

Table 4. Observed and calculated structure factors for pararealgar.

hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc
100	43	39	350	192	190	821	96	92	361	64	69	212	129	-128
200	129	-126	550	51	-49	921	35	-16	461	132	129	312	110	113
400	170	-170	750	49	-52	-931	66	59	661	34	40	412	57	54
500	89	-84	060	122	126	-731	54	58	-671	39	-26	512	30	-31
600	73	74	260	34	-33	-631	34	25	-571	114	110	-922	36	27
700	44	-42	460	54	-42	-531	265	-266	-271	37	44	-722	34	33
800	36	-21	560	36	-31	-431	56	-56	-171	59	-61	-622	44	37
900	42	-15	660	44	40	-231	93	-92	171	44	39	-522	97	96
310	56	-55	170	46	-45	-131	196	195	-481	37	-26	-322	91	-89
410	94	94	370	77	76	031	137	135	-381	69	-71	-222	276	-274
510	64	63	470	41	46	131	77	-75	-281	118	-118	-122	74	-71
610	54	-51	570	64	62	231	49	-53	281	34	32	122	120	116
710	67	68	180	62	-62	431	44	46	481	84	-84	222	31	7
910	76	-76	380	61	65	531	61	58	-902	95	88	522	55	59
020	120	114	-911	39	-39	831	91	-89	-702	110	111	722	39	34
120	38	18	-811	94	97	-241	47	-40	-602	124	-127	-732	32	-38
220	67	63	-611	91	-92	-141	91	-91	-502	73	-69	-632	55	56
420	89	87	-311	136	-132	041	149	-150	-202	109	-104	-532	130	133
520	52	-58	-111	151	-144	441	89	88	002	66	-58	-332	80	80
620	112	-113	011	23	-26	541	41	39	102	82	-81	-232	36	25
720	83	-84	111	182	177	741	60	52	202	228	-234	-132	123	-123
920	46	14	211	96	96	841	43	-32	302	208	214	132	94	-95
130	44	-44	311	203	199	-751	47	-39	402	156	162	232	95	-94
330	53	53	411	54	54	-651	30	13	502	66	64	332	50	46
430	135	136	611	136	-137	-551	39	-38	602	142	146	-842	66	65
530	62	61	-721	56	64	-451	53	51	702	63	-66	-542	70	69
630	54	-58	-621	52	55	-351	29	29	802	101	-104	-242	126	-126
830	58	-59	-321	37	-34	-251	93	-96	-712	72	-72	042	50	-44
040	96	-96	-221	249	-247	-151	28	-24	-612	55	54	142	47	49
140	78	78	021	56	55	151	39	23	-512	108	109	242	84	84
240	66	67	121	108	-111	251	29	28	-412	72	-73	342	39	-39
340	116	-118	221	179	178	351	56	52	-312	116	114	442	40	37
440	135	135	321	32	25	751	39	24	-212	51	49	542	64	61
640	93	-94	421	197	-200	-161	111	-111	-112	187	-185	642	98	-99
150	60	61	521	105	102	061	156	-157	012	58	60	742	47	36
250	111	110	621	43	37	261	83	-85	112	56	-56	-752	123	120

hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc
-452	60	53	-423	51	52	063	34	33	-134	61	58	-125	63	65
-352	118	-120	-323	44	-46	563	94	-95	034	113	114	025	173	-172
-152	215	219	-223	202	203	-373	78	-81	134	94	91	125	55	52
052	50	-51	-123	81	79	173	114	115	234	84	-86	225	127	126
152	118	-117	023	41	-38	373	87	-82	534	57	-64	425	59	62
252	44	-45	123	60	-54	473	45	31	-644	36	-24	625	86	-78
352	170	-174	223	62	-59	-283	129	131	-544	79	78	-735	46	40
552	70	71	423	75	-73	-183	64	63	-244	117	120	-635	40	-31
-762	27	21	623	60	61	083	35	-22	-144	76	-73	-435	64	66
-662	74	-74	723	37	-30	183	72	-66	044	63	61	-335	73	-72
-462	30	16	-533	29	20	283	69	-60	244	116	-116	-135	72	75
-162	41	35	-433	94	94	-804	114	-119	344	54	-51	035	70	71
162	50	-43	-333	168	168	-404	353	355	-754	120	-115	135	61	61
262	75	-76	-233	81	-87	-204	190	-193	-654	79	-82	235	40	-30
362	30	32	-133	114	-117	104	89	-86	-254	56	60	435	81	-84
462	49	48	133	261	-264	204	89	89	-154	115	116	535	69	-60
662	34	26	333	154	155	404	89	-91	154	71	-72	-445	97	-100
-572	60	60	733	66	-66	504	54	-50	254	47	42	045	65	63
-472	72	75	-843	47	-53	-614	36	26	554	64	68	145	47	46
072	73	-71	-643	36	34	-414	29	-12	-464	75	76	245	33	25
172	78	-76	-443	83	83	-314	41	-42	-264	66	-64	345	53	61
282	44	-46	-343	83	86	014	65	61	264	56	59	545	46	-47
382	36	35	143	41	-41	114	115	117	-374	46	-39	-655	35	-42
-813	45	41	243	40	32	214	59	-61	-174	92	92	-455	32	30
-713	112	115	443	63	-66	514	116	-117	174	39	37	155	36	-26
-613	35	45	543	76	-77	714	38	35	-715	95	-100	355	52	52
-513	82	84	743	56	41	-824	43	38	-615	34	-29	-565	44	-54
-313	120	-119	-753	31	33	-424	73	73	-315	102	103	-465	135	-132
-113	34	-16	-253	62	-63	-224	85	85	-215	84	81	065	96	96
013	102	-99	-153	27	14	024	47	48	-115	126	123	265	41	-5
213	88	-91	053	89	91	124	65	-65	215	88	-88	365	86	84
313	118	-122	153	70	-71	224	130	-132	615	107	-102	-606	63	-61
413	136	141	653	40	38	324	74	-78	-625	83	-86	-506	68	-59
713	84	83	-663	81	80	724	35	33	-425	81	79	-406	73	-72
813	68	67	-463	46	50	-334	48	-47	-325	75	-74	-206	105	-103
-623	150	-153	-363	82	83	-234	33	35	-225	27	15	-106	123	122

hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc	hkl	Fo	Fc
006	172	172	-626	97	-96	246	49	-46	066	57	44	227	63	56
206	67	69	126	59	61	446	87	91	-417	60	-61	327	45	-33
406	98	-108	226	51	48	-356	128	-128	-317	56	-53	-337	79	-83
-516	84	-82	526	62	-55	-256	35	-33	-117	83	-83	-137	99	100
-216	67	-65	-536	46	-44	-156	86	-82	017	67	69	047	66	-64
016	57	55	436	54	50	156	72	71	-527	50	49	147	65	-66
116	52	-48	146	67	66	256	53	51	027	40	-33	018	40	16

φ