

AM-90-425

Variation of displacement parameters in structure refinements of low albite

Th. Armbruster, H. B. Burgi, M. Kunz, E. Gnos, St. Bronnimann, Ch. Lienert

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 75, 1-2, 135-140.

(2) 1-17

Table 2 (for deposit)

Observed and calculated structure factors of Roc Tourné low albite  
(17 pages).

Variation of displacement parameters in structure  
refinements of low albite

Th. Armbruster, H.B. Bürgi, M. Kunz

Laboratory for Chemical and Mineralogical Crystallography,  
University of Bern, Freiestr. 3, CH-3012 Bern, Switzerland

E. Gnos

Mineralogical and Petrographical Institute, University Bern,  
Baltzerstr. 1, CH-3012 Bern, Switzerland

S. Brönnimann, and Ch. Lienert

Institute for Inorganic Chemistry, University of Bern,  
Freistr.3, CH-3012 Bern, Switzerland.

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
2	-2	-12	4.90	4.91	10	-2	-12	2.57	2.26	11	-1	-11	6.07	5.95
2	0	-12	2.24	2.02	10	0	-12	5.46	5.42	11	1	-11	1.16	1.64
2	2	-12	7.39	7.23	10	2	-12	1.04	1.91	11	3	-11	2.23	1.35
2	4	-12	0.00	1.91	10	4	-12	2.55	2.81	11	5	-11	9.11	9.30
2	6	-12	4.52	4.55	10	6	-12	0.00	0.52	11	7	-11	4.65	4.42
3	-5	-12	1.44	1.43	0	2	-11	15.27	14.77	11	9	-11	1.32	1.35
3	-3	-12	12.06	12.03	0	4	-11	4.03	3.66	11	-2	-11	10.85	10.76
3	-1	-12	4.65	4.84	0	6	-11	4.79	4.79	12	0	-11	1.37	0.80
3	1	-12	0.87	1.79	0	8	-11	7.98	8.06	12	2	-11	15.79	15.63
3	3	-12	6.34	6.11	1	-7	-11	15.22	14.86	12	4	-11	5.15	5.03
3	5	-12	0.00	0.37	1	-5	-11	2.62	2.96	12	6	-11	4.94	4.77
3	7	-12	8.40	8.46	1	-3	-11	10.34	10.43	12	8	-11	5.58	5.45
4	-6	-12	3.19	2.78	1	-1	-11	5.88	5.97	0	2	-10	0.00	1.26
4	-4	-12	5.69	5.47	1	1	-11	2.35	3.41	0	4	-10	0.00	1.26
4	-2	-12	0.00	1.80	1	3	-11	3.28	3.31	0	6	-10	4.26	4.23
4	0	-12	0.95	0.41	1	5	-11	6.73	6.85	0	8	-10	3.54	3.32
4	2	-12	7.95	7.81	1	7	-11	9.67	9.59	0	10	-10	4.11	4.00
4	4	-12	2.19	0.24	1	9	-11	2.98	3.06	0	12	-10	8.39	8.29
4	6	-12	4.63	4.57	2	-8	-11	0.00	1.95	1	-11	-10	0.69	1.58
4	8	-12	3.49	3.64	2	-6	-11	4.77	4.73	1	-9	-10	2.92	3.25
5	-5	-12	3.37	3.20	2	-4	-11	12.34	12.13	1	-7	-10	9.20	9.33
5	-3	-12	2.64	2.46	2	-2	-11	2.64	2.71	1	-5	-10	0.00	0.44
5	-1	-12	12.25	12.41	2	0	-11	5.91	5.71	1	-3	-10	3.41	3.48
5	1	-12	7.07	6.95	2	2	-11	14.27	13.86	1	-1	-10	6.57	6.41
5	3	-12	0.38	1.30	2	4	-11	0.00	0.36	1	1	-10	4.02	3.94
5	5	-12	5.77	5.62	2	6	-11	3.76	3.54	1	3	-10	2.11	1.88
5	7	-12	2.14	1.07	2	8	-11	3.93	3.96	1	5	-10	2.70	2.60
5	9	-12	6.13	6.15	2	10	-11	2.04	2.25	1	7	-10	2.49	1.86
5	-6	-12	5.71	5.54	3	-9	-11	4.20	4.06	1	9	-10	2.38	2.45
6	-4	-12	11.84	12.17	3	-7	-11	6.09	6.13	1	11	-10	5.37	5.45
6	-2	-12	6.08	6.11	3	-5	-11	2.52	1.90	1	13	-10	2.65	3.54
6	0	-12	7.36	7.14	3	-3	-11	6.76	7.03	1	15	-10	2.83	5.89
6	2	-12	5.04	5.07	3	-1	-11	10.58	10.60	2	-10	-10	1.60	0.15
6	4	-12	3.57	3.51	3	1	-11	1.88	0.13	2	-8	-10	2.35	1.28
6	6	-12	10.48	10.68	3	3	-11	6.59	6.39	2	-6	-10	7.76	7.82
6	8	-12	2.00	1.29	3	5	-11	5.79	5.78	2	-4	-10	0.00	0.61
6	10	-12	12.72	12.46	3	7	-11	4.06	4.20	2	-2	-10	0.00	11.14
7	-5	-12	5.22	5.05	3	9	-11	2.40	2.94	2	0	-10	0.00	0.07
7	-3	-12	6.98	6.76	3	11	-11	7.42	7.41	2	2	-10	11.11	12.58
7	-1	-12	8.15	8.29	4	-10	-11	10.66	10.71	2	4	-10	12.90	13.93
7	1	-12	4.89	4.81	4	-8	-11	8.62	8.44	2	6	-10	14.19	3.47
7	3	-12	2.31	2.16	4	-6	-11	19.50	19.04	2	8	-10	3.36	14.04
7	5	-12	2.08	2.17	4	-4	-11	14.31	14.21	2	10	-10	4.29	7.15
7	7	-12	2.10	2.37	4	-2	-11	6.27	6.38	2	12	-10	7.23	2.36
7	9	-12	3.34	3.47	4	0	-11	10.78	10.42	3	14	-10	8.52	8.63
8	-6	-12	2.41	2.19	4	2	-11	2.68	3.07	3	16	-10	12.39	12.26
8	-4	-12	0.00	0.76	4	4	-11	8.11	8.12	3	18	-10	1.85	1.83
8	-2	-12	10.67	10.65	4	6	-11	10.42	10.19	3	20	-10	8.55	8.51
8	0	-12	2.41	1.34	4	8	-11	11.20	11.38	3	22	-10	2.53	2.74
8	2	-12	12.48	11.89	4	10	-11	18.32	18.35	3	24	-10	1.14	1.10
8	4	-12	5.48	5.47	4	12	-11	3.88	3.97	3	26	-10	10.66	10.69
8	6	-12	11.08	11.34	5	-9	-11	6.02	5.94	3	28	-10	4.13	3.97
8	8	-12	2.96	2.91	5	-7	-11	1.53	2.13	3	30	-10	11.05	10.72
9	-5	-12	5.83	5.69	5	-5	-11	3.80	3.82	3	32	-10	7.38	7.19
9	-3	-12	11.96	11.81	5	-3	-11	2.15	2.44	3	34	-10	3.21	3.21
9	-1	-12	6.12	5.72	5	-1	-11	9.37	9.40	3	36	-10	0.00	0.00
9	1	-12	1.23	0.95	5	1	-11	10.09	10.19	3	38	-10	3.87	3.92
9	3	-12	2.78	2.22	5	3	-11	10.06	9.91	3	40	-10	0.00	2.58
9	5	-12	1.24	0.70	5	5	-11	14.15	14.13	4	42	-10	10.44	10.35
9	7	-12	10.89	10.82	5	7	-11	2.38	2.47	4	44	-10	10.44	10.35

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
4	-8	-10	4.11	4.08	8	-2	-10	9.41	9.39	0	8	-9	7.38	7.30
4	-6	-10	3.09	3.18	8	0	-10	1.30 LR	1.67	0	10	-9	4.82	4.70
4	-4	-10	6.09	6.05	8	2	-10	11.18	10.92	0	12	-9	8.08	7.91
4	-2	-10	7.55	7.48	8	4	-10	12.71	12.72	0	14	-9	3.52	3.76
4	0	-10	5.01	4.92	8	6	-10	12.83	13.24	0	13	-9	6.95	6.80
4	2	-10	2.56	2.45	8	8	-10	0.00 LR	0.47	1	-11	-9	2.55 LR	1.68
4	4	-10	2.34	1.46	8	10	-10	7.90	7.69	1	-9	-9	5.77	5.73
4	6	-10	6.85	6.70	8	12	-10	1.33 LR	0.62	1	-7	-9	17.28	17.15
4	8	-10	9.63	9.61	8	14	-10	7.48	7.39	1	-5	-9	7.28	7.18
4	10	-10	2.13	2.13	9	11	-10	5.40	5.20	1	-3	-9	10.29	10.25
4	12	-10	5.32	5.30	9	9	-10	5.32	5.37	1	-1	-9	8.51	8.55
4	14	-10	6.71	6.71	9	7	-10	2.59 LR	1.52	1	1	-9	2.56	2.72
5	-13	-10	4.89	4.78	9	5	-10	5.52	5.48	1	3	-9	7.54	7.46
5	-11	-10	18.14	17.92	9	3	-10	3.02	2.62	1	5	-9	13.66	13.96
5	-9	-10	2.36	0.03	9	1	-10	10.82	10.42	1	7	-9	18.26	18.20
5	-7	-10	7.00	6.97	9	1	-10	13.16	12.45	1	9	-9	2.28 LR	0.92
5	-5	-10	15.80	16.01	9	3	-10	7.61	7.35	1	11	-9	2.40 LR	23.35
5	-3	-10	20.58	20.92	9	5	-10	4.95	4.94	1	13	-9	6.62	2.90
5	-1	-10	18.21	18.60	9	7	-10	1.58 LR	2.35	1	15	-9	5.42	5.31
5	1	-10	9.60	9.22	9	9	-10	0.00 LR	1.37	2	-14	-9	3.03	2.99
5	3	-10	13.72	13.52	9	11	-10	5.93	0.65	2	-12	-9	12.19 LR	12.19
5	5	-10	9.51	9.29	10	-10	-10	5.93	5.78	2	-8	-9	2.09 LR	0.31
5	7	-10	2.61	2.25	10	-8	-10	6.40	6.29	2	-6	-9	16.52	16.43
5	9	-10	11.58	11.49	10	-6	-10	5.45	5.22	2	-4	-9	15.55	15.72
5	11	-10	0.00	0.72	10	-4	-10	5.96	5.78	2	-2	-9	6.11	6.15
5	13	-10	10.37	10.29	10	-2	-10	1.56 LR	0.85	2	0	-9	7.75	7.82
5	15	-10	6.99	6.81	10	0	-10	1.71 LR	2.22	2	2	-9	6.59	6.64
6	-12	-10	0.00	0.48	10	2	-10	3.87	3.80	2	4	-9	10.37	10.63
6	-10	-10	0.00	0.03	10	4	-10	7.63	7.44	2	6	-9	4.53	4.49
6	-8	-10	2.95	3.19	10	6	-10	4.55	4.63	2	8	-9	18.43	17.96
6	-6	-10	0.00	0.25	10	8	-10	5.34	5.41	2	10	-9	14.21	14.10
6	-4	-10	6.54	6.63	10	10	-10	10.75	10.95	2	12	-9	4.03	3.95
6	-2	-10	2.27	0.29	10	12	-10	7.36	7.15	2	14	-9	12.77 LR	12.62
6	2	-10	3.10	2.95	11	-7	-10	2.91	2.76	2	16	-9	2.19	1.84
6	4	-10	2.57	2.15	11	-5	-10	6.31	6.27	3	-15	-9	18.27 LR	17.65
6	6	-10	3.24	2.21	11	-3	-10	3.25	3.51	3	-13	-9	11.05	11.23
6	8	-10	1.86	3.41	11	-1	-10	13.99	13.73	3	-11	-9	4.99	4.99
6	10	-10	3.86	0.86	11	1	-10	4.98	4.90	3	-9	-9	6.71	6.71
6	12	-10	2.69	3.95	11	3	-10	7.78	7.83	3	-7	-9	13.97	14.03
6	14	-10	12.11	12.05	11	5	-10	0.66 LR	0.46	3	-5	-9	0.00 LR	0.40
7	-11	-10	11.19	10.99	11	7	-10	0.67 LR	1.98	3	-3	-9	24.68	24.93
7	-9	-10	17.44	17.14	11	9	-10	5.51 LR	5.48	3	-1	-9	16.67	16.82
7	-7	-10	0.00	0.60	12	-6	-10	1.05 LR	0.44	3	3	-9	26.06	25.96
7	-5	-10	19.43	19.27	12	-4	-10	0.78 LR	1.70	3	5	-9	20.26	20.06
7	-3	-10	3.09	2.85	12	-2	-10	6.36	6.30	3	7	-9	7.06	6.82
7	-1	-10	0.76	1.18	12	0	-10	0.55 LR	1.39	3	9	-9	7.35	7.14
7	1	-10	8.81	8.56	12	2	-10	7.95 LR	7.96	3	11	-9	0.00	0.58
7	3	-10	1.83	2.40	12	4	-10	2.59 LR	3.13	3	13	-9	8.09	7.93
7	5	-10	14.38	14.74	12	6	-10	2.93	3.20	3	15	-9	8.15	8.01
7	7	-10	5.59	5.16	12	8	-10	3.31	3.15	3	17	-9	8.54	8.11
7	9	-10	3.71	3.79	13	-3	-10	10.80	10.63	4	-14	-9	2.79 LR	8.11
7	11	-10	5.19	4.83	13	-1	-10	2.74 LR	2.91	4	-12	-9	13.09	12.95
7	13	-10	8.48	8.34	13	1	-10	7.28	7.18	4	-10	-9	5.18	5.10
8	-12	-10	3.65	3.51	13	3	-10	7.72	7.63	4	-8	-9	0.00 LR	0.38
8	-10	-10	0.75	2.19	13	5	-10	0.40 LR	0.20	4	-6	-9	14.22	14.41
8	-8	-10	1.86	1.65	0	2	-9	33.12	32.78	4	-4	-9	11.49	11.97
8	-6	-10	1.75	1.60	0	4	-9	0.00 LR	0.87	4	-2	-9	8.67	9.11
8	-4	-10			0	6	-9	17.35	16.96	4	0	-9	9.11	9.36

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
8	-8	-9	4.34	4.33	12	4	-9	6.37	6.48	3	-5	-8	4.20	4.23
8	-6	-9	24.11	23.71	12	6	-9	0.00	0.43	3	-3	-8	8.52	8.62
8	-4	-9	14.24	14.10	12	8	-9	6.49	6.21	3	-1	-8	20.55	20.90
8	-2	-9	5.87	5.71	12	10	-9	5.36	5.55	3	1	-8	4.14	4.00
8	0	-9	8.70	8.80	13	-5	-9	0.00	0.95	3	3	-8	2.65	2.77
8	2	-9	0.00	0.97	13	-3	-9	5.73	5.51	3	5	-8	4.46	4.46
8	4	-9	15.92	16.34	13	-1	-9	8.44	8.35	3	7	-8	9.93	9.83
8	6	-9	8.86	9.14	13	1	-9	4.85	4.83	3	9	-8	11.62	11.71
8	8	-9	17.71	17.67	13	3	-9	6.05	6.06	3	11	-8	9.66	9.66
8	10	-9	18.72	19.01	13	5	-9	11.71	11.45	3	13	-8	3.83	3.80
8	12	-9	8.06	7.91	13	7	-9	2.46	0.19	3	15	-8	7.29	7.45
8	14	-9	9.67	9.60	14	2	-9	2.07	1.39	3	17	-8	3.34	3.43
8	16	-9	1.28	1.49	0	2	-8	6.52	6.74	3	19	-8	9.35	9.47
9	-13	-9	7.92	7.77	0	4	-8	10.48	10.78	4	-16	-8	3.82	4.04
9	-11	-9	4.28	4.42	0	6	-8	2.63	2.57	4	-14	-8	5.74	5.62
9	-9	-9	4.36	4.31	0	8	-8	12.84	12.96	4	-12	-8	5.16	5.12
9	-7	-9	2.17	1.55	0	10	-8	4.53	4.40	4	-10	-8	16.37	16.28
9	-5	-9	1.99	0.70	0	12	-8	3.59	3.65	4	-8	-8	2.25	1.82
9	-3	-9	4.80	4.85	0	14	-8	3.13	3.18	4	-6	-8	1.11	1.11
9	-1	-9	16.59	16.69	0	16	-8	1.74	0.15	4	-4	-8	3.79	3.84
9	1	-9	10.60	11.05	1	-15	-8	10.09	10.15	4	-2	-8	14.40	14.38
9	3	-9	14.24	14.05	1	-13	-8	7.66	7.44	4	0	-8	12.08	12.18
9	5	-9	24.42	24.10	1	-11	-8	10.83	10.83	4	2	-8	11.44	11.44
9	7	-9	5.89	5.96	1	-9	-8	17.03	17.08	4	4	-8	0.65	1.18
9	9	-9	12.42	12.41	1	-7	-8	20.17	20.68	4	6	-8	11.73	12.00
9	11	-9	0.91	1.51	1	-5	-8	19.73	20.02	4	8	-8	6.73	7.00
9	13	-9	1.67	2.85	1	-3	-8	20.45	20.88	4	10	-8	0.00	0.39
9	15	-9	8.88	8.86	1	-1	-8	21.40	21.83	4	12	-8	8.91	8.76
10	-10	-9	8.75	8.88	1	1	-8	9.70	9.94	4	14	-8	4.61	4.61
10	-8	-9	6.32	6.28	1	3	-8	27.97	28.06	4	16	-8	12.22	12.43
10	-6	-9	8.15	8.12	1	5	-8	10.35	10.53	4	18	-8	2.68	1.55
10	-4	-9	1.94	0.60	1	7	-8	21.58	21.92	4	20	-8	0.00	0.07
10	-2	-9	12.94	13.12	1	9	-8	9.26	9.55	5	-15	-8	0.00	0.00
10	0	-9	11.81	11.64	1	11	-8	5.71	5.65	5	-13	-8	3.20	3.08
10	2	-9	0.86	1.60	1	13	-8	7.17	7.12	5	-11	-8	2.50	1.25
10	4	-9	27.14	27.14	1	15	-8	2.28	2.65	5	-9	-8	5.31	5.36
10	6	-9	10.68	10.36	1	17	-8	13.15	12.94	5	-7	-8	5.81	5.89
10	8	-9	9.88	9.48	1	17	-8	6.86	6.88	5	-5	-8	1.91	1.99
10	10	-9	12.73	13.02	2	-16	-8	5.10	5.04	5	-3	-8	3.58	3.66
10	12	-9	0.92	0.34	2	-14	-8	3.80	3.87	5	-1	-8	6.87	7.10
10	14	-9	1.19	1.19	2	-12	-8	6.62	6.76	5	1	-8	5.76	5.87
10	16	-9	0.78	0.69	2	-10	-8	2.92	3.21	5	3	-8	2.22	2.33
11	-9	-9	0.78	0.51	2	-8	-8	0.55	1.48	5	5	-8	3.27	3.33
11	-7	-9	14.32	14.08	2	-6	-8	0.55	1.48	5	7	-8	3.36	3.40
11	-5	-9	1.63	0.18	2	-4	-8	3.37	3.46	5	9	-8	10.76	11.03
11	-3	-9	11.46	11.12	2	-2	-8	3.98	4.04	5	11	-8	13.98	14.10
11	-1	-9	3.84	3.80	2	0	-8	2.92	3.05	5	13	-8	2.16	2.16
11	1	-9	4.23	4.24	2	2	-8	8.50	8.45	5	15	-8	10.85	10.89
11	3	-9	2.32	2.36	2	4	-8	12.40	12.40	5	17	-8	1.96	0.35
11	5	-9	7.59	7.75	2	6	-8	3.06	2.80	5	19	-8	2.34	2.07
11	7	-9	13.56	13.62	2	8	-8	10.47	10.52	6	-16	-8	8.25	8.22
11	9	-9	21.24	21.45	2	10	-8	9.47	9.42	6	-14	-8	1.97	1.38
11	11	-9	6.29	6.18	2	12	-8	7.47	7.51	6	-12	-8	10.47	10.74
11	13	-9	0.00	1.08	2	14	-8	0.63	1.59	6	-10	-8	5.81	5.64
12	-8	-9	2.39	2.56	2	16	-8	1.42	1.03	6	-8	-8	4.12	4.12
12	-6	-9	9.53	9.52	2	18	-8	2.76	0.18	6	-6	-8	2.73	2.78
12	-4	-9	9.91	9.56	3	-15	-8	12.06	11.95	6	-4	-8	4.48	4.55
12	-2	-9	4.20	4.23	3	-13	-8	12.92	12.82	6	-2	-8	9.55	9.63
12	0	-9	15.45	15.28	3	-11	-8	15.08	15.15	6	0	-8	6.68	6.64
12	2	-9	15.45	15.28	3	-9	-8	1.20	0.18	6	2	-8	4.59	4.71
12	4	-9	15.45	15.28	3	-7	-8	1.73	2.15	6	4	-8	9.92	10.13

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
10	-4	-8	0.00	1.35	1-13	-7	1.95	2.47	6.36	7	-3	-7	4.27	4.04
10	-2	-8	0.00	1.60	1-11	-7	17.86	17.98	9.55	7	-1	-7	24.45	24.23
10	0	-8	3.24	3.09	1-9	-7	1.43	0.79	14.39	7	1	-7	10.86	10.91
10	2	-8	7.96	8.01	1-7	-7	6.77	6.85	21.64	7	3	-7	29.39	29.83
10	4	-8	4.36	4.48	1-5	-7	7.56	7.75	7.52	7	5	-7	11.44	11.45
10	6	-8	3.87	4.88	1-3	-7	7.70	7.96	21.48	7	7	-7	5.91	5.76
10	8	-8	1.65	0.49	1-1	-7	28.74	28.96	32.08	7	9	-7	2.73	3.04
10	10	-8	6.34	6.34	1	-7	0.00	0.25	1.48	7	11	-7	2.67	2.30
10	12	-8	6.06	6.23	1	3	15.42	15.38	16.67	7	13	-7	17.29	17.52
10	14	-8	2.82	2.67	1	5	12.11	12.18	6.61	7	15	-7	3.33	3.17
11	-11	-8	9.70	9.80	1	7	5.57	5.66	5.79	7	17	-7	14.29	13.88
11	-9	-8	6.07	6.07	1	9	3.53	3.56	4.71	7	19	-7	11.94	11.72
11	-7	-8	14.45	14.18	1	11	15.25	15.58	4.33	8	16	-7	0.00	1.30
11	-5	-8	1.31	1.47	1	13	11.21	11.44	14.45	8	18	-7	2.21	0.54
11	-3	-8	13.74	13.36	1	15	2.51	2.60	0.00	8	20	-7	10.08	10.28
11	-1	-8	3.69	3.76	1	17	10.65	10.47	7.13	8	22	-7	20.66	20.61
11	1	-8	6.68	6.63	1	19	1.58	0.93	0.00	8	24	-7	6.82	6.82
11	3	-8	9.83	9.69	2-18	-7	0.00	0.47	1.49	8	26	-7	31.72	32.00
11	5	-8	6.31	6.28	2-16	-7	3.48	3.54	13.80	8	28	-7	17.83	17.90
11	7	-8	9.38	9.48	2-14	-7	2.90	2.60	9.61	8	30	-7	18.28	18.25
11	9	-8	7.92	7.81	2-12	-7	11.39	11.17	19.62	8	32	-7	5.72	5.85
11	11	-8	3.69	3.20	2-10	-7	19.63	20.15	26.57	8	34	-7	6.27	6.23
11	13	-8	2.38	1.85	2-8	-7	1.42	1.10	12.25	8	36	-7	2.55	2.33
12	-10	-8	4.81	3.02	2-6	-7	39.51	40.66	26.43	8	38	-7	15.79	16.25
12	-8	-8	4.78	4.78	2-4	-7	9.52	9.97	26.43	8	40	-7	9.22	9.44
12	-6	-8	3.27	3.32	2-2	-7	15.57	16.01	3.62	8	42	-7	23.99	24.41
12	-4	-8	5.02	5.11	2	0	11.95	12.32	3.53	8	44	-7	15.61	15.72
12	-2	-8	1.69	1.84	2	2	3.55	3.57	5.74	8	46	-7	7.35	7.36
12	0	-8	1.64	0.43	2	4	20.74	20.65	10.36	8	48	-7	2.63	2.33
12	2	-8	7.20	7.03	2	6	6.01	6.11	31.57	9	50	-7	4.77	4.56
12	4	-8	6.81	6.73	2	8	27.01	27.10	7.51	9	52	-7	16.79	16.98
12	6	-8	0.37	1.08	2	10	17.56	17.81	18.28	9	54	-7	8.43	8.34
12	8	-8	5.50	5.55	2	12	12.86	13.12	0.00	9	56	-7	13.75	13.70
12	10	-8	5.13	5.20	2	14	12.94	12.42	0.96	9	58	-7	26.67	26.54
12	12	-8	7.81	7.91	2	16	3.82	3.70	2.17	9	60	-7	15.50	15.77
13	-7	-8	9.05	8.85	2	18	2.09	2.14	2.17	9	62	-7	15.29	15.52
13	-5	-8	4.63	4.56	2	20	2.14	2.38	5.86	9	64	-7	4.93	4.83
13	-3	-8	2.50	2.80	3-17	-7	2.36	1.92	13.12	9	66	-7	9.20	9.53
13	-1	-8	3.20	3.07	3-15	-7	10.29	10.08	4.99	9	68	-7	0.00	0.03
13	1	-8	3.46	3.73	3-13	-7	10.61	10.61	0.00	9	70	-7	13.30	13.48
13	3	-8	3.87	4.08	3-11	-7	4.33	4.04	21.98	9	72	-7	5.99	5.55
13	5	-8	0.00	0.50	3-9	-7	24.04	24.58	15.67	9	74	-7	6.99	6.66
13	7	-8	2.36	2.36	3-7	-7	11.47	11.41	11.47	9	76	-7	13.39	13.54
13	9	-8	3.59	3.63	3-5	-7	1.44	1.35	24.65	9	78	-7	5.10	4.95
14	-2	-8	3.63	3.63	3-3	-7	20.37	21.00	15.29	9	80	-7	0.00	1.16
14	0	-8	0.93	0.93	3-1	-7	14.10	14.65	15.13	9	82	-7	8.02	8.03
14	2	-8	0.89	0.89	3	1	2.91	2.79	7.71	9	84	-7	11.13	11.40
14	4	-8	1.25	1.82	3	3	21.58	21.85	7.96	10	86	-7	13.89	13.65
14	6	-8	3.36	3.27	3	5	14.64	14.53	20.48	10	88	-7	2.30	2.85
14	8	-8	28.83	28.95	3	7	4.98	4.95	11.43	10	90	-7	8.21	8.28
0	0	-7	6.94	6.97	3	9	4.07	4.27	13.35	10	92	-7	2.54	2.87
0	0	-7	6.12	6.19	3	11	1.29	0.34	7.15	10	94	-7	19.04	18.91
0	0	-7	8.23	8.25	3	13	12.06	12.31	2.85	10	96	-7	15.78	16.00
0	10	-7	5.63	5.77	3	15	9.11	9.18	7.15	10	98	-7	16.51	16.89
0	12	-7	8.99	9.10	3	17	11.84	11.79	22.69	10	100	-7	31.69	31.82
0	14	-7	15.66	15.64	3	19	12.91	12.79	11.46	10	102	-7	13.52	13.22
0	16	-7	12.18	12.18	4-18	-7	8.43	8.49	5.37	10	104	-7	1.41	1.41
0	18	-7	3.89	3.89	4-16	-7	8.29	8.27	8.54	10	106	-7	1.87	1.89
1	-17	-7	10.13	10.14	4-14	-7	7.77	7.57	18.09	10	108	-7	1.41	1.41
1	-15	-7	17.97	17.85	4-12	-7	21.57	21.70	18.09	10	110	-7	1.87	1.89





H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
10	2	-6	1.33	0.41	0	16	-5	0.00	1.13	3	11	-5	16.70	16.68
10	4	-6	6.11	5.80	0	18	-5	1.64	0.29	3	13	-5	5.53	5.70
10	6	-6	0.00	0.46	0	20	-5	3.68	3.77	3	15	-5	4.52	4.43
10	8	-6	8.31	8.52	1	-17	-5	8.90	8.81	3	17	-5	4.80	4.80
10	10	-6	2.95	2.93	1	-19	-5	15.14	15.30	3	19	-5	4.87	5.08
10	12	-6	0.00	1.08	1	-15	-5	22.10	22.20	3	21	-5	4.89	4.73
10	14	-6	1.92	1.84	1	-13	-5	9.45	9.33	4	-20	-5	0.69	0.23
10	16	-6	3.55	3.22	1	-11	-5	15.92	16.25	4	-18	-5	16.72	16.76
11	-13	-6	2.49	1.43	1	-9	-5	5.19	4.99	4	-16	-5	4.76	4.78
11	-11	-6	5.00	5.22	1	-7	-5	0.85	1.32	4	-14	-5	23.68	23.80
11	-9	-6	1.10	1.78	1	-5	-5	34.63	35.52	4	-12	-5	17.51	17.51
11	-7	-6	12.56	12.93	1	-3	-5	19.42	19.42	4	-10	-5	9.01	9.21
11	-5	-6	10.06	10.07	1	-1	-5	48.40	49.08	4	-8	-5	7.49	7.51
11	-3	-6	4.27	4.34	1	1	-5	3.38	3.48	4	-6	-5	1.57	1.51
11	-1	-6	9.79	9.73	1	3	-5	53.80	54.11	4	-4	-5	36.86	36.86
11	1	-6	8.11	8.33	1	5	-5	2.10	2.14	4	-2	-5	26.99	26.99
11	3	-6	23.68	23.95	1	7	-5	21.00	21.07	4	0	-5	48.32	47.39
11	5	-6	2.59	2.72	1	9	-5	8.85	8.73	4	2	-5	50.69	50.69
11	7	-6	15.63	15.93	1	11	-5	7.80	7.90	4	4	-5	13.08	13.68
11	9	-6	4.99	5.18	1	13	-5	18.71	19.20	4	6	-5	34.77	35.46
11	11	-6	11.05	11.17	1	15	-5	10.87	10.71	4	8	-5	10.01	9.88
11	13	-6	7.04	7.32	1	17	-5	16.55	16.64	4	10	-5	2.75	2.41
11	15	-6	7.80	7.56	1	19	-5	5.26	5.44	4	12	-5	10.23	10.79
12	-10	-6	0.00	0.94	1	21	-5	6.24	6.29	4	14	-5	1.91	2.19
12	-12	-6	3.52	3.62	2	-20	-5	6.92	7.19	4	16	-5	17.66	18.03
12	-8	-6	5.46	5.38	2	-18	-5	8.60	8.78	4	18	-5	5.31	5.53
12	-6	-6	5.53	5.62	2	-16	-5	4.13	3.92	4	20	-5	6.05	6.06
12	-4	-6	0.00	1.47	2	-14	-5	2.40	2.61	4	22	-5	8.19	8.10
12	-2	-6	0.00	0.15	2	-12	-5	20.11	20.30	5	-17	-5	5.80	6.63
12	0	-6	6.55	6.61	2	-10	-5	11.27	11.15	5	-15	-5	1.64	1.23
12	2	-6	3.85	3.92	2	-8	-5	7.07	7.10	5	-13	-5	6.70	6.77
12	4	-6	3.64	3.76	2	-6	-5	43.52	43.91	5	-11	-5	4.86	4.88
12	6	-6	1.02	0.50	2	-4	-5	3.47	14.47	5	-9	-5	2.52	2.41
12	8	-6	4.71	4.37	2	-2	-5	14.38	14.49	5	-7	-5	28.21	28.41
12	10	-6	8.69	8.82	2	0	-5	11.19	11.03	5	-5	-5	19.39	19.40
12	12	-6	4.77	4.73	2	2	-5	4.55	4.66	5	-3	-5	27.29	27.73
13	-9	-6	0.00	0.57	2	4	-5	22.74	22.20	5	-1	-5	17.83	17.62
13	-7	-6	5.49	5.61	2	6	-5	4.29	4.64	5	1	-5	42.46	43.17
13	-5	-6	4.65	4.81	2	8	-5	29.23	29.26	5	3	-5	11.68	12.03
13	-3	-6	8.93	8.72	2	10	-5	4.55	4.69	5	5	-5	4.31	4.10
13	-1	-6	9.56	9.46	2	12	-5	13.42	14.11	5	7	-5	21.66	22.46
13	1	-6	7.19	7.46	2	14	-5	1.31	0.76	5	9	-5	8.38	8.41
13	3	-6	9.28	9.17	2	16	-5	4.78	4.75	5	11	-5	3.69	3.77
13	5	-6	4.39	4.71	2	18	-5	9.27	9.10	5	13	-5	10.58	10.67
13	7	-6	12.41	12.25	2	20	-5	3.22	3.18	5	15	-5	0.61	1.47
13	9	-6	0.00	0.65	3	-19	-5	8.85	8.79	5	17	-5	2.55	2.68
13	11	-6	11.65	11.36	3	-17	-5	0.00	0.72	5	19	-5	2.76	2.96
14	-4	-6	3.27	3.34	3	-15	-5	3.68	3.57	6	-18	-5	10.82	10.73
14	-2	-6	3.85	3.76	3	-13	-5	19.07	19.33	6	-16	-5	2.49	3.32
14	0	-6	0.95	1.37	3	-11	-5	7.90	8.41	6	-14	-5	11.85	11.88
14	2	-6	2.34	2.13	3	-9	-5	38.32	39.20	6	-12	-5	13.83	13.93
14	4	-6	4.60	4.27	3	-7	-5	26.66	26.99	6	-10	-5	1.05	1.04
14	6	-6	31.43	31.40	3	-5	-5	34.62	34.77	6	-8	-5	42.16	42.55
0	0	-5	3.84	4.01	3	-3	-5	22.05	22.25	6	-6	-5	10.05	10.11
0	0	-5	13.83	14.04	3	-1	-5	12.41	11.66	6	-4	-5	0.24	0.32
0	0	-5	13.67	13.84	3	1	-5	3.47	3.68	6	-2	-5	21.88	21.88
0	10	-5	0.50	0.28	3	3	-5	12.14	11.89	6	0	-5	13.66	13.10
0	12	-5	2.33	1.76	3	5	-5	16.38	16.40	6	2	-5	28.32	28.70
0	14	-5	8.71	8.80	3	7	-5	20.77	20.91	6	4	-5		

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
9	9	5	16.53	16.51	13	11	5	5.26	5.33	2	18	-4	10.94	11.30
9	11	-5	21.10	21.41	14	-6	-5	5.21	5.25	2	20	-4	7.39	7.34
9	13	-5	6.11	6.30	14	-4	-5	5.94	5.95	2	22	-4	1.37	0.24
9	15	-5	8.81	8.65	14	-2	-5	11.95	11.88	3	-21	-4	8.32	8.24
9	17	-5	0.00	0.27	14	0	-5	13.50	13.70	3	-17	-4	1.00	0.97
10	-14	-5	11.73	11.46	14	2	-5	14.39	14.70	3	-19	-4	6.87	6.84
10	-12	-5	11.41	11.46	14	4	-5	2.88	3.48	3	-15	-4	8.55	8.90
10	-10	-5	1.28	1.01	14	6	-5	10.52	10.58	3	-13	-4	6.80	7.08
10	-8	-5	4.08	4.22	0	2	-4	41.03	39.74	3	-11	-4	3.55	3.77
10	-6	-5	6.46	6.48	0	4	-4	20.46	20.31	3	-9	-4	0.95	1.26
10	-4	-5	20.10	20.05	0	6	-4	29.57	29.45	3	-7	-4	1.49	1.38
10	-2	-5	17.87	17.76	0	8	-4	39.19	39.02	3	-5	-4	13.45	13.44
10	0	-5	24.07	24.27	0	10	-4	3.96	3.97	3	-3	-4	6.97	6.97
10	2	-5	34.13	34.71	0	12	-4	19.41	19.41	3	-1	-4	1.98	2.50
10	4	-5	2.40	2.33	0	14	-4	1.15	1.11	3	1	-4	1.96	1.70
10	6	-5	17.38	17.79	0	16	-4	0.00	1.65	3	3	-4	10.34	10.41
10	8	-5	3.16	3.01	0	18	-4	6.93	6.90	3	5	-4	14.76	14.73
10	10	-5	0.00	1.46	0	20	-4	1.42	0.26	3	7	-4	1.27	1.25
10	12	-5	11.48	11.41	0	22	-4	11.85	11.71	3	9	-4	27.84	28.41
10	14	-5	4.14	3.94	1	-21	-4	3.25	3.29	3	11	-4	23.34	23.38
10	16	-5	8.51	8.44	1	-19	-4	7.95	7.87	3	13	-4	5.18	5.15
11	-13	-5	1.70	0.89	1	-17	-4	2.96	2.92	3	15	-4	15.71	15.90
11	-11	-5	8.34	8.14	1	-15	-4	2.31	2.27	3	17	-4	4.52	4.18
11	-9	-5	4.62	4.53	1	-13	-4	12.29	12.39	3	19	-4	10.95	10.96
11	-7	-5	1.17	1.33	1	-11	-4	12.29	12.52	3	21	-4	5.69	5.64
11	-5	-5	14.41	14.49	1	-9	-4	19.44	19.59	4	-20	-4	6.49	6.41
11	-3	-5	2.06	2.19	1	-7	-4	12.27	12.47	4	-18	-4	15.76	15.71
11	-1	-5	26.56	26.73	1	-5	-4	0.43	0.57	4	-16	-4	5.71	5.98
11	1	-5	2.70	2.66	1	-3	-4	15.94	16.34	4	-14	-4	7.97	8.10
11	3	-5	19.68	19.78	1	-1	-4	16.26	15.88	4	-12	-4	5.10	5.03
11	5	-5	15.29	15.24	1	1	-4	15.26	14.69	4	-10	-4	23.55	23.84
11	7	-5	12.08	11.99	1	3	-4	17.27	17.20	4	-8	-4	29.36	29.51
11	9	-5	4.23	4.68	1	5	-4	11.55	11.06	4	-6	-4	32.11	32.58
11	11	-5	7.38	6.91	1	7	-4	13.86	13.69	4	-4	-4	9.04	9.09
11	13	-5	2.05	3.03	1	9	-4	38.67	38.77	4	-2	-4	32.41	32.32
11	15	-5	0.00	0.86	1	11	-4	20.68	20.99	4	0	-4	2.99	2.30
12	-12	-5	2.06	1.95	1	13	-4	1.61	1.37	4	2	-4	37.51	36.63
12	-10	-5	14.06	13.89	1	15	-4	20.65	20.99	4	4	-4	14.51	14.55
12	-8	-5	4.38	4.41	1	17	-4	10.97	11.04	4	6	-4	16.94	16.96
12	-6	-5	20.43	20.39	1	19	-4	9.13	8.70	4	8	-4	33.73	34.46
12	-4	-5	13.36	13.35	1	21	-4	4.39	4.50	4	10	-4	2.04	1.31
12	0	-5	0.00	0.51	2	-20	-4	0.00	1.68	4	12	-4	8.40	8.08
12	2	-5	6.01	6.34	2	-18	-4	14.25	14.31	4	14	-4	0.81	0.77
12	4	-5	14.80	14.98	2	-16	-4	12.60	12.90	4	16	-4	6.63	6.75
12	6	-5	7.59	7.59	2	-14	-4	23.73	24.09	4	18	-4	7.80	7.93
12	8	-5	22.72	22.87	2	-12	-4	1.19	1.12	4	20	-4	3.87	3.93
12	10	-5	10.36	10.16	2	-10	-4	37.71	39.00	4	22	-4	10.66	10.41
12	12	-5	8.87	8.67	2	-8	-4	17.32	17.33	5	-19	-4	7.71	7.58
12	14	-5	5.15	5.15	2	-6	-4	5.52	5.47	5	-17	-4	2.89	3.07
13	-9	-5	6.39	6.35	2	-4	-4	27.54	28.09	5	-15	-4	6.08	6.10
13	-7	-5	7.14	7.14	2	-2	-4	38.32	38.99	5	-13	-4	6.03	6.38
13	-5	-5	3.23	2.91	2	0	-4	76.32	79.70	5	-11	-4	11.98	11.86
13	-3	-5	6.27	6.39	2	2	-4	35.43	34.90	5	-9	-4	8.81	8.75
13	-1	-5	1.12	1.44	2	4	-4	1.81	0.81	5	-7	-4	5.95	5.94
13	1	-5	4.85	4.43	2	6	-4	30.18	30.59	5	-5	-4	11.28	10.92
13	3	-5	5.45	5.46	2	8	-4	0.52	0.26	5	-3	-4	3.04	2.46
13	5	-5	2.36	2.36	2	10	-4	26.01	26.35	5	-1	-4	38.36	37.40
13	7	-5	7.07	7.07	2	12	-4	5.00	4.87	5	1	-4	10.00	9.32
13	9	-5		6.64	2	14	-4	18.12	18.48	5	3	-4	47.21	48.15
					2	16	-4	19.89	20.31	5	5	-4	4.50	4.81

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
8	4	-4	13.90	13.84	12	-8	-4	4.89	4.95	1	21	-3	7.58	7.49
8	6	-4	9.15	9.20	12	-6	-4	8.71	8.64	2	-20	-3	2.55	3.31
8	8	-4	8.05	8.48	12	-4	-4	8.81	9.11	2	-18	-3	23.12	23.13
8	10	-4	1.96	1.79	12	-2	-4	11.77	11.44	2	-16	-3	2.25	1.99
8	12	-4	11.54	11.80	12	0	-4	14.77	14.94	2	-14	-3	25.58	25.89
8	14	-4	12.61	12.61	12	2	-4	13.95	13.94	2	-12	-3	17.59	17.86
8	16	-4	12.02	11.93	12	4	-4	6.77	6.63	2	-10	-3	11.72	12.02
8	18	-4	1.96	0.50	12	6	-4	8.47	8.77	2	-8	-3	15.74	15.48
9	-17	-4	4.02	4.01	12	8	-4	0.00	0.26	2	-6	-3	15.27	15.14
9	-15	-4	5.77	5.97	12	10	-4	4.90	5.01	2	-4	-3	8.30	9.75
9	-13	-4	3.12	3.06	12	12	-4	1.61	0.52	2	-2	-3	20.65	19.59
9	-11	-4	11.85	11.86	13	-9	-4	1.63	0.84	2	0	-3	1.77	3.29
9	-9	-4	8.27	8.27	13	-7	-4	3.42	3.18	2	2	-3	6.58	8.35
9	-7	-4	3.78	3.78	13	-5	-4	4.71	4.72	2	4	-3	7.40	5.73
9	-5	-4	2.66	2.66	13	-3	-4	3.53	3.78	2	6	-3	10.75	10.24
9	-3	-4	6.58	6.58	13	-1	-4	4.66	4.65	2	8	-3	14.97	14.85
9	-1	-4	16.24	16.23	13	1	-4	0.00	0.46	2	10	-3	10.52	10.52
9	3	-4	0.70	0.86	13	3	-4	5.55	5.56	2	12	-3	1.13	0.32
9	5	-4	15.17	15.39	13	5	-4	5.94	5.89	2	14	-3	6.82	6.75
9	7	-4	10.87	11.08	13	7	-4	12.78	12.73	2	16	-3	1.35	1.33
9	9	-4	10.41	10.73	13	9	-4	9.94	9.57	2	18	-3	1.73	1.43
9	9	-4	9.31	9.28	13	11	-4	12.53	12.81	2	20	-3	1.70	2.20
9	11	-4	3.27	3.55	14	-4	-4	3.36	3.51	2	22	-3	1.88	0.36
9	13	-4	2.17	1.66	14	-2	-4	1.18	0.96	3	-21	-3	8.10	8.06
9	15	-4	1.73	1.05	14	0	-4	0.68	0.96	3	-19	-3	3.65	3.56
9	17	-4	8.91	8.93	14	2	-4	2.48	1.88	3	-17	-3	2.26	1.44
10	-16	-4	5.11	5.01	14	4	-4	4.56	4.69	3	-15	-3	11.63	11.81
10	-14	-4	10.43	10.27	14	6	-4	7.45	7.36	3	-13	-3	21.90	22.25
10	-12	-4	3.45	3.26	0	0	-3	8.44	8.29	3	-11	-3	6.51	6.62
10	-10	-4	12.84	13.23	0	2	-3	39.42	39.25	3	-9	-3	39.53	39.60
10	-8	-4	6.11	6.06	0	6	-3	3.09	3.45	3	-7	-3	15.04	14.78
10	-6	-4	25.78	26.19	0	8	-3	31.90	32.08	3	-5	-3	40.00	40.09
10	-4	-4	7.14	7.37	0	10	-3	2.89	2.48	3	-3	-3	7.35	7.43
10	-2	-4	13.57	13.56	0	12	-3	19.19	19.63	3	-1	-3	24.90	23.27
10	0	-4	2.13	2.24	0	14	-3	1.06	0.65	3	1	-3	7.33	7.01
10	2	-4	4.28	4.39	0	16	-3	11.09	11.24	3	3	-3	13.79	13.81
10	4	-4	18.25	18.45	0	18	-3	5.81	5.69	3	5	-3	19.92	20.33
10	6	-4	7.20	7.19	0	20	-3	3.23	3.15	3	7	-3	21.52	21.53
10	8	-4	18.41	18.72	0	22	-3	2.01	1.42	3	9	-3	29.99	30.36
10	10	-4	4.49	4.41	1	-21	-3	9.20	9.00	3	11	-3	12.22	12.16
10	12	-4	12.76	12.52	1	-19	-3	2.18	1.81	3	13	-3	13.61	14.27
10	14	-4	1.75	0.31	1	-17	-3	6.79	7.18	3	15	-3	8.71	8.73
10	16	-4	0.95	0.98	1	-15	-3	16.18	16.60	3	17	-3	16.81	16.71
11	-13	-4	3.39	3.11	1	-13	-3	1.99	2.13	3	19	-3	1.97	1.72
11	-11	-4	4.07	4.12	1	-11	-3	4.61	4.84	3	21	-3	0.94	0.93
11	-9	-4	4.08	3.94	1	-9	-3	28.85	28.70	4	-18	-3	4.24	4.23
11	-7	-4	2.26	2.01	1	-7	-3	1.35	1.63	4	-16	-3	5.78	5.54
11	-5	-4	7.01	7.06	1	-5	-3	9.05	8.47	4	-14	-3	1.58	1.54
11	-3	-4	9.95	9.96	1	-3	-3	21.40	22.18	4	-12	-3	24.11	24.10
11	-1	-4	5.50	5.71	1	-1	-3	22.35	19.62	4	-10	-3	2.36	2.28
11	1	-4	0.75	1.03	1	1	-3	5.47	4.65	4	-8	-3	10.69	10.94
11	3	-4	17.67	18.13	1	3	-3	12.36	10.11	4	-6	-3	30.96	30.88
11	5	-4	1.15	1.14	1	5	-3	2.68	2.84	4	-4	-3	12.81	12.30
11	7	-4	6.60	6.48	1	7	-3	15.50	15.29	4	-2	-3	18.91	18.63
11	9	-4	4.67	4.89	1	9	-3	10.03	9.99	4	0	-3	64.17	61.60
11	11	-4	0.00	0.68	1	11	-3	11.61	11.77	4	2	-3	20.86	19.62
11	13	-4	7.55	7.96	1	13	-3	14.44	14.83	4	4	-3	4.69	4.22
11	15	-4	2.05	0.59	1	15	-3	0.00	0.71	4	6	-3	33.26	33.56
12	-12	-4	0.00	0.90	1	17	-3	12.63	12.96	4	8	-3	19.24	19.75
12	-10	-4	14.08	13.93	1	19	-3	3.60	3.45	4	8	-3	19.24	19.75

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
7	1	-3	9.53	8.93	10	10	-3	1.76	2.38	1	-17	-2	1.27	1.48
7	3	-3	20.81	21.01	10	12	-3	2.29	2.24	1	-15	-2	9.23	9.25
7	5	-3	14.59	14.49	10	14	-3	5.04	4.87	1	-13	-2	11.83	11.74
7	7	-3	11.53	11.37	10	16	-3	0.87	1.32	1	-11	-2	11.32	11.38
7	9	-3	17.28	16.93	11	-13	-3	3.22	2.86	1	-9	-2	41.04	41.13
7	11	-3	17.40	18.05	11	-11	-3	5.21	5.21	1	-7	-2	5.19	4.82
7	13	-3	0.00	0.61	11	-9	-3	3.06	2.86	1	-5	-2	14.89	12.74
7	15	-3	7.95	7.69	11	-7	-3	8.90	8.75	1	-3	-2	38.38	38.84
7	17	-3	5.20	5.49	11	-5	-3	7.05	7.08	1	-1	-2	36.10	37.16
7	19	-3	1.15	0.61	11	-3	-3	2.71	2.45	1	1	-2	32.96	32.40
8	-18	-3	13.19	13.50	11	-1	-3	21.02	21.29	1	3	-2	9.42	20.76
8	-16	-3	6.20	6.49	11	1	-3	8.95	9.22	1	5	-2	26.60	10.90
8	-14	-3	17.85	28.40	11	3	-3	11.85	11.69	1	7	-2	59.84	26.42
8	-12	-3	13.06	13.14	11	5	-3	3.41	3.15	1	9	-2	30.60	60.24
8	-10	-3	10.85	10.55	11	7	-3	11.20	11.19	1	11	-2	16.73	30.51
8	-8	-3	15.50	15.84	11	9	-3	4.52	4.40	1	13	-2	30.87	16.40
8	-6	-3	1.28	1.03	11	11	-3	5.20	5.20	1	15	-2	0.00	30.63
8	-4	-3	22.56	22.64	11	13	-3	8.03	7.90	1	17	-2	5.08	0.61
8	-2	-3	8.15	8.40	11	15	-3	1.77	1.18	1	19	-2	2.29	5.02
8	0	-3	29.17	29.84	12	-12	-3	6.89	6.78	1	21	-2	8.06	1.99
8	2	-3	27.94	28.37	12	-10	-3	2.48	3.10	1	23	-2	5.30	7.83
8	4	-3	11.33	11.27	12	-8	-3	7.73	7.74	2	-22	-2	0.00	5.35
8	6	-3	11.10	11.31	12	-6	-3	13.48	13.94	2	-20	-2	2.10	1.02
8	8	-3	7.05	6.61	12	-4	-3	6.81	7.63	2	-18	-2	10.39	0.58
8	10	-3	7.14	6.99	12	-2	-3	4.86	6.87	2	-16	-2	8.35	10.33
8	12	-3	14.31	15.16	12	0	-3	4.92	4.86	2	-14	-2	12.42	8.15
8	14	-3	5.86	5.96	12	2	-3	13.03	12.89	2	-12	-2	14.41	15.10
8	16	-3	10.77	10.67	12	4	-3	2.56	3.14	2	-10	-2	9.37	9.37
8	18	-3	2.32	2.32	12	6	-3	15.50	15.40	2	-8	-2	36.83	36.57
9	-17	-3	3.13	3.46	12	8	-3	11.70	11.45	2	-6	-2	18.63	18.59
9	-15	-3	12.12	12.04	12	10	-3	7.43	7.00	2	-4	-2	7.13	7.26
9	-13	-3	14.28	14.30	12	12	-3	15.22	15.23	2	-2	-2	40.69	41.61
9	-11	-3	4.63	4.95	13	-9	-3	4.20	4.18	2	0	-2	0.84	0.84
9	-9	-3	17.30	17.20	13	-7	-3	8.03	8.01	2	2	-2	22.87	22.76
9	-7	-3	7.75	7.68	13	-5	-3	11.87	12.01	2	4	-2	27.66	27.46
9	-5	-3	5.90	5.99	13	-3	-3	3.49	3.53	2	6	-2	13.97	14.60
9	-3	-3	10.09	9.96	13	-1	-3	3.18	3.31	2	8	-2	8.71	8.89
9	-1	-3	0.00	0.03	13	1	-3	3.55	3.51	2	10	-2	3.56	3.45
9	1	-3	6.47	6.35	13	3	-3	9.87	10.12	2	12	-2	7.54	7.57
9	3	-3	0.00	0.66	13	5	-3	10.95	10.75	2	14	-2	13.08	13.15
9	5	-3	0.00	0.66	13	7	-3	5.14	5.08	2	16	-2	19.12	19.60
9	7	-3	11.79	12.21	13	9	-3	9.24	9.08	2	18	-2	1.73	1.73
9	9	-3	10.45	10.24	14	-2	-3	14.63	14.70	2	20	-2	3.45	3.45
9	11	-3	7.51	7.24	14	0	-3	13.89	13.89	3	-22	-2	8.89	8.89
9	13	-3	3.24	3.32	14	2	-3	1.31	1.70	3	-20	-2	0.90	0.70
9	15	-3	1.64	0.87	14	4	-3	36.82	35.54	3	-18	-2	18.58	18.58
10	-16	-3	2.41	2.55	0	2	-2	13.91	12.15	3	-16	-2	1.73	1.05
10	-14	-3	10.91	10.71	0	4	-2	46.65	46.15	3	-14	-2	10.09	9.79
10	-12	-3	17.26	16.93	0	6	-2	25.27	24.86	3	-12	-2	8.76	8.28
10	-10	-3	11.55	11.64	0	8	-2	23.15	24.03	3	-10	-2	10.71	9.04
10	-8	-3	27.01	27.22	0	10	-2	20.54	20.32	3	-8	-2	13.24	15.83
10	-6	-3	10.64	10.78	0	12	-2	15.02	14.88	3	-6	-2	22.42	23.05
10	-4	-3	12.39	12.67	0	14	-2	7.18	6.96	3	-4	-2	2.66	4.23
10	-2	-3	8.52	8.47	0	16	-2	6.73	6.83	3	-2	-2	5.69	6.37
10	0	-3	14.38	15.07	0	18	-2	0.00	0.89	3	0	-2	18.18	18.11
10	2	-3	5.14	5.17	0	20	-2	3.50	3.49	3	2	-2	6.97	7.08
10	4	-3	0.00	0.58	1	-21	-2	4.59	4.45	3	4	-2	18.18	18.11
10	6	-3	16.32	16.36	1	-19	-2	7.68	7.77	3	6	-2	6.97	7.08
10	8	-3			1	-17	-2			3	8	-2		

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
6	0	-2	62.45	61.80	9	3	-2	23.54	23.50	0	2	-1	1.71	1.18
6	2	-2	41.31	41.59	9	5	-2	3.11	3.13	0	4	-1	45.84	45.57
6	4	-2	30.19	30.50	9	7	-2	6.30	6.15	0	6	-1	4.71	4.56
6	6	-2	14.69	15.36	9	9	-2	2.84	2.69	0	8	-1	34.96	34.21
6	8	-2	9.20	9.19	9	11	-2	3.54	3.03	0	10	-1	12.84	13.06
6	10	-2	11.72	12.11	9	13	-2	14.03	14.35	0	12	-1	18.07	17.98
6	12	-2	8.56	8.19	9	15	-2	3.97	3.82	0	14	-1	14.82	14.81
6	14	-2	27.36	26.71	9	17	-2	19.94	19.69	0	16	-1	16.87	17.24
6	16	-2	7.90	8.27	10	16	-2	1.44	0.34	0	18	-1	16.51	16.37
6	18	-2	8.34	8.56	10	14	-2	1.59	2.08	0	20	-1	9.05	8.99
6	20	-2	7.89	7.80	10	12	-2	11.58	11.71	0	22	-1	7.19	7.11
7	-17	-2	0.00	1.13	10	10	-2	1.33	1.00	1	-21	-1	6.07	6.06
7	-15	-2	0.00	2.44	10	8	-2	6.99	7.37	1	-19	-1	14.80	14.89
7	-13	-2	0.00	0.65	10	6	-2	19.93	19.92	1	-17	-1	3.11	2.86
7	-11	-2	8.53	8.38	10	4	-2	5.86	5.74	1	-15	-1	1.44	1.25
7	-9	-2	2.45	1.81	10	2	-2	6.38	6.42	1	-13	-1	8.18	7.93
7	-7	-2	8.64	9.00	10	0	-2	11.10	10.81	1	-11	-1	4.52	4.71
7	-5	-2	15.62	15.37	10	0	-2	0.00	0.35	1	-9	-1	23.51	23.57
7	-3	-2	18.58	18.21	10	4	-2	12.29	12.14	1	-7	-1	11.26	11.28
7	-1	-2	1.21	0.76	10	6	-2	8.10	8.23	1	-5	-1	17.71	17.71
7	1	-2	7.71	8.09	10	8	-2	18.04	17.77	1	-3	-1	2.65	2.52
7	3	-2	10.04	10.04	10	10	-2	7.84	8.23	1	-1	-1	11.58	10.99
7	5	-2	10.23	10.65	10	12	-2	12.21	12.52	1	1	-1	12.04	11.98
7	7	-2	32.52	32.12	10	14	-2	2.21	2.52	1	3	-1	33.49	33.38
7	9	-2	21.60	21.34	10	16	-2	7.40	6.86	1	5	-1	31.77	31.77
7	11	-2	31.94	31.76	11	13	-2	4.17	0.42	1	7	-1	9.88	9.07
7	13	-2	14.16	14.16	11	11	-2	3.23	3.49	1	9	-1	8.78	8.56
7	15	-2	13.86	13.86	11	9	-2	13.47	13.61	1	11	-1	6.68	6.44
7	17	-2	6.05	6.15	11	7	-2	8.42	8.58	1	13	-1	13.05	12.83
7	19	-2	1.55	1.28	11	5	-2	10.40	10.34	1	15	-1	5.33	5.36
8	-18	-2	10.14	10.65	11	3	-2	2.61	2.55	1	17	-1	11.91	11.91
8	-16	-2	2.74	2.42	11	1	-2	0.68	2.04	1	19	-1	1.58	0.07
8	-14	-2	2.66	3.85	11	1	-2	2.86	2.61	1	21	-1	2.18	2.80
8	-12	-2	6.48	6.25	11	5	-2	8.75	8.84	1	23	-1	2.19	2.29
8	-10	-2	16.02	15.90	11	7	-2	4.79	4.63	2	22	-1	7.07	7.10
8	-8	-2	23.45	23.29	11	9	-2	10.49	10.57	2	20	-1	17.98	18.33
8	-6	-2	20.90	20.99	11	11	-2	12.47	12.12	2	18	-1	10.44	10.16
8	-4	-2	0.00	0.31	11	13	-2	0.78	0.30	2	16	-1	27.39	27.12
8	2	-2	22.84	22.47	12	10	-2	8.10	8.27	2	14	-1	2.80	2.88
8	4	-2	2.76	2.66	12	8	-2	2.26	2.32	2	12	-1	20.47	21.18
8	6	-2	16.73	16.45	12	6	-2	4.36	4.36	2	10	-1	8.13	7.82
8	8	-2	11.95	12.11	12	4	-2	12.64	12.52	2	8	-1	12.22	12.38
8	10	-2	27.57	27.80	12	2	-2	7.25	7.32	2	6	-1	50.55	51.00
8	12	-2	7.10	7.80	12	0	-2	18.29	18.66	2	4	-1	10.11	9.27
8	14	-2	6.87	6.91	12	4	-2	14.28	14.66	2	2	-1	70.65	68.97
8	16	-2	6.20	6.56	12	6	-2	10.47	10.47	2	0	-1	22.01	21.51
8	18	-2	6.22	6.05	12	8	-2	10.81	11.07	2	4	-1	52.32	54.09
8	18	-2	2.19	0.38	12	8	-2	2.68	2.98	2	6	-1	2.75	1.94
9	-17	-2	4.65	4.80	12	10	-2	5.68	5.52	2	8	-1	44.33	45.11
9	-15	-2	11.57	11.27	12	12	-2	2.69	2.69	2	10	-1	12.06	12.28
9	-13	-2	3.99	3.76	13	7	-2	1.77	0.25	2	12	-1	29.95	29.87
9	-11	-2	10.81	10.83	13	5	-2	1.65	1.56	2	14	-1	18.35	18.36
9	-9	-2	2.15	1.65	13	3	-2	5.37	5.44	2	16	-1	18.54	18.34
9	-7	-2	4.97	5.01	13	1	-2	0.66	0.39	2	18	-1	6.73	6.66
9	-5	-2	5.19	5.16	13	1	-2	2.49	2.79	2	20	-1	0.37	1.67
9	-3	-2	9.52	9.58	13	3	-2	4.54	4.62	2	22	-1	6.52	6.41
9	-1	-2	10.10	9.38	13	5	-2	4.74	4.72	2	24	-1	8.85	8.78
9	1	-2	2.83	2.38	13	7	-2	6.78	6.91	3	21	-1	1.50	0.82
					13	9	-2	9.83	9.68	3	19	-1	7.27	7.16
					13	9	-2			3	17	-1		

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	17	-1	8.55	8.44	8	14	-1	1.12	1.41	12	8	-1	2.73	3.26
5	19	-1	4.51	4.53	8	16	-1	12.78	12.91	12	10	-1	4.70	4.76
5	21	-1	7.51	7.12	8	18	-1	1.92	1.09	13	-5	-1	3.72	3.72
6	-20	-1	9.36	9.13	9	-17	-1	10.51	10.53	13	-3	-1	2.32	2.40
6	-18	-1	10.60	10.51	9	-15	-1	14.01	14.16	13	-1	-1	8.04	7.95
6	-16	-1	8.64	8.82	9	-13	-1	2.70	2.54	13	1	-1	6.16	6.09
6	-14	-1	21.39	21.24	9	-11	-1	6.85	6.89	13	3	-1	0.00	0.62
6	-12	-1	5.60	5.52	9	-9	-1	1.20	0.83	13	5	-1	4.38	4.55
6	-10	-1	3.59	3.47	9	-7	-1	8.24	8.27	13	7	-1	0.89	1.88
6	-6	-1	2.00	1.13	9	-5	-1	8.41	8.36	13	7	-1	11.44	11.06
6	-4	-1	30.98	30.63	9	-3	-1	8.03	7.61	0	2	0	73.42	73.71
6	-2	-1	12.44	12.08	9	-1	-1	16.65	16.88	0	6	0	50.16	49.48
6	0	-1	12.50	12.09	9	1	-1	11.79	12.03	0	8	0	31.99	30.90
6	2	-1	24.42	23.99	9	3	-1	11.89	11.66	0	10	0	34.99	36.25
6	4	-1	1.70	1.40	9	5	-1	3.67	3.39	0	12	0	5.41	5.39
6	6	-1	1.85	2.08	9	7	-1	17.44	17.15	0	14	0	27.33	27.23
6	8	-1	16.85	17.30	9	9	-1	7.12	6.89	0	16	0	21.04	20.76
6	10	-1	3.13	2.90	9	11	-1	0.00	1.43	0	18	0	17.25	17.52
6	12	-1	4.51	4.05	9	13	-1	4.42	4.04	0	20	0	3.82	3.92
6	14	-1	3.68	2.98	9	15	-1	7.52	7.04	0	22	0	4.75	4.64
6	16	-1	5.90	6.17	10	-14	-1	1.87	1.61	1	-21	0	6.97	6.98
6	18	-1	5.74	6.08	10	-12	-1	5.49	5.79	1	-19	0	8.83	8.66
6	20	-1	9.24	8.92	10	-10	-1	15.21	15.59	1	-17	0	15.06	15.19
7	-19	-1	5.65	5.83	10	-8	-1	13.88	14.18	1	-15	0	2.17	1.90
7	-17	-1	5.34	5.35	10	-6	-1	22.71	22.56	1	-13	0	4.14	4.36
7	-15	-1	0.00	0.73	10	-4	-1	5.42	5.30	1	-11	0	34.05	33.90
7	-13	-1	18.45	18.49	10	-2	-1	20.72	20.74	1	-9	0	22.05	20.43
7	-11	-1	3.06	3.16	10	0	-1	4.66	4.47	1	-7	0	21.57	18.50
7	-9	-1	20.26	19.62	10	2	-1	8.61	8.65	1	-5	0	53.43	52.61
7	-7	-1	11.16	11.20	10	4	-1	11.24	11.04	1	-3	0	9.10	8.58
7	-5	-1	21.16	20.91	10	6	-1	3.92	3.86	1	-1	0	8.23	7.90
7	-3	-1	6.81	6.86	10	8	-1	23.73	24.22	1	1	0	38.04	38.35
7	-1	-1	10.17	11.17	10	10	-1	1.01	0.32	1	3	0	2.34	1.19
7	1	-1	10.63	11.08	10	12	-1	7.42	7.33	1	5	0	17.24	16.49
7	3	-1	11.14	10.87	10	14	-1	1.97	1.55	1	7	0	36.77	36.95
7	5	-1	16.05	15.96	10	16	-1	10.60	10.46	1	9	0	11.91	11.99
7	7	-1	5.10	5.12	11	-13	-1	2.77	2.66	1	11	0	14.21	14.27
7	9	-1	20.46	20.09	11	-11	-1	0.56	0.94	1	13	0	15.99	15.97
7	11	-1	14.56	14.63	11	-9	-1	0.00	0.49	1	15	0	5.01	4.82
7	13	-1	0.00	1.05	11	-7	-1	4.44	4.84	1	17	0	9.58	9.46
7	15	-1	9.27	9.19	11	-5	-1	4.27	4.21	1	19	0	3.48	3.48
7	17	-1	4.50	4.16	11	-3	-1	3.66	3.90	2	-22	0	15.39	15.39
8	-18	-1	2.65	1.94	11	-1	-1	8.78	8.73	2	-20	0	4.52	4.46
8	-16	-1	13.00	13.60	11	1	-1	4.07	3.85	2	-18	0	15.59	15.80
8	-14	-1	8.57	8.42	11	3	-1	0.00	0.34	2	-16	0	3.33	3.30
8	-12	-1	5.05	4.68	11	5	-1	3.87	3.65	2	-14	0	5.98	6.30
8	-10	-1	9.98	10.21	11	7	-1	2.00	1.95	2	-12	0	22.93	22.73
8	-8	-1	8.04	7.77	11	9	-1	2.10	2.58	2	-10	0	17.48	16.73
8	-6	-1	13.00	12.95	11	13	-1	0.00	0.90	2	-8	0	58.85	58.05
8	-4	-1	5.71	5.50	12	-10	-1	11.85	11.80	2	-6	0	51.28	50.00
8	-2	-1	31.53	30.99	12	-8	-1	1.16	0.73	2	-4	0	22.94	21.50
8	0	-1	17.29	17.56	12	-6	-1	0.00	0.81	2	-2	0	60.12	58.29
8	2	-1	15.34	15.48	12	-4	-1	9.97	10.16	2	0	0	1.47	0.20
8	4	-1	10.60	10.71	12	-2	-1	9.56	9.85	2	2	0	56.26	56.21
8	6	-1	15.90	15.85	12	0	-1	18.91	19.37	2	4	0	30.60	28.69
8	8	-1	2.22	2.18	12	2	-1	11.71	11.65	2	6	0	36.67	36.79
8	10	-1	23.11	22.67	12	4	-1	0.00	1.09	2	8	0	61.51	62.54
8	12	-1			12	6	-1	8.78	8.86	2	10	0	1.89	1.24
					12	12				2	12		21.27	21.00

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	3	0	22.55	22.07	8	0	0	2.82	2.74	12	6	0	10.50	10.50
5	5	0	18.31	18.01	8	2	0	8.60	8.47	12	8	0	2.80	3.35
5	7	0	19.64	20.17	8	4	0	28.35	28.79	13	-3	0	9.15	9.34
5	9	0	25.16	24.82	8	6	0	21.57	21.77	13	-1	0	6.79	6.76
5	11	0	12.37	11.96	8	8	0	34.83	34.90	13	3	0	1.35	1.83
5	13	0	15.86	15.32	8	10	0	0.00	0.12	13	3	0	12.34	12.04
5	15	0	5.82	5.88	8	12	0	22.16	22.29	13	-1	1	15.29	14.88
5	17	0	8.91	8.61	8	14	0	1.33	0.50	0	2	1	1.36	0.35
5	19	0	4.45	4.45	8	16	0	2.12	2.25	0	4	1	10.27	11.03
5	21	0	1.81	1.25	8	18	0	6.92	6.83	0	6	1	33.15	33.42
6	-20	0	4.69	4.52	9	-15	0	8.40	8.36	0	8	1	3.97	3.80
6	-18	0	1.75	1.23	9	-13	0	6.05	5.96	0	10	1	3.93	3.82
6	-16	0	4.60	4.74	9	-11	0	5.12	5.28	0	12	1	8.75	8.37
6	-14	0	15.98	15.77	9	-9	0	5.99	6.03	0	14	1	1.07	1.43
6	-12	0	1.68	1.56	9	-7	0	2.84	2.54	0	16	1	9.15	8.98
6	-10	0	3.23	3.49	9	-5	0	5.89	5.83	0	18	1	5.02	5.03
6	-8	0	5.68	5.35	9	-3	0	16.45	16.14	0	20	1	9.89	9.89
6	-6	0	10.68	10.73	9	-1	0	8.57	8.75	0	22	1	2.67	2.33
6	-4	0	45.77	45.99	9	1	0	3.35	3.44	0	22	1	2.54	2.59
6	-2	0	21.04	21.89	9	3	0	24.27	24.22	1	-21	1	7.95	7.79
6	0	0	55.24	54.82	9	5	0	1.31	1.76	1	-19	1	8.74	8.61
6	2	0	38.54	38.71	9	7	0	7.48	7.36	1	-17	1	7.91	7.79
6	4	0	47.25	47.98	9	9	0	5.16	5.28	1	-15	1	21.11	20.79
6	6	0	9.99	10.31	9	9	0	3.44	3.28	1	-13	1	11.12	10.99
6	8	0	5.32	5.43	9	11	0	8.09	8.26	1	-11	1	29.20	29.09
6	10	0	5.52	5.48	9	13	0	6.07	6.23	1	-9	1	15.99	15.33
6	12	0	14.37	14.09	10	-14	0	14.72	14.33	1	-7	1	31.91	32.37
6	14	0	25.84	25.75	10	-12	0	4.10	4.36	1	-5	1	52.68	51.23
6	16	0	11.95	11.89	10	-10	0	13.52	13.95	1	-3	1	31.37	30.87
6	18	0	8.11	8.01	10	-8	0	2.61	2.80	1	-1	1	51.28	50.87
6	20	0	11.15	11.06	10	-6	0	2.82	3.07	1	3	1	40.74	41.66
7	-19	0	12.06	11.62	10	-4	0	16.22	16.36	1	5	1	33.72	34.12
7	-17	0	4.08	4.13	10	-2	0	31.31	2.45	1	7	1	15.12	14.78
7	-15	0	2.27	1.69	10	2	0	14.42	14.61	1	9	1	15.56	15.84
7	-13	0	6.80	6.70	10	4	0	17.37	17.79	1	11	1	8.47	9.06
7	-11	0	0.43	0.24	10	6	0	12.50	12.76	1	13	1	14.27	14.36
7	-9	0	17.73	17.46	10	8	0	1.97	1.59	1	15	1	12.73	12.63
7	-7	0	6.71	6.53	10	10	0	2.97	3.12	1	17	1	19.82	19.87
7	-5	0	11.87	11.86	10	12	0	2.93	2.94	1	19	1	7.40	7.34
7	-3	0	20.89	20.42	10	14	0	8.52	8.31	1	21	1	9.00	9.01
7	-1	0	17.45	17.11	11	-11	0	1.36	1.05	2	-22	1	6.84	6.81
7	3	0	14.38	14.63	11	-9	0	14.36	14.66	2	-20	1	2.80	2.73
7	5	0	8.94	14.36	11	-7	0	4.81	4.85	2	-18	1	2.58	2.51
7	7	0	13.46	8.52	11	-5	0	11.63	11.86	2	-16	1	4.50	4.46
7	9	0	15.24	13.41	11	-3	0	9.08	9.19	2	-14	1	3.45	3.57
7	11	0	9.57	15.24	11	-1	0	1.13	1.06	2	-12	1	22.51	21.92
7	13	0	3.95	4.14	11	1	0	1.36	1.49	2	-10	1	9.95	10.29
7	15	0	10.94	9.57	11	3	0	4.88	4.94	2	-8	1	25.47	24.94
7	17	0	3.42	3.28	11	5	0	11.19	11.32	2	-6	1	5.44	5.07
7	19	0	7.74	8.07	11	7	0	1.84	1.84	2	-4	1	45.13	41.57
8	-18	0	4.47	4.26	11	9	0	15.84	15.76	2	-2	1	20.68	19.41
8	-16	0	4.41	4.26	11	11	0	5.84	5.94	2	0	1	4.35	3.07
8	-14	0	11.88	11.72	12	-8	0	11.74	11.99	2	2	1	17.45	17.46
8	-12	0	12.10	12.49	12	-6	0	3.76	3.71	2	4	1	2.13	2.13
8	-10	0	24.60	24.51	12	-4	0	4.15	3.85	2	6	1	27.88	28.99
8	-8	0	30.17	29.90	12	-2	0	12.29	12.85	2	8	1	22.46	22.80
8	-6	0	16.12	15.98	12	2	0	3.87	3.77	2	10	1	13.65	13.87
8	-4	0	17.44	17.36	12	4	0	0.00	0.26	2	12	1	3.65	3.30
8	-2	0			12	16	0				16	1	12.85	12.41

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	9	1	5.98	6.36	1	15	1	11.66	12.12	1	17	2	28.37	28.10
5	11	1	0.00	0.64	1	13	1	3.92	4.06	1	15	2	16.17	15.88
5	13	1	2.91	3.17	1	11	1	6.54	6.33	1	13	2	15.06	14.98
5	15	1	1.36	2.45	1	9	1	8.95	9.00	1	11	2	10.93	11.15
5	17	1	5.15	4.98	1	7	1	10.62	10.33	1	9	2	9.98	10.09
5	19	1	5.69	5.88	1	5	1	3.32	3.29	1	7	2	22.70	22.00
6	18	1	8.66	8.43	1	3	1	16.94	17.04	1	5	2	2.68	3.04
6	16	1	5.51	5.47	1	1	1	17.33	17.23	1	3	2	15.14	16.35
6	14	1	19.74	20.12	1	1	1	0.00	0.47	1	1	2	14.36	15.73
6	12	1	9.74	10.10	1	3	1	11.17	11.13	1	3	2	7.28	10.07
6	10	1	12.58	12.31	1	5	1	10.51	10.35	1	5	2	18.24	18.61
6	8	1	5.96	4.69	1	7	1	17.03	17.31	1	7	2	5.77	4.45
6	6	1	8.92	9.23	1	9	1	2.73	2.64	1	9	2	19.74	20.73
6	4	1	26.89	26.87	1	11	1	3.49	3.75	1	11	2	20.29	19.81
6	2	1	0.67	0.37	1	13	1	2.09	2.43	1	13	2	11.98	11.78
6	0	1	25.31	25.54	1	15	1	1.87	1.05	1	15	2	22.33	22.29
6	2	1	8.26	7.85	1	1	1	2.04	0.88	1	17	2	5.30	5.45
6	4	1	15.40	15.25	1	3	1	5.83	5.88	1	19	2	3.81	4.00
6	6	1	6.57	6.14	1	5	1	5.51	5.51	1	21	2	6.49	6.30
6	8	1	14.40	14.13	1	7	1	6.59	6.43	1	23	2	7.83	7.61
6	10	1	15.08	14.76	1	9	1	6.53	6.57	1	25	2	6.25	6.45
6	12	1	14.02	14.12	1	11	1	3.36	3.65	1	27	2	7.26	7.18
6	14	1	3.57	3.89	1	13	1	6.97	6.76	1	29	2	2.82	2.75
6	16	1	2.95	5.88	1	15	1	4.55	4.53	1	31	2	8.49	8.49
6	18	1	5.89	2.79	1	17	1	2.30	0.30	1	33	2	18.90	18.47
7	17	1	3.36	3.51	1	1	1	10.01	9.90	1	1	2	1.17	0.41
7	15	1	7.76	7.80	1	3	1	0.00	1.46	1	3	2	59.57	59.53
7	13	1	14.79	15.20	1	5	1	3.48	3.37	1	5	2	22.36	22.34
7	11	1	8.66	8.95	1	7	1	12.82	12.81	1	7	2	35.02	34.03
7	9	1	18.23	17.92	1	9	1	1.63	1.90	1	9	2	32.79	32.02
7	7	1	4.22	4.05	1	11	1	3.79	3.88	1	11	2	15.31	14.58
7	5	1	13.19	13.12	1	13	1	0.00	1.89	1	13	2	51.36	50.05
7	3	1	18.64	18.67	1	15	1	7.88	7.97	1	15	2	40.45	39.79
7	1	1	21.74	21.67	1	17	1	9.42	9.57	1	17	2	55.23	56.45
7	7	1	14.40	14.13	1	19	1	2.78	2.75	1	19	2	60.25	61.43
7	5	1	9.04	9.12	1	1	1	2.10	2.96	1	1	2	16.74	16.73
7	3	1	6.53	6.51	1	3	1	9.48	9.33	1	3	2	9.72	9.53
7	1	1	11.31	11.44	1	5	1	4.15	3.90	1	5	2	34.75	34.75
7	7	1	3.71	3.65	1	7	1	2.64	2.85	1	7	2	12.58	12.60
7	9	1	12.36	11.97	1	9	1	3.77	3.98	1	9	2	1.43	1.50
7	11	1	5.43	5.28	1	11	1	12.88	12.71	1	11	2	2.77	1.69
7	13	1	6.87	7.12	1	13	1	4.26	4.35	1	13	2	3.09	3.15
8	16	1	1.18	5.00	1	15	1	2.55	2.04	1	15	2	14.52	15.01
8	14	1	13.67	13.72	1	17	1	0.69	0.69	1	17	2	13.90	13.56
8	12	1	6.14	6.10	1	19	1	82.62	87.63	1	19	2	2.42	2.60
8	10	1	25.08	24.88	1	1	2	7.46	7.04	1	1	2	22.85	22.91
8	8	1	12.99	12.96	1	3	2	22.29	23.09	1	3	2	16.82	16.07
8	6	1	15.05	14.81	1	5	2	30.74	30.35	1	5	2	1.04	1.09
8	4	1	10.09	10.26	1	7	2	13.38	14.15	1	7	2	4.66	4.47
8	2	1	11.10	11.47	1	9	2	21.05	21.59	1	9	2	12.17	12.53
8	8	2	5.85	5.89	1	11	2	8.71	8.75	1	11	2	0.00	0.45
8	6	2	10.88	10.62	1	13	2	6.39	6.38	1	13	2	24.92	25.33
8	4	2	3.90	3.88	1	15	2	15.30	15.52	1	15	2	7.11	7.30
8	2	2	1.40	0.21	1	17	2	2.28	2.71	1	17	2	6.72	7.17
8	8	10	7.07	6.62	1	19	2	7.63	7.57	1	19	2	14.48	14.09
8	12	14	0.00	0.20	1	1	2	16.43	16.13	1	1	2	5.14	5.14
8	14	16	1.98	1.96	1	3	2	3.57	3.79	1	3	2	14.14	14.09



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
6	12	2	13.04	13.09	10	2	2	4.75	4.81	2	8	3	9.39	9.69
6	14	2	11.77	11.82	10	4	2	16.62	15.80	2	10	3	0.00	0.53
6	16	2	1.40	2.77	10	6	2	4.77	4.66	2	12	3	6.78	6.81
6	18	2	1.96	1.42	10	8	2	3.25	2.99	2	14	3	22.21	22.66
7	17	2	18.35	18.73	10	10	2	8.94	9.05	2	16	3	5.80	5.91
7	15	2	7.54	7.56	11	-7	2	1.58	1.23	2	18	3	11.59	11.68
7	13	2	13.11	13.00	11	-5	2	7.61	7.74	2	20	3	6.51	6.59
7	11	2	6.36	6.83	11	-3	2	9.98	9.84	3	-21	3	11.19	11.46
7	9	2	4.60	4.71	11	-1	2	3.09	3.28	3	-19	3	2.48	2.81
7	7	2	10.49	10.62	11	1	2	0.00	1.08	3	-17	3	14.45	14.27
7	5	2	6.44	6.36	11	3	2	5.03	4.92	3	-15	3	4.16	4.24
7	3	2	21.82	21.82	11	5	2	4.72	4.60	3	-13	3	15.85	16.07
7	1	2	14.95	14.06	11	7	2	4.89	5.03	3	-11	3	14.34	14.52
7	7	2	14.39	14.06	11	9	3	11.43	10.40	3	-9	3	20.60	20.68
7	5	2	18.84	18.92	0	0	3	17.67	17.38	3	-7	3	34.73	34.63
7	3	2	3.91	3.98	0	2	3	19.17	19.69	3	-5	3	29.82	30.01
7	1	2	7.44	7.80	0	4	3	23.58	24.11	3	-3	3	11.44	11.10
7	7	2	11.11	11.18	0	6	3	26.86	27.43	3	-1	3	27.40	27.52
7	5	2	15.88	15.86	0	8	3	8.12	7.91	3	1	3	3.13	2.65
7	3	2	10.31	9.99	0	10	3	4.12	4.06	3	3	3	45.94	45.98
7	1	2	5.64	5.68	0	12	3	6.85	6.73	3	5	3	2.01	1.56
8	16	2	8.98	8.96	0	14	3	7.52	7.57	3	7	3	39.91	40.93
8	14	2	9.67	9.29	0	16	3	3.33	3.11	3	9	3	18.04	18.32
8	12	2	7.14	7.17	1	18	3	5.29	5.00	3	11	3	2.47	2.80
8	10	2	13.15	13.68	1	20	3	0.48	2.00	3	13	3	1.74	0.65
8	8	2	14.23	14.29	1	22	3	4.63	4.68	3	15	3	6.57	6.57
8	6	2	7.57	7.66	1	24	3	1.84	1.70	3	17	3	2.43	2.15
8	4	2	3.47	3.46	1	26	3	9.73	9.86	3	19	3	4.01	4.08
8	2	2	12.68	12.68	1	28	3	14.86	14.85	3	21	3	5.88	6.07
8	0	2	11.13	11.35	1	30	3	5.64	5.11	3	23	3	2.73	2.61
8	2	2	10.20	9.96	1	32	3	30.36	29.81	3	25	3	11.73	11.58
8	4	2	23.26	23.16	1	34	3	24.61	23.31	3	27	3	1.39	1.20
8	6	2	19.07	19.27	1	36	3	54.90	54.26	3	29	3	13.12	13.08
8	8	2	3.57	3.29	1	38	3	12.08	11.70	3	31	3	1.99	2.11
8	10	2	13.64	13.80	1	40	3	4.41	4.31	3	33	3	22.80	22.92
8	12	2	0.00	0.20	1	42	3	18.13	18.26	3	35	3	13.47	13.06
8	14	2	0.00	0.63	1	44	3	8.41	8.74	3	37	3	9.72	10.07
8	16	2	5.34	5.24	1	46	3	22.48	23.29	3	39	3	14.03	14.78
8	18	2	18.49	18.61	1	48	3	0.87	0.70	3	41	3	18.30	18.44
8	20	2	6.82	7.08	1	50	3	15.25	15.56	3	43	3	8.19	8.19
8	22	2	11.23	11.33	1	52	3	11.48	11.72	3	45	3	3.34	3.25
8	24	2	4.03	4.10	1	54	3	4.76	4.91	3	47	3	13.65	14.18
8	26	2	1.40	1.29	1	56	3	5.07	5.07	3	49	3	9.94	9.53
8	28	2	1.27	1.86	2	58	3	6.39	6.47	3	51	3	0.00	1.76
8	30	2	9.38	9.33	2	60	3	5.94	6.14	3	53	3	10.26	10.24
8	32	2	5.88	5.94	2	62	3	12.07	12.05	3	55	3	2.62	3.33
8	34	2	9.91	9.99	2	64	3	20.05	20.27	3	57	3	9.14	8.93
8	36	2	3.22	3.45	2	66	3	3.38	3.29	3	59	3	0.67	1.20
8	38	2	0.00	1.57	2	68	3	15.14	14.66	3	61	3	23.60	24.02
8	40	2	5.55	5.68	2	70	3	4.80	4.87	3	63	3	1.06	1.31
8	42	2	7.36	7.64	2	72	3	47.11	46.28	3	65	3	18.53	18.45
8	44	2	2.62	2.95	2	74	3	30.99	29.98	3	67	3	3.21	3.13
8	46	2	7.20	7.39	2	76	3	19.99	19.81	3	69	3	12.46	12.53
8	48	2	10.87	10.79	2	78	3	8.41	8.09	3	71	3	19.98	20.19
8	50	2	6.99	6.89	2	80	3	41.87	41.93	3	73	3	8.33	8.39
8	52	2	23.14	23.68	2	82	3	11.93	12.01	3	75	3	20.24	19.99
8	54	2			2	84	3			3	77	3	16.14	16.16

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
9	-3	3	2.92	2.96	9	-1	4	15.37	15.70	9	-1	4	5.86	5.84
9	-1	3	8.79	9.06	9	1	4	8.89	8.94	9	1	4	4.87	5.24
9	1	3	10.00	10.01	9	3	4	21.00	21.29	9	3	4	2.17	2.19
9	3	3	13.82	14.85	9	5	4	0.50	0.64	9	5	4	11.31	11.41
9	5	3	6.15	5.94	9	7	4	5.62	5.52	9	7	4	12.58	13.00
9	7	3	15.48	15.25	9	9	4	9.91	9.89	9	9	4	12.26	12.45
9	9	3	5.31	5.31	9	9	4	5.99	6.06	10	-6	4	11.21	11.16
10	-8	3	5.84	5.69	10	-4	4	6.24	6.31	10	-4	4	0.00	0.37
10	-6	3	3.53	3.18	10	-2	4	11.62	11.36	10	-2	4	8.45	8.40
10	-4	3	9.52	9.62	10	0	4	4.61	4.65	10	0	4	12.20	12.22
10	-2	3	1.73	1.95	10	2	4	0.00	0.85	10	2	4	0.00	1.19
10	0	3	13.88	14.47	10	4	4	2.60	0.93	10	4	4	1.94	3.11
10	2	3	1.97	2.13	10	0	4	2.72	1.61	10	0	4	18.27	18.93
10	4	3	5.03	5.21	10	2	4	10.76	10.44	10	2	4	0.51	1.60
10	6	3	1.64	2.51	10	4	4	3.73	4.01	10	4	4	28.93	29.72
10	8	3	7.56	7.49	10	6	4	23.42	24.18	10	6	4	8.57	8.26
11	-3	3	5.22	5.16	11	-6	4	17.45	17.23	11	-6	4	7.27	7.37
11	-1	3	10.20	10.12	11	-4	4	9.17	9.08	11	-4	4	14.07	14.62
11	1	3	12.35	12.65	11	-2	4	15.37	15.51	11	-2	4	3.85	3.94
11	3	3	7.11	7.14	11	0	4	7.30	7.37	11	0	4	9.30	9.58
11	5	3	20.98	19.88	11	2	4	12.96	13.13	11	2	4	0.00	0.18
0	0	4	21.29	21.42	0	0	4	4.03	3.71	0	0	4	0.85	1.58
0	2	4	12.16	12.02	0	2	4	25.13	25.75	0	2	4	0.85	1.66
0	4	4	31.31	32.02	0	4	4	16.61	16.83	0	4	4	12.95	12.66
0	6	4	25.87	26.38	0	6	4	10.10	10.13	0	6	4	5.04	5.03
0	8	4	12.62	13.15	0	8	4	11.64	11.57	0	8	4	10.45	10.56
0	10	4	9.77	10.14	0	10	4	5.62	5.53	0	10	4	15.49	15.66
0	12	4	0.99	1.06	0	12	4	2.24	0.30	0	12	4	20.96	21.51
0	14	4	2.87	2.73	0	14	4	4.19	4.14	0	14	4	15.79	16.04
0	16	4	6.37	6.39	0	16	4	5.07	4.99	0	16	4	9.10	9.57
0	18	4	2.64	2.52	0	18	4	0.52	2.59	0	18	4	36.63	36.39
0	20	4	9.97	10.04	0	20	4	4.96	4.99	0	20	4	5.10	5.24
1	-21	4	12.32	12.80	1	-3	4	7.19	7.41	1	-3	4	3.55	3.35
1	-17	4	25.86	26.23	1	-1	4	2.62	2.60	1	-1	4	22.59	22.10
1	-15	4	0.00	1.31	1	1	4	17.98	21.86	1	1	4	6.73	6.61
1	-13	4	14.84	15.26	1	3	4	7.88	8.05	1	3	4	19.08	19.17
1	-11	4	4.18	4.22	1	5	4	13.83	13.76	1	5	4	22.82	23.26
1	-9	4	1.48	0.99	1	7	4	17.18	17.22	1	7	4	10.72	11.01
1	-7	4	43.02	43.30	1	9	4	11.35	11.41	1	9	4	8.87	9.05
1	-5	4	0.00	0.13	1	11	4	5.79	5.88	1	11	4	9.45	9.77
1	-3	4	51.52	50.89	1	13	4	1.82	1.78	1	13	4	5.08	4.93
1	-1	4	20.43	20.07	1	15	4	0.00	1.45	1	15	4	9.92	10.10
1	1	4	46.81	46.87	1	17	4	5.47	5.50	1	17	4	2.78	2.78
1	3	4	7.73	7.98	1	19	4	1.52	1.69	1	19	4	6.53	6.36
1	5	4	25.98	26.16	1	21	4	8.37	8.50	1	21	4	1.74	1.24
1	7	4	3.50	3.77	1	23	4	2.60	2.32	1	23	4	6.24	6.03
1	9	4	6.91	7.01	1	25	4	9.59	9.76	1	25	4	5.02	5.18
1	11	4	5.07	5.09	1	27	4	6.61	6.25	1	27	4	8.22	8.16
1	13	4	18.87	18.77	1	29	4	8.54	8.54	1	29	4	6.77	7.04
1	15	4	5.80	5.81	1	31	4	21.73	21.94	1	31	4	0.00	0.07
1	17	4	7.21	7.22	1	33	4	2.66	3.26	1	33	4	12.97	12.82
2	-18	4	8.41	8.68	2	-4	4	12.31	12.31	2	-4	4	18.14	18.23
2	-16	4	2.53	1.75	2	-2	4	6.86	6.95	2	-2	4	28.01	27.66
2	-14	4	9.72	10.20	2	0	4	3.49	3.59	2	0	4	21.44	20.69
2	-12	4	12.55	12.56	2	2	4	0.69	1.68	2	2	4	7.70	7.46
2	-10	4	2.11	1.60	2	4	4	17.73	18.10	2	4	4	21.82	21.95
2	-8	4	17.33	17.20	2	6	4	7.36	7.41	2	6	4	3.23	3.31
2	-6	4	17.94	18.48	2	8	4	15.29	14.88	2	8	4	4.67	4.65
2	-4	4			2	10	4	2.26	1.31	2	10	4	13.25	13.40

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
2	14	5	18.15	18.30	6	-8	5	4.64	4.55	1	-1	6	4.09	4.29
2	16	5	5.57	5.47	6	-6	5	9.23	9.00	1	1	6	2.76	2.51
2	18	5	15.63	15.15	6	-4	5	6.55	6.62	1	3	6	6.95	6.88
3	-17	5	4.06	3.92	6	-2	5	9.52	9.58	1	5	6	9.16	8.93
3	-19	5	1.74	2.43	6	0	5	13.07	13.90	1	7	6	3.72	3.61
3	-15	5	8.51	8.28	6	2	5	8.60	8.90	1	9	6	1.33	0.99
3	-13	5	5.75	5.65	6	4	5	10.86	10.88	1	11	6	1.24	0.29
3	-11	5	1.41	0.67	6	6	5	1.48	1.48	1	13	6	1.40	2.22
3	-7	5	2.33	0.88	6	8	5	5.22	5.14	1	15	6	10.81	10.76
3	-5	5	10.41	10.74	6	10	5	7.47	7.13	1	17	6	0.00	0.29
3	-3	5	10.62	10.73	6	12	5	5.27	5.18	2	-18	6	3.37	3.24
3	-1	5	3.62	3.54	6	14	5	7.32	7.46	2	-16	6	11.77	11.85
3	3	5	2.25	2.45	7	-11	5	4.41	4.50	2	-14	6	15.31	15.12
3	5	5	19.40	19.88	7	-9	5	15.10	15.07	2	-12	6	8.66	8.90
3	7	5	11.99	12.40	7	-7	5	14.57	14.37	2	-10	6	12.42	12.58
3	9	5	7.10	7.19	7	-5	5	16.20	16.35	2	-8	6	5.70	5.74
3	11	5	24.57	25.29	7	-3	5	1.63	2.01	2	-6	6	4.41	4.36
3	13	5	1.41	2.56	7	-1	5	12.35	12.15	2	-4	6	2.12	2.04
3	15	5	9.74	9.48	7	1	5	9.81	9.60	2	0	6	14.10	14.20
3	17	5	3.64	3.74	7	3	5	10.82	10.57	2	2	6	21.31	21.19
3	19	5	3.80	2.80	7	5	5	13.30	13.22	2	4	6	1.17	0.25
4	-18	5	4.89	4.89	7	7	5	0.98	0.12	2	6	6	9.10	9.25
4	-16	5	3.49	3.18	7	9	5	22.66	22.80	2	8	6	7.47	7.52
4	-14	5	2.06	2.23	7	11	5	0.39	2.80	2	10	6	7.24	7.52
4	-12	5	12.87	13.18	8	-10	5	2.33	1.51	2	12	6	3.37	3.47
4	-10	5	0.00	0.68	8	-8	5	3.68	2.26	2	14	6	11.12	11.29
4	-8	5	14.31	14.17	8	-6	5	5.77	3.44	2	16	6	0.00	1.34
4	-6	5	13.69	14.47	8	-4	5	1.63	5.91	3	-17	6	9.82	11.29
4	-4	5	2.79	3.01	8	0	5	6.38	0.97	3	-15	6	1.34	1.34
4	0	5	1.11	0.42	8	2	5	4.47	6.44	3	-13	6	9.93	10.60
4	2	5	10.23	10.31	8	4	5	1.31	2.20	3	-11	6	2.88	2.57
4	4	5	1.27	1.26	8	6	5	4.85	4.58	3	-9	6	11.64	11.48
4	6	5	20.75	21.16	8	8	5	2.11	1.13	3	-7	6	12.64	12.38
4	8	5	6.38	6.48	8	5	5	0.00	1.68	3	-5	6	19.41	19.17
4	10	5	17.31	17.15	9	-3	5	10.44	10.74	3	-3	6	6.65	6.65
4	12	5	7.77	7.56	9	-1	5	5.28	5.18	3	1	6	16.78	16.89
4	14	5	2.24	0.20	9	1	5	12.35	12.41	3	3	6	2.20	2.21
4	16	5	1.06	0.38	9	3	5	8.56	8.55	3	5	6	25.45	25.74
4	18	5	0.56	1.09	9	5	5	1.37	3.95	3	7	6	15.29	15.33
4	20	5	2.31	2.48	9	0	6	3.82	3.95	3	9	6	12.59	12.38
5	-15	5	12.05	12.21	0	0	6	17.91	18.21	3	11	6	5.65	5.42
5	-13	5	3.01	3.10	0	2	6	3.68	3.80	3	13	6	16.87	16.85
5	-11	5	6.61	6.38	0	4	6	29.19	29.89	3	15	6	8.46	8.52
5	-9	5	4.40	4.31	0	6	6	11.46	11.48	3	17	6	1.89	2.84
5	-7	5	4.78	1.00	0	8	6	14.46	14.63	4	-16	6	11.16	11.12
5	-5	5	24.57	24.85	0	10	6	5.09	5.05	4	-14	6	1.15	1.87
5	-3	5	5.71	5.63	0	12	6	11.65	11.52	4	-12	6	6.34	6.38
5	-1	5	33.23	33.46	0	14	6	7.46	7.33	4	-10	6	18.04	18.08
5	1	5	12.24	12.44	0	16	6	11.87	11.75	4	-8	6	2.67	2.34
5	3	5	15.40	15.59	0	18	6	4.52	4.41	4	-6	6	1.51	1.70
5	5	5	5.61	5.64	1	-19	6	10.12	10.17	4	-4	6	17.09	17.11
5	7	5	10.70	10.88	1	-17	6	9.25	9.19	4	0	6	5.90	5.84
5	9	5	12.38	12.53	1	-15	6	1.03	0.92	4	2	6	8.83	8.72
5	11	5	11.78	12.17	1	-13	6	16.12	16.07	4	4	6	10.81	10.86
5	13	5	11.55	11.60	1	-11	6	11.19	11.02	4	6	6	5.44	5.36
5	15	5	2.34	2.54	1	-9	6	2.31	2.35	4	8	6	11.84	11.89
5	17	5	1.19	0.57	1	-7	6	4.99	5.08	4	10	6	0.88	2.47
5	19	5	1.21	0.20	1	-5	6	11.49	11.08	4	12	6	2.28	2.22

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
1	-5	7	21.51	21.76	5	-5	7	9.22	9.29	2	12	8	1.46	0.67
1	-3	7	13.86	14.09	5	-3	7	1.49	1.27	2	-10	9	7.54	7.61
1	-1	7	2.25	2.57	5	-1	7	3.41	3.31	2	-8	9	17.19	17.41
1	1	7	4.21	3.99	5	1	7	3.41	3.35	2	-6	9	2.16	1.50
1	3	7	19.63	19.73	5	3	7	11.11	11.10	2	-4	9	9.82	9.56
1	5	7	25.04	25.50	5	5	7	4.53	4.62	2	-2	9	5.35	4.92
1	7	7	24.08	24.34	5	7	7	5.09	4.96	2	0	9	5.69	5.66
1	9	7	28.70	28.99	5	9	7	11.06	10.89	2	2	9	3.24	3.19
1	11	7	7.55	7.53	5	11	7	4.15	4.33	2	4	9	9.80	9.85
1	13	7	18.23	18.01	6	13	7	2.69	2.41	2	6	9	12.18	11.94
1	15	7	3.21	2.79	6	15	7	3.89	3.62	2	8	9	1.60	1.53
2	-16	7	3.56	3.57	6	-8	7	9.84	9.70	3	10	9	9.21	9.19
2	-14	7	5.53	5.49	6	-6	7	2.31	2.77	3	-9	9	2.04	1.11
2	-12	7	2.53	2.39	6	-4	7	7.90	7.99	3	-7	9	2.63	2.60
2	-10	7	1.88	1.66	6	-2	7	11.43	10.96	3	-5	9	9.23	9.17
2	-8	7	7.73	10.24	6	0	7	9.45	9.45	3	-3	9	11.39	11.49
2	-6	7	7.73	7.78	6	2	7	2.83	2.92	3	-1	9	5.72	5.67
2	-4	7	1.36	1.58	6	4	7	3.72	3.47	3	1	9	17.55	17.51
2	-2	7	10.48	10.74	6	6	7	0.00	0.37	3	3	9	2.47	3.22
2	0	7	12.71	12.66	6	8	7	6.27	6.38	3	5	9	5.76	5.90
2	2	7	0.54	1.07	7	-5	7	3.68	6.38	3	7	9	1.57	1.55
2	4	7	9.06	9.27	7	-3	7	4.17	3.59	4	-6	9	5.75	5.54
2	6	7	16.82	17.07	7	-1	7	0.56	0.51	4	-4	9	3.73	3.56
2	8	7	9.39	9.34	7	1	7	12.29	11.78	4	0	9	6.56	6.50
2	10	7	3.38	3.52	7	3	7	3.38	3.51	4	2	9	5.22	5.27
2	12	7	13.60	13.87	7	5	7	1.54	1.59	4	4	9	1.66	1.54
2	14	7	2.65	2.58	7	7	7	0.00	0.03	4	6	9	5.08	4.82
3	-15	7	7.61	7.73	7	9	7	12.10	12.02	4	8	9	3.14	3.14
3	-13	7	14.81	15.01	7	11	7	0.00	0.03	4	10	9	0.00	0.49
3	-11	7	5.36	5.53	7	13	7	1.24	0.59	4	12	9	0.00	1.49
3	-9	7	6.56	6.43	7	15	7	1.48	0.70	4	14	9	2.09	2.93
3	-7	7	7.78	7.37	7	17	7	0.00	0.33	4	16	9	2.70	2.63
3	-5	7	3.98	3.93	7	19	7	2.63	3.31	4	18	9	0.97	1.02
3	-3	7	24.60	24.83	7	21	7	11.08	11.02	4	20	9	8.83	8.79
3	-1	7	0.32	0.75	7	23	7	7.29	7.22	4	22	9	0.00	1.56
3	1	7	25.42	25.60	7	25	7	21.18	21.14	4	24	9	0.00	1.64
3	3	7	11.39	11.85	7	27	7	11.95	12.02	4	26	9	2.07	3.32
3	5	7	7.85	7.92	7	29	7	13.05	13.01	4	28	9	2.69	3.52
3	7	7	4.77	4.65	7	31	7	3.95	3.91	4	30	9	6.80	6.60
3	9	7	3.74	3.85	7	33	7	12.83	12.67	4	32	9	12.75	12.60
3	11	7	11.19	11.11	7	35	7	6.91	6.95	4	34	9	9.90	9.90
3	13	7	7.88	7.85	7	37	7	18.32	18.35	4	36	9	5.39	5.61
4	-14	7	10.31	10.30	7	39	7	7.22	7.66	4	38	9	8.68	8.57
4	-12	7	10.04	9.94	7	41	7	9.94	10.16	4	40	9	8.63	8.58
4	-10	7	13.13	12.89	7	43	7	6.55	6.59	4	42	9	0.00	0.95
4	-8	7	2.17	1.84	7	45	7	4.02	3.91	4	44	9	3.41	3.12
4	-6	7	8.17	8.25	7	47	7	10.91	10.85	4	46	9	3.32	3.20
4	-4	7	1.94	1.75	7	49	7	0.00	2.42	4	48	9	4.99	4.85
4	-2	7	2.40	2.29	7	51	7	0.00	10.23	4	50	9	2.09	1.63
4	2	7	10.63	10.50	7	53	7	0.00	0.04	4	52	9	1.91	0.78
4	4	7	7.08	7.10	7	55	7	0.00	7.24	4	54	9	4.82	4.54
4	6	7	15.41	15.38	7	57	7	5.74	5.64	4	56	9	7.63	7.32
4	8	7	3.11	2.94	7	59	7	18.65	18.56	4	58	9	1.64	1.13
4	10	7	13.98	13.61	7	61	7	8.45	8.64	4	60	9	5.30	5.14
4	12	7	4.61	4.66	7	63	7	6.02	6.22	4	62	9	3.99	3.69
4	14	7	2.87	2.81	7	65	7	8.96	8.91	4	64	9	8.31	7.99
5	-11	7	11.77	11.66	7	67	7	7.60	7.87	4	66	9	6.80	6.48
5	-9	7	4.51	4.38	7	69	7	7.49	7.52	4	68	9	7.19	8.57
5	-7	7	16.37	16.41	7	71	7	7.31	7.25	4	70	9	12.72	12.41