

Table 4a  
 NMM-05-011  
 Cell 90, 2005  
 Gatta, et al.

Anomalous elastic behavior and high-pressure structural evolution of zeolite lewyne by GDD Gatta, P Comodi, PF Zanazzi and T Boffa Ballaran (ms. 1768)

Observed and calculated structure factors for lewyne in air at 0.0001 GPa

h k l			10Fo			10Fc			h k l			10Fo			10Fc			h k l			10Fo			10Fc						
1	1	0	1171	1225	17	0	17	1	158	153	-29	0	3	3	771	960	11	-13	13	4	143	128	-22	-2	17	5	323	337	14	
0	3	0	2227	2028	33	-17	18	1	281	235	17	-2	4	3	115	203	9	-10	13	4	379	401	9	-16	18	5	207	158	21	
-2	4	0	2392	2291	31	-14	18	1	534	555	11	-4	5	3	1557	1620	23	-7	13	4	169	192	16	-13	18	5	728	734	13	
-1	5	0	2056	2140	40	-8	18	1	269	219	15	-1	5	3	884	837	13	-4	13	4	172	199	17	-10	18	5	224	218	18	
-3	6	0	3040	2469	46	-5	18	1	569	578	12	-6	6	3	536	553	8	-1	13	4	95	118	-39	-7	18	5	534	498	11	
-2	7	0	1334	1309	14	-16	19	1	148	143	-32	-3	6	3	1303	1308	19	-9	14	4	153	169	-20	-4	18	5	433	430	11	
-4	8	0	5533	5305	83	-7	19	1	169	174	-27	-5	7	3	280	174	6	-6	14	4	299	301	11	-1	18	5	409	423	13	
-1	8	0	1131	873	16	-4	19	1	128	37	-37	-2	7	3	676	683	10	-3	14	4	204	307	15	-12	19	5	388	434	13	
-3	9	0	103	130	-18	-15	20	1	217	196	-23	-7	8	3	162	166	10	0	14	4	357	435	12	-6	19	5	204	150	-22	
0	9	0	4195	4003	129	-12	20	1	206	234	-22	-4	8	3	479	679	8	-8	15	4	396	381	10	-3	19	5	308	332	16	
-5	10	0	1503	1511	23	-6	20	1	226	204	21	-1	8	3	609	600	10	-5	15	4	483	498	10	-14	20	5	218	301	-23	
-2	10	0	999	958	11	-8	21	1	214	161	22	-9	9	3	516	418	9	-16	16	4	138	122	-31	-10	21	5	668	619	13	
-4	11	0	128	181	-17	-2	21	2	2246	2296	33	-6	9	3	363	378	7	-16	16	4	321	336	12	-13	21	5	114	17	-51	
-1	11	0	817	722	20	-1	3	2	3340	3074	37	-3	9	3	525	467	9	-13	16	4	412	361	10	-10	21	0	6	2389	2267	35
-6	12	0	440	488	9	-3	4	2	2128	1685	32	0	9	3	1767	1692	26	-10	16	4	375	325	11	-1	2	6	856	973	12	
-3	12	0	1056	987	11	0	4	2	6648	6233	99	-8	10	3	518	523	9	-15	17	4	428	387	10	-3	3	6	1274	1405	19	
0	12	0	2103	1879	81	-5	5	2	251	73	5	-5	10	3	348	424	7	-15	17	4	218	244	19	0	4	6	1265	1195	18	
-5	13	0	1934	1944	28	-2	5	2	1187	1190	18	-2	10	3	254	272	9	-9	17	4	369	357	12	-4	4	6	516	578	8	
-2	13	0	177	225	11	-4	6	2	640	692	10	-7	11	3	432	515	8	-6	17	4	108	60	-38	-4	5	6	947	834	14	
-7	14	0	590	550	10	-1	6	2	689	473	10	-4	11	3	328	406	8	-6	17	4	156	39	-28	-4	5	6	654	592	10	
-4	14	0	304	348	8	-6	7	2	1253	1021	19	-12	12	3	466	483	9	-11	18	4	292	348	15	-3	6	6	307	189	6	
-1	14	0	712	723	8	-3	7	2	1120	901	17	-9	12	3	349	305	8	-5	18	4	290	294	15	0	6	6	130	101	-13	
-6	15	0	598	573	7	0	7	2	420	406	7	-9	12	3	469	503	9	-2	18	4	97	192	-67	-5	7	6	884	775	13	
-3	15	0	152	172	-23	-8	8	2	3009	2697	45	-6	12	3	459	503	9	-16	19	4	179	166	-27	-2	7	6	574	604	9	
0	15	0	169	243	-41	-5	8	2	702	722	11	-3	12	3	353	357	8	-16	19	4	275	282	16	-7	8	6	340	385	7	
-8	16	0	1824	1603	28	-2	8	2	2791	2620	42	0	12	3	411	492	9	-13	19	4	208	133	-22	-1	8	6	803	738	12	
-2	16	0	535	488	8	-7	9	2	1122	1037	17	-11	13	3	210	192	13	-4	19	4	208	133	-22	-1	8	6	803	738	12	
-7	17	0	133	44	-19	-4	9	2	1494	1472	22	-8	13	3	465	535	9	-1	19	4	178	176	-29	-9	9	6	1208	1072	18	
-4	17	0	1837	1724	20	-1	9	2	1465	1493	22	-5	13	3	507	477	9	-15	20	4	174	45	-27	-6	9	6	258	177	8	
-1	17	0	641	631	26	-9	10	2	538	573	9	-2	13	3	119	177	-26	-9	20	4	170	22	-25	-3	9	6	411	255	8	
-9	18	0	1217	1121	19	-6	10	2	648	611	10	-13	14	3	320	363	11	-6	20	4	158	182	-30	0	9	6	6	280	258	7
-3	18	0	391	364	11	-3	10	2	790	792	12	-7	14	3	155	49	-17	-8	21	4	238	233	20	-8	10	6	435	502	8	
-8	19	0	543	563	31	-3	10	2	136	118	-17	-1	14	3	152	20	-21	-8	21	4	204	128	-25	-5	10	6	788	698	12	
-8	19	0	309	305	31	-11	11	2	153	341	-17	-3	15	3	170	24	-22	0	1	5	3233	3212	24	-2	10	6	477	377	8	
-2	19	0	196	221	17	-8	11	2	1154	1196	18	0	15	3	170	24	-22	-2	2	5	1668	1223	24	-10	11	6	315	239	9	
-10	20	0	290	318	16	-5	11	2	1182	1144	18	-11	16	3	323	317	12	-1	3	5	2387	2418	35	-7	11	6	1059	1054	16	
-7	20	0	143	63	-23	-2	11	2	874	820	14	-8	16	3	475	541	10	-3	4	5	1516	1604	22	-4	11	6	825	755	13	
-4	20	0	445	379	14	-16	17	3	316	382	15	0	4	5	1266	1259	19	0	4	5	1266	1259	19	-1	11	6	181	238	14	
-9	21	0	775	713	33	-13	17	3	429	399	11	-5	5	5	1638	1397	24	-5	5	5	1638	1397	24	-12	12	6	108	19	-28	
0	2	1	339	424	5	-4	12	2	1898	1682	29	-10	17	3	97	137	-46	-2	5	5	1084	877	16	-9	12	6	224	114	12	

-2	3	1	791	691	12	-1	12	2	170	277	16	-7	17	3	144	87	-27	-4	6	5	944	724	14	-6	12	6	517	558	9
-4	4	1	2501	2245	37	-12	13	2	727	692	12	-4	17	3	404	431	11	-1	6	5	142	126	10	-3	12	6	71	69	-60
-1	4	1	170	95	6	-9	13	2	1744	1756	26	-18	18	3	150	141	-34	-6	7	5	1538	1441	23	0	12	6	190	192	15
-3	5	1	54	37	-26	-6	13	2	223	191	12	-15	18	3	247	178	17	-3	7	5	637	524	10	-11	13	6	159	158	-19
0	5	1	481	602	8	-3	13	2	152	4	-18	-12	18	3	112	43	-41	0	7	5	169	90	10	-8	13	6	242	204	12
-5	6	1	845	897	12	0	13	2	1646	1609	25	-9	18	3	216	289	19	-8	8	5	2269	2084	33	-13	14	6	318	313	9
-2	6	1	96	245	-17	-14	14	2	238	207	15	-3	18	3	106	88	-50	-5	8	5	370	301	7	-13	14	6	190	160	18
-7	7	1	860	837	13	-11	14	2	678	614	12	0	18	3	296	293	16	-2	8	5	1201	1141	18	-10	14	6	111	22	-30
-1	7	1	860	837	13	-8	14	2	206	206	14	-14	19	3	187	45	-22	-7	9	5	391	322	7	-7	14	6	144	164	-21
-6	8	1	283	272	7	-5	14	2	85	129	-42	-11	19	3	94	82	-72	-4	9	5	2174	2022	32	-4	14	6	310	272	11
-3	8	1	1032	872	16	-2	14	2	652	593	11	-16	20	3	333	331	16	-1	9	5	2155	1955	32	-1	14	6	320	371	11
0	8	1	1338	1127	20	-13	15	2	336	338	11	-13	20	3	148	222	-35	-9	10	5	888	806	14	-15	15	6	167	94	-22
-8	9	1	364	354	7	-10	15	2	738	621	12	-10	20	3	162	55	-28	-6	10	5	113	120	-19	-12	15	6	507	515	10
-5	9	1	1472	1600	22	-7	15	2	124	269	-28	-7	20	3	98	113	-69	-3	10	5	2041	1857	30	-9	15	6	91	98	-48
-2	9	1	136	73	13	-4	15	2	359	311	11	-4	20	3	113	159	-54	0	10	5	336	265	8	-3	15	6	831	850	14
-10	10	1	168	149	13	-1	15	2	538	497	11	-12	21	3	248	270	20	-11	11	5	475	547	9	0	15	6	439	390	11
-7	10	1	1126	1046	17	-15	16	2	344	328	12	-9	21	3	168	187	-30	-8	11	5	702	735	11	-14	16	6	149	245	-29
-6	11	1	146	120	14	-12	16	2	981	895	16	-1	1	4	150	115	5	-5	11	5	716	723	11	-11	16	6	354	425	12
-3	11	1	335	352	8	-9	16	2	198	162	17	0	2	4	882	1035	14	-2	11	5	512	587	9	-8	16	6	119	50	-32
0	11	1	140	161	-18	-3	16	2	283	307	13	-2	2	4	1810	1568	27	-10	12	5	258	316	11	-5	16	6	403	343	10
-11	12	1	280	148	10	0	16	2	677	582	12	-1	4	4	786	626	12	-4	12	5	883	653	14	-2	16	6	188	190	19
-8	12	1	764	627	12	-17	17	2	1119	997	18	-3	5	4	1124	921	17	-12	13	5	1473	1371	22	-16	17	6	143	113	-31
-5	12	1	227	206	10	-14	17	2	156	140	-25	0	5	4	1746	1559	26	-9	13	5	959	884	15	-13	17	6	349	323	13
-2	12	1	154	98	-17	-11	17	2	678	638	12	-5	6	4	1410	1299	21	-3	13	5	359	315	9	-4	17	6	163	82	-23
-13	13	1	432	428	10	-8	17	2	1041	997	16	-2	6	4	881	858	13	0	13	5	1131	1096	17	-18	18	6	221	150	22
-10	13	1	90	163	-38	-5	17	2	813	818	14	-7	7	4	506	241	8	-14	14	5	94	87	-47	-12	18	6	203	159	-21
-7	13	1	364	372	9	-2	17	2	360	382	13	-4	7	4	475	363	8	-11	14	5	803	770	13	-9	18	6	165	283	-27
-4	13	1	397	438	9	-16	18	2	308	315	15	-1	7	4	1406	1351	21	-8	14	5	171	142	16	-6	18	6	111	86	-41
-1	13	1	202	294	15	-13	18	2	530	556	11	-6	8	4	311	273	7	-5	14	5	385	469	9	-17	19	6	184	84	-27
-12	14	1	163	134	-19	-10	18	2	186	161	-22	-3	8	4	131	165	12	-2	14	5	213	221	15	-14	19	6	110	130	-55
-9	14	1	625	597	11	-7	18	2	623	546	12	0	8	4	1194	849	18	-13	15	5	337	317	12	-8	19	6	301	322	15
-6	14	1	135	163	-23	-4	18	2	238	261	17	-8	9	4	423	395	8	-10	15	5	423	374	10	-5	19	6	163	149	-26
-3	14	1	314	324	11	-1	18	2	183	251	-26	-5	9	4	305	230	7	-7	15	5	127	33	-25	-2	19	6	193	14	-21
0	14	1	631	631	11	-18	19	2	135	62	-41	-2	9	4	998	892	15	-4	15	5	148	213	-24	-16	20	6	178	225	-29
-11	15	1	80	100	-56	-15	19	2	175	195	-26	-10	10	4	106	85	-24	-1	15	5	419	432	11	-13	20	6	200	262	-25
-8	15	1	288	272	11	-12	19	2	465	455	12	-7	10	4	845	806	13	-15	16	5	137	212	-34	-10	20	6	175	78	-26
-5	15	1	79	33	-60	-9	19	2	252	232	17	-4	10	4	588	510	10	-12	16	5	737	681	13	-7	20	6	174	174	-27
-2	15	1	242	296	15	-3	19	2	221	224	21	-1	10	4	520	603	9	-9	16	5	192	160	19	0	2	7	1893	2032	43
-16	16	1	129	124	-34	-14	20	2	325	312	14	-9	11	4	654	699	11	-6	16	5	776	750	13	-2	3	7	2639	2827	60
-13	16	1	182	213	-21	-8	20	2	394	307	14	-6	11	4	327	363	8	-3	16	5	433	397	11	-4	4	7	478	610	12
-10	16	1	428	409	10	-5	20	2	218	156	22	-3	11	4	717	753	11	0	16	5	462	422	11	-1	4	7	1187	1154	25
-15	17	1	159	137	-27	-13	21	2	635	587	13	0	11	4	128	22	-20	-17	17	5	1068	873	17	-3	5	7	671	1008	15
-12	17	1	210	143	17	-10	21	2	182	113	-26	-11	12	4	267	160	11	-14	17	5	200	195	20	0	5	7	2433	2615	48
-9	17	1	265	264	13	-1	2	3	336	299	5	-8	12	4	304	206	10	-11	17	5	403	394	11	-5	6	7	1111	1316	25
-3	17	1	262	207	15	-3	3	3	1229	1070	18	-2	12	4	805	775	13	-5	17	5	861	743	14	-2	6	7	1116	1197	23

h	k	1	10Fo	10Fc	10S	h	k	1	10Fo	10Fc	10S	h	k	1	10Fo	10Fc	10S	h	k	1	10Fo	10Fc	10S						
-7	7	7	1561	1853	38	-7	12	8	486	550	12	-13	17	9	1045	1123	23	-8	8	11	1381	1252	24	-3	15	12	500	467	11
-4	7	7	228	212	7	-4	12	8	353	401	10	-7	17	9	98	69	-30	-5	8	11	1346	1274	24	0	15	12	352	317	12
-1	7	7	2897	2962	57	-1	12	8	501	480	12	-4	17	9	961	1062	22	-2	8	11	308	280	8	-14	16	12	524	494	12
-6	8	7	946	1090	21	-9	13	8	745	862	18	-1	17	9	402	413	12	-7	9	11	331	297	8	-11	16	12	294	272	13
-3	8	7	1028	1077	21	-6	13	8	155	177	12	-18	18	9	503	571	13	-4	9	11	312	355	8	-8	16	12	722	697	13
0	8	7	2419	2360	46	0	13	8	861	995	20	-15	18	9	292	283	13	-1	9	11	592	563	11	-5	16	12	159	135	-23
-8	9	7	1404	1546	32	-14	14	8	75	141	-36	-12	18	9	272	239	13	-9	10	11	276	240	9	-2	16	12	443	440	12
-5	9	7	2483	2675	52	-11	14	8	264	330	11	-9	18	9	616	693	15	-3	10	11	116	64	-17	-16	17	12	234	187	16
-2	9	7	1559	1708	30	-8	14	8	139	107	-14	-6	18	9	122	26	-24	0	10	11	122	209	-18	-13	17	12	856	892	16
-7	10	7	2434	2768	52	-2	14	8	395	423	11	-3	18	9	350	351	12	-11	11	11	253	340	11	-10	17	12	257	237	14
-4	10	7	971	1034	19	-13	15	8	198	200	13	0	18	9	157	261	-21	-8	11	11	409	373	9	-7	17	12	231	208	16
-1	10	7	91	74	-22	-10	15	8	311	302	10	-14	19	9	161	177	-21	-5	11	11	203	254	11	-4	17	12	1003	949	17
-9	11	7	1323	1383	30	-4	15	8	482	536	12	-11	19	9	333	332	13	-2	11	11	278	306	10	-1	17	12	254	307	17
-6	11	7	972	1003	20	-7	15	8	660	757	16	-5	19	9	226	242	14	-10	12	11	335	327	9	-15	18	12	161	153	-27
-3	11	7	606	591	12	-15	16	8	338	350	11	-2	19	9	193	220	18	-4	12	11	273	263	10	-12	18	12	176	168	-23
0	11	7	741	794	14	-12	16	8	159	233	16	-8	19	9	314	365	13	-7	12	11	995	990	19	-9	18	12	441	426	12
-11	12	7	287	328	9	-9	16	8	153	185	-16	-7	20	9	144	101	-24	-12	13	11	409	426	10	-6	18	12	200	145	20
-8	12	7	941	1001	20	-3	16	8	144	197	-19	-1	10	1415	1360	29	-9	13	11	459	456	10	-14	19	12	106	145	-50	
-5	12	7	206	189	11	-17	17	8	184	205	16	0	2	10	1565	1808	31	-6	13	11	160	142	16	-11	19	12	256	267	17
-2	12	7	1092	1117	20	-14	17	8	82	50	-37	-2	10	10	565	651	11	-3	13	11	133	27	-19	-8	19	12	376	368	13
-13	13	7	1396	1485	33	-11	17	8	164	218	12	-4	10	725	955	15	-14	14	11	146	87	-23	-13	20	12	194	133	-24	
-10	13	7	318	340	9	-8	17	8	255	215	12	-1	4	10	1193	1250	24	0	14	11	574	547	12	-5	19	12	186	106	-23
-7	13	7	632	626	13	-5	17	8	97	162	-33	-3	5	10	445	518	9	-5	14	11	352	318	10	-10	20	12	290	274	16
-4	13	7	1520	1549	28	-16	18	8	160	150	-19	0	5	10	789	825	16	-2	14	11	120	140	-25	-1	1	13	1126	823	17
-1	13	7	765	756	14	-13	18	8	268	326	12	-7	7	10	588	684	12	-10	15	11	122	94	-18	-2	3	13	226	319	7
-12	14	7	416	504	11	-10	18	8	74	1	-53	-4	7	10	310	329	8	-4	15	11	122	271	11	-4	4	13	246	274	8
-9	14	7	493	587	11	-7	18	8	274	310	13	-4	7	10	315	464	8	-4	15	11	305	271	11	-1	4	13	658	691	11
-6	14	7	403	373	10	-4	18	8	220	215	14	-1	7	10	315	464	8	-1	15	11	156	59	-23	-3	5	13	149	152	11
-3	14	7	1019	1003	18	-12	19	8	279	324	13	-6	8	10	527	603	11	-15	16	11	123	38	-30	0	5	13	2028	1837	32
0	14	7	270	377	13	-6	19	8	125	37	-24	-3	8	10	102	23	-15	-12	16	11	571	525	12	-5	6	13	242	227	9
-14	15	7	709	801	17	-14	20	8	81	148	-58	0	8	10	1236	1349	24	-9	16	11	238	242	14	-2	6	13	194	224	10
-11	15	7	613	740	14	-11	20	8	188	214	16	-8	9	10	130	186	-13	-9	16	11	288	256	14	-7	7	13	259	291	9
-8	15	7	528	596	12	-8	20	8	152	117	-22	-2	9	10	382	558	9	-3	16	11	333	323	12	-7	7	13	259	291	9
-5	15	7	992	1015	18	-5	20	8	186	259	19	-2	9	10	593	704	12	0	16	11	380	400	12	-4	7	13	238	182	9
-2	15	7	840	807	15	0	20	9	1078	1277	22	-10	10	10	539	604	12	-17	17	11	427	444	12	-1	7	13	792	763	13
-16	16	7	232	264	13	-1	2	9	110	14	8	-7	10	10	496	556	11	-14	17	11	288	256	14	-6	8	13	78	9	-35
-13	16	7	306	301	11	-3	3	9	1753	1560	37	-4	10	10	779	834	16	-8	17	11	467	504	11	-3	8	13	576	523	10
-10	16	7	993	1135	20	0	3	9	1753	1560	37	-9	11	10	239	258	10	-5	17	11	408	436	11	-8	9	13	609	619	11
-4	16	7	497	493	11	-2	4	9	165	97	7	-1	10	10	347	430	9	-16	18	11	103	4	-43	-8	9	13	487	467	9
-1	16	7	526	534	12	-4	5	9	1815	1957	37	-6	11	10	80	58	-27	-4	18	11	107	132	-40	-2	9	13	410	369	8
-15	17	7	581	590	14	-1	5	9	2686	2917	56	-3	11	10	222	326	10	-1	18	11	157	186	-26	-10	10	13	530	503	10
-12	17	7	685	730	15	-6	6	9	1594	1394	33	0	11	10	81	26	-30	-9	19	11	139	7	-27	-7	10	13	677	714	11
-9	17	7	1278	1331	24	-3	6	9	1508	1635	32	-11	12	10	253	288	11	-6	19	11	133	31	-29	-4	10	13	277	260	10

-6 17	7	498	514	11	0	6	9	1019	913	22	-8	12	10	364	462	9	-11	20	11	102	125	-46	-9	11	13	176	128	15
-3 17	7	168	111	-22	-5	7	9	366	251	8	-5	12	10	78	87	-32	8	20	11	366	348	13	-6	11	13	133	136	-20
0 17	7	1052	1034	18	-2	7	9	1020	1000	22	-2	12	10	163	103	13	0	12	3952	3903	68	-3	11	13	268	236	11	
-17 18	7	284	390	13	-7	8	9	425	573	10	-10	13	10	426	490	10	-1	2	12	1219	1199	21	0	11	13	213	176	13
-14 18	7	319	399	12	-4	8	9	2028	2140	43	-7	13	10	357	340	9	-3	3	12	550	559	10	-11	12	13	147	82	-21
-11 18	7	858	889	18	-1	8	9	67	209	-26	-4	13	10	183	166	13	0	3	12	1037	987	18	-8	12	13	99	71	-32
-8 18	7	94	7	-42	-9	9	9	2372	2418	49	-1	13	10	130	102	-21	-2	4	12	1172	1177	20	-5	12	13	354	309	9
-5 18	7	662	663	13	-6	9	9	442	440	10	-12	14	10	184	209	14	-4	5	12	1249	1233	22	-2	12	13	287	287	11
-2 18	7	428	419	12	-3	9	9	836	868	18	-9	14	10	340	342	10	-1	5	12	1462	1407	25	-13	13	13	241	296	15
-16 19	7	464	543	13	0	9	9	1878	1998	41	-6	14	10	323	367	10	-6	6	12	1557	1524	27	-10	13	13	132	215	-26
-13 19	7	442	455	12	-8	10	9	737	739	16	0	14	10	150	245	-21	-3	6	12	1015	1039	17	-7	13	13	109	32	-30
-10 19	7	275	267	14	-5	10	9	319	349	8	-14	15	10	158	166	-19	0	6	12	782	832	13	-4	13	13	493	479	10
-7 19	7	608	618	13	-2	10	9	74	13	-26	-8	15	10	317	350	11	-5	7	12	1019	1007	18	-1	13	13	283	245	12
-4 19	7	443	447	12	-10	11	9	638	687	14	-5	15	10	270	352	12	-2	7	12	1135	1192	19	-12	14	13	103	48	-40
-15 20	7	225	248	16	-7	11	9	591	614	13	-16	16	10	142	189	-24	-7	8	12	117	183	-17	-9	14	13	427	420	10
-9 20	7	265	259	15	-4	11	9	147	113	12	-13	16	10	78	88	-55	-4	8	12	2448	2362	41	-6	14	13	299	325	12
-6 20	7	487	486	13	-1	11	9	810	831	18	-10	16	10	343	370	10	-1	8	12	215	268	10	0	14	13	571	545	11
-11 21	7	175	173	-24	-12	12	9	996	1013	21	-7	16	10	157	67	-18	-9	9	12	1846	1855	32	-11	15	13	191	212	19
0 1	8	98	27	7	-9	12	9	307	365	9	-4	16	10	255	239	13	-6	9	12	505	513	10	-8	15	13	93	126	-44
-2 2	8	118	165	7	-6	12	9	470	568	11	-1	16	10	117	88	-31	-3	9	12	1312	1248	22	-2	15	13	287	302	13
-1 3	8	1178	1246	28	-3	12	9	590	713	14	-15	17	10	124	132	-28	0	9	12	1467	1432	24	-16	16	13	158	38	-27
-3 4	8	194	75	6	0	12	9	769	920	17	-12	17	10	165	15	-19	-8	10	12	1012	992	18	-13	16	13	111	25	-41
0 4	8	346	503	9	-11	13	9	446	446	11	-6	17	10	205	253	15	-5	10	12	144	27	-15	-10	16	13	204	285	20
-2 5	8	1032	1100	25	-8	13	9	1372	1556	29	-3	17	10	145	122	-23	-2	10	12	654	588	12	-7	16	13	129	66	-29
-4 6	8	357	383	9	-5	13	9	1199	1301	26	0	17	10	177	224	-23	-10	11	12	602	610	11	-4	16	13	181	153	-21
-1 6	8	264	321	7	-2	13	9	493	546	12	-11	18	10	124	119	-28	-7	11	12	340	360	9	-1	16	13	152	166	-29
-3 7	8	563	669	14	-13	14	9	227	261	12	-8	18	10	124	59	-27	-4	11	12	327	297	9	-12	17	13	178	224	-23
0 7	8	592	734	14	-10	14	9	165	214	14	-2	18	10	222	195	17	-1	11	12	539	618	10	-9	17	13	155	256	-29
-8 8	8	391	487	10	-7	14	9	736	778	16	-13	19	10	188	227	19	-12	12	12	1173	1149	21	-6	17	13	110	71	-43
-5 8	8	193	223	8	-4	14	9	81	13	-34	-10	19	10	186	151	-19	-9	12	12	274	229	10	-3	17	13	103	216	-55
-2 8	8	740	843	18	-1	14	9	368	477	11	-4	19	10	184	121	-20	-6	12	12	827	812	14	0	17	13	108	79	-49
-7 9	8	665	679	16	-15	15	9	508	521	12	0	1	11	114	190	10	-3	12	12	405	420	9	-14	18	13	386	319	13
-4 9	8	626	741	15	-12	15	9	108	13	-25	-2	2	11	1426	1301	25	0	12	12	524	537	11	-5	18	13	244	264	18
-1 9	8	92	58	-16	-9	15	9	389	371	11	-1	3	11	480	451	9	-11	13	12	633	585	12	-2	18	13	109	27	-52
-9 10	8	176	184	10	-6	15	9	590	590	14	-3	4	11	267	343	6	-8	13	12	1071	1013	19	-13	19	13	189	101	-24
-6 10	8	168	70	9	-3	15	9	386	397	11	0	4	11	1187	1137	21	-5	13	12	864	843	15	-10	19	13	118	98	-44
-3 10	8	117	252	-13	0	15	9	213	265	14	-5	5	11	1280	1107	22	-2	13	12	388	403	10	-4	19	13	196	128	-24
0 10	8	134	188	12	-14	16	9	398	391	11	-2	5	11	391	367	8	-7	14	12	403	431	10	-12	20	13	179	188	-27
-11 11	8	415	557	11	-11	16	9	213	204	13	-4	6	11	229	271	8	-1	14	12	231	236	15	-9	20	13	121	53	-45
-8 11	8	968	1027	23	-8	16	9	578	625	14	-1	6	11	1167	1041	21	-15	15	12	149	186	-26	0	1	14	3121	3126	48
-5 11	8	631	664	25	-5	16	9	139	14	-18	-6	7	11	221	241	8	-12	15	12	109	107	-35	-2	2	14	446	329	8
-2 11	8	294	325	9	-2	16	9	323	398	12	-3	7	11	163	214	10	-9	15	12	381	404	10	-1	3	14	1580	1493	24
-10 12	8	191	216	10	-16	17	9	297	349	13	0	7	11	189	304	9	-6	15	12	635	660	12	-3	4	14	1310	1267	20

0	4	14	4943	4593	76	-2	13	15	302	335	13	-4	9	17	319	295	9	0	5	19	1928	1773	29	-1	2	21	794	824	13
-5	5	14	2092	1938	32	-13	14	15	392	329	11	-1	9	17	306	264	9	-5	6	19	127	151	-21	-3	3	21	116	146	-24
-2	5	14	559	472	9	-10	14	15	483	422	10	-9	10	17	145	201	-22	-2	6	19	156	154	-16	0	3	21	131	115	-20
-1	6	14	825	739	13	-7	14	15	102	138	-41	-6	10	17	563	559	10	-4	7	19	392	444	9	-2	4	21	1339	1302	21
-4	6	14	167	125	12	-4	14	15	257	166	13	-3	10	17	113	5	-27	-1	7	19	519	506	10	-1	5	21	733	658	12
-6	7	14	1211	1137	19	-1	14	15	384	391	12	0	10	17	243	260	13	-6	8	19	134	132	-22	-4	5	21	1165	1100	18
-3	7	14	1008	1043	16	-15	15	15	94	83	-60	-11	11	17	273	245	13	-3	8	19	344	349	9	-6	6	21	697	729	12
0	7	14	174	241	13	-6	15	15	198	146	20	-8	11	17	171	184	-19	0	8	19	1156	1123	18	-3	6	21	1707	1534	26
-8	8	14	3480	3143	54	-3	15	15	160	186	-24	-5	11	17	128	51	-24	-8	9	19	836	804	14	0	6	21	338	428	10
-5	8	14	2338	2136	36	0	15	15	175	107	-24	-2	11	17	182	151	17	-5	9	19	1367	1281	21	-5	7	21	892	885	14
-2	8	14	1226	1138	19	-2	16	15	182	130	-25	-10	12	17	203	179	17	-2	9	19	396	347	9	-2	7	21	1037	1064	16
-7	9	14	712	714	12	-13	17	15	330	376	14	-7	12	17	180	231	18	-10	10	19	652	562	12	-7	8	21	180	161	18
-4	9	14	2568	2274	40	-4	17	15	178	286	-26	-12	13	17	397	353	12	-7	10	19	593	576	11	-4	8	21	1700	1570	26
-1	9	14	1587	1457	25	-1	17	15	185	53	-25	-9	13	17	269	215	13	-4	10	19	130	63	-23	-1	8	21	498	501	10
-9	10	14	565	505	10	-12	18	15	137	71	-36	-6	13	17	227	207	15	-9	11	19	466	436	10	-9	9	21	1514	1421	23
-3	10	14	704	668	12	-9	18	15	426	411	12	-3	13	17	456	453	10	-9	11	19	447	456	10	-6	9	21	164	163	-19
0	10	14	268	241	11	-6	18	15	128	114	-39	-6	13	17	227	207	15	-6	11	19	359	401	11	-3	9	21	191	241	16
-11	11	14	373	401	10	-3	18	15	228	263	22	-14	14	17	114	55	-40	-3	11	19	91	106	-43	0	9	21	1403	1359	22
-8	11	14	273	220	11	0	2	16	1502	1453	23	-2	14	17	184	90	-21	-8	12	19	636	624	11	-5	10	21	663	693	12
-5	11	14	611	619	11	-2	16	1502	1009	16	-1	15	17	163	47	-26	-2	12	19	149	194	-25	-2	10	21	529	543	10	
-10	12	14	1018	866	16	-4	4	16	3973	3689	61	-12	16	17	176	233	-27	-13	13	19	1055	961	17	-10	11	21	813	759	14
-7	12	14	193	290	16	-1	4	16	1145	1169	18	-9	16	17	366	337	13	-10	13	19	197	173	-20	-7	11	21	716	715	12
-4	12	14	1870	1793	29	-3	5	16	1403	1389	22	-6	16	17	131	86	-34	-4	13	19	266	235	14	-4	11	21	604	569	11
-1	12	14	89	69	-45	0	5	16	1968	1825	30	-3	16	17	190	220	-24	-4	13	19	1230	1168	19	-1	11	21	989	961	16
-12	13	14	1127	1020	18	-5	6	16	446	487	8	0	16	17	290	295	17	-1	13	19	579	584	11	-12	12	21	687	686	12
-9	13	14	2010	1830	31	-2	6	16	927	937	15	-14	17	17	99	124	-63	-12	14	19	173	155	-24	-9	12	21	131	68	-32
-3	13	14	395	290	10	-7	7	16	283	391	10	-8	17	17	365	265	13	-9	14	19	614	582	12	-6	12	21	908	834	15
0	13	14	2274	2021	35	-4	7	16	457	501	9	-5	17	17	301	300	16	-6	14	19	100	15	-45	-3	12	21	618	555	12
-14	14	14	465	405	11	-1	7	16	918	908	15	-10	18	17	133	92	-43	0	14	19	344	462	11	-11	13	21	602	550	12
-11	14	14	360	400	12	-6	8	16	1055	970	17	-13	18	17	123	6	-38	-14	15	19	300	326	16	-8	13	21	1041	1015	17
-8	14	14	262	261	13	-3	8	16	287	233	10	-10	18	17	130	6	-38	-11	15	19	331	304	14	-5	13	21	1040	986	17
-5	14	14	886	762	15	0	8	16	1580	1579	24	-7	18	17	163	165	-30	-11	15	19	311	304	14	-2	13	21	670	684	12
-2	14	14	380	359	11	-8	9	16	1008	976	16	0	18	1522	1446	23	-8	15	19	206	206	21	-2	13	21	670	684	12	
-13	15	14	315	347	13	-5	9	16	1397	1317	22	-1	2	18	1113	1121	17	-5	15	19	245	308	17	-13	14	21	379	300	16
-10	15	14	442	514	11	-2	9	16	558	571	10	-3	3	18	923	899	14	-2	15	19	197	252	-22	-7	14	21	959	889	16
-7	15	14	460	368	10	-10	10	16	264	226	12	0	3	18	960	1009	15	-13	16	19	376	413	14	-4	14	21	104	183	-52
-4	15	14	416	399	11	-7	10	16	618	667	11	-2	4	18	975	983	15	-10	16	19	172	222	-27	-1	14	21	285	272	16
-1	15	14	218	284	18	-4	10	16	269	280	11	-4	5	18	133	8	-18	-7	16	19	184	201	-25	-15	15	21	630	613	13
-15	16	14	341	299	14	-1	10	16	325	290	10	-1	5	18	74	13	-39	-4	16	19	433	438	12	-12	15	21	465	457	12
-12	16	14	1049	941	17	-9	11	16	904	923	15	-6	6	18	305	280	9	-12	17	19	481	506	12	-9	15	21	460	465	11
-9	16	14	393	332	12	-6	11	16	1045	1051	17	-3	6	18	470	437	9	-9	17	19	798	700	14	-6	15	21	481	458	11
-6	16	14	514	506	11	0	11	16	493	474	10	-5	7	18	982	896	15	-11	18	19	447	399	13	-3	15	21	502	441	12
-3	16	14	435	428	12	-11	12	16	184	195	18	-2	7	18	604	652	10	-2	2	20	304	217	8	0	15	21	167	255	-32

0 16 14 604 603 12 -8 12 16 1341 1261 21 -7 8 18 137 14 -20 1 3 20 225 151 11 -14 16 21 420 388 13  
-17 17 14 1159 1092 19 -5 12 16 347 318 10 -4 8 18 441 463 9 0 4 20 436 447 9 -11 16 21 139 153 -34  
-14 17 14 420 415 12 -2 12 16 714 684 12 -9 9 18 322 304 11 -5 5 20 379 393 9 -8 16 21 344 356 14  
-11 17 14 235 275 18 -13 13 16 1447 1291 23 -6 9 18 99 121 -31 -4 6 20 307 268 9 -5 16 21 231 246 20  
-8 17 14 1463 1298 23 -7 13 16 100 131 -39 -3 9 18 455 344 9 -1 6 20 158 155 -16 -2 16 21 411 437 14  
-5 17 14 1052 981 17 -1 13 16 664 675 12 0 9 18 364 368 9 -6 7 20 255 259 12 -10 17 21 174 160 -27  
-2 17 14 273 259 17 -12 14 16 320 359 13 -8 10 18 195 251 17 -3 7 20 510 492 10 -7 17 21 188 167 -25  
-13 18 14 626 567 12 -9 14 16 524 474 11 -5 10 18 440 482 9 0 7 20 1016 939 16 -1 1 22 123 79 -21  
-10 18 14 315 222 15 -6 14 16 314 358 12 -2 10 18 606 528 11 -8 8 20 338 332 11 0 2 22 329 303 10  
-7 18 14 452 443 12 -3 14 16 820 790 14 -10 11 18 586 537 11 -5 8 20 156 231 -19 -2 3 22 615 621 11  
-4 18 14 369 354 14 0 14 16 144 172 -30 -4 11 18 112 7 -30 -2 8 20 147 153 -21 -4 4 22 168 212 17  
-12 19 14 424 348 13 -14 15 16 510 489 12 -1 11 18 556 565 11 -7 9 20 364 380 10 -3 5 22 681 687 11  
0 0 15 945 871 15 -8 15 16 431 395 11 -12 12 18 292 399 14 -4 9 20 355 361 9 0 5 22 150 160 -19  
-1 2 15 418 323 8 -5 15 16 447 479 11 -6 12 18 408 349 10 -9 10 20 254 234 13 -5 6 22 114 79 -28  
-3 3 15 64 116 -38 -2 15 16 343 324 13 -3 12 18 236 276 15 -6 10 20 268 333 13 -2 6 22 383 395 9  
0 3 15 410 464 8 -16 16 16 241 332 19 -0 12 18 289 332 14 -3 10 20 161 124 -20 -4 7 22 404 396 9  
-2 4 15 212 222 9 -13 16 16 401 397 13 -11 13 18 322 338 13 0 10 20 132 51 -27 -1 7 22 575 579 11  
-4 5 15 1071 983 17 -10 16 16 442 423 11 -8 13 18 153 120 -24 -11 11 20 204 143 18 -6 8 22 531 509 10  
-1 5 15 1262 1163 20 -4 16 16 651 688 12 -5 13 18 363 352 12 -8 11 20 363 339 11 -3 8 22 189 171 17  
-6 6 15 207 142 11 -15 17 16 270 286 17 -2 13 18 287 337 14 -5 11 20 154 36 -21 0 8 22 415 371 10  
-3 6 15 1065 1054 17 -12 17 16 541 508 12 -10 14 18 166 156 -24 -2 11 20 152 67 -24 -8 9 22 181 97 18  
0 6 15 319 433 8 -9 17 16 892 819 15 -7 14 18 511 515 11 -10 12 20 283 240 14 -5 9 22 286 263 12  
-5 7 15 252 236 10 -6 17 16 201 207 -21 -4 14 18 194 237 20 -7 12 20 385 335 11 -2 9 22 142 52 -24  
-2 7 15 185 281 12 -3 17 16 162 35 -29 -1 14 18 103 165 -52 -4 12 20 128 198 -33 -7 10 22 485 486 10  
-7 8 15 319 270 8 -14 18 16 268 215 19 -15 15 18 258 230 18 -1 12 20 262 251 15 -4 10 22 150 83 -23  
-4 8 15 1390 1327 22 -11 18 16 492 452 12 -12 15 18 198 133 -21 -12 13 20 121 102 -39 -1 10 22 245 188 15  
-9 9 15 729 689 12 -8 18 16 188 95 -24 -9 15 18 352 316 13 -9 13 20 276 273 14 -9 11 22 326 323 13  
-6 9 15 104 193 -27 -5 18 16 386 373 13 -6 15 18 417 425 11 -3 13 20 134 76 -30 -6 11 22 578 549 11  
-3 9 15 441 400 9 -10 19 16 173 180 -27 -14 16 18 139 186 -36 0 13 20 406 425 13 -3 11 22 581 543 11  
0 9 15 828 728 13 0 1 17 1195 921 18 -11 16 18 106 83 -47 -14 14 20 211 164 -22 0 11 22 532 491 11  
-8 10 15 216 187 13 -2 2 17 624 525 10 -8 16 18 265 246 17 -5 14 20 485 458 11 -11 12 22 477 464 11  
-5 10 15 333 322 9 -1 3 17 304 290 7 -2 16 18 255 213 18 -2 14 20 199 134 20 -5 12 22 124 106 -34  
-2 10 15 150 191 -18 -3 4 17 670 627 11 -13 17 18 243 197 19 -10 15 20 170 183 -27 -2 12 22 387 394 12  
-7 11 15 217 140 12 0 4 17 325 348 8 -10 17 18 168 86 -26 -7 15 20 376 334 13 -13 13 22 292 276 15  
-4 11 15 99 198 -34 -5 5 17 274 334 9 -7 17 18 211 129 -22 -4 15 20 373 361 13 -7 13 22 187 172 -22  
-1 11 15 87 149 -43 -2 5 17 338 317 8 -4 17 18 99 147 -63 -1 15 20 155 31 -30 -4 13 22 274 292 16  
-9 12 15 266 247 12 -4 6 17 570 513 10 -12 18 18 314 264 16 -15 16 20 269 261 18 -12 14 22 96 130 -67  
-6 12 15 369 390 10 -1 6 17 173 142 13 -9 18 18 132 51 -40 -12 16 20 230 134 19 -9 14 22 229 206 18  
-3 12 15 104 162 -33 -6 7 17 150 29 -16 -1 19 1131 1175 17 -8 16 20 259 239 17 -6 14 22 181 135 -23  
0 12 15 644 686 12 -3 7 17 745 647 12 0 2 19 836 753 13 -3 16 20 111 156 -56 -3 14 22 420 449 13  
-11 13 15 110 80 -35 0 7 17 750 662 12 -2 3 19 171 245 14 -11 17 20 132 53 -38 0 14 22 198 112 -24  
-8 13 15 685 679 12 -5 8 17 431 400 9 -4 4 19 1933 1754 29 -5 17 20 112 14 -50 -14 15 22 159 144 -33  
-5 13 15 475 472 10 -7 9 17 235 181 12 -1 4 19 464 422 9 0 0 21 2076 2018 32 -11 15 22 206 232 -23

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-8	15	22	516	472	12	-7	8	24	145	41	-25	-2	8	26	509	535	11	-5	9	28	1315	1237	21	0	2	31	187	105	-22
-5	15	22	96	53	-62	-4	8	24	437	444	10	-7	9	26	445	451	11	-2	9	28	202	203	-21	-2	3	31	208	233	21
-13	16	22	168	100	-30	-6	9	24	185	132	-19	-4	9	26	609	589	11	-7	10	28	416	457	12	-5	6	31	133	94	-35
-10	16	22	280	258	16	-3	9	24	336	169	12	-1	9	26	397	386	12	-1	10	28	185	199	-24	-2	6	31	162	170	-27
-7	16	22	130	193	-40	0	9	24	185	168	-21	-6	10	26	367	393	12	-9	11	28	379	342	13	-4	7	31	184	229	-25
-4	16	22	181	208	-27	-8	10	24	334	306	12	-3	10	26	519	532	11	-6	11	28	395	446	13	-6	8	31	108	182	-51
-6	17	22	197	184	-26	-5	10	24	178	152	-20	0	10	26	198	253	-22	0	11	28	185	59	-25	-3	8	31	96	25	-62
0	1	23	490	468	9	-2	10	24	98	123	-47	-11	11	26	96	86	-61	-8	12	28	977	1014	16	0	8	31	224	236	21
-2	2	23	633	558	11	-1	11	24	199	117	20	-5	11	26	479	508	11	-5	12	28	281	346	16	-5	9	31	98	166	-68
-1	3	23	559	530	10	-12	12	24	313	260	15	-2	11	26	187	223	-24	-2	12	28	272	321	17	-2	9	31	203	187	-22
-3	4	23	527	524	10	-9	12	24	160	151	-26	-10	12	26	423	470	13	-7	13	28	217	212	21	-3	11	31	113	70	-51
0	4	23	1757	1734	27	-6	12	24	204	199	20	-7	12	26	95	37	-66	-4	13	28	1107	1016	18	0	1	32	113	78	-42
-5	5	23	1593	1467	25	0	12	24	172	206	-27	-4	12	26	676	671	13	0	1	29	534	497	11	-2	2	32	417	397	11
-2	5	23	547	558	10	-11	13	24	209	109	21	-12	13	26	234	228	20	-2	2	29	286	267	14	-1	3	32	389	409	13
-4	6	23	554	538	10	-8	13	24	133	19	-34	-9	13	26	477	506	12	-3	4	29	293	289	14	-1	3	32	244	173	17
-6	7	23	709	688	12	-2	13	24	186	178	-24	-6	13	26	335	313	15	0	4	29	894	962	15	0	4	32	476	474	11
-3	7	23	295	279	12	-4	14	24	175	178	-28	0	13	26	559	535	12	-5	5	29	146	118	-28	-2	5	32	317	328	14
0	7	23	345	354	11	-1	14	24	212	139	22	-11	14	26	341	323	15	-4	6	29	127	13	-33	-4	6	32	348	389	14
-8	8	23	1050	1033	17	-3	15	24	174	16	-27	-5	14	26	131	171	-44	-2	5	29	146	118	-28	-2	5	32	317	328	14
-5	8	23	107	342	-40	-8	16	24	195	161	-25	-2	14	26	340	293	14	-3	7	29	187	184	-21	-1	6	32	333	330	14
-2	8	23	377	439	10	1	1	25	244	290	13	0	15	26	113	140	-51	-8	8	29	424	424	11	-6	7	32	327	357	15
-7	9	23	187	182	19	0	2	25	169	212	-18	0	0	27	846	855	14	-5	8	29	190	15	-22	0	7	32	163	237	15
-4	9	23	1200	1138	19	-4	4	25	659	701	11	-1	2	27	258	282	13	-2	8	29	173	105	-24	-8	8	32	438	404	-13
-1	9	23	893	883	15	-1	4	25	256	287	13	0	3	27	724	680	12	-4	9	29	619	585	12	-2	8	32	337	312	15
-9	10	23	200	163	19	3	5	25	299	277	11	-2	4	27	396	383	11	-1	9	29	360	390	13	-7	9	32	255	260	19
-6	10	23	255	240	14	0	5	25	684	660	12	-1	5	27	356	305	11	-9	10	29	162	250	-31	-4	9	32	99	52	-64
-3	10	23	822	781	14	-5	6	25	82	236	-70	-6	6	27	162	235	-23	-6	10	29	173	62	-26	-3	10	32	308	288	16
0	10	23	159	188	-25	-2	6	25	91	68	-46	0	6	27	137	63	-26	-3	10	29	192	35	-22	0	0	33	734	769	13
-11	11	23	451	484	11	-4	7	25	215	168	16	-5	7	27	115	161	-35	0	10	29	265	253	17	-1	2	33	195	82	-22
-8	11	23	211	213	18	-6	8	25	112	140	-37	-2	7	27	185	239	19	-11	11	29	276	231	17	-3	3	33	290	338	16
-5	11	23	622	637	12	-3	8	25	425	478	10	-4	8	27	283	270	14	-8	11	29	110	35	-49	-2	4	33	382	458	13
-2	11	23	384	376	12	0	8	25	827	852	14	-1	8	27	257	248	16	-7	12	29	199	134	-24	0	3	33	166	175	-27
-10	12	23	432	440	11	-8	9	25	597	576	12	-9	9	27	422	450	13	-4	12	29	269	370	19	-4	5	33	282	369	17
-7	12	23	168	210	-23	-5	9	25	568	580	11	-3	9	27	252	229	16	-6	13	29	113	43	-51	-1	5	33	396	456	13
-4	12	23	1149	1095	18	-10	10	25	205	228	20	0	9	27	368	416	13	0	0	30	1529	1495	24	-3	6	33	148	196	-35
-1	12	23	202	139	20	-7	10	25	133	28	-30	-7	11	27	115	171	-40	-1	2	30	443	436	11	-3	6	33	138	177	-36
-12	13	23	570	570	12	-4	10	25	165	151	-24	-6	12	27	144	108	-30	-3	3	30	342	442	13	-5	7	33	210	110	22
-9	13	23	1077	1028	17	-8	12	25	508	535	11	-3	12	27	200	20	-23	0	3	30	496	484	11	-4	8	33	444	502	13
-6	13	23	256	220	16	-5	12	25	315	340	14	0	12	27	173	163	-29	-2	4	30	842	451	11	-6	9	33	101	128	-65
0	13	23	799	820	14	-2	12	25	116	61	-41	-8	13	27	209	205	-22	-4	5	30	847	833	14	-3	9	33	168	179	-28
-14	14	23	200	112	-24	-13	13	25	458	471	12	-5	13	27	283	232	17	-1	5	30	665	699	12	0	2	34	188	87	-39
-11	14	23	545	535	12	-10	13	25	96	38	-67	-2	13	27	251	206	18	-6	6	30	185	143	-22	-2	3	34	138	140	-36
-8	14	23	276	254	16	-4	13	25	452	459	12	-10	14	27	152	166	-34	-3	6	30	719	697	13	-1	4	34	120	9	-44
-5	14	23	435	344	12	-1	13	25	226	237	21	-7	14	27	166	91	-30	0	6	30	334	293	13	0	5	34	293	239	16

-2	14	23	234	226	19	-9	14	25	155	201	-30	-4	14	27	183	99	-26	-5	7	30	607	558	12	-5	6	34	200	167	-24	
-13	15	23	194	245	-26	-6	14	25	154	75	-31	-1	1	28	903	916	15	-2	7	30	389	403	13	-4	7	34	322	288	15	
-7	15	23	347	317	14	-5	15	25	207	83	-23	0	2	28	303	313	13	13	-7	8	30	196	200	-22	-1	7	34	220	208	22
-4	15	23	251	245	18	0	1	26	247	304	13	-2	3	28	435	473	10	10	-4	8	30	1102	1106	18	0	1	35	312	244	15
-1	15	23	102	229	-71	-2	2	26	359	413	11	-4	4	28	2098	2037	32	32	-1	8	30	213	291	-22	-2	2	35	440	494	12
-12	16	23	344	401	15	-1	3	26	648	709	11	-1	4	28	796	821	13	13	-9	9	30	825	799	14	-1	3	35	371	428	14
-6	16	23	448	419	14	-3	4	26	186	191	18	-3	5	28	530	517	11	11	-6	9	30	173	129	-25	-3	4	35	193	121	-25
0	0	24	259	241	11	0	4	26	1361	1300	21	0	5	28	1489	1432	23	23	-3	9	30	192	198	-23	0	4	35	907	888	15
-1	2	24	106	38	-29	-5	5	26	733	689	13	-5	6	28	152	58	-24	-24	0	9	30	839	786	14	-5	5	35	488	572	13
0	3	24	698	674	12	-2	5	26	491	522	10	-2	6	28	312	338	14	14	-8	10	30	231	209	21	-2	5	35	383	408	14
-2	4	24	176	157	17	-4	6	26	575	604	11	-4	7	28	154	183	-26	-26	-5	10	30	169	81	-27	-4	6	35	386	412	14
-4	5	24	152	65	-20	-6	7	26	645	633	12	-1	7	28	520	528	11	11	-2	10	30	214	259	22	-1	2	36	142	136	-35
-6	6	24	652	637	11	-3	7	26	170	147	-21	-6	8	28	291	342	15	15	-10	11	30	438	446	14	-3	3	36	300	381	17
-3	6	24	322	269	11	0	7	26	351	328	12	-3	8	28	694	690	13	13	-7	11	30	165	72	-29	0	3	36	190	264	-28
0	6	24	354	252	11	-8	8	26	939	901	15	0	8	28	1201	1191	19	19	-1	11	30	286	333	17	-1	11	30	264	264	-28
-2	7	24	141	169	-24	-5	8	26	484	516	11	-8	9	28	936	893	16	16	-6	12	30	449	435	13	-6	12	30	190	264	-28



**Anomalous elastic behavior and high-pressure structural evolution of zeolite lewyne by GD Gatta, P Comodi, PF Zanazzi and T Boffa Ballaran (ms. 1768)**

Observed and calculated structure factors for lewyne in DAC at 0.079 GPa

Observed				Calculated				Structure factors				for lewyne in DAC at 0.079 GPa			
h	k	l	10Fo	h	k	l	10Fo	h	k	l	10Fo	h	k	l	10Fo
-1	2	0	1107	1157	12	-1	3	2	2935	3148	46	0	12	3	589
0	3	0	2489	2534	72	-3	4	2	1903	1715	23	-11	13	3	20
-2	4	0	2183	2116	23	0	4	2	6153	6074	93	-5	13	3	240
-1	5	0	1989	2111	25	-5	5	2	170	50	-26	-2	13	3	20
-3	6	0	3541	3316	24	-2	5	2	1143	1154	34	-13	14	3	267
0	6	0	626	779	6	-4	6	2	798	887	16	-10	14	3	22
-2	7	0	1165	1279	8	-1	6	2	742	775	32	-7	14	3	20
-4	8	0	5727	5498	63	-6	7	2	1190	1109	21	-4	14	3	22
-1	8	0	1248	1226	28	-3	7	2	1020	987	25	-1	14	3	22
-3	9	0	34	130	-34	0	7	2	688	717	34	-12	15	3	22
0	9	0	4129	4222	103	-8	8	2	2950	3010	45	-6	15	3	22
-5	10	0	1437	1309	13	-5	8	2	672	606	35	-3	15	3	595
-2	10	0	1012	998	16	-2	8	2	2553	2715	53	-11	16	3	24
-4	11	0	155	298	-155	-7	9	2	1088	1139	23	-5	16	3	24
-1	11	0	804	901	11	-4	9	2	1218	1041	13	-13	17	3	25
-6	12	0	335	132	-47	-1	9	2	1208	1471	103	-10	17	3	24
-3	12	0	1119	1105	7	-9	10	2	384	277	37	-7	17	3	24
0	12	0	1891	2288	31	-6	10	2	705	831	61	-4	17	3	405
-5	13	0	1775	1910	24	-3	10	2	805	775	36	-12	18	3	26
-2	13	0	49	201	-48	-8	11	2	889	891	20	-9	18	3	25
-4	14	0	377	272	37	-5	11	2	1120	1195	12	-6	18	3	83
-1	14	0	639	663	25	-2	11	2	848	984	43	-4	4	4	873
-6	15	0	645	739	35	-10	12	2	835	877	35	-1	4	4	1436
-3	15	0	22	211	-22	-7	12	2	672	619	40	-3	5	4	585
-8	16	0	2012	1966	33	-4	12	2	1947	1906	39	0	5	4	1469
-5	16	0	24	78	-24	-12	13	2	739	709	65	-5	6	4	510
-2	16	0	608	537	45	-9	13	2	1600	1799	43	-2	6	4	1020
-7	17	0	24	92	-24	-6	13	2	467	272	38	-7	7	4	922
-4	17	0	1890	1819	33	-3	13	2	20	62	-19	-4	7	4	676
-9	18	0	1191	1110	30	0	13	2	1405	1574	59	-1	7	4	1020
-6	18	0	26	142	-26	-5	14	2	20	152	-19	-6	8	4	392
0	2	1	667	703	10	-2	14	2	732	624	32	-3	8	4	163
-2	3	1	892	965	15	-13	15	2	498	477	48	0	8	4	1307
-4	4	1	2706	2373	41	-7	15	2	22	291	-21	-8	9	4	671
-1	4	1	60	36	-59	-12	16	2	1053	1152	25	-5	9	4	15
-3	5	1	10	64	-10	-6	16	2	910	723	29	-2	9	4	670
0	5	1	10	21	-10	-14	17	2	25	51	-25	-10	10	4	187
-5	6	1	880	870	11	-11	17	2	874	672	33	-7	10	4	708
-2	7	1	1019	1181	19	-8	17	2	1156	1110	27	-4	10	4	429
-7	7	1	62	98	-62	-10	18	2	25	41	-24	-1	10	4	461
-4	7	1	13	166	-13	-7	18	2	725	610	38	-9	11	4	642

-1	7	1	879	925	50	-3	3	3	607	670	10	-6	11	4	342	249	-44	0	6	6	505	484	33	-10	16	7	1140	1318	18
-6	8	1	484	578	20	0	3	3	960	1118	7	-3	11	4	531	699	30	-5	7	6	741	803	41	-4	16	7	1053	873	42
-3	8	1	830	785	13	-2	4	3	45	173	-44	0	11	4	19	139	-19	-2	7	6	318	281	31	-9	17	7	1315	1519	27
0	8	1	1357	1223	22	-4	5	3	1222	1272	21	-11	12	4	20	30	-19	-7	8	6	32	104	-31	-11	18	7	1143	1105	32
-5	9	1	1071	1046	9	-1	5	3	793	611	10	-8	12	4	599	581	20	-4	8	6	15	145	-14	-8	18	7	26	207	-26
-2	9	1	16	3	-15	-6	6	3	509	535	28	-5	12	4	154	248	-95	-1	8	6	602	505	21	-8	8	8	448	433	30
-10	10	1	18	261	-18	-3	6	3	925	933	11	-2	12	4	612	777	30	-9	9	6	1673	1493	63	-7	9	8	667	560	23
-7	10	1	1096	962	9	0	6	3	13	227	-13	-13	13	4	304	140	-81	-6	9	6	429	281	15	-9	10	8	18	136	-18
-4	10	1	16	3	-15	-5	7	3	541	475	24	-10	13	4	414	287	33	-3	9	6	16	384	-15	-6	10	8	18	15	-18
-9	11	1	18	49	-18	-7	8	3	15	98	-14	-4	13	4	346	160	-62	0	9	6	598	665	32	-3	10	8	18	10	-18
-6	11	1	452	473	32	-4	8	3	480	432	20	-1	13	4	178	185	-108	-8	10	6	266	42	-36	0	10	8	436	153	38
-3	11	1	18	197	-18	-1	8	3	452	537	24	-12	14	4	22	119	-22	-5	10	6	382	533	34	-8	11	8	914	920	17
-11	12	1	278	31	-48	-9	9	3	615	604	22	-6	14	4	271	342	-75	-10	11	6	105	152	-54	-5	11	8	680	758	19
-8	12	1	876	757	10	-6	9	3	421	354	18	-14	15	4	505	431	49	-7	11	6	721	876	16	-2	11	8	19	247	-19
-5	12	1	298	464	-54	-3	9	3	426	298	19	-11	15	4	22	127	-22	-1	11	6	156	202	-156	-4	12	8	237	217	-94
-2	12	1	19	265	-19	0	9	3	1316	1220	21	-8	15	4	22	182	-21	-6	12	6	221	225	-55	-1	12	8	445	362	-50
-13	13	1	363	369	-62	-8	10	3	499	437	18	-5	15	4	380	377	-58	-3	12	6	384	435	-54	-12	13	8	22	259	-21
-10	13	1	20	259	-19	-5	10	3	251	179	-50	-2	15	4	427	371	-56	0	12	6	162	34	-161	-6	13	8	181	148	-180
-7	13	1	164	275	-163	-2	10	3	486	391	27	-13	16	4	24	317	-24	-8	13	6	490	352	42	-3	13	8	22	146	-21
-4	13	1	372	357	-52	-10	11	3	19	341	-19	-10	16	4	482	462	34	-5	13	6	660	777	36	-11	14	8	22	544	-22
-1	13	1	189	194	-189	-4	11	3	274	309	-58	-7	16	4	22	106	-22	-2	13	6	22	88	-21	-8	14	8	298	226	-72
-3	14	1	402	408	-53	-12	12	3	648	689	40	-4	16	4	592	499	37	-13	14	6	22	279	-22	-5	14	8	450	402	47
-14	15	1	24	115	-24	-9	12	3	500	309	34	-12	17	4	25	141	-24	-10	14	6	22	46	-21	-10	15	8	22	312	-22
-13	16	1	364	276	-74	-6	12	3	510	483	31	-9	17	4	685	447	38	-7	14	6	22	122	-21	-7	15	8	22	432	-22
-2	2	2	2502	2539	113	-3	12	3	588	455	30	-11	18	4	26	303	-26	-1	14	6	23	286	-23						

Anomalous elastic behavior and high-pressure structural evolution of zeolite lewyne by GD Gatta, P Comodi, PF Zanazzi and T Boffa Ballaran (ms. 1768)

Observed and calculated structure factors for lewyne in DAC at 3.0 GPa

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-1	2	0	1044	1068	12	-9	14	1	491	570	43	-3	6	3	600	672	12	-3	7	5	672	651	21
0	3	0	2702	2671	29	-3	14	1	551	474	40	-5	7	3	414	479	31	0	7	5	728	828	17
-2	4	0	1964	1919	22	-7	16	1	279	171	-93	-1	8	3	503	522	22	-8	8	5	3022	3062	46
-1	5	0	2050	2223	53	-2	2	2	2607	2794	177	-6	9	3	301	255	-38	-2	8	5	960	995	12
-3	6	0	3735	3477	23	-1	3	2	3010	3253	141	-3	9	3	398	329	-80	-7	9	5	465	354	28
0	6	0	625	888	33	-3	4	2	1837	1653	19	0	9	3	1099	885	10	-4	9	5	1597	1140	83
-2	7	0	993	1039	13	0	4	2	5942	5684	90	-5	10	3	233	175	-57	-1	9	5	2237	2357	17
-4	8	0	5930	5633	63	-2	5	2	1159	1145	19	-2	10	3	336	377	-40	-9	10	5	594	465	28
-1	8	0	1414	1468	21	-4	6	2	1063	1020	12	-7	11	3	439	495	40	-6	10	5	241	255	-50
0	9	0	4171	4042	95	-1	6	2	903	972	25	-9	12	3	270	319	-77	-3	10	5	1699	1644	44
-5	10	0	1397	1295	25	-6	7	2	1337	1269	62	-6	12	3	318	347	-51	-8	11	5	343	172	-45
-2	10	0	906	855	13	-3	7	2	721	746	21	0	12	3	538	545	38	-5	11	5	410	270	38
-4	11	0	588	571	31	0	7	2	808	747	17	-5	13	3	414	400	-49	-10	12	5	474	446	30
-1	11	0	761	818	23	-8	8	2	3068	3053	47	-7	14	3	308	290	-65	-10	12	5	510	580	30
-3	12	0	1245	1127	9	-5	8	2	660	566	12	-3	15	3	574	435	41	-7	12	5	943	938	15
0	12	0	2516	2457	122	-2	8	2	2359	2545	75	-11	16	3	383	352	-67	-4	12	5	1647	1678	47
-5	13	0	1742	1830	29	-7	9	2	1257	1198	15	-4	4	4	1097	937	22	-12	13	5	756	808	22
-7	14	0	822	663	27	-4	9	2	1104	795	11	-1	4	4	1623	1553	14	-9	13	5	1296	1439	17
-1	14	0	888	649	29	-1	9	2	1261	1470	22	-3	5	4	486	462	16	0	13	5	703	812	35
-6	15	0	723	643	32	-6	10	2	920	1006	32	0	5	4	1090	1114	13	-11	14	5	449	428	-50
-3	15	0	423	429	32	-3	10	2	1087	973	31	-5	6	4	901	912	21	-8	14	5	497	397	41
-8	16	0	2055	2148	34	-11	11	2	198	119	-121	-2	6	4	504	401	-86	-10	15	5	252	177	-104
-4	17	0	1501	1635	62	-8	11	2	487	522	23	-7	7	4	1025	1000	19	-10	15	5	534	474	44
-9	18	0	1113	1046	32	-5	11	2	1085	1145	12	-4	7	4	536	650	25	-9	16	5	458	381	-53
0	2	1	796	801	12	-2	11	2	824	909	28	-1	7	4	941	999	12	-6	16	5	798	616	33
-2	3	1	891	987	9	-10	12	2	874	888	18	-6	8	4	548	596	11	-11	17	5	515	403	-56
-4	4	1	2653	2506	40	-7	12	2	649	629	27	0	8	4	1343	1371	23	-8	17	5	1063	1001	31
-3	5	1	198	128	-27	-4	12	2	1956	1907	48	-8	9	4	792	724	25	-5	17	5	853	779	36
-5	6	1	823	778	37	-12	13	2	607	592	36	-2	9	4	515	519	18	-6	6	6	569	690	21
-2	6	1	1087	1266	28	-9	13	2	1510	1633	29	-7	10	4	530	672	14	-3	6	6	450	477	27
-4	7	1	225	118	-41	-6	13	2	556	409	35	-4	10	4	196	114	-73	0	6	6	407	372	25
-1	7	1	876	923	12	0	13	2	1112	1240	25	-1	10	4	584	522	22	-5	7	6	642	630	13
-6	8	1	709	744	11	-11	14	2	666	651	34	-8	12	4	436	379	37	-2	7	6	234	45	-30
-3	8	1	736	698	16	-8	14	2	203	297	-133	-2	12	4	436	379	37	-7	8	6	155	106	-61
0	8	1	1248	1254	81	-2	14	2	603	623	37	-5	12	4	584	625	-94	-1	8	6	431	368	27
-5	9	1	896	808	21	-10	15	2	988	773	29	-2	13	4	258	185	-94	-9	9	6	1671	1563	19
-10	10	1	296	345	-56	-12	16	2	1094	1127	26	-10	13	4	379	283	-49	-6	9	6	244	176	-39
-7	10	1	952	809	12	-6	16	2	875	717	30	-10	16	4	464	417	-53	-3	9	6	575	506	24
-1	10	1	229	181	-49	-11	17	2	567	547	48	-4	16	4	525	425	50	-5	10	6	531	486	26
-9	11	1	186	127	-114	-8	17	2	1048	953	30	-9	17	4	328	451	-87	-2	10	6	462	283	34
-6	11	1	458	503	34	-5	17	2	978	870	33	-3	4	5	2137	2177	33	-7	11	6	649	605	26
-11	14	8	445	505	-50	-11	14	8	445	505	-50	-11	14	8	445	505	-50	-11	14	8	445	505	-50

-8	12	1	844	780	49	-3	3	3	455	613	12	0	4	5	1237	1442	14	-4	11	6	559	545	29	-10	15	8	249	317-129
-5	12	1	412	508	40	0	3	3	989	1062	11	-5	5	5	1874	1913	29	-9	12	6	422	383	-44					
-13	13	1	605	483	39	-4	5	3	1078	1078	12	-2	5	5	1734	1558	15	-6	12	6	209	47-107						
-10	13	1	420	328	34	-1	5	3	815	680	19	-4	6	5	987	945	8*	-4	14	6	541	410	45					
-7	13	1	255	194	-80	-6	6	3	541	555	13	-6	7	5	1365	1388	50	-1	14	6	427	257	-56					