

AM-96-615

6932

Hyttsjöite, a new, complex layered plumbosilicate with unique tetrahedral sheets from Långban, Sweden

Edward S. Grew, Donald R. Peacor, Roland C. Rouse, Martin G. Yates, Shu-Chun Su, and Nicholas Marquez

For deposit: Tables 4 and 6

81 May-June 1996

743-753, pp 139, (1)

American Mineralogist

Table 4. Observed and calculated structure factors for hyttsjöite

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	0-101		-469*	85	165	3	2-89		0*	172	403
2	0-100		265*	84	312	1	3-89		508*	177	240
3	0-99		185*	55	339	2	4-89		-470*	139	183
1	1-99		-254*	221	240	2	0-88		186*	22	399
1	0-98		-435*	36	175	5	0-88		-462*	145	163
2	1-98		290*	217	125	3	1-88		379*	203	93
2	0-97		204*	124	157	1	2-88		-456*	247	172
3	1-97		-338*	69	75	4	2-88		240*	238	353
1	2-97		442*	554	105	2	3-88		-517*	41	158
3	0-96		-254*	234	255	1	5-88		268*	36	349
1	1-96		187*	773	454	3	0-87		-363*	30	177
2	2-96		-243*	107	94	1	1-87		262*	116	331
1	0-95		-141*	185	310	4	1-87		-351*	169	208
4	0-95		304*	121	277	2	2-87		-196*	278	216
2	1-95		-631*	269	165	3	3-87		394*	439	243
1	3-95		0*	147	389	1	4-87		270*	230	330
2	0-94		488*	408	87	1	0-86		-495*	213	157
3	1-94		578	425	66	4	0-86		609	578	57
1	2-94		433*	226	267	2	1-86		954	928	51
2	3-94		492*	532	87	5	1-86		262*	420	113
3	0-93		451*	88	232	3	2-86		284*	369	116
1	1-93		0*	671	454	1	3-86		509	327	72
4	1-93		489*	455	208	4	3-86		378*	244	204
2	2-93		-180*	121	112	2	4-86		-206*	367	237
1	4-93		426*	8	262	2	0-85		674	520	60
1	0-92		300*	489	106	5	0-85		305*	112	95
4	0-92		748	734	56	3	1-85		393*	396	90
2	1-92		408*	563	108	1	2-85		499*	623	245
3	2-92		-510*	392	162	4	2-85		378*	8	214
1	3-92		386*	4	272	2	3-85		1096	1087	44
2	0-91		460*	198	236	3	4-85		94*	134	193
5	0-91		-495*	21	182	1	5-85		-253*	251	222
3	1-91		181*	59	316	3	0-84		272*	22	102
1	2-91		600	623	82	6	0-84		-137*	296	135
2	3-91		185*	56	352	1	1-84		506	250	74
3	0-90		233*	142	135	4	1-84		0*	400	410
1	1-90		-456*	115	152	2	2-84		477*	384	234
4	1-90		438*	301	74	5	2-84		165*	92	289
2	2-90		0*	365	438	3	3-84		0*	495	410
3	3-90		-298*	235	252	1	4-84		379*	43	243
1	4-90		381*	295	103	2	5-84		-333*	161	208
1	0-89		-234*	346	228	1	0-83		-128*	137	260
4	0-89		607	506	61	4	0-83		-237*	241	224
2	1-89		-480*	573	163	2	1-83		311*	110	319

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
5	1	-83	-250*	99	236	1	1	-78	1071	1081	48
3	2	-83	488*	362	215	4	1	-78	681	701	49
1	3	-83	-234*	240	214	2	2	-78	644	673	61
4	3	-83	672	629	50	5	2	-78	977	947	39
2	4	-83	362*	368	255	3	3	-78	169*	48	343
2	0	-82	-389*	36	151	1	4	-78	368*	320	259
5	0	-82	751	738	50	4	4	-78	710	695	49
3	1	-82	500	424	67	2	5	-78	312*	278	293
6	1	-82	-394*	33	198	1	0	-77	430*	239	196
1	2	-82	-131*	79	293	4	0	-77	722	755	49
4	2	-82	156*	61	147	7	0	-77	480	540	66
2	3	-82	-476*	57	166	2	1	-77	-357*	423	159
3	4	-82	-507*	282	161	5	1	-77	480	506	60
1	5	-82	423*	37	228	3	2	-77	253*	166	107
3	0	-81	184*	351	148	6	2	-77	87*	367	184
6	0	-81	-196*	59	105	1	3	-77	-409*	261	164
1	1	-81	-558*	26	139	4	3	-77	319*	237	92
4	1	-81	307*	601	103	2	4	-77	-194*	156	256
2	2	-81	333*	132	98	3	5	-77	463*	449	75
5	2	-81	-143*	275	132	1	6	-77	462*	638	280
3	3	-81	-314*	120	181	2	0	-76	-409*	370	159
1	4	-81	-307*	28	206	5	0	-76	-330*	372	195
2	5	-81	-463*	242	185	3	1	-76	279*	279	254
1	0	-80	-281*	85	169	6	1	-76	275*	62	231
4	0	-80	276*	262	269	1	2	-76	400*	26	216
2	1	-80	248*	152	313	4	2	-76	-273*	68	205
5	1	-80	-200*	189	285	2	3	-76	595	522	60
3	2	-80	-543*	323	152	5	3	-76	0*	123	409
1	3	-80	-324*	144	202	3	4	-76	0*	372	428
4	3	-80	-323*	79	187	1	5	-76	-586*	567	134
2	4	-80	310*	142	248	2	6	-76	255*	345	260
1	6	-80	-255*	144	241	3	0	-75	-177*	94	227
2	0	-79	176*	300	403	6	0	-75	553	589	57
5	0	-79	-364*	546	214	1	1	-75	-210*	250	223
3	1	-79	595	584	63	4	1	-75	-633*	40	124
6	1	-79	321*	99	226	7	1	-75	353*	461	209
1	2	-79	708	762	65	2	2	-75	-311*	233	167
4	2	-79	284*	330	238	5	2	-75	173*	369	140
2	3	-79	-426*	184	150	3	3	-75	699	636	46
5	3	-79	-517*	249	170	1	4	-75	404*	419	275
3	4	-79	457*	363	216	4	4	-75	-145*	277	310
1	5	-79	420*	216	226	2	5	-75	-199*	154	219
3	0	-78	367*	484	249	1	7	-75	326*	280	316
6	0	-78	-201*	27	279	1	0	-74	228*	315	297

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
4	0-74		783	801	42	5	4-71		233*	51	303
7	0-74		262*	29	103	3	5-71		-589*	153	147
2	1-74		288*	230	296	1	6-71		-464*	40	180
5	1-74		-136*	75	266	2	0-70		397*	291	247
3	2-74		232*	268	113	5	0-70		385*	280	63
6	2-74		358*	305	257	8	0-70		-538*	160	164
1	3-74		533	542	72	3	1-70		339*	341	217
4	3-74		226*	352	110	6	1-70		-393*	116	187
2	4-74		489*	697	216	1	2-70		-546*	406	132
3	5-74		-562*	319	159	4	2-70		636	646	49
1	6-74		375*	430	274	2	3-70		538	557	63
2	0-73		-450*	415	140	5	3-70		161*	92	327
5	0-73		-264*	101	212	3	4-70		-192*	125	221
3	1-73		-125*	36	236	1	5-70		774	760	53
6	1-73		0*	287	384	4	5-70		644	716	57
1	2-73		409*	360	91	2	6-70		178*	109	279
4	2-73		223*	151	281	3	0-69		650	580	46
2	3-73		411*	226	211	6	0-69		-134*	392	279
5	3-73		-118*	147	139	1	1-69		458*	627	88
3	4-73		183*	33	128	4	1-69		255*	410	97
1	5-73		-141*	350	117	7	1-69		0*	493	440
2	6-73		180*	276	365	2	2-69		402*	271	72
3	0-72		266*	74	233	5	2-69		-272*	305	197
6	0-72		-531*	159	136	3	3-69		353*	97	191
1	1-72		243*	666	364	6	3-69		321*	424	251
4	1-72		463	473	61	1	4-69		489*	302	216
7	1-72		-390*	166	208	4	4-69		211*	301	120
2	2-72		-175*	204	244	2	5-69		317*	99	94
5	2-72		315*	361	268	3	6-69		77*	379	212
3	3-72		396*	724	253	1	7-69		531*	499	234
1	4-72		220*	83	129	1	0-68		-130*	508	105
4	4-72		-452*	175	139	4	0-68		1011	968	33
2	5-72		-367*	494	184	7	0-68		0*	66	401
1	7-72		-294*	40	205	2	1-68		1073	1058	38
1	0-71		-192*	308	83	5	1-68		425*	455	70
4	0-71		253*	288	246	3	2-68		215*	314	272
7	0-71		1002	985	38	6	2-68		415*	353	69
2	1-71		-380*	190	148	1	3-68		-241*	14	182
5	1-71		539	601	58	4	3-68		445*	550	196
3	2-71		631	654	52	2	4-68		-342*	337	172
6	2-71		-249*	127	200	5	4-68		288*	228	98
1	3-71		-303*	390	198	3	5-68		565	630	58
4	3-71		359*	424	251	1	6-68		897	927	52
2	4-71		560	559	63	2	7-68		256*	40	301

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	0-67		-197*	250	209	5	0-64		197*	34	270
5	0-67		399*	505	66	8	0-64		-144*	31	308
8	0-67		144*	282	139	3	1-64		348*	544	217
3	1-67		391*	370	70	6	1-64		333*	353	219
6	1-67		672	656	44	1	2-64		532*	922	88
1	2-67		1529	1544	35	4	2-64		327*	18	194
4	2-67		-340*	214	159	7	2-64		0*	381	443
7	2-67		-392*	315	190	2	3-64		-295*	39	180
2	3-67		390*	243	216	5	3-64		811	840	42
5	3-67		-441*	341	167	3	4-64		275*	302	267
3	4-67		-353*	437	183	1	5-64		171*	120	326
1	5-67		856	927	50	4	5-64		-657*	61	145
4	5-67		412*	279	203	2	6-64		613	655	61
2	6-67		-345*	8	178	1	8-64		0*	168	223
3	0-66		-164*	71	217	3	0-63		238*	457	283
6	0-66		-228*	219	86	6	0-63		285*	354	216
1	1-66		1017	1004	44	1	1-63		-328*	44	163
4	1-66		-276*	143	190	4	1-63		463*	449	194
7	1-66		-201*	200	258	7	1-63		264*	431	278
2	2-66		-167*	229	227	2	2-63		-90*	72	116
5	2-66		-482*	276	147	5	2-63		-185*	78	222
3	3-66		462	417	59	3	3-63		446	501	65
6	3-66		356*	91	211	6	3-63		278*	289	97
1	4-66		-410*	202	142	1	4-63		466*	451	198
4	4-66		-391*	314	162	4	4-63		533	423	55
2	5-66		-551*	103	115	2	5-63		-371*	394	171
3	6-66		-145*	273	274	5	5-63		-394*	319	192
1	7-66		323*	181	244	3	6-63		170*	157	145
1	0-65		-155*	469	231	1	7-63		-344*	55	170
4	0-65		-293*	299	196	1	0-62		434*	40	198
7	0-65		377*	306	64	4	0-62		0*	337	367
2	1-65		401*	109	189	7	0-62		-359*	75	154
5	1-65		641	642	47	2	1-62		523	561	57
8	1-65		219*	249	277	5	1-62		0*	226	360
3	2-65		-210*	204	217	8	1-62		-361*	326	220
6	2-65		551	599	54	3	2-62		-206*	444	223
1	3-65		-263*	154	182	6	2-62		0*	11	409
4	3-65		-294*	70	197	1	3-62		-415*	24	118
2	4-65		548	607	59	4	3-62		213*	11	241
5	4-65		594	592	58	2	4-62		-448*	221	137
3	5-65		0*	190	375	5	4-62		-401*	279	167
1	6-65		202*	353	143	3	5-62		0*	202	379
2	7-65		-246*	28	91	1	6-62		-296*	317	204
2	0-64		338*	79	230	4	6-62		339*	131	248

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	7-62		180*	320	354	2	4-59		-439*	231	142
2	0-61		548	637	58	5	4-59		224*	132	242
5	0-61		-404*	181	152	3	5-59		-463*	53	152
8	0-61		351*	294	75	1	6-59		346*	13	86
3	1-61		681	751	43	4	6-59		332*	374	92
6	1-61		146*	361	320	2	7-59		699	744	62
1	2-61		519*	730	227	2	0-58		215*	198	107
4	2-61		143*	12	298	5	0-58		144*	247	119
7	2-61		-322*	29	201	8	0-58		-563*	212	135
2	3-61		1263	1276	33	3	1-58		132*	91	316
5	3-61		-331*	14	184	6	1-58		-290*	61	175
3	4-61		-181*	112	253	1	2-58		303*	560	251
6	4-61		641	570	49	4	2-58		268*	310	85
1	5-61		232*	267	120	7	2-58		-141*	359	286
4	5-61		233*	505	336	2	3-58		-346*	262	172
2	6-61		0*	100	381	5	3-58		301*	224	203
3	7-61		248*	477	323	3	4-58		589	596	53
1	8-61		255*	168	129	6	4-58		263*	26	100
3	0-60		265*	23	213	1	5-58		-173*	251	247
6	0-60		454	432	55	4	5-58		235*	265	108
1	1-60		831	837	44	2	6-58		565	569	63
4	1-60		1280	1323	30	3	7-58		475	395	71
7	1-60		330*	482	80	1	8-58		267*	28	117
2	2-60		-319*	241	167	3	0-57		337*	153	176
5	2-60		-205*	137	87	6	0-57		384*	352	195
3	3-60		1001	1012	35	9	0-57		505	640	58
6	3-60		596	639	53	1	1-57		-507*	254	103
1	4-60		227*	344	312	4	1-57		959	1083	38
4	4-60		941	1053	40	7	1-57		-334*	177	172
2	5-60		-428*	23	143	2	2-57		0*	33	334
5	5-60		-389*	265	189	5	2-57		795	769	37
3	6-60		-199*	28	264	8	2-57		0*	216	427
1	7-60		-415*	53	155	3	3-57		-207*	61	224
1	0-59		-207*	322	180	6	3-57		-278*	399	223
4	0-59		910	899	32	1	4-57		557	516	57
7	0-59		250*	178	227	4	4-57		231*	158	105
2	1-59		-342*	119	141	2	5-57		317*	156	86
5	1-59		392*	365	166	5	5-57		163*	253	321
8	1-59		154*	335	303	3	6-57		898	884	42
3	2-59		710	740	40	1	7-57		-236*	312	215
6	2-59		260*	570	252	2	8-57		257*	89	324
1	3-59		-373*	101	141	1	0-56		209*	218	307
4	3-59		419	415	61	4	0-56		-223*	229	225
7	3-59		250*	138	100	7	0-56		427	433	59

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
2	1-56		583	666	50	2	5-54		323*	240	82
5	1-56		270*	38	198	5	5-54		167*	255	141
8	1-56		417*	455	66	3	6-54		332*	177	188
3	2-56		564	655	50	1	7-54		-268*	93	195
6	2-56		259*	125	85	2	8-54		495	330	72
1	3-56		472	391	65	1	0-53		250*	287	275
4	3-56		144*	346	309	4	0-53		953	935	29
7	3-56		222*	118	251	7	0-53		877	880	36
2	4-56		-168*	21	245	2	1-53		903	909	35
5	4-56		-364*	15	164	5	1-53		617	642	43
3	5-56		317*	487	269	8	1-53		396*	106	65
1	6-56		631	619	58	3	2-53		-192*	236	217
4	6-56		0*	85	424	6	2-53		868	877	37
2	7-56		414*	220	81	1	3-53		252*	407	278
2	0-55		133*	222	324	4	3-53		-173*	67	215
5	0-55		0*	242	348	7	3-53		0*	514	468
8	0-55		390*	330	177	2	4-53		686	700	45
3	1-55		128*	119	287	5	4-53		217*	50	266
6	1-55		-285*	126	172	3	5-53		347*	438	255
1	2-55		-180*	182	195	1	6-53		1153	1211	39
4	2-55		494	447	48	4	6-53		-555*	103	147
7	2-55		456	419	60	2	7-53		189*	52	135
2	3-55		-195*	255	190	2	0-52		-140*	323	216
5	3-55		222*	34	94	5	0-52		0*	355	370
3	4-55		332*	92	212	8	0-52		351*	286	70
6	4-55		-250*	121	228	3	1-52		486	484	47
1	5-55		-295*	28	169	6	1-52		-125*	189	253
4	5-55		216*	145	111	9	1-52		-519*	359	171
2	6-55		300*	311	99	1	2-52		1092	1099	33
3	7-55		248*	190	111	4	2-52		331*	179	64
1	8-55		428*	261	86	7	2-52		-415*	95	155
3	0-54		793	732	32	2	3-52		238*	305	251
6	0-54		-122*	298	231	5	3-52		0*	336	368
9	0-54		264*	259	94	3	4-52		857	930	39
1	1-54		1131	1168	35	6	4-52		-201*	101	241
4	1-54		652	752	45	1	5-52		775	749	44
7	1-54		-403*	303	173	4	5-52		-382*	292	165
2	2-54		497	601	56	2	6-52		398*	98	196
5	2-54		834	808	37	5	6-52		502	504	63
8	2-54		346*	22	205	3	7-52		299*	164	261
3	3-54		311*	87	198	1	8-52		184*	198	349
6	3-54		195*	451	121	3	0-51		236*	417	231
1	4-54		712	703	47	6	0-51		260*	463	246
4	4-54		905	889	38	9	0-51		258*	341	217

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	1-51		-446*	24	103	5	3-49		379*	400	66
4	1-51		250*	253	207	3	4-49		0*	237	357
7	1-51		798	838	39	6	4-49		404*	486	73
2	2-51		-362*	100	133	1	5-49		-385*	228	153
5	2-51		-122*	4	247	4	5-49		485	484	61
8	2-51		-206*	99	227	2	6-49		276*	39	242
3	3-51		193*	405	106	5	6-49		-331*	52	191
6	3-51		150*	132	285	3	7-49		-201*	36	258
1	4-51		0*	281	337	1	8-49		319*	411	100
4	4-51		561	499	52	3	0-48		482	506	44
2	5-51		-273*	78	193	6	0-48		-237*	60	195
5	5-51		-141*	567	285	9	0-48		399*	322	64
3	6-51		-255*	60	74	1	1-48		232*	158	250
1	7-51		483	447	73	4	1-48		-108*	292	267
2	8-51		442*	462	253	7	1-48		-539*	171	117
1	0-50		138*	399	153	2	2-48		-367*	89	125
4	0-50		1111	1150	28	5	2-48		189*	234	104
7	0-50		-254*	194	215	8	2-48		-250*	65	236
2	1-50		-172*	179	186	3	3-48		671	581	38
5	1-50		-202*	302	213	6	3-48		-231*	40	219
8	1-50		295*	383	85	1	4-48		298*	329	88
3	2-50		536	535	43	4	4-48		820	802	38
6	2-50		348*	324	71	7	4-48		533	624	59
1	3-50		315*	397	220	2	5-48		-361*	232	150
4	3-50		274*	149	208	5	5-48		-420*	147	174
7	3-50		0*	499	442	3	6-48		-231*	166	211
2	4-50		1252	1259	30	1	7-48		339*	71	239
5	4-50		214*	284	286	4	7-48		822	808	47
3	5-50		598	634	50	2	8-48		0*	79	412
6	5-50		319*	249	84	1	0-47		937	1025	39
1	6-50		417*	298	72	4	0-47		655	720	38
4	6-50		285*	16	239	7	0-47		725	809	39
2	7-50		539	617	64	2	1-47		745	761	34
1	9-50		519*	582	83	5	1-47		1344	1296	25
2	0-49		706	746	37	8	1-47		1068	1105	33
5	0-49		554	593	42	3	2-47		-260*	100	163
8	0-49		700	704	40	6	2-47		312*	335	206
3	1-49		830	850	31	1	3-47		-455*	122	103
6	1-49		-246*	137	198	4	3-47		502	472	48
9	1-49		-444*	43	166	7	3-47		429*	373	66
1	2-49		267*	56	88	2	4-47		308*	225	215
4	2-49		-113*	62	249	5	4-47		257*	469	257
7	2-49		-409*	42	153	3	5-47		563	600	54
2	3-49		981	983	32	6	5-47		333*	237	83

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	6-47		456*	470	71	2	8-45		0*	101	377
4	6-47		-342*	460	190	1	0-44		406*	466	199
2	7-47		313*	28	96	4	0-44		869	885	27
3	8-47		-561*	420	159	7	0-44		265*	371	230
1	9-47		376*	417	275	10	0-44		254*	517	223
2	0-46		1061	1123	28	2	1-44		722	852	36
5	0-46		-155*	270	221	5	1-44		435	541	54
8	0-46		338*	316	73	8	1-44		-433*	49	173
3	1-46		-226*	75	64	3	2-44		207*	267	228
6	1-46		547	456	42	6	2-44		336*	134	198
9	1-46		557	553	54	1	3-44		-198*	318	168
1	2-46		758	747	40	4	3-44		-628*	363	117
4	2-46		356*	68	162	7	3-44		-464*	34	130
7	2-46		-233*	295	240	2	4-44		402*	93	176
2	3-46		1179	1184	29	5	4-44		253*	412	238
5	3-46		709	689	40	3	5-44		-446*	291	144
8	3-46		-496*	528	171	6	5-44		287*	9	89
3	4-46		-166*	716	265	1	6-44		691	644	48
6	4-46		475	425	60	4	6-44		108*	286	168
1	5-46		148*	113	333	2	7-44		234*	343	305
4	5-46		738	845	43	3	8-44		-535*	252	168
2	6-46		156*	518	326	1	9-44		-252*	305	238
5	6-46		-359*	210	192	2	0-43		-486*	36	102
3	7-46		661	710	57	5	0-43		976	980	27
1	8-46		-137*	216	278	8	0-43		-185*	447	258
3	0-45		189*	208	204	3	1-43		223*	293	211
6	0-45		354*	272	161	6	1-43		798	781	34
9	0-45		-199*	353	271	9	1-43		367*	4	172
1	1-45		471	565	57	1	2-43		2164	2180	33
4	1-45		621	629	36	4	2-43		466	437	47
7	1-45		-257*	222	212	7	2-43		-188*	287	233
2	2-45		0*	324	316	2	3-43		687	718	39
5	2-45		-392*	168	152	5	3-43		-122*	421	281
8	2-45		637	645	49	8	3-43		376*	364	70
3	3-45		-247*	64	183	3	4-43		512	439	48
6	3-45		146*	345	312	6	4-43		263*	347	255
1	4-45		392*	74	189	1	5-43		1071	1087	35
4	4-45		272*	136	80	4	5-43		258*	373	243
7	4-45		-389*	144	195	2	6-43		404*	34	184
2	5-45		560	453	47	5	6-43		735	732	48
5	5-45		312*	414	244	3	7-43		265*	192	100
3	6-45		0*	193	394	1	8-43		305*	41	267
1	7-45		642	701	56	3	0-42		-187*	210	189
4	7-45		238*	59	280	6	0-42		-280*	160	175

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
9	0-42		-279*	112	203	6	1-40		127*	46	301
1	1-42		2066	2070	31	9	1-40		764	802	41
4	1-42		-403*	272	134	4	2-40		711	704	33
7	1-42		-284*	127	178	7	2-40		349*	472	217
2	2-42		654	688	36	2	3-40		-142*	396	220
5	2-42		1468	1499	25	5	3-40		375*	284	60
8	2-42		337*	289	208	8	3-40		-293*	103	195
3	3-42		887	852	30	3	4-40		-227*	211	197
6	3-42		-184*	66	256	6	4-40		838	828	37
1	4-42		-275*	142	147	1	5-40		766	760	41
4	4-42		465	443	55	4	5-40		327*	257	209
7	4-42		373*	458	77	2	6-40		-326*	506	192
2	5-42		764	738	38	5	6-40		-249*	19	235
5	5-42		779	700	41	3	7-40		-171*	142	104
3	6-42		-226*	280	239	1	8-40		548	561	68
1	7-42		551	508	55	2	9-40		-366*	288	180
4	7-42		-291*	296	226	3	0-39		-91*	47	231
2	8-42		94*	120	196	6	0-39		468	446	45
1	0-41		-306*	202	132	9	0-39		249*	402	234
4	0-41		613	616	32	4	1-39		375	409	48
7	0-41		430	381	52	7	1-39		301*	294	178
10	0-41		360*	67	177	2	2-39		644	711	36
2	1-41		108*	448	321	5	2-39		466	483	52
5	1-41		678	609	34	8	2-39		299*	101	210
8	1-41		353*	233	181	3	3-39		763	718	33
3	2-41		1008	995	26	6	3-39		513	400	47
6	2-41		269*	353	204	1	4-39		256*	312	85
9	2-41		215*	251	263	4	4-39		234*	280	213
1	3-41		-237*	442	174	7	4-39		614	562	52
4	3-41		340*	204	183	2	5-39		-280*	46	171
7	3-41		424*	526	187	5	5-39		447	432	57
2	4-41		-325*	146	139	3	6-39		508	579	59
5	4-41		458	353	52	1	7-39		379*	492	84
3	5-41		870	847	35	4	7-39		317*	188	91
6	5-41		213*	191	110	2	8-39		828	922	51
1	6-41		121*	141	151	1	0-38		-258*	105	130
4	6-41		-193*	409	231	4	0-38		148*	268	237
2	7-41		230*	456	331	7	0-38		640	587	36
3	8-41		423*	545	226	10	0-38		146*	42	288
1	9-41		403*	621	102	2	1-38		485	510	38
2	0-40		550	534	34	5	1-38		383	373	51
5	0-40		379	349	49	8	1-38		-133*	143	252
8	0-40		-450*	135	157	3	2-38		-222*	183	165
3	1-40		864	858	26	6	2-38		350*	167	166

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
9	2-38		-364*	11	202	6	3-36		798	842	37
1	3-38		241*	27	224	1	4-36		-223*	77	169
4	3-38		-112*	133	257	4	4-36		658	620	40
7	3-38		-411*	316	181	7	4-36		-247*	381	248
2	4-38		785	817	35	2	5-36		-195*	101	196
5	4-38		200*	21	253	5	5-36		0*	301	383
3	5-38		-240*	149	181	3	6-36		149*	47	293
6	5-38		-286*	373	242	1	7-36		414*	348	210
1	6-38		89*	185	170	4	7-36		-202*	193	251
4	6-38		-358*	214	174	2	8-36		0*	573	413
2	7-38		-184*	144	236	1	0-35		858	835	31
3	8-38		171*	299	337	4	0-35		1722	1721	24
1	9-38		409*	451	270	7	0-35		0*	235	367
2	0-37		-145*	326	206	10	0-35		253*	202	230
5	0-37		-343*	197	140	2	1-35		-242*	180	140
8	0-37		-426*	139	137	5	1-35		743	759	31
3	1-37		503	560	38	8	1-35		954	1019	35
6	1-37		691	682	34	3	2-35		742	710	29
9	1-37		544	513	50	6	2-35		747	797	37
1	2-37		922	906	27	9	2-35		-255*	42	241
4	2-37		414	313	47	1	3-35		-159*	126	183
7	2-37		207*	164	96	4	3-35		123*	42	257
2	3-37		743	778	33	7	3-35		360*	398	224
5	3-37		0*	208	376	2	4-35		593	612	39
8	3-37		0*	248	384	5	4-35		278*	161	218
3	4-37		-250*	35	168	3	5-35		634	567	43
6	4-37		296*	29	217	6	5-35		-425*	176	176
1	5-37		480	473	52	1	6-35		-162*	286	246
4	5-37		406*	404	191	4	6-35		336*	447	79
2	6-37		261*	279	91	2	7-35		870	870	41
5	6-37		224*	183	253	3	8-35		-323*	230	209
3	7-37		540	465	55	1	9-35		404*	154	229
1	8-37		262*	301	112	2	0-34		358	334	42
2	9-37		-296*	328	215	5	0-34		380	306	44
3	0-36		215*	147	184	8	0-34		309*	338	70
6	0-36		435	456	48	3	1-34		-257*	71	152
9	0-36		257*	130	79	6	1-34		565	535	37
1	1-36		303*	160	183	9	1-34		177*	38	112
4	1-36		1158	1157	23	1	2-34		183*	82	85
7	1-36		563	555	42	4	2-34		-275*	97	158
2	2-36		715	709	29	7	2-34		-465*	269	142
5	2-36		553	487	39	2	3-34		1121	1127	24
8	2-36		359*	206	67	5	3-34		378	316	56
3	3-36		1413	1403	24	8	3-34		463	507	63

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	4-34		487	439	45	2	4-32		391	358	51
6	4-34		0*	392	398	5	4-32		364*	385	62
1	5-34		132*	50	326	3	5-32		621	597	44
4	5-34		282*	118	214	6	5-32		-87*	58	150
7	5-34		271*	140	271	1	6-32		1254	1193	30
2	6-34		764	786	41	4	6-32		-169*	26	99
5	6-34		-199*	156	256	2	7-32		618	648	49
3	7-34		275*	154	231	5	7-32		456*	361	194
1	8-34		335*	487	215	3	8-32		-518*	190	158
2	9-34		-151*	53	124	1	9-32		399*	38	226
3	0-33		-85*	124	227	2	0-31		172*	133	191
6	0-33		642	652	35	5	0-31		317*	105	135
9	0-33		569	582	46	8	0-31		159*	149	106
1	1-33		956	924	25	3	1-31		326	312	46
4	1-33		516	396	33	6	1-31		520	441	39
7	1-33		104*	24	130	9	1-31		146*	74	287
2	2-33		-389*	59	106	1	2-31		1439	1411	22
5	2-33		1121	1099	25	4	2-31		273*	185	186
8	2-33		253*	180	88	7	2-31		488	498	50
3	3-33		-340*	14	125	2	3-31		804	743	26
6	3-33		669	672	42	5	3-31		311*	402	194
1	4-33		297*	474	210	8	3-31		-350*	46	188
4	4-33		226*	247	85	3	4-31		-422*	285	135
7	4-33		432*	498	203	6	4-31		144*	175	240
2	5-33		328*	313	69	1	5-31		0*	368	311
5	5-33		360*	189	192	4	5-31		-123*	235	284
3	6-33		733	725	42	7	5-31		108*	187	158
6	6-33		396*	357	72	2	6-31		-118*	126	239
1	7-33		-324*	117	168	5	6-31		155*	501	305
4	7-33		757	797	48	3	7-31		231*	225	109
2	8-33		-137*	126	268	1	8-31		-171*	77	93
1	0-32		173*	517	277	2	9-31		-386*	367	200
4	0-32		511	559	35	3	0-30		396	357	35
7	0-32		-423*	52	125	6	0-30		255*	105	178
10	0-32		463	442	54	9	0-30		-269*	142	209
2	1-32		1397	1406	18	1	1-30		-37*	120	125
5	1-32		-210*	124	198	4	1-30		531	532	34
8	1-32		555	562	48	7	1-30		165*	111	102
3	2-32		1062	1013	23	10	1-30		-518*	272	153
6	2-32		390	403	58	2	2-30		581	615	31
9	2-32		151*	235	306	5	2-30		290*	129	60
1	3-32		293*	294	184	8	2-30		315*	189	74
4	3-32		718	714	33	3	3-30		381	401	49
7	3-32		325*	228	207	6	3-30		646	653	41

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	4-30		778	755	33	2	3-28		590	567	32
4	4-30		887	861	31	5	3-28		-383*	460	156
7	4-30		263*	465	270	8	3-28		-141*	433	311
2	5-30		339*	425	182	3	4-28		1286	1287	24
5	5-30		558	488	48	6	4-28		490	542	55
3	6-30		681	627	41	1	5-28		279*	541	200
6	6-30		568	589	58	4	5-28		-173*	211	235
1	7-30		300*	131	202	7	5-28		381*	281	178
4	7-30		-243*	201	222	2	6-28		364*	596	224
2	8-30		-334*	128	172	5	6-28		-574*	529	156
1	10-30		263*	241	131	3	7-28		470	475	61
1	0-29		287*	255	65	1	8-28		-259*	347	208
4	0-29		979	986	21	4	8-28		435*	147	206
7	0-29		922	960	29	2	9-28		-144*	241	262
10	0-29		450	440	55	3	0-27		520	506	27
2	1-29		931	958	21	6	0-27		259*	277	65
5	1-29		423	472	43	9	0-27		709	696	38
8	1-29		137*	60	119	1	1-27		852	880	25
3	2-29		-438*	213	97	4	1-27		173*	280	198
6	2-29		1172	1161	27	7	1-27		468	523	50
9	2-29		272*	356	92	10	1-27		256*	85	214
1	3-29		301*	249	56	2	2-27		267*	396	163
4	3-29		195*	54	80	5	2-27		650	615	33
7	3-29		-326*	414	204	8	2-27		0*	290	357
2	4-29		1089	1041	25	3	3-27		290*	90	137
5	4-29		-213*	291	208	6	3-27		171*	275	108
8	4-29		299*	346	88	1	4-27		-162*	390	200
3	5-29		131*	41	294	4	4-27		-75*	121	129
6	5-29		262*	95	239	7	4-27		524	463	53
1	6-29		1072	1066	32	2	5-27		-360*	34	139
4	6-29		331*	57	211	5	5-27		685	657	41
2	7-29		-380*	113	158	3	6-27		422*	317	185
5	7-29		503	519	65	6	6-27		156*	83	307
3	8-29		165*	421	336	1	7-27		254*	132	239
1	9-29		176*	164	143	4	7-27		-577*	76	131
2	0-28		-237*	310	149	2	8-27		109*	42	165
5	0-28		103*	33	242	1	10-27		-148*	91	290
8	0-28		571	514	41	1	0-26		657	690	31
3	1-28		-324*	126	119	4	0-26		1482	1515	23
6	1-28		145*	250	103	7	0-26		269*	219	188
9	1-28		430	248	57	10	0-26		450	284	55
1	2-28		1683	1667	26	2	1-26		-280*	251	136
4	2-28		289*	229	55	5	1-26		289*	360	58
7	2-28		135*	272	282	8	1-26		448	520	56

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	2-26		345	360	47	4	1-24		646	613	26
6	2-26		351*	298	165	7	1-24		218*	64	218
9	2-26		-354*	219	196	10	1-24		286*	408	87
1	3-26		571	594	34	2	2-24		1379	1364	21
4	3-26		-413*	34	132	5	2-24		350	283	52
7	3-26		246*	248	246	8	2-24		142*	84	280
2	4-26		826	789	27	3	3-24		965	930	24
5	4-26		-323*	234	182	6	3-24		959	954	31
8	4-26		-92*	130	159	1	4-24		437	446	44
3	5-26		863	869	32	4	4-24		789	765	31
6	5-26		-138*	4	287	7	4-24		-138*	54	262
1	6-26		133*	243	262	2	5-24		601	595	39
4	6-26		206*	148	252	5	5-24		410	459	61
2	7-26		337*	388	76	3	6-24		59*	147	174
5	7-26		-551*	79	161	6	6-24		601	575	51
3	8-26		-316*	81	205	1	7-24		620	608	46
1	9-26		346*	426	262	4	7-24		380*	219	195
2	0-25		758	797	21	2	8-24		824	849	44
5	0-25		1152	1152	21	1	10-24		361*	247	283
8	0-25		949	999	30	1	0-23		188*	419	228
3	1-25		1535	1542	22	4	0-23		1012	1025	19
6	1-25		-312*	63	152	7	0-23		1189	1194	24
9	1-25		203*	226	101	10	0-23		0*	155	397
1	2-25		-76*	217	220	2	1-23		173*	175	70
4	2-25		260*	203	177	5	1-23		417	461	42
7	2-25		189*	348	238	8	1-23		191*	24	224
2	3-25		1271	1292	20	3	2-23		671	690	26
5	3-25		213*	302	219	6	2-23		-200*	45	189
8	3-25		198*	28	108	9	2-23		153*	46	121
3	4-25		491	508	43	1	3-23		815	763	24
6	4-25		645	576	40	4	3-23		1107	1126	25
1	5-25		321*	271	185	7	3-23		652	630	41
4	5-25		1000	1000	31	2	4-23		217*	110	73
7	5-25		433	490	66	5	4-23		-271*	154	181
2	6-25		190*	251	248	8	4-23		826	907	41
5	6-25		-479*	26	136	3	5-23		554	566	42
3	7-25		-295*	129	178	6	5-23		-413*	50	147
1	8-25		257*	353	105	1	6-23		0*	106	327
4	8-25		163*	382	310	4	6-23		203*	374	304
2	9-25		171*	59	325	2	7-23		-216*	86	204
3	0-24		353	307	39	5	7-23		366*	482	79
6	0-24		1240	1203	22	3	8-23		969	934	39
9	0-24		306*	163	214	1	9-23		-194*	129	241
1	1-24		1316	1314	20	2	0-22		163*	172	185

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
5	0-22		1226	1227	19	2	8-21		-401*	259	166
8	0-22		163*	88	98	3	9-21		234*	262	275
3	1-22		590	595	25	1	10-21		415*	324	83
6	1-22		-579*	77	105	1	0-20		249*	108	63
9	1-22		974	991	33	4	0-20		349	346	37
1	2-22		227*	122	190	7	0-20		165*	534	257
4	2-22		497	521	36	10	0-20		-245*	409	246
7	2-22		-431*	384	150	2	1-20		-272*	163	130
2	3-22		241*	114	158	5	1-20		234*	518	214
5	3-22		297*	317	175	8	1-20		481	440	48
8	3-22		559	518	51	3	2-20		-152*	59	172
3	4-22		438	487	46	6	2-20		411	471	50
6	4-22		376*	346	63	9	2-20		-378*	97	177
1	5-22		821	759	29	1	3-20		637	671	28
4	5-22		1360	1352	27	4	3-20		-97*	81	107
7	5-22		-414*	110	165	7	3-20		-130*	63	271
2	6-22		-305*	182	171	2	4-20		-362*	170	126
5	6-22		254*	170	88	5	4-20		293*	262	68
3	7-22		-473*	434	153	8	4-20		-659*	61	140
1	8-22		506	618	62	3	5-20		241*	136	74
4	8-22		-147*	265	322	6	5-20		259*	21	81
2	9-22		374*	292	231	1	6-20		284*	176	193
3	0-21		111*	311	207	4	6-20		282*	95	221
6	0-21		-146*	35	213	2	7-20		315*	283	72
9	0-21		454	490	52	5	7-20		-252*	451	260
1	1-21		153*	254	231	3	8-20		107*	210	162
4	1-21		1095	1121	21	1	9-20		0*	225	400
7	1-21		-264*	271	209	2	0-19		196*	28	164
10	1-21		137*	236	140	5	0-19		740	722	24
2	2-21		708	729	24	8	0-19		-322*	326	172
5	2-21		555	567	36	3	1-19		-214*	235	159
8	2-21		446*	624	194	6	1-19		670	634	32
3	3-21		-236*	187	164	9	1-19		-305*	97	184
6	3-21		184*	403	265	1	2-19		1904	1921	27
9	3-21		496	543	61	4	2-19		749	732	26
1	4-21		490	424	37	7	2-19		227*	215	84
4	4-21		-337*	114	131	2	3-19		668	632	25
7	4-21		418*	388	184	5	3-19		267*	143	176
2	5-21		358*	271	165	8	3-19		148*	385	308
5	5-21		726	702	38	3	4-19		0*	99	303
3	6-21		376*	326	61	6	4-19		470	406	51
6	6-21		378*	286	202	1	5-19		1143	1146	25
1	7-21		1037	1032	34	4	5-19		260*	74	183
4	7-21		737	756	43	7	5-19		-504*	47	143

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	6-19		258*	207	195	2	4-17		-117*	109	92
5	6-19		590	645	48	5	4-17		312*	371	184
3	7-19		-260*	109	220	8	4-17		246*	80	97
1	8-19		0*	53	378	3	5-17		121*	383	294
4	8-19		159*	22	313	6	5-17		-136*	229	266
2	9-19		162*	328	148	1	6-17		1298	1312	26
3	0-18		811	783	18	4	6-17		951	975	34
6	0-18		871	870	25	2	7-17		511	456	47
9	0-18		-78*	191	143	5	7-17		362*	296	69
1	1-18		2028	2060	30	3	8-17		572	627	50
4	1-18		-89*	99	227	1	9-17		573	634	60
7	1-18		-439*	20	132	2	0-16		-63*	324	251
10	1-18		199*	100	102	5	0-16		-185*	40	153
2	2-18		859	832	20	8	0-16		-242*	232	199
5	2-18		1593	1598	23	3	1-16		1132	1134	18
8	2-18		373*	256	59	6	1-16		276*	101	163
3	3-18		1612	1616	23	9	1-16		610	667	45
6	3-18		182*	477	267	1	2-16		619	618	27
9	3-18		427*	408	181	4	2-16		331*	518	155
1	4-18		653	662	29	7	2-16		853	897	33
4	4-18		267*	353	182	2	3-16		644	656	26
7	4-18		440*	680	199	5	3-16		-249*	46	176
2	5-18		670	664	33	8	3-16		-311*	36	171
5	5-18		-180*	279	251	3	4-16		627	611	33
3	6-18		-401*	415	143	6	4-16		-180*	116	239
6	6-18		-561*	184	149	1	5-16		905	909	27
1	7-18		-203*	333	185	4	5-16		-446*	125	135
4	7-18		336*	238	222	7	5-16		598	597	52
2	8-18		482	483	60	2	6-16		625	645	36
3	9-18		350*	402	82	5	6-16		-135*	326	323
1	10-18		465*	411	228	3	7-16		-290*	231	181
1	0-17		192*	153	195	1	8-16		293*	93	206
4	0-17		226*	220	162	4	8-16		156*	140	306
7	0-17		698	691	31	2	9-16		396*	72	175
10	0-17		-422*	85	175	3	0-15		-205*	30	159
2	1-17		2179	2176	31	6	0-15		610	617	31
5	1-17		1330	1276	19	9	0-15		-570*	28	127
8	1-17		132*	206	291	1	1-15		587	609	29
3	2-17		990	970	19	4	1-15		454	492	32
6	2-17		533	508	39	7	1-15		744	723	31
9	2-17		744	695	42	10	1-15		147*	191	289
1	3-17		169*	49	74	2	2-15		440	478	33
4	3-17		244*	137	64	5	2-15		289*	277	175
7	3-17		500	488	49	8	2-15		-295*	337	198

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	3-15		903	880	23	9	1-13		294*	280	76
6	3-15		127*	209	292	1	2-13		1078	1107	18
9	3-15		-493*	73	181	4	2-13		272*	290	54
1	4-15		462	477	35	7	2-13		396	344	54
4	4-15		333*	314	152	2	3-13		157*	110	189
7	4-15		252*	418	252	5	3-13		-415*	94	141
2	5-15		329*	268	53	8	3-13		-339*	104	195
5	5-15		825	825	34	3	4-13		217*	17	170
3	6-15		476	510	46	6	4-13		550	508	45
6	6-15		801	811	42	1	5-13		569	576	35
1	7-15		-233*	399	211	4	5-13		376	370	55
4	7-15		-411*	109	176	7	5-13		262*	231	239
2	8-15		913	925	37	2	6-13		121*	165	266
3	9-15		-332*	376	222	5	6-13		-147*	290	115
1	10-15		245*	69	309	3	7-13		400	377	56
1	0-14		242*	356	57	1	8-13		617	619	48
4	0-14		1081	1090	17	4	8-13		278*	77	91
7	0-14		717	727	30	2	9-13		325*	416	90
10	0-14		214*	164	91	3	0-12		379	387	34
2	1-14		929	936	18	6	0-12		-142*	59	208
5	1-14		600	593	30	9	0-12		298*	58	190
8	1-14		348*	335	192	1	1-12		759	711	22
3	2-14		227*	218	54	4	1-12		850	868	21
6	2-14		315*	228	164	7	1-12		675	711	33
9	2-14		-347*	247	193	10	1-12		472	480	54
1	3-14		118*	223	94	2	2-12		-263*	169	141
4	3-14		285*	444	172	5	2-12		-253*	26	162
7	3-14		582	607	43	8	2-12		-131*	322	288
2	4-14		1723	1704	27	3	3-12		976	977	22
5	4-14		-107*	135	118	6	3-12		465	497	46
8	4-14		-326*	4	189	9	3-12		597	588	48
3	5-14		839	787	29	1	4-12		626	581	26
6	5-14		506	457	50	4	4-12		327*	336	53
1	6-14		398	353	49	7	4-12		324*	144	70
4	6-14		237*	30	223	2	5-12		559	533	33
2	7-14		0*	430	406	5	5-12		744	736	37
5	7-14		403*	149	183	3	6-12		357*	187	152
3	8-14		262*	406	262	6	6-12		-381*	68	185
1	9-14		422*	763	244	1	7-12		316*	187	181
2	0-13		203*	93	59	4	7-12		156*	270	125
5	0-13		1066	1069	20	2	8-12		325*	33	215
8	0-13		-208*	216	209	3	9-12		-363*	129	208
3	1-13		251*	388	154	1	10-12		212*	208	127
6	1-13		904	913	27	1	0-11		733	749	21

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
4	0-11		1497	1505	23	1	8-10		-125*	173	280
7	0-11		-494*	62	117	4	8-10		-356*	77	211
10	0-11		-279*	18	203	2	9-10		-346*	253	178
2	1-11		491	532	29	3	0 -9		-376*	220	110
5	1-11		787	791	25	6	0 -9		705	697	27
8	1-11		1059	1090	29	9	0 -9		325*	395	207
3	2-11		558	536	26	1	1 -9		342	306	41
6	2-11		1059	1074	25	4	1 -9		518	506	28
9	2-11		-424*	237	158	7	1 -9		-200*	194	216
1	3-11		273*	50	144	10	1 -9		254*	273	89
4	3-11		703	692	28	2	2 -9		769	764	20
7	3-11		632	592	41	5	2 -9		239*	268	176
2	4-11		525	573	33	8	2 -9		415	469	56
5	4-11		530	471	41	3	3 -9		244*	210	57
8	4-11		-545*	15	164	6	3 -9		954	935	28
3	5-11		534	574	39	9	3 -9		233*	109	97
6	5-11		-331*	109	163	1	4 -9		-149*	293	178
1	6-11		747	776	30	4	4 -9		114*	466	302
4	6-11		299*	195	191	7	4 -9		338*	428	74
2	7-11		684	705	37	2	5 -9		-291*	212	159
5	7-11		274*	424	91	5	5 -9		-334*	112	162
3	8-11		-437*	184	148	3	6 -9		175*	424	234
1	9-11		271*	235	237	6	6 -9		287*	469	90
2	0-10		302	380	44	1	7 -9		435	411	49
5	0-10		1053	1029	19	4	7 -9		-544*	408	160
8	0-10		578	589	38	2	8 -9		-131*	181	247
11	0-10		0*	53	446	3	9 -9		-490*	227	164
3	1-10		748	729	20	1	10 -9		-435*	22	169
6	1-10		634	559	31	1	0 -8		565	577	25
9	1-10		621	646	42	4	0 -8		380	357	32
1	2-10		680	755	24	7	0 -8		196*	54	201
4	2-10		296*	320	48	10	0 -8		400*	703	188
7	2-10		-472*	114	141	2	1 -8		1389	1420	21
2	3-10		1204	1234	19	5	1 -8		-166*	271	208
5	3-10		781	762	29	8	1 -8		-250*	162	211
8	3-10		290*	145	204	3	2 -8		956	942	18
3	4-10		705	727	29	6	2 -8		351*	199	158
6	4-10		252*	87	77	9	2 -8		-373*	205	187
1	5-10		68*	168	128	1	3 -8		-285*	44	135
4	5-10		814	838	32	4	3 -8		754	755	26
7	5-10		150*	352	296	7	3 -8		-222*	149	223
2	6-10		624	672	37	2	4 -8		602	539	27
5	6-10		-506*	393	148	5	4 -8		485	543	45
3	7-10		-257*	126	200	8	4 -8		261*	271	237

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	5	-8	278*	200	168	9	3	-6	367*	45	196
6	5	-8	201*	86	236	1	4	-6	-85*	38	215
1	6	-8	964	953	26	4	4	-6	673	665	30
4	6	-8	131*	73	287	7	4	-6	0*	45	388
2	7	-8	799	847	34	2	5	-6	-324*	158	146
5	7	-8	-203*	228	260	5	5	-6	-252*	513	228
3	8	-8	388*	371	184	3	6	-6	899	959	29
1	9	-8	-134*	32	272	6	6	-6	-379*	488	190
2	0	-7	430	448	32	1	7	-6	-502*	300	134
5	0	-7	485	464	31	4	7	-6	503	539	50
8	0	-7	-119*	58	233	2	8	-6	462	402	50
11	0	-7	-149*	261	334	3	9	-6	438*	428	199
3	1	-7	-227*	148	138	1	10	-6	165*	73	289
6	1	-7	916	871	24	1	0	-5	219*	495	158
9	1	-7	312*	189	159	4	0	-5	933	929	18
1	2	-7	2635	2667	35	7	0	-5	659	680	30
4	2	-7	322	306	45	10	0	-5	472	422	52
7	2	-7	-121*	262	272	2	1	-5	185*	230	62
2	3	-7	1711	1705	25	5	1	-5	170*	316	202
5	3	-7	562	545	35	8	1	-5	-124*	58	266
8	3	-7	-338*	129	181	3	2	-5	493	559	29
3	4	-7	292*	172	53	6	2	-5	849	861	28
6	4	-7	188*	447	276	9	2	-5	287*	49	76
1	5	-7	539	629	33	1	3	-5	201*	438	168
4	5	-7	442	398	45	4	3	-5	664	666	28
7	5	-7	211*	138	267	7	3	-5	-128*	111	266
2	6	-7	272*	204	61	2	4	-5	402	410	36
5	6	-7	628	690	43	5	4	-5	322*	451	152
3	7	-7	333*	149	61	8	4	-5	532	492	53
1	8	-7	424	473	61	3	5	-5	-109*	223	256
4	8	-7	367*	296	203	6	5	-5	314*	153	169
2	9	-7	96*	146	168	1	6	-5	192*	112	198
3	0	-6	281*	116	119	4	6	-5	183*	334	252
6	0	-6	534	535	34	2	7	-5	457	493	48
9	0	-6	-224*	35	211	5	7	-5	327*	235	176
1	1	-6	454	392	31	3	8	-5	513	482	50
4	1	-6	123*	82	184	1	9	-5	523	424	50
7	1	-6	-33*	23	155	2	0	-4	180*	371	174
10	1	-6	0*	60	413	5	0	-4	202*	140	149
2	2	-6	303	285	41	8	0	-4	395	394	49
5	2	-6	840	881	26	11	0	-4	837	913	37
8	2	-6	336*	83	172	3	1	-4	510	537	26
3	3	-6	1496	1505	23	6	1	-4	217*	427	198
6	3	-6	972	953	28	9	1	-4	-404*	268	168

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	2	-4	1357	1341	20	7	0	-2	697	767	31
4	2	-4	-185*	255	184	10	0	-2	317*	7	180
7	2	-4	773	787	34	2	1	-2	362	363	35
2	3	-4	402	408	31	5	1	-2	406	302	36
5	3	-4	471	498	39	8	1	-2	220*	121	83
8	3	-4	496	568	55	3	2	-2	143*	155	176
3	4	-4	907	935	24	6	2	-2	231*	76	197
6	4	-4	624	603	41	9	2	-2	357*	259	183
1	5	-4	260*	93	140	1	3	-2	547	571	25
4	5	-4	351*	331	54	4	3	-2	-107*	91	98
7	5	-4	297*	87	209	7	3	-2	-221*	115	216
2	6	-4	1208	1189	22	2	4	-2	-307*	184	140
5	6	-4	320*	399	69	5	4	-2	-287*	48	148
3	7	-4	324*	397	202	8	4	-2	-502*	192	160
1	8	-4	423	451	59	3	5	-2	337	392	50
4	8	-4	-144*	138	283	6	5	-2	240*	339	201
2	9	-4	217*	108	101	1	6	-2	219*	129	190
3	0	-3	807	841	18	4	6	-2	461	486	47
6	0	-3	402	467	43	2	7	-2	-109*	68	118
9	0	-3	655	662	37	5	7	-2	324*	68	192
1	1	-3	684	666	21	3	8	-2	405*	299	178
4	1	-3	552	585	26	1	9	-2	-329*	112	183
7	1	-3	71*	255	144	2	0	-1	854	854	17
10	1	-3	-354*	302	209	5	0	-1	608	619	25
2	2	-3	219*	301	155	8	0	-1	-238*	484	207
5	2	-3	258*	438	186	11	0	-1	389	44	60
8	2	-3	286*	243	73	3	1	-1	961	974	16
3	3	-3	960	976	20	6	1	-1	362	332	46
6	3	-3	247*	129	204	9	1	-1	197*	48	241
9	3	-3	192*	314	113	1	2	-1	1069	1068	15
1	4	-3	-373*	227	109	4	2	-1	1008	998	20
4	4	-3	246*	93	185	7	2	-1	-363*	153	160
7	4	-3	981	981	33	2	3	-1	1415	1449	23
2	5	-3	-250*	100	152	5	3	-1	-245*	489	197
5	5	-3	-308*	270	182	8	3	-1	552	523	48
3	6	-3	589	606	37	3	4	-1	284*	239	47
6	6	-3	386*	273	183	6	4	-1	440	486	51
1	7	-3	-199*	283	210	1	5	-1	697	661	24
4	7	-3	-191*	268	279	4	5	-1	355*	496	160
2	8	-3	738	734	39	7	5	-1	-202*	314	260
3	9	-3	216*	120	311	2	6	-1	-114*	100	103
1	10	-3	-204*	75	244	5	6	-1	237*	429	231
1	0	-2	89*	306	229	3	7	-1	467	444	48
4	0	-2	787	772	19	1	8	-1	134*	270	288

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
4	8	-1	388*	46	169	6	5	1	462	442	46
2	9	-1	0*	358	419	1	6	1	1009	1016	24
3	0	0	2114	2109	33	4	6	1	180*	16	228
6	0	0	202*	141	176	2	7	1	857	891	31
9	0	0	912	978	32	5	7	1	375*	344	64
1	1	0	400	406	31	3	8	1	446	447	52
4	1	0	2458	2431	37	1	9	1	538	530	50
7	1	0	1085	1096	26	2	0	2	560	537	23
10	1	0	486	290	51	5	0	2	576	591	26
2	2	0	458	426	27	8	0	2	-168*	743	277
5	2	0	488	472	37	11	0	2	328*	361	186
8	2	0	453*	612	190	3	1	2	407	437	30
3	3	0	-355*	162	116	6	1	2	-148*	163	212
6	3	0	311*	320	64	9	1	2	550	635	46
9	3	0	0*	101	439	1	2	2	-255*	73	141
1	4	0	887	916	19	4	2	2	-160*	117	165
4	4	0	1842	1870	28	7	2	2	0*	33	354
7	4	0	244*	473	229	2	3	2	199*	455	167
2	5	0	575	558	32	5	3	2	144*	245	96
5	5	0	583	602	41	8	3	2	847	817	34
3	6	0	761	719	29	3	4	2	1077	1075	20
6	6	0	-203*	68	101	6	4	2	366*	390	172
1	7	0	209*	134	220	1	5	2	254*	468	153
4	7	0	-191*	346	266	4	5	2	385	375	47
2	8	0	-434*	118	155	7	5	2	306*	281	76
3	9	0	1116	1150	34	2	6	2	0*	99	339
1	10	0	-289*	179	209	5	6	2	-329*	83	195
1	0	1	209*	349	161	3	7	2	620	562	36
4	0	1	1498	1543	23	1	8	2	351*	585	207
7	0	1	420	298	40	4	8	2	427	473	62
10	0	1	398	291	58	2	9	2	-198*	131	246
2	1	1	1467	1505	22	3	0	3	266*	273	44
5	1	1	970	961	21	6	0	3	647	671	29
8	1	1	-124*	411	279	9	0	3	570	569	46
3	2	1	247*	247	45	1	1	3	-72*	422	234
6	2	1	1006	1006	25	4	1	3	684	704	22
9	2	1	386*	544	175	7	1	3	492	465	41
1	3	1	-183*	22	169	10	1	3	208*	75	236
4	3	1	0*	174	305	2	2	3	529	555	23
7	3	1	-256*	25	199	5	2	3	806	830	25
2	4	1	903	908	20	8	2	3	335*	364	185
5	4	1	0*	204	369	3	3	3	-183*	171	163
8	4	1	211*	517	282	6	3	3	-291*	75	177
3	5	1	659	659	29	9	3	3	533	587	52

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	4	3	731	727	21	4	2	5	257*	336	52
4	4	3	-361*	286	147	7	2	5	333*	261	179
7	4	3	465	457	51	2	3	5	-236*	51	144
2	5	3	228*	95	159	5	3	5	588	635	34
5	5	3	873	897	31	8	3	5	-275*	78	207
3	6	3	476	461	41	3	4	5	-266*	38	173
6	6	3	-202*	205	259	6	4	5	95*	157	134
1	7	3	817	758	29	1	5	5	252*	251	146
4	7	3	968	985	31	4	5	5	-311*	80	175
2	8	3	-261*	356	221	7	5	5	-538*	86	167
3	9	3	-147*	59	288	2	6	5	-295*	20	149
1	10	3	334*	354	86	5	6	5	304*	69	194
1	0	4	413	455	32	3	7	5	-497*	149	136
4	0	4	136*	123	70	1	8	5	68*	144	153
7	0	4	253*	107	64	4	8	5	144*	369	324
10	0	4	259*	192	82	2	9	5	598	474	47
2	1	4	678	744	20	0	0	6	775	841	47
5	1	4	721	690	25	3	0	6	547	547	24
8	1	4	317*	688	220	6	0	6	249*	550	179
3	2	4	593	604	23	9	0	6	189*	292	272
6	2	4	804	801	29	1	1	6	1191	1123	15
9	2	4	327*	82	176	4	1	6	324	308	37
1	3	4	597	591	21	7	1	6	336*	309	158
4	3	4	386	350	40	10	1	6	331*	153	188
7	3	4	361*	341	58	2	2	6	1202	1216	17
2	4	4	1017	1007	18	5	2	6	1075	1081	22
5	4	4	-166*	365	236	8	2	6	497	481	47
8	4	4	245*	134	92	3	3	6	1149	1100	18
3	5	4	288*	262	136	6	3	6	211*	338	211
6	5	4	195*	240	261	9	3	6	269*	179	87
1	6	4	834	838	26	1	4	6	523	497	25
4	6	4	219*	41	192	4	4	6	241*	141	61
2	7	4	357	296	52	7	4	6	382*	416	60
5	7	4	430*	639	184	2	5	6	800	765	24
3	8	4	-137*	143	278	5	5	6	419	304	47
1	9	4	568	521	45	3	6	6	0*	18	347
2	0	5	222*	186	53	6	6	6	565	525	47
5	0	5	425	416	33	1	7	6	-431*	73	140
8	0	5	489	571	46	4	7	6	-271*	82	217
11	0	5	443	432	60	2	8	6	-556*	75	127
3	1	5	277	265	40	3	9	6	209*	32	255
6	1	5	-350*	98	142	1	10	6	413*	212	195
9	1	5	-233*	156	240	4	0	7	450	420	29
1	2	5	344	297	34	7	0	7	1419	1366	25

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
10	0	7	529	507	49	2	9	8	-282*	105	219
2	1	7	2048	2102	29	3	0	9	462	478	29
5	1	7	1111	1100	20	6	0	9	103*	70	257
8	1	7	225*	419	218	9	0	9	141*	294	118
3	2	7	810	811	18	1	1	9	1227	1187	15
6	2	7	803	799	28	4	1	9	-244*	54	139
9	2	7	483	561	58	7	1	9	678	753	34
1	3	7	597	598	23	10	1	9	-324*	29	178
4	3	7	452	393	33	2	2	9	455	452	26
7	3	7	772	764	35	5	2	9	596	624	32
2	4	7	741	731	23	8	2	9	403	447	58
5	4	7	-86*	103	126	3	3	9	270*	11	115
8	4	7	330*	297	76	6	3	9	523	485	41
3	5	7	188*	81	188	9	3	9	337*	135	172
6	5	7	290*	355	74	1	4	9	258*	288	43
1	6	7	1192	1172	21	4	4	9	240*	54	60
4	6	7	702	663	33	7	4	9	-70*	50	158
2	7	7	686	674	34	2	5	9	226*	156	154
5	7	7	285*	234	224	5	5	9	750	807	34
3	8	7	760	780	38	3	6	9	-119*	340	248
1	9	7	280*	299	83	6	6	9	721	711	42
2	0	8	446	487	32	1	7	9	485	476	41
5	0	8	130*	448	231	4	7	9	302*	293	186
8	0	8	-536*	176	133	2	8	9	266*	300	237
11	0	8	697	719	44	3	9	9	315*	361	80
3	1	8	144*	169	66	1	10	9	378*	77	202
6	1	8	109*	226	254	1	0	10	743	748	21
9	1	8	838	822	35	4	0	10	1608	1609	25
1	2	8	1645	1588	25	7	0	10	-366*	209	134
4	2	8	681	678	24	10	0	10	138*	123	124
7	2	8	218*	270	230	2	1	10	909	903	16
2	3	8	1270	1332	22	5	1	10	608	585	27
5	3	8	192*	204	202	8	1	10	601	617	41
8	3	8	322*	33	154	3	2	10	555	582	24
3	4	8	712	736	25	6	2	10	196*	262	78
6	4	8	223*	426	223	9	2	10	494	422	56
1	5	8	1317	1315	18	1	3	10	960	929	16
4	5	8	800	778	28	4	3	10	478	481	33
7	5	8	-143*	250	290	7	3	10	133*	349	299
2	6	8	209*	198	69	2	4	10	1209	1209	18
5	6	8	615	674	40	5	4	10	-236*	149	189
3	7	8	286*	358	162	8	4	10	148*	40	301
1	8	8	-176*	68	233	3	5	10	1146	1164	22
4	8	8	-251*	9	229	6	5	10	-382*	101	182

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	6	10	507	495	35	1	4	12	-128*	73	77
4	6	10	193*	218	88	4	4	12	498	527	36
2	7	10	-456*	23	134	7	4	12	0*	219	217
5	7	10	-288*	325	224	2	5	12	435	441	36
3	8	10	308*	226	66	5	5	12	622	578	37
1	9	10	744	701	38	3	6	12	659	666	32
2	0	11	660	624	23	6	6	12	202*	199	218
5	0	11	1441	1440	19	1	7	12	-259*	275	178
8	0	11	451	443	49	4	7	12	135*	276	282
11	0	11	485	321	52	2	8	12	-395*	182	183
3	1	11	927	965	17	3	9	12	205*	480	294
6	1	11	1004	1018	24	1	10	12	-145*	208	273
9	1	11	-488*	121	149	4	0	13	-271*	554	162
1	2	11	1831	1792	28	7	0	13	504	469	40
4	2	11	414	443	36	10	0	13	412	387	60
7	2	11	467	502	48	2	1	13	38*	32	122
2	3	11	493	460	25	5	1	13	534	581	31
5	3	11	222*	239	189	8	1	13	359*	466	66
8	3	11	419	305	54	3	2	13	413	399	29
3	4	11	0*	113	324	6	2	13	587	629	36
6	4	11	647	669	35	9	2	13	-374*	52	188
1	5	11	1045	1056	20	1	3	13	-174*	67	181
4	5	11	702	728	33	4	3	13	716	780	28
7	5	11	441	427	55	7	3	13	373*	356	58
2	6	11	221*	82	188	2	4	13	-250*	33	156
5	6	11	270*	566	240	5	4	13	595	583	35
3	7	11	312*	35	167	8	4	13	-526*	260	170
1	8	11	726	689	32	3	5	13	-293*	86	157
4	8	11	347*	44	186	6	5	13	336*	131	179
2	9	11	249*	290	218	1	6	13	-184*	340	212
0	0	12	216*	934	377	4	6	13	-598*	187	126
3	0	12	125*	202	208	2	7	13	-323*	236	182
6	0	12	-267*	203	150	5	7	13	317*	134	195
9	0	12	-469*	278	133	3	8	13	441	532	54
1	1	12	1003	988	18	1	9	13	604	596	42
4	1	12	672	688	22	2	0	14	475	529	31
7	1	12	-259*	78	178	5	0	14	910	916	21
10	1	12	-356*	394	216	8	0	14	-319*	279	165
2	2	12	72*	40	209	3	1	14	76*	105	95
5	2	12	649	663	29	6	1	14	593	608	33
8	2	12	309*	77	191	9	1	14	746	754	39
3	3	12	368	418	37	1	2	14	1524	1511	22
6	3	12	-207*	278	213	4	2	14	160*	149	71
9	3	12	151*	374	306	7	2	14	-274*	230	177

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	3	14	891	853	17	2	1	16	957	960	16
5	3	14	1070	1055	24	5	1	16	258*	307	57
8	3	14	144*	361	317	8	1	16	0*	359	369
3	4	14	99*	197	227	3	2	16	-229*	276	162
6	4	14	117*	120	121	6	2	16	-321*	116	143
1	5	14	-323*	132	142	9	2	16	227*	192	99
4	5	14	830	813	29	1	3	16	-209*	225	160
7	5	14	252*	64	252	4	3	16	541	511	31
2	6	14	849	831	26	7	3	16	-485*	257	142
5	6	14	532	494	45	2	4	16	334	324	39
3	7	14	-409*	283	149	5	4	16	291*	278	161
1	8	14	284*	220	193	8	4	16	330*	302	211
4	8	14	-358*	181	199	3	5	16	342*	340	145
2	9	14	-549*	79	155	6	5	16	237*	63	237
0	0	15	942	1287	47	1	6	16	181*	308	181
3	0	15	-291*	261	126	4	6	16	332*	206	157
6	0	15	314*	286	50	2	7	16	518	409	39
9	0	15	249*	229	82	5	7	16	-481*	42	148
1	1	15	539	525	24	3	8	16	333*	468	218
4	1	15	848	861	20	1	9	16	341*	252	168
7	1	15	-436*	99	128	2	0	17	820	834	20
10	1	15	-252*	121	253	5	0	17	306*	568	154
2	2	15	1303	1297	21	8	0	17	230*	49	78
5	2	15	543	571	33	3	1	17	-298*	88	122
8	2	15	632	596	40	6	1	17	483	445	39
3	3	15	-411*	69	120	9	1	17	-545*	38	136
6	3	15	940	914	27	1	2	17	1925	1968	30
9	3	15	648	659	46	4	2	17	232*	265	155
1	4	15	0*	151	293	7	2	17	221*	76	156
4	4	15	394	399	42	2	3	17	1930	1905	29
7	4	15	444	376	52	5	3	17	-250*	112	186
2	5	15	185*	77	70	8	3	17	-462*	68	165
5	5	15	220*	236	79	3	4	17	386	326	37
3	6	15	234*	180	184	6	4	17	818	760	30
6	6	15	678	679	43	1	5	17	-311*	300	141
1	7	15	841	824	27	4	5	17	287*	341	187
4	7	15	329*	271	176	7	5	17	0*	43	405
2	8	15	131*	502	288	2	6	17	-301*	173	156
3	9	15	351*	321	155	5	6	17	-272*	374	236
1	10	15	277*	291	89	3	7	17	-318*	357	183
1	0	16	218*	100	65	1	8	17	715	681	34
4	0	16	486	528	30	4	8	17	-359*	133	185
7	0	16	332*	442	180	2	9	17	-246*	109	207
10	0	16	212*	480	305	0	0	18	328*	1132	119

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	0	18	231*	165	51	4	6	19	-257*	394	228
6	0	18	876	859	26	2	7	19	1116	1112	25
9	0	18	316*	29	194	5	7	19	-192*	75	110
1	1	18	1610	1550	26	3	8	19	-342*	107	183
4	1	18	676	704	23	1	9	19	-387*	127	173
7	1	18	525	554	42	2	0	20	-252*	112	142
10	1	18	-157*	86	118	5	0	20	-352*	72	120
2	2	18	75*	224	217	8	0	20	-244*	479	226
5	2	18	1198	1197	21	3	1	20	278*	124	123
8	2	18	418	298	55	6	1	20	-266*	52	178
3	3	18	1766	1762	27	9	1	20	153*	116	119
6	3	18	853	837	29	1	2	20	-494*	131	91
9	3	18	0*	133	416	4	2	20	96*	187	243
1	4	18	0*	152	317	7	2	20	750	751	34
4	4	18	805	808	27	2	3	20	315	283	36
7	4	18	313*	235	200	5	3	20	-338*	21	157
2	5	18	268*	237	162	8	3	20	706	721	42
5	5	18	-286*	287	191	3	4	20	784	760	23
3	6	18	262*	537	220	6	4	20	188*	316	95
6	6	18	285*	117	201	1	5	20	478	502	31
1	7	18	553	583	36	4	5	20	310*	51	141
4	7	18	585	652	42	7	5	20	-357*	145	176
2	8	18	714	702	33	2	6	20	1083	1071	22
3	9	18	201*	164	269	5	6	20	302*	86	179
1	10	18	510	462	55	3	7	20	328*	341	57
1	0	19	-58*	97	115	1	8	20	218*	254	218
4	0	19	620	648	25	4	8	20	369*	318	168
7	0	19	266*	95	186	2	9	20	243*	90	213
10	0	19	-244*	92	238	3	0	21	653	645	23
2	1	19	253*	149	131	6	0	21	539	546	35
5	1	19	548	548	31	9	0	21	497	501	52
8	1	19	300*	188	210	1	1	21	-303*	48	121
3	2	19	1213	1201	20	4	1	21	830	809	21
6	2	19	675	691	32	7	1	21	292*	212	66
9	2	19	-515*	65	152	10	1	21	309*	159	198
1	3	19	381	341	30	2	2	21	202*	375	152
4	3	19	527	488	31	5	2	21	233*	13	60
7	3	19	456	569	53	8	2	21	140*	75	266
2	4	19	1033	999	19	3	3	21	1035	972	19
5	4	19	292*	146	167	6	3	21	247*	242	210
8	4	19	247*	332	96	9	3	21	331*	53	72
3	5	19	188*	273	183	1	4	21	345	297	34
6	5	19	-136*	179	275	4	4	21	220*	11	172
1	6	19	-242*	239	199	7	4	21	878	941	36

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	5	21	-105*	104	226	8	3	23	325*	114	207
5	5	21	0*	70	359	3	4	23	1000	984	22
3	6	21	817	815	28	6	4	23	417	446	53
6	6	21	568	519	47	1	5	23	-302*	207	158
1	7	21	198*	233	187	4	5	23	210*	163	75
4	7	21	621	654	39	7	5	23	473	468	56
2	8	21	767	741	33	2	6	23	376	431	44
3	9	21	141*	305	257	5	6	23	-497*	172	136
1	10	21	408	42	58	3	7	23	-372*	237	186
1	0	22	1049	1059	20	1	8	23	593	563	37
4	0	22	809	797	21	4	8	23	-418*	257	204
7	0	22	869	855	28	2	9	23	241*	52	219
10	0	22	-283*	39	189	0	0	24	3628	3338	56
2	1	22	228*	236	49	3	0	24	-208*	100	159
5	1	22	338*	608	168	6	0	24	541	486	35
8	1	22	893	852	32	9	0	24	-375*	81	168
3	2	22	611	577	22	1	1	24	1517	1473	23
6	2	22	386	366	47	4	1	24	852	832	21
9	2	22	333*	295	76	7	1	24	278*	215	171
1	3	22	74*	39	92	10	1	24	48*	53	195
4	3	22	103*	132	237	2	2	24	1351	1317	19
7	3	22	330*	131	177	5	2	24	691	720	30
2	4	22	321	362	41	8	2	24	314*	191	178
5	4	22	315*	312	56	3	3	24	1289	1244	22
8	4	22	-490*	46	144	6	3	24	957	967	28
3	5	22	731	726	26	1	4	24	261*	187	134
6	5	22	398	246	55	4	4	24	751	725	27
1	6	22	257*	101	171	7	4	24	398*	100	175
4	6	22	682	674	35	2	5	24	-303*	433	176
2	7	22	226*	41	67	5	5	24	128*	138	259
5	7	22	-253*	36	213	3	6	24	353*	409	155
3	8	22	-444*	194	168	6	6	24	401*	487	170
1	9	22	-496*	18	156	1	7	24	-118*	270	254
2	0	23	1160	1185	21	4	7	24	430	433	50
5	0	23	1014	1038	22	2	8	24	495	442	42
8	0	23	683	702	38	1	10	24	443	375	57
3	1	23	1248	1216	18	1	0	25	1532	1533	21
6	1	23	637	697	33	4	0	25	2438	2431	34
9	1	23	360*	245	199	7	0	25	759	691	31
1	2	23	171*	152	152	10	0	25	0*	274	408
4	2	23	520	512	31	2	1	25	1145	1133	16
7	2	23	288*	342	207	5	1	25	-304*	123	148
2	3	23	271	284	41	8	1	25	982	1010	33
5	3	23	196*	302	191	3	2	25	341	280	36

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
6	2	25	823	837	30	7	1	27	-169*	470	236
9	2	25	383*	418	69	10	1	27	411*	368	70
1	3	25	324	363	36	2	2	27	312	348	38
4	3	25	138*	255	90	5	2	27	-153*	64	202
7	3	25	349*	195	60	8	2	27	-358*	199	161
2	4	25	207*	131	56	3	3	27	341	352	43
5	4	25	335*	388	56	6	3	27	579	611	39
8	4	25	416*	508	189	1	4	27	672	662	22
3	5	25	1227	1213	21	4	4	27	619	537	30
6	5	25	-239*	120	240	7	4	27	421	437	56
1	6	25	954	968	23	2	5	27	-509*	59	112
4	6	25	310*	160	159	5	5	27	925	984	30
2	7	25	0*	446	399	3	6	27	387	423	47
5	7	25	242*	444	255	6	6	27	192*	21	104
3	8	25	270*	594	224	1	7	27	-268*	56	195
1	9	25	-309*	58	193	4	7	27	541	535	44
2	0	26	648	683	25	2	8	27	282*	363	69
5	0	26	-217*	56	184	1	10	27	289*	42	186
8	0	26	790	793	37	1	0	28	-329*	174	117
3	1	26	899	894	19	4	0	28	286*	457	162
6	1	26	587	552	34	7	0	28	-327*	83	164
9	1	26	227*	258	92	10	0	28	308*	417	226
1	2	26	1258	1259	19	2	1	28	946	931	17
4	2	26	-99*	68	241	5	1	28	149*	373	235
7	2	26	260*	59	183	8	1	28	-183*	220	235
2	3	26	507	552	29	3	2	28	445	465	32
5	3	26	459	420	38	6	2	28	849	842	30
8	3	26	206*	505	296	9	2	28	-290*	128	218
3	4	26	1225	1186	20	1	3	28	495	500	24
6	4	26	262*	205	185	4	3	28	752	719	26
1	5	26	662	634	24	7	3	28	236*	236	214
4	5	26	313*	273	55	2	4	28	1019	1015	20
7	5	26	473	433	55	5	4	28	272*	514	229
2	6	26	410	403	43	8	4	28	147*	358	314
5	6	26	505	466	47	3	5	28	272*	271	55
3	7	26	-264*	317	240	6	5	28	137*	182	261
1	8	26	389	331	48	1	6	28	892	908	24
4	8	26	304*	322	69	4	6	28	-455*	36	145
2	9	26	-408*	211	188	2	7	28	396	418	50
3	0	27	-162*	222	166	5	7	28	566	621	48
6	0	27	914	916	26	3	8	28	-697*	198	123
9	0	27	655	633	42	1	9	28	522	525	45
1	1	27	178*	481	185	2	0	29	857	873	21
4	1	27	251*	79	145	5	0	29	-382*	80	117

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
8	0	29	451	499	55	1	10	30	143*	146	282
3	1	29	947	930	19	1	0	31	304*	166	53
6	1	29	163*	310	254	4	0	31	260*	317	160
9	1	29	0*	342	399	7	0	31	862	857	31
1	2	29	980	995	16	10	0	31	488	380	56
4	2	29	638	637	28	2	1	31	1392	1353	22
7	2	29	226*	266	213	5	1	31	872	895	25
2	3	29	1191	1180	17	8	1	31	479	532	52
5	3	29	576	608	36	3	2	31	168*	167	67
8	3	29	291*	235	205	6	2	31	762	770	31
3	4	29	-215*	124	182	9	2	31	230*	309	99
6	4	29	545	569	45	1	3	31	252*	283	43
1	5	29	-146*	46	208	4	3	31	639	619	29
4	5	29	0*	105	360	7	3	31	335*	528	179
7	5	29	0*	113	441	2	4	31	-101*	182	247
2	6	29	194*	64	188	5	4	31	-372*	37	150
5	6	29	235*	312	235	3	5	31	264*	380	61
3	7	29	127*	126	232	6	5	31	-506*	8	144
1	8	29	-469*	233	147	1	6	31	507	559	35
4	8	29	-149*	359	281	4	6	31	243*	213	73
2	9	29	684	703	40	2	7	31	242*	131	190
0	0	30	1555	1475	27	5	7	31	-210*	162	261
3	0	30	219*	301	175	3	8	31	269*	530	211
6	0	30	-240*	65	190	1	9	31	-242*	199	256
9	0	30	498	512	52	2	0	32	281*	377	52
1	1	30	564	553	25	5	0	32	809	761	26
4	1	30	330	290	44	8	0	32	192*	140	242
7	1	30	-501*	211	125	3	1	32	314*	584	149
10	1	30	-211*	93	220	6	1	32	331*	159	155
2	2	30	-230*	356	165	9	1	32	749	804	45
5	2	30	270*	98	159	1	2	32	1080	1087	18
8	2	30	0*	346	414	4	2	32	385	397	42
3	3	30	317	187	43	7	2	32	317*	243	64
6	3	30	-249*	84	74	2	3	32	1151	1159	19
1	4	30	138*	55	71	5	3	32	-310*	67	166
4	4	30	195*	360	210	8	3	32	292*	293	197
7	4	30	-140*	116	265	3	4	32	815	772	24
2	5	30	336	337	45	6	4	32	612	572	39
5	5	30	-263*	185	191	1	5	32	885	890	22
3	6	30	168*	64	198	4	5	32	965	951	27
6	6	30	449	388	55	7	5	32	319*	74	197
1	7	30	-364*	141	160	2	6	32	195*	228	184
4	7	30	608	587	41	5	6	32	489	455	49
2	8	30	509	375	43	3	7	32	-134*	510	279

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	8	32	-371*	165	160	3	8	34	0*	263	412
2	9	32	194*	23	245	1	9	34	606	671	44
3	0	33	526	526	30	2	0	35	665	696	27
6	0	33	370	390	54	5	0	35	1092	1046	23
9	0	33	385*	439	66	8	0	35	507	496	50
1	1	33	815	870	21	3	1	35	1057	1050	20
4	1	33	878	857	23	6	1	35	436	449	46
7	1	33	301*	367	66	9	1	35	-425*	50	158
2	2	33	401	403	31	1	2	35	1763	1740	26
5	2	33	341	327	50	4	2	35	628	595	29
8	2	33	491	581	57	7	2	35	351*	375	172
3	3	33	840	823	22	2	3	35	-364*	35	121
6	3	33	630	617	38	5	3	35	311*	280	162
1	4	33	-324*	49	122	8	3	35	573	495	50
4	4	33	341*	97	150	3	4	35	130*	91	92
7	4	33	539	512	47	6	4	35	189*	127	246
2	5	33	252*	113	56	1	5	35	1039	1054	21
5	5	33	653	667	37	4	5	35	727	708	31
3	6	33	-378*	159	162	2	6	35	114*	181	107
6	6	33	281*	314	213	5	6	35	469	494	51
1	7	33	655	682	31	3	7	35	-332*	136	207
4	7	33	-492*	1	162	1	8	35	-187*	114	247
2	8	33	-238*	222	232	2	9	35	193*	163	218
1	0	34	185*	167	80	0	0	36	1623	1659	31
4	0	34	574	516	31	3	0	36	418	438	36
7	0	34	606	660	40	6	0	36	-110*	61	258
10	0	34	272*	182	92	9	0	36	408	313	60
2	1	34	825	818	20	1	1	36	1795	1770	28
5	1	34	929	930	25	4	1	36	979	996	23
8	1	34	197*	17	249	7	1	36	-277*	287	185
3	2	34	301	294	46	2	2	36	974	948	19
6	2	34	208*	104	79	5	2	36	1725	1769	28
9	2	34	518	539	54	8	2	36	203*	96	207
1	3	34	-203*	366	176	3	3	36	-276*	135	155
4	3	34	634	606	29	6	3	36	128*	63	274
7	3	34	-358*	142	185	1	4	36	-99*	48	213
2	4	34	604	567	26	4	4	36	688	646	30
5	4	34	-217*	13	212	7	4	36	201*	83	227
3	5	34	0*	487	406	2	5	36	821	848	25
6	5	34	239*	14	209	5	5	36	726	718	36
1	6	34	595	634	31	3	6	36	653	678	33
4	6	34	638	652	36	1	7	36	522	512	37
2	7	34	316*	321	58	4	7	36	270*	247	182
5	7	34	239*	328	239	2	8	36	-310*	387	219

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	0	37	440	469	43	6	0	39	508	463	40
4	0	37	802	788	27	9	0	39	-480*	154	142
7	0	37	-293*	39	183	1	1	39	225*	331	59
10	0	37	215*	237	117	4	1	39	700	682	26
2	1	37	865	852	21	7	1	39	-248*	50	72
5	1	37	595	594	35	2	2	39	828	835	20
8	1	37	294*	224	72	5	2	39	343*	530	159
3	2	37	630	653	27	8	2	39	364*	442	67
6	2	37	203*	66	80	3	3	39	557	529	31
9	2	37	261*	151	237	6	3	39	342*	471	210
1	3	37	302	298	40	1	4	39	749	761	22
4	3	37	542	524	34	4	4	39	260*	331	65
7	3	37	0*	431	421	7	4	39	404*	423	63
2	4	37	-105*	153	242	2	5	39	240*	96	159
5	4	37	340*	339	56	5	5	39	720	730	35
3	5	37	615	607	32	3	6	39	0*	48	384
6	5	37	310*	72	191	1	7	39	578	604	36
1	6	37	-307*	379	181	4	7	39	468	349	49
4	6	37	-487*	114	133	2	8	39	749	746	33
2	7	37	228*	198	72	1	0	40	-503*	155	86
3	8	37	634	669	41	4	0	40	-196*	37	182
1	9	37	647	609	37	7	0	40	260*	345	236
2	0	38	-240*	17	142	10	0	40	-362*	236	194
5	0	38	591	584	36	2	1	40	-89*	192	232
8	0	38	138*	42	297	5	1	40	-453*	45	129
3	1	38	-377*	195	116	8	1	40	-233*	157	240
6	1	38	158*	35	94	3	2	40	-303*	266	140
9	1	38	777	781	42	6	2	40	738	792	34
1	2	38	559	573	24	9	2	40	0*	145	233
4	2	38	-184*	205	195	1	3	40	1045	1065	18
7	2	38	-345*	464	184	4	3	40	-322*	221	162
2	3	38	265*	251	47	7	3	40	-176*	259	108
5	3	38	522	595	41	2	4	40	810	843	24
8	3	38	292*	386	236	5	4	40	-287*	218	208
3	4	38	-276*	119	172	3	5	40	-171*	44	213
6	4	38	411	423	53	6	5	40	341*	67	159
1	5	38	523	526	31	1	6	40	723	720	28
4	5	38	474	491	42	4	6	40	291*	110	172
2	6	38	508	607	38	2	7	40	327*	229	171
5	6	38	236*	134	222	3	8	40	0*	190	236
3	7	38	294*	283	63	1	9	40	-321*	344	208
1	8	38	500	545	45	2	0	41	330*	70	139
2	9	38	346*	162	60	5	0	41	-106*	56	252
3	0	39	315*	327	50	8	0	41	342*	275	196

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	1	41	387	346	39	5	1	43	747	766	31
6	1	41	122*	506	315	8	1	43	734	717	39
9	1	41	204*	342	113	3	2	43	875	855	23
1	2	41	1124	1136	18	6	2	43	-306*	110	186
4	2	41	412	363	41	1	3	43	329	382	40
7	2	41	-228*	253	209	4	3	43	-200*	188	195
2	3	41	235*	471	181	7	3	43	676	723	40
5	3	41	-121*	98	253	2	4	43	1187	1215	21
8	3	41	-254*	76	232	5	4	43	-431*	145	163
3	4	41	442	355	38	3	5	43	338	382	51
6	4	41	-240*	59	83	6	5	43	225*	79	92
1	5	41	-383*	375	144	1	6	43	577	519	32
4	5	41	214*	35	195	4	6	43	-137*	429	301
2	6	41	259*	398	190	2	7	43	1008	1025	27
5	6	41	0*	234	453	3	8	43	-147*	19	289
3	7	41	-276*	87	215	1	9	43	-384*	124	193
1	8	41	246*	135	70	2	0	44	560	597	35
2	9	41	498	490	48	5	0	44	294*	224	59
0	0	42	920	1044	46	8	0	44	460	460	56
3	0	42	146*	24	218	3	1	44	140*	115	87
6	0	42	989	960	27	6	1	44	215*	86	232
9	0	42	343*	218	69	9	1	44	426*	352	181
1	1	42	993	1022	20	1	2	44	358	378	40
4	1	42	493	434	36	4	2	44	309*	318	145
7	1	42	379*	391	59	7	2	44	0*	505	432
2	2	42	-167*	268	203	2	3	44	1231	1209	19
5	2	42	754	725	30	5	3	44	244*	56	202
8	2	42	356*	300	190	8	3	44	434	363	58
3	3	42	1392	1385	20	3	4	44	316*	267	50
6	3	42	715	720	36	6	4	44	0*	273	395
1	4	42	633	649	25	1	5	44	105*	536	280
4	4	42	-244*	158	189	4	5	44	537	557	43
7	4	42	565	505	44	2	6	44	827	851	28
2	5	42	343	370	48	5	6	44	244*	137	79
5	5	42	-306*	36	177	3	7	44	-370*	19	166
3	6	42	301*	268	167	1	8	44	0*	190	216
1	7	42	0*	83	386	3	0	45	106*	93	262
4	7	42	-169*	41	118	6	0	45	-201*	172	208
2	8	42	263*	604	234	9	0	45	364*	342	72
1	0	43	245*	474	213	1	1	45	284*	303	54
4	0	43	1069	1042	23	4	1	45	246*	372	204
7	0	43	263*	390	212	7	1	45	-223*	309	224
10	0	43	-395*	342	217	2	2	45	519	572	33
2	1	43	594	567	28	5	2	45	408	381	46

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
8	2	45	386*	126	168	3	4	47	-236*	93	195
3	3	45	-312*	220	171	6	4	47	252*	47	74
6	3	45	603	641	41	1	5	47	107*	114	239
1	4	45	171*	55	203	4	5	47	830	845	31
4	4	45	-174*	85	91	2	6	47	430	443	43
7	4	45	531	538	53	5	6	47	-208*	107	258
2	5	45	248*	139	178	3	7	47	278*	37	66
5	5	45	-239*	15	240	1	8	47	259*	67	197
3	6	45	765	762	32	0	0	48	1218	1507	50
1	7	45	171*	151	201	3	0	48	856	868	27
4	7	45	235*	684	253	6	0	48	546	506	42
2	8	45	351*	316	58	9	0	48	148*	290	138
1	0	46	-127*	404	213	1	1	48	-210*	335	153
4	0	46	337*	388	156	4	1	48	538	510	35
7	0	46	1132	1134	30	7	1	48	271*	435	212
2	1	46	1132	1133	21	2	2	48	-478*	42	106
5	1	46	235*	146	200	5	2	48	-340*	225	186
8	1	46	477	468	54	8	2	48	146*	52	297
3	2	46	-105*	121	263	3	3	48	258*	162	56
6	2	46	-400*	175	146	6	3	48	-231*	50	211
1	3	46	674	725	25	1	4	48	657	688	26
4	3	46	942	939	26	4	4	48	623	635	35
7	3	46	444	491	60	7	4	48	-493*	298	181
2	4	46	685	714	28	2	5	48	352	226	48
5	4	46	287*	116	189	5	5	48	381*	508	168
3	5	46	418	423	45	3	6	48	0*	178	353
6	5	46	342*	472	176	1	7	48	656	654	33
1	6	46	779	846	29	4	7	48	-420*	151	188
4	6	46	132*	102	268	2	8	48	188*	138	258
2	7	46	0*	156	416	1	0	49	930	937	32
3	8	46	657	616	38	4	0	49	1534	1530	22
1	9	46	234*	507	241	7	0	49	557	619	49
2	0	47	-266*	316	162	2	1	49	735	728	28
5	0	47	482	435	42	5	1	49	317*	94	166
8	0	47	-299*	182	173	8	1	49	537	534	51
3	1	47	641	604	30	3	2	49	-172*	115	82
6	1	47	282*	281	186	6	2	49	710	751	37
9	1	47	293*	384	88	1	3	49	380	367	38
1	2	47	302*	439	148	4	3	49	232*	23	170
4	2	47	613	647	32	7	3	49	0*	40	424
7	2	47	399	430	57	2	4	49	214*	112	173
2	3	47	285*	386	148	5	4	49	415	416	51
5	3	47	-251*	106	189	3	5	49	599	491	34
8	3	47	291*	119	196	6	5	49	-147*	249	345

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	6	49	701	717	30	2	1	52	153*	136	220
4	6	49	-373*	82	193	5	1	52	173*	403	259
2	7	49	0*	296	381	8	1	52	-141*	36	301
1	9	49	111*	160	129	3	2	52	316*	342	53
2	0	50	424	357	44	6	2	52	-391*	267	162
5	0	50	426	387	49	1	3	52	299*	332	148
8	0	50	583	551	45	4	3	52	580	446	34
3	1	50	440	431	42	7	3	52	108*	218	141
6	1	50	579	612	41	2	4	52	667	669	29
9	1	50	-393*	63	198	5	4	52	623	551	37
1	2	50	1736	1764	26	3	5	52	485	420	41
4	2	50	-198*	297	210	6	5	52	-149*	27	292
7	2	50	394*	163	168	1	6	52	202*	165	76
2	3	50	291*	137	133	4	6	52	-319*	230	200
5	3	50	756	703	31	2	7	52	501	470	43
3	4	50	898	895	26	1	9	52	302*	429	186
6	4	50	143*	199	122	2	0	53	534	566	41
1	5	50	623	671	31	5	0	53	215*	186	215
4	5	50	-232*	366	219	8	0	53	507	579	53
2	6	50	656	632	33	3	1	53	1113	1120	24
5	6	50	638	660	40	6	1	53	152*	171	113
3	7	50	-496*	82	158	1	2	53	622	643	30
1	8	50	-280*	47	211	4	2	53	582	570	35
3	0	51	790	808	29	7	2	53	-167*	122	110
6	0	51	342*	205	155	2	3	53	1143	1154	21
9	0	51	308*	346	84	5	3	53	284*	454	198
1	1	51	847	866	26	3	4	53	263*	8	61
4	1	51	326*	438	153	6	4	53	887	874	35
7	1	51	578	500	42	1	5	53	67*	67	126
2	2	51	556	524	32	4	5	53	271*	307	70
5	2	51	543	556	41	2	6	53	-227*	121	245
8	2	51	223*	197	98	3	7	53	297*	293	71
3	3	51	246*	311	167	1	8	53	264*	281	200
6	3	51	427	433	53	0	0	54	1822	1862	37
1	4	51	68*	50	122	3	0	54	281*	231	65
4	4	51	639	663	36	6	0	54	263*	420	212
2	5	51	115*	130	101	9	0	54	213*	428	293
5	5	51	499	454	46	1	1	54	454	422	44
3	6	51	128*	94	251	4	1	54	438	529	49
1	7	51	99*	123	118	7	1	54	168*	285	112
2	8	51	231*	225	210	2	2	54	214*	229	186
1	0	52	-255*	322	186	5	2	54	249*	305	206
4	0	52	636	579	37	8	2	54	-553*	141	146
7	0	52	137*	166	294	3	3	54	595	611	34

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
6	3	54	192*	237	226	9	0	57	482	522	60
1	4	54	-253*	39	188	1	1	57	285*	544	212
4	4	54	676	680	35	4	1	57	1328	1333	24
2	5	54	-329*	151	190	7	1	57	372*	161	169
5	5	54	-287*	185	208	2	2	57	-190*	69	206
3	6	54	290*	142	185	5	2	57	-491*	19	135
1	7	54	-232*	189	220	8	2	57	570	642	52
2	8	54	715	732	36	3	3	57	745	737	28
1	0	55	370*	214	62	6	3	57	336*	287	62
4	0	55	788	772	32	1	4	57	210*	324	70
7	0	55	-189*	148	95	4	4	57	317*	303	60
2	1	55	549	551	36	2	5	57	0*	214	404
5	1	55	279*	439	205	5	5	57	412*	578	191
8	1	55	-140*	149	128	3	6	57	598	532	36
3	2	55	327	250	50	1	7	57	359*	382	57
6	2	55	298*	420	190	2	8	57	-366*	171	196
1	3	55	-153*	98	228	1	0	58	186*	103	298
4	3	55	241*	564	227	4	0	58	0*	37	338
7	3	55	-145*	32	303	7	0	58	804	874	38
2	4	55	295*	376	167	2	1	58	-429*	37	126
5	4	55	-274*	24	213	5	1	58	636	627	39
3	5	55	-184*	52	237	8	1	58	544	456	51
1	6	55	0*	135	372	3	2	58	137*	201	100
4	6	55	135*	138	247	6	2	58	382*	451	168
2	7	55	403	390	49	1	3	58	-223*	429	221
2	0	56	-230*	101	179	4	3	58	-126*	185	282
5	0	56	519	470	42	7	3	58	-627*	225	139
8	0	56	254*	196	222	2	4	58	-171*	198	249
3	1	56	336*	375	56	5	4	58	233*	18	219
6	1	56	296*	194	168	3	5	58	-325*	58	187
1	2	56	431	433	41	1	6	58	-259*	129	180
4	2	56	315*	93	154	4	6	58	333*	392	190
7	2	56	361*	350	68	2	7	58	480	528	51
2	3	56	-254*	361	184	2	0	59	-368*	328	135
5	3	56	129*	137	289	5	0	59	364*	339	185
3	4	56	613	595	34	8	0	59	417*	327	190
6	4	56	-251*	195	245	3	1	59	568	548	37
1	5	56	418	429	41	6	1	59	-319*	28	189
4	5	56	595	597	39	1	2	59	925	922	26
2	6	56	429	383	46	4	2	59	695	723	35
3	7	56	440	500	54	7	2	59	286*	115	217
1	8	56	331*	78	61	2	3	59	324	310	50
3	0	57	-139*	213	93	5	3	59	-188*	29	242
6	0	57	-330*	135	176	3	4	59	121*	16	253

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
6	4	59	179*	183	114	1	2	62	743	734	31
1	5	59	642	703	32	4	2	62	-498*	183	128
4	5	59	231*	125	210	7	2	62	-250*	384	265
2	6	59	220*	168	214	2	3	62	302*	259	143
3	7	59	301*	214	199	5	3	62	-471*	94	155
1	8	59	268*	182	210	3	4	62	333*	377	60
0	0	60	1279	1255	37	6	4	62	198*	263	233
3	0	60	321*	378	181	1	5	62	866	889	28
6	0	60	390	461	59	4	5	62	0*	204	405
1	1	60	876	926	30	2	6	62	129*	208	255
4	1	60	957	948	29	1	8	62	473	446	48
7	1	60	531	498	50	0	0	63	-568*	266	116
2	2	60	364	394	52	3	0	63	0*	314	362
5	2	60	1305	1309	26	6	0	63	195*	179	238
3	3	60	465	409	40	1	1	63	328*	507	202
6	3	60	286*	332	78	4	1	63	310*	203	172
1	4	60	669	625	28	7	1	63	-422*	542	200
4	4	60	780	770	32	2	2	63	618	647	35
2	5	60	211*	491	211	5	2	63	-371*	349	166
5	5	60	239*	264	200	3	3	63	278*	204	59
3	6	60	626	626	39	6	3	63	-143*	585	334
1	7	60	-438*	61	165	1	4	63	-120*	280	251
1	0	61	-299*	476	174	4	4	63	292*	195	166
4	0	61	1055	1038	27	2	5	63	304*	171	184
7	0	61	143*	323	261	5	5	63	670	650	40
2	1	61	1244	1263	25	3	6	63	555	531	44
5	1	61	742	694	35	1	7	63	595	580	39
8	1	61	-146*	288	321	1	0	64	-188*	220	229
3	2	61	554	568	38	4	0	64	-357*	171	165
6	2	61	363*	436	178	7	0	64	545	531	51
1	3	61	190*	69	200	2	1	64	-253*	58	169
4	3	61	216*	8	203	5	1	64	188*	362	258
7	3	61	-599*	413	163	8	1	64	329*	51	178
2	4	61	-213*	51	214	3	2	64	419	277	47
5	4	61	-582*	123	141	6	2	64	598	532	44
3	5	61	624	662	38	1	3	64	448	456	41
1	6	61	1068	1051	26	4	3	64	-226*	108	207
4	6	61	236*	267	243	2	4	64	1243	1267	25
2	7	61	339*	207	60	5	4	64	-143*	257	305
2	0	62	-476*	218	129	3	5	64	-307*	113	205
5	0	62	-324*	194	187	1	6	64	496	462	40
8	0	62	206*	238	107	2	7	64	301*	133	185
3	1	62	298*	262	165	2	0	65	-158*	76	226
6	1	62	194*	365	279	5	0	65	-468*	399	145

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
8	0	65	297*	71	180	3	1	68	286*	356	200
3	1	65	216*	243	216	6	1	68	200*	173	235
6	1	65	218*	53	88	1	2	68	0*	63	367
1	2	65	199*	71	83	4	2	68	185*	69	92
4	2	65	139*	69	108	7	2	68	0*	233	452
7	2	65	353*	67	174	2	3	68	1324	1312	24
2	3	65	-421*	36	151	5	3	68	-140*	263	299
5	3	65	578	615	43	3	4	68	-300*	17	188
3	4	65	120*	197	117	1	5	68	299*	317	62
1	5	65	-257*	190	212	4	5	68	712	714	40
4	5	65	-203*	240	261	2	6	68	424	455	55
2	6	65	305*	135	64	0	0	69	1205	1146	38
1	8	65	303*	190	200	3	0	69	-358*	241	153
3	0	66	220*	207	200	6	0	69	-301*	222	174
6	0	66	342*	224	202	1	1	69	393*	523	64
1	1	66	861	821	33	4	1	69	265*	563	231
4	1	66	259*	341	220	7	1	69	253*	60	202
7	1	66	251*	363	220	2	2	69	278*	344	189
2	2	66	206*	157	81	5	2	69	305*	570	219
5	2	66	-443*	383	158	3	3	69	178*	51	210
3	3	66	460	394	42	6	3	69	490	555	54
6	3	66	219*	251	95	1	4	69	-252*	177	176
1	4	66	201*	94	183	4	4	69	-398*	472	199
4	4	66	-309*	59	200	2	5	69	-192*	192	246
2	5	66	554	558	40	3	6	69	-79*	116	169
3	6	66	-291*	65	240	1	7	69	294*	295	74
1	7	66	-247*	158	248	1	0	70	668	650	45
1	0	67	-489*	435	138	4	0	70	405	416	60
4	0	67	743	807	37	7	0	70	401*	303	63
7	0	67	211*	312	101	2	1	70	-291*	235	182
2	1	67	332*	373	178	5	1	70	276*	207	229
5	1	67	546	570	46	3	2	70	181*	477	282
3	2	67	603	594	37	6	2	70	284*	349	200
6	2	67	145*	57	120	1	3	70	0*	182	379
1	3	67	-207*	100	196	4	3	70	265*	465	236
4	3	67	184*	146	216	2	4	70	-347*	210	180
2	4	67	711	743	32	5	4	70	139*	348	305
5	4	67	-186*	109	111	3	5	70	484	495	52
3	5	67	457	439	48	1	6	70	263*	319	200
1	6	67	-273*	240	225	2	0	71	135*	503	328
2	7	67	580	610	43	5	0	71	195*	300	281
2	0	68	773	759	36	8	0	71	0*	173	446
5	0	68	333*	391	207	3	1	71	250*	232	79
8	0	68	364*	388	202	6	1	71	502	607	54

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	2	71	1540	1528	25	3	0	75	573	607	47
4	2	71	378*	267	172	6	0	75	205*	163	251
2	3	71	-179*	106	256	1	1	75	820	880	40
5	3	71	473	428	53	4	1	75	276*	197	223
3	4	71	131*	259	306	7	1	75	253*	118	238
1	5	71	335*	551	180	2	2	75	681	742	38
4	5	71	-257*	435	265	5	2	75	786	769	39
2	6	71	-478*	28	176	3	3	75	351*	489	166
0	0	72	-116*	280	304	1	4	75	-295*	139	197
3	0	72	-367*	59	162	4	4	75	-325*	356	241
6	0	72	203*	77	257	2	5	75	-399*	72	178
1	1	72	544	626	53	1	7	75	-540*	176	175
4	1	72	234*	373	228	1	0	76	-471*	129	140
7	1	72	-442*	42	150	4	0	76	-451*	333	165
2	2	72	-123*	41	250	7	0	76	512	490	54
5	2	72	197*	538	300	2	1	76	-587*	360	123
3	3	72	-264*	455	218	5	1	76	286*	279	224
1	4	72	-288*	61	174	3	2	76	234*	124	205
4	4	72	193*	10	251	6	2	76	-469*	285	177
2	5	72	-392*	134	191	1	3	76	340*	291	155
1	7	72	362*	454	189	4	3	76	135*	205	122
1	0	73	-167*	124	253	2	4	76	176*	92	93
4	0	73	294*	433	80	3	5	76	195*	276	238
7	0	73	-662*	214	138	1	6	76	416	288	54
2	1	73	-546*	120	116	2	0	77	284*	259	242
5	1	73	-270*	201	196	5	0	77	-359*	98	186
3	2	73	598	578	41	3	1	77	949	874	31
6	2	73	430*	466	183	6	1	77	146*	195	278
1	3	73	275*	248	68	1	2	77	330*	42	154
4	3	73	-83*	85	151	4	2	77	494	414	47
2	4	73	286*	78	182	2	3	77	588	614	42
3	5	73	-479*	253	165	5	3	77	346*	57	162
1	6	73	-199*	102	271	3	4	77	179*	342	108
2	0	74	-402*	51	167	1	5	77	-310*	177	201
5	0	74	432	430	58	2	6	77	-447*	66	186
3	1	74	-380*	140	167	0	0	78	1661	1514	34
6	1	74	-569*	151	137	3	0	78	-286*	202	197
1	2	74	625	771	45	6	0	78	489	507	56
4	2	74	193*	55	236	1	1	78	-433*	69	142
2	3	74	-259*	201	195	4	1	78	672	625	42
5	3	74	-290*	373	225	2	2	78	249*	198	80
3	4	74	-441*	624	190	5	2	78	286*	4	217
1	5	74	259*	144	196	3	3	78	847	856	34
2	6	74	479	480	50	1	4	78	224*	83	204

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
4	4	78	543	531	50	4	2	83	-285*	216	215
2	5	78	304*	24	173	2	3	83	-195*	188	251
1	0	79	545	552	58	3	4	83	-208*	15	266
4	0	79	1218	1199	30	1	5	83	194*	56	237
7	0	79	0*	85	416	0	0	84	578	568	64
2	1	79	-384*	165	154	3	0	84	251*	167	228
5	1	79	-445*	35	168	6	0	84	259*	356	94
3	2	79	-134*	238	287	1	1	84	552	619	60
1	3	79	-322*	204	185	4	1	84	-198*	98	262
4	3	79	-143*	298	314	2	2	84	270*	291	83
2	4	79	584	553	40	5	2	84	677	762	45
3	5	79	-422*	466	222	3	3	84	-143*	167	306
1	6	79	310*	29	176	1	4	84	373*	287	61
2	0	80	146*	303	320	2	5	84	278*	438	231
5	0	80	174*	36	103	1	0	85	429*	317	189
3	1	80	199*	59	234	4	0	85	-138*	623	303
6	1	80	255*	380	214	2	1	85	1017	1036	35
1	2	80	454	350	54	5	1	85	504	549	62
4	2	80	-242*	31	221	3	2	85	-421*	304	175
2	3	80	-407*	401	188	1	3	85	244*	61	222
3	4	80	195*	348	261	4	3	85	350*	83	180
1	5	80	191*	350	256	2	4	85	296*	233	76
3	0	81	201*	252	283	2	0	86	150*	140	322
6	0	81	390*	173	203	5	0	86	-249*	177	219
1	1	81	-653*	126	112	3	1	86	-438*	398	185
4	1	81	693	642	41	1	2	86	976	951	36
2	2	81	-132*	125	240	4	2	86	-145*	120	311
5	2	81	-64*	318	185	2	3	86	635	636	45
3	3	81	410	344	57	3	4	86	717	669	40
1	4	81	266*	238	209	1	5	86	0*	542	430
2	5	81	308*	88	175	0	0	87	-703*	149	115
1	0	82	355*	378	78	3	0	87	-514*	74	146
4	0	82	349*	537	223	1	1	87	222*	564	352
2	1	82	-587*	119	132	4	1	87	338*	225	75
5	1	82	415*	543	206	2	2	87	293*	115	207
3	2	82	-130*	310	126	3	3	87	229*	237	95
1	3	82	289*	237	72	1	4	87	0*	431	442
4	3	82	246*	378	231	1	0	88	-329*	242	162
2	4	82	95*	75	145	4	0	88	631	659	48
1	6	82	-298*	333	270	2	1	88	212*	162	276
2	0	83	-261*	34	182	5	1	88	-148*	198	300
5	0	83	-424*	152	176	3	2	88	330*	152	178
3	1	83	321*	268	205	1	3	88	355*	415	209
1	2	83	-458*	198	160	2	4	88	316*	549	221

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
2	0	89	472	426	59	1	2	98	-592*	32	142
5	0	89	-208*	288	302	0	0	99	-714*	226	158
3	1	89	297*	226	240	3	0	99	432*	378	197
1	2	89	-459*	10	169	1	1	99	412*	298	193
4	2	89	209*	99	264	1	0	100	-416*	9	173
2	3	89	368*	365	73	2	0	101	342*	78	175
1	5	89	314*	459	194	0	0	102	892	860	49
3	0	90	247*	188	95						
1	1	90	-336*	275	193						
4	1	90	299*	267	248						
2	2	90	-211*	29	100						
3	3	90	-471*	156	199						
1	4	90	319*	54	181						
1	0	91	-456*	89	134						
4	0	91	296*	104	209						
2	1	91	374*	227	221						
3	2	91	259*	341	244						
1	3	91	-574*	28	138						
2	0	92	257*	281	98						
3	1	92	535	489	54						
1	2	92	-347*	93	211						
2	3	92	710	677	45						
0	0	93	1123	1034	41						
3	0	93	-321*	58	208						
1	1	93	-629*	109	134						
4	1	93	482	541	60						
2	2	93	497	518	61						
1	4	93	-495*	72	165						
1	0	94	379*	248	71						
4	0	94	149*	384	334						
2	1	94	-286*	283	89						
3	2	94	-334*	129	216						
1	3	94	231*	87	103						
2	0	95	-453*	69	165						
3	1	95	-417*	41	166						
1	2	95	906	864	41						
0	0	96	-587*	315	167						
3	0	96	-207*	50	288						
1	1	96	857	781	50						
2	2	96	83*	74	178						
1	0	97	384*	75	205						
2	1	97	628	534	53						
1	3	97	377*	320	215						
2	0	98	-327*	117	189						

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.