AM-89-424

Crystal structure of wiserite

Franz Pertlik, Pete J. Dunn

For deposit: Table 3

American Mineralogist, 74, 11-12, 1351-1354. pp. 1-18

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	1	0	0	850	0	2	0	646	912	2	2	0	744	-549	-1	3	0	1133	1099	1	3	0	1105	-1025
3	3	0	1328	-1336	-2	4	0	556	683	0	4	0	974	1129	2	4	0	632	716	4	4	0	1329	1460
-3	5	0	186	-199	-1	5	0	613	621	1	5	0	71	-84	3	5	0	2146	2071	5	5	0	2325	-2188
-4	6	0	2061	2208	-2	6	0	1041	1157	0	6	0	2608	-2384	2	6	0	527	-339	4	6	0	183	32
6	6	0	1535	1601	-5	7	0	449	-311	-3	7	0	1682	-1709	-1	7	0	627	-551	1	7	0	1641	-1591
3	7	0	1639	1597	5	7	0	1644	-1490	7	7	0	2601	2444	-6	8	0	2057	-1798	-4	8	0	224	359
-2	8	0	791	852	0	8	0	2894	2914	2	8	0	843	1001	4	8	0	369	510	6	8	0	942	-754
8	8	0	1578	1584	-7	9	0	1334	1334	-5	9	0	2286	2200	-3	9	0	687	-715	-1	9	0	1201	-1127
1	9	0	806	-680	3	9	0	1249	1228	5	9	0	349	-326	7	9	0	827	-764	9	9	0	236	-251
-8	10	0	1723	1799	-6	10	0	308	377	-4	10	0	274	373	-2	10	0	487	543	0	10	0	1547	1559
2	10	0	2133	2005	4	10	0	298	-176	6	10	0	535	-405	8	10	0	1935	-1792	10	10	0	882	894
-9	11	0	431	399	-7	11	0	794	-793	-5	11	0	1243	-1212	-3	11	0	264	-242	-1	11	0	184	181
1	11	0	86	36	3	11	0	1664	-1590	5	11	0	530	-506	7	11	0	514	471	9	11	0	1861	1821
11	11	0	96	83	-10	12	0	567	634	-8	12	0	1090	1147	-6	12	0	94	-20	-4	12	0	1584	-1466
-2	12	0	417	429	0	12	0	679	747	2	12	0	2119	2094	4	12	0	220	273	6	12	0	1289	1289
8	12	0	1622	1590	10	12	0	2088	2108	12	12	0	355	-347	-11	13	0	53	-25	-9	13	0	894	877
-7	13	0	132	-130	-5	13	0	270	264	-3	13	0	173	-172	-1	13	0	1829	1773	1	13	0	1154	1114
3	13	0	58	40	5	13	0	445	-423	7	13	0	598	-572	9	13	0	942	906	11	13	0	165	170
13	13	0	362	341	-12	14	0	689	757	-10	14	0	1398	1421	-8	14	0	965	-913	-6	14	0	1436	1453
-4	14	0	528	585	-2	14	0	2805	2858	0	14	0	1623	-1509	2	14	0	0	114	4	14	0	359	-285
6	14	0	1717	1691	8	14	0	805	-721	10	14	0	111	-130	12	14	0	1442	-1371	14	14	0	1134	1131
-13	15	0	1060	1048	-11	15	0	1233	1268	-9	15	0	1670	1690	-7	15	0	1372	-1408	-5	15	0	523	518
-3	15	0	651	-659	-1	15	0	1352	1364	1	15	0	1425	-1381	3	15	0	1011	-952	5	15	0	0	-52
7	15	0	1084	1091	9	15	0	56	-59	11	15	0	475	-467	13	15	0	387	410	15	15	0	1058	1071
14	16	0	554	581	-12	16	0	250	252	-10	16	0	217	-180	-8	16	0	527	-510	-6	16	0	57	57
-4	16	0	597	607	-2	16	0	1186	1267	0	16	0	394	437	2	16	0	208	-138	4	16	0	418	411
6	16	0	523	581	8	16	0	1297	1251	10	16	0	286	343	12	16	0	830	827	14	16	0	191	-156
16	16	0	576	589	-15	17	0	597	-588	-13	17	0	37	-96	-11	17	0	1026	-1038	-9	17	0	398	-392
-7	17	0	361	-365	-5	17	0	1076	1108	-3	17	0	0	64	-1	17	0	341	-366	1	17	0	204	204
3	17	0	1178	1172	5	17	0	1756	1658	7	17	0	44	34	9	17	0	237	-245	11	17	0	949	-936
13	17	0	381	394	15	17	0	237	-275	17	17	0	100	-35	-16	18	0	156	-171	-14	18	0	906	900
12	18	0	1065	1106	-10	18	0	573	599	-8	18	0	53	-61	-6	18	0	542	554	-4	18	0	328	384
-2	18	0	1049	1099	0	18	0	368	404	2	18	0	788	797	4	18	0	447	492	6	18	0	147	-134
8	18	0	476	-357	10	18	0	173	-168	12	18	0	965	966	14	18	0	290	325	16	18	0	175	-207
18	18	0	821	-803	-17	19	0	579	629	-15	19	0	299	305	-13	19	0	72	54	-11	19	0	52	-95
-9	19	0	90	-82	-7	19	0	256	261	-5	19	0	76	52	-3	19	0	465	446	-1	19	0	930	-933
1	19	0	701	-687	3	19	0	1833	-1790	5	19	0	411	405	7	19	0	530	-537	9	19	0	671	663
11	19	0	553	-540	13	19	0	55	-58	15	19	0	246	-221	17	19	0	575	559	19	19	0	145	121
18	20	0	674	658	-16	20	0	528	565	-14	20	0	215	200	-12	20	0	216	-220	-10	20	0	468	498
-8	20	0	742	776	-6	20	0	166	178	-4	20	0	1051	-1093	-2	20	0	714	-717	0	20	0	528	554

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	20	0	1307	1337	4	20	0	136	108	6	20	0	198	-180	8	20	0	283	273	10	20	0	593	586
12	20	0	873	881	14	20	0	147	111	16	20	0	619	633	18	20	0	222	208	20	20	0	549	523
-19	21	0	587	-605	-17	21	0	154	-194	-15	21	0	288	322	-13	21	0	133	-172	-11	21	0	395	-396
-9	21	0	731	+760	-7	21	0	369	397	-5	21	0	530	-551	-3	21	0	287	292	-1	21	0	540	-561
1	21	0	1255	1216	3	21	0	409	-416	5	21	0	449	430	7	21	0	822	-834	9	21	0	641	638
11	21	0	501	457	13	21	0	71	100	15	21	0	1032	-1073	17	21	0	707	-700	19	21	0	166	-131
21	21	0	284	255	-20	22	0	570	-570	-18	22	0	362	360	-16	22	0	534	-579	-14	22	0	486	508
-12	22	0	818	-854	-10	22	0	589	624	-8	22	0	131	-132	-6	22	0	1154	1188	-4	22	0	222	253
-2	22	0	840	890	0	22	0	393	-364	2	22	0	977	948	4	22	0	121	-89	6	22	0	734	711
8	22	0	61	-32	10	22	0	117	-96	12	22	0	464	-493	14	22	0	50	30	16	22	0	242	202
18	22	0	299	214	20	22	0	74	63	22	22	0	83	13	-21	23	0	177	175	-19	23	0	93	58
-17	23	0	166	245	-15	23	0	532	-613	-13	23	0	122	168	-11	23	0	376	359	-9	23	0	741	794
-7	23	0	283	210	-5	23	0	438	-451	-3	23	0	182	-178	-1	23	0	326	317	1	23	0	277	298
3	23	0	693	-692	5	23	0	672	-675	7	23	0	279	-211	9	23	0	15	30	11	23	0	171	211
13	23	0	302	-332	15	23	0	473	468	17	23	0	163	-152	19	23	0	492	443	21	23	0	345	-297
23	23	0	428	399	-22	24	0	92	56	-20	24	0	173	-211	-18	24	0	701	710	-16	24	0	361	376
-14	24	0	646	641	-12	24	0	314	-315	-10	24	0	277	238	-8	24	0	108	70	-6	24	0	215	-200
-4	24	0	163	-210	-2	24	0	73	-76	0	24	0	370	338	2	24	0	350	-333	4	24	0	188	-181
6	24	0	285	-301	8	24	0	1005	985	10	24	0	269	228	12	24	0	339	334	14	24	0	430	-435
16	24	0	1051	990	18	24	0	558	557	20	24	0	549	484	22	24	0	300	-329	24	24	0	49	34
-23	25	0	52	40	-21	25	0	506	539	-19	25	0	227	215	-17	25	0	44	48	-15	25	0	519	-543
-13	25	0	67	-100	-11	25	0	31	-19	-9	25	0	144	-140	-7	25	0	38	-86	-5	25	0	252	-258
-3	25	0	129	-146	-1	25	0	156	-156	1	25	0	367	352	3	25	0	279	263	5	25	0	409	457
7	25	0	389	338	9	25	0	123	168	11	25	0	82	60	13	25	0	150	-151	15	25	0	258	279
17	25	0	90	-89	19	25	0	63	7	21	25	0	371	-376	23	25	0	109	68	-22	26	0	354	309
-20	26	0	102	69	-18	26	0	113	-141	-16	26	0	617	-637	-14	26	0	299	295	-12	26	0	522	494
-10	26	0	394	418	-8	26	0	224	-237	-6	26	0	249	-282	-4	26	0	796	848	-2	26	0	952	955
0	26	0	877	897	2	26	0	332	-344	4	26	0	279	243	6	26	0	52	78	8	26	0	845	782
10	26	0	470	-462	12	26	0	261	267	14	26	0	321	-345	16	26	0	162	177	18	26	0	230	-285
20	26	0	256	-240	22	26	0	196	143	-21	27	0	202	185	-19	27	0	164	224	-17	27	0	79	-112
-15	27	0	314	-308	-13	27	0	97	-95	-11	27	0	488	493	-9	27	0	179	-157	-7	27	0	199	217
-5	27	0	153	135	-3	27	0	900	937	-1	27	0	30	27	1	27	0	387	-407	3	27	0	463	-465
5	27	0	277	243	7	27	0	383	403	9	27	0	27	-22	11	27	0	840	-841	13	27	0	552	-501
15	27	0	442	413	17	27	0	506	526	19	27	0	251	225	21	27	0	232	-228	-20	28	0	509	459
-18	28	0	94	128	-16	28	0	218	156	-14	28	0	322	325	-12	28	0	848	846	-10	28	0	466	485
-8	28	0	313	291	-6	28	0	385	-420	-4	28	0	52	-35	-2	28	0	309	-327	0	28	0	595	622
2	28	0	75	18	4	28	0	556	584	6	28	0	256	-280	8	28	0	540	537	10	28	0	96	-118
12	28	0	814	753	14	28	0	341	347	16	28	0	502	466	18	28	0	85	114	20	28	0	54	-34
-17	29	0	394	-360	-15	29	0	786	746	-13	29	0	31	5	-11	29	0	122	127	-9	29	0	1202	-1213
-7	29	0	230	232	-5	29	0	135	-141	-3	29	0	487	527	-1	29	0	683	-743	1	29	0	422	-397

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	29	0	91	-131	5	29	0	413	441	7	29	0	35	31	9	29	0	451	446	11	29	0	471	506
13	29	0	427	352	15	29	0	155	-135	17	29	0	329	-309	-16	30	0	178	-187	-14	30	0	121	60
-12	30	0	120	-117	-10	30	0	174	141	-8	30	0	85	-96	-6	30	0	579	584	-4	30	0	466	450
-2	30	0	210	211	0	30	0	0	-20	2	30	0	490	504	4	30	0	690	669	6	30	0	530	492
8	30	0	210	-204	10	30	0	158	-217	12	30	0	0	50	14	30	0	580	520	16	30	0	49	80
-15	31	0	194	218	-13	31	0	43	7	-11	31	0	333	346	-9	31	0	83	93	-7	31	0	420	440
-5	31	0	71	-36	-3	31	0	90	25	-1	31	0	239	272	1	31	0	145	136	3	31	0	242	281
5	31	0	585	-584	7	31	0	221	-225	9	31	0	481	-468	11	31	0	356	337	13	31	0	361	-342
15	31	0	153	-156	-12	32	0	73	14	-10	32	0	96	85	-8	32	0	454	429	-6	32	0	396	354
-4	32	0	303	292	-2	32	0	205	-266	0	32	0	44	-11	2	32	0	86	-104	4	32	0	73	54
6	32	0	233	-246	8	32	0	155	104	10	32	0	251	221	12	32	0	159	125	-9	33	0	46	-58
-7	33	0	56	89	-5	33	0	81	-87	-3	33	0	479	-442	-1	33	0	41	11	1	33	0	40	28
3	33	0	488	494	5	33	0	268	-278	7	33	0	45	79	9	33	0	99	-100	-6	34	0	481	-490
-4	34	0	339	289	-2	34	0	149	141	0	34	0	457	435	2	34	0	95	-161	4	34	0	323	318
6	34	0	349	289	0	0	1	670	-479	0	1	1	15	-12	1	1	1	456	-447	-1	2	1	481	-443
0	2	1	326	425	1	2	1	653	-600	2	2	1	441	-264	-2	3	1	497	-464	-1	3	1	176	84
0	3	1	111	98	1	3	1	420	374	2	3	1	501	-494	3	3	1	2733	2689	-3	4	1	741	638
-2	4	1	1658	-1391	-1	4	1	1287	-1218	0	4	1	2473	2625	1	4	1	72	66	2	4	1	1646	1646
3	4	1	874	786	4	4	1	2437	2420	-4	5	1	270	277	-3	5	1	301	330	-2	5	1	480	437
-1	5	1	1536	1489	0	5	1	182	-162	1	5	1	1085	889	2	5	1	368	-328	3	5	1	964	-869
4	5	1	715	650	5	5	1	274	-282	-5	6	1	275	-265	-4	6	1	405	-284	-3	6	1	338	338
-2	6	1	489	-402	-1	6	1	162	147	0	6	1	2256	2290	1	6	1	545	492	2	6	1	649	775
3	6	1	412	-364	4	6	1	1988	-1720	5	6	1	101	98	6	6	1	1127	-991	-6	7	1	192	-167
-5	7	1	626	-623	-4	7	1	538	-523	-3	7	1	267	-259	-2	7	1	72	-65	-1	7	1	972	842
0	7	1	248	229	1	7	1	153	174	2	7	1	306	299	3	7	1	369	-404	4	7	1	896	-830
5	7	1	1131	-1051	6	7	1	419	-412	7	7	1	895	834	-7	8	1	108	114	-6	8	1	295	344
-5	8	1	148	-132	-4	8	1	1027	1081	-3	8	1	609	-577	-2	8	1	1292	1352	-1	8	1	180	150
0	8	1	31	74	1	8	1	80	-61	2	8	1	1320	1314	3	8	1	535	485	4	8	1	1505	1527
5	8	1	889	-822	6	8	1	3405	3305	7	8	1	293	272	8	8	1	665	735	-8	9	1	254	248
-7	9	1	1800	-1767	-6	9	1	221	-210	-5	9	1	452	-414	-4	9	1	99	-83	-3	9	1	1393	1319
-2	9	1	531	-499	-1	9	1	2839	2800	0	9	1	307	288	1	9	1	681	-666	2	9	1	196	183
3	9	1	39	10	4	9	1	1009	936	5	9	1	805	-745	6	9	1	114	-93	7	9	1	422	417
8	9	1	122	-110	9	9	1	196	-215	-9	10	1	113	103	-8	10	1	290	323	-7	10	1	321	-323
-6	10	1	1891	1931	-5	10	1	26	-2	-4	10	1	965	1036	-3	10	1	354	339	-2	10	1	1821	1855
-1	10	1	809	796	0	10	1	991	-866	1	10	1	463	-431	2	10	1	212	244	3	10	1	0	29
4	10	1	1613	-1439	5	10	1	237	-229	6	10	1	1705	1722	7	10	1	453	437	8	10	1	437	453
9	10	1	57	10	10	10	1	702	755	-10	11	1	42	4	-9	11	1	623	601	-8	11	1	648	634
-7	11	1	811	-778	-6	11	1	89	83	-5	11	1	623	602	-4	11	1	100	106	-3	11	1	2350	-2312
-2	11	1	399	-393	-1	11	1	285	-294	0	11	1	695	675	1	11	1	2202	-2056	2	11	1	712	-667
3	11	1	2273	2155	4	11	1	190	176	5	11	1	548	-528	6	11	1	349	-349	7	11	1	489	-442

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
8	11	1	109	114	9	11	1	1582	-1566	10	11	1	154	-154	11	11	1	517	532	-11	12	1	44	42
-10	12	1	639	-599	-9	12	1	192	-187	-8	12	1	747	-724	-7	12	1	25	-28	-6	12	1	160	-100
-5	12	1	175	165	-4	12	1	1218	1284	-3	12	1	280	-276	-2	12	1	437	514	-1	12	1	594	-578
0	12	1	170	-131	1	12	1	134	-131	2	12	1	371	428	3	12	1	113	120	4	12	1	790	820
5	12	1	247	235	6	12	1	823	852	7	12	1	206	-202	8	12	1	686	730	9	12	1	275	-281
10	12	1	563	558	11	12	1	64	73	12	12	1	1203	1231	-12	13	1	394	397	-11	13	1	886	-877
-10	13	1	222	-215	-9	13	1	87	46	-8	13	1	206	-212	-7	13	1	124	115	-6	13	1	332	-338
-5	13	1	842	862	-4	13	1	508	513	-3	13	1	652	616	-2	13	1	128	118	-1	13	1	866	872
0	13	1	212	-214	1	13	1	106	-109	2	13	1	391	-363	3	13	1	475	465	4	13	1	66	40
5	13	1	676	637	6	13	1	506	495	7	13	1	235	-222	8	13	1	196	195	9	13	1	305	-290
10	13	1	51	-81	11	13	1	1268	-1263	12	13	1	51	-49	13	13	1	69	95	-13	14	1	345	-347
-12	14	1	271	278	-11	14	1	58	56	-10	14	1	580	616	-9	14	1	157	-146	-8	14	1	1002	1060
-7	14	1	171	170	-6	14	1	318	365	-5	14	1	46	-29	-4	14	1	429	-399	-3	14	1	394	400
-2	14	1	358	403	-1	14	1	313	320	0	14	1	752	813	1	14	1	46	-3	2	14	1	1271	1286
3	14	1	101	111	4	14	1	444	-390	5	14	1	67	83	6	14	1	584	-537	7	14	1	47	21
8	14	1	544	-522	9	14	1	196	-172	10	14	1	703	732	11	14	1	417	-421	12	14	1	94	97
13	14	1	54	21	14	14	1	450	-455	-14	15	1	56	53	-13	15	1	721	728	-12	15	1	71	89
-11	15	1	562	-576	-10	15	1	181	181	-9	15	1	244	-240	-8	15	1	140	-129	-7	15	1	289	278
-6	15	1	0	-10	-5	15	1	182	173	-4	15	1	144	-143	-3	15	1	719	-728	-2	15	1	388	384
-1	15	1	1153	-1159	0	15	1	160	166	1	15	1	141	-115	2	15	1	64	51	3	15	1	458	-441
4	15	1	327	-316	5	15	1	158	155	6	15	1	203	193	7	15	1	797	-745	8	15	1	198	-192
9	15	1	1150	1098	10	15	1	247	267	11	15	1	204	198	12	15	1	576	-586	13	15	1	786	790
14	15	1	42	11	15	15	1	694	-717	-15	16	1	185	161	-14	16	1	188	-205	-13	16	1	111	101
-12	16	1	225	-215	-11	16	1	250	-229	-10	16	1	356	375	-9	16	1	235	234	-8	16	1	56	99
-7	16	1	113	124	-6	16	1	261	271	-5	16	1	209	199	-4	16	1	696	-677	-3	16	1	527	-531
-2	16	1	119	-91	-1	16	1	98	-112	0	16	1	383	-328	1	16	1	68	-65	2	16	1	664	650
3	16	1	95	90	4	16	1	243	262	5	16	1	311	-298	6	16	1	998	979	7	16	1	63	91
8	16	1	299	-267	9	16	1	28	-51	10	16	1	773	767	11	16	1	441	467	12	16	1	584	594
13	16	1	92	-90	14	16	1	751	765	15	16	1	47	-51	16	16	1	401	381	-16	17	1	31	-17
-15	17	1	295	-309	-14	17	1	0	21	-13	17	1	264	-253	-12	17	1	0	36	-11	17	1	39	21
-10	17	1	215	-205	-9	17	1	42	11	-8	17	1	177	-192	-7	17	1	694	-693	-6	17	1	87	-76
-5	17	1	914	-946	-4	17	1	108	-117	-3	17	1	604	624	-2	17	1	162	-145	-1	17	1	850	845
0	17	1	238	-246	1	17	1	1359	1331	2	17	1	273	259	3	17	1	823	-813	4	17	1	28	7
5	17	1	104	-108	6	17	1	210	195	7	17	1	421	-418	8	17	1	370	-357	9	17	1	1363	1334
10	17	1	125	110	11	17	1	495	-502	12	17	1	203	205	13	17	1	106	-105	14	17	1	279	299
15	17	1	695	-696	16	17	1	58	-76	17	17	1	67	43	-17	18	1	198	173	-16	18	1	64	12
-15	18	1	150	-135	-14	18	1	215	197	-13	18	1	59	58	-12	18	1	848	-838	-11	18	1	214	-239
-10	18	1	1558	1560	-9	18	1	214	248	-8	18	1	737	776	-7	18	1	368	-388	-6	18	1	1778	1828
-5	18	1	38	29	-4	18	1	403	-400	-3	18	1	185	-203	-2	18	1	1119	1134	-1	18	1	381	399
0	18	1	244	235	1	18	1	86	85	2	18	1	623	672	3	18	1	100	83	4	18	1	764	-756

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	18	1	377	-350	6	18	1	986	966	7	18	1	452	427	8	18	1	181	199	9	18	1	117	153
10	18	1	597	579	11	18	1	83	77	12	18	1	995	-985	13	18	1	231	-246	14	18	1	404	-418
15	18	1	159	-134	16	18	1	249	252	17	18	1	38	-31	18	18	1	842	853	-18	19	1	0	15
-17	19	1	7	30	-16	19	1	178	183	-15	19	1	569	-567	-14	19	1	220	-226	-13	19	1	560	576
-12	19	1	112	-110	-11	19	1	0	52	-10	19	1	85	-95	-9	19	1	1200	1244	-8	19	1	685	718
-7	19	1	405	-413	-6	19	1	217	213	-5	19	1	210	-203	-4	19	1	93	-90	-3	19	1	560	-587
-2	19	1	342	-356	-1	19	1	304	332	0	19	1	98	98	1	19	1	205	186	2	19	1	238	260
3	19	1	118	-96	4	19	1	53	22	5	19	1	749	-742	6	19	1	373	-351	7	19	1	768	-776
8	19	1	118	-129	9	19	1	148	-146	10	19	1	44	51	11	19	1	240	218	12	19	1	20	-10
13	19	1	214	199	14	19	1	128	-164	15	19	1	463	475	16	19	1	50	-50	17	19	1	110	88
18	19	1	47	-20	19	19	1	297	310	-19	20	1	164	-179	-18	20	1	519	505	-17	20	1	66	69
-16	20	1	40	-30	-15	20	1	0	23	-14	20	1	623	629	-13	20	1	163	171	-12	20	1	487	482
-11	20	1	110	-118	-10	20	1	380	391	-9	20	1	136	114	-8	20	1	1051	-1051	-7	20	1	56	69
-6	20	1	117	-106	-5	20	1	141	131	-4	20	1	521	561	-3	20	1	128	-141	-2	20	1	1003	1058
-1	20	1	43	-40	0	20	1	303	308	1	20	1	83	65	2	20	1	737	-724	3	20	1	62	-7
4	20	1	177	179	5	20	1	171	-198	6	20	1	1015	1015	7	20	1	374	-351	8	20	1	1527	1483
9	20	1	75	57	10	20	1	234	230	11	20	1	29	44	12	20	1	571	562	13	20	1	107	138
14	20	1	140	122	15	20	1	48	-54	16	20	1	949	940	17	20	1	115	130	18	20	1	195	-220
19	20	1	100	-86	20	20	1	591	586	-20	21	1	193	187	-19	21	1	318	328	-18	21	1	37	-10
-17	21	1	73	-57	-16	21	1	108	123	-15	21	1	652	-677	-14	21	1	41	-29	-13	21	1	54	-65
-12	21	1	162	169	-11	21	1	112	-121	-10	21	1	180	-176	-9	21	1	165	169	-8	21	1	35	-72
-7	21	1	519	-515	-6	21	1	46	-41	-5	21	1	349	-397	-4	21	1	66	50	-3	21	1	313	321
-2	21	1	79	-83	-1	21	1	146	161	0	21	1	123	-97	1	21	1	132	158	2	21	1	75	-81
3	21	1	192	-192	4	21	1	60	13	5	21	1	1053	1040	6	21	1	169	158	7	21	1	650	661
8	21	1	56	40	9	21	1	144	140	10	21	1	111	116	11	21	1	913	-898	12	21	1	62	53
13	21	1	44	-37	14	21	1	38	28	15	21	1	356	343	16	21	1	96	73	17	21	1	441	462
18	21	1	45	18	19	21	1	418	-410	20	21	1	0	54	21	21	1	741	-737	-21	22	1	17	29
-20	22	1	27	-11	-19	22	1	127	114	-18	22	1	216	-238	-17	22	1	65	-106	-16	22	1	349	-371
-15	22	1	195	-169	-14	22	1	283	282	-13	22	1	105	-126	-12	22	1	377	399	-11	22	1	0	25
-10	22	1	599	613	-9	22	1	66	-32	-8	22	1	45	-22	-7	22	1	129	-143	-6	22	1	316	342
-5	22	1	110	-114	-4	22	1	588	573	-3	22	1	148	163	-2	22	1	700	724	-1	22	1	73	-34
0	22	1	715	721	1	22	1	120	124	2	22	1	175	177	3	22	1	127	-156	4	22	1	357	367
5	22	1	253	275	6	22	1	147	-155	7	22	1	75	78	8	22	1	507	501	9	22	1	105	78
10	22	1	181	-177	11	22	1	334	-309	12	22	1	435	416	13	22	1	150	137	14	22	1	287	-291
15	22	1	59	-6	16	22	1	402	381	17	22	1	261	280	18	22	1	481	-485	19	22	1	301	-329
20	22	1	429	402	21	22	1	130	-114	22	22	1	406	389	-22	23	1	54	20	-21	23	1	109	96
20	23	1	22	-6	-19	23	1	348	-339	-18	23	1	54	-49	-17	23	1	106	104	-16	23	1	148	-166
15	23	1	654	666	-14	23	1	66	-29	-13	23	1	714	741	-12	23	1	63	49	-11	23	1	99	5
10	23	1	89	103	-9	23	1	357	-363	-8	23	1	148	-152	-7	23	1	651	644	-6	23	1	61	45
-5	23	1	541	586	-4	23	1	53	-45	-3	23	1	668	686	-2	23	1	373	396	-1	23	1	786	-826

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	23	1	46	-20	1	23	1	72	-88	2	23	1	185	197	3	23	1	322	-324	4	23	1	240	-265
5	23	1	357	358	6	23	1	106	94	7	23	1	341	-348	8	23	1	77	114	9	23	1	348	-321
10	23	1	113	79	11	23	1	350	-342	12	23	1	310	-293	13	23	1	343	344	14	23	1	108	-118
15	23	1	0	27	16	23	1	95	-74	17	23	1	109	119	18	23	1	155	189	19	23	1	159	169
20	23	1	0	-42	21	23	1	260	262	22	23	1	75	-47	23	23	1	169	157	-23	24	1	88	-71
-22	24	1	637	614	-21	24	1	79	42	-20	24	1	442	419	-19	24	1	57	-12	-18	24	1	80	72
-17	24	1	65	34	-16	24	1	69	60	-15	24	1	39	28	-14	24	1	455	449	-13	24	1	95	108
-12	24	1	500	490	-11	24	1	45	45	-10	24	1	114	104	-9	24	1	54	27	-8	24	1	70	-39
-7	24	1	85	78	-6	24	1	149	141	-5	24	1	143	160	-4	24	1	154	148	-3	24	1	85	36
-2	24	1	216	-227	-1	24	1	104	-82	0	24	1	270	-282	1	24	1	120	-124	2	24	1	0	-17
3	24	1	0	20	4	24	1	815	820	5	24	1	28	24	6	24	1	41	-35	7	24	1	140	-169
8	24	1	85	33	9	24	1	45	-35	10	24	1	183	-195	11	24	1	79	-103	12	24	1	958	928
13	24	1	118	114	14	24	1	400	369	15	24	1	50	-32	16	24	1	513	494	17	24	1	82	46
18	24	1	402	-423	19	24	1	0	10	20	24	1	160	142	21	24	1	77	22	22	24	1	355	318
23	24	1	61	39	24	24	1	180	141	-23	25	1	189	167	-22	25	1	166	176	-21	25	1	199	-191
-20	25	1	140	98	-19	25	1	61	18	-18	25	1	72	-5	-17	25	1	144	-129	-16	25	1	147	-165
-15	25	1	350	374	-14	25	1	179	183	-13	25	1	271	-281	-12	25	1	118	133	-11	25	1	175	163
-10	25	1	144	144	-9	25	1	802	-823	-8	25	1	348	-362	-7	25	1	138	155	-6	25	1	0	24
-5	25	1	696	-725	-4	25	1	110	-95	-3	25	1	556	579	-2	25	1	249	246	-1	25	1	423	-423
0	25	1	280	-278	1	25	1	791	803	2	25	1	55	7	3	25	1	313	-305	4	25	1	0	-17
5	25	1	373	390	6	25	1	52	111	7	25	1	289	272	8	25	1	0	-85	9	25	1	724	720
10	25	1	67	32	11	25	1	181	147	12	25	1	40	-20	13	25	1	79	29	14	25	1	156	140
15	25	1	324	-319	16	25	1	0	76	17	25	1	83	-103	18	25	1	65	-25	19	25	1	48	-32
20	25	1	60	-7	21	25	1	63	-34	22	25	1	22	28	23	25	1	124	-105	-21	26	1	103	136
-20	26	1	327	-343	-19	26	1	103	66	-18	26	1	506	476	-17	26	1	152	189	-16	26	1	190	-215
-15	26	1	184	-193	-14	26	1	90	74	-13	26	1	0	20	-12	26	1	635	-675	-11	26	1	19	-12
-10	26	1	182	178	-9	26	1	63	68	-8	26	1	449	461	-7	26	1	242	-237	-6	26	1	971	991
-5	26	1	57	-51	-4	26	1	192	-217	-3	26	1	86	-88	-2	26	1	85	76	-1	26	1	167	169
0	26	1	37	32	1	26	1	75	-36	2	26	1	705	713	3	26	1	21	-4	4	26	1	272	262
5	26	1	119	88	6	26	1	79	68	7	26	1	188	237	8	26	1	80	-39	9	26	1	177	158
10	26	1	272	254	11	26	1	93	101	12	26	1	60	48	13	26	1	110	-97	14	26	1	200	-239
15	26	1	55	-80	16	26	1	84	-137	17	26	1	55	-23	18	26	1	311	265	19	26	1	52	20
20	26	1	0	-23	21	26	1	75	-67	-20	27	1	59	-52	-19	27	1	455	-461	-18	27	1	35	-16
-17	27	1	142	-141	-16	27	1	22	13	-15	27	1	136	117	-14	27	1	97	-108	-13	27	1	122	118
-12	27	1	167	-174	-11	27	1	244	250	-10	27	1	25	51	-9	27	1	76	52	-8	27	1	133	145
-7	27	1	161	162	-6	27	1	129	147	-5	27	1	175	-186	-4	27	1	97	-116	-3	27	1	69	55
-2	27	1	62	-90	-1	27	1	53	-14	0	27	1	47	26	1	27	1	374	384	2	27	1	198	180
3	27	1	67	45	4	27	1	55	88	5	27	1	922	-923	6	27	1	144	-160	7	27	1	586	-589
8	27	1	0	-22	9	27	1	474	-480	10	27	1	23	-22	11	27	1	518	508	12	27	1	245	213
13	27	1	233	-219	14	27	1	147	-127	15	27	1	163	159	16	27	1	72	4	17	27	1	319	-328

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
18	27	1	113	-88	19	27	1	522	510	20	27	1	84	32	-19	28	1	187	-161	-18	28	1	648	632
-17	28	1	107	78	-16	28	1	235	229	-15	28	1	64	3	-14	28	1	536	502	-13	28	1	81	98
-12	28	1	247	237	-11	28	1	69	-6	-10	28	1	71	47	-9	28	1	32	15	-8	28	1	136	110
-7	28	1	0	-5	-6	28	1	254	245	-5	28	1	92	99	-4	28	1	335	323	-3	28	1	57	72
-2	28	1	53	-46	-1	28	1	43	13	0	28	1	108	-127	1	28	1	62	70	2	28	1	542	-541
3	28	1	38	-4	4	28	1	103	88	5	28	1	125	-111	6	28	1	80	36	7	28	1	211	-234
8	28	1	671	646	9	28	1	28	-25	10	28	1	0	14	11	28	1	0	47	12	28	1	37	54
13	28	1	135	97	14	28	1	196	-218	15	28	1	140	-117	16	28	1	276	258	17	28	1	69	-50
18	28	1	447	387	19	28	1	151	157	-17	29	1	66	-41	-16	29	1	182	171	-15	29	1	432	-409
-14	29	1	66	63	-13	29	1	518	-526	-12	29	1	23	-4	-11	29	1	138	152	-10	29	1	63	-6
-9	29	1	231	230	-8	29	1	109	131	-7	29	1	126	-125	-6	29	1	96	80	-5	29	1	653	-693
-4	29	1	35	-19	-3	29	1	347	-360	-2	29	1	198	-190	-1	29	1	31	15	0	29	1	180	-148
1	29	1	106	115	2	29	1	131	-88	3	29	1	74	62	4	29	1	166	153	5	29	1	125	-119
6	29	1	98	-98	7	29	1	252	234	8	29	1	0	10	9	29	1	110	-94	10	29	1	77	-109
11	29	1	121	125	12	29	1	100	138	13	29	1	326	-304	14	29	1	40	-26	15	29	1	376	363
16	29	1	0	22	17	29	1	76	57	-15	30	1	46	-25	-14	30	1	173	-172	-13	30	1	102	-103
-12	30	1	60	-56	-11	30	1	83	71	-10	30	1	129	-153	-9	30	1	41	-54	-8	30	1	87	60
-7	30	1	22	50	-6	30	1	188	-211	-5	30	1	125	-128	-4	30	1	370	385	-3	30	1	102	86
-2	30	1	396	369	-1	30	1	123	-109	0	30	1	1024	1014	1	30	1	125	64	2	30	1	153	110
3	30	1	158	-142	4	30	1	269	237	5	30	1	174	176	6	30	1	319	-317	7	30	1	136	-152
8	30	1	739	699	9	30	1	0	80	10	30	1	356	310	11	30	1	41	-37	12	30	1	92	77
13	30	1	87	131	14	30	1	329	-352	15	30	1	90	83	16	30	1	174	-174	-13	31	1	129	-134
-12	31	1	207	-221	-11	31	1	114	105	-10	31	1	44	-34	-9	31	1	11	-60	-8	31	1	0	-24
-7	31	1	31	69	-6	31	1	0	21	-5	31	1	168	152	-4	31	1	30	-30	-3	31	1	91	99
-2	31	1	112	101	-1	31	1	18	56	0	31	1	201	209	1	31	1	225	-193	2	31	1	157	112
3	31	1	46	27	4	31	1	61	-31	5	31	1	152	142	6	31	1	44	-5	7	31	1	207	203
8	31	1	0	46	9	31	1	382	-376	10	31	1	0	45	11	31	1	282	-282	12	31	1	0	-57
13	31	1	408	-406	14	31	1	123	-176	-11	32	1	0	-12	-10	32	1	362	354	-9	32	1	88	-77
-8	32	1	340	307	-7	32	1	128	128	-6	32	1	453	-486	-5	32	1	62	-2	-4	32	1	363	316
-3	32	1	0	63	-2	32	1	120	-147	-1	32	1	129	-155	0	32	1	191	178	1	32	1	89	86
2	32	1	592	-620	3	32	1	36	-2	4	32	1	240	205	5	32	1	186	172	6	32	1	185	-202
7	32	1	115	-96	8	32	1	411	386	9	32	1	76	-90	10	32	1	28	-28	11	32	1	47	-53
-8	33	1	103	-105	-7	33	1	214	-228	-6	33	1	105	-73	-5	33	1	250	-244	-4	33	1	26	-24
-3	33	1	351	335	-2	33	1	108	138	-1	33	1	79	52	0	33	1	64	-51	1	33	1	223	-221
2	33	1	134	-144	3	33	1	443	-442	4	33	1	198	-175	5	33	1	187	186	6	33	1	68	58
7	33	1	392	393	8	33	1	88	94	0	34	1	98	73	1	34	1	70	-32	0	0	2	4613	4400
0	1	2	1226	1174	1	1	2	355	-312	-1	2	2	936	-900	0	2	2	777	839	1	2	2	968	947
2	2	2	640	-555	-2	3	2	91	62	-1	3	2	952	928	0	3	2	525	-511	1	3	2	946	-932
2	3	2	57	65	3	3	2	1117	-1107	-3	4	2	91	111	-2	4	2	634	700	-1	4	2	512	498
0	4	2	824	872	1	4	2	531	-530	2	4	2	591	612	3	4	2	135	-135	4	4	2	590	653

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	5	2	193	-209	-3	5	2	196	159	-2	5	2	188	-196	-1	5	2	237	238	0	5	2	724	751
1	5	2	121	83	2	5	2	113	-121	3	5	2	1017	1011	4	5	2	700	700	5	5	2	898	-869
-5	6	2	446	451	-4	6	2	979	1031	-3	6	2	223	200	-2	6	2	750	794	-1	6	2	309	304
0	6	2	983	-936	1	6	2	118	132	2	6	2	314	-265	3	6	2	294	264	4	6	2	136	-73
5	6	2	449	-416	6	6	2	543	589	-6	7	2	122	-114	-5	7	2	81	75	-4	7	2	1103	1091
-3	7	2	1818	-1797	-2	7	2	467	-476	-1	7	2	281	-278	0	7	2	527	-518	1	7	2	863	-877
2	7	2	1160	-1128	3	7	2	1476	1474	4	7	2	1004	961	5	7	2	647	-641	6	7	2	552	-531
7	7	2	791	794	-7	8	2	159	-153	-6	8	2	711	-644	-5	8	2	907	-867	-4	8	2	476	504
-3	8	2	188	190	-2	8	2	138	189	-1	8	2	136	-134	0	8	2	1504	1538	1	8	2	62	-24
2	8	2	556	607	3	8	2	404	-368	4	8	2	321	365	5	8	2	355	337	6	8	2	76	95
7	8	2	139	161	8	8	2	495	510	-8	9	2	26	-27	-7	9	2	917	939	-6	9	2	442	-455
-5	9	2	1227	1190	-4	9	2	134	122	-3	9	2	219	-223	-2	9	2	144	133	-1	9	2	964	-979
0	9	2	224	233	1	9	2	36	-50	2	9	2	99	-108	3	9	2	682	681	4	9	2	77	74
5	9	2	259	-245	6	9	2	33	-15	7	9	2	395	-367	8	9	2	368	380	9	9	2	316	-320
-9	10	2	381	-383	-8	10	2	1151	1169	-7	10	2	969	992	-6	10	2	435	449	-5	10	2	250	243
-4	10	2	262	266	-3	10	2	10	32	-2	10	2	330	380	-1	10	2	442	-466	0	10	2	502	521
1	10	2	104	105	2	10	2	1234	1229	3	10	2	632	620	4	10	2	183	219	5	10	2	196	192
6	10	2	296	-268	7	10	2	384	-384	8	10	2	973	-956	9	10	2	535	-525	10	10	2	300	265
-10	11	2	31	29	-9	11	2	297	286	-8	11	2	117	-134	-7	11	2	764	-787	-6	11	2	406	404
-5	11	2	497	-483	-4	11	2	292	260	-3	11	2	228	-235	-2	11	2	228	250	-1	11	2	583	604
0	11	2	180	-171	1	11	2	455	-466	2	11	2	147	134	3	11	2	1106	-1109	4	11	2	123	-115
5	11	2	437	-406	6	11	2	179	-155	7	11	2	511	492	8	11	2	1091	-1071	9	11	2	1339	1314
10	11	2	37	-28	11	11	2	39	31	-11	12	2	0	1	-10	12	2	352	371	-9	12	2	123	141
-8	12	2	744	771	-7	12	2	467	-490	-6	12	2	113	34	-5	12	2	112	-98	-4	12	2	835	-805
-3	12	2	485	-490	-2	12	2	245	228	-1	12	2	317	316	0	12	2	618	650	1	12	2	657	-624
2	12	2	1287	1305	3	12	2	18	-12	4	12	2	128	145	5	12	2	214	-212	6	12	2	935	943
7	12	2	746	726	8	12	2	816	797	9	12	2	238	-230	10	12	2	1385	1387	11	12	2	267	265
12	12	2	255	-248	-12	13	2	516	-514	-11	13	2	316	323	-10	13	2	77	-95	-9	13	2	379	383
-8	13	2	592	589	-7	13	2	337	-344	-6	13	2	260	-275	-5	13	2	97	-36	-4	13	2	614	-595
-3	13	2	234	226	-2	13	2	662	-661	-1	13	2	1223	1222	0	13	2	503	503	1	13	2	737	723
2	13	2	503	516	3	13	2	360	-369	4	13	2	80	-105	5	13	2	153	-155	6	13	2	73	-57
7	13	2	47	14	8	13	2	402	391	9	13	2	654	656	10	13	2	733	727	11	13	2	69	-113
12	13	2	107	118	13	13	2	77	81	-13	14	2	43	-79	-12	14	2	486	481	-11	14	2	600	-590
10	14	2	1173	1189	-9	14	2	234	231	-8	14	2	299	-275	-7	14	2	197	-186	-6	14	2	675	665
-5	14	2	439	432	-4	14	2	252	270	-3	14	2	498	-490	-2	14	2	1702	1728	-1	14	2	705	719
0	14	2	500	-469	1	14	2	34	25	2	14	2	106	108	3	14	2	465	488	4	14	2	545	-521
5	14	2	409	-456	6	14	2	859	845	7	14	2	31	11	8	14	2	0	-11	9	14	2	115	-101
10	14	2	60	92	11	14	2	481	475	12	14	2	858	-870	13	14	2	338	-347	14	14	2	467	476
14	15	2	115	-137	-13	15	2	719	725	-12	15	2	346	349	-11	15	2	649	628	-10	15	2	111	-116
-9	15	2	1116	1148	-8	15	2	571	569	-7	15	2	768	-774	-6	15	2	348	-340	-5	15	2	321	309

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	15	2	508	507	-3	15	2	452	-470	-2	15	2	417	-425	-1	15	2	647	661	0	15	2	243	243
1	15	2	717	-706	2	15	2	323	-312	3	15	2	311	-298	4	15	2	68	133	5	15	2	178	-152
6	15	2	90	-106	7	15	2	513	512	8	15	2	118	-97	9	15	2	56	-51	10	15	2	320	-318
11	15	2	289	+259	12	15	2	226	-224	13	15	2	421	405	14	15	2	45	27	15	15	2	675	689
15	16	2	207	-171	-14	16	2	443	442	-13	16	2	295	290	-12	16	2	320	331	-11	16	2	604	598
-10	16	2	28	-52	-9	16	2	499	515	-8	16	2	409	-406	-7	16	2	144	-167	-6	16	2	12	44
-5	16	2	223	-223	-4	16	2	198	180	-3	16	2	109	-101	-2	16	2	978	1021	-1	16	2	340	363
0	16	2	173	196	1	16	2	319	-321	2	16	2	19	-11	3	16	2	674	-688	4	16	2	253	247
5	16	2	250	-221	6	16	2	400	402	7	16	2	146	154	8	16	2	855	866	9	16	2	218	206
10	16	2	476	445	11	16	2	162	-145	12	16	2	445	455	13	16	2	251	237	14	16	2	50	-67
15	16	2	196	223	16	16	2	351	334	-16	17	2	355	368	-15	17	2	331	-329	-14	17	2	325	-317
-13	17	2	243	-281	-12	17	2	149	-168	-11	17	2	695	-696	-10	17	2	283	-313	-9	17	2	259	-286
-8	17	2	159	192	-7	17	2	48	74	-6	17	2	250	-262	-5	17	2	805	842	-4	17	2	62	69
-3	17	2	172	-168	-2	17	2	56	-18	-1	17	2	434	-443	0	17	2	299	289	1	17	2	230	231
2	17	2	140	-118	3	17	2	818	820	4	17	2	390	-402	5	17	2	1263	1238	6	17	2	149	150
7	17	2	305	-307	8	17	2	315	305	9	17	2	213	-190	10	17	2	341	314	11	17	2	444	-480
12	17	2	333	-319	13	17	2	437	418	14	17	2	0	-43	15	17	2	205	-195	16	17	2	128	129
17	17	2	77	-88	-17	18	2	359	-372	-16	18	2	106	-100	-15	18	2	60	-18	-14	18	2	799	810
13	18	2	119	-118	-12	18	2	758	737	-11	18	2	128	-129	-10	18	2	334	335	-9	18	2	220	-241
-8	18	2	135	-153	-7	18	2	63	63	-6	18	2	470	466	-5	18	2	137	145	-4	18	2	470	485
-3	18	2	44	-52	-2	18	2	646	657	-1	18	2	145	-144	0	18	2	206	211	1	18	2	487	465
2	18	2	567	586	3	18	2	554	555	4	18	2	371	359	5	18	2	532	513	6	18	2	78	85
7	18	2	169	-156	8	18	2	397	-393	9	18	2	61	-48	10	18	2	255	-249	11	18	2	253	-261
12	18	2	745	717	13	18	2	277	291	14	18	2	320	299	15	18	2	173	-184	16	18	2	47	-27
17	18	2	26	-23	18	18	2	561	-594	-18	19	2	417	-401	-17	19	2	554	549	-16	19	2	253	-272
15	19	2	180	194	-14	19	2	238	246	-13	19	2	138	162	-12	19	2	251	258	-11	19	2	192	-216
10	19	2	39	34	-9	19	2	32	-25	-8	19	2	277	-298	-7	19	2	185	173	-6	19	2	167	187
-5	19	2	169	167	-4	19	2	238	255	-3	19	2	232	222	-2	19	2	611	622	-1	19	2	696	-737
0	19	2	335	-338	1	19	2	525	-533	2	19	2	233	215	3	19	2	1044	-988	4	19	2	407	-396
5	19	2	99	81	6	19	2	430	411	7	19	2	297	-264	8	19	2	414	-411	9	19	2	382	372
10	19	2	41	66	11	19	2	250	-246	12	19	2	233	-247	13	19	2	100	-65	14	19	2	240	244
15	19	2	240	-262	16	19	2	264	-281	17	19	2	354	361	18	19	2	129	-116	19	19	2	222	211
19	20	2	257	227	-18	20	2	345	332	-17	20	2	132	149	-16	20	2	426	395	-15	20	2	144	-125
14	20	2	243	246	-13	20	2	170	156	-12	20	2	89	-94	-11	20	2	41	-12	-10	20	2	251	232
-9	20	2	110	100	-8	20	2	384	405	-7	20	2	60	-83	-6	20	2	316	309	-5	20	2	214	216
-4	20	2	513	-549	-3	20	2	12	-25	-2	20	2	401	-426	-1	20	2	0	-9	0	20	2	64	70
1	20	2	512	-501	2	20	2	945	919	3	20	2	78	-35	4	20	2	324	331	5	20	2	105	-94
6	20	2	46	-94	7	20	2	151	151	8	20	2	49	72	9	20	2	99	-86	10	20	2	215	213
11	20	2	239	-231	12	20	2	678	649	13	20	2	48	-65	14	20	2	323	341	15	20	2	185	193
16	20	2	509	469	17	20	2	298	306	18	20	2	92	74	19	20	2	60	-18	20	20	2	350	324

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
20	21	2	142	152	-19	21	2	408	-394	-18	21	2	254	221	-17	21	2	274	-266	-16	21	2	151	165
15	21	2	169	123	-14	21	2	144	145	-13	21	2	49	-28	-12	21	2	20	-37	-11	21	2	147	-141
10	21	2	150	165	-9	21	2	612	-620	-8	21	2	53	-82	-7	21	2	42	28	-6	21	2	0	46
-5	21	2	451	-455	-4	21	2	614	-640	-3	21	2	397	405	-2	21	2	69	-65	-1	21	2	170	-166
0	21	2	153	-154	1	21	2	698	689	2	21	2	504	494	3	21	2	443	-469	4	21	2	359	-352
5	21	2	350	362	6	21	2	133	130	7	21	2	501	-472	8	21	2	140	-120	9	21	2	609	591
10	21	2	376	377	11	21	2	154	151	12	21	2	150	141	13	21	2	147	-158	14	21	2	108	100
15	21	2	762	-727	16	21	2	27	40	17	21	2	413	-399	18	21	2	39	52	19	21	2	92	-69
20	21	2	136	-109	21	21	2	82	71	-21	22	2	104	103	-20	22	2	341	-376	-19	22	2	429	-404
18	22	2	356	332	-17	22	2	146	143	-16	22	2	355	-361	-15	22	2	95	-111	-14	22	2	241	196
13	22	2	372	380	-12	22	2	542	-549	-11	22	2	517	-529	-10	22	2	475	477	-9	22	2	136	-100
-8	22	2	64	41	-7	22	2	196	-195	-6	22	2	713	714	-5	22	2	353	369	-4	22	2	144	145
-3	22	2	218	-255	-2	22	2	524	547	-1	22	2	13	6	0	22	2	43	-57	1	22	2	150	-125
2	22	2	590	579	3	22	2	522	503	4	22	2	26	-34	5	22	2	110	-102	6	22	2	436	422
7	22	2	65	8	8	22	2	53	53	9	22	2	46	24	10	22	2	76	31	11	22	2	306	314
12	22	2	291	-291	13	22	2	32	-38	14	22	2	129	-164	15	22	2	337	-343	16	22	2	244	206
17	22	2	182	-189	18	22	2	191	175	19	22	2	17	55	20	22	2	163	124	21	22	2	69	69
22	22	2	76	-85	-22	23	2	89	-132	-21	23	2	185	199	-20	23	2	49	66	-19	23	2	49	32
18	23	2	193	-179	-17	23	2	142	126	-16	23	2	62	-31	-15	23	2	456	-468	-14	23	2	222	-233
13	23	2	125	98	-12	23	2	74	87	-11	23	2	311	341	-10	23	2	57	-61	-9	23	2	511	535
-8	23	2	24	31	-7	23	2	41	72	-6	23	2	230	205	-5	23	2	358	-341	-4	23	2	230	233
-3	23	2	59	-79	-2	23	2	74	36	-1	23	2	258	267	0	23	2	86	-96	1	23	2	244	253
2	23	2	203	211	3	23	2	608	-578	4	23	2	204	192	5	23	2	475	-481	6	23	2	83	57
7	23	2	102	-111	8	23	2	79	-104	9	23	2	44	22	10	23	2	259	-273	11	23	2	175	161
12	23	2	99	95	13	23	2	307	-279	14	23	2	100	-106	15	23	2	272	260	16	23	2	37	33
17	23	2	0	4	18	23	2	337	-332	19	23	2	343	347	20	23	2	66	69	21	23	2	250	-264
22	23	2	102	-73	-21	24	2	0	10	-20	24	2	71	-33	-19	24	2	166	-164	-18	24	2	693	648
17	24	2	137	147	-16	24	2	241	231	-15	24	2	194	-200	-14	24	2	393	386	-13	24	2	267	254
12	24	2	197	-237	-11	24	2	33	45	-10	24	2	390	367	-9	24	2	313	314	-8	24	2	77	55
-7	24	2	74	24	-6	24	2	266	-303	-5	24	2	0	-16	-4	24	2	249	-266	-3	24	2	23	3
-2	24	2	85	29	-1	24	2	71	60	0	24	2	306	313	1	24	2	0	-18	2	24	2	135	-152
3	24	2	247	-243	4	24	2	250	-265	5	24	2	253	-258	6	24	2	228	-230	7	24	2	277	-260
8	24	2	869	799	9	24	2	212	209	10	24	2	298	289	11	24	2	60	-61	12	24	2	324	282
13	24	2	116	96	14	24	2	402	-419	15	24	2	172	-163	16	24	2	587	564	17	24	2	221	203
18	24	2	599	537	19	24	2	62	47	20	24	2	473	456	21	24	2	74	73	-20	25	2	101	68
19	25	2	193	226	-18	25	2	183	172	-17	25	2	111	113	-16	25	2	342	366	-15	25	2	386	-385
14	25	2	187	-196	-13	25	2	204	-207	-12	25	2	100	-116	-11	25	2	56	-6	-10	25	2	55	-39
-9	25	2	44	-5	-8	25	2	174	173	-7	25	2	73	101	-6	25	2	69	-42	-5	25	2	248	-288
-4	25	2	216	-222	-3	25	2	142	-118	-2	25	2	172	-210	-1	25	2	177	-200	0	25	2	46	-39
1	25	2	281	279	2	25	2	0	-6	3	25	2	218	213	4	25	2	135	-126	5	25	2	331	331

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
6	25	2	247	-257	7	25	2	143	134	8	25	2	93	86	9	25	2	189	177	10	25	2	105	128
11	25	2	83	28	12	25	2	132	105	13	25	2	44	59	14	25	2	184	-184	15	25	2	212	220
16	25	2	267	274	17	25	2	165	-129	18	25	2	242	218	19	25	2	0	-13	20	25	2	293	278
-19	26	2	34	-8	-18	26	2	72	-59	-17	26	2	84	55	-16	26	2	423	-457	-15	26	2	68	-29
14	26	2	221	194	-13	26	2	47	-83	-12	26	2	369	340	-11	26	2	0	-48	-10	26	2	367	378
-9	26	2	76	-103	-8	26	2	131	-163	-7	26	2	163	147	-6	26	2	203	-206	-5	26	2	268	-269
-4	26	2	598	534	-3	26	2	142	-122	-2	26	2	786	798	-1	26	2	234	-265	0	26	2	735	727
1	26	2	412	421	2	26	2	240	-262	3	26	2	91	80	4	26	2	163	156	5	26	2	256	259
6	26	2	78	20	7	26	2	382	-368	8	26	2	565	541	9	26	2	373	347	10	26	2	260	-259
11	26	2	0	-10	12	26	2	158	127	13	26	2	310	294	14	26	2	235	-234	15	26	2	345	-349
16	26	2	203	134	17	26	2	0	10	18	26	2	167	-163	19	26	2	55	-59	-17	27	2	56	49
-16	27	2	221	-225	-15	27	2	149	-145	-14	27	2	89	-79	-13	27	2	156	-143	-12	27	2	99	-96
11	27	2	233	226	-10	27	2	165	160	-9	27	2	57	-22	-8	27	2	337	-325	-7	27	2	261	273
-6	27	2	123	118	-5	27	2	160	185	-4	27	2	127	130	-3	27	2	505	489	-2	27	2	465	486
-1	27	2	32	-41	0	27	2	34	-39	1	27	2	293	-276	2	27	2	48	-100	3	27	2	207	-226
4	27	2	137	-131	5	27	2	195	216	6	27	2	161	156	7	27	2	265	215	8	27	2	80	-58
9	27	2	37	-97	10	27	2	33	7	11	27	2	464	-458	12	27	2	149	-133	13	27	2	358	-352
14	27	2	77	-105	15	27	2	295	287	16	27	2	151	-149	17	27	2	295	260	-16	28	2	135	97
15	28	2	209	-212	-14	28	2	391	398	-13	28	2	233	-216	-12	28	2	683	645	-11	28	2	164	155
10	28	2	278	285	-9	28	2	200	197	-8	28	2	175	125	-7	28	2	86	78	-6	28	2	145	-173
-5	28	2	137	-107	-4	28	2	167	161	-3	28	2	220	226	-2	28	2	201	-225	-1	28	2	78	90
0	28	2	347	310	1	28	2	190	183	2	28	2	0	-17	3	28	2	188	-190	4	28	2	558	506
5	28	2	110	124	6	28	2	86	-41	7	28	2	40	-71	8	28	2	268	243	9	28	2	44	25
10	28	2	212	-253	11	28	2	486	-476	12	28	2	675	644	13	28	2	148	-126	14	28	2	463	438
15	28	2	91	69	16	28	2	451	416	-14	29	2	269	266	-13	29	2	39	32	-12	29	2	0	11
11	29	2	89	72	-10	29	2	399	410	-9	29	2	918	-912	-8	29	2	268	-274	-7	29	2	91	67
-6	29	2	0	-34	-5	29	2	115	-116	-4	29	2	402	-393	-3	29	2	493	484	-2	29	2	158	155
-1	29	2	456	-449	0	29	2	73	-67	1	29	2	312	-324	2	29	2	69	9	3	29	2	152	-137
4	29	2	104	-145	5	29	2	326	316	6	29	2	44	49	7	29	2	145	170	8	29	2	58	34
9	29	2	278	292	10	29	2	150	160	11	29	2	284	260	12	29	2	77	64	13	29	2	222	227
14	29	2	0	30	-11	30	2	159	-176	-10	30	2	26	11	-9	30	2	99	-97	-8	30	2	0	-29
-7	30	2	153	-156	-6	30	2	493	456	-5	30	2	70	68	-4	30	2	407	392	-3	30	2	44	-13
-2	30	2	128	80	-1	30	2	123	-133	0	30	2	42	-48	1	30	2	265	-258	2	30	2	406	349
3	30	2	0	-18	4	30	2	642	634	5	30	2	149	125	6	30	2	407	382	7	30	2	193	169
8	30	2	74	-79	9	30	2	132	139	10	30	2	244	-244	11	30	2	164	172	12	30	2	110	52
-9	31	2	77	21	-8	31	2	251	-244	-7	31	2	234	252	-6	31	2	25	55	-5	31	2	42	-43
-4	31	2	102	99	-3	31	2	126	121	-2	31	2	83	96	-1	31	2	308	297	0	31	2	37	47
1	31	2	59	38	2	31	2	0	-34	3	31	2	99	76	4	31	2	343	347	5	31	2	417	-427
6	31	2	108	87	7	31	2	117	-110	8	31	2	41	-35	9	31	2	250	-276	-4	32	2	196	153
-3	32	2	97	114	-2	32	2	183	-206	-1	32	2	123	118	0	32	2	132	96	1	32	2	46	-4

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	32	2	49	-41	3	32	2	185	-166	4	32	2	54	10	0	0	3	31	-62	0	1	3	25	-30
1	1	3	33	2	-1	2	3	38	62	0	2	3	94	92	1	2	3	198	-199	2	2	3	78	-70
-2	3	3	590	-588	-1	3	3	221	-226	0	3	3	101	90	1	3	3	45	13	2	3	3	787	-766
3	3	3	948	968	-3	4	3	129	130	-2	4	3	172	-169	-1	4	3	1159	-1148	0	4	3	1041	1073
1	4	3	615	619	2	4	3	621	635	3	4	3	347	336	4	4	3	636	665	-4	5	3	473	477
-3	5	3	0	28	-2	5	3	244	-245	-1	5	3	414	407	0	5	3	146	-146	1	5	3	267	263
2	5	3	519	540	3	5	3	154	-148	4	5	3	657	648	5	5	3	203	-177	-5	6	3	142	-151
-4	6	3	133	-132	-3	6	3	726	729	-2	6	3	38	65	-1	6	3	232	-230	0	6	3	669	666
1	6	3	35	56	2	6	3	262	283	3	6	3	162	157	4	6	3	470	-467	5	6	3	145	156
6	6	3	248	-245	-6	7	3	29	-32	-5	7	3	195	-192	-4	7	3	777	-805	-3	7	3	107	-94
-2	7	3	149	-144	-1	7	3	761	773	0	7	3	422	441	1	7	3	176	-188	2	7	3	148	142
3	7	3	265	-285	4	7	3	697	-704	5	7	3	438	-441	6	7	3	881	-885	7	7	3	549	555
-7	8	3	206	188	-6	8	3	64	5	-5	8	3	193	215	-4	8	3	434	431	-3	8	3	559	-573
-2	8	3	463	426	-1	8	3	201	-213	0	8	3	366	383	1	8	3	375	-355	2	8	3	317	321
3	8	3	536	521	4	8	3	541	554	5	8	3	452	-433	6	8	3	1369	1382	7	8	3	379	384
8	8	3	512	524	-8	9	3	68	-8	-7	9	3	624	-632	-6	9	3	546	-562	-5	9	3	177	-184
-4	9	3	66	22	-3	9	3	470	509	-2	9	3	215	-230	-1	9	3	1046	1053	0	9	3	499	484
1	9	3	42	-18	2	9	3	204	-187	3	9	3	53	-20	4	9	3	868	861	5	9	3	395	-378
6	9	3	281	297	7	9	3	98	100	8	9	3	235	251	9	9	3	54	-66	-9	10	3	263	290
-8	10	3	42	58	-7	10	3	600	-598	-6	10	3	703	704	-5	10	3	67	22	-4	10	3	614	607
-3	10	3	336	358	-2	10	3	730	744	-1	10	3	1166	1171	0	10	3	297	-312	1	10	3	219	-242
2	10	3	50	-34	3	10	3	112	-82	4	10	3	272	-299	5	10	3	561	-574	6	10	3	832	842
7	10	3	655	654	8	10	3	297	314	9	10	3	113	110	10	10	3	251	242	-10	11	3	64	66
-9	11	3	338	313	-8	11	3	829	857	-7	11	3	266	-273	-6	11	3	274	-278	-5	11	3	66	74
-4	11	3	453	467	-3	11	3	837	-875	-2	11	3	299	-290	-1	11	3	230	-214	0	11	3	669	684
1	11	3	686	-716	2	11	3	933	-968	3	11	3	612	633	4	11	3	67	-4	5	11	3	92	-53
6	11	3	288	-276	7	11	3	173	-185	8	11	3	413	427	9	11	3	578	-583	10	11	3	353	-358
11	11	3	145	139	-11	12	3	337	334	-10	12	3	315	-302	-9	12	3	0	13	-8	12	3	279	-299
-7	12	3	47	85	-6	12	3	78	61	-5	12	3	404	-416	-4	12	3	429	451	-3	12	3	456	-478
-2	12	3	386	365	-1	12	3	327	-324	0	12	3	50	8	1	12	3	125	-101	2	12	3	297	286
3	12	3	179	188	4	12	3	174	158	5	12	3	245	-253	6	12	3	422	409	7	12	3	363	-349
8	12	3	324	309	9	12	3	74	43	10	12	3	385	383	11	12	3	273	272	12	12	3	552	520
-12	13	3	456	449	-11	13	3	439	-472	-10	13	3	413	-410	-9	13	3	52	-58	-8	13	3	285	-312
-7	13	3	219	234	-6	13	3	185	-157	-5	13	3	429	424	-4	13	3	495	511	-3	13	3	48	-30
-2	13	3	72	-89	-1	13	3	222	174	0	13	3	131	-118	1	13	3	68	66	2	13	3	474	-485
3	13	3	291	315	4	13	3	374	390	5	13	3	288	275	6	13	3	524	521	7	13	3	153	-161
8	13	3	68	8	9	13	3	89	-107	10	13	3	119	112	11	13	3	531	-519	12	13	3	66	16
13	13	3	66	41	-13	14	3	563	-599	-12	14	3	178	140	-11	14	3	55	69	-10	14	3	359	345
-9	14	3	56	-40	-8	14	3	399	386	-7	14	3	73	87	-6	14	3	402	406	-5	14	3	70	94
-4	14	3	35	-33	-3	14	3	405	414	-2	14	3	81	75	-1	14	3	432	419	0	14	3	170	154

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	14	3	209	224	2	14	3	660	661	3	14	3	80	52	4	14	3	190	-201	5	14	3	187	181
6	14	3	184	-191	7	14	3	81	82	8	14	3	405	-419	9	14	3	381	-389	10	14	3	438	409
11	14	3	456	-434	12	14	3	171	163	13	14	3	111	-117	14	14	3	29	-15	-14	15	3	0	20
-13	15	3	408	435	-12	15	3	20	-20	-11	15	3	363	-407	-10	15	3	63	90	-9	15	3	27	-51
-8	15	3	158	171	-7	15	3	49	-34	-6	15	3	156	152	-5	15	3	159	154	-4	15	3	155	-167
-3	15	3	185	-214	-2	15	3	218	216	-1	15	3	319	-328	0	15	3	103	90	1	15	3	108	-100
2	15	3	540	566	3	15	3	172	-159	4	15	3	446	-449	5	15	3	156	-153	6	15	3	70	49
7	15	3	174	-174	8	15	3	570	-567	9	15	3	394	395	10	15	3	374	362	11	15	3	29	30
12	15	3	486	-475	13	15	3	216	195	14	15	3	0	34	15	15	3	196	-193	-15	16	3	526	541
-14	16	3	102	-163	-13	16	3	289	294	-12	16	3	63	-78	-11	16	3	426	-463	-10	16	3	166	130
-9	16	3	40	8	-8	16	3	223	219	-7	16	3	228	241	-6	16	3	175	146	-5	16	3	592	584
-4	16	3	354	-405	-3	16	3	572	-587	-2	16	3	122	-152	-1	16	3	445	-441	0	16	3	41	-49
1	16	3	516	-525	2	16	3	437	417	3	16	3	388	423	4	16	3	258	236	5	16	3	216	-211
6	16	3	335	322	7	16	3	191	188	8	16	3	85	6	9	16	3	349	-313	10	16	3	423	413
11	16	3	421	416	12	16	3	277	256	13	16	3	134	145	14	16	3	226	211	15	16	3	96	115
16	16	3	270	256	-16	17	3	66	-74	-15	17	3	211	-195	-14	17	3	63	62	-13	17	3	80	-74
-12	17	3	83	99	-11	17	3	49	-32	-10	17	3	272	-292	-9	17	3	0	-19	-8	17	3	324	-324
-7	17	3	289	-313	-6	17	3	204	-212	-5	17	3	335	-344	-4	17	3	230	-241	-3	17	3	238	244
-2	17	3	177	-179	-1	17	3	391	410	0	17	3	375	-381	1	17	3	643	631	2	17	3	295	277
3	17	3	355	-370	4	17	3	57	100	5	17	3	136	-162	6	17	3	259	269	7	17	3	250	-260
8	17	3	485	-513	9	17	3	665	685	10	17	3	300	310	11	17	3	120	-107	12	17	3	199	197
13	17	3	123	-108	14	17	3	562	552	15	17	3	366	-381	16	17	3	104	-98	17	17	3	0	75
17	18	3	281	302	-16	18	3	41	24	-15	18	3	150	-148	-14	18	3	64	20	-13	18	3	213	226
12	18	3	246	-285	-11	18	3	552	-548	-10	18	3	621	604	-9	18	3	182	164	-8	18	3	361	358
-7	18	3	550	-563	-6	18	3	832	825	-5	18	3	269	283	-4	18	3	0	8	-3	18	3	218	-227
-2	18	3	522	486	-1	18	3	535	527	0	18	3	189	172	1	18	3	80	-39	2	18	3	355	332
3	18	3	181	165	4	18	3	201	-199	5	18	3	270	-282	6	18	3	466	455	7	18	3	592	595
8	18	3	213	166	9	18	3	121	84	10	18	3	237	200	11	18	3	143	134	12	18	3	412	-419
13	18	3	375	-373	14	18	3	323	-336	15	18	3	97	-120	16	18	3	198	172	17	18	3	88	-77
18	18	3	526	490	-18	19	3	96	-121	-17	19	3	0	-11	-16	19	3	158	170	-15	19	3	334	-338
14	19	3	409	-426	-13	19	3	198	248	-12	19	3	15	56	-11	19	3	308	299	-10	19	3	53	-9
-9	19	3	555	578	-8	19	3	880	873	-7	19	3	303	-304	-6	19	3	209	204	-5	19	3	286	-311
-4	19	3	27	-32	-3	19	3	223	-193	-2	19	3	259	-280	-1	19	3	129	137	0	19	3	200	198
1	19	3	118	117	2	19	3	171	159	3	19	3	129	-134	4	19	3	154	-151	5	19	3	246	-264
6	19	3	216	-227	7	19	3	320	-308	8	19	3	137	-112	9	19	3	60	47	10	19	3	32	-4
11	19	3	23	-26	12	19	3	261	-282	13	19	3	159	160	14	19	3	447	-427	15	19	3	241	230
16	19	3	117	99	17	19	3	101	131	18	19	3	146	162	19	19	3	49	29	-19	20	3	195	-182
18	20	3	344	334	-17	20	3	132	112	-16	20	3	0	-11	-15	20	3	67	-61	-14	20	3	362	296
13	20	3	213	195	-12	20	3	243	235	-11	20	3	83	-89	-10	20	3	349	326	-9	20	3	461	492
-8	20	3	457	-474	-7	20	3	52	-33	-6	20	3	42	-35	-5	20	3	51	59	-4	20	3	317	283

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	20	3	287	-294	-2	20	3	579	603	-1	20	3	45	34	0	20	3	210	195	1	20	3	287	290
2	20	3	308	-324	3	20	3	134	-143	4	20	3	67	-44	5	20	3	577	-577	6	20	3	523	466
7	20	3	525	-525	8	20	3	897	875	9	20	3	201	199	10	20	3	342	331	11	20	3	199	198
12	20	3	249	217	13	20	3	269	244	14	20	3	43	10	15	20	3	299	-311	16	20	3	566	514
17	20	3	270	268	18	20	3	40	72	19	20	3	0	-25	20	20	3	374	341	-20	21	3	371	369
19	21	3	255	280	-18	21	3	7	50	-17	21	3	72	-6	-16	21	3	173	147	-15	21	3	344	-325
14	21	3	101	-73	-13	21	3	43	-51	-12	21	3	328	321	-11	21	3	0	-30	-10	21	3	307	-303
-9	21	3	50	61	-8	21	3	115	-93	-7	21	3	206	-204	-6	21	3	211	-231	-5	21	3	242	-247
-4	21	3	103	87	-3	21	3	212	193	-2	21	3	49	53	-1	21	3	64	-32	0	21	3	216	-227
1	21	3	76	103	2	21	3	171	-157	3	21	3	83	8	4	21	3	131	-88	5	21	3	556	585
6	21	3	288	295	7	21	3	250	212	8	21	3	266	254	9	21	3	62	56	10	21	3	146	148
11	21	3	423	-420	12	21	3	55	-23	13	21	3	53	35	14	21	3	85	100	15	21	3	126	127
16	21	3	152	143	17	21	3	282	261	18	21	3	150	147	19	21	3	210	-204	20	21	3	119	98
19	22	3	349	362	-18	22	3	135	-141	-17	22	3	76	-49	-16	22	3	202	-249	-15	22	3	515	-527
14	22	3	285	251	-13	22	3	376	-383	-12	22	3	335	326	-11	22	3	152	143	-10	22	3	416	414
-9	22	3	180	175	-8	22	3	77	-112	-7	22	3	263	-249	-6	22	3	312	287	-5	22	3	505	-515
-4	22	3	312	292	-3	22	3	71	71	-2	22	3	504	489	-1	22	3	222	252	0	22	3	216	192
1	22	3	348	336	2	22	3	112	82	3	22	3	250	-247	4	22	3	236	213	5	22	3	248	252
6	22	3	43	8	7	22	3	61	55	8	22	3	219	170	9	22	3	467	450	10	22	3	94	17
11	22	3	427	-428	12	22	3	331	292	13	22	3	76	89	14	22	3	0	-26	15	22	3	179	-169
16	22	3	181	155	17	22	3	480	455	18	22	3	193	-219	19	22	3	408	-398	-18	23	3	76	-61
17	23	3	61	72	-16	23	3	123	-126	-15	23	3	259	265	-14	23	3	68	-88	-13	23	3	364	380
12	23	3	52	-96	-11	23	3	82	55	-10	23	3	164	171	-9	23	3	133	-139	-8	23	3	103	-112
-7	23	3	208	216	-6	23	3	259	285	-5	23	3	415	427	-4	23	3	170	-177	-3	23	3	403	404
-2	23	3	477	471	-1	23	3	289	-286	0	23	3	0	32	1	23	3	146	-180	2	23	3	413	419
3	23	3	179	-168	4	23	3	320	-322	5	23	3	212	211	6	23	3	0	56	7	23	3	165	-134
8	23	3	47	-63	9	23	3	306	-316	10	23	3	234	260	11	23	3	197	-196	12	23	3	335	-328
13	23	3	187	190	14	23	3	166	-152	15	23	3	88	88	16	23	3	253	-238	17	23	3	40	58
18	23	3	152	134	-16	24	3	143	98	-15	24	3	81	73	-14	24	3	251	223	-13	24	3	219	214
12	24	3	204	169	-11	24	3	70	43	-10	24	3	133	100	-9	24	3	34	68	-8	24	3	68	58
-7	24	3	144	125	-6	24	3	94	82	-5	24	3	333	355	-4	24	3	102	53	-3	24	3	117	100
-2	24	3	122	-143	-1	24	3	157	-184	0	24	3	81	-90	1	24	3	194	-181	2	24	3	116	69
3	24	3	103	-74	4	24	3	486	464	5	24	3	149	132	6	24	3	33	-7	7	24	3	279	-263
8	24	3	85	12	9	24	3	222	-224	10	24	3	90	-104	11	24	3	256	-220	12	24	3	560	502
13	24	3	232	227	14	24	3	204	177	15	24	3	71	-28	16	24	3	276	227	-15	25	3	220	220
14	25	3	336	330	-13	25	3	87	-76	-12	25	3	140	113	-11	25	3	40	13	-10	25	3	225	218
-9	25	3	459	-438	-8	25	3	478	-483	-7	25	3	68	50	-6	25	3	121	120	-5	25	3	256	-252
-4	25	3	268	-270	-3	25	3	341	318	-2	25	3	274	256	-1	25	3	206	-212	0	25	3	514	-529
1	25	3	330	341	2	25	3	218	220	3	25	3	66	-64	4	25	3	66	-18	5	25	3	179	162
6	25	3	147	112	7	25	3	86	101	8	25	3	210	-206	9	25	3	311	315	10	25	3	71	8

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
11	25	3	173	180	12	25	3	191	195	13	25	3	64	65	14	25	3	294	294	15	25	3	198	-193
-13	26	3	156	161	-12	26	3	363	-376	-11	26	3	164	-169	-10	26	3	45	10	-9	26	3	137	-117
-8	26	3	313	289	-7	26	3	354	-352	-6	26	3	503	480	-5	26	3	148	150	-4	26	3	51	-32
-3	26	3	0	-17	-2	26	3	68	34	-1	26	3	54	102	0	26	3	93	60	1	26	3	243	-261
2	26	3	383	323	3	26	3	113	104	4	26	3	332	315	5	26	3	332	349	6	26	3	92	47
7	26	3	465	451	8	26	3	0	-31	9	26	3	169	163	10	26	3	69	4	11	26	3	0	-25
12	26	3	104	52	13	26	3	20	38	-11	27	3	193	211	-10	27	3	126	87	-9	27	3	0	8
-8	27	3	137	146	-7	27	3	7	24	-6	27	3	241	233	-5	27	3	221	-237	-4	27	3	197	-201
-3	27	3	20	40	-2	27	3	38	4	-1	27	3	31	2	0	27	3	34	40	1	27	3	196	202
2	27	3	267	258	3	27	3	34	-59	4	27	3	207	190	5	27	3	380	-381	6	27	3	246	-222
7	27	3	276	-280	8	27	3	0	16	9	27	3	211	-204	10	27	3	99	-75	11	27	3	242	241
-8	28	3	190	172	-7	28	3	27	19	-6	28	3	158	122	-5	28	3	267	263	-4	28	3	159	126
-3	28	3	143	140	-2	28	3	79	10	-1	28	3	69	-17	0	28	3	59	23	1	28	3	46	73
2	28	3	355	-371	3	28	3	37	-54	4	28	3	40	-87	5	28	3	76	-80	6	28	3	103	36
7	28	3	447	-448	8	28	3	493	456	-3	29	3	266	-245	-2	29	3	184	-191	-1	29	3	39	-58
0	29	3	250	-247	1	29	3	177	192	2	29	3	331	-349	3	29	3	51	31	0	0	4	1071	1108
0	1	4	791	816	1	1	4	189	-201	-1	2	4	570	-568	0	2	4	333	298	1	2	4	524	537
2	2	4	93	92	-2	3	4	18	44	-1	3	4	316	307	0	3	4	155	-172	1	3	4	328	-328
2	3	4	115	-96	3	3	4	115	-131	-3	4	4	80	78	-2	4	4	175	136	-1	4	4	265	253
0	4	4	146	155	1	4	4	253	-264	2	4	4	66	-31	3	4	4	302	-321	4	4	4	614	641
-4	5	4	99	-54	-3	5	4	206	178	-2	5	4	102	-91	-1	5	4	186	201	0	5	4	538	561
1	5	4	25	-45	2	5	4	50	-61	3	5	4	66	133	4	5	4	456	486	5	5	4	43	-23
-5	6	4	235	225	-4	6	4	369	343	-3	6	4	242	227	-2	6	4	212	204	-1	6	4	315	341
0	6	4	145	-206	1	6	4	95	86	2	6	4	113	-134	3	6	4	122	114	4	6	4	89	45
5	6	4	311	-346	6	6	4	227	234	-6	7	4	78	-38	-5	7	4	75	-105	-4	7	4	780	797
-3	7	4	385	-371	-2	7	4	314	-316	-1	7	4	214	-243	0	7	4	327	-362	1	7	4	133	-137
2	7	4	807	-875	3	7	4	284	283	4	7	4	562	575	5	7	4	49	36	6	7	4	308	-317
7	7	4	170	159	-7	8	4	101	-91	-6	8	4	71	-97	-5	8	4	729	-741	-4	8	4	46	36
-3	8	4	74	47	-2	8	4	193	146	-1	8	4	103	-109	0	8	4	339	345	1	8	4	0	37
2	8	4	291	266	3	8	4	140	-172	4	8	4	51	59	5	8	4	162	167	6	8	4	90	39
7	8	4	190	176	8	8	4	140	122	-8	9	4	38	-67	-7	9	4	227	221	-6	9	4	256	-253
-5	9	4	329	367	-4	9	4	120	117	-3	9	4	35	-70	-2	9	4	42	-23	-1	9	4	146	-124
0	9	4	195	198	1	9	4	207	-237	2	9	4	128	-127	3	9	4	43	37	4	9	4	129	153
5	9	4	26	-37	6	9	4	29	-61	7	9	4	41	4	8	9	4	339	347	9	9	4	129	-125
-9	10	4	340	-317	-8	10	4	545	506	-7	10	4	722	715	-6	10	4	176	144	-5	10	4	393	391
-4	10	4	206	-261	-3	10	4	50	-20	-2	10	4	143	128	-1	10	4	395	-376	0	10	4	525	516
1	10	4	116	109	2	10	4	554	586	3	10	4	482	526	4	10	4	150	-220	5	10	4	151	142
6	10	4	70	-118	7	10	4	263	-265	8	10	4	175	-239	9	10	4	542	-559	10	10	4	397	395
10	11	4	47	7	-9	11	4	222	219	-8	11	4	76	53	-7	11	4	75	-90	-6	11	4	173	188
-5	11	4	41	45	-4	11	4	243	231	-3	11	4	235	-235	-2	11	4	73	64	-1	11	4	140	95

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	11	4	97	-95	1	11	4	115	-89	2	11	4	185	224	3	11	4	170	-202	4	11	4	142	-147
5	11	4	306	-340	6	11	4	266	-274	7	11	4	97	122	8	11	4	745	-806	9	11	4	296	316
10	11	4	77	11	11	11	4	284	291	-11	12	4	30	-50	-10	12	4	36	15	-9	12	4	65	-9
-8	12	4	347	372	-7	12	4	171	-177	-6	12	4	72	20	-5	12	4	48	-25	-4	12	4	77	-76
-3	12	4	388	-393	-2	12	4	101	72	-1	12	4	60	69	0	12	4	380	364	1	12	4	535	-577
2	12	4	422	412	3	12	4	110	82	4	12	4	194	201	5	12	4	232	-212	6	12	4	233	194
7	12	4	427	442	8	12	4	339	324	9	12	4	96	-110	10	12	4	262	229	11	12	4	304	283
12	12	4	49	-32	-12	13	4	419	-409	-11	13	4	155	137	-10	13	4	143	-150	-9	13	4	145	164
-8	13	4	410	417	-7	13	4	189	-187	-6	13	4	240	-242	-5	13	4	112	-84	-4	13	4	420	-422
-3	13	4	47	17	-2	13	4	525	-554	-1	13	4	434	465	0	13	4	425	456	1	13	4	295	290
2	13	4	411	423	3	13	4	116	-96	4	13	4	89	30	5	13	4	68	-12	6	13	4	53	-49
7	13	4	92	79	8	13	4	170	207	9	13	4	257	268	10	13	4	625	646	11	13	4	52	-60
12	13	4	54	98	13	13	4	0	-27	-13	14	4	81	-68	-12	14	4	227	206	-11	14	4	448	-453
10	14	4	312	295	-9	14	4	171	170	-8	14	4	69	53	-7	14	4	172	-193	-6	14	4	213	209
-5	14	4	298	322	-4	14	4	211	192	-3	14	4	366	-369	-2	14	4	505	490	-1	14	4	594	586
0	14	4	48	-54	1	14	4	90	58	2	14	4	0	-44	3	14	4	384	389	4	14	4	124	-164
5	14	4	352	-356	6	14	4	353	352	7	14	4	75	80	8	14	4	251	226	9	14	4	87	-89
10	14	4	0	40	11	14	4	424	444	12	14	4	314	-337	13	14	4	345	-360	14	14	4	169	159
14	15	4	254	-237	-13	15	4	239	233	-12	15	4	328	308	-11	15	4	276	298	-10	15	4	64	11
-9	15	4	159	164	-8	15	4	460	461	-7	15	4	168	-151	-6	15	4	218	-220	-5	15	4	53	75
-4	15	4	430	437	-3	15	4	46	-59	-2	15	4	252	-242	-1	15	4	99	91	0	15	4	163	141
1	15	4	55	-27	2	15	4	258	-264	3	15	4	62	-73	4	15	4	24	-17	5	15	4	67	37
6	15	4	81	-68	7	15	4	81	49	8	15	4	76	-62	9	15	4	56	68	10	15	4	290	-280
11	15	4	114	-127	12	15	4	321	-324	13	15	4	168	187	14	15	4	73	77	15	15	4	189	165
15	16	4	173	-166	-14	16	4	459	410	-13	16	4	256	240	-12	16	4	322	291	-11	16	4	549	569
10	16	4	0	5	-9	16	4	552	540	-8	16	4	286	-311	-7	16	4	315	-290	-6	16	4	39	12
-5	16	4	184	-210	-4	16	4	199	207	-3	16	4	163	-147	-2	16	4	402	356	-1	16	4	407	397
0	16	4	54	-71	1	16	4	198	-213	2	16	4	70	-12	3	16	4	485	-531	4	16	4	158	157
5	16	4	286	-278	6	16	4	374	337	7	16	4	130	80	8	16	4	299	290	9	16	4	213	245
10	16	4	193	148	11	16	4	99	-92	12	16	4	178	161	13	16	4	74	139	14	16	4	85	91
15	16	4	167	167	16	16	4	151	110	-16	17	4	369	346	-15	17	4	230	-247	-14	17	4	262	-258
13	17	4	41	8	-12	17	4	105	-103	-11	17	4	80	-82	-10	17	4	286	-303	-9	17	4	122	-91
-8	17	4	155	158	-7	17	4	15	-3	-6	17	4	353	-347	-5	17	4	272	294	-4	17	4	106	121
-3	17	4	131	137	-2	17	4	38	-5	-1	17	4	219	-219	0	17	4	86	94	1	17	4	44	-93
2	17	4	100	-139	3	17	4	111	131	4	17	4	285	-300	5	17	4	403	406	6	17	4	238	245
7	17	4	54	56	8	17	4	273	283	9	17	4	54	-37	10	17	4	337	352	11	17	4	243	-248
12	17	4	256	-276	13	17	4	141	122	14	17	4	38	-36	15	17	4	40	52	16	17	4	101	97
17	17	4	122	139	-16	18	4	0	-86	-15	18	4	185	-211	-14	18	4	286	276	-13	18	4	89	-120
12	18	4	306	262	-11	18	4	74	-70	-10	18	4	286	259	-9	18	4	170	-158	-8	18	4	0	-54
-7	18	4	21	15	-6	18	4	211	191	-5	18	4	91	105	-4	18	4	36	-22	-3	18	4	46	-33

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	18	4	416	423	-1	18	4	71	50	0	18	4	196	156	1	18	4	269	284	2	18	4	386	389
3	18	4	514	538	4	18	4	64	-36	5	18	4	434	435	6	18	4	91	-60	7	18	4	117	-83
8	18	4	104	-137	9	18	4	52	-84	10	18	4	88	82	11	18	4	264	-229	12	18	4	269	209
13	18	4	280	262	14	18	4	156	125	15	18	4	139	-133	16	18	4	0	-60	-15	19	4	151	113
14	19	4	163	165	-13	19	4	101	114	-12	19	4	288	260	-11	19	4	190	-183	-10	19	4	52	75
-9	19	4	73	-60	-8	19	4	282	-291	-7	19	4	104	89	-6	19	4	121	137	-5	19	4	239	253
-4	19	4	210	206	-3	19	4	63	-87	-2	19	4	553	562	-1	19	4	311	-311	0	19	4	172	-178
1	19	4	267	-278	2	19	4	131	158	3	19	4	148	-168	4	19	4	321	-329	5	19	4	49	-40
6	19	4	371	349	7	19	4	135	-154	8	19	4	428	-421	9	19	4	79	120	10	19	4	51	76
11	19	4	67	77	12	19	4	186	-176	13	19	4	144	-129	14	19	4	177	176	15	19	4	156	-179
13	20	4	142	153	-12	20	4	91	38	-11	20	4	46	-35	-10	20	4	200	169	-9	20	4	167	167
-8	20	4	209	186	-7	20	4	44	-27	-6	20	4	132	90	-5	20	4	265	272	-4	20	4	64	-61
-3	20	4	47	-49	-2	20	4	89	-150	-1	20	4	136	-150	0	20	4	121	85	1	20	4	499	-497
2	20	4	384	360	3	20	4	80	-74	4	20	4	214	188	5	20	4	49	-50	6	20	4	82	-98
7	20	4	125	120	8	20	4	53	-69	9	20	4	108	-105	10	20	4	97	40	11	20	4	206	-206
12	20	4	374	359	13	20	4	55	35	-12	21	4	0	-11	-11	21	4	156	-159	-10	21	4	148	126
-9	21	4	200	-191	-8	21	4	94	-54	-7	21	4	61	-38	-6	21	4	52	28	-5	21	4	169	-164
-4	21	4	552	-549	-3	21	4	114	95	-2	21	4	26	-44	-1	21	4	45	7	0	21	4	201	-195
1	21	4	225	234	2	21	4	511	506	3	21	4	94	-62	4	21	4	295	-292	5	21	4	50	15
6	21	4	71	68	7	21	4	211	-176	8	21	4	228	-219	9	21	4	177	158	10	21	4	309	298
11	21	4	115	113	12	21	4	267	257	-10	22	4	196	151	-9	22	4	127	-142	-8	22	4	133	107
-7	22	4	218	-194	-6	22	4	230	193	-5	22	4	312	311	-4	22	4	120	73	-3	22	4	192	-195
-2	22	4	162	133	-1	22	4	23	13	0	22	4	25	31	1	22	4	140	-158	2	22	4	199	174
3	22	4	481	485	4	22	4	125	110	5	22	4	70	35	6	22	4	155	108	7	22	4	73	9
8	22	4	165	124	9	22	4	18	26	10	22	4	0	-10	-7	23	4	103	141	-6	23	4	275	278
-5	23	4	184	-198	-4	23	4	195	187	-3	23	4	91	-86	-2	23	4	102	99	-1	23	4	0	27
0	23	4	114	-109	1	23	4	214	226	2	23	4	224	216	3	23	4	129	-155	4	23	4	136	134
5	23	4	162	-151	6	23	4	134	122	7	23	4	188	-219	-3	24	4	70	-29	-2	24	4	95	49
-1	24	4	162	124	0	24	4	45	-19	1	24	4	42	53	2	24	4	101	-147	3	24	4	244	-253
0	0	5	127	75	0	1	5	51	-29	1	1	5	80	142	-1	2	5	51	12	0	2	5	52	-64
1	2	5	35	-81	2	2	5	83	44	-2	3	5	274	-292	-1	3	5	121	-137	0	3	5	91	-93
1	3	5	60	-36	2	3	5	443	-488	3	3	5	72	91	-3	4	5	46	44	-2	4	5	182	161
-1	4	5	622	-625	0	4	5	284	278	1	4	5	217	221	2	4	5	217	217	3	4	5	218	234
4	4	5	34	-95	-4	5	5	257	250	-3	5	5	136	-150	-2	5	5	76	-49	-1	5	5	51	49
0	5	5	77	80	1	5	5	17	72	2	5	5	171	180	3	5	5	64	86	4	5	5	344	364
5	5	5	52	-91	-5	6	5	96	-92	-4	6	5	49	-19	-3	6	5	186	194	-2	6	5	163	133
-1	6	5	163	-151	0	6	5	169	136	1	6	5	149	168	2	6	5	118	66	3	6	5	92	73
4	6	5	0	-49	5	6	5	71	-4	6	6	5	92	41	-6	7	5	55	-54	-5	7	5	49	4
-4	7	5	323	-331	-3	7	5	45	29	-2	7	5	207	-210	-1	7	5	377	404	0	7	5	266	296
1	7	5	85	-58	2	7	5	34	40	3	7	5	127	-96	4	7	5	380	-421	5	7	5	196	-206

Observed and Calculated Structure Factors

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
6	7	5	584	-637	7	7	5	263	243	-7	8	5	178	159	-6	8	5	16	-33	-5	8	5	91	-71
-4	8	5	150	130	-3	8	5	310	-308	-2	8	5	152	120	-1	8	5	87	-58	0	8	5	296	272
1	8	5	87	-96	2	8	5	73	-40	3	8	5	148	173	4	8	5	195	184	5	8	5	308	-354
6	8	5	244	271	7	8	5	303	311	8	8	5	349	325	-8	9	5	149	171	-7	9	5	120	-97
-6	9	5	226	-233	-5	9	5	52	-85	-4	9	5	115	-113	-3	9	5	60	49	-2	9	5	278	-288
-1	9	5	221	229	0	9	5	342	369	1	9	5	133	158	2	9	5	75	26	3	9	5	39	3
4	9	5	435	501	5	9	5	92	-81	6	9	5	76	55	7	9	5	138	-130	8	9	5	125	121
9	9	5	37	38	-9	10	5	95	67	-8	10	5	51	-66	-7	10	5	316	-294	-6	10	5	185	150
-5	10	5	54	44	-4	10	5	367	355	-3	10	5	287	299	-2	10	5	171	128	-1	10	5	727	715
0	10	5	59	-86	1	10	5	0	-6	2	10	5	67	-89	3	10	5	53	-46	4	10	5	205	182
5	10	5	416	-403	6	10	5	400	399	7	10	5	344	339	8	10	5	172	143	9	10	5	100	79
10	10	5	0	-60	-10	11	5	31	10	-9	11	5	52	20	-8	11	5	465	450	-7	11	5	0	-45
-6	11	5	39	-31	-5	11	5	139	-144	-4	11	5	272	272	-3	11	5	86	-78	-2	11	5	241	-238
-1	11	5	103	-87	0	11	5	295	294	1	11	5	84	-92	2	11	5	446	-466	3	11	5	47	-36
4	11	5	90	90	5	11	5	92	90	6	11	5	140	-113	7	11	5	0	-6	8	11	5	185	190
9	11	5	88	-74	10	11	5	183	-195	11	11	5	123	-131	-10	12	5	58	14	-9	12	5	39	-5
-8	12	5	8	-76	-7	12	5	123	-106	-6	12	5	113	84	-5	12	5	138	-133	-4	12	5	134	80
-3	12	5	274	-263	-2	12	5	149	132	-1	12	5	206	-213	0	12	5	111	48	1	12	5	243	-241
2	12	5	153	115	3	12	5	133	118	4	12	5	0	-71	5	12	5	99	-114	6	12	5	136	97
7	12	5	126	-119	8	12	5	120	79	9	12	5	110	-87	10	12	5	259	215	-8	13	5	270	-264
-7	13	5	168	160	-6	13	5	219	-217	-5	13	5	45	88	-4	13	5	373	381	-3	13	5	86	-100
-2	13	5	41	9	-1	13	5	153	-139	0	13	5	57	-46	1	13	5	64	50	2	13	5	273	-278
3	13	5	110	99	4	13	5	188	177	5	13	5	67	47	6	13	5	367	376	7	13	5	41	-53
8	13	5	86	104	-7	14	5	56	66	-6	14	5	235	213	-5	14	5	97	107	-4	14	5	58	10
-3	14	5	196	193	-2	14	5	100	54	-1	14	5	190	194	0	14	5	56	-105	1	14	5	65	20
2	14	5	228	205	3	14	5	223	235	4	14	5	54	-62	5	14	5	137	110	6	14	5	46	-35
7	14	5	69	93	-5	15	5	95	98	-4	15	5	27	64	-3	15	5	67	-46	-2	15	5	147	160
-1	15	5	138	133	0	15	5	7	44	1	15	5	68	-57	2	15	5	200	175	3	15	5	53	-37
4	15	5	267	-242																				