

CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1996, 8(6), 1229-1235, DOI:[10.1021/cm950524b](https://doi.org/10.1021/cm950524b)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

I-1235-41

Table 1. Observed and calculated structure factors for

2

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	5	2	210	207	1	6	-1	3	73	74	2	8	3	3	52	58	3	-3	9	3	25	23	7	8	2	4	33	40	5
-4	5	2	12	8	12	7	-1	3	104	109	2	9	3	3	90	96	2	-2	9	3	76	78	4	9	2	4	90	101	2
-3	5	2	119	113	1	8	-1	3	26	19	7	-10	4	3	0	12	1	-1	9	3	64	65	2	-11	3	4	99	100	2
-2	5	2	64	66	4	9	-1	3	60	54	3	-9	4	3	50	53	3	0	9	3	31	37	4	-10	3	4	112	111	2
-1	5	2	47	38	4	10	-1	3	33	37	6	-8	4	3	199	196	1	1	9	3	57	58	2	-9	3	4	167	166	1
0	5	2	102	105	2	-11	0	3	48	46	4	-7	4	3	37	36	4	2	9	3	30	24	4	-8	3	4	116	117	1
1	5	2	149	151	5	-10	0	3	0	4	1	-6	4	3	90	91	2	3	9	3	49	48	4	-7	3	4	64	67	2
2	5	2	300	299	3	-9	0	3	146	149	1	-5	4	3	41	42	3	-11	-1	4	42	38	4	-6	3	4	104	107	1
3	5	2	135	135	1	-8	0	3	76	76	2	-4	4	3	23	25	5	-10	-1	4	46	41	3	-5	3	4	149	147	1
4	5	2	212	207	1	-7	0	3	0	27	1	-3	4	3	137	137	1	-9	-1	4	51	56	3	-4	3	4	286	291	1
5	5	2	185	182	1	-6	0	3	215	211	1	-2	4	3	98	97	1	-8	-1	4	17	20	16	-3	3	4	226	218	1
6	5	2	114	109	1	-5	0	3	149	159	1	-1	4	3	99	93	1	-7	-1	4	128	126	1	-2	3	4	198	179	6
7	5	2	118	119	2	-4	0	3	163	162	1	0	4	3	163	166	1	-6	-1	4	236	238	1	-1	3	4	395	378	2
8	5	2	47	43	4	-3	0	3	240	235	1	1	4	3	82	83	1	-5	-1	4	238	243	1	0	3	4	95	85	1
9	5	2	45	43	4	-2	0	3	318	304	1	2	4	3	11	19	10	-4	-1	4	178	170	1	1	3	4	338	318	1
-9	6	2	64	65	3	-1	0	3	282	306	2	3	4	3	67	70	2	-3	-1	4	154	142	1	2	3	4	62	60	5
-8	6	2	97	96	2	0	0	3	197	185	2	4	4	3	160	158	1	-2	-1	4	397	368	1	3	3	4	66	61	2
-7	6	2	58	62	3	1	0	3	89	86	1	5	4	3	54	54	3	-1	-1	4	271	270	1	4	3	4	19	28	8
-6	6	2	63	66	2	2	0	3	45	17	2	6	4	3	109	112	2	0	-1	4	239	242	4	5	3	4	82	82	2
-5	6	2	61	61	2	3	0	3	165	186	1	7	4	3	57	62	3	1	-1	4	281	285	1	6	3	4	64	64	2
-4	6	2	114	112	1	4	0	3	245	242	1	8	4	3	32	30	5	2	-1	4	205	208	1	7	3	4	62	59	2
-3	6	2	30	23	4	5	0	3	179	190	1	9	4	3	23	27	10	3	-1	4	145	146	1	8	3	4	45	46	4
-2	6	2	119	116	1	6	0	3	0	6	1	-10	5	3	56	55	3	4	-1	4	124	119	1	9	3	4	67	72	3
-1	6	2	26	21	3	7	0	3	82	76	2	-9	5	3	56	54	3	5	-1	4	176	174	1	-10	4	4	58	53	3
0	6	2	184	194	2	8	0	3	88	85	2	-8	5	3	115	116	2	6	-1	4	110	111	2	-9	4	4	61	60	3
1	6	2	278	279	1	9	0	3	47	48	4	-7	5	3	181	184	1	7	-1	4	138	140	1	-8	4	4	120	121	2
2	6	2	139	138	1	10	0	3	7	25	7	-6	5	3	193	203	1	8	-1	4	122	123	2	-7	4	4	51	51	3
3	6	2	131	135	1	-11	1	3	91	92	2	-5	5	3	43	35	3	9	-1	4	43	35	4	-6	4	4	253	256	1
4	6	2	97	100	2	-10	1	3	46	43	3	-4	5	3	80	79	2	-11	0	4	0	1	1	-5	4	4	118	115	1
5	6	2	106	105	2	-9	1	3	58	64	3	-3	5	3	73	67	1	-10	0	4	51	56	3	-4	4	4	54	50	2
6	6	2	51	47	3	-8	1	3	58	54	2	-2	5	3	78	75	1	-9	0	4	51	52	3	-3	4	4	118	113	1
7	6	2	28	20	6	-7	1	3	67	60	2	-1	5	3	223	225	1	-8	0	4	27	16	6	-2	4	4	89	94	1
8	6	2	75	68	2	-6	1	3	113	104	1	0	5	3	165	163	1	-7	0	4	225	223	1	-1	4	4	90	73	2
-8	7	2	104	97	2	-5	1	3	121	116	1	1	5	3	15	17	6	-6	0	4	208	209	1	0	4	4	160	157	1
-7	7	2	66	65	3	-4	1	3	180	173	1	2	5	3	176	171	2	-5	0	4	172	159	1	1	4	4	25	16	4
-6	7	2	93	94	2	-3	1	3	268	262	1	3	5	3	78	84	2	-4	0	4	68	73	1	2	4	4	117	114	4
-5	7	2	45	46	3	-2	1	3	439	448	2	4	5	3	68	71	2	-3	0	4	126	135	1	3	4	4	30	31	4
-4	7	2	48	53	3	-1	1	3	640	666	3	5	5	3	127	136	1	-2	0	4	477	473	1	4	4	4	71	74	2
-3	7	2	126	123	1	0	1	3	216	233	1	6	5	3	36	37	4	-1	0	4	41	70	2	5	4	4	90	89	2
-2	7	2	64	67	1	1	1	3	310	330	1	7	5	3	108	112	2	0	0	4	223	201	2	6	4	4	136	148	2
-1	7	2	114	115	3	2	1	3	280	291	4	8	5	3	17	26	17	1	0	4	150	151	2	7	4	4	63	63	3
0	7	2	55	58	2	3	1	3	139	136	1	-9	6	3	35	36	5	2	0	4	20	23	3	8	4	4	28	32	7
1	7	2	73	73	1	4	1	3	249	249	1	-8	6	3	30	35	6	3	0	4	28	21	2	9	4	4	0	15	1
2	7	2	82	77	6	5	1	3	233	241	1	-7	6	3	76	75	2	4	0	4	57	55	2	-10	5	4	81	79	2
3	7	2	65	69	2	6	1	3	72	74	2	-6	6	3	83	81	2	5	0	4	242	242	1	-9	5	4	32	32	5
4	7	2	102	101	2	7	1	3	112	109	2	-5	6	3	246	245	1	6	0	4	30	29	5	-8	5	4	68	69	2
5	7	2	36	32	4	8	1	3	12	19	12	-4	6	3	218	222	1	7	0	4	229	230	1	-7	5	4	88	86	2
6	7	2	33	28	5	9	1	3	57	54	3	-3	6	3	108	114	1	8	0	4	45	47	4	-6	5	4	189	192	1
7	7	2	27	26	7	10	1	3	33	37	6	-2	6	3	257	259	1	9	0	4	63	59	3	-5	5	4	84	88	2
-7	8	2	94	97	2	-11	2	3	24	13	8	-1	6	3	120	132	3	10	0	4	0	31	1	-4	5	4	88	87	1
-6	8	2	92	88	2	-10	2	3	22	24	9	0	6	3	112	108	1	-11	1	4	34	38	5	-3	5	4	138	139	1
-5	8	2	71	67	2	-9	2	3	97	100	2	1	6	3	132	134	1	-10	1	4	35	41	5	-2	5	4	86	85	6
-4	8	2	147	158	2	-8	2	3	45	44	3	2	6	3	98	96	1	-9	1	4	60	56	2	-1	5	4	55	56	2
-3	8	2	145	144	2	-7	2	3	109	110	1	3	6	3	155	160	1	-8	1	4	28	20	6	0	5	4	108	107	1
-2	8	2	37	37	5	-6	2	3	207	210	1	4	6	3	149	150	1	-7	1	4	131	126	1	1	5	4	68	62	1
-1	8	2	103	109	3	-5	2	3	272	260	1	5	6	3	27	29	6	-6	1	4	231	238	1	2	5	4	28	34	3
0	8	2	27	35	4	-4	2	3	312	306	1	6	6	3	35	26	4	-5	1	4	240	243	1	3	5	4	98	93	1
1	8	2	116	113	3	-3	2	3	304	309	1	7	6	3	84	86	2	-4	1	4	177	170	1	4	5	4	73	71	2
2	8	2	74	68	1	-2	2	3	91	93	1	8	6	3	75	75	3	-3	1	4	155	142	1	5	5	4	67	68	2
3	8	2	16	24	15	-1	2	3	410	413	1	-8	7	3	31	12	5	-2	1	4	397	368	3	6	5	4			

I-1235-42

Table 1. Observed and calculated structure factors for

2

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	7	4	68	67	2	-8	2	5	137	135	1	5	6	5	73	74	2	3	1	6	53	55	2	-2	6	6	155	156	1
4	7	4	130	132	2	-7	2	5	109	111	1	6	6	5	138	135	2	4	1	6	113	109	1	-1	6	6	319	315	1
5	7	4	60	60	3	-6	2	5	74	71	2	7	6	5	25	15	8	5	1	6	105	108	2	0	6	6	240	241	1
6	7	4	77	82	2	-5	2	5	188	189	1	-8	7	5	96	89	2	6	1	6	67	68	2	1	6	6	81	80	3
-7	8	4	23	28	10	-4	2	5	190	184	1	-7	7	5	106	101	2	7	1	6	23	30	9	2	6	6	141	143	4
-6	8	4	61	53	3	-3	2	5	347	345	1	-6	7	5	72	72	2	8	1	6	68	62	3	3	6	6	94	96	2
-5	8	4	0	17	1	-2	2	5	124	108	2	-5	7	5	31	28	5	-11	2	6	36	34	5	4	6	6	61	56	3
-4	8	4	46	49	3	-1	2	5	293	292	5	-4	7	5	67	89	2	-10	2	6	51	49	3	5	6	6	34	32	5
-3	8	4	37	28	4	0	2	5	83	81	1	-3	7	5	54	50	3	-9	2	6	67	61	2	6	6	6	33	41	6
-2	8	4	56	59	2	1	2	5	199	182	3	-2	7	5	41	44	3	-8	2	6	108	110	2	-8	7	6	66	69	3
-1	8	4	17	6	7	2	2	5	82	86	2	-1	7	5	112	113	1	-7	2	6	136	138	1	-7	7	6	29	25	6
0	8	4	39	38	3	3	2	5	74	69	1	0	7	5	169	170	1	-6	2	6	77	71	2	-6	7	6	0	5	1
1	8	4	91	93	1	4	2	5	111	118	1	1	7	5	130	134	2	-5	2	6	94	94	1	-5	7	6	51	53	3
2	8	4	53	54	3	5	2	5	86	94	2	2	7	5	108	109	3	-4	2	6	187	191	1	-4	7	6	44	36	3
3	8	4	57	55	3	6	2	5	30	41	5	3	7	5	69	69	2	-3	2	6	344	346	1	-3	7	6	145	149	1
4	8	4	47	50	4	7	2	5	30	25	5	4	7	5	64	63	2	-2	2	6	239	225	1	-2	7	6	39	32	2
5	8	4	36	31	5	8	2	5	50	49	3	5	7	5	14	19	14	-1	2	6	400	389	3	-1	7	6	33	33	3
-4	9	4	30	37	6	9	2	5	59	64	3	6	7	5	77	73	3	0	2	6	264	262	3	0	7	6	87	83	1
-3	9	4	21	19	9	-11	3	5	23	33	9	-6	8	5	56	50	3	1	2	6	197	202	3	1	7	6	54	51	2
-2	9	4	57	59	3	-10	3	5	43	35	4	-5	8	5	32	27	5	2	2	6	174	167	4	2	7	6	4	8	4
-1	9	4	63	59	2	-9	3	5	112	112	2	-4	8	5	55	52	3	3	2	6	14	18	13	3	7	6	41	41	4
0	9	4	109	105	1	-8	3	5	68	66	2	-3	8	5	36	31	4	4	2	6	44	40	3	4	7	6	28	27	7
1	9	4	148	145	1	-7	3	5	95	88	2	-2	8	5	37	33	4	5	2	6	63	64	2	5	7	6	37	34	5
2	9	4	48	41	2	-6	3	5	4	12	3	-1	8	5	55	55	2	6	2	6	111	106	2	-6	8	6	60	59	3
-11	-1	5	0	12	1	-5	3	5	84	83	1	0	8	5	91	89	1	7	2	6	43	34	4	-5	8	6	81	82	2
-10	-1	5	52	53	3	-4	3	5	180	183	1	1	8	5	49	44	9	8	2	6	50	39	3	-4	8	6	89	85	2
-9	-1	5	74	78	2	-3	3	5	215	212	1	2	8	5	68	61	4	-11	3	6	73	69	3	-3	8	6	43	33	3
-8	-1	5	47	53	3	-2	3	5	160	155	2	3	8	5	71	69	2	-10	3	6	0	13	1	-2	8	6	40	39	3
-7	-1	5	94	92	2	-1	3	5	81	74	1	4	8	5	31	31	6	-9	3	6	117	119	2	-1	8	6	15	17	14
-6	-1	5	197	205	1	0	3	5	96	93	3	-4	9	5	34	38	5	-8	3	6	10	15	9	0	8	6	78	81	1
-5	-1	5	266	271	1	1	3	5	114	116	2	-3	9	5	83	77	2	-7	3	6	122	125	1	1	8	6	65	69	2
-4	-1	5	157	155	1	2	3	5	12	22	11	-2	9	5	65	63	4	-6	3	6	118	114	1	2	8	6	54	59	2
-3	-1	5	203	199	1	3	3	5	101	95	1	-1	9	5	67	63	2	-5	3	6	143	144	1	3	8	6	95	98	2
-2	-1	5	235	231	5	4	3	5	48	53	3	0	9	5	47	44	2	-4	3	6	133	123	1	-3	9	6	24	27	8
-1	-1	5	315	308	2	5	3	5	43	48	3	1	9	5	14	8	14	-3	3	6	222	208	1	-2	9	6	19	22	7
0	-1	5	395	404	1	6	3	5	37	39	4	-11	-1	6	12	26	12	-2	3	6	169	163	2	-1	9	6	37	34	5
1	-1	5	177	184	4	7	3	5	45	44	4	-10	-1	6	37	37	5	-1	3	6	50	46	5	0	9	6	37	30	3
2	-1	5	159	169	1	8	3	5	90	92	2	-9	-1	6	74	70	2	0	3	6	54	64	1	-11	-1	7	60	60	3
3	-1	5	39	34	4	9	3	5	142	144	2	-8	-1	6	69	68	2	1	3	6	147	147	1	-10	-1	7	98	96	2
4	-1	5	24	18	6	-10	4	5	67	65	3	-7	-1	6	85	87	2	2	3	6	187	188	1	-9	-1	7	98	94	2
5	-1	5	32	31	5	-9	4	5	7	17	7	-6	-1	6	86	82	2	3	3	6	24	27	6	-8	-1	7	40	50	4
6	-1	5	150	149	1	-8	4	5	82	76	2	-5	-1	6	63	53	2	4	3	6	36	38	4	-7	-1	7	96	95	2
7	-1	5	20	23	11	-7	4	5	143	149	1	-4	-1	6	156	164	1	5	3	6	57	54	3	-6	-1	7	101	105	1
8	-1	5	96	96	2	-6	4	5	151	152	1	-3	-1	6	180	183	1	6	3	6	58	55	3	-5	-1	7	162	154	1
9	-1	5	62	54	3	-5	4	5	146	150	1	-2	-1	6	126	121	3	7	3	6	91	92	2	-4	-1	7	103	92	1
-11	0	5	56	52	3	-4	4	5	94	95	1	-1	-1	6	96	104	1	8	3	6	77	76	3	-3	-1	7	168	161	1
-10	0	5	14	0	14	-3	4	5	162	162	1	0	-1	6	248	231	4	-10	4	6	90	92	2	-2	-1	7	275	270	1
-9	0	5	9	22	9	-2	4	5	171	172	3	1	-1	6	75	74	2	-9	4	6	83	88	2	-1	-1	7	257	258	1
-8	0	5	104	107	2	-1	4	5	68	74	3	2	-1	6	174	170	1	-8	4	6	135	135	2	0	-1	7	198	205	1
-7	0	5	27	23	5	0	4	5	61	66	1	3	-1	6	52	55	2	-7	4	6	75	78	2	1	-1	7	52	53	1
-6	0	5	73	77	2	1	4	5	131	122	1	4	-1	6	107	109	1	-6	4	6	0	28	1	2	-1	7	77	76	1
-5	0	5	111	105	1	2	4	5	140	144	3	5	-1	6	107	108	2	-5	4	6	187	189	1	3	-1	7	191	193	1
-4	0	5	88	77	1	3	4	5	194	194	1	6	-1	6	68	68	2	-4	4	6	191	179	1	4	-1	7	52	55	3
-3	0	5	266	257	1	4	4	5	98	104	2	7	-1	6	31	30	6	-3	4	6	106	105	1	5	-1	7	56	58	3
-2	0	5	92	117	1	5	4	5	66	67	2	8	-1	6	63	61	3	-2	4	6	180	174	1	6	-1	7	91	85	2
-1	0	5	84	75	1	6	4	5	147	149	2	-11	0	6	24	24	8	-1	4	6	89	88	3	7	-1	7	45	37	4
0	0	5	50	54	1	7	4	5	52	56	3	-10	0	6	54	55	3	0	4	6	30	21	2	8	-1	7	67	70	3
1	0	5	351	347	1	8	4	5	62	65	3	-9	0	6	92	90	2	1	4	6	65	62	1	-11	0	7	63	63	3
2	0	5	45	49	1	-10	5	5	32	36	6	-8	0	6	67	68	2	2	4	6	122	122	1	-10	0	7	56	54	3
3	0	5	108	101	1	-9	5	5	18	19	14	-7	0	6	273	269	1	3	4	6	64	61	2	-9	0	7	26	19	6
4	0	5	35	28	4																								

I-1235-43

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	1	7	78	76	1	1	6	7	130	125	1	-3	2	8	49	49	2	0	8	8	43	34	3	-6	3	9	55	61	4
3	1	7	196	193	1	2	6	7	87	94	1	-2	2	8	71	76	1	1	8	8	33	24	4	-10	4	9	79	86	3
4	1	7	48	54	3	3	6	7	47	49	3	-1	2	8	104	108	3	-11	-1	9	45	39	4	-9	4	9	52	46	3
5	1	7	56	57	3	4	6	7	60	61	3	0	2	8	125	129	1	-10	-1	9	25	22	8	-8	4	9	74	75	2
6	1	7	83	85	2	5	6	7	42	43	4	1	2	8	167	169	2	-9	-1	9	128	130	2	-7	4	9	60	55	2
7	1	7	45	37	4	-7	7	7	37	38	5	2	2	8	51	48	2	-8	-1	9	115	115	2	-6	4	9	90	86	2
8	1	7	69	70	3	-6	7	7	34	24	4	3	2	8	55	54	3	-7	-1	9	165	159	1	-5	4	9	165	168	1
-11	2	7	64	60	3	-5	7	7	106	109	2	4	2	8	25	21	7	-6	-1	9	191	199	1	-4	4	9	33	38	4
-10	2	7	42	43	4	-4	7	7	99	103	2	5	2	8	110	111	2	-5	-1	9	37	38	4	-3	4	9	82	84	2
-9	2	7	28	26	6	-3	7	7	147	140	1	6	2	8	40	37	4	-4	-1	9	119	115	1	-2	4	9	81	76	1
-8	2	7	121	119	1	-2	7	7	134	133	1	7	2	8	45	42	4	-3	-1	9	110	113	1	-1	4	9	105	107	1
-7	2	7	83	73	2	-1	7	7	103	102	1	-10	3	8	59	53	3	-2	-1	9	88	82	1	0	4	9	152	152	4
-6	2	7	159	157	1	0	7	7	37	36	3	-9	3	8	47	49	4	-1	-1	9	103	100	1	1	4	9	61	64	2
-5	2	7	35	36	3	1	7	7	44	42	2	-8	3	8	108	109	2	0	-1	9	97	101	1	2	4	9	87	85	1
-4	2	7	162	162	1	2	7	7	77	74	1	-7	3	8	64	66	2	1	-1	9	107	106	1	3	4	9	79	79	2
-3	2	7	164	148	1	3	7	7	37	35	5	-6	3	8	107	109	2	2	-1	9	71	67	2	4	4	9	30	32	6
-2	2	7	75	83	2	4	7	7	72	75	3	-5	3	8	112	115	1	3	-1	9	82	81	1	5	4	9	37	33	4
-1	2	7	123	113	2	-5	8	7	24	9	7	-4	3	8	76	75	2	4	-1	9	102	102	2	-9	5	9	55	50	3
0	2	7	56	61	1	-4	8	7	46	51	4	-3	3	8	124	131	1	5	-1	9	39	39	5	-8	5	9	30	35	6
1	2	7	127	126	1	-3	8	7	31	29	5	-2	3	8	151	150	1	6	-1	9	45	54	4	-7	5	9	41	49	4
2	2	7	31	30	3	-2	8	7	95	88	1	-1	3	8	115	106	1	-11	0	9	91	95	2	-6	5	9	48	50	3
3	2	7	38	47	4	-1	8	7	59	60	2	0	3	8	176	172	3	-10	0	9	70	73	3	-5	5	9	94	97	2
4	2	7	207	209	1	0	8	7	44	38	2	1	3	8	109	106	3	-9	0	9	122	128	2	-4	5	9	130	140	1
5	2	7	99	99	2	1	8	7	87	86	3	2	3	8	88	89	1	-8	0	9	114	112	2	-3	5	9	101	108	2
6	2	7	55	60	3	2	8	7	82	82	2	3	3	8	35	33	4	-7	0	9	154	157	1	-2	5	9	112	113	1
7	2	7	35	34	5	-11	-1	8	51	36	3	4	3	8	26	26	6	-6	0	9	77	74	2	-1	5	9	155	166	1
8	2	7	28	29	7	-10	-1	8	82	79	2	5	3	8	82	78	2	-5	0	9	97	104	1	0	5	9	111	110	1
-11	3	7	92	96	2	-9	-1	8	85	94	2	6	3	8	25	33	8	-4	0	9	109	97	1	1	5	9	74	74	3
-10	3	7	125	128	2	-8	-1	8	58	60	3	7	3	8	86	91	2	-3	0	9	0	7	1	2	5	9	31	37	9
-9	3	7	68	61	2	-7	-1	8	75	78	2	-10	4	8	56	55	3	-2	0	9	62	66	1	3	5	9	40	38	4
-8	3	7	142	143	1	-6	-1	8	60	58	2	-9	4	8	27	29	7	-1	0	9	214	209	1	4	5	9	77	70	2
-7	3	7	105	109	2	-5	-1	8	177	177	1	-8	4	8	176	180	1	0	0	9	71	67	1	5	5	9	52	45	3
-6	3	7	21	13	7	-4	-1	8	109	105	1	-7	4	8	110	112	2	1	0	9	0	2	1	-8	6	9	12	9	11
-5	3	7	100	98	1	-3	-1	8	29	27	4	-6	4	8	89	92	2	2	0	9	37	36	3	-7	6	9	72	80	2
-4	3	7	217	212	1	-2	-1	8	62	63	1	-5	4	8	153	158	1	3	0	9	48	51	2	-6	6	9	23	26	8
-3	3	7	53	48	2	-1	-1	8	130	132	1	-4	4	8	89	88	2	4	0	9	39	46	4	-5	6	9	58	62	3
-2	3	7	62	61	1	0	-1	8	239	240	5	-3	4	8	48	51	3	5	0	9	0	11	1	-4	6	9	62	70	2
-1	3	7	145	127	4	1	-1	8	121	127	1	-2	4	8	55	58	2	6	0	9	26	20	7	-3	6	9	77	81	2
0	3	7	25	20	3	2	-1	8	121	120	2	-1	4	8	167	165	1	7	0	9	39	37	5	-2	6	9	29	24	4
1	3	7	156	157	1	3	-1	8	115	114	2	0	4	8	105	108	1	-11	1	9	38	39	5	-1	6	9	138	134	5
2	3	7	44	40	3	4	-1	8	102	102	2	1	4	8	154	159	7	-10	1	9	26	22	7	0	6	9	174	172	3
3	3	7	64	60	2	5	-1	8	82	85	2	2	4	8	100	97	2	-9	1	9	128	130	2	1	6	9	104	103	1
4	3	7	110	119	2	6	-1	8	68	73	3	3	4	8	109	108	2	-8	1	9	115	115	2	2	6	9	76	74	1
5	3	7	24	21	6	7	-1	8	19	31	19	4	4	8	74	66	2	-7	1	9	166	159	1	3	6	9	137	138	2
6	3	7	83	85	2	-11	0	8	103	106	2	5	4	8	25	27	8	-6	1	9	192	199	1	-6	7	9	40	40	4
7	3	7	110	114	2	-10	0	8	61	57	3	6	4	8	97	84	2	-5	1	9	36	38	4	-5	7	9	40	34	4
-10	4	7	26	34	8	-9	0	8	169	166	1	-9	5	8	63	60	3	-4	1	9	121	115	1	-4	7	9	27	36	6
-9	4	7	64	65	3	-8	0	8	179	178	1	-8	5	8	60	53	3	-3	1	9	108	113	1	-3	7	9	10	8	10
-8	4	7	31	23	5	-7	0	8	134	137	1	-7	5	8	95	94	2	-2	1	9	86	82	2	-2	7	9	32	30	3
-7	4	7	232	232	1	-6	0	8	88	87	2	-6	5	8	97	98	2	-1	1	9	100	100	2	-1	7	9	35	33	5
-6	4	7	42	40	3	-5	0	8	71	72	2	-5	5	8	95	96	2	0	1	9	102	101	2	0	7	9	90	87	2
-5	4	7	124	122	1	-4	0	8	57	53	2	-4	5	8	85	80	2	1	1	9	107	106	3	1	7	9	29	41	5
-4	4	7	82	90	2	-3	0	8	43	25	2	-3	5	8	94	94	2	2	1	9	71	67	1	2	7	9	78	71	4
-3	4	7	37	38	3	-2	0	8	99	85	1	-2	5	8	75	70	2	3	1	9	85	81	2	-2	8	9	0	11	1
-2	4	7	101	97	5	-1	0	8	104	112	1	-1	5	8	158	158	2	4	1	9	99	102	2	-10	-1	10	78	76	3
-1	4	7	223	220	1	0	0	8	252	249	1	0	5	8	132	140	4	5	1	9	41	39	4	-9	-1	10	81	80	2
0	4	7	203	203	4	1	0	8	309	305	1	1	5	8	70	72	1	6	1	9	52	54	4	-8	-1	10	84	83	2
1	4	7	220	226	3	2	0	8	214	210	2	2	5	8	94	95	1	-10	2	9	54	59	3	-7	-1	10	177	170	1
2	4	7	136	138	3	3	0	8	136	127	2	3	5	8	140	133	1	-9	2	9	176	178	1	-6	-1	10	263	254	1
3	4	7	86	95	2	4	0	8	175	176	1	4	5	8	72	68	2	-8	2	9	95	94	2	-5	-1	10	184	184	1
4	4	7	76	75	2	5</																							

I-1235-44

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-8	1	10	92	83	2	-2	6	10	61	54	2	-4	3	11	52	55	3	3	1	12	35	38	5	0	1	13	12	6	11
-7	1	10	169	170	1	-1	6	10	49	47	3	-3	3	11	66	69	2	4	1	12	40	40	5	1	1	13	147	144	1
-6	1	10	247	253	1	0	6	10	57	58	7	-2	3	11	99	96	3	-9	2	12	33	42	6	2	1	13	8	7	7
-5	1	10	180	184	1	1	6	10	31	32	4	-1	3	11	74	68	2	-8	2	12	77	79	2	-8	2	13	19	21	18
-4	1	10	154	155	1	2	6	10	62	65	2	0	3	11	84	86	2	-7	2	12	68	61	2	-7	2	13	21	26	11
-3	1	10	233	227	1	-5	7	10	34	32	5	1	3	11	119	117	4	-6	2	12	123	124	2	-6	2	13	53	55	3
-2	1	10	158	161	1	-4	7	10	27	35	7	2	3	11	51	48	2	-5	2	12	209	208	1	-5	2	13	29	33	6
-1	1	10	54	46	2	-3	7	10	16	8	15	3	3	11	174	169	2	-4	2	12	129	126	2	-4	2	13	61	58	3
0	1	10	115	116	1	-2	7	10	25	25	10	4	3	11	68	67	3	-3	2	12	112	117	2	-3	2	13	41	48	4
1	1	10	26	21	4	-1	7	10	32	15	3	-8	4	11	40	36	4	-2	2	12	204	208	5	-2	2	13	89	90	2
2	1	10	32	34	6	0	7	10	33	27	4	-7	4	11	56	56	3	-1	2	12	101	102	1	-1	2	13	13	11	13
3	1	10	81	83	2	-10	-1	11	56	53	3	-6	4	11	64	69	3	0	2	12	77	79	1	0	2	13	41	36	4
4	1	10	62	58	3	-9	-1	11	28	28	7	-5	4	11	66	65	2	1	2	12	96	96	1	1	2	13	15	16	15
5	1	10	67	70	3	-8	-1	11	105	110	2	-4	4	11	77	72	2	2	2	12	71	74	2	2	2	13	51	47	2
6	1	10	34	36	6	-7	-1	11	110	109	2	-3	4	11	69	69	2	3	2	12	80	77	2	-7	3	13	41	42	5
-10	2	10	0	24	1	-6	-1	11	20	17	10	-2	4	11	40	45	3	-8	3	12	20	21	11	-6	3	13	16	30	16
-9	2	10	109	104	2	-5	-1	11	164	165	1	-1	4	11	13	23	12	-7	3	12	133	137	2	-5	3	13	37	38	4
-8	2	10	77	75	2	-4	-1	11	94	88	2	0	4	11	109	107	1	-6	3	12	45	54	4	-4	3	13	65	60	2
-7	2	10	126	131	2	-3	-1	11	60	62	3	1	4	11	46	49	2	-5	3	12	85	89	2	-3	3	13	57	52	3
-6	2	10	53	49	3	-2	-1	11	85	85	3	2	4	11	82	76	2	-4	3	12	92	97	2	-2	3	13	85	87	2
-5	2	10	40	36	4	-1	-1	11	116	121	2	3	4	11	67	70	3	-3	3	12	88	87	2	-1	3	13	17	19	8
-4	2	10	192	201	1	0	-1	11	63	62	5	-7	5	11	27	37	7	-2	3	12	66	68	4	0	3	13	75	75	5
-3	2	10	96	94	2	1	-1	11	145	147	2	-6	5	11	150	152	2	-1	3	12	79	81	2	1	3	13	35	36	5
-2	2	10	50	47	2	2	-1	11	46	48	2	-5	5	11	81	80	2	0	3	12	63	64	2	-6	4	13	75	72	2
-1	2	10	98	98	1	3	-1	11	32	36	6	-4	5	11	51	45	3	1	3	12	152	147	1	-5	4	13	45	45	4
0	2	10	80	80	3	4	-1	11	70	77	3	-3	5	11	75	76	2	2	3	12	85	80	3	-4	4	13	33	26	5
1	2	10	42	40	2	5	-1	11	61	63	3	-2	5	11	45	43	2	3	3	12	58	61	3	-3	4	13	38	37	4
2	2	10	85	87	1	-10	0	11	73	70	3	-1	5	11	87	84	1	-8	4	12	11	14	11	-2	4	13	47	52	3
3	2	10	108	105	2	-9	0	11	6	17	5	0	5	11	19	20	7	-7	4	12	114	113	2	-1	4	13	44	42	4
4	2	10	63	62	3	-8	0	11	6	2	5	1	5	11	51	47	5	-6	4	12	0	18	1	0	4	13	36	35	4
5	2	10	0	18	1	-7	0	11	126	124	2	2	5	11	82	86	2	-5	4	12	49	57	3	-4	5	13	0	12	1
-10	3	10	62	62	3	-6	0	11	43	42	4	-6	6	11	70	74	3	-4	4	12	89	87	2	-3	5	13	19	5	12
-9	3	10	114	113	2	-5	0	11	64	59	2	-5	6	11	25	26	7	-3	4	12	98	97	2	-2	5	13	16	21	15
-8	3	10	49	53	3	-4	0	11	0	8	1	-4	6	11	46	39	4	-2	4	12	86	85	1	-7	-1	14	0	17	1
-7	3	10	55	55	3	-3	0	11	96	101	2	-3	6	11	139	135	2	-1	4	12	131	131	2	-6	-1	14	45	50	4
-6	3	10	125	133	1	-2	0	11	101	96	1	-2	6	11	114	110	1	0	4	12	95	92	2	-5	-1	14	54	49	3
-5	3	10	153	166	1	-1	0	11	48	45	2	-1	6	11	91	90	4	1	4	12	60	62	2	-4	-1	14	0	11	1
-4	3	10	70	77	2	0	0	11	170	170	2	0	6	11	92	94	1	2	4	12	30	30	4	-3	-1	14	96	102	2
-3	3	10	136	148	1	1	0	11	18	18	8	1	6	11	46	45	3	-6	5	12	77	80	2	-2	-1	14	58	58	5
-2	3	10	142	146	2	2	0	11	68	71	2	-9	-1	12	58	50	3	-5	5	12	23	20	8	-1	-1	14	130	131	1
-1	3	10	50	49	2	3	0	11	108	107	3	-8	-1	12	77	81	2	-4	5	12	33	29	5	0	-1	14	134	132	2
0	3	10	130	126	1	4	0	11	15	11	14	-7	-1	12	70	65	2	-3	5	12	47	39	3	1	-1	14	57	58	2
1	3	10	87	86	4	5	0	11	29	39	7	-6	-1	12	53	47	3	-2	5	12	47	45	2	-7	0	14	96	93	2
2	3	10	36	36	4	-10	1	11	53	53	4	-5	-1	12	64	64	2	-1	5	12	46	47	2	-6	0	14	44	51	4
3	3	10	30	32	5	-9	1	11	28	28	7	-4	-1	12	72	70	2	0	5	12	13	18	13	-5	0	14	100	97	2
4	3	10	52	59	3	-8	1	11	109	110	2	-3	-1	12	69	72	2	1	5	12	18	19	8	-4	0	14	86	85	2
5	3	10	52	47	3	-7	1	11	110	109	2	-2	-1	12	100	102	2	-4	6	12	87	88	2	-3	0	14	26	24	7
-9	4	10	62	72	3	-6	1	11	0	17	1	-1	-1	12	8	17	8	-3	6	12	90	90	2	-2	0	14	18	1	17
-8	4	10	60	66	3	-5	1	11	159	165	1	0	-1	12	65	61	2	-2	6	12	76	85	5	-1	0	14	37	31	3
-7	4	10	106	114	2	-4	1	11	79	88	2	1	-1	12	54	53	2	-8	-1	13	35	33	5	0	0	14	42	40	3
-6	4	10	131	131	2	-3	1	11	60	62	2	2	-1	12	53	58	5	-7	-1	13	53	55	4	1	0	14	60	63	4
-5	4	10	41	38	3	-2	1	11	87	85	1	3	-1	12	44	38	3	-6	-1	13	0	11	1	-7	1	14	25	17	8
-4	4	10	48	45	3	-1	1	11	119	121	1	4	-1	12	41	40	5	-5	-1	13	75	76	2	-6	1	14	56	50	3
-3	4	10	21	24	8	0	1	11	59	62	5	-9	0	12	0	3	1	-4	-1	13	90	97	2	-5	1	14	50	49	4
-2	4	10	42	41	2	1	1	11	142	147	1	-8	0	12	22	4	9	-3	-1	13	69	66	2	-4	1	14	0	11	1
-1	4	10	71	74	3	2	1	11	46	48	2	-7	0	12	54	54	3	-2	-1	13	39	37	3	-3	1	14	106	102	2
0	4	10	73	78	1	3	1	11	34	35	5	-6	0	12	97	97	2	-1	-1	13	45	39	2	-2	1	14	62	58	2
1	4	10	86	89	1	4	1	11	78	77	3	-5	0	12	92	93	2	0	-1	13	0	6	1	-1	1	14	130	131	2
2	4	10	103	102	4	5	1	11	72	63	3	-4	0	12	204	216	1	1	-1	13	144	144	1	0	1	14	137	132	1
3	4	10	100	98	2	-10	2	11	71																				

I-1235-45

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 1

3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	0	0	0	9	1	4	16	0	201	194	3	2	37	0	48	37	11	-1	7	1	605	612	1	1	15	1	174	171	2
2	0	0	398	380	1	5	16	0	0	16	1	0	38	0	65	72	9	0	7	1	68	69	6	2	15	1	67	62	5
3	0	0	20	9	20	1	17	0	69	51	4	1	38	0	158	153	4	1	7	1	685	698	1	3	15	1	44	49	11
4	0	0	8	14	7	2	17	0	141	140	3	2	38	0	75	75	8	2	7	1	117	112	3	4	15	1	134	140	4
5	0	0	39	36	14	3	17	0	294	291	3	1	39	0	29	33	28	3	7	1	80	74	5	5	15	1	72	77	8
1	1	0	348	343	1	4	17	0	10	42	10	2	39	0	0	3	1	4	7	1	37	36	13	-5	16	1	59	61	10
2	1	0	390	406	1	5	17	0	35	20	18	0	40	0	59	65	10	5	7	1	207	200	4	-4	16	1	166	158	3
3	1	0	13	11	13	0	18	0	541	541	2	1	40	0	93	91	7	-5	8	1	127	121	5	-3	16	1	199	191	3
4	1	0	69	69	6	1	18	0	174	178	2	1	41	0	100	99	6	-4	8	1	83	91	6	-2	16	1	39	32	9
5	1	0	73	60	6	2	18	0	97	87	4	-5	0	1	61	58	8	-3	8	1	268	270	2	-1	16	1	99	101	3
1	2	0	92	95	2	3	18	0	90	84	5	-4	0	1	25	39	25	-2	8	1	32	36	10	0	16	1	107	101	4
2	2	0	507	510	1	4	18	0	101	103	5	-3	0	1	539	532	2	-1	8	1	202	217	2	1	16	1	230	219	2
3	2	0	197	197	2	5	18	0	46	34	12	-2	0	1	94	96	3	0	8	1	461	453	5	2	16	1	53	54	7
4	2	0	84	78	5	1	19	0	214	212	2	-1	0	1	404	428	1	1	8	1	486	464	1	3	16	1	182	184	3
5	2	0	64	70	8	2	19	0	268	268	2	0	0	1	144	139	1	2	8	1	315	318	2	4	16	1	77	69	6
1	3	0	288	289	1	3	19	0	276	278	3	1	0	1	362	374	1	3	8	1	173	179	3	5	16	1	17	19	16
2	3	0	303	308	2	4	19	0	59	62	8	2	0	1	83	82	3	4	8	1	35	21	14	-5	17	1	60	51	9
3	3	0	181	177	2	5	19	0	55	32	9	3	0	1	454	454	2	5	8	1	0	33	1	-4	17	1	18	21	18
4	3	0	249	251	3	0	20	0	118	123	3	4	0	1	0	1	1	-5	9	1	81	71	6	-3	17	1	35	28	16
5	3	0	67	60	7	1	20	0	57	52	6	5	0	1	32	21	20	-4	9	1	52	46	8	-2	17	1	94	95	4
0	4	0	175	168	1	2	20	0	119	117	4	-5	1	1	46	37	11	-3	9	1	129	133	3	-1	17	1	323	327	2
1	4	0	332	340	1	3	20	0	51	51	9	-4	1	1	236	241	3	-2	9	1	107	94	3	0	17	1	105	103	4
2	4	0	53	62	4	4	20	0	30	9	28	-3	1	1	32	31	13	-1	9	1	641	657	1	1	17	1	22	27	22
3	4	0	24	7	23	5	20	0	54	32	10	-2	1	1	442	448	1	0	9	1	683	686	5	2	17	1	106	113	4
4	4	0	106	120	4	1	21	0	86	79	5	-1	1	1	383	391	1	1	9	1	172	179	2	3	17	1	86	82	5
5	4	0	90	103	6	2	21	0	126	125	3	0	1	1	52	67	2	2	9	1	141	140	2	4	17	1	0	12	1
1	5	0	751	775	1	3	21	0	222	221	3	1	1	1	381	374	1	3	9	1	71	66	5	5	17	1	84	68	7
2	5	0	323	330	2	4	21	0	102	101	5	2	1	1	192	195	2	4	9	1	34	46	15	-5	18	1	41	45	16
3	5	0	30	36	12	0	22	0	66	73	6	3	1	1	107	104	3	5	9	1	131	137	5	-4	18	1	106	110	5
4	5	0	150	148	3	1	22	0	369	356	2	4	1	1	106	115	4	-5	10	1	74	63	7	-3	18	1	147	152	4
5	5	0	45	36	12	2	22	0	114	113	4	5	1	1	75	87	7	-4	10	1	43	53	11	-2	18	1	69	69	6
0	6	0	159	157	1	3	22	0	128	130	4	-5	2	1	11	13	10	-3	10	1	129	130	3	-1	18	1	80	97	5
1	6	0	726	733	1	4	22	0	36	24	18	-4	2	1	16	19	16	-2	10	1	340	338	2	0	18	1	130	130	6
2	6	0	179	179	2	1	23	0	489	488	2	-3	2	1	246	249	2	-1	10	1	252	244	2	1	18	1	72	67	5
3	6	0	94	89	3	2	23	0	128	132	4	-2	2	1	215	219	2	0	10	1	355	360	4	2	18	1	259	259	2
4	6	0	142	142	4	3	23	0	203	207	3	-1	2	1	645	665	1	1	10	1	63	67	4	3	18	1	59	59	8
5	6	0	30	35	25	4	23	0	30	15	30	0	2	1	308	308	1	2	10	1	111	114	3	4	18	1	51	50	10
1	7	0	141	144	2	0	24	0	138	138	3	1	2	1	832	844	1	3	10	1	188	190	3	5	18	1	37	26	17
2	7	0	321	322	2	1	24	0	242	234	3	2	2	1	194	186	2	4	10	1	79	84	6	-5	19	1	98	90	6
3	7	0	0	30	1	2	24	0	53	60	9	3	2	1	67	54	5	5	10	1	0	8	1	-4	19	1	43	65	14
4	7	0	78	78	6	3	24	0	42	33	12	4	2	1	62	70	7	-5	11	1	89	91	6	-3	19	1	137	133	4
5	7	0	40	38	14	4	24	0	46	18	11	5	2	1	126	116	4	-4	11	1	0	10	1	-2	19	1	133	123	3
0	8	0	116	116	2	1	25	0	140	126	4	-5	3	1	96	98	6	-3	11	1	81	85	5	-1	19	1	282	284	2
1	8	0	324	319	1	2	25	0	0	9	1	-4	3	1	125	126	4	-2	11	1	32	42	11	0	19	1	519	516	3
2	8	0	131	132	2	3	25	0	200	202	3	-3	3	1	88	100	4	-1	11	1	433	424	1	1	19	1	68	62	5
3	8	0	77	57	4	4	25	0	42	19	14	-2	3	1	401	389	2	0	11	1	239	239	1	2	19	1	126	124	3
4	8	0	142	145	4	0	26	0	207	207	3	-1	3	1	802	814	1	1	11	1	433	429	1	3	19	1	48	44	10
5	8	0	56	60	9	1	26	0	216	213	3	0	3	1	707	712	1	2	11	1	492	483	2	4	19	1	111	112	5
1	9	0	315	310	1	2	26	0	88	66	5	1	3	1	661	666	1	3	11	1	66	55	6	-5	20	1	28	21	27
2	9	0	74	87	4	3	26	0	137	130	4	2	3	1	0	17	1	4	11	1	94	92	5	-4	20	1	84	81	6
3	9	0	215	220	3	4	26	0	129	119	5	3	3	1	166	160	3	5	11	1	79	80	7	-3	20	1	55	53	9
4	9	0	234	236	3	1	27	0	84	85	6	4	3	1	59	47	6	-5	12	1	34	27	23	-2	20	1	89	90	5
5	9	0	30	47	29	2	27	0	49	40	10	5	3	1	0	5	1	-4	12	1	181	181	3	-1	20	1	84	89	5
0	10	0	617	615	1	3	27	0	124	125	4	-5	4	1	137	132	4	-3	12	1	280	282	2	0	20	1	89	109	14
1	10	0	187	175	2	4	27	0	0	25	1	-4	4	1	72	58	6	-2	12	1	61	56	5	1	20	1	216	217	2
2	10	0	406	408	2	0	28	0	110	104	5	-3	4	1	47	55	7	-1	12	1	106	99	3	2	20	1	66	68	6
3	10	0	201	208	3	1	28	0	189	189	3	-2	4	1	152	149	2	0	12	1	266	267	4	3	20	1	60	64	8
4	10	0	159	155	4	2	28	0	101	104	5	-1	4	1	281	285	1	1	12	1	40	40	7	4	20	1	58	38	8
5	10	0	93	92	6	3	28	0	31	16	22	0	4	1	493	487	1	2	12	1	395	389	2</						

I-1235-46

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	24	1	57	74	9	-2	36	1	61	66	10	-4	6	2	119	117	5	-2	14	2	23	24	23	3	23	2	42	52	14
2	24	1	180	182	3	-1	36	1	37	20	17	-3	6	2	110	114	4	-1	14	2	212	203	2	4	23	2	23	32	23
3	24	1	53	49	9	0	36	1	44	35	9	-2	6	2	214	232	2	0	14	2	229	231	1	-4	24	2	0	26	1
4	24	1	142	141	5	1	36	1	17	45	17	-1	6	2	204	207	2	1	14	2	209	205	2	-3	24	2	0	15	1
-4	25	1	0	21	1	2	36	1	78	77	7	0	6	2	182	182	2	2	14	2	135	139	3	-2	24	2	232	229	3
-3	25	1	12	26	11	-2	37	1	44	13	13	1	6	2	150	146	2	3	14	2	31	46	22	-1	24	2	172	176	4
-2	25	1	82	85	7	-1	37	1	73	72	8	2	6	2	71	78	5	4	14	2	116	116	5	0	24	2	140	140	4
-1	25	1	139	136	3	0	37	1	106	98	4	3	6	2	47	53	8	-5	15	2	116	110	5	1	24	2	101	102	5
0	25	1	433	434	4	1	37	1	0	12	1	4	6	2	112	123	5	-4	15	2	14	22	13	2	24	2	92	105	6
1	25	1	22	39	22	2	37	1	35	17	21	5	6	2	23	27	23	-3	15	2	54	45	8	3	24	2	51	63	11
2	25	1	105	109	5	-2	38	1	114	98	5	-5	7	2	45	37	12	-2	15	2	275	275	2	4	24	2	58	38	9
3	25	1	24	42	24	-1	38	1	62	40	9	-4	7	2	181	183	3	-1	15	2	258	260	2	-4	25	2	41	38	16
4	25	1	0	33	1	0	38	1	24	35	23	-3	7	2	163	158	3	0	15	2	109	105	7	-3	25	2	166	162	4
-4	26	1	31	39	31	1	38	1	35	34	24	-2	7	2	252	250	2	1	15	2	347	337	2	-2	25	2	152	158	4
-3	26	1	46	37	10	2	38	1	160	151	4	-1	7	2	49	54	6	2	15	2	15	14	14	-1	25	2	0	58	1
-2	26	1	197	202	3	-2	39	1	74	75	9	0	7	2	61	55	3	3	15	2	188	189	3	0	25	2	71	73	6
-1	26	1	120	115	4	-1	39	1	46	40	14	1	7	2	28	30	12	4	15	2	92	84	6	1	25	2	113	111	5
0	26	1	0	14	1	0	39	1	108	108	4	2	7	2	505	496	2	-5	16	2	0	30	1	2	25	2	227	223	3
1	26	1	66	68	7	1	39	1	44	56	15	3	7	2	134	130	4	-4	16	2	47	53	11	3	25	2	93	85	6
2	26	1	209	218	3	-1	40	1	29	13	29	4	7	2	51	34	8	-3	16	2	0	44	1	4	25	2	41	39	16
3	26	1	75	79	7	0	40	1	28	25	22	5	7	2	136	139	4	-2	16	2	138	148	3	-4	26	2	80	66	7
4	26	1	0	5	1	1	40	1	56	41	11	-5	8	2	71	69	7	-1	16	2	124	127	3	-3	26	2	94	97	6
-4	27	1	0	21	1	0	41	1	95	80	4	-4	8	2	72	60	7	0	16	2	122	129	2	-2	26	2	89	81	6
-3	27	1	28	21	27	-5	0	2	30	36	29	-3	8	2	94	94	4	1	16	2	352	347	2	-1	26	2	488	490	3
-2	27	1	160	160	4	-4	0	2	70	73	6	-2	8	2	261	252	2	2	16	2	52	45	8	0	26	2	54	57	11
-1	27	1	121	126	4	-3	0	2	32	36	15	-1	8	2	471	448	2	3	16	2	68	67	7	1	26	2	163	169	4
0	27	1	127	129	3	-2	0	2	274	280	2	0	8	2	415	421	2	4	16	2	91	76	5	2	26	2	47	62	11
1	27	1	94	105	6	-1	0	2	64	68	4	1	8	2	98	97	3	-5	17	2	0	15	1	3	26	2	58	52	9
2	27	1	102	102	5	0	0	2	795	812	3	2	8	2	136	139	3	-4	17	2	85	82	6	4	26	2	81	93	8
3	27	1	103	108	5	1	0	2	45	45	6	3	8	2	206	207	3	-3	17	2	129	130	4	-4	27	2	15	23	15
4	27	1	36	34	20	2	0	2	35	27	9	4	8	2	28	28	28	-2	17	2	70	73	6	-3	27	2	89	90	6
-4	28	1	99	89	6	3	0	2	27	16	18	5	8	2	27	28	27	-1	17	2	40	57	10	-2	27	2	36	55	18
-3	28	1	50	47	11	4	0	2	46	53	10	-5	9	2	29	38	28	0	17	2	43	47	7	-1	27	2	97	134	8
-2	28	1	156	150	4	5	0	2	0	7	1	-4	9	2	188	192	3	1	17	2	91	92	4	0	27	2	69	69	5
-1	28	1	59	63	9	-5	1	2	127	137	5	-3	9	2	55	46	7	2	17	2	18	32	17	1	27	2	142	148	4
0	28	1	0	19	1	-4	1	2	94	96	5	-2	9	2	189	194	2	3	17	2	214	224	3	2	27	2	86	92	6
1	28	1	75	74	7	-3	1	2	239	240	2	-1	9	2	145	143	2	4	17	2	128	122	5	3	27	2	53	39	10
2	28	1	243	239	3	-2	1	2	127	136	3	0	9	2	0	10	1	-5	18	2	35	16	20	-4	28	2	0	19	1
3	28	1	67	67	8	-1	1	2	218	222	2	1	9	2	134	131	2	-4	18	2	39	27	14	-3	28	2	33	29	19
4	28	1	91	87	7	0	1	2	305	293	1	2	9	2	599	599	2	-3	18	2	88	98	6	-2	28	2	87	86	6
-4	29	1	67	73	9	1	1	2	388	375	2	3	9	2	24	14	24	-2	18	2	76	79	6	-1	28	2	285	284	3
-3	29	1	60	33	8	2	1	2	224	223	2	4	9	2	90	84	5	-1	18	2	206	207	2	0	28	2	22	18	22
-2	29	1	110	99	5	3	1	2	30	24	14	5	9	2	26	10	26	0	18	2	141	145	2	1	28	2	130	135	4
-1	29	1	102	99	5	4	1	2	139	141	4	-5	10	2	70	76	8	1	18	2	35	24	12	2	28	2	119	113	4
0	29	1	276	276	2	5	1	2	37	23	15	-4	10	2	76	81	6	2	18	2	119	116	4	3	28	2	23	22	22
1	29	1	49	59	11	-5	2	2	98	85	5	-3	10	2	89	98	5	3	18	2	216	221	3	-3	29	2	83	86	7
2	29	1	123	127	4	-4	2	2	48	53	10	-2	10	2	430	429	2	4	18	2	52	53	10	-2	29	2	120	115	4
3	29	1	59	56	9	-3	2	2	46	39	8	-1	10	2	294	287	2	-4	19	2	53	59	10	-1	29	2	0	38	1
-4	30	1	69	65	8	-2	2	2	39	44	8	0	10	2	336	335	1	-3	19	2	115	119	4	0	29	2	57	56	6
-3	30	1	109	103	5	-1	2	2	258	265	2	1	10	2	409	407	2	-2	19	2	156	150	3	1	29	2	16	26	15
-2	30	1	91	77	6	0	2	2	286	286	2	2	10	2	195	201	2	-1	19	2	61	74	7	2	29	2	62	52	8
-1	30	1	155	158	4	1	2	2	305	291	2	3	10	2	62	68	7	0	19	2	55	70	54	3	29	2	99	95	6
0	30	1	78	63	7	2	2	2	316	322	2	4	10	2	155	154	4	1	19	2	61	57	7	-3	30	2	53	38	11
1	30	1	63	52	8	3	2	2	85	86	5	5	10	2	47	48	11	2	19	2	281	286	3	-2	30	2	42	28	14
2	30	1	84	81	6	4	2	2	0	14	1	-5	11	2	22	19	22	3	19	2	37	52	16	-1	30	2	0	21	1
3	30	1	31	21	30	5	2	2	104	108	6	-4	11	2	94	90	5	4	19	2	0	18	1	0	30	2	172	171	2
-3	31	1	34	35	23	-5	3	2	75	72	7	-3	11	2	26	13	26	-4	20	2	59	64	9	1	30	2	140	132	4
-2	31	1	237	245	3	-4	3	2	0	3	1	-2	11	2	73	75	5	-3	20	2	102	115	5	2	30	2	37	28	17
-1	31	1	49	45	10	-3	3	2	62	61	6	-1	11	2	345	327	2	-2	20	2	116	121	4	3	30	2	0		

I-1235-47

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	36	2	54	44	11	-1	7	3	281	287	2	1	16	3	261	263	3	-1	27	3	60	46	9	-4	4	4	80	70	7
-1	36	2	131	133	5	0	7	3	140	135	2	2	16	3	0	6	1	0	27	3	83	82	4	-3	4	4	50	34	10
0	36	2	43	48	9	1	7	3	131	140	3	3	16	3	83	73	6	1	27	3	89	89	6	-2	4	4	49	33	10
1	36	2	189	184	4	2	7	3	73	72	5	4	16	3	65	43	8	2	27	3	165	168	4	-1	4	4	89	75	5
2	36	2	87	94	7	3	7	3	28	25	28	-4	17	3	73	85	8	3	27	3	103	105	6	0	4	4	237	243	2
-2	37	2	0	1	1	4	7	3	66	61	7	-3	17	3	216	225	3	-3	28	3	62	63	10	1	4	4	108	108	4
-1	37	2	53	57	12	-5	8	3	70	63	8	-2	17	3	0	21	1	-2	28	3	149	155	4	2	4	4	125	125	4
0	37	2	58	59	7	-4	8	3	147	148	4	-1	17	3	306	307	3	-1	28	3	212	207	3	3	4	4	120	121	4
1	37	2	50	48	13	-3	8	3	147	150	4	0	17	3	278	276	2	0	28	3	58	58	7	4	4	4	74	80	7
-1	38	2	114	121	5	-2	8	3	78	66	5	1	17	3	71	68	6	1	28	3	124	122	4	-4	5	4	142	135	4
0	38	2	57	37	7	-1	8	3	55	58	6	2	17	3	89	85	5	2	28	3	50	34	11	-3	5	4	154	154	4
1	38	2	92	86	6	0	8	3	157	156	2	3	17	3	23	36	22	3	28	3	0	25	1	-2	5	4	285	286	3
-1	39	2	59	50	12	1	8	3	129	131	3	4	17	3	39	34	15	-3	29	3	0	27	1	-1	5	4	193	189	3
0	39	2	87	82	5	2	8	3	124	121	3	-4	18	3	38	42	16	-2	29	3	73	98	9	0	5	4	214	215	2
1	39	2	0	27	1	3	8	3	174	185	4	-3	18	3	156	156	4	-1	29	3	50	70	13	1	5	4	44	27	10
0	40	2	20	35	20	4	8	3	29	12	24	-2	18	3	190	193	3	0	29	3	239	243	2	2	5	4	306	313	3
-5	0	3	0	1	1	-5	9	3	32	59	31	-1	18	3	160	166	3	1	29	3	34	27	22	3	5	4	33	22	18
-4	0	3	26	33	25	-4	9	3	61	69	8	0	18	3	147	148	2	2	29	3	47	50	13	4	5	4	50	40	12
-3	0	3	309	315	3	-3	9	3	0	33	1	1	18	3	76	77	6	3	29	3	96	108	7	-4	6	4	66	70	9
-2	0	3	20	15	20	-2	9	3	158	156	3	2	18	3	143	138	4	-3	30	3	37	15	17	-3	6	4	108	106	5
-1	0	3	97	101	4	-1	9	3	71	77	5	3	18	3	93	85	5	-2	30	3	122	113	5	-2	6	4	145	144	4
0	0	3	0	1	1	0	9	3	99	89	2	4	18	3	0	46	1	-1	30	3	61	67	10	-1	6	4	61	54	7
1	0	3	232	245	2	1	9	3	208	213	2	-4	19	3	0	27	1	0	30	3	47	56	17	0	6	4	95	93	3
2	0	3	0	23	1	2	9	3	0	23	1	-3	19	3	42	31	13	1	30	3	40	52	16	1	6	4	145	151	3
3	0	3	22	37	22	3	9	3	62	61	7	-2	19	3	161	161	4	2	30	3	93	91	7	2	6	4	121	124	4
4	0	3	22	31	21	4	9	3	82	87	7	-1	19	3	65	73	8	-3	31	3	76	79	9	3	6	4	40	50	14
-5	1	3	0	18	1	-5	10	3	116	109	5	0	19	3	169	202	18	-2	31	3	69	46	8	4	6	4	90	77	6
-4	1	3	72	71	6	-4	10	3	75	78	7	1	19	3	56	47	8	-1	31	3	0	9	1	-4	7	4	45	44	14
-3	1	3	307	308	3	-3	10	3	0	32	1	2	19	3	89	92	5	0	31	3	124	129	3	-3	7	4	58	58	8
-2	1	3	70	72	5	-2	10	3	107	100	4	3	19	3	0	12	1	1	31	3	0	12	1	-2	7	4	108	102	5
-1	1	3	356	357	2	-1	10	3	196	195	2	4	19	3	170	173	5	2	31	3	133	136	5	-1	7	4	127	131	4
0	1	3	147	139	2	0	10	3	109	107	4	-4	20	3	71	62	8	-2	32	3	24	11	24	0	7	4	53	50	9
1	1	3	60	70	6	1	10	3	189	189	3	-3	20	3	0	20	1	-1	32	3	0	8	1	1	7	4	149	146	3
2	1	3	70	72	5	2	10	3	73	78	6	-2	20	3	22	30	22	0	32	3	0	25	1	2	7	4	84	78	6
3	1	3	161	164	4	3	10	3	98	105	5	-1	20	3	59	60	8	1	32	3	143	144	5	3	7	4	124	126	4
4	1	3	45	13	10	4	10	3	85	91	7	0	20	3	233	230	4	2	32	3	96	108	7	4	7	4	35	40	25
-5	2	3	0	26	1	-5	11	3	64	61	9	1	20	3	103	106	5	-2	33	3	0	11	1	-4	8	4	87	69	6
-4	2	3	110	113	5	-4	11	3	35	59	18	2	20	3	162	161	3	-1	33	3	9	24	9	-3	8	4	70	73	7
-3	2	3	185	188	3	-3	11	3	49	51	10	3	20	3	27	39	26	0	33	3	246	247	4	-2	8	4	68	66	7
-2	2	3	35	27	11	-2	11	3	115	115	4	4	20	3	106	115	6	1	33	3	78	59	7	-1	8	4	210	221	3
-1	2	3	491	482	2	-1	11	3	129	137	3	-4	21	3	54	32	10	2	33	3	32	38	32	0	8	4	224	228	3
0	2	3	21	16	20	0	11	3	40	33	8	-3	21	3	9	24	8	-2	34	3	116	113	6	1	8	4	25	29	25
1	2	3	290	275	2	1	11	3	169	169	3	-2	21	3	36	30	17	-1	34	3	53	35	9	2	8	4	164	161	4
2	2	3	29	28	18	2	11	3	111	105	4	-1	21	3	129	131	4	0	34	3	51	67	9	3	8	4	85	87	6
3	2	3	178	177	3	3	11	3	41	33	12	0	21	3	247	257	4	1	34	3	40	52	18	4	8	4	46	36	12
4	2	3	21	28	20	4	11	3	80	80	6	1	21	3	60	64	8	-2	35	3	59	55	10	-4	9	4	57	45	10
-5	3	3	107	95	5	-5	12	3	34	23	21	2	21	3	83	92	6	-1	35	3	30	35	30	-3	9	4	10	10	10
-4	3	3	0	8	1	-4	12	3	35	55	19	3	21	3	58	63	9	0	35	3	104	108	4	-2	9	4	0	35	1
-3	3	3	235	236	3	-3	12	3	206	209	3	4	21	3	27	39	27	1	35	3	18	20	18	-1	9	4	68	66	7
-2	3	3	156	154	3	-2	12	3	51	45	8	-4	22	3	42	32	17	-1	36	3	83	70	7	0	9	4	0	32	1
-1	3	3	82	86	4	-1	12	3	228	221	2	-3	22	3	50	43	10	0	36	3	103	111	4	1	9	4	36	58	17
0	3	3	353	337	1	0	12	3	223	222	2	-2	22	3	150	151	4	1	36	3	100	91	7	2	9	4	176	168	3
1	3	3	337	345	2	1	12	3	122	121	4	-1	22	3	40	39	16	-1	37	3	0	14	1	3	9	4	55	61	9
2	3	3	60	51	6	2	12	3	39	56	12	0	22	3	270	274	2	0	37	3	52	54	9	4	9	4	78	71	7
3	3	3	118	118	4	3	12	3	193	189	3	1	22	3	88	77	5	-4	0	4	84	83	6	-4	10	4	28	33	27
4	3	3	75	67	7	4	12	3	45	44	13	2	22	3	35	25	16	-3	0	4	31	35	26	-3	10	4	40	39	13
-5	4	3	20	31	20	-5	13	3	22	14	21	3	22	3	0	23	1	-2	0	4	278	282	3	-2	10	4	85	88	6
-4	4	3	60	54	8	-4	13	3	0	49	1	-4	23	3	126	128	5	-1	0	4	15	1	14	-1	10	4	0	14	1
-3	4	3	141	146	4	-3	13	3	71	74	7	-3	23	3	50	51	11	0	0	4	262	254	2	0	10	4	158	154	2
-2	4	3	150	145	3	-2	13	3																					

I-1235-48

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 4

3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	14	4	67	57	7	1	24	4	181	173	4	1	4	5	44	23	11	-2	15	5	0	22	1	-1	2	6	77	77	7
-2	14	4	144	133	4	2	24	4	99	89	5	2	4	5	72	72	7	-1	15	5	0	40	1	0	2	6	75	69	5
-1	14	4	64	62	8	-3	25	4	28	8	27	3	4	5	171	163	4	0	15	5	155	158	3	1	2	6	46	43	13
0	14	4	173	176	2	-2	25	4	39	18	16	-4	5	5	81	69	7	1	15	5	66	72	8	2	2	6	76	75	8
1	14	4	240	242	3	-1	25	4	56	36	9	-3	5	5	11	23	10	2	15	5	83	78	7	-3	3	6	47	48	14
2	14	4	43	50	12	0	25	4	19	31	18	-2	5	5	33	40	21	-3	16	5	56	43	10	-2	3	6	31	23	30
3	14	4	49	33	10	1	25	4	42	41	15	-1	5	5	143	139	4	-2	16	5	97	97	5	-1	3	6	54	68	11
-4	15	4	0	17	1	2	25	4	23	34	22	0	5	5	115	111	3	-1	16	5	84	74	6	0	3	6	120	128	5
-3	15	4	19	40	19	-3	26	4	52	53	13	1	5	5	95	90	5	0	16	5	109	99	3	1	3	6	35	48	23
-2	15	4	289	294	3	-2	26	4	60	53	10	2	5	5	50	62	12	1	16	5	92	89	6	2	3	6	0	17	1
-1	15	4	23	41	23	-1	26	4	222	221	4	3	5	5	58	72	11	2	16	5	57	50	9	-3	4	6	45	11	14
0	15	4	109	113	3	0	26	4	80	82	6	-4	6	5	46	30	12	-3	17	5	63	28	9	-2	4	6	16	7	16
1	15	4	48	63	12	1	26	4	57	62	9	-3	6	5	47	54	12	-2	17	5	71	75	8	-1	4	6	74	78	7
2	15	4	37	30	13	2	26	4	68	79	8	-2	6	5	10	8	10	-1	17	5	107	104	5	0	4	6	173	170	3
3	15	4	21	19	20	-3	27	4	92	83	7	-1	6	5	36	45	19	0	17	5	84	82	4	1	4	6	83	82	6
-4	16	4	16	18	16	-2	27	4	0	22	1	0	6	5	95	97	4	1	17	5	36	22	17	2	4	6	26	25	25
-3	16	4	14	27	13	-1	27	4	117	120	5	1	6	5	42	51	13	2	17	5	59	64	9	-3	5	6	40	61	19
-2	16	4	12	32	11	0	27	4	42	23	10	2	6	5	177	179	4	-3	18	5	89	88	7	-2	5	6	68	73	9
-1	16	4	195	196	3	1	27	4	139	144	5	3	6	5	53	40	11	-2	18	5	34	12	20	-1	5	6	38	36	18
0	16	4	213	215	2	2	27	4	50	49	12	-4	7	5	58	45	10	-1	18	5	126	124	5	0	5	6	28	36	21
1	16	4	103	103	5	-2	28	4	29	43	29	-3	7	5	58	50	9	0	18	5	0	8	1	1	5	6	52	57	12
2	16	4	60	60	8	-1	28	4	44	5	13	-2	7	5	172	164	4	1	18	5	88	85	6	2	5	6	82	76	7
3	16	4	37	10	16	0	28	4	73	74	5	-1	7	5	236	227	3	2	18	5	68	67	8	-3	6	6	25	8	25
-4	17	4	46	44	14	1	28	4	114	116	5	0	7	5	109	106	3	-3	19	5	39	23	17	-2	6	6	59	53	10
-3	17	4	71	70	8	2	28	4	33	42	32	1	7	5	116	107	4	-2	19	5	71	67	8	-1	6	6	61	61	10
-2	17	4	113	122	5	-2	29	4	0	40	1	2	7	5	135	128	4	-1	19	5	37	31	18	0	6	6	6	16	6
-1	17	4	154	152	4	-1	29	4	63	61	9	3	7	5	96	96	6	0	19	5	31	35	15	1	6	6	0	6	1
0	17	4	136	131	3	0	29	4	63	70	7	-4	8	5	93	89	6	1	19	5	38	54	19	2	6	6	60	58	10
1	17	4	230	234	3	1	29	4	52	56	12	-3	8	5	90	77	6	2	19	5	97	93	6	-3	7	6	51	51	12
2	17	4	93	100	5	2	29	4	20	38	19	-2	8	5	66	67	8	-3	20	5	63	61	10	-2	7	6	38	39	19
3	17	4	159	162	4	-2	30	4	104	95	6	-1	8	5	280	290	3	-2	20	5	21	26	20	-1	7	6	40	27	16
-4	18	4	79	78	8	-1	30	4	65	49	8	0	8	5	45	49	25	-1	20	5	56	28	9	0	7	6	16	18	15
-3	18	4	34	52	18	0	30	4	29	32	28	1	8	5	172	171	4	0	20	5	0	26	1	1	7	6	92	96	6
-2	18	4	122	132	4	1	30	4	125	122	5	2	8	5	32	31	25	1	20	5	73	84	8	2	7	6	29	25	28
-1	18	4	88	77	6	-2	31	4	0	35	1	3	8	5	43	34	16	2	20	5	99	99	6	-3	8	6	24	51	24
0	18	4	28	37	19	-1	31	4	0	24	1	-4	9	5	57	51	11	-3	21	5	60	42	10	-2	8	6	0	11	1
1	18	4	122	118	4	0	31	4	31	31	16	-3	9	5	17	9	16	-2	21	5	35	21	19	-1	8	6	33	36	25
2	18	4	144	134	4	1	31	4	52	47	12	-2	9	5	42	39	14	-1	21	5	38	24	17	0	8	6	10	25	10
3	18	4	0	29	1	-1	32	4	83	84	8	-1	9	5	129	132	5	0	21	5	79	77	5	1	8	6	0	13	1
-4	19	4	0	9	1	0	32	4	8	38	7	0	9	5	53	50	6	1	21	5	108	101	5	2	8	6	29	11	28
-3	19	4	89	87	6	1	32	4	57	57	12	1	9	5	119	115	5	2	21	5	0	7	1	-2	9	6	88	81	7
-2	19	4	94	92	5	-1	33	4	61	55	11	2	9	5	23	43	22	-2	22	5	20	33	20	-1	9	6	0	28	1
-1	19	4	83	85	6	0	33	4	0	11	1	3	9	5	83	93	7	-1	22	5	51	37	11	0	9	6	88	98	5
0	19	4	193	200	2	-4	0	5	25	28	24	-4	10	5	68	53	8	0	22	5	29	9	20	1	9	6	65	68	9
1	19	4	171	172	4	-3	0	5	0	22	1	-3	10	5	21	20	21	1	22	5	22	20	22	-2	10	6	32	28	31
2	19	4	32	40	23	-2	0	5	83	82	6	-2	10	5	118	126	5	2	22	5	48	42	13	-1	10	6	46	51	14
3	19	4	0	24	1	-1	0	5	127	127	4	-1	10	5	153	156	4	-2	23	5	0	20	1	0	10	6	70	61	5
-4	20	4	46	54	15	0	0	5	54	59	6	0	10	5	127	131	3	-1	23	5	117	112	5	1	10	6	101	97	5
-3	20	4	81	88	8	1	0	5	102	103	5	1	10	5	57	61	10	0	23	5	114	115	4	-2	11	6	101	94	6
-2	20	4	77	80	7	2	0	5	32	23	21	2	10	5	100	110	6	1	23	5	26	36	26	-1	11	6	44	34	13
-1	20	4	208	205	3	3	0	5	29	10	29	3	10	5	53	41	11	-2	24	5	87	87	7	0	11	6	127	122	4
0	20	4	23	23	22	-4	1	5	55	70	12	-4	11	5	58	33	9	-1	24	5	43	16	15	1	11	6	0	8	1
1	20	4	37	29	14	-3	1	5	49	25	11	-3	11	5	0	14	1	0	24	5	5	22	5	-2	12	6	59	26	9
2	20	4	15	18	15	-2	1	5	72	68	7	-2	11	5	36	52	19	1	24	5	93	87	6	-1	12	6	148	157	5
3	20	4	83	81	7	-1	1	5	39	46	16	-1	11	5	8	13	8	-2	25	5	63	65	10	0	12	6	124	120	4
-3	21	4	184	195	4	0	1	5	41	46	9	0	11	5	74	75	5	-1	25	5	104	97	6	1	12	6	59	49	10
-2	21	4	166	167	4	1	1	5	60	71	9	1	11	5	158	157	4	0	25	5	0	16	1	-2	13	6	49	21	11
-1	21	4	0	29	1	2	1	5	99	112	5	2	11	5	79	69	7	1	25	5	0	22	1	-1	13	6	41	39	18
0	21	4	62	57	5	3	1	5	57	56	10	3	11	5	27	17	26	-2	26	5	72	76	9	0	13	6	141	148	9
1	21	4	35	39	18	-4	2																						

I-1235-49

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	487	464	1	6	2	1	145	148	1	-6	1	2	59	60	1	-2	8	2	95	96	1	6	5	3	85	83	1
4	0	0	129	143	1	-6	3	1	101	99	1	-5	1	2	138	140	1	-1	8	2	90	89	1	-5	6	3	26	29	4
6	0	0	169	171	1	-5	3	1	58	58	1	-4	1	2	131	126	1	0	8	2	8	6	7	-4	6	3	108	111	1
2	1	0	231	235	1	-4	3	1	53	53	1	-3	1	2	92	97	1	1	8	2	89	89	1	-3	6	3	170	167	1
3	1	0	384	376	1	-3	3	1	102	102	1	-2	1	2	158	162	1	2	8	2	95	96	1	-2	6	3	152	149	1
4	1	0	226	225	1	-2	3	1	369	360	1	-1	1	2	393	416	1	3	8	2	45	52	2	-1	6	3	0	16	1
5	1	0	137	138	1	-1	3	1	167	161	1	0	1	2	131	113	1	4	8	2	20	10	5	0	6	3	75	71	1
6	1	0	77	80	1	0	3	1	266	254	1	1	1	2	392	416	1	-3	9	2	108	101	1	1	6	3	19	15	3
7	1	0	51	52	2	1	3	1	174	161	1	2	1	2	154	162	1	-2	9	2	117	116	1	2	6	3	149	149	1
0	2	0	1093	1142	2	2	3	1	366	360	1	3	1	2	96	97	1	-1	9	2	31	36	3	3	6	3	169	167	1
1	2	0	249	218	1	3	3	1	100	102	1	4	1	2	132	126	1	0	9	2	7	11	7	4	6	3	107	111	1
2	2	0	236	234	1	4	3	1	58	52	1	5	1	2	139	140	1	1	9	2	36	36	2	5	6	3	35	29	3
3	2	0	448	455	1	5	3	1	63	58	1	6	1	2	56	60	2	2	9	2	113	116	1	-5	7	3	61	58	2
4	2	0	10	3	9	6	3	1	104	99	1	7	1	2	145	146	1	3	9	2	112	101	1	-4	7	3	153	154	1
5	2	0	48	46	2	-6	4	1	72	73	1	-6	2	2	120	121	1	-1	10	2	18	15	6	-3	7	3	85	84	1
6	2	0	79	80	1	-5	4	1	52	47	1	-5	2	2	87	87	1	0	10	2	35	38	2	-2	7	3	120	123	1
1	3	0	57	36	1	-4	4	1	146	143	1	-4	2	2	235	233	1	1	10	2	19	15	5	-1	7	3	131	136	1
2	3	0	162	162	1	-3	4	1	63	65	1	-3	2	2	24	23	2	1	0	3	935	920	5	0	7	3	185	185	1
3	3	0	138	133	1	-2	4	1	57	60	1	-2	2	2	169	169	1	2	0	3	242	231	1	1	7	3	132	136	1
4	3	0	114	108	1	-1	4	1	155	158	1	-1	2	2	532	550	1	3	0	3	225	210	1	2	7	3	123	123	1
5	3	0	54	60	1	0	4	1	83	82	1	0	2	2	54	55	1	4	0	3	45	41	1	3	7	3	86	84	1
6	3	0	122	125	1	1	4	1	151	158	1	1	2	2	538	550	1	5	0	3	315	313	1	4	7	3	150	154	1
0	4	0	370	371	1	2	4	1	60	60	1	2	2	2	168	169	1	6	0	3	64	63	1	5	7	3	59	58	2
1	4	0	12	16	5	3	4	1	62	65	1	3	2	2	26	23	2	7	0	3	0	6	1	-4	8	3	129	129	1
2	4	0	449	436	1	4	4	1	144	143	1	4	2	2	238	233	1	-7	1	3	172	172	1	-3	8	3	65	63	1
3	4	0	318	323	1	5	4	1	51	47	2	5	2	2	91	87	1	-6	1	3	155	150	1	-2	8	3	187	189	1
4	4	0	71	69	1	6	4	1	73	73	1	6	2	2	120	121	1	-5	1	3	45	43	2	-1	8	3	164	160	1
5	4	0	45	43	2	-6	5	1	105	101	1	-6	3	2	166	164	1	-4	1	3	113	108	1	0	8	3	305	310	1
6	4	0	105	109	1	-5	5	1	98	98	1	-5	3	2	90	92	1	-3	1	3	84	91	1	1	8	3	160	160	1
1	5	0	93	96	1	-4	5	1	63	62	1	-4	3	2	140	136	1	-2	1	3	675	678	1	2	8	3	184	189	1
2	5	0	224	223	1	-3	5	1	27	29	2	-3	3	2	93	90	1	-1	1	3	237	233	1	3	8	3	66	63	1
3	5	0	208	201	1	-2	5	1	139	128	1	-2	3	2	312	310	1	0	1	3	16	5	3	4	8	3	129	129	1
4	5	0	63	64	1	-1	5	1	287	294	1	-1	3	2	119	115	1	1	1	3	236	233	1	-3	9	3	87	88	1
5	5	0	128	130	1	0	5	1	148	148	1	0	3	2	287	295	1	2	1	3	678	678	1	-2	9	3	50	45	2
6	5	0	30	31	3	1	5	1	296	294	1	1	3	2	114	116	1	3	1	3	86	91	1	-1	9	3	34	32	2
0	6	0	31	31	2	2	5	1	137	128	1	2	3	2	312	310	1	4	1	3	109	108	1	0	9	3	83	81	1
1	6	0	126	122	1	3	5	1	29	29	2	3	3	2	90	90	1	5	1	3	35	43	2	1	9	3	26	32	3
2	6	0	65	63	1	4	5	1	56	62	1	4	3	2	140	136	1	6	1	3	153	150	1	2	9	3	50	45	2
3	6	0	89	90	1	5	5	1	100	98	1	5	3	2	86	92	1	7	1	3	171	172	1	3	9	3	89	88	1
4	6	0	162	162	1	6	5	1	104	101	1	6	3	2	163	164	1	-6	2	3	48	46	2	0	10	3	123	126	1
5	6	0	44	42	2	-5	6	1	59	55	1	-6	4	2	14	15	13	-5	2	3	173	173	1	0	0	4	357	376	2
1	7	0	275	278	1	-4	6	1	62	61	1	-5	4	2	87	88	1	-4	2	3	158	155	1	1	0	4	335	331	2
2	7	0	123	123	1	-3	6	1	55	52	1	-4	4	2	206	205	1	-3	2	3	122	114	1	2	0	4	480	458	5
3	7	0	113	120	1	-2	6	1	187	186	1	-3	4	2	142	146	1	-2	2	3	179	171	1	3	0	4	172	169	1
4	7	0	119	128	1	-1	6	1	97	98	1	-2	4	2	217	211	1	-1	2	3	305	319	1	4	0	4	65	67	1
5	7	0	64	62	2	0	6	1	8	2	7	-1	4	2	138	134	1	0	2	3	252	260	1	5	0	4	77	77	1
0	8	0	63	60	1	1	6	1	98	98	1	0	4	2	120	119	1	1	2	3	305	319	1	6	0	4	47	46	1
1	8	0	274	279	1	2	6	1	191	186	1	1	4	2	141	134	1	2	2	3	175	171	1	-6	1	4	44	49	2
2	8	0	69	70	1	3	6	1	52	52	1	2	4	2	217	211	1	3	2	3	125	114	1	-5	1	4	128	129	1
3	8	0	17	11	6	4	6	1	57	61	1	3	4	2	139	146	1	4	2	3	157	155	1	-4	1	4	98	102	1
4	8	0	16	24	9	5	6	1	54	55	2	4	4	2	208	205	1	5	2	3	174	173	1	-3	1	4	149	136	1
1	9	0	133	133	1	-5	7	1	93	93	1	5	4	2	89	88	1	6	2	3	44	46	2	-2	1	4	587	577	1
2	9	0	54	52	2	-4	7	1	5	7	5	6	4	2	0	15	1	-6	3	3	58	53	2	-1	1	4	680	691	1
3	9	0	13	7	12	-3	7	1	58	55	1	-6	5	2	77	79	1	-5	3	3	168	173	1	0	1	4	132	163	1
0	10	0	61	56	2	-2	7	1	88	93	1	-5	5	2	31	22	3	-4	3	3	230	228	1	1	1	4	682	691	1
1	10	0	126	131	1	-1	7	1	81	85	1	-4	5	2	56	55	1	-3	3	3	54	53	1	2	1	4	586	577	1
1	0	1	221	225	2	0	7	1	171	178	1	-3	5	2	104	105	1	-2	3	3	227	214	1	3	1	4	151	136	1
2	0	1	300	270	1	1	7	1	83	86	1	-2	5	2	106	105	1	-1	3	3	581	591	1	4	1	4	99	102	1
3	0	1	199	180	1	2	7	1	92	93	1	-1	5	2	116	118	1	0	3	3	313	321	1	5	1	4	134	129	1
4	0	1	191	193	1	3	7	1	55	55	1	0	5	2	294	303	1	1	3	3	583	59							

I-1235-50

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	4	4	123	119	1	6	2	5	48	45	2	5	1	6	96	97	1	-6	1	7	76	82	1	-2	9	7	100	98	1
-1	4	4	202	210	1	-6	3	5	144	148	1	6	1	6	109	116	1	-5	1	7	75	77	1	-1	9	7	103	100	1
0	4	4	118	117	1	-5	3	5	163	163	1	-6	2	6	73	71	1	-4	1	7	186	186	1	0	9	7	126	125	1
1	4	4	207	210	1	-4	3	5	38	39	2	-5	2	6	118	124	1	-3	1	7	169	162	1	1	9	7	107	100	1
2	4	4	123	119	1	-3	3	5	219	210	1	-4	2	6	126	129	1	-2	1	7	333	315	1	2	9	7	102	98	1
3	4	4	95	93	1	-2	3	5	71	70	1	-3	2	6	121	127	1	-1	1	7	481	486	1	0	0	8	259	258	1
4	4	4	201	207	1	-1	3	5	162	151	1	-2	2	6	74	63	1	0	1	7	160	158	1	1	0	8	11	19	3
5	4	4	164	167	1	0	3	5	82	75	2	-1	2	6	106	107	1	1	1	7	486	486	1	2	0	8	205	196	1
6	4	4	46	44	2	1	3	5	163	151	1	0	2	6	186	201	1	2	1	7	335	315	1	3	0	8	257	261	1
-6	5	4	40	36	2	2	3	5	72	70	1	1	2	6	108	107	1	3	1	7	168	162	1	4	0	8	89	83	1
-5	5	4	136	136	1	3	3	5	214	210	1	2	2	6	72	64	1	4	1	7	186	186	1	5	0	8	71	77	2
-4	5	4	196	195	1	4	3	5	41	39	2	3	2	6	121	127	1	5	1	7	76	77	1	6	0	8	99	102	1
-3	5	4	149	148	1	5	3	5	165	163	1	4	2	6	129	128	1	6	1	7	79	82	1	-6	1	8	110	104	1
-2	5	4	191	190	1	6	3	5	147	148	1	5	2	6	119	124	1	-6	2	7	102	102	1	-5	1	8	182	188	1
-1	5	4	334	330	1	-6	4	5	136	134	1	6	2	6	73	71	1	-5	2	7	166	168	1	-4	1	8	213	213	1
0	5	4	311	308	2	-5	4	5	17	11	6	-6	3	6	113	113	1	-4	2	7	121	119	1	-3	1	8	243	243	1
1	5	4	338	330	1	-4	4	5	196	195	1	-5	3	6	42	39	2	-3	2	7	257	249	1	-2	1	8	256	256	1
2	5	4	194	190	1	-3	4	5	106	112	1	-4	3	6	129	135	1	-2	2	7	229	236	1	-1	1	8	375	391	1
3	5	4	150	148	1	-2	4	5	155	164	1	-3	3	6	189	196	1	-1	2	7	163	162	1	0	1	8	416	408	2
4	5	4	195	195	1	-1	4	5	36	29	1	-2	3	6	57	62	1	0	2	7	115	136	1	1	1	8	379	391	1
5	5	4	139	136	1	0	4	5	118	131	1	-1	3	6	155	148	1	1	2	7	160	162	1	2	1	8	261	256	1
6	5	4	42	36	2	1	4	5	32	29	1	0	3	6	225	202	1	2	2	7	230	236	1	3	1	8	241	243	1
-5	6	4	89	84	1	2	4	5	157	164	1	1	3	6	159	148	1	3	2	7	259	249	1	4	1	8	216	213	1
-4	6	4	131	135	1	3	4	5	105	112	1	2	3	6	57	62	1	4	2	7	120	119	1	5	1	8	187	188	1
-3	6	4	42	43	2	4	4	5	193	195	1	3	3	6	189	196	1	5	2	7	167	168	1	6	1	8	107	104	1
-2	6	4	29	25	2	5	4	5	18	11	5	4	3	6	133	136	1	6	2	7	104	102	1	-6	2	8	33	31	3
-1	6	4	148	148	1	6	4	5	137	134	1	5	3	6	38	39	2	-6	3	7	108	104	1	-5	2	8	141	147	1
0	6	4	257	255	1	-5	5	5	74	76	1	6	3	6	113	113	1	-5	3	7	187	190	1	-4	2	8	63	59	1
1	6	4	145	148	1	-4	5	5	104	108	1	-6	4	6	41	41	2	-4	3	7	163	165	1	-3	2	8	227	230	1
2	6	4	25	25	3	-3	5	5	72	67	1	-5	4	6	209	217	1	-3	3	7	108	108	1	-2	2	8	178	167	1
3	6	4	46	43	2	-2	5	5	160	157	1	-4	4	6	75	73	1	-2	3	7	126	133	1	-1	2	8	243	240	1
4	6	4	136	135	1	-1	5	5	72	77	1	-3	4	6	183	189	1	-1	3	7	381	379	1	0	2	8	186	185	1
5	6	4	84	84	1	0	5	5	43	53	1	-2	4	6	140	138	1	0	3	7	123	126	1	1	2	8	247	240	1
-4	7	4	114	110	1	1	5	5	74	77	1	-1	4	6	160	156	1	1	3	7	383	379	1	2	2	8	182	167	1
-3	7	4	90	91	1	2	5	5	160	157	1	0	4	6	57	56	1	3	3	7	107	107	1	4	2	8	58	59	1
-2	7	4	205	204	1	3	5	5	72	67	1	2	4	6	138	138	1	4	3	7	163	165	1	5	2	8	145	147	1
-1	7	4	77	81	1	4	5	5	105	108	1	3	4	6	185	189	1	5	3	7	185	190	1	6	2	8	33	31	3
0	7	4	31	29	1	5	5	5	76	76	1	4	4	6	74	73	1	6	3	7	105	104	1	-6	3	8	96	94	1
1	7	4	79	82	1	-5	6	5	91	93	1	5	4	6	207	217	1	-6	4	7	19	19	6	-5	3	8	15	19	8
2	7	4	205	204	1	-4	6	5	47	47	2	4	4	6	45	41	2	-5	4	7	62	63	1	-4	3	8	142	142	1
3	7	4	93	91	1	-3	6	5	138	143	1	6	4	6	53	52	2	-4	4	7	205	205	1	-3	3	8	246	253	1
4	7	4	116	110	1	-2	6	5	99	95	1	-5	5	6	107	109	1	-3	4	7	229	237	1	-2	3	8	174	171	1
-4	8	4	78	71	1	-1	6	5	117	119	1	-4	5	6	182	181	1	-2	4	7	329	321	1	-1	3	8	70	49	1
-3	8	4	42	45	2	0	6	5	167	176	1	-3	5	6	105	109	1	-1	4	7	282	280	1	0	3	8	126	126	4
-2	8	4	113	113	1	1	6	5	119	119	1	-2	5	6	169	164	1	0	4	7	32	35	2	1	3	8	56	49	1
-1	8	4	75	74	1	2	6	5	95	95	1	-1	5	6	194	187	2	1	4	7	281	280	1	2	3	8	175	171	1
0	8	4	89	97	1	3	6	5	138	143	1	0	5	6	164	164	1	2	4	7	324	321	1	3	3	8	252	253	1
1	8	4	72	74	1	4	6	5	47	47	2	1	5	6	107	109	1	3	4	7	231	237	1	4	3	8	141	142	1
2	8	4	112	113	1	5	6	5	93	93	1	2	5	6	181	181	1	4	4	7	205	205	1	5	3	8	22	19	4
3	8	4	44	45	2	-4	7	5	98	101	1	3	5	6	113	109	1	5	4	7	58	63	2	6	3	8	95	94	1
4	8	4	81	71	1	-3	7	5	203	199	1	4	5	6	51	52	2	6	4	7	25	19	4	-5	4	8	100	100	1
-3	9	4	83	79	1	-2	7	5	26	30	3	5	5	6	44	39	2	-5	5	7	30	32	3	-4	4	8	21	27	4
-2	9	4	101	106	1	-1	7	5	174	172	1	-5	6	6	55	56	1	-4	5	7	133	137	1	-3	4	8	128	129	1
-1	9	4	127	125	1	0	7	5	160	168	1	-4	6	6	47	50	2	-3	5	7	134	137	1	-2	4	8	153	158	1
0	9	4	31	35	2	1	7	5	171	172	1	-3	6	6	127	133	1	-2	5	7	201	200	1	-1	4	8	225	233	1
1	9	4	128	125	1	2	7	5	28	30	3	-2	6	6	94	93	1	-1	5	7	125	124	1	0	4	8	154	154	1
2	9	4	107	106	1	3	7	5	200	199	1	0	6	6	74	65	1	0	5	7	108	98	1	1	4	8	226	233	1
3	9	4	83	79	1	4	7	5	101	101	1	1	6	6	97	93	1	1	5	7	127	124	1	2	4	8	154	158	1
0	10	4	43	37	1	-4	8	5	29	33	3	2	5	6	126	133	1	2	5	7	196	200	1	3	4	8	132	129	1
1	0	5	545	501	1	-3	8	5	75	77	1	3																	

I-1235-51

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	7	8	126	126	1	-3	7	9	142	142	1	2	6	10	99	100	1	2	7	11	13	13	12	-5	1	13	72	75	1
3	7	8	45	46	2	-2	7	9	66	65	1	3	6	10	62	63	1	3	7	11	198	198	1	-4	1	13	56	52	2
4	7	8	130	130	1	-1	7	9	166	165	1	4	6	10	99	98	1	-2	8	11	29	25	3	-3	1	13	56	54	1
-3	8	8	74	80	1	0	7	9	34	28	1	-3	7	10	59	59	2	-1	8	11	49	47	2	-2	1	13	198	207	1
-2	8	8	55	50	2	1	7	9	163	165	1	-2	7	10	73	75	1	0	8	11	18	13	3	-1	1	13	89	85	1
-1	8	8	83	83	1	2	7	9	65	65	1	-1	7	10	126	123	1	1	8	11	43	47	2	0	1	13	82	96	1
0	8	8	79	74	2	3	7	9	140	142	1	0	7	10	206	210	1	2	8	11	31	25	3	1	1	13	92	85	1
1	8	8	83	83	1	4	7	9	54	52	2	1	7	10	121	123	1	0	0	12	323	337	2	2	1	13	203	207	1
2	8	8	48	50	2	-3	8	9	41	45	2	2	7	10	76	75	1	1	0	12	121	133	1	3	1	13	57	54	1
3	8	8	81	80	1	-2	8	9	75	74	1	3	7	10	57	59	2	2	0	12	2	1	2	4	1	13	56	52	2
-1	9	8	62	62	2	-1	8	9	74	71	1	-2	8	10	62	59	1	3	0	12	101	101	1	5	1	13	77	75	1
0	9	8	18	21	6	0	8	9	106	107	1	-1	8	10	21	17	4	4	0	12	44	47	4	-5	2	13	82	81	1
1	9	8	60	62	2	1	8	9	72	71	1	0	8	10	76	74	1	5	0	12	30	30	2	-4	2	13	44	43	2
1	0	9	138	127	2	2	8	9	69	74	1	1	8	10	29	17	3	-5	1	12	45	47	2	-3	2	13	137	144	1
2	0	9	213	207	1	3	8	9	49	45	2	2	8	10	60	59	2	-4	1	12	83	82	1	-2	2	13	137	135	1
3	0	9	45	45	1	-1	9	9	59	59	2	1	0	11	198	218	2	-3	1	12	128	132	1	-1	2	13	65	61	1
4	0	9	145	134	1	0	9	9	7	1	6	2	0	11	125	136	1	-2	1	12	39	40	2	0	2	13	189	189	1
5	0	9	276	273	1	1	9	9	59	59	2	3	0	11	161	166	2	-1	1	12	127	132	1	1	2	13	68	61	1
6	0	9	18	24	5	0	0	10	317	329	1	4	0	11	43	43	1	0	1	12	13	17	4	2	2	13	136	135	1
-6	1	9	57	52	2	1	0	10	286	296	1	5	0	11	94	95	1	1	1	12	130	132	1	3	2	13	142	144	1
-5	1	9	25	29	3	2	0	10	177	167	1	6	0	11	8	19	8	2	1	12	40	40	2	4	2	13	39	43	2
-4	1	9	126	123	1	3	0	10	159	159	1	-6	1	11	79	73	1	3	1	12	134	132	1	5	2	13	82	81	1
-3	1	9	179	176	1	4	0	10	58	54	1	-5	1	11	69	69	1	4	1	12	83	82	1	-5	3	13	98	92	1
-2	1	9	205	211	1	5	0	10	166	163	2	-4	1	11	222	224	1	5	1	12	48	47	2	-4	3	13	142	139	1
-1	1	9	227	222	1	6	0	10	68	72	1	-3	1	11	157	160	1	-5	2	12	79	84	1	-3	3	13	28	21	3
0	1	9	120	127	1	-6	1	10	58	61	2	-2	1	11	192	192	1	-4	2	12	85	89	1	-2	3	13	92	92	1
1	1	9	228	222	1	-5	1	10	63	67	1	-1	1	11	187	183	1	-3	2	12	102	101	1	-1	3	13	268	282	1
2	1	9	204	211	1	-4	1	10	178	181	1	0	1	11	33	31	1	-2	2	12	62	59	1	0	3	13	83	75	1
3	1	9	178	176	1	-3	1	10	32	38	2	1	1	11	187	183	1	-1	2	12	103	104	1	1	3	13	274	282	1
4	1	9	124	124	1	-2	1	10	83	77	1	2	1	11	195	192	1	0	2	12	290	297	1	2	3	13	93	92	1
5	1	9	34	29	2	-1	1	10	331	325	1	3	1	11	160	160	1	1	2	12	104	104	1	3	3	13	27	21	3
6	1	9	58	52	2	0	1	10	106	121	1	4	1	11	220	224	1	2	2	12	62	59	1	4	3	13	143	139	1
-6	2	9	85	85	1	1	1	10	331	325	1	5	1	11	68	69	1	3	2	12	102	101	1	5	3	13	99	92	1
-5	2	9	60	51	1	2	1	10	82	77	1	6	1	11	80	73	1	4	2	12	85	89	1	-4	4	13	79	77	1
-4	2	9	133	132	1	3	1	10	32	38	2	-5	2	11	71	74	1	5	2	12	83	84	1	-3	4	13	89	87	1
-3	2	9	52	51	1	4	1	10	180	181	1	-4	2	11	0	11	1	-5	3	12	81	80	1	-2	4	13	164	163	1
-2	2	9	164	153	1	5	1	10	60	68	2	-3	2	11	200	195	1	-4	3	12	54	58	2	-1	4	13	195	198	1
-1	2	9	98	100	1	6	1	10	61	61	2	-2	2	11	119	124	1	-3	3	12	104	104	1	0	4	13	354	353	1
0	2	9	225	227	1	-6	2	10	37	41	3	-1	2	11	240	237	1	-2	3	12	55	57	1	1	4	13	196	199	1
1	2	9	100	100	1	-5	2	10	133	132	1	0	2	11	27	20	1	-1	3	12	136	132	1	2	4	13	168	163	1
2	2	9	163	153	1	-4	2	10	117	113	1	1	2	11	241	237	1	0	3	12	40	36	1	3	4	13	86	87	1
3	2	9	51	51	1	-3	2	10	246	256	1	2	2	11	118	124	1	1	3	12	138	131	1	4	4	13	78	77	1
4	2	9	137	132	1	-2	2	10	118	122	1	3	2	11	202	195	1	2	3	12	57	57	1	-4	5	13	74	73	1
5	2	9	60	51	1	-1	2	10	130	127	1	4	2	11	0	11	1	3	3	12	101	104	1	-3	5	13	26	26	4
6	2	9	87	85	1	0	2	10	142	125	1	5	2	11	69	74	1	4	3	12	54	58	2	-2	5	13	22	22	4
-6	3	9	44	46	2	1	2	10	131	127	1	-5	3	11	103	102	1	5	3	12	79	80	1	-1	5	13	129	130	1
-5	3	9	33	38	3	2	2	10	122	122	1	-4	3	11	140	137	1	-5	4	12	126	122	1	0	5	13	15	14	4
-4	3	9	125	113	1	3	2	10	250	257	1	-3	3	11	58	64	1	-4	4	12	107	107	1	1	5	13	129	130	1
-3	3	9	85	90	1	4	2	10	118	113	1	-2	3	11	83	84	1	-3	4	12	69	69	1	2	5	13	21	22	5
-2	3	9	267	259	1	5	2	10	130	132	1	-1	3	11	168	173	1	-2	4	12	183	182	1	3	5	13	31	26	3
-1	3	9	238	234	1	6	2	10	37	41	3	0	3	11	61	68	1	-1	4	12	228	230	1	4	5	13	70	73	2
0	3	9	111	111	1	-5	3	10	79	81	1	1	3	11	170	173	1	0	4	12	30	19	2	-3	6	13	88	86	1
1	3	9	239	234	1	-4	3	10	182	185	1	2	3	11	79	84	1	1	4	12	228	230	1	-2	6	13	76	76	1
2	3	9	268	259	1	-3	3	10	65	70	1	3	3	11	59	64	1	2	4	12	182	182	1	-1	6	13	124	129	1
3	3	9	89	90	1	-2	3	10	133	136	1	4	3	11	141	137	1	3	4	12	67	69	1	0	6	13	78	82	1
4	3	9	122	113	1	-1	3	10	70	68	1	5	3	11	103	102	1	4	4	12	101	107	1	1	6	13	121	129	1
5	3	9	43	38	2	0	3	10	90	93	1	-5	4	11	99	95	1	5	4	12	125	122	1	2	6	13	76	76	1
6	3	9	37	46	3	1	3	10	75	68	1	-4	4	11	83	86	1	-4	5	12	57	61	2	3	6	13	84	86	1
-5	4	9	54	58	2	2	3	10	132	136	1	-3	4	11	192	189	1	-3	5	12	80	80	1	-2	7	13	4	19	3
-4</																													

I-1235-52

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 4

4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	2	14	80	75	1	3	1	15	82	86	1	0	1	16	33	31	1	3	1	17	31	27	3	1	3	18	125	124	1
5	2	14	71	67	2	4	1	15	105	103	1	1	1	16	163	162	1	4	1	17	157	159	1	2	3	18	85	84	1
-4	3	14	33	34	3	-4	2	15	109	112	1	2	1	16	114	114	1	-4	2	17	75	66	1	3	3	18	66	62	1
-3	3	14	78	79	1	-3	2	15	149	149	1	3	1	16	121	124	1	-3	2	17	48	45	2	-2	4	18	142	139	1
-2	3	14	37	31	2	-2	2	15	153	155	1	4	1	16	54	56	2	-2	2	17	134	137	1	-1	4	18	85	84	1
-1	3	14	60	66	1	-1	2	15	99	96	1	-4	2	16	106	109	1	-1	2	17	101	102	1	0	4	18	136	133	1
0	3	14	132	131	1	0	2	15	127	120	1	-3	2	16	101	105	1	0	2	17	255	253	1	1	4	18	85	84	1
1	3	14	67	66	1	1	2	15	101	96	1	-2	2	16	8	2	8	1	2	17	103	102	1	2	4	18	143	139	1
2	3	14	34	31	2	2	2	15	157	155	1	-1	2	16	192	202	1	2	2	17	135	136	1	-1	5	18	91	90	1
3	3	14	83	79	1	3	2	15	151	149	1	0	2	16	16	6	7	3	2	17	47	44	2	0	5	18	26	22	3
4	3	14	31	35	3	4	2	15	107	111	1	1	2	16	197	203	1	4	2	17	76	66	1	1	5	18	88	90	1
-4	4	14	86	90	1	-4	3	15	47	42	2	2	2	16	2	2	2	-3	3	17	40	42	2	1	0	19	0	5	1
-3	4	14	94	98	1	-3	3	15	19	26	5	3	2	16	102	105	1	-2	3	17	177	178	1	2	0	19	47	49	3
-2	4	14	50	56	2	-2	3	15	88	86	1	4	2	16	106	109	1	-1	3	17	74	80	1	3	0	19	37	42	2
-1	4	14	75	72	1	-1	3	15	48	49	2	-4	3	16	89	87	1	0	3	17	17	17	11	-3	1	19	111	114	1
0	4	14	132	129	1	0	3	15	65	64	1	-3	3	16	92	93	1	1	3	17	79	80	1	-2	1	19	0	12	1
1	4	14	79	72	1	1	3	15	54	50	1	-2	3	16	55	55	2	2	3	17	173	178	1	-1	1	19	33	31	3
2	4	14	53	56	2	2	3	15	86	86	1	-1	3	16	170	173	1	3	3	17	45	42	2	0	1	19	17	6	6
3	4	14	93	98	1	3	3	15	29	26	3	0	3	16	227	231	1	-3	4	17	59	60	2	1	1	19	29	31	3
4	4	14	88	90	1	4	3	15	44	42	2	1	3	16	175	173	1	-2	4	17	97	85	1	2	1	19	20	12	5
-4	5	14	71	66	1	-4	4	15	77	81	1	2	3	16	52	55	2	-1	4	17	76	69	1	3	1	19	114	114	1
-3	5	14	100	102	1	-3	4	15	103	101	1	3	3	16	91	93	1	0	4	17	0	9	1	-2	2	19	41	44	2
-2	5	14	79	74	1	-2	4	15	107	105	1	4	3	16	90	87	1	1	4	17	73	69	1	-1	2	19	27	29	3
-1	5	14	116	120	1	-1	4	15	162	162	1	-3	4	16	53	50	2	2	4	17	90	84	1	0	2	19	111	107	2
0	5	14	36	35	1	0	4	15	81	79	1	-2	4	16	85	91	1	3	4	17	61	60	2	1	2	19	32	29	3
1	5	14	115	120	1	1	4	15	166	163	1	-1	4	16	63	66	1	-2	5	17	94	96	1	2	2	19	44	44	2
2	5	14	76	74	1	2	4	15	107	105	1	0	4	16	211	210	1	-1	5	17	162	157	1	-2	3	19	107	105	1
3	5	14	100	102	1	3	4	15	103	101	1	1	4	16	65	66	1	0	5	17	26	24	3	-1	3	19	43	44	2
4	5	14	64	66	2	4	4	15	80	81	1	2	4	16	89	91	1	1	5	17	162	157	1	0	3	19	177	173	1
-3	6	14	31	35	3	-3	5	15	52	50	2	3	4	16	54	50	2	2	5	17	98	96	1	1	3	19	42	44	2
-2	6	14	79	81	1	-2	5	15	26	19	3	-3	5	16	59	59	2	0	6	17	28	23	2	2	3	19	106	105	1
-1	6	14	162	159	1	-1	5	15	58	57	2	-2	5	16	23	26	4	0	0	18	209	211	1	-1	4	19	27	24	4
0	6	14	70	63	1	0	5	15	70	71	1	-1	5	16	56	58	2	1	0	18	35	36	2	0	4	19	64	63	1
1	6	14	165	159	1	1	5	15	55	57	2	0	5	16	181	174	2	2	0	18	160	168	1	1	4	19	23	24	5
2	6	14	80	81	1	2	5	15	17	19	7	1	5	16	54	58	2	3	0	18	40	39	1	0	0	20	135	131	1
3	6	14	31	35	3	3	5	15	48	50	2	2	5	16	24	26	5	-3	1	18	69	70	1	1	0	20	108	109	1
-2	7	14	83	81	1	-2	6	15	53	55	2	3	5	16	66	59	2	-2	1	18	91	88	1	2	0	20	160	156	1
-1	7	14	33	33	3	-1	6	15	41	45	2	-2	6	16	24	26	4	-1	1	18	81	77	1	-2	1	20	69	69	2
0	7	14	25	13	3	0	6	15	44	46	1	-1	6	16	36	32	3	0	1	18	43	42	1	-1	1	20	71	67	1
1	7	14	34	33	3	1	6	15	45	45	2	0	6	16	121	123	2	1	1	18	82	77	1	0	1	20	20	18	5
2	7	14	78	81	1	2	6	15	53	55	2	1	6	16	32	32	3	2	1	18	94	88	1	1	1	20	72	67	1
1	0	15	393	405	2	-1	7	15	24	25	4	2	6	16	30	26	3	3	1	18	67	70	1	2	1	20	69	69	2
2	0	15	21	18	3	0	7	15	31	32	2	1	0	17	50	48	3	-3	2	18	20	23	6	-1	2	20	93	96	1
3	0	15	55	69	2	1	7	15	27	25	4	2	0	17	123	124	1	-2	2	18	46	45	2	0	2	20	15	14	6
4	0	15	0	11	1	0	0	16	326	330	1	3	0	17	58	67	1	-1	2	18	43	43	2	1	2	20	97	96	1
5	0	15	90	81	2	1	0	16	48	49	1	4	0	17	115	109	1	0	2	18	39	36	1	-1	3	20	53	58	2
-4	1	15	104	103	1	2	0	16	143	142	1	-4	1	17	157	159	1	1	2	18	45	43	2	0	3	20	25	27	3
-3	1	15	80	86	1	3	0	16	25	22	2	-3	1	17	21	27	5	2	2	18	48	45	2	1	3	20	57	58	2
-2	1	15	16	13	6	4	0	16	76	76	1	-2	1	17	75	77	1	3	2	18	23	23	5	1	0	21	36	32	2
-1	1	15	101	100	1	-4	1	16	58	56	2	-1	1	17	126	129	1	-3	3	18	65	62	2	0	1	21	27	15	2
0	1	15	76	77	1	-3	1	16	118	124	1	0	1	17	23	26	2	-2	3	18	87	84	1						
1	1	15	104	100	1	-2	1	16	113	114	1	1	1	17	128	129	1	-1	3	18	122	124	1						
2	1	15	8	13	8	-1	1	16	159	162	1	2	1	17	82	77	1	0	3	18	186	185	1						

I-1235-53

5

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	109	95	1	0	1	1	81	90	1	3	7	1	191	191	1	-2	3	2	210	209	1	-4	10	2	77	74	1
4	0	0	415	412	6	1	1	1	472	480	1	4	7	1	49	50	1	-1	3	2	286	285	1	-3	10	2	96	92	1
6	0	0	48	47	1	2	1	1	161	177	1	5	7	1	17	26	6	0	3	2	170	178	1	-2	10	2	28	34	3
1	1	0	248	262	2	3	1	1	166	167	1	6	7	1	97	98	1	1	3	2	279	285	1	-1	10	2	219	222	1
2	1	0	266	248	3	4	1	1	279	283	1	-6	8	1	94	93	1	2	3	2	208	209	1	0	10	2	213	221	1
3	1	0	107	104	2	5	1	1	58	56	1	-5	8	1	131	131	1	3	3	2	258	254	1	1	10	2	221	222	1
4	1	0	198	200	2	6	1	1	147	155	1	-4	8	1	40	41	2	4	3	2	161	165	1	2	10	2	35	34	2
5	1	0	107	114	2	7	1	1	126	122	1	-3	8	1	136	135	1	5	3	2	191	197	1	3	10	2	92	92	1
6	1	0	53	55	1	-7	2	1	27	32	4	-2	8	1	149	151	1	6	3	2	86	88	1	4	10	2	75	74	1
7	1	0	77	74	3	-6	2	1	254	253	1	-1	8	1	192	198	1	7	3	2	152	153	1	-3	11	2	101	98	1
0	2	0	432	423	1	-5	2	1	109	113	1	0	8	1	17	23	5	-7	4	2	18	22	7	-2	11	2	141	144	1
1	2	0	740	759	4	-4	2	1	127	123	1	1	8	1	193	198	1	-6	4	2	76	78	1	-1	11	2	119	117	1
2	2	0	377	374	3	-3	2	1	232	228	1	2	8	1	146	151	1	-5	4	2	166	170	1	0	11	2	22	24	5
3	2	0	139	142	1	-2	2	1	477	456	1	3	8	1	136	135	1	-4	4	2	272	265	1	1	11	2	115	117	1
4	2	0	166	160	1	-1	2	1	192	181	1	4	8	1	44	41	2	-3	4	2	150	143	1	2	11	2	140	144	1
5	2	0	170	167	1	0	2	1	84	94	1	5	8	1	126	131	1	-2	4	2	185	179	1	3	11	2	100	98	1
6	2	0	72	77	1	1	2	1	192	181	1	6	8	1	94	93	1	-1	4	2	372	358	1	-1	12	2	35	38	3
7	2	0	114	116	1	2	2	1	467	456	1	-5	9	1	75	73	1	0	4	2	100	110	1	0	12	2	52	48	2
1	3	0	338	328	2	3	2	1	231	228	1	-4	9	1	87	89	1	1	4	2	369	358	1	1	12	2	43	38	2
2	3	0	60	60	1	4	2	1	126	123	1	-3	9	1	181	185	1	2	4	2	181	179	1	1	0	3	45	57	1
3	3	0	54	51	1	5	2	1	108	112	1	-2	9	1	133	132	1	3	4	2	146	143	1	2	0	3	573	578	5
4	3	0	53	49	1	6	2	1	245	253	1	-1	9	1	160	165	1	4	4	2	266	265	1	3	0	3	276	266	1
5	3	0	147	138	2	7	2	1	29	32	3	0	9	1	209	211	1	5	4	2	167	170	1	4	0	3	276	271	2
6	3	0	257	262	4	-7	3	1	158	161	1	1	9	1	159	165	1	6	4	2	75	78	1	5	0	3	231	221	2
7	3	0	139	146	1	-6	3	1	149	149	1	2	9	1	132	132	1	7	4	2	26	22	3	6	0	3	24	27	3
0	4	0	258	223	1	-5	3	1	34	35	2	3	9	1	179	184	1	-7	5	2	65	58	2	7	0	3	46	47	1
1	4	0	376	364	1	-4	3	1	37	40	2	4	9	1	90	89	1	-6	5	2	85	82	1	-7	1	3	32	33	3
2	4	0	261	249	1	-3	3	1	261	246	1	5	9	1	71	74	1	-5	5	2	192	196	1	-6	1	3	195	195	1
3	4	0	118	122	1	-2	3	1	303	292	1	-4	10	1	104	108	1	-4	5	2	225	224	1	-5	1	3	89	83	1
4	4	0	68	63	1	-1	3	1	339	325	1	-3	10	1	175	174	1	-3	5	2	218	221	1	-4	1	3	241	227	1
5	4	0	170	159	1	0	3	1	377	378	1	-2	10	1	26	13	3	-2	5	2	330	324	1	-3	1	3	259	247	1
6	4	0	206	200	3	1	3	1	337	325	1	-1	10	1	114	115	1	-1	5	2	368	356	1	-2	1	3	379	382	1
7	4	0	92	93	2	2	3	1	299	292	1	0	10	1	24	21	4	0	5	2	331	318	1	-1	1	3	512	540	1
1	5	0	245	246	1	3	3	1	256	246	1	1	10	1	109	115	1	1	5	2	368	356	1	0	1	3	289	293	1
2	5	0	91	92	1	4	3	1	38	40	1	2	10	1	25	13	4	2	5	2	327	324	1	1	1	3	503	540	1
3	5	0	113	111	1	5	3	1	37	35	2	3	10	1	172	174	1	3	5	2	216	221	1	2	1	3	375	381	1
4	5	0	166	164	2	6	3	1	142	149	1	4	10	1	105	108	1	4	5	2	223	224	1	3	1	3	256	247	1
5	5	0	259	261	3	7	3	1	156	161	1	-3	11	1	92	96	1	5	5	2	189	196	1	4	1	3	237	227	1
6	5	0	73	70	1	-7	4	1	74	79	1	-2	11	1	84	85	1	6	5	2	85	82	1	5	1	3	85	83	1
7	5	0	173	169	1	-6	4	1	186	182	1	-1	11	1	68	71	1	7	5	2	57	58	2	6	1	3	190	196	1
0	6	0	96	77	1	-5	4	1	245	243	1	0	11	1	87	81	1	-6	6	2	30	30	3	7	1	3	19	33	5
1	6	0	142	137	1	-4	4	1	292	286	1	1	11	1	74	71	1	-5	6	2	51	47	2	-7	2	3	128	127	1
2	6	0	429	419	1	-3	4	1	359	350	1	2	11	1	84	85	1	-4	6	2	73	69	1	-6	2	3	140	142	1
3	6	0	68	70	1	-2	4	1	160	157	1	3	11	1	89	96	1	-3	6	2	147	147	1	-5	2	3	413	418	1
4	6	0	0	4	1	-1	4	1	366	357	1	-1	12	1	45	47	2	-2	6	2	160	156	1	-4	2	3	216	219	1
5	6	0	110	113	1	0	4	1	667	686	1	0	12	1	147	142	1	-1	6	2	90	72	1	-3	2	3	206	187	1
6	6	0	115	116	1	1	4	1	364	358	1	1	12	1	46	47	2	0	6	2	63	57	1	-2	2	3	308	299	1
1	7	0	192	192	1	2	4	1	157	157	1	0	0	2	189	233	1	1	6	2	89	72	1	-1	2	3	695	729	1
2	7	0	253	246	1	3	4	1	348	350	1	1	0	2	4	23	4	2	6	2	159	156	1	0	2	3	593	611	1
3	7	0	77	74	1	4	4	1	286	286	1	2	0	2	65	67	1	3	6	2	145	147	1	1	2	3	691	729	1
4	7	0	76	79	1	5	4	1	240	243	1	3	0	2	395	408	3	4	6	2	68	69	1	2	2	3	303	298	1
5	7	0	92	91	1	6	4	1	181	182	1	4	0	2	322	312	4	5	6	2	53	48	1	3	2	3	202	187	1
6	7	0	186	185	3	7	4	1	78	79	1	5	0	2	242	247	3	6	6	2	28	30	3	4	2	3	216	219	1
0	8	0	355	358	1	-7	5	1	147	145	1	6	0	2	197	200	3	-6	7	2	126	123	1	5	2	3	407	418	1
1	8	0	73	78	1	-6	5	1	32	33	3	7	0	2	95	98	2	-5	7	2	12	15	12	6	2	3	139	142	1
2	8	0	29	28	2	-5	5	1	69	69	1	-7	1	2	91	90	1	-4	7	2	245	248	1	7	2	3	122	127	1
3	8	0	185	178	1	-4	5	1	88	88	1	-6	1	2	270	273	1	-3	7	2	241	241	1	-7	3	3	98	96	1
4	8	0	244	252	3	-3	5	1	32	28	2	-5	1	2	110	110	1	-2	7	2	157	152	1	-6	3	3	53	54	2
5	8	0	162	161	1	-2	5	1	366	360	1	-4	1	2	167	169	1	-1	7	2	207	214	1	-5	3	3	166	170	1
6	8	0	9																										

I-1235-54

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	5	3	154	152	1	-3	1	4	269	259	1	0	7	4	163	171	1	-2	3	5	119	116	1	0	10	5	96	97	1
-2	5	3	305	296	1	-2	1	4	284	268	1	1	7	4	62	62	1	-1	3	5	229	226	1	1	10	5	145	137	1
-1	5	3	96	87	1	-1	1	4	106	106	1	2	7	4	145	150	1	0	3	5	446	442	1	2	10	5	71	75	1
0	5	3	269	254	1	0	1	4	590	640	1	3	7	4	177	170	1	1	3	5	226	226	1	3	10	5	18	17	6
1	5	3	87	87	1	1	1	4	104	106	1	4	7	4	98	100	1	2	3	5	117	115	1	4	10	5	83	81	1
2	5	3	302	296	1	2	1	4	280	268	1	5	7	4	174	174	1	3	3	5	218	211	1	-3	11	5	143	140	1
3	5	3	152	152	1	3	1	4	264	259	1	6	7	4	106	111	1	4	3	5	116	118	1	-2	11	5	141	144	1
4	5	3	137	135	1	4	1	4	278	271	1	-5	8	4	62	64	2	5	3	5	145	142	1	-1	11	5	159	159	1
5	5	3	273	278	1	5	1	4	109	118	1	-4	8	4	88	88	1	6	3	5	135	138	1	0	11	5	51	52	2
6	5	3	82	80	1	6	1	4	54	52	1	-3	8	4	145	138	1	7	3	5	39	36	2	1	11	5	157	159	1
7	5	3	91	92	1	7	1	4	72	83	1	-2	8	4	123	128	1	-7	4	5	47	47	2	2	11	5	142	144	1
-6	6	3	47	48	2	-7	2	4	56	56	2	-1	8	4	140	139	1	-6	4	5	145	143	1	3	11	5	144	140	1
-5	6	3	128	130	1	-6	2	4	86	86	1	0	8	4	217	230	1	-5	4	5	86	88	1	0	0	6	212	232	1
-4	6	3	77	75	1	-5	2	4	83	79	1	1	8	4	137	139	1	-4	4	5	61	65	1	1	0	6	21	5	1
-3	6	3	111	108	1	-4	2	4	233	228	1	2	8	4	121	128	1	-3	4	5	301	299	1	2	0	6	406	413	2
-2	6	3	160	158	1	-3	2	4	194	188	1	3	8	4	143	138	1	-2	4	5	116	112	1	3	0	6	146	142	1
-1	6	3	200	208	1	-2	2	4	392	381	1	4	8	4	86	89	1	-1	4	5	304	289	1	4	0	6	21	23	10
0	6	3	288	300	1	-1	2	4	315	294	1	5	8	4	63	64	1	0	4	5	293	283	1	5	0	6	5	10	4
1	6	3	198	208	1	0	2	4	144	137	1	-5	9	4	66	70	2	1	4	5	300	289	1	6	0	6	260	259	2
2	6	3	161	158	1	1	2	4	311	294	1	-4	9	4	58	55	2	2	4	5	116	112	1	7	0	6	23	25	3
3	6	3	109	108	1	2	2	4	389	381	1	-3	9	4	95	86	1	3	4	5	296	299	1	-7	1	6	86	78	1
4	6	3	75	75	1	3	2	4	190	188	1	-2	9	4	65	71	1	4	4	5	64	65	1	-6	1	6	104	108	1
5	6	3	129	130	1	4	2	4	230	228	1	-1	9	4	70	70	1	5	4	5	87	88	1	-5	1	6	44	48	2
6	6	3	46	48	2	5	2	4	79	79	1	0	9	4	369	369	1	6	4	5	143	143	1	-4	1	6	99	97	1
-6	7	3	62	66	2	6	2	4	82	86	1	1	9	4	73	70	1	7	4	5	47	47	2	-3	1	6	178	180	1
-5	7	3	122	117	1	7	2	4	56	56	1	2	9	4	68	71	1	-6	5	5	40	37	2	-2	1	6	276	287	1
-4	7	3	85	87	1	-7	3	4	131	132	1	3	9	4	95	86	1	-5	5	5	77	81	1	-1	1	6	467	487	1
-3	7	3	92	92	1	-6	3	4	96	99	1	4	9	4	56	55	2	-4	5	5	123	122	1	0	1	6	237	232	1
-2	7	3	237	239	1	-5	3	4	135	136	1	5	9	4	67	70	1	-3	5	5	67	70	1	1	1	6	464	487	1
-1	7	3	80	82	1	-4	3	4	251	255	1	-4	10	4	74	68	1	-2	5	5	132	124	1	2	1	6	273	287	1
0	7	3	114	119	1	-3	3	4	144	142	1	-3	10	4	49	51	2	-1	5	5	255	246	1	3	1	6	176	180	1
1	7	3	79	82	1	-2	3	4	195	207	1	-2	10	4	75	75	1	0	5	5	46	25	1	4	1	6	95	97	1
2	7	3	232	238	1	-1	3	4	552	546	1	-1	10	4	139	140	1	1	5	5	254	246	1	5	1	6	46	48	1
3	7	3	90	92	1	0	3	4	21	30	2	0	10	4	68	73	1	2	5	5	129	124	1	6	1	6	102	108	1
4	7	3	86	87	1	1	3	4	551	546	1	1	10	4	143	140	1	3	5	5	72	70	1	7	1	6	80	78	1
5	7	3	118	117	1	2	3	4	194	207	1	2	10	4	77	75	1	4	5	5	122	122	1	-7	2	6	58	56	2
6	7	3	66	66	1	3	3	4	143	142	1	3	10	4	57	51	1	5	5	5	77	81	1	-6	2	6	139	135	1
-5	8	3	86	86	1	4	3	4	250	255	1	4	10	4	74	68	1	6	5	5	43	37	2	-5	2	6	164	165	1
-4	8	3	117	118	1	5	3	4	132	135	1	-3	11	4	54	54	2	-6	6	5	97	96	1	-4	2	6	204	199	1
-3	8	3	165	168	1	6	3	4	96	99	1	-2	11	4	121	119	1	-5	6	5	57	53	1	-3	2	6	102	99	1
-2	8	3	76	73	1	7	3	4	129	132	1	-1	11	4	49	48	2	-4	6	5	358	362	1	-2	2	6	112	100	1
-1	8	3	154	148	1	-7	4	4	128	124	1	0	11	4	96	96	1	-3	6	5	161	165	1	-1	2	6	263	264	1
0	8	3	227	244	1	-6	4	4	68	70	1	1	11	4	46	48	2	-2	6	5	115	106	1	0	2	6	364	343	1
1	8	3	153	148	1	-5	4	4	142	139	1	2	11	4	120	119	1	-1	6	5	26	25	2	1	2	6	262	264	1
2	8	3	77	73	1	-4	4	4	114	118	1	3	11	4	54	54	2	0	6	5	24	16	2	2	2	6	109	100	1
3	8	3	161	168	1	-3	4	4	159	158	1	-1	12	4	15	12	12	1	6	5	29	25	2	3	2	6	100	99	1
4	8	3	115	118	1	-2	4	4	201	201	1	0	12	4	64	65	2	2	6	5	113	106	1	4	2	6	201	199	1
5	8	3	85	86	1	-1	4	4	177	178	1	1	12	4	17	12	7	3	6	5	158	165	1	5	2	6	164	165	1
-5	9	3	49	50	2	0	4	4	177	162	1	1	0	5	111	101	1	4	6	5	353	361	1	6	2	6	137	135	1
-4	9	3	38	34	3	1	4	4	178	178	1	2	0	5	385	396	2	5	6	5	51	53	2	7	2	6	55	56	2
-3	9	3	366	368	1	2	4	4	197	201	1	3	0	5	96	92	1	6	6	5	99	96	1	-7	3	6	80	76	1
-2	9	3	53	54	1	3	4	4	156	158	1	4	0	5	18	18	7	-6	7	5	99	96	1	-6	3	6	116	116	1
-1	9	3	222	225	1	4	4	4	114	118	1	5	0	5	233	234	1	-5	7	5	142	140	1	-5	3	6	188	191	1
0	9	3	57	57	1	5	4	4	142	139	1	6	0	5	266	282	4	-4	7	5	133	139	1	-4	3	6	190	186	1
1	9	3	221	226	1	6	4	4	65	71	1	7	0	5	34	34	2	-3	7	5	253	262	1	-3	3	6	147	151	1
2	9	3	51	54	1	7	4	4	127	124	1	-7	1	5	96	95	1	-2	7	5	132	138	1	-2	3	6	169	163	1
3	9	3	362	368	1	-7	5	4	17	11	9	-6	1	5	104	101	1	-1	7	5	127	125	1	-1	3	6	99	95	1
4	9	3	32	34	3	-6	5	4	200	196	1	-5	1	5	173	172	1	0	7	5	240	237	1	0	3	6	232	216	1
5	9	3	50	50	2	-5	5	4	155	157	1	-4	1	5	152	149	1	1	7	5	127	126	1	1	3	6	102	95	1
-4	10	3	42	46	2	-4	5	4	114	118	1	-3	1																

I-1235-55

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	5	6	83	82	1	0	2	7	362	349	1	2	9	7	118	118	1	5	5	8	87	89	1	-4	3	9	272	273	1
5	5	6	132	131	1	1	2	7	210	195	1	3	9	7	162	173	1	6	5	8	123	121	1	-3	3	9	225	218	1
6	5	6	28	31	3	2	2	7	234	219	1	4	9	7	131	130	1	-6	6	8	49	42	2	-2	3	9	78	78	1
-6	6	6	147	142	1	3	2	7	142	140	1	-3	10	7	122	118	1	-5	6	8	59	59	2	-1	3	9	421	419	1
-5	6	6	123	119	1	4	2	7	173	173	1	-2	10	7	43	51	2	-4	6	8	41	38	2	0	3	9	116	118	1
-4	6	6	295	303	1	5	2	7	160	172	1	-1	10	7	84	79	1	-3	6	8	119	119	1	1	3	9	417	419	1
-3	6	6	42	35	2	6	2	7	82	88	1	0	10	7	127	126	1	-2	6	8	295	301	1	2	3	9	80	78	1
-2	6	6	22	25	3	7	2	7	0	14	1	1	10	7	84	79	1	-1	6	8	178	186	1	3	3	9	221	218	1
-1	6	6	148	138	1	-7	3	7	80	75	1	2	10	7	51	51	2	0	6	8	84	81	1	4	3	9	272	273	1
0	6	6	399	414	1	-6	3	7	63	69	2	3	10	7	112	118	1	1	6	8	175	186	1	5	3	9	70	70	1
1	6	6	149	138	1	-5	3	7	86	89	1	-2	11	7	73	74	1	2	6	8	295	301	1	6	3	9	57	54	2
2	6	6	19	25	3	-4	3	7	235	231	1	-1	11	7	101	102	1	3	6	8	119	119	1	-6	4	9	99	98	1
3	6	6	35	35	2	-3	3	7	326	311	1	0	11	7	15	10	9	4	6	8	35	38	2	-5	4	9	236	228	1
4	6	6	293	303	1	-2	3	7	242	247	1	1	11	7	96	102	1	5	6	8	58	59	2	-4	4	9	135	144	1
5	6	6	121	119	1	-1	3	7	238	240	1	2	11	7	74	74	1	6	6	8	45	42	2	-3	4	9	119	118	1
6	6	6	143	141	1	0	3	7	101	92	1	0	0	8	93	90	1	-5	7	8	115	113	1	-2	4	9	119	113	1
-6	7	6	122	120	1	1	3	7	237	240	1	1	0	8	93	111	1	-4	7	8	109	113	1	-1	4	9	86	94	1
-5	7	6	48	51	2	2	3	7	239	247	1	2	0	8	193	197	1	-3	7	8	89	85	1	0	4	9	157	160	1
-4	7	6	108	113	1	3	3	7	319	311	1	3	0	8	14	0	3	-2	7	8	277	276	1	1	4	9	89	94	1
-3	7	6	209	211	1	4	3	7	234	231	1	4	0	8	146	145	1	-1	7	8	95	99	1	2	4	9	121	113	1
-2	7	6	163	162	1	5	3	7	81	89	1	5	0	8	122	124	1	0	7	8	55	53	1	3	4	9	118	118	1
-1	7	6	212	208	1	6	3	7	67	69	1	6	0	8	87	78	1	1	7	8	95	99	1	4	4	9	136	144	1
0	7	6	263	269	1	7	3	7	79	75	1	7	0	8	100	97	3	2	7	8	276	276	1	5	4	9	235	228	1
1	7	6	210	208	1	-6	4	7	48	45	2	-7	1	8	200	193	1	3	7	8	90	85	1	6	4	9	98	99	1
2	7	6	161	162	1	-5	4	7	164	162	1	-6	1	8	50	52	2	4	7	8	109	113	1	-6	5	9	81	73	1
3	7	6	206	211	1	-4	4	7	102	110	1	-5	1	8	75	77	1	5	7	8	114	113	1	-5	5	9	25	17	4
4	7	6	106	113	1	-3	4	7	141	142	1	-4	1	8	11	8	10	-5	8	8	59	55	2	-4	5	9	226	225	1
5	7	6	46	50	2	-2	4	7	201	202	1	-3	1	8	339	342	1	-4	8	8	78	78	1	-3	5	9	31	39	3
6	7	6	119	120	1	-1	4	7	85	80	1	-2	1	8	151	145	1	-3	8	8	90	90	1	-2	5	9	155	150	1
-5	8	6	27	29	4	0	4	7	423	423	1	-1	1	8	87	80	1	-2	8	8	21	12	4	-1	5	9	60	63	1
-4	8	6	49	49	2	1	4	7	84	80	1	0	1	8	30	28	1	-1	8	8	252	256	1	0	5	9	298	307	1
-3	8	6	107	118	1	2	4	7	199	202	1	1	1	8	87	80	1	0	8	8	129	135	1	1	5	9	58	63	1
-2	8	6	196	206	1	3	4	7	139	142	1	2	1	8	148	145	1	1	8	8	254	256	1	2	5	9	158	150	1
-1	8	6	152	152	1	4	4	7	104	110	1	3	1	8	335	343	1	2	8	8	0	12	1	3	5	9	38	39	2
0	8	6	17	14	6	5	4	7	164	162	1	4	1	8	21	8	3	3	8	8	91	90	1	4	5	9	224	225	1
1	8	6	152	152	1	6	4	7	39	45	2	5	1	8	74	77	1	4	8	8	77	78	1	5	5	9	16	17	7
2	8	6	197	205	1	-6	5	7	13	21	12	6	1	8	51	52	2	5	8	8	58	55	2	6	5	9	76	74	1
3	8	6	107	118	1	-5	5	7	86	85	1	7	1	8	199	193	1	-4	9	8	147	148	1	-5	6	9	107	106	1
4	8	6	54	49	2	-4	5	7	223	220	1	-7	2	8	62	56	2	-3	9	8	175	173	1	-4	6	9	118	113	1
5	8	6	30	29	3	-3	5	7	118	119	1	-6	2	8	74	75	1	-2	9	8	100	101	1	-3	6	9	192	197	1
-4	9	6	101	99	1	-2	5	7	106	94	1	-5	2	8	144	134	1	-1	9	8	104	99	1	-2	6	9	113	105	1
-3	9	6	146	139	1	-1	5	7	314	307	1	-4	2	8	264	262	1	0	9	8	73	69	1	-1	6	9	108	105	1
-2	9	6	91	90	1	0	5	7	234	220	1	-3	2	8	255	256	1	1	9	8	103	99	1	0	6	9	140	147	1
-1	9	6	100	103	1	1	5	7	315	307	1	-2	2	8	177	171	1	2	9	8	97	101	1	1	6	9	105	105	1
0	9	6	179	192	1	2	5	7	107	95	1	-1	2	8	78	66	1	3	9	8	174	173	1	2	6	9	111	104	1
1	9	6	97	103	1	3	5	7	118	119	1	0	2	8	253	254	1	4	9	8	149	148	1	3	6	9	192	196	1
2	9	6	89	90	1	4	5	7	224	220	1	1	2	8	79	66	1	-3	10	8	25	28	5	4	6	9	117	113	1
3	9	6	147	139	1	5	5	7	86	85	1	2	2	8	175	171	1	-2	10	8	52	58	2	5	6	9	100	106	1
4	9	6	101	99	1	6	5	7	28	21	3	3	2	8	251	256	1	-1	10	8	56	55	2	-5	7	9	63	55	2
-3	10	6	98	94	1	-6	6	7	30	29	4	4	2	8	263	262	1	0	10	8	104	100	1	-4	7	9	67	64	1
-2	10	6	90	87	1	-5	6	7	21	30	5	5	2	8	143	134	1	1	10	8	53	55	2	-3	7	9	66	59	1
-1	10	6	37	38	2	-4	6	7	165	163	1	6	2	8	75	75	1	2	10	8	59	57	2	-2	7	9	129	129	1
0	10	6	160	162	1	-3	6	7	173	172	1	7	2	8	58	56	2	3	10	8	33	28	3	-1	7	9	211	212	1
1	10	6	41	38	2	-2	6	7	113	124	1	-6	3	8	77	74	1	-1	11	8	12	21	12	0	7	9	33	34	2
2	10	6	87	87	1	-1	6	7	177	177	1	-5	3	8	71	65	1	0	11	8	91	83	1	1	7	9	207	213	1
3	10	6	101	94	1	0	6	7	157	134	1	-4	3	8	219	209	1	1	11	8	18	21	8	2	7	9	130	129	1
-2	11	6	112	112	1	1	6	7	178	177	1	-3	3	8	148	149	1	1	0	9	118	116	1	3	7	9	66	60	1
-1	11	6	117	122	1	2	6	7	113	124	1	-2	3	8	88	94	1	2	0	9	220	226	1	4	7	9	63	64	1
0	11	6	161	157	1	3	6	7	173	172	1	-1	3	8	218	229	1	3	0	9	108	110	1	5	7	9	55	55	2
1	11	6	118	122	1	4	6	7	165	163	1	0	3	8	322														

I-1235-56

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	1	10	227	236	1	-2	9	10	85	94	1	-1	7	11	199	198	1	4	6	12	72	69	1	0	7	13	0	8	1
-2	1	10	77	87	1	-1	9	10	70	68	1	0	7	11	20	29	5	-4	7	12	120	113	1	1	7	13	92	87	1
-1	1	10	297	305	1	0	9	10	68	56	1	1	7	11	198	198	1	-3	7	12	50	43	2	2	7	13	93	92	1
0	1	10	0	15	1	1	9	10	65	68	1	2	7	11	131	132	1	-2	7	12	112	110	1	3	7	13	97	95	1
1	1	10	298	305	1	2	9	10	86	94	1	3	7	11	29	32	3	-1	7	12	44	49	2	-2	8	13	72	71	1
2	1	10	76	87	1	3	9	10	38	36	3	4	7	11	122	123	1	0	7	12	43	38	2	-1	8	13	79	79	1
3	1	10	223	235	1	-1	10	10	134	132	1	-3	8	11	73	67	1	1	7	12	49	49	2	0	8	13	107	107	1
4	1	10	218	218	1	0	10	10	52	51	2	-2	8	11	72	73	1	2	7	12	109	110	1	1	8	13	80	79	1
5	1	10	140	141	1	1	10	10	131	132	1	-1	8	11	36	32	2	3	7	12	42	43	2	2	8	13	73	71	1
6	1	10	93	90	1	1	0	11	186	193	1	0	8	11	40	39	2	4	7	12	116	113	1	0	0	14	66	66	1
-6	2	10	56	54	2	2	0	11	27	21	2	1	8	11	32	32	3	-3	8	12	102	100	1	1	0	14	109	108	1
-5	2	10	72	78	1	3	0	11	5	14	5	2	8	11	72	73	1	-2	8	12	118	115	1	2	0	14	76	60	2
-4	2	10	120	128	1	4	0	11	245	239	1	3	8	11	72	67	1	-1	8	12	109	113	1	3	0	14	37	40	1
-3	2	10	110	108	1	5	0	11	113	117	1	-2	9	11	107	106	1	0	8	12	63	62	1	4	0	14	67	70	1
-2	2	10	214	220	1	6	0	11	30	29	2	-1	9	11	89	86	1	1	8	12	110	113	1	5	0	14	69	68	1
-1	2	10	141	126	1	-6	1	11	92	90	1	0	9	11	27	32	4	2	8	12	117	115	1	-5	1	14	135	124	1
0	2	10	220	218	1	-5	1	11	92	93	1	1	9	11	85	86	1	3	8	12	100	100	1	-4	1	14	74	65	1
1	2	10	142	126	1	-4	1	11	63	57	1	2	9	11	107	106	1	-1	9	12	86	81	1	-3	1	14	88	87	1
2	2	10	212	220	1	-3	1	11	108	106	1	0	0	12	290	295	1	0	9	12	220	213	1	-2	1	14	81	82	1
3	2	10	106	108	1	-2	1	11	120	122	1	1	0	12	77	88	1	1	9	12	80	81	1	-1	1	14	193	194	1
4	2	10	120	129	1	-1	1	11	103	113	1	2	0	12	202	213	1	1	0	13	183	184	1	0	1	14	54	58	1
5	2	10	70	78	1	0	1	11	26	37	3	3	0	12	95	97	1	2	0	13	56	56	1	1	1	14	191	194	1
6	2	10	57	54	2	1	1	11	105	113	1	4	0	12	53	50	1	3	0	13	130	124	1	2	1	14	80	82	1
-6	3	10	130	125	1	2	1	11	122	122	1	5	0	12	12	10	9	4	0	13	93	94	1	3	1	14	89	87	1
-5	3	10	83	93	1	3	1	11	108	106	1	6	0	12	46	43	1	5	0	13	262	267	1	4	1	14	68	65	1
-4	3	10	25	26	4	4	1	11	64	57	1	-6	1	12	56	44	2	-5	1	13	20	20	6	5	1	14	131	124	1
-3	3	10	45	39	2	5	1	11	88	92	1	-5	1	12	52	52	2	-4	1	13	34	36	3	-5	2	14	129	123	1
-2	3	10	260	272	1	6	1	11	90	90	1	-4	1	12	182	179	1	-3	1	13	49	52	2	-4	2	14	20	16	6
-1	3	10	105	115	1	-6	2	11	159	160	1	-3	1	12	194	208	1	-2	1	13	73	83	1	-3	2	14	208	208	1
0	3	10	73	62	1	-5	2	11	164	168	1	-2	1	12	54	58	1	-1	1	13	160	158	1	-2	2	14	70	74	1
1	3	10	105	115	1	-4	2	11	43	49	2	-1	1	12	128	138	1	0	1	13	21	18	4	-1	2	14	169	177	1
2	3	10	259	273	1	-3	2	11	64	69	1	0	1	12	202	219	1	1	1	13	160	158	1	0	2	14	60	59	1
3	3	10	47	38	1	-2	2	11	195	204	1	1	1	12	129	138	1	2	1	13	75	83	1	1	2	14	171	177	1
4	3	10	28	27	3	-1	2	11	209	206	1	2	1	12	51	58	1	3	1	13	51	52	1	2	2	14	71	74	1
5	3	10	83	93	1	0	2	11	101	112	1	3	1	12	191	208	1	4	1	13	36	36	2	3	2	14	207	208	1
6	3	10	129	125	1	1	2	11	206	206	1	4	1	12	180	179	1	5	1	13	26	19	3	4	2	14	14	16	13
-6	4	10	59	58	2	2	2	11	197	204	1	5	1	12	49	52	2	-5	2	13	129	129	1	5	2	14	128	123	1
-5	4	10	146	142	1	3	2	11	61	69	1	6	1	12	54	44	2	-4	2	13	54	54	2	-4	3	14	39	41	3
-4	4	10	92	94	1	4	2	11	50	49	1	-5	2	12	31	38	3	-3	2	13	44	53	2	-3	3	14	99	94	1
-3	4	10	122	128	1	5	2	11	165	168	1	-4	2	12	153	142	1	-2	2	13	119	122	1	-2	3	14	133	132	1
-2	4	10	175	177	1	6	2	11	160	160	1	-3	2	12	183	174	1	-1	2	13	141	148	1	-1	3	14	21	23	4
-1	4	10	122	120	1	-6	3	11	71	69	2	-2	2	12	184	183	1	0	2	13	187	203	1	0	3	14	100	102	1
0	4	10	70	79	1	-5	3	11	48	47	2	-1	2	12	199	195	1	1	2	13	140	148	1	1	3	14	25	23	3
1	4	10	123	120	1	-4	3	11	106	98	1	0	2	12	268	279	1	2	2	13	113	122	1	2	3	14	132	132	1
2	4	10	170	177	1	-3	3	11	91	92	1	1	2	12	198	195	1	3	2	13	48	53	2	3	3	14	96	94	1
3	4	10	119	128	1	-2	3	11	71	75	1	2	2	12	180	183	1	4	2	13	54	54	2	4	3	14	41	41	2
4	4	10	93	94	1	-1	3	11	183	196	1	3	2	12	181	174	1	5	2	13	130	129	1	-4	4	14	183	178	1
5	4	10	149	143	1	0	3	11	131	132	1	4	2	12	150	142	1	-5	3	13	18	13	7	-3	4	14	108	107	1
6	4	10	55	58	2	1	3	11	184	196	1	5	2	12	42	38	2	-4	3	13	135	130	1	-2	4	14	216	219	1
-6	5	10	90	87	1	2	3	11	72	75	1	-5	3	12	112	105	1	-3	3	13	81	82	1	-1	4	14	293	292	1
-5	5	10	79	72	1	3	3	11	92	91	1	-4	3	12	79	78	1	-2	3	13	149	153	1	0	4	14	168	177	1
-4	5	10	153	153	1	4	3	11	105	98	1	-3	3	12	90	97	1	-1	3	13	132	135	1	1	4	14	291	292	1
-3	5	10	73	78	1	5	3	11	51	47	2	-2	3	12	216	216	1	0	3	13	294	306	1	2	4	14	219	219	1
-2	5	10	225	222	1	6	3	11	70	68	1	-1	3	12	135	128	1	1	3	13	131	135	1	3	4	14	108	107	1
-1	5	10	65	66	1	-5	4	11	62	63	2	0	3	12	30	35	3	2	3	13	149	153	1	4	4	14	181	178	1
0	5	10	222	222	1	-4	4	11	82	78	1	1	3	12	135	128	1	3	3	13	77	82	1	-4	5	14	85	78	1
1	5	10	73	78	1	-3	4	11	90	94	1	2	3	12	213	216	1	4	3	13	133	129	1	-3	5	14	106	109	1
2	5	10	152	153	1	-2	4	11	199	197	1	3	3	12	92	97	1	5	3	13	23	13	4	-2	5	14	44	40	2
3	5	10	76	72	1	-1	4	11	100	104	1	4	3	12															

I-1235-57

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 5

5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	2	15	20	20	6	2	4	15	27	17	3	-2	1	16	49	51	2	0	4	16	17	9	6	-1	2	17	66	65	1
-3	2	15	152	148	1	3	4	15	155	152	1	-1	1	16	62	64	1	1	4	16	53	51	2	0	2	17	143	142	1
-2	2	15	25	31	4	-3	5	15	57	56	2	0	1	16	50	47	2	2	4	16	72	68	1	1	2	17	70	65	1
-1	2	15	173	180	1	-2	5	15	197	196	1	1	1	16	59	64	2	3	4	16	83	82	1	2	2	17	61	59	2
0	2	15	21	37	5	-1	5	15	70	66	1	2	1	16	50	51	2	-2	5	16	90	88	1	-2	3	17	40	45	3
1	2	15	172	179	1	0	5	15	74	74	1	3	1	16	139	138	1	-1	5	16	24	22	5	-1	3	17	123	125	1
2	2	15	32	31	3	1	5	15	73	67	1	-3	2	16	64	69	2	0	5	16	21	10	5	0	3	17	76	69	1
3	2	15	148	149	1	2	5	15	198	196	1	-2	2	16	13	18	12	1	5	16	35	22	3	1	3	17	125	125	1
4	2	15	6	21	5	3	5	15	57	56	2	-1	2	16	91	90	1	2	5	16	88	88	1	2	3	17	44	45	2
-4	3	15	51	46	2	-2	6	15	16	20	9	0	2	16	225	234	1	-1	6	16	30	31	4	-1	4	17	73	67	1
-3	3	15	130	125	1	-1	6	15	86	90	1	1	2	16	90	90	1	0	6	16	114	113	1	0	4	17	212	209	1
-2	3	15	133	138	1	0	6	15	12	22	12	2	2	16	25	18	4	1	6	16	30	31	3	1	4	17	67	67	2
-1	3	15	71	67	1	1	6	15	91	90	1	3	2	16	67	69	1	1	0	17	16	20	5	0	0	18	194	198	1
0	3	15	13	0	11	2	6	15	18	20	7	-3	3	16	76	74	1	2	0	17	210	202	1	1	0	18	23	2	3
1	3	15	70	67	1	-1	7	15	134	131	1	-2	3	16	59	60	2	3	0	17	74	71	1	-1	1	18	43	38	2
2	3	15	130	138	1	0	7	15	135	132	1	-1	3	16	135	135	1	-3	1	17	117	112	1	0	1	18	84	79	1
3	3	15	126	125	1	1	7	15	132	131	1	0	3	16	67	66	1	-2	1	17	89	88	1	1	1	18	38	38	3
4	3	15	45	46	2	0	0	16	318	311	1	1	3	16	134	135	1	-1	1	17	127	126	1	-1	2	18	42	38	2
-3	4	15	158	152	1	1	0	16	56	50	1	2	3	16	67	60	1	0	1	17	36	30	3	0	2	18	24	18	5
-2	4	15	27	17	3	2	0	16	42	45	1	3	3	16	77	74	1	1	1	17	123	126	1	1	2	18	39	38	3
-1	4	15	151	146	1	3	0	16	0	5	1	-3	4	16	86	82	1	2	1	17	86	88	1						
0	4	15	84	83	1	4	0	16	18	20	4	-2	4	16	68	68	2	3	1	17	114	112	1						
1	4	15	147	146	1	-3	1	16	144	138	1	-1	4	16	53	52	2	-2	2	17	60	60	2						

I-1235-58

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	-9	-12	31	27	15	0	-6	-11	0	24	1	-4	-7	-10	0	26	1	0	0	-10	36	31	9	-8	-4	-9	19	17	19
-4	-9	-12	17	23	17	1	-6	-11	25	28	24	-3	-7	-10	82	59	5	1	0	-10	13	27	13	-7	-4	-9	36	12	8
-3	-9	-12	49	38	7	2	-6	-11	47	39	7	-2	-7	-10	24	22	20	2	0	-10	20	23	20	-6	-4	-9	45	37	6
-2	-9	-12	17	10	17	3	-6	-11	13	5	12	-1	-7	-10	58	61	5	3	0	-10	81	82	4	-5	-4	-9	11	12	10
-5	-8	-12	51	46	7	-7	-5	-11	0	23	1	0	-7	-10	68	57	5	4	0	-10	59	51	6	-4	-4	-9	86	86	3
-4	-8	-12	37	29	11	-6	-5	-11	0	13	1	1	-7	-10	26	24	15	-3	1	-10	65	51	5	-3	-4	-9	62	59	4
-3	-8	-12	36	43	12	-5	-5	-11	51	46	6	2	-7	-10	25	29	24	-2	1	-10	17	26	17	-2	-4	-9	55	57	5
-2	-8	-12	44	54	9	-4	-5	-11	68	63	5	3	-7	-10	36	32	10	-1	1	-10	62	64	6	-1	-4	-9	107	103	3
-1	-8	-12	41	36	10	-3	-5	-11	73	68	4	-8	-6	-10	20	31	19	0	1	-10	14	16	13	0	-4	-9	99	104	3
0	-8	-12	44	32	9	-2	-5	-11	23	33	23	-7	-6	-10	0	20	1	1	1	-10	28	22	14	1	-4	-9	132	130	3
-6	-7	-12	35	25	11	-1	-5	-11	0	16	1	-6	-6	-10	38	43	9	2	1	-10	39	30	9	2	-4	-9	0	19	1
-5	-7	-12	53	43	7	0	-5	-11	44	38	7	-5	-6	-10	18	17	18	3	1	-10	9	21	9	3	-4	-9	67	68	5
-4	-7	-12	20	19	19	1	-5	-11	31	19	12	-4	-6	-10	40	42	8	4	1	-10	37	46	11	4	-4	-9	11	9	10
-3	-7	-12	0	7	1	2	-5	-11	36	26	10	-3	-6	-10	21	20	21	-1	2	-10	26	5	20	5	-4	-9	33	20	11
-2	-7	-12	30	34	15	3	-5	-11	27	20	21	-2	-6	-10	52	64	6	0	2	-10	32	15	13	6	-4	-9	34	2	12
-1	-7	-12	0	19	1	-6	-4	-11	41	33	9	-1	-6	-10	22	9	22	1	2	-10	22	18	22	-8	-3	-9	35	22	11
0	-7	-12	41	42	10	-5	-4	-11	41	30	8	0	-6	-10	14	25	14	2	2	-10	0	12	1	-7	-3	-9	33	19	10
-6	-6	-12	0	26	1	-4	-4	-11	34	19	10	1	-6	-10	82	84	4	-8	-10	-9	97	93	4	-6	-3	-9	0	25	1
-5	-6	-12	0	6	1	-3	-4	-11	42	37	7	2	-6	-10	37	50	10	-7	-10	-9	34	25	11	-5	-3	-9	31	26	10
-4	-6	-12	9	6	9	-2	-4	-11	25	27	20	3	-6	-10	37	26	9	0	-10	-9	27	11	16	-4	-3	-9	110	114	3
-3	-6	-12	16	15	15	-1	-4	-11	18	33	18	4	-6	-10	13	18	13	1	-10	-9	0	8	1	-3	-3	-9	33	34	8
-2	-6	-12	64	59	5	0	-4	-11	0	22	1	-8	-5	-10	32	20	12	-9	-9	-9	57	55	7	-2	-3	-9	36	37	8
-1	-6	-12	0	21	1	1	-4	-11	0	10	1	-7	-5	-10	57	56	5	-8	-9	-9	52	47	6	-1	-3	-9	51	36	5
0	-6	-12	23	21	23	2	-4	-11	54	49	6	-6	-5	-10	33	34	10	-7	-9	-9	33	32	12	0	-3	-9	44	53	7
1	-6	-12	39	21	10	3	-4	-11	9	16	9	-5	-5	-10	37	47	9	-6	-9	-9	70	66	4	1	-3	-9	78	79	4
-5	-5	-12	40	35	9	-6	-3	-11	20	30	20	-4	-5	-10	48	56	7	-5	-9	-9	26	28	18	2	-3	-9	35	36	9
-4	-5	-12	41	40	9	-5	-3	-11	0	6	1	-3	-5	-10	105	101	3	-4	-9	-9	0	9	1	3	-3	-9	48	47	6
-3	-5	-12	19	19	18	-4	-3	-11	0	11	1	-2	-5	-10	60	59	4	-2	-9	-9	10	6	10	4	-3	-9	40	35	8
-2	-5	-12	14	19	13	-3	-3	-11	56	52	5	-1	-5	-10	23	7	22	-1	-9	-9	46	40	7	5	-3	-9	27	30	15
-1	-5	-12	0	11	1	-2	-3	-11	16	29	16	0	-5	-10	59	67	5	0	-9	-9	0	19	1	6	-3	-9	38	30	9
0	-5	-12	0	11	1	-1	-3	-11	72	70	4	1	-5	-10	27	41	16	1	-9	-9	43	38	8	-8	-2	-9	34	28	12
1	-5	-12	19	14	19	0	-3	-11	16	7	16	2	-5	-10	53	38	6	2	-9	-9	0	13	1	-7	-2	-9	0	12	1
-5	-4	-12	40	30	9	1	-3	-11	24	24	24	3	-5	-10	0	20	1	-9	-8	-9	26	7	22	-6	-2	-9	44	44	7
-4	-4	-12	0	10	1	2	-3	-11	8	20	7	4	-5	-10	31	12	13	-8	-8	-9	48	23	6	-5	-2	-9	22	26	22
-3	-4	-12	0	8	1	3	-3	-11	34	31	12	-8	-4	-10	30	24	16	-7	-8	-9	20	18	19	-4	-2	-9	0	20	1
-2	-4	-12	0	31	1	-5	-2	-11	0	16	1	-7	-4	-10	0	8	1	-6	-8	-9	76	70	4	-3	-2	-9	93	92	3
-1	-4	-12	0	10	1	-4	-2	-11	35	17	10	-6	-4	-10	19	26	19	-5	-8	-9	25	8	16	-2	-2	-9	33	30	9
0	-4	-12	9	21	9	-3	-2	-11	52	37	6	-5	-4	-10	71	75	4	-4	-8	-9	44	30	7	-1	-2	-9	34	34	9
1	-4	-12	0	19	1	-2	-2	-11	46	50	7	-4	-4	-10	12	22	12	-3	-8	-9	25	22	19	0	-2	-9	24	23	17
-2	-4	-12	39	40	11	-1	-2	-11	37	21	9	-3	-4	-10	11	7	11	-2	-8	-9	45	53	7	1	-2	-9	20	14	19
-4	-3	-12	59	57	6	0	-2	-11	51	43	6	-2	-4	-10	55	55	5	-1	-8	-9	33	36	10	2	-2	-9	76	79	4
-3	-3	-12	21	34	20	1	-2	-11	42	43	8	-1	-4	-10	24	22	24	0	-8	-9	13	4	12	3	-2	-9	58	57	5
-2	-3	-12	23	26	23	2	-2	-11	32	23	12	0	-4	-10	56	51	5	1	-8	-9	32	8	11	4	-2	-9	78	73	4
-1	-3	-12	34	21	12	3	-2	-11	54	49	7	1	-4	-10	36	35	9	2	-8	-9	0	26	1	5	-2	-9	15	9	14
0	-3	-12	44	32	8	-4	-1	-11	59	57	6	2	-4	-10	44	45	7	3	-8	-9	0	27	1	6	-2	-9	28	22	15
1	-3	-12	58	54	6	-3	-1	-11	35	26	10	3	-4	-10	40	52	9	-9	-7	-9	49	43	7	-7	-1	-9	39	40	9
-2	-2	-12	43	50	9	-2	-1	-11	0	14	1	4	-4	-10	9	18	9	-8	-7	-9	53	59	7	-6	-1	-9	68	62	4
-1	-2	-12	22	30	22	-1	-1	-11	56	51	6	5	-4	-10	0	19	1	-7	-7	-9	17	18	17	-5	-1	-9	57	60	6
0	-2	-12	31	22	15	0	-1	-11	0	8	1	-7	-3	-10	0	4	1	-6	-7	-9	29	22	11	-4	-1	-9	15	28	15
1	-2	-12	38	32	11	1	-1	-11	25	31	25	-6	-3	-10	38	18	8	-5	-7	-9	41	37	7	-3	-1	-9	31	36	10
-6	-10	-11	40	28	9	2	-1	-11	5	13	4	-5	-3	-10	51	48	6	-4	-7	-9	85	81	3	-2	-1	-9	0	13	1
-5	-10	-11	30	11	15	3	-1	-11	47	48	9	-4	-3	-10	45	56	7	-3	-7	-9	29	20	11	-1	-1	-9	38	31	8
-4	-10	-11	27	6	17	-2	0	-11	44	41	8	-3	-3	-10	67	64	4	-2	-7	-9	36	30	8	0	-1	-9	34	42	9
-3	-10	-11	18	14	17	-1	0	-11	0	6	1	-2	-3	-10	44	30	6	-1	-7	-9	36	37	9	1	-1	-9	33	45	10
-2	-10	-11	26	22	25	0	0	-11	0	12	1	-1	-3	-10	16	16	15	0	-7	-9	25	12	16	2	-1	-9	42	45	7
-1	-10	-11	19	7	18	1	0	-11	42	27	9	0	-3	-10	75	70	4	1	-7	-9	0	16	1	3	-1	-9	25	24	18
-7	-9	-11	0	7	1	2	0	-11	44	47	9	1	-3	-10	66	69	5	2	-7	-9	0	11	1	4	-1	-9	22	24	22
-6	-9	-11	0	11	1	-7	-10	-10	0	14	1	2	-3	-10	52	41	6	3	-7	-9	38	43	9	5	-1	-9	38	27	9
-5	-9	-11	14	16	13	-6	-10	-10	48	35	7	3	-3	-10	49	47	7	4	-7	-9	27	8	18	6	-1	-9	0	30	1
-4	-9	-11	66	55	5	-5	-10	-10	32	20	12	4	-3	-10	24	24	23	-9	-6	-9	21	19	21	-6	0	-9	0	5	1
-3	-9	-11	47	43																									

I-1235-59

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	2	-9	33	43	12	-2	-4	-8	7	17	7	-2	2	-8	21	29	20	-3	-5	-7	119	116	2	2	0	-7	69	66	4
3	2	-9	0	23	1	-1	-4	-8	26	34	14	-1	2	-8	0	0	1	-2	-5	-7	112	108	2	3	0	-7	88	88	3
4	2	-9	52	51	7	0	-4	-8	20	28	19	0	2	-8	39	38	8	-1	-5	-7	19	21	18	4	0	-7	52	58	5
5	2	-9	23	25	23	1	-4	-8	62	69	5	1	2	-8	0	11	1	0	-5	-7	18	8	18	5	0	-7	0	18	1
-2	3	-9	0	25	1	2	-4	-8	119	119	2	2	2	-8	8	14	8	1	-5	-7	7	4	7	6	0	-7	59	65	5
-1	3	-9	39	38	9	3	-4	-8	65	65	4	3	2	-8	53	42	5	2	-5	-7	23	21	23	7	0	-7	27	28	16
0	3	-9	45	34	8	4	-4	-8	0	37	1	4	2	-8	32	21	11	3	-5	-7	56	58	5	8	0	-7	34	3	12
1	3	-9	0	19	1	5	-4	-8	0	3	1	5	2	-8	72	66	4	4	-5	-7	95	96	3	-7	1	-7	70	56	5
2	3	-9	8	30	8	6	-4	-8	22	8	22	6	2	-8	38	39	10	5	-5	-7	32	47	11	-6	1	-7	21	20	20
3	3	-9	60	50	6	-9	-3	-8	0	2	1	-4	3	-8	13	22	13	6	-5	-7	54	46	6	-5	1	-7	56	45	5
4	3	-9	47	31	7	-8	-3	-8	26	2	15	-3	3	-8	47	46	7	-10	-4	-7	27	17	17	-4	1	-7	69	63	4
-8	-10	-8	54	48	6	-7	-3	-8	36	29	8	-2	3	-8	23	26	22	-9	-4	-7	0	24	1	-3	1	-7	81	81	3
-1	-10	-8	32	18	12	-6	-3	-8	0	13	1	-1	3	-8	12	5	12	-8	-4	-7	21	14	21	-2	1	-7	85	90	3
-9	-9	-8	32	20	13	-5	-3	-8	56	61	5	0	3	-8	33	34	10	-7	-4	-7	29	33	12	-1	1	-7	64	72	4
-7	-9	-8	37	22	8	-4	-3	-8	0	13	1	1	3	-8	23	9	22	-6	-4	-7	75	78	4	0	1	-7	130	128	2
-6	-9	-8	45	31	7	-3	-3	-8	19	17	18	2	3	-8	34	19	9	-5	-4	-7	64	55	4	1	1	-7	135	133	2
0	-9	-8	31	33	12	-2	-3	-8	65	60	4	3	3	-8	41	31	8	-4	-4	-7	53	46	5	2	1	-7	161	164	2
1	-9	-8	42	41	8	-1	-3	-8	46	50	6	4	3	-8	66	56	5	-3	-4	-7	33	26	8	3	1	-7	67	73	4
2	-9	-8	11	15	11	0	-3	-8	47	48	6	5	3	-8	27	35	19	-2	-4	-7	131	119	2	4	1	-7	45	45	6
3	-9	-8	12	14	11	1	-3	-8	58	56	5	6	3	-8	34	33	13	-1	-4	-7	51	55	5	5	1	-7	55	46	5
-10	-8	-8	15	32	15	2	-3	-8	30	41	11	-2	4	-8	0	8	1	0	-4	-7	32	26	8	6	1	-7	53	61	6
-9	-8	-8	37	45	10	3	-3	-8	86	91	3	-1	4	-8	0	9	1	1	-4	-7	31	28	10	7	1	-7	38	43	9
-8	-8	-8	95	94	3	4	-3	-8	0	7	1	0	4	-8	67	58	5	2	-4	-7	28	17	13	8	1	-7	28	31	20
-7	-8	-8	26	29	16	5	-3	-8	31	29	11	1	4	-8	0	11	1	3	-4	-7	97	104	3	-6	2	-7	27	5	15
-6	-8	-8	33	14	10	6	-3	-8	31	23	12	2	4	-8	34	30	11	4	-4	-7	78	79	4	-5	2	-7	0	9	1
-5	-8	-8	66	74	5	7	-3	-8	0	15	1	3	4	-8	0	23	1	5	-4	-7	37	15	8	-4	2	-7	31	36	11
-4	-8	-8	53	54	5	-8	-2	-8	0	10	1	4	4	-8	19	12	19	6	-4	-7	0	5	1	-3	2	-7	47	48	6
-3	-8	-8	76	82	4	-7	-2	-8	47	58	7	5	4	-8	0	18	1	7	-4	-7	24	3	23	-2	2	-7	60	64	5
-2	-8	-8	92	94	3	-6	-2	-8	34	32	9	1	5	-8	40	21	9	-9	-3	-7	33	29	10	-1	2	-7	45	49	7
-1	-8	-8	48	51	6	-5	-2	-8	87	86	3	2	5	-8	20	16	20	-8	-3	-7	23	12	23	0	2	-7	104	96	3
0	-8	-8	35	37	9	-4	-2	-8	28	20	10	-8	-10	-7	28	25	15	-7	-3	-7	59	62	5	1	2	-7	19	30	18
1	-8	-8	53	45	5	-3	-2	-8	88	91	3	-1	-10	-7	37	30	10	-6	-3	-7	121	124	2	2	2	-7	34	44	9
2	-8	-8	23	13	22	-2	-2	-8	121	132	3	-9	-9	-7	35	30	11	-5	-3	-7	0	7	1	3	2	-7	34	39	9
3	-8	-8	28	12	15	-1	-2	-8	102	96	3	-7	-9	-7	32	34	11	-4	-3	-7	59	63	4	4	2	-7	0	7	1
4	-8	-8	26	32	24	0	-2	-8	193	190	2	1	-9	-7	22	25	21	-3	-3	-7	54	51	4	5	2	-7	19	25	18
-10	-7	-8	49	59	8	1	-2	-8	66	71	4	3	-9	-7	28	11	16	-2	-3	-7	106	105	2	6	2	-7	16	16	15
-9	-7	-8	54	47	6	2	-2	-8	109	115	3	-10	-8	-7	28	36	18	-1	-3	-7	122	115	2	7	2	-7	30	17	12
-8	-7	-8	93	90	3	3	-2	-8	82	85	3	-8	-8	-7	72	75	5	0	-3	-7	99	98	3	-5	3	-7	29	7	13
-7	-7	-8	0	5	1	4	-2	-8	39	34	8	-7	-8	-7	46	42	7	1	-3	-7	143	143	2	-4	3	-7	27	2	14
-6	-7	-8	143	150	2	5	-2	-8	31	35	12	-6	-8	-7	42	38	7	2	-3	-7	39	37	8	-3	3	-7	26	15	15
-5	-7	-8	164	167	2	6	-2	-8	0	8	1	-5	-8	-7	36	40	8	3	-3	-7	74	75	4	-2	3	-7	57	47	5
-4	-7	-8	123	122	2	7	-2	-8	42	46	9	-4	-8	-7	145	150	2	4	-3	-7	63	63	4	-1	3	-7	69	56	4
-3	-7	-8	59	61	5	-8	-1	-8	33	8	10	-3	-8	-7	0	31	1	5	-3	-7	23	22	23	0	3	-7	53	48	5
-2	-7	-8	50	43	6	-7	-1	-8	84	74	4	-2	-8	-7	85	90	3	6	-3	-7	27	10	16	1	3	-7	18	15	18
-1	-7	-8	52	53	5	-6	-1	-8	50	48	5	-1	-8	-7	0	19	1	7	-3	-7	0	13	1	2	3	-7	42	40	7
0	-7	-8	68	67	4	-5	-1	-8	0	13	1	0	-8	-7	45	46	6	-9	-2	-7	15	23	15	3	3	-7	33	35	11
1	-7	-8	39	48	8	-4	-1	-8	0	23	1	1	-8	-7	18	22	18	-8	-2	-7	86	77	4	4	3	-7	0	21	1
2	-7	-8	37	43	9	-3	-1	-8	82	87	3	2	-8	-7	44	46	7	-7	-2	-7	25	22	15	5	3	-7	32	20	11
3	-7	-8	14	17	14	-2	-1	-8	62	58	4	3	-8	-7	46	50	7	-6	-2	-7	104	100	3	6	3	-7	35	27	10
4	-7	-8	0	18	1	-1	-1	-8	117	115	3	4	-8	-7	12	20	12	-5	-2	-7	111	108	3	7	3	-7	0	9	1
5	-7	-8	24	13	24	0	-1	-8	30	27	11	-10	-7	-7	28	12	15	-4	-2	-7	35	28	8	-4	4	-7	0	10	1
-10	-6	-8	0	17	1	1	-1	-8	100	102	3	-9	-7	-7	42	41	8	-3	-2	-7	54	55	5	-3	4	-7	32	29	11
-9	-6	-8	18	9	18	2	-1	-8	75	74	4	-8	-7	-7	0	16	1	-2	-2	-7	33	42	9	-2	4	-7	0	16	1
-8	-6	-8	47	50	7	3	-1	-8	94	101	3	-7	-7	-7	21	23	21	-1	-2	-7	71	71	3	-1	4	-7	28	19	13
-7	-6	-8	54	49	5	4	-1	-8	0	16	1	-6	-7	-7	130	126	2	0	-2	-7	73	78	3	0	4	-7	11	33	10
-6	-6	-8	43	43	7	5	-1	-8	0	26	1	-5	-7	-7	65	63	4	1	-2	-7	146	148	2	1	4	-7	35	19	9
-5	-6	-8	73	76	4	6	-1	-8	17	20	17	-4	-7	-7	47	49	6	2	-2	-7	107	105	3	2	4	-7	44	39	7
-4	-6	-8	104	109	3	7	-1	-8	0	15	1	-3	-7	-7	55	45	5	3	-2	-7	41	45	8	3	4	-7	28	12	13
-3	-6	-8	92	92	3	-7	0	-8	40	33	8	-2	-7	-7	89	86	3	4	-2	-7	25	15	15	4	4	-7	71	76	4
-2	-6	-8	195	199	2	-6	0	-8	26	21	14	-1	-7	-7	120	118	3	5	-2	-7	20	34	20	5	4	-7	0	13	1
-1	-6	-8	88	89	3	-5	0	-8	49	33	6	0	-7	-7	35	16	8	6	-2	-7	42	50	8	6	4	-7	37	21	9</

I-1235-60

Table 1. Observed and calculated structure factors for

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	-7	-6	12	30	12	-5	-2	-6	51	47	5	1	3	-6	47	61	6	-8	-5	-5	77	84	4	8	-1	-5	32	27	10
-6	-7	-6	27	29	13	-4	-2	-6	36	42	7	2	3	-6	38	42	8	-7	-5	-5	54	44	5	9	-1	-5	27	38	18
-5	-7	-6	192	194	2	-3	-2	-6	168	169	2	3	3	-6	73	78	4	-6	-5	-5	44	38	6	-9	0	-5	32	41	13
-4	-7	-6	136	136	2	-2	-2	-6	74	73	3	4	3	-6	39	27	7	-5	-5	-5	96	98	2	-8	0	-5	31	36	11
-3	-7	-6	234	233	2	-1	-2	-6	217	221	1	5	3	-6	49	35	6	-4	-5	-5	75	81	3	-7	0	-5	19	23	18
-2	-7	-6	92	90	3	0	-2	-6	94	87	2	6	3	-6	41	48	8	-3	-5	-5	123	126	2	-6	0	-5	49	54	6
-1	-7	-6	185	182	2	1	-2	-6	34	39	7	7	3	-6	28	11	14	-2	-5	-5	90	90	2	-5	0	-5	137	137	2
0	-7	-6	103	99	3	2	-2	-6	60	57	4	8	3	-6	46	30	7	-1	-5	-5	150	151	2	-4	0	-5	191	195	2
1	-7	-6	34	33	9	3	-2	-6	82	81	3	-5	4	-6	29	20	15	0	-5	-5	89	83	2	-3	0	-5	19	20	18
2	-7	-6	66	66	4	4	-2	-6	63	62	4	-4	4	-6	25	26	17	1	-5	-5	143	141	2	-2	0	-5	114	113	2
3	-7	-6	72	73	4	5	-2	-6	63	60	4	-3	4	-6	68	73	5	2	-5	-5	99	94	3	-1	0	-5	150	149	1
4	-7	-6	0	19	1	6	-2	-6	21	9	20	-2	4	-6	45	53	7	3	-5	-5	35	48	9	0	0	-5	32	34	6
5	-7	-6	31	30	12	7	-2	-6	54	50	5	-1	4	-6	45	49	7	4	-5	-5	73	72	4	1	0	-5	147	142	1
-10	-6	-6	28	20	14	8	-2	-6	25	24	24	0	4	-6	0	23	1	5	-5	-5	82	77	3	2	0	-5	55	66	4
-9	-6	-6	23	19	22	-9	-1	-6	0	17	1	1	4	-6	37	46	8	6	-5	-5	39	47	8	3	0	-5	36	36	7
-8	-6	-6	36	34	9	-8	-1	-6	24	21	22	2	4	-6	30	24	10	7	-5	-5	30	42	14	4	0	-5	92	97	3
-7	-6	-6	50	53	5	-7	-1	-6	55	57	5	3	4	-6	43	41	7	-9	-4	-5	70	62	4	5	0	-5	43	39	7
-6	-6	-6	48	49	6	-6	-1	-6	25	15	12	4	4	-6	7	12	7	-8	-4	-5	30	1	10	6	0	-5	13	15	13
-5	-6	-6	165	168	2	-5	-1	-6	104	106	3	5	4	-6	39	52	9	-7	-4	-5	56	52	5	7	0	-5	45	44	7
-4	-6	-6	50	41	5	-4	-1	-6	61	66	4	6	4	-6	21	22	20	-6	-4	-5	74	73	3	8	0	-5	62	69	5
-3	-6	-6	76	82	3	-3	-1	-6	55	59	4	7	4	-6	39	51	10	-5	-4	-5	70	76	3	9	0	-5	53	45	7
-2	-6	-6	50	52	5	-2	-1	-6	247	243	1	8	4	-6	26	10	22	-4	-4	-5	33	43	6	-8	1	-5	34	24	9
-1	-6	-6	0	26	1	-1	-1	-6	38	38	6	-4	5	-6	5	13	4	-3	-4	-5	79	77	2	-7	1	-5	4	11	4
0	-6	-6	79	69	3	0	-1	-6	63	56	3	-3	5	-6	0	15	1	-2	-4	-5	114	108	2	-6	1	-5	104	98	3
1	-6	-6	105	105	3	1	-1	-6	250	249	1	-2	5	-6	17	28	16	-1	-4	-5	92	86	2	-5	1	-5	44	34	6
2	-6	-6	66	71	4	2	-1	-6	145	151	2	-1	5	-6	105	101	3	0	-4	-5	75	82	3	-4	1	-5	83	83	3
3	-6	-6	67	61	4	3	-1	-6	24	10	15	0	5	-6	64	66	5	1	-4	-5	158	153	2	-3	1	-5	31	33	9
4	-6	-6	46	46	6	4	-1	-6	0	12	1	1	5	-6	98	103	3	2	-4	-5	79	83	3	-2	1	-5	26	26	10
5	-6	-6	81	78	4	5	-1	-6	29	18	10	2	5	-6	0	14	1	3	-4	-5	27	28	12	-1	1	-5	103	100	2
6	-6	-6	43	28	8	6	-1	-6	8	27	8	3	5	-6	52	46	6	4	-4	-5	144	145	2	0	1	-5	42	40	5
-10	-5	-6	0	15	1	7	-1	-6	55	50	5	4	5	-6	70	66	5	5	-4	-5	59	56	4	1	1	-5	29	30	9
-9	-5	-6	59	65	5	8	-1	-6	49	50	7	5	5	-6	0	15	1	6	-4	-5	26	15	15	2	1	-5	62	62	4
-8	-5	-6	45	44	6	-9	0	-6	24	9	23	6	5	-6	0	21	1	7	-4	-5	0	14	1	3	1	-5	85	79	3
-7	-5	-6	38	48	8	-8	0	-6	30	25	11	7	5	-6	52	49	7	8	-4	-5	0	30	1	4	1	-5	63	57	4
-6	-5	-6	115	123	2	-7	0	-6	15	21	15	-2	6	-6	19	7	19	-10	-3	-5	39	13	7	5	1	-5	71	64	3
-5	-5	-6	59	60	4	-6	0	-6	31	29	9	-1	6	-6	40	39	8	-9	-3	-5	33	32	9	6	1	-5	8	28	7
-4	-5	-6	90	91	3	-5	0	-6	74	78	4	0	6	-6	39	22	9	-8	-3	-5	80	73	3	7	1	-5	44	52	7
-3	-5	-6	160	155	2	-4	0	-6	0	17	1	1	6	-6	13	30	12	-7	-3	-5	68	71	4	8	1	-5	40	20	7
-2	-5	-6	46	44	5	-3	0	-6	55	58	5	2	6	-6	38	50	10	-6	-3	-5	52	52	5	9	1	-5	36	29	10
-1	-5	-6	180	172	2	-2	0	-6	100	94	2	3	6	-6	64	52	5	-5	-3	-5	129	135	2	-8	2	-5	39	34	9
0	-5	-6	54	58	5	-1	0	-6	0	19	1	4	6	-6	29	37	14	-4	-3	-5	216	218	1	-7	2	-5	38	27	8
1	-5	-6	84	77	3	0	0	-6	44	34	5	5	6	-6	0	9	1	-3	-3	-5	86	85	2	-6	2	-5	58	59	5
2	-5	-6	38	52	8	1	0	-6	73	78	3	6	6	-6	42	32	9	-2	-3	-5	72	73	2	-5	2	-5	0	15	1
3	-5	-6	126	130	2	2	0	-6	70	65	3	2	7	-6	18	15	17	-1	-3	-5	167	162	1	-4	2	-5	22	11	21
4	-5	-6	63	62	4	3	0	-6	188	192	2	3	7	-6	14	13	14	0	-3	-5	54	53	3	-3	2	-5	51	51	5
5	-5	-6	0	33	1	4	0	-6	99	103	3	3	-9	-5	0	9	1	1	-3	-5	161	164	1	-2	2	-5	39	30	7
6	-5	-6	26	24	16	5	0	-6	133	138	2	-10	-8	-5	50	39	7	2	-3	-5	242	237	1	-1	2	-5	60	58	4
7	-5	-6	33	19	12	6	0	-6	103	111	3	-7	-8	-5	46	51	6	3	-3	-5	61	62	4	0	2	-5	90	85	3
-10	-4	-6	40	15	8	7	0	-6	90	87	3	-6	-8	-5	26	23	14	4	-3	-5	9	18	9	1	2	-5	47	32	5
-9	-4	-6	55	56	5	8	0	-6	14	14	13	-5	-8	-5	17	31	16	5	-3	-5	43	39	6	2	2	-5	92	94	3
-8	-4	-6	26	5	12	-8	1	-6	40	23	8	-4	-8	-5	62	65	5	6	-3	-5	53	52	5	3	2	-5	53	61	5
-7	-4	-6	68	57	4	-7	1	-6	62	50	5	-3	-8	-5	130	133	2	7	-3	-5	0	13	1	4	2	-5	91	86	3
-6	-4	-6	151	152	2	-6	1	-6	43	41	7	-2	-8	-5	139	148	2	8	-3	-5	23	12	22	5	2	-5	35	27	8
-5	-4	-6	155	165	2	-5	1	-6	57	56	5	-1	-8	-5	91	94	3	-10	-2	-5	19	24	18	6	2	-5	57	51	4
-4	-4	-6	60	63	4	-4	1	-6	19	24	18	0	-8	-5	121	125	2	-9	-2	-5	0	8	1	7	2	-5	42	39	7
-3	-4	-6	92	92	2	-3	1	-6	109	108	3	1	-8	-5	31	26	10	-8	-2	-5	33	33	9	8	2	-5	35	20	9
-2	-4	-6	30	32	7	-2	1	-6	43	32	6	3	-8	-5	53	54	6	-7	-2	-5	58	61	4	9	2	-5	37	22	10
-1	-4	-6	103	101	2	-1	1	-6	98	98	3	4	-8	-5	0	8	1	-6	-2	-5	171	175	2	-7	3	-5	14	2	14
0	-4	-6	150	146	2	0	1	-6	16	10	15	-10	-7	-5	0	16	1	-5	-2	-5	35	37	7	-6	3	-5	46	36	6
1	-4	-6	31	37	8	1	1	-6	184	186	2	-9	-7	-5	30	28	12	-4	-2	-5	174	179	1	-5	3	-5	17	26	17
2	-4	-6	26	7	12	2	1	-6	146	144	2	-8	-7	-5	47	43	6	-3	-2	-5	86	92	2						

I-1235-61

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	5	-5	29	6	13	-6	-4	-4	53	54	5	9	0	-4	49	36	6	0	6	-4	61	52	4	-2	-4	-3	53	53	3
-3	5	-5	37	24	9	-5	-4	-4	67	65	3	-9	1	-4	30	31	13	1	6	-4	130	125	2	-1	-4	-3	359	364	1
-2	5	-5	41	43	7	-4	-4	-4	146	147	1	-8	1	-4	23	18	22	2	6	-4	131	134	3	0	-4	-3	41	47	4
-1	5	-5	39	32	8	-3	-4	-4	21	24	11	-7	1	-4	66	69	4	3	6	-4	82	78	4	1	-4	-3	107	105	2
0	5	-5	25	33	18	-2	-4	-4	132	135	1	-6	1	-4	16	19	16	4	6	-4	0	14	1	2	-4	-3	37	35	5
1	5	-5	46	39	6	-1	-4	-4	45	43	4	-5	1	-4	200	201	2	5	6	-4	60	62	5	3	-4	-3	43	45	5
2	5	-5	40	48	8	0	-4	-4	263	265	1	-4	1	-4	49	45	5	6	6	-4	47	52	7	4	-4	-3	34	40	8
3	5	-5	100	99	3	1	-4	-4	19	27	18	-3	1	-4	7	11	6	7	6	-4	47	37	7	5	-4	-3	23	16	16
4	5	-5	78	76	4	2	-4	-4	55	61	4	-2	1	-4	204	202	1	8	6	-4	36	26	11	6	-4	-3	63	59	4
5	5	-5	82	85	4	3	-4	-4	89	85	3	-1	1	-4	71	74	3	-3	7	-4	24	16	23	7	-4	-3	25	25	17
6	5	-5	48	39	6	4	-4	-4	92	96	3	0	1	-4	157	161	1	-2	7	-4	22	23	21	8	-4	-3	9	17	9
7	5	-5	0	15	1	5	-4	-4	46	39	5	1	1	-4	50	49	4	-1	7	-4	21	24	20	-8	-3	-3	42	29	6
8	5	-5	30	16	15	6	-4	-4	24	15	16	2	1	-4	85	88	2	0	7	-4	47	33	6	-7	-3	-3	87	88	3
-3	6	-5	7	8	6	7	-4	-4	29	29	12	3	1	-4	204	197	1	1	7	-4	0	11	1	-6	-3	-3	56	44	4
-2	6	-5	16	21	16	8	-4	-4	41	18	8	4	1	-4	45	56	5	2	7	-4	32	13	11	-5	-3	-3	34	35	5
-1	6	-5	48	44	7	-8	-3	-4	45	34	5	5	1	-4	37	30	7	3	7	-4	6	2	6	-4	-3	-3	108	108	2
0	6	-5	23	33	23	-7	-3	-4	29	18	11	6	1	-4	47	56	6	4	7	-4	67	69	5	-3	-3	-3	134	124	1
1	6	-5	39	25	8	-6	-3	-4	0	29	1	7	1	-4	78	77	3	5	7	-4	28	29	14	-2	-3	-3	145	152	1
2	6	-5	4	12	4	-5	-3	-4	160	160	2	8	1	-4	50	42	5	6	7	-4	19	9	18	-1	-3	-3	166	168	1
3	6	-5	34	10	9	-4	-3	-4	149	149	1	9	1	-4	24	40	24	7	7	-4	25	20	24	0	-3	-3	222	211	1
4	6	-5	39	40	8	-3	-3	-4	84	79	2	-8	2	-4	26	13	15	0	8	-4	40	17	9	1	-3	-3	146	134	1
5	6	-5	49	54	7	-2	-3	-4	134	129	1	-7	2	-4	48	41	6	1	8	-4	34	21	11	2	-3	-3	51	42	3
6	6	-5	99	92	3	-1	-3	-4	261	253	1	-6	2	-4	94	98	3	2	8	-4	33	14	10	3	-3	-3	42	38	5
7	6	-5	54	59	7	0	-3	-4	189	189	1	-5	2	-4	45	48	6	3	8	-4	35	43	11	4	-3	-3	52	46	4
-1	7	-5	32	18	13	1	-3	-4	74	74	2	-4	2	-4	73	71	4	4	8	-4	62	54	5	5	-3	-3	60	63	4
0	7	-5	39	30	9	2	-3	-4	119	115	2	-3	2	-4	34	33	8	5	8	-4	48	27	7	6	-3	-3	71	75	4
1	7	-5	46	46	7	3	-3	-4	170	170	2	-2	2	-4	148	144	2	6	8	-4	33	11	12	7	-3	-3	61	53	5
2	7	-5	0	16	1	4	-3	-4	83	82	3	-1	2	-4	54	52	4	-8	-10	-3	31	27	14	8	-3	-3	18	21	17
3	7	-5	37	44	10	5	-3	-4	30	35	10	0	2	-4	318	319	1	1	-10	-3	0	13	1	9	-3	-3	15	25	15
4	7	-5	41	36	8	6	-3	-4	13	27	13	1	2	-4	56	55	3	3	-9	-3	39	37	9	-8	-2	-3	30	18	10
5	7	-5	14	15	13	7	-3	-4	32	27	10	2	2	-4	25	3	9	-10	-8	-3	0	13	1	-7	-2	-3	118	120	2
6	7	-5	49	58	8	8	-3	-4	0	25	1	3	2	-4	43	44	6	-7	-8	-3	75	73	4	-6	-2	-3	55	55	4
-3	8	-4	28	23	14	-10	-2	-4	27	29	15	4	2	-4	8	17	8	-6	-8	-3	37	39	8	-5	-2	-3	60	65	3
-10	-8	-4	9	12	9	-9	-2	-4	0	19	1	5	2	-4	50	55	6	-5	-8	-3	96	101	3	-4	-2	-3	106	106	2
-7	-8	-4	69	69	4	-8	-2	-4	127	126	2	6	2	-4	51	49	5	-4	-8	-3	44	43	7	-3	-2	-3	86	81	2
-6	-8	-4	37	46	6	-7	-2	-4	30	32	10	7	2	-4	40	28	7	-3	-8	-3	45	42	6	-2	-2	-3	391	407	1
-5	-8	-4	126	122	2	-6	-2	-4	31	39	9	8	2	-4	20	25	19	-2	-8	-3	28	25	12	-1	-2	-3	49	52	3
-4	-8	-4	0	17	1	-5	-2	-4	71	72	3	9	2	-4	50	49	7	-1	-8	-3	61	59	5	0	-2	-3	58	51	2
-3	-8	-4	89	89	3	-4	-2	-4	202	201	1	-7	3	-4	32	35	11	0	-8	-3	8	17	8	1	-2	-3	55	50	3
-2	-8	-4	142	139	2	-3	-2	-4	108	116	1	-6	3	-4	46	39	6	1	-8	-3	25	15	14	2	-2	-3	315	312	1
-1	-8	-4	124	130	3	-2	-2	-4	407	408	1	-5	3	-4	27	18	12	3	-8	-3	27	27	16	3	-2	-3	44	35	4
0	-8	-4	35	37	8	-1	-2	-4	92	93	2	-4	3	-4	31	35	10	-9	-7	-3	24	15	24	4	-2	-3	107	110	2
1	-8	-4	61	65	4	0	-2	-4	133	136	1	-3	3	-4	17	35	17	-8	-7	-3	41	28	7	5	-2	-3	73	76	3
3	-8	-4	0	15	1	1	-2	-4	140	143	1	-2	3	-4	94	96	3	-7	-7	-3	114	120	3	6	-2	-3	99	106	3
-9	-7	-4	0	17	1	2	-2	-4	157	153	1	-1	3	-4	60	59	4	-6	-7	-3	29	37	13	7	-2	-3	92	88	3
-8	-7	-4	40	41	8	3	-2	-4	204	203	1	0	3	-4	109	103	2	-5	-7	-3	29	27	11	8	-2	-3	44	43	7
-7	-7	-4	68	68	4	4	-2	-4	104	108	2	1	3	-4	38	45	7	-4	-7	-3	64	65	4	9	-2	-3	17	28	16
-6	-7	-4	70	67	4	5	-2	-4	74	72	4	2	3	-4	75	72	3	-3	-7	-3	90	93	3	-10	-1	-3	12	17	12
-5	-7	-4	14	18	14	6	-2	-4	95	87	3	3	3	-4	82	81	3	-2	-7	-3	61	66	4	-9	-1	-3	32	33	10
-4	-7	-4	34	23	8	7	-2	-4	127	114	2	4	3	-4	0	26	1	-1	-7	-3	75	78	3	-8	-1	-3	33	27	8
-3	-7	-4	83	80	3	8	-2	-4	0	34	1	5	3	-4	27	28	14	0	-7	-3	138	139	2	-7	-1	-3	110	110	2
-2	-7	-4	99	95	3	9	-2	-4	20	18	20	6	3	-4	85	82	3	1	-7	-3	94	92	3	-6	-1	-3	69	68	3
-1	-7	-4	20	16	20	-10	-1	-4	0	10	1	7	3	-4	34	36	9	2	-7	-3	34	29	8	-5	-1	-3	14	12	13
0	-7	-4	90	89	3	-9	-1	-4	21	12	21	8	3	-4	6	19	6	3	-7	-3	18	38	18	-4	-1	-3	162	160	1
1	-7	-4	90	82	3	-8	-1	-4	134	130	2	9	3	-4	12	29	12	4	-7	-3	49	40	6	-3	-1	-3	225	224	1
2	-7	-4	0	24	1	-7	-1	-4	43	37	6	-6	4	-4	11	10	11	-8	-6	-3	31	34	10	-2	-1	-3	152	157	1
3	-7	-4	83	83	4	-6	-1	-4	71	68	3	-5	4	-4	38	47	9	-7	-6	-3	42	42	7	-1	-1	-3	115	121	1
4	-7	-4	86	91	4	-5	-1	-4	122	119	2	-4	4	-4	94	93	3	-6	-6	-3	26	26	14	0	-1	-3	47	50	3
-8	-6	-4	60	68	4	-4	-1	-4	91	83	2	-3	4	-4	0	21	1	-5	-6	-3	103	94	2	1	-1	-3	97	92	1
-7	-6	-4	38	32	8	-3	-1	-4	326	324	1	-2	4	-4	37	36	8	-4	-6	-3	113	111	2	2	-1	-3	417	402	1
-6	-6	-4	89	79	3	-2	-1	-4	132	128	1	-1	4	-4	75	84	4	-3											

I-1235-62

6

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	1	-3	46	43	6	9	5	-3	0	23	1	5	-6	-2	22	26	21	10	-1	-2	32	31	13	3	4	-2	27	23	9
-6	1	-3	21	14	21	-5	6	-3	77	73	5	-8	-5	-2	107	102	3	-10	0	-2	40	33	9	4	4	-2	120	126	2
-5	1	-3	171	174	2	-4	6	-3	0	9	1	-7	-5	-2	0	17	1	-9	0	-2	23	21	22	5	4	-2	143	148	2
-4	1	-3	24	27	10	-3	6	-3	30	15	11	-6	-5	-2	45	40	6	-8	0	-2	164	167	2	6	4	-2	90	84	3
-3	1	-3	294	287	1	-2	6	-3	0	11	1	-5	-5	-2	181	180	1	-7	0	-2	106	106	3	7	4	-2	53	39	5
-2	1	-3	25	19	7	-1	6	-3	44	31	6	-4	-5	-2	168	164	1	-6	0	-2	53	56	5	8	4	-2	7	31	7
-1	1	-3	361	358	1	0	6	-3	38	37	7	-3	-5	-2	202	197	1	-5	0	-2	102	105	2	9	4	-2	51	40	6
0	1	-3	248	250	1	1	6	-3	52	63	5	-2	-5	-2	318	306	1	-4	0	-2	285	284	1	10	4	-2	45	33	7
1	1	-3	267	266	1	2	6	-3	38	36	8	-1	-5	-2	81	78	2	-2	0	-2	85	90	2	-7	5	-2	59	59	6
2	1	-3	115	111	1	3	6	-3	111	110	3	0	-5	-2	272	267	1	-1	0	-2	261	250	1	-6	5	-2	0	15	1
3	1	-3	270	256	1	4	6	-3	34	30	8	1	-5	-2	198	192	1	0	0	-2	433	431	1	-5	5	-2	20	7	20
4	1	-3	69	63	3	5	6	-3	10	17	10	2	-5	-2	157	159	2	1	0	-2	79	92	2	-4	5	-2	29	31	11
5	1	-3	52	46	4	6	6	-3	59	50	5	3	-5	-2	113	109	2	2	0	-2	339	332	1	-3	5	-2	7	16	6
6	1	-3	93	93	3	7	6	-3	29	32	12	4	-5	-2	65	66	4	3	0	-2	233	229	1	-2	5	-2	37	46	8
7	1	-3	37	41	8	8	6	-3	0	14	1	5	-5	-2	42	50	7	4	0	-2	70	69	2	-1	5	-2	73	70	4
8	1	-3	36	27	9	9	6	-3	0	28	1	6	-5	-2	23	21	23	5	0	-2	82	84	3	0	5	-2	24	21	15
9	1	-3	12	24	12	-4	7	-3	20	9	20	7	-5	-2	0	6	1	6	0	-2	109	111	2	1	5	-2	29	19	10
10	1	-3	30	32	14	-3	7	-3	30	25	12	-8	-4	-2	104	114	3	7	0	-2	76	82	4	2	5	-2	21	14	21
-9	2	-3	35	31	11	-2	7	-3	44	37	7	-7	-4	-2	28	22	12	8	0	-2	56	44	5	3	5	-2	115	116	2
-8	2	-3	37	37	8	-1	7	-3	24	17	20	-6	-4	-2	68	70	3	9	0	-2	35	44	9	4	5	-2	64	61	4
-7	2	-3	69	72	4	0	7	-3	31	30	11	-5	-4	-2	149	150	2	10	0	-2	36	12	10	5	5	-2	139	140	2
-6	2	-3	46	35	5	1	7	-3	41	44	8	-4	-4	-2	126	126	1	-9	1	-2	22	24	21	6	5	-2	83	78	3
-5	2	-3	24	8	13	2	7	-3	28	18	12	-3	-4	-2	207	204	1	-8	1	-2	82	80	3	7	5	-2	44	30	6
-4	2	-3	35	45	8	3	7	-3	31	32	11	-2	-4	-2	245	240	1	-7	1	-2	41	42	6	8	5	-2	70	72	4
-3	2	-3	183	180	1	4	7	-3	44	50	7	-1	-4	-2	170	171	1	-6	1	-2	92	91	3	9	5	-2	22	22	22
-2	2	-3	26	24	8	5	7	-3	53	55	6	0	-4	-2	186	177	1	-5	1	-2	99	95	2	10	5	-2	43	41	9
-1	2	-3	116	115	2	6	7	-3	15	18	14	1	-4	-2	46	40	4	-4	1	-2	69	73	3	-6	6	-2	30	22	14
0	2	-3	248	248	1	7	7	-3	47	57	7	2	-4	-2	148	143	1	-3	1	-2	107	108	2	-5	6	-2	65	72	5
1	2	-3	299	286	1	8	7	-3	37	23	10	3	-4	-2	40	21	5	-2	1	-2	208	215	1	-4	6	-2	0	5	1
2	2	-3	245	238	1	-2	8	-3	0	13	1	4	-4	-2	49	35	5	-1	1	-2	128	129	1	-3	6	-2	52	50	5
3	2	-3	67	62	3	-1	8	-3	47	47	8	5	-4	-2	13	30	13	0	1	-2	388	397	1	-2	6	-2	44	49	6
4	2	-3	72	67	3	0	8	-3	22	31	22	6	-4	-2	0	14	1	1	1	-2	275	286	1	-1	6	-2	37	24	7
5	2	-3	51	59	5	1	8	-3	75	78	4	7	-4	-2	83	81	4	2	1	-2	102	98	1	0	6	-2	0	6	1
6	2	-3	50	52	6	2	8	-3	25	20	22	8	-4	-2	0	7	1	3	1	-2	457	443	1	1	6	-2	34	31	9
7	2	-3	50	43	5	3	8	-3	55	52	6	-8	-3	-2	0	34	1	4	1	-2	62	63	3	2	6	-2	58	62	5
8	2	-3	0	13	1	4	8	-3	30	28	13	-7	-3	-2	105	109	3	5	1	-2	60	61	4	3	6	-2	68	71	4
9	2	-3	22	30	22	5	8	-3	29	28	14	-6	-3	-2	77	84	3	6	1	-2	164	166	2	4	6	-2	114	112	3
10	2	-3	75	65	5	6	8	-3	27	37	17	-5	-3	-2	252	241	1	7	1	-2	24	9	14	5	6	-2	25	14	14
-8	3	-3	27	7	15	7	8	-3	20	18	20	-4	-3	-2	90	87	2	8	1	-2	93	90	3	6	6	-2	30	37	11
-7	3	-3	0	14	1	1	9	-3	31	9	13	-3	-3	-2	423	442	1	9	1	-2	52	43	6	7	6	-2	52	57	6
-6	3	-3	88	91	4	2	9	-3	46	35	7	-2	-3	-2	365	380	1	10	1	-2	22	3	21	8	6	-2	77	76	4
-5	3	-3	88	83	3	3	9	-3	52	57	7	-1	-3	-2	522	545	1	-9	2	-2	18	14	18	9	6	-2	30	35	13
-4	3	-3	0	30	1	4	9	-3	25	9	25	0	-3	-2	56	64	3	-8	2	-2	0	8	1	10	6	-2	25	39	25
-3	3	-3	36	21	7	5	9	-3	0	7	1	1	-3	-2	256	256	1	-7	2	-2	23	13	18	-4	7	-2	53	52	6
-2	3	-3	79	76	3	-8	-10	-2	61	65	6	2	-3	-2	9	20	9	-6	2	-2	0	22	1	-3	7	-2	61	59	5
-1	3	-3	229	232	1	-1	-10	-2	19	21	18	3	-3	-2	115	120	2	-5	2	-2	0	16	1	-2	7	-2	53	57	6
0	3	-3	30	25	7	-9	-9	-2	27	28	15	4	-3	-2	87	86	3	-4	2	-2	48	41	4	-1	7	-2	76	75	4
1	3	-3	46	44	4	-7	-9	-2	13	21	13	5	-3	-2	49	51	6	-3	2	-2	64	61	3	0	7	-2	61	55	4
2	3	-3	120	110	2	1	-9	-2	48	45	6	6	-3	-2	8	27	8	-2	2	-2	137	141	1	1	7	-2	72	70	4
3	3	-3	47	51	5	3	-9	-2	0	8	1	7	-3	-2	82	80	3	-1	2	-2	158	158	1	2	7	-2	131	142	2
4	3	-3	38	45	7	-10	-8	-2	40	34	9	8	-3	-2	0	25	1	0	2	-2	305	317	1	3	7	-2	0	26	1
5	3	-3	134	132	2	-7	-8	-2	48	52	6	9	-3	-2	20	20	20	1	2	-2	331	320	1	4	7	-2	49	53	6
6	3	-3	133	138	2	-6	-8	-2	44	38	6	-8	-2	-2	33	17	8	2	2	-2	231	218	1	5	7	-2	43	34	7
7	3	-3	72	66	4	-5	-8	-2	0	16	1	-7	-2	-2	0	23	1	3	2	-2	195	194	1	6	7	-2	61	57	5
8	3	-3	34	20	9	-4	-8	-2	85	86	3	-6	-2	-2	0	24	1	4	2	-2	256	248	1	7	7	-2	48	54	7
9	3	-3	69	64	4	-3	-8	-2	66	76	4	-5	-2	-2	187	179	1	5	2	-2	44	48	5	8	7	-2	32	31	11
10	3	-3	28	18	16	-2	-8	-2	71	62	4	-4	-2	-2	269	267	1	6	2	-2	201	199	2	9	7	-2	43	16	7
-7	4	-3	23	14	22	-1	-8	-2	35	17	8	-3	-2	-2	128	135	1	7	2	-2	116	117	3	-3	8	-2	0	16	1
-6	4	-3	28	18	12	0	-8	-2	0	5	1	-2	-2	-2	299	303	1	8	2	-2	29	27	11	-2	8	-2	19	20	19
-5	4	-3	0	11	1	1	-8	-2	36	36	8	-1	-2	-2	64	57	2	9	2	-2	27	34	14	-1	8	-2	17	14	17
-4	4	-3	0	15	1	3	-8	-2	33	16	9																		

Table 1. Observed and calculated structure factors for

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	-8	-1	42	41	7	7	-3	-1	77	77	4	-2	2	-1	121	130	1	-1	7	-1	0	12	1	5	-7	0	25	32	20
-6	-8	-1	43	32	7	8	-3	-1	46	38	6	-1	2	-1	453	462	1	0	7	-1	17	18	16	-10	-6	0	27	36	20
-5	-8	-1	65	64	4	9	-3	-1	54	43	6	0	2	-1	107	106	1	1	7	-1	67	70	4	-9	-6	0	98	100	3
-4	-8	-1	40	34	7	-8	-2	-1	29	26	10	1	2	-1	434	419	1	2	7	-1	78	82	4	-8	-6	0	60	57	5
-3	-8	-1	83	85	3	-7	-2	-1	70	75	4	2	2	-1	406	397	1	3	7	-1	43	27	6	-7	-6	0	58	58	5
-2	-8	-1	122	123	2	-6	-2	-1	90	93	2	3	2	-1	329	315	1	4	7	-1	45	49	6	-6	-6	0	76	79	4
-1	-8	-1	0	10	1	-5	-2	-1	46	45	4	4	2	-1	171	165	1	5	7	-1	70	64	4	-5	-6	0	31	30	10
0	-8	-1	10	7	10	-4	-2	-1	361	346	1	5	2	-1	65	61	3	6	7	-1	25	22	17	-4	-6	0	112	109	2
1	-8	-1	87	85	3	-3	-2	-1	439	429	1	6	2	-1	116	114	2	7	7	-1	0	21	1	-3	-6	0	184	184	2
3	-8	-1	45	43	7	-2	-2	-1	301	314	1	7	2	-1	102	95	3	8	7	-1	0	5	1	-2	-6	0	127	131	2
4	-8	-1	0	12	1	-1	-2	-1	181	198	1	8	2	-1	51	48	5	9	7	-1	51	49	6	-1	-6	0	148	146	2
-10	-7	-1	35	39	11	0	-2	-1	414	446	1	9	2	-1	78	73	4	10	7	-1	0	4	1	0	-6	0	60	49	4
-9	-7	-1	67	61	5	1	-2	-1	741	781	1	10	2	-1	8	29	7	-4	8	-1	25	14	24	1	-6	0	127	132	2
-8	-7	-1	67	59	4	2	-2	-1	348	350	1	-8	3	-1	50	41	6	-3	8	-1	5	12	4	2	-6	0	54	50	5
-7	-7	-1	69	71	4	3	-2	-1	107	110	2	-7	3	-1	44	27	6	-2	8	-1	32	24	11	3	-6	0	37	37	7
-6	-7	-1	93	87	3	4	-2	-1	71	70	3	-6	3	-1	33	25	8	-1	8	-1	21	9	20	4	-6	0	26	12	13
-5	-7	-1	33	22	10	5	-2	-1	0	12	1	-5	3	-1	42	42	6	0	8	-1	0	13	1	5	-6	0	27	20	12
-4	-7	-1	71	76	4	6	-2	-1	76	76	3	-4	3	-1	140	145	2	1	8	-1	37	28	9	6	-6	0	0	9	1
-3	-7	-1	74	76	4	7	-2	-1	0	21	1	-3	3	-1	35	36	6	2	8	-1	38	32	8	-8	-5	0	70	77	4
-2	-7	-1	57	52	5	8	-2	-1	0	12	1	-2	3	-1	14	18	14	3	8	-1	115	115	3	-7	-5	0	63	64	5
-1	-7	-1	98	100	3	9	-2	-1	36	24	9	-1	3	-1	21	29	11	4	8	-1	44	43	6	-6	-5	0	115	120	2
0	-7	-1	29	17	11	-10	-1	-1	0	12	1	0	3	-1	35	23	4	5	8	-1	43	50	7	-5	-5	0	87	88	3
1	-7	-1	77	77	3	-8	-1	-1	22	34	21	1	3	-1	97	102	1	6	8	-1	18	27	17	-4	-5	0	203	205	1
2	-7	-1	14	3	13	-7	-1	-1	257	262	2	2	3	-1	180	172	1	7	8	-1	66	62	5	-3	-5	0	58	61	3
3	-7	-1	66	67	4	-6	-1	-1	236	232	1	3	3	-1	163	162	1	8	8	-1	40	38	8	-2	-5	0	48	51	4
4	-7	-1	55	48	5	-5	-1	-1	15	22	14	4	3	-1	43	46	4	9	8	-1	60	56	6	-1	-5	0	99	102	2
5	-7	-1	10	23	10	-4	-1	-1	166	155	1	5	3	-1	45	39	4	-2	9	-1	19	11	19	0	-5	0	108	102	2
-8	-6	-1	55	50	5	-3	-1	-1	58	65	2	6	3	-1	27	26	11	-1	9	-1	0	9	1	1	-5	0	24	17	12
-7	-6	-1	171	180	2	-2	-1	-1	306	312	1	7	3	-1	222	226	2	0	9	-1	0	6	1	2	-5	0	96	105	3
-6	-6	-1	38	43	8	-1	-1	-1	126	128	1	8	3	-1	61	48	4	1	9	-1	33	35	11	3	-5	0	59	60	4
-5	-6	-1	213	213	2	0	-1	-1	125	131	1	9	3	-1	26	29	15	2	9	-1	24	25	24	4	-5	0	46	47	5
-4	-6	-1	120	121	2	1	-1	-1	228	233	1	10	3	-1	21	15	20	3	9	-1	46	40	7	5	-5	0	18	16	17
-3	-6	-1	198	185	1	2	-1	-1	70	61	2	-8	4	-1	0	20	1	4	9	-1	20	19	20	6	-5	0	39	42	8
-2	-6	-1	59	52	4	3	-1	-1	200	192	1	-7	4	-1	26	33	16	5	9	-1	43	37	7	7	-5	0	25	19	21
-1	-6	-1	61	67	4	4	-1	-1	122	123	2	-6	4	-1	0	23	1	6	9	-1	0	12	1	-8	-4	0	132	129	2
0	-6	-1	85	82	3	5	-1	-1	115	113	2	-5	4	-1	45	41	6	7	9	-1	26	11	18	-7	-4	0	85	91	3
1	-6	-1	41	36	6	6	-1	-1	72	75	3	-4	4	-1	26	35	15	8	9	-1	42	36	9	-6	-4	0	99	101	3
2	-6	-1	39	38	7	7	-1	-1	104	105	3	-3	4	-1	22	30	21	0	10	-1	31	22	15	-5	-4	0	77	79	3
3	-6	-1	0	12	1	8	-1	-1	36	32	8	-2	4	-1	37	23	6	1	10	-1	13	19	13	-4	-4	0	163	169	1
4	-6	-1	59	57	5	9	-1	-1	20	5	19	-1	4	-1	47	58	4	2	10	-1	18	34	18	-3	-4	0	88	85	2
5	-6	-1	16	14	15	10	-1	-1	0	20	1	0	4	-1	39	38	5	3	10	-1	28	11	15	-2	-4	0	348	350	1
6	-6	-1	25	17	19	-10	0	-1	52	49	6	1	4	-1	50	45	3	4	10	-1	12	6	12	-1	-4	0	172	167	1
-8	-5	-1	31	36	10	-9	0	-1	37	35	9	2	4	-1	84	83	2	5	10	-1	0	31	1	0	-4	0	97	97	2
-7	-5	-1	158	160	2	-8	0	-1	19	16	19	3	4	-1	14	19	14	6	10	-1	24	24	23	1	-4	0	58	53	3
-6	-5	-1	27	40	13	-7	0	-1	21	14	20	4	4	-1	171	164	1	-8	-10	0	38	13	10	2	-4	0	92	91	2
-5	-5	-1	82	78	3	-5	0	-1	25	29	13	5	4	-1	117	116	2	-7	-10	0	0	20	1	3	-4	0	5	18	4
-4	-5	-1	116	118	2	-4	0	-1	222	215	1	6	4	-1	192	204	2	-6	-10	0	22	7	22	4	-4	0	21	4	21
-3	-5	-1	134	125	2	-3	0	-1	179	184	1	7	4	-1	44	52	6	-1	-10	0	31	20	12	5	-4	0	0	10	1
-2	-5	-1	88	79	2	-2	0	-1	532	578	1	8	4	-1	45	48	6	0	-10	0	0	10	1	6	-4	0	0	28	1
-1	-5	-1	176	167	1	-1	0	-1	385	385	1	9	4	-1	96	92	3	1	-10	0	7	6	6	7	-4	0	35	44	10
0	-5	-1	302	303	1	-1	0	-1	63	63	1	10	4	-1	27	15	14	-9	-9	0	0	14	1	8	-4	0	33	18	10
1	-5	-1	159	152	2	0	0	-1	196	201	1	-7	5	-1	16	19	15	-8	-9	0	0	27	1	-8	-3	0	169	169	2
2	-5	-1	33	24	7	1	0	-1	62	50	2	-6	5	-1	38	7	7	-7	-9	0	27	20	16	-7	-3	0	79	88	4
3	-5	-1	33	18	8	2	0	-1	41	46	4	-5	5	-1	97	98	3	-6	-9	0	34	26	9	-6	-3	0	72	74	3
4	-5	-1	107	106	3	3	0	-1	99	100	2	-4	5	-1	38	37	7	-5	-9	0	0	18	1	-5	-3	0	43	39	5
5	-5	-1	23	31	19	4	0	-1	17	18	17	-3	5	-1	88	84	3	-1	-9	0	36	25	9	-4	-3	0	61	62	3
6	-5	-1	34	35	9	5	0	-1	35	40	7	-2	5	-1	63	70	4	0	-9	0	0	13	1	-3	-3	0	55	56	3
7	-5	-1	0	14	1	6	0	-1	80	81	3	-1	5	-1	72	76	3	1	-9	0	0	11	1	-2	-3	0	206	189	1
-8	-4	-1	29	29	10	7	0	-1	146	142	2	0	5	-1	46	39	5	2	-9	0	26	14	19	-1	-3	0	96	95	1
-7	-4	-1	51	57	5	8	0	-1	35	20	9	1	5	-1	42	33	5	3	-9	0	30	35	16	0	-3	0	46	41	3
-6	-4	-1	89	88	3	9	0	-1	36	17	10	2	5	-1															

I-1235-64

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 7

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-6	-1	0	26	42	12	5	3	0	39	39	5	7	8	0	14	4	14	2	-6	1	11	14	10	2	-1	1	227	218	1
-5	-1	0	133	133	2	6	3	0	75	74	3	8	8	0	14	15	13	3	-6	1	135	135	2	3	-1	1	322	320	1
-4	-1	0	258	258	1	7	3	0	86	88	3	9	8	0	43	54	9	4	-6	1	40	32	7	4	-1	1	72	75	2
-3	-1	0	316	320	1	8	3	0	166	169	2	10	8	0	25	35	24	5	-6	1	74	72	4	5	-1	1	0	7	1
-2	-1	0	491	495	1	9	3	0	45	36	6	-3	9	0	30	35	15	6	-6	1	0	6	1	6	-1	1	39	29	6
-1	-1	0	79	79	1	10	3	0	36	33	9	-2	9	0	0	14	1	-10	-5	1	0	11	1	7	-1	1	41	37	6
0	-1	0	236	237	1	11	3	0	0	15	1	-1	9	0	0	11	1	-9	-5	1	76	74	4	8	-1	1	23	29	22
1	-1	0	126	134	1	-8	4	0	43	18	7	0	9	0	34	13	9	-8	-5	1	93	97	3	9	-1	1	30	17	11
2	-1	0	216	217	1	-7	4	0	41	44	8	1	9	0	34	25	9	-7	-5	1	135	138	2	10	-1	1	27	9	17
3	-1	0	226	213	1	-6	4	0	43	28	6	2	9	0	55	56	5	-6	-5	1	34	31	10	-10	0	1	28	17	15
4	-1	0	177	177	1	-5	4	0	11	10	10	3	9	0	31	16	12	-5	-5	1	149	146	2	-9	0	1	0	20	1
5	-1	0	120	124	2	-4	4	0	0	4	1	4	9	0	26	16	14	-4	-5	1	61	61	4	-8	0	1	75	81	4
6	-1	0	39	31	6	-3	4	0	6	18	5	5	9	0	13	18	12	-3	-5	1	285	290	1	-7	0	1	144	142	2
7	-1	0	21	7	17	-2	4	0	95	91	2	6	9	0	13	26	12	-2	-5	1	72	72	3	-6	0	1	36	40	8
8	-1	0	88	90	3	-1	4	0	52	53	3	7	9	0	32	20	11	-1	-5	1	26	33	10	-5	0	1	17	18	16
9	-1	0	91	86	3	0	4	0	96	97	2	8	9	0	0	27	1	0	-5	1	34	39	7	-4	0	1	95	100	2
10	-1	0	44	30	8	1	4	0	174	167	1	9	9	0	10	14	9	1	-5	1	67	76	4	-3	0	1	37	46	4
-10	0	0	0	9	1	2	4	0	352	350	1	-1	10	0	26	6	24	2	-5	1	65	70	4	-2	0	1	56	50	3
-9	0	0	11	6	11	3	4	0	91	85	2	0	10	0	0	10	1	3	-5	1	84	84	3	-1	0	1	198	201	1
-8	0	0	0	5	1	4	4	0	165	169	1	1	10	0	25	20	24	4	-5	1	43	37	6	0	0	1	62	63	1
-7	0	0	29	27	11	5	4	0	80	79	3	2	10	0	56	52	6	5	-5	1	97	98	3	1	0	1	386	384	1
-6	0	0	113	106	2	6	4	0	100	101	2	3	10	0	52	44	6	6	-5	1	0	7	1	2	0	1	534	578	1
-5	0	0	96	97	2	7	4	0	82	91	3	4	10	0	0	15	1	7	-5	1	38	19	8	3	0	1	181	184	1
-4	0	0	134	128	1	8	4	0	127	129	2	5	10	0	29	27	14	-10	-4	1	17	15	16	4	0	1	222	215	1
-3	0	0	80	76	2	9	4	0	34	37	9	6	10	0	0	7	1	-9	-4	1	95	92	3	5	0	1	120	124	2
-2	0	0	575	605	1	10	4	0	20	26	20	7	10	0	15	20	14	-8	-4	1	43	48	7	6	0	1	29	29	9
-1	0	0	42	44	1	11	4	0	0	8	1	8	10	0	28	13	18	-7	-4	1	42	52	7	7	0	1	25	14	11
1	0	0	43	44	1	-7	5	0	0	19	1	3	11	0	41	33	9	-6	-4	1	197	204	2	8	0	1	20	15	20
2	0	0	577	605	1	-6	5	0	40	42	8	4	11	0	36	18	11	-5	-4	1	112	115	2	9	0	1	33	35	10
3	0	0	79	76	2	-5	5	0	0	16	1	5	11	0	35	23	12	-4	-4	1	163	164	2	10	0	1	44	49	7
4	0	0	133	128	1	-4	5	0	42	47	6	-6	-10	1	46	23	8	-3	-4	1	14	19	14	-10	1	1	18	20	17
5	0	0	94	97	2	-3	5	0	65	60	4	-5	-10	1	23	31	22	-2	-4	1	81	83	2	-9	1	1	0	5	1
6	0	0	110	106	2	-2	5	0	103	105	2	-4	-10	1	0	6	1	-1	-4	1	45	45	4	-8	1	1	32	32	10
7	0	0	18	27	18	-1	5	0	13	17	13	-3	-10	1	0	11	1	0	-4	1	36	38	5	-7	1	1	99	105	3
8	0	0	0	4	1	0	5	0	110	102	2	-2	-10	1	30	34	14	1	-4	1	54	58	3	-6	1	1	75	75	4
9	0	0	20	6	19	1	5	0	102	102	2	-1	-10	1	0	19	1	2	-4	1	22	23	13	-5	1	1	114	113	2
10	0	0	0	9	1	2	5	0	53	51	3	0	-10	1	12	22	11	3	-4	1	27	30	11	-4	1	1	122	123	2
-10	1	0	30	30	14	3	5	0	63	61	3	-8	-9	1	52	36	7	4	-4	1	34	35	8	-3	1	1	200	192	1
-9	1	0	87	86	4	4	5	0	200	205	1	-7	-9	1	0	12	1	5	-4	1	51	41	5	-2	1	1	73	61	2
-8	1	0	79	90	4	5	5	0	88	88	3	-6	-9	1	34	12	10	6	-4	1	42	23	6	-1	1	1	227	233	1
-7	1	0	12	7	11	6	5	0	115	120	2	-5	-9	1	44	37	7	7	-4	1	43	33	6	0	1	1	125	131	1
-6	1	0	36	30	8	7	5	0	72	64	4	-4	-9	1	33	19	10	8	-4	1	9	20	9	1	1	1	128	127	1
-5	1	0	116	124	2	8	5	0	73	77	4	-3	-9	1	43	40	8	-8	-3	1	51	48	6	2	1	1	308	312	1
-4	1	0	179	177	1	9	5	0	65	65	4	-2	-9	1	0	25	1	-7	-3	1	216	226	2	3	1	1	57	65	2
-3	1	0	227	213	1	10	5	0	45	40	7	-1	-9	1	22	35	21	-6	-3	1	25	26	13	4	1	1	163	154	1
-2	1	0	217	217	1	11	5	0	34	29	12	0	-9	1	0	6	1	-5	-3	1	33	39	7	5	1	1	28	22	7
-1	1	0	125	134	1	-6	6	0	0	9	1	1	-9	1	0	9	1	-4	-3	1	51	46	3	6	1	1	236	232	1
0	1	0	235	237	1	-5	6	0	39	20	8	2	-9	1	0	11	1	-3	-3	1	166	162	1	7	1	1	263	252	2
1	1	0	77	79	1	-4	6	0	32	12	9	-9	-8	1	62	56	6	-2	-3	1	180	172	1	8	1	1	28	34	11
2	1	0	491	495	1	-3	6	0	26	37	14	-8	-8	1	45	38	7	-1	-3	1	98	102	1	10	1	1	0	12	1
3	1	0	317	320	1	-2	6	0	51	50	5	-7	-8	1	60	62	5	0	-3	1	28	23	6	-9	2	1	26	24	18
4	1	0	258	258	1	-1	6	0	125	132	2	-6	-8	1	23	27	22	1	-3	1	21	29	11	-8	2	1	0	11	1
5	1	0	135	133	1	0	6	0	57	49	4	-5	-8	1	41	50	7	2	-3	1	28	18	6	-7	2	1	24	21	18
6	1	0	44	42	5	1	6	0	154	146	2	-4	-8	1	41	43	7	3	-3	1	41	36	5	-6	2	1	69	76	4
7	1	0	88	88	3	2	6	0	132	131	2	-3	-8	1	116	115	3	4	-3	1	140	145	2	-5	2	1	14	12	13
8	1	0	70	65	4	3	6	0	182	184	2	-2	-8	1	37	32	8	5	-3	1	43	42	6	-4	2	1	74	70	2
10	1	0	38	13	8	4	6	0	115	109	2	-1	-8	1	36	28	8	6	-3	1	0	25	1	-3	2	1	110	110	2
-9	2	0	24	22	23	5	6	0	41	30	6	0	-8	1	14	13	14	7	-3	1	42	27	6	-2	2	1	349	350	1
-8	2	0	0	6	1	6	6	0	78	79	3	1	-8	1	28	9	12	8	-3	1	49	41	6	-1	2	1	741	781	1
-7	2	0	73	73	4	7	6	0	50	58	5	2	-8	1	19	25	19	-10	-2	1	35	29	9	0	2	1	416	446	1
-6	2	0	23	14	20	8	6	0	55	57	5	3</																	

I-1235-65

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 8

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-8	4	1	46	34	7	4	9	1	39	34	8	-7	-4	2	32	39	10	6	0	2	54	56	4	-3	5	2	116	109	2
-7	4	1	38	51	9	5	9	1	44	53	7	-6	-4	2	86	84	3	7	0	2	111	106	2	-2	5	2	154	159	2
-6	4	1	0	10	1	7	9	1	38	39	9	-5	-4	2	145	148	2	8	0	2	164	167	2	-1	5	2	191	192	1
-5	4	1	21	10	20	9	9	1	39	46	10	-4	-4	2	117	126	2	9	0	2	10	21	9	0	5	2	277	267	1
-4	4	1	54	41	5	-1	10	1	35	25	10	-3	-4	2	32	23	7	10	0	2	40	33	8	1	5	2	79	78	2
-3	4	1	59	64	4	0	10	1	0	5	1	-2	-4	2	222	224	1	-10	1	2	38	31	10	2	5	2	321	306	1
-2	4	1	47	50	4	2	10	1	30	27	13	-1	-4	2	35	28	6	-9	1	2	15	12	14	3	5	2	198	197	1
-1	4	1	90	87	2	3	10	1	40	45	8	0	-4	2	201	194	1	-8	1	2	62	52	4	4	5	2	167	164	1
0	4	1	201	197	1	4	10	1	41	39	8	1	-4	2	68	67	3	-7	1	2	75	77	4	5	5	2	181	180	2
1	4	1	352	350	1	5	10	1	53	50	6	2	-4	2	39	37	6	-6	1	2	75	67	4	6	5	2	40	40	6
2	4	1	226	233	1	7	10	1	12	18	11	3	-4	2	59	69	4	-5	1	2	125	119	2	7	5	2	14	17	13
3	4	1	331	325	1	8	10	1	28	11	16	4	-4	2	123	130	2	-4	1	2	133	130	2	8	5	2	99	102	3
4	4	1	78	71	2	3	11	1	35	28	11	5	-4	2	46	53	6	-3	1	2	148	144	1	9	5	2	67	64	4
5	4	1	106	102	2	4	11	1	0	19	1	6	-4	2	18	11	17	-2	1	2	101	105	1	10	5	2	28	18	12
6	4	1	82	88	3	5	11	1	70	60	5	7	-4	2	12	5	11	-1	1	2	57	55	3	11	5	2	27	28	19
7	4	1	58	57	4	-4	-10	2	21	17	20	-10	-3	2	35	31	10	0	1	2	445	465	1	-5	6	2	18	26	18
8	4	1	22	29	21	-3	-10	2	0	13	1	-9	-3	2	24	11	24	1	1	2	21	20	7	-4	6	2	24	10	17
9	4	1	35	28	9	-7	-9	2	0	6	1	-8	-3	2	70	72	4	2	1	2	244	270	1	-3	6	2	53	61	5
10	4	1	0	16	1	-6	-9	2	19	22	19	-7	-3	2	67	55	4	3	1	2	181	166	1	-2	6	2	38	28	7
11	4	1	0	14	1	-5	-9	2	31	36	12	-6	-3	2	102	104	3	4	1	2	211	205	1	-1	6	2	45	44	5
-7	5	1	19	14	18	-4	-9	2	48	53	7	-5	-3	2	151	155	2	5	1	2	43	49	4	0	6	2	214	215	1
-6	5	1	39	35	8	-3	-9	2	55	54	6	-4	-3	2	202	199	1	6	1	2	39	31	5	1	6	2	110	110	2
-5	5	1	37	31	8	-2	-9	2	23	8	23	-3	-3	2	102	100	2	7	1	2	44	50	6	2	6	2	70	58	3
-4	5	1	101	106	3	-1	-9	2	14	19	14	-2	-3	2	89	104	2	8	1	2	29	22	9	3	6	2	130	133	2
-3	5	1	20	18	19	0	-9	2	35	20	10	-1	-3	2	36	37	5	9	1	2	70	72	4	4	6	2	67	68	3
-2	5	1	22	24	18	1	-9	2	23	22	23	0	-3	2	138	139	1	10	1	2	35	34	9	5	6	2	83	82	3
-1	5	1	158	152	2	-8	-8	2	33	9	11	1	-3	2	239	231	1	-9	2	2	50	52	7	6	6	2	140	145	2
0	5	1	305	303	1	-7	-8	2	27	29	18	2	-3	2	168	168	1	-8	2	2	23	15	23	7	6	2	199	200	2
1	5	1	172	167	1	-6	-8	2	0	4	1	3	-3	2	93	96	3	-7	2	2	72	73	4	8	6	2	34	25	8
2	5	1	85	79	2	-5	-8	2	59	57	5	4	-3	2	130	125	2	-6	2	2	36	42	9	9	6	2	39	36	8
3	5	1	135	125	1	-4	-8	2	54	59	6	5	-3	2	58	55	4	-5	2	2	0	25	1	10	6	2	55	67	6
4	5	1	121	118	2	-3	-8	2	0	11	1	6	-3	2	0	24	1	-4	2	2	44	41	5	11	6	2	17	15	17
5	5	1	78	78	3	-2	-8	2	32	33	10	7	-3	2	0	5	1	-3	2	2	94	94	2	-4	7	2	20	27	20
6	5	1	34	40	8	-1	-8	2	69	66	4	8	-3	2	22	5	21	-2	2	2	82	78	2	-3	7	2	36	20	8
7	5	1	159	160	2	0	-8	2	14	21	13	-10	-2	2	29	21	13	-1	2	2	78	80	2	-2	7	2	79	80	4
8	5	1	31	36	10	1	-8	2	4	13	4	-9	-2	2	48	34	6	0	2	2	506	501	1	-1	7	2	40	41	7
9	5	1	42	35	7	2	-8	2	14	20	14	-8	-2	2	24	27	17	1	2	2	62	57	2	0	7	2	60	51	4
10	5	1	37	34	9	3	-8	2	0	16	1	-7	-2	2	113	117	3	2	2	2	302	303	1	1	7	2	118	121	2
11	5	1	55	39	6	-9	-7	2	41	16	9	-6	-2	2	200	199	2	3	2	2	126	135	1	2	7	2	69	67	4
-6	6	1	23	17	23	-8	-7	2	30	31	14	-5	-2	2	49	48	5	4	2	2	266	267	1	3	7	2	166	167	2
-5	6	1	17	14	16	-7	-7	2	61	54	5	-4	-2	2	255	248	1	5	2	2	185	179	1	4	7	2	0	16	1
-4	6	1	55	58	5	-6	-7	2	65	57	5	-3	-2	2	195	194	1	6	2	2	35	24	6	5	7	2	70	72	4
-3	6	1	0	12	1	-5	-7	2	24	34	24	-2	-2	2	230	218	1	7	2	2	13	23	12	6	7	2	51	55	5
-2	6	1	46	38	6	-4	-7	2	51	54	5	-1	-2	2	328	320	1	8	2	2	0	17	1	7	7	2	31	23	10
-1	6	1	33	36	9	-3	-7	2	20	26	19	0	-2	2	306	317	1	9	2	2	22	21	22	8	7	2	50	48	6
0	6	1	91	82	3	-2	-7	2	136	142	2	1	-2	2	160	158	1	-9	3	2	19	20	19	9	7	2	84	89	4
1	6	1	73	67	3	-1	-7	2	75	70	4	2	-2	2	139	141	1	-8	3	2	33	25	11	10	7	2	47	54	7
2	6	1	42	52	6	0	-7	2	58	54	5	3	-2	2	62	61	3	-7	3	2	86	80	3	11	7	2	81	78	4
3	6	1	192	185	1	1	-7	2	78	75	4	4	-2	2	45	41	5	-6	3	2	28	27	11	-4	8	2	26	25	21
4	6	1	116	121	2	2	-7	2	60	57	5	5	-2	2	20	16	20	-5	3	2	48	51	6	-3	8	2	0	16	1
5	6	1	214	213	2	3	-7	2	70	59	4	6	-2	2	20	22	19	-4	3	2	89	86	3	-1	8	2	33	36	9
6	6	1	46	44	6	4	-7	2	45	52	8	7	-2	2	0	13	1	-3	3	2	120	120	2	0	8	2	14	5	13
7	6	1	176	180	2	-10	-6	2	43	39	9	8	-2	2	4	8	4	-2	3	2	7	20	7	1	8	2	17	17	17
8	6	1	58	50	4	-9	-6	2	33	35	12	9	-2	2	32	14	11	-1	3	2	257	256	1	2	8	2	66	62	4
9	6	1	0	18	1	-8	-6	2	75	76	4	-10	-1	2	0	3	1	0	3	2	63	64	2	3	8	2	71	76	4
10	6	1	37	41	10	-7	-6	2	63	57	5	-9	-1	2	50	43	6	1	3	2	523	545	1	4	8	2	84	86	3
11	6	1	59	55	6	-6	-6	2	31	37	10	-8	-1	2	89	90	3	2	3	2	366	380	1	5	8	2	20	16	19
-5	7	1	27	23	16	-5	-6	2	19	14	18	-7	-1	2	19	9	19	3	3	2	420	442	1	6	8	2	41	38	6
-4	7	1	49	48	6	-4	-6	2	108	112	3	-6	-1	2	160	166	2	4	3	2	85	87	2	7	8	2	52	52	5
-3	7	1	74	67	4	-3	-6	2	64	71	4	-5	-1	2	67	61	3	5	3	2	253	241	1	10	8	2	33	34	12
-2	7	1	0	3	1	-2	-6	2	63</																				

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 9

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	-8	3	56	47	6	-3	-2	3	69	62	3	7	2	3	122	120	2	7	7	3	121	120	2	-4	-3	4	0	26	1
2	-8	3	0	13	1	-2	-2	3	245	238	1	8	2	3	28	18	10	8	7	3	16	28	16	-3	-3	4	79	81	3
-8	-7	3	30	23	14	-1	-2	3	295	286	1	9	2	3	0	8	1	9	7	3	0	15	1	-2	-3	4	68	72	3
-7	-7	3	64	57	5	0	-2	3	245	248	1	-9	3	3	0	25	1	10	7	3	16	19	16	-1	-3	4	38	45	6
-6	-7	3	29	18	13	1	-2	3	121	115	1	-8	3	3	19	21	19	11	7	3	60	53	6	0	-3	4	110	103	2
-5	-7	3	47	55	7	2	-2	3	24	24	8	-7	3	3	62	53	4	-3	8	3	39	27	8	1	-3	4	49	59	5
-4	-7	3	41	50	8	3	-2	3	181	180	2	-6	3	3	75	75	4	-1	8	3	22	15	21	2	-3	4	102	96	2
-3	-7	3	37	32	8	4	-2	3	37	45	7	-5	3	3	57	63	5	0	8	3	24	17	18	3	-3	4	26	35	12
-2	-7	3	0	18	1	5	-2	3	11	8	11	-4	3	3	43	46	6	1	8	3	64	59	4	4	-3	4	37	35	7
-1	-7	3	38	44	8	6	-2	3	36	35	7	-3	3	3	35	38	6	2	8	3	38	25	8	5	-3	4	26	18	12
0	-7	3	24	30	18	7	-2	3	70	72	4	-2	3	3	40	42	5	3	8	3	50	42	6	6	-3	4	38	39	8
1	-7	3	20	17	19	8	-2	3	41	37	8	-1	3	3	146	134	1	4	8	3	50	43	6	7	-3	4	40	35	8
2	-7	3	25	37	19	9	-2	3	19	30	18	0	3	3	221	211	1	5	8	3	103	101	3	-9	-2	4	47	49	8
3	-7	3	25	25	20	-10	-1	3	45	32	8	1	3	3	167	168	1	6	8	3	36	39	8	-8	-2	4	38	25	9
4	-7	3	0	9	1	-9	-1	3	23	24	23	2	3	3	142	152	1	7	8	3	74	73	4	-7	-2	4	38	28	8
-9	-6	3	31	28	14	-8	-1	3	0	27	1	3	3	3	136	124	1	10	8	3	0	13	1	-6	-2	4	46	49	6
-8	-6	3	0	14	1	-7	-1	3	34	41	9	4	3	3	110	108	2	-3	9	3	26	37	22	-5	-2	4	53	55	5
-7	-6	3	35	32	10	-6	-1	3	92	93	3	5	3	3	40	35	4	2	9	3	30	18	11	-4	-2	4	25	17	14
-6	-6	3	63	50	4	-5	-1	3	48	46	5	6	3	3	52	44	4	3	9	3	44	44	6	-3	-2	4	51	44	5
-5	-6	3	0	17	1	-4	-1	3	63	63	3	7	3	3	86	88	3	4	9	3	67	69	4	-2	-2	4	9	3	8
-4	-6	3	20	30	19	-3	-1	3	276	256	1	8	3	3	32	29	8	5	9	3	81	87	4	-1	-2	4	53	55	3
-3	-6	3	107	110	3	-2	-1	3	113	111	1	9	3	3	36	45	9	-1	10	3	14	13	13	0	-2	4	316	319	1
-2	-6	3	22	36	21	-1	-1	3	265	266	1	10	3	3	35	14	9	8	10	3	33	27	10	1	-2	4	49	52	4
-1	-6	3	65	63	4	0	-1	3	249	250	1	11	3	3	53	44	6	-6	-8	4	0	11	1	2	-2	4	147	144	2
0	-6	3	44	37	6	1	-1	3	362	358	1	-8	4	3	19	17	18	-5	-8	4	0	27	1	3	-2	4	27	33	10
1	-6	3	26	31	14	2	-1	3	39	19	4	-7	4	3	27	25	15	-4	-8	4	65	54	5	4	-2	4	73	71	3
2	-6	3	29	11	10	3	-1	3	289	287	1	-6	4	3	61	59	5	-3	-8	4	36	43	10	5	-2	4	38	48	7
3	-6	3	21	15	21	4	-1	3	29	27	8	-5	4	3	14	16	14	-2	-8	4	8	14	7	6	-2	4	96	98	3
4	-6	3	0	9	1	5	-1	3	170	174	2	-4	4	3	40	40	7	-1	-8	4	0	21	1	7	-2	4	47	41	6
5	-6	3	74	73	5	6	-1	3	28	14	9	-3	4	3	48	45	5	0	-8	4	26	17	18	8	-2	4	0	13	1
-9	-5	3	33	23	11	7	-1	3	46	43	5	-2	4	3	41	35	5	-7	-7	4	0	20	1	-9	-1	4	53	40	6
-8	-5	3	11	17	10	8	-1	3	53	58	5	-1	4	3	105	105	2	-6	-7	4	36	9	9	-8	-1	4	42	42	8
-7	-5	3	36	34	9	9	-1	3	54	51	6	0	4	3	41	47	4	-5	-7	4	32	29	11	-7	-1	4	78	77	4
-6	-5	3	16	14	16	-10	0	3	33	13	11	1	4	3	361	364	1	-4	-7	4	78	69	4	-6	-1	4	56	56	5
-5	-5	3	20	24	19	-9	0	3	6	19	6	2	4	3	52	53	3	-3	-7	4	0	2	1	-5	-1	4	31	30	10
-4	-5	3	34	38	9	-8	0	3	55	51	5	3	4	3	40	35	4	-2	-7	4	18	13	18	-4	-1	4	47	56	5
-3	-5	3	108	112	3	-7	0	3	62	57	4	4	4	3	145	146	1	-1	-7	4	16	11	15	-3	-1	4	208	197	1
-2	-5	3	32	46	10	-6	0	3	168	174	2	5	4	3	128	133	2	0	-7	4	32	33	11	-2	-1	4	83	88	2
-1	-5	3	90	94	3	-5	0	3	106	109	2	6	4	3	104	101	2	1	-7	4	35	24	10	-1	-1	4	55	49	3
0	-5	3	42	25	6	-4	0	3	328	330	1	7	4	3	108	109	3	2	-7	4	0	23	1	0	-1	4	157	161	1
1	-5	3	55	59	4	-3	0	3	242	241	1	8	4	3	26	36	12	3	-7	4	0	16	1	1	-1	4	75	74	2
2	-5	3	21	33	21	-2	0	3	283	273	1	9	4	3	63	54	4	-8	-6	4	0	26	1	2	-1	4	206	202	1
3	-5	3	74	73	4	-1	0	3	136	130	1	10	4	3	71	60	4	-7	-6	4	53	37	6	3	-1	4	8	11	8
4	-5	3	28	28	12	0	0	3	278	283	1	11	4	3	0	7	1	-6	-6	4	56	52	6	4	-1	4	53	45	4
5	-5	3	55	47	5	1	0	3	311	316	1	-7	5	3	19	19	18	-5	-6	4	60	62	5	5	-1	4	201	201	2
6	-5	3	0	17	1	2	0	3	239	238	1	-6	5	3	0	21	1	-4	-6	4	7	14	7	6	-1	4	19	19	19
-10	-4	3	17	34	17	3	0	3	262	259	1	-5	5	3	26	24	15	-3	-6	4	81	78	4	7	-1	4	71	69	4
-9	-4	3	76	68	4	4	0	3	55	54	3	-4	5	3	58	54	5	-2	-6	4	134	134	2	8	-1	4	27	18	13
-8	-4	3	52	48	6	5	0	3	45	49	5	-3	5	3	70	67	4	-1	-6	4	125	125	3	9	-1	4	0	31	1
-7	-4	3	41	34	7	6	0	3	66	58	3	-2	5	3	47	52	5	0	-6	4	57	52	5	-9	0	4	45	36	7
-6	-4	3	52	38	5	7	0	3	22	32	21	-1	5	3	61	58	3	1	-6	4	35	16	8	-8	0	4	61	56	5
-5	-4	3	30	35	11	8	0	3	65	69	4	0	5	3	292	290	1	2	-6	4	43	41	7	-7	0	4	78	76	3
-4	-4	3	64	59	4	9	0	3	0	15	1	1	5	3	276	274	1	3	-6	4	35	41	9	-6	0	4	46	53	7
-3	-4	3	37	31	7	10	0	3	48	47	7	2	5	3	96	91	2	4	-6	4	5	9	4	-5	0	4	75	67	3
-2	-4	3	77	77	3	-9	1	3	65	67	5	3	5	3	97	104	2	-9	-5	4	74	75	5	-4	0	4	45	49	5
-1	-4	3	59	60	4	-8	1	3	76	80	4	4	5	3	312	317	1	-8	-5	4	100	103	4	-3	0	4	121	117	2
0	-4	3	74	70	3	-7	1	3	55	46	5	5	5	3	36	38	6	-7	-5	4	95	94	4	-2	0	4	152	147	1
1	-4	3	158	161	2	-6	1	3	33	49	10	6	5	3	57	55	4	-6	-5	4	37	43	9	-1	0	4	55	52	3
2	-4	3	31	22	9	-5	1	3	53	49	5	7	5	3	132	132	2	-5	-5	4	44	43	7	0	0	4	177	184	1
3	-4	3	49	47	5	-4	1	3	148	146	2	8	5	3	68	56	4	-4	-5	4	57	60	5	1	0	4	25	38	7
4	-4	3	0	15	1	-3	1	3	147	145	1	9	5	3	93	100	3	-3	-5										

I-1235-67

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 10

6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	2	4	114	114	3	8	6	4	60	68	5	-3	-3	5	44	45	7	-4	2	5	18	20	18	11	6	5	20	22	20
-6	2	4	86	87	3	9	6	4	33	32	10	-2	-3	5	80	83	3	-3	2	5	104	106	2	-5	7	5	0	19	1
-5	2	4	75	72	4	10	6	4	19	5	19	-1	-3	5	187	178	2	-2	2	5	69	70	3	-4	7	5	0	9	1
-4	2	4	103	108	2	11	6	4	96	91	4	0	-3	5	71	79	4	-1	2	5	246	225	1	-3	7	5	0	23	1
-3	2	4	203	204	1	-4	7	4	84	91	4	1	-3	5	79	82	3	0	2	5	32	28	6	-2	7	5	96	97	3
-2	2	4	156	153	1	-3	7	4	82	83	4	2	-3	5	87	99	3	1	2	5	334	329	1	-1	7	5	95	87	3
-1	2	4	146	143	1	-2	7	4	4	24	3	3	-3	5	29	33	10	2	2	5	162	150	1	0	7	5	0	14	1
0	2	4	137	136	1	-1	7	4	79	82	4	4	-3	5	32	44	9	3	2	5	93	92	2	1	7	5	131	132	2
1	2	4	95	92	1	0	7	4	90	89	3	5	-3	5	20	26	20	4	2	5	174	179	1	2	7	5	79	76	3
2	2	4	408	408	1	1	7	4	0	17	1	6	-3	5	24	36	24	5	2	5	42	37	5	3	7	5	47	43	5
3	2	4	105	116	2	2	7	4	92	95	3	7	-3	5	0	2	1	6	2	5	173	175	2	4	7	5	161	159	2
4	2	4	202	201	1	3	7	4	83	80	3	-9	-2	5	24	22	23	7	2	5	59	61	4	5	7	5	78	68	3
5	2	4	64	72	3	4	7	4	33	23	8	-8	-2	5	16	20	15	8	2	5	38	33	7	6	7	5	51	57	5
6	2	4	24	39	14	5	7	4	40	19	6	-7	-2	5	0	39	1	9	2	5	0	8	1	7	7	5	35	25	8
7	2	4	32	32	8	6	7	4	71	67	4	-6	-2	5	61	51	5	10	2	5	44	24	7	8	7	5	49	43	5
8	2	4	123	126	2	7	7	4	77	68	3	-5	-2	5	0	27	1	-8	3	5	19	12	19	9	7	5	21	28	20
9	2	4	31	19	9	8	7	4	39	41	7	-4	-2	5	92	86	3	-7	3	5	13	13	13	10	7	5	38	16	9
10	2	4	32	29	11	9	7	4	0	17	1	-3	-2	5	69	61	4	-6	3	5	63	52	5	11	7	5	40	28	9
-8	3	4	27	25	16	10	7	4	61	66	6	-2	-2	5	92	94	3	-5	3	5	25	39	16	-4	8	5	14	8	14
-7	3	4	32	27	11	11	7	4	5	17	4	-1	-2	5	38	32	6	-4	3	5	17	18	16	-3	8	5	36	54	10
-6	3	4	31	27	10	-3	8	4	0	15	1	0	-2	5	92	85	3	-3	3	5	64	62	4	-1	8	5	29	26	11
-5	3	4	41	35	7	-1	8	4	60	65	5	1	-2	5	63	58	4	-2	3	5	245	237	1	0	8	5	119	125	3
-4	3	4	84	82	3	0	8	4	43	37	7	2	-2	5	31	30	8	-1	3	5	164	164	1	1	8	5	91	94	3
-3	3	4	170	170	2	1	8	4	132	130	2	3	-2	5	50	51	5	0	3	5	58	53	3	2	8	5	145	148	2
-2	3	4	121	115	2	2	8	4	145	139	2	4	-2	5	0	11	1	1	3	5	170	162	1	3	8	5	128	133	2
-1	3	4	73	74	2	3	8	4	84	89	3	5	-2	5	14	15	14	2	3	5	75	74	2	4	8	5	74	65	4
0	3	4	188	189	1	4	8	4	29	17	11	6	-2	5	57	59	5	3	3	5	88	85	2	5	8	5	31	31	10
1	3	4	261	253	1	5	8	4	121	122	3	7	-2	5	31	27	11	4	3	5	219	218	1	6	8	5	37	23	7
2	3	4	136	129	1	6	8	4	52	45	5	8	-2	5	37	34	10	5	3	5	125	135	2	7	8	5	53	51	5
3	3	4	84	79	2	7	8	4	68	69	4	-9	-1	5	27	29	21	6	3	5	52	52	5	10	8	5	47	39	7
4	3	4	150	149	1	10	8	4	0	12	1	-8	-1	5	17	20	17	7	3	5	74	71	3	-3	9	5	25	9	24
5	3	4	158	160	1	-3	9	4	23	23	22	-7	-1	5	45	52	7	8	3	5	72	73	4	2	9	5	0	20	1
6	3	4	20	29	19	2	9	4	16	25	15	-6	-1	5	28	28	12	9	3	5	36	32	8	3	9	5	27	32	13
7	3	4	5	18	5	3	9	4	58	61	5	-5	-1	5	64	64	4	10	3	5	12	13	12	4	9	5	0	11	1
8	3	4	21	34	21	4	9	4	73	75	4	-4	-1	5	52	57	5	-8	4	5	33	30	13	5	9	5	164	166	2
9	3	4	31	29	10	5	9	4	64	61	4	-3	-1	5	83	79	3	-7	4	5	34	14	10	-3	-7	6	34	13	12
10	3	4	17	19	16	-6	-7	5	58	58	6	-2	-1	5	62	62	3	-6	4	5	0	15	1	-2	-7	6	0	15	1
11	3	4	42	23	8	-5	-7	5	14	15	13	-1	-1	5	19	30	18	-5	4	5	56	56	5	-6	-6	6	23	32	22
-8	4	4	0	18	1	-4	-7	5	33	36	11	0	-1	5	44	40	4	-4	4	5	144	145	2	-5	-6	6	0	9	1
-7	4	4	0	29	1	-3	-7	5	60	44	5	1	-1	5	102	100	2	-3	4	5	30	28	10	-4	-6	6	32	37	12
-6	4	4	0	15	1	-2	-7	5	22	16	21	2	-1	5	31	26	8	-2	4	5	87	83	3	-3	-6	6	39	52	9
-5	4	4	30	39	11	-1	-7	5	40	46	8	3	-1	5	39	33	6	-1	4	5	160	153	1	-2	-6	6	48	50	7
-4	4	4	98	96	3	0	-7	5	17	30	16	4	-1	5	83	83	3	0	4	5	79	82	2	-1	-6	6	33	30	11
-3	4	4	86	85	3	1	-7	5	12	18	12	5	-1	5	40	34	6	1	4	5	90	86	2	0	-6	6	13	22	12
-2	4	4	59	61	3	-7	-6	5	65	59	5	6	-1	5	99	98	3	2	4	5	112	108	2	1	-6	6	42	39	8
-1	4	4	26	27	8	-6	-6	5	91	92	4	7	-1	5	24	11	18	3	4	5	78	77	2	2	-6	6	27	7	20
0	4	4	265	265	1	-5	-6	5	52	54	6	8	-1	5	27	24	14	4	4	5	39	43	5	-7	-5	6	53	49	7
1	4	4	41	43	4	-4	-6	5	34	40	10	-9	0	5	48	45	8	5	4	5	74	76	3	-6	-5	6	35	21	10
2	4	4	135	135	1	-3	-6	5	13	10	12	-8	0	5	68	69	5	6	4	5	70	73	4	-5	-5	6	23	15	22
3	4	4	28	24	6	-2	-6	5	43	12	6	-7	0	5	45	44	7	7	4	5	54	52	5	-4	-5	6	79	66	4
4	4	4	146	147	1	-1	-6	5	36	25	9	-6	0	5	0	15	1	8	4	5	0	1	1	-3	-5	6	46	46	7
5	4	4	73	65	3	0	-6	5	36	33	9	-5	0	5	33	39	10	9	4	5	65	62	4	-2	-5	6	0	14	1
6	4	4	55	54	4	1	-6	5	52	44	6	-4	0	5	88	98	3	10	4	5	32	17	11	-1	-5	6	101	103	3
7	4	4	21	29	20	2	-6	5	31	21	11	-3	0	5	40	36	6	11	4	5	23	8	22	0	-5	6	67	66	5
8	4	4	31	29	9	3	-6	5	0	8	1	-2	0	5	58	66	3	-7	5	5	53	42	6	1	-5	6	97	101	3
9	4	4	37	43	9	-8	-5	5	0	16	1	-1	0	5	146	143	1	-6	5	5	52	47	6	2	-5	6	22	28	22
10	4	4	0	20	1	-7	-5	5	0	15	1	0	0	5	30	34	6	-5	5	5	79	77	4	3	-5	6	28	15	14
11	4	4	40	27	8	-6	-5	5	0	39	1	1	0	5	155	149	1	-4	5	5	69	72	4	4	-5	6	0	13	1
-7	5	4	26	34	20	-5	-5	5	82	85	4	2	0	5	121	113	2	-3	5	5	29	48	13	-8	-4	6	31	10	14
-6	5	4	64	55	5	-4	-5	5	72	76	4	3	0	5	18	20	18	-2	5	5	101	94	3	-7	-4	6	47	51	8
-5	5	4	45	21	6	-3	-5	5	99	99	3	4	0	5	192	1													

I-1235-68

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 11

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	-2	6	39	25	8	-3	3	6	124	125	2	4	8	6	50	59	6	5	0	7	36	24	7	10	5	7	.44	29	8
-4	-2	6	27	42	13	-2	3	6	0	21	1	5	8	6	83	87	3	6	0	7	93	91	3	-6	6	7	8	10	8
-3	-2	6	119	119	3	-1	3	6	140	144	2	6	8	6	94	100	3	7	0	7	13	5	13	-5	6	7	0	1	1
-2	-2	6	62	69	5	0	3	6	70	68	3	7	8	6	41	44	7	8	0	7	47	44	7	-4	6	7	19	4	19
-1	-2	6	44	45	6	1	3	6	33	40	6	10	8	6	8	20	8	-8	1	7	39	26	10	-3	6	7	18	25	18
0	-2	6	123	125	2	2	3	6	98	85	2	-3	9	6	0	1	1	-7	1	7	31	26	12	-2	6	7	132	134	2
1	-2	6	31	27	10	3	3	6	65	74	3	-1	9	6	35	40	10	-6	1	7	19	21	18	-1	6	7	131	136	2
2	-2	6	14	22	13	4	3	6	25	20	11	2	9	6	22	24	22	-5	1	7	14	22	13	0	6	7	58	63	5
3	-2	6	0	14	1	5	3	6	105	108	2	3	9	6	34	38	9	-4	1	7	51	61	5	1	6	7	37	26	8
4	-2	6	44	37	6	6	3	6	28	11	10	4	9	6	53	42	5	-3	1	7	89	91	3	2	6	7	142	139	2
5	-2	6	28	14	11	7	3	6	15	10	14	5	9	6	95	90	3	-2	1	7	173	169	2	3	6	7	68	60	4
6	-2	6	21	45	21	8	3	6	80	83	4	9	9	6	15	21	15	-1	1	7	27	29	12	4	6	7	170	168	2
7	-2	6	49	47	7	9	3	6	31	22	10	-3	-6	7	50	44	8	0	1	7	171	172	2	5	6	7	43	46	6
-8	-1	6	22	13	22	10	3	6	0	24	1	-2	-6	7	27	19	19	1	1	7	146	147	2	6	6	7	120	117	2
-7	-1	6	64	61	5	-7	4	6	10	23	10	-1	-6	7	29	38	18	2	1	7	89	94	3	7	6	7	0	21	1
-6	-1	6	0	7	1	-6	4	6	12	15	12	-5	-5	7	19	26	19	3	1	7	138	137	2	8	6	7	83	80	4
-5	-1	6	0	21	1	-5	4	6	25	14	15	-4	-5	7	37	36	10	4	1	7	132	137	2	9	6	7	85	87	4
-4	-1	6	17	25	17	-4	4	6	48	44	6	-3	-5	7	0	18	1	5	1	7	31	45	9	10	6	7	33	24	12
-3	-1	6	184	197	2	-3	4	6	100	99	3	-2	-5	7	21	40	20	6	1	7	87	83	3	-5	7	7	21	17	21
-2	-1	6	137	144	2	-2	4	6	25	7	14	-1	-5	7	27	27	16	7	1	7	29	9	10	-4	7	7	62	62	5
-1	-1	6	184	186	2	-1	4	6	43	37	6	0	-5	7	37	34	9	8	1	7	0	20	1	-3	7	7	38	40	8
0	-1	6	0	10	1	0	4	6	145	146	2	1	-5	7	35	9	10	9	1	7	28	26	16	-2	7	7	59	59	5
1	-1	6	96	98	3	1	4	6	104	101	2	2	-5	7	29	33	16	-7	2	7	32	23	13	-1	7	7	78	78	4
2	-1	6	3	32	3	2	4	6	29	32	8	-6	-4	7	34	21	11	-6	2	7	66	50	4	0	7	7	0	16	1
3	-1	6	111	108	2	3	4	6	91	92	2	-5	-4	7	14	13	13	-5	2	7	34	33	9	1	7	7	116	118	3
4	-1	6	4	24	3	4	4	6	60	63	4	-4	-4	7	76	76	4	-4	2	7	0	15	1	2	7	7	91	86	3
5	-1	6	48	56	5	5	4	6	161	164	2	-3	-4	7	23	12	23	-3	2	7	37	45	9	3	7	7	40	45	7
6	-1	6	51	41	5	6	4	6	155	152	2	-2	-4	7	39	39	8	-2	2	7	108	105	2	4	7	7	47	49	6
7	-1	6	58	50	5	7	4	6	61	57	4	-1	-4	7	21	19	20	-1	2	7	145	148	2	5	7	7	71	63	4
8	-1	6	36	23	9	8	4	6	31	5	9	0	-4	7	24	33	20	0	2	7	73	78	3	6	7	7	128	126	2
-8	0	6	30	14	15	9	4	6	67	56	4	1	-4	7	0	19	1	1	2	7	70	71	3	7	7	7	23	23	17
-7	0	6	89	87	4	10	4	6	22	15	21	2	-4	7	0	16	1	2	2	7	54	42	4	8	7	7	32	16	10
-6	0	6	110	111	3	-7	5	6	0	19	1	3	-4	7	25	29	22	3	2	7	59	55	4	9	7	7	42	41	8
-5	0	6	135	138	2	-6	5	6	33	24	11	4	-4	7	0	10	1	4	2	7	29	28	10	10	7	7	17	12	17
-4	0	6	99	103	3	-5	5	6	40	33	8	-7	-3	7	11	9	11	5	2	7	108	108	3	-4	8	7	21	20	20
-3	0	6	190	192	2	-4	5	6	57	62	5	-6	-3	7	0	27	1	6	2	7	97	100	3	-3	8	7	46	50	7
-2	0	6	69	65	3	-3	5	6	128	130	2	-5	-3	7	0	20	1	7	2	7	0	22	1	-2	8	7	42	46	8
-1	0	6	78	78	3	-2	5	6	48	52	6	-4	-3	7	17	21	16	8	2	7	80	77	4	-1	8	7	19	22	18
0	0	6	44	34	5	-1	5	6	74	77	3	-3	-3	7	39	36	8	9	2	7	16	23	16	0	8	7	40	46	7
1	0	6	35	19	6	0	5	6	53	58	5	-2	-3	7	38	40	8	-7	3	7	32	13	13	1	8	7	19	19	18
2	0	6	96	94	3	1	5	6	179	172	2	-1	-3	7	0	15	1	-6	3	7	0	10	1	2	8	7	87	90	3
3	0	6	54	58	4	2	5	6	33	44	7	0	-3	7	46	48	6	-5	3	7	10	22	10	3	8	7	25	31	15
4	0	6	33	17	8	3	5	6	159	155	2	1	-3	7	57	56	5	-4	3	7	67	63	4	4	8	7	148	150	2
5	0	6	74	78	3	4	5	6	90	91	3	2	-3	7	53	47	5	-3	3	7	75	75	4	5	8	7	36	40	8
6	0	6	0	29	1	5	5	6	57	60	4	3	-3	7	14	15	13	-2	3	7	42	37	7	6	8	7	43	38	6
7	0	6	17	21	16	6	5	6	117	123	3	4	-3	7	0	2	1	-1	3	7	145	143	2	7	8	7	44	42	7
8	0	6	0	25	1	7	5	6	49	48	5	5	-3	7	23	7	22	0	3	7	97	98	3	8	8	7	80	75	4
9	0	6	31	9	12	8	5	6	42	44	7	-7	-2	7	31	17	13	1	3	7	123	115	2	10	8	7	33	36	13
-8	1	6	51	50	7	9	5	6	54	65	6	-6	-2	7	36	16	9	2	3	7	105	105	2	-3	9	7	13	11	13
-7	1	6	51	50	6	10	5	6	10	15	10	-5	-2	7	29	25	12	3	3	7	53	51	4	-1	9	7	0	25	1
-6	1	6	0	27	1	-6	6	6	29	28	16	-4	-2	7	13	7	12	4	3	7	68	63	3	2	9	7	37	45	8
-5	1	6	0	18	1	-5	6	6	82	78	4	-3	-2	7	0	38	1	5	3	7	0	7	1	3	9	7	38	41	8
-4	1	6	15	12	14	-4	6	6	43	46	8	-2	-2	7	50	44	5	6	3	7	128	124	2	4	9	7	54	63	5
-3	1	6	12	10	12	-3	6	6	67	61	4	-1	-2	7	29	30	10	7	3	7	64	62	4	5	9	7	0	5	1
-2	1	6	151	151	2	-2	6	6	76	71	4	0	-2	7	97	96	3	8	3	7	23	12	19	7	9	7	28	34	13
-1	1	6	251	249	1	-1	6	6	97	105	3	1	-2	7	51	49	5	9	3	7	9	29	9	9	9	7	43	30	8
0	1	6	57	56	3	0	6	6	66	69	4	2	-2	7	70	64	4	-7	4	7	0	3	1	-1	10	7	32	30	12
1	1	6	43	38	5	1	6	6	24	26	14	3	-2	7	50	48	5	-6	4	7	0	5	1	2	10	7	0	5	1
2	1	6	245	243	1	2	6	6	55	52	4	4	-2	7	39	36	8	-5	4	7	0	15	1	5	10	7	28	31	14
3	1	6	59	59	4	3	6	6	83	82	3	5	-2	7	0	9	1	-4	4	7	76	79	4	8	10	7	6	25	6
4	1	6	70	66	3	4	6	6	38	41	7	6	-2	7	0	5	1	-3	4	7	109	104	3	-2					

I-1235-69

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 12

h k l 10Fo 10Fc 10s				h k l 10Fo 10Fc 10s				h k l 10Fo 10Fc 10s				h k l 10Fo 10Fc 10s				h k l 10Fo 10Fc 10s			
3 -2 8	27	31	14	3 4 8	41	49	7	-1 -3 9	45	19	6	1 4 9	107	103	3	-1 -2 10	0	18	1
4 -2 8	0	18	1	4 4 8	0	8	1	0 -3 9	0	34	1	2 4 9	58	57	4	0 -2 10	0	15	1
5 -2 8	18	10	18	5 4 8	36	37	8	1 -3 9	33	38	12	3 4 9	55	59	5	1 -2 10	16	5	15
-7 -1 8	39	31	10	6 4 8	80	87	3	2 -3 9	44	25	8	4 4 9	87	86	3	-4 -1 10	53	46	7
-6 -1 8	59	56	6	7 4 8	59	63	5	-5 -2 9	27	24	20	5 4 9	0	12	1	-3 -1 10	32	21	13
-5 -1 8	32	11	10	8 4 8	0	5	1	-4 -2 9	56	51	6	6 4 9	34	38	9	-2 -1 10	25	30	25
-4 -1 8	31	35	11	9 4 8	16	25	16	-3 -2 9	37	23	9	7 4 9	0	12	1	-1 -1 10	13	22	12
-3 -1 8	56	55	5	-6 5 8	35	14	11	-2 -2 9	32	43	12	8 4 9	17	17	17	0 -1 10	0	16	1
-2 -1 8	35	26	8	-5 5 8	0	4	1	-1 -2 9	31	28	11	9 4 9	0	12	1	1 -1 10	84	64	4
-1 -1 8	32	25	9	-4 5 8	0	14	1	0 -2 9	12	19	11	-5 5 9	46	40	8	2 -1 10	39	26	8
0 -1 8	39	38	7	-3 5 8	48	37	5	1 -2 9	11	14	10	-4 5 9	0	11	1	3 -1 10	60	51	6
1 -1 8	42	37	6	-2 5 8	13	27	13	2 -2 9	32	22	11	-3 5 9	35	34	9	-4 0 10	61	51	5
2 -1 8	30	30	11	-1 5 8	71	77	4	3 -2 9	13	5	13	-2 5 9	39	26	8	-3 0 10	90	82	4
3 -1 8	4	11	4	0 5 8	56	56	5	4 -2 9	7	6	6	-1 5 9	63	68	4	-2 0 10	15	23	15
4 -1 8	0	15	1	1 5 8	68	71	4	-6 -1 9	12	25	11	0 5 9	65	74	4	-1 0 10	35	27	10
5 -1 8	28	8	13	2 5 8	36	41	8	-5 -1 9	72	61	5	1 5 9	35	30	8	0 0 10	47	31	6
6 -1 8	0	14	1	3 5 8	72	71	4	-4 -1 9	37	27	9	2 5 9	115	116	3	1 0 10	23	7	22
-7 0 8	40	28	10	4 5 8	73	76	4	-3 -1 9	34	36	9	3 5 9	84	83	3	2 0 10	38	28	8
-6 0 8	0	14	1	5 5 8	116	116	2	-2 -1 9	0	9	1	4 5 9	141	149	2	3 0 10	40	41	8
-5 0 8	14	24	13	6 5 8	22	24	21	-1 -1 9	18	22	18	5 5 9	58	59	5	4 0 10	25	17	20
-4 0 8	37	20	8	7 5 8	26	27	14	0 -1 9	30	23	11	6 5 9	82	77	3	5 0 10	30	25	16
-3 0 8	24	22	16	8 5 8	28	21	13	1 -1 9	54	62	6	7 5 9	0	14	1	-5 1 10	22	6	21
-2 0 8	32	37	10	9 5 8	27	20	15	2 -1 9	82	88	4	8 5 9	0	10	1	-4 1 10	15	14	14
-1 0 8	170	173	2	-5 6 8	33	8	11	3 -1 9	12	22	11	9 5 9	0	10	1	-3 1 10	76	72	4
0 0 8	59	63	4	-4 6 8	30	29	12	4 -1 9	0	15	1	-5 6 9	21	6	21	-2 1 10	62	57	5
1 0 8	128	135	2	-3 6 8	0	18	1	5 -1 9	28	3	16	-4 6 9	21	14	21	-1 1 10	30	30	11
2 0 8	76	77	3	-2 6 8	51	41	5	-6 0 9	0	31	1	-3 6 9	54	63	6	0 1 10	0	16	1
3 0 8	56	52	4	-1 6 8	22	15	21	-5 0 9	0	28	1	-2 6 9	50	53	6	1 1 10	63	66	5
4 0 8	124	123	3	0 6 8	118	114	2	-4 0 9	24	13	19	-1 6 9	59	50	5	2 1 10	0	17	1
5 0 8	42	33	7	1 6 8	91	89	3	-3 0 9	7	19	7	0 6 9	48	46	6	3 1 10	55	51	6
6 0 8	0	21	1	2 6 8	194	199	2	-2 0 9	23	24	23	1 6 9	63	60	4	4 1 10	19	5	19
7 0 8	36	33	10	3 6 8	91	92	3	-1 0 9	20	8	20	2 6 9	43	49	7	5 1 10	58	55	6
-7 1 8	35	15	11	4 6 8	114	109	2	0 0 9	52	44	5	3 6 9	23	24	18	6 1 10	0	5	1
-6 1 8	25	20	25	5 6 8	79	76	3	1 0 9	29	24	12	4 6 9	67	58	4	-5 2 10	55	63	7
-5 1 8	32	26	11	6 6 8	47	43	6	2 0 9	40	32	7	5 6 9	21	36	21	-4 2 10	42	43	8
-4 1 8	7	16	7	7 6 8	49	49	6	3 0 9	69	58	4	6 6 9	146	148	2	-3 2 10	66	57	5
-3 1 8	99	101	3	8 6 8	58	50	5	4 0 9	47	48	6	7 6 9	72	77	4	-2 2 10	16	19	16
-2 1 8	76	74	4	9 6 8	35	9	9	5 0 9	36	41	9	8 6 9	47	50	7	-1 2 10	43	43	7
-1 1 8	107	102	3	10 6 8	21	17	21	6 0 9	0	5	1	9 6 9	25	19	24	0 2 10	36	32	8
0 1 8	17	27	17	-5 7 8	0	13	1	-6 1 9	31	30	15	-4 7 9	24	8	23	1 2 10	50	60	6
1 1 8	119	115	2	-4 7 8	23	18	22	-5 1 9	22	27	22	-3 7 9	28	43	16	2 2 10	0	15	1
2 1 8	62	58	4	-3 7 8	0	17	1	-4 1 9	21	24	21	-2 7 9	30	11	11	3 2 10	12	4	12
3 1 8	86	87	3	-2 7 8	39	43	8	-3 1 9	24	24	23	-1 7 9	16	16	15	4 2 10	14	18	14
4 1 8	30	23	9	-1 7 8	41	48	8	-2 1 9	47	45	6	0 7 9	21	12	21	5 2 10	20	28	20
5 1 8	0	13	1	0 7 8	73	67	4	-1 1 9	41	45	7	1 7 9	41	37	7	6 2 10	16	3	16
6 1 8	38	48	8	1 7 8	53	53	5	0 1 9	50	42	5	2 7 9	32	30	10	-5 3 10	13	13	12
7 1 8	78	74	4	2 7 8	39	43	7	1 1 9	15	31	14	3 7 9	16	20	16	-4 3 10	39	24	9
8 1 8	28	8	15	3 7 8	63	61	4	2 1 9	18	13	17	4 7 9	88	81	3	-3 3 10	66	47	4
-7 2 8	42	46	9	4 7 8	122	122	2	3 1 9	27	36	13	5 7 9	39	37	7	-2 3 10	59	41	5
-6 2 8	0	8	1	5 7 8	166	167	2	4 1 9	21	28	20	6 7 9	0	22	1	-1 3 10	74	69	4
-5 2 8	39	35	9	6 7 8	150	150	2	5 1 9	63	60	4	7 7 9	0	18	1	0 3 10	73	70	4
-4 2 8	35	34	9	7 7 8	0	5	1	6 1 9	61	62	5	8 7 9	62	59	5	1 3 10	22	16	22
-3 2 8	85	85	3	8 7 8	91	90	3	7 1 9	37	40	10	9 7 9	38	43	10	2 3 10	26	30	14
-2 2 8	110	115	3	9 7 8	42	47	8	-6 2 9	25	22	25	-3 8 9	17	27	16	3 3 10	68	64	4
-1 2 8	69	71	4	10 7 8	58	59	6	-5 2 9	0	9	1	-2 8 9	23	26	23	4 3 10	60	56	5
0 2 8	193	191	2	-4 8 8	9	32	9	-4 2 9	73	73	4	-1 8 9	0	8	1	5 3 10	56	48	5
1 2 8	95	97	3	-3 8 8	33	12	11	-3 2 9	49	57	6	0 8 9	8	4	8	6 3 10	0	18	1
2 2 8	127	132	2	-2 8 8	20	13	20	-2 2 9	73	79	4	1 8 9	43	36	7	7 3 10	9	4	9
3 2 8	91	91	3	-1 8 8	8	45	8	-1 2 9	7	14	6	2 8 9	50	53	6	-5 4 10	0	19	1
4 2 8	24	20	14	0 8 8	42	37	7	0 2 9	29	23	10	3 8 9	32	22	10	-4 4 10	17	18	17
5 2 8	89	86	3	1 8 8	49	51	6	1 2 9	38	34	7	4 8 9	27	30	13	-3 4 10	51	52	6
6 2 8	48	32	6	2 8 8	93	94	3	2 2 9	25	30	13	5 8 9	14	8	13	-2 4 10	46	45	7
7 2 8	47	58	6	3 8 8	80	82	3	3 2 9	95	92	3	6 8 9	67	70	5	-1 4 10	39	35	8
8 2 8	9	10	9	4 8 8	60	54	4	4 2 9	0	20	1	7 8 9	19	18	19	0 4 10	51	51	6
-7 3 8	0	15	1	5 8 8	79	74	3	5 2 9	0	26	1	8 8 9	19	23	19	1 4 10	27	22	13
-6 3 8	28	23	15	6 8 8	0	14	1	6 2 9	43	44	7	9 8 9	0	7	1	2 4 10	49	55	6
-5 3 8	21	29	21	7 8 8	20	29	20	7 2 9	29	12	12	-2 9 9	25	13	24	3 4 10	0	7	1
-4 3 8	19	7	19	8 8 8	92	94	4	8 2 9	31	28	14	-1 9 9	45	38	7	4 4 10	30	22	12
-3 3 8	85	91	3	9 8 8	58	45	6	-6 3 9	39	29	10	0 9 9	37	19	9	5 4 10	80	75	4
-2 3 8	49	41	5	10 8 8	25	32	25	-5 3 9	8	30	7	1 9 9	38	40	9	6 4 10	0	26	1
-1 3 8	43	56	7	-3 9 8	8	14	8	-4 3 9	39	35	8	2 9 9	25	7	16	7 4 10	0	8	1
0 3 8	45	48	6	-2 9 8	16	15	16	-3 3 9	55	47	5	3 9 9	25	11	16	8 4 10	36	24	10
1 3 8	46	50	6	-1 9 8	30	41	14	-2 3 9	41	36	7	4 9 9	9	9	9	-4 5 10	0	12	1
2 3 8	64	60	4	0 9 8	35	33	10	-1 3 9	79	79	3	5 9 9	34	28	9	-3 5 10	0	20	1
3 3 8	20	17	19	2 9 8	0	19	1	0 3 9	46	53	6	6 9 9	70	66	4	-2 5 10	41	38	8
4 3 8	13	13	12	3 9 8	37	28	8	1 3 9	42	36	6	7 9 9	36	32	9	-1 5 10	37	41	9

I-1235-70

Table 1. Observed and calculated structure factors for

Page 13

6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	6	10	23	9	23	8	9	10	0	16	1	3	3	11	57	52	5	2	7	11	74	75	4	-1	4	12	0	19	1
2	6	10	62	64	5	0	10	10	20	11	20	4	3	11	0	11	1	3	7	11	36	32	9	0	4	12	34	21	11
3	6	10	12	20	12	1	10	10	48	25	6	5	3	11	0	6	1	4	7	11	24	37	24	1	4	12	24	10	24
4	6	10	51	42	5	2	10	10	27	18	16	6	3	11	31	30	15	5	7	11	38	39	9	2	4	12	33	31	12
5	6	10	0	17	1	3	10	10	32	20	12	-3	4	11	19	16	19	6	7	11	50	44	6	3	4	12	0	8	1
6	6	10	45	43	7	4	10	10	0	0	1	-2	4	11	57	49	6	7	7	11	18	20	18	4	4	12	0	10	1
7	6	10	33	20	10	5	10	10	23	20	23	-1	4	11	0	10	1	-1	8	11	53	41	7	5	4	12	39	30	9
8	6	10	37	31	10	6	10	10	48	35	7	0	4	11	0	22	1	0	8	11	52	39	7	-1	5	12	36	14	10
-3	7	10	18	32	17	7	10	10	24	14	23	1	4	11	39	33	8	1	8	11	50	55	7	0	5	12	0	11	1
-2	7	10	26	29	18	3	11	10	28	30	18	2	4	11	17	27	16	2	8	11	15	37	15	1	5	12	24	11	24
-1	7	10	26	24	16	4	11	10	31	36	15	3	4	11	36	37	9	3	8	11	0	17	1	2	5	12	22	19	22
0	7	10	50	57	7	5	11	10	43	31	8	4	4	11	30	19	11	4	8	11	70	68	4	3	5	12	26	19	19
1	7	10	65	61	5	-2	0	11	49	47	8	5	4	11	39	30	8	5	8	11	54	50	6	4	5	12	33	40	13
2	7	10	0	22	1	-1	0	11	25	27	24	6	4	11	19	33	19	6	8	11	44	34	7	5	5	12	36	35	10
3	7	10	63	59	4	0	0	11	7	12	6	-3	5	11	0	20	1	7	8	11	0	8	1	-1	6	12	7	21	6
4	7	10	28	26	13	1	0	11	22	6	21	-2	5	11	27	26	15	0	9	11	0	20	1	0	6	12	40	21	9
5	7	10	61	60	5	2	0	11	21	41	21	-1	5	11	0	19	1	1	9	11	54	57	7	1	6	12	36	21	10
6	7	10	55	44	5	-3	1	11	54	48	7	0	5	11	37	38	9	2	9	11	40	32	9	2	6	12	58	59	6
7	7	10	0	21	1	-2	1	11	16	13	16	1	5	11	15	16	14	3	9	11	42	43	9	3	6	12	0	15	1
8	7	10	39	22	9	-1	1	11	32	31	12	2	5	11	28	33	14	4	9	11	59	55	6	4	6	12	15	6	15
-2	8	10	0	31	1	0	1	11	27	8	14	3	5	11	57	68	6	5	9	11	13	15	13	5	6	12	26	6	22
-1	8	10	0	3	1	1	1	11	61	52	5	4	5	11	65	63	5	6	9	11	10	11	10	6	6	12	11	26	10
0	8	10	16	16	16	2	1	11	0	14	1	5	5	11	58	46	5	7	9	11	42	7	8	0	7	12	54	42	6
1	8	10	0	9	1	3	1	11	49	26	6	6	5	11	0	13	1	1	10	11	0	7	1	1	7	12	0	19	1
2	8	10	45	33	6	4	1	11	72	57	5	7	5	11	32	23	11	2	10	11	22	22	21	2	7	12	34	34	11
3	8	10	0	13	1	-3	2	11	48	49	8	-3	6	11	23	5	22	3	10	11	0	14	1	3	7	12	17	8	17
4	8	10	41	33	7	-2	2	11	30	23	13	-2	6	11	24	39	24	4	10	11	0	6	1	4	7	12	0	19	1
5	8	10	30	22	12	-1	2	11	49	43	7	-1	6	11	31	28	13	5	10	11	13	11	13	5	7	12	50	43	7
6	8	10	0	6	1	0	2	11	45	43	7	0	6	11	34	24	10	6	10	11	33	28	12	6	7	12	23	25	23
7	8	10	35	30	10	1	2	11	22	21	21	1	6	11	27	31	14	-1	2	12	19	32	18	0	8	12	36	32	12
8	8	10	0	8	1	2	2	11	53	50	6	2	6	11	50	43	6	0	2	12	24	22	24	1	8	12	45	36	8
-1	9	10	31	33	13	3	2	11	42	37	8	3	6	11	39	28	8	1	2	12	52	30	6	2	8	12	60	54	6
0	9	10	0	17	1	4	2	11	25	17	24	4	6	11	67	65	5	2	2	12	63	50	5	3	8	12	41	43	9
1	9	10	0	14	1	5	2	11	22	16	22	5	6	11	30	29	12	-1	3	12	49	54	7	4	8	12	41	29	9
2	9	10	40	21	8	-3	3	11	41	31	9	6	6	11	5	27	4	0	3	12	36	32	10	5	8	12	48	46	8
3	9	10	0	16	1	-2	3	11	0	20	1	7	6	11	14	16	14	1	3	12	37	21	9	2	9	12	27	10	19
4	9	10	19	13	18	-1	3	11	19	24	19	-2	7	11	38	32	10	2	3	12	33	25	11	3	9	12	51	38	7
5	9	10	27	14	15	0	3	11	31	7	10	-1	7	11	14	7	13	3	3	12	29	34	16	4	9	12	36	23	11
6	9	10	21	20	21	1	3	11	64	70	5	0	7	11	27	39	18	4	3	12	70	57	5	5	9	12	30	27	15
7	9	10	25	24	25	2	3	11	32	29	11	1	7	11	0	8	1	-2	4	12	47	40	8						