Table 7. Observed and calculated structure factor moduli.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
2	0	-8	395	390	3	1	-7	295	294	11	1	0	315	310
4	0	-8	127	130	5	1	-7	124	117	13	1	0	212	211
6	0	-8	381	386	7	1	-7	272	275	15	1	0	46	48
8	0	-8	50	47	9	1	-7	122	125	1	1	1	179	187
2	0	-6	357	356	1	1	-6	122	121	3	1	1	731	710
4	0	-6	717	715	3	1	-6	381	379	5	1	1	29	25
6	0	-6	443	444	5	1	-6	270	265	7	1	1	296	296
8	0	-6	240	240	7	1	-6	291	290	9	1	1	49	42
10	0	-6	784	787	9	1	-6	129	132	11	1	1	411	412
12	0	-6	179	179	13	1	-6	280	278	13	1	1	32	32
2	0	-4	85	75	1	1	-5	81	82	1	1	2	632	593
4	0	-4	739	722	3	1	-5	483	476	3	1	2	203	212
6	0	-4	1022	1020	5	1	-5	163	161	5	1	2	382	389
10	0	-4	443	440	7	1	-5	348	347	7	1	2	495	500
12	0	-4	151	150	9	1	-5	71	71	9	1	2	304	304
14	0	-4	694	697	11	1	-5	80	77	11	1	2	279	278
2	0	-2	378	330	13	1	-5	179	179	1	1	3	63	58
4	0	-2	969	920	1	1	-4	566	550	3	1	3	371	370
6	0	-2	914	902	3	1	-4	741	731	5	1	3	201	204
8	0	-2	345	354	5	1	-4	147	143	7	1	3	287	290
10	0	-2	687	689	7	1	-4	263	261	9	1	3	183	182
12	0	-2	108	103	9	1	-4	196	190	11	1	3	375	373
14	0	-2	600	601	11	1	-4	146	146	1	1	4	49	43
2	0	0	66	65	13	1	-4	115	112	3	1	4	440	446
4	0	0	137	212	15	1	-4	98	97	5	1	4	90	88
6	0	0	786	780	1	1	-3	112	109	7	1	4	116	118
8	0	0	756	785	3	1	-3	694	676	9	1	4	231	232
10	0	0	536	538	5	1	-3	237	235	11	1	4	306	302
12	0	0	94	96	7	1	-3	441	439	1	1	5	184	179
14	0	0	631	630	9	1	-3	105	98	3	1	5	84	82
0	0	2	1287	1009	11	1	-3	132	131	5	1	5	184	187
2	0	2	837	790	13	1	-3	74	74	7	1	5	353	355
4	0	2	1033	1004	15	1	-3	90	88	9	1	5	128	126
6	0	2	104	110	1	1	-2	74	75	1	1	6	152	158
8	0	2	522	527	3	1	-2	119	74	3	1	6	140	140
10	0	2	758	760	5	1	-2	360	363	5	1	6	40	37
0	0	4	1018	972	7	1	-2	890	897	7	1	6	302	302
2	0	4	230	227	9	1	-2	314	316	1	1	7	254	260
4	0	4	878	883	11	1	-2	33	32	2	2	-8	137	136
6	0	4	147	147	13	1	-2	147	143	4	2	-8	331	332
8	0	4	413	415	1	1	-1	81	76	6	2	-8	58	58
10	0	4	311	310	3	1	-1	781	738	8	2	-8	83	82
0	0	6	369	366	5	1	-1	141	141	2	2	-7	235	237
2	0	6	78	82	7	1	-1	392	397	4	2	-7	290	291
4	0	6	833	838	9	1	-1	59	56	6	2	-7	117	116
0	0	8	487	484	11	1	-1	309	312	8	2	-7	523	525
1	1	-8	182	184	3	1	0	681	671	10	2	-7	122	122
3	1	-8	355	352	5	1	0	604	604	2	2	-6	86	82
5	1	-8	208	210	7	1	0	407	415	4	2	-6	111	112
1	1	-7	110	111	9	1	0	37	38	6	2	-6	173	172

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
8	2	-6	234	232	8	2	1	387	388	13	3	-6	160	159
10	2	-6	112	110	10	2	1	36	31	1	3	-5	920	917
12	2	-6	228	233	12	2	1	479	477	3	3	-5	192	186
2	2	-5	504	497	14	2	1	60	55	5	3	-5	452	444
4	2	-5	214	218	0	2	2	629	580	7	3	-5	125	125
6	2	-5	166	165	2	2	2	441	441	9	3	-5	660	661
8	2	-5	659	662	4	2	2	395	398	11	3	-5	97	96
10	2	-5	41	37	6	2	2	440	445	13	3	-5	100	101
12	2	-5	415	420	8	2	2	347	351	1	3	-4	204	199
14	2	-5	65	65	10	2	2	106	106	3	3	-4	321	327
2	2	-4	194	193	12	2	2	119	118	5	3	-4	343	330
4	2	-4	351	354	0	2	3	106	110	9	3	-4	288	290
6	2	-4	54	47	2	2	3	741	735	11	3	-4	225	225
8	2	-4	119	122	4	2	3	87	88	1	3	-3	1097	1020
10	2	-4	97	96	6	2	3	686	690	3	3	-3	272	270
12	2	-4	288	290	8	2	3	309	312	5	3	-3	682	680
14	2	-4	115	115	10	2	3	101	98	7	3	-3	287	290
2	2	-3	1109	1026	12	2	3	300	296	9	3	-3	772	776
4	2	-3	268	274	0	2	4	143	151	11	3	-3	325	328
6	2	-3	115	108	2	2	4	588	590	13	3	-3	27	23
8	2	-3	649	651	6	2	4	24	19	15	3	-3	222	219
10	2	-3	95	97	8	2	4	182	183	1	3	-2	635	613
12	2	-3	560	562	10	2	4	271	269	3	3	-2	54	34
14	2	-3	126	125	0	2	5	167	169	5	3	-2	381	371
2	2	-2	212	226	2	2	5	757	762	7	3	-2	324	327
4	2	-2	204	192	4	2	5	175	173	9	3	-2	184	187
6	2	-2	523	519	6	2	5	413	418	11	3	-2	62	62
8	2	-2	277	281	8	2	5	219	216	13	3	-2	231	230
10	2	-2	247	248	0	2	6	95	93	15	3	-2	146	144
12	2	-2	358	357	2	2	6	336	338	1	3	-1	761	744
14	2	-2	133	131	4	2	6	27	21	3	3	-1	861	799
2	2	-1	1101	922	6	2	6	173	174	5	3	-1	990	960
4	2	-1	625	605	0	2	7	58	58	7	3	-1	468	474
6	2	-1	485	500	2	2	7	523	533	9	3	-1	699	710
8	2	-1	359	355	0	2	8	135	138	11	3	-1	260	261
10	2	-1	25	29	1	3	-8	112	113	13	3	-1	243	243
12	2	-1	687	694	3	3	-8	171	171	15	3	-1	199	199
14	2	-1	56	56	5	3	-8	207	205	1	3	0	164	177
0	2	0	225	234	1	3	-7	490	495	3	3	0	636	615
2	2	0	599	587	3	3	-7	267	264	5	3	0	423	428
4	2	0	225	220	5	3	-7	545	546	7	3	0	55	55
6	2	0	212	220	7	3	-7	239	238	9	3	0	347	350
8	2	0	215	212	9	3	-7	202	206	11	3	0	196	199
10	2	0	30	29	11	3	-7	88	87	13	3	0	65	65
12	2	0	196	198	1	3	-6	332	333	1	3	1	243	184
14	2	0	33	29	3	3	-6	15	13	3	3	1	391	381
0	2	1	388	372	5	3	-6	214	216	5	3	1	1260	1185
2	2	1	961	886	7	3	-6	243	243	7	3	1	213	212
4	2	1	284	274	9	3	-6	122	123	9	3	1	464	470
6	2	1	733	745	11	3	-6	56	54	11	3	1	92	91

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
13	3	1	397	389	6	4	-4	28	13	0	4	4	129	123
1	3	2	494	479	8	4	-4	171	169	2	4	4	352	350
5	3	2	348	346	10	4	-4	386	386	4	4	4	517	520
7	3	2	284	285	12	4	-4	269	270	6	4	4	133	133
9	3	2	174	177	14	4	-4	138	134	8	4	4	65	64
11	3	2	44	43	2	4	-3	387	392	10	4	4	55	53
13	3	2	236	233	4	4	-3	364	356	0	4	5	253	255
1	3	3	170	178	6	4	-3	419	425	2	4	5	229	232
3	3	3	43	38	8	4	-3	134	139	4	4	5	503	502
5	3	3	779	777	10	4	-3	240	243	6	4	5	35	32
7	3	3	87	88	12	4	-3	111	109	8	4	5	91	94
9	3	3	541	535	14	4	-3	316	317	0	4	6	368	370
11	3	3	116	113	2	4	-2	240	231	2	4	6	372	374
1	3	4	130	127	4	4	-2	63	61	4	4	6	123	117
3	3	4	348	353	6	4	-2	142	140	6	4	6	70	69
5	3	4	227	227	8	4	-2	21	20	0	4	7	266	267
7	3	4	30	21	10	4	-2	221	223	2	4	7	93	94
9	3	4	282	282	12	4	-2	274	273	1	5	-7	38	40
1	3	5	205	207	14	4	-2	236	234	5	5	-7	208	212
3	3	5	119	122	2	4	-1	179	182	7	5	-7	53	53
5	3	5	417	420	4	4	-1	143	139	9	5	-7	29	29
7	3	5	65	63	6	4	-1	130	131	3	5	-6	887	878
9	3	5	445	443	8	4	-1	210	217	5	5	-6	75	73
1	3	6	205	206	10	4	-1	327	328	7	5	-6	360	358
3	3	6	75	77	12	4	-1	265	267	9	5	-6	205	204
5	3	6	187	189	14	4	-1	288	289	11	5	-6	360	362
7	3	6	185	187	0	4	0	37	70	1	5	-5	64	66
1	3	7	203	205	2	4	0	153	162	5	5	-5	157	157
3	3	7	267	269	4	4	0	644	641	9	5	-5	82	81
4	4	-8	64	66	6	4	0	326	327	11	5	-5	55	52
6	4	-8	104	100	8	4	0	117	116	1	5	-4	129	136
2	4	-7	112	111	10	4	0	471	475	3	5	-4	809	794
4	4	-7	94	95	12	4	0	208	207	5	5	-4	157	160
6	4	-7	204	205	0	4	1	860	831	7	5	-4	877	871
8	4	-7	157	157	2	4	1	171	173	11	5	-4	247	248
10	4	-7	320	324	4	4	1	424	420	13	5	-4	508	508
2	4	-6	30	29	6	4	1	57	58	3	5	-3	179	184
4	4	-6	166	166	8	4	1	79	82	5	5	-3	363	373
6	4	-6	202	200	10	4	1	358	362	9	5	-3	50	50
8	4	-6	81	74	12	4	1	49	48	11	5	-3	96	97
10	4	-6	126	127	0	4	2	612	598	3	5	-2	989	965
12	4	-6	158	161	2	4	2	437	431	5	5	-2	132	127
2	4	-5	79	77	4	4	2	404	406	7	5	-2	917	914
4	4	-5	237	231	8	4	2	79	75	9	5	-2	172	175
6	4	-5	210	212	10	4	2	91	89	11	5	-2	413	417
8	4	-5	157	156	0	4	3	477	474	13	5	-2	203	202
10	4	-5	317	318	4	4	3	483	485	1	5	-1	336	337
12	4	-5	80	81	6	4	3	145	146	3	5	-1	124	122
14	4	-5	260	263	8	4	3	136	137	5	5	-1	127	127
4	4	-4	256	255	10	4	3	219	222	7	5	-1	113	104

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
9	5	-1	103	104	2	6	-5	48	47	4	6	3	422	422
11	5	-1	97	95	4	6	-5	237	241	6	6	3	144	143
13	5	-1	110	111	6	6	-5	295	293	8	6	3	112	113
1	5	0	900	879	10	6	-5	230	232	10	6	3	187	187
3	5	0	652	671	12	6	-5	102	103	0	6	4	148	147
5	5	0	79	85	2	6	-4	366	369	2	6	4	103	97
7	5	0	1072	1065	4	6	-4	427	427	4	6	4	548	547
9	5	0	126	129	6	6	-4	310	315	6	6	4	355	355
11	5	0	456	458	8	6	-4	401	401	8	6	4	21	21
13	5	0	202	200	10	6	-4	269	268	0	6	5	304	302
1	5	1	134	139	12	6	-4	112	115	2	6	5	119	121
3	5	1	168	170	2	6	-3	204	206	4	6	5	249	252
5	5	1	216	218	4	6	-3	232	231	6	6	5	66	67
7	5	1	88	90	6	6	-3	191	189	0	6	6	175	176
9	5	1	78	77	8	6	-3	165	168	2	6	6	289	291
11	5	1	79	79	10	6	-3	274	271	4	6	6	309	313
13	5	1	86	86	14	6	-3	232	232	0	6	7	194	198
1	5	2	727	713	2	6	-2	703	699	1	7	-7	319	323
3	5	2	1039	1009	6	6	-2	518	527	3	7	-7	49	48
7	5	2	587	593	10	6	-2	36	33	5	7	-7	384	388
9	5	2	144	145	12	6	-2	279	283	7	7	-7	38	33
11	5	2	661	663	14	6	-2	428	425	1	7	-6	285	288
1	5	3	314	322	2	6	-1	66	66	3	7	-6	237	238
3	5	3	39	33	4	6	-1	406	403	5	7	-6	231	230
5	5	3	107	103	6	6	-1	290	296	7	7	-6	115	113
7	5	3	68	66	8	6	-1	72	70	9	7	-6	113	115
9	5	3	258	259	10	6	-1	255	257	1	7	-5	360	363
11	5	3	130	128	12	6	-1	101	92	3	7	-5	126	122
1	5	4	616	615	14	6	-1	181	179	5	7	-5	670	667
3	5	4	509	512	0	6	0	900	898	9	7	-5	225	227
5	5	4	267	270	2	6	0	334	330	11	7	-5	264	266
7	5	4	619	624	4	6	0	140	135	1	7	-4	302	304
9	5	4	95	96	6	6	0	94	92	3	7	-4	51	51
1	5	5	39	39	8	6	0	170	172	5	7	-4	233	229
3	5	5	130	128	10	6	0	336	336	7	7	-4	183	184
5	5	5	29	30	12	6	0	364	365	9	7	-4	309	309
7	5	5	100	97	0	6	1	527	529	11	7	-4	118	121
1	5	6	366	373	2	6	1	242	241	13	7	-4	104	102
3	5	6	359	362	4	6	1	289	290	1	7	-3	651	651
5	5	6	285	287	6	6	1	83	85	3	7	-3	20	8
3	5	7	151	155	8	6	1	261	262	5	7	-3	605	604
2	6	-7	213	214	10	6	1	237	241	9	7	-3	452	452
4	6	-7	109	108	0	6	2	900	889	11	7	-3	146	144
6	6	-7	141	142	2	6	2	117	106	13	7	-3	159	158
8	6	-7	86	89	4	6	2	186	184	1	7	-2	410	406
2	6	-6	44	41	6	6	2	218	217	3	7	-2	115	113
4	6	-6	120	120	8	6	2	166	166	5	7	-2	324	322
6	6	-6	209	209	10	6	2	177	176	7	7	-2	143	149
8	6	-6	354	354	12	6	2	176	177	9	7	-2	202	206
10	6	-6	262	263	0	6	3	386	381	11	7	-2	45	44

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
13	7	-2	131	129	8	8	-4	219	218	2	8	5	494	498
1	7	-1	477	483	10	8	-4	261	262	4	8	5	91	90
3	7	-1	36	37	12	8	-4	62	65	6	8	5	362	361
5	7	-1	853	863	2	8	-3	620	619	0	8	6	319	320
9	7	-1	339	338	4	8	-3	226	225	2	8	6	66	66
11	7	-1	119	119	6	8	-3	157	157	1	9	-6	87	87
13	7	-1	325	326	8	8	-3	372	369	3	9	-6	119	119
3	7	0	153	152	10	8	-3	40	38	5	9	-6	131	131
5	7	0	467	467	12	8	-3	533	538	7	9	-6	123	120
7	7	0	284	285	2	8	-2	336	337	1	9	-5	193	193
9	7	0	236	236	4	8	-2	224	224	3	9	-5	486	485
11	7	0	40	37	6	8	-2	208	211	5	9	-5	59	59
13	7	0	102	105	8	8	-2	257	259	7	9	-5	193	197
1	7	1	604	613	10	8	-2	202	205	9	9	-5	92	92
3	7	1	96	88	12	8	-2	114	113	1	9	-4	186	184
5	7	1	523	528	2	8	-1	924	927	3	9	-4	249	248
7	7	1	132	133	4	8	-1	190	195	5	9	-4	144	141
9	7	1	546	545	6	8	-1	231	232	7	9	-4	94	93
11	7	1	141	140	8	8	-1	362	365	9	9	-4	73	72
3	7	2	195	198	12	8	-1	470	471	11	9	-4	56	52
5	7	2	364	364	0	8	0	105	73	1	9	-3	351	351
7	7	2	51	50	2	8	0	351	355	3	9	-3	199	197
9	7	2	188	189	4	8	0	457	461	5	9	-3	100	98
11	7	2	140	138	6	8	0	92	94	7	9	-3	469	471
1	7	3	295	302	8	8	0	125	130	9	9	-3	314	313
3	7	3	139	138	10	8	0	354	352	11	9	-3	105	104
5	7	3	456	456	12	8	0	160	158	1	9	-2	62	61
7	7	3	49	49	0	8	1	247	248	3	9	-2	97	98
9	7	3	491	489	2	8	1	560	561	5	9	-2	183	183
1	7	4	31	28	4	8	1	179	184	7	9	-2	280	277
3	7	4	74	72	6	8	1	592	594	9	9	-2	155	153
5	7	4	158	158	8	8	1	157	158	1	9	-1	155	156
7	7	4	68	68	10	8	1	52	51	3	9	-1	136	136
9	7	4	318	319	0	8	2	294	296	5	9	-1	364	368
1	7	5	312	320	2	8	2	176	179	7	9	-1	642	641
3	7	5	309	316	4	8	2	309	311	9	9	-1	23	22
5	7	5	135	137	6	8	2	289	288	1	9	0	58	56
1	7	6	122	119	8	8	2	101	106	3	9	0	214	214
3	7	6	62	63	10	8	2	147	151	5	9	0	199	199
4	8	-7	245	250	0	8	3	18	6	7	9	0	152	152
2	8	-6	227	232	2	8	3	679	678	9	9	0	97	96
4	8	-6	57	58	4	8	3	193	191	11	9	0	120	116
6	8	-6	203	204	6	8	3	466	465	1	9	1	271	269
8	8	-6	242	243	8	8	3	332	332	3	9	1	198	198
2	8	-5	475	477	0	8	4	145	149	5	9	1	271	272
4	8	-5	100	100	2	8	4	134	136	7	9	1	415	420
8	8	-5	594	599	4	8	4	323	327	9	9	1	60	62
2	8	-4	350	351	6	8	4	229	230	11	9	1	257	260
4	8	-4	265	268	8	8	4	78	81	1	9	2	97	93
6	8	-4	88	93	0	8	5	74	75	3	9	2	48	48

h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc	h	k	l	Fobs	Fcalc
5	9	2	153	153	4	10	2	716	720	3	11	4	172	169
7	9	2	208	205	6	10	2	118	118	1	11	5	305	306
9	9	2	163	163	8	10	2	159	162	2	12	-4	321	317
1	9	3	412	411	2	10	3	249	250	4	12	-4	63	62
3	9	3	370	371	4	10	3	134	133	6	12	-4	142	142
5	9	3	279	276	6	10	3	128	133	2	12	-3	446	449
7	9	3	272	274	0	10	4	561	563	4	12	-3	96	95
3	9	4	106	100	2	10	4	52	48	6	12	-3	69	68
5	9	4	74	74	4	10	4	565	575	2	12	-2	408	409
7	9	4	60	61	6	10	4	229	226	6	12	-2	105	105
1	9	5	76	76	0	10	5	33	30	8	12	-2	97	95
3	9	5	233	230	2	10	5	122	123	2	12	-1	323	325
5	9	5	119	117	3	11	-5	158	159	4	12	-1	187	187
1	9	6	84	81	5	11	-5	278	276	6	12	-1	260	257
2	10	-6	283	282	1	11	-4	280	282	8	12	-1	145	142
4	10	-6	228	228	3	11	-4	335	333	0	12	0	405	402
2	10	-5	208	207	5	11	-4	159	157	2	12	0	290	289
4	10	-5	39	37	7	11	-4	221	224	4	12	0	153	147
6	10	-5	47	46	1	11	-3	202	206	6	12	0	73	74
8	10	-5	274	276	3	11	-3	218	217	8	12	0	48	45
2	10	-4	213	217	5	11	-3	108	108	2	12	1	489	487
4	10	-4	330	333	7	11	-3	258	258	6	12	1	219	221
6	10	-4	392	392	9	11	-3	128	132	0	12	2	211	214
8	10	-4	144	143	1	11	-2	158	158	2	12	2	112	113
10	10	-4	401	401	3	11	-2	162	164	4	12	2	28	25
2	10	-3	163	168	5	11	-2	254	253	6	12	2	276	275
4	10	-3	83	80	7	11	-2	430	432	0	12	3	34	32
6	10	-3	49	48	9	11	-2	183	183	2	12	3	278	279
8	10	-3	73	72	1	11	-1	139	141	4	12	3	83	81
2	10	-2	167	167	3	11	-1	119	124	2	12	4	128	131
4	10	-2	536	540	5	11	-1	264	268	1	13	-3	269	273
6	10	-2	268	275	7	11	-1	286	284	3	13	-3	104	101
8	10	-2	200	201	9	11	-1	20	9	5	13	-3	500	497
10	10	-2	533	539	1	11	0	30	29	1	13	-2	159	160
2	10	-1	397	404	3	11	0	223	223	3	13	-2	191	195
4	10	-1	42	41	5	11	0	355	358	5	13	-2	167	165
8	10	-1	146	144	7	11	0	314	315	1	13	-1	378	379
0	10	0	763	771	9	11	0	90	90	5	13	-1	371	370
2	10	0	93	98	1	11	1	381	381	1	13	0	244	250
4	10	0	572	572	3	11	1	197	198	3	13	0	228	230
6	10	0	232	233	7	11	1	339	337	5	13	0	111	103
8	10	0	240	243	9	11	1	202	203	1	13	1	169	166
10	10	0	477	480	1	11	2	156	157	3	13	1	37	30
0	10	1	137	136	3	11	2	205	203	5	13	1	468	464
2	10	1	81	83	5	11	2	272	269	1	13	2	268	272
4	10	1	112	110	7	11	2	210	208	3	13	2	254	259
6	10	1	239	244	1	11	3	215	217	1	13	3	281	276
10	10	1	52	50	3	11	3	182	184	2	14	-1	59	59
0	10	2	587	595	5	11	3	141	145	0	14	0	155	149
2	10	2	70	73	1	11	4	38	37	2	14	0	113	109
0	14	1	395	395	2	14	1	126	124					