

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

Observed and calculated structure factors for levyne in air after decompression

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-1	2	0	1152	1235	17	0	4	2	6204	6140	94	-13	14	3	271	303	17	-1	4	7	1347	1221	20
0	3	0	2229	2189	23	-5	5	2	269	145	7	-7	14	3	210	90	19	-3	5	7	882	1051	14
-2	4	0	2280	2223	34	-2	5	2	1137	1210	17	-1	14	3	189	27	-24	0	5	7	2360	2338	36
-1	5	0	1987	2007	21	-4	6	2	627	773	10	-9	15	3	130	62	-37	-5	6	7	1388	1431	21
-3	6	0	2999	2742	45	-1	6	2	674	556	11	-3	15	3	658	599	12	-2	6	7	1320	1296	20
0	6	0	579	746	6	-6	7	2	1183	1013	18	-11	16	3	393	317	13	-4	7	7	1787	1831	27
-2	7	0	1275	1289	14	-3	7	2	1075	968	16	-8	16	3	439	530	13	-12	13	5	932	902	15
-4	8	0	5599	5290	20	0	7	2	436	508	8	-5	16	3	80	104	-79	-9	13	5	1513	1402	23
-1	8	0	1093	976	12	-8	8	2	2847	2726	43	-2	16	3	145	21	-38	-3	13	5	286	260	15
-3	9	0	147	72	-23	-5	8	2	667	719	11	-13	17	3	435	356	14	0	13	5	1050	1015	17
0	9	0	4118	3918	57	-2	8	2	2711	2617	41	-4	17	3	335	375	17	-14	14	5	80	29	-79
-5	10	0	1418	1422	22	-7	9	2	1029	1088	16	-9	18	3	197	244	-29	-11	14	5	734	735	13
-2	10	0	963	976	10	-4	9	2	1408	1298	21	-6	18	3	100	25	-99	-5	14	5	333	392	13
-4	11	0	137	51	-25	-1	9	2	1408	1410	22	0	1	4	146	145	8	-13	15	5	107	207	-54
-1	11	0	767	736	9	-9	10	2	468	485	9	0	2	4	908	978	14	-2	15	5	236	301	21
-6	12	0	422	369	10	-6	10	2	634	642	11	-2	3	4	1663	1541	25	-10	15	5	419	395	11
-3	12	0	1007	994	25	-3	10	2	768	781	12	-4	4	4	374	510	7	-4	15	5	223	109	21
0	12	0	2005	1929	31	0	10	2	51	29	-51	-1	4	4	866	840	13	-1	15	5	432	437	13
-5	13	0	1847	1836	20	-11	11	2	176	227	-20	-3	5	4	1001	905	15	-15	16	5	210	155	-26
-2	13	0	173	220	16	-8	11	2	1108	1113	17	0	5	4	1663	1477	25	-12	16	5	752	805	13
-7	14	0	566	559	11	-5	11	2	1111	1120	17	-5	6	4	1296	1222	20	-9	16	5	91	220	-91
-4	14	0	287	265	10	-2	11	2	834	798	13	-2	6	4	776	771	12	-6	16	5	756	739	13
-1	14	0	660	615	8	-10	12	2	723	734	12	-7	7	4	506	423	9	-3	16	5	462	461	14
-6	15	0	548	587	26	-7	12	2	513	522	10	-4	7	4	493	457	9	-8	12	7	1160	1144	18
0	15	0	233	187	-46	-4	12	2	1856	1683	28	-1	7	4	1297	1280	20	-17	17	5	922	862	16
-8	16	0	1744	1669	27	-1	12	2	168	236	-24	-6	8	4	119	142	-22	-11	17	5	122	156	-55
-5	16	0	159	31	-31	-12	13	2	691	649	12	-3	8	4	319	341	8	-14	17	5	379	352	15
-2	16	0	476	494	9	-9	13	2	1643	1670	25	0	8	4	1192	874	18	-8	17	5	1064	1026	17
-7	17	0	116	79	-54	-6	13	2	279	210	14	-8	9	4	405	375	9	-5	17	5	773	743	14
-4	17	0	1705	1661	18	-3	13	2	57	51	-56	-5	9	4	321	273	8	-7	18	5	474	496	14
-9	18	0	1146	1055	19	0	13	2	1563	1525	24	-2	9	4	918	816	14	0	0	6	2235	2322	34
-6	18	0	50	95	-49	-14	14	2	209	253	-23	-7	10	4	103	164	-36	-1	2	6	707	787	11
0	2	1	354	343	6	-11	14	2	626	582	12	-10	10	4	756	751	12	-3	3	6	1153	1304	17
-2	3	1	750	667	11	-8	14	2	260	232	16	-4	10	4	526	468	10	0	3	6	1376	1352	21
-4	4	1	2278	2332	34	-5	14	2	110	41	-44	-9	11	4	469	566	9	-2	4	6	336	396	7
-1	4	1	191	199	9	-2	14	2	614	565	12	-9	11	4	605	678	11	-4	5	6	745	667	12
-3	5	1	64	23	-35	-13	15	2	348	349	14	-6	11	4	305	318	12	-1	5	6	789	798	12
0	5	1	455	426	8	-10	15	2	679	645	12	-3	11	4	704	721	12	-6	6	6	398	425	8
-5	6	1	772	869	12	-7	15	2	216	218	21	-11	12	4	274	146	14	-3	6	6	415	330	8
-2	6	1	823	908	13	-4	15	2	375	251	13	-8	12	4	314	223	12	0	6	6	133	241	-18
-7	7	1	58	126	-58	-1	15	2	494	516	12	-5	12	4	38	106	-37	-5	7	6	785	697	12

-table 4A
 NW-05-11
 Gatta et al
 #1768
 vol. 70
 1975

-4	7	1	157	69	14	-15	16	2	184	273	-31	-2	12	4	739	731	12	-2	7	6	443	470	8	-13	16	7	250	319	22
-1	7	1	863	798	13	-12	16	2	909	940	15	-13	16	4	221	113	20	-7	8	6	236	264	12	-10	16	7	1091	1143	18
-6	8	1	302	306	9	-9	16	2	111	185	-51	-10	13	4	327	353	13	-4	8	6	75	131	-47	-7	16	7	196	44	-25
-3	8	1	993	946	15	-6	16	2	743	671	13	-7	13	4	137	197	-29	-1	8	6	676	606	11	-4	16	7	600	631	12
0	8	1	1323	1181	20	-3	16	2	337	332	15	-4	13	4	196	166	20	-9	9	6	1244	1212	19	-1	16	7	507	471	13
-8	9	1	321	302	10	0	16	2	658	628	13	-1	13	4	147	126	-31	-6	9	6	250	336	12	-12	17	7	743	748	14
-5	9	1	1383	1434	21	-14	17	2	216	122	-26	-6	14	4	161	263	-27	-3	9	6	261	336	12	-9	17	7	1353	1330	21
-2	9	1	115	35	-26	-11	17	2	637	662	13	0	14	4	46	20	-45	0	9	6	495	415	10	-6	17	7	554	559	12
-7	10	1	1053	976	16	-8	17	2	967	972	16	-14	15	4	308	397	17	-8	10	6	353	375	11	-11	18	7	895	915	15
-4	10	1	179	26	16	-5	17	2	783	813	14	-11	15	4	89	33	-88	-5	10	6	693	660	11	0	1	8	54	55	-53
-1	10	1	136	106	-25	-2	17	2	307	390	19	-8	15	4	226	332	21	-2	10	6	407	342	9	-1	3	8	1374	1330	21
-6	11	1	350	330	11	-13	18	2	492	501	13	-5	15	4	414	444	12	-10	11	6	281	231	13	-3	4	8	91	202	-24
-3	11	1	88	19	-49	-10	18	2	191	143	-28	-2	15	4	225	295	23	-7	11	6	950	951	15	0	4	8	391	487	8
0	11	1	163	257	-23	-7	18	2	556	569	13	-13	16	4	322	336	17	-4	11	6	711	683	12	-2	5	8	1105	1052	17
-11	12	1	154	157	-27	-1	2	3	293	268	5	-10	16	4	372	336	14	-1	11	6	153	222	-25	-4	6	8	336	334	8
-8	12	1	677	703	12	-3	3	3	1076	963	16	-4	16	4	418	374	14	-9	12	6	195	249	-20	-1	6	8	310	305	8
-5	12	1	166	166	-22	0	3	3	743	954	11	-12	17	4	227	45	22	-6	12	6	378	423	11	-6	7	8	232	149	11
-2	12	1	39	120	-38	-2	4	3	123	166	-13	-9	17	4	349	340	16	-3	12	6	95	73	-50	-3	7	8	591	618	10
-13	13	1	397	414	13	-4	5	3	1443	1512	22	-3	17	4	244	190	22	0	12	6	195	49	-21	0	7	8	599	684	10
-10	13	1	139	110	-30	-1	5	3	849	748	13	-11	18	4	282	319	20	-11	13	6	183	128	-23	-8	8	8	357	359	9
-7	13	1	347	363	12	-6	6	3	483	546	8	-8	18	4	50	195	-49	-8	13	6	247	308	16	-5	8	8	265	327	11
-4	13	1	402	389	10	-3	6	3	1223	1131	19	-5	18	4	287	263	20	-5	13	6	391	417	11	-2	8	8	847	847	13
-12	14	1	189	138	-23	0	6	3	348	371	7	0	1	5	2893	3173	44	-2	13	6	151	15	-29	-7	9	8	751	664	12
-9	14	1	593	569	11	-5	7	3	266	214	9	-2	2	5	1364	1151	20	-13	14	6	90	159	-90	-4	9	8	795	816	13
-6	14	1	116	198	-41	-2	7	3	625	604	10	-1	3	5	2246	2197	34	-7	14	6	84	158	-83	-1	9	8	184	78	18
-3	14	1	291	325	15	-4	8	3	453	587	8	-3	4	5	1662	1772	25	-4	14	6	322	266	14	-9	10	8	90	176	-51
0	14	1	629	601	12	-1	8	3	562	508	10	0	4	5	1124	1272	17	-1	14	6	289	365	17	-6	10	8	211	86	15
-14	15	1	66	93	-66	-9	9	3	465	429	9	-5	5	5	1616	1671	24	-15	15	6	175	71	-31	-3	10	8	185	159	18
-8	15	1	236	254	19	-6	9	3	313	357	10	-2	5	5	1158	1026	18	-12	15	6	435	427	12	0	10	8	126	179	-31
-5	15	1	115	16	-43	-3	9	3	487	460	9	-4	6	5	972	864	15	-9	15	6	125	83	-41	-11	11	8	472	531	10
-2	15	1	242	270	21	0	9	3	1665	1629	25	-1	6	5	148	124	15	-6	15	6	117	6	-45	-8	11	8	1066	980	17
-16	16	1	87	134	-86	-8	10	3	461	496	9	-6	7	5	1461	1406	22	-3	15	6	700	737	13	-5	11	8	752	718	12
-13	16	1	254	212	19	-5	10	3	331	338	10	-3	7	5	676	588	11	0	15	6	428	350	14	-2	11	8	296	331	13
-10	16	1	340	406	15	-2	10	3	286	304	12	0	7	5	254	204	10	-14	16	6	146	193	-40	-10	12	8	90	211	-66
-7	16	1	45	133	-45	-10	11	3	199	90	18	-8	8	5	2211	2236	34	-11	16	6	333	327	15	-7	12	8	429	445	10
-4	16	1	208	147	-24	-7	11	3	366	434	10	-5	8	5	374	348	8	-5	16	6	305	249	17	-4	12	8	257	251	15
-1	16	1	120	166	-51	-4	11	3	316	409	11	-2	8	5	1111	1019	17	-2	16	6	212	164	-26	-1	12	8	548	435	11
-15	17	1	189	117	-29	-1	11	3	145	6	-25	-7	9	5	391	295	9	-13	17	6	398	383	15	-12	13	8	87	145	-86
-9	17	1	240	267	20	-12	12	3	443	491	11	-4	9	5	2009	1977	30	-4	17	6	376	425	15	-9	13	8	902	957	15
-6	17	1	135	43	-43	-9	12	3	337	308	10	-1	9	5	2158	2071	33	-12	18	6	101	171	-101	-6	13	8	223	142	17
-3	17	1	198	234	-28	-6	12	3	447	492	10	-9	10	5	787	745	13	-9	18	6	259	268	22	0	13	8	1049	1094	17
-8	18	1	246	215	21	-3	12	3	313	373	12	-6	10	5	228	180	13	-6	18	6	87	86	-87	-11	14	8	373	411	13
-5	18	1	538	542	13	0	12	3	448	494	11	-3	10	5	1934	1857	29	-1	1	7	3410	3315	51	-5	14	8	327	344	14
-2	2	2	2050	2315	31	-11	13	3	143	149	-29	0	10	5	337	246	11	0	2	7	2141	2091	32	-2	14	8	438	438	13
-3	4	2	1996	1684	30	-8	13	3	412	508	10	-11	11	5	408	482	10	-2	3	7	3016	2963	45	-13	15	8	210	217	-24
						-5	13	3	505	455	10	-8	11	5	560	541	10	-4	4	7	533	619	9	-10	15	8	352	343	14

h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S			
-7 15	8	501	517 11	-8 12	10	294	333 14	-5 10	12	201	200 17	-4 9	14	2082	2048 32	-8 9	16	1030	1018 16
-4 15	8	711	749 13	-5 12	10	97	91 -49	-2 10	12	661	667 12	-1 9	14	1365	1320 21	-5 9	16	1406	1392 22
-1 15	8	83	206 -83	-2 12	10	165	87 -24	-10 11	12	620	633 11	-9 10	14	357	364 12	-2 9	16	484	544 10
-15 16	8	373	294 16	-13 13	10	120	118 -45	-7 11	12	312	273 13	-6 10	14	78	103 -77	-10 10	16	357	269 12
-9 16	8	123	109 -45	-10 13	10	490	511 11	-4 11	12	226	298 18	-3 10	14	749	717 13	-7 10	16	615	684 11
-11 17	8	162	212 -35	-7 13	10	362	324 11	-1 11	12	585	596 11	0 10	14	130	162 -34	-4 10	16	194	229 -21
-8 17	8	222	279 -24	-4 13	10	163	304 -27	-12 12	12	964	994 16	-11 11	14	303	369 15	-1 10	16	327	286 13
-5 17	8	178	245 -33	-1 13	10	88	204 -88	-9 12	12	216	138 19	-8 11	14	256	197 16	-9 11	16	900	910 15
-10 18	8	134	28 -46	-12 14	10	112	134 -54	-6 12	12	812	795 14	-5 11	14	611	612 11	-6 11	16	943	958 15
-7 18	8	351	345 17	-9 14	10	327	374 15	-3 12	12	266	245 16	-2 11	14	472	515 11	-3 11	16	42	84 -42
0 0	9	1439	1674 22	-6 14	10	348	344 14	0 12	12	420	409 13	-10 12	14	914	856 15	0 11	16	267	394 18
0 0	9	1439	1674 22	-6 14	10	348	344 14	0 12	12	420	409 13	-10 12	14	914	856 15	0 11	16	267	394 18
-3 3	9	1154	1303 18	-3 14	10	241	170 19	-11 13	12	597	605 12	-7 12	14	227	287 19	-11 12	16	209	93 -22
-4 5	9	2003	1791 30	0 14	10	251	210 20	-8 13	12	867	807 14	-4 12	14	1689	1675 26	-8 12	16	1387	1326 22
-4 5	9	1867	1839 28	-14 15	10	109	107 -64	-5 13	12	657	628 12	-1 12	14	188	54 -24	-5 12	16	340	351 14
-1 5	9	2874	2816 11	-11 15	10	93	113 -92	-2 13	12	401	437 12	-12 13	14	959	939 16	-2 12	16	649	630 12
-6 6	9	1874	1664 28	-8 15	10	339	358 15	-13 14	12	157	109 -34	-9 13	14	1618	1629 25	-13 13	16	1362	1279 21
-3 6	9	1687	1691 26	-5 15	10	271	281 18	-10 14	12	259	228 17	-6 13	14	180	157 -26	-7 13	16	211	115 -23
0 6	9	1382	1271 21	-10 16	10	336	332 16	-7 14	12	355	417 14	-3 13	14	297	225 16	-4 13	16	1536	1453 24
-5 7	9	533	468 9	-7 16	10	164	114 -32	-4 14	12	64	5 -63	0 13	14	1910	1829 29	-1 13	16	697	743 13
-2 7	9	1229	1185 19	-4 16	10	194	163 -28	-1 14	12	195	104 -26	-11 14	14	406	426 13	-12 14	16	352	336 15
-7 8	9	502	548 9	-6 17	10	258	225 21	-15 15	12	182	185 -32	-8 14	14	112	132 -54	-9 14	16	461	460 12
-4 8	9	2306	2224 35	0 1 11	1039	998	16	-9 15	12	475	444 12	-5 14	14	555	584 12	-6 14	16	296	339 17
-1 8	9	186	202 16	-2 2 11	1039	998	16	-6 15	12	694	700 13	-2 14	14	256	378 21	-3 14	16	765	737 14
-9 9	9	2411	2386 37	-1 3 11	177	96 12	-4 11	15	12	456	395 13	-13 15	14	258	381 22	-11 15	16	210	94 -26
-6 9	9	709	683 12	-3 4 11	174	243 13	0 15	12	208	327 -29	-10 15	14	483	569 12	-8 15	16	329	295 17	
-3 9	9	1057	1057 16	0 4 11	1339	1303 20	-11 16	12	234	258 23	-7 15	14	303	311 17	-5 15	16	459	471 14	
0 9	9	2045	1973 31	-5 5 11	1022	1001 16	-8 16	12	606	617 12	-4 15	14	392	360 14	-2 15	16	396	320 15	
-8 10	9	900	923 14	-2 5 11	143	172 -18	-2 16	12	129	139 -48	-1 15	14	307	354 19	-10 16	16	388	428 15	
-5 10	9	312	252 11	-4 6 11	495	501 9	-2 16	12	434	436 15	-12 16	14	1008	926 17	-7 16	16	159	162 -39	
-2 10	9	302	171 12	-1 6 11	1033	910 16	-10 17	12	325	269 17	-9 16	14	390	328 15	0 1 17	796	639 13	-39	
-10 11	9	787	815 13	-6 7 11	418	427 9	-7 17	12	336	241 17	-6 16	14	527	526 13	-2 2 17	393	340 9		
-7 11	9	648	640 11	-3 7 11	410	405 9	-1 1 13	722	588 11	-17 17	14	1006	1009 17	-1 3 17	337	280 10			
-1 11	9	1005	978 16	0 7 11	326	451 11	0 2 13	474	516 8	-8 17	14	1255	1206 20	-3 4 17	355	393 9			
-12 12	9	1103	1049 18	-8 8 11	1335	1299 21	-2 3 13	598	656 10	0 0 15	1132	1046 17	0 4 17	585	617 10				
-9 12	9	272	322 15	-5 8 11	1245	1204 19	-1 4 13	461	505 9	-1 2 15	402	351 8	-5 5 17	453	478 9				
-6 12	9	600	669 11	-2 8 11	156	8 -20	0 5 13	1558	1507 24	-3 3 15	174	47 16	-2 5 17	292	282 11				
-3 12	9	648	641 12	-7 9 11	134	110 -26	-5 6 13	406	416 9	0 3 15	444	441 9	-4 6 17	397	434 9				
0 12	9	918	973 15	-4 9 11	316	367 11	-2 6 13	234	229 12	-2 4 15	185	189 15	-3 7 17	468	481 10				
-11 13	9	517	495 11	-1 9 11	591	561 11	-7 7 13	199	234 16	-4 5 15	970	991 15	0 7 17	542	552 11				
-8 13	9	1498	1501 23	-9 10 11	185	160 -20	-4 7 13	187	143 16	-1 5 15	1154	1125 18	-5 8 17	86	150 -67				
-5 13	9	1323	1229 21	-6 10 11	184	246 -19	-1 7 13	690	691 11	-6 6 15	206	93 16	-2 8 17	129	108 -30				
-2 13	9	599	583 12	-3 10 11	300	214 12	-6 8 13	71	84 -71	-3 6 15	891	945 14	-7 9 17	121	135 -36				
-13 14	9	130	136 -41	0 10 11	341	354 12	-3 8 13	322	303 11	0 6 15	385	404 9	-1 9 17	188	137 -21				
-10 14	9	169	105 -26	-11 11 11	249	288 16	0 8 13	488	504 10	-5 7 15	281	288 12	-9 10 17	74	102 -73				

-7 14	9	926	878	15	-8 11	11	192	165	-21	-8	9	13	359	342	10	-2	7	15	151	231	-22	-6	10	17	438	451	11	
-1 14	9	368	360	14	-5 11	11	149	52	-25	-5	9	13	447	435	10	-7	8	15	345	305	12	-3	10	17	102	61	-49	
-15 15	9	567	523	13	-2 11	11	217	176	17	-2	9	13	424	435	10	-4	8	15	1466	1422	23	0	10	17	217	181	20	
-12 15	9	104	53	-65	-10	12	11	415	420	12	-10	10	13	408	394	10	-1	8	15	146	59	-25	-11	11	17	136	108	-36
-9 15	9	561	515	12	-7 12	11	176	214	-23	-7	10	13	580	664	11	-9	9	15	613	639	11	-8	11	17	137	186	-34	
-6 15	9	715	703	13	-4 12	11	1026	1013	16	-4	10	13	232	141	15	-6	9	15	284	159	13	-5	11	17	165	60	-26	
-3 15	9	441	400	13	-1 12	11	60	6	-60	-1	10	13	40	65	-39	-3	9	15	392	350	10	-2	11	17	185	54	-24	
0 15	9	252	313	22	-12	13	11	237	391	21	-9	11	13	41	141	-40	0	9	15	770	685	13	-10	12	17	158	135	-31
-14 16	9	424	459	15	-9 13	11	507	519	11	-6	11	13	182	140	-21	-8	10	15	198	197	20	-7	12	17	221	174	20	
-11 16	9	202	235	-27	-6 13	11	133	14	-33	-3	11	13	156	158	-26	-5	10	15	301	329	14	-4	12	17	154	111	-31	
-8 16	9	783	761	14	0 13	11	582	608	12	0	11	13	237	129	17	-2	10	15	236	202	16	-1	12	17	191	11	-27	
-5 16	9	67	20	-67	-11	14	11	212	35	-22	-11	12	13	76	93	-75	-4	11	15	189	224	-23	-12	13	17	260	249	20
-2 16	9	441	479	14	-8 14	11	76	56	-76	-8	12	13	72	11	-72	-12	12	15	267	191	17	-6	13	17	224	167	21	
-13 17	9	1132	1105	18	-5 14	11	177	237	-27	-5	12	13	284	319	15	-9	12	15	199	244	-24	-3	13	17	368	395	15	
-7 17	9	249	144	22	-13	15	11	199	5	-26	-2	12	13	196	268	-22	-6	12	15	384	394	13	-8	14	17	228	95	22
-4 17	9	1058	1038	17	-7 15	11	424	286	13	-13	13	13	94	175	-93	-3	12	15	151	180	-32	-10	15	17	70	124	-70	
-9 18	9	565	582	13	-1 15	11	177	91	-29	-7	13	13	61	55	-61	0	12	15	651	698	12	0	0	18	1739	1754	26	
-1 10	1407	1159	21	-12	16	11	542	521	12	-4	13	13	371	344	13	-8	13	15	682	699	12	-1	2	18	1043	1071	16	
0 20	1592	1687	24	-9	16	11	238	199	21	-9	14	13	275	300	17	-5	13	15	467	454	12	-3	3	18	1033	1023	16	
-2 30	538	600	9	-6	16	11	107	57	-70	-6	14	13	135	241	-38	-2	13	15	265	297	18	0	3	18	1158	1196	18	
-4 40	660	694	11	-3	16	11	172	262	-35	0	14	13	429	425	15	-13	14	15	339	305	16	-2	4	18	872	918	14	
-1 40	1174	1170	18	-8	17	11	446	496	14	-14	15	13	150	20	-39	-10	14	15	447	389	13	-4	5	18	136	133	-26	
-3 50	530	556	9	-5	17	11	360	435	17	-11	15	13	117	235	-54	-4	14	15	132	144	-44	-1	5	18	361	287	11	
0 50	804	907	13	0	0	12	3359	3283	51	-8	15	13	175	102	-28	-1	14	15	415	390	14	-6	6	18	170	170	-22	
-5 60	1004	974	15	-1	2	12	1419	1417	21	-2	15	13	364	289	16	-12	15	15	191	89	-29	-3	6	18	375	390	10	
-2 60	143	58	-17	-3	3	12	447	472	8	-10	16	13	213	290	-26	-6	15	15	245	130	20	-5	7	18	876	822	14	
-7 70	568	569	10	0	3	12	1140	1099	17	-9	17	13	237	183	-25	-8	16	15	179	81	-31	-2	7	18	614	652	11	
-4 70	360	317	9	-2	4	12	1217	1246	19	0	1	14	3042	3114	46	-5	16	15	133	28	-46	-7	8	18	57	134	-56	
-1 70	242	354	12	-4	5	12	1125	1055	17	-2	2	14	586	523	10	-1	1	16	1221	1119	19	-4	8	18	628	662	11	
-6 80	520	535	10	-1	5	12	1007	944	16	-1	3	14	1588	1576	24	0	2	16	1398	1436	21	-1	8	18	57	2	-56	
-3 80	171	137	17	-6	6	12	1608	1554	24	-3	4	14	1097	1111	17	-2	3	16	902	982	14	-9	9	18	511	530	11	
0 80	1241	1215	19	-3	6	12	1015	1056	16	0	4	14	4317	4268	65	-4	4	16	3892	3709	59	-6	9	18	71	77	-70	
-8 90	139	117	-25	0	6	12	1007	1001	16	-5	5	14	1573	1604	24	-1	4	16	1171	1253	18	-3	9	18	368	282	12	
-5 90	256	300	13	-5	7	12	1068	1081	17	-2	5	14	471	488	9	-3	5	16	1238	1294	19	0	9	18	571	511	11	
-2 90	635	679	11	-2	7	12	1157	1228	18	-4	6	14	728	735	12	0	5	16	1829	1831	28	-8	10	18	192	290	-23	
-10 100	526	591	10	-7	8	12	79	59	-66	-1	6	14	241	144	12	-5	6	16	499	515	10	-5	10	18	373	380	13	
-7 100	436	431	9	-4	8	12	2078	2036	32	-6	7	14	1130	1180	18	-2	6	16	834	835	13	-2	10	18	508	425	11	
-4 100	796	782	13	-1	8	12	177	266	-19	-3	7	14	1071	1144	17	-7	7	16	481	545	10	-10	11	18	478	470	11	
-1 100	317	297	12	-9	9	12	1423	1457	22	0	7	14	337	323	11	-4	7	16	679	691	11	-4	11	18	157	70	-28	
-9 110	365	357	11	-6	9	12	726	717	12	-8	8	14	3105	3045	47	-1	7	16	883	888	14	-1	11	18	517	558	12	
-3 110	200	238	19	-3	9	12	1355	1358	21	-5	8	14	1925	1916	29	-6	8	16	887	920	14	-12	12	18	442	484	14	
0 110	136	35	-31	0	9	12	1184	1165	18	-2	8	14	1225	1173	19	-3	8	16	355	312	12	-6	12	18	311	334	15	
-11 120	285	268	15	-8	10	12	1045	985	16	-7	9	14	749	796	12	0	8	16	1746	1729	27	-3	12	18	360	365	14	

h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S				h k l 10Fo 10Fc 10S													
0	12	18	469	447	12	-4	9	20	342	391	13	-2	6	22	341	359	13	-5	7	24	118	115	-46	-5	11	26	415	378	15
-11	13	18	357	322	15	-1	9	20	75	122	-75	-7	7	22	318	326	14	-2	7	24	126	18	-40	0	0	27	584	520	12
-8	13	18	224	245	23	-9	10	20	322	287	15	-4	7	22	246	285	17	-4	8	24	300	314	16	-1	2	27	290	322	16
-5	13	18	450	425	13	-6	10	20	201	198	-22	-1	7	22	538	551	11	-1	8	24	216	158	22	0	3	27	522	462	12
-2	13	18	316	313	17	-11	11	20	172	57	-32	-6	8	22	409	405	13	-9	9	24	192	202	-28	-2	4	27	356	379	14
-7	14	18	439	492	14	-8	11	20	79	198	-79	-3	8	22	87	110	-86	-3	9	24	336	287	15	-6	6	27	116	132	-54
-9	15	18	274	283	21	-10	12	20	224	80	22	0	8	22	232	253	20	-8	10	24	173	184	-32	-3	6	27	47	24	-46
-6	15	18	260	349	23	-7	12	20	168	190	-30	-8	9	22	187	137	-25	-8	10	24	68	133	-68	0	6	27	242	34	21
-1	1	19	1111	1158	17	-1	12	20	97	126	-97	-5	9	22	404	382	13	-5	10	24	207	55	-24	-2	7	27	234	239	22
0	2	19	763	675	12	-12	13	20	113	12	-63	-10	10	22	48	12	-47	-2	10	24	136	33	-43	-4	8	27	168	51	-32
-2	3	19	190	140	17	-9	13	20	154	275	-37	-7	10	22	497	504	12	-7	11	24	98	192	-97	-1	8	27	241	288	23
-4	4	19	1676	1618	26	-6	13	20	83	30	-83	-1	10	22	235	175	21	-4	11	24	224	98	-24	-6	9	27	248	107	21
-1	4	19	345	343	11	-3	13	20	235	46	22	-9	11	22	345	324	16	-1	11	24	142	22	-45	-3	9	27	172	140	-34
-3	5	19	53	101	-52	-8	14	20	172	204	-32	-6	11	22	535	530	12	-9	12	24	72	124	-71	-5	10	27	124	69	-55
0	5	19	1550	1467	24	-5	14	20	373	427	16	-3	11	22	440	444	13	-1	1	25	207	215	21	-1	1	28	671	719	13
-5	6	19	109	116	-39	0	0	21	2156	2151	33	0	11	22	429	441	15	0	2	25	60	33	-60	0	2	28	453	453	12
-2	6	19	127	46	-30	-1	2	21	647	661	11	-11	12	22	297	346	19	-2	3	25	105	139	-51	-2	3	28	485	544	12
-7	7	19	81	43	-80	-3	3	21	255	221	15	-2	12	22	364	342	16	-4	4	25	781	738	13	-4	4	28	1708	1653	26
-4	7	19	482	514	10	0	3	21	255	164	14	-7	13	22	141	123	-45	-1	4	25	297	242	15	-1	4	28	603	597	12
-1	7	19	394	380	12	-2	4	21	1120	1124	18	-4	13	22	219	341	-26	-3	5	25	210	31	21	-3	5	28	634	591	12
-6	8	19	135	97	-31	-4	5	21	649	679	11	0	1	23	487	495	10	0	5	25	713	726	13	0	5	28	1231	1144	20
-3	8	19	286	306	14	-1	5	21	1132	1127	18	-2	2	23	714	671	12	-5	6	25	127	83	-40	-5	6	28	246	142	21
0	8	19	1209	1159	19	-6	6	21	632	692	12	-3	4	23	378	418	11	-4	7	25	311	278	15	-4	7	28	119	149	-55
-8	9	19	721	756	13	-3	6	21	1362	1282	21	-1	3	23	701	675	12	-2	6	25	100	132	-65	-2	6	28	418	405	14
-5	9	19	1159	1126	18	0	6	21	372	362	12	0	4	23	1726	1748	26	-1	7	25	247	254	19	-1	7	28	556	584	12
-2	9	19	289	266	15	-5	7	21	709	736	12	-5	5	23	1371	1357	21	-6	8	25	81	50	-80	-6	8	28	338	374	17
-10	10	19	494	469	11	-2	7	21	919	923	15	-4	6	23	644	620	12	-3	8	25	405	399	14	-3	8	28	465	497	13
-7	10	19	502	483	11	-7	8	21	149	24	-30	-4	6	23	644	620	12	0	8	25	834	848	14	0	8	28	1005	976	17
-4	10	19	114	55	-44	-4	8	21	1703	1654	26	-1	6	23	245	73	17	-8	9	25	578	563	12	-5	9	28	993	975	17
-1	10	19	396	418	13	-1	8	21	286	348	16	-6	7	23	810	781	14	-5	9	25	567	580	12	0	1	29	497	408	12
-9	11	19	379	384	14	-9	9	21	1444	1411	23	-3	7	23	237	283	18	-2	9	25	239	130	22	-2	2	29	271	255	19
-6	11	19	290	278	16	-3	9	21	138	191	-35	0	7	23	394	447	13	-10	10	25	323	267	18	0	4	29	230	201	23
-3	11	19	162	97	-29	0	9	21	1314	1348	21	-8	8	23	1135	1106	18	-7	10	25	218	267	-23	-3	4	29	834	834	14
0	11	19	324	297	16	-8	10	21	638	631	12	-5	8	23	329	365	14	-4	10	25	275	266	20	-5	5	29	461	466	14
-8	12	19	627	641	12	-2	10	21	463	473	12	-2	8	23	509	548	11	-1	10	25	86	45	-86	-2	5	29	194	163	-27
-13	13	19	839	818	15	-10	11	21	707	655	13	-7	9	23	318	317	16	-6	11	25	186	47	-29	-4	6	29	208	44	-26
-10	13	19	205	170	-26	-7	11	21	541	582	12	-4	9	23	1108	1139	18	0	1	26	226	240	19	-1	6	29	70	10	-69
-7	13	19	284	273	18	-4	11	21	445	443	13	-1	9	23	849	860	15	-2	2	26	347	330	14	-6	7	29	133	48	-46
-4	13	19	1033	1021	17	-1	11	21	907	870	15	-9	10	23	135	73	-41	-1	3	26	663	652	12	-3	7	29	101	30	-101
-1	13	19	534	555	13	-12	12	21	776	807	14	-6	10	23	313	359	17	-3	4	26	133	167	-39	0	7	29	86	135	-86
-9	14	19	426	448	14	-9	12	21	236	165	22	-3	10	23	850	859	15	0	4	26	923	926	15	-5	8	29	124	35	-55
-6	14	19	190	80	-28	-6	12	21	719	696	13	0	10	23	388	300	15	-5	5	26	462	410	12	0	0	30	1527	1514	24
-3	14	19	361	375	16	-3	12	21	645	617	13	-11	11	23	419	443	15	-2	5	26	422	408	13	-1	1	30	401	408	14
-8	15	19	71	104	-71	0	12	21	926	935	16	-8	11	23	286	273	18	-4	6	26	453	462	12	-3	3	30	473	448	12

0	1	20	199	169	17	-11	13	21	475	461	13	-5	11	23	676	701	13	-1	6	26	216	163	-22	0	3	30	567	518	13
-3	4	20	471	445	10	-8	13	21	976	1025	16	-2	11	23	444	438	14	-6	7	26	508	535	12	-2	4	30	438	458	14
0	4	20	340	400	12	-5	13	21	936	959	16	-10	12	23	506	494	12	0	7	26	232	192	22	-4	5	30	805	775	14
-5	5	20	374	419	10	-2	13	21	577	581	13	-7	12	23	291	193	18	-8	8	26	692	737	13	-1	5	30	631	712	13
-2	5	20	290	335	13	-7	14	21	806	793	14	-4	12	23	1116	1106	18	-5	8	26	377	416	14	-3	6	30	660	663	13
-4	6	20	136	25	-29	-1	1	22	208	51	17	-6	13	23	339	300	17	-2	8	26	491	478	12	-4	8	30	1144	1145	19
-1	6	20	250	284	15	0	2	22	386	327	11	0	0	24	213	218	19	-7	9	26	406	402	14	0	2	31	186	13	-29
-6	7	20	141	106	-29	-2	3	22	528	541	10	-1	2	24	41	108	-41	-4	9	26	342	368	17	-2	3	31	217	132	-25
-3	7	20	314	298	13	-4	4	22	171	261	-23	-3	3	24	59	19	-59	-1	9	26	395	299	15	-4	4	31	242	225	24
0	7	20	709	661	12	-3	5	22	579	615	11	0	3	24	585	550	11	-9	10	26	209	127	-27	0	1	32	101	244	-101
-8	8	20	358	383	13	0	5	22	336	274	13	-6	6	24	507	482	11	-6	10	26	336	340	17	-2	2	32	440	341	15
-5	8	20	230	292	18	-5	6	22	186	35	-22	0	6	24	300	154	15	-3	10	26	428	445	15						