

CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1997, 9(5), 1234-1240, DOI:[10.1021/cm9606078](https://doi.org/10.1021/cm9606078)

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 © 1997 American Chemical Society

Hydrogen atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for
[Ca(thd)₂(tetraen)].

atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{eq}
H(1A)	3238(7)	1487(5)	5799(2)	195
H(1B)	3761(7)	521(5)	5789(2)	195
H(1C)	2946(7)	846(5)	6380(2)	195
H(2A)	1077(7)	1777(5)	5787(2)	229
H(2B)	740(7)	1046(5)	6300(2)	229
H(2C)	107(7)	1038(5)	5607(2)	229
H(3A)	725(11)	-400(4)	5445(2)	294
H(3B)	1292(11)	-379(4)	6153(2)	294
H(3C)	2104(11)	-722(4)	5566(2)	294
H(6A)	2443(4)	-403(2)	4565(2)	75
H(9A)	1777(5)	126(3)	2605(2)	118
H(9B)	1035(5)	-585(3)	3006(2)	118
H(9C)	2012(5)	-879(3)	2475(2)	118
H(10A)	3986(4)	310(3)	2739(2)	125
H(10B)	4155(4)	-701(3)	2607(2)	125
H(10C)	4730(4)	-276(3)	3238(2)	125
H(11A)	3560(8)	-1326(3)	3938(3)	169
H(11B)	3097(8)	-1760(3)	3285(3)	169
H(11C)	2121(8)	-1467(3)	3816(3)	169
H(1AB)	442(5)	2947(4)	4752(3)	84
H(1AD)	363(5)	3598(4)	4228(3)	84
H(2AB)	-1314(9)	2781(5)	4164(6)	112
H(2AC)	-468(9)	1931(5)	4165(6)	112
H(3AA)	-1040(9)	2276(6)	3074(5)	105
H(3AB)	-458(9)	3221(6)	3149(5)	105
H(5AA)	1115(11)	3116(5)	2349(4)	103
H(5AB)	610(11)	2235(5)	2112(4)	103
H(6AA)	2606(9)	2343(4)	1858(3)	101
H(6AC)	2421(9)	1648(4)	2320(3)	101
H(1BA)	-1111(19)	2137(7)	4805(6)	285
H(1BB)	-742(19)	2554(7)	5438(6)	285
H(2BB)	459(10)	3416(7)	4777(4)	126
H(2BC)	-893(10)	3819(7)	4845(4)	126
H(3BA)	-1519(11)	3116(7)	3881(5)	137
H(3BB)	-343(11)	3710(7)	3735(5)	137
H(5BA)	-1164(11)	2326(6)	3028(4)	110
H(5BB)	-167(11)	1569(6)	3076(4)	110
H(6BA)	195(8)	2475(5)	2171(4)	82
H(6BB)	417(8)	3278(5)	2646(4)	82

Bond lengths [Å] and angles [deg] for [Ca(thd)₂(tetraen)].

Ca(1)-O(1)#1	2.345(2)
Ca(1)-O(1)	2.345(2)
Ca(1)-O(2)	2.394(2)
Ca(1)-O(2)#1	2.394(2)
Ca(1)-N(4A)	2.521(6)
Ca(1)-N(4A)#1	2.521(6)
Ca(1)-N(1A)#1	2.530(6)
Ca(1)-N(1A)	2.530(6)
Ca(1)-N(7B)	2.598(5)
Ca(1)-N(7B)#1	2.598(5)
Ca(1)-N(4B)	2.717(9)
Ca(1)-N(4B)#1	2.717(9)
O(1)-C(5)	1.233(4)
O(2)-C(7)	1.245(3)
C(1)-C(4)	1.489(8)
C(1)-H(1A)	0.98
C(1)-H(1B)	0.98
C(1)-H(1C)	0.98
C(2)-C(4)	1.565(10)
C(2)-H(2A)	0.98
C(2)-H(2B)	0.98
C(2)-H(2C)	0.98
C(3)-C(4)	1.491(6)
C(3)-H(3A)	0.98
C(3)-H(3B)	0.98
C(3)-H(3C)	0.98
C(4)-C(5)	1.552(4)
C(5)-C(6)	1.392(5)
C(6)-C(7)	1.382(4)
C(6)-H(6A)	0.95
C(7)-C(8)	1.544(4)
C(8)-C(11)	1.505(5)
C(8)-C(9)	1.516(6)
C(8)-C(10)	1.546(6)
C(9)-H(9A)	0.98
C(9)-H(9B)	0.98
C(9)-H(9C)	0.98
C(10)-H(10A)	0.98
C(10)-H(10B)	0.98
C(10)-H(10C)	0.98
C(11)-H(11A)	0.98
C(11)-H(11B)	0.98
C(11)-H(11C)	0.98
N(1A)-C(2A)	1.42(1)
N(1A)-H(1AB)	0.92
N(1A)-H(1AD)	0.92
C(2A)-C(3A)	1.57(2)
C(2A)-H(2AB)	0.99
C(2A)-H(2AC)	0.99
C(3A)-N(4A)	1.44(1)
C(3A)-H(3AA)	0.99
C(3A)-H(3AB)	0.99
N(4A)-C(5A)	1.456(10)
C(5A)-C(6A)	1.45(2)
C(5A)-C(6A)#1	1.68(2)
C(5A)-H(5AA)	0.96

C(5A)-H(5AB)	0.96
C(6A)-C(6A)#1	0.89(1)
C(6A)-C(5A)#1	1.68(2)
C(6A)-H(6AA)	0.90
C(6A)-H(6AC)	0.90
N(1B)-C(2B)	1.39(2)
N(1B)-H(1BA)	0.88
N(1B)-H(1BB)	0.88
C(2B)-C(3B)	1.54(1)
C(2B)-H(2BB)	0.99
C(2B)-H(2BC)	0.99
C(3B)-N(4B)	1.39(1)
C(3B)-H(3BA)	0.99
C(3B)-H(3BB)	0.99
N(4B)-C(5B)	1.45(1)
C(5B)-C(6B)	1.51(1)
C(5B)-H(5BA)	0.99
C(5B)-H(5BB)	0.99
C(6B)-N(7B)	1.46(1)
C(6B)-H(6BA)	0.99
C(6B)-H(6BB)	0.99
N(7B)-N(7B)#1	1.68(2)
O(1)#1-Ca(1)-O(1)	80.2(1)
O(1)#1-Ca(1)-O(2)	143.78(8)
O(1)-Ca(1)-O(2)	71.59(7)
O(1)#1-Ca(1)-O(2)#1	71.59(7)
O(1)-Ca(1)-O(2)#1	143.78(8)
O(2)-Ca(1)-O(2)#1	142.57(10)
O(1)#1-Ca(1)-N(4A)	139.3(2)
O(1)-Ca(1)-N(4A)	105.3(2)
O(2)-Ca(1)-N(4A)	71.8(1)
O(2)#1-Ca(1)-N(4A)	83.3(1)
O(1)#1-Ca(1)-N(4A)#1	105.3(2)
O(1)-Ca(1)-N(4A)#1	139.3(2)
O(2)-Ca(1)-N(4A)#1	83.3(1)
O(2)#1-Ca(1)-N(4A)#1	71.8(1)
N(4A)-Ca(1)-N(4A)#1	96.2(3)
O(1)#1-Ca(1)-N(1A)#1	73.5(2)
O(1)-Ca(1)-N(1A)#1	74.4(2)
O(2)-Ca(1)-N(1A)#1	77.4(2)
O(2)#1-Ca(1)-N(1A)#1	116.8(2)
N(4A)-Ca(1)-N(1A)#1	147.2(2)
N(4A)#1-Ca(1)-N(1A)#1	69.0(2)
O(1)#1-Ca(1)-N(1A)	74.4(2)
O(1)-Ca(1)-N(1A)	73.5(2)
O(2)-Ca(1)-N(1A)	116.8(2)
O(2)#1-Ca(1)-N(1A)	77.4(2)
N(4A)-Ca(1)-N(1A)	69.0(2)
N(4A)#1-Ca(1)-N(1A)	147.2(2)
N(1A)#1-Ca(1)-N(1A)	137.7(3)
O(1)#1-Ca(1)-N(7B)	147.5(1)
O(1)-Ca(1)-N(7B)	127.2(1)
O(2)-Ca(1)-N(7B)	68.5(1)
O(2)#1-Ca(1)-N(7B)	76.1(1)
O(1)#1-Ca(1)-N(7B)#1	127.2(1)
O(1)-Ca(1)-N(7B)#1	147.5(1)
O(2)-Ca(1)-N(7B)#1	76.1(1)
O(2)#1-Ca(1)-N(7B)#1	68.5(1)

N(7B)-Ca(1)-N(7B)#1	37.8(3)
O(1)#1-Ca(1)-N(4B)	107.9(2)
O(1)-Ca(1)-N(4B)	80.4(2)
O(2)-Ca(1)-N(4B)	89.6(2)
O(2)#1-Ca(1)-N(4B)	87.1(2)
N(7B)-Ca(1)-N(4B)	66.3(2)
N(7B)#1-Ca(1)-N(4B)	103.1(2)
O(1)#1-Ca(1)-N(4B)#1	80.4(2)
O(1)-Ca(1)-N(4B)#1	107.9(2)
O(2)-Ca(1)-N(4B)#1	87.1(2)
O(2)#1-Ca(1)-N(4B)#1	89.6(2)
N(7B)-Ca(1)-N(4B)#1	103.1(2)
N(7B)#1-Ca(1)-N(4B)#1	66.3(2)
N(4B)-Ca(1)-N(4B)#1	169.4(3)
C(5)-O(1)-Ca(1)	136.7(2)
C(7)-O(2)-Ca(1)	135.5(2)
C(4)-C(1)-H(1A)	109.5(3)
C(4)-C(1)-H(1B)	109.5(4)
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
C(4)-C(1)-H(1C)	109.5(3)
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
C(4)-C(2)-H(2A)	109.5(3)
C(4)-C(2)-H(2B)	109.5(3)
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
C(4)-C(2)-H(2C)	109.5(3)
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
C(4)-C(3)-H(3A)	109.5(4)
C(4)-C(3)-H(3B)	109.5(2)
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
C(4)-C(3)-H(3C)	109.5(5)
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
C(3)-C(4)-C(1)	119.2(6)
C(3)-C(4)-C(5)	113.8(3)
C(1)-C(4)-C(5)	106.4(4)
C(3)-C(4)-C(2)	103.0(6)
C(1)-C(4)-C(2)	106.0(4)
C(5)-C(4)-C(2)	107.7(4)
O(1)-C(5)-C(6)	124.6(3)
O(1)-C(5)-C(4)	114.2(3)
C(6)-C(5)-C(4)	121.2(3)
C(7)-C(6)-C(5)	125.5(3)
C(7)-C(6)-H(6A)	117.3(2)
C(5)-C(6)-H(6A)	117.3(2)
O(2)-C(7)-C(6)	124.2(3)
O(2)-C(7)-C(8)	114.6(3)
C(6)-C(7)-C(8)	121.2(3)
C(11)-C(8)-C(9)	109.7(4)
C(11)-C(8)-C(7)	115.7(3)
C(9)-C(8)-C(7)	107.9(3)
C(11)-C(8)-C(10)	109.4(4)
C(9)-C(8)-C(10)	105.5(3)
C(7)-C(8)-C(10)	108.1(3)
C(8)-C(9)-H(9A)	109.5(2)
C(8)-C(9)-H(9B)	109.5(2)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5

C(8)-C(9)-H(9C)	109.5(2)
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
C(8)-C(10)-H(10A)	109.5(2)
C(8)-C(10)-H(10B)	109.5(2)
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
C(8)-C(10)-H(10C)	109.5(2)
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
C(8)-C(11)-H(11A)	109.5(3)
C(8)-C(11)-H(11B)	109.5(2)
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
C(8)-C(11)-H(11C)	109.5(3)
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(2A)-N(1A)-Ca(1)	109.6(5)
C(2A)-N(1A)-H(1AB)	109.8(6)
Ca(1)-N(1A)-H(1AB)	109.8(1)
C(2A)-N(1A)-H(1AD)	109.8(4)
Ca(1)-N(1A)-H(1AD)	109.8(1)
H(1AB)-N(1A)-H(1AD)	108.2
N(1A)-C(2A)-C(3A)	108.2(8)
N(1A)-C(2A)-H(2AB)	110.0(5)
C(3A)-C(2A)-H(2AB)	110.0(5)
N(1A)-C(2A)-H(2AC)	110.0(4)
C(3A)-C(2A)-H(2AC)	110.0(4)
H(2AB)-C(2A)-H(2AC)	108.4
N(4A)-C(3A)-C(2A)	111.4(7)
N(4A)-C(3A)-H(3AA)	109.4(4)
C(2A)-C(3A)-H(3AA)	109.4(5)
N(4A)-C(3A)-H(3AB)	109.4(4)
C(2A)-C(3A)-H(3AB)	109.4(4)
H(3AA)-C(3A)-H(3AB)	108.0
C(3A)-N(4A)-C(5A)	115.8(7)
C(3A)-N(4A)-Ca(1)	113.4(5)
C(5A)-N(4A)-Ca(1)	113.8(6)
C(6A)-C(5A)-C(6A)#1	32.0(5)
C(6A)-C(5A)-N(4A)	112.1(7)
C(6A)#1-C(5A)-N(4A)	118.9(7)
C(6A)-C(5A)-H(5AA)	107.4(4)
C(6A)#1-C(5A)-H(5AA)	76.1(4)
N(4A)-C(5A)-H(5AA)	111.1(4)
C(6A)-C(5A)-H(5AB)	107.1(4)
C(6A)#1-C(5A)-H(5AB)	124.3(3)
N(4A)-C(5A)-H(5AB)	111.1(5)
H(5AA)-C(5A)-H(5AB)	107.8
C(6A)#1-C(6A)-C(5A)	88(1)
C(6A)#1-C(6A)-C(5A)#1	60(1)
C(5A)-C(6A)-C(5A)#1	140.0(6)
C(6A)#1-C(6A)-H(6AA)	74.4(3)
C(5A)-C(6A)-H(6AA)	113.0(4)
C(5A)#1-C(6A)-H(6AA)	82.8(3)
C(6A)#1-C(6A)-H(6AC)	160(1)
C(5A)-C(6A)-H(6AC)	107.9(4)
C(5A)#1-C(6A)-H(6AC)	100.7(4)
H(6AA)-C(6A)-H(6AC)	108.1
C(2B)-N(1B)-H(1BA)	120.0(7)
C(2B)-N(1B)-H(1BB)	120.0(7)

H(1BA)-N(1B)-H(1BB)	120.0
N(1B)-C(2B)-C(3B)	109.8(10)
N(1B)-C(2B)-H(2BB)	109.7(10)
C(3B)-C(2B)-H(2BB)	109.7(6)
N(1B)-C(2B)-H(2BC)	109.7(7)
C(3B)-C(2B)-H(2BC)	109.7(6)
H(2BB)-C(2B)-H(2BC)	108.2
N(4B)-C(3B)-C(2B)	109.6(8)
N(4B)-C(3B)-H(3BA)	109.8(6)
C(2B)-C(3B)-H(3BA)	109.8(6)
N(4B)-C(3B)-H(3BB)	109.8(6)
C(2B)-C(3B)-H(3BB)	109.8(6)
H(3BA)-C(3B)-H(3BB)	108.2
C(3B)-N(4B)-C(5B)	114.4(8)
C(3B)-N(4B)-Ca(1)	117.3(7)
C(5B)-N(4B)-Ca(1)	108.2(7)
N(4B)-C(5B)-C(6B)	113.6(8)
N(4B)-C(5B)-H(5BA)	108.8(6)
C(6B)-C(5B)-H(5BA)	108.8(5)
N(4B)-C(5B)-H(5BB)	108.8(5)
C(6B)-C(5B)-H(5BB)	108.8(5)
H(5BA)-C(5B)-H(5BB)	107.7
N(7B)-C(6B)-C(5B)	107.2(7)
H(5AA)-C(6B)-H(5AB)	82.5(7)
N(7B)-C(6B)-H(6BA)	110.3(4)
C(5B)-C(6B)-H(6BA)	110.3(4)
N(7B)-C(6B)-H(6BB)	110.3(3)
C(5B)-C(6B)-H(6BB)	110.3(5)
H(6BA)-C(6B)-H(6BB)	108.5
C(6B)-N(7B)-N(7B)#1	147.8(5)
C(6B)-N(7B)-Ca(1)	113.8(4)
N(7B)#1-N(7B)-Ca(1)	71.1(2)
Ca(1)-N(7B)-H(5AA)	122.2(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 $-x + 1/2, -y + 1/2, z$

Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Ca}(\text{thd})_2(\text{tetraen})]$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$.

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ca(1)	51(1)	37(1)	23(1)	0	0	8(1)
O(1)	101(2)	58(1)	31(1)	10(1)	16(1)	22(1)
O(2)	90(2)	32(1)	37(1)	7(1)	15(1)	10(1)
C(1)	167(6)	165(6)	59(2)	13(3)	-59(3)	-7(5)
C(2)	164(6)	243(8)	49(2)	-39(3)	49(3)	-110(5)
C(3)	436(14)	109(4)	43(2)	26(2)	-1(5)	-125(6)
C(4)	191(5)	76(2)	30(1)	14(1)	-18(2)	-69(3)
C(5)	79(2)	50(2)	31(1)	11(1)	-6(1)	-24(2)
C(6)	112(3)	35(1)	40(1)	11(1)	-16(2)	-22(2)
C(7)	48(2)	32(1)	41(1)	4(1)	-4(1)	-4(1)
C(8)	56(2)	31(1)	57(2)	-3(1)	1(1)	-4(1)
C(9)	95(3)	74(2)	67(2)	-19(2)	-8(2)	-7(2)
C(10)	77(3)	57(2)	116(4)	-18(2)	23(3)	-2(2)
C(11)	217(7)	32(2)	90(3)	3(2)	7(4)	-8(3)
N(1A)	49(4)	55(3)	64(3)	3(2)	3(3)	8(3)
C(2A)	39(6)	41(3)	145(10)	7(4)	0(5)	2(3)
C(3A)	59(6)	67(5)	84(6)	-3(4)	-31(5)	3(4)
N(4A)	58(4)	44(2)	51(3)	0(2)	-17(3)	-4(2)
C(5A)	106(8)	56(4)	44(4)	3(3)	-28(5)	-8(4)
C(6A)	132(8)	47(3)	23(2)	-1(2)	-2(3)	-11(4)
N(1B)	357(23)	109(9)	104(8)	18(6)	91(12)	40(10)
C(2B)	85(7)	94(6)	73(5)	-19(5)	10(5)	7(5)
C(3B)	90(8)	82(7)	102(7)	-12(5)	-18(6)	10(5)
N(4B)	54(6)	84(5)	59(4)	-5(3)	-9(3)	15(4)
C(5B)	90(8)	66(5)	63(5)	-10(4)	-21(4)	-6(5)
C(6B)	65(6)	52(4)	47(4)	-1(3)	-35(3)	-6(3)
N(7B)	92(4)	31(2)	30(2)	2(2)	-11(3)	-6(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
4	0	0	1914	1894	46	5	3	1	126	65	-3	5	14	1	31	25	8	8	5	2	306	309	9	3	16	2	104	89	4
1	1	0	30	2113	-30	6	3	1	20	17	7	6	14	1	91	88	9	9	5	2	42	49	8	4	16	2	45	44	7
3	1	0	1314	1321	27	7	3	1	104	64	5	7	14	1	12	13	11	1	6	2	117	151	9	5	16	2	15	27	14
5	1	0	521	576	41	8	3	1	175	168	25	8	14	1	14	15	14	2	6	2	11	6	10	6	16	2	87	77	5
2	2	0	2044	2108	45	1	4	1	175	186	3	9	14	1	8	2	7	3	6	2	367	400	7	7	16	2	48	45	21
4	2	0	485	422	45	2	4	1	162	235	2	2	15	1	71	58	5	4	6	2	132	160	5	8	16	2	34	33	12
6	2	0	48	71	1	3	4	1	265	251	5	3	15	1	57	54	6	5	6	2	342	344	13	0	17	2	94	107	8
8	2	0	21	33	20	4	4	1	63	63	3	4	15	1	48	60	6	6	6	2	31	20	5	1	17	2	55	47	6
1	3	0	267	174	-19	5	4	1	181	143	3	5	15	1	44	38	10	7	6	2	290	319	16	2	17	2	76	67	5
3	3	0	33	50	2	6	4	1	46	9	4	6	15	1	36	35	13	8	6	2	54	62	8	3	17	2	65	57	5
5	3	0	39	47	3	7	4	1	91	76	3	7	15	1	11	16	10	9	6	2	121	146	5	4	17	2	111	116	3
7	3	0	214	222	10	8	4	1	19	20	18	8	15	1	29	30	19	2	7	2	335	367	7	5	17	2	82	76	7
4	4	0	395	429	43	1	5	1	272	341	9	9	15	1	0	6	1	3	7	2	97	64	3	6	17	2	86	89	7
6	4	0	555	461	31	2	5	1	26	2	5	2	16	1	26	10	26	4	7	2	525	534	23	7	17	2	46	60	12
8	4	0	350	301	7	3	5	1	201	256	3	3	16	1	29	32	14	5	7	2	151	113	3	8	17	2	51	51	10
1	5	0	600	650	22	4	5	1	146	147	5	4	16	1	76	70	5	6	7	2	241	236	4	0	18	2	70	71	8
5	5	0	435	458	34	5	5	1	70	108	2	5	16	1	17	27	16	7	7	2	23	11	7	1	18	2	173	161	3
7	5	0	391	437	10	6	5	1	19	18	5	6	16	1	41	31	12	8	7	2	150	181	15	2	18	2	43	51	9
4	6	0	483	484	35	7	5	1	63	47	3	7	16	1	7	19	6	9	7	2	55	65	14	3	18	2	161	145	3
6	6	0	214	219	7	8	5	1	32	33	8	8	16	1	34	3	13	2	8	2	21	28	21	4	18	2	54	67	6
8	6	0	208	203	10	1	6	1	229	238	15	1	17	1	26	16	23	3	8	2	717	657	19	5	18	2	120	112	5
3	7	0	261	214	6	2	6	1	121	185	4	2	17	1	80	67	11	4	8	2	19	10	11	6	18	2	20	23	19
5	7	0	225	205	6	3	6	1	0	16	1	3	17	1	10	19	9	5	8	2	281	261	9	7	18	2	94	87	6
7	7	0	316	283	16	4	6	1	148	100	4	4	17	1	14	11	13	6	8	2	34	27	5	0	19	2	100	94	5
9	7	0	47	32	9	5	6	1	108	113	5	5	17	1	0	19	1	7	8	2	279	296	17	1	19	2	20	25	20
2	8	0	131	174	6	6	6	1	55	39	3	6	17	1	0	5	1	8	8	2	43	59	8	2	19	2	89	72	4
4	8	0	372	363	6	7	6	1	121	109	5	7	17	1	0	2	1	9	8	2	152	146	9	3	19	2	12	9	12
6	8	0	355	352	7	8	6	1	146	124	5	8	17	1	20	17	20	1	9	2	89	53	27	4	19	2	90	91	8
8	8	0	274	271	7	9	6	1	139	131	7	9	18	1	0	3	1	2	9	2	344	304	8	5	19	2	0	12	1
1	9	0	83	77	5	1	7	1	114	48	-6	2	18	1	42	24	11	3	9	2	245	238	7	6	19	2	43	62	16
3	9	0	373	431	8	2	7	1	225	247	14	3	18	1	53	50	7	4	9	2	337	346	8	0	20	2	7	3	7
5	9	0	303	258	15	3	7	1	115	102	2	4	18	1	34	14	10	5	9	2	137	94	5	1	20	2	97	90	4
7	9	0	280	289	14	4	7	1	87	73	2	5	18	1	0	3	1	6	9	2	190	162	7	2	20	2	31	45	13
9	9	0	142	181	7	5	7	1	47	43	3	6	18	1	23	21	22	7	9	2	92	117	8	3	20	2	75	99	5
2	10	0	415	382	9	6	7	1	5	14	5	7	18	1	0	6	1	8	9	2	263	225	8	4	20	2	0	15	1
4	10	0	257	253	8	7	7	1	19	2	18	1	19	1	4	13	3	9	9	2	20	15	19	1	1	3	487	552	12
6	10	0	88	51	4	8	7	1	82	85	6	2	19	1	19	7	19	0	10	2	80	74	6	2	1	3	388	424	8
8	10	0	29	39	28	9	7	1	51	68	13	3	19	1	24	14	23	1	10	2	342	342	29	3	1	3	761	773	15
1	11	0	385	326	8	1	8	1	57	45	3	4	19	1	28	37	28	2	10	2	213	144	72	4	1	3	114	194	2
3	11	0	120	97	6	2	8	1	93	69	4	5	19	1	36	17	20	3	10	2	282	288	5	5	1	3	520	498	19
5	11	0	131	126	6	3	8	1	21	11	9	6	19	1	35	43	13	4	10	2	113	115	3	6	1	3	38	37	3
7	11	0	91	76	8	4	8	1	140	100	3	1	20	1	5	7	5	5	10	2	79	76	4	7	1	3	398	389	7
9	11	0	21	32	20	5	8	1	55	62	3	2	20	1	33	23	12	6	10	2	59	42	4	8	1	3	66	51	20
0	12	0	243	269	8	6	8	1	235	193	16	3	20	1	64	70	6	7	10	2	146	178	10	1	2	3	480	490	14
4	12	0	173	157	7	7	8	1	28	38	16	4	20	1	0	10	1	8	10	2	66	57	6	2	2	3	228	203	9
6	12	0	95	99	8	8	8	1	35	4	11	2	0	2	603	595	17	9	10	2	38	48	16	3	2	3	641	698	12
8	12	0	92	85	6	9	8	1	51	46	10	3	0	2	2199	2307	48	0	11	2	142	131	5	4	2	3	506	447	20
5	13	0	263	268	9	1	9	1	36	2	9	4	0	2	470	437	16	1	11	2	111	118	5	5	2	3	374	399	7
7	13	0	184	230	5	2	9	1	45	13	4	5	0	2	992	939	29	2	11	2	78	67	7	6	2	3	300	269	5
9	13	0	93	130	8	3	9	1	225	240	4	6	0	2	24	12	12	3	11	2	287	301	16	7	2	3	34	32	6
2	14	0	283	290	12	4	9	1	66	82	3	8	0	2	14	52	14	5	11	2	104	98	8	8	2	3	30	51	22
4	14	0	287	283	7	5	9	1	171	207	6	1	1	2	180	1640	-179	6	11	2	34	23	5	1	3	3	404	376	13
6	14	0	252	274	6	6	9	1	15	14	14	1	1	2	70	295	-70	6	11	2	79	83	5	2	3	3	158	180	3
8	14	0	181	159	6	7	9	1	22	40	22	2	1	2	414	378	8	7	11	2	11	4	11	3	3	3	373	410	13
3	15	0	21	27	21	8	9	1	64	68	12	3	1	2	650	651	45	8	11	2	46	49	11	4	3	3	389	435	11
5	15	0	40	43	14	9	9	1	0	6	1	4	1	2	1105	1058	17	9	11	2	0	13	1	5	3	3	240	247	4
7	15	0	163	140	6	1	10	1	188	234	4	5	1	2	45	13	1	0	12	2	235	307	38	6	3	3	68	123	2
2	16	0	30	37	30	2	10	1	76	71	3	6	1	2	473	438	16	1	12	2	71	52	5	7	3	3	46	45	3
4	16	0	32	45	19	3	10	1	122	126	3	7	1	2	97	110	4	2	12	2	265	250	25	8	3	3	40	32	9
8	16	0	0	31	1	4	10	1	119	115	4	8	1	2	222	232	5	3	12	2	196								

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
9	7	3	23	22	23	6	18	3	0	3	1	8	8	4	194	198	7	4	18	4	165	148	9	1	10	5	28	17	8
1	8	3	169	151	3	7	18	3	19	24	18	9	8	4	46	45	20	5	18	4	51	58	10	2	10	5	55	86	4
2	3	8	30	27	9	1	19	3	11	18	11	0	9	4	496	570	37	6	18	4	82	89	7	3	10	5	55	55	3
3	8	3	209	248	7	2	19	3	0	4	1	1	9	4	178	198	6	7	18	4	17	14	16	4	10	5	151	161	4
4	8	3	30	25	5	3	19	3	17	16	16	2	9	4	549	494	38	0	19	4	79	77	6	5	10	5	42	23	5
5	8	3	54	74	3	4	19	3	32	26	24	3	9	4	340	348	6	1	19	4	128	118	4	6	10	5	152	135	4
6	8	3	18	13	17	5	19	3	0	17	1	4	9	4	105	94	3	2	19	4	5	7	4	7	10	5	58	45	7
7	8	3	72	28	4	1	20	3	11	4	11	5	9	4	293	282	4	3	19	4	148	140	4	8	10	5	9	5	9
8	8	3	32	50	14	2	20	3	53	47	6	6	9	4	103	106	3	4	19	4	11	8	11	9	10	5	11	2	11
9	8	3	53	47	10	3	20	3	0	11	1	7	9	4	313	289	11	5	19	4	111	112	5	1	11	5	15	16	15
1	9	3	171	146	3	4	20	3	55	36	9	8	9	4	133	110	5	0	20	4	100	120	5	2	11	5	71	84	4
2	9	3	75	72	4	0	0	4	741	641	27	9	9	4	125	133	6	1	20	4	32	41	9	3	11	5	26	22	10
3	9	3	147	138	6	1	0	4	1420	1387	21	0	10	4	42	43	10	2	20	4	92	88	3	4	11	5	162	134	5
4	9	3	49	70	3	2	0	4	770	783	16	1	10	4	90	71	11	3	20	4	103	82	5	5	11	5	81	103	3
5	9	3	101	101	3	3	0	4	725	709	34	2	10	4	104	125	3	1	1	5	205	217	5	6	11	5	23	28	23
6	9	3	31	3	8	4	0	4	1056	1132	20	3	10	4	104	87	6	2	1	5	197	129	4	7	11	5	120	95	5
7	9	3	119	121	5	5	0	4	276	290	8	4	10	4	287	309	14	3	1	5	479	414	16	8	11	5	24	20	24
8	9	3	42	30	9	6	0	4	647	591	45	5	10	4	11	14	11	4	1	5	648	664	20	9	11	5	83	73	8
9	9	3	62	64	13	7	0	4	0	9	1	6	10	4	160	163	5	5	1	5	591	530	26	1	12	5	58	60	5
1	10	3	26	7	26	8	0	4	458	476	13	7	10	4	127	150	9	6	1	5	408	365	7	2	12	5	45	41	6
2	10	3	223	242	4	0	1	4	315	267	6	8	10	4	150	157	5	7	1	5	105	77	5	3	12	5	76	67	6
3	10	3	9	11	8	1	1	4	192	131	-5	9	10	4	60	59	14	8	1	5	162	157	4	4	12	5	11	11	10
4	10	3	84	82	7	2	1	4	572	583	15	0	11	4	82	56	7	1	2	5	370	351	15	5	12	5	40	54	5
5	10	3	0	35	1	3	1	4	537	507	14	1	11	4	175	150	7	2	2	5	264	204	6	6	12	5	20	27	19
6	10	3	99	89	4	4	1	4	315	282	6	2	11	4	136	136	3	3	2	5	271	262	9	7	12	5	74	75	6
7	10	3	88	44	4	5	1	4	372	360	16	3	11	4	79	92	3	4	2	5	452	456	17	8	12	5	19	14	19
8	10	3	84	94	4	6	1	4	107	102	2	4	11	4	135	143	9	5	2	5	92	88	5	9	12	5	73	62	9
9	10	3	45	40	15	7	1	4	471	476	11	5	11	4	17	44	17	6	2	5	312	285	8	1	13	5	87	61	3
1	11	3	22	29	22	8	1	4	2	9	2	6	11	4	57	49	5	7	2	5	23	15	9	2	13	5	26	10	14
2	11	3	144	138	5	0	2	4	148	111	8	7	11	4	89	97	5	8	2	5	117	115	3	3	13	5	88	98	3
3	11	3	17	35	16	1	2	4	1261	1238	18	8	11	4	32	40	16	9	2	5	85	70	6	4	13	5	7	11	6
4	11	3	88	171	-7	2	2	4	101	94	1	9	11	4	79	88	8	1	3	5	457	474	13	5	13	5	6	14	5
5	11	3	55	56	5	3	2	4	29	19	4	0	12	4	124	81	6	2	3	5	204	231	5	6	13	5	51	38	6
6	11	3	56	54	5	4	2	4	317	310	10	1	12	4	342	328	8	3	3	5	292	266	11	7	13	5	64	66	9
7	11	3	6	19	5	5	2	4	107	112	4	2	12	4	43	56	7	4	3	5	322	307	5	8	13	5	50	48	9
8	11	3	23	20	23	6	2	4	87	95	2	3	12	4	237	259	6	5	3	5	14	19	14	9	13	5	28	19	27
9	11	3	25	23	25	7	2	4	22	16	6	4	12	4	119	111	4	6	3	5	55	45	2	1	14	5	90	91	4
1	12	3	35	40	11	8	2	4	107	132	4	5	12	4	100	69	3	7	3	5	106	123	6	2	14	5	155	144	7
2	12	3	0	14	1	0	3	4	177	120	4	6	12	4	99	89	4	8	3	5	0	5	1	3	14	5	179	188	5
3	12	3	50	64	7	1	3	4	257	270	8	7	12	4	107	95	5	9	3	5	37	26	20	4	14	5	32	58	11
4	12	3	40	55	6	2	3	4	332	344	8	8	12	4	131	116	6	1	4	5	131	241	-3	5	14	5	134	154	4
5	12	3	31	20	9	3	3	4	614	589	14	9	12	4	0	26	1	2	4	5	47	97	2	6	14	5	14	14	13
6	12	3	63	56	5	4	3	4	180	188	2	0	13	4	181	142	5	3	4	5	457	411	18	7	14	5	112	91	7
7	12	3	74	53	6	5	3	4	106	92	4	1	13	4	396	367	12	4	4	5	35	25	3	8	14	5	18	31	17
8	12	3	58	50	8	6	3	4	158	163	3	2	13	4	0	9	1	5	4	5	264	225	6	9	14	5	38	38	36
9	12	3	30	35	30	7	3	4	159	172	6	3	13	4	389	380	10	6	4	5	52	78	3	1	15	5	6	17	5
1	13	3	50	53	9	8	3	4	160	136	4	4	13	4	16	13	16	7	4	5	29	27	5	2	15	5	54	50	5
2	13	3	48	47	5	9	3	4	84	79	9	5	13	4	287	254	9	8	4	5	139	128	9	3	15	5	33	29	8
3	13	3	16	7	15	0	4	4	336	370	9	6	13	4	92	83	4	9	4	5	20	34	20	4	15	5	81	90	4
4	13	3	15	34	14	1	4	4	324	296	5	7	13	4	251	236	8	1	5	5	56	38	2	5	15	5	21	4	20
5	13	3	47	35	6	2	4	4	140	170	3	8	13	4	24	25	23	2	5	5	121	118	3	6	15	5	70	70	9
6	13	3	114	118	3	3	4	4	521	545	23	9	13	4	148	138	7	3	5	5	242	211	3	7	15	5	14	6	13
7	13	3	71	59	7	4	4	4	736	681	48	0	14	4	362	355	14	4	5	5	193	142	3	8	15	5	9	24	9
8	13	3	23	14	23	5	4	4	432	443	8	1	14	4	158	124	3	5	5	5	162	174	4	9	15	5	44	40	31
9	13	3	62	60	17	6	4	4	149	143	3	2	14	4	337	328	12	6	5	5	45	47	4	1	16	5	24	11	13
1	14	3	30	14	30	7	4	4	131	166	3	3	14	4	20	16	20	7	5	5	22	35	8	2	16	5	17	10	17
2	14	3	45	38	9	8	4	4	222	207	6	4	14	4	363	375	11	8	5	5	17	14	16	3	16	5	0	1	1
3	14	3	32	25	10	9	4	4	205	225	13	5	14	4	69	52	5	9	5	5	79	73	7	4	16	5	17	6	17
4	14	3	127	142	4	0	5	4	765	325	-37	6	14	4	251	241	7	1	6	5	140	111	3	5	16	5	25	11	23
5	14	3	53	57	7	1	5	4	865	891	15	7	14	4	2	12	2	2	6	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																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
8 0 6 80 17 -8	3 10 6 209 209 11	3 1 7 319 345 5	6 11 7 90 79 3	7 2 8 136 119 4	8 0 6 33 69 18	4 10 6 137 121 4	4 1 7 128 95 6	7 11 7 119 108 4	8 2 8 213 179 7	0 1 6 612 631 15	5 10 6 246 227 7	5 1 7 191 245 2	8 11 7 70 79 8	9 2 8 159 147 6	1 1 6 427 429 14	6 10 6 77 82 3	6 1 7 44 44 4	9 11 7 34 2 33	0 3 8 1312 1302 49	3 1 6 345 346 15	7 10 6 218 191 5	7 1 7 20 56 19	1 12 7 47 22 7	1 3 8 254 255 3	5 1 6 520 531 22	8 10 6 79 80 5	8 1 7 0 2 1	2 12 7 6 18 5	2 3 8 560 552 52	3 1 6 216 228 5	9 10 6 159 146 7	9 1 7 10 16 10	3 12 7 51 51 5	4 3 8 124 159 2	6 1 6 394 373 7	0 11 6 31 53 14	1 2 7 231 280 7	4 12 7 59 49 5	5 3 8 301 262 6	7 1 6 27 24 10	1 11 6 153 148 3	2 2 7 248 236 4	5 12 7 33 35 10	6 3 8 74 80 3	8 1 6 395 381 16	2 11 6 22 27 22	3 2 7 272 249 7	6 12 7 81 58 5	7 3 8 188 210 5	9 1 6 154 149 5	3 11 6 32 43 7	4 2 7 329 356 12	7 12 7 0 3 1	8 3 8 30 44 11	0 2 6 54 51 3	4 11 6 135 134 3	5 2 7 95 126 3	8 12 7 95 94 12	9 3 8 70 62 6	1 2 6 507 584 15	5 11 6 22 25 14	6 2 7 226 225 4	9 12 7 32 45 31	9 3 8 174 165 7	2 2 6 135 194 2	6 11 6 32 47 7	7 2 7 215 176 5	1 13 7 0 22 1	0 4 8 82 54 5	3 2 6 422 390 15	7 11 6 98 77 5	8 2 7 53 43 7	2 13 7 94 108 5	1 4 8 1098 1110 20	4 2 6 367 354 8	8 11 6 83 97 7	3 13 7 101 127 3	2 4 8 72 46 2	5 2 6 223 238 8	9 11 6 63 62 11	4 13 7 0 6 1	3 4 8 500 464 15	6 2 6 267 256 6	0 12 6 94 142 5	5 13 7 170 168 6	4 4 8 162 139 4	7 2 6 312 296 26	1 12 6 35 43 8	6 13 7 79 85 4	5 4 8 257 248 4	8 2 6 43 66 6	2 12 6 101 77 3	7 13 7 64 87 6	6 4 8 84 87 3	9 2 6 121 137 6	3 12 6 30 38 9	8 13 7 27 34 22	7 4 8 134 137 3	0 3 6 251 151 -4	4 12 6 63 54 4	9 13 7 71 78 12	8 4 8 203 201 5	1 3 6 595 623 14	5 12 6 38 51 10	0 14 7 41 52 7	9 4 8 36 37 32	2 3 6 313 374 11	6 12 6 81 100 4	1 14 7 46 57 5	0 5 8 660 563 43	3 3 6 447 345 13	7 12 6 88 91 6	2 14 7 15 10 15	1 5 8 778 749 17	4 3 6 431 451 19	8 12 6 59 70 7	3 14 7 16 17 16	2 5 8 402 326 6	5 3 6 334 342 16	9 12 6 39 73 39	4 14 7 16 6 16	3 5 8 293 317 13	6 3 6 160 143 7	0 13 6 277 275 9	5 14 7 16 5 15	4 5 8 359 370 16	7 3 6 97 84 5	1 13 6 58 70 4	6 14 7 40 16 16	5 5 8 386 401 14	8 3 6 213 214 5	2 13 6 169 123 10	7 14 7 21 2 20	6 5 8 177 151 6	9 3 6 200 180 6	3 13 6 13 37 13	8 15 7 12 16 11	7 5 8 201 201 6	0 4 6 1039 952 58	4 13 6 191 187 3	9 15 7 0 2 1	8 5 8 66 48 5	1 4 6 144 157 4	5 13 6 23 11 23	0 6 8 193 193 7	2 4 6 1011 1001 29	6 13 6 190 191 4	1 15 7 9 6 8	9 5 8 732 701 46	3 4 6 543 557 14	7 13 6 66 78 7	2 15 7 52 48 6	0 6 8 127 145 4	4 4 6 430 449 9	8 13 6 129 153 11	3 15 7 25 7 24	2 6 8 299 313 11	5 4 6 226 208 3	9 13 6 56 51 12	4 15 7 13 15 12	3 6 8 164 157 7	6 4 6 198 188 3	0 14 6 85 68 6	5 15 7 15 18 15	4 6 8 360 383 15	7 4 6 218 198 21	1 14 6 225 232 5	6 15 7 18 23 18	5 6 8 19 26 7	8 4 6 150 138 5	2 14 6 9 17 8	7 15 7 17 7 16	6 6 8 264 262 26	9 4 6 219 183 7	3 14 6 273 284 9	8 15 7 26 22 12	7 6 8 42 23 5	0 5 6 2005 1422 -68	4 14 6 30 29 11	9 16 7 21 20 20	8 6 8 194 187 6	1 5 6 708 719 17	5 14 6 208 215 4	0 16 8 24 9 24	9 6 8 31 29 30	2 5 6 866 825 18	6 14 6 7 14 7	1 16 7 42 36 9	0 7 8 52 117 6	3 5 6 344 354 9	7 14 6 193 189 13	2 16 7 16 21 15	1 7 8 222 234 10	4 5 6 599 583 22	8 14 6 0 7 1	3 16 7 0 14 1	2 7 8 17 29 16	5 5 6 237 226 7	9 14 6 137 126 9	4 16 7 25 4 25	3 7 8 290 295 5	6 5 6 213 228 3	0 15 6 325 330 14	5 16 7 37 46 7	4 7 8 33 21 5	7 5 6 105 102 2	1 15 6 174 149 6	6 16 7 41 31 8	5 7 8 257 235 6	8 5 6 182 192 4	2 15 6 216 226 8	7 16 7 43 36 8	6 7 8 29 44 8	9 5 6 87 86 7	3 15 6 50 65 6	8 16 7 109 116 6	7 7 8 45 34 4	0 6 6 97 124 4	4 15 6 215 209 7	9 16 7 21 10 21	8 7 8 17 16 17	1 6 6 774 695 19	5 15 6 32 31 11	0 17 8 49 52 13	2 8 8 170 153 7	2 6 6 117 165 4	6 15 6 91 94 5	1 17 8 21 11 11	3 8 8 390 331 17	3 6 6 546 553 19	7 15 6 45 38 11	2 17 8 0 19 1	4 8 8 180 188 6	4 6 6 63 72 3	8 15 6 61 61 15	3 17 8 49 47 7	5 8 8 248 231 9	5 6 6 323 310 7	9 15 6 17 15 17	4 17 8 60 2 4	6 8 8 125 117 3	6 6 6 89 72 6	0 16 6 190 188 8	5 17 8 144 44 4	7 8 8 70 63 4	7 6 6 261 265 7	1 16 6 154 147 5	6 17 8 54 49 4	8 8 8 128 111 8	8 6 6 0 16 1	2 16 6 59 73 4	7 17 8 29 17 13	9 8 8 93 99 4	9 6 6 153 141 7	3 16 6 83 73 4	8 17 8 0 0 1	0 8 8 62 55 10	0 7 6 239 264 6	4 16 6 86 80 5	9 17 8 24 3 17	10 8 8 68 68 10	1 7 6 93 104 2	5 16 6 10 19 10	0 18 8 345 378 40	2 7 6 221 230 11	6 16 6 79 75 8	1 19 8 283 302 12	4 7 6 485 499 14	8 16 6 0 11 1	2 19 8 411 410 12	5 7 6 137 151 2	0 17 6 19 18 18	3 19 8 44 41 5	6 7 6 176 171 5	1 17 6 139 127 6	4 19 8 363 340 11	7 7 6 6 13 5	2 17 6 71 68 4	5 19 8 174 191 8	8 7 6 204 196 9	3 17 6 80 81 4	6 19 8 152 164 7	9 7 6 42 27 24	4 17 6 0 19 1	7 19 8 163 138 4	0 8 6 281 239 15	5 17 6 54 47 9	8 19 8 126 117 6	1 8 6 468 471 7	6 17 6 32 21 31	9 19 8 164 150 6	2 8 6 212 224 8	7 17 6 31 51 21	0 10 8 86 88 10	3 8 6 461 432 9	8 17 6 64 27 10	1 10 8 262 294 25	4 8 6 134 137 3	0 18 6 127 113 5	2 10 8 258 280 18	5 8 6 268 298 6	1 18 6 93 98 3	3 10 8 46 54 5	6 8 6 178 161 4	2 18 6 34 36 11	4 10 8 229 207 6	7 8 6 174 193 3	3 18 6 128 114 5	5 10 8 183 187 4	8 8 6 107 89 6	4 18 6 49 48 8	6 10 8 149 158 5	9 8 6 105 133 7	5 18 6 48 69 10	7 10 8 155 164 5	0 9 6 365 358 13	6 18 6 64 61 7	8 10 8 143 145 3	1 9 6 449 477 7	0 19 6 157 157 14	9 10 8 154 159 6	2 9 6 137 143 7	1 19 6 35 38 9	0 10 8 108 105 10	3 9 6 337 346 6	2 19 6 124 116 3	10 10 8 121 116 8	4 9 6 352 334 7	3 19 6 21 16 21	0 11 8 172 176 12	5 9 6 327 302 9	4 19 6 129 136 3	1 11 8 194 197 5	6 9 6 303 281 6	5 19 6 39 40 12	2 11 8 114 128 3	7 9 6 156 187 5	0 20 6 11 7 11	3 11 8 207 191 4	8 9 6 219 205 9	1 20 6 74 76 4	4 11 8 131 126 5	9 9 6 36 60 28	2 20 6 22 36 22	5 11 8 187 185 6	0 10 6 183 147 4	3 20 6 65 62 10	6 11 8 193 181 6	1 10 6 180 176 4	1 1 7 285 255 5	7 11 8 72 74 5	2 10 6 204 204 8	2 1 7 0 25 1	8 11 8 113 107 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											
10	11	8	74	75	8	8	3	9	42	45	9	5	13	9	0	12	1	1	5	10	115	92	4	7	13	10	12	18	11
0	12	8	438	383	12	9	3	9	69	50	8	6	13	9	51	65	5	2	5	10	408	421	30	8	13	10	58	61	18
1	12	8	70	64	3	1	4	9	0	43	1	7	13	9	0	13	1	3	5	10	380	387	7	9	13	10	55	30	14
2	12	8	121	113	3	2	4	9	275	231	4	8	13	9	43	34	29	4	5	10	393	397	4	0	14	10	60	59	7
3	12	8	113	128	4	3	4	9	250	243	5	9	13	9	59	41	14	5	5	10	196	180	4	1	14	10	168	153	4
4	12	8	151	142	6	4	4	9	240	217	3	1	14	9	81	77	4	6	5	10	188	189	4	2	14	10	30	33	10
5	12	8	126	119	4	5	4	9	153	152	4	2	14	9	95	89	5	7	5	10	184	184	7	3	14	10	151	145	12
6	12	8	115	92	3	6	4	9	226	226	7	3	14	9	71	60	4	8	5	10	244	240	5	4	14	10	26	29	15
7	12	8	73	98	4	7	4	9	50	81	6	4	14	9	135	128	6	9	5	10	99	95	7	5	14	10	115	130	7
8	12	8	40	37	29	8	4	9	45	56	8	5	14	9	99	88	9	10	5	10	69	84	10	6	14	10	33	33	14
9	12	8	63	76	13	9	4	9	46	21	13	6	14	9	30	33	11	0	6	10	319	350	5	7	14	10	146	111	5
0	13	8	72	85	11	1	5	9	47	53	4	7	14	9	11	9	10	1	6	10	218	233	3	8	14	10	26	26	26
1	13	8	299	300	12	2	5	9	112	116	3	8	14	9	71	68	12	2	6	10	247	238	7	9	14	10	83	93	10
2	13	8	55	52	5	3	5	9	0	7	1	1	15	9	0	1	1	3	6	10	152	151	2	0	15	10	178	159	5
3	13	8	143	134	5	4	5	9	157	146	3	2	15	9	12	33	12	4	6	10	259	239	6	1	15	10	93	85	4
4	13	8	23	15	23	5	5	9	72	67	3	3	15	9	62	73	4	5	6	10	250	237	4	2	15	10	95	102	5
5	13	8	124	124	5	6	5	9	68	102	3	4	15	9	90	86	7	3	15	10	110	112	3	3	15	10	133	137	9
6	13	8	5	16	5	7	5	9	65	46	3	5	15	9	71	60	4	4	6	10	13	20	12	4	15	10	127	135	13
7	13	8	89	90	14	8	5	9	4	28	4	6	15	9	11	12	10	8	6	10	84	80	4	5	15	10	63	82	5
8	13	8	40	23	25	9	5	9	71	54	9	7	15	9	19	4	19	9	6	10	143	135	6	6	15	10	143	126	4
9	13	8	26	54	25	10	5	9	48	26	11	8	15	9	17	5	16	10	6	10	57	53	17	7	15	10	81	89	7
0	14	8	240	253	23	1	6	9	231	259	5	1	16	9	44	41	7	0	7	10	189	181	4	8	15	10	92	95	9
1	14	8	84	88	3	2	6	9	101	55	2	2	16	9	12	23	12	0	16	10	254	229	3	0	16	10	67	67	7
2	14	8	134	126	4	3	6	9	67	79	3	3	16	9	30	16	9	2	7	10	41	45	5	1	16	10	35	43	12
3	14	8	54	56	6	4	6	9	289	279	7	4	16	9	0	14	1	3	7	10	145	128	5	2	16	10	111	113	3
4	14	8	177	174	3	5	6	9	76	67	4	5	16	9	27	29	12	4	7	10	18	46	17	3	16	10	84	69	5
5	14	8	22	13	21	6	6	9	165	167	5	6	16	9	27	46	27	5	7	10	108	94	5	4	16	10	117	130	10
6	14	8	122	120	4	7	6	9	57	77	4	7	16	9	30	46	29	6	7	10	39	37	8	5	16	10	73	76	5
7	14	8	9	22	8	8	6	9	76	83	5	1	17	9	10	10	10	7	7	10	89	96	3	6	16	10	84	86	8
8	14	8	113	114	8	9	6	9	0	12	1	2	17	9	62	60	4	8	7	10	77	65	11	7	16	10	38	50	16
0	15	8	252	241	31	10	6	9	14	43	14	3	17	9	46	42	7	9	7	10	0	15	1	0	17	10	0	14	1
1	15	8	169	172	8	1	7	9	78	76	3	4	17	9	33	24	12	10	7	10	29	30	28	1	17	10	110	111	4
2	15	8	193	170	7	2	7	9	185	169	11	5	17	9	21	14	20	0	8	10	116	85	4	2	17	10	31	21	10
3	15	8	165	151	3	3	7	9	84	73	4	6	17	9	0	22	1	1	8	10	250	214	4	3	17	10	187	159	4
4	15	8	146	135	3	4	7	9	90	100	3	1	18	9	14	9	13	2	8	10	26	25	12	4	17	10	45	35	12
5	15	8	109	106	5	5	7	9	45	54	4	2	18	9	44	37	8	3	8	10	34	34	6	5	17	10	92	87	5
6	15	8	90	89	4	6	7	9	0	1	1	3	18	9	17	17	16	4	8	10	63	77	4	6	17	10	13	21	12
7	15	8	100	114	14	7	7	9	72	61	5	4	18	9	60	49	7	5	8	10	230	234	8	0	18	10	122	102	7
8	15	8	27	20	27	8	7	9	19	6	19	5	18	9	34	31	33	6	8	10	115	87	8	1	18	10	166	145	8
0	16	8	129	121	13	9	7	9	66	53	11	1	19	9	22	14	22	7	8	10	39	42	6	2	18	10	111	111	6
1	16	8	153	170	9	10	7	9	67	60	11	2	19	9	0	7	1	8	10	70	59	13	3	18	10	122	109	5	
2	16	8	9	18	8	1	8	9	40	14	5	3	19	9	4	2	3	9	8	10	93	100	8	4	18	10	104	100	5
3	16	8	200	186	6	2	8	9	126	109	5	0	0	10	75	106	8	10	8	10	80	52	9	5	18	10	89	80	10
4	16	8	15	31	15	3	8	9	48	55	4	1	0	10	1475	1408	45	0	9	10	201	212	4	0	19	10	107	116	8
5	16	8	70	79	5	4	8	9	220	233	7	2	0	10	462	414	23	1	9	10	98	106	3	1	19	10	77	94	4
6	16	8	53	70	12	5	8	9	111	99	8	3	0	10	574	451	31	2	9	10	143	158	3	2	19	10	117	111	4
7	16	8	41	45	11	6	8	9	194	190	22	4	0	10	162	156	3	3	9	10	240	237	14	3	19	10	112	108	4
0	17	8	166	172	21	7	8	9	69	44	4	5	0	10	112	122	4	4	9	10	308	334	19	1	1	11	3	1	3
1	17	8	47	43	6	8	8	9	97	94	6	5	0	10	146	145	8	5	9	10	158	161	9	2	1	11	379	386	11
2	17	8	128	130	8	9	8	9	33	34	33	6	0	10	0	21	1	6	9	10	194	168	5	3	1	11	210	197	6
3	17	8	24	24	24	10	8	9	26	50	26	7	0	10	0	21	1	7	9	10	100	115	3	4	1	11	282	288	4
4	17	8	118	103	5	1	9	9	24	6	12	8	0	10	71	56	6	8	9	10	117	127	7	5	1	11	211	201	3
5	17	8	0	21	1	2	9	9	100	115	3	9	0	10	74	63	7	9	9	10	117	116	8	6	1	11	259	281	5
6	17	8	39	58	17	3	9	9	23	18	14	1	1	10	148	134	3	9	9	10	106	102	8	7	1	11	0	11	1
7	17	8	77	61	10	4	9	9	94	87	5	2	1	10	684	569	167	0	10	10	205	187	5	8	1	11	55	50	6
0	18	8	165	165	5	5	9	9	22	3	16	3	1	10	409	427	34	1	10	10	443	397	8	9	1	11	64	44	5
1	18	8	102	90	6	6	9	9	125	148	12	4	1	10	343	342	4	2	10	10	204	202	9	1	2	11	192	180	2
2	18	8	148	133	6	7	9	9	54	44	6	5	1	10	101	94	2	3	10	10	261	261	25	2	2	11	42	42	3
3	18	8	96	94	8	8	9	9	66	63	10	6	1	10	62	56	4	4	10	10	240	273	1						

Observed and calculated structure factors Ca(thd)2(tetraen)															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														
1	6	11	59	55	3	2	16	11	70	59	5	3	7	12	179	155	3	1	17	12	0	11	1	7	9	13	30	34	14
2	6	11	85	88	3	3	16	11	24	29	24	4	7	12	65	59	4	2	17	12	121	113	4	8	9	13	0	1	1
3	6	11	211	221	3	4	16	11	17	4	16	5	7	12	9	29	9	3	17	12	30	24	16	9	9	13	0	12	1
4	6	11	60	54	4	5	16	11	27	22	23	6	7	12	133	169	4	4	17	12	81	73	6	10	9	13	21	16	20
5	6	11	127	145	3	6	16	11	55	43	12	7	7	12	0	14	1	5	17	12	15	30	15	1	10	13	112	111	3
6	6	11	83	90	4	7	16	11	27	15	26	8	7	12	126	116	5	0	18	12	95	85	7	2	10	13	43	42	6
7	6	11	15	32	14	1	17	11	27	9	20	9	7	12	57	64	12	1	18	12	69	64	5	3	10	13	135	130	3
8	6	11	0	12	1	2	17	11	30	28	15	10	7	12	83	73	11	2	18	12	107	97	6	4	10	13	24	15	17
9	6	11	22	25	21	3	17	11	15	30	14	1	8	12	177	159	5	3	18	12	62	74	6	5	10	13	47	52	8
10	6	11	12	7	12	4	17	11	17	2	17	1	8	12	157	138	4	4	18	12	88	88	6	6	10	13	39	4	10
1	7	11	22	42	13	5	17	11	25	29	24	2	8	12	218	245	4	0	19	12	48	58	18	7	10	13	41	56	10
2	7	11	107	87	2	6	17	11	38	33	25	3	8	12	142	104	2	1	1	13	72	101	2	9	10	13	11	18	11
3	7	11	112	115	3	1	18	11	23	19	22	4	8	12	243	246	7	2	1	13	233	241	3	10	10	13	12	9	11
4	7	11	8	18	8	2	18	11	21	38	20	5	8	12	89	101	3	3	1	13	7	5	7	1	11	13	78	76	4
5	7	11	46	44	5	3	18	11	9	17	9	6	8	12	73	74	4	4	1	13	164	173	3	2	11	13	79	60	3
6	7	11	40	62	7	4	18	11	91	73	5	7	8	12	96	108	7	5	1	13	96	70	2	3	11	13	21	36	21
7	7	11	21	2	20	1	19	11	4	0	4	8	8	12	119	125	9	6	1	13	123	138	3	4	11	13	33	29	10
8	7	11	67	80	7	2	19	11	12	19	11	9	8	12	61	66	13	7	1	13	23	21	23	5	11	13	30	16	13
9	7	11	0	24	1	0	0	12	103	105	3	0	9	12	231	216	5	8	1	13	50	58	7	6	11	13	90	78	4
10	7	11	135	160	3	1	0	12	305	301	5	1	9	12	399	399	9	9	1	13	11	7	11	7	11	13	64	51	7
1	8	11	35	51	8	2	0	12	303	363	13	2	9	12	205	195	6	1	2	13	73	54	2	8	11	13	67	42	12
2	8	11	0	1	1	3	0	12	285	296	8	3	9	12	377	372	12	2	2	13	78	101	2	9	11	13	46	27	18
3	8	11	29	42	10	4	0	12	379	337	16	4	9	12	226	205	3	3	2	13	296	307	4	1	12	13	39	33	7
4	8	11	83	85	4	5	0	12	32	28	6	5	9	12	242	232	9	4	2	13	73	80	2	2	12	13	34	25	7
5	8	11	36	31	8	6	0	12	84	83	6	6	9	12	155	153	3	5	2	13	377	364	7	3	12	13	84	81	3
6	8	11	66	77	6	7	0	12	259	237	6	7	9	12	116	98	4	6	2	13	50	68	7	4	12	13	30	5	12
7	8	11	40	33	8	8	0	12	210	231	5	8	9	12	95	113	8	7	2	13	160	159	3	5	12	13	9	20	9
8	8	11	49	36	16	9	0	12	18	42	17	0	10	12	282	297	9	8	2	13	60	31	5	6	12	13	21	12	21
9	8	11	35	19	31	0	1	12	890	765	676	1	10	12	508	463	10	9	2	13	48	54	7	7	12	13	15	24	15
10	8	11	123	133	3	1	1	12	156	175	2	2	10	12	248	222	13	10	2	13	21	8	20	8	12	13	25	37	25
1	9	11	146	123	3	2	1	12	304	325	6	3	10	12	355	347	13	1	3	13	122	134	2	9	12	13	27	22	27
2	9	11	125	124	6	3	1	12	312	310	6	4	10	12	188	164	3	2	3	13	100	100	2	1	13	13	72	61	4
3	9	11	171	193	3	4	1	12	298	296	3	5	10	12	305	283	9	3	3	13	124	148	2	2	13	13	42	42	7
4	9	11	104	81	4	5	1	12	192	164	3	6	10	12	29	47	12	4	3	13	205	196	6	3	13	13	13	12	12
5	9	11	99	124	4	6	1	12	206	210	6	7	10	12	223	207	5	5	3	13	101	112	3	4	13	13	128	12	4
6	9	11	106	107	4	7	1	12	122	123	4	9	10	12	136	108	7	6	3	13	229	215	9	5	13	13	0	2	1
7	9	11	13	3	12	8	1	12	89	94	4	10	10	12	49	42	16	7	3	13	22	45	22	6	13	13	71	77	5
8	9	11	26	38	26	9	1	12	105	95	4	0	11	12	514	540	26	8	3	13	7	14	6	7	13	13	26	32	26
9	9	11	111	85	3	0	2	12	74	90	3	1	11	12	83	70	3	9	3	13	25	19	25	8	13	13	20	28	20
10	9	11	47	23	6	1	2	12	404	417	6	2	11	12	371	370	5	10	3	13	18	23	17	1	14	13	62	49	4
1	10	11	184	191	5	2	2	12	259	260	3	3	11	12	14	23	13	1	4	13	80	82	2	2	14	13	33	23	9
2	10	11	82	75	3	3	2	12	574	575	21	4	11	12	266	276	5	2	4	13	78	35	2	3	14	13	31	30	10
3	10	11	161	154	4	4	2	12	225	239	5	5	11	12	54	55	6	3	4	13	167	151	4	4	14	13	43	16	8
4	10	11	35	33	12	5	2	12	271	236	4	6	11	12	196	196	4	4	4	13	58	47	3	5	14	13	18	25	17
5	10	11	10	22	10	6	2	12	30	41	12	7	11	12	28	26	12	5	4	13	209	194	11	6					

	k	l	10Fo	10Fc	10s		k	l	10Fo	10Fc	10s		k	l	10Fo	10Fc	10s		k	l	10Fo	10Fc	10s		k	l	10Fo	10Fc	10s	
6	2	14	231	210	5	5	11	14	229	218	5	9	4	15	19	12	18	5	15	15	0	13	1	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
7	2	14	82	68	4	6	11	14	33	28	13	10	4	15	41	33	41	6	15	15	18	2	18	1	0	8	16	114	107	6
8	2	14	110	100	4	7	11	14	107	130	9	2	5	15	17	32	17	2	16	15	16	23	16	2	8	16	223	229	5	
9	2	14	23	10	23	8	11	14	67	67	12	2	5	15	44	42	5	2	16	15	43	37	11	3	8	16	0	25	1	
10	2	14	102	99	8	9	11	14	80	76	10	3	5	15	60	74	4	3	16	15	52	45	7	4	8	16	161	157	3	
0	3	14	226	259	4	0	12	14	291	246	8	4	5	15	72	74	3	4	16	15	61	74	7	5	8	16	86	91	4	
1	3	14	419	417	10	1	12	14	15	22	14	5	5	15	83	68	7	5	16	15	26	28	25	6	8	16	154	160	3	
2	3	14	149	157	2	2	12	14	116	132	4	6	5	15	0	11	1	1	17	15	35	33	11	7	8	16	72	74	7	
3	3	14	330	337	6	3	12	14	5	11	5	7	5	15	25	29	24	2	17	15	11	5	11	8	8	16	88	87	5	
4	3	14	228	231	7	4	12	14	132	115	4	8	5	15	0	3	1	3	17	15	37	25	12	9	8	16	46	51	17	
5	3	14	300	305	6	5	12	14	11	22	10	9	5	15	24	14	24	0	0	16	125	108	14	10	8	16	16	6	16	
6	3	14	107	122	5	6	12	14	94	91	4	10	5	15	0	8	1	1	0	16	133	99	5	0	9	16	344	355	6	
7	3	14	255	277	6	7	12	14	35	30	13	1	6	15	15	9	14	2	0	16	133	153	5	1	9	16	178	178	4	
8	3	14	139	140	5	8	12	14	20	48	19	2	6	15	33	36	10	3	0	16	119	115	5	2	9	16	212	230	5	
9	3	14	99	88	4	9	12	14	30	41	30	3	6	15	9	6	9	4	0	16	123	130	3	3	9	16	203	193	5	
10	3	14	19	11	19	0	13	14	41	52	13	4	6	15	17	31	17	5	0	16	63	79	5	4	9	16	258	268	6	
0	4	14	364	368	9	1	13	14	85	80	3	5	6	15	84	61	8	6	0	16	108	126	5	5	9	16	182	183	3	
1	4	14	378	390	6	2	13	14	99	91	4	6	6	15	56	68	4	7	0	16	126	99	5	6	9	16	160	175	3	
2	4	14	295	283	6	3	13	14	22	35	22	7	6	15	11	16	10	8	0	16	134	116	7	7	9	16	143	150	5	
3	4	14	352	339	7	4	13	14	75	64	5	8	6	15	12	12	12	9	0	16	140	119	7	8	9	16	41	82	13	
4	4	14	386	380	10	5	13	14	72	73	5	9	6	15	26	23	25	0	1	16	196	194	8	0	10	16	111	94	4	
5	4	14	270	297	12	6	13	14	36	47	10	10	6	15	38	38	22	1	1	16	91	97	3	1	10	16	288	270	5	
6	4	14	264	287	4	7	13	14	110	95	11	1	7	15	90	80	3	2	1	16	52	49	3	2	10	16	71	64	4	
7	4	14	234	236	5	8	13	14	104	81	9	2	7	15	124	141	2	3	1	16	165	136	6	3	10	16	258	274	11	
8	4	14	111	140	4	0	14	14	151	138	5	3	7	15	131	141	3	4	1	16	147	156	3	3	10	16	78	72	5	
9	4	14	89	95	5	1	14	14	57	66	6	4	7	15	83	69	4	5	1	16	119	116	6	4	10	16	200	210	4	
10	4	14	113	132	9	2	14	14	91	106	4	5	7	15	113	119	3	6	1	16	128	116	5	5	10	16	115	115	4	
0	5	14	451	421	18	3	14	14	33	33	15	6	7	15	77	69	3	7	1	16	27	36	26	7	10	16	108	107	7	
1	5	14	216	209	5	4	14	14	145	126	3	7	7	15	64	71	7	8	1	16	50	72	8	8	10	16	132	101	5	
2	5	14	303	314	4	5	14	14	51	59	8	8	7	15	23	7	22	9	1	16	15	22	14	0	11	16	173	168	8	
3	5	14	35	34	8	6	14	14	119	112	7	10	7	15	25	4	25	0	2	16	12	13	12	1	11	16	26	17	11	
4	5	14	287	291	9	7	14	14	44	42	44	1	8	15	21	28	20	1	2	16	148	173	2	2	11	16	121	122	4	
5	5	14	209	209	11	8	14	14	51	66	19	2	8	15	90	93	3	2	2	16	267	256	5	3	11	16	49	53	5	
6	5	14	137	135	5	0	15	14	41	36	12	3	8	15	29	31	9	3	2	16	247	257	4	4	11	16	164	156	7	
7	5	14	223	205	4	1	15	14	113	101	5	4	8	15	89	88	4	4	2	16	61	46	3	5	11	16	21	15	20	
8	5	14	159	164	7	2	15	14	41	49	7	5	8	15	30	34	11	5	2	16	165	156	5	6	11	16	83	88	5	
9	5	14	118	106	5	3	15	14	149	120	13	6	8	15	49	69	7	6	2	16	20	12	19	7	11	16	20	18	20	
10	5	14	22	15	21	4	15	14	17	13	17	7	8	15	18	26	18	7	2	16	123	129	5	8	11	16	80	81	11	
0	6	14	151	152	4	5	15	14	99	85	5	8	8	15	40	44	17	8	2	16	21	8	21	9	11	16	31	11	30	
1	6	14	35	31	7	6	15	14	0	9	1	10	8	15	0	9	1	9	2	16	98	99	5	0	12	16	30	21	29	
2	6	14	53	49	5	7	15	14	90	82	11	1	9	15	3	8	2	10	2	16	33	26	32	1	12	16	58	75	4	
3	6	14	43	60	6	0	16	14	107	88	5	2	9	15	116	128	5	0	3	16	449	489	10	2	12	16	3	7	3	
4	6	14	143	149	2	1	16	14	42	31	8	3	9	15	66	65	6	1	3	16	108	104	2	3	12	16	94	73	4	
5	6	14	29	25	14	2	16	14	75	83	5	4	9	15	120	122	3	2	3	16	467	477	9	4	12	16	14	7	14	
6	6	14	237	225	14	3	16	14	24	20	23	5	9	15	23	46	23	3	3	16	35	52	6	5	12	16	68	90	4	
7	6	14	68	61	8	4	16	14	56	65	7	6	9	15	95	88	4	4	3	16	443	454	12	6	12	16	11	14	10	
8	6	14	160	142	5	5	16	14	25	19	24	7	9	15	5	18	4	5	3	16	128	131	3	7	12	16	76	90	11	
9	6	14	16	9	16	6	16	14	94	87	23	8	9	15	89	92	9	6	3	16	190	167	4	0	13	16	118	129	12	
10	6	14	95	106	8	0	17	14	48	31	13	9	9	15	17	17	17	7	3	16	104	94	5	1	13	16	60	42	5	
0	7	14	16	16	16	1	17	14	136	134	4	1	10	15	60	56	5	8	3	16	89	97	5	2	13	16	78	95	3	
1	7	14	72	73	4	2	17	14	65	57	6	2	10	15	5	7	4	9	3	16	17	6	16	3	13	16	26	30	17	
2	7	14	158	151	6	3	17	14	112	112	4	3	10	15	68	68	4	10	3	16	123	103	7	4	13	16	116	134	8	
3	7	14	102	95	4	4	17	14	73	63	6	4	10	15	93	84	9	2	4	16	241	203	4	5	13	16	77	73	5	
4	7	14	70	72	3	0	18	14	54	73	20	5	10	15	98	101	3	3	4	16	574	539	9	6	13	16	101	110	4	
5	7	14	221	227	25	1	18	14	111	109	8	6	10	15	13	4	12	4	4	16	244	249	7	7	13	16	24	52	18	
6	7	14	9	19	8	2	18	14	127	104	8	7	10	15	86	87	6	5	4	16	235	246	6	0	14	16	9	28	8	
7	7	14	117	133	5	1	1	15	70	68	3	8	10	15	7	11	7	6	4	16	192	198	4	1	14	16	186	187	17	
8	7	14	43	41	9	2	1	15	78	85	2	9	10	15	0	33	1	7	4	16	132	129	4	2	14	16	50	41	6	
9	8	14	139	143	7	3	1	15	27	29	6	1	11	15	26	25	10	8	4	16	104	100	4	3	14	16	175	172	14	
0																														

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s											
9	2	17	28	6	28	4	13	17	16	25	15	4	7	18	26	35	10	10	3	19	46	40	15	1	1	20	73	56	4
10	2	17	20	11	19	5	13	17	0	2	1	5	7	18	81	74	4	1	2	19	42	39	5	2	1	20	300	285	8
1	3	17	94	91	2	6	13	17	18	17	18	6	7	18	104	120	5	2	3	19	98	94	4	3	1	20	18	19	18
2	3	17	16	12	16	7	13	17	0	3	1	7	7	18	71	61	7	3	4	19	11	16	11	4	1	20	171	170	3
3	3	17	89	86	3	1	14	17	44	31	8	8	7	18	83	78	8	4	4	19	126	128	3	6	1	20	198	200	6
4	3	17	104	91	6	2	14	17	0	19	1	5	4	19	61	79	13	5	4	19	15	8	15	7	1	20	70	60	9
5	3	17	0	9	1	3	14	17	31	19	12	10	7	18	34	46	34	6	4	19	49	54	9	8	1	20	171	156	5
6	3	17	58	37	7	4	14	17	15	2	14	0	8	18	79	77	4	7	4	19	3	23	2	9	1	20	12	3	11
7	3	17	27	34	23	5	14	17	0	3	1	1	8	18	4	16	3	8	4	19	31	35	20	0	2	20	42	56	11
8	3	17	11	28	10	6	14	17	20	16	20	2	8	18	143	146	9	9	4	19	39	37	14	1	2	20	124	105	4
9	3	17	0	10	1	1	15	17	19	5	18	3	8	18	26	13	13	10	4	19	26	1	25	2	2	20	32	26	7
10	3	17	23	8	23	2	15	17	0	17	1	4	8	18	174	188	11	1	5	19	32	34	7	3	2	20	162	127	3
1	4	17	16	29	15	3	15	17	0	10	1	5	8	18	20	28	20	2	5	19	60	56	4	4	2	20	101	91	3
2	4	17	117	137	2	4	15	17	20	22	19	6	8	18	118	118	6	3	5	19	64	63	3	5	2	20	121	109	4
3	4	17	59	66	5	5	15	17	0	7	1	7	8	18	35	36	35	4	5	19	33	29	7	6	2	20	70	74	11
4	4	17	167	156	5	1	16	17	30	5	20	8	8	18	151	141	4	5	5	19	17	5	16	7	2	20	137	137	4
5	4	17	27	25	8	2	16	17	35	27	13	9	8	18	0	4	1	6	5	19	0	26	1	8	2	20	0	2	1
6	4	17	175	168	6	3	16	17	24	36	23	0	9	18	126	111	6	7	5	19	29	24	23	9	2	20	128	112	4
7	4	17	53	25	7	0	0	18	231	224	7	1	9	18	192	203	5	8	5	19	66	51	7	0	3	20	83	88	3
8	4	17	0	15	1	0	0	18	105	123	3	2	9	18	63	60	8	9	5	19	0	24	1	1	3	20	190	196	3
9	4	17	49	39	9	2	0	18	428	438	9	3	9	18	291	261	7	10	5	19	28	29	28	2	3	20	201	213	5
10	4	17	14	6	13	3	0	18	135	132	12	4	9	18	57	60	6	1	6	19	30	31	7	3	3	20	180	180	3
1	5	17	0	1	1	4	0	18	356	335	10	5	9	18	163	163	14	2	6	19	101	96	3	4	3	20	148	146	4
2	5	17	86	82	3	7	0	18	54	32	9	6	9	18	49	58	10	3	6	19	44	48	5	5	3	20	22	23	21
3	5	17	45	61	5	8	0	18	194	190	6	7	9	18	134	152	9	4	6	19	16	26	16	6	3	20	122	123	4
4	5	17	18	17	18	9	0	18	20	6	20	8	9	18	74	77	9	5	6	19	23	30	15	7	3	20	6	14	6
5	5	17	115	116	4	0	1	18	175	186	4	0	10	18	244	231	9	6	6	19	81	83	5	8	3	20	146	146	7
6	5	17	48	59	8	1	1	18	136	154	3	1	10	18	46	51	6	7	6	19	0	1	1	9	3	20	32	21	31
7	5	17	18	27	17	2	1	18	18	21	17	2	10	18	209	211	8	8	6	19	28	35	27	0	4	20	123	128	3
8	5	17	26	22	26	3	1	18	349	339	6	3	10	18	83	82	7	9	6	19	11	9	10	1	4	20	233	250	7
9	5	17	0	1	1	4	1	18	96	96	2	4	10	18	163	164	16	10	6	19	32	32	32	2	4	20	139	135	2
10	5	17	0	19	1	5	1	18	169	158	5	5	10	18	96	104	6	1	7	19	51	58	5	3	4	20	280	300	4
1	6	17	50	68	4	6	1	18	50	51	10	6	10	18	96	101	5	2	7	19	6	1	6	4	4	20	119	124	3
2	6	17	55	48	4	7	1	18	142	150	4	7	10	18	47	58	11	3	7	19	74	77	4	5	4	20	171	171	5
3	6	17	13	2	12	8	1	18	0	25	1	0	11	18	23	17	23	4	7	19	27	25	11	6	4	20	14	14	14
4	6	17	127	114	3	9	1	18	183	179	4	1	11	18	70	76	5	5	7	19	33	40	6	7	4	20	177	187	4
5	6	17	38	36	6	0	2	18	26	36	11	2	11	18	74	75	4	6	7	19	0	18	1	8	4	20	89	80	6
6	6	17	69	45	6	1	2	18	17	7	17	3	11	18	91	96	4	7	7	19	17	10	17	9	4	20	119	136	5
7	6	17	29	18	16	2	2	18	127	119	3	4	11	18	100	88	5	8	7	19	10	8	10	10	4	20	25	31	24
8	6	17	29	28	22	3	2	18	176	146	3	5	11	18	68	70	5	9	7	19	25	13	25	0	5	20	177	181	5
9	6	17	44	31	20	4	2	18	145	136	3	6	11	18	23	3	23	1	8	19	15	8	15	1	5	20	122	123	2
10	6	17	0	10	1	5	2	18	0	17	1	7	11	18	75	84	9	2	8	19	19	22	18	2	5	20	242	246	5
1	7	17	27	25	10	6	2	18	122	117	4	0	12	18	75	61	6	3	8	19	67	65	4	3	5	20	21	12	12
2	7	17	35	40	8	7	2	18	84	82	5	1	12	18	84	74	4	4	8	19	18	15	18	4	5	20	172	177	5
3	7	17	126	134	7	8	2	18	161	146	5	2	12	18	57	60	5	5	8	19	74	52	5	5	5	20	13	2	12
4	7	17	42	32	7	9	2	18	22	21	22	3	12	18	45	40	8	6	8	19	41	42	10	6	5	20	157	160	4
5	7	17	91	89	3	10	2	18	124	112	7	4	12	18	92	93	4	7	8	19	37	38	29	7	5	20	44	45	11
6	7	17	0	10	1	0	3	18	0	19	1	5	12	18	40	15	12	8	8	19	43	42	12	8	5	20	181	161	5
7	7	17	0	27	1	1	3	18	353	342	7	6	12	18	81	93	7	9	8	19	24	17	24	9	5	20	59	67	11
8	7	17	45	46	14	2	3	18	112	111	2	7	12	18	40	26	10	1	9	19	21	33	20	0	6	20	181	180	7
9	7	17	19	9	18	3	3	18	322	324	6	0	13	18	71	66	7	2	9	19	61	59	7	1	6	20	223	217	5
10	7	17	7	1	7	4	3	18	111	107	3	1	13	18	140	129	4	3	9	19	19	10	19	2	6	20	120	108	3
1	8	17	14	6	13	5	3	18	154	151	3	2	13	18	39	37	11	4	9	19	64	76	5	3	6	20	195	200	5
2	8	17	115	112	3	6	3	18	42	21	11	3	13	18	128	137	4	5	9	19	45	51	7	4	6	20	24	35	11
3	8	17	51	56	5	7	3	18	130	121	5	4	13	18	7	16	6	6	9	19	54	61	8	5	6	20	94	93	5
4	8	17	105	114	7	8	3	18	10	10	9	5	13	18	98	107	4	7	9	19	32	26	32	6	6	20	78	77	9
5	8	17	14	2	14	9	3	18	120	112	5	6	13	18	17	2	17	8	9	19	27	23	26	7	6	20	130	120	5
6	8	17	45	50	17	10	3	18	67	56	15	0	14	18	183	163	5	1	10	19	0	4	1	8	6	20	22	10	22
7	8	17	40	12	15	1	4	18	90	101	3	1	14	18	0	4	1	2	10	19	28	27	12	9	6	20	53		

Observed and calculated structure factors Ca(thd)2(tetraen)															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
7	10	20	135	133	9	2	9	21	44	53	7	5	7	22	138	128	6	2	9	23	52	58	5
0	11	20	87	77	6	3	9	21	23	28	14	6	7	22	80	78	6	3	9	23	29	43	10
1	11	20	123	106	3	4	9	21	37	31	9	7	7	22	142	133	5	4	9	23	32	28	15
2	11	20	129	120	8	5	9	21	17	2	16	0	8	22	76	67	4	5	9	23	42	41	11
3	11	20	78	70	4	6	9	21	24	16	23	1	8	22	148	146	2	1	10	23	12	13	11
4	11	20	111	113	4	7	9	21	18	3	18	2	8	22	104	103	4	2	10	23	49	46	6
5	11	20	0	13	1	1	10	21	19	27	19	3	8	22	76	70	4	3	10	23	6	6	5
6	11	20	100	111	7	2	10	21	43	53	7	4	8	22	103	110	3	4	10	23	30	23	22
0	12	20	41	14	10	3	10	21	7	2	6	5	8	22	83	77	6	1	11	23	20	19	19
1	12	20	198	188	8	4	10	21	59	52	5	6	8	22	126	134	7	2	11	23	16	5	15
2	12	20	25	28	25	5	10	21	19	15	19	7	8	22	0	4	1	3	11	23	12	14	11
3	12	20	173	165	17	6	10	21	7	18	6	0	9	22	45	46	10	4	12	23	19	13	19
4	12	20	0	17	1	1	11	21	0	4	1	1	9	22	128	128	4	2	0	24	257	243	13
5	12	20	112	107	5	2	11	21	50	51	6	2	9	22	43	35	6	6	0	24	46	35	14
6	12	20	38	47	14	3	11	21	18	14	17	3	9	22	139	149	3	7	0	24	112	99	7
0	13	20	189	206	5	4	11	21	62	52	5	4	9	22	26	20	20	0	1	24	305	294	7
1	13	20	30	32	15	5	11	21	13	13	13	5	9	22	117	118	6	1	1	24	201	201	4
2	13	20	178	175	7	6	11	21	36	25	14	6	9	22	0	13	1	2	1	24	205	206	5
3	13	20	26	18	20	1	12	21	29	28	12	0	10	22	139	154	5	3	1	24	184	172	8
4	13	20	120	126	6	2	12	21	17	19	16	1	10	22	163	165	5	4	1	24	184	184	6
0	14	20	16	23	16	3	12	21	69	70	5	2	10	22	142	152	3	5	1	24	80	82	8
1	14	20	103	114	7	4	12	21	0	5	1	3	10	22	104	97	3	6	1	24	132	121	4
2	14	20	8	20	8	5	12	21	63	31	7	4	10	22	106	105	4	7	1	24	34	27	17
3	14	20	89	91	4	1	13	21	16	11	16	5	10	22	19	4	8	0	2	24	114	101	5
1	1	21	22	37	13	2	13	21	13	11	12	6	10	22	102	96	7	1	2	24	254	230	12
2	1	21	31	33	8	3	13	21	27	16	11	0	11	22	61	55	6	2	2	24	80	82	3
3	1	21	64	73	14	1	14	21	25	15	24	1	11	22	170	176	3	3	2	24	165	155	4
4	1	21	33	37	11	1	0	22	64	54	8	2	11	22	7	5	6	4	2	24	56	67	10
5	1	21	52	59	9	2	0	22	211	215	11	3	11	22	110	118	3	5	2	24	142	151	4
6	1	21	31	31	30	3	0	22	21	6	20	4	11	22	0	9	1	6	2	24	55	36	8
7	1	21	18	19	18	7	0	22	40	33	21	0	12	22	160	177	5	7	2	24	74	65	7
8	1	21	73	68	6	8	0	22	120	116	11	1	12	22	104	109	3	0	3	24	108	100	4
9	1	21	30	20	26	9	0	22	0	17	1	2	12	22	158	162	4	1	3	24	34	23	7
1	2	21	27	20	12	0	1	22	115	114	8	3	12	22	83	89	4	2	3	24	84	78	3
2	2	21	26	29	11	1	1	22	219	210	8	0	13	22	50	66	7	3	3	24	15	29	15
3	2	21	41	46	5	2	1	22	58	57	6	1	13	22	123	121	4	4	3	24	166	155	4
4	2	21	85	85	5	3	1	22	191	177	4	1	1	23	20	27	20	5	3	24	0	10	1
5	2	21	37	36	11	5	1	22	202	200	6	2	1	23	29	26	12	6	3	24	127	124	12
6	2	21	108	109	6	6	1	22	105	95	7	3	1	23	81	92	14	7	3	24	19	10	18
7	2	21	58	47	9	7	1	22	122	126	7	5	1	23	81	90	5	0	4	24	25	45	24
8	2	21	37	42	18	8	1	22	17	12	17	6	1	23	36	49	23	1	4	24	89	94	3
9	2	21	49	42	9	9	1	22	59	79	18	7	1	23	24	34	23	2	4	24	12	8	11
1	3	21	0	10	1	0	2	22	105	102	4	8	1	23	58	50	10	3	4	24	131	116	3
2	3	21	17	16	17	1	2	22	72	76	3	1	2	23	14	15	14	4	4	24	18	14	18
3	3	21	86	84	3	2	2	22	131	124	3	2	2	23	35	29	8	5	4	24	171	168	4
4	3	21	42	38	6	3	2	22	40	33	6	3	2	23	51	53	5	6	4	24	0	7	1
5	3	21	112	103	5	4	2	22	155	134	4	4	2	23	105	101	4	7	4	24	65	71	7
6	3	21	28	23	22	5	2	22	75	75	7	5	2	23	0	5	1	0	5	24	190	174	4
7	3	21	106	79	7	6	2	22	128	126	7	6	2	23	58	49	7	1	5	24	91	99	3
8	3	21	15	4	14	7	2	22	0	8	1	7	2	23	38	30	15	2	5	24	147	139	3
9	3	21	49	51	9	8	2	22	64	65	9	8	2	23	19	4	19	3	5	24	44	52	7
1	4	21	31	24	6	9	2	22	13	13	13	1	3	23	21	24	13	4	5	24	138	147	4
2	4	21	32	39	6	0	3	22	60	60	5	2	3	23	58	52	4	5	5	24	29	39	23
3	4	21	38	27	5	1	3	22	156	142	3	3	3	23	29	28	9	6	5	24	108	117	5
4	4	21	42	35	7	2	3	22	27	34	8	4	3	23	68	67	7	0	6	24	86	86	5
5	4	21	0	15	1	3	3	22	50	60	5	5	3	23	51	35	8	1	6	24	166	150	7
6	4	21	18	4	18	4	3	22	11	13	11	6	3	23	27	36	27	2	6	24	113	104	4
7	4	21	36	44	19	5	3	22	133	126	4	7	3	23	0	2	1	3	6	24	117	113	3
8	4	21	38	25	15	6	3	22	24	8	24	8	3	23	12	30	12	4	6	24	65	61	7
9	4	21	25	14	25	7	3	22	140	121	4	1	4	23	41	39	5	5	6	24	143	152	5
1	5	21	29	30	8	8	3	22	25	16	25	2	4	23	20	1	19	6	6	24	36	36	16
2	5	21	38	31	6	9	3	22	61	50	9	3	4	23	0	7	1	0	7	24	79	83	6
3	5	21	0	7	1	0	4	22	165	165	5	4	4	23	0	4	1	1	7	24	101	83	3
4	5	21	13	14	12	1	4	22	41	37	6	5	4	23	26	23	26	2	7	24	104	100	3
5	5	21	69	58	6	2	4	22	121	125	3	6	4	23	30	9	20	3	7	24	93	81	3
6	5	21	23	22	22	3	4	22	7	23	6	7	4	23	0	19	1	4	7	24	150	136	5
7	5	21	65	54	7	4	4	22	91	98	3	8	4	23	43	41	18	5	7	24	52	55	9
8	5	21	30	20	30	5	4	22	2	8	1	1	5	23	20	13	20	0	8	24	34	29	12
9	5	21	25	12	25	6	4	22	185	177	4	2	5	23	51	41	5	1	8	24	115	123	4
1	6	21	17	13	17	7	4	22	39	40	12	3	5	23	15	8	15	2	8	24	97	93	4
2	6	21	55	67	4	8	4	22	106	107	6	4	5	23	0	11	1	3	8	24	133	134	3
3	6	21	0	14	1	0	5	22	86	89	4	5	5	23	41	22	12	4	8	24	66	65	7
4	6	21	37	35	7	1	5	22	66	77	3	6	5	23	24	18	24	5	8	24	114	116	6