

AM-90-425

Variation of displacement parameters in structure refinements of low albite

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

For deposit: Table 2

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

(2) 1-17

Table 2 (for deposit)

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

Variation of displacement parameters in structure  
refinements of low albite

Th. Armbruster, H.B. Bürgi, M. Kunz

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

E. Gnos

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

S. Brönnimann, and Ch. Lienert

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

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
2	-2	-12	4.90	4.91	10	-2	-12	2.57	2.26	5	9	-11	5.96	5.93
2	0	-12	2.24	2.02	10	0	-12	5.46	5.42	5	11	-11	2.69	2.10
2	2	-12	7.39	7.23	10	2	-12	1.04	1.91	5	13	-11	8.63	8.43
2	4	-12	0.00	1.91	10	4	-12	2.55	2.81	6	-10	-11	0.00	0.12
2	6	-12	4.52	4.55	10	6	-12	0.00	0.52	6	-8	-11	5.88	5.93
3	-5	-12	1.44	1.45	0	2	-11	15.27	14.77	6	-6	-11	1.53	1.29
3	-3	-12	12.06	12.03	0	4	-11	4.03	3.66	6	-4	-11	4.36	4.36
3	-1	-12	4.65	4.84	0	6	-11	4.79	4.79	6	-2	-11	16.70	16.80
3	1	-12	0.87	1.79	0	8	-11	7.98	8.06	6	0	-11	2.43	2.25
3	3	-12	6.34	6.11	1	-7	-11	15.22	14.86	6	2	-11	22.52	22.11
3	5	-12	0.00	0.37	1	-5	-11	2.62	2.96	6	4	-11	9.40	9.59
3	7	-12	8.40	8.46	1	-3	-11	10.34	10.43	6	6	-11	12.68	12.46
4	-6	-12	3.19	2.78	1	-1	-11	5.88	5.97	6	8	-11	3.44	3.58
4	-4	-12	5.69	5.47	1	1	-11	2.35	3.41	6	10	-11	2.42	1.90
4	-2	-12	0.00	1.80	1	3	-11	3.28	3.31	6	12	-11	5.73	5.65
4	0	-12	0.95	0.41	1	5	-11	6.73	6.85	7	-9	-11	2.52	1.67
4	2	-12	7.95	7.81	1	7	-11	9.67	9.59	7	-7	-11	13.17	12.90
4	4	-12	2.19	0.24	1	9	-11	2.98	3.06	7	-5	-11	1.80	0.99
4	6	-12	4.63	4.57	2	-8	-11	0.00	1.95	7	-3	-11	16.53	16.60
4	8	-12	3.49	3.64	2	-6	-11	4.77	4.73	7	-1	-11	1.49	1.63
5	-5	-12	3.37	3.20	2	-4	-11	12.34	12.13	7	1	-11	6.89	7.10
5	-3	-12	2.64	2.46	2	-2	-11	2.64	1.92	7	3	-11	0.89	0.28
5	-1	-12	12.25	12.41	2	0	-11	5.91	5.71	7	5	-11	3.30	2.97
5	1	-12	7.07	6.95	2	2	-11	14.27	13.86	7	7	-11	15.51	15.50
5	3	-12	0.38	1.30	2	4	-11	0.00	0.36	7	9	-11	3.65	3.84
5	5	-12	5.77	5.62	2	6	-11	3.76	3.54	7	11	-11	13.92	13.77
5	7	-12	2.14	1.07	2	8	-11	3.93	3.96	7	13	-11	13.99	14.00
5	9	-12	6.13	6.15	2	10	-11	2.04	2.25	8	-8	-11	7.26	7.02
5	-6	-12	5.71	5.54	3	-9	-11	4.20	4.06	8	-6	-11	15.20	14.71
6	-4	-12	11.84	12.17	3	-7	-11	6.09	6.13	8	-4	-11	13.62	13.50
6	-2	-12	6.08	6.11	3	-5	-11	2.52	1.90	8	-2	-11	0.00	0.56
6	0	-12	7.36	7.14	3	-3	-11	6.76	7.03	8	0	-11	12.25	12.17
6	2	-12	5.04	5.07	3	-1	-11	10.58	10.60	8	2	-11	0.00	0.84
6	4	-12	3.57	3.51	3	1	-11	1.88	0.13	8	4	-11	4.20	4.36
6	6	-12	10.48	10.68	3	3	-11	6.59	6.39	8	6	-11	4.18	4.35
6	8	-12	2.00	1.29	3	5	-11	5.79	5.78	8	8	-11	1.52	0.96
6	10	-12	12.72	12.46	3	7	-11	4.06	4.20	8	10	-11	4.52	4.44
7	-5	-12	5.22	5.05	3	9	-11	2.40	2.94	8	12	-11	4.44	4.45
7	-3	-12	6.98	6.76	3	11	-11	7.42	7.41	9	-9	-11	5.18	5.10
7	-1	-12	8.15	8.29	4	-10	-11	10.66	10.71	9	-7	-11	2.73	2.55
7	1	-12	4.89	4.81	4	-8	-11	8.62	8.44	9	-5	-11	2.80	2.19
7	3	-12	2.31	2.16	4	-6	-11	19.50	19.04	9	-3	-11	0.93	0.19
7	5	-12	2.08	2.17	4	-4	-11	14.31	14.21	9	-1	-11	9.53	9.19
7	7	-12	2.30	2.37	4	-2	-11	6.27	6.38	9	1	-11	6.69	6.36
7	9	-12	3.34	3.47	4	0	-11	10.78	10.42	9	3	-11	10.97	11.28
8	-6	-12	2.41	2.19	4	2	-11	2.68	3.07	9	5	-11	11.76	11.10
8	-4	-12	0.00	0.76	4	4	-11	8.11	8.12	9	7	-11	1.98	1.62
8	-2	-12	10.67	10.65	4	6	-11	10.42	10.19	9	9	-11	3.88	3.83
8	0	-12	2.41	1.34	4	8	-11	11.20	11.38	9	11	-11	0.97	1.10
8	2	-12	12.48	11.89	4	10	-11	18.32	18.35	10	-6	-11	8.34	8.11
8	4	-12	5.48	5.47	4	12	-11	3.88	3.97	10	-4	-11	12.65	12.57
8	6	-12	11.08	11.34	5	-9	-11	6.02	5.94	10	-2	-11	0.00	0.70
8	8	-12	2.91	2.91	5	-7	-11	1.53	2.13	10	0	-11	0.00	2.68
9	-5	-12	5.83	5.69	5	-5	-11	3.80	3.82	10	2	-11	6.91	6.67
9	-3	-12	11.96	11.81	5	-3	-11	2.15	2.44	10	4	-11	6.97	6.96
9	-1	-12	6.12	5.72	5	-1	-11	9.37	9.40	10	6	-11	5.50	5.62
9	1	-12	1.23	0.95	5	1	-11	10.09	10.19	10	8	-11	9.16	8.99
9	3	-12	2.78	2.22	5	3	-11	10.06	9.91	10	10	-11	10.13	9.86
9	5	-12	1.24	0.70	5	5	-11	14.15	14.13	11	-5	-11	1.86	1.18
9	7	-12	10.89	10.82	5	7	-11	2.38	2.47	11	-3	-11	3.48	3.23

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
4	-8	-10	4.11	4.08	0	8	-2	-10	9.39	0	8	-9	7.38	7.30
4	-6	-10	3.09	3.18	0	10	0	-9	1.67	0	10	-9	4.82	4.70
4	-4	-10	6.09	6.05	0	12	0	-9	10.92	0	12	-9	8.08	7.91
4	0	-10	7.55	7.48	0	14	0	-9	2.72	0	14	-9	3.52	3.76
4	2	-10	5.01	4.92	0	13	0	-9	13.24	0	13	-9	6.95	6.80
4	4	-10	2.56	2.45	1	11	0	-9	0.47	1	11	-9	2.55	2.72
4	6	-10	2.34	1.46	1	9	0	-9	7.69	1	9	-9	5.77	5.73
4	8	-10	6.85	6.70	1	7	0	-9	0.62	1	7	-9	17.28	17.15
4	10	-10	9.63	9.61	1	5	0	-9	7.39	1	5	-9	7.28	7.18
4	12	-10	2.13	2.13	1	3	0	-9	5.20	1	3	-9	10.29	10.25
4	14	-10	5.32	5.30	1	1	0	-9	5.37	1	1	-9	8.51	8.55
4	16	-10	6.71	6.71	1	1	0	-9	1.52	1	1	-9	2.56	2.72
5	-13	-10	4.89	4.78	1	3	0	-9	5.48	1	3	-9	7.54	7.46
5	-11	-10	18.14	17.92	1	5	0	-9	3.02	1	5	-9	13.66	13.96
5	-9	-10	2.36	0.03	1	7	0	-9	10.42	1	7	-9	18.26	18.20
5	-7	-10	7.00	6.97	1	9	0	-9	12.45	1	9	-9	2.28	0.92
5	-5	-10	7.28	7.55	1	11	0	-9	3.47	1	11	-9	23.40	23.35
5	-3	-10	15.80	16.01	1	13	0	-9	7.35	1	13	-9	6.62	6.55
5	-1	-10	20.58	20.92	1	15	0	-9	4.94	1	15	-9	5.42	5.31
5	1	-10	18.21	18.60	1	17	0	-9	1.58	1	17	-9	3.03	2.99
5	3	-10	9.60	9.22	1	19	0	-9	0.65	1	19	-9	12.19	12.19
5	5	-10	13.72	13.52	1	21	0	-9	5.78	1	21	-9	2.09	0.31
5	7	-10	9.51	9.29	1	23	0	-9	6.29	1	23	-9	16.52	16.43
5	9	-10	2.61	2.25	1	25	0	-9	5.45	1	25	-9	15.55	15.72
5	11	-10	11.58	11.49	1	27	0	-9	5.96	1	27	-9	6.11	6.15
5	13	-10	0.00	0.72	1	29	0	-9	1.56	1	29	-9	7.75	7.82
5	15	-10	10.37	10.29	1	31	0	-9	3.87	1	31	-9	10.37	10.63
6	-12	-10	6.99	6.81	1	33	0	-9	7.63	1	33	-9	4.53	4.49
6	-10	-10	0.00	0.48	1	35	0	-9	4.55	1	35	-9	18.43	17.96
6	-8	-10	0.00	0.03	1	37	0	-9	5.34	1	37	-9	14.21	14.10
6	-6	-10	2.95	3.19	1	39	0	-9	10.95	1	39	-9	4.03	3.95
6	-4	-10	0.00	0.25	1	41	0	-9	2.76	1	41	-9	12.77	12.62
6	-2	-10	6.54	6.63	1	43	0	-9	6.27	1	43	-9	2.19	1.84
6	0	-10	2.27	0.29	1	45	0	-9	3.51	1	45	-9	18.27	17.65
6	2	-10	3.10	2.95	1	47	0	-9	6.99	1	47	-9	11.05	11.23
6	4	-10	2.57	2.21	1	49	0	-9	4.98	1	49	-9	6.71	6.71
6	6	-10	3.24	3.41	1	51	0	-9	7.83	1	51	-9	13.97	14.03
6	8	-10	1.86	0.86	1	53	0	-9	0.46	1	53	-9	0.00	0.40
6	10	-10	3.86	3.95	1	55	0	-9	1.98	1	55	-9	24.68	24.93
6	12	-10	2.69	2.51	1	57	0	-9	5.48	1	57	-9	16.67	16.82
6	14	-10	11.19	10.99	1	59	0	-9	1.70	1	59	-9	26.06	25.96
6	16	-10	17.49	17.14	1	61	0	-9	0.78	1	61	-9	20.26	20.06
6	18	-10	0.00	0.60	1	63	0	-9	6.30	1	63	-9	7.06	6.82
6	20	-10	19.43	19.27	1	65	0	-9	1.39	1	65	-9	7.35	7.14
6	22	-10	3.09	2.85	1	67	0	-9	7.96	1	67	-9	0.00	0.58
6	24	-10	0.76	1.18	1	69	0	-9	3.13	1	69	-9	8.09	7.93
6	26	-10	8.81	8.56	1	71	0	-9	3.20	1	71	-9	8.15	8.01
6	28	-10	1.83	2.40	1	73	0	-9	2.93	1	73	-9	8.54	8.35
6	30	-10	14.38	14.74	1	75	0	-9	3.15	1	75	-9	8.11	8.11
6	32	-10	2.14	1.56	1	77	0	-9	10.63	1	77	-9	2.79	1.60
6	34	-10	5.59	5.19	1	79	0	-9	2.63	1	79	-9	13.09	12.95
6	36	-10	3.71	3.79	1	81	0	-9	7.18	1	81	-9	5.18	5.10
6	38	-10	5.19	4.83	1	83	0	-9	7.63	1	83	-9	0.00	0.38
6	40	-10	8.48	8.34	1	85	0	-9	0.40	1	85	-9	14.22	14.41
6	42	-10	3.65	3.51	1	87	0	-9	32.20	1	87	-9	11.49	11.97
6	44	-10	0.75	2.19	1	89	0	-9	0.87	1	89	-9	8.67	9.11
6	46	-10	1.86	1.65	1	91	0	-9	17.35	1	91	-9	9.11	9.36
6	48	-10	1.75	1.60	1	93	0	-9	16.96	1	93	-9	9.11	9.36



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
8	-8	-9	4.34	4.33	12	4	-9	6.37	6.48	3	-5	-8	4.20	4.23
8	-6	-9	24.11	23.71	12	6	-9	0.00	0.43	3	-3	-8	8.52	8.62
8	-4	-9	14.24	14.10	12	8	-9	6.49	6.21	3	-1	-8	20.55	20.90
8	-2	-9	5.87	5.71	12	10	-9	5.36	5.55	3	1	-8	4.14	4.00
8	0	-9	8.70	8.80	13	-5	-9	0.00	0.95	3	3	-8	2.65	2.77
8	2	-9	0.00	0.97	13	-3	-9	5.73	5.51	3	5	-8	4.46	4.46
8	4	-9	15.92	16.34	13	-1	-9	8.44	8.35	3	7	-8	9.93	9.83
8	6	-9	8.86	9.14	13	1	-9	4.85	4.83	3	9	-8	11.62	11.71
8	8	-9	17.71	17.67	13	3	-9	6.05	6.06	3	11	-8	9.66	9.66
8	10	-9	18.72	19.01	13	5	-9	11.71	11.45	3	13	-8	3.83	3.80
8	12	-9	8.06	7.91	13	7	-9	2.46	0.19	3	15	-8	7.29	7.45
8	14	-9	9.67	9.60	14	2	-9	2.07	1.39	3	17	-8	3.34	3.43
9	-13	-9	1.28	1.49	0	2	-8	6.52	6.74	4	19	-8	9.35	9.47
9	-11	-9	4.28	4.42	0	4	-8	10.48	10.78	4	16	-8	3.82	4.04
9	-9	-9	4.36	4.31	0	6	-8	2.63	2.57	4	14	-8	5.74	5.62
9	-7	-9	2.17	1.55	0	8	-8	12.84	12.96	4	12	-8	5.16	5.12
9	-5	-9	1.99	0.70	0	10	-8	4.53	4.40	4	10	-8	16.37	16.28
9	-3	-9	4.80	4.85	0	14	-8	3.59	3.65	4	8	-8	1.11	1.82
9	-1	-9	16.59	16.69	0	16	-8	1.74	0.15	4	6	-8	3.79	3.84
9	1	-9	10.60	11.05	1	-15	-8	10.09	10.15	4	4	-8	14.40	14.38
9	3	-9	14.24	14.55	1	-13	-8	7.44	7.44	4	2	-8	12.08	12.18
9	5	-9	24.42	24.10	1	-11	-8	10.83	10.83	4	0	-8	11.44	11.44
9	7	-9	5.89	5.96	1	-9	-8	17.03	17.08	4	4	-8	0.65	1.18
9	9	-9	12.42	12.41	1	-7	-8	20.17	20.68	4	6	-8	11.73	12.03
9	11	-9	0.91	1.51	1	-5	-8	19.73	20.02	4	8	-8	6.73	7.00
9	13	-9	1.67	2.85	1	-3	-8	20.45	20.88	4	10	-8	0.00	0.39
9	15	-9	8.88	8.86	1	-1	-8	21.40	21.83	4	12	-8	8.91	8.76
10	-10	-9	8.75	8.88	1	1	-8	9.70	9.94	4	14	-8	4.61	4.61
10	-8	-9	6.32	6.28	1	3	-8	27.97	28.06	4	16	-8	12.22	12.43
10	-6	-9	8.15	8.12	1	5	-8	10.35	10.53	4	18	-8	2.68	1.55
10	-4	-9	1.94	0.60	1	7	-8	21.58	21.92	5	-15	-8	0.00	0.07
10	-2	-9	12.94	13.12	1	9	-8	9.26	9.55	5	-13	-8	3.20	3.08
10	0	-9	11.81	11.64	1	11	-8	5.71	5.65	5	-11	-8	2.51	1.25
10	2	-9	0.86	1.60	1	13	-8	7.17	7.12	5	-9	-8	5.31	5.36
10	4	-9	27.14	27.14	1	15	-8	2.28	2.65	5	-7	-8	5.81	5.89
10	6	-9	10.68	10.36	1	17	-8	13.15	12.94	5	-5	-8	1.91	1.99
10	8	-9	9.88	9.48	2	-16	-8	6.86	6.86	5	-3	-8	3.58	3.66
10	10	-9	12.73	13.02	2	-14	-8	5.10	5.04	5	-1	-8	6.87	7.10
10	12	-9	0.92	0.34	2	-12	-8	3.80	3.87	5	1	-8	5.76	5.87
10	14	-9	1.19	1.19	2	-10	-8	6.62	6.76	5	3	-8	2.22	2.33
11	-9	-9	0.78	0.69	2	-8	-8	2.97	3.21	5	5	-8	3.27	3.33
11	-7	-9	14.32	14.08	2	-6	-8	0.55	1.48	5	7	-8	3.36	3.40
11	-5	-9	1.63	0.18	2	-4	-8	3.37	3.46	5	9	-8	10.76	11.03
11	-3	-9	11.46	11.12	2	-2	-8	3.98	4.04	5	11	-8	13.98	14.10
11	-1	-9	3.84	3.80	2	0	-8	2.92	3.05	5	13	-8	2.18	2.16
11	1	-9	4.23	4.24	2	2	-8	8.50	8.45	5	15	-8	10.85	10.89
11	3	-9	2.32	2.36	2	4	-8	12.40	12.41	5	17	-8	1.96	0.35
11	5	-9	7.59	7.75	2	6	-8	3.06	2.80	5	19	-8	2.34	2.07
11	7	-9	13.56	13.62	2	8	-8	10.47	10.52	6	-16	-8	8.25	8.22
11	9	-9	21.24	21.45	2	10	-8	9.47	9.42	6	-14	-8	1.97	1.38
11	11	-9	6.29	6.18	2	12	-8	7.47	7.51	6	-12	-8	10.47	10.74
11	13	-9	0.00	1.08	2	14	-8	0.63	1.59	6	-10	-8	5.81	5.64
12	-8	-9	2.39	2.56	2	16	-8	1.42	1.03	6	-8	-8	4.12	4.12
12	-6	-9	9.53	9.52	2	18	-8	2.76	0.18	6	-6	-8	2.73	2.78
12	-4	-9	9.91	9.56	3	-15	-8	12.06	11.95	6	-4	-8	4.48	4.55
12	-2	-9	4.20	4.23	3	-13	-8	2.92	2.82	6	-2	-8	9.55	9.63
12	0	-9	15.45	15.28	3	-11	-8	15.08	15.15	6	0	-8	6.68	6.64
12	2	-9	15.45	15.28	3	-9	-8	1.20	0.18	6	2	-8	4.59	4.71
12	4	-9	15.45	15.28	3	-7	-8	1.73	2.15	6	4	-8	9.92	10.13

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
10	-4	-8	0.00	1.35	4	-10	-7	6.36	6.42	7	-3	-7	4.27	4.04
10	-2	-8	0.00	1.60	4	-8	-7	9.55	9.68	7	-1	-7	24.45	24.23
10	0	-8	3.24	3.09	4	-6	-7	14.39	14.54	7	1	-7	10.86	10.91
10	2	-8	7.96	8.01	4	-4	-7	21.64	22.20	7	3	-7	29.39	29.83
10	4	-8	4.36	4.48	4	-2	-7	7.52	7.61	7	5	-7	11.44	11.45
10	6	-8	3.87	4.88	4	0	-7	21.48	21.72	7	7	-7	5.91	5.76
10	8	-8	1.65	0.49	4	2	-7	32.08	32.26	7	9	-7	2.73	3.04
10	10	-8	6.34	6.34	4	4	-7	1.48	1.43	7	11	-7	2.67	2.30
10	12	-8	6.06	6.23	4	6	-7	16.61	16.80	7	13	-7	17.29	17.52
10	14	-8	2.82	2.67	4	8	-7	6.61	6.80	7	15	-7	3.33	3.17
11	-11	-8	9.70	9.80	4	10	-7	5.79	5.92	7	17	-7	14.29	13.88
11	-9	-8	6.07	6.07	4	12	-7	4.71	4.80	7	19	-7	11.94	11.72
11	-7	-8	14.45	14.18	4	14	-7	4.33	4.24	8	-16	-7	0.00	1.30
11	-5	-8	1.31	1.31	4	16	-7	14.45	14.28	8	-14	-7	2.21	0.54
11	-3	-8	13.74	13.36	4	18	-7	0.00	0.15	8	-12	-7	10.08	10.28
11	-1	-8	3.69	3.76	4	20	-7	7.13	7.07	8	-10	-7	20.66	20.61
11	1	-8	6.68	6.63	5	-17	-7	0.00	0.23	8	-8	-7	6.82	6.82
11	3	-8	9.83	9.69	5	-15	-7	1.49	1.98	8	-6	-7	31.72	32.00
11	5	-8	6.31	6.28	5	-13	-7	13.80	13.92	8	-4	-7	17.83	17.90
11	7	-8	9.38	9.48	5	-11	-7	9.61	9.66	8	-2	-7	18.28	18.25
11	9	-8	7.92	7.81	5	-9	-7	19.62	19.90	8	0	-7	5.72	5.85
11	11	-8	3.69	3.20	5	-7	-7	26.57	27.04	8	2	-7	6.27	6.23
11	13	-8	2.38	1.85	5	-5	-7	12.25	12.73	8	4	-7	15.79	16.25
12	-10	-8	4.81	3.02	5	-3	-7	26.43	26.87	8	6	-7	9.22	9.44
12	-8	-8	4.81	4.78	5	-1	-7	3.62	3.66	8	8	-7	23.99	24.41
12	-6	-8	3.27	3.32	5	1	-7	3.53	3.55	8	10	-7	15.61	15.72
12	-4	-8	5.02	5.11	5	3	-7	5.74	5.84	8	12	-7	8.27	8.23
12	-2	-8	1.69	1.84	5	5	-7	10.36	10.60	8	14	-7	7.35	7.36
12	0	-8	1.64	0.43	5	7	-7	31.57	32.56	8	16	-7	2.63	2.33
12	2	-8	7.03	7.03	5	9	-7	12.52	12.56	8	18	-7	2.55	3.03
12	4	-8	6.81	6.73	5	11	-7	29.25	30.14	9	-15	-7	4.77	4.56
12	6	-8	0.37	0.43	5	13	-7	7.51	7.58	9	-13	-7	16.79	16.98
12	8	-8	5.50	5.55	5	15	-7	18.27	18.28	9	-11	-7	8.43	8.34
12	10	-8	5.13	5.20	5	17	-7	0.00	1.35	9	-9	-7	13.75	13.70
12	12	-8	7.81	7.91	5	19	-7	0.96	0.18	9	-7	-7	26.67	26.54
13	-7	-8	9.05	8.85	6	-16	-7	2.17	1.98	9	-5	-7	15.50	15.77
13	-5	-8	4.63	4.56	6	-14	-7	5.86	5.84	9	-3	-7	15.29	15.52
13	-3	-8	2.50	2.80	6	-12	-7	13.12	13.09	9	-1	-7	4.93	4.83
13	-1	-8	3.07	3.07	6	-10	-7	4.99	5.03	9	1	-7	9.20	9.53
13	1	-8	3.73	3.73	6	-8	-7	0.00	0.67	9	3	-7	0.00	0.03
13	3	-8	4.08	4.08	6	-6	-7	21.98	22.37	9	5	-7	13.30	13.48
13	5	-8	0.50	0.50	6	-4	-7	15.67	15.73	9	7	-7	5.99	5.55
13	7	-8	2.36	2.36	6	-2	-7	11.47	11.60	9	9	-7	6.99	6.66
13	9	-8	3.59	3.59	6	0	-7	24.65	24.82	9	11	-7	13.39	13.54
14	-2	-8	3.63	3.63	6	2	-7	15.29	15.42	9	13	-7	5.10	4.95
14	0	-8	0.93	0.93	6	4	-7	15.13	15.30	9	15	-7	0.00	1.16
14	2	-8	0.89	0.89	6	6	-7	7.71	7.75	9	17	-7	8.02	8.03
14	4	-8	2.17	1.82	6	8	-7	7.96	8.14	10	-14	-7	11.13	11.40
14	6	-8	3.27	3.27	6	10	-7	21.48	20.83	10	-12	-7	13.89	13.65
14	8	-8	28.95	28.95	6	12	-7	1.42	1.00	10	-10	-7	2.30	2.85
0	0	-7	6.97	6.97	6	14	-7	4.27	4.95	10	-8	-7	8.21	8.28
0	2	-7	6.12	6.12	6	16	-7	4.07	4.34	10	-6	-7	2.54	2.87
0	4	-7	8.23	8.23	6	18	-7	12.06	12.31	10	-4	-7	19.04	18.91
0	6	-7	8.25	8.25	6	20	-7	9.11	9.18	10	-2	-7	15.78	16.00
0	10	-7	5.77	5.77	7	-17	-7	11.79	11.79	10	0	-7	16.51	16.89
0	12	-7	9.10	9.10	7	-15	-7	12.79	12.79	10	2	-7	31.69	31.82
0	14	-7	15.64	15.64	7	-13	-7	8.69	8.69	10	4	-7	1.22	0.11
0	16	-7	12.18	12.18	7	-11	-7	8.29	8.29	10	6	-7	13.52	13.22
0	18	-7	3.89	3.89	7	-9	-7	7.57	7.57	10	8	-7	1.41	1.87
1	-17	-7	10.13	10.13	7	-7	-7	8.54	8.54	10	10	-7	1.87	1.89
1	-15	-7	17.97	17.85	7	-5	-7	18.09	17.95	10	10	-7		

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
10	12	-7	12.72	12.98	1	-13	-6	6.59	6.43	4	-14	-6	1.14	0.66
10	14	-7	4.80	4.87	1	-11	-6	0.00	0.87	4	-12	-6	5.32	5.40
10	16	-7	12.70	12.74	1	-9	-6	4.47	4.36	4	-10	-6	2.39	2.52
11	-13	-7	5.21	5.39	1	-7	-6	0.00	0.42	4	-8	-6	7.98	8.35
11	-11	-7	2.84	0.94	1	-5	-6	8.38	8.39	4	-6	-6	15.05	15.49
11	-9	-7	3.84	3.86	1	-3	-6	5.86	5.86	4	-4	-6	4.30	4.30
11	-7	-7	7.27	7.36	1	-1	-6	18.72	18.79	4	-2	-6	5.85	6.28
11	-5	-7	3.46	3.46	1	1	-6	2.05	1.60	4	0	-6	13.33	12.71
11	-3	-7	9.30	9.03	1	3	-6	29.42	29.58	4	2	-6	13.31	13.31
11	-1	-7	8.04	7.81	1	5	-6	3.49	2.98	4	4	-6	4.67	4.58
11	1	-7	2.55	1.80	1	7	-6	18.32	18.69	4	6	-6	2.30	2.22
11	3	-7	3.84	3.53	1	9	-6	6.93	6.76	4	8	-6	7.82	7.68
11	5	-7	8.76	8.59	1	11	-6	1.44	1.55	4	10	-6	12.47	12.56
11	7	-7	9.15	9.38	1	13	-6	18.85	19.12	4	12	-6	5.88	6.09
11	9	-7	0.00	1.27	1	15	-6	1.13	1.12	4	14	-6	7.66	7.78
11	11	-7	21.72	21.30	1	17	-6	24.64	24.77	4	16	-6	13.53	13.52
11	13	-7	7.18	7.39	1	19	-6	14.64	14.67	4	18	-6	3.16	3.16
11	15	-7	7.76	7.80	2	-18	-6	2.02	2.30	4	20	-6	6.79	6.86
12	-10	-7	10.34	9.98	2	-16	-6	0.00	1.72	5	-19	-6	11.80	11.30
12	-8	-7	1.62	0.53	2	-14	-6	10.47	10.79	5	-17	-6	2.01	2.67
12	-6	-7	16.17	16.14	2	-12	-6	5.41	5.42	8	-15	-6	8.95	9.15
12	-4	-7	13.88	14.20	2	-10	-6	13.60	14.18	5	-13	-6	3.11	3.07
12	-2	-7	5.51	5.59	2	-8	-6	3.47	3.72	5	-11	-6	15.55	15.52
12	0	-7	4.43	4.30	2	-6	-6	7.38	7.72	5	-9	-6	14.03	14.00
12	2	-7	7.61	7.65	2	-4	-6	6.68	6.50	8	-7	-6	7.67	7.86
12	4	-7	9.56	9.64	2	-2	-6	10.42	10.16	8	-5	-6	8.00	8.27
12	6	-7	9.08	8.75	2	0	-6	27.80	27.54	8	-3	-6	18.23	18.17
12	8	-7	14.78	14.66	2	2	-6	10.52	9.75	8	4	-6	29.47	28.98
12	10	-7	12.35	12.58	2	4	-6	13.04	12.69	8	6	-6	4.86	4.73
12	12	-7	0.00	0.40	2	6	-6	4.88	4.83	8	8	-6	28.76	28.73
13	-9	-7	1.99	2.43	2	8	-6	23.12	23.51	8	10	-6	10.12	10.12
13	-7	-7	0.88	0.37	2	10	-6	1.10	0.51	8	12	-6	26.52	27.70
13	-5	-7	0.00	0.14	2	12	-6	11.51	11.37	8	14	-6	6.79	6.68
13	-3	-7	1.66	0.71	2	14	-6	13.61	13.57	8	16	-6	3.01	3.01
13	-1	-7	11.09	10.93	2	16	-6	6.53	6.33	8	18	-6	10.02	9.83
13	1	-7	2.57	2.53	2	18	-6	4.97	4.91	9	-15	-6	2.50	2.83
13	3	-7	10.03	10.03	2	20	-6	6.82	6.68	9	-13	-6	16.74	17.16
13	5	-7	10.85	10.98	3	-19	-6	4.36	4.06	9	-11	-6	12.75	12.94
13	7	-7	5.38	5.48	3	-17	-6	4.36	4.06	9	-9	-6	14.96	14.78
13	9	-7	3.89	3.81	3	-15	-6	6.36	6.47	9	-7	-6	2.80	2.40
13	11	-7	0.00	1.80	3	-13	-6	3.52	3.41	9	-5	-6	6.29	6.07
14	-4	-7	8.30	8.09	3	-11	-6	21.27	21.63	9	-3	-6	4.97	4.88
14	-2	-7	0.00	1.20	3	-9	-6	20.00	20.55	9	-1	-6	16.58	16.72
14	0	-7	7.12	6.84	3	-7	-6	7.03	7.25	9	1	-6	9.47	9.44
14	2	-7	5.21	5.21	3	-5	-6	16.33	16.82	9	3	-6	18.87	19.02
14	4	-7	8.38	8.25	3	-3	-6	24.74	24.92	9	5	-6	6.63	6.73
14	6	-7	0.00	0.22	3	-1	-6	48.98	50.12	9	7	-6	17.55	17.10
0	0	-6	13.77	13.78	3	1	-6	6.23	6.50	9	9	-6	0.72	1.11
0	2	-6	18.55	18.35	3	3	-6	27.36	27.53	9	11	-6	5.70	5.66
0	4	-6	4.80	4.66	3	5	-6	4.36	4.91	9	13	-6	17.11	16.99
0	6	-6	28.91	29.51	3	7	-6	39.13	40.15	9	15	-6	1.31	1.57
0	8	-6	9.40	9.20	3	9	-6	18.71	19.07	9	17	-6	1.57	1.57
0	10	-6	12.34	12.31	3	11	-6	36.96	37.23	9	19	-6	24.55	24.55
0	12	-6	6.20	6.11	3	13	-6	1.44	0.99	10	-14	-6	11.04	10.63
0	14	-6	0.80	1.04	3	15	-6	25.13	25.47	10	-12	-6	7.16	7.32
0	16	-6	0.76	0.86	3	17	-6	3.56	3.32	10	-10	-6	4.00	3.88
0	18	-6	1.68	2.23	3	19	-6	2.56	2.32	10	-8	-6	2.41	2.54
0	20	-6	1.10	0.72	3	21	-6	5.59	5.72	10	-6	-6	1.72	1.55
1	-19	-6	6.13	6.07	4	-18	-6	3.48	3.20	7	-17	-6	2.20	2.24
1	-17	-6	0.95	2.17	4	-16	-6	5.88	5.91	7	-15	-6	12.00	12.30
1	-15	-6												



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
10	2	-6	1.33	0.41	0	16	-5	0.00	1.13	3	11	-5	16.70	16.68
10	4	-6	6.11	5.80	0	18	-5	1.64	0.29	3	13	-5	5.53	5.70
10	6	-6	0.00	0.46	0	20	-5	3.68	3.77	3	15	-5	4.52	4.43
10	8	-6	8.31	8.52	1	-19	-5	8.90	8.81	6	10	-5	4.80	4.80
10	10	-6	2.95	2.93	1	-17	-5	15.14	15.30	6	12	-5	4.87	4.88
10	12	-6	0.00	1.08	1	-15	-5	22.10	22.20	6	14	-5	4.89	4.73
10	14	-6	1.92	1.84	1	-13	-5	9.45	9.33	6	16	-5	0.00	1.48
10	16	-6	3.55	3.22	1	-11	-5	15.92	16.25	6	18	-5	5.07	5.00
11	-13	-6	2.49	1.43	1	-9	-5	5.19	4.99	6	20	-5	3.91	3.78
11	-11	-6	5.00	5.22	1	-7	-5	0.85	1.32	7	-19	-5	9.02	8.80
11	-9	-6	1.10	1.78	1	-5	-5	34.63	35.52	7	-17	-5	14.15	13.88
11	-7	-6	12.53	12.93	1	-3	-5	19.42	19.42	7	-15	-5	3.40	3.35
11	-5	-6	10.06	10.07	1	-1	-5	48.40	49.08	7	-13	-5	6.45	6.35
11	-3	-6	4.27	4.34	1	1	-5	3.38	3.48	7	-11	-5	7.78	7.78
11	-1	-6	9.79	9.73	1	3	-5	53.80	54.11	7	-9	-5	5.01	5.27
11	1	-6	8.33	8.33	1	5	-5	2.10	2.14	7	-7	-5	7.66	6.97
11	3	-6	23.68	23.95	1	7	-5	21.00	21.07	7	-5	-5	7.11	6.97
11	5	-6	2.59	2.72	1	9	-5	8.85	8.73	7	-3	-5	5.54	5.30
11	7	-6	15.63	15.93	1	11	-5	7.80	7.90	7	-1	-5	27.69	27.00
11	9	-6	4.99	5.18	1	13	-5	18.71	19.20	7	1	-5	2.86	2.58
11	11	-6	11.05	11.17	1	15	-5	10.87	10.71	7	3	-5	22.99	22.40
11	13	-6	7.04	7.32	1	17	-5	16.55	16.64	7	5	-5	14.00	14.16
11	15	-6	7.80	7.56	1	19	-5	5.26	5.44	7	7	-5	14.25	14.26
12	-10	-6	0.00	0.94	1	21	-5	6.24	6.29	7	9	-5	2.28	2.48
12	-12	-6	3.52	3.62	2	-20	-5	8.60	8.78	7	11	-5	0.00	0.09
12	-14	-6	5.46	5.38	2	-18	-5	4.13	3.92	7	13	-5	12.67	12.25
12	-16	-6	5.53	5.62	2	-16	-5	2.40	2.61	7	15	-5	6.28	6.21
12	-18	-6	0.00	1.47	2	-14	-5	20.11	20.30	7	17	-5	13.76	13.82
12	-20	-6	0.00	0.15	2	-12	-5	11.27	11.15	7	19	-5	12.77	12.18
12	0	-6	6.55	6.61	2	-10	-5	7.07	7.10	8	-18	-5	8.99	9.01
12	2	-6	3.85	3.92	2	-8	-5	43.52	43.91	8	-16	-5	4.90	4.60
12	4	-6	3.64	3.76	2	-6	-5	3.47	2.49	8	-14	-5	18.49	18.27
12	6	-6	1.02	0.50	2	-4	-5	14.38	14.47	8	-12	-5	12.53	12.53
12	8	-6	4.71	4.37	2	-2	-5	11.19	11.03	8	-10	-5	6.84	6.81
12	10	-6	8.69	8.82	2	0	-5	4.55	4.66	8	-8	-5	16.80	16.88
12	12	-6	4.77	4.73	2	2	-5	22.74	22.20	8	-6	-5	12.62	12.62
12	14	-6	0.00	0.57	2	4	-5	4.29	4.64	8	-4	-5	23.62	23.73
13	-7	-6	5.49	5.61	2	6	-5	29.23	29.26	8	-2	-5	7.76	7.76
13	-5	-6	6.65	6.81	2	8	-5	13.42	14.11	8	0	-5	11.49	11.52
13	-3	-6	8.93	8.72	2	10	-5	4.55	4.69	8	2	-5	25.70	25.95
13	-1	-6	9.56	9.46	2	12	-5	1.31	0.76	8	4	-5	5.10	4.99
13	1	-6	7.19	7.46	2	14	-5	4.78	4.75	8	6	-5	3.84	3.67
13	3	-6	9.28	9.17	2	16	-5	9.27	9.10	8	8	-5	16.14	16.85
13	5	-6	4.39	4.71	2	18	-5	3.22	3.18	8	10	-5	6.18	5.98
13	7	-6	12.61	12.25	2	20	-5	8.85	8.79	8	12	-5	1.40	0.31
13	9	-6	0.00	0.65	3	-19	-5	0.00	0.72	8	14	-5	2.00	1.61
13	11	-6	11.65	11.36	3	-17	-5	3.68	3.57	8	16	-5	1.76	1.69
14	-4	-6	3.27	3.34	3	-15	-5	19.07	19.33	9	18	-5	4.37	4.47
14	-2	-6	3.85	3.76	3	-13	-5	7.90	8.41	9	17	-5	4.41	4.47
14	0	-6	0.95	1.37	3	-11	-5	38.32	39.20	9	15	-5	16.88	16.97
14	2	-6	2.34	2.13	3	-9	-5	26.66	26.99	9	13	-5	4.59	4.70
14	4	-6	4.60	4.27	3	-7	-5	34.62	34.77	9	11	-5	17.81	17.85
14	6	-6	31.43	31.40	3	-5	-5	22.05	22.25	9	9	-5	22.21	22.43
0	0	-5	3.84	4.01	3	-3	-5	12.41	11.66	9	7	-5	17.05	16.67
0	2	-5	13.83	14.04	3	-1	-5	3.47	3.68	9	5	-5	16.02	16.10
0	4	-5	13.83	13.84	3	1	-5	12.14	11.89	9	3	-5	4.51	4.51
0	6	-5	0.50	0.28	3	3	-5	25.81	26.29	9	1	-5	3.88	3.65
0	10	-5	2.33	1.76	3	5	-5	16.38	16.40	9	3	-5	14.97	15.45
0	12	-5	8.71	8.80	3	7	-5	20.77	20.91	9	5	-5	13.47	13.51

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
9	9	5	16.53	16.51	13	11	-5	5.26	5.33	2	18	-4	10.94	11.30
9	11	-5	21.10	21.41	14	-6	-5	5.21	5.25	2	20	-4	7.39	7.34
9	13	-5	6.11	6.30	14	-4	-5	5.94	5.95	2	22	-4	1.37	0.24
9	15	-5	8.81	8.65	14	-2	-5	11.95	11.88	3	-21	-4	8.32	8.24
9	17	-5	0.00	0.27	14	0	-5	13.50	14.70	3	-19	-4	1.00	0.97
10	-14	-5	11.73	11.46	14	2	-5	14.39	14.70	3	-17	-4	6.87	6.84
10	-12	-5	11.41	11.46	14	4	-5	2.88	3.48	3	-15	-4	8.55	8.90
10	-10	-5	1.28	1.01	14	6	-5	10.52	10.58	3	-13	-4	6.80	7.08
10	-8	-5	4.08	4.22	0	2	-4	41.03	39.74	3	-11	-4	3.55	3.77
10	-6	-5	6.46	6.48	0	4	-4	20.46	20.31	3	-9	-4	0.95	1.26
10	-4	-5	20.10	20.05	0	6	-4	29.57	29.45	3	-7	-4	1.49	1.38
10	-2	-5	17.87	17.76	0	8	-4	39.19	39.02	3	-5	-4	13.45	13.44
10	0	-5	24.07	24.27	0	10	-4	3.96	3.97	3	-3	-4	6.97	6.97
10	2	-5	34.13	34.71	0	12	-4	19.41	19.41	3	-1	-4	1.98	2.50
10	4	-5	2.40	2.33	0	14	-4	1.15	1.11	3	1	-4	1.96	1.70
10	6	-5	17.38	17.79	0	16	-4	0.00	6.90	3	3	-4	10.34	10.41
10	8	-5	3.16	3.01	0	18	-4	6.93	6.90	3	5	-4	14.76	14.73
10	10	-5	0.00	1.46	0	20	-4	1.42	0.26	3	7	-4	1.27	1.25
10	12	-5	11.48	11.41	0	22	-4	11.85	11.71	3	9	-4	27.84	28.41
10	14	-5	8.51	8.94	1	-21	-4	3.25	3.29	3	11	-4	23.34	23.38
10	16	-5	4.51	4.44	1	-19	-4	7.95	7.87	3	13	-4	5.15	5.18
11	-13	-5	1.70	0.89	1	-17	-4	2.96	2.92	3	15	-4	15.71	15.90
11	-11	-5	8.34	8.14	1	-15	-4	2.31	2.27	3	17	-4	4.52	4.18
11	-9	-5	4.62	4.53	1	-13	-4	12.20	12.39	3	19	-4	10.95	10.96
11	-7	-5	1.17	0.33	1	-11	-4	12.29	12.52	3	21	-4	5.69	5.64
11	-5	-5	14.41	14.49	1	-9	-4	19.44	19.59	4	-20	-4	6.49	6.41
11	-3	-5	2.06	2.19	1	-7	-4	12.27	12.47	4	-18	-4	15.76	15.21
11	-1	-5	26.56	26.73	1	-5	-4	0.43	0.57	4	-16	-4	5.71	5.98
11	1	-5	2.70	2.66	1	-3	-4	15.91	16.34	4	-14	-4	7.97	8.10
11	3	-5	19.68	19.78	1	-1	-4	16.26	15.88	4	-12	-4	5.10	5.03
11	5	-5	15.29	15.24	1	1	-4	15.26	14.69	4	-10	-4	23.55	23.84
11	7	-5	12.08	11.99	1	3	-4	17.27	17.20	4	-8	-4	29.36	29.51
11	9	-5	4.23	4.68	1	5	-4	11.55	11.06	4	-6	-4	32.11	32.58
11	11	-5	7.38	6.91	1	7	-4	13.86	13.69	4	-4	-4	9.04	9.09
11	13	-5	2.05	3.03	1	9	-4	38.67	38.77	4	-2	-4	32.41	32.32
11	15	-5	0.00	0.86	1	11	-4	20.68	20.99	4	0	-4	2.99	2.30
12	-12	-5	2.06	1.95	1	13	-4	1.61	1.37	4	2	-4	37.51	36.63
12	-10	-5	14.06	13.89	1	15	-4	20.65	20.99	4	4	-4	14.51	14.55
12	-8	-5	4.38	4.41	1	17	-4	10.97	11.04	4	6	-4	16.94	16.96
12	-6	-5	20.43	20.39	1	19	-4	9.13	8.70	4	8	-4	33.73	34.46
12	-4	-5	13.36	13.33	1	21	-4	0.00	4.50	4	10	-4	2.04	1.31
12	0	-5	0.00	0.51	2	-20	-4	4.00	4.50	4	12	-4	8.40	8.08
12	2	-5	6.01	6.34	2	-18	-4	14.25	14.31	4	14	-4	0.81	0.77
12	4	-5	14.80	14.98	2	-16	-4	12.60	12.90	4	16	-4	6.63	6.75
12	6	-5	7.59	7.59	2	-14	-4	23.73	24.09	4	18	-4	7.80	7.93
12	8	-5	22.72	22.87	2	-12	-4	1.19	1.12	4	20	-4	3.87	3.93
12	10	-5	10.36	10.16	2	-10	-4	37.71	39.00	4	22	-4	10.66	10.41
12	12	-5	8.87	8.67	2	-8	-4	17.32	17.33	5	-19	-4	7.71	7.58
12	14	-5	5.08	5.15	2	-6	-4	5.52	5.47	5	-17	-4	2.89	3.07
13	-9	-5	6.39	6.35	2	-4	-4	27.54	28.09	5	-15	-4	6.08	6.10
13	-7	-5	7.03	7.14	2	-2	-4	38.32	38.99	5	-13	-4	6.03	6.38
13	-5	-5	3.23	2.91	2	0	-4	76.32	79.70	5	-11	-4	11.98	11.86
13	-3	-5	6.27	6.39	2	2	-4	35.45	34.90	5	-9	-4	8.81	8.75
13	-1	-5	1.12	1.44	2	4	-4	1.81	0.81	5	-7	-4	5.95	5.94
13	1	-5	4.85	4.43	2	6	-4	30.18	30.59	5	-5	-4	11.28	10.92
13	3	-5	5.45	5.46	2	8	-4	0.52	0.26	5	-3	-4	3.04	2.46
13	5	-5	2.36	1.97	2	10	-4	26.01	26.35	5	-1	-4	38.36	37.40
13	7	-5	7.07	6.64	2	12	-4	5.00	4.87	5	1	-4	10.00	9.32
13	9	-5			2	14	-4	18.12	18.48	5	3	-4	47.21	48.15
13		-5			2	16	-4	19.89	20.31	5	5	-4	4.50	4.81

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
8	4	-4	13.90	13.84	12	-8	-4	4.89	4.95	1	21	-3	7.58	7.49
8	6	-4	9.15	9.20	12	-6	-4	8.71	8.64	4	10	-3	2.55	3.31
8	8	-4	8.05	8.48	12	-4	-4	8.81	9.11	4	12	-3	23.12	23.13
8	10	-4	1.96	1.79	12	-2	-4	11.77	11.44	4	14	-3	2.25	1.99
8	12	-4	11.54	11.80	12	0	-4	14.77	14.74	4	16	-3	25.58	25.89
8	14	-4	12.61	12.61	12	2	-4	13.95	13.94	4	18	-3	17.59	17.86
8	16	-4	12.02	11.93	12	4	-4	6.77	6.63	4	20	-3	11.72	12.02
8	18	-4	0.50	0.50	12	6	-4	8.47	8.77	4	22	-3	15.74	15.48
9	-17	-4	4.02	4.01	12	8	-4	0.00	0.26	5	-21	-3	15.27	15.48
9	-15	-4	5.97	5.07	12	10	-4	4.90	5.01	5	-19	-3	8.30	9.59
9	-13	-4	3.12	3.06	12	12	-4	1.61	0.52	5	-17	-3	19.75	9.70
9	-11	-4	11.85	11.86	13	-9	-4	1.63	0.84	5	-15	-3	20.65	27.35
9	-9	-4	8.18	8.27	13	-7	-4	3.42	0.84	5	-13	-3	1.77	5.61
9	-7	-4	3.78	3.78	13	-5	-4	4.71	3.18	5	-11	-3	6.58	7.42
9	-5	-4	2.66	2.66	13	-3	-4	3.53	3.78	5	-9	-3	10.75	6.63
9	-3	-4	6.58	6.58	13	-1	-4	4.66	4.65	5	-7	-3	14.97	2.06
9	-1	-4	16.24	16.23	13	1	-4	0.00	0.46	5	-5	-3	10.52	38.16
9	1	-4	0.70	0.86	13	3	-4	5.55	5.56	5	-3	-3	1.13	30.31
9	3	-4	15.17	15.39	13	5	-4	5.94	5.89	5	-1	-3	6.82	26.57
9	5	-4	10.87	11.08	13	7	-4	12.78	12.73	5	1	-3	1.35	1.15
9	7	-4	10.41	10.73	13	9	-4	9.94	9.57	5	3	-3	1.73	50.39
9	9	-4	9.31	9.28	13	11	-4	12.53	12.81	5	5	-3	1.88	15.58
9	11	-4	3.27	3.55	14	-4	-4	3.36	3.51	5	7	-3	1.70	12.75
9	13	-4	2.17	1.66	14	-2	-4	1.18	0.96	5	9	-3	8.10	2.92
9	15	-4	1.05	1.05	14	0	-4	0.68	1.49	5	11	-3	3.56	4.80
9	17	-4	8.93	8.93	14	2	-4	2.48	1.88	5	13	-3	2.26	18.38
10	-16	-4	5.11	5.01	14	4	-4	4.56	4.69	5	15	-3	11.63	3.24
10	-14	-4	10.43	10.27	14	6	-4	7.45	7.36	5	17	-3	11.81	12.97
10	-12	-4	3.45	3.26	0	2	-3	8.44	8.29	5	19	-3	21.90	22.25
10	-10	-4	12.84	13.23	0	4	-3	3.09	3.45	5	21	-3	6.51	6.62
10	-8	-4	6.11	6.06	0	6	-3	31.90	32.08	6	-20	-3	39.53	39.60
10	-6	-4	25.78	26.19	0	8	-3	19.19	19.48	6	-18	-3	15.04	14.78
10	-4	-4	7.14	7.37	0	10	-3	2.89	2.48	6	-16	-3	40.00	40.09
10	-2	-4	13.57	13.56	0	12	-3	1.06	0.65	6	-14	-3	7.35	7.43
10	0	-4	2.13	2.24	0	14	-3	11.09	11.24	6	-12	-3	24.90	23.27
10	2	-4	4.28	4.39	0	16	-3	5.81	5.69	6	-10	-3	7.33	7.01
10	4	-4	18.25	18.45	0	18	-3	3.23	3.15	6	-8	-3	13.79	13.81
10	6	-4	7.20	7.19	0	20	-3	2.01	1.42	6	-6	-3	19.92	20.33
10	8	-4	18.61	18.72	0	22	-3	9.20	9.00	6	-4	-3	21.52	21.53
10	10	-4	4.49	4.41	1	-21	-3	2.18	1.81	6	0	-3	29.99	30.36
10	12	-4	12.76	12.52	1	-19	-3	6.79	7.18	6	-2	-3	12.22	12.16
10	14	-4	1.75	0.31	1	-17	-3	16.18	16.60	6	2	-3	13.61	14.27
10	16	-4	0.95	0.98	1	-15	-3	1.99	2.13	6	4	-3	8.71	8.73
11	-13	-4	3.39	3.11	1	-13	-3	4.61	4.84	6	6	-3	1.97	1.72
11	-11	-4	4.07	4.12	1	-11	-3	28.85	28.70	6	8	-3	9.53	9.63
11	-9	-4	4.08	3.94	1	-9	-3	1.35	1.63	6	10	-3	0.94	1.80
11	-7	-4	2.26	2.01	1	-7	-3	9.05	8.47	6	12	-3	4.24	4.25
11	-5	-4	7.01	7.06	1	-5	-3	21.40	22.18	6	14	-3	5.78	5.54
11	-3	-4	9.95	9.96	1	-3	-3	22.35	19.62	6	16	-3	2.54	2.54
11	-1	-4	5.50	5.71	1	-1	-3	5.47	4.65	6	18	-3	5.78	6.07
11	1	-4	0.75	1.03	1	1	-3	12.36	10.11	6	20	-3	24.11	24.10
11	3	-4	17.67	18.13	1	3	-3	2.68	2.84	6	-19	-3	2.36	2.28
11	5	-4	1.14	1.14	1	5	-3	15.50	15.29	6	-17	-3	10.94	10.94
11	7	-4	6.60	6.48	1	7	-3	10.03	9.99	6	-15	-3	30.88	30.88
11	9	-4	4.67	4.89	1	9	-3	11.61	11.77	6	-13	-3	12.81	12.30
11	11	-4	0.00	0.68	1	11	-3	14.44	14.83	6	-11	-3	18.91	18.63
11	13	-4	7.55	7.96	1	13	-3	0.00	0.71	6	-9	-3	64.17	61.60
11	15	-4	2.05	0.59	1	15	-3	12.63	12.96	6	-7	-3	20.86	19.62
12	-12	-4	0.00	0.90	1	17	-3	3.60	3.45	6	-5	-3	33.26	33.56
12	-10	-4	14.08	13.93	1	19	-3			6	-3	-3	19.24	19.75



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
7	1	-3	9.53	8.93	10	10	-3	1.76	2.38	1	-17	-2	1.27	1.48
7	3	-3	20.81	21.01	10	12	-3	2.29	2.24	1	-15	-2	9.23	9.25
7	5	-3	14.59	14.49	10	14	-3	5.04	4.87	1	-13	-2	11.83	11.74
7	7	-3	11.53	11.53	10	16	-3	0.87	1.32	1	-11	-2	11.32	11.38
7	9	-3	7.28	6.93	11	-13	-3	3.22	2.86	1	-9	-2	41.04	41.13
7	11	-3	17.40	18.05	11	-11	-3	5.21	5.21	1	-7	-2	5.19	4.82
7	13	-3	0.00	0.61	11	-9	-3	3.06	2.86	1	-5	-2	14.89	12.74
7	15	-3	7.95	7.69	11	-7	-3	8.90	8.75	1	-3	-2	38.38	38.84
7	17	-3	5.20	5.49	11	-5	-3	7.05	7.08	1	-1	-2	36.10	37.16
7	19	-3	1.15	0.61	11	-3	-3	2.71	2.45	1	1	-2	32.96	32.40
8	-18	-3	13.19	13.50	11	-1	-3	21.02	21.29	1	3	-2	21.02	20.76
8	-16	-3	6.20	6.49	11	1	-3	11.85	9.22	1	5	-2	9.42	10.90
8	-14	-3	27.85	28.40	11	3	-3	3.41	3.15	1	7	-2	26.60	26.42
8	-12	-3	13.06	13.14	11	5	-3	11.20	11.19	1	9	-2	59.84	60.24
8	-10	-3	10.85	10.55	11	7	-3	4.52	4.40	1	11	-2	30.60	30.51
8	-8	-3	15.50	15.84	11	9	-3	5.20	5.20	1	13	-2	16.73	16.40
8	-6	-3	1.28	1.03	11	11	-3	8.03	7.90	1	15	-2	30.87	30.63
8	-4	-3	22.56	22.64	11	13	-3	1.77	1.18	1	17	-2	0.00	0.61
8	-2	-3	8.15	8.40	11	15	-3	6.89	6.78	1	19	-2	5.08	5.02
8	0	-3	29.17	29.84	12	-12	-3	6.89	6.89	1	21	-2	2.29	1.99
8	2	-3	27.94	28.37	12	-10	-3	2.48	3.10	1	23	-2	8.06	7.83
8	4	-3	11.33	11.27	12	-8	-3	7.73	7.74	2	-22	-2	5.30	5.35
8	6	-3	11.10	11.31	12	-6	-3	13.48	13.94	2	-20	-2	0.00	1.02
8	8	-3	7.05	6.61	12	-4	-3	7.80	7.63	2	-18	-2	2.10	0.58
8	10	-3	7.14	6.99	12	-2	-3	6.81	6.87	2	-16	-2	10.33	10.33
8	12	-3	14.31	15.16	12	0	-3	4.86	5.03	2	-14	-2	8.35	8.15
8	14	-3	5.86	5.96	12	2	-3	4.92	4.86	2	-12	-2	12.42	12.27
8	16	-3	10.77	10.67	12	4	-3	13.03	12.89	2	-10	-2	14.41	15.10
8	18	-3	2.77	2.32	12	6	-3	2.56	3.14	2	-8	-2	9.37	9.37
9	-17	-3	3.13	3.46	12	8	-3	15.50	15.40	2	-6	-2	36.83	36.57
9	-15	-3	12.12	12.04	12	10	-3	11.70	11.45	2	-4	-2	18.63	18.59
9	-13	-3	14.28	14.30	12	12	-3	7.43	7.00	2	-2	-2	7.13	7.26
9	-11	-3	4.63	4.95	13	-9	-3	15.23	15.23	2	0	-2	78.59	75.66
9	-9	-3	17.30	17.20	13	-7	-3	4.20	4.18	2	2	-2	40.69	41.61
9	-7	-3	7.75	7.68	13	-5	-3	8.03	8.01	2	4	-2	0.84	0.84
9	-5	-3	5.99	5.99	13	-3	-3	7.62	7.64	2	6	-2	22.87	22.76
9	-3	-3	9.96	9.96	13	-1	-3	11.87	12.01	2	8	-2	21.60	21.82
9	-1	-3	0.00	0.00	13	1	-3	3.49	3.53	2	10	-2	27.06	27.83
9	1	-3	0.00	1.09	13	3	-3	3.18	3.31	2	12	-2	1.30	0.89
9	3	-3	6.47	6.35	13	5	-3	3.55	3.51	2	14	-2	27.66	27.46
9	5	-3	0.00	9.66	13	7	-3	9.87	10.12	2	16	-2	13.97	14.60
9	7	-3	0.00	0.17	13	9	-3	10.95	10.75	2	18	-2	8.71	8.89
9	9	-3	11.79	12.21	14	-4	-3	5.14	5.08	2	20	-2	3.56	3.45
9	11	-3	10.45	10.04	14	-2	-3	9.24	9.08	2	22	-2	7.54	7.57
9	13	-3	7.51	7.24	14	0	-3	14.63	14.70	3	-21	-2	3.95	3.95
9	15	-3	3.24	3.32	14	2	-3	13.63	13.89	3	-19	-2	8.82	8.61
9	17	-3	1.64	0.87	14	4	-3	1.31	1.70	3	-17	-2	13.09	13.15
10	-16	-3	0.00	0.65	14	6	-3	36.82	35.54	3	-15	-2	19.43	19.60
10	-14	-3	2.41	2.55	0	2	-2	13.91	12.15	3	-13	-2	0.90	0.70
10	-12	-3	17.26	16.93	0	4	-2	46.15	46.12	3	-11	-2	19.12	18.58
10	-10	-3	11.55	11.64	0	6	-2	25.27	24.86	3	-9	-2	1.73	1.05
10	-8	-3	27.01	27.22	0	8	-2	23.15	24.03	3	-7	-2	10.09	9.79
10	-6	-3	10.64	10.78	0	10	-2	20.54	20.32	3	-5	-2	8.76	8.28
10	-4	-3	12.39	12.67	0	12	-2	15.02	14.88	3	-3	-2	10.71	9.04
10	-2	-3	8.52	8.47	0	14	-2	7.18	6.96	3	-1	-2	13.24	15.83
10	0	-3	14.38	15.07	0	16	-2	6.73	6.83	3	1	-2	22.42	23.05
10	2	-3	5.14	5.17	0	18	-2	0.00	0.89	3	3	-2	2.66	4.23
10	4	-3	0.00	0.58	0	20	-2	3.50	3.49	3	5	-2	5.69	6.37
10	6	-3	0.00	0.58	1	-21	-2	4.59	4.45	3	7	-2	18.18	18.11
10	8	-3	16.32	16.36	1	-19	-2	7.68	7.77	3	9	-2	6.97	7.08



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
6	0	-2	62.45	61.80	9	3	-2	23.54	23.50	0	2	-1	1.71	1.18
6	2	-2	41.31	41.59	9	5	-2	3.11	3.13	0	4	-1	45.84	45.57
6	4	-2	30.19	30.50	9	7	-2	6.30	6.15	0	6	-1	4.71	4.56
6	6	-2	14.69	15.36	9	9	-2	2.84	2.69	0	8	-1	34.96	34.21
6	8	-2	9.20	9.19	9	11	-2	3.54	3.03	0	10	-1	12.84	13.06
6	10	-2	11.72	12.11	9	13	-2	14.03	14.35	0	12	-1	18.07	17.98
6	12	-2	8.56	8.19	9	15	-2	3.97	3.82	0	14	-1	14.81	14.81
6	14	-2	27.36	26.71	9	17	-2	19.94	19.69	0	16	-1	16.87	17.24
6	16	-2	7.90	8.27	10	16	-2	1.44	0.34	0	18	-1	16.51	16.37
6	18	-2	8.34	8.56	10	14	-2	1.59	2.08	0	20	-1	9.05	8.99
6	20	-2	7.89	7.80	10	12	-2	11.58	11.71	0	22	-1	7.19	7.11
7	19	-2	0.00	1.13	10	10	-2	1.33	1.00	1	21	-1	6.07	6.06
7	17	-2	2.30	2.44	10	8	-2	6.99	7.37	1	19	-1	14.80	14.89
7	15	-2	0.00	0.65	10	6	-2	19.93	19.92	1	17	-1	3.11	2.86
7	13	-2	8.53	8.38	10	4	-2	5.86	5.74	1	15	-1	1.44	1.25
7	11	-2	2.45	1.81	10	2	-2	6.38	6.42	1	13	-1	8.18	7.93
7	9	-2	8.64	9.00	10	0	-2	11.10	10.81	1	11	-1	4.52	4.71
7	7	-2	15.62	15.37	10	0	-2	0.00	0.35	1	9	-1	23.51	23.57
7	5	-2	18.58	18.21	10	4	-2	12.29	12.14	1	7	-1	11.86	11.26
7	3	-2	1.21	0.76	10	8	-2	8.04	8.23	1	5	-1	16.70	17.71
7	1	-2	7.71	8.09	10	6	-2	18.04	17.77	1	3	-1	2.65	2.52
7	0	-2	10.04	10.04	10	10	-2	7.84	8.23	1	1	-1	11.58	10.99
7	0	-2	10.23	10.65	10	12	-2	12.21	12.52	1	1	-1	12.04	11.98
7	0	-2	32.32	32.12	10	14	-2	2.21	2.52	1	1	-1	33.49	33.38
7	0	-2	21.60	21.57	10	16	-2	7.40	6.86	1	1	-1	31.77	31.77
7	0	-2	31.94	31.76	11	13	-2	4.17	0.42	1	1	-1	9.88	9.07
7	0	-2	14.43	14.16	11	11	-2	3.23	3.49	1	1	-1	8.78	8.56
7	0	-2	6.05	13.86	11	9	-2	13.47	13.61	1	1	-1	6.68	6.44
7	0	-2	1.55	6.15	11	7	-2	8.42	8.64	1	1	-1	13.05	12.83
7	0	-2	10.14	10.65	11	5	-2	10.40	10.34	1	1	-1	5.33	5.36
8	18	-2	2.74	2.42	11	3	-2	2.61	2.55	1	1	-1	1.58	1.91
8	16	-2	2.66	3.85	11	1	-2	0.68	2.04	1	1	-1	2.18	0.07
8	14	-2	6.48	6.25	11	5	-2	8.75	8.84	1	1	-1	2.19	2.80
8	12	-2	16.02	15.90	11	7	-2	4.79	4.63	2	2	-1	7.07	7.10
8	10	-2	23.45	23.29	11	9	-2	10.49	10.57	2	2	-1	17.98	18.33
8	8	-2	20.90	20.99	11	11	-2	12.47	12.12	2	16	-1	10.44	10.16
8	6	-2	0.00	0.31	11	13	-2	0.78	0.30	2	14	-1	27.39	27.12
8	4	-2	22.84	22.47	12	10	-2	8.10	8.27	2	12	-1	2.80	2.88
8	2	-2	2.76	2.66	12	8	-2	2.26	2.32	2	10	-1	20.47	21.18
8	0	-2	16.73	16.45	12	6	-2	4.36	4.36	2	8	-1	8.13	7.82
8	0	-2	11.95	12.11	12	4	-2	12.64	12.52	2	6	-1	12.22	12.38
8	0	-2	7.84	7.80	12	2	-2	7.25	7.32	2	4	-1	50.55	51.00
8	0	-2	27.57	27.61	12	0	-2	18.29	18.66	2	2	-1	10.11	9.27
8	0	-2	6.87	6.56	12	4	-2	14.28	14.67	2	0	-1	70.65	68.97
8	0	-2	11.20	11.50	12	6	-2	10.47	10.47	2	2	-1	22.01	21.51
8	0	-2	6.22	6.05	12	8	-2	2.81	11.07	2	4	-1	52.32	54.09
8	0	-2	2.19	0.38	12	10	-2	5.68	2.98	2	6	-1	1.94	1.94
8	0	-2	4.65	4.80	12	12	-2	2.69	5.52	2	8	-1	45.11	45.11
9	17	-2	11.57	11.27	13	12	-2	1.77	2.69	2	10	-1	12.06	12.28
9	15	-2	3.99	3.76	13	10	-2	1.65	0.25	2	12	-1	29.95	29.87
9	13	-2	10.81	10.83	13	8	-2	5.37	5.44	2	14	-1	18.54	18.36
9	11	-2	2.15	1.65	13	6	-2	0.66	0.39	2	16	-1	6.73	6.66
9	9	-2	4.97	5.01	13	4	-2	2.49	2.79	2	18	-1	0.37	1.67
9	7	-2	5.19	5.16	13	2	-2	4.54	4.62	2	20	-1	6.52	6.41
9	5	-2	9.52	9.58	13	0	-2	4.74	4.72	3	21	-1	8.85	8.78
9	3	-2	10.10	9.38	13	2	-2	6.78	6.91	3	19	-1	1.50	0.82
9	1	-2	2.83	2.38	13	4	-2	9.83	9.68	3	17	-1	7.27	7.16

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	17	-1	8.55	8.44	8	14	-1	1.12	1.41	12	8	-1	2.73	3.26
5	19	-1	4.51	4.53	8	16	-1	12.78	12.91	12	10	-1	4.70	4.76
5	21	-1	7.51	7.12	8	18	-1	1.92	1.09	13	-5	-1	3.72	3.72
6	-20	-1	9.36	9.13	9	-17	-1	10.51	10.53	13	-3	-1	2.32	2.40
6	-18	-1	10.60	10.51	9	-15	-1	14.01	14.16	13	-1	-1	8.04	6.95
6	-16	-1	8.64	8.82	9	-13	-1	2.70	2.54	13	1	-1	6.16	6.09
6	-14	-1	21.39	21.24	9	-11	-1	6.85	6.89	13	3	-1	0.00	0.62
6	-12	-1	5.60	5.52	9	-9	-1	1.20	0.83	13	5	-1	4.38	4.55
6	-10	-1	5.72	5.77	9	-7	-1	8.24	8.27	13	7	-1	0.89	1.88
6	-8	-1	3.59	3.47	9	-5	-1	8.41	8.36	13	9	-1	11.44	11.06
6	-6	-1	2.00	1.13	9	-3	-1	8.03	7.61	0	2	0	73.71	73.71
6	-4	-1	30.98	30.63	9	-1	-1	16.65	16.88	0	6	0	50.16	49.48
6	-2	-1	12.44	12.08	9	1	-1	11.79	12.03	0	8	0	31.99	30.90
6	0	-1	12.50	12.09	9	3	-1	11.89	11.46	0	10	0	34.99	36.25
6	2	-1	24.42	23.99	9	5	-1	3.67	3.39	0	12	0	5.41	5.39
6	4	-1	1.70	1.40	9	7	-1	17.44	17.15	0	14	0	27.33	27.23
6	6	-1	1.85	2.08	9	9	-1	7.12	6.89	0	16	0	21.04	20.76
6	8	-1	16.85	17.30	9	11	-1	0.00	1.43	0	18	0	17.25	17.52
6	10	-1	3.13	2.90	9	13	-1	4.42	4.04	0	20	0	3.82	3.92
6	12	-1	4.51	4.05	9	15	-1	7.52	7.04	0	22	0	4.75	4.64
6	14	-1	3.68	2.98	9	17	-1	1.87	1.61	1	-21	0	6.97	6.98
6	16	-1	5.90	6.17	10	-14	-1	5.49	5.79	1	-19	0	8.83	6.67
6	18	-1	5.74	6.08	10	-12	-1	15.21	15.59	1	-17	0	15.06	15.19
6	20	-1	9.24	8.92	10	-10	-1	13.88	14.18	1	-15	0	2.17	1.90
7	-19	-1	5.65	5.83	10	-8	-1	22.71	22.56	1	-13	0	4.14	4.36
7	-17	-1	5.34	5.35	10	-6	-1	5.42	5.30	1	-11	0	34.05	33.90
7	-15	-1	0.00	0.73	10	-4	-1	20.72	20.74	1	-9	0	22.05	20.43
7	-13	-1	18.45	18.49	10	-2	-1	4.66	4.47	1	-7	0	21.57	18.50
7	-11	-1	3.06	3.16	10	0	-1	8.61	8.65	1	-5	0	53.43	52.61
7	-9	-1	20.25	19.62	10	2	-1	11.24	11.04	1	-3	0	9.10	8.58
7	-7	-1	11.16	11.20	10	4	-1	3.92	3.86	1	-1	0	8.23	7.90
7	-5	-1	21.16	20.91	10	6	-1	23.73	24.22	1	3	0	38.04	38.35
7	-3	-1	6.81	6.86	10	8	-1	1.01	0.32	1	5	0	2.34	1.19
7	-1	-1	10.71	11.17	10	10	-1	7.42	7.33	1	7	0	17.24	16.49
7	1	-1	10.63	11.08	10	12	-1	1.97	1.55	1	9	0	36.77	36.95
7	3	-1	11.14	10.87	10	14	-1	10.60	10.43	1	11	0	14.21	11.99
7	5	-1	16.05	15.96	10	16	-1	2.77	2.66	1	13	0	15.99	14.27
7	7	-1	5.10	5.12	11	-13	-1	0.56	0.94	1	15	0	5.01	4.82
7	9	-1	20.46	20.09	11	-11	-1	0.00	0.49	1	17	0	9.58	9.46
7	11	-1	14.56	14.63	11	-9	-1	4.44	4.84	1	19	0	3.48	3.48
7	13	-1	0.00	1.05	11	-7	-1	4.27	4.21	1	21	0	15.39	15.39
7	15	-1	9.27	9.19	11	-5	-1	3.66	3.90	2	-22	0	4.52	4.46
7	17	-1	4.50	4.16	11	-3	-1	8.78	8.73	2	-20	0	15.59	15.80
8	-18	-1	2.30	1.94	11	-1	-1	4.07	3.85	2	-18	0	3.33	3.30
8	-16	-1	2.65	0.99	11	3	-1	0.00	0.34	2	-16	0	5.98	6.30
8	-14	-1	13.00	13.60	11	5	-1	3.87	3.65	2	-14	0	22.93	22.73
8	-12	-1	8.57	8.42	11	7	-1	2.00	1.95	2	-12	0	17.48	16.73
8	-10	-1	5.05	4.68	11	9	-1	0.00	0.81	2	-10	0	58.85	58.05
8	-8	-1	9.98	10.21	11	11	-1	0.00	0.90	2	-8	0	51.28	50.00
8	-6	-1	8.04	7.77	11	13	-1	11.85	11.80	2	-6	0	22.94	21.50
8	-4	-1	13.00	12.95	12	-10	-1	1.16	0.73	2	-4	0	60.12	58.29
8	-2	-1	5.71	5.50	12	-8	-1	0.00	0.81	2	-2	0	1.47	0.20
8	0	-1	31.53	30.99	12	-6	-1	9.97	10.16	2	2	0	56.26	56.21
8	2	-1	17.29	17.56	12	-4	-1	9.56	9.85	2	4	0	30.60	28.69
8	4	-1	15.34	15.48	12	-2	-1	18.91	19.37	2	6	0	36.67	36.79
8	6	-1	10.60	10.71	12	0	-1	11.71	11.65	2	8	0	61.51	62.54
8	8	-1	15.90	15.85	12	2	-1	0.00	1.09	2	10	0	1.89	1.24
8	10	-1	2.22	2.18	12	4	-1	8.78	8.86	2	12	0	21.27	21.00
8	12	-1	23.11	22.67	12	6	-1							

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	3	0	22.55	22.07	12	6	0	10.50	10.50	2	18	1	7.21	7.24
5	5	0	18.31	18.01	12	8	0	2.80	2.80	2	20	1	4.63	4.79
5	7	0	19.64	20.17	13	-3	0	9.15	3.35	2	22	1	8.96	8.76
5	9	0	24.82	24.82	13	-1	0	6.79	6.76	3	-21	1	15.31	15.34
5	11	0	12.37	11.96	13	3	0	1.35	1.83	3	-19	1	6.06	6.29
5	13	0	15.86	15.32	13	3	0	12.34	12.04	3	-17	1	16.44	16.71
5	15	0	5.82	5.88	13	0	1	15.29	14.88	3	-15	1	22.53	22.65
5	17	0	8.91	8.61	13	0	1	1.36	0.35	3	-13	1	15.56	15.35
5	19	0	4.45	4.45	13	2	4	10.27	11.03	3	-11	1	5.75	5.82
5	21	0	1.81	1.25	13	0	6	33.15	33.42	3	-9	1	2.63	2.96
6	-20	0	4.69	4.52	13	0	8	3.97	3.80	3	-7	1	12.60	12.91
6	-18	0	1.75	1.23	13	0	10	3.93	3.82	3	-5	1	29.44	28.51
6	-16	0	4.60	4.74	13	0	12	8.75	8.37	3	-3	1	17.87	18.38
6	-14	0	15.98	15.77	13	0	14	1.07	1.43	3	-1	1	20.76	19.23
6	-12	0	1.68	1.56	13	0	16	9.15	8.98	3	3	1	16.26	15.04
6	-10	0	3.23	3.49	13	0	18	5.02	5.03	3	3	1	12.02	12.65
6	-8	0	5.68	5.35	13	0	20	9.89	9.89	3	5	1	39.19	39.02
6	-6	0	10.68	10.73	13	0	22	2.67	2.33	3	7	1	11.69	11.45
6	-4	0	45.77	45.99	13	1	0	2.54	2.59	3	9	1	14.00	13.49
6	-2	0	21.04	20.89	13	1	1	7.95	7.79	3	11	1	12.09	12.25
6	0	0	54.82	54.82	13	1	1	8.74	8.61	3	13	1	13.86	13.87
6	2	0	38.54	38.71	13	1	1	7.91	7.64	3	15	1	1.38	1.11
6	4	0	47.25	47.98	13	1	1	21.11	20.79	3	17	1	1.64	1.19
6	6	0	9.99	10.31	13	1	1	11.12	10.99	3	19	1	3.89	3.69
6	8	0	5.32	5.43	13	1	1	29.20	29.09	3	21	1	0.00	1.43
6	10	0	5.52	5.48	13	1	1	15.99	15.33	4	-20	1	1.68	0.74
6	12	0	14.37	14.09	13	1	1	31.91	32.37	4	-18	1	1.45	1.00
6	14	0	25.84	25.75	13	1	1	52.68	51.23	4	-16	1	0.22	0.29
6	16	0	11.95	11.89	13	1	1	31.37	30.87	4	-14	1	15.84	15.94
6	18	0	8.11	8.01	13	1	1	51.28	50.87	4	-12	1	3.11	2.22
6	20	0	11.15	11.06	13	1	1	40.74	41.66	4	-10	1	16.96	17.22
7	-19	0	12.06	11.97	13	1	1	33.72	34.12	4	0	1	3.46	3.49
7	-17	0	4.08	4.13	13	1	1	15.12	14.78	4	2	1	31.29	31.04
7	-15	0	2.27	1.69	13	1	1	8.47	9.06	4	4	1	26.22	26.57
7	-13	0	6.80	6.70	13	1	1	14.27	14.36	4	6	1	10.19	10.06
7	-11	0	0.43	0.24	13	1	1	12.73	12.63	4	8	1	12.01	12.08
7	-9	0	17.73	17.46	13	1	1	19.82	19.87	4	10	1	19.60	19.42
7	-7	0	6.71	6.53	13	1	1	7.40	7.34	4	14	1	13.05	13.19
7	-5	0	11.87	11.86	13	1	1	9.00	9.01	4	16	1	15.90	15.43
7	-3	0	20.89	20.42	13	1	1	6.84	6.81	4	18	1	2.63	2.76
7	-1	0	17.45	17.11	13	1	1	2.80	2.73	4	19	1	5.13	5.03
7	1	0	10.91	10.63	13	1	1	2.58	2.51	4	17	1	8.71	8.59
7	3	0	14.38	14.36	13	1	1	4.46	4.46	4	15	1	0.00	1.20
7	5	0	8.94	8.52	13	1	1	3.57	3.57	4	13	1	4.59	4.51
7	7	0	13.46	13.41	13	1	1	22.51	21.92	4	11	1	15.11	15.33
7	9	0	15.24	15.24	13	1	1	9.95	10.29	4	9	1	6.69	6.04
7	11	0	4.14	4.14	13	1	1	25.47	24.94	4	7	1	11.50	11.54
7	13	0	9.57	9.57	13	1	1	4.44	5.07	4	5	1	17.26	17.26
7	15	0	10.94	10.91	13	1	1	45.13	41.57	4	3	1	14.90	14.31
7	17	0	3.42	3.28	13	1	1	20.68	19.41	4	1	1	1.87	1.70
7	19	0	7.74	8.07	13	1	1	4.35	3.07	4	1	1	2.82	2.98
8	-18	0	4.47	4.26	13	1	1	17.45	17.46	4	1	1	15.30	15.33
8	-16	0	4.41	4.26	13	1	1	2.13	1.98	4	1	1	6.69	6.04
8	-14	0	11.88	11.72	13	1	1	2.13	2.13	4	1	1	11.50	11.54
8	-12	0	12.49	12.49	13	1	1	22.46	22.88	4	1	1	17.06	17.26
8	-10	0	24.60	24.51	13	1	1	13.65	13.87	4	1	1	14.90	14.31
8	-8	0	30.17	29.90	13	1	1	3.65	3.30	4	1	1	1.87	1.70
8	-6	0	16.12	15.98	13	1	1	12.85	12.41	4	1	1	2.82	2.98
8	-4	0	17.44	17.36	13	1	1	0.00	0.26	4	1	1	15.30	15.33



ALBIT ROC TOURNE				STRUCTURE FACTORS				PAGE 13						
H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
5	9	1	5.98	6.36	9	15	1	11.66	12.12	1	17	2	28.37	28.10
5	11	1	0.00	0.64	9	13	1	3.92	4.06	1	15	2	16.17	15.88
5	13	1	2.91	3.17	9	11	1	6.54	6.33	1	13	2	15.06	14.98
5	15	1	1.36	4.45	9	9	1	8.95	9.00	1	11	2	10.93	11.15
5	17	1	5.15	4.98	9	7	1	10.60	10.33	1	9	2	9.98	10.09
5	19	1	8.66	5.88	9	5	1	3.32	3.29	1	7	2	22.70	22.00
6	18	1	5.51	8.43	9	3	1	16.94	17.04	1	5	2	2.68	3.04
6	16	1	19.39	5.47	9	1	1	17.33	17.23	1	3	2	15.14	16.35
6	14	1	9.74	20.12	9	1	1	0.00	0.47	1	1	2	14.36	15.73
6	12	1	12.58	10.10	9	3	1	11.17	11.13	1	3	2	7.28	10.07
6	10	1	8.96	12.31	9	5	1	10.51	10.35	1	5	2	5.77	4.45
6	8	1	5.02	4.69	9	7	1	17.03	17.31	1	7	2	18.24	18.61
6	6	1	26.89	9.23	9	9	1	2.73	2.64	1	9	2	20.29	20.73
6	4	1	0.67	0.37	9	13	1	3.49	3.75	1	13	2	19.74	19.81
6	2	1	25.31	25.54	9	15	1	2.09	2.43	1	15	2	11.98	11.78
6	0	1	8.26	7.85	10	12	1	2.04	1.05	1	17	2	5.30	5.45
6	8	1	15.40	15.25	10	10	1	5.83	5.88	1	19	2	3.81	4.00
6	6	1	6.57	6.14	10	8	1	5.51	5.51	1	21	2	6.49	6.30
6	4	1	14.40	14.76	10	6	1	6.59	6.43	1	23	2	7.83	7.61
6	2	1	15.08	14.76	10	4	1	6.53	6.57	1	25	2	6.25	6.45
6	0	1	14.02	14.12	10	2	1	3.36	3.65	1	27	2	7.26	7.18
6	14	1	3.57	3.89	10	0	1	6.97	6.76	1	29	2	2.82	2.75
6	16	1	5.89	5.88	10	2	1	4.55	4.53	1	31	2	8.52	8.49
6	18	1	2.95	2.79	10	4	1	2.30	2.30	1	33	2	18.90	18.47
7	17	1	3.36	3.51	10	6	1	10.01	9.90	1	35	2	1.17	0.41
7	15	1	7.76	7.80	10	8	1	0.00	1.46	1	37	2	59.57	59.53
7	13	1	14.79	15.20	10	10	1	3.48	3.37	1	39	2	22.36	22.34
7	11	1	8.66	8.95	10	12	1	12.88	12.81	1	41	2	35.02	34.03
7	9	1	18.23	17.92	11	9	1	1.63	1.90	1	43	2	32.79	32.02
7	7	1	4.22	4.05	11	7	1	3.79	3.88	1	45	2	15.31	14.58
7	5	1	13.19	13.12	11	5	1	0.00	1.89	1	47	2	51.36	50.05
7	3	1	13.91	14.21	11	3	1	7.88	7.97	1	49	2	40.45	39.79
7	1	1	18.64	18.67	11	1	1	9.42	9.57	1	51	2	55.23	56.45
7	7	1	21.74	21.67	11	1	1	3.10	3.02	1	53	2	60.25	61.43
7	5	1	14.40	14.13	11	3	1	2.78	2.75	1	55	2	34.53	34.75
7	3	1	9.04	9.12	11	5	1	2.10	2.96	1	57	2	9.72	9.53
7	1	1	6.53	6.51	11	7	1	9.48	9.33	1	59	2	12.49	12.60
7	7	1	11.31	11.44	11	9	1	4.15	3.90	1	61	2	1.43	1.50
7	5	1	3.71	3.65	12	6	1	3.77	3.98	1	63	2	2.77	1.69
7	3	1	12.36	11.97	12	4	1	0.69	2.04	1	65	2	13.90	13.56
7	1	1	5.45	5.28	12	2	1	82.62	87.63	1	67	2	2.42	2.60
7	7	1	6.87	7.12	12	0	1	12.88	12.71	1	69	2	16.82	16.07
8	16	1	5.12	5.00	12	2	1	4.26	4.35	1	71	2	3.09	3.15
8	14	1	13.67	13.72	12	4	1	0.69	2.50	1	73	2	14.52	15.01
8	12	1	6.14	6.10	12	6	1	82.62	87.63	1	75	2	13.90	13.56
8	10	1	25.08	24.88	12	8	1	22.29	23.09	1	77	2	2.42	2.60
8	8	1	12.99	12.96	12	10	1	30.74	30.35	1	79	2	22.85	22.91
8	6	1	15.05	14.81	12	12	1	13.38	14.15	1	81	2	16.07	16.07
8	4	1	10.09	10.26	12	14	1	21.05	21.59	1	83	2	4.66	4.47
8	2	1	11.10	11.47	12	16	1	8.71	8.75	1	85	2	12.17	12.53
8	0	1	5.85	5.89	12	18	1	26.43	26.65	1	87	2	0.00	0.45
8	8	1	10.88	10.62	12	20	1	6.39	6.38	1	89	2	24.92	25.33
8	6	1	3.90	3.88	12	22	1	15.30	15.52	1	91	2	6.72	7.30
8	4	1	11.90	11.74	12	24	1	2.28	2.71	1	93	2	7.11	7.17
8	2	1	7.07	6.62	12	26	1	16.43	16.13	1	95	2	14.48	14.09
8	0	1	0.00	0.20	12	28	1	3.57	3.79	1	97	2	5.14	5.14
8	8	1	1.98	1.96	12	30	1	1.96	1.96	1	99	2	14.48	14.09
8	6	1	1.98	1.96	12	32	1	1.96	1.96	1	101	2	15.67	15.65
8	4	1	1.98	1.96	12	34	1	1.96	1.96	1	103	2	16.89	16.89
8	2	1	1.98	1.96	12	36	1	1.96	1.96	1	105	2	1.38	1.38
8	0	1	1.98	1.96	12	38	1	1.96	1.96	1	107	2	1.38	1.38



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
6	12	2	13.04	13.09	10	2	2	4.75	4.81	2	8	3	9.39	9.69
6	14	2	11.77	11.82	10	4	2	16.62	15.80	2	10	3	0.00	0.53
6	16	2	1.40	2.77	10	6	2	4.77	4.66	2	12	3	6.78	6.81
6	18	2	1.96	1.42	10	8	2	3.25	2.99	2	14	3	22.21	22.66
7	17	2	18.35	18.73	10	10	2	8.94	9.05	2	16	3	5.80	5.91
7	15	2	7.54	7.56	11	-7	2	1.58	1.23	2	18	3	11.59	11.68
7	13	2	13.11	13.00	11	-5	2	7.61	7.74	2	20	3	6.51	6.59
7	11	2	6.36	6.83	11	-3	2	9.98	9.84	3	-21	3	11.19	11.46
7	9	2	4.60	4.71	11	-1	2	3.09	3.28	3	-19	3	2.48	1.81
7	7	2	10.49	10.62	11	1	2	0.00	1.08	3	-17	3	14.45	14.27
7	5	2	6.44	6.36	11	3	2	5.03	4.92	3	-15	3	4.16	4.24
7	3	2	21.88	21.82	11	5	2	4.72	4.60	3	-13	3	15.85	16.07
7	1	2	14.77	14.95	11	7	2	4.89	5.03	3	-11	3	14.34	14.52
7	1	2	14.39	14.06	11	9	2	11.43	10.40	3	-9	3	20.60	20.68
7	1	2	18.84	18.92	11	11	2	17.67	17.58	3	-7	3	34.73	34.63
7	1	2	3.91	3.98	0	0	2	19.17	19.69	3	-5	3	29.82	30.01
7	1	2	7.44	7.80	0	2	2	45.90	46.84	3	-3	3	11.44	11.10
7	1	2	11.11	11.18	0	4	2	23.58	24.11	3	-1	3	27.40	27.52
7	1	2	15.88	15.86	0	6	2	26.86	27.43	3	1	3	3.13	2.65
7	1	2	10.31	10.31	0	8	2	8.12	7.91	3	3	3	45.94	45.98
7	1	2	5.64	5.68	0	10	2	4.12	4.06	3	5	3	2.01	1.56
8	16	2	8.98	8.96	0	12	2	6.85	6.73	3	7	3	39.91	40.93
8	14	2	9.67	9.29	0	14	2	7.52	7.57	3	9	3	18.04	18.32
8	12	2	7.14	7.17	1	-21	2	3.35	3.11	3	11	3	2.43	2.15
8	10	2	13.68	13.68	1	-19	2	5.29	5.01	3	13	3	1.74	0.65
8	8	2	14.23	14.29	1	-17	2	0.48	2.00	3	15	3	6.57	6.80
8	6	2	7.57	7.66	1	-15	2	4.63	4.68	3	17	3	2.47	2.80
8	4	2	3.47	3.46	1	-13	2	1.84	1.58	3	19	3	4.01	4.08
8	2	2	12.68	12.68	1	-11	2	9.73	9.86	3	20	3	5.88	6.07
8	0	2	11.13	11.35	1	-9	2	14.86	14.45	3	22	3	11.73	11.58
8	0	2	10.20	9.96	1	-7	2	5.64	5.11	3	24	3	1.39	1.20
8	0	2	23.26	23.16	1	-5	2	30.36	29.81	3	26	3	13.12	13.08
8	0	2	19.07	19.27	1	-3	2	24.61	24.26	3	28	3	22.80	22.92
8	0	2	3.57	3.29	1	1	2	12.08	11.70	3	30	3	13.47	13.06
8	0	2	13.64	13.80	1	3	2	4.41	4.31	3	32	3	9.72	10.07
8	0	2	0.00	0.20	1	5	2	18.13	18.26	3	34	3	14.03	14.44
8	0	2	0.00	0.43	1	7	2	8.41	8.74	3	36	3	18.30	18.47
8	0	2	5.34	5.24	1	9	2	22.48	23.29	3	38	3	8.19	8.19
8	0	2	18.49	18.61	1	11	2	0.87	0.70	3	40	3	3.34	3.25
8	0	2	6.82	7.08	1	13	2	15.25	15.56	3	42	3	9.94	9.53
8	0	2	11.23	11.33	1	15	2	11.48	11.72	3	44	3	0.00	1.76
8	0	2	4.03	4.10	1	17	2	4.76	4.91	3	46	3	10.26	10.24
8	0	2	1.40	1.29	1	19	2	5.07	5.07	3	48	3	2.62	2.33
8	0	2	1.27	1.86	2	-20	2	6.39	6.47	3	50	3	9.14	8.93
8	0	2	9.38	9.33	2	-18	2	5.94	6.14	3	52	3	0.67	1.20
8	0	2	5.88	5.94	2	-16	2	12.07	12.05	3	54	3	23.60	24.02
8	0	2	9.91	9.99	2	-14	2	20.05	20.27	3	56	3	1.06	1.31
8	0	2	3.22	3.45	2	-12	2	3.38	3.29	3	58	3	18.53	18.45
8	0	2	0.00	1.57	2	-10	2	15.14	14.66	3	60	3	3.21	3.13
8	0	2	5.55	5.68	2	-8	2	4.80	4.87	3	62	3	19.98	20.19
8	0	2	7.36	7.64	2	-6	2	47.11	46.28	3	64	3	8.33	8.39
8	0	2	2.62	2.95	2	-4	2	30.99	29.98	3	66	3	20.24	19.99
8	0	2	7.20	7.39	2	-2	2	19.99	19.81	3	68	3	16.14	16.16
8	0	2	10.87	10.79	2	0	2	8.41	8.09	3	70	3	5.88	5.85
8	0	2	6.99	6.89	2	2	2	41.87	41.93	3	72	3	2.80	2.88
8	0	2	23.14	23.68	2	4	2	11.93	12.01	3	74	3	10.80	10.91
8	0	2			2	6	2			3	76	3	7.49	7.51

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
9	-3	3	2.92	2.96	9	-1	4	15.37	15.70	9	-1	4	5.86	5.84
9	-1	3	8.79	9.06	9	1	4	8.89	8.94	9	1	4	4.87	5.24
9	1	3	10.00	10.01	9	3	4	21.00	21.29	9	3	4	2.17	2.19
9	3	3	1.19	1.85	9	5	4	0.50	0.64	9	5	4	11.31	11.41
9	5	3	13.82	14.08	9	7	4	5.62	5.52	9	7	4	12.58	13.00
9	7	3	6.15	5.94	9	9	4	9.91	9.89	9	9	4	12.26	12.45
9	9	3	15.48	15.25	9	7	4	5.99	6.06	9	7	4	11.21	11.16
9	11	3	5.34	5.31	9	9	4	6.24	6.31	9	9	4	0.00	0.37
10	-8	3	5.84	5.69	10	-4	4	11.62	11.36	10	-4	4	8.45	8.40
10	-6	3	3.18	3.18	10	-2	4	4.61	4.65	10	-2	4	12.20	12.22
10	-4	3	9.52	9.62	10	0	4	0.00	0.85	10	0	4	0.00	1.19
10	-2	3	1.73	1.95	10	2	4	2.60	0.93	10	2	4	1.94	3.11
10	0	3	13.88	14.47	10	4	4	2.72	0.93	10	4	4	18.27	18.93
10	2	3	1.97	2.13	10	0	5	10.76	10.44	10	0	5	0.51	1.60
10	4	3	5.03	5.21	10	2	5	3.73	4.01	10	2	5	0.51	1.60
10	6	3	1.64	2.51	10	4	5	23.42	24.18	10	4	5	28.93	29.72
10	8	3	7.56	7.49	10	6	5	17.45	17.23	10	6	5	8.57	8.26
10	10	3	5.22	5.16	10	8	5	9.17	9.08	10	8	5	14.07	14.62
11	-3	3	10.20	10.12	11	-3	4	15.37	15.51	11	-3	4	3.85	3.94
11	-1	3	12.35	12.65	11	-1	4	7.30	7.37	11	-1	4	9.30	9.58
11	1	3	7.11	7.14	11	1	4	12.96	13.13	11	1	4	0.00	0.18
11	3	3	20.98	19.88	11	3	4	4.03	3.71	11	3	4	0.85	1.58
0	0	4	21.29	21.42	0	0	4	25.13	25.75	0	0	4	12.95	12.66
0	2	4	12.16	12.02	0	2	4	16.61	16.83	0	2	4	5.04	5.03
0	4	4	31.31	32.02	0	4	4	10.10	10.13	0	4	4	10.45	10.56
0	6	4	25.87	26.38	0	6	4	11.64	11.57	0	6	4	3.63	3.71
0	8	4	12.62	13.15	0	8	4	5.62	5.53	0	8	4	15.49	15.66
0	10	4	9.77	10.14	0	10	4	2.24	0.30	0	10	4	20.96	21.51
0	12	4	0.99	1.06	0	12	4	4.19	4.14	0	12	4	15.79	16.04
0	14	4	2.87	2.73	0	14	4	0.52	0.99	0	14	4	9.10	9.57
0	16	4	6.37	6.39	0	16	4	4.96	4.99	0	16	4	36.63	36.39
0	18	4	2.64	2.52	0	18	4	7.19	7.41	0	18	4	5.10	5.24
0	20	4	9.97	10.04	0	20	4	2.62	2.60	0	20	4	3.55	3.35
1	-19	4	12.32	12.80	1	-19	4	7.19	7.41	1	-19	4	22.59	22.10
1	-17	4	25.86	26.23	1	-17	4	21.52	21.86	1	-17	4	6.73	6.61
1	-15	4	0.00	1.31	1	-15	4	17.98	17.76	1	-15	4	19.08	19.17
1	-13	4	14.84	15.26	1	-13	4	13.83	13.76	1	-13	4	22.82	23.26
1	-11	4	4.18	4.22	1	-11	4	17.18	17.22	1	-11	4	10.72	11.01
1	-9	4	1.48	0.99	1	-9	4	11.35	11.41	1	-9	4	8.87	9.05
1	-7	4	43.02	43.30	1	-7	4	5.79	5.88	1	-7	4	9.45	9.77
1	-5	4	0.00	0.13	1	-5	4	15.09	15.61	1	-5	4	5.08	4.93
1	-3	4	51.52	50.89	1	-3	4	0.00	1.78	1	-3	4	9.92	10.10
1	-1	4	20.43	20.07	1	-1	4	5.47	5.50	1	-1	4	2.78	2.78
1	1	4	46.81	46.87	1	1	4	1.52	1.69	1	1	4	6.53	6.36
1	3	4	7.73	7.98	1	3	4	8.37	8.50	1	3	4	1.74	1.24
1	5	4	25.98	26.16	1	5	4	2.60	2.32	1	5	4	6.24	6.03
1	7	4	3.50	3.77	1	7	4	9.59	9.76	1	7	4	5.02	5.18
1	9	4	6.91	7.01	1	9	4	6.61	6.25	1	9	4	8.22	8.16
1	11	4	5.07	5.09	1	11	4	8.54	8.54	1	11	4	6.77	7.04
1	13	4	18.87	18.77	1	13	4	21.73	21.94	1	13	4	0.00	0.07
1	15	4	5.80	5.81	1	15	4	2.66	3.26	1	15	4	12.97	12.82
1	17	4	7.21	7.22	1	17	4	12.31	12.31	1	17	4	18.14	18.23
2	-18	4	8.41	8.68	2	-18	4	6.86	6.95	2	-18	4	28.01	27.66
2	-16	4	2.53	1.75	2	-16	4	3.49	3.59	2	-16	4	21.44	20.69
2	-14	4	9.72	10.20	2	-14	4	0.69	1.68	2	-14	4	7.70	7.46
2	-12	4	12.55	12.56	2	-12	4	17.73	18.10	2	-12	4	21.82	21.95
2	-10	4	7.33	1.60	2	-10	4	7.36	7.41	2	-10	4	0.00	0.71
2	-8	4	17.94	7.20	2	-8	4	15.29	14.88	2	-8	4	3.23	3.31
2	-6	4	18.48	18.48	2	-6	4	2.26	1.31	2	-6	4	4.67	4.65
2	-4	4	17.94	18.48	2	-4	4	14.30	14.30	2	-4	4	13.25	13.40

H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
2	14	5	18.15	18.30	6	-8	5	4.64	4.55	1	-1	6	4.09	4.29	4	14	6	5.90	5.91
2	16	5	5.57	5.47	6	-6	5	9.23	9.00	1	1	6	2.76	2.51	5	15	6	1.98	0.04
2	18	5	15.63	15.15	6	-4	5	6.55	6.62	1	3	6	6.95	6.88	5	13	6	11.57	11.06
3	-17	5	4.06	3.92	6	-2	5	9.52	9.58	1	5	6	9.16	8.93	5	11	6	1.24	0.32
3	-15	5	1.74	2.43	6	0	5	13.07	13.02	1	7	6	3.72	3.61	5	-9	6	2.42	2.46
3	-13	5	8.51	8.28	6	2	5	8.60	8.90	1	9	6	1.33	0.99	5	-7	6	17.39	17.87
3	-11	5	5.75	5.65	6	4	5	10.86	10.88	1	11	6	1.24	0.29	5	-5	6	1.28	1.36
3	-9	5	1.41	0.88	6	6	5	1.48	1.48	1	13	6	1.40	2.22	5	-3	6	23.97	24.17
3	-7	5	2.33	2.36	6	8	5	5.22	5.14	1	15	6	0.00	10.76	5	-1	6	5.28	5.30
3	-5	5	10.41	10.74	6	10	5	7.47	7.13	1	17	6	3.37	0.29	5	3	6	1.49	1.52
3	-3	5	10.62	10.73	6	12	5	5.27	5.18	2	-18	6	11.77	3.24	5	5	6	14.34	14.53
3	-1	5	3.62	3.54	6	14	5	7.32	7.46	2	-16	6	15.31	11.85	5	7	6	0.00	1.62
3	3	5	2.25	2.45	6	-11	5	4.41	4.50	2	-14	6	8.66	8.90	5	9	6	6.05	6.11
3	5	5	19.40	19.88	6	-9	5	15.10	15.07	2	-12	6	12.42	12.58	5	11	6	4.46	4.76
3	7	5	11.99	12.40	6	-7	5	14.57	14.37	2	-10	6	5.70	5.74	5	13	6	0.00	0.76
3	9	5	7.10	7.19	6	-5	5	16.20	16.35	2	-8	6	4.41	4.36	5	15	6	7.68	7.64
3	11	5	24.57	25.29	6	-3	5	1.63	2.01	2	-6	6	2.12	2.04	6	-12	6	5.74	5.57
3	13	5	1.41	2.56	6	-1	5	12.35	12.15	2	-4	6	14.10	14.20	6	-8	6	14.74	14.66
3	15	5	9.74	9.48	6	1	5	9.81	9.60	2	0	6	21.31	21.19	6	-6	6	6.36	6.33
3	17	5	3.64	3.74	6	3	5	10.82	10.57	2	2	6	1.17	0.25	6	-4	6	6.44	8.61
3	19	5	3.08	2.80	6	5	5	13.30	13.22	2	4	6	9.10	9.26	6	-2	6	8.44	4.80
4	-18	5	4.89	4.89	6	7	5	0.98	0.12	2	6	6	7.47	7.52	6	0	6	4.70	7.07
4	-16	5	3.18	3.18	6	7	5	22.66	22.80	2	8	6	7.24	7.52	6	2	6	7.22	7.39
4	-14	5	2.06	2.23	6	9	5	0.39	1.51	2	8	6	7.64	7.52	6	4	6	0.00	0.14
4	-12	5	12.87	13.18	6	11	5	2.33	2.26	2	10	6	3.37	3.57	6	6	6	17.38	17.45
4	-10	5	0.00	0.68	6	10	5	3.68	3.44	2	12	6	11.12	11.29	6	6	6	6.26	6.12
4	-8	5	14.29	14.17	6	8	5	5.77	5.91	2	14	6	0.00	1.34	6	8	6	6.42	6.37
4	-6	5	4.31	4.47	6	-8	5	0.00	0.97	3	16	6	9.82	9.93	6	10	6	6.42	6.37
4	-4	5	13.69	13.69	6	-4	5	1.63	0.49	3	17	6	10.56	10.60	6	12	6	12.98	13.15
4	-2	5	2.79	3.01	6	0	5	6.38	6.44	3	15	6	2.88	2.57	6	12	6	10.77	10.53
4	0	5	1.11	0.42	6	2	5	4.47	4.23	3	13	6	25.43	25.43	6	10	6	6.88	6.82
4	2	5	10.23	10.31	6	4	5	1.31	2.20	3	11	6	11.64	11.48	6	8	6	4.21	4.11
4	4	5	1.27	1.26	6	4	5	4.85	4.58	3	9	6	14.42	14.60	6	6	6	0.00	0.27
4	6	5	20.75	21.16	6	6	5	2.11	1.13	3	7	6	12.64	12.38	6	4	6	7.75	7.92
4	8	5	6.38	6.48	6	8	5	0.00	1.68	3	5	6	19.41	19.17	6	2	6	5.34	5.47
4	10	5	17.31	17.15	6	8	5	10.44	10.74	3	3	6	16.65	16.65	6	0	6	7.28	7.28
4	12	5	7.77	7.56	6	-5	5	5.28	5.18	3	1	6	16.78	16.89	6	0	6	11.57	11.59
4	14	5	2.24	0.20	6	-1	5	12.35	12.41	3	3	6	2.20	2.21	6	2	6	1.71	0.45
4	16	5	1.06	0.38	6	3	5	8.55	8.55	3	5	6	25.45	25.74	6	4	6	5.85	5.85
4	18	5	0.56	1.09	6	5	5	3.37	3.95	3	5	6	15.29	15.33	6	6	6	5.44	5.45
5	-17	5	2.31	2.48	6	0	6	3.82	3.95	3	7	6	12.59	12.38	6	8	6	2.99	2.98
5	-15	5	13.05	12.21	6	0	6	17.91	18.21	3	9	6	5.65	5.42	6	10	6	7.28	7.26
5	-13	5	3.01	3.10	6	2	6	3.68	3.80	3	11	6	16.87	16.85	6	12	6	11.57	11.59
5	-11	5	6.61	6.38	6	4	6	29.19	29.89	3	13	6	8.46	8.55	6	14	6	1.71	0.45
5	-9	5	4.40	4.31	6	6	6	11.46	11.48	3	15	6	1.89	2.84	6	16	6	5.85	5.85
5	-7	5	4.78	4.00	6	8	6	14.46	14.63	4	-16	6	11.16	11.12	6	18	6	11.63	11.71
5	-5	5	24.57	24.85	6	10	6	5.09	5.05	4	-14	6	1.15	1.87	6	20	6	2.13	2.46
5	-3	5	5.71	5.63	6	12	6	11.65	11.52	4	-12	6	6.34	6.38	6	22	6	22.99	23.31
5	-1	5	33.23	33.46	6	14	6	7.46	7.33	4	-10	6	18.04	18.09	6	24	6	1.01	0.93
5	3	5	12.24	12.44	6	16	6	11.87	11.75	4	-8	6	2.67	2.34	6	26	6	10.11	10.63
5	5	5	15.40	15.59	6	18	6	4.52	4.41	4	-6	6	17.09	17.11	6	28	6	7.27	7.40
5	7	5	5.61	5.64	6	-19	6	10.12	10.17	4	-4	6	5.90	5.84	6	30	6	10.78	10.72
5	9	5	10.70	10.88	6	-17	6	9.19	9.19	4	-2	6	8.83	8.72	6	32	6	12.39	12.40
5	11	5	12.38	12.53	6	15	6	1.03	0.92	4	0	6	5.90	5.84	6	34	6	8.61	8.42
5	13	5	11.78	12.17	6	13	6	16.07	16.07	4	2	6	8.83	8.72	6	36	6	0.00	0.31
5	15	5	11.55	11.60	6	11	6	11.19	11.02	4	4	6	10.81	10.86	6	38	6	3.94	3.80
5	17	5	2.34	2.54	6	-9	6	2.31	2.35	4	6	6	5.44	5.36	6	40	6	3.01	2.87
5	19	5	1.19	0.57	6	-7	6	4.99	5.08	4	8	6	0.88	1.18	6	42	6	21.99	22.31
6	-10	5	1.21	0.20	6	-5	6	11.49	11.08	4	10	6	2.28	2.47	6	44	6	19.68	19.87



H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)	H	K	L	F(OBS)	F(CALC)
1	-5	7	21.51	21.76	5	-5	7	9.22	9.29	8	12	8	1.46	0.67
1	-3	7	13.86	14.09	5	-3	7	1.49	1.27	8	13	8	3.69	3.77
1	-1	7	2.25	2.57	5	-1	7	3.41	3.31	8	11	8	2.07	2.24
1	1	7	4.21	3.99	5	1	7	3.41	3.35	8	-9	8	2.53	2.10
1	3	7	19.63	19.73	5	3	7	11.11	11.10	8	-7	8	11.30	11.25
1	5	7	25.04	25.50	5	5	7	4.53	4.62	8	-2	9	6.39	6.26
1	7	7	24.08	24.34	5	7	7	5.09	4.96	8	0	9	7.83	7.65
1	7	7	28.70	28.99	5	7	7	11.06	10.89	8	2	9	3.55	3.41
1	9	7	7.55	7.53	5	9	7	4.15	4.33	8	4	9	9.05	9.05
1	11	7	18.23	18.01	6	11	7	2.69	2.41	8	6	9	7.20	7.07
1	13	7	3.21	2.79	6	13	7	3.89	3.62	8	8	9	1.09	1.46
1	15	7	3.56	3.57	6	15	7	9.84	9.70	8	10	9	1.83	0.99
2	-16	7	5.53	5.49	6	-16	7	2.31	2.77	8	-9	9	8.24	8.19
2	-14	7	2.53	2.39	6	-14	7	7.90	7.99	8	-7	9	1.80	0.40
2	-12	7	1.88	1.66	6	-12	7	11.43	10.96	8	-5	9	7.26	7.24
2	-10	7	10.24	10.24	6	-10	7	9.45	9.45	8	-3	9	4.78	4.64
2	-8	7	7.73	7.78	6	-8	7	2.83	2.92	8	-1	9	15.98	15.90
2	-6	7	1.36	1.58	6	-6	7	3.72	3.67	8	1	9	0.75	0.62
2	-4	7	10.48	10.74	6	-4	7	0.00	0.37	8	3	9	8.12	7.94
2	-2	7	12.71	12.66	6	-2	7	6.27	6.38	8	5	9	6.64	6.55
2	0	7	0.54	1.07	7	0	7	3.68	3.59	8	7	9	0.90	0.54
2	2	7	9.06	9.27	7	2	7	4.17	4.03	8	-6	9	3.68	3.58
2	4	7	16.82	17.07	7	4	7	0.56	0.51	8	-4	9	3.98	3.92
2	6	7	3.38	3.52	7	6	7	12.29	11.78	8	-2	9	5.22	5.27
2	8	7	9.39	9.34	7	8	7	3.38	3.51	8	0	9	1.29	1.73
2	10	7	13.60	13.87	0	10	8	1.54	1.59	8	2	9	1.73	0.15
2	12	7	2.65	2.58	0	12	8	0.00	0.03	8	4	9	6.69	6.51
2	14	7	7.61	7.73	0	14	8	12.10	12.02	8	6	9	4.49	4.48
2	15	7	14.81	15.01	0	15	8	1.24	0.59	8	8	9	5.25	5.27
3	-1	7	5.36	5.53	0	-1	8	1.68	0.70	8	-9	8	9.85	9.72
3	-3	7	6.56	6.43	0	-3	8	0.00	0.33	8	-7	8	2.57	2.72
3	-5	7	7.78	7.37	0	-5	8	2.63	3.31	8	-5	8	7.19	7.22
3	-7	7	3.98	3.93	0	-7	8	11.08	11.02	8	-3	8	3.61	3.74
3	-9	7	24.60	24.83	1	-9	8	7.29	7.22	8	-1	8	8.98	8.90
3	-3	7	0.32	0.75	1	-3	8	21.18	21.14	8	1	10	6.19	6.09
3	-1	7	25.42	25.60	1	-1	8	11.95	12.02	8	3	10	3.16	3.01
3	1	7	11.39	11.85	1	1	8	13.05	13.01	8	5	10	6.88	6.74
3	3	7	7.85	7.92	1	3	8	3.95	3.91	8	7	10	4.53	4.61
3	5	7	4.77	4.65	1	5	8	12.83	12.67	8	9	10	0.00	0.46
3	7	7	3.74	3.85	1	7	8	6.91	6.95	8	11	10	7.71	7.69
3	9	7	11.19	11.11	1	9	8	18.32	18.35	8	13	10	16.73	16.65
3	11	7	1.45	1.56	1	11	8	7.22	7.66	8	15	10	12.14	12.24
3	13	7	7.88	7.85	1	13	8	9.94	10.16	8	17	10	5.06	6.16
4	-14	7	10.04	10.30	1	-14	8	6.55	6.59	8	-8	10	0.00	0.82
4	-12	7	9.94	9.94	1	-12	8	4.02	3.91	8	-6	10	12.10	11.82
4	-10	7	13.13	12.89	1	-10	8	10.91	10.85	8	-4	10	2.57	2.12
4	-8	7	2.17	1.84	1	-8	8	3.57	3.20	8	-2	10	2.95	3.81
4	-6	7	8.17	8.25	1	-6	8	0.00	2.42	8	0	10	6.24	6.16
4	-4	7	1.94	1.75	2	-4	8	10.44	10.23	8	2	10	1.40	0.51
4	-2	7	2.90	2.29	2	-2	8	0.00	0.04	8	4	10	18.66	18.76
4	0	7	10.63	10.50	2	0	8	0.00	0.04	8	6	10	10.47	10.49
4	2	7	7.08	7.10	2	2	8	7.10	7.24	8	8	10	9.19	9.12
4	4	7	15.41	15.38	2	4	8	5.74	5.64	8	10	10	15.01	14.96
4	6	7	3.11	2.94	2	6	8	18.65	18.56	8	12	10	6.96	7.00
4	8	7	13.98	13.61	2	8	8	8.45	8.64	8	14	10	0.89	1.69
4	10	7	4.61	4.66	2	10	8	6.02	6.22	8	16	10	8.68	8.59
4	12	7	2.87	2.81	2	12	8	8.96	8.91	8	18	10	9.25	9.30
5	-11	7	11.77	11.66	2	-11	8	7.60	7.87	8	-9	9	2.66	1.38
5	-9	7	4.51	4.38	2	-9	8	7.49	7.52	8	-7	9	11.69	11.69
5	-7	7	16.37	16.41	2	-7	8	7.31	7.25	8	-5	9	2.66	1.38