

TABLE 5. Observed and calculated structure factors in omineliteValues of 10*Fobs and 10*Fcalc
Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	0	0	1415	1461	3	7	3	0	357	362	5
4	0	0	938	914	4	8	3	0	92	90	3
6	0	0	39	39	4	9	3	0	191	180	2
8	0	0	642	655	6	10	3	0	131	132	3
10	0	0	796	801	7	11	3	0	342	357	5
12	0	0	499	518	7	12	3	0	620	616	9
14	0	0	180	178	3	13	3	0	303	304	5
1	1	0	164	164	2	14	3	0	209	205	3
2	1	0	430	437	3	15	3	0	120	115	4
3	1	0	221	225	3	0	4	0	2291	2317	4
4	1	0	176	161	3	1	4	0	366	375	4
5	1	0	897	887	5	2	4	0	27*	83	17
6	1	0	615	623	5	3	4	0	218	216	3
7	1	0	429	422	6	4	4	0	234	225	3
8	1	0	524	516	6	5	4	0	147	156	2
9	1	0	281	305	4	6	4	0	155	153	3
10	1	0	36*	24	22	7	4	0	398	408	6
11	1	0	153	147	3	8	4	0	283	307	4
12	1	0	345	340	5	9	4	0	160	163	3
13	1	0	49*	68	22	10	4	0	589	598	8
14	1	0	202	195	3	11	4	0	37*	48	21
15	1	0	199	187	4	12	4	0	498	490	7
0	2	0	846	809	3	13	4	0	146	146	4
1	2	0	250	250	4	14	4	0	146	150	4
2	2	0	505	496	4	15	4	0	46*	36	23
3	2	0	458	467	4	1	5	0	1372	1337	5
4	2	0	689	769	4	2	5	0	370	360	5
5	2	0	345	348	4	3	5	0	413	394	5
6	2	0	1197	1235	5	4	5	0	29*	50	18
7	2	0	163	161	2	5	5	0	586	611	6
8	2	0	700	730	7	6	5	0	40	47	5
9	2	0	144	144	2	7	5	0	172	178	3
10	2	0	155	144	3	8	5	0	310	317	5
11	2	0	98	103	4	9	5	0	472	499	6
12	2	0	59	57	5	10	5	0	389	395	6
13	2	0	216	218	3	11	5	0	38*	45	25
14	2	0	38*	24	9	12	5	0	229	231	3
15	2	0	0*	11	50	13	5	0	-23*	32	31
1	3	0	705	689	4	14	5	0	331	335	5
2	3	0	54	61	3	0	6	0	895	841	5
3	3	0	114	121	2	1	6	0	127	117	2
4	3	0	192	188	3	2	6	0	360	364	5
5	3	0	614	612	5	3	6	0	810	827	6
6	3	0	679	703	6	4	6	0	632	660	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc
Page 2

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
5	6	0	399	408	5	7	9	0	573	602	8
6	6	0	1177	1247	6	8	9	0	95	100	4
7	6	0	336	345	5	9	9	0	367	383	5
8	6	0	806	861	7	10	9	0	175	181	3
9	6	0	301	310	4	11	9	0	128	132	4
10	6	0	569	586	8	12	9	0	-13*	12	16
11	6	0	126	126	3	13	9	0	158	163	4
12	6	0	362	364	5	0	10	0	703	700	7
13	6	0	308	313	4	1	10	0	214	217	3
14	6	0	87	84	5	2	10	0	402	402	6
1	7	0	499	495	6	3	10	0	351	359	5
2	7	0	139	139	2	4	10	0	107	105	3
3	7	0	241	242	4	5	10	0	46	35	6
4	7	0	29*	9	20	6	10	0	449	457	6
5	7	0	291	300	4	7	10	0	228	237	3
6	7	0	156	164	3	8	10	0	351	356	5
7	7	0	395	410	6	9	10	0	39	33	8
8	7	0	126	131	3	10	10	0	391	398	6
9	7	0	141	144	3	11	10	0	301	303	5
10	7	0	-25*	50	27	12	10	0	199	203	4
11	7	0	433	441	6	1	11	0	339	337	5
12	7	0	233	240	3	2	11	0	294	299	4
13	7	0	-16*	14	34	3	11	0	122	126	3
14	7	0	42*	32	26	4	11	0	370	371	6
0	8	0	978	964	6	5	11	0	399	414	6

TABLE 5

1	8	0	183	177	3	6	11	0	176	178	3
2	8	0	722	740	6	7	11	0	343	352	5
3	8	0	180	190	3	8	11	0	85	81	5
4	8	0	87	92	3	9	11	0	316	329	4
5	8	0	71	73	4	10	11	0	165	172	4
6	8	0	418	436	6	11	11	0	278	280	4
7	8	0	395	408	6	0	12	0	384	382	5
8	8	0	83	90	4	1	12	0	83	82	4
9	8	0	164	169	3	2	12	0	516	527	7
10	8	0	199	204	3	3	12	0	200	202	3
11	8	0	193	195	3	4	12	0	415	409	6
12	8	0	272	279	4	5	12	0	121	120	3
13	8	0	377	385	5	6	12	0	623	642	9
1	9	0	291	279	4	7	12	0	101	98	4
2	9	0	177	181	3	8	12	0	173	176	3
3	9	0	384	396	5	9	12	0	88	99	5
4	9	0	348	364	5	10	12	0	96	98	5
5	9	0	739	758	7	1	13	0	418	425	6
6	9	0	122	127	3	2	13	0	256	259	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 3

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	----	----
3	13	0	163	158	3	10	1	1	335	336	5
4	13	0	138	133	3	11	1	1	325	325	5
5	13	0	251	255	4	12	1	1	205	209	3
6	13	0	21*	31	13	13	1	1	123	116	4
7	13	0	172	177	4	14	1	1	70	55	5
8	13	0	271	282	4	15	1	1	352	342	5
9	13	0	148	146	4	0	2	1	123	110	2
0	14	0	566	576	8	1	2	1	820	782	3
1	14	0	187	183	3	2	2	1	406	391	4
2	14	0	74	78	5	3	2	1	931	945	4
3	14	0	229	228	4	4	2	1	483	473	5
4	14	0	36*	24	9	5	2	1	227	230	3
5	14	0	120	116	4	6	2	1	18*	54	26
6	14	0	-48*	32	23	7	2	1	317	310	5
7	14	0	316	320	5	8	2	1	100	102	3
8	14	0	257	257	4	9	2	1	446	452	6
1	15	0	285	279	4	10	2	1	237	235	3
2	15	0	285	289	4	11	2	1	138	136	3
3	15	0	72	74	6	12	2	1	106	100	3
4	15	0	380	376	5	13	2	1	207	198	3
5	15	0	45*	59	24	14	2	1	161	156	4
6	15	0	175	176	4	15	2	1	45*	9	23
0	16	0	143	148	4	1	3	1	-12*	23	23
1	16	0	147	150	4	2	3	1	438	431	4
2	16	0	45*	30	26	3	3	1	19*	7	20
3	16	0	95	99	5	4	3	1	127	134	2
4	16	0	434	421	7	5	3	1	516	521	5
1	0	1	1261	1260	3	6	3	1	47	44	4
3	0	1	1049	1084	4	7	3	1	381	387	6
5	0	1	1060	1070	5	8	3	1	535	543	7
7	0	1	343	369	5	9	3	1	227	224	4
9	0	1	281	291	4	10	3	1	99	82	3
11	0	1	74	77	4	11	3	1	572	584	8
13	0	1	-38*	24	20	12	3	1	103	110	4
15	0	1	248	241	4	13	3	1	185	182	3
1	1	1	208	187	3	14	3	1	167	166	4
2	1	1	31	27	5	15	3	1	219	209	4
3	1	1	404	399	4	0	4	1	524	513	4
4	1	1	88	68	2	1	4	1	335	339	5
5	1	1	707	702	5	2	4	1	-7*	31	26
6	1	1	368	384	5	3	4	1	527	538	5
7	1	1	50	31	4	4	4	1	101	106	2
8	1	1	53	37	5	5	4	1	196	209	3
9	1	1	413	407	6	6	4	1	421	417	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

TABLE 5

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
7	4	1	458	473	7	7	7	1	177	184	2
8	4	1	71	72	4	8	7	1	321	338	5
9	4	1	474	482	6	9	7	1	49	45	6
10	4	1	173	173	3	10	7	1	130	127	3
11	4	1	105	109	4	11	7	1	187	191	3
12	4	1	87	87	5	12	7	1	170	175	3
13	4	1	30*	45	30	13	7	1	102	93	4
14	4	1	136	128	4	14	7	1	122	128	5
15	4	1	169	162	4	0	8	1	193	191	3
1	5	1	384	356	5	1	8	1	335	320	5
2	5	1	902	884	5	2	8	1	51	37	4
3	5	1	221	223	3	3	8	1	557	562	7
4	5	1	498	503	6	4	8	1	209	209	3
5	5	1	12*	21	12	5	8	1	89	88	3
6	5	1	237	242	4	6	8	1	217	225	3
7	5	1	-23*	11	25	7	8	1	258	266	4
8	5	1	319	322	5	8	8	1	184	189	3
9	5	1	561	566	8	9	8	1	104	106	3
10	5	1	51	37	5	10	8	1	390	391	6
11	5	1	40	40	7	11	8	1	79	74	5
12	5	1	127	124	3	12	8	1	245	251	3
13	5	1	0*	4	48	13	8	1	-17*	46	36
14	5	1	181	175	3	1	9	1	261	268	4
0	6	1	37	30	5	2	9	1	586	586	7
1	6	1	617	600	5	3	9	1	246	257	4
2	6	1	448	438	6	4	9	1	141	141	3
3	6	1	412	416	6	5	9	1	111	110	3
4	6	1	899	895	6	6	9	1	84	81	4
5	6	1	454	451	6	7	9	1	121	129	3
6	6	1	186	187	2	8	9	1	622	644	8
7	6	1	76	72	4	9	9	1	248	254	4
8	6	1	81	79	4	10	9	1	107	102	4
9	6	1	112	113	3	11	9	1	43*	51	26
10	6	1	350	358	5	12	9	1	31*	75	33
11	6	1	166	170	3	13	9	1	38*	1	25
12	6	1	134	136	4	0	10	1	436	443	6
13	6	1	-44*	10	23	1	10	1	231	221	3
14	6	1	286	277	4	2	10	1	190	184	3
1	7	1	209	206	3	3	10	1	236	233	4
2	7	1	623	612	6	4	10	1	271	281	4
3	7	1	75	67	3	5	10	1	135	136	3
4	7	1	564	571	6	6	10	1	143	135	3
5	7	1	50	43	5	7	10	1	39	39	7
6	7	1	205	206	3	8	10	1	261	263	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
9	10	1	48	56	7	1	15	1	365	362	5
10	10	1	329	336	5	2	15	1	175	174	3
11	10	1	171	172	3	3	15	1	38*	40	9
12	10	1	45	56	9	4	15	1	201	201	3
1	11	1	321	325	5	5	15	1	390	387	6
2	11	1	441	442	6	6	15	1	-43*	37	23
3	11	1	20*	25	31	0	16	1	274	270	4
4	11	1	539	545	8	1	16	1	210	209	4
5	11	1	433	438	6	2	16	1	26*	47	34
6	11	1	154	155	3	3	16	1	257	255	4
7	11	1	-21*	44	29	4	16	1	-31*	12	32
8	11	1	164	161	3	0	0	2	1300	1278	4
9	11	1	0*	35	46	2	0	2	613	604	4
10	11	1	222	225	3	4	0	2	1091	1110	5
11	11	1	174	175	4	6	0	2	2009	2096	6
0	12	1	97	91	4	8	0	2	374	379	6
1	12	1	427	418	6	10	0	2	440	444	6
2	12	1	122	123	3	12	0	2	502	490	8
3	12	1	43*	65	21	14	0	2	324	309	5
4	12	1	169	165	3	1	1	2	72	56	2
5	12	1	48*	66	22	2	1	2	475	455	4

TABLE 5

6	12	1	-26*	15	27	3	1	2	961	894	5
7	12	1	306	315	5	4	1	2	228	224	3
8	12	1	-57*	3	17	5	1	2	556	566	6
9	12	1	-38*	15	26	6	1	2	436	437	6
10	12	1	180	184	4	7	1	2	134	135	2
1	13	1	164	166	3	8	1	2	369	366	6
2	13	1	307	303	5	9	1	2	107	109	3
3	13	1	16*	63	40	10	1	2	87	84	4
4	13	1	258	254	4	11	1	2	310	308	4
5	13	1	177	181	3	12	1	2	420	417	6
6	13	1	180	180	3	13	1	2	282	274	4
7	13	1	220	220	3	14	1	2	273	272	4
8	13	1	145	149	4	15	1	2	49*	77	28
9	13	1	125	127	4	0	2	2	1247	1240	4
0	14	1	84	84	5	1	2	2	185	170	3
1	14	1	-45*	38	23	2	2	2	846	866	4
2	14	1	326	323	5	3	2	2	508	486	5
3	14	1	142	146	4	4	2	2	82	79	3
4	14	1	90	89	5	5	2	2	192	199	3
5	14	1	25*	49	32	6	2	2	166	170	3
6	14	1	126	133	4	7	2	2	48	47	5
7	14	1	214	217	3	8	2	2	262	267	4
8	14	1	238	238	4	9	2	2	40	31	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
10	2	2	630	637	8	10	5	2	287	279	4
11	2	2	193	189	3	11	5	2	90	89	4
12	2	2	615	618	9	12	5	2	159	148	3
13	2	2	291	291	4	13	5	2	188	180	3
14	2	2	232	225	4	14	5	2	245	243	3
15	2	2	-25*	72	36	0	6	2	1550	1543	6
1	3	2	613	527	4	1	6	2	123	123	2
2	3	2	60	63	3	2	6	2	1027	1022	6
3	3	2	162	162	3	3	6	2	754	753	6
4	3	2	187	185	3	4	6	2	833	839	6
5	3	2	472	465	6	5	6	2	360	354	5
6	3	2	630	639	6	6	6	2	489	488	7
7	3	2	680	691	7	7	6	2	317	324	4
8	3	2	78	78	4	8	6	2	-29*	27	23
9	3	2	101	98	3	9	6	2	271	271	4
10	3	2	112	108	3	10	6	2	459	455	7
11	3	2	158	146	3	11	6	2	129	128	4
12	3	2	607	586	8	12	6	2	497	504	7
13	3	2	260	248	4	13	6	2	300	301	4
14	3	2	210	206	3	14	6	2	343	342	5
0	4	2	305	297	4	1	7	2	462	466	6
1	4	2	409	399	5	2	7	2	190	186	3
2	4	2	429	425	5	3	7	2	363	361	5
3	4	2	264	241	4	4	7	2	55	58	5
4	4	2	1014	1005	6	5	7	2	430	432	6
5	4	2	239	236	4	6	7	2	248	250	3
6	4	2	1357	1379	6	7	7	2	228	231	3
7	4	2	273	263	4	8	7	2	36*	31	22
8	4	2	165	160	3	9	7	2	136	135	3
9	4	2	20*	55	29	10	7	2	122	125	4
10	4	2	194	195	3	11	7	2	270	276	4
11	4	2	150	145	3	12	7	2	128	131	4
12	4	2	198	188	3	13	7	2	185	181	4
13	4	2	247	236	4	0	8	2	244	241	4
14	4	2	109	105	5	1	8	2	181	179	3
1	5	2	1045	1014	5	2	8	2	202	206	3
2	5	2	296	285	4	3	8	2	127	127	3
3	5	2	543	514	6	4	8	2	540	542	7
4	5	2	150	154	2	5	8	2	123	130	3
5	5	2	456	459	6	6	8	2	494	490	7
6	5	2	121	120	3	7	8	2	428	429	6
7	5	2	397	406	6	8	8	2	248	247	4
8	5	2	385	381	6	9	8	2	233	235	3
9	5	2	107	106	3	10	8	2	372	377	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

TABLE 5

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 7

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
11	8	2	119	121	4	5	12	2	133	132	4
12	8	2	246	243	3	6	12	2	363	364	6
13	8	2	316	315	5	7	12	2	88	89	5
1	9	2	778	771	7	8	12	2	382	375	6
2	9	2	163	160	3	9	12	2	115	121	4
3	9	2	325	323	5	10	12	2	573	583	9
4	9	2	372	369	5	1	13	2	413	403	6
5	9	2	178	177	3	2	13	2	212	211	3
6	9	2	120	124	3	3	13	2	112	112	4
7	9	2	344	340	5	4	13	2	107	106	4
8	9	2	105	105	3	5	13	2	162	167	3
9	9	2	409	417	6	6	13	2	89	90	5
10	9	2	144	142	4	7	13	2	246	248	3
11	9	2	241	237	4	8	13	2	342	338	5
12	9	2	37*	6	25	9	13	2	37*	24	27
0	10	2	385	380	6	0	14	2	-51*	27	21
1	10	2	164	167	3	1	14	2	163	162	3
2	10	2	169	163	3	2	14	2	206	203	3
3	10	2	305	296	5	3	14	2	194	194	3
4	10	2	545	538	8	4	14	2	369	361	6
5	10	2	84	84	4	5	14	2	79	76	5
6	10	2	394	398	6	6	14	2	470	456	7
7	10	2	322	314	5	7	14	2	294	290	5
8	10	2	0*	14	40	1	15	2	-16*	15	35
9	10	2	101	98	4	2	15	2	292	285	5
10	10	2	162	165	4	3	15	2	36*	39	10
11	10	2	214	208	3	4	15	2	352	334	6
12	10	2	286	293	5	5	15	2	229	232	3
1	11	2	432	428	6	0	16	2	416	405	6
2	11	2	280	279	4	1	16	2	125	120	4
3	11	2	332	320	5	2	16	2	283	280	4
4	11	2	293	297	4	1	0	3	1285	1239	5
5	11	2	390	392	6	3	0	3	703	701	5
6	11	2	208	203	4	5	0	3	657	660	6
7	11	2	159	158	3	7	0	3	132	125	3
8	11	2	126	126	4	9	0	3	406	412	6
9	11	2	0*	53	53	11	0	3	41	35	7
10	11	2	235	233	4	13	0	3	93	89	4
11	11	2	205	212	4	1	1	3	368	346	5
0	12	2	828	819	8	2	1	3	268	248	4
1	12	2	65	62	5	3	1	3	147	151	2
2	12	2	306	305	4	4	1	3	281	280	4
3	12	2	181	178	3	5	1	3	389	405	5
4	12	2	471	462	7	6	1	3	444	449	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 8

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
7	1	3	74	80	4	7	4	3	183	187	3
8	1	3	89	96	3	8	4	3	163	156	3
9	1	3	438	441	7	9	4	3	535	528	7
10	1	3	161	161	3	10	4	3	222	218	3
11	1	3	346	345	5	11	4	3	97	95	4
12	1	3	73	62	5	12	4	3	125	129	4
13	1	3	35*	58	29	13	4	3	80	66	5
14	1	3	41*	38	24	14	4	3	82	75	5
0	2	3	114	106	2	1	5	3	125	122	2
1	2	3	196	195	3	2	5	3	492	492	6
2	2	3	475	445	5	3	5	3	311	307	5
3	2	3	889	877	6	4	5	3	635	637	7
4	2	3	243	241	4	5	5	3	102	101	3
5	2	3	321	329	5	6	5	3	69	77	4
6	2	3	148	148	2	7	5	3	81	84	4
7	2	3	462	479	6	8	5	3	343	347	5
8	2	3	158	162	3	9	5	3	440	445	7

TABLE 5

9	2	3	289	285	4	10	5	3	77	81	5
10	2	3	272	270	4	11	5	3	37*	21	22
11	2	3	132	128	3	12	5	3	39*	15	21
12	2	3	137	139	4	13	5	3	43	34	8
13	2	3	84	76	5	0	6	3	43	40	5
14	2	3	113	106	4	1	6	3	286	276	4
1	3	3	38	24	4	2	6	3	365	363	5
2	3	3	594	579	6	3	6	3	418	414	6
3	3	3	34	18	5	4	6	3	733	726	7
4	3	3	177	168	2	5	6	3	511	521	7
5	3	3	419	419	6	6	6	3	143	141	3
6	3	3	73	62	4	7	6	3	210	212	3
7	3	3	340	337	5	8	6	3	68	72	5
8	3	3	419	427	7	9	6	3	31*	26	23
9	3	3	204	201	3	10	6	3	332	329	5
10	3	3	102	95	4	11	6	3	128	124	4
11	3	3	519	526	8	12	6	3	130	128	4
12	3	3	32*	14	9	13	6	3	-35*	70	31
13	3	3	175	162	3	1	7	3	300	295	5
14	3	3	121	109	4	2	7	3	675	673	7
0	4	3	616	597	6	3	7	3	25*	66	26
1	4	3	572	567	6	4	7	3	313	315	5
2	4	3	97	91	2	5	7	3	126	129	3
3	4	3	424	405	6	6	7	3	89	91	4
4	4	3	59	61	4	7	7	3	82	86	4
5	4	3	68	69	4	8	7	3	245	242	3
6	4	3	257	255	4	9	7	3	108	109	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 9

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10	7	3	218	224	3	4	11	3	368	373	5
11	7	3	121	123	4	5	11	3	450	449	7
12	7	3	265	265	4	6	11	3	76	73	5
13	7	3	130	131	4	7	11	3	81	85	5
0	8	3	86	85	3	8	11	3	98	103	5
1	8	3	100	98	3	9	11	3	54*	63	23
2	8	3	114	118	3	10	11	3	270	282	4
3	8	3	453	449	6	0	12	3	103	102	4
4	8	3	242	250	4	1	12	3	261	270	4
5	8	3	39	8	7	2	12	3	109	103	4
6	8	3	273	268	4	3	12	3	40	25	8
7	8	3	381	389	6	4	12	3	158	158	3
8	8	3	126	122	3	5	12	3	134	131	4
9	8	3	167	173	3	6	12	3	-16*	26	34
10	8	3	300	309	4	7	12	3	360	373	6
11	8	3	58	60	7	8	12	3	-60*	3	19
12	8	3	192	195	4	9	12	3	95	92	5
1	9	3	258	251	4	1	13	3	79	82	5
2	9	3	402	393	6	2	13	3	194	194	3
3	9	3	223	222	3	3	13	3	141	134	3
4	9	3	299	291	4	4	13	3	324	326	4
5	9	3	82	81	4	5	13	3	226	222	3
6	9	3	37*	19	21	6	13	3	116	114	4
7	9	3	117	110	3	7	13	3	261	261	4
8	9	3	583	599	8	8	13	3	173	169	4
9	9	3	228	226	4	0	14	3	120	126	4
10	9	3	36*	26	9	1	14	3	123	118	4
11	9	3	54*	57	23	2	14	3	251	256	3
12	9	3	137	131	4	3	14	3	117	116	4
0	10	3	299	298	5	4	14	3	36*	47	29
1	10	3	63	68	5	5	14	3	82	89	6
2	10	3	70	59	4	6	14	3	82	82	6
3	10	3	181	174	3	1	15	3	325	320	5
4	10	3	333	329	5	2	15	3	228	220	4
5	10	3	197	197	3	3	15	3	26*	30	35
6	10	3	186	188	3	4	15	3	98	96	5
7	10	3	159	159	3	0	0	4	2623	2781	6
8	10	3	174	169	3	2	0	4	880	889	6
9	10	3	119	124	4	4	0	4	569	569	7
10	10	3	257	257	4	6	0	4	163	161	3
11	10	3	155	157	4	8	0	4	547	545	8
1	11	3	233	227	3	10	0	4	557	567	8
2	11	3	501	494	7	12	0	4	372	372	6
3	11	3	71	70	5	1	1	4	132	130	2

TABLE 5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	1	4	282	281	4	5	4	4	129	122	3
3	1	4	12*	18	30	6	4	4	172	178	3
4	1	4	71	65	4	7	4	4	302	306	5
5	1	4	445	466	6	8	4	4	323	331	5
6	1	4	406	412	6	9	4	4	128	122	3
7	1	4	270	269	4	10	4	4	454	451	7
8	1	4	379	384	5	11	4	4	33*	44	10
9	1	4	146	141	3	12	4	4	385	378	6
10	1	4	-14*	6	29	13	4	4	130	127	4
11	1	4	182	181	3	1	5	4	829	836	7
12	1	4	290	280	4	2	5	4	221	218	3
13	1	4	105	99	4	3	5	4	75	92	4
0	2	4	248	250	4	4	5	4	91	88	3
1	2	4	134	130	2	5	5	4	370	373	6
2	2	4	125	121	2	6	5	4	53	41	5
3	2	4	312	302	5	7	5	4	164	162	3
4	2	4	723	722	7	8	5	4	246	253	4
5	2	4	218	222	3	9	5	4	316	317	5
6	2	4	812	812	7	10	5	4	317	312	5
7	2	4	109	108	3	11	5	4	-37*	29	24
8	2	4	684	685	8	12	5	4	194	193	3
9	2	4	103	105	4	13	5	4	19*	19	33
10	2	4	102	95	4	0	6	4	347	352	5
11	2	4	85	87	5	1	6	4	83	86	3
12	2	4	7*	19	21	2	6	4	319	308	5
13	2	4	194	186	4	3	6	4	559	565	7
1	3	4	302	303	4	4	6	4	496	491	7
2	3	4	31*	53	21	5	6	4	277	295	4
3	3	4	-28*	4	21	6	6	4	814	822	8
4	3	4	116	114	3	7	6	4	257	263	3
5	3	4	184	197	3	8	6	4	713	726	8
6	3	4	494	508	7	9	6	4	240	243	4
7	3	4	291	288	4	10	6	4	419	425	6
8	3	4	71	71	4	11	6	4	102	104	4
9	3	4	165	170	3	12	6	4	261	258	4
10	3	4	95	97	4	1	7	4	343	340	5
11	3	4	208	205	3	2	7	4	114	118	3
12	3	4	511	503	7	3	7	4	27*	46	23
13	3	4	289	277	4	4	7	4	15*	17	13
0	4	4	1351	1370	6	5	7	4	321	312	5
1	4	4	314	304	5	6	7	4	149	143	3
2	4	4	341	340	5	7	7	4	297	295	5
3	4	4	92	98	3	8	7	4	100	100	4
4	4	4	27*	11	8	9	7	4	70	65	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
10	7	4	-49*	43	21	8	11	4	51*	74	24
11	7	4	315	317	5	9	11	4	231	232	3
12	7	4	191	192	4	0	12	4	240	233	3
0	8	4	640	638	7	1	12	4	73	62	5
1	8	4	150	150	3	2	12	4	431	431	6
2	8	4	645	647	8	3	12	4	170	162	3
3	8	4	132	125	3	4	12	4	328	326	5
4	8	4	129	126	3	5	12	4	93	96	5
5	8	4	40*	58	23	6	12	4	463	462	7
6	8	4	278	279	4	7	12	4	76	80	6
7	8	4	318	324	5	8	12	4	173	179	4
8	8	4	149	149	3	1	13	4	378	366	6
9	8	4	145	144	3	2	13	4	215	209	3

TABLE 5

10	8	4	147	150	4	3	13	4	76	76	5
11	8	4	168	160	4	4	13	4	112	110	4
1	9	4	296	295	4	5	13	4	180	179	4
2	9	4	140	141	3	6	13	4	0*	32	52
3	9	4	351	337	5	0	14	4	449	443	7
4	9	4	282	283	4	1	14	4	153	148	4
5	9	4	504	501	7	2	14	4	106	100	5
6	9	4	101	102	4	3	14	4	187	184	4
7	9	4	465	464	7	4	14	4	41*	15	25
8	9	4	42*	79	27	1	0	5	505	497	7
9	9	4	286	291	4	3	0	5	597	616	7
10	9	4	145	145	4	5	0	5	674	678	8
11	9	4	32*	43	27	7	0	5	326	323	5
0	10	4	455	461	7	9	0	5	138	129	4
1	10	4	164	163	3	11	0	5	99	88	4
2	10	4	366	368	6	1	1	5	33	24	6
3	10	4	277	271	4	2	1	5	130	127	3
4	10	4	109	105	4	3	1	5	309	315	4
5	10	4	43*	29	21	4	1	5	87	92	4
6	10	4	314	313	4	5	1	5	435	433	6
7	10	4	202	200	3	6	1	5	171	169	3
8	10	4	343	349	5	7	1	5	81	76	4
9	10	4	26*	30	34	8	1	5	-70*	31	16
10	10	4	310	313	4	9	1	5	248	243	4
1	11	4	261	256	4	10	1	5	315	311	5
2	11	4	245	242	4	11	1	5	196	193	3
3	11	4	36*	23	9	12	1	5	242	234	4
4	11	4	293	291	4	0	2	5	143	140	2
5	11	4	371	370	5	1	2	5	446	454	6
6	11	4	145	144	4	2	2	5	124	117	3
7	11	4	282	277	4	3	2	5	586	584	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
4	2	5	340	342	5	11	5	5	-30*	73	32
5	2	5	94	96	3	0	6	5	-43*	23	18
6	2	5	42	37	6	1	6	5	463	466	7
7	2	5	71	84	4	2	6	5	261	257	4
8	2	5	-25*	13	26	3	6	5	217	218	3
9	2	5	370	365	6	4	6	5	536	551	7
10	2	5	122	124	4	5	6	5	235	243	3
11	2	5	102	100	4	6	6	5	126	128	3
12	2	5	-43*	38	21	7	6	5	23*	19	30
1	3	5	32*	21	19	8	6	5	58	58	6
2	3	5	166	165	2	9	6	5	145	153	4
3	3	5	34	27	7	10	6	5	268	262	4
4	3	5	223	228	3	11	6	5	147	153	4
5	3	5	304	319	5	1	7	5	76	68	4
6	3	5	43	56	6	2	7	5	304	308	5
7	3	5	253	255	3	3	7	5	110	115	4
8	3	5	371	371	5	4	7	5	467	480	7
9	3	5	165	164	3	5	7	5	-39*	31	19
10	3	5	155	152	3	6	7	5	190	195	3
11	3	5	429	425	7	7	7	5	189	194	3
12	3	5	132	127	4	8	7	5	264	273	4
0	4	5	267	258	4	9	7	5	-33*	19	28
1	4	5	106	101	3	10	7	5	-24*	32	35
2	4	5	162	165	3	0	8	5	206	203	3
3	4	5	398	404	6	1	8	5	284	296	4
4	4	5	118	118	3	2	8	5	34*	13	22
5	4	5	207	207	3	3	8	5	393	406	6
6	4	5	336	337	5	4	8	5	90	87	4
7	4	5	387	393	6	5	8	5	99	98	4
8	4	5	-34*	4	25	6	8	5	116	111	4
9	4	5	293	291	4	7	8	5	109	105	4
10	4	5	75	81	6	8	8	5	170	173	3
11	4	5	-16*	78	37	9	8	5	33*	38	10
12	4	5	42*	29	26	10	8	5	332	339	5
1	5	5	223	225	3	1	9	5	177	175	3
2	5	5	585	592	7	2	9	5	467	465	7
3	5	5	100	99	3	3	9	5	168	168	3
4	5	5	221	216	3	4	9	5	28*	24	29
5	5	5	67	72	5	5	9	5	90	89	5
6	5	5	189	194	3	6	9	5	79	81	5
7	5	5	48	46	6	7	9	5	111	104	4

TABLE 5

8	5	5	177	181	3	8	9	5	461	468	7
9	5	5	448	448	7	9	9	5	189	195	4
10	5	5	100	95	5	0	10	5	363	363	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 13

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	10	5	241	241	3	1	2	6	86	81	4
2	10	5	190	189	3	2	2	6	722	734	8
3	10	5	190	191	3	3	2	6	228	235	4
4	10	5	137	139	4	4	2	6	77	77	4
5	10	5	63	65	6	5	2	6	113	118	3
6	10	5	-29*	54	33	6	2	6	-48*	30	20
7	10	5	41	43	8	7	2	6	42	37	7
8	10	5	249	255	3	8	2	6	-42*	40	24
1	11	5	289	282	4	9	2	6	-41*	29	24
2	11	5	270	262	4	10	2	6	413	401	6
3	11	5	36*	15	8	11	2	6	126	127	5
4	11	5	464	465	7	1	3	6	41*	23	20
5	11	5	275	280	4	2	3	6	33	33	7
6	11	5	158	159	4	3	3	6	162	167	3
7	11	5	26*	6	33	4	3	6	80	77	4
0	12	5	25*	48	36	5	3	6	97	87	4
1	12	5	371	368	6	6	3	6	371	372	5
2	12	5	106	96	4	7	3	6	374	370	6
3	12	5	40*	67	26	8	3	6	38*	57	24
4	12	5	114	112	4	9	3	6	0*	18	48
5	12	5	32*	5	29	10	3	6	73	70	6
6	12	5	32*	14	26	0	4	6	283	276	4
1	13	5	184	175	4	1	4	6	240	240	4
2	13	5	281	277	4	2	4	6	360	359	5
3	13	5	26*	12	33	3	4	6	84	83	4
4	13	5	143	136	4	4	4	6	592	593	8
0	0	6	737	766	8	5	4	6	130	131	3
2	0	6	379	385	6	6	4	6	726	739	9
4	0	6	533	541	7	7	4	6	176	178	3
6	0	6	1023	1027	9	8	4	6	219	220	3
8	0	6	318	313	5	9	4	6	36*	43	25
10	0	6	234	220	3	10	4	6	99	98	5
1	1	6	32*	8	19	1	5	6	465	475	7
2	1	6	204	205	3	2	5	6	141	136	3
3	1	6	151	147	3	3	5	6	87	89	4
4	1	6	47*	61	22	4	5	6	113	107	4
5	1	6	384	388	6	5	5	6	349	356	5
6	1	6	249	250	4	6	5	6	74	70	5
7	1	6	114	117	4	7	5	6	215	214	3
8	1	6	244	242	3	8	5	6	236	240	4
9	1	6	17*	27	35	9	5	6	160	157	3
10	1	6	62	52	6	10	5	6	196	194	4
11	1	6	126	122	4	0	6	6	676	677	8
0	2	6	530	546	8	1	6	6	71	63	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 14

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	6	6	637	631	8	0	12	6	449	434	7
3	6	6	415	411	6	1	12	6	-35*	42	28
4	6	6	428	444	6	1	0	7	557	557	8
5	6	6	202	212	3	3	0	7	353	358	5
6	6	6	167	160	3	5	0	7	318	309	5
7	6	6	211	208	3	7	0	7	25*	58	32
8	6	6	-34*	65	29	9	0	7	289	287	4
9	6	6	182	188	4	1	1	7	178	183	3
1	7	6	318	315	5	2	1	7	119	112	4

TABLE 5

2	7	6	111	111	4	3	1	7	57	52	6
3	7	6	77	74	5	4	1	7	168	164	3
4	7	6	33*	40	25	5	1	7	147	153	4
5	7	6	198	202	3	6	1	7	255	253	4
6	7	6	152	152	4	7	1	7	72	78	6
7	7	6	169	172	4	8	1	7	81	71	5
8	7	6	40*	26	24	9	1	7	305	306	5
9	7	6	37*	21	28	0	2	7	78	77	5
0	8	6	40*	52	24	1	2	7	81	80	4
1	8	6	115	115	4	2	2	7	237	238	3
2	8	6	-22*	2	30	3	2	7	456	464	7
3	8	6	-36*	74	29	4	2	7	83	87	5
4	8	6	365	370	5	5	2	7	195	189	3
5	8	6	88	74	4	6	2	7	115	112	4
6	8	6	253	257	4	7	2	7	292	300	4
7	8	6	288	288	4	8	2	7	132	131	4
8	8	6	253	251	4	9	2	7	159	161	4
1	9	6	399	395	6	1	3	7	-15*	15	14
2	9	6	108	107	4	2	3	7	290	288	4
3	9	6	144	138	4	3	3	7	16*	21	33
4	9	6	233	230	4	4	3	7	95	89	4
5	9	6	232	240	3	5	3	7	212	216	3
6	9	6	100	90	5	6	3	7	25*	31	31
7	9	6	242	244	4	7	3	7	192	188	3
0	10	6	149	150	4	8	3	7	252	254	4
1	10	6	117	118	4	0	4	7	344	354	5
2	10	6	179	179	3	1	4	7	275	283	4
3	10	6	199	196	3	2	4	7	44*	57	24
4	10	6	367	372	5	3	4	7	245	248	3
5	10	6	57	52	7	4	4	7	45*	81	26
6	10	6	209	208	4	5	4	7	35*	31	25
1	11	6	306	303	5	6	4	7	108	109	4
2	11	6	185	189	4	7	4	7	71	77	6
3	11	6	123	111	4	8	4	7	124	129	4
4	11	6	206	206	3	1	5	7	-15*	12	34

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	----	----
2	5	7	239	242	4	4	2	8	416	430	6
3	5	7	203	204	3	5	2	8	109	106	5
4	5	7	367	361	5	1	3	8	-54*	49	23
5	5	7	85	88	5	2	3	8	31*	28	31
6	5	7	23*	21	13	3	3	8	66	63	6
7	5	7	84	81	5	4	3	8	58	54	7
8	5	7	223	223	4	5	3	8	45	44	9
0	6	7	38	34	8	0	4	8	589	597	8
1	6	7	151	149	4	1	4	8	161	165	4
2	6	7	184	188	3	2	4	8	267	271	4
3	6	7	229	229	4	3	4	8	50	48	7
4	6	7	380	391	6	4	4	8	42	38	9
5	6	7	335	327	5	1	5	8	450	443	7
6	6	7	85	86	5	2	5	8	112	112	4
7	6	7	140	142	4	3	5	8	85	82	5
1	7	7	208	208	3	4	5	8	49*	52	23
2	7	7	389	387	6	0	6	8	41*	29	26
3	7	7	80	82	5	1	6	8	51	36	8
4	7	7	177	173	3	2	6	8	168	166	4
5	7	7	111	114	5						
6	7	7	33*	47	11						
0	8	7	43*	29	23						
1	8	7	0*	40	50						
2	8	7	113	105	4						
3	8	7	261	264	4						
4	8	7	184	178	4						
5	8	7	41*	13	22						
1	9	7	162	156	4						
2	9	7	222	224	4						
3	9	7	135	136	4						
0	0	8	1083	1106	9						
2	0	8	441	445	7						
4	0	8	248	249	3						
6	0	8	244	242	3						
1	1	8	86	87	5						
2	1	8	138	137	4						
3	1	8	143	142	4						

TABLE 5

4	1	8	26*	28	30
5	1	8	167	167	4
6	1	8	211	209	3
0	2	8	30*	38	29
1	2	8	30*	57	29
2	2	8	-51*	24	19
3	2	8	138	148	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.