

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
2	0	0	1932	2005	18	-4	4	0	421	349	47	-10	8	0	299	211	298	5	11	0	0	175	1	-3	15	0	1963	1958	20
4	0	0	0	221	1	-2	4	0	239	183	94	-8	8	0	347	188	149	7	11	0	729	719	50	-1	15	0	428	301	59
6	0	0	2713	2734	34	2	4	0	230	250	67	-6	8	0	293	59	292	9	11	0	0	130	1	1	15	0	182	207	181
8	0	0	2536	2799	141	4	4	0	300	262	75	-4	8	0	396	248	75	11	11	0	455	228	349	3	15	0	1899	2003	20
10	0	0	1462	1354	51	6	4	0	0	46	1	-2	8	0	0	96	1	-10	12	0	138	280	138	5	15	0	321	165	93
-11	1	0	0	70	1	8	4	0	291	158	291	0	8	0	0	31	1	-8	12	0	392	48	130	7	15	0	0	12	1
-9	1	0	279	64	278	10	4	0	0	109	1	2	8	0	0	66	1	-6	12	0	306	100	134	9	15	0	74	314	73
-7	1	0	272	345	156	-11	5	0	914	798	134	4	8	0	288	324	81	-4	12	0	0	101	1	11	15	0	0	373	1
-5	1	0	959	914	28	-9	5	0	0	144	1	6	8	0	208	59	207	-2	12	0	3513	3554	30	-10	16	0	306	527	305
-3	1	0	368	286	62	-7	5	0	1043	967	46	8	8	0	158	141	158	0	12	0	3223	3243	28	-8	16	0	0	43	1
-1	1	0	93	142	92	-5	5	0	426	261	79	10	8	0	67	331	67	2	12	0	3520	3581	25	-6	16	0	435	283	86
1	1	0	0	141	1	-3	5	0	800	802	36	-11	9	0	631	568	107	4	12	0	134	22	134	-4	16	0	260	268	260
3	1	0	309	338	100	-1	5	0	62	64	61	-9	9	0	0	222	1	6	12	0	339	86	92	-2	16	0	390	355	52
5	1	0	886	846	30	1	5	0	0	88	1	-7	9	0	1861	1779	36	8	12	0	0	63	1	0	16	0	126	43	126
7	1	0	346	332	103	3	5	0	925	875	38	-5	9	0	1516	1454	56	10	12	0	0	196	1	2	16	0	433	349	76
9	1	0	310	323	310	5	5	0	130	198	130	-3	9	0	2569	2797	28	-11	13	0	0	104	1	4	16	0	163	178	162
11	1	0	0	77	1	7	5	0	1035	982	41	-1	9	0	149	199	149	-9	13	0	516	245	100	6	16	0	285	208	126
-10	2	0	600	593	99	9	5	0	169	379	168	1	9	0	0	203	1	-7	13	0	281	65	189	8	16	0	0	167	1
-8	2	0	623	708	75	11	5	0	803	812	94	3	9	0	2610	2682	22	-5	13	0	514	478	65	10	16	0	880	360	115
-6	2	0	623	543	45	-10	6	0	209	378	208	5	9	0	1526	1631	28	-3	13	0	273	257	67	-11	17	0	112	283	112
-4	2	0	161	66	161	-8	6	0	178	255	178	7	9	0	1740	1702	39	-1	13	0	302	316	60	-9	17	0	374	24	242
-2	2	0	162	74	162	-6	6	0	164	239	164	9	9	0	0	208	1	1	13	0	297	271	91	-7	17	0	172	79	171
2	2	0	139	100	138	-4	6	0	390	360	52	11	9	0	619	622	164	3	13	0	173	141	173	-5	17	0	357	161	210
4	2	0	179	178	178	-2	6	0	0	11	1	-10	10	0	73	104	73	5	13	0	517	508	50	-3	17	0	205	88	129
6	2	0	661	640	44	0	6	0	277	158	40	-8	10	0	304	104	199	7	13	0	303	193	146	-1	17	0	327	283	65
8	2	0	774	797	65	2	6	0	0	53	1	-6	10	0	283	93	149	9	13	0	150	249	149	1	17	0	330	323	58
10	2	0	620	388	98	4	6	0	433	441	51	-4	10	0	244	289	158	11	13	0	318	144	317	3	17	0	124	149	124
-11	3	0	1709	1675	53	6	6	0	190	214	189	-2	10	0	217	228	165	-10	14	0	211	161	210	5	17	0	0	159	1
-9	3	0	967	734	108	8	6	0	263	203	262	0	10	0	0	35	1	-8	14	0	365	316	242	7	17	0	290	103	158
-7	3	0	2224	2241	27	10	6	0	556	369	115	2	10	0	0	173	1	-6	14	0	138	222	138	9	17	0	0	23	1
-5	3	0	2988	2962	24	-11	7	0	440	334	439	4	10	0	227	323	119	-4	14	0	361	276	115	11	17	0	0	118	1
-3	3	0	4572	4664	31	-9	7	0	325	140	192	6	10	0	196	204	196	-2	14	0	402	383	49	-10	18	0	685	688	93
-1	3	0	1361	1398	17	-7	7	0	417	321	122	8	10	0	216	245	216	0	14	0	0	17	1	-8	18	0	388	417	126
1	3	0	1337	1353	16	-5	7	0	913	814	39	10	10	0	0	60	1	2	14	0	245	342	244	-6	18	0	541	559	72
3	3	0	4466	4355	30	-3	7	0	91	200	91	-11	11	0	0	154	1	4	14	0	225	303	215	-4	18	0	255	225	170
5	3	0	3098	3164	30	-1	7	0	145	17	144	-9	11	0	0	35	1	6	14	0	237	199	196	-2	18	0	441	362	56
7	3	0	2170	2234	27	1	7	0	0	0	1	-7	11	0	771	758	55	8	14	0	137	295	136	0	18	0	0	97	1
9	3	0	786	760	72	3	7	0	101	148	100	-5	11	0	224	190	223	10	14	0	0	91	1	2	18	0	495	492	58
11	3	0	1585	1568	57	5	7	0	702	712	37	-3	11	0	579	572	65	-11	15	0	417	422	166	4	18	0	359	355	62
-10	4	0	281	97	281	7	7	0	411	353	86	-1	11	0	0	55	1	-9	15	0	461	331	120	6	18	0	675	663	48
-8	4	0	279	178	278	9	7	0	0	395	1	1	11	0	0	48	1	-7	15	0	272	20	271	8	18	0	292	390	202
-6	4	0	213	81	213	11	7	0	0	185	1	3	11	0	539	609	42	-5	15	0	409	266	85	10	18	0	609	683	164

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-9	19	0	330	150	184	-9	23	0	207	55	206	-7	27	0	2125	2263	37	-5	31	0	574	442	170	3	35	0	155	389	155
-7	19	0	53	261	53	-7	23	0	474	24	92	-5	27	0	873	893	51	-3	31	0	0	15	1	5	35	0	0	238	1
-5	19	0	203	30	203	-5	23	0	331	31	126	-3	27	0	216	281	215	-1	31	0	381	332	80	7	35	0	614	733	96
-3	19	0	0	186	1	-3	23	0	458	327	81	-1	27	0	1981	1937	40	1	31	0	350	242	144	9	35	0	0	178	1
-1	19	0	164	128	163	-1	23	0	141	158	140	1	27	0	1854	1884	23	3	31	0	271	47	270	-8	36	0	1509	1489	59
1	19	0	242	55	89	1	23	0	328	305	67	3	27	0	499	282	137	5	31	0	412	296	108	-6	36	0	441	394	175
3	19	0	453	71	114	3	23	0	423	369	77	5	27	0	867	844	52	7	31	0	704	696	76	-4	36	0	1768	1774	41
5	19	0	125	166	124	5	23	0	0	55	1	7	27	0	2172	2281	52	9	31	0	136	293	136	-2	36	0	1308	1249	33
7	19	0	352	274	117	7	23	0	0	179	1	9	27	0	1186	1238	62	-8	32	0	404	375	145	0	36	0	6853	6457	46
9	19	0	283	275	283	9	23	0	60	106	59	-10	28	0	806	649	165	-6	32	0	300	121	193	2	36	0	1323	1234	41
-10	20	0	255	185	254	-10	24	0	1435	1372	52	-8	28	0	446	232	143	-4	32	0	549	503	60	4	36	0	1836	1744	39
-8	20	0	277	191	277	-8	24	0	265	156	264	-6	28	0	342	410	149	-2	32	0	212	102	211	6	36	0	207	567	207
-6	20	0	229	187	228	-6	24	0	1748	1842	36	-4	28	0	793	787	56	0	32	0	106	25	105	8	36	0	1619	1548	85
-4	20	0	0	129	1	-4	24	0	2937	3047	25	-2	28	0	232	46	231	2	32	0	307	33	236	-9	37	0	253	193	252
-2	20	0	411	298	54	-2	24	0	792	742	35	0	28	0	399	73	283	4	32	0	456	412	94	-7	37	0	70	80	70
0	20	0	182	49	182	2	24	0	575	574	56	2	28	0	102	150	102	6	32	0	0	225	1	-5	37	0	480	166	104
2	20	0	352	217	85	4	24	0	3059	3180	25	4	28	0	736	771	55	8	32	0	547	427	115	-3	37	0	204	402	204
4	20	0	0	17	1	6	24	0	1883	1872	38	6	28	0	0	243	1	-9	33	0	334	63	248	-1	37	0	314	269	131
6	20	0	382	318	151	8	24	0	192	162	192	8	28	0	316	442	302	-7	33	0	3242	3481	39	1	37	0	483	359	73
8	20	0	310	79	280	10	24	0	1482	1385	65	10	28	0	722	631	115	-5	33	0	1368	1289	43	3	37	0	204	204	204
10	20	0	0	318	1	-9	25	0	514	629	106	-9	29	0	400	234	148	-3	33	0	2215	2333	25	5	37	0	0	225	1
-9	21	0	999	1024	58	-7	25	0	406	299	115	-7	29	0	756	893	65	-1	33	0	3539	3553	29	7	37	0	203	237	203
-7	21	0	1534	1475	41	-5	25	0	0	261	1	-5	29	0	185	183	185	1	33	0	3524	3619	28	9	37	0	183	197	183
-5	21	0	0	26	1	-3	25	0	359	351	73	-3	29	0	0	42	1	3	33	0	2167	2227	33	-8	38	0	475	369	264
-3	21	0	1290	1218	32	-1	25	0	321	177	107	-1	29	0	0	247	1	5	33	0	1301	1337	44	-6	38	0	558	646	97
-1	21	0	666	626	35	1	25	0	356	417	66	1	29	0	258	190	122	7	33	0	3385	3469	40	-4	38	0	239	74	239
1	21	0	631	551	32	3	25	0	301	251	123	3	29	0	0	30	1	9	33	0	117	17	117	-2	38	0	227	149	227
3	21	0	1357	1311	32	5	25	0	50	133	49	5	29	0	84	192	84	-8	34	0	595	478	93	0	38	0	392	17	103
5	21	0	221	28	221	7	25	0	362	201	159	7	29	0	885	954	62	-6	34	0	774	880	113	2	38	0	285	174	229
7	21	0	1529	1506	42	9	25	0	584	351	116	9	29	0	355	334	283	-4	34	0	0	77	1	4	38	0	396	277	134
9	21	0	1133	1022	88	-10	26	0	209	133	209	-10	30	0	652	639	112	-2	34	0	191	99	190	6	38	0	633	569	178
-10	22	0	644	615	95	-8	26	0	601	611	126	-6	30	0	586	492	77	0	34	0	0	65	1	8	38	0	0	451	1
-8	22	0	339	382	229	-6	26	0	584	370	75	-4	30	0	1333	1382	29	2	34	0	25	58	25	-9	39	0	574	404	210
-6	22	0	490	462	88	-4	26	0	192	82	192	-2	30	0	1117	1119	31	4	34	0	0	20	1	-7	39	0	1599	1682	45
-4	22	0	547	553	42	-2	26	0	709	687	39	0	30	0	2560	2657	24	6	34	0	656	699	76	-5	39	0	1787	1807	41
-2	22	0	555	504	43	0	26	0	132	28	132	2	30	0	1124	1201	39	8	34	0	222	324	221	-3	39	0	234	23	233
0	22	0	271	29	89	2	26	0	752	610	64	4	30	0	1481	1550	48	-9	35	0	259	171	259	-1	39	0	488	500	79
2	22	0	549	611	56	4	26	0	0	112	1	6	30	0	488	501	126	-7	35	0	648	505	77	1	39	0	513	523	93
4	22	0	469	468	50	6	26	0	510	460	92	8	30	0	941	929	93	-5	35	0	298	209	234	3	39	0	236	84	235
6	22	0	428	441	77	8	26	0	348	631	348	10	30	0	561	613	157	-3	35	0	482	439	87	5	39	0	1682	1766	78
8	22	0	482	244	123	10	26	0	472	493	202	-9	31	0	348	301	347	-1	35	0	498	531	70	7	39	0	1623	1652	49
10	22	0	285	402	284	-9	27	0	1081	1179	59	-7	31	0	839	841	60	1	35	0	463	505	72	9	39	0	0	408	1

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-8	40	0	318	191	317	8	44	0	99	103	98	-2	50	0	388	378	138	-5	57	0	218	16	218	-1	-59	1	0	144	1
-6	40	0	108	174	107	-7	45	0	1461	1543	52	0	50	0	466	30	465	-3	57	0	574	641	155	1	-59	1	321	46	320
-4	40	0	0	92	1	-5	45	0	1113	1094	88	2	50	0	257	338	257	-1	57	0	380	74	217	3	-59	1	312	10	312
-2	40	0	453	391	89	-3	45	0	0	132	1	4	50	0	0	192	1	1	57	0	402	104	183	-4	-58	1	0	238	1
0	40	0	0	29	1	-1	45	0	207	145	206	6	50	0	0	36	1	3	57	0	512	611	140	-2	-58	1	350	316	349
2	40	0	216	214	216	1	45	0	405	226	183	-5	51	0	226	136	225	5	57	0	0	10	1	0	-58	1	397	14	218
4	40	0	0	47	1	3	45	0	459	130	119	-3	51	0	657	676	76	-4	58	0	0	284	1	2	-58	1	120	129	119
6	40	0	0	23	1	5	45	0	1074	1116	62	-1	51	0	427	387	257	-2	58	0	526	270	191	4	-58	1	0	338	1
8	40	0	364	219	241	7	45	0	1559	1536	53	1	51	0	317	311	316	0	58	0	264	140	263	-5	-57	1	241	334	241
-7	41	0	258	489	257	-6	46	0	293	469	292	3	51	0	726	769	79	2	58	0	168	235	167	-3	-57	1	456	278	162
-5	41	0	597	525	87	-4	46	0	0	189	1	5	51	0	248	65	248	4	58	0	396	271	247	-1	-57	1	1204	1220	70
-3	41	0	407	5	247	-2	46	0	453	265	102	-6	52	0	0	195	1	-3	59	0	0	58	1	1	-57	1	1239	1226	65
-1	41	0	295	176	206	0	46	0	109	31	109	-4	52	0	265	129	265	-1	59	0	147	144	146	3	-57	1	218	398	217
1	41	0	169	51	169	2	46	0	15	305	14	-2	52	0	0	257	1	1	59	0	353	189	294	-4	-56	1	0	7	1
3	41	0	0	51	1	4	46	0	0	118	1	0	52	0	176	88	175	3	59	0	0	277	1	-2	-56	1	293	65	292
5	41	0	493	528	113	6	46	0	354	379	248	2	52	0	189	256	188	-4	60	0	727	710	239	0	-56	1	523	471	130
7	41	0	409	565	176	8	46	0	362	380	361	4	52	0	0	58	1	-2	60	0	917	774	131	2	-56	1	630	538	133
-8	42	0	398	214	187	-7	47	0	113	223	113	6	52	0	220	9	220	0	60	0	1426	1396	64	4	-56	1	565	527	229
-6	42	0	479	326	113	-5	47	0	548	412	105	-5	53	0	150	179	149	2	60	0	770	823	121	-5	-55	1	235	416	234
-4	42	0	0	151	1	-3	47	0	205	135	204	-3	53	0	171	193	171	4	60	0	835	753	99	-3	-55	1	377	130	192
-2	42	0	513	540	81	-1	47	0	320	305	172	-1	53	0	287	35	287	-3	61	0	204	233	204	-1	-55	1	0	142	1
0	42	0	767	702	54	1	47	0	335	97	236	1	53	0	295	68	294	-1	61	0	322	318	322	1	-55	1	369	45	273
2	42	0	504	588	98	3	47	0	0	90	1	3	53	0	0	217	1	1	61	0	324	284	324	3	-55	1	0	76	1
4	42	0	0	91	1	5	47	0	564	568	106	5	53	0	197	14	197	3	61	0	392	208	250	5	-55	1	402	297	235
6	42	0	265	203	265	7	47	0	513	427	208	-6	54	0	291	328	291	-2	62	0	251	68	250	-6	-54	1	2407	2349	45
8	42	0	456	247	167	-6	48	0	983	1006	65	-4	54	0	37	160	37	0	62	0	0	120	1	-4	-54	1	455	421	153
-7	43	0	427	559	147	-4	48	0	1270	1255	49	-2	54	0	503	174	281	2	62	0	269	176	269	-2	-54	1	600	486	104
-5	43	0	333	298	203	-2	48	0	582	522	126	0	54	0	474	402	131	-1	63	0	968	787	119	0	-54	1	751	463	81
-3	43	0	597	165	158	0	48	0	379	180	157	2	54	0	149	154	148	1	63	0	763	736	101	2	-54	1	414	324	217
-1	43	0	546	117	225	2	48	0	725	519	72	4	54	0	304	103	303	0	64	0	230	155	230	4	-54	1	2432	2567	57
1	43	0	263	275	262	4	48	0	1184	1218	55	6	54	0	68	314	67	-1	-63	1	1325	1211	67	-5	-53	1	332	355	332
3	43	0	0	141	1	6	48	0	1137	1118	101	-5	55	0	0	122	1	-2	-62	1	299	58	298	-3	-53	1	306	391	305
5	43	0	301	146	301	-7	49	0	0	273	1	-3	55	0	186	58	186	0	-62	1	318	90	318	-1	-53	1	179	60	178
7	43	0	347	329	265	-5	49	0	738	654	79	-1	55	0	300	210	299	2	-62	1	0	129	1	1	-53	1	672	29	366
-8	44	0	360	83	240	-3	49	0	446	472	112	1	55	0	332	198	331	-3	-61	1	0	121	1	3	-53	1	561	611	119
-6	44	0	415	339	138	-1	49	0	0	192	1	3	55	0	0	118	1	-1	-61	1	361	24	360	5	-53	1	462	573	163
-4	44	0	290	90	290	1	49	0	437	370	158	5	55	0	571	129	131	1	-61	1	0	13	1	-6	-52	1	363	294	250
-2	44	0	191	165	190	3	49	0	432	402	208	-4	56	0	0	127	1	-4	-60	1	0	254	1	-4	-52	1	477	325	130
0	44	0	0	84	1	5	49	0	488	632	131	-2	56	0	467	228	151	-2	-60	1	379	213	241	-2	-52	1	562	486	104
2	44	0	318	135	212	7	49	0	0	224	1	0	56	0	0	37	1	0	-60	1	143	163	142	0	-52	1	501	630	140
4	44	0	0	143	1	-6	50	0	290	100	290	2	56	0	0	202	1	2	-60	1	0	125	1	2	-52	1	731	54	367
6	44	0	544	393	115	-4	50	0	134	59	133	4	56	0	109	138	108	-3	-59	1	68	2	68	4	-52	1	414	40	156

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
6-52	1	424	336	219		2-46	1	136	129	136		3-41	1	267	354	267		-2-36	1	634	612	67		4-32	1	354	295	128	
-7-51	1	2049	2084	50		4-46	1	397	315	143		5-41	1	528	611	102		0-36	1	477	424	72		6-32	1	663	646	75	
-5-51	1	84	211	83		6-46	1	411	33	172		7-41	1	324	17	266		2-36	1	0	114	1		8-32	1	386	272	169	
-3-51	1	2007	2150	42		-7-45	1	222	62	221		-8-40	1	0	154	1		4-36	1	431	377	179		-9-31	1	0	92	1	
-1-51	1	1351	1425	115		-5-45	1	221	156	221		-6-40	1	302	273	301		6-36	1	287	285	286		-7-31	1	165	175	165	
1-51	1	3463	3449	105		-3-45	1	659	562	115		-4-40	1	0	50	1		8-36	1	353	378	220		-5-31	1	140	110	140	
3-51	1	802	692	76		-1-45	1	1779	1750	42		-2-40	1	233	245	232		-9-35	1	374	32	244		-3-31	1	513	392	77	
5-51	1	1614	1458	116		1-45	1	1527	1530	36		0-40	1	399	412	149		-7-35	1	17	112	16		-1-31	1	580	679	47	
-6-50	1	476	406	143		3-45	1	653	715	77		2-40	1	0	79	1		-5-35	1	0	187	1		1-31	1	0	22	1	
-4-50	1	304	29	303		5-45	1	691	727	83		4-40	1	205	335	204		-3-35	1	0	147	1		3-31	1	422	331	78	
-2-50	1	401	395	147		7-45	1	467	275	145		6-40	1	404	77	218		-1-35	1	403	200	85		5-31	1	248	262	247	
0-50	1	183	261	183		-8-44	1	442	399	261		8-40	1	0	33	1		1-35	1	0	29	1		7-31	1	0	144	1	
2-50	1	521	510	102		-6-44	1	0	40	1		-9-39	1	294	137	293		3-35	1	382	220	100		9-31	1	311	124	310	
4-50	1	234	269	233		-4-44	1	0	68	1		-7-39	1	396	352	158		5-35	1	211	12	210		-10-30	1	172	334	171	
6-50	1	548	253	548		-2-44	1	0	42	1		-5-39	1	0	186	1		7-35	1	287	168	286		-8-30	1	721	778	82	
-7-49	1	853	495	181		0-44	1	473	510	107		-3-39	1	914	873	53		9-35	1	339	90	339		-6-30	1	1051	1132	50	
-5-49	1	188	258	188		2-44	1	725	744	57		-1-39	1	995	849	92		-8-34	1	0	73	1		-4-30	1	1641	1593	37	
-3-49	1	199	241	199		4-44	1	138	135	137		1-39	1	983	1002	40		-6-34	1	369	219	162		-2-30	1	251	217	251	
-1-49	1	247	45	247		6-44	1	364	258	191		3-39	1	974	671	175		-4-34	1	0	25	1		0-30	1	936	848	64	
1-49	1	0	25	1		-7-43	1	242	101	241		5-39	1	576	492	87		-2-34	1	96	52	95		2-30	1	1648	1769	26	
3-49	1	348	397	192		-5-43	1	531	676	95		7-39	1	220	237	219		0-34	1	335	296	101		4-30	1	1174	1112	43	
5-49	1	271	76	271		-3-43	1	262	133	262		-8-38	1	88	2	88		2-34	1	176	355	176		6-30	1	835	884	60	
-6-48	1	1351	1369	53		-1-43	1	139	34	139		-6-38	1	256	99	256		4-34	1	347	388	153		8-30	1	557	544	177	
-4-48	1	949	998	60		1-43	1	388	285	110		-4-38	1	0	65	1		6-34	1	226	53	226		-9-29	1	181	164	180	
-2-48	1	1084	1077	53		3-43	1	365	404	213		-2-38	1	0	105	1		8-34	1	0	25	1		-7-29	1	215	36	214	
0-48	1	1590	1628	53		5-43	1	552	439	97		0-38	1	301	159	138		-9-33	1	0	247	1		-5-29	1	568	442	291	
2-48	1	1366	1467	58		7-43	1	323	213	322		2-38	1	105	130	104		-7-33	1	0	2	1		-3-29	1	382	246	98	
4-48	1	1355	1394	69		-8-42	1	340	304	340		4-38	1	108	312	107		-5-33	1	100	159	100		-1-29	1	691	658	60	
6-48	1	428	503	400		-6-42	1	922	1002	63		6-38	1	187	171	187		-3-33	1	1043	1064	44		1-29	1	353	386	80	
-7-47	1	0	352	1		-4-42	1	774	762	133		8-38	1	928	329	405		-1-33	1	337	413	91		3-29	1	121	21	120	
-5-47	1	0	50	1		-2-42	1	1482	1490	41		-9-37	1	356	23	287		1-33	1	612	599	59		5-29	1	75	115	74	
-3-47	1	127	62	126		0-42	1	815	869	52		-7-37	1	348	312	192		3-33	1	0	132	1		7-29	1	444	296	115	
-1-47	1	306	65	306		2-42	1	1040	1117	48		-5-37	1	919	54	418		5-33	1	172	141	172		9-29	1	318	285	317	
1-47	1	545	483	102		4-42	1	1830	1970	39		-3-37	1	276	270	275		7-33	1	604	575	89		-10-28	1	0	61	1	
3-47	1	412	372	135		6-42	1	890	993	67		-1-37	1	0	94	1		9-33	1	329	72	328		-8-28	1	228	77	227	
5-47	1	393	102	169		8-42	1	582	671	198		1-37	1	323	119	118		-10-32	1	216	10	216		-6-28	1	542	435	87	
7-47	1	262	200	261		-9-41	1	184	126	184		3-37	1	250	123	250		-8-32	1	869	382	70		-4-28	1	227	232	226	
-8-46	1	487	541	161		-7-41	1	0	66	1		5-37	1	373	458	147		-6-32	1	47	13	46		-2-28	1	98	56	98	
-6-46	1	327	295	248		-5-41	1	176	204	176		7-37	1	0	48	1		-4-32	1	821	771	55		0-28	1	553	500	49	
-4-46	1	193	184	192		-3-41	1	190	238	189		-8-36	1	272	268	272		-2-32	1	581	566	67		2-28	1	301	313	105	
-2-46	1	362	325	157		-1-41	1	284	385	284		-6-36	1	158	195	158		0-32	1	0	134	1		4-28	1	0	104	1	
0-46	1	134	2	133		1-41	1	138	363	137		-4-36	1	97	186	96		2-32	1	226	145	226		6-28	1	372	127	130	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
8-28	1	298	246	297		-9-23	1	421	282	314		10-20	1	466	409	138		6-16	1	936	1002	51		2-12	1	829	717	65	
-9-27	1	408	262	377		-7-23	1	628	566	79		-11-19	1	0	305	1		8-16	1	555	366	171		4-12	1	1128	1031	37	
-7-27	1	614	619	81		-5-23	1	0	128	1		-9-19	1	188	283	188		10-16	1	189	144	188		6-12	1	905	840	51	
-5-27	1	655	631	70		-3-23	1	459	345	79		-7-19	1	414	207	98		-11-15	1	590	505	210		8-12	1	526	491	95	
-3-27	1	1649	1647	56		-1-23	1	446	333	49		-5-19	1	237	231	136		-9-15	1	555	625	108		10-12	1	0	40	1	
-1-27	1	2675	2770	35		1-23	1	210	209	210		-3-19	1	134	301	133		-7-15	1	3545	3692	30		-11-11	1	844	261	137	
1-27	1	2189	2169	43		3-23	1	104	45	103		-1-19	1	523	584	37		-5-15	1	545	489	45		-9-11	1	0	54	1	
3-27	1	333	315	92		5-23	1	433	277	108		1-19	1	1091	1083	25		-3-15	1	3404	3661	32		-7-11	1	139	72	139	
5-27	1	278	98	234		7-23	1	583	254	151		3-19	1	679	674	73		-1-15	1	2339	2437	20		-5-11	1	180	7	180	
7-27	1	599	475	83		9-23	1	174	249	173		5-19	1	233	104	233		1-15	1	6733	6308	44		-3-11	1	103	157	103	
9-27	1	333	18	239		-10-22	1	0	141	1		7-19	1	387	659	301		3-15	1	2288	2222	30		-1-11	1	153	156	152	
-10-26	1	283	118	282		-8-22	1	673	717	83		9-19	1	225	217	225		5-15	1	2449	2447	33		1-11	1	0	152	1	
-8-26	1	136	27	135		-6-22	1	104	48	104		-10-18	1	2068	1963	61		7-15	1	0	15	1		3-11	1	0	222	1	
-6-26	1	357	291	141		-4-22	1	0	16	1		-8-18	1	1294	1272	60		9-15	1	0	184	1		5-11	1	119	79	119	
-4-26	1	214	36	213		-2-22	1	0	26	1		-6-18	1	6947	6766	47		-10-14	1	0	40	1		7-11	1	314	110	313	
-2-26	1	277	233	140		0-22	1	274	234	87		-4-18	1	1576	1517	55		-8-14	1	69	267	68		9-11	1	241	57	241	
0-26	1	0	18	1		2-22	1	516	511	62		-2-18	1	1430	1279	31		-6-14	1	0	241	1		-10-10	1	627	631	111	
2-26	1	423	384	88		4-22	1	404	343	92		0-18	1	3534	3667	32		-4-14	1	298	233	79		-8-10	1	438	469	96	
4-26	1	324	93	130		6-22	1	789	900	59		2-18	1	5265	4825	36		-2-14	1	198	303	197		-6-10	1	241	371	162	
6-26	1	71	199	70		8-22	1	382	261	381		4-18	1	6007	5865	52		0-14	1	0	152	1		-4-10	1	390	437	73	
8-26	1	0	110	1		10-22	1	467	100	139		6-18	1	2873	2938	36		2-14	1	336	372	62		-2-10	1	0	77	1	
-9-25	1	201	35	201		-11-21	1	580	578	235		8-18	1	2862	3010	94		4-14	1	905	887	41		0-10	1	390	413	42	
-7-25	1	0	215	1		-9-21	1	220	304	220		10-18	1	232	85	231		6-14	1	374	316	130		2-10	1	259	154	84	
-5-25	1	0	289	1		-7-21	1	1860	1934	84		-11-17	1	241	325	240		8-14	1	562	562	88		4-10	1	966	916	69	
-3-25	1	127	189	126		-5-21	1	1090	1126	64		-9-17	1	157	131	157		10-14	1	0	138	1		6-10	1	493	545	83	
-1-25	1	245	12	145		-3-21	1	1227	1301	33		-7-17	1	144	84	143		-11-13	1	0	152	1		8-10	1	384	539	136	
1-25	1	75	50	74		-1-21	1	3541	3600	26		-5-17	1	254	299	114		-9-13	1	227	353	226		10-10	1	0	0	1	
3-25	1	35	87	35		1-21	1	2612	2627	23		-3-17	1	520	540	55		-7-13	1	1192	1157	60		-11-9	1	0	216	1	
5-25	1	131	189	130		3-21	1	368	305	70		-1-17	1	894	863	23		-5-13	1	233	140	203		-9-9	1	341	285	152	
7-25	1	389	26	157		5-21	1	1512	1469	38		1-17	1	988	962	25		-3-13	1	569	569	33		-7-9	1	718	690	47	
9-25	1	404	263	175		7-21	1	383	297	225		3-17	1	697	632	48		-1-13	1	60	56	59		-5-9	1	605	682	42	
-10-24	1	0	19	1		9-21	1	195	243	195		5-17	1	541	484	71		1-13	1	129	139	129		-3-9	1	3081	3250	23	
-8-24	1	485	500	113		-10-20	1	799	662	113		7-17	1	225	25	225		3-13	1	103	160	103		-1-9	1	2435	2533	19	
-6-24	1	348	413	137		-8-20	1	0	71	1		9-17	1	352	420	205		5-13	1	518	574	74		1-9	1	4438	4209	30	
-4-24	1	338	68	131		-6-20	1	2050	2229	35		-10-16	1	484	561	156		7-13	1	360	117	360		3-9	1	506	446	210	
-2-24	1	0	60	1		-4-20	1	0	2	1		-8-16	1	503	555	86		9-13	1	0	26	1		5-9	1	247	22	246	
0-24	1	0	99	1		-2-20	1	392	426	74		-6-16	1	1290	1266	33		-10-12	1	739	859	128		7-9	1	555	473	141	
2-24	1	197	3	196		0-20	1	159	131	158		-4-16	1	267	158	266		-8-12	1	856	794	91		9-9	1	264	276	264	
4-24	1	448	367	112		2-20	1	749	670	33		-2-16	1	338	323	81		-6-12	1	550	514	55		-10-8	1	0	171	1	
6-24	1	346	430	148		4-20	1	962	882	42		0-16	1	723	719	40		-4-12	1	562	631	40		-8-8	1	300	229	155	
8-24	1	0	15	1		6-20	1	284	440	284		2-16	1	0	184	1		-2-12	1	389	447	42		-6-8	1	0	20	1	
10-24	1	435	356	160		8-20	1	788	958	68		4-16	1	230	248	229		0-12	1	624	553	39		-4-8	1	638	636	35	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-2	-8	1	318	271	58	-6	-4	1	417	460	67	-10	0	1	377	119	302	7	3	1	231	83	231	5	7	1	404	358	75
0	-8	1	0	147	1	-4	-4	1	383	405	55	-8	0	1	694	709	54	9	3	1	489	255	112	7	7	1	523	341	286
2	-8	1	485	484	61	-2	-4	1	101	171	100	-6	0	1	0	254	1	-10	4	1	386	427	385	9	7	1	0	37	1
4	-8	1	268	409	151	0	-4	1	127	178	126	-4	0	1	319	351	69	-8	4	1	329	159	134	-10	8	1	431	1	141
6	-8	1	295	329	294	2	-4	1	66	42	65	-2	0	1	392	242	106	-6	4	1	543	453	76	-8	8	1	363	406	134
8	-8	1	194	294	193	4	-4	1	156	295	156	0	0	1	317	324	96	-4	4	1	331	382	64	-6	8	1	148	104	147
10	-8	1	400	400	143	6	-4	1	204	102	203	2	0	1	158	1	157	-2	4	1	0	94	1	-4	8	1	633	674	34
-11	-7	1	0	8	1	8	-4	1	0	308	1	4	0	1	200	261	199	0	4	1	217	126	87	-2	8	1	280	262	62
-9	-7	1	240	344	239	10	-4	1	190	131	190	6	0	1	681	599	49	2	4	1	0	158	1	0	8	1	164	154	164
-7	-7	1	363	315	95	-11	-3	1	327	164	326	8	0	1	280	104	279	4	4	1	305	229	84	2	8	1	456	443	44
-5	-7	1	278	286	145	-9	-3	1	331	297	170	10	0	1	673	576	94	6	4	1	0	276	1	4	8	1	380	314	67
-3	-7	1	747	723	62	-7	-3	1	360	371	153	-11	1	1	242	14	242	8	4	1	0	213	1	6	8	1	274	173	158
-1	-7	1	619	582	24	-5	-3	1	366	331	69	-9	1	1	159	234	158	10	4	1	456	373	152	8	8	1	0	83	1
1	-7	1	0	113	1	-3	-3	1	1310	1336	20	-7	1	1	0	8	1	-11	5	1	0	275	1	10	8	1	343	304	342
3	-7	1	122	222	121	-1	-3	1	1155	1214	16	-5	1	1	379	360	65	-9	5	1	329	88	179	-11	9	1	513	213	128
5	-7	1	378	330	146	1	-3	1	1559	1619	17	-3	1	1	0	35	1	-7	5	1	322	306	106	-9	9	1	175	282	175
7	-7	1	57	292	56	3	-3	1	526	373	46	-1	1	1	110	27	109	-5	5	1	344	396	68	-7	9	1	637	592	83
9	-7	1	278	76	277	5	-3	1	353	233	79	1	1	1	0	47	1	-3	5	1	390	320	49	-5	9	1	539	575	46
-10	-6	1	771	847	82	7	-3	1	0	81	1	3	1	1	119	42	118	-1	5	1	414	410	42	-3	9	1	2993	3065	23
-8	-6	1	745	710	52	9	-3	1	180	285	180	5	1	1	359	62	241	1	5	1	219	32	80	-1	9	1	2409	2436	24
-6	-6	1	1200	1205	29	-10	-2	1	0	158	1	7	1	1	0	56	1	3	5	1	499	546	43	1	9	1	4413	4283	30
-4	-6	1	2780	2856	23	-8	-2	1	193	132	193	9	1	1	324	96	187	5	5	1	486	491	59	3	9	1	540	511	73
-2	-6	1	718	675	23	-6	-2	1	0	257	1	-10	2	1	236	106	236	7	5	1	336	352	137	5	9	1	203	100	202
0	-6	1	555	551	27	-4	-2	1	263	51	84	-8	2	1	259	86	258	9	5	1	425	257	137	7	9	1	596	543	67
2	-6	1	3611	3529	26	-2	-2	1	0	31	1	-6	2	1	64	125	63	-10	6	1	693	769	80	9	9	1	0	369	1
4	-6	1	1915	1907	44	0	-2	1	0	115	1	-4	2	1	114	57	114	-8	6	1	781	734	53	-10	10	1	724	627	149
6	-6	1	1163	1105	42	2	-2	1	268	102	111	-2	2	1	134	27	133	-6	6	1	1165	1149	29	-8	10	1	555	576	85
8	-6	1	973	1011	55	4	-2	1	240	225	113	0	2	1	179	74	114	-4	6	1	2816	2899	23	-6	10	1	324	365	90
10	-6	1	515	409	116	6	-2	1	0	23	1	2	2	1	87	158	87	0	6	1	554	556	34	-4	10	1	302	281	72
-11	-5	1	250	319	250	8	-2	1	251	54	250	4	2	1	296	260	87	2	6	1	3481	3433	25	-2	10	1	49	61	48
-9	-5	1	0	214	1	10	-2	1	0	118	1	6	2	1	442	36	204	4	6	1	1928	1991	23	0	10	1	381	392	53
-7	-5	1	248	293	196	-11	-1	1	319	116	319	8	2	1	0	177	1	6	6	1	1108	1133	35	2	10	1	0	185	1
-5	-5	1	324	348	76	-9	-1	1	81	94	80	10	2	1	407	31	171	8	6	1	1039	1021	56	4	10	1	967	931	42
-3	-5	1	283	319	71	-7	-1	1	93	4	92	-11	3	1	514	152	138	10	6	1	216	388	215	6	10	1	489	335	70
-1	-5	1	396	388	32	-5	-1	1	330	327	75	-9	3	1	327	212	200	-11	7	1	104	94	104	8	10	1	631	587	85
1	-5	1	0	46	1	-3	-1	1	135	65	135	-7	3	1	438	421	76	-9	7	1	391	253	131	10	10	1	225	97	225
3	-5	1	478	433	61	-1	-1	1	0	34	1	-5	3	1	262	154	118	-7	7	1	385	376	81	-11	11	1	402	94	199
5	-5	1	364	420	101	1	-1	1	170	61	118	-3	3	1	1372	1417	41	-5	7	1	275	315	93	-9	11	1	155	91	155
7	-5	1	345	300	242	3	-1	1	274	172	80	-1	3	1	1178	1294	21	-3	7	1	726	741	44	-7	11	1	520	57	357
9	-5	1	280	209	279	5	-1	1	248	124	247	1	3	1	1528	1531	17	-1	7	1	509	503	38	-5	11	1	164	30	163
-10	-4	1	342	325	273	7	-1	1	0	165	1	3	3	1	449	463	48	1	7	1	195	10	110	-3	11	1	235	219	168
-8	-4	1	307	282	142	9	-1	1	142	53	141	5	3	1	0	113	1	3	7	1	230	233	230	-1	11	1	170	195	169

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
1	11	1	180	45	180	-1	15	1	2481	2454	24	-3	19	1	184	99	183	-5	23	1	215	179	214	-3	27	1	1591	1616	25
3	11	1	156	227	155	1	15	1	6708	6401	44	-1	19	1	545	587	44	-3	23	1	269	248	128	-1	27	1	2764	2848	24
5	11	1	167	86	166	3	15	1	2327	2277	33	1	19	1	932	929	26	-1	23	1	433	417	54	1	27	1	2189	2230	23
7	11	1	167	41	167	5	15	1	2522	2617	26	3	19	1	625	680	42	1	23	1	279	295	93	3	27	1	363	359	85
9	11	1	279	181	278	7	15	1	128	29	128	5	19	1	0	43	1	3	23	1	0	15	1	5	27	1	0	23	1
-10	12	1	903	871	65	9	15	1	0	84	1	7	19	1	653	663	67	5	23	1	395	477	101	7	27	1	231	367	230
-8	12	1	635	668	134	-10	16	1	578	438	93	9	19	1	324	440	323	7	23	1	0	157	1	9	27	1	0	33	1
-6	12	1	491	493	56	-8	16	1	587	582	86	-10	20	1	631	706	91	9	23	1	150	113	150	-10	28	1	332	270	285
-4	12	1	601	534	37	-6	16	1	1364	1295	57	-8	20	1	0	46	1	-10	24	1	272	29	271	-8	28	1	163	74	162
-2	12	1	439	406	42	-4	16	1	196	5	196	-6	20	1	2096	2107	25	-8	24	1	460	513	108	-6	28	1	372	375	224
0	12	1	680	663	26	-2	16	1	338	300	74	-4	20	1	257	98	106	-6	24	1	462	514	72	-4	28	1	0	188	1
2	12	1	827	869	29	0	16	1	743	722	28	-2	20	1	340	330	66	-4	24	1	217	206	190	-2	28	1	277	180	111
4	12	1	1234	1201	27	2	16	1	0	122	1	0	20	1	161	5	161	-2	24	1	0	83	1	0	28	1	468	451	78
6	12	1	852	869	44	4	16	1	174	268	174	2	20	1	747	744	33	0	24	1	0	15	1	2	28	1	485	310	55
8	12	1	555	540	87	6	16	1	803	713	46	4	20	1	986	980	39	2	24	1	182	133	181	4	28	1	0	58	1
10	12	1	0	159	1	8	16	1	400	567	139	6	20	1	421	450	93	4	24	1	488	384	64	6	28	1	0	146	1
-11	13	1	531	172	530	10	16	1	0	280	1	8	20	1	1002	972	52	6	24	1	431	531	95	8	28	1	208	72	207
-9	13	1	114	317	113	-11	17	1	485	367	136	10	20	1	0	428	1	8	24	1	0	115	1	-9	29	1	244	205	244
-7	13	1	1201	1203	33	-9	17	1	0	95	1	-11	21	1	539	560	127	10	24	1	344	288	344	-7	29	1	231	191	230
-5	13	1	318	268	79	-7	17	1	0	63	1	-9	21	1	514	419	105	-9	25	1	215	135	214	-5	29	1	398	402	84
-3	13	1	554	581	36	-5	17	1	219	228	164	-7	21	1	1942	1959	36	-7	25	1	454	345	108	-3	29	1	296	378	105
-1	13	1	0	71	1	-3	17	1	607	584	36	-5	21	1	1059	1059	31	-5	25	1	326	225	93	-1	29	1	788	826	43
1	13	1	0	101	1	-1	17	1	968	910	25	-3	21	1	1298	1324	24	-3	25	1	0	137	1	1	29	1	409	278	68
3	13	1	70	139	69	1	17	1	991	918	25	-1	21	1	3532	3624	26	-1	25	1	271	122	100	3	29	1	213	10	212
5	13	1	593	588	52	3	17	1	697	647	47	1	21	1	2445	2542	22	1	25	1	142	29	142	5	29	1	0	98	1
7	13	1	266	49	244	5	17	1	545	515	58	3	21	1	335	206	84	3	25	1	0	57	1	7	29	1	318	274	318
9	13	1	0	21	1	7	17	1	0	37	1	5	21	1	1381	1370	51	5	25	1	172	111	172	9	29	1	286	254	285
-10	14	1	0	118	1	9	17	1	333	408	333	7	21	1	433	398	102	7	25	1	336	217	248	-10	30	1	745	406	184
-8	14	1	0	151	1	-10	18	1	1981	1938	45	9	21	1	242	182	241	9	25	1	0	274	1	-8	30	1	856	786	69
-6	14	1	166	57	165	-8	18	1	1254	1221	75	-10	22	1	167	66	166	-10	26	1	0	156	1	-6	30	1	1159	1133	63
-4	14	1	199	339	199	-6	18	1	7111	6854	48	-8	22	1	554	647	86	-8	26	1	0	45	1	-4	30	1	1610	1632	28
-2	14	1	225	172	154	-4	18	1	1592	1627	23	-6	22	1	359	285	94	-6	26	1	438	478	80	-2	30	1	384	312	77
0	14	1	203	187	115	0	18	1	3434	3437	25	-4	22	1	172	130	171	-4	26	1	0	90	1	0	30	1	886	832	34
2	14	1	417	434	58	2	18	1	5127	4739	35	-2	22	1	0	80	1	-2	26	1	176	264	176	2	30	1	1680	1714	26
6	14	1	305	324	134	4	18	1	5926	5765	41	0	22	1	166	215	166	0	26	1	0	115	1	4	30	1	1149	1106	35
8	14	1	564	606	86	6	18	1	2974	3036	29	2	22	1	402	383	60	2	26	1	247	322	132	6	30	1	912	914	68
10	14	1	212	25	212	8	18	1	2958	3035	32	4	22	1	186	334	186	4	26	1	220	12	220	8	30	1	532	523	321
-11	15	1	731	571	89	10	18	1	455	68	290	6	22	1	835	800	48	6	26	1	186	80	186	-9	31	1	0	128	1
-9	15	1	829	638	64	-11	19	1	349	163	254	8	22	1	215	248	215	8	26	1	0	109	1	-7	31	1	0	120	1
-7	15	1	3458	3606	29	-9	19	1	269	284	268	10	22	1	0	131	1	-9	27	1	393	328	146	-5	31	1	254	105	175
-5	15	1	514	480	77	-7	19	1	486	437	96	-9	23	1	354	176	173	-7	27	1	510	564	98	-3	31	1	538	533	56
-3	15	1	3390	3622	25	-5	19	1	371	419	73	-7	23	1	554	473	93	-5	27	1	625	528	48	-1	31	1	409	390	74

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
1	31	1	177	0	177	7	35	1	162	148	161	0	40	1	544	408	70	-1	45	1	1711	1743	36	-7	51	1	2058	1973	106
3	31	1	491	366	89	9	35	1	443	30	230	2	40	1	417	71	107	1	45	1	1850	1482	253	-5	51	1	255	363	254
5	31	1	388	374	161	-8	36	1	243	265	243	4	40	1	368	301	189	3	45	1	717	787	118	-3	51	1	2147	2164	44
7	31	1	440	65	145	-6	36	1	0	128	1	6	40	1	294	64	294	5	45	1	751	702	85	-1	51	1	1423	1415	41
9	31	1	344	332	343	-4	36	1	0	141	1	8	40	1	0	57	1	7	45	1	379	275	294	1	51	1	3389	3396	41
-10	32	1	0	27	1	-2	36	1	588	565	58	-9	41	1	149	72	148	-8	46	1	555	299	136	3	51	1	762	595	82
-8	32	1	353	305	191	0	36	1	416	401	83	-7	41	1	213	108	212	-6	46	1	411	426	174	5	51	1	1523	1545	80
-6	32	1	0	50	1	2	36	1	240	130	239	-5	41	1	0	294	1	-4	46	1	0	28	1	-6	52	1	0	347	1
-4	32	1	801	857	56	4	36	1	494	474	106	-3	41	1	436	451	96	-2	46	1	779	180	261	-4	52	1	198	151	198
-2	32	1	559	470	55	6	36	1	314	263	313	-1	41	1	296	443	164	0	46	1	348	219	152	-2	52	1	593	538	99
0	32	1	346	66	91	8	36	1	301	286	301	1	41	1	370	388	165	2	46	1	317	54	316	0	52	1	593	551	196
2	32	1	207	74	207	-9	37	1	0	59	1	3	41	1	438	542	126	4	46	1	330	430	253	2	52	1	333	225	277
4	32	1	147	269	146	-7	37	1	463	471	182	5	41	1	573	545	102	6	46	1	0	52	1	4	52	1	376	320	218
6	32	1	535	637	135	-5	37	1	0	121	1	7	41	1	0	5	1	6	52	1	0	287	1	6	52	1	178	231	178
8	32	1	361	267	264	-3	37	1	118	152	117	-8	42	1	45	243	44	-5	47	1	414	40	414	-5	53	1	306	331	305
-9	33	1	303	220	302	-1	37	1	242	130	241	-6	42	1	1084	1016	128	-3	47	1	0	58	1	-3	53	1	308	171	307
-7	33	1	265	94	264	1	37	1	177	122	177	-4	42	1	878	778	78	-1	47	1	337	168	160	-1	53	1	90	55	89
-5	33	1	219	140	219	3	37	1	233	21	233	-2	42	1	1563	1484	95	1	47	1	390	497	162	1	53	1	0	21	1
-3	33	1	1075	1100	35	5	37	1	390	385	157	0	42	1	860	816	49	3	47	1	510	288	115	3	53	1	684	714	97
-1	33	1	360	327	92	7	37	1	0	78	1	2	42	1	1226	1085	205	5	47	1	239	125	239	5	53	1	523	540	153
1	33	1	628	610	51	-8	38	1	0	33	1	4	42	1	1977	1961	63	7	47	1	0	188	1	-6	54	1	2329	2395	47
3	33	1	193	40	193	-6	38	1	0	117	1	6	42	1	928	1003	102	-6	48	1	1384	1415	56	-4	54	1	346	495	345
5	33	1	244	149	243	-4	38	1	0	33	1	8	42	1	539	664	151	-4	48	1	1086	1019	47	-2	54	1	392	416	159
7	33	1	560	569	106	-2	38	1	0	75	1	-7	43	1	0	32	1	-2	48	1	1119	1123	59	0	54	1	630	369	98
9	33	1	0	78	1	0	38	1	533	268	203	-5	43	1	508	382	118	0	48	1	1642	1562	39	2	54	1	390	409	187
-8	34	1	697	26	697	2	38	1	241	147	241	-3	43	1	288	278	203	2	48	1	1530	1497	46	4	54	1	2405	2505	45
-6	34	1	0	188	1	4	38	1	0	181	1	-1	43	1	257	18	256	4	48	1	1314	1395	54	-5	55	1	429	340	223
-4	34	1	0	20	1	6	38	1	418	318	149	1	43	1	209	102	208	6	48	1	388	507	249	-3	55	1	288	80	288
-2	34	1	106	224	105	8	38	1	0	125	1	3	43	1	252	288	252	-7	49	1	721	596	147	-1	55	1	431	40	160
0	34	1	295	273	124	-9	39	1	684	118	683	5	43	1	297	326	296	-5	49	1	503	308	141	1	55	1	389	240	218
2	34	1	456	352	73	-7	39	1	366	269	181	7	43	1	431	169	279	-3	49	1	227	427	226	3	55	1	265	13	265
4	34	1	429	338	121	-5	39	1	189	210	188	-8	44	1	505	502	150	-1	49	1	164	96	163	5	55	1	758	228	446
6	34	1	188	142	188	-3	39	1	821	824	56	-6	44	1	124	160	124	1	49	1	113	174	113	-4	56	1	0	105	1
8	34	1	306	124	305	-1	39	1	926	822	88	-4	44	1	92	242	92	3	49	1	458	464	133	-2	56	1	285	30	285
-9	35	1	0	3	1	1	39	1	1023	1056	40	-2	44	1	437	96	208	5	49	1	141	255	141	0	56	1	758	649	89
-7	35	1	141	100	141	3	39	1	636	611	82	0	44	1	642	598	83	-6	50	1	479	243	157	2	56	1	560	541	158
-5	35	1	317	288	149	5	39	1	187	495	187	2	44	1	657	764	82	-4	50	1	60	68	59	4	56	1	538	603	302
-3	35	1	0	65	1	7	39	1	274	200	273	4	44	1	364	77	180	-2	50	1	377	415	138	-5	57	1	368	362	367
-1	35	1	381	324	92	-8	40	1	0	113	1	6	44	1	0	243	1	0	50	1	412	359	160	-3	57	1	222	346	222
1	35	1	254	16	253	-6	40	1	0	336	1	-7	45	1	0	107	1	2	50	1	443	429	247	-1	57	1	1263	1230	82
3	35	1	326	131	131	-4	40	1	0	31	1	-5	45	1	300	127	300	4	50	1	329	186	329	1	57	1	1280	1220	61
5	35	1	0	189	1	-2	40	1	222	176	221	-3	45	1	480	553	113	6	50	1	1173	309	626	3	57	1	458	392	254

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ		
-4	58	1	949	324	576	-4-54	2	428	179	213		-5-47	2	531	477	111		6-42	2	304	60	303		7-37	2		0	181	1		
-2	58	1	188	54	188	-2-54	2		0	48	1	-3-47	2		0	306	1		-7-41	2	257	352	256		-8-36	2	484	486	143		
0	58	1	147	11	147	0-54	2		0	172	1	-1-47	2	176	243	176		-5-41	2	263	432	262		-6-36	2	1408	1455	47			
2	58	1	173	120	172	2-54	2	257	52	256		1-47	2	306	205	305		-3-41	2	265	223	265		-4-36	2	328	53	164			
4	58	1	460	338	199	4-54	2	941	193	146		3-47	2	229	18	229		-1-41	2	474	365	111		-2-36	2	5850	5849	51			
-3	59	1	241	190	240	-5-53	2	168	193	167		5-47	2	311	9	310		1-41	2		0	207	1		0-36	2	4054	4068	32		
-1	59	1	380	204	267	-3-53	2	208	361	207		-6-46	2	383	406	182		3-41	2		0	189	1		2-36	2	1604	1562	49		
1	59	1		0	225	1	-1-53	2	265	131	265		-4-46	2	387	350	162		5-41	2	447	315	137		4-36	2	2496	2662	48		
3	59	1	238	32	238	1-53	2	272	181	271		-2-46	2	234	359	233		7-41	2	201	272	201		6-36	2	905	812	67			
-4	60	1	215	213	214	3-53	2		0	45	1	0-46	2		0	68	1		-8-40	2		0	134	1		-9-35	2	889	523	221	
-2	60	1	260	187	259	-6-52	2		0	5	1	2-46	2	89	229	89		-6-40	2	426	136	147		-7-35	2	317	240	278			
0	60	1		0	76	1	-4-52	2	172	201	172	4-46	2	198	267	197		-4-40	2	425	268	124		-5-35	2	1241	1191	46			
2	60	1	428	93	220	-2-52	2	358	235	357		6-46	2	319	21	319		-2-40	2	389	346	141		-3-35	2	208	147	208			
-3	61	1	87	235	86	0-52	2		0	110	1	-7-45	2	771	861	123		0-40	2	242	266	241		-1-35	2	740	821	91			
-1	61	1		0	132	1	2-52	2	540	239	163	-5-45	2	827	856	85		2-40	2	380	444	122		1-35	2		0	160	1		
1	61	1	460		1	192	4-52	2	539	48	252	-3-45	2		0	141	1		4-40	2	259	239	259		3-35	2	347	393	160		
-2	62	1	331	105	331		-5-51	2		0	44	1	-1-45	2	714	717	76		6-40	2	305	23	304		5-35	2	276	369	276		
0	62	1	229	169	228		-3-51	2		0	109	1	1-45	2	786	867	90		-9-39	2	262	59	262		7-35	2	326	27	242		
2	62	1		0	159	1	-1-51	2	226	196	225	3-45	2	1126	958	194		-7-39	2	1000	1040	66		-8-34	2	285	451	284			
-1	63	1	1258	1201	129		1-51	2	226	141	225	5-45	2	1119	1187	62		-5-39	2	1600	1640	44		-6-34	2	625	737	129			
-2-60	2		806	693	93		3-51	2	119	242	119	-8-44	2	291	79	290		-3-39	2	342	411	171		-4-34	2	393	431	116			
0-60	2		378	245	378		5-51	2		0	4	1	-6-44	2		0	51	1		-1-39	2	1329	1246	44		-2-34	2	1264	1189	41	
-3-59	2		249	41	249		-6-50	2	191	249	190	-4-44	2	284	38	284		1-39	2	1230	1230	38		0-34	2		58	178	58		
-1-59	2		114	132	114		-4-50	2	698	205	410	-2-44	2	399	305	145		3-39	2	1496	1554	45		2-34	2		258	49	258		
1-59	2		345	43	345		-2-50	2	430	437	147	0-44	2	408	463	146		5-39	2	1613	1673	89		4-34	2		744	689	68		
-4-58	2		0	58	1		0-50	2		0	176	1	2-44	2		0	17	1		7-39	2		49	48	48		6-34	2	233	245	233
-2-58	2		288	115	287		2-50	2	317	76	317	4-44	2		0	2	1		-8-38	2	348	134	291		8-34	2		564	368	129	
0-58	2		0	3	1		4-50	2		0	26	1	6-44	2	293	4	292		-6-38	2		0	180	1		-9-33	2	1220	1064	119	
2-58	2		313	233	312		-7-49	2	434	165	177	-7-43	2		0	222	1		-4-38	2	488	561	344		-7-33	2		431	542	131	
-3-57	2		692	459	204		-5-49	2		0	100	1	-5-43	2	75	386	75		-2-38	2	937	907	55		-5-33	2	3594	3794	40		
-1-57	2		280	158	280		-3-49	2	378	159	167	-3-43	2	205	144	204		0-38	2	1034	1015	41		-3-33	2	2129	2223	34			
1-57	2		490	384	203		-1-49	2	427	404	309	-1-43	2	229	153	229		2-38	2	291	164	197		-1-33	2		583	628	56		
3-57	2		0	25	1		1-49	2	424	315	175	1-43	2	424	33	115		4-38	2	785	689	159		1-33	2	2848	2888	28			
-4-56	2		71	31	70		3-49	2	292	159	292	3-43	2	134	175	134		6-38	2		0	103	1		3-33	2		639	605	71	
-2-56	2		354	62	237		5-49	2	302	204	301	5-43	2	471	369	210		-9-37	2		0	16	1		5-33	2	3766	3929	42		
0-56	2		0	168	1		-6-48	2	490	520	142	-8-42	2		0	209	1		-7-37	2		63	383	63		7-33	2		250	57	250
2-56	2		633	492	140		-4-48	2	813	832	100	-6-42	2	315	86	314		-5-37	2	704	823	74		-10-32	2		178	18	177		
-5-55	2		198	47	197		-2-48	2	1241	1135	79	-4-42	2	345	252	180		-3-37	2	737	776	65		-8-32	2		0	154	1		
-3-55	2		924	121	454		0-48	2	908	940	69	-2-42	2	259	196	259		-1-37	2	1141	1029	39		-6-32	2		325	88	324		
-1-55	2		583	189	210		2-48	2	411	409	170	0-42	2	501	421	106		1-37	2	961	851	55		-4-32	2		363	259	121		
1-55	2		494	136	167		4-48	2	211	23	210	2-42	2	544	305	109		3-37	2		0	89	1		-2-32	2		975	1038	37	
3-55	2		447	64	212		-7-47	2	570	491	129	4-42	2		0	105	1		5-37	2	442	228	131		0-32	2		392	296	86	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
2-32	2	771	722	49		-9-27	2	596	740	111		-3-23	2	565	570	71		-3-19	2	105	82	105		-3-15	2	2046	2058	22	
4-32	2	660	562	81		-7-27	2	933	902	107		-1-23	2	0	74	1		-1-19	2	211	227	163		-1-15	2	1047	1014	30	
6-32	2	555	629	94		-5-27	2	1819	1862	36		1-23	2	381	350	74		1-19	2	157	58	156		1-15	2	1506	1354	24	
8-32	2	0	25	1		-3-27	2	545	502	46		3-23	2	485	484	146		3-19	2	180	51	179		3-15	2	604	491	47	
-9-31	2	465	548	150		-1-27	2	399	479	71		5-23	2	396	264	121		5-19	2	0	81	1		5-15	2	1247	1238	43	
-7-31	2	393	211	287		1-27	2	2057	2111	28		7-23	2	194	57	193		7-19	2	0	247	1		7-15	2	1635	1598	44	
-5-31	2	816	720	59		3-27	2	1004	1009	47		9-23	2	0	98	1		9-19	2	0	232	1		9-15	2	525	445	113	
-3-31	2	799	647	90		5-27	2	971	954	57		-10-22	2	0	77	1		-10-18	2	239	297	239		-10-14	2	496	544	143	
-1-31	2	251	16	160		7-27	2	835	826	73		-8-22	2	505	78	505		-8-18	2	713	768	81		-8-14	2	561	623	79	
1-31	2	324	355	124		-10-26	2	0	196	1		-6-22	2	772	706	166		-6-18	2	254	274	188		-6-14	2	713	700	46	
3-31	2	467	420	96		-8-26	2	52	36	52		-4-22	2	474	402	57		-4-18	2	111	204	111		-4-14	2	704	656	38	
5-31	2	426	227	129		-6-26	2	0	306	1		-2-22	2	660	635	39		-2-18	2	369	296	61		-2-14	2	182	10	182	
7-31	2	241	423	240		-4-26	2	313	222	149		0-22	2	174	148	174		0-18	2	324	40	88		0-14	2	527	569	63	
-10-30	2	479	384	196		-2-26	2	923	930	31		2-22	2	469	412	60		2-18	2	156	89	156		2-14	2	243	160	122	
-8-30	2	369	354	284		0-26	2	468	414	60		4-22	2	316	44	315		4-18	2	916	862	49		4-14	2	123	55	123	
-6-30	2	1604	1610	59		2-26	2	498	456	62		6-22	2	282	195	281		6-18	2	548	360	84		6-14	2	495	590	96	
-4-30	2	1082	1128	44		4-26	2	650	690	69		8-22	2	184	259	184		8-18	2	600	589	91		8-14	2	257	253	256	
-2-30	2	1466	1416	29		6-26	2	235	282	234		-11-21	2	0	186	1		-11-17	2	351	338	351		-11-13	2	954	54	306	
0-30	2	941	810	37		8-26	2	0	51	1		-9-21	2	419	336	148		-9-17	2	147	358	147		-9-13	2	503	600	120	
2-30	2	1544	1554	30		-9-25	2	0	257	1		-7-21	2	0	247	1		-7-17	2	321	279	137		-7-13	2	0	167	1	
4-30	2	437	446	113		-7-25	2	377	506	212		-5-21	2	462	439	66		-5-17	2	351	294	84		-5-13	2	578	512	48	
6-30	2	1224	1291	92		-5-25	2	536	548	78		-3-21	2	665	674	36		-3-17	2	227	79	121		-3-13	2	537	544	41	
8-30	2	762	740	80		-3-25	2	44	35	43		-1-21	2	592	582	72		-1-17	2	237	46	156		-1-13	2	43	161	43	
-9-29	2	332	278	332		-1-25	2	547	588	49		1-21	2	1262	1158	53		1-17	2	277	93	98		1-13	2	727	687	33	
-7-29	2	343	271	343		1-25	2	746	663	41		3-21	2	728	631	53		3-17	2	237	190	184		3-13	2	749	742	36	
-5-29	2	304	339	303		3-25	2	0	17	1		5-21	2	147	449	146		5-17	2	438	447	101		5-13	2	405	436	105	
-3-29	2	282	222	206		5-25	2	275	75	275		7-21	2	453	322	190		7-17	2	239	180	238		7-13	2	646	356	152	
-1-29	2	0	12	1		7-25	2	338	338	194		9-21	2	963	902	65		9-17	2	350	85	195		9-13	2	68	148	68	
1-29	2	82	156	81		9-25	2	352	280	199		-10-20	2	173	238	173		-10-16	2	159	256	158		-10-12	2	393	454	217	
3-29	2	264	230	264		-10-24	2	0	140	1		-8-20	2	0	57	1		-8-16	2	402	485	141		-8-12	2	1597	1629	34	
5-29	2	499	608	125		-8-24	2	0	84	1		-6-20	2	104	88	103		-6-16	2	110	52	110		-6-12	2	2373	2534	26	
7-29	2	223	150	223		-6-24	2	1104	1096	45		-4-20	2	0	13	1		-4-16	2	0	89	1		-4-12	2	2161	2198	23	
-10-28	2	431	263	430		-4-24	2	1762	1831	37		-2-20	2	139	77	139		-2-16	2	227	270	115		-2-12	2	1942	1985	21	
-8-28	2	175	173	175		-2-24	2	2441	2539	23		0-20	2	576	556	44		0-16	2	344	321	69		0-12	2	89	279	88	
-6-28	2	476	692	119		0-24	2	1663	1681	24		2-20	2	0	72	1		2-16	2	643	658	49		2-12	2	1876	1872	24	
-4-28	2	579	517	67		2-24	2	731	722	59		4-20	2	0	3	1		4-16	2	306	70	146		4-12	2	2554	2434	34	
-2-28	2	450	502	62		4-24	2	599	386	75		6-20	2	366	183	366		6-16	2	420	80	131		6-12	2	405	388	119	
0-28	2	0	57	1		6-24	2	176	17	176		8-20	2	355	80	355		8-16	2	510	591	181		8-12	2	1519	1422	68	
2-28	2	372	254	94		8-24	2	921	376	348		-11-19	2	590	163	394		-11-15	2	699	648	129		-11-11	2	244	101	243	
4-28	2	492	525	296		-9-23	2	154	49	153		-9-19	2	211	158	210		-9-15	2	1074	1028	57		-9-11	2	1017	1073	49	
6-28	2	510	530	99		-7-23	2	0	198	1		-7-19	2	112	16	112		-7-15	2	254	211	253		-7-11	2	341	446	116	
8-28	2	635	528	96		-5-23	2	676	605	59		-5-19	2	172	55	172		-5-15	2	744	739	39		-5-11	2	405	423	70	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-3	-11	2	737	708	48	-1	-7	2	0	84	1	-1	-3	2	171	51	171	-3	1	2	1360	1297	29	-3	5	2	819	672	71
-1	-11	2	296	269	77	1	-7	2	352	285	61	1	-3	2	424	24	48	-1	1	2	413	424	47	-1	5	2	0	106	1
1	-11	2	868	817	30	3	-7	2	526	497	48	3	-3	2	660	618	38	1	1	2	278	327	96	1	5	2	513	539	41
3	-11	2	299	122	91	5	-7	2	446	456	90	5	-3	2	5368	5189	38	3	1	2	789	750	34	3	5	2	316	240	82
5	-11	2	275	65	274	7	-7	2	659	611	78	7	-3	2	961	997	56	5	1	2	1540	1642	29	5	5	2	1218	1184	78
7	-11	2	121	331	121	9	-7	2	433	195	134	9	-3	2	1059	1089	80	7	1	2	203	9	203	7	5	2	156	169	155
9	-11	2	118	45	117	-10	-6	2	0	35	1	-10	-2	2	516	470	112	9	1	2	182	515	182	9	5	2	358	500	218
-10	-10	2	394	213	200	-8	-6	2	0	125	1	-8	-2	2	457	569	91	-10	2	2	625	433	99	-10	6	2	0	79	1
-8	-10	2	600	580	69	-6	-6	2	488	509	63	-6	-2	2	1536	1512	28	-8	2	2	588	596	66	-8	6	2	24	62	23
-6	-10	2	1067	961	33	-4	-6	2	50	104	50	-4	-2	2	652	587	38	-6	2	2	1539	1549	49	-6	6	2	429	487	71
-4	-10	2	203	8	203	-2	-6	2	421	410	62	-2	-2	2	932	958	25	-4	2	2	668	669	63	-4	6	2	0	138	1
-2	-10	2	0	123	1	0	-6	2	171	42	171	0	-2	2	0	106	1	-2	2	2	944	859	24	-2	6	2	529	454	49
0	-10	2	349	289	209	2	-6	2	255	302	98	2	-2	2	305	241	74	0	2	2	239	209	85	0	6	2	0	31	1
2	-10	2	406	267	62	4	-6	2	321	254	109	4	-2	2	509	515	54	2	2	2	362	366	61	2	6	2	312	225	75
4	-10	2	349	231	88	6	-6	2	710	741	67	6	-2	2	160	31	160	4	2	2	452	370	62	4	6	2	269	150	119
6	-10	2	197	136	197	8	-6	2	672	557	80	8	-2	2	209	201	208	6	2	2	118	31	118	6	6	2	730	709	60
8	-10	2	427	322	426	-11	-5	2	354	210	354	-11	-1	2	586	556	135	8	2	2	244	69	243	8	6	2	611	419	94
-11	-9	2	588	545	202	-9	-5	2	1023	982	46	-9	-1	2	554	510	82	-11	3	2	241	533	241	-11	7	2	435	379	195
-9	-9	2	1887	1865	45	-7	-5	2	120	198	119	-7	-1	2	858	888	53	-9	3	2	1686	1607	42	-9	7	2	726	627	65
-7	-9	2	1192	1181	35	-5	-5	2	817	804	35	-5	-1	2	390	372	67	-7	3	2	1248	1196	34	-7	7	2	595	633	59
-5	-9	2	352	342	77	-3	-5	2	692	653	40	-3	-1	2	1346	1453	22	-5	3	2	2159	2336	24	-5	7	2	290	84	102
-3	-9	2	2166	2113	21	-1	-5	2	171	41	171	-1	-1	2	554	516	35	-3	3	2	3149	3124	24	-3	7	2	266	169	82
-1	-9	2	150	42	149	1	-5	2	385	398	55	1	-1	2	270	343	77	-1	3	2	0	112	1	-1	7	2	188	59	187
3	-9	2	160	80	160	3	-5	2	190	23	190	3	-1	2	855	787	31	1	3	2	509	214	79	1	7	2	226	262	105
5	-9	2	2774	2744	35	5	-5	2	1197	1168	34	5	-1	2	1552	1431	34	3	3	2	705	705	37	3	7	2	328	270	80
7	-9	2	1667	1686	65	7	-5	2	498	333	99	7	-1	2	318	167	192	5	3	2	5233	5025	37	5	7	2	530	454	64
9	-9	2	531	548	113	9	-5	2	420	477	137	9	-1	2	431	432	153	7	3	2	1048	951	53	7	7	2	780	695	68
-10	-8	2	0	3	1	-10	-4	2	303	60	303	-10	0	2	1070	1136	65	9	3	2	951	1034	163	9	7	2	299	236	299
-8	-8	2	0	11	1	-8	-4	2	313	136	151	-8	0	2	1610	1218	305	-10	4	2	303	38	302	-10	8	2	0	62	1
-6	-8	2	265	83	149	-6	-4	2	658	655	48	-6	0	2	5089	4965	36	-8	4	2	174	15	174	-8	8	2	263	173	262
-4	-8	2	185	110	185	-4	-4	2	171	219	170	-4	0	2	3137	3198	25	-6	4	2	529	491	57	-6	8	2	167	139	166
-2	-8	2	104	178	103	-2	-4	2	214	96	113	-2	0	2	8580	8087	55	-4	4	2	216	20	216	-4	8	2	244	30	244
0	-8	2	0	72	1	0	-4	2	546	527	38	0	0	2	3565	3436	26	-2	4	2	106	106	105	-2	8	2	274	161	99
2	-8	2	685	682	35	2	-4	2	474	408	48	2	0	2	4977	4868	34	0	4	2	569	504	32	0	8	2	230	13	150
4	-8	2	274	233	115	4	-4	2	222	64	180	4	0	2	2495	2565	25	2	4	2	413	404	52	2	8	2	682	685	37
6	-8	2	465	335	95	6	-4	2	0	118	1	6	0	2	2076	2155	41	4	4	2	266	30	129	4	8	2	297	296	111
8	-8	2	625	570	115	8	-4	2	354	264	178	8	0	2	1932	2003	42	6	4	2	416	377	95	6	8	2	484	402	81
-11	-7	2	203	449	202	-11	-3	2	503	527	172	10	0	2	1812	1579	53	8	4	2	480	466	116	8	8	2	572	595	92
-9	-7	2	589	515	76	-9	-3	2	1659	1603	45	-11	1	2	332	418	331	-11	5	2	198	206	197	-11	9	2	511	565	148
-7	-7	2	594	608	59	-7	-3	2	1384	1387	32	-9	1	2	507	486	89	-9	5	2	922	818	74	-9	9	2	1940	1969	35
-5	-7	2	0	30	1	-5	-3	2	2100	2279	23	-7	1	2	769	752	47	-7	5	2	341	127	111	-7	9	2	1242	1158	36
-3	-7	2	213	57	125	-3	-3	2	3130	3131	24	-5	1	2	233	351	139	-5	5	2	701	762	39	-5	9	2	419	470	63

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-3	9	2	2205	2263	21	-3	13	2	488	453	43	-1	17	2	56	100	55	-1	21	2	561	600	44	3	25	2	359	50	209
-1	9	2	146	129	146	-1	13	2	192	137	191	1	17	2	0	12	1	1	21	2	1243	1172	27	5	25	2	126	104	126
1	9	2	679	558	53	1	13	2	667	632	62	3	17	2	0	63	1	3	21	2	668	641	50	7	25	2	266	217	266
3	9	2	0	158	1	3	13	2	696	674	42	5	17	2	304	230	147	5	21	2	386	422	109	9	25	2	0	125	1
5	9	2	2802	2923	36	5	13	2	515	499	69	7	17	2	231	257	230	7	21	2	180	293	180	-10	26	2	0	247	1
7	9	2	1914	1798	42	7	13	2	569	672	83	9	17	2	268	51	268	9	21	2	845	862	139	-8	26	2	0	9	1
9	9	2	489	581	133	9	13	2	419	233	349	-10	18	2	469	340	146	-10	22	2	195	133	195	-6	26	2	373	321	101
-10	10	2	0	150	1	-10	14	2	506	382	131	-8	18	2	673	686	72	-8	22	2	0	182	1	-4	26	2	435	510	102
-8	10	2	552	536	74	-8	14	2	661	614	59	-6	18	2	0	96	1	-6	22	2	622	603	54	-2	26	2	962	938	32
-6	10	2	945	968	65	-6	14	2	693	663	46	-4	18	2	220	165	180	-4	22	2	432	414	65	0	26	2	274	210	125
-4	10	2	0	82	1	-4	14	2	602	656	41	-2	18	2	177	249	176	-2	22	2	603	606	40	2	26	2	445	421	72
-2	10	2	220	193	165	-2	14	2	161	181	161	0	18	2	284	162	86	0	22	2	303	224	89	4	26	2	573	599	69
0	10	2	296	347	94	0	14	2	516	459	40	2	18	2	148	97	147	2	22	2	315	319	100	6	26	2	427	371	117
2	10	2	250	333	114	2	14	2	242	192	127	4	18	2	863	781	57	4	22	2	165	251	164	8	26	2	0	117	1
4	10	2	436	408	73	4	14	2	57	193	56	6	18	2	316	382	316	6	22	2	194	4	193	-9	27	2	707	588	89
6	10	2	303	9	161	6	14	2	582	391	105	8	18	2	647	647	101	8	22	2	203	351	202	-7	27	2	861	814	47
8	10	2	375	207	215	8	14	2	412	418	156	-11	19	2	0	18	1	-9	23	2	0	27	1	-5	27	2	1808	1819	27
-11	11	2	409	233	210	-11	15	2	543	641	135	-9	19	2	0	65	1	-7	23	2	308	72	138	-3	27	2	434	369	97
-9	11	2	1202	1178	54	-9	15	2	1079	1054	57	-7	19	2	141	0	140	-5	23	2	722	679	43	-1	27	2	372	364	90
-7	11	2	418	397	104	-7	15	2	0	262	1	-5	19	2	255	107	181	-3	23	2	510	494	53	1	27	2	2015	2073	25
-5	11	2	391	288	95	-5	15	2	711	737	40	-3	19	2	0	38	1	-1	23	2	290	324	93	3	27	2	1102	1044	37
-3	11	2	761	759	34	-3	15	2	1918	2007	31	-1	19	2	321	300	74	1	23	2	259	318	130	5	27	2	986	930	47
-1	11	2	223	178	168	-1	15	2	1032	1017	33	1	19	2	36	100	36	3	23	2	263	318	262	7	27	2	895	795	75
1	11	2	913	855	31	3	15	2	694	584	47	3	19	2	0	114	1	5	23	2	314	143	165	-10	28	2	235	253	235
3	11	2	204	265	203	5	15	2	1136	1077	37	5	19	2	141	154	140	7	23	2	144	266	144	-8	28	2	0	196	1
5	11	2	189	249	189	7	15	2	1525	1542	38	7	19	2	0	13	1	9	23	2	135	7	135	-6	28	2	626	637	57
7	11	2	339	213	189	9	15	2	404	465	206	9	19	2	0	152	1	-10	24	2	249	95	249	-4	28	2	502	543	62
9	11	2	0	21	1	-10	16	2	380	285	198	-10	20	2	359	201	271	-8	24	2	0	103	1	-2	28	2	456	438	63
-10	12	2	651	444	93	-8	16	2	425	495	98	-8	20	2	217	17	217	-6	24	2	1041	892	62	0	28	2	224	14	224
-8	12	2	1653	1648	65	-6	16	2	202	114	201	-6	20	2	0	0	1	-4	24	2	1767	1737	69	2	28	2	327	232	111
-6	12	2	2439	2520	53	-4	16	2	0	12	1	-4	20	2	237	54	149	-2	24	2	2446	2528	23	4	28	2	564	526	69
-4	12	2	2192	2335	23	-2	16	2	294	260	75	-2	20	2	80	145	79	0	24	2	1644	1690	25	6	28	2	534	524	90
-2	12	2	1961	1946	42	0	16	2	406	332	55	0	20	2	540	544	52	2	24	2	789	816	41	8	28	2	361	384	361
0	12	2	174	125	173	2	16	2	650	547	54	2	20	2	0	116	1	4	24	2	456	437	95	-9	29	2	474	285	145
2	12	2	1903	1967	30	4	16	2	0	278	1	4	20	2	126	157	125	6	24	2	0	14	1	-7	29	2	263	243	263
4	12	2	2544	2532	34	6	16	2	0	1	1	6	20	2	255	223	255	8	24	2	388	347	280	-5	29	2	240	159	240
6	12	2	532	418	76	8	16	2	284	472	284	8	20	2	0	23	1	-9	25	2	543	222	237	-3	29	2	158	124	157
8	12	2	1483	1351	63	-11	17	2	293	225	292	-11	21	2	0	197	1	-7	25	2	522	494	74	-1	29	2	194	66	193
-11	13	2	342	288	342	-9	17	2	463	350	183	-9	21	2	424	410	155	-5	25	2	613	593	52	1	29	2	124	123	124
-9	13	2	414	443	215	-7	17	2	310	244	139	-7	21	2	0	224	1	-3	25	2	325	211	90	3	29	2	128	145	128
-7	13	2	354	401	106	-5	17	2	407	337	171	-5	21	2	386	446	133	-1	25	2	396	424	69	5	29	2	573	622	81
-5	13	2	590	575	47	-3	17	2	0	115	1	-3	21	2	665	667	39	1	25	2	801	729	39	7	29	2	0	173	1

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-10	30	2	104	404	104	0	34	2	0	133	1	-3	39	2	388	490	104	2	44	2	128	206	128	4	50	2	0	69	1
-8	30	2	531	312	109	2	34	2	303	98	157	-1	39	2	1163	1102	39	4	44	2	399	194	213	-5	51	2	0	106	1
-6	30	2	1624	1553	73	4	34	2	688	757	63	1	39	2	1221	1159	38	6	44	2	198	112	198	-3	51	2	329	159	301
-4	30	2	1033	1065	56	6	34	2	0	350	1	3	39	2	1594	1521	37	-7	45	2	921	879	91	-1	51	2	245	157	244
-2	30	2	1611	1591	27	8	34	2	314	242	314	5	39	2	1670	1600	48	-5	45	2	809	876	98	1	51	2	511	221	143
0	30	2	887	872	39	-9	35	2	674	489	108	7	39	2	135	89	134	-3	45	2	190	186	189	3	51	2	357	174	356
2	30	2	1655	1590	30	-7	35	2	288	459	288	-8	40	2	0	179	1	-1	45	2	696	606	65	5	51	2	387	113	386
4	30	2	533	550	81	-5	35	2	1231	1322	37	-6	40	2	438	198	268	1	45	2	868	870	72	-6	52	2	0	122	1
6	30	2	1370	1284	51	-3	35	2	141	86	141	-4	40	2	283	266	202	3	45	2	1070	1005	66	-4	52	2	408	232	214
8	30	2	622	749	138	-1	35	2	769	619	52	-2	40	2	303	393	163	5	45	2	1222	1191	68	-2	52	2	366	91	366
-9	31	2	526	495	127	1	35	2	0	22	1	0	40	2	184	282	183	-6	46	2	0	416	1	0	52	2	297	24	296
-7	31	2	241	213	240	3	35	2	409	278	105	2	40	2	426	325	107	-4	46	2	482	382	104	2	52	2	193	299	192
-5	31	2	871	826	42	5	35	2	365	311	202	4	40	2	407	273	180	-2	46	2	320	387	169	4	52	2	0	48	1
-3	31	2	728	768	57	7	35	2	0	109	1	6	40	2	0	74	1	0	46	2	352	85	148	-5	53	2	0	241	1
-1	31	2	120	80	119	-8	36	2	448	403	159	-7	41	2	1075	318	382	2	46	2	230	279	230	-3	53	2	436	202	164
1	31	2	432	372	90	-6	36	2	1459	1369	35	-5	41	2	280	231	279	4	46	2	329	323	329	-1	53	2	0	23	1
3	31	2	397	436	100	-4	36	2	237	187	236	-3	41	2	46	222	46	6	46	2	0	212	1	1	53	2	366	312	316
5	31	2	370	384	135	-2	36	2	5800	5834	41	-1	41	2	327	111	147	-7	47	2	572	636	208	3	53	2	286	44	285
7	31	2	91	286	91	0	36	2	4073	4207	32	1	41	2	237	192	236	-5	47	2	426	389	159	-4	54	2	0	188	1
-10	32	2	27	185	26	2	36	2	1606	1533	33	3	41	2	140	284	140	-3	47	2	388	221	129	-2	54	2	0	79	1
-8	32	2	0	60	1	4	36	2	2586	2583	31	5	41	2	188	396	188	-1	47	2	360	67	150	0	54	2	270	118	269
-6	32	2	88	179	87	6	36	2	985	892	72	7	41	2	383	160	383	1	47	2	0	70	1	2	54	2	261	15	260
-4	32	2	168	120	167	-9	37	2	224	139	224	-8	42	2	371	109	371	3	47	2	237	142	236	4	54	2	444	153	260
-2	32	2	1025	956	36	-7	37	2	319	407	274	-6	42	2	0	7	1	5	47	2	258	67	257	-5	55	2	150	81	150
0	32	2	329	299	112	-5	37	2	761	684	52	-4	42	2	319	210	165	-6	48	2	606	519	174	-3	55	2	0	180	1
2	32	2	827	855	47	-3	37	2	644	572	66	-2	42	2	401	274	111	-4	48	2	1186	732	315	-1	55	2	207	214	207
4	32	2	521	420	80	-1	37	2	1160	1257	38	0	42	2	540	511	81	-2	48	2	1215	1199	45	1	55	2	0	97	1
6	32	2	618	575	103	1	37	2	863	850	48	2	42	2	352	221	155	0	48	2	889	963	58	3	55	2	424	80	424
8	32	2	0	24	1	3	37	2	123	33	122	4	42	2	206	86	205	2	48	2	513	441	138	-4	56	2	0	58	1
-9	33	2	1142	1112	62	5	37	2	409	460	169	6	42	2	0	4	1	4	48	2	429	80	209	-2	56	2	0	44	1
-7	33	2	303	501	302	7	37	2	0	38	1	-7	43	2	46	242	45	-7	49	2	249	10	248	0	56	2	180	216	180
-5	33	2	3677	3862	31	-8	38	2	278	125	278	-5	43	2	370	333	140	-5	49	2	343	76	342	2	56	2	453	341	223
-3	33	2	2092	2138	39	-6	38	2	399	220	118	-3	43	2	275	71	274	-3	49	2	460	317	209	-3	57	2	630	501	135
-1	33	2	793	737	59	-4	38	2	231	402	230	-1	43	2	298	359	198	-1	49	2	289	412	288	-1	57	2	341	167	340
1	33	2	2798	2878	27	-2	38	2	886	799	85	1	43	2	262	38	261	1	49	2	344	359	343	1	57	2	602	319	165
3	33	2	687	722	67	0	38	2	1070	874	50	3	43	2	0	152	1	3	49	2	575	212	133	3	57	2	0	5	1
5	33	2	3871	3899	34	2	38	2	397	59	111	5	43	2	337	222	337	5	49	2	609	126	608	-4	58	2	380	5	379
7	33	2	318	69	317	4	38	2	685	761	92	-8	44	2	0	94	1	-6	50	2	327	170	326	-2	58	2	78	107	77
-8	34	2	675	481	90	6	38	2	0	151	1	-6	44	2	79	174	79	-4	50	2	858	357	77	0	58	2	379	115	378
-6	34	2	754	745	54	-9	39	2	0	29	1	-4	44	2	288	9	253	-2	50	2	381	334	149	2	58	2	540	320	203
-4	34	2	489	482	74	-7	39	2	941	934	71	-2	44	2	347	367	140	0	50	2	150	47	149	-3	59	2	0	214	1
-2	34	2	1273	1247	55	-5	39	2	1542	1565	47	0	44	2	469	432	99	2	50	2	0	160	1	-1	59	2	476	118	254

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
1 59	2		0	91	1	3-47	3		677	447	103	-4-40	3		175	214	174	5-35	3		143	312	143	-9-29	3		236	366	235
-2 60	2		584	647	222	-6-46	3		429	404	182	-2-40	3		680	525	101	-8-34	3		491	143	228	-7-29	3		353	249	204
0 60	2		457	240	307	-4-46	3		0	194	1	0-40	3		495	492	141	-6-34	3		150	368	150	-5-29	3		292	217	248
-2-56	3		789	167	788	-2-46	3		231	134	231	2-40	3		438	246	309	-4-34	3		162	371	161	-3-29	3		0	154	1
0-56	3		557	110	215	0-46	3		365	413	244	4-40	3		204	161	204	-2-34	3		301	72	229	-1-29	3		425	441	84
-3-55	3		359	282	358	2-46	3		0	305	1	-7-39	3		387	290	206	0-34	3		402	55	111	1-29	3		575	535	66
-1-55	3		690	624	157	4-46	3		0	48	1	-5-39	3		570	652	133	2-34	3		322	315	207	3-29	3		503	315	99
1-55	3		0	3	1	-7-45	3		569	602	135	-3-39	3		678	581	77	4-34	3		199	228	198	5-29	3		250	212	249
-4-54	3		599	529	132	-5-45	3		701	712	92	-1-39	3		455	482	222	6-34	3		0	144	1	7-29	3		270	18	269
-2-54	3		1908	1874	52	-3-45	3		871	990	142	1-39	3		324	356	172	-9-33	3		419	154	230	-10-28	3		220	113	219
0-54	3		0	120	1	-1-45	3		617	663	98	3-39	3		529	541	174	-7-33	3		166	263	166	-8-28	3		173	328	173
-3-53	3		629	700	132	1-45	3		725	566	116	5-39	3		81	121	81	-5-33	3		0	34	1	-6-28	3		0	26	1
-1-53	3		1160	1100	71	3-45	3		640	493	393	-8-38	3		310	14	310	-3-33	3		181	351	180	-4-28	3		696	55	100
1-53	3		384	293	384	-6-44	3		410	424	183	-6-38	3		128	131	127	-1-33	3		1201	1151	41	-2-28	3		454	443	79
-4-52	3		464	30	180	-4-44	3		511	359	208	-4-38	3		0	206	1	1-33	3		542	485	73	0-28	3		293	106	148
-2-52	3		990	1012	91	-2-44	3		297	94	297	-2-38	3		0	208	1	3-33	3		0	191	1	2-28	3		234	124	233
0-52	3		323	336	322	0-44	3		253	10	252	0-38	3		264	313	263	5-33	3		151	5	150	4-28	3		363	417	332
2-52	3		725	645	138	2-44	3		56	267	55	2-38	3		239	39	238	-8-32	3		0	8	1	6-28	3		291	307	290
-5-51	3		1649	1570	80	4-44	3		334	67	334	4-38	3		0	11	1	-6-32	3		0	192	1	-9-27	3		492	417	153
-3-51	3		369	200	251	-7-43	3		346	302	346	6-38	3		171	196	171	-4-32	3		0	40	1	-7-27	3		546	465	107
-1-51	3		2882	2830	43	-5-43	3		455	418	198	-7-37	3		137	174	136	-2-32	3		0	255	1	-5-27	3		757	808	64
1-51	3		674	7	146	-3-43	3		845	692	216	-5-37	3		290	304	289	0-32	3		801	758	56	-3-27	3		1600	1617	37
3-51	3		691	614	122	-1-43	3		170	433	170	-3-37	3		0	41	1	2-32	3		274	138	274	-1-27	3		1981	1955	31
-4-50	3		547	561	131	1-43	3		478	519	118	-1-37	3		530	157	192	4-32	3		377	15	205	1-27	3		1105	1059	38
-2-50	3		587	320	179	3-43	3		0	110	1	1-37	3		237	237	236	6-32	3		0	159	1	3-27	3		305	158	231
0-50	3		434	425	204	5-43	3		183	424	183	3-37	3		429	306	240	-9-31	3		250	390	249	5-27	3		1079	1077	54
2-50	3		904	604	110	-8-42	3		673	741	119	5-37	3		0	5	1	-7-31	3		490	293	388	7-27	3		422	389	161
-5-49	3		627	509	111	-6-42	3		63	187	63	-8-36	3		181	162	181	-5-31	3		0	3	1	-10-26	3		0	36	1
-3-49	3		132	213	132	-4-42	3		424	503	225	-6-36	3		0	99	1	-3-31	3		334	163	192	-8-26	3		449	445	332
-1-49	3		558	537	128	-2-42	3		813	886	69	-4-36	3		362	424	155	-1-31	3		0	84	1	-6-26	3		189	72	188
1-49	3		353	419	353	0-42	3		809	830	74	-2-36	3		533	499	93	1-31	3		111	140	111	-4-26	3		251	31	251
3-49	3		205	215	204	2-42	3		1432	1363	50	0-36	3		197	15	196	3-31	3		302	71	301	-2-26	3		282	97	149
-6-48	3		716	681	101	4-42	3		970	866	101	2-36	3		211	4	210	5-31	3		389	97	165	0-26	3		0	218	1
-4-48	3		1007	1090	80	-7-41	3		0	25	1	4-36	3		297	315	297	7-31	3		261	268	261	2-26	3		298	254	148
-2-48	3		1153	1191	91	-5-41	3		221	242	220	6-36	3		208	251	208	-8-30	3		0	6	1	4-26	3		697	568	73
0-48	3		1050	1010	73	-3-41	3		42	306	42	-9-35	3		376	118	376	-6-30	3		972	955	73	6-26	3		580	599	101
2-48	3		1004	1184	93	-1-41	3		769	730	74	-7-35	3		0	63	1	-4-30	3		962	910	52	-9-25	3		311	105	310
4-48	3		303	171	302	1-41	3		297	198	297	-5-35	3		0	54	1	-2-30	3		0	72	1	-7-25	3		447	237	128
-5-47	3		298	13	298	3-41	3		286	140	285	-3-35	3		0	44	1	0-30	3		1789	1655	31	-5-25	3		208	352	207
-3-47	3		578	409	126	5-41	3		182	156	182	-1-35	3		342	119	126	2-30	3		1738	1637	51	-3-25	3		309	129	120
-1-47	3		0	399	1	-8-40	3		0	227	1	1-35	3		314	356	171	4-30	3		1281	1237	51	-1-25	3		0	114	1
1-47	3		0	152	1	-6-40	3		270	91	269	3-35	3		0	345	1	6-30	3		238	516	238	1-25	3		140	12	140

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
3-25	3	350	51	349		-4-20	3	349	366	135		4-16	3	309	257	308		-11-11	3	335	177	334		-7 -7	3	352	255	118	
5-25	3	0	64	1		-2-20	3	667	507	68		6-16	3	512	387	103		-9-11	3	380	296	170		-5 -7	3	691	619	46	
7-25	3	729	158	248		0-20	3	242	173	192		8-16	3	4	328	4		-7-11	3	284	168	182		-3 -7	3	372	354	85	
-10-24	3	0	11	1		2-20	3	65	61	65		-9-15	3	1906	1892	46		-5-11	3	0	110	1		-1 -7	3	469	434	57	
-8-24	3	726	414	121		4-20	3	585	439	83		-7-15	3	824	788	52		-3-11	3	117	36	117		1 -7	3	474	472	59	
-6-24	3	312	245	311		6-20	3	494	394	111		-5-15	3	2392	2431	33		-1-11	3	0	58	1		3 -7	3	210	121	210	
-4-24	3	0	68	1		8-20	3	264	106	263		-3-15	3	324	72	143		1-11	3	128	159	127		5 -7	3	219	128	218	
-2-24	3	292	279	136		-9-19	3	938	978	70		-1-15	3	5302	5227	37		3-11	3	189	1	189		7 -7	3	0	4	1	
0-24	3	134	56	134		-7-19	3	780	960	67		1-15	3	0	171	1		5-11	3	212	100	212		-10 -6	3	538	351	121	
2-24	3	0	70	1		-5-19	3	738	629	52		3-15	3	924	907	44		7-11	3	0	74	1		-8 -6	3	92	188	92	
4-24	3	256	161	256		-3-19	3	222	292	222		5-15	3	1016	1017	55		-10-10	3	507	460	196		-6 -6	3	1318	1273	33	
6-24	3	549	186	101		-1-19	3	1687	1670	27		7-15	3	695	683	82		-8-10	3	0	108	1		-4 -6	3	602	661	63	
-9-23	3	555	551	118		1-19	3	295	58	125		-10-14	3	225	116	225		-6-10	3	0	194	1		-2 -6	3	276	292	103	
-7-23	3	290	356	290		3-19	3	370	446	116		-8-14	3	341	79	188		-4-10	3	210	135	210		0 -6	3	2352	2432	31	
-5-23	3	217	177	216		5-19	3	875	818	72		-6-14	3	251	0	250		-2-10	3	437	398	63		2 -6	3	2167	2205	31	
-3-23	3	184	29	184		7-19	3	812	4	370		-4-14	3	320	293	101		0-10	3	175	231	175		4 -6	3	1394	1340	33	
-1-23	3	254	97	186		-10-18	3	401	13	214		-2-14	3	745	689	38		2-10	3	882	952	38		6 -6	3	1140	1119	50	
1-23	3	150	127	149		-8-18	3	2912	3086	55		0-14	3	547	512	54		4-10	3	0	97	1		8 -6	3	212	203	211	
3-23	3	204	78	203		-6-18	3	658	718	59		2-14	3	905	870	39		6-10	3	729	727	106		-11 -5	3	0	9	1	
5-23	3	444	396	117		-4-18	3	1007	953	36		4-14	3	589	617	82		8-10	3	210	192	210		-9 -5	3	266	226	266	
7-23	3	0	135	1		-2-18	3	5319	5259	38		6-14	3	1401	1412	54		-11 -9	3	0	162	1		-7 -5	3	0	13	1	
-10-22	3	432	211	432		0-18	3	1613	1535	35		8-14	3	0	112	1		-9 -9	3	946	905	55		-5 -5	3	287	296	163	
-8-22	3	408	11	157		2-18	3	2805	2943	27		-11-13	3	455	417	232		-7 -9	3	0	12	1		-3 -5	3	433	375	63	
-6-22	3	0	245	1		4-18	3	2483	2558	85		-9-13	3	865	939	68		-5 -9	3	1584	1568	29		-1 -5	3	0	180	1	
-4-22	3	192	220	191		6-18	3	3837	3974	43		-7-13	3	240	172	239		-3 -9	3	892	886	48		1 -5	3	839	783	36	
-2-22	3	395	319	84		8-18	3	268	176	268		-5-13	3	818	742	42		-1 -9	3	3090	3063	26		3 -5	3	304	264	115	
0-22	3	320	203	114		-9-17	3	766	709	83		-3-13	3	283	223	106		1 -9	3	706	728	43		5 -5	3	90	31	90	
2-22	3	417	172	117		-7-17	3	370	276	155		-1-13	3	638	544	45		3 -9	3	411	366	81		7 -5	3	451	207	124	
4-22	3	1069	1074	157		-5-17	3	785	828	50		1-13	3	400	103	400		5 -9	3	1252	1179	47		-10 -4	3	0	279	1	
6-22	3	708	744	79		-3-17	3	316	54	99		3-13	3	79	119	78		7 -9	3	822	603	97		-8 -4	3	295	210	193	
-9-21	3	1084	1062	61		-1-17	3	2093	2104	25		5-13	3	171	234	170		-10 -8	3	423	310	423		-6 -4	3	256	82	186	
-7-21	3	1562	1576	66		1-17	3	202	152	202		7-13	3	0	4	1		-8 -8	3	224	148	223		-4 -4	3	0	166	1	
-5-21	3	884	872	54		3-17	3	835	776	47		-10-12	3	418	429	198		-6 -8	3	355	281	107		-2 -4	3	0	104	1	
-3-21	3	1237	1202	31		5-17	3	477	333	134		-8-12	3	371	17	130		-4 -8	3	180	194	180		0 -4	3	286	132	103	
-1-21	3	2824	2867	44		7-17	3	544	242	146		-6-12	3	308	296	133		-2 -8	3	353	324	76		2 -4	3	218	79	217	
1-21	3	868	842	42		-10-16	3	314	250	313		-4-12	3	538	554	55		0 -8	3	183	283	182		4 -4	3	0	198	1	
3-21	3	188	172	188		-8-16	3	1090	1095	53		-2-12	3	635	555	43		2 -8	3	460	457	65		6 -4	3	242	34	241	
5-21	3	873	752	59		-6-16	3	425	307	89		0-12	3	696	589	70		4 -8	3	195	90	195		8 -4	3	0	59	1	
7-21	3	426	272	270		-4-16	3	0	62	1		2-12	3	660	606	49		6 -8	3	654	652	78		-11 -3	3	148	263	148	
-10-20	3	0	129	1		-2-16	3	1571	1545	33		4-12	3	313	429	192		8 -8	3	440	394	143		-9 -3	3	413	246	132	
-8-20	3	1574	1665	45		0-16	3	549	558	53		6-12	3	778	770	91		-11 -7	3	0	194	1		-7 -3	3	193	4	193	
-6-20	3	0	368	1		2-16	3	879	925	39		8-12	3	488	259	147		-9 -7	3	702	675	84		-5 -3	3	639	570	51	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-3	-3	3	913	831	32	1	1	3	154	53	154	5	5	3	0	158	1	-10	10	3	423	375	207	-6	14	3	182	214	182
-1	-3	3	1159	1106	38	3	1	3	346	247	93	7	5	3	179	232	179	-8	10	3	167	0	166	-4	14	3	195	352	195
1	-3	3	573	520	47	5	1	3	302	243	171	-10	6	3	400	341	179	-6	10	3	93	145	93	-2	14	3	834	826	43
3	-3	3	389	425	103	7	1	3	151	21	151	-8	6	3	152	106	151	-4	10	3	158	70	157	0	14	3	701	629	69
5	-3	3	250	6	250	-10	2	3	66	73	66	-6	6	3	1313	1302	33	-2	10	3	377	345	145	2	14	3	834	858	74
7	-3	3	0	60	1	-8	2	3	240	70	240	-4	6	3	626	626	45	0	10	3	0	110	1	4	14	3	414	438	99
-10	-2	3	244	77	244	-6	2	3	5	12	5	-2	6	3	275	245	274	2	10	3	901	904	38	6	14	3	1297	1264	71
-8	-2	3	0	123	1	-4	2	3	155	43	155	0	6	3	2233	2353	51	4	10	3	237	159	236	8	14	3	293	24	293
-6	-2	3	0	34	1	-2	2	3	0	10	1	2	6	3	2185	2194	26	6	10	3	805	800	65	-9	15	3	1949	1905	66
-4	-2	3	0	65	1	0	2	3	0	152	1	4	6	3	1328	1317	33	8	10	3	0	11	1	-7	15	3	808	802	51
-2	-2	3	0	37	1	2	2	3	57	228	57	6	6	3	985	1023	58	-11	11	3	405	43	405	-5	15	3	2371	2473	27
0	-2	3	0	99	1	4	2	3	0	196	1	8	6	3	0	160	1	-9	11	3	340	96	186	-3	15	3	211	77	210
2	-2	3	564	256	155	6	2	3	0	165	1	-11	7	3	558	221	176	-7	11	3	382	242	112	-1	15	3	5368	5315	47
4	-2	3	364	173	101	8	2	3	333	123	277	-9	7	3	624	551	79	-5	11	3	231	134	231	1	15	3	196	264	196
6	-2	3	0	129	1	-11	3	3	519	270	261	-7	7	3	164	113	163	-3	11	3	0	90	1	3	15	3	942	959	50
8	-2	3	460	230	134	-9	3	3	418	301	123	-5	7	3	757	651	158	-1	11	3	88	17	87	5	15	3	1100	993	80
-11	-1	3	434	340	298	-7	3	3	0	136	1	-3	7	3	444	460	72	1	11	3	202	220	201	7	15	3	722	577	85
-9	-1	3	211	36	211	-5	3	3	529	543	61	-1	7	3	422	456	75	3	11	3	241	178	240	-10	16	3	145	70	145
-7	-1	3	399	186	100	-3	3	3	907	882	39	1	7	3	524	334	99	5	11	3	117	39	116	-8	16	3	1163	1115	45
-5	-1	3	0	27	1	-1	3	3	1188	1105	70	3	7	3	0	129	1	7	11	3	0	102	1	-6	16	3	307	264	136
-3	-1	3	59	291	59	1	3	3	624	616	43	5	7	3	0	215	1	-10	12	3	148	308	148	-4	16	3	0	206	1
-1	-1	3	0	34	1	3	3	3	275	198	131	7	7	3	197	39	197	-8	12	3	0	134	1	-2	16	3	1542	1520	45
1	-1	3	0	106	1	5	3	3	0	96	1	-10	8	3	519	479	159	-6	12	3	391	212	117	0	16	3	363	264	101
3	-1	3	394	222	154	7	3	3	437	17	132	-8	8	3	310	222	310	-4	12	3	476	565	75	2	16	3	905	827	40
5	-1	3	313	13	312	-10	4	3	282	200	282	-6	8	3	330	321	119	-2	12	3	680	718	60	4	16	3	146	118	145
7	-1	3	0	99	1	-8	4	3	346	316	141	-4	8	3	40	111	40	0	12	3	698	708	52	6	16	3	503	168	346
-10	0	3	0	116	1	-6	4	3	0	250	1	-2	8	3	249	345	169	2	12	3	837	743	40	8	16	3	187	274	187
-8	0	3	225	24	225	-4	4	3	201	185	201	0	8	3	369	355	151	4	12	3	43	318	42	-9	17	3	924	889	180
-6	0	3	189	90	188	-2	4	3	0	242	1	2	8	3	360	355	127	6	12	3	823	806	58	-7	17	3	537	600	78
-4	0	3	114	227	113	0	4	3	218	27	217	4	8	3	181	78	180	8	12	3	412	178	170	-5	17	3	843	797	50
-2	0	3	63	135	63	2	4	3	307	101	102	6	8	3	715	531	77	-11	13	3	751	562	312	-3	17	3	0	138	1
0	0	3	310	261	84	4	4	3	291	228	291	8	8	3	127	57	126	-9	13	3	986	978	54	-1	17	3	2112	2190	77
2	0	3	196	221	195	6	4	3	0	122	1	-11	9	3	0	117	1	-7	13	3	215	141	214	1	17	3	9	132	9
4	0	3	639	635	55	8	4	3	0	51	1	-9	9	3	898	796	60	-5	13	3	794	784	46	3	17	3	805	888	48
6	0	3	0	227	1	-11	5	3	127	37	126	-7	9	3	0	56	1	-3	13	3	248	214	210	5	17	3	330	309	154
8	0	3	479	690	130	-9	5	3	424	391	121	-5	9	3	1532	1446	35	-1	13	3	518	508	62	7	17	3	0	369	1
-11	1	3	235	211	234	-7	5	3	0	1	1	-3	9	3	796	742	54	1	13	3	272	250	126	-10	18	3	0	68	1
-9	1	3	0	16	1	-5	5	3	267	271	144	-1	9	3	2917	2978	51	3	13	3	0	151	1	-8	18	3	3149	3090	39
-7	1	3	280	267	184	-3	5	3	0	310	1	1	9	3	703	580	56	5	13	3	244	237	244	-6	18	3	456	628	115
-5	1	3	0	108	1	-1	5	3	215	196	215	3	9	3	160	257	160	7	13	3	258	6	258	-4	18	3	996	920	44
-3	1	3	182	156	181	1	5	3	831	824	35	5	9	3	1222	1154	39	-10	14	3	0	114	1	-2	18	3	5213	5152	58
-1	1	3	0	4	1	3	5	3	251	304	170	7	9	3	592	648	99	-8	14	3	97	197	97	0	18	3	1594	1501	35

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
2	18	3	2760	2851	28	-7	23	3	363	430	143	5	27	3	1093	1009	61	4	32	3	146	133	145	-6	38	3	419	181	140
4	18	3	2563	2554	30	-5	23	3	231	76	231	7	27	3	552	353	145	6	32	3	418	247	201	-4	38	3	46	162	46
6	18	3	3935	3980	35	-3	23	3	0	18	1	-8	28	3	189	133	188	-9	33	3	0	282	1	-2	38	3	244	69	244
8	18	3	633	173	134	-1	23	3	0	85	1	-6	28	3	123	126	122	-7	33	3	244	240	244	0	38	3	289	324	289
-9	19	3	969	756	246	1	23	3	136	133	135	-4	28	3	248	4	247	-5	33	3	221	216	221	2	38	3	133	137	133
-7	19	3	863	812	57	3	23	3	116	219	115	-2	28	3	574	528	95	-3	33	3	209	252	209	4	38	3	0	132	1
-5	19	3	475	562	87	5	23	3	377	419	140	0	28	3	290	473	289	-1	33	3	949	995	61	6	38	3	0	95	1
-3	19	3	0	49	1	7	23	3	246	89	246	2	28	3	260	56	260	1	33	3	479	414	106	-7	39	3	112	298	112
-1	19	3	1552	1534	35	-10	24	3	0	33	1	4	28	3	292	276	239	3	33	3	350	60	189	-5	39	3	658	596	77
1	19	3	0	103	1	-8	24	3	592	609	95	6	28	3	432	369	164	5	33	3	131	15	130	-3	39	3	576	564	119
3	19	3	407	353	95	-6	24	3	303	269	197	-9	29	3	378	488	377	-8	34	3	298	240	298	-1	39	3	551	557	92
5	19	3	969	906	54	-4	24	3	0	59	1	-7	29	3	226	341	225	-6	34	3	0	201	1	1	39	3	442	292	128
7	19	3	344	318	343	-2	24	3	188	237	188	-5	29	3	82	136	81	-4	34	3	244	165	243	3	39	3	565	441	112
-10	20	3	267	8	267	0	24	3	188	107	188	-3	29	3	289	115	196	-2	34	3	0	24	1	5	39	3	676	148	172
-8	20	3	1617	1563	44	2	24	3	107	62	107	-1	29	3	517	449	80	0	34	3	0	79	1	-8	40	3	199	378	198
-6	20	3	151	283	151	4	24	3	396	358	127	1	29	3	680	678	145	2	34	3	234	367	234	-6	40	3	282	16	281
-4	20	3	251	150	251	6	24	3	1120	331	387	3	29	3	415	414	158	4	34	3	364	252	164	-4	40	3	0	43	1
-2	20	3	570	671	65	-9	25	3	366	248	365	5	29	3	856	266	287	6	34	3	0	110	1	-2	40	3	515	538	99
0	20	3	0	218	1	-7	25	3	298	315	238	7	29	3	0	83	1	-9	35	3	473	218	211	0	40	3	115	190	115
2	20	3	183	234	182	-5	25	3	393	286	114	-8	30	3	177	8	177	-7	35	3	250	95	249	2	40	3	463	48	127
4	20	3	310	462	167	-3	25	3	184	240	183	-6	30	3	864	896	61	-5	35	3	131	79	131	4	40	3	134	118	134
6	20	3	491	291	106	-1	25	3	252	25	252	-4	30	3	860	902	142	-3	35	3	72	45	71	-7	41	3	0	49	1
8	20	3	0	224	1	1	25	3	48	169	48	-2	30	3	204	23	203	-1	35	3	0	228	1	-5	41	3	352	277	189
-9	21	3	1010	1053	86	3	25	3	250	63	249	0	30	3	1647	1562	45	1	35	3	266	388	266	-3	41	3	561	418	182
-7	21	3	1475	1522	42	5	25	3	0	174	1	2	30	3	1722	1667	42	3	35	3	402	117	167	-1	41	3	634	670	86
-5	21	3	803	808	99	7	25	3	207	247	207	4	30	3	1224	1208	45	5	35	3	616	365	107	1	41	3	0	94	1
-3	21	3	1294	1200	38	-10	26	3	0	2	1	6	30	3	541	493	160	-8	36	3	451	102	256	3	41	3	0	116	1
-1	21	3	2650	2718	33	-8	26	3	530	562	113	-9	31	3	0	119	1	-6	36	3	0	44	1	5	41	3	327	175	326
1	21	3	878	861	42	-6	26	3	222	107	222	-4	36	3	352	427	147	-4	36	3	352	427	147	-6	42	3	0	184	1
3	21	3	376	94	346	-4	26	3	0	201	1	-5	31	3	0	227	1	-2	36	3	460	432	102	-4	42	3	532	538	99
5	21	3	767	697	62	-2	26	3	104	118	104	-3	31	3	0	261	1	0	36	3	205	65	205	-2	42	3	796	806	167
7	21	3	419	427	190	0	26	3	110	146	110	-1	31	3	91	271	91	2	36	3	158	61	157	0	42	3	883	814	68
-10	22	3	0	127	1	2	26	3	352	227	122	1	31	3	0	93	1	4	36	3	296	193	295	2	42	3	1487	1395	51
-8	22	3	305	361	305	4	26	3	547	535	84	3	31	3	176	284	175	6	36	3	0	178	1	4	42	3	910	931	116
-6	22	3	198	241	197	6	26	3	636	435	94	5	31	3	222	49	222	-7	37	3	163	216	163	-7	43	3	611	404	180
-4	22	3	0	125	1	-9	27	3	474	402	200	7	31	3	562	432	190	-5	37	3	288	205	288	-5	43	3	641	527	93
-2	22	3	232	251	232	-7	27	3	245	400	245	-8	32	3	798	42	113	-3	37	3	0	18	1	-3	43	3	336	404	192
0	22	3	267	254	267	-5	27	3	666	755	90	-6	32	3	156	3	155	-1	37	3	348	35	157	-1	43	3	491	313	113
2	22	3	363	266	103	-3	27	3	1675	1649	55	-4	32	3	257	141	257	1	37	3	393	194	149	1	43	3	208	318	207
4	22	3	1101	1046	45	-1	27	3	1983	2060	34	-2	32	3	0	392	1	3	37	3	623	82	246	3	43	3	0	41	1
6	22	3	888	917	65	1	27	3	1167	1106	45	0	32	3	616	778	75	5	37	3	365	52	365	5	43	3	541	173	232
-9	23	3	305	521	304	3	27	3	351	174	135	2	32	3	233	75	233	-8	38	3	0	88	1	-6	44	3	452	475	158

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-4	44	3	0	318	1	-4	52	3	446	333	180	-5	-41	4	0	3	1	-2	-34	4	359	21	359	0	-28	4	661	554	71
-2	44	3	251	193	251	-2	52	3	1015	961	115	-3	-41	4	200	27	199	0	-34	4	1125	1092	51	2	-28	4	151	57	150
0	44	3	0	178	1	0	52	3	585	292	135	-1	-41	4	251	244	251	2	-34	4	495	720	495	4	-28	4	158	170	157
2	44	3	307	280	306	2	52	3	679	637	164	1	-41	4	494	418	153	4	-34	4	504	208	131	-9	-27	4	573	495	146
4	44	3	299	80	298	-3	53	3	617	720	120	3	-41	4	99	348	98	-7	-33	4	1735	1753	52	-7	-27	4	541	557	118
-7	45	3	516	564	261	-1	53	3	1102	1030	73	-6	-40	4	269	73	269	-5	-33	4	1116	977	59	-5	-27	4	986	936	65
-5	45	3	587	602	108	1	53	3	654	193	146	-4	-40	4	226	203	226	-3	-33	4	321	66	274	-3	-27	4	459	399	92
-3	45	3	969	977	67	-4	54	3	779	466	213	-2	-40	4	432	264	162	-1	-33	4	2135	2216	33	-1	-27	4	699	613	65
-1	45	3	804	644	168	-2	54	3	1806	1778	52	0	-40	4	0	251	1	1	-33	4	565	387	141	1	-27	4	329	374	154
1	45	3	819	691	79	0	54	3	399	72	399	2	-40	4	212	45	212	3	-33	4	2751	2844	116	3	-27	4	1089	870	120
3	45	3	618	397	188	-3	55	3	0	60	1	-7	-39	4	468	441	175	-8	-32	4	665	520	119	5	-27	4	1543	1527	52
-6	46	3	265	326	264	-1	55	3	418	356	242	-5	-39	4	0	217	1	-6	-32	4	255	54	255	-8	-26	4	637	615	174
-4	46	3	0	359	1	1	55	3	0	69	1	-3	-39	4	890	800	70	-4	-32	4	790	816	135	-6	-26	4	530	576	112
-2	46	3	222	64	222	-2	56	3	356	304	355	-1	-39	4	765	675	88	-2	-32	4	244	66	243	-4	-26	4	526	466	114
0	46	3	511	269	180	0	56	3	216	248	216	1	-39	4	430	441	169	0	-32	4	1354	1271	41	-2	-26	4	409	150	111
2	46	3	576	222	178	-3	-49	4	258	55	258	3	-39	4	1638	1591	90	2	-32	4	254	335	254	0	-26	4	654	468	70
4	46	3	490	48	283	-1	-49	4	644	140	205	-6	-38	4	188	212	188	4	-32	4	603	481	109	2	-26	4	320	140	198
-5	47	3	369	27	229	-2	-48	4	146	47	145	-4	-38	4	278	366	277	-7	-31	4	623	683	110	4	-26	4	470	256	470
-3	47	3	514	462	113	0	-48	4	535	340	216	-2	-38	4	402	468	171	-5	-31	4	499	441	126	-9	-25	4	393	444	291
-1	47	3	362	411	267	-3	-47	4	0	189	1	0	-38	4	621	377	101	-3	-31	4	57	42	57	-7	-25	4	430	100	233
1	47	3	0	41	1	-1	-47	4	444	41	243	2	-38	4	525	616	131	-1	-31	4	848	759	55	-5	-25	4	513	608	172
3	47	3	230	590	230	1	-47	4	906	247	122	-7	-37	4	533	411	227	1	-31	4	519	420	149	-3	-25	4	228	162	228
-6	48	3	690	708	112	-4	-46	4	0	44	1	-5	-37	4	352	594	234	3	-31	4	416	292	157	-1	-25	4	24	115	23
-4	48	3	1023	1051	60	-2	-46	4	196	146	196	5	-37	4	582	553	143	1	-31	4	417	460	176	1	-25	4	0	40	1
-2	48	3	1164	1230	58	0	-46	4	623	367	193	-8	-30	4	963	779	169	3	-25	4	818	733	93	3	-25	4	838	844	68
0	48	3	1054	1031	67	-5	-45	4	186	36	186	-6	-30	4	260	133	259	5	-25	4	318	376	318	5	-25	4	313	152	313
2	48	3	1279	1171	85	-3	-45	4	762	663	96	-4	-30	4	1115	939	65	-8	-24	4	975	864	61	-8	-24	4	1615	1477	52
4	48	3	75	213	74	-1	-45	4	622	612	127	-2	-30	4	580	435	114	-6	-24	4	500	423	114	-6	-24	4	1448	1393	59
-5	49	3	646	562	108	1	-45	4	508	507	229	0	-30	4	1531	1513	49	-4	-24	4	1075	1040	58	-4	-24	4	665	538	66
-3	49	3	0	189	1	-4	-44	4	49	211	49	2	-30	4	1648	1685	45	-2	-24	4	704	680	115	-2	-24	4	276	105	202
-1	49	3	664	556	93	-2	-44	4	408	314	232	0	-36	4	2810	2833	40	4	-30	4	816	949	76	0	-24	4	887	798	52
1	49	3	409	326	408	0	-44	4	521	271	165	-7	-29	4	1058	1031	97	2	-24	4	323	150	322	2	-24	4	926	944	60
3	49	3	290	74	289	2	-44	4	398	204	245	4	-36	4	479	288	212	-5	-29	4	544	77	109	4	-24	4	442	325	130
-4	50	3	481	555	152	-5	-43	4	243	15	243	-3	-29	4	1110	1164	69	6	-24	4	253	230	252	6	-24	4	1031	972	73
-2	50	3	460	417	152	-3	-43	4	0	102	1	-1	-29	4	666	484	102	-9	-23	4	317	229	184	-9	-23	4	353	262	352
0	50	3	490	323	151	-1	-43	4	120	218	120	1	-29	4	435	2	149	-7	-23	4	0	68	1	-7	-23	4	318	120	317
2	50	3	455	467	284	1	-43	4	272	19	271	3	-29	4	481	316	108	-5	-23	4	594	696	97	-5	-23	4	207	238	207
-5	51	3	1639	1518	83	-6	-42	4	0	138	1	1	-35	4	400	347	171	-3	-23	4	270	177	270	-3	-23	4	281	345	225
-3	51	3	181	197	181	-4	-42	4	507	223	186	5	-35	4	1045	1054	65	-1	-23	4	236	30	235	-1	-23	4	0	55	1
-1	51	3	2785	2805	42	-2	-42	4	251	369	250	-6	-28	4	1531	1559	63	1	-23	4	489	222	128	1	-23	4	0	49	1
1	51	3	192	21	191	0	-42	4	363	94	339	-4	-28	4	263	325	262	3	-23	4	0	149	1	3	-23	4	517	481	106
3	51	3	565	592	231	2	-42	4	272	155	272	-4	-34	4	709	635	82	-2	-28	4	0	77	1	5	-23	4	920	713	222

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-8-22	4	1077	1068	70		-5-17	4	212	195	212		-6-12	4	1871	1812	33		-7 -7	4	0	230	1		5 -3	4	603	651	97	
-6-22	4	323	446	322		-3-17	4	115	180	114		-4-12	4	1138	1154	38		-5 -7	4	0	144	1		7 -3	4	901	921	105	
-4-22	4	136	82	135		-1-17	4	281	9	168		-2-12	4	1391	1360	33		-3 -7	4	0	26	1		-10 -2	4	161	89	160	
-2-22	4	240	100	239		1-17	4	117	68	116		0-12	4	51	64	50		-1 -7	4	206	352	205		-8 -2	4	1268	1307	52	
0-22	4	367	171	125		3-17	4	282	8	281		2-12	4	308	204	148		1 -7	4	221	242	220		-6 -2	4	213	132	212	
2-22	4	436	323	111		5-17	4	0	14	1		4-12	4	205	251	205		3 -7	4	0	74	1		-4 -2	4	1519	1439	99	
4-22	4	201	223	201		-10-16	4	0	237	1		6-12	4	398	351	176		5 -7	4	455	343	131		-2 -2	4	894	781	48	
6-22	4	311	11	311		-8-16	4	384	365	204		-9-11	4	155	56	154		7 -7	4	280	168	279		0 -2	4	917	880	51	
-9-21	4	476	350	475		-6-16	4	0	58	1		-7-11	4	902	826	54		-10 -6	4	0	246	1		2 -2	4	657	564	74	
-7-21	4	452	278	141		-4-16	4	540	504	71		-5-11	4	541	447	98		-8 -6	4	487	125	236		4 -2	4	163	14	162	
-5-21	4	586	483	79		-2-16	4	207	269	206		-3-11	4	401	261	153		-6 -6	4	202	282	202		6 -2	4	0	141	1	
-3-21	4	412	278	95		0-16	4	37	12	36		-1-11	4	807	618	135		-4 -6	4	67	58	66		-9 -1	4	0	91	1	
-1-21	4	81	198	80		2-16	4	179	347	178		1-11	4	822	830	52		-2 -6	4	416	76	86		-7 -1	4	1540	1742	45	
1-21	4	84	44	84		4-16	4	353	33	185		3-11	4	0	138	1		0 -6	4	260	196	207		-5 -1	4	0	182	1	
3-21	4	795	757	73		6-16	4	0	138	1		5-11	4	0	70	1		2 -6	4	366	227	114		-3 -1	4	335	300	130	
5-21	4	832	814	74		-9-15	4	547	173	278		-10-10	4	521	95	220		4 -6	4	781	620	256		-1 -1	4	2330	2493	34	
-8-20	4	405	46	182		-7-15	4	565	598	110		-8-10	4	325	302	238		6 -6	4	0	160	1		1 -1	4	0	303	1	
-6-20	4	0	261	1		-5-15	4	187	131	186		-6-10	4	501	390	89		-9 -5	4	0	212	1		3 -1	4	1528	1523	35	
-4-20	4	0	89	1		-3-15	4	185	182	184		-4-10	4	936	967	44		-7 -5	4	897	941	186		5 -1	4	113	142	113	
-2-20	4	0	24	1		-1-15	4	897	792	80		-2-10	4	843	772	63		-5 -5	4	0	15	1		7 -1	4	775	668	116	
0-20	4	295	169	181		1-15	4	439	394	93		0-10	4	254	273	254		-3 -5	4	131	101	130		-10 0	4	373	131	373	
2-20	4	636	678	69		3-15	4	0	21	1		2-10	4	574	492	70		-1 -5	4	0	73	1		-8 0	4	2666	2691	50	
4-20	4	0	163	1		5-15	4	307	389	307		4-10	4	431	395	154		1 -5	4	151	131	151		-6 0	4	580	690	87	
6-20	4	355	265	272		-10-14	4	0	36	1		6-10	4	0	113	1		3 -5	4	492	396	84		-4 0	4	4016	4169	98	
-9-19	4	0	59	1		-8-14	4	351	17	241		-9 -9	4	343	361	342		5 -5	4	0	187	1		-2 0	4	2642	2785	34	
-7-19	4	214	311	214		-6-14	4	300	311	204		-7 -9	4	1055	1043	49		7 -5	4	423	401	189		0 0	4	4413	4446	58	
-5-19	4	558	83	196		-4-14	4	723	724	54		-5 -9	4	0	113	1		-10 -4	4	0	261	1		2 0	4	3422	3409	31	
-3-19	4	0	144	1		-2-14	4	827	568	130		-3 -9	4	742	715	51		-8 -4	4	549	434	106		4 0	4	814	775	102	
-1-19	4	0	2	1		0-14	4	347	374	115		-1 -9	4	1878	1892	29		-6 -4	4	330	90	173		6 0	4	766	911	85	
1-19	4	269	292	268		2-14	4	539	429	75		1 -9	4	1003	945	42		-4 -4	4	729	745	63		-9 1	4	0	24	1	
3-19	4	351	115	162		4-14	4	0	122	1		3 -9	4	943	914	52		-2 -4	4	996	892	46		-7 1	4	1320	1260	46	
5-19	4	0	133	1		6-14	4	222	263	221		5 -9	4	860	577	157		0 -4	4	698	645	52		-5 1	4	139	70	139	
-8-18	4	198	137	198		-9-13	4	0	67	1		-10 -8	4	386	171	385		2 -4	4	904	792	47		-3 1	4	307	147	152	
-6-18	4	90	73	89		-7-13	4	593	604	83		-8 -8	4	252	54	252		4 -4	4	0	261	1		-1 1	4	2097	2119	34	
-4-18	4	226	61	226		-5-13	4	311	418	153		-6 -8	4	0	2	1		6 -4	4	441	171	151		1 1	4	0	78	1	
-2-18	4	234	333	234		-3-13	4	600	520	76		-4 -8	4	746	643	54		-9 -3	4	256	55	256		3 1	4	1456	1542	38	
0-18	4	0	90	1		-1-13	4	789	715	108		-2 -8	4	475	509	75		-7 -3	4	1933	1961	42		5 1	4	0	86	1	
2-18	4	167	250	167		1-13	4	896	798	48		0 -8	4	473	492	79		-5 -3	4	137	400	137		7 1	4	631	657	113	
4-18	4	98	299	98		3-13	4	262	51	262		2 -8	4	504	499	80		-3 -3	4	790	764	54		-10 2	4	199	59	198	
6-18	4	711	651	97		5-13	4	330	247	255		4 -8	4	195	225	194		-1 -3	4	3078	3121	56		-8 2	4	1349	1327	48	
-9-17	4	0	139	1		-10-12	4	291	59	290		6 -8	4	306	267	305		1 -3	4	564	611	66		-6 2	4	41	84	41	
-7-17	4	0	44	1		-8-12	4	348	387	278		-9 -7	4	472	435	164		3 -3	4	2610	2715	39		-4 2	4	1590	1566	39	

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-2	2	4	919	1041	60	-7	7	4	438	484	118	-10	12	4	289	132	289	6	16	4	0	56	1	-6	22	4	274	290	274
0	2	4	1114	1026	45	-5	7	4	193	78	192	-8	12	4	547	366	103	-9	17	4	0	84	1	-4	22	4	0	74	1
2	2	4	747	817	57	-3	7	4	0	73	1	-6	12	4	1738	1759	80	-7	17	4	0	60	1	-2	22	4	98	24	98
4	2	4	0	145	1	-1	7	4	318	182	135	-4	12	4	1190	1196	66	-5	17	4	0	146	1	0	22	4	358	421	145
6	2	4	0	125	1	1	7	4	0	206	1	-2	12	4	1344	1321	60	-3	17	4	206	37	205	2	22	4	253	173	252
-9	3	4	39	232	39	3	7	4	0	181	1	0	12	4	271	151	248	-1	17	4	0	55	1	4	22	4	257	65	257
-7	3	4	1871	1889	43	5	7	4	395	369	185	2	12	4	263	139	262	1	17	4	263	149	262	6	22	4	0	125	1
-5	3	4	336	395	151	7	7	4	211	207	210	4	12	4	0	193	1	3	17	4	0	29	1	-9	23	4	61	265	60
-3	3	4	758	840	118	-10	8	4	171	24	170	6	12	4	356	314	355	5	17	4	0	3	1	-7	23	4	160	17	159
-1	3	4	2833	2818	35	-8	8	4	211	69	211	-9	13	4	0	97	1	-8	18	4	184	66	184	-5	23	4	0	354	1
1	3	4	528	531	85	-6	8	4	0	56	1	-7	13	4	344	174	343	-6	18	4	0	92	1	-3	23	4	205	215	205
3	3	4	2621	2701	35	-4	8	4	883	867	52	-5	13	4	118	197	118	-4	18	4	268	5	268	-1	23	4	276	136	276
5	3	4	583	655	174	-2	8	4	567	579	71	-3	13	4	373	476	302	-2	18	4	234	267	234	1	23	4	0	38	1
7	3	4	850	985	91	0	8	4	376	464	225	-1	13	4	752	700	58	0	18	4	212	127	211	3	23	4	486	423	115
-10	4	4	280	114	280	2	8	4	384	419	134	1	13	4	892	831	55	2	18	4	348	344	166	5	23	4	632	704	110
-8	4	4	461	207	119	4	8	4	114	41	114	3	13	4	337	66	180	4	18	4	160	335	159	-8	24	4	1411	1388	52
-6	4	4	186	244	185	6	8	4	368	331	255	5	13	4	0	312	1	6	18	4	490	587	239	-6	24	4	1484	1462	44
-4	4	4	633	597	69	-9	9	4	416	402	171	-10	14	4	42	22	42	-9	19	4	411	39	207	-4	24	4	607	546	78
-2	4	4	954	862	54	-7	9	4	1144	1143	50	-8	14	4	0	167	1	-7	19	4	198	158	198	-2	24	4	189	235	188
0	4	4	649	664	64	-5	9	4	402	98	110	-6	14	4	476	521	99	-5	19	4	120	83	119	0	24	4	791	740	64
2	4	4	904	825	57	-3	9	4	671	842	84	-4	14	4	729	921	125	-3	19	4	293	77	196	2	24	4	833	893	91
4	4	4	361	228	211	-1	9	4	1877	1881	35	-2	14	4	665	670	64	-1	19	4	346	65	134	4	24	4	609	249	262
6	4	4	0	273	1	1	9	4	1058	1021	70	0	14	4	259	97	259	1	19	4	362	172	139	6	24	4	1211	981	101
-9	5	4	329	323	329	3	9	4	1001	969	100	2	14	4	646	531	75	3	19	4	0	28	1	-9	25	4	349	252	349
-7	5	4	739	781	68	5	9	4	716	659	96	4	14	4	392	13	147	5	19	4	162	212	162	-7	25	4	0	46	1
-5	5	4	0	5	1	-10	10	4	0	139	1	6	14	4	197	382	197	-8	20	4	65	325	65	-5	25	4	574	509	83
-3	5	4	297	275	160	-8	10	4	0	272	1	-9	15	4	480	74	258	-6	20	4	0	78	1	-3	25	4	160	45	159
-1	5	4	0	18	1	-6	10	4	495	496	99	-7	15	4	553	508	87	-4	20	4	223	219	222	-1	25	4	152	87	152
1	5	4	63	111	63	-4	10	4	709	693	62	-5	15	4	0	166	1	-2	20	4	0	52	1	1	25	4	0	119	1
3	5	4	363	415	127	-2	10	4	713	619	57	-3	15	4	234	50	233	0	20	4	367	31	132	3	25	4	901	722	189
5	5	4	0	33	1	0	10	4	209	247	208	-1	15	4	824	849	144	2	20	4	719	673	83	5	25	4	604	484	119
7	5	4	476	410	166	2	10	4	717	611	127	1	15	4	553	418	82	4	20	4	0	28	1	-8	26	4	582	636	106
-10	6	4	137	305	137	4	10	4	345	341	185	3	15	4	0	30	1	6	20	4	196	172	196	-6	26	4	558	550	120
-8	6	4	116	18	116	6	10	4	336	222	336	5	15	4	0	345	1	-9	21	4	468	412	164	-4	26	4	439	214	109
-6	6	4	0	248	1	-9	11	4	0	141	1	-10	16	4	568	286	156	-7	21	4	324	242	186	-2	26	4	273	215	273
-4	6	4	312	233	159	-7	11	4	1007	1111	110	-8	16	4	0	151	1	-5	21	4	488	602	120	0	26	4	656	710	76
-2	6	4	327	176	210	-5	11	4	543	555	84	-6	16	4	0	93	1	-3	21	4	454	429	98	2	26	4	235	98	234
0	6	4	108	196	108	-3	11	4	510	537	80	-4	16	4	458	415	133	-1	21	4	323	273	238	4	26	4	292	205	291
2	6	4	297	25	213	-1	11	4	799	862	53	-2	16	4	0	149	1	1	21	4	0	103	1	-9	27	4	635	468	158
4	6	4	714	722	65	1	11	4	857	861	55	0	16	4	358	54	123	3	21	4	782	742	71	-7	27	4	480	524	116
6	6	4	0	202	1	3	11	4	0	43	1	2	16	4	234	344	233	5	21	4	924	876	82	-5	27	4	799	853	64
-9	7	4	315	247	314	5	11	4	397	62	184	4	16	4	164	143	164	-8	22	4	852	979	75	-3	27	4	334	421	159

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
-1	27	4	627	663	75	-1	33	4	2080	2119	47	0	40	4	461	419	135	-2	-34	5	0	257	1	1	-25	5	0	81	1
1	27	4	493	400	103	1	33	4	537	409	107	2	40	4	112	117	111	0	-34	5	197	219	197	3	-25	5	155	102	155
3	27	4	1094	819	58	3	33	4	2898	2910	54	-5	41	4	70	7	69	-5	-33	5	0	31	1	-6	-24	5	533	2	206
5	27	4	1545	1369	94	-8	34	4	1302	1449	61	-3	41	4	328	67	294	-3	-33	5	148	288	148	-4	-24	5	0	135	1
-8	28	4	308	228	307	-6	34	4	121	319	121	-1	41	4	253	293	253	-1	-33	5	424	319	186	-2	-24	5	186	38	186
-6	28	4	0	157	1	-4	34	4	555	602	279	1	41	4	417	294	176	1	-33	5	0	142	1	0	-24	5	0	140	1
-4	28	4	0	121	1	-2	34	4	229	58	228	3	41	4	477	228	211	-6	-32	5	0	107	1	2	-24	5	0	148	1
-2	28	4	0	32	1	0	34	4	968	896	58	-6	42	4	626	69	533	-4	-32	5	262	138	261	-7	-23	5	389	484	388
0	28	4	431	489	118	2	34	4	792	695	79	-4	42	4	283	168	282	-2	-32	5	0	147	1	-5	-23	5	409	56	382
2	28	4	341	173	197	4	34	4	364	58	364	-2	42	4	490	460	129	0	-32	5	110	43	110	-3	-23	5	252	123	251
4	28	4	0	262	1	-7	35	4	1194	1052	93	0	42	4	235	134	235	-5	-31	5	446	466	445	-1	-23	5	137	158	136
-7	29	4	292	129	292	-5	35	4	494	489	248	2	42	4	272	148	271	-3	-31	5	386	362	296	1	-23	5	0	88	1
-5	29	4	369	185	152	-3	35	4	409	17	408	-5	43	4	0	14	1	-1	-31	5	0	31	1	3	-23	5	410	361	234
-3	29	4	406	168	333	-1	35	4	505	290	104	-3	43	4	366	271	202	1	-31	5	327	287	326	-6	-22	5	45	249	45
-1	29	4	306	372	258	1	35	4	200	269	199	-1	43	4	293	275	293	-6	-30	5	0	58	1	-4	-22	5	602	588	108
1	29	4	0	163	1	3	35	4	1050	1120	68	1	43	4	0	137	1	-4	-30	5	0	95	1	-2	-22	5	647	747	91
3	29	4	647	477	92	-6	36	4	294	447	293	-4	44	4	472	278	137	-2	-30	5	732	711	85	0	-22	5	396	226	396
5	29	4	532	181	148	-4	36	4	1534	1447	47	-2	44	4	479	397	139	0	-30	5	875	811	73	2	-22	5	0	421	1
-8	30	4	828	779	83	-2	36	4	1627	1615	45	0	44	4	372	409	371	-2	-30	5	872	833	143	-7	-21	5	1388	1266	83
-6	30	4	0	383	1	0	36	4	2712	2714	40	2	44	4	603	258	412	-5	-29	5	437	381	302	-5	-21	5	605	513	157
-4	30	4	819	945	123	2	36	4	1022	1022	65	-5	45	4	332	137	332	-3	-29	5	256	432	255	-3	-21	5	843	796	70
-2	30	4	387	505	130	4	36	4	325	254	324	-3	45	4	727	664	88	-1	-29	5	285	337	284	-1	-21	5	625	641	154
0	30	4	1155	1115	81	-7	37	4	429	35	179	-1	45	4	492	524	258	1	-29	5	0	29	1	1	-21	5	546	509	143
2	30	4	568	678	158	-5	37	4	400	339	149	1	45	4	346	405	345	-6	-28	5	192	314	192	3	-21	5	1119	927	113
4	30	4	822	878	88	-3	37	4	547	573	102	-4	46	4	0	5	1	-4	-28	5	264	453	263	-8	-20	5	195	354	194
-7	31	4	644	696	90	-1	37	4	692	787	78	-2	46	4	272	118	271	-2	-28	5	672	672	86	-6	-20	5	828	785	118
-5	31	4	578	579	90	1	37	4	581	172	126	0	46	4	340	331	340	0	-28	5	226	315	225	-4	-20	5	942	816	100
-3	31	4	377	42	145	3	37	4	1107	1182	94	-3	47	4	399	96	399	2	-28	5	236	133	235	-2	-20	5	489	447	113
-1	31	4	737	773	75	-6	38	4	0	34	1	-1	47	4	0	16	1	-7	-27	5	690	625	154	0	-20	5	237	307	237
1	31	4	454	219	211	-4	38	4	199	14	199	1	47	4	315	105	314	-5	-27	5	910	686	114	2	-20	5	170	237	169
3	31	4	78	58	78	-2	38	4	548	568	169	-2	48	4	517	117	140	-3	-27	5	500	566	180	-7	-19	5	1396	1517	81
5	31	4	784	510	158	0	38	4	463	556	132	0	48	4	541	312	139	-1	-27	5	723	678	85	-5	-19	5	0	43	1
-8	32	4	936	828	76	2	38	4	548	564	125	-1	49	4	0	4	1	1	-27	5	146	259	146	-3	-19	5	1233	1298	52
-6	32	4	0	8	1	-7	39	4	401	359	215	-2	-38	5	193	133	193	-6	-26	5	414	69	413	-1	-19	5	274	86	274
-4	32	4	753	711	70	-5	39	4	0	103	1	-3	-37	5	0	98	1	-4	-26	5	503	206	210	1	-19	5	490	326	150
-2	32	4	0	64	1	-3	39	4	855	846	90	-1	-37	5	0	59	1	-2	-26	5	455	451	130	3	-19	5	1276	1162	93
0	32	4	1379	1453	48	-1	39	4	577	680	100	-4	-36	5	0	27	1	0	-26	5	461	453	220	-8	-18	5	219	158	219
2	32	4	419	364	148	1	39	4	175	381	175	-2	-36	5	0	146	1	2	-26	5	178	370	177	-6	-18	5	933	1028	97
4	32	4	576	530	126	3	39	4	1477	1517	58	0	-36	5	0	234	1	-7	-25	5	533	353	184	-4	-18	5	2860	2902	74
-7	33	4	1864	1799	47	-6	40	4	0	90	1	-3	-35	5	0	11	1	-5	-25	5	266	168	266	-2	-18	5	806	836	66
-5	33	4	1096	1083	85	-4	40	4	0	93	1	-1	-35	5	0	102	1	-3	-25	5	97	163	97	0	-18	5	1434	1536	83
-3	33	4	171	117	171	-2	40	4	0	225	1	-4	-34	5	0	192	1	-1	-25	5	213	63	213	2	-18	5	686	577	151

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	
4-18	5	3233	3092	68		-3-11	5	182	77	181		3 -5	5	350	200	349		3 1 5	0	183	1		-6 8 5	0	291	1				
-7-17	5	1470	1282	77		-1-11	5	0	150	1		-8 -4	5	0	31	1		-8 2 5	0	64	1		-4 8 5	290	388	289				
-5-17	5	188	10	188		1-11	5	251	100	250		-6 -4	5	0	48	1		-6 2 5	0	178	1		-2 8 5	234	293	234				
-3-17	5	1506	1678	70		3-11	5	0	233	1		-4 -4	5	0	197	1		-4 2 5	152	39	151		0 8 5	496	572	103				
-1-17	5	446	146	146		-8-10	5	610	433	148		-2 -4	5	318	384	184		-2 2 5	0	79	1		2 8 5	320	31	319				
1-17	5	502	610	142		-6-10	5	38	150	38		0 -4	5	277	163	277		0 2 5	129	186	129		4 8 5	633	496	158				
3-17	5	964	804	112		-4-10	5	468	485	116		2 -4	5	487	252	487		2 2 5	513	309	128		-7 9 5	936	927	98				
-8-16	5	0	175	1		-2-10	5	0	234	1		4 -4	5	299	74	298		4 2 5	0	100	1		-5 9 5	0	376	1				
-6-16	5	776	748	92		0-10	5	893	776	138		-9 -3	5	0	118	1		-9 3 5	278	100	277		-3 9 5	1034	1099	54				
-4-16	5	1625	1672	108		2-10	5	425	46	213		-7 -3	5	0	101	1		-7 3 5	132	134	132		-1 9 5	504	442	145				
-2-16	5	620	433	80		4-10	5	532	593	208		-5 -3	5	62	228	61		-5 3 5	105	315	105		1 9 5	250	74	250				
0-16	5	1038	1219	74		-7 -9	5	1057	945	68		-3 -3	5	551	558	95		-3 3 5	509	516	100		3 9 5	631	703	107				
2-16	5	57	291	56		-5 -9	5	462	412	119		-1 -3	5	420	388	120		-1 3 5	527	480	91		-8 10 5	205	269	205				
4-16	5	861	884	128		-3 -9	5	1192	1175	71		1 -3	5	294	328	294		1 3 5	0	174	1		-6 10 5	232	42	232				
-7-15	5	2146	1923	66		-1 -9	5	716	633	73		3 -3	5	0	49	1		3 3 5	0	83	1		-4 10 5	152	352	152				
-5-15	5	469	333	137		1 -9	5	237	21	237		-8 -2	5	296	45	296		-8 4 5	0	48	1		-2 10 5	0	194	1				
-3-15	5	1871	1855	41		3 -9	5	721	807	143		-6 -2	5	0	131	1		-6 4 5	277	106	277		0 10 5	759	686	130				
-1-15	5	514	433	107		-8 -8	5	0	115	1		-4 -2	5	0	37	1		-4 4 5	0	182	1		2 10 5	0	229	1				
1-15	5	999	950	66		-6 -8	5	158	190	158		-2 -2	5	0	88	1		-2 4 5	108	136	108		4 10 5	595	656	137				
3-15	5	1433	1334	85		-4 -8	5	381	387	380		0 -2	5	0	308	1		0 4 5	249	179	249		-7 11 5	275	40	275				
-8-14	5	0	155	1		-2 -8	5	154	301	154		2 -2	5	392	248	189		2 4 5	421	12	184		-5 11 5	85	278	84				
-6-14	5	569	347	116		0 -8	5	445	435	222		4 -2	5	0	108	1		4 4 5	80	215	79		-3 11 5	274	145	274				
-4-14	5	730	712	77		2 -8	5	0	31	1		-9 -1	5	349	293	349		-7 5 5	166	351	166		-1 11 5	262	165	262				
-2-14	5	156	136	155		4 -8	5	364	590	364		-7 -1	5	0	33	1		-5 5 5	132	283	132		1 11 5	0	19	1				
0-14	5	1079	893	113		-7 -7	5	853	811	79		-5 -1	5	0	229	1		-3 5 5	142	236	142		3 11 5	240	35	239				
2-14	5	0	221	1		-5 -7	5	341	533	341		-3 -1	5	0	9	1		-1 5 5	538	610	94		-8 12 5	415	326	238				
4-14	5	1417	1479	88		-3 -7	5	423	532	212		-1 -1	5	0	54	1		1 5 5	701	98	700		-6 12 5	202	237	201				
-7-13	5	950	952	83		-1 -7	5	143	328	142		1 -1	5	0	73	1		3 5 5	0	136	1		-4 12 5	341	249	160				
-5-13	5	250	296	249		1 -7	5	0	125	1		3 -1	5	384	118	226		-8 6 5	273	265	272		-2 12 5	100	293	99				
-3-13	5	491	507	141		3 -7	5	0	195	1		-8 0	5	266	143	265		-6 6 5	340	61	196		0 12 5	817	386	312				
-1-13	5	362	49	161		-8 -6	5	0	192	1		-6 0	5	0	119	1		-4 6 5	208	207	208		2 12 5	305	281	304				
1-13	5	341	14	313		-6 -6	5	283	83	282		-4 0	5	106	93	105		-2 6 5	1087	1090	53		4 12 5	909	696	86				
3-13	5	438	131	322		-4 -6	5	223	296	223		-2 0	5	143	281	143		0 6 5	1495	1456	92		-7 13 5	865	909	71				
-8-12	5	564	390	175		-2 -6	5	1010	1026	56		0 0	5	257	292	257		2 6 5	1036	1012	93		-5 13 5	0	330	1				
-6-12	5	453	226	151		0 -6	5	1549	1517	46		2 0	5	446	382	149		4 6 5	1003	780	99		-3 13 5	435	493	172				
-4-12	5	308	71	307		2 -6	5	1105	1091	64		4 0	5	0	254	1		-7 7 5	719	681	89		-1 13 5	0	65	1				
-2-12	5	400	325	128		4 -6	5	850	878	123		-9 1	5	304	239	303		-5 7 5	410	420	137		1 13 5	0	39	1				
0-12	5	446	356	144		-7 -5	5	308	271	307		-7 1	5	0	82	1		-3 7 5	423	476	126		3 13 5	231	55	231				
2-12	5	118	356	118		-5 -5	5	421	441	133		-5 1	5	0	104	1		-1 7 5	369	307	145		-8 14 5	275	55	274				
4-12	5	663	733	163		-3 -5	5	0	146	1		-3 1	5	0	132	1		1 7 5	0	9	1		-6 14 5	519	604	106				
-7-11	5	558	252	128		-1 -5	5	467	483	114		-1 1	5	318	31	187		3 7 5	254	149	254		-4 14 5	874	946	85				
-5-11	5	0	72	1		1 -5	5	0	57	1		1 1	5	217	186	216		-8 8 5	465	245	155		-2 14 5	0	102	1				

Table 3. Observed and calculated structure factors for crystal HMR-BO n.1.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	10F _o	10F _c	10σ
0	14	5	987	929	69	-5	21	5	453	468	119	-5	29	5	467	505	252	-1	-13	6	321	85	321	-1	1	6	0	99	1
2	14	5	217	24	217	-3	21	5	610	728	100	-3	29	5	388	519	163	-4	-12	6	372	202	284	-4	2	6	536	495	160
4	14	5	1437	1318	91	-1	21	5	636	611	98	-1	29	5	179	387	178	-2	-12	6	0	64	1	-2	2	6	1107	1250	63
-7	15	5	2070	2046	45	1	21	5	524	496	112	1	29	5	69	2	68	0	-12	6	300	417	299	0	2	6	216	88	215
-5	15	5	0	270	1	3	21	5	880	939	78	-6	30	5	0	91	1	-5	-11	6	353	352	352	-5	3	6	0	21	1
-3	15	5	1933	1921	42	-6	22	5	0	129	1	-4	30	5	264	34	264	-3	-11	6	224	200	224	-3	3	6	1336	1354	140
-1	15	5	298	307	244	-4	22	5	335	373	181	-2	30	5	597	618	98	-1	-11	6	311	170	310	-1	3	6	221	349	220
1	15	5	823	840	71	-2	22	5	457	571	119	0	30	5	872	902	74	-4	-10	6	0	180	1	-4	4	6	342	23	342
3	15	5	1379	1319	57	0	22	5	228	318	228	2	30	5	930	851	75	-2	-10	6	446	334	155	-2	4	6	659	645	95
-8	16	5	0	48	1	2	22	5	287	429	287	-5	31	5	0	223	1	0	-10	6	156	365	156	0	4	6	302	109	302
-6	16	5	600	550	116	-7	23	5	320	314	319	-3	31	5	0	98	1	-5	-9	6	556	329	136	-5	5	6	0	125	1
-4	16	5	1288	1354	90	-5	23	5	0	102	1	-1	31	5	0	60	1	-3	-9	6	673	686	99	-3	5	6	562	215	159
-2	16	5	350	241	162	-3	23	5	159	42	158	1	31	5	165	155	165	-1	-9	6	460	597	156	-1	5	6	298	28	297
0	16	5	1000	1031	59	-1	23	5	0	171	1	-6	32	5	84	22	83	-4	-8	6	72	8	72	-4	6	6	0	92	1
2	16	5	335	51	232	1	23	5	351	308	205	-4	32	5	0	146	1	-2	-8	6	308	283	307	-2	6	6	0	140	1
4	16	5	682	681	111	3	23	5	0	206	1	-2	32	5	297	103	296	0	-8	6	195	164	194	0	6	6	0	104	1
-7	17	5	1593	1624	52	-6	24	5	197	14	197	0	32	5	310	133	309	-5	-7	6	496	47	496	-5	7	6	0	19	1
-5	17	5	0	78	1	-4	24	5	319	154	229	-5	33	5	0	53	1	-3	-7	6	228	184	228	-3	7	6	0	165	1
-3	17	5	1648	1782	45	-2	24	5	474	169	345	-1	-7	6	190	67	189	-1	-7	6	190	67	189	-1	7	6	334	34	334
-1	17	5	370	185	152	0	24	5	0	67	1	-1	33	5	0	166	1	-4	-6	6	0	38	1	-4	8	6	0	77	1
1	17	5	594	656	188	2	24	5	78	179	78	1	33	5	267	255	267	-2	-6	6	347	177	264	-2	8	6	538	418	116
3	17	5	974	1011	70	-7	25	5	331	287	280	-4	34	5	0	246	1	0	-6	6	92	2	91	0	8	6	178	220	178
-8	18	5	0	159	1	-5	25	5	0	81	1	-2	34	5	0	118	1	-5	-5	6	0	43	1	-5	9	6	0	476	1
-6	18	5	1011	983	62	-3	25	5	0	37	1	0	34	5	281	190	280	-3	-5	6	356	222	238	-3	9	6	622	669	100
-4	18	5	2837	2918	54	-1	25	5	292	6	292	-5	35	5	0	268	1	-1	-5	6	114	119	113	-1	9	6	460	499	141
-2	18	5	873	916	64	1	25	5	192	4	192	-3	35	5	0	15	1	-4	-4	6	186	261	185	-4	10	6	0	23	1
0	18	5	1484	1503	90	3	25	5	0	260	1	-1	35	5	0	106	1	-2	-4	6	1086	818	132	-2	10	6	0	262	1
2	18	5	517	503	117	-6	26	5	0	256	1	-4	36	5	0	1	1	0	-4	6	36	132	36	0	10	6	77	110	77
4	18	5	3150	3118	45	-4	26	5	270	305	270	-2	36	5	0	119	1	-5	-3	6	462	50	265	-5	11	6	485	443	132
-7	19	5	1025	1132	64	-2	26	5	463	477	123	0	36	5	357	216	356	-3	-3	6	1481	1415	53	-3	11	6	0	138	1
-5	19	5	0	78	1	0	26	5	402	407	153	-3	37	5	0	38	1	-1	-3	6	304	372	304	-1	11	6	0	216	1
-3	19	5	1019	931	55	2	26	5	502	366	136	-1	37	5	126	75	126	-4	-2	6	280	209	279	-4	12	6	237	126	236
-1	19	5	0	161	1	-7	27	5	544	580	122	-2	38	5	385	156	200	-2	-2	6	1032	934	66	-2	12	6	0	56	1
1	19	5	456	478	135	-5	27	5	617	667	93	0	-2	6	311	242	310	0	-2	6	259	29	258	0	12	6	476	395	476
3	19	5	1157	1190	64	-3	27	5	775	672	74	-3	-17	6	265	29	265	-5	-1	6	440	10	169	-3	13	6	0	51	1
-8	20	5	0	374	1	-1	27	5	621	724	92	-4	-16	6	176	185	176	-3	-1	6	1552	1659	53	-1	13	6	0	312	1
-6	20	5	715	837	81	1	27	5	211	172	211	-2	-16	6	173	124	172	-1	-1	6	400	386	182	-4	14	6	184	157	183
-4	20	5	947	1087	60	-6	28	5	0	82	1	-3	-15	6	0	33	1	-4	0	6	386	7	202	-2	14	6	206	170	206
-2	20	5	710	797	76	-4	28	5	267	379	267	-1	-15	6	456	99	163	-2	0	6	2425	2518	43	-3	15	6	151	30	151
0	20	5	241	342	241	-2	28	5	226	569	225	-4	-14	6	340	7	339	0	0	6	0	123	1	-1	15	6	0	61	1
2	20	5	0	225	1	0	28	5	306	324	305	-2	-14	6	550	236	287	-5	1	6	188	40	187	-4	16	6	0	162	1
-7	21	5	1133	1142	70	2	28	5	345	212	292	-3	-13	6	0	89	1	-3	1	6	1350	1417	56	-2	16	6	0	132	1

Page 24

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	10σ	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	10σ	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	10σ	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	10σ	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	10σ
-3	17	6	327	186	261	-2	18	6	0	158	1																		