

10|F|o vs 10|F|c

page 4

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
1	4	926	899	17	3	14	227	236	18	6	2	307	292	12
1	5	360	357	13	4	-14	99	14	33	6	3	357	333	13
1	6	227	216	12	4	-13	265	272	14	6	4	274	253	11
1	7	286	283	11	4	-10	449	432	14	6	5	313	310	12
1	8	406	404	14	4	-8	277	266	11	6	7	342	362	13
1	9	287	277	12	4	-7	365	371	13	6	8	144	134	22
1	10	99	97	31	4	-6	281	278	12	6	9	269	269	14
1	12	127	164	29	4	-4	173	185	13	6	10	158	137	21
2	-12	251	243	14	4	-3	154	113	14	6	11	301	316	15
2	-10	394	382	14	4	-2	198	201	12	6	13	214	189	18
2	-9	109	61	21	4	0	1495	1483	24	7	-13	129	110	26
2	-8	600	587	16	4	1	784	819	16	7	-11	191	194	18
2	-7	275	283	10	4	2	407	434	15	7	-9	185	213	17
2	-6	589	580	15	4	3	193	192	13	7	-8	254	248	13
2	-5	377	399	12	4	5	220	197	12	7	-7	367	359	14
2	-3	613	616	14	4	6	159	106	16	7	-5	200	212	14
2	-2	934	951	17	4	7	201	208	15	7	-4	422	415	17
2	-1	2464	2463	38	4	8	179	149	15	7	-3	136	126	18
2	0	2458	2449	38	4	12	243	235	17	7	-1	348	300	13
2	1	822	824	16	5	-15	237	203	16	7	0	325	305	13
2	2	205	185	12	5	-14	244	224	15	7	1	336	332	13
2	3	766	795	16	5	-12	332	312	14	7	2	520	523	17
2	4	514	519	15	5	-11	107	135	28	7	4	288	283	11
2	6	738	703	16	5	-8	479	453	17	7	5	446	416	18
2	7	441	441	13	5	-7	175	157	14	7	6	571	575	17
2	8	184	186	16	5	-6	453	461	17	7	7	322	317	13
2	9	209	182	15	5	-5	338	309	12	7	9	261	246	15
2	10	174	211	19	5	-3	253	248	11	7	11	225	194	18
2	11	316	312	13	5	-2	629	623	15	8	-14	265	263	16
3	-16	155	100	21	5	-1	538	507	15	8	-9	474	471	15
3	-12	107	87	28	5	0	616	590	15	8	-7	292	278	11
3	-10	237	234	13	5	2	152	174	15	8	-5	372	374	14
3	-9	459	443	17	5	4	214	224	12	8	-3	360	343	13
3	-7	750	727	17	5	6	93	102	28	8	-1	594	605	16
3	-5	646	658	15	5	7	183	165	16	8	0	306	296	12
3	-4	153	173	15	5	8	329	307	13	8	1	139	145	19
3	-3	563	552	14	5	9	286	269	13	8	3	222	252	14
3	-2	687	696	15	5	13	311	301	15	8	5	206	218	16
3	0	409	392	15	5	14	282	297	17	8	7	200	202	18
3	1	116	74	19	6	-15	287	309	15	8	8	246	214	15
3	2	565	576	14	6	-12	235	207	15	8	9	212	193	18
3	3	89	26	23	6	-11	133	149	25	9	-11	172	151	19
3	4	268	271	11	6	-8	741	727	18	9	-9	159	193	22
3	5	413	458	17	6	-7	233	227	12	9	-8	117	109	27
3	6	120	90	20	6	-5	170	184	15	9	-6	362	345	13
3	7	227	236	13	6	-3	184	158	13	9	-4	181	176	15
3	8	294	298	12	6	-2	186	181	13	9	-1	209	239	15
3	10	176	197	19	6	-1	272	289	10	9	1	340	350	13
3	11	177	119	19	6	0	637	642	16	9	2	362	353	14
3	13	235	247	18	6	1	98	95	23	9	3	287	299	12

10|F|o vs 10|F|c

page 5

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
9	4	391	410	15	14	-6	179	150	21	2	-5	428	418	15
9	5	214	189	15	14	-5	325	300	14	2	-2	574	600	15
9	6	159	147	22	14	-3	110	16	32	2	0	476	455	15
9	7	392	387	13	14	-2	213	215	19	2	1	196	180	12
9	8	490	458	15	14	-1	163	154	24	2	2	273	269	11
9	9	238	222	17	14	0	174	145	21	2	3	471	440	16
10	-12	183	192	20	14	4	252	280	18	2	4	203	220	14
10	-7	255	249	14	14	6	160	154	25	2	5	143	156	18
10	-6	274	262	13	15	-5	193	175	21	2	6	563	542	18
10	-3	382	389	15	15	-1	188	149	21	2	8	127	116	25
10	-2	264	272	13	15	0	199	189	19	3	-15	193	235	20
10	-1	446	407	18	15	1	154	165	25	3	-12	146	149	22
10	1	340	328	13	15	2	197	157	20	3	-10	198	193	15
10	2	261	257	13	16	-2	177	140	22	3	-9	298	289	12
10	7	414	417	14	16	0	156	137	25	3	-8	272	259	11
10	9	250	279	17	16	1	146	158	27	3	-4	327	347	13
10	10	137	108	26						3	-3	283	302	10
10	11	276	295	17	^^^^^^ h = 3 ^^^^^^					3	-2	405	396	17
11	-12	290	276	15						3	0	141	171	17
11	-11	120	109	28	0	-13	219	263	18	3	4	298	290	12
11	-6	389	377	16	0	-7	417	405	16	3	6	235	238	13
11	-3	382	384	13	0	-3	232	213	11	3	12	169	151	22
11	-2	545	555	19	0	-1	592	594	15	3	13	160	136	24
11	1	270	304	14	0	5	294	293	11	4	-13	178	163	19
11	3	316	308	13	0	7	473	465	18	4	-10	160	153	18
11	5	221	243	18	0	9	330	314	13	4	-8	480	515	19
11	8	244	260	18	0	11	208	195	19	4	-4	521	507	16
11	9	240	301	19	1	-14	375	383	15	4	-3	591	587	16
11	10	150	153	25	1	-13	132	95	24	4	-2	164	167	16
12	-11	235	239	17	1	-12	228	216	15	4	0	102	61	22
12	-9	225	230	18	1	-10	133	132	19	4	1	440	425	16
12	-8	315	294	14	1	-9	160	163	16	4	2	230	221	12
12	-7	372	360	15	1	-5	129	136	18	4	4	378	385	14
12	-6	111	128	31	1	-4	316	322	11	4	5	343	351	12
12	-4	144	132	24	1	-3	470	440	14	4	6	329	326	13
12	0	138	93	24	1	-1	108	50	20	4	7	294	299	13
12	3	179	190	21	1	0	181	173	14	4	9	147	111	23
12	7	118	152	33	1	1	574	598	15	4	11	312	301	14
12	8	157	121	24	1	2	392	422	13	5	-15	229	235	17
13	-10	231	264	19	1	3	201	188	13	5	-13	251	274	16
13	-9	177	131	21	1	4	174	177	15	5	-12	308	324	13
13	-8	305	305	15	1	6	821	787	18	5	-9	146	101	18
13	-3	128	75	27	1	9	232	246	16	5	-8	210	204	14
13	2	196	187	19	2	-14	320	332	14	5	-7	266	288	12
13	4	285	316	16	2	-12	290	301	13	5	-6	195	162	13
13	5	222	219	20	2	-10	176	163	16	5	-4	298	289	11
13	6	289	263	15	2	-9	726	705	18	5	-3	228	206	12
13	8	130	94	28	2	-8	298	307	11	5	-2	683	687	16
14	-8	178	150	22	2	-7	280	299	11	5	0	110	48	22
14	-7	130	123	28	2	-6	211	179	12	5	1	357	370	14

10|F|o vs 10|F|c

page 6

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
5	2	233	243	12	9	-11	126	110	27	~~~~~ h = 4 ~~~~~				
5	4	266	236	12	9	-8	108	81	28					
5	5	289	309	12	9	-7	216	218	16					
5	7	301	313	13	9	-4	415	394	15	0	-8	178	190	17
5	9	118	20	28	9	-3	308	312	12	0	-6	173	178	16
5	10	196	178	18	9	-2	151	178	21	0	-2	322	294	12
5	11	206	193	19	9	-1	485	498	18	0	2	403	384	13
6	-13	123	90	26	9	0	328	314	14	0	4	256	254	13
6	-8	271	268	13	9	2	200	222	17	0	6	370	383	13
6	-2	358	362	13	9	4	127	110	26	0	8	102	45	32
6	-1	130	175	20	9	10	146	156	28	1	-13	185	183	19
6	0	780	757	18	10	-11	194	182	19	1	-11	213	200	17
6	2	368	369	14	10	-8	126	147	28	1	-7	160	167	17
6	3	336	344	12	10	-3	144	103	22	1	-6	202	214	14
6	4	183	187	16	10	-2	435	437	15	1	-5	551	534	17
6	5	259	272	13	10	0	289	300	13	1	-4	451	434	17
6	8	197	186	18	10	3	130	140	27	1	-3	504	529	17
6	10	306	299	15	10	4	235	234	16	1	-2	204	221	13
7	-14	139	167	26	10	8	225	220	19	1	-1	150	162	17
7	-13	136	167	26	11	-11	217	206	18	1	0	522	553	17
7	-10	141	144	24	11	-10	132	71	26	1	2	156	149	18
7	-9	158	155	20	11	-9	191	222	20	1	3	209	199	14
7	-8	127	143	24	11	-8	231	251	17	1	6	145	108	21
7	-5	298	304	12	11	-7	240	211	16	2	-14	214	209	18
7	-4	318	320	12	11	-6	198	225	19	2	-10	443	448	15
7	-3	254	288	12	11	-4	223	221	16	2	-9	166	151	18
7	-1	255	287	12	11	-3	311	312	13	2	-8	584	570	17
7	0	248	259	13	11	-1	195	200	19	2	-7	241	242	13
7	1	332	317	13	11	0	194	210	18	2	-6	339	343	12
7	2	480	506	18	11	3	230	206	16	2	-5	345	360	14
7	4	232	236	13	11	6	157	232	28	2	-4	207	194	13
7	5	166	170	18	11	8	222	224	19	2	-2	125	91	19
7	6	174	186	19	11	9	202	165	19	2	0	684	694	17
7	11	155	34	23	12	-10	246	250	17	2	1	360	392	15
8	-13	235	214	16	12	-7	373	364	15	2	2	402	411	14
8	-12	211	205	17	12	-6	554	580	22	2	3	174	190	18
8	-10	294	301	14	12	-3	235	238	17	2	4	393	386	15
8	-9	165	145	19	12	-1	230	230	17	2	6	262	255	14
8	-8	379	368	13	12	2	267	240	15	2	8	163	132	22
8	-6	211	233	15	12	4	235	206	16	3	-11	99	70	32
8	-4	105	112	27	13	-5	305	311	15	3	-9	169	174	18
8	-1	137	89	19	13	5	184	173	22	3	-8	290	317	13
8	0	348	347	14	14	-6	114	111	32	3	-7	190	208	15
8	2	511	497	19	14	-5	142	170	26	3	-6	158	171	17
8	3	263	247	13	14	-4	114	68	31	3	-5	230	188	12
8	6	313	289	13	14	-2	135	137	27	3	-4	142	134	18
8	9	155	145	24	14	4	125	143	32	3	-3	793	813	18
8	10	242	220	18	15	-3	186	157	20	3	-2	146	170	19
9	-13	148	160	25	15	-1	220	221	18	3	-1	474	498	17
9	-12	134	112	25	15	2	206	245	21	3	0	161	112	17

10|F|o vs 10|F|c

page 7

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
3	5	153	135	21	7	7	243	230	16					
4	-11	156	140	22	7	8	364	377	14	^^^^^^ h = 5 ^^^^^^				
4	-8	365	368	15	7	9	169	154	23					
4	-7	170	179	18	8	-11	193	158	19	0	-13	112	27	28
4	-6	302	271	11	8	-9	425	451	17	0	-11	262	301	15
4	-4	236	255	13	8	-8	163	184	22	0	-9	430	427	16
4	-3	432	450	14	8	-7	307	296	13	0	-1	256	253	13
4	-2	607	599	17	8	-6	165	171	19	0	5	258	279	16
4	-1	892	914	19	8	-1	190	193	19	1	-12	206	208	19
4	0	326	355	13	8	1	183	191	19	1	-10	162	125	20
4	1	150	151	19	8	2	152	117	21	1	-9	204	158	16
4	2	139	106	20	8	3	214	202	17	1	-4	181	206	17
4	3	575	563	18	8	4	342	347	13	1	1	115	26	26
4	5	203	178	16	8	9	147	98	26	1	2	149	179	23
4	6	254	238	14	9	-10	133	157	27	1	5	275	301	16
4	7	132	163	28	9	-7	267	292	15	1	6	163	158	23
4	8	114	84	32	9	-6	184	192	20	1	9	125	101	32
4	11	318	322	15	9	-4	152	152	22	2	-13	130	34	26
5	-14	191	184	19	9	-3	228	209	16	2	-11	204	222	18
5	-13	126	148	29	9	-2	102	155	34	2	-9	231	246	17
5	-10	177	163	19	9	3	130	96	26	2	-4	154	185	20
5	-8	147	113	20	9	4	417	410	14	2	-3	261	256	14
5	-7	118	73	24	9	5	255	223	17	2	-2	156	128	19
5	-5	257	248	13	9	7	277	285	15	2	0	203	219	17
5	-4	529	530	18	9	8	282	266	16	2	1	147	129	22
5	-3	269	267	13	10	-10	140	139	26	2	2	192	166	17
5	-1	476	490	18	10	-9	137	63	25	2	3	334	338	13
5	0	191	146	15	10	-7	204	214	19	2	8	112	59	33
5	2	179	156	17	10	-6	191	163	19	3	-13	103	79	33
5	5	361	348	14	10	1	125	75	27	3	-12	213	210	18
5	8	239	236	17	10	6	231	258	18	3	-7	164	201	21
5	9	379	390	16	10	7	281	265	16	3	-5	150	161	22
6	-12	158	119	21	11	-8	112	97	31	3	1	146	124	22
6	-10	199	168	17	11	-6	255	260	17	3	3	160	104	20
6	-6	220	247	16	11	-5	108	92	33	3	4	140	108	24
6	-4	124	138	24	11	-4	205	202	19	3	6	373	370	15
6	-3	251	289	13	11	-3	175	166	21	3	8	133	121	28
6	-2	153	116	18	11	-2	167	163	22	4	-10	145	177	25
6	-1	508	512	18	11	0	163	195	25	4	-5	138	139	23
6	1	172	160	18	11	4	225	227	18	4	-3	233	236	15
6	2	355	375	13	12	-6	133	124	27	4	-2	191	227	17
6	4	163	133	20	12	-1	307	351	15	4	-1	325	334	13
6	5	139	93	23	12	0	120	23	29	4	1	117	63	27
6	6	263	272	16	12	1	284	275	15	4	2	392	390	16
6	7	215	222	18	12	3	211	198	19	4	7	200	194	21
7	-12	168	176	21	12	5	190	195	20	5	-6	124	92	26
7	-9	213	216	17	13	-6	210	208	19	5	-5	227	254	16
7	-6	212	236	16	13	-4	168	194	24	5	-4	195	215	18
7	-3	368	365	13	13	-2	133	107	27	5	-2	118	106	26
7	1	161	138	19	13	1	130	141	29	5	0	356	356	14

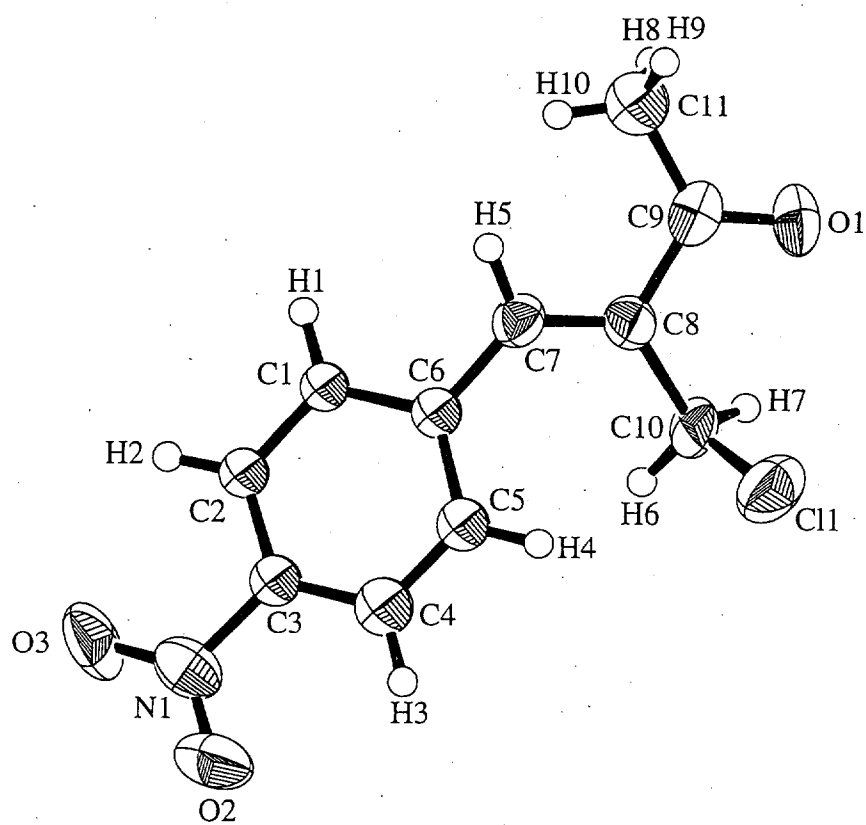
10|F|o vs 10|F|c

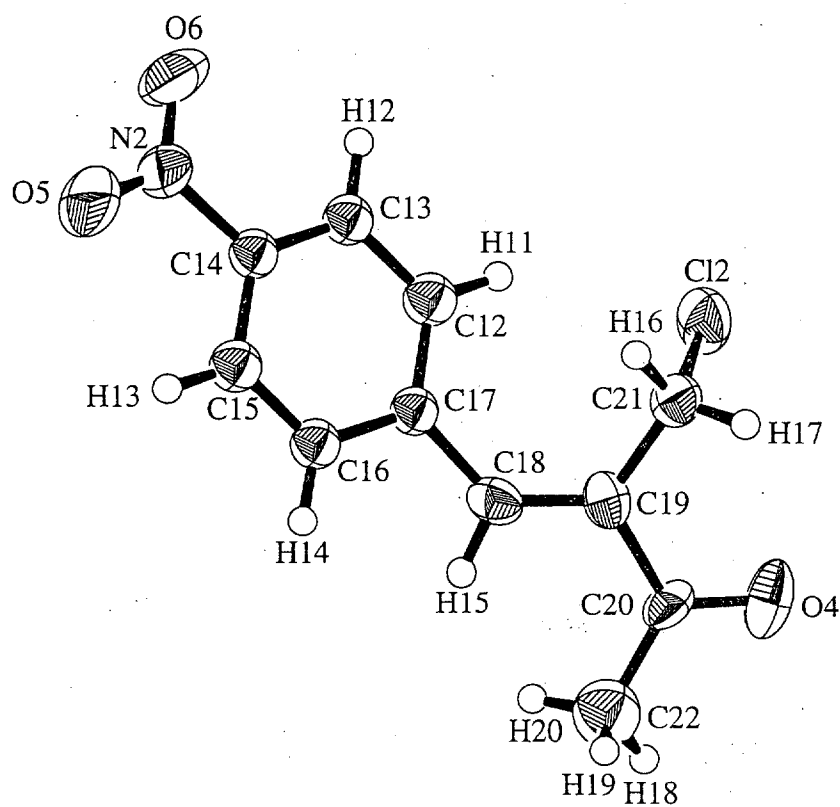
page 8

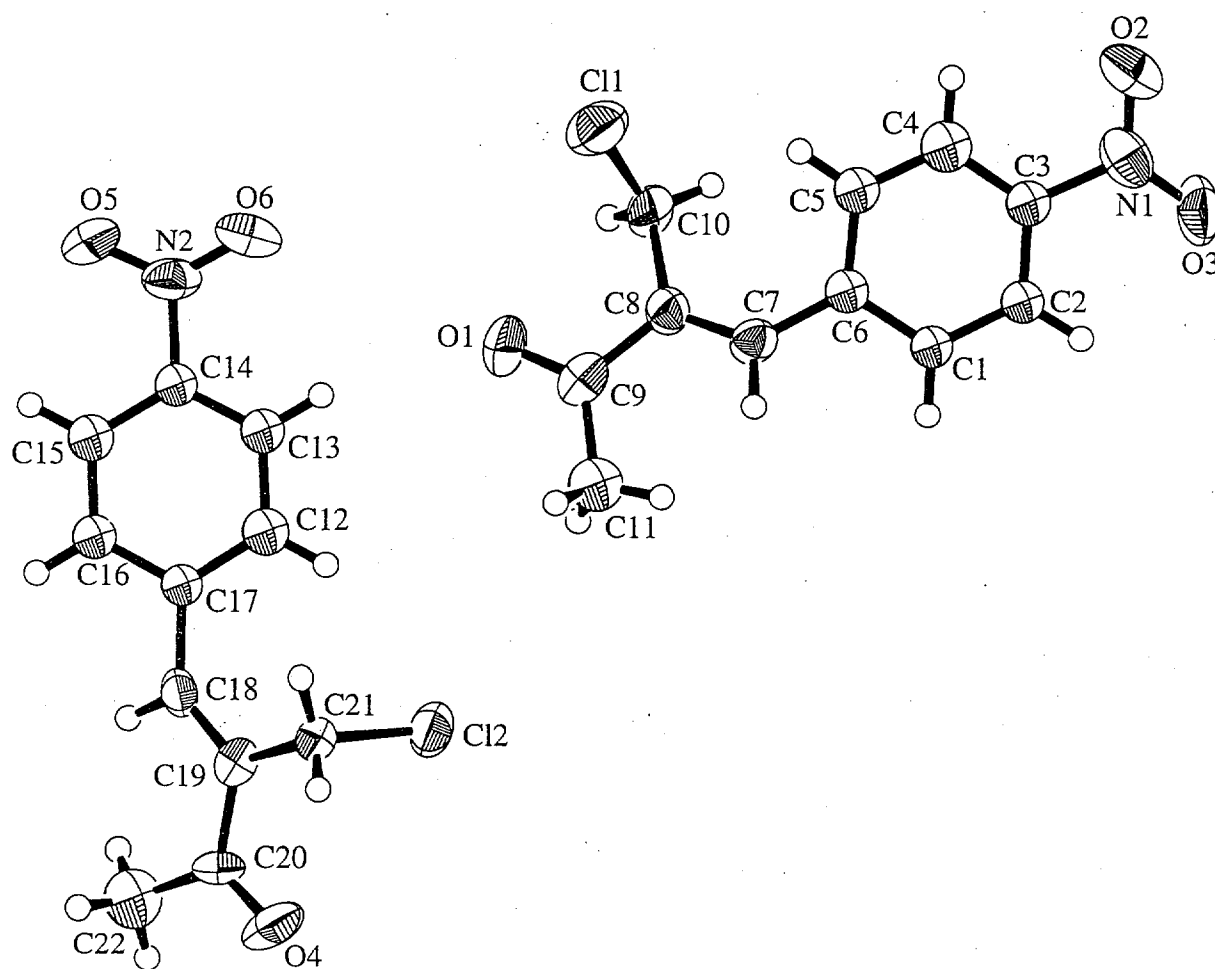
k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
5	1	153	153	23	2	-8	178	210	23					
5	4	155	118	24	2	0	143	146	32					
5	6	164	177	23	2	2	284	271	17					
5	8	192	157	20	2	5	169	223	29					
6	-8	240	231	16	3	-6	177	170	24					
6	-2	201	220	18	3	-5	150	125	28					
6	-1	112	128	30	3	-4	184	216	24					
6	1	197	226	20	3	0	166	167	26					
6	2	146	128	25	4	-7	156	182	28					
6	3	134	106	27	4	-6	274	283	17					
6	5	180	161	22	4	-4	193	168	24					
7	-6	176	152	20	4	-1	215	225	22					
7	-2	106	146	34	4	6	262	270	20					
7	6	267	266	16	5	-6	154	96	25					
7	7	153	129	25	5	-4	323	350	16					
8	-10	203	207	20	5	-3	178	167	24					
8	-6	142	133	25	6	-9	173	129	24					
8	-5	201	203	19	6	-7	253	272	19					
8	-4	137	71	25	6	-3	159	234	32					
8	-2	319	329	14	6	-2	141	195	31					
8	0	138	110	25	6	-1	206	278	23					
8	2	278	276	16	6	4	151	154	31					
8	3	149	120	25	7	-8	139	159	32					
9	-9	268	317	17	7	-6	188	132	24					
9	-8	129	167	30	7	-5	163	219	30					
9	-3	246	261	17	7	-4	171	132	24					
9	-2	134	130	28	7	1	212	182	22					
9	0	132	62	26	7	4	187	178	24					
9	5	228	259	19	8	-4	130	80	30					
9	6	159	123	23	8	1	250	237	19					
10	-7	232	231	18										
10	-6	281	287	15										
10	-5	136	138	28										
11	-5	248	247	20										
11	-1	146	196	30										

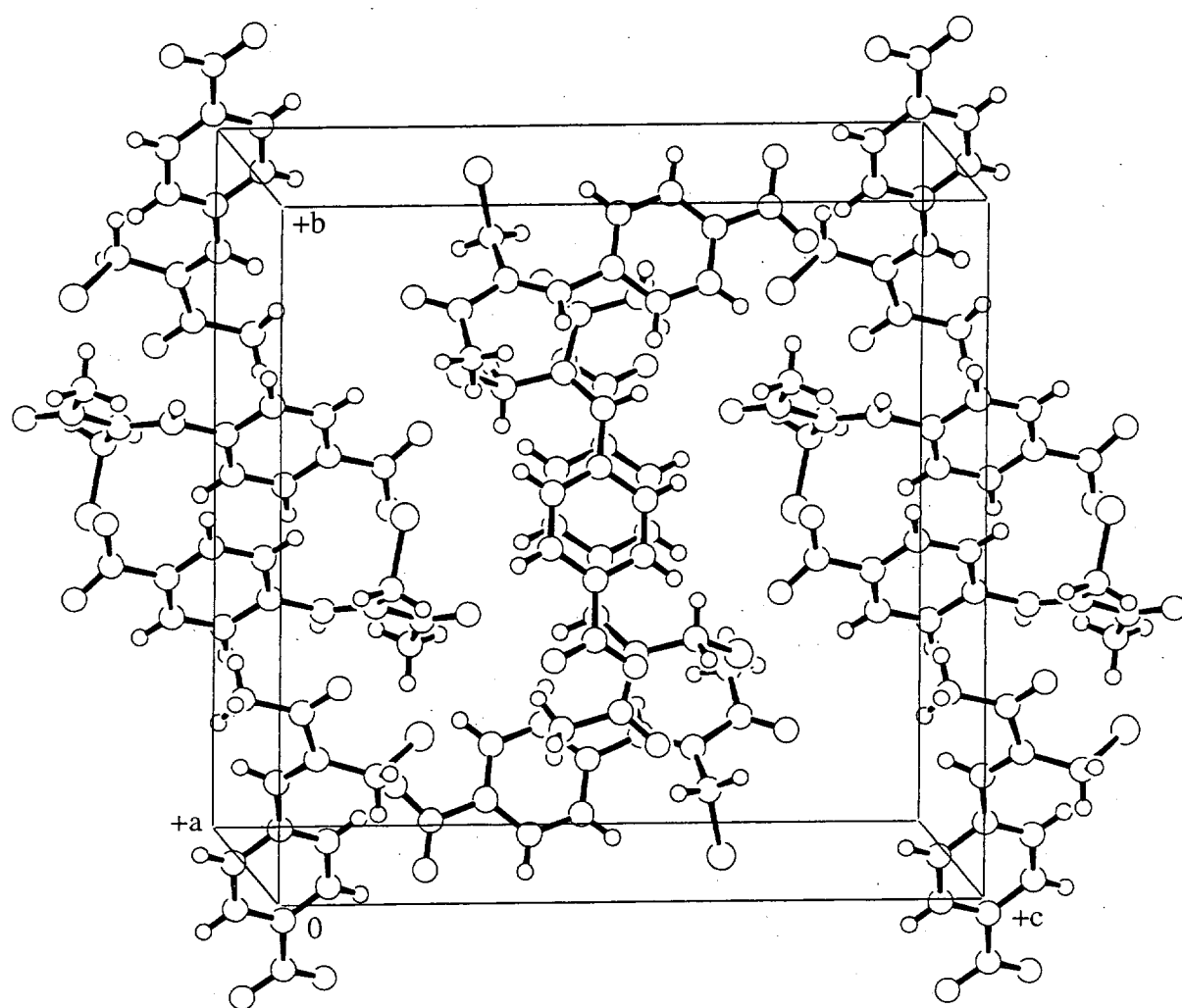
^^^^^^ h = 6 ^^^^^^

0	-10	216	225	21
0	-8	501	530	17
0	-6	157	148	26
0	-2	159	210	28
0	2	153	152	29
0	6	150	150	30
1	-11	152	153	27
1	-10	125	135	35
1	-7	141	109	28
1	-6	171	131	24
1	-1	313	301	16
1	4	163	136	28









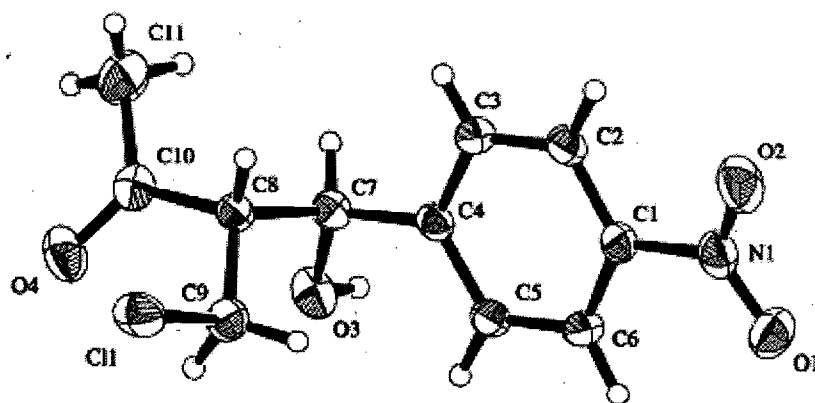


Figure 1. The crystal structure of **1a**.

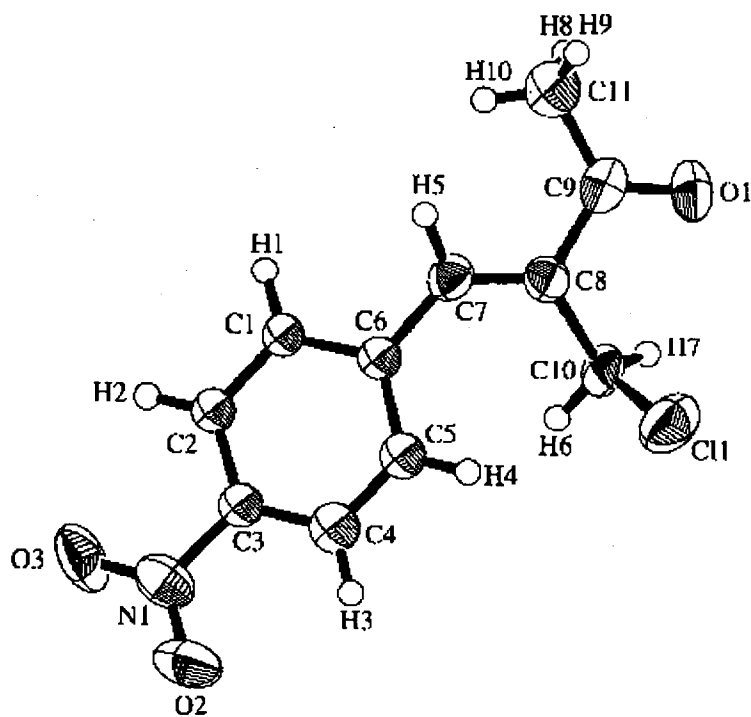


Figure 2. The crystal structure of **3a**.