

Table 3

Table 3 a. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #1 at room T and P

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
2	0	0	2376	2366	25	6	6	1	313	302	5	2	8	2	577	594	6	2	10	3	8	65	-8	6	0	5	328	317	5
4	0	0	759	740	8	-5	7	1	91	142	-16	4	8	2	165	125	8	4	10	3	118	38	-16	-7	1	5	325	340	13
6	0	0	480	488	5	-3	7	1	157	93	6	-5	9	2	9	158	-8	-3	11	3	391	400	-21	-5	1	5	336	335	4
1	1	0	201	189	1	-1	7	1	263	287	6	-3	9	2	353	379	4	-1	11	3	372	408	5	-3	1	5	230	264	6
3	1	0	556	567	4	1	7	1	660	650	10	-1	9	2	766	763	8	1	11	3	69	204	-31	1	1	5	545	568	6
5	1	0	621	636	4	3	7	1	703	720	7	1	9	2	471	450	11	3	11	3	9	37	-8	3	1	5	696	700	7
7	1	0	381	401	3	5	7	1	420	423	11	3	9	2	261	210	-13	-2	12	3	373	361	5	5	1	5	491	488	5
0	2	0	121	99	2	-6	8	1	141	190	-11	5	9	2	182	116	8	0	12	3	308	301	-23	-6	2	5	279	229	5
2	2	0	1031	936	7	-4	8	1	267	241	-27	-4	10	2	139	128	-10	2	12	3	217	128	9	-4	2	5	400	307	16
4	2	0	622	629	4	-2	8	1	84	138	-11	-2	10	2	430	404	5	-1	13	3	299	323	5	-2	2	5	405	419	4
6	2	0	438	414	6	0	8	1	592	528	6	0	10	2	592	596	12	-6	0	4	476	481	5	0	2	5	460	434	5
1	3	0	745	720	9	2	8	1	637	647	7	2	10	2	369	338	-30	-4	0	4	900	910	9	2	2	5	1099	1118	11
3	3	0	668	666	5	4	8	1	445	409	-25	4	10	2	170	185	-9	-2	0	4	1885	1948	20	4	2	5	633	627	7
5	3	0	784	767	6	-5	9	1	778	785	8	-3	11	2	235	207	-13	0	0	4	2295	2321	24	6	2	5	299	313	5
7	3	0	379	373	6	-3	9	1	1470	1455	15	-1	11	2	453	458	7	2	0	4	2428	2443	25	-7	3	5	542	544	11
0	4	0	941	915	12	-1	9	1	1240	1225	13	1	11	2	482	500	5	4	0	4	1429	1436	15	-5	3	5	1039	1010	20
2	4	0	336	357	3	1	9	1	556	552	19	3	11	2	247	293	7	6	0	4	192	223	8	-3	3	5	1726	1705	18
4	4	0	636	588	5	3	9	1	483	493	-35	-2	12	2	340	345	6	-7	1	4	393	380	7	-1	3	5	2342	2441	104
6	4	0	491	488	4	5	9	1	558	567	18	0	12	2	332	329	5	-5	1	4	674	696	7	1	3	5	1642	1630	17
1	5	0	5	202	-4	-4	10	1	112	39	-12	2	12	2	551	571	20	-3	1	4	796	789	12	3	3	5	450	362	17
3	5	0	444	459	5	-2	10	1	240	194	4	-1	13	2	272	289	8	-1	1	4	508	559	6	5	3	5	340	326	5
5	5	0	521	529	4	0	10	1	268	271	5	1	13	2	293	328	-15	1	1	4	498	299	-9	-6	4	5	302	327	10
7	5	0	317	350	6	2	10	1	436	411	15	-6	0	3	360	373	12	3	1	4	402	341	5	-4	4	5	44	131	-43
0	6	0	2682	2608	28	4	10	1	361	387	8	-4	0	3	1098	1089	11	5	1	4	417	424	5	-2	4	5	6	214	-5
2	6	0	1951	1892	14	-3	11	1	101	19	-19	-2	0	3	611	514	6	-6	2	4	455	432	5	0	4	5	793	798	14
4	6	0	558	558	4	-1	11	1	8	116	-8	0	0	3	1071	1109	11	-4	2	4	747	758	9	2	4	5	581	587	6
6	6	0	343	316	5	1	11	1	306	320	9	2	0	3	88	191	-9	-2	2	4	210	186	6	4	4	5	664	673	7
1	7	0	48	116	-48	3	11	1	375	384	14	4	0	3	426	335	5	0	2	4	542	387	5	6	4	5	331	303	5
3	7	0	322	344	3	-2	12	1	9	163	-8	6	0	3	77	61	-27	2	2	4	596	596	6	-7	5	5	263	279	8
5	7	0	421	431	4	0	12	1	333	300	5	-7	1	3	164	102	-9	4	2	4	346	371	4	-5	5	5	212	246	6
0	8	0	406	360	5	2	12	1	537	552	7	-5	1	3	502	515	5	6	2	4	441	467	7	-3	5	5	310	180	-10
2	8	0	152	209	-25	-1	13	1	9	109	-9	-3	1	3	1123	1134	20	-7	3	4	528	536	8	-1	5	5	330	246	4
4	8	0	390	365	3	1	13	1	228	265	9	-1	1	3	1450	1437	15	-5	3	4	478	468	10	1	5	5	453	446	5
6	8	0	306	322	3	-6	0	2	1479	1441	15	1	1	3	864	844	9	-3	3	4	6	233	-5	3	5	5	549	563	7
1	9	0	316	311	3	-4	0	2	1952	1891	20	3	1	3	237	262	5	-1	3	4	182	197	4	5	5	5	382	397	12
3	9	0	371	389	5	-2	0	2	887	952	9	5	1	3	179	146	6	1	3	4	307	343	3	-6	6	5	306	305	12

Table 3

5 9 0 543 550 4 0 0 2 793 908 -55 7 1 3 149 183 -11 3 3 4 168 204 6 -4 6 5 87 76 -17
 0 10 0 75 92 -20 2 0 2 2114 2061 22 -6 2 3 361 330 5 5 3 4 502 513 5 -2 6 5 442 339 5
 2 10 0 315 279 11 4 0 2 1124 1097 12 -4 2 3 791 799 8 -6 4 4 484 484 5 0 6 5 201 218 3
 4 10 0 338 310 4 6 0 2 1032 1024 11 -2 2 3 582 696 6 -4 4 4 403 431 10 2 6 5 357 369 4
 1 11 0 30 90 -30 -7 1 2 152 58 -10 0 2 3 1186 1159 4 -2 4 4 593 601 6 4 6 5 825 820 9
 3 11 0 232 216 -23 -5 1 2 7 115 -6 2 2 3 123 179 5 0 4 4 245 262 6 -5 7 5 216 236 7
 0 12 0 1286 1286 14 -3 1 2 549 569 6 4 2 3 252 161 -31 2 4 4 334 257 4 -3 7 5 219 157 4
 2 12 0 795 791 6 -1 1 2 1408 1470 15 6 2 3 244 286 -14 4 4 4 571 572 16 -1 7 5 136 204 -8
 1 13 0 108 17 -14 1 1 2 1596 1608 17 -7 3 3 777 790 8 6 4 4 351 346 11 1 7 5 395 402 4
 -6 0 1 349 370 4 3 1 2 811 802 18 -5 3 3 555 569 6 -7 5 4 301 337 -15 3 7 5 501 496 9
 -4 0 1 818 784 8 5 1 2 232 226 5 -3 3 3 929 961 17 -5 5 4 558 586 6 5 7 5 360 357 5
 -2 0 1 749 714 8 7 1 2 89 55 -14 -1 3 3 2105 2059 22 -3 5 4 591 618 6 -4 8 5 150 99 -9
 2 0 1 1439 1414 15 -6 2 2 206 180 9 1 3 3 1921 1942 20 -1 5 4 389 398 4 -2 8 5 160 155 7
 4 0 1 808 839 8 -4 2 2 195 236 -17 3 3 3 1721 1706 18 1 5 4 6 231 -5 0 8 5 462 465 5
 6 0 1 265 210 -20 -2 2 2 1042 965 11 5 3 3 1321 1334 14 3 5 4 260 294 -17 2 8 5 433 433 9
 -7 1 1 303 286 5 0 2 2 1571 1616 46 7 3 3 601 594 12 5 5 4 361 369 5 4 8 5 494 476 10
 -5 1 1 184 215 6 2 2 2 408 480 4 -6 4 3 203 232 7 -6 6 4 357 318 5 -5 9 5 663 638 12
 -3 1 1 5 118 -4 4 2 2 395 431 4 -4 4 3 635 608 20 -4 6 4 889 897 9 -3 9 5 1034 1017 11
 -1 1 1 436 443 4 6 2 2 117 60 -15 -2 4 3 1096 1095 11 -2 6 4 1091 1093 11 -1 9 5 1356 1342 14
 1 1 1 1151 1168 18 -7 3 2 9 156 -8 0 4 3 352 299 4 0 6 4 1727 1704 18 1 9 5 886 898 9
 3 1 1 1125 1112 12 -5 3 2 319 313 13 2 4 3 360 375 4 2 6 4 1912 1923 20 3 9 5 229 222 7
 5 1 1 598 603 6 -3 3 2 649 652 23 4 4 3 8 195 -8 4 6 4 863 895 19 -4 10 5 9 93 -9
 7 1 1 9 172 -8 -1 3 2 1399 1409 23 6 4 3 155 146 -8 6 6 4 196 256 -12 -2 10 5 94 90 -20
 -6 2 1 367 343 5 1 3 2 603 504 7 -7 5 3 127 67 -18 -5 7 4 457 469 5 0 10 5 185 173 8
 -4 2 1 93 158 -12 3 3 2 6 221 -6 -5 5 3 377 409 15 -3 7 4 439 471 9 2 10 5 399 420 10
 -2 2 1 884 912 12 5 3 2 23 76 -23 -3 5 3 865 874 9 -1 7 4 363 268 8 -3 11 5 9 48 -9
 0 2 1 803 797 8 7 3 2 103 71 -20 -1 5 3 1007 978 10 1 7 4 237 143 -24 -1 11 5 8 86 -8
 2 2 1 996 943 10 -6 4 2 57 34 -56 1 5 3 565 563 6 3 7 4 206 212 6 1 11 5 228 208 7
 4 2 1 863 878 11 -4 4 2 512 444 8 3 5 3 299 175 -6 5 7 4 295 286 5 3 11 5 247 275 8
 6 2 1 269 239 7 -2 4 2 814 816 8 5 5 3 138 102 -12 -6 8 4 316 340 10 -2 12 5 77 69 -33
 -7 3 1 326 350 13 0 4 2 802 857 8 -6 6 3 327 283 6 -4 8 4 364 300 5 0 12 5 210 122 9
 -5 3 1 1226 1224 13 2 4 2 1018 1005 10 -4 6 3 761 762 8 -2 8 4 326 314 8 -6 0 6 1035 1038 11
 -3 3 1 2582 2593 20 4 4 2 8 191 -7 -2 6 3 819 828 8 0 8 4 72 120 -19 -4 0 6 1967 1916 20
 -1 3 1 2313 2365 38 6 4 2 8 74 -8 0 6 3 67 228 -15 2 8 4 120 142 -9 -2 0 6 1652 1626 17
 1 3 1 916 952 9 -7 5 2 132 56 -16 2 6 3 6 258 -6 4 8 4 335 354 5 0 0 6 878 958 9
 3 3 1 914 955 9 -5 5 2 81 100 -13 4 6 3 177 177 7 -5 9 4 401 364 5 2 0 6 625 569 6
 5 3 1 888 899 9 -3 5 2 436 456 14 6 6 3 72 112 -28 -3 9 4 258 214 -29 4 0 6 1027 1041 11
 7 3 1 676 648 7 -1 5 2 1019 1032 10 -5 7 3 359 361 6 -1 9 4 93 93 -15 6 0 6 955 973 10
 -6 4 1 243 247 7 1 5 2 1153 1138 12 -3 7 3 714 718 10 1 9 4 179 175 7 -7 1 6 9 108 -9

Table 3

-4 4 1 438 382 5 3 5 2 606 637 6 -1 7 3 781 798 9 3 9 4 8 76 -8 -5 1 6 133 123 -8
 -2 4 1 5 159 -4 5 5 2 92 187 -24 1 7 3 442 461 5 -4 10 4 358 365 15 -3 1 6 402 330 9
 0 4 1 1032 950 11 -6 6 2 1234 1270 16 3 7 3 202 154 6 -2 10 4 173 164 -9 -1 1 6 693 720 23
 2 4 1 1006 1005 11 -4 6 2 1218 1225 13 5 7 3 9 102 -8 0 10 4 229 126 -7 1 1 6 939 926 10
 4 4 1 530 524 6 -2 6 2 739 739 8 -6 8 3 9 171 -9 2 10 4 163 204 -9 3 1 6 663 634 8
 6 4 1 315 325 4 0 6 2 928 959 10 -4 8 3 480 453 5 4 10 4 206 203 8 5 1 6 174 222 -10
 -7 5 1 236 229 7 2 6 2 913 929 9 -2 8 3 698 711 7 -3 11 4 246 276 8 -6 2 6 95 76 -21
 -5 5 1 161 168 7 4 6 2 1024 1016 11 0 8 3 318 313 5 -1 11 4 79 145 -25 -4 2 6 350 201 -15
 -3 5 1 83 82 -13 6 6 2 787 815 8 2 8 3 259 232 10 1 11 4 8 88 -8 -2 2 6 960 977 29
 -1 5 1 287 312 10 -5 7 2 76 56 -26 4 8 3 52 124 -51 3 11 4 206 145 9 0 2 6 867 845 9
 1 5 1 779 788 8 -3 7 2 303 344 9 -5 9 3 323 354 5 -2 12 4 668 637 15 2 2 6 862 880 9
 3 5 1 839 844 9 -1 7 2 758 773 8 -3 9 3 450 500 8 0 12 4 819 806 9 4 2 6 401 393 7
 5 5 1 457 485 5 1 7 2 829 847 9 -1 9 3 865 915 19 2 12 4 893 886 9 6 2 6 106 21 -21
 -6 6 1 309 288 5 3 7 2 461 470 18 1 9 3 1004 1016 10 -6 0 5 270 216 5 -7 3 6 166 104 -9
 -4 6 1 313 313 6 5 7 2 8 127 -8 3 9 3 1016 1021 29 -4 0 5 84 238 -16 -5 3 6 191 188 7
 -2 6 1 827 787 9 -6 8 2 100 9 -15 5 9 3 875 878 9 -2 0 5 328 363 4 -3 3 6 211 209 6
 0 6 1 665 668 9 -4 8 2 277 231 8 -4 10 3 361 345 6 0 0 5 999 1027 10 -1 3 6 836 846 15
 2 6 1 1119 1102 12 -2 8 2 460 485 5 -2 10 3 401 376 13 2 0 5 840 852 9 1 3 6 1357 1375 21
 4 6 1 482 461 12 0 8 2 613 582 6 0 10 3 328 367 14 4 0 5 850 880 9 3 3 6 409 412 8
 5 3 6 109 178 -16 -5 5 7 258 254 -24 -1 7 8 253 272 6 3 1 10 385 386 5 -4 0 12 400 443 -27
 -6 4 6 8 91 -8 -3 5 7 558 564 10 1 7 8 8 131 -8 -6 2 10 110 16 -14 -2 0 12 463 455 6
 -4 4 6 298 315 5 -1 5 7 722 727 8 3 7 8 49 167 -48 -4 2 10 174 167 8 0 0 12 1138 1127 12
 -2 4 6 462 479 18 1 5 7 454 499 5 -4 8 8 416 403 7 -2 2 10 350 346 4 2 0 12 1225 1171 13
 0 4 6 1138 1148 14 3 5 7 162 175 -8 -2 8 8 331 319 9 0 2 10 575 580 6 -5 1 12 366 341 8
 2 4 6 736 736 26 5 5 7 10 81 -9 0 8 8 122 23 -10 2 2 10 667 682 8 -3 1 12 354 386 5
 4 4 6 260 264 5 -6 6 7 153 113 -10 2 8 8 9 106 -8 4 2 10 246 252 8 -1 1 12 337 285 -17
 6 4 6 10 83 -9 -4 6 7 489 507 10 -3 9 8 327 312 13 -5 3 10 107 162 -19 1 1 12 95 142 -18
 -5 5 6 165 113 8 -2 6 7 866 880 9 -1 9 8 145 181 -10 -3 3 10 8 27 -8 3 1 12 10 116 -9
 -3 5 6 251 284 -25 0 6 7 394 416 5 1 9 8 9 154 -8 -1 3 10 227 215 7 -4 2 12 372 376 18
 -1 5 6 587 601 6 2 6 7 42 101 -42 3 9 8 9 89 -9 1 3 10 501 490 6 -2 2 12 504 515 6
 1 5 6 728 759 27 4 6 7 9 153 -9 -2 10 8 173 208 -8 3 3 10 545 556 6 0 2 12 218 200 7
 3 5 6 554 527 6 -5 7 7 267 229 5 0 10 8 56 123 -55 -6 4 10 10 89 -9 2 2 12 9 44 -9
 5 5 6 223 191 10 -3 7 7 502 510 6 2 10 8 78 17 -33 -4 4 10 8 27 -8 -5 3 12 396 369 6
 -6 6 6 804 820 31 -1 7 7 614 620 24 -1 11 8 186 166 8 -2 4 10 355 385 5 -3 3 12 537 542 6
 -4 6 6 1347 1342 22 1 7 7 422 418 5 -6 0 9 339 323 9 0 4 10 649 644 7 -1 3 12 218 180 9
 -2 6 6 1437 1437 24 3 7 7 66 153 -24 -4 0 9 106 97 -15 2 4 10 493 453 21 1 3 12 340 349 5
 0 6 6 431 365 7 -4 8 7 430 435 5 -2 0 9 412 355 7 4 4 10 361 351 11 3 3 12 176 205 -10
 2 6 6 457 472 8 -2 8 7 514 526 15 0 0 9 311 225 5 -5 5 10 9 73 -9 -4 4 12 454 476 6
 4 6 6 912 909 10 0 8 7 450 455 6 2 0 9 221 212 7 -3 5 10 239 231 7 -2 4 12 312 327 5

Table 3

-5 7 6 8 51 -8 2 8 7 244 236 8 4 0 9 242 300 8 -1 5 10 442 450 18 0 4 12 218 250 8
 -3 7 6 187 209 6 4 8 7 95 21 -17 -5 1 9 358 332 18 1 5 10 510 479 7 2 4 12 9 98 -9
 -1 7 6 450 473 13 -5 9 7 587 601 -35 -3 1 9 170 249 8 3 5 10 367 333 13 -3 5 12 356 324 5
 1 7 6 598 602 8 -3 9 7 209 226 7 -1 1 9 395 292 5 -4 6 10 881 879 10 -1 5 12 205 247 8
 3 7 6 433 418 5 -1 9 7 358 331 12 1 1 9 429 458 5 -2 6 10 792 777 8 1 5 12 179 124 -10
 5 7 6 129 136 -19 1 9 7 909 917 10 3 1 9 461 477 5 0 6 10 650 644 7 -4 6 12 179 257 -10
 -4 8 6 143 182 -9 3 9 7 960 970 10 5 1 9 359 319 7 2 6 10 428 453 5 -2 6 12 491 486 12
 -2 8 6 291 308 -22 -4 10 7 149 241 -11 -6 2 9 287 321 5 -3 7 10 100 159 -21 0 6 12 861 846 12
 0 8 6 684 675 7 -2 10 7 458 446 5 -4 2 9 270 277 4 -1 7 10 306 343 -16 2 6 12 915 913 10
 2 8 6 495 479 16 0 10 7 313 337 7 -2 2 9 290 73 -7 1 7 10 391 394 12 -3 7 12 262 277 8
 4 8 6 65 173 -53 2 10 7 9 62 -9 0 2 9 376 373 5 3 7 10 267 268 8 -1 7 12 29 184 -29
 -5 9 6 116 72 -13 -3 11 7 214 274 9 2 2 9 522 515 7 -4 8 10 106 15 -15 1 7 12 53 77 -53
 -3 9 6 64 73 -37 -1 11 7 321 345 5 4 2 9 397 408 5 -2 8 10 272 251 7 -2 8 12 200 218 10
 -1 9 6 505 509 13 1 11 7 260 218 -21 -5 3 9 884 896 17 0 8 10 436 428 18 0 8 12 43 158 -42
 1 9 6 835 824 9 -6 0 8 191 225 8 -3 3 9 1526 1531 16 2 8 10 357 310 10 -4 0 13 9 85 -9
 3 9 6 331 318 10 -4 0 8 459 473 5 -1 3 9 1418 1427 15 -3 9 10 51 80 -51 -2 0 13 351 339 5
 -4 10 6 162 90 -11 -2 0 8 1558 1566 17 1 3 9 1040 1057 19 -1 9 10 50 188 -50 0 0 13 114 164 -18
 -2 10 6 360 385 5 0 0 8 1667 1678 18 3 3 9 668 634 7 1 9 10 383 366 5 2 0 13 121 196 -19
 0 10 6 443 433 5 2 0 8 1415 1428 15 5 3 9 212 258 9 -6 0 11 130 59 -18 -5 1 13 243 239 9
 2 10 6 447 422 5 4 0 8 777 768 8 -6 4 9 326 295 5 -4 0 11 148 180 -12 -3 1 13 102 177 -22
 -3 11 6 210 147 9 -7 1 8 181 253 -9 -4 4 9 80 102 -23 -2 0 11 495 485 6 -1 1 13 9 132 -8
 -1 11 6 312 295 5 -5 1 8 506 529 14 -2 4 9 189 187 6 0 0 11 447 422 5 1 1 13 250 221 8
 1 11 6 390 376 5 -3 1 8 677 646 7 0 4 9 8 142 -7 2 0 11 226 190 8 -4 2 13 179 197 -9
 -2 12 6 612 611 11 -1 1 8 453 461 8 2 4 9 413 433 5 4 0 11 281 252 9 -2 2 13 9 124 -9
 0 12 6 225 254 8 1 1 8 88 268 -17 4 4 9 489 472 18 -5 1 11 299 248 5 0 2 13 9 145 -9
 -6 0 7 8 72 -8 3 1 8 278 281 4 -5 5 9 252 268 8 -3 1 11 475 480 5 2 2 13 180 135 -9
 -4 0 7 346 369 6 5 1 8 316 308 -20 -3 5 9 178 177 7 -1 1 11 557 535 6 -3 3 13 845 851 9
 -2 0 7 1331 1375 14 -6 2 8 458 464 6 -1 5 9 213 202 4 1 1 11 376 379 5 -1 3 13 1181 1174 18
 0 0 7 596 592 6 -4 2 8 604 595 8 1 5 9 333 360 4 3 1 11 191 162 8 1 3 13 768 747 11
 2 0 7 387 429 7 -2 2 8 316 377 -16 3 5 9 351 393 9 -6 2 11 10 81 -9 -4 4 13 171 247 -12
 4 0 7 25 40 -24 0 2 8 305 325 4 -4 6 9 81 172 -26 -4 2 11 346 377 -20 -2 4 13 77 96 -22
 6 0 7 9 83 -9 2 2 8 67 24 -26 -2 6 9 8 47 -7 -2 2 11 692 687 7 0 4 13 136 22 -11
 -7 1 7 140 70 -11 4 2 8 284 289 5 0 6 9 8 33 -8 0 2 11 466 457 6 2 4 13 176 244 -13
 -5 1 7 324 318 4 -5 3 8 803 801 14 2 6 9 165 183 -10 2 2 11 355 384 5 -3 5 13 191 143 9
 -3 1 7 700 710 7 -3 3 8 389 407 9 4 6 9 393 366 6 4 2 11 116 91 -21 -1 5 13 9 95 -9
 -1 1 7 900 926 9 -1 3 8 388 431 15 -5 7 9 287 239 -15 -5 3 11 660 657 7 1 5 13 189 171 -10
 1 1 7 692 647 7 1 3 8 400 346 -23 -3 7 9 38 156 -37 -3 3 11 657 629 15 -2 6 13 280 252 5
 3 1 7 106 244 -15 3 3 8 8 37 -8 -1 7 9 180 182 7 -1 3 11 360 386 5 0 6 13 237 200 8

Table 3

5	1	7	9	117	-8	5	3	8	10	195	-9	1	7	9	319	310	5	1	3	11	475	457	6	-4	0	14	906	906	10
-6	2	7	261	276	-21	-6	4	8	326	351	15	3	7	9	333	347	5	3	3	11	871	849	9	-2	0	14	759	748	8
-4	2	7	467	487	8	-4	4	8	582	595	6	-4	8	9	9	87	-9	-4	4	11	330	337	11	0	0	14	197	222	9
-2	2	7	1076	1062	11	-2	4	8	518	506	25	-2	8	9	101	106	-19	-2	4	11	499	474	6	-3	1	14	103	112	-23
0	2	7	803	805	8	0	4	8	226	28	-6	0	8	9	130	119	-10	0	4	11	604	613	11	-1	1	14	294	293	-27
2	2	7	295	137	-4	2	4	8	242	223	4	2	8	9	313	322	-20	2	4	11	198	225	8	1	1	14	446	404	6
4	2	7	46	159	-45	4	4	8	210	231	8	-3	9	9	952	970	17	-5	5	11	230	206	9	-2	2	14	9	66	-9
6	2	7	10	77	-9	-5	5	8	436	453	8	-1	9	9	880	868	19	-3	5	11	364	395	5	0	2	14	345	377	11
-7	3	7	901	874	10	-3	5	8	543	545	6	1	9	9	662	656	7	-1	5	11	481	437	20	-3	3	14	142	206	-15
-5	3	7	868	890	9	-1	5	8	349	365	4	-2	10	9	64	44	-29	1	5	11	272	304	12	-1	3	14	169	191	-10
-3	3	7	443	374	5	1	5	8	181	207	6	0	10	9	154	122	-10	3	5	11	198	126	-10	1	3	14	333	356	5
-1	3	7	616	579	6	3	5	8	278	232	-30	-6	0	10	969	960	10	-4	6	11	9	182	-9	-2	4	14	248	183	8
1	3	7	1554	1585	18	5	5	8	219	267	10	-4	0	10	922	951	10	-2	6	11	284	300	5	0	4	14	234	230	9
3	3	7	1544	1542	16	-6	6	8	189	257	-11	-2	0	10	1054	1071	20	0	6	11	541	551	25	-1	5	14	184	246	-13
5	3	7	872	872	9	-4	6	8	329	325	5	0	0	10	975	965	10	2	6	11	10	91	-9	-2	0	15	326	346	6
-6	4	7	202	143	8	-2	6	8	1016	1042	11	2	0	10	360	389	5	-3	7	11	332	352	10	0	0	15	227	232	8
-4	4	7	637	646	7	0	6	8	1534	1535	16	4	0	10	484	491	6	-1	7	11	390	389	5	-1	1	15	376	399	5
-2	4	7	717	735	12	2	6	8	933	932	13	-5	1	10	9	100	-8	1	7	11	251	277	8						
0	4	7	607	631	6	4	6	8	645	654	16	-3	1	10	288	275	5	-2	8	11	376	353	9						
2	4	7	328	346	14	-5	7	8	333	366	16	-1	1	10	508	526	6	0	8	11	432	422	6						
4	4	7	126	46	-12	-3	7	8	412	416	5	1	1	10	590	564	6	-1	9	11	200	260	9						

Table 3 b. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #2 at room T and P

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
2	0	0	2300	2372	8	4	6	1	492	477	16	3	7	2	496	475	5	-1	9	3	941	913	9	-2	12	4	679	671	6
4	0	0	699	724	7	6	6	1	310	304	4	5	7	2	124	126	-9	1	9	3	1089	1055	37	0	12	4	764	875	-59
6	0	0	478	493	5	-5	7	1	164	158	4	-6	8	2	7	9	-7	3	9	3	1105	1069	39	2	12	4	942	929	23
1	1	0	200	205	2	-3	7	1	111	102	-6	-4	8	2	226	237	10	5	9	3	959	914	9	4	12	4	587	589	6
3	1	0	552	564	12	-1	7	1	310	293	5	-2	8	2	501	493	21	-4	10	3	356	360	15	-6	0	5	215	216	-15
5	1	0	610	635	4	1	7	1	712	678	15	0	8	2	601	589	12	-2	10	3	388	380	10	-4	0	5	231	243	7
7	1	0	366	398	3	3	7	1	753	735	8	2	8	2	622	601	13	0	10	3	311	368	-18	-2	0	5	345	345	3
0	2	0	117	119	2	5	7	1	450	447	10	4	8	2	103	127	-10	2	10	3	7	68	-7	0	0	5	1100	1050	10
2	2	0	944	924	20	-6	8	1	189	193	-10	-5	9	2	138	168	-8	4	10	3	97	23	-13	2	0	5	847	860	8
4	2	0	609	625	5	-4	8	1	230	239	7	-3	9	2	381	378	18	-3	11	3	396	406	12	4	0	5	896	914	27
6	2	0	401	421	5	-2	8	1	162	152	4	-1	9	2	800	776	8	-1	11	3	415	423	4	6	0	5	304	322	4
1	3	0	763	749	14	0	8	1	497	545	19	1	9	2	509	487	16	1	11	3	196	210	6	-7	1	5	350	343	4
3	3	0	663	668	16	2	8	1	680	675	7	3	9	2	228	216	3	3	11	3	94	37	-15	-5	1	5	342	340	3
5	3	0	764	771	11	4	8	1	423	428	13	5	9	2	79	108	-16	-4	12	3	534	519	21	-3	1	5	254	260	2
7	3	0	315	371	13	-5	9	1	807	810	33	-4	10	2	128	139	-13	-2	12	3	405	403	5	-1	1	5	302	308	3

Table 3

0 4 0 944 931 10 -3 9 1 1519 1482 19 -2 10 2 451 436 12 0 12 3 300 318 -31 1 1 5 579 584 5
 2 4 0 360 368 8 -1 9 1 1287 1264 20 0 10 2 539 627 -49 2 12 3 149 104 -10 3 1 5 714 728 11
 4 4 0 589 593 14 1 9 1 601 575 23 2 10 2 369 364 4 -1 13 3 334 349 14 5 1 5 504 509 7
 6 4 0 433 493 13 3 9 1 496 498 15 4 10 2 205 211 4 -6 0 4 486 485 5 -6 2 5 244 232 3
 1 5 0 210 210 3 5 9 1 568 568 12 -3 11 2 234 229 10 -4 0 4 905 913 12 -4 2 5 300 296 6
 3 5 0 462 467 10 -4 10 1 52 32 -23 -1 11 2 489 484 5 -2 0 4 1891 1946 18 -2 2 5 421 414 5
 5 5 0 490 543 5 -2 10 1 178 180 -16 1 11 2 545 534 15 0 0 4 2233 2358 21 0 2 5 411 422 5
 7 5 0 241 358 -25 0 10 1 254 279 4 3 11 2 303 305 4 2 0 4 2394 2460 23 2 2 5 1138 1133 24
 0 6 0 2492 2647 17 2 10 1 433 417 14 -4 12 2 756 735 19 4 0 4 1417 1457 13 4 2 5 657 646 6
 2 6 0 1882 1916 26 4 10 1 381 386 17 -2 12 2 383 376 4 6 0 4 230 228 -21 6 2 5 313 316 5
 4 6 0 519 563 11 -3 11 1 87 12 -12 0 12 2 286 323 10 -7 1 4 379 374 7 -7 3 5 543 552 6
 6 6 0 229 320 -24 -1 11 1 72 111 -16 2 12 2 586 565 10 -5 1 4 666 692 6 -5 3 5 1008 1014 9
 1 7 0 91 104 -5 1 11 1 347 337 -22 -1 13 2 314 307 13 -3 1 4 790 803 11 -3 3 5 1752 1716 50
 3 7 0 327 347 -18 3 11 1 394 403 9 1 13 2 335 335 -30 -1 1 4 552 559 7 -1 3 5 2415 2466 96
 5 7 0 366 432 -42 -2 12 1 172 176 -13 -6 0 3 370 377 5 1 1 4 266 271 7 1 3 5 1690 1648 27
 0 8 0 320 351 4 0 12 1 249 288 8 -4 0 3 1080 1106 10 3 1 4 335 335 4 3 3 5 369 375 4
 2 8 0 203 203 3 2 12 1 583 569 10 -2 0 3 480 515 4 5 1 4 426 435 4 5 3 5 327 339 4
 4 8 0 379 373 6 4 12 1 396 412 10 0 0 3 1081 1088 3 -6 2 4 429 428 4 7 3 5 630 632 7
 6 8 0 338 337 9 -1 13 1 116 123 -12 2 0 3 187 192 2 -4 2 4 754 765 12 -6 4 5 319 317 5
 1 9 0 335 322 5 1 13 1 294 298 10 4 0 3 350 350 6 -2 2 4 196 202 3 -4 4 5 136 126 5
 3 9 0 388 381 5 -1 15 1 553 594 14 6 0 3 71 68 -16 0 2 4 354 348 4 -2 4 5 190 185 -14
 5 9 0 559 562 9 -8 0 2 706 697 7 -7 1 3 125 105 -9 2 2 4 590 599 5 0 4 5 841 801 14
 0 10 0 7 100 -7 -6 0 2 1424 1453 14 -5 1 3 523 513 5 4 2 4 376 377 4 2 4 5 622 604 6
 2 10 0 299 298 6 -4 0 2 1883 1896 19 -3 1 3 1117 1131 11 6 2 4 466 474 5 4 4 5 683 676 20
 4 10 0 321 333 5 -2 0 2 893 937 10 -1 1 3 1475 1468 31 -7 3 4 558 545 6 6 4 5 315 305 7
 1 11 0 90 91 -9 0 0 2 837 866 8 1 1 3 860 865 8 -5 3 4 470 466 4 -7 5 5 296 286 4
 3 11 0 225 232 4 2 0 2 2022 2073 20 3 1 3 247 254 3 -3 3 4 226 230 2 -5 5 5 258 255 -14
 0 12 0 1128 1326 48 4 0 2 1122 1115 11 5 1 3 143 149 -10 -1 3 4 191 180 9 -3 5 5 166 172 3
 2 12 0 841 834 9 6 0 2 1022 1032 10 7 1 3 184 193 -11 1 3 4 351 346 6 -1 5 5 219 222 3
 1 13 0 72 9 -41 8 0 2 811 787 13 -6 2 3 327 330 4 3 3 4 210 215 -21 1 5 5 449 457 7
 -8 0 1 504 509 10 -7 1 2 62 55 -19 -4 2 3 788 801 9 5 3 4 514 522 7 3 5 5 593 580 5
 -6 0 1 374 383 4 -5 1 2 115 111 4 -2 2 3 686 702 31 7 3 4 615 613 6 5 5 5 405 418 4
 -4 0 1 782 794 8 -3 1 2 551 553 5 0 2 3 1261 1191 13 -6 4 4 509 498 5 -6 6 5 312 308 4
 -2 0 1 739 751 7 -1 1 2 1464 1445 52 2 2 3 200 197 6 -4 4 4 441 439 14 -4 6 5 6 78 -6
 2 0 1 1394 1444 14 1 1 2 1634 1619 39 4 2 3 146 157 5 -2 4 4 613 604 30 -2 6 5 346 363 10
 4 0 1 834 840 8 3 1 2 788 812 9 6 2 3 291 286 7 0 4 4 282 274 3 0 6 5 223 217 8
 6 0 1 206 210 9 5 1 2 213 221 4 -7 3 3 798 793 8 2 4 4 245 248 3 2 6 5 381 385 4
 -7 1 1 290 294 9 7 1 2 86 49 -13 -5 3 3 573 556 14 4 4 4 591 589 13 4 6 5 831 839 8
 -5 1 1 216 224 5 -6 2 2 170 180 -13 -3 3 3 936 946 15 6 4 4 379 368 4 -5 7 5 249 246 8

Table 3

-3 1 1 118 125 2 -4 2 2 246 244 6 -1 3 3 2185 2066 21 -7 5 4 333 332 6 -3 7 5 173 165 3
 -1 1 1 444 446 11 -2 2 2 979 943 41 1 3 3 2054 1966 20 -5 5 4 589 588 29 -1 7 5 204 210 -19
 1 1 1 1176 1148 34 0 2 2 1663 1616 16 3 3 3 1753 1728 31 -3 5 4 646 648 -43 1 7 5 401 418 15
 3 1 1 1136 1121 28 2 2 2 487 501 9 5 3 3 1371 1357 18 -1 5 4 414 408 11 3 7 5 528 537 5
 5 1 1 604 612 6 4 2 2 426 437 4 7 3 3 611 617 6 1 5 4 236 229 3 5 7 5 393 382 4
 7 1 1 183 181 -11 6 2 2 6 71 -6 -6 4 3 230 231 3 3 5 4 287 294 5 -4 8 5 119 110 -9
 -6 2 1 323 338 4 -7 3 2 139 163 -8 -4 4 3 621 606 16 5 5 4 401 383 4 -2 8 5 147 145 -8
 -4 2 1 154 154 3 -5 3 2 312 318 8 -2 4 3 1130 1103 -60 -6 6 4 336 318 -19 0 8 5 489 480 9
 -2 2 1 959 926 48 -3 3 2 674 658 24 0 4 3 292 318 3 -4 6 4 962 897 13 2 8 5 451 460 4
 0 2 1 817 792 8 -1 3 2 1507 1447 34 2 4 3 372 369 3 -2 6 4 1166 1117 17 4 8 5 497 497 5
 2 2 1 941 930 18 1 3 2 486 516 6 4 4 3 184 189 3 0 6 4 1833 1741 38 -5 9 5 665 655 33
 4 2 1 869 886 9 3 3 2 224 227 2 6 4 3 154 140 -20 2 6 4 2021 1968 49 -3 9 5 1044 1064 -59
 6 2 1 239 242 3 5 3 2 71 83 -11 -7 5 3 41 70 -40 4 6 4 940 916 22 -1 9 5 1376 1376 13
 -7 3 1 347 348 4 7 3 2 91 71 -13 -5 5 3 403 407 6 6 6 4 263 261 4 1 9 5 935 919 33
 -5 3 1 1256 1231 39 -6 4 2 71 40 -14 -3 5 3 895 869 42 -5 7 4 474 473 22 3 9 5 226 234 -12
 -3 3 1 2627 2623 127 -4 4 2 453 449 18 -1 5 3 1018 997 24 -3 7 4 471 468 18 -4 10 5 107 83 -12
 -1 3 1 2447 2377 29 -2 4 2 848 831 -45 1 5 3 606 568 13 -1 7 4 263 269 5 -2 10 5 95 86 -13
 1 3 1 933 942 18 0 4 2 867 860 8 3 5 3 169 167 3 1 7 4 90 121 -13 0 10 5 132 167 -11
 3 3 1 952 947 24 2 4 2 1085 1031 11 5 5 3 132 109 -19 3 7 4 242 209 8 2 10 5 443 435 4
 5 3 1 920 912 28 4 4 2 214 219 3 -6 6 3 286 286 4 5 7 4 290 294 4 -3 11 5 97 38 -14
 7 3 1 668 650 7 6 4 2 30 83 -30 -4 6 3 786 770 36 -6 8 4 340 338 4 -1 11 5 8 73 -7
 -6 4 1 244 242 4 -7 5 2 7 50 -7 -2 6 3 891 856 11 -4 8 4 313 308 3 1 11 5 213 209 -28
 -4 4 1 370 376 -20 -5 5 2 103 108 -8 0 6 3 265 238 11 -2 8 4 334 318 -18 3 11 5 291 295 4
 -2 4 1 161 157 4 -3 5 2 470 458 -25 2 6 3 233 233 3 0 8 4 118 117 -10 -2 12 5 8 90 -7
 0 4 1 982 936 11 -1 5 2 1087 1042 12 4 6 3 174 189 4 2 8 4 157 136 4 0 12 5 100 119 -18
 2 4 1 1012 995 25 1 5 2 1211 1160 41 6 6 3 86 116 -16 4 8 4 362 359 4 2 12 5 398 397 11
 4 4 1 534 522 15 3 5 2 654 652 6 -5 7 3 375 376 4 -5 9 4 390 384 16 -8 0 6 494 479 12
 6 4 1 321 328 6 5 5 2 192 186 3 -3 7 3 749 743 -40 -3 9 4 223 217 -24 -6 0 6 1065 1021 23
 -7 5 1 243 238 4 -8 6 2 563 558 6 -1 7 3 848 825 8 -1 9 4 133 68 -8 -4 0 6 1938 1937 18
 -5 5 1 159 166 4 -6 6 2 1319 1288 58 1 7 3 486 488 6 1 9 4 199 201 9 -2 0 6 1607 1639 15
 -3 5 1 93 73 -6 -4 6 2 1248 1247 61 3 7 3 176 163 5 3 9 4 41 68 -40 0 0 6 938 952 8
 -1 5 1 320 311 7 -2 6 2 792 744 9 5 7 3 125 100 -9 -4 10 4 377 379 -26 2 0 6 581 587 5
 1 5 1 829 780 16 0 6 2 898 948 -48 -6 8 3 191 184 -37 -2 10 4 191 180 -15 4 0 6 1052 1061 10
 3 5 1 857 865 16 2 6 2 974 929 27 -4 8 3 459 461 18 0 10 4 128 136 -10 6 0 6 1035 1006 9
 5 5 1 483 485 14 4 6 2 1061 1036 14 -2 8 3 751 733 7 2 10 4 180 212 -20 -7 1 6 82 106 -16
 -6 6 1 291 295 4 6 6 2 855 840 26 0 8 3 329 339 4 4 10 4 160 225 -10 -5 1 6 95 117 -9
 -4 6 1 306 323 10 -5 7 2 85 38 -12 2 8 3 250 240 3 -3 11 4 290 303 7 -3 1 6 315 323 3
 -2 6 1 823 805 20 -3 7 2 347 342 15 4 8 3 149 138 5 -1 11 4 156 163 -9 -1 1 6 698 735 10
 0 6 1 625 658 -34 -1 7 2 826 777 8 -5 9 3 359 365 12 1 11 4 88 90 -19 1 1 6 955 950 9

Table 3

2	6	1	1185	1124	12	1	7	2	900	859	29	-3	9	3	505	496	25	3	11	4	129	156	-12	3	1	6	642	648	6
5	1	6	232	224	5	-1	3	7	556	575	8	-4	6	8	334	330	4	2	0	10	390	391	4	1	7	11	314	299	11
-6	2	6	78	75	-14	1	3	7	1682	1615	15	-2	6	8	1055	1049	20	4	0	10	508	502	5	-2	8	11	370	380	4
-4	2	6	171	180	-8	3	3	7	1642	1581	17	0	6	8	1699	1582	43	6	0	10	642	632	6	0	8	11	458	455	11
-2	2	6	997	992	9	5	3	7	925	906	12	2	6	8	1013	992	19	-5	1	10	123	98	-9	-1	9	11	259	259	11
0	2	6	874	879	8	-6	4	7	140	136	-47	4	6	8	709	690	8	-3	1	10	273	275	3	3	9	11	589	641	11
2	2	6	879	880	16	-4	4	7	662	650	6	-5	7	8	376	367	18	-1	1	10	541	540	6	-4	0	12	433	450	4
4	2	6	411	412	4	-2	4	7	764	761	28	-3	7	8	412	424	4	1	1	10	620	590	6	-2	0	12	465	463	5
6	2	6	67	15	-22	0	4	7	635	622	12	-1	7	8	273	270	7	3	1	10	412	406	4	0	0	12	1223	1169	20
-7	3	6	131	115	-10	2	4	7	345	356	4	1	7	8	139	133	-9	-6	2	10	7	19	-7	2	0	12	1275	1257	12
-5	3	6	190	191	4	4	4	7	116	42	-10	3	7	8	138	162	-11	-4	2	10	147	154	-15	4	0	12	542	548	6
-3	3	6	224	217	8	-5	5	7	259	256	7	-4	8	8	421	405	5	-2	2	10	358	358	6	-5	1	12	347	348	11
-1	3	6	846	858	36	-3	5	7	566	571	5	-2	8	8	333	327	-18	0	2	10	614	589	14	-3	1	12	395	391	4
1	3	6	1426	1397	28	-1	5	7	732	739	12	0	8	8	7	27	-7	2	2	10	717	716	7	-1	1	12	291	292	6
3	3	6	422	425	11	1	5	7	497	506	9	2	8	8	57	101	-37	4	2	10	274	271	6	1	1	12	171	152	-9
5	3	6	185	184	-17	3	5	7	185	182	-17	-5	9	8	640	609	-40	-5	3	10	185	167	5	3	1	12	156	123	-25
-6	4	6	87	90	-13	5	5	7	145	79	-9	-3	9	8	315	330	4	-3	3	10	94	21	-11	-4	2	12	388	386	4
-4	4	6	320	325	4	-6	6	7	125	124	-10	-1	9	8	182	186	-11	-1	3	10	210	214	5	-2	2	12	516	526	9
-2	4	6	473	490	13	-4	6	7	509	512	7	1	9	8	181	174	-20	1	3	10	525	519	5	0	2	12	211	222	-16
0	4	6	1259	1174	27	-2	6	7	909	907	-52	3	9	8	62	76	-38	3	3	10	584	584	6	2	2	12	75	41	-19
2	4	6	791	771	7	0	6	7	425	423	14	-2	10	8	205	219	9	-6	4	10	140	89	-10	-5	3	12	378	379	5
4	4	6	269	273	-15	2	6	7	156	96	-37	0	10	8	8	133	-7	-4	4	10	72	24	-17	-3	3	12	561	580	5
6	4	6	26	99	-26	4	6	7	176	163	5	2	10	8	8	30	-8	-2	4	10	368	382	4	-1	3	12	207	191	-18
-5	5	6	118	106	-9	-5	7	7	244	233	5	-1	11	8	166	180	-18	0	4	10	708	689	7	1	3	12	386	378	4
-3	5	6	291	284	3	-3	7	7	517	530	5	-2	12	8	617	632	12	2	4	10	479	482	5	3	3	12	215	218	6
-1	5	6	627	625	17	-1	7	7	634	647	15	0	12	8	782	773	-46	4	4	10	369	369	16	-4	4	12	493	499	12
1	5	6	815	790	17	1	7	7	443	442	15	2	12	8	601	640	6	-5	5	10	112	79	-12	-2	4	12	332	346	4
3	5	6	550	554	5	3	7	7	172	165	-29	-6	0	9	318	320	4	-3	5	10	223	234	4	0	4	12	252	253	4
5	5	6	177	193	5	-4	8	7	457	460	17	-4	0	9	73	94	-13	-1	5	10	467	465	11	2	4	12	136	120	-11
-6	6	6	865	828	25	-2	8	7	573	562	14	-2	0	9	354	360	7	1	5	10	525	514	5	-3	5	12	320	340	4
-4	6	6	1383	1359	-85	0	8	7	485	471	5	0	0	9	199	203	9	3	5	10	369	353	4	-1	5	12	253	257	4
-2	6	6	1510	1459	14	2	8	7	239	251	8	2	0	9	209	225	4	-6	6	10	766	735	31	1	5	12	56	134	-36
0	6	6	380	380	11	4	8	7	38	19	-37	4	0	9	311	312	15	-4	6	10	917	899	12	-4	6	12	248	255	10
2	6	6	472	472	4	-5	9	7	638	613	24	-5	1	9	336	337	12	-2	6	10	807	818	22	-2	6	12	484	499	9
4	6	6	973	940	9	-3	9	7	244	226	11	-3	1	9	254	253	7	0	6	10	692	655	6	0	6	12	934	908	9
6	6	6	769	761	7	-1	9	7	334	340	4	-1	1	9	286	293	7	2	6	10	464	467	9	2	6	12	968	972	14
-5	7	6	100	49	-11	1	9	7	931	938	37	1	1	9	488	469	22	-3	7	10	168	158	5	-3	7	12	270	281	5
-3	7	6	205	202	3	3	9	7	1043	1022	29	3	1	9	510	502	5	-1	7	10	351	355	6	-1	7	12	205	187	-32
-1	7	6	480	481	4	5	9	7	625	628	16	5	1	9	345	347	8	1	7	10	418	410	4	1	7	12	74	79	-24

Table 3

1 7 6 624 622 6 -4 10 7 236 245 9 -6 2 9 312 317 8 3 7 10 300 291 4 -2 8 12 234 233 5
 3 7 6 424 422 5 -2 10 7 471 462 5 -4 2 9 298 289 3 -4 8 10 136 21 -11 0 8 12 162 154 7
 5 7 6 108 140 -15 0 10 7 347 349 -21 -2 2 9 75 78 -13 -2 8 10 239 239 4 -4 0 13 99 98 -14
 -4 8 6 193 171 -14 2 10 7 8 56 -8 0 2 9 371 362 8 0 8 10 465 456 5 -2 0 13 371 380 6
 -2 8 6 322 316 4 -3 11 7 280 293 5 2 2 9 550 550 7 2 8 10 340 333 6 0 0 13 130 167 -11
 0 8 6 724 695 19 -1 11 7 356 358 9 4 2 9 430 424 8 -3 9 10 140 65 -11 2 0 13 195 209 6
 2 8 6 501 505 5 1 11 7 189 229 -23 -5 3 9 927 908 8 -1 9 10 214 200 -14 -5 1 13 241 238 4
 4 8 6 149 179 -10 -2 12 7 636 617 11 -3 3 9 1541 1561 14 1 9 10 403 397 5 -3 1 13 204 181 8
 -5 9 6 25 83 -24 -8 0 8 588 564 7 -1 3 9 1468 1471 39 -6 0 11 139 73 -10 -1 1 13 123 142 -11
 -3 9 6 7 72 -6 -6 0 8 228 220 6 1 3 9 1142 1100 20 -4 0 11 173 166 7 1 1 13 228 230 10
 -1 9 6 521 528 7 -4 0 8 464 455 4 3 3 9 672 665 6 -2 0 11 498 515 5 -4 2 13 214 209 -16
 1 9 6 827 846 27 -2 0 8 1591 1600 29 5 3 9 273 270 4 0 0 11 475 456 5 -2 2 13 141 119 -39
 3 9 6 330 332 4 0 0 8 1716 1707 16 -6 4 9 308 303 4 2 0 11 152 191 -9 0 2 13 173 162 7
 -4 10 6 82 99 -18 2 0 8 1475 1470 30 -4 4 9 108 90 -9 4 0 11 251 261 5 2 2 13 143 142 -20
 -2 10 6 392 406 8 4 0 8 829 819 8 -2 4 9 177 177 5 -5 1 11 250 251 4 -3 3 13 856 887 10
 0 10 6 482 477 7 -7 1 8 270 247 -15 0 4 9 156 150 7 -3 1 11 476 495 5 -1 3 13 1274 1243 54
 2 10 6 446 450 4 -5 1 8 543 526 5 2 4 9 443 434 4 -1 1 11 561 555 8 1 3 13 800 798 13
 -3 11 6 174 150 -11 -3 1 8 634 649 6 4 4 9 502 496 16 1 1 11 401 398 4 -4 4 13 256 249 8
 -1 11 6 313 323 10 -1 1 8 452 468 4 -5 5 9 270 269 9 3 1 11 126 179 -12 -2 4 13 142 111 -10
 1 11 6 391 411 10 1 1 8 271 267 3 -3 5 9 183 183 4 -6 2 11 57 77 -33 0 4 13 124 17 -11
 -4 12 6 811 810 38 3 1 8 279 280 5 -1 5 9 206 200 4 -4 2 11 368 372 4 2 4 13 235 254 7
 -2 12 6 646 630 6 5 1 8 323 315 4 1 5 9 366 366 7 -2 2 11 702 728 11 -3 5 13 120 140 -13
 0 12 6 232 269 -22 -6 2 8 476 468 7 3 5 9 412 412 19 0 2 11 485 479 8 -1 5 13 64 101 -29
 -6 0 7 7 81 -6 -4 2 8 613 610 6 -4 6 9 192 180 9 2 2 11 386 388 5 1 5 13 188 175 6
 -4 0 7 376 370 5 -2 2 8 359 363 6 -2 6 9 108 57 -11 4 2 11 8 106 -8 -2 6 13 272 265 4
 -2 0 7 1344 1385 12 0 2 8 339 333 3 0 6 9 7 27 -6 -7 3 11 600 594 6 0 6 13 212 225 5
 0 0 7 624 633 6 2 2 8 36 22 -36 2 6 9 184 177 -17 -5 3 11 681 673 8 -1 9 13 848 864 8
 2 0 7 430 443 4 4 2 8 273 296 6 4 6 9 390 393 12 -3 3 11 635 647 6 -4 0 14 911 943 19
 4 0 7 6 49 -6 -5 3 8 866 826 8 -5 7 9 244 250 -16 -1 3 11 378 386 4 -2 0 14 783 788 9
 6 0 7 122 89 -12 -3 3 8 415 420 5 -3 7 9 145 162 -9 1 3 11 479 471 5 0 0 14 235 239 5
 -7 1 7 88 71 -15 -1 3 8 415 436 8 -1 7 9 197 191 -12 3 3 11 885 907 10 -3 1 14 84 115 -19
 -5 1 7 315 318 3 1 3 8 360 362 4 1 7 9 322 326 4 5 3 11 871 863 8 -1 1 14 310 303 4
 -3 1 7 718 717 6 3 3 8 7 34 -6 3 7 9 375 378 8 -4 4 11 354 354 4 1 1 14 429 428 5
 -1 1 7 897 940 8 5 3 8 218 200 5 -4 8 9 83 92 -18 -2 4 11 473 485 5 -2 2 14 8 55 -7
 1 1 7 665 659 6 -6 4 8 374 360 11 -2 8 9 128 112 -11 0 4 11 645 636 6 0 2 14 385 389 4
 3 1 7 254 254 3 -4 4 8 613 603 6 0 8 9 118 130 -12 2 4 11 234 240 5 -3 3 14 224 224 -25
 5 1 7 117 123 -11 -2 4 8 523 530 8 2 8 9 342 338 12 -5 5 11 208 199 -18 -1 3 14 228 204 10
 -6 2 7 289 276 3 0 4 8 6 29 -6 -5 9 9 614 620 28 -3 5 11 399 407 4 1 3 14 394 381 11
 -4 2 7 516 500 8 2 4 8 234 230 6 -3 9 9 1014 1010 46 -1 5 11 451 455 15 -2 4 14 171 191 -30

Table 3

-2 2 7 1057 1071 22 4 4 8 255 255 4 -1 9 9 949 928 12 1 5 11 331 321 4 0 4 14 247 249 5
0 2 7 866 838 8 -5 5 8 456 460 4 1 9 9 709 700 18 3 5 11 97 139 -17 -1 5 14 252 260 5
2 2 7 129 135 -7 -3 5 8 564 553 -30 -2 10 9 39 56 -38 -4 6 11 203 192 5 -4 6 14 797 844 10
4 2 7 129 161 -8 -1 5 8 370 383 8 0 10 9 123 115 -13 -2 6 11 317 313 9 -2 0 15 384 378 5
6 2 7 8 87 -7 1 5 8 224 210 -13 -6 0 10 1002 972 9 0 6 11 601 583 16 -1 1 15 428 431 11
-7 3 7 917 884 8 3 5 8 231 239 4 -4 0 10 971 960 15 2 6 11 126 103 -11 0 0 16 612 613 16
-5 3 7 917 897 39 5 5 8 296 283 15 -2 0 10 1094 1086 21 -3 7 11 365 373 4 2 0 16 589 579 6
-3 3 7 374 365 -20 -6 6 8 248 254 11 0 0 10 1033 1013 12 -1 7 11 402 418 4

Table 3 c. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #1 at 39.4 kbar

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 h k l 10Fo 10Fc 10s
2 0 0 2599 2393 17 -6 2 1 380 373 15 0 10 1 301 313 -43 -3 7 2 343 367 10 0 6 3 211 290 -67
4 0 0 907 868 16 -4 2 1 286 195 -22 2 10 1 437 458 21 -1 7 2 730 784 23 2 6 3 331 368 20
6 0 0 582 525 21 -2 2 1 1038 933 33 4 10 1 442 459 22 1 7 2 898 897 28 4 6 3 162 251 -14
1 1 0 204 202 4 0 2 1 639 775 15 -3 11 1 154 94 -30 3 7 2 675 598 -62 -5 7 3 357 380 21
3 1 0 562 563 9 2 2 1 1005 961 6 -1 11 1 215 186 -32 -6 8 2 184 80-183 -3 7 3 704 727 24
5 1 0 677 657 15 4 2 1 977 919 14 1 11 1 352 358 -41 -4 8 2 269 315 -32 -1 7 3 854 878 12
7 1 0 510 462 18 6 2 1 299 331 -99 3 11 1 465 437 15 -2 8 2 461 505 19 1 7 3 577 584 20
0 2 0 131 141 5 -7 3 1 488 429 -85 -2 12 1 260 223 -46 0 8 2 602 639 13 3 7 3 272 230 -64
2 2 0 1057 937 13 -5 3 1 1343 1277 23 0 12 1 164 148 -13 2 8 2 680 693 -71 5 7 3 195 129 -31
4 2 0 615 621 11 -3 3 1 2698 2592 9 2 12 1 376 415 23 4 8 2 267 232 15 -4 8 3 466 479 -53
6 2 0 493 477 14 -1 3 1 2323 2449 35 -1 13 1 221 154 -31 -5 9 2 220 230 -19 -2 8 3 766 763 13
1 3 0 788 777 6 1 3 1 1016 1048 21 1 13 1 182 290 -26 -3 9 2 245 238 -40 0 8 3 445 430 14
3 3 0 581 529 10 3 3 1 992 980 13 -4 0 2 2143 1974 19 -1 9 2 617 633 27 2 8 3 246 362 -42
5 3 0 682 626 19 5 3 1 913 857 9 -2 0 2 1015 1039 12 1 9 2 409 416 22 4 8 3 207 141 -15
7 3 0 389 290 -38 7 3 1 597 603 23 2 0 2 1926 1897 15 3 9 2 214 213 -57 -5 9 3 392 427 -73
0 4 0 949 956 6 -6 4 1 291 269 10 4 0 2 1082 961 17 5 9 2 207 92 -17 -3 9 3 514 528 14
2 4 0 347 338 13 -4 4 1 433 447 8 6 0 2 1164 999 22 -4 10 2 175 172 -24 -1 9 3 859 856 14
4 4 0 624 618 10 -2 4 1 163 187 9 -5 1 2 230 178 13 -2 10 2 371 436 19 1 9 3 867 933 35
6 4 0 499 522 15 0 4 1 1025 1005 33 -3 1 2 490 544 7 0 10 2 631 626 16 3 9 3 969 989 32
1 5 0 252 231 -37 2 4 1 977 952 10 3 1 2 980 934 13 2 10 2 363 420 -70 5 9 3 966 920 37
3 5 0 445 470 10 4 4 1 636 609 15 5 1 2 409 330 19 4 10 2 253 300 -48 -4 10 3 343 389 -65
5 5 0 551 559 10 6 4 1 435 433 -36 7 1 2 271 104 -25 -3 11 2 216 248 -56 -2 10 3 444 459 15
0 6 0 2490 2603 17 -7 5 1 97 273 -28 -6 2 2 224 269 -24 -1 11 2 492 478 15 0 10 3 493 508 14
2 6 0 1899 1950 8 -5 5 1 176 225 -47 -4 2 2 312 298 8 1 11 2 424 544 29 2 10 3 196 156 -29
4 6 0 628 641 9 -3 5 1 150 145 -18 -2 2 2 954 995 15 3 11 2 402 379 18 -3 11 3 395 427 26
6 6 0 364 369 21 -1 5 1 223 345 -30 2 2 2 561 601 13 -2 12 2 324 427-178 -1 11 3 502 491 -41
1 7 0 156 182 9 1 5 1 740 782 42 4 2 2 637 590 31 0 12 2 352 373 16 1 11 3 321 321 -55
3 7 0 355 384 9 3 5 1 907 874 35 6 2 2 115 122 -24 2 12 2 489 549 18 -2 12 3 294 289 -34

Table 3

5	7	0	454	460	15	5	5	1	595	583	10	-7	3	2	298	226	18	-1	13	2	272	332	-25	0	12	3	256	284	16
0	8	0	469	430	15	-6	6	1	169	156	-41	-5	3	2	374	390	21	-6	0	3	233	237	-21	2	12	3	215	82	-63
2	8	0	220	238	7	-4	6	1	360	375	13	-3	3	2	580	543	20	-4	0	3	947	929	16	-6	4	4	531	525	15
4	8	0	486	415	-56	-2	6	1	879	854	13	-1	3	2	1351	1326	9	-7	1	3	218	166	-16	-4	4	4	550	534	19
6	8	0	348	378	15	0	6	1	546	531	12	1	3	2	507	584	8	-5	1	3	544	519	28	-5	5	4	686	633	27
1	9	0	361	387	15	2	6	1	940	949	21	3	3	2	286	299	15	-3	1	3	1069	1094	10	-3	5	4	757	745	12
3	9	0	221	245	-34	4	6	1	429	413	9	5	3	2	193	105	-25	5	1	3	194	162	-14	-6	6	4	421	374	17
5	9	0	378	408	18	6	6	1	297	284	-46	7	3	2	241	126	-17	-6	2	3	448	380	-56	-4	6	4	1017	859	14
2	10	0	312	328	10	-5	7	1	177	201	-40	-6	4	2	255	111	-22	-4	2	3	811	785	23	-2	6	4	917	949	12
4	10	0	326	327	18	-3	7	1	186	150	-13	-4	4	2	514	505	15	4	2	3	202	232	-22	-5	7	4	501	532	15
1	11	0	175	152	-15	-1	7	1	259	320	-22	-2	4	2	765	780	34	-7	3	3	874	822	17	-3	7	4	680	598	24
3	11	0	243	257	-22	1	7	1	618	637	25	0	4	2	846	926	9	-5	3	3	699	652	9	-1	7	4	405	404	12
0	12	0	1357	1277	38	3	7	1	702	746	23	2	4	2	1099	1084	12	-3	3	3	961	953	11	1	7	4	111	190	-46
2	12	0	766	814	21	5	7	1	494	509	11	4	4	2	333	307	9	3	3	3	1698	1625	12	-4	8	4	423	400	21
1	13	0	149	99	-34	-6	8	1	207	211	-26	6	4	2	266	171	-25	5	3	3	1502	1407	15	-2	8	4	474	473	24
-6	0	1	266	255	-21	-4	8	1	238	299	10	-5	5	2	138	165	-21	-6	4	3	255	274	-39	0	8	4	172	150	-19
-4	0	1	887	855	16	-2	8	1	159	181	-29	-3	5	2	479	465	8	-4	4	3	691	648	22	-5	9	4	314	295	-72
-2	0	1	842	757	11	0	8	1	624	574	36	-1	5	2	946	993	31	-2	4	3	1124	1139	10	-3	9	4	188	217	-15
2	0	1	1434	1390	13	2	8	1	627	651	28	1	5	2	1073	1157	32	0	4	3	395	455	12	-1	9	4	212	99	-20
4	0	1	832	782	16	4	8	1	487	475	24	3	5	2	750	747	15	2	4	3	499	533	14	1	9	4	183	227	-39
-7	1	1	345	324	-32	-5	9	1	826	823	27	5	5	2	291	282	13	4	4	3	235	175	-100	-4	10	4	416	448	17
-5	1	1	200	268	-23	-3	9	1	1424	1455	32	-6	6	2	1272	1274	16	-5	5	3	417	427	-32	-2	10	4	130	251	-59
-3	1	1	165	154	7	-1	9	1	1131	1276	-124	-4	6	2	1272	1277	17	-3	5	3	910	864	12	0	10	4	225	209	-33
-1	1	1	413	441	4	1	9	1	698	654	18	-2	6	2	708	874	-127	-1	5	3	1007	1078	10	2	10	4	260	178	-23
1	1	1	1007	1099	5	3	9	1	519	527	-36	0	6	2	938	973	28	1	5	3	681	709	14	-3	11	4	304	381	-42
3	1	1	1200	1121	19	5	9	1	457	546	30	2	6	2	832	857	16	3	5	3	198	273	-14	-1	11	4	256	250	-23
5	1	1	770	705	36	-4	10	1	246	106	-34	4	6	2	1035	953	68	-4	6	3	641	627	20	-2	12	4	580	611	23
7	1	1	228	279	-34	-2	10	1	194	274	-35	6	6	2	694	765	26	-2	6	3	830	787	11	0	12	4	735	761	19

Table 3 d. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #2 at 296°C

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
2	0	0	2187	2210	22	-1	11	1	101	23	-8	4	4	3	112	114	5	-3	1	5	157	157	3	1	9	6	661	645	10
4	0	0	524	501	8	1	11	1	193	202	6	-5	5	3	234	214	4	-1	1	5	233	239	3	0	10	6	265	293	5
6	0	0	177	206	4	-6	0	2	607	716	9	-3	5	3	672	640	10	1	1	5	453	464	6	-6	0	7	57	7	-10
1	1	0	165	177	1	-4	0	2	1457	1348	22	-1	5	3	826	833	12	3	1	5	550	484	8	-4	0	7	340	291	5
3	1	0	419	454	5	-2	0	2	720	822	11	1	5	3	425	449	6	5	1	5	180	237	4	-2	0	7	1084	1072	17
5	1	0	401	381	8	0	0	2	710	788	10	3	5	3	85	77	-7	-6	2	5	88	84	-7	0	0	7	499	541	8
0	2	0	107	93	2	2	0	2	1853	1828	28	5	5	3	6	16	-5	-4	2	5	170	156	4	2	0	7	326	334	5

Table 3

2	2	0	784	821	12	4	0	2	844	785	13	-4	6	3	680	569	10	-2	2	5	310	315	4	4	0	7	6	27	-5
4	2	0	452	435	5	6	0	2	349	477	5	-2	6	3	780	773	11	0	2	5	321	323	5	-5	1	7	151	154	4
6	2	0	149	178	3	-5	1	2	88	34	-6	0	6	3	233	264	4	2	2	5	911	877	13	-3	1	7	526	492	8
1	3	0	644	686	6	-3	1	2	416	433	6	2	6	3	161	205	4	4	2	5	401	400	6	-1	1	7	668	705	10
3	3	0	594	568	7	-1	1	2	1339	1370	20	4	6	3	59	84	-11	-5	3	5	576	562	8	1	1	7	462	442	7
5	3	0	572	502	6	1	1	2	1417	1511	21	-5	7	3	192	181	4	-3	3	5	1435	1277	21	3	1	7	141	115	5
0	4	0	820	840	12	3	1	2	598	636	9	-3	7	3	524	508	8	-1	3	5	2226	2066	32	-4	2	7	315	283	5
2	4	0	263	289	3	5	1	2	88	115	-6	-1	7	3	616	639	9	1	3	5	1379	1316	20	-2	2	7	808	748	12
4	4	0	406	382	4	-6	2	2	17	59	-17	1	7	3	332	336	5	3	3	5	232	212	4	0	2	7	643	630	10
6	4	0	187	218	3	-4	2	2	139	143	3	3	7	3	65	57	-10	5	3	5	109	135	-6	2	2	7	23	38	-22
1	5	0	104	143	-20	-2	2	2	800	831	12	-4	8	3	298	263	5	-4	4	5	41	43	-18	4	2	7	73	56	-9
3	5	0	337	339	5	0	2	2	1521	1540	23	-2	8	3	509	507	8	-2	4	5	77	85	-6	-5	3	7	366	421	6
5	5	0	346	293	6	2	2	2	361	383	5	0	8	3	196	222	5	0	4	5	661	650	9	-3	3	7	207	198	4
0	6	0	2315	2416	15	4	2	2	282	256	4	2	8	3	135	123	5	2	4	5	444	452	6	-1	3	7	397	393	6
2	6	0	1604	1604	17	6	2	2	26	13	-25	4	8	3	6	47	-5	4	4	5	357	387	5	1	3	7	1273	1187	19
4	6	0	375	351	9	-5	3	2	150	152	4	-3	9	3	305	280	5	-5	5	5	104	-5	3	3	7	984	974	15	
1	7	0	4	20	-4	-3	3	2	575	594	8	-1	9	3	635	666	9	-3	5	5	85	83	-7	-4	4	7	330	359	5
3	7	0	212	211	7	-1	3	2	1373	1425	20	1	9	3	747	791	11	-1	5	5	153	135	4	-2	4	7	571	532	9
5	7	0	247	229	5	1	3	2	428	527	6	3	9	3	748	681	11	1	5	5	330	330	5	0	4	7	414	410	6
0	8	0	215	228	5	3	3	2	226	193	4	-2	10	3	234	237	5	3	5	5	397	355	6	2	4	7	199	194	4
2	8	0	120	120	-6	5	3	2	94	53	-6	0	10	3	105	213	-11	-4	6	5	102	68	-7	4	4	7	47	53	-16
4	8	0	223	198	5	-6	4	2	85	12	-6	2	10	3	20	13	-20	-2	6	5	247	240	4	-5	5	7	51	106	-14
1	9	0	192	209	3	-4	4	2	287	283	5	-1	11	3	246	250	5	0	6	5	129	107	-6	-3	5	7	390	358	6
3	9	0	353	318	4	-2	4	2	688	698	10	-6	0	4	166	206	4	2	6	5	379	346	6	-1	5	7	515	508	8
0	10	0	7	11	-6	0	4	2	696	768	10	-4	0	4	678	616	10	4	6	5	497	514	7	1	5	7	307	296	5
2	10	0	148	146	4	2	4	2	819	828	12	-2	0	4	1745	1687	25	-3	7	5	89	51	-7	3	5	7	32	72	-32
1	11	0	6	8	-6	4	4	2	107	102	-5	0	0	4	2196	2185	32	-1	7	5	114	107	-7	-4	6	7	327	346	5
-6	0	1	190	195	4	-5	5	2	77	22	-7	2	0	4	2071	1994	30	1	7	5	270	263	5	-2	6	7	771	705	12
-4	0	1	569	566	8	-3	5	2	327	317	5	4	0	4	1045	926	15	3	7	5	348	308	5	0	6	7	328	340	5
-2	0	1	584	640	8	-1	5	2	879	907	13	-5	1	4	436	386	6	-4	8	5	6	25	-5	2	6	7	53	51	-17
2	0	1	1288	1361	19	1	5	2	959	985	14	-3	1	4	592	591	8	-2	8	5	71	48	-10	-3	7	7	353	311	6
4	0	1	727	673	11	3	5	2	442	473	7	-1	1	4	453	463	6	0	8	5	317	308	5	-1	7	7	423	413	7
6	0	1	78	128	-7	5	5	2	81	86	-8	1	1	4	208	219	3	2	8	5	313	295	5	1	7	7	253	245	5
-5	1	1	114	102	5	-4	6	2	955	809	14	3	1	4	218	216	4	-3	9	5	740	670	10	3	7	7	86	34	-9
-3	1	1	61	58	-6	-2	6	2	564	571	8	5	1	4	225	216	4	-1	9	5	1005	962	14	-2	8	7	360	334	6
-1	1	1	373	403	5	0	6	2	712	784	11	-6	2	4	135	192	5	1	9	5	608	602	9	0	8	7	262	260	5
1	1	1	1018	1097	15	2	6	2	723	721	11	-4	2	4	552	492	8	-2	10	5	49	9	-22	2	8	7	101	103	-9
3	1	1	872	903	13	4	6	2	770	649	11	-2	2	4	134	146	3	0	10	5	30	70	-30	-1	9	7	163	165	6
5	1	1	381	343	6	-5	7	2	6	17	-5	0	2	4	272	265	4	-6	0	6	326	464	5	1	9	7	555	562	9

Table 3

-6 2 1 90 152 -7 -3 7 2 223 213 4 2 2 4 463 484 7 -4 0 6 1425 1216 21 -4 0 8 272 224 5
-4 2 1 53 91 -8 -1 7 2 619 626 9 4 2 4 241 220 4 -2 0 6 1264 1232 18 -2 0 8 1230 1120 19
-2 2 1 774 807 11 1 7 2 659 701 10 -5 3 4 347 316 5 0 0 6 723 712 10 0 0 8 1300 1251 20
0 2 1 723 766 11 3 7 2 286 299 5 -3 3 4 214 211 3 2 0 6 416 412 6 2 0 8 1077 903 17
2 2 1 747 791 11 -4 8 2 134 103 5 -1 3 4 175 184 3 4 0 6 758 578 11 4 0 8 340 365 6
4 2 1 644 594 10 -2 8 2 328 347 5 1 3 4 262 248 4 -5 1 6 85 32 -7 -5 1 8 226 245 4
6 2 1 94 99 -6 0 8 2 376 441 6 3 3 4 126 108 5 -3 1 6 209 215 4 -3 1 8 442 372 7
-5 3 1 769 739 11 2 8 2 405 400 6 5 3 4 284 312 5 -1 1 6 557 604 8 -1 1 8 298 273 5
-3 3 1 2337 2123 35 4 8 2 6 45 -5 -6 4 4 165 211 5 1 1 6 744 759 11 1 1 8 155 144 5
-1 3 1 2319 2229 35 -3 9 2 352 326 6 -4 4 4 309 268 5 3 1 6 441 421 6 3 1 8 183 151 4
1 3 1 793 860 12 -1 9 2 710 721 11 -2 4 4 452 448 6 5 1 6 6 92 -5 -4 2 8 376 327 6
3 3 1 702 714 10 1 9 2 436 483 7 0 4 4 200 210 4 -6 2 6 18 12 -18 -2 2 8 213 193 4
5 3 1 513 515 8 3 9 2 218 189 4 2 4 4 146 150 3 -4 2 6 60 82 -10 0 2 8 210 188 4
-6 4 1 69 102 -9 -2 10 2 279 273 5 4 4 4 349 340 5 -2 2 6 766 743 11 2 2 8 70 29 -10
-4 4 1 221 221 4 0 10 2 372 445 6 -5 5 4 297 304 5 0 2 6 665 717 10 4 2 8 90 111 -7
-2 4 1 3 100 -3 2 10 2 236 214 5 -3 5 4 461 425 7 2 2 6 642 595 9 -5 3 8 337 427 6
0 4 1 802 847 12 -1 11 2 299 309 5 -1 5 4 281 297 4 4 2 6 227 195 4 -3 3 8 320 292 5
2 4 1 809 861 12 1 11 2 325 338 6 1 5 4 152 146 4 -5 3 6 89 88 -6 -1 3 8 310 307 5
4 4 1 356 331 5 -6 0 3 207 212 4 3 5 4 172 160 4 -3 3 6 109 101 5 1 3 8 248 252 5
-5 5 1 70 66 -9 -4 0 3 970 828 14 5 5 4 120 181 -6 -1 3 6 749 743 11 3 3 8 51 55 -15
-3 5 1 4 14 -4 -2 0 3 401 482 6 -4 6 4 658 537 9 1 3 6 1171 1159 17 -4 4 8 278 301 5
-1 5 1 226 234 3 0 0 3 911 1012 9 -2 6 4 928 887 13 3 3 6 329 307 5 -2 4 8 320 308 5
1 5 1 647 677 10 2 0 3 168 190 3 0 6 4 1424 1440 20 5 3 6 82 94 -8 0 4 8 5 75 -5
3 5 1 638 633 9 4 0 3 232 228 4 2 6 4 1590 1484 23 -4 4 6 172 160 4 2 4 8 105 87 -7
5 5 1 269 249 5 6 0 3 6 15 -5 4 6 4 595 523 9 -2 4 6 367 345 6 -3 5 8 291 292 5
-4 6 1 206 199 4 -5 1 3 333 294 5 -5 7 4 226 227 4 0 4 6 918 898 13 -1 5 8 212 202 4
-2 6 1 616 624 9 -3 1 3 887 899 13 -3 7 4 321 289 5 2 4 6 547 541 8 1 5 8 124 93 6
0 6 1 596 667 9 -1 1 3 1303 1341 19 -1 7 4 149 143 5 4 4 6 104 99 -6 3 5 8 43 113 -20
2 6 1 1015 1040 15 1 1 3 739 761 11 1 7 4 98 35 -8 -5 5 6 6 26 -5 -4 6 8 127 143 5
4 6 1 420 390 6 3 1 3 157 165 3 3 7 4 115 103 -7 -3 5 6 162 163 4 -2 6 8 735 653 11
-5 7 1 6 40 -5 5 1 3 69 45 -9 -4 8 4 178 150 4 -1 5 6 476 454 7 0 6 8 1133 1057 18
-3 7 1 5 13 -4 -6 2 3 115 149 5 -2 8 4 188 174 4 1 5 6 570 578 8 2 6 8 500 569 8
-1 7 1 193 189 4 -4 2 3 586 551 9 0 8 4 90 42 -10 3 5 6 323 323 5 -3 7 8 199 202 4
1 7 1 503 539 7 -2 2 3 549 591 8 2 8 4 84 40 -10 -4 6 6 927 781 14 -1 7 8 124 104 -7
3 7 1 500 517 7 0 2 3 1050 1077 15 -3 9 4 216 198 4 -2 6 6 1086 994 16 1 7 8 66 35 -12
5 7 1 224 216 4 2 2 3 168 172 3 -1 9 4 116 91 -7 0 6 6 220 230 4 -2 8 8 135 150 -6
-4 8 1 126 109 5 4 2 3 95 77 -6 1 9 4 151 102 6 2 6 6 296 255 5 0 8 8 97 64 -9
-2 8 1 89 61 -7 -5 3 3 298 305 5 3 9 4 6 17 -6 4 6 6 368 479 6 -1 9 8 116 98 -8
0 8 1 374 404 6 -3 3 3 724 722 11 -2 10 4 55 73 -18 -3 7 6 93 90 -8 -4 0 9 5 52 -5

Table 3

2 8 1 466 480 7 -1 3 3 1978 1880 29 0 10 4 77 21 -14 -1 7 6 329 338 5 -2 0 9 250 237 5
 4 8 1 246 225 4 1 3 3 1781 1800 26 2 10 4 113 91 -9 1 7 6 432 423 7 0 0 9 160 161 4
 -3 9 1 1086 1016 16 3 3 3 1342 1306 20 -6 0 5 93 126 -7 3 7 6 238 231 5 2 0 9 219 199 4
 -1 9 1 989 987 15 5 3 3 705 719 10 -4 0 5 204 164 4 -4 8 6 97 60 -7 -5 1 9 58 118 -11
 1 9 1 371 405 6 -6 4 3 44 97 -16 -2 0 5 231 238 3 -2 8 6 186 176 5 -3 1 9 102 94 -6
 3 9 1 315 284 5 -4 4 3 417 399 6 0 0 5 893 885 13 0 8 6 448 455 7 -1 1 9 175 154 4
 -2 10 1 80 64 -9 -2 4 3 904 916 13 2 0 5 695 707 10 2 8 6 325 291 6 1 1 9 321 275 5
 0 10 1 85 164 -12 0 4 3 234 253 4 4 0 5 762 607 11 -3 9 6 33 13 -32 3 1 9 234 235 5
 2 10 1 256 271 5 2 4 3 233 249 4 -5 1 5 191 163 4 -1 9 6 441 448 7 -4 2 9 98 111 -6
 -2 2 9 95 72 -6 -2 6 9 67 37 -11 -2 2 10 217 206 5 -4 0 11 73 117 -9 -1 5 11 168 210 5
 0 2 9 227 210 4 0 6 9 52 73 -15 0 2 10 374 315 6 -2 0 11 360 325 6 1 5 11 89 131 -8
 2 2 9 338 328 6 2 6 9 127 142 6 2 2 10 347 356 6 0 0 11 333 274 6 -2 0 12 191 201 5
 5 3 9 278 390 5 -3 7 9 54 38 -14 -3 3 10 55 49 -12 2 0 11 71 90 -10 0 0 12 555 541 9
 -3 3 9 978 905 16 -1 7 9 58 59 -14 -1 3 10 199 191 5 -3 1 11 216 232 5 -3 1 12 47 162 -18
 -1 3 9 1001 917 16 1 7 9 97 157 -8 1 3 10 347 333 6 -1 1 11 332 285 6 -1 1 12 120 114 -6
 1 3 9 695 612 11 0 8 9 49 53 -20 -4 4 10 41 8 -18 1 1 11 179 175 4 1 1 12 61 37 -10
 3 3 9 211 291 5 -4 0 10 510 466 8 -2 4 10 155 188 5 -4 2 11 87 142 -7 -2 2 12 142 206 6
 -4 4 9 58 9 -11 -2 0 10 690 562 11 0 4 10 366 388 6 -2 2 11 359 357 6 0 2 12 6 72 -6
 -2 4 9 48 67 -16 0 0 10 705 560 11 2 4 10 161 220 5 0 2 11 249 235 5 -1 3 12 64 91 -11
 0 4 9 117 92 -6 2 0 10 213 177 5 -3 5 10 79 91 -9 2 2 11 88 149 -8 -2 4 12 35 129 -34
 2 4 9 186 230 4 -3 1 10 154 123 4 -1 5 10 208 241 5 -3 3 11 194 258 4 0 4 12 27 62 -27
 -3 5 9 63 47 -10 -1 1 10 344 313 6 1 5 10 198 266 5 -1 3 11 169 177 5 -1 1 13 6 22 -6
 -1 5 9 64 88 -12 1 1 10 380 330 6 -2 6 10 306 396 6 1 3 11 156 214 5
 1 5 9 154 188 5 3 1 10 65 175 -12 0 6 10 280 295 5 -2 4 11 175 223 5
 3 5 9 130 170 6 -4 2 10 66 53 -10 -1 7 10 122 176 -6 0 4 11 236 301 5

Table 3 e. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #2 at 435°C

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
 2 0 0 2180 2252 16 2 8 1 472 475 7 3 3 3 1461 1411 21 -5 1 5 166 170 5 1 1 7 488 486 7
 4 0 0 531 524 8 -1 9 1 987 959 15 -4 4 3 435 426 6 -3 1 5 149 147 3 3 1 7 123 96 -7
 1 1 0 180 183 2 1 9 1 378 376 6 -2 4 3 1002 952 14 -1 1 5 224 241 4 -4 2 7 332 330 5
 3 1 0 444 461 4 -4 0 2 1591 1494 24 0 4 3 265 250 4 1 1 5 487 494 7 -2 2 7 841 835 12
 5 1 0 416 420 4 -2 0 2 775 824 11 2 4 3 240 261 4 3 1 5 577 547 8 0 2 7 674 661 10
 0 2 0 86 92 3 0 0 2 815 807 12 4 4 3 100 87 -7 -4 2 5 161 160 5 2 2 7 76 34 -11
 2 2 0 840 810 21 2 0 2 1875 1894 28 -3 5 3 708 656 10 -2 2 5 339 321 5 -3 3 7 211 199 5
 4 2 0 470 459 20 4 0 2 939 880 14 -1 5 3 863 847 12 0 2 5 325 332 5 -1 3 7 445 446 7
 1 3 0 701 699 7 -5 1 2 5 21 -5 1 5 3 437 453 7 2 2 5 934 891 13 1 3 7 1342 1310 20
 3 3 0 668 645 17 -3 1 2 444 454 7 3 5 3 24 62 -24 4 2 5 400 427 6 3 3 7 1002 1100 15

Table 3

5 3 0 674 666 7 -1 1 2 1390 1399 20 -4 6 3 761 692 11 -3 3 5 1467 1389 21 -4 4 7 361 423 6
 0 4 0 872 841 13 1 1 2 1534 1533 23 -2 6 3 866 825 13 -1 3 5 2160 2169 31 -2 4 7 598 576 9
 2 4 0 262 263 3 3 1 2 650 623 10 0 6 3 255 271 5 1 3 5 1401 1367 20 0 4 7 430 440 7
 4 4 0 424 399 13 5 1 2 80 82 -9 2 6 3 216 220 4 3 3 5 221 216 4 2 4 7 196 196 5
 1 5 0 64 102 -5 -4 2 2 156 144 4 -3 7 3 519 515 8 -4 4 5 5 32 -5 -3 5 7 429 417 7
 3 5 0 327 326 8 -2 2 2 874 851 13 -1 7 3 606 617 9 -2 4 5 75 97 -8 -1 5 7 590 559 9
 0 6 0 2290 2378 16 0 2 2 1569 1555 23 1 7 3 307 303 5 0 4 5 696 684 10 1 5 7 346 318 6
 2 6 0 1631 1621 17 2 2 2 379 418 6 3 7 3 6 36 -6 2 4 5 458 451 7 -2 6 7 835 800 12
 4 6 0 368 354 4 4 2 2 275 276 5 -2 8 3 506 501 8 -3 5 5 5 62 -5 0 6 7 360 368 6
 1 7 0 22 25 -22 -5 3 2 172 180 5 0 8 3 207 197 6 -1 5 5 122 109 -6 -1 7 7 425 427 7
 3 7 0 208 208 5 -3 3 2 699 677 10 2 8 3 111 105 -8 1 5 5 342 338 5 -4 0 8 265 259 5
 0 8 0 148 205 -8 -1 3 2 1431 1458 21 -1 9 3 618 644 9 3 5 5 426 406 6 -2 0 8 1328 1314 19
 2 8 0 77 83 -9 1 3 2 484 547 7 -4 0 4 707 729 10 -2 6 5 266 249 5 0 0 8 1408 1386 21
 1 9 0 184 191 5 3 3 2 245 265 4 -2 0 4 1778 1792 26 0 6 5 112 93 -9 2 0 8 1118 1041 16
 -4 0 1 588 602 9 -4 4 2 269 276 5 0 0 4 2100 2276 30 2 6 5 424 415 6 -3 1 8 469 431 7
 -2 0 1 674 664 10 -2 4 2 723 695 11 2 0 4 2158 2135 31 -3 7 5 6 29 -5 -1 1 8 305 306 5
 2 0 1 1436 1434 21 0 4 2 744 748 11 4 0 4 1098 1010 16 -1 7 5 33 94 -33 1 1 8 143 136 7
 4 0 1 815 769 12 2 4 2 868 844 13 -5 1 4 435 439 6 1 7 5 233 256 5 -4 2 8 384 383 6
 -5 1 1 104 93 -6 4 4 2 78 99 -9 -3 1 4 626 631 9 0 8 5 285 291 6 -2 2 8 199 195 4
 -3 1 1 78 60 -5 -3 5 2 319 325 5 -1 1 4 468 477 7 -4 0 6 1541 1460 22 0 2 8 208 211 5
 -1 1 1 420 425 6 -1 5 2 918 909 14 1 1 4 217 225 4 -2 0 6 1367 1335 20 2 2 8 6 27 -6
 1 1 1 1125 1113 16 1 5 2 1006 979 15 3 1 4 228 226 4 0 0 6 712 740 10 -3 3 8 347 340 6
 3 1 1 935 946 14 3 5 2 436 446 7 -4 2 4 551 563 8 2 0 6 435 440 6 -1 3 8 338 354 6
 5 1 1 359 371 6 -4 6 2 956 884 14 -2 2 4 150 160 3 4 0 6 699 709 10 1 3 8 248 244 5
 -4 2 1 5 33 -4 -2 6 2 574 553 8 0 2 4 298 299 4 -3 1 6 235 229 4 -2 4 8 318 335 5
 -2 2 1 851 814 12 0 6 2 735 762 11 2 2 4 499 488 7 -1 1 6 626 650 9 0 4 8 114 97 -8
 0 2 1 791 767 12 2 6 2 728 719 11 4 2 4 211 218 4 1 1 6 806 818 12 2 4 8 62 101 -17
 2 2 1 803 826 12 -3 7 2 209 212 5 -5 3 4 378 421 6 3 1 6 455 456 7 -3 5 8 298 317 5
 4 2 1 712 652 11 -1 7 2 639 616 9 -3 3 4 256 250 4 -4 2 6 5 57 -5 -1 5 8 209 208 5
 -5 3 1 860 884 13 1 7 2 662 691 10 -1 3 4 186 192 3 -2 2 6 838 825 12 1 5 8 88 78 -11
 -3 3 1 2374 2293 35 3 7 2 273 292 5 1 3 4 261 261 4 0 2 6 772 760 11 -2 6 8 762 742 11
 -1 3 1 2273 2244 34 -2 8 2 354 348 6 3 3 4 62 105 -13 2 2 6 698 660 10 0 6 8 1174 1154 17
 1 3 1 842 874 12 0 8 2 397 425 6 -4 4 4 289 282 5 -3 3 6 88 105 -8 -2 0 9 261 254 5
 3 3 1 757 732 11 2 8 2 382 404 6 -2 4 4 457 459 7 -1 3 6 822 826 12 0 0 9 194 197 5
 5 3 1 505 578 8 -1 9 2 749 730 11 0 4 4 196 213 4 1 3 6 1266 1232 18 2 0 9 250 234 5
 -4 4 1 211 207 4 1 9 2 498 503 8 2 4 4 164 152 4 3 3 6 346 363 5 -3 1 9 107 101 -7
 -2 4 1 4 95 -3 -4 0 3 1063 1018 15 4 4 4 310 345 5 -4 4 6 167 170 5 -1 1 9 177 173 6
 0 4 1 858 852 13 -2 0 3 462 498 7 -3 5 4 459 451 7 -2 4 6 367 349 6 1 1 9 324 316 5
 2 4 1 895 865 13 0 0 3 1008 1032 10 -1 5 4 266 284 4 0 4 6 949 936 14 -2 2 9 128 100 -7

Table 3

4 4 1 365 365 6 2 0 3 190 188 3 1 5 4 130 123 6 2 4 6 569 564 8 0 2 9 245 247 5
 -3 5 1 45 24 -15 4 0 3 229 228 4 3 5 4 172 146 5 -3 5 6 151 156 5 2 2 9 331 366 6
 -1 5 1 235 245 4 -5 1 3 325 328 5 -4 6 4 656 619 9 -1 5 6 464 489 7 -3 3 9 964 1101 14
 1 5 1 698 681 10 -3 1 3 940 939 14 -2 6 4 941 912 13 1 5 6 599 612 9 -1 3 9 1020 1033 15
 3 5 1 672 673 10 -1 1 3 1352 1371 19 0 6 4 1444 1475 21 3 5 6 340 346 6 1 3 9 664 699 10
 -4 6 1 195 197 5 1 1 3 746 763 11 2 6 4 1571 1541 23 -2 6 6 1098 1069 16 -2 4 9 6 78 -6
 -2 6 1 644 630 9 3 1 3 152 154 4 -3 7 4 302 293 5 0 6 6 198 213 5 0 4 9 116 106 -8
 0 6 1 670 674 10 -4 2 3 601 596 9 -1 7 4 163 149 6 2 6 6 281 270 5 -1 5 9 122 94 -8
 2 6 1 1114 1083 16 -2 2 3 563 593 8 1 7 4 20 30 -19 -1 7 6 337 340 6 -2 0 10 744 691 11
 4 6 1 477 465 7 0 2 3 1103 1101 16 -2 8 4 190 183 5 1 7 6 428 445 7 0 0 10 722 671 11
 -3 7 1 5 19 -5 2 2 3 171 161 4 0 8 4 96 28 -12 -4 0 7 398 395 6 -1 1 10 372 368 6
 -1 7 1 168 156 4 4 2 3 110 55 -7 -4 0 5 225 241 4 -2 0 7 1271 1238 18 1 1 10 398 383 6
 1 7 1 512 513 8 -5 3 3 288 313 5 -2 0 5 245 256 4 0 0 7 544 563 8 -2 2 10 217 247 5
 3 7 1 489 507 7 -3 3 3 756 758 11 0 0 5 956 922 14 2 0 7 355 356 6 0 2 10 388 383 6
 -2 8 1 72 28 -11 -1 3 3 1983 1925 29 2 0 5 790 823 11 -3 1 7 565 559 8 -1 3 10 224 228 5
 0 8 1 365 384 6 1 3 3 1823 1812 26 4 0 5 833 775 12 -1 1 7 771 781 11

Table 3 f. Observed and calculated structure factors for "Cs-tetra-ferri-annite" crystal #2 at room T after heating

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
 2 0 0 2379 2341 10 6 6 1 234 239 5 -2 8 2 665 646 24 -4 10 3 359 362 17 2 0 5 811 819 9
 4 0 0 726 720 8 -5 7 1 79 90 -17 0 8 2 725 734 25 -2 10 3 469 460 19 4 0 5 814 809 14
 6 0 0 449 466 5 -3 7 1 58 75 -17 2 8 2 707 687 7 0 10 3 438 452 13 6 0 5 243 260 6
 1 1 0 239 244 2 -1 7 1 209 201 3 4 8 2 237 234 10 2 10 3 144 147 -11 -7 1 5 315 332 12
 3 1 0 580 580 4 1 7 1 471 469 6 -5 9 2 192 201 5 4 10 3 89 137 -20 -5 1 5 346 334 14
 5 1 0 640 643 6 3 7 1 605 606 6 -3 9 2 243 237 4 -3 11 3 482 495 12 -3 1 5 238 248 -13
 7 1 0 383 394 5 5 7 1 354 343 4 -1 9 2 618 607 10 -1 11 3 512 506 8 -1 1 5 265 299 3
 0 2 0 158 133 2 -6 8 1 139 119 -11 1 9 2 367 346 7 1 11 3 338 341 7 1 1 5 467 491 5
 2 2 0 1031 973 8 -4 8 1 145 100 -8 3 9 2 126 137 -10 3 11 3 143 161 -11 3 1 5 634 625 7
 4 2 0 699 682 5 -2 8 1 137 26 -7 5 9 2 57 34 -41 -2 12 3 269 247 -28 5 1 5 453 447 6
 6 2 0 417 432 4 0 8 1 366 398 9 -4 10 2 86 69 -17 0 12 3 152 193 -13 -6 2 5 204 207 6
 1 3 0 800 734 9 2 8 1 547 535 9 -2 10 2 284 261 -16 2 12 3 9 16 -8 -4 2 5 303 296 4
 3 3 0 628 611 5 4 8 1 305 294 4 0 10 2 434 465 8 -6 0 4 424 441 5 -2 2 5 349 349 6
 5 3 0 671 672 7 -5 9 1 677 662 27 2 10 2 279 260 13 -4 0 4 863 860 9 0 2 5 308 334 4
 7 3 0 302 302 8 -3 9 1 1304 1281 59 4 10 2 107 101 -14 -2 0 4 1841 1909 19 2 2 5 987 1005 16
 0 4 0 929 881 17 -1 9 1 1100 1101 -65 -3 11 2 153 106 -9 0 0 4 2190 2302 23 4 2 5 595 594 9
 2 4 0 275 278 7 1 9 1 514 510 5 -1 11 2 335 336 14 2 0 4 2409 2433 25 6 2 5 286 294 7
 4 4 0 495 486 9 3 9 1 422 419 7 1 11 2 337 339 4 4 0 4 1352 1339 14 -7 3 5 480 481 18
 6 4 0 427 425 10 5 9 1 453 453 14 3 11 2 190 163 5 6 0 4 224 193 10 -5 3 5 951 938 11
 1 5 0 90 36 -30 -4 10 1 158 163 -28 -4 12 2 583 570 -38 -7 1 4 359 363 5 -3 3 5 1706 1656 18

Table 3

3 5 0 378 367 5 -2 10 1 337 331 -23 -2 12 2 298 287 10 -5 1 4 680 703 7 -1 3 5 2376 2418 49
 5 5 0 476 472 5 0 10 1 314 334 11 0 12 2 169 246 -12 -3 1 4 834 817 17 1 3 5 1575 1583 24
 7 5 0 288 283 3 2 10 1 452 448 5 2 12 2 422 428 5 -1 1 4 578 589 6 3 3 5 329 335 11
 0 6 0 2562 2485 11 4 10 1 447 440 7 -1 13 2 292 303 12 1 1 4 317 342 7 5 3 5 294 292 4
 2 6 0 1883 1785 27 -3 11 1 118 112 -12 1 13 2 365 379 13 3 1 4 351 354 6 -6 4 5 367 371 -21
 4 6 0 539 524 10 -1 11 1 248 257 -26 -6 0 3 306 303 4 5 1 4 412 405 6 -4 4 5 180 181 -9
 6 6 0 275 277 7 1 11 1 469 471 5 -4 0 3 1038 1027 11 -6 2 4 446 449 21 -2 4 5 339 321 13
 1 7 0 320 293 8 3 11 1 485 491 7 -2 0 3 492 524 5 -4 2 4 790 798 17 0 4 5 888 875 31
 3 7 0 416 413 8 -2 12 1 212 218 -22 0 0 3 1153 1153 4 -2 2 4 244 254 6 2 4 5 600 605 6
 5 7 0 454 455 6 0 12 1 149 148 -12 2 0 3 206 188 3 0 2 4 507 482 8 4 4 5 656 663 7
 0 8 0 440 451 20 2 12 1 388 370 7 4 0 3 364 376 4 2 2 4 586 596 6 6 4 5 331 328 6
 2 8 0 367 341 9 -1 13 1 87 54 -21 6 0 3 79 88 -18 4 2 4 354 352 4 -5 5 5 324 339 4
 4 8 0 493 486 10 1 13 1 137 149 -15 -7 1 3 97 100 -15 6 2 4 439 435 5 -3 5 5 269 282 9
 6 8 0 384 389 5 -8 0 2 603 604 7 -5 1 3 470 480 5 -7 3 4 461 455 5 -1 5 5 313 310 8
 1 9 0 369 359 9 -6 0 2 1364 1348 14 -3 1 3 1098 1109 11 -5 3 4 429 429 5 1 5 5 481 487 12
 3 9 0 288 270 4 -4 0 2 1919 1880 20 -1 1 3 1399 1426 14 -3 3 4 206 222 3 3 5 5 634 621 7
 5 9 0 423 400 6 -2 0 2 905 952 9 1 1 3 761 790 8 -1 3 4 202 201 6 5 5 5 445 447 5
 0 10 0 105 84 -13 0 0 2 876 928 9 3 1 3 236 243 6 1 3 4 413 401 18 -6 6 5 245 253 11
 2 10 0 193 201 4 2 0 2 2033 1993 21 5 1 3 143 132 5 3 3 4 233 240 3 -4 6 5 7 22 -6
 4 10 0 210 195 4 4 0 2 1041 1027 11 7 1 3 141 148 -12 5 3 4 449 447 8 -2 6 5 402 383 13
 1 11 0 132 67 -34 6 0 2 936 949 10 -6 2 3 322 305 8 -6 4 4 435 420 5 0 6 5 297 279 -18
 3 11 0 140 115 7 8 0 2 655 668 8 -4 2 3 741 742 10 -4 4 4 400 391 4 2 6 5 299 304 4
 0 12 0 986 1058 42 -7 1 2 53 80 -38 -2 2 3 617 642 6 -2 4 4 525 523 6 4 6 5 690 690 15
 2 12 0 669 644 16 -5 1 2 157 147 4 0 2 3 1055 1090 11 0 4 4 177 167 3 -5 7 5 184 172 7
 1 13 0 173 144 -15 -3 1 2 601 584 6 2 2 3 148 159 7 2 4 4 194 212 8 -3 7 5 124 92 -8
 -6 0 1 324 319 4 -1 1 2 1457 1496 15 4 2 3 156 142 -22 4 4 4 477 468 5 -1 7 5 133 151 -9
 -4 0 1 805 770 21 1 1 2 1658 1661 17 6 2 3 204 238 -21 6 4 4 256 257 5 1 7 5 286 295 4
 -2 0 1 788 743 8 3 1 2 822 809 12 -7 3 3 719 735 22 -7 5 4 294 275 5 3 7 5 358 352 4
 2 0 1 1390 1356 14 5 1 2 240 241 4 -5 3 3 560 559 6 -5 5 4 503 496 21 5 7 5 269 256 -14
 4 0 1 778 782 8 7 1 2 70 84 -24 -3 3 3 919 924 22 -3 5 4 515 514 5 -4 8 5 71 23 -20
 6 0 1 195 187 6 -6 2 2 192 200 5 -1 3 3 1997 1987 29 -1 5 4 317 323 5 -2 8 5 66 31 -18
 -7 1 1 238 262 5 -4 2 2 280 275 8 1 3 3 1822 1861 19 1 5 4 140 112 4 0 8 5 256 268 4
 -5 1 1 211 201 3 -2 2 2 1087 1057 14 3 3 3 1638 1643 17 3 5 4 188 167 4 2 8 5 314 300 9
 -3 1 1 74 118 -8 0 2 2 1690 1693 17 5 3 3 1198 1248 12 5 5 4 288 285 4 4 8 5 402 392 6
 -1 1 1 403 409 4 2 2 2 509 529 6 7 3 3 491 505 6 -6 6 4 284 271 -22 -5 9 5 553 542 12
 1 1 1 1099 1124 11 4 2 2 448 450 5 -6 4 3 231 250 11 -4 6 4 821 806 18 -3 9 5 927 899 25
 3 1 1 1111 1084 11 6 2 2 7 95 -7 -4 4 3 641 639 9 -2 6 4 1025 1002 35 -1 9 5 1211 1205 37
 5 1 1 549 564 6 -7 3 2 155 162 -31 -2 4 3 1208 1190 24 0 6 4 1613 1631 20 1 9 5 758 785 8
 7 1 1 151 147 -36 -5 3 2 347 349 9 0 4 3 395 411 15 2 6 4 1859 1808 19 3 9 5 190 175 8

Table 3

-6 2 1 312 309 4 -3 3 2 597 579 8 2 4 3 452 443 9 4 6 4 805 796 16 -4 10 5 150 159 -10
 -4 2 1 107 110 -7 -1 3 2 1359 1343 31 4 4 3 264 276 4 6 6 4 209 205 -23 -2 10 5 189 197 -15
 -2 2 1 868 832 11 1 3 2 439 485 6 6 4 3 179 196 -40 -5 7 4 534 521 24 0 10 5 288 292 9
 0 2 1 718 744 9 3 3 2 234 226 3 -7 5 3 8 126 -8 -3 7 4 565 564 21 2 10 5 441 436 17
 2 2 1 930 917 10 5 3 2 7 37 -6 -5 5 3 482 486 12 -1 7 4 345 343 -28 -3 11 5 212 176 6
 4 2 1 815 828 14 7 3 2 160 112 -10 -3 5 3 999 972 29 1 7 4 292 280 5 -1 11 5 160 175 -32
 6 2 1 200 211 4 -6 4 2 7 29 -6 -1 5 3 1097 1082 40 3 7 4 312 318 -17 1 11 5 263 280 5
 -7 3 1 319 317 4 -4 4 2 387 388 14 1 5 3 705 680 10 5 7 4 313 309 4 3 11 5 388 369 11
 -5 3 1 1147 1137 29 -2 4 2 685 665 16 3 5 3 292 286 5 -6 8 4 410 395 6 -2 12 5 172 147 -63
 -3 3 1 2593 2522 82 0 4 2 732 766 7 5 5 3 118 145 -11 -4 8 4 415 396 12 0 12 5 173 177 -14
 -1 3 1 2401 2365 71 2 4 2 954 921 18 -6 6 3 213 183 -14 -2 8 4 494 465 -29 -6 0 6 993 980 10
 1 3 1 919 946 19 4 4 2 123 126 -29 -4 6 3 664 660 23 0 8 4 273 275 4 -4 0 6 1887 1879 20
 3 3 1 937 938 10 6 4 2 7 38 -7 -2 6 3 774 757 8 2 8 4 230 229 11 -2 0 6 1654 1633 17
 5 3 1 795 816 8 -7 5 2 79 8 -21 0 6 3 184 197 -13 4 8 4 399 380 5 0 0 6 889 925 25
 7 3 1 542 559 7 -5 5 2 100 22 -10 2 6 3 170 188 -20 -5 9 4 323 277 9 2 0 6 508 526 5
 -6 4 1 277 280 13 -3 5 2 387 382 4 4 6 3 242 236 9 -3 9 4 174 147 -14 4 0 6 931 937 15
 -4 4 1 466 471 18 -1 5 2 933 924 34 6 6 3 158 137 -10 -1 9 4 7 2 -6 6 0 6 809 819 9
 -2 4 1 302 299 -15 1 5 2 1018 991 10 -5 7 3 266 256 5 1 9 4 229 245 -12 -7 1 6 149 120 -14
 0 4 1 1043 1009 11 3 5 2 526 521 5 -3 7 3 607 603 20 3 9 4 132 132 -11 -5 1 6 6 136 -6
 2 4 1 1110 1062 11 5 5 2 128 133 -9 -1 7 3 697 702 14 -4 10 4 309 298 5 -3 1 6 351 326 5
 4 4 1 594 593 6 -6 6 2 1125 1133 35 1 7 3 339 344 5 -2 10 4 136 83 -10 -1 1 6 669 688 7
 6 4 1 348 350 10 -4 6 2 1165 1153 25 3 7 3 91 70 -11 0 10 4 132 54 -11 1 1 6 944 936 10
 -7 5 1 269 277 -19 -2 6 2 747 722 12 5 7 3 120 72 -12 2 10 4 147 158 -11 3 1 6 649 656 9
 -5 5 1 251 233 -17 0 6 2 866 900 9 -6 8 3 156 103 -10 4 10 4 106 134 -17 5 1 6 221 228 -13
 -3 5 1 182 156 -11 2 6 2 843 835 17 -4 8 3 353 353 6 -3 11 4 196 164 5 -6 2 6 138 107 -9
 -1 5 1 460 437 15 4 6 2 922 906 10 -2 8 3 556 548 10 -1 11 4 161 42 -10 -4 2 6 214 225 4
 1 5 1 1050 977 11 6 6 2 728 725 8 0 8 3 155 176 -8 1 11 4 125 27 -14 -2 2 6 974 961 12
 3 5 1 970 939 10 -5 7 2 127 165 -10 2 8 3 123 135 -9 3 11 4 8 11 -8 0 2 6 850 864 9
 5 5 1 501 522 14 -3 7 2 408 394 -27 4 8 3 57 36 -33 -2 12 4 527 511 9 2 2 6 909 915 11
 -6 6 1 234 216 4 -1 7 2 868 832 29 -5 9 3 318 309 -27 0 12 4 646 672 7 4 2 6 379 386 -21
 -4 6 1 328 334 16 1 7 2 982 952 10 -3 9 3 436 426 15 2 12 4 752 718 8 6 2 6 76 14 -21
 -2 6 1 849 819 30 3 7 2 552 543 6 -1 9 3 771 785 20 -6 0 5 177 187 -18 -7 3 6 86 71 -19
 0 6 1 551 561 6 5 7 2 159 186 6 1 9 3 880 881 18 -4 0 5 236 241 -18 -5 3 6 209 208 -16
 2 6 1 996 971 10 -6 8 2 79 68 -22 3 9 3 923 907 10 -2 0 5 413 408 6 -3 3 6 248 254 -27
 4 6 1 395 382 4 -4 8 2 321 341 -19 5 9 3 745 737 8 0 0 5 1105 1048 15 -1 3 6 795 786 11
 1 3 6 1285 1313 26 0 4 7 733 716 20 4 6 8 585 594 8 -5 1 10 119 98 -12 -1 7 11 277 276 -33
 3 3 6 366 373 6 2 4 7 401 406 10 -5 7 8 363 369 6 -3 1 10 231 250 -22 1 7 11 138 182 -13
 5 3 6 153 150 -9 4 4 7 47 25 -46 -3 7 8 460 476 8 -1 1 10 501 486 6 -2 8 11 171 238 -11
 -6 4 6 23 72 -23 -5 5 7 291 286 8 -1 7 8 376 370 5 1 1 10 520 513 6 0 8 11 309 338 5

Table 3

-4 4 6 287 273 4 -3 5 7 668 657 14 1 7 8 211 196 -13 3 1 10 395 372 15 -1 9 11 128 177 -15
 -2 4 6 382 389 9 -1 5 7 826 832 13 3 7 8 191 202 -61 -6 2 10 8 21 -8 -4 0 12 371 381 5
 0 4 6 967 981 18 1 5 7 562 550 6 -4 8 8 494 497 -32 -4 2 10 192 185 -28 -2 0 12 366 349 5
 2 4 6 621 629 15 3 5 7 197 196 5 -2 8 8 363 386 5 -2 2 10 329 323 5 0 0 12 1060 995 11
 4 4 6 226 222 4 5 5 7 78 106 -23 0 8 8 130 72 -11 0 2 10 542 532 6 2 0 12 1054 1018 11
 6 4 6 8 38 -8 -6 6 7 176 156 -38 2 8 8 201 180 6 2 2 10 608 607 6 -5 1 12 303 303 -15
 -5 5 6 103 38 -11 -4 6 7 434 415 16 -3 9 8 224 244 -13 4 2 10 265 253 5 -3 1 12 366 371 5
 -3 5 6 166 147 4 -2 6 7 773 781 13 -1 9 8 201 177 6 -5 3 10 95 160 -16 -1 1 12 324 303 9
 -1 5 6 454 466 8 0 6 7 379 386 14 1 9 8 186 173 7 -3 3 10 101 24 -12 1 1 12 150 142 -10
 1 5 6 670 704 15 2 6 7 91 92 -15 3 9 8 97 6 -22 -1 3 10 178 153 -9 3 1 12 102 84 -18
 3 5 6 459 456 5 4 6 7 168 154 -36 -2 10 8 158 172 -12 1 3 10 463 461 6 -4 2 12 352 368 7
 5 5 6 117 121 -13 -5 7 7 108 170 -14 0 10 8 8 69 -8 3 3 10 492 521 7 -2 2 12 538 526 6
 -6 6 6 732 730 13 -3 7 7 370 364 14 2 10 8 9 53 -8 -6 4 10 142 75 -11 0 2 12 202 193 9
 -4 6 6 1271 1262 43 -1 7 7 485 505 5 -1 11 8 100 41 -21 -4 4 10 7 38 -7 2 2 12 121 15 -13
 -2 6 6 1341 1366 42 1 7 7 319 351 10 0 12 8 540 553 6 -2 4 10 293 311 12 -5 3 12 326 328 5
 0 6 6 325 329 6 3 7 7 35 84 -34 -6 0 9 313 325 5 0 4 10 512 516 5 -3 3 12 528 547 10
 2 6 6 412 418 6 -4 8 7 326 326 8 -4 0 9 7 61 -6 2 4 10 332 340 9 -1 3 12 204 202 6
 4 6 6 764 769 22 -2 8 7 426 435 15 -2 0 9 318 327 4 4 4 10 231 260 -19 1 3 12 307 302 10
 6 6 6 579 583 6 0 8 7 330 352 4 0 0 9 140 170 -8 -5 5 10 36 22 -36 3 3 12 189 182 -10
 -5 7 6 89 125 -16 2 8 7 146 108 -11 2 0 9 122 137 -10 -3 5 10 155 143 -9 -4 4 12 394 394 8
 -3 7 6 333 302 -19 4 8 7 121 75 -15 4 0 9 273 284 -20 -1 5 10 314 327 5 -2 4 12 261 261 -14
 -1 7 6 513 514 17 -5 9 7 529 517 -27 -5 1 9 342 336 4 1 5 10 365 363 6 0 4 12 162 206 -11
 1 7 6 591 607 23 -3 9 7 152 201 -10 -3 1 9 223 224 -24 3 5 10 245 281 -16 2 4 12 8 28 -8
 3 7 6 458 481 5 -1 9 7 234 264 5 -1 1 9 205 234 -18 -6 6 10 611 618 8 -3 5 12 261 281 5
 5 7 6 168 200 -11 1 9 7 712 755 29 1 1 9 375 383 6 -4 6 10 792 813 8 -1 5 12 225 206 -25
 -4 8 6 238 242 -17 3 9 7 787 784 8 3 1 9 385 386 5 -2 6 10 724 737 8 1 5 12 8 51 -8
 -2 8 6 368 382 14 -4 10 7 246 259 5 5 1 9 247 248 -14 0 6 10 583 588 8 -4 6 12 62 200 -51
 0 8 6 768 783 10 -2 10 7 433 440 5 -6 2 9 292 300 10 2 6 10 307 341 -29 -2 6 12 394 383 8
 2 8 6 573 585 8 0 10 7 367 396 5 -4 2 9 238 232 -12 -3 7 10 178 193 -23 0 6 12 712 702 7
 4 8 6 249 233 9 2 10 7 136 168 -13 -2 2 9 95 118 -12 -1 7 10 367 368 5 2 6 12 793 765 9
 -5 9 6 98 125 -18 -3 11 7 378 376 6 0 2 9 307 324 4 1 7 10 387 396 5 -3 7 12 305 271 -50
 -3 9 6 148 136 -30 -1 11 7 430 461 9 2 2 9 417 429 5 3 7 10 254 276 6 -1 7 12 256 237 5
 -1 9 6 378 390 5 1 11 7 254 289 -21 4 2 9 339 340 5 -4 8 10 8 70 -8 1 7 12 168 138 -11
 1 9 6 611 655 18 -6 0 8 229 214 7 -5 3 9 833 799 14 -2 8 10 276 302 5 -4 0 13 8 115 -8
 3 9 6 228 232 -27 -4 0 8 440 435 11 -3 3 9 1399 1421 14 0 8 10 410 424 5 -2 0 13 286 281 5
 -4 10 6 8 68 -8 -2 0 8 1430 1449 15 -1 3 9 1384 1351 15 2 8 10 314 343 -18 0 0 13 136 162 -12
 -2 10 6 295 295 5 0 0 8 1559 1567 16 1 3 9 1051 1034 19 -3 9 10 9 3 -8 2 0 13 173 154 -19
 0 10 6 254 276 5 2 0 8 1354 1344 14 3 3 9 558 573 9 -1 9 10 119 94 -15 -3 1 13 176 169 -10

Table 3

2	10	6	292	296	5	4	0	8	743	735	13	5	3	9	160	184	-12	1	9	10	269	285	6	-1	1	13	137	73	-12
-3	11	6	8	8	-8	-7	1	8	213	233	-13	-6	4	9	330	316	-28	-6	0	11	79	11	-25	1	1	13	160	129	-10
-1	11	6	156	174	-11	-5	1	8	509	512	5	-4	4	9	102	166	-13	-4	0	11	135	132	-10	-4	2	13	172	177	-10
1	11	6	272	281	5	-3	1	8	674	670	7	-2	4	9	233	220	-21	-2	0	11	445	459	5	-2	2	13	135	84	-12
-4	12	6	643	624	26	-1	1	8	477	474	5	0	4	9	182	171	-12	0	0	11	482	467	6	0	2	13	111	59	-14
0	12	6	216	198	7	1	1	8	242	250	4	2	4	9	434	448	15	2	0	11	192	208	-24	2	2	13	126	103	-14
-6	0	7	7	115	-7	3	1	8	275	274	8	4	4	9	436	435	7	4	0	11	186	218	-11	-3	3	13	755	736	8
-4	0	7	304	307	6	5	1	8	305	287	7	-5	5	9	301	316	12	-5	1	11	180	212	-13	-1	3	13	1115	1051	18
-2	0	7	1355	1370	14	-6	2	8	469	479	5	-3	5	9	226	219	-20	-3	1	11	406	411	8	1	3	13	698	662	7
0	0	7	583	596	6	-4	2	8	614	620	18	-1	5	9	240	261	-21	-1	1	11	467	459	11	-4	4	13	249	274	-28
2	0	7	339	352	15	-2	2	8	440	418	5	1	5	9	353	369	12	1	1	11	345	346	4	-2	4	13	155	121	-12
4	0	7	22	43	-21	0	2	8	306	308	4	3	5	9	355	366	5	3	1	11	74	137	-27	0	4	13	119	32	-15
6	0	7	74	27	-26	2	2	8	47	22	-47	-4	6	9	151	150	-10	-6	2	11	103	40	-16	2	4	13	230	213	10
-7	1	7	8	66	-7	4	2	8	244	267	8	-2	6	9	57	63	-29	-4	2	11	288	315	4	-3	5	13	145	179	-14
-5	1	7	278	284	6	-5	3	8	718	735	11	0	6	9	129	46	-10	-2	2	11	582	585	6	-1	5	13	69	76	-30
-3	1	7	649	661	7	-3	3	8	410	414	4	2	6	9	149	104	-10	0	2	11	420	421	14	1	5	13	38	142	-38
-1	1	7	876	903	34	-1	3	8	348	368	4	4	6	9	297	299	5	2	2	11	365	359	-19	-2	6	13	182	229	-11
1	1	7	639	617	7	1	3	8	306	315	4	-5	7	9	238	214	-21	4	2	11	9	61	-8	0	6	13	218	189	-59
3	1	7	183	187	-38	3	3	8	32	16	-31	-3	7	9	122	116	-12	-5	3	11	635	633	16	-1	9	13	662	648	7
5	1	7	8	76	-7	5	3	8	139	122	-11	-1	7	9	7	78	-7	-3	3	11	569	600	8	-4	0	14	826	825	8
-6	2	7	161	224	-9	-6	4	8	282	276	4	1	7	9	202	216	-18	-1	3	11	301	312	4	-2	0	14	731	687	8
-4	2	7	435	419	7	-4	4	8	534	536	6	3	7	9	234	244	8	1	3	11	365	353	4	0	0	14	252	218	-14
-2	2	7	1030	1034	19	-2	4	8	447	457	5	-4	8	9	8	10	-8	3	3	11	698	721	19	-3	1	14	9	74	-8
0	2	7	756	760	10	0	4	8	35	68	-35	-2	8	9	8	13	-8	-4	4	11	314	329	9	-1	1	14	259	241	5
2	2	7	149	104	-7	2	4	8	147	132	-9	0	8	9	8	31	-7	-2	4	11	453	465	20	1	1	14	364	354	6
4	2	7	114	117	-11	4	4	8	183	161	-45	2	8	9	246	201	5	0	4	11	573	586	6	-2	2	14	90	37	-20
6	2	7	59	72	-41	-5	5	8	393	393	14	-3	9	9	802	810	8	2	4	11	257	261	12	0	2	14	345	328	6
-7	3	7	822	803	12	-3	5	8	484	474	7	-1	9	9	729	768	9	-5	5	11	178	226	-11	-3	3	14	191	203	-11
-5	3	7	854	869	9	-1	5	8	243	252	-18	1	9	9	553	577	20	-3	5	11	379	386	-21	-1	3	14	171	149	-10
-3	3	7	376	359	7	1	5	8	53	104	-31	-2	10	9	79	34	-29	-1	5	11	452	450	5	1	3	14	294	292	5
-1	3	7	543	540	21	3	5	8	115	167	-13	0	10	9	175	169	-10	1	5	11	348	365	-20	-2	4	14	9	90	-8
1	3	7	1437	1456	15	5	5	8	209	189	7	-6	0	10	890	873	9	3	5	11	173	146	-11	0	4	14	153	146	-12
3	3	7	1313	1369	26	-6	6	8	174	241	-10	-4	0	10	912	902	9	-4	6	11	141	104	-12	-1	5	14	146	172	-12
5	3	7	763	770	16	-4	6	8	250	264	7	-2	0	10	1112	1084	11	-2	6	11	238	263	-16	-4	6	14	636	675	24
-6	4	7	171	180	-11	-2	6	8	921	918	10	0	0	10	929	912	10	0	6	11	514	514	7	-2	0	15	298	295	-30
-4	4	7	650	648	18	0	6	8	1350	1362	14	2	0	10	293	307	9	2	6	11	8	86	-8	-1	1	15	338	323	5
-2	4	7	733	732	8	2	6	8	820	847	-42	4	0	10	387	378	5	-3	7	11	280	266	9						