AM-94-545

Maricopaite, an unusual lead calcium zeolite with an interrupted mordenite-like framework and intrachannel Pb_4 tetrahedral clusters

Roland C. Rouse, Donald R. Peacor

For deposit: Tables 2 and 4

American Mineralogist, 79, 1-2, 175-184.

Table 4. Anisotropic displacement factors ($Å^2$) for maricopaite

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Pb1	0.0232(5)	0.0253(5)	0.0370(6)	-0.0027(7)	0	0
Pb2	0.016(2)	0.022(2)	0.031(2)	0.002(2)	0	0
Pb3	0.0480(10)	0.0128(6)	0.0261(8)	0	0	-0.0027(8)
Pb4	0.049(4)	0.026(3)	0.054(5)	0	0	-0.008(4)
T1	0.021(2)	0.015(2)	0.008(2)	-0.006(2)	0.004(2)	0.001(2)
T2	0.024(2)	0.015(2)	0.014(2)	-0.002(2)	0.000(3)	-0.005(2)
T3	0.017(2)	0.015(2)	0.012(2)	0.004(2)	0.001(3)	-0.001(2)
T4	0.007(3)	0.023(3)	0.009(3)	-0.005(3)	0	0
T5	0.022(4)	0.005(3)	0.015(3)	-0.002(3)	0	0
T6	0.018(2)	0.014(2)	0.016(2)	0.004(2)	0.000(3)	0.004(2)
T7	0.017(4)	0.020(3)	0.022(4)	-0.003(3)	0	0
T8	0.013(4)	0.016(3)	0.013(3)	-0.004(3)	0	0

Note: Anisotropic displacement factors are of the form $\exp[-2\pi^2(h^2a^2U_{11} + k^2b^2U_{22} + l^2c^2U_{33} + 2hkabU_{12} + 2hlacU_{13} + 2klbcU_{23})]$. The anions were refined using isotropic displacement factors. Esd's are in parenthesis.

Table 2.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc for maricopaite

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
4	0	0	-120*	148	213	21	3	0	-309*	253	301
6	0	0	951	953	20	23	3	0	197*	347	442
8	0	0	2181	2128	33	25	3	0	-179*	214	181
10	0	0	4479	4374	59	0	4	0	866	827	16
12	0	0	5633	5305	73	2	4	0	1565	1619	24
14	0	0	1330	1492	27	4	4	0	2588	2780	41
16	0	0	1477	1410	31	6	4	0	3065	3296	45
18	0	0	744	708	47	8	4	0	1380	1326	23
20	0	0	1334	1389	39	10	4	0	180*	239	242
22	0	0	1652	1693	38	12	4	0	556	439	44
24	0	0	493*	276	253	14	4	0	2014	1998	31
5	1	0	2003	1818	30	16	4	0	1681	1600	30
7	1	0	2022	1854	31	18	4	0	530*	974	251
9	1	0	3250	3213	46	20	4	0	559*	1063	245
11	1	0	3135	3134	46	22	4	0	388*	386	313
13	1	0	1208	1292	28	24	4	0	813	995	61
15	1	0	633	646	43	1	5	0	2817	2890	41
17	1	0	480*	455	219	3	5	0	4880	4788	45
19	1	0	1052	1159	41	5	5	0	1471	1482	18
21	1	0	1233	1368	41	7	5	0	1034	985	20
23	1	0	683	857	65	9	5	0	938	925	26
25	1	0	497*	701	265	11	5	0	1967	1711	32
0	2	0	2583	2326	28	13	5	0	1498	1587	25
2	2	0	1945	1727	31	15	5	0	1729	1804	28
4	2	0	3785	4092	42	17	5	0	457*	540	224
6	2	0	1552	1500	25	19	5	0	604	567	59
8	2	0	2667	2860	39	21	5	0	901	887	50
10	2	0	1501	1613	27	23	5	0	486*	445	295
12	2	0	814	839	33	0	6	0	7235	7333	45
14	2	0	1635	1607	26	2	6	0	2750	2709	40
16	2	0	841	784	43	4	6	0	1300	1315	18
18	2	0	-226*	178	322	6	6	0	2473	2584	36
20	2	0	1662	1698	34	8	6	0	2391	2374	37
22	2	0	-259*	375	333	10	6	0	1683	1642	23
24	2	0	329*	247	114	12	6	0	1806	1866	26
3	3	0	1047	949	16	14	6	0	2093	2003	34
5	3	0	4746	4634	46	16	6	0	0*	401	492
7	3	0	3319	3032	49	18	6	0	1094	1055	39
9	3	0	600	591	33	20	6	0	1062	1046	43
11	3	0	1402	1318	23	22	6	0	658	583	65
13	3	0	534	429	47	24	6	0	400*	207	95
15	3	0	1389	1432	30	1	7	0	2404	2429	35
17	3	0	1812	1814	30	3	7	0	939	888	19
19	3	0	-625*	163	177	5	7	0	980	700	20

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
7	7	0	696	694	28	22	10	0	762	757	64
9	7	0	2055	2078	35	1	11	0	301*	621	201
11	7	0	1666	1784	26	3	11	0	4131	4108	60
13	7	0	499	441	51	5	11	0	1874	2013	23
15	7	0	1232	1238	34	7	11	0	1087	1113	26
17	7	0	1014	1035	42	9	11	0	732	780	36
19	7	0	712	749	57	11	11	0	537	591	50
21	7	0	-487*	707	298	13	11	0	2079	2004	29
23	7	0	0*	326	570	15	11	0	1742	1698	32
0	8	0	3290	3230	48	17	11	0	767	771	51
2	8	0	2391	2246	36	19	11	0	340*	215	298
4	8	0	2238	2405	34	21	11	0	408*	670	363
6	8	0	1185	1288	21	0	12	0	823	728	27
8	8	0	1544	1593	23	2	12	0	2101	2144	30
10	8	0	3053	3009	47	4	12	0	1385	1370	23
12	8	0	1087	1112	31	6	12	0	3279	3221	50
14	8	0	-493*	112	176	8	12	0	1764	1774	26
16	8	0	1400	1403	34	10	12	0	1991	1927	29
18	8	0	374*	601	98	12	12	0	946	1009	39
20	8	0	628	623	71	14	12	0	388*	841	285
22	8	0	401*	504	323	16	12	0	875	897	48
1	9	0	1660	1603	26	18	12	0	931	955	50
3	9	0	1240	1206	20	20	12	0	722	578	65
5	9	0	4727	4759	62	22	12	0	722	695	70
7	9	0	2428	2545	36	1	13	0	1463	1491	23
9	9	0	1773	1783	29	3	13	0	1480	1379	23
11	9	0	1194	1270	27	5	13	0	1530	1500	24
13	9	0	795	755	41	7	13	0	949	1012	32
15	9	0	1578	1555	31	9	13	0	2069	2079	27
17	9	0	1703	1674	33	11	13	0	1332	1216	32
19	9	0	-532*	461	221	13	13	0	385*	502	254
21	9	0	909	829	52	15	13	0	408*	858	300
23	9	0	458*	442	272	17	13	0	431*	820	309
0	10	0	1749	1625	26	19	13	0	1191	1188	46
2	10	0	1508	1519	23	21	13	0	753	774	66
4	10	0	2860	2772	44	0	14	0	716	637	35
6	10	0	1666	1586	24	2	14	0	3867	3896	56
8	10	0	1604	1544	28	4	14	0	250*	464	250
10	10	0	1258	1230	26	6	14	0	0*	279	408
12	10	0	-205*	462	292	8	14	0	1984	1932	28
14	10	0	1801	1809	30	10	14	0	2741	2720	44
16	10	0	1633	1681	33	12	14	0	384*	192	275
18	10	0	327*	375	318	14	14	0	781	792	50
20	10	0	396*	454	319	16	14	0	1233	1229	41

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
18	14	0	1225	1311	46	9	19	0	894	922	47
20	14	0	1336	1320	45	11	19	0	226*	291	143
1	15	0	2894	2903	43	13	19	0	519*	662	279
3	15	0	530	594	47	15	19	0	1500	1439	41
5	15	0	828	777	37	0	20	0	1118	1023	36
7	15	0	443*	471	225	2	20	0	1084	1123	37
9	15	0	1920	1848	31	4	20	0	1457	1518	33
11	15	0	2578	2614	36	6	20	0	780	794	49
13	15	0	706	785	54	8	20	0	450*	660	273
15	15	0	530	682	76	10	20	0	1503	1469	39
17	15	0	0*	426	544	12	20	0	693	786	66
19	15	0	523*	485	83	14	20	0	-589*	489	266
0	16	0	2495	2530	35	1	21	0	1158	1136	36
2	16	0	1623	1609	27	3	21	0	857	835	45
4	16	0	944	920	36	5	21	0	-310*	215	293
6	16	0	1374	1396	31	7	21	0	763	635	54
8	16	0	233*	234	285	9	21	0	757	755	59
10	16	0	1889	1828	30	11	21	0	1131	1181	47
12	16	0	1347	1410	36	13	21	0	-279*	466	358
14	16	0	536*	460	228	0	22	0	1022	1001	42
16	16	0	636	614	70	2	22	0	922	1008	43
18	16	0	523*	544	85	4	22	0	-662*	417	195
1	17	0	1169	1230	31	6	22	0	527*	252	224
3	17	0	1095	979	34	8	22	0	752	684	60
5	17	0	1359	1372	33	10	22	0	953	973	50
7	17	0	1487	1440	30	12	22	0	600	631	73
9	17	0	1476	1439	32	1	23	0	678	771	60
11	17	0	442*	191	227	3	23	0	1003	899	43
13	17	0	581	569	66	5	23	0	419*	392	277
15	17	0	1094	1079	50	7	23	0	844	809	53
17	17	0	-194*	530	392	9	23	0	519*	696	279
0	18	0	797	830	41	0	24	0	571	748	65
2	18	0	472	409	61	2	24	0	762	777	55
4	18	0	2051	1992	37	4	24	0	1258	1235	41
6	18	0	1361	1429	33	6	24	0	1766	1784	37
8	18	0	1722	1716	31	8	24	0	0*	524	561
10	18	0	793	709	49	1	25	0	-527*	318	256
12	18	0	-359*	292	261	3	25	0	541	388	70
14	18	0	824	768	59	5	25	0	1482	1603	40
16	18	0	1561	1552	43	2	0	1	371	387	31
1	19	0	371*	499	245	4	0	1	1155	1205	17
3	19	0	507*	825	217	6	0	1	1067	1149	22
5	19	0	2169	2263	29	8	0	1	275*	252	198
7	19	0	1192	1210	37	10	0	1	1128	1107	23

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
12	0	1	243*	481	279	23	3	1	200*	82	394
14	0	1	689	751	40	0	4	1	2762	2764	38
16	0	1	946	861	39	2	4	1	485	600	29
18	0	1	356*	55	270	4	4	1	882	975	19
20	0	1	463*	748	265	6	4	1	2135	2108	30
22	0	1	-260*	403	333	8	4	1	304*	287	49
24	0	1	-679*	356	209	10	4	1	1468	1462	22
1	1	1	999	947	16	12	4	1	1710	1634	27
3	1	1	831	973	18	14	4	1	1071	1057	31
5	1	1	1130	959	18	16	4	1	1012	1003	37
7	1	1	427	293	37	18	4	1	-163*	224	319
9	1	1	834	838	27	20	4	1	326*	808	352
11	1	1	1279	1313	24	22	4	1	393*	322	265
13	1	1	619	473	39	24	4	1	-657*	279	219
15	1	1	1682	1771	27	1	5	1	1519	1457	23
17	1	1	-380*	405	237	3	5	1	466	565	31
19	1	1	1059	1041	42	5	5	1	1633	1776	24
21	1	1	851	837	53	7	5	1	448	522	37
23	1	1	349*	180	305	9	5	1	393*	885	198
25	1	1	795	801	63	11	5	1	911	958	30
0	2	1	1676	1666	24	13	5	1	-336*	94	187
2	2	1	691	739	19	15	5	1	840	816	41
4	2	1	582	384	26	17	5	1	561	549	58
6	2	1	3200	3028	47	19	5	1	530	463	67
8	2	1	1261	1312	23	21	5	1	550	622	77
10	2	1	1824	1958	30	23	5	1	-611*	125	215
12	2	1	1009	980	29	0	6	1	3342	3239	49
14	2	1	1628	1550	26	2	6	1	790	822	21
16	2	1	1429	1391	31	4	6	1	2476	2367	37
18	2	1	499	604	69	6	6	1	1633	1651	25
20	2	1	1328	1397	38	8	6	1	604	685	33
22	2	1	-184*	243	394	10	6	1	1532	1563	27
24	2	1	204*	465	447	12	6	1	1214	1269	28
1	3	1	2545	2538	36	14	6	1	735	680	39
3	3	1	1093	1225	15	16	6	1	1184	1217	36
5	3	1	3415	3376	44	18	6	1	405*	260	249
7	3	1	2310	2241	33	20	6	1	-688*	603	188
9	3	1	2749	2699	42	22	6	1	697	621	63
11	3	1	2236	2307	32	24	6	1	519	286	77
13	3	1	-189*	291	270	1	7	1	1244	1267	19
15	3	1	1688	1653	31	3	7	1	635	664	26
17	3	1	793	807	46	5	7	1	2095	2110	34
19	3	1	859	915	47	7	7	1	1145	1117	22
21	3	1	562	654	70	9	7	1	1259	1294	23

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
11	7	1	1527	1514	24	3	11	1	1068	1037	25
13	7	1	-426*	364	182	5	11	1	1442	1413	24
15	7	1	1874	1916	29	7	11	1	-186*	216	259
17	7	1	828	776	46	9	11	1	985	997	30
19	7	1	945	963	48	11	11	1	1194	1251	30
21	7	1	1031	957	48	13	11	1	165*	200	336
23	7	1	350*	131	330	15	11	1	758	758	49
0	8	1	1491	1404	21	17	11	1	584	336	61
2	8	1	916	841	21	19	11	1	276*	286	370
4	8	1	779	813	25	21	11	1	925	889	53
6	8	1	3125	3056	47	0	12	1	2891	2876	41
8	8	1	1035	1027	24	2	12	1	1104	1049	25
10	8	1	1920	1940	29	4	12	1	2056	2139	28
12	8	1	651	579	41	6	12	1	1576	1646	24
14	8	1	1379	1407	32	8	12	1	-312*	307	209
16	8	1	1398	1373	33	10	12	1	1758	1735	27
18	8	1	369*	449	270	12	12	1	1154	1215	34
20	8	1	1266	1261	42	14	12	1	421*	413	75
22	8	1	-861*	284	165	16	12	1	1259	1300	38
1	9	1	1432	1518	25	18	12	1	-256*	306	365
3	9	1	391	353	44	20	12	1	284*	612	347
5	9	1	1573	1570	30	22	12	1	665	680	69
7	9	1	1223	1249	23	1	13	1	805	847	32
9	9	1	1243	1345	25	3	13	1	260*	355	75
11	9	1	1589	1631	25	5	13	1	1891	1882	28
13	9	1	338*	104	75	7	13	1	932	979	33
15	9	1	1210	1260	35	9	13	1	1119	1167	33
17	9	1	-375*	361	226	11	13	1	944	890	39
19	9	1	643	637	60	13	13	1	244*	265	298
21	9	1	488*	496	319	15	13	1	1216	1108	38
23	9	1	238*	77	143	17	13	1	-624*	686	217
0	10	1	1346	1384	22	19	13	1	200*	560	438
2	10	1	712	678	29	21	13	1	538*	576	86
4	10	1	1152	1220	23	0	14	1	905	853	30
6	10	1	1222	1264	23	2	14	1	144*	247	315
8	10	1	764	737	32	4	14	1	893	861	33
10	10	1	941	929	32	6	14	1	975	941	31
12	10	1	1195	1123	31	8	14	1	500	484	57
14	10	1	375*	471	247	10	14	1	845	848	40
16	10	1	437*	572	286	12	14	1	-398*	279	248
18	10	1	-351*	97	264	14	14	1	870	850	47
20	10	1	522*	603	273	16	14	1	519	535	71
22	10	1	353*	417	363	18	14	1	562	587	79
1	11	1	2053	2059	33	20	14	1	611	532	75

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	15	1	1117	1105	29	13	19	1	-188*	157	355
3	15	1	0*	468	438	15	19	1	280*	394	365
5	15	1	1619	1572	27	0	20	1	750	756	46
7	15	1	-151*	540	339	2	20	1	245*	265	300
9	15	1	506	465	63	4	20	1	609	764	59
11	15	1	650	644	52	6	20	1	467*	600	75
13	15	1	338*	312	94	8	20	1	257*	127	303
15	15	1	498*	572	235	10	20	1	323*	447	340
17	15	1	852	795	56	12	20	1	542*	199	239
19	15	1	0*	389	561	14	20	1	325*	289	114
0	16	1	1548	1564	27	1	21	1	919	1026	43
2	16	1	556	560	52	3	21	1	557	586	62
4	16	1	1756	1788	29	5	21	1	1187	1297	41
6	16	1	560	633	55	7	21	1	219*	441	140
8	16	1	416*	261	68	9	21	1	539	438	69
10	16	1	1198	1228	36	11	21	1	573	621	73
12	16	1	253*	253	320	13	21	1	-526*	60	288
14	16	1	620	528	62	0	22	1	1153	1146	38
16	16	1	733	666	59	2	22	1	-709*	191	200
18	16	1	-553*	97	210	4	22	1	1298	1306	38
1	17	1	1558	1582	28	6	22	1	-458*	251	263
3	17	1	943	907	36	8	22	1	498*	99	244
5	17	1	1206	1202	32	10	22	1	576*	716	260
7	17	1	442*	122	231	12	22	1	323*	18	113
9	17	1	955	931	43	1	23	1	450*	523	79
11	17	1	961	921	41	3	23	1	611	457	60
13	17	1	-696*	248	196	5	23	1	678	648	62
15	17	1	957	838	49	7	23	1	402*	312	93
17	17	1	448*	329	276	9	23	1	-397*	538	359
0	18	1	1262	1219	32	0	24	1	260*	588	348
2	18	1	877	783	39	2	24	1	-584*	245	242
4	18	1	1214	1229	34	4	24	1	467*	496	80
6	18	1	1017	992	39	6	24	1	0*	324	567
8	18	1	348*	204	234	8	24	1	-285*	217	328
10	18	1	1104	1051	39	1	25	1	244*	439	126
12	18	1	382*	341	92	3	25	1	327*	175	327
14	18	1	334*	195	304	0	0	2	1302	1259	22
16	18	1	1013	837	47	2	0	2	3548	3636	48
1	19	1	743	766	46	4	0	2	6874	6792	50
3	19	1	277*	224	99	6	0	2	5626	5561	57
5	19	1	937	925	42	8	0	2	717	721	30
7	19	1	566	567	61	10	0	2	778	731	31
9	19	1	668	546	54	12	0	2	327*	571	222
11	19	1	592	569	70	14	0	2	1258	1114	30

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
16	0	2	4006	4117	60	4	4	2	963	863	20
18	0	2	948	813	45	6	4	2	1246	1132	19
20	0	2	545	332	74	8	4	2	2034	2064	31
22	0	2	700	612	68	10	4	2	2518	2518	41
24	0	2	640	645	79	12	4	2	754	801	38
1	1	2	1561	1430	22	14	4	2	551	439	51
3	1	2	4357	4482	49	16	4	2	-411*	705	225
5	1	2	3913	4078	56	18	4	2	745	836	55
7	1	2	3580	3554	54	20	4	2	991	998	47
9	1	2	788	822	30	22	4	2	763	886	65
11	1	2	761	825	35	24	4	2	-200*	404	403
13	1	2	703	696	42	1	5	2	2302	2219	34
15	1	2	2287	2222	38	3	5	2	1214	1230	17
17	1	2	1318	1282	37	5	5	2	2246	2432	33
19	1	2	826	901	52	7	5	2	1249	1253	21
21	1	2	943	853	54	9	5	2	2934	2892	44
23	1	2	467*	325	238	11	5	2	679	419	39
0	2	2	2073	2267	31	13	5	2	913	934	34
2	2	2	2594	2519	38	15	5	2	1145	1175	36
4	2	2	4169	3979	52	17	5	2	730	803	52
6	2	2	1894	1832	27	19	5	2	989	974	48
8	2	2	1554	1568	22	21	5	2	1724	1682	38
10	2	2	1382	1461	25	23	5	2	208*	400	466
12	2	2	1716	1775	29	0	6	2	1730	1581	25
14	2	2	2238	2113	29	2	6	2	2277	2263	31
16	2	2	934	858	40	4	6	2	2518	2682	36
18	2	2	-616*	190	191	6	6	2	1762	1712	26
20	2	2	869	932	51	8	6	2	698	576	32
22	2	2	288*	430	396	10	6	2	2138	2073	29
24	2	2	958	912	58	12	6	2	466	467	54
1	3	2	4033	3903	48	14	6	2	1704	1746	29
3	3	2	635	571	25	16	6	2	1813	1818	31
5	3	2	1154	1208	18	18	6	2	416*	506	257
7	3	2	777	723	25	20	6	2	555*	459	244
9	3	2	1527	1536	23	22	6	2	614*	989	291
11	3	2	3379	3343	48	1	7	2	108*	528	276
13	3	2	476	531	57	3	7	2	1528	1519	23
15	3	2	-148*	548	347	5	7	2	2288	2295	34
17	3	2	742	698	50	7	7	2	1423	1534	22
19	3	2	462*	340	265	9	7	2	360*	401	188
21	3	2	896	953	56	11	7	2	376*	490	63
23	3	2	293*	589	403	13	7	2	767	844	43
0	4	2	3972	3992	49	15	7	2	1251	1277	37
2	4	2	1646	1757	23	17	7	2	1001	1005	45

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
19	7	2	968	877	47	13	11	2	990	962	38
21	7	2	202*	473	422	15	11	2	314*	472	295
23	7	2	395*	187	107	17	11	2	-249*	286	362
0	8	2	1773	1902	26	19	11	2	1317	1344	45
2	8	2	1543	1488	25	21	11	2	1141	1099	50
4	8	2	1800	1764	26	0	12	2	2335	2340	35
6	8	2	2378	2301	34	2	12	2	1789	1721	28
8	8	2	758	667	32	4	12	2	399	464	54
10	8	2	745	767	35	6	12	2	2898	2903	42
12	8	2	2406	2379	37	8	12	2	214*	542	354
14	8	2	1317	1253	33	10	12	2	1873	1845	28
16	8	2	886	862	49	12	12	2	950	783	40
18	8	2	470*	349	74	14	12	2	839	799	46
20	8	2	665	708	66	16	12	2	634	647	64
22	8	2	-194*	168	404	18	12	2	733	675	62
1	9	2	3601	3650	51	20	12	2	614	580	78
3	9	2	1396	1380	21	1	13	2	1726	1773	24
5	9	2	1725	1751	27	3	13	2	1129	1095	28
7	9	2	1503	1512	23	5	13	2	1540	1596	25
9	9	2	1377	1387	25	7	13	2	870	947	36
11	9	2	3364	3333	48	9	13	2	1344	1370	31
13	9	2	664	713	51	11	13	2	786	790	45
15	9	2	1115	1072	40	13	13	2	1445	1510	35
17	9	2	494*	510	242	15	13	2	1385	1351	36
19	9	2	548	406	71	17	13	2	278*	737	408
21	9	2	815	759	58	19	13	2	541*	620	299
0	10	2	2800	2824	41	21	13	2	-285*	379	341
2	10	2	1900	1907	28	0	14	2	1238	1183	27
4	10	2	1066	1018	24	2	14	2	2362	2329	37
6	10	2	1717	1699	21	4	14	2	1213	1134	27
8	10	2	2377	2331	32	6	14	2	1680	1727	28
10	10	2	1897	1902	26	8	14	2	1291	1299	32
12	10	2	1088	1050	34	10	14	2	168*	329	331
14	10	2	-503*	577	190	12	14	2	-370*	470	269
16	10	2	551*	710	261	14	14	2	2712	2722	33
18	10	2	513*	346	268	16	14	2	695	633	66
20	10	2	1582	1496	39	18	14	2	383*	369	105
22	10	2	-996*	575	193	20	14	2	-490*	525	263
1	11	2	1957	1962	26	1	15	2	216*	351	310
3	11	2	1035	1037	27	3	15	2	718	662	43
5	11	2	400	479	52	5	15	2	3651	3465	57
7	11	2	1453	1315	25	7	15	2	1564	1557	30
9	11	2	2709	2657	42	9	15	2	-160*	234	341
11	11	2	1200	1177	34	11	15	2	-166*	537	388

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
13	15	2	789	746	54
15	15	2	1358	1329	43
17	15	2	1282	1286	46
19	15	2	482*	380	93
0	16	2	1005	1023	36
2	16	2	1191	1207	33
4	16	2	1565	1541	30
6	16	2	2648	2682	40
8	16	2	349*	318	85
10	16	2	808	867	47
12	16	2	660	681	60
14	16	2	705	698	61
16	16	2	1013	1115	52
18	16	2	462*	715	305
1	17	2	1238	1325	35
3	17	2	1633	1571	30
5	17	2	631	665	54
7	17	2	297*	397	270
9	17	2	1304	1296	35
11	17	2	1107	1147	44
13	17	2	612	593	70
15	17	2	486*	710	295
17	17	2	-625*	106	236
0	18	2	2018	2043	35
2	18	2	1138	1105	35
4	18	2	590	658	54
6	18	2	521*	640	235
8	18	2	912	943	48
10	18	2	1284	1335	39
12	18	2	1552	1557	38
14	18	2	-269*	334	344
16	18	2	-197*	17	422
1	19	2	1394	1396	34
3	19	2	455*	516	73
5	19	2	-171*	343	375
7	19	2	312*	472	312
9	19	2	738	794	57
11	19	2	2004	2005	34
13	19	2	440*	366	88
15	19	2	798	728	60
0	20	2	1412	1442	33
2	20	2	-427*	504	237
4	20	2	847	824	48
6	20	2	956	1029	46
8	20	2	772	872	58
10	20	2	834	951	57
12	20	2	1101	1001	45
14	20	2	1245	1191	45
1	21	2	472	505	72
3	21	2	912	798	48
5	21	2	1312	1348	41
7	21	2	564*	789	255
9	21	2	792	796	56
11	21	2	278*	395	372
13	21	2	-697*	341	179
0	22	2	366*	591	311
2	22	2	454*	514	289
4	22	2	850	852	52
6	22	2	976	1053	48
8	22	2	432*	565	88
10	22	2	0*	534	639
1	23	2	556	564	71
3	23	2	872	901	52
5	23	2	1118	952	44
7	23	2	-440*	515	285
9	23	2	441*	839	300
0	24	2	2013	1991	33
2	24	2	-521*	578	262
4	24	2	193*	456	392
6	24	2	583	562	69
0	0	3	1544	1577	20
2	0	3	407	640	38
4	0	3	653	581	27
6	0	3	296*	609	197
8	0	3	321*	659	214
10	0	3	1039	1068	28
12	0	3	687	723	41
14	0	3	547	539	61
16	0	3	753	602	50
18	0	3	329*	112	299
20	0	3	672	740	71
22	0	3	559*	398	264
1	1	3	1090	1100	19
3	1	3	667	521	28
5	1	3	1864	1919	29
7	1	3	127*	115	279
9	1	3	1839	1925	31
11	1	3	873	772	35

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
13	1	3	226*	522	295	5	5	3	1275	1255	21
15	1	3	1441	1440	33	7	5	3	664	690	32
17	1	3	244*	301	123	9	5	3	560	378	41
19	1	3	1123	1180	46	11	5	3	1019	1017	32
21	1	3	716	711	69	13	5	3	429*	478	217
23	1	3	0*	642	608	15	5	3	1019	1016	39
0	2	3	1875	1719	29	17	5	3	635	635	61
2	2	3	-248*	97	185	19	5	3	305*	197	115
4	2	3	1632	1705	23	21	5	3	288*	469	406
6	2	3	635	615	33	23	5	3	-346*	538	356
8	2	3	1590	1590	26	0	6	3	2612	2450	37
10	2	3	2621	2683	44	2	6	3	1355	1303	20
12	2	3	267*	411	275	4	6	3	1186	1287	22
14	2	3	1636	1662	29	6	6	3	2309	2348	37
16	2	3	1354	1310	35	8	6	3	1293	1266	24
18	2	3	853	783	48	10	6	3	1276	1175	26
20	2	3	445*	471	274	12	6	3	909	913	34
22	2	3	711	759	71	14	6	3	500	470	66
1	3	3	1425	1528	22	16	6	3	1051	1065	42
3	3	3	1195	1204	19	18	6	3	506	333	74
5	3	3	929	964	25	20	6	3	1111	1060	46
7	3	3	2969	3004	41	22	6	3	-479*	152	266
9	3	3	497	535	45	1	7	3	2247	2191	33
11	3	3	2672	2751	42	3	7	3	1008	992	24
13	3	3	-522*	215	174	5	7	3	1595	1721	27
15	3	3	2215	2234	37	7	7	3	588	516	37
17	3	3	484*	350	253	9	7	3	1687	1681	24
19	3	3	-527*	359	212	11	7	3	1609	1637	26
21	3	3	862	997	62	13	7	3	473	462	63
23	3	3	-342*	15	274	15	7	3	1610	1574	33
0	4	3	814	757	22	17	7	3	-296*	167	270
2	4	3	818	876	23	19	7	3	667	841	70
4	4	3	1927	1970	27	21	7	3	901	836	55
6	4	3	1802	1900	28	0	8	3	2132	2175	31
8	4	3	1098	1110	25	2	8	3	421	451	43
10	4	3	1700	1611	28	4	8	3	955	937	26
12	4	3	0*	362	443	6	8	3	233*	473	240
14	4	3	736	629	46	8	8	3	1028	1111	30
16	4	3	1670	1685	33	10	8	3	2623	2708	35
18	4	3	189*	436	424	12	8	3	828	900	43
20	4	3	562*	475	256	14	8	3	1628	1597	32
22	4	3	-273*	204	300	16	8	3	809	852	52
1	5	3	840	903	23	18	8	3	670	757	63
3	5	3	1088	1060	22	20	8	3	-821*	540	200

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
22	8	3	831	961	63	20	12	3	895	775	56
1	9	3	1063	1001	25	1	13	3	1565	1542	25
3	9	3	637	587	36	3	13	3	1408	1478	27
5	9	3	1016	944	26	5	13	3	958	916	34
7	9	3	1475	1508	26	7	13	3	876	889	39
9	9	3	1078	1096	30	9	13	3	559	554	59
11	9	3	1297	1385	32	11	13	3	1743	1702	30
13	9	3	599	582	55	13	13	3	183*	698	435
15	9	3	1065	1135	42	15	13	3	1096	1158	44
17	9	3	270*	305	362	17	13	3	-324*	24	316
19	9	3	-185*	325	385	19	13	3	-519*	236	252
21	9	3	510*	744	283	0	14	3	1222	1193	30
0	10	3	1023	1006	26	2	14	3	530	563	57
2	10	3	1241	1108	24	4	14	3	520	483	56
4	10	3	834	885	32	6	14	3	525	415	56
6	10	3	860	968	32	8	14	3	-419*	455	246
8	10	3	854	821	34	10	14	3	989	1053	41
10	10	3	389*	919	265	12	14	3	490	401	74
12	10	3	256*	339	107	14	14	3	537*	642	259
14	10	3	920	954	46	16	14	3	309*	429	123
16	10	3	533*	788	277	18	14	3	579	453	75
18	10	3	-549*	455	241	1	15	3	1546	1507	29
20	10	3	556	617	84	3	15	3	880	745	38
1	11	3	672	620	36	5	15	3	1168	1110	34
3	11	3	602	649	40	7	15	3	474*	82	201
5	11	3	2120	2129	30	9	15	3	246*	723	338
7	11	3	476	425	52	11	15	3	1115	979	40
9	11	3	933	887	38	13	15	3	-178*	177	359
11	11	3	438*	312	74	15	15	3	-416*	327	269
13	11	3	-542*	186	187	17	15	3	-644*	410	249
15	11	3	618	588	60	0	16	3	1182	1222	35
17	11	3	1301	1305	42	2	16	3	337*	465	82
19	11	3	856	749	58	4	16	3	450	417	68
21	11	3	574	534	83	6	16	3	1474	1486	32
0	12	3	2761	2693	44	8	16	3	1372	1383	35
2	12	3	531	572	45	10	16	3	362*	482	244
4	12	3	1645	1702	24	12	16	3	-620*	566	183
6	12	3	2490	2545	34	14	16	3	-263*	281	314
8	12	3	680	726	46	16	16	3	0*	497	608
10	12	3	1078	935	35	18	16	3	-404*	492	314
12	12	3	987	1049	42	1	17	3	885	864	41
14	12	3	708	646	56	3	17	3	-401*	108	230
16	12	3	1008	1050	46	5	17	3	1575	1589	32
18	12	3	485*	511	87	7	17	3	-240*	223	287

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
9	17	3	945	908	46	0	24	3	944	1026	50
11	17	3	518	462	79	2	24	3	-492*	326	307
13	17	3	-528*	153	236	0	0	4	8626	8757	63
15	17	3	-388*	421	319	2	0	4	878	898	27
17	17	3	882	919	62	4	0	4	-238*	52	207
0	18	3	2181	2265	34	6	0	4	1136	1196	25
2	18	3	-376*	330	259	8	0	4	1580	1522	26
4	18	3	907	982	44	10	0	4	2433	2460	37
6	18	3	965	1034	47	12	0	4	3220	3159	46
8	18	3	-560*	204	204	14	0	4	-541*	53	194
10	18	3	689	580	59	16	0	4	200*	107	143
12	18	3	840	815	57	18	0	4	558*	553	246
14	18	3	952	958	54	20	0	4	1113	1172	51
16	18	3	0*	300	612	22	0	4	1200	1198	52
1	19	3	434*	573	248	1	1	4	3636	3516	56
3	19	3	-174*	474	381	3	1	4	1474	1486	23
5	19	3	851	900	49	5	1	4	1593	1521	25
7	19	3	772	641	53	7	1	4	1282	1265	25
9	19	3	379*	277	277	9	1	4	2376	2447	36
11	19	3	734	610	59	11	1	4	1778	1798	27
13	19	3	-479*	317	266	13	1	4	1281	1247	34
0	20	3	1231	1260	38	15	1	4	-322*	479	265
2	20	3	-131*	243	162	17	1	4	-726*	334	171
4	20	3	693	746	59	19	1	4	569*	837	289
6	20	3	-183*	523	435	21	1	4	1086	1047	51
8	20	3	-287*	156	116	0	2	4	1809	1845	25
10	20	3	619	557	66	2	2	4	1067	1065	24
12	20	3	529*	365	259	4	2	4	1515	1514	24
1	21	3	1124	1109	43	6	2	4	1150	1189	27
3	21	3	-414*	113	259	8	2	4	2348	2219	30
5	21	3	1084	1186	46	10	2	4	1242	1228	28
7	21	3	-873*	111	182	12	2	4	434*	261	197
9	21	3	712	695	64	14	2	4	882	876	44
11	21	3	-564*	589	302	16	2	4	-288*	590	297
0	22	3	909	832	48	18	2	4	507	386	73
2	22	3	385*	459	96	20	2	4	977	974	53
4	22	3	332*	263	302	22	2	4	351*	281	121
6	22	3	878	929	56	1	3	4	700	594	30
8	22	3	1158	1187	47	3	3	4	1097	1077	24
10	22	3	283*	210	346	5	3	4	2882	2989	46
1	23	3	585	698	72	7	3	4	2016	2077	25
3	23	3	432*	294	276	9	3	4	232*	297	91
5	23	3	-280*	389	347	11	3	4	734	647	42
7	23	3	557	621	81	13	3	4	0*	533	495

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
15	3	4	1159	1173	40	11	7	4	1336	1385	32
17	3	4	1189	1219	40	13	7	4	-225*	377	313
19	3	4	-137*	99	165	15	7	4	519*	622	221
21	3	4	424*	193	100	17	7	4	432*	578	276
0	4	4	461	399	39	19	7	4	0*	496	535
2	4	4	863	793	26	21	7	4	513*	539	284
4	4	4	2609	2629	40	0	8	4	1874	2017	22
6	4	4	2338	2403	32	2	8	4	1161	1172	25
8	4	4	376*	496	60	4	8	4	971	959	29
10	4	4	357*	459	67	6	8	4	836	845	34
12	4	4	588	591	53	8	8	4	1546	1461	26
14	4	4	1506	1586	34	10	8	4	1877	1934	29
16	4	4	1053	1080	43	12	8	4	837	802	46
18	4	4	301*	488	114	14	8	4	0*	251	495
20	4	4	288*	641	376	16	8	4	885	869	51
22	4	4	212*	322	430	18	8	4	490*	342	81
1	5	4	1271	1314	22	20	8	4	293*	555	402
3	5	4	2179	2238	30	1	9	4	1420	1450	25
5	5	4	1990	2020	32	3	9	4	633	608	38
7	5	4	891	776	29	5	9	4	2988	3013	45
9	5	4	860	867	33	7	9	4	1604	1579	28
11	5	4	637	665	50	9	9	4	1275	1307	32
13	5	4	883	828	44	11	9	4	1194	1183	35
15	5	4	1353	1412	37	13	9	4	259*	337	115
17	5	4	839	852	52	15	9	4	1224	1180	40
19	5	4	545	571	80	17	9	4	1028	972	50
21	5	4	589*	674	292	19	9	4	205*	316	389
0	6	4	2930	2936	44	21	9	4	366*	610	376
2	6	4	1174	1166	24	0	10	4	1076	1080	28
4	6	4	935	860	28	2	10	4	720	702	37
6	6	4	1924	1869	25	4	10	4	2370	2376	35
8	6	4	1468	1453	25	6	10	4	1706	1719	26
10	6	4	1239	1283	31	8	10	4	636	630	51
12	6	4	1292	1148	33	10	10	4	800	787	44
14	6	4	705	669	53	12	10	4	459*	403	72
16	6	4	418*	422	248	14	10	4	1106	1168	43
18	6	4	666	738	63	16	10	4	1361	1397	42
20	6	4	718	803	70	18	10	4	350*	240	307
22	6	4	599*	503	289	20	10	4	419*	411	295
1	7	4	1689	1739	24	1	11	4	274*	153	76
3	7	4	638	726	36	3	11	4	2087	2125	35
5	7	4	463	382	50	5	11	4	1660	1684	27
7	7	4	327*	378	222	7	11	4	478*	743	221
9	7	4	1368	1395	29	9	11	4	-271*	295	279

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
11	11	4	0*	215	430	0	16	4	1768	1756	30
13	11	4	1128	1084	39	2	16	4	1474	1452	31
15	11	4	1270	1300	42	4	16	4	666	658	57
17	11	4	490*	660	297	6	16	4	753	711	49
19	11	4	0*	60	606	8	16	4	257*	669	377
0	12	4	562	597	48	10	16	4	1266	1268	39
2	12	4	1371	1355	30	12	16	4	955	945	51
4	12	4	1171	1183	33	14	16	4	200*	393	459
6	12	4	1982	2046	30	16	16	4	537*	501	83
8	12	4	678	701	49	1	17	4	740	711	49
10	12	4	1477	1508	32	3	17	4	693	768	56
12	12	4	787	811	51	5	17	4	1069	1019	43
14	12	4	709	578	55	7	17	4	1071	998	42
16	12	4	0*	794	600	9	17	4	802	863	57
18	12	4	356*	663	312	11	17	4	380*	183	98
1	13	4	943	991	37	13	17	4	567	531	74
3	13	4	1037	1011	36	15	17	4	0*	766	654
5	13	4	1325	1332	33	0	18	4	-677*	320	196
7	13	4	802	701	45	2	18	4	-303*	277	295
9	13	4	1259	1197	35	4	18	4	1453	1434	36
11	13	4	1251	1207	37	6	18	4	1125	1213	43
13	13	4	534*	302	251	8	18	4	1074	1147	46
15	13	4	340*	578	340	10	18	4	-595*	517	232
17	13	4	556	562	80	12	18	4	527*	233	267
19	13	4	985	942	55	14	18	4	-633*	711	261
0	14	4	687	593	49	1	19	4	554	395	66
2	14	4	2215	2238	31	3	19	4	525	623	71
4	14	4	-316*	375	286	5	19	4	1234	1231	43
6	14	4	336*	251	246	7	19	4	875	955	53
8	14	4	1073	1127	41	9	19	4	195*	390	427
10	14	4	2033	2004	31	11	19	4	684	589	65
12	14	4	776	722	53	13	19	4	407*	568	319
14	14	4	-412*	140	258	0	20	4	864	732	50
16	14	4	351*	545	369	2	20	4	677	637	60
18	14	4	963	870	54	4	20	4	864	892	51
1	15	4	2265	2256	34	6	20	4	758	667	57
3	15	4	290*	402	264	8	20	4	534	516	79
5	15	4	170*	300	390	10	20	4	985	1042	52
7	15	4	188*	251	135	1	21	4	902	889	49
9	15	4	1555	1525	34	3	21	4	414*	519	94
11	15	4	1844	1929	34	5	21	4	487*	427	83
13	15	4	-640*	460	217	7	21	4	-277*	406	344
15	15	4	-271*	443	367	9	21	4	530*	579	285
17	15	4	392*	286	104	0	22	4	760	875	60

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	22	4	705	733	60	13	3	5	401*	348	256
4	22	4	392*	305	287	15	3	5	799	609	51
6	22	4	344*	131	313	17	3	5	965	942	53
1	23	4	536	635	78	19	3	5	1123	1208	50
3	23	4	637	656	68	21	3	5	396*	410	110
0	0	5	454	538	48	0	4	5	3127	3030	44
2	0	5	284*	18	200	2	4	5	879	866	31
4	0	5	957	900	31	4	4	5	1129	1119	28
6	0	5	965	800	32	6	4	5	1248	1223	29
8	0	5	353*	36	200	8	4	5	353*	373	247
10	0	5	-335*	528	243	10	4	5	955	907	40
12	0	5	200*	133	128	12	4	5	2110	2075	33
14	0	5	641	563	60	14	4	5	1257	1306	39
16	0	5	695	668	63	16	4	5	569	495	70
18	0	5	418*	112	100	18	4	5	-645*	82	225
20	0	5	496*	432	95	20	4	5	-554*	641	263
1	1	5	631	547	37	1	5	5	963	975	29
3	1	5	1088	1195	28	3	5	5	487	533	50
5	1	5	1224	1136	28	5	5	5	1262	1310	28
7	1	5	543	534	50	7	5	5	617	516	46
9	1	5	230*	277	330	9	5	5	689	743	48
11	1	5	1415	1511	32	11	5	5	903	874	43
13	1	5	835	718	47	13	5	5	-286*	146	287
15	1	5	1229	1264	39	15	5	5	453*	349	81
17	1	5	398*	536	321	17	5	5	485*	344	239
19	1	5	597	524	77	19	5	5	628	546	71
21	1	5	459*	472	103	21	5	5	346*	504	130
0	2	5	1253	1329	24	0	6	5	1912	1876	31
2	2	5	512	499	43	2	6	5	424	394	53
4	2	5	948	761	31	4	6	5	2039	2007	36
6	2	5	2694	2713	42	6	6	5	437	484	62
8	2	5	1791	1798	28	8	6	5	1363	1360	31
10	2	5	865	820	41	10	6	5	1101	1077	38
12	2	5	995	1061	43	12	6	5	749	771	52
14	2	5	1047	1016	43	14	6	5	911	914	46
16	2	5	833	754	53	16	6	5	788	831	56
18	2	5	-739*	215	184	18	6	5	-626*	90	209
20	2	5	1368	1373	47	20	6	5	-443*	361	313
1	3	5	1514	1500	23	1	7	5	-243*	435	269
3	3	5	1628	1576	24	3	7	5	581	575	44
5	3	5	2351	2329	32	5	7	5	1545	1549	25
7	3	5	1065	968	30	7	7	5	938	1003	37
9	3	5	2225	2091	39	9	7	5	443*	543	73
11	3	5	1454	1489	31	11	7	5	732	790	50

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
13	7	5	-414*	463	213	0	12	5	1943	1864	37
15	7	5	1151	1331	42	2	12	5	1079	1104	36
17	7	5	447*	701	313	4	12	5	1692	1633	29
19	7	5	708	592	68	6	12	5	511*	469	230
0	8	5	516	557	50	8	12	5	658	683	54
2	8	5	368*	308	60	10	12	5	1612	1627	34
4	8	5	340*	299	238	12	12	5	738	772	56
6	8	5	3001	2935	49	14	12	5	441*	346	272
8	8	5	1503	1410	30	16	12	5	204*	901	486
10	8	5	568	701	63	18	12	5	-451*	111	292
12	8	5	181*	250	377	1	13	5	502*	385	226
14	8	5	882	890	49	3	13	5	1037	1017	38
16	8	5	1127	1065	44	5	13	5	1613	1654	32
18	8	5	355*	37	311	7	13	5	681	677	54
20	8	5	1298	1232	47	9	13	5	1283	1277	38
1	9	5	801	734	37	11	13	5	408*	145	86
3	9	5	-256*	184	249	13	13	5	478*	553	86
5	9	5	1133	1130	33	15	13	5	536*	612	288
7	9	5	858	875	43	17	13	5	691	749	72
9	9	5	419*	544	232	0	14	5	171*	253	367
11	9	5	1218	1211	38	2	14	5	298*	232	289
13	9	5	494*	301	215	4	14	5	886	889	44
15	9	5	780	896	61	6	14	5	776	824	50
17	9	5	-570*	325	229	8	14	5	482	544	73
19	9	5	-487*	500	270	10	14	5	-311*	346	312
0	10	5	1526	1515	29	12	14	5	-454*	136	252
2	10	5	1502	1550	29	14	14	5	853	791	56
4	10	5	1099	1045	35	16	14	5	-489*	480	297
6	10	5	1026	997	37	1	15	5	-339*	421	271
8	10	5	381*	602	266	3	15	5	-295*	425	304
10	10	5	1015	983	41	5	15	5	1401	1366	36
12	10	5	1354	1344	36	7	15	5	525	507	69
14	10	5	510*	946	274	9	15	5	189*	495	450
16	10	5	575	545	79	11	15	5	-131*	491	184
18	10	5	447*	430	97	13	15	5	495*	463	89
1	11	5	1900	1832	29	15	15	5	556	469	76
3	11	5	1244	1197	32	0	16	5	859	950	46
5	11	5	-222*	201	266	2	16	5	476*	589	207
7	11	5	380*	89	225	4	16	5	1798	1799	33
9	11	5	784	640	49	6	16	5	745	813	55
11	11	5	1189	1212	39	8	16	5	566	524	69
13	11	5	270*	70	342	10	16	5	1145	1209	47
15	11	5	844	678	56	12	16	5	400*	236	314
17	11	5	504*	361	279	14	16	5	-446*	327	307

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	17	5	1247	1245	39	15	1	6	1040	907	49
3	17	5	977	961	47	17	1	6	883	806	58
5	17	5	374*	461	264	19	1	6	528*	429	271
7	17	5	191*	152	375	0	2	6	1461	1515	26
9	17	5	592	608	72	2	2	6	1240	1355	31
11	17	5	447*	732	286	4	2	6	935	1012	38
13	17	5	542*	206	246	6	2	6	934	1004	41
0	18	5	683	530	57	8	2	6	513	475	63
2	18	5	1183	1253	42	10	2	6	1093	1177	40
4	18	5	1052	932	45	12	2	6	374*	841	354
6	18	5	584	514	72	14	2	6	825	839	54
8	18	5	-635*	287	233	16	2	6	454*	534	334
10	18	5	927	1035	56	18	2	6	-274*	458	390
12	18	5	578*	238	246	1	3	6	1646	1629	27
1	19	5	672	612	61	3	3	6	783	757	42
3	19	5	384*	371	301	5	3	6	-502*	249	194
5	19	5	599	519	68	7	3	6	386*	264	78
7	19	5	-513*	284	266	9	3	6	1144	1007	38
9	19	5	607	567	74	11	3	6	1450	1423	35
0	20	5	-385*	551	325	13	3	6	270*	538	341
2	20	5	389*	225	322	15	3	6	492*	319	83
4	20	5	543	542	77	17	3	6	-283*	96	116
6	20	5	738	732	62	19	3	6	426*	269	362
8	20	5	494*	225	243	0	4	6	1624	1661	27
1	21	5	571	594	74	2	4	6	960	965	37
3	21	5	-198*	682	480	4	4	6	453*	272	192
5	21	5	966	1005	54	6	4	6	406*	441	232
0	0	6	2423	2305	35	8	4	6	1139	1123	38
2	0	6	287*	102	89	10	4	6	1365	1205	36
4	0	6	3152	3244	48	12	4	6	690	659	57
6	0	6	2180	2275	27	14	4	6	-645*	110	196
8	0	6	457*	454	245	16	4	6	315*	478	122
10	0	6	-162*	528	346	18	4	6	553*	304	252
12	0	6	188*	340	371	1	5	6	1908	1790	28
14	0	6	845	703	51	3	5	6	1043	989	34
16	0	6	1147	1239	51	5	5	6	852	825	40
18	0	6	371*	719	400	7	5	6	767	793	47
1	1	6	840	849	38	9	5	6	1139	1064	40
3	1	6	2095	2075	29	11	5	6	996	1036	45
5	1	6	1868	1755	28	13	5	6	563	291	65
7	1	6	1405	1390	32	15	5	6	642	649	71
9	1	6	261*	424	117	17	5	6	-471*	440	252
11	1	6	421*	436	83	19	5	6	-402*	295	331
13	1	6	507*	536	240	0	6	6	2698	2735	37

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	6	6	494	600	59	14	10	6	201*	538	383
4	6	6	1408	1295	31	16	10	6	-522*	247	270
6	6	6	957	974	41	1	11	6	1438	1417	34
8	6	6	637	624	57	3	11	6	395*	268	73
10	6	6	1049	1098	41	5	11	6	-337*	291	270
12	6	6	521	363	68	7	11	6	947	910	44
14	6	6	339*	640	357	9	11	6	1327	1241	39
16	6	6	-501*	546	282	11	11	6	825	770	54
18	6	6	-442*	235	296	13	11	6	400*	206	303
1	7	6	-266*	346	300	15	11	6	504*	188	269
3	7	6	737	713	45	0	12	6	1737	1679	30
5	7	6	1263	1266	35	2	12	6	740	732	50
7	7	6	856	808	44	4	12	6	-241*	199	309
9	7	6	439*	272	259	6	12	6	1020	1014	42
11	7	6	-811*	299	179	8	12	6	976	919	46
13	7	6	433*	568	285	10	12	6	473*	817	322
15	7	6	697	678	69	12	12	6	-533*	465	253
17	7	6	293*	368	358	14	12	6	290*	390	354
0	8	6	583	451	55	1	13	6	1000	1071	43
2	8	6	1036	1154	37	3	13	6	615	610	60
4	8	6	1085	1122	38	5	13	6	1015	1119	43
6	8	6	1222	1274	36	7	13	6	702	659	57
8	8	6	-471*	366	223	9	13	6	510*	557	258
10	8	6	843	742	48	11	13	6	198*	437	436
12	8	6	710	679	58	13	13	6	810	864	60
14	8	6	561*	608	239	15	13	6	1124	1020	49
16	8	6	687	725	72	0	14	6	386*	530	87
18	8	6	-348*	187	329	2	14	6	509	424	70
1	9	6	1424	1518	31	4	14	6	1129	1056	41
3	9	6	594	667	57	6	14	6	1298	1259	41
5	9	6	1163	1103	36	8	14	6	510*	430	266
7	9	6	775	866	51	10	14	6	343*	391	343
9	9	6	995	1044	44	12	14	6	-275*	393	363
11	9	6	1333	1357	38	14	14	6	-252*	983	145
13	9	6	515*	536	83	1	15	6	-151*	219	160
15	9	6	428*	596	102	3	15	6	495*	517	80
17	9	6	627*	532	276	5	15	6	1695	1731	36
0	10	6	1844	1831	30	7	15	6	1124	1088	46
2	10	6	759	649	47	9	15	6	-426*	145	285
4	10	6	447*	457	75	11	15	6	497*	321	255
6	10	6	-443*	383	230	13	15	6	207*	306	362
8	10	6	715	675	54	0	16	6	706	783	62
10	10	6	1192	1074	42	2	16	6	537*	816	252
12	10	6	944	861	49	4	16	6	872	978	59

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
6	16	6	894	944	56	14	2	7	-654*	785	271
8	16	6	280*	722	365	16	2	7	922	886	60
10	16	6	292*	382	135	1	3	7	799	824	46
12	16	6	585*	299	249	3	3	7	749	768	51
1	17	6	657	648	67	5	3	7	932	911	45
3	17	6	513*	867	316	7	3	7	1459	1516	35
5	17	6	463*	560	92	9	3	7	464*	351	257
7	17	6	488*	149	228	11	3	7	1228	1214	42
9	17	6	568	588	80	13	3	7	286*	215	372
0	18	6	919	879	55	15	3	7	1286	1418	49
2	18	6	806	764	58	17	3	7	302*	344	394
4	18	6	-194*	215	379	0	4	7	1169	1251	37
6	18	6	383*	185	101	2	4	7	994	1018	40
8	18	6	-401*	388	311	4	4	7	1187	1161	39
1	19	6	-278*	690	396	6	4	7	1090	1113	42
3	19	6	400*	553	322	8	4	7	631	654	65
5	19	6	548	529	77	10	4	7	795	835	56
0	20	6	527*	450	290	12	4	7	504*	471	79
2	20	6	-495*	499	316	14	4	7	0*	559	577
0	0	7	988	975	42	16	4	7	1151	1278	52
2	0	7	328*	577	102	1	5	7	891	883	43
4	0	7	-564*	25	185	3	5	7	387*	391	271
6	0	7	182*	102	347	5	5	7	474*	627	274
8	0	7	188*	472	392	7	5	7	369*	586	306
10	0	7	674	709	67	9	5	7	-584*	165	202
12	0	7	201*	491	442	11	5	7	777	671	58
14	0	7	208*	12	423	13	5	7	350*	163	306
16	0	7	215*	191	438	15	5	7	360*	591	388
1	1	7	482*	703	262	0	6	7	1107	1126	40
3	1	7	305*	593	287	2	6	7	847	870	46
5	1	7	817	859	52	4	6	7	468*	332	237
7	1	7	453*	309	233	6	6	7	1239	1272	38
9	1	7	1060	1098	45	8	6	7	951	955	48
11	1	7	668	627	66	10	6	7	740	608	58
13	1	7	455*	242	269	12	6	7	447*	571	328
15	1	7	756	685	70	14	6	7	-272*	362	387
17	1	7	-873*	331	195	16	6	7	471*	479	321
0	2	7	0*	460	519	1	7	7	1001	920	42
2	2	7	323*	484	97	3	7	7	458	135	69
4	2	7	1125	1136	40	5	7	7	500	427	72
6	2	7	-440*	482	247	7	7	7	-349*	75	263
8	2	7	883	1000	52	9	7	7	916	900	49
10	2	7	1449	1497	39	11	7	7	873	904	56
12	2	7	-445*	179	247	13	7	7	415*	128	96

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
15	7	7	845	749	64	11	13	7	1024	1018	54
0	8	7	971	1025	43	0	14	7	879	900	56
2	8	7	176*	579	403	2	14	7	-266*	414	351
4	8	7	180*	448	412	4	14	7	-465*	27	258
6	8	7	581	548	62	6	14	7	-430*	154	312
8	8	7	579	467	65	8	14	7	496*	265	284
10	8	7	1507	1605	41	10	14	7	696	601	71
12	8	7	-536*	523	288	1	15	7	916	958	53
14	8	7	508*	723	281	3	15	7	394*	691	327
1	9	7	534*	585	241	5	15	7	-753*	274	230
3	9	7	254*	753	373	7	15	7	0*	103	576
5	9	7	553*	510	243	9	15	7	546*	564	323
7	9	7	563	579	69	0	16	7	908	924	54
9	9	7	938	974	52	2	16	7	446*	368	285
11	9	7	263*	612	147	4	16	7	-196*	193	371
13	9	7	470*	495	96	6	16	7	957	979	55
15	9	7	343*	578	131	1	17	7	485*	441	89
0	10	7	937	1002	46	3	17	7	351*	233	307
2	10	7	1347	1342	37	5	17	7	921	1004	59
4	10	7	-354*	428	292	0	0	8	1618	1830	36
6	10	7	423*	515	270	2	0	8	1475	1484	37
8	10	7	-520*	341	247	4	0	8	732	602	57
10	10	7	640	672	69	6	0	8	484*	688	277
12	10	7	205*	126	389	8	0	8	713	729	64
14	10	7	933	1007	57	10	0	8	1166	1168	48
1	11	7	-308*	259	325	12	0	8	0*	613	600
3	11	7	414*	269	273	14	0	8	308*	995	444
5	11	7	1533	1495	38	1	1	8	1393	1350	37
7	11	7	-412*	292	299	3	1	8	-306*	230	307
9	11	7	563*	477	239	5	1	8	531	578	78
11	11	7	204*	106	414	7	1	8	282*	444	387
13	11	7	417*	207	336	9	1	8	1084	1019	49
0	12	7	1316	1243	41	11	1	8	511*	524	318
2	12	7	-444*	345	270	13	1	8	328*	606	136
4	12	7	626	739	71	0	2	8	978	967	43
6	12	7	1557	1633	39	2	2	8	-611*	326	213
8	12	7	443*	442	93	4	2	8	561	335	70
10	12	7	54*	324	252	6	2	8	1128	1089	46
12	12	7	749	634	67	8	2	8	201*	318	430
1	13	7	968	749	47	10	2	8	0*	737	564
3	13	7	853	919	54	12	2	8	-275*	128	373
5	13	7	405*	318	96	14	2	8	429*	341	289
7	13	7	661	577	68	1	3	8	106*	97	183
9	13	7	351*	419	331	3	3	8	794	781	54

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
5	3	8	981	973	52	11	9	8	-169*	973	184
7	3	8	559*	875	277	0	10	8	-596*	209	239
9	3	8	-773*	278	204	2	10	8	163*	216	172
11	3	8	414*	235	303	4	10	8	980	975	53
13	3	8	371*	317	116	6	10	8	1179	1014	44
0	4	8	343*	433	95	8	10	8	581*	426	273
2	4	8	412*	459	234	10	10	8	363*	254	330
4	4	8	1248	1367	42	1	11	8	-574*	280	230
6	4	8	717	712	64	3	11	8	-271*	602	395
8	4	8	-185*	380	375	5	11	8	908	969	55
10	4	8	354*	383	344	7	11	8	524*	325	81
12	4	8	-277*	336	403	9	11	8	-449*	126	300
1	5	8	-178*	475	399	0	12	8	-433*	234	290
3	5	8	375*	387	303	2	12	8	561*	512	263
5	5	8	1305	1344	42	4	12	8	915	916	54
7	5	8	595*	327	254	6	12	8	422*	401	99
9	5	8	710	799	70	8	12	8	475*	410	96
11	5	8	682	725	72	1	13	8	537	339	79
13	5	8	-567*	203	269	3	13	8	285*	607	371
0	6	8	452*	711	274	5	13	8	-529*	604	304
2	6	8	672	649	60	0	14	8	1013	1123	53
4	6	8	999	1009	48	2	14	8	538*	258	254
6	6	8	-320*	541	302	4	14	8	624	487	75
8	6	8	201*	366	420	0	0	9	492*	88	263
10	6	8	-547*	567	260	2	0	9	321*	271	122
12	6	8	-596*	334	262	4	0	9	-472*	568	279
1	7	8	416*	814	306	6	0	9	297*	515	363
3	7	8	741	876	61	8	0	9	-444*	226	287
5	7	8	-614*	147	205	1	1	9	-603*	318	212
7	7	8	-302*	216	116	3	1	9	569	652	80
9	7	8	189*	568	184	5	1	9	361*	454	389
11	7	8	510*	523	96	7	1	9	-340*	289	321
0	8	8	1066	1147	44	9	1	9	-778*	166	219
2	8	8	497*	509	78	0	2	9	821	689	54
4	8	8	-322*	196	331	2	2	9	490*	382	289
6	8	8	280*	518	354	4	2	9	-272*	417	388
8	8	8	646	514	72	6	2	9	930	913	56
10	8	8	-340*	663	341	8	2	9	624	520	77
12	8	8	-350*	753	360	1	3	9	617	661	71
1	9	8	505*	837	271	3	3	9	685	530	67
3	9	8	695	615	60	5	3	9	0*	465	580
5	9	8	874	931	60	7	3	9	754	609	65
7	9	8	796	711	62	9	3	9	212*	581	477
9	9	8	-708*	432	216	0	4	9	1419	1330	40

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	4	9	499*	430	82						
4	4	9	-550*	488	269						
6	4	9	304*	363	139						
8	4	9	0*	223	585						
1	5	9	549*	365	233						
3	5	9	0*	222	556						
5	5	9	611	478	75						
7	5	9	349*	316	121						
0	6	9	479*	636	306						
2	6	9	482*	142	267						
4	6	9	536*	968	330						
6	6	9	-691*	413	241						
1	7	9	394*	89	309						
3	7	9	638	502	74						
5	7	9	544*	726	300						
0	8	9	-396*	221	335						
2	8	9	-397*	322	309						
4	8	9	-530*	184	257						
1	9	9	531*	323	277						
3	9	9	-201*	228	418						

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.