

	0	8	2	374	398	10		2	-9	3	330	331	13		6	-4	3	178	171	7
1	1	3	429	405	11		-5	6	3	176	182	7								
	1	8	2	222	222	6		3	-9	3	207	225	8		7	-4	3	241	236	7
2	1	3	91	93	3		-4	6	3	105	123	6								
	2	8	2	81	85	4		4	-9	3	117	123	6		8	-4	3	125	115	4
3	1	3	264	257	7		-3	6	3	408	420	21								
	3	8	2	97	104	6		5	-9	3	135	149	7		9	-4	3	179	180	8
4	1	3	540	542	10		-2	6	3	350	404	17								
	4	8	2	251	265	10		6	-9	3	64	63	8		-10	-3	3	86	96	7
5	1	3	431	449	11		-1	6	3	134	142	4								
	5	8	2	8	14	7		-8	-8	3	30	23	18		-9	-3	3	23	25	22
6	1	3	317	322	9		0	6	3	28	22	8								
	6	8	2	281	286	11		-7	-8	3	234	228	9		-8	-3	3	258	295	10
7	1	3	275	288	11		1	6	3	536	542	14								
	7	8	2	135	129	6		-6	-8	3	135	122	7		-7	-3	3	201	189	6
8	1	3	162	163	7		2	6	3	263	266	7								
	8	8	2	150	155	7		-5	-8	3	243	216	10		-6	-3	3	274	266	7
9	1	3	107	115	6		3	6	3	518	535	13								
	-6	9	2	0	2	1		-4	-8	3	246	229	10		-5	-3	3	249	245	7
10	1	3	144	144	7		4	6	3	361	361	14								
	-5	9	2	160	163	7		-3	-8	3	171	181	7		-4	-3	3	174	171	7
-7	2	3	155	142	7		5	6	3	255	271	10								
	-4	9	2	99	103	6		-2	-8	3	39	37	6		-3	-3	3	129	124	4
-6	2	3	62	68	6		6	6	3	163	167	7								
	-3	9	2	344	367	13		-1	-8	3	226	232	6		-2	-3	3	859	798	22
-5	2	3	288	285	11		7	6	3	249	246	10								
	-2	9	2	86	89	7		0	-8	3	173	179	5		-1	-3	3	377	581	160
-4	2	3	160	155	7		10	6	3	177	184	8								
	-1	9	2	216	222	6		1	-8	3	191	188	5		0	-3	3	276	295	7
-3	2	3	448	457	23		-8	7	3	125	119	7								
	0	9	2	55	54	5		2	-8	3	154	154	6		1	-3	3	707	688	15
-2	2	3	189	188	6		-7	7	3	25	27	24								
	1	9	2	246	257	7		3	-8	3	331	322	13		2	-3	3	38	42	4
-1	2	3	166	219	69		-6	7	3	242	244	10								
	2	9	2	46	54	8		4	-8	3	242	220	10		3	-3	3	120	117	4
0	2	3	935	944	24		-5	7	3	80	78	6								
	3	9	2	412	453	15		5	-8	3	80	80	6		4	-3	3	516	515	19
1	2	3	75	86	3		-4	7	3	236	238	9								
	4	9	2	200	208	8		6	-8	3	124	127	6		5	-3	3	133	143	6
2	2	3	626	639	16		-3	7	3	163	170	7								
	5	9	2	98	109	6		7	-8	3	111	103	6		6	-3	3	339	296	13
3	2	3	792	748	27		-2	7	3	181	171	7								
	6	9	2	34	37	11		-8	-7	3	202	194	5		7	-3	3	365	366	11
4	2	3	497	484	12		-1	7	3	18	20	18								
	7	9	2	136	133	7		-7	-7	3	45	42	9		8	-3	3	171	175	8
5	2	3	126	115	4		0	7	3	567	574	15								
	8	9	2	46	49	8		-6	-7	3	329	328	13		9	-3	3	110	112	7
6	2	3	297	288	29		1	7	3	245	272	7								
	-5	10	2	0	19	1		-5	-7	3	155	164	7		10	-3	3	63	63	9
7	2	3	275	275	11		2	7	3	283	305	22								
	-4	10	2	163	160	7		-4	-7	3	18	7	17		-10	-2	3	36	50	11
8	2	3	123	132	6		3	7	3	253	295	10								
	-3	10	2	62	62	7		-3	-7	3	123	130	6		-7	-2	3	281	276	7
9	2	3	214	215	9		4	7	3	148	140	7								
	-2	10	2	157	161	7		-2	-7	3	334	343	9		-6	-2	3	140	132	4
10	2	3	173	180	8		5	7	3	45	48	7								

0	10	2	240	240	7	-1	-7	3	104	97	4	-5	-2	3	228	218	6
-8	3	3	3	8	3	6	7	3	338	349	13						
1	10	2	35	42	7	0	-7	3	310	307	8	-4	-2	3	57	47	4
-7	3	3	146	138	7	7	7	3	179	176	7						
2	10	2	238	255	9	1	-7	3	386	396	10	-3	-2	3	634	617	13
-6	3	3	418	418	16	-7	8	3	186	175	8						
3	10	2	115	112	6	2	-7	3	93	90	4	-2	-2	3	399	405	10
-5	3	3	165	159	7	-6	8	3	103	109	6						
4	10	2	253	264	10	3	-7	3	151	127	7	-1	-2	3	153	172	30
-4	3	3	191	196	8	-5	8	3	130	113	7						
5	10	2	110	97	7	4	-7	3	185	176	8	0	-2	3	308	306	16
-3	3	3	272	274	7	-4	8	3	111	113	6						
6	10	2	153	155	7	5	-7	3	111	107	6	1	-2	3	303	317	9
-2	3	3	353	362	9	-3	8	3	322	320	12						
7	10	2	30	37	15	6	-7	3	284	253	11	2	-2	3	29	17	5
-1	3	3	79	68	3	-2	8	3	38	30	7						
8	10	2	222	205	9	7	-7	3	252	241	10	3	-2	3	438	455	9
0	3	3	604	615	43	-1	8	3	321	296	8						
-4	11	2	51	53	8	8	-7	3	33	32	16	4	-2	3	384	414	10
1	3	3	287	276	8	0	8	3	76	78	6						
-3	11	2	97	96	6	-8	-6	3	78	65	4	5	-2	3	261	268	7
2	3	3	376	371	10	1	8	3	342	357	16						
-2	11	2	0	3	1	-7	-6	3	260	248	10	6	-2	3	282	276	7
3	3	3	514	513	15	2	8	3	23	18	12						
-1	11	2	174	181	5	-6	-6	3	89	87	6	7	-2	3	130	128	4
4	3	3	233	232	6	3	8	3	167	181	7						
0	11	2	44	51	10	-5	-6	3	209	202	8	8	-2	3	57	60	7
5	3	3	265	253	7	4	8	3	120	124	6						
1	11	2	245	232	10	-4	-6	3	53	47	7	9	-2	3	124	178	7
6	3	3	285	280	8	5	8	3	244	257	10						
2	11	2	102	100	6	-3	-6	3	322	318	12	10	-2	3	119	116	7
7	3	3	172	181	7	6	8	3	119	124	6						
3	11	2	138	128	7	-2	-6	3	190	177	5	-7	-1	3	63	58	4
8	3	3	244	245	10	7	8	3	182	194	8						
5	11	2	183	185	8	-1	-6	3	380	394	10	-6	-1	3	340	339	9
9	3	3	234	236	9	8	8	3	181	159	8						
6	11	2	59	57	8	0	-6	3	341	342	9	-5	-1	3	73	68	3
10	3	3	51	54	9	-6	9	3	131	126	7						
-2	12	2	191	178	8	1	-6	3	170	164	5	-4	-1	3	657	634	17
-8	4	3	52	49	7	-5	9	3	50	47	9						
-1	12	2	16	23	15	2	-6	3	219	229	38	-3	-1	3	486	476	10
-7	4	3	262	248	10	-4	9	3	265	264	10						
0	12	2	137	141	7	3	-6	3	296	302	8	-2	-1	3	513	506	11
-6	4	3	197	197	8	-3	9	3	81	86	6						
1	12	2	62	70	7	4	-6	3	168	180	7	-1	-1	3	294	268	8
-5	4	3	360	339	14	-2	9	3	229	231	6						
2	12	2	69	78	7	5	-6	3	155	159	7	0	-1	3	320	301	7
-4	4	3	123	106	6	-1	9	3	49	51	8						
3	12	2	16	6	16	6	-6	3	304	266	12	1	-1	3	533	504	14
-3	4	3	212	203	6	0	9	3	116	118	4						
4	12	2	155	153	7	7	-6	3	58	57	7	2	-1	3	1120	1063	24
-2	4	3	195	173	5	1	9	3	0	3	1						
0	13	2	43	41	12	8	-6	3	68	65	5	3	-1	3	375	404	10
-1	4	3	532	481	70	2	9	3	212	221	9						
1	13	2	118	114	7	9	-6	3	124	125	5	4	-1	3	18	9	17
0	4	3	8	31	8	3	9	3	69	65	6						

	-2-12	3	142	140	7	-7	-5	3	19	5	19	5	-1	3	23	11	9
1	4	3	658	666	24	4	9	3	319	346	12						
	0-12	3	47	50	10	-6	-5	3	272	261	11	6	-1	3	88	102	44
2	4	3	323	318	8	5	9	3	188	186	8						
	1-12	3	142	143	7	-5	-5	3	122	115	6	7	-1	3	111	107	6
3	4	3	240	243	6	6	9	3	103	101	6						
	2-12	3	91	95	7	-4	-5	3	452	490	17	8	-1	3	259	260	10
4	4	3	192	189	8	7	9	3	93	77	7						
	-4-11	3	70	72	7	-3	-5	3	351	339	9	9	-1	3	175	175	8
5	4	3	287	272	8	8	9	3	134	136	7						
	-2-11	3	168	169	7	-2	-5	3	301	310	8	10	-1	3	54	52	9
6	4	3	180	178	5	-5	10	3	186	194	8						
	-1-11	3	0	4	1	-1	-5	3	24	30	18	-7	0	3	419	406	16
7	4	3	244	252	10	-4	10	3	49	51	9						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 4

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	10	3	152	159	7	-2	-7	4	112	106	4	-3	-2	4	409	402	11
-6	3	4	141	150	6	-6	8	4	147	152	7	-2	-2	4	511	496	11
-2	10	3	108	117	6	-1	-7	4	349	360	9	-1	-2	4	512	526	13
-5	3	4	199	223	8	-5	8	4	74	76	6	0	-2	4	163	151	3
-1	10	3	183	191	5	0	-7	4	351	353	9	1	-2	4	322	335	8
-4	3	4	370	363	14	-4	8	4	219	206	9	2	-2	4	327	331	6
0	10	3	0	12	1	1	-7	4	22	11	15	3	-2	4	170	182	3
-3	3	4	394	374	10	-3	8	4	14	4	14	4	-2	4	451	475	12
1	10	3	229	234	6	2	-7	4	234	226	17	5	-2	4	490	492	13
-2	3	4	245	220	7	-2	8	4	220	202	6	6	-2	4	24	6	11
2	10	3	129	132	6	3	-7	4	209	217	8	7	-2	4	247	239	7
-1	3	4	12	18	12	-1	8	4	106	100	4	8	-2	4	143	141	7
3	10	3	217	227	9	4	-7	4	399	392	15	9	-2	4	75	71	7
0	3	4	180	167	5	0	8	4	259	272	7	-7	-1	4	298	299	8
4	10	3	180	191	8	5	-7	4	91	82	6	-6	-1	4	141	129	4
1	3	4	510	618	34	1	8	4	180	195	5	-5	-1	4	362	373	9
5	10	3	81	80	6	6	-7	4	139	137	7	-4	-1	4	290	270	8
2	3	4	422	424	11	2	8	4	9	11	8	-3	-1	4	224	211	5
6	10	3	40	43	11	7	-7	4	58	58	8	-2	-1	4	188	204	4
3	3	4	388	379	10	3	8	4	76	83	6	-1	-1	4	877	848	23
7	10	3	218	221	9	8	-7	4	179	169	8	0	-1	4	109	104	3
4	3	4	359	368	13	4	8	4	223	224	9	1	-1	4	421	442	11
8	10	3	98	102	6	-8	-6	4	141	133	5	2	-1	4	324	321	8
5	3	4	202	200	6	5	8	4	93	91	6	3	-1	4	499	488	9
-4	11	3	59	61	8	-7	-6	4	200	184	6	4	-1	4	321	351	8
6	3	4	181	192	5	6	8	4	282	282	11	5	-1	4	229	235	11
-3	11	3	0	7	1	-6	-6	4	223	216	9	4	-6	4	332	333	13
7	3	4	242	241	10	7	8	4	309	297	12	2	9	4	97	99	6
-2	11	3	131	137	7	-5	-6	4	78	77	6	5	-6	4	301	298	12
8	3	4	247	248	10	8	8	4	0	4	1	3	9	4	175	182	7
-1	11	3	50	55	6	-4	-6	4	63	53	6						
9	3	4	164	162	7	-6	9	4	29	29	18						
0	11	3	274	269	7	-3	-6	4	90	95	5						
10	3	4	192	199	8	-5	9	4	175	161	8						
1	11	3	119	123	6	-2	-6	4	471	431	12						
-8	4	4	190	173	8	-4	9	4	26	30	25						
2	11	3	113	123	6	-1	-6	4	488	475	13						
-7	4	4	33	27	12	-3	9	4	290	287	11						
3	11	3	88	88	6	0	-6	4	169	156	5						
-6	4	4	433	415	16	-2	9	4	145	143	5						
4	11	3	141	147	7	1	-6	4	180	172	5						
-5	4	4	225	233	9	-1	9	4	115	112	4						
5	11	3	69	70	7	2	-6	4	92	94	5						
-4	4	4	202	180	8	0	9	4	67	64	4						
6	11	3	177	194	8	3	-6	4	81	94	6						
-3	4	4	65	67	4	1	9	4	229	235	11						
-2	12	3	32	30	16	4	-6	4	332	333	13						
-2	4	4	499	491	13	2	9	4	97	99	6						
-1	12	3	132	147	7	5	-6	4	301	298	12						
-1	4	4	205	184	6	3	9	4	175	182	7						

	0	12	3	86	79	7		6	-6	4	152	145	7		5	-1	4	46	42	5
0	4	4	740	750	19		4	9	4	210	212	9								
	1	12	3	101	108	6		7	-6	4	254	245	10		6	-1	4	79	79	4
1	4	4	418	601	185		5	9	4	47	57	8								
	2	12	3	49	54	10		8	-6	4	18	17	17		7	-1	4	192	194	8
2	4	4	101	108	4		6	9	4	68	65	7								
	3	12	3	123	123	7		9	-6	4	56	55	7		8	-1	4	259	264	10
3	4	4	75	84	3		7	9	4	135	145	6								
	4	12	3	57	50	9		-7	-5	4	281	269	7		9	-1	4	130	124	7
4	4	4	147	153	6		8	9	4	135	121	7								
	0	13	3	27	35	27		-6	-5	4	228	217	5		10	-1	4	146	144	7
5	4	4	200	177	8		-5	10	4	33	35	16								
	-1	-12	4	28	41	27		-5	-5	4	305	296	12		-7	0	4	43	44	7
6	4	4	442	438	11		-4	10	4	183	181	8								
	0	-12	4	150	153	7		-4	-5	4	265	253	10		-6	0	4	392	412	15
7	4	4	315	330	12		-3	10	4	133	132	7								
	1	-12	4	141	143	7		-3	-5	4	472	450	12		-5	0	4	311	318	8
8	4	4	100	102	6		-2	10	4	100	99	6								
	-4	-11	4	75	83	7		-2	-5	4	450	468	29		-4	0	4	399	406	10
9	4	4	172	169	8		-1	10	4	44	45	9								
	-3	-11	4	66	76	7		-1	-5	4	141	143	4		-3	0	4	346	329	7
10	4	4	40	42	13		0	10	4	192	193	6								
	-1	-11	4	174	173	8		0	-5	4	105	82	7		-2	0	4	491	497	10
-9	5	4	260	229	10		1	10	4	73	67	4								
	0	-11	4	106	111	4		1	-5	4	283	308	8		-1	0	4	143	133	4
-8	5	4	168	163	7		2	10	4	250	267	10								
	1	-11	4	112	116	6		2	-5	4	315	317	8		0	0	4	338	335	7
-7	5	4	46	46	8		3	10	4	186	200	8								
	2	-11	4	148	160	7		3	-5	4	409	419	9		1	0	4	435	428	11
-6	5	4	99	96	6		4	10	4	169	177	7								
	3	-11	4	27	33	26		4	-5	4	240	233	6		2	0	4	245	224	5
-5	5	4	253	263	10		5	10	4	152	148	7								
	-6	-10	4	130	128	7		5	-5	4	127	123	4		3	0	4	428	438	11
-4	5	4	40	35	9		6	10	4	121	119	6								
	-5	-10	4	85	82	7		6	-5	4	111	114	4		4	0	4	119	112	6
-3	5	4	538	461	27		7	10	4	60	63	7								
	-4	-10	4	136	150	7		7	-5	4	73	64	4		5	0	4	205	204	6
-2	5	4	313	250	12		8	10	4	120	128	6								
	-3	-10	4	76	70	7		8	-5	4	121	121	4		6	0	4	404	406	10
-1	5	4	319	312	8		-3	11	4	39	48	11								
	-2	-10	4	250	258	10		9	-5	4	186	180	8		7	0	4	368	398	14
0	5	4	244	253	7		-2	11	4	57	59	7								
	-1	-10	4	206	208	9		-7	-4	4	40	39	5		8	0	4	90	98	6
1	5	4	459	475	13		-1	11	4	150	150	5								
	0	-10	4	134	139	5		-6	-4	4	424	409	11		9	0	4	226	238	9
2	5	4	349	351	10		0	11	4	91	89	4								
	1	-10	4	176	175	10		-5	-4	4	305	297	6		10	0	4	27	19	27
3	5	4	381	422	11		1	11	4	185	190	8								
	2	-10	4	13	16	12		-4	-4	4	327	329	12		-7	1	4	231	232	9
4	5	4	134	137	6		2	11	4	125	128	6								
	3	-10	4	24	28	23		-3	-4	4	492	475	13		-6	1	4	276	264	11
5	5	4	400	380	15		3	11	4	102	105	6								
	4	-10	4	186	190	8		-2	-4	4	312	295	9		-5	1	4	169	179	7
6	5	4	321	333	12		4	11	4	105	108	6								
	-7	-9	4	116	113	7		-1	-4	4	42	28	5		-4	1	4	43	29	7
7	5	4	128	147	6		5	11	4	125	133	7								

-6	-9	4	95	93	6	0	-4	4	825	766	21	-3	1	4	505	548	11
8	5	4	105	106	6	6	11	4	91	89	7						
-5	-9	4	261	253	10	1	-4	4	546	535	11	-2	1	4	607	578	13
9	5	4	211	213	9	-2	12	4	162	157	8						
-4	-9	4	158	176	7	2	-4	4	222	226	5	-1	1	4	527	525	14
10	5	4	113	123	7	-1	12	4	133	131	7						
-3	-9	4	140	131	7	3	-4	4	430	443	9	0	1	4	549	508	13
-8	6	4	100	91	7	0	12	4	101	104	7						
-2	-9	4	193	199	8	4	-4	4	162	158	5	1	1	4	455	425	21
-7	6	4	52	56	8	1	12	4	137	136	7						
-1	-9	4	202	212	6	5	-4	4	110	111	4	2	1	4	474	476	12
-6	6	4	118	119	6	2	12	4	13	12	13						
0	-9	4	152	148	5	6	-4	4	215	228	6	3	1	4	577	545	15
-5	6	4	37	45	9	3	12	4	24	8	24						
1	-9	4	169	161	5	7	-4	4	151	142	5	4	1	4	723	757	19
-4	6	4	432	450	16	4	12	4	157	162	7						
2	-9	4	58	63	7	8	-4	4	213	200	6	5	1	4	112	92	4
-3	6	4	379	383	10	-1	-12	5	35	37	17						
3	-9	4	234	237	9	9	-4	4	254	238	10	6	1	4	274	277	7
-2	6	4	139	147	4	0	-12	5	103	106	7						
4	-9	4	223	232	9	-10	-3	4	23	23	23	7	1	4	328	340	13
-1	6	4	219	213	6	-3	-11	5	95	95	7						
5	-9	4	42	47	11	-9	-3	4	202	245	8	8	1	4	214	228	9
0	6	4	258	284	7	-2	-11	5	93	95	7						
6	-9	4	120	117	7	-7	-3	4	296	277	8	9	1	4	63	62	7
1	6	4	113	123	4	0	-11	5	123	125	5						
-8	-8	4	57	57	5	-6	-3	4	255	242	7	10	1	4	92	97	7
2	6	4	580	581	25	1	-11	5	212	218	9						
-7	-8	4	12	16	12	-5	-3	4	59	55	4	-8	2	4	119	108	6
3	6	4	346	353	13	2	-11	5	6	19	5						
-6	-8	4	292	280	11	-4	-3	4	93	86	4	-7	2	4	58	63	6
4	6	4	285	305	11	3	-11	5	85	97	7						
-5	-8	4	196	190	8	-3	-3	4	401	377	7	-6	2	4	97	88	6
5	6	4	284	305	11	-5	-10	5	68	69	8						
-4	-8	4	161	177	7	-2	-3	4	471	454	12	-5	2	4	116	106	6
6	6	4	183	194	7	-4	-10	5	29	31	18						
-3	-8	4	249	245	10	-1	-3	4	393	438	17	-4	2	4	360	379	14
7	6	4	91	89	5	-3	-10	5	163	159	7						
-2	-8	4	155	154	7	0	-3	4	334	308	9	-3	2	4	167	183	5
-7	7	4	183	171	8	-2	-10	5	183	190	8						
-1	-8	4	198	203	6	1	-3	4	296	284	12	-2	2	4	362	366	14
-6	7	4	133	137	7	-1	-10	5	164	162	7						
0	-8	4	161	152	5	2	-3	4	496	492	10	-1	2	4	875	872	23
-5	7	4	147	153	7	0	-10	5	196	190	6						
1	-8	4	181	180	5	3	-3	4	314	325	5	0	2	4	121	144	4
-4	7	4	82	82	6	1	-10	5	53	49	6						
2	-8	4	219	209	13	4	-3	4	261	255	7	1	2	4	173	166	5
-3	7	4	146	151	7	2	-10	5	94	98	6						
3	-8	4	348	358	13	5	-3	4	335	336	10	2	2	4	575	580	29
-2	7	4	89	93	6	3	-10	5	93	92	6						
4	-8	4	30	25	14	6	-3	4	306	323	8	3	2	4	613	612	16
-1	7	4	322	339	11	4	-10	5	152	150	7						
5	-8	4	22	18	21	7	-3	4	90	99	4	4	2	4	567	575	15
0	7	4	105	106	4	-6	-9	5	110	109	7						
6	-8	4	97	97	6	8	-3	4	184	172	8	5	2	4	461	475	12
1	7	4	425	439	11	-5	-9	5	127	116	7						

7	-8	4	171	165	8	9	-3	4	134	132	7	6	2	4	119	101	11	
2	7	4	278	280	7	-4	-9	5	235	244	9							
	-8	-7	4	14	5	13	10	-3	4	153	152	7	7	2	4	357	369	14
3	7	4	195	196	8	-3	-9	5	228	227	9							
	-7	-7	4	287	278	6	-10	-2	4	124	163	6	8	2	4	209	201	9
4	7	4	187	175	8	-2	-9	5	155	151	7							
	-6	-7	4	257	246	10	-7	-2	4	232	218	6	9	2	4	157	163	7
5	7	4	183	203	8	-1	-9	5	297	301	8							
	-5	-7	4	51	48	8	-6	-2	4	110	100	4	10	2	4	176	174	8
6	7	4	103	92	6	0	-9	5	56	55	5							
	-4	-7	4	117	112	6	-5	-2	4	16	12	16	-8	3	4	28	8	27
7	7	4	238	235	9	1	-9	5	63	57	8							
	-3	-7	4	177	158	8	-4	-2	4	572	543	15	-7	3	4	264	255	10
-7	8	4	75	64	7	2	-9	5	192	182	8							

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 5

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	-9	5	216	225	9	-7	-3	5	257	245	7	9	1	5	130	131	7
4	6	5	215	222	9	2-10	6		0	14	1	10	1	5	146	140	7
4	-9	5	46	53	9	-6	-3	5	273	261	7	-8	2	5	168	162	7
5	6	5	186	178	8	3-10	6		60	61	8	-7	2	5	100	88	6
5	-9	5	175	170	8	-5	-3	5	249	236	7	-6	2	5	142	127	6
6	6	5	189	190	8	4-10	6		94	91	6	-5	2	5	192	193	8
-8	-8	5	94	92	4	-4	-3	5	210	197	6	-4	2	5	214	226	8
7	6	5	164	151	7	-6	-9	6	164	159	5	-3	2	5	476	459	22
-7	-8	5	141	136	4	-3	-3	5	320	300	7	-2	2	5	677	605	18
-7	7	5	38	42	11	-5	-9	6	133	129	7	-1	2	5	53	23	4
-6	-8	5	187	189	8	-2	-3	5	266	260	5	0	2	5	603	618	26
-6	7	5	136	139	7	-4	-9	6	144	149	7	1	2	5	261	338	37
-5	-8	5	187	180	8	-1	-3	5	676	697	14	2	2	5	381	374	10
-5	7	5	111	120	6	-3	-9	6	155	145	7	3	2	5	571	553	15
-4	-8	5	211	208	9	0	-3	5	513	498	9	4	2	5	508	506	19
-4	7	5	219	243	9	-2	-9	6	276	271	11	5	2	5	65	58	4
-3	-8	5	79	72	6	1	-3	5	449	437	8	6	2	5	241	250	8
-3	7	5	230	259	9	-1	-9	6	97	94	6	7	2	5	362	384	14
-2	-8	5	226	219	9	2	-3	5	83	78	2	8	2	5	257	266	10
-2	7	5	21	16	14	0	-9	6	215	218	6	9	2	5	147	138	7
-1	-8	5	108	114	4	3	-3	5	298	297	5	10	2	5	181	181	8
-1	7	5	6	8	5	1	-9	6	88	79	4	-8	3	5	47	45	8
0	-8	5	219	217	6	4	-3	5	362	366	9	-7	3	5	124	117	6
0	7	5	410	433	11	2	-9	6	153	150	7	-6	3	5	330	345	13
1	-8	5	262	250	7	5	-3	5	227	246	6	-5	3	5	278	270	11
1	7	5	298	318	8	3	-9	6	105	108	6	2	-8	6			
2	-8	5	315	302	8	6	-3	5	220	236	9						
2	7	5	130	133	7	4	-9	6	297	260	12						
3	-8	5	103	102	6	7	-3	5	379	377	10						
3	7	5	189	201	8	5	-9	6	26	18	25						
4	-8	5	258	275	10	8	-3	5	42	40	6						
4	7	5	81	79	6	-7	-8	6	58	61	6						
5	-8	5	19	2	18	9	-3	5	190	186	8						
5	7	5	96	100	6	-6	-8	6	190	185	4						
6	-8	5	165	161	7	-7	-2	5	119	111	4						
6	7	5	245	215	10	-5	-8	6	314	308	12						
-8	-7	5	167	163	5	-6	-2	5	101	94	4						
7	7	5	216	194	9	-4	-8	6	124	128	6						
-7	-7	5	178	168	5	-5	-2	5	235	228	6						
-6	8	5	66	64	7	-3	-8	6	287	292	11						
-6	-7	5	178	162	4	-4	-2	5	156	145	5						
-5	8	5	91	94	6	-2	-8	6	9	21	8						
-5	-7	5	231	242	9	-3	-2	5	539	525	11						
-4	8	5	27	17	16	-1	-8	6	270	257	7						
-4	-7	5	6	18	5	-2	-2	5	594	594	12						
-3	8	5	207	223	8	0	-8	6	93	92	4						
-3	-7	5	201	205	8	-1	-2	5	17	28	16						
-2	8	5	41	42	6	1	-8	6	205	198	6						
-2	-7	5	168	167	18	0	-2	5	206	214	4						
-1	8	5	193	207	6	2	-8	6	227	222	9						

-1	-7	5	255	252	7	1	-2	5	449	439	12	-4	3	5	227	244	9	
0	8	5	269	261	7	3	-8	6	427	379	16							
	0	-7	5	162	150	5	2	-2	5	449	454	8	-3	3	5	385	369	10
1	8	5	124	125	4	4	-8	6	106	94	7							
	1	-7	5	350	319	14	3	-2	5	278	276	5	-2	3	5	391	344	20
2	8	5	110	107	5	5	-8	6	118	113	7							
	2	-7	5	12	9	11	4	-2	5	541	552	14	-1	3	5	152	143	9
3	8	5	74	77	6	6	-8	6	146	155	7							
	3	-7	5	325	353	12	5	-2	5	171	170	5	0	3	5	210	225	6
4	8	5	186	176	8	-8	-7	6	103	99	5							
	4	-7	5	129	127	6	6	-2	5	229	240	6	1	3	5	293	288	11
5	8	5	113	127	6	-7	-7	6	181	173	5							
	5	-7	5	105	101	6	7	-2	5	16	11	16	2	3	5	456	464	12
6	8	5	245	224	10	-6	-7	6	332	321	9							
	6	-7	5	198	195	8	8	-2	5	161	169	7	3	3	5	741	750	19
7	8	5	46	53	8	-5	-7	6	25	12	13							
	7	-7	5	294	277	11	9	-2	5	144	140	7	4	3	5	231	235	9
8	8	5	139	134	7	-4	-7	6	144	142	7							
	8	-7	5	0	7	1	10	-2	5	212	208	9	5	3	5	173	169	7
-5	9	5	32	38	14	-3	-7	6	143	144	7							
	-8	-6	5	134	130	4	-7	-1	5	104	100	4	6	3	5	89	77	4
-4	9	5	160	160	7	-2	-7	6	291	290	11							
	-7	-6	5	205	199	6	-6	-1	5	200	198	6	7	3	5	249	249	10
-3	9	5	85	82	6	-1	-7	6	115	114	4							
	-6	-6	5	310	294	7	-5	-1	5	105	102	4	8	3	5	178	177	8
-2	9	5	149	142	5	0	-7	6	382	394	10							
	-5	-6	5	79	77	6	-4	-1	5	566	578	15	9	3	5	244	248	10
-1	9	5	86	76	4	1	-7	6	146	133	5							
	-4	-6	5	32	29	13	-3	-1	5	571	560	12	10	3	5	81	82	7
0	9	5	115	120	4	2	-7	6	436	426	11							
	-3	-6	5	306	310	12	-2	-1	5	176	173	4	-8	4	5	98	89	6
1	9	5	167	173	9	3	-7	6	24	28	24							
	-2	-6	5	447	460	12	-1	-1	5	48	59	6	-7	4	5	222	215	9
2	9	5	130	141	6	4	-7	6	272	237	11							
	-1	-6	5	251	242	7	0	-1	5	406	396	8	-6	4	5	274	260	11
3	9	5	17	29	17	5	-7	6	88	71	7							
	0	-6	5	463	458	12	1	-1	5	215	240	30	-5	4	5	75	78	6
4	9	5	249	246	10	6	-7	6	164	167	7							
	1	-6	5	15	6	14	2	-1	5	423	414	9	-4	4	5	39	42	9
5	9	5	318	293	12	7	-7	6	71	72	7							
	2	-6	5	43	37	5	3	-1	5	394	406	7	-3	4	5	294	289	21
6	9	5	59	62	7	-8	-6	6	150	140	5							
	3	-6	5	194	200	8	4	-1	5	36	41	5	-2	4	5	69	67	7
7	9	5	206	210	8	-7	-6	6	267	253	7							
	4	-6	5	389	410	15	5	-1	5	167	173	5	-1	4	5	475	496	12
8	9	5	35	30	12	-6	-6	6	15	19	15							
	5	-6	5	77	77	6	6	-1	5	71	59	4	0	4	5	308	289	8
-4	10	5	159	145	7	-5	-6	6	43	40	5							
	6	-6	5	160	157	7	7	-1	5	265	273	7	1	4	5	373	465	39
-3	10	5	111	108	7	-4	-6	6	253	239	5							
	7	-6	5	51	57	8	8	-1	5	0	155	-1	2	4	5	393	347	16
-2	10	5	163	161	7	-3	-6	6	318	317	12							
	8	-6	5	132	109	7	9	-1	5	179	182	8	3	4	5	81	77	4
-1	10	5	91	86	4	-2	-6	6	250	262	10							
	-8	-5	5	12	5	11	10	-1	5	37	32	16	4	4	5	182	176	7
0	10	5	90	85	6	-1	-6	6	477	478	12							

-7	-5	5	70	59	4	-7	0	5	298	310	11	5	4	5	369	315	14	
1	10	5	180	188	6	0	-6	6	99	92	4							
	-6	-5	5	340	331	9	-6	0	5	191	180	5	6	4	5	294	288	11
2	10	5	167	177	7	1	-6	6	139	138	4							
	-5	-5	5	174	163	4	-5	0	5	234	245	6	7	4	5	166	169	5
3	10	5	152	151	7	2	-6	6	125	115	4							
	-4	-5	5	374	389	14	-4	0	5	214	221	7	8	4	5	248	242	10
4	10	5	182	184	8	3	-6	6	306	329	12							
	-3	-5	5	369	364	14	-3	0	5	332	331	7	9	4	5	75	83	7
5	10	5	76	82	6	4	-6	6	145	155	7							
	-2	-5	5	259	259	7	-2	0	5	99	101	3	10	4	5	128	129	7
6	10	5	31	28	15	5	-6	6	350	293	13							
	-1	-5	5	406	402	11	-1	0	5	709	702	18	-9	5	5	107	99	6
7	10	5	192	192	8	6	-6	6	99	100	6							
	0	-5	5	286	276	8	0	0	5	478	469	10	-8	5	5	169	168	7
-3	11	5	74	74	7	7	-6	6	271	248	11							
	1	-5	5	240	217	6	1	0	5	382	432	34	-7	5	5	108	110	6
-2	11	5	112	107	6	8	-6	6	78	84	6							
	2	-5	5	372	381	14	2	0	5	479	473	10	-6	5	5	165	151	7
-1	11	5	113	108	4	-8	-5	6	166	155	5							
	3	-5	5	296	299	8	3	0	5	176	158	5	-5	5	5	202	195	8
0	11	5	193	192	6	-7	-5	6	172	166	5							
	4	-5	5	217	210	6	4	0	5	395	406	10	-4	5	5	321	330	12
1	11	5	177	177	8	-6	-5	6	338	323	9							
	5	-5	5	336	335	9	5	0	5	218	214	9	-3	5	5	126	123	4
2	11	5	115	122	6	-5	-5	6	202	190	6							
	6	-5	5	14	19	13	6	0	5	149	151	4	-2	5	5	308	323	12
3	11	5	177	184	8	-4	-5	6	171	153	5							
	7	-5	5	73	75	4	7	0	5	75	76	6	-1	5	5	453	478	12
4	11	5	41	45	10	-3	-5	6	309	317	7							
	8	-5	5	83	89	4	8	0	5	349	368	13	0	5	5	162	158	5
5	11	5	105	102	7	-2	-5	6	439	461	11							
	9	-5	5	150	143	7	9	0	5	54	48	9	1	5	5	311	290	8
6	11	5	152	157	7	-1	-5	6	31	25	8							
	-8	-4	5	124	113	4	10	0	5	106	104	7	2	5	5	259	276	7
-2	12	5	51	60	9	0	-5	6	192	188	5							
	-7	-4	5	322	303	8	-8	1	5	225	236	9	3	5	5	73	64	4
-1	12	5	126	122	7	1	-5	6	425	429	11							
	-6	-4	5	357	343	9	-7	1	5	194	190	8	4	5	5	446	452	17
0	12	5	170	166	8	2	-5	6	135	162	21							
	-5	-4	5	135	134	4	-6	1	5	131	130	6	5	5	5	400	395	15
1	12	5	59	66	8	3	-5	6	270	242	10							
	-4	-4	5	356	351	7	-5	1	5	232	239	9	6	5	5	257	259	10
2	12	5	86	92	6	4	-5	6	408	393	15							
	-3	-4	5	243	231	7	-4	1	5	217	220	9	7	5	5	277	288	11
3	12	5	93	95	6	5	-5	6	21	17	20							
	-2	-4	5	268	262	7	-3	1	5	306	288	6	-8	6	5	102	100	6
-3	-11	6	47	49	10	6	-5	6	123	118	6							
	-1	-4	5	464	474	12	-2	1	5	343	357	7	-7	6	5	63	64	7
-2	-11	6	68	73	8	7	-5	6	61	59	5							
	0	-4	5	72	73	4	-1	1	5	208	218	5	-6	6	5	14	16	14
-1	-11	6	100	97	7	8	-5	6	159	159	5							
	1	-4	5	347	359	9	0	1	5	397	406	8	-5	6	5	240	244	9
0	-11	6	198	189	8	9	-5	6	93	95	7							
	2	-4	5	610	620	16	1	1	5	619	660	34	-4	6	5	288	307	11
1	-11	6	30	32	19	-8	-4	6	137	137	4							

3	-4	5	250	250	7	2	1	5	322	317	8	-3	6	5	284	291	11
2-11	6	173	172	8	-7	-4	6	118	110	4							
4	-4	5	255	253	7	3	1	5	391	384	10	-2	6	5	242	246	7
-4-10	6	78	85	7	-6	-4	6	401	381	10							
5	-4	5	109	125	4	4	1	5	381	383	10	-1	6	5	126	127	4
-3-10	6	111	109	7	-5	-4	6	427	416	11							
6	-4	5	130	121	4	5	1	5	366	399	10	0	6	5	104	105	4
-2-10	6	143	138	7	-4	-4	6	214	216	6							
7	-4	5	201	196	6	6	1	5	452	461	12	1	6	5	472	486	12
-1-10	6	249	260	10	-3	-4	6	435	432	9							
8	-4	5	267	259	7	7	1	5	475	501	18	2	6	5	486	484	13
0-10	6	13	21	12	-2	-4	6	136	130	3							
9	-4	5	69	67	8	8	1	5	42	43	10	3	6	5	297	313	11
1-10	6	166	163	5	-1	-4	6	159	154	3							

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 6

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	-4	6	506	497	9	-5	1	6	75	71	6	-7	6	6	47	52	9
-4	-10	7	115	119	7	0	-4	7	341	337	7	-6	6	6	168	167	7
1	-4	6	608	604	11	-4	1	6	139	154	4	-5	6	6	205	200	8
-3	-10	7	127	129	7	1	-4	7	267	266	6	-4	6	6	203	189	8
2	-4	6	30	17	6	-3	1	6	315	307	7	-3	6	6	350	346	13
-2	-10	7	218	226	9	2	-4	7	491	487	14	-2	6	6	150	141	5
3	-4	6	293	286	5	-2	1	6	574	573	12	-1	6	6	126	127	4
0	-10	7	204	206	6	3	-4	7	118	114	3	0	6	6	188	178	5
4	-4	6	139	143	4	-1	1	6	413	422	9	1	6	6	302	317	8
1	-10	7	6	13	5	4	-4	7	262	251	7	2	6	6	353	371	9
5	-4	6	207	202	8	0	1	6	570	555	12	3	6	6	250	263	10
2	-10	7	153	163	7	5	-4	7	13	5	13	4	6	6	230	227	9
6	-4	6	179	179	5	1	1	6	11	8	10	5	6	6	92	93	6
3	-10	7	14	10	14	6	-4	7	159	157	5	-7	7	6	105	104	6
7	-4	6	141	141	4	2	1	6	551	573	12	-6	7	6	76	77	6
-5	-9	7	129	129	4	7	-4	7	124	119	4	-5	7	6	147	138	7
8	-4	6	62	59	5	3	1	6	105	103	4	-4	7	6	230	234	9
-4	-9	7	216	213	9	8	-4	7	248	252	7	-3	7	6	73	78	6
9	-4	6	262	264	10	4	1	6	370	368	14	-2	7	6	104	108	4
-3	-9	7	273	286	11	9	-4	7	27	24	27	-1	7	6	243	273	7
-8	-3	6	245	237	7	5	1	6	324	332	8	0	7	6	225	219	6
-2	-9	7	24	16	23	-8	-3	7	154	154	5	1	7	6	131	135	4
-7	-3	6	136	133	4	6	1	6	299	299	8	2	7	6	367	381	10
-1	-9	7	274	271	11	-7	-3	7	273	272	7	0	-8	7	268	284	7
-6	-3	6	192	175	5	7	1	6	126	126	4	6	-3	7	138	140	4
0	-9	7	17	25	17	-6	-3	7	178	172	5						
-5	-3	6	96	94	4	8	1	6	221	231	9						
1	-9	7	130	132	4	-5	-3	7	337	324	9						
-4	-3	6	219	208	6	9	1	6	80	79	7						
2	-9	7	144	147	7	-4	-3	7	60	65	4						
-3	-3	6	253	262	5	10	1	6	145	152	7						
3	-9	7	193	206	8	-3	-3	7	296	285	6						
-2	-3	6	363	361	8	-8	2	6	38	35	10						
4	-9	7	18	32	17	-2	-3	7	155	158	4						
-1	-3	6	548	536	11	-7	2	6	67	66	6						
5	-9	7	239	230	10	-1	-3	7	370	363	8						
0	-3	6	567	563	12	-6	2	6	64	60	6						
-6	-8	7	192	187	6	0	-3	7	325	319	7						
1	-3	6	187	170	4	-5	2	6	134	129	6						
-5	-8	7	105	107	3	1	-3	7	437	446	9						
2	-3	6	461	463	10	-4	2	6	373	377	14						
-4	-8	7	294	287	6	2	-3	7	226	211	6						
3	-3	6	77	84	2	-3	2	6	481	513	12						
-3	-8	7	36	35	12	3	-3	7	165	168	4						
4	-3	6	345	331	16	-2	2	6	118	118	4						
-2	-8	7	251	255	10	4	-3	7	301	309	8						
5	-3	6	207	215	11	-1	2	6	514	507	13						
-1	-8	7	65	69	5	5	-3	7	407	419	11						
6	-3	6	335	328	24	0	2	6	143	158	7						
0	-8	7	268	284	7	6	-3	7	138	140	4						

7	-3	6	89	82	4	1	2	6	397	420	15	3	7	6	55	55	7		
1	-8	7	162	149	5	7	-3	7	297	291	8								
	8	-3	6	246	248	7		2	6	434	419	11	4	7	6	142	138	7	
2	-8	7	343	347	13	8	-3	7	89	90	4								
	9	-3	6	12	7	12		3	2	6	549	543	14	5	7	6	70	69	6
3	-8	7		3	21	3	9	-3	7	158	154	7							
	-8	-2	6	68	74	4		4	2	6	299	291	11	6	7	6	200	200	8
4	-8	7	224	228	9	-8	-2	7	247	242	7								
	-7	-2	6	217	213	6		5	2	6	467	460	17	7	7	6	122	120	6
5	-8	7	21	14	21	-7	-2	7	13	11	12								
	-6	-2	6	160	164	5		6	2	6	122	107	4	-6	8	6	105	100	6
6	-8	7	208	207	9	-6	-2	7	92	93	4								
	-5	-2	6	118	108	4		7	2	6	398	393	15	-5	8	6	102	109	6
-7	-7	7	178	176	5	-5	-2	7	233	233	6								
	-4	-2	6	318	303	8		8	2	6	5	12	5	-3	8	6	85	93	6
-6	-7	7	86	85	4	-4	-2	7	287	275	8								
	-3	-2	6	373	363	8		9	2	6	69	66	7	-2	8	6	73	61	8
-5	-7	7	344	328	9	-3	-2	7	89	88	3								
	-2	-2	6	53	52	4		10	2	6	179	189	8	-1	8	6	96	94	4
-4	-7	7	6	4	6	-2	-2	7	390	395	8								
	-1	-2	6	433	428	9		-8	3	6	152	143	7	0	8	6	200	204	6
-3	-7	7	186	190	4	-1	-2	7	87	86	6								
	0	-2	6	225	207	5		-7	3	6	161	165	7	1	8	6	266	281	7
-2	-7	7	69	64	6	0	-2	7	486	456	10								
	1	-2	6	273	278	6		-6	3	6	146	142	7	2	8	6	19	25	18
-1	-7	7	252	243	7	1	-2	7	51	35	4								
	2	-2	6	254	253	5		-5	3	6	68	69	6	3	8	6	89	87	6
0	-7	7	181	182	5	2	-2	7	343	338	7								
	3	-2	6	327	326	7		-4	3	6	301	325	11	4	8	6	137	140	6
1	-7	7	504	485	13	3	-2	7	29	33	6								
	4	-2	6	251	252	7		-3	3	6	267	252	7	5	8	6	266	262	10
2	-7	7	20	21	19	4	-2	7	318	335	10								
	5	-2	6	475	496	12		-2	3	6	216	204	6	6	8	6	111	102	6
3	-7	7	262	276	10	5	-2	7	22	12	14								
	6	-2	6	10	4	9		-1	3	6	44	32	7	7	8	6	293	296	11
4	-7	7	24	16	23	6	-2	7	304	326	8								
	7	-2	6	198	204	6		0	3	6	110	129	4	8	8	6	17	25	17
5	-7	7	125	130	6	7	-2	7	11	17	11								
	8	-2	6	0	7	1		1	3	6	428	564	72	-5	9	6	104	104	6
6	-7	7	142	151	7	8	-2	7	177	183	6								
	9	-2	6	189	189	8		2	3	6	641	594	17	-4	9	6	76	70	7
7	-7	7	342	343	13	9	-2	7	25	20	25								
	10	-2	6	54	54	10		3	3	6	206	196	7	-3	9	6	202	209	8
-8	-6	7	203	193	7	-8	-1	7	37	34	10								
	-8	-1	6	227	221	9		4	3	6	348	349	13	-2	9	6	179	185	8
-7	-6	7	69	67	5	-7	-1	7	82	79	4								
	-7	-1	6	115	111	4		5	3	6	27	17	13	-1	9	6	61	59	5
-6	-6	7	260	246	7	-6	-1	7	240	241	6								
	-6	-1	6	31	20	7		6	3	6	165	168	7	0	9	6	249	230	7
-5	-6	7	58	60	5	-5	-1	7	192	188	5								
	-5	-1	6	285	286	8		7	3	6	212	210	6	1	9	6	44	39	6
-4	-6	7	129	126	4	-4	-1	7	251	252	7								
	-4	-1	6	341	343	9		8	3	6	319	321	12	2	9	6	110	110	6
-3	-6	7	245	240	5	-3	-1	7	465	466	10								
	-3	-1	6	266	260	6		9	3	6	64	63	8	3	9	6	178	155	8
-2	-6	7	417	415	10	-2	-1	7	176	158	4								

-2	-1	6	198	211	4	10	3	6	229	231	9	4	9	6	244	225	10
-1	-6	7	44	40	4	-1	-1	7	68	69	3						
-1	-1	6	300	297	8	-8	4	6	205	190	8	5	9	6	41	52	9
0	-6	7	307	313	8	0	-1	7	180	176	4						
0	-1	6	113	114	3	-7	4	6	98	95	6	6	9	6	194	177	8
1	-6	7	64	62	3	1	-1	7	288	277	6						
1	-1	6	205	213	6	-6	4	6	301	312	12	7	9	6	68	75	6
2	-6	7	159	155	4	2	-1	7	71	82	3						
2	-1	6	432	418	9	-5	4	6	313	323	12	8	9	6	116	121	6
3	-6	7	41	48	9	3	-1	7	457	486	10						
3	-1	6	101	108	3	-4	4	6	10	23	10	-4	10	6	147	149	7
4	-6	7	298	305	11	4	-1	7	28	25	14						
4	-1	6	421	418	11	-3	4	6	198	194	8	-3	10	6	189	189	8
5	-6	7	99	103	6	5	-1	7	320	323	8						
5	-1	6	19	22	18	-2	4	6	399	408	15	-1	10	6	105	99	4
6	-6	7	199	195	8	6	-1	7	54	57	5						
6	-1	6	168	171	5	-1	4	6	181	171	8	0	10	6	157	149	5
7	-6	7	14	17	13	7	-1	7	212	222	6						
7	-1	6	81	82	4	0	4	6	247	243	7	1	10	6	209	205	9
8	-6	7	140	137	7	8	-1	7	65	56	7						
8	-1	6	271	267	11	1	4	6	472	509	12	2	10	6	180	185	8
-8	-5	7	52	49	6	9	-1	7	223	231	9						
9	-1	6	0	52	1	2	4	6	115	111	4	3	10	6	190	202	8
-7	-5	7	127	124	4	10	-1	7	0	41	1						
10	-1	6	220	222	9	3	4	6	148	153	4	4	10	6	134	125	7
-6	-5	7	218	208	6	-8	0	7	261	242	10						
-8	0	6	216	219	9	4	4	6	248	241	10	5	10	6	212	209	9
-5	-5	7	165	157	5	-7	0	7	120	127	6						
-7	0	6	139	142	6	5	4	6	199	197	8	6	10	6	34	28	14
-4	-5	7	377	366	10	-6	0	7	141	127	4						
-6	0	6	298	291	8	6	4	6	232	198	9	7	10	6	117	119	6
-3	-5	7	513	520	13	-5	0	7	180	177	5						
-5	0	6	299	301	8	7	4	6	296	293	11	-3	11	6	39	37	11
-2	-5	7	8	8	7	-4	0	7	378	383	10						
-4	0	6	135	138	4	9	4	6	197	201	8	-2	11	6	64	66	7
-1	-5	7	259	256	5	-3	0	7	18	7	13						
-3	0	6	390	375	8	-8	5	6	170	158	8	-1	11	6	165	160	5
0	-5	7	145	144	3	-2	0	7	244	240	5						
-2	0	6	139	131	3	-7	5	6	106	91	7	0	11	6	135	133	5
1	-5	7	155	148	3	-1	0	7	416	404	9						
-1	0	6	27	9	6	-6	5	6	86	95	6	1	11	6	154	167	7
2	-5	7	322	322	8	0	0	7	521	525	11						
0	0	6	298	303	6	-5	5	6	161	152	7	2	11	6	210	216	9
3	-5	7	358	342	14	1	0	7	101	74	4						
1	0	6	402	437	10	-4	5	6	135	127	6	3	11	6	53	54	8
4	-5	7	113	115	6	2	0	7	417	416	9						
2	0	6	294	295	6	-3	5	6	375	388	10	4	11	6	142	138	7
5	-5	7	243	245	10	3	0	7	42	42	4						
3	0	6	372	376	8	-2	5	6	256	302	14	5	11	6	100	105	6
6	-5	7	8	1	8	4	0	7	372	367	14						
4	0	6	91	84	4	-1	5	6	245	234	12	-2	12	6	138	130	7
7	-5	7	124	114	7	5	0	7	119	115	4						
5	0	6	114	117	4	0	5	6	456	454	28	-1	12	6	198	185	8
8	-5	7	28	29	17	6	0	7	209	200	6						
6	0	6	312	286	12	1	5	6	211	216	7	0	12	6	25	30	25
-8	-4	7	120	123	4	7	0	7	11	5	10						

7	0	6	478	497	12	2	5	6	248	201	14	1	12	6	118	124	7
-7	-4	7	157	151	5	8	0	7	296	302	11						
8	0	6	37	35	12	3	5	6	315	300	17	2	12	6	29	42	18
-6	-4	7	382	356	10	9	0	7	82	80	7						
9	0	6	177	168	8	4	5	6	244	246	10	3	12	6	60	67	8
-5	-4	7	55	57	5	10	0	7	179	182	8						
10	0	6	74	71	8	5	5	6	186	193	8	-2	-11	7	28	26	28
-4	-4	7	123	120	4	-8	1	7	119	115	6						
-8	1	6	221	223	9	6	5	6	392	363	15	-1	-11	7	78	79	7
-3	-4	7	286	286	8	-7	1	7	302	302	12						
-7	1	6	182	184	8	7	5	6	12	16	11	0	-11	7	57	59	9
-2	-4	7	260	261	6	-6	1	7	112	110	6						
-6	1	6	242	247	9	-8	6	6	40	38	11	1	-11	7	235	239	10
-1	-4	7	180	179	4	-5	1	7	230	245	9						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 7

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	1	7	29	31	8	-3	6	7	138	149	6	3	-10	8	121	114	7
-5	-3	8	14	20	14	-6	2	8	94	89	6	-4	-9	8	206	209	5
-3	1	7	266	252	8	-2	6	7	286	273	14	-3	-9	8	104	100	3
-4	-3	8	171	165	5	-5	2	8	236	243	9	-2	-9	8	302	301	7
-2	1	7	329	345	7	-1	6	7	152	146	5	-1	-9	8	50	51	4
-3	-3	8	204	196	6	-4	2	8	220	226	9	0	-9	8	165	172	5
-1	1	7	481	512	10	0	6	7	306	291	15	1	-9	8	55	56	4
-2	-3	8	499	480	13	-3	2	8	466	477	12	2	-9	8	203	209	9
0	1	7	217	214	5	1	6	7	143	136	14	3	-9	8	36	33	15
-1	-3	8	102	105	3	-2	2	8	15	27	15	4	-9	8	191	187	8
1	1	7	741	758	19	2	6	7	331	340	9	-6	-8	8	107	105	5
0	-3	8	565	563	12	-1	2	8	602	620	16	-5	-8	8	321	309	9
2	1	7	71	73	3	3	6	7	230	232	9	-4	-8	8	81	78	4
1	-3	8	226	217	5	0	2	8	166	166	5	-3	-8	8	322	316	7
3	1	7	313	329	8	4	6	7	271	256	10	-2	-8	8	92	96	3
2	-3	8	271	263	7	1	2	8	380	388	10	-1	-8	8	160	155	3
4	1	7	255	248	10	5	6	7	7	7	6	0	-8	8	89	87	3
3	-3	8	34	33	5	2	2	8	68	77	4	1	-8	8	267	266	5
5	1	7	452	458	17	6	6	7	208	198	8	2	-8	8	154	158	7
4	-3	8	379	385	14	3	2	8	422	453	11	3	-8	8	368	341	14
6	1	7	234	233	6	7	6	7	48	41	8	4	-8	8	112	103	7
5	-3	8	23	10	13	4	2	8	171	164	7	5	-8	8	193	171	8
7	1	7	391	399	10	-7	7	7	11	22	11	-7	-7	8	63	59	5
6	-3	8	250	238	8	5	2	8	546	535	20	-6	-7	8	243	248	7
8	1	7	176	173	8	-6	7	7	169	175	7	-5	-7	8	52	44	6
7	-3	8	25	13	12	6	2	8	91	84	6						
9	1	7	73	65	7	-5	7	7	212	221	9						
8	-3	8	215	220	6	7	2	8	179	174	7						
10	1	7	150	151	8	-4	7	7	45	44	9						
9	-3	8	61	60	8	10	2	8	120	128	7						
-8	2	7	227	205	9	-3	7	7	246	232	10						
-8	-2	8	22	20	16	-8	3	8	80	80	6						
-7	2	7	67	65	6	-2	7	7	59	57	5						
-7	-2	8	206	208	6	-7	3	8	125	117	6						
-6	2	7	173	190	7	-1	7	7	77	73	6						
-6	-2	8	87	89	4	-6	3	8	248	224	10						
-5	2	7	109	102	6	0	7	7	244	240	7						
-5	-2	8	221	216	6	-5	3	8	97	89	6						
-4	2	7	289	303	11	1	7	7	340	356	9						
-4	-2	8	52	56	5	-4	3	8	225	240	9						
-3	2	7	158	149	15	2	7	7	10	9	10						
-3	-2	8	186	175	4	-3	3	8	32	39	8						
-2	2	7	617	673	19	3	7	7	282	276	11						
-2	-2	8	79	86	7	-2	3	8	242	304	41						
-1	2	7	52	50	6	4	7	7	76	75	6						
-1	-2	8	603	602	13	-1	3	8	197	205	5						
0	2	7	263	279	7	5	7	7	252	244	10						
0	-2	8	7	1	6	0	3	8	325	328	8						
1	2	7	49	60	5	6	7	7	35	40	11						
1	-2	8	290	288	6	1	3	8	178	194	5						

2	2	7	416	414	11	7	7	7	213	213	9	-4	-7	8	191	188	6
2	-2	8	96	87	3	2	3	8	579	579	15						
3	2	7	309	317	8	-6	8	7	52	55	9	-3	-7	8	79	77	4
3	-2	8	269	281	6	3	3	8	67	68	4						
4	2	7	454	446	17	-5	8	7	65	71	7	-2	-7	8	276	269	6
4	-2	8	71	68	6	4	3	8	355	363	13						
5	2	7	130	126	6	-4	8	7	129	132	6	-1	-7	8	83	84	3
5	-2	8	552	564	21	5	3	8	43	41	8						
6	2	7	393	388	15	-3	8	7	73	71	7	0	-7	8	379	388	7
6	-2	8	123	124	4	6	3	8	266	255	10						
7	2	7	113	108	4	-2	8	7	90	93	4	1	-7	8	9	4	9
7	-2	8	197	191	6	7	3	8	35	22	12						
8	2	7	172	184	8	-1	8	7	189	187	7	2	-7	8	332	337	13
8	-2	8	93	95	4	-8	4	8	119	106	7						
9	2	7	79	76	7	0	8	7	327	343	9	3	-7	8	61	66	7
9	-2	8	162	174	7	-7	4	8	173	165	8						
10	2	7	222	221	9	1	8	7	72	76	4	4	-7	8	59	55	9
-8	-1	8	128	137	6	-6	4	8	195	200	8						
-8	3	7	25	24	25	2	8	7	186	174	8	5	-7	8	112	99	7
-7	-1	8	6	3	6	-5	4	8	336	324	13						
-7	3	7	21	24	21	4	8	7	243	232	10	6	-7	8	315	306	12
-6	-1	8	173	167	5	-4	4	8	83	95	6						
-6	3	7	308	330	12	5	8	7	18	17	18	-8	-6	8	108	102	5
-5	-1	8	244	239	7	-3	4	8	177	170	8						
-5	3	7	340	338	13	6	8	7	238	243	9	-7	-6	8	234	220	7
-4	-1	8	402	385	10	-2	4	8	113	123	4						
-4	3	7	94	80	6	7	8	7	49	54	9	-6	-6	8	25	23	14
-3	-1	8	79	75	3	-1	4	8	183	182	12						
-3	3	7	507	541	13	8	8	7	209	217	8	-5	-6	8	142	137	5
-2	-1	8	251	268	5	0	4	8	311	261	11						
-2	3	7	5	3	4	-5	9	7	47	45	9	-4	-6	8	196	196	6
-1	-1	8	37	41	5	1	4	8	416	426	11						
-1	3	7	77	83	4	-4	9	7	104	108	6	-3	-6	8	313	315	8
0	-1	8	404	383	8	2	4	8	166	172	5						
0	3	7	182	183	5	-3	9	7	109	109	6	-1	-6	8	273	261	6
1	-1	8	93	72	3	3	4	8	267	277	10						
1	3	7	504	511	28	-2	9	7	146	150	7	0	-6	8	38	46	5
2	-1	8	430	432	9	4	4	8	173	178	7						
2	3	7	159	166	9	-1	9	7	218	208	6	1	-6	8	333	327	7
3	-1	8	58	56	3	5	4	8	202	186	8						
3	3	7	576	588	15	0	9	7	43	47	6	2	-6	8	75	91	34
4	-1	8	360	356	14	6	4	8	65	68	6						
4	3	7	59	59	6	1	9	7	214	218	6	3	-6	8	174	173	7
5	-1	8	118	123	6	7	4	8	379	359	14						
5	3	7	94	84	5	2	9	7	84	90	6	4	-6	8	121	114	6
6	-1	8	264	288	14	-8	5	8	147	139	7						
6	3	7	39	11	9	3	9	7	164	159	7	5	-6	8	239	238	10
7	-1	8	12	2	12	-7	5	8	99	94	6						
7	3	7	327	319	12	4	9	7	152	161	7	6	-6	8	43	44	10
8	-1	8	231	231	9	-6	5	8	154	160	7						
9	3	7	221	217	9	5	9	7	322	307	12	7	-6	8	233	230	9
9	-1	8	51	47	9	-5	5	8	139	134	7						
10	3	7	60	68	10	6	9	7	25	28	25	-8	-5	8	160	159	5
-8	0	8	43	46	9	-4	5	8	105	110	6						
-8	4	7	140	136	7	7	9	7	183	187	8	-7	-5	8	17	17	16
-7	0	8	159	165	7	-3	5	8	274	287	11						

-7	4	7	142	153	7	8	9	7	0	22	1	-6	-5	8	189	179	5
-6	0	8	271	262	7	-2	5	8	524	530	14						
-6	4	7	196	200	8	-4	10	7	165	152	8	-5	-5	8	179	173	8
-5	0	8	402	409	10	-1	5	8	37	32	7						
-5	4	7	25	24	25	-3	10	7	99	99	6	-4	-5	8	204	201	6
-4	0	8	80	82	4	0	5	8	263	281	11						
-4	4	7	16	8	15	-2	10	7	176	170	8	-3	-5	8	80	82	4
-3	0	8	325	337	7	1	5	8	101	91	4						
-3	4	7	316	312	8	-1	10	7	46	44	6	-2	-5	8	275	275	7
-2	0	8	47	45	4	2	5	8	173	166	5						
-2	4	7	331	406	35	0	10	7	93	93	4	-1	-5	8	17	13	16
-1	0	8	221	225	5	3	5	8	97	95	6						
-1	4	7	305	306	13	1	10	7	138	143	7	0	-5	8	193	180	4
0	0	8	371	372	8	4	5	8	360	371	14						
0	4	7	256	284	22	2	10	7	171	173	8	1	-5	8	270	255	6
1	0	8	551	557	12	5	5	8	49	49	8						
1	4	7	105	92	4	3	10	7	203	184	9	2	-5	8	227	217	6
2	0	8	74	69	3	6	5	8	239	207	9						
2	4	7	514	514	13	4	10	7	217	238	9	4	-5	8	310	319	12
3	0	8	539	544	11	7	5	8	0	9	1						
3	4	7	65	65	4	5	10	7	27	29	20	5	-5	8	95	89	6
4	0	8	111	111	6	-7	6	8	167	133	8						
4	4	7	215	196	9	6	10	7	103	96	7	6	-5	8	165	159	7
5	0	8	239	231	9	-6	6	8	95	88	6						
5	4	7	187	156	8	7	10	7	90	95	6	7	-5	8	18	20	17
6	0	8	80	82	4	-5	6	8	127	129	6						
6	4	7	280	268	11	-3	11	7	99	96	7	8	-5	8	135	130	7
7	0	8	299	357	43	-4	6	8	110	101	6						
7	4	7	63	59	7	-2	11	7	89	88	7	-8	-4	8	67	70	5
9	0	8	188	183	8	-3	6	8	248	242	10						
-8	5	7	141	130	7	-1	11	7	104	101	4	-7	-4	8	168	161	5
-8	1	8	255	266	10	-2	6	8	199	194	6						
-7	5	7	221	217	9	0	11	7	140	142	5	-6	-4	8	204	182	6
-7	1	8	17	3	16	-1	6	8	312	299	8						
-6	5	7	114	108	6	1	11	7	243	225	10	-5	-4	8	418	395	11
-6	1	8	261	263	10	0	6	8	24	30	12						
-5	5	7	174	184	7	2	11	7	53	48	9	-4	-4	8	55	62	5
-5	1	8	81	85	6	1	6	8	218	220	6						
-4	5	7	69	64	7	3	11	7	184	162	8	-3	-4	8	389	368	10
-4	1	8	202	199	6	2	6	8	248	242	14						
-3	5	7	202	200	8	4	11	7	15	26	15	-2	-4	8	147	148	5
-3	1	8	84	84	3	3	6	8	368	364	14						
-2	5	7	291	283	22	5	11	7	96	97	7	-1	-4	8	60	50	4
-2	1	8	644	666	17	4	6	8	81	79	6						
-1	5	7	362	374	9	-1	12	7	53	53	9	0	-4	8	213	205	6
-1	1	8	265	273	6	5	6	8	320	318	12						
0	5	7	129	111	4	0	12	7	155	158	7	1	-4	8	487	472	10
0	1	8	613	619	13	6	6	8	142	135	7						
1	5	7	218	206	6	1	12	7	25	35	25	2	-4	8	51	47	5
1	1	8	202	196	4	7	6	8	96	95	6						
2	5	7	155	156	5	2	12	7	136	132	7	3	-4	8	261	250	10
2	1	8	305	305	6	-6	7	8	144	143	7						
3	5	7	190	163	8	3	12	7	46	44	10	4	-4	8	39	41	9
3	1	8	181	181	5	-5	7	8	67	60	7						
4	5	7	418	386	16	-1	11	8	42	40	12	5	-4	8	152	147	7
4	1	8	392	408	15	-4	7	8	223	179	9						

5	5	7	499	477	19	0-11	8	268	261	11	6	-4	8	46	40	6	
5	1	8	250	258	10	-2	7	8	177	170	5						
	6	5	7	72	64	6	-3-10	8	108	110	4	7	-4	8	217	219	6
6	1	8	351	338	13	-1	7	8	167	160	9						
	7	5	7	197	187	8	-2-10	8	99	99	4	8	-4	8	20	12	20
7	1	8	83	83	4	0	7	8	264	238	38						
	-7	6	7	83	87	6	-1-10	8	202	203	9	9	-4	8	190	194	8
8	1	8	204	210	9	1	7	8	47	53	8						
	-6	6	7	159	119	8	0-10	8	10	3	10	-8	-3	8	156	154	5
9	1	8	87	89	7	2	7	8	293	303	8						
	-5	6	7	189	181	8	1-10	8	193	199	8	-7	-3	8	48	47	5
10	1	8	203	218	9	3	7	8	72	71	6						
	-4	6	7	285	300	11	2-10	8	33	48	16	-6	-3	8	305	293	8
	-7	2	8	205	206	8	4	7	8	267	268	10					

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 8

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
5	7	8	8	10	7	5	-7	9	163	163	7	-6	-1	9	196	184	6
-1	4	9	87	81	4	5	10	9	65	69	7	-5	-1	9	399	408	10
6	7	8	216	211	9	6	-7	9	11	1	11	-4	-1	9	13	10	12
0	4	9	315	317	8	6	10	9	56	61	9	-3	-1	9	222	218	6
7	7	8	36	32	11	-7	-6	9	16	10	16	-2	-1	9	118	122	4
1	4	9	78	70	7	-2	11	9	34	31	15	-1	-1	9	490	515	10
8	7	8	277	277	11	-6	-6	9	176	172	5	0	-1	9	55	54	3
2	4	9	309	300	13	-1	11	9	86	81	7	1	-1	9	306	309	6
-5	8	8	153	148	7	-5	-6	9	34	26	9	2	-1	9	17	2	14
3	4	9	130	118	6	0	11	9	81	88	6	3	-1	9	503	516	12
-4	8	8	55	60	7	-4	-6	9	140	144	5	4	-1	9	149	146	7
4	4	9	211	200	8	1	11	9	223	196	9	5	-1	9	394	385	15
-3	8	8	51	56	8	-3	-6	9	115	111	6	6	-1	9	205	199	8
5	4	9	102	106	6	2	11	9	0	12	1	7	-1	9	185	175	5
-2	8	8	89	85	4	-2	-6	9	315	308	8	8	-1	9	17	4	17
6	4	9	293	279	11	3	11	9	174	150	8	9	-1	9	229	242	9
-1	8	8	195	182	6	-1	-6	9	57	52	4	-8	0	9	87	93	6
7	4	9	96	93	6	1	12	9	10	10	10	-7	0	9	51	56	7
0	8	8	147	144	9	0	-6	9	268	266	6	-6	0	9	305	295	8
-7	5	9	207	188	9	-1	-10	10	205	207	8	-5	0	9	67	70	4
1	8	8	302	311	8	1	-6	9	153	147	4	-4	0	9	391	386	10
-6	5	9	8	6	7	0	-10	10	86	88	5	-3	0	9	59	59	4
2	8	8	128	121	6	2	-6	9	137	130	4	-2	0	9	164	172	5
-5	5	9	115	124	6	1	-10	10	170	163	8	-1	0	9	177	187	4
3	8	8	230	218	9	3	-6	9	38	38	11	0	0	9	686	677	14
-4	5	9	63	66	7	-3	-9	10	32	33	11						
4	8	8	56	58	7	4	-6	9	208	212	9						
-3	5	9	98	102	6	-2	-9	10	266	267	7						
5	8	8	272	260	11	5	-6	9	19	2	19						
-2	5	9	136	133	4	-1	-9	10	93	92	5						
6	8	8	44	41	10	6	-6	9	257	259	10						
-1	5	9	297	302	12	0	-9	10	119	119	4						
7	8	8	259	264	10	7	-6	9	186	189	8						
0	5	9	203	190	6	1	-9	10	15	30	14						
8	8	8	48	48	8	-7	-5	9	150	145	5						
1	5	9	277	273	11	2	-9	10	124	125	7						
-4	9	8	102	109	6	-6	-5	9	35	35	9						
2	5	9	72	65	4	3	-9	10	10	11	9						
-3	9	8	93	93	6	-5	-5	9	243	230	7						
3	5	9	238	236	9	-4	-8	10	91	90	5						
-2	9	8	201	210	8	-4	-5	9	155	154	5						
4	5	9	145	144	7	-3	-8	10	217	222	6						
-1	9	8	10	17	9	-3	-5	9	405	395	11						
5	5	9	364	345	14	-2	-8	10	110	110	4						
0	9	8	220	216	6	-2	-5	9	204	205	6						
6	5	9	101	96	6	-1	-8	10	108	111	4						
1	9	8	25	34	11	-1	-5	9	96	91	3						
7	5	9	195	171	8	0	-8	10	54	58	4						
2	9	8	77	80	6	0	-5	9	32	37	6						
-6	6	9	137	136	7	1	-8	10	303	294	7						

3	9	8	182	189	8	1	-5	9	246	243	5	1	0	9	73	69	3
-5	6	9	124	111	7	2	-8	10	33	30	16						
4	9	8	266	271	10	2	-5	9	47	47	5	2	0	9	360	373	8
-4	6	9	189	196	8	3	-8	10	225	225	9						
5	9	8	0	4	1	3	-5	9	215	212	9	3	0	9	91	103	3
-3	6	9	55	57	7	4	-8	10	106	106	7						
6	9	8	180	179	8	4	-5	9	135	130	7	4	0	9	351	357	13
-2	6	9	375	330	19	-5	-7	10	62	62	5						
7	9	8	44	45	12	5	-5	9	235	227	9	5	0	9	45	49	7
-1	6	9	102	98	4	-4	-7	10	254	244	9						
8	9	8	164	166	7	6	-5	9	82	82	6	6	0	9	244	253	10
0	6	9	153	150	5	-3	-7	10	16	22	16						
-3	10	8	202	204	8	7	-5	9	144	134	7	7	0	9	13	1	12
1	6	9	141	131	10	-2	-7	10	205	198	6						
-2	10	8	24	29	23	8	-5	9	59	65	7	9	0	9	64	55	8
2	6	9	199	194	6	-1	-7	10	14	1	14						
-1	10	8	122	123	6	-8	-4	9	89	90	4	-8	1	9	45	44	9
3	6	9	57	58	7	0	-7	10	310	300	7						
0	10	8	78	66	5	-7	-4	9	54	49	6	-7	1	9	262	258	10
4	6	9	371	353	14	1	-7	10	160	162	4						
1	10	8	150	151	7	-6	-4	9	266	251	7	-6	1	9	60	57	7
5	6	9	104	86	6	2	-7	10	229	218	9						
2	10	8	143	138	7	-5	-4	9	88	87	4	-5	1	9	320	339	12
6	6	9	121	122	6	3	-7	10	77	75	7						
3	10	8	243	237	10	-4	-4	9	252	239	7	-4	1	9	0	10	1
7	6	9	53	48	7	4	-7	10	105	104	7						
4	10	8	42	39	11	-3	-4	9	53	53	5	-3	1	9	204	197	6
8	6	9	262	256	10	5	-7	10	28	20	24						
5	10	8	174	155	8	-2	-4	9	301	300	8	-2	1	9	221	230	6
-6	7	9	74	67	7	-6	-6	10	100	94	5						
6	10	8	26	31	25	-1	-4	9	20	27	16	-1	1	9	705	728	15
-5	7	9	234	209	10	-5	-6	10	146	147	5						
-2	11	8	119	116	7	0	-4	9	459	429	10	0	1	9	168	162	4
-4	7	9	15	14	15	-4	-6	10	0	3	1						
-1	11	8	120	121	7	1	-4	9	54	51	4	1	1	9	491	490	10
-3	7	9	166	168	7	-3	-6	10	225	216	6						
0	11	8	159	160	7	2	-4	9	367	384	8	2	1	9	27	30	6
-2	7	9	8	1	8	-2	-6	10	43	39	6						
1	11	8	71	73	7	3	-4	9	155	161	7	3	1	9	341	336	9
-1	7	9	201	200	6	-1	-6	10	285	263	6						
2	11	8	204	216	9	4	-4	9	168	168	7	4	1	9	45	51	8
0	7	9	12	13	12	0	-6	10	146	146	4						
3	11	8	0	10	1	5	-4	9	119	114	6	5	1	9	383	371	14
1	7	9	272	235	27	1	-6	10	255	250	6						
4	11	8	130	141	7	6	-4	9	190	196	8	6	1	9	95	100	6
2	7	9	28	22	20	2	-6	10	165	167	7						
5	11	8	63	56	8	7	-4	9	18	13	17	7	1	9	269	272	10
3	7	9	411	402	15	3	-6	10	119	116	6						
-1	12	8	155	160	7	8	-4	9	227	220	9	-8	2	9	154	141	7
4	7	9	103	95	6	4	-6	10	8	2	7						
0	12	8	15	18	14	-8	-3	9	83	78	4	-7	2	9	12	15	11
5	7	9	214	194	9	5	-6	10	265	248	10						
1	12	8	124	128	7	-7	-3	9	239	240	7	-6	2	9	209	221	8
6	7	9	32	30	14	6	-6	10	238	227	10						
2	12	8	22	18	22	-6	-3	9	67	68	4	-5	2	9	125	123	6
7	7	9	188	179	8	-7	-5	10	12	16	12						

-2-10	9	186	191	4	-5 -3	9	343	325	9	-4	2	9	244	245	10
8	7	9	21	25	20	-6 -5 10	125	124	5						
-1-10	9	19	5	19	-4 -3	9	91	85	4	-3	2	9	131	145	6
-5	8	9	15	32	15	-5 -5 10	32	35	10						
0-10	9	219	218	5	-3 -3	9	221	218	6	-2	2	9	432	550	74
-4	8	9	78	80	6	-4 -5 10	266	261	7						
1-10	9	122	132	7	-2 -3	9	13	8	13	-1	2	9	73	82	4
-3	8	9	17	27	17	-3 -5 10	0	8	1						
2-10	9	95	108	7	-1 -3	9	280	269	6	0	2	9	311	319	8
-2	8	9	173	166	8	-2 -5 10	245	235	7						
-4 -9	9	32	32	11	0 -3	9	100	103	3	1	2	9	171	178	5
-1	8	9	81	80	6	-1 -5 10	68	59	4						
-3 -9	9	241	244	7	1 -3	9	562	561	12	2	2	9	298	299	8
0	8	9	330	325	9	0 -5 10	302	286	6						
-2 -9	9	13	14	13	2 -3	9	181	183	5	3	2	9	199	202	6
1	8	9	150	154	5	1 -5 10	171	162	4						
-1 -9	9	213	214	5	3 -3	9	312	314	12	4	2	9	618	605	23
2	8	9	139	143	7	2 -5 10	158	154	5						
0 -9	9	14	18	14	4 -3	9	63	55	6	5	2	9	55	41	7
3	8	9	23	23	23	3 -5 10	71	68	6						
1 -9	9	164	162	7	5 -3	9	349	345	13	6	2	9	270	264	10
4	8	9	283	280	11	4 -5 10	355	343	14						
2 -9	9	29	28	20	6 -3	9	47	50	6	7	2	9	77	75	6
5	8	9	18	2	17	5 -5 10	182	189	8						
3 -9	9	164	163	8	7 -3	9	240	251	14	-8	3	9	38	41	13
6	8	9	226	219	9	6 -5 10	137	140	7						
-5 -8	9	67	60	5	8 -3	9	119	119	4	-7	3	9	138	145	7
7	8	9	13	17	12	7 -5 10	117	121	6						
-4 -8	9	318	317	9	9 -3	9	152	158	7	-6	3	9	108	105	6
8	8	9	225	235	9	-7 -4 10	120	123	4						
-3 -8	9	40	42	8	-8 -2	9	207	205	6	-5	3	9	314	323	12
-4	9	9	52	45	9	-6 -4 10	25	16	13						
-2 -8	9	180	182	5	-7 -2	9	80	80	4	-4	3	9	49	46	7
-3	9	9	114	113	7	-5 -4 10	378	373	10						
-1 -8	9	0	9	1	-6 -2	9	243	235	7	-3	3	9	271	290	10
-2	9	9	87	85	7	-4 -4 10	94	89	4						
0 -8	9	231	231	5	-5 -2	9	39	38	6	-2	3	9	141	142	7
-1	9	9	284	276	8	-3 -4 10	246	233	7						
1 -8	9	39	34	8	-4 -2	9	227	229	6	-1	3	9	185	184	8
0	9	9	29	32	9	-2 -4 10	165	164	5						
2 -8	9	309	311	12	-3 -2	9	23	17	13	0	3	9	208	207	6
1	9	9	142	151	7	-1 -4 10	84	81	3						
3 -8	9	45	44	10	-2 -2	9	544	528	14	1	3	9	418	417	16
2	9	9	13	17	12	0 -4 10	125	122	3						
4 -8	9	156	157	7	-1 -2	9	176	175	4	2	3	9	12	8	11
3	9	9	200	183	8	1 -4 10	516	513	11						
5 -8	9	15	16	14	0 -2	9	489	481	10	3	3	9	351	355	13
4	9	9	51	51	9	2 -4 10	85	83	4						
-6 -7	9	9	15	9	1 -2	9	207	206	5	4	3	9	108	110	6
5	9	9	230	219	9	3 -4 10	222	229	9						
-5 -7	9	319	315	9	2 -2	9	124	122	4	5	3	9	297	290	11
6	9	9	16	19	16	4 -4 10	166	168	7						
-4 -7	9	90	85	4	3 -2	9	45	55	8	6	3	9	36	34	10
7	9	9	162	168	7	5 -4 10	193	192	8						
-3 -7	9	150	149	5	4 -2	9	531	519	20	7	3	9	225	217	9
-3 10	9	35	34	12	6 -4 10	57	67	7							

-2	-7	9	29	34	11	5	-2	9	194	179	8	-8	4	9	60	66	7
-2	10	9	136	139	7	7	-4	10	260	268	10						
-1	-7	9	249	242	5	6	-2	9	327	319	12	-7	4	9	114	120	6
-1	10	9	0	1	1	8	-4	10	58	54	8						
0	-7	9	58	57	4	7	-2	9	23	25	15	-6	4	9	212	219	9
0	10	9	78	74	4	-8	-3	10	155	155	6						
1	-7	9	406	394	9	8	-2	9	188	196	5	-5	4	9	52	48	7
1	10	9	137	137	7	-7	-3	10	36	25	8						
2	-7	9	82	81	6	9	-2	9	58	59	9	-4	4	9	83	72	6
2	10	9	205	213	9	-6	-3	10	292	295	9						
3	-7	9	171	175	8	-8	-1	9	37	48	11	-3	4	9	171	164	7
3	10	9	71	78	7	-5	-3	10	99	97	4						
4	-7	9	54	60	8	-7	-1	9	58	58	5	-2	4	9	373	397	10
4	10	9	228	230	9	-4	-3	10	287	287	8						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 9

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	-3	10	49	45	6	1	2	10	231	232	6	3	8	10	242	244	10
3	-4	11	87	80	6	-5	2	11	15	9	14	4	8	10	64	64	7
-2	-3	10	424	396	11	2	2	10	93	99	4	5	8	10	188	176	8
4	-4	11	236	239	9	-4	2	11	258	265	10	6	8	10	55	52	8
-1	-3	10	183	174	4	3	2	10	309	307	12	7	8	10	236	231	9
5	-4	11	168	170	7	-3	2	11	33	23	12	8	8	10	109	97	6
0	-3	10	473	470	10	4	2	10	85	79	6	-4	9	10	110	108	7
6	-4	11	188	179	8	-2	2	11	293	308	8	-3	9	10	33	33	15
1	-3	10	186	184	4	5	2	10	365	358	14	-2	9	10	235	225	9
7	-4	11	28	36	25	-1	2	11	206	223	6	-1	9	10	53	53	5
2	-3	10	291	292	8	6	2	10	73	63	6	0	9	10	176	169	5
8	-4	11	133	140	7	0	2	11	201	203	6	1	9	10	36	39	13
3	-3	10	51	50	8	7	2	10	97	95	6	2	9	10	73	69	7
-7	-3	11	183	178	6	1	2	11	38	44	10	3	9	10	115	113	6
4	-3	10	302	296	12	-7	3	10	45	50	9	4	9	10	283	283	11
-6	-3	11	84	89	4	2	2	11	243	247	7	5	9	10	84	76	7
5	-3	10	49	42	8	-6	3	10	174	185	7	6	9	10	178	164	8
-5	-3	11	259	265	7	3	2	11	32	23	14	7	9	10	37	39	13
6	-3	10	216	213	9	-5	3	10	29	23	17	-2	10	10	0	19	1
-4	-3	11	139	137	5	4	2	11	341	344	13	-1	10	10	110	113	6
7	-3	10	64	57	7	-4	3	10	219	218	9	0	10	10	33	31	8
-3	-3	11	201	189	6	5	2	11	236	229	9	1	10	10	126	134	7
8	-3	10	265	274	10	-3	3	10	74	68	6	2	10	10	53	53	9
-2	-3	11	83	84	3	6	2	11	178	173	8	3	10	10	201	205	8
-8	-2	10	17	3	17	-2	3	10	247	242	7	4	10	10	50	54	10
-1	-3	11	261	268	6	7	2	11	112	112	6	3	10	10	239	234	9
-7	-2	10	164	159	5	-1	3	10	84	86	4						
0	-3	11	15	23	15	8	2	11	107	107	6						
-6	-2	10	109	108	4	0	3	10	321	322	8						
1	-3	11	644	656	14	-7	3	11	102	95	7						
-5	-2	10	193	193	6	1	3	10	13	14	13						
2	-3	11	239	240	7	-6	3	11	18	26	18						
-4	-2	10	43	38	6	2	3	10	308	333	8						
3	-3	11	175	176	8	-5	3	11	159	166	7						
-3	-2	10	296	304	8	3	3	10	130	134	6						
4	-3	11	53	43	7	-4	3	11	16	13	16						
-2	-2	10	53	55	5	4	3	10	343	337	13						
5	-3	11	208	207	9	-3	3	11	254	256	10						
-1	-2	10	543	543	11	5	3	10	196	193	8						
6	-3	11	96	91	6	-2	3	11	199	209	6						
0	-2	10	219	222	5	6	3	10	154	156	7						
7	-3	11	285	289	11	-1	3	11	43	41	6						
1	-2	10	343	339	7	7	3	10	16	5	16						
8	-3	11	128	131	6	0	3	11	36	33	7						
2	-2	10	76	71	4	-7	4	10	136	142	7						
-7	-2	11	82	86	5	1	3	11	374	376	10						
3	-2	10	384	390	14	-6	4	10	26	23	26						
-6	-2	11	127	129	4	2	3	11	77	81	4						
4	-2	10	146	141	7	-5	4	10	204	204	8						
-5	-2	11	89	89	4	3	3	11	239	234	9						

5	-2	10	437	445	16	-4	4	10	59	61	7	-1	11	10	35	38	15
-4	-2	11	255	254	7	4	3	11	268	278	10						
6	-2	10	115	113	6	-3	4	10	33	42	11	0	11	10	148	145	7
-3	-2	11	7	5	7	5	3	11	245	233	10						
7	-2	10	180	177	8	-2	4	10	13	2	13	1	11	10	0	9	1
-2	-2	11	392	408	8	6	3	11	69	67	6						
8	-2	10	116	114	6	-1	4	10	174	158	14	2	11	10	197	195	9
-1	-2	11	246	244	5	7	3	11	193	184	8						
-8	-1	10	121	119	7	0	4	10	141	141	4	3	11	10	70	63	8
0	-2	11	196	198	4	8	3	11	77	66	6						
-7	-1	10	13	25	13	1	4	10	405	399	11	-2	-9	11	8	10	8
1	-2	11	108	108	3	-6	4	11	172	168	8						
-6	-1	10	212	211	6	2	4	10	177	176	5	-1	-9	11	224	220	6
2	-2	11	263	269	13	-5	4	11	81	77	6						
-5	-1	10	19	15	18	3	4	10	170	166	7	0	-9	11	132	131	5
3	-2	11	23	30	22	-4	4	11	170	179	7						
-4	-1	10	287	284	8	4	4	10	47	42	8	1	-9	11	43	46	12
4	-2	11	430	435	16	-3	4	11	38	36	13						
-3	-1	10	9	19	9	5	4	10	293	269	11	2	-9	11	44	46	10
5	-2	11	170	170	7	-2	4	11	236	232	6						
-2	-1	10	328	323	9	6	4	10	69	68	6	-3	-8	11	42	50	7
6	-2	11	235	236	9	-1	4	11	149	154	5						
-1	-1	10	270	286	6	7	4	10	265	243	10	-2	-8	11	199	198	6
7	-2	11	66	58	7	0	4	11	206	201	9						
0	-1	10	340	352	7	-7	5	10	33	35	14	-1	-8	11	74	72	5
8	-2	11	188	196	8	1	4	11	218	217	6						
1	-1	10	94	97	3	-6	5	10	165	169	7	0	-8	11	194	193	5
-7	-1	11	89	86	4	2	4	11	223	208	6						
2	-1	10	335	347	10	-5	5	10	21	12	21	1	-8	11	58	54	9
-6	-1	11	27	30	12	3	4	11	107	100	6						
3	-1	10	19	16	19	-4	5	10	141	136	7	2	-8	11	197	199	8
-5	-1	11	283	281	8	4	4	11	201	179	8						
4	-1	10	442	441	17	-3	5	10	106	96	6	3	-8	11	75	81	7
-4	-1	11	45	51	6	5	4	11	184	165	8						
5	-1	10	290	289	11	-2	5	10	366	344	15	-4	-7	11	202	205	6
-3	-1	11	306	319	8	6	4	11	231	210	9						
6	-1	10	277	267	11	-1	5	10	183	182	5	-3	-7	11	91	97	5
-2	-1	11	135	131	4	7	4	11	92	93	6						
7	-1	10	13	17	12	0	5	10	184	169	8	-2	-7	11	12	10	12
-1	-1	11	278	282	6	8	4	11	208	203	9						
8	-1	10	187	203	8	1	5	10	16	2	15	-1	-7	11	207	210	6
0	-1	11	209	213	5	-6	5	11	51	55	8						
-8	0	10	97	95	6	2	5	10	110	99	6	0	-7	11	64	64	4
1	-1	11	205	216	5	-5	5	11	86	77	6						
-7	0	10	152	168	7	3	5	10	60	53	9	1	-7	11	321	308	7
2	-1	11	98	98	4	-4	5	11	23	20	23						
-6	0	10	83	79	4	4	5	10	344	282	13	2	-7	11	204	201	9
3	-1	11	416	441	16	-3	5	11	155	150	7						
-5	0	10	450	474	12	5	5	10	0	9	1	3	-7	11	144	149	7
4	-1	11	301	308	12	-2	5	11	50	41	5						
-4	0	10	153	161	5	6	5	10	219	210	9	4	-7	11	117	116	7
5	-1	11	174	170	7	-1	5	11	303	313	8						
-3	0	10	110	105	4	7	5	10	101	94	6	5	-7	11	122	120	7
6	-1	11	102	106	6	0	5	11	44	50	6						
-2	0	10	117	119	4	8	5	10	139	138	7	-5	-6	11	84	79	5
7	-1	11	173	179	7	1	5	11	375	340	12						

-1	0	10	334	340	7	-5	6	10	100	103	6	-4	-6	11	196	191	8	
8	-1	11	17	10	16	2	5	11	263	263	10							
	0	0	10	84	75	6	-4	6	10	128	117	7	-3	-6	11	27	17	12
-7	0	11	62	60	7	3	5	11	88	84	6							
	1	0	10	504	520	11	-3	6	10	286	282	11	-2	-6	11	289	276	8
-6	0	11	239	247	7	4	5	11	30	29	14							
	2	0	10	39	35	6	-2	6	10	34	36	8	-1	-6	11	153	151	4
-5	0	11	119	120	4	5	5	11	301	288	12							
	3	0	10	374	381	14	-1	6	10	257	254	7	0	-6	11	194	186	5
-4	0	11	194	194	6	6	5	11	225	168	9							
	4	0	10	137	143	6	0	6	10	69	64	5	1	-6	11	216	215	5
-3	0	11	125	126	6	7	5	11	146	136	7							
	5	0	10	180	179	8	1	6	10	242	242	12	2	-6	11	160	159	7
-2	0	11	218	226	5	8	5	11	145	136	7							
	6	0	10	25	31	17	2	6	10	28	26	22	3	-6	11	37	34	12
-1	0	11	108	107	3	-5	6	11	39	35	12							
	7	0	10	254	247	10	3	6	10	281	260	11	4	-6	11	232	234	9
0	0	11	346	346	7	-4	6	11	202	203	8							
	8	0	10	51	49	7	4	6	10	153	125	7	5	-6	11	187	187	8
1	0	11	25	19	12	-3	6	11	56	63	7							
-8	1	10	144	146	7	5	6	10	282	246	11	6	-6	11	182	183	8	
2	0	11	313	325	8	-2	6	11	229	227	9							
	-7	1	10	10	15	10	6	6	10	99	95	6	-6	-5	11	87	84	5
3	0	11	74	74	6	-1	6	11	165	158	10							
-6	1	10	223	230	9	7	6	10	151	154	7	-5	-5	11	99	102	4	
4	0	11	153	153	7	0	6	11	121	121	4							
-4	1	10	253	260	7	8	6	10	14	14	13	-4	-5	11	29	21	11	
5	0	11	102	101	6	1	6	11	86	72	4							
-3	1	10	143	140	4	-5	7	10	19	13	19	-3	-5	11	327	312	9	
6	0	11	199	196	8	2	6	11	269	256	11							
	-2	1	10	363	379	10	-4	7	10	183	188	8	-2	-5	11	191	183	6
7	0	11	37	28	10	3	6	11	78	78	6							
-1	1	10	57	61	4	-3	7	10	53	62	8	-1	-5	11	129	124	4	
8	0	11	180	188	8	4	6	11	325	313	12							
	0	1	10	496	510	10	-2	7	10	193	181	8	0	-5	11	129	125	4
-7	1	11	227	229	9	5	6	11	159	143	7							
	1	1	10	62	68	3	-1	7	10	59	61	5	1	-5	11	210	200	5
-6	1	11	79	83	6	6	6	11	237	196	10							
	2	1	10	119	118	3	0	7	10	175	169	5	2	-5	11	87	93	6
-5	1	11	198	212	8	7	6	11	63	60	7							
	3	1	10	161	165	7	1	7	10	46	42	6	3	-5	11	262	257	10
-4	1	11	91	97	4	8	6	11	153	162	7							
	4	1	10	352	354	13	2	7	10	367	361	14	4	-5	11	129	134	7
-3	1	11	155	145	5	-5	7	11	220	215	9							
	5	1	10	69	67	6	3	7	10	101	103	6	5	-5	11	239	232	10
-2	1	11	219	224	5	-4	7	11	73	68	7							
	6	1	10	335	326	13	4	7	10	285	280	11	6	-5	11	194	199	8
-1	1	11	422	422	9	-3	7	11	203	201	9							
	7	1	10	113	114	6	5	7	10	91	94	6	7	-5	11	64	63	8
0	1	11	174	172	4	-2	7	11	137	136	7							
	8	1	10	149	151	7	6	7	10	176	155	8	-7	-4	11	66	58	8
1	1	11	260	254	6	-1	7	11	141	132	5							
-8	2	10	22	33	22	7	7	10	29	24	16	-6	-4	11	208	207	6	
2	1	11	55	61	15	0	7	11	21	15	21							
	-7	2	10	145	154	7	8	7	10	294	288	11	-5	-4	11	62	59	5
3	1	11	153	153	7	1	7	11	318	316	9							

-6	2	10	0	3	1	-4	8	10	97	87	7	-4	-4	11	335	328	9
4	1	11	40	35	10	2	7	11	60	63	8						
-5	2	10	251	240	10	-3	8	10	96	77	7	-3	-4	11	102	100	4
5	1	11	193	192	8	3	7	11	334	313	13						
-4	2	10	125	126	6	-2	8	10	85	55	8	-2	-4	11	241	234	7
6	1	11	18	18	18	4	7	11	217	197	9						
-3	2	10	281	296	11	-1	8	10	295	260	36	-1	-4	11	73	68	3
7	1	11	219	213	9	5	7	11	117	115	6						
-2	2	10	69	83	4	0	8	10	39	33	7	0	-4	11	363	360	8
8	1	11	161	161	7	6	7	11	0	15	1						
-1	2	10	397	427	10	1	8	10	263	253	7	1	-4	11	206	192	5
-7	2	11	0	11	1	7	7	11	267	244	11						
0	2	10	23	21	12	2	8	10	114	118	6	2	-4	11	196	200	6
-6	2	11	158	160	7	8	7	11	47	52	9						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 10

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	8	11	145	121	8	2	-3	12	169	175	7	-3	3	12	156	162	7
1	10	12	92	83	7	-2	0	13	213	218	6	-2	3	12	187	179	5
-2	8	11	232	216	9	3	-3	12	13	28	13	-2	3	12	187	179	5
2	10	12	15	5	15	-1	0	13	177	181	4	-1	3	12	218	219	6
-1	8	11	50	54	6	4	-3	12	227	223	9	-1	3	12	218	219	6
3	10	12	143	139	7	0	0	13	111	106	3	0	3	12	199	194	8
0	8	11	248	234	12	5	-3	12	95	91	6	0	3	12	199	194	8
-1	-8	13	198	189	7	1	0	13	94	95	3	1	3	12	143	151	4
1	8	11	101	90	7	6	-3	12	201	191	8	1	3	12	143	151	4
0	-8	13	32	38	12	2	0	13	310	316	12	2	3	12	298	328	8
2	8	11	249	215	10	7	-3	12	142	140	7	2	3	12	298	328	8
1	-8	13	22	4	22	3	0	13	343	343	13	3	3	12	223	231	9
3	8	11	96	90	6	8	-3	12	167	176	7	3	3	12	223	231	9
-2	-7	13	89	86	5	4	0	13	57	54	8	4	3	12	183	184	8
4	8	11	216	192	9	-6	-2	12	83	84	5	4	3	12	183	184	8
-1	-7	13	182	176	6	5	0	13	112	104	6	5	3	12	271	258	11
5	8	11	0	2	1	-5	-2	12	129	134	4	5	3	12	271	258	11
0	-7	13	118	118	4	6	0	13	165	162	7	6	3	12	156	160	7
6	8	11	217	207	9	-4	-2	12	57	60	8	6	3	12	156	160	7
1	-7	13	196	193	8	7	0	13	187	196	8	7	3	12	82	78	6
7	8	11	59	53	8	-3	-2	12	346	347	9	7	3	12	82	78	6
2	-7	13	198	202	9	8	0	13	107	112	6	8	3	12	216	210	9
-3	9	11	133	139	7	-2	-2	12	70	68	4	8	3	12	216	210	9
3	-7	13	110	111	7	-6	1	13	115	120	7	-6	4	12	38	42	11
-2	9	11	17	18	17	-1	-2	12	282	290	6	-6	4	12	38	42	11
-3	-6	13	112	111	7	-5	1	13	79	80	7	-5	4	12	156	147	7
-1	9	11	251	241	7	0	-2	12	276	273	6	-5	4	12	156	147	7
-2	-6	13	209	210	6	-4	1	13	48	48	9	-4	4	12	72	79	6
0	9	11	89	91	4	1	-2	12	285	285	6	-4	4	12	72	79	6
-1	-6	13	191	186	8	-3	1	13	201	205	6	-3	4	12	163	164	7
1	9	11	91	88	7	2	-2	12	219	225	6	-3	4	12	163	164	7
0	-6	13	116	115	7	-2	1	13	45	43	6	-2	4	12	114	114	4
2	9	11	0	6	1	3	-2	12	173	180	7	-2	4	12	114	114	4
1	-6	13	229	224	9	-1	1	13	226	221	5	-1	4	12	137	126	4
3	9	11	170	167	8	4	-2	12	48	43	9	-1	4	12	137	126	4
2	-6	13	101	99	7	0	1	13	192	186	4	0	4	12	0	13	1
4	9	11	44	42	10	5	-2	12	234	232	9	0	4	12	0	13	1
3	-6	13	113	115	7	1	1	13	200	192	5	1	4	12	453	435	13
5	9	11	178	167	8	6	-2	12	132	126	7	1	4	12	453	435	13
4	-6	13	200	192	9	2	1	13	266	260	10	2	4	12	346	327	13
6	9	11	46	37	12	7	-2	12	171	173	8	2	4	12	346	327	13
-4	-5	13	60	62	6	3	1	13	151	149	7	3	4	12	176	167	8
-2	10	11	101	105	7	8	-2	12	164	167	7	3	4	12	176	167	8
-3	-5	13	224	224	6	5	1	13	68	64	7	4	4	12	219	206	9
-1	10	11	0	12	1	-7	-1	12	46	48	7	4	4	12	219	206	9
-2	-5	13	212	204	6	6	1	13	176	165	8	5	4	12	180	162	8
0	10	11	104	106	7	-6	-1	12	84	90	4	5	4	12	180	162	8
-1	-5	13	171	153	8	7	1	13	183	187	8	6	4	12	143	127	7
1	10	11	63	60	8	-5	-1	12	8	8	7	6	4	12	143	127	7
0	-5	13	141	138	4	8	1	13	217	224	9						

	2	10	11	190	184	8	-4	-1	12	248	248	7	7	4	12	238	229	9
1	-5	13	95	94	4		-6	2	13	125	126	7						
	3	10	11	40	34	12	-3	-1	12	134	135	4	8	4	12	175	168	8
2	-5	13	153	155	7		-5	2	13	78	80	7						
	4	10	11	156	152	7	-2	-1	12	271	275	6	-5	5	12	76	73	7
3	-5	13	210	218	9		-4	2	13	173	170	8						
	0	11	11	55	53	10	-1	-1	12	209	212	5	-4	5	12	139	130	7
4	-5	13	189	183	8		-3	2	13	100	111	6						
	1	11	11	193	186	8	0	-1	12	52	54	4	-3	5	12	14	29	14
5	-5	13	99	97	7		-2	2	13	271	283	11						
	2	11	11	76	68	7	1	-1	12	39	48	5	-2	5	12	225	236	9
-5	-4	13	72	75	5		-1	2	13	242	251	7						
	-2	-8	12	117	115	5	2	-1	12	376	416	19	-1	5	12	156	160	5
-4	-4	13	219	224	9		0	2	13	108	105	4						
	-1	-8	12	142	137	5	3	-1	12	236	234	9	0	5	12	147	151	5
-3	-4	13	247	248	7		1	2	13	114	114	4						
	0	-8	12	39	41	7	4	-1	12	205	200	8	1	5	12	129	114	11
-2	-4	13	101	106	4		2	2	13	239	239	10						
	1	-8	12	159	157	8	5	-1	12	252	254	10	2	5	12	157	154	7
-1	-4	13	71	68	7		3	2	13	197	201	8						
	2	-8	12	82	87	7	6	-1	12	143	138	7	3	5	12	34	39	13
0	-4	13	164	158	4		4	2	13	271	262	11						
	-3	-7	12	75	76	5	7	-1	12	38	40	11	4	5	12	292	277	11
1	-4	13	169	160	4		5	2	13	266	258	10						
	-2	-7	12	186	188	6	8	-1	12	136	143	7	5	5	12	179	166	8
2	-4	13	168	155	8		6	2	13	127	122	6						
	-1	-7	12	99	97	5	-7	0	12	142	154	7	6	5	12	200	189	8
3	-4	13	119	119	7		7	2	13	191	188	8						
	0	-7	12	230	223	5	-6	0	12	37	43	11	7	5	12	169	153	8
4	-4	13	195	192	8		8	2	13	67	78	6						
	1	-7	12	218	216	9	-5	0	12	209	209	6	8	5	12	120	125	6
5	-4	13	186	184	8		-5	3	13	129	142	7						
	2	-7	12	143	140	7	-4	0	12	153	162	5	-5	6	12	155	145	7
6	-4	13	6	16	6		-4	3	13	75	83	7						
	3	-7	12	78	85	7	-3	0	12	159	159	5	-4	6	12	16	18	16
-5	-3	13	161	160	6		-3	3	13	234	232	9						
	4	-7	12	140	144	7	-2	0	12	5	13	4	-3	6	12	270	281	11
-4	-3	13	129	134	5		-2	3	13	221	221	9						
	-4	-6	12	150	143	5	-1	0	12	137	131	5	-2	6	12	150	146	7
-3	-3	13	173	177	6		-1	3	13	130	133	4						
	-3	-6	12	140	135	5	0	0	12	123	118	3	-1	6	12	223	211	6
-2	-3	13	49	51	6		0	3	13	129	132	4						
	-2	-6	12	21	23	21	1	0	12	320	317	7	0	6	12	134	130	7
-1	-3	13	295	301	6		1	3	13	307	307	8						
	-1	-6	12	266	261	7	2	0	12	109	110	4	1	6	12	216	225	6
0	-3	13	152	159	4		2	3	13	201	212	8						
	0	-6	12	203	206	5	3	0	12	209	220	8	2	6	12	101	104	6
1	-3	13	281	290	6		3	3	13	240	244	10						
	1	-6	12	151	153	4	4	0	12	226	234	9	3	6	12	144	145	7
2	-3	13	297	283	12		4	3	13	246	247	10						
	2	-6	12	216	210	9	5	0	12	40	42	9	4	6	12	63	66	7
3	-3	13	87	84	6		5	3	13	199	195	8						
	3	-6	12	146	146	7	6	0	12	56	50	7	5	6	12	278	285	11
4	-3	13	123	110	7		6	3	13	175	175	8						
	4	-6	12	112	111	7	7	0	12	233	235	9	6	6	12	168	161	7
5	-3	13	71	68	7		7	3	13	181	181	8						

5	-6	12	168	170	8	8	0	12	130	133	6	7	6	12	127	115	7
6	-3	13	93	89	7	8	3	13	140	146	7						
-5	-5	12	16	24	16	-7	1	12	9	16	8	8	6	12	54	43	10
7	-3	13	196	194	8	-5	4	13	144	137	7						
-4	-5	12	237	238	7	-6	1	12	187	190	8	-4	7	12	223	216	9
-6	-2	13	112	107	5	-4	4	13	138	142	7						
-3	-5	12	147	143	5	-5	1	12	103	111	6	-3	7	12	113	119	6
-5	-2	13	108	113	4	-3	4	13	155	159	7						
-2	-5	12	255	237	7	-4	1	12	142	154	7	-2	7	12	109	114	6
-4	-2	13	111	116	5	-2	4	13	81	79	7						
-1	-5	12	176	168	4	-3	1	12	59	57	5	-1	7	12	15	10	14
-3	-2	13	90	93	4	-1	4	13	67	65	5						
0	-5	12	129	121	4	-2	1	12	352	359	7	0	7	12	248	249	7
-2	-2	13	337	327	9	0	4	13	234	238	6						
1	-5	12	194	195	5	-1	1	12	170	173	4	1	7	12	18	24	18
-1	-2	13	181	182	4	1	4	13	238	243	7						
2	-5	12	181	182	8	0	1	12	148	139	4	2	7	12	429	357	16
0	-2	13	105	98	3	2	4	13	245	222	10						
3	-5	12	66	65	8	1	1	12	185	183	4	3	7	12	195	187	8
1	-2	13	205	203	5	3	4	13	150	133	7						
4	-5	12	287	277	11	2	1	12	177	179	5	4	7	12	160	152	7
2	-2	13	211	211	9	4	4	13	166	162	7						
5	-5	12	259	260	10	3	1	12	24	18	23	5	7	12	87	72	7
3	-2	13	52	56	7	5	4	13	199	189	8						
6	-5	12	28	29	27	4	1	12	169	173	7	6	7	12	187	182	8
4	-2	13	300	310	12	6	4	13	208	188	9						
-6	-4	12	31	32	11	5	1	12	159	161	7	7	7	12	47	47	9
5	-2	13	200	209	8	7	4	13	140	130	7						
-5	-4	12	167	175	5	6	1	12	202	198	8	8	7	12	191	173	8
6	-2	13	90	87	6	8	4	13	192	194	8						
-4	-4	12	96	100	4	7	1	12	204	195	8	-3	8	12	87	88	7
7	-2	13	218	215	9	-5	5	13	123	120	7						
-3	-4	12	246	237	7	8	1	12	42	47	9	-2	8	12	22	16	22
-6	-1	13	8	18	7	-4	5	13	40	39	11						
-2	-4	12	124	118	4	-6	2	12	72	77	7	-1	8	12	203	192	6
-5	-1	13	183	188	5	-3	5	13	176	185	8						
-1	-4	12	124	131	3	-5	2	12	104	101	6	0	8	12	48	41	9
-4	-1	13	154	160	5	-2	5	13	59	59	7						
0	-4	12	7	5	6	-4	2	12	55	53	8	1	8	12	262	256	10
-3	-1	13	218	221	6	-1	5	13	259	259	18						
1	-4	12	327	324	7	-3	2	12	234	246	9	2	8	12	143	140	7
-2	-1	13	245	254	7	0	5	13	167	151	7						
2	-4	12	132	129	7	-2	2	12	66	69	4	3	8	12	136	139	7
-1	-1	13	94	91	6	1	5	13	219	222	6						
3	-4	12	300	285	12	-1	2	12	275	289	7	4	8	12	61	52	8
0	-1	13	112	111	3	2	5	13	280	280	11						
4	-4	12	225	223	9	0	2	12	218	226	7	5	8	12	137	126	7
1	-1	13	162	164	4	3	5	13	56	51	9						
5	-4	12	101	98	6	1	2	12	135	136	6	6	8	12	30	20	29
2	-1	13	207	210	8	4	5	13	27	25	27						
6	-4	12	86	86	7	2	2	12	109	104	4	-2	9	12	192	173	8
3	-1	13	227	220	9	5	5	13	222	206	9						
7	-4	12	153	150	7	3	2	12	250	246	10	-1	9	12	88	86	7
4	-1	13	207	221	8	6	5	13	169	154	8						
-6	-3	12	233	230	7	4	2	12	179	173	8	0	9	12	65	70	5
5	-1	13	97	95	6	7	5	13	165	151	8						

-5	-3	12	216	208	6	5	2	12	204	195	8	1	9	12	10	4	9
6	-1	13	134	139	7	8	5	13	149	158	7						
-4	-3	12	162	165	6	6	2	12	185	177	8	2	9	12	116	117	7
7	-1	13	133	141	7	-4	6	13	169	171	8						
-3	-3	12	71	70	4	7	2	12	172	167	7	3	9	12	26	17	26
8	-1	13	139	150	7	-3	6	13	75	76	7						
-2	-3	12	279	276	8	8	2	12	118	129	6	4	9	12	198	190	9
-6	0	13	175	176	8	-2	6	13	196	182	8						
-1	-3	12	91	91	4	-6	3	12	189	181	8	5	9	12	112	105	7
-5	0	13	71	74	5	-1	6	13	105	99	7						
0	-3	12	280	269	6	-5	3	12	61	66	7	-1	10	12	107	101	7
-4	0	13	164	167	5	0	6	13	148	142	5						
1	-3	12	234	233	5	-4	3	12	217	229	9	0	10	12	24	24	23
-3	0	13	132	130	4	1	6	13	9	5	8						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1
Page 11

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	6	13	233	241	9	-2	-1	14	176	176	5	7	5	14	168	153	8
6	0	15	104	112	7	3	-3	16	123	130	7	-3	6	14	147	138	7
3	6	13	75	74	7	-1	-1	14	181	182	4	-2	6	14	122	133	7
-4	1	15	115	128	6	-3	-2	16	52	58	7	-1	6	14	105	102	4
4	6	13	295	281	11	0	-1	14	111	111	3	0	6	14	108	102	5
-3	1	15	82	87	7	-2	-2	16	139	149	6	1	6	14	86	84	7
5	6	13	223	223	9	1	-1	14	161	157	4	2	6	14	46	52	9
-1	1	15	141	145	4	-1	-2	16	93	88	5	3	6	14	122	116	7
6	6	13	83	83	7	2	-1	14	209	210	9	4	6	14	68	63	8
0	1	15	161	166	5	0	-2	16	196	197	5	5	6	14	193	184	8
7	6	13	71	64	8	3	-1	14	309	321	12	6	6	14	147	150	7
1	1	15	190	193	7	1	-2	16	27	35	26	-3	7	14	100	95	7
8	6	13	86	90	7	4	-1	14	159	160	7	-2	7	14	81	71	8
2	1	15	318	323	12	2	-2	16	143	147	7	-1	7	14	59	59	9
-3	7	13	81	87	7	5	-1	14	209	214	9	0	7	14	205	183	6
3	1	15	39	46	12	3	-2	16	47	46	10	1	7	14	109	106	7
-2	7	13	93	85	7	6	-1	14	12	25	12	2	7	14	152	160	7
4	1	15	53	47	9	4	-2	16	123	129	7	3	7	14	147	132	7
-1	7	13	132	121	8	7	-1	14	164	170	7	4	7	14	84	76	9
5	1	15	152	149	7	-3	-1	16	164	173	5	5	7	14	122	117	7
0	7	13	15	15	15	-5	0	14	187	189	5	6	7	14	55	51	10
6	1	15	232	231	9	-2	-1	16	81	80	5	-2	8	14	27	21	27
1	7	13	300	251	12	-4	0	14	166	167	5	-1	8	14	161	155	8
7	1	15	70	71	7	-1	-1	16	224	221	6	0	8	14	130	123	7
2	7	13	107	106	7	3	0	14	58	61	5	1	8	14	135	129	7
-4	2	15	128	135	7	0	-1	16	18	13	18	3	0	16	18	29	18
3	7	13	150	152	7	-2	0	14	128	129	4	4	-1	16	74	78	7
-3	2	15	143	145	7	1	-1	16	158	164	7	2	0	14	314	322	12
4	7	13	75	76	7	-1	0	14	109	106	3	5	-1	16	223	221	9
-2	2	15	133	124	7	2	-1	16	70	68	7	3	0	14	27	33	26
5	7	13	155	146	7	0	0	14	61	60	4	-3	0	16	0	20	1
-1	2	15	158	167	5	3	-1	16	216	226	9	4	0	14	192	191	8
6	7	13	90	70	8	1	0	14	272	279	6	-2	0	16	140	137	5
0	2	15	90	91	4	4	-1	16	74	78	7	5	0	14	82	78	6
7	7	13	155	151	7	2	0	14	314	322	12	-1	0	16	67	70	5
1	2	15	131	129	4	5	-1	16	223	221	9	6	0	14	171	168	8
-3	8	13	53	59	9	3	0	14	27	33	26	0	0	16	160	156	4
2	2	15	156	152	7	-3	0	16	0	20	1	7	0	14	144	146	7
-2	8	13	111	113	7	4	0	14	192	191	8	1	0	16	108	105	7
3	2	15	203	207	9	-2	0	16	140	137	5	-5	1	14	112	119	6
-1	8	13	50	41	9	5	0	14	82	78	6	2	0	16	246	251	10
4	2	15	173	164	8	-1	0	16	67	70	5	-4	1	14	113	125	6
0	8	13	188	188	6	6	0	14	171	168	8	3	0	16	18	29	18
5	2	15	161	156	7	0	0	16	160	156	4						
1	8	13	127	127	7	7	0	14	144	146	7						
6	2	15	72	77	7	1	0	16	108	105	7						
2	8	13	121	120	7	-5	1	14	112	119	6						
7	2	15	170	174	8	2	0	16	246	251	10						
3	8	13	94	95	6	-4	1	14	113	125	6						
-4	3	15	113	116	7	3	0	16	18	29	18						

4	8	13	82	80	7	-3	1	14	103	114	6	2	8	14	133	138	7	
-3	3	15	183	181	8	4	0	16	203	202	9							
	5	8	13	0	7	1	-2	1	14	173	178	5	3	8	14	35	36	13
-2	3	15	225	237	9	5	0	16	82	85	7							
	-2	9	13	31	30	30	-1	1	14	174	181	4	4	8	14	39	40	11
-1	3	15	48	48	6	-3	1	16	54	67	8							
	-1	9	13	174	134	8	0	1	14	94	88	3	-1	9	14	109	74	8
0	3	15	128	137	4	-2	1	16	89	87	7							
	0	9	13	83	80	7	1	1	14	159	159	4	0	9	14	37	47	15
1	3	15	150	151	7	-1	1	16	123	128	7							
	2	9	13	69	68	8	2	1	14	205	199	9	1	9	14	75	73	8
2	3	15	146	154	7	0	1	16	99	91	4							
	3	9	13	74	76	7	3	1	14	228	230	9	2	9	14	70	62	8
3	3	15	155	165	7	1	1	16	227	230	9							
	4	9	13	81	69	7	4	1	14	61	64	7	-1	-6	15	227	227	7
4	3	15	216	222	9	2	1	16	0	17	1							
	0	10	13	61	57	9	5	1	14	124	118	6	0	-6	15	79	71	5
5	3	15	102	104	6	3	1	16	131	135	7							
	1	10	13	24	5	23	6	1	14	165	165	7	1	-6	15	160	159	8
6	3	15	135	144	7	4	1	16	45	48	11							
	-1	-7	14	216	206	6	7	1	14	273	276	11	-2	-5	15	206	219	8
7	3	15	71	73	7	5	1	16	176	172	8							
	0	-7	14	97	97	5	8	1	14	12	24	12	-1	-5	15	106	108	5
-4	4	15	20	28	20	-3	2	16	123	125	7							
	1	-7	14	91	102	7	-5	2	14	67	67	8	0	-5	15	207	213	5
-3	4	15	77	80	7	-2	2	16	172	181	8							
	-2	-6	14	113	115	7	-4	2	14	3	21	3	1	-5	15	0	3	1
-1	4	15	71	77	5	-1	2	16	78	74	7							
	-1	-6	14	221	218	6	-3	2	14	267	265	11	2	-5	15	135	131	7
0	4	15	195	193	6	0	2	16	196	202	6							
	0	-6	14	268	261	6	-2	2	14	174	187	8	3	-5	15	114	117	7
1	4	15	230	228	9	1	2	16	40	41	12							
	1	-6	14	59	55	9	-1	2	14	195	199	6	-3	-4	15	177	186	5
2	4	15	99	90	7	2	2	16	186	196	8							
	2	-6	14	209	205	9	0	2	14	195	208	6	-2	-4	15	0	7	1
4	4	15	108	103	7	3	2	16	40	37	12							
	3	-6	14	97	97	7	1	2	14	112	117	4	-1	-4	15	68	76	5
5	4	15	186	182	8	4	2	16	63	67	8							
	-3	-5	14	188	194	6	2	2	14	201	205	8	0	-4	15	181	182	4
6	4	15	86	74	7	5	2	16	141	151	7							
	-2	-5	14	136	131	5	3	2	14	222	213	9	1	-4	15	144	150	7
-3	5	15	87	88	6	6	2	16	232	227	9							
	-1	-5	14	196	199	6	4	2	14	146	148	7	2	-4	15	78	79	7
-2	5	15	60	62	9	-3	3	16	214	216	9							
	0	-5	14	65	62	4	5	2	14	176	171	8	3	-4	15	199	200	9
-1	5	15	124	125	10	-2	3	16	45	42	10							
	1	-5	14	138	134	7	6	2	14	203	204	8	4	-4	15	57	65	9
0	5	15	227	210	9	-1	3	16	101	110	6							
	2	-5	14	101	104	7	7	2	14	115	128	6	-3	-3	15	65	70	5
1	5	15	36	32	15	0	3	16	94	94	5							
	3	-5	14	173	170	8	8	2	14	141	159	7	-1	-3	15	170	171	5
2	5	15	156	161	7	1	3	16	147	148	7							
	4	-5	14	157	151	8	-5	3	14	92	105	7	0	-3	15	174	173	4
3	5	15	0	9	1	2	3	16	131	133	7							
	-4	-4	14	119	123	5	-4	3	14	138	145	7	1	-3	15	127	128	7
4	5	15	27	27	27	3	3	16	236	234	10							

-3	-4	14	146	151	5	-3	3	14	176	180	8	2	-3	15	244	236	10
5	5	15	129	127	7	4	3	16	69	68	8						
-2	-4	14	222	222	6	-2	3	14	121	124	6	3	-3	15	0	3	1
6	5	15	167	159	8	5	3	16	163	169	7						
-1	-4	14	109	114	4	-1	3	14	179	178	5	4	-3	15	143	146	7
-3	6	15	81	82	7	-3	4	16	57	63	9						
0	-4	14	43	46	5	0	3	14	162	159	5	5	-3	15	33	43	15
-2	6	15	122	123	7	-2	4	16	150	151	7						
1	-4	14	190	183	8	1	3	14	109	115	4	-4	-2	15	105	104	5
-1	6	15	112	115	7	-1	4	16	47	44	10						
2	-4	14	236	235	10	2	3	14	232	240	9	-3	-2	15	92	100	5
0	6	15	66	74	5	0	4	16	136	142	5						
3	-4	14	148	152	7	3	3	14	215	225	9	-2	-2	15	200	199	6
1	6	15	94	101	6	2	4	16	217	210	9						
4	-4	14	250	248	10	4	3	14	197	194	8	-1	-2	15	225	232	5
2	6	15	111	106	6	3	4	16	27	29	27						
5	-4	14	40	32	14	5	3	14	205	211	8	0	-2	15	108	106	3
3	6	15	111	114	7	4	4	16	172	156	8						
-4	-3	14	100	102	4	6	3	14	109	111	6	1	-2	15	181	184	8
4	6	15	122	124	7	5	4	16	0	8	1						
-3	-3	14	130	128	5	7	3	14	113	117	6	2	-2	15	106	117	6
5	6	15	233	219	10	-2	5	16	156	144	8						
-2	-3	14	135	149	5	8	3	14	136	140	7	3	-2	15	167	162	8
-2	7	15	57	59	9	-1	5	16	166	157	8						
-1	-3	14	85	95	3	-4	4	14	113	120	6	4	-2	15	171	176	8
-1	7	15	97	86	7	0	5	16	70	62	6						
0	-3	14	210	212	5	-3	4	14	105	102	6	5	-2	15	248	255	10
0	7	15	87	78	8	1	5	16	217	215	9						
1	-3	14	197	196	5	-1	4	14	144	142	5	-4	-1	15	130	136	5
1	7	15	118	120	7	2	5	16	19	17	18						
2	-3	14	93	99	6	0	4	14	105	108	4	-3	-1	15	108	110	4
2	7	15	115	100	7	3	5	16	74	73	7						
3	-3	14	130	127	7	1	4	14	298	292	8	-2	-1	15	225	222	6
3	7	15	114	97	7	4	5	16	119	120	7						
4	-3	14	171	167	8	2	4	14	340	313	13	-1	-1	15	70	69	4
4	7	15	155	130	8	5	5	16	221	221	9						
5	-3	14	161	163	7	3	4	14	84	73	7	0	-1	15	129	128	4
-1	8	15	116	100	7	-2	6	16	79	83	7						
6	-3	14	77	76	7	4	4	14	125	123	7	1	-1	15	106	105	4
0	8	15	78	74	8	-1	6	16	58	65	8						
-5	-2	14	122	117	5	5	4	14	117	115	7	2	-1	15	202	209	8
1	8	15	149	146	7	0	6	16	118	123	7						
-4	-2	14	99	104	4	6	4	14	141	126	7	3	-1	15	123	122	7
2	8	15	37	38	13	1	6	16	0	4	1						
-3	-2	14	204	206	6	7	4	14	175	171	8	4	-1	15	185	198	8
3	8	15	84	82	7	2	6	16	76	70	8						
-2	-2	14	216	220	6	8	4	14	168	171	7	5	-1	15	131	142	7
-1	-5	16	176	186	9	3	6	16	107	103	7						
-1	-2	14	213	209	5	-4	5	14	73	81	7	6	-1	15	215	212	9
1	-5	16	110	106	7	4	6	16	152	142	7						
0	-2	14	244	248	5	-3	5	14	10	24	10	-4	0	15	71	71	5
-2	-4	16	177	176	5	-1	7	16	114	116	7						
1	-2	14	82	81	3	-2	5	14	140	129	7	-3	0	15	169	167	5
-1	-4	16	42	40	8	0	7	16	56	54	12						
2	-2	14	208	224	9	-1	5	14	74	69	5	-2	0	15	51	56	6
0	-4	16	118	127	4	1	7	16	105	110	7						

	3	-2	14	90	99	6		0	5	14	210	187	11		-1	0	15	130	138	4
1	-4	16	53	60	9		2	7	16	90	73	9								
	4	-2	14	72	71	7		1	5	14	175	177	8		0	0	15	121	124	4
2	-4	16	139	150	7		-1	-3	17	54	53	6								
	5	-2	14	175	171	8		2	5	14	82	77	7		1	0	15	186	191	4
-2	-3	16	62	69	6		0	-3	17	170	175	8								
	6	-2	14	204	205	9		3	5	14	41	39	12		2	0	15	82	81	7
-1	-3	16	101	108	5		1	-3	17	20	5	20								
	-5	-1	14	64	71	5		4	5	14	228	224	9		3	0	15	273	272	11
0	-3	16	197	191	5		2	-3	17	119	128	7								
	-4	-1	14	166	167	5		5	5	14	196	192	8		4	0	15	22	16	22
1	-3	16	237	237	10		-2	-2	17	115	107	5								
	-3	-1	14	204	206	6		6	5	14	95	88	7		5	0	15	140	138	7
2	-3	16	13	11	13		-1	-2	17	235	232	8								

Table 6. Observed and calculated structure factors for 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		h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
	0	-2	17	12	16	11		3	0	17	220	215	9		-2	3	17	175	189	8
1	5	17	17	5	16		0	1	18	26	24	25								
	1	-2	17	213	205	9		4	0	17	11	3	11		-1	3	17	16	22	16
2	5	17	122	121	7		1	1	18	178	180	8								
	2	-2	17	29	23	29		-2	1	17	120	132	7		0	3	17	105	110	7
3	5	17	48	46	11		-1	2	18	26	37	26								
	3	-2	17	118	120	7		-1	1	17	84	88	6		1	3	17	61	63	9
0	6	17	34	34	17		0	2	18	162	167	8								
	-2	-1	17	195	202	8		0	1	17	206	225	6		2	3	17	162	171	7
1	6	17	84	93	7		1	2	18	19	30	19								
	-1	-1	17	0	3	1		1	1	17	10	5	9		3	3	17	70	69	8
2	6	17	39	36	16		2	2	18	89	97	7								
	0	-1	17	147	151	4		2	1	17	207	212	9		4	3	17	187	190	8
1	-2	18	37	37	18		-1	3	18	120	128	7								
	1	-1	17	29	27	28		3	1	17	60	62	9		-2	4	17	43	43	12
-1	-1	18	227	234	9		0	3	18	58	58	10								
	2	-1	17	201	197	9		4	1	17	105	103	7		-1	4	17	108	108	7
0	-1	18	54	59	11		1	3	18	157	155	8								
	3	-1	17	43	43	11		-2	2	17	121	122	7		0	4	17	113	108	7
1	-1	18	141	137	8		2	3	18	29	17	29								
	-2	0	17	17	16	17		-1	2	17	186	185	8		1	4	17	217	215	9
-1	0	18	20	24	19		0	4	18	104	104	7								
	-1	0	17	157	158	5		0	2	17	32	42	10		2	4	17	11	14	11
0	0	18	129	134	7		1	4	18	49	50	11								
	0	0	17	16	15	16		1	2	17	185	197	8		3	4	17	198	188	9
1	0	18	38	33	16															
	1	0	17	168	174	8		3	2	17	115	129	7		-1	5	17	29	27	26
2	0	18	234	234	10															
	2	0	17	22	9	22		4	2	17	97	108	6		0	5	17	163	142	8
-1	1	18	196	209	8															

Table 7. Crystal data and structure refinement for Zr1.

Identification code	Zr1
Empirical formula	C19 H31 N Si Zr
Formula weight	392.76
Temperature	153(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, C2/c
Unit cell dimensions	a = 23.1827(15) Å α = 90 deg. b = 12.2603(8) Å β = 100.2350(10) deg. c = 14.1942(9) Å γ = 90 deg.
Volume	3970.2(4) Å ³
Z, Calculated density	8, 1.314 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.612 mm ⁻¹
F(000)	1648
Crystal size	.20 x .31 x .17 mm
Theta range for data collection	1.79 to 28.27 deg.
Limiting indices	-30 ≤ h ≤ 30, -16 ≤ k ≤ 15, -18 ≤ l ≤ 18
Reflections collected / unique	17902 / 4772 [R(int) = 0.0222]
Completeness to theta = 28.27	96.9 %
Absorption correction	SADABS
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	4772 / 0 / 323
Goodness-of-fit on F ²	1.053
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0298, wR2 = 0.0763
R indices (all data)	R1 = 0.0356, wR2 = 0.0797
Largest diff. peak and hole	0.727 and -0.601 e ⁻ /Å ³

Table 8. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for Zr1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Zr(1)	943(1)	2355(1)	1024(1)	24(1)
Si(1)	1848(1)	2987(1)	2750(1)	27(1)
N(1)	1319(1)	3612(1)	1891(1)	29(1)
C(1)	1854(1)	1180(1)	1362(1)	25(1)
C(2)	1700(1)	1580(1)	2243(1)	26(1)
C(3)	1173(1)	1003(2)	2332(1)	27(1)
C(4)	983(1)	326(1)	1536(1)	27(1)
C(5)	1413(1)	416(1)	928(1)	25(1)
C(6)	1467(1)	-111(2)	54(1)	30(1)
C(7)	1938(1)	128(2)	-366(1)	35(1)
C(8)	2367(1)	897(2)	50(1)	35(1)
C(9)	2328(1)	1426(2)	886(1)	30(1)
C(10)	474(1)	-454(2)	1396(1)	31(1)
C(11)	662(1)	-1612(2)	1708(2)	46(1)
C(12)	1707(1)	3038(2)	4004(2)	40(1)
C(13)	2616(1)	3444(2)	2768(2)	38(1)
C(14)	1144(1)	4777(2)	1795(2)	33(1)
C(15)	1656(2)	5481(2)	1672(5)	92(2)
C(16)	670(2)	4917(3)	934(3)	87(1)
C(17)	906(4)	5132(4)	2657(3)	115(2)
C(18)	-31(1)	2277(2)	1017(2)	37(1)
C(19)	1048(1)	2593(2)	-504(2)	42(1)

Table 9. Bond lengths [Å] and angles [deg] for Zr1.

Zr(1)-N(1)	2.0664(15)
Zr(1)-C(19)	2.244(2)
Zr(1)-C(18)	2.256(2)
Zr(1)-C(2)	2.4279(17)
Zr(1)-C(3)	2.4744(17)
Zr(1)-C(1)	2.5318(17)
Zr(1)-C(4)	2.5881(17)
Zr(1)-C(5)	2.6297(17)
Zr(1)-Si(1)	3.0293(5)
Si(1)-N(1)	1.7446(16)
Si(1)-C(13)	1.863(2)
Si(1)-C(12)	1.866(2)
Si(1)-C(2)	1.8767(18)
N(1)-C(14)	1.484(2)
C(1)-C(9)	1.421(3)
C(1)-C(5)	1.441(2)
C(1)-C(2)	1.446(2)
C(2)-C(3)	1.437(2)
C(3)-C(4)	1.408(2)
C(4)-C(5)	1.434(2)
C(4)-C(10)	1.503(2)
C(5)-C(6)	1.424(2)
C(6)-C(7)	1.365(3)
C(7)-C(8)	1.421(3)
C(8)-C(9)	1.368(3)
C(10)-C(11)	1.528(3)
C(14)-C(17)	1.495(4)
C(14)-C(16)	1.501(3)
C(14)-C(15)	1.503(4)
N(1)-Zr(1)-C(19)	111.79(8)
N(1)-Zr(1)-C(18)	110.54(8)
C(19)-Zr(1)-C(18)	106.34(10)
N(1)-Zr(1)-C(2)	72.07(6)
C(19)-Zr(1)-C(2)	123.39(8)
C(18)-Zr(1)-C(2)	125.63(8)
N(1)-Zr(1)-C(3)	92.35(6)
C(19)-Zr(1)-C(3)	140.00(8)
C(18)-Zr(1)-C(3)	93.28(7)
C(2)-Zr(1)-C(3)	34.07(6)
N(1)-Zr(1)-C(1)	93.53(6)
C(19)-Zr(1)-C(1)	91.52(8)
C(18)-Zr(1)-C(1)	140.99(7)
C(2)-Zr(1)-C(1)	33.83(6)
C(3)-Zr(1)-C(1)	54.24(6)
N(1)-Zr(1)-C(4)	124.02(6)
C(19)-Zr(1)-C(4)	113.04(8)
C(18)-Zr(1)-C(4)	86.95(7)
C(2)-Zr(1)-C(4)	55.87(6)
C(3)-Zr(1)-C(4)	32.20(6)
C(1)-Zr(1)-C(4)	54.04(6)
N(1)-Zr(1)-C(5)	124.74(6)
C(19)-Zr(1)-C(5)	87.15(8)

C(18)-Zr(1)-C(5)	112.66(7)
C(2)-Zr(1)-C(5)	55.19(5)
C(3)-Zr(1)-C(5)	52.94(6)
C(1)-Zr(1)-C(5)	32.36(5)
C(4)-Zr(1)-C(5)	31.90(5)
N(1)-Zr(1)-Si(1)	33.80(4)
C(19)-Zr(1)-Si(1)	124.71(7)
C(18)-Zr(1)-Si(1)	124.27(6)
C(2)-Zr(1)-Si(1)	38.27(4)
C(3)-Zr(1)-Si(1)	62.54(4)
C(1)-Zr(1)-Si(1)	63.74(4)
C(4)-Zr(1)-Si(1)	91.94(4)
C(5)-Zr(1)-Si(1)	92.23(4)
N(1)-Si(1)-C(13)	115.36(10)
N(1)-Si(1)-C(12)	115.59(10)
C(13)-Si(1)-C(12)	107.78(11)
N(1)-Si(1)-C(2)	94.46(7)
C(13)-Si(1)-C(2)	112.99(9)
C(12)-Si(1)-C(2)	110.22(10)
N(1)-Si(1)-Zr(1)	41.22(5)
C(13)-Si(1)-Zr(1)	127.65(8)
C(12)-Si(1)-Zr(1)	124.52(8)
C(2)-Si(1)-Zr(1)	53.25(5)
C(14)-N(1)-Si(1)	129.29(12)
C(14)-N(1)-Zr(1)	125.69(12)
Si(1)-N(1)-Zr(1)	104.98(7)
C(9)-C(1)-C(5)	118.96(16)
C(9)-C(1)-C(2)	132.10(16)
C(5)-C(1)-C(2)	108.92(15)
C(9)-C(1)-Zr(1)	118.66(12)
C(5)-C(1)-Zr(1)	77.56(10)
C(2)-C(1)-Zr(1)	69.15(9)
C(3)-C(2)-C(1)	104.70(15)
C(3)-C(2)-Si(1)	121.28(13)
C(1)-C(2)-Si(1)	125.94(13)
C(3)-C(2)-Zr(1)	74.74(10)
C(1)-C(2)-Zr(1)	77.03(10)
Si(1)-C(2)-Zr(1)	88.49(7)
C(4)-C(3)-C(2)	111.66(16)
C(4)-C(3)-Zr(1)	78.35(10)
C(2)-C(3)-Zr(1)	71.20(10)
C(3)-C(4)-C(5)	106.60(15)
C(3)-C(4)-C(10)	127.35(17)
C(5)-C(4)-C(10)	125.62(16)
C(3)-C(4)-Zr(1)	69.45(10)
C(5)-C(4)-Zr(1)	75.65(10)
C(10)-C(4)-Zr(1)	125.84(12)
C(6)-C(5)-C(4)	131.82(16)
C(6)-C(5)-C(1)	120.16(16)
C(4)-C(5)-C(1)	108.01(15)
C(6)-C(5)-Zr(1)	123.80(12)
C(4)-C(5)-Zr(1)	72.46(10)
C(1)-C(5)-Zr(1)	70.08(9)
C(7)-C(6)-C(5)	118.92(17)
C(6)-C(7)-C(8)	120.99(18)
C(9)-C(8)-C(7)	121.82(18)
C(8)-C(9)-C(1)	119.10(17)