CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1996, 8(3), 721-726, DOI:10.1021/cm950392m

I-726-m1

Cm950392M

Supplementary Material
for

Synthesis and Characterization of Novel One-Dimensional Phases from Supercritical Ammonia: $Cs_3Ag_2Sb_3S_8$, α- and β-Cs_2AgSbS_4, and Cs_2AgAsS_4

Paul T. Wood, George L. Schimek, and Joseph W. Kolis*

Department of Chemistry,

Clemson University

Clemson, South Carolina 29634-1905

I-726-M2

Supplementary Table 1. Crystallographic data for I

Crystal Data	
Empirical Formula	$Cs_3Ag_2Sb_3S_8$
Formula weight (g/mol)	1236.2
Color; Habit	Red, parallelepiped
Size (mm)	0.04 x 0.05 x 0.07
Space Group	Monoclinic, *P21/m* (#11)
Unit Cell Dimensions	
a (Å)	10.539(3)
b (Å)	7.234(3)
c (Å)	12.777(3)
α (°)	90
β (°)	101.96(2)
γ (°)	90
V ($Å^3$)	952.7(9)
Formula units/cell	2
Dcalc (g/cm^3)	4.309
F(000)	1080
Data Collection*	
Unit Cell Reflections	50 ($22 < 2\theta < 44°$)
2θ Range	3.5 to 45.0°
Scan Type	$\omega/2\theta$
Scan Speed	Variable; 2.09 to 14.65°/min.
Reflections Collected	1452
Reflections Unique (Rint)	1365 (0.0333)
Indices	(*11 7 ±13*)
Crystal Decomposition	Negligible (2%)
Absorption Coefficient	12.717 mm^{-1}
Min./Max. Transmission	0.665/1.00, Psi scans
Refinement*	
Final Residuals	$R = 0.0377$; $R_w = 0.0445$
Goodness-of-Fit	$S = 1.03$
Largest Δ/σ	0.001
Reflections Observed ($I>3\sigma(I)$)	873
Parameters Refined	88
Data-to-Parameter Ratio	9.9:1
Max./Min. Difference Peaks	1.40/-1.45 $e^-/Å^3$

*(Nicolet R3mV diffractometer; graphite monochromated Mo Kα radiation (λ = 0.71073 Å); temperature = 22°; solved by Direct Methods (SHELXTL PLUS), refined using full-matrix least-squares)

I-726-m3

Supplementary Table 2. Crystallographic data for **II**

Crystal Data	
Empirical Formula	α-Cs_2AgSbS_4
Formula weight (g/mol)	623.7
Color; Habit	Yellow, polyhedron
Size (mm)	0.08 x 0.08 x 0.10
Space Group	Monoclinic, *P21/c* (#14)
Unit Cell Dimensions	
a (Å)	6.848(3)
b (Å)	11.413(3)
c (Å)	13.187(3)
α (°)	90
β (°)	102.45(3)
γ (°)	90
V ($Å^3$)	1006.5(6)
Formula units/cell	4
Dcalc (g/cm^3)	4.115
F(000)	1088
Data Collection*	
Unit Cell Reflections	25(20.9< 2θ <30.1°)
2θ Range	3.0 to 50.0°
Scan Type	ω/2θ
Scan Speed	8°/min w/up to 3 rescans
Reflections Collected	2041
Reflections Unique (Rint)	1876 (0.0254)
Indices	(*8*,*13*,*±15*)
Crystal Decomposition	Negligible (3%)
Absorption Coefficient	12.498 mm^{-1}
Min./Max. Transmission	0.813/1.294, DIFABS
Refinement*	
Final Residuals	R = 0.0397; R_w = 0.0461
Goodness-of-Fit	S = 1.94
Largest Δ/σ	0.001
Reflections Observed (I>3σ(I))	1153
Parameters Refined	74
Data-to-Parameter Ratio	15.6:1
Max./Min. Difference Peaks	1.09/-1.29 $e^-/Å^3$

*(Rigaku AFC7R diffractometer; graphite monochromated Mo Kα radiation (λ = 0.71073 Å); temperature = 22°; solved by Direct Methods (SHELXTL PLUS), refined using full-matrix least-squares)

I-726-M4

Supplementary Table 3. Crystallographic data for **III**

Crystal Data	
Empirical Formula	β-Cs_2AgSbS_4
Formula weight (g/mol)	623.7
Color; Habit	yellow, parallelepiped
Size (mm)	0.02 x 0.03 x 0.20
Space Group	Triclinic, *P-1* (#2)
Unit Cell Dimensions	
a (Å)	6.917(2)
b (Å)	7.341(2)
c (Å)	10.998(2)
α (°)	73.83(2)
β (°)	76.08(2)
γ (°)	71.71(2)
V ($Å^3$)	502.0(2)
Formula units/cell	2
D_{calc} (g/cm^3)	4.126
F(000)	544
Data Collection*	
Unit Cell Reflections	23 (12 < 2θ < 22°)
2θ Range	4 to 50.0°
Scan Type	ω/2θ
Scan Speed	8°/min. w/ up to 3 rescans
Reflections Collected	1941
Reflections Unique (Rint)	1764 (0.0270)
Indices	(*±8 −8 ±13*)
Crystal Decomposition	Negligible (2%)
Absorption Coefficient	12.536 mm^{-1}
Min./Max. Transmission	0.928/1.067, DIFABS
Refinement*	
Final Residuals	R = 0.0343; R_w = 0.0423
Goodness-of-Fit	S = 1.05
Largest Δ/σ	0.001
Reflections Observed (I>3σ(I))	1017
Parameters Refined	73
Data-to-Parameter Ratio	13.9:1
Max./Min. Difference Peaks	0.90/−1.33 $e^-/Å^3$

*(Rigaku AFC7R diffractometer; graphite monochromated Mo Kα radiation (λ = 0.71073 Å); temperature = 22°; solved by Direct Methods (SHELXTL PLUS), refined using full-matrix least-squares)

I-726-MS

Supplementary Table 4. Crystallographic data for **IV**

Crystal Data	
Empirical Formula	Cs_2AgAsS_4
Formula weight (g/mol)	576.9
Color; Habit	yellow, plate
Size (mm)	0.1 x 0.1 x 0.2
Space Group	Triclinic, *P-1* (#2)
Unit Cell Dimensions	
a (Å)	6.783(2)
b (Å)	7.191(2)
c (Å)	11.088(2)
α (°)	73.61(3)
β (°)	75.10(3)
γ (°)	70.83(3)
V ($Å^3$)	481.9(2)
Formula units/cell	2
Dcalc (g/cm^3)	3.975
F(000)	508
Data Collection*	
Unit Cell Reflections	39 ($9 < 2\theta < 21°$)
2θ Range	3.5 to 45.0°
Scan Type	ω/2θ
Scan Speed	3°/min.
Reflections Collected	1381
Reflections Unique (Rint)	1260 (0.0245)
Indices	(*±7 -7 ±11*)
Crystal Decomposition	Negligible (2%)
Absorption Coefficient	13.723 mm^{-1}
Min./Max. Transmission	0.461/1.000
Refinement*	
Final Residuals	$R = 0.0397$; $R_w = 0.0601$
Goodness-of-Fit	$S = 1.82$
Largest Δ/σ	0.002
Reflections Observed ($I>3\sigma(I)$)	1139
Parameters Refined	73
Data-to-Parameter Ratio	15.6:1
Max./Min. Difference Peaks	1.22/-1.60 $e^-/Å^3$

*(Syntex $P2_1$ diffractometer; graphite monochromated Mo Kα radiation (λ = 0.71073 Å); temperature = 22°; solved by Direct Methods (SHELXTL PLUS), refined using full-matrix least-squares)

I-726-m6

Supplementary Table 5. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$)*

$Cs_3Ag_2Sb_3S_8$ (I)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cs1	37(1)	35(1)	34(1)	0	-4(1)	0
Cs2	54(2)	35(1)	28(1)	0	2(1)	0
Cs3	23(1)	42(1)	38(1)	0	-2(1)	0
Sb1	17(1)	18(1)	19(1)	0	1(1)	0
Sb2	18(1)	23(1)	17(1)	0	1(1)	0
Sb3	20(1)	18(1)	15(1)	0	1(1)	0
Ag1	44(1)	46(1)	35(1)	5(1)	11(1)	8(1)
S1	25(5)	30(5)	19(4)	0	4(3)	0
S2	25(3)	21(3)	26(3)	-6(3)	6(2)	-4(2)
S3	17(4)	26(4)	20(4)	0	0(3)	0
S4	48(4)	28(3)	25(3)	15(3)	2(3)	4(3)
S5	25(5)	46(6)	32(5)	0	8(4)	0
S6	47(6)	43(5)	9(4)	0	7(4)	0

α-Cs_2AgSbS_4 (II)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cs1	34(1)	51(1)	45(1)	0(1)	-1(1)	12(1)
Cs2	60(1)	38(1)	43(1)	6(1)	21(1)	1(1)
Sb1	19(1)	24(1)	19(1)	0(1)	4(1)	-2(1)
Ag1	46(1)	33(1)	55(1)	3(1)	13(1)	5(1)
S1	30(3)	29(2)	27(2)	-6(2)	8(2)	-5(2)
S2	34(3)	30(2)	21(2)	-3(2)	5(2)	-2(2)
S3	26(2)	32(2)	28(2)	2(2)	11(2)	7(2)
S4	32(3)	31(2)	42(3)	8(2)	0(2)	-3(2)

β-Cs_2AgSbS_4 (III)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cs1	45(1)	34(1)	28(1)	-8(1)	-1(1)	-6(1)
Cs2	26(1)	30(1)	51(1)	-6(1)	-9(1)	-9(1)
Sb1	16(1)	17(1)	21(1)	-5(1)	-3(1)	-4(1)
Ag1	40(1)	48(1)	28(1)	-14(1)	-5(1)	-3(1)
S1	23(2)	21(2)	32(2)	-7(2)	-2(2)	-7(2)
S2	25(2)	19(2)	27(2)	-9(2)	2(2)	-6(2)
S3	16(2)	42(3)	21(2)	-5(2)	-1(1)	-6(2)
S4	33(2)	29(2)	31(2)	-6(2)	-15(2)	-2(2)

Cs_2AgAsS_4 (IV)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cs1	52(1)	31(1)	28(1)	-12(1)	-1(1)	-6(1)
Cs2	24(1)	28(1)	61(1)	-6(1)	-8(1)	-12(1)
As1	15(1)	16(1)	18(1)	-5(1)	-2(1)	-3(1)
Ag1	41(1)	41(1)	24(1)	-13(1)	-7(1)	-2(1)
S1	24(2)	18(1)	26(2)	-8(1)	-3(1)	-4(1)
S2	26(2)	19(1)	23(2)	-9(1)	-2(1)	-5(1)
S3	20(2)	35(2)	20(2)	-6(1)	-2(1)	-6(1)
S4	31(2)	29(2)	22(2)	-8(1)	-11(1)	-1(1)

*The anisotropic displacement factor takes the form: $\exp[-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + ... + 2klb^*c^*U_{23})]$.

I-726-M7

Supplementary Table 6. Bond Angles (degrees) in $Cs_3Ag_2Sb_3S_8$ (I)

S(2)-Cs(1)-S(3)	63.9(2)
S(2)-Cs(1)-S(1A)	150.2(1)
S(3)-Cs(1)-S(1A)	100.6(2)
S(2)-Cs(1)-S(1B)	150.2(1)
S(3)-Cs(1)-S(1B)	100.6(2)
S(1A)-Cs(1)-S(1B)	52.9(2)
S(2)-Cs(1)-S(3A)	90.6(1)
S(3)-Cs(1)-S(3A)	86.1(1)
S(1A)-Cs(1)-S(3A)	61.9(2)
S(1B)-Cs(1)-S(3A)	114.6(2)
S(2)-Cs(1)-S(3B)	90.6(1)
S(3)-Cs(1)-S(3B)	86.1(1)
S(1A)-Cs(1)-S(3B)	114.6(2)
S(1B)-Cs(1)-S(3B)	61.9(2)
S(3A)-Cs(1)-S(3B)	170.6(3)
S(2)-Cs(1)-S(4A)	59.7(1)
S(3)-Cs(1)-S(4A)	115.7(1)
S(1A)-Cs(1)-S(4A)	113.2(1)
S(1B)-Cs(1)-S(4A)	143.5(1)
S(3A)-Cs(1)-S(4A)	66.8(2)
S(3B)-Cs(1)-S(4A)	121.6(2)
S(2)-Cs(1)-S(4D)	59.7(1)
S(3)-Cs(1)-S(4D)	115.7(1)
S(1A)-Cs(1)-S(4D)	143.5(1)
S(1B)-Cs(1)-S(4D)	113.2(1)
S(3A)-Cs(1)-S(4D)	121.6(2)
S(3B)-Cs(1)-S(4D)	66.8(2)
S(4A)-Cs(1)-S(4D)	54.9(2)
Cs(3)-Cs(1)-S(6B)	111.8(1)
S(2)-Cs(1)-S(6B)	126.2(2)
S(3)-Cs(1)-S(6B)	169.9(2)
S(1A)-Cs(1)-S(6B)	70.5(1)
S(1B)-Cs(1)-S(6B)	70.5(1)
S(3A)-Cs(1)-S(6B)	93.4(1)
S(3B)-Cs(1)-S(6B)	93.4(1)
S(4A)-Cs(1)-S(6B)	73.0(1)
S(4D)-Cs(1)-S(6B)	73.0(1)
S(3)-Cs(3)-S(4)	146.8(1)
S(3)-Cs(3)-S(5)	104.7(2)
S(4)-Cs(3)-S(5)	62.5(1)
S(3)-Cs(3)-S(6)	90.0(1)
S(4)-Cs(3)-S(6)	57.5(1)
S(5)-Cs(3)-S(6)	73.0(1)
S(3)-Cs(3)-S(4B)	71.9(2)
S(4)-Cs(3)-S(4B)	102.7(1)
S(5)-Cs(3)-S(4B)	148.6(1)
S(6)-Cs(3)-S(4B)	75.8(1)
S(3)-Cs(3)-S(4C)	71.9(2)
S(4)-Cs(3)-S(4C)	135.5(1)
S(5)-Cs(3)-S(4C)	148.6(1)
S(6)-Cs(3)-S(4C)	136.8(1)
S(4B)-Cs(3)-S(4C)	61.5(2)
S(3)-Cs(3)-S(4E)	146.8(1)
S(4)-Cs(3)-S(4E)	57.7(2)
S(5)-Cs(3)-S(4E)	62.5(1)
S(6)-Cs(3)-S(4E)	112.5(1)
S(4B)-Cs(3)-S(4E)	135.5(1)

I-726-m8

Supplementary Table 6 (cont)

S(4C)-Cs(3)-S(4E)	102.7(1)
S(3)-Cs(3)-S(6A)	90.0(1)
S(4)-Cs(3)-S(6A)	112.5(1)
S(5)-Cs(3)-S(6A)	73.0(1)
S(6)-Cs(3)-S(6A)	144.8(2)
S(4B)-Cs(3)-S(6A)	136.8(1)
S(4C)-Cs(3)-S(6A)	75.8(1)
S(4E)-Cs(3)-S(6A)	57.5(1)
S(3)-Cs(3)-S(6C)	124.9(2)
S(4)-Cs(3)-S(6C)	74.5(1)
S(5)-Cs(3)-S(6C)	130.4(2)
S(6)-Cs(3)-S(6C)	104.4(1)
S(4B)-Cs(3)-S(6C)	61.3(1)
S(4C)-Cs(3)-S(6C)	61.3(1)
S(4E)-Cs(3)-S(6C)	74.5(1)
S(6A)-Cs(3)-S(6C)	104.4(1)
S(3)-Cs(2)-S(1A)	96.5(2)
S(3)-Cs(2)-S(1B)	96.5(2)
S(1A)-Cs(2)-S(1B)	55.7(2)
S(3)-Cs(2)-S(2A)	174.1(2)
S(1A)-Cs(2)-S(2A)	78.3(1)
S(1B)-Cs(2)-S(2A)	78.3(1)
S(3)-Cs(2)-S(2B)	80.8(1)
S(1A)-Cs(2)-S(2B)	60.6(1)
S(1B)-Cs(2)-S(2B)	115.5(2)
S(2A)-Cs(2)-S(2B)	98.9(1)
S(3)-Cs(2)-S(2C)	80.8(1)
S(1A)-Cs(2)-S(2C)	115.5(2)
S(1B)-Cs(2)-S(2C)	60.6(1)
S(2A)-Cs(2)-S(2C)	98.9(1)
S(2B)-Cs(2)-S(2C)	160.5(3)
S(3)-Cs(2)-S(4B)	63.1(1)
S(1A)-Cs(2)-S(4B)	119.6(1)
S(1B)-Cs(2)-S(4B)	159.3(2)
S(2A)-Cs(2)-S(4B)	121.8(1)
S(2B)-Cs(2)-S(4B)	60.3(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4B)	115.8(1)
S(3)-Cs(2)-S(4C)	63.1(1)
S(1A)-Cs(2)-S(4C)	159.3(2)
S(1B)-Cs(2)-S(4C)	119.6(1)
S(2A)-Cs(2)-S(4C)	121.8(1)
S(2B)-Cs(2)-S(4C)	115.8(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4C)	60.3(1)
S(4B)-Cs(2)-S(4C)	56.4(2)
S(1)-Sb(1)-S(2)	105.1(2)
S(1)-Sb(1)-S(3)	111.5(2)
S(2)-Sb(1)-S(3)	113.7(3)
S(1)-Sb(1)-S(1C)	109.5(3)
S(2)-Sb(1)-S(1C)	105.1(2)
S(3)-Sb(1)-S(1C)	111.5(2)
S(4)-Sb(2)-S(5)	98.6(2)
S(4)-Sb(2)-S(4E)	93.8(3)
S(5)-Sb(2)-S(4E)	98.6(2)
S(4)-Sb(3)-S(6)	96.6(2)
S(4)-Sb(3)-S(4F)	91.8(3)
S(6)-Sb(3)-S(4F)	96.6(2)
S(1)-Ag(1)-S(5)	126.9(2)

I-726-m9

Supplementary Table 6 (cont)

S(1)-Ag(1)-S(6)	113.2(2)
S(5)-Ag(1)-S(6)	110.1(2)
S(1)-Ag(1)-S(5A)	100.4(2)
S(5)-Ag(1)-S(5A)	102.1(1)
S(6)-Ag(1)-S(5A)	98.5(2)
Sb(2)-S(4)-Sb(3)	99.9(2)
Sb(2)-S(5)-Ag(1)	126.1(2)
Sb(2)-S(5)-Ag(1B)	89.2(2)
Ag(1)-S(5)-Ag(1B)	77.9(1)
Sb(2)-S(5)-Ag(1D)	89.2(2)
Ag(1)-S(5)-Ag(1D)	132.0(3)
Ag(1B)-S(5)-Ag(1D)	70.6(2)
Sb(2)-S(5)-Ag(1E)	126.1(2)
Ag(1)-S(5)-Ag(1E)	99.0(2)
Ag(1B)-S(5)-Ag(1E)	132.0(3)
Ag(1D)-S(5)-Ag(1E)	77.9(1)
Sb(3)-S(6)-Ag(1)	84.4(2)
Sb(3)-S(6)-Ag(1F)	84.4(2)
Ag(1)-S(6)-Ag(1F)	75.3(2)

I-726-M10

Supplementary Table 7. Bond angles in α-Cs_2AgSbS_4 (II)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
S(1)	Cs(1)	S(1)	129.08(7)	S(1)	Cs(2)	S(4)	117.7(1)
S(1)	Cs(1)	S(2)	86.9(1)	S(1)	Cs(2)	S(4)	64.5(1)
S(1)	Cs(1)	S(2)	123.7(1)	S(2)	Cs(2)	S(2)	135.14(8)
S(1)	Cs(1)	S(3)	149.6(1)	S(2)	Cs(2)	S(3)	73.41(9)
S(1)	Cs(1)	S(3)	65.17(9)	S(2)	Cs(2)	S(3)	65.3(1)
S(1)	Cs(1)	S(4)	64.87(9)	S(2)	Cs(2)	S(4)	70.1(1)
S(1)	Cs(1)	S(2)	73.3(1)	S(2)	Cs(2)	S(4)	159.8(1)
S(1)	Cs(1)	S(2)	78.2(1)	S(2)	Cs(2)	S(4)	104.8(1)
S(1)	Cs(1)	S(3)	80.0(1)	S(2)	Cs(2)	S(3)	62.16(9)
S(1)	Cs(1)	S(3)	98.47(9)	S(2)	Cs(2)	S(3)	157.5(1)
S(1)	Cs(1)	S(4)	64.4(1)	S(2)	Cs(2)	S(4)	109.7(1)
S(2)	Cs(1)	S(2)	147.5(1)	S(2)	Cs(2)	S(4)	62.54(9)
S(2)	Cs(1)	S(3)	95.2(1)	S(2)	Cs(2)	S(4)	105.7(1)
S(2)	Cs(1)	S(3)	136.7(1)	S(3)	Cs(2)	S(3)	138.50(8)
S(2)	Cs(1)	S(4)	71.3(1)	S(3)	Cs(2)	S(4)	98.9(1)
S(2)	Cs(1)	S(3)	64.5(1)	S(3)	Cs(2)	S(4)	124.58(9)
S(2)	Cs(1)	S(3)	62.34(9)	S(3)	Cs(2)	S(4)	125.8(1)
S(2)	Cs(1)	S(4)	109.6(1)	S(3)	Cs(2)	S(4)	64.3(1)
S(3)	Cs(1)	S(3)	125.9(1)	S(3)	Cs(2)	S(4)	95.8(1)
S(3)	Cs(1)	S(4)	144.1(1)	S(3)	Cs(2)	S(4)	70.7(1)
S(3)	Cs(1)	S(4)	67.0(1)	S(4)	Cs(2)	S(4)	96.0(1)
S(1)	Cs(2)	S(2)	77.5(1)	S(4)	Cs(2)	S(4)	132.5(1)
S(1)	Cs(2)	S(2)	86.9(1)	S(4)	Cs(2)	S(4)	73.3(1)
S(1)	Cs(2)	S(3)	62.30(9)	S(1)	Cs(2)	S(3)	110.0(1)
S(1)	Cs(2)	S(4)	146.3(1)	Cs(1)	S(1)	Ag(1)	92.2(1)
S(1)	Sb(1)	S(2)	106.2(1)	Cs(1)	S(1)	S(2)	119.3(1)
S(1)	Sb(1)	S(3)	109.0(2)	Cs(1)	S(1)	S(3)	94.3(1)
S(1)	Sb(1)	S(4)	113.5(2)	Cs(1)	S(1)	S(4)	60.26(9)
S(2)	Sb(1)	S(3)	109.6(2)	Cs(1)	S(1)	Cs(2)	76.95(9)
S(2)	Sb(1)	S(4)	110.0(2)	Cs(1)	S(1)	Sb(1)	140.9(2)
S(3)	Sb(1)	S(4)	108.4(2)	Cs(1)	S(1)	Ag(1)	74.8(1)
Cs(1)	S(1)	Ag(1)	85.6(1)	Cs(2)	S(1)	Sb(1)	97.5(1)
Cs(2)	S(1)	Ag(1)	128.3(1)	Cs(2)	S(1)	Ag(1)	149.5(2)
S(1)	Ag(1)	S(1)	111.4(1)	Ag(1)	S(1)	Ag(1)	68.6(1)
S(1)	Ag(1)	S(2)	85.8(1)	Sb(1)	S(1)	Ag(1)	79.4(1)
S(1)	Ag(1)	S(3)	116.9(1)	Sb(1)	S(1)	Ag(1)	111.6(2)
S(1)	Ag(1)	S(2)	110.2(1)	S(1)	Ag(1)	S(3)	103.4(1)
S(2)	Ag(1)	S(3)	128.4(1)	Cs(1)	S(1)	Cs(1)	125.3(1)
Cs(1)	S(1)	Cs(2)	78.24(9)	Cs(1)	S(1)	Sb(1)	90.1(1)
Cs(1)	S(1)	Ag(1)	152.3(1)	Cs(2)	S(2)	Sb(1)	90.7(1)
Cs(2)	S(2)	Ag(1)	162.4(2)	Cs(1)	S(2)	Cs(1)	147.5(1)
Cs(1)	S(2)	Cs(2)	73.64(9)	Cs(1)	S(2)	Cs(2)	73.36(8)
Cs(1)	S(2)	Sb(1)	91.2(1)	Sb(1)	S(2)	Ag(1)	87.1(1)
Cs(1)	S(2)	Ag(1)	124.2(2)	Cs(1)	S(2)	Cs(2)	110.0(1)
Cs(1)	S(2)	Cs(2)	76.48(9)	Cs(1)	S(2)	Sb(1)	101.0(1)
Cs(1)	S(2)	Ag(1)	86.7(1)	Cs(2)	S(2)	Cs(2)	115.7(1)
Cs(2)	S(2)	Sb(1)	142.8(2)	Cs(1)	S(3)	Cs(1)	124.4(1)
Cs(2)	S(2)	Ag(1)	74.9(1)	Cs(1)	S(3)	Cs(2)	149.9(1)
Cs(1)	S(3)	Cs(2)	93.7(1)	Cs(1)	S(3)	Sb(1)	91.2(1)
Cs(1)	S(3)	Ag(1)	79.8(1)	Sb(1)	S(3)	Ag(1)	112.4(2)
Cs(1)	S(3)	Cs(2)	67.18(8)	Cs(1)	S(3)	Cs(2)	73.93(8)
Cs(1)	S(3)	Sb(1)	143.0(2)	Cs(1)	S(3)	Ag(1)	86.4(1)
Cs(2)	S(3)	Cs(2)	116.4(1)	Cs(2)	S(3)	Sb(1)	87.4(1)
Cs(2)	S(3)	Ag(1)	73.1(1)	Cs(1)	S(4)	Cs(2)	166.6(1)
Cs(1)	S(4)	Cs(2)	107.5(1)	Cs(1)	S(4)	Cs(2)	71.06(9)
Cs(1)	S(4)	Sb(1)	85.5(1)	Cs(2)	S(3)	Sb(1)	96.0(1)
Cs(2)	S(3)	Ag(1)	150.9(2)	Cs(2)	S(4)	Cs(2)	84.0(1)
Cs(2)	S(4)	Cs(2)	106.7(1)	Cs(2)	S(4)	Sb(1)	87.5(1)
Cs(2)	S(4)	Cs(2)	132.5(1)	Cs(2)	S(4)	Sb(1)	90.3(1)
Cs(2)	S(4)	Sb(1)	135.3(2)				

I-726-M11

Supplementary Table 8. Bond angles (degrees) in β-Cs_2AgSbS_4 (III)

S(1)-Cs(1)-S(2)	95.6(1)
S(1)-Cs(1)-S(3)	157.1(1)
S(2)-Cs(1)-S(3)	62.6(1)
S(1)-Cs(1)-S(4)	139.8(1)
S(2)-Cs(1)-S(4)	121.7(1)
S(3)-Cs(1)-S(4)	59.6(1)
S(1)-Cs(1)-S(1B)	104.7(1)
S(2)-Cs(1)-S(1B)	119.7(1)
S(3)-Cs(1)-S(1B)	93.1(1)
S(4)-Cs(1)-S(1B)	71.1(1)
S(1)-Cs(1)-S(2A)	76.5(1)
S(2)-Cs(1)-S(2A)	169.9(1)
S(3)-Cs(1)-S(2A)	124.2(1)
S(4)-Cs(1)-S(2A)	64.6(1)
S(1B)-Cs(1)-S(2A)	69.0(1)
S(1)-Cs(1)-S(2B)	64.8(1)
S(2)-Cs(1)-S(2B)	93.9(1)
S(3)-Cs(1)-S(2B)	107.3(1)
S(4)-Cs(1)-S(2B)	95.9(1)
S(1B)-Cs(1)-S(2B)	146.1(1)
S(2A)-Cs(1)-S(2B)	77.1(1)
S(1)-Cs(1)-S(2C)	66.7(1)
S(2)-Cs(1)-S(2C)	67.3(1)
S(3)-Cs(1)-S(2C)	107.5(1)
S(4)-Cs(1)-S(2C)	138.2(1)
S(1B)-Cs(1)-S(2C)	70.3(1)
S(2A)-Cs(1)-S(2C)	114.1(1)
S(2B)-Cs(1)-S(2C)	125.3(1)
S(1)-Cs(2)-S(2)	85.6(1)
S(2)-Cs(2)-S(1A)	67.6(1)
S(1)-Cs(2)-S(2C)	64.9(1)
S(2)-Cs(2)-S(2C)	64.0(1)
S(1A)-Cs(2)-S(2C)	102.6(1)
S(1)-Cs(2)-S(3A)	135.6(1)
S(2)-Cs(2)-S(3A)	138.6(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3A)	71.3(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3A)	123.0(1)
S(1)-Cs(2)-S(3B)	63.3(1)
S(2)-Cs(2)-S(3B)	100.5(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3B)	118.3(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3B)	126.7(1)
S(3A)-Cs(2)-S(3B)	102.5(1)
S(1)-Cs(2)-S(3C)	102.6(1)
S(2)-Cs(2)-S(3C)	110.5(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3C)	89.0(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3C)	59.2(1)
S(3A)-Cs(2)-S(3C)	64.1(1)
S(3B)-Cs(2)-S(3C)	145.1(1)
S(1)-Cs(2)-S(4A)	78.1(1)
S(2)-Cs(2)-S(4A)	163.7(1)
S(1A)-Cs(2)-S(4A)	128.7(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4A)	107.3(1)
S(3A)-Cs(2)-S(4A)	57.6(1)
S(3B)-Cs(2)-S(4A)	73.1(1)
S(3C)-Cs(2)-S(4A)	72.7(1)
S(1)-Cs(2)-S(4D)	120.5(1)
S(2)-Cs(2)-S(4D)	90.6(1)

I-726-M12

Supplementary Table 8 (cont)

S(1A)-Cs(2)-S(4D)	60.6(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4D)	154.1(1)
S(3A)-Cs(2)-S(4D)	72.7(1)
S(3B)-Cs(2)-S(4D)	59.2(1)
S(3C)-Cs(2)-S(4D)	133.5(1)
S(4A)-Cs(2)-S(4D)	98.5(1)
S(1A)-Ag(1)-S(3A)	124.1(2)
S(1A)-Ag(1)-S(4B)	116.8(1)
S(3A)-Ag(1)-S(4B)	86.5(1)
S(1A)-Ag(1)-S(4E)	110.2(1)
S(3A)-Ag(1)-S(4E)	110.8(1)
S(4B)-Ag(1)-S(4E)	105.1(1)
S(2)-Sb(1)-S(3)	108.9(1)
S(2)-Sb(1)-S(1C)	109.7(1)
S(3)-Sb(1)-S(1C)	110.2(2)
S(2)-Sb(1)-S(4C)	113.1(2)
S(3)-Sb(1)-S(4C)	107.3(1)
S(1C)-Sb(1)-S(4C)	107.5(1)
Ag(1A)-S(1)-Sb(1B)	111.7(1)
Sb(1)-S(3)-Ag(1B)	85.8(1)
Ag(1C)-S(4)-Ag(1D)	74.9(1)
Ag(1C)-S(4)-Sb(1A)	79.7(1)
Ag(1D)-S(4)-Sb(1A)	111.7(1)

I-726-M13

Suppplementary Table 9. Bond angles (degrees) in Cs_2AgAsS_4 (**IV**)

S(1)-Cs(1)-S(2)	98.0(1)
S(1)-Cs(1)-S(3)	155.2(1)
S(2)-Cs(1)-S(3)	58.6(1)
S(1)-Cs(1)-S(4)	140.0(1)
S(2)-Cs(1)-S(4)	120.1(1)
S(3)-Cs(1)-S(4)	61.7(1)
S(1)-Cs(1)-S(1B)	105.2(1)
S(2)-Cs(1)-S(1B)	113.2(1)
S(3)-Cs(1)-S(1B)	92.7(1)
S(4)-Cs(1)-S(1B)	72.3(1)
S(1)-Cs(1)-S(2A)	80.6(1)
S(2)-Cs(1)-S(2A)	177.1(1)
S(3)-Cs(1)-S(2A)	122.4(1)
S(4)-Cs(1)-S(2A)	60.7(1)
S(1B)-Cs(1)-S(2A)	69.7(1)
S(1)-Cs(1)-S(2B)	59.7(1)
S(2)-Cs(1)-S(2B)	96.1(1)
S(3)-Cs(1)-S(2B)	111.2(1)
S(4)-Cs(1)-S(2B)	101.6(1)
S(1B)-Cs(1)-S(2B)	149.3(1)
S(2A)-Cs(1)-S(2B)	81.0(1)
S(1)-Cs(2)-S(1A)	150.0(1)
S(1)-Cs(2)-S(2C)	67.5(1)
S(1A)-Cs(2)-S(2C)	104.2(1)
S(1)-Cs(2)-S(3A)	137.5(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3A)	72.0(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3A)	122.2(1)
S(1)-Cs(2)-S(3B)	59.1(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3B)	116.9(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3B)	125.8(1)
S(3A)-Cs(2)-S(3B)	103.7(1)
S(1)-Cs(2)-S(3C)	105.8(1)
S(1A)-Cs(2)-S(3C)	91.6(1)
S(2C)-Cs(2)-S(3C)	57.7(1)
S(3A)-Cs(2)-S(3C)	64.7(1)
S(3B)-Cs(2)-S(3C)	145.2(1)
S(1)-Cs(2)-S(4A)	79.5(1)
S(1A)-Cs(2)-S(4A)	129.7(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4A)	105.8(1)
S(3A)-Cs(2)-S(4A)	58.0(1)
S(3B)-Cs(2)-S(4A)	74.0(1)
S(3C)-Cs(2)-S(4A)	72.3(1)
S(1)-Cs(2)-S(4D)	118.4(1)
S(1A)-Cs(2)-S(4D)	57.0(1)
S(2C)-Cs(2)-S(4D)	153.9(1)
S(3A)-Cs(2)-S(4D)	72.4(1)
S(3B)-Cs(2)-S(4D)	61.8(1)
S(3C)-Cs(2)-S(4D)	133.2(1)
S(4A)-Cs(2)-S(4D)	100.2(1)
S(1A)-Ag(1)-S(3A)	125.6(1)
S(1A)-Ag(1)-S(4B)	123.1(1)
S(3A)-Ag(1)-S(4B)	80.7(1)
S(1A)-Ag(1)-S(4E)	112.4(1)
S(3A)-Ag(1)-S(4E)	109.4(1)
S(4B)-Ag(1)-S(4E)	99.8(1)
S(2)-As(1)-S(3)	109.6(1)
S(2)-As(1)-S(1C)	108.9(1)

 I-726-M14

Supplementary Table 9 (cont)

S(3)-As(1)-S(1C)	110.1(1)
S(2)-As(1)-S(4C)	112.3(1)
S(3)-As(1)-S(4C)	108.2(1)
S(1C)-As(1)-S(4C)	107.7(1)
Ag(1A)-S(1)-As(1B)	110.9(1)
As(1)-S(3)-Ag(1B)	87.7(1)
Ag(1D)-S(4)-As(1A)	113.4(1)
Ag(1C)-S(4)-Ag(1D)	80.2(1)
Ag(1C)-S(4)-As(1A)	82.2(1)

I-726-M15

Supplementary Table 10. Bond Distances (Å)

$Cs_3Ag_2Sb_3S_8$ (I)

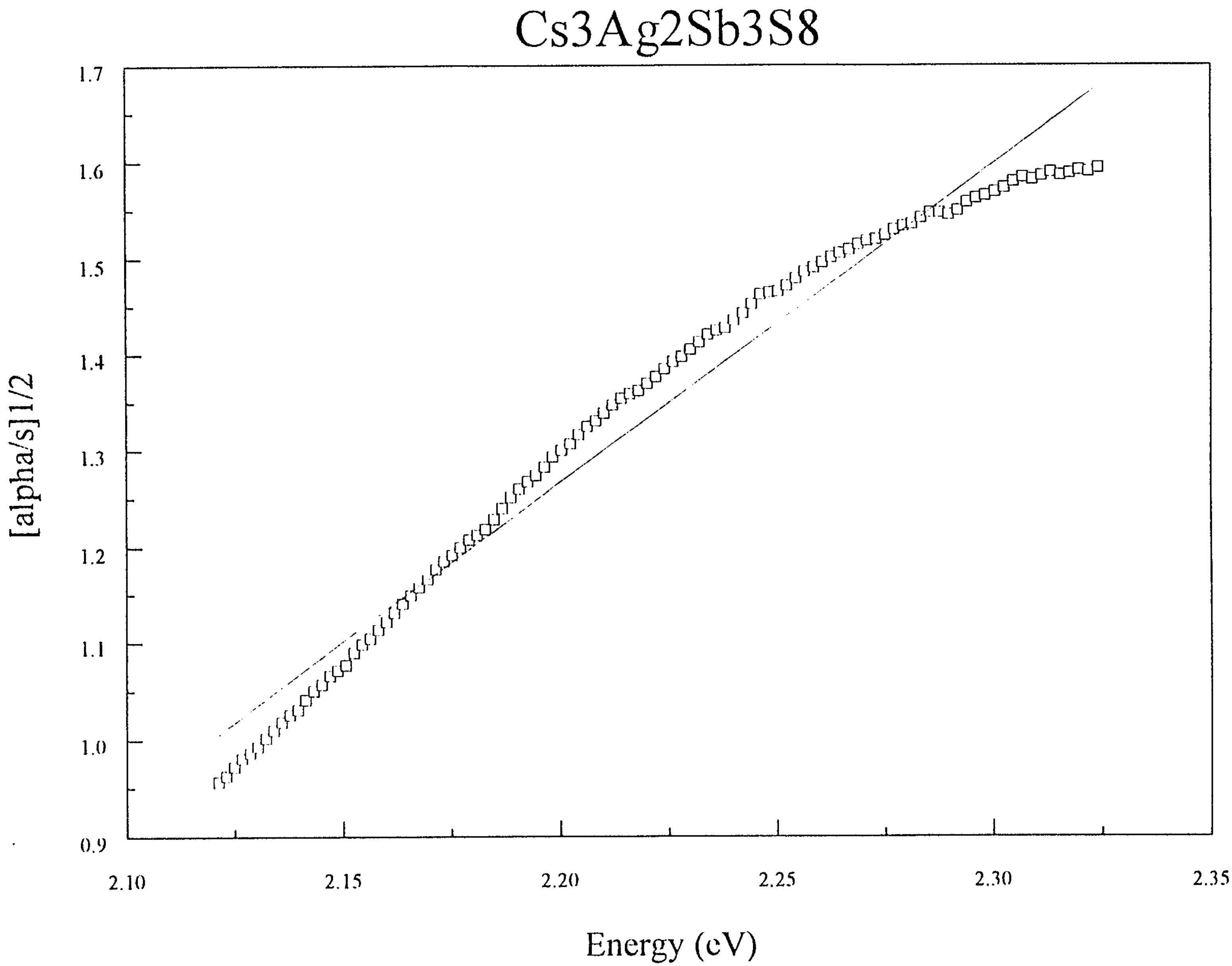
Sb1-S1	2.472(8)		Cs1-S5	3.767(8)	
Sb1-S2	2.497(6)	x2	Cs1-S5a	3.629(2)	x2
Sb2-S2	2.497(6)	x2	Cs1-S6	3.538(9)	
Sb2-S3	2.385(7)		Cs2-S2	3.798(5)	x2
Sb3-S4	2.339(6)	x2	Cs2-S4	3.651(6)	x2
Sb3-S5	2.308(9)		Cs2-S6	3.700(9)	
Sb3-S6	2.315(8)		Cs2-S6a	3.670(2)	x2
Ag1-S1	2.630(5)		Cs3-S1	3.463(8)	
Ag1-S1a	2.799(6)		Cs3-S2	3.782(5)	x2
Ag1-S3a	2.648(7)		Cs3-S2a	3.507(6)	x2
Ag1-S4	2.472(6)		Cs3-S3	3.794(3)	x2
Cs1-S2	3.958(6)	x2	Cs3-S3a	3.635(8)	
Cs1-S3	3.569(7)		Cs3-S5	3.614(9)	
Cs1-S4	3.833(7)	x2			

α-Cs_2AgSbS_4 (II)

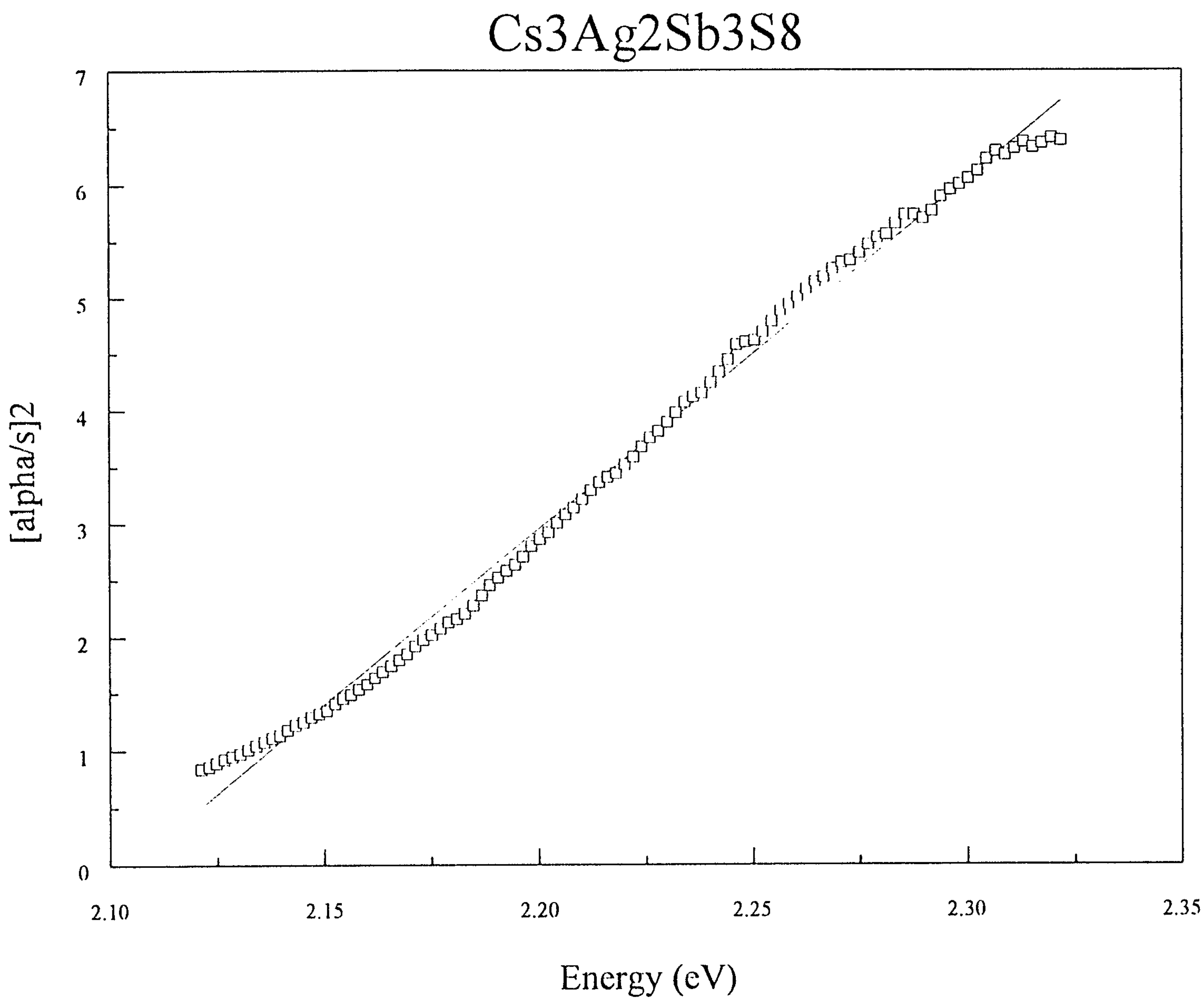
Sb1-S1	2.352(4)	Cs1-S3	3.588(4)
Sb1-S2	2.342(4)	Cs1-S3a	3.867(4)
Sb1-S3	2.345(4)	Cs1-S4	3.739(5)
Sb1-S4	2.309(4)	Cs2-S1	3.477(4)
Ag1-S1	2.919(4)	Cs2-S2	3.739(4)
Ag1-S1a	2.603(5)	Cs2-S2a	3.591(4)
Ag1-S2	2.583(4)	Cs2-S3	3.884(5)
Ag1-S3b	2.480(4)	Cs2-S3a	3.414(4)
Cs1-S1	3.522(4)	Cs2-S4	3.663(5)
Cs1-S1a	3.583(4)	Cs2-S4a	3.745(5)
Cs1-S2	3.544(5)	Cs2-S4b	3.821(5)
Cs1-S2a	3.589(5)		

β-Cs_2AgSbS_4 (III)		Cs_2AgAsS_4 (IV)	
Sb1-S1	2.346(4)	As1-S1	2.180(3)
Sb1-S2	2.334(5)	As1-S2	2.173(3)
Sb1-S3	2.346(4)	As1-S3	2.179(3)
Sb1-S4	2.321(5)	As1-S4	2.155(3)
Ag1-S1	2.881(5)	Ag1-S1	2.831(4)
Ag1-S1a	2.566(4)	Ag1-S1a	2.587(3)
Ag1-S2	2.613(4)	Ag1-S2	2.610(3)
Ag1-S3b	2.479(4)	Ag1-S3b	2.478(3)
Cs1-S1	3.548(5)	Cs1-S1	3.512(4)
Cs1-S2	3.657(4)	Cs1-S2	3.644(3)
Cs1-S3	3.392(4)	Cs1-S3	3.399(3)
Cs1-S3a	3.573(4)	Cs1-S3a	3.622(3)
Cs1-S4	3.634(5)	Cs1-S4	3.588(4)
Cs1-S4a	3.736(5)	Cs1-S4a	3.605(4)
Cs1-S4b	3.714(4)	Cs1-S4b	3.669(3)
Cs2-S1	3.634(4)	Cs2-S1	3.682(3)
Cs2-S1a	3.553(4)	Cs2-S1a	3.533(3)
Cs2-S2	3.799(5)	Cs2-S2	3.879(4)
Cs2-S2a	3.692(5)	Cs2-S2a	3.607(3)
Cs2-S2b	3.559(5)	Cs2-S2b	3.502(3)
Cs2-S3	3.625(5)	Cs2-S3	3.623(4)
Cs2-S3a	3.922(5)	Cs2-S3a	3.821(3)
Cs2-S4	4.025(4)	Cs2-S4	3.804(3)

$\alpha/S = \frac{\left(1 - \frac{ref}{100}\right)^2}{\left(2 * \frac{ref}{100}\right)}$

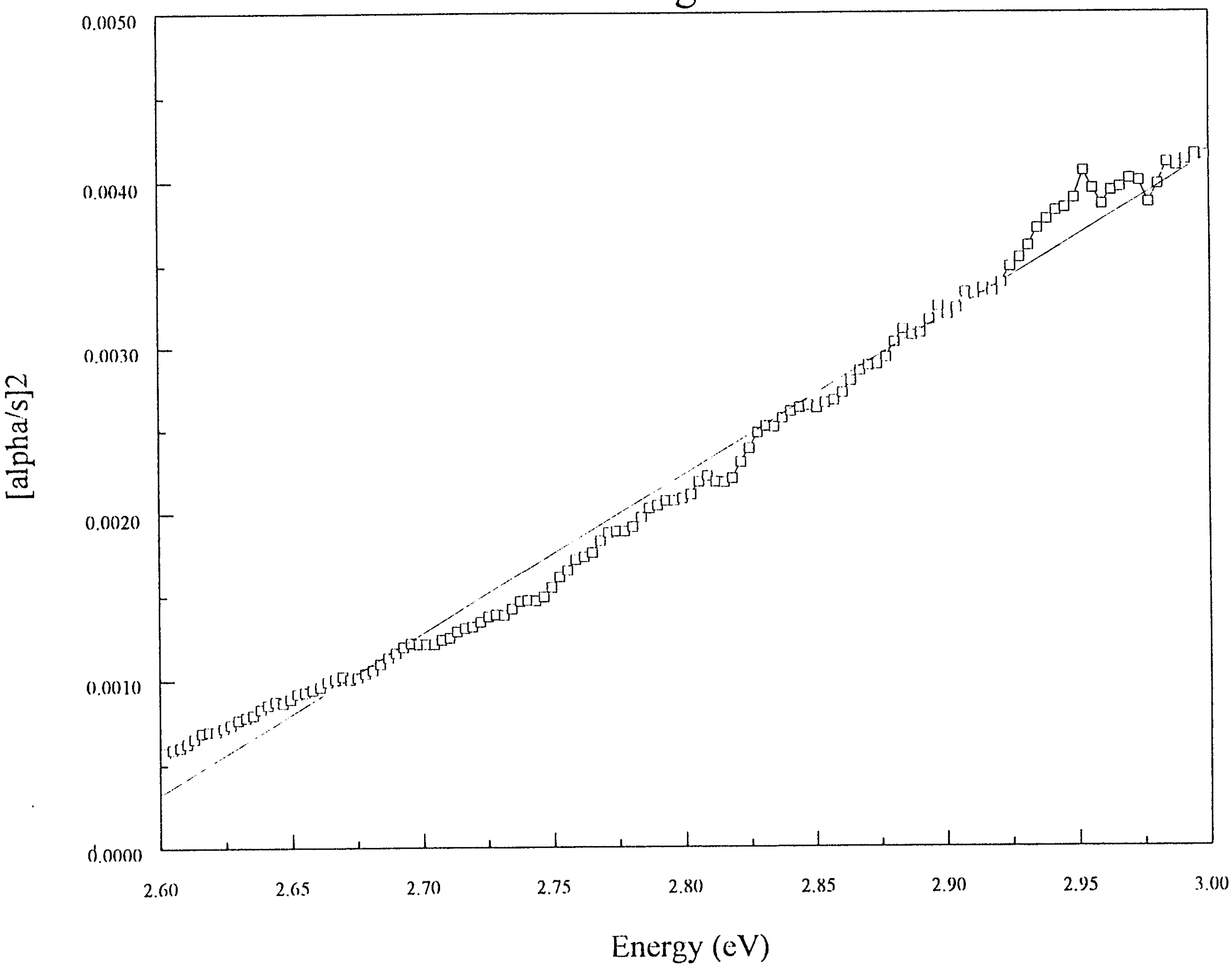


I-726-M16


Cs3Ag2Sb3S8
[alpha/s]2
Energy (eV)
0
1
2
3
4
5
6
7
2.10
2.15
2.20
2.25
2.30
2.35

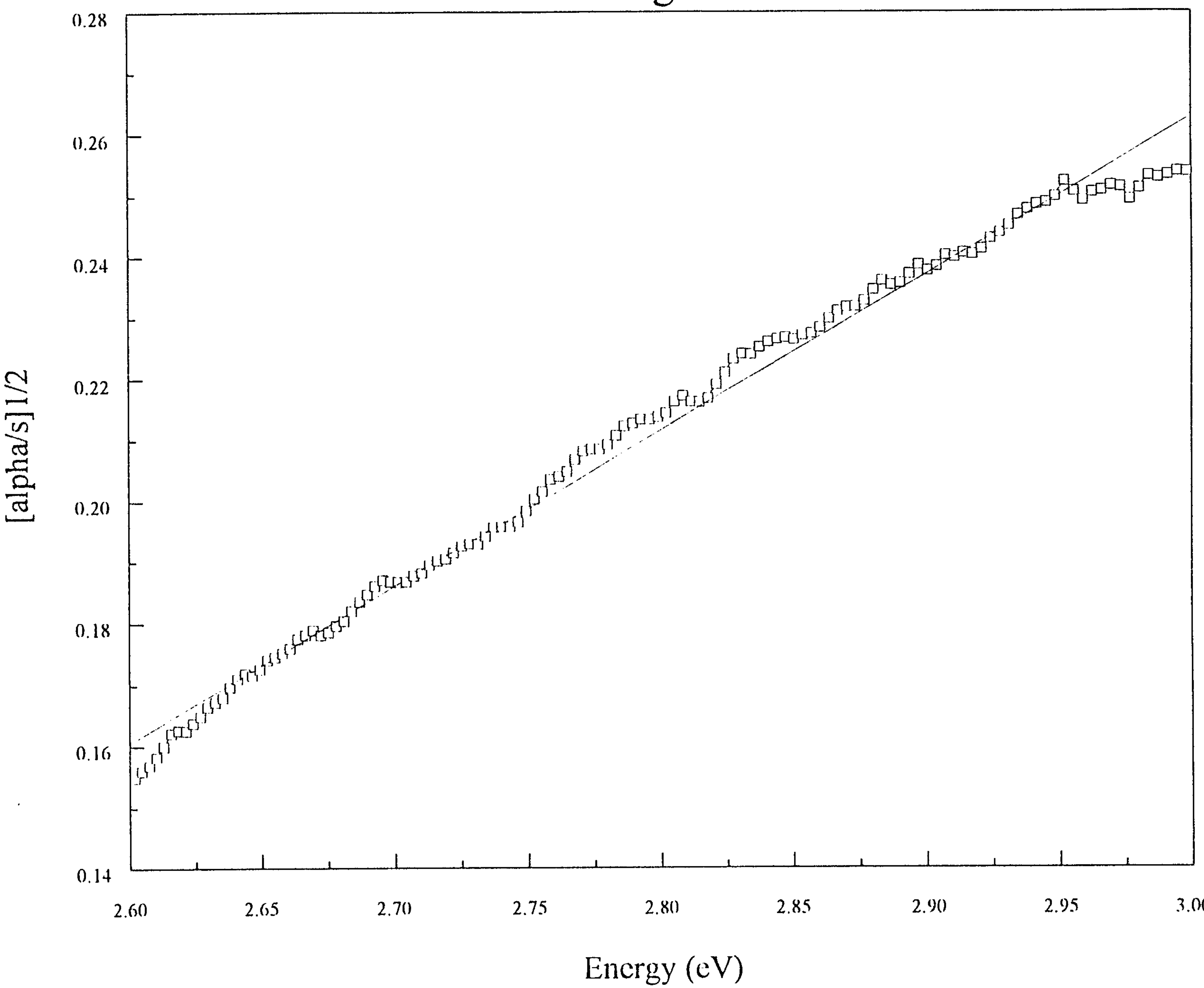
I-726-M17

Cs2AgSbS4

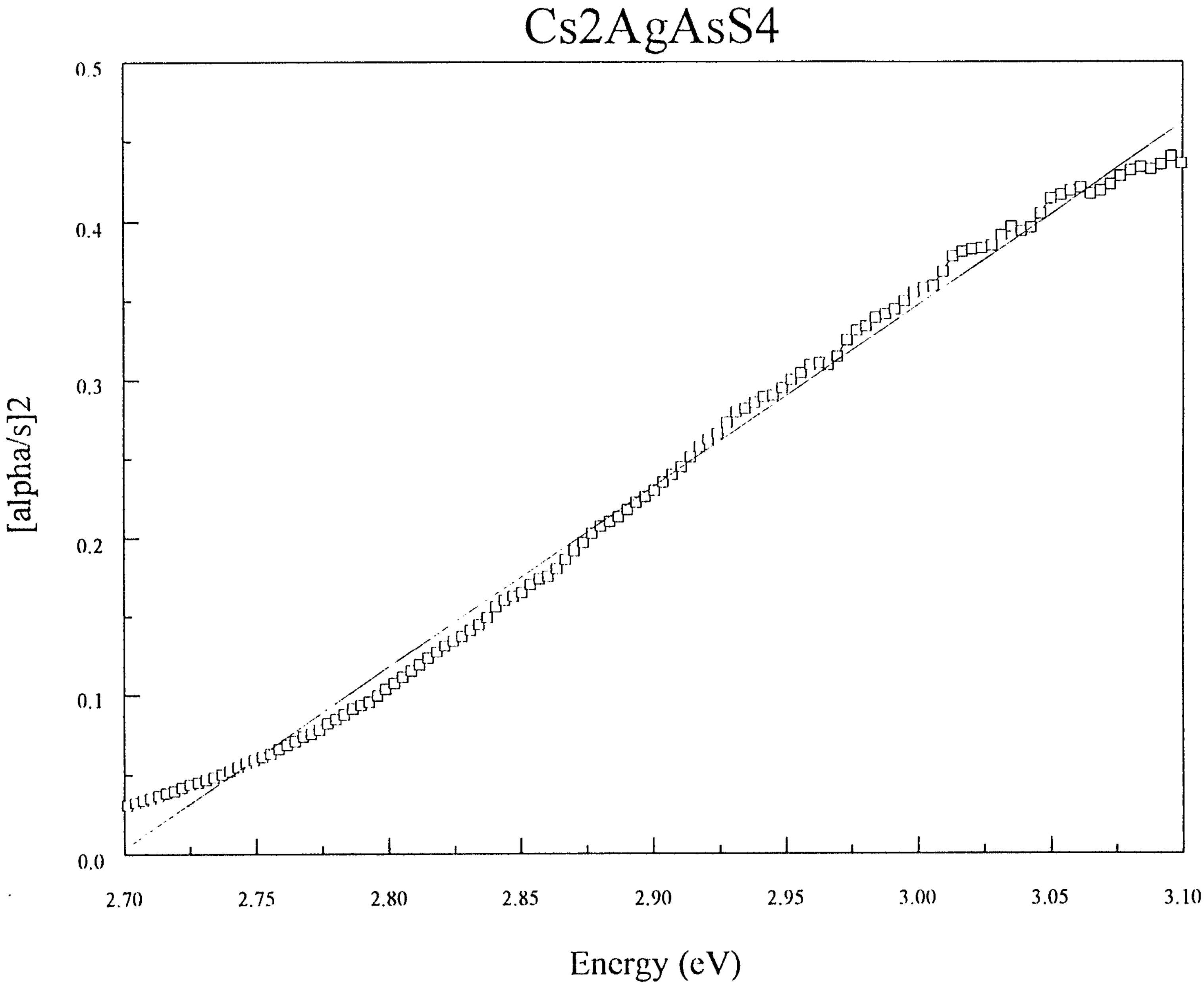


I-726-M8

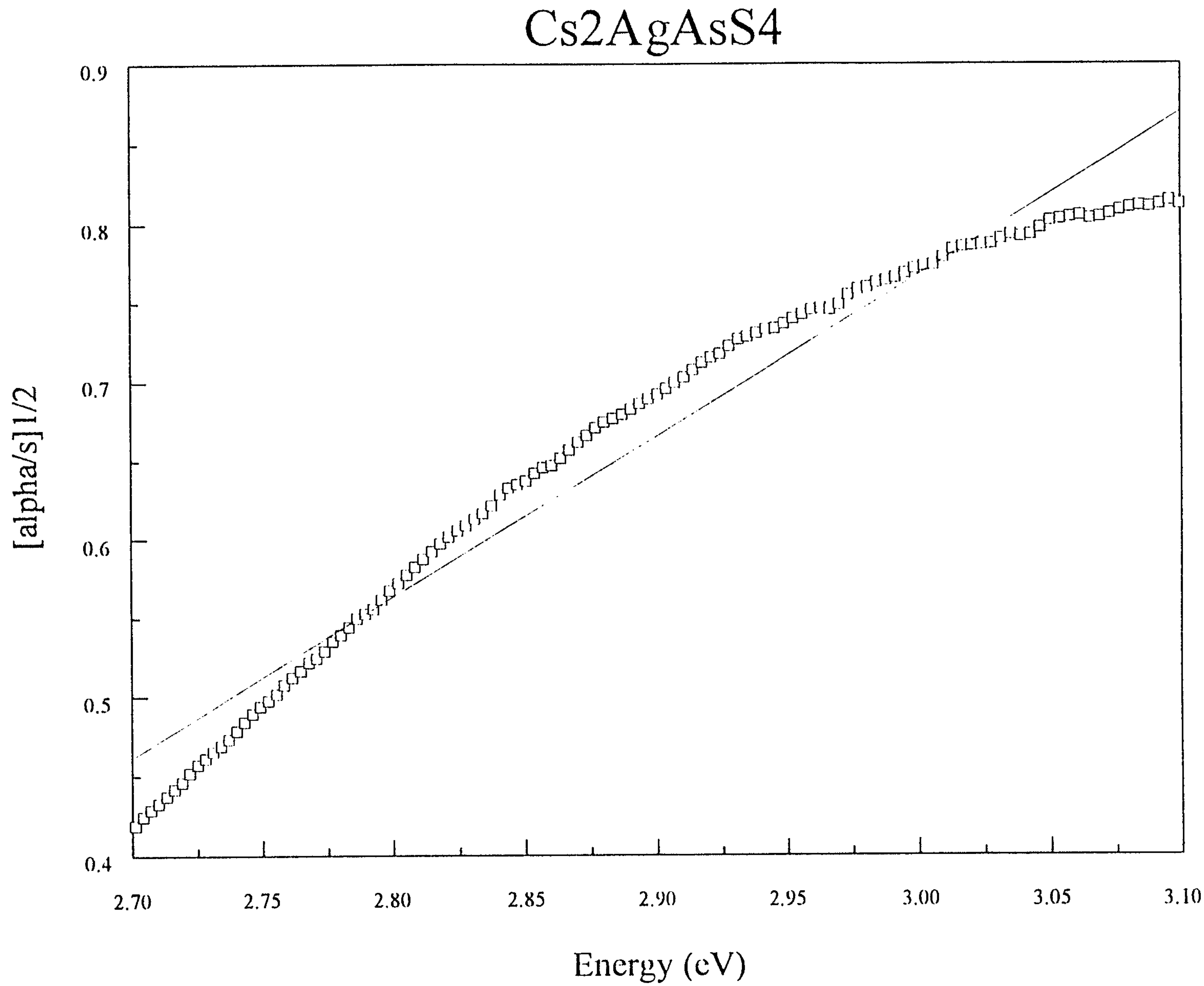
Cs2AgSbS4



I-726-M19


Cs2AgAsS4
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.0
[alpha/s]2
2.70
2.75
2.80
2.85
2.90
2.95
3.00
3.05
3.10
Energy (eV)

I-726-mao


Cs2AgAsS4
[alpha/s]1/2
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
2.70
2.75
2.80
2.85
2.90
2.95
3.00
3.05
3.10
Energy (eV)

I-726-M21

I-726-M22

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR I

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	0	0	1437	1298	11
2	0	0	1198	-1121	23
3	0	0	4439	-4414	20
4	0	0	2431	-2391	25
5	0	0	509	-507	55
6	0	0	141	108	-141
7	0	0	2228	2248	38
8	0	0	158	202	-158
9	0	0	834	861	48
10	0	0	429	-441	55
11	0	0	739	-752	55
1	1	0	196	-207	-36
2	1	0	734	751	42
3	1	0	77	-47	-77
4	1	0	258	-230	-53
5	1	0	1293	-1263	39
6	1	0	633	-630	52
7	1	0	1870	1933	41
8	1	0	245	231	-117
9	1	0	144	70	-144
10	1	0	1341	-1301	39
11	1	0	403	229	-219
0	2	0	3421	-3823	-18
1	2	0	1201	1294	28
2	2	0	124	146	-124
3	2	0	2098	2136	27
4	2	0	590	-585	47
5	2	0	1800	-1886	37
6	2	0	173	228	-173
7	2	0	254	-279	-94
8	2	0	947	910	44
9	2	0	407	-153	-183
10	2	0	628	645	43
1	3	0	860	877	37
2	3	0	378	337	48
3	3	0	498	488	46
4	3	0	172	111	-172
5	3	0	470	500	57
6	3	0	98	-57	-98
7	3	0	1879	-1910	45
8	3	0	249	-67	-249
9	3	0	269	280	-107
10	3	0	1434	1374	41
0	4	0	5377	5808	-25
1	4	0	631	639	49
2	4	0	703	-736	49
3	4	0	2575	-2638	33
4	4	0	1351	-1314	45
5	4	0	258	-239	-89
6	4	0	102	53	-102
7	4	0	1467	1465	42
8	4	0	160	47	-160
9	4	0	577	603	45
1	5	0	219	239	-86
2	5	0	820	792	44
3	5	0	274	295	-77
10	2	2	424	-434	59
-10	3	2	454	448	68
-9	3	2	356	350	-79
-7	3	2	526	500	61
-6	3	2	285	-272	-285
-5	3	2	815	-814	53
-4	3	2	347	-316	47
-3	3	2	906	-911	48
-2	3	2	2289	2424	29
-1	3	2	249	-236	-184
0	3	2	591	643	31
1	3	2	1405	-1464	30
2	3	2	257	-257	-215
3	3	2	413	-389	51
4	3	2	623	-627	29
5	3	2	1853	1876	39
6	3	2	800	768	46
7	3	2	377	334	61
8	3	2	1322	-1417	45
9	3	2	834	-891	53
-9	4	2	314	-377	-86
-8	4	2	302	295	-86
-7	4	2	899	-846	53
-6	4	2	397	-419	-71
-5	4	2	223	-217	-129
-4	4	2	475	433	54
-3	4	2	919	898	43
-2	4	2	248	-59	-248
-1	4	2	627	-643	48
0	4	2	91	150	-68
1	4	2	725	759	44
2	4	2	83	-140	-83

H	K	L	10FO	10FC	10S
4	5	0	119	-226	-119
5	5	0	1033	-1016	45
6	5	0	753	-689	46
7	5	0	1155	1118	47
8	5	0	331	272	-80
0	6	0	2232	-2182	37
1	6	0	347	206	-185
2	6	0	282	220	-99
3	6	0	1383	1386	42
4	6	0	164	19	-164
5	6	0	874	-837	54
6	6	0	109	29	-109
7	6	0	318	-291	-90
1	7	0	624	560	34
2	7	0	427	410	51
3	7	0	296	266	-148
4	7	0	177	65	-177
-11	0	1	170	-197	-170
-10	0	1	1425	1412	43
-9	0	1	99	118	-99
-8	0	1	1377	-1320	48
-7	0	1	264	241	-73
-6	0	1	575	-560	50
-5	0	1	1183	1211	38
-4	0	1	2658	-2635	23
-3	0	1	1593	1522	24
-2	0	1	522	-517	39
-1	0	1	917	849	13
1	0	1	297	251	-52
2	0	1	1134	1038	27
3	0	1	1094	-984	35
4	0	1	1078	-1006	38
5	0	1	1971	-1991	31
6	0	1	437	489	66
7	0	1	1531	1543	44
8	0	1	493	508	53
9	0	1	677	-695	59
10	0	1	103	162	-103
-11	1	1	369	-347	-67
-10	1	1	247	-27	-247
-9	1	1	160	391	-160
-8	1	1	1058	1038	42
-7	1	1	325	244	-218
-6	1	1	743	-695	50
-5	1	1	1490	-1443	34
-4	1	1	1005	-1010	40
-3	1	1	2142	2216	24
-2	1	1	738	720	39
-1	1	1	370	-334	45
0	1	1	78	-44	-55
1	1	1	429	390	40
2	1	1	1459	1511	27
3	1	1	2523	-2548	25
4	1	1	254	-229	-57
5	1	1	1371	-1335	39
6	1	1	1526	1478	39
-7	6	2	173	56	-173
-6	6	2	198	117	-198
-5	6	2	243	171	-123
-4	6	2	677	-685	59
-3	6	2	336	-343	-94
-2	6	2	1064	1023	40
-1	6	2	657	651	50
0	6	2	454	-449	30
1	6	2	610	-622	48
2	6	2	283	-410	-283
3	6	2	97	-96	-97
4	6	2	766	753	35
5	6	2	380	-338	-64
6	6	2	173	69	-173
-4	7	2	346	-288	-71
-3	7	2	437	-412	52
-2	7	2	1127	1136	50
-1	7	2	174	59	-174
0	7	2	319	256	46
1	7	2	678	-647	41
2	7	2	97	-110	-97
3	7	2	209	-255	-209
4	7	2	347	-350	-74
-11	0	3	333	391	-71
-10	0	3	1121	1188	43
-9	0	3	1264	1246	43
-8	0	3	94	-169	-94
-7	0	3	1968	-2067	36
-6	0	3	2805	-2829	29
-5	0	3	826	901	46
-4	0	3	1696	1678	25
-3	0	3	1629	1603	23

H	K	L	10FO	10FC	10S
7	1	1	825	785	47
8	1	1	101	-100	-101
9	1	1	217	227	-152
10	1	1	461	-468	52
-10	2	1	605	-606	48
-9	2	1	1331	1257	38
-8	2	1	1765	1756	46
-7	2	1	311	-379	-72
-6	2	1	391	-320	-142
-5	2	1	3374	-3564	29
-4	2	1	81	83	-81
-3	2	1	128	-262	-128
-2	2	1	3033	3157	23
-1	2	1	1574	1629	25
0	2	1	1301	1378	17
1	2	1	119	-28	-119
2	2	1	4010	-4242	22
3	2	1	2059	-2161	28
4	2	1	137	198	-137
5	2	1	2056	1992	35
6	2	1	750	697	50
7	2	1	560	536	54
8	2	1	325	307	-79
9	2	1	102	9	-102
10	2	1	727	-758	52
-10	3	1	151	-200	-151
-9	3	1	391	-407	62
-8	3	1	622	-689	48
-7	3	1	240	198	-111
-6	3	1	1119	1050	44
-5	3	1	1282	1312	47
-4	3	1	403	370	40
-3	3	1	2523	-2509	28
-2	3	1	1170	-1168	36
-1	3	1	240	284	-48
0	3	1	598	655	52
1	3	1	580	561	42
2	3	1	726	-733	41
3	3	1	1808	1906	32
4	3	1	215	-301	-102
5	3	1	610	586	48
6	3	1	1551	-1482	36
7	3	1	601	-595	54
8	3	1	393	383	60
9	3	1	108	85	-108
10	3	1	522	460	49
-9	4	1	107	-36	-107
-8	4	1	1173	-1173	46
-7	4	1	103	94	-103
-6	4	1	280	-164	-280
-5	4	1	1183	1106	44
-4	4	1	1482	-1506	44
-3	4	1	817	828	60
-2	4	1	552	-563	45
-1	4	1	155	192	-155
0	4	1	455	505	37
0	1	3	2777	-2873	77
1	1	3	1241	-1080	27
2	1	3	271	-230	-153
3	1	3	2581	2445	26
4	1	3	1122	1027	40
5	1	3	961	-950	41
6	1	3	889	-825	52
7	1	3	481	-550	54
8	1	3	291	-275	-83
9	1	3	469	476	50
10	1	3	466	452	62
-10	2	3	827	-782	42
-9	2	3	636	-676	54
-8	2	3	534	546	51
-7	2	3	840	786	46
-6	2	3	761	867	52
-5	2	3	1188	-1170	40
-4	2	3	1254	-1226	38
-3	2	3	682	-712	44
-2	2	3	1653	1728	28
-1	2	3	2269	2280	25
0	2	3	1002	-1055	41
1	2	3	1110	1142	31
2	2	3	2659	-2745	25
3	2	3	638	-547	49
4	2	3	1371	-1347	38
5	2	3	1918	1973	37
6	2	3	1135	1137	44
7	2	3	503	-491	44
8	2	3	193	203	-193
9	2	3	646	-719	49
-10	3	3	327	-348	-78

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	4	1	162	220	-162
2	4	1	966	931	44
3	4	1	315	-318	-54
4	4	1	614	-584	52
5	4	1	1533	-1484	37
6	4	1	101	191	-101
7	4	1	960	1011	45
8	4	1	263	332	-104
9	4	1	491	-513	-85
-8	5	1	799	790	48
-7	5	1	560	485	53
-6	5	1	173	-175	-173
-5	5	1	906	-890	46
-4	5	1	897	-894	42
-3	5	1	816	785	43
-2	5	1	105	158	-105
-1	5	1	202	-213	-98
0	5	1	309	315	50
1	5	1	682	680	41
2	5	1	1184	1153	47
3	5	1	1536	-1518	42
4	5	1	611	-579	50
5	5	1	1128	-1091	43
6	5	1	839	818	50
7	5	1	607	621	41
8	5	1	168	153	-168
-7	6	1	305	-276	-95
-6	6	1	107	-184	-107
-5	6	1	1733	-1602	40
-4	6	1	266	275	-91
-3	6	1	160	101	-160
-2	6	1	1376	1299	39
-1	6	1	363	375	-69
0	6	1	443	369	28
2	6	1	1786	-1816	44
3	6	1	817	-807	46
4	6	1	401	386	67
5	6	1	1127	1090	46
6	6	1	287	172	-96
-5	7	1	694	676	51
-4	7	1	172	89	-172
-3	7	1	1362	-1244	38
-2	7	1	626	-646	44
-1	7	1	247	216	-91
0	7	1	406	371	52
1	7	1	314	292	-66
2	7	1	250	-289	-94
3	7	1	859	825	53
4	7	1	169	-98	-169
-11	0	2	103	97	-103
-10	0	2	1017	1004	45
-9	0	2	294	-358	-84
-8	0	2	545	526	38
-7	0	2	1243	-1235	45
-6	0	2	872	-839	39
-5	0	2	699	-635	37
-4	4	3	1046	1129	57
-3	4	3	787	822	47
-2	4	3	239	237	-76
-1	4	3	441	-480	55
0	4	3	129	-30	-129
1	4	3	1771	-1843	32
2	4	3	1494	1462	36
3	4	3	326	-332	-55
4	4	3	878	930	43
5	4	3	408	-440	-70
6	4	3	277	-266	-90
7	4	3	319	256	-79
8	4	3	171	-99	-171
-8	5	3	108	134	-108
-7	5	3	715	-714	56
-6	5	3	510	528	76
-5	5	3	889	-932	55
-4	5	3	168	122	-168
-3	5	3	541	507	50
-2	5	3	944	926	47
-1	5	3	488	538	43
0	5	3	1296	-1334	45
1	5	3	589	-598	43
2	5	3	147	-134	-147
3	5	3	1344	1328	39
4	5	3	393	389	53
5	5	3	736	-731	47
6	5	3	561	-514	54
7	5	3	240	-155	-122
-7	6	3	737	683	51
-6	6	3	737	710	49
-5	6	3	468	-471	53

H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	0	2	444	389	30
-3	0	2	1462	1453	24
-2	0	2	424	420	41
-1	0	2	452	-462	30
0	0	2	404	429	24
1	0	2	873	836	30
2	0	2	819	-742	41
3	0	2	1752	-1614	28
4	0	2	1065	-1013	41
5	0	2	2280	2191	31
6	0	2	155	180	-155
7	0	2	853	826	41
8	0	2	1348	-1317	42
9	0	2	163	-22	-163
10	0	2	389	-388	62
-11	1	2	838	-892	46
-10	1	2	670	-600	57
-9	1	2	310	-271	-75
-8	1	2	928	841	45
-7	1	2	181	-225	-181
-6	1	2	451	469	59
-5	1	2	624	649	44
-4	1	2	353	-366	55
-3	1	2	482	517	40
-2	1	2	2776	-3121	-20
-1	1	2	866	963	30
0	1	2	69	29	-52
1	1	2	2393	2444	19
2	1	2	290	345	-59
3	1	2	125	-27	-125
4	1	2	82	133	-82
5	1	2	2553	-2602	31
6	1	2	803	-785	45
7	1	2	355	-116	-182
8	1	2	1799	1884	46
9	1	2	1144	1155	43
10	1	2	242	-220	-126
-10	2	2	650	-594	39
-9	2	2	1282	1327	41
-7	2	2	156	-30	-156
-6	2	2	318	-294	-210
-5	2	2	139	-177	-139
-4	2	2	1163	-1195	39
-3	2	2	133	-153	-133
-2	2	2	2508	2646	25
-1	2	2	1489	1558	27
0	2	2	1070	-1085	53
1	2	2	1456	-1532	26
2	2	2	1322	-1303	29
3	2	2	516	-545	47
4	2	2	1339	1386	38
5	2	2	393	-402	59
6	2	2	640	594	53
7	2	2	350	-190	-198
8	2	2	1501	1480	41
9	2	2	752	-746	44
-6	0	4	2078	-2088	31
-5	0	4	1382	-1337	32
-4	0	4	1468	-1528	29
-3	0	4	3454	3585	20
-2	0	4	1429	1343	23
-1	0	4	3904	3476	-18
0	0	4	3064	-2819	-30
1	0	4	2939	-2789	21
2	0	4	285	-281	43
3	0	4	354	-383	53
4	0	4	765	822	49
5	0	4	92	-71	-92
6	0	4	2373	2241	37
7	0	4	164	-113	-164
8	0	4	408	-421	57
9	0	4	685	-707	46
-11	1	4	584	620	49
-10	1	4	856	-884	49
-9	1	4	160	-125	-160
-8	1	4	325	315	-64
-7	1	4	668	667	42
-6	1	4	246	-45	-246
-5	1	4	2056	-2126	29
-4	1	4	246	-85	-190
-3	1	4	822	858	38
-2	1	4	1303	1247	26
-1	1	4	563	589	45
0	1	4	127	66	-93
1	1	4	291	-172	-76
2	1	4	1081	-989	35
3	1	4	1122	-1020	38
4	1	4	776	755	45

I-726-m23

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR I

H	K	L	10FO	10FC	10S
3	4	2	954	-896	38
4	4	2	747	-691	46
5	4	2	1403	1395	48
6	4	2	102	-29	-102
7	4	2	439	441	71
8	4	2	985	-963	46
9	4	2	169	43	-169
-8	5	2	761	735	55
-7	5	2	105	24	-105
-6	5	2	410	279	-183
-5	5	2	159	277	-159
-4	5	2	479	-432	58
-3	5	2	95	-27	-95
-2	5	2	1828	-1796	38
-1	5	2	611	656	32
0	5	2	395	407	41
1	5	2	1603	1586	38
2	5	2	181	208	-181
3	5	2	155	-169	-155
4	5	2	158	-201	-158
5	5	2	1757	-1721	47
6	5	2	522	-545	64
7	5	2	172	44	-172
8	5	2	1434	1386	47
9	2	4	274	242	-100
-10	3	4	892	907	42
-9	3	4	404	374	-77
-8	3	4	114	-15	-114
-7	3	4	531	-548	50
-6	3	4	315	-258	-68
-5	3	4	1156	1220	41
-4	3	4	288	-314	-288
-3	3	4	670	-663	49
-2	3	4	448	-463	51
-1	3	4	214	271	-214
0	3	4	307	371	37
1	3	4	143	13	-143
2	3	4	233	198	-68
3	3	4	268	274	-66
4	3	4	845	-872	42
5	3	4	314	41	-236
6	3	4	590	-628	53
7	3	4	1266	1271	46
8	3	4	436	371	53
9	3	4	322	-213	-322
-9	4	4	181	-22	-181
-8	4	4	744	745	48
-7	4	4	171	91	-171
-6	4	4	1442	-1403	44
-5	4	4	1022	-1053	52
-4	4	4	1197	-1242	43
-3	4	4	2145	2138	38
-2	4	4	844	878	43
-1	4	4	2133	2246	33
0	4	4	1514	-1615	25
1	4	4	1509	-1582	37
2	4	4	127	-51	-127
3	4	4	375	-350	49
4	4	4	310	256	-310
5	4	4	242	-216	-103
6	4	4	1608	1644	40
7	4	4	167	41	-167
8	4	4	220	-202	-152
-8	5	4	453	355	60
-7	5	4	397	475	-85
-6	5	4	183	-303	-183
-5	5	4	1636	-1606	42
-4	5	4	246	-255	-112
-3	5	4	620	643	54
-2	5	4	921	1012	46
-1	5	4	606	627	45
0	5	4	280	261	44
1	5	4	262	-227	-72
2	5	4	925	-898	42
3	5	4	952	-961	42
4	5	4	376	373	-66
5	5	4	184	216	-184
6	5	4	945	934	41
7	5	4	479	-503	58
-7	6	4	468	-474	62
6	3	6	823	-821	54
7	3	6	791	-810	46
8	3	6	162	37	-162
-9	4	6	254	-225	-117
-8	4	6	407	-376	61
-7	4	6	268	224	-268
-6	4	6	1022	1058	49
-5	4	6	293	380	-87

H	K	L	10FO	10FC	10S
-2	0	3	726	707	35
-1	0	3	653	-674	33
0	0	3	186	-143	-36
1	0	3	3366	-3206	19
2	0	3	2269	2116	24
3	0	3	638	-691	46
4	0	3	1607	1490	34
5	0	3	464	-404	53
6	0	3	157	-162	-157
7	0	3	354	414	-61
8	0	3	306	-289	-78
9	0	3	526	481	62
10	0	3	1577	-1623	44
-11	1	3	103	75	-103
-10	1	3	427	412	53
-9	1	3	160	-271	-160
-8	1	3	153	87	-153
-7	1	3	1393	-1350	43
-6	1	3	878	917	51
-5	1	3	1334	-1313	35
-4	1	3	624	676	42
-3	1	3	1185	1201	30
-2	1	3	1339	1364	26
-1	1	3	558	597	42
-6	6	4	179	139	-179
-5	6	4	666	665	44
-4	6	4	1724	1670	42
-3	6	4	868	-838	53
-2	6	4	157	-220	-157
-1	6	4	933	-926	41
0	6	4	609	612	53
1	6	4	97	-136	-97
2	6	4	436	-416	51
3	6	4	277	286	-96
4	6	4	100	-82	-100
5	6	4	767	713	48
-4	7	4	251	-248	-132
-3	7	4	483	-461	48
-2	7	4	257	-198	-96
-1	7	4	235	307	-104
0	7	4	338	296	46
1	7	4	163	98	-163
2	7	4	101	17	-101
3	7	4	172	27	-172
-11	0	5	271	-268	-93
-10	0	5	325	-400	-275
-9	0	5	1207	-1201	42
-8	0	5	1050	1011	42
-7	0	5	573	-557	57
-6	0	5	430	451	47
-5	0	5	474	-429	36
-4	0	5	2441	2418	25
-3	0	5	860	960	36
-2	0	5	2423	-2370	21
-1	0	5	1679	-1480	23
0	0	5	1385	-1325	19
1	0	5	938	903	37
2	0	5	638	653	49
3	0	5	1668	1533	34
4	0	5	375	433	-63
5	0	5	153	-89	-153
6	0	5	903	-942	48
7	0	5	610	-618	37
8	0	5	311	-332	-80
9	0	5	1257	1228	43
-11	1	5	102	19	-102
-10	1	5	164	279	-164
-9	1	5	763	754	47
-8	1	5	269	-131	-269
-7	1	5	764	-729	41
-6	1	5	388	-377	45
-5	1	5	514	-513	45
-4	1	5	75	36	-75
-3	1	5	204	41	-204
-2	1	5	235	242	-43
-1	1	5	2972	2749	21
0	1	5	160	-193	-57
1	1	5	723	-650	45
2	1	5	3272	-3069	26
3	1	5	671	672	53
-1	0	7	118	0	-118
0	0	7	1626	-1535	22
1	0	7	2583	2498	28
2	0	7	657	683	54
3	0	7	90	33	-90
4	0	7	233	227	-98
6	0	7	404	383	-71
7	0	7	1555	-1586	44

H	K	L	10FO	10FC	10S
-9	3	3	437	420	55
-8	3	3	179	263	-179
-7	3	3	1294	1320	42
-6	3	3	909	-897	54
-5	3	3	536	665	71
-4	3	3	1062	-1019	40
-3	3	3	1225	-1206	41
-2	3	3	933	-951	38
-1	3	3	205	165	-149
0	3	3	2685	2913	17
1	3	3	1155	1134	33
2	3	3	217	-136	-80
3	3	3	2490	-2549	31
4	3	3	1296	-1272	43
5	3	3	644	672	47
6	3	3	913	923	46
7	3	3	727	766	61
8	3	3	328	430	-85
9	3	3	356	-379	-70
-9	4	3	895	924	47
-8	4	3	107	-82	-107
-7	4	3	1409	-1423	45
-6	4	3	1940	-1865	44
-5	4	3	669	731	64
4	1	5	1205	1134	45
5	1	5	507	467	56
6	1	5	315	335	-71
7	1	5	1110	-1084	43
8	1	5	454	426	71
9	1	5	458	-446	59
-10	2	5	730	709	40
-9	2	5	162	-10	-162
-8	2	5	2631	-2658	38
-7	2	5	252	-221	-89
-6	2	5	342	-325	-169
-5	2	5	1486	1569	39
-4	2	5	738	801	44
-3	2	5	1278	1327	35
-2	2	5	1099	1134	35
-1	2	5	972	-992	34
0	2	5	1067	-1134	51
1	2	5	2988	-3012	25
2	2	5	539	-567	39
3	2	5	1203	1132	41
4	2	5	1698	1659	39
5	2	5	715	671	40
6	2	5	883	889	44
7	2	5	289	-286	-289
8	2	5	1085	-1098	45
9	2	5	1474	-1603	46
-10	3	5	105	31	-105
-9	3	5	404	-406	60
-8	3	5	151	110	-151
-7	3	5	299	316	-76
-6	3	5	143	-182	-143
-5	3	5	94	19	-94
-4	3	5	150	54	-150
-3	3	5	541	558	53
-2	3	5	459	528	49
-1	3	5	1886	-1878	35
0	3	5	90	-58	-65
1	3	5	80	-39	-80
2	3	5	1853	1915	34
3	3	5	806	-826	38
4	3	5	734	-742	46
5	3	5	97	70	-97
6	3	5	164	75	-164
7	3	5	963	1009	42
8	3	5	500	-496	66
-9	4	5	857	-812	43
-8	4	5	886	912	53
-7	4	5	386	-204	-218
-6	4	5	266	272	-266
-5	4	5	526	-503	54
-4	4	5	1371	1412	42
-3	4	5	494	487	41
-2	4	5	1439	-1538	47
-1	4	5	712	-744	38
0	4	5	553	-542	39
1	4	5	751	746	42
1	3	7	1163	-1183	37
2	3	7	404	-358	43
3	3	7	414	432	66
4	3	7	509	513	51
5	3	7	158	131	-158
6	3	7	293	206	-79
7	3	7	620	651	55
-8	4	7	168	24	-168

H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	6	3	845	-812	45
-3	6	3	592	-621	51
-2	6	3	558	536	51
-1	6	3	865	926	44
0	6	3	340	-344	42
1	6	3	929	893	41
2	6	3	980	-929	50
3	6	3	383	-322	-172
4	6	3	897	-887	44
5	6	3	856	816	44
6	6	3	518	477	47
-4	7	3	527	-475	75
-3	7	3	598	-584	40
-2	7	3	508	-509	62
-1	7	3	196	189	-154
0	7	3	1489	1415	27
1	7	3	628	650	57
2	7	3	99	-157	-99
3	7	3	1370	-1334	38
-11	0	4	170	84	-170
-10	0	4	1309	1320	37
-9	0	4	94	-63	-94
-8	0	4	892	866	45
-7	0	4	183	-162	-130
2	4	5	305	329	-58
3	4	5	861	846	44
4	4	5	155	111	-155
5	4	5	99	-106	-99
6	4	5	565	-621	44
7	4	5	290	-353	-87
-8	5	5	108	-48	-108
-7	5	5	634	-633	52
-6	5	5	502	-555	72
-5	5	5	544	-557	63
-4	5	5	105	-35	-105
-3	5	5	320	303	-320
-2	5	5	566	583	60
-1	5	5	1916	1916	38
0	5	5	155	-115	-110
1	5	5	804	-806	40
2	5	5	2243	-2272	38
3	5	5	218	185	-218
4	5	5	834	862	46
5	5	5	614	607	52
6	5	5	445	422	-157
-6	6	5	300	-114	-300
-5	6	5	666	650	65
-4	6	5	105	173	-105
-3	6	5	553	544	72
-2	6	5	611	625	46
-1	6	5	177	-207	-177
0	6	5	270	-333	-71
1	6	5	1543	-1450	38
2	6	5	414	-402	53
3	6	5	452	404	44
4	6	5	680	704	51
5	6	5	253	276	-111
-3	7	5	376	407	-67
-2	7	5	357	365	-65
-1	7	5	906	-884	42
0	7	5	97	-160	-69
1	7	5	165	-14	-165
-11	0	6	168	-1	-168
-10	0	6	589	-622	53
-9	0	6	460	-446	63
-8	0	6	657	-603	46
-7	0	6	288	276	-62
-6	0	6	1557	1585	36
-5	0	6	776	771	52
-4	0	6	106	-220	-106
-3	0	6	673	-658	38
-2	0	6	493	-447	33
-1	0	6	503	-487	45
0	0	6	1120	-1156	24
1	0	6	1660	-1603	30
2	0	6	1545	1488	33
3	0	6	2046	1954	34
4	0	6	2906	2854	34
5	0	6	1513	-1540	48
6	0	6	1331	-1353	45
2	0	8	1412	-1431	43
3	0	8	359	431	54
4	0	8	566	523	52
5	0	8	1414	1502	44
6	0	8	478	-479	54
7	0	8	821	-905	53
-10	1	8	590	609	48
-9	1	8	378	312	55

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	1	4	304	87	-222
6	1	4	1242	1173	41
7	1	4	1008	-1056	53
8	1	4	204	-263	-204
9	1	4	166	80	-166
-10	2	4	557	-513	52
-9	2	4	221	-237	-142
-8	2	4	1406	-1408	41
-7	2	4	1109	-1121	44
-6	2	4	90	19	-90
-5	2	4	1057	1129	45
-4	2	4	3390	3623	27
-3	2	4	942	-1078	44
-2	2	4	184	229	-88
-1	2	4	2110	-2210	25
0	2	4	532	593	35
1	2	4	859	-868	39
2	2	4	1006	-995	39
3	2	4	825	827	41
4	2	4	159	126	-159
5	2	4	1635	1679	42
6	2	4	726	-727	49
7	2	4	210	-263	-154
8	2	4	548	-547	47
7	0	6	1378	-1389	45
8	0	6	158	-105	-158
-10	1	6	373	-355	58
-9	1	6	652	-674	47
-8	1	6	96	-70	-96
-7	1	6	909	972	49
-6	1	6	1856	1753	34
-5	1	6	1721	-1703	32
-4	1	6	876	-844	45
-3	1	6	1957	-1929	27
-2	1	6	1287	1259	30
-1	1	6	1338	1263	29
0	1	6	948	927	28
1	1	6	1078	1027	37
2	1	6	1131	-1109	41
3	1	6	251	-225	-83
4	1	6	2295	-2164	35
5	1	6	431	430	47
6	1	6	1062	1031	50
7	1	6	727	692	54
8	1	6	300	-293	-300
-10	2	6	252	139	-252
-9	2	6	375	-436	-69
-8	2	6	630	-610	58
-7	2	6	159	19	-159
-6	2	6	433	398	57
-5	2	6	788	812	50
-4	2	6	1086	1102	43
-3	2	6	649	734	59
-2	2	6	1811	-1775	28
-1	2	6	2660	-2586	25
0	2	6	238	269	40
1	2	6	2444	2415	28
2	2	6	82	10	-82
3	2	6	199	180	-107
4	2	6	1438	-1369	43
5	2	6	597	581	60
6	2	6	313	-129	-313
7	2	6	625	612	45
8	2	6	351	-320	-265
-10	3	6	556	501	59
-9	3	6	624	626	57
-8	3	6	209	-205	-159
-7	3	6	1311	-1297	42
-6	3	6	1793	-1816	45
-5	3	6	1440	1493	45
-4	3	6	1214	1221	39
-3	3	6	2188	2237	35
-2	3	6	689	-672	45
-1	3	6	1193	-1223	38
0	3	6	1333	-1388	48
1	3	6	1316	-1429	38
2	3	6	681	694	38
3	3	6	395	421	49
4	3	6	2170	2285	40
5	3	6	259	26	-259
6	3	8	150	-178	-150
-8	4	8	673	630	40
-7	4	8	730	-727	48
-6	4	8	207	164	-175
-5	4	8	264	-320	-98
-4	4	8	658	628	57
-3	4	8	883	-919	51
-2	4	8	302	351	-72

I-726-M24

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR I

H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	4	6	275	-314	-275
-3	4	6	427	-475	51
-2	4	6	197	-100	-197
-1	4	6	94	-94	-94
0	4	6	713	-663	37
1	4	6	1234	-1202	36
2	4	6	869	851	41
3	4	6	1315	1294	37
4	4	6	1937	2006	44
5	4	6	1067	-1086	50
6	4	6	911	-963	51
7	4	6	949	-940	47
-8	5	6	219	-233	-219
-7	5	6	449	421	58
-6	5	6	949	976	55
-5	5	6	941	-993	54
-4	5	6	331	-356	-78
-3	5	6	863	-841	57
-2	5	6	928	946	50
-1	5	6	648	680	47
0	5	6	304	265	48
1	5	6	332	289	-56
2	5	6	763	-721	36
3	5	6	156	-86	-156
4	5	6	1190	-1157	45
5	5	6	465	467	49
6	5	6	767	752	52
-6	6	6	111	42	-111
-5	6	6	192	98	-192
-4	6	6	448	405	57
-3	6	6	549	532	55
-2	6	6	629	-680	58
-1	6	6	994	-1072	49
0	6	6	301	303	45
1	6	6	1256	1228	36
2	6	6	287	-278	-76
3	6	6	187	-221	-187
4	6	6	832	-780	44
-1	7	6	641	-649	46
-10	0	7	697	-689	45
-9	0	7	1221	-1168	37
-8	0	7	94	47	-94
-7	0	7	607	545	37
-6	0	7	1573	1585	38
-5	0	7	487	487	58
-4	0	7	886	-914	45
-3	0	7	158	-150	-102
-2	0	7	1727	-1648	28
-1	1	9	1620	-1559	35
0	1	9	252	-260	-51
1	1	9	481	450	50
2	1	9	903	940	42
3	1	9	518	537	51
4	1	9	1363	-1352	41
5	1	9	473	463	52
6	1	9	266	-280	-97
-9	2	9	480	-483	57
-8	2	9	963	949	40
-7	2	9	135	68	-135
-6	2	9	763	-762	39
-5	2	9	91	-129	-91
-4	2	9	558	603	42
-3	2	9	1058	1055	34
-2	2	9	852	-849	42
-1	2	9	477	-454	33
0	2	9	725	-746	35
1	2	9	137	68	-137
2	2	9	775	727	49
3	2	9	1046	1058	46
4	2	9	302	73	-302
5	2	9	161	-173	-161
6	2	9	1206	-1215	53
-8	3	9	316	237	-316
-7	3	9	294	355	-79
-6	3	9	626	641	45
-5	3	9	589	596	54
-4	3	9	768	-784	45
-3	3	9	285	-299	-81
-2	3	9	833	-850	41
-1	3	9	944	936	38
0	3	9	90	134	-64
1	3	9	198	-194	-120
2	3	9	481	-479	39
3	3	9	217	-143	-111
4	3	9	1299	1259	44
5	3	9	562	-568	41
-7	4	9	785	815	59
-6	4	9	863	873	44

H	K	L	10FO	10FC	10S
8	0	7	207	96	-189
-10	1	7	596	-592	63
-9	1	7	95	-111	-95
-8	1	7	1313	-1258	40
-7	1	7	295	58	-295
-6	1	7	144	17	-144
-5	1	7	1081	1101	46
-4	1	7	1899	1889	31
-3	1	7	1123	-1123	37
-2	1	7	1541	-1385	30
-1	1	7	1835	-1807	29
0	1	7	1435	1368	48
1	1	7	1117	1078	40
2	1	7	580	572	48
3	1	7	247	-62	-247
4	1	7	285	-270	-69
5	1	7	99	-27	-99
6	1	7	316	-334	-72
7	1	7	979	-974	43
8	1	7	244	181	-115
-10	2	7	102	-102	-102
-9	2	7	921	936	43
-8	2	7	96	-96	-96
-7	2	7	292	-161	-292
-6	2	7	154	51	-154
-5	2	7	564	596	49
-4	2	7	137	115	-137
-3	2	7	916	-978	46
-2	2	7	417	444	60
-1	2	7	1283	-1298	34
0	2	7	1533	1521	33
1	2	7	425	-402	37
2	2	7	622	582	36
3	2	7	167	111	-167
4	2	7	277	-236	-277
5	2	7	490	-423	55
6	2	7	1528	-1504	41
7	2	7	1329	1304	41
-9	3	7	171	-42	-171
-8	3	7	793	782	49
-7	3	7	326	-303	-68
-6	3	7	98	0	-98
-5	3	7	578	-615	46
-4	3	7	1133	-1134	42
-3	3	7	1152	1210	49
-2	3	7	1127	1136	37
-1	3	7	1097	1124	45
0	3	7	1620	-1640	55
4	4	9	907	-912	36
-6	5	9	174	-150	-174
-5	5	9	171	-51	-171
-4	5	9	840	830	53
-3	5	9	119	127	-119
-2	5	9	173	132	-173
-1	5	9	1275	-1229	49
0	5	9	325	-316	49
1	5	9	357	382	57
2	5	9	761	817	44
-9	0	10	155	149	-155
-8	0	10	489	532	43
-7	0	10	791	772	42
-6	0	10	144	-159	-144
-5	0	10	585	-600	46
-4	0	10	87	-134	-87
-3	0	10	348	-335	47
-2	0	10	992	-1026	40
-1	0	10	139	-145	-139
0	0	10	508	481	32
1	0	10	2212	2180	37
2	0	10	151	89	-151
3	0	10	317	-298	-65
4	0	10	1409	-1515	43
5	0	10	368	-422	61
-9	1	10	1274	1280	47
-8	1	10	614	644	46
-7	1	10	242	190	-86
-6	1	10	1777	-1817	42
-5	1	10	179	-268	-179
-4	1	10	95	142	-95
-3	1	10	171	103	-171
-2	1	10	457	470	62
-1	1	10	87	-220	-87
0	1	10	1123	1134	29
1	1	10	711	-660	41
2	1	10	215	187	-215
3	1	10	706	-668	57
4	1	10	218	118	-119
5	1	10	223	200	-122

H	K	L	10FO	10FC	10S
-7	4	7	281	327	-94
-6	4	7	945	976	58
-5	4	7	170	211	-170
-4	4	7	621	-672	53
-3	4	7	165	96	-165
-2	4	7	859	-857	46
-1	4	7	101	67	-101
0	4	7	1160	-1150	29
1	4	7	1519	1561	34
2	4	7	311	345	-64
3	4	7	300	-65	-300
4	4	7	248	232	-103
5	4	7	167	-83	-167
6	4	7	368	351	-62
-7	5	7	203	-90	-203
-6	5	7	174	26	-174
-5	5	7	883	922	48
-4	5	7	1362	1425	50
-3	5	7	507	-530	51
-2	5	7	958	-1022	52
-1	5	7	1261	-1324	45
0	5	7	592	631	52
1	5	7	616	604	43
2	5	7	458	470	42
3	5	7	95	89	-95
4	5	7	217	-27	-125
5	5	7	103	30	-103
-5	6	7	186	191	-186
-4	6	7	112	46	-112
-3	6	7	417	-387	62
-2	6	7	448	415	54
-1	6	7	574	-467	48
0	6	7	830	813	27
1	6	7	284	-299	-116
2	6	7	161	41	-161
3	6	7	100	-77	-100
-10	0	8	468	-438	61
-9	0	8	311	277	-67
-8	0	8	969	891	40
-7	0	8	795	-777	40
-6	0	8	469	468	47
-5	0	8	438	-479	36
-4	0	8	731	729	46
-3	0	8	1498	-1527	35
-2	0	8	271	302	-61
-1	0	8	832	773	47
0	0	8	309	-347	41
1	0	8	404	397	48
1	2	10	1688	-1587	41
2	2	10	511	-509	57
3	2	10	447	-447	44
4	2	10	207	154	-147
5	2	10	330	-336	-81
-8	3	10	545	-546	51
-7	3	10	165	116	-165
-6	3	10	1989	1926	44
-5	3	10	416	417	46
-4	3	10	359	-268	-171
-3	3	10	422	-466	44
-2	3	10	797	-781	37
-1	3	10	89	-3	-89
0	3	10	789	-786	37
1	3	10	924	970	42
2	3	10	178	182	-178
3	3	10	647	640	48
4	3	10	166	-275	-166
-6	4	10	101	-72	-101
-5	4	10	335	-311	-65
-4	4	10	161	34	-161
-3	4	10	264	-207	-80
-2	4	10	853	-903	43
-1	4	10	297	-291	-62
0	4	10	343	285	47
1	4	10	1591	1644	38
2	4	10	246	197	-92
3	4	10	99	-156	-99
-4	5	10	106	34	-106
-3	5	10	167	-163	-167
-2	5	10	165	21	-165
-1	5	10	206	-199	-124
0	5	10	790	844	35
1	5	10	98	-141	-98
-8	0	11	217	-232	-115
-7	0	11	693	-713	38
-6	0	11	145	-43	-145
-5	0	11	148	-182	-148
-4	0	11	553	567	44
-3	0	11	857	-844	42

H	K	L	10FO	10FC	10S
-8	1	8	1079	-1040	45
-7	1	8	482	-459	44
-6	1	8	455	-427	54
-5	1	8	959	931	42
-4	1	8	398	409	49
-3	1	8	320	-288	43
-2	1	8	195	-182	-81
-1	1	8	329	329	54
0	1	8	244	-247	-44
1	1	8	86	-95	-86
2	1	8	318	-317	-77
3	1	8	978	978	47
4	1	8	501	-523	51
5	1	8	108	124	-108
6	1	8	159	67	-159
7	1	8	309	17	-309
-9	2	8	506	-489	43
-8	2	8	339	-296	-63
-7	2	8	1161	1155	44
-6	2	8	305	326	-76
-5	2	8	1339	1350	44
-4	2	8	1196	-1211	44
-3	2	8	119	-116	-119
-2	2	8	870	-922	42
-1	2	8	871	-933	41
0	2	8	253	259	-78
1	2	8	878	784	44
2	2	8	2591	2564	34
3	2	8	541	-527	38
4	2	8	1016	-1019	41
5	2	8	1662	-1631	38
6	2	8	382	-87	-182
7	2	8	504	525	47
-9	3	8	492	-461	52
-8	3	8	748	724	48
-7	3	8	428	369	57
-6	3	8	532	504	39
-5	3	8	496	-489	40
-4	3	8	93	-50	-93
-3	3	8	277	304	-94
-2	3	8	140	-83	-140
-1	3	8	676	-676	42
0	3	8	88	-58	-62
1	3	8	91	56	-91
2	3	8	442	477	51
3	3	8	547	-525	39
4	3	8	591	623	60
5	3	8	98	-108	-98
-6	1	11	238	246	-88
-5	1	11	417	429	49
-4	1	11	1450	-1396	35
-3	1	11	364	-430	48
-2	1	11	143	-137	-143
-1	1	11	504	482	47
0	1	11	109	-137	-80
1	1	11	232	251	-92
2	1	11	1087	1091	41
3	1	11	539	527	49
4	1	11	764	-799	48
-7	2	11	532	543	46
-6	2	11	783	-718	40
-5	2	11	1353	-1349	40
-4	2	11	1099	-1144	43
-3	2	11	1608	1652	43
-2	2	11	721	795	59
-1	2	11	1018	1053	39
0	2	11	147	-79	-104
1	2	11	579	-624	42
2	2	11	414	-367	56
3	2	11	1054	-1028	43
4	2	11	318	269	-71
-7	3	11	453	-391	48
-6	3	11	98	-81	-98
-5	3	11	471	-471	55
-4	3	11	891	865	53
-3	3	11	91	38	-91
-2	3	11	90	4	-90
-1	3	11	202	-236	-114
0	3	11	439	475	41
1	3	11	152	71	-152
2	3	11	838	-898	45
3	3	11	640	-678	53
-5	4	11	101	33	-101
-4	4	11	457	496	46
-3	4	11	733	-666	44
-2	4	11	155	58	-155
-1	4	11	151	-162	-151
0	4	11	694	716	37

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	4	8	532	596	38
0	4	8	352	-340	48
1	4	8	98	78	-98
2	4	8	1152	-1186	43
3	4	8	257	259	-86
4	4	8	529	535	41
5	4	8	1287	1306	39
-6	5	8	110	-162	-110
-5	5	8	859	836	48
-4	5	8	468	467	64
-3	5	8	108	-155	-108
-2	5	8	180	-289	-180
-1	5	8	100	28	-100
0	5	8	322	-341	47
1	5	8	144	-141	-144
2	5	8	217	-66	-217
3	5	8	838	852	41
4	5	8	162	-180	-162
-4	6	8	520	-530	74
-3	6	8	179	131	-179
-2	6	8	307	-285	-92
-1	6	8	562	-534	39
0	6	8	96	-118	-68
1	6	8	275	278	-81
-9	0	9	336	297	-241
-8	0	9	154	71	-154
-7	0	9	1173	1219	40
-6	0	9	1222	1216	38
-5	0	9	190	170	-119
-4	0	9	1417	-1433	39
-3	0	9	3275	-3182	29
-2	0	9	256	-256	-62
-1	0	9	1244	1206	41
0	0	9	1942	1872	31
1	0	9	1062	1006	40
2	0	9	407	423	61
3	0	9	1119	-1195	46
4	0	9	1251	-1337	45
5	0	9	533	-580	44
6	0	9	1088	1111	47
-9	1	9	161	-129	-161
-8	1	9	472	-436	42
-7	1	9	365	-307	50
-6	1	9	391	-394	46
-5	1	9	308	-285	-55
-4	1	9	1034	1105	40
-3	1	9	137	140	-137
-2	1	9	506	518	33
1	0	12	624	-651	43
2	0	12	883	880	43
3	0	12	501	479	42
-7	1	12	359	110	-184
-6	1	12	440	-465	51
-5	1	12	565	-527	48
-4	1	12	284	238	-67
-3	1	12	564	535	34
-2	1	12	314	331	-59
-1	1	12	790	-761	41
0	1	12	300	-281	47
1	1	12	100	-130	-100
2	1	12	537	545	51
3	1	12	163	166	-163
-6	2	12	240	272	-93
-5	2	12	271	-327	-94
-4	2	12	510	-480	47
-3	2	12	230	-299	-99
-2	2	12	239	-175	-85
-1	2	12	1556	1550	45
0	2	12	678	731	35
1	2	12	152	167	-152
2	2	12	1669	-1628	38
-5	3	12	169	233	-169
-4	3	12	429	-463	47
-3	3	12	496	-575	53
-2	3	12	167	-155	-167
-1	3	12	932	953	44
0	3	12	435	472	39
1	3	12	277	128	-277
-5	0	13	414	-435	46
-4	0	13	196	-123	-134
-3	0	13	877	900	46
-2	0	13	769	771	41
-1	0	13	147	147	-147
0	0	13	285	-306	-67
1	0	13	408	-405	54
-5	1	13	502	448	43
-4	1	13	567	-633	55
-3	1	13	289	-278	-68

I-726-m25

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR I

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	4	9	101	208	-101	-8	2	10	479	468	55	-2	0	11	377	343	46	1	4	11	97	183	-97	-2	1	13	92	135	-92
-4	4	9	833	-948	51	-7	2	10	337	339	-62	-1	0	11	89	-31	-89	-7	0	12	470	-456	45	-1	1	13	541	533	42
-3	4	9	2315	-2214	40	-6	2	10	142	-234	-142	0	0	11	1002	1005	57	-6	0	12	784	-723	42	0	1	13	356	378	48
-2	4	9	324	-133	-222	-5	2	10	911	-965	52	1	0	11	92	139	-92	-5	0	12	279	1	-279	1	1	13	992	-939	44
-1	4	9	804	831	39	-4	2	10	1033	-1047	44	2	0	11	1148	-1212	45	-4	0	12	475	466	54	-4	2	13	300	233	-238
0	4	9	1165	1192	49	-3	2	10	506	-514	48	3	0	11	223	212	-113	-3	0	12	1354	1365	39	-3	2	13	519	-497	41
1	4	9	575	582	40	-2	2	10	868	867	40	4	0	11	422	-403	52	-2	0	12	1328	1275	38	-2	2	13	154	-3	-154
2	4	9	364	332	53	-1	2	10	1698	1733	39	-8	1	11	97	105	-97	-1	0	12	1868	-1712	42	-1	2	13	94	-96	-94
3	4	9	784	-798	38	0	2	10	1474	1440	63	-7	1	11	796	763	43	0	0	12	1197	-1197	45	0	2	13	308	-310	49

I-726-M26

10|F|o vs 10|F|c for II

^^^^^^^ h = 0 ^^^^^^^

k	l	Fo	Fc	sigF
0	2	934	823	22
0	4	4207	4109	96
0	6	245	362	16
0	8	1665	1663	19
0	10	1745	1687	66
0	12	931	936	52
1	-10	310	334	30
1	-7	1505	1511	54
1	-5	1650	1640	31
1	-3	1876	1939	54
1	1	1189	1120	20
1	2	250	145	7
1	4	3389	3301	70
1	6	1348	1329	26
1	8	1150	1232	42
1	9	269	282	19
1	11	490	487	20
1	14	707	737	16
1	15	688	721	17
2	-12	555	550	15
2	-11	791	836	17
2	-6	328	364	16
2	-1	662	638	35
2	0	466	369	14
2	2	598	581	12
2	3	824	765	46
2	5	572	547	23
2	7	708	728	30
2	10	414	426	16
2	13	376	420	43
3	-9	706	745	20
3	-5	708	710	14
3	-4	1633	1622	24
3	1	732	751	12
3	2	1649	1556	34
3	3	1343	1367	30
3	6	1267	1258	15
3	7	563	562	13
3	8	759	764	18
3	14	602	642	21
4	-6	977	1024	33
4	-4	1782	1794	18
4	-1	232	217	14
4	0	5200	5276	38
4	3	379	350	9
4	5	868	832	31
4	8	1602	1638	19
4	10	1460	1480	29
4	11	284	228	24
4	12	999	1042	52
5	-14	617	607	61
5	-13	325	345	23
5	-8	1054	1044	19
5	-5	2118	2099	19
5	1	1987	1816	37
5	2	359	297	11
5	3	1812	1838	17
5	4	2326	2346	20
5	6	513	503	45
5	7	2027	2066	20
5	9	405	421	38
5	12	288	280	31
6	-13	511	533	39
6	-11	1045	1051	20
6	-7	427	401	13
6	-5	805	780	17
6	1	1914	1865	18
6	3	2473	2446	54
6	8	264	287	36
6	9	332	334	18
6	10	239	249	32
7	-12	588	620	51
7	-9	970	943	68
7	-8	515	546	47
7	-6	254	309	42
7	-2	810	803	17
7	1	1388	1398	16
7	3	618	644	20
7	10	516	534	15
8	-12	850	850	64
8	-10	381	326	40
8	-8	576	562	13
8	-6	1069	1047	20
8	-5	361	333	20
8	-2	704	690	14
8	0	1364	1382	22
8	4	653	636	18
8	9	248	220	24
9	-8	808	818	54
9	-7	1401	1399	22
9	-3	1600	1563	24
9	2	536	515	19
9	4	995	955	19
9	5	494	480	25
10	-5	371	401	16
10	-3	1357	1393	20
10	-2	348	346	16
10	-1	1091	1103	19
10	0	805	789	26
10	6	444	426	14
10	8	374	341	52
11	-7	306	333	19
11	-2	998	990	21
11	1	749	730	34
11	4	1026	1002	35
11	6	336	336	18
12	-6	1034	990	23
12	-3	276	272	33
12	-2	819	814	16
12	4	241	255	23
12	7	240	260	33
13	-4	272	197	26
13	2	702	707	15
13	3	526	497	16

^^^^^^^ h = 1 ^^^^^^^

k	l	Fo	Fc	sigF
0	-14	706	744	22
0	-12	921	930	26
0	-8	307	330	22
0	-6	227	258	23
0	-4	315	289	17
0	-2	300	215	13
0	0	270	313	9
0	6	588	577	16
0	8	1092	1154	24
0	10	297	280	27
0	12	771	757	25
1	-11	541	544	19
1	-10	317	296	25
1	-9	1637	1671	24
1	-8	1336	1350	23
1	-7	646	686	17
1	-6	1769	1768	21
1	-5	2261	2247	22
1	-4	768	753	18
1	-3	204	69	18
1	-2	358	316	10
1	-1	494	467	13
1	0	611	531	12
1	1	1106	1189	13
1	2	2840	2770	23
1	3	2732	2638	23
1	4	270	291	18
1	5	831	854	19
1	6	1382	1390	20
1	7	1419	1484	22
1	9	297	232	25

I-726-m27

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
1	10	599	621	19	4	-13	475	474	23	6	0	1654	1715	20
1	12	864	894	27	4	-12	455	488	22	6	1	490	506	14
1	13	435	426	27	4	-10	339	328	25	6	2	1509	1575	20
1	14	376	366	33	4	-9	737	745	21	6	4	1306	1378	21
2	-15	398	399	30	4	-8	335	345	21	6	5	222	204	27
2	-14	440	405	26	4	-7	1134	1135	22	6	6	1130	1121	23
2	-12	2039	2149	32	4	-5	1386	1384	19	6	8	674	683	23
2	-11	477	478	20	4	-4	336	306	15	6	9	632	647	18
2	-10	1387	1396	27	4	-3	223	213	20	6	10	1193	1129	31
2	-8	1363	1442	22	4	-2	431	467	14	6	11	698	624	22
2	-6	956	988	20	4	-1	2030	1934	20	7	-13	541	587	24
2	-5	230	204	20	4	0	509	500	14	7	-10	684	651	19
2	-4	1393	1258	18	4	1	2058	2013	20	7	-9	1048	1087	30
2	-2	5479	5327	40	4	2	478	455	15	7	-8	987	1028	29
2	-1	218	204	18	4	3	820	793	18	7	-6	1127	1148	25
2	0	648	784	16	4	5	201	175	25	7	-5	1710	1751	23
2	1	183	171	20	4	6	339	356	18	7	-4	912	972	24
2	2	1666	1638	17	4	7	974	973	24	7	-3	390	339	16
2	4	263	111	16	4	8	871	865	28	7	-1	826	799	21
2	5	451	446	15	4	9	921	917	30	7	1	1215	1270	20
2	6	3506	3560	29	4	12	655	598	21	7	2	1923	2004	23
2	8	880	896	26	5	-12	307	295	30	7	3	1660	1719	22
2	9	614	621	19	5	-11	1121	1146	31	7	5	1727	1764	24
2	10	2328	2360	30	5	-9	325	351	24	7	6	1431	1462	25
2	11	393	415	27	5	-8	305	233	23	7	11	508	529	25
2	12	432	474	25	5	-7	789	809	25	7	12	351	252	33
3	-13	484	483	23	5	-5	413	446	15	8	-12	425	398	24
3	-11	484	516	21	5	-4	881	884	21	8	-11	308	339	28
3	-9	1608	1629	25	5	-3	746	790	21	8	-10	261	241	33
3	-8	1883	1886	24	5	-2	471	470	15	8	-9	1026	1010	30
3	-7	404	373	15	5	-1	529	507	15	8	-7	628	630	19
3	-6	1511	1537	20	5	0	1070	1084	18	8	-5	941	947	26
3	-5	2549	2573	24	5	1	410	493	14	8	-3	390	399	18
3	-4	1522	1494	18	5	2	673	658	20	8	-2	427	417	17
3	-2	626	576	19	5	3	540	572	15	8	-1	1350	1377	22
3	-1	1312	1150	16	5	4	476	479	15	8	1	1472	1493	22
3	0	242	272	17	5	5	711	740	23	8	3	985	1001	24
3	1	2664	2669	22	5	6	260	291	24	8	4	299	266	23
3	2	3919	3949	30	5	7	1136	1172	25	8	5	391	379	21
3	3	2692	2674	23	5	9	471	452	21	8	6	714	713	22
3	4	991	943	19	5	12	381	316	30	8	7	1222	1225	28
3	5	2820	2834	25	6	-14	456	405	25	8	9	1468	1430	31
3	6	2080	2066	23	6	-12	885	850	24	8	10	430	412	27
3	8	568	541	18	6	-11	465	501	23	9	-11	820	815	25
3	10	552	546	20	6	-8	728	715	21	9	-8	363	376	24
3	11	623	590	20	6	-6	1600	1631	23	9	-7	538	557	19
3	12	708	667	21	6	-5	517	538	17	9	-6	778	767	20
3	13	774	772	26	6	-4	843	758	21	9	-4	752	772	20
3	14	537	520	26	6	-2	3368	3421	28	9	-3	539	531	17
4	-14	570	604	23	6	-1	665	645	20	9	-2	562	581	18

I-726-m28

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
9	-1	599	594	20						2	1	553	520	15
9	0	1372	1414	24	^^^^^^^ h = 2 ^^^^^^^					2	2	319	301	15
9	2	541	529	18						2	5	1241	1234	20
9	5	1023	1000	28	0	-14	1577	1497	35	2	6	1143	1098	22
9	6	265	178	28	0	-12	624	593	20	2	7	899	927	25
9	7	846	812	24	0	-10	451	449	24	2	10	864	823	23
9	8	657	646	22	0	-8	434	437	19	2	11	376	437	31
9	9	371	330	28	0	-6	4127	4170	35	2	12	387	444	30
9	10	453	425	27	0	-4	4119	4219	34	3	-13	543	511	22
10	-10	426	403	21	0	-2	5258	5354	40	3	-11	572	556	19
10	-9	310	290	26	0	0	2896	2748	25	3	-10	1140	1156	28
10	-8	717	717	23	0	2	1614	1568	19	3	-7	489	498	16
10	-6	1137	1155	29	0	4	2964	2964	26	3	-6	1346	1321	21
10	-5	367	338	21	0	6	723	666	24	3	-5	891	910	20
10	-4	500	520	17	0	8	2508	2579	29	3	-4	650	662	21
10	-2	808	804	21	0	10	601	642	20	3	-3	493	471	16
10	-1	466	481	18	0	12	347	320	31	3	-2	252	268	18
10	0	1103	1125	26	0	14	443	369	31	3	-1	1011	1005	18
10	2	259	240	26	1	-11	1108	1082	30	3	0	2360	2251	22
10	3	465	497	19	1	-10	1859	1878	28	3	1	1489	1502	18
10	4	1524	1569	28	1	-8	958	1009	24	3	4	1445	1477	21
10	5	223	212	33	1	-7	1896	2003	23	3	5	1047	1083	21
10	8	395	302	24	1	-6	1689	1708	22	3	8	367	360	23
10	9	408	412	26	1	-5	347	286	16	3	10	776	739	25
11	-9	534	515	20	1	-4	741	710	20	3	11	300	315	34
11	-6	317	309	26	1	-3	552	590	16	3	12	590	570	23
11	-5	714	725	23	1	-2	893	802	19	3	13	656	621	24
11	-4	476	446	19	1	0	2452	2462	22	4	-14	1246	1270	36
11	0	429	436	20	1	1	2724	2842	24	4	-11	725	689	23
11	1	421	431	20	1	2	752	770	19	4	-10	882	885	22
11	2	453	425	18	1	3	990	969	19	4	-9	428	429	20
11	3	690	688	19	1	4	1993	1949	21	4	-8	870	873	26
11	4	240	269	33	1	5	644	650	16	4	-7	462	440	16
11	5	375	382	24	1	8	753	763	22	4	-6	1797	1823	22
11	6	407	386	24	1	9	903	933	23	4	-5	403	399	15
11	7	313	271	31	1	10	632	632	19	4	-4	2987	3036	26
11	8	444	419	26	1	11	607	613	21	4	-2	2632	2584	24
12	-5	693	711	23	1	12	836	827	28	4	-1	541	516	15
12	-4	316	308	23	1	13	515	506	25	4	0	1399	1357	18
12	-2	496	484	18	2	-13	469	472	23	4	1	315	304	16
12	-1	1055	1013	28	2	-11	454	415	21	4	2	449	538	15
12	1	527	539	18	2	-8	876	888	24	4	3	246	266	21
12	4	236	224	33	2	-7	404	402	16	4	4	2535	2576	25
12	6	478	427	22	2	-6	485	460	15	4	7	367	363	23
13	-3	510	495	19	2	-5	187	178	26	4	8	2312	2286	30
13	-2	215	180	31	2	-4	351	326	14	4	9	445	425	22
13	-1	286	256	25	2	-3	1050	1076	18	5	-13	392	416	26
13	0	668	675	19	2	-2	207	148	22	5	-11	1480	1474	29
13	1	302	280	26	2	-1	853	800	18	5	-10	1161	1175	30
13	2	749	698	22	2	0	325	311	14	5	-9	708	697	22

I-T26-M29

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
5	-8	1128	1158	25	8	-10	733	709	23	11	3	404	452	23
5	-7	2645	2728	27	8	-9	324	347	26	11	4	440	442	20
5	-6	1043	1027	22	8	-8	922	928	22	11	5	333	314	27
5	-5	610	557	18	8	-5	346	375	23	11	6	597	588	21
5	-4	646	620	17	8	-4	1058	1078	25	11	7	425	380	25
5	-2	788	732	21	8	-2	998	1004	24	12	-6	526	571	19
5	-1	499	416	14	8	-1	226	204	27	12	-5	336	332	24
5	0	1600	1644	20	8	2	898	922	25	12	-2	363	360	23
5	1	2658	2757	24	8	4	851	823	27	12	0	441	459	19
5	2	813	819	20	8	6	283	221	28	12	1	300	348	27
5	3	708	663	22	8	7	599	627	19	12	2	1010	994	30
5	4	1279	1314	22	8	8	796	734	25	12	3	284	275	27
5	5	697	730	19	8	9	454	461	25	12	5	522	470	21
5	7	504	502	20	8	10	735	691	25	13	-2	359	312	22
5	8	687	646	20	9	-11	656	622	19	13	-1	423	418	20
5	9	645	635	21	9	-10	384	393	24	13	0	489	485	19
5	11	1411	1337	35	9	-9	744	746	23	13	1	379	340	22
5	12	902	822	29	9	-8	412	409	22					
6	-13	496	472	22	9	-7	1086	1097	28	^^^^^^^ h = 3 ^^^^^^^				
6	-11	813	861	24	9	-6	553	542	17					
6	-9	1011	997	28	9	-5	404	440	21	0	-10	453	427	26
6	-7	962	996	27	9	-4	327	325	23	0	-8	348	381	28
6	-5	1096	1090	22	9	-3	524	529	17	0	-4	403	315	20
6	-3	2675	2662	26	9	-1	670	663	20	0	-2	499	511	17
6	-1	852	827	21	9	0	931	946	26	0	2	619	545	18
6	1	250	261	21	9	1	1718	1769	25	0	4	400	409	18
6	2	436	468	15	9	2	630	626	21	0	6	1015	917	25
6	5	1283	1283	24	9	3	916	946	29	0	8	377	338	26
6	6	523	533	19	9	4	692	660	21	0	12	565	544	25
6	7	1438	1379	28	9	5	628	625	20	1	-13	796	789	23
6	11	501	488	28	9	6	655	592	20	1	-12	1047	1013	33
7	-13	616	658	22	10	-9	530	586	19	1	-11	736	675	24
7	-12	387	353	26	10	-8	356	387	25	1	-10	356	328	25
7	-11	283	229	30	10	-7	717	716	23	1	-9	943	986	29
7	-9	351	376	24	10	-6	556	533	17	1	-8	1202	1267	27
7	-7	348	381	23	10	-5	497	509	19	1	-7	798	826	19
7	-6	572	601	16	10	-4	240	250	30	1	-6	650	632	20
7	-5	1247	1264	24	10	-3	1645	1648	27	1	-5	367	381	20
7	-4	421	421	18	10	-2	355	342	21	1	-4	864	774	25
7	-2	979	990	23	10	-1	537	558	18	1	-2	1096	1155	22
7	-1	1061	1096	22	10	0	331	368	22	1	-1	1905	1964	23
7	1	259	341	25	10	5	802	794	23	1	0	1462	1480	21
7	3	548	577	17	10	7	856	796	24	1	1	660	663	17
7	4	295	305	24	11	-8	492	518	20	1	2	1463	1442	21
7	5	918	937	26	11	-5	670	651	23	1	3	1038	1003	21
7	6	1139	1185	28	11	-4	793	805	22	1	5	707	713	20
7	7	360	388	27	11	-2	938	1010	29	1	6	783	755	20
7	9	420	412	27	11	-1	528	524	17	1	7	450	456	21
7	10	901	830	26	11	0	292	293	25	1	8	315	307	29
7	11	433	440	30	11	2	338	336	24	1	9	491	476	23

I-726-M30

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
1	10	1085	1210	36	4	-1	705	670	22	7	0	1282	1303	24
1	11	555	573	24	4	1	1028	1061	21	7	1	446	459	17
1	12	533	558	25	4	3	1149	1127	22	7	2	1007	994	25
2	-14	361	356	29	4	4	263	251	25	7	3	983	1020	28
2	-12	1006	937	32	4	5	580	566	18	7	4	722	739	22
2	-10	539	512	18	4	6	677	625	21	7	5	410	422	22
2	-9	221	205	32	4	9	596	566	21	7	7	752	737	25
2	-8	2002	2073	26	4	11	659	678	24	7	9	515	475	25
2	-7	343	330	20	4	12	334	302	38	7	10	630	578	25
2	-6	2173	2226	25	5	-13	742	736	23	8	-9	454	426	20
2	-5	512	478	16	5	-8	302	299	25	8	-8	309	294	26
2	-4	3124	3099	28	5	-7	879	840	26	8	-7	736	712	21
2	-2	2025	2025	23	5	-6	352	361	20	8	-6	307	309	25
2	0	793	693	21	5	-5	221	223	29	8	-5	1806	1793	27
2	2	1982	1986	22	5	-4	207	166	27	8	-3	854	815	26
2	3	437	451	16	5	-3	846	846	23	8	-2	223	269	32
2	4	1971	2019	23	5	-2	826	828	23	8	-1	323	323	22
2	5	429	433	18	5	1	769	699	22	8	0	548	576	16
2	6	2546	2625	28	5	2	526	547	17	8	1	1139	1201	25
2	8	620	575	18	5	4	472	457	17	8	3	1572	1650	27
2	9	289	295	34	5	5	736	723	22	8	4	733	693	22
2	12	400	313	31	5	8	346	351	30	8	5	347	368	26
3	-13	423	353	23	5	9	343	325	29	8	6	284	211	28
3	-12	1051	1013	31	5	11	617	565	24	8	7	771	762	26
3	-11	927	940	23	6	-11	380	360	24	8	9	494	495	25
3	-9	1033	1092	28	6	-10	581	546	18	9	-11	326	292	25
3	-8	970	964	26	6	-8	1401	1432	27	9	-7	696	706	23
3	-5	1092	1095	22	6	-7	695	726	21	9	-6	946	969	28
3	-4	1587	1617	22	6	-6	871	892	27	9	-4	792	798	21
3	-3	675	619	16	6	-5	588	581	17	9	-3	789	787	21
3	-2	2139	2157	23	6	-4	2436	2434	26	9	-2	305	311	23
3	-1	3837	3923	31	6	-1	266	250	22	9	-1	676	689	21
3	0	2363	2331	24	6	0	1027	1052	23	9	0	444	461	19
3	1	497	492	16	6	2	1612	1647	23	9	1	605	604	17
3	2	2446	2420	24	6	4	426	402	19	9	2	382	416	22
3	3	1842	1893	22	6	5	794	784	22	9	4	692	725	23
3	4	435	464	17	6	6	1533	1457	29	9	5	669	706	21
3	5	496	503	17	6	8	557	490	21	9	8	543	501	24
3	6	296	269	26	6	9	403	376	29	10	-6	410	366	20
3	7	708	676	23	7	-13	397	339	26	10	-4	776	745	21
3	9	509	440	22	7	-12	656	689	19	10	-3	463	462	18
3	10	1196	1152	34	7	-11	690	699	21	10	-2	831	830	28
3	11	453	406	27	7	-9	1111	1151	31	10	0	1013	1050	28
3	12	427	336	28	7	-8	715	731	24	10	1	284	315	27
4	-13	593	618	21	7	-6	423	388	19	10	2	892	875	22
4	-11	447	496	23	7	-5	355	371	21	10	6	429	382	26
4	-7	1095	1079	24	7	-4	433	497	19	11	-8	275	207	28
4	-5	1842	1808	23	7	-3	534	546	16	11	-6	452	454	20
4	-3	653	587	17	7	-2	1143	1175	24	11	-2	462	461	18
4	-2	483	436	16	7	-1	2352	2397	26	11	-1	734	705	21

I-726-M31

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
11	0	344	321	23	2	0	566	539	17	5	0	861	955	26
11	3	310	293	27	2	1	940	976	25	5	1	683	727	21
11	4	509	468	20	2	2	302	332	23	5	3	408	418	22
12	-5	840	851	22	2	3	248	250	29	5	5	1512	1477	29
12	-4	327	351	26	2	4	1098	1133	26	5	6	568	572	20
12	-2	261	287	27	2	5	819	807	22	5	7	416	435	27
12	3	731	719	21	2	6	597	592	19	5	8	997	947	25
					3	-12	518	523	20	5	9	1157	1094	38
^^^^^^^ h = 4 ^^^^^^^					3	-10	441	447	22	6	-11	326	347	26
					3	-8	378	362	21	6	-9	1203	1225	29
0	-14	848	768	27	3	-7	640	637	18	6	-7	842	865	21
0	-12	473	447	27	3	-6	634	639	18	6	-6	275	229	26
0	-10	1726	1694	36	3	-4	917	900	26	6	-5	301	348	27
0	-8	693	609	23	3	-3	897	878	25	6	-3	395	346	19
0	-6	3744	3413	36	3	-2	1437	1456	24	6	-1	858	869	29
0	-4	338	358	26	3	-1	785	809	25	6	0	360	360	22
0	0	2407	2476	27	3	0	878	964	25	6	1	1740	1696	26
0	2	2373	2328	27	3	1	530	535	18	6	2	376	327	22
0	4	3261	3190	32	3	2	644	667	21	6	3	325	317	26
0	6	549	525	20	3	3	660	624	20	6	4	390	363	23
0	8	449	487	24	3	4	443	445	20	6	5	1169	1159	29
1	-14	486	478	27	3	7	334	323	28	6	7	847	862	26
1	-13	734	709	25	3	8	1040	1080	34	6	9	339	352	36
1	-12	626	605	22	3	11	438	461	31	7	-8	635	657	20
1	-11	932	851	25	4	-14	450	437	23	7	-7	735	722	22
1	-10	1150	1125	35	4	-13	305	314	32	7	-6	474	487	20
1	-9	542	513	21	4	-12	254	221	35	7	-5	462	423	18
1	-6	614	622	20	4	-11	382	423	26	7	-4	530	450	17
1	-5	635	692	20	4	-10	1280	1319	31	7	-2	413	378	20
1	-4	757	846	21	4	-8	261	274	30	7	-1	844	836	26
1	-3	1725	1821	26	4	-6	2238	2418	28	7	0	503	510	17
1	-2	1849	1848	26	4	-5	368	382	21	7	2	436	440	20
1	-1	474	467	18	4	-1	447	475	18	7	3	1120	1115	29
1	0	1606	1571	24	4	0	1347	1327	23	7	4	847	831	22
1	1	1165	1123	24	4	1	246	280	30	7	5	439	418	23
1	3	440	455	19	4	2	1987	2007	26	7	6	571	527	20
1	4	391	391	21	4	4	1786	1834	27	7	8	566	544	24
1	5	775	761	23	4	6	988	998	32	8	-11	340	367	28
1	6	513	527	21	4	7	434	467	25	8	-10	443	409	21
1	8	1507	1468	30	4	9	369	393	32	8	-8	520	531	19
1	9	754	723	23	5	-13	1245	1284	33	8	-6	801	792	23
2	-14	476	485	25	5	-11	764	775	24	8	-4	419	376	19
2	-12	517	525	22	5	-10	989	1002	23	8	-2	426	441	21
2	-10	356	338	26	5	-9	843	850	22	8	0	728	748	23
2	-9	533	540	19	5	-6	348	341	22	8	1	429	418	20
2	-8	330	314	25	5	-5	691	698	22	8	2	445	430	20
2	-7	663	694	19	5	-4	515	494	17	8	3	413	449	23
2	-4	272	270	27	5	-3	1719	1687	26	8	4	296	246	29
2	-3	364	337	21	5	-2	1365	1358	26	8	5	257	211	33
2	-1	985	945	25	5	-1	300	283	23	8	6	787	734	27

I-726-M32

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF
8	7	481	472	26
9	-9	338	338	25
9	-8	272	291	29
9	-7	449	420	20
9	-6	242	233	30
9	-5	528	546	18
9	-4	368	351	23
9	-3	1490	1543	28
9	-2	779	743	20
9	-1	355	353	23
9	1	895	922	30
9	2	590	574	18
9	4	286	273	32
9	5	513	496	22
10	-7	702	705	20
10	-6	322	301	24
10	-5	248	262	32
10	-3	268	345	30
10	-1	465	503	18
10	1	963	954	30
10	5	788	719	25
11	-6	439	367	19
11	-5	397	370	21
11	-4	254	252	30
11	-2	507	530	18
11	-1	363	329	22
11	0	475	513	20
11	2	540	524	19
11	3	625	583	19

^^^^^^^ h = 5 ^^^^^^^

k	l	Fo	Fc	sigF
0	-14	425	466	36
0	-10	532	515	28
0	-8	511	433	26
0	-4	285	190	33
0	2	935	915	22
0	10	933	945	29
1	-14	591	536	26
1	-12	1080	989	28
1	-11	432	420	28
1	-9	567	533	21
1	-5	759	801	25
1	-4	1273	1288	31
1	-3	913	857	24
1	-2	510	443	22
1	-1	295	227	29
1	0	351	340	26
1	2	396	426	24
1	3	685	671	21
1	4	716	730	21
1	5	255	304	37
1	6	1264	1383	33
1	7	757	763	23
2	-13	278	282	37
2	-12	1151	1067	33
2	-11	395	421	27
2	-10	510	530	23
2	-8	2631	2558	34
2	-7	319	297	30
2	-4	419	416	24
2	0	2114	2253	29
2	2	925	982	30
2	4	1106	1091	30
2	8	428	362	28
3	-12	734	709	22
3	-10	303	282	28
3	-8	631	574	21
3	-7	1394	1431	31
3	-6	495	528	22
3	-5	1256	1239	30
3	-4	2140	2147	30
3	-3	1710	1630	29
3	-1	1287	1232	29
3	0	1018	977	30
3	2	426	359	22
3	3	579	536	20
3	4	575	557	20
3	6	1238	1200	33
3	7	757	768	23
3	9	361	361	33
4	-13	417	474	26
4	-11	817	838	24
4	-10	329	236	22
4	-9	362	376	26
4	-7	677	642	19
4	-5	875	807	22
4	-4	333	317	28
4	-3	656	615	21
4	-1	496	524	21
4	2	387	458	25
4	3	790	794	23
4	5	882	880	24
4	7	349	326	32
4	8	322	241	33
5	-9	743	769	21
5	-7	432	460	22
5	-5	333	309	28
5	-4	419	424	23
5	-1	251	229	33
5	0	508	502	19
5	1	589	529	19
5	2	463	441	21
5	4	249	261	36
5	5	410	406	24
5	6	477	521	26
6	-12	604	592	19
6	-11	447	525	22
6	-10	421	441	22
6	-8	1095	1089	33
6	-7	380	393	25
6	-6	881	815	22
6	-2	976	1002	30
6	-1	461	483	20
6	0	1191	1263	29
6	1	295	341	30
6	2	723	753	21
6	3	483	456	21
6	4	946	925	25
6	5	549	520	21
7	-11	475	496	21
7	-8	503	509	20
7	-7	883	880	23
7	-5	932	872	31
7	-4	1187	1159	32
7	-3	1011	903	31
7	-1	953	933	28
7	0	633	622	20
7	2	403	360	23
7	3	533	521	20
7	6	616	591	22
7	7	690	666	23
8	-9	614	613	19
8	-7	615	613	21
8	-5	946	951	22
8	-3	902	863	31
8	-1	420	425	22
8	0	415	428	23
8	1	561	584	19
8	2	298	278	28
8	3	781	781	25
8	5	343	374	31
9	-7	705	673	24
9	-6	561	551	19
9	-3	243	224	31
9	-1	422	421	21
9	1	328	340	27
9	2	522	518	20
9	4	605	611	21
10	-6	752	745	24

I-726-m33

10|F|o vs 10|F|c for II

k	l	Fo	Fc	sigF
10	-5	340	367	26
10	-2	886	807	29
10	0	288	261	28

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

k	l	Fo	Fc	sigF
0	-12	976	972	27
0	-10	1226	1096	39
0	-8	520	490	28
0	-6	461	382	28
0	-2	2876	2926	37
0	0	622	572	20
0	2	1882	1950	34
1	-10	293	265	36
1	-9	496	478	26
1	-8	435	494	28
1	-7	457	425	27
1	-6	1575	1615	36
1	-5	1044	968	26
1	-3	749	648	24
1	-2	962	889	27
1	0	277	279	37
1	2	823	828	26
1	3	528	566	22
1	4	685	707	20
1	6	561	620	24
2	-12	237	79	38
2	-8	344	336	30
2	-7	532	500	22
2	-5	424	450	29
2	-2	398	440	30
2	-1	642	662	20
2	0	624	688	21
2	4	353	347	30
3	-11	426	409	25
3	-10	281	267	32
3	-8	390	416	27
3	-6	1147	1104	35
3	-5	487	429	23
3	-2	755	687	24
3	-1	522	480	22
3	2	366	380	28
3	4	670	731	20
3	6	369	394	34
4	-10	1132	1116	33
4	-8	423	412	26
4	-7	614	602	21
4	-5	269	271	37
4	-2	1676	1699	33
4	1	336	377	29
4	2	1262	1262	33
4	3	388	376	26
5	-9	677	695	22
5	-7	598	557	21
5	-6	1067	1027	33
5	-5	1081	979	34
5	-3	948	899	25
5	-2	624	585	21
5	-1	555	542	21
5	1	391	372	27
5	2	546	587	23
5	3	801	904	27
5	4	319	302	34
5	5	1098	1016	34
5	6	622	564	23
6	-9	441	482	22
6	-7	517	596	22
6	-5	931	946	24
6	-3	354	352	29
6	-1	1090	1120	35
6	1	1100	1122	34
7	-8	473	452	22
7	-3	819	812	26
7	-1	567	618	21
7	0	553	556	20
7	4	433	371	25
8	-7	359	400	29
8	-4	507	451	23
8	-2	453	389	22
8	1	337	391	29
8	2	405	427	28
9	-3	408	432	24

^^^^^^^ h = 7 ^^^^^^^

k	l	Fo	Fc	sigF
0	-4	439	520	29
0	-2	361	349	35
0	0	431	473	29
1	-8	530	607	27
1	-7	596	533	23
1	-4	462	429	29
1	0	938	887	27
1	1	551	560	23
1	4	868	936	28
2	-10	644	716	24
2	-8	263	345	40
2	-4	1166	1220	38
2	0	1092	1063	27
2	4	568	549	23
3	-8	582	546	23
3	-7	1050	1046	29
3	-6	487	498	27
3	-1	347	250	32
3	0	853	883	29
3	1	598	642	23
3	3	781	749	26
3	4	827	908	25
4	-7	270	213	36
4	-3	655	628	24
4	-2	270	319	44
4	-1	852	846	29
4	0	274	208	36
4	3	398	448	30
5	-5	376	373	31
5	-3	351	349	32
5	-2	358	328	31
5	2	460	467	27
6	-4	1104	974	37
6	-3	381	365	30
6	-1	552	598	23
6	0	800	783	23

^^^^^^^ h = 8 ^^^^^^^

k	l	Fo	Fc	sigF
0	-6	754	795	25
0	-4	903	1082	27
0	-2	1068	1112	29
1	-1	376	342	33
2	-2	445	448	30

I-726-M34

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR III

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	0	0	53	-71	-39
2	0	0	2614	-2647	20
3	0	0	72	58	-51
4	0	0	396	388	20
5	0	0	90	-140	-64
6	0	0	628	-627	15
7	0	0	97	115	-69
-7	1	0	381	344	25
-6	1	0	344	354	25
-5	1	0	452	435	19
-4	1	0	844	-826	25
-3	1	0	859	-874	21
-2	1	0	66	80	-66
-1	1	0	64	-90	-64
0	1	0	614	614	11
1	1	0	54	-105	-54
2	1	0	1087	1136	17
3	1	0	1067	1068	20
4	1	0	1651	-1664	24
5	1	0	663	-620	21
6	1	0	353	355	23
7	1	0	99	-129	-99
-6	2	0	94	-4	-94
-5	2	0	1355	1347	28
-4	2	0	167	108	-167
-3	2	0	1363	-1367	24
-2	2	0	163	-179	-61
-1	2	0	459	-438	14
0	2	0	156	104	-72
1	2	0	451	443	13
2	2	0	133	189	-133
3	2	0	913	867	21
4	2	0	77	-23	-77
5	2	0	195	-187	-37
6	2	0	457	-474	20
7	2	0	646	-666	20
-6	3	0	520	458	20
-5	3	0	366	391	25
-4	3	0	352	-324	23
-3	3	0	81	138	-81
-2	3	0	951	1007	23
-1	3	0	1425	-1415	21
0	3	0	1368	-1339	20
1	3	0	643	675	22
2	3	0	149	139	-36
3	3	0	1011	987	22
4	3	0	542	507	17
5	3	0	576	-539	17
6	3	0	237	-174	33
7	3	0	100	-142	-100
-5	4	0	100	13	-100
-4	4	0	909	924	23
-3	4	0	386	404	22
-2	4	0	389	-378	19
-1	4	0	609	-619	17
0	4	0	176	225	-102
4	6	1	1235	1193	30
5	6	1	689	677	22
6	6	1	365	-370	27
7	6	1	213	-264	-213
-2	7	1	106	110	-106
-1	7	1	764	781	23
0	7	1	92	-65	-92
1	7	1	1095	-1035	29
2	7	1	247	-264	37
3	7	1	257	283	-95
4	7	1	177	252	-177
5	7	1	161	-23	-161
6	7	1	191	129	-191
0	8	1	226	43	-125
1	8	1	250	-301	-116
2	8	1	100	65	-100
3	8	1	286	-359	-102
4	8	1	405	-361	27
-5	-7	2	113	-6	-113
-4	-7	2	686	655	23
-3	-7	2	102	45	-102
-2	-7	2	244	-242	-129
-1	-7	2	338	366	32
0	-7	2	102	10	-102
1	-7	2	516	-537	23
-6	-6	2	251	-140	-106
-5	-6	2	240	-290	-122
-4	-6	2	100	-25	-100
-3	-6	2	93	33	-93
-2	-6	2	644	642	22
-1	-6	2	798	755	25
0	-6	2	747	-789	26

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	4	0	75	55	-75
2	4	0	1560	-1511	24
3	4	0	455	464	16
4	4	0	1450	1442	26
5	4	0	89	-6	-89
6	4	0	92	-145	-92
7	4	0	232	-282	-75
-4	5	0	278	211	32
-3	5	0	226	21	-87
-2	5	0	643	659	21
-1	5	0	709	686	22
0	5	0	1010	-957	26
1	5	0	765	-803	20
2	5	0	156	34	-156
3	5	0	348	341	23
4	5	0	94	-80	-94
5	5	0	206	-182	-135
6	5	0	850	830	26
7	5	0	106	285	-106
-3	6	0	105	-139	-105
-2	6	0	246	238	39
-1	6	0	572	577	18
0	6	0	226	-79	-91
1	6	0	96	153	-96
2	6	0	436	-427	20
3	6	0	1013	-1012	30
4	6	0	246	272	36
5	6	0	561	583	20
6	6	0	102	113	-102
-2	7	0	404	407	27
-1	7	0	451	451	23
0	7	0	199	-145	-173
1	7	0	98	147	-98
2	7	0	96	157	-96
3	7	0	448	-482	23
4	7	0	262	-234	-102
5	7	0	187	-213	-187
6	7	0	101	78	-101
0	8	0	764	759	23
1	8	0	247	218	-123
2	8	0	362	-336	29
3	8	0	107	-165	-107
4	8	0	203	223	-203
-3	-8	1	202	66	-202
-2	-8	1	339	284	32
-1	-8	1	101	100	-101
-5	-7	1	187	-185	-187
-4	-7	1	550	-533	21
-3	-7	1	103	-228	-103
-2	-7	1	820	805	25
-1	-7	1	498	499	22
0	-7	1	294	-266	32
1	-7	1	99	-25	-99
2	-7	1	295	-229	-94
-6	-6	1	162	-99	-162
-5	-6	1	671	-659	23
3	-4	2	908	-973	31
4	-4	2	417	-424	22
5	-4	2	98	142	-98
-7	-3	2	102	26	-102
-6	-3	2	292	320	30
-5	-3	2	95	270	-95
-4	-3	2	149	-99	-149
-3	-3	2	535	-523	18
-2	-3	2	1632	-1648	23
-1	-3	2	648	651	17
0	-3	2	1683	1716	23
1	-3	2	665	-689	19
2	-3	2	83	86	-83
3	-3	2	651	643	23
4	-3	2	97	-275	-97
5	-3	2	565	-562	19
6	-3	2	374	-379	28
-7	-2	2	255	166	35
-6	-2	2	245	305	38
-5	-2	2	541	510	19
-4	-2	2	250	-240	26
-3	-2	2	131	-85	-131
-2	-2	2	555	-552	18
-1	-2	2	638	-618	21
0	-2	2	72	-147	-72
1	-2	2	244	-267	21
2	-2	2	1706	1714	23
3	-2	2	680	691	20
4	-2	2	1169	-1141	26
5	-2	2	93	-60	-93
6	-2	2	96	82	-96
-7	-1	2	732	-736	23

H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	-6	1	99	109	-99
-3	-6	1	196	-52	-134
-2	-6	1	425	-461	22
-1	-6	1	216	300	-75
0	-6	1	728	716	25
1	-6	1	417	427	23
2	-6	1	494	-482	21
3	-6	1	439	-435	24
-7	-5	1	409	423	27
-6	-5	1	557	521	19
-5	-5	1	254	-209	-94
-4	-5	1	97	-198	-97
-3	-5	1	813	-830	22
-2	-5	1	537	-528	17
-1	-5	1	1152	1108	26
0	-5	1	193	88	-116
1	-5	1	368	-349	22
2	-5	1	578	590	19
3	-5	1	352	341	26
4	-5	1	288	-377	-94
-7	-4	1	161	197	-161
-6	-4	1	550	548	19
-5	-4	1	94	43	-94
-4	-4	1	90	-79	-90
-3	-4	1	186	-121	-112
-2	-4	1	563	-616	17
-1	-4	1	218	-234	-65
0	-4	1	787	-785	25
1	-4	1	677	674	20
2	-4	1	1550	1582	26
3	-4	1	541	-500	19
4	-4	1	603	-591	19
5	-4	1	261	217	-83
-7	-3	1	410	-427	26
-6	-3	1	954	975	31
-5	-3	1	628	634	21
-4	-3	1	553	-548	17
-3	-3	1	154	182	-154
-2	-3	1	75	20	-75
-1	-3	1	271	-294	20
0	-3	1	1102	-1095	20
1	-3	1	538	-537	16
2	-3	1	1307	1314	24
3	-3	1	624	592	18
4	-3	1	93	22	-93
5	-3	1	192	-188	-144
6	-3	1	448	-413	24
-7	-2	1	98	67	-98
-6	-2	1	292	-280	28
-5	-2	1	713	-723	21
-4	-2	1	961	917	25
-3	-2	1	2716	2709	29
-2	-2	1	1537	-1518	20
-1	-2	1	2520	-2612	25
0	-2	1	1158	1140	18
1	-2	1	368	372	13
3	0	2	761	732	17
4	0	2	317	317	22
5	0	2	179	242	-84
6	0	2	194	260	-121
7	0	2	292	-259	30
-7	1	2	193	-102	-59
-6	1	2	600	-587	20
-5	1	2	193	-39	-121
-4	1	2	549	510	19
-3	1	2	194	244	-73
-2	1	2	534	469	16
-1	1	2	66	96	-66
0	1	2	727	737	16
1	1	2	1326	-1321	17
2	1	2	2227	-2344	23
3	1	2	1310	1320	20
4	1	2	945	913	22
5	1	2	298	-322	24
6	1	2	288	327	30
7	1	2	96	149	-96
8	1	2	151	-73	-151
-6	2	2	351	-337	27
-5	2	2	499	-463	18
-4	2	2	447	-451	18
-3	2	2	191	-209	-56
-2	2	2	2052	2064	24
-1	2	2	755	763	19
0	2	2	1878	-1839	21
1	2	2	66	-138	-66
2	2	2	677	675	20
3	2	2	216	-183	24
4	2	2	1521	-1533	24

H	K	L	10FO	10FC	10S
2	-2	1	624	-650	18
3	-2	1	305	-300	21
4	-2	1	760	766	22
5	-2	1	896	918	23
6	-2	1	335	-349	29
7	-2	1	446	-495	26
-7	-1	1	462	-483	21
-6	-1	1	315	-291	25
-5	-1	1	218	245	-87
-4	-1	1	76	-20	-76
-3	-1	1	670	654	22
-2	-1	1	449	409	14
-1	-1	1	577	582	18
0	-1	1	144	118	-57
1	-1	1	2563	-2701	25
2	-1	1	173	-127	-60
3	-1	1	1305	1320	22
4	-1	1	396	-366	17
5	-1	1	253	217	30
6	-1	1	533	519	18
7	-1	1	97	14	-97
-7	0	1	162	-235	-85
-6	0	1	982	-973	22
-5	0	1	115	-3	-75
-4	0	1	95	-71	-70
-3	0	1	452	404	10
-2	0	1	953	931	13
-1	0	1	143	-11	-30
1	0	1	501	-508	10
2	0	1	609	-560	20
3	0	1	646	-619	13
4	0	1	851	-852	17
5	0	1	1159	1148	19
6	0	1	807	819	18
7	0	1	412	-411	18
-7	1	1	214	-120	-112
-6	1	1	95	131	-95
-5	1	1	237	232	-89
-4	1	1	1492	-1497	25
-3	1	1	675	-648	18
-2	1	1	1916	1957	22
-1	1	1	357	316	12
0	1	1	500	448	12
1	1	1	202	262	-13
2	1	1	1093	-1068	17
3	1	1	120	-96	-120
4	1	1	425	-423	15
5	1	1	207	-221	-89
6	1	1	285	223	27
7	1	1	395	365	23
-6	2	1	214	-180	-119
-5	2	1	628	-614	19
-4	2	1	248	-217	29
-3	2	1	248	253	23
-2	2	1	253	-211	19
-1	2	1	1506	-1509	19
0	4	2	184	-180	-78
1	4	2	2429	2399	27
2	4	2	345	340	17
3	4	2	1646	-1626	24
4	4	2	257	-254	29
5	4	2	91	-135	-91
6	4	2	177	63	-69
7	4	2	206	182	-48
8	4	2	104	-6	-104
-4	5	2	416	423	25
-3	5	2	483	-496	20
-2	5	2	1213	-1174	29
-1	5	2	315	288	25
0	5	2	682	688	21
1	5	2	164	228	-164
2	5	2	87	-22	-87
3	5	2	192	237	-110
4	5	2	498	468	17
5	5	2	730	-742	25
6	5	2	637	-617	20
7	5	2	208	159	-86
-3	6	2	101	-113	-101
-2	6	2	399	-423	25
-1	6	2	94	41	-94
0	6	2	576	-602	18
1	6	2	95	-228	-95
2	6	2	1164	1155	28
3	6	2	419	403	21
4	6	2	231	-267	-113
5	6	2	146	-219	-146
6	6	2	207	-90	-130
7	6	2	99	-101	-99

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	2	1	1740	1738	20
1	2	1	2542	2524	25
2	2	1	1392	-1392	19
3	2	1	833	-789	22
4	2	1	145	-225	-145
5	2	1	309	-316	23
6	2	1	189	234	-70
7	2	1	95	-25	-95
8	2	1	102	193	-102
-6	3	1	97	117	-97
-5	3	1	260	235	33
-4	3	1	254	160	-75
-3	3	1	1113	-1124	24
-2	3	1	503	-512	17
-1	3	1	396	401	15
0	3	1	408	397	14
1	3	1	289	238	16
2	3	1	191	12	-63
3	3	1	1263	1263	22
4	3	1	255	-264	25
5	3	1	1561	-1552	27
6	3	1	173	52	-173
7	3	1	261	316	-97
8	3	1	103	61	-103
-5	4	1	209	202	-124
-4	4	1	552	535	18
-3	4	1	331	-302	23
-2	4	1	215	-262	-90
-1	4	1	796	-724	26
0	4	1	1046	-1057	22
1	4	1	1438	1419	22
2	4	1	1103	1120	22
3	4	1	527	-497	17
4	4	1	179	-226	-138
5	4	1	155	243	-155
6	4	1	157	128	-94
7	4	1	794	-811	27
-4	5	1	240	310	-114
-3	5	1	397	-370	23
-2	5	1	91	67	-91
-1	5	1	135	90	-135
0	5	1	934	-976	28
1	5	1	84	-110	-84
2	5	1	235	205	-78
3	5	1	344	339	23
4	5	1	994	1001	28
5	5	1	94	-186	-94
6	5	1	586	-561	20
7	5	1	167	-85	-167
-3	6	1	810	836	26
-2	6	1	348	-382	28
-1	6	1	726	-676	25
0	6	1	94	70	-94
1	6	1	416	386	20
2	6	1	744	-745	23
3	6	1	624	-642	20
-2	-6	3	375	339	27
-1	-6	3	444	-447	23
0	-6	3	869	-841	24
1	-6	3	156	-2	-156
2	-6	3	366	399	28
3	-6	3	99	-15	-99
-6	-5	3	392	-399	26
-5	-5	3	418	-436	25
-4	-5	3	729	736	21
-3	-5	3	925	982	31
-2	-5	3	688	-684	21
-1	-5	3	186	-95	-160
0	-5	3	471	461	19
1	-5	3	474	-502	21
2	-5	3	542	-567	19
3	-5	3	98	-104	-98
4	-5	3	484	494	23
-6	-4	3	260	-228	36
-5	-4	3	373	-378	25
-4	-4	3	260	-217	33
-3	-4	3	410	436	21
-2	-4	3	296	309	26
-1	-4	3	894	880	26
0	-4	3	84	-40	-84
1	-4	3	1207	-1209	27
2	-4	3	256	220	-86
3	-4	3	186	66	-154
4	-4	3	551	-520	19
5	-4	3	142	225	-142
-7	-3	3	458	-413	23
-6	-3	3	534	-515	20
-5	-3	3	143	207	-143

I-726-M35

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR III

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	-6	2	498	-475	21
2	-6	2	328	343	30
3	-6	2	259	-247	-90
-6	-5	2	105	24	-105
-5	-5	2	98	-19	-98
-4	-5	2	340	-370	29
-3	-5	2	463	-471	20
-2	-5	2	202	203	-128
-1	-5	2	1310	1257	28
0	-5	2	145	187	-145
1	-5	2	482	-487	19
2	-5	2	244	-277	-98
3	-5	2	372	-365	25
4	-5	2	199	148	-59
-7	-4	2	534	531	23
-6	-4	2	574	589	20
-5	-4	2	1104	-1141	30
-4	-4	2	989	-951	27
-3	-4	2	1058	1016	26
-2	-4	2	85	-106	-85
-1	-4	2	542	-556	17
0	-4	2	541	570	19
1	-4	2	977	935	25
2	-4	2	307	236	24
6	-2	3	242	-167	-94
-7	-1	3	391	329	26
-6	-1	3	210	51	-115
-5	-1	3	178	223	-178
-4	-1	3	84	0	-84
-3	-1	3	76	-135	-76
-2	-1	3	1127	-1267	-22
-1	-1	3	1280	-1362	20
0	-1	3	2274	2433	24
1	-1	3	1095	1088	19
2	-1	3	1180	-1194	21
3	-1	3	415	428	16
4	-1	3	242	183	-72
5	-1	3	386	-383	22
6	-1	3	518	-513	19
7	-1	3	205	-271	-180
-7	0	3	96	16	-68
-6	0	3	265	313	32
-5	0	3	1138	1124	20
-4	0	3	184	-119	-59
-3	0	3	1583	-1561	22
-2	0	3	367	339	15
-1	0	3	567	544	11
0	0	3	851	-835	14
1	0	3	1263	-1312	13
2	0	3	1044	1058	25
3	0	3	2540	2637	26
4	0	3	777	-811	18
5	0	3	1472	-1488	20
6	0	3	321	310	25
7	0	3	100	115	-71
-6	1	3	492	-413	20
-5	1	3	792	783	24
-4	1	3	958	942	25
-3	1	3	517	-521	17
-2	1	3	139	18	-109
-1	1	3	887	-843	18
0	1	3	824	-841	18
1	1	3	686	671	19
2	1	3	445	-405	13
3	1	3	428	423	15
4	1	3	923	927	24
5	1	3	175	243	-175
6	1	3	283	-330	30
7	1	3	778	-778	26
8	1	3	215	-22	-125
-6	2	3	308	322	31
-5	2	3	92	-11	-92
-4	2	3	369	-347	20
-3	2	3	438	440	16
-2	2	3	1855	1882	24
-1	2	3	812	-813	20
0	2	3	2521	-2482	26
1	2	3	624	627	20
2	2	3	146	82	-92
3	2	3	75	-36	-75
3	5	4	935	-923	27
4	5	4	216	297	-106
5	5	4	755	740	24
6	5	4	98	150	-98
7	5	4	246	191	-103
-3	6	4	287	-316	-84
-2	6	4	258	-221	36
-1	6	4	1250	1231	29

H	K	L	10FO	10FC	10S
-6	-1	2	249	259	-95
-5	-1	2	1576	1576	28
-4	-1	2	83	-209	-83
-3	-1	2	559	-572	18
-2	-1	2	135	186	-36
-1	-1	2	667	-708	19
0	-1	2	147	-149	-85
1	-1	2	749	-687	19
2	-1	2	68	64	-68
3	-1	2	1134	1112	22
4	-1	2	480	498	16
5	-1	2	210	171	-89
6	-1	2	720	-713	24
7	-1	2	484	-509	23
-7	0	2	119	-11	-86
-6	0	2	113	85	-83
-5	0	2	88	-47	-62
-4	0	2	317	-321	16
-3	0	2	1506	1487	16
-2	0	2	1368	1322	15
-1	0	2	2378	-2465	28
0	0	2	782	-765	20
1	0	2	268	298	11
2	0	2	531	-572	11
4	2	3	745	752	25
5	2	3	86	51	-86
6	2	3	223	261	-105
7	2	3	146	-26	-146
8	2	3	246	-409	-139
-6	3	3	496	-507	22
-5	3	3	532	-552	19
-4	3	3	737	766	23
-3	3	3	616	611	19
-2	3	3	165	-168	-160
-1	3	3	139	73	-139
0	3	3	270	282	20
1	3	3	150	146	-35
2	3	3	1735	-1722	22
3	3	3	682	-641	18
4	3	3	1306	1305	24
5	3	3	170	251	-170
6	3	3	98	211	-98
7	3	3	246	162	-80
8	3	3	384	-344	26
-5	4	3	368	-353	26
-4	4	3	94	-31	-94
-3	4	3	384	-390	23
-2	4	3	344	308	22
-1	4	3	1654	1707	24
0	4	3	247	-255	25
1	4	3	1146	-1151	22
2	4	3	168	-66	-95
3	4	3	81	67	-81
4	4	3	193	-224	-116
5	4	3	633	-581	20
6	4	3	554	578	19
7	4	3	860	890	25
8	4	3	146	-185	-146
-4	5	3	226	-93	-96
-3	5	3	430	-430	23
-2	5	3	214	-166	-110
-1	5	3	841	815	27
0	5	3	186	244	-120
1	5	3	395	372	18
2	5	3	259	236	27
3	5	3	1287	-1295	25
4	5	3	333	-314	24
5	5	3	440	444	22
6	5	3	225	-76	-91
7	5	3	186	65	-186
-3	6	3	266	-289	-83
-2	6	3	250	130	-84
-1	6	3	206	245	-116
0	6	3	211	-116	-100
1	6	3	220	246	-96
2	6	3	763	751	24
3	6	3	96	-193	-96
4	6	3	425	-403	21
5	6	3	509	-500	20
6	6	3	403	-403	26
4	-4	5	324	295	31
5	-4	5	425	-392	25
-6	-3	5	101	47	-101
-5	-3	5	485	496	21
-4	-3	5	132	31	-100
-3	-3	5	101	112	-101
-2	-3	5	195	287	-50
-1	-3	5	636	-624	20

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	2	2	87	-60	-87
6	2	2	1745	1790	29
7	2	2	272	220	-85
8	2	2	650	-669	20
-6	3	2	301	-309	32
-5	3	2	90	11	-90
-4	3	2	93	-116	-93
-3	3	2	978	-1000	26
-2	3	2	483	477	16
-1	3	2	1016	1021	21
0	3	2	199	163	24
1	3	2	841	851	19
2	3	2	908	-857	20
3	3	2	1035	-999	22
4	3	2	255	221	24
5	3	2	89	-232	-89
6	3	2	152	53	-152
7	3	2	332	347	27
8	3	2	333	361	32
-5	4	2	752	-770	26
-4	4	2	518	-476	18
-3	4	2	412	389	19
-2	4	2	133	188	-133
-1	4	2	939	-932	24
7	6	3	522	557	23
-2	7	3	578	-574	20
-1	7	3	558	-554	20
0	7	3	425	423	23
1	7	3	406	475	25
2	7	3	224	231	-120
3	7	3	248	-52	-83
4	7	3	148	35	-148
5	7	3	98	-69	-98
6	7	3	524	-512	21
0	8	3	263	-322	-104
1	8	3	590	-585	20
2	8	3	662	680	21
3	8	3	879	902	26
4	8	3	246	-347	-141
5	8	3	454	-416	25
-3	-7	4	168	173	-168
-2	-7	4	447	-422	27
-1	-7	4	235	-236	-140
0	-7	4	278	266	-110
-5	-6	4	108	149	-108
-4	-6	4	215	22	-128
-3	-6	4	226	-252	-159
-2	-6	4	571	-548	20
-1	-6	4	101	247	-101
0	-6	4	103	-44	-103
1	-6	4	389	-343	25
2	-6	4	590	574	20
-5	-5	4	205	241	-205
-4	-5	4	420	379	23
-3	-5	4	195	339	-195
-2	-5	4	447	-449	22
-1	-5	4	461	-470	20
0	-5	4	420	-423	23
1	-5	4	99	-25	-99
2	-5	4	779	794	26
3	-5	4	155	10	-155
4	-5	4	103	-201	-103
-6	-4	4	104	107	-104
-5	-4	4	312	325	30
-4	-4	4	94	-106	-94
-3	-4	4	702	717	24
-2	-4	4	224	233	-66
-1	-4	4	633	-651	20
0	-4	4	295	-303	29
1	-4	4	364	-348	23
2	-4	4	174	7	-174
3	-4	4	170	121	-170
4	-4	4	369	377	27
5	-4	4	495	445	22
-6	-3	4	306	-291	32
-5	-3	4	521	-614	20
-4	-3	4	93	-100	-93
-3	-3	4	1566	1656	26
-2	-3	4	330	369	24
-1	-3	4	1297	-1359	25
-5	1	5	551	-565	18
-4	1	5	88	-30	-88
-3	1	5	598	-624	19
-2	1	5	449	437	16
-1	1	5	1065	1023	21
0	1	5	524	-532	17
1	1	5	622	556	18
2	1	5	567	571	19

H	K	L	10FO	10FC	10S
-2	7	2	102	-158	-102
-1	7	2	94	-39	-94
0	7	2	371	-346	26
1	7	2	338	-299	25
2	7	2	101	199	-101
3	7	2	165	30	-62
4	7	2	574	583	19
5	7	2	479	491	23
6	7	2	551	-580	21
0	8	2	388	-424	29
1	8	2	155	-154	-155
2	8	2	146	133	-146
3	8	2	98	-97	-98
4	8	2	99	61	-99
5	8	2	416	407	26
-4	-7	3	514	496	22
-3	-7	3	217	-193	-177
-2	-7	3	439	-458	25
-1	-7	3	258	-108	-94
0	-7	3	276	-195	-87
1	-7	3	257	143	-92
-5	-6	3	105	-131	-105
-4	-6	3	103	-128	-103
-3	-6	3	641	650	20
0	-3	4	401	398	19
1	-3	4	135	144	-135
2	-3	4	724	-691	22
3	-3	4	368	-388	24
4	-3	4	95	93	-95
5	-3	4	813	799	26
6	-3	4	112	314	-112
-6	-2	4	669	-664	22
-5	-2	4	265	269	32
-4	-2	4	90	34	-90
-3	-2	4	493	-492	17
-2	-2	4	174	181	-145
-1	-2	4	1172	1272	24
0	-2	4	1236	1270	22
1	-2	4	1803	-1838	24
2	-2	4	1307	-1318	24
3	-2	4	1123	1132	26
4	-2	4	93	-99	-93
5	-2	4	416	-435	22
6	-2	4	401	396	25
-6	-1	4	607	-611	21
-5	-1	4	229	-253	37
-4	-1	4	306	-295	24
-3	-1	4	296	-298	21
-2	-1	4	682	720	20
-1	-1	4	173	-118	-35
0	-1	4	560	551	18
1	-1	4	958	935	21
2	-1	4	434	-419	15
3	-1	4	780	-803	27
4	-1	4	1012	-914	27
5	-1	4	420	392	21
6	-1	4	638	665	20
7	-1	4	108	-215	-108
-6	0	4	339	322	29
-5	0	4	473	460	16
-4	0	4	979	-992	19
-3	0	4	1270	-1314	16
-2	0	4	1114	1130	20
-1	0	4	88	85	-66
0	0	4	179	-193	-56
1	0	4	1360	1414	18
2	0	4	74	-123	-52
3	0	4	198	-273	-61
4	0	4	374	-343	13
5	0	4	573	-583	14
6	0	4	159	-45	-113
7	0	4	190	130	-45
-6	1	4	166	148	-166
-5	1	4	436	-402	20
-4	1	4	228	195	-75
-3	1	4	140	164	-140
-2	1	4	502	-491	16
-1	1	4	1752	-1732	22
0	1	4	249	274	19
1	1	4	2696	2703	27
-4	5	5	101	218	-101
-3	5	5	299	375	33
-2	5	5	228	-39	-85
-1	5	5	140	-24	-140
0	5	5	815	-807	21
1	5	5	864	-878	28
2	5	5	967	1014	27
3	5	5	488	490	18

H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	-3	3	313	-313	25
-3	-3	3	87	-199	-87
-2	-3	3	151	-124	-151
-1	-3	3	548	548	17
0	-3	3	1195	1167	23
1	-3	3	84	-94	-84
2	-3	3	477	-456	17
3	-3	3	892	-867	29
4	-3	3	300	-321	30
5	-3	3	743	718	26
6	-3	3	247	6	-96
-7	-2	3	148	98	-148
-6	-2	3	432	443	22
-5	-2	3	89	83	-89
-4	-2	3	1474	-1401	26
-3	-2	3	81	-100	-81
-2	-2	3	454	480	15
-1	-2	3	436	-483	15
0	-2	3	1150	1138	21
1	-2	3	548	591	19
2	-2	3	300	-255	19
3	-2	3	85	-144	-85
4	-2	3	507	-510	18
5	-2	3	242	-239	-98
2	1	4	171	-211	-77
3	1	4	568	-557	16
4	1	4	84	183	-84
5	1	4	561	-547	18
6	1	4	92	-88	-92
7	1	4	182	-152	-182
-6	2	4	166	31	-166
-5	2	4	260	426	-99
-4	2	4	1004	972	27
-3	2	4	880	-836	27
-2	2	4	1193	-1192	22
-1	2	4	416	431	15
0	2	4	70	30	-70
1	2	4	270	-284	18
2	2	4	174	-206	-84
3	2	4	1281	1308	22
4	2	4	1032	1021	24
5	2	4	1134	-1165	27
6	2	4	545	-569	19
7	2	4	92	63	-92
8	2	4	108	-78	-108
-5	3	4	254	189	-84
-4	3	4	962	963	30
-3	3	4	87	3	-87
-2	3	4	384	-385	18
-1	3	4	77	-57	-77
0	3	4	1363	-1348	22
1	3	4	195	144	28
2	3	4	897	919	23
3	3	4	380	-361	17
4	3	4	401	401	19
5	3	4	607	613	20
6	3	4	169	64	-169
7	3	4	615	-654	21
8	3	4	602	-604	20
-5	4	4	190	269	-190
-4	4	4	95	258	-95
-3	4	4	97	-2	-97
-2	4	4	238	220	-78
-1	4	4	586	570	20
0	4	4	769	-761	19
1	4	4	758	-710	24
2	4	4	344	-310	18
3	4	4	325	-299	20
4	4	4	1408	1358	25
5	4	4	542	548	18
6	4	4	675	-692	21
7	4	4	94	7	-94
8	4	4	101	101	-101
-4	5	4	103	-164	-103
-3	5	4	815	806	25
-2	5	4	338	344	25
-1	5	4	161	-101	-161
0	5	4	185	-138	-71
1	5	4	86	-50	-86
2	5	4	328	-301	22
1	-4	6	279	358	-87
2	-4	6	99	-15	-99
3	-4	6	108	-259	-108
4	-4	6	395	-414	29
-5	-3	6	563	543	20
-4	-3	6	855	-876	24
-3	-3	6	523	-578	21
-2	-3	6	511	526	20

I-726-M36

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR III

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	6	4	788	810	22
1	6	4	1303	-1334	28
2	6	4	621	-574	21
3	6	4	488	526	20
4	6	4	156	-8	-156
5	6	4	548	-522	19
6	6	4	104	-35	-104
7	6	4	855	851	27
-2	7	4	174	-1	-81
-1	7	4	244	130	-89
0	7	4	97	250	-97
1	7	4	226	202	-100
2	7	4	422	441	22
3	7	4	500	-497	21
4	7	4	925	-902	32
5	7	4	150	215	-150
6	7	4	285	284	38
0	8	4	101	61	-101
1	8	4	219	229	-139
2	8	4	404	398	25
3	8	4	102	-26	-102
4	8	4	441	-419	25
5	8	4	88	-131	-88
-4	-6	5	471	-456	26
-3	-6	5	108	-133	-108
-2	-6	5	151	-73	-151
-1	-6	5	217	164	-87
0	-6	5	251	311	-44
1	-6	5	235	267	-145
2	-6	5	100	111	-100
-5	-5	5	227	-77	-147
-4	-5	5	746	-756	23
-3	-5	5	105	237	-105
-2	-5	5	96	-1	-96
-1	-5	5	582	-558	19
0	-5	5	100	96	-100
1	-5	5	491	469	21
2	-5	5	554	585	20
3	-5	5	98	-75	-98
-5	-4	5	473	486	23
-4	-4	5	482	447	21
-3	-4	5	149	-139	-149
-2	-4	5	1206	-1254	30
-1	-4	5	315	-291	29
0	-4	5	1175	1144	29
1	-4	5	390	-414	25
2	-4	5	275	-344	-96
3	-4	5	880	886	26
-4	1	6	295	-335	30
-3	1	6	91	-120	-91
-2	1	6	1278	1315	25
-1	1	6	933	899	24
0	1	6	1419	-1418	23
1	1	6	381	-366	19
2	1	6	182	-129	-98
3	1	6	370	-390	19
4	1	6	492	487	18
5	1	6	206	-97	-73
6	1	6	140	281	-140
7	1	6	572	587	21
-5	2	6	884	-898	25
-4	2	6	157	305	-157
-3	2	6	615	629	20
-2	2	6	584	-577	20
-1	2	6	249	239	27
0	2	6	1024	1059	23
1	2	6	562	566	17
2	2	6	1328	-1326	23
3	2	6	1349	-1361	24
4	2	6	857	819	27
5	2	6	240	263	-90
6	2	6	258	-153	-80
7	2	6	379	441	29
-5	3	6	307	-245	33
-4	3	6	230	-336	-124
-3	3	6	530	-533	17
-2	3	6	237	-242	-86
-1	3	6	1477	1461	25
0	3	6	343	304	19
1	3	6	769	-810	27
2	3	6	610	580	17
3	3	6	86	46	-86
4	3	6	699	-692	21
5	3	6	705	-702	24
6	3	6	99	111	-99
7	3	6	795	812	27
8	3	6	219	152	-139
-4	4	6	270	-193	-84

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	-3	5	669	-652	22
1	-3	5	439	-444	19
2	-3	5	735	708	23
3	-3	5	885	846	23
4	-3	5	292	-408	-89
5	-3	5	102	24	-102
-6	-2	5	205	-277	-100
-5	-2	5	811	802	24
-4	-2	5	92	53	-92
-3	-2	5	101	-168	-101
-2	-2	5	903	967	29
-1	-2	5	378	-379	20
0	-2	5	684	-723	21
1	-2	5	331	-345	23
2	-2	5	403	-371	19
3	-2	5	423	422	20
4	-2	5	414	396	22
5	-2	5	426	400	21
6	-2	5	95	19	-95
-6	-1	5	96	-27	-96
-5	-1	5	512	-539	20
-4	-1	5	625	-590	20
-3	-1	5	947	917	27
-2	-1	5	1828	1897	26
-1	-1	5	928	-991	24
0	-1	5	1070	-1083	23
1	-1	5	445	507	16
2	-1	5	542	-561	15
3	-1	5	135	-112	-135
4	-1	5	91	18	-91
5	-1	5	98	83	-98
6	-1	5	678	715	24
7	-1	5	183	178	-183
-6	0	5	562	-570	15
-5	0	5	559	-549	14
-4	0	5	365	384	17
-3	0	5	85	-63	-60
-2	0	5	198	122	-63
-1	0	5	558	534	19
0	0	5	882	894	16
1	0	5	78	80	-55
2	0	5	1781	-1859	19
3	0	5	198	-128	-58
4	0	5	557	537	13
5	0	5	326	-336	27
6	0	5	416	411	20
7	0	5	363	367	21
-6	1	5	251	-267	-95
2	5	6	976	1028	27
3	5	6	391	367	21
4	5	6	266	-297	34
5	5	6	101	-325	-101
6	5	6	621	-610	20
7	5	6	250	124	-93
-3	6	6	578	592	22
-2	6	6	397	-405	25
-1	6	6	973	-1022	31
0	6	6	95	159	-95
1	6	6	319	352	30
2	6	6	95	116	-95
3	6	6	95	144	-95
4	6	6	270	172	-80
5	6	6	105	347	-105
6	6	6	310	-274	32
7	6	6	483	-495	24
-1	7	6	193	-75	-83
0	7	6	96	-57	-96
1	7	6	740	-726	21
2	7	6	97	-87	-97
3	7	6	806	837	25
4	7	6	103	112	-103
5	7	6	99	-47	-99
6	7	6	200	128	-200
1	8	6	188	1	-188
2	8	6	98	-128	-98
3	8	6	214	-329	-214
4	8	6	279	-88	-85
5	8	6	746	764	25
-3	-5	7	107	140	-107
-2	-5	7	549	547	23
-1	-5	7	105	-1	-105
0	-5	7	107	-75	-107
1	-5	7	285	-321	41
2	-5	7	348	-328	33
-4	-4	7	116	-235	-116
-3	-4	7	448	402	26
-2	-4	7	245	377	-127
-1	-4	7	253	-295	-112

H	K	L	10FO	10FC	10S
3	1	5	634	-616	20
4	1	5	1078	-1094	26
5	1	5	503	-509	19
6	1	5	986	1000	32
7	1	5	412	446	26
-6	2	5	100	24	-100
-5	2	5	88	-30	-88
-4	2	5	93	87	-93
-3	2	5	726	-742	22
-2	2	5	486	-452	17
-1	2	5	251	273	24
0	2	5	75	38	-75
1	2	5	1781	1755	23
2	2	5	315	309	19
3	2	5	1614	-1635	24
4	2	5	134	158	-134
5	2	5	240	207	-82
6	2	5	516	-504	19
7	2	5	251	-210	37
8	2	5	355	372	32
-5	3	5	95	-72	-95
-4	3	5	359	-364	26
-3	3	5	89	1	-89
-2	3	5	84	-103	-84
-1	3	5	513	-511	16
0	3	5	887	-832	23
1	3	5	1215	1186	22
2	3	5	1437	1386	23
3	3	5	566	-545	17
4	3	5	204	-164	-61
5	3	5	377	-386	22
6	3	5	364	-360	25
7	3	5	206	161	-46
8	3	5	110	-156	-110
-5	4	5	96	174	-96
-4	4	5	904	899	24
-3	4	5	89	79	-89
-2	4	5	1638	-1655	27
-1	4	5	194	-84	-63
0	4	5	944	943	26
1	4	5	441	-438	16
2	4	5	454	-460	16
3	4	5	634	622	18
4	4	5	1369	1322	26
5	4	5	354	-294	24
6	4	5	1096	-1172	31
7	4	5	99	-53	-99
8	4	5	112	142	-112
-5	-2	7	96	35	-96
-4	-2	7	281	-266	40
-3	-2	7	699	-732	23
-2	-2	7	411	430	25
-1	-2	7	188	57	-188
0	-2	7	381	-418	25
1	-2	7	902	880	30
2	-2	7	688	671	22
3	-2	7	347	-318	27
4	-2	7	913	-906	24
5	-2	7	270	-198	36
-5	-1	7	580	590	20
-4	-1	7	166	92	-166
-3	-1	7	1029	-1089	33
-2	-1	7	102	-106	-102
-1	-1	7	96	138	-96
0	-1	7	324	-323	27
1	-1	7	692	756	24
2	-1	7	215	148	-93
3	-1	7	167	109	-167
4	-1	7	296	377	-89
5	-1	7	570	-577	20
6	-1	7	485	-492	22
-5	0	7	274	-248	34
-4	0	7	501	486	14
-3	0	7	496	511	14
-2	0	7	523	-517	27
-1	0	7	1255	-1228	30
0	0	7	418	-405	14
1	0	7	1360	1397	23
2	0	7	87	22	-62
3	0	7	415	-418	16
4	0	7	829	859	17
5	0	7	94	-31	-67
6	0	7	494	-472	15
7	0	7	256	-268	-80
-5	1	7	99	229	-99
-4	1	7	982	984	31
-3	1	7	131	-122	-131
-2	1	7	973	-943	28

H	K	L	10FO	10FC	10S
4	5	5	222	-249	-115
5	5	5	365	357	24
6	5	5	250	136	-99
7	5	5	267	-226	-96
-3	6	5	96	194	-96
-2	6	5	181	229	-181
-1	6	5	196	130	-81
0	6	5	305	-315	28
1	6	5	605	-596	19
2	6	5	94	34	-94
3	6	5	180	-218	-180
4	6	5	95	136	-95
5	6	5	927	949	24
6	6	5	96	9	-96
7	6	5	421	-391	26
-2	7	5	488	521	24
-1	7	5	174	-118	-174
0	7	5	99	-76	-99
1	7	5	96	-128	-96
2	7	5	101	-206	-101
3	7	5	329	-282	29
4	7	5	100	-197	-100
5	7	5	392	365	25
6	7	5	341	343	31
0	8	5	777	806	24
1	8	5	220	71	-69
2	8	5	766	-781	22
3	8	5	257	-280	-99
4	8	5	103	74	-103
5	8	5	103	157	-103
-2	-6	6	331	-308	33
-1	-6	6	223	-60	-193
0	-6	6	806	713	28
1	-6	6	109	-124	-109
-4	-5	6	350	-349	31
-3	-5	6	254	-238	41
-2	-5	6	98	44	-98
-1	-5	6	615	595	20
0	-5	6	536	528	21
1	-5	6	494	-493	23
2	-5	6	102	-105	-102
3	-5	6	222	106	-136
-5	-4	6	417	355	28
-4	-4	6	277	-303	37
-3	-4	6	539	-553	20
-2	-4	6	102	-100	-102
-1	-4	6	100	51	-100
0	-4	6	632	632	20
2	2	7	680	682	21
3	2	7	238	-181	-76
4	2	7	91	-11	-91
5	2	7	584	595	20
6	2	7	356	351	28
7	2	7	106	-48	-106
-4	3	7	198	-307	-155
-3	3	7	239	-92	-78
-2	3	7	486	484	20
-1	3	7	1056	1013	26
0	3	7	198	-212	-39
1	3	7	961	-979	27
2	3	7	232	-213	33
3	3	7	461	-472	18
4	3	7	397	426	22
5	3	7	547	554	19
6	3	7	322	-340	29
7	3	7	245	314	-124
-4	4	7	563	-587	21
-3	4	7	498	473	20
-2	4	7	359	328	24
-1	4	7	92	33	-92
0	4	7	385	385	22
1	4	7	90	39	-90
2	4	7	89	-75	-89
3	4	7	688	-678	24
4	4	7	467	-471	20
5	4	7	185	233	-185
6	4	7	180	192	-104
7	4	7	546	512	20
-3	5	7	173	-130	-173
-2	5	7	486	-512	21
-1	5	7	334	342	26
0	5	7	1211	1193	28
1	5	7	264	-308	-86
2	5	7	438	-413	20
3	5	7	288	265	30
4	5	7	312	-296	29
5	5	7	464	-439	21
6	5	7	270	-245	36

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	-3	6	449	-456	21
0	-3	6	93	-52	-93
1	-3	6	473	471	20
2	-3	6	182	230	-112
3	-3	6	441	483	23
4	-3	6	201	-208	-147
5	-3	6	525	-559	23
-6	-2	6	105	60	-105
-5	-2	6	264	307	36
-4	-2	6	341	382	32
-3	-2	6	102	-66	-102
-2	-2	6	479	-505	21
-1	-2	6	972	-1048	28
0	-2	6	460	440	19
1	-2	6	614	612	20
2	-2	6	518	-519	18
3	-2	6	703	692	20
4	-2	6	500	495	20
5	-2	6	468	-453	21
6	-2	6	301	-301	34
-6	-1	6	94	-115	-94
-5	-1	6	389	390	25
-4	-1	6	702	640	23
-3	-1	6	482	-467	20
-2	-1	6	246	119	-85
-1	-1	6	218	187	-89
0	-1	6	842	-848	26
1	-1	6	744	-783	20
2	-1	6	85	40	-85
3	-1	6	1454	1468	27
4	-1	6	359	347	25
5	-1	6	762	-762	25
6	-1	6	97	130	-97
-6	0	6	340	-344	21
-5	0	6	124	-21	-83
-4	0	6	562	533	13
-3	0	6	131	158	-78
-2	0	6	823	815	20
-1	0	6	173	-219	-79
0	0	6	1615	-1642	17
1	0	6	482	491	13
2	0	6	253	196	-48
3	0	6	732	-714	25
4	0	6	366	340	16
5	0	6	821	809	24
6	0	6	389	424	40
7	0	6	560	-557	15
-5	1	6	100	-108	-100
4	7	7	199	103	-199
5	7	7	268	-210	-103
6	7	7	470	-461	25
1	8	7	294	357	-93
2	8	7	102	-21	-102
3	8	7	106	122	-106
4	8	7	255	302	-43
-1	-5	8	575	-548	23
0	-5	8	113	217	-113
-3	-4	8	168	-48	-168
-2	-4	8	598	645	22
-1	-4	8	253	82	-101
0	-4	8	670	-701	23
1	-4	8	580	-552	21
2	-4	8	288	227	-86
3	-4	8	538	538	24
-4	-3	8	239	133	-142
-3	-3	8	109	-79	-109
-2	-3	8	646	654	21
-1	-3	8	105	123	-105
0	-3	8	287	-325	-95
1	-3	8	151	16	-151
2	-3	8	513	-486	21
3	-3	8	174	-220	-174
4	-3	8	261	211	-98
-4	-2	8	443	-458	29
-3	-2	8	177	275	-177
-2	-2	8	914	955	25
-1	-2	8	104	-184	-104
0	-2	8	378	-401	27
1	-2	8	790	773	24
2	-2	8	214	-333	-214
3	-2	8	726	-717	22
4	-2	8	106	-49	-106
5	-2	8	107	31	-107
-5	-1	8	546	-548	22
-4	-1	8	359	345	30
-3	-1	8	105	-105	-105
-2	-1	8	635	-611	20
-1	-1	8	266	224	-91

I-726-M37

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR III

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	10S
-3	4	6	353	-364	25
-2	4	6	362	-391	24
-1	4	6	296	303	28
0	4	6	88	10	-88
1	4	6	325	313	22
2	4	6	1317	1311	24
3	4	6	663	-603	18
4	4	6	960	-996	29
5	4	6	179	182	-179
6	4	6	157	-95	-157
7	4	6	161	-95	-161
-3	5	6	96	-90	-96
-2	5	6	147	42	-147
-1	5	6	313	-308	27
0	5	6	342	-354	26
1	5	6	96	82	-96
4	0	8	589	-594	13
5	0	8	516	-556	15
6	0	8	212	153	-51
-4	1	8	273	283	37
-3	1	8	517	-530	20
-2	1	8	786	-735	23
-1	1	8	162	181	-162
0	1	8	192	-212	-167
1	1	8	473	484	19
2	1	8	835	812	29
3	1	8	502	-524	19
4	1	8	245	216	39
5	1	8	254	218	37
6	1	8	681	-697	24
7	1	8	309	-353	37
-4	2	8	102	2	-102
-3	2	8	286	312	32
-2	2	8	246	-275	-100
-1	2	8	464	-460	20
0	2	8	524	-501	18
1	2	8	152	-8	-81
2	2	8	716	699	22
3	2	8	96	136	-96
4	2	8	454	466	21
5	2	8	99	25	-99
6	2	8	679	-689	23
7	2	8	101	-11	-101
-4	3	8	456	491	24
-3	3	8	799	825	26
-2	3	8	687	-715	22
-1	3	8	578	-590	19
0	3	8	471	480	19
1	3	8	392	-406	22
2	3	8	493	-470	18
3	3	8	94	101	-94
4	3	8	912	845	29
5	3	8	622	637	20
6	3	8	525	-532	20
7	3	8	353	-373	31
-3	4	8	103	191	-103
-2	4	8	333	370	28
-1	4	8	525	509	19
0	4	8	432	-429	21
1	4	8	1428	-1422	27
2	4	8	445	435	21
3	4	8	761	712	23
4	4	8	628	-615	20
5	4	8	97	197	-97
6	4	8	643	669	21
7	4	8	104	139	-104
-3	5	8	99	76	-99
-2	5	8	225	146	-104
-1	5	8	237	226	-41
0	5	8	401	407	23
1	5	8	298	-285	30
2	5	8	546	-556	19
2	-1	11	581	547	22
3	-1	11	170	295	-170
-2	0	11	322	-348	37
-1	0	11	109	-63	-77
0	0	11	258	-284	-56
1	0	11	122	-172	-89
2	0	11	517	531	17
3	0	11	106	-51	-75
4	0	11	208	139	-117
-2	1	11	280	249	-98
-1	1	11	354	-314	30
0	1	11	402	-390	26
1	1	11	300	-365	-91
2	1	11	108	215	-108
3	1	11	106	137	-106
4	1	11	112	201	-112

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	-4	7	510	516	22
1	-4	7	245	168	-41
2	-4	7	765	-736	23
3	-4	7	242	-217	-125
4	-4	7	105	-2	-105
-5	-3	7	107	-123	-107
-4	-3	7	109	14	-109
-3	-3	7	402	-443	28
-2	-3	7	104	-150	-104
-1	-3	7	412	418	24
0	-3	7	1016	1018	31
1	-3	7	230	-59	-97
2	-3	7	913	-913	31
3	-3	7	149	207	-149
4	-3	7	103	6	-103
5	-3	7	423	-398	28
3	5	8	440	-444	23
4	5	8	98	-78	-98
5	5	8	800	772	24
6	5	8	103	163	-103
7	5	8	242	-213	-125
-2	6	8	485	450	22
-1	6	8	99	-107	-99
0	6	8	263	244	-102
1	6	8	390	379	25
2	6	8	236	-302	-114
3	6	8	470	-457	22
4	6	8	238	-341	-125
5	6	8	105	138	-105
6	6	8	104	189	-104
0	7	8	716	776	24
1	7	8	374	392	28
2	7	8	527	-533	22
3	7	8	96	-92	-96
4	7	8	99	-25	-99
5	7	8	107	-245	-107
2	8	8	109	212	-109
3	8	8	527	548	24
4	8	8	265	-251	-115
-2	-4	9	380	334	32
-1	-4	9	393	-348	30
0	-4	9	501	-470	24
1	-4	9	335	242	33
-3	-3	9	278	392	-139
-2	-3	9	198	-17	-198
-1	-3	9	636	-665	21
0	-3	9	310	-289	34
1	-3	9	424	355	25
2	-3	9	240	-241	-124
3	-3	9	109	106	-109
-4	-2	9	419	414	32
-3	-2	9	108	-13	-108
-2	-2	9	200	212	-200
-1	-2	9	484	466	24
0	-2	9	562	-575	20
1	-2	9	621	-621	21
2	-2	9	103	-123	-103
3	-2	9	442	410	23
4	-2	9	218	288	-146
-4	-1	9	236	227	-90
-3	-1	9	207	-65	-207
-2	-1	9	427	375	25
-1	-1	9	689	671	20
0	-1	9	609	-635	21
1	-1	9	101	-157	-101
2	-1	9	100	107	-100
3	-1	9	629	-643	21
4	-1	9	99	-29	-99
5	-1	9	386	419	30
-4	0	9	329	-342	31
-3	0	9	101	-73	-72
-2	0	9	330	303	30
-2	2	11	105	-49	-105
-1	2	11	151	-214	-151
0	2	11	462	444	24
1	2	11	447	-434	23
2	2	11	664	-613	23
3	2	11	97	60	-97
4	2	11	271	242	39
5	2	11	450	436	26
-2	3	11	102	89	-102
-1	3	11	475	474	24
0	3	11	424	458	27
1	3	11	811	-760	26
2	3	11	451	-439	24
3	3	11	414	382	24
4	3	11	108	-310	-108
5	3	11	106	-61	-106

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	1	7	566	572	18
0	1	7	86	-61	-86
1	1	7	952	-955	26
2	1	7	426	-409	18
3	1	7	690	685	22
4	1	7	1228	1262	28
5	1	7	242	-223	-97
6	1	7	548	-544	20
7	1	7	239	-20	-108
-5	2	7	101	-56	-101
-4	2	7	417	428	22
-3	2	7	161	197	-161
-2	2	7	140	111	-140
-1	2	7	774	750	20
0	2	7	1021	-1005	26
1	2	7	1036	-1044	25
-1	0	9	645	676	34
0	0	9	149	-60	-81
1	0	9	160	50	-80
2	0	9	255	-158	35
3	0	9	784	-776	19
4	0	9	253	208	-79
5	0	9	107	74	-75
6	0	9	221	-174	-101
-4	1	9	354	-368	31
-3	1	9	440	435	23
-2	1	9	193	-304	-193
-1	1	9	99	-174	-99
0	1	9	525	530	20
1	1	9	691	713	22
2	1	9	210	157	-118
3	1	9	991	-975	29
4	1	9	307	-296	31
5	1	9	103	155	-103
6	1	9	105	-75	-105
-4	2	9	204	-132	-65
-3	2	9	486	-457	21
-2	2	9	664	-648	22
-1	2	9	739	711	25
0	2	9	512	475	20
1	2	9	802	-786	24
2	2	9	719	722	24
3	2	9	809	800	24
4	2	9	643	-629	22
5	2	9	826	-826	25
6	2	9	183	-184	-131
7	2	9	500	508	25
-3	3	9	102	84	-102
-2	3	9	409	-416	25
-1	3	9	428	-464	22
0	3	9	95	-93	-95
1	3	9	263	184	-83
2	3	9	1050	1037	29
3	3	9	199	43	-126
4	3	9	641	-631	22
5	3	9	315	302	29
6	3	9	102	-159	-102
7	3	9	461	-462	25
-3	4	9	192	212	-192
-2	4	9	104	195	-104
-1	4	9	649	-657	23
0	4	9	455	-443	21
1	4	9	101	31	-101
2	4	9	478	468	21
3	4	9	278	297	-89
4	4	9	97	41	-97
5	4	9	168	345	-168
6	4	9	376	-333	26
7	4	9	427	-450	26
-2	5	9	99	-2	-99
-1	5	9	861	-878	26
0	5	9	103	62	-103
0	4	11	334	327	32
1	4	11	212	359	-212
2	4	11	240	-221	-121
3	4	11	533	-532	22
4	4	11	389	-430	28
5	4	11	402	391	29
0	5	11	104	58	-104
1	5	11	352	325	29
2	5	11	216	42	-83
3	5	11	100	71	-100
4	5	11	112	-298	-112
5	5	11	456	-465	25
1	6	11	327	394	36
2	6	11	326	-288	34
3	6	11	215	219	-177
4	6	11	302	293	-93

H	K	L	10FO	10FC	10S
7	5	7	416	412	26
-2	6	7	98	44	-98
-1	6	7	93	-145	-93
0	6	7	96	-140	-96
1	6	7	279	247	32
2	6	7	1002	1039	31
3	6	7	99	132	-99
4	6	7	1258	-1272	30
5	6	7	99	-134	-99
6	6	7	443	438	24
7	6	7	261	-195	-101
-1	7	7	105	-150	-105
0	7	7	229	44	-95
1	7	7	102	72	-102
2	7	7	249	152	-89
3	7	7	372	454	28
1	5	9	244	187	-91
2	5	9	400	-403	24
3	5	9	97	22	-97
4	5	9	211	271	-170
5	5	9	563	564	21
6	5	9	103	177	-103
-1	6	9	102	193	-102
0	6	9	281	249	36
1	6	9	623	-634	21
2	6	9	695	-719	22
3	6	9	484	486	23
4	6	9	202	275	-202
5	6	9	162	-13	-162
6	6	9	227	269	-145
1	7	9	102	-28	-102
2	7	9	103	-236	-103
3	7	9	277	-321	-98
4	7	9	107	-272	-107
5	7	9	280	307	-109
-1	-3	10	109	144	-109
0	-3	10	271	-283	-46
1	-3	10	184	211	-184
2	-3	10	409	433	29
-2	-2	10	230	-246	-160
-1	-2	10	108	-140	-108
0	-2	10	391	-390	29
1	-2	10	327	340	35
2	-2	10	109	122	-109
3	-2	10	114	-148	-114
4	-2	10	582	587	22
-3	-1	10	449	440	29
-2	-1	10	258	96	-115
-1	-1	10	261	-299	-108
0	-1	10	620	-665	21
1	-1	10	256	63	-41
2	-1	10	284	239	35
3	-1	10	108	-161	-108
4	-1	10	415	431	27
5	-1	10	286	217	-99
-3	0	10	110	161	-78
-2	0	10	447	-467	29
-1	0	10	699	692	17
0	0	10	334	308	33
1	0	10	1132	-1131	48
2	0	10	548	-540	16
3	0	10	404	394	35
4	0	10	665	685	16
5	0	10	105	-28	-74
-3	1	10	256	147	-102
-2	1	10	268	265	-99
-1	1	10	771	729	26
0	1	10	190	-190	-190
1	1	10	913	-872	24
2	1	10	108	323	-108
3	1	10	100	-137	-100
4	1	10	508	-458	21
-1	0	12	298	-329	-86
0	0	12	351	317	33
1	0	12	319	276	34
2	0	12	311	324	27
3	0	12	109	-59	-77
-1	1	12	257	-243	-47
0	1	12	476	443	25
1	1	12	297	-249	-90
2	1	12	105	117	-105
3	1	12	557	566	24
4	1	12	254	-11	-119
-1	2	12	483	-493	26
0	2	12	371	-365	30
1	2	12	204	-8	-204
2	2	12	558	540	21
3	2	12	205	154	-162

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	-1	8	835	859	23
1	-1	8	760	770	24
2	-1	8	727	-754	25
3	-1	8	697	-694	21
4	-1	8	191	228	-191
5	-1	8	253	-190	-108
6	-1	8	106	24	-106
-5	0	8	252	-176	-71
-4	0	8	195	134	-92
-3	0	8	586	-594	15
-2	0	8	484	-483	17
-1	0	8	726	695	17
0	0	8	114	-177	-84
1	0	8	242	227	-73
2	0	8	912	888	21
3	0	8	177	-138	-81
5	1	10	272	300	41
6	1	10	381	357	30
-3	2	10	105	-154	-105
-2	2	10	372	338	27
-1	2	10	505	494	21
0	2	10	215	202	-80
1	2	10	268	-231	35
2	2	10	100	112	-100
3	2	10	442	-489	24
4	2	10	477	-435	22
5	2	10	415	362	24
6	2	10	105	-36	-105
-3	3	10	223	226	-157
-2	3	10	104	194	-104
-1	3	10	430	-406	24
0	3	10	389	340	25
1	3	10	474	499	22
2	3	10	330	278	28
3	3	10	270	-258	35
4	3	10	768	-743	25
5	3	10	103	-124	-103
6	3	10	107	126	-107
-2	4	10	494	-494	24
-1	4	10	100	-260	-100
0	4	10	789	765	25
1	4	10	104	118	-104
2	4	10	158	-158	-158
3	4	10	508	520	22
4	4	10	191	-173	-101
5	4	10	443	-463	25
6	4	10	231	-263	-141
-1	5	10	162	-197	-162
0	5	10	100	-197	-100
1	5	10	104	-70	-104
2	5	10	559	537	20
3	5	10	700	694	24
4	5	10	444	-462	25
5	5	10	318	-327	33
6	5	10	221	180	-170
0	6	10	238	-259	-124
1	6	10	248	137	-98
2	6	10	202	-93	-158
3	6	10	103	166	-103
4	6	10	412	449	27
5	6	10	207	239	-207
2	7	10	226	-5	-114
3	7	10	106	49	-106
4	7	10	111	175	-111
-1	-2	11	195	-3	-195
0	-2	11	543	555	25
1	-2	11	393	398	31
2	-2	11	298	-151	-93
-2	-1	11	570	-581	25
-1	-1	11	249	285	-147
0	-1	11	107	-40	-107
1	-1	11	247	-258	-142
0	3	12	205	-215	-71
1	3	12	206	-212	-206
2	3	12	282	-227	-96
3	3	12	153	223	-153
4	3	12	287	233	-93
0	4	12	185	203	-185
1	4	12	206	175	-181
2	4	12	761	-753	24
3	4	12	259	-195	42
4	4	12	298	350	-102
1	5	12	110	-216	-110
2	5	12	667	-681	23
3	5	12	109	70	-109
4	5	12	227	161	-122
2	2	13	233	154	-168
2	3	13	236	-209	-164

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR III

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	1	11	252	343	-124

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	4	11	108	55	-108

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	-1	12	247	152	-120

H	K	L	10FO	10FC	10S
4	2	12	305	-383	-116

H	K	L	10FO	10FC	10S

 I-726-M38

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR IV

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	0	0	165	-142	11
2	0	0	2700	-2827	39
3	0	0	88	111	5
4	0	0	733	703	11
5	0	0	44	21	-24
6	0	0	501	-462	10
-6	1	0	552	568	12
-5	1	0	522	487	11
-4	1	0	899	-871	18
-3	1	0	553	-554	11
-2	1	0	256	229	6
-1	1	0	88	-20	-5
0	1	0	534	485	11
1	1	0	302	-358	6
2	1	0	646	613	13
3	1	0	837	1000	17
4	1	0	1030	-1280	21
5	1	0	555	-619	12
6	1	0	552	586	12
-6	2	0	90	70	-16
-5	2	0	1139	1106	23
-4	2	0	102	-101	9
-3	2	0	890	-886	18
-2	2	0	8	20	-31
-1	2	0	349	-315	7
0	2	0	286	218	6
1	2	0	245	241	6
2	2	0	168	-97	-5
3	2	0	690	616	14
4	2	0	81	-68	12
5	2	0	231	-212	8
6	2	0	113	-135	12
7	2	0	430	-454	11
-5	3	0	296	286	8
-4	3	0	518	-531	11
-3	3	0	181	186	6
-2	3	0	1090	1090	22
-1	3	0	1065	-1093	21
0	3	0	1065	-1055	21
1	3	0	623	604	13
2	3	0	157	129	5
3	3	0	666	615	14
4	3	0	237	241	7
5	3	0	481	-472	11
6	3	0	66	-15	-25
7	3	0	123	-80	17
-4	4	0	577	579	12
-3	4	0	337	343	8
-2	4	0	230	-245	6
-1	4	0	619	-645	13
0	4	0	466	482	10
1	4	0	355	368	8
2	4	0	1520	-1522	30
3	4	0	150	143	6
4	4	0	1485	1451	30
5	4	0	90	3	-16
-1	-2	2	534	-458	11
0	-2	2	42	-38	-16
1	-2	2	364	-387	8
2	-2	2	1022	1037	20
3	-2	2	700	717	14
4	-2	2	898	-919	18
5	-2	2	136	-157	7
6	-2	2	207	212	7
-6	-1	2	196	185	12
-5	-1	2	904	963	19
-4	-1	2	285	-325	8
-3	-1	2	116	-138	8
-2	-1	2	272	335	7
-1	-1	2	591	-566	12
0	-1	2	121	26	-5
1	-1	2	671	-613	13
2	-1	2	274	-225	6
3	-1	2	1106	1110	22
4	-1	2	366	362	8
5	-1	2	208	-213	6
6	-1	2	494	-471	11
-6	0	2	67	35	-19
-5	0	2	389	-380	7
-4	0	2	523	-505	12
-3	0	2	1460	1543	21
-2	0	2	1160	1231	22
-1	0	2	1896	-2302	60
0	0	2	523	-585	8
1	0	2	717	738	10
2	0	2	509	-514	7
3	0	2	449	416	7
4	0	2	288	288	7

H	K	L	10FO	10FC	10S
6	4	0	435	-436	10
-3	5	0	200	-209	7
-2	5	0	756	769	15
-1	5	0	611	631	13
0	5	0	832	-826	17
1	5	0	673	-690	14
2	5	0	52	40	-17
3	5	0	507	516	11
4	5	0	85	64	12
5	5	0	403	-400	9
6	5	0	507	472	11
-2	6	0	214	211	7
-1	6	0	308	311	8
0	6	0	162	-156	7
1	6	0	258	273	7
2	6	0	241	-242	7
3	6	0	829	-821	17
4	6	0	238	238	7
5	6	0	549	558	12
0	7	0	348	-357	8
1	7	0	202	193	7
2	7	0	283	289	8
3	7	0	458	-449	10
4	7	0	190	-201	7
-3	-7	1	150	-164	7
-2	-7	1	677	677	14
-1	-7	1	396	406	9
-5	-6	1	586	-560	13
-4	-6	1	384	379	9
-3	-6	1	39	-2	-26
-2	-6	1	621	-625	13
-1	-6	1	261	273	7
0	-6	1	601	619	13
1	-6	1	201	187	7
2	-6	1	397	-397	9
-6	-5	1	429	432	10
-5	-5	1	86	-85	13
-4	-5	1	148	-141	7
-3	-5	1	680	-662	14
-2	-5	1	259	-261	7
-1	-5	1	1001	998	20
0	-5	1	163	-169	6
1	-5	1	516	-530	11
2	-5	1	617	636	13
3	-5	1	283	296	7
-6	-4	1	379	361	9
-5	-4	1	84	-79	14
-4	-4	1	55	3	-21
-3	-4	1	144	126	6
-2	-4	1	312	-301	7
-1	-4	1	215	-203	6
0	-4	1	661	-651	13
1	-4	1	371	376	8
2	-4	1	1269	1297	25
3	-4	1	396	-399	9
4	-4	1	663	-651	14
3	2	2	133	155	5
4	2	2	1218	-1124	24
5	2	2	414	-386	10
6	2	2	1319	1370	27
7	2	2	294	358	10
-5	3	2	208	196	8
-4	3	2	60	-45	-18
-3	3	2	893	-857	18
-2	3	2	377	386	8
-1	3	2	649	633	13
0	3	2	48	-85	-13
1	3	2	655	654	13
2	3	2	567	-517	11
3	3	2	662	-649	13
4	3	2	318	301	7
5	3	2	287	-261	7
6	3	2	42	-25	-29
7	3	2	395	411	10
-4	4	2	271	-274	7
-3	4	2	465	457	10
-2	4	2	334	329	8
-1	4	2	1097	-1113	22
0	4	2	550	-550	11
1	4	2	2145	2224	43
2	4	2	545	524	11
3	4	2	1644	-1646	33
4	4	2	281	-258	7
5	4	2	191	197	7
6	4	2	81	93	10
7	4	2	173	163	10
-3	5	2	355	-370	8
-2	5	2	927	-942	19

H	K	L	10FO	10FC	10S
-6	-3	1	663	664	14
-5	-3	1	164	162	8
-4	-3	1	369	-352	9
-3	-3	1	481	467	10
-2	-3	1	49	11	-16
-1	-3	1	247	-270	6
0	-3	1	734	-719	15
1	-3	1	578	-542	12
2	-3	1	1054	1082	21
3	-3	1	595	588	12
4	-3	1	287	-300	7
5	-3	1	223	-231	7
-6	-2	1	476	-520	11
-5	-2	1	913	-980	19
-4	-2	1	1066	1059	21
-3	-2	1	2491	2487	49
-2	-2	1	1780	-1706	35
-1	-2	1	2462	-2353	49
0	-2	1	1549	1551	31
1	-2	1	594	597	12
2	-2	1	776	-812	16
3	-2	1	281	-285	6
4	-2	1	565	567	12
5	-2	1	697	711	14
6	-2	1	376	-364	9
-6	-1	1	136	-103	12
-5	-1	1	267	274	9
-4	-1	1	178	-201	8
-3	-1	1	245	258	7
-2	-1	1	275	244	7
-1	-1	1	762	706	15
0	-1	1	268	271	6
1	-1	1	2172	-2332	43
2	-1	1	142	-134	4
3	-1	1	1525	1574	30
4	-1	1	320	-318	7
5	-1	1	289	-288	7
6	-1	1	394	372	9
-6	0	1	623	-577	10
-5	0	1	72	72	11
-4	0	1	215	-205	5
-3	0	1	365	316	6
-2	0	1	520	537	8
-1	0	1	256	-203	5
0	0	1	469	529	7
1	0	1	331	-327	5
2	0	1	504	-419	10
3	0	1	156	-122	4
4	0	1	691	-657	10
5	0	1	677	608	10
6	0	1	826	756	12
-6	1	1	276	274	8
-5	1	1	400	355	9
-4	1	1	1308	-1232	26
-3	1	1	495	-442	10
-2	1	1	1399	1387	28
-1	-6	3	502	-500	11
0	-6	3	632	-628	13
1	-6	3	116	106	8
-5	-5	3	307	-314	9
-4	-5	3	717	714	15
-3	-5	3	639	629	13
-2	-5	3	867	-865	18
-1	-5	3	103	15	15
0	-5	3	742	745	15
1	-5	3	445	-451	10
2	-5	3	539	-542	11
3	-5	3	52	-8	-20
-5	-4	3	131	-166	11
-4	-4	3	275	-272	8
-3	-4	3	142	141	8
-2	-4	3	147	135	7
-1	-4	3	724	697	15
0	-4	3	154	136	6
1	-4	3	1018	-994	20
2	-4	3	148	154	6
3	-4	3	251	247	7
4	-4	3	489	-492	11
-6	-3	3	127	-108	11
-5	-3	3	240	238	8
-4	-3	3	350	-350	9
-3	-3	3	166	-162	7
-2	-3	3	251	-220	7
-1	-3	3	241	231	6
0	-3	3	1174	1107	23
1	-3	3	91	-70	8
2	-3	3	614	-590	13
3	-3	3	441	-434	9

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	1	1	39	-35	-16
0	1	1	357	276	7
1	1	1	195	241	4
2	1	1	810	-725	16
3	1	1	202	169	6
4	1	1	271	-345	8
5	1	1	327	-362	9
6	1	1	420	420	10
7	1	1	327	358	10
-5	2	1	345	-325	8
-4	2	1	107	-96	9
-3	2	1	451	454	9
-2	2	1	267	-262	6
-1	2	1	1704	-1751	34
0	2	1	1380	1406	27
1	2	1	2324	2431	46
2	2	1	1310	-1315	26
3	2	1	1060	-968	21
4	2	1	87	71	-19
5	2	1	59	-66	-24
6	2	1	246	265	9
7	2	1	82	17	-27
-5	3	1	590	600	12
-4	3	1	114	107	7
-3	3	1	1062	-1076	21
-2	3	1	267	-273	6
-1	3	1	426	443	9
0	3	1	343	373	7
1	3	1	9	-33	-37
2	3	1	315	-347	7
3	3	1	1093	1075	22
4	3	1	108	72	8
5	3	1	1484	-1411	30
6	3	1	48	16	-30
7	3	1	580	608	13
-4	4	1	332	315	8
-3	4	1	151	-148	6
-2	4	1	111	116	7
-1	4	1	679	-662	14
0	4	1	979	-1001	20
1	4	1	1253	1230	25
2	4	1	967	966	19
3	4	1	597	-583	12
4	4	1	431	-416	9
5	4	1	175	176	7
6	4	1	392	347	9
-3	5	1	413	-405	9
-2	5	1	296	291	7
-1	5	1	197	196	6
0	5	1	892	-898	18
1	5	1	52	-21	-14
2	5	1	312	314	7
3	5	1	140	121	6
4	5	1	565	553	12
5	5	1	167	-155	7
6	5	1	350	-356	9
4	-1	3	487	485	10
5	-1	3	251	-249	7
6	-1	3	321	-328	8
-6	0	3	253	287	6
-5	0	3	1063	1059	15
-4	0	3	318	-323	6
-3	0	3	1233	-1315	18
-2	0	3	655	665	10
-1	0	3	666	748	19
0	0	3	767	-789	13
1	0	3	1191	-1286	26
2	0	3	607	550	11
3	0	3	2184	2171	41
4	0	3	442	-465	7
5	0	3	1468	-1482	24
6	0	3	366	345	9
-5	1	3	513	491	11
-4	1	3	535	510	11
-3	1	3	267	-272	7
-2	1	3	311	315	7
-1	1	3	771	-659	16
0	1	3	655	-627	13
1	1	3	829	719	17
2	1	3	620	-526	13
3	1	3	77	77	11
4	1	3	943	897	19
5	1	3	98	96	14
6	1	3	355	-343	9
7	1	3	587	-519	13
-5	2	3	185	-174	8
-4	2	3	673	-663	14
-3	2	3	371	364	8

H	K	L	10FO	10FC	10S
-2	6	1	270	-266	7
-1	6	1	629	-638	13
0	6	1	100	82	9
1	6	1	705	709	14
2	6	1	592	-586	12
3	6	1	917	-914	19
4	6	1	937	959	19
5	6	1	776	782	16
0	7	1	55	108	-22
1	7	1	728	-725	15
2	7	1	365	-372	9
3	7	1	197	182	7
4	7	1	438	442	10
-4	-6	2	172	-183	8
-3	-6	2	80	-80	13
-2	-6	2	533	528	11
-1	-6	2	657	659	14
0	-6	2	696	-685	14
1	-6	2	437	-432	10
-5	-5	2	115	-120	10
-4	-5	2	365	-352	9
-3	-5	2	288	-271	7
-2	-5	2	92	48	15
-1	-5	2	869	875	18
0	-5	2	203	207	6
1	-5	2	480	-481	10
2	-5	2	160	-157	6
3	-5	2	192	-188	7
-6	-4	2	539	531	12
-5	-4	2	1198	-1175	24
-4	-4	2	606	-582	13
-3	-4	2	1226	1205	25
-2	-4	2	293	-299	7
-1	-4	2	842	-845	17
0	-4	2	587	591	12
1	-4	2	832	836	17
2	-4	2	110	107	7
3	-4	2	851	-871	17
4	-4	2	345	-369	8
-6	-3	2	226	254	9
-5	-3	2	390	387	9
-4	-3	2	100	97	9
-3	-3	2	553	-520	12
-2	-3	2	1485	-1417	30
-1	-3	2	767	741	15
0	-3	2	1631	1590	32
1	-3	2	946	-967	19
2	-3	2	323	-316	7
3	-3	2	774	780	16
4	-3	2	50	-83	-19
5	-3	2	450	-435	10
-6	-2	2	227	262	9
-5	-2	2	296	322	9
-4	-2	2	268	-255	8
-3	-2	2	155	131	7
-2	-2	2	273	-233	7
-3	4	3	587	-572	12
-2	4	3	154	162	6
-1	4	3	1430	1466	29
0	4	3	201	-186	5
1	4	3	1058	-1055	21
2	4	3	84	-86	6
3	4	3	301	316	7
4	4	3	137	105	6
5	4	3	608	-589	13
6	4	3	137	138	7
7	4	3	828	790	17
-3	5	3	254	-255	7
-2	5	3	208	-209	7
-1	5	3	449	468	10
0	5	3	64	43	8
1	5	3	371	352	8
2	5	3	311	320	7
3	5	3	1012	-1034	20
4	5	3	246	-229	6
5	5	3	499	528	11
6	5	3	110	-96	11
-2	6	3	150	149	7
-1	6	3	290	298	7
0	6	3	408	-367	9
1	6	3	64	15	-16
2	6	3	797	795	16
3	6	3	115	-106	9
4	6	3	410	-411	9
5	6	3	255	-268	7
6	6	3	291	-280	8
0	7	3	367	356	9
1	7	3	398	398	9

I-726-m39

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR IV

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	0	2	55	29	-16
6	0	2	158	162	5
-6	1	2	628	-576	13
-5	1	2	116	122	11
-4	1	2	344	322	8
-3	1	2	48	-28	-20
-2	1	2	258	201	6
-1	1	2	158	140	5
0	1	2	1009	940	20
1	1	2	1010	-936	20
2	1	2	2145	-2215	43
3	1	2	1257	1195	25
4	1	2	941	1236	-19
5	1	2	586	-578	13
6	1	2	115	-136	11
7	1	2	205	190	10
-5	2	2	234	-215	7
-4	2	2	673	-642	14
-3	2	2	288	-281	7
-2	2	2	1874	1839	37
-1	2	2	459	472	9
0	2	2	1796	-1768	36
1	2	2	86	-103	6
2	2	2	829	828	17
-5	-3	4	415	-450	10
-4	-3	4	15	-31	-61
-3	-3	4	1272	1257	26
-2	-3	4	117	101	8
-1	-3	4	1209	-1187	24
0	-3	4	595	584	12
1	-3	4	334	326	8
2	-3	4	706	-718	14
3	-3	4	183	-196	7
4	-3	4	112	94	8
5	-3	4	439	461	10
-5	-2	4	522	523	12
-4	-2	4	16	7	-63
-3	-2	4	762	-772	16
-2	-2	4	76	-30	-17
-1	-2	4	1143	1125	23
0	-2	4	1226	1155	24
1	-2	4	1491	-1459	30
2	-2	4	1272	-1257	25
3	-2	4	1207	1228	24
4	-2	4	154	155	6
5	-2	4	719	-724	15
-6	-1	4	292	-269	10
-5	-1	4	51	-23	-33
-4	-1	4	355	-360	9
-3	-1	4	220	-215	8
-2	-1	4	589	620	12
-1	-1	4	474	-458	10
0	-1	4	247	210	6
1	-1	4	1215	1116	24
2	-1	4	346	-312	8
3	-1	4	738	-700	15
4	-1	4	573	-571	12
5	-1	4	208	209	6
6	-1	4	665	663	14
-5	0	4	614	619	9
-4	0	4	880	-925	13
-3	0	4	996	-1047	14
-2	0	4	1026	1192	15
-1	0	4	61	-88	-15
0	0	4	652	-741	9
1	0	4	1118	1255	16
2	0	4	229	227	5
3	0	4	390	-365	7
4	0	4	322	-327	6
5	0	4	462	-475	43
6	0	4	209	219	6
-5	1	4	165	-153	9
-4	1	4	329	327	9
-3	1	4	194	202	7
-2	1	4	331	-335	8
-1	1	4	1502	-1526	30
0	1	4	90	63	9
1	1	4	2260	2443	45
2	1	4	176	-210	6
3	1	4	966	-1034	19
2	-2	6	711	-684	15
3	-2	6	182	187	7
4	-2	6	715	701	15
5	-2	6	285	-281	8
-5	-1	6	308	289	10
-4	-1	6	320	309	9
-3	-1	6	492	-462	11
-2	-1	6	442	430	10

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	5	2	151	136	6
0	5	2	519	546	11
1	5	2	304	318	7
2	5	2	212	-230	6
3	5	2	84	-69	7
4	5	2	585	579	12
5	5	2	423	-425	9
6	5	2	676	-652	14
-2	6	2	250	-254	7
-1	6	2	220	218	7
0	6	2	543	-542	11
1	6	2	338	-332	8
2	6	2	928	937	19
3	6	2	402	392	9
4	6	2	344	-355	8
5	6	2	338	-334	8
6	6	2	51	26	-22
0	7	2	167	-152	7
1	7	2	233	-223	7
2	7	2	148	136	7
3	7	2	56	-71	-19
4	7	2	348	365	8
-3	-6	3	762	766	16
-2	-6	3	291	279	8
4	1	4	227	279	8
5	1	4	119	-112	6
6	1	4	83	-40	12
7	1	4	66	-59	-24
-5	2	4	459	461	11
-4	2	4	955	901	19
-3	2	4	797	-770	16
-2	2	4	966	-924	19
-1	2	4	581	549	12
0	2	4	229	225	6
1	2	4	270	-272	6
2	2	4	558	-521	11
3	2	4	791	757	16
4	2	4	1108	1096	22
5	2	4	885	-874	18
6	2	4	717	-673	15
7	2	4	278	296	9
-4	3	4	581	567	12
-3	3	4	55	12	-21
-2	3	4	70	13	-12
-1	3	4	59	54	-16
0	3	4	1274	-1208	25
1	3	4	247	211	6
2	3	4	934	917	19
3	3	4	592	-565	12
4	3	4	110	85	6
5	3	4	585	593	12
6	3	4	90	73	9
7	3	4	479	-457	11
-4	4	4	126	135	9
-3	4	4	259	-260	7
-2	4	4	227	224	7
-1	4	4	783	768	16
0	4	4	599	-607	12
1	4	4	643	-621	13
2	4	4	79	-35	7
3	4	4	317	-330	7
4	4	4	873	861	18
5	4	4	572	570	12
6	4	4	609	-612	13
7	4	4	142	-131	8
-3	5	4	568	551	12
-2	5	4	183	164	7
-1	5	4	128	-111	9
0	5	4	97	-76	10
1	5	4	230	232	6
2	5	4	116	-104	6
3	5	4	1012	-1030	20
4	5	4	168	178	6
5	5	4	914	949	18
6	5	4	12	10	-50
-2	6	4	406	-403	9
-1	6	4	1078	1092	22
0	6	4	822	825	17
1	6	4	1170	-1171	23
2	6	4	650	-642	13
3	3	6	310	305	7
4	3	6	526	-494	11
5	3	6	555	-540	12
6	3	6	83	-82	9
7	3	6	674	668	14
-3	4	6	274	-264	8
-2	4	6	352	-341	8
-1	4	6	342	338	8

H	K	L	10FO	10FC	10S
4	-3	3	158	-169	6
5	-3	3	529	516	11
-6	-2	3	641	661	14
-5	-2	3	63	68	-29
-4	-2	3	1153	-1238	23
-3	-2	3	148	141	11
-2	-2	3	512	496	11
-1	-2	3	736	-745	15
0	-2	3	820	762	16
1	-2	3	633	642	13
2	-2	3	342	-319	7
3	-2	3	84	-102	6
4	-2	3	391	-408	9
5	-2	3	129	-125	8
-6	-1	3	18	-16	-71
-5	-1	3	329	337	9
-4	-1	3	177	171	9
-3	-1	3	73	-41	-20
-2	-1	3	1011	-1102	20
-1	-1	3	1112	-1148	22
0	-1	3	2075	2121	41
1	-1	3	1036	958	21
2	-1	3	1500	-1501	30
3	-1	3	183	194	5
3	6	4	588	582	12
4	6	4	289	291	7
5	6	4	410	-417	9
6	6	4	297	-294	8
0	7	4	124	124	8
1	7	4	34	-45	-21
2	7	4	410	416	9
3	7	4	137	-155	7
4	7	4	714	-727	15
5	7	4	109	116	8
-3	-5	5	378	355	9
-2	-5	5	87	-71	-15
-1	-5	5	588	-582	12
0	-5	5	217	218	7
1	-5	5	329	315	8
2	-5	5	226	240	7
-4	-4	5	540	543	12
-3	-4	5	105	-94	12
-2	-4	5	1070	-1050	22
-1	-4	5	168	-179	7
0	-4	5	1163	1141	23
1	-4	5	434	-429	10
2	-4	5	701	-699	14
3	-4	5	849	856	17
-5	-3	5	271	279	9
-4	-3	5	188	-209	9
-3	-3	5	180	201	8
-2	-3	5	642	631	13
-1	-3	5	551	-545	12
0	-3	5	713	-696	15
1	-3	5	209	-214	7
2	-3	5	482	469	10
3	-3	5	705	703	15
4	-3	5	324	-313	8
-5	-2	5	558	570	13
-4	-2	5	271	-279	9
-3	-2	5	182	-200	8
-2	-2	5	1100	1147	22
-1	-2	5	176	-177	7
0	-2	5	854	-831	17
1	-2	5	207	-204	6
2	-2	5	222	-202	6
3	-2	5	462	466	10
4	-2	5	319	314	8
5	-2	5	63	-64	-11
-5	-1	5	555	-526	13
-4	-1	5	528	-513	12
-3	-1	5	727	728	15
-2	-1	5	1424	1491	28
-1	-1	5	859	-927	17
0	-1	5	985	-967	20
1	-1	5	798	813	16
2	-1	5	306	-298	7
3	-1	5	310	-298	7
4	-1	5	114	117	7
5	-1	5	39	-34	-24
4	-2	7	646	-627	14
-4	-1	7	168	189	10
-3	-1	7	845	-811	18
-2	-1	7	80	-64	-22
-1	-1	7	190	179	9
0	-1	7	422	-422	10
1	-1	7	536	557	12
2	-1	7	210	194	8

H	K	L	10FO	10FC	10S
-2	2	3	1992	1962	40
-1	2	3	694	-688	14
0	2	3	2324	-2323	46
1	2	3	865	845	17
2	2	3	18	442	-71
3	2	3	376	-399	8
4	2	3	497	478	10
5	2	3	120	122	8
6	2	3	93	106	13
7	2	3	120	-68	-24
-5	3	3	485	-453	11
-4	3	3	546	548	12
-3	3	3	348	330	8
-2	3	3	125	-132	6
-1	3	3	51	-29	-15
0	3	3	270	289	6
1	3	3	488	488	10
2	3	3	1393	-1394	28
3	3	3	854	-846	17
4	3	3	1330	1347	26
5	3	3	446	429	10
6	3	3	299	-276	8
7	3	3	52	-43	-29
-4	4	3	63	11	-13
6	-1	5	442	468	10
-5	0	5	331	-314	9
-4	0	5	479	469	8
-3	0	5	176	-179	9
-2	0	5	186	-214	5
-1	0	5	269	274	5
0	0	5	782	828	11
1	0	5	385	385	8
2	0	5	1453	-1560	24
3	0	5	331	-292	6
4	0	5	922	876	17
5	0	5	303	-294	5
6	0	5	53	-46	-14
-5	1	5	214	-208	9
-4	1	5	49	-67	-30
-3	1	5	633	-628	13
-2	1	5	459	447	10
-1	1	5	702	726	14
0	1	5	866	-838	18
1	1	5	466	451	10
2	1	5	784	833	16
3	1	5	450	-497	10
4	1	5	728	-805	15
5	1	5	461	-432	10
6	1	5	720	693	15
-5	2	5	143	157	9
-4	2	5	313	297	9
-3	2	5	647	-633	14
-2	2	5	420	-388	9
-1	2	5	195	218	6
0	2	5	250	-260	6
1	2	5	1333	1223	27
2	2	5	577	560	12
3	2	5	1409	-1334	28
4	2	5	90	14	-17
5	2	5	322	308	8
6	2	5	364	-382	8
7	2	5	17	-40	-68
-4	3	5	90	-71	10
-3	3	5	109	112	9
-2	3	5	38	-4	-26
-1	3	5	454	-454	10
0	3	5	997	-945	20
1	3	5	956	945	19
2	3	5	1473	1410	29
3	3	5	708	-713	14
4	3	5	443	-441	9
5	3	5	9	3	-37
6	3	5	157	-150	6
7	3	5	170	164	8
-3	4	5	106	80	9
-2	4	5	1514	-1470	30
-1	4	5	12	23	-49
0	4	5	1014	1017	20
1	4	5	330	-331	7
2	4	5	657	-670	13
-1	4	7	151	-156	8
0	4	7	181	182	7
1	4	7	188	199	7
2	4	7	195	173	6
3	4	7	636	-616	13
4	4	7	551	-536	12
5	4	7	487	479	10
6	4	7	184	207	7

H	K	L	10FO	10FC	10S
2	7	3	55	60	-20
3	7	3	207	-212	7
4	7	3	143	141	7
5	7	3	127	135	8
-2	-6	4	462	-463	10
-1	-6	4	257	237	8
0	-6	4	36	37	-28
-4	-5	4	282	291	8
-3	-5	4	453	455	10
-2	-5	4	334	-329	8
-1	-5	4	502	-494	11
0	-5	4	137	-143	8
1	-5	4	13	3	-50
2	-5	4	482	475	11
-5	-4	4	126	99	14
-4	-4	4	276	-279	8
-3	-4	4	717	697	15
-2	-4	4	335	340	8
-1	-4	4	653	-642	13
0	-4	4	183	-178	6
1	-4	4	197	-185	7
2	-4	4	25	6	-29
3	-4	4	221	235	7
4	-4	4	108	104	8
3	4	5	269	258	6
4	4	5	1154	1170	23
5	4	5	65	-44	-13
6	4	5	1133	-1125	23
7	4	5	13	-13	-52
-3	5	5	232	220	7
-2	5	5	53	-2	-21
-1	5	5	219	224	7
0	5	5	556	-539	12
1	5	5	858	-854	17
2	5	5	801	799	16
3	5	5	502	493	11
4	5	5	378	-394	8
5	5	5	153	146	7
6	5	5	176	178	7
-1	6	5	292	299	8
0	6	5	187	-187	7
1	6	5	555	-562	12
2	6	5	193	196	6
3	6	5	64	-89	-16
4	6	5	204	-197	6
5	6	5	696	708	14
6	6	5	175	178	7
0	7	5	112	-86	11
1	7	5	127	-142	8
2	7	5	42	48	-24
3	7	5	156	-143	7
4	7	5	356	-363	8
5	7	5	277	271	7
-2	-5	6	118	141	9
-1	-5	6	444	426	10
0	-5	6	357	357	9
1	-5	6	381	-373	9
-3	-4	6	564	-576	12
-2	-4	6	73	95	-21
-1	-4	6	62	52	-21
0	-4	6	366	361	9
1	-4	6	223	228	7
2	-4	6	145	-145	7
3	-4	6	36	-35	-29
-4	-3	6	651	-681	14
-3	-3	6	284	-309	8
-2	-3	6	581	589	13
-1	-3	6	500	-492	11
0	-3	6	236	-243	7
1	-3	6	505	505	11
2	-3	6	103	85	8
3	-3	6	276	292	7
4	-3	6	45	-75	-25
-5	-2	6	121	114	-27
-4	-2	6	428	416	11
-3	-2	6	127	135	10
-2	-2	6	334	-336	9
-1	-2	6	893	-913	18
0	-2	6	342	336	8
1	-2	6	786	747	16
1	0	8	155	-173	12
2	0	8	810	788	14
3	0	8	30	21	-31
4	0	8	472	-456	8
5	0	8	385	-402	12
-3	1	8	263	-260	9
-2	1	8	604	-632	13
-1	1	8	148	138	10

I-726-m40

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR IV

H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	-1	6	400	412	9
0	-1	6	878	-891	18
1	-1	6	584	-598	12
2	-1	6	43	57	-26
3	-1	6	942	940	19
4	-1	6	441	436	10
5	-1	6	682	-666	14
-5	0	6	133	-127	10
-4	0	6	234	228	18
-3	0	6	16	8	-45
-2	0	6	830	830	12
-1	0	6	76	85	-16
0	0	6	1366	-1432	28
1	0	6	379	366	6
2	0	6	334	367	7
3	0	6	718	-719	15
4	0	6	320	303	8
5	0	6	659	630	10
6	0	6	136	123	6
-4	1	6	350	-349	9
-3	1	6	220	-223	8
-2	1	6	1026	1039	21
-1	1	6	828	840	17
0	1	6	1160	-1231	23
1	1	6	321	-300	8
2	1	6	239	261	7
3	1	6	365	-397	9
4	1	6	296	328	8
5	1	6	16	20	-64
6	1	6	73	-21	-21
-4	2	6	447	448	10
-3	2	6	535	507	12
-2	2	6	792	-777	16
-1	2	6	14	-34	-55
0	2	6	1011	1003	20
1	2	6	733	710	15
2	2	6	1066	-1042	21
3	2	6	1414	-1356	28
4	2	6	924	894	19
5	2	6	622	598	13
6	2	6	593	-557	13
-4	3	6	142	-141	9
-3	3	6	508	-506	11
-2	3	6	308	-296	8
-1	3	6	1210	1174	24
0	3	6	148	145	7
1	3	6	922	-885	19
2	3	6	617	574	13
4	6	8	391	-375	9
5	6	8	226	222	7
-1	-3	9	335	-329	9
0	-3	9	227	-258	9
1	-3	9	275	263	9
-2	-2	9	17	31	-67
-1	-2	9	654	636	14
0	-2	9	325	-312	9
1	-2	9	581	-606	13
2	-2	9	80	-114	-20
3	-2	9	260	248	8
-3	-1	9	132	-93	11
-2	-1	9	213	203	10
-1	-1	9	640	614	14
0	-1	9	445	-442	11
1	-1	9	198	-191	8
2	-1	9	224	253	8
3	-1	9	504	-535	11
4	-1	9	27	-29	-40
-3	0	9	79	-83	-18
-2	0	9	213	191	9
-1	0	9	528	507	8
0	0	9	207	-183	7
1	0	9	26	-61	-34
2	0	9	316	292	6
3	0	9	540	-539	9
4	0	9	108	-107	8
5	0	9	208	198	7

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	4	6	168	-168	7
1	4	6	157	-154	6
2	4	6	1218	1219	24
3	4	6	127	-115	7
4	4	6	1018	-1002	20
5	4	6	92	86	7
6	4	6	86	83	9
-2	5	6	83	-4	-18
-1	5	6	124	-116	8
0	5	6	325	-336	8
1	5	6	233	-229	7
2	5	6	841	854	17
3	5	6	476	472	10
4	5	6	407	-406	9
5	5	6	268	-288	7
6	5	6	343	-349	8
-1	6	6	941	-939	19
0	6	6	112	112	8
1	6	6	442	450	10
2	6	6	49	72	-21
3	6	6	154	-132	7
4	6	6	44	31	-22
5	6	6	440	433	10
6	6	6	177	-154	7
1	7	6	714	-697	15
2	7	6	144	-132	8
3	7	6	816	828	17
4	7	6	13	36	-52
-2	-4	7	215	227	9
-1	-4	7	449	-434	10
0	-4	7	433	412	10
1	-4	7	471	468	11
2	-4	7	647	-639	14
-3	-3	7	551	-575	12
-2	-3	7	94	-97	14
-1	-3	7	353	342	9
0	-3	7	582	582	12
1	-3	7	139	102	15
2	-3	7	657	-640	14
3	-3	7	77	84	-15
-4	-2	7	177	-179	11
-3	-2	7	731	-714	15
-2	-2	7	405	408	10
-1	-2	7	93	116	-17
0	-2	7	600	-626	13
1	-2	7	718	704	15
2	-2	7	665	663	14
3	-2	7	383	-370	9
-3	1	9	413	381	11
-2	1	9	463	-441	11
-1	1	9	242	-252	9
0	1	9	454	437	11
1	1	9	454	443	10
2	1	9	263	268	8
3	1	9	632	-626	14
4	1	9	345	-356	9
5	1	9	259	265	9
-2	2	9	644	-661	14
-1	2	9	540	565	12
0	2	9	458	487	10
1	2	9	899	-949	18
2	2	9	405	421	10
3	2	9	954	1038	19
4	2	9	446	-472	10
5	2	9	749	-798	16
-2	3	9	296	-306	8
-1	3	9	424	-439	10
0	3	9	26	-54	-39
1	3	9	52	-12	-27
2	3	9	699	724	15
3	3	9	255	246	8
4	3	9	627	-639	13
5	3	9	136	153	9
6	3	9	103	81	14
-1	4	9	523	-528	11
0	4	9	504	-494	11

H	K	L	10FO	10FC	10S
3	-1	7	166	-166	8
4	-1	7	385	375	9
5	-1	7	292	-315	8
-4	0	7	490	492	8
-3	0	7	673	648	10
-2	0	7	386	-382	7
-1	0	7	1101	-1084	18
0	0	7	365	-344	7
1	0	7	1326	1367	19
2	0	7	94	64	10
3	0	7	916	-986	13
4	0	7	685	694	14
5	0	7	505	483	8
6	0	7	518	-494	8
-4	1	7	694	696	15
-3	1	7	241	-251	8
-2	1	7	628	-649	13
-1	1	7	773	809	16
0	1	7	60	38	-24
1	1	7	902	-960	18
2	1	7	272	-305	8
3	1	7	399	391	9
4	1	7	923	965	19
5	1	7	61	-6	-27
6	1	7	620	-627	13
-4	2	7	209	215	9
-3	2	7	117	-103	10
-2	2	7	110	72	13
-1	2	7	979	1015	20
0	2	7	642	-614	13
1	2	7	1149	-1187	23
2	2	7	605	611	13
3	2	7	66	70	-21
4	2	7	199	-184	8
5	2	7	454	443	10
6	2	7	202	199	9
-3	3	7	156	-172	8
-2	3	7	179	183	8
-1	3	7	899	905	18
0	3	7	13	38	-54
1	3	7	887	-868	18
2	3	7	110	-98	10
3	3	7	262	-248	7
4	3	7	194	196	7
5	3	7	598	557	13
6	3	7	331	-326	8
-3	4	7	421	416	10
-2	4	7	241	240	8
1	4	9	14	13	-57
2	4	9	513	507	11
3	4	9	260	247	8
4	4	9	334	-329	8
5	4	9	234	229	8
0	5	9	97	91	10
1	5	9	256	274	8
2	5	9	356	-336	9
3	5	9	107	-77	10
4	5	9	112	80	9
5	5	9	394	374	9
1	6	9	377	-374	9
2	6	9	877	-855	18
3	6	9	417	403	10
4	6	9	440	432	10
0	-2	10	459	-439	11
1	-2	10	75	98	-23
-1	-1	10	90	-43	14
0	-1	10	444	-414	11
1	-1	10	207	-140	8
2	-1	10	244	253	9
3	-1	10	200	-189	9
-2	0	10	584	-538	9
-1	0	10	815	728	13
0	0	10	672	623	10
1	0	10	1153	-1079	17
2	0	10	656	-619	10
3	0	10	466	421	10

H	K	L	10FO	10FC	10S
-2	5	7	559	-540	12
-1	5	7	253	272	8
0	5	7	1039	1015	21
1	5	7	417	-415	9
2	5	7	504	-499	11
3	5	7	471	469	10
4	5	7	39	-12	-24
5	5	7	397	-391	9
6	5	7	308	-299	8
-1	6	7	143	-156	8
0	6	7	192	-181	7
1	6	7	59	-27	-19
2	6	7	791	781	16
3	6	7	409	395	9
4	6	7	1005	-1011	20
5	6	7	278	-273	7
1	7	7	55	-64	-22
2	7	7	114	94	9
3	7	7	431	432	10
4	7	7	13	24	-53
0	-4	8	647	-675	14
-2	-3	8	487	489	11
-1	-3	8	63	100	-25
0	-3	8	305	-318	8
1	-3	8	189	206	8
2	-3	8	283	-311	8
3	-3	8	302	-298	8
-3	-2	8	340	305	10
-2	-2	8	690	684	15
-1	-2	8	393	-374	10
0	-2	8	515	-526	11
1	-2	8	1399	982	-28
2	-2	8	104	74	12
3	-2	8	940	-938	19
4	-2	8	69	-75	-21
-3	-1	8	271	-260	9
-2	-1	8	767	-705	16
-1	-1	8	264	261	8
0	-1	8	633	599	13
1	-1	8	534	533	12
2	-1	8	360	-386	9
3	-1	8	604	-632	13
4	-1	8	253	252	8
5	-1	8	77	-40	-19
-3	0	8	629	-595	11
-2	0	8	619	-601	10
-1	0	8	754	720	11
0	0	8	124	-118	8
4	0	10	572	586	9
-2	1	10	150	144	12
-1	1	10	563	532	13
0	1	10	17	29	-67
1	1	10	722	-711	15
2	1	10	254	248	9
3	1	10	64	38	-28
4	1	10	520	-484	12
-2	2	10	326	329	9
-1	2	10	310	330	9
0	2	10	16	18	-63
1	2	10	280	-282	8
2	2	10	321	335	9
3	2	10	79	-80	-22
4	2	10	606	-644	13
5	2	10	209	223	10
-1	3	10	437	-440	10
0	3	10	194	212	9
1	3	10	334	345	9
2	3	10	185	204	8
3	3	10	57	15	-26
4	3	10	539	-580	12
5	3	10	134	-148	12
0	4	10	698	720	15
1	4	10	179	175	8
2	4	10	492	-491	11
3	4	10	445	446	10
4	4	10	220	226	8

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	1	8	158	-176	10
1	1	8	158	170	9
2	1	8	737	752	15
3	1	8	402	-423	10
4	1	8	124	-43	15
5	1	8	372	357	10
6	1	8	463	-483	11
-3	2	8	353	360	9
-2	2	8	15	-41	-62
-1	2	8	300	-321	8
0	2	8	520	-532	11
1	2	8	112	-75	17
2	2	8	778	805	16
3	2	8	85	-38	12
4	2	8	127	-103	15
5	2	8	273	286	9
6	2	8	290	-297	9
-3	3	8	597	594	13
-2	3	8	628	-633	13
-1	3	8	310	-318	8
0	3	8	665	657	14
1	3	8	360	-350	9
2	3	8	564	-546	12
3	3	8	45	27	-26
4	3	8	570	542	12
5	3	8	607	607	13
6	3	8	400	-380	10
-2	4	8	223	235	8
-1	4	8	593	589	13
0	4	8	72	-88	-19
1	4	8	1273	-1257	25
2	4	8	230	223	7
3	4	8	834	828	17
4	4	8	626	-608	13
5	4	8	117	-84	9
6	4	8	679	652	14
-1	5	8	178	169	8
0	5	8	462	464	10
1	5	8	199	-192	7
2	5	8	443	-429	10
3	5	8	215	-218	7
4	5	8	185	-179	7
5	5	8	546	527	12
6	5	8	295	288	8
0	6	8	86	96	12
1	6	8	459	455	10
2	6	8	81	-80	13
3	6	8	442	-416	10
5	4	10	415	-395	10
1	5	10	99	-100	10
2	5	10	310	325	8
3	5	10	632	630	13
4	5	10	313	-307	8
0	0	11	283	-267	9
1	0	11	486	-445	9
2	0	11	538	529	10
3	0	11	203	182	7
-1	1	11	218	-181	9
0	1	11	131	-118	12
1	1	11	335	-340	9
2	1	11	120	63	14
3	1	11	158	176	11
0	2	11	641	634	14
1	2	11	86	-59	-22
2	2	11	758	-745	16
3	2	11	1182	-92	-24
4	2	11	263	237	9
0	3	11	412	458	10
1	3	11	437	-469	10
2	3	11	399	-447	10
3	3	11	360	387	9
4	3	11	207	-213	9
1	4	11	244	284	8
2	4	11	166	-175	9
3	4	11	235	-245	8
4	4	11	282	-300	9