

STRUCTURE DETERMINATION SUMMARYCrystal Data

Empirical Formula	$C_{25}H_{45}N_3O_8SSi_2$
Color; Habit	Colourless prism
Crystal Size (mm)	$0.22\{010\}\{0\bar{1}0\} \times 0.36\{101\} \times 0.32\{10\bar{1}\}$
Crystal System	Monoclinic
Space Group	$P2_1$
Unit Cell Dimensions	$a = 12.200(2) \text{ \AA}$ $b = 21.648(3) \text{ \AA}$ $c = 12.475(2) \text{ \AA}$ $\beta = 91.09(1)^\circ$
Volume	$3293.9(14) \text{ \AA}^3$
Z	4
Formula Weight	603.9
Density(calc.)	1.218 g/cm^3
Absorption Coefficient	2.17 cm^{-1}
F(000)	1296

Data Collection

Diffractometer Used	Siemens P4
Radiation	MoK α (λ = 0.71073 Å)
Temperature (K)	200
Monochromator	Highly oriented graphite crystal
2 θ Range	4.0 to 45.0°
Scan Type	ω
Scan Speed	Variable; 2.25 to 30.00°/min. in ω
Scan Range (ω)	1.40°
Background Measurement	Stationary crystal and stationary counter at beginning and end of scan, each for 25.0% of total scan time
Standard Reflections	3 measured every 100 reflections
Index Ranges	$0 \leq h \leq 13$, $0 \leq k \leq 23$ $-13 \leq l \leq 13$
Reflections Collected	4672
Independent Reflections	4433 (R_{int} = 2.66%)
Observed Reflections	3613 ($F > 4.0\sigma(F)$)
Absorption Correction	Face-indexed numerical
Min./Max. Transmission	0.9324 / 0.9556

Solution and Refinement

System Used	Siemens SHELXTL IRIS
Solution	Direct Methods
Refinement Method	Full-Matrix Least-Squares
Quantity Minimized	$\sum w(F_o - F_c)^2$
Hydrogen Atoms	Riding model, refined isotropic U^*
Weighting Scheme	$w^{-1} = \sigma^2(F)$
Number of Parameters Refined	685
Final R Indices (obs. data)	R = 5.62 %, wR = 5.42 %
(R Indices (all data)	R = 6.85 %, wR = 5.50 %)
Goodness-of-Fit	2.34
Largest and Mean Δ/σ	0.012, 0.001
Data-to-Parameter Ratio	5.3:1
Largest Difference Peak	0.74 eÅ ⁻³
Largest Difference Hole	-0.52 eÅ ⁻³

* Because of the limited number of observed data, the two molecules per asymmetric unit and the resolvable disorder present in one molecule, hydrogen atom isotropic thermal parameters were refined using common variables, the groupings being dependent on location and nature.

Table 1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U(eq)
Molecule 1				
N(1)	9171(6)	7060(3)	2470(5)	29(2)
C(2)	9359(7)	6577(5)	3162(7)	38(4)
N(3)	8899(6)	6665(3)	4168(5)	33(3)
C(4)	8354(7)	7188(4)	4500(7)	31(3)
C(5)	8234(7)	7679(4)	3752(7)	33(3)
C(6)	8657(7)	7591(4)	2767(6)	31(3)
C(1')	9609(7)	7020(4)	1385(6)	30(3)
C(2')	8749(7)	7082(4)	492(6)	31(3)
C(3')	9493(8)	7261(4)	-427(6)	36(3)
C(4')	10317(7)	7716(4)	144(6)	30(3)
O(4')	10339(5)	7525(3)	1242(4)	32(2)
C(5')	10090(7)	8398(4)	75(7)	37(3)
O(5')	8990(4)	8527(3)	424(5)	36(2)
O(7)	9869(6)	6111(3)	2931(5)	56(3)
C(8)	9074(9)	6160(5)	4957(8)	61(4)
O(9)	8020(5)	7214(3)	5427(5)	48(3)
C(10)	7666(8)	8268(5)	4079(7)	49(4)
O(11)	8155(4)	6549(3)	344(4)	35(2)
Si(12)	6806(3)	6476(2)	182(3)	73(1)
C(13)	6106(10)	7171(6)	587(16)	159(11)
C(14)	6474(13)	6404(10)	-1289(10)	159(10)
C(15)	6408(11)	5770(6)	869(13)	93(6)
C(16)	5193(9)	5596(7)	535(13)	117(7)
C(17)	7116(12)	5242(7)	585(18)	174(12)
C(18)	6609(14)	5882(9)	2111(11)	155(10)
O(19)	10130(5)	6704(3)	-694(4)	36(2)
S(20)	10065(2)	6525	-1919(2)	45(1)
C(21)	9194(8)	7099(5)	-2291(7)	43(4)
C(22)	8927(8)	7447(4)	-1449(8)	37(3)
N(23)	8206(6)	7914(4)	-1437(6)	54(3)
O(24)	9609(6)	5928(3)	-2014(6)	67(3)
O(25)	11142(6)	6600(4)	-2346(5)	76(3)
Si(26)	8521(2)	9221(2)	799(2)	38(1)
C(27)	7047(7)	9058(5)	975(8)	51(4)
C(28)	9260(8)	9443(5)	2064(8)	56(4)
C(29)	8718(8)	9815(5)	-273(8)	47(4)
C(30)	8297(10)	9587(6)	-1364(9)	83(5)
C(31)	8080(8)	10401(5)	74(10)	67(5)
C(32)	9979(6)	10001(3)	-348(5)	59(4)
Molecule 2 (Disordered model A:B = 5:3)				
N(1)	4233(6)	7890(4)	3318(6)	35(3)
C(2)	4373(7)	8391(5)	2641(7)	42(4)
N(3)	3899(6)	8333(4)	1641(5)	40(3)
C(4)	3353(7)	7804(5)	1276(8)	40(4)
C(5)	3271(7)	7301(4)	1988(7)	30(3)
C(6)	3703(7)	7357(4)	2969(7)	34(3)
C(1')	4653(6)	7935(3)	4414(5)	32(3)
C(2')	3811(7)	7863(4)	5281(7)	33(3)
C(3')	4572(7)	7717(4)	6244(6)	30(3)
C(4')	5429(7)	7298(4)	5744(7)	35(3)
O(4')	5405(5)	7434(3)	4597(4)	33(2)
C(5')	5352(9)	6606(5)	5880(8)	59(4)
O(5')A	4523(9)	6346(6)	5475(10)	44(3)

O(5')B	4103(15)	6399(10)	5428(15)	44(3)
O(7)	4875(6)	8859(4)	2931(5)	61(3)
C(8)	3944(10)	8873(6)	930(8)	78(5)
O(9)	2984(5)	7807(4)	361(5)	59(3)
C(10)	2712(8)	6716(5)	1607(7)	53(4)
O(11)	3152(4)	8373(3)	5410(4)	36(2)
Si(12)	1841(2)	8453(2)	5066(2)	58(1)
C(13)	1179(9)	7667(6)	5022(14)	130(8)
C(14)	1763(10)	8812(8)	3731(9)	121(8)
C(15)	1247(9)	8968(6)	6093(9)	68(5)
C(16)	34(10)	9135(8)	5822(10)	120(7)
C(17)	1933(10)	9563(6)	6190(11)	91(6)
C(18)	1273(11)	8646(7)	7192(10)	115(7)
O(19)	5125(5)	8293(3)	6513(4)	39(2)
S(20)	4983(2)	8498(2)	7724(2)	50(1)
C(21)	4137(8)	7908(5)	8049(8)	48(4)
C(22)	3973(8)	7526(5)	7248(7)	42(4)
N(23)	3323(7)	7016(4)	7181(7)	63(4)
O(24)	4469(6)	9091(3)	7729(6)	76(3)
O(25)	6014(6)	8464(4)	8252(5)	73(3)
Si(26)A	4350(4)	5573(3)	5597(4)	51(1)
Si(26)B	3492(7)	5699(4)	5522(6)	51(1)
C(27)	3821(10)	5398(6)	6937(9)	84(4)
C(28)A	5637(15)	5188(8)	5449(16)	70(5)
C(28)B	2105(25)	5816(16)	5210(24)	70(5)
C(29)A	3302(15)	5349(8)	4612(13)	55(4)
C(29)B	4102(26)	5184(13)	4565(22)	55(4)
C(30)A	2933(16)	4674(10)	4688(18)	76(6)
C(30)B	3499(27)	4555(17)	4565(31)	76(6)
C(31)	3876(10)	5436(6)	3434(9)	85(4)
C(32)A	2320(17)	5783(10)	4572(16)	83(6)
C(32)B	5244(27)	5032(16)	4724(28)	83(6)

A:B Occupancy 5:3 . C(5'), C(27) and C(31) common to both disorder models.

Thermal parameters of disorder pairings refined as common variables.

* Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table 2. Bond lengths (Å)

Molecule 1

N(1)-C(2)	1.372(12)	N(1)-C(6)	1.364(12)
N(1)-C(1')	1.468(10)	C(2)-N(3)	1.398(11)
C(2)-O(7)	1.222(13)	N(3)-C(4)	1.382(11)
N(3)-C(8)	1.483(12)	C(4)-C(5)	1.421(13)
C(4)-O(9)	1.235(11)	C(5)-C(6)	1.355(12)
C(5)-C(10)	1.510(13)	C(1')-C(2')	1.521(11)
C(1')-O(4')	1.423(11)	C(2')-C(3')	1.527(12)
C(2')-O(11)	1.372(11)	C(3')-C(4')	1.568(12)
C(3')-O(19)	1.475(11)	C(3')-C(22)	1.493(12)
C(4')-O(4')	1.431(9)	C(4')-C(5')	1.505(13)
C(5')-O(5')	1.445(10)	O(5')-Si(26)	1.677(7)
O(11)-Si(12)	1.661(6)	Si(12)-C(13)	1.806(15)
Si(12)-C(14)	1.878(14)	Si(12)-C(15)	1.822(14)
C(15)-C(16)	1.577(18)	C(15)-C(17)	1.482(20)
C(15)-C(18)	1.582(21)	O(19)-S(20)	1.577(6)
S(20)-C(21)	1.694(10)	S(20)-O(24)	1.412(7)
S(20)-O(25)	1.437(7)	C(21)-C(22)	1.338(13)
C(22)-N(23)	1.342(13)	Si(26)-C(27)	1.850(9)
Si(26)-C(28)	1.865(10)	Si(26)-C(29)	1.876(10)
C(29)-C(30)	1.528(15)	C(29)-C(31)	1.554(14)
C(29)-C(32)	1.594(12)		

Molecule 2

N(1)-C(2)	1.387(13)	N(1)-C(6)	1.390(12)
N(1)-C(1')	1.454(9)	C(2)-N(3)	1.371(11)
C(2)-O(7)	1.232(13)	N(3)-C(4)	1.396(13)
N(3)-C(8)	1.468(14)	C(4)-C(5)	1.410(13)
C(4)-O(9)	1.220(11)	C(5)-C(6)	1.329(12)
C(5)-C(10)	1.510(13)	C(1')-C(2')	1.513(11)
C(1')-O(4')	1.437(9)	C(2')-C(3')	1.537(12)
C(2')-O(11)	1.377(11)	C(3')-C(4')	1.525(12)
C(3')-O(19)	1.454(11)	C(3')-C(22)	1.520(12)
C(4')-O(4')	1.460(10)	C(4')-C(5')	1.511(14)
O(5')A-C(5')	1.257(16)	O(5')A-Si(26)A	1.693(14)
O(5')B-C(5')	1.676(22)	O(5')B-Si(26)B	1.693(22)
O(19)-S(20)	1.587(6)	S(20)-C(21)	1.696(11)
S(20)-O(24)	1.428(8)	S(20)-O(25)	1.410(7)
C(21)-C(22)	1.309(14)	C(22)-N(23)	1.361(14)
O(11)-Si(12)	1.657(6)	Si(12)-C(13)	1.885(14)
Si(12)-C(14)	1.838(13)	Si(12)-C(15)	1.855(12)
C(15)-C(16)	1.553(16)	C(15)-C(17)	1.540(17)
C(15)-C(18)	1.537(18)	Si(26)A-C(27)	1.844(13)
Si(26)A-C(28)A	1.789(19)	Si(26)A-C(29)A	1.822(18)
Si(26)B-C(27)	1.917(14)	Si(26)B-C(28)B	1.747(32)
Si(26)B-C(29)B	1.805(30)	C(29)A-C(30)A	1.532(27)
C(29)A-C(31)	1.651(20)	C(29)A-C(32)A	1.523(28)
C(29)B-C(30)B	1.546(46)	C(29)B-C(31)	1.533(30)
C(29)B-C(32)B	1.442(45)		

Table 3. Bond angles ($^{\circ}$)

Molecule 1

C(2)-N(1)-C(6)	122.9(7)	C(2)-N(1)-C(1')	118.4(7)
C(6)-N(1)-C(1')	118.5(7)	N(1)-C(2)-N(3)	113.3(8)
N(1)-C(2)-O(7)	124.1(8)	N(3)-C(2)-O(7)	122.5(8)
C(2)-N(3)-C(4)	125.8(8)	C(2)-N(3)-C(8)	116.2(8)
C(4)-N(3)-C(8)	117.9(7)	N(3)-C(4)-C(5)	117.4(8)
N(3)-C(4)-O(9)	119.2(8)	C(5)-C(4)-O(9)	123.4(8)
C(4)-C(5)-C(6)	117.0(8)	C(4)-C(5)-C(10)	119.7(8)
C(6)-C(5)-C(10)	123.3(8)	N(1)-C(6)-C(5)	123.4(8)
N(1)-C(1')-C(2')	114.4(7)	N(1)-C(1')-O(4')	108.0(6)
C(2')-C(1')-O(4')	105.4(6)	C(1')-C(2')-C(3')	99.2(7)
C(1')-C(2')-O(11)	112.3(7)	C(3')-C(2')-O(11)	115.7(7)
C(2')-C(3')-C(4')	101.8(6)	C(2')-C(3')-O(19)	106.5(7)
C(2')-C(3')-C(22)	115.9(8)	C(4')-C(3')-O(19)	106.3(7)
C(4')-C(3')-C(22)	120.1(8)	O(19)-C(3')-C(22)	105.3(7)
C(3')-C(4')-O(4')	104.7(6)	C(3')-C(4')-C(5')	118.3(7)
O(4')-C(4')-C(5')	109.8(7)	C(1')-O(4')-C(4')	109.9(6)
C(4')-C(5')-O(5')	110.0(7)	C(5')-O(5')-Si(26)	125.4(5)
C(2')-O(11)-Si(12)	128.0(6)	O(11)-Si(12)-C(13)	108.8(5)
O(11)-Si(12)-C(14)	108.8(5)	O(11)-Si(12)-C(15)	107.1(5)
C(13)-Si(12)-C(14)	104.4(9)	C(13)-Si(12)-C(15)	115.7(7)
C(14)-Si(12)-C(15)	109.6(8)	C(3')-O(19)-S(20)	113.7(5)
O(19)-S(20)-C(21)	96.0(4)	O(19)-S(20)-O(24)	108.7(4)
O(19)-S(20)-O(25)	107.6(4)	C(21)-S(20)-O(24)	113.9(5)
C(21)-S(20)-O(25)	112.9(5)	O(24)-S(20)-O(25)	115.7(5)
S(20)-C(21)-C(22)	111.0(7)	C(3')-C(22)-C(21)	113.8(8)
C(3')-C(22)-N(23)	119.1(8)	C(21)-C(22)-N(23)	127.1(9)
Si(12)-C(15)-C(16)	109.5(10)	Si(12)-C(15)-C(17)	111.9(11)
Si(12)-C(15)-C(18)	107.2(10)	C(16)-C(15)-C(17)	107.5(11)
C(16)-C(15)-C(18)	115.0(12)	C(17)-C(15)-C(18)	105.8(14)
O(5')-Si(26)-C(29)	111.5(4)	O(5')-Si(26)-C(27)	101.5(4)
O(5')-Si(26)-C(28)	107.8(4)	C(27)-Si(26)-C(28)	113.8(4)
C(27)-Si(26)-C(29)	110.7(4)	C(28)-Si(26)-C(29)	111.1(5)
Si(26)-C(29)-C(30)	111.6(7)	Si(26)-C(29)-C(31)	106.9(7)
Si(26)-C(29)-C(32)	110.6(6)	C(30)-C(29)-C(31)	110.5(9)
C(30)-C(29)-C(32)	109.7(8)	C(31)-C(29)-C(32)	107.5(7)

Molecule 2

C(2)-N(1)-C(6)	121.4(7)	C(2)-N(1)-C(1')	118.4(7)
C(6)-N(1)-C(1')	120.2(7)	N(1)-C(2)-N(3)	115.3(9)
N(1)-C(2)-O(7)	122.0(8)	N(3)-C(2)-O(7)	122.7(9)
C(2)-N(3)-C(4)	124.2(8)	C(2)-N(3)-C(8)	117.1(8)
C(4)-N(3)-C(8)	118.6(8)	N(3)-C(4)-C(5)	117.9(8)
N(3)-C(4)-O(9)	117.8(9)	C(5)-C(4)-O(9)	124.3(10)
C(4)-C(5)-C(6)	118.5(8)	C(4)-C(5)-C(10)	119.2(8)
C(6)-C(5)-C(10)	122.3(8)	N(1)-C(6)-C(5)	122.6(8)
N(1)-C(1')-C(2')	115.7(6)	N(1)-C(1')-O(4')	108.1(6)
C(2')-C(1')-O(4')	104.4(6)	C(1')-C(2')-C(3')	99.9(6)
C(1')-C(2')-O(11)	114.0(7)	C(3')-C(2')-O(11)	114.8(7)
C(2')-C(3')-C(4')	102.2(6)	C(2')-C(3')-O(19)	105.9(7)
C(4')-C(3')-O(19)	106.6(7)	C(2')-C(3')-C(22)	114.1(7)
C(4')-C(3')-C(22)	121.3(8)	O(19)-C(3')-C(22)	105.7(7)
C(3')-C(4')-O(4')	106.3(7)	C(3')-C(4')-C(5')	119.9(8)
O(4')-C(4')-C(5')	108.0(7)	C(1')-O(4')-C(4')	107.9(6)
C(4')-C(5')-O(5')A	116.8(10)	C(4')-C(5')-O(5')B	106.6(10)
C(5')-O(5')A-Si(26)A	120.5(10)	C(5')-O(5')B-Si(26)B	128.0(13)
C(2')-O(11)-Si(12)	128.1(6)	O(11)-Si(12)-C(13)	108.9(5)

O(11)-Si(12)-C(14)	108.2(5)	C(13)-Si(12)-C(14)	109.9(7)
O(11)-Si(12)-C(15)	105.8(4)	C(13)-Si(12)-C(15)	112.9(6)
C(14)-Si(12)-C(15)	111.0(6)	Si(12)-C(15)-C(16)	111.9(8)
Si(12)-C(15)-C(17)	109.7(8)	C(16)-C(15)-C(17)	109.7(11)
Si(12)-C(15)-C(18)	110.0(9)	C(16)-C(15)-C(18)	107.6(10)
C(17)-C(15)-C(18)	107.9(10)	C(3')-O(19)-S(20)	113.7(5)
O(19)-S(20)-C(21)	95.4(4)	O(19)-S(20)-O(24)	108.2(4)
C(21)-S(20)-O(24)	113.9(5)	O(19)-S(20)-O(25)	108.5(4)
C(21)-S(20)-O(25)	113.0(5)	O(24)-S(20)-O(25)	115.6(5)
S(20)-C(21)-C(22)	112.2(8)	C(3')-C(22)-C(21)	112.9(9)
C(3')-C(22)-N(23)	117.3(8)	C(21)-C(22)-N(23)	129.8(9)
O(5')A-Si(26)A-C(27)	109.3(6)	O(5')A-Si(26)A-C(28)A	109.9(7)
C(27)-Si(26)A-C(28)A	108.7(8)	O(5')A-Si(26)A-C(29)A	106.8(7)
C(27)-Si(26)A-C(29)A	107.7(7)	C(28)A-Si(26)A-C(29)A	114.3(9)
O(5')B-Si(26)B-C(27)	106.4(8)	O(5')B-Si(26)B-C(28)B	106.3(14)
C(27)-Si(26)B-C(28)B	116.1(12)	O(5')B-Si(26)B-C(29)B	108.6(12)
C(27)-Si(26)B-C(29)B	108.5(11)	C(28)B-Si(26)B-C(29)B	110.6(15)
Si(26)A-C(29)A-C(30)A	114.5(13)	Si(26)A-C(29)A-C(31)	105.4(11)
C(30)A-C(29)A-C(31)	107.1(14)	Si(26)A-C(29)A-C(32)A	113.5(13)
C(30)A-C(29)A-C(32)A	111.0(16)	C(31)-C(29)A-C(32)A	104.3(13)
Si(26)B-C(29)B-C(30)B	110.0(22)	Si(26)B-C(29)B-C(31)	108.6(17)
C(30)B-C(29)B-C(31)	103.7(22)	Si(26)B-C(29)B-C(32)B	117.3(22)
C(30)B-C(29)B-C(32)B	105.0(26)	C(31)-C(29)B-C(32)B	111.4(24)

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Molecule 1						
N(1)	41(5)	23(4)	24(4)	6(4)	10(3)	3(4)
C(2)	43(6)	43(7)	27(6)	-11(6)	-10(4)	-4(5)
N(3)	42(4)	31(5)	27(4)	3(4)	-1(4)	12(4)
C(4)	34(6)	36(6)	23(5)	-11(5)	0(4)	5(5)
C(5)	22(5)	38(6)	40(6)	1(4)	2(4)	-11(5)
C(6)	37(6)	33(6)	23(5)	-3(5)	1(4)	5(4)
C(1')	36(6)	25(5)	29(5)	5(5)	3(4)	1(4)
C(2')	31(5)	26(6)	36(5)	5(5)	6(4)	7(4)
C(3')	46(6)	39(6)	24(5)	11(5)	-3(5)	-2(4)
C(4')	22(5)	39(6)	27(5)	7(4)	0(4)	14(4)
O(4')	35(4)	31(4)	31(3)	-3(3)	1(3)	4(3)
C(5')	35(6)	37(6)	38(5)	-12(5)	9(4)	3(5)
O(5')	29(4)	27(3)	52(4)	6(3)	2(3)	2(3)
O(7)	88(6)	36(4)	45(4)	29(4)	11(4)	7(3)
C(8)	92(9)	47(7)	45(6)	7(7)	15(6)	20(5)
O(9)	45(4)	66(5)	34(4)	6(4)	1(3)	1(3)
C(10)	52(6)	56(7)	39(6)	7(6)	12(5)	-7(5)
O(11)	36(4)	29(4)	40(3)	-3(3)	-2(3)	-1(3)
Si(12)	39(2)	59(2)	120(3)	-8(2)	1(2)	7(2)
C(13)	39(8)	69(10)	370(30)	17(8)	23(12)	-36(14)
C(14)	128(13)	275(25)	73(10)	-77(16)	-50(9)	56(13)
C(15)	84(10)	58(9)	137(13)	-4(8)	9(9)	-7(8)
C(16)	28(7)	104(12)	219(17)	-33(8)	-6(9)	24(12)
C(17)	82(12)	61(11)	380(32)	-29(9)	66(15)	-24(15)
C(18)	180(17)	226(21)	60(10)	-50(17)	7(10)	29(12)
O(19)	47(4)	29(4)	32(3)	16(3)	0(3)	1(3)
S(20)	58(2)	43(2)	33(1)	4(1)	9(1)	-1(1)
C(21)	61(7)	49(7)	19(5)	-7(6)	-6(5)	4(5)
C(22)	43(6)	29(6)	39(6)	-3(5)	-16(5)	12(5)
N(23)	63(6)	60(6)	37(5)	21(5)	-18(4)	1(4)
O(24)	96(6)	38(5)	68(5)	-5(4)	-5(4)	-10(4)
O(25)	59(5)	114(7)	55(4)	3(5)	36(4)	5(5)
Si(26)	41(2)	29(1)	43(2)	2(1)	-3(1)	2(1)
C(27)	44(6)	58(7)	51(6)	4(5)	3(5)	-1(5)
C(28)	60(7)	48(7)	59(7)	-3(6)	-18(6)	6(6)
C(29)	46(6)	34(6)	61(7)	9(5)	-8(6)	11(5)
C(30)	99(10)	82(9)	66(8)	-11(8)	-35(8)	40(7)
C(31)	49(7)	41(7)	109(10)	5(6)	-16(7)	16(6)
C(32)	71(8)	34(6)	72(8)	-3(6)	14(6)	19(6)
Molecule 2						
N(1)	37(5)	35(5)	32(5)	-2(4)	-5(4)	-1(4)
C(2)	33(6)	52(7)	39(6)	-1(6)	7(5)	14(6)
N(3)	46(5)	55(6)	18(4)	-3(5)	2(3)	8(4)
C(4)	30(6)	68(8)	22(5)	2(6)	4(4)	-4(5)
C(5)	26(5)	32(6)	32(5)	8(4)	0(4)	-7(5)
C(6)	40(6)	18(5)	43(6)	-5(5)	2(5)	-8(4)
C(1')	40(6)	32(5)	24(5)	-7(5)	-3(4)	-4(4)
C(2')	34(6)	28(5)	38(6)	1(5)	-5(5)	-6(4)
C(3')	28(5)	29(5)	33(5)	-2(4)	6(4)	-1(4)
C(4')	31(5)	39(6)	34(5)	-5(5)	-9(4)	4(4)
O(4')	34(4)	34(4)	30(3)	4(3)	4(3)	2(3)
C(5')	87(8)	53(7)	37(6)	11(7)	8(6)	15(6)
O(7)	83(6)	53(5)	45(4)	-34(5)	-7(4)	15(4)
C(8)	90(9)	103(10)	42(7)	-15(8)	-4(6)	21(7)

O(9)	38(4)	105(6)	35(4)	-6(4)	-3(3)	-1(4)
C(10)	46(6)	56(7)	56(7)	7(6)	-16(5)	-20(6)
O(11)	32(3)	42(4)	35(3)	4(3)	-4(3)	-4(3)
Si(12)	38(2)	74(2)	63(2)	13(2)	-8(1)	-14(2)
C(13)	30(7)	107(12)	252(20)	2(8)	-23(10)	-70(13)
C(14)	82(10)	226(19)	56(8)	79(12)	-6(7)	20(10)
C(15)	53(8)	78(9)	75(8)	22(7)	-2(6)	-1(7)
C(16)	69(9)	197(18)	93(10)	53(11)	-18(8)	-41(11)
C(17)	84(10)	58(8)	131(13)	7(8)	10(9)	-21(8)
C(18)	101(11)	158(16)	88(10)	49(11)	51(8)	41(10)
O(19)	45(4)	42(4)	29(3)	-11(3)	-4(3)	-10(3)
S(20)	54(2)	55(2)	40(1)	14(2)	-15(1)	-17(1)
C(21)	62(7)	60(7)	22(5)	10(6)	2(5)	-1(5)
C(22)	51(7)	48(7)	28(6)	6(6)	0(5)	10(5)
N(23)	85(7)	53(6)	52(6)	-23(6)	21(5)	11(5)
O(24)	93(6)	56(5)	79(6)	26(5)	-11(5)	-23(4)
O(25)	63(5)	96(6)	59(5)	8(5)	-32(4)	-22(5)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2(h^2a^{*2}u_{11} + \dots + 2klb^*c^*u_{23})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
Molecule 1				
H(6)	8594	7921	2256	17(7)
H(1')	9996	6637	1307	17(7)
H(2')	8268	7418	655	17(7)
H(4')	11031	7635	-134	17(7)
H(5'x)	10608	8617	522	17(7)
H(5'y)	10167	8537	-650	17(7)
H(8x)	8733	6266	5620	106(18)
H(8y)	9847	6104	5080	106(18)
H(8z)	8760	5785	4682	106(18)
H(10x)	7657	8551	3487	106(18)
H(10y)	8057	8449	4675	106(18)
H(10z)	6927	8179	4281	106(18)
H(13x)	6270	7234	1335	257(28)
H(13y)	5327	7139	480	257(28)
H(13z)	6379	7513	182	257(28)
H(14x)	6804	6033	-1553	257(28)
H(14y)	6744	6752	-1680	257(28)
H(14z)	5692	6378	-1382	257(28)
H(16x)	4947	5227	883	257(28)
H(16y)	5174	5536	-227	257(28)
H(16z)	4722	5934	717	257(28)
H(17x)	6890	4875	952	257(28)
H(17y)	7858	5340	792	257(28)
H(17z)	7074	5174	-175	257(28)
H(18x)	6406	5527	2525	257(28)
H(18y)	6172	6230	2316	257(28)
H(18z)	7370	5973	2240	257(28)
H(21)	8946	7165	-3017	17(7)
H(23x)	8061	8106	-815	17(7)
H(23y)	7862	8033	-2047	17(7)
H(27x)	6709	8947	301	80(9)
H(27y)	6701	9422	1251	80(9)
H(27z)	6966	8724	1475	80(9)
H(28x)	9144	9131	2595	80(9)
H(28y)	8981	9831	2315	80(9)
H(28z)	10030	9482	1935	80(9)
H(30x)	8401	9895	-1906	80(9)
H(30y)	7531	9493	-1314	80(9)
H(30z)	8691	9219	-1549	80(9)
H(31x)	8157	10719	-457	80(9)
H(31y)	8362	10547	751	80(9)
H(31z)	7320	10297	139	80(9)
H(32x)	10068	10304	-900	80(9)
H(32y)	10407	9642	-511	80(9)
H(32z)	10221	10169	328	80(9)
Molecule 2				
H(6)	3665	7010	3446	47(9)
H(1')	5023	8323	4518	47(9)
H(2')	3364	7509	5119	47(9)
H(4')	6131	7436	6011	47(9)
H(5'w)A	5983	6428	5551	47(9)
H(5'x)A	5397	6514	6633	47(9)
H(5'y)B	5917	6409	5479	47(9)

H(5'z)B	5443	6498	6623	47(9)
H(8x)	3603	8787	246	98(17)
H(8y)	4700	8978	831	98(17)
H(8z)	3575	9212	1264	98(17)
H(10x)	2719	6417	2175	98(17)
H(10y)	3095	6553	1004	98(17)
H(10z)	1968	6806	1397	98(17)
H(13x)	1515	7422	4477	139(15)
H(13y)	407	7701	4870	139(15)
H(13z)	1292	7473	5707	139(15)
H(14x)	2092	9215	3770	139(15)
H(14y)	1009	8851	3509	139(15)
H(14z)	2146	8564	3222	139(15)
H(16x)	-265	9404	6353	139(15)
H(16y)	-413	8771	5757	139(15)
H(16z)	49	9345	5145	139(15)
H(17x)	1637	9835	6719	139(15)
H(17y)	1933	9767	5507	139(15)
H(17z)	2670	9452	6393	139(15)
H(18x)	971	8918	7717	139(15)
H(18y)	2017	8548	7390	139(15)
H(18z)	847	8273	7156	139(15)
H(21)	3805	7861	8735	47(9)
H(23x)	3262	6813	6553	47(9)
H(23y)	2954	6883	7754	47(9)
H(27u)A	4353	5512	7478	106(14)
H(27v)A	3667	4964	6990	106(14)
H(27w)A	3159	5629	7039	106(14)
H(27x)B	3495	5671	7448	106(14)
H(27y)B	4599	5383	7062	106(14)
H(27z)B	3519	4991	7015	106(14)
H(28u)A	5934	5272	4757	106(14)
H(28v)A	5537	4751	5531	106(14)
H(28w)A	6133	5337	5997	106(14)
H(28x)B	2021	5964	4487	106(14)
H(28y)B	1808	6113	5695	106(14)
H(28z)B	1723	5431	5281	106(14)
H(30u)A	2390	4590	4141	106(14)
H(30v)A	2626	4604	5381	106(14)
H(30w)A	3551	4406	4596	106(14)
H(30x)B	3821	4287	4045	106(14)
H(30y)B	2730	4601	4407	106(14)
H(30z)B	3598	4381	5268	106(14)
H(31u)A	3366	5325	2871	106(14)
H(31v)A	4511	5175	3401	106(14)
H(31w)A	4093	5859	3348	106(14)
H(31x)B	4199	5166	2918	106(14)
H(31y)B	4192	5840	3374	106(14)
H(31z)B	3100	5460	3301	106(14)
H(32u)A	1793	5652	4038	106(14)
H(32v)A	2567	6193	4405	106(14)
H(32w)A	1987	5784	5263	106(14)
H(32x)B	5541	4763	4191	106(14)
H(32y)B	5303	4838	5415	106(14)
H(32z)B	5647	5413	4736	106(14)

A:B Occupancy 5:3

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(1)

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
2	0	0	1493	1494	7	3	7	0	763	761	12	10	14	0	26	31	-26	-13	1	1	62	46	-30	-1	4	1	1183	1151	8
3	4	0	115	103	6	4	7	0	162	131	6	1	15	0	287	295	6	-12	1	1	114	99	13	0	4	1	720	793	15
4	0	0	405	420	7	5	7	0	697	691	12	2	15	0	205	213	6	-11	1	1	93	114	16	1	4	1	757	763	10
5	0	0	203	211	5	6	7	0	73	76	13	3	15	0	273	247	6	-10	1	1	246	254	7	2	4	1	416	434	7
6	0	0	1066	1022	13	7	7	0	389	369	5	4	15	0	180	161	8	-9	1	1	264	281	6	3	4	1	512	518	9
7	0	0	324	308	5	8	7	0	137	141	9	5	15	0	195	196	7	-8	1	1	272	256	5	4	4	1	249	222	5
8	0	0	70	62	15	9	7	0	195	182	8	6	15	0	74	99	18	-7	1	1	110	93	9	5	4	1	149	181	6
9	0	0	167	157	8	10	7	0	25	26	-25	7	15	0	157	171	9	-6	1	1	392	394	6	6	4	1	114	154	8
10	0	0	306	330	7	11	7	0	226	234	8	8	15	0	129	146	12	-5	1	1	608	592	11	7	4	1	292	297	6
11	0	0	52	61	-40	12	7	0	86	106	20	9	15	0	25	34	-25	-4	1	1	587	637	10	8	4	1	103	93	11
12	0	0	25	36	-25	13	0	8	221	214	4	10	15	0	47	14	-47	-3	1	1	755	727	9	9	4	1	108	95	12
13	0	0	25	9	-25	1	8	0	232	222	4	0	16	0	763	763	14	-2	1	1	1780	1822	8	10	4	1	143	152	10
2	1	0	1564	1608	8	2	8	0	440	433	7	1	16	0	92	80	13	-1	1	1	1054	1083	6	11	4	1	103	112	14
3	1	0	316	303	5	3	8	0	298	303	6	2	16	0	99	95	12	1	1	1	528	603	8	12	4	1	117	114	13
4	1	0	141	121	5	4	8	0	101	106	8	3	16	0	232	218	7	2	1	1	1546	1513	8	-12	5	1	106	90	15
5	1	0	280	278	4	5	8	0	169	160	6	4	16	0	77	90	17	3	1	1	206	163	5	-11	5	1	112	105	12
6	1	0	91	108	10	6	8	0	79	108	13	5	16	0	77	81	19	4	1	1	279	277	5	-10	5	1	133	142	11
7	1	0	355	362	5	7	8	0	634	622	10	6	16	0	205	218	8	5	1	1	633	641	10	-9	5	1	410	389	8
8	1	0	274	273	5	8	8	0	35	75	-35	7	16	0	93	82	16	6	1	1	127	122	9	-8	5	1	391	386	6
9	1	0	144	123	9	9	8	0	224	212	7	8	16	0	120	138	13	7	1	1	146	137	7	-7	5	1	562	551	9
10	1	0	217	209	7	10	8	0	159	140	9	9	16	0	61	24	-29	8	1	1	225	211	6	-6	5	1	468	485	7
11	1	0	141	139	11	11	8	0	26	44	-26	1	17	0	214	209	7	9	1	1	147	159	9	-5	5	1	216	227	5
12	1	0	147	160	11	12	8	0	55	79	-44	2	17	0	128	132	10	10	1	1	188	216	8	-4	5	1	629	627	10
13	1	0	68	77	-26	1	9	0	590	546	9	3	17	0	57	55	-27	11	1	1	26	12	-26	-3	5	1	637	697	10
1	2	0	714	719	7	2	9	0	454	473	8	4	17	0	79	95	18	12	1	1	25	47	-25	-2	5	1	631	613	10
2	2	0	659	660	8	3	9	0	792	744	12	5	17	0	120	117	12	13	1	1	65	70	-26	-1	5	1	110	139	7
3	2	0	1426	1459	9	4	9	0	20	43	-20	6	17	0	186	205	8	-13	2	1	178	167	10	0	5	1	627	656	26
4	2	0	282	243	5	5	9	0	435	452	7	7	17	0	78	91	20	-12	2	1	93	87	16	1	5	1	189	190	4
5	2	0	208	212	5	6	9	0	381	362	6	8	17	0	73	53	-22	-11	2	1	158	181	10	2	5	1	558	554	9
6	2	0	117	122	8	7	9	0	146	155	8	0	18	0	196	182	8	-10	2	1	127	128	11	3	5	1	388	359	7
7	2	0	101	83	10	8	9	0	268	267	6	1	18	0	435	431	8	-9	2	1	68	42	-18	4	5	1	548	549	9
8	2	0	156	152	7	9	9	0	221	212	8	2	18	0	151	139	9	-8	2	1	167	176	7	5	5	1	354	353	6
9	2	0	393	395	7	10	9	0	79	69	19	3	18	0	88	95	16	-7	2	1	197	205	6	6	5	1	542	536	9
10	2	0	189	173	8	11	9	0	38	49	-38	4	18	0	138	129	11	-6	2	1	427	410	8	7	5	1	488	485	8
11	2	0	143	122	11	12	9	0	49	43	-49	5	18	0	114	106	12	-5	2	1	268	258	4	8	5	1	346	337	7
12	2	0	69	62	-24	0	10	0	1143	1090	12	6	18	0	76	71	-19	-4	2	1	580	593	9	9	5	1	471	466	8
13	2	0	26	33	-26	1	10	0	219	210	5	7	18	0	62	86	-28	-3	2	1	1137	1158	10	10	5	1	55	69	-34
1	3	0	1384	1421	7	2	10	0	157	165	6	8	18	0	61	30	-29	-2	2	1	280	258	4	11	5	1	82	92	17
2	3	0	770	755	9	3	10	0	141	161	6	1	19	0	338	330	6	-1	2	1	523	533	7	12	5	1	143	177	12
3	3	0	983	1016	10	4	10	0	68	86	13	2	19	0	156	147	9	0	2	1	291	280	8	-12	6	1	122	117	13
4	3	0	1278	1248	11	5	10	0	70	67	14	3	19	0	118	130	12	1	2	1	295	307	5	-11	6	1	125	102	12
5	3	0	332	331	6	6	10	0	350	339	6	4	19	0	208	225	8	2	2	1	900	939	8	-10	6	1	58	14	-28
6	3	0	43	86	-24	7	10	0	70	67	16	5	19	0	148	149	10	3	2	1	1268	1290	9	-9	6	1	293	294	6
7	3	0	379	364	6	8	10	0	91	103	15	6	19	0	98	84	14	4	2	1	450	429	8	-8	6	1	357	362	5
8	3	0	244	248	6	9	10	0	108	108	13	7	19	0	89	80	17	5	2	1	114	92	8	-7	6	1	146	140	8
9	3	0	273	286	6	10	10	0	185	203	9	0	20	0	197	210	9	6	2	1	820	808	13	-6	6	1	313	304	5
10	3	0	116	137	12	11	10	0	85	80	18	1	20	0	293	312	7	7	2	1	129	130	8	-5	6	1	257	255	5
11	3	0	37	40	-37	1	11	0	238	253	5	2	20	0	212	213	8	8	2	1	140	151	8	-4	6	1	442	417	7
12	3	0	150	147	11	2	11	0	332	322	6	3	20	0	82	94	19	9	2	1	97	68	12	-3	6	1	325	358	6
13	3	0	51	37	-51	3	11	0	233	225	5	4	20	0	49	92	-49	10	2	1	175	188	9	-2	6	1	607	593	10
0	4	0	369	349	7	4	11	0	225	226	5	5	20	0	47	36	-47	11	2	1	136	128	11	-1	6	1	422	432	7
1	4	0	1759	1791	8	5	11	0	177	170	7	6	20	0	25	22	-25	12	2	1	73	81	-21	0	6	1	285	292	4
2	4	0	400	393	7	6	11	0	283	291	6	1	21	0	99	95	16	13	2	1	49	82	-49	1	6	1	226	203	4
3	4	0	161	178	5	7	11	0	182	186	7	2	21	0	100	92	15	-13	3	1	97	128	17	2	6	1	897	880	10
4	4	0	523	521	9	8	11	0	213	190	8	3	21	0	151	133	11	-12	3	1	133	119	12	3	6	1	138	155	6
5	4	0	340	352	5	9	11	0	53	45	-31	4	21	0	156	152	10	-11	3	1	164	167	10	4	6	1	771	779	12
6	4	0	359	366	6	10	11	0	61	55	-28	5	21	0	26	41	-26	-10	3	1	203	204	7	5	6	1	430	430	7
7	4	0	236	248	6	11	11	0	84	82	20	0	22	0	284	274	7	-9	3	1	212	213	7						

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(1)

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
-11	8	1	98	84	16	7	11	1	220	220	7	-9	16	1	89	78	17	4	21	1	40	64	-40	-12	3	2	45	28	-45
-10	8	1	102	101	13	8	11	1	218	227	8	-8	16	1	25	3	-25	5	21	1	26	70	-26	-11	3	2	108	140	14
-9	8	1	172	172	9	9	11	1	238	239	7	-7	16	1	66	70	-22	-4	22	1	162	150	11	-10	3	2	65	41	-22
-8	8	1	500	499	8	10	11	1	236	228	8	-6	16	1	64	87	-23	-3	22	1	75	104	-22	-9	3	2	213	206	7
-7	8	1	96	86	12	11	11	1	131	131	13	-5	16	1	64	72	-22	-2	22	1	147	158	11	-8	3	2	181	175	7
-6	8	1	672	671	12	-11	12	1	68	52	-28	-4	16	1	45	48	-45	-1	22	1	147	135	11	-7	3	2	307	289	6
-5	8	1	113	101	8	-10	12	1	57	37	-35	-3	16	1	288	300	6	0	22	1	26	15	-19	-6	3	2	512	521	9
-4	8	1	652	644	11	-9	12	1	25	32	-25	-2	16	1	187	172	7	1	22	1	120	121	13	-5	3	2	511	493	9
-3	8	1	827	821	12	-8	12	1	213	219	8	-1	16	1	243	253	6	2	22	1	124	118	13	-4	3	2	188	133	7
-2	8	1	1122	1087	11	-7	12	1	122	125	11	0	16	1	186	163	5	3	22	1	92	122	18	-3	3	2	1025	1049	10
-1	8	1	189	169	5	-6	12	1	260	258	6	1	16	1	99	56	13	4	22	1	135	122	12	-2	3	2	553	494	9
0	8	1	532	535	6	-5	12	1	347	348	5	2	16	1	198	190	8	-1	23	1	71	83	-23	-1	3	2	533	402	10
1	8	1	366	376	7	-4	12	1	151	149	7	3	16	1	218	226	7	0	23	1	101	99	12	0	3	2	392	443	5
2	8	1	960	891	12	-3	12	1	261	263	5	4	16	1	149	144	9	1	23	1	103	112	16	1	3	2	1503	1530	8
3	8	1	572	576	11	-2	12	1	173	141	7	5	16	1	41	44	-41	-13	0	2	53	48	-53	2	3	2	928	941	9
4	8	1	390	369	6	-1	12	1	162	157	6	6	16	1	24	43	-24	-12	0	2	113	91	14	3	3	2	505	482	7
5	8	1	153	149	7	0	12	1	225	218	4	7	16	1	50	74	-41	-11	0	2	93	55	15	4	3	2	804	797	11
6	8	1	602	583	9	1	12	1	277	289	5	8	16	1	101	108	15	-10	0	2	24	40	-24	5	3	2	736	754	12
7	8	1	149	165	8	2	12	1	445	458	8	9	16	1	104	107	15	-9	0	2	105	96	11	6	3	2	428	440	9
8	8	1	269	257	6	3	12	1	147	141	7	-8	17	1	94	113	15	-8	0	2	467	470	8	7	3	2	567	566	9
9	8	1	69	76	-23	4	12	1	192	174	6	-7	17	1	89	65	17	-7	0	2	243	245	5	8	3	2	270	272	5
10	8	1	122	97	11	5	12	1	165	141	8	-6	17	1	108	132	13	-6	0	2	640	632	11	9	3	2	100	117	13
11	8	1	74	74	-21	6	12	1	183	196	7	-5	17	1	110	89	13	-5	0	2	130	103	7	10	3	2	148	150	9
12	8	1	62	62	-32	7	12	1	255	252	7	-4	17	1	205	200	8	-4	0	2	236	236	4	11	3	2	193	200	9
-12	9	1	26	12	-26	8	12	1	126	115	12	-3	17	1	301	286	6	-3	0	2	247	245	4	12	3	2	100	122	15
-11	9	1	157	140	10	9	12	1	74	68	-20	-2	17	1	194	215	8	-2	0	2	878	820	9	-12	4	2	50	74	-50
-10	9	1	118	106	12	10	12	1	158	163	10	-1	17	1	235	236	7	-1	0	2	912	918	7	-11	4	2	209	206	8
-9	9	1	297	271	7	11	12	1	26	52	-26	0	17	1	115	106	11	0	0	2	1158	1220	8	-10	4	2	118	124	12
-8	9	1	441	439	6	-10	13	1	94	68	15	1	17	1	107	87	13	1	0	2	293	221	5	-9	4	2	213	213	7
-7	9	1	225	234	6	-9	13	1	201	215	8	2	17	1	100	111	13	2	0	2	1191	1224	9	-8	4	2	302	271	6
-6	9	1	83	85	14	-8	13	1	99	88	14	3	17	1	192	199	8	3	0	2	356	359	7	-7	4	2	490	495	8
-5	9	1	330	341	5	-7	13	1	282	264	7	4	17	1	242	235	7	4	0	2	154	176	5	-6	4	2	72	36	16
-4	9	1	242	219	6	-6	13	1	224	226	7	5	17	1	125	135	12	5	0	2	277	306	5	-5	4	2	280	277	5
-3	9	1	356	326	5	-5	13	1	326	312	5	6	17	1	165	166	9	6	0	2	246	229	6	-4	4	2	755	718	12
-2	9	1	508	524	8	-4	13	1	249	256	6	7	17	1	186	162	9	7	0	2	322	323	5	-3	4	2	491	491	8
-1	9	1	385	372	8	-3	13	1	442	436	8	8	17	1	39	37	-39	8	0	2	466	456	9	-2	4	2	1428	1450	9
0	9	1	251	254	4	-2	13	1	112	107	10	-8	18	1	122	113	13	9	0	2	297	301	7	-1	4	2	672	655	9
1	9	1	331	318	5	-1	13	1	683	678	11	-7	18	1	25	42	-25	10	0	2	57	57	-28	0	4	2	759	766	8
2	9	1	209	161	5	0	13	1	122	96	6	-6	18	1	135	137	10	11	0	2	144	163	11	1	4	2	355	358	6
3	9	1	504	507	9	1	13	1	531	553	9	-5	18	1	157	167	10	12	0	2	243	245	8	2	4	2	264	341	9
4	9	1	542	508	9	2	13	1	344	348	6	-4	18	1	96	111	15	-13	1	2	26	25	-26	3	4	2	215	216	5
5	9	1	472	473	8	3	13	1	394	362	7	-3	18	1	240	246	7	-12	1	2	176	173	9	4	4	2	721	732	12
6	9	1	213	208	6	4	13	1	160	164	8	-2	18	1	85	84	18	-11	1	2	182	195	9	5	4	2	150	164	6
7	9	1	280	279	5	5	13	1	436	435	8	-1	18	1	168	143	9	-10	1	2	157	160	9	6	4	2	370	364	6
8	9	1	226	194	7	6	13	1	240	234	7	0	18	1	363	353	5	-9	1	2	139	109	9	7	4	2	464	449	8
9	9	1	426	408	7	7	13	1	334	332	6	1	18	1	180	193	9	-8	1	2	310	304	5	8	4	2	419	430	7
10	9	1	122	155	12	8	13	1	49	62	-42	2	18	1	184	203	9	-7	1	2	114	94	8	9	4	2	176	162	8
11	9	1	56	69	-39	9	13	1	70	112	-23	3	18	1	216	195	7	-6	1	2	168	161	6	10	4	2	85	47	15
12	9	1	88	101	18	10	13	1	26	6	-26	4	18	1	216	217	8	-5	1	2	527	558	9	11	4	2	220	210	8
-11	10	1	25	40	-25	-10	14	1	25	75	-25	5	18	1	190	190	8	-4	1	2	558	548	10	12	4	2	146	147	10
-10	10	1	149	151	10	-9	14	1	52	69	-39	6	18	1	107	120	13	-3	1	2	787	775	10	-12	5	2	66	84	-26
-9	10	1	136	130	11	-8	14	1	173	190	9	7	18	1	73	69	-22	-2	1	2	673	673	9	-11	5	2	25	37	-25
-8	10	1	173	186	9	-7	14	1	121	114	11	8	18	1	89	51	18	-1	1	2	887	824	8	-10	5	2	262	272	7
-7	10	1	118	124	10	-6	14	1	149	126	9	-7	19	1	71	53	-23	0	1	2	435	435	9	-9	5	2	216	234	7
-6	10	1	129	150	9	-5	14	1	292	277	6	-6	19	1	83	102	18	1	1	2	1331	1359	7	-8	5	2	291	283	6
-5	10	1	220	208	5	-4	14	1	192	172	7	-5	19	1	103	105	14	3	1	2	389	367	6	-7	5	2	661	660	10
-4	10	1	342	336	7	-3	14	1	167	188	7	-4	19	1	105	107	13	4	1	2	334	315	6	-6	5	2	408	416	5
-3	10	1	225	224	5	-2	14	1	178	181	6	-3	19	1	116	120	1												

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(1)

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
3	6	2	642	626	10	-4	10	2	223	210	5	-3	14	2	214	208	6	-3	19	2	284	265	7	10	1	3	94	83	14
4	6	2	32	38	-32	-3	10	2	447	434	7	-2	14	2	449	466	8	-2	19	2	274	263	7	11	1	3	169	152	9
5	6	2	656	661	11	-2	10	2	435	443	7	-1	14	2	461	477	8	-1	19	2	203	191	8	12	1	3	98	96	14
6	6	2	127	138	8	-1	10	2	314	291	5	0	14	2	288	295	4	0	19	2	89	94	13	-12	2	3	46	47	-46
7	6	2	499	505	9	0	10	2	371	372	5	1	14	2	336	332	5	1	19	2	296	297	6	-11	2	3	95	95	16
8	6	2	324	332	6	1	10	2	424	396	8	2	14	2	305	261	6	2	19	2	130	139	11	-10	2	3	132	118	11
9	6	2	196	214	8	2	10	2	100	134	11	3	14	2	131	150	9	3	19	2	82	69	19	-9	2	3	195	209	7
10	6	2	230	225	7	3	10	2	328	315	6	4	14	2	259	255	6	4	19	2	74	103	-22	-8	2	3	277	286	6
11	6	2	226	230	8	4	10	2	140	139	8	5	14	2	123	97	11	5	19	2	194	187	8	-7	2	3	324	314	5
12	6	2	175	170	9	5	10	2	189	188	6	6	14	2	75	58	18	6	19	2	39	24	-39	-6	2	3	211	205	5
-12	7	2	43	36	-43	6	10	2	124	114	9	7	14	2	63	77	-27	7	19	2	68	28	-26	-5	2	3	163	179	6
-11	7	2	220	221	8	7	10	2	174	181	8	8	14	2	100	90	14	-6	20	2	70	46	-24	-4	2	3	261	243	4
-10	7	2	157	170	9	8	10	2	589	583	10	9	14	2	89	69	16	-5	20	2	98	89	16	-3	2	3	245	250	4
-9	7	2	336	338	7	9	10	2	184	184	9	10	14	2	27	42	-27	-4	20	2	133	129	12	-2	2	3	438	401	7
-8	7	2	79	58	16	10	10	2	116	126	13	-9	15	2	45	68	-45	-3	20	2	26	26	-26	-1	2	3	440	404	7
-7	7	2	418	414	6	11	10	2	106	106	15	-8	15	2	89	68	16	-2	20	2	91	82	17	0	2	3	405	384	6
-6	7	2	126	128	8	-11	11	2	47	34	-47	-7	15	2	71	60	-19	-1	20	2	128	120	12	1	2	3	669	707	9
-5	7	2	303	308	5	-10	11	2	156	163	10	-6	15	2	100	108	14	0	20	2	198	203	6	2	2	3	594	616	10
-4	7	2	305	321	6	-9	11	2	25	28	-25	-5	15	2	222	262	7	1	20	2	121	106	12	3	2	3	283	295	5
-3	7	2	377	358	6	-8	11	2	234	241	7	-4	15	2	193	189	8	2	20	2	208	222	8	4	2	3	490	507	8
-2	7	2	203	199	4	-7	11	2	348	366	7	-3	15	2	68	55	-21	3	20	2	93	100	16	5	2	3	402	411	7
-1	7	2	232	228	7	-6	11	2	223	215	6	-2	15	2	186	196	8	4	20	2	61	47	-29	6	2	3	243	263	5
0	7	2	153	171	4	-5	11	2	119	91	9	-1	15	2	214	212	7	5	20	2	65	33	-25	7	2	3	133	120	8
1	7	2	362	373	7	-4	11	2	39	21	-39	0	15	2	349	352	4	6	20	2	63	40	-30	8	2	3	327	344	6
2	7	2	227	215	4	-3	11	2	155	170	8	1	15	2	222	228	6	-5	21	2	44	57	-44	9	2	3	265	259	6
3	7	2	187	164	6	-2	11	2	94	76	10	2	15	2	470	480	9	-4	21	2	26	46	-26	10	2	3	118	147	12
4	7	2	129	133	8	-1	11	2	456	398	7	3	15	2	339	326	5	-3	21	2	40	48	-40	11	2	3	76	100	-20
5	7	2	168	136	7	0	11	2	301	295	4	4	15	2	130	117	10	-2	21	2	99	112	16	12	2	3	51	80	-51
6	7	2	80	95	12	1	11	2	525	519	9	5	15	2	78	69	19	-1	21	2	64	58	-27	-12	3	3	59	53	-31
7	7	2	143	151	9	2	11	2	44	65	-27	6	15	2	265	259	6	0	21	2	89	87	13	-11	3	3	36	30	-36
8	7	2	132	142	10	3	11	2	497	485	8	7	15	2	68	43	-21	1	21	2	93	85	15	-10	3	3	122	109	11
9	7	2	191	197	8	4	11	2	133	143	8	8	15	2	46	47	-46	2	21	2	64	35	-27	-9	3	3	198	208	7
10	7	2	183	202	9	5	11	2	31	65	-31	9	15	2	51	59	-42	3	21	2	93	89	16	-8	3	3	96	51	13
11	7	2	57	43	-34	6	11	2	153	168	8	-9	16	2	82	70	-21	4	21	2	61	31	-31	-7	3	3	244	228	5
12	7	2	40	65	-40	7	11	2	122	108	12	-8	16	2	114	100	13	5	21	2	58	39	-36	-6	3	3	143	141	7
-12	8	2	130	122	12	8	11	2	106	99	15	-7	16	2	40	35	-40	-3	22	2	88	94	19	-5	3	3	152	150	7
-11	8	2	182	185	10	9	11	2	217	221	8	-6	16	2	188	206	8	-2	22	2	161	151	10	-4	3	3	577	575	10
-10	8	2	95	107	16	10	11	2	72	27	-21	-5	16	2	107	100	13	-1	22	2	194	187	9	-3	3	3	426	475	8
-9	8	2	224	224	8	11	11	2	173	170	10	-4	16	2	168	161	9	0	22	2	69	38	17	-2	3	3	470	451	8
-8	8	2	279	267	6	-11	12	2	226	232	9	-3	16	2	274	259	6	1	22	2	148	120	11	-1	3	3	316	319	6
-7	8	2	220	246	6	-10	12	2	83	79	19	-2	16	2	353	333	6	2	22	2	147	126	11	0	3	3	575	578	14
-6	8	2	322	314	7	-9	12	2	57	80	-31	-1	16	2	154	135	9	3	22	2	93	89	17	1	3	3	252	263	4
-5	8	2	323	358	6	-8	12	2	71	62	-21	0	16	2	72	88	14	0	23	2	43	39	-30	2	3	3	282	256	5
-4	8	2	165	168	6	-7	12	2	271	284	7	1	16	2	362	361	6	-12	0	3	36	58	-36	3	3	3	233	252	5
-3	8	2	597	600	10	-6	12	2	261	248	6	2	16	2	524	507	8	-11	0	3	93	48	15	4	3	3	393	386	7
-2	8	2	303	278	5	-5	12	2	239	231	6	3	16	2	149	141	10	-10	0	3	24	4	-24	5	3	3	397	386	7
-1	8	2	554	578	10	-4	12	2	225	230	6	4	16	2	300	319	6	-9	0	3	50	42	-29	6	3	3	208	219	5
0	8	2	247	253	3	-3	12	2	233	214	5	5	16	2	171	149	9	-8	0	3	40	41	-40	7	3	3	266	291	5
1	8	2	260	270	5	-2	12	2	214	208	5	6	16	2	105	83	13	-7	0	3	42	70	-31	8	3	3	328	339	6
2	8	2	114	112	8	-1	12	2	510	498	9	7	16	2	41	47	-41	-6	0	3	262	260	5	9	3	3	121	112	11
3	8	2	422	390	8	0	12	2	257	249	5	8	16	2	110	104	13	-5	0	3	129	99	8	10	3	3	209	219	8
4	8	2	113	109	8	1	12	2	405	395	7	9	16	2	62	60	-26	-4	0	3	276	259	5	11	3	3	80	64	18
5	8	2	371	375	6	2	12	2	79	106	13	-8	17	2	136	125	12	-3	0	3	53	82	-17	-12	4	3	103	86	15
6	8	2	242	240	5	3	12	2	325	323	7	-7	17	2	106	105	14	-2	0	3	91	90	8	-12	4	3	129	120	12
7	8	2	129	130	9	4	12	2	170	159	7	-6	17	2	77	67	-21	-1	0	3	48	55	-19	-11	4	3	185	174	9
8	8	2	340	325	6	5	12	2	189	189	7	-5	17	2	107	121	14	0	0	3	689	704	7	-10	4	3	214	217	7
9	8	2	195	180	8	6	12	2	145	146	9	-4	17	2	135	127	10	1	0	3	297	311	4	-9	4	3	258	251	6
10	8	2	100	106	14	7	12	2	142	160	10	-3	17	2	200	216	8	2	0	3	224	221							

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(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
0	5	3	618	635	13	-7	9	3	148	124	10	-4	13	3	257	260	6	8	17	3	110	110	14	-4	1	4	260	229	5
1	5	3	441	421	8	-6	9	3	100	88	11	-3	13	3	299	298	5	-7	18	3	140	141	11	-3	1	4	187	179	5
2	5	3	363	333	4	-5	9	3	21	52	-21	-2	13	3	203	200	6	-6	18	3	120	125	13	-2	1	4	602	602	10
3	5	3	205	236	6	-4	9	3	444	460	8	-1	13	3	150	143	8	-5	18	3	99	116	15	-1	1	4	509	475	9
4	5	3	605	627	10	-3	9	3	386	368	7	0	13	3	247	248	5	-4	18	3	249	242	7	0	1	4	1337	1315	23
5	5	3	278	276	5	-2	9	3	461	454	7	1	13	3	251	243	5	-3	18	3	169	179	10	1	1	4	262	223	9
6	5	3	170	182	6	-1	9	3	346	357	5	2	13	3	251	251	5	-2	18	3	372	397	6	2	1	4	449	458	8
7	5	3	532	546	10	0	9	3	288	289	4	3	13	3	171	163	8	-1	18	3	233	216	7	3	1	4	286	264	6
8	5	3	171	193	8	1	9	3	111	117	10	4	13	3	138	152	9	0	18	3	292	276	5	4	1	4	532	526	9
9	5	3	322	341	6	2	9	3	314	306	5	5	13	3	152	158	9	1	18	3	251	232	7	5	1	4	148	144	7
10	5	3	329	326	6	3	9	3	230	232	6	6	13	3	343	333	6	2	18	3	164	197	10	6	1	4	104	118	9
11	5	3	106	86	14	4	9	3	146	161	9	7	13	3	113	109	13	3	18	3	257	261	7	7	1	4	358	351	5
12	5	3	26	47	-26	5	9	3	68	76	14	8	13	3	226	251	8	4	18	3	285	297	7	8	1	4	156	191	8
-12	6	3	26	55	-26	6	9	3	22	21	-22	9	13	3	127	129	12	5	18	3	95	102	17	9	1	4	188	192	8
-11	6	3	100	112	16	7	9	3	419	428	7	10	13	3	50	49	-50	6	18	3	26	39	-26	10	1	4	126	121	11
-10	6	3	199	212	8	8	9	3	178	174	9	-10	14	3	47	59	-47	7	18	3	73	53	-24	11	1	4	159	138	10
-9	6	3	401	417	6	9	9	3	89	70	16	-9	14	3	139	134	12	-7	19	3	81	93	-21	12	1	4	66	74	-26
-8	6	3	297	296	7	10	9	3	137	102	12	-8	14	3	243	242	8	-6	19	3	79	97	-21	-12	2	4	91	85	17
-7	6	3	123	126	10	11	9	3	139	133	11	-7	14	3	152	163	10	-5	19	3	78	87	-20	-11	2	4	98	91	15
-6	6	3	237	244	5	-11	10	3	26	54	-26	-6	14	3	226	226	7	-4	19	3	227	235	8	-10	2	4	79	59	17
-5	6	3	564	591	9	-10	10	3	95	70	16	-5	14	3	101	107	16	-3	19	3	66	85	-25	-9	2	4	187	178	8
-4	6	3	419	429	7	-9	10	3	90	95	16	-4	14	3	277	298	6	-2	19	3	303	296	7	-8	2	4	208	205	7
-3	6	3	210	208	5	-8	10	3	78	52	-22	-3	14	3	105	92	12	-1	19	3	224	224	8	-7	2	4	255	226	6
-2	6	3	178	162	5	-7	10	3	300	309	6	-2	14	3	109	119	11	0	19	3	332	328	5	-6	2	4	160	169	6
-1	6	3	238	243	5	-6	10	3	220	197	6	-1	14	3	92	115	14	1	19	3	131	140	12	-5	2	4	224	214	5
0	6	3	321	325	5	-5	10	3	302	310	5	0	14	3	135	136	6	2	19	3	230	230	8	-4	2	4	491	488	8
1	6	3	415	404	7	-4	10	3	143	124	8	1	14	3	353	366	6	3	19	3	146	143	11	-3	2	4	383	400	6
2	6	3	215	193	4	-3	10	3	362	343	5	2	14	3	198	182	7	4	19	3	162	180	10	-2	2	4	458	406	8
3	6	3	217	213	5	-2	10	3	146	158	9	3	14	3	360	344	6	5	19	3	76	53	-20	-1	2	4	267	234	5
4	6	3	159	139	7	-1	10	3	292	296	5	4	14	3	165	163	9	6	19	3	179	158	9	0	2	4	416	416	9
5	6	3	63	85	-22	0	10	3	200	205	5	5	14	3	488	467	8	-6	20	3	39	58	-39	1	2	4	527	507	9
6	6	3	279	278	5	1	10	3	392	364	6	6	14	3	138	158	11	-5	20	3	140	142	11	2	2	4	588	577	9
7	6	3	166	178	7	2	10	3	481	489	8	7	14	3	212	225	8	-4	20	3	121	133	13	3	2	4	177	147	6
8	6	3	285	294	6	3	10	3	89	118	13	8	14	3	191	184	9	-3	20	3	77	99	-21	4	2	4	317	359	6
9	6	3	108	83	14	4	10	3	390	391	6	9	14	3	162	170	10	-2	20	3	205	198	9	5	2	4	414	385	7
10	6	3	79	59	18	5	10	3	154	161	8	10	14	3	26	38	-26	-1	20	3	25	15	-25	6	2	4	54	105	-20
11	6	3	121	132	12	6	10	3	261	260	6	-9	15	3	112	110	14	0	20	3	111	112	10	7	2	4	368	372	8
12	6	3	57	50	-35	7	10	3	97	71	14	-8	15	3	27	13	-27	1	20	3	143	145	11	8	2	4	250	252	6
-12	7	3	62	61	-28	8	10	3	469	465	7	-7	15	3	155	152	10	2	20	3	235	263	8	9	2	4	138	128	10
-11	7	3	25	44	-25	9	10	3	211	229	8	-6	15	3	208	208	8	3	20	3	26	22	-26	10	2	4	124	130	11
-10	7	3	46	42	-46	10	10	3	81	87	19	-5	15	3	303	292	6	4	20	3	166	169	10	11	2	4	26	43	-26
-9	7	3	209	228	8	11	10	3	82	103	-21	-4	15	3	58	34	-31	5	20	3	26	49	-26	12	2	4	68	56	-26
-8	7	3	232	216	-7	-11	11	3	38	30	-38	-3	15	3	288	281	6	6	20	3	76	64	-21	-12	3	4	89	92	18
-7	7	3	315	321	6	-10	11	3	93	95	17	-2	15	3	170	165	8	-4	21	3	126	110	13	-11	3	4	105	99	14
-6	7	3	300	288	5	-9	11	3	157	167	10	-1	15	3	358	388	7	-3	21	3	73	52	-23	-10	3	4	162	152	9
-5	7	3	167	188	7	-8	11	3	214	211	8	-2	21	3	424	434	5	-2	21	3	129	163	13	-9	3	4	136	150	10
-4	7	3	82	65	11	-7	11	3	397	381	7	1	15	3	172	181	8	-1	21	3	122	128	12	-8	3	4	86	102	14
-3	7	3	266	269	4	-6	11	3	232	227	6	2	15	3	61	41	-23	0	21	3	26	59	-18	-7	3	4	267	248	6
-2	7	3	482	480	8	-5	11	3	223	242	6	3	15	3	271	282	6	1	21	3	159	161	10	-6	3	4	509	497	9
-1	7	3	308	314	5	-4	11	3	155	178	7	4	15	3	350	344	6	2	21	3	85	71	18	-5	3	4	331	312	6
0	7	3	196	187	5	-3	11	3	400	402	7	5	15	3	218	238	8	3	21	3	65	89	-28	-4	3	4	454	446	8
1	7	3	93	92	9	-2	11	3	479	467	7	6	15	3	193	209	8	4	21	3	122	148	14	-3	3	4	354	343	6
2	7	3	163	110	7	-1	11	3	750	765	13	7	15	3	81	74	19	-3	22	3	26	31	-26	-2	3	4	590	562	10
3	7	3	147	131	7	0	11	3	219	240	4	8	15	3	221	232	8	-2	22	3	97	86	17	-1	3	4	793	779	10
4	7	3	174	178	5	3	11	3	290	275	6	-9	15	3	61	50	-32	-1	22	3	147	126	11	0	3	4	851	876	18
5	7	3	323	312	6	4	11	3	206	208	6	0	22	3	107	109	16	0	22	3	107	99	10	1	3	4	406	418	7
6	7	3	261	256	5	5	11	3	97	65	12	1	22	3	206	184	9	1	22	3	45	31	-45	2	3	4	609	593	10
7	7	3	289	282	6	6	11	3	161	161	8	-7	16	3	113	121	13	2	22</										

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(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
11	4	4	125	119	12	4	8	4	152	149	7	5	12	4	228	220	7	0	17	4	137	134	8	-7	1	5	129	136	10
12	4	4	98	101	17	5	8	4	91	102	12	6	12	4	210	208	10	1	17	4	89	116	18	-6	1	5	258	252	5
-12	5	4	97	95	17	6	8	4	243	237	6	7	12	4	164	168	10	2	17	4	105	124	14	-5	1	5	485	469	8
-11	5	4	40	47	-40	7	8	4	354	324	6	8	12	4	266	272	8	3	17	4	59	76	-29	-4	1	5	246	247	5
-10	5	4	188	188	9	8	8	4	81	69	17	9	12	4	93	89	17	4	17	4	153	171	11	-3	1	5	423	382	6
-9	5	4	101	97	13	9	8	4	243	224	7	10	12	4	186	181	9	5	17	4	147	144	11	-2	1	5	404	414	6
-8	5	4	191	168	8	10	8	4	190	199	8	-10	13	4	71	76	-25	6	17	4	88	129	18	-1	1	5	367	399	6
-7	5	4	186	185	7	11	8	4	250	251	8	-9	13	4	27	62	-27	7	17	4	68	74	-25	0	1	5	88	64	6
-6	5	4	236	253	5	-11	9	4	115	135	15	-8	13	4	136	142	11	8	17	4	60	61	-36	1	1	5	255	258	4
-5	5	4	383	355	6	-10	9	4	205	200	9	-7	13	4	151	140	11	-7	18	4	27	33	-27	2	1	5	75	87	12
-4	5	4	431	433	8	-9	9	4	157	173	9	-6	13	4	234	249	7	-6	18	4	25	62	-25	3	1	5	597	581	10
-3	5	4	658	618	11	-8	9	4	116	139	12	-5	13	4	188	186	8	-5	18	4	43	8	-43	4	1	5	159	158	7
-2	5	4	352	332	6	-7	9	4	152	161	9	-4	13	4	74	61	18	-4	18	4	44	62	-44	5	1	5	189	204	8
-1	5	4	138	128	6	-6	9	4	123	121	9	-3	13	4	96	86	13	-3	18	4	178	183	9	6	1	5	384	396	6
0	5	4	272	263	3	-5	9	4	54	64	-21	-2	13	4	169	150	7	-2	18	4	146	132	10	7	1	5	211	220	6
1	5	4	230	229	4	-4	9	4	353	347	6	-1	13	4	227	221	7	-1	18	4	357	382	7	8	1	5	123	148	10
2	5	4	463	463	8	-3	9	4	153	150	7	0	13	4	289	297	5	0	18	4	25	22	-18	9	1	5	233	239	7
3	5	4	578	579	10	-2	9	4	122	132	9	1	13	4	402	399	6	1	18	4	249	262	8	10	1	5	70	87	-21
4	5	4	118	139	11	-1	9	4	271	259	5	2	13	4	114	111	10	2	18	4	143	149	10	11	1	5	55	74	-34
5	5	4	242	256	6	0	9	4	296	290	4	3	13	4	382	371	6	3	18	4	152	157	10	12	1	5	129	123	12
6	5	4	180	186	7	1	9	4	311	338	5	4	13	4	200	202	7	4	18	4	160	150	10	12	2	5	110	108	14
7	5	4	38	13	-38	2	9	4	421	420	7	5	13	4	269	282	6	5	18	4	181	176	9	-11	2	5	73	62	-21
8	5	4	274	262	6	3	9	4	240	240	5	6	13	4	25	72	-25	6	18	4	103	102	14	-10	2	5	65	56	-23
9	5	4	137	135	10	4	9	4	237	232	6	7	13	4	368	370	6	7	18	4	95	90	17	-9	2	5	62	53	-23
10	5	4	173	175	9	5	9	4	146	155	7	8	13	4	266	255	7	-6	19	4	106	106	15	-8	2	5	78	94	16
11	5	4	53	23	-40	6	9	4	156	162	8	9	13	4	229	216	8	-5	19	4	26	47	-26	-7	2	5	330	326	6
12	5	4	196	175	9	7	9	4	321	324	6	10	13	4	103	116	16	-4	19	4	117	116	13	-6	2	5	395	401	6
-12	6	4	104	103	16	8	9	4	139	154	10	-9	14	4	45	52	-45	-3	19	4	37	37	-37	-5	2	5	140	149	8
-11	6	4	91	70	16	9	9	4	108	115	13	-8	14	4	177	167	9	-2	19	4	64	85	-27	-4	2	5	184	150	5
-10	6	4	201	218	8	10	9	4	149	125	11	-7	14	4	228	250	8	-1	19	4	326	344	7	-3	2	5	285	278	6
-9	6	4	159	171	9	11	9	4	85	74	20	-6	14	4	197	208	8	0	19	4	153	164	7	-2	2	5	123	58	8
-8	6	4	97	112	14	-11	10	4	135	141	12	-5	14	4	129	111	11	1	19	4	208	218	9	-1	2	5	503	511	9
-7	6	4	163	151	8	-10	10	4	172	177	10	-4	14	4	209	211	7	2	19	4	127	103	11	0	2	5	218	241	11
-6	6	4	303	304	5	-9	10	4	150	147	10	-3	14	4	138	141	9	3	19	4	26	31	-26	1	2	5	168	150	6
-5	6	4	222	222	5	-8	10	4	327	323	6	-2	14	4	163	173	8	4	19	4	61	76	-30	2	2	5	533	551	8
-4	6	4	62	44	14	-7	10	4	188	204	8	-1	14	4	115	140	11	5	19	4	26	54	-26	3	2	5	227	219	5
-3	6	4	687	677	12	-6	10	4	242	251	6	0	14	4	351	365	8	6	19	4	48	59	-48	4	2	5	235	209	5
-2	6	4	388	345	7	-5	10	4	367	354	7	1	14	4	130	138	9	-5	20	4	26	63	-26	5	2	5	415	402	7
-1	6	4	474	470	8	-4	10	4	139	120	7	2	14	4	296	308	6	-4	20	4	96	72	16	6	2	5	97	122	13
0	6	4	533	558	16	-3	10	4	220	201	5	3	14	4	75	58	17	-3	20	4	91	109	17	7	2	5	237	255	6
1	6	4	265	251	5	-2	10	4	121	133	8	4	14	4	38	35	-38	-2	20	4	51	50	-51	8	2	5	263	272	6
2	6	4	568	572	10	-1	10	4	333	315	7	5	14	4	310	308	6	-1	20	4	144	129	11	9	2	5	24	58	-24
3	6	4	351	405	5	0	10	4	326	347	6	6	14	4	114	116	13	0	20	4	191	192	6	10	2	5	76	87	19
4	6	4	101	128	9	1	10	4	247	233	5	7	14	4	193	187	9	1	20	4	154	143	10	11	2	5	26	48	-26
5	6	4	124	144	8	2	10	4	213	200	5	8	14	4	158	152	11	2	20	4	59	66	-30	12	2	5	139	117	12
6	6	4	464	491	7	3	10	4	212	218	6	9	14	4	81	98	-21	3	20	4	134	111	12	-12	3	5	74	56	-23
7	6	4	392	400	7	4	10	4	21	53	-21	-9	15	4	101	106	16	4	20	4	132	113	12	-11	3	5	66	61	-28
8	6	4	225	222	7	5	10	4	164	184	8	-8	15	4	121	139	13	5	20	4	105	80	15	-10	3	5	82	88	17
9	6	4	128	138	11	6	10	4	299	299	6	-7	15	4	92	77	17	-4	21	4	120	122	14	-9	3	5	173	177	8
10	6	4	70	79	-23	7	10	4	175	187	8	-6	15	4	25	61	-25	-3	21	4	111	96	14	-8	3	5	167	161	8
11	6	4	157	182	10	8	10	4	191	194	9	-5	15	4	198	212	8	-2	21	4	177	185	10	-7	3	5	83	80	14
12	6	4	195	206	10	9	10	4	106	103	14	-4	15	4	110	121	12	-1	21	4	80	89	-21	-6	3	5	96	62	12
-11	7	4	94	107	17	10	10	4	111	118	14	-3	15	4	97	109	13	0	21	4	198	185	8	-5	3	5	321	326	5
-10	7	4	57	72	-32	11	10	4	162	134	11	-2	15	4	118	117	11	1	21	4	101	100	15	-4	3	5	176	148	6
-9	7	4	107	79	13	-10	11	4	49	40	-49	-1	15	4	115	104	11	2	21	4	104	106	16	-3	3	5	223	200	5
-8	7	4	229	231	7	-9	11	4	104	108	15	0	15	4	515	523	6	3	21	4	94	106	18	-2	3	5	538	524	10
-7	7	4	645	653	11	-8	11	4	90	91	16	1	15	4	124	113	10	4	21	4	84	54	20	-1	3	5	357	329	6
-6	7	4	321	338	5	-7	11	4	220	215	8	2	15	4	113	132	11	-1	22										

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(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
9	4	5	236	225	7	7	8	5	179	188	8	-9	13	5	86	106	20	-3	18	5	154	146	10	-3	2	6	504	504	9
10	4	5	110	109	12	8	8	5	146	135	10	-8	13	5	25	28	-25	-2	18	5	115	114	13	-2	2	6	213	195	5
11	4	5	116	94	13	9	8	5	156	149	10	-7	13	5	64	83	-26	-1	18	5	134	132	11	-1	2	6	52	57	-21
-11	5	5	26	40	-26	10	8	5	147	149	11	-6	13	5	67	82	-25	0	18	5	157	176	7	0	2	6	182	180	6
-10	5	5	62	75	-25	11	8	5	127	109	13	-5	13	5	128	139	10	1	18	5	107	123	15	1	2	6	183	204	6
-9	5	5	70	14	-21	-11	9	5	101	110	18	-4	13	5	174	158	8	2	18	5	104	104	13	2	2	6	107	118	10
-8	5	5	166	195	9	-10	9	5	52	80	-50	-3	13	5	118	120	10	3	18	5	147	140	11	3	2	6	440	404	8
-7	5	5	154	157	9	-9	9	5	142	116	11	-2	13	5	129	140	9	4	18	5	87	67	17	4	2	6	373	400	6
-6	5	5	320	338	5	-8	9	5	155	155	10	-1	13	5	287	318	6	5	18	5	72	95	-23	5	2	6	506	503	8
-5	5	5	192	173	6	-7	9	5	150	158	9	0	13	5	110	85	7	6	18	5	26	19	-26	6	2	6	243	240	6
-4	5	5	546	529	10	-6	9	5	162	146	8	1	13	5	265	264	6	-5	19	5	26	6	-26	7	2	6	142	135	9
-3	5	5	225	206	5	-5	9	5	281	270	6	2	13	5	109	103	11	-4	19	5	26	24	-26	8	2	6	156	161	9
-2	5	5	332	336	6	-4	9	5	225	221	6	3	13	5	124	139	10	-3	19	5	96	116	16	9	2	6	62	77	-24
-1	5	5	388	381	6	-3	9	5	389	378	6	4	13	5	138	161	10	-2	19	5	175	155	9	10	2	6	69	63	-22
0	5	5	151	158	4	-2	9	5	261	261	5	5	13	5	38	51	-38	-1	19	5	143	138	11	11	2	6	69	21	-24
1	5	5	464	481	8	-1	9	5	189	218	6	6	13	5	314	304	6	0	19	5	110	110	9	-11	3	6	85	76	20
2	5	5	108	123	8	0	9	5	195	182	4	7	13	5	127	135	12	1	19	5	111	122	13	-10	3	6	149	151	11
3	5	5	520	527	8	1	9	5	242	246	5	8	13	5	43	48	-43	2	19	5	26	54	-26	-9	3	6	154	156	9
4	5	5	544	535	9	2	9	5	101	116	10	9	13	5	164	182	10	3	19	5	91	91	17	-8	3	6	170	180	8
5	5	5	467	468	8	3	9	5	169	177	7	-9	14	5	91	111	18	4	19	5	195	199	9	-7	3	6	187	171	8
6	5	5	79	120	16	4	9	5	178	171	7	-8	14	5	138	148	12	5	19	5	26	22	-26	-6	3	6	268	267	5
7	5	5	287	294	6	5	9	5	252	255	6	-7	14	5	140	133	11	-4	20	5	27	56	-27	-5	3	6	378	394	7
8	5	5	213	209	7	6	9	5	217	199	7	-6	14	5	147	152	10	-3	20	5	102	113	16	-4	3	6	77	85	13
9	5	5	272	261	6	7	9	5	124	129	11	-5	14	5	222	201	7	-2	20	5	123	112	13	-3	3	6	598	573	10
10	5	5	79	84	19	8	9	5	214	210	8	-4	14	5	250	250	6	-1	20	5	138	130	12	-2	3	6	70	50	14
11	5	5	94	108	17	9	9	5	186	201	9	-3	14	5	296	295	6	0	20	5	129	114	14	-1	3	6	646	582	12
-11	6	5	184	208	10	10	9	5	26	35	-26	-2	14	5	406	409	7	1	20	5	152	157	10	0	3	6	128	130	5
-10	6	5	172	166	9	-10	10	5	124	139	13	-1	14	5	321	316	5	2	20	5	129	142	12	1	3	6	1075	1084	13
-9	6	5	199	197	8	-9	10	5	99	85	14	0	14	5	280	270	5	3	20	5	69	65	-26	2	3	6	294	296	4
-8	6	5	452	434	8	-8	10	5	134	135	10	1	14	5	165	158	9	4	20	5	27	21	-27	3	3	6	388	382	8
-7	6	5	146	166	9	-7	10	5	199	202	8	2	14	5	236	267	8	-3	21	5	59	28	-36	4	3	6	217	232	6
-6	6	5	168	151	8	-6	10	5	310	317	6	3	14	5	280	271	6	-2	21	5	43	12	-43	5	3	6	210	221	7
-5	6	5	71	55	14	-5	10	5	131	148	9	4	14	5	128	132	11	-1	21	5	147	148	11	6	3	6	194	179	7
-4	6	5	204	194	5	-4	10	5	308	300	5	5	14	5	311	301	6	0	21	5	54	52	-30	7	3	6	372	362	7
-3	6	5	326	304	5	-3	10	5	150	152	8	6	14	5	112	125	13	1	21	5	77	83	-22	8	3	6	101	108	13
-2	6	5	112	107	8	-2	10	5	149	153	7	7	14	5	73	90	-23	2	21	5	166	174	10	9	3	6	113	88	12
-1	6	5	144	128	7	-1	10	5	387	401	6	8	14	5	68	66	-25	-11	0	6	39	22	-39	10	3	6	295	297	7
0	6	5	604	570	7	0	10	5	305	318	4	9	14	5	76	75	-22	-10	0	6	144	171	11	11	3	6	144	153	12
1	6	5	226	227	4	1	10	5	196	183	6	-8	15	5	180	173	10	-9	0	6	47	74	-47	-11	4	6	132	149	13
2	6	5	178	170	5	2	10	5	129	139	8	-7	15	5	191	172	9	-8	0	6	47	17	-47	-10	4	6	111	124	14
3	6	5	268	259	5	3	10	5	321	323	6	-6	15	5	25	51	-25	-7	0	6	23	28	-23	-9	4	6	104	101	13
4	6	5	85	89	12	4	10	5	186	197	8	-5	15	5	94	111	16	-6	0	6	126	132	9	-8	4	6	149	164	10
5	6	5	144	133	7	5	10	5	41	53	-41	-4	15	5	173	191	8	-5	0	6	460	470	8	-7	4	6	114	103	11
6	6	5	349	347	6	6	10	5	270	273	6	-3	15	5	166	162	9	-4	0	6	376	354	7	-6	4	6	167	180	7
7	6	5	149	149	9	7	10	5	131	117	11	-2	15	5	194	182	8	-3	0	6	490	526	9	-5	4	6	205	202	6
8	6	5	346	345	6	8	10	5	92	74	16	-1	15	5	250	262	6	-2	0	6	455	458	8	-4	4	6	330	317	6
9	6	5	128	113	11	9	10	5	113	108	13	0	15	5	105	94	9	-1	0	6	62	68	-17	-3	4	6	192	182	6
10	6	5	70	72	-23	10	10	5	154	156	11	1	15	5	118	112	12	0	0	6	41	1	-17	-2	4	6	162	142	6
11	6	5	26	35	-26	-10	11	5	75	72	-24	2	15	5	150	143	10	1	0	6	284	299	4	-1	4	6	447	463	7
-11	7	5	111	104	15	-9	11	5	115	109	14	3	15	5	177	161	9	2	0	6	80	24	14	0	4	6	619	602	14
-10	7	5	84	85	18	-8	11	5	89	87	18	4	15	5	174	171	9	3	0	6	382	376	7	1	4	6	143	141	7
-9	7	5	136	147	11	-7	11	5	114	118	12	5	15	5	185	172	9	4	0	6	262	221	6	2	4	6	212	216	5
-8	7	5	266	276	7	-6	11	5	247	223	6	6	15	5	25	25	-25	5	0	6	313	320	6	3	4	6	315	301	5
-7	7	5	93	102	14	-5	11	5	106	103	11	7	15	5	127	136	12	6	0	6	47	45	-30	4	4	6	352	351	6
-6	7	5	448	438	7	-4	11	5	108	125	11	8	15	5	92	97	18	7	0	6	59	86	-22	5	4	6	262	263	6
-5	7	5	78	57	14	-3	11	5	210	211	6	-8	16	5	142	146	12	8	0	6	338	329	6	6	4	6	139	142	9
-4	7	5	295	312	6	-2	11	5	232	228	6	-7	16	5	118	120	14	9	0	6	96	115	15	7	4	6	153	165	9
-3	7	5	212	195	5	-1	11	5	238	239	5	-6	16	5	121	108	12	10	0	6	175								

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(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
-5	6	6	235	202	6	1	10	6	179	162	7	-5	15	6	92	73	16	9	0	7	155	150	10	8	4	7	78	113	18
-4	6	6	179	153	6	0	10	6	226	231	5	-4	15	6	86	83	17	10	0	7	103	147	15	8	4	7	106	116	14
-3	6	6	40	34	-40	1	10	6	324	338	5	-3	15	6	248	233	7	11	0	7	51	31	-51	10	4	7	68	64	-23
-2	6	6	330	326	6	2	10	6	176	159	7	-2	15	6	320	305	6	-11	1	7	26	39	-26	-10	5	7	57	32	-37
-1	6	6	241	240	5	3	10	6	180	170	7	-1	15	6	118	106	11	-10	1	7	49	54	-49	-10	5	7	129	135	12
0	6	6	652	635	9	4	10	6	231	244	7	0	15	6	154	175	8	-9	1	7	92	91	15	-8	5	7	115	111	13
1	6	6	215	224	5	5	10	6	114	117	11	1	15	6	119	144	11	-8	1	7	25	6	-25	-7	5	7	126	107	12
2	6	6	270	261	5	6	10	6	283	288	6	2	15	6	178	181	9	-6	1	7	67	69	-21	-6	5	7	238	234	6
3	6	6	106	110	9	7	10	6	319	313	6	3	15	6	177	180	10	-5	1	7	101	88	12	-5	5	7	232	253	6
4	6	6	68	74	16	8	10	6	83	100	19	4	15	6	197	199	8	-5	1	7	344	354	5	-4	5	7	120	98	10
5	6	6	342	352	6	9	10	6	71	55	-25	5	15	6	88	91	17	-4	1	7	266	233	5	-3	5	7	101	93	10
6	6	6	202	204	7	10	10	6	145	168	12	6	15	6	157	156	10	-3	1	7	299	209	5	-2	5	7	91	71	11
7	6	6	335	331	6	-10	11	6	27	25	-27	-7	15	6	49	20	-49	-1	1	7	255	248	5	-1	5	7	463	459	8
8	6	6	24	25	-24	-9	11	6	106	104	15	8	15	6	26	17	-26	0	1	7	209	198	6	0	5	7	156	162	5
9	6	6	113	150	13	-8	11	6	244	246	7	-7	16	6	99	80	16	-1	1	7	58	69	12	1	5	7	85	59	12
10	6	6	26	32	-26	-7	11	6	98	91	15	-6	16	6	268	277	7	2	1	7	379	376	5	2	5	7	193	214	6
11	6	6	181	175	10	-6	11	6	100	111	14	-5	16	6	260	238	8	3	1	7	419	447	6	3	5	7	249	251	5
-11	7	6	50	33	-50	-5	11	6	126	117	10	-4	16	6	233	265	8	4	1	7	153	140	7	4	5	7	252	249	6
-10	7	6	163	161	10	-4	11	6	125	124	11	-3	16	6	108	90	14	5	1	7	380	383	6	5	5	7	247	230	6
-9	7	6	433	462	8	-3	11	6	123	125	10	-2	16	6	177	174	9	6	1	7	286	272	6	6	5	7	166	172	9
-8	7	6	252	248	8	-2	11	6	348	347	5	-1	16	6	50	56	-40	7	1	7	127	157	10	7	5	7	378	369	6
-7	7	6	194	203	8	-1	11	6	247	234	6	0	16	6	176	178	6	8	1	7	155	137	9	8	5	7	198	185	8
-6	7	6	149	171	9	0	11	6	82	80	14	1	16	6	147	121	10	9	1	7	112	104	12	9	5	7	88	104	16
-5	7	6	47	36	-33	1	11	6	187	187	7	2	16	6	212	226	8	10	1	7	188	185	9	10	5	7	84	73	19
-4	7	6	146	166	5	2	11	6	101	97	12	3	16	6	165	152	10	11	1	7	78	93	-21	10	6	7	150	132	11
-3	7	6	229	252	7	3	11	6	100	141	12	4	16	6	226	261	8	-10	1	7	87	82	17	-9	6	7	112	106	13
-2	7	6	153	150	6	4	11	6	286	298	6	5	16	6	173	187	10	-9	2	7	56	50	-36	-8	6	7	161	175	10
-1	7	6	148	142	7	5	11	6	214	227	7	6	16	6	174	186	10	-8	2	7	144	146	11	-7	6	7	167	173	9
0	7	6	261	262	5	6	11	6	91	125	16	7	16	6	126	103	13	-7	2	7	215	235	8	-6	6	7	154	154	9
1	7	6	121	149	8	7	11	6	47	60	-47	8	16	6	84	68	20	-6	2	7	238	249	7	-5	6	7	94	67	13
2	7	6	109	115	9	8	11	6	90	85	18	9	16	6	122	110	13	-5	2	7	217	211	7	-4	6	7	317	321	5
3	7	6	94	79	10	9	11	6	236	224	8	10	16	6	86	70	-26	-4	2	7	140	161	9	-3	6	7	69	107	16
4	7	6	58	56	-19	10	12	6	92	91	18	11	16	6	118	129	12	-3	2	7	136	134	8	-2	6	7	384	406	6
5	7	6	22	26	-22	11	12	6	135	129	11	12	16	6	144	164	11	-2	2	7	114	139	10	-1	6	7	238	229	5
6	7	6	108	121	12	12	12	6	90	92	16	13	16	6	84	96	17	-1	2	7	432	454	7	0	6	7	108	107	7
7	7	6	300	307	6	13	12	6	88	95	17	14	16	6	64	76	-17	-2	2	7	77	73	13	1	6	7	153	167	7
8	7	6	232	213	7	14	12	6	115	103	12	15	16	6	173	188	9	-1	2	7	463	476	8	2	6	7	253	253	5
9	7	6	181	190	9	15	12	6	77	53	17	16	16	6	243	237	7	3	2	7	410	417	5	3	6	7	21	11	-21
10	7	6	197	215	9	16	12	6	95	118	13	17	16	6	26	34	-26	4	2	7	179	178	7	4	6	7	250	247	6
-10	8	6	102	96	15	-1	12	6	64	69	-21	18	16	6	25	15	-25	5	2	7	202	229	6	5	6	7	166	164	8
-9	8	6	197	192	9	0	12	6	110	119	8	19	16	6	104	97	15	6	2	7	337	320	6	6	6	7	385	390	6
-8	8	6	79	95	19	1	12	6	47	42	-35	20	16	6	57	61	-38	7	2	7	250	253	6	7	6	7	335	342	6
-7	8	6	461	484	9	2	12	6	86	107	13	21	16	6	46	39	-46	8	2	7	158	155	6	8	6	7	111	99	13
-6	8	6	88	77	15	3	12	6	164	143	8	22	16	6	160	182	10	9	2	7	106	125	11	9	6	7	77	109	-19
-5	8	6	59	52	-20	4	12	6	211	190	7	23	16	6	160	182	10	10	2	7	91	79	15	10	6	7	140	129	12
-4	8	6	244	241	6	5	12	6	226	218	7	24	16	6	192	192	8	-10	2	7	35	53	-35	-9	7	7	46	49	-46
-3	8	6	66	65	-17	6	12	6	244	232	7	25	16	6	174	167	9	-9	2	7	91	83	16	-8	7	7	82	84	18
-2	8	6	122	195	8	7	12	6	154	165	10	26	16	6	83	67	17	-8	2	7	26	54	-26	-7	7	7	359	369	6
-1	8	6	440	412	7	8	12	6	170	182	10	27	16	6	99	102	11	-7	2	7	48	49	-48	-6	7	7	193	188	8
0	8	6	191	232	4	9	12	6	46	29	-46	28	16	6	84	69	16	-6	2	7	55	52	-40	-5	7	7	192	205	8
1	8	6	265	268	6	10	12	6	88	84	19	29	16	6	41	50	-41	-5	2	7	26	52	-26	-4	7	7	23	43	-23
2	8	6	146	134	7	11	12	6	94	113	16	30	16	6	196	216	9	-4	2	7	100	110	15	-3	7	7	150	146	8
3	8	6	300	306	5	12	12	6	45	44	-45	31	16	6	68	90	-24	-3	2	7	230	240	7	-2	7	7	197	212	6
4	8	6	215	219	6	13	12	6	91	94	16	32	16	6	102	93	16	-2	2	7	176	195	8	-1	7	7	372	370	6
5	8	6	147	148	9	14	12	6	262	254	6	33	16	6	186	176	9	0	2	7	237	246	6	0	7	7	200	192	6
6	8	6	145	144	9	15	12	6	55	14	-29	34	16	6	151	188	9	-1	2	7	35	44	-23	0	7	7	119	147	6
7	8	6	189	204	10	16	12	6	177	182	9	35	16	6	192	202	9	-1	2	7	225	226	6	1	7	7	84	81	12
8	8	6	45	78	-45	17	12	6	92	99	17	36	16	6	31	30	-23	2	2	7									

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(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
-7	9	7	254	249	7	-8	14	7	101	103	16	9	0	8	171	200	10	-6	5	8	151	162	10	6	9	8	283	282	7
-6	9	7	185	197	9	-7	14	7	152	142	11	-10	0	8	190	177	9	-5	5	8	144	128	9	7	9	8	63	104	-29
-5	9	7	384	388	6	-6	14	7	41	18	-41	-10	1	8	178	167	10	-4	5	8	348	346	5	8	9	8	156	148	11
-4	9	7	202	207	7	-5	14	7	217	219	8	-9	1	8	66	94	-24	-3	5	8	269	263	6	9	9	8	80	84	-22
-3	9	7	146	140	9	-4	14	7	48	11	-48	-8	1	8	76	96	19	-2	5	8	158	143	8	-9	10	8	64	47	-31
-2	9	7	86	60	14	-3	14	7	397	417	8	-7	1	8	293	298	6	-1	5	8	198	183	7	-8	10	8	111	97	14
-1	9	7	105	92	11	-2	14	7	105	93	14	-6	1	8	107	112	12	0	5	8	728	742	9	-7	10	8	26	48	-26
0	9	7	140	138	6	-1	14	7	250	250	7	-5	1	8	78	85	16	1	5	8	211	223	6	-6	10	8	240	225	7
1	9	7	332	333	5	0	14	7	220	223	8	-4	1	8	390	382	5	2	5	8	290	261	5	-5	10	8	119	145	12
2	9	7	244	265	6	1	14	7	131	161	11	-3	1	8	131	119	9	3	5	8	202	196	7	-4	10	8	46	29	-46
3	9	7	319	336	6	2	14	7	99	97	14	-2	1	8	238	231	6	4	5	8	271	276	6	-3	10	8	289	301	6
4	9	7	60	76	-25	3	14	7	378	377	6	-1	1	8	633	627	11	5	5	8	258	263	6	-2	10	8	220	241	7
5	9	7	106	116	15	4	14	7	107	116	14	0	1	8	416	448	5	6	5	8	326	319	6	-1	10	8	121	115	10
6	9	7	228	241	7	5	14	7	209	195	9	1	1	8	298	266	5	7	5	8	198	159	8	0	10	8	116	110	8
7	9	7	319	291	7	6	14	7	93	81	17	2	1	8	333	326	6	8	5	8	25	15	-25	1	10	8	23	31	-23
8	9	7	226	212	8	7	14	7	101	108	17	3	1	8	119	119	9	9	5	8	172	185	10	2	10	8	97	66	13
9	9	7	115	110	13	-7	15	7	47	38	-47	4	1	8	102	103	12	10	5	8	26	36	-26	3	10	8	323	336	6
-9	10	7	136	134	12	-6	15	7	26	43	-26	5	1	8	255	239	6	-10	6	8	59	67	-37	4	10	8	208	204	8
-8	10	7	47	46	-47	-5	15	7	88	60	18	6	1	8	198	197	7	-9	6	8	107	87	14	5	10	8	177	158	9
-7	10	7	94	104	17	-4	15	7	55	77	-36	7	1	8	199	202	8	-8	6	8	41	52	-41	6	10	8	134	110	12
-6	10	7	212	215	8	-3	15	7	112	110	13	8	1	8	149	142	10	-7	6	8	179	179	9	7	10	8	26	48	-26
-5	10	7	290	287	6	-2	15	7	185	183	8	9	1	8	79	46	19	-6	6	8	161	163	9	8	10	8	48	30	-48
-4	10	7	340	330	6	-1	15	7	160	137	9	10	1	8	167	170	11	-5	6	8	163	176	8	-8	11	8	150	129	11
-3	10	7	239	254	6	0	15	7	135	143	9	-10	2	8	140	155	11	-4	6	8	176	185	8	-7	11	8	84	96	18
-2	10	7	94	85	13	1	15	7	196	199	8	-9	2	8	25	25	-25	-3	6	8	268	265	6	-6	11	8	147	144	11
-1	10	7	249	242	6	2	15	7	76	90	-21	-8	2	8	142	138	10	-2	6	8	279	263	6	-5	11	8	216	216	8
0	10	7	106	87	8	3	15	7	139	149	11	-7	2	8	258	275	7	-1	6	8	331	336	6	-4	11	8	141	111	11
1	10	7	106	91	11	4	15	7	93	110	15	-6	2	8	276	307	6	0	6	8	90	63	10	-3	11	8	194	206	8
2	10	7	113	98	10	5	15	7	256	248	7	-5	2	8	247	221	6	1	6	8	334	318	6	-2	11	8	315	310	6
3	10	7	291	276	6	6	15	7	57	56	-36	-4	2	8	293	308	6	2	6	8	248	246	6	-1	11	8	146	164	10
4	10	7	253	263	7	7	15	7	142	145	11	-3	2	8	96	76	12	3	6	8	244	249	6	0	11	8	244	245	5
5	10	7	333	342	6	-6	16	7	159	154	10	-2	2	8	280	255	5	4	6	8	265	251	6	1	11	8	163	166	9
6	10	7	384	423	6	-5	16	7	130	151	12	-1	2	8	344	338	6	5	6	8	168	142	9	2	11	8	140	131	10
7	10	7	346	349	7	-4	16	7	85	87	18	0	2	8	411	423	5	6	6	8	24	14	-24	3	11	8	202	197	8
8	10	7	127	113	12	-3	16	7	106	120	14	1	2	8	154	157	8	7	6	8	59	49	-30	4	11	8	185	163	9
9	10	7	100	76	16	-2	16	7	165	192	9	2	2	8	347	362	6	8	6	8	206	185	8	5	11	8	108	103	15
-9	11	7	125	128	13	-1	16	7	25	18	-25	3	2	8	67	53	-18	9	6	8	93	72	17	6	11	8	149	164	11
-8	11	7	247	243	8	0	16	7	239	230	6	4	2	8	313	297	6	-9	7	8	127	115	13	7	11	8	65	34	-27
-7	11	7	176	169	9	1	16	7	91	92	15	5	2	8	398	395	6	-8	7	8	133	130	12	8	11	8	26	47	-26
-6	11	7	262	253	7	2	16	7	77	81	-21	6	2	8	200	202	8	-7	7	8	221	230	8	-8	12	8	43	37	-43
-5	11	7	145	121	9	3	16	7	26	47	-26	7	2	8	108	138	15	-6	7	8	41	50	-41	-7	12	8	128	131	13
-4	11	7	83	42	18	4	16	7	27	51	-27	8	2	8	118	131	12	-5	7	8	132	98	10	-6	12	8	216	241	8
-3	11	7	164	172	9	5	16	7	150	129	11	9	2	8	106	112	14	-4	7	8	266	256	6	-5	12	8	93	58	16
-2	11	7	213	230	7	6	16	7	26	47	-26	10	2	8	26	37	-26	-3	7	8	221	206	7	-4	12	8	163	171	10
-1	11	7	132	150	9	-5	17	7	130	103	12	-10	3	8	73	71	-23	-2	7	8	113	121	10	-3	12	8	226	216	7
0	11	7	206	193	5	-4	17	7	204	211	9	-9	3	8	149	165	10	-1	7	8	115	104	10	-2	12	8	187	175	8
1	11	7	154	132	8	-3	17	7	26	20	-26	-8	3	8	145	157	10	0	7	8	316	306	4	-1	12	8	70	42	-23
2	11	7	152	144	8	-2	17	7	191	187	9	-7	3	8	259	253	7	1	7	8	99	85	11	0	12	8	352	359	7
3	11	7	139	152	10	-1	17	7	162	153	10	-6	3	8	25	25	-25	2	7	8	105	119	10	1	12	8	329	338	6
4	11	7	382	358	6	0	17	7	128	128	8	-5	3	8	221	226	7	3	7	8	401	406	6	2	12	8	209	204	7
5	11	7	92	96	16	1	17	7	92	62	15	-4	3	8	243	242	6	4	7	8	131	144	10	3	12	8	214	209	8
6	11	7	27	31	-27	2	17	7	116	122	13	-3	3	8	78	92	15	5	7	8	226	231	7	4	12	8	160	165	10
7	11	7	185	194	10	3	17	7	87	113	18	-2	3	8	149	137	9	6	7	8	106	105	13	5	12	8	181	162	9
8	11	7	173	180	10	4	17	7	154	154	12	-1	3	8	425	437	7	7	7	8	117	115	13	6	12	8	81	92	-20
9	11	7	26	44	-26	5	17	7	26	27	-26	0	3	8	155	132	6	8	7	8	123	131	13	7	12	8	50	70	-50
-9	12	7	145	139	11	-4	18	7	54	39	-39	1	3	8	255	256	6	9	7	8	204	199	9	-7	13	8	134	120	12
-8	12	7	163	169	11	-3	18	7	87	64	17	2	3	8	533	538	9	-9	8	8	93	88	17	-6	13	8	60	47	-31
-7	12	7	302	314	7	-2	18	7	26	13	-26	3	3	8	195	193	7	-8	8	8	121	124	13						

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(1)

PAGE 9

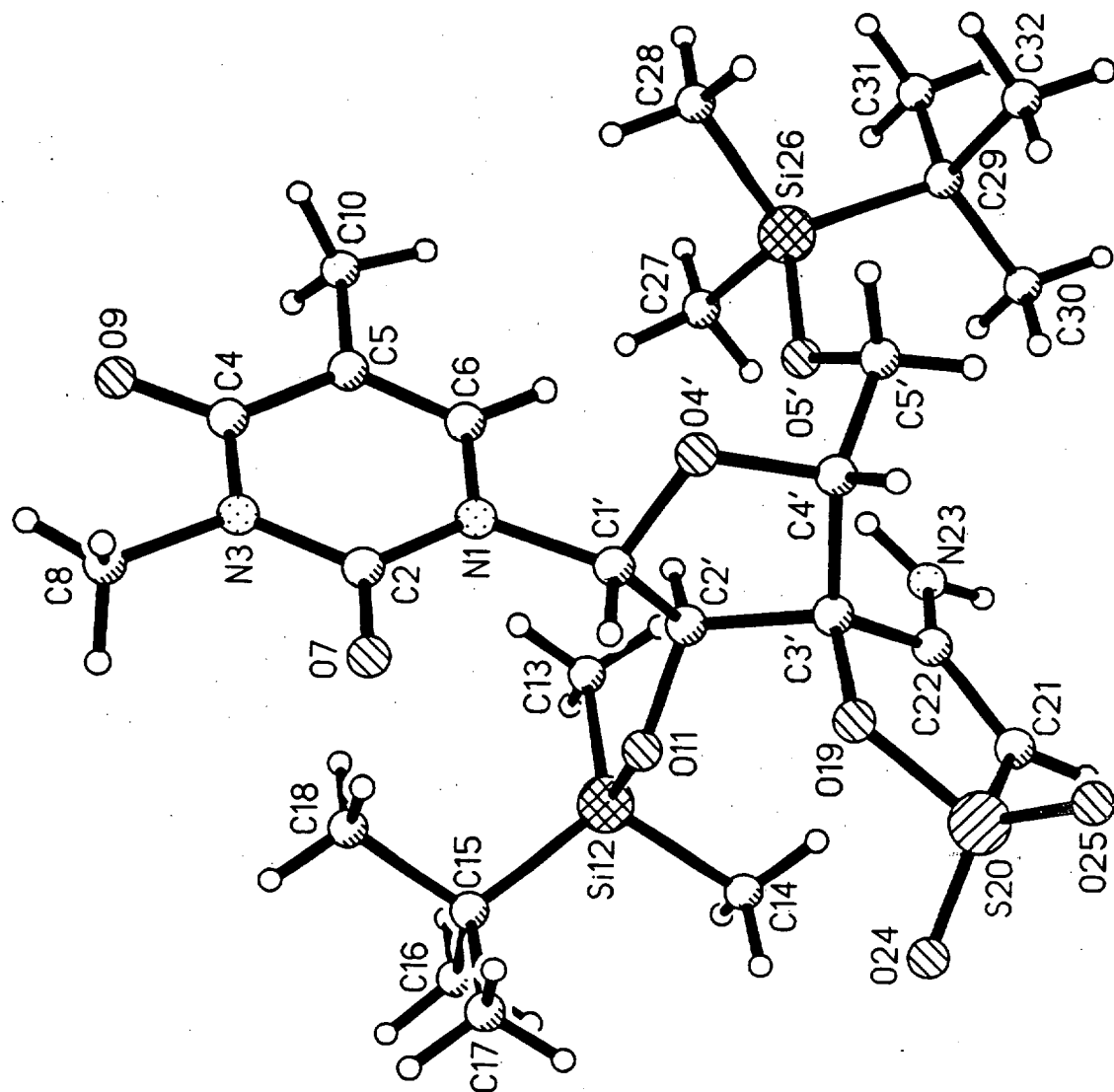
H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
0	15	8	245	238	9	-9	3	9	115	99	13	6	7	9	260	250	7	2	13	9	199	212	8	-5	3	10	36	52	-36
1	15	8	104	126	14	-8	3	9	107	107	14	7	7	9	49	73	-49	3	13	9	144	149	11	-4	3	10	116	80	12
2	15	8	143	154	11	-7	3	9	83	74	18	8	7	9	27	26	-27	4	13	9	213	218	9	-3	3	10	143	150	10
3	15	8	137	141	11	-6	3	9	250	264	7	-8	8	9	26	19	-26	5	13	9	101	104	15	-2	3	10	209	233	7
4	15	8	88	70	19	-5	3	9	144	139	10	-7	8	9	66	73	-25	6	13	9	197	182	9	-1	3	10	299	295	6
5	15	8	77	95	-20	-4	3	9	453	446	8	-6	8	9	210	217	8	-5	14	9	79	92	-22	0	3	10	292	280	5
6	15	8	50	72	-50	-3	3	9	46	25	-46	-5	8	9	110	90	13	-4	14	9	126	111	13	1	3	10	127	117	11
-5	16	8	44	70	-44	-2	3	9	120	132	11	-4	8	9	254	224	7	-3	14	9	46	56	-46	2	3	10	127	139	11
-4	16	8	65	40	-25	-1	3	9	79	63	15	-3	8	9	196	194	8	-2	14	9	66	75	-27	3	3	10	208	214	8
-3	16	8	100	101	16	0	3	9	246	246	4	-2	8	9	83	66	16	-1	14	9	141	128	11	4	3	10	218	232	8
-2	16	8	140	137	11	1	3	9	137	131	9	-1	8	9	166	171	8	0	14	9	150	129	8	5	3	10	72	106	-21
-1	16	8	130	141	12	2	3	9	311	315	5	0	8	9	137	145	7	1	14	9	117	102	12	6	3	10	229	191	7
0	16	8	212	221	6	3	3	9	181	184	7	1	8	9	170	187	8	2	14	9	185	191	9	7	3	10	159	146	10
1	16	8	203	224	9	4	3	9	217	224	8	2	8	9	181	143	8	3	14	9	79	90	-20	8	3	10	62	67	-28
2	16	8	130	140	11	5	3	9	146	136	10	3	8	9	103	99	13	4	14	9	180	196	10	-8	4	10	48	46	-48
3	16	8	134	121	12	6	3	9	257	234	7	4	8	9	358	371	6	5	14	9	26	16	-26	-7	4	10	26	37	-26
4	16	8	108	74	15	7	3	9	167	138	9	5	8	9	199	194	8	-5	15	9	54	74	-46	-6	4	10	135	134	11
5	16	8	26	26	-26	8	3	9	39	52	-39	6	8	9	203	212	8	-4	15	9	138	123	11	-5	4	10	109	100	13
-4	17	8	41	10	-41	9	3	9	43	44	-43	7	8	9	38	33	-38	-3	15	9	102	86	14	-4	4	10	150	157	9
-3	17	8	131	140	13	-9	4	9	81	80	19	8	8	9	214	183	9	-2	15	9	128	146	12	-3	4	10	216	217	7
-2	17	8	26	46	-26	-8	4	9	26	49	-26	-8	9	9	26	28	-26	-1	15	9	164	168	10	-2	4	10	181	184	8
-1	17	8	79	56	-21	-7	4	9	26	40	-26	-7	9	9	141	139	11	0	15	9	74	72	16	-1	4	10	286	290	7
0	17	8	215	214	8	-6	4	9	137	132	11	-6	9	9	212	199	8	1	15	9	140	151	11	0	4	10	314	318	4
1	17	8	70	85	-23	-5	4	9	161	157	9	-5	9	9	186	202	9	2	15	9	26	1	-26	1	4	10	446	453	8
2	17	8	94	112	16	-4	4	9	110	127	13	-4	9	9	375	384	6	3	15	9	162	168	11	2	4	10	73	108	-20
3	17	8	26	27	-26	-3	4	9	126	118	10	-3	9	9	79	51	19	4	15	9	116	115	14	3	4	10	184	177	8
4	17	8	40	42	-40	-2	4	9	111	85	12	-2	9	9	126	113	10	-3	16	9	105	91	16	4	4	10	91	71	16
-3	18	8	44	22	-44	-1	4	9	300	324	6	-1	9	9	77	62	18	-2	16	9	154	138	11	5	4	10	162	156	9
-2	18	8	125	136	14	0	4	9	137	156	7	0	9	9	260	245	5	-1	16	9	108	93	15	6	4	10	92	80	17
-1	18	8	254	254	8	1	4	9	167	154	8	1	9	9	170	188	8	0	16	9	82	67	15	7	4	10	169	137	9
0	18	8	82	94	15	2	4	9	392	393	6	2	9	9	149	155	9	1	16	9	185	204	9	8	4	10	37	15	-37
1	18	8	27	41	-27	3	4	9	90	55	14	3	9	9	212	225	7	2	16	9	139	159	12	-8	5	10	133	134	12
2	18	8	74	36	-21	4	4	9	196	205	7	4	9	9	175	170	10	3	16	9	207	188	9	-7	5	10	151	130	10
-9	0	9	149	133	11	5	4	9	256	266	7	5	9	9	148	130	11	-1	17	9	135	135	13	-6	5	10	26	42	-26
-8	0	9	54	85	-39	6	4	9	179	168	9	6	9	9	313	305	7	0	17	9	171	159	15	-5	5	10	114	116	13
-7	0	9	136	115	11	7	4	9	57	50	-31	7	9	9	121	133	14	-4	17	9	100	121	17	-4	5	10	60	64	-27
-6	0	9	91	86	15	8	4	9	242	222	8	8	9	9	84	73	20	-8	0	10	236	228	8	-3	5	10	83	94	17
-5	0	9	182	174	8	9	4	9	181	171	9	-8	10	9	71	94	-24	-7	0	10	217	236	8	-2	5	10	110	100	13
-4	0	9	273	279	6	-9	5	9	112	122	14	-7	10	9	59	89	-35	-6	0	10	112	97	13	-1	5	10	341	348	6
-3	0	9	23	9	-23	-8	5	9	180	159	9	-6	10	9	210	227	8	-5	0	10	92	144	16	0	5	10	191	205	8
-2	0	9	390	401	6	-7	5	9	228	215	8	-5	10	9	98	58	15	-4	0	10	54	83	-30	1	5	10	367	378	6
-1	0	9	255	275	6	-6	5	9	203	220	8	-4	10	9	231	252	8	-3	0	10	348	358	7	2	5	10	71	71	-19
0	0	9	176	184	5	-5	5	9	174	178	8	-3	10	9	211	201	8	-2	0	10	41	79	-41	3	5	10	204	181	7
1	0	9	505	514	8	-4	5	9	109	101	12	-2	10	9	220	244	7	-1	0	10	372	380	8	4	5	10	216	195	8
2	0	9	78	49	16	-3	5	9	145	166	9	-1	10	9	166	161	9	0	0	10	76	134	12	5	5	10	94	99	15
3	0	9	69	29	-21	-2	5	9	104	93	11	0	10	9	76	75	13	1	0	10	63	97	-23	6	5	10	108	68	13
4	0	9	118	95	12	-1	5	9	355	348	5	1	10	9	78	47	17	2	0	10	68	63	-21	7	5	10	165	170	10
5	0	9	167	157	9	0	5	9	138	129	6	2	10	9	70	63	-20	3	0	10	138	121	11	8	5	10	45	59	-45
6	0	9	59	33	-28	1	5	9	143	166	9	3	10	9	139	155	10	4	0	10	88	108	17	-8	6	10	102	87	17
7	0	9	131	111	11	2	5	9	66	106	-21	4	10	9	233	261	8	5	0	10	206	212	8	-7	6	10	37	62	-37
8	0	9	267	269	7	3	5	9	56	38	-27	5	10	9	294	277	7	6	0	10	169	148	10	-6	6	10	121	110	12
9	0	9	27	18	-27	4	5	9	116	106	11	6	10	9	86	72	19	7	0	10	136	149	12	-5	6	10	162	158	9
-9	1	9	26	23	-26	5	5	9	197	181	8	7	10	9	70	75	-23	8	0	10	26	14	-26	-4	6	10	145	156	10
-8	1	9	86	92	17	6	5	9	70	41	-23	-7	11	9	109	80	15	-8	1	10	67	74	-28	-3	6	10	250	258	7
-7	1	9	259	243	7	7	5	9	82	91	18	-6	11	9	124	132	13	-7	1	10	63	62	-27	-2	6	10	131	149	11
-6	1	9	210	220	8	8	5	9	85	72	19	-5	11	9	220	252	8	-6	1	10	157	150	10	-1	6	10	374	377	6
-5	1	9	117	120	11	9	5	9	65	47	-28	-4	11	9	167	147	9	-5	1	10	193	213	8	0	6	10	178	153	6
-4	1	9	238	227	7	-9	6	9	68	73	-25	-3	11	9	168	143	9	-4	1	10	113	109	12	1	6				

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C:\XSCANS\GD719 in P2(1)

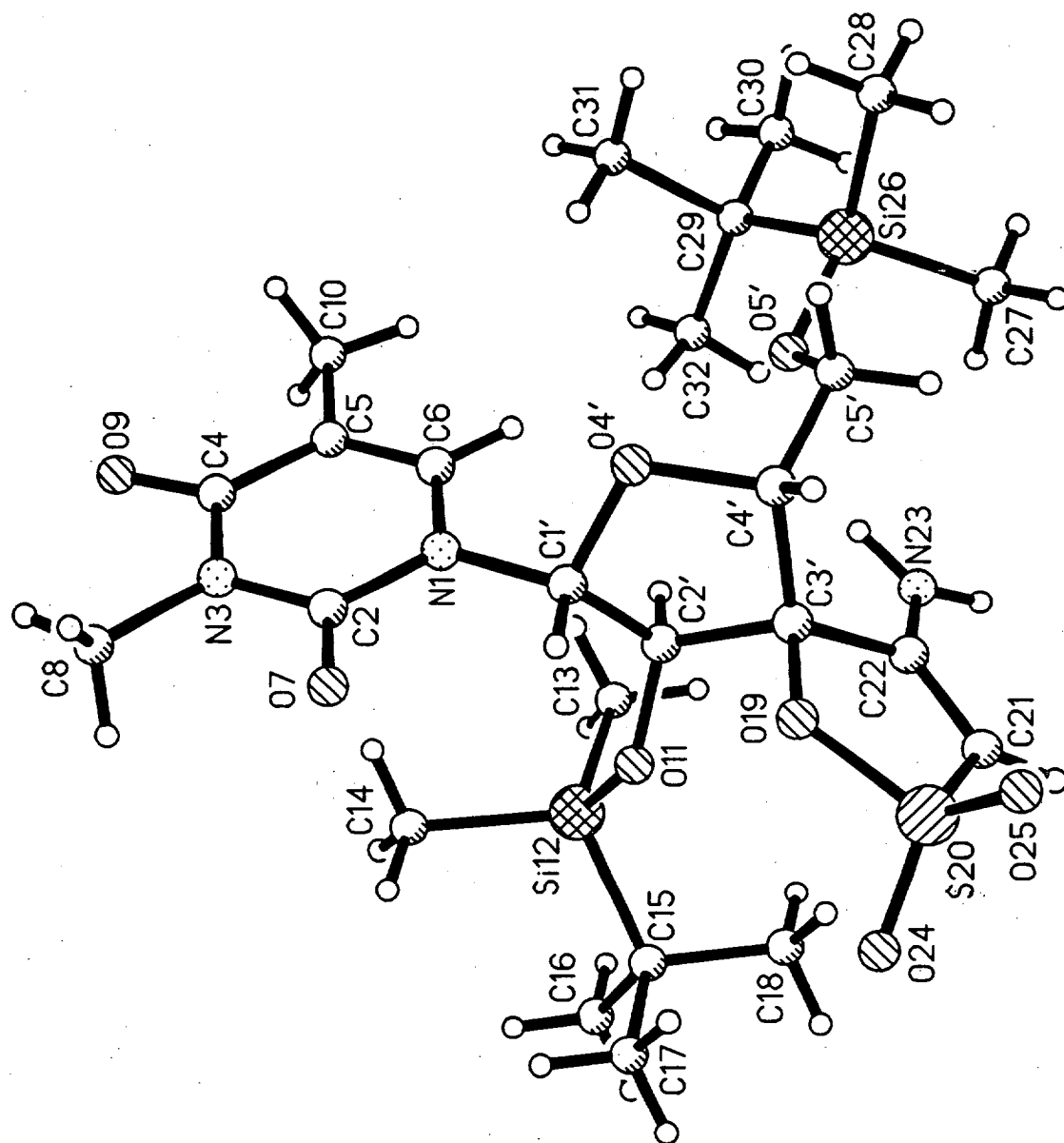
PAGE 10

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
3	8	10	59	80	-28	1	15	10	26	68	-26	-6	5	11	73	92	-24	1	11	11	189	156	9	-1	5	12	214	226	8
4	8	10	85	74	17	2	15	10	168	138	11	-5	5	11	59	84	-32	2	11	11	83	84	19	0	5	12	31	24	-23
5	8	10	131	100	11	-7	0	11	196	228	9	-4	5	11	85	103	18	3	11	11	49	39	-49	1	5	12	172	138	9
6	8	10	44	69	-44	-6	0	11	174	148	10	-3	5	11	162	173	10	4	11	11	27	68	-27	2	5	12	25	54	-25
7	8	10	79	40	-22	-5	0	11	202	197	8	-2	5	11	122	103	12	-3	12	11	165	132	11	3	5	12	143	141	11
-7	9	10	109	77	15	-4	0	11	160	166	10	-1	5	11	165	160	9	-2	12	11	26	21	-26	4	5	12	25	16	-25
-6	9	10	25	42	-25	-3	0	11	102	99	14	0	5	11	58	82	-19	-1	12	11	26	35	-26	-5	6	12	67	67	-29
-5	9	10	123	106	12	-2	0	11	93	129	15	1	5	11	175	208	9	0	12	11	133	111	9	-4	6	12	26	9	-26
-4	9	10	43	47	-43	-1	0	11	250	254	7	2	5	11	108	104	13	1	12	11	110	118	14	-3	6	12	103	95	15
-3	9	10	145	169	10	0	0	11	41	51	-29	3	5	11	58	94	-32	2	12	11	26	49	-26	-2	6	12	39	70	-39
-2	9	10	187	224	8	1	0	11	109	136	12	4	5	11	187	195	9	3	12	11	27	40	-27	-1	6	12	25	15	-25
-1	9	10	158	151	10	2	0	11	188	174	8	5	5	11	100	91	15	-1	13	11	197	187	9	0	6	12	177	179	8
0	9	10	216	188	5	3	0	11	182	160	9	6	5	11	27	51	-27	0	13	11	118	80	10	1	6	12	91	96	16
1	9	10	293	299	6	4	0	11	195	220	9	-6	6	11	96	82	16	1	13	11	73	36	-23	2	6	12	25	24	-25
2	9	10	172	181	9	5	0	11	258	303	8	-5	6	11	106	116	15	-6	0	12	138	163	13	3	6	12	70	76	-22
3	9	10	104	96	14	6	0	11	63	30	-29	-4	6	11	194	201	9	-5	0	12	67	75	-28	4	6	12	102	81	16
4	9	10	124	88	12	7	0	11	230	210	8	-3	6	11	295	298	7	-4	0	12	90	51	17	-4	7	12	143	147	11
5	9	10	94	101	17	-7	1	11	27	13	-27	-2	6	11	248	261	7	-3	0	12	26	76	-26	-3	7	12	76	85	-21
6	9	10	103	93	15	-6	1	11	76	91	-21	-1	6	11	120	105	12	-2	0	12	26	24	-26	-2	7	12	69	18	-26
-6	10	10	157	130	11	-5	1	11	202	204	8	0	6	11	181	187	8	-1	0	12	25	18	-25	-1	7	12	100	81	16
-5	10	10	150	153	10	-4	1	11	73	99	-22	1	6	11	161	178	10	0	0	12	204	242	8	0	7	12	31	36	-23
-4	10	10	44	34	-44	-3	1	11	185	185	9	2	6	11	171	181	9	1	0	12	24	51	-24	1	7	12	150	129	11
-3	10	10	69	72	-23	-2	1	11	54	66	-32	3	6	11	316	311	6	2	0	12	97	41	16	2	7	12	182	189	9
-2	10	10	57	52	-31	-1	1	11	72	134	-20	4	6	11	79	57	20	3	0	12	138	149	12	3	7	12	26	47	-26
-1	10	10	138	141	10	0	1	11	86	87	13	5	6	11	48	54	-48	4	0	12	52	51	-52	4	7	12	73	41	-23
0	10	10	66	50	16	1	1	11	83	102	16	6	6	11	45	4	-45	5	0	12	99	53	17	-4	8	12	27	28	-27
1	10	10	279	283	7	2	1	11	25	37	-25	-6	7	11	122	101	13	-6	1	12	44	46	-44	-3	8	12	59	49	-30
2	10	10	241	243	7	3	1	11	251	240	7	-5	7	11	152	121	10	-5	1	12	135	103	13	-2	8	12	133	134	11
3	10	10	147	125	10	4	1	11	246	250	8	-4	7	11	162	156	10	-4	1	12	115	121	14	-1	8	12	66	78	-28
4	10	10	99	79	15	5	1	11	27	56	-27	-3	7	11	118	101	13	-3	1	12	102	101	15	0	8	12	192	192	7
5	10	10	70	87	-24	6	1	11	151	160	11	-2	7	11	129	128	12	-2	1	12	265	241	7	1	8	12	142	152	12
6	10	10	105	127	15	7	1	11	179	164	10	-1	7	11	200	214	8	-1	1	12	25	24	-25	2	8	12	59	39	-31
-6	11	10	27	25	-27	-7	2	11	113	113	14	0	7	11	176	178	7	0	1	12	157	161	8	3	8	12	46	78	-46
-5	11	10	47	82	-47	-6	2	11	202	203	9	1	7	11	135	156	11	1	1	12	93	63	15	-3	9	12	27	63	-27
-4	11	10	104	82	15	-5	2	11	164	180	10	2	7	11	115	118	12	2	1	12	130	122	12	-3	9	12	133	118	12
-3	11	10	243	240	7	-4	2	11	301	311	7	3	7	11	26	40	-26	3	1	12	148	173	10	-1	9	12	127	129	12
-2	11	10	104	103	14	-3	2	11	165	165	10	4	7	11	196	176	9	4	1	12	182	159	10	0	9	12	69	43	-18
-1	11	10	350	339	6	-2	2	11	84	96	17	5	7	11	42	22	-42	5	1	12	135	111	13	1	9	12	74	73	-21
0	11	10	147	152	7	-1	2	11	172	161	9	6	7	11	168	152	10	-6	2	12	141	159	13	2	9	12	130	99	12
1	11	10	164	146	10	0	2	11	80	83	12	-6	8	11	47	26	-47	-5	2	12	260	274	8	-1	10	12	82	36	19
2	11	10	25	60	-25	1	2	11	100	93	13	-5	8	11	46	44	-46	-4	2	12	73	86	-22	0	10	12	70	69	-19
3	11	10	117	98	13	2	2	11	49	95	-38	-4	8	11	82	76	19	-3	2	12	47	55	-47	1	10	12	26	39	-26
4	11	10	104	115	15	3	2	11	149	180	10	-3	8	11	97	90	16	-2	2	12	74	73	-23	-3	0	13	27	37	-27
5	11	10	126	133	13	4	2	11	306	310	7	-2	8	11	175	168	10	-1	2	12	152	93	10	-2	0	13	137	150	12
6	11	10	97	87	17	5	2	11	144	142	11	-1	8	11	69	70	-23	0	2	12	161	187	7	-1	0	13	131	103	12
-5	12	10	50	23	-50	6	2	11	150	128	11	0	8	11	129	110	9	1	2	12	25	49	-25	0	0	13	42	31	-30
-4	12	10	72	51	-22	7	2	11	68	70	-27	1	8	11	124	105	12	2	2	12	133	130	11	1	0	13	26	58	-26
-3	12	10	164	148	10	-7	3	11	104	110	16	2	8	11	79	142	19	3	2	12	40	40	-40	2	0	13	78	93	-21
-2	12	10	145	116	11	-6	3	11	134	140	12	3	8	11	79	90	19	4	2	12	72	65	-24	3	0	13	206	226	9
-1	12	10	182	192	9	-5	3	11	25	22	-25	4	8	11	109	81	14	5	2	12	277	243	8	-3	1	13	52	14	-52
0	12	10	138	134	8	-4	3	11	151	157	10	5	8	11	77	56	-21	-5	3	12	60	51	-35	-2	1	13	49	39	-49
1	12	10	174	163	9	-3	3	11	91	94	16	-5	9	11	67	32	-25	-4	3	12	193	198	9	-1	1	13	47	74	-47
2	12	10	124	110	12	-2	3	11	150	157	9	-4	9	11	159	151	10	-3	3	12	51	60	-45	0	1	13	108	78	10
3	12	10	108	89	15	-1	3	11	190	208	8	-3	9	11	143	124	11	-2	3	12	182	162	9	1	1	13	121	86	13
4	12	10	48	31	-48	0	3	11	28	18	-21	-2	9	11	137	105	12	-1	3	12	68	114	-24	2	1	13	60	71	-35
5	12	10	158	141	11	1	3	11	129	112	10	-1	9	11	57	43	-31	0	3	12	152	155	7	3	1	13	90	54	18
-5	13	10	26	43	-26	2	3	11	65	50	-23	0	9	11	133	142	8	1	3	12	171	157	9	-3	2	13	54	81	-41
-4	13	10	14																										

Molecules 1



Molecule 2A



Molecule 2B

