Table 1. Observed and calculated structure factors for metahewettite Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

1 0 0 176 323 7 6 3 1 351 338 4 -15 1 3 246 250 6 12 0 4 47 7 47 -2 3 5 129 116 5

2 0 0 757 780 4 7 3 1 634 638 4 -14 1 3 527 537 5 13 0 4 363 383 8 -1 3 5 657 639 3

3 0 0 1805 1787 10 8 3 1 93 102 10 -13 1 3 55 28 16 -14 2 4 189 182 8 0 3 5 0 25 1

4 0 0 164 155 2 9 3 1 51 73 25 -12 1 3 40 20 23 -13 2 4 283 282 4 1 3 5 311 300 3

5 0 0 94 100 4 10 3 1 432 445 4 -11 1 3 466 461 3 -12 2 4 188 177 5 2 3 5 716 710 4

6 0 0 358 365 3 11 3 1 0 54 1 -10 1 3 179 178 3 -11 2 4 573 572 3 3 3 5 237 235 4

7 0 0 619 616 3 -2 5 1 208 195 14 -9 1 3 113 110 4 -10 2 4 263 256 3 4 3 5 392 386 4

8 0 0 235 235 5 -1 5 1 384 400 9 -8 1 3 315 312 3 -9 2 4 106 107 7 5 3 5 461 453 4

9 0 0 229 195 3 0 5 1 55 80 54 -7 1 3 462 485 2 -8 2 4 1275 1249 6 6 3 5 192 190 6

10 0 0 672 656 5 1 5 1 196 197 18 -6 1 3 423 444 2 -7 2 4 164 155 6 7 3 5 374 384 4

11 0 0 531 519 5 2 5 1 62 81 61 -5 1 3 348 352 2 -6 2 4 274 274 4 8 3 5 158 138 18

12 0 0 275 277 6 -15 0 2 171 188 10 -4 1 3 1287 1313 6 -5 2 4 582 580 3 9 3 5 470 468 4

13 0 0 104 76 14 -14 0 2 342 359 7 -3 1 3 382 357 3 -4 2 4 526 529 2 10 3 5 231 244 7

14 0 0 397 412 8 -13 0 2 81 60 18 -2 1 3 587 561 2 -3 2 4 524 520 2 -16 0 6 229 222 9

15 0 0 0 20 1 -12 0 2 56 60 34 -1 1 3 2457 2303 10 -2 2 4 131 105 3 -15 0 6 540 565 6

0 2 0 3602 3455 19 -11 0 2 967 963 7 0 1 3 543 529 2 -1 2 4 35 29 20 -14 0 6 90 76 16

1 2 0 234 204 2 -10 0 2 35 12 29 1 1 3 726 716 3 0 2 4 421 420 2 -13 0 6 298 291 12

2 2 0 509 513 2 -9 0 2 78 82 7 2 1 3 1026 1022 4 1 2 4 98 94 5 -12 0 6 644 629 5

3 2 0 1168 1177 5 -8 0 2 1615 1624 8 3 1 3 112 85 5 2 2 4 151 141 3 -11 0 6 118 122 7

4 2 0 95 82 4 -7 0 2 902 918 5 4 1 3 256 271 3 3 2 4 1692 1686 12 -10 0 6 394 389 4

5 2 0 131 134 3 -6 0 2 210 216 3 5 1 3 147 149 3 4 2 4 387 384 3 -9 0 6 56 36 10

6 2 0 286 274 3 -5 0 2 196 189 4 6 1 3 823 835 3 5 2 4 44 44 14 -8 0 6 1542 1525 11

7 2 0 494 485 3 -4 0 2 662 662 3 7 1 3 67 73 7 6 2 4 1225 1220 5 -7 0 6 93 83 5

8 2 0 151 148 5 -3 0 2 488 532 3 8 1 3 154 167 3 7 2 4 92 89 8 -6 0 6 410 414 3

9 2 0 155 157 4 -2 0 2 297 310 4 9 1 3 502 505 3 8 2 4 300 299 5 -5 0 6 2503 2511 33

10 2 0 555 558 3 -1 0 2 357 398 10 10 1 3 448 450 3 9 2 4 484 487 3 -4 0 6 501 484 8

11 2 0 465 473 4 0 0 2 2006 2084 11 11 1 3 124 122 6 10 2 4 192 201 5 -3 0 6 781 781 9

12 2 0 230 236 4 1 0 2 282 288 2 12 1 3 21 19 21 11 2 4 120 121 8 -2 0 6 2029 1990 30

13 2 0 63 71 20 2 0 2 264 266 3 13 1 3 210 204 6 12 2 4 0 11 1 -1 0 6 428 413 6

0 4 0 1579 1590 10 3 0 2 2107 2153 11 -13 3 3 30 36 30 -10 4 4 195 202 16 0 0 6 999 991 8

1 4 0 107 113 8 4 0 2 364 352 3 -12 3 3 65 35 18 -9 4 4 28 49 28 1 0 6 166 151 3

2 4 0 310 300 4 5 0 2 493 522 3 -11 3 3 366 370 5 -8 4 4 838 849 6 2 0 6 233 235 3

3 4 0 626 634 4 6 0 2 1029 1035 6 -10 3 3 129 137 8 -7 4 4 124 121 10 3 0 6 910 902 5

4 4 0 0 23 1 7 0 2 410 413 6 -9 3 3 98 88 10 -6 4 4 206 203 6 4 0 6 188 185 3

5 4 0 174 154 7 8 0 2 436 441 3 -8 3 3 241 234 6 -5 4 4 451 456 7 5 0 6 441 445 3

6 4 0 175 163 7 9 0 2 201 198 4 -7 3 3 339 317 6 -4 4 4 333 326 7 6 0 6 523 505 3

7 4 0 333 320 6 10 0 2 448 448 4 -6 3 3 313 296 5 -3 4 4 318 316 4 7 0 6 300 287 4

8 4 0 0 57 1 11 0 2 314 309 5 -5 3 3 164 150 7 -2 4 4 33 60 33 8 0 6 233 236 4

9 4 0 88 108 17 12 0 2 177 157 7 -4 3 3 824 816 4 -1 4 4 0 33 1 9 0 6 705 696 5

-15 1 1 121 117 9 13 0 2 356 358 7 -3 3 3 198 169 3 0 4 4 213 199 4 10 0 6 106 85 10

-14 1 1 433 445 4 14 0 2 300 317 7 -2 3 3 280 252 3 1 4 4 99 101 10 11 0 6 274 270 11

-13 1 1 108 111 8 -14 2 2 317 323 5 -1 3 3 1162 1147 4 2 4 4 157 145 11 12 0 6 213 212 14

-12 1 1 25 31 25 -13 2 2 60 69 16 0 3 3 274 257 4 3 4 4 865 893 5 -15 2 6 501 513 4

-11 1 1 357 361 3 -12 2 2 53 54 17 1 3 3 416 410 3 4 4 4 183 184 14 -14 2 6 65 74 15

-10 1 1 289 278 3 -11 2 2 811 810 4 2 3 3 555 554 3 5 4 4 0 32 1 -13 2 6 259 245 6

-9 1 1 591 604 3 -10 2 2 25 25 24 3 3 3 53 14 13 6 4 4 746 761 6 -12 2 6 542 538 3

-8 1 1 59 71 8 -9 2 2 67 66 10 4 3 3 210 206 4 7 4 4 73 72 20 -11 2 6 101 97 9

-7 1 1 887 895 4 -8 2 2 1229 1217 6 5 3 3 89 72 12 -16 1 5 186 183 12 -10 2 6 349 342 4

-6 1 1 393 391 2 -7 2 2 724 719 4 6 3 3 538 541 4 -15 1 5 344 345 5 -9 2 6 61 39 10

-5 1 1 256 240 2 -6 2 2 186 177 3 7 3 3 3 24 3 -14 1 5 232 239 5 -8 2 6 1152 1148 5

-4 1 1 214 133 2 -5 2 2 151 134 3 8 3 3 87 102 11 -13 1 5 218 219 4 -7 2 6 72 74 6

-3 1 1 484 497 5 -4 2 2 432 430 4 9 3 3 362 373 4 -12 1 5 540 539 3 -6 2 6 294 286 3

-2 1 1 469 493 2 -3 2 2 380 375 2 10 3 3 384 386 4 -11 1 5 603 597 5 -5 2 6 1713 1728 7

-1 1 1 1427 1392 5 -2 2 2 269 247 2 11 3 3 102 108 10 -10 1 5 325 324 3 -4 2 6 352 353 2

0 1 1 274 257 2 -1 2 2 270 254 2 -3 5 3 50 72 49 -9 1 5 809 813 4 -3 2 6 540 546 2

1 1 1 490 496 2 0 2 2 1402 1367 5 -2 5 3 80 126 38 -8 1 5 544 546 6 -2 2 6 1334 1328 5

2 1 1 130 106 2 1 2 2 225 213 2 -1 5 3 607 632 10 -7 1 5 154 157 5 -1 2 6 302 293 2

3 1 1 617 600 6 2 2 2 160 150 3 0 5 3 125 132 17 -6 1 5 155 138 2 0 2 6 678 688 3

4 1 1 1057 1078 6 3 2 2 1609 1609 7 1 5 3 271 273 10 -5 1 5 325 313 2 1 2 6 66 69 8

5 1 1 30 40 14 4 2 2 261 248 2 -16 0 4 28 9 28 -4 1 5 129 175 2 2 2 6 205 205 3

6 1 1 498 498 2 5 2 2 437 434 2 -15 0 4 548 565 8 -3 1 5 390 402 2 3 2 6 647 646 3

7 1 1 949 967 4 6 2 2 832 819 4 -14 0 4 201 211 8 -2 1 5 302 272 3 4 2 6 135 130 4

8 1 1 178 183 3 7 2 2 317 306 3 -13 0 4 284 295 11 -1 1 5 515 602 3 5 2 6 361 353 4

9 1 1 113 114 5 8 2 2 378 378 3 -12 0 4 199 207 7 0 1 5 28 26 14 6 2 6 462 456 3

10 1 1 569 573 3 9 2 2 170 164 5 -11 0 4 675 670 5 1 1 5 454 466 2 7 2 6 236 239 4

11 1 1 79 76 9 10 2 2 392 398 4 -10 0 4 302 301 4 2 1 5 934 966 4 8 2 6 172 182 5

12 1 1 207 203 4 11 2 2 255 252 4 -9 0 4 169 170 4 3 1 5 409 413 2 9 2 6 606 613 4

13 1 1 98 98 10 12 2 2 137 135 7 -8 0 4 1554 1557 9 4 1 5 522 520 2 10 2 6 76 83 13

14 1 1 308 310 9 13 2 2 327 333 5 -7 0 4 187 170 3 5 1 5 699 701 3 11 2 6 239 247 5

-12 3 1 67 63 18 -9 4 2 67 44 23 -6 0 4 295 310 9 6 1 5 258 260 3 -10 4 6 270 275 6

-11 3 1 284 282 5 -8 4 2 730 731 6 -5 0 4 495 554 3 7 1 5 485 496 3 -9 4 6 0 28 1

-10 3 1 214 207 5 -7 4 2 460 464 5 -4 0 4 685 704 6 8 1 5 222 219 3 -8 4 6 707 707 5

-9 3 1 428 428 4 -6 4 2 117 130 10 -3 0 4 694 724 4 9 1 5 585 583 5 -7 4 6 88 79 15

-8 3 1 77 45 12 -5 4 2 96 86 12 -2 0 4 133 131 7 10 1 5 341 343 4 -6 4 6 149 152 10

-7 3 1 680 675 4 -4 4 2 235 218 5 -1 0 4 61 24 6 11 1 5 64 78 17 -5 4 6 934 957 8

-6 3 1 204 195 4 -3 4 2 220 204 8 0 0 4 710 683 5 12 1 5 259 267 5 -4 4 6 214 214 6

-5 3 1 137 135 5 -2 4 2 199 194 5 1 0 4 101 97 4 -13 3 5 150 158 8 -3 4 6 327 315 5

-4 3 1 292 266 4 -1 4 2 152 149 5 2 0 4 69 82 6 -12 3 5 400 401 4 -2 4 6 675 693 4

-3 3 1 288 266 4 0 4 2 784 788 3 3 0 4 2551 2537 15 -11 3 5 435 442 4 -1 4 6 163 163 7

-2 3 1 313 296 3 1 4 2 136 143 6 4 0 4 581 589 3 -10 3 5 239 237 5 0 4 6 384 392 4

-1 3 1 751 740 3 2 4 2 48 54 25 5 0 4 9 33 8 -9 3 5 487 483 4 1 4 6 0 26 1

0 3 1 153 135 3 3 4 2 966 985 6 6 0 4 1563 1581 8 -8 3 5 401 384 4 2 4 6 149 156 8

1 3 1 317 301 3 4 4 2 161 148 8 7 0 4 96 98 6 -7 3 5 123 119 6 3 4 6 366 369 5

2 3 1 102 88 5 5 4 2 316 308 6 8 0 4 345 339 4 -6 3 5 117 111 6 4 4 6 32 61 32

3 3 1 352 350 3 6 4 2 529 533 5 9 0 4 566 572 4 -5 3 5 193 190 6 5 4 6 238 235 7

4 3 1 557 551 3 7 4 2 183 176 8 10 0 4 232 234 5 -4 3 5 229 210 3 6 4 6 347 367 6

5 3 1 63 44 14 8 4 2 287 294 7 11 0 4 124 127 9 -3 3 5 249 239 4 -16 1 7 335 344 5

Table 1. Observed and calculated structure factors for metahewettite Page 2

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-15 1 7 182 168 7 -7 2 8 640 643 3 -14 0 10 57 59 27 6 1 11 391 381 3 -16 1 13 0 21 1

-14 1 7 168 165 6 -6 2 8 67 58 6 -13 0 10 558 553 5 7 1 11 58 61 16 -15 1 13 264 264 6

-13 1 7 394 385 6 -5 2 8 1499 1504 6 -12 0 10 532 525 6 8 1 11 399 391 4 -14 1 13 509 509 7

-12 1 7 416 406 5 -4 2 8 283 269 2 -11 0 10 311 301 5 9 1 11 285 288 5 -13 1 13 372 371 4

-11 1 7 138 130 5 -3 2 8 35 38 17 -10 0 10 129 120 6 -13 3 11 495 500 4 -12 1 13 385 388 5

-10 1 7 154 144 4 -2 2 8 670 684 3 -9 0 10 428 423 3 -12 3 11 220 223 5 -11 1 13 46 53 17

-9 1 7 876 861 4 -1 2 8 38 36 12 -8 0 10 503 511 3 -11 3 11 135 141 7 -10 1 13 456 445 3

-8 1 7 654 654 3 0 2 8 441 446 3 -7 0 10 66 47 8 -10 3 11 299 298 4 -9 1 13 636 632 3

-7 1 7 607 605 3 1 2 8 838 843 4 -6 0 10 294 305 3 -9 3 11 57 58 19 -8 1 13 167 159 4

-6 1 7 210 210 3 2 2 8 0 14 1 -5 0 10 714 709 14 -8 3 11 123 109 8 -7 1 13 220 229 3

-5 1 7 228 236 2 3 2 8 526 522 3 -4 0 10 151 161 4 -7 3 11 209 207 9 -6 1 13 275 265 3

-4 1 7 329 343 2 4 2 8 141 132 6 -3 0 10 84 88 5 -6 3 11 784 780 5 -5 1 13 91 88 5

-3 1 7 543 532 2 5 2 8 259 269 3 -2 0 10 1590 1613 10 -5 3 11 151 148 6 -4 1 13 566 587 3

-2 1 7 81 88 3 6 2 8 342 333 5 -1 0 10 449 451 3 -4 3 11 388 383 4 -3 1 13 1071 1087 5

-1 1 7 310 276 2 7 2 8 346 344 4 0 0 10 467 469 4 -3 3 11 749 749 4 -2 1 13 527 534 3

0 1 7 299 293 3 8 2 8 154 158 6 1 0 10 1331 1339 8 -2 3 11 248 253 4 -1 1 13 800 802 4

1 1 7 89 90 3 9 2 8 482 483 4 2 0 10 296 294 4 -1 3 11 669 680 4 0 1 13 1146 1140 5

2 1 7 1822 1845 8 10 2 8 193 204 6 3 0 10 494 486 4 0 3 11 386 390 4 1 1 13 266 267 4

3 1 7 492 491 3 -10 4 8 42 22 42 4 0 10 421 422 4 1 3 11 149 136 10 2 1 13 868 855 4

4 1 7 613 613 3 -9 4 8 345 350 14 5 0 10 0 14 1 2 3 11 402 399 4 3 1 13 145 141 5

5 1 7 761 757 3 -8 4 8 177 168 12 6 0 10 187 188 10 3 3 11 57 17 27 4 1 13 233 231 5

6 1 7 245 245 3 -7 4 8 409 413 10 7 0 10 275 277 5 4 3 11 256 251 6 5 1 13 80 98 12

7 1 7 328 324 3 -6 4 8 20 21 20 8 0 10 395 370 17 5 3 11 194 197 8 6 1 13 89 104 12

8 1 7 368 370 5 -5 4 8 869 888 6 9 0 10 0 29 1 6 3 11 278 288 6 7 1 13 397 388 4

9 1 7 284 279 4 -4 4 8 139 128 9 10 0 10 142 144 14 -17 0 12 283 280 11 8 1 13 37 24 37

10 1 7 283 280 5 -3 4 8 52 61 27 -15 2 10 229 235 6 -16 0 12 0 12 1 -13 3 13 305 309 6

11 1 7 28 22 27 -2 4 8 528 543 5 -14 2 10 44 59 44 -15 0 12 457 449 6 -12 3 13 348 342 5

12 1 7 520 535 12 -1 4 8 83 75 15 -13 2 10 511 506 5 -14 0 12 166 165 10 -11 3 13 82 67 16

-13 3 7 297 284 7 0 4 8 327 330 5 -12 2 10 449 447 4 -13 0 12 583 577 5 -10 3 13 345 341 6

-12 3 7 354 342 4 1 4 8 531 533 5 -11 2 10 288 276 4 -12 0 12 83 48 12 -9 3 13 449 461 5

-11 3 7 90 85 11 2 4 8 46 3 45 -10 2 10 162 145 5 -11 0 12 392 389 7 -8 3 13 122 127 9

-10 3 7 134 132 8 3 4 8 329 342 6 -9 2 10 365 357 3 -10 0 12 683 674 5 -7 3 13 128 132 8

-9 3 7 666 649 7 4 4 8 34 74 34 -8 2 10 435 429 5 -9 0 12 524 508 4 -6 3 13 210 202 5

-8 3 7 451 439 4 5 4 8 224 222 8 -7 2 10 42 33 15 -8 0 12 959 966 5 -5 3 13 0 28 1

-7 3 7 447 446 3 -16 1 9 467 468 5 -6 2 10 241 234 4 -7 0 12 721 728 9 -4 3 13 320 325 4

-6 3 7 207 199 4 -15 1 9 228 220 5 -5 2 10 458 467 3 -6 0 12 570 581 7 -3 3 13 737 735 5

-5 3 7 209 198 8 -14 1 9 330 333 4 -4 2 10 156 153 4 -5 0 12 447 473 6 -2 3 13 338 342 5

-4 3 7 245 249 4 -13 1 9 336 335 4 -3 2 10 33 32 32 -4 0 12 119 116 4 -1 3 13 539 536 4

-3 3 7 247 240 3 -12 1 9 105 86 6 -2 2 10 1162 1172 5 -3 0 12 57 57 9 0 3 13 776 780 4

-2 3 7 70 63 9 -11 1 9 75 74 8 -1 2 10 336 331 3 -2 0 12 426 431 3 1 3 13 192 188 6

-1 3 7 52 66 16 -10 1 9 532 534 3 0 2 10 333 333 3 -1 0 12 199 204 4 2 3 13 645 650 6

0 3 7 166 162 5 -9 1 9 768 770 3 1 2 10 1044 1030 5 0 0 12 433 437 6 3 3 13 113 115 14

1 3 7 46 29 22 -8 1 9 33 12 16 2 2 10 237 238 5 1 0 12 755 755 5 4 3 13 176 185 10

2 3 7 1116 1106 6 -7 1 9 853 868 4 3 2 10 412 400 6 2 0 12 123 114 6 5 3 13 102 98 14

3 3 7 299 294 6 -6 1 9 1990 2001 8 4 2 10 366 362 4 3 0 12 0 25 1 -17 0 14 417 415 30

4 3 7 375 379 5 -5 1 9 950 961 4 5 2 10 0 5 1 4 0 12 478 459 4 -16 0 14 349 348 12

5 3 7 545 536 6 -4 1 9 947 952 4 6 2 10 180 170 6 5 0 12 193 199 12 -15 0 14 153 173 9

6 3 7 165 161 8 -3 1 9 587 583 3 7 2 10 240 239 5 6 0 12 203 204 7 -14 0 14 305 297 6

7 3 7 292 283 5 -2 1 9 157 156 3 8 2 10 341 330 5 7 0 12 259 259 7 -13 0 14 216 217 6

8 3 7 283 278 6 -1 1 9 604 610 3 9 2 10 62 29 20 8 0 12 32 76 32 -12 0 14 351 328 6

9 3 7 223 228 7 0 1 9 170 178 2 -10 4 10 157 150 9 9 0 12 264 252 8 -11 0 14 227 219 5

-16 0 8 470 480 7 1 1 9 496 508 2 -9 4 10 261 258 9 -15 2 12 411 407 5 -10 0 14 506 485 10

-15 0 8 325 323 7 2 1 9 27 26 26 -8 4 10 287 303 8 -14 2 12 148 146 7 -9 0 14 69 76 11

-14 0 8 347 358 6 3 1 9 41 57 15 -7 4 10 29 8 29 -13 2 12 514 506 6 -8 0 14 162 158 5

-13 0 8 342 335 6 4 1 9 365 368 3 -6 4 10 132 133 9 -12 2 12 54 44 19 -7 0 14 728 720 9

-12 0 8 656 650 5 5 1 9 572 560 3 -5 4 10 259 242 6 -11 2 12 307 313 4 -6 0 14 425 427 3

-11 0 8 272 269 8 6 1 9 360 357 3 -4 4 10 137 131 9 -10 2 12 580 575 4 -5 0 14 624 625 4

-10 0 8 210 216 4 7 1 9 311 302 4 -3 4 10 0 18 1 -9 2 12 418 415 3 -4 0 14 102 112 13

-9 0 8 754 752 4 8 1 9 480 475 4 -2 4 10 665 680 6 -8 2 12 754 748 4 -3 0 14 107 111 5

-8 0 8 380 376 3 9 1 9 42 32 41 -1 4 10 184 186 7 -7 2 12 567 556 3 -2 0 14 264 256 4

-7 0 8 856 848 11 10 1 9 397 400 5 0 4 10 184 183 9 -6 2 12 438 433 4 -1 0 14 573 571 4

-6 0 8 148 120 3 11 1 9 86 109 16 1 4 10 632 651 9 -5 2 12 383 382 3 0 0 14 170 162 10

-5 0 8 2090 2077 23 -13 3 9 280 272 5 2 4 10 161 156 9 -4 2 12 96 80 8 1 0 14 72 80 12

-4 0 8 401 407 13 -12 3 9 93 80 11 3 4 10 270 284 8 -3 2 12 32 33 32 2 0 14 144 147 6

-3 0 8 221 203 3 -11 3 9 12 16 12 4 4 10 249 258 7 -2 2 12 306 311 3 3 0 14 110 120 10

-2 0 8 638 688 6 -10 3 9 355 342 4 -16 1 11 304 302 10 -1 2 12 144 143 5 4 0 14 655 636 5

-1 0 8 86 58 6 -9 3 9 552 548 4 -15 1 11 386 391 5 0 2 12 323 317 3 5 0 14 325 313 6

0 0 8 486 507 5 -8 3 9 50 4 20 -14 1 11 197 188 6 1 2 12 645 637 4 6 0 14 118 109 11

1 0 8 1040 1069 6 -7 3 9 515 512 4 -13 1 11 643 639 4 2 2 12 125 115 7 7 0 14 217 220 12

2 0 8 20 37 20 -6 3 9 1182 1177 6 -12 1 11 303 297 3 3 2 12 0 14 1 8 0 14 205 197 10

3 0 8 635 649 4 -5 3 9 559 563 3 -11 1 11 169 157 4 4 2 12 421 414 4 -15 2 14 153 173 8

4 0 8 167 166 6 -4 3 9 613 607 4 -10 1 11 432 433 3 5 2 12 169 181 7 -14 2 14 265 264 5

5 0 8 285 292 6 -3 3 9 377 337 4 -9 1 11 24 20 24 6 2 12 196 191 6 -13 2 14 187 188 6

6 0 8 437 427 4 -2 3 9 107 96 7 -8 1 11 121 118 6 7 2 12 234 231 6 -12 2 14 299 294 4

7 0 8 422 423 4 -1 3 9 366 375 4 -7 1 11 303 293 3 8 2 12 86 72 21 -11 2 14 194 190 5

8 0 8 151 154 7 0 3 9 104 108 8 -6 1 11 1097 1098 5 -9 4 12 265 274 11 -10 2 14 442 431 3

9 0 8 563 558 5 1 3 9 317 310 4 -5 1 11 234 241 2 -8 4 12 453 465 8 -9 2 14 50 57 22

10 0 8 236 229 7 2 3 9 50 65 49 -4 1 11 466 479 2 -7 4 12 335 338 10 -8 2 14 167 166 6

11 0 8 118 103 17 3 3 9 78 18 13 -3 1 11 1038 1062 4 -6 4 12 239 251 7 -7 2 14 640 632 4

-15 2 8 294 289 5 4 3 9 239 240 7 -2 1 11 338 347 3 -5 4 12 257 254 6 -6 2 14 353 349 4

-14 2 8 299 300 4 5 3 9 465 463 5 -1 1 11 921 937 4 -4 4 12 76 18 20 -5 2 14 557 546 3

-13 2 8 293 284 4 6 3 9 262 278 6 0 1 11 589 600 3 -3 4 12 59 2 31 -4 2 14 122 128 6

-12 2 8 567 559 4 7 3 9 253 244 6 1 1 11 198 203 2 -2 4 12 194 182 10 -3 2 14 80 91 9

-11 2 8 230 222 4 8 3 9 378 380 5 2 1 11 561 549 4 -1 4 12 100 75 15 -2 2 14 248 246 3

-10 2 8 133 131 5 -17 0 10 193 189 10 3 1 11 0 26 1 0 4 12 153 182 14 -1 2 14 439 435 4

-9 2 8 592 581 5 -16 0 10 373 365 7 4 1 11 284 283 3 1 4 12 459 450 7 0 2 14 147 151 7

-8 2 8 281 281 3 -15 0 10 265 262 8 5 1 11 257 259 6 2 4 12 74 101 25 1 2 14 80 70 16

Table 1. Observed and calculated structure factors for metahewettite Page 3

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

2 2 14 134 121 8 -8 0 16 217 216 4 -7 3 17 81 94 18 -1 1 19 95 82 15 -2 1 21 124 102 10

3 2 14 128 124 8 -7 0 16 359 355 4 -6 3 17 688 690 4 0 1 19 252 245 6 -1 1 21 61 27 27

4 2 14 547 545 6 -6 0 16 177 176 11 -5 3 17 181 180 7 1 1 19 188 190 9 0 1 21 428 421 10

5 2 14 278 279 5 -5 0 16 623 632 9 -4 3 17 52 37 51 2 1 19 168 158 9 1 1 21 161 166 10

6 2 14 99 88 18 -4 0 16 827 820 6 -3 3 17 352 350 6 3 1 19 168 196 10 -14 0 22 241 267 16

-8 4 14 129 152 10 -3 0 16 547 534 4 -2 3 17 28 34 28 -11 3 19 258 253 6 -13 0 22 124 115 18

-7 4 14 463 478 7 -2 0 16 695 682 5 -1 3 17 89 67 15 -10 3 19 0 55 1 -12 0 22 181 192 11

-6 4 14 219 228 10 -1 0 16 223 211 6 0 3 17 203 209 7 -9 3 19 268 266 5 -11 0 22 27 58 26

-5 4 14 396 408 10 0 0 16 107 104 11 1 3 17 273 277 5 -8 3 19 514 505 4 -10 0 22 499 516 7

-4 4 14 118 123 13 1 0 16 254 253 7 -16 0 18 343 371 8 -7 3 19 203 197 13 -9 0 22 209 213 14

-3 4 14 57 59 35 2 0 16 322 308 7 -15 0 18 262 262 8 -6 3 19 632 644 6 -8 0 22 78 68 36

-2 4 14 203 206 10 3 0 16 251 256 7 -14 0 18 149 147 9 -5 3 19 370 374 6 -7 0 22 579 581 6

-1 4 14 246 246 7 4 0 16 23 27 23 -13 0 18 584 588 13 -4 3 19 160 161 10 -6 0 22 346 345 7

0 4 14 129 130 16 5 0 16 172 168 10 -12 0 18 158 151 11 -3 3 19 591 588 7 -5 0 22 114 109 15

-16 1 15 213 209 6 6 0 16 363 354 9 -11 0 18 409 400 11 -2 3 19 0 32 1 -4 0 22 459 462 8

-15 1 15 237 241 6 -15 2 16 94 101 14 -10 0 18 383 385 5 -1 3 19 85 79 18 -3 0 22 138 135 28

-14 1 15 602 612 5 -14 2 16 389 379 6 -9 0 18 73 76 57 -15 0 20 92 118 20 -2 0 22 224 227 13

-13 1 15 164 159 5 -13 2 16 264 264 8 -8 0 18 19 37 19 -14 0 20 60 58 59 -1 0 22 33 26 33

-12 1 15 678 676 4 -12 2 16 314 311 5 -7 0 18 59 65 19 -13 0 20 359 366 7 0 0 22 258 236 16

-11 1 15 607 595 4 -11 2 16 0 16 1 -6 0 18 71 3 15 -12 0 20 329 326 12 1 0 22 203 203 22

-10 1 15 310 304 3 -10 2 16 92 97 11 -5 0 18 80 84 13 -11 0 20 227 227 8 -12 2 22 154 182 9

-9 1 15 879 882 6 -9 2 16 42 40 41 -4 0 18 345 345 5 -10 0 20 377 371 9 -11 2 22 60 47 24

-8 1 15 480 473 3 -8 2 16 160 170 6 -3 0 18 158 148 8 -9 0 20 176 183 17 -10 2 22 451 443 5

-7 1 15 477 479 3 -7 2 16 315 314 5 -2 0 18 114 103 11 -8 0 20 78 93 43 -9 2 22 193 197 7

-6 1 15 710 709 3 -6 2 16 141 128 6 -1 0 18 374 362 6 -7 0 20 440 447 5 -8 2 22 84 65 14

-5 1 15 419 425 3 -5 2 16 502 492 3 0 0 18 212 207 7 -6 0 20 57 45 27 -7 2 22 520 514 9

-4 1 15 13 14 13 -4 2 16 690 684 4 1 0 18 418 403 6 -5 0 20 160 166 8 -6 2 22 295 300 6

-3 1 15 507 505 3 -3 2 16 441 433 3 2 0 18 307 304 18 -4 0 20 99 88 28 -5 2 22 83 90 30

-2 1 15 446 447 3 -2 2 16 570 565 4 3 0 18 0 11 1 -3 0 20 0 44 1 -4 2 22 420 420 10

-1 1 15 35 27 34 -1 2 16 187 186 5 4 0 18 276 271 8 -2 0 20 0 22 1 -3 2 22 101 115 14

0 1 15 482 471 3 0 2 16 82 76 14 5 0 18 86 70 51 -1 0 20 133 121 16 -2 2 22 219 207 8

1 1 15 292 285 4 1 2 16 234 233 6 -14 2 18 116 134 12 0 0 20 270 244 9 -13 1 23 239 247 7

2 1 15 416 395 4 2 2 16 255 261 6 -13 2 18 511 513 5 1 0 20 219 228 11 -12 1 23 287 310 12

3 1 15 585 582 4 3 2 16 224 227 6 -12 2 18 137 126 9 2 0 20 308 297 28 -11 1 23 571 585 10

4 1 15 64 61 19 4 2 16 71 23 20 -11 2 18 353 342 5 3 0 20 165 203 18 -10 1 23 180 169 8

5 1 15 559 543 7 5 2 16 147 151 10 -10 2 18 340 339 6 -13 2 20 338 332 7 -9 1 23 68 37 20

6 1 15 69 58 19 -16 1 17 168 167 12 -9 2 18 96 74 11 -12 2 20 297 299 7 -8 1 23 197 195 7

7 1 15 237 238 7 -15 1 17 457 456 5 -8 2 18 13 30 13 -11 2 20 193 196 7 -7 1 23 158 160 9

-13 3 15 114 116 13 -14 1 17 167 176 7 -7 2 18 37 52 36 -10 2 20 351 351 5 -6 1 23 72 86 18

-12 3 15 502 508 5 -13 1 17 297 298 4 -6 2 18 40 3 40 -9 2 20 152 159 8 -5 1 23 134 145 13

-11 3 15 463 459 6 -12 1 17 230 219 5 -5 2 18 42 58 36 -8 2 20 72 79 15 -4 1 23 47 22 47

-10 3 15 253 249 6 -11 1 17 727 716 5 -4 2 18 315 312 8 -7 2 20 409 410 4 -3 1 23 289 285 6

-9 3 15 634 645 5 -10 1 17 379 369 4 -3 2 18 127 132 8 -6 2 20 0 33 1 -2 1 23 324 334 11

-8 3 15 318 323 5 -9 1 17 491 486 3 -2 2 18 118 108 9 -5 2 20 154 149 10 -13 0 24 143 142 20

-7 3 15 316 323 4 -8 1 17 516 512 3 -1 2 18 322 326 5 -4 2 20 41 78 41 -12 0 24 181 203 16

-6 3 15 488 489 4 -7 1 17 94 88 8 0 2 18 184 185 7 -3 2 20 57 39 30 -11 0 24 276 274 16

-5 3 15 292 288 4 -6 1 17 879 875 4 1 2 18 367 367 5 -2 2 20 43 36 42 -10 0 24 0 14 1

-4 3 15 37 25 36 -5 1 17 248 248 3 2 2 18 260 267 7 -1 2 20 123 121 10 -9 0 24 136 170 13

-3 3 15 368 374 5 -4 1 17 57 62 13 3 2 18 0 16 1 0 2 20 224 223 7 -8 0 24 264 268 18

-2 3 15 287 294 6 -3 1 17 471 464 4 -15 1 19 294 300 6 1 2 20 190 194 8 -7 0 24 248 249 10

-1 3 15 55 46 26 -2 1 17 56 38 15 -14 1 19 321 317 5 -15 1 21 229 241 11 -6 0 24 223 239 9

0 3 15 383 392 4 -1 1 17 0 31 1 -13 1 19 289 292 5 -14 1 21 709 708 8 -5 0 24 73 58 29

1 3 15 215 226 6 0 1 17 261 263 6 -12 1 19 279 282 5 -13 1 21 79 79 18 -4 0 24 428 429 11

2 3 15 348 347 6 1 1 17 366 362 4 -11 1 19 316 314 5 -12 1 21 248 261 6 -3 0 24 217 215 11

3 3 15 450 449 8 2 1 17 264 272 5 -10 1 19 59 53 17 -11 1 21 235 246 6 -2 0 24 19 61 18

-16 0 16 204 217 12 3 1 17 434 437 5 -9 1 19 362 361 6 -10 1 21 122 142 9 -10 1 25 69 84 27

-15 0 16 120 111 13 4 1 17 341 346 8 -8 1 19 629 633 7 -9 1 21 180 179 6 -9 1 25 173 204 10

-14 0 16 430 430 6 5 1 17 319 328 6 -7 1 19 256 249 5 -8 1 21 258 264 5 -8 1 25 527 530 10

-13 0 16 287 279 6 -12 3 17 191 188 8 -6 1 19 837 845 5 -7 1 21 69 72 16 -7 1 25 61 63 27

-12 0 16 365 356 5 -11 3 17 574 580 5 -5 1 19 471 468 4 -6 1 21 173 171 11 -6 1 25 56 39 36

-11 0 16 27 30 26 -10 3 17 267 269 6 -4 1 19 204 205 5 -5 1 21 593 591 4

-10 0 16 139 125 6 -9 3 17 432 423 5 -3 1 19 754 744 5 -4 1 21 294 298 5

-9 0 16 44 67 26 -8 3 17 426 418 4 -2 1 19 26 39 25 -3 1 21 494 489 5