

Table 5. Observed and calculated structure factors for aravaipate (page 1)

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
2	0	0	2353	2334	28	9	3	0	1652	1614	24	13	6	0	0	88	1	1	1	1004	1117	20	25	2	1	0	7	1	
6	0	0	483	239	85	10	3	0	1026	904	39	14	6	0	575	500	90	2	1	1	1422	1402	28	26	2	1	89	48	88
8	0	0	7173	7066	92	11	3	0	187	53	186	15	6	0	625	654	87	3	1	1	5167	5324	11	27	2	1	679	747	138
10	0	0	3740	3647	77	12	3	0	931	945	43	16	6	0	2339	2248	107	4	1	1	4259	4381	16	28	2	1	432	604	294
12	0	0	1060	947	45	13	3	0	1143	1140	43	17	6	0	736	745	96	5	1	1	4846	4789	37	29	2	1	119	53	118
14	0	0	1163	1010	47	14	3	0	1013	946	51	18	6	0	1154	1077	74	6	1	1	1037	999	24	30	2	1	613	573	155
16	0	0	5278	5096	69	15	3	0	2237	2227	58	19	6	0	296	321	296	7	1	1	0	25	1	31	2	1	416	334	415
18	0	0	3304	3050	33	16	3	0	0	65	1	20	6	0	0	24	1	8	1	1	336	314	53	-29	3	1	0	275	1
20	0	0	960	857	92	17	3	0	1188	1113	61	21	6	0	0	65	1	9	1	1	1055	1071	27	-28	3	1	1685	1889	70
22	0	0	888	879	84	18	3	0	374	430	373	1	7	0	341	264	110	10	1	1	574	490	54	-27	3	1	0	194	1
24	0	0	3144	3159	53	19	3	0	543	480	120	2	7	0	1402	1381	39	11	1	1	3449	3511	20	-26	3	1	784	866	117
26	0	0	2199	2084	58	20	3	0	758	734	102	3	7	0	973	951	53	12	1	1	3531	3473	21	-25	3	1	156	57	156
28	0	0	530	413	156	21	3	0	1186	1145	76	4	7	0	384	437	104	13	1	1	4300	4315	27	-24	3	1	156	427	156
30	0	0	959	859	96	22	3	0	694	689	86	5	7	0	1216	1224	41	14	1	1	1550	1579	29	-23	3	1	363	439	362
32	0	0	1909	1972	62	23	3	0	1470	1385	69	6	7	0	1661	1632	40	15	1	1	1121	1043	44	-22	3	1	2294	2491	77
1	1	0	801	828	17	24	3	0	421	526	233	7	7	0	120	231	119	16	1	1	159	286	158	-21	3	1	751	558	130
2	1	0	1369	1428	16	25	3	0	0	208	1	8	7	0	338	235	113	17	1	1	714	731	54	-20	3	1	3064	3043	65
3	1	0	1038	980	16	26	3	0	0	34	1	9	7	0	428	275	120	18	1	1	173	239	173	-19	3	1	0	283	1
4	1	0	1445	1508	27	27	3	0	598	723	260	10	7	0	1396	1344	37	19	1	1	2254	2267	50	-18	3	1	351	429	206
5	1	0	1057	1023	25	28	3	0	541	485	377	11	7	0	496	612	80	20	1	1	2286	2298	36	-17	3	1	0	84	1
6	1	0	1674	1657	24	29	3	0	752	695	222	12	7	0	0	159	1	21	1	1	3186	3354	33	-16	3	1	235	358	234
7	1	0	787	789	27	0	4	0	3645	3584	33	13	7	0	1059	1012	117	22	1	1	1338	1268	48	-15	3	1	0	195	1
8	1	0	424	391	64	1	4	0	3616	3571	23	14	7	0	1552	1377	92	23	1	1	445	425	136	-14	3	1	3480	3500	34
9	1	0	522	524	46	2	4	0	1645	1529	43	-31	0	1	1081	946	95	24	1	1	531	487	97	-13	3	1	1234	1100	92
10	1	0	2459	2485	23	3	4	0	597	575	42	-29	0	1	0	196	1	25	1	1	1232	1171	61	-12	3	1	4176	4113	30
11	1	0	979	890	37	4	4	0	0	16	1	-27	0	1	674	480	118	26	1	1	0	46	1	-11	3	1	656	460	102
12	1	0	2312	2240	24	5	4	0	1039	1018	30	-25	0	1	1394	1264	76	27	1	1	1408	1318	59	-10	3	1	357	416	71
13	1	0	960	879	38	6	4	0	562	483	49	-23	0	1	1131	1021	59	28	1	1	1524	1557	47	-9	3	1	161	106	160
14	1	0	1397	1242	35	7	4	0	1843	1751	29	-21	0	1	530	518	107	29	1	1	2216	2343	43	-8	3	1	432	429	37
15	1	0	953	927	42	8	4	0	3357	3159	22	-19	0	1	1682	1718	45	30	1	1	857	810	74	-7	3	1	445	414	32
16	1	0	982	1010	50	9	4	0	3182	3126	22	-17	0	1	2041	2117	42	31	1	1	242	394	242	-6	3	1	3031	2970	16
17	1	0	1088	945	47	10	4	0	1450	1383	26	-15	0	1	1221	1183	63	-31	2	1	614	632	117	-5	3	1	872	803	25
18	1	0	1612	1584	38	11	4	0	160	248	160	-13	0	1	1416	1390	42	-30	2	1	639	687	151	-4	3	1	6342	6226	24
19	1	0	0	126	1	12	4	0	245	256	202	-11	0	1	2128	2075	35	-29	2	1	0	267	1	-3	3	1	1183	1193	16
20	1	0	1086	975	49	13	4	0	351	303	113	-9	0	1	2132	2240	30	-28	2	1	553	711	158	-2	3	1	285	301	42
21	1	0	1067	967	67	14	4	0	428	376	91	-7	0	1	410	351	108	-27	2	1	600	639	90	-1	3	1	102	163	101
22	1	0	0	145	1	15	4	0	1520	1415	48	-5	0	1	2252	2219	71	-26	2	1	539	640	115	0	3	1	518	498	25
23	1	0	741	806	84	16	4	0	2631	2623	40	-3	0	1	1719	1846	26	-25	2	1	304	26	303	1	3	1	821	818	19
24	1	0	1110	966	89	17	4	0	2685	2650	48	-1	0	1	1610	1692	20	-24	2	1	539	532	112	2	3	1	1592	1556	30
25	1	0	0	177	1	18	4	0	1460	1419	98	1	0	1	364	300	42	-23	2	1	837	789	77	3	3	1	617	529	78
26	1	0	1055	1030	80	19	4	0	405	491	166	3	0	1	1929	2072	17	-22	2	1	1381	1353	58	4	3	1	6332	6180	17
27	1	0	264	261	264	20	4	0	255	365	255	5	0	1	1697	1874	55	-21	2	1	0	238	1	5	3	1	804	817	30
28	1	0	349	362	184	21	4	0	923	887	87	7	0	1	1760	1782	27	-20	2	1	859	836	67	6	3	1	1474	1340	21
29	1	0	851	780	71	22	4	0	0	215	1	9	0	1	89	107	88	-19	2	1	1511	1404	52	7	3	1	416	406	51
30	1	0	0	5	1	23	4	0	463	526	234	11	0	1	2842	2867	32	-18	2	1	656	624	78	8	3	1	652	600	42
31	1	0	204	127	203	24	4	0	1636	1585	96	13	0	1	2424	2463	34	-17	2	1	483	281	97	9	3	1	661	635	42
32	1	0	738	773	128	25	4	0	1932	1907	61	15	0	1	1232	1174	58	-16	2	1	1499	1486	44	10	3	1	776	738	57
0	2	0	3557	3420	24	26	4	0	1230	1216	89	17	0	1	1247	1201	85	-15	2	1	1088	1063	42	11	3	1	756	711	96
1	2	0	5304	5129	32	27	4	0	0	74	1	19	0	1	2017	2122	56	-14	2	1	1893	1932	27	12	3	1	5335	5049	43
2	2	0	224	134	113	1	5	0	1236	1237	31	21	0	1	1062	1006	82	-13	2	1	453	379	67	13	3	1	681	460	358
3	2	0	317	379	49	2	5	0	838	735	42	23	0	1	0	83	1	-12	2	1	634	595	48	14	3	1	1834	1777	44
4	2	0	290	136	58	3	5	0	1230	1261	31	25	0	1	1135	1069	84	-11	2	1	1728	1743	26	15	3	1	362	231	140
5	2	0	0	159	1	4	5	0	1952	1921	39	27	0	1	1244	1117	81	-10	2	1	191	124	160	16	3	1	628	660	85
6	2	0	1277	1152	28	5	5	0	1440	1390	32	29	0	1	0	119	1	-9	2	1	227	251	103	17	3	1	0	101	1
7	2	0	5220	5045	24	6	5	0	813	682	46	31	0	1	0	80	1	-8	2	1	1665	1730	27	18	3	1	281	39	280
8	2	0	3097	2917	44	7	5	0	1477	1377	51	-31	1	1	752	725	82	-7	2	1	822	790	24	19	3</				







