

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	0	0	182	150	11	8	8	0	23	86	22	4	16	0	44	49	24	4	26	0	123	46	18	-2	4	1	282	249	3
9	0	0	582	545	13	9	8	0	83	75	17	5	16	0	133	96	12	5	26	0	93	118	20	-1	4	1	1312	1420	13
10	0	0	131	127	13	10	8	0	108	94	15	6	16	0	102	63	18	6	26	0	129	85	17	0	4	1	1886	1994	18
1	1	0	468	199	-7	1	9	0	541	529	6	7	16	0	206	195	11	1	27	0	82	69	14	1	4	1	175	138	3
7	1	0	286	285	9	2	9	0	82	71	6	8	16	0	59	34	28	2	27	0	60	23	40	2	4	1	168	167	4
8	1	0	290	272	10	3	9	0	671	678	7	9	16	0	118	73	14	4	27	0	112	106	17	3	4	1	625	578	7
9	1	0	41	17	41	4	9	0	403	403	5	10	16	0	23	25	23	5	27	0	0	14	1	4	4	1	1560	1533	13
10	1	0	305	274	10	5	9	0	437	415	11	11	16	0	64	83	31	0	28	0	87	17	21	5	4	1	516	519	8
0	2	0	1597	1761	68	6	9	0	336	335	9	1	17	0	30	46	29	1	28	0	53	70	28	7	4	1	397	398	10
1	2	0	438	316	-4	7	9	0	95	92	16	2	17	0	54	50	11	2	28	0	88	33	14	8	4	1	435	450	6
2	2	0	355	376	5	8	9	0	252	262	10	3	17	0	57	67	24	3	28	0	79	97	26	9	4	1	642	639	8
3	2	0	1836	1881	25	9	9	0	181	208	11	4	17	0	102	155	11	4	28	0	98	44	23	10	4	1	124	108	10
4	2	0	968	930	13	10	9	0	132	133	13	5	17	0	119	127	14	1	29	0	105	87	24	11	4	1	115	67	14
5	2	0	1093	1002	22	11	9	0	84	52	19	6	17	0	33	14	33	2	29	0	0	21	1	12	4	1	260	298	10
6	2	0	707	708	15	0	10	0	400	387	7	7	17	0	145	121	13	3	29	0	118	112	19	-11	5	1	107	72	13
7	2	0	277	232	9	1	10	0	55	6	8	8	17	0	96	19	17	4	29	0	121	133	19	-10	5	1	48	15	28
8	2	0	289	274	10	2	10	0	156	183	4	9	17	0	68	26	27	1	30	0	65	64	38	-9	5	1	213	219	7
9	2	0	447	422	12	3	10	0	900	935	9	10	17	0	93	96	20	-10	1	1	97	111	14	-8	5	1	94	87	72
10	2	0	111	69	16	4	10	0	714	688	8	0	18	0	357	364	17	-9	1	1	142	109	13	-7	5	1	551	511	9
11	2	0	68	53	15	5	10	0	120	91	7	1	18	0	145	137	5	-8	1	1	75	66	22	-6	5	1	197	219	8
1	3	0	765	827	7	6	10	0	370	350	10	2	18	0	332	355	5	-3	1	1	4122	4013	81	-5	5	1	44	50	14
2	3	0	97	187	-4	7	10	0	270	276	10	3	18	0	0	43	1	-2	1	1	173	242	5	-4	5	1	314	314	5
3	3	0	1497	1418	14	8	10	0	321	307	10	4	18	0	40	10	24	-1	1	1	262	231	6	-3	5	1	1235	1259	14
4	3	0	524	481	8	9	10	0	54	19	36	6	18	0	164	154	12	0	1	1	0	203	-1	-2	5	1	909	827	9
5	3	0	438	403	7	10	10	0	80	25	19	7	18	0	139	156	13	1	1	1	1167	1134	16	-1	5	1	223	124	3
6	3	0	677	651	14	11	10	0	0	49	1	8	18	0	115	129	17	2	1	1	643	501	7	0	5	1	1790	1888	17
7	3	0	167	195	11	12	10	0	40	64	39	9	18	0	79	92	24	3	1	1	2450	2507	27	1	5	1	1104	1206	11
8	3	0	137	97	14	1	11	0	456	467	5	10	18	0	140	109	16	4	1	1	517	527	8	2	5	1	470	437	6
9	3	0	229	183	11	2	11	0	319	288	4	1	19	0	69	85	10	5	1	1	84	97	14	3	5	1	219	282	4
10	3	0	397	401	10	3	11	0	863	798	9	2	19	0	809	773	8	6	1	1	2303	2237	45	4	5	1	646	661	7
11	3	0	145	207	11	4	11	0	65	52	22	3	19	0	317	309	6	7	1	1	311	286	9	5	5	1	48	102	16
0	4	0	2695	2598	37	5	11	0	226	245	10	4	19	0	98	86	18	8	1	1	120	113	14	6	5	1	183	215	7
1	4	0	169	180	4	6	11	0	700	645	15	6	19	0	136	157	15	9	1	1	462	440	8	7	5	1	256	261	6
2	4	0	512	508	5	7	11	0	286	290	10	7	19	0	48	1	47	-11	2	1	110	133	13	8	5	1	0	2	1
3	4	0	475	472	5	8	11	0	279	287	10	8	19	0	82	66	20	-10	2	1	161	156	6	9	5	1	115	122	13
4	4	0	855	912	10	9	11	0	135	147	13	9	19	0	83	26	20	-9	2	1	129	166	15	10	5	1	67	13	23
5	4	0	312	309	4	10	11	0	60	7	31	0	20	0	308	324	7	-8	2	1	200	185	11	11	5	1	117	106	14
6	4	0	199	196	5	11	11	0	63	81	28	1	20	0	192	185	6	-7	2	1	520	493	12	12	5	1	113	95	15
7	4	0	221	234	5	12	11	0	99	36	18	2	20	0	142	137	7	-6	2	1	59	93	26	-11	6	1	49	8	36
8	4	0	594	602	7	0	12	0	932	874	13	3	20	0	317	310	6	-5	2	1	240	247	9	-10	6	1	60	91	25
9	4	0	261	245	7	1	12	0	122	60	6	4	20	0	89	87	33	-4	2	1	182	147	8	-9	6	1	91	115	12
10	4	0	36	22	35	2	12	0	108	121	6	5	20	0	136	124	14	-3	2	1	2207	2219	43	-8	6	1	212	221	7
11	4	0	112	85	14	3	12	0	752	678	8	6	20	0	322	320	11	-2	2	1	2036	2076	20	-7	6	1	691	689	13
1	5	0	1729	1684	17	4	12	0	231	266	5	7	20	0	79	75	21	-1	2	1	496	544	5	-6	6	1	181	217	7
2	5	0	1110	1106	11	5	12	0	212	179	6	8	20	0	70	53	27	0	2	1	1185	1113	11	-5	6	1	1343	1372	15
3	5	0	1026	1069	11	6	12	0	0	30	1	9	20	0	76	38	24	1	2	1	944	1034	9	-4	6	1	716	622	10
4	5	0	136	108	12	7	12	0	0	18	1	1	21	0	251	247	5	2	2	1	2030	1973	23	-3	6	1	43	3	13
5	5	0	201	221	4	8	12	0	122	97	14	2	21	0	0	19	1	3	2	1	1691	1774	19	-2	6	1	286	262	3
6	5	0	765	722	11	9	12	0	131	102	13	3	21	0	116	66	27	4	2	1	22	56	21	-1	6	1	34	54	19
7	5	0	296	286	9	10	12	0	0	5	1	4	21	0	180	173	12	5	2	1	331	287	6	0	6	1	1435	1404	14
8	5	0	617	573	10	11	12	0	81	14	23	5	21	0	0	28	1	6	2	1	418	421	10	1	6	1	608	675	6
9	5	0	43	70	43	12	12	0	96	67	18	6	21	0	45	84	44	7	2	1	842	829	17	2	6	1	303	238	6
10	5	0	245	241	17	1	13	0	240	216	5	7	21	0	111	100	18	8	2	1	419	414	11	3	6	1	1343	1377	15
11	5	0	115	132	14	2	13	0	204	217	4	8	21	0	0	12	1	9	2	1	583	581	13	4	6	1	240	280	6
12	5	0	199	197	10	3	13	0	159	157	4	0	22	0	126	100	15	10	2	1	101	135	17	5	6	1	253	276	4
0	6	0	908	892	13	4	13	0	301	349	5	1	22	0	76	86	10	-11	3	1	102	55	18	6	6	1	242	243	9
1	6	0	129	167	4	5	13	0	246	236	9	2	22	0	164	146	7	-10	3	1	60	26	59	7	6	1	55	24	24
2	6	0	212	188	3	6	13	0	272	263	10	3	22	0	0	31	1	-9	3	1	40	21	24	8	6	1	43	41	42
3	6	0	645	660	7																								

Table 6S. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-9	8	1	119	115	12	3	11	1	450	464	5	-3	15	1	133	147	6	-1	19	1	187	164	7	2	24	1	46	53	45
-8	8	1	84	73	16	4	11	1	136	146	6	-2	15	1	141	108	5	0	19	1	46	22	46	3	24	1	0	27	1
-7	8	1	10	27	9	5	11	1	37	56	36	-1	15	1	113	97	6	1	19	1	161	173	6	4	24	1	84	52	24
-6	8	1	107	68	12	6	11	1	55	39	34	0	15	1	104	74	6	2	19	1	141	143	6	5	24	1	69	62	29
-5	8	1	563	520	8	7	11	1	355	327	10	1	15	1	59	12	58	3	19	1	425	414	6	6	24	1	0	79	1
-4	8	1	391	354	5	8	11	1	135	131	13	2	15	1	317	288	7	4	19	1	214	208	7	7	24	1	69	84	32
-3	8	1	281	281	4	9	11	1	152	123	12	3	15	1	214	203	4	5	19	1	0	54	1	-6	25	1	96	57	23
-2	8	1	435	405	5	10	11	1	53	17	40	4	15	1	165	195	8	6	19	1	53	37	46	-5	25	1	93	111	22
-1	8	1	234	255	4	11	11	1	39	51	39	5	15	1	338	343	10	7	19	1	0	113	1	-4	25	1	207	183	12
0	8	1	355	310	4	12	11	1	0	24	1	6	15	1	446	431	12	8	19	1	148	164	14	-3	25	1	74	73	13
1	8	1	380	421	4	-12	12	1	84	86	22	7	15	1	81	85	21	9	19	1	113	53	19	-2	25	1	64	79	23
2	8	1	642	655	6	-11	12	1	89	91	19	8	15	1	88	105	18	-9	20	1	161	152	13	-1	25	1	104	39	20
3	8	1	188	178	5	-10	12	1	133	115	13	9	15	1	89	114	20	-8	20	1	138	146	16	0	25	1	208	235	7
4	8	1	262	244	4	-9	12	1	66	67	25	10	15	1	41	10	41	-7	20	1	148	114	13	1	25	1	83	14	11
5	8	1	15	43	14	-8	12	1	43	86	42	11	15	1	62	66	35	-6	20	1	40	11	40	2	25	1	19	6	19
6	8	1	260	255	9	-7	12	1	0	27	1	-11	16	1	0	66	1	-5	20	1	0	17	1	3	25	1	101	39	23
7	8	1	100	63	14	-6	12	1	211	182	10	-10	16	1	62	13	28	-4	20	1	152	112	21	4	25	1	61	18	39
8	8	1	380	381	10	-5	12	1	581	579	9	-9	16	1	78	75	21	-3	20	1	130	131	7	5	25	1	84	70	22
9	8	1	151	160	12	-4	12	1	67	19	9	-8	16	1	138	155	14	-2	20	1	178	162	9	-6	26	1	102	77	20
11	8	1	78	48	21	-3	12	1	496	449	5	-6	16	1	0	48	1	-1	20	1	316	321	5	-5	26	1	0	62	1
12	8	1	103	36	18	-2	12	1	172	143	4	-5	16	1	316	332	10	0	20	1	111	91	13	-4	26	1	115	102	18
13	8	1	155	182	14	-1	12	1	145	180	5	-4	16	1	254	256	5	1	20	1	122	95	13	-3	26	1	48	73	47
-12	9	1	0	5	1	0	12	1	468	442	5	-3	16	1	255	265	6	2	20	1	66	49	28	-2	26	1	39	32	38
-11	9	1	0	32	1	1	12	1	217	214	4	-2	16	1	138	114	6	3	20	1	131	123	8	-1	26	1	82	64	33
-10	9	1	88	11	16	2	12	1	156	140	5	-1	16	1	407	374	5	4	20	1	54	26	42	0	26	1	119	116	20
-9	9	1	282	288	10	3	12	1	61	46	13	0	16	1	127	126	5	5	20	1	142	163	15	1	26	1	0	17	1
-8	9	1	45	24	44	4	12	1	236	270	5	1	16	1	286	258	5	6	20	1	77	32	24	2	26	1	60	2	60
-7	9	1	238	214	9	5	12	1	315	292	7	2	16	1	73	57	8	7	20	1	111	86	16	3	26	1	163	181	24
-6	9	1	348	339	9	6	12	1	384	349	11	3	16	1	357	327	5	8	20	1	35	13	35	4	26	1	0	67	1
-5	9	1	461	467	7	7	12	1	87	51	19	4	16	1	157	141	9	9	20	1	101	36	17	5	26	1	0	63	1
-4	9	1	189	169	4	8	12	1	84	16	20	5	16	1	233	218	11	-8	21	1	149	143	13	6	26	1	0	23	1
-3	9	1	172	134	4	9	12	1	34	23	33	6	16	1	132	117	13	-5	21	1	86	92	22	-4	27	1	36	88	36
-2	9	1	620	602	6	10	12	1	108	147	15	7	16	1	0	5	1	-4	21	1	137	155	10	-3	27	1	12	49	11
-1	9	1	476	478	6	11	12	1	102	42	16	8	16	1	109	100	15	-3	21	1	161	143	8	-2	27	1	127	79	24
0	9	1	257	225	4	12	12	1	109	108	17	9	16	1	139	114	14	-2	21	1	243	220	6	-1	27	1	0	30	1
1	9	1	85	110	6	-11	13	1	61	34	31	10	16	1	41	42	40	-1	21	1	372	384	5	0	27	1	58	55	57
2	9	1	42	14	11	-10	13	1	70	29	24	11	16	1	74	3	25	0	21	1	456	427	6	1	27	1	0	30	1
3	9	1	1008	1040	11	-9	13	1	239	225	10	-10	17	1	99	30	19	1	21	1	25	24	25	2	27	1	0	26	1
4	9	1	22	6	21	-8	13	1	78	1	20	-9	17	1	150	161	14	2	21	1	46	15	19	3	27	1	134	117	16
5	9	1	495	514	8	-7	13	1	268	237	10	-8	17	1	85	24	20	3	21	1	227	241	9	4	27	1	145	145	16
6	9	1	376	373	10	-6	13	1	58	61	24	-7	17	1	267	270	11	4	21	1	125	150	11	5	27	1	56	69	55
7	9	1	232	229	10	-5	13	1	162	160	11	-6	17	1	0	29	1	5	21	1	49	13	49	-4	28	1	0	60	1
8	9	1	116	155	13	-4	13	1	310	261	5	-5	17	1	186	184	11	6	21	1	52	55	51	-3	28	1	98	98	21
9	9	1	72	78	22	-3	13	1	70	104	8	-4	17	1	259	247	7	7	21	1	84	22	21	-2	28	1	164	164	10
10	9	1	209	206	11	-2	13	1	168	174	4	-3	17	1	64	77	11	8	21	1	0	82	1	-1	28	1	127	48	15
11	9	1	143	99	13	-1	13	1	90	41	7	-2	17	1	543	509	7	9	21	1	125	80	16	0	28	1	102	89	42
12	9	1	0	16	1	0	13	1	200	178	5	-1	17	1	158	138	6	-8	22	1	126	92	15	1	28	1	67	43	31
13	9	1	93	114	18	1	13	1	120	140	6	0	17	1	351	326	5	-7	22	1	167	183	13	2	28	1	94	124	14
-12	10	1	9	4	8	2	13	1	33	30	27	1	17	1	328	328	5	-6	22	1	54	40	42	3	28	1	43	71	42
-11	10	1	118	102	14	3	13	1	332	370	4	2	17	1	0	14	1	-5	22	1	175	180	13	4	28	1	113	3	18
-10	10	1	89	75	17	4	13	1	260	260	7	3	17	1	105	62	10	-4	22	1	211	211	8	-3	29	1	128	25	17
-9	10	1	80	27	20	5	13	1	143	187	8	4	17	1	539	543	9	-3	22	1	132	109	9	-2	29	1	0	59	1
-8	10	1	103	91	15	6	13	1	66	76	22	5	17	1	126	152	14	-2	22	1	90	64	20	-1	29	1	66	64	65
-7	10	1	69	92	20	7	13	1	214	197	11	6	17	1	177	171	12	-1	22	1	223	248	6	0	29	1	58	16	27
-6	10	1	203	225	9	8	13	1	81	32	21	7	17	1	75	92	22	0	22	1	133	128	14	1	29	1	91	41	21
-5	10	1	200	191	6	9	13	1	137	150	13	8	17	1	55	55	38	1	22	1	346	323	5	2	29	1	129	148	17
-4	10	1	104	102	5	10	13	1	50	56	50	9	17	1	36	57	36	2	22	1	74	11	15	4	29	1	0	1	1
-3	10	1	513	514	5	12	13	1	70	38	26	10	17	1	0	15	1	3	22	1	227	210	8	0	30	1	23	12	22
-2	10	1	236	207	4	-10	14	1	0	56	1	-10	18	1															

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
5	1	2	748	724	9	6	5	2	847	841	12	-4	9	2	210	220	4	-8	13	2	65	89	23	-5	17	2	103	78	10
6	1	2	470	459	11	7	5	2	336	326	6	-3	9	2	57	80	12	-7	13	2	585	556	13	-4	17	2	50	9	20
7	1	2	78	75	20	8	5	2	180	151	7	-2	9	2	1012	1022	10	-6	13	2	288	279	10	-3	17	2	368	374	6
8	1	2	82	94	13	9	5	2	85	87	12	-1	9	2	183	192	4	-5	13	2	218	209	6	-2	17	2	11	22	11
9	1	2	477	484	12	10	5	2	131	146	12	0	9	2	598	616	6	-4	13	2	72	39	11	-1	17	2	38	47	19
-11	2	2	134	56	15	11	5	2	92	96	18	1	9	2	307	215	5	-3	13	2	105	110	7	0	17	2	105	122	6
-10	2	2	97	107	12	12	5	2	87	25	20	2	9	2	198	237	4	-2	13	2	83	55	6	1	17	2	89	95	8
-9	2	2	0	12	1	-11	6	2	0	23	1	3	9	2	967	957	11	-1	13	2	391	361	5	2	17	2	344	329	6
-8	2	2	81	98	21	-10	6	2	104	101	11	4	9	2	48	17	15	0	13	2	263	249	4	3	17	2	179	187	8
-7	2	2	157	196	12	-9	6	2	126	116	12	5	9	2	0	12	1	1	13	2	85	112	7	4	17	2	33	65	32
-5	2	2	364	329	8	-8	6	2	269	273	9	6	9	2	432	451	11	2	13	2	318	268	4	5	17	2	97	77	18
-4	2	2	498	462	10	-7	6	2	11	2	10	7	9	2	22	20	21	3	13	2	309	298	5	7	17	2	105	103	17
-3	2	2	360	301	9	-6	6	2	94	98	9	8	9	2	144	160	12	4	13	2	80	29	18	8	17	2	83	54	22
-2	2	2	79	127	7	-5	6	2	769	752	9	9	9	2	104	101	15	5	13	2	287	317	7	9	17	2	40	48	39
-1	2	2	142	34	-3	-4	6	2	458	395	5	10	9	2	142	121	13	6	13	2	62	47	27	-10	18	2	119	81	16
0	2	2	1358	1291	15	-3	6	2	586	664	6	11	9	2	83	39	21	7	13	2	178	184	12	-9	18	2	57	87	41
1	2	2	243	200	4	-2	6	2	245	272	3	12	9	2	70	46	26	8	13	2	124	106	15	-8	18	2	117	103	15
2	2	2	96	104	15	-1	6	2	233	242	3	-12	10	2	143	131	13	9	13	2	90	73	19	-6	18	2	107	118	16
3	2	2	676	683	8	0	6	2	245	256	3	-11	10	2	69	25	23	10	13	2	98	91	18	-5	18	2	63	6	27
4	2	2	341	354	5	1	6	2	85	98	5	-9	10	2	162	160	11	11	13	2	19	28	18	-4	18	2	46	32	28
5	2	2	115	103	7	2	6	2	241	235	4	-8	10	2	334	338	10	-11	14	2	112	67	16	-3	18	2	76	10	20
6	2	2	142	127	11	3	6	2	282	295	4	-7	10	2	79	91	17	-10	14	2	100	129	16	-2	18	2	216	197	5
7	2	2	417	384	10	4	6	2	509	465	6	-6	10	2	70	98	20	-9	14	2	6	28	6	-1	18	2	0	29	1
8	2	2	934	903	19	5	6	2	20	8	19	-5	10	2	290	278	6	-8	14	2	195	199	11	0	18	2	89	37	13
9	2	2	442	420	11	6	6	2	352	347	9	-4	10	2	497	508	5	-7	14	2	0	2	1	1	18	2	203	197	5
12	2	2	330	338	7	7	6	2	442	464	11	-3	10	2	700	619	7	-6	14	2	76	46	20	2	18	2	180	154	5
-11	3	2	70	6	29	9	6	2	270	280	10	-2	10	2	345	298	4	-5	14	2	110	90	9	3	18	2	60	45	18
-10	3	2	215	171	16	10	6	2	72	8	22	-1	10	2	380	372	4	-4	14	2	121	117	8	4	18	2	208	181	12
-9	3	2	0	20	1	11	6	2	83	91	20	0	10	2	722	702	7	-3	14	2	467	447	5	5	18	2	177	177	12
-8	3	2	0	4	1	12	6	2	250	245	11	1	10	2	0	37	1	-2	14	2	18	3	17	6	18	2	22	63	22
-7	3	2	115	106	6	-11	7	2	71	65	21	2	10	2	122	48	5	-1	14	2	226	244	4	7	18	2	149	141	14
-6	3	2	449	442	6	-10	7	2	80	60	17	3	10	2	217	218	5	0	14	2	230	220	4	8	18	2	0	27	1
-5	3	2	916	855	10	-9	7	2	78	63	14	4	10	2	42	20	16	1	14	2	41	40	18	9	18	2	126	56	15
-4	3	2	34	41	15	-8	7	2	239	251	7	5	10	2	176	195	7	2	14	2	59	54	9	10	18	2	80	66	22
-3	3	2	516	414	5	-7	7	2	385	407	8	6	10	2	0	29	1	3	14	2	378	353	6	-10	19	2	0	24	1
-2	3	2	1363	1539	13	-6	7	2	224	213	6	7	10	2	50	9	49	4	14	2	114	140	18	-9	19	2	104	111	17
-1	3	2	300	182	-3	-5	7	2	130	112	6	8	10	2	355	317	10	5	14	2	106	109	10	-8	19	2	148	123	15
0	3	2	961	1117	11	-4	7	2	326	294	5	9	10	2	164	149	12	6	14	2	115	90	15	-7	19	2	160	134	13
1	3	2	303	410	4	-3	7	2	670	626	7	10	10	2	110	44	16	7	14	2	221	222	11	-5	19	2	104	117	10
2	3	2	93	158	11	-2	7	2	433	409	5	11	10	2	153	152	13	8	14	2	0	29	1	-4	19	2	232	254	6
3	3	2	722	665	10	-1	7	2	1052	1071	10	12	10	2	65	35	30	9	14	2	103	55	18	-3	19	2	65	48	15
4	3	2	387	405	5	0	7	2	50	51	9	-11	11	2	64	83	25	10	14	2	55	34	42	-2	19	2	390	378	6
5	3	2	421	377	7	1	7	2	444	518	5	-10	11	2	124	124	13	11	14	2	70	41	28	-1	19	2	177	191	5
6	3	2	886	814	18	2	7	2	537	535	6	-9	11	2	129	106	13	-11	15	2	60	46	34	0	19	2	562	545	6
7	3	2	281	273	9	3	7	2	577	552	7	-8	11	2	366	332	10	-10	15	2	45	67	44	1	19	2	63	57	16
8	3	2	360	385	10	4	7	2	94	88	8	-7	11	2	91	14	17	-9	15	2	49	34	48	2	19	2	253	256	5
9	3	2	234	258	11	5	7	2	478	495	6	-6	11	2	487	480	12	-8	15	2	89	27	18	3	19	2	16	61	16
11	3	2	84	66	12	6	7	2	298	326	9	-5	11	2	44	4	19	-7	15	2	397	413	11	4	19	2	74	77	40
12	3	2	191	189	12	7	7	2	64	31	22	-4	11	2	226	200	5	-6	15	2	59	14	27	5	19	2	158	173	12
-11	4	2	74	14	20	8	7	2	320	299	10	-3	11	2	543	517	6	-5	15	2	56	31	19	6	19	2	203	228	12
-10	4	2	130	111	9	9	7	2	175	166	11	-2	11	2	109	142	5	-4	15	2	288	262	5	7	19	2	146	121	14
-9	4	2	193	177	7	10	7	2	84	80	18	-1	11	2	458	425	5	-3	15	2	199	195	5	8	19	2	40	34	39
-8	4	2	156	138	7	11	7	2	46	22	45	0	11	2	262	269	4	-2	15	2	133	114	5	9	19	2	143	121	15
-7	4	2	145	139	7	12	7	2	0	6	1	1	11	2	687	692	7	-1	15	2	657	596	7	-9	20	2	42	54	42
-6	4	2	289	278	6	13	7	2	103	36	17	2	11	2	131	99	5	0	15	2	166	151	5	-8	20	2	107	86	18
-5	4	2	66	69	14	-11	8	2	0	62	1	3	11	2	118	71	6	1	15	2	18	36	18	-7	20	2	267	281	12
-4	4	2	357	390	5	-10	8	2	125	129	12	4	11	2	58	48	16	2	15	2	187	184	5	-6	20	2	65	88	28
-3	4	2	176	213	4	-9	8	2	184	159	10	5	11	2	117	102	12	3	15	2	56	2	56	-5	20	2	187	244	8
-2	4	2	1570	1529	15	-8	8	2	62	79	23	6	11	2	337														

Table 6. Observed and calculated structure factors for 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
7 21	2	0	15	1		-1 28	2	138	150	10		2 4	3	866	951	8		-4 8	3	458	407	6		-12 12	3	67	24	27	
-8 22	2	94	72	19		0 28	2	34	11	34		3 4	3	669	776	10		-3 8	3	734	696	7		-11 12	3	163	157	11	
-7 22	2	156	156	14		1 28	2	91	139	21		4 4	3	378	399	6		-2 8	3	329	302	4		-10 12	3	157	177	11	
-6 22	2	44	6	43		2 28	2	0	37	1		5 4	3	145	127	6		-1 8	3	240	232	4		-9 12	3	137	156	12	
-5 22	2	122	123	17		3 28	2	0	36	1		10 4	3	37	25	36		0 8	3	324	343	4		-8 12	3	0	20	1	
-4 22	2	400	403	8		4 28	2	99	14	22		11 4	3	32	36	32		1 8	3	284	276	4		-7 12	3	308	309	10	
-3 22	2	87	122	10		-3 29	2	169	69	14		12 4	3	326	361	11		2 8	3	327	314	5		-6 12	3	582	578	13	
-2 22	2	174	194	7		-2 29	2	80	32	52		13 4	3	192	166	12		3 8	3	284	211	6		-5 12	3	359	329	7	
-1 22	2	110	95	11		-1 29	2	66	78	35		-12 5	3	88	27	22		4 8	3	474	510	6		-4 12	3	235	221	5	
0 22	2	86	64	9		0 29	2	116	92	17		-11 5	3	69	11	29		5 8	3	369	343	5		-3 12	3	118	103	5	
1 22	2	53	44	15		2 29	2	65	28	41		-10 5	3	46	69	25		6 8	3	287	322	9		-2 12	3	459	425	5	
2 22	2	157	109	11		3 29	2	0	15	1		-9 5	3	295	306	15		7 8	3	117	140	13		-1 12	3	156	144	4	
3 22	2	157	116	9		4 29	2	129	102	17		-8 5	3	119	118	9		8 8	3	83	93	18		0 12	3	1157	1133	11	
4 22	2	105	110	25		1 30	2	58	21	57		-7 5	3	61	57	15		9 8	3	105	88	15		1 12	3	367	351	5	
5 22	2	136	125	15		2 30	2	0	79	1		-6 5	3	334	304	6		10 8	3	150	96	13		2 12	3	171	198	5	
6 22	2	47	89	47		-11 1	3	93	29	18		-5 5	3	79	77	7		11 8	3	0	16	1		3 12	3	402	400	6	
7 22	2	84	14	22		-10 1	3	497	504	13		-4 5	3	113	136	4		12 8	3	114	103	16		4 12	3	132	129	6	
8 22	2	50	13	50		-9 1	3	78	84	25		-3 5	3	315	256	4		-12 9	3	111	65	15		5 12	3	98	110	9	
-8 23	2	86	106	23		-5 1	3	302	279	5		-2 5	3	1013	1131	9		-11 9	3	78	93	20		6 12	3	197	156	10	
-7 23	2	201	212	13		-4 1	3	259	246	4		-1 5	3	390	376	4		-10 9	3	12	21	12		7 12	3	210	216	11	
-6 23	2	81	33	23		-3 1	3	169	191	4		0 5	3	15	82	14		-9 9	3	79	73	18		8 12	3	42	27	41	
-5 23	2	77	6	24		-2 1	3	569	563	11		1 5	3	987	1090	11		-7 9	3	180	211	9		9 12	3	161	159	13	
-4 23	2	137	140	9		-1 1	3	1246	1274	17		2 5	3	281	255	4		-6 9	3	357	354	9		10 12	3	85	92	21	
-3 23	2	128	108	10		0 1	3	933	984	13		3 5	3	103	94	4		-5 9	3	310	315	5		11 12	3	95	12	19	
-2 23	2	134	166	8		1 1	3	964	923	13		4 5	3	99	137	5		-4 9	3	163	195	5		12 12	3	0	42	1	
-1 23	2	169	183	8		2 1	3	475	543	7		5 5	3	649	651	9		-3 9	3	163	152	4		-12 13	3	86	67	20	
0 23	2	274	260	5		3 1	3	1099	1070	12		8 5	3	209	220	6		-2 9	3	148	133	4		-11 13	3	38	8	38	
1 23	2	90	59	19		4 1	3	316	346	4		9 5	3	0	16	1		-1 9	3	244	210	4		-10 13	3	56	29	31	
2 23	2	18	34	18		5 1	3	854	813	10		10 5	3	38	59	38		0 9	3	60	17	8		-9 13	3	0	30	1	
3 23	2	80	103	14		6 1	3	1332	1325	26		11 5	3	285	319	10		1 9	3	71	57	7		-8 13	3	65	36	24	
4 23	2	86	83	21		7 1	3	253	244	6		12 5	3	88	46	20		2 9	3	580	535	7		-7 13	3	146	140	12	
5 23	2	147	184	14		8 1	3	460	475	8		13 5	3	90	95	22		3 9	3	154	174	6		-6 13	3	60	10	25	
6 23	2	89	6	21		-11 2	3	130	164	15		-11 6	3	93	24	26		4 9	3	549	581	7		-5 13	3	123	94	8	
7 23	2	52	47	52		-10 2	3	46	78	46		-10 6	3	0	15	1		5 9	3	0	16	1		-4 13	3	223	226	5	
-7 24	2	32	18	31		-9 2	3	86	73	15		-9 6	3	230	212	7		6 9	3	99	69	15		-3 13	3	238	243	4	
-6 24	2	184	158	14		-8 2	3	218	218	5		-8 6	3	301	282	8		7 9	3	316	290	10		-2 13	3	132	130	5	
-5 24	2	66	31	28		-7 2	3	438	423	7		-7 6	3	366	347	7		8 9	3	111	106	14		-1 13	3	33	6	22	
-4 24	2	178	171	8		-6 2	3	264	232	6		-6 6	3	55	23	47		9 9	3	31	6	30		0 13	3	225	216	4	
-3 24	2	23	85	23		-5 2	3	161	158	5		-5 6	3	50	51	11		10 9	3	22	43	22		1 13	3	253	275	4	
-2 24	2	0	13	1		-4 2	3	578	646	9		-4 6	3	371	386	4		12 9	3	0	7	1		2 13	3	678	624	8	
-1 24	2	88	83	10		-3 2	3	19	24	18		-3 6	3	68	73	6		-12 10	3	75	116	22		3 13	3	231	213	5	
0 24	2	6	33	5		-2 2	3	245	201	4		-2 6	3	84	83	6		-11 10	3	110	85	14		4 13	3	72	72	10	
1 24	2	378	380	7		-1 2	3	1028	1027	14		-1 6	3	317	288	4		-10 10	3	0	2	1		5 13	3	200	223	8	
2 24	2	157	108	29		0 2	3	765	540	-7		0 6	3	3075	3111	30		-9 10	3	51	34	39		6 13	3	0	15	1	
3 24	2	59	21	28		1 2	3	545	497	8		1 6	3	93	4	6		-8 10	3	195	223	10		7 13	3	0	94	1	
4 24	2	95	76	20		2 2	3	603	599	9		2 6	3	61	53	9		-7 10	3	405	371	10		8 13	3	25	39	25	
5 24	2	176	201	14		3 2	3	238	292	5		3 6	3	553	507	7		-6 10	3	129	99	11		9 13	3	62	90	28	
6 24	2	0	32	1		4 2	3	755	682	9		4 6	3	146	188	5		-5 10	3	93	114	6		11 13	3	126	97	16	
7 24	2	184	151	14		5 2	3	414	473	5		5 6	3	685	678	7		-4 10	3	65	19	8		-12 14	3	81	59	21	
-6 25	2	0	4	1		6 2	3	546	571	12		6 6	3	36	40	36		-3 10	3	106	114	5		-11 14	3	98	27	18	
-5 25	2	107	4	18		7 2	3	202	194	9		7 6	3	322	313	6		-2 10	3	143	147	4		-10 14	3	47	58	46	
-4 25	2	131	108	10		8 2	3	317	385	7		8 6	3	462	469	8		-1 10	3	561	533	6		-9 14	3	70	62	23	
-3 25	2	53	64	23		9 2	3	547	564	13		9 6	3	155	156	12		0 10	3	652	626	7		-8 14	3	83	74	18	
-2 25	2	143	127	12		-11 3	3	90	35	21		10 6	3	90	26	19		1 10	3	33	18	18		-7 14	3	272	282	10	
-1 25	2	40	27	40		-10 3	3	63	45	17		11 6	3	60	89	33		2 10	3	141	155	5		-6 14	3	179	164	10	
0 25	2	73	37	43		-9 3	3	54	85	19		12 6	3	315	282	11		3 10	3	202	187	5		-5 14	3	178	205	7	
1 25	2	52	75	40		-8 3	3	112	71	11		13 6	3	101	87	19		4 10	3	230	270	5		-4 14	3	172	195	6	
2 25	2	79	26	24		-7 3	3	145	125	7		-11 7	3	95	86	15		5 10	3	268	240	8		-3 14	3	144	125	8	
3 25	2	34	67	33		-6 3	3	699	664	17		-10 7	3	171	216	8		6 10	3	112	106	12		-2 14	3	151	125	5	
4 25	2	59	65	39		-5 3	3	148	136	7		-9 7	3	167	188	12		7 10	3	0	1	1		-1 14	3				

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
6 15	3	210	181	12		-6 20	3	146	164	14		6 25	3	0	53	1		8 2	4	69	26	24		12 6	4	0	105	1	
7 15	3	29	44	28		-5 20	3	0	17	1		-4 26	3	55	24	24		13 2	4	82	31	82		13 6	4	104	90	20	
8 15	3	76	91	22		-4 20	3	0	9	1		-3 26	3	183	166	9		-12 3	4	132	5	15		-11 7	4	91	64	13	
9 15	3	0	80	1		-3 20	3	59	1	20		-2 26	3	52	72	20		-11 3	4	0	2	1		-10 7	4	97	117	11	
10 15	3	147	135	15		-2 20	3	32	27	31		-1 26	3	0	7	1		-10 3	4	220	210	12		-9 7	4	127	126	9	
11 15	3	94	39	20		-1 20	3	131	151	8		0 26	3	64	48	31		-9 3	4	170	181	7		-8 7	4	276	254	7	
-11 16	3	68	61	26		0 20	3	84	70	11		1 26	3	63	81	29		-8 3	4	29	34	29		-7 7	4	167	129	14	
-10 16	3	73	18	21		1 20	3	205	195	7		2 26	3	181	183	15		-7 3	4	230	211	6		-6 7	4	400	398	9	
-9 16	3	94	72	16		2 20	3	114	87	9		3 26	3	23	15	22		-6 3	4	222	219	7		-5 7	4	34	38	14	
-8 16	3	102	89	16		3 20	3	177	197	16		4 26	3	39	118	38		-5 3	4	221	220	4		-4 7	4	217	247	5	
-7 16	3	150	167	13		4 20	3	83	9	18		5 26	3	28	1	27		-4 3	4	265	248	6		-3 7	4	58	70	9	
-6 16	3	217	213	11		5 20	3	43	3	42		6 26	3	68	116	33		-3 3	4	1085	1119	15		-2 7	4	399	311	4	
-5 16	3	39	27	39		6 20	3	0	23	1		-5 27	3	28	37	27		-2 3	4	233	149	4		-1 7	4	410	435	4	
-4 16	3	281	236	6		7 20	3	102	95	20		-4 27	3	76	50	17		-1 3	4	1819	1803	17		0 7	4	247	247	4	
-3 16	3	93	103	8		8 20	3	102	23	19		-3 27	3	63	14	62		0 3	4	779	820	11		1 7	4	1358	1409	15	
-2 16	3	196	218	5		9 20	3	63	12	35		-2 27	3	36	47	35		1 3	4	164	246	5		2 7	4	106	54	6	
-1 16	3	238	226	4		-9 21	3	155	123	14		-1 27	3	43	11	29		2 3	4	1159	1161	16		3 7	4	379	373	5	
0 16	3	201	240	5		-8 21	3	117	98	16		0 27	3	83	68	22		3 3	4	245	227	5		4 7	4	567	599	7	
1 16	3	77	54	12		-7 21	3	306	292	11		2 27	3	92	64	16		4 3	4	409	470	6		5 7	4	83	71	8	
2 16	3	155	140	8		-6 21	3	59	43	35		3 27	3	55	43	55		5 3	4	310	265	6		6 7	4	541	507	12	
3 16	3	156	136	6		-5 21	3	27	21	27		4 27	3	0	47	1		12 3	4	98	64	11		7 7	4	147	138	11	
4 16	3	73	84	21		-4 21	3	37	53	36		5 27	3	0	55	1		13 3	4	125	168	16		9 7	4	172	160	11	
5 16	3	53	5	38		-3 21	3	181	190	6		-4 28	3	25	23	24		-12 4	4	90	12	20		10 7	4	164	158	12	
6 16	3	109	65	15		-2 21	3	11	3	11		-3 28	3	98	78	55		-11 4	4	109	25	16		11 7	4	182	162	12	
7 16	3	183	178	13		-1 21	3	64	64	16		-2 28	3	76	24	20		-10 4	4	82	68	25		12 7	4	83	40	25	
8 16	3	57	89	42		0 21	3	60	73	12		-1 28	3	64	97	21		-9 4	4	253	250	8		13 7	4	75	13	26	
9 16	3	0	50	1		1 21	3	649	668	7		0 28	3	96	112	20		-8 4	4	264	252	6		-11 8	4	24	10	23	
10 16	3	113	90	18		2 21	3	275	289	8		1 28	3	100	17	19		-7 4	4	138	114	7		-10 8	4	33	1	32	
-10 17	3	88	113	19		3 21	3	143	150	10		3 28	3	117	107	18		-6 4	4	0	2	1		-9 8	4	47	38	24	
-9 17	3	103	81	16		4 21	3	47	12	47		4 28	3	41	61	41		-5 4	4	232	197	4		-8 8	4	489	515	17	
-8 17	3	0	84	1		5 21	3	124	110	16		-2 29	3	59	87	58		-4 4	4	339	341	4		-7 8	4	556	531	14	
-7 17	3	77	62	23		6 21	3	86	93	20		-1 29	3	0	24	1		-3 4	4	384	436	4		-6 8	4	328	354	7	
-6 17	3	224	251	11		7 21	3	94	102	21		0 29	3	55	35	55		-2 4	4	656	703	7		-5 8	4	60	83	8	
-5 17	3	35	30	34		-8 22	3	47	57	47		2 29	3	37	64	37		-1 4	4	1779	1847	17		-4 8	4	1003	1001	11	
-4 17	3	224	242	5		-7 22	3	101	113	17		-2 30	3	0	19	1		0 4	4	1865	1916	21		-3 8	4	265	311	4	
-3 17	3	67	68	16		-6 22	3	150	165	14		1 30	3	0	74	1		1 4	4	2109	2131	20		-2 8	4	586	546	6	
-2 17	3	339	343	5		-5 22	3	38	64	38		2 30	3	0	35	1		2 4	4	366	330	6		-1 8	4	519	446	5	
-1 17	3	193	189	5		-4 22	3	97	93	14		-11 0	4	131	89	16		3 4	4	480	497	7		0 8	4	165	196	5	
0 17	3	93	95	7		-3 22	3	233	241	6		-5 0	4	263	254	6		4 4	4	237	258	5		1 8	4	31	21	31	
1 17	3	549	521	6		-2 22	3	23	15	22		-4 0	4	1271	1297	25		5 4	4	340	371	6		2 8	4	230	222	4	
2 17	3	228	206	5		-1 22	3	189	193	9		-2 0	4	0	2078	-1		11 4	4	177	187	7		3 8	4	0	2	1	
3 17	3	72	61	11		0 22	3	0	14	1		-1 0	4	65	48	9		12 4	4	125	92	16		4 8	4	364	410	5	
4 17	3	263	260	7		1 22	3	48	29	26		0 0	4	1926	1706	38		-12 5	4	0	32	1		5 8	4	282	223	5	
5 17	3	121	88	15		2 22	3	13	15	12		1 0	4	2604	2775	51		-11 5	4	125	44	16		6 8	4	47	53	47	
6 17	3	104	90	16		3 22	3	127	95	17		2 0	4	1223	1206	24		-10 5	4	161	157	22		7 8	4	56	77	30	
7 17	3	140	139	15		4 22	3	85	20	21		3 0	4	1673	1681	23		-9 5	4	205	233	14		8 8	4	129	125	13	
8 17	3	69	89	30		5 22	3	98	125	23		4 0	4	295	293	5		-8 5	4	0	20	1		10 8	4	0	26	1	
10 17	3	102	35	18		6 22	3	98	121	22		5 0	4	1381	1447	19		-7 5	4	341	319	10		11 8	4	74	95	24	
-10 18	3	0	39	1		7 22	3	98	53	19		6 0	4	0	82	1		-6 5	4	45	74	44		12 8	4	108	99	17	
-9 18	3	187	183	13		-8 23	3	66	59	29		7 0	4	210	206	9		-5 5	4	582	518	7		-11 9	4	0	28	1	
-8 18	3	135	149	13		-7 23	3	30	12	29		8 0	4	287	249	9		-4 5	4	15	3	15		-10 9	4	188	165	10	
-7 18	3	137	124	13		-6 23	3	80	88	25		-11 1	4	27	21	26		-3 5	4	698	715	7		-9 9	4	111	136	13	
-6 18	3	46	43	45		-5 23	3	28	4	27		-10 1	4	52	28	52		-2 5	4	773	777	7		-8 9	4	157	141	10	
-5 18	3	99	98	10		-4 23	3	183	188	8		-9 1	4	72	117	15		-1 5	4	330	295	5		-7 9	4	76	142	17	
-4 18	3	0	30	1		-3 23	3	158	148	10		-8 1	4	75	104	12		0 5	4	354	284	5		-6 9	4	393	397	10	
-3 18	3	96	123	10		-2 23	3	200	223	13		-5 1	4	131	112	6		1 5	4	231	199	4		-5 9	4	49	36	19	
-2 18	3	66	77	19		-1 23	3	159	168	7		-4 1	4	94	75	4		2 5	4	644	591	6		-4 9	4	424	438	5	
-1 18	3	51	45	38		0 23	3	79	68	25		-3 1	4	265	270	20		3 5	4	310	291	4		-3 9	4	221	256	5	
0 18	3	146	162	7		1 23	3	92	18	19		-2 1	4	78	255	5		4 5	4	47	51	16		-2 9	4	36	86	14	
1 18	3	139	113	8		2 23	3	87	88	13		-1 1	4	412	446	6		5 5	4	56	1	19		-1 9	4	491	447	5</	

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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 10	4	142	146	13		2 14	4	75	73	9		5 18	4	38	46	38		4 23	4	58	8	22		-9 2	5	52	16	17	
8 10	4	74	66	23		3 14	4	135	129	6		6 18	4	268	272	11		5 23	4	0	36	1		-8 2	5	214	208	7	
10 10	4	77	17	22		4 14	4	81	62	13		7 18	4	0	68	1		6 23	4	121	85	17		-7 2	5	71	73	12	
11 10	4	204	217	12		5 14	4	76	100	13		8 18	4	123	86	16		7 23	4	103	30	19		-6 2	5	137	136	4	
12 10	4	97	86	21		6 14	4	194	166	11		9 18	4	40	17	40		-7 24	4	41	81	41		-5 2	5	364	380	4	
-12 11	4	0	39	1		7 14	4	212	188	11		10 18	4	0	11	1		-6 24	4	83	58	21		-4 2	5	1121	1117	15	
-11 11	4	171	152	11		8 14	4	309	282	11		-10 19	4	85	115	20		-5 24	4	78	113	15		-3 2	5	572	576	6	
-10 11	4	20	86	19		9 14	4	66	100	30		-9 19	4	96	102	18		-4 24	4	191	191	22		-2 2	5	1307	1321	15	
-9 11	4	39	34	38		10 14	4	49	40	49		-8 19	4	129	163	15		-3 24	4	9	24	9		-1 2	5	3166	3225	36	
-8 11	4	129	130	11		11 14	4	92	74	21		-7 19	4	68	31	26		-2 24	4	54	66	18		0 2	5	616	539	9	
-7 11	4	220	227	10		-11 15	4	36	54	35		-6 19	4	0	63	1		-1 24	4	288	308	6		1 2	5	888	980	12	
-6 11	4	619	647	14		-10 15	4	165	143	12		-5 19	4	67	87	17		0 24	4	49	12	22		2 2	5	725	694	10	
-5 11	4	509	466	8		-9 15	4	187	206	11		-4 19	4	249	274	7		1 24	4	148	140	14		3 2	5	471	511	6	
-4 11	4	70	30	8		-8 15	4	15	44	15		-3 19	4	139	141	7		2 24	4	162	154	9		4 2	5	273	235	5	
-3 11	4	42	46	15		-7 15	4	181	184	11		-2 19	4	274	290	6		3 24	4	132	84	46		5 2	5	491	495	6	
-2 11	4	1073	1005	10		-6 15	4	216	209	8		-1 19	4	295	264	5		4 24	4	190	203	12		6 2	5	307	315	6	
-1 11	4	378	358	5		-5 15	4	208	203	7		0 19	4	566	548	6		5 24	4	130	115	15		7 2	5	978	986	20	
0 11	4	632	613	6		-4 15	4	130	114	6		1 19	4	101	107	9		6 24	4	102	110	23		13 2	5	144	179	9	
1 11	4	443	430	6		-3 15	4	54	6	18		2 19	4	36	24	36		7 24	4	92	37	22		-12 3	5	57	20	46	
2 11	4	302	299	5		-2 15	4	665	646	7		3 19	4	219	198	8		-6 25	4	90	40	21		-11 3	5	166	108	13	
3 11	4	320	298	5		-1 15	4	112	74	6		4 19	4	168	175	8		-5 25	4	68	42	27		-10 3	5	99	114	19	
4 11	4	217	210	5		0 15	4	429	414	6		6 19	4	131	90	16		-4 25	4	119	121	11		-9 3	5	192	179	7	
5 11	4	75	79	12		1 15	4	22	54	22		7 19	4	144	152	14		-3 25	4	114	132	14		-8 3	5	0	18	1	
6 11	4	344	374	10		2 15	4	36	16	36		8 19	4	89	85	19		-2 25	4	0	13	1		-7 3	5	438	383	10	
7 11	4	42	94	42		3 15	4	393	352	6		-9 20	4	12	25	11		-1 25	4	148	149	13		-6 3	5	358	314	8	
8 11	4	89	51	19		4 15	4	33	31	33		-8 20	4	68	45	25		0 25	4	100	96	14		-5 3	5	96	72	8	
9 11	4	189	193	11		5 15	4	71	45	16		-7 20	4	115	97	15		1 25	4	193	220	8		-4 3	5	112	111	3	
10 11	4	69	45	26		6 15	4	96	106	18		-6 20	4	44	3	43		2 25	4	68	43	17		-3 3	5	72	100	6	
11 11	4	34	0	33		7 15	4	223	189	11		-5 20	4	94	79	12		3 25	4	210	210	8		-2 3	5	490	471	7	
-12 12	4	120	112	15		8 15	4	66	91	32		-4 20	4	197	201	8		5 25	4	69	88	27		-1 3	5	1540	1549	17	
-11 12	4	17	76	17		9 15	4	45	2	45		-3 20	4	271	258	6		6 25	4	79	27	26		0 3	5	718	668	7	
-10 12	4	118	118	13		10 15	4	105	79	17		-2 20	4	452	452	7		-6 26	4	0	13	1		1 3	5	860	889	12	
-9 12	4	72	89	20		11 15	4	63	30	41		-1 20	4	490	492	6		-5 26	4	0	15	1		2 3	5	683	734	10	
-8 12	4	69	67	22		-10 16	4	31	50	30		0 20	4	50	90	16		-4 26	4	0	2	1		3 3	5	173	115	5	
-7 12	4	226	222	10		-9 16	4	265	256	11		1 20	4	165	142	7		-3 26	4	97	73	12		4 3	5	393	446	11	
-6 12	4	0	42	1		-8 16	4	9	35	8		2 20	4	351	343	6		-2 26	4	76	44	22		5 3	5	709	707	10	
-5 12	4	456	450	7		-7 16	4	116	110	14		3 20	4	91	77	20		0 26	4	75	23	23		6 3	5	816	804	17	
-4 12	4	468	428	6		-6 16	4	99	119	21		4 20	4	24	60	24		1 26	4	145	166	14		12 3	5	23	53	22	
-3 12	4	388	378	5		-5 16	4	123	137	8		5 20	4	0	7	1		2 26	4	160	74	37		13 3	5	24	58	23	
-2 12	4	240	268	4		-4 16	4	68	35	14		6 20	4	120	116	16		3 26	4	75	67	17		-12 4	5	64	52	39	
-1 12	4	66	2	18		-3 16	4	0	46	1		7 20	4	120	90	17		4 26	4	153	157	15		-11 4	5	73	58	29	
0 12	4	376	333	5		-2 16	4	24	12	23		8 20	4	128	135	16		5 26	4	109	129	19		-10 4	5	84	1	24	
1 12	4	126	123	6		-1 16	4	251	230	5		9 20	4	62	32	39		-5 27	4	0	42	1		-9 4	5	289	309	7	
2 12	4	94	127	7		0 16	4	91	57	7		-9 21	4	74	95	23		-4 27	4	34	45	33		-8 4	5	72	60	30	
3 12	4	179	187	5		1 16	4	14	24	14		-8 21	4	43	53	43		-3 27	4	83	47	14		-7 4	5	243	251	6	
4 12	4	49	39	48		2 16	4	253	236	5		-7 21	4	284	308	11		-2 27	4	0	31	1		-6 4	5	238	205	6	
5 12	4	350	295	11		3 16	4	115	140	11		-6 21	4	100	129	18		2 27	4	111	49	12		-5 4	5	560	545	6	
6 12	4	134	138	13		4 16	4	401	393	12		-5 21	4	73	103	14		3 27	4	115	107	41		-4 4	5	96	5	5	
7 12	4	172	175	12		5 16	4	151	158	8		-4 21	4	68	72	16		4 27	4	57	11	57		-3 4	5	315	287	4	
8 12	4	472	454	12		6 16	4	118	100	15		-3 21	4	90	70	10		5 27	4	90	20	23		-2 4	5	388	373	5	
9 12	4	31	61	31		7 16	4	136	156	15		-2 21	4	128	123	7		-4 28	4	70	7	32		-1 4	5	144	163	4	
10 12	4	0	32	1		8 16	4	96	105	19		-1 21	4	82	68	10		-3 28	4	62	38	62		0 4	5	1406	1376	16	
11 12	4	11	131	10		9 16	4	0	54	1		0 21	4	12	37	11		-2 28	4	71	33	18		1 4	5	1723	1748	17	
-12 13	4	0	64	1		10 16	4	67	3	29		1 21	4	227	231	13		-1 28	4	131	98	16		2 4	5	48	32	14	
-11 13	4	66	42	28		-10 17	4	0	5	1		2 21	4	117	127	10		0 28	4	129	124	16		3 4	5	81	102	19	
-9 13	4	132	139	13		-9 17	4	0	71	1		3 21	4	27	1	26		1 28	4	86	128	21		4 4	5	366	426	6	
-8 13	4	247	228	10		-8 17	4	249	244	11		4 21	4	42	17	42		3 28	4	194	116	13		5 4	5	721	746	10	
-7 13	4	431	453	11		-7 17	4	343	359	11		5 21	4	81	96	21		4 28	4	24	4	24		11 4	5	124	105	15	
-6 13	4	71	74	24		-6 17	4	204	210	7		7 21	4	15	2	15		-3 29	4	110	36	19		12 4	5	71	102	26	
-5 13	4	141	160	7		-5 17	4	76	55	18		8 21	4																

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-6	6	5	339	366	6	11	9	5	73	37	27	6	13	5	233	226	10	5	17	5	383	377	8	4	22	5	36	31	35
-5	6	5	205	202	4	12	9	5	89	87	22	7	13	5	0	28	1	6	17	5	96	90	20	5	22	5	0	29	1
-4	6	5	123	84	5	-11	10	5	67	18	22	8	13	5	71	93	27	7	17	5	0	64	1	6	22	5	144	135	16
-3	6	5	321	283	4	-10	10	5	112	102	13	9	13	5	150	130	14	8	17	5	0	12	1	7	22	5	89	108	24
-2	6	5	477	499	5	-9	10	5	88	69	15	10	13	5	37	25	36	9	17	5	0	23	1	8	22	5	111	94	19
-1	6	5	48	4	10	-8	10	5	95	104	15	11	13	5	0	85	1	10	17	5	241	251	12	-7	23	5	44	59	44
0	6	5	1026	1024	14	-7	10	5	96	115	14	-12	14	5	73	79	23	-10	18	5	82	45	21	-6	23	5	18	35	17
1	6	5	643	585	7	-6	10	5	232	224	6	-11	14	5	42	28	42	-9	18	5	100	124	17	-5	23	5	71	97	25
2	6	5	277	248	4	-5	10	5	723	729	10	-10	14	5	58	41	26	-8	18	5	62	82	26	-4	23	5	114	130	10
3	6	5	299	348	4	-4	10	5	150	159	5	-9	14	5	0	37	1	-7	18	5	73	65	24	-3	23	5	191	201	8
4	6	5	173	171	4	-3	10	5	341	317	6	-8	14	5	51	18	35	-6	18	5	106	115	10	-2	23	5	167	142	7
5	6	5	291	261	6	-2	10	5	846	890	8	-7	14	5	123	145	13	-5	18	5	116	97	14	-1	23	5	216	187	8
8	6	5	522	503	8	-1	10	5	498	584	6	-6	14	5	50	18	17	-4	18	5	330	353	7	0	23	5	34	33	33
9	6	5	46	36	25	0	10	5	122	114	10	-5	14	5	338	351	7	-3	18	5	116	106	13	1	23	5	140	142	11
10	6	5	38	72	38	1	10	5	215	235	5	-4	14	5	148	111	5	-2	18	5	49	79	17	2	23	5	151	143	9
11	6	5	75	104	23	2	10	5	98	127	7	-3	14	5	304	272	5	-1	18	5	197	184	5	3	23	5	0	26	1
12	6	5	107	48	19	3	10	5	72	93	16	-2	14	5	426	430	5	0	18	5	463	428	7	4	23	5	90	129	13
-13	6	5	0	5	1	4	10	5	280	269	6	-1	14	5	49	7	14	1	18	5	301	296	6	5	23	5	19	27	19
-12	7	5	0	32	1	5	10	5	113	137	8	0	14	5	466	475	8	2	18	5	139	145	10	6	23	5	144	118	15
-11	7	5	118	81	17	7	10	5	80	79	22	1	14	5	190	187	5	3	18	5	403	414	8	7	23	5	0	27	1
-10	7	5	140	137	8	8	10	5	170	143	11	2	14	5	63	6	17	4	18	5	79	41	15	-7	24	5	90	68	18
-9	7	5	107	84	10	9	10	5	59	28	36	3	14	5	483	478	7	5	18	5	74	52	23	-6	24	5	199	139	13
-8	7	5	348	351	7	10	10	5	69	59	28	4	14	5	44	20	44	6	18	5	304	326	11	-5	24	5	86	98	24
-7	7	5	592	575	12	11	10	5	74	32	25	5	14	5	202	214	7	7	18	5	73	51	25	-4	24	5	54	62	53
-6	7	5	132	117	10	-11	11	5	128	123	13	6	14	5	34	68	33	8	18	5	34	41	34	-3	24	5	45	7	39
-5	7	5	307	345	5	-10	11	5	205	202	10	7	14	5	206	220	11	9	18	5	77	24	25	-2	24	5	134	126	10
-4	7	5	377	388	4	-9	11	5	36	36	36	8	14	5	263	271	11	-8	19	5	127	158	14	-1	24	5	150	139	14
-3	7	5	70	123	8	-8	11	5	242	216	10	9	14	5	27	74	26	-7	19	5	189	222	11	0	24	5	193	209	8
-2	7	5	528	593	6	-7	11	5	150	176	11	10	14	5	73	41	26	-5	19	5	272	283	7	1	24	5	0	37	1
-1	7	5	214	246	5	-6	11	5	182	140	6	11	14	5	54	58	53	-4	19	5	67	73	25	2	24	5	88	106	29
0	7	5	384	308	5	-5	11	5	126	137	7	-10	15	5	91	54	18	-3	19	5	204	258	6	3	24	5	53	47	26
1	7	5	299	240	5	-4	11	5	95	97	7	-9	15	5	139	126	13	-2	19	5	75	112	11	4	24	5	12	63	12
2	7	5	488	462	6	-3	11	5	152	182	4	-8	15	5	120	57	13	-1	19	5	111	80	8	5	24	5	0	22	1
3	7	5	376	377	5	-2	11	5	430	471	5	-7	15	5	217	216	11	0	19	5	96	94	10	6	24	5	70	30	32
4	7	5	289	323	6	-1	11	5	705	715	8	-6	15	5	54	1	16	1	19	5	194	215	6	7	24	5	102	96	22
5	7	5	388	328	5	0	11	5	427	454	6	-5	15	5	205	208	7	2	19	5	0	66	1	-6	25	5	79	13	25
6	7	5	770	755	11	1	11	5	282	272	5	-4	15	5	277	271	5	3	19	5	83	90	14	-5	25	5	20	84	20
7	7	5	286	271	11	2	11	5	20	60	19	-3	15	5	120	105	6	4	19	5	129	101	10	-4	25	5	101	74	12
8	7	5	273	299	7	3	11	5	243	272	5	-2	15	5	109	130	10	5	19	5	109	102	17	-3	25	5	65	54	18
9	7	5	66	2	26	4	11	5	255	245	5	-1	15	5	448	440	5	6	19	5	106	49	18	-2	25	5	123	134	10
10	7	5	94	101	19	5	11	5	427	433	10	0	15	5	363	358	6	7	19	5	93	82	20	-1	25	5	62	64	36
11	7	5	144	127	13	6	11	5	0	33	1	1	15	5	59	35	24	8	19	5	25	14	25	0	25	5	170	139	24
12	7	5	103	84	19	8	11	5	169	188	12	2	15	5	87	33	11	9	19	5	0	33	1	1	25	5	152	165	13
-10	8	5	129	133	9	9	11	5	0	9	1	3	15	5	92	57	9	-9	20	5	101	95	18	2	25	5	71	8	27
-9	8	5	219	211	7	10	11	5	44	12	44	4	15	5	107	108	10	-8	20	5	82	26	20	3	25	5	90	30	37
-8	8	5	72	96	72	11	11	5	67	6	31	5	15	5	33	38	32	-7	20	5	86	41	20	4	25	5	0	71	1
-7	8	5	593	589	16	12	11	5	122	113	17	6	15	5	153	143	13	-6	20	5	79	57	13	5	25	5	163	149	14
-6	8	5	131	166	8	-12	12	5	62	118	30	7	15	5	366	332	11	-5	20	5	76	46	13	6	25	5	87	107	23
-5	8	5	439	472	6	-11	12	5	0	18	1	8	15	5	147	135	14	-4	20	5	193	205	19	-6	26	5	63	81	32
-4	8	5	212	190	4	-10	12	5	45	111	45	9	15	5	67	26	32	-3	20	5	279	271	8	-5	26	5	76	51	28
-3	8	5	680	642	7	-9	12	5	123	145	12	10	15	5	135	119	15	-2	20	5	251	235	6	-4	26	5	47	33	33
-2	8	5	75	31	7	-8	12	5	0	84	1	-11	16	5	29	77	28	-1	20	5	351	361	6	-3	26	5	81	67	14
-1	8	5	463	462	6	-7	12	5	505	484	12	-10	16	5	39	6	38	0	20	5	79	65	11	-2	26	5	27	26	27
0	8	5	389	402	5	-6	12	5	429	425	11	-9	16	5	172	159	11	1	20	5	48	67	36	-1	26	5	113	84	11
1	8	5	333	344	5	-5	12	5	711	696	10	-8	16	5	54	58	33	2	20	5	79	86	17	0	26	5	144	112	21
2	8	5	0	43	1	-4	12	5	440	397	6	-7	16	5	162	148	12	3	20	5	152	135	15	1	26	5	9	37	8
3	8	5	54	37	12	-3	12	5	0	25	1	-6	16	5	213	214	19	4	20	5	211	195	8	2	26	5	94	19	19
4	8	5	282	237	6	-2	12	5	184	181	4	-5	16	5	408	414	12	5	20	5	171	161	14	3	26	5	77	48	36
5	8	5	671	673	8	-1	12	5	294	264	4	-																	

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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	0	6	333	327	7	-12	5	6	124	82	16	8	8	6	198	216	11	8	12	6	178	170	12	9	16	6	0	46	1
-3	0	6	97	433	-6	-11	5	6	117	5	16	9	8	6	137	123	14	9	12	6	68	38	26	10	16	6	27	52	27
-2	0	6	701	698	14	-10	5	6	137	131	16	10	8	6	58	54	32	10	12	6	120	125	16	-10	17	6	0	66	1
-1	0	6	826	963	16	-9	5	6	356	325	7	12	8	6	137	120	16	11	12	6	32	81	31	-9	17	6	75	52	21
0	0	6	3898	3919	77	-8	5	6	212	207	12	-11	9	6	20	1	20	-11	13	6	63	40	25	-8	17	6	69	66	24
1	0	6	2088	1979	41	-7	5	6	39	82	30	-10	9	6	186	191	8	-10	13	6	215	220	10	-7	17	6	74	93	23
2	0	6	364	387	9	-6	5	6	138	164	7	-9	9	6	219	234	7	-9	13	6	170	154	11	-6	17	6	49	43	21
3	0	6	501	516	11	-5	5	6	401	454	5	-8	9	6	322	330	8	-8	13	6	90	93	16	-5	17	6	195	168	7
4	0	6	873	835	18	-4	5	6	190	204	3	-7	9	6	240	225	10	-7	13	6	162	145	11	-4	17	6	54	92	16
5	0	6	1004	1059	20	-3	5	6	0	9	1	-6	9	6	661	617	8	-6	13	6	469	441	8	-3	17	6	250	230	5
6	0	6	711	706	15	-2	5	6	826	758	8	-5	9	6	752	743	9	-5	13	6	194	189	6	-2	17	6	158	165	6
7	0	6	149	162	10	-1	5	6	1136	1146	11	-4	9	6	170	209	5	-4	13	6	112	76	6	-1	17	6	188	208	10
-12	1	6	76	29	75	0	5	6	594	648	9	-3	9	6	454	450	6	-3	13	6	275	250	5	0	17	6	345	326	6
-11	1	6	68	26	32	1	5	6	525	466	5	-2	9	6	258	332	4	-2	13	6	34	50	34	1	17	6	96	92	8
-8	1	6	117	99	8	2	5	6	522	486	8	-1	9	6	83	35	7	-1	13	6	146	146	7	2	17	6	451	448	7
-7	1	6	129	144	7	3	5	6	555	571	8	0	9	6	152	234	6	0	13	6	346	351	5	3	17	6	0	19	1
-6	1	6	217	214	6	4	5	6	784	850	11	1	9	6	420	427	8	1	13	6	9	14	8	4	17	6	33	27	32
-5	1	6	636	660	9	5	5	6	118	147	13	2	9	6	710	664	8	2	13	6	360	353	6	5	17	6	81	38	20
-4	1	6	56	73	16	6	5	6	194	196	9	3	9	6	794	769	9	3	13	6	310	331	5	6	17	6	360	391	12
-3	1	6	65	89	11	11	5	6	61	26	61	4	9	6	165	145	7	4	13	6	44	66	23	7	17	6	55	31	54
-2	1	6	319	275	5	12	5	6	99	86	22	5	9	6	559	535	7	5	13	6	372	417	9	8	17	6	109	102	18
-1	1	6	606	606	9	-13	6	6	60	49	59	6	9	6	695	736	15	6	13	6	9	15	8	9	17	6	71	99	30
0	1	6	1826	1856	25	-12	6	6	97	61	20	7	9	6	117	152	14	7	13	6	54	9	38	10	17	6	39	37	39
1	1	6	2151	2310	30	-11	6	6	110	77	18	8	9	6	66	41	27	8	13	6	124	148	16	-10	18	6	128	136	15
2	1	6	294	258	5	-10	6	6	57	28	19	9	9	6	63	82	30	9	13	6	29	5	29	-9	18	6	100	90	16
3	1	6	0	0	1	-9	6	6	57	51	23	10	9	6	61	35	32	10	13	6	39	60	39	-8	18	6	50	57	49
4	1	6	1091	1168	15	-8	6	6	160	131	7	11	9	6	0	59	1	11	13	6	61	57	39	-7	18	6	187	164	12
5	1	6	350	359	5	-7	6	6	77	134	11	12	9	6	62	71	38	-12	14	6	120	90	13	-6	18	6	97	116	10
6	1	6	278	260	6	-6	6	6	92	77	9	-11	10	6	148	150	11	-10	14	6	21	103	20	-5	18	6	70	12	41
-12	2	6	61	51	41	-5	6	6	267	252	4	-10	10	6	59	58	24	-8	14	6	57	76	27	-4	18	6	132	115	8
-10	2	6	124	126	18	-4	6	6	226	265	4	-9	10	6	43	69	43	-7	14	6	249	259	10	-3	18	6	47	83	47
-8	2	6	209	242	7	-3	6	6	155	182	4	-7	10	6	201	184	9	-6	14	6	68	29	12	-2	18	6	59	83	22
-7	2	6	112	122	8	-2	6	6	322	294	4	-6	10	6	140	108	6	-5	14	6	313	291	6	-1	18	6	550	525	7
-6	2	6	159	193	4	-1	6	6	718	708	8	-5	10	6	380	377	7	-4	14	6	86	60	8	0	18	6	225	264	6
-5	2	6	428	374	6	0	6	6	297	359	4	-4	10	6	663	674	10	-3	14	6	605	608	8	1	18	6	195	158	6
-4	2	6	71	60	21	1	6	6	62	86	9	-3	10	6	255	228	4	-2	14	6	641	615	8	2	18	6	398	349	6
-3	2	6	414	475	6	2	6	6	0	13	1	-2	10	6	480	478	7	-1	14	6	151	137	6	3	18	6	395	331	9
-2	2	6	148	83	4	3	6	6	0	23	1	-1	10	6	38	101	38	0	14	6	394	361	6	4	18	6	276	257	8
-1	2	6	1746	1815	24	4	6	6	41	61	35	0	10	6	357	295	5	1	14	6	88	71	8	5	18	6	269	280	8
0	2	6	1349	1398	19	5	6	6	674	719	10	1	10	6	281	278	5	2	14	6	159	163	10	6	18	6	197	197	12
1	2	6	782	693	11	6	6	6	79	15	15	2	10	6	518	484	7	3	14	6	187	180	7	7	18	6	132	141	16
2	2	6	108	164	7	9	6	6	107	97	11	3	10	6	145	131	6	4	14	6	195	186	6	8	18	6	64	68	37
3	2	6	273	314	5	10	6	6	39	55	38	4	10	6	484	473	6	5	14	6	440	444	8	-10	19	6	67	83	28
4	2	6	702	687	8	11	6	6	101	51	18	5	10	6	148	134	17	6	14	6	281	236	11	-9	19	6	98	76	18
5	2	6	909	905	10	12	6	6	105	69	20	6	10	6	318	284	10	7	14	6	56	91	40	-8	19	6	0	12	1
-13	3	6	156	69	15	-12	7	6	31	39	31	7	10	6	39	53	38	8	14	6	79	52	22	-7	19	6	236	252	11
-12	3	6	103	105	19	-11	7	6	83	77	23	8	10	6	0	102	1	9	14	6	168	181	14	-6	19	6	46	4	25
-11	3	6	69	72	30	-10	7	6	144	149	48	9	10	6	86	91	21	10	14	6	61	71	40	-5	19	6	67	87	33
-10	3	6	168	142	12	-9	7	6	0	53	1	10	10	6	86	6	21	11	14	6	155	141	15	-4	19	6	266	267	7
-9	3	6	156	142	8	-8	7	6	106	136	9	11	10	6	63	64	34	-11	15	6	67	42	24	-3	19	6	150	140	10
-8	3	6	111	134	8	-7	7	6	181	168	15	12	10	6	66	17	35	-10	15	6	178	147	11	-2	19	6	345	373	7
-7	3	6	0	27	1	-6	7	6	144	80	5	-11	11	6	68	62	22	-9	15	6	132	164	13	-1	19	6	102	65	11
-6	3	6	543	543	11	-5	7	6	239	210	4	-10	11	6	216	234	9	-8	15	6	126	117	13	0	19	6	383	374	6
-5	3	6	55	40	10	-4	7	6	425	458	5	-9	11	6	49	30	30	-7	15	6	186	172	11	1	19	6	84	117	10
-4	3	6	133	152	3	-3	7	6	421	456	5	-8	11	6	376	396	10	-6	15	6	254	259	7	2	19	6	192	192	6
-3	3	6	430	387	6	-2	7	6	50	74	9	-7	11	6	83	107	16	-5	15	6	150	117	21	3	19	6	381	368	11
-2	3	6	661	651	9	-1	7	6	93	58	13	-6	11	6	321	330	9	-4	15	6	372	377	7	4	19	6	127	108	22
-1	3	6	467	498	6	0	7	6	95	123	6	-5	11	6	163	113	6	-3	15	6	502	459	7	5	19	6	178	132	14
0	3	6	239	313	5	1	7	6	32	25	31	-4	11																

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
1	21	6	66	35	17	1	28	6	92	36	20	-12	5	7	0	4	1	12	8	7	52	31	52	-10	13	7	69	72	20
2	21	6	109	83	12	2	28	6	120	54	16	-11	5	7	100	60	20	-11	9	7	0	73	1	-9	13	7	36	68	35
3	21	6	139	164	10	3	28	6	116	93	12	-10	5	7	214	213	13	-10	9	7	212	201	7	-8	13	7	145	116	12
4	21	6	0	18	1	4	28	6	83	62	27	-9	5	7	0	33	1	-9	9	7	40	51	40	-7	13	7	195	187	6
5	21	6	0	34	1	-3	29	6	0	1	1	-8	5	7	50	11	22	-8	9	7	163	180	9	-6	13	7	211	208	10
6	21	6	123	116	19	-2	29	6	82	66	26	-7	5	7	338	349	6	-7	9	7	306	297	10	-5	13	7	220	196	6
7	21	6	88	54	23	-1	29	6	117	43	20	-6	5	7	97	113	8	-6	9	7	104	80	6	-4	13	7	164	189	8
8	21	6	0	37	1	0	29	6	44	96	43	-5	5	7	82	102	9	-5	9	7	0	4	1	-3	13	7	60	31	22
-8	22	6	79	56	24	1	29	6	0	40	1	-4	5	7	318	376	4	-4	9	7	508	513	6	-2	13	7	627	565	8
-7	22	6	80	65	22	2	29	6	132	98	17	-3	5	7	161	146	4	-3	9	7	56	80	10	-1	13	7	559	566	7
-6	22	6	140	141	9	-12	1	7	175	135	26	-2	5	7	417	465	4	-2	9	7	204	221	4	0	13	7	715	696	9
-5	22	6	49	4	24	-11	1	7	270	249	12	-1	5	7	70	17	10	-1	9	7	892	908	10	1	13	7	91	83	9
-4	22	6	245	243	10	-8	1	7	54	47	14	0	5	7	55	6	9	0	9	7	458	447	6	2	13	7	339	347	5
-3	22	6	91	5	20	-7	1	7	373	375	7	1	5	7	676	684	7	1	9	7	224	228	5	3	13	7	388	379	6
-2	22	6	183	142	8	-6	1	7	131	116	3	2	5	7	107	129	7	2	9	7	286	308	5	4	13	7	135	129	6
-1	22	6	63	18	31	-5	1	7	22	16	22	3	5	7	131	134	6	3	9	7	245	273	6	5	13	7	106	140	10
0	22	6	81	30	46	-4	1	7	219	188	4	4	5	7	30	80	30	4	9	7	238	257	5	6	13	7	132	133	14
1	22	6	69	123	25	-3	1	7	415	419	19	5	5	7	311	330	6	5	9	7	169	159	6	7	13	7	64	46	28
2	22	6	31	4	30	-2	1	7	704	743	10	6	5	7	449	478	11	6	9	7	255	292	10	8	13	7	152	167	14
3	22	6	64	37	28	-1	1	7	851	912	12	11	5	7	54	57	30	8	9	7	56	6	38	9	13	7	80	20	24
5	22	6	22	13	21	0	1	7	1757	1814	24	12	5	7	0	2	1	9	9	7	218	176	11	10	13	7	90	110	24
6	22	6	103	91	20	1	1	7	585	528	8	-12	6	7	77	43	30	11	9	7	0	0	1	11	13	7	112	58	19
7	22	6	62	22	39	2	1	7	348	320	6	-11	6	7	31	7	30	12	9	7	129	120	17	-11	14	7	96	91	16
8	22	6	55	22	55	3	1	7	713	685	10	-10	6	7	56	47	51	-11	10	7	56	63	27	-10	14	7	92	46	16
-7	23	6	90	33	21	4	1	7	52	48	13	-9	6	7	124	122	13	-10	10	7	95	37	14	-9	14	7	25	5	25
-6	23	6	121	134	10	5	1	7	267	298	6	-8	6	7	254	242	8	-9	10	7	52	77	21	-8	14	7	83	54	17
-5	23	6	71	10	15	6	1	7	330	365	9	-6	6	7	83	92	10	-8	10	7	126	100	16	-7	14	7	73	96	12
-4	23	6	57	23	56	-13	2	7	79	90	25	-5	6	7	417	400	5	-7	10	7	67	11	20	-6	14	7	46	60	21
-3	23	6	316	343	8	-12	2	7	138	131	15	-4	6	7	392	399	5	-6	10	7	0	67	1	-5	14	7	0	15	1
-2	23	6	194	217	15	-11	2	7	67	19	32	-3	6	7	91	26	6	-5	10	7	153	175	11	-4	14	7	168	178	7
-1	23	6	148	152	9	-10	2	7	0	36	1	-2	6	7	548	490	6	-4	10	7	248	207	8	-3	14	7	478	445	8
0	23	6	154	159	9	-8	2	7	332	299	8	-1	6	7	243	299	4	-3	10	7	300	315	5	-2	14	7	272	280	5
1	23	6	117	147	21	-7	2	7	329	312	8	0	6	7	328	347	5	-2	10	7	370	360	5	-1	14	7	95	108	8
2	23	6	185	189	13	-6	2	7	270	253	4	1	6	7	169	206	5	-1	10	7	301	316	5	0	14	7	169	156	6
3	23	6	150	150	10	-5	2	7	27	26	26	2	6	7	242	236	4	0	10	7	153	153	7	1	14	7	439	443	6
5	23	6	122	110	16	-4	2	7	294	298	4	3	6	7	113	118	12	1	10	7	858	881	10	2	14	7	465	454	6
6	23	6	134	111	16	-3	2	7	0	55	1	4	6	7	70	66	33	2	10	7	453	454	6	3	14	7	120	127	8
7	23	6	43	76	42	-2	2	7	83	150	6	5	6	7	518	492	8	3	10	7	451	407	6	4	14	7	0	30	1
-7	24	6	43	38	43	-1	2	7	705	648	10	6	6	7	87	95	16	4	10	7	843	826	10	5	14	7	128	106	24
-6	24	6	29	63	29	0	2	7	180	299	5	10	6	7	14	24	14	5	10	7	331	293	11	6	14	7	100	107	17
-5	24	6	0	27	1	1	2	7	36	84	22	11	6	7	77	129	14	6	10	7	135	101	12	7	14	7	345	319	11
-4	24	6	117	126	13	2	2	7	167	110	6	12	6	7	25	10	24	7	10	7	67	87	26	8	14	7	182	143	13
-3	24	6	48	26	47	3	2	7	347	361	6	-13	7	7	158	158	16	9	10	7	97	95	19	9	14	7	158	95	14
-2	24	6	70	43	70	4	2	7	819	799	12	-10	7	7	88	101	19	10	10	7	20	53	19	10	14	7	66	80	34
-1	24	6	79	44	15	5	2	7	677	734	8	-9	7	7	35	29	35	11	10	7	0	11	1	-8	15	7	55	85	29
0	24	6	0	60	1	6	2	7	378	397	6	-8	7	7	192	202	7	-11	11	7	100	68	13	-7	15	7	160	143	7
1	24	6	100	46	100	-13	3	7	122	22	18	-7	7	7	548	546	15	-10	11	7	58	66	24	-6	15	7	38	9	37
2	24	6	72	41	50	-12	3	7	120	9	16	-6	7	7	236	239	4	-9	11	7	32	50	32	-5	15	7	106	108	12
3	24	6	136	121	24	-11	3	7	77	42	26	-5	7	7	166	169	4	-8	11	7	243	240	9	-4	15	7	339	356	7
4	24	6	210	216	8	-10	3	7	123	114	15	-4	7	7	416	463	5	-7	11	7	749	787	11	-3	15	7	99	95	10
5	24	6	65	33	29	-9	3	7	43	36	42	-3	7	7	433	461	6	-6	11	7	67	37	37	-2	15	7	71	75	13
6	24	6	182	192	14	-8	3	7	152	158	8	-2	7	7	327	353	4	-5	11	7	39	28	39	-1	15	7	148	127	7
-6	25	6	64	51	23	-7	3	7	56	70	16	-1	7	7	567	557	7	-4	11	7	46	10	34	0	15	7	302	283	5
-5	25	6	90	98	13	-6	3	7	260	239	7	0	7	7	77	171	8	-3	11	7	513	488	6	1	15	7	194	182	9
-4	25	6	35	31	34	-5	3	7	100	76	3	1	7	7	405	428	5	-2	11	7	262	283	5	2	15	7	508	528	7
-3	25	6	82	39	17	-4	3	7	88	98	6	2	7	7	201	190	5	-1	11	7	765	762	9	3	15	7	219	191	6
-2	25	6	0	43	1	-3	3	7	370	330	4	3	7	7	415	388	5	0	11	7	116	151	6	4	15	7	256	252	7
-1	25	6	83	11	19	-2	3	7	343	280	5	4	7	7	101	136	6	1	11	7	707	705	8	5	15	7	65	75	44
0	25	6	87	13	12	-1	3	7	608	596	6	5	7	7	90	70	6	2	11	7	57	95	21						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-6	17	7	261	257	7	8	21	7	99	20	22	4	28	7	47	65	46	-2	4	8	505	482	6	-3	8	8	671	722	7
-5	17	7	79	63	18	-8	22	7	105	32	18	-3	29	7	155	66	15	-1	4	8	1390	1476	16	-2	8	8	828	773	8
-4	17	7	299	295	7	-7	22	7	47	1	46	-1	29	7	154	70	14	0	4	8	243	221	12	-1	8	8	526	422	6
-3	17	7	149	133	11	-6	22	7	119	149	10	0	29	7	84	15	24	1	4	8	741	789	11	0	8	8	78	58	8
-2	17	7	256	254	7	-5	22	7	69	51	16	1	29	7	135	3	16	2	4	8	422	432	7	1	8	8	361	373	5
-1	17	7	463	446	7	-4	22	7	102	117	10	2	29	7	88	27	24	3	4	8	265	220	6	2	8	8	244	271	6
0	17	7	44	51	34	-3	22	7	23	12	22	3	29	7	118	83	17	4	4	8	527	452	8	3	8	8	196	212	5
1	17	7	443	495	6	-2	22	7	157	151	11	-13	0	8	265	219	12	5	4	8	220	185	6	4	8	8	0	35	1
2	17	7	78	19	48	-1	22	7	112	141	10	-12	0	8	77	31	27	6	4	8	350	390	10	5	8	8	143	122	5
3	17	7	226	209	6	0	22	7	66	91	65	-7	0	8	239	239	6	12	4	8	78	55	29	6	8	8	0	5	1
4	17	7	0	9	1	1	22	7	111	115	11	-6	0	8	392	373	8	-13	5	8	84	7	22	7	8	8	204	208	7
5	17	7	435	436	8	2	22	7	59	43	58	-5	0	8	55	24	10	-12	5	8	92	53	21	8	8	8	40	80	39
6	17	7	251	194	12	3	22	7	166	170	10	-4	0	8	288	383	7	-11	5	8	254	252	12	9	8	8	93	114	19
7	17	7	107	66	18	4	22	7	148	139	28	-3	0	8	29	48	29	-10	5	8	0	32	1	10	8	8	90	71	21
8	17	7	68	60	30	5	22	7	78	52	27	-2	0	8	578	574	12	-9	5	8	88	114	57	11	8	8	0	17	1
9	17	7	156	163	14	6	22	7	14	12	13	-1	0	8	2089	2018	41	-8	5	8	286	307	8	-11	9	8	31	31	31
10	17	7	32	22	32	7	22	7	80	1	28	0	0	8	2908	3005	57	-7	5	8	261	230	6	-10	9	8	107	121	10
-10	18	7	157	140	13	8	22	7	103	137	21	1	0	8	639	658	13	-6	5	8	392	393	5	-9	9	8	94	85	10
-9	18	7	78	77	21	-7	23	7	134	137	15	2	0	8	34	114	33	-5	5	8	74	38	10	-8	9	8	579	575	13
-8	18	7	127	126	13	-6	23	7	61	52	44	3	0	8	72	66	15	-4	5	8	118	115	5	-7	9	8	111	106	6
-7	18	7	92	29	15	-5	23	7	80	67	13	4	0	8	602	570	13	-3	5	8	771	786	9	-6	9	8	654	649	8
-6	18	7	260	284	7	-4	23	7	75	50	47	5	0	8	0	2	1	-2	5	8	303	404	4	-5	9	8	333	376	5
-5	18	7	61	21	14	-3	23	7	144	121	9	6	0	8	907	919	19	-1	5	8	473	452	5	-4	9	8	274	289	6
-4	18	7	270	263	7	-2	23	7	60	57	60	-13	1	8	60	20	59	0	5	8	108	167	7	-3	9	8	456	424	6
-3	18	7	0	51	1	-1	23	7	114	93	10	-12	1	8	58	72	45	1	5	8	313	270	6	-2	9	8	529	659	6
-2	18	7	0	3	1	0	23	7	120	68	54	-11	1	8	64	26	34	2	5	8	26	8	26	-1	9	8	255	261	5
-1	18	7	321	326	6	1	23	7	202	206	7	-6	1	8	362	345	7	3	5	8	52	27	14	0	9	8	95	74	7
0	18	7	44	45	43	2	23	7	16	31	15	-5	1	8	374	364	5	4	5	8	519	545	8	1	9	8	29	94	28
1	18	7	0	30	1	3	23	7	77	1	29	-4	1	8	401	405	9	5	5	8	115	108	16	2	9	8	196	213	5
2	18	7	50	86	28	4	23	7	63	33	21	-3	1	8	438	432	6	6	5	8	193	206	10	3	9	8	35	30	35
3	18	7	342	327	6	5	23	7	0	39	1	-2	1	8	115	80	5	11	5	8	128	108	9	4	9	8	203	210	5
4	18	7	54	60	43	6	23	7	41	0	41	-1	1	8	1011	1037	14	12	5	8	112	123	14	5	9	8	70	37	13
5	18	7	282	248	11	7	23	7	0	6	1	0	1	8	270	209	5	-13	6	8	67	24	35	6	9	8	51	104	50
6	18	7	106	123	18	-7	24	7	44	49	43	1	1	8	378	285	6	-12	6	8	67	10	33	7	9	8	383	355	11
7	18	7	0	95	1	-6	24	7	24	15	23	2	1	8	212	232	5	-11	6	8	111	1	17	8	9	8	66	76	28
8	18	7	0	4	1	-5	24	7	0	65	1	3	1	8	361	364	6	-10	6	8	48	18	47	9	9	8	154	128	14
9	18	7	67	34	34	-4	24	7	48	47	47	4	1	8	42	70	41	-9	6	8	134	163	26	10	9	8	76	63	24
-9	19	7	0	53	1	-3	24	7	38	74	38	5	1	8	221	247	6	-8	6	8	173	179	8	11	9	8	89	69	21
-8	19	7	76	49	21	-2	24	7	58	82	21	6	1	8	582	600	9	-7	6	8	0	2	1	-10	10	8	280	282	7
-7	19	7	244	244	7	-1	24	7	70	100	15	-13	2	8	173	144	14	-6	6	8	147	150	7	-9	10	8	265	289	9
-6	19	7	321	332	7	0	24	7	85	24	20	-12	2	8	58	13	57	-5	6	8	611	651	7	-8	10	8	258	266	7
-5	19	7	159	144	14	1	24	7	77	49	14	-11	2	8	127	145	17	-4	6	8	485	483	6	-7	10	8	105	103	21
-4	19	7	562	531	9	2	24	7	38	29	38	-10	2	8	140	96	16	-3	6	8	588	547	7	-6	10	8	282	303	5
-3	19	7	91	93	19	3	24	7	79	2	43	-8	2	8	97	89	9	-2	6	8	12	1	12	-5	10	8	68	37	31
-2	19	7	81	107	14	4	24	7	82	0	27	-7	2	8	113	144	7	-1	6	8	49	74	9	-4	10	8	457	441	8
-1	19	7	378	355	11	5	24	7	0	29	1	-6	2	8	67	4	11	0	6	8	927	1027	11	-3	10	8	245	235	4
0	19	7	48	79	48	6	24	7	32	105	32	-5	2	8	265	225	4	1	6	8	39	29	14	-2	10	8	472	460	6
1	19	7	226	246	6	7	24	7	0	32	1	-4	2	8	165	180	49	2	6	8	39	50	25	-1	10	8	1072	1062	12
2	19	7	94	125	16	-5	25	7	98	85	12	-3	2	8	169	191	5	3	6	8	808	811	12	0	10	8	602	623	7
3	19	7	409	410	12	-4	25	7	110	118	21	-2	2	8	584	604	14	4	6	8	225	209	6	1	10	8	560	540	9
4	19	7	183	195	9	-3	25	7	0	32	1	-1	2	8	199	214	5	5	6	8	67	56	66	2	10	8	257	282	6
5	19	7	70	113	30	-2	25	7	57	48	57	0	2	8	473	548	7	6	6	8	61	66	24	3	10	8	79	87	10
6	19	7	104	108	20	-1	25	7	148	41	12	1	2	8	618	669	9	10	6	8	62	42	26	4	10	8	141	127	7
7	19	7	0	48	1	0	25	7	44	96	36	2	2	8	191	226	5	11	6	8	79	53	14	5	10	8	71	97	36
8	19	7	51	2	51	1	25	7	65	115	33	3	2	8	815	868	12	12	6	8	12	115	11	6	10	8	213	233	11
9	19	7	64	57	37	2	25	7	92	76	24	4	2	8	365	346	6	-13	7	8	116	57	19	7	10	8	254	273	10
-7	20	7	55	24	30	3	25	7	141	95	22	5	2	8	373	352	8	-12	7	8	0	68	1	8	10	8	303	256	11
-6	20	7	83	23	38	4	25	7	49	25	48	6	2	8	113	140	11	-11	7	8	110	93	18	9	10	8	50	42	49
-5	20	7	133	144	10	5	25	7	154	72	17	-13	3	8	115	91	18	-10	7	8	205	213	12	11	10</				

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-5	12	8	0	46	1	-5	16	8	203	184	7	6	20	8	95	43	22	-1	27	8	129	101	25	-13	5	9	75	77	32
-4	12	8	397	345	7	-4	16	8	561	530	9	7	20	8	107	20	21	0	27	8	104	91	59	-12	5	9	81	19	26
-3	12	8	271	251	6	-3	16	8	24	8	23	8	20	8	30	51	30	1	27	8	129	141	16	-11	5	9	215	202	13
-2	12	8	419	414	6	-2	16	8	207	217	7	-8	21	8	0	12	1	2	27	8	55	92	55	-10	5	9	0	57	1
-1	12	8	36	2	36	-1	16	8	399	362	6	-7	21	8	144	151	9	3	27	8	62	102	37	-9	5	9	178	155	14
0	12	8	70	65	10	0	16	8	24	21	23	-6	21	8	138	106	29	4	27	8	128	118	17	-8	5	9	306	326	8
1	12	8	59	29	12	1	16	8	271	263	6	-5	21	8	72	9	37	5	27	8	42	63	42	-7	5	9	194	212	6
2	12	8	42	81	21	2	16	8	0	10	1	-4	21	8	199	200	8	-2	28	8	40	40	39	-6	5	9	466	472	6
3	12	8	266	268	5	3	16	8	214	199	6	-3	21	8	183	188	15	-1	28	8	102	25	18	-5	5	9	50	20	10
4	12	8	398	381	6	4	16	8	437	457	8	-2	21	8	46	71	46	0	28	8	89	20	19	-4	5	9	74	69	8
5	12	8	195	219	7	5	16	8	408	383	8	-1	21	8	73	79	73	1	28	8	111	109	17	-3	5	9	578	604	8
6	12	8	87	159	18	6	16	8	0	99	1	0	21	8	46	59	29	2	28	8	81	7	24	-2	5	9	37	32	15
7	12	8	144	146	15	7	16	8	188	146	13	1	21	8	17	18	16	4	28	8	0	6	1	-1	5	9	185	174	4
8	12	8	99	125	20	8	16	8	393	385	12	2	21	8	63	85	37	-2	29	8	0	23	1	0	5	9	152	103	3
9	12	8	71	105	29	9	16	8	31	8	31	3	21	8	55	17	47	-1	29	8	0	74	1	1	5	9	26	11	26
10	12	8	89	113	22	-10	17	8	76	63	23	4	21	8	94	99	17	1	29	8	156	86	14	2	5	9	183	187	6
11	12	8	82	27	24	-9	17	8	65	90	24	5	21	8	119	121	17	2	29	8	63	20	42	3	5	9	193	188	6
-10	13	8	152	136	11	-8	17	8	0	47	1	6	21	8	91	21	21	-13	1	9	94	81	15	4	5	9	308	304	6
-9	13	8	113	91	13	-7	17	8	278	247	12	7	21	8	0	24	1	-12	1	9	107	58	19	5	5	9	212	181	16
-8	13	8	232	205	10	-6	17	8	262	237	7	8	21	8	58	47	57	-7	1	9	36	78	20	6	5	9	760	746	16
-7	13	8	161	139	6	-5	17	8	41	26	27	-8	22	8	87	27	20	-6	1	9	342	332	7	12	5	9	79	84	60
-6	13	8	557	542	9	-4	17	8	306	294	7	-7	22	8	39	18	39	-5	1	9	112	127	4	-12	6	9	12	55	11
-5	13	8	138	129	7	-3	17	8	131	136	16	-6	22	8	81	44	13	-4	1	9	562	564	11	-11	6	9	86	74	23
-4	13	8	368	375	8	-2	17	8	340	298	7	-5	22	8	58	3	58	-3	1	9	211	201	4	-10	6	9	188	155	13
-3	13	8	366	331	14	-1	17	8	332	336	6	-4	22	8	93	30	19	-2	1	9	468	466	7	-9	6	9	221	210	7
-2	13	8	525	494	7	0	17	8	160	138	6	-3	22	8	88	40	24	-1	1	9	183	202	11	-8	6	9	257	233	12
-1	13	8	343	341	5	1	17	8	376	387	6	-2	22	8	71	57	15	0	1	9	404	411	6	-7	6	9	315	277	7
0	13	8	308	317	5	2	17	8	180	155	7	-1	22	8	99	59	19	1	1	9	227	222	5	-6	6	9	127	132	7
1	13	8	332	366	5	3	17	8	157	116	11	0	22	8	89	115	43	2	1	9	596	588	9	-5	6	9	163	166	4
2	13	8	262	251	5	4	17	8	91	89	90	1	22	8	94	100	27	3	1	9	329	349	6	-4	6	9	163	158	5
3	13	8	222	221	5	5	17	8	146	155	33	2	22	8	138	128	38	4	1	9	214	181	6	-3	6	9	291	300	5
4	13	8	0	1	1	6	17	8	82	48	24	3	22	8	173	119	17	5	1	9	615	540	9	-2	6	9	381	365	4
5	13	8	215	196	17	7	17	8	193	156	14	4	22	8	194	157	16	6	1	9	293	261	6	-1	6	9	1789	1879	17
6	13	8	214	184	11	8	17	8	181	172	14	6	22	8	18	1	18	-13	2	9	69	49	43	0	6	9	109	149	6
7	13	8	109	62	18	9	17	8	61	33	38	7	22	8	83	47	24	-11	2	9	43	73	43	1	6	9	174	141	4
8	13	8	70	45	30	-10	18	8	161	137	12	-7	23	8	61	58	19	-7	2	9	79	38	10	2	6	9	85	70	18
9	13	8	0	13	1	-8	18	8	0	14	1	-6	23	8	33	42	32	-6	2	9	380	390	6	3	6	9	58	45	15
11	13	8	75	69	29	-7	18	8	220	230	7	-5	23	8	70	59	15	-5	2	9	246	224	4	4	6	9	562	571	9
-11	14	8	78	9	19	-6	18	8	54	48	53	-4	23	8	54	33	22	-4	2	9	624	665	64	5	6	9	195	202	6
-10	14	8	162	184	11	-5	18	8	36	12	35	-3	23	8	96	89	14	-3	2	9	381	360	6	6	6	9	106	95	13
-9	14	8	114	102	14	-4	18	8	231	239	7	-2	23	8	99	76	13	-2	2	9	404	381	6	11	6	9	70	0	16
-8	14	8	103	102	15	-3	18	8	0	53	1	0	23	8	106	112	11	-1	2	9	232	152	5	12	6	9	198	170	13
-7	14	8	383	365	7	-2	18	8	147	139	9	1	23	8	109	63	15	0	2	9	54	25	12	-12	7	9	0	41	1
-6	14	8	31	54	31	-1	18	8	386	411	8	2	23	8	0	44	1	1	2	9	624	599	9	-11	7	9	116	105	21
-5	14	8	47	61	46	0	18	8	119	104	8	3	23	8	6	13	6	2	2	9	70	97	9	-10	7	9	86	25	24
-4	14	8	131	110	8	1	18	8	181	172	6	4	23	8	120	43	15	3	2	9	658	687	14	-9	7	9	421	401	8
-3	14	8	268	287	6	2	18	8	565	574	8	5	23	8	171	148	15	4	2	9	485	516	8	-8	7	9	231	237	11
-2	14	8	281	264	9	3	18	8	219	257	6	7	23	8	126	23	17	5	2	9	233	261	6	-7	7	9	514	546	14
-1	14	8	238	237	5	4	18	8	413	373	8	-7	24	8	95	76	12	6	2	9	69	43	16	-6	7	9	87	71	6
0	14	8	458	447	6	5	18	8	0	5	1	-6	24	8	87	93	21	-13	3	9	55	86	55	-5	7	9	324	343	5
1	14	8	192	174	6	6	18	8	37	73	36	-5	24	8	118	114	10	-12	3	9	98	61	22	-4	7	9	155	169	6
2	14	8	48	26	21	7	18	8	96	41	20	-4	24	8	115	105	16	-11	3	9	236	252	12	-3	7	9	568	580	7
3	14	8	133	148	7	8	18	8	49	23	48	-3	24	8	103	64	11	-10	3	9	132	142	16	-2	7	9	588	643	6
4	14	8	146	161	7	9	18	8	97	56	21	-2	24	8	138	89	9	-8	3	9	340	353	8	-1	7	9	156	39	4
5	14	8	0	73	1	-9	19	8	54	66	40	-1	24	8	43	17	43	-7	3	9	73	56	11	0	7	9	162	201	7
6	14	8	273	261	11	-8	19	8	218	200	11	0	24	8	95	60	50	-6	3	9	478	426	7	1	7	9	682	623	8
7	14	8	70	78	30	-7	19	8	391	367	11	1	24	8	175	130	51	-5	3	9	276	263	5	2	7	9	529	493	6
8	14	8	121	150	16	-6	19	8	100	85	12	2	24	8	50	70	27	-4	3	9	85	154	14	3	7	9	290	246	4
9	14	8	124	104	15	-5	19	8	125	109	27	3	24	8	85	84	26	-											

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-11	9	9	152	136	16	-9	13	9	67	63	21	-7	17	9	257	241	7	-8	22	9	86	26	20	2	0	10	583	543	13
-10	9	9	64	52	38	-8	13	9	198	203	10	-6	17	9	56	63	17	-7	22	9	46	48	25	3	0	10	657	653	14
-9	9	9	46	39	46	-7	13	9	269	280	14	-5	17	9	64	50	64	-6	22	9	122	94	9	4	0	10	338	360	9
-8	9	9	124	90	19	-6	13	9	58	58	13	-4	17	9	246	263	8	-5	22	9	60	23	19	5	0	10	359	364	10
-7	9	9	390	369	6	-5	13	9	197	181	6	-3	17	9	204	216	7	-4	22	9	24	57	24	6	0	10	269	335	9
-6	9	9	228	196	5	-4	13	9	13	9	13	-2	17	9	210	220	13	-3	22	9	0	53	1	-13	1	10	110	16	13
-5	9	9	120	107	6	-3	13	9	626	573	10	-1	17	9	72	105	15	-2	22	9	105	102	11	-12	1	10	14	22	13
-4	9	9	481	481	6	-2	13	9	120	96	10	0	17	9	465	515	7	-1	22	9	157	165	21	-6	1	10	143	164	37
-3	9	9	854	847	9	-1	13	9	132	109	7	1	17	9	573	542	8	0	22	9	57	77	22	-5	1	10	113	121	57
-2	9	9	243	275	5	0	13	9	202	188	9	2	17	9	823	809	10	1	22	9	78	101	16	-4	1	10	294	291	5
-1	9	9	661	668	8	1	13	9	485	478	6	3	17	9	53	51	19	2	22	9	54	47	54	-3	1	10	110	127	6
0	9	9	99	72	7	2	13	9	191	216	6	4	17	9	234	239	10	3	22	9	113	90	12	-2	1	10	533	539	8
1	9	9	863	822	10	3	13	9	94	74	14	5	17	9	672	662	11	4	22	9	0	40	1	-1	1	10	445	417	7
2	9	9	28	56	28	4	13	9	117	121	8	6	17	9	155	125	14	5	22	9	31	46	30	0	1	10	243	193	5
3	9	9	59	44	12	5	13	9	179	166	13	7	17	9	0	23	1	6	22	9	62	69	48	1	1	10	571	538	8
4	9	9	72	45	13	6	13	9	169	145	12	8	17	9	197	235	13	7	22	9	142	76	16	2	1	10	202	242	5
5	9	9	134	133	6	7	13	9	86	111	22	9	17	9	34	53	34	-7	23	9	41	25	40	3	1	10	159	187	8
6	9	9	256	200	7	8	13	9	0	47	1	-9	18	9	65	62	24	-6	23	9	123	85	9	4	1	10	120	108	24
8	9	9	104	64	16	9	13	9	195	188	12	-8	18	9	97	148	16	-5	23	9	66	48	66	5	1	10	727	766	11
9	9	9	96	79	18	10	13	9	181	195	13	-7	18	9	36	48	35	-4	23	9	82	9	29	6	1	10	330	322	7
10	9	9	84	8	24	-11	14	9	89	8	18	-6	18	9	88	72	17	-3	23	9	48	36	47	-13	2	10	124	62	18
11	9	9	0	29	1	-10	14	9	142	92	12	-5	18	9	304	333	8	-2	23	9	76	22	16	-12	2	10	31	12	30
-10	10	9	37	35	36	-9	14	9	134	85	12	-4	18	9	282	278	7	-1	23	9	0	14	1	-11	2	10	83	53	25
-9	10	9	250	235	10	-8	14	9	37	53	37	-3	18	9	0	19	1	0	23	9	0	10	1	-7	2	10	157	158	6
-8	10	9	78	76	44	-7	14	9	272	286	6	-2	18	9	414	392	8	1	23	9	73	88	23	-6	2	10	223	242	6
-7	10	9	27	14	26	-6	14	9	310	277	6	-1	18	9	460	492	8	2	23	9	76	8	19	-5	2	10	480	611	91
-6	10	9	424	428	6	-5	14	9	0	29	1	0	18	9	299	296	6	3	23	9	114	43	12	-4	2	10	203	181	5
-5	10	9	188	165	5	-4	14	9	109	88	9	1	18	9	63	49	15	4	23	9	129	117	11	-3	2	10	66	63	9
-4	10	9	399	403	6	-3	14	9	89	74	11	2	18	9	252	259	7	5	23	9	0	17	1	-2	2	10	45	28	14
-3	10	9	99	122	9	-2	14	9	214	201	7	3	18	9	72	21	30	6	23	9	0	25	1	-1	2	10	55	36	11
-2	10	9	243	216	5	-1	14	9	338	329	5	4	18	9	91	106	13	7	23	9	146	132	18	0	2	10	88	123	23
-1	10	9	1666	1693	19	0	14	9	353	371	6	5	18	9	39	92	38	-6	24	9	55	10	36	1	2	10	97	108	8
0	10	9	835	838	10	1	14	9	252	243	5	6	18	9	177	180	14	-5	24	9	37	3	36	2	2	10	60	71	13
1	10	9	208	203	5	2	14	9	243	237	8	7	18	9	31	22	30	-4	24	9	151	132	9	3	2	10	165	173	6
2	10	9	213	182	5	3	14	9	582	555	8	8	18	9	185	180	13	-3	24	9	146	164	19	4	2	10	203	189	12
3	10	9	146	131	6	4	14	9	197	177	6	9	18	9	94	76	23	-2	24	9	141	128	36	5	2	10	130	161	7
4	10	9	124	158	6	5	14	9	197	192	8	-9	19	9	116	86	15	-1	24	9	119	127	23	6	2	10	75	78	17
5	10	9	146	149	7	6	14	9	87	107	21	-8	19	9	36	28	35	0	24	9	62	29	34	-13	3	10	132	7	18
6	10	9	252	251	11	7	14	9	188	196	13	-7	19	9	56	35	32	1	24	9	107	43	11	-12	3	10	78	13	27
7	10	9	103	113	17	8	14	9	167	175	13	-6	19	9	179	185	13	2	24	9	133	129	11	-11	3	10	81	74	26
8	10	9	180	126	12	9	14	9	152	128	16	-5	19	9	276	261	7	3	24	9	94	69	15	-10	3	10	0	30	1
9	10	9	88	37	24	10	14	9	145	66	16	-4	19	9	222	236	11	4	24	9	173	168	10	-7	3	10	215	200	7
10	10	9	86	68	23	-11	15	9	78	133	19	-3	19	9	292	285	17	5	24	9	37	57	36	-6	3	10	67	75	8
-10	11	9	51	84	34	-10	15	9	125	137	12	-2	19	9	28	5	28	6	24	9	34	47	33	-5	3	10	140	192	32
-9	11	9	251	236	9	-9	15	9	36	15	35	-1	19	9	274	265	7	-6	25	9	82	61	14	-4	3	10	91	74	8
-8	11	9	340	347	7	-8	15	9	98	90	14	0	19	9	156	192	8	-5	25	9	0	26	1	-3	3	10	156	139	5
-7	11	9	91	85	8	-7	15	9	278	309	6	1	19	9	57	29	23	-4	25	9	0	74	1	-2	3	10	604	533	7
-6	11	9	449	484	7	-6	15	9	272	259	9	2	19	9	226	214	9	-3	25	9	128	116	24	-1	3	10	35	51	22
-5	11	9	299	323	6	-5	15	9	218	193	7	3	19	9	220	219	9	-2	25	9	66	34	24	0	3	10	87	89	9
-4	11	9	714	726	10	-4	15	9	26	55	25	4	19	9	89	99	16	-1	25	9	0	4	1	1	3	10	1010	997	14
-3	11	9	813	793	12	-3	15	9	75	88	12	5	19	9	188	180	9	0	25	9	108	25	16	2	3	10	192	107	6
-2	11	9	147	159	5	-2	15	9	355	325	7	6	19	9	0	75	1	1	25	9	103	4	19	3	3	10	178	185	6
-1	11	9	151	163	6	-1	15	9	397	393	6	7	19	9	144	111	16	2	25	9	0	19	1	4	3	10	454	464	7
0	11	9	355	384	5	0	15	9	366	350	7	8	19	9	94	71	21	3	25	9	80	17	25	5	3	10	551	568	9
1	11	9	368	338	6	1	15	9	0	28	1	-9	20	9	75	43	23	4	25	9	81	20	16	6	3	10	117	90	11
2	11	9	437	418	6	2	15	9	572	569	7	-8	20	9	59	44	31	5	25	9	27	50	26	-13	4	10	120	38	18
3	11	9	102	71	8	3	15	9	226	232	6	-7	20	9	116	153	9	6	25	9	113	51	19	-12	4	10	161	134	16
4	11	9	549	557	7	4	15	9	208	186	8	-6	20	9	119	96	16	-5	26	9	55	25	54	-11	4	10	0	52	1
5	11	9	385	371	11	5	1																						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
0	5	10	27	34	27	2	9	10	169	162	5	2	13	10	537	541	7	5	17	10	159	115	19	-5	23	10	100	62	11
1	5	10	769	792	11	3	9	10	0	4	1	3	13	10	42	48	22	6	17	10	0	92	1	-4	23	10	95	151	20
2	5	10	599	558	9	4	9	10	89	70	9	4	13	10	37	42	37	7	17	10	118	109	16	-3	23	10	152	162	9
3	5	10	257	254	6	5	9	10	211	202	5	5	13	10	541	554	9	8	17	10	0	4	1	-2	23	10	67	19	28
4	5	10	442	443	7	6	9	10	324	335	6	6	13	10	66	16	26	-10	18	10	86	3	19	-1	23	10	72	84	16
5	5	10	945	945	13	7	9	10	132	141	9	7	13	10	250	266	12	-8	18	10	100	85	13	0	23	10	0	3	1
6	5	10	102	102	14	8	9	10	85	67	22	8	13	10	200	182	12	-7	18	10	67	16	23	1	23	10	154	136	9
12	5	10	147	139	23	9	9	10	231	194	11	9	13	10	88	151	21	-6	18	10	73	106	12	2	23	10	163	149	20
-13	6	10	213	133	13	10	9	10	82	76	25	10	13	10	187	191	13	-5	18	10	100	97	10	3	23	10	272	251	17
-11	6	10	0	39	1	11	9	10	86	58	24	-11	14	10	66	81	22	-3	18	10	159	181	8	4	23	10	67	57	20
-10	6	10	152	156	15	-11	10	10	119	123	19	-10	14	10	79	67	17	-2	18	10	170	205	8	6	23	10	102	72	24
-9	6	10	248	246	7	-10	10	10	108	98	44	-9	14	10	348	380	10	-1	18	10	248	290	14	7	23	10	115	10	19
-8	6	10	212	250	6	-9	10	10	0	43	1	-8	14	10	76	46	26	0	18	10	63	76	15	-7	24	10	0	33	1
-7	6	10	287	275	6	-8	10	10	40	23	39	-7	14	10	293	273	6	1	18	10	128	95	11	-6	24	10	0	24	1
-6	6	10	392	406	7	-7	10	10	271	283	6	-6	14	10	205	228	6	2	18	10	590	523	8	-5	24	10	160	107	8
-5	6	10	453	420	6	-6	10	10	680	664	8	-5	14	10	194	181	10	3	18	10	93	115	16	-4	24	10	94	81	13
-4	6	10	273	237	4	-5	10	10	277	289	5	-4	14	10	37	50	36	4	18	10	99	123	29	-3	24	10	91	81	19
-3	6	10	123	144	5	-4	10	10	234	241	5	-3	14	10	137	87	8	5	18	10	150	135	16	-2	24	10	126	107	21
-2	6	10	643	556	6	-3	10	10	812	799	12	-2	14	10	735	748	11	7	18	10	245	256	12	-1	24	10	0	28	1
-1	6	10	91	126	8	-2	10	10	845	861	10	-1	14	10	0	39	1	8	18	10	180	169	15	0	24	10	47	64	47
0	6	10	108	204	6	-1	10	10	0	1	1	0	14	10	487	455	8	9	18	10	0	5	1	1	24	10	0	11	1
1	6	10	54	13	46	0	10	10	882	891	10	1	14	10	77	32	76	-9	19	10	114	112	15	2	24	10	173	160	14
2	6	10	346	340	8	1	10	10	87	89	8	2	14	10	314	309	7	-8	19	10	72	66	17	3	24	10	104	68	20
3	6	10	289	280	6	2	10	10	488	448	6	3	14	10	764	772	9	-7	19	10	82	32	32	4	24	10	148	58	34
4	6	10	119	129	8	3	10	10	87	49	9	4	14	10	0	10	1	-6	19	10	153	129	7	5	24	10	96	31	23
5	6	10	711	707	11	4	10	10	496	492	7	5	14	10	0	7	1	-5	19	10	172	180	8	6	24	10	0	90	1
6	6	10	163	207	11	5	10	10	144	128	6	6	14	10	165	159	13	-4	19	10	209	200	7	-6	25	10	89	15	19
11	6	10	62	43	19	6	10	10	21	98	21	7	14	10	613	581	15	-3	19	10	84	42	15	-5	25	10	66	52	65
12	6	10	57	3	57	7	10	10	63	66	32	8	14	10	167	214	14	-2	19	10	73	78	72	-4	25	10	105	68	48
-12	7	10	126	50	16	8	10	10	209	250	12	9	14	10	0	12	1	-1	19	10	243	250	7	-3	25	10	137	127	32
-11	7	10	313	309	12	9	10	10	0	61	1	10	14	10	133	155	17	0	19	10	50	89	24	-2	25	10	108	101	11
-10	7	10	155	179	14	10	10	10	0	27	1	-10	15	10	113	107	13	1	19	10	231	251	6	-1	25	10	61	102	61
-9	7	10	262	262	11	11	10	10	18	24	18	-9	15	10	38	87	37	2	19	10	204	180	7	0	25	10	145	104	30
-8	7	10	375	395	9	-10	11	10	250	244	9	-8	15	10	20	28	20	3	19	10	128	133	8	1	25	10	83	2	82
-7	7	10	471	458	13	-9	11	10	29	74	29	-7	15	10	234	231	8	4	19	10	208	193	9	2	25	10	76	113	26
-6	7	10	163	190	5	-8	11	10	70	100	26	-6	15	10	27	52	26	5	19	10	269	285	8	3	25	10	70	19	27
-5	7	10	353	342	5	-7	11	10	129	126	9	-5	15	10	274	265	7	6	19	10	0	54	1	4	25	10	27	68	26
-4	7	10	461	464	6	-6	11	10	331	362	5	-4	15	10	209	197	7	7	19	10	0	13	1	5	25	10	176	71	15
-3	7	10	535	543	7	-5	11	10	180	158	5	-3	15	10	231	217	8	-8	20	10	124	126	9	6	25	10	59	34	59
-2	7	10	1281	1253	12	-4	11	10	360	303	7	-2	15	10	622	640	10	-7	20	10	79	46	17	-5	26	10	76	30	25
-1	7	10	112	172	5	-3	11	10	803	800	12	-1	15	10	1088	1063	13	-6	20	10	140	107	16	-4	26	10	90	16	20
0	7	10	178	190	5	-2	11	10	270	292	5	0	15	10	147	144	6	-5	20	10	64	26	15	-3	26	10	60	81	60
1	7	10	1008	915	12	-1	11	10	762	779	9	1	15	10	356	344	6	-4	20	10	108	71	10	-2	26	10	88	53	12
2	7	10	579	513	6	0	11	10	85	89	9	2	15	10	579	522	8	-3	20	10	38	2	38	-1	26	10	150	137	25
3	7	10	327	333	6	1	11	10	139	143	8	3	15	10	128	103	47	-2	20	10	183	159	12	0	26	10	80	20	16
4	7	10	402	387	7	2	11	10	467	474	6	4	15	10	168	170	8	-1	20	10	123	138	9	1	26	10	78	57	26
5	7	10	402	379	7	3	11	10	230	218	8	5	15	10	416	433	9	0	20	10	0	38	1	3	26	10	58	19	48
6	7	10	298	269	10	4	11	10	89	58	9	6	15	10	281	248	12	1	20	10	164	144	13	4	26	10	77	93	33
9	7	10	23	84	22	5	11	10	363	338	7	7	15	10	100	104	19	2	20	10	264	286	6	5	26	10	0	23	1
10	7	10	75	69	22	6	11	10	77	23	22	8	15	10	93	126	22	3	20	10	165	151	15	-4	27	10	0	1	1
11	7	10	59	5	45	7	11	10	137	107	15	9	15	10	202	192	13	4	20	10	70	43	19	-3	27	10	61	27	32
-12	8	10	172	151	15	8	11	10	178	173	13	10	15	10	0	50	1	5	20	10	194	182	14	-2	27	10	53	37	52
-11	8	10	78	89	26	9	11	10	68	72	27	-11	16	10	94	52	18	6	20	10	0	76	1	-1	27	10	56	71	26
-10	8	10	58	17	57	11	11	10	130	78	19	-10	16	10	18	22	17	7	20	10	142	124	16	0	27	10	0	2	1
-9	8	10	136	139	24	-10	12	10	203	225	9	-9	16	10	143	151	12	8	20	10	76	55	31	1	27	10	86	45	20
-8	8	10	231	259	7	-9	12	10	216	203	9	-8	16	10	91	55	35	-8	21	10	37	50	37	2	27	10	78	88	26
-7	8	10	242	249	14	-8	12	10	112	79	12	-7	16	10	76	52	17	-7	21	10	86	111	12</						

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-3	2	11	30	62	30	-8	7	11	243	235	6	-10	11	11	80	3	17	-7	15	11	0	7	1	0	19	11	201	221	19
-2	2	11	137	122	6	-7	7	11	53	32	53	-9	11	11	113	106	10	-6	15	11	428	395	8	1	19	11	0	4	1
-1	2	11	197	145	5	-6	7	11	702	709	8	-8	11	11	410	389	8	-5	15	11	224	236	9	2	19	11	75	53	24
0	2	11	758	815	11	-5	7	11	118	97	6	-7	11	11	271	265	6	-4	15	11	91	115	11	3	19	11	371	309	6
1	2	11	30	38	30	-4	7	11	36	62	35	-6	11	11	91	69	8	-3	15	11	587	549	9	4	19	11	101	82	36
2	2	11	116	109	8	-3	7	11	346	226	4	-5	11	11	138	151	13	-2	15	11	161	125	8	5	19	11	36	3	36
3	2	11	717	681	10	-2	7	11	506	583	5	-4	11	11	326	299	6	-1	15	11	562	548	9	6	19	11	88	118	25
4	2	11	188	149	8	-1	7	11	597	569	6	-3	11	11	29	56	28	0	15	11	60	82	16	7	19	11	61	98	48
5	2	11	115	123	8	0	7	11	529	522	7	-2	11	11	169	172	5	1	15	11	131	164	12	-9	20	11	0	101	1
6	2	11	424	446	11	1	7	11	1028	1065	10	-1	11	11	178	155	5	2	15	11	110	96	9	-8	20	11	97	108	19
-13	3	11	0	28	1	2	7	11	971	904	11	0	11	11	115	122	7	3	15	11	32	61	32	-7	20	11	79	3	13
-12	3	11	56	51	55	3	7	11	392	421	7	1	11	11	383	395	6	4	15	11	271	262	6	-6	20	11	0	19	1
-11	3	11	141	147	16	4	7	11	229	202	12	2	11	11	37	38	31	5	15	11	560	550	14	-5	20	11	116	75	25
-10	3	11	167	129	15	5	7	11	227	243	6	3	11	11	156	168	6	6	15	11	113	126	17	-4	20	11	101	72	16
-7	3	11	71	57	11	6	7	11	447	417	11	4	11	11	364	394	6	7	15	11	123	63	19	-3	20	11	64	10	17
-6	3	11	567	563	20	10	7	11	32	19	31	5	11	11	211	185	8	8	15	11	156	140	16	-2	20	11	56	69	20
-5	3	11	306	361	47	11	7	11	186	197	9	6	11	11	83	39	22	9	15	11	48	55	48	-1	20	11	196	156	8
-4	3	11	81	57	12	-12	8	11	144	162	17	7	11	11	0	61	1	10	15	11	43	14	42	0	20	11	65	52	17
-3	3	11	45	59	20	-11	8	11	0	9	1	8	11	11	101	44	21	-11	16	11	37	76	37	1	20	11	110	93	9
-2	3	11	627	669	6	-10	8	11	294	305	12	9	11	11	76	16	26	-10	16	11	123	115	13	2	20	11	106	64	9
-1	3	11	241	283	5	-9	8	11	307	310	7	10	11	11	214	213	12	-9	16	11	99	53	15	3	20	11	58	15	40
0	3	11	773	769	11	-8	8	11	172	160	12	11	11	11	0	11	1	-8	16	11	209	197	12	4	20	11	0	30	1
1	3	11	548	458	8	-7	8	11	420	422	8	-10	12	11	94	29	16	-7	16	11	185	175	9	5	20	11	71	59	26
2	3	11	114	112	13	-6	8	11	86	104	12	-9	12	11	89	84	15	-6	16	11	175	175	14	7	20	11	223	229	14
3	3	11	136	164	8	-5	8	11	483	477	6	-8	12	11	138	140	11	-5	16	11	376	367	7	8	20	11	100	114	24
4	3	11	447	417	7	-4	8	11	86	51	7	-7	12	11	217	209	6	-4	16	11	495	484	8	-8	21	11	51	8	50
5	3	11	178	167	7	-3	8	11	582	593	7	-6	12	11	460	486	8	-3	16	11	58	73	58	-7	21	11	198	151	7
6	3	11	23	51	22	-2	8	11	465	418	5	-5	12	11	159	136	7	-2	16	11	68	123	37	-6	21	11	71	52	20
-13	4	11	9	11	8	-1	8	11	287	287	5	-4	12	11	707	693	10	-1	16	11	117	131	10	-5	21	11	88	53	12
-12	4	11	105	75	20	0	8	11	1018	1055	12	-3	12	11	179	171	6	0	16	11	70	62	12	-4	21	11	0	40	1
-11	4	11	143	109	15	1	8	11	74	101	10	-2	12	11	173	169	8	1	16	11	100	92	16	-2	21	11	39	19	39
-10	4	11	115	76	19	2	8	11	12	48	11	-1	12	11	294	274	7	2	16	11	291	280	6	-1	21	11	236	278	8
-9	4	11	553	547	14	3	8	11	168	174	6	0	12	11	492	482	7	3	16	11	420	433	7	0	21	11	0	35	1
-7	4	11	190	204	7	4	8	11	512	509	6	1	12	11	149	166	6	4	16	11	473	442	9	1	21	11	217	200	8
-6	4	11	254	251	5	5	8	11	387	381	5	2	12	11	82	55	13	5	16	11	215	213	8	2	21	11	42	20	33
-5	4	11	10	42	9	6	8	11	212	183	10	3	12	11	169	185	6	6	16	11	68	76	33	3	21	11	64	79	21
-4	4	11	222	218	5	7	8	11	269	279	7	4	12	11	159	158	6	7	16	11	239	220	13	4	21	11	174	155	28
-3	4	11	142	153	11	8	8	11	65	43	22	5	12	11	53	79	24	8	16	11	0	78	1	5	21	11	0	15	1
-2	4	11	220	240	4	9	8	11	0	41	1	6	12	11	129	146	16	9	16	11	79	13	30	6	21	11	48	23	47
-1	4	11	92	102	14	10	8	11	0	1	1	7	12	11	269	264	12	-10	17	11	88	57	18	7	21	11	53	8	53
0	4	11	45	96	17	11	8	11	42	109	42	8	12	11	230	224	13	-9	17	11	197	173	11	-8	22	11	65	41	24
1	4	11	347	364	5	-12	9	11	63	27	53	9	12	11	55	1	54	-8	17	11	59	17	59	-6	22	11	92	94	39
2	4	11	141	158	7	-11	9	11	282	253	13	10	12	11	159	145	14	-7	17	11	189	164	7	-5	22	11	86	36	12
3	4	11	545	559	8	-10	9	11	17	17	17	-10	13	11	126	105	12	-6	17	11	63	88	18	-4	22	11	70	50	14
4	4	11	370	389	7	-9	9	11	112	121	14	-9	13	11	79	37	18	-5	17	11	49	22	30	-3	22	11	95	44	34
5	4	11	102	109	11	-8	9	11	226	241	8	-8	13	11	68	17	20	-4	17	11	60	37	28	-2	22	11	86	39	38
6	4	11	226	224	9	-7	9	11	91	53	7	-7	13	11	191	185	6	-3	17	11	89	85	21	-1	22	11	153	170	11
-11	5	11	152	132	15	-6	9	11	140	121	13	-6	13	11	561	567	9	-2	17	11	334	328	7	0	22	11	103	88	9
-10	5	11	102	60	22	-5	9	11	296	290	5	-5	13	11	97	90	13	-1	17	11	58	92	19	1	22	11	50	61	49
-9	5	11	117	120	18	-4	9	11	104	79	7	-4	13	11	111	51	9	0	17	11	310	348	6	2	22	11	190	197	7
-8	5	11	42	52	23	-3	9	11	999	968	11	-3	13	11	835	840	12	1	17	11	280	270	6	3	22	11	166	184	13
-7	5	11	471	497	10	-2	9	11	232	234	4	-2	13	11	777	743	11	2	17	11	311	336	6	4	22	11	73	81	24
-5	5	11	134	122	5	-1	9	11	521	546	7	-1	13	11	192	190	7	3	17	11	68	69	23	5	22	11	67	17	37
-4	5	11	499	517	7	0	9	11	110	126	8	0	13	11	260	292	5	4	17	11	341	319	8	6	22	11	154	121	15
-3	5	11	465	458	11	1	9	11	697	699	8	1	13	11	423	441	6	5	17	11	277	258	22	7	22	11	0	25	1
-2	5	11	1650	1693	18	2	9	11	779	802	9	2	13	11	438	454	6	6	17	11	192	155	14	-8	23	11	106	10	15
-1	5	11	941	918	9	3	9	11	249	258	5	3	13	11	152	171	9	7	17	11	0	18	1	-7	23	11			

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

	h	k	l	10Fo	10Fc	10s		h	k	l	10Fo	10Fc	10s		h	k	l	10Fo	10Fc	10s		h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0 25 11	49	3	49	-11	4	12	144	111	15	1	8	12	493	449	6	1	12	12	113	122	7	5	16	12	177	182	9
1 25 11	58	117	57	-10	4	12	160	136	16	2	8	12	370	331	5	2	12	12	79	102	13	6	16	12	64	60	36
2 25 11	0	39	1	-7	4	12	283	285	8	3	8	12	798	759	8	3	12	12	512	471	7	7	16	12	136	142	17
3 25 11	76	74	27	-6	4	12	107	131	21	4	8	12	64	65	14	4	12	12	68	67	20	8	16	12	179	145	14
4 25 11	92	44	38	-5	4	12	698	717	13	5	8	12	43	4	42	5	12	12	126	119	10	9	16	12	0	18	1
5 25 11	0	78	1	-4	4	12	145	138	9	6	8	12	357	399	11	6	12	12	150	222	13	-9	17	12	0	32	1
-4 26 11	148	69	15	-3	4	12	375	365	6	8	8	12	222	236	8	7	12	12	430	413	12	-8	17	12	39	10	38
-3 26 11	35	25	35	-2	4	12	843	759	10	9	8	12	136	133	10	8	12	12	0	9	1	-7	17	12	115	96	14
-2 26 11	51	63	50	-1	4	12	852	879	12	10	8	12	100	45	18	9	12	12	32	71	31	-6	17	12	15	2	14
-1 26 11	155	141	9	0	4	12	354	317	6	-12	9	12	76	99	31	10	12	12	0	11	1	-5	17	12	15	21	14
0 26 11	57	24	45	1	4	12	0	1	1	-11	9	12	0	11	1	-10	13	12	79	4	17	-4	17	12	175	191	16
1 26 11	110	15	17	2	4	12	202	155	6	-10	9	12	286	267	12	-9	13	12	36	17	36	-3	17	12	216	208	7
2 26 11	0	17	1	3	4	12	101	95	9	-9	9	12	84	79	20	-8	13	12	211	225	10	-2	17	12	50	20	22
3 26 11	173	86	14	4	4	12	872	875	13	-8	9	12	89	98	88	-7	13	12	302	272	6	-1	17	12	153	205	25
4 26 11	98	24	22	5	4	12	51	56	36	-7	9	12	221	242	11	-6	13	12	355	385	7	0	17	12	41	5	41
5 26 11	181	107	15	6	4	12	194	135	9	-6	9	12	654	640	8	-5	13	12	71	26	25	1	17	12	76	133	12
-3 27 11	104	28	19	-12	5	12	70	5	31	-5	9	12	174	189	6	-4	13	12	106	112	14	2	17	12	162	161	16
-2 27 11	53	6	42	-11	5	12	142	104	15	-4	9	12	332	332	5	-3	13	12	189	182	7	3	17	12	104	118	10
-1 27 11	76	33	28	-10	5	12	141	110	16	-3	9	12	711	717	8	-2	13	12	274	237	7	4	17	12	0	1	1
0 27 11	102	82	13	-9	5	12	223	191	13	-2	9	12	1106	1094	11	-1	13	12	199	159	6	5	17	12	153	177	10
1 27 11	0	44	1	-8	5	12	30	15	29	-1	9	12	708	774	8	0	13	12	175	161	6	6	17	12	389	412	12
3 27 11	0	7	1	-7	5	12	269	298	8	0	9	12	0	29	1	1	13	12	336	362	6	7	17	12	78	14	28
-1 28 11	140	35	17	-6	5	12	29	21	28	1	9	12	29	25	28	2	13	12	79	82	14	8	17	12	187	153	14
0 28 11	50	7	49	-5	5	12	107	96	11	2	9	12	20	7	20	3	13	12	5	6	5	9	17	12	213	210	14
1 28 11	117	55	17	-4	5	12	447	493	7	3	9	12	451	439	6	4	13	12	204	201	6	-10	18	12	50	32	49
2 28 11	125	57	17	-3	5	12	697	699	10	4	9	12	472	447	6	5	13	12	79	68	19	-9	18	12	143	106	12
-13 0 12	0	61	1	-2	5	12	280	196	5	5	9	12	30	9	30	6	13	12	130	129	16	-8	18	12	25	57	24
-6 0 12	78	19	8	-1	5	12	177	249	4	6	9	12	745	750	9	7	13	12	69	58	36	-7	18	12	200	216	11
-5 0 12	30	46	29	0	5	12	520	533	9	7	9	12	23	70	23	8	13	12	65	11	33	-6	18	12	71	4	28
-4 0 12	626	635	13	1	5	12	565	581	7	8	9	12	219	212	8	9	13	12	74	71	29	-5	18	12	76	72	12
-3 0 12	183	119	7	2	5	12	255	248	8	9	9	12	213	223	8	10	13	12	100	98	22	-4	18	12	70	55	22
-2 0 12	680	563	14	3	5	12	55	75	15	10	9	12	78	82	24	-11	14	12	0	15	1	-3	18	12	101	64	17
-1 0 12	788	836	16	4	5	12	195	186	11	11	9	12	0	41	1	-10	14	12	75	32	18	-2	18	12	61	31	17
0 0 12	682	609	14	5	5	12	156	175	17	-11	10	12	98	97	23	-9	14	12	188	194	10	-1	18	12	65	55	22
1 0 12	54	91	22	6	5	12	53	14	32	-10	10	12	59	14	52	-7	14	12	69	96	29	0	18	12	118	70	11
2 0 12	336	390	9	-12	6	12	40	52	39	-9	10	12	51	10	20	-6	14	12	640	627	10	1	18	12	116	120	9
3 0 12	450	438	11	-11	6	12	78	15	27	-8	10	12	378	399	10	-5	14	12	152	148	7	2	18	12	412	386	7
4 0 12	563	579	13	-10	6	12	229	205	13	-7	10	12	82	79	8	-4	14	12	437	426	8	3	18	12	41	43	41
5 0 12	129	117	12	-9	6	12	61	21	44	-6	10	12	369	376	6	-3	14	12	211	216	7	4	18	12	0	72	1
-13 1 12	0	44	1	-8	6	12	303	321	7	-5	10	12	446	446	6	-2	14	12	600	568	9	5	18	12	178	161	9
-12 1 12	0	22	1	-7	6	12	155	155	8	-4	10	12	110	136	10	-1	14	12	428	395	8	6	18	12	167	81	15
-7 1 12	98	382	-7	-6	6	12	137	134	8	-3	10	12	668	648	8	0	14	12	521	539	7	7	18	12	87	138	21
-6 1 12	11	25	11	-5	6	12	42	88	41	-2	10	12	951	975	11	1	14	12	353	363	6	8	18	12	159	143	14
-5 1 12	64	14	16	-4	6	12	170	158	5	-1	10	12	65	57	18	2	14	12	449	420	7	-9	19	12	69	19	25
-4 1 12	265	193	6	-3	6	12	279	267	5	0	10	12	144	94	12	3	14	12	357	356	6	-8	19	12	83	76	53
-3 1 12	781	799	11	-2	6	12	942	947	9	1	10	12	156	169	6	4	14	12	249	267	6	-7	19	12	79	40	17
-2 1 12	38	42	19	-1	6	12	430	419	5	2	10	12	169	166	6	5	14	12	164	195	9	-6	19	12	186	180	20
-1 1 12	65	64	10	0	6	12	889	894	8	3	10	12	278	244	5	6	14	12	47	58	46	-5	19	12	68	72	23
0 1 12	89	110	8	1	6	12	163	139	7	4	10	12	619	599	8	7	14	12	184	174	13	-4	19	12	26	45	26
1 1 12	375	385	7	2	6	12	0	51	1	5	10	12	260	237	8	8	14	12	103	116	21	-3	19	12	240	267	7
2 1 12	131	152	7	3	6	12	884	800	13	6	10	12	147	97	9	9	14	12	155	119</							

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
2	21	12	158	171	8	6	1	13	221	214	7	-5	7	13	139	131	5	-3	11	13	6	17	6	1	15	13	347	325	8
3	21	12	144	154	11	-12	2	13	184	146	14	-4	7	13	541	528	7	-2	11	13	581	574	9	2	15	13	286	293	6
4	21	12	142	119	26	-7	2	13	283	257	7	-3	7	13	31	49	30	-1	11	13	564	557	7	3	15	13	95	66	19
7	21	12	48	9	48	-6	2	13	98	127	65	-2	7	13	587	577	6	0	11	13	273	253	5	4	15	13	45	41	45
-8	22	12	108	94	14	-4	2	13	37	54	18	-1	7	13	743	773	7	1	11	13	641	602	8	5	15	13	195	219	11
-7	22	12	119	77	9	-3	2	13	426	452	7	0	7	13	61	94	9	2	11	13	211	206	8	6	15	13	376	380	12
-6	22	12	77	61	23	-2	2	13	866	797	12	1	7	13	338	351	5	3	11	13	195	186	6	7	15	13	76	90	32
-5	22	12	141	142	8	-1	2	13	1197	1136	17	2	7	13	138	114	8	4	11	13	0	33	1	8	15	13	158	135	14
-4	22	12	169	140	15	0	2	13	73	47	10	3	7	13	297	311	7	5	11	13	423	413	8	9	15	13	104	87	21
-3	22	12	137	172	9	1	2	13	43	100	43	4	7	13	134	133	24	6	11	13	166	184	13	-10	16	13	60	14	26
-2	22	12	188	225	8	2	2	13	164	169	7	5	7	13	398	379	7	7	11	13	89	53	24	-9	16	13	85	109	16
-1	22	12	197	195	8	3	2	13	38	26	38	6	7	13	353	358	11	8	11	13	111	66	19	-8	16	13	220	222	10
0	22	12	84	98	14	4	2	13	317	292	7	10	7	13	59	60	23	9	11	13	105	157	20	-7	16	13	140	168	7
1	22	12	146	152	10	5	2	13	100	73	9	11	7	13	44	87	43	10	11	13	131	81	18	-6	16	13	198	177	7
2	22	12	237	238	8	6	2	13	168	226	10	-12	8	13	95	30	22	-10	12	13	205	234	7	-5	16	13	293	283	7
3	22	12	65	69	30	-12	3	13	97	24	20	-11	8	13	156	120	15	-9	12	13	242	235	7	-4	16	13	114	162	11
4	22	12	105	101	13	-11	3	13	100	61	20	-10	8	13	33	13	32	-8	12	13	38	44	38	-3	16	13	206	189	7
5	22	12	125	85	18	-7	3	13	165	190	7	-9	8	13	317	332	7	-7	12	13	36	40	36	-2	16	13	268	283	7
6	22	12	79	74	33	-6	3	13	138	121	73	-8	8	13	150	134	7	-6	12	13	138	114	6	-1	16	13	37	38	37
7	22	12	97	2	25	-5	3	13	192	193	5	-7	8	13	111	111	9	-5	12	13	556	554	12	0	16	13	120	101	19
-7	23	12	117	55	13	-4	3	13	251	295	5	-6	8	13	49	69	12	-4	12	13	216	216	6	1	16	13	276	291	6
-6	23	12	139	78	14	-3	3	13	291	318	6	-5	8	13	436	447	6	-3	12	13	178	145	7	2	16	13	574	605	8
-5	23	12	74	16	14	-2	3	13	1202	1161	17	-4	8	13	0	30	1	-2	12	13	76	41	12	3	16	13	263	249	7
-4	23	12	82	21	68	-1	3	13	907	892	13	-3	8	13	266	260	5	-1	12	13	224	224	7	4	16	13	43	21	43
-3	23	12	152	154	9	0	3	13	737	705	11	-2	8	13	244	278	4	0	12	13	342	327	6	5	16	13	122	130	11
-2	23	12	134	126	17	1	3	13	145	128	7	-1	8	13	189	174	4	1	12	13	502	463	7	6	16	13	159	163	15
-1	23	12	153	125	10	2	3	13	234	283	4	0	8	13	438	478	6	2	12	13	154	146	7	7	16	13	97	102	23
0	23	12	48	60	47	3	3	13	128	149	7	1	8	13	56	112	26	3	12	13	212	187	6	8	16	13	0	13	1
1	23	12	244	257	8	4	3	13	387	367	7	2	8	13	306	336	5	4	12	13	71	43	23	9	16	13	132	133	17
2	23	12	0	19	1	5	3	13	287	292	7	3	8	13	757	758	9	5	12	13	243	286	11	-10	17	13	37	11	37
3	23	12	183	195	15	6	3	13	289	278	10	4	8	13	276	252	7	6	12	13	138	149	16	-9	17	13	69	91	24
4	23	12	0	46	1	-12	4	13	0	0	1	5	8	13	120	105	19	7	12	13	103	55	20	-8	17	13	76	40	20
6	23	12	149	59	18	-7	4	13	195	216	7	6	8	13	271	215	10	8	12	13	121	169	18	-7	17	13	80	94	15
-6	24	12	165	121	26	-6	4	13	236	246	88	8	8	13	0	3	1	9	12	13	101	114	22	-6	17	13	81	84	29
-5	24	12	0	29	1	-5	4	13	121	113	17	9	8	13	0	49	1	10	12	13	41	7	41	-5	17	13	77	12	20
-4	24	12	82	18	21	-4	4	13	351	342	6	10	8	13	139	131	10	-10	13	13	108	97	13	-4	17	13	305	303	8
-3	24	12	134	105	35	-3	4	13	85	70	8	11	8	13	0	70	1	-9	13	13	174	169	10	-3	17	13	369	344	8
-2	24	12	94	66	46	-2	4	13	98	91	5	-11	9	13	171	187	14	-8	13	13	81	67	15	-2	17	13	187	136	7
-1	24	12	77	54	25	-1	4	13	15	51	15	-10	9	13	112	91	20	-7	13	13	79	66	36	-1	17	13	256	221	8
0	24	12	77	53	15	0	4	13	219	209	6	-9	9	13	128	99	28	-6	13	13	0	26	1	0	17	13	251	268	9
1	24	12	74	40	73	1	4	13	636	643	8	-8	9	13	222	220	9	-5	13	13	349	376	7	1	17	13	39	14	39
2	24	12	53	84	53	2	4	13	50	39	19	-7	9	13	124	155	8	-4	13	13	241	245	6	2	17	13	621	622	8
3	24	12	68	32	67	3	4	13	200	179	10	-6	9	13	436	433	6	-3	13	13	452	497	8	3	17	13	113	88	13
4	24	12	113	116	58	4	4	13	0	11	1	-5	9	13	261	272	5	-2	13	13	608	576	9	4	17	13	140	136	10
5	24	12	97	51	24	5	4	13	94	8	13	-4	9	13	92	105	9	-1	13	13	293	294	7	5	17	13	54	43	53
6	24	12	0	16	1	6	4	13	176	209	10	-3	9	13	131	149	6	0	13	13	291	288	6	6	17	13	138	123	16
-5	25	12	51	52	50	-10	5	13	278	285	13	-2	9	13	357	364	5	1	13	13	237	231	6	7	17	13	153	155	17
-4	25	12	86	99	14	-9	5	13	248	231	12	-1	9	13	391	383	6	2	13	13	321	336	6	8	17	13	44	53	43
-3	25	12	77	46	14	-8	5	13	155	125	6	0	9	13	371	370	6	3	13	13	100	25	17	-9	18	13	0	1	1
-2	25	12	68	12	31	-7	5	13	325	375	8	1	9	13	95	106	10	4	13	13	65	22	13	-8	18	13	121	146	11
-1	25	12	77	49	25	-6	5	13	173	203	5	2	9	13	134	136	19	5	13	13	327	340	9	-7	18	13	0	22	1
0	25	12	48	19	48	-5	5	13	275	278	7	3	9	13	207	182	5	6	13	13	146	133	16	-6	18	13	300	310	7
1	25	12	115	18	19	-4	5	13	38	34	38	4	9	13	92	74	8	7	13	13	174	147	14	-5	18	13	236	239	13
2	25	12	113	84	17	-3	5	13	20	29	20	5	9	13	49	30	15	8	13	13	148	176	16	-4	18	13	48	89	22
3	25	12	113	131	18	-2	5	13	433	375	6	6	9	13	580	545	8	9	13	13	0	17	1	-3	18	13	148	142	21
4	25	12	106	5	45	-1	5	13	322	353	4	7	9	13	404	380	9	10	13	13	0	84	1	-2	18	13	173	136	9
-4	26	12	111	92	11	0	5	13	165	117	5	8	9	13	73	90	16	-10	14	13	69	100	20	-1	18	13	221	227	8
-3	26	12	0	31																									

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-2	20	13	60	43	19	-1	28	13	101	60	22	4	5	14	448	418	8	-5	10	14	246	228	5	2	14	14	185	174	6
-1	20	13	30	59	30	0	28	13	95	60	23	5	5	14	255	243	7	-4	10	14	483	491	6	3	14	14	540	573	7
0	20	13	141	175	12	-6	0	14	350	370	8	6	5	14	0	64	1	-3	10	14	0	16	1	4	14	14	132	139	9
1	20	13	49	49	32	-5	0	14	33	55	32	-12	6	14	81	80	25	-2	10	14	40	89	22	5	14	14	296	292	8
2	20	13	165	135	7	-4	0	14	408	342	9	-11	6	14	104	76	22	-1	10	14	577	565	7	6	14	14	0	69	1
3	20	13	278	272	8	-3	0	14	249	245	8	-10	6	14	98	40	21	0	10	14	500	500	7	7	14	14	280	259	12
4	20	13	121	138	12	-2	0	14	64	90	17	-9	6	14	194	197	14	1	10	14	86	99	10	8	14	14	0	24	1
5	20	13	58	64	41	-1	0	14	561	498	12	-8	6	14	267	265	20	2	10	14	441	399	8	9	14	14	22	66	21
7	20	13	52	25	51	0	0	14	312	256	9	-7	6	14	244	227	6	3	10	14	451	431	6	-10	15	14	45	71	45
-8	21	13	97	70	18	1	0	14	339	338	9	-6	6	14	415	407	7	4	10	14	201	224	9	-9	15	14	59	39	25
-7	21	13	156	124	8	2	0	14	200	265	9	-5	6	14	274	273	5	5	10	14	0	8	1	-8	15	14	95	79	15
-6	21	13	17	39	17	3	0	14	55	40	22	-4	6	14	80	81	9	6	10	14	394	421	6	-7	15	14	66	2	17
-5	21	13	41	15	32	4	0	14	377	372	10	-3	6	14	52	14	22	7	10	14	255	236	8	-6	15	14	257	236	7
-4	21	13	78	12	39	5	0	14	201	178	10	-2	6	14	606	616	6	8	10	14	62	12	39	-5	15	14	111	95	9
-3	21	13	52	46	36	6	0	14	89	136	17	-1	6	14	510	513	5	9	10	14	52	4	51	-4	15	14	307	335	7
-2	21	13	49	36	49	-6	1	14	143	132	5	0	6	14	386	396	4	10	10	14	26	46	25	-3	15	14	66	85	44
-1	21	13	86	78	14	-5	1	14	93	80	7	1	6	14	171	193	7	-11	11	14	0	1	1	-2	15	14	423	419	8
0	21	13	270	275	8	-4	1	14	14	25	14	2	6	14	73	72	13	-10	11	14	163	167	17	-1	15	14	63	33	35
1	21	13	249	285	18	-3	1	14	278	246	6	3	6	14	283	324	7	-9	11	14	0	46	1	0	15	14	72	107	30
2	21	13	76	3	21	-2	1	14	195	239	6	4	6	14	194	176	9	-8	11	14	348	320	7	1	15	14	293	292	6
3	21	13	99	45	19	-1	1	14	0	1	1	5	6	14	232	189	7	-7	11	14	281	277	7	2	15	14	92	6	15
4	21	13	114	28	41	0	1	14	80	76	10	6	6	14	448	445	12	-6	11	14	55	66	21	3	15	14	164	144	14
5	21	13	0	29	1	1	1	14	637	670	10	-12	7	14	120	69	17	-5	11	14	16	20	16	4	15	14	275	279	6
6	21	13	24	17	23	2	1	14	31	37	30	-11	7	14	96	97	22	-4	11	14	439	417	7	5	15	14	88	43	23
7	21	13	0	29	1	3	1	14	47	46	22	-10	7	14	41	26	41	-3	11	14	216	232	14	6	15	14	115	79	18
-8	22	13	121	87	13	4	1	14	59	19	32	-9	7	14	107	120	20	-2	11	14	353	343	7	7	15	14	240	208	13
-7	22	13	108	94	40	5	1	14	176	183	7	-8	7	14	165	150	7	-1	11	14	53	90	14	8	15	14	0	37	1
-6	22	13	156	142	36	6	1	14	114	125	10	-7	7	14	182	182	15	0	11	14	230	200	6	9	15	14	213	187	13
-5	22	13	54	30	35	-12	2	14	108	15	19	-6	7	14	339	325	5	1	11	14	50	88	16	-9	16	14	43	38	43
-4	22	13	80	20	14	-6	2	14	84	74	7	-5	7	14	199	192	5	2	11	14	289	294	6	-8	16	14	149	148	12
-3	22	13	50	69	23	-5	2	14	72	92	8	-4	7	14	299	265	5	3	11	14	46	43	25	-7	16	14	24	10	23
-2	22	13	46	21	34	-4	2	14	141	153	9	-3	7	14	128	136	8	4	11	14	115	107	8	-6	16	14	146	156	7
-1	22	13	269	267	8	-3	2	14	172	163	5	-2	7	14	399	414	5	5	11	14	131	110	15	-5	16	14	233	242	7
0	22	13	82	68	15	-2	2	14	50	4	22	-1	7	14	368	375	4	6	11	14	403	424	12	-4	16	14	168	148	10
1	22	13	31	67	30	-1	2	14	158	191	17	0	7	14	22	15	21	7	11	14	0	29	1	-3	16	14	68	17	17
2	22	13	0	99	1	0	2	14	153	180	6	1	7	14	492	486	6	8	11	14	0	31	1	-2	16	14	162	170	18
3	22	13	0	76	1	1	2	14	314	340	6	2	7	14	492	473	8	9	11	14	133	90	18	-1	16	14	526	545	10
4	22	13	96	25	21	2	2	14	152	155	7	3	7	14	123	137	8	10	11	14	63	115	42	0	16	14	203	196	8
5	22	13	0	16	1	3	2	14	255	287	8	4	7	14	65	43	15	-10	12	14	97	33	23	1	16	14	52	1	26
6	22	13	87	6	28	4	2	14	301	296	8	5	7	14	371	370	7	-8	12	14	160	185	8	2	16	14	537	528	9
7	22	13	97	128	27	5	2	14	211	214	7	6	7	14	156	124	12	-7	12	14	133	142	13	3	16	14	225	192	15
-7	23	13	82	53	19	-12	3	14	54	55	54	11	7	14	86	63	18	-6	12	14	460	468	6	4	16	14	93	132	15
-6	23	13	57	86	42	-11	3	14	63	81	37	-11	8	14	121	102	18	-5	12	14	127	123	10	5	16	14	129	124	23
-5	23	13	48	17	47	-7	3	14	318	307	8	-9	8	14	170	140	15	-4	12	14	49	19	49	6	16	14	116	120	21
-4	23	13	82	95	14	-6	3	14	218	197	10	-8	8	14	200	204	17	-3	12	14	365	333	7	7	16	14	49	32	48
-3	23	13	124	117	16	-5	3	14	31	5	31	-7	8	14	58	8	14	-2	12	14	357	353	7	9	16	14	140	123	20
-2	23	13	0	23	1	-4	3	14	127	98	6	-6	8	14	128	141	11	-1	12	14	497	494	8	-9	17	14	47	51	47
-1	23	13	123	114	10	-3	3	14	37	62	21	-5	8	14	617	589	8	0	12	14	269	265	6	-8	17	14	179	201	11
0	23	13	96	120	29	-2	3	14	79	93	29	-4	8	14	224	226	5	1	12	14	206	193	6	-7	17	14	192	203	7
1	23	13	85	112	16	-1	3	14	376	361	7	-3	8	14	375	339	5	2	12	14	243	254	6	-6	17	14	176	159	7
2	23	13	106	90	19	0	3	14	265	254	6	-2	8	14	738	753	9	3	12	14	359	358	6	-5	17	14	69	68	20
3	23	13	33	68	33	1	3	14	138	115	7	-1	8	14	200	188	4	4	12	14	59	70	15	-4	17	14	237	249	7
4	23	13	120	123	54	2	3	14	251	236	6	0	8	14	780	749	9	5	12	14	113	72	11	-3	17	14	293	246	7
5	23	13	69	43	38	3	3	14	77	59	12	1	8	14	239	210	4	6	12	14	51	94	50	-2	17	14	38	12	38
-6	24	13	107	22	15	4	3	14	101	91	10	2	8	14	77	65	8	7	12	14	0	34	1	-1	17	14	175	156	8
-5	24	13	91	109	21	5	3	14	534	512	9	3	8	14	404	388	7	8	12	14	85	132	25	0	17	14	376	382	8
-4	24	13	74	65	15	6	3	14	221	201	10	4	8	14	142	145	8	9	12	14	82	29	25	1	17	14	217	230	6
-3	24	13	60	33	22	-11	4	14	68	57	37	5																	

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-3	19	14	138	158	9	2	25	14	131	60	18	0	5	15	518	495	6	-8	10	15	55	57	16	1	14	15	201	184	6
-2	19	14	193	227	11	3	25	14	118	111	18	1	5	15	552	575	7	-7	10	15	150	156	24	2	14	15	367	371	6
-1	19	14	168	160	10	4	25	14	73	28	30	2	5	15	414	395	7	-6	10	15	221	197	5	3	14	15	141	126	13
0	19	14	348	363	8	5	25	14	102	86	24	3	5	15	4	56	4	-5	10	15	226	217	5	4	14	15	219	206	6
1	19	14	143	130	16	-3	26	14	0	10	1	4	5	15	355	313	7	-4	10	15	302	312	5	5	14	15	0	77	1
2	19	14	111	103	25	-2	26	14	102	76	31	5	5	15	0	48	1	-3	10	15	483	499	10	6	14	15	123	53	18
3	19	14	18	8	18	-1	26	14	126	91	11	6	5	15	156	146	11	-2	10	15	156	159	6	7	14	15	98	111	21
4	19	14	50	63	49	0	26	14	130	122	23	-12	6	15	121	36	19	-1	10	15	337	297	5	8	14	15	84	15	29
6	19	14	322	308	13	1	26	14	104	92	19	-11	6	15	204	197	13	0	10	15	304	312	5	9	14	15	91	81	26
7	19	14	228	134	14	2	26	14	68	13	34	-10	6	15	91	59	24	1	10	15	92	77	9	-10	15	15	167	166	10
8	19	14	132	106	19	3	26	14	121	61	19	-9	6	15	198	166	13	2	10	15	449	446	6	-8	15	15	61	34	23
-8	20	14	89	15	34	4	26	14	122	102	19	-8	6	15	33	21	33	3	10	15	101	77	8	-7	15	15	105	140	8
-7	20	14	108	12	14	-2	27	14	0	35	1	-7	6	15	166	151	13	4	10	15	143	147	6	-6	15	15	192	210	7
-6	20	14	26	40	26	-1	27	14	75	37	30	-6	6	15	112	110	7	5	10	15	0	19	1	-5	15	15	30	15	29
-5	20	14	68	40	19	0	27	14	86	58	26	-5	6	15	265	273	6	6	10	15	50	14	50	-4	15	15	96	88	12
-4	20	14	106	115	10	-1	28	14	188	150	15	-4	6	15	78	105	11	7	10	15	284	250	8	-3	15	15	134	142	21
-3	20	14	21	30	20	0	28	14	52	18	51	-3	6	15	167	123	6	8	10	15	62	28	20	-2	15	15	151	150	30
-2	20	14	236	247	8	-6	1	15	327	318	6	-2	6	15	811	803	9	9	10	15	94	133	21	-1	15	15	180	153	8
-1	20	14	249	221	8	-5	1	15	232	220	5	-1	6	15	134	128	4	-10	10	15	97	96	22	0	15	15	386	370	13
0	20	14	91	97	13	-4	1	15	273	227	5	0	6	15	503	484	9	-11	11	15	54	60	54	1	15	15	125	104	8
1	20	14	104	110	12	-3	1	15	216	183	5	1	6	15	0	50	1	-10	11	15	129	101	18	2	15	15	85	42	14
2	20	14	112	32	11	-2	1	15	259	249	6	2	6	15	898	864	13	-9	11	15	0	23	1	3	15	15	406	394	7
3	20	14	72	64	20	-1	1	15	136	142	7	3	6	15	381	340	7	-8	11	15	75	76	48	4	15	15	270	254	6
4	20	14	0	34	1	0	1	15	145	156	12	4	6	15	657	633	10	-7	11	15	152	180	17	5	15	15	99	52	13
5	20	14	112	82	42	1	1	15	43	30	26	5	6	15	69	4	20	-6	11	15	366	368	6	6	15	15	0	11	1
6	20	14	103	46	22	2	1	15	404	403	7	6	6	15	215	191	11	-5	11	15	177	163	6	7	15	15	123	63	17
7	20	14	69	28	38	3	1	15	180	144	7	-11	7	15	126	68	16	-4	11	15	302	314	5	8	15	15	67	76	34
-8	21	14	80	130	18	4	1	15	248	210	9	-10	7	15	55	22	55	-3	11	15	557	546	10	9	15	15	251	212	13
-7	21	14	0	10	1	5	1	15	0	54	1	-9	7	15	0	29	1	-2	11	15	152	168	8	-8	16	15	69	84	20
-6	21	14	74	28	20	6	1	15	235	224	15	-8	7	15	120	93	26	-1	11	15	243	224	7	-7	16	15	112	105	43
-5	21	14	36	4	36	-12	2	15	119	139	20	-7	7	15	65	89	13	0	11	15	238	271	5	-6	16	15	132	145	15
-4	21	14	66	66	15	-7	2	15	0	30	1	-6	7	15	129	131	11	1	11	15	0	18	1	-5	16	15	101	74	10
-3	21	14	71	77	16	-6	2	15	93	95	7	-5	7	15	224	240	6	2	11	15	142	167	11	-4	16	15	441	453	9
-2	21	14	51	45	27	-5	2	15	163	175	5	-4	7	15	359	360	5	3	11	15	518	482	7	-3	16	15	164	206	7
-1	21	14	117	119	27	-4	2	15	208	205	11	-3	7	15	265	268	5	4	11	15	78	101	12	-2	16	15	63	119	17
0	21	14	57	41	33	-3	2	15	331	354	6	-2	7	15	724	722	9	5	11	15	142	164	10	-1	16	15	262	257	8
1	21	14	45	2	44	-2	2	15	685	623	14	-1	7	15	278	298	4	6	11	15	83	136	20	0	16	15	155	114	9
2	21	14	35	41	34	-1	2	15	640	619	10	0	7	15	33	38	18	8	11	15	0	5	1	1	16	15	109	117	14
3	21	14	80	75	17	0	2	15	222	223	6	1	7	15	308	313	7	9	11	15	106	78	21	2	16	15	205	224	7
4	21	14	139	178	15	1	2	15	140	153	7	2	7	15	255	266	7	10	11	15	70	37	38	3	16	15	0	29	1
5	21	14	126	117	21	2	2	15	304	312	7	3	7	15	417	387	8	-9	12	15	0	7	1	4	16	15	250	261	8
7	21	14	22	61	22	3	2	15	77	89	11	4	7	15	153	150	17	-8	12	15	87	93	86	5	16	15	42	9	41
-8	22	14	102	52	15	4	2	15	378	371	7	5	7	15	78	57	31	-7	12	15	133	122	6	6	16	15	75	87	29
-7	22	14	80	23	21	5	2	15	116	126	13	6	7	15	406	342	11	-6	12	15	202	193	5	7	16	15	279	256	12
-6	22	14	71	40	14	6	2	15	0	46	1	-11	8	15	85	54	23	-5	12	15	118	108	16	8	16	15	104	76	21
-5	22	14	86	80	18	-12	3	15	0	69	1	-10	8	15	66	16	32	-4	12	15	130	103	7	-10	17	15	37	65	37
-4	22	14	73	26	21	-11	3	15	59	95	54	-9	8	15	78	66	28	-3	12	15	105	121	9	-8	17	15	161	218	11
-3	22	14	0	59	1	-6	3	15	598	578	9	-8	8	15	219	195	7	-2	12	15	497	449	11	-6	17	15	49	52	18
-2	22	14	37	18	36	-5	3	15	331	333	6	-7	8	15	128	126	8	-1	12	15	614	590	10	-5	17	15	195	188	15
-1	22	14	47	63	46	-4	3	15	197	185	15	-6	8	15	224	250	5	0	12	15	231	200	6	-4	17	15	212	234	7
0	22	14	122	134	11	-3	3	15	98	61	7	-5	8	15	624	620	8	1	12	15	268	263	6	-3	17	15	138	132	15
1	22	14	79	54	16	-2	3	15	37	60	23	-4	8	15	62	74	17	2	12	15	153	186	7	-2	17	15	61	40	39
2	22	14	151	151	10	-1	3	15	442	438	7	-3	8	15	183	186	5	3	12	15	92	92	43	-1	17	15	108	77	11
3	22	14	155	155	10	0	3	15	103	98	16	-2	8	15	187	205	5	4	12	15	29	58	29	0	17	15	137	146	10
4	22	14	0	62	1	1	3	15	440	461	7	-1	8	15	251	232	4	5	12	15	301	278	8	1	17	15	233	201	8
5	22	14	57	32	57	2	3	15	194	209	7	0	8	15	307	315	7	6	12	15	67	47	32	2	17	15	42	9	41
6	22	14	23	57	23	3	3	15	17	51	17	1	8	15	422	399	5	7	12	15	391	379	12	3	17	15	32	7	31
-7	23	14	70	7	27	4																							

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
0	19	15	82	67	15	3	26	15	135	74	17	3	5	16	11	8	10	-3	10	16	82	108	10	5	14	16	119	105	44
1	19	15	59	22	20	-1	27	15	124	37	17	4	5	16	88	95	12	-2	10	16	362	363	6	6	14	16	121	130	18
2	19	15	154	177	8	0	27	15	0	71	1	5	5	16	230	255	7	-1	10	16	976	957	14	7	14	16	150	172	15
3	19	15	130	103	8	-6	0	16	63	49	15	6	5	16	139	176	12	0	10	16	126	119	7	8	14	16	0	46	1
4	19	15	115	107	27	-5	0	16	417	373	10	-11	6	16	42	4	42	1	10	16	332	289	6	9	14	16	51	10	50
5	19	15	259	251	13	-4	0	16	479	445	11	-10	6	16	143	69	15	2	10	16	369	344	7	-10	15	16	89	113	16
6	19	15	184	91	15	-2	0	16	345	367	9	-9	6	16	106	72	22	3	10	16	251	249	12	-9	15	16	38	33	37
7	19	15	0	4	1	-1	0	16	1065	1098	22	-8	6	16	120	95	14	4	10	16	267	239	5	-8	15	16	77	94	18
-8	20	15	33	77	33	0	0	16	502	472	12	-7	6	16	297	311	11	5	10	16	31	18	30	-7	15	16	298	303	16
-7	20	15	97	68	36	1	0	16	61	63	22	-6	6	16	185	174	6	6	10	16	250	249	6	-6	15	16	149	159	7
-6	20	15	59	60	58	2	0	16	18	22	18	-5	6	16	589	567	9	7	10	16	170	132	20	-5	15	16	73	54	30
-5	20	15	57	1	17	3	0	16	135	146	11	-4	6	16	92	102	9	8	10	16	48	54	47	-4	15	16	125	125	12
-4	20	15	200	179	8	4	0	16	500	495	12	-3	6	16	377	352	7	9	10	16	83	71	27	-3	15	16	59	91	35
-3	20	15	0	81	1	5	0	16	161	161	11	-2	6	16	213	201	11	10	10	16	82	69	27	-2	15	16	257	223	14
-2	20	15	46	7	30	6	0	16	87	98	20	-1	6	16	44	34	15	-10	11	16	134	121	18	-1	15	16	234	211	7
-1	20	15	168	141	9	-6	1	16	334	313	6	0	6	16	229	249	5	-9	11	16	0	10	1	0	15	16	4	5	4
0	20	15	111	84	12	-5	1	16	273	230	5	1	6	16	48	10	19	-8	11	16	76	54	19	1	15	16	204	191	6
1	20	15	108	129	12	-4	1	16	289	284	6	2	6	16	104	149	21	-7	11	16	150	155	8	2	15	16	91	94	10
2	20	15	142	121	24	-3	1	16	309	314	6	3	6	16	32	1	31	-6	11	16	29	2	29	3	15	16	36	64	35
3	20	15	92	61	18	-2	1	16	477	468	8	4	6	16	292	304	7	-5	11	16	16	0	16	4	15	16	0	30	1
4	20	15	136	131	11	-1	1	16	557	566	9	5	6	16	94	79	11	-4	11	16	100	102	8	5	15	16	0	14	1
5	20	15	74	88	28	0	1	16	78	81	12	6	6	16	220	194	10	-3	11	16	210	226	6	6	15	16	124	78	17
6	20	15	158	137	17	1	1	16	193	249	6	-11	7	16	105	7	21	-2	11	16	232	255	7	7	15	16	215	178	13
7	20	15	71	75	41	2	1	16	161	150	14	-10	7	16	88	36	25	-1	11	16	68	77	14	8	15	16	106	22	23
-8	21	15	56	36	33	3	1	16	0	9	1	-9	7	16	138	130	17	0	11	16	460	438	6	-10	16	16	119	117	13
-7	21	15	108	70	51	4	1	16	191	181	25	-8	7	16	74	68	12	1	11	16	475	487	7	-9	16	16	94	7	15
-6	21	15	18	0	17	5	1	16	146	173	8	-7	7	16	430	409	22	2	11	16	245	252	6	-8	16	16	40	56	40
-5	21	15	32	29	32	6	1	16	175	232	13	-6	7	16	47	39	14	3	11	16	62	53	17	-7	16	16	71	60	44
-4	21	15	82	109	15	-12	2	16	55	21	55	-5	7	16	162	116	5	4	11	16	362	330	6	-6	16	16	57	67	40
-3	21	15	111	95	19	-6	2	16	29	23	28	-4	7	16	10	47	9	5	11	16	92	106	91	-5	16	16	108	105	9
-2	21	15	74	56	33	-5	2	16	203	191	6	-3	7	16	556	545	7	6	11	16	31	124	30	-4	16	16	49	75	48
-1	21	15	32	76	31	-4	2	16	143	110	6	-2	7	16	601	561	12	7	11	16	25	8	25	-3	16	16	108	100	12
0	21	15	229	252	9	-3	2	16	232	225	6	-1	7	16	497	466	6	8	11	16	0	50	1	-2	16	16	82	86	13
1	21	15	172	186	9	-2	2	16	143	141	6	0	7	16	303	280	4	9	11	16	77	101	35	-1	16	16	69	85	68
2	21	15	85	41	29	-1	2	16	299	301	6	1	7	16	357	345	7	-10	12	16	0	68	1	0	16	16	460	457	8
3	21	15	121	40	16	0	2	16	402	383	7	2	7	16	225	210	7	-9	12	16	43	43	43	1	16	16	94	102	64
4	21	15	146	113	15	1	2	16	93	122	9	3	7	16	176	162	7	-8	12	16	0	29	1	2	16	16	126	125	8
5	21	15	21	70	20	2	2	16	148	215	8	4	7	16	187	175	22	-7	12	16	80	95	9	3	16	16	590	603	9
6	21	15	111	125	22	3	2	16	153	141	11	5	7	16	61	51	18	-6	12	16	211	211	5	4	16	16	84	65	22
7	21	15	76	12	34	4	2	16	349	381	7	-11	8	16	87	20	27	-5	12	16	392	409	6	5	16	16	57	50	56
-6	22	15	67	8	16	5	2	16	139	153	9	-10	8	16	82	51	24	-4	12	16	110	141	15	6	16	16	272	266	12
-5	22	15	91	7	12	6	2	16	79	90	20	-9	8	16	144	146	16	-3	12	16	0	81	1	7	16	16	133	189	17
-4	22	15	0	10	1	-12	3	16	101	59	24	-8	8	16	235	211	12	-2	12	16	176	182	7	8	16	16	46	10	46
-3	22	15	131	143	9	-11	3	16	147	130	16	-7	8	16	141	127	9	-1	12	16	426	422	8	-9	17	16	91	70	17
-2	22	15	111	65	12	-7	3	16	181	134	8	-6	8	16	51	17	19	0	12	16	346	321	6	-8	17	16	60	54	27
-1	22	15	24	2	23	-6	3	16	117	88	6	-5	8	16	328	303	5	1	12	16	39	4	38	-7	17	16	0	19	1
0	22	15	55	0	54	-5	3	16	207	195	5	-4	8	16	227	242	5	2	12	16	60	60	14	-6	17	16	59	58	58
1	22	15	90	107	44	-4	3	16	212	241	5	-3	8	16	246	227	5	3	12	16	219	197	7	-5	17	16	105	113	10
2	22	15	154	139	10	-3	3	16	245	243	12	-2	8	16	56	11	27	4	12	16	142	157	7	-4	17	16	72	112	20
3	22	15	85	50	22	-2	3	16	70	45	10	-1	8	16	15	55	15	5	12	16	61	79	27	-3	17	16	73	81	15
4	22	15	112	56	47	-1	3	16	0	33	1	0	8	16	286	281	5	6	12	16	0	59	1	-2	17	16	175	145	11
5	22	15	58	45	58	0	3	16	579	561	9	1	8	16	197	203	5	8	12	16	104	123	20	-1	17	16	262	264	8
-6	23	15	0	72	1	1	3	16	409	382	7	2	8	16	67	91	10	9	12	16	70	76	41	0	17	16	46	5	46
-5	23	15	39	62	38	2	3	16	404	382	7	3	8	16	322	338	9	-10	13	16	58	17	25	1	17	16	165	151	9
-4	23	15	0	5	1	3	3	16	404	347	7	4	8	16	31	77	31	-9	13	16	96	106	11	2	17	16	307	291	13
-3	23	15	17	51	17	4	3	16	44	9	44	5	8	16	221	208	7	-8	13	16	83	51	27	3	17	16	0	4	1
-2	23	15	90	83	13	5	3	16	551	560	9	6	8	16	124	126	16	-7	13	16	81	76	9	4	17	16	95	90	44
-1	23	15	29	18																									

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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 19 16	27	70	26			2 1 17	0	7	1			-4 7 17	0	5	1			7 11 17	135	98	17			-1 16 17	12	35	12		
5 19 16	59	23	34			3 1 17	59	24	35			-3 7 17	464	463	6			8 11 17	223	207	13			0 16 17	140	119	11		
6 19 16	146	156	15			4 1 17	178	168	7			-2 7 17	87	101	8			9 11 17	0	55	1			1 16 17	40	10	40		
7 19 16	106	86	22			5 1 17	40	11	39			-1 7 17	163	142	7			-10 12 17	116	138	20			2 16 17	50	71	29		
-7 20 16	144	129	26			6 1 17	164	152	11			0 7 17	370	401	4			-9 12 17	36	32	36			3 16 17	136	158	8		
-6 20 16	133	104	9			-7 2 17	442	428	10			1 7 17	332	295	7			-8 12 17	119	137	19			4 16 17	166	168	10		
-5 20 16	0	51	1			-6 2 17	126	128	6			2 7 17	162	163	7			-7 12 17	81	86	13			5 16 17	33	27	32		
-4 20 16	62	60	19			-5 2 17	155	176	10			3 7 17	234	208	7			-6 12 17	153	168	7			6 16 17	40	28	39		
-2 20 16	83	18	14			-4 2 17	472	407	7			4 7 17	219	207	7			-5 12 17	0	5	1			7 16 17	79	50	32		
-1 20 16	93	56	13			-3 2 17	20	40	20			5 7 17	128	142	13			-4 12 17	30	51	29			8 16 17	133	72	20		
0 20 16	104	95	12			-2 2 17	432	419	7			6 7 17	9	39	8			-3 12 17	42	62	42			-9 17 17	142	140	11		
1 20 16	66	89	24			-1 2 17	97	114	10			-11 8 17	26	7	26			-2 12 17	27	86	27			-8 17 17	64	23	25		
2 20 16	210	213	9			0 2 17	385	399	7			-10 8 17	309	273	12			-1 12 17	254	259	7			-7 17 17	106	97	9		
3 20 16	148	189	10			1 2 17	63	65	13			-9 8 17	107	116	21			0 12 17	211	178	7			-6 17 17	0	14	1		
4 20 16	72	51	23			2 2 17	446	358	8			-8 8 17	229	242	7			1 12 17	179	195	8			-5 17 17	84	78	16		
5 20 16	36	29	35			3 2 17	180	152	7			-7 8 17	50	43	49			2 12 17	242	207	6			-4 17 17	57	66	33		
7 20 16	0	43	1			4 2 17	57	16	17			-6 8 17	128	153	6			3 12 17	65	55	26			-3 17 17	41	39	40		
-7 21 16	47	29	46			5 2 17	86	86	21			-5 8 17	207	213	6			4 12 17	88	78	10			-2 17 17	55	78	54		
-6 21 16	55	11	19			6 2 17	215	270	11			-4 8 17	55	23	16			5 12 17	267	217	8			-1 17 17	204	221	10		
-5 21 16	110	70	32			-7 3 17	297	297	8			-3 8 17	8	40	7			6 12 17	68	34	33			0 17 17	285	298	10		
-4 21 16	84	72	12			-6 3 17	390	370	6			-2 8 17	165	179	6			7 12 17	191	181	15			1 17 17	0	26	1		
-3 21 16	58	109	21			-5 3 17	119	133	7			-1 8 17	40	13	27			8 12 17	0	15	1			2 17 17	179	129	9		
-2 21 16	149	126	10			-4 3 17	87	89	8			0 8 17	188	197	6			9 12 17	98	102	24			3 17 17	112	124	10		
-1 21 16	108	71	20			-3 3 17	480	446	11			1 8 17	353	365	5			-9 13 17	0	4	1			4 17 17	61	67	25		
0 21 16	53	27	25			-2 3 17	241	241	6			2 8 17	71	24	13			-8 13 17	148	166	24			5 17 17	155	120	20		
1 21 16	94	4	23			-1 3 17	149	151	7			3 8 17	163	166	8			-7 13 17	226	237	5			6 17 17	75	51	34		
2 21 16	83	61	15			0 3 17	265	240	6			4 8 17	0	16	1			-6 13 17	138	119	7			7 17 17	22	47	22		
3 21 16	28	30	27			1 3 17	160	161	8			5 8 17	253	209	10			-5 13 17	0	56	1			8 17 17	120	104	22		
4 21 16	115	91	16			2 3 17	531	513	9			9 8 17	57	31	40			-4 13 17	121	132	14			-8 18 17	67	48	23		
5 21 16	77	82	34			3 3 17	115	145	9			10 8 17	0	51	1			-3 13 17	213	212	7			-7 18 17	44	52	29		
6 21 16	121	130	21			4 3 17	86	2	16			-11 9 17	125	85	18			-2 13 17	236	241	7			-6 18 17	0	24	1		
-7 22 16	0	104	1			5 3 17	306	351	7			-10 9 17	136	85	17			-1 13 17	201	224	7			-5 18 17	298	307	8		
-6 22 16	179	175	17			6 3 17	165	177	11			-9 9 17	128	87	17			0 13 17	174	177	8			-4 18 17	127	104	9		
-5 22 16	77	65	30			-11 4 17	99	28	24			-8 9 17	240	238	18			1 13 17	73	93	12			-3 18 17	100	100	39		
-4 22 16	43	39	42			-7 4 17	54	35	21			-7 9 17	48	89	47			2 13 17	431	433	7			-2 18 17	244	261	8		
-3 22 16	56	94	55			-6 4 17	234	267	5			-6 9 17	70	76	9			3 13 17	119	116	8			-1 18 17	80	80	14		
-2 22 16	54	15	22			-5 4 17	258	300	8			-5 9 17	153	166	6			4 13 17	216	186	7			0 18 17	158	122	24		
-1 22 16	77	70	17			-4 4 17	169	172	6			-4 9 17	256	260	5			5 13 17	177	152	24			1 18 17	44	59	44		
0 22 16	106	91	12			-3 4 17	392	376	7			-3 9 17	72	69	10			6 13 17	49	73	48			2 18 17	123	92	14		
1 22 16	0	48	1			-2 4 17	62	55	20			-2 9 17	297	301	5			7 13 17	131	124	19			3 18 17	157	147	10		
2 22 16	61	70	23			-1 4 17	718	694	12			-1 9 17	107	128	7			8 13 17	0	72	1			4 18 17	149	152	10		
3 22 16	134	97	16			0 4 17	151	170	7			0 9 17	503	497	7			9 13 17	79	44	29			5 18 17	0	32	1		
4 22 16	98	69	37			1 4 17	178	176	7			1 9 17	400	394	6			-10 14 17	111	26	13			6 18 17	173	167	17		
6 22 16	137	40	19			2 4 17	623	628	10			2 9 17	190	170	5			-9 14 17	161	135	10			7 18 17	54	114	53		
-6 23 16	48	41	47			3 4 17	281	235	7			3 9 17	14	31	13			-8 14 17	179	178	10			-7 19 17	38	25	37		
-5 23 16	93	62	13			4 4 17	235	230	7			4 9 17	269	236	5			-7 14 17	60	72	20			-6 19 17	37	16	36		
-4 23 16	0	4	1			5 4 17	15	4	15			5 9 17	196	196	6			-6 14 17	154	168	7			-5 19 17	84	76	23		
-3 23 16	0	25	1			6 4 17	156	176	11			6 9 17	100	92	10			-5 14 17	235	253	7			-4 19 17	89	98	12		
-2 23 16	268	278	17			-11 5 17	110	58	19			7 9 17	107	74	12			-4 14 17	64	28	57			-3 19 17	139	126	9		
-1 23 16	24	23	23			-10 5 17	123	115	20			8 9 17	39	0	39			-3 14 17	115	119	10			-2 19 17	27	66	27		
0 23 16	91	57	20			-7 5 17	48	46	24			9 9 17	0	44	1			-2 14 17	63	93	17			-1 19 17	73	102	16		
1 23 16	46	63	46			-6 5 17	130	134	6			-10 10 17	106	6	22			-1 14 17	0	23	1			0 19 17	57	47	25		
2 23 16	0	36	1			-5 5 17	35	31	34			-9 10 17	151	117	17			0 14 17	65	99	65			1 19 17	49	60	48		
3 23 16	100	87	19			-4 5 17	239	211	6			-8 10 17	71	33	16			1 14 17	171	186	7			2 19 17	137	119	10		
4 23 16	0	66	1			-3 5 17	225	196	6			-7 10 17	219	198	16			2 14 17	35	37	34			3 19 17	117	97	15		
5 23 16	70	33	41			-2 5 17	314	320	6			-6 10 17	52	3	18			3 14 17	201	202	6			4 19 17	70	70	43		
-5 24 16	114	124	14			-1 5 17	526	488	8			-5 10 17	77	104	15			4 14 17	77	69	15			5 19 17	147	178	16		
-4 24 16	69	89	66			0 5 17	336	300	7			-4 10 17	181	171</															

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-5	22	17	230	227	12	4	3	18	0	31	1	-10	9	18	66	35	32	0	13	18	80	15	23	3	18	18	90	88	12
-4	22	17	74	1	22	5	3	18	229	214	16	-9	9	18	50	30	49	1	13	18	93	147	14	4	18	18	76	49	19
-3	22	17	0	40	1	-11	4	18	56	81	55	-8	9	18	20	105	19	2	13	18	71	88	13	5	18	18	76	59	24
-2	22	17	127	71	11	-7	4	18	46	33	25	-7	9	18	85	31	13	3	13	18	47	46	24	7	18	18	88	70	31
-1	22	17	195	188	9	-6	4	18	410	393	9	-6	9	18	163	148	12	4	13	18	112	88	17	-7	19	18	84	36	15
0	22	17	52	47	52	-5	4	18	203	193	9	-5	9	18	135	158	7	5	13	18	76	76	34	-6	19	18	0	8	1
1	22	17	124	61	50	-4	4	18	65	41	17	-4	9	18	236	236	5	6	13	18	99	73	23	-5	19	18	54	35	38
2	22	17	0	41	1	-3	4	18	72	64	11	-3	9	18	176	174	7	7	13	18	46	11	46	-4	19	18	134	144	9
3	22	17	202	188	13	-2	4	18	471	445	8	-2	9	18	18	6	17	-10	14	18	31	60	30	-3	19	18	82	59	45
4	22	17	176	166	13	-1	4	18	125	126	24	-1	9	18	89	98	13	-8	14	18	81	73	15	-2	19	18	108	99	12
5	22	17	0	1	1	0	4	18	302	322	7	0	9	18	23	46	23	-7	14	18	65	65	13	-1	19	18	98	110	13
6	22	17	32	10	31	1	4	18	101	129	11	1	9	18	147	140	7	-6	14	18	199	213	18	0	19	18	60	49	60
-5	23	17	50	54	49	2	4	18	66	66	32	2	9	18	277	272	5	-5	14	18	139	144	12	1	19	18	178	188	9
-4	23	17	76	83	16	3	4	18	367	342	7	3	9	18	152	137	6	-4	14	18	91	107	11	2	19	18	139	118	50
-3	23	17	0	28	1	4	4	18	58	46	18	4	9	18	108	133	8	-3	14	18	96	63	12	3	19	18	130	144	10
-2	23	17	44	13	44	5	4	18	67	23	17	5	9	18	105	104	15	-2	14	18	52	4	51	4	19	18	117	96	24
-1	23	17	0	51	1	6	4	18	0	105	1	6	9	18	367	355	6	-1	14	18	58	51	19	5	19	18	103	88	14
0	23	17	79	77	18	-11	5	18	194	179	14	7	9	18	83	61	82	0	14	18	134	107	26	6	19	18	58	52	58
1	23	17	199	180	26	-10	5	18	134	142	17	8	9	18	231	232	9	1	14	18	59	39	35	7	19	18	83	5	31
2	23	17	114	112	19	-9	5	18	99	13	25	9	9	18	0	5	1	2	14	18	56	5	26	-7	20	18	116	55	29
3	23	17	93	78	22	-7	5	18	353	352	9	-10	10	18	93	91	25	3	14	18	381	340	7	-6	20	18	80	9	18
5	23	17	55	29	55	-6	5	18	0	8	1	-9	10	18	132	95	13	4	14	18	268	273	12	-5	20	18	102	70	17
-4	24	17	18	2	18	-5	5	18	40	58	21	-8	10	18	0	6	1	5	14	18	231	215	12	-4	20	18	33	29	33
-3	24	17	0	60	1	-4	5	18	150	144	9	-7	10	18	115	117	10	6	14	18	158	179	17	-3	20	18	96	17	60
-2	24	17	180	141	9	-3	5	18	629	606	10	-6	10	18	69	85	11	7	14	18	78	58	31	-2	20	18	123	93	11
-1	24	17	0	36	1	-2	5	18	280	247	6	-5	10	18	160	153	6	8	14	18	189	186	15	-1	20	18	81	3	23
0	24	17	32	39	32	-1	5	18	258	253	9	-4	10	18	136	157	6	-9	15	18	4	48	4	0	20	18	18	28	18
1	24	17	150	129	22	0	5	18	363	359	7	-3	10	18	317	312	6	-8	15	18	15	107	15	1	20	18	64	76	20
2	24	17	0	9	1	1	5	18	233	222	7	-2	10	18	365	357	6	-7	15	18	54	86	16	2	20	18	99	70	27
-2	25	17	70	103	36	2	5	18	40	70	40	-1	10	18	495	468	8	-6	15	18	0	18	1	3	20	18	142	150	14
-1	25	17	11	13	10	3	5	18	326	295	7	0	10	18	356	327	9	-4	15	18	171	162	7	4	20	18	0	59	1
0	25	17	95	105	26	4	5	18	168	166	8	1	10	18	64	67	63	-3	15	18	9	12	9	5	20	18	116	58	19
1	25	17	196	161	13	5	5	18	476	425	8	2	10	18	67	91	13	-2	15	18	168	145	9	6	20	18	77	49	39
2	25	17	10	41	9	6	5	18	0	7	1	3	10	18	191	229	6	-1	15	18	203	163	8	-7	21	18	96	65	16
3	25	17	0	65	1	-11	6	18	157	132	16	4	10	18	504	500	6	0	15	18	245	257	11	-6	21	18	48	28	26
-1	26	17	55	77	55	-10	6	18	181	196	14	5	10	18	72	2	14	1	15	18	126	126	10	-5	21	18	19	14	18
0	26	17	117	142	21	-9	6	18	425	404	13	6	10	18	79	122	16	2	15	18	41	63	41	-4	21	18	146	159	9
-6	0	18	84	92	13	-8	6	18	22	21	21	7	10	18	60	83	60	3	15	18	25	10	25	-3	21	18	89	63	63
-5	0	18	65	54	18	-7	6	18	156	126	9	8	10	18	177	162	9	4	15	18	90	33	11	-2	21	18	15	40	14
-4	0	18	65	21	18	-6	6	18	385	364	7	9	10	18	76	60	17	5	15	18	45	101	45	-1	21	18	62	57	61
-3	0	18	371	311	10	-5	6	18	189	147	18	-10	11	18	76	84	30	6	15	18	140	115	18	0	21	18	24	45	23
-2	0	18	993	863	20	-4	6	18	78	98	19	-9	11	18	46	66	46	7	15	18	97	117	24	1	21	18	126	135	16
-1	0	18	344	327	10	-3	6	18	194	197	6	-8	11	18	64	18	49	-9	16	18	117	54	13	2	21	18	66	48	22
0	0	18	369	331	10	-2	6	18	82	110	15	-7	11	18	150	150	32	-8	16	18	74	31	21	3	21	18	57	27	43
1	0	18	247	202	9	-1	6	18	0	9	1	-6	11	18	104	77	8	-7	16	18	116	107	8	4	21	18	92	79	21
2	0	18	107	157	13	0	6	18	196	224	10	-5	11	18	81	69	15	-6	16	18	95	90	10	5	21	18	54	81	53
3	0	18	202	168	10	1	6	18	450	456	12	-4	11	18	54	107	14	-5	16	18	164	187	7	6	21	18	91	58	31
4	0	18	0	56	1	2	6	18	484	469	12	-3	11	18	86	45	22	-4	16	18	99	87	11	-6	22	18	109	79	15
5	0	18	76	42	21	3	6	18	54	70	20	-2	11	18	333	329	7	-3	16	18	287	310	8	-5	22	18	89	72	34
6	0	18	0	42	1	4	6	18	0	26	1	-1	11	18	151	125	8	-2	16	18	46	19	27	-4	22	18	0	39	1
-7	1	18	125	143	9	5	6	18	221	200	7	0	11	18	369	352	7	-1	16	18	191	178	8	-3	22	18	72	28	49
-6	1	18	87	82	13	6	6	18	106	91	15	1	11	18	30	14	30	0	16	18	36	14	36	-2	22	18	55	66	54
-5	1	18	345	325	6	-11	7	18	128	99	19	2	11	18	141	133	8	1	16	18	100	108	13	-1	22	18	74	22	29
-4	1	18	30	25	30	-10	7	18	0	33	1	3	11	18	130	112	8	2	16	18	157	152	9	0	22	18	61	72	61
-3	1	18	302	242	6	-9	7	18	173	93	14	4	11	18	136	134	8	3	16	18	120	117	9	1	22	18	0	48	1
-2	1	18	0	33	1	-8	7	18	287	305	11	5	11	18	95	72	50	4	16	18	63	14	47	2	22	18	82	37	20
-1	1	18	234	200	6	-7	7	18	98	95	10	7	11	18	108	97	20	5	16	18	0	37	1	3	22	18	0	26	1
0	1	18	267	289	6	-6	7	18	191	186	6	8	11	18	179	185	15	6											

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
1	1	19	74	99	19	-4	7	19	61	82	18	-9	12	19	116	122	46	-7	17	19	25	91	25	3	23	19	74	69	32
2	1	19	130	103	10	-3	7	19	343	346	6	-8	12	19	21	38	21	-6	17	19	79	68	13	4	23	19	176	153	15
3	1	19	178	129	10	-2	7	19	318	334	5	-7	12	19	168	165	8	-5	17	19	30	18	30	-2	24	19	0	42	1
4	1	19	341	322	7	-1	7	19	185	149	12	-6	12	19	70	72	15	-4	17	19	232	252	9	-1	24	19	41	29	40
5	1	19	74	26	19	0	7	19	375	376	5	-5	12	19	140	138	7	-3	17	19	179	170	8	0	24	19	99	40	60
6	1	19	143	114	13	1	7	19	40	58	40	-4	12	19	0	51	1	-2	17	19	79	101	31	1	24	19	36	70	35
-7	2	19	134	138	9	2	7	19	112	126	10	-3	12	19	0	87	1	-1	17	19	69	63	22	2	24	19	103	21	19
-6	2	19	141	152	6	3	7	19	142	141	9	-2	12	19	64	42	20	0	17	19	141	138	10	-1	25	19	119	84	20
-5	2	19	48	33	17	4	7	19	271	243	7	-1	12	19	276	270	7	1	17	19	25	26	25	0	25	19	146	46	15
-4	2	19	753	712	11	5	7	19	81	89	25	0	12	19	46	41	46	2	17	19	96	116	13	-6	0	20	70	91	18
-3	2	19	75	29	11	6	7	19	109	44	16	1	12	19	65	55	18	3	17	19	0	13	1	-5	0	20	324	328	9
-2	2	19	327	305	7	-10	8	19	119	4	20	2	12	19	249	221	6	4	17	19	120	49	12	-4	0	20	204	165	9
-1	2	19	697	670	10	-9	8	19	235	212	13	3	12	19	120	139	16	5	17	19	82	1	31	-3	0	20	313	257	10
0	2	19	72	44	12	-8	8	19	147	153	9	4	12	19	67	66	26	6	17	19	113	175	23	-2	0	20	246	220	9
1	2	19	42	8	34	-7	8	19	143	132	8	5	12	19	68	66	23	7	17	19	106	5	23	-1	0	20	296	296	10
2	2	19	439	455	11	-6	8	19	104	92	11	6	12	19	261	244	13	-8	18	19	91	21	17	0	0	20	301	306	10
3	2	19	222	239	7	-5	8	19	315	309	5	7	12	19	119	96	21	-7	18	19	106	103	15	1	0	20	88	109	17
4	2	19	96	102	12	-4	8	19	54	54	26	8	12	19	8	11	7	-5	18	19	107	76	33	2	0	20	457	479	12
5	2	19	344	351	8	-3	8	19	76	101	10	-9	13	19	50	66	49	-4	18	19	59	29	18	3	0	20	335	370	11
6	2	19	185	206	12	-2	8	19	47	67	17	-8	13	19	96	34	14	-3	18	19	147	126	9	4	0	20	415	383	11
-7	3	19	98	92	11	-1	8	19	243	245	8	-7	13	19	190	216	18	-2	18	19	0	17	1	5	0	20	256	268	11
-6	3	19	46	77	26	0	8	19	105	104	14	-6	13	19	47	11	24	-1	18	19	111	107	15	-7	1	20	245	237	8
-5	3	19	189	172	6	1	8	19	20	68	19	-5	13	19	150	144	10	0	18	19	42	9	42	-6	1	20	72	54	25
-4	3	19	265	278	9	2	8	19	64	13	26	-4	13	19	61	150	19	1	18	19	134	83	28	-5	1	20	415	387	7
-3	3	19	4	1	4	3	8	19	213	209	8	-3	13	19	20	31	19	2	18	19	139	149	13	-4	1	20	164	126	7
-2	3	19	292	259	6	4	8	19	79	119	15	-2	13	19	284	310	7	3	18	19	13	29	12	-3	1	20	617	607	9
-1	3	19	104	126	10	5	8	19	194	170	8	-1	13	19	54	96	54	4	18	19	108	4	23	-2	1	20	14	40	14
0	3	19	335	332	7	6	8	19	138	93	13	0	13	19	133	164	13	5	18	19	41	45	40	-1	1	20	47	40	46
1	3	19	368	399	7	-10	9	19	63	20	39	1	13	19	247	223	8	6	18	19	0	46	1	0	1	20	86	96	10
2	3	19	253	262	7	-9	9	19	128	126	16	2	13	19	325	357	6	7	18	19	105	92	23	1	1	20	474	434	8
3	3	19	118	114	9	-8	9	19	123	83	13	3	13	19	54	3	41	-7	19	19	30	2	30	2	1	20	151	157	8
4	3	19	357	342	7	-7	9	19	72	54	71	4	13	19	109	73	14	-6	19	19	38	36	38	3	1	20	81	58	24
5	3	19	214	218	7	-6	9	19	53	65	26	5	13	19	209	211	9	-5	19	19	77	59	70	4	1	20	0	27	1
6	3	19	190	195	11	-5	9	19	75	46	14	6	13	19	140	90	17	-4	19	19	103	118	11	5	1	20	71	107	71
-11	4	19	134	70	18	-4	9	19	66	59	12	7	13	19	103	12	23	-3	19	19	146	145	9	-7	2	20	327	331	9
-7	4	19	133	149	9	-3	9	19	387	412	6	8	13	19	117	97	23	-2	19	19	78	50	31	-6	2	20	220	226	6
-6	4	19	463	463	7	-2	9	19	331	326	5	-9	14	19	0	23	1	-1	19	19	79	99	27	-5	2	20	311	285	6
-5	4	19	376	381	9	-1	9	19	80	77	14	-8	14	19	53	37	29	0	19	19	53	63	24	-4	2	20	188	171	6
-4	4	19	376	395	7	0	9	19	186	183	13	-7	14	19	78	50	17	1	19	19	30	9	30	-3	2	20	31	53	31
-3	4	19	95	136	10	1	9	19	182	158	6	-6	14	19	29	30	28	2	19	19	71	44	26	-2	2	20	48	9	20
-2	4	19	89	83	10	2	9	19	108	99	7	-5	14	19	60	41	60	3	19	19	118	141	11	-1	2	20	485	471	8
-1	4	19	477	456	8	3	9	19	49	16	23	-4	14	19	0	35	1	4	19	19	55	65	55	0	2	20	143	171	8
0	4	19	207	183	12	4	9	19	122	119	9	-3	14	19	53	5	34	5	19	19	0	78	1	1	2	20	171	149	8
1	4	19	125	97	9	5	9	19	46	14	46	-2	14	19	107	125	19	6	19	19	157	158	18	2	2	20	747	730	11
2	4	19	248	243	7	6	9	19	203	178	12	-1	14	19	98	69	25	-7	20	19	97	64	16	3	2	20	79	64	14
3	4	19	155	162	8	7	9	19	96	88	13	0	14	19	70	1	18	-6	20	19	0	39	1	4	2	20	26	77	26
4	4	19	320	317	7	8	9	19	213	209	23	1	14	19	65	63	18	-5	20	19	131	148	16	5	2	20	176	171	17
5	4	19	245	254	7	9	9	19	31	8	30	2	14	19	108	126	9	-4	20	19	66	41	29	6	2	20	121	134	14
6	4	19	0	32	1	-10	10	19	89	51	26	3	14	19	250	256	7	-3	20	19	190	198	12	-7	3	20	548	531	12
-10	5	19	95	67	24	-9	10	19	292	260	12	4	14	19	138	90	8	-2	20	19	6	38	6	-6	3	20	207	177	6
-7	5	19	8	65	7	-8	10	19	70	13	69	5	14	19	0	31	1	-1	20	19	114	110	11	-5	3	20	262	236	6
-6	5	19	162	164	6	-7	10	19	123	107	10	6	14	19	122	99	20	0	20	19	148	125	10	-4	3	20	203	252	6
-5	5	19	185	166	6	-6	10	19	303	310	5	7	14	19	49	10	48	1	20	19	0	46	1	-3	3	20	588	564	9
-4	5	19	176	204	9	-5	10	19	263	278	5	8	14	19	0	41	1	2	20	19	24	50	24	-2	3	20	279	240	7
-3	5	19	263	275	9	-4	10	19	115	110	7	-9	15	19	84	57	18	3	20	19	0	48	1	-1	3	20	216	202	10
-2	5	19	204	162	7	-3	10	19	75	104	15	-7	15	19	50	67	49	4	20	19	52	8	52	0	3	20	251	221	7
-1	5	19	465	466	8	-2	10	19	269	274	7	-5	15	19	78	54	17	5	20	19	101	102	16	1	3	20	329	304	7
0	5	19	681	680	10	-1	10	19	257	246	7	-4	15	19	246	232	7	6	2										

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

	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	5	20	250	258	19		5	10	20	103	119	10	-9	16	20	43	26	42	0	23	20	77	57	19	3	6	21	258	279	8
5	5	20	183	153	8		6	10	20	141	162	11	-7	16	20	132	136	12	1	23	20	206	185	16	4	6	21	147	162	8
6	5	20	0	77	1		7	10	20	69	29	69	-6	16	20	57	108	18	2	23	20	62	29	40	5	6	21	72	74	72
-10	6	20	231	222	13		8	10	20	140	113	11	-4	16	20	26	55	26	3	23	20	110	106	19	6	6	21	94	1	15
-9	6	20	157	153	17		-9	11	20	184	185	8	-3	16	20	29	2	28	-1	24	20	43	85	43	-10	7	21	54	49	54
-8	6	20	227	202	13		-8	11	20	39	27	38	-2	16	20	0	54	1	0	24	20	214	197	15	-9	7	21	335	332	10
-7	6	20	60	74	18		-7	11	20	99	108	11	-1	16	20	50	3	50	1	24	20	31	78	30	-8	7	21	305	293	12
-6	6	20	430	437	7		-6	11	20	94	26	12	0	16	20	142	141	9	-7	1	21	127	106	10	-7	7	21	140	175	8
-5	6	20	576	564	9		-5	11	20	75	69	23	1	16	20	61	35	25	-6	1	21	182	224	6	-6	7	21	51	14	33
-4	6	20	128	104	8		-4	11	20	176	182	9	2	16	20	108	82	11	-5	1	21	434	441	7	-5	7	21	133	102	6
-3	6	20	552	578	9		-3	11	20	0	10	1	3	16	20	144	97	24	-4	1	21	551	546	9	-4	7	21	391	396	7
-2	6	20	301	318	7		-2	11	20	126	156	12	4	16	20	122	125	12	-3	1	21	248	277	19	-3	7	21	398	414	6
-1	6	20	386	357	7		-1	11	20	281	291	7	5	16	20	66	63	31	-2	1	21	34	2	33	-2	7	21	345	334	6
0	6	20	296	324	7		0	11	20	64	22	15	7	16	20	191	159	15	-1	1	21	266	264	7	-1	7	21	31	59	30
1	6	20	135	131	9		1	11	20	128	101	9	-8	17	20	110	88	14	0	1	21	36	9	35	0	7	21	403	382	8
2	6	20	343	358	7		2	11	20	149	135	10	-6	17	20	0	42	1	1	1	21	321	318	7	1	7	21	132	115	9
3	6	20	105	79	10		3	11	20	227	215	6	-5	17	20	0	10	1	2	1	21	271	278	11	2	7	21	284	279	7
4	6	20	50	10	24		4	11	20	151	161	15	-4	17	20	52	24	51	3	1	21	147	138	23	3	7	21	0	37	1
5	6	20	77	90	15		5	11	20	75	105	19	-3	17	20	67	20	50	4	1	21	156	126	26	4	7	21	170	174	8
6	6	20	170	96	11		6	11	20	86	87	28	-2	17	20	0	36	1	5	1	21	530	533	11	5	7	21	80	75	80
-10	7	20	147	133	16		7	11	20	70	75	36	-1	17	20	45	27	45	-7	2	21	107	106	12	6	7	21	140	141	12
-9	7	20	100	37	20		8	11	20	134	116	19	0	17	20	62	65	39	-6	2	21	748	766	11	-10	8	21	57	15	56
-8	7	20	60	26	17		-9	12	20	35	5	35	1	17	20	32	35	31	-5	2	21	50	40	49	-9	8	21	175	140	15
-7	7	20	69	39	15		-8	12	20	92	16	13	2	17	20	0	30	1	-4	2	21	127	109	8	-8	8	21	182	185	8
-6	7	20	146	126	11		-7	12	20	64	64	30	4	17	20	83	13	82	-3	2	21	254	187	7	-7	8	21	106	24	11
-5	7	20	112	97	7		-6	12	20	56	50	17	5	17	20	82	68	82	-2	2	21	343	333	7	-6	8	21	73	89	19
-4	7	20	186	190	11		-5	12	20	190	182	6	6	17	20	175	137	17	-1	2	21	842	832	12	-5	8	21	130	150	7
-3	7	20	349	306	6		-4	12	20	130	171	8	7	17	20	135	25	19	0	2	21	724	764	11	-4	8	21	29	24	29
-2	7	20	294	262	5		-3	12	20	68	53	16	-7	18	20	58	72	18	1	2	21	514	536	9	-3	8	21	34	14	33
-1	7	20	278	299	7		-2	12	20	0	11	1	-6	18	20	59	58	49	2	2	21	466	451	8	-2	8	21	68	28	42
0	7	20	179	182	8		-1	12	20	54	67	24	-5	18	20	177	168	8	3	2	21	884	868	14	-1	8	21	151	155	10
1	7	20	21	24	20		0	12	20	285	291	7	-4	18	20	76	81	23	4	2	21	235	226	7	0	8	21	343	353	7
2	7	20	340	360	7		1	12	20	272	289	7	-3	18	20	90	65	13	5	2	21	61	66	31	1	8	21	0	49	1
3	7	20	178	176	8		2	12	20	154	134	8	-2	18	20	49	59	26	-7	3	21	265	289	9	2	8	21	54	72	22
4	7	20	190	184	9		3	12	20	191	197	9	-1	18	20	106	44	18	-6	3	21	161	157	6	3	8	21	44	35	33
5	7	20	192	200	25		4	12	20	168	125	16	0	18	20	51	59	50	-5	3	21	299	304	6	4	8	21	214	193	8
6	7	20	173	189	12		5	12	20	130	161	13	1	18	20	0	10	1	-4	3	21	329	350	7	5	8	21	152	116	9
-10	8	20	182	181	15		7	12	20	68	112	48	3	18	20	104	82	103	-3	3	21	239	236	6	-10	9	21	70	15	30
-9	8	20	250	246	13		8	12	20	0	94	1	4	18	20	53	38	53	-2	3	21	63	21	18	-9	9	21	119	76	17
-8	8	20	59	78	20		-8	13	20	87	54	13	5	18	20	135	133	12	-1	3	21	778	772	12	-8	9	21	122	114	14
-7	8	20	66	58	15		-7	13	20	136	123	20	6	18	20	142	94	18	0	3	21	309	320	7	-7	9	21	104	62	11
-6	8	20	225	231	5		-6	13	20	51	45	50	-7	19	20	79	64	18	1	3	21	115	144	11	-6	9	21	74	74	10
-5	8	20	197	208	7		-5	13	20	108	120	19	-6	19	20	141	136	9	2	3	21	313	310	13	-5	9	21	154	172	6
-4	8	20	299	288	5		-4	13	20	90	83	17	-5	19	20	55	10	21	3	3	21	131	118	15	-4	9	21	306	334	6
-3	8	20	54	22	19		-3	13	20	100	102	18	-4	19	20	80	92	45	4	3	21	111	109	11	-3	9	21	482	518	7
-2	8	20	100	98	13		-2	13	20	153	139	8	-3	19	20	152	126	12	5	3	21	13	1	13	-2	9	21	90	122	15
-1	8	20	203	190	7		-1	13	20	91	65	25	-2	19	20	119	105	11	6	3	21	11	49	10	-1	9	21	0	10	1
0	8	20	452	438	8		0	13	20	97	101	18	-1	19	20	66	18	26	-7	4	21	318	308	9	0	9				

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
6	11	21	50	62	50	-5	17	21	65	59	35	-3	1	22	158	148	13	3	7	22	88	104	13	-9	13	22	133	84	13
7	11	21	22	76	21	-4	17	21	78	101	14	-2	1	22	506	471	8	4	7	22	17	9	16	-8	13	22	78	44	38
8	11	21	67	70	47	-3	17	21	131	127	30	-1	1	22	179	191	7	5	7	22	319	335	9	-7	13	22	61	76	23
-9	12	21	114	111	11	-2	17	21	87	74	14	0	1	22	766	762	12	-9	8	22	138	87	16	-6	13	22	48	10	19
-8	12	21	30	2	29	-1	17	21	241	215	9	1	1	22	67	9	36	-8	8	22	100	111	42	-5	13	22	181	169	10
-7	12	21	89	43	13	0	17	21	144	99	9	2	1	22	164	191	9	-7	8	22	257	253	17	-4	13	22	223	239	7
-6	12	21	36	6	36	1	17	21	54	72	26	3	1	22	40	20	39	-6	8	22	397	432	6	-3	13	22	74	108	14
-5	12	21	166	193	10	2	17	21	7	49	7	4	1	22	180	174	8	-5	8	22	213	183	6	-2	13	22	104	54	10
-4	12	21	37	79	36	3	17	21	118	112	34	5	1	22	468	473	9	-4	8	22	41	7	41	-1	13	22	173	198	8
-3	12	21	69	83	17	4	17	21	0	23	1	-7	2	22	122	147	12	-3	8	22	248	223	7	0	13	22	0	44	1
-2	12	21	46	59	28	5	17	21	156	164	20	-6	2	22	92	108	9	-2	8	22	368	361	7	1	13	22	140	115	15
-1	12	21	52	65	52	6	17	21	144	19	19	-5	2	22	167	180	7	-1	8	22	426	450	8	2	13	22	221	207	8
0	12	21	0	4	1	7	17	21	40	10	40	-3	2	22	66	74	14	0	8	22	142	190	8	3	13	22	110	22	16
1	12	21	66	25	16	-7	18	21	98	27	17	-2	2	22	309	330	14	1	8	22	0	31	1	4	13	22	9	31	8
2	12	21	189	185	8	-6	18	21	52	17	22	-1	2	22	429	401	8	2	8	22	226	220	8	5	13	22	80	46	26
3	12	21	47	27	47	-5	18	21	93	92	19	0	2	22	208	181	23	3	8	22	344	383	8	6	13	22	0	36	1
4	12	21	92	33	25	-4	18	21	79	62	14	1	2	22	288	283	7	4	8	22	253	211	13	7	13	22	81	113	34
6	12	21	149	141	17	-3	18	21	137	136	10	2	2	22	581	571	10	5	8	22	58	26	57	-9	14	22	57	0	32
7	12	21	124	156	21	-2	18	21	0	0	1	3	2	22	77	55	26	-9	9	22	82	60	25	-8	14	22	142	166	13
8	12	21	46	50	45	-1	18	21	13	20	12	4	2	22	270	257	8	-8	9	22	73	45	31	-7	14	22	127	113	14
-9	13	21	78	7	19	0	18	21	81	65	15	5	2	22	274	287	18	-7	9	22	79	74	14	-6	14	22	0	67	1
-8	13	21	58	77	20	1	18	21	0	55	1	-7	3	22	129	159	10	-6	9	22	131	61	8	-5	14	22	68	69	22
-7	13	21	169	168	8	2	18	21	210	200	12	-5	3	22	198	207	20	-5	9	22	0	53	1	-4	14	22	51	44	22
-6	13	21	58	42	32	3	18	21	151	135	14	-4	3	22	525	497	8	-4	9	22	63	27	12	-3	14	22	259	270	7
-5	13	21	51	73	22	5	18	21	0	27	1	-3	3	22	634	630	10	-3	9	22	18	13	17	-2	14	22	0	25	1
-4	13	21	147	171	9	6	18	21	189	84	16	-2	3	22	318	312	7	-2	9	22	127	137	9	-1	14	22	65	29	18
-3	13	21	45	100	45	-7	19	21	161	167	11	-1	3	22	184	190	22	-1	9	22	85	65	27	0	14	22	51	32	29
-2	13	21	154	124	8	-6	19	21	49	20	27	0	3	22	677	701	10	0	9	22	186	190	8	1	14	22	46	5	31
-1	13	21	86	32	19	-5	19	21	29	14	29	1	3	22	167	117	8	1	9	22	53	40	22	2	14	22	70	21	24
0	13	21	278	335	7	-4	19	21	133	130	10	2	3	22	250	248	8	2	9	22	0	28	1	3	14	22	168	146	9
1	13	21	244	243	7	-3	19	21	48	57	47	3	3	22	217	231	11	3	9	22	101	122	17	4	14	22	63	51	23
2	13	21	60	48	20	-1	19	21	66	38	19	4	3	22	134	132	10	4	9	22	95	102	9	5	14	22	84	50	84
3	13	21	141	106	10	0	19	21	82	37	78	5	3	22	184	154	8	5	9	22	145	151	14	6	14	22	133	74	18
4	13	21	0	10	1	2	19	21	51	32	27	-7	4	22	79	84	14	6	9	22	0	95	1	7	14	22	107	26	23
5	13	21	72	83	19	3	19	21	9	6	9	-6	4	22	146	122	15	7	9	22	35	33	35	-7	15	22	0	12	1
6	13	21	123	130	19	4	19	21	45	15	44	-5	4	22	177	158	10	8	9	22	106	73	60	-6	15	22	164	132	9
7	13	21	0	56	1	5	19	21	0	33	1	-4	4	22	342	346	7	-9	10	22	111	1	20	-5	15	22	87	10	12
8	13	21	90	44	28	6	19	21	78	10	32	-3	4	22	100	109	21	-8	10	22	206	203	11	-4	15	22	124	125	14
-9	14	21	81	90	20	-7	20	21	106	33	15	-2	4	22	191	179	7	-7	10	22	169	157	9	-3	15	22	98	74	19
-8	14	21	68	51	24	-5	20	21	0	65	1	-1	4	22	397	414	8	-6	10	22	200	198	6	-2	15	22	90	83	13
-7	14	21	75	86	19	-4	20	21	78	37	21	0	4	22	279	261	9	-5	10	22	107	74	15	-1	15	22	46	50	30
-6	14	21	26	0	25	-3	20	21	127	127	14	1	4	22	47	36	31	-4	10	22	166	206	7	0	15	22	61	64	19
-5	14	21	17	4	16	-2	20	21	166	150	25	2	4	22	54	45	43	-3	10	22	48	14	48	1	15	22	81	59	15
-4	14	21	0	4	1	-1	20	21	15	30	14	3	4	22	154	172	9	-2	10	22	68	66	61	2	15	22	70	60	69
-3	14	21	0	1	1	0	20	21	70	33	31	4	4	22	161	154	9	-1	10	22	95	158	21	3	15	22	124	90	15
-2	14	21	0	43	1	1	20	21	62	69	22	5	4	22	272	301	8	0	10	22	43	10	42	4	15	22	62	22	40
-1	14	21	143	168	13	2	20	21	0	33	1	-10	5	22	139	137	18	1	10	22	118	53	10	5	15	22	79	73	40
0	14	21	119	120	11	3	20	21	171	175	14	-7	5	22	248	258	9	2	10	22	347	380	8	7	15	22	0	66	1
2	14	21	0	70	1	4	20	21	0	47	1	-6	5	22	254	272	6	3	10	22	179	167	11	-7	16	22	95	97	18
3	14	21	181	200	9	5	20	21	0	14	1	-5	5	22	399	431	7	4	10	22	62	62	14	-6	16	22	97	87	11
4	14	21	9	30	8	-5	21	21	0	16	1	-4	5	22	391	377	7	5	10	22	83	108	20	-5	16	22	64	30	16
5	14	21	166	152	10	-4	21	21	103	72	17	-3	5	22	416	424	8	6	10	22	79	52	18	-4	16	22	64	6	17
6	14	21	102	18	27	-3	21	21	51	71	50	-2	5	22	227	221	7	7	10	22	109	79	15	-3	16	22	82	67	15
7	14	21	77	57	40	-2	21	21	32	43	31	-1	5	22	54	43	21	8	10	22	43	2	43	-2	16	22	167	178	9
-9	15	21	0	59	1	-1	21	21	210	181	9	0	5	22	248	290	7	-9	11	22	186	155	15	-1	16	22	49	91	48
-8	15	21	128	128	14	0	21	21	251	240	15	1	5	22	0	15	1	-8	11	22	51	16	51	0	16	22	30	16	30
-7	15	21	12	5	12	1	21	21	256	235	8	2	5	22	55	35	36	-7	11	22	115	83	10	1	16	22	83	37	22
-6	15	21	0	0	1	2	21	21	121	94	15	3	5	22	84	91	14	-6	11	22									

Table 6. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
5	18	22	0	10	1	4	4	23	135	124	10	0	10	23	58	62	58	-3	16	23	173	163	9	-2	2	24	205	194	10
6	18	22	120	24	22	5	4	23	58	40	34	1	10	23	158	151	9	-2	16	23	89	92	15	-1	2	24	34	11	34
-7	19	22	87	97	18	-10	5	23	40	13	40	2	10	23	430	441	8	-1	16	23	113	98	19	0	2	24	236	277	7
-6	19	22	176	185	11	-7	5	23	64	50	19	3	10	23	215	217	6	0	16	23	63	49	32	1	2	24	321	323	7
-5	19	22	56	20	22	-6	5	23	86	70	29	4	10	23	60	33	24	1	16	23	20	14	19	2	2	24	133	123	10
-4	19	22	67	8	18	-5	5	23	269	267	6	5	10	23	110	77	43	2	16	23	42	10	41	3	2	24	42	34	41
-3	19	22	31	8	31	-4	5	23	137	167	8	6	10	23	134	133	28	3	16	23	0	37	1	4	2	24	241	266	8
-2	19	22	145	163	10	-3	5	23	134	137	8	7	10	23	81	23	23	4	16	23	0	43	1	5	2	24	104	73	12
-1	19	22	78	43	78	-2	5	23	50	35	25	8	10	23	49	83	48	5	16	23	120	31	12	-7	3	24	40	64	40
0	19	22	202	171	16	-1	5	23	147	150	9	-9	11	23	114	40	22	6	16	23	52	41	52	-6	3	24	0	29	1
1	19	22	0	6	1	0	5	23	531	524	11	-8	11	23	71	75	17	-6	17	23	88	19	18	-5	3	24	135	157	8
2	19	22	115	128	12	1	5	23	186	183	8	-7	11	23	72	57	16	-5	17	23	97	26	12	-4	3	24	331	311	9
3	19	22	22	25	22	2	5	23	0	32	1	-6	11	23	70	41	16	-4	17	23	70	28	16	-3	3	24	187	173	7
4	19	22	0	27	1	3	5	23	80	71	20	-5	11	23	136	78	35	-3	17	23	235	197	8	-2	3	24	84	78	14
-6	20	22	104	114	17	4	5	23	103	91	23	-4	11	23	200	246	11	-2	17	23	84	62	15	-1	3	24	200	227	10
-5	20	22	109	112	16	5	5	23	43	66	43	-3	11	23	69	20	16	-1	17	23	185	203	13	0	3	24	341	349	8
-4	20	22	221	215	8	-9	6	23	44	25	44	-1	11	23	0	4	1	0	17	23	119	115	11	1	3	24	205	218	8
-3	20	22	60	31	29	-8	6	23	73	83	29	0	11	23	0	5	1	1	17	23	131	128	33	2	3	24	22	53	22
-2	20	22	229	203	8	-7	6	23	90	103	14	1	11	23	194	167	8	2	17	23	99	30	71	3	3	24	189	173	18
-1	20	22	49	90	49	-6	6	23	254	269	6	2	11	23	43	13	42	3	17	23	202	166	35	4	3	24	269	280	8
0	20	22	114	65	11	-5	6	23	243	257	7	3	11	23	60	1	59	-6	18	23	201	191	11	5	3	24	357	358	8
1	20	22	57	6	56	-4	6	23	46	10	46	4	11	23	76	66	19	-5	18	23	230	244	8	-6	4	24	32	37	31
2	20	22	127	99	28	-3	6	23	54	75	18	5	11	23	111	114	28	-4	18	23	128	126	11	-5	4	24	215	209	7
3	20	22	95	88	23	-2	6	23	343	358	7	6	11	23	66	25	47	-3	18	23	44	37	44	-4	4	24	70	80	18
5	20	22	0	17	1	-1	6	23	43	23	42	-9	12	23	161	158	11	-2	18	23	56	53	33	-3	4	24	80	87	12
-4	21	22	44	50	44	0	6	23	0	16	1	-8	12	23	67	16	16	-1	18	23	137	122	54	-2	4	24	45	9	45
-3	21	22	60	51	33	1	6	23	432	444	8	-7	12	23	85	6	13	0	18	23	116	105	48	-1	4	24	479	466	8
-2	21	22	95	73	14	2	6	23	102	151	12	-6	12	23	92	54	13	1	18	23	51	19	51	0	4	24	108	109	10
-1	21	22	79	37	25	3	6	23	111	122	11	-5	12	23	147	158	13	2	18	23	0	82	1	1	4	24	301	293	8
0	21	22	0	40	1	4	6	23	61	27	20	-4	12	23	95	26	10	3	18	23	89	43	88	2	4	24	165	161	9
1	21	22	37	46	36	5	6	23	0	58	1	-3	12	23	100	84	16	4	18	23	30	27	29	3	4	24	237	235	8
2	21	22	27	19	27	-9	7	23	173	149	14	-2	12	23	81	78	47	5	18	23	38	6	38	4	4	24	155	158	16
3	21	22	0	52	1	-8	7	23	61	9	38	-1	12	23	87	8	15	-6	19	23	60	61	29	5	4	24	102	61	17
4	21	22	116	115	19	-7	7	23	109	109	10	0	12	23	134	139	9	-5	19	23	0	94	1	-7	5	24	0	64	1
-2	22	22	181	99	14	-6	7	23	60	56	16	1	12	23	117	126	10	-4	19	23	127	123	13	-6	5	24	66	73	14
-1	22	22	34	13	33	-5	7	23	208	200	6	2	12	23	71	85	17	-3	19	23	44	72	43	-5	5	24	0	32	1
0	22	22	117	40	17	-4	7	23	271	287	6	3	12	23	56	53	55	-2	19	23	85	50	33	-4	5	24	137	166	8
1	22	22	69	91	52	-3	7	23	96	69	9	4	12	23	88	97	13	-1	19	23	0	16	1	-3	5	24	205	229	7
0	23	22	126	21	20	-2	7	23	233	227	7	5	12	23	221	219	36	0	19	23	49	31	49	-2	5	24	180	176	9
-7	1	23	241	257	9	-1	7	23	298	262	7	7	12	23	130	174	22	1	19	23	30	57	30	-1	5	24	104	126	12
-6	1	23	323	315	7	0	7	23	518	539	9	-9	13	23	0	45	1	2	19	23	121	7	16	0	5	24	213	223	12
-5	1	23	291	282	7	1	7	23	297	282	7	-8	13	23	119	95	19	3	19	23	83	136	30	1	5	24	254	306	14
-4	1	23	105	145	10	2	7	23	56	42	24	-7	13	23	0	7	1	5	19	23	0	5	1	2	5	24	52	74	27
-3	1	23	530	558	9	3	7	23	0	66	1	-6	13	23	47	29	46	-4	20	23	80	64	21	3	5	24	117	164	11
-2	1	23	488	483	8	4	7	23	180	150	22	-5	13	23	62	50	14	-3	20	23	54	51	39	4	5	24	170	193	9
-1	1	23	407	366	8	5	7	23	115	95	11	-4	13	23	78	42	15	-2	20	23	136	94	11	5	5	24	131	116	22
0	1	23	354	356	7	-9	8	23	193	130	14	-3	13	23	299	314	7	-1	20	23	34	0	33	-9	6	24	88	41	26
1	1	23	545	562	9	-8	8	23	73	8	15	-2	13	23	75	88	27	0	20	23	103	86	13	-8	6	24	0	71	1
2	1	23	303	288	9	-7	8	23	73	56	14	-1	13	23	77	103	48	1	20	23	64	82	21	-7	6	24	95	89	13
3	1	23	125	122	19	-6	8	23	71	40	12	0	13	23	71	65	15	2	20	23	97	93	14	-6	6	24	67	34	13
4	1	23	690	669	11	-5	8	23	92	64	8	1	13	23	53	50	24	3	20	23	0	36	1	-5	6	24	175	158	7
5	1	23	432	457	17	-4	8	23	76	73	33	2	13	23	0	9	1	4	20	23	57	9	57	-3	6	24	120	146	20
-6	2	23	247	237	6	-3	8	23	50	31	15	3	13	23	136	96	14	-2	21	23	52	36	51	-4	6	24	309	317	7
-5	2	23	164	126	7	-2	8	23	207	257	7	4	13	23	46	45	46	-1	21	23	148	119	19	-2	6	24	53	42	31
-4	2	23	95	98	14	-1	8	23	324	305	7	5	13	23	112	122	22	0	21	23	65	89	42	-1	6	24	197	188	8
-3	2	23	575	550	9	0	8	23	82	119	17	6	13	23	0	28	1	1	21	23	0	37	1	0	6	24	93	46	15
-2	2	23	436	459	8	1	8	23	0	13	1	-8	14	23	119	68	13	2	21	23	13	0	13	1	6	24	169	170	12
-1	2	23	764	767	12	2	8	23	0	44	1	-6	14	23	48	53</													

Table 6S. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
3	8	24	0	2	1	-2	14	24	0	20	1	-7	2	25	0	41	1	-2	8	25	94	11	16	-4	14	25	123	108	10
4	8	24	59	41	58	-1	14	24	80	70	15	-6	2	25	140	160	8	-1	8	25	255	261	7	-3	14	25	60	48	19
5	8	24	103	101	12	0	14	24	89	65	13	-5	2	25	280	305	7	0	8	25	25	52	24	-2	14	25	54	6	23
-9	9	24	91	21	22	1	14	24	49	8	40	-4	2	25	104	154	10	1	8	25	128	131	11	-1	14	25	93	113	12
-8	9	24	115	68	10	2	14	24	170	136	13	-3	2	25	0	39	1	2	8	25	122	108	10	0	14	25	85	76	24
-7	9	24	157	116	24	3	14	24	241	226	14	-2	2	25	192	220	7	3	8	25	89	93	14	1	14	25	24	26	24
-6	9	24	41	43	41	4	14	24	80	72	16	-1	2	25	483	493	8	4	8	25	147	119	9	2	14	25	75	15	49
-5	9	24	50	69	18	5	14	24	76	35	76	0	2	25	0	13	1	5	8	25	168	160	13	3	14	25	106	126	13
-4	9	24	126	93	11	6	14	24	0	53	1	1	2	25	135	112	20	-8	9	25	79	28	25	4	14	25	89	67	22
-3	9	24	63	5	44	-7	15	24	90	65	19	2	2	25	270	256	8	-7	9	25	70	36	44	6	14	25	31	65	30
-2	9	24	97	113	11	-6	15	24	97	64	11	3	2	25	64	70	30	-6	9	25	77	28	17	-6	15	25	134	128	16
-1	9	24	146	184	23	-5	15	24	134	129	12	4	2	25	125	116	27	-5	9	25	106	61	11	-4	15	25	71	94	71
0	9	24	154	149	9	-4	15	24	73	5	31	5	2	25	126	122	16	-4	9	25	131	108	15	-3	15	25	69	55	29
1	9	24	84	25	14	-3	15	24	164	161	19	-7	3	25	141	174	11	-3	9	25	18	65	18	-2	15	25	87	73	14
2	9	24	169	168	11	-2	15	24	50	51	27	-6	3	25	36	95	36	-2	9	25	83	66	12	-1	15	25	0	32	1
3	9	24	97	96	11	-1	15	24	216	173	16	-5	3	25	145	130	13	-1	9	25	66	65	15	0	15	25	95	2	12
4	9	24	0	2	1	0	15	24	78	98	14	-4	3	25	375	386	7	0	9	25	161	171	9	1	15	25	0	9	1
5	9	24	147	113	17	1	15	24	134	156	15	-3	3	25	23	61	22	1	9	25	255	283	9	2	15	25	97	44	48
6	9	24	159	165	11	2	15	24	81	60	34	-2	3	25	303	307	7	2	9	25	142	115	14	3	15	25	58	9	57
7	9	24	164	121	42	3	15	24	113	21	18	-1	3	25	74	58	16	3	9	25	104	96	13	4	15	25	122	61	18
-8	10	24	155	120	8	4	15	24	71	10	34	0	3	25	215	193	12	4	9	25	46	23	46	5	15	25	119	97	18
-7	10	24	184	163	8	5	15	24	122	27	14	1	3	25	210	197	9	5	9	25	144	113	14	6	15	25	0	20	1
-6	10	24	157	132	13	-6	16	24	106	22	16	2	3	25	208	207	14	6	9	25	0	67	1	-6	16	25	144	121	9
-5	10	24	116	105	21	-5	16	24	75	85	23	3	3	25	176	161	9	7	9	25	85	75	85	-5	16	25	98	68	12
-4	10	24	79	93	14	-4	16	24	65	15	33	4	3	25	286	285	8	-8	10	25	111	97	10	-4	16	25	164	162	12
-3	10	24	40	73	31	-3	16	24	50	21	50	5	3	25	0	71	1	-7	10	25	83	98	28	-3	16	25	48	43	34
-2	10	24	72	38	14	-2	16	24	62	72	61	-7	4	25	56	18	26	-6	10	25	32	3	32	-2	16	25	169	151	14
-1	10	24	211	225	8	-1	16	24	155	125	9	-6	4	25	91	77	10	-5	10	25	155	148	6	-1	16	25	43	68	42
0	10	24	185	172	8	0	16	24	35	44	34	-4	4	25	38	25	37	-4	10	25	52	13	40	0	16	25	88	47	14
1	10	24	137	144	23	1	16	24	68	33	21	-5	4	25	373	372	7	-3	10	25	145	150	10	1	16	25	58	69	23
2	10	24	54	47	23	2	16	24	26	7	25	-3	4	25	180	203	7	-2	10	25	72	68	17	2	16	25	97	9	14
3	10	24	184	173	9	3	16	24	0	20	1	-2	4	25	152	167	18	-1	10	25	183	195	8	3	16	25	47	14	44
4	10	24	105	126	8	4	16	24	57	17	44	-1	4	25	111	129	11	0	10	25	109	102	11	4	16	25	104	99	20
5	10	24	103	105	35	6	16	24	113	24	24	0	4	25	72	49	17	1	10	25	95	44	61	5	16	25	75	26	28
6	10	24	131	119	25	-6	17	24	88	78	12	1	4	25	49	80	26	2	10	25	142	137	9	-5	17	25	68	31	68
7	10	24	83	50	83	-5	17	24	82	23	14	2	4	25	149	160	9	3	10	25	61	51	34	-4	17	25	52	23	27
-8	11	24	136	85	10	-4	17	24	169	170	13	3	4	25	170	180	9	4	10	25	91	82	13	-3	17	25	235	228	8
-7	11	24	43	40	43	-3	17	24	107	85	29	4	4	25	79	95	16	5	10	25	69	86	23	-2	17	25	13	30	13
-6	11	24	186	203	8	-2	17	24	88	118	32	5	4	25	65	55	64	6	10	25	0	32	1	-1	17	25	79	66	15
-5	11	24	61	58	14	-1	17	24	44	81	44	-9	5	25	48	10	47	7	10	25	18	12	17	0	17	25	94	62	14
-4	11	24	69	52	24	0	17	24	98	21	18	-7	5	25	111	125	12	-8	11	25	129	112	10	1	17	25	247	231	9
-3	11	24	165	170	9	1	17	24	84	27	15	-6	5	25	108	105	24	-7	11	25	176	196	8	2	17	25	0	15	1
-2	11	24	82	89	13	2	17	24	140	132	20	-4	5	25	79	54	24	-6	11	25	106	100	8	3	17	25	64	83	25
-1	11	24	49	61	33	3	17	24	175	134	9	-3	5	25	58	77	19	-5	11	25	79	76	19	-5	18	25	57	58	34
0	11	24	37	0	36	4	17	24	141	27	17	-2	5	25	66	13	16	-4	11	25	32	68	31	-4	18	25	113	85	19
1	11	24	141	121	10	5	17	24	0	58	1	-1	5	25	342	327	8	-3	11	25	63	76	15	-3	18	25	63	65	19
2	11	24	50	46	29	-6	18	24	80	129	21	0	5	25	39	45	39	-2	11	25	61	16	22	-2	18	25	45	62	44
3	11	24	149	139	17	-5	18	24	115	72	13	1	5	25	111	128	11	-1	11	25	0	50	1	-1	18	25	122	139	12
4	11	24	255	230	9	-4	18	24	90	66	14	2	5	25	27	64	26	0	11	25	171	195	8	0	18	25	0	16	1
5	11	24	252	253	9	-3	18	24	69	68	19	3	5	25	51	32	51	1	11	25	143	150	24	1	18	25	184	155	17
6	11	24	156	115	19	-2	18	24	97	29	14	4	5	25	168	180	15	2	11	25	11	21	11	2	18	25	20	53	20
7	11	24	50	34	49	-1	18	24	0	24	1	5	5	25	276	297	8	3	11	25	79	68	78	4	18	25	110	78	21
-8	12	24	105	36	20	0	18	24	96	75	13	-9	6	25	152	108	16	4	11	25	65	47	33	-3	19	25	52	50	51
-7	12	24	0	32	1	1	18	24	115	86	32	-8	6	25	102	77	21	5	11	25	61	75	61	-2	19	25	29	15	28
-6	12	24	99	51	11	2	18	24	72	44	20	-7	6	25	106	130	13	6	11	25	167	122	19	-1	19	25	0	5	1
-5	12	24	147	163	15	4	18	24	62	56	51	-6	6	25	0	27	1	7	11	25	38	79	38	0	19	25	88	53	15
-4	12	24	53	4	22	5	18	24	141	32	17	-5	6	25	135	118	8	-8	12	25	61	40	40	1	19	25	84	48	17
-3	12	24	89	96	12	-5	19	24	256	234	11	-4	6	25	173	198	7	-7</											

Table 6S. Observed and calculated structure factors for 2:5

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	26	73	85	14	2	8	26	68	57	21	4	14	26	106	18	19	2	4	27	105	46	29	-6	11	27	78	33	30
-3	2	26	79	80	13	3	8	26	0	30	1	6	14	26	113	48	24	3	4	27	134	113	15	-5	11	27	54	53	54
-2	2	26	142	151	8	4	8	26	73	76	73	-6	15	26	102	58	16	4	4	27	173	152	9	-4	11	27	203	188	8
-1	2	26	58	26	19	5	8	26	21	5	21	-5	15	26	192	161	8	5	4	27	113	70	38	-3	11	27	46	53	45
0	2	26	52	68	22	-8	9	26	228	216	22	-4	15	26	0	36	1	-7	5	27	82	99	18	-2	11	27	75	102	15
1	2	26	118	119	11	-7	9	26	35	31	35	-3	15	26	75	57	26	-6	5	27	156	168	11	-1	11	27	0	47	1
2	2	26	127	138	14	-6	9	26	81	16	14	-2	15	26	77	89	16	-5	5	27	71	73	14	0	11	27	0	44	1
3	2	26	149	121	47	-5	9	26	111	42	31	-1	15	26	100	74	19	-4	5	27	53	48	20	1	11	27	109	86	18
4	2	26	84	68	16	-4	9	26	143	149	8	0	15	26	50	66	49	-3	5	27	0	53	1	2	11	27	19	73	18
5	2	26	120	146	12	-3	9	26	0	27	1	1	15	26	84	78	17	-2	5	27	0	12	1	3	11	27	86	45	21
-7	3	26	128	114	12	-2	9	26	0	42	1	2	15	26	39	19	39	-1	5	27	264	286	8	4	11	27	112	146	13
-6	3	26	114	65	52	-1	9	26	128	111	9	3	15	26	0	34	1	0	5	27	177	155	10	5	11	27	123	107	17
-5	3	26	107	92	24	0	9	26	40	27	39	4	15	26	124	102	19	1	5	27	175	183	10	6	11	27	112	99	26
-4	3	26	274	277	14	1	9	26	96	112	18	5	15	26	0	12	1	2	5	27	106	85	12	-7	12	27	65	5	65
-3	3	26	240	227	7	2	9	26	145	150	34	-6	16	26	66	23	27	3	5	27	65	52	65	-6	12	27	81	28	59
-2	3	26	82	80	21	3	9	26	41	27	41	-5	16	26	132	117	80	4	5	27	69	90	18	-5	12	27	72	39	72
-1	3	26	120	143	10	4	9	26	110	48	11	-4	16	26	87	51	15	5	5	27	85	31	15	-4	12	27	128	101	10
0	3	26	95	51	12	5	9	26	154	107	19	-3	16	26	126	116	66	-8	6	27	111	26	20	-3	12	27	79	51	40
1	3	26	52	97	51	6	9	26	38	83	37	-2	16	26	74	25	23	-7	6	27	147	144	18	-2	12	27	59	35	32
2	3	26	0	52	1	7	9	26	24	0	23	-1	16	26	31	24	31	-6	6	27	98	108	10	-1	12	27	181	177	8
3	3	26	93	55	15	-8	10	26	52	76	51	0	16	26	88	70	15	-5	6	27	67	45	15	0	12	27	134	132	19
4	3	26	98	81	13	-7	10	26	104	75	76	1	16	26	39	2	39	-4	6	27	102	99	11	1	12	27	96	11	20
5	3	26	0	44	1	-6	10	26	202	185	24	2	16	26	105	93	38	-3	6	27	195	203	8	2	12	27	0	47	1
-7	4	26	80	112	17	-5	10	26	104	96	57	3	16	26	66	45	43	-2	6	27	0	29	1	3	12	27	0	24	1
-6	4	26	28	16	27	-4	10	26	94	91	33	4	16	26	143	102	16	-1	6	27	172	170	30	4	12	27	60	63	27
-5	4	26	43	26	42	-3	10	26	81	87	12	-5	17	26	68	62	24	0	6	27	235	225	8	5	12	27	92	69	23
-4	4	26	66	54	15	-2	10	26	298	319	8	-4	17	26	99	82	13	1	6	27	69	106	20	6	12	27	0	23	1
-3	4	26	155	165	10	-1	10	26	100	96	11	-3	17	26	36	56	36	2	6	27	84	101	15	-7	13	27	102	152	20
-2	4	26	93	61	20	0	10	26	0	14	1	-2	17	26	73	37	18	3	6	27	54	0	24	-6	13	27	86	81	16
-1	4	26	126	154	10	1	10	26	0	13	1	-1	17	26	0	59	1	4	6	27	0	5	1	-5	13	27	85	126	55
0	4	26	0	14	1	2	10	26	100	14	17	0	17	26	51	55	51	5	6	27	104	116	30	-4	13	27	47	23	36
1	4	26	194	199	12	3	10	26	103	110	12	1	17	26	77	75	36	-8	7	27	134	7	16	-3	13	27	57	53	19
2	4	26	97	58	14	4	10	26	106	128	38	2	17	26	86	57	85	-7	7	27	125	91	32	-2	13	27	43	15	43
3	4	26	42	59	41	5	10	26	23	24	22	4	17	26	118	2	19	-6	7	27	111	91	18	-1	13	27	0	39	1
4	4	26	126	127	13	6	10	26	32	59	32	-3	18	26	83	29	22	-5	7	27	105	83	16	0	13	27	72	7	25
5	4	26	41	16	41	7	10	26	0	36	1	-2	18	26	147	100	27	-4	7	27	105	108	10	1	13	27	41	24	40
-9	5	26	61	32	60	-8	11	26	77	52	15	-1	18	26	55	1	30	-3	7	27	34	31	34	2	13	27	74	54	29
-7	5	26	162	162	11	-7	11	26	85	53	14	0	18	26	72	53	19	-2	7	27	201	196	8	3	13	27	18	23	17
-6	5	26	84	25	11	-6	11	26	113	0	57	3	18	26	79	19	33	-1	7	27	84	46	14	4	13	27	155	27	100
-5	5	26	76	81	12	-5	11	26	128	127	21	0	19	26	179	175	14	0	7	27	175	185	9	5	13	27	78	101	34
-4	5	26	57	45	57	-4	11	26	113	127	10	1	19	26	103	25	20	1	7	27	48	98	32	-6	14	27	205	204	11
-3	5	26	287	306	7	-3	11	26	145	143	31	2	19	26	191	142	13	2	7	27	49	58	29	-5	14	27	140	78	9
-2	5	26	246	259	8	-2	11	26	141	121	9	-6	1	27	73	58	18	3	7	27	56	46	23	-4	14	27	55	34	24
-1	5	26	141	170	10	-1	11	26	80	77	14	-5	1	27	39	31	33	4	7	27	124	4	16	-3	14	27	92	61	12
0	5	26	144	139	10	0	11	26	35	46	34	-4	1	27	111	78	9	5	7	27	98	69	18	-2	14	27	36	5	35
1	5	26	110	53	16	1	11	26	102	104	12	-3	1	27	72	14	14	-8	8	27	131	18	17	-1	14	27	63	5	19
2	5	26	109	105	13	2	11	26	73	68	17	-1	1	27	0	46	1	-7	8	27	74	5	29	0	14	27	75	81	21
3	5	26	68	67	19	3	11	26	87	79	15	0	1	27	176	161	8	-6	8	27	65	57	22	1	14	27	117	124	24
4	5	26	167	149	15	4	11	26	100	96	23	1	1	27	266	241	8	-5	8	27	55	20	32	2	14	27	80	58	33
5	5	26	128	29	30	5	11	26	93	54	21	2	1	27	46	10	46	-4	8	27	110	68	35	3	14	27	0	37	1
-8	6	26	62	39	38	6	11	26	110	11	25	3	1	27	43	70	43	-3	8	27	55	23	55	4	14	27	0	23	1
-7	6	26	76	62	29	-8	12	26	84	25	20	4	1	27	38	28	38	-2	8	27	104	92	10	5	14	27	0	11	1
-6	6	26	0	24	1	-7	12	26	145	92	9	5	1	27	266	263	14	-1	8	27	103	92	12	-6	15	27	114	29	16
-5	6	26	160	181	21	-6	12	26	97	73	19	-7	2	27	68	51	20	0	8	27	65	27	23	-5	15	27	120	61	15
-4	6	26	288	280	7	-5	12	26	65	33	24	-6	2	27	82	49	47	1	8	27	30	0	29	-4	15	27	108	45	15
-3	6	26	45	52	26	-4	12	26	45	69	45	-5	2	27	51	56	50	2	8	27	120	127	11	-3	15	27	35	17	35
-2	6	26	63	8	28	-3	12	26	24	29	23	-4	2	27	32	29	31	3	8	27	0	65	1	-2	15	27	66	78	19
-1	6	26	37	13	37	-2	12	26	136	92	10	-3	2	27	214	235	7	4	8	27	204	196	11	-1	15	27	39	52	39

Table 6S. Observed and calculated structure factors for 2:5

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
-6	1	28	149	167	12	3	7	28	109	62	39	-4	15	28	99	68	17	-7	7	29	72	27	23	1	15	29	74	88	28
-4	1	28	0	22	1	4	7	28	56	7	22	-3	15	28	152	140	40	-6	7	29	207	176	12	2	15	29	124	121	18
-3	1	28	103	125	12	5	7	28	112	88	16	-2	15	28	31	16	30	-5	7	29	106	30	10	-6	0	30	0	23	1
-2	1	28	130	154	10	-7	8	28	87	69	54	-1	15	28	0	18	1	-3	7	29	159	136	12	-4	0	30	108	90	15
-1	1	28	114	110	10	-6	8	28	89	17	12	0	15	28	40	33	40	-2	7	29	141	126	18	-3	0	30	75	76	21
0	1	28	0	51	1	-5	8	28	107	139	9	1	15	28	117	0	17	-1	7	29	100	80	12	-2	0	30	186	224	12
1	1	28	39	79	38	-4	8	28	86	83	43	2	15	28	0	5	1	0	7	29	111	107	18	-1	0	30	78	107	21
2	1	28	0	39	1	-3	8	28	97	92	11	3	15	28	142	96	18	1	7	29	257	228	8	0	0	30	343	333	12
3	1	28	81	105	37	-2	8	28	34	40	34	-1	16	28	63	38	46	2	7	29	65	70	64	1	0	30	105	93	19
4	1	28	147	150	10	-1	8	28	114	101	11	0	16	28	12	9	11	3	7	29	33	5	32	2	0	30	298	291	12
5	1	28	80	121	38	0	8	28	29	21	28	1	16	28	94	125	25	4	7	29	75	44	27	3	0	30	98	29	21
-7	2	28	61	41	23	1	8	28	0	14	1	2	16	28	0	10	1	5	7	29	118	22	15	4	0	30	107	171	19
-6	2	28	86	74	11	2	8	28	79	37	23	3	16	28	0	20	1	-7	8	29	149	145	33	5	0	30	0	6	1
-5	2	28	0	3	1	3	8	28	51	47	50	-6	1	29	87	63	27	-6	8	29	132	137	18	-6	1	30	80	85	18
-4	2	28	74	62	14	4	8	28	120	107	74	-5	1	29	155	142	10	-5	8	29	0	25	1	-5	1	30	27	22	26
-3	2	28	75	30	22	5	8	28	74	20	26	-4	1	29	94	88	11	-4	8	29	65	38	29	-4	1	30	111	108	34
-2	2	28	15	36	15	-7	9	28	152	141	36	-3	1	29	86	64	12	-3	8	29	46	11	30	-3	1	30	157	168	27
-1	2	28	66	90	46	-6	9	28	159	115	16	-2	1	29	73	33	39	-2	8	29	35	8	34	-2	1	30	112	102	11
0	2	28	83	75	40	-5	9	28	32	25	31	-1	1	29	47	45	46	-1	8	29	69	20	17	-1	1	30	60	40	20
1	2	28	68	7	18	-4	9	28	172	178	8	0	1	29	59	13	23	0	8	29	0	34	1	1	1	30	66	68	25
2	2	28	0	12	1	-3	9	28	55	49	31	1	1	29	155	145	27	1	8	29	64	39	34	2	1	30	26	22	26
3	2	28	0	89	1	-2	9	28	63	51	28	2	1	29	71	49	18	2	8	29	57	19	22	3	1	30	56	93	55
4	2	28	107	56	12	-1	9	28	0	35	1	3	1	29	110	94	13	3	8	29	104	100	13	4	1	30	95	104	16
5	2	28	76	72	18	0	9	28	0	8	1	4	1	29	28	29	27	4	8	29	153	126	9	5	1	30	181	171	10
-7	3	28	80	101	17	1	9	28	60	61	21	5	1	29	203	188	9	5	8	29	129	79	17	-6	2	30	125	131	23
-6	3	28	86	49	12	2	9	28	79	29	16	-6	2	29	59	61	17	-7	9	29	202	188	21	-5	2	30	0	49	1
-5	3	28	0	15	1	3	9	28	0	24	1	-5	2	29	190	187	12	-6	9	29	176	172	15	-4	2	30	33	46	32
-4	3	28	73	7	21	4	9	28	81	33	36	-4	2	29	74	7	18	-5	9	29	69	51	16	-3	2	30	142	160	21
-3	3	28	42	1	42	5	9	28	182	157	13	-3	2	29	46	99	25	-4	9	29	86	15	19	-2	2	30	59	33	18
-2	3	28	0	56	1	6	9	28	34	83	33	-2	2	29	0	22	1	-3	9	29	52	46	51	-1	2	30	98	88	12
-1	3	28	80	46	18	-7	10	28	197	173	19	-1	2	29	43	70	42	-2	9	29	70	84	20	0	2	30	59	84	59
0	3	28	231	228	20	-6	10	28	133	63	25	0	2	29	143	136	10	-1	9	29	74	81	16	1	2	30	55	80	55
1	3	28	0	37	1	-5	10	28	52	28	51	1	2	29	164	156	9	0	9	29	133	133	16	2	2	30	87	14	21
2	3	28	0	34	1	-4	10	28	253	259	12	2	2	29	102	51	29	1	9	29	75	63	17	3	2	30	50	2	50
3	3	28	45	18	45	-3	10	28	224	240	11	3	2	29	99	115	20	2	9	29	63	37	24	4	2	30	119	96	118
4	3	28	70	42	34	-2	10	28	169	145	8	4	2	29	0	21	1	3	9	29	46	60	46	5	2	30	77	96	29
5	3	28	0	60	1	-1	10	28	85	88	14	5	2	29	147	125	18	4	9	29	93	84	14	-7	3	30	34	25	33
-7	4	28	0	38	1	0	10	28	167	161	9	-7	3	29	74	85	20	5	9	29	101	45	22	-6	3	30	91	49	51
-6	4	28	69	48	52	1	10	28	0	48	1	-6	3	29	75	45	22	-6	10	29	169	152	9	-5	3	30	47	3	26
-5	4	28	85	56	18	2	10	28	136	75	42	-5	3	29	137	118	13	-5	10	29	80	70	38	-4	3	30	53	49	52
-4	4	28	36	72	36	3	10	28	145	133	11	-4	3	29	133	172	14	-4	10	29	121	118	10	-3	3	30	135	116	19
-3	4	28	85	70	13	4	10	28	59	90	44	-3	3	29	254	246	7	-3	10	29	134	148	9	-2	3	30	56	43	55
-2	4	28	63	65	42	5	10	28	107	23	18	-2	3	29	0	6	1	-2	10	29	164	169	17	-1	3	30	140	131	10
-1	4	28	244	258	8	6	10	28	120	12	26	-1	3	29	0	42	1	-1	10	29	58	60	57	0	3	30	216	249	8
0	4	28	100	82	23	-7	11	28	123	22	33	0	3	29	87	31	39	0	10	29	65	74	64	1	3	30	66	74	65
1	4	28	69	93	17	-6	11	28	49	56	25	1	3	29	201	196	10	1	10	29	63	44	63	2	3	30	109	4	19
2	4	28	192	165	21	-5	11	28	116	67	10	2	3	29	72	91	18	2	10	29	123	91	12	3	3	30	102	71	52
3	4	28	67	40	40	-4	11	28	54	11	53	3	3	29	35	66	35	3	10	29	97	84	97	4	3	30	92	11	22
4	4	28	138	88	15	-3	11	28	0	38	1	4	3	29	44	39	43	4	10	29	35	36	34	5	3	30	44	13	44
5	4	28	54	29	53	-2	11	28	139	155	12	5	3	29	59	97	27	5	10	29	108	14	19	-7	4	30	140	90	11
-7	5	28	55	121	33	-1	11	28	153	139	9	-7	4	29	77	84	21	-6	11	29	48	23	47	-6	4	30	169	171	25
-6	5	28	70	21	21	0	11	28	47	33	46	-6	4	29	155	167	8	-5	11	29	185	116	20	-5	4	30	67	41	26
-5	5	28	35	32	35	1	11	28	105	48	17	-5	4	29	74	61	74	-4	11	29	0	44	1	-4	4	30	108	101	11
-4	5	28	50	41	35	2	11	28	33	3	33	-4	4	29	81	79	14	-3	11	29	122	130	19	-3	4	30	82	61	14
-3	5	28	252	254	7	3	11	28	75	2	18	-3	4	29	20	38	20	-2	11	29	89	87	23	-2	4	30	70	17	16
-2	5	28	133	134	10	4	11	28	51	86	51	-2	4	29	66	59	18	-1	11	29	172	156	17	-1	4	30	109	109	13
-1	5	28	41	59	41	5	11	28	63	31	37	-1	4	29	65	42	18	0	11	29	104	122	13	0	4	30	0	15	1
0	5	28	0	17	1	-7	12	28	120	17	17	0	4	29	52	54	47	1	11	29	72	75	71	1	4	30	0	29	1
1	5	28	137	93	14	-6	12	28	116	64	14	1																	

Table 6S. Observed and calculated structure factors for 1

Page 29

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	7	30	24	29	24	-3	12	30	60	45	25	4	4	31	76	89	43	-1	10	31	127	141	14	-2	5	32	61	20	37
-5	7	30	145	118	41	-2	12	30	0	23	1	5	4	31	90	83	23	0	10	31	17	51	17	-1	5	32	56	92	56
-4	7	30	33	31	32	-1	12	30	137	126	13	-7	5	31	136	50	16	1	10	31	75	9	75	0	5	32	105	84	12
-3	7	30	142	121	10	0	12	30	95	79	14	-6	5	31	57	71	57	2	10	31	133	135	17	-1	5	32	133	152	18
-2	7	30	73	99	72	1	12	30	62	75	23	-5	5	31	61	49	19	-2	11	31	141	107	15	2	5	32	39	42	38
-1	7	30	87	5	14	2	12	30	0	21	1	-4	5	31	57	20	41	-1	11	31	105	111	13	3	5	32	73	8	73
0	7	30	117	127	24	3	12	30	26	20	26	-3	5	31	57	11	41	1	11	31	107	110	21	4	5	32	141	125	16
1	7	30	79	64	15	-2	13	30	0	61	1	-2	5	31	39	41	39	2	11	31	51	25	50	-5	6	32	0	52	1
2	7	30	24	9	23	-1	13	30	47	18	47	-1	5	31	103	116	30	-6	0	32	73	67	24	-4	6	32	172	171	9
3	7	30	73	7	73	0	13	30	0	73	1	0	5	31	99	124	12	-5	0	32	159	128	12	-3	6	32	104	98	13
4	7	30	43	31	42	1	13	30	224	223	14	1	5	31	182	127	27	-4	0	32	106	100	15	-2	6	32	95	108	18
5	7	30	123	15	19	2	13	30	155	152	16	2	5	31	154	145	13	-3	0	32	246	252	11	-1	6	32	73	24	17
-7	8	30	188	44	13	-6	1	31	183	153	16	3	5	31	163	147	10	-2	0	32	34	21	34	0	6	32	92	75	42
-6	8	30	187	163	8	-5	1	31	114	133	25	4	5	31	49	55	49	-1	0	32	47	45	47	1	6	32	0	35	1
-5	8	30	32	19	31	-4	1	31	0	5	1	-6	6	31	0	16	1	1	0	32	42	67	42	2	6	32	0	28	1
-4	8	30	69	32	56	-3	1	31	40	86	39	-5	6	31	90	76	13	2	0	32	60	36	40	3	6	32	135	142	16
-3	8	30	48	78	30	-2	1	31	80	46	19	-4	6	31	99	83	14	3	0	32	0	51	1	-5	7	32	145	75	12
-2	8	30	213	203	15	-1	1	31	154	150	9	-3	6	31	123	113	14	4	0	32	30	24	29	-3	7	32	190	213	15
-1	8	30	144	123	10	0	1	31	86	108	23	-2	6	31	18	37	17	-6	1	32	83	102	13	-2	7	32	187	154	9
0	8	30	217	210	13	1	1	31	55	22	54	-1	6	31	188	204	9	-5	1	32	75	83	14	-1	7	32	67	15	24
1	8	30	0	61	1	2	1	31	62	35	32	0	6	31	42	10	42	-4	1	32	60	68	59	0	7	32	146	123	10
2	8	30	104	88	12	3	1	31	81	73	26	1	6	31	0	7	1	-3	1	32	80	50	34	1	7	32	257	245	12
3	8	30	70	76	20	4	1	31	39	10	38	2	6	31	90	56	14	-1	1	32	33	22	32	2	7	32	227	176	31
4	8	30	102	25	31	5	1	31	0	38	1	3	6	31	97	142	40	0	1	32	76	3	49	3	7	32	19	26	19
5	8	30	136	32	16	-6	2	31	87	68	12	4	6	31	91	26	91	1	1	32	119	18	17	-4	8	32	53	45	52
-6	9	30	150	181	12	-5	2	31	129	129	34	-5	7	31	116	41	19	2	1	32	0	65	1	-3	8	32	193	165	12
-5	9	30	0	52	1	-4	2	31	67	16	25	-4	7	31	46	0	46	3	1	32	49	58	49	-2	8	32	195	182	11
-4	9	30	59	11	59	-3	2	31	149	141	18	-3	7	31	122	121	11	4	1	32	66	8	37	-1	8	32	63	26	62
-3	9	30	94	146	14	-2	2	31	81	65	20	-2	7	31	150	117	46	-6	2	32	90	97	12	0	8	32	0	7	1
-2	9	30	220	230	10	-1	2	31	175	187	9	-1	7	31	146	128	13	-5	2	32	82	65	14	1	8	32	118	78	17
-1	9	30	147	139	10	0	2	31	159	172	20	0	7	31	90	74	14	-4	2	32	0	16	1	2	8	32	164	153	15
0	9	30	89	92	15	1	2	31	96	68	18	1	7	31	79	54	42	-3	2	32	169	154	8	-4	1	33	95	26	19
1	9	30	31	18	30	2	2	31	75	82	18	2	7	31	0	16	1	-2	2	32	91	18	19	-3	1	33	27	56	26
2	9	30	120	113	14	3	2	31	72	68	19	3	7	31	43	9	43	-1	2	32	79	12	15	-2	1	33	37	34	36
3	9	30	60	91	60	4	2	31	62	82	62	4	7	31	76	77	20	0	2	32	117	139	12	-1	1	33	94	63	19
4	9	30	109	32	19	5	2	31	143	59	16	-6	8	31	70	13	22	1	2	32	74	5	18	0	1	33	82	0	61
-6	10	30	110	23	15	-6	3	31	125	123	11	-5	8	31	34	36	34	2	2	32	45	75	45	1	1	33	0	40	1
-5	10	30	71	43	18	-5	3	31	67	38	17	-4	8	31	43	22	42	4	2	32	122	55	13	2	1	33	0	31	1
-4	10	30	267	276	8	-4	3	31	63	85	18	-3	8	31	36	6	36	-6	3	32	86	97	13	-4	2	33	159	169	13
-3	10	30	119	109	10	-3	3	31	83	74	14	-2	8	31	189	156	14	-5	3	32	87	34	22	-3	2	33	103	31	19
-2	10	30	182	183	10	-2	3	31	0	23	1	-1	8	31	40	17	40	-4	3	32	0	7	1	-2	2	33	93	57	13
-1	10	30	0	13	1	-1	3	31	75	71	75	0	8	31	59	13	58	-3	3	32	11	62	10	-1	2	33	59	18	44
0	10	30	169	176	10	0	3	31	134	101	32	1	8	31	83	80	15	-2	3	32	115	109	11	1	2	33	59	114	56
1	10	30	103	60	13	1	3	31	74	50	18	2	8	31	97	101	13	-1	3	32	118	117	11	2	2	33	0	14	1
2	10	30	74	57	19	2	3	31	180	131	9	3	8	31	147	139	34	1	3	32	69	84	20	-4	3	33	195	162	13
3	10	30	141	97	34	3	3	31	119	98	12	4	8	31	126	79	17	2	3	32	89	0	21	-3	3	33	29	51	28
-6	11	30	0	7	1	4	3	31	57	43	56	-5	9	31	197	224	11	3	3	32	102	2	21	-2	3	33	62	94	60
-5	11	30	124	24	14	5	3	31	82	63	63	-4	9	31	90	66	48	-6	4	32	75	12	22	-1	3	33	84	58	16
-4	11	30	100	17	26	-7	4	31	96	82	17	-3	9	31	95	120	12	-5	4	32	107	83	33	0	3	33	158	146	11
-3	11	30	0	26	1	-6	4	31	43	58	43	-2	9	31	42	47	41	-4	4	32	0	5	1	1	3	33	94	13	18
-2	11	30	88	60	87	-4	4	31	65	82	18	-1	9	31	45	29	44	-2	4	32	148	154	10	-3	4	33	0	29	1
-1	11	30	138	138	40	-3	4	31	165	141	9	0	9	31	76	95	17	-1	4	32	253	236	9	-2	4	33	88	39	22
0	11	30	102	101	14	-2	4	31	52	14	52	1	9	31	116	48	12	2	4	32	40	15	39	-1	4	33	44	29	43
1	11	30	134	102	21	-1	4	31	37	34	37	2	9	31	0	42	1	3	4	32	104	101	18	0	4	33	52	5	52
2	11	30	60	54	59	0	4	31	77	24	77	3	9	31	0	4	1	4	4	32	0	17	1	1	4	33	107	86	13
3	11	30	66	36	65	1	4	31	150	130	19	-4	10	31	0	26	1	-5	5	32	108	74	25	-2	5	33	103	55	18
4	11	30	0	29	1	2	4	31	138	103	13	-3	10	31	202	220	8	-4	5	32	51	90	51	-1	5	33	191	168	31
-4	12	30	115	79	16	3	4	31	47	18	46	-2	10	31	51	55	28	-3	5	32	0	5	1	0	5	33	107	134	18