

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-8	0	0	0	6	1	-48	0	0	26	15	26	-87	-3	0	0	29	1	-27	-3	0	34	20	6	15	-3	0	104	100	3
8	0	0	0	6	1	-48	0	0	15	15	14	-85	-3	0	61	62	5	-27	-3	0	8	20	7	-17	3	0	259	264	5
-8	0	0	4	6	4	-50	0	0	28	9	16	-85	-3	0	56	62	5	-27	-3	0	26	20	14	-17	3	0	258	264	6
-8	0	0	0	6	1	-50	0	0	7	9	7	-83	-3	0	14	1	13	-25	-3	0	34	28	5	-19	3	0	29	34	4
-10	0	0	27	9	3	-50	0	0	23	9	22	-83	-3	0	16	1	16	-25	-3	0	42	28	4	-19	3	0	37	34	3
-10	0	0	19	9	2	-50	0	0	27	9	27	-81	-3	0	110	118	4	-25	-3	0	39	28	7	-19	3	0	35	34	4
-12	0	0	10	5	10	-52	0	0	25	27	25	-81	-3	0	110	118	4	-25	-3	0	41	28	3	19	-3	0	34	34	5
-12	0	0	0	5	1	-52	0	0	40	27	6	-79	-3	0	95	94	4	-23	-3	0	21	22	17	-19	3	0	31	34	3
12	0	0	15	5	5	-52	0	0	19	27	12	-79	-3	0	92	94	4	-23	-3	0	29	22	12	-21	3	0	43	42	4
-12	0	0	0	5	1	-52	0	0	18	27	17	-77	-3	0	446	451	9	-23	-3	0	24	22	9	21	-3	0	44	42	4
-14	0	0	15	4	4	-52	0	0	24	27	10	-77	-3	0	465	451	9	-23	-3	0	34	22	7	-21	3	0	49	42	3
14	0	0	15	4	7	-52	0	0	46	27	22	-75	-3	0	399	393	8	-21	-3	0	46	48	4	-21	3	0	39	42	2
-14	0	0	0	4	1	-54	0	0	53	46	5	-75	-3	0	397	393	8	-21	-3	0	48	48	4	-23	3	0	27	20	4
-14	0	0	18	4	14	-54	0	0	66	46	10	-75	-3	0	389	393	8	-21	-3	0	49	48	2	-23	3	0	13	20	12
-16	0	0	20	7	3	-54	0	0	48	46	4	-73	-3	0	232	233	5	-21	-3	0	44	48	3	-23	3	0	14	20	14
-16	0	0	19	7	7	-54	0	0	47	46	4	-73	-3	0	237	233	5	-21	-3	0	49	48	3	-23	3	0	12	20	12
-16	0	0	20	7	12	-54	0	0	44	46	8	-73	-3	0	226	233	5	-19	-3	0	38	38	3	23	-3	0	27	20	13
-18	0	0	19	7	8	-56	0	0	55	58	7	-71	-3	0	38	31	6	-19	-3	0	34	38	4	-25	3	0	37	25	5
18	0	0	15	7	9	-56	0	0	58	58	4	-71	-3	0	49	31	7	-19	-3	0	36	38	4	-25	3	0	40	25	6
-18	0	0	0	7	1	-56	0	0	58	58	4	-71	-3	0	35	31	9	-19	-3	0	34	38	4	25	-3	0	43	25	8
-18	0	0	6	7	5	-56	0	0	64	58	5	-69	-3	0	83	78	4	-17	-3	0	274	298	5	-25	3	0	35	25	4
-20	0	0	20	10	2	-56	0	0	77	58	8	-69	-3	0	80	78	4	-17	-3	0	272	298	5	-27	3	0	16	18	15

-20 0 0 14 10 14 -58 0 0 148 149 3 -69 -3 0 79 78 3 -17 -3 0 278 298 5 -27 3 0 13 18 13
20 0 0 12 10 11 -58 0 0 149 149 3 -67 -3 0 25 6 25 -17 -3 0 270 298 4 -27 3 0 14 18 13
-20 0 0 17 10 17 -58 0 0 149 149 5 -67 -3 0 20 6 19 -15 -3 0 101 113 3 -27 3 0 25 18 16
-22 0 0 25 18 4 -58 0 0 145 149 4 -67 -3 0 22 6 14 -15 -3 0 102 113 2 -27 3 0 20 18 16
-22 0 0 33 18 6 -58 0 0 143 149 6 -65 -3 0 41 43 6 -15 -3 0 98 113 3 27 -3 0 21 18 21
22 0 0 29 18 3 -62 0 0 543 521 10 -65 -3 0 40 43 5 15 3 0 97 113 2 -29 3 0 29 25 4
-22 0 0 27 18 2 -62 0 0 519 521 10 -65 -3 0 46 43 12 -15 -3 0 105 113 2 29 -3 0 37 25 9
-22 0 0 22 18 15 -62 0 0 527 521 12 -63 -3 0 29 24 9 -15 -3 0 104 113 3 -29 3 0 25 25 9
-24 0 0 12 2 11 -62 0 0 522 521 10 -63 -3 0 25 24 25 -13 -3 0 85 85 2 -29 3 0 36 25 6
24 0 0 0 2 1 -64 0 0 620 599 12 -63 -3 0 0 24 1 -13 -3 0 82 85 3 -29 3 0 21 25 9
-24 0 0 10 2 9 -64 0 0 630 599 11 -61 -3 0 46 40 11 -13 -3 0 80 85 2 -29 3 0 21 25 4
-24 0 0 0 2 1 -64 0 0 616 599 12 -61 -3 0 42 40 5 13 3 0 80 85 2 -31 3 0 28 19 16
-24 0 0 0 2 1 -64 0 0 602 599 15 -61 -3 0 35 40 6 -13 -3 0 86 85 3 31 -3 0 32 19 11
-24 0 0 0 2 1 -66 0 0 105 103 3 -59 -3 0 29 29 18 11 3 0 67 77 2 -31 3 0 20 19 13
-26 0 0 30 20 4 -66 0 0 112 103 5 -59 -3 0 28 29 9 -11 -3 0 74 77 3 -31 3 0 18 19 18
-26 0 0 28 20 2 -66 0 0 120 103 4 -59 -3 0 31 29 8 -11 -3 0 74 77 3 -31 3 0 13 19 13
-26 0 0 36 20 9 -66 0 0 105 103 4 -57 -3 0 54 54 5 -11 -3 0 75 77 2 33 -3 0 33 32 5
26 0 0 27 20 3 -68 0 0 146 124 4 -57 -3 0 53 54 4 -11 -3 0 72 77 2 -33 3 0 40 32 6
-26 0 0 28 20 12 -68 0 0 130 124 3 -57 -3 0 54 54 4 -9 -3 0 57 50 3 -33 3 0 28 32 6
-26 0 0 28 20 5 -68 0 0 134 124 4 -55 -3 0 25 30 11 -9 -3 0 52 50 3 -33 3 0 34 32 7
-28 0 0 61 55 3 -68 0 0 137 124 5 -55 -3 0 21 30 15 -9 -3 0 55 50 3 -33 3 0 36 32 6
-28 0 0 63 55 2 -70 0 0 50 53 4 -55 -3 0 25 30 10 -9 -3 0 54 50 2 -35 3 0 29 20 6
-28 0 0 66 55 4 -70 0 0 53 53 8 -55 -3 0 37 30 12 9 3 0 51 50 2 -35 3 0 0 20 1
-28 0 0 63 55 2 -70 0 0 67 53 7 -53 -3 0 107 105 3 -7 -3 0 34 38 4 -35 3 0 33 20 7
-28 0 0 65 55 4 -70 0 0 48 53 5 -53 -3 0 106 105 3 -7 -3 0 38 38 6 -35 3 0 17 20 17
28 0 0 61 55 2 -72 0 0 60 16 15 -53 -3 0 110 105 4 -7 -3 0 38 38 3 35 -3 0 29 20 13
-30 0 0 192 158 4 -72 0 0 42 16 20 -53 -3 0 101 105 4 7 3 0 31 38 3 -37 3 0 48 48 3

-30 0 0 189 158 5 -72 0 0 29 16 12 -51 -3 0 40 7 7 -7 -3 0 37 38 7 -37 3 0 45 48 4
-30 0 0 178 158 3 -76 0 0 23 9 23 -51 -3 0 9 7 8 -5 -3 0 31 33 4 -37 3 0 49 48 3
-30 0 0 185 158 3 -76 0 0 13 9 13 -51 -3 0 16 7 15 -5 -3 0 36 33 4 -37 3 0 60 48 5
-32 0 0 500 494 9 -80 0 0 26 18 21 -51 -3 0 23 7 10 -5 -3 0 36 33 3 37 -3 0 51 48 4
-32 0 0 501 494 9 -84 0 0 37 31 9 -51 -3 0 5 7 5 5 3 0 34 33 2 -39 3 0 21 22 20
-32 0 0 479 494 9 -84 0 0 38 31 10 -49 -3 0 335 344 6 -5 -3 0 37 33 4 -39 3 0 31 22 8
-34 0 0 112 106 3 -86 0 0 28 5 15 -49 -3 0 318 344 7 -3 -3 0 30 29 4 -39 3 0 23 22 9
-34 0 0 119 106 4 -86 0 0 0 5 1 -49 -3 0 323 344 6 -3 -3 0 28 29 5 -39 3 0 23 22 9
-34 0 0 112 106 3 -88 0 0 30 16 14 -49 -3 0 333 344 6 3 3 0 24 29 3 39 -3 0 17 22 16
-34 0 0 124 106 5 -88 0 0 22 16 22 -47 -3 0 257 264 5 -3 -3 0 29 29 4 -41 3 0 107 102 4
-36 0 0 71 60 4 -90 0 0 810 822 17 -47 -3 0 265 264 5 -3 -3 0 31 29 3 41 -3 0 106 102 4
-36 0 0 74 60 3 -90 0 0 841 822 16 -47 -3 0 264 264 5 -1 -3 0 31 27 8 -41 3 0 108 102 3
-36 0 0 78 60 6 -92 0 0 245 240 6 -45 -3 0 1751 1861 32 -1 -3 0 33 27 6 -43 3 0 71 47 5
-36 0 0 73 60 2 -92 0 0 251 240 5 -45 -3 0 1740 1861 33 -1 -3 0 31 27 4 43 -3 0 48 47 5
-38 0 0 62 60 2 -94 0 0 392 372 8 -41 -3 0 117 114 3 1 3 0 28 27 3 -43 3 0 63 47 3
-38 0 0 67 60 2 -94 0 0 380 372 8 -41 -3 0 117 114 3 -1 -3 0 30 27 7 45 -3 0 1588 1668 34
-38 0 0 64 60 4 -96 0 0 46 63 6 -41 -3 0 120 114 3 1 -3 0 31 27 4 -45 3 0 1679 1668 29
-38 0 0 70 60 7 -96 0 0 50 63 7 -39 -3 0 16 25 15 1 -3 0 30 27 4 47 -3 0 228 237 6
-38 0 0 64 60 3 -98 0 0 19 4 18 -39 -3 0 27 25 14 -1 3 0 28 27 3 -47 3 0 242 237 6
-40 0 0 23 9 23 -98 0 0 0 4 1 -39 -3 0 32 25 6 3 -3 0 28 28 5 -47 3 0 245 237 7
-40 0 0 19 9 18 -100 0 0 19 23 19 -37 -3 0 58 54 3 3 -3 0 31 28 4 -47 3 0 243 237 5
-40 0 0 29 9 29 -100 0 0 21 23 21 -37 -3 0 55 54 3 -3 3 0 27 28 3 -47 3 0 240 237 5
-40 0 0 14 9 14 -102 0 0 33 28 15 -37 -3 0 60 54 4 5 -3 0 39 31 3 -47 3 0 236 237 6
-40 0 0 26 9 12 -102 0 0 35 28 17 -35 -3 0 27 23 13 5 -3 0 38 31 3 -49 3 0 309 310 6
-42 0 0 36 35 7 -104 0 0 0 4 1 -35 -3 0 39 23 9 -5 3 0 34 31 3 -49 3 0 309 310 8
-42 0 0 38 35 5 -104 0 0 26 4 26 -35 -3 0 32 23 10 -7 3 0 29 35 3 -49 3 0 299 310 9
-42 0 0 46 35 12 -106 0 0 32 10 25 -33 -3 0 43 36 7 7 -3 0 39 35 3 -49 3 0 321 310 6

-42 0 0 44 35 3 -103 -3 0 90 91 4 -33 -3 0 37 36 5 7 -3 0 39 35 3 -49 3 0 313 310 7
 -44 0 0 4 0 3 -101 -3 0 45 41 8 -33 -3 0 47 36 4 9 -3 0 55 46 2 -49 3 0 303 310 6
 -44 0 0 30 0 30 -99 -3 0 34 23 12 -31 -3 0 22 21 21 -9 3 0 50 46 2 -51 3 0 26 6 26
 -44 0 0 7 0 6 -97 -3 0 34 34 13 -31 -3 0 23 21 15 9 -3 0 53 46 3 -51 3 0 42 6 13
 -44 0 0 13 0 12 -95 -3 0 13 14 12 -31 -3 0 0 21 1 11 -3 0 74 70 2 -51 3 0 35 6 19
 -46 0 0 33 14 10 -93 -3 0 41 27 10 -31 -3 0 10 21 9 -11 3 0 67 70 2 -51 3 0 0 6 1
 -46 0 0 24 14 24 -91 -3 0 0 22 1 -29 -3 0 37 28 7 11 -3 0 77 70 3 -51 3 0 2 6 1
 -46 0 0 16 14 13 -91 -3 0 20 22 19 -29 -3 0 30 28 10 -13 3 0 77 76 2 -51 3 0 25 6 13
 -46 0 0 0 14 1 -89 -3 0 35 34 12 -29 -3 0 41 28 4 13 -3 0 84 76 3 -51 3 0 20 6 20
 -48 0 0 38 15 32 -89 -3 0 33 34 11 -29 -3 0 37 28 9 13 -3 0 79 76 2 -53 3 0 93 95 3
 -48 0 0 15 15 15 -87 -3 0 13 29 12 -27 -3 0 12 20 12 -15 3 0 102 100 2 -53 3 0 88 95 4

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 2

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-53 3 0 94 95 3 -84 -6 0 32 29 13 -16 -6 0 23 8 12 -20 6 0 11 15 10 -27 -9 0 8 15 7
 -53 3 0 97 95 3 -82 -6 0 0 1 1 -16 -6 0 31 8 12 20 -6 0 0 15 1 -25 -9 0 51 39 8
 -53 3 0 99 95 4 -80 -6 0 31 13 12 -16 -6 0 0 8 1 20 -6 0 16 15 16 -25 -9 0 43 39 10
 -53 3 0 91 95 4 -78 -6 0 27 2 15 -16 -6 0 0 8 1 -20 6 0 23 15 22 -23 -9 0 33 26 11
 -55 3 0 16 27 16 -76 -6 0 19 6 18 -16 -6 0 0 8 1 20 -6 0 16 15 16 -23 -9 0 44 26 19
 -55 3 0 42 27 15 -74 -6 0 7 13 6 -14 -6 0 0 3 1 22 -6 0 13 5 12 -23 -9 0 25 26 25
 -55 3 0 29 27 9 -74 -6 0 0 13 1 -14 -6 0 13 3 13 22 -6 0 33 5 17 -21 -9 0 83 86 5
 -55 3 0 22 27 12 -72 -6 0 20 8 19 -14 -6 0 21 3 20 -22 6 0 15 5 15 -21 -9 0 102 86 5
 -55 3 0 46 27 13 -72 -6 0 0 8 1 -14 -6 0 0 3 1 22 -6 0 0 5 1 -19 -9 0 48 35 15
 -57 3 0 58 49 6 -70 -6 0 40 38 12 -14 -6 0 0 3 1 -22 6 0 15 5 14 -19 -9 0 36 35 11
 -57 3 0 47 49 4 -70 -6 0 37 38 7 -14 -6 0 7 3 6 24 -6 0 18 23 17 -19 -9 0 40 35 10

-57 3 0 48 49 5 -68 -6 0 56 61 4 -12 -6 0 0 5 1 -24 6 0 15 23 15 -15 -9 0 140 123 4
 -57 3 0 57 49 6 -68 -6 0 50 61 5 -12 -6 0 0 5 1 -24 6 0 31 23 11 -13 -9 0 102 110 4
 -57 3 0 44 49 5 -66 -6 0 44 52 5 -12 -6 0 19 5 18 26 -6 0 0 6 1 -11 -9 0 28 31 15
 -59 3 0 21 26 21 -66 -6 0 54 52 4 -12 -6 0 27 5 26 -26 6 0 0 6 1 -11 -9 0 46 31 15
 -59 3 0 35 26 9 -64 -6 0 208 224 4 -12 -6 0 0 5 1 -28 6 0 42 61 5 -11 -9 0 33 31 11
 -59 3 0 39 26 18 -64 -6 0 207 224 5 -12 -6 0 12 5 12 -30 6 0 191 186 5 -9 -9 0 33 38 7
 -59 3 0 0 26 1 -62 -6 0 328 354 6 -10 -6 0 9 3 8 -32 6 0 673 750 17 -9 -9 0 45 38 8
 -59 3 0 21 26 20 -62 -6 0 327 354 7 -10 -6 0 0 3 1 -34 6 0 82 85 4 -7 -9 0 0 26 1
 -61 3 0 31 36 7 -60 -6 0 172 169 4 -10 -6 0 0 3 1 -36 6 0 80 77 4 -7 -9 0 7 26 7
 -61 3 0 39 36 6 -60 -6 0 166 169 4 -10 -6 0 17 3 17 -38 6 0 41 37 6 -7 -9 0 43 26 15
 -61 3 0 37 36 9 -58 -6 0 110 119 3 -10 -6 0 37 3 10 -40 6 0 13 2 13 -5 -9 0 33 26 11
 -61 3 0 46 36 8 -58 -6 0 103 119 3 -8 -6 0 22 7 22 -42 6 0 24 18 15 -5 -9 0 44 26 7
 -61 3 0 55 36 12 -58 -6 0 109 119 4 -8 -6 0 31 7 16 -44 6 0 0 4 1 -5 -9 0 32 26 11
 -63 3 0 12 22 11 -56 -6 0 27 30 19 -8 -6 0 31 7 11 -46 6 0 10 5 10 -3 -9 0 0 25 1
 -63 3 0 40 22 17 -56 -6 0 43 30 15 -8 -6 0 0 7 1 -48 6 0 20 10 19 -3 -9 0 17 25 17
 -63 3 0 12 22 12 -56 -6 0 34 30 8 -8 -6 0 17 7 16 -50 6 0 0 5 1 -3 -9 0 23 25 22
 -63 3 0 14 22 13 -54 -6 0 51 42 6 -8 -6 0 8 7 7 -52 6 0 0 13 1 -1 -9 0 24 25 18
 -63 3 0 25 22 24 -54 -6 0 32 42 11 -6 -6 0 0 2 1 -52 6 0 15 13 14 -1 -9 0 47 25 7
 -65 3 0 46 40 15 -54 -6 0 37 42 5 -6 -6 0 0 2 1 -54 6 0 35 37 10 -1 -9 0 19 25 19
 -65 3 0 50 40 8 -52 -6 0 44 15 8 -6 -6 0 21 2 20 -54 6 0 43 37 10 1 -9 0 20 25 19
 -65 3 0 33 40 10 -52 -6 0 0 15 1 -6 -6 0 11 2 10 -56 6 0 30 27 14 1 -9 0 18 25 18
 -65 3 0 42 40 7 -52 -6 0 0 15 1 -6 -6 0 18 2 17 -56 6 0 33 27 12 3 -9 0 32 25 11
 -65 3 0 38 40 8 -50 -6 0 13 6 13 -4 -6 0 0 9 1 -58 6 0 100 105 4 3 -9 0 24 25 22
 -67 3 0 14 5 14 -50 -6 0 0 6 1 -4 -6 0 12 9 12 -58 6 0 99 105 4 5 -9 0 26 26 13
 -67 3 0 19 5 19 -50 -6 0 45 6 7 -4 -6 0 27 9 16 -60 6 0 158 149 5 5 -9 0 28 26 13
 -67 3 0 0 5 1 -48 -6 0 15 12 15 -4 -6 0 35 9 7 -60 6 0 159 149 4 7 -9 0 17 25 16
 -67 3 0 13 5 13 -48 -6 0 14 12 14 -4 -6 0 0 9 1 -62 6 0 314 312 6 7 -9 0 11 25 10

-67 3 0 5 5 4 -48 -6 0 29 12 29 0 6 0 1751 1874 31 -62 6 0 316 312 8 9 -9 0 30 37 13
 -69 3 0 67 72 5 -46 -6 0 38 6 16 0 -6 0 1704 1874 34 -64 6 0 207 198 5 9 -9 0 37 37 9
 -69 3 0 74 72 5 -46 -6 0 0 6 1 0 -6 0 1698 1874 37 -64 6 0 199 198 6 11 -9 0 23 30 22
 -69 3 0 66 72 5 -46 -6 0 8 6 7 2 -6 0 43 9 6 -66 6 0 46 46 10 11 -9 0 27 30 14
 -69 3 0 67 72 4 -44 -6 0 27 5 26 -2 6 0 35 9 5 -66 6 0 41 46 8 13 -9 0 94 105 4
 -69 3 0 83 72 6 -44 -6 0 0 5 1 2 -6 0 29 9 10 -68 6 0 50 54 6 13 -9 0 108 105 4
 -71 3 0 36 28 8 -42 -6 0 18 21 17 2 -6 0 24 9 11 -68 6 0 51 54 7 15 -9 0 129 117 4
 -71 3 0 50 28 7 -42 -6 0 29 21 29 2 -6 0 26 9 16 -70 6 0 34 33 16 15 -9 0 121 117 4
 -71 3 0 30 28 12 -40 -6 0 12 3 12 4 -6 0 12 9 11 -70 6 0 35 33 12 17 -9 0 267 307 7
 -71 3 0 41 28 8 -40 -6 0 42 3 15 4 -6 0 12 9 12 -72 6 0 15 7 14 17 -9 0 292 307 6
 -71 3 0 44 28 21 -38 -6 0 52 42 6 4 -6 0 23 9 23 -74 6 0 4 11 4 19 -9 0 31 33 11
 -73 3 0 201 215 5 -38 -6 0 47 42 7 4 -6 0 31 9 14 -76 6 0 18 5 17 19 -9 0 31 33 10
 -73 3 0 208 215 6 -38 -6 0 45 42 4 -4 6 0 13 9 13 -78 6 0 10 2 10 21 -9 0 61 80 4
 -73 3 0 211 215 5 -36 -6 0 104 87 4 4 -6 0 16 9 15 -80 6 0 16 12 15 -21 9 0 65 80 5
 -73 3 0 205 215 6 -36 -6 0 109 87 4 6 -6 0 0 2 1 -82 6 0 0 1 1 -23 9 0 20 24 19
 -75 3 0 389 365 8 -34 -6 0 97 96 3 -6 6 0 0 2 1 -84 6 0 23 26 23 -25 9 0 30 36 15
 -75 3 0 383 365 8 -34 -6 0 105 96 4 6 -6 0 0 2 1 -86 6 0 2 5 1 -27 9 0 0 14 1
 -77 3 0 437 419 8 -34 -6 0 107 96 4 6 -6 0 24 2 20 -88 6 0 0 2 1 -29 9 0 0 28 1
 -77 3 0 422 419 9 -32 -6 0 846 843 17 6 -6 0 0 2 1 -90 6 0 653 639 13 -31 9 0 19 15 18
 -79 3 0 91 87 4 -30 -6 0 234 209 5 6 -6 0 0 2 1 -71 -9 0 0 9 1 -33 9 0 24 29 23
 -79 3 0 85 87 4 -26 -6 0 0 6 1 8 -6 0 0 7 1 -69 -9 0 39 49 8 -35 9 0 0 11 1
 -81 3 0 100 110 4 -26 -6 0 0 6 1 8 -6 0 0 7 1 -67 -9 0 19 2 19 -37 9 0 33 35 10
 -81 3 0 103 110 4 -26 -6 0 21 6 19 8 -6 0 18 7 17 -65 -9 0 11 27 11 -61 9 0 15 22 15
 -83 3 0 4 1 4 -26 -6 0 0 6 1 8 -6 0 23 7 23 -63 -9 0 16 12 16 -63 9 0 17 11 17
 -83 3 0 0 1 1 -26 -6 0 0 6 1 -8 6 0 14 7 13 -61 -9 0 0 25 1 -65 9 0 26 24 25
 -85 3 0 51 58 6 -24 -6 0 30 26 17 8 -6 0 19 7 18 -59 -9 0 20 13 19 -67 9 0 0 1 1
 -85 3 0 50 58 6 -24 -6 0 16 26 15 10 -6 0 8 3 8 -57 -9 0 23 28 23 -69 9 0 50 43 9

```

-87 3 0 19 27 18 -24 -6 0 17 26 16 -10 6 0 23 3 18 -55 -9 0 0 15 1 0 -12 0 1114 1051 22
-87 3 0 19 27 18 -24 -6 0 5 26 5 10 -6 0 0 3 1 -53 -9 0 42 43 7 2 -12 0 36 15 18
-89 3 0 34 32 13 -24 -6 0 33 26 12 10 -6 0 0 3 1 -51 -9 0 15 0 14 4 -12 0 25 36 25
-89 3 0 28 32 17 -24 -6 0 40 26 14 10 -6 0 8 3 8 -49 -9 0 153 197 4 6 -12 0 11 10 10
-91 3 0 13 20 12 -22 -6 0 0 5 1 12 -6 0 0 5 1 -47 -9 0 213 254 5 8 -12 0 24 11 23
-91 3 0 24 20 24 -22 -6 0 14 5 14 12 -6 0 13 5 13 -45 -9 0 938 1072 19 10 -12 0 22 9 22
-93 3 0 29 25 28 -22 -6 0 0 5 1 12 -6 0 9 5 9 -43 -9 0 20 9 19 12 -12 0 10 3 9
-93 3 0 20 25 20 -22 -6 0 0 5 1 12 -6 0 29 5 17 -41 -9 0 71 73 4 14 -12 0 0 4 1
-95 3 0 9 13 8 -22 -6 0 24 5 24 -12 6 0 18 5 17 -41 -9 0 80 73 5 16 -12 0 13 1 13
-95 3 0 31 13 20 -20 -6 0 15 16 14 14 -6 0 16 3 16 -39 -9 0 0 12 1 -67 9 -1 21 17 21
-97 3 0 26 32 26 -20 -6 0 0 16 1 14 -6 0 26 3 25 -39 -9 0 0 12 1 -65 9 -1 34 27 19
-97 3 0 20 32 19 -20 -6 0 11 16 11 14 -6 0 0 3 1 -37 -9 0 44 38 10 -63 9 -1 25 17 24
-99 3 0 10 22 9 -20 -6 0 11 16 11 -14 6 0 0 3 1 -37 -9 0 44 38 9 35 -9 1 0 16 1
-99 3 0 13 22 12 -20 -6 0 0 16 1 16 -6 0 0 8 1 -35 -9 0 0 12 1 -35 9 -1 0 16 1
-101 3 0 41 38 8 -20 -6 0 28 16 14 16 -6 0 0 8 1 -35 -9 0 0 12 1 -33 9 -1 19 32 19
-101 3 0 52 38 8 -18 -6 0 0 4 1 -16 6 0 23 8 22 -33 -9 0 44 32 24 33 -9 1 30 32 13
-103 3 0 78 86 5 -18 -6 0 24 4 23 16 -6 0 0 8 1 -33 -9 0 18 32 18 31 -9 1 25 17 22
-94 -6 0 400 384 8 -18 -6 0 13 4 12 18 -6 0 3 4 2 -31 -9 0 21 16 21 -31 9 -1 0 17 1
-92 -6 0 282 279 6 -18 -6 0 10 4 9 18 -6 0 18 4 18 -31 -9 0 30 16 16 -29 9 -1 29 35 21
-90 -6 0 673 711 13 -18 -6 0 15 4 14 -18 6 0 0 4 1 -29 -9 0 50 31 16 29 -9 1 32 35 11
-88 -6 0 38 2 11 -18 -6 0 37 4 10 18 -6 0 0 4 1 -29 -9 0 21 31 21 27 -9 1 11 9 10
-86 -6 0 0 5 1 -16 -6 0 11 8 10 -18 6 0 17 4 16 -27 -9 0 0 15 1 -27 9 -1 11 9 10

```

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 3

h k l

Fo

Fc

s

h k l

Fo

Fc

s

h k l

Fo

Fc

s

h k l

Fo

Fc

s

h k l

Fo

Fc

s

25 -9 1

39

46

6

-90 6 -1

498

433

10

8 -6 1

0

3

1

-22 -6 1

43

28

6

-101 3 -1

0

6

1

23 -9 1 23 19 22 -88 6 -1 178 168 5 -8 6 -1 27 3 13 -24 -6 1 33 36 12 -101 3 -1 0 6 1
 23 -9 1 10 19 9 -86 6 -1 55 33 11 8 -6 1 19 3 18 -24 -6 1 22 36 20 -99 3 -1 14 17 14
 21 -9 1 91 101 4 -84 6 -1 33 22 21 8 -6 1 18 3 18 -24 -6 1 25 36 9 -99 3 -1 12 17 11
 21 -9 1 100 101 4 -82 6 -1 25 16 24 6 -6 1 61 62 4 -24 -6 1 33 36 7 -97 3 -1 14 12 14
 19 -9 1 64 69 4 -80 6 -1 0 4 1 -6 6 -1 54 62 4 -24 -6 1 35 36 7 -97 3 -1 24 12 23
 19 -9 1 63 69 5 -78 6 -1 21 7 21 6 -6 1 56 62 3 -26 -6 1 41 43 4 -95 3 -1 0 21 1
 17 -9 1 269 291 6 -76 6 -1 0 6 1 6 -6 1 61 62 4 -26 -6 1 54 43 5 -95 3 -1 23 21 23
 17 -9 1 283 291 6 -74 6 -1 0 17 1 6 -6 1 56 62 4 -26 -6 1 47 43 3 -93 3 -1 28 23 25
 15 -9 1 160 186 5 -72 6 -1 0 7 1 -4 6 -1 30 13 11 -26 -6 1 49 43 4 -93 3 -1 15 23 15
 15 -9 1 174 186 4 -70 6 -1 35 42 15 4 -6 1 38 13 11 -28 -6 1 88 101 3 -91 3 -1 17 24 17
 13 -9 1 128 137 4 -70 6 -1 39 42 11 4 -6 1 14 13 13 -28 -6 1 92 101 4 -91 3 -1 19 24 19
 13 -9 1 135 137 4 -68 6 -1 13 5 12 4 -6 1 33 13 12 -28 -6 1 84 101 3 -89 3 -1 24 24 24
 11 -9 1 7 13 6 -68 6 -1 0 5 1 4 -6 1 24 13 11 -28 -6 1 91 101 3 -89 3 -1 27 24 18
 11 -9 1 0 13 1 -66 6 -1 29 30 20 2 -6 1 30 24 15 -30 -6 1 351 389 7 -87 3 -1 33 25 14
 9 -9 1 44 43 9 -66 6 -1 40 30 11 2 -6 1 27 24 8 -30 -6 1 356 389 7 -87 3 -1 28 25 16
 9 -9 1 39 43 9 -64 6 -1 152 149 5 -2 6 -1 41 24 8 -30 -6 1 342 389 7 -85 3 -1 26 26 25
 7 -9 1 20 22 20 -64 6 -1 149 149 4 2 -6 1 41 24 5 -30 -6 1 354 389 7 -85 3 -1 16 26 16
 7 -9 1 15 22 15 -62 6 -1 400 391 10 2 -6 1 35 24 7 -32 -6 1 577 614 12 -83 3 -1 52 43 9
 5 -9 1 38 32 10 -62 6 -1 408 391 8 0 -6 1 869 863 17 -32 -6 1 602 614 12 -83 3 -1 44 43 7
 5 -9 1 32 32 11 -60 6 -1 21 6 21 0 -6 1 876 863 18 -32 -6 1 599 614 13 -81 3 -1 36 28 14
 3 -9 1 16 15 15 -60 6 -1 27 6 25 0 -6 1 866 863 19 -32 -6 1 623 614 11 -81 3 -1 28 28 14
 3 -9 1 0 15 1 -58 6 -1 12 9 12 0 -6 1 894 863 17 -34 -6 1 248 271 5 -79 3 -1 287 294 6
 1 -9 1 24 26 24 -58 6 -1 17 9 17 -2 -6 1 42 34 6 -34 -6 1 247 271 5 -79 3 -1 288 294 6
 1 -9 1 14 26 14 -56 6 -1 15 5 15 -2 -6 1 53 34 4 -34 -6 1 251 271 5 -77 3 -1 100 85 4
 -1 -9 1 0 13 1 -56 6 -1 19 5 18 2 6 -1 42 34 5 -34 -6 1 233 271 5 -77 3 -1 93 85 4
 -1 -9 1 39 13 18 -54 6 -1 32 38 11 -2 -6 1 32 34 7 -36 -6 1 125 119 4 -75 3 -1 823 816 16
 -1 -9 1 0 13 1 -54 6 -1 39 38 10 -2 -6 1 32 34 5 -36 -6 1 123 119 3 -75 3 -1 834 816 16

-3-9 1 28 31 14 -52 6-1 0 3 1 -4-6 1 54 48 5 -38-6 1 61 71 5 -73 3-1 118 127 4
 -3-9 1 36 31 24 -50 6-1 16 25 16 -4-6 1 47 48 4 -38-6 1 59 71 3 -73 3-1 116 127 6
 -3-9 1 20 31 20 -50 6-1 24 25 12 -4-6 1 45 48 4 -38-6 1 66 71 5 -73 3-1 127 127 4
 -5-9 1 0 9 1 -48 6-1 4 7 4 -4-6 1 45 48 5 -40-6 1 48 42 7 -71 3-1 59 48 8
 -5-9 1 35 9 26 -48 6-1 0 7 1 4 6-1 44 48 5 -40-6 1 36 42 6 -71 3-1 52 48 5
 -5-9 1 0 9 1 -46 6-1 29 25 13 -4-6 1 53 48 4 -40-6 1 41 42 7 -71 3-1 47 48 7
 -7-9 1 39 42 8 -46 6-1 28 25 9 -6-6 1 64 71 3 -42-6 1 17 21 17 -69 3-1 55 53 8
 -7-9 1 43 42 7 -44 6-1 0 0 1 6 6-1 68 71 4 -42-6 1 0 21 1 -69 3-1 54 53 7
 -9-9 1 28 4 12 -44 6-1 15 0 14 -6-6 1 72 71 4 -42-6 1 19 21 19 -69 3-1 48 53 5
 -9-9 1 26 4 23 -42 6-1 38 43 4 -6-6 1 68 71 3 -44-6 1 4 24 4 -67 3-1 41 31 7
 -11-9 1 75 72 4 -42 6-1 36 43 6 -6-6 1 64 71 3 -44-6 1 35 24 17 -67 3-1 35 31 12
 -11-9 1 76 72 4 -40 6-1 23 18 11 -8-6 1 42 34 5 -44-6 1 27 24 15 -67 3-1 50 31 9
 -13-9 1 215 218 5 -40 6-1 24 18 18 -8-6 1 43 34 6 -46-6 1 42 11 7 -65 3-1 59 45 8
 -13-9 1 222 218 5 -38 6-1 91 106 4 -8-6 1 44 34 10 -46-6 1 19 11 18 -65 3-1 37 45 7
 -15-9 1 934 937 20 -38 6-1 96 106 3 -8-6 1 33 34 6 -46-6 1 0 11 1 -65 3-1 47 45 7
 -15-9 1 916 937 19 -36 6-1 68 67 3 -8-6 1 37 34 7 -48-6 1 39 26 14 -63 3-1 30 32 10
 -17-9 1 260 265 6 -36 6-1 62 67 5 -8-6 1 41 34 8 -48-6 1 18 26 17 -63 3-1 53 32 13
 -17-9 1 256 265 6 -34 6-1 243 283 7 8 6-1 46 34 5 -48-6 1 50 26 6 -63 3-1 35 32 10
 -19-9 1 48 52 7 -34 6-1 251 283 6 -10-6 1 35 41 5 -50-6 1 38 9 17 -61 3-1 47 45 7
 -19-9 1 37 52 7 -32 6-1 46 45 5 -10-6 1 45 41 5 -50-6 1 0 9 1 -61 3-1 56 45 8
 -21-9 1 23 33 22 -32 6-1 49 45 4 -10-6 1 39 41 5 -50-6 1 31 9 25 -61 3-1 39 45 6
 -21-9 1 23 33 22 32-6 1 49 45 4 -10-6 1 50 41 4 -52-6 1 29 35 16 -59 3-1 45 28 10
 -21-9 1 33 33 10 30-6 1 1238 1374 27 -10-6 1 47 41 5 -52-6 1 33 35 24 -59 3-1 20 28 20
 -23-9 1 27 38 25 -30 6-1 1279 1374 27 -12-6 1 26 25 10 -54-6 1 0 4 1 -59 3-1 25 28 12
 -23-9 1 38 38 9 28-6 1 199 199 5 -12-6 1 24 25 12 -54-6 1 0 4 1 -59 3-1 22 28 22
 -23-9 1 32 38 6 -28 6-1 204 199 5 -12-6 1 33 25 13 -54-6 1 18 4 17 -57 3-1 49 56 5
 -25-9 1 26 33 17 26-6 1 96 93 3 -12-6 1 45 25 6 -56-6 1 55 55 4 -57 3-1 66 56 7

-25 -9 1 25 33 24 -26 6 -1 99 93 3 -12 -6 1 30 25 9 -56 -6 1 62 55 4 -57 3 -1 48 56 5
 -25 -9 1 20 33 19 -24 6 -1 18 13 17 -12 -6 1 37 25 5 -58 -6 1 122 131 4 -57 3 -1 52 56 4
 -27 -9 1 7 25 6 24 -6 1 23 13 15 -12 -6 1 34 25 7 -58 -6 1 128 131 3 -55 3 -1 18 10 18
 -27 -9 1 26 25 25 22 -6 1 43 47 5 -14 -6 1 38 28 6 -60 -6 1 691 716 14 -55 3 -1 21 10 21
 -27 -9 1 11 25 11 -22 6 -1 44 47 4 -14 -6 1 25 28 24 -60 -6 1 701 716 13 -55 3 -1 13 10 13
 -29 -9 1 17 22 16 20 -6 1 11 10 11 -14 -6 1 32 28 7 -62 -6 1 460 497 9 -55 3 -1 18 10 17
 -29 -9 1 29 22 13 -20 6 -1 0 10 1 -14 -6 1 44 28 5 -62 -6 1 464 497 9 -55 3 -1 13 10 12
 -29 -9 1 17 22 16 -20 6 -1 15 10 14 -14 -6 1 27 28 9 -64 -6 1 217 226 5 -53 3 -1 89 92 3
 -31 -9 1 32 18 11 20 -6 1 33 10 15 -14 -6 1 39 28 6 -64 -6 1 216 226 5 -53 3 -1 88 92 3
 -31 -9 1 14 18 14 -18 6 -1 37 32 7 -16 -6 1 22 22 15 -66 -6 1 50 51 5 -53 3 -1 104 92 5
 -33 -9 1 26 18 26 18 -6 1 30 32 6 -16 -6 1 41 22 6 -66 -6 1 46 51 5 -53 3 -1 92 92 3
 -33 -9 1 13 18 13 -18 6 -1 41 32 8 -16 -6 1 19 22 18 -68 -6 1 86 85 3 -53 3 -1 91 92 4
 -35 -9 1 24 17 23 18 -6 1 41 32 7 -16 -6 1 24 22 11 -68 -6 1 79 85 4 -51 3 -1 0 2 1
 -35 -9 1 25 17 18 -16 6 -1 16 11 15 -16 -6 1 18 22 17 -70 -6 1 32 31 10 -51 3 -1 9 2 9
 -37 -9 1 15 5 14 16 -6 1 26 11 26 -16 -6 1 35 22 13 -70 -6 1 24 31 23 -51 3 -1 15 2 15
 -37 -9 1 0 5 1 16 -6 1 16 11 15 -18 -6 1 25 26 10 -72 -6 1 39 39 8 -51 3 -1 12 2 11
 -39 -9 1 47 33 10 -16 6 -1 25 11 19 -18 -6 1 24 26 21 -72 -6 1 33 39 14 -51 3 -1 24 2 23
 -41 -9 1 45 49 6 16 -6 1 15 11 14 -18 -6 1 42 26 11 -74 -6 1 0 11 1 -49 3 -1 115 113 4
 -43 -9 1 235 262 5 14 -6 1 28 30 10 -18 -6 1 26 26 11 -74 -6 1 20 11 19 -49 3 -1 127 113 5
 -45 -9 1 593 665 12 -14 6 -1 42 30 8 -18 -6 1 34 26 8 -76 -6 1 27 24 14 -49 3 -1 113 113 3
 -47 -9 1 169 191 4 14 -6 1 28 30 10 -18 -6 1 26 26 26 -76 -6 1 22 24 22 -49 3 -1 109 113 3
 -49 -9 1 93 100 4 -14 6 -1 26 30 11 -20 -6 1 45 25 5 -78 -6 1 17 5 16 -49 3 -1 116 113 3
 -51 -9 1 18 21 17 14 -6 1 39 30 7 -20 -6 1 27 25 9 -78 -6 1 0 5 1 -47 3 -1 214 217 6
 -53 -9 1 6 9 5 12 -6 1 0 8 1 -20 -6 1 19 25 18 -80 -6 1 23 29 22 -47 3 -1 204 217 5
 -55 -9 1 0 1 1 12 -6 1 24 8 12 -20 -6 1 22 25 13 -80 -6 1 0 29 1 -47 3 -1 206 217 4
 -57 -9 1 11 18 10 12 -6 1 8 8 8 -20 -6 1 37 25 13 -82 -6 1 0 11 1 -47 3 -1 212 217 4
 -59 -9 1 0 4 1 -12 6 -1 0 8 1 -20 -6 1 31 25 8 -82 -6 1 19 11 18 -47 3 -1 211 217 5

-61 -9 1 20 18 19 10 -6 1 49 39 5 -22 -6 1 34 28 7 -84 -6 1 66 67 5 -47 3 -1 206 217 4
-63 -9 1 0 4 1 -10 6 -1 44 39 4 -22 -6 1 43 28 6 -86 -6 1 95 88 4 -45 3 -1 838 817 21
-65 -9 1 2 18 1 10 -6 1 37 39 5 -22 -6 1 25 28 13 -88 -6 1 308 311 6 -45 3 -1 852 817 14
-67 -9 1 0 10 1 10 -6 1 34 39 6 -22 -6 1 38 28 13 -90 -6 1 521 534 10 -45 3 -1 840 817 15
-69 -9 1 14 13 13 8 -6 1 0 3 1 -22 -6 1 27 28 11 -103 3 -1 0 4 1 -45 3 -1 829 817 16

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 4

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-45	3	-1	813	817	19	9	-3	1	83	82	2	-25	-3	1	22	21	10	-75	-3	1	50	36	4	-48	0	-1	16	7	15
-45	3	-1	861	817	19	9	-3	1	85	82	2	-25	-3	1	19	21	8	-77	-3	1	100	102	3	-46	0	-1	39	35	8
-43	3	-1	289	302	8	9	-3	1	91	82	3	-25	-3	1	26	21	4	-79	-3	1	401	409	8	-46	0	-1	35	35	21
-43	3	-1	300	302	5	-9	3	-1	79	82	2	-27	-3	1	25	21	6	-81	-3	1	39	39	7	-46	0	-1	48	35	5
-43	3	-1	290	302	6	7	-3	1	43	36	3	-27	-3	1	28	21	4	-83	-3	1	52	46	5	-44	0	-1	34	2	6
-43	3	-1	301	302	7	7	-3	1	38	36	3	-27	-3	1	38	21	8	-85	-3	1	13	5	12	-44	0	-1	36	2	18
-43	3	-1	299	302	6	-7	3	-1	40	36	2	-27	-3	1	32	21	9	-87	-3	1	0	9	1	-44	0	-1	21	2	20
-41	3	-1	32	31	6	7	-3	1	42	36	3	-27	-3	1	34	21	4	-89	-3	1	22	18	21	-42	0	-1	58	51	7
-41	3	-1	34	31	7	-7	3	-1	40	36	3	-29	-3	1	18	18	10	-91	-3	1	26	15	26	-42	0	-1	54	51	4
41	-3	1	37	31	7	5	-3	1	52	46	3	-29	-3	1	21	18	20	-93	-3	1	0	20	1	-42	0	-1	53	51	5
-41	3	-1	30	31	5	-5	3	-1	48	46	2	-29	-3	1	36	18	8	-95	-3	1	24	8	24	-40	0	-1	26	13	26
-41	3	-1	31	31	8	-5	3	-1	49	46	2	-29	-3	1	6	18	6	-97	-3	1	31	27	15	-40	0	-1	23	13	23
-41	3	-1	43	31	12	5	-3	1	47	46	3	-31	-3	1	25	16	14	-99	-3	1	0	22	1	-40	0	-1	35	13	11
39	-3	1	29	6	19	5	-3	1	50	46	3	-31	-3	1	0	16	1	-101	-3	1	34	29	15	-40	0	-1	15	13	14
-39	3	-1	10	6	9	-3	3	-1	26	26	4	-31	-3	1	27	16	12	-106	0	-1	0	6	1	-38	0	-1	109	106	3
-39	3	-1	16	6	16	3	-3	1	29	26	6	-31	-3	1	13	16	12	-104	0	-1	0	5	1	-38	0	-1	105	106	5
-39	3	-1	22	6	18	3	-3	1	29	26	10	-33	-3	1	20	15	20	-104	0	-1	19	5	18	-38	0	-1	102	106	4

-39 3 -1 0 6 1 3 -3 1 35 26 6 -33 -3 1 9 15 9 -102 0 -1 21 16 21 -36 0 -1 19 6 18
 -39 3 -1 0 6 1 -3 3 -1 23 26 6 -33 -3 1 15 15 14 -102 0 -1 27 16 27 -36 0 -1 40 6 7
 -37 3 -1 42 45 4 -1 3 -1 38 32 4 -33 -3 1 14 15 14 -100 0 -1 52 52 8 -36 0 -1 0 6 1
 -37 3 -1 53 45 5 -1 3 -1 28 32 3 -35 -3 1 21 17 9 -100 0 -1 60 52 6 -34 0 -1 171 171 3
 -37 3 -1 41 45 3 1 -3 1 31 32 4 -35 -3 1 22 17 22 -98 0 -1 44 38 7 -34 0 -1 175 171 3
 -37 3 -1 46 45 3 1 -3 1 37 32 4 -35 -3 1 0 17 1 -98 0 -1 58 38 9 -34 0 -1 167 171 5
 37 -3 1 53 45 4 1 -3 1 35 32 3 -35 -3 1 26 17 14 -96 0 -1 203 185 5 -34 0 -1 176 171 5
 -37 3 -1 49 45 5 -1 -3 1 12 19 11 -37 -3 1 0 4 1 -96 0 -1 201 185 5 -32 0 -1 575 527 10
 -35 3 -1 25 29 5 1 3 -1 24 19 14 -37 -3 1 0 4 1 -94 0 -1 231 218 5 -32 0 -1 566 527 11
 -35 3 -1 27 29 8 -1 -3 1 30 19 9 -37 -3 1 23 4 22 -94 0 -1 238 218 5 -32 0 -1 592 527 14
 35 -3 1 35 29 7 -1 -3 1 22 19 12 -37 -3 1 12 4 11 -92 0 -1 147 142 4 -32 0 -1 590 527 11
 -35 3 -1 43 29 11 -3 -3 1 42 37 3 -37 -3 1 10 4 10 -92 0 -1 145 142 4 -30 0 -1 1742 1719 30
 -35 3 -1 27 29 10 -3 -3 1 39 37 3 -39 -3 1 64 68 3 -90 0 -1 658 633 13 -30 0 -1 1731 1719 38
 -35 3 -1 33 29 4 -3 -3 1 29 37 4 -39 -3 1 68 68 3 -90 0 -1 654 633 13 -30 0 -1 1699 1719 34
 -33 3 -1 41 42 6 3 3 -1 36 37 4 -39 -3 1 68 68 3 -88 0 -1 245 246 5 -30 0 -1 1663 1719 44
 -33 3 -1 42 42 6 5 3 -1 28 9 9 -39 -3 1 66 68 3 -88 0 -1 246 246 5 -30 0 -1 1649 1719 32
 -33 3 -1 38 42 3 -5 -3 1 18 9 18 -41 -3 1 98 102 3 -86 0 -1 64 63 5 -30 0 -1 1733 1719 31
 -33 3 -1 43 42 3 -5 -3 1 12 9 11 -41 -3 1 103 102 3 -86 0 -1 69 63 5 -28 0 -1 293 276 5
 -33 3 -1 33 42 5 -5 -3 1 18 9 18 -41 -3 1 101 102 3 -84 0 -1 42 40 9 -28 0 -1 293 276 8
 33 -3 1 50 42 4 -7 -3 1 65 57 3 -41 -3 1 96 102 3 -84 0 -1 30 40 13 -28 0 -1 296 276 7
 -31 3 -1 28 30 5 7 3 -1 57 57 3 -43 -3 1 464 480 9 -82 0 -1 18 24 18 -26 0 -1 135 132 4
 -31 3 -1 27 30 6 -7 -3 1 62 57 3 -43 -3 1 462 480 9 -82 0 -1 29 24 13 -26 0 -1 127 132 2
 -31 3 -1 28 30 7 -7 -3 1 58 57 2 -43 -3 1 476 480 9 -80 0 -1 13 3 12 26 0 1 128 132 3
 -31 3 -1 32 30 9 -9 -3 1 39 32 4 -45 -3 1 1152 1124 20 -80 0 -1 0 3 1 -26 0 -1 133 132 4
 31 -3 1 40 30 8 -9 -3 1 38 32 3 -45 -3 1 1111 1124 20 -78 0 -1 0 11 1 -26 0 -1 129 132 2
 -31 3 -1 36 30 7 9 3 -1 37 32 4 -45 -3 1 1085 1124 23 -78 0 -1 5 11 5 -24 0 -1 33 29 2
 -29 3 -1 43 40 7 -9 -3 1 35 32 4 -45 -3 1 1097 1124 22 -76 0 -1 0 13 1 -24 0 -1 37 29 7

-29 3 -1 43 40 6 11 3 -1 156 161 4 -47 -3 1 164 164 4 -76 0 -1 19 13 19 -24 0 -1 34 29 6
-29 3 -1 45 40 3 -11 -3 1 165 161 4 -47 -3 1 167 164 4 -76 0 -1 0 13 1 -24 0 -1 31 29 5
-29 3 -1 39 40 3 -11 -3 1 159 161 3 -47 -3 1 167 164 4 -74 0 -1 27 32 12 -24 0 -1 32 29 3
-27 3 -1 9 19 9 -11 -3 1 164 161 3 -47 -3 1 169 164 3 -74 0 -1 24 32 23 24 0 1 34 29 3
27 -3 1 12 19 11 -11 -3 1 158 161 3 -49 -3 1 52 56 3 -74 0 -1 44 32 19 -22 0 -1 80 74 4
-27 3 -1 19 19 19 -13 -3 1 435 411 8 -49 -3 1 63 56 4 -72 0 -1 45 24 18 -22 0 -1 77 74 2
-27 3 -1 23 19 7 -13 -3 1 439 411 9 -49 -3 1 54 56 4 -72 0 -1 23 24 18 -22 0 -1 75 74 2
27 -3 1 23 19 19 13 3 -1 426 411 9 -49 -3 1 58 56 5 -72 0 -1 29 24 10 -22 0 -1 73 74 3
25 -3 1 65 51 3 -13 -3 1 435 411 8 -51 -3 1 39 10 9 -70 0 -1 83 95 4 -20 0 -1 24 23 2
-25 3 -1 55 51 3 -13 -3 1 417 411 8 -51 -3 1 17 10 17 -70 0 -1 93 95 6 -20 0 -1 28 23 4
-25 3 -1 55 51 4 -15 -3 1 1445 1642 26 -51 -3 1 35 10 12 -70 0 -1 78 95 3 20 0 1 26 23 3
-25 3 -1 53 51 3 15 3 -1 1454 1642 29 -51 -3 1 22 10 21 -68 0 -1 65 66 4 -20 0 -1 37 23 10
-23 3 -1 24 7 9 -15 -3 1 1429 1642 27 -53 -3 1 49 28 5 -68 0 -1 71 66 7 -20 0 -1 29 23 6
-23 3 -1 34 7 12 -15 -3 1 1464 1642 28 -53 -3 1 29 28 5 -68 0 -1 61 66 4 -20 0 -1 29 23 6
23 -3 1 29 7 6 -17 -3 1 698 663 12 -53 -3 1 37 28 5 -66 0 -1 142 156 5 -20 0 -1 28 23 5
-23 3 -1 23 7 7 -17 -3 1 688 663 15 -53 -3 1 39 28 6 -66 0 -1 139 156 4 18 0 1 42 52 2
-21 3 -1 91 89 4 -17 -3 1 696 663 13 -55 -3 1 30 28 8 -66 0 -1 141 156 3 -18 0 -1 47 52 4
-21 3 -1 88 89 2 -17 -3 1 689 663 15 -55 -3 1 21 28 20 -64 0 -1 18 4 18 -18 0 -1 43 52 3
21 -3 1 92 89 3 17 3 -1 678 663 14 -55 -3 1 32 28 16 -64 0 -1 0 4 1 -18 0 -1 52 52 2
-21 3 -1 89 89 3 -19 -3 1 10 6 10 -55 -3 1 25 28 13 -64 0 -1 32 4 28 -16 0 -1 14 18 13
-19 3 -1 86 81 2 -19 -3 1 23 6 8 -57 -3 1 35 42 6 -62 0 -1 805 779 15 -16 0 -1 17 18 2
19 -3 1 87 81 3 -19 -3 1 20 6 20 -57 -3 1 53 42 5 -62 0 -1 771 779 19 16 0 1 24 18 4
-19 3 -1 83 81 4 19 3 -1 19 6 19 -57 -3 1 31 42 6 -62 0 -1 804 779 16 -16 0 -1 24 18 14
19 -3 1 84 81 2 -19 -3 1 0 6 1 -59 -3 1 26 26 10 -60 0 -1 37 39 7 14 0 1 37 50 2
-19 3 -1 78 81 2 -19 -3 1 17 6 17 -59 -3 1 0 26 1 -60 0 -1 20 39 18 -14 0 -1 41 50 2
-17 3 -1 227 230 6 -19 -3 1 29 6 9 -59 -3 1 37 26 12 -60 0 -1 41 39 15 -14 0 -1 42 50 2
17 -3 1 239 230 5 -21 -3 1 32 34 6 -61 -3 1 26 35 11 -58 0 -1 69 1 15 -12 0 -1 20 4 3

```

-17 3 -1 228 230 4 21 3 -1 38 34 4 -61 -3 1 40 35 13 -58 0 -1 25 1 11 -12 0 -1 21 4 4
17 -3 1 230 230 5 -21 -3 1 35 34 3 -61 -3 1 38 35 9 -58 0 -1 0 1 1 12 0 1 19 4 3
-17 3 -1 237 230 5 -21 -3 1 36 34 3 -63 -3 1 20 18 20 -56 0 -1 39 30 9 8 0 1 18 18 2
-15 3 -1 435 422 8 -21 -3 1 41 34 3 -63 -3 1 6 18 6 -56 0 -1 37 30 7 -4 0 -1 60 74 2
-15 3 -1 450 422 9 -21 -3 1 42 34 3 -63 -3 1 18 18 17 -56 0 -1 73 30 21 -4 0 -1 64 74 2
-15 3 -1 429 422 10 -21 -3 1 40 34 4 -65 -3 1 22 28 22 -54 0 -1 48 42 5 -2 0 -1 233 277 5
15 -3 1 426 422 9 -23 -3 1 10 15 10 -65 -3 1 20 28 20 -54 0 -1 45 42 4 -2 0 -1 236 277 5
13 -3 1 133 126 3 -23 -3 1 0 15 1 -65 -3 1 24 28 13 -54 0 -1 52 42 6 2 0 1 242 277 4
-13 3 -1 124 126 4 -23 -3 1 12 15 11 -67 -3 1 20 18 20 -54 0 -1 63 42 17 0 0 1 692 711 13
13 -3 1 136 126 3 23 3 -1 0 15 1 -67 -3 1 45 18 7 -54 0 -1 52 42 7 0 0 -1 713 711 14
-11 3 -1 46 45 3 -23 -3 1 0 15 1 -69 -3 1 23 17 19 -50 0 -1 30 37 7 2 0 -1 218 257 4
11 -3 1 50 45 3 -23 -3 1 9 15 8 -69 -3 1 44 17 13 -50 0 -1 49 37 6 -2 0 1 216 257 4
-11 3 -1 46 45 2 -23 -3 1 13 15 12 -71 -3 1 31 26 10 -50 0 -1 45 37 11 4 0 -1 94 106 2
-11 3 -1 44 45 6 -25 -3 1 30 21 4 -71 -3 1 41 26 13 -50 0 -1 47 37 11 -4 0 1 96 106 2
11 -3 1 48 45 2 -25 -3 1 39 21 7 -73 -3 1 51 16 12 -48 0 -1 0 7 1 16 0 -1 25 30 3
11 -3 1 43 45 4 -25 -3 1 20 21 19 -73 -3 1 19 16 18 -48 0 -1 25 7 25 -16 0 1 27 30 2

```

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

```

-16 0 1 30 30 6 -60 0 1 1015 999 20 -49 -3 -1 122 125 3 -13 -3 -1 146 136 3 31 -3 -1 30 14 11
18 0 -1 36 32 3 -60 0 1 1058 999 20 -49 -3 -1 138 125 4 -13 -3 -1 141 136 3 -31 3 1 0 14 1
-18 0 1 36 32 6 -60 0 1 1015 999 26 -49 -3 -1 128 125 4 -11 -3 -1 48 49 3 -31 3 1 28 14 8
-18 0 1 33 32 2 -62 0 1 772 721 15 -47 -3 -1 232 242 5 -11 -3 -1 55 49 4 -31 3 1 16 14 15
-22 0 1 33 29 8 -62 0 1 752 721 15 -47 -3 -1 234 242 5 -11 -3 -1 39 49 3 -33 3 1 25 13 10
22 0 -1 28 29 4 -62 0 1 748 721 19 -47 -3 -1 240 242 6 11 3 1 46 49 2 33 -3 -1 5 13 5
-22 0 1 28 29 4 -62 0 1 735 721 14 -45 -3 -1 890 912 17 -11 -3 -1 44 49 3 -33 3 1 11 13 10

```

-22 0 1 29 29 2 -64 0 1 584 576 11 -45 -3 -1 919 912 17 -9 -3 -1 90 87 2 -35 3 1 25 15 11
 24 0 -1 26 19 7 -64 0 1 602 576 11 -45 -3 -1 957 912 20 -9 -3 -1 82 87 2 35 -3 -1 29 15 13
 -24 0 1 22 19 6 -64 0 1 577 576 15 -43 -3 -1 318 338 6 -9 -3 -1 92 87 2 -35 3 1 13 15 12
 -24 0 1 30 19 8 -64 0 1 594 576 11 -43 -3 -1 339 338 7 -7 -3 -1 33 37 4 37 -3 -1 29 4 13
 -24 0 1 28 19 22 -66 0 1 120 129 4 -43 -3 -1 316 338 6 -7 -3 -1 46 37 3 -37 3 1 16 4 16
 26 0 -1 47 49 3 -66 0 1 118 129 3 -41 -3 -1 44 35 4 -7 -3 -1 40 37 3 -37 3 1 0 4 1
 -26 0 1 51 49 3 -66 0 1 114 129 3 -41 -3 -1 45 35 6 -7 -3 -1 30 37 5 -39 3 1 58 61 7
 -26 0 1 52 49 5 -68 0 1 158 151 4 -41 -3 -1 45 35 7 7 3 1 42 37 2 -39 3 1 64 61 3
 -26 0 1 47 49 2 -68 0 1 159 151 4 -41 -3 -1 37 35 5 -7 -3 -1 48 37 4 39 -3 -1 59 61 4
 28 0 -1 29 28 4 -68 0 1 163 151 4 -39 -3 -1 25 6 14 -5 -3 -1 47 47 3 -39 3 1 58 61 3
 -28 0 1 35 28 7 -70 0 1 54 62 5 -39 -3 -1 30 6 15 -5 -3 -1 56 47 3 -41 3 1 92 92 6
 -28 0 1 38 28 12 -70 0 1 52 62 5 -39 -3 -1 31 6 15 -5 -3 -1 39 47 4 41 -3 -1 98 92 4
 -28 0 1 27 28 3 -70 0 1 69 62 7 -39 -3 -1 39 6 6 5 3 1 51 47 2 -41 3 1 94 92 3
 30 0 -1 493 523 11 -72 0 1 86 54 6 -37 -3 -1 53 50 3 -5 -3 -1 60 47 3 -41 3 1 97 92 3
 -30 0 1 515 523 9 -74 0 1 61 23 8 -37 -3 -1 54 50 4 3 3 1 31 26 5 43 -3 -1 418 432 9
 -30 0 1 532 523 12 -74 0 1 31 23 10 -37 -3 -1 56 50 4 -3 -3 -1 30 26 5 -43 3 1 432 432 8
 -30 0 1 509 523 9 -74 0 1 30 23 11 -37 -3 -1 53 50 5 -3 -3 -1 34 26 6 -43 3 1 430 432 8
 -30 0 1 520 523 9 -76 0 1 58 31 17 -37 -3 -1 44 50 4 -3 -3 -1 36 26 6 -43 3 1 432 432 11
 -32 0 1 192 191 5 -76 0 1 26 31 15 -35 -3 -1 43 32 4 -3 -3 -1 27 26 14 -43 3 1 449 432 10
 -32 0 1 178 191 3 -76 0 1 33 31 9 -35 -3 -1 43 32 4 -1 -3 -1 38 32 5 -45 3 1 1029 1015 25
 -32 0 1 187 191 4 -78 0 1 18 12 18 -35 -3 -1 35 32 5 1 3 1 32 32 3 -45 3 1 1033 1015 20
 -32 0 1 181 191 4 -78 0 1 19 12 19 -35 -3 -1 35 32 6 -1 -3 -1 31 32 5 -45 3 1 1024 1015 19
 -32 0 1 186 191 4 -78 0 1 52 12 22 -35 -3 -1 45 32 6 -1 -3 -1 45 32 3 45 -3 -1 1012 1015 21
 -34 0 1 142 147 3 -80 0 1 37 35 9 -33 -3 -1 49 47 5 1 -3 -1 31 18 5 -47 3 1 156 148 4
 -34 0 1 141 147 3 -80 0 1 40 35 7 -33 -3 -1 55 47 4 1 -3 -1 33 18 11 47 -3 -1 154 148 4
 -34 0 1 145 147 4 -82 0 1 10 11 9 -33 -3 -1 55 47 3 -1 3 1 24 18 3 -47 3 1 153 148 6
 -34 0 1 150 147 4 -82 0 1 24 11 21 -33 -3 -1 43 47 4 1 -3 -1 25 18 10 -47 3 1 158 148 3

-34 0 1 149 147 3 -84 0 1 79 83 4 -33 -3 -1 51 47 3 3 -3 -1 42 36 4 -47 3 1 150 148 4
 -36 0 1 98 92 4 -84 0 1 84 83 4 -31 -3 -1 43 33 7 3 -3 -1 36 36 4 49 -3 -1 47 51 7
 36 0 -1 84 92 3 -86 0 1 119 117 4 -31 -3 -1 38 33 5 3 -3 -1 45 36 4 -49 3 1 49 51 4
 -36 0 1 91 92 3 -86 0 1 120 117 4 -31 -3 -1 39 33 4 -3 3 1 40 36 2 -49 3 1 49 51 4
 -36 0 1 90 92 2 -88 0 1 375 370 8 -31 -3 -1 39 33 4 -5 3 1 25 8 6 -49 3 1 48 51 9
 -36 0 1 90 92 3 -88 0 1 364 370 7 -31 -3 -1 35 33 5 7 -3 -1 63 53 3 -49 3 1 61 51 4
 -36 0 1 91 92 3 -90 0 1 663 651 13 -31 -3 -1 41 33 5 -7 3 1 62 53 2 -51 3 1 24 9 16
 -38 0 1 43 36 5 -90 0 1 645 651 13 -29 -3 -1 40 45 4 7 -3 -1 69 53 3 51 -3 -1 32 9 17
 38 0 -1 39 36 4 -92 0 1 7 11 6 -29 -3 -1 50 45 3 7 -3 -1 58 53 3 -51 3 1 32 9 32
 -38 0 1 44 36 4 -92 0 1 30 11 20 -29 -3 -1 57 45 3 9 -3 -1 37 29 4 -51 3 1 19 9 19
 -38 0 1 55 36 7 -94 0 1 82 90 5 -29 -3 -1 53 45 4 -9 3 1 35 29 3 -51 3 1 19 9 18
 -38 0 1 36 36 3 -94 0 1 84 90 4 -29 -3 -1 45 45 4 9 -3 -1 37 29 5 -51 3 1 25 9 25
 -38 0 1 38 36 3 -96 0 1 144 136 4 -29 -3 -1 51 45 3 9 -3 -1 32 29 4 -53 3 1 52 25 13
 -40 0 1 39 35 5 -96 0 1 133 136 4 -27 -3 -1 26 22 11 11 -3 -1 154 146 3 -53 3 1 33 25 8
 -40 0 1 42 35 5 -98 0 1 40 14 13 -27 -3 -1 32 22 6 11 -3 -1 159 146 3 -53 3 1 45 25 11
 -40 0 1 38 35 3 -98 0 1 31 14 14 -27 -3 -1 35 22 5 13 -3 -1 418 369 6 -53 3 1 44 25 5
 -40 0 1 43 35 15 -100 0 1 59 64 6 -27 -3 -1 34 22 5 -13 3 1 410 369 8 53 -3 -1 50 25 7
 -44 0 1 35 21 9 -100 0 1 57 64 6 -27 -3 -1 24 22 10 13 -3 -1 422 369 8 -53 3 1 33 25 8
 -44 0 1 18 21 10 -102 0 1 26 14 26 -27 -3 -1 21 22 20 -15 3 1 1502 1465 30 -55 3 1 46 26 14
 -44 0 1 16 21 16 -104 0 1 42 23 14 -27 -3 -1 22 22 21 15 -3 -1 1593 1465 31 -55 3 1 50 26 5
 -44 0 1 37 21 6 -83 -3 -1 54 46 5 -25 -3 -1 60 57 3 15 -3 -1 1586 1465 30 -55 3 1 26 26 13
 -46 0 1 22 0 22 -81 -3 -1 30 30 12 -25 -3 -1 58 57 3 17 -3 -1 680 588 13 -57 3 1 54 39 5
 -46 0 1 34 0 10 -79 -3 -1 310 317 6 -25 -3 -1 61 57 3 17 -3 -1 663 588 11 -57 3 1 47 39 16
 -46 0 1 8 0 8 -77 -3 -1 115 92 3 -25 -3 -1 62 57 3 -17 3 1 669 588 12 -57 3 1 38 39 8
 -46 0 1 0 0 1 -75 -3 -1 901 884 18 -25 -3 -1 59 57 3 -19 3 1 0 6 1 -59 3 1 0 24 1
 -48 0 1 37 26 5 -73 -3 -1 132 137 3 -23 -3 -1 27 8 8 19 -3 -1 0 6 1 -59 3 1 21 24 21
 -48 0 1 34 26 11 -71 -3 -1 48 52 5 -23 -3 -1 17 8 16 -19 3 1 8 6 7 -59 3 1 17 24 16

-48 0 1 43 26 20 -69 -3 -1 53 57 4 -23 -3 -1 31 8 8 19 -3 -1 19 6 19 -61 3 1 30 32 9
-50 0 1 12 3 11 -67 -3 -1 40 34 5 -23 -3 -1 25 8 12 -19 3 1 15 6 15 -61 3 1 50 32 15
-50 0 1 12 3 11 -65 -3 -1 55 49 4 -23 -3 -1 31 8 4 -21 3 1 37 30 3 -61 3 1 29 32 12
-50 0 1 32 3 12 -63 -3 -1 49 36 6 -23 -3 -1 33 8 12 21 -3 -1 39 30 3 -63 3 1 23 16 13
-50 0 1 15 3 14 -63 -3 -1 36 36 5 -21 -3 -1 107 100 3 -21 3 1 31 30 4 -63 3 1 7 16 6
-50 0 1 0 3 1 -61 -3 -1 47 49 4 -21 -3 -1 94 100 3 -21 3 1 29 30 4 -63 3 1 0 16 1
-50 0 1 6 3 5 -61 -3 -1 57 49 5 -21 -3 -1 99 100 2 21 -3 -1 36 30 5 -63 3 1 29 16 28
-52 0 1 41 38 6 -59 -3 -1 32 30 17 -21 -3 -1 103 100 2 23 -3 -1 25 13 12 -65 3 1 21 26 20
-52 0 1 39 38 5 -59 -3 -1 45 30 10 -19 -3 -1 82 91 3 -23 3 1 22 13 11 -65 3 1 29 26 11
-52 0 1 37 38 5 -59 -3 -1 32 30 8 -19 -3 -1 93 91 3 23 -3 -1 19 13 16 -65 3 1 52 26 13
-52 0 1 38 38 5 -59 -3 -1 21 30 14 -19 -3 -1 90 91 2 -23 3 1 0 13 1 -65 3 1 14 26 13
-52 0 1 54 38 10 -57 -3 -1 58 62 4 -19 -3 -1 86 91 3 -23 3 1 5 13 4 -67 3 1 12 16 11
-54 0 1 12 9 12 -57 -3 -1 71 62 6 -19 -3 -1 88 91 2 25 -3 -1 24 18 13 -67 3 1 10 16 10
-54 0 1 9 9 9 -57 -3 -1 67 62 4 -17 -3 -1 249 254 4 -25 3 1 25 18 6 -67 3 1 31 16 10
-54 0 1 23 9 22 -55 -3 -1 54 11 12 -17 -3 -1 243 254 4 -25 3 1 30 18 7 -67 3 1 54 16 13
-54 0 1 0 9 1 -55 -3 -1 14 11 14 -17 -3 -1 237 254 5 25 -3 -1 26 18 8 -69 3 1 21 16 21
-54 0 1 0 9 1 -55 -3 -1 32 11 21 -17 -3 -1 238 254 5 -25 3 1 20 18 9 -69 3 1 18 16 17
-56 0 1 98 82 7 -55 -3 -1 16 11 15 -17 -3 -1 244 254 5 -27 3 1 20 19 15 -69 3 1 46 16 16
-56 0 1 84 82 3 -55 -3 -1 35 11 13 -15 -3 -1 493 464 9 -27 3 1 19 19 9 -69 3 1 26 16 12
-56 0 1 87 82 4 -53 -3 -1 117 102 6 -15 -3 -1 488 464 7 -27 3 1 20 19 9 -71 3 1 27 24 14
-56 0 1 89 82 3 -53 -3 -1 102 102 3 -15 -3 -1 487 464 9 27 -3 -1 28 19 7 -71 3 1 51 24 12
-58 0 1 163 148 4 -53 -3 -1 105 102 4 -15 -3 -1 464 464 10 27 -3 -1 28 19 11 -71 3 1 34 24 11
-58 0 1 155 148 4 -53 -3 -1 113 102 5 -15 -3 -1 485 464 9 -29 3 1 17 16 17 -71 3 1 32 24 11
-58 0 1 157 148 3 -51 -3 -1 33 3 19 -13 -3 -1 138 136 3 -29 3 1 21 16 12 -73 3 1 26 15 16
-58 0 1 151 148 4 -51 -3 -1 41 3 10 -13 -3 -1 138 136 3 29 -3 -1 12 16 11 -73 3 1 17 15 17
-60 0 1 1000 999 20 -49 -3 -1 131 125 4 -13 -3 -1 139 136 3 -29 3 1 15 16 15 -73 3 1 52 15 13

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-73	3	1	0	15	1	-18	-6	-1	38	35	6	18	-6	-1	40	24	9	-27	-9	-1	0	10	1	-1	-9	2	18	12	18
-75	3	1	47	33	7	-18	-6	-1	43	35	7	20	-6	-1	46	24	8	-27	-9	-1	0	10	1	-1	-9	2	0	12	1
-75	3	1	45	33	6	-16	-6	-1	6	12	5	20	-6	-1	17	24	16	-25	-9	-1	47	51	6	-3	-9	2	0	11	1
-75	3	1	45	33	6	-16	-6	-1	14	12	13	-20	6	1	39	24	8	-25	-9	-1	63	51	7	-3	-9	2	18	11	18
-77	3	1	97	95	4	-16	-6	-1	7	12	7	-20	6	1	22	24	13	-23	-9	-1	22	21	21	-5	-9	2	20	18	20
-77	3	1	97	95	4	-16	-6	-1	38	12	15	22	-6	-1	27	26	21	-23	-9	-1	39	21	22	-5	-9	2	0	18	1
-77	3	1	92	95	4	-16	-6	-1	0	12	1	-22	6	1	20	26	19	-21	-9	-1	121	110	5	-7	-9	2	10	13	10
-79	3	1	380	382	10	-14	-6	-1	34	32	7	-22	6	1	32	26	6	-21	-9	-1	112	110	4	-7	-9	2	10	13	10
-79	3	1	390	382	8	-14	-6	-1	35	32	8	22	-6	-1	40	26	6	-19	-9	-1	85	75	6	-9	-9	2	12	4	11
-79	3	1	391	382	8	-14	-6	-1	42	32	7	24	-6	-1	16	33	16	-19	-9	-1	80	75	4	-9	-9	2	0	4	1
-81	3	1	42	37	8	-14	-6	-1	42	32	10	-24	6	1	23	33	10	-17	-9	-1	319	314	7	-11	-9	2	60	54	5
-81	3	1	37	37	7	-14	-6	-1	41	32	6	-26	6	1	44	40	5	-15	-9	-1	186	199	5	-11	-9	2	64	54	5
-81	3	1	43	37	7	-12	-6	-1	0	8	1	26	-6	-1	56	40	4	-13	-9	-1	147	146	4	-13	-9	2	255	254	6
-83	3	1	49	43	6	-12	-6	-1	12	8	12	28	-6	-1	89	92	3	-11	-9	-1	25	14	25	-13	-9	2	262	254	6
-83	3	1	53	43	6	-12	-6	-1	11	8	11	-28	6	1	80	92	4	-11	-9	-1	9	14	9	-15	-9	2	582	563	12
-83	3	1	45	43	7	-12	-6	-1	17	8	16	-30	6	1	307	354	8	-11	-9	-1	29	14	15	-15	-9	2	579	563	13
-85	3	1	17	5	16	-12	-6	-1	34	8	11	30	-6	-1	304	354	5	-9	-9	-1	43	45	9	-17	-9	2	207	206	5
-85	3	1	0	5	1	-10	-6	-1	43	41	5	-32	6	1	535	556	13	-9	-9	-1	57	45	6	-17	-9	2	205	206	5
-85	3	1	18	5	18	-10	-6	-1	33	41	4	-34	6	1	210	245	6	-9	-9	-1	39	45	6	-19	-9	2	38	44	11
-87	3	1	4	8	4	-10	-6	-1	44	41	5	-36	6	1	108	107	4	-7	-9	-1	20	23	20	-19	-9	2	42	44	7
-87	3	1	0	8	1	-10	-6	-1	35	41	6	-38	6	1	52	63	5	-7	-9	-1	15	23	15	-21	-9	2	26	13	25
-89	3	1	20	17	19	-10	-6	-1	49	41	6	-40	6	1	33	38	7	-7	-9	-1	8	23	8	-21	-9	2	14	13	14
-89	3	1	0	17	1	-8	-6	-1	26	3	25	-42	6	1	21	19	21	-5	-9	-1	27	33	12	-23	-9	2	10	10	10

-91 3 1 0 14 1 -8-6-1 21 3 20 -44 6 1 23 22 22 -5-9-1 52 33 13 -23-9 2 13 10 12
 -91 3 1 35 14 14 -8-6-1 7 3 7 -46 6 1 4 10 4 -5-9-1 40 33 9 -25-9 2 0 10 1
 -93 3 1 0 19 1 -8-6-1 0 3 1 -48 6 1 16 23 15 -5-9-1 40 33 18 -25-9 2 26 10 17
 -93 3 1 0 19 1 -8-6-1 0 3 1 -50 6 1 15 8 14 -3-9-1 13 16 12 -27-9 2 0 3 1
 -95 3 1 22 7 22 -6-6-1 63 65 4 -50 6 1 23 8 23 -3-9-1 0 16 1 -27-9 2 0 3 1
 -95 3 1 0 7 1 -6-6-1 64 65 4 -52 6 1 34 31 10 -3-9-1 21 16 21 -29-9 2 12 8 12
 -97 3 1 30 25 19 -6-6-1 62 65 3 -52 6 1 36 31 10 -3-9-1 45 16 8 -29-9 2 16 8 15
 -97 3 1 31 25 20 -6-6-1 58 65 3 -54 6 1 0 4 1 -1-9-1 24 26 19 -29-9 2 0 8 1
 -99 3 1 0 21 1 -4-6-1 18 14 18 -54 6 1 0 4 1 -1-9-1 18 26 18 -31-9 2 0 6 1
 -99 3 1 11 21 10 -4-6-1 30 14 15 -56 6 1 55 49 5 -1-9-1 34 26 28 -31-9 2 0 6 1
 -101 3 1 34 28 14 -4-6-1 27 14 8 -56 6 1 56 49 5 1-9-1 14 13 13 -31-9 2 2 6 2
 -101 3 1 38 28 13 -4-6-1 0 14 1 -58 6 1 118 117 4 1-9-1 15 13 15 -33-9 2 17 7 17
 -103 3 1 33 15 16 -4-6-1 13 14 13 -58 6 1 116 117 4 3-9-1 20 31 19 -33-9 2 0 7 1
 -64-6-1 146 171 4 0-6-1 870 877 14 -60 6 1 666 640 13 5-9-1 9 9 9 -33-9 2 0 7 1
 -62-6-1 400 446 8 0-6-1 890 877 17 -60 6 1 665 640 17 7-9-1 37 42 7 -35-9 2 0 7 1
 -60-6-1 20 7 20 0-6-1 859 877 17 -62 6 1 453 444 9 9-9-1 8 4 8 -35-9 2 21 7 20
 -60-6-1 32 7 31 0-6-1 848 877 19 -62 6 1 449 444 11 11-9-1 73 71 4 -37-9 2 28 2 27
 -58-6-1 0 11 1 2-6-1 36 34 7 -64 6 1 209 202 6 13-9-1 217 213 5 -39-9 2 28 20 23
 -58-6-1 39 11 20 2-6-1 33 34 6 -64 6 1 208 202 5 15-9-1 931 913 19 -41-9 2 44 43 6
 -56-6-1 50 5 13 2-6-1 39 34 9 -66 6 1 50 46 9 -35 9 1 0 16 1 -43-9 2 142 156 4
 -56-6-1 24 5 24 2-6-1 49 34 5 -66 6 1 42 46 8 -37 9 1 0 5 1 -45-9 2 16 4 15
 -54-6-1 35 44 6 2-6-1 42 34 5 -68 6 1 77 76 5 -39 9 1 31 30 12 -47-9 2 259 290 6
 -52-6-1 38 4 18 2-6-1 49 34 5 -68 6 1 83 76 5 -59 9 1 0 4 1 -49-9 2 274 284 6
 -52-6-1 0 4 1 4-6-1 56 48 5 -70 6 1 17 27 17 -61 9 1 12 16 12 -51-9 2 99 103 4
 -50-6-1 39 29 9 4-6-1 61 48 4 -72 6 1 45 35 10 -63 9 1 15 3 15 -53-9 2 82 80 5
 -50-6-1 48 29 14 4-6-1 53 48 4 -74 6 1 0 10 1 -65 9 1 19 16 18 -55-9 2 53 53 11
 -48-6-1 0 8 1 4-6-1 51 48 4 -76 6 1 14 22 13 -67 9 1 0 9 1 -57-9 2 28 27 27

-48 -6 -1 0 8 1 4 -6 -1 50 48 5 -78 6 1 0 4 1 -69 9 1 30 12 29 -59 -9 2 32 21 25
 -46 -6 -1 49 28 13 -4 6 1 44 48 4 -80 6 1 29 26 29 2-12 -1 80 82 6 -61 -9 2 0 7 1
 -46 -6 -1 34 28 6 6 -6 -1 71 70 3 -82 6 1 23 10 22 4-12 -1 41 19 13 -63 -9 2 0 12 1
 -44 -6 -1 0 0 1 6 -6 -1 77 70 4 -84 6 1 64 60 8 6-12 -1 29 34 29 -65 -9 2 0 1 1
 -44 -6 -1 41 0 15 6 -6 -1 69 70 4 -86 6 1 87 80 6 8-12 -1 0 3 1 -90 6 -2 84 92 7
 -42 -6 -1 41 49 5 -6 6 1 75 70 3 -88 6 1 297 281 6 10-12 -1 0 15 1 -88 6 -2 182 171 5
 -42 -6 -1 58 49 5 6 -6 -1 73 70 4 -90 6 1 507 484 10 12-12 -1 0 5 1 -86 6 -2 50 42 13
 -42 -6 -1 53 49 5 6 -6 -1 74 70 4 -71 -9 -1 53 31 29 -65 9 -2 14 13 14 -84 6 -2 0 5 1
 -40 -6 -1 26 21 12 -8 6 1 39 33 4 -69 -9 -1 59 38 21 29 -9 2 0 17 1 -82 6 -2 2 5 2
 -40 -6 -1 41 21 7 8 -6 -1 27 33 7 -67 -9 -1 23 19 22 27 -9 2 20 11 19 -80 6 -2 17 19 17
 -40 -6 -1 35 21 9 8 -6 -1 48 33 5 -65 -9 -1 53 31 26 27 -9 2 0 11 1 -78 6 -2 9 22 8
 -38 -6 -1 122 121 4 8 -6 -1 43 33 8 -63 -9 -1 13 19 13 25 -9 2 20 28 20 -76 6 -2 0 23 1
 -38 -6 -1 126 121 4 8 -6 -1 38 33 12 -61 -9 -1 54 29 24 25 -9 2 21 28 21 -74 6 -2 14 24 14
 -36 -6 -1 79 76 4 8 -6 -1 36 33 7 -59 -9 -1 0 18 1 23 -9 2 24 28 24 -72 6 -2 39 29 14
 -36 -6 -1 80 76 5 10 -6 -1 45 39 6 -57 -9 -1 56 33 20 23 -9 2 13 28 12 -70 6 -2 23 16 23
 -36 -6 -1 71 76 3 10 -6 -1 43 39 8 -55 -9 -1 0 10 1 21 -9 2 33 33 13 -70 6 -2 22 16 21
 -34 -6 -1 301 323 6 -10 6 1 41 39 4 -53 -9 -1 72 51 8 21 -9 2 0 33 1 -68 6 -2 87 85 5
 -30 -6 -1 1504 1557 30 10 -6 -1 33 39 5 -51 -9 -1 41 10 23 19 -9 2 21 6 20 -68 6 -2 78 85 6
 -28 -6 -1 240 225 5 -12 6 1 38 24 8 -49 -9 -1 105 92 6 19 -9 2 0 6 1 -66 6 -2 48 39 10
 -26 -6 -1 114 105 3 -12 6 1 18 24 18 -47 -9 -1 94 95 6 17 -9 2 210 208 5 -66 6 -2 35 39 15
 -26 -6 -1 118 105 4 12 -6 -1 35 24 11 -45 -9 -1 545 475 11 17 -9 2 227 208 5 -64 6 -2 255 268 7
 -24 -6 -1 14 14 13 12 -6 -1 22 24 12 -43 -9 -1 159 161 5 15 -9 2 508 482 11 -64 6 -2 256 268 6
 -24 -6 -1 0 14 1 12 -6 -1 40 24 6 -43 -9 -1 177 161 5 15 -9 2 495 482 10 -64 6 -2 260 268 5
 -24 -6 -1 35 14 11 14 -6 -1 33 26 11 -41 -9 -1 65 49 8 13 -9 2 231 230 5 -62 6 -2 156 166 4
 -24 -6 -1 27 14 27 -14 6 1 36 26 9 -41 -9 -1 53 49 9 13 -9 2 230 230 5 -62 6 -2 161 166 4
 -22 -6 -1 70 53 4 14 -6 -1 42 26 6 -39 -9 -1 0 3 1 11 -9 2 87 83 5 -62 6 -2 151 166 5
 -22 -6 -1 59 53 6 -14 6 1 24 26 10 -39 -9 -1 25 3 24 11 -9 2 86 83 4 -60 6 -2 324 327 7

-22 -6 -1	60	53	5	14 -6 -1	22	26	12	-37 -9 -1	55	35	8	9 -9 2	27	27	23	-60 6 -2	325	327	7
-22 -6 -1	53	53	5	-16 6 1	21	21	15	-37 -9 -1	48	35	9	9 -9 2	25	27	25	-60 6 -2	323	327	8
-20 -6 -1	0	11	1	-16 6 1	29	21	11	-35 -9 -1	16	18	15	7 -9 2	38	29	10	-58 6 -2	169	179	4
-20 -6 -1	16	11	16	16 -6 -1	19	21	16	-35 -9 -1	0	18	1	7 -9 2	31	29	15	-58 6 -2	161	179	4
-20 -6 -1	29	11	16	16 -6 -1	36	21	13	-33 -9 -1	37	35	12	5 -9 2	21	3	21	-58 6 -2	167	179	5
-20 -6 -1	0	11	1	16 -6 -1	26	21	18	-33 -9 -1	47	35	18	5 -9 2	0	3	1	-56 6 -2	58	69	4
-20 -6 -1	39	11	13	-18 6 1	30	24	8	-31 -9 -1	13	19	12	3 -9 2	0	13	1	-56 6 -2	61	69	5
-18 -6 -1	33	35	8	18 -6 -1	17	24	16	-31 -9 -1	2	19	2	3 -9 2	26	13	19	-56 6 -2	64	69	5
-18 -6 -1	45	35	8	-18 6 1	32	24	10	-29 -9 -1	30	38	17	1 -9 2	16	5	16	-54 6 -2	64	71	4
-18 -6 -1	30	35	9	18 -6 -1	39	24	12	-29 -9 -1	46	38	9	1 -9 2	18	5	17	-54 6 -2	65	71	5

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 7

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-52	6	-2	40	49	10	-18	6	2	45	48	6	-82	6	2	43	41	14	-43	3	-2	285	286	5	11	-3	2	67	68	2
-52	6	-2	35	49	6	-18	6	2	46	48	3	-82	6	2	34	41	10	-43	3	-2	272	286	7	-9	3	-2	19	1	18
-50	6	-2	44	54	7	-18	6	2	48	48	4	-84	6	2	35	34	11	-43	3	-2	289	286	7	9	-3	2	17	1	16
-50	6	-2	42	54	5	-18	6	2	56	48	5	-84	6	2	53	34	11	-43	3	-2	269	286	6	-9	3	-2	0	1	1
-48	6	-2	35	33	9	-20	6	2	41	1	12	-86	6	2	119	128	4	-41	3	-2	110	115	3	9	-3	2	13	1	12
-48	6	-2	23	33	23	-20	6	2	12	1	12	-86	6	2	123	128	4	-41	3	-2	119	115	5	-9	3	-2	0	1	1
-46	6	-2	47	50	5	-20	6	2	24	1	14	-88	6	2	206	213	5	-41	3	-2	110	115	3	7	-3	2	34	22	4
-46	6	-2	45	50	9	-20	6	2	22	1	13	-88	6	2	198	213	5	-41	3	-2	111	115	3	-7	3	-2	31	22	10
-44	6	-2	22	19	21	-20	6	2	34	1	13	-90	6	2	144	152	4	-41	3	-2	108	115	3	7	-3	2	25	22	3
-44	6	-2	0	19	1	-22	6	2	83	77	4	-99	3	-2	25	24	25	-39	3	-2	32	40	5	-7	3	-2	28	22	6
-42	6	-2	61	71	4	-22	6	2	76	77	3	-97	3	-2	35	19	14	-39	3	-2	36	40	8	-5	3	-2	17	3	17
-42	6	-2	58	71	5	-22	6	2	75	77	3	-95	3	-2	18	29	18	-39	3	-2	33	40	6	5	-3	2	10	3	10
-40	6	-2	24	1	16	-22	6	2	80	77	3	-93	3	-2	11	17	10	-39	3	-2	39	40	4	5	-3	2	25	3	10

-38 6 -2 134 141 4 -26 -6 2 159 151 4 -91 3 -2 33 35 14 -39 3 -2 56 40 11 -5 3 -2 26 3 12
-36 6 -2 57 55 4 -26 -6 2 164 151 4 -89 3 -2 17 13 16 -37 3 -2 32 34 8 3 -3 2 24 14 10
-34 6 -2 280 281 6 -26 -6 2 157 151 4 -87 3 -2 51 54 7 -37 3 -2 43 34 7 3 -3 2 21 14 9
-32 6 -2 171 159 4 -26 -6 2 165 151 4 -85 3 -2 17 10 17 -37 3 -2 41 34 9 -3 3 -2 27 14 11
-30 6 -2 482 466 11 -28 -6 2 247 230 5 -83 3 -2 111 112 4 -37 3 -2 42 34 4 3 -3 2 18 14 9
-28 6 -2 309 303 7 -28 -6 2 248 230 5 -81 3 -2 113 110 4 -37 3 -2 35 34 4 1 -3 2 27 1 9
-26 6 -2 26 16 12 -28 -6 2 240 230 5 -79 3 -2 261 263 6 -35 3 -2 16 2 15 1 -3 2 0 1 1
24 -6 2 0 16 1 -28 -6 2 247 230 5 -79 3 -2 264 263 6 35 -3 2 0 2 1 1 -3 2 14 1 14
-24 6 -2 28 16 10 -30 -6 2 639 637 14 -77 3 -2 204 204 5 -35 3 -2 0 2 1 -1 3 -2 24 1 14
22 -6 2 49 58 4 -30 -6 2 631 637 13 -77 3 -2 206 204 5 -35 3 -2 0 2 1 -1 -3 2 32 21 6
-22 6 -2 57 58 4 -30 -6 2 640 637 13 -75 3 -2 703 685 14 -35 3 -2 18 2 18 -1 -3 2 25 21 11
-20 6 -2 39 38 5 -30 -6 2 656 637 12 -75 3 -2 705 685 14 -35 3 -2 0 2 1 1 3 -2 33 21 9
20 -6 2 36 38 5 -32 -6 2 219 219 5 -73 3 -2 324 329 7 -33 3 -2 16 7 15 -1 -3 2 24 21 6
-18 6 -2 45 55 4 -32 -6 2 216 219 5 -73 3 -2 330 329 7 33 -3 2 20 7 19 -3 -3 2 22 12 10
18 -6 2 43 55 4 -32 -6 2 217 219 5 -71 3 -2 63 58 5 -33 3 -2 13 7 12 -3 -3 2 15 12 15
-16 6 -2 32 32 9 -34 -6 2 207 236 5 -71 3 -2 56 58 7 -33 3 -2 25 7 11 3 3 -2 0 12 1
16 -6 2 35 32 7 -34 -6 2 217 236 5 -69 3 -2 16 7 15 -33 3 -2 0 7 1 -3 -3 2 19 12 14
14 -6 2 46 51 4 -34 -6 2 217 236 5 -69 3 -2 0 7 1 -33 3 -2 31 7 11 -5 -3 2 39 39 4
-14 6 -2 48 51 4 -36 -6 2 111 108 3 -69 3 -2 40 7 24 31 -3 2 0 4 1 5 3 -2 40 39 5
-12 6 -2 5 17 4 -36 -6 2 108 108 3 -67 3 -2 0 6 1 -31 3 -2 15 4 14 -5 -3 2 34 39 3
12 -6 2 16 17 16 -36 -6 2 113 108 4 -67 3 -2 7 6 7 -31 3 -2 9 4 9 -5 -3 2 38 39 3
-10 6 -2 74 73 4 -36 -6 2 104 108 4 -67 3 -2 39 6 28 -31 3 -2 26 4 26 -7 -3 2 3 9 2
10 -6 2 62 73 3 -38 -6 2 102 107 4 -67 3 -2 14 6 13 -31 3 -2 10 4 9 -7 -3 2 24 9 10
-10 6 -2 68 73 3 -38 -6 2 103 107 3 -65 3 -2 25 20 11 -31 3 -2 17 4 17 -7 -3 2 15 9 14
8 -6 2 45 23 6 -38 -6 2 99 107 3 -65 3 -2 29 20 28 -29 3 -2 16 10 16 -7 -3 2 8 9 7
8 -6 2 37 23 7 -38 -6 2 103 107 4 -65 3 -2 18 20 18 -29 3 -2 29 10 24 7 3 -2 34 9 9
-8 6 -2 44 23 8 -40 -6 2 65 57 5 -65 3 -2 19 20 19 -29 3 -2 11 10 10 -9 -3 2 9 16 8

8-6 2 37 23 6 -40-6 2 56 57 4 -63 3-2 17 19 17 -29 3-2 16 10 15 -9-3 2 7 16 7
6-6 2 143 136 4 -40-6 2 58 57 4 -63 3-2 15 19 14 29-3 2 18 10 18 9 3-2 0 16 1
6-6 2 144 136 4 -40-6 2 65 57 5 -63 3-2 20 19 19 -27 3-2 0 4 1 -9-3 2 11 16 10
-6 6-2 134 136 4 -42-6 2 48 53 5 -63 3-2 12 19 12 -27 3-2 0 4 1 -9-3 2 22 16 14
6-6 2 133 136 4 -42-6 2 52 53 6 -61 3-2 24 27 23 -27 3-2 16 4 16 11 3-2 143 133 4
4-6 2 131 125 3 -42-6 2 46 53 7 -61 3-2 33 27 8 27-3 2 5 4 5 -11-3 2 143 133 3
4-6 2 135 125 4 -44-6 2 43 30 9 -61 3-2 31 27 9 -27 3-2 2 4 2 -11-3 2 139 133 3
-4 6-2 126 125 4 -44-6 2 59 30 6 -61 3-2 55 27 9 -25 3-2 34 22 7 -11-3 2 142 133 3
4-6 2 130 125 4 -44-6 2 50 30 11 -59 3-2 25 24 13 -25 3-2 41 22 13 -11-3 2 142 133 3
2-6 2 390 368 8 -46-6 2 37 35 16 -59 3-2 40 24 22 25-3 2 33 22 4 -13-3 2 603 562 11
2-6 2 391 368 8 -46-6 2 40 35 10 -59 3-2 25 24 17 -25 3-2 24 22 8 -13-3 2 602 562 13
2-6 2 391 368 8 -46-6 2 35 35 19 -59 3-2 26 24 11 -25 3-2 28 22 4 -13-3 2 603 562 11
0-6 2 37 18 6 -48-6 2 0 16 1 -57 3-2 23 29 13 23-3 2 21 6 21 13 3-2 588 562 12
0-6 2 32 18 7 -48-6 2 34 16 20 -57 3-2 27 29 14 -23 3-2 9 6 9 -13-3 2 620 562 12
0-6 2 37 18 7 -48-6 2 23 16 22 -57 3-2 53 29 14 -23 3-2 31 6 20 -15-3 2 1253 1199 22
0 6-2 36 18 9 -50-6 2 34 34 11 -57 3-2 26 29 11 -23 3-2 7 6 7 -15-3 2 1236 1199 23
-2-6 2 415 395 8 -50-6 2 51 34 6 -55 3-2 33 33 33 -23 3-2 0 6 1 -15-3 2 1187 1199 27
-2-6 2 416 395 9 -50-6 2 38 34 15 -55 3-2 34 33 7 -21 3-2 22 5 21 15 3-2 1246 1199 24
-2-6 2 423 395 8 -52-6 2 24 4 23 -55 3-2 35 33 8 -21 3-2 19 5 11 -17-3 2 415 379 7
-4-6 2 153 153 4 -52-6 2 33 4 23 -55 3-2 33 33 8 21-3 2 19 5 10 -17-3 2 410 379 8
-4-6 2 160 153 4 -54-6 2 80 81 4 -53 3-2 0 3 1 21-3 2 17 5 16 17 3-2 410 379 8
-4-6 2 155 153 4 -56-6 2 142 151 4 -53 3-2 11 3 11 -21 3-2 0 5 1 -17-3 2 404 379 9
-6-6 2 129 130 3 -56-6 2 151 151 4 -53 3-2 12 3 12 -21 3-2 17 5 16 -19-3 2 33 29 4
-6-6 2 125 130 4 -58-6 2 438 448 8 -53 3-2 18 3 17 -19 3-2 25 17 7 19 3-2 34 29 6
-6-6 2 135 130 4 -58-6 2 422 448 9 -51 3-2 86 98 3 19-3 2 26 17 5 -19-3 2 44 29 6
6 6-2 122 130 4 -60-6 2 664 676 13 -51 3-2 91 98 3 19-3 2 28 17 5 -19-3 2 27 29 5
-8-6 2 72 66 4 -60-6 2 666 676 13 -51 3-2 100 98 5 -19 3-2 30 17 7 -19-3 2 39 29 5

-8 -6 2 64 66 3 -62 -6 2 219 228 5 -51 3 -2 93 98 3 -19 3 -2 21 17 21 -21 -3 2 86 81 3
 8 6 -2 66 66 4 -62 -6 2 217 228 5 -49 3 -2 182 184 4 -19 3 -2 32 17 4 -21 -3 2 80 81 3
 -8 -6 2 73 66 4 -64 -6 2 51 49 5 -49 3 -2 178 184 4 -17 3 -2 277 284 5 -21 -3 2 77 81 3
 -10 -6 2 73 70 4 -64 -6 2 47 49 5 -49 3 -2 179 184 4 -17 3 -2 284 284 7 21 3 -2 81 81 3
 -10 -6 2 67 70 3 -66 -6 2 50 48 6 -49 3 -2 173 184 5 -17 3 -2 292 284 6 -21 -3 2 79 81 3
 -10 -6 2 77 70 4 -66 -6 2 55 48 5 -49 3 -2 185 184 5 17 -3 2 291 284 6 -23 -3 2 48 47 3
 -12 -6 2 31 35 6 -68 -6 2 54 58 4 -47 3 -2 537 535 12 17 -3 2 286 284 6 -23 -3 2 49 47 3
 -12 -6 2 37 35 7 -68 -6 2 55 58 5 -47 3 -2 524 535 13 -15 3 -2 437 445 8 23 3 -2 42 47 5
 -12 -6 2 32 35 8 -70 -6 2 39 33 8 -47 3 -2 528 535 10 -15 3 -2 403 445 10 -23 -3 2 39 47 4
 -12 -6 2 24 35 11 -70 -6 2 45 33 12 -47 3 -2 522 535 9 15 -3 2 416 445 9 -23 -3 2 46 47 4
 -14 -6 2 51 46 5 -72 -6 2 33 36 16 -47 3 -2 541 535 10 -15 3 -2 427 445 9 -23 -3 2 52 47 4
 14 6 -2 52 46 6 -72 -6 2 26 36 16 -47 3 -2 548 535 12 13 -3 2 185 186 4 -25 -3 2 65 58 3
 -14 -6 2 40 46 5 -74 -6 2 0 17 1 -45 3 -2 111 111 3 -13 3 -2 193 186 4 25 3 -2 61 58 4
 -14 -6 2 48 46 4 -74 -6 2 19 17 18 -45 3 -2 115 111 4 -13 3 -2 196 186 4 -25 -3 2 53 58 4
 -14 -6 2 52 46 5 -76 -6 2 27 24 15 -45 3 -2 124 111 5 13 -3 2 180 186 5 -25 -3 2 59 58 3
 -16 -6 2 16 18 15 -76 -6 2 10 24 9 -45 3 -2 119 111 3 -13 3 -2 194 186 4 -25 -3 2 57 58 3
 -16 -6 2 0 18 1 -78 -6 2 24 15 23 -45 3 -2 121 111 3 -11 3 -2 70 68 3 -25 -3 2 60 58 3
 -16 -6 2 19 18 18 -78 -6 2 16 15 15 -45 3 -2 119 111 3 -11 3 -2 73 68 3 -27 -3 2 28 29 5
 -16 -6 2 38 18 6 -80 -6 2 0 12 1 -43 3 -2 289 286 6 11 -3 2 72 68 3 -27 -3 2 36 29 5
 -16 -6 2 9 18 8 -80 -6 2 0 12 1 -43 3 -2 286 286 6 -11 3 -2 74 68 3 -27 -3 2 35 29 7

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-27 -3 2 35 29 9 -69 -3 2 24 6 23 -36 0 -2 50 48 4 12 0 -2 54 63 3 -54 0 2 112 100 6
 27 3 -2 31 29 13 -69 -3 2 0 6 1 -34 0 -2 169 165 4 -12 0 2 58 63 2 -54 0 2 115 100 4

-29 -3 2 34 33 4 -69 -3 2 11 6 11 -34 0 -2 170 165 4 -14 0 2 67 71 2 -54 0 2 103 100 4
 -29 -3 2 37 33 6 -71 -3 2 12 9 12 -34 0 -2 172 165 5 -14 0 2 69 71 2 -54 0 2 108 100 3
 29 3 -2 38 33 6 -71 -3 2 0 9 1 -34 0 -2 168 165 5 14 0 -2 70 71 3 -56 0 2 196 189 4
 -29 -3 2 33 33 5 -73 -3 2 47 41 5 -32 0 -2 250 211 5 16 0 -2 35 32 4 -56 0 2 198 189 4
 -29 -3 2 36 33 5 -73 -3 2 37 41 7 -32 0 -2 255 211 5 -16 0 2 38 32 3 -56 0 2 196 189 5
 -29 -3 2 52 33 5 -75 -3 2 95 91 4 -32 0 -2 246 211 7 -16 0 2 32 32 3 -56 0 2 196 189 6
 -31 -3 2 19 9 14 -75 -3 2 97 91 3 -32 0 -2 242 211 6 -18 0 2 61 61 3 -56 0 2 200 189 4
 -31 -3 2 24 9 14 -77 -3 2 442 435 9 -30 0 -2 1352 1200 30 18 0 -2 60 61 3 -58 0 2 562 570 11
 -31 -3 2 26 9 16 -79 -3 2 164 166 4 -30 0 -2 1347 1200 24 -18 0 2 76 61 5 -58 0 2 546 570 11
 -31 -3 2 44 9 6 -81 -3 2 177 184 4 -30 0 -2 1305 1200 34 -18 0 2 63 61 2 -58 0 2 575 570 11
 -31 -3 2 22 9 21 -83 -3 2 106 106 4 -30 0 -2 1344 1200 27 -20 0 2 25 10 4 -58 0 2 569 570 14
 -33 -3 2 30 22 10 -85 -3 2 71 78 4 -28 0 -2 690 640 16 20 0 -2 29 10 9 -60 0 2 826 827 21
 -33 -3 2 27 22 15 -87 -3 2 53 56 5 -28 0 -2 696 640 18 -20 0 2 31 10 5 -60 0 2 832 827 16
 -33 -3 2 34 22 11 -89 -3 2 10 19 10 -28 0 -2 706 640 14 -20 0 2 34 10 15 -60 0 2 845 827 16
 -35 -3 2 16 4 15 -91 -3 2 15 24 14 -28 0 -2 707 640 12 -22 0 2 84 75 2 -62 0 2 84 75 3
 -35 -3 2 0 4 1 -93 -3 2 0 3 1 -26 0 -2 49 39 4 22 0 -2 76 75 3 -62 0 2 83 75 4
 -35 -3 2 0 4 1 -95 -3 2 18 17 18 -26 0 -2 62 39 5 -22 0 2 78 75 2 -62 0 2 84 75 3
 -35 -3 2 24 4 14 -97 -3 2 31 19 16 -26 0 -2 52 39 2 -24 0 2 31 33 3 -64 0 2 245 239 5
 -37 -3 2 12 2 12 -99 -3 2 49 38 6 -26 0 -2 44 39 4 -24 0 2 33 33 7 -64 0 2 246 239 6
 -37 -3 2 0 2 1 -102 0 -2 22 18 21 -26 0 -2 52 39 5 -24 0 2 33 33 3 -64 0 2 246 239 5
 -37 -3 2 15 2 15 -100 0 -2 115 109 4 -24 0 -2 0 1 1 -24 0 2 46 33 7 -66 0 2 186 200 5
 -37 -3 2 27 2 17 -98 0 -2 79 73 5 -24 0 -2 16 1 16 24 0 -2 35 33 4 -66 0 2 191 200 4
 -39 -3 2 45 48 4 -96 0 -2 239 239 6 -24 0 -2 12 1 12 -26 0 2 103 102 3 -66 0 2 185 200 5
 -39 -3 2 47 48 6 -94 0 -2 91 82 5 -24 0 -2 21 1 21 -26 0 2 101 102 3 -68 0 2 134 132 4
 -39 -3 2 55 48 3 -92 0 -2 302 268 7 -24 0 -2 20 1 19 26 0 -2 95 102 3 -68 0 2 131 132 4
 -39 -3 2 43 48 3 -90 0 -2 118 110 4 -22 0 -2 72 78 3 -26 0 2 102 102 2 -68 0 2 133 132 3
 -39 -3 2 47 48 4 -88 0 -2 219 215 5 -22 0 -2 68 78 4 -26 0 2 111 102 4 -70 0 2 87 88 3

-39 -3 2 41 48 4 -86 0 -2 52 44 6 -22 0 -2 71 78 3 -28 0 2 137 144 3 -70 0 2 93 88 5
-39 -3 2 39 48 5 -84 0 -2 0 2 1 -22 0 -2 68 78 2 -28 0 2 145 144 4 -70 0 2 85 88 4
-41 -3 2 98 102 3 -82 0 -2 0 15 1 -22 0 -2 74 78 4 -28 0 2 136 144 3 -72 0 2 58 61 4
-41 -3 2 101 102 3 -80 0 -2 26 26 17 -20 0 -2 54 47 5 -28 0 2 139 144 3 -72 0 2 59 61 4
-41 -3 2 104 102 3 -78 0 -2 33 38 11 20 0 2 46 47 2 28 0 -2 129 144 4 -72 0 2 68 61 7
-41 -3 2 102 102 3 -76 0 -2 24 21 23 -20 0 -2 55 47 3 -30 0 2 312 327 7 -74 0 2 42 37 7
-41 -3 2 103 102 3 -74 0 -2 55 52 9 -20 0 -2 44 47 3 -30 0 2 307 327 6 -74 0 2 76 37 13
-41 -3 2 102 102 3 -74 0 -2 44 52 6 -20 0 -2 47 47 2 -30 0 2 301 327 6 -76 0 2 39 37 6
-41 -3 2 99 102 3 -72 0 -2 48 11 10 18 0 2 65 82 2 -32 0 2 399 389 9 -76 0 2 34 37 7
-43 -3 2 279 280 6 -72 0 -2 10 11 10 -18 0 -2 74 82 3 -32 0 2 399 389 7 -78 0 2 20 29 19
-43 -3 2 285 280 5 -70 0 -2 75 84 4 -18 0 -2 71 82 4 -32 0 2 407 389 10 -80 0 2 29 18 12
-43 -3 2 275 280 5 -70 0 -2 80 84 7 -18 0 -2 66 82 3 -32 0 2 389 389 7 -82 0 2 50 58 6
-43 -3 2 279 280 6 -68 0 -2 59 35 8 -18 0 -2 69 82 2 32 0 -2 377 389 8 -84 0 2 50 38 9
-43 -3 2 280 280 5 -68 0 -2 40 35 6 -16 0 -2 35 35 3 -34 0 2 21 17 7 -86 0 2 156 163 4
-43 -3 2 275 280 6 -66 0 -2 62 72 4 16 0 2 32 35 2 -34 0 2 0 17 1 -88 0 2 265 271 6
-45 -3 2 65 62 3 -66 0 -2 73 72 6 -16 0 -2 40 35 7 34 0 -2 34 17 8 -90 0 2 202 206 5
-45 -3 2 73 62 4 -64 0 -2 314 330 8 -16 0 -2 33 35 5 -34 0 2 26 17 25 -92 0 2 146 139 4
-45 -3 2 66 62 3 -64 0 -2 319 330 6 -16 0 -2 40 35 3 -34 0 2 29 17 7 -94 0 2 247 242 5
-45 -3 2 60 62 3 -64 0 -2 305 330 6 -16 0 -2 34 35 2 -36 0 2 35 31 4 -96 0 2 25 6 24
-45 -3 2 70 62 4 -62 0 -2 58 66 4 -14 0 -2 78 87 2 -36 0 2 33 31 3 -98 0 2 14 9 13
-47 -3 2 410 397 8 -62 0 -2 74 66 6 -14 0 -2 69 87 3 -36 0 2 41 31 12 -100 0 2 33 26 20
-47 -3 2 413 397 8 -62 0 -2 60 66 4 -14 0 -2 72 87 4 36 0 -2 34 31 5 -102 0 2 25 4 25
-47 -3 2 409 397 8 -60 0 -2 521 529 13 -14 0 -2 77 87 2 -36 0 2 29 31 4 -104 0 2 37 18 18
-47 -3 2 405 397 8 -60 0 -2 547 529 10 -14 0 -2 70 87 2 -38 0 2 52 51 3 -43 -3 -2 321 319 7
-47 -3 2 405 397 8 -60 0 -2 533 529 10 12 0 2 27 2 4 -38 0 2 64 51 6 -41 -3 -2 129 128 4
-49 -3 2 300 317 6 -58 0 -2 222 222 4 -12 0 -2 26 2 9 -38 0 2 55 51 3 -41 -3 -2 120 128 3
-49 -3 2 315 317 6 -58 0 -2 228 222 5 -12 0 -2 28 2 27 -38 0 2 55 51 3 -41 -3 -2 125 128 3

-49 -3 2 304 317 6 -58 0 -2 225 222 7 -12 0 -2 38 2 6 38 0 -2 53 51 4 -39 -3 -2 45 44 5
-49 -3 2 304 317 6 -58 0 -2 222 222 6 -12 0 -2 25 2 5 -40 0 2 46 38 8 -39 -3 -2 49 44 5
-51 -3 2 123 115 3 -56 0 -2 92 78 7 -12 0 -2 31 2 9 -40 0 2 42 38 4 -39 -3 -2 51 44 4
-51 -3 2 119 115 3 -56 0 -2 84 78 3 -10 0 -2 125 144 3 -40 0 2 36 38 3 -37 -3 -2 45 38 10
-51 -3 2 118 115 3 -56 0 -2 81 78 3 -10 0 -2 126 144 3 40 0 -2 35 38 5 -37 -3 -2 45 38 5
-51 -3 2 122 115 4 -56 0 -2 88 78 5 10 0 2 124 144 3 42 0 -2 37 32 5 -37 -3 -2 37 38 6
-53 -3 2 73 76 3 -54 0 -2 101 86 6 -10 0 -2 123 144 2 -42 0 2 37 32 3 -35 -3 -2 14 3 14
-53 -3 2 78 76 3 -54 0 -2 87 86 3 -10 0 -2 120 144 3 -42 0 2 51 32 11 -35 -3 -2 0 3 1
-53 -3 2 78 76 3 -54 0 -2 91 86 5 -8 0 -2 73 72 2 -42 0 2 44 32 8 -35 -3 -2 29 3 10
-53 -3 2 78 76 4 -52 0 -2 65 60 4 -8 0 -2 68 72 3 -42 0 2 33 32 4 -35 -3 -2 19 3 19
-55 -3 2 35 43 5 -52 0 -2 68 60 6 -8 0 -2 61 72 4 -42 0 2 40 32 5 -33 -3 -2 12 8 11
-55 -3 2 44 43 6 -50 0 -2 64 73 4 -8 0 -2 70 72 2 -44 0 2 34 19 16 -33 -3 -2 0 8 1
-55 -3 2 49 43 7 -50 0 -2 67 73 3 -6 0 -2 276 304 5 -44 0 2 28 19 8 -33 -3 -2 32 8 5
-57 -3 2 28 17 13 -50 0 -2 73 73 6 -6 0 -2 274 304 6 -44 0 2 31 19 12 -33 -3 -2 20 8 19
-57 -3 2 14 17 13 -50 0 -2 88 73 7 -6 0 -2 281 304 5 -44 0 2 41 19 10 -31 -3 -2 17 5 16
-57 -3 2 0 17 1 -48 0 -2 49 48 4 -4 0 -2 302 314 6 -46 0 2 28 24 5 -31 -3 -2 24 5 23
-59 -3 2 0 9 1 -48 0 -2 61 48 6 -4 0 -2 304 314 6 -46 0 2 24 24 8 -31 -3 -2 0 5 1
-59 -3 2 0 9 1 -48 0 -2 48 48 4 -4 0 -2 310 314 5 -46 0 2 34 24 11 -31 -3 -2 20 5 19
-59 -3 2 7 9 7 -46 0 -2 84 65 7 4 0 2 305 314 5 -46 0 2 48 24 12 -31 -3 -2 21 5 20
-61 -3 2 0 4 1 -46 0 -2 62 65 6 -2 0 -2 906 887 18 -46 0 2 30 24 30 -29 -3 -2 16 11 16
-61 -3 2 0 4 1 -44 0 -2 76 42 8 2 0 2 888 887 16 -48 0 2 30 9 29 -29 -3 -2 39 11 12
-61 -3 2 0 4 1 -44 0 -2 51 42 7 2 0 -2 934 927 18 -48 0 2 20 9 19 -29 -3 -2 12 11 11
-63 -3 2 12 3 12 -42 0 -2 69 76 5 -2 0 2 909 927 17 -48 0 2 25 9 25 -29 -3 -2 14 11 13
-63 -3 2 7 3 6 -40 0 -2 39 43 5 -4 0 2 330 344 6 -48 0 2 15 9 15 -27 -3 -2 0 5 1
-63 -3 2 15 3 14 -40 0 -2 55 43 10 4 0 -2 327 344 7 -48 0 2 10 9 10 -27 -3 -2 0 5 1
-65 -3 2 0 12 1 -40 0 -2 48 43 6 6 0 -2 244 258 5 -48 0 2 32 9 8 -27 -3 -2 22 5 13
-65 -3 2 28 12 28 -38 0 -2 114 113 4 -6 0 2 248 258 4 -50 0 2 35 28 6 -27 -3 -2 0 5 1

-65 -3 2 0 12 1 -38 0 -2 114 113 5 8 0 -2 114 119 3 -50 0 2 37 28 6 -25 -3 -2 44 24 9

-67 -3 2 9 3 9 -38 0 -2 109 113 3 -8 0 2 113 119 2 -50 0 2 58 28 10 -25 -3 -2 33 24 5

-67 -3 2 19 3 18 -36 0 -2 62 48 6 10 0 -2 109 117 3 -50 0 2 53 28 12 -25 -3 -2 39 24 4

-67 -3 2 16 3 15 -36 0 -2 51 48 5 -10 0 2 110 117 2 -54 0 2 104 100 3 -25 -3 -2 34 24 10

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 9

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-23	-3	-2	15	7	14	-17	3	2	401	348	10	-71	3	2	0	8	1	-4	-6	-2	153	131	4	-78	6	2	0	14	1
-23	-3	-2	33	7	11	17	-3	-2	411	348	6	-71	3	2	6	8	5	-4	-6	-2	143	131	4	-80	6	2	13	11	12
-23	-3	-2	19	7	19	-19	3	2	24	27	5	-73	3	2	44	39	7	-2	-6	-2	412	384	8	-82	6	2	29	38	28
-23	-3	-2	23	7	13	19	-3	-2	37	27	6	-73	3	2	43	39	6	-2	-6	-2	409	384	8	-84	6	2	32	31	22
-21	-3	-2	19	6	18	-19	3	2	28	27	4	-75	3	2	92	86	4	-2	-6	-2	401	384	7	-86	6	2	115	117	5
-21	-3	-2	0	6	1	19	-3	-2	37	27	5	-75	3	2	96	86	4	0	-6	-2	34	19	6	-88	6	2	201	195	5
-21	-3	-2	28	6	14	21	-3	-2	79	74	3	-77	3	2	444	409	11	0	-6	-2	43	19	6	-90	6	2	149	139	5
-21	-3	-2	23	6	23	21	-3	-2	85	74	2	-77	3	2	437	409	9	0	-6	-2	40	19	6	-69	-9	-2	58	3	10
-19	-3	-2	28	18	5	-21	3	2	81	74	3	-79	3	2	160	156	5	0	-6	-2	44	19	7	-67	-9	-2	46	4	25
-19	-3	-2	29	18	5	-21	3	2	77	74	3	-79	3	2	163	156	4	2	-6	-2	412	405	7	-65	-9	-2	58	15	19
-19	-3	-2	34	18	10	-23	3	2	43	43	3	-81	3	2	172	174	5	2	-6	-2	418	405	9	-61	-9	-2	5	18	5
-19	-3	-2	37	18	7	-23	3	2	48	43	3	-81	3	2	174	174	4	2	-6	-2	438	405	8	-59	-9	-2	28	19	28
-17	-3	-2	310	308	6	23	-3	-2	40	43	5	-83	3	2	105	100	4	2	-6	-2	428	405	8	-57	-9	-2	33	17	32
-17	-3	-2	326	308	5	-25	3	2	54	52	3	-85	3	2	78	74	5	4	-6	-2	153	156	4	-55	-9	-2	0	28	1
-17	-3	-2	329	308	6	25	-3	-2	57	52	4	-87	3	2	43	53	7	4	-6	-2	152	156	4	-53	-9	-2	9	3	9
-17	-3	-2	321	308	6	-25	3	2	51	52	3	-89	3	2	31	18	17	4	-6	-2	157	156	3	-51	-9	-2	75	47	7
-15	-3	-2	467	480	8	-27	3	2	27	26	5	-91	3	2	22	23	22	4	-6	-2	152	156	4	-49	-9	-2	146	114	6
-15	-3	-2	460	480	9	-27	3	2	29	26	4	-93	3	2	9	3	8	4	-6	-2	163	156	4	-47	-9	-2	403	361	9
-13	-3	-2	204	199	3	27	-3	-2	41	26	5	-95	3	2	19	16	18	6	-6	-2	128	131	4	-45	-9	-2	153	140	5

-13 -3 -2 212 199 4 -29 3 2 27 30 5 -97 3 2 25 18 25 6 -6 -2 136 131 3 -45 -9 -2 148 140 5
-13 -3 -2 204 199 4 -29 3 2 32 30 4 -99 3 2 47 36 8 6 -6 -2 134 131 3 -43 -9 -2 225 229 6
-13 -3 -2 204 199 4 29 -3 -2 43 30 9 -56 -6 -2 95 80 6 6 -6 -2 132 131 4 -43 -9 -2 244 229 6
-11 -3 -2 78 72 3 31 -3 -2 21 8 20 -54 -6 -2 94 81 6 8 -6 -2 61 66 4 -41 -9 -2 105 102 5
-11 -3 -2 73 72 3 -31 3 2 13 8 12 -52 -6 -2 54 56 6 8 -6 -2 63 66 4 -41 -9 -2 108 102 5
-11 -3 -2 76 72 2 -31 3 2 4 8 4 -52 -6 -2 57 56 8 8 -6 -2 58 66 4 -39 -9 -2 50 33 16
-11 -3 -2 79 72 3 -33 3 2 13 20 13 -50 -6 -2 71 62 6 8 -6 -2 66 66 4 -39 -9 -2 40 33 12
-11 -3 -2 76 72 2 33 -3 -2 32 20 13 -50 -6 -2 65 62 5 -8 6 2 66 66 3 -37 -9 -2 50 36 9
-9 -3 -2 28 1 8 -33 3 2 30 20 9 -48 -6 -2 49 38 8 10 -6 -2 68 70 4 -37 -9 -2 48 36 10
-9 -3 -2 0 1 1 -35 3 2 7 3 7 -48 -6 -2 47 38 6 10 -6 -2 68 70 4 -35 -9 -2 0 3 1
-9 -3 -2 27 1 15 35 -3 -2 0 3 1 -46 -6 -2 62 57 7 10 -6 -2 69 70 4 -35 -9 -2 30 3 30
-9 -3 -2 24 1 14 -35 3 2 12 3 12 -46 -6 -2 63 57 5 -10 6 2 66 70 3 -33 -9 -2 56 14 14
-9 -3 -2 29 1 12 -37 3 2 27 2 11 -44 -6 -2 41 22 18 -12 6 2 35 34 5 -33 -9 -2 22 14 22
-7 -3 -2 37 23 8 37 -3 -2 37 2 12 -44 -6 -2 37 22 20 12 -6 -2 39 34 6 -31 -9 -2 0 5 1
-7 -3 -2 34 23 4 -39 3 2 44 44 4 -44 -6 -2 26 22 17 12 -6 -2 28 34 9 -31 -9 -2 20 5 19
-7 -3 -2 38 23 6 39 -3 -2 55 44 5 -42 -6 -2 74 82 4 12 -6 -2 44 34 9 -29 -9 -2 30 19 29
-7 -3 -2 40 23 9 -41 3 2 98 93 3 -42 -6 -2 73 82 5 14 -6 -2 40 45 6 -29 -9 -2 18 19 18
-5 -3 -2 26 3 10 41 -3 -2 97 93 4 -42 -6 -2 86 82 5 14 -6 -2 50 45 5 -27 -9 -2 0 12 1
-5 -3 -2 11 3 11 -41 3 2 92 93 3 -40 -6 -2 42 1 15 -14 6 2 41 45 4 -27 -9 -2 0 12 1
-5 -3 -2 23 3 12 -43 3 2 261 257 6 -40 -6 -2 21 1 21 14 -6 -2 45 45 5 -25 -9 -2 21 32 20
-5 -3 -2 27 3 11 -43 3 2 262 257 5 -40 -6 -2 0 1 1 16 -6 -2 11 18 11 -25 -9 -2 38 32 18
5 3 2 15 3 14 43 -3 -2 255 257 6 -38 -6 -2 164 162 4 -16 6 2 30 18 12 -23 -9 -2 29 31 15
-5 -3 -2 0 3 1 -43 3 2 255 257 5 -36 -6 -2 71 64 5 16 -6 -2 33 18 13 -23 -9 -2 48 31 12
-3 -3 -2 25 14 19 -45 3 2 61 57 3 -36 -6 -2 83 64 5 18 -6 -2 57 46 5 -21 -9 -2 35 36 26
-3 -3 -2 25 14 17 -45 3 2 64 57 3 -36 -6 -2 70 64 4 18 -6 -2 59 46 4 -21 -9 -2 32 36 14
-3 -3 -2 18 14 17 -45 3 2 58 57 4 -34 -6 -2 336 322 7 -18 6 2 51 46 4 -19 -9 -2 32 7 25
-3 -3 -2 30 14 9 45 -3 -2 61 57 5 -32 -6 -2 197 182 4 20 -6 -2 22 1 21 -19 -9 -2 9 7 9

3 3 2 26 14 6 -47 3 2 377 364 7 -30 -6 -2 563 532 11 22 -6 -2 81 73 3 -17 -9 -2 250 229 6
-3 -3 -2 22 14 16 -47 3 2 385 364 7 -28 -6 -2 368 345 7 -24 6 2 40 32 6 -17 -9 -2 262 229 6
1 3 2 15 1 15 47 -3 -2 376 364 8 -26 -6 -2 38 18 16 24 -6 -2 51 32 5 -15 -9 -2 544 528 11
-1 -3 -2 28 1 14 -47 3 2 385 364 9 -26 -6 -2 30 18 11 -26 6 2 145 142 4 -15 -9 -2 551 528 11
-1 -3 -2 20 1 19 -49 3 2 287 292 6 -26 -6 -2 43 18 13 -28 6 2 228 215 6 -13 -9 -2 238 251 6
-1 -3 -2 13 1 12 -49 3 2 284 292 5 -24 -6 -2 31 18 11 -30 6 2 578 593 14 -13 -9 -2 256 251 5
-1 -3 -2 11 1 11 -49 3 2 279 292 6 -24 -6 -2 25 18 25 -32 6 2 188 203 5 -11 -9 -2 96 90 5
1 -3 -2 28 21 9 49 -3 -2 278 292 6 -24 -6 -2 34 18 17 -34 6 2 191 218 5 -11 -9 -2 98 90 4
1 -3 -2 19 21 18 -49 3 2 292 292 7 -22 -6 -2 69 65 5 -36 6 2 94 100 4 -9 -9 -2 36 29 12
1 -3 -2 30 21 5 -51 3 2 110 106 4 -22 -6 -2 66 65 5 -38 6 2 85 98 4 -9 -9 -2 44 29 12
1 -3 -2 30 21 12 51 -3 -2 110 106 4 -22 -6 -2 60 65 5 -40 6 2 54 52 5 -7 -9 -2 36 31 10
-1 3 2 24 21 4 -51 3 2 101 106 5 -20 -6 -2 37 43 7 -42 6 2 39 49 6 -7 -9 -2 38 31 16
3 -3 -2 10 11 9 -51 3 2 105 106 3 -20 -6 -2 41 43 6 -44 6 2 25 28 14 -5 -9 -2 0 3 1
-3 3 2 16 11 15 -51 3 2 119 106 3 -20 -6 -2 48 43 6 -44 6 2 23 28 22 -5 -9 -2 8 3 7
3 -3 -2 23 11 14 -53 3 2 66 70 4 -18 -6 -2 58 61 4 -46 6 2 25 32 24 -3 -9 -2 0 14 1
3 -3 -2 20 11 20 -53 3 2 79 70 6 -18 -6 -2 60 61 6 -46 6 2 32 32 10 -1 -9 -2 0 5 1
3 -3 -2 31 11 5 -53 3 2 69 70 4 -18 -6 -2 58 61 5 -48 6 2 15 15 15 1 -9 -2 26 13 19
5 -3 -2 43 38 3 -55 3 2 36 39 8 -16 -6 -2 36 35 6 -48 6 2 24 15 24 3 -9 -2 0 12 1
5 -3 -2 40 38 4 -55 3 2 54 39 14 -16 -6 -2 42 35 13 -50 6 2 25 31 18 5 -9 -2 20 19 20
5 -3 -2 38 38 4 -55 3 2 35 39 6 -16 -6 -2 47 35 12 -50 6 2 30 31 14 7 -9 -2 7 13 7
5 -3 -2 42 38 5 -57 3 2 21 16 20 -14 -6 -2 59 56 5 -52 6 2 0 4 1 9 -9 -2 0 5 1
-5 3 2 38 38 3 -57 3 2 20 16 20 -14 -6 -2 57 56 5 -52 6 2 12 4 11 11 -9 -2 55 54 6
7 -3 -2 28 9 10 -57 3 2 6 16 5 -14 -6 -2 60 56 5 -54 6 2 74 74 5 -67 9 2 0 9 1
-7 3 2 17 9 17 -59 3 2 16 9 16 -12 -6 -2 19 19 19 -54 6 2 72 74 5 -69 9 2 0 2 1
7 -3 -2 32 9 11 -59 3 2 0 9 1 -12 -6 -2 36 19 15 -56 6 2 134 138 4 23 -9 3 35 42 16
7 -3 -2 0 9 1 -59 3 2 0 9 1 -12 -6 -2 45 19 12 -56 6 2 135 138 5 21 -9 3 13 5 13
7 -3 -2 2 9 2 -61 3 2 0 4 1 -10 -6 -2 86 79 4 -58 6 2 411 407 10 19 -9 3 52 49 9

9 -3 -2 37 15 9 -61 3 2 0 4 1 -10 -6 -2 79 79 4 -58 6 2 405 407 8 17 -9 3 0 9 1
 9 -3 -2 24 15 15 -61 3 2 0 4 1 -10 -6 -2 79 79 4 -60 6 2 600 614 12 15 -9 3 94 91 4
 9 -3 -2 24 15 9 -63 3 2 8 3 7 -10 -6 -2 77 79 4 -60 6 2 606 614 15 13 -9 3 78 78 5
 -9 3 2 26 15 7 -63 3 2 9 3 9 -8 -6 -2 51 24 6 -62 6 2 199 207 5 13 -9 3 75 78 5
 11 -3 -2 147 124 3 -63 3 2 0 3 1 -8 -6 -2 40 24 7 -62 6 2 200 207 6 11 -9 3 26 21 22
 -11 3 2 145 124 3 -65 3 2 22 11 22 -8 -6 -2 40 24 6 -64 6 2 47 45 7 11 -9 3 32 21 15
 13 -3 -2 606 521 12 -65 3 2 0 11 1 -8 -6 -2 40 24 7 -64 6 2 46 45 7 9 -9 3 31 34 15
 13 -3 -2 591 521 10 -65 3 2 34 11 34 -6 -6 -2 145 144 3 -66 6 2 42 44 8 9 -9 3 40 34 11
 -13 3 2 600 521 11 -67 3 2 26 3 26 -6 -6 -2 150 144 4 -66 6 2 47 44 7 7 -9 3 48 42 9
 15 -3 -2 1259 1105 25 -67 3 2 15 3 15 -6 -6 -2 150 144 4 -68 6 2 50 52 6 7 -9 3 47 42 7
 15 -3 -2 1281 1105 20 -67 3 2 22 3 21 -6 -6 -2 147 144 4 -70 6 2 40 30 12 5 -9 3 32 24 14
 -15 3 2 1238 1105 23 -69 3 2 0 6 1 -4 -6 -2 139 131 4 -72 6 2 32 33 17 5 -9 3 29 24 15
 17 -3 -2 414 348 8 -69 3 2 0 6 1 -4 -6 -2 145 131 4 -74 6 2 0 15 1 3 -9 3 25 31 25
 -17 3 2 396 348 8 -69 3 2 0 6 1 -4 -6 -2 144 131 4 -76 6 2 16 22 16 3 -9 3 32 31 15

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 10

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
1	-9	3	14	14	13	-2	-6	3	261	261	6	-78	-6	3	20	5	19	-33	3	-3	33	26	30	-15	-3	3	120	106	3
1	-9	3	0	14	1	-2	-6	3	256	261	6	-78	-6	3	22	5	21	-33	3	-3	26	26	10	-15	-3	3	118	106	3
-1	-9	3	31	28	14	-4	-6	3	69	75	3	-80	-6	3	29	26	28	-33	3	-3	24	26	14	15	3	-3	129	106	4
-1	-9	3	29	28	15	-4	-6	3	80	75	4	-80	-6	3	24	26	24	-33	3	-3	24	26	12	-15	-3	3	130	106	3
-3	-9	3	0	5	1	-6	-6	3	48	22	11	-82	-6	3	17	20	16	-33	3	-3	34	26	5	-17	-3	3	968	959	23
-3	-9	3	19	5	18	-6	-6	3	22	22	15	-82	-6	3	27	20	27	31	-3	3	38	21	9	-17	-3	3	992	959	21
-5	-9	3	40	43	8	-8	-6	3	23	14	22	-84	-6	3	48	58	12	-31	3	-3	29	21	12	-17	-3	3	1003	959	18
-5	-9	3	41	43	7	-8	-6	3	23	14	12	-84	-6	3	48	58	5	-31	3	-3	16	21	16	17	3	-3	994	959	20

-7-9 3 58 52 6 -10-6 3 46 37 6 -86-6 3 44 56 8 -31 3-3 27 21 10 -19-3 3 520 521 12
-7-9 3 52 52 6 -10-6 3 36 37 5 -86-6 3 51 56 6 -31 3-3 29 21 9 -19-3 3 533 521 10
-9-9 3 122 119 4 -12-6 3 37 19 15 -88-6 3 80 103 5 -31 3-3 31 21 30 19 3-3 531 521 11
-9-9 3 120 119 4 -12-6 3 13 19 13 -95 3-3 0 3 1 -29 3-3 32 19 31 -19-3 3 543 521 11
-11-9 3 220 224 5 -14-6 3 36 34 5 -93 3-3 14 22 14 -29 3-3 32 19 6 -21-3 3 261 260 5
-11-9 3 220 224 5 -14-6 3 43 34 6 -91 3-3 0 13 1 -29 3-3 0 19 1 21 3-3 262 260 6
-13-9 3 420 421 9 -16-6 3 21 12 19 -89 3-3 40 33 12 -29 3-3 16 19 16 -21-3 3 274 260 6
-13-9 3 431 421 9 -16-6 3 40 12 13 -87 3-3 47 43 8 -29 3-3 26 19 10 -21-3 3 266 260 6
-15-9 3 63 62 6 -18-6 3 32 36 6 -85 3-3 78 72 5 29-3 3 23 19 17 -23-3 3 143 142 3
-17-9 3 574 552 12 -18-6 3 42 36 6 -83 3-3 69 69 6 -27 3-3 24 17 16 23 3-3 135 142 4
-19-9 3 285 285 6 -20-6 3 13 4 12 -81 3-3 68 81 5 27-3 3 36 17 9 -23-3 3 136 142 3
-21-9 3 140 131 4 -20-6 3 0 4 1 -79 3-3 195 174 5 -27 3-3 32 17 8 -23-3 3 141 142 3
-23-9 3 50 54 7 -22-6 3 47 43 5 -77 3-3 621 581 13 -27 3-3 22 17 13 -25-3 3 98 97 3
-25-9 3 43 38 8 -22-6 3 52 43 5 -75 3-3 225 226 5 -27 3-3 47 17 15 25 3-3 94 97 4
-27-9 3 8 9 7 -22-6 3 47 43 5 -73 3-3 447 441 9 -25 3-3 4 17 4 -25-3 3 98 97 3
-29-9 3 6 20 6 -24-6 3 0 5 1 -71 3-3 188 194 5 -25 3-3 32 17 31 -25-3 3 108 97 4
-37-9 3 57 64 5 -24-6 3 15 5 14 -69 3-3 60 62 5 -25 3-3 25 17 12 -25-3 3 96 97 3
-39-9 3 70 77 5 -24-6 3 17 5 16 -67 3-3 19 29 18 -23 3-3 45 37 4 -27-3 3 47 49 4
-41-9 3 139 148 4 -26-6 3 0 1 1 -65 3-3 6 10 5 23-3 3 47 37 4 -27-3 3 55 49 5
-43-9 3 175 191 4 -26-6 3 13 1 12 -63 3-3 13 7 13 -23 3-3 39 37 4 27 3-3 44 49 6
-45-9 3 105 116 4 -26-6 3 13 1 13 -63 3-3 16 7 16 -23 3-3 47 37 5 -29-3 3 48 49 4
-47-9 3 289 275 6 -28-6 3 143 141 4 -63 3-3 9 7 9 -23 3-3 48 37 8 29 3-3 53 49 5
-49-9 3 124 123 4 -28-6 3 141 141 4 -61 3-3 0 25 1 -21 3-3 20 8 19 -29-3 3 52 49 5
-51-9 3 119 122 4 -28-6 3 144 141 3 -61 3-3 33 25 33 -21 3-3 12 8 12 31 3-3 30 13 15
-53-9 3 109 104 4 -30-6 3 61 55 5 -61 3-3 0 25 1 21-3 3 18 8 17 -31-3 3 32 13 9
-55-9 3 68 76 5 -30-6 3 65 55 4 -59 3-3 0 1 1 -21 3-3 9 8 8 -31-3 3 27 13 21
-57-9 3 56 59 6 -30-6 3 65 55 4 -59 3-3 0 1 1 -21 3-3 0 8 1 -31-3 3 15 13 15

-59 -9 3 43 34 16 -34 -6 3 212 230 5 -59 3 -3 37 1 37 -19 3 -3 126 114 4 33 3 -3 55 53 5
 -61 -9 3 46 38 15 -34 -6 3 220 230 5 -57 3 -3 26 37 12 -19 3 -3 121 114 3 -33 -3 3 58 53 5
 -60 6 -3 226 237 6 -34 -6 3 227 230 5 -57 3 -3 12 37 12 -19 3 -3 121 114 3 -33 -3 3 50 53 4
 -58 6 -3 159 179 4 -34 -6 3 229 230 5 -57 3 -3 45 37 20 -19 3 -3 118 114 5 -33 -3 3 69 53 5
 -58 6 -3 159 179 5 -36 -6 3 123 122 4 -55 3 -3 34 33 8 19 -3 3 119 114 3 -33 -3 3 52 53 4
 -56 6 -3 35 30 7 -36 -6 3 116 122 4 -55 3 -3 49 33 17 -13 3 -3 272 277 7 -35 -3 3 46 30 4
 -56 6 -3 32 30 16 -36 -6 3 122 122 4 -55 3 -3 37 33 8 -11 3 -3 53 48 3 -35 -3 3 44 30 6
 -54 6 -3 24 15 24 -36 -6 3 119 122 4 -53 3 -3 90 100 6 -11 3 -3 50 48 4 -35 -3 3 34 30 5
 -54 6 -3 25 15 19 -38 -6 3 118 111 4 -53 3 -3 85 100 4 11 -3 3 46 48 3 -37 -3 3 94 100 3
 -52 6 -3 27 23 26 -38 -6 3 107 111 3 -53 3 -3 82 100 4 11 -3 3 49 48 4 -37 -3 3 103 100 4
 -52 6 -3 0 23 1 -38 -6 3 107 111 4 -51 3 -3 109 119 4 9 -3 3 12 11 11 -37 -3 3 90 100 3
 -50 6 -3 30 30 12 -38 -6 3 110 111 4 -51 3 -3 121 119 5 -9 3 -3 0 11 1 -37 -3 3 93 100 3
 -50 6 -3 38 30 10 -40 -6 3 55 52 5 -51 3 -3 110 119 4 -9 3 -3 0 11 1 -39 -3 3 108 103 4
 -48 6 -3 15 20 15 -40 -6 3 54 52 5 -49 3 -3 211 223 5 9 -3 3 18 11 18 -39 -3 3 97 103 3
 -48 6 -3 15 20 15 -40 -6 3 60 52 6 -49 3 -3 217 223 6 -7 3 -3 31 19 12 -39 -3 3 102 103 3
 -46 6 -3 24 33 24 -40 -6 3 59 52 6 -49 3 -3 211 223 5 7 -3 3 31 19 5 -39 -3 3 103 103 3
 -44 6 -3 20 10 19 -42 -6 3 56 48 7 -47 3 -3 75 68 4 7 -3 3 23 19 7 -41 -3 3 188 191 4
 -42 6 -3 37 36 9 -42 -6 3 42 48 6 -47 3 -3 84 68 3 -5 3 -3 23 12 22 -41 -3 3 185 191 4
 -40 6 -3 21 14 20 -42 -6 3 43 48 6 -47 3 -3 93 68 6 5 -3 3 13 12 12 -41 -3 3 188 191 4
 -38 6 -3 16 16 15 -42 -6 3 56 48 6 -45 3 -3 258 238 5 5 -3 3 21 12 17 -41 -3 3 188 191 4
 -36 6 -3 133 124 4 -44 -6 3 45 21 8 -45 3 -3 251 238 5 3 -3 3 28 24 6 -41 -3 3 186 191 4
 -34 6 -3 273 264 6 -44 -6 3 13 21 12 -45 3 -3 256 238 6 3 -3 3 23 24 5 -41 -3 3 193 191 4
 -32 6 -3 923 886 20 -44 -6 3 31 21 15 -45 3 -3 246 238 7 -3 3 -3 33 24 11 -43 -3 3 242 241 5
 -30 6 -3 340 326 8 -44 -6 3 35 21 24 -43 3 -3 285 284 7 -1 3 -3 14 8 14 -43 -3 3 234 241 5
 -28 6 -3 683 686 15 -46 -6 3 38 32 19 -43 3 -3 290 284 6 1 -3 3 8 8 7 -43 -3 3 240 241 5
 -26 6 -3 342 346 8 -46 -6 3 31 32 15 -43 3 -3 287 284 6 1 -3 3 16 8 15 -43 -3 3 239 241 5
 -24 6 -3 139 136 4 -46 -6 3 37 32 16 -41 3 -3 143 150 4 -1 -3 3 29 30 4 -43 -3 3 242 241 5

-22 6 -3 88 89 4 -46 -6 3 32 32 12 -41 3 -3 148 150 4 1 3 -3 39 30 6 -45 -3 3 127 127 3
 -20 6 -3 38 38 6 -48 -6 3 21 18 21 -41 3 -3 155 150 5 -1 -3 3 30 30 5 -45 -3 3 128 127 3
 -18 6 -3 38 36 8 -48 -6 3 23 18 23 -41 3 -3 150 150 4 3 3 -3 32 17 10 -45 -3 3 128 127 4
 18 -6 3 37 36 8 -48 -6 3 47 18 7 -41 3 -3 140 150 4 -3 -3 3 31 17 5 -45 -3 3 123 127 3
 -16 6 -3 14 17 14 -52 -6 3 50 56 6 -39 3 -3 89 90 3 -3 -3 3 23 17 7 -45 -3 3 131 127 3
 16 -6 3 0 17 1 -54 -6 3 62 57 4 -39 3 -3 90 90 4 5 3 -3 68 65 4 -47 -3 3 347 340 7
 14 -6 3 18 26 18 -56 -6 3 209 228 5 -39 3 -3 95 90 5 -5 -3 3 70 65 3 -47 -3 3 341 340 7
 -14 6 -3 19 26 18 -58 -6 3 340 356 7 -39 3 -3 101 90 3 -5 -3 3 67 65 3 -47 -3 3 343 340 7
 12 -6 3 18 11 17 -60 -6 3 107 103 4 -39 3 -3 85 90 4 -5 -3 3 62 65 3 -47 -3 3 350 340 7
 -12 6 -3 20 11 20 -62 -6 3 548 530 10 -39 3 -3 90 90 3 -7 -3 3 99 99 3 -47 -3 3 348 340 7
 10 -6 3 38 25 6 -62 -6 3 519 530 11 -37 3 -3 59 57 4 -7 -3 3 104 99 3 -49 -3 3 127 128 3
 -10 6 -3 24 25 15 -64 -6 3 405 405 8 -37 3 -3 49 57 4 7 3 -3 104 99 3 -49 -3 3 130 128 4
 10 -6 3 25 25 11 -64 -6 3 391 405 8 -37 3 -3 48 57 5 -7 -3 3 102 99 3 -49 -3 3 129 128 3
 8 -6 3 5 22 4 -66 -6 3 114 120 4 -37 3 -3 59 57 4 9 3 -3 215 221 5 -49 -3 3 130 128 4
 8 -6 3 23 22 13 -66 -6 3 114 120 4 -37 3 -3 61 57 5 -9 -3 3 216 221 4 -49 -3 3 129 128 3
 -8 6 -3 24 22 14 -68 -6 3 45 41 6 -37 3 -3 58 57 7 -9 -3 3 221 221 5 -51 -3 3 116 120 3
 6 -6 3 32 7 16 -68 -6 3 39 41 7 -35 3 -3 47 39 4 -9 -3 3 214 221 5 -51 -3 3 112 120 3
 6 -6 3 9 7 8 -70 -6 3 13 1 12 -35 3 -3 39 39 5 -11 -3 3 394 388 9 -51 -3 3 113 120 3
 -6 6 -3 0 7 1 -70 -6 3 0 1 1 -35 3 -3 50 39 8 11 3 -3 399 388 8 -51 -3 3 112 120 3
 4 -6 3 95 102 3 -72 -6 3 9 9 9 -35 3 -3 48 39 5 -11 -3 3 395 388 8 -51 -3 3 114 120 4
 4 -6 3 103 102 4 -72 -6 3 22 9 21 -35 3 -3 49 39 8 -11 -3 3 394 388 7 -53 -3 3 110 114 3
 2 -6 3 240 247 5 -74 -6 3 19 14 19 -35 3 -3 50 39 4 -13 -3 3 753 712 15 -53 -3 3 119 114 3
 2 -6 3 244 247 5 -74 -6 3 19 14 18 -35 3 -3 45 39 4 -13 -3 3 717 712 17 -53 -3 3 114 114 3
 0 -6 3 337 330 7 -76 -6 3 0 12 1 -33 3 -3 11 26 10 13 3 -3 716 712 15 -53 -3 3 116 114 4
 0 -6 3 341 330 7 -76 -6 3 16 12 16 -33 3 -3 32 26 11 -13 -3 3 734 712 13 -55 -3 3 62 69 4

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-55 -3 3 71 69 4 -58 0 -3 199 192 6 -10 0 -3 78 82 3 42 0 -3 29 19 18 -45 -3 -3 253 264 5
-55 -3 3 68 69 3 -56 0 -3 27 28 13 -8 0 -3 62 58 3 -42 0 3 19 19 9 -45 -3 -3 261 264 5
-55 -3 3 63 69 4 -56 0 -3 33 28 9 -8 0 -3 71 58 3 -42 0 3 36 19 8 -43 -3 -3 278 315 6
-57 -3 3 53 59 4 -56 0 -3 53 28 15 -8 0 -3 59 58 4 -42 0 3 21 19 20 -43 -3 -3 300 315 5
-57 -3 3 58 59 4 -54 0 -3 35 21 7 -6 0 -3 144 150 4 -44 0 3 28 2 10 -43 -3 -3 294 315 6
-57 -3 3 60 59 4 -54 0 -3 51 21 15 -6 0 -3 146 150 3 -44 0 3 13 2 13 -43 -3 -3 289 315 6
-57 -3 3 60 59 5 -54 0 -3 27 21 12 -6 0 -3 152 150 3 -44 0 3 6 2 5 -41 -3 -3 151 167 4
-59 -3 3 36 24 6 -52 0 -3 33 30 33 -4 0 -3 120 115 3 44 0 -3 24 2 24 -41 -3 -3 159 167 4
-59 -3 3 40 24 9 -52 0 -3 33 30 9 -4 0 -3 124 115 3 -46 0 3 20 19 11 -41 -3 -3 147 167 4
-59 -3 3 35 24 7 -52 0 -3 28 30 10 4 0 3 120 115 3 -46 0 3 27 19 7 -41 -3 -3 159 167 4
-59 -3 3 51 24 10 -50 0 -3 39 38 7 -4 0 -3 126 115 3 46 0 -3 41 19 11 -41 -3 -3 162 167 3
-61 -3 3 35 37 8 -50 0 -3 33 38 6 0 0 3 410 453 8 -46 0 3 38 19 4 -39 -3 -3 108 100 3
-61 -3 3 49 37 6 -50 0 -3 53 38 13 0 0 -3 433 453 7 -46 0 3 32 19 13 -39 -3 -3 94 100 3
-61 -3 3 38 37 11 -48 0 -3 47 35 15 0 0 -3 415 453 8 -48 0 3 15 8 14 -39 -3 -3 95 100 3
-61 -3 3 36 37 7 -48 0 -3 32 35 9 0 0 -3 418 453 8 -48 0 3 0 8 1 -39 -3 -3 96 100 4
-63 -3 3 18 0 18 -48 0 -3 28 35 9 4 0 -3 167 167 4 -48 0 3 18 8 12 -39 -3 -3 107 100 4
-63 -3 3 0 0 1 -46 0 -3 22 30 14 4 0 -3 173 167 3 -48 0 3 18 8 18 -37 -3 -3 70 63 5
-63 -3 3 23 0 22 -46 0 -3 50 30 13 -4 0 3 172 167 3 48 0 -3 33 8 15 -37 -3 -3 60 63 4
-63 -3 3 11 0 10 -46 0 -3 41 30 9 6 0 -3 156 159 3 -50 0 3 22 10 10 -37 -3 -3 69 63 5
-65 -3 3 50 37 11 -46 0 -3 31 30 9 -6 0 3 153 159 3 -50 0 3 29 10 10 -37 -3 -3 57 63 4
-65 -3 3 38 37 7 -44 0 -3 38 36 6 6 0 -3 150 159 4 -50 0 3 45 10 10 -37 -3 -3 59 63 4
-65 -3 3 43 37 9 -44 0 -3 32 36 6 -8 0 3 86 84 2 -50 0 3 37 10 12 -35 -3 -3 39 44 6
-65 -3 3 38 37 6 -44 0 -3 35 36 12 8 0 -3 84 84 3 -52 0 3 52 60 4 -35 -3 -3 47 44 5
-67 -3 3 40 27 11 -44 0 -3 55 36 12 8 0 -3 85 84 3 -52 0 3 53 60 4 -35 -3 -3 68 44 5
-67 -3 3 30 27 10 -44 0 -3 29 36 9 10 0 -3 81 81 3 -52 0 3 46 60 5 -35 -3 -3 45 44 5

-67 -3 3 35 27 9 -42 0 -3 0 11 1 10 0 -3 77 81 3 -52 0 3 63 60 4 -35 -3 -3 48 44 7
-69 -3 3 69 74 4 -42 0 -3 42 11 16 -10 0 3 79 81 2 -52 0 3 57 60 3 -35 -3 -3 57 44 4
-69 -3 3 71 74 3 -42 0 -3 0 11 1 12 0 -3 50 52 3 -54 0 3 76 85 3 -33 -3 -3 34 29 14
-71 -3 3 124 120 3 -42 0 -3 19 11 18 12 0 -3 51 52 4 -54 0 3 74 85 4 -33 -3 -3 41 29 6
-71 -3 3 126 120 4 -42 0 -3 20 11 17 -12 0 3 54 52 2 -54 0 3 78 85 3 -33 -3 -3 38 29 17
-73 -3 3 264 273 5 -40 0 -3 71 78 3 -14 0 3 58 55 2 -54 0 3 84 85 4 -33 -3 -3 31 29 15
-73 -3 3 266 273 6 -40 0 -3 68 78 3 14 0 -3 53 55 3 -54 0 3 82 85 3 -33 -3 -3 31 29 8
-75 -3 3 299 287 6 -40 0 -3 73 78 4 -14 0 3 54 55 2 -56 0 3 255 290 5 -31 -3 -3 44 23 9
-75 -3 3 295 287 6 -40 0 -3 80 78 4 -14 0 3 50 55 2 -56 0 3 261 290 5 -31 -3 -3 30 23 7
-77 -3 3 129 125 4 -40 0 -3 79 78 5 14 0 -3 56 55 3 -56 0 3 259 290 7 -31 -3 -3 33 23 22
-77 -3 3 127 125 4 -38 0 -3 95 86 5 -16 0 3 38 34 3 -56 0 3 262 290 5 -31 -3 -3 38 23 12
-79 -3 3 50 57 5 -38 0 -3 89 86 4 -16 0 3 35 34 4 -58 0 3 397 436 8 -31 -3 -3 34 23 11
-79 -3 3 49 57 6 -38 0 -3 89 86 4 16 0 -3 40 34 5 -58 0 3 399 436 8 -29 -3 -3 38 21 15
-81 -3 3 202 206 5 -36 0 -3 302 298 6 -18 0 3 50 43 3 -58 0 3 409 436 10 -29 -3 -3 21 21 21
-81 -3 3 206 206 4 -36 0 -3 298 298 7 -18 0 3 41 43 3 -58 0 3 413 436 8 -29 -3 -3 0 21 1
-83 -3 3 136 141 4 -36 0 -3 289 298 6 18 0 -3 49 43 4 -60 0 3 74 71 5 -29 -3 -3 7 21 6
-83 -3 3 134 141 4 -34 0 -3 525 517 12 18 0 -3 40 43 3 -60 0 3 74 71 3 -27 -3 -3 35 19 12
-85 -3 3 109 113 4 -34 0 -3 524 517 9 -18 0 3 42 43 3 -60 0 3 65 71 4 -27 -3 -3 37 19 9
-87 -3 3 79 82 4 -34 0 -3 496 517 12 -20 0 3 21 15 5 -60 0 3 73 71 3 -27 -3 -3 43 19 12
-89 -3 3 42 53 7 -34 0 -3 513 517 10 20 0 -3 35 15 6 -62 0 3 848 890 17 -27 -3 -3 41 19 8
-91 -3 3 43 36 6 -32 0 -3 1144 1105 27 -20 0 3 28 15 4 -62 0 3 894 890 17 -25 -3 -3 28 19 12
-93 -3 3 35 33 12 -32 0 -3 1170 1105 24 -20 0 3 24 15 9 -62 0 3 892 890 22 -25 -3 -3 0 19 1
-95 -3 3 29 4 14 -32 0 -3 1195 1105 26 22 0 -3 36 34 6 -62 0 3 890 890 17 -25 -3 -3 41 19 10
-97 -3 3 55 61 7 -32 0 -3 1205 1105 21 -22 0 3 38 34 3 -64 0 3 469 496 9 -25 -3 -3 21 19 20
-100 0 -3 134 130 5 -30 0 -3 277 250 5 -22 0 3 38 34 4 -64 0 3 462 496 9 -23 -3 -3 49 40 5
-98 0 -3 47 43 8 -30 0 -3 280 250 6 -22 0 3 30 34 4 -64 0 3 446 496 9 -23 -3 -3 49 40 6
-96 0 -3 96 83 5 -30 0 -3 277 250 7 24 0 -3 37 40 6 -64 0 3 469 496 11 -23 -3 -3 44 40 5

-94 0 -3 339 309 7 -26 0 -3 411 402 9 -24 0 3 41 40 3 -66 0 3 26 10 24 -23 -3 -3 45 40 4
 -92 0 -3 103 92 5 -26 0 -3 402 402 8 -24 0 3 37 40 3 -66 0 3 36 10 20 -21 -3 -3 24 9 23
 -90 0 -3 101 80 5 -26 0 -3 406 402 7 -24 0 3 44 40 3 -66 0 3 30 10 7 -21 -3 -3 14 9 13
 -88 0 -3 188 192 5 -24 0 -3 144 144 3 -26 0 3 88 86 3 -66 0 3 11 10 11 -21 -3 -3 23 9 22
 -86 0 -3 111 111 4 -24 0 -3 136 144 4 -26 0 3 87 86 3 -68 0 3 57 28 7 -21 -3 -3 31 9 14
 -84 0 -3 79 86 5 -24 0 -3 146 144 4 -26 0 3 90 86 2 -68 0 3 40 28 8 -19 -3 -3 123 124 4
 -82 0 -3 49 61 7 -22 0 -3 100 103 4 26 0 -3 91 86 3 -70 0 3 66 64 6 -19 -3 -3 137 124 3
 -80 0 -3 41 45 10 -22 0 -3 94 103 3 -28 0 3 306 307 6 -70 0 3 56 64 4 -19 -3 -3 130 124 3
 -78 0 -3 36 38 11 -22 0 -3 91 103 3 28 0 -3 326 307 7 -70 0 3 56 64 4 -19 -3 -3 124 124 4
 -76 0 -3 27 22 13 -20 0 -3 48 25 12 -28 0 3 321 307 6 -72 0 3 45 44 6 -17 -3 -3 185 150 4
 -76 0 -3 36 22 11 -20 0 -3 37 25 9 -28 0 3 325 307 8 -72 0 3 43 44 5 -17 -3 -3 174 150 4
 -74 0 -3 13 32 13 -20 0 -3 30 25 12 -30 0 3 376 350 7 -74 0 3 35 41 6 -17 -3 -3 177 150 4
 -74 0 -3 24 32 24 -20 0 -3 30 25 4 -30 0 3 374 350 7 -74 0 3 38 41 7 -17 -3 -3 176 150 3
 -72 0 -3 38 37 8 -18 0 -3 38 44 5 -30 0 3 376 350 9 -76 0 3 45 31 8 -15 -3 -3 327 285 5
 -72 0 -3 42 37 6 -18 0 -3 33 44 5 30 0 -3 369 350 8 -76 0 3 30 31 9 -15 -3 -3 338 285 7
 -70 0 -3 0 8 1 -18 0 -3 51 44 7 32 0 -3 183 169 5 -78 0 3 0 20 1 -15 -3 -3 327 285 6
 -70 0 -3 25 8 14 -18 0 -3 38 44 3 -32 0 3 195 169 5 -78 0 3 24 20 14 -13 -3 -3 324 296 6
 -70 0 -3 11 8 11 16 0 3 22 5 8 -32 0 3 194 169 4 -80 0 3 45 41 10 -13 -3 -3 319 296 6
 -68 0 -3 183 173 6 -16 0 -3 15 5 14 -32 0 3 190 169 4 -80 0 3 29 41 9 -13 -3 -3 314 296 5
 -68 0 -3 165 173 4 -16 0 -3 29 5 5 -34 0 3 103 95 3 -82 0 3 11 14 11 -11 -3 -3 53 51 5
 -68 0 -3 177 173 4 -16 0 -3 33 5 20 34 0 -3 100 95 4 -82 0 3 14 14 14 -11 -3 -3 59 51 3
 -66 0 -3 182 182 4 -16 0 -3 26 5 14 -34 0 3 99 95 3 -86 0 3 62 55 6 -11 -3 -3 52 51 5
 -66 0 -3 189 182 6 14 0 3 49 48 3 -34 0 3 100 95 3 -88 0 3 109 116 4 -9 -3 -3 14 11 13
 -66 0 -3 185 182 4 -14 0 -3 40 48 8 36 0 -3 37 31 6 -90 0 3 60 58 7 -9 -3 -3 23 11 14
 -64 0 -3 569 575 13 -14 0 -3 46 48 4 -36 0 3 36 31 7 -92 0 3 225 220 5 -9 -3 -3 24 11 24
 -64 0 -3 573 575 11 -14 0 -3 36 48 6 -36 0 3 39 31 8 -94 0 3 88 83 5 -7 -3 -3 31 20 9
 -64 0 -3 569 575 10 -14 0 -3 41 48 4 -36 0 3 26 31 5 -96 0 3 141 134 4 -7 -3 -3 40 20 11

-62 0 -3 340 311 8 -12 0 -3 32 30 5 38 0 -3 50 44 5 -98 0 3 82 82 6 -7 -3 -3 37 20 10
-62 0 -3 329 311 7 -12 0 -3 31 30 11 -38 0 3 50 44 4 -100 0 3 44 30 13 -5 -3 -3 0 12 1
-62 0 -3 331 311 6 -12 0 -3 38 30 7 -38 0 3 49 44 3 -102 0 3 32 25 26 -5 -3 -3 0 12 1
-60 0 -3 183 152 6 -12 0 -3 33 30 10 -38 0 3 52 44 3 -49 -3 -3 211 246 5 -5 -3 -3 25 12 14
-60 0 -3 178 152 4 12 0 3 37 30 4 -40 0 3 30 13 12 -49 -3 -3 213 246 4 -5 -3 -3 20 12 20
-60 0 -3 174 152 4 -10 0 -3 69 82 4 -40 0 3 21 13 20 -47 -3 -3 83 76 4 -3 -3 -3 41 25 5
-58 0 -3 191 192 4 -10 0 -3 72 82 3 40 0 -3 7 13 6 -47 -3 -3 86 76 4 -3 -3 -3 13 25 12
-58 0 -3 197 192 4 -10 0 -3 70 82 4 -40 0 3 16 13 15 -45 -3 -3 249 264 5 -3 -3 -3 34 25 10

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 12

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-3 -3 -3 36 25 8 -57 3 3 63 56 7 -8 -6 -3 31 24 11 -21 -9 -3 0 5 1 -18 -6 4 57 55 4
1 3 3 20 8 15 -59 3 3 34 23 9 -6 -6 -3 30 7 30 -19 -9 -3 48 55 8 -18 -6 4 63 55 6
-1 -3 -3 0 8 1 -59 3 3 44 23 15 -6 -6 -3 9 7 8 -17 -9 -3 25 10 24 -20 -6 4 63 42 6
-1 -3 -3 0 8 1 -61 3 3 32 35 8 -6 -6 -3 0 7 1 -15 -9 -3 116 101 4 -20 -6 4 48 42 5
1 -3 -3 36 30 6 -61 3 3 41 35 21 -4 -6 -3 112 110 4 -13 -9 -3 90 86 5 -22 -6 4 140 133 4
1 -3 -3 38 30 5 -63 3 3 0 0 1 -4 -6 -3 109 110 4 -11 -9 -3 33 24 15 -22 -6 4 147 133 5
-1 3 3 30 30 4 -63 3 3 17 0 16 -4 -6 -3 111 110 3 -9 -9 -3 42 38 10 -24 -6 4 186 176 5
3 -3 -3 38 17 7 -65 3 3 53 35 12 -4 -6 -3 114 110 4 -7 -9 -3 43 46 8 -24 -6 4 184 176 5
-3 3 3 26 17 9 -65 3 3 33 35 8 -2 -6 -3 267 263 6 -5 -9 -3 26 26 25 -26 -6 4 387 375 8
3 -3 -3 37 17 8 -67 3 3 36 26 9 -2 -6 -3 268 263 6 -3 -9 -3 37 34 12 -26 -6 4 383 375 8
3 -3 -3 30 17 15 -69 3 3 72 70 4 -2 -6 -3 276 263 5 -1 -9 -3 29 15 19 -28 -6 4 414 402 9
-5 3 3 67 64 3 -71 3 3 121 114 4 -2 -6 -3 263 263 6 1 -9 -3 18 30 18 -28 -6 4 409 402 9
5 -3 -3 66 64 4 -71 3 3 121 114 4 0 -6 -3 362 349 8 3 -9 -3 25 6 25 -30 -6 4 143 136 4
5 -3 -3 69 64 3 -73 3 3 260 258 7 0 -6 -3 384 349 7 5 -9 -3 41 45 8 -30 -6 4 143 136 4

5 -3 -3 70 64 3 -73 3 3 265 258 5 0 -6 -3 360 349 8 7 -9 -3 62 55 6 -30 -6 4 135 136 4
7 -3 -3 105 98 3 -75 3 3 291 272 7 0 -6 -3 366 349 7 9 -9 -3 128 124 4 -32 -6 4 810 791 17
7 -3 -3 106 98 2 -75 3 3 288 272 6 2 -6 -3 274 274 6 -9 -9 4 108 103 5 -32 -6 4 794 791 16
7 -3 -3 106 98 3 -77 3 3 123 119 4 2 -6 -3 272 274 6 -11 -9 4 271 255 6 -32 -6 4 790 791 16
-7 3 3 105 98 3 -77 3 3 125 119 4 2 -6 -3 266 274 6 -13 -9 4 382 364 8 -34 -6 4 511 514 10
-9 3 3 221 216 4 -79 3 3 45 54 7 4 -6 -3 70 78 4 -15 -9 4 205 191 5 -34 -6 4 515 514 11
9 -3 -3 226 216 4 -81 3 3 204 196 5 4 -6 -3 86 78 4 -17 -9 4 425 397 9 -34 -6 4 499 514 10
9 -3 -3 224 216 5 -83 3 3 139 134 4 4 -6 -3 84 78 5 -19 -9 4 143 147 4 -36 -6 4 207 194 5
9 -3 -3 218 216 5 -85 3 3 114 108 4 4 -6 -3 75 78 5 -21 -9 4 0 10 1 -36 -6 4 194 194 5
11 -3 -3 388 377 8 -87 3 3 67 78 5 6 -6 -3 23 23 22 -23 -9 4 38 23 12 -36 -6 4 201 194 4
-11 3 3 392 377 7 -89 3 3 50 51 7 6 -6 -3 14 23 14 -25 -9 4 49 41 9 -38 -6 4 57 45 6
11 -3 -3 396 377 7 -91 3 3 43 34 11 6 -6 -3 29 23 11 -47 -9 4 247 225 6 -38 -6 4 54 45 5
11 -3 -3 397 377 6 -93 3 3 18 32 17 6 -6 -3 28 23 12 -49 -9 4 41 38 8 -38 -6 4 47 45 6
13 -3 -3 721 687 15 -95 3 3 26 4 25 8 -6 -3 32 14 25 -51 -9 4 76 84 5 -40 -6 4 0 10 1
13 -3 -3 731 687 13 -97 3 3 55 59 7 8 -6 -3 13 14 12 -53 -9 4 102 101 5 -40 -6 4 21 10 20
-13 3 3 728 687 13 -99 3 3 82 74 5 8 -6 -3 0 14 1 -55 -9 4 91 95 5 -40 -6 4 0 10 1
13 -3 -3 733 687 11 -52 -6 -3 52 27 15 8 -6 -3 0 14 1 -50 6 -4 25 29 25 -42 -6 4 23 25 22
15 -3 -3 125 102 3 -50 -6 -3 46 35 8 10 -6 -3 38 38 8 -48 6 -4 26 19 19 -42 -6 4 30 25 21
15 -3 -3 129 102 3 -48 -6 -3 47 24 17 10 -6 -3 41 38 7 -46 6 -4 25 15 24 -44 -6 4 13 10 12
15 -3 -3 119 102 4 -48 -6 -3 46 24 17 10 -6 -3 48 38 7 -44 6 -4 2 11 2 -44 -6 4 25 10 25
-15 3 3 127 102 3 -48 -6 -3 28 24 15 10 -6 -3 61 38 5 -42 6 -4 0 7 1 -46 -6 4 44 35 7
-15 3 3 117 102 3 -46 -6 -3 43 38 15 14 -6 -3 46 34 13 -40 6 -4 30 21 13 -46 -6 4 32 35 13
-17 3 3 965 916 25 -46 -6 -3 53 38 14 16 -6 -3 0 12 1 -40 6 -4 39 21 38 -48 -6 4 40 18 7
-17 3 3 984 916 18 -46 -6 -3 25 38 24 -38 6 3 97 105 4 -38 6 -4 10 7 10 -48 -6 4 29 18 16
17 -3 -3 972 916 20 -44 -6 -3 43 11 8 -40 6 3 46 49 5 -38 6 -4 0 7 1 -50 -6 4 74 75 5
17 -3 -3 989 916 18 -44 -6 -3 20 11 20 -42 6 3 39 45 6 -36 6 -4 58 56 5 -50 -6 4 71 75 5
-19 3 3 524 495 13 -44 -6 -3 26 11 16 -44 6 3 25 20 15 -36 6 -4 72 56 7 -52 -6 4 109 105 4

-19 3 3 506 495 10 -42 -6 -3 49 42 8 -46 6 3 33 30 10 -34 6 -4 0 11 1 -52 -6 4 108 105 4
19 -3 -3 524 495 10 -42 -6 -3 46 42 7 -48 6 3 0 17 1 -34 6 -4 0 11 1 -54 -6 4 196 200 5
21 -3 -3 254 246 6 -42 -6 -3 37 42 7 -50 6 3 13 16 13 -32 6 -4 125 131 4 -56 -6 4 294 284 6
-21 3 3 268 246 6 -40 -6 -3 13 17 12 -52 6 3 45 52 6 -32 6 -4 120 131 6 -58 -6 4 332 335 7
-21 3 3 253 246 5 -40 -6 -3 43 17 8 -54 6 3 54 53 5 -30 6 -4 259 284 8 -60 -6 4 49 29 6
-23 3 3 139 134 3 -38 -6 -3 0 18 1 -56 6 3 198 212 6 -30 6 -4 284 284 6 -62 -6 4 471 452 9
23 -3 -3 134 134 4 -38 -6 -3 5 18 4 -58 6 3 308 330 8 -26 6 -4 204 203 5 -64 -6 4 45 41 13
-23 3 3 137 134 4 -38 -6 -3 30 18 29 -60 6 3 92 96 4 -26 6 -4 194 203 6 -66 -6 4 108 116 4
-25 3 3 93 91 3 -36 -6 -3 155 144 5 -62 6 3 482 491 12 -24 6 -4 70 68 7 -68 -6 4 97 101 4
25 -3 -3 101 91 4 -36 -6 -3 154 144 4 -63 -9 -3 53 6 19 -24 6 -4 74 68 4 -70 -6 4 53 58 6
-25 3 3 96 91 3 -36 -6 -3 173 144 4 -61 -9 -3 30 22 30 -22 6 -4 0 15 1 -70 -6 4 51 58 5
27 -3 -3 53 46 5 -34 -6 -3 312 305 7 -59 -9 -3 28 3 27 -22 6 -4 29 15 28 -72 -6 4 36 42 9
-27 3 3 53 46 3 -32 -6 -3 1070 1020 21 -57 -9 -3 33 30 32 -20 6 -4 35 9 34 -72 -6 4 48 42 12
-27 3 3 45 46 3 -30 -6 -3 393 375 8 -55 -9 -3 53 25 18 -20 6 -4 24 9 23 -74 -6 4 0 11 1
29 -3 -3 50 46 6 -28 -6 -3 820 786 16 -53 -9 -3 70 63 7 -18 6 -4 27 25 15 -74 -6 4 0 11 1
-29 3 3 46 46 4 -26 -6 -3 438 395 8 -51 -9 -3 66 67 8 -18 6 -4 39 25 32 -76 -6 4 0 26 1
-29 3 3 39 46 4 -26 -6 -3 405 395 9 -51 -9 -3 63 67 7 -16 6 -4 36 27 10 -76 -6 4 20 26 19
-31 3 3 11 13 11 -24 -6 -3 164 155 4 -49 -9 -3 132 139 5 -16 6 -4 47 27 10 -78 -6 4 0 10 1
31 -3 -3 22 13 22 -24 -6 -3 149 155 5 -49 -9 -3 146 139 5 -14 6 -4 49 30 17 -78 -6 4 28 10 27
-31 3 3 38 13 8 -24 -6 -3 163 155 4 -47 -9 -3 106 78 5 -14 6 -4 35 30 10 -80 -6 4 51 37 13
33 -3 -3 58 50 5 -22 -6 -3 105 101 4 -47 -9 -3 102 78 6 -12 6 -4 18 24 18 -80 -6 4 39 37 10
-33 3 3 49 50 4 -22 -6 -3 93 101 5 -45 -9 -3 152 146 5 -12 6 -4 49 24 18 -82 -6 4 33 32 13
-33 3 3 43 50 4 -22 -6 -3 108 101 4 -45 -9 -3 153 146 5 12 -6 4 24 24 14 -89 3 -4 51 47 10
-35 3 3 46 28 4 -20 -6 -3 57 43 11 -43 -9 -3 203 196 6 -10 6 -4 17 23 16 -87 3 -4 33 34 17
35 -3 -3 45 28 7 -20 -6 -3 39 43 7 -43 -9 -3 204 196 5 10 -6 4 32 23 9 -85 3 -4 49 46 8
37 -3 -3 90 93 4 -20 -6 -3 47 43 6 -41 -9 -3 86 84 5 8 -6 4 30 36 6 -83 3 -4 24 8 23
-37 3 3 94 93 3 -20 -6 -3 50 43 7 -41 -9 -3 98 84 5 -8 6 -4 35 36 9 -81 3 -4 59 59 7

-37	3	3	88	93	3	-18	-6	-3	41	40	7	-39	-9	-3	50	47	7	-6	6	-4	29	27	12	-79	3	-4	197	181	5
39	-3	-3	102	97	4	-18	-6	-3	49	40	10	-39	-9	-3	56	47	7	6	-6	4	21	27	20	-77	3	-4	206	178	5
-39	3	3	100	97	3	-18	-6	-3	51	40	6	-37	-9	-3	45	29	16	4	-6	4	119	128	3	-75	3	-4	152	136	4
-39	3	3	97	97	3	-18	-6	-3	51	40	6	-37	-9	-3	22	29	22	-4	6	-4	115	128	4	-73	3	-4	438	428	9
-41	3	3	182	179	5	-16	-6	-3	23	19	23	-35	-9	-3	40	28	16	2	-6	4	173	190	4	-71	3	-4	261	263	6
-43	3	3	232	226	6	-16	-6	-3	20	19	19	-35	-9	-3	0	28	1	-2	6	-4	171	190	4	-69	3	-4	146	149	4
-45	3	3	123	119	4	-16	-6	-3	28	19	28	-33	-9	-3	19	13	18	0	-6	4	129	125	4	-67	3	-4	61	67	5
-45	3	3	120	119	4	-16	-6	-3	29	19	11	-33	-9	-3	21	13	20	-2	-6	4	197	211	5	-65	3	-4	43	51	7
-47	3	3	335	319	8	-14	-6	-3	51	28	13	-31	-9	-3	23	20	22	-4	-6	4	100	113	3	-63	3	-4	0	4	1
-47	3	3	318	319	7	-14	-6	-3	51	28	12	-31	-9	-3	0	20	1	-6	-6	4	9	14	9	-61	3	-4	35	35	10
-49	3	3	121	120	5	-14	-6	-3	25	28	15	-29	-9	-3	0	2	1	-8	-6	4	9	1	8	-59	3	-4	43	40	7
-49	3	3	127	120	4	-12	-6	-3	13	13	12	-29	-9	-3	24	2	23	-10	-6	4	52	32	12	-59	3	-4	40	40	7
-51	3	3	110	113	4	-12	-6	-3	27	13	27	-27	-9	-3	17	24	17	-10	-6	4	36	32	6	-59	3	-4	41	40	6
-51	3	3	111	113	5	-12	-6	-3	13	13	13	-27	-9	-3	0	24	1	-12	-6	4	7	14	6	-57	3	-4	62	75	4
-53	3	3	115	107	5	-10	-6	-3	32	27	32	-25	-9	-3	0	6	1	-12	-6	4	19	14	18	-57	3	-4	69	75	4
-53	3	3	110	107	4	-10	-6	-3	22	27	22	-25	-9	-3	0	6	1	-14	-6	4	54	35	12	-57	3	-4	64	75	5
-55	3	3	63	65	6	-10	-6	-3	29	27	11	-23	-9	-3	50	48	13	-14	-6	4	37	35	6	-55	3	-4	112	116	4
-55	3	3	65	65	4	-8	-6	-3	17	24	16	-23	-9	-3	42	48	11	-16	-6	4	14	1	13	-55	3	-4	124	116	6
-57	3	3	54	56	4	-8	-6	-3	34	24	22	-21	-9	-3	22	5	21	-16	-6	4	37	1	20	-55	3	-4	114	116	4

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 13

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---

-55	3	-4	110	116	4	-9	3	-4	234	242	5	-51	-3	4	86	89	4	-58	0	-4	583	580	10	-12	0	-4	42	19	5
-53	3	-4	166	174	4	7	-3	4	127	137	3	-51	-3	4	89	89	4	-58	0	-4	573	580	14	-12	0	-4	18	19	18
-53	3	-4	169	174	4	7	-3	4	135	137	4	-53	-3	4	127	118	3	-56	0	-4	366	377	9	-12	0	-4	33	19	12
-53	3	-4	176	174	6	-7	3	-4	135	137	4	-53	-3	4	122	118	4	-56	0	-4	359	377	7	-10	0	-4	99	89	3

-53 3 -4 159 174 5 5 -3 4 51 61 3 -53 -3 4 118 118 4 -56 0 -4 362 377 7 -10 0 -4 90 89 3
 -51 3 -4 188 188 4 5 -3 4 60 61 3 -53 -3 4 122 118 4 -54 0 -4 149 156 4 -10 0 -4 82 89 4
 -51 3 -4 189 188 5 -5 3 -4 61 61 4 -55 -3 4 104 101 4 -54 0 -4 145 156 4 -8 0 -4 40 45 7
 -51 3 -4 186 188 5 3 -3 4 33 41 4 -55 -3 4 97 101 3 -54 0 -4 158 156 6 -8 0 -4 50 45 5
 -51 3 -4 195 188 6 3 -3 4 44 41 4 -55 -3 4 104 101 4 -52 0 -4 88 99 4 -8 0 -4 55 45 4
 -49 3 -4 137 135 4 -3 3 -4 42 41 6 -55 -3 4 98 101 4 -52 0 -4 107 99 6 -6 0 -4 98 100 3
 -49 3 -4 137 135 4 1 -3 4 19 20 19 -57 -3 4 85 89 4 -52 0 -4 87 99 4 -6 0 -4 97 100 3
 -49 3 -4 132 135 4 -1 3 -4 35 20 12 -57 -3 4 85 89 4 -50 0 -4 39 40 6 -6 0 -4 91 100 4
 -49 3 -4 143 135 6 1 -3 4 25 20 8 -57 -3 4 83 89 4 -50 0 -4 40 40 7 -4 0 -4 48 50 6
 -47 3 -4 222 217 7 1 3 -4 30 24 16 -57 -3 4 86 89 3 -50 0 -4 49 40 10 -4 0 -4 60 50 4
 -47 3 -4 215 217 5 -1 -3 4 21 24 10 -59 -3 4 64 61 5 -50 0 -4 52 40 10 -4 0 -4 50 50 5
 -47 3 -4 221 217 4 -1 -3 4 32 24 9 -59 -3 4 49 61 5 -48 0 -4 58 47 9 -2 0 -4 210 210 4
 -47 3 -4 218 217 5 -3 -3 4 34 28 9 -59 -3 4 62 61 4 -48 0 -4 42 47 6 2 0 4 201 210 4
 -45 3 -4 130 132 3 3 3 -4 28 28 20 -61 -3 4 51 52 5 -48 0 -4 41 47 8 -2 0 -4 203 210 5
 -45 3 -4 126 132 4 -3 -3 4 22 28 10 -61 -3 4 69 52 5 -48 0 -4 41 47 6 -2 0 -4 201 210 5
 -45 3 -4 128 132 6 -5 -3 4 29 17 7 -61 -3 4 50 52 5 -46 0 -4 5 6 4 0 0 -4 497 480 10
 -45 3 -4 124 132 4 -5 -3 4 30 17 6 -63 -3 4 45 36 10 -46 0 -4 33 6 17 0 0 -4 507 480 10
 -43 3 -4 94 94 4 5 3 -4 35 17 11 -63 -3 4 25 36 13 -46 0 -4 38 6 26 0 0 4 496 480 9
 -43 3 -4 102 94 3 -7 -3 4 117 113 4 -65 -3 4 38 35 12 -46 0 -4 16 6 16 0 0 -4 520 480 9
 -43 3 -4 95 94 4 -7 -3 4 111 113 3 -65 -3 4 36 35 8 -44 0 -4 42 53 6 2 0 -4 220 220 5
 -43 3 -4 96 94 6 7 3 -4 118 113 4 -67 -3 4 53 51 5 -44 0 -4 41 53 6 2 0 -4 218 220 5
 -41 3 -4 73 75 4 -9 -3 4 178 172 4 -67 -3 4 46 51 6 -44 0 -4 47 53 10 -2 0 4 214 220 4
 -41 3 -4 72 75 4 -9 -3 4 172 172 4 -69 -3 4 44 36 11 -44 0 -4 50 53 5 4 0 -4 21 25 21
 -41 3 -4 74 75 4 9 3 -4 178 172 4 -69 -3 4 41 36 7 -42 0 -4 51 34 14 4 0 -4 37 25 5
 -41 3 -4 71 75 7 -11 -3 4 425 432 9 -71 -3 4 169 188 4 -42 0 -4 41 34 7 -4 0 4 28 25 4
 -39 3 -4 40 39 6 -11 -3 4 431 432 10 -71 -3 4 170 188 4 -42 0 -4 39 34 6 4 0 -4 39 25 5
 -39 3 -4 56 39 16 11 3 -4 433 432 9 -73 -3 4 151 156 4 -42 0 -4 27 34 11 6 0 -4 118 119 3

-39 3 -4 44 39 8 13 3 -4 622 612 12 -73 -3 4 153 156 4 -40 0 -4 93 101 3 6 0 -4 106 119 4
-39 3 -4 47 39 7 -13 -3 4 624 612 13 -75 -3 4 108 109 3 -40 0 -4 95 101 4 6 0 -4 118 119 3
-37 3 -4 34 33 7 -13 -3 4 609 612 14 -75 -3 4 109 109 4 -40 0 -4 106 101 5 -6 0 4 115 119 3
-37 3 -4 36 33 9 -15 -3 4 346 348 8 -75 -3 4 102 109 4 -40 0 -4 91 101 3 -6 0 4 117 119 3
-37 3 -4 39 33 33 15 3 -4 346 348 7 -77 -3 4 427 415 8 -38 0 -4 101 101 5 -8 0 4 88 90 2
-37 3 -4 41 33 8 -15 -3 4 354 348 7 -77 -3 4 410 415 8 -38 0 -4 97 101 4 -8 0 4 93 90 3
-35 3 -4 15 11 14 -15 -3 4 342 348 7 -79 -3 4 645 610 12 -38 0 -4 96 101 3 8 0 -4 93 90 3
-35 3 -4 10 11 9 17 3 -4 641 623 13 -79 -3 4 625 610 13 -38 0 -4 93 101 3 8 0 -4 92 90 3
-35 3 -4 22 11 21 -17 -3 4 642 623 14 -81 -3 4 181 179 4 -36 0 -4 147 150 4 -10 0 4 95 94 2
-35 3 -4 38 11 32 -17 -3 4 640 623 12 -81 -3 4 180 179 4 -36 0 -4 145 150 4 10 0 -4 92 94 3
-33 3 -4 19 26 19 -17 -3 4 648 623 14 -83 -3 4 0 6 1 -36 0 -4 147 150 4 10 0 -4 93 94 3
-33 3 -4 22 26 21 19 3 -4 190 185 5 -83 -3 4 32 6 13 -36 0 -4 147 150 5 -10 0 4 97 94 3
-33 3 -4 24 26 24 -19 -3 4 184 185 4 -85 -3 4 55 59 6 -36 0 -4 148 150 3 -12 0 4 61 61 3
-33 3 -4 17 26 16 -19 -3 4 190 185 4 -85 -3 4 60 59 5 -34 0 -4 37 9 23 12 0 -4 58 61 4
-31 3 -4 0 2 1 -21 -3 4 59 44 7 -87 -3 4 73 80 5 -34 0 -4 0 9 1 -12 0 4 60 61 3
-31 3 -4 7 2 7 -21 -3 4 53 44 6 -87 -3 4 70 80 5 -34 0 -4 30 9 16 14 0 -4 72 69 4
-31 3 -4 27 2 16 -21 -3 4 42 44 4 -89 -3 4 66 74 5 -34 0 -4 18 9 17 -14 0 4 65 69 3
-31 3 -4 23 2 22 21 3 -4 50 44 6 -89 -3 4 76 74 5 -34 0 -4 0 9 1 -14 0 4 65 69 3
-31 3 -4 16 2 15 -21 -3 4 41 44 4 -91 -3 4 59 61 6 -32 0 -4 392 396 8 -16 0 4 47 35 3
-29 3 -4 42 41 7 23 3 -4 88 85 4 -91 -3 4 53 61 6 -32 0 -4 400 396 9 16 0 -4 49 35 5
-29 3 -4 47 41 6 -23 -3 4 97 85 4 -93 -3 4 46 31 9 -32 0 -4 409 396 8 -16 0 4 36 35 4
-29 3 -4 32 41 10 -23 -3 4 89 85 4 -94 0 -4 383 349 8 -32 0 -4 399 396 7 -18 0 4 80 72 3
-29 3 -4 59 41 16 -23 -3 4 82 85 3 -92 0 -4 153 123 5 -32 0 -4 398 396 7 18 0 -4 73 72 4
-29 3 -4 32 41 9 -25 -3 4 103 101 4 -90 0 -4 52 44 8 -30 0 -4 454 441 8 20 0 -4 40 15 6
-29 3 -4 44 41 5 25 3 -4 95 101 4 -88 0 -4 41 23 12 -30 0 -4 457 441 8 -22 0 4 147 151 3
-27 3 -4 47 42 10 -25 -3 4 95 101 3 -86 0 -4 49 38 10 -30 0 -4 446 441 9 22 0 -4 152 151 4
-27 3 -4 38 42 9 -27 -3 4 85 83 4 -84 0 -4 14 4 13 -30 0 -4 455 441 9 -24 0 4 170 167 4

-27 3 -4 41 42 6 -27 -3 4 82 83 3 -84 0 -4 0 4 1 -30 0 -4 449 441 11 24 0 -4 169 167 4
-27 3 -4 56 42 5 27 3 -4 81 83 4 -82 0 -4 5 10 4 -28 0 -4 791 741 15 -24 0 4 171 167 4
-27 3 -4 49 42 5 -29 -3 4 81 76 4 -82 0 -4 0 10 1 -28 0 -4 755 741 14 -26 0 4 396 391 9
-27 3 -4 40 42 5 29 3 -4 69 76 5 -80 0 -4 16 4 15 -28 0 -4 775 741 18 -26 0 4 395 391 7
-25 3 -4 97 105 4 -29 -3 4 73 76 3 -80 0 -4 0 4 1 -28 0 -4 779 741 14 26 0 -4 383 391 8
-25 3 -4 91 105 4 -31 -3 4 54 58 4 -78 0 -4 9 0 9 -26 0 -4 406 402 7 -28 0 4 398 392 10
25 -3 4 103 105 4 31 3 -4 54 58 6 -78 0 -4 16 0 16 -26 0 -4 397 402 7 28 0 -4 391 392 8
-25 3 -4 95 105 4 33 3 -4 57 61 6 -76 0 -4 24 7 23 -26 0 -4 405 402 10 -28 0 4 393 392 7
-25 3 -4 103 105 3 -33 -3 4 49 61 4 -76 0 -4 26 7 25 -26 0 -4 410 402 8 -30 0 4 253 251 5
-25 3 -4 97 105 6 -33 -3 4 54 61 4 -74 0 -4 17 12 17 -24 0 -4 188 177 5 30 0 -4 260 251 6
-25 3 -4 111 105 4 -35 -3 4 38 41 5 -74 0 -4 26 12 23 -24 0 -4 185 177 5 -30 0 4 252 251 6
-17 3 -4 797 788 15 -35 -3 4 32 41 6 -72 0 -4 31 25 12 -24 0 -4 186 177 4 -32 0 4 817 785 15
17 -3 4 753 788 18 -37 -3 4 49 47 4 -72 0 -4 36 25 11 -22 0 -4 46 51 7 -32 0 4 816 785 20
-17 3 -4 782 788 15 -37 -3 4 42 47 5 -70 0 -4 42 34 9 -22 0 -4 59 51 8 32 0 -4 797 785 17
-17 3 -4 767 788 18 -39 -3 4 36 34 8 -70 0 -4 26 34 25 -22 0 -4 54 51 4 -34 0 4 726 702 17
-15 3 -4 200 170 5 -39 -3 4 36 34 9 -68 0 -4 39 21 10 -20 0 -4 17 23 16 34 0 -4 711 702 14
15 -3 4 199 170 5 -41 -3 4 37 43 6 -68 0 -4 20 21 20 -20 0 -4 28 23 19 -34 0 4 704 702 13
-15 3 -4 211 170 5 -41 -3 4 34 43 6 -66 0 -4 68 65 5 -20 0 -4 32 23 14 36 0 -4 336 344 7
-15 3 -4 199 170 6 -43 -3 4 60 57 4 -66 0 -4 75 65 4 -18 0 -4 47 36 9 -36 0 4 347 344 8
-15 3 -4 195 170 5 -43 -3 4 59 57 4 -64 0 -4 331 348 9 -18 0 -4 44 36 9 -36 0 4 343 344 6
-13 3 -4 694 683 14 -45 -3 4 74 64 4 -64 0 -4 339 348 7 -18 0 -4 39 36 11 -38 0 4 148 147 3
-13 3 -4 690 683 14 -45 -3 4 68 64 4 -64 0 -4 329 348 6 -16 0 -4 24 3 23 -38 0 4 144 147 4
-13 3 -4 691 683 14 -47 -3 4 276 275 6 -62 0 -4 906 915 17 -16 0 -4 24 3 23 38 0 -4 144 147 4
13 -3 4 672 683 16 -47 -3 4 281 275 6 -62 0 -4 920 915 18 -16 0 -4 40 3 18 -40 0 4 68 69 3
11 -3 4 513 521 12 -49 -3 4 52 52 5 -62 0 -4 903 915 21 -16 0 -4 30 3 16 -40 0 4 74 69 3
-11 3 -4 510 521 10 -49 -3 4 44 52 5 -60 0 -4 67 58 5 -14 0 -4 62 67 6 40 0 -4 70 69 5
-11 3 -4 525 521 10 -49 -3 4 52 52 5 -60 0 -4 82 58 7 -14 0 -4 57 67 5 -42 0 4 21 10 21

9 -3 4 230 242 5 -51 -3 4 91 89 3 -60 0 -4 73 58 5 -14 0 -4 70 67 4 -42 0 4 15 10 14
 -9 3 -4 230 242 5 -51 -3 4 86 89 4 -58 0 -4 577 580 12 -12 0 -4 26 19 25 -44 0 4 7 16 7

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 14

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-44	0	4	0	16	1	-27	-3	-4	51	46	7	15	-3	-4	350	346	8	-20	-6	-4	0	10	1	-35	-9	-4	21	3	21
-46	0	4	26	22	7	-27	-3	-4	43	46	5	-15	3	4	360	346	7	-20	-6	-4	0	10	1	-33	-9	-4	0	10	1
-46	0	4	46	22	9	-25	-3	-4	103	115	4	15	-3	-4	363	346	7	-18	-6	-4	32	28	10	-31	-9	-4	0	6	1
-48	0	4	41	42	4	-25	-3	-4	101	115	4	-17	3	4	661	616	12	-18	-6	-4	50	28	14	-29	-9	-4	22	21	21
-48	0	4	46	42	5	-25	-3	-4	113	115	3	17	-3	-4	659	616	14	-18	-6	-4	54	28	11	-27	-9	-4	19	18	19
-50	0	4	86	84	4	-25	-3	-4	105	115	3	17	-3	-4	675	616	14	-18	-6	-4	40	28	8	-25	-9	-4	75	62	6
-50	0	4	87	84	3	-23	-3	-4	209	214	4	17	-3	-4	672	616	12	-16	-6	-4	22	31	21	-23	-9	-4	134	121	5
-52	0	4	144	151	4	-23	-3	-4	198	214	5	19	-3	-4	192	182	5	-16	-6	-4	36	31	27	-21	-9	-4	281	258	6
-52	0	4	146	151	4	-23	-3	-4	208	214	4	19	-3	-4	191	182	4	-16	-6	-4	40	31	15	-19	-9	-4	469	444	10
-54	0	4	245	245	5	-23	-3	-4	199	214	5	19	-3	-4	189	182	5	-16	-6	-4	32	31	12	-17	-9	-4	616	583	12
-54	0	4	247	245	6	-21	-3	-4	375	387	7	-19	3	4	191	182	4	-14	-6	-4	30	33	12	-15	-9	-4	192	160	5
-56	0	4	365	379	9	-21	-3	-4	388	387	8	21	-3	-4	38	43	6	-14	-6	-4	51	33	14	-13	-9	-4	536	513	11
-56	0	4	369	379	7	-21	-3	-4	389	387	8	21	-3	-4	44	43	7	-14	-6	-4	30	33	11	-11	-9	-4	425	408	9
-56	0	4	370	379	7	-21	-3	-4	383	387	6	-21	3	4	43	43	5	-14	-6	-4	49	33	12	-9	-9	-4	220	212	5
-58	0	4	441	458	9	-19	-3	-4	669	669	13	21	-3	-4	48	43	6	-12	-6	-4	24	27	24	-7	-9	-4	139	133	5
-58	0	4	446	458	11	-19	-3	-4	643	669	12	23	-3	-4	80	83	4	-12	-6	-4	33	27	33	-5	-9	-4	79	72	5
-58	0	4	453	458	9	-19	-3	-4	670	669	13	23	-3	-4	79	83	4	-12	-6	-4	40	27	8	-3	-9	-4	43	50	8
-60	0	4	88	85	3	-19	-3	-4	670	669	10	-23	3	4	84	83	3	-12	-6	-4	28	27	13	-1	-9	-4	32	31	18
-60	0	4	85	85	4	-17	-3	-4	883	853	17	23	-3	-4	91	83	4	-10	-6	-4	35	26	10	1	-9	-4	41	28	12
-60	0	4	94	85	4	-17	-3	-4	876	853	18	25	-3	-4	102	98	4	-10	-6	-4	25	26	15	3	-9	-4	32	32	15

-62 0 4 399 405 8 -17 -3 -4 879 853 17 25 -3 -4 91 98 4 -10 -6 -4 6 26 5 5 -9 -4 20 6 19
-62 0 4 403 405 10 -17 -3 -4 847 853 14 -25 3 4 95 98 3 -10 -6 -4 40 26 15 19 -9 -4 138 153 5
-62 0 4 401 405 8 -17 -3 -4 865 853 16 -27 3 4 84 81 3 -8 -6 -4 38 40 9 21 -9 -4 0 10 1
-64 0 4 89 90 5 -15 -3 -4 229 184 4 -27 3 4 75 81 3 -8 -6 -4 57 40 13 23 -9 -4 32 24 16
-64 0 4 92 90 3 -15 -3 -4 223 184 5 27 -3 -4 79 81 4 -8 -6 -4 42 40 7 25 -9 -4 38 42 13
-64 0 4 85 90 4 -15 -3 -4 220 184 5 27 -3 -4 84 81 4 -8 -6 -4 40 40 6 27 -9 -4 28 27 27
-66 0 4 71 78 6 -15 -3 -4 219 184 4 -29 3 4 70 74 3 -6 -6 -4 33 30 10 29 -9 -4 22 34 22
-66 0 4 72 78 3 -15 -3 -4 214 184 5 29 -3 -4 71 74 4 -6 -6 -4 38 30 24 -74 6 -5 0 16 1
-66 0 4 72 78 4 -13 -3 -4 771 733 15 31 -3 -4 52 56 5 -6 -6 -4 30 30 29 -72 6 -5 50 42 10
-68 0 4 44 49 4 -13 -3 -4 753 733 12 -31 3 4 51 56 3 -6 -6 -4 28 30 12 -70 6 -5 0 18 1
-68 0 4 43 49 6 -13 -3 -4 759 733 15 -33 3 4 55 58 4 -4 -6 -4 138 140 4 -68 6 -5 0 14 1
-70 0 4 15 2 14 -13 -3 -4 764 733 14 33 -3 -4 58 58 5 -4 -6 -4 122 140 4 -66 6 -5 33 37 17
-70 0 4 0 2 1 -13 -3 -4 776 733 16 -35 3 4 33 39 5 -4 -6 -4 137 140 5 -64 6 -5 31 31 18
-72 0 4 0 5 1 -11 -3 -4 562 557 10 -37 3 4 40 45 5 -4 -6 -4 132 140 4 -62 6 -5 281 284 6
-72 0 4 12 5 12 -11 -3 -4 566 557 11 -39 3 4 25 33 10 -2 -6 -4 203 207 5 -60 6 -5 114 108 5
-74 0 4 12 18 12 -11 -3 -4 562 557 12 -39 3 4 48 33 7 -2 -6 -4 198 207 5 -58 6 -5 504 517 10
-74 0 4 11 18 11 -11 -3 -4 545 557 9 -41 3 4 54 41 11 0 -6 -4 158 135 4 -56 6 -5 375 385 8
-76 0 4 0 10 1 -11 -3 -4 571 557 11 -43 3 4 59 55 4 0 -6 -4 151 135 4 -54 6 -5 195 206 5
-76 0 4 0 10 1 -9 -3 -4 251 258 6 -43 3 4 52 55 7 2 -6 -4 237 226 5 -52 6 -5 88 88 5
-57 -3 -4 69 83 5 -9 -3 -4 250 258 5 -45 3 4 71 61 5 2 -6 -4 220 226 5 -50 6 -5 32 37 16
-57 -3 -4 75 83 5 -9 -3 -4 254 258 4 -45 3 4 64 61 4 2 -6 -4 223 226 5 -48 6 -5 16 1 15
-55 -3 -4 119 128 4 -9 -3 -4 252 258 6 -47 3 4 255 264 6 4 -6 -4 117 120 4 -46 6 -5 0 3 1
-55 -3 -4 113 128 4 -7 -3 -4 148 145 3 -47 3 4 275 264 7 4 -6 -4 120 120 4 -44 6 -5 36 35 12
-53 -3 -4 171 191 4 -7 -3 -4 147 145 4 -49 3 4 58 49 6 4 -6 -4 121 120 4 -42 6 -5 36 25 12
-53 -3 -4 163 191 5 -7 -3 -4 148 145 3 -49 3 4 45 49 5 6 -6 -4 12 15 12 -40 6 -5 69 70 5
-51 -3 -4 193 207 5 -7 -3 -4 141 145 4 -51 3 4 85 86 5 6 -6 -4 0 15 1 -38 6 -5 62 60 5
-51 -3 -4 195 207 4 -7 -3 -4 136 145 4 -51 3 4 86 86 4 6 -6 -4 0 15 1 -38 6 -5 59 60 5

-49 -3 -4 146 148 4 -5 -3 -4 54 65 6 -53 3 4 116 113 4 8 -6 -4 40 1 17 -36 6 -5 96 95 4
 -49 -3 -4 138 148 4 -5 -3 -4 64 65 3 -53 3 4 116 113 5 8 -6 -4 0 1 1 -34 6 -5 23 21 22
 -49 -3 -4 141 148 4 -5 -3 -4 68 65 4 -55 3 4 92 97 5 10 -6 -4 57 33 12 -32 6 -5 103 116 4
 -47 -3 -4 227 239 4 -5 -3 -4 64 65 4 -55 3 4 94 97 4 10 -6 -4 34 33 11 -30 6 -5 211 217 5
 -47 -3 -4 225 239 5 -5 -3 -4 62 65 4 -57 3 4 73 85 5 12 -6 -4 36 15 21 -28 6 -5 102 94 4
 -47 -3 -4 221 239 5 -3 -3 -4 48 43 9 -57 3 4 82 85 4 12 -6 -4 18 15 18 -26 6 -5 0 5 1
 -45 -3 -4 127 146 4 -3 -3 -4 50 43 5 -59 3 4 55 58 7 14 -6 -4 47 36 7 -24 6 -5 24 34 23
 -45 -3 -4 130 146 4 -3 -3 -4 42 43 7 -59 3 4 53 58 5 14 -6 -4 32 36 11 -22 6 -5 29 11 16
 -45 -3 -4 135 146 4 -3 -3 -4 34 43 6 -61 3 4 56 50 5 16 -6 -4 6 1 5 -20 6 -5 30 26 15
 -43 -3 -4 96 104 4 1 -3 -4 21 24 15 -63 3 4 33 35 8 16 -6 -4 0 1 1 -18 6 -5 14 2 14
 -43 -3 -4 101 104 4 1 -3 -4 0 24 1 -65 3 4 33 33 11 18 -6 -4 58 56 6 -16 6 -5 33 29 13
 -43 -3 -4 99 104 3 1 -3 -4 0 24 1 -67 3 4 42 49 7 18 -6 -4 64 56 6 -16 6 -5 51 29 21
 -41 -3 -4 84 82 4 1 -3 -4 0 24 1 -69 3 4 28 35 16 20 -6 -4 44 42 7 -14 6 -5 42 33 29
 -41 -3 -4 75 82 4 3 -3 -4 39 29 9 -52 -6 -4 56 72 6 20 -6 -4 52 42 6 -14 6 -5 33 33 12
 -41 -3 -4 79 82 4 3 -3 -4 39 29 10 -50 -6 -4 29 34 16 22 -6 -4 136 134 4 -12 6 -5 54 66 5
 -39 -3 -4 46 43 6 3 -3 -4 48 29 6 -48 -6 -4 21 22 21 24 -6 -4 190 177 5 -12 6 -5 57 66 10
 -39 -3 -4 68 43 5 3 -3 -4 47 29 11 -46 -6 -4 10 18 10 26 -6 -4 374 374 7 -10 6 -5 89 99 4
 -39 -3 -4 38 43 7 5 -3 -4 5 17 4 -44 -6 -4 0 13 1 28 -6 -4 403 399 8 -8 6 -5 161 178 4
 -37 -3 -4 35 37 9 -5 3 4 30 17 9 -42 -6 -4 11 8 11 30 -6 -4 147 134 5 -4 -6 5 376 386 8
 -37 -3 -4 49 37 7 5 -3 -4 40 17 8 -40 -6 -4 39 24 16 32 -6 -4 756 777 14 -6 -6 5 260 257 6
 -37 -3 -4 57 37 5 5 -3 -4 41 17 7 -40 -6 -4 37 24 9 -50 6 4 65 71 5 -8 -6 5 167 164 4
 -37 -3 -4 35 37 9 5 -3 -4 24 17 14 -38 -6 -4 0 8 1 -52 6 4 95 100 4 -10 -6 5 90 90 4
 -35 -3 -4 21 12 21 7 -3 -4 126 115 4 -38 -6 -4 8 8 8 -54 6 4 171 190 5 -12 -6 5 55 55 5
 -35 -3 -4 0 12 1 -7 3 4 115 115 3 -36 -6 -4 67 65 5 -56 6 4 261 269 7 -14 -6 5 38 31 10
 -35 -3 -4 35 12 23 7 -3 -4 109 115 4 -36 -6 -4 70 65 4 -55 -9 -4 68 79 7 -16 -6 5 24 14 24
 -35 -3 -4 20 12 20 7 -3 -4 119 115 3 -34 -6 -4 25 12 24 -55 -9 -4 74 79 6 -18 -6 5 41 39 9
 -33 -3 -4 25 28 25 9 -3 -4 177 174 5 -34 -6 -4 0 12 1 -53 -9 -4 102 107 5 -20 -6 5 41 47 6

-33	-3	-4	38	28	11	9	-3	-4	189	174	3	-32	-6	-4	131	151	5	-53	-9	-4	106	107	5	-22	-6	5	138	150	4
-33	-3	-4	23	28	17	9	-3	-4	195	174	4	-32	-6	-4	139	151	4	-51	-9	-4	104	110	6	-24	-6	5	226	233	5
-33	-3	-4	10	28	10	-9	3	4	182	174	4	-28	-6	-4	450	463	9	-51	-9	-4	108	110	5	-26	-6	5	427	421	9
-31	-3	-4	20	2	19	11	-3	-4	445	434	10	-26	-6	-4	202	234	5	-49	-9	-4	69	81	6	-28	-6	5	435	416	9
-31	-3	-4	29	2	19	11	-3	-4	451	434	9	-26	-6	-4	215	234	5	-49	-9	-4	69	81	7	-32	-6	5	458	428	10
-31	-3	-4	11	2	11	11	-3	-4	441	434	8	-26	-6	-4	224	234	5	-47	-9	-4	157	148	5	-34	-6	5	302	283	7
-31	-3	-4	26	2	25	11	-3	-4	441	434	7	-24	-6	-4	81	78	5	-47	-9	-4	161	148	5	-36	-6	5	64	63	5
-29	-3	-4	39	45	7	-11	3	4	451	434	8	-24	-6	-4	84	78	4	-45	-9	-4	46	53	11	-38	-6	5	0	9	1
-29	-3	-4	33	45	11	13	-3	-4	657	611	13	-24	-6	-4	85	78	5	-45	-9	-4	41	53	22	-38	-6	5	0	9	1
-29	-3	-4	42	45	7	13	-3	-4	647	611	12	-22	-6	-4	22	17	21	-43	-9	-4	49	34	11	-40	-6	5	39	31	11
-29	-3	-4	59	45	6	-13	3	4	633	611	12	-22	-6	-4	18	17	18	-41	-9	-4	0	24	1	-40	-6	5	38	31	12
-27	-3	-4	45	46	7	13	-3	-4	629	611	13	-22	-6	-4	0	17	1	-39	-9	-4	19	10	19	-42	-6	5	28	28	20
-27	-3	-4	41	46	7	15	-3	-4	367	346	8	-20	-6	-4	0	10	1	-37	-9	-4	20	9	20	-42	-6	5	19	28	18

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 15

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-44	-6	5	35	33	18	-25	3	-5	78	79	8	-84	0	-5	24	32	24	-26	0	-5	111	117	3	-46	0	5	50	58	4
-44	-6	5	47	33	9	-23	3	-5	52	45	11	-82	0	-5	18	28	17	-26	0	-5	118	117	6	-48	0	5	39	35	4
-46	-6	5	37	30	15	-23	3	-5	47	45	9	-82	0	-5	0	28	1	-24	0	-5	78	49	8	-52	0	5	11	23	11
-48	-6	5	22	8	21	-21	3	-5	92	91	7	-80	0	-5	23	18	23	-24	0	-5	55	49	6	-56	0	5	58	72	4
-50	-6	5	51	52	11	-21	3	-5	87	91	5	-80	0	-5	31	18	19	-24	0	-5	59	49	5	-58	0	5	63	78	4
-52	-6	5	49	37	11	-19	3	-5	413	423	8	-78	0	-5	27	18	26	-22	0	-5	36	27	8	-60	0	5	32	32	6
-54	-6	5	89	94	4	-19	3	-5	398	423	10	-78	0	-5	16	18	16	-22	0	-5	52	27	10	-60	0	5	45	32	11
-56	-6	5	100	101	4	-17	3	-5	577	593	14	-76	0	-5	23	15	22	-22	0	-5	35	27	10	-62	0	5	168	175	4
-58	-6	5	111	115	4	-17	3	-5	596	593	12	-76	0	-5	29	15	19	-22	0	-5	52	27	10	-62	0	5	162	175	5
-60	-6	5	67	59	5	-15	3	-5	137	123	6	-74	0	-5	7	7	7	-20	0	-5	24	10	14	-64	0	5	37	41	7

-62 -6 5 164 151 4 -15 3 -5 137 123 4 -74 0 -5 16 7 15 -20 0 -5 21 10 21 -64 0 5 39 41 5
-64 -6 5 103 103 4 -13 3 -5 783 762 16 -72 0 -5 14 17 13 -20 0 -5 25 10 22 -66 0 5 104 113 4
-66 -6 5 63 63 6 -11 3 -5 540 546 11 -72 0 -5 24 17 23 -20 0 -5 29 10 23 -66 0 5 103 113 4
-68 -6 5 124 117 5 -9 3 -5 202 210 5 -70 0 -5 0 4 1 -18 0 -5 36 8 35 -68 0 5 101 107 4
-70 -6 5 111 101 5 1 -3 5 48 53 3 -70 0 -5 10 4 10 -18 0 -5 5 8 5 -68 0 5 106 107 4
-72 -6 5 90 88 5 -1 -3 5 43 48 4 -68 0 -5 59 45 6 -18 0 -5 16 8 16 -70 0 5 70 69 5
-83 3 -5 164 144 5 -3 -3 5 51 56 4 -68 0 -5 49 45 7 -18 0 -5 28 8 27 -72 0 5 51 57 6
-81 3 -5 215 198 5 -5 -3 5 33 34 5 -66 0 -5 48 33 8 -16 0 -5 0 6 1 -74 0 5 26 39 25
-79 3 -5 122 117 5 -7 -3 5 62 66 3 -66 0 -5 45 33 8 -16 0 -5 18 6 17 -76 0 5 11 29 10
-77 3 -5 228 205 6 -9 -3 5 37 20 5 -64 0 -5 181 166 4 -16 0 -5 15 6 15 -78 0 5 0 20 1
-75 3 -5 32 31 16 -11 -3 5 145 153 4 -64 0 -5 175 166 4 -16 0 -5 17 6 16 -80 0 5 21 21 20
-73 3 -5 0 10 1 -13 -3 5 141 137 4 -62 0 -5 315 295 6 -14 0 -5 49 20 17 -82 0 5 0 12 1
-71 3 -5 55 63 6 -15 -3 5 102 98 3 -62 0 -5 303 295 6 -14 0 -5 20 20 20 -84 0 5 15 16 15
-69 3 -5 19 23 19 -17 -3 5 315 300 7 -60 0 -5 64 48 5 -14 0 -5 20 20 19 -67 -3 -5 24 27 23
-67 3 -5 23 25 23 -19 -3 5 126 123 4 -60 0 -5 68 48 5 -14 0 -5 19 20 19 -65 -3 -5 0 11 1
-67 3 -5 30 25 13 -21 -3 5 31 28 6 -58 0 -5 579 587 14 -14 0 -5 36 20 9 -63 -3 -5 0 9 1
-65 3 -5 25 10 20 -23 -3 5 65 65 4 -58 0 -5 612 587 11 -12 0 -5 47 31 11 -61 -3 -5 46 52 10
-65 3 -5 14 10 14 -23 -3 5 67 65 3 -58 0 -5 598 587 12 -12 0 -5 44 31 8 -59 -3 -5 29 11 20
-63 3 -5 0 8 1 -25 -3 5 95 99 3 -56 0 -5 449 446 9 -12 0 -5 51 31 5 -57 -3 -5 55 54 8
-63 3 -5 0 8 1 -25 -3 5 94 99 3 -56 0 -5 457 446 11 -12 0 -5 51 31 15 -55 -3 -5 21 14 20
-61 3 -5 31 48 17 -27 -3 5 78 77 4 -56 0 -5 448 446 8 -12 0 -5 37 31 8 -53 -3 -5 67 75 6
-61 3 -5 36 48 10 -27 -3 5 74 77 4 -54 0 -5 240 244 5 -10 0 -5 66 73 4 -53 -3 -5 74 75 5
-59 3 -5 0 10 1 -29 -3 5 83 87 3 -54 0 -5 241 244 5 -10 0 -5 66 73 5 -51 -3 -5 251 267 5
-59 3 -5 0 10 1 -29 -3 5 79 87 4 -54 0 -5 248 244 7 -10 0 -5 75 73 5 -51 -3 -5 260 267 5
-57 3 -5 48 50 9 -31 -3 5 47 43 5 -52 0 -5 101 90 7 -10 0 -5 67 73 4 -49 -3 -5 485 507 9
-57 3 -5 42 50 8 -31 -3 5 50 43 5 -52 0 -5 86 90 4 -8 0 -5 141 138 4 -49 -3 -5 479 507 10
-55 3 -5 13 13 12 -33 -3 5 69 79 4 -52 0 -5 86 90 4 -8 0 -5 147 138 4 -47 -3 -5 464 478 8

-55 3 -5 14 13 13 -33 -3 5 73 79 4 -50 0 -5 48 49 6 -8 0 -5 139 138 3 -47 -3 -5 454 478 9
-55 3 -5 0 13 1 -35 -3 5 32 16 12 -50 0 -5 43 49 9 -8 0 -5 134 138 4 -47 -3 -5 449 478 9
-53 3 -5 61 68 5 -35 -3 5 20 16 20 -50 0 -5 60 49 10 -8 0 -5 140 138 4 -45 -3 -5 405 405 8
-53 3 -5 66 68 5 -37 -3 5 82 85 4 -50 0 -5 47 49 7 -6 0 -5 211 213 5 -45 -3 -5 388 405 8
-53 3 -5 65 68 5 -37 -3 5 83 85 4 -48 0 -5 23 33 23 -6 0 -5 216 213 5 -45 -3 -5 404 405 7
-51 3 -5 248 244 6 -39 -3 5 19 9 18 -48 0 -5 23 33 22 -6 0 -5 215 213 4 -43 -3 -5 127 125 4
-51 3 -5 245 244 5 -39 -3 5 15 9 15 -48 0 -5 54 33 11 -6 0 -5 216 213 5 -43 -3 -5 127 125 5
-49 3 -5 475 461 9 -41 -3 5 71 76 4 -48 0 -5 52 33 11 -4 0 -5 336 339 7 -43 -3 -5 128 125 4
-49 3 -5 461 461 11 -41 -3 5 77 76 4 -46 0 -5 24 22 23 -4 0 -5 340 339 7 -41 -3 -5 261 276 6
-49 3 -5 465 461 9 -43 -3 5 123 123 4 -46 0 -5 31 22 12 -4 0 -5 344 339 6 -41 -3 -5 268 276 5
-47 3 -5 449 435 8 -43 -3 5 123 123 4 -46 0 -5 28 22 14 -4 0 -5 323 339 6 -41 -3 -5 266 276 6
-47 3 -5 449 435 9 -45 -3 5 378 357 8 -46 0 -5 52 22 11 -2 0 -5 254 262 6 -39 -3 -5 171 171 4
-47 3 -5 441 435 10 -45 -3 5 364 357 8 -44 0 -5 86 94 4 -2 0 -5 268 262 6 -39 -3 -5 166 171 4
-45 3 -5 396 368 9 -47 -3 5 237 213 5 -44 0 -5 78 94 5 -2 0 -5 265 262 5 -39 -3 -5 162 171 5
-45 3 -5 380 368 10 -47 -3 5 238 213 6 -44 0 -5 94 94 6 0 0 -5 222 241 5 -37 -3 -5 140 151 4
-45 3 -5 400 368 7 -49 -3 5 517 498 11 -44 0 -5 78 94 4 0 0 -5 224 241 4 -37 -3 -5 136 151 4
-45 3 -5 394 368 8 -49 -3 5 504 498 10 -42 0 -5 72 74 5 0 0 -5 222 241 5 -37 -3 -5 141 151 5
-43 3 -5 118 113 4 -51 -3 5 312 306 7 -42 0 -5 74 74 5 -2 0 5 328 331 6 -35 -3 -5 96 81 5
-43 3 -5 125 113 6 -51 -3 5 318 306 7 -42 0 -5 78 74 4 2 0 -5 323 331 7 -35 -3 -5 80 81 4
-43 3 -5 118 113 4 -53 -3 5 122 117 4 -42 0 -5 90 74 6 2 0 -5 318 331 7 -35 -3 -5 90 81 4
-43 3 -5 123 113 4 -53 -3 5 116 117 4 -40 0 -5 164 164 5 4 0 -5 362 376 8 -33 -3 -5 82 97 4
-41 3 -5 241 251 8 -55 -3 5 35 40 11 -40 0 -5 152 164 4 -4 0 5 370 376 7 -33 -3 -5 92 97 4
-41 3 -5 252 251 6 -55 -3 5 48 40 10 -40 0 -5 154 164 4 4 0 -5 359 376 8 -33 -3 -5 89 97 5
-41 3 -5 252 251 6 -57 -3 5 36 28 13 -40 0 -5 143 164 4 4 0 -5 367 376 8 -31 -3 -5 55 29 8
-41 3 -5 262 251 5 -57 -3 5 21 28 20 -38 0 -5 139 132 4 6 0 -5 190 198 5 -31 -3 -5 44 29 8
-39 3 -5 162 156 6 -59 -3 5 24 19 23 -38 0 -5 127 132 4 6 0 -5 190 198 5 -31 -3 -5 42 29 7
-39 3 -5 161 156 4 -59 -3 5 22 19 21 -38 0 -5 136 132 4 6 0 -5 181 198 4 -29 -3 -5 77 97 4

-39 3 -5 157 156 5 -61 -3 5 46 60 7 -38 0 -5 139 132 6 -6 0 5 191 198 4 -29 -3 -5 78 97 5
 -39 3 -5 161 156 4 -61 -3 5 53 60 5 -36 0 -5 130 134 4 8 0 -5 108 109 4 -29 -3 -5 79 97 6
 -37 3 -5 144 137 6 -63 -3 5 12 18 12 -36 0 -5 137 134 4 8 0 -5 104 109 4 -27 -3 -5 60 5 13
 -37 3 -5 133 137 4 -63 -3 5 23 18 22 -36 0 -5 147 134 5 -8 0 5 114 109 3 -27 -3 -5 27 5 23
 -37 3 -5 140 137 4 -63 -3 5 26 18 14 -36 0 -5 138 134 4 -10 0 5 55 51 3 -27 -3 -5 32 5 11
 -37 3 -5 127 137 4 -65 -3 5 104 110 4 -34 0 -5 82 72 7 10 0 -5 44 51 8 -25 -3 -5 78 86 4
 -35 3 -5 74 73 5 -67 -3 5 126 131 4 -34 0 -5 63 72 5 10 0 -5 45 51 5 -25 -3 -5 85 86 6
 -35 3 -5 91 73 7 -69 -3 5 245 249 5 -34 0 -5 69 72 4 -12 0 5 22 22 19 -25 -3 -5 76 86 5
 -35 3 -5 77 73 4 -71 -3 5 303 318 6 -34 0 -5 59 72 5 12 0 -5 36 22 13 -23 -3 -5 47 50 6
 -35 3 -5 84 73 4 -73 -3 5 250 248 6 -32 0 -5 325 336 8 14 0 -5 27 16 26 -23 -3 -5 47 50 8
 -33 3 -5 79 88 5 -75 -3 5 299 266 6 -32 0 -5 315 336 6 -14 0 5 0 16 1 -23 -3 -5 49 50 8
 -33 3 -5 79 88 4 -77 -3 5 555 501 11 -32 0 -5 323 336 6 -16 0 5 25 20 13 -21 -3 -5 108 99 4
 -33 3 -5 81 88 4 -79 -3 5 192 196 5 -32 0 -5 331 336 7 16 0 -5 32 20 17 -21 -3 -5 100 99 4
 -33 3 -5 94 88 7 -81 -3 5 72 65 5 -30 0 -5 213 205 6 -18 0 5 39 51 4 -19 -3 -5 443 461 9
 -31 3 -5 40 26 10 -83 -3 5 68 60 6 -30 0 -5 219 205 5 -18 0 5 45 51 4 -19 -3 -5 443 461 8
 -31 3 -5 65 26 17 -85 -3 5 35 23 23 -30 0 -5 214 205 5 -20 0 5 94 104 3 -17 -3 -5 640 644 12
 -31 3 -5 43 26 9 -87 -3 5 0 1 1 -30 0 -5 208 205 4 -22 0 5 202 223 4 -17 -3 -5 660 644 13
 -29 3 -5 68 89 9 -90 0 -5 324 295 7 -28 0 -5 256 243 5 -24 0 5 377 377 7 -15 -3 -5 161 134 4
 -29 3 -5 68 89 5 -88 0 -5 22 23 22 -28 0 -5 251 243 7 -26 0 5 653 623 13 -15 -3 -5 157 134 4
 -27 3 -5 0 5 1 -88 0 -5 16 23 16 -28 0 -5 242 243 5 -28 0 5 661 607 13 -15 -3 -5 152 134 4
 -27 3 -5 0 5 1 -86 0 -5 51 54 10 -28 0 -5 249 243 5 -40 0 5 97 98 3 -13 -3 -5 821 824 16
 -27 3 -5 44 5 29 -86 0 -5 51 54 9 -26 0 -5 111 117 4 -42 0 5 69 77 3 -13 -3 -5 866 824 17
 -25 3 -5 68 79 5 -84 0 -5 20 32 19 -26 0 -5 109 117 4 -44 0 5 68 75 3 -13 -3 -5 859 824 18

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-11 -3 -5 608 589 12 -20 -6 -5 18 30 17 39 -9 -5 29 25 28 -45 3 -6 84 74 5 -82 0 -6 119 109 5
 -11 -3 -5 595 589 13 -18 -6 -5 0 3 1 41 -9 -5 27 54 27 -45 3 -6 82 74 5 -80 0 -6 71 77 6
 -11 -3 -5 589 589 11 -18 -6 -5 7 3 7 43 -9 -5 101 84 5 -45 3 -6 79 74 5 -78 0 -6 26 23 25
 -9 -3 -5 216 226 5 -16 -6 -5 32 33 11 -62 6 -6 126 124 5 -43 3 -6 440 407 9 -78 0 -6 27 23 27
 -9 -3 -5 229 226 5 -16 -6 -5 37 33 10 -60 6 -6 138 128 5 -43 3 -6 432 407 8 -76 0 -6 48 55 10
 -9 -3 -5 221 226 5 -14 -6 -5 38 37 7 -58 6 -6 0 13 1 -43 3 -6 440 407 10 -76 0 -6 46 55 12
 -7 -3 -5 65 65 5 -14 -6 -5 35 37 10 -56 6 -6 94 105 5 -41 3 -6 396 390 9 -74 0 -6 24 24 24
 -7 -3 -5 68 65 5 -14 -6 -5 51 37 8 -54 6 -6 49 63 9 -41 3 -6 407 390 8 -74 0 -6 20 24 19
 -7 -3 -5 62 65 4 -12 -6 -5 71 75 4 -52 6 -6 0 21 1 -39 3 -6 225 229 5 -70 0 -6 74 88 5
 -5 -3 -5 27 18 13 -12 -6 -5 73 75 4 -50 6 -6 15 1 14 -39 3 -6 225 229 6 -70 0 -6 80 88 5
 -5 -3 -5 29 18 10 -12 -6 -5 73 75 6 -48 6 -6 32 21 18 -37 3 -6 86 83 5 -68 0 -6 150 160 4
 -5 -3 -5 39 18 16 -10 -6 -5 105 111 5 -46 6 -6 29 19 28 -37 3 -6 82 83 5 -68 0 -6 144 160 4
 -3 -3 -5 43 44 6 -10 -6 -5 103 111 4 -44 6 -6 45 44 11 -35 3 -6 34 43 14 -66 0 -6 145 167 4
 -3 -3 -5 51 44 6 -10 -6 -5 101 111 4 -42 6 -6 14 1 13 -35 3 -6 19 43 18 -66 0 -6 152 167 4
 -3 -3 -5 56 44 6 -8 -6 -5 195 199 4 -40 6 -6 60 81 6 -33 3 -6 34 31 14 -64 0 -6 162 184 5
 -1 -3 -5 53 56 5 -8 -6 -5 189 199 5 -38 6 -6 47 59 8 -33 3 -6 30 31 15 -64 0 -6 165 184 4
 -1 -3 -5 50 56 6 -8 -6 -5 189 199 5 -36 6 -6 111 135 5 -31 3 -6 21 18 20 -62 0 -6 31 29 17
 -1 -3 -5 61 56 5 -6 -6 -5 256 268 6 -34 6 -6 83 106 5 -31 3 -6 24 18 23 -62 0 -6 3 29 3
 1 -3 -5 52 51 5 -6 -6 -5 255 268 5 -32 6 -6 11 20 10 -27 3 -6 53 49 8 -60 0 -6 178 184 4
 1 -3 -5 53 51 5 -6 -6 -5 256 268 6 -30 6 -6 178 186 5 -27 3 -6 26 49 25 -60 0 -6 182 184 5
 1 -3 -5 44 51 6 -4 -6 -5 344 349 7 -28 6 -6 67 67 6 -27 3 -6 60 49 11 -58 0 -6 65 69 6
 1 -3 -5 56 51 6 -4 -6 -5 341 349 8 -26 6 -6 82 91 5 -25 3 -6 128 128 7 -58 0 -6 68 69 5
 3 -3 -5 57 59 6 -4 -6 -5 334 349 7 -24 6 -6 82 89 5 -25 3 -6 118 128 5 -56 0 -6 228 234 5
 3 -3 -5 65 59 4 -2 -6 -5 169 167 5 -22 6 -6 96 101 5 -23 3 -6 96 97 5 -56 0 -6 223 234 5
 3 -3 -5 58 59 4 -2 -6 -5 173 167 5 -20 6 -6 61 66 6 -23 3 -6 105 97 7 -54 0 -6 129 144 4
 3 -3 -5 66 59 5 -2 -6 -5 167 167 4 -18 6 -6 62 76 6 -21 3 -6 125 129 7 -54 0 -6 133 144 4

5 -3 -5 37 35 8 0 -6 -5 406 428 8 -16 6 -6 37 27 12 -21 3 -6 120 129 5 -52 0 -6 73 77 5
5 -3 -5 44 35 7 0 -6 -5 412 428 9 -16 6 -6 36 27 14 -19 3 -6 38 38 13 -52 0 -6 76 77 5
5 -3 -5 32 35 32 0 -6 -5 416 428 8 -14 6 -6 47 55 8 -19 3 -6 67 38 17 -50 0 -6 11 8 11
5 -3 -5 48 35 9 2 -6 -5 232 221 6 -14 6 -6 41 55 7 -17 3 -6 121 123 7 -50 0 -6 0 8 1
7 -3 -5 79 69 5 2 -6 -5 233 221 5 -12 6 -6 23 14 22 -17 3 -6 122 123 4 -48 0 -6 0 7 1
7 -3 -5 92 69 5 2 -6 -5 231 221 6 -12 6 -6 18 14 18 -15 3 -6 197 207 7 -48 0 -6 18 7 17
-11 3 5 167 157 4 4 -6 -5 405 421 8 -10 6 -6 6 19 6 -15 3 -6 210 207 5 -46 0 -6 44 41 8
11 -3 -5 163 157 5 4 -6 -5 410 421 8 -10 6 -6 44 19 13 -13 3 -6 62 59 6 -46 0 -6 51 41 8
11 -3 -5 177 157 5 4 -6 -5 418 421 9 0 6 -6 88 72 5 -13 3 -6 77 59 8 -44 0 -6 0 18 1
11 -3 -5 164 157 4 6 -6 -5 272 279 6 -2 -6 6 375 359 8 -11 3 -6 77 83 5 -44 0 -6 16 18 16
13 -3 -5 157 141 4 8 -6 -5 179 177 5 -4 -6 6 327 324 7 -9 3 -6 100 102 5 -42 0 -6 30 28 16
13 -3 -5 158 141 4 10 -6 -5 90 96 5 -6 -6 6 114 114 4 -7 3 -6 50 38 9 -42 0 -6 23 28 23
15 -3 -5 113 100 4 12 -6 -5 61 58 6 -8 -6 6 9 14 8 -5 -3 6 103 111 3 -40 0 -6 51 65 7
17 -3 -5 338 305 7 14 -6 -5 27 33 19 -10 -6 6 38 40 8 -7 -3 6 132 141 4 -40 0 -6 60 65 5
19 -3 -5 141 125 4 16 -6 -5 0 14 1 -12 -6 6 47 47 7 -9 -3 6 129 135 4 -38 0 -6 73 80 5
21 -3 -5 35 28 10 18 -6 -5 35 41 12 -14 -6 6 43 50 6 -11 -3 6 77 74 3 -38 0 -6 72 80 5
21 -3 -5 45 28 12 20 -6 -5 43 49 8 -16 -6 6 42 48 6 -13 -3 6 150 153 4 -36 0 -6 211 227 5
23 -3 -5 72 66 5 22 -6 -5 140 156 5 -18 -6 6 30 19 14 -15 -3 6 340 341 7 -36 0 -6 214 227 4
23 -3 -5 68 66 5 24 -6 -5 237 240 6 -20 -6 6 66 74 5 -17 -3 6 46 37 5 -36 0 -6 203 227 5
25 -3 -5 100 99 4 26 -6 -5 420 432 9 -46 -6 6 36 14 19 -19 -3 6 239 235 5 -34 0 -6 213 241 5
25 -3 -5 99 99 4 28 -6 -5 425 424 9 -48 -6 6 0 31 1 -21 -3 6 227 227 5 -34 0 -6 233 241 5
27 -3 -5 84 77 4 30 -6 -5 55 17 7 -50 -6 6 0 3 1 -23 -3 6 145 139 4 -34 0 -6 228 241 5
27 -3 -5 67 77 5 32 -6 -5 443 433 10 -52 -6 6 33 17 28 -25 -3 6 78 85 4 -32 0 -6 77 80 5
29 -3 -5 82 86 4 34 -6 -5 290 285 7 -54 -6 6 57 40 6 -27 -3 6 34 23 9 -32 0 -6 79 80 4
29 -3 -5 77 86 5 36 -6 -5 59 63 6 -56 -6 6 89 71 5 -29 -3 6 18 28 18 -32 0 -6 74 80 5
31 -3 -5 41 43 7 -41 -9 -5 136 155 5 -58 -6 6 194 172 5 -31 -3 6 44 38 11 -30 0 -6 398 392 8
33 -3 -5 66 78 5 -39 -9 -5 86 90 5 -60 -6 6 172 164 5 -31 -3 6 35 38 10 -30 0 -6 386 392 7

35 -3 -5 11 16 10 -37 -9 -5 72 76 6 -62 -6 6 99 99 5 -33 -3 6 47 51 5 -30 0 -6 381 392 8
37 -3 -5 81 84 4 -35 -9 -5 47 42 10 -64 -6 6 194 192 5 -33 -3 6 57 51 5 -28 0 -6 91 97 4
-41 3 5 65 75 4 -33 -9 -5 51 48 8 -75 3 -6 302 288 7 -35 -3 6 106 120 4 -28 0 -6 92 97 4
-43 3 5 123 121 4 -31 -9 -5 18 18 17 -73 3 -6 148 131 5 -35 -3 6 123 120 4 -28 0 -6 97 97 4
-45 3 5 358 350 9 -29 -9 -5 50 50 10 -73 3 -6 126 131 4 -37 -3 6 163 173 5 -26 0 -6 177 186 4
-47 3 5 226 209 6 -27 -9 -5 0 1 1 -71 3 -6 0 4 1 -37 -3 6 178 173 4 -26 0 -6 186 186 5
-49 3 5 496 487 12 -25 -9 -5 53 52 7 -71 3 -6 0 4 1 -39 -3 6 264 281 7 -26 0 -6 182 186 5
-53 3 5 115 115 4 -23 -9 -5 12 17 11 -69 3 -6 55 47 10 -39 -3 6 286 281 6 -24 0 -6 209 204 5
-55 3 5 33 39 7 -21 -9 -5 30 31 22 -69 3 -6 42 47 8 -41 -3 6 334 340 8 -24 0 -6 209 204 4
-57 3 5 31 27 10 -19 -9 -5 248 263 6 -67 3 -6 63 48 7 -41 -3 6 347 340 7 -24 0 -6 216 204 5
-59 3 5 23 18 15 -17 -9 -5 406 398 8 -67 3 -6 48 48 7 -43 -3 6 235 217 5 -22 0 -6 189 185 4
-61 3 5 52 58 5 -15 -9 -5 149 134 5 -65 3 -6 53 59 8 -43 -3 6 232 217 6 -22 0 -6 196 185 5
-63 3 5 24 18 15 -13 -9 -5 535 524 11 -65 3 -6 49 59 6 -45 -3 6 233 235 6 -22 0 -6 185 185 5
-56 -6 -5 415 448 9 -11 -9 -5 342 350 7 -63 3 -6 52 35 8 -45 -3 6 241 235 5 -20 0 -6 140 143 4
-54 -6 -5 220 239 5 -9 -9 -5 107 107 5 -63 3 -6 32 35 14 -47 -3 6 360 340 8 -20 0 -6 146 143 4
-52 -6 -5 94 102 5 -7 -9 -5 20 6 20 -61 3 -6 49 50 8 -47 -3 6 364 340 7 -20 0 -6 139 143 4
-50 -6 -5 44 43 8 -5 -9 -5 47 44 12 -61 3 -6 48 50 8 -49 -3 6 299 289 6 -18 0 -6 118 110 4
-48 -6 -5 0 1 1 -3 -9 -5 55 51 9 -59 3 -6 24 22 24 -49 -3 6 291 289 7 -18 0 -6 111 110 4
-46 -6 -5 15 4 15 -1 -9 -5 54 58 9 -59 3 -6 19 22 18 -51 -3 6 50 51 5 -18 0 -6 116 110 4
-44 -6 -5 44 41 7 1 -9 -5 51 45 11 -57 3 -6 44 40 12 -51 -3 6 43 51 6 -16 0 -6 79 84 4
-42 -6 -5 24 30 24 11 -9 -5 93 84 5 -57 3 -6 44 40 9 -53 -3 6 49 22 10 -16 0 -6 93 84 4
-40 -6 -5 85 82 4 13 -9 -5 65 67 7 -55 3 -6 24 16 23 -55 -3 6 51 47 5 -16 0 -6 69 84 5
-38 -6 -5 73 70 5 15 -9 -5 55 45 10 -55 3 -6 0 16 1 -57 -3 6 44 35 13 -14 0 -6 62 54 4
-36 -6 -5 110 110 4 17 -9 -5 190 179 5 -53 3 -6 42 45 10 -59 -3 6 9 19 8 -14 0 -6 57 54 6
-34 -6 -5 6 24 6 19 -9 -5 113 97 5 -53 3 -6 37 45 14 -61 -3 6 28 31 28 -14 0 -6 69 54 5
-32 -6 -5 114 135 4 21 -9 -5 5 3 4 -51 3 -6 35 22 15 -63 -3 6 37 35 15 -12 0 -6 71 77 5
-30 -6 -5 237 251 5 23 -9 -5 22 17 21 -51 3 -6 27 22 26 -65 -3 6 79 85 5 -12 0 -6 61 77 5

-28 -6 -5 110 109 4 25 -9 -5 49 41 11 -51 3 -6 25 22 24 -67 -3 6 149 141 4 -12 0 -6 58 77 6
-26 -6 -5 7 6 6 27 -9 -5 26 28 25 -49 3 -6 182 188 4 -69 -3 6 203 201 5 -10 0 -6 18 23 17
-24 -6 -5 41 39 10 29 -9 -5 35 42 17 -49 3 -6 189 188 5 -71 -3 6 255 235 6 -10 0 -6 22 23 22
-24 -6 -5 41 39 8 31 -9 -5 19 9 19 -49 3 -6 186 188 5 -73 -3 6 144 123 4 -10 0 -6 22 23 21
-22 -6 -5 0 13 1 33 -9 -5 29 44 26 -47 3 -6 263 250 6 -75 -3 6 28 36 28 -8 0 -6 150 193 4
-22 -6 -5 12 13 11 35 -9 -5 0 7 1 -47 3 -6 266 250 5 -77 -3 6 50 37 7 -8 0 -6 158 193 4
-20 -6 -5 34 30 11 37 -9 -5 54 53 10 -47 3 -6 265 250 6 -79 -3 6 51 52 7 -6 0 -6 191 214 5

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 17

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-6	0	-6	195	214	4	-11	-3	-6	78	90	4	-10	-6	-6	29	22	14	-65	3	-7	47	59	8	-32	0	-7	50	46	8
-4	0	-6	377	398	7	-11	-3	-6	91	90	5	-10	-6	-6	16	22	16	-63	3	-7	41	32	15	-30	0	-7	35	11	11
-10	0	6	10	11	10	-11	-3	-6	77	90	4	-8	-6	-6	76	97	4	-63	3	-7	33	32	15	-30	0	-7	28	11	24
-12	0	6	12	5	11	-9	-3	-6	105	110	4	-8	-6	-6	78	97	5	-61	3	-7	49	54	9	-28	0	-7	130	139	4
-32	0	6	87	101	3	-9	-3	-6	103	110	4	-6	-6	-6	135	152	4	-61	3	-7	45	54	10	-28	0	-7	131	139	4
-34	0	6	67	61	3	-9	-3	-6	99	110	5	-6	-6	-6	142	152	4	-59	3	-7	34	32	15	-26	0	-7	119	129	4
-36	0	6	161	158	4	-7	-3	-6	44	41	6	-4	-6	-6	336	360	7	-59	3	-7	42	32	13	-26	0	-7	116	129	4
-38	0	6	145	138	4	-7	-3	-6	47	41	8	-4	-6	-6	316	360	7	-57	3	-7	97	111	5	-24	0	-7	47	60	8
-40	0	6	133	129	4	-7	-3	-6	48	41	6	-2	-6	-6	308	307	7	-57	3	-7	115	111	5	-24	0	-7	51	60	6
-42	0	6	95	85	4	-5	-3	-6	41	47	8	-2	-6	-6	291	307	6	-55	3	-7	152	157	5	-22	0	-7	0	11	1
-44	0	6	82	84	4	-5	-3	-6	37	47	7	0	-6	-6	99	81	4	-55	3	-7	162	157	5	-22	0	-7	24	11	23
-46	0	6	47	35	6	-5	-3	-6	57	47	6	0	-6	-6	105	81	4	-53	3	-7	264	256	6	-20	0	-7	31	15	18
-48	0	6	61	68	4	-3	-3	-6	28	11	12	2	-6	-6	407	400	9	-53	3	-7	252	256	6	-20	0	-7	0	15	1
-56	0	6	36	28	17	-3	-3	-6	42	11	16	4	-6	-6	353	359	8	-51	3	-7	270	269	6	-18	0	-7	36	26	14
-58	0	6	164	159	5	-3	-3	-6	24	11	23	6	-6	-6	121	126	4	-51	3	-7	282	269	6	-18	0	-7	47	26	8
-60	0	6	155	156	4	-1	-3	-6	49	39	14	8	-6	-6	0	15	1	-49	3	-7	213	202	5	-18	0	-7	30	26	13

-62 0 6 55 31 10 -1 -3 -6 38 39 7 10 -6 -6 46 44 7 -47 3 -7 158 158 5 -16 0 -7 29 19 15
-64 0 6 124 134 4 -1 -3 -6 41 39 9 12 -6 -6 49 51 7 -45 3 -7 243 232 6 -16 0 -7 21 19 21
-66 0 6 138 134 4 1 -3 -6 55 61 5 14 -6 -6 55 54 7 -43 3 -7 82 72 6 -14 0 -7 51 48 7
-68 0 6 63 52 5 1 -3 -6 57 61 5 16 -6 -6 50 52 7 -41 3 -7 179 174 5 -14 0 -7 49 48 6
-70 0 6 40 38 15 1 -3 -6 61 61 6 18 -6 -6 26 20 26 -39 3 -7 146 162 5 -12 0 -7 26 23 25
-72 0 6 0 7 1 3 -3 -6 78 89 4 20 -6 -6 69 79 6 -37 3 -7 90 102 5 -10 0 -7 107 114 4
-74 0 6 0 7 1 3 -3 -6 83 89 4 22 -6 -6 57 55 6 -35 3 -7 41 38 12 -8 0 -7 122 128 4
-76 0 6 22 36 22 3 -3 -6 93 89 5 24 -6 -6 137 157 5 -33 3 -7 0 12 1 -6 0 -7 202 218 5
-78 0 6 25 14 25 5 -3 -6 117 117 5 26 -6 -6 125 131 5 -31 3 -7 18 5 17 -4 0 -7 163 168 4
-80 0 6 52 57 7 5 -3 -6 115 117 4 28 -6 -6 44 38 11 -29 3 -7 29 35 28 -16 0 7 65 66 5
-82 0 6 48 61 8 7 -3 -6 150 149 5 30 -6 -6 188 187 5 -27 3 -7 0 35 1 -18 0 7 88 92 4
-84 0 6 90 112 5 7 -3 -6 153 149 4 32 -6 -6 0 7 1 -27 3 -7 36 35 15 -20 0 7 121 130 4
-86 0 6 80 99 5 9 -3 -6 143 142 4 34 -6 -6 134 145 5 -25 3 -7 106 105 5 -22 0 7 142 148 4
-75 -3 -6 324 312 7 9 -3 -6 144 142 5 36 -6 -6 134 140 5 -23 3 -7 148 139 5 -24 0 7 117 130 4
-73 -3 -6 153 142 5 11 -3 -6 89 77 5 38 -6 -6 83 85 5 -21 3 -7 218 212 5 -26 0 7 30 26 23
-71 -3 -6 0 4 1 11 -3 -6 84 77 4 40 -6 -6 61 62 7 -19 3 -7 168 162 5 -28 0 7 205 203 5
-69 -3 -6 57 52 8 13 -3 -6 163 160 4 42 -6 -6 41 39 9 -17 3 -7 69 58 6 -30 0 7 296 294 7
-67 -3 -6 56 52 10 13 -3 -6 171 160 5 44 -6 -6 32 39 17 -15 3 -7 330 308 7 -32 0 7 109 104 4
-65 -3 -6 50 65 9 15 -3 -6 371 355 7 46 -6 -6 20 14 20 -13 3 -7 122 114 5 -34 0 7 219 222 5
-63 -3 -6 45 38 12 15 -3 -6 376 355 8 48 -6 -6 28 32 28 -11 3 -7 204 197 5 -36 0 7 225 229 5
-61 -3 -6 49 54 11 17 -3 -6 51 38 5 50 -6 -6 0 3 1 -9 3 -7 240 227 6 -38 0 7 124 111 4
-59 -3 -6 33 24 18 17 -3 -6 54 38 7 52 -6 -6 0 17 1 -7 3 -7 205 188 5 -44 0 7 19 6 18
-57 -3 -6 49 44 8 19 -3 -6 259 243 6 54 -6 -6 48 40 11 -5 3 -7 128 123 5 -60 0 7 131 134 4
-55 -3 -6 30 17 23 19 -3 -6 257 243 6 56 -6 -6 83 71 6 -3 3 -7 91 91 5 -62 0 7 28 7 27
-55 -3 -6 25 17 24 21 -3 -6 247 235 6 -19 -9 -6 19 35 18 -11 -3 7 123 135 4 -64 0 7 97 89 5
-53 -3 -6 47 49 9 21 -3 -6 247 235 6 -17 -9 -6 110 105 5 -13 -3 7 103 102 4 -66 0 7 41 44 8
-53 -3 -6 51 49 10 23 -3 -6 151 143 4 -15 -9 -6 182 182 5 -15 -3 7 11 29 11 -68 0 7 0 12 1

-51 -3 -6 31 24 18 25 -3 -6 93 87 4 -13 -9 -6 70 66 6 -17 -3 7 93 95 4 -70 0 7 0 1 1
-51 -3 -6 31 24 16 27 -3 -6 37 24 11 -11 -9 -6 48 68 10 -19 -3 7 67 85 4 -72 0 7 0 17 1
-49 -3 -6 190 206 4 29 -3 -6 38 28 11 -9 -9 -6 84 91 5 -21 -3 7 21 4 21 -65 -3 -7 67 64 7
-49 -3 -6 183 206 5 31 -3 -6 41 39 11 -7 -9 -6 47 52 11 -23 -3 7 29 19 14 -63 -3 -7 50 35 12
-47 -3 -6 272 274 5 33 -3 -6 56 51 6 -5 -9 -6 47 58 9 -25 -3 7 40 36 6 -61 -3 -7 59 59 10
-47 -3 -6 262 274 6 35 -3 -6 113 121 4 -3 -9 -6 17 16 17 -27 -3 7 27 15 16 -59 -3 -7 33 35 21
-45 -3 -6 87 81 4 -53 3 6 10 22 10 1 -9 -6 42 25 13 -29 -3 7 21 16 21 -57 -3 -7 118 121 5
-45 -3 -6 80 81 5 -55 3 6 46 46 5 3 -9 -6 71 76 5 -39 -3 7 122 140 4 -55 -3 -7 172 171 5
-43 -3 -6 462 448 9 -60 -6 -6 143 148 5 5 -9 -6 68 69 6 -41 -3 7 147 145 4 -53 -3 -7 275 280 6
-43 -3 -6 460 448 9 -58 -6 -6 19 15 18 7 -9 -6 108 110 5 -43 -3 7 54 44 11 -51 -3 -7 297 295 6
-41 -3 -6 408 429 9 -56 -6 -6 108 122 5 9 -9 -6 73 79 6 -45 -3 7 137 126 4 -49 -3 -7 225 222 5
-41 -3 -6 420 429 8 -54 -6 -6 65 74 7 11 -9 -6 40 47 13 -47 -3 7 99 102 4 -47 -3 -7 170 173 5
-39 -3 -6 234 252 5 -52 -6 -6 28 24 28 13 -9 -6 135 128 5 -49 -3 7 166 146 4 -45 -3 -7 258 254 5
-39 -3 -6 239 252 5 -50 -6 -6 0 1 1 15 -9 -6 251 249 6 -51 -3 7 271 249 6 -43 -3 -7 81 79 5
-37 -3 -6 84 91 5 -48 -6 -6 43 25 12 17 -9 -6 64 59 7 -53 -3 7 226 212 5 -41 -3 -7 187 191 5
-37 -3 -6 87 91 5 -46 -6 -6 34 23 17 19 -9 -6 169 169 5 -55 -3 7 155 148 4 -39 -3 -7 166 178 5
-35 -3 -6 36 48 13 -44 -6 -6 45 52 8 21 -9 -6 186 175 5 -57 -3 7 93 89 4 -37 -3 -7 95 112 5
-35 -3 -6 38 48 12 -42 -6 -6 9 1 8 23 -9 -6 124 118 5 -59 -3 7 52 61 6 -35 -3 -7 37 41 14
-33 -3 -6 20 34 20 -40 -6 -6 67 95 5 -46 6 -7 47 36 9 -61 -3 7 35 6 22 -33 -3 -7 0 13 1
-33 -3 -6 30 34 16 -38 -6 -6 63 68 6 -44 6 -7 36 40 16 -63 -3 7 6 47 5 -31 -3 -7 17 6 17
-31 -3 -6 0 20 1 -38 -6 -6 62 68 7 -42 6 -7 28 14 27 -65 -3 7 42 42 15 -31 -3 -7 0 6 1
-31 -3 -6 24 20 24 -36 -6 -6 133 158 4 -40 6 -7 10 26 10 -67 -3 7 38 53 22 -29 -3 -7 36 38 11
-29 -3 -6 78 89 5 -36 -6 -6 143 158 4 -38 6 -7 23 31 22 -68 0 -7 10 21 10 -29 -3 -7 40 38 13
-29 -3 -6 76 89 5 -34 -6 -6 104 123 5 -36 6 -7 26 12 26 -66 0 -7 97 101 5 -27 -3 -7 37 38 12
-27 -3 -6 67 54 6 -34 -6 -6 107 123 5 -34 6 -7 67 71 6 -64 0 -7 44 59 12 -27 -3 -7 29 38 28
-27 -3 -6 59 54 6 -32 -6 -6 0 24 1 -32 6 -7 0 5 1 -62 0 -7 49 40 8 -25 -3 -7 108 116 4
-25 -3 -6 132 140 4 -32 -6 -6 19 24 18 -30 6 -7 78 82 6 -60 0 -7 250 230 5 -25 -3 -7 108 116 5

-25 -3 -6 129 140 5 -30 -6 -6 209 216 5 -28 6 -7 53 51 8 -58 0 -7 125 128 5 -23 -3 -7 159 153 4
-25 -3 -6 136 140 4 -30 -6 -6 206 216 5 -26 6 -7 101 107 5 -56 0 -7 57 68 7 -23 -3 -7 148 153 5
-23 -3 -6 105 106 4 -28 -6 -6 76 79 5 -24 6 -7 89 96 6 -54 0 -7 141 131 4 -21 -3 -7 238 232 5
-23 -3 -6 116 106 5 -28 -6 -6 73 79 6 -22 6 -7 39 45 15 -52 0 -7 112 109 4 -21 -3 -7 224 232 5
-23 -3 -6 106 106 4 -26 -6 -6 96 106 4 -20 6 -7 0 33 1 -50 0 -7 95 101 5 -19 -3 -7 182 178 5
-21 -3 -6 134 142 4 -24 -6 -6 108 103 4 -18 6 -7 0 11 1 -48 0 -7 59 57 7 -19 -3 -7 177 178 5
-21 -3 -6 140 142 5 -22 -6 -6 115 117 4 -16 6 -7 23 22 22 -46 0 -7 49 55 8 -17 -3 -7 76 64 4
-21 -3 -6 129 142 4 -20 -6 -6 79 77 5 -14 6 -7 44 46 13 -44 0 -7 21 15 20 -17 -3 -7 71 64 6
-19 -3 -6 49 42 8 -20 -6 -6 71 77 5 -12 6 -7 46 53 9 -42 0 -7 38 31 13 -15 -3 -7 355 337 8
-19 -3 -6 44 42 8 -18 -6 -6 79 88 5 -10 6 -7 95 105 5 -40 0 -7 38 16 12 -15 -3 -7 365 337 7
-19 -3 -6 47 42 9 -18 -6 -6 74 88 5 -8 6 -7 106 122 5 -40 0 -7 28 16 27 -13 -3 -7 135 125 4
-17 -3 -6 135 135 5 -16 -6 -6 36 31 11 -6 6 -7 133 143 5 -38 0 -7 0 3 1 -11 -3 -7 229 215 5
-17 -3 -6 140 135 4 -16 -6 -6 42 31 7 -4 6 -7 67 71 7 -36 0 -7 52 43 7 -9 -3 -7 266 248 6
-15 -3 -6 231 225 5 -14 -6 -6 54 63 6 -2 6 -7 127 133 5 -36 0 -7 48 43 9 -7 -3 -7 207 204 5
-15 -3 -6 226 225 5 -14 -6 -6 54 63 5 0 6 -7 209 211 5 -34 0 -7 16 26 15 -5 -3 -7 137 134 4
-13 -3 -6 70 64 4 -12 -6 -6 19 16 18 2 6 -7 111 117 5 -34 0 -7 6 26 5 -5 -3 -7 133 134 4
-13 -3 -6 78 64 6 -12 -6 -6 18 16 17 -54 -6 7 100 98 4 -32 0 -7 54 46 9 -3 -3 -7 95 99 4

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 18

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-3 -3 -7 92 99 4 -12 6 -8 76 82 6 -12 -6 -8 77 95 6 -55 -1 0 0 16 1 -19 -1 0 51 52 3
-1 -3 -7 47 51 7 -10 6 -8 117 119 5 -10 -6 -8 120 138 5 -55 -1 0 0 16 1 19 1 0 48 52 4
-1 -3 -7 42 51 6 -8 6 -8 182 194 5 -8 -6 -8 218 224 5 -53 -1 0 89 91 8 -19 -1 0 54 52 14
1 -3 -7 42 40 6 -6 6 -8 200 211 5 -8 -6 -8 200 224 5 -53 -1 0 90 91 10 11 1 0 35 55 5
3 -3 -7 0 23 1 -4 6 -8 141 148 5 -6 -6 -8 231 243 6 -53 -1 0 101 91 10 -9 -1 0 25 45 25

5 -3 -7 0 7 1 -2 6 -8 157 141 5 -4 -6 -8 165 170 5 -53 -1 0 110 91 10 -9 -1 0 27 45 26
7 -3 -7 40 59 7 0 6 -8 281 268 7 -2 -6 -8 176 161 5 -53 -1 0 94 91 10 -9 -1 0 27 45 10
9 -3 -7 76 80 4 2 6 -8 123 107 6 0 -6 -8 325 307 8 -51 -1 0 10 13 9 9 1 0 34 45 5
11 -3 -7 130 143 4 4 6 -8 240 229 6 2 -6 -8 135 122 5 -51 -1 0 0 13 1 7 1 0 30 38 13
13 -3 -7 113 108 4 6 6 -8 279 267 7 4 -6 -8 269 260 7 -51 -1 0 0 13 1 -7 -1 0 25 38 25
15 -3 -7 17 31 16 -47 3 -8 76 61 7 6 -6 -8 315 303 7 -49 -1 0 207 234 10 -7 -1 0 0 38 1
17 -3 -7 105 101 4 -45 3 -8 368 320 8 8 -6 -8 214 199 6 -49 -1 0 227 234 9 -7 -1 0 41 38 13
19 -3 -7 70 89 5 -43 3 -8 142 135 5 10 -6 -8 107 106 5 -49 -1 0 224 234 9 -5 -1 0 17 25 16
21 -3 -7 21 5 21 -41 3 -8 212 192 6 12 -6 -8 47 30 12 -47 -1 0 91 65 17 -5 -1 0 30 25 15
23 -3 -7 28 20 16 -39 3 -8 297 276 7 14 -6 -8 0 16 1 -47 -1 0 88 65 12 5 1 0 25 25 20
25 -3 -7 45 37 9 -37 3 -8 227 206 6 16 -6 -8 32 40 23 -47 -1 0 81 65 10 -5 -1 0 25 25 20
-46 -6 -7 47 42 11 -35 3 -8 145 142 5 18 -6 -8 0 12 1 -47 -1 0 70 65 11 -3 -1 0 29 26 11
-46 -6 -7 55 42 11 -33 3 -8 83 74 6 -15 3 -9 103 80 6 -45 -1 0 189 171 8 3 1 0 16 26 15
-44 -6 -7 41 46 16 -31 3 -8 54 42 10 -13 3 -9 187 173 5 -45 -1 0 194 171 8 -3 -1 0 22 26 21
-44 -6 -7 47 46 12 -29 3 -8 27 23 26 -11 3 -9 179 164 5 -45 -1 0 168 171 9 -3 -1 0 15 26 14
-42 -6 -7 37 17 15 -27 3 -8 31 18 26 -9 3 -9 59 37 8 -45 -1 0 173 171 8 1 1 0 25 23 12
-42 -6 -7 33 17 27 -25 3 -8 55 45 8 -7 3 -9 36 41 20 -45 -1 0 177 171 8 -1 -1 0 22 23 21
-40 -6 -7 0 30 1 -23 3 -8 98 80 5 -5 3 -9 79 86 6 -43 -1 0 0 4 1 -1 -1 0 13 23 13
-40 -6 -7 17 30 16 -21 3 -8 102 81 5 -3 3 -9 83 65 6 -43 -1 0 41 4 41 1 -1 0 13 23 13
-38 -6 -7 37 36 20 -19 3 -8 59 50 7 -1 3 -9 101 113 6 -43 -1 0 51 4 27 -1 1 0 0 23 1
-38 -6 -7 32 36 21 -17 3 -8 60 46 9 1 3 -9 59 6 8 -43 -1 0 41 4 41 -3 1 0 24 24 13
-36 -6 -7 19 14 18 -15 3 -8 82 64 6 3 3 -9 163 168 5 -43 -1 0 0 4 1 3 -1 0 0 24 1
-36 -6 -7 32 14 31 -13 3 -8 87 64 5 5 3 -9 142 129 5 -41 -1 0 60 39 11 -5 1 0 29 23 11
-34 -6 -7 74 83 6 -11 3 -8 42 9 13 7 3 -9 264 245 6 -41 -1 0 72 39 12 5 -1 0 26 23 19
-34 -6 -7 82 83 6 -9 3 -8 55 29 10 -34 0 -9 165 149 5 -41 -1 0 72 39 9 -7 1 0 0 33 1
-32 -6 -7 15 6 15 -7 3 -8 68 47 7 -32 0 -9 207 196 5 -41 -1 0 44 39 13 7 -1 0 30 33 14
-32 -6 -7 21 6 21 -5 3 -8 27 24 27 -15 -3 -9 109 88 5 -41 -1 0 59 39 22 -9 1 0 38 40 9

-30 -6 -7 90 96 5 -3 3 -8 42 43 14 -13 -3 -9 200 190 5 -39 -1 0 0 15 1 9 -1 0 29 40 18
 -30 -6 -7 88 96 6 -1 3 -8 24 6 24 -11 -3 -9 198 179 5 -39 -1 0 0 15 1 -11 1 0 25 48 24
 -28 -6 -7 64 60 7 1 3 -8 52 56 11 -9 -3 -9 69 40 7 -39 -1 0 0 15 1 11 -1 0 36 48 13
 -28 -6 -7 70 60 7 -47 -3 8 142 151 5 -7 -3 -9 47 45 14 -39 -1 0 0 15 1 -11 1 0 26 48 21
 -26 -6 -7 110 125 5 -49 -3 8 236 206 5 -5 -3 -9 89 94 6 -37 -1 0 50 15 32 -19 1 0 39 47 16
 -26 -6 -7 110 125 5 -51 -3 8 269 254 6 -3 -3 -9 88 71 6 -37 -1 0 57 15 23 19 -1 0 38 47 18
 -24 -6 -7 94 112 5 -53 -3 8 125 115 4 -1 -3 -9 111 123 5 -37 -1 0 38 15 37 21 -1 0 43 71 19
 -24 -6 -7 97 112 6 -52 0 -8 54 60 8 -81 -1 0 124 100 11 -37 -1 0 58 15 15 -21 1 0 62 71 6
 -22 -6 -7 43 52 12 -50 0 -8 58 57 7 -79 -1 0 100 13 14 -35 -1 0 48 6 26 -21 1 0 50 71 18
 -20 -6 -7 30 38 25 -48 0 -8 24 16 24 -79 -1 0 60 13 35 -35 -1 0 62 6 20 23 -1 0 10 27 9
 -18 -6 -7 22 13 22 -46 0 -8 53 65 8 -79 -1 0 16 13 16 -35 -1 0 73 6 17 -23 1 0 10 27 9
 -16 -6 -7 11 26 10 -44 0 -8 69 61 6 -77 -1 0 200 179 9 -35 -1 0 44 6 21 -23 1 0 37 27 36
 -16 -6 -7 16 26 15 -42 0 -8 120 130 5 -77 -1 0 197 179 11 -33 -1 0 0 13 1 -23 1 0 0 27 1
 -14 -6 -7 55 53 6 -40 0 -8 181 188 5 -75 -1 0 0 8 1 -33 -1 0 56 13 22 -25 1 0 66 54 9
 -14 -6 -7 53 53 8 -38 0 -8 224 234 5 -75 -1 0 78 8 32 -33 -1 0 65 13 18 -25 1 0 63 54 6
 -12 -6 -7 53 61 7 -36 0 -8 201 203 5 -75 -1 0 0 8 1 -33 -1 0 29 13 29 -25 1 0 62 54 11
 -12 -6 -7 56 61 6 -34 0 -8 21 24 20 -73 -1 0 14 30 13 -33 -1 0 40 13 5 -25 1 0 68 54 12
 -10 -6 -7 103 121 4 -32 0 -8 250 254 5 -73 -1 0 50 30 50 -31 -1 0 19 24 18 -27 1 0 46 26 26
 -10 -6 -7 106 121 5 -30 0 -8 153 151 4 -73 -1 0 0 30 1 -31 -1 0 0 24 1 -27 1 0 48 26 30
 -8 -6 -7 126 140 4 -28 0 -8 229 238 5 -71 -1 0 0 2 1 -31 -1 0 14 24 14 -27 1 0 39 26 17
 -8 -6 -7 121 140 5 -26 0 -8 0 1 1 -71 -1 0 70 2 36 -31 -1 0 0 24 1 -27 1 0 4 26 4
 -6 -6 -7 150 163 5 -24 0 -8 105 128 4 -71 -1 0 0 2 1 -29 -1 0 0 19 1 27 -1 0 0 26 1
 -6 -6 -7 143 163 5 -22 0 -8 108 121 4 -71 -1 0 0 2 1 -29 -1 0 0 19 1 -29 1 0 26 18 26
 -4 -6 -7 82 81 5 -56 0 8 61 64 6 -69 -1 0 0 5 1 -29 -1 0 3 19 3 29 -1 0 17 18 16
 -4 -6 -7 73 81 6 -45 -3 -8 390 350 8 -69 -1 0 0 5 1 -29 -1 0 0 19 1 -29 1 0 41 18 40
 -2 -6 -7 138 151 5 -43 -3 -8 143 147 5 -69 -1 0 69 5 31 -27 -1 0 47 28 18 -29 1 0 22 18 22
 0 -6 -7 251 240 6 -41 -3 -8 223 210 5 -69 -1 0 39 5 38 27 1 0 41 28 6 -29 1 0 43 18 24

2-6-7 124 132 5 -39-3-8 319 303 7 -67-1 0 0 3 1 -27-1 0 0 28 1 -31 1 0 0 22 1
 4-6-7 158 140 5 -37-3-8 245 227 6 -67-1 0 50 3 50 -27-1 0 23 28 22 -31 1 0 30 22 30
 6-6-7 208 219 5 -35-3-8 161 156 5 -67-1 0 0 3 1 -27-1 0 31 28 31 -31 1 0 42 22 16
 8-6-7 157 154 5 -33-3-8 81 81 6 -67-1 0 0 3 1 -27-1 0 15 28 15 -31 1 0 24 22 23
 10-6-7 110 118 5 -31-3-8 24 47 24 -65-1 0 0 27 1 -27-1 0 32 28 13 31-1 0 38 22 23
 12-6-7 65 51 6 -29-3-8 20 25 20 -65-1 0 22 27 22 -25-1 0 57 58 13 -33 1 0 47 12 29
 14-6-7 57 65 6 -27-3-8 0 20 1 -65-1 0 68 27 36 -25-1 0 55 58 7 -33 1 0 29 12 29
 16-6-7 27 18 26 -25-3-8 58 49 8 -65-1 0 0 27 1 -25-1 0 65 58 4 33-1 0 21 12 21
 18-6-7 71 80 6 -23-3-8 103 88 5 -63-1 0 0 9 1 -25-1 0 80 58 9 -33 1 0 30 12 29
 20-6-7 64 72 6 -21-3-8 112 89 5 -63-1 0 8 9 8 -25-1 0 65 58 13 -33 1 0 47 12 20
 22-6-7 99 109 5 -19-3-8 68 55 7 -63-1 0 0 9 1 25 1 0 70 58 4 -33 1 0 26 12 25
 24-6-7 66 69 6 -17-3-8 62 51 7 -63-1 0 0 9 1 -25-1 0 77 58 15 35-1 0 26 5 26
 26-6-7 19 30 19 -15-3-8 99 70 5 -61-1 0 27 7 27 23 1 0 41 30 9 -37 1 0 0 14 1
 28-6-7 147 144 5 -13-3-8 89 70 5 -61-1 0 20 7 20 -23-1 0 20 30 20 -37 1 0 29 14 28
 30-6-7 167 165 5 -11-3-8 39 10 15 -61-1 0 33 7 33 -23-1 0 15 30 15 37-1 0 0 14 1
 32-6-7 104 89 5 -9-3-8 49 32 12 -61-1 0 0 7 1 -23-1 0 35 30 9 -37 1 0 27 14 26
 34-6-7 101 103 5 1-3-8 58 61 5 -59-1 0 0 6 1 -23-1 0 0 30 1 -37 1 0 30 14 30
 36-6-7 149 148 5 3-3-8 39 39 7 -59-1 0 91 6 19 -23-1 0 0 30 1 -37 1 0 40 14 14
 38-6-7 103 91 5 5-3-8 76 87 4 -59-1 0 26 6 25 -23-1 0 33 30 17 -39 1 0 0 14 1
 40-6-7 66 75 7 7-3-8 51 68 6 -59-1 0 73 6 28 21 1 0 64 78 4 -39 1 0 0 14 1
 42-6-7 17 16 17 9-3-8 37 50 8 -57-1 0 58 42 21 -21-1 0 57 78 6 -39 1 0 0 14 1
 44-6-7 22 37 22 11-3-8 74 68 5 -57-1 0 36 42 35 -21-1 0 70 78 15 -39 1 0 0 14 1
 46-6-7 46 38 9 13-3-8 194 196 5 -57-1 0 73 42 26 -21-1 0 63 78 11 -39 1 0 38 14 37
 48-6-7 37 41 18 15-3-8 88 84 5 -57-1 0 47 42 46 -21-1 0 52 78 9 -41 1 0 53 37 27
 50-6-7 69 73 7 17-3-8 211 212 5 -57-1 0 47 42 17 -21-1 0 72 78 3 -41 1 0 37 37 24
 -18 6-8 23 23 22 -18-6-8 0 27 1 -55-1 0 0 16 1 -21-1 0 68 78 8 -41 1 0 0 37 1
 -16 6-8 0 35 1 -16-6-8 35 40 18 -55-1 0 26 16 25 -19-1 0 45 52 11 -41 1 0 0 37 1

-14 6 -8 20 29 19 -14 -6 -8 25 33 24 -55 -1 0 81 16 13 -19 -1 0 46 52 26 -41 1 0 47 37 18

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 19

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-43	1	0	36	4	36	-78	-2	0	0	9	1	-26	-2	0	38	1	38	-24	2	0	5	12	5	-60	2	0	123	98	11
-43	1	0	49	4	16	-78	-2	0	15	9	14	-26	-2	0	27	1	24	-24	2	0	0	12	1	-60	2	0	109	98	12
-43	1	0	0	4	1	-78	-2	0	0	9	1	-26	-2	0	29	1	28	-24	2	0	0	12	1	-60	2	0	85	98	13
-43	1	0	0	4	1	-76	-2	0	45	9	44	-24	-2	0	0	13	1	24	-2	0	0	12	1	-60	2	0	103	98	10
-43	1	0	67	4	11	-76	-2	0	0	9	1	-24	-2	0	0	13	1	-26	2	0	27	1	26	-60	2	0	108	98	10
-45	1	0	167	163	8	-76	-2	0	38	9	38	-24	-2	0	0	13	1	26	-2	0	38	1	31	-62	2	0	94	76	13
-45	1	0	172	163	8	-74	-2	0	71	2	25	-24	-2	0	23	13	22	-26	2	0	26	1	26	-62	2	0	106	76	22
-45	1	0	172	163	8	-74	-2	0	0	2	1	-24	-2	0	65	13	25	-26	2	0	16	1	15	-62	2	0	101	76	13
-45	1	0	168	163	9	-74	-2	0	35	2	35	-22	-2	0	0	10	1	-26	2	0	18	1	18	-62	2	0	74	76	18
-47	1	0	67	62	14	-72	-2	0	25	38	25	-22	-2	0	31	10	31	-28	2	0	0	20	1	-62	2	0	84	76	12
-47	1	0	57	62	11	-72	-2	0	40	38	40	-22	-2	0	37	10	36	-28	2	0	0	20	1	-64	2	0	219	207	11
-47	1	0	85	62	11	-72	-2	0	0	38	1	-22	-2	0	0	10	1	28	-2	0	0	20	1	-64	2	0	247	207	9
-47	1	0	80	62	10	-70	-2	0	10	28	9	-22	-2	0	0	10	1	-28	2	0	0	20	1	-64	2	0	236	207	10
-49	1	0	207	225	9	-70	-2	0	0	28	1	22	2	0	0	10	1	-28	2	0	44	20	19	-66	2	0	0	4	1
-49	1	0	221	225	8	-70	-2	0	24	28	24	-20	-2	0	19	18	18	32	-2	0	148	162	7	-66	2	0	20	4	19
-49	1	0	211	225	9	-68	-2	0	63	62	18	-20	-2	0	85	18	17	-32	2	0	153	162	7	-66	2	0	0	4	1
-49	1	0	199	225	10	-68	-2	0	82	62	20	-20	-2	0	28	18	28	-32	2	0	140	162	8	-66	2	0	0	4	1
-51	1	0	0	13	1	-68	-2	0	88	62	14	-20	-2	0	0	18	1	-32	2	0	149	162	6	-66	2	0	0	4	1
-51	1	0	37	13	36	-66	-2	0	27	4	27	-20	-2	0	19	18	18	-34	2	0	44	30	33	-68	2	0	67	58	26
-51	1	0	39	13	38	-66	-2	0	18	4	17	20	2	0	50	18	12	-34	2	0	53	30	16	-68	2	0	71	58	30
-51	1	0	0	13	1	-66	-2	0	31	4	30	18	2	0	38	8	21	-34	2	0	23	30	22	-68	2	0	85	58	29
-51	1	0	45	13	45	-64	-2	0	231	220	8	-18	-2	0	25	8	25	34	-2	0	43	30	31	-68	2	0	42	58	42

-51 1 0 0 13 1 -64 -2 0 197 220 10 -18 -2 0 31 8 31 -36 2 0 0 1 1 -70 2 0 33 27 33
 -53 1 0 64 88 22 -62 -2 0 87 81 10 -18 -2 0 38 8 38 36 -2 0 34 1 34 -70 2 0 0 27 1
 -53 1 0 81 88 9 -62 -2 0 85 81 11 -18 -2 0 0 8 1 -36 2 0 0 1 1 -70 2 0 0 27 1
 -53 1 0 109 88 10 -62 -2 0 80 81 15 -18 -2 0 0 8 1 -36 2 0 0 1 1 -70 2 0 0 27 1
 -53 1 0 79 88 12 -60 -2 0 99 105 10 -16 -2 0 32 2 32 -38 2 0 8 10 8 -72 2 0 47 36 46
 -53 1 0 81 88 12 -60 -2 0 110 105 9 -16 -2 0 0 2 1 -38 2 0 43 10 42 -72 2 0 59 36 28
 -53 1 0 69 88 13 -60 -2 0 119 105 8 -16 -2 0 0 2 1 38 -2 0 0 10 1 -72 2 0 43 36 43
 -55 1 0 0 16 1 -58 -2 0 0 3 1 -16 -2 0 23 2 22 -38 2 0 27 10 27 -72 2 0 73 36 29
 -55 1 0 26 16 25 -58 -2 0 0 3 1 -16 -2 0 0 2 1 -38 2 0 0 10 1 -74 2 0 30 2 29
 -55 1 0 0 16 1 -58 -2 0 18 3 18 16 2 0 12 2 11 -40 2 0 33 38 33 -74 2 0 47 2 47
 -55 1 0 31 16 31 -56 -2 0 63 40 17 -14 -2 0 0 2 1 -40 2 0 62 38 14 -74 2 0 98 2 24
 -55 1 0 16 16 16 -56 -2 0 38 40 38 -14 -2 0 0 2 1 40 -2 0 49 38 20 -74 2 0 53 2 52
 -55 1 0 0 16 1 -56 -2 0 62 40 27 -14 -2 0 7 2 7 -40 2 0 0 38 1 -76 2 0 25 8 24
 -57 1 0 42 40 41 -56 -2 0 57 40 26 -14 -2 0 0 2 1 -40 2 0 0 38 1 -76 2 0 0 8 1
 -57 1 0 16 40 16 -54 -2 0 21 11 21 -14 -2 0 0 2 1 -40 2 0 76 38 18 -76 2 0 95 8 24
 -57 1 0 46 40 32 -54 -2 0 14 11 14 -12 -2 0 0 14 1 -42 2 0 30 32 30 -76 2 0 8 8 8
 -57 1 0 43 40 43 -54 -2 0 48 11 47 -12 -2 0 0 14 1 -42 2 0 0 32 1 -78 2 0 0 8 1
 -57 1 0 62 40 34 -54 -2 0 0 11 1 -12 -2 0 0 14 1 42 -2 0 26 32 25 -78 2 0 47 8 47
 -57 1 0 44 40 28 -52 -2 0 33 5 33 12 2 0 7 14 7 -42 2 0 54 32 26 -72 -4 0 85 31 14
 -59 1 0 52 5 48 -52 -2 0 15 5 15 -12 -2 0 28 14 28 -42 2 0 39 32 31 -72 -4 0 0 31 1
 -59 1 0 30 5 29 -52 -2 0 74 5 20 -10 -2 0 38 20 29 -42 2 0 78 32 23 -70 -4 0 86 32 13
 -59 1 0 0 5 1 -52 -2 0 0 5 1 -10 -2 0 51 20 15 -44 2 0 0 17 1 -70 -4 0 0 32 1
 -59 1 0 0 5 1 -52 -2 0 60 5 39 8 2 0 0 11 1 -44 2 0 0 17 1 -68 -4 0 57 16 43
 -59 1 0 37 5 37 -50 -2 0 35 37 35 -8 -2 0 30 11 30 -44 2 0 34 17 34 -68 -4 0 30 16 29
 -61 1 0 0 7 1 -50 -2 0 0 37 1 -8 -2 0 29 11 29 -44 2 0 0 17 1 -66 -4 0 40 17 39
 -61 1 0 30 7 30 -50 -2 0 90 37 15 -8 -2 0 0 11 1 -44 2 0 0 17 1 -66 -4 0 0 17 1
 -61 1 0 0 7 1 -50 -2 0 38 37 38 6 2 0 0 1 1 -46 2 0 65 2 24 -64 -4 0 78 21 14

-61 1 0 59 7 33 -48-2 0 62 14 25 -6-2 0 34 1 34 -46 2 0 0 2 1 -64-4 0 0 21 1
 -63 1 0 44 9 43 -48-2 0 38 14 38 -6-2 0 0 1 1 -46 2 0 26 2 26 -62-4 0 24 19 23
 -63 1 0 18 9 17 -48-2 0 97 14 13 -6-2 0 26 1 25 -46 2 0 0 2 1 -62-4 0 60 19 34
 -63 1 0 0 9 1 -46-2 0 0 3 1 4 2 0 27 6 27 -46 2 0 49 2 48 -62-4 0 24 19 24
 -63 1 0 56 9 52 -46-2 0 40 3 39 -4-2 0 46 6 18 -48 2 0 40 12 39 -60-4 0 8 10 8
 -65 1 0 0 26 1 -46-2 0 68 3 26 -4-2 0 0 6 1 -48 2 0 33 12 32 -60-4 0 0 10 1
 -65 1 0 11 26 10 -44-2 0 43 19 37 -4-2 0 6 6 5 -48 2 0 0 12 1 -60-4 0 38 10 37
 -65 1 0 44 26 44 -44-2 0 83 19 14 2 2 0 0 4 1 -48 2 0 10 12 10 -58-4 0 0 6 1
 -65 1 0 0 26 1 -44-2 0 20 19 19 -2-2 0 0 4 1 -48 2 0 33 12 33 -58-4 0 0 6 1
 -67 1 0 44 3 44 -42-2 0 57 35 25 -2-2 0 0 4 1 -48 2 0 0 12 1 -58-4 0 44 6 44
 -67 1 0 0 3 1 -42-2 0 47 35 24 -2-2 0 0 4 1 -50 2 0 0 34 1 -56-4 0 60 14 33
 -67 1 0 38 3 37 -42-2 0 59 35 30 -2 2 0 0 4 1 -50 2 0 0 34 1 -56-4 0 54 14 52
 -67 1 0 0 3 1 -40-2 0 6 42 6 2-2 0 0 4 1 -50 2 0 0 34 1 -56-4 0 16 14 16
 -69 1 0 24 4 23 -40-2 0 28 42 27 4-2 0 0 6 1 -50 2 0 0 34 1 -54-4 0 0 3 1
 -69 1 0 72 4 27 -40-2 0 86 42 17 -4 2 0 0 6 1 -50 2 0 0 34 1 -54-4 0 70 3 25
 -69 1 0 0 4 1 -38-2 0 0 11 1 -6 2 0 23 1 23 -50 2 0 0 34 1 -54-4 0 0 3 1
 -69 1 0 50 4 39 -38-2 0 24 11 24 6-2 0 24 1 23 -52 2 0 0 5 1 -52-4 0 0 1 1
 -71 1 0 0 2 1 -38-2 0 6 11 5 8-2 0 0 10 1 -52 2 0 0 5 1 -52-4 0 6 1 5
 -71 1 0 0 2 1 -38-2 0 0 11 1 -8 2 0 0 10 1 -52 2 0 12 5 12 -52-4 0 0 1 1
 -71 1 0 6 2 6 -36-2 0 22 1 21 -10 2 0 46 18 13 -52 2 0 8 5 7 -50-4 0 0 24 1
 -71 1 0 92 2 22 -36-2 0 0 1 1 10-2 0 46 18 16 -52 2 0 89 5 24 -50-4 0 44 24 44
 -73 1 0 36 29 35 -36-2 0 34 1 33 12-2 0 19 12 18 -52 2 0 0 5 1 -50-4 0 99 24 16
 -73 1 0 61 29 51 -36-2 0 0 1 1 -12 2 0 30 12 30 -54 2 0 0 11 1 -50-4 0 0 24 1
 -73 1 0 46 29 46 -34-2 0 37 33 37 14-2 0 0 2 1 -54 2 0 0 11 1 -48-4 0 0 25 1
 -73 1 0 0 29 1 -34-2 0 0 33 1 -14 2 0 14 2 14 -54 2 0 51 11 50 -48-4 0 62 25 27
 -75 1 0 96 7 26 -34-2 0 66 33 22 -16 2 0 8 2 8 -54 2 0 0 11 1 -48-4 0 0 25 1
 -75 1 0 46 7 45 -34-2 0 52 33 24 16-2 0 28 2 27 -54 2 0 0 11 1 -48-4 0 82 25 29


```

-75 1 0 0 7 1 -32 -2 0 143 180 9 18 -2 0 0 7 1 -54 2 0 49 11 48 -46 -4 0 0 8 1
-75 1 0 89 7 14 -32 -2 0 171 180 6 -18 2 0 0 7 1 -56 2 0 52 38 28 -46 -4 0 0 8 1
-77 1 0 205 174 10 -32 -2 0 157 180 7 -18 2 0 0 7 1 -56 2 0 42 38 42 -46 -4 0 0 8 1
-77 1 0 198 174 9 -32 -2 0 175 180 8 -20 2 0 39 16 23 -56 2 0 72 38 34 -44 -4 0 8 12 8
-77 1 0 206 174 11 -32 -2 0 177 180 8 20 -2 0 18 16 18 -56 2 0 40 38 39 -44 -4 0 30 12 30
-77 1 0 188 174 11 -28 -2 0 0 23 1 -20 2 0 0 16 1 -56 2 0 31 38 30 -44 -4 0 58 12 31
-79 1 0 0 12 1 -28 -2 0 0 23 1 -20 2 0 0 16 1 -58 2 0 0 2 1 -44 -4 0 0 12 1
-79 1 0 6 12 5 -28 -2 0 36 23 35 -22 2 0 4 9 3 -58 2 0 0 2 1 -44 -4 0 0 12 1
-79 1 0 47 12 47 -28 -2 0 0 23 1 -22 2 0 30 9 30 -58 2 0 0 2 1 -42 -4 0 84 18 29
-81 1 0 88 98 15 -26 -2 0 0 1 1 -22 2 0 22 9 21 -58 2 0 37 2 36 -42 -4 0 32 18 32
-81 1 0 91 98 18 -26 -2 0 11 1 11 22 -2 0 12 9 11 -58 2 0 0 2 1 -42 -4 0 83 18 26

```

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 20

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-42	-4	0	0	18	1	4	4	0	0	13	1	-36	4	0	27	34	26	-51	-5	0	0	14	1	-7	-5	0	40	17	39
-42	-4	0	27	18	26	-2	-4	0	0	4	1	-36	4	0	50	34	22	-49	-5	0	200	214	9	-7	-5	0	42	17	31
-40	-4	0	0	50	1	2	4	0	30	4	29	38	-4	0	0	0	1	-47	-5	0	43	25	42	7	5	0	16	17	16
-40	-4	0	65	50	24	-2	-4	0	0	4	1	-38	4	0	28	0	27	-47	-5	0	0	25	1	-7	-5	0	0	17	1
-40	-4	0	40	50	26	-2	-4	0	0	4	1	-38	4	0	0	0	1	-47	-5	0	60	25	47	-7	-5	0	57	17	23
-40	-4	0	86	50	16	-2	-4	0	26	4	25	-38	4	0	0	0	1	-47	-5	0	0	25	1	-5	-5	0	57	11	24
-40	-4	0	89	50	30	0	-4	0	198	173	8	-40	4	0	31	44	30	-45	-5	0	129	157	9	-5	-5	0	34	11	33
-38	-4	0	0	0	1	0	-4	0	204	173	7	-40	4	0	65	44	20	-45	-5	0	149	157	12	5	5	0	0	11	1
-38	-4	0	46	0	45	0	4	0	184	173	7	40	-4	0	46	44	46	-45	-5	0	140	157	10	-5	-5	0	0	11	1
-38	-4	0	49	0	41	0	-4	0	194	173	8	-40	4	0	40	44	39	-45	-5	0	143	157	8	-5	-5	0	0	11	1
-36	-4	0	92	39	14	0	-4	0	188	173	9	-42	4	0	0	16	1	-43	-5	0	0	4	1	3	5	0	0	24	1

-36 -4 0 19 39 18 2 -4 0 0 4 1 -42 4 0 34 16 34 -43 -5 0 25 4 25 -3 -5 0 0 24 1
 -36 -4 0 85 39 16 2 -4 0 25 4 25 42 -4 0 37 16 36 -43 -5 0 30 4 30 -3 -5 0 7 24 6
 -34 -4 0 81 12 32 2 -4 0 0 4 1 -42 4 0 58 16 22 -43 -5 0 0 4 1 -3 -5 0 39 24 39
 -34 -4 0 0 12 1 -2 4 0 0 4 1 -42 4 0 30 16 30 -41 -5 0 28 31 27 -3 -5 0 61 24 24
 -34 -4 0 7 12 6 2 -4 0 5 4 4 -44 4 0 0 10 1 -41 -5 0 54 31 34 1 5 0 45 20 41
 -32 -4 0 334 307 12 4 -4 0 37 13 37 -44 4 0 29 10 28 -41 -5 0 0 31 1 -1 -5 0 0 20 1
 -32 -4 0 313 307 13 4 -4 0 0 13 1 44 -4 0 32 10 32 -41 -5 0 61 31 17 -1 -5 0 14 20 13
 -32 -4 0 317 307 12 -4 4 0 0 13 1 -44 4 0 17 10 16 -39 -5 0 47 10 21 -1 -5 0 45 20 45
 -28 -4 0 27 54 26 4 -4 0 0 13 1 -44 4 0 49 10 38 -39 -5 0 0 10 1 -1 -5 0 46 20 43
 -28 -4 0 69 54 11 6 -4 0 5 0 4 -46 4 0 0 7 1 -39 -5 0 34 10 34 1 -5 0 0 20 1
 -28 -4 0 86 54 12 6 -4 0 0 0 1 -46 4 0 5 7 5 -39 -5 0 29 10 29 -1 5 0 55 20 23
 -28 -4 0 70 54 12 6 -4 0 12 0 12 46 -4 0 36 7 35 -37 -5 0 60 20 60 1 -5 0 0 20 1
 -28 -4 0 87 54 27 -6 4 0 0 0 1 -46 4 0 0 7 1 -37 -5 0 0 20 1 1 -5 0 47 20 34
 -26 -4 0 0 13 1 -8 4 0 41 2 40 -46 4 0 0 7 1 -37 -5 0 47 20 46 1 -5 0 30 20 29
 -26 -4 0 0 13 1 8 -4 0 0 2 1 -48 4 0 52 23 52 -37 -5 0 90 20 23 3 -5 0 32 24 31
 -26 -4 0 0 13 1 8 -4 0 0 2 1 -48 4 0 0 23 1 -35 -5 0 0 20 1 3 -5 0 71 24 19
 -26 -4 0 12 13 11 8 -4 0 0 2 1 48 -4 0 81 23 13 -35 -5 0 28 20 27 -3 5 0 0 24 1
 -26 -4 0 53 13 34 10 -4 0 29 21 28 -48 4 0 23 23 23 -35 -5 0 36 20 35 3 -5 0 0 24 1
 -24 -4 0 0 21 1 10 -4 0 0 21 1 -50 4 0 69 21 20 -35 -5 0 59 20 58 5 -5 0 19 11 18
 -24 -4 0 0 21 1 10 -4 0 33 21 33 -50 4 0 56 21 49 -33 -5 0 41 14 41 5 -5 0 51 11 51
 -24 -4 0 29 21 29 -10 4 0 46 21 23 50 -4 0 85 21 22 -33 -5 0 89 14 28 -5 5 0 55 11 24
 -24 -4 0 40 21 40 -10 4 0 32 21 31 -50 4 0 0 21 1 -33 -5 0 29 14 29 5 -5 0 53 11 28
 -24 -4 0 0 21 1 -12 4 0 0 10 1 -52 4 0 0 1 1 -33 -5 0 18 14 17 5 -5 0 48 11 47
 -22 -4 0 43 18 43 -12 4 0 0 10 1 -52 4 0 0 1 1 -31 -5 0 43 10 42 7 -5 0 0 17 1
 -22 -4 0 0 18 1 12 -4 0 0 10 1 52 -4 0 63 1 30 -31 -5 0 23 10 23 -7 5 0 0 17 1
 -22 -4 0 68 18 33 12 -4 0 0 10 1 -52 4 0 38 1 37 -31 -5 0 0 10 1 7 -5 0 0 17 1
 -22 -4 0 27 18 27 12 -4 0 35 10 35 -54 4 0 9 3 9 -29 -5 0 24 11 23 7 -5 0 0 17 1

-20 -4 0 0 8 1 14 -4 0 31 18 31 -54 4 0 46 3 46 -29 -5 0 0 11 1 -9 5 0 27 38 26
-20 -4 0 0 8 1 14 -4 0 0 18 1 -56 4 0 33 12 32 -29 -5 0 24 11 23 9 -5 0 0 38 1
-20 -4 0 0 8 1 -14 4 0 18 18 17 -56 4 0 32 12 32 -29 -5 0 30 11 29 9 -5 0 77 38 25
-20 -4 0 0 8 1 -14 4 0 14 18 13 -58 4 0 9 5 9 -29 -5 0 58 11 28 9 -5 0 33 38 32
-18 -4 0 18 10 18 14 -4 0 0 18 1 -58 4 0 0 5 1 -27 -5 0 42 19 42 -9 5 0 23 38 22
-18 -4 0 69 10 29 -16 4 0 0 8 1 -60 4 0 90 9 46 -27 -5 0 24 19 24 11 -5 0 0 51 1
-18 -4 0 25 10 24 16 -4 0 21 8 21 -60 4 0 0 9 1 -27 -5 0 22 19 22 -11 5 0 55 51 22
-18 -4 0 0 10 1 -16 4 0 5 8 5 -60 4 0 44 9 44 -27 -5 0 58 19 57 11 -5 0 77 51 19
-18 -4 0 48 10 23 16 -4 0 0 8 1 -62 4 0 32 17 31 -27 -5 0 0 19 1 11 -5 0 53 51 20
-16 -4 0 0 8 1 18 -4 0 0 9 1 -62 4 0 0 17 1 -25 -5 0 0 17 1 -11 5 0 0 51 1
-16 -4 0 0 8 1 18 -4 0 13 9 13 -62 4 0 115 17 19 -25 -5 0 17 17 17 -13 5 0 71 80 11
-16 -4 0 0 8 1 -18 4 0 45 9 25 -64 4 0 125 19 33 -25 -5 0 37 17 37 -13 5 0 73 80 11
-16 -4 0 38 8 37 -18 4 0 12 9 11 -64 4 0 0 19 1 -25 -5 0 42 17 42 13 -5 0 68 80 11
-14 -4 0 0 20 1 20 -4 0 0 7 1 -66 4 0 0 15 1 -23 -5 0 51 20 51 13 -5 0 74 80 12
-14 -4 0 31 20 31 -20 4 0 0 7 1 -66 4 0 105 15 39 -23 -5 0 61 20 61 15 -5 0 224 218 9
-14 -4 0 0 20 1 -20 4 0 38 7 38 -66 4 0 0 15 1 -23 -5 0 50 20 40 -15 5 0 223 218 8
-14 -4 0 23 20 23 20 -4 0 0 7 1 -68 4 0 0 14 1 -23 -5 0 31 20 30 15 -5 0 220 218 9
-14 -4 0 0 20 1 -20 4 0 0 7 1 -68 4 0 52 14 36 -21 -5 0 81 38 31 -15 5 0 214 218 7
-12 -4 0 0 11 1 -22 4 0 29 16 29 -68 4 0 122 14 18 -21 -5 0 76 38 20 17 -5 0 133 159 9
-12 -4 0 55 11 26 22 -4 0 0 16 1 -70 4 0 120 29 19 -21 -5 0 77 38 14 17 -5 0 139 159 7
-12 -4 0 65 11 15 -22 4 0 37 16 37 -70 4 0 24 29 24 -21 -5 0 28 38 28 -17 5 0 142 159 6
-12 -4 0 0 11 1 22 -4 0 8 16 7 -70 4 0 6 29 5 -19 -5 0 62 29 32 -17 5 0 144 159 8
-12 -4 0 29 11 29 -22 4 0 0 16 1 -72 4 0 0 29 1 -19 -5 0 60 29 26 19 -5 0 16 26 16
-12 -4 0 49 11 28 -24 4 0 30 19 29 -72 4 0 33 29 32 -19 -5 0 81 29 30 19 -5 0 38 26 37
12 4 0 27 11 27 24 -4 0 43 19 43 -67 -5 0 0 2 1 -19 -5 0 16 29 15 -19 5 0 26 26 26
-10 -4 0 0 23 1 -24 4 0 40 19 16 -67 -5 0 0 2 1 -17 -5 0 165 174 8 -19 5 0 36 26 35
-10 -4 0 48 23 24 -24 4 0 51 19 22 -65 -5 0 6 40 6 -17 -5 0 146 174 9 21 -5 0 36 34 35

-10	-4	0	60	23	22	-26	4	0	36	11	35	-65	-5	0	0	40	1	-17	-5	0	152	174	8	21	-5	0	42	34	41
-10	-4	0	45	23	22	-26	4	0	0	11	1	-65	-5	0	26	40	25	-17	-5	0	142	174	12	-21	5	0	0	34	1
10	4	0	40	23	35	-26	4	0	0	11	1	-63	-5	0	0	8	1	-15	-5	0	232	237	10	-21	5	0	36	34	36
-10	-4	0	26	23	25	26	-4	0	0	11	1	-63	-5	0	0	8	1	-15	-5	0	216	237	9	-21	5	0	43	34	19
-10	-4	0	35	23	34	28	-4	0	86	48	17	-63	-5	0	0	8	1	-15	-5	0	221	237	10	23	-5	0	0	18	1
-8	-4	0	0	2	1	-28	4	0	30	48	29	-61	-5	0	11	21	11	-15	-5	0	219	237	9	-23	5	0	39	18	21
-8	-4	0	31	2	30	-28	4	0	62	48	19	-61	-5	0	46	21	46	-13	-5	0	87	86	30	23	-5	0	12	18	11
-8	-4	0	56	2	18	-28	4	0	54	48	19	-61	-5	0	34	21	34	-13	-5	0	64	86	11	-23	5	0	0	18	1
-8	-4	0	0	2	1	-30	4	0	82	6	18	-59	-5	0	61	19	38	-13	-5	0	93	86	17	-23	5	0	23	18	23
8	4	0	0	2	1	30	-4	0	89	6	18	-59	-5	0	28	19	27	-13	-5	0	76	86	10	-25	5	0	0	15	1
-8	-4	0	20	2	19	-30	4	0	73	6	10	-59	-5	0	0	19	1	-13	-5	0	91	86	11	-25	5	0	0	15	1
6	4	0	0	0	1	-30	4	0	66	6	13	-57	-5	0	0	30	1	-11	-5	0	76	54	19	25	-5	0	24	15	24
-6	-4	0	0	0	1	32	-4	0	291	269	10	-57	-5	0	51	30	50	-11	-5	0	90	54	17	25	-5	0	0	15	1
-6	-4	0	0	0	1	-32	4	0	292	269	11	-57	-5	0	44	30	43	-11	-5	0	44	54	43	-25	5	0	0	15	1
-6	-4	0	62	0	18	-32	4	0	286	269	12	-55	-5	0	0	2	1	-11	-5	0	41	54	40	-27	5	0	0	17	1
-6	-4	0	26	0	26	-32	4	0	268	269	10	-55	-5	0	0	2	1	-11	-5	0	31	54	30	-27	5	0	0	17	1
-6	-4	0	0	0	1	34	-4	0	43	11	42	-55	-5	0	0	2	1	-9	-5	0	34	41	34	-27	5	0	0	17	1
-4	-4	0	0	13	1	-34	4	0	37	11	37	-53	-5	0	67	85	30	-9	-5	0	15	41	15	27	-5	0	0	17	1
-4	-4	0	48	13	30	-34	4	0	37	11	37	-53	-5	0	108	85	18	-9	-5	0	0	41	1	29	-5	0	52	9	51
-4	-4	0	0	13	1	-34	4	0	74	11	17	-53	-5	0	90	85	10	-9	-5	0	45	41	35	-29	5	0	5	9	5
-4	-4	0	11	13	10	36	-4	0	72	34	12	-51	-5	0	31	14	30	-9	-5	0	8	41	8	-29	5	0	0	9	1
-4	-4	0	29	13	28	-36	4	0	76	34	17	-51	-5	0	45	14	45	-7	-5	0	0	17	1	-31	5	0	0	9	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

31 -5 0 0 9 1 -19 -7 0 27 35 26 -49 7 0 98 114 13 16 -8 0 0 2 1 -18 -8 1 34 2 33

-31 5 0 0 9 1 -19-7 0 0 35 1 -51 7 0 0 2 1 16-8 0 0 2 1 -18-8 1 44 2 43
 -33 5 0 60 12 24 -17-7 0 257 240 10 -53 7 0 34 39 33 -18 8 0 47 8 46 -18-8 1 0 2 1
 33-5 0 56 12 42 -17-7 0 292 240 11 -40-8 0 0 14 1 18-8 0 0 8 1 -20-8 1 22 18 22
 -33 5 0 51 12 50 -17-7 0 251 240 13 -40-8 0 65 14 64 18-8 0 30 8 29 -20-8 1 0 18 1
 -33 5 0 0 12 1 -17-7 0 268 240 11 -38-8 0 0 11 1 -20 8 0 0 13 1 -20-8 1 0 18 1
 35-5 0 68 18 28 -15-7 0 109 88 12 -38-8 0 49 11 49 20-8 0 0 13 1 -20-8 1 0 18 1
 -35 5 0 80 18 21 -15-7 0 122 88 15 -36-8 0 33 25 32 20-8 0 21 13 20 -22-8 1 45 15 45
 -35 5 0 29 18 28 -15-7 0 116 88 13 -36-8 0 18 25 18 22-8 0 31 2 30 -22-8 1 62 15 39
 -35 5 0 23 18 22 -15-7 0 137 88 19 -34-8 0 61 1 61 -22 8 0 34 2 33 -22-8 1 0 15 1
 -37 5 0 0 17 1 -13-7 0 122 94 30 -34-8 0 48 1 47 24-8 0 15 23 14 -22-8 1 40 15 39
 -37 5 0 0 17 1 -13-7 0 164 94 15 -32-8 0 176 191 11 -24 8 0 40 23 40 -24-8 1 0 4 1
 37-5 0 0 17 1 -13-7 0 111 94 16 -32-8 0 215 191 13 -26 8 0 8 6 7 -24-8 1 30 4 29
 -37 5 0 35 17 34 -13-7 0 109 94 12 -32-8 0 199 191 14 -28 8 0 0 33 1 -24-8 1 88 4 52
 39-5 0 0 9 1 -11-7 0 20 10 19 -30-8 0 47 42 46 -30 8 0 23 38 22 -24-8 1 43 4 42
 -39 5 0 0 9 1 -11-7 0 0 10 1 -30-8 0 37 42 36 -32 8 0 147 173 11 -26-8 1 68 42 29
 -39 5 0 53 9 33 -11-7 0 106 10 27 -30-8 0 0 42 1 -34 8 0 0 1 1 -26-8 1 0 42 1
 -39 5 0 18 9 17 -11-7 0 0 10 1 -28-8 0 31 36 30 -36 8 0 31 22 30 -26-8 1 48 42 47
 -41 5 0 0 28 1 -9-7 0 35 21 34 -28-8 0 21 36 21 -38 8 0 0 10 1 -26-8 1 23 42 23
 -43 5 0 0 4 1 -9-7 0 0 21 1 -28-8 0 0 36 1 -40 8 0 35 12 34 -28-8 1 16 25 15
 -45 5 0 118 138 10 -9-7 0 52 21 52 -26-8 0 0 6 1 -38 8-1 0 11 1 -28-8 1 86 25 61
 -47 5 0 0 22 1 -9-7 0 34 21 34 -26-8 0 0 6 1 -38 8-1 39 11 38 -28-8 1 0 25 1
 -49 5 0 207 188 11 -7-7 0 57 11 42 -26-8 0 43 6 42 -36 8-1 46 22 46 -28-8 1 27 25 27
 -51 5 0 0 12 1 -7-7 0 36 11 36 -24-8 0 0 24 1 -36 8-1 0 22 1 -30-8 1 129 156 15
 -51 5 0 29 12 29 -7-7 0 50 11 49 -24-8 0 0 24 1 -34 8-1 84 74 21 -30-8 1 150 156 11
 -53 5 0 72 75 30 -7-7 0 8 11 7 -24-8 0 52 24 51 -34 8-1 86 74 16 -30-8 1 128 156 10
 -53 5 0 71 75 22 -5-7 0 100 19 37 -24-8 0 114 24 40 34-8 1 60 74 35 -30-8 1 166 156 15
 -55 5 0 0 2 1 -5-7 0 12 19 12 -22-8 0 0 2 1 32-8 1 61 66 33 -32-8 1 119 121 15

-55 5 0 5 2 5 -5 -7 0 39 19 39 -22 -8 0 118 2 31 -32 8 -1 60 66 37 -32 -8 1 115 121 12
-57 5 0 46 26 46 -5 -7 0 0 19 1 -22 -8 0 0 2 1 30 -8 1 126 138 11 -34 -8 1 79 68 30
-57 5 0 0 26 1 -3 -7 0 0 3 1 -22 -8 0 0 2 1 -30 8 -1 130 138 13 -34 -8 1 91 68 24
-59 5 0 0 16 1 -3 -7 0 0 3 1 -20 -8 0 101 14 40 26 -8 1 25 4 24 -36 -8 1 0 15 1
-59 5 0 46 16 45 -3 -7 0 93 3 14 -20 -8 0 0 14 1 24 -8 1 46 4 46 -36 -8 1 0 15 1
-61 5 0 0 19 1 -3 -7 0 0 3 1 -20 -8 0 0 14 1 24 -8 1 0 4 1 -38 -8 1 12 28 12
-61 5 0 0 19 1 -3 -7 0 64 3 64 -20 -8 0 17 14 17 22 -8 1 0 5 1 -51 7 -1 0 20 1
-63 5 0 15 7 14 -1 -7 0 0 16 1 -18 -8 0 0 8 1 22 -8 1 61 5 60 -49 7 -1 73 84 24
-63 5 0 30 7 30 -1 -7 0 0 16 1 -18 -8 0 0 8 1 20 -8 1 0 23 1 -47 7 -1 90 104 14
-65 5 0 0 36 1 -1 -7 0 77 16 25 -18 -8 0 0 8 1 20 -8 1 31 23 31 -47 7 -1 114 104 8
-65 5 0 39 36 39 -1 -7 0 0 16 1 -18 -8 0 0 8 1 18 -8 1 57 15 57 -45 7 -1 102 98 9
-67 5 0 0 2 1 -1 -7 0 0 16 1 -16 -8 0 65 2 64 18 -8 1 15 15 15 -45 7 -1 96 98 13
-67 5 0 0 2 1 1 -7 0 89 16 15 -16 -8 0 0 2 1 16 -8 1 43 14 42 -43 7 -1 31 34 31
-67 5 0 134 2 18 1 -7 0 20 16 19 -16 -8 0 14 2 14 16 -8 1 0 14 1 -43 7 -1 0 34 1
-49 -7 0 146 129 11 1 -7 0 31 16 30 -16 -8 0 76 2 76 14 -8 1 0 16 1 -41 7 -1 0 27 1
-49 -7 0 174 129 15 1 -7 0 0 16 1 -14 -8 0 0 17 1 14 -8 1 24 16 24 -41 7 -1 48 27 29
-47 -7 0 127 109 17 3 -7 0 0 3 1 -14 -8 0 0 17 1 12 -8 1 10 4 9 -39 7 -1 0 0 1
-47 -7 0 119 109 12 3 -7 0 47 3 47 -14 -8 0 43 17 42 12 -8 1 0 4 1 -39 7 -1 42 0 41
-45 -7 0 155 128 11 3 -7 0 26 3 25 -14 -8 0 0 17 1 10 -8 1 14 10 14 -37 7 -1 44 19 44
-45 -7 0 166 128 15 3 -7 0 0 3 1 -12 -8 0 76 14 60 10 -8 1 21 10 21 -37 7 -1 18 19 17
-43 -7 0 48 16 47 -3 7 0 68 3 29 -12 -8 0 0 14 1 8 -8 1 58 16 58 -35 7 -1 0 25 1
-43 -7 0 26 16 25 5 -7 0 30 19 29 -12 -8 0 56 14 56 8 -8 1 39 16 38 -35 7 -1 0 25 1
-41 -7 0 58 36 57 5 -7 0 0 19 1 -12 -8 0 19 14 19 6 -8 1 0 17 1 33 -7 1 33 21 33
-41 -7 0 107 36 36 -5 7 0 42 19 41 -10 -8 0 44 21 43 6 -8 1 0 17 1 -33 7 -1 0 21 1
-39 -7 0 11 18 10 5 -7 0 29 19 28 -10 -8 0 45 21 45 4 -8 1 0 24 1 -33 7 -1 15 21 14
-39 -7 0 0 18 1 5 -7 0 90 19 14 -10 -8 0 0 21 1 4 -8 1 17 24 17 31 -7 1 8 9 7
-39 -7 0 11 18 11 7 -7 0 0 11 1 -10 -8 0 50 21 50 2 -8 1 121 11 28 -31 7 -1 31 9 30

-37 -7 0 0 2 1 -7 7 0 84 11 22 -8 -8 0 0 13 1 2 -8 1 0 11 1 -31 7 -1 0 9 1
-37 -7 0 0 2 1 7 -7 0 19 11 18 -8 -8 0 27 13 27 2 -8 1 11 11 10 -29 7 -1 0 22 1
-37 -7 0 0 2 1 9 -7 0 15 20 15 -8 -8 0 46 13 46 0 -8 1 83 57 28 29 -7 1 36 22 36
-35 -7 0 0 25 1 9 -7 0 20 20 20 -8 -8 0 46 13 45 0 -8 1 98 57 33 -27 7 -1 35 16 35
-35 -7 0 62 25 46 11 -7 0 38 10 37 -6 -8 0 72 8 72 0 -8 1 70 57 32 27 -7 1 0 16 1
-35 -7 0 69 25 69 11 -7 0 0 10 1 -6 -8 0 0 8 1 -2 -8 1 69 19 69 25 -7 1 10 16 10
-33 -7 0 0 5 1 13 -7 0 96 89 12 -6 -8 0 24 8 23 -2 -8 1 35 19 34 25 -7 1 65 16 28
-33 -7 0 57 5 56 13 -7 0 112 89 18 -6 -8 0 24 8 24 -2 -8 1 28 19 27 -25 7 -1 0 16 1
-33 -7 0 19 5 18 15 -7 0 109 83 10 -4 -8 0 0 16 1 -4 -8 1 0 19 1 23 -7 1 0 20 1
-31 -7 0 43 33 43 15 -7 0 116 83 18 -4 -8 0 27 16 27 -4 -8 1 32 19 31 23 -7 1 31 20 31
-31 -7 0 0 33 1 17 -7 0 237 224 11 -4 -8 0 35 16 34 -4 -8 1 32 19 32 21 -7 1 117 67 17
-31 -7 0 87 33 44 17 -7 0 258 224 11 -2 -8 0 56 2 55 -6 -8 1 64 24 64 21 -7 1 92 67 14
-29 -7 0 43 14 42 19 -7 0 34 33 34 -2 -8 0 39 2 39 -6 -8 1 0 24 1 19 -7 1 40 40 40
-29 -7 0 0 14 1 19 -7 0 27 33 26 -2 -8 0 58 2 58 -6 -8 1 0 24 1 19 -7 1 50 40 50
-29 -7 0 0 14 1 21 -7 0 77 64 18 0 -8 0 105 4 15 -8 -8 1 71 16 70 17 -7 1 253 214 10
-27 -7 0 55 27 55 21 -7 0 87 64 23 0 -8 0 28 4 27 -8 -8 1 0 16 1 17 -7 1 246 214 11
-27 -7 0 79 27 57 -21 7 0 79 64 19 0 -8 0 42 4 42 -8 -8 1 29 16 28 15 -7 1 156 116 12
-27 -7 0 0 27 1 -23 7 0 0 22 1 2 -8 0 0 2 1 -10 -8 1 0 10 1 15 -7 1 158 116 10
-25 -7 0 32 43 32 23 -7 0 33 22 33 2 -8 0 90 2 33 -10 -8 1 0 10 1 13 -7 1 79 70 23
-25 -7 0 39 43 39 25 -7 0 23 39 22 2 -8 0 0 2 1 -10 -8 1 0 10 1 13 -7 1 63 70 35
-25 -7 0 0 43 1 -25 7 0 18 39 18 4 -8 0 0 16 1 -12 -8 1 0 9 1 11 -7 1 20 10 20
-25 -7 0 0 43 1 -27 7 0 19 25 19 4 -8 0 0 16 1 -12 -8 1 0 9 1 11 -7 1 0 10 1
-23 -7 0 36 24 36 -29 7 0 0 13 1 6 -8 0 35 7 34 -12 -8 1 0 9 1 9 -7 1 0 19 1
-23 -7 0 30 24 29 -31 7 0 0 30 1 6 -8 0 0 7 1 -14 -8 1 81 20 59 9 -7 1 0 19 1
-23 -7 0 0 24 1 -33 7 0 42 4 41 8 -8 0 20 13 19 -14 -8 1 38 20 38 7 -7 1 0 20 1
-23 -7 0 96 24 39 -35 7 0 6 23 5 8 -8 0 0 13 1 -14 -8 1 30 20 29 7 -7 1 0 20 1
-21 -7 0 85 69 14 -37 7 0 38 1 37 10 -8 0 0 20 1 -14 -8 1 0 20 1 5 -7 1 44 31 44

-21 -7 0 97 69 20 -39 7 0 34 16 34 10 -8 0 10 20 10 -16 -8 1 50 18 50 5 -7 1 0 31 1
-21 -7 0 89 69 13 -41 7 0 0 32 1 12 -8 0 39 14 39 -16 -8 1 0 18 1 5 -7 1 46 31 46
-21 -7 0 96 69 45 -43 7 0 0 14 1 12 -8 0 0 14 1 -16 -8 1 0 18 1 3 -7 1 0 36 1
-19 -7 0 0 35 1 -45 7 0 122 113 11 14 -8 0 47 16 47 -16 -8 1 56 18 55 3 -7 1 0 36 1
-19 -7 0 97 35 41 -47 7 0 96 96 14 14 -8 0 58 16 34 -18 -8 1 54 2 53 3 -7 1 58 36 58

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 22

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

1 -7 1 0 15 1 -51 -7 1 70 13 40 11 -5 1 40 28 39 -25 -5 1 0 16 1 -66 4 -1 76 49 31
1 -7 1 36 15 36 -51 -7 1 116 13 36 11 -5 1 0 28 1 -27 -5 1 32 7 32 -66 4 -1 29 49 28
1 -7 1 37 15 36 -67 5 -1 0 4 1 -11 5 -1 52 28 32 -27 -5 1 54 7 54 -64 4 -1 140 85 12
1 7 -1 29 21 29 -67 5 -1 26 4 25 11 -5 1 30 28 30 -27 -5 1 0 7 1 -64 4 -1 105 85 17
-1 -7 1 0 21 1 -65 5 -1 46 11 46 9 -5 1 47 46 29 -27 -5 1 35 7 34 -64 4 -1 96 85 16
-1 -7 1 0 21 1 -65 5 -1 0 11 1 9 -5 1 51 46 40 -27 -5 1 63 7 55 -60 4 -1 56 18 36
-1 -7 1 90 21 31 -63 5 -1 15 2 14 -9 5 -1 38 46 38 -29 -5 1 37 17 37 -60 4 -1 50 18 50
-3 -7 1 0 28 1 -63 5 -1 0 2 1 -9 5 -1 47 46 47 -29 -5 1 0 17 1 -60 4 -1 40 18 40
-3 -7 1 18 28 17 -61 5 -1 0 10 1 9 -5 1 68 46 27 -29 -5 1 35 17 35 -60 4 -1 90 18 26
3 7 -1 40 28 40 -61 5 -1 0 10 1 7 -5 1 0 19 1 -29 -5 1 25 17 24 -58 4 -1 18 31 18
-3 -7 1 20 28 20 -59 5 -1 0 20 1 7 -5 1 45 19 29 -29 -5 1 67 17 24 -58 4 -1 39 31 39
-5 -7 1 35 14 35 -59 5 -1 0 20 1 7 -5 1 72 19 26 -31 -5 1 0 28 1 -58 4 -1 61 31 53
-5 -7 1 68 14 53 -57 5 -1 33 29 33 -7 5 -1 24 19 24 -31 -5 1 0 28 1 -58 4 -1 29 31 29
-5 -7 1 47 14 47 -57 5 -1 31 29 30 -7 5 -1 0 19 1 -31 -5 1 25 28 24 -56 4 -1 0 10 1
-5 -7 1 94 14 15 -55 5 -1 39 0 39 5 -5 1 53 31 39 -31 -5 1 0 28 1 -56 4 -1 0 10 1
-7 -7 1 49 13 49 -55 5 -1 0 0 1 5 -5 1 46 31 46 -31 -5 1 47 28 47 -56 4 -1 0 10 1
-7 -7 1 0 13 1 -53 5 -1 52 63 21 -5 5 -1 56 31 31 -33 -5 1 33 16 33 -56 4 -1 25 10 25

-7 -7 1 22 13 21 -53 5 -1 58 63 54 -5 5 -1 21 31 20 -33 -5 1 0 16 1 -54 4 -1 0 12 1
 -9 -7 1 0 12 1 -53 5 -1 34 63 33 5 -5 1 33 31 33 -33 -5 1 60 16 60 -54 4 -1 0 12 1
 -9 -7 1 46 12 46 -51 5 -1 45 13 44 -3 5 -1 0 3 1 -33 -5 1 16 16 16 -54 4 -1 0 12 1
 -9 -7 1 0 12 1 -51 5 -1 0 13 1 3 -5 1 21 3 21 -33 -5 1 95 16 22 -54 4 -1 10 12 10
 -9 -7 1 26 12 26 -51 5 -1 32 13 31 3 -5 1 0 3 1 -35 -5 1 0 23 1 -50 4 -1 0 22 1
 -11 -7 1 36 29 35 -49 5 -1 106 117 8 3 -5 1 34 3 34 -35 -5 1 26 23 25 -50 4 -1 45 22 44
 -11 -7 1 67 29 31 -49 5 -1 102 117 12 1 -5 1 47 29 46 -35 -5 1 72 23 38 -50 4 -1 58 22 57
 -11 -7 1 0 29 1 -47 5 -1 196 196 11 -1 5 -1 0 29 1 -35 -5 1 47 23 47 -50 4 -1 46 22 45
 -11 -7 1 0 29 1 -47 5 -1 203 196 7 1 -5 1 67 29 29 -35 -5 1 49 23 49 -50 4 -1 0 22 1
 -13 -7 1 50 20 50 -45 5 -1 91 89 9 1 -5 1 78 29 13 -37 -5 1 0 33 1 -48 4 -1 0 29 1
 -13 -7 1 0 20 1 -45 5 -1 86 89 13 1 -5 1 0 29 1 -37 -5 1 0 33 1 -48 4 -1 26 29 26
 -13 -7 1 52 20 51 -43 5 -1 0 6 1 -1 -5 1 29 8 29 -37 -5 1 45 33 45 -48 4 -1 0 29 1
 -13 -7 1 33 20 33 -43 5 -1 0 6 1 -1 -5 1 37 8 36 -39 -5 1 29 1 28 -48 4 -1 81 29 12
 -15 -7 1 275 223 10 -41 5 -1 0 23 1 -1 -5 1 0 8 1 -39 -5 1 0 1 1 -48 4 -1 0 29 1
 -15 -7 1 247 223 10 -41 5 -1 36 23 36 -1 -5 1 63 8 25 -39 -5 1 0 1 1 -46 4 -1 0 12 1
 -15 -7 1 255 223 11 -39 5 -1 57 1 34 1 5 -1 42 8 41 -39 -5 1 39 1 31 -46 4 -1 35 12 34
 -15 -7 1 259 223 11 -39 5 -1 0 1 1 3 5 -1 67 18 22 -41 -5 1 32 19 32 -46 4 -1 57 12 43
 -17 -7 1 58 49 29 -39 5 -1 0 1 1 -3 -5 1 33 18 33 -41 -5 1 0 19 1 -46 4 -1 0 12 1
 -17 -7 1 0 49 1 -37 5 -1 40 30 40 -3 -5 1 58 18 29 -41 -5 1 38 19 38 -46 4 -1 74 12 19
 -17 -7 1 11 49 10 37 -5 1 0 30 1 -3 -5 1 76 18 19 -41 -5 1 83 19 38 46 -4 1 39 12 39
 -17 -7 1 22 49 22 -37 5 -1 12 30 12 -3 -5 1 0 18 1 -43 -5 1 95 12 34 44 -4 1 51 11 50
 -19 -7 1 0 61 1 -37 5 -1 0 30 1 -5 -5 1 29 30 29 -43 -5 1 39 12 38 -44 4 -1 28 11 28
 -19 -7 1 39 61 39 35 -5 1 85 29 14 5 5 -1 51 30 33 -43 -5 1 39 12 39 -44 4 -1 23 11 23
 -19 -7 1 33 61 33 -35 5 -1 7 29 7 -5 -5 1 77 30 27 -43 -5 1 18 12 18 -44 4 -1 60 11 26
 -19 -7 1 82 61 20 -35 5 -1 24 29 24 -5 -5 1 0 30 1 -45 -5 1 50 34 49 -44 4 -1 33 11 32
 -21 -7 1 44 54 43 -35 5 -1 34 29 33 -5 -5 1 49 30 49 -45 -5 1 0 34 1 -44 4 -1 0 11 1
 -21 -7 1 14 54 14 -33 5 -1 46 13 27 -7 -5 1 69 41 21 -45 -5 1 32 34 31 -44 4 -1 84 11 20

-21 -7 1 63 54 28 -33 5 -1 48 13 48 -7 -5 1 60 41 18 -45 -5 1 50 34 20 -42 4 -1 0 4 1
 -21 -7 1 14 54 14 33 -5 1 0 13 1 7 5 -1 76 41 20 -47 -5 1 191 206 8 -42 4 -1 0 4 1
 -23 -7 1 0 47 1 -33 5 -1 0 13 1 -7 -5 1 62 41 28 -47 -5 1 183 206 9 -42 4 -1 17 4 17
 -23 -7 1 114 47 31 -31 5 -1 0 2 1 -7 -5 1 48 41 47 -49 -5 1 95 96 10 -42 4 -1 23 4 23
 -23 -7 1 68 47 25 -31 5 -1 0 2 1 -9 -5 1 23 5 23 -49 -5 1 84 96 12 -42 4 -1 34 4 34
 -23 -7 1 59 47 30 31 -5 1 0 2 1 -9 -5 1 25 5 25 -49 -5 1 97 96 9 42 -4 1 45 4 45
 -25 -7 1 30 32 30 29 -5 1 48 25 48 -9 -5 1 0 5 1 -51 -5 1 0 32 1 -40 4 -1 0 27 1
 -25 -7 1 70 32 69 29 -5 1 39 25 39 9 5 -1 70 5 19 -51 -5 1 62 32 33 -40 4 -1 35 27 35
 -25 -7 1 0 32 1 -29 5 -1 10 25 10 -9 -5 1 0 5 1 -51 -5 1 31 32 31 40 -4 1 81 27 23
 -25 -7 1 0 32 1 -29 5 -1 0 25 1 -11 -5 1 54 47 21 -53 -5 1 18 62 17 -40 4 -1 0 27 1
 -27 -7 1 58 29 48 -27 5 -1 0 3 1 -11 -5 1 63 47 26 -53 -5 1 94 62 20 -40 4 -1 35 27 34
 -27 -7 1 0 29 1 -27 5 -1 0 3 1 -11 -5 1 16 47 15 -53 -5 1 55 62 22 -40 4 -1 0 27 1
 -27 -7 1 0 29 1 27 -5 1 35 3 34 11 5 -1 61 47 21 -55 -5 1 0 35 1 -38 4 -1 30 22 29
 -27 -7 1 0 29 1 27 -5 1 0 3 1 -11 -5 1 76 47 30 -55 -5 1 0 35 1 -38 4 -1 0 22 1
 -29 -7 1 0 15 1 -25 5 -1 52 46 20 -13 -5 1 61 21 28 -55 -5 1 39 35 38 38 -4 1 37 22 37
 -29 -7 1 66 15 66 -25 5 -1 72 46 22 13 5 -1 50 21 33 -57 -5 1 0 14 1 -38 4 -1 53 22 44
 -29 -7 1 36 15 36 25 -5 1 46 46 45 -13 -5 1 22 21 21 -57 -5 1 50 14 50 -38 4 -1 46 22 46
 -29 -7 1 0 15 1 25 -5 1 0 46 1 -13 -5 1 59 21 30 -57 -5 1 0 14 1 -38 4 -1 53 22 16
 -31 -7 1 60 10 31 -23 5 -1 0 1 1 -13 -5 1 57 21 24 -59 -5 1 0 1 1 -36 4 -1 54 44 29
 -31 -7 1 48 10 48 23 -5 1 13 1 12 -13 -5 1 28 21 27 -59 -5 1 0 1 1 36 -4 1 61 44 40
 -31 -7 1 77 10 77 23 -5 1 0 1 1 -15 -5 1 296 304 10 -59 -5 1 0 1 1 -36 4 -1 68 44 22
 -31 -7 1 0 10 1 -23 5 -1 0 1 1 -15 -5 1 274 304 12 -61 -5 1 38 7 37 -36 4 -1 38 44 38
 -33 -7 1 18 14 17 21 -5 1 29 51 28 -15 -5 1 293 304 11 -61 -5 1 50 7 49 -36 4 -1 71 44 21
 -33 -7 1 0 14 1 21 -5 1 12 51 11 -15 -5 1 295 304 10 -61 -5 1 33 7 33 -36 4 -1 27 44 26
 -33 -7 1 17 14 16 -21 5 -1 49 51 21 -17 -5 1 68 35 16 -63 -5 1 49 31 48 34 -4 1 100 86 11
 -33 -7 1 66 14 65 -21 5 -1 64 51 24 -17 -5 1 73 35 31 -63 -5 1 0 31 1 -34 4 -1 115 86 14
 -35 -7 1 74 41 24 -19 5 -1 0 25 1 -17 -5 1 61 35 26 -63 -5 1 38 31 38 -34 4 -1 100 86 10

-35 -7 1 18 41 17 19 -5 1 54 25 26 -17 -5 1 62 35 27 -65 -5 1 0 21 1 -34 4 -1 96 86 7

-35 -7 1 50 41 49 -19 5 -1 56 25 17 -19 -5 1 92 60 23 -65 -5 1 0 21 1 -34 4 -1 89 86 12

-37 -7 1 59 31 48 19 -5 1 25 25 24 -19 -5 1 74 60 24 -67 -5 1 0 10 1 -34 4 -1 97 86 9

-37 -7 1 0 31 1 17 -5 1 204 209 9 -19 -5 1 56 60 20 -67 -5 1 39 10 39 -32 4 -1 127 115 8

-39 -7 1 54 1 53 -17 5 -1 201 209 8 -19 -5 1 63 60 24 -72 4 -1 88 21 34 -32 4 -1 107 115 7

-39 -7 1 82 1 59 17 -5 1 197 209 9 -21 -5 1 29 20 28 -72 4 -1 28 21 27 -32 4 -1 118 115 8

-41 -7 1 34 5 33 -17 5 -1 195 209 7 -21 -5 1 57 20 43 -72 4 -1 0 21 1 32 -4 1 111 115 11

-41 -7 1 0 5 1 -15 5 -1 70 56 21 -21 -5 1 0 20 1 -70 4 -1 0 26 1 -32 4 -1 107 115 10

-43 -7 1 0 6 1 -15 5 -1 45 56 24 -21 -5 1 0 20 1 -70 4 -1 0 26 1 -30 4 -1 219 191 7

-43 -7 1 0 6 1 15 -5 1 45 56 45 -23 -5 1 0 27 1 -70 4 -1 80 26 38 -30 4 -1 215 191 8

-45 -7 1 119 7 33 15 -5 1 27 56 26 -23 -5 1 4 27 3 -68 4 -1 0 31 1 -30 4 -1 218 191 9

-45 -7 1 53 7 52 13 -5 1 93 110 10 -23 -5 1 42 27 42 -68 4 -1 23 31 23 30 -4 1 219 191 9

-47 -7 1 245 231 11 -13 5 -1 103 110 7 -23 -5 1 0 27 1 -68 4 -1 25 31 24 28 -4 1 19 15 18

-47 -7 1 278 231 12 -13 5 -1 115 110 8 -25 -5 1 41 16 40 -68 4 -1 40 31 39 -28 4 -1 32 15 31

-49 -7 1 126 8 20 13 -5 1 134 110 8 -25 -5 1 19 16 18 -66 4 -1 42 49 42 28 -4 1 0 15 1

-49 -7 1 25 8 25 -11 5 -1 0 28 1 -25 -5 1 0 16 1 -66 4 -1 95 49 27 -28 4 -1 0 15 1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 23

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-28 4 -1 0 15 1 4 4 -1 27 8 27 -40 -4 1 36 38 35 -54 2 -1 0 7 1 -24 2 -1 0 5 1

-26 4 -1 52 21 28 -6 -4 1 0 1 1 -40 -4 1 37 38 36 -54 2 -1 46 7 45 -22 2 -1 39 8 39

26 -4 1 0 21 1 -6 -4 1 17 1 17 -42 -4 1 65 34 44 -54 2 -1 33 7 33 -22 2 -1 0 8 1

26 -4 1 29 21 29 -6 -4 1 12 1 11 -42 -4 1 60 34 27 -54 2 -1 0 7 1 -22 2 -1 36 8 36

-26 4 -1 52 21 26 -8 -4 1 0 12 1 -42 -4 1 47 34 19 -54 2 -1 26 7 25 22 -2 1 39 8 33

-26 4 -1 0 21 1 -8 -4 1 44 12 44 -42 -4 1 31 34 31 -52 2 -1 0 17 1 -22 2 -1 45 8 27

-24 4 -1 23 6 22 -8 -4 1 0 12 1 -42 -4 1 61 34 27 -52 2 -1 9 17 9 -20 2 -1 78 24 16

-24 4 -1 39 6 38 -8 -4 1 22 12 21 -44 -4 1 0 19 1 -52 2 -1 0 17 1 20 -2 1 44 24 24
24 -4 1 0 6 1 8 4 -1 61 12 25 -44 -4 1 0 19 1 -52 2 -1 90 17 13 -20 2 -1 65 24 12
24 -4 1 33 6 32 -10 -4 1 46 25 44 -44 -4 1 71 19 33 -52 2 -1 0 17 1 -20 2 -1 22 24 21
-24 4 -1 0 6 1 -10 -4 1 59 25 18 -44 -4 1 0 19 1 -52 2 -1 0 17 1 -18 2 -1 0 0 1
22 -4 1 0 4 1 10 4 -1 60 25 23 -44 -4 1 0 19 1 -50 2 -1 0 14 1 18 -2 1 0 0 1
22 -4 1 0 4 1 -10 -4 1 23 25 23 -46 -4 1 84 17 27 -50 2 -1 0 14 1 -18 2 -1 44 0 43
-22 4 -1 32 4 32 -10 -4 1 23 25 23 -46 -4 1 0 17 1 -50 2 -1 0 14 1 -18 2 -1 0 0 1
-22 4 -1 42 4 41 -12 -4 1 38 35 37 -46 -4 1 29 17 28 -50 2 -1 19 14 19 -16 2 -1 0 6 1
-22 4 -1 26 4 25 -12 -4 1 0 35 1 -46 -4 1 10 17 9 -50 2 -1 46 14 45 -16 2 -1 28 6 27
-20 4 -1 29 16 29 -12 -4 1 0 35 1 -48 -4 1 0 32 1 -50 2 -1 0 14 1 -16 2 -1 32 6 32
20 -4 1 30 16 29 12 4 -1 34 35 34 -48 -4 1 42 32 41 -48 2 -1 0 24 1 16 -2 1 0 6 1
20 -4 1 0 16 1 -12 -4 1 19 35 19 -48 -4 1 16 32 16 -48 2 -1 0 24 1 -14 2 -1 38 6 38
-20 4 -1 30 16 29 -14 -4 1 0 2 1 -50 -4 1 26 21 25 -48 2 -1 0 24 1 -14 2 -1 13 6 12
-20 4 -1 52 16 27 -14 -4 1 35 2 35 -50 -4 1 0 21 1 -48 2 -1 0 24 1 -14 2 -1 14 6 13
-18 4 -1 31 17 30 -14 -4 1 36 2 35 -50 -4 1 0 21 1 -48 2 -1 72 24 28 14 -2 1 38 6 37
18 -4 1 27 17 26 14 4 -1 55 2 26 -52 -4 1 0 5 1 -48 2 -1 0 24 1 -12 2 -1 40 7 39
-18 4 -1 48 17 47 -14 -4 1 0 2 1 -52 -4 1 40 5 40 -46 2 -1 0 17 1 12 -2 1 47 7 8
18 -4 1 0 17 1 -16 -4 1 74 15 18 -52 -4 1 28 5 27 -46 2 -1 23 17 22 12 -2 1 56 7 13
-18 4 -1 0 17 1 16 4 -1 39 15 38 -54 -4 1 0 13 1 -46 2 -1 30 17 30 -12 2 -1 40 7 24
-16 4 -1 0 11 1 -16 -4 1 47 15 25 -54 -4 1 28 13 27 -46 2 -1 0 17 1 -12 2 -1 19 7 18
-16 4 -1 0 11 1 -16 -4 1 0 15 1 -54 -4 1 24 13 23 -46 2 -1 37 17 36 -10 2 -1 55 25 8
16 -4 1 6 11 5 -16 -4 1 0 15 1 -56 -4 1 53 13 38 -44 2 -1 56 2 39 -10 2 -1 67 25 10
16 -4 1 0 11 1 -16 -4 1 0 15 1 -56 -4 1 21 13 20 -44 2 -1 36 2 36 10 -2 1 58 25 12
-16 4 -1 36 11 36 -18 -4 1 25 7 25 -56 -4 1 34 13 33 -44 2 -1 26 2 26 10 -2 1 55 25 8
14 -4 1 59 18 21 -18 -4 1 51 7 23 -58 -4 1 0 13 1 -44 2 -1 0 2 1 -10 2 -1 62 25 13
14 -4 1 40 18 40 -18 -4 1 23 7 22 -58 -4 1 58 13 32 -44 2 -1 0 2 1 8 -2 1 37 12 16
-14 4 -1 31 18 30 -18 -4 1 66 7 30 -58 -4 1 0 13 1 -42 2 -1 48 4 15 -8 2 -1 39 12 20

14 -4 1 15 18 15 -18 -4 1 0 7 1 -60 -4 1 28 4 27 -42 2 -1 55 4 19 -6 2 -1 21 40 20
-14 4 -1 64 18 18 18 4 -1 28 7 28 -60 -4 1 0 4 1 -42 2 -1 31 4 31 6 -2 1 26 40 26
-14 4 -1 44 18 33 -18 -4 1 31 7 31 -60 -4 1 35 4 34 -42 2 -1 0 4 1 6 -2 1 52 40 15
12 -4 1 0 9 1 -20 -4 1 41 15 41 -62 -4 1 70 69 13 -42 2 -1 36 4 35 -6 2 -1 0 40 1
12 -4 1 0 9 1 -20 -4 1 0 15 1 -62 -4 1 83 69 23 -40 2 -1 27 22 27 -4 2 -1 0 44 1
-12 4 -1 24 9 23 -20 -4 1 0 15 1 -62 -4 1 75 69 12 -40 2 -1 25 22 24 4 -2 1 32 44 32
-12 4 -1 22 9 21 -20 -4 1 0 15 1 -64 -4 1 39 37 39 -40 2 -1 53 22 28 4 -2 1 39 44 22
12 -4 1 0 9 1 -20 -4 1 6 15 5 -64 -4 1 40 37 39 -40 2 -1 63 22 29 -4 2 -1 29 44 29
-12 4 -1 0 9 1 -22 -4 1 12 10 11 -64 -4 1 0 37 1 -40 2 -1 16 22 16 -2 2 -1 144 176 5
-10 4 -1 31 1 30 -22 -4 1 69 10 20 -66 -4 1 0 24 1 -38 2 -1 0 22 1 2 -2 1 149 176 6
-10 4 -1 27 1 26 -22 -4 1 44 10 32 -66 -4 1 0 24 1 -38 2 -1 0 22 1 -2 2 -1 149 176 6
10 -4 1 59 1 26 -22 -4 1 11 10 10 -66 -4 1 0 24 1 -38 2 -1 0 22 1 2 -2 1 147 176 6
-10 4 -1 0 1 1 -22 -4 1 0 10 1 -68 -4 1 52 36 51 -38 2 -1 18 22 17 0 -2 1 193 227 8
10 -4 1 28 1 27 -22 -4 1 52 10 26 -68 -4 1 38 36 38 -38 2 -1 62 22 26 0 2 -1 198 227 7
10 -4 1 24 1 23 -24 -4 1 0 3 1 -68 -4 1 57 36 34 36 -2 1 57 24 26 0 -2 1 197 227 7
-8 4 -1 0 13 1 -24 -4 1 58 3 22 -70 -4 1 0 22 1 -36 2 -1 0 24 1 -2 -2 1 164 191 7
8 -4 1 0 13 1 -24 -4 1 38 3 37 -70 -4 1 0 22 1 -36 2 -1 30 24 30 -2 -2 1 161 191 7
-8 4 -1 70 13 16 -24 -4 1 0 3 1 -72 -4 1 0 18 1 -36 2 -1 0 24 1 2 2 -1 164 191 5
8 -4 1 56 13 25 -24 -4 1 0 3 1 -72 -4 1 0 18 1 -36 2 -1 0 24 1 2 2 -1 166 191 7
8 -4 1 24 13 23 -26 -4 1 61 41 28 -78 2 -1 50 3 50 -36 2 -1 46 24 26 -4 -2 1 43 35 16
-8 4 -1 33 13 32 -26 -4 1 68 41 22 -78 2 -1 0 3 1 34 -2 1 68 69 10 -4 -2 1 62 35 13
-6 4 -1 18 5 17 -26 -4 1 38 41 37 -76 2 -1 22 6 21 -34 2 -1 56 69 8 4 2 -1 39 35 16
6 -4 1 18 5 18 -26 -4 1 54 41 54 -76 2 -1 29 6 28 -34 2 -1 58 69 16 4 2 -1 32 35 31
-6 4 -1 0 5 1 -28 -4 1 0 22 1 -74 2 -1 0 13 1 -34 2 -1 59 69 15 -6 -2 1 48 39 20
6 -4 1 46 5 46 -28 -4 1 0 22 1 -74 2 -1 0 13 1 -34 2 -1 76 69 10 6 2 -1 22 39 21
6 -4 1 0 5 1 -28 -4 1 0 22 1 -74 2 -1 50 13 49 -34 2 -1 64 69 9 -6 -2 1 48 39 14
6 -4 1 58 5 19 -28 -4 1 19 22 18 -72 2 -1 28 4 27 -32 2 -1 169 180 8 -8 -2 1 20 24 19

4 -4 1 23 8 23 -30 -4 1 195 177 8 -72 2 -1 46 4 45 -32 2 -1 170 180 5 8 2 -1 48 24 16
 4 -4 1 0 8 1 -30 -4 1 200 177 9 -72 2 -1 44 4 44 -32 2 -1 174 180 7 -8 -2 1 23 24 22
 4 -4 1 36 8 35 -30 -4 1 178 177 9 -70 2 -1 0 15 1 -32 2 -1 166 180 7 10 2 -1 44 8 18
 -4 4 -1 0 8 1 -30 -4 1 194 177 9 -70 2 -1 0 15 1 32 -2 1 174 180 7 -10 -2 1 26 8 25
 -4 4 -1 30 8 29 -32 -4 1 216 201 10 -70 2 -1 0 15 1 -32 2 -1 172 180 8 -10 -2 1 41 8 28
 4 -4 1 18 8 18 -32 -4 1 224 201 8 -68 2 -1 29 28 28 -30 2 -1 37 39 32 -10 -2 1 42 8 32
 2 -4 1 36 17 35 -32 -4 1 208 201 9 -68 2 -1 33 28 33 -30 2 -1 55 39 21 12 2 -1 48 24 15
 -2 4 -1 42 17 18 -32 -4 1 195 201 10 -68 2 -1 103 28 23 30 -2 1 64 39 15 -12 -2 1 29 24 29
 2 -4 1 39 17 38 -34 -4 1 136 120 10 -66 2 -1 0 24 1 -30 2 -1 41 39 24 -12 -2 1 43 24 43
 2 -4 1 21 17 20 -34 -4 1 137 120 8 -66 2 -1 23 24 22 -30 2 -1 39 39 18 -12 -2 1 30 24 30
 2 -4 1 0 17 1 -34 -4 1 134 120 8 -66 2 -1 31 24 31 -30 2 -1 55 39 16 -12 -2 1 0 24 1
 -2 4 -1 39 17 38 -34 -4 1 133 120 10 -64 2 -1 85 72 17 -28 2 -1 0 3 1 -14 -2 1 37 22 16
 0 4 -1 189 192 8 -36 -4 1 92 50 12 -64 2 -1 98 72 14 -28 2 -1 0 3 1 -14 -2 1 38 22 38
 0 -4 1 215 192 8 -36 -4 1 69 50 23 -64 2 -1 74 72 20 -28 2 -1 37 3 37 14 2 -1 26 22 25
 0 -4 1 181 192 9 -36 -4 1 87 50 14 -62 2 -1 247 222 9 28 -2 1 34 3 34 -14 -2 1 60 22 27
 0 -4 1 213 192 8 -36 -4 1 64 50 17 -62 2 -1 238 222 11 -28 2 -1 0 3 1 -14 -2 1 33 22 32
 0 -4 1 201 192 8 -36 -4 1 55 50 11 -62 2 -1 254 222 11 -28 2 -1 0 3 1 -16 -2 1 0 15 1
 -2 -4 1 0 25 1 -36 -4 1 62 50 20 -60 2 -1 40 23 39 -26 2 -1 36 15 36 16 2 -1 34 15 34
 -2 -4 1 19 25 18 -38 -4 1 51 51 17 -60 2 -1 57 23 57 -26 2 -1 29 15 29 -16 -2 1 0 15 1
 -2 -4 1 0 25 1 -38 -4 1 61 51 58 -60 2 -1 37 23 37 26 -2 1 14 15 13 -16 -2 1 0 15 1
 2 4 -1 29 25 29 -38 -4 1 46 51 46 -58 2 -1 59 16 50 -26 2 -1 32 15 31 -16 -2 1 51 15 44
 -2 -4 1 24 25 23 -38 -4 1 66 51 22 -58 2 -1 0 16 1 -26 2 -1 9 15 9 18 2 -1 27 3 26
 -4 -4 1 0 8 1 -38 -4 1 86 51 22 -58 2 -1 0 16 1 -24 2 -1 65 5 12 -18 -2 1 27 3 26
 -4 -4 1 47 8 22 -40 -4 1 38 38 38 -56 2 -1 0 2 1 24 -2 1 37 5 37 -18 -2 1 28 3 27
 -4 -4 1 34 8 34 -40 -4 1 7 38 6 -56 2 -1 30 2 30 -24 2 -1 25 5 24 -18 -2 1 53 3 17
 -4 -4 1 45 8 34 -40 -4 1 57 38 57 -56 2 -1 0 2 1 -24 2 -1 0 5 1 -18 -2 1 29 3 29

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-20	-2	1	0	13	1	-66	-2	1	79	86	12	-39	1	-1	41	6	40	17	1	-1	35	25	21	-55	-1	1	34	11	33
-20	-2	1	62	13	9	-68	-2	1	84	73	13	-37	1	-1	59	39	8	-17	-1	1	57	25	12	-57	-1	1	74	6	25
-20	-2	1	46	13	34	-68	-2	1	80	73	14	-37	1	-1	33	39	32	-17	-1	1	31	25	31	-57	-1	1	0	6	1
-20	-2	1	13	13	13	-70	-2	1	0	44	1	-37	1	-1	8	39	8	-17	-1	1	40	25	6	-57	-1	1	0	6	1
-20	-2	1	37	13	37	-70	-2	1	36	44	36	-37	1	-1	67	39	9	-19	-1	1	56	84	9	-57	-1	1	45	6	37
22	2	-1	24	16	23	-72	-2	1	65	19	30	-37	1	-1	32	39	31	-19	-1	1	74	84	4	-59	-1	1	77	4	25
-22	-2	1	0	16	1	-72	-2	1	10	19	9	-37	1	-1	35	39	35	-19	-1	1	75	84	6	-59	-1	1	26	4	26
-22	-2	1	0	16	1	-74	-2	1	47	31	46	-35	1	-1	63	9	17	-19	-1	1	72	84	14	-59	-1	1	0	4	1
-22	-2	1	45	16	32	-74	-2	1	45	31	44	-35	1	-1	53	9	20	19	1	-1	72	84	5	-61	-1	1	72	11	29
-22	-2	1	77	16	21	-76	-2	1	73	27	30	-35	1	-1	44	9	12	-21	-1	1	49	61	9	-61	-1	1	0	11	1
-24	-2	1	21	3	21	-76	-2	1	49	27	37	-35	1	-1	8	9	7	-21	-1	1	43	61	6	-61	-1	1	29	11	28
-24	-2	1	0	3	1	-78	-2	1	31	22	31	-35	1	-1	57	9	23	21	1	-1	53	61	11	-63	-1	1	30	31	30
-24	-2	1	20	3	20	-79	1	-1	185	185	11	-33	1	-1	20	22	19	-21	-1	1	59	61	17	-63	-1	1	0	31	1
24	2	-1	0	3	1	-79	1	-1	215	185	9	-33	1	-1	30	22	30	-21	-1	1	59	61	18	-63	-1	1	0	31	1
-24	-2	1	0	3	1	-77	1	-1	86	77	19	-33	1	-1	0	22	1	-23	-1	1	9	51	8	-65	-1	1	35	28	34
-26	-2	1	0	34	1	-77	1	-1	81	77	21	-33	1	-1	27	22	26	-23	-1	1	66	51	16	-65	-1	1	0	28	1
-26	-2	1	60	34	12	-75	1	-1	111	55	16	-33	1	-1	56	22	10	23	1	-1	60	51	6	-65	-1	1	27	28	26
26	2	-1	19	34	19	-75	1	-1	46	55	46	-31	1	-1	0	1	1	-23	-1	1	52	51	5	-67	-1	1	0	18	1
-26	-2	1	0	34	1	-75	1	-1	76	55	21	31	-1	1	0	1	1	-23	-1	1	58	51	9	-67	-1	1	24	18	24
-26	-2	1	13	34	12	-73	1	-1	36	30	36	-31	1	-1	49	1	27	27	1	-1	42	9	17	-67	-1	1	81	18	27
-28	-2	1	34	20	33	-73	1	-1	75	30	20	-31	1	-1	0	1	1	-29	-1	1	28	15	28	-69	-1	1	0	32	1
28	2	-1	44	20	17	-73	1	-1	0	30	1	-29	1	-1	38	35	23	-29	-1	1	0	15	1	-69	-1	1	0	32	1
-28	-2	1	16	20	16	-71	1	-1	40	2	39	-29	1	-1	56	35	18	-29	-1	1	31	15	30	-69	-1	1	50	32	32

-28-2 1 0 20 1 -71 1-1 0 2 1 29-1 1 0 35 1 -29-1 1 34 15 33 -71-1 1 0 13 1
 -30-2 1 42 30 10 -71 1-1 0 2 1 -29 1-1 0 35 1 29 1-1 42 15 16 -71-1 1 0 13 1
 -30-2 1 0 30 1 -69 1-1 0 36 1 -27 1-1 0 6 1 -29-1 1 28 15 27 -71-1 1 64 13 63
 -30-2 1 3 30 2 -69 1-1 0 36 1 -27 1-1 0 6 1 -31-1 1 70 11 10 -73-1 1 0 6 1
 -30-2 1 67 30 12 -69 1-1 15 36 14 -27 1-1 0 6 1 -31-1 1 0 11 1 -73-1 1 16 6 16
 -32-2 1 184 211 8 -67 1-1 29 8 28 -27 1-1 0 6 1 31 1-1 22 11 21 -73-1 1 18 6 17
 -32-2 1 191 211 6 -67 1-1 59 8 59 27-1 1 0 6 1 -31-1 1 40 11 40 -75-1 1 0 48 1
 -34-2 1 0 14 1 -67 1-1 13 8 13 -25 1-1 49 47 13 -31-1 1 0 11 1 -75-1 1 43 48 42
 -34-2 1 78 14 22 -65 1-1 0 16 1 -25 1-1 51 47 26 -31-1 1 45 11 29 -75-1 1 47 48 47
 -34-2 1 0 14 1 -65 1-1 6 16 6 -25 1-1 73 47 15 -33-1 1 25 32 24 -77-1 1 73 64 20
 -36-2 1 43 3 42 -65 1-1 37 16 36 -25 1-1 58 47 8 -33-1 1 53 32 21 -77-1 1 68 64 25
 -36-2 1 0 3 1 -63 1-1 46 18 45 25-1 1 56 47 8 -33-1 1 57 32 24 -77-1 1 97 64 18
 -36-2 1 0 3 1 -63 1-1 28 18 27 -23 1-1 28 12 28 -33-1 1 32 32 31 -79-1 1 193 151 9
 -36-2 1 0 3 1 -63 1-1 17 18 17 -23 1-1 44 12 29 33 1-1 41 32 18 -79-1 1 165 151 10
 -38-2 1 0 18 1 -61 1-1 72 19 32 -23 1-1 20 12 20 -33-1 1 34 32 19 -79-1-1 225 191 10
 -38-2 1 29 18 28 -61 1-1 0 19 1 23-1 1 0 12 1 -33-1 1 17 32 16 -79-1-1 241 191 11
 -38-2 1 33 18 33 -61 1-1 0 19 1 -23 1-1 0 12 1 -35-1 1 50 44 7 -77-1-1 106 80 16
 -38-2 1 8 18 7 -59 1-1 42 6 41 -21 1-1 80 92 7 -35-1 1 34 44 33 -77-1-1 94 80 14
 -38-2 1 0 18 1 -59 1-1 52 6 22 -21 1-1 75 92 5 -35-1 1 32 44 32 -77-1-1 95 80 14
 -40-2 1 6 21 5 -59 1-1 54 6 26 -21 1-1 76 92 13 -35-1 1 0 44 1 -75-1-1 105 57 23
 -40-2 1 60 21 17 -57 1-1 82 22 24 21-1 1 70 92 7 -35-1 1 29 44 29 -75-1-1 65 57 30
 -40-2 1 26 21 26 -57 1-1 0 22 1 -21 1-1 73 92 10 -37-1 1 49 40 7 -75-1-1 75 57 21
 -42-2 1 7 0 7 -57 1-1 41 22 41 -19 1-1 61 60 17 -37-1 1 46 40 37 -73-1-1 0 31 1
 -42-2 1 66 0 26 -57 1-1 37 22 36 -19 1-1 51 60 19 -37-1 1 45 40 38 -73-1-1 90 31 26
 -42-2 1 20 0 20 -55 1-1 83 3 25 -19 1-1 49 60 14 -37-1 1 56 40 20 -73-1-1 61 31 29
 -44-2 1 43 12 42 -55 1-1 16 3 15 19-1 1 74 60 11 -37-1 1 19 40 19 -71-1-1 0 2 1
 -44-2 1 0 12 1 -55 1-1 29 3 28 -19 1-1 58 60 13 -39-1 1 0 4 1 -71-1-1 0 2 1

-44 -2 1 0 12 1 -55 1 -1 0 3 1 -17 1 -1 250 327 9 -39 -1 1 0 4 1 -71 -1 -1 90 2 25
 -44 -2 1 29 12 29 -53 1 -1 42 67 41 15 -1 1 77 84 5 -39 -1 1 0 4 1 -69 -1 -1 0 37 1
 -46 -2 1 10 8 9 -53 1 -1 63 67 37 -15 1 -1 66 84 6 -39 -1 1 51 4 28 -69 -1 -1 0 37 1
 -46 -2 1 0 8 1 -53 1 -1 82 67 10 -15 1 -1 83 84 8 -41 -1 1 52 15 33 -69 -1 -1 76 37 33
 -46 -2 1 62 8 31 -51 1 -1 0 28 1 -15 1 -1 95 84 7 -41 -1 1 21 15 20 -67 -1 -1 0 8 1
 -46 -2 1 51 8 27 -51 1 -1 47 28 46 -15 1 -1 73 84 8 -41 -1 1 15 15 14 -67 -1 -1 12 8 11
 -48 -2 1 0 23 1 -51 1 -1 37 28 37 -11 1 -1 30 45 30 -41 -1 1 23 15 23 -67 -1 -1 65 8 44
 -48 -2 1 47 23 46 -51 1 -1 0 28 1 -11 1 -1 51 45 14 -43 -1 1 0 15 1 -65 -1 -1 60 17 22
 -48 -2 1 28 23 27 -49 1 -1 120 147 6 11 -1 1 0 45 1 -43 -1 1 40 15 40 -65 -1 -1 63 17 43
 -48 -2 1 0 23 1 -49 1 -1 125 147 9 9 -1 1 43 54 8 -43 -1 1 59 15 12 -65 -1 -1 27 17 27
 -48 -2 1 78 23 23 -49 1 -1 141 147 9 -9 1 -1 46 54 16 -43 -1 1 14 15 13 -63 -1 -1 42 19 41
 -50 -2 1 0 41 1 -49 1 -1 119 147 8 -9 1 -1 53 54 11 -45 -1 1 56 23 31 -63 -1 -1 0 19 1
 -50 -2 1 52 41 52 -49 1 -1 140 147 8 -7 1 -1 41 26 17 -45 -1 1 62 23 24 -63 -1 -1 13 19 13
 -50 -2 1 0 41 1 -47 1 -1 209 217 8 7 -1 1 0 26 1 -45 -1 1 0 23 1 -61 -1 -1 17 19 17
 -50 -2 1 26 41 26 -47 1 -1 184 217 9 -7 1 -1 0 26 1 -45 -1 1 45 23 29 -61 -1 -1 26 19 25
 -50 -2 1 0 41 1 -47 1 -1 209 217 8 -3 1 -1 16 30 16 -47 -1 1 263 264 11 -61 -1 -1 6 19 5
 -52 -2 1 33 24 33 -47 1 -1 182 217 10 3 -1 1 3 30 2 -47 -1 1 267 264 11 -59 -1 -1 0 6 1
 -52 -2 1 15 24 15 -47 1 -1 200 217 6 3 -1 1 9 30 9 -49 -1 1 95 95 9 -59 -1 -1 46 6 18
 -52 -2 1 24 24 24 -45 1 -1 107 126 6 -3 1 -1 0 30 1 -49 -1 1 97 95 10 -59 -1 -1 0 6 1
 -52 -2 1 35 24 35 -45 1 -1 120 126 7 -1 1 -1 25 34 24 -49 -1 1 112 95 9 -57 -1 -1 0 23 1
 -52 -2 1 0 24 1 -45 1 -1 115 126 8 1 -1 1 30 34 15 -51 -1 1 4 32 4 -57 -1 -1 60 23 33
 -54 -2 1 83 17 15 -45 1 -1 135 126 8 -1 1 -1 18 34 18 -51 -1 1 54 32 39 -57 -1 -1 59 23 20
 -54 -2 1 20 17 20 -45 1 -1 125 126 9 1 -1 1 24 34 23 -51 -1 1 0 32 1 -57 -1 -1 70 23 30
 -54 -2 1 48 17 46 -43 1 -1 12 24 11 1 1 -1 10 12 10 -51 -1 1 31 32 30 -57 -1 -1 0 23 1
 -54 -2 1 0 17 1 -43 1 -1 15 24 15 -1 -1 1 0 12 1 -51 -1 1 0 32 1 -55 -1 -1 70 3 13
 -54 -2 1 28 17 27 -43 1 -1 32 24 31 1 1 -1 12 12 11 -51 -1 1 0 32 1 -55 -1 -1 38 3 31
 -58 -2 1 65 25 33 -43 1 -1 28 24 28 -1 -1 1 0 12 1 -53 -1 1 80 64 13 -55 -1 -1 73 3 21

-58	-2	1	28	25	27	-43	1	-1	46	24	46	3	1	-1	47	44	7	-53	-1	1	60	64	22	-55	-1	-1	0	3	1
-58	-2	1	0	25	1	-41	1	-1	33	31	32	5	1	-1	32	9	22	-53	-1	1	38	64	25	-55	-1	-1	4	3	4
-58	-2	1	0	25	1	-41	1	-1	25	31	25	-5	-1	1	7	9	6	-53	-1	1	49	64	27	-53	-1	-1	87	69	11
-60	-2	1	76	74	20	-41	1	-1	60	31	24	7	1	-1	59	43	10	-53	-1	1	53	64	19	-53	-1	-1	81	69	23
-60	-2	1	124	74	11	-41	1	-1	38	31	37	-9	-1	1	38	9	19	-53	-1	1	80	64	11	-53	-1	-1	83	69	11
-60	-2	1	78	74	13	-41	1	-1	33	31	32	9	1	-1	10	9	10	-55	-1	1	66	11	27	-53	-1	-1	66	69	10
-60	-2	1	94	74	18	-39	1	-1	0	6	1	13	1	-1	51	35	7	-55	-1	1	27	11	27	-53	-1	-1	51	69	24
-62	-2	1	154	150	9	-39	1	-1	8	6	7	-13	-1	1	41	35	21	-55	-1	1	22	11	22	-51	-1	-1	16	29	16
-64	-2	1	200	191	10	-39	1	-1	54	6	20	-13	-1	1	40	35	10	-55	-1	1	56	11	26	-51	-1	-1	49	29	48
-66	-2	1	78	86	12	-39	1	-1	37	6	36	-15	-1	1	306	414	11	-55	-1	1	9	11	9	-51	-1	-1	35	29	35

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-51	-1	-1	31	29	31	-7	-1	-1	25	27	24	-41	1	1	36	15	35	-77	1	1	71	62	34	-36	-2	-1	63	26	22
-49	-1	-1	163	154	8	-7	-1	-1	32	27	13	-41	1	1	28	15	27	-77	1	1	83	62	18	-36	-2	-1	40	26	40
-49	-1	-1	148	154	8	-7	-1	-1	20	27	19	-41	1	1	74	15	17	-79	1	1	183	147	9	-36	-2	-1	69	26	18
-49	-1	-1	151	154	9	-7	-1	-1	15	27	15	-41	1	1	67	15	19	-79	1	1	154	147	12	-34	-2	-1	95	76	7
-47	-1	-1	222	227	9	-3	-1	-1	0	29	1	41	-1	-1	26	15	26	-78	-2	-1	12	3	11	-34	-2	-1	74	76	10
-47	-1	-1	215	227	9	-3	-1	-1	0	29	1	-43	1	1	53	14	28	-78	-2	-1	12	3	12	-34	-2	-1	83	76	9
-47	-1	-1	236	227	9	-3	-1	-1	21	29	20	-43	1	1	45	14	44	-76	-2	-1	36	7	36	-34	-2	-1	59	76	25
-45	-1	-1	141	132	7	3	1	1	18	29	18	43	-1	-1	53	14	20	-76	-2	-1	0	7	1	-34	-2	-1	99	76	8
-45	-1	-1	138	132	8	1	1	1	37	33	5	-43	1	1	0	14	1	-76	-2	-1	110	7	27	-34	-2	-1	87	76	7
-45	-1	-1	127	132	9	-1	-1	-1	33	33	14	-43	1	1	15	14	14	-74	-2	-1	0	14	1	-34	-2	-1	87	76	10
-43	-1	-1	75	25	11	-1	-1	-1	14	33	14	-45	1	1	0	22	1	-74	-2	-1	0	14	1	-32	-2	-1	206	199	7
-43	-1	-1	34	25	33	-1	1	1	26	11	14	-45	1	1	31	22	31	-74	-2	-1	0	14	1	-32	-2	-1	197	199	7
-43	-1	-1	64	25	17	1	-1	-1	15	11	15	-45	1	1	27	22	27	-72	-2	-1	28	4	27	-32	-2	-1	202	199	8

-41 -1 -1 0 33 1 1 -1 -1 31 11 17 -45 1 1 30 22 29 -72 -2 -1 0 4 1 -32 -2 -1 188 199 8
 -41 -1 -1 63 33 11 5 -1 -1 18 9 18 -45 1 1 12 22 12 -72 -2 -1 0 4 1 -32 -2 -1 198 199 8
 -41 -1 -1 39 33 39 -5 1 1 9 9 9 -47 1 1 252 253 10 -70 -2 -1 55 16 28 -32 -2 -1 208 199 8
 -39 -1 -1 0 6 1 -9 1 1 14 8 13 -47 1 1 253 253 10 -70 -2 -1 45 16 45 -32 -2 -1 184 199 8
 -39 -1 -1 0 6 1 9 -1 -1 27 8 27 -47 1 1 236 253 12 -70 -2 -1 0 16 1 -30 -2 -1 46 43 33
 -39 -1 -1 25 6 24 -9 1 1 0 8 1 -47 1 1 243 253 8 -68 -2 -1 36 29 36 -30 -2 -1 61 43 19
 -37 -1 -1 16 41 15 9 -1 -1 24 8 23 -47 1 1 249 253 9 -68 -2 -1 57 29 28 -30 -2 -1 64 43 10
 -37 -1 -1 67 41 8 -11 1 1 50 61 5 -49 1 1 94 92 13 -68 -2 -1 95 29 24 -30 -2 -1 60 43 10
 -37 -1 -1 65 41 12 -11 1 1 42 61 10 -49 1 1 88 92 10 -66 -2 -1 0 26 1 -30 -2 -1 64 43 19
 -37 -1 -1 53 41 18 11 -1 -1 46 61 7 -49 1 1 71 92 10 -66 -2 -1 0 26 1 -30 -2 -1 36 43 35
 -33 -1 -1 0 23 1 11 -1 -1 45 61 7 -49 1 1 83 92 18 -66 -2 -1 0 26 1 -30 -2 -1 62 43 23
 -33 -1 -1 52 23 19 13 -1 -1 43 32 13 -51 1 1 0 30 1 -64 -2 -1 116 77 12 -30 -2 -1 73 43 24
 -33 -1 -1 59 23 21 13 -1 -1 0 32 1 -51 1 1 0 30 1 -64 -2 -1 88 77 15 -28 -2 -1 47 4 34
 -33 -1 -1 55 23 16 -13 1 1 30 32 19 -51 1 1 0 30 1 -64 -2 -1 75 77 13 -28 -2 -1 46 4 31
 -33 -1 -1 0 23 1 -13 1 1 22 32 21 -51 1 1 0 30 1 -62 -2 -1 270 237 11 -28 -2 -1 56 4 34
 -33 -1 -1 43 23 22 17 -1 -1 30 22 29 -51 1 1 20 30 20 -62 -2 -1 262 237 11 -28 -2 -1 0 4 1
 -33 -1 -1 0 23 1 17 -1 -1 14 22 14 -51 1 1 77 30 23 -62 -2 -1 266 237 9 -28 -2 -1 29 4 29
 -31 -1 -1 19 1 18 -17 1 1 0 22 1 -53 1 1 55 62 22 -60 -2 -1 70 24 22 -28 -2 -1 65 4 15
 -31 -1 -1 33 1 33 -17 1 1 13 22 13 -53 1 1 49 62 49 -60 -2 -1 0 24 1 -28 -2 -1 28 4 28
 -31 -1 -1 58 1 20 19 -1 -1 47 76 8 -53 1 1 49 62 48 -60 -2 -1 72 24 29 -26 -2 -1 43 16 43
 -31 -1 -1 47 1 17 -19 1 1 53 76 7 -53 1 1 38 62 38 -60 -2 -1 19 24 19 -26 -2 -1 0 16 1
 -31 -1 -1 23 1 23 -19 1 1 57 76 5 -53 1 1 64 62 25 -58 -2 -1 57 17 27 -26 -2 -1 50 16 25
 -31 -1 -1 0 1 1 19 -1 -1 61 76 7 -53 1 1 51 62 18 -58 -2 -1 54 17 34 -26 -2 -1 54 16 19
 -31 -1 -1 0 1 1 21 -1 -1 56 56 11 -55 1 1 8 11 7 -58 -2 -1 84 17 14 -26 -2 -1 0 16 1
 -29 -1 -1 45 37 28 21 -1 -1 23 56 22 -55 1 1 0 11 1 -58 -2 -1 12 17 12 -26 -2 -1 0 16 1
 -29 -1 -1 51 37 15 -21 1 1 38 56 19 -55 1 1 34 11 34 -58 -2 -1 0 17 1 -26 -2 -1 41 16 29
 -29 -1 -1 48 37 29 -21 1 1 42 56 13 -55 1 1 39 11 38 -56 -2 -1 0 2 1 -26 -2 -1 0 16 1

-29 -1 -1 52 37 21 -23 1 1 44 47 16 -55 1 1 6 11 5 -56 -2 -1 0 2 1 -24 -2 -1 34 5 33
-29 -1 -1 0 37 1 23 -1 -1 0 47 1 -55 1 1 26 11 25 -56 -2 -1 69 2 20 -24 -2 -1 0 5 1
-29 -1 -1 47 37 17 23 -1 -1 54 47 8 -57 1 1 0 6 1 -56 -2 -1 69 2 13 -24 -2 -1 42 5 24
-29 -1 -1 46 37 29 -23 1 1 47 47 12 -57 1 1 63 6 33 -56 -2 -1 18 2 17 -24 -2 -1 48 5 33
-27 -1 -1 31 6 30 -23 1 1 71 47 16 -57 1 1 20 6 20 -54 -2 -1 24 8 23 -24 -2 -1 0 5 1
-27 -1 -1 0 6 1 25 -1 -1 54 21 14 -57 1 1 0 6 1 -54 -2 -1 31 8 31 -24 -2 -1 0 5 1
-27 -1 -1 0 6 1 25 -1 -1 65 21 10 -57 1 1 48 6 47 -54 -2 -1 0 8 1 -24 -2 -1 0 5 1
-27 -1 -1 0 6 1 -27 1 1 45 9 44 -57 1 1 0 6 1 -54 -2 -1 0 8 1 -24 -2 -1 0 5 1
-27 -1 -1 0 6 1 -27 1 1 41 9 20 -59 1 1 11 4 10 -54 -2 -1 26 8 26 -22 -2 -1 21 8 21
-27 -1 -1 0 6 1 27 -1 -1 57 9 13 -59 1 1 44 4 43 -52 -2 -1 23 18 23 -22 -2 -1 69 8 25
-27 -1 -1 15 6 14 -27 1 1 50 9 32 -59 1 1 37 4 37 -52 -2 -1 51 18 32 -22 -2 -1 39 8 39
-25 -1 -1 68 50 15 -27 1 1 53 9 12 -59 1 1 0 4 1 -52 -2 -1 40 18 40 -22 -2 -1 0 8 1
-25 -1 -1 84 50 9 -29 1 1 41 14 18 -59 1 1 36 4 36 -52 -2 -1 70 18 25 -22 -2 -1 63 8 20
-25 -1 -1 67 50 7 -29 1 1 16 14 16 -61 1 1 0 11 1 -52 -2 -1 0 18 1 -22 -2 -1 38 8 37
-25 -1 -1 73 50 17 -29 1 1 40 14 39 -61 1 1 0 11 1 -50 -2 -1 59 15 31 -22 -2 -1 66 8 15
-25 -1 -1 45 50 27 29 -1 -1 17 14 16 -61 1 1 0 11 1 -50 -2 -1 63 15 20 -20 -2 -1 46 27 32
-25 -1 -1 79 50 8 -29 1 1 50 14 21 -61 1 1 43 11 43 -50 -2 -1 56 15 23 -20 -2 -1 71 27 25
-25 -1 -1 55 50 14 -29 1 1 30 14 22 -61 1 1 0 11 1 -48 -2 -1 30 26 29 -20 -2 -1 33 27 33
-23 -1 -1 22 12 22 31 -1 -1 0 10 1 -63 1 1 56 30 39 -48 -2 -1 37 26 37 -20 -2 -1 49 27 29
-23 -1 -1 28 12 27 -31 1 1 3 10 2 -63 1 1 0 30 1 -48 -2 -1 38 26 38 -20 -2 -1 64 27 19
-23 -1 -1 0 12 1 -31 1 1 0 10 1 -63 1 1 18 30 18 -46 -2 -1 12 19 12 -20 -2 -1 0 27 1
-23 -1 -1 50 12 28 -31 1 1 42 10 41 -63 1 1 0 30 1 -46 -2 -1 59 19 22 -18 -2 -1 35 0 35
-23 -1 -1 0 12 1 -31 1 1 24 10 23 -63 1 1 0 30 1 -46 -2 -1 0 19 1 -18 -2 -1 0 0 1
-23 -1 -1 23 12 22 -31 1 1 31 10 31 -65 1 1 0 27 1 -44 -2 -1 43 3 42 -18 -2 -1 0 0 1
-23 -1 -1 17 12 17 -33 1 1 31 30 31 -65 1 1 45 27 45 -44 -2 -1 0 3 1 -18 -2 -1 0 0 1
-21 -1 -1 83 98 12 -33 1 1 56 30 12 -65 1 1 0 27 1 -44 -2 -1 51 3 37 -18 -2 -1 67 0 16
-21 -1 -1 81 98 7 -33 1 1 64 30 20 -65 1 1 20 27 19 -44 -2 -1 35 3 35 -18 -2 -1 24 0 24

-21 -1 -1 64 98 9 33 -1 -1 34 30 33 -65 1 1 19 27 19 -42 -2 -1 56 5 21 -16 -2 -1 0 7 1
 -21 -1 -1 81 98 6 -33 1 1 64 30 9 -67 1 1 0 17 1 -42 -2 -1 65 5 12 -16 -2 -1 0 7 1
 -21 -1 -1 67 98 10 -35 1 1 29 42 29 -67 1 1 12 17 11 -42 -2 -1 30 5 30 -16 -2 -1 41 7 41
 -19 -1 -1 57 64 8 35 -1 -1 45 42 23 -67 1 1 39 17 39 -42 -2 -1 56 5 29 -16 -2 -1 26 7 25
 -19 -1 -1 62 64 15 -35 1 1 47 42 16 -67 1 1 30 17 29 -40 -2 -1 54 24 30 16 2 1 29 7 13
 -19 -1 -1 63 64 8 -35 1 1 60 42 20 -69 1 1 0 31 1 -40 -2 -1 70 24 20 -16 -2 -1 0 7 1
 -19 -1 -1 58 64 16 -35 1 1 56 42 13 -69 1 1 49 31 37 -40 -2 -1 0 24 1 -16 -2 -1 0 7 1
 -17 -1 -1 275 348 9 -35 1 1 16 42 16 -69 1 1 89 31 23 -40 -2 -1 45 24 44 14 2 1 29 7 16
 -15 -1 -1 92 89 5 -37 1 1 0 38 1 -69 1 1 30 31 30 -40 -2 -1 56 24 20 -14 -2 -1 19 7 18
 -15 -1 -1 91 89 6 -37 1 1 43 38 20 -71 1 1 0 13 1 -38 -2 -1 60 24 24 -14 -2 -1 0 7 1
 -15 -1 -1 82 89 5 -37 1 1 46 38 46 -71 1 1 0 13 1 -38 -2 -1 59 24 21 -14 -2 -1 14 7 14
 -13 -1 -1 122 151 5 -37 1 1 0 38 1 -71 1 1 0 13 1 -38 -2 -1 48 24 47 -14 -2 -1 40 7 13
 -13 -1 -1 111 151 5 37 -1 -1 44 38 23 -71 1 1 69 13 34 -38 -2 -1 41 24 40 -12 -2 -1 54 8 9
 -13 -1 -1 111 151 5 -37 1 1 0 38 1 -73 1 1 21 6 20 -38 -2 -1 35 24 35 -12 -2 -1 46 8 45
 11 1 1 34 47 4 -39 1 1 19 4 19 -73 1 1 48 6 48 -38 -2 -1 36 24 36 -12 -2 -1 44 8 27
 -11 -1 -1 14 47 14 39 -1 -1 14 4 14 -73 1 1 23 6 22 -38 -2 -1 70 24 16 -12 -2 -1 32 8 32
 -11 -1 -1 33 47 23 -39 1 1 0 4 1 -75 1 1 48 47 47 -36 -2 -1 0 26 1 12 2 1 27 8 20
 -11 -1 -1 37 47 5 -39 1 1 0 4 1 -75 1 1 32 47 32 -36 -2 -1 33 26 32 -10 -2 -1 75 26 9
 -11 -1 -1 39 47 11 -39 1 1 0 4 1 -75 1 1 23 47 22 -36 -2 -1 0 26 1 -10 -2 -1 71 26 14
 7 1 1 27 27 10 -39 1 1 0 4 1 -77 1 1 66 62 23 -36 -2 -1 64 26 18 8 2 1 34 13 15

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-8 -2 -1 45 13 12 -38 2 1 39 17 38 -68 2 1 60 69 23 -28 -4 -1 0 17 1 10 -4 -1 51 23 22
 -8 -2 -1 51 13 13 38 -2 -1 50 17 22 -68 2 1 74 69 21 -28 -4 -1 63 17 26 -10 4 1 22 23 21

-8-2-1 0 13 1 -38 2 1 40 17 40 -68 2 1 77 69 29 -26-4-1 40 24 39 -12 4 1 30 33 30
 -8-2-1 25 13 24 -38 2 1 0 17 1 -68 2 1 76 69 27 -26-4-1 27 24 27 -12 4 1 36 33 35
 -6-2-1 16 41 15 -38 2 1 55 17 15 -68 2 1 72 69 20 -26-4-1 85 24 13 12-4-1 0 33 1
 -6-2-1 44 41 7 -40 2 1 0 19 1 -70 2 1 52 41 29 -24-4-1 39 7 39 12-4-1 26 33 26
 -6-2-1 0 41 1 -40 2 1 12 19 12 -70 2 1 73 41 33 -24-4-1 31 7 31 12-4-1 75 33 23
 6 2 1 46 41 10 40-2-1 56 19 21 -70 2 1 81 41 35 -24-4-1 67 7 21 14-4-1 47 2 34
 -6-2-1 0 41 1 -40 2 1 0 19 1 -70 2 1 0 41 1 -22-4-1 25 4 24 14-4-1 0 2 1
 -4-2-1 47 45 46 -40 2 1 19 19 19 -70 2 1 47 41 47 -22-4-1 0 4 1 14-4-1 64 2 29
 -4-2-1 37 45 21 -40 2 1 41 19 18 -72 2 1 46 18 46 -22-4-1 52 4 51 -14 4 1 36 2 36
 4 2 1 29 45 28 -42 2 1 11 0 11 -72 2 1 29 18 29 -22-4-1 65 4 37 -14 4 1 25 2 25
 -4-2-1 21 45 20 -42 2 1 29 0 29 -72 2 1 0 18 1 -20-4-1 55 18 28 16-4-1 42 14 42
 -4-2-1 26 45 25 -42 2 1 0 0 1 -72 2 1 16 18 16 -20-4-1 0 18 1 16-4-1 0 14 1
 0-2-1 165 218 6 42-2-1 69 0 17 -72 2 1 0 18 1 -20-4-1 66 18 20 -16 4 1 0 14 1
 0 2 1 161 218 5 -42 2 1 0 0 1 -74 2 1 71 29 37 -20-4-1 21 18 20 -16 4 1 24 14 24
 0-2-1 160 218 6 -42 2 1 0 0 1 -74 2 1 28 29 28 -20-4-1 14 18 14 -18 4 1 0 6 1
 -2 2 1 126 179 5 -44 2 1 15 11 15 -74 2 1 30 29 30 -18-4-1 32 19 31 18-4-1 0 6 1
 4-2-1 40 32 18 44-2-1 0 11 1 -74 2 1 97 29 27 -18-4-1 36 19 36 -18 4 1 23 6 23
 4-2-1 33 32 33 -44 2 1 0 11 1 -74 2 1 0 29 1 -18-4-1 49 19 32 18-4-1 0 6 1
 -4 2 1 30 32 30 -44 2 1 0 11 1 -76 2 1 94 26 30 -18-4-1 0 19 1 -20 4 1 0 13 1
 6-2-1 33 36 32 -44 2 1 47 11 47 -76 2 1 49 26 48 -16-4-1 2 13 2 20-4-1 49 13 28
 -6 2 1 47 36 12 -44 2 1 0 11 1 -76 2 1 0 26 1 -16-4-1 71 13 20 -20 4 1 0 13 1
 6-2-1 55 36 12 -46 2 1 13 7 12 -76 2 1 49 26 48 -16-4-1 0 13 1 20-4-1 47 13 33
 -8 2 1 27 22 27 -46 2 1 59 7 29 -76 2 1 37 26 37 -16-4-1 35 13 34 -22 4 1 18 9 17
 8-2-1 34 22 33 -46 2 1 13 7 12 -78 2 1 17 21 17 -14-4-1 25 20 24 22-4-1 0 9 1
 8-2-1 21 22 20 46-2-1 36 7 35 -78 2 1 57 21 31 -14-4-1 25 20 25 22-4-1 55 9 24
 10-2-1 34 7 33 -46 2 1 52 7 52 -78 2 1 0 21 1 -14-4-1 24 20 23 -22 4 1 0 9 1
 10-2-1 41 7 25 -46 2 1 0 7 1 -72-4-1 23 23 23 -12-4-1 0 9 1 24-4-1 66 3 19

-10 2 1 35 7 21 48 -2 -1 29 21 28 -70 -4 -1 0 29 1 -12 -4 -1 58 9 8 -24 4 1 0 3 1
12 -2 -1 28 21 27 -48 2 1 30 21 29 -68 -4 -1 24 34 23 -12 -4 -1 0 9 1 24 -4 -1 57 3 22
-12 2 1 35 21 17 -48 2 1 17 21 16 -66 -4 -1 23 54 23 -12 -4 -1 44 9 43 -24 4 1 0 3 1
12 -2 -1 44 21 22 -48 2 1 50 21 36 -66 -4 -1 33 54 32 -12 -4 -1 37 9 26 -24 4 1 0 3 1
-12 2 1 46 21 14 -48 2 1 25 21 24 -64 -4 -1 100 95 12 -10 -4 -1 42 1 26 -26 4 1 61 37 11
14 -2 -1 27 19 27 -48 2 1 0 21 1 -62 -4 -1 77 52 12 -10 -4 -1 25 1 25 26 -4 -1 70 37 18
-14 2 1 32 19 18 -48 2 1 85 21 20 -62 -4 -1 103 52 11 -10 -4 -1 44 1 38 -26 4 1 0 37 1
-14 2 1 26 19 25 -50 2 1 59 39 36 -60 -4 -1 0 20 1 -10 -4 -1 0 1 1 -26 4 1 0 37 1
14 -2 -1 36 19 35 -50 2 1 18 39 18 -60 -4 -1 7 20 6 -8 -4 -1 0 14 1 26 -4 -1 54 37 24
16 -2 -1 42 13 20 -50 2 1 0 39 1 -58 -4 -1 0 34 1 -8 -4 -1 0 14 1 -28 4 1 8 20 7
16 -2 -1 0 13 1 -50 2 1 63 39 16 -58 -4 -1 13 34 12 -8 -4 -1 38 14 38 -28 4 1 55 20 15
-16 2 1 15 13 14 -50 2 1 60 39 26 -56 -4 -1 0 11 1 -8 -4 -1 58 14 15 -28 4 1 0 20 1
-16 2 1 43 13 17 -50 2 1 0 39 1 -56 -4 -1 0 11 1 -8 -4 -1 9 14 8 28 -4 -1 0 20 1
-18 2 1 14 3 14 -50 2 1 16 39 15 -54 -4 -1 0 14 1 -6 -4 -1 44 5 43 28 -4 -1 42 20 42
18 -2 -1 0 3 1 -52 2 1 0 22 1 -54 -4 -1 42 14 41 -6 -4 -1 18 5 17 -30 4 1 160 157 7
-18 2 1 0 3 1 -52 2 1 15 22 15 -54 -4 -1 0 14 1 -6 -4 -1 40 5 40 -30 4 1 162 157 8
18 -2 -1 0 3 1 -52 2 1 52 22 36 -52 -4 -1 0 11 1 -6 -4 -1 12 5 11 30 -4 -1 158 157 8
-20 2 1 30 11 29 -52 2 1 20 22 20 -52 -4 -1 41 11 40 6 4 1 29 5 28 -32 4 1 179 179 7
-20 2 1 0 11 1 -52 2 1 70 22 29 -52 -4 -1 0 11 1 -6 -4 -1 43 5 27 32 -4 -1 174 179 8
20 -2 -1 13 11 12 -52 2 1 12 22 12 -50 -4 -1 17 25 17 -4 -4 -1 0 8 1 -32 4 1 179 179 9
20 -2 -1 8 11 7 -52 2 1 27 22 26 -50 -4 -1 0 25 1 -4 -4 -1 35 8 34 34 -4 -1 113 107 8
22 -2 -1 22 14 22 -54 2 1 24 16 23 -50 -4 -1 35 25 34 -4 -4 -1 40 8 29 -34 4 1 102 107 9
-22 2 1 52 14 19 -54 2 1 0 16 1 -48 -4 -1 0 33 1 4 4 1 40 8 27 -34 4 1 116 107 7
-22 2 1 6 14 6 -54 2 1 0 16 1 -48 -4 -1 42 33 41 -4 -4 -1 0 8 1 -36 4 1 42 44 24
22 -2 -1 25 14 24 -54 2 1 0 16 1 -48 -4 -1 34 33 34 -4 -4 -1 0 8 1 -36 4 1 64 44 11
24 -2 -1 45 3 19 -54 2 1 0 16 1 -48 -4 -1 95 33 25 -2 -4 -1 0 18 1 -36 4 1 72 44 17
24 -2 -1 40 3 26 -54 2 1 47 16 25 -46 -4 -1 87 14 15 -2 -4 -1 18 18 17 36 -4 -1 45 44 44

-24 2 1 24 3 24 -56 2 1 29 21 29 -46 -4 -1 27 14 27 -2 -4 -1 38 18 38 38 -4 -1 53 45 30
-24 2 1 0 3 1 -56 2 1 37 21 37 -46 -4 -1 27 14 26 -2 -4 -1 0 18 1 -38 4 1 45 45 45
-24 2 1 0 3 1 -56 2 1 56 21 29 -46 -4 -1 0 14 1 2 4 1 0 18 1 -38 4 1 29 45 28
-26 2 1 31 31 30 -56 2 1 38 21 37 -44 -4 -1 0 13 1 0 -4 -1 168 192 7 -38 4 1 24 45 24
26 -2 -1 52 31 17 -56 2 1 0 21 1 -44 -4 -1 39 13 39 0 -4 -1 182 192 8 -38 4 1 80 45 15
-26 2 1 30 31 29 -56 2 1 82 21 25 -44 -4 -1 0 13 1 0 4 1 153 192 7 40 -4 -1 44 33 44
-26 2 1 0 31 1 -58 2 1 51 23 50 -44 -4 -1 49 13 48 0 -4 -1 168 192 7 -40 4 1 69 33 18
-26 2 1 21 31 21 -58 2 1 0 23 1 -44 -4 -1 0 13 1 0 -4 -1 166 192 8 -40 4 1 28 33 28
-28 2 1 27 18 27 -58 2 1 70 23 38 -40 -4 -1 103 31 28 2 -4 -1 40 25 40 -40 4 1 0 33 1
28 -2 -1 0 18 1 -58 2 1 4 23 4 -40 -4 -1 16 31 16 2 -4 -1 27 25 27 -42 4 1 45 30 23
-28 2 1 0 18 1 -58 2 1 0 23 1 -40 -4 -1 0 31 1 2 -4 -1 16 25 16 -42 4 1 0 30 1
-28 2 1 31 18 31 -60 2 1 79 69 17 -40 -4 -1 45 31 44 -2 4 1 0 25 1 42 -4 -1 0 30 1
-28 2 1 22 18 22 -60 2 1 82 69 29 -38 -4 -1 77 25 14 2 -4 -1 42 25 31 -42 4 1 23 30 23
-30 2 1 55 27 19 -60 2 1 88 69 14 -38 -4 -1 0 25 1 4 -4 -1 0 8 1 -44 4 1 51 17 29
-30 2 1 0 27 1 -60 2 1 70 69 13 -38 -4 -1 15 25 14 -4 4 1 0 8 1 44 -4 -1 75 17 19
-30 2 1 47 27 18 -60 2 1 77 69 15 -36 -4 -1 68 51 26 4 -4 -1 0 8 1 -44 4 1 38 17 38
30 -2 -1 16 27 15 -62 2 1 152 141 9 -36 -4 -1 22 51 21 4 -4 -1 30 8 29 -44 4 1 17 17 17
-30 2 1 0 27 1 -62 2 1 159 141 10 -36 -4 -1 68 51 28 4 -4 -1 39 8 39 -46 4 1 33 15 33
-32 2 1 177 190 7 -62 2 1 152 141 10 -34 -4 -1 100 98 14 -6 4 1 18 1 18 -46 4 1 56 15 26
32 -2 -1 161 190 8 -62 2 1 149 141 9 -34 -4 -1 124 98 10 6 -4 -1 14 1 14 -46 4 1 1 15 1
-32 2 1 168 190 7 -62 2 1 145 141 11 -34 -4 -1 106 98 10 -6 4 1 44 1 24 46 -4 -1 53 15 37
34 -2 -1 24 13 24 -64 2 1 212 181 9 -34 -4 -1 116 98 10 6 -4 -1 84 1 21 -48 4 1 69 29 20
-34 2 1 0 13 1 -64 2 1 208 181 9 -32 -4 -1 129 130 8 6 -4 -1 36 1 35 -48 4 1 0 29 1
-34 2 1 29 13 28 -64 2 1 206 181 10 -32 -4 -1 120 130 12 8 -4 -1 55 11 44 48 -4 -1 46 29 46
-34 2 1 27 13 27 -64 2 1 184 181 11 -32 -4 -1 132 130 8 8 -4 -1 0 11 1 -48 4 1 25 29 24
-34 2 1 31 13 30 -64 2 1 193 181 10 -32 -4 -1 111 130 11 -8 4 1 16 11 16 -48 4 1 20 29 19
-36 2 1 0 3 1 -66 2 1 84 81 15 -30 -4 -1 241 217 9 8 -4 -1 0 11 1 -50 4 1 0 18 1

-36 2 1 0 3 1 -66 2 1 112 81 19 -30 -4 -1 223 217 10 -8 4 1 20 11 19 -50 4 1 26 18 26
-36 2 1 28 3 27 -66 2 1 76 81 17 -30 -4 -1 228 217 10 10 -4 -1 39 23 38 -52 4 1 34 5 33
-36 2 1 0 3 1 -66 2 1 82 81 18 -30 -4 -1 242 217 10 -10 4 1 0 23 1 -52 4 1 0 5 1
36 -2 -1 0 3 1 -66 2 1 40 81 39 -28 -4 -1 93 17 19 10 -4 -1 0 23 1 -54 4 1 0 11 1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 27

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-54	4	1	0	11	1	-29	-5	-1	50	28	49	-11	5	1	69	44	17	-43	-7	-1	60	39	60	9	-7	-1	0	12	1
-56	4	1	0	12	1	-29	-5	-1	97	28	24	-11	5	1	28	44	28	-41	-7	-1	62	31	46	11	-7	-1	0	28	1
-56	4	1	34	12	34	-29	-5	-1	0	28	1	13	-5	-1	70	20	20	-41	-7	-1	0	31	1	13	-7	-1	0	19	1
-58	4	1	46	12	45	-29	-5	-1	0	28	1	-13	5	1	0	20	1	-41	-7	-1	40	31	39	15	-7	-1	250	214	11
-58	4	1	12	12	12	-27	-5	-1	0	4	1	13	-5	-1	26	20	26	-39	-7	-1	43	0	43	17	-7	-1	4	47	4
-60	4	1	0	3	1	-27	-5	-1	50	4	49	-13	5	1	22	20	22	-39	-7	-1	0	0	1	-19	7	1	49	57	37
-60	4	1	60	3	36	-27	-5	-1	0	4	1	-15	5	1	221	284	9	-39	-7	-1	70	0	70	-21	7	1	55	51	27
-60	4	1	0	3	1	-27	-5	-1	57	4	39	15	-5	-1	243	284	9	-37	-7	-1	0	21	1	-23	7	1	33	44	33
-62	4	1	65	63	64	-25	-5	-1	0	52	1	15	-5	-1	240	284	9	-37	-7	-1	111	21	37	-25	7	1	34	30	34
-62	4	1	66	63	30	-25	-5	-1	53	52	39	-15	5	1	227	284	10	-37	-7	-1	10	21	10	-27	7	1	5	26	5
-62	4	1	66	63	21	-25	-5	-1	39	52	39	17	-5	-1	52	32	33	-35	-7	-1	0	28	1	-29	7	1	0	14	1
-64	4	1	40	33	40	-25	-5	-1	45	52	44	-17	5	1	41	32	30	-35	-7	-1	0	28	1	-31	7	1	38	9	38
-64	4	1	0	33	1	-23	-5	-1	0	1	1	17	-5	-1	64	32	27	-35	-7	-1	0	28	1	-33	7	1	10	13	10
-64	4	1	0	33	1	-23	-5	-1	0	1	1	-17	5	1	72	32	17	-33	-7	-1	0	23	1	-35	7	1	0	37	1
-66	4	1	0	22	1	-23	-5	-1	51	1	50	19	-5	-1	49	55	49	-33	-7	-1	0	23	1	-37	7	1	0	28	1
-66	4	1	0	22	1	-21	-5	-1	38	57	38	-19	5	1	47	55	35	-33	-7	-1	42	23	41	-39	7	1	0	1	1
-66	4	1	0	22	1	-21	-5	-1	63	57	25	-19	5	1	36	55	36	-31	-7	-1	107	10	36	-41	7	1	24	4	23
-68	4	1	92	33	61	-21	-5	-1	84	57	27	19	-5	-1	50	55	39	-31	-7	-1	0	10	1	-43	7	1	0	5	1
-68	4	1	30	33	29	-19	-5	-1	22	27	21	21	-5	-1	0	18	1	-31	-7	-1	74	10	36	-45	7	1	0	6	1

-68 4 1 25 33 25 -19 -5 -1 48 27 48 21 -5 -1 11 18 11 -29 -7 -1 45 24 45 -47 7 1 225 208 11
 -70 4 1 32 20 32 -19 -5 -1 5 27 4 -21 5 1 0 18 1 -29 -7 -1 64 24 63 -49 7 1 0 8 1
 -70 4 1 35 20 35 -17 -5 -1 198 230 8 -21 5 1 13 18 13 -29 -7 -1 74 24 73 -51 7 1 0 12 1
 -70 4 1 114 20 41 -17 -5 -1 199 230 9 -23 5 1 36 25 36 -27 -7 -1 0 18 1 -38 -8 -1 65 13 55
 -72 4 1 19 17 18 -17 -5 -1 197 230 9 23 -5 -1 59 25 28 -27 -7 -1 0 18 1 -38 -8 -1 85 13 84
 -72 4 1 0 17 1 -15 -5 -1 74 61 12 -23 5 1 0 25 1 -27 -7 -1 0 18 1 -36 -8 -1 23 25 23
 -67 -5 -1 104 4 14 -15 -5 -1 31 61 30 23 -5 -1 23 25 23 -25 -7 -1 15 18 14 -36 -8 -1 0 25 1
 -65 -5 -1 0 12 1 -15 -5 -1 50 61 23 -25 5 1 10 14 10 -25 -7 -1 0 18 1 -34 -8 -1 156 84 18
 -63 -5 -1 92 2 14 -13 -5 -1 95 120 12 25 -5 -1 48 14 47 -25 -7 -1 64 18 63 -34 -8 -1 78 84 38
 -63 -5 -1 11 2 11 -13 -5 -1 103 120 9 -25 5 1 45 14 35 -23 -7 -1 0 22 1 -32 -8 -1 79 74 33
 -61 -5 -1 62 11 50 -13 -5 -1 97 120 8 25 -5 -1 63 14 25 -23 -7 -1 0 22 1 -32 -8 -1 144 74 35
 -61 -5 -1 0 11 1 -11 -5 -1 0 30 1 -27 5 1 31 6 31 -23 -7 -1 23 22 23 -30 -8 -1 208 155 15
 -59 -5 -1 33 23 32 -11 -5 -1 26 30 26 -27 5 1 0 6 1 -21 -7 -1 120 74 17 -30 -8 -1 154 155 17
 -59 -5 -1 40 23 39 -11 -5 -1 54 30 54 27 -5 -1 80 6 12 -21 -7 -1 124 74 21 -28 -8 -1 47 10 47
 -59 -5 -1 23 23 22 -11 -5 -1 68 30 10 27 -5 -1 30 6 30 -21 -7 -1 119 74 16 -28 -8 -1 56 10 55
 -57 -5 -1 62 33 48 -9 -5 -1 54 48 54 29 -5 -1 58 15 31 -19 -7 -1 40 44 40 -28 -8 -1 0 10 1
 -57 -5 -1 12 33 12 -9 -5 -1 73 48 20 -29 5 1 47 15 37 -19 -7 -1 66 44 65 -26 -8 -1 60 5 59
 -57 -5 -1 38 33 38 -9 -5 -1 60 48 26 -29 5 1 0 15 1 -19 -7 -1 35 44 34 -26 -8 -1 0 5 1
 -55 -5 -1 0 0 1 -9 -5 -1 0 48 1 29 -5 -1 70 15 23 -19 -7 -1 30 44 30 -26 -8 -1 7 5 7
 -55 -5 -1 72 0 37 -7 -5 -1 22 20 22 -31 5 1 12 26 11 -17 -7 -1 265 233 12 -24 -8 -1 43 5 42
 -55 -5 -1 9 0 9 -7 -5 -1 20 20 19 -31 5 1 11 26 10 -15 -7 -1 172 126 13 -24 -8 -1 49 5 49
 -53 -5 -1 73 72 13 -7 -5 -1 0 20 1 31 -5 -1 38 26 38 -15 -7 -1 174 126 12 -24 -8 -1 0 5 1
 -53 -5 -1 90 72 25 -7 -5 -1 18 20 18 -33 5 1 0 14 1 -15 -7 -1 193 126 13 -22 -8 -1 50 5 49
 -53 -5 -1 15 72 14 -7 -5 -1 16 20 16 33 -5 -1 51 14 36 -13 -7 -1 89 75 22 -22 -8 -1 85 5 54
 -51 -5 -1 0 14 1 -5 -5 -1 41 33 30 -33 5 1 40 14 39 -13 -7 -1 126 75 18 -22 -8 -1 0 5 1
 -51 -5 -1 34 14 33 -5 -5 -1 45 33 37 35 -5 -1 35 20 34 -13 -7 -1 78 75 13 -20 -8 -1 0 25 1
 -51 -5 -1 24 14 24 -5 -5 -1 70 33 22 -35 5 1 34 20 34 -13 -7 -1 101 75 16 -20 -8 -1 92 25 60

-49 -5 -1 140 133 8 -5 -5 -1 65 33 23 -35 5 1 66 20 22 -11 -7 -1 6 11 5 -20 -8 -1 38 25 38
 -49 -5 -1 130 133 12 -5 -5 -1 85 33 21 -35 5 1 41 20 31 -11 -7 -1 54 11 53 -18 -8 -1 87 16 48
 -49 -5 -1 128 133 10 -3 -5 -1 0 3 1 -37 5 1 50 30 21 -11 -7 -1 0 11 1 -18 -8 -1 0 16 1
 -49 -5 -1 133 133 15 -3 -5 -1 65 3 30 -37 5 1 0 30 1 -11 -7 -1 0 11 1 -18 -8 -1 42 16 42
 -47 -5 -1 205 225 9 -3 -5 -1 52 3 31 -39 5 1 28 1 27 -9 -7 -1 15 20 14 -18 -8 -1 0 16 1
 -47 -5 -1 204 225 9 -3 -5 -1 53 3 24 -39 5 1 31 1 30 -9 -7 -1 0 20 1 -16 -8 -1 61 15 60
 -47 -5 -1 204 225 10 -1 -5 -1 28 30 27 -41 5 1 0 17 1 -9 -7 -1 59 20 58 -16 -8 -1 96 15 54
 -47 -5 -1 211 225 12 -1 -5 -1 0 30 1 -41 5 1 52 17 22 -9 -7 -1 52 20 51 -16 -8 -1 35 15 34
 -45 -5 -1 140 102 13 1 5 1 19 30 18 -43 5 1 0 11 1 -7 -7 -1 19 21 18 -16 -8 -1 42 15 41
 -45 -5 -1 116 102 12 -1 -5 -1 0 30 1 -43 5 1 30 11 29 -7 -7 -1 72 21 71 -14 -8 -1 42 17 41
 -45 -5 -1 98 102 12 -1 -5 -1 0 30 1 -45 5 1 14 30 13 -7 -7 -1 31 21 31 -14 -8 -1 56 17 56
 -43 -5 -1 49 7 49 1 -5 -1 0 8 1 -45 5 1 37 30 37 -7 -7 -1 0 21 1 -14 -8 -1 0 17 1
 -43 -5 -1 0 7 1 -1 5 1 34 8 33 -47 5 1 181 184 10 -5 -7 -1 72 33 71 -14 -8 -1 40 17 39
 -43 -5 -1 0 7 1 1 -5 -1 0 8 1 -47 5 1 187 184 11 -5 -7 -1 31 33 31 -12 -8 -1 65 5 64
 -41 -5 -1 35 26 35 1 -5 -1 63 8 19 -49 5 1 88 86 16 -5 -7 -1 0 33 1 -12 -8 -1 0 5 1
 -41 -5 -1 58 26 41 1 -5 -1 0 8 1 -49 5 1 84 86 15 -5 -7 -1 67 33 63 -12 -8 -1 36 5 35
 -41 -5 -1 0 26 1 3 -5 -1 0 17 1 -51 5 1 0 28 1 -3 -7 -1 0 37 1 -12 -8 -1 0 5 1
 -41 -5 -1 44 26 44 3 -5 -1 38 17 38 -51 5 1 42 28 41 -3 -7 -1 49 37 49 -10 -8 -1 10 11 10
 -41 -5 -1 100 26 33 -3 5 1 0 17 1 -53 5 1 47 56 30 -3 -7 -1 0 37 1 -10 -8 -1 91 11 43
 -39 -5 -1 0 1 1 3 -5 -1 0 17 1 -53 5 1 45 56 45 -3 -7 -1 116 37 33 -10 -8 -1 0 11 1
 -39 -5 -1 17 1 17 3 -5 -1 0 17 1 -55 5 1 10 31 10 -1 -7 -1 16 16 15 -10 -8 -1 53 11 52
 -39 -5 -1 51 1 50 5 -5 -1 27 29 27 -55 5 1 0 31 1 -1 -7 -1 21 16 21 -8 -8 -1 0 17 1
 -37 -5 -1 55 34 54 -5 5 1 0 29 1 -57 5 1 29 13 28 -1 -7 -1 0 16 1 -8 -8 -1 40 17 40
 -37 -5 -1 0 34 1 5 -5 -1 43 29 43 -57 5 1 20 13 20 -1 -7 -1 0 16 1 -8 -8 -1 30 17 30
 -37 -5 -1 53 34 52 5 -5 -1 0 29 1 -59 5 1 0 1 1 1 -7 -1 0 21 1 -8 -8 -1 84 17 69
 -37 -5 -1 70 34 31 5 -5 -1 25 29 24 -59 5 1 29 1 28 1 -7 -1 0 21 1 -6 -8 -1 0 18 1
 -35 -5 -1 0 33 1 -5 5 1 48 29 29 -61 5 1 32 6 31 1 -7 -1 0 21 1 -6 -8 -1 0 18 1

-35 -5 -1 22 33 21 7 -5 -1 56 40 22 -61 5 1 13 6 13 1 -7 -1 24 21 24 -6 -8 -1 0 18 1
 -35 -5 -1 80 33 43 -7 5 1 0 40 1 -63 5 1 7 28 6 3 -7 -1 72 29 51 -6 -8 -1 0 18 1
 -35 -5 -1 43 33 42 7 -5 -1 96 40 20 -63 5 1 37 28 36 3 -7 -1 0 29 1 -4 -8 -1 0 25 1
 -33 -5 -1 0 15 1 7 -5 -1 41 40 40 -65 5 1 34 19 34 3 -7 -1 64 29 63 -4 -8 -1 4 25 4
 -33 -5 -1 95 15 31 7 -5 -1 30 40 30 -65 5 1 0 19 1 3 -7 -1 37 29 37 -4 -8 -1 43 25 42
 -33 -5 -1 38 15 38 -7 5 1 0 40 1 -67 5 1 0 9 1 5 -7 -1 0 14 1 -4 -8 -1 106 25 35
 -33 -5 -1 51 15 50 9 -5 -1 0 5 1 -67 5 1 0 9 1 5 -7 -1 55 14 55 -2 -8 -1 99 12 34
 -33 -5 -1 63 15 47 -9 5 1 0 5 1 -49 -7 -1 171 96 15 5 -7 -1 93 14 14 -2 -8 -1 0 12 1
 -31 -5 -1 50 2 50 9 -5 -1 12 5 12 -47 -7 -1 137 120 12 5 -7 -1 35 14 35 -2 -8 -1 14 12 13
 -31 -5 -1 0 2 1 -9 5 1 0 5 1 -47 -7 -1 182 120 14 5 -7 -1 10 14 10 -2 -8 -1 40 12 39
 -31 -5 -1 0 2 1 9 -5 -1 34 5 34 -45 -7 -1 122 112 12 7 -7 -1 88 13 15 0 -8 -1 53 58 32
 -31 -5 -1 0 2 1 11 -5 -1 65 44 21 -45 -7 -1 136 112 17 7 -7 -1 0 13 1 0 -8 -1 81 58 27
 -31 -5 -1 0 2 1 11 -5 -1 0 44 1 -43 -7 -1 73 39 73 7 -7 -1 0 13 1 0 -8 -1 87 58 41
 -29 -5 -1 20 28 19 11 -5 -1 35 44 35 -43 -7 -1 60 39 60 7 -7 -1 30 13 29 0 -8 -1 99 58 40

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 28

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
2	-8	-1	86	19	49	-26	-8	2	0	28	1	-25	-7	2	0	12	1	21	-5	2	51	51	51	-19	-5	2	59	22	23
2	-8	-1	55	19	54	-26	-8	2	0	28	1	-25	-7	2	0	12	1	-21	5	-2	53	51	21	-19	-5	2	55	22	39
2	-8	-1	22	19	21	-26	-8	2	69	28	40	-25	-7	2	31	12	30	21	-5	2	8	51	8	19	5	-2	0	22	1
2	-8	-1	40	19	40	-28	-8	2	47	29	46	-25	-7	2	0	12	1	-21	5	-2	58	51	43	-19	-5	2	32	22	31
4	-8	-1	0	19	1	-28	-8	2	62	29	38	-27	-7	2	0	16	1	-19	5	-2	73	69	14	-21	-5	2	44	22	44
4	-8	-1	14	19	14	-28	-8	2	0	29	1	-27	-7	2	0	16	1	19	-5	2	82	69	13	-21	-5	2	74	22	23
6	-8	-1	0	24	1	-30	-8	2	142	137	15	-27	-7	2	54	16	53	19	-5	2	53	69	24	-21	-5	2	8	22	7
6	-8	-1	6	24	5	-30	-8	2	126	137	10	-27	-7	2	25	16	24	-19	5	-2	106	69	17	-21	-5	2	0	22	1

8-8-1 0 16 1 -30-8 2 143 137 10 -29-7 2 49 12 49 17-5 2 55 60 23 -21-5 2 62 22 21
 10-8-1 14 10 13 -32-8 2 79 50 27 -29-7 2 0 12 1 -17 5-2 57 60 17 -23-5 2 19 1 18
 12-8-1 34 9 33 -32-8 2 42 50 42 -29-7 2 0 12 1 17-5 2 81 60 14 -23-5 2 52 1 37
 14-8-1 0 20 1 -32-8 2 65 50 30 -29-7 2 17 12 17 -17 5-2 80 60 23 -23-5 2 48 1 38
 16-8-1 0 17 1 -34-8 2 96 87 22 -31-7 2 39 25 39 -15 5-2 183 180 7 -23-5 2 0 1 1
 -26 8 1 44 40 44 -34-8 2 76 87 26 -31-7 2 0 25 1 -15 5-2 177 180 9 -23-5 2 52 1 51
 -28 8 1 49 23 49 -47 7-2 171 156 13 -31-7 2 54 25 53 15-5 2 189 180 9 -23-5 2 10 1 10
 -30 8 1 108 145 13 -47 7-2 190 156 8 -31-7 2 93 25 38 15-5 2 181 180 8 -25-5 2 0 2 1
 -32 8 1 81 112 16 -45 7-2 0 13 1 -33-7 2 87 9 50 13-5 2 12 20 11 -25-5 2 49 2 48
 -34 8 1 76 62 22 -45 7-2 0 13 1 -33-7 2 27 9 26 -13 5-2 41 20 41 -25-5 2 0 2 1
 -36 8 1 52 14 52 -43 7-2 54 3 54 -33-7 2 0 9 1 -13 5-2 28 20 27 -25-5 2 33 2 33
 -38 8 1 0 25 1 -43 7-2 44 3 43 -35-7 2 0 11 1 13-5 2 6 20 5 -25-5 2 54 2 53
 -32 8-2 92 82 20 -41 7-2 0 25 1 -35-7 2 52 11 51 -11 5-2 0 19 1 -27-5 2 12 24 12
 -30 8-2 100 79 18 -41 7-2 0 25 1 -35-7 2 47 11 46 11-5 2 38 19 38 -27-5 2 0 24 1
 28-8 2 67 51 38 -39 7-2 0 5 1 -37-7 2 0 12 1 11-5 2 26 19 25 -27-5 2 0 24 1
 26-8 2 44 29 44 -37 7-2 43 8 42 -37-7 2 3 12 3 11-5 2 0 19 1 -27-5 2 0 24 1
 24-8 2 33 2 32 -35 7-2 0 14 1 -37-7 2 43 12 42 -11 5-2 30 19 29 -27-5 2 28 24 28
 22-8 2 0 16 1 -33 7-2 0 17 1 -39-7 2 0 30 1 9-5 2 49 44 24 -29-5 2 0 3 1
 22-8 2 0 16 1 -31 7-2 0 19 1 -39-7 2 45 30 45 -9 5-2 23 44 22 -29-5 2 33 3 33
 20-8 2 0 4 1 -29 7-2 18 5 17 -39-7 2 0 30 1 -9 5-2 39 44 39 -29-5 2 0 3 1
 20-8 2 9 4 9 -27 7-2 0 20 1 -41-7 2 39 21 39 9-5 2 95 44 21 -29-5 2 0 3 1
 18-8 2 41 3 41 -25 7-2 28 8 27 -41-7 2 56 21 55 9-5 2 41 44 41 -29-5 2 50 3 49
 18-8 2 0 3 1 25-7 2 27 8 26 -43-7 2 128 34 29 -7 5-2 0 5 1 -31-5 2 31 10 30
 16-8 2 0 1 1 23-7 2 0 23 1 -43-7 2 0 34 1 7-5 2 23 5 23 -31-5 2 37 10 36
 16-8 2 16 1 16 -23 7-2 25 23 25 -47-7 2 194 127 13 -7 5-2 27 5 26 -31-5 2 98 10 30
 14-8 2 13 32 13 -21 7-2 0 53 1 -49-7 2 128 114 11 7-5 2 0 5 1 -31-5 2 39 10 39
 14-8 2 0 32 1 21-7 2 70 53 27 -63 5-2 0 14 1 7-5 2 62 5 36 -31-5 2 0 10 1

12-8 2 52 4 52 19-7 2 11 34 10 -63 5-2 0 14 1 -5 5-2 0 36 1 -33-5 2 0 2 1
12-8 2 29 4 29 17-7 2 13 5 12 -63 5-2 28 14 27 5-5 2 0 36 1 -33-5 2 0 2 1
10-8 2 0 21 1 15-7 2 300 252 12 -61 5-2 38 9 37 5-5 2 63 36 22 -33-5 2 72 2 26
10-8 2 0 21 1 13-7 2 87 56 19 -61 5-2 46 9 46 -5 5-2 10 36 10 -33-5 2 67 2 67
8-8 2 47 7 47 11-7 2 51 25 51 -61 5-2 0 9 1 5-5 2 0 36 1 -35-5 2 21 11 21
8-8 2 0 7 1 9-7 2 0 2 1 -59 5-2 52 11 51 -3 5-2 0 10 1 -35-5 2 0 11 1
6-8 2 0 5 1 7-7 2 0 3 1 -59 5-2 33 11 32 3-5 2 41 10 41 -35-5 2 0 11 1
6-8 2 0 5 1 5-7 2 0 7 1 -59 5-2 0 11 1 3-5 2 0 10 1 -35-5 2 49 11 49
4-8 2 56 6 55 5-7 2 18 7 17 -57 5-2 35 11 35 3-5 2 53 10 52 -37-5 2 22 28 21
4-8 2 21 6 20 3-7 2 0 10 1 -57 5-2 0 11 1 -3 5-2 33 10 33 -37-5 2 65 28 64
2-8 2 50 34 50 3-7 2 0 10 1 -57 5-2 66 11 18 1-5 2 0 10 1 -37-5 2 0 28 1
2-8 2 42 34 41 1-7 2 0 1 1 -55 5-2 0 21 1 -1 5-2 0 10 1 -37-5 2 38 28 38
2-8 2 76 34 49 1-7 2 25 1 24 -55 5-2 34 21 33 1-5 2 36 10 36 -39-5 2 0 23 1
0-8 2 165 154 13 -1-7 2 17 10 17 -55 5-2 20 21 20 -1-5 2 0 17 1 -39-5 2 39 23 39
0-8 2 170 154 12 -1-7 2 37 10 37 -53 5-2 29 24 28 -1-5 2 49 17 49 -39-5 2 0 23 1
0-8 2 178 154 10 -1-7 2 0 10 1 -53 5-2 0 24 1 -3-5 2 57 34 56 -39-5 2 0 23 1
-2-8 2 0 39 1 -3-7 2 58 4 32 -53 5-2 0 24 1 3 5-2 18 34 18 -41-5 2 46 5 46
-2-8 2 68 39 42 -3-7 2 41 4 41 -51 5-2 0 7 1 -3-5 2 51 34 48 -41-5 2 9 5 8
-2-8 2 79 39 45 -3-7 2 26 4 25 -51 5-2 37 7 37 -3-5 2 31 34 30 -41-5 2 0 5 1
-4-8 2 40 2 40 -5-7 2 44 26 43 -51 5-2 0 7 1 -5-5 2 47 21 46 -41-5 2 0 5 1
-4-8 2 0 2 1 -5-7 2 70 26 51 -49 5-2 45 23 44 -5-5 2 0 21 1 -41-5 2 0 5 1
-4-8 2 0 2 1 -5-7 2 0 26 1 -49 5-2 0 23 1 5 5-2 67 21 31 -43-5 2 32 8 31
-6-8 2 51 19 51 -7-7 2 70 44 57 -47 5-2 233 242 12 -5-5 2 76 21 30 -43-5 2 51 8 50
-6-8 2 21 19 21 -7-7 2 23 44 22 -47 5-2 260 242 8 -7-5 2 68 26 21 -43-5 2 0 8 1
-6-8 2 55 19 55 -7-7 2 32 44 32 -45 5-2 94 97 10 -7-5 2 9 26 9 -43-5 2 15 8 15
-8-8 2 56 5 55 -9-7 2 0 7 1 -45 5-2 98 97 15 -7-5 2 69 26 12 -45-5 2 108 108 9
-8-8 2 0 5 1 -9-7 2 0 7 1 -43 5-2 26 10 26 -7-5 2 75 26 32 -45-5 2 104 108 11

-8	-8	2	26	5	25	-9	-7	2	0	7	1	-43	5	-2	0	10	1	7	5	-2	82	26	22	-45	-5	2	134	108	13
-10	-8	2	41	49	41	-11	-7	2	45	43	44	-41	5	-2	0	1	1	-9	-5	2	50	41	38	-45	-5	2	85	108	12
-10	-8	2	16	49	15	-11	-7	2	64	43	26	-41	5	-2	0	1	1	-9	-5	2	44	41	43	-47	-5	2	179	146	11
-10	-8	2	23	49	23	-11	-7	2	129	43	24	-39	5	-2	0	12	1	-9	-5	2	34	41	33	-47	-5	2	139	146	9
-12	-8	2	69	4	68	-13	-7	2	86	89	14	-37	5	-2	0	10	1	9	5	-2	36	41	35	-47	-5	2	146	146	9
-12	-8	2	0	4	1	-13	-7	2	111	89	14	-35	5	-2	16	33	15	-9	-5	2	37	41	37	-49	-5	2	0	51	1
-12	-8	2	27	4	27	-13	-7	2	117	89	19	-33	5	-2	79	19	21	-11	-5	2	72	77	13	-49	-5	2	17	51	17
-14	-8	2	82	17	49	-15	-7	2	132	109	13	33	-5	2	71	19	30	-11	-5	2	71	77	15	-49	-5	2	13	51	12
-14	-8	2	12	17	12	-15	-7	2	140	109	13	-33	5	-2	0	19	1	11	5	-2	107	77	10	-51	-5	2	21	10	21
-14	-8	2	53	17	52	-15	-7	2	114	109	11	-31	5	-2	0	13	1	-11	-5	2	96	77	9	-51	-5	2	0	10	1
-16	-8	2	0	3	1	-17	-7	2	142	109	12	31	-5	2	68	13	29	-11	-5	2	92	77	12	-51	-5	2	38	10	38
-16	-8	2	42	3	41	-17	-7	2	121	109	11	-31	5	-2	0	13	1	13	5	-2	123	108	10	-53	-5	2	27	21	26
-16	-8	2	0	3	1	-17	-7	2	123	109	14	-29	5	-2	0	4	1	-13	-5	2	118	108	9	-53	-5	2	19	21	19
-18	-8	2	0	26	1	-19	-7	2	17	16	16	-29	5	-2	0	4	1	-13	-5	2	125	108	10	-53	-5	2	0	21	1
-18	-8	2	0	26	1	-19	-7	2	54	16	32	29	-5	2	47	4	46	-13	-5	2	121	108	8	-55	-5	2	37	11	36
-18	-8	2	93	26	41	-19	-7	2	42	16	42	-27	5	-2	25	5	25	-15	-5	2	121	110	7	-55	-5	2	59	11	43
-20	-8	2	0	3	1	-19	-7	2	22	16	22	27	-5	2	28	5	27	-15	-5	2	95	110	9	-55	-5	2	71	11	28
-20	-8	2	72	3	72	-21	-7	2	8	28	7	-27	5	-2	61	5	26	-15	-5	2	95	110	13	-57	-5	2	0	40	1
-20	-8	2	0	3	1	-21	-7	2	0	28	1	-25	5	-2	40	2	39	15	5	-2	106	110	11	-57	-5	2	26	40	26
-22	-8	2	0	35	1	-21	-7	2	0	28	1	-25	5	-2	9	2	9	-15	-5	2	87	110	12	-57	-5	2	70	40	27
-22	-8	2	41	35	41	-21	-7	2	0	28	1	25	-5	2	25	2	25	-17	-5	2	219	218	10	-59	-5	2	57	25	36
-22	-8	2	86	35	48	-23	-7	2	19	31	19	-23	5	-2	62	22	30	-17	-5	2	221	218	9	-59	-5	2	0	25	1
-24	-8	2	0	11	1	-23	-7	2	63	31	25	23	-5	2	64	22	34	-17	-5	2	224	218	9	-59	-5	2	36	25	35
-24	-8	2	64	11	33	-23	-7	2	112	31	29	-23	5	-2	0	22	1	17	5	-2	214	218	10	-61	-5	2	0	23	1
-24	-8	2	0	11	1	-23	-7	2	32	31	31	23	-5	2	27	22	27	-19	-5	2	45	22	45	-61	-5	2	27	23	27

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-63 -5 2 0 11 1 -34 4 -2 0 33 1 -8 -4 2 18 10 17 -38 -4 2 77 61 19 -52 2 -2 54 22 54
-63 -5 2 50 11 49 -34 4 -2 46 33 25 8 4 -2 5 10 5 -40 -4 2 37 28 37 -52 2 -2 68 22 31
-65 -5 2 0 18 1 -34 4 -2 57 33 28 -8 -4 2 76 10 23 -40 -4 2 0 28 1 -52 2 -2 19 22 19
-65 -5 2 0 18 1 34 -4 2 40 33 39 -8 -4 2 35 10 34 -40 -4 2 0 28 1 -50 2 -2 0 3 1
-68 4 -2 70 52 41 -32 4 -2 94 91 12 -10 -4 2 29 16 29 -40 -4 2 35 28 34 -50 2 -2 0 3 1
-68 4 -2 0 52 1 -32 4 -2 95 91 9 -10 -4 2 40 16 31 -40 -4 2 38 28 38 -50 2 -2 0 3 1
-68 4 -2 50 52 50 -32 4 -2 92 91 9 -10 -4 2 50 16 33 -40 -4 2 84 28 14 -50 2 -2 0 3 1
-66 4 -2 80 89 31 32 -4 2 128 91 8 -10 -4 2 0 16 1 -42 -4 2 0 15 1 -50 2 -2 0 3 1
-66 4 -2 72 89 17 -30 4 -2 157 142 7 10 4 -2 48 16 47 -42 -4 2 0 15 1 -48 2 -2 0 14 1
-66 4 -2 93 89 18 30 -4 2 154 142 8 -12 -4 2 0 5 1 -42 -4 2 0 15 1 -48 2 -2 0 14 1
-66 4 -2 82 89 35 -30 4 -2 146 142 9 -12 -4 2 0 5 1 -42 -4 2 78 15 19 -48 2 -2 0 14 1
-64 4 -2 125 94 14 -30 4 -2 157 142 8 12 4 -2 38 5 37 -42 -4 2 72 15 53 -46 2 -2 47 13 46
-64 4 -2 94 94 10 -28 4 -2 104 76 8 -12 -4 2 0 5 1 -44 -4 2 0 22 1 -46 2 -2 12 13 12
-64 4 -2 113 94 13 -28 4 -2 81 76 8 -12 -4 2 0 5 1 -44 -4 2 85 22 36 -46 2 -2 0 13 1
-64 4 -2 121 94 16 -28 4 -2 97 76 11 -14 -4 2 53 21 31 -44 -4 2 0 22 1 -44 2 -2 0 16 1
-62 4 -2 115 82 13 28 -4 2 87 76 11 -14 -4 2 59 21 19 -44 -4 2 23 22 23 -44 2 -2 0 16 1
-62 4 -2 96 82 18 -26 4 -2 88 39 10 -14 -4 2 0 21 1 -46 -4 2 31 21 30 -44 2 -2 0 16 1
-62 4 -2 89 82 14 26 -4 2 87 39 20 14 4 -2 0 21 1 -46 -4 2 0 21 1 -44 2 -2 0 16 1
-62 4 -2 100 82 14 -26 4 -2 88 39 19 -14 -4 2 54 21 23 -46 -4 2 28 21 28 -42 2 -2 41 20 41
-60 4 -2 56 31 35 -26 4 -2 66 39 14 -14 -4 2 21 21 20 -48 -4 2 0 8 1 -42 2 -2 0 20 1
-60 4 -2 58 31 21 -24 4 -2 52 2 34 -16 -4 2 41 13 41 -48 -4 2 27 8 27 -42 2 -2 0 20 1
-60 4 -2 67 31 45 24 -4 2 0 2 1 -16 -4 2 0 13 1 -48 -4 2 0 8 1 -42 2 -2 0 20 1
-60 4 -2 0 31 1 -24 4 -2 0 2 1 16 4 -2 0 13 1 -50 -4 2 0 42 1 -42 2 -2 0 20 1
-58 4 -2 103 46 21 -24 4 -2 11 2 11 -16 -4 2 25 13 24 -50 -4 2 21 42 21 -40 2 -2 0 25 1
-58 4 -2 56 46 21 -22 4 -2 45 8 45 -16 -4 2 0 13 1 -50 -4 2 0 42 1 -40 2 -2 33 25 33

-58 4 -2 58 46 29 22 -4 2 26 8 26 -16 -4 2 34 13 34 -52 -4 2 18 34 17 -40 2 -2 36 25 35
-58 4 -2 0 46 1 -22 4 -2 21 8 20 -18 -4 2 0 44 1 -52 -4 2 0 34 1 -40 2 -2 21 25 21
-56 4 -2 47 12 29 22 -4 2 38 8 38 -18 -4 2 0 44 1 -52 -4 2 38 34 38 -40 2 -2 49 25 48
-56 4 -2 31 12 31 -22 4 -2 45 8 45 -18 -4 2 48 44 48 -54 -4 2 0 31 1 -38 2 -2 0 48 1
-56 4 -2 65 12 48 20 -4 2 0 23 1 18 4 -2 39 44 38 -54 -4 2 0 31 1 -38 2 -2 13 48 13
-56 4 -2 65 12 36 -20 4 -2 33 23 32 -18 -4 2 57 44 22 -54 -4 2 78 31 19 -38 2 -2 48 48 47
-56 4 -2 49 12 48 20 -4 2 43 23 43 -18 -4 2 52 44 19 -56 -4 2 0 6 1 -38 2 -2 27 48 26
-54 4 -2 59 18 19 -20 4 -2 12 23 11 -20 -4 2 44 15 32 -56 -4 2 21 6 21 -38 2 -2 32 48 31
-54 4 -2 11 18 11 -20 4 -2 3 23 3 -20 -4 2 0 15 1 -56 -4 2 39 6 39 -36 2 -2 90 78 16
-54 4 -2 0 18 1 18 -4 2 28 37 28 -20 -4 2 10 15 10 -58 -4 2 26 35 26 -36 2 -2 72 78 13
-54 4 -2 51 18 51 -18 4 -2 22 37 22 -20 -4 2 28 15 27 -58 -4 2 0 35 1 -36 2 -2 70 78 12
-54 4 -2 0 18 1 -18 4 -2 27 37 26 20 4 -2 37 15 36 -58 -4 2 24 35 23 -36 2 -2 97 78 7
-52 4 -2 33 18 32 18 -4 2 0 37 1 -20 -4 2 0 15 1 -60 -4 2 91 67 22 -36 2 -2 99 78 11
-52 4 -2 0 18 1 -18 4 -2 62 37 20 -22 -4 2 55 43 18 -60 -4 2 57 67 20 -36 2 -2 69 78 16
-52 4 -2 0 18 1 -16 4 -2 0 3 1 22 4 -2 52 43 29 -60 -4 2 77 67 13 -34 2 -2 137 153 6
-52 4 -2 0 18 1 -16 4 -2 9 3 9 -22 -4 2 46 43 45 -62 -4 2 66 59 18 -34 2 -2 126 153 9
-52 4 -2 12 18 12 16 -4 2 0 3 1 -22 -4 2 19 43 18 -62 -4 2 68 59 27 -34 2 -2 150 153 8
-50 4 -2 23 13 23 -16 4 -2 51 3 38 -22 -4 2 65 43 22 -62 -4 2 96 59 21 -34 2 -2 153 153 8
-50 4 -2 0 13 1 16 -4 2 0 3 1 -22 -4 2 61 43 27 -64 -4 2 130 116 10 -34 2 -2 137 153 7
-50 4 -2 78 13 23 -14 4 -2 0 0 1 -24 -4 2 29 3 28 -64 -4 2 126 116 9 -32 2 -2 174 171 8
-50 4 -2 27 13 27 -14 4 -2 0 0 1 24 4 -2 26 3 25 -64 -4 2 113 116 10 -32 2 -2 178 171 6
-50 4 -2 17 13 16 14 -4 2 10 0 9 -24 -4 2 72 3 29 -66 -4 2 0 26 1 -32 2 -2 152 171 9
-48 4 -2 0 16 1 14 -4 2 0 0 1 -24 -4 2 2 3 1 -66 -4 2 36 26 35 -32 2 -2 166 171 6
-48 4 -2 41 16 40 -14 4 -2 10 0 10 -24 -4 2 39 3 38 -68 -4 2 0 5 1 -32 2 -2 174 171 7
-48 4 -2 0 16 1 12 -4 2 56 13 21 -24 -4 2 33 3 32 -68 -4 2 15 5 15 -30 2 -2 159 157 6
-48 4 -2 30 16 30 -12 4 -2 29 13 28 -26 -4 2 70 74 13 -70 -4 2 0 4 1 -30 2 -2 163 157 8
-48 4 -2 46 16 45 -12 4 -2 0 13 1 -26 -4 2 97 74 12 -70 -4 2 0 4 1 -30 2 -2 162 157 9

-46 4 -2 75 16 12 -12 4 -2 0 13 1 -26 -4 2 98 74 7 -76 2 -2 62 14 34 30 -2 2 169 157 7
 -46 4 -2 0 16 1 12 -4 2 28 13 28 -26 -4 2 75 74 10 -74 2 -2 0 9 1 -30 2 -2 166 157 8
 -46 4 -2 0 16 1 -10 4 -2 51 9 17 -26 -4 2 80 74 13 -72 2 -2 39 2 38 -30 2 -2 169 157 7
 -46 4 -2 0 16 1 10 -4 2 13 9 13 -28 -4 2 103 73 7 -70 2 -2 0 41 1 -28 2 -2 43 18 42
 -46 4 -2 60 16 43 10 -4 2 63 9 18 -28 -4 2 97 73 12 -70 2 -2 0 41 1 -28 2 -2 75 18 13
 -46 4 -2 0 16 1 -10 4 -2 48 9 26 -28 -4 2 75 73 14 -70 2 -2 23 41 22 28 -2 2 32 18 32
 -44 4 -2 4 21 3 8 -4 2 0 7 1 -28 -4 2 78 73 12 -68 2 -2 16 2 15 -28 2 -2 25 18 25
 -44 4 -2 0 21 1 -8 4 -2 43 7 22 -28 -4 2 62 73 17 -68 2 -2 0 2 1 -28 2 -2 34 18 34
 -44 4 -2 58 21 25 -6 4 -2 0 11 1 -30 -4 2 234 222 11 -68 2 -2 53 2 52 -28 2 -2 0 18 1
 -44 4 -2 0 21 1 -6 4 -2 0 11 1 -30 -4 2 235 222 10 -66 2 -2 17 11 17 -26 2 -2 0 9 1
 -44 4 -2 0 21 1 6 -4 2 0 11 1 -30 -4 2 257 222 10 -66 2 -2 0 11 1 -26 2 -2 0 9 1
 -42 4 -2 62 8 34 6 -4 2 0 11 1 -30 -4 2 243 222 9 -66 2 -2 0 11 1 -26 2 -2 28 9 27
 -42 4 -2 9 8 9 4 -4 2 33 38 32 -32 -4 2 91 59 20 -64 2 -2 93 82 16 26 -2 2 0 9 1
 -42 4 -2 30 8 30 -4 4 -2 52 38 42 -32 -4 2 72 59 11 -64 2 -2 97 82 16 -26 2 -2 0 9 1
 -42 4 -2 36 8 36 4 -4 2 55 38 24 -32 -4 2 87 59 29 -64 2 -2 85 82 17 -26 2 -2 17 9 17
 -42 4 -2 78 8 12 -4 4 -2 30 38 30 -32 -4 2 79 59 12 -62 2 -2 118 121 11 -24 2 -2 0 9 1
 -40 4 -2 14 26 14 -2 4 -2 132 113 8 -32 -4 2 82 59 9 -62 2 -2 135 121 13 24 -2 2 46 9 21
 -40 4 -2 0 26 1 2 -4 2 122 113 7 -32 -4 2 76 59 12 -62 2 -2 166 121 10 -24 2 -2 0 9 1
 -40 4 -2 29 26 28 -2 4 -2 105 113 6 -34 -4 2 121 105 8 -60 2 -2 123 99 13 -24 2 -2 26 9 25
 -40 4 -2 0 26 1 2 -4 2 100 113 8 -34 -4 2 117 105 8 -60 2 -2 130 99 13 -24 2 -2 10 9 10
 40 -4 2 34 26 34 -2 -4 2 125 127 7 -34 -4 2 101 105 8 -60 2 -2 120 99 10 -22 2 -2 40 7 24
 -40 4 -2 26 26 26 -2 -4 2 115 127 8 -34 -4 2 113 105 9 -58 2 -2 39 39 39 -22 2 -2 41 7 40
 -40 4 -2 52 26 34 2 4 -2 131 127 8 -34 -4 2 117 105 10 -58 2 -2 37 39 37 22 -2 2 46 7 20
 -38 4 -2 26 2 25 -2 -4 2 108 127 8 -34 -4 2 107 105 11 -58 2 -2 87 39 26 -22 2 -2 55 7 12
 -38 4 -2 22 2 22 4 4 -2 57 23 28 -36 -4 2 0 57 1 -58 2 -2 45 39 26 -22 2 -2 37 7 37
 -38 4 -2 17 2 17 -4 -4 2 25 23 25 -36 -4 2 50 57 21 -56 2 -2 29 7 29 -20 2 -2 39 0 24
 -38 4 -2 0 2 1 -4 -4 2 46 23 45 -36 -4 2 58 57 28 -56 2 -2 0 7 1 -20 2 -2 0 0 1

38	-4	2	68	2	28	-4	-4	2	63	23	18	-36	-4	2	60	57	37	-56	2	-2	0	7	1	-20	2	-2	31	0	30
-38	4	-2	12	2	11	-4	-4	2	14	23	14	-36	-4	2	65	57	17	-56	2	-2	30	7	30	-18	2	-2	0	4	1
-36	4	-2	14	24	13	-6	-4	2	0	6	1	-36	-4	2	45	57	45	-54	2	-2	37	10	37	-18	2	-2	17	4	17
36	-4	2	59	24	33	6	4	-2	32	6	31	-38	-4	2	120	61	23	-54	2	-2	21	10	21	-18	2	-2	5	4	4
-36	4	-2	43	24	42	-6	-4	2	41	6	40	-38	-4	2	62	61	15	-54	2	-2	11	10	11	18	-2	2	0	4	1
-36	4	-2	48	24	47	-6	-4	2	0	6	1	-38	-4	2	52	61	25	-54	2	-2	0	10	1	-18	2	-2	0	4	1
-36	4	-2	0	24	1	-6	-4	2	39	6	39	-38	-4	2	90	61	13	-52	2	-2	40	22	27	16	-2	2	0	4	1
-36	4	-2	31	24	30	-8	-4	2	50	10	29	-38	-4	2	71	61	20	-52	2	-2	30	22	29	-16	2	-2	51	4	23

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 30

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-16	2	-2	11	4	11	-24	-2	2	48	8	29	-64	-2	2	0	10	1	-31	1	-2	0	27	1	19	1	-2	0	1	1
-16	2	-2	0	4	1	-24	-2	2	29	8	29	-64	-2	2	33	10	33	-31	1	-2	0	27	1	-19	-1	2	0	1	1
-16	2	-2	0	4	1	26	2	-2	51	23	20	-64	-2	2	3	10	2	-31	1	-2	0	27	1	-19	-1	2	16	1	15
-14	2	-2	41	20	40	-26	-2	2	0	23	1	-66	-2	2	63	78	16	-29	1	-2	0	6	1	-19	-1	2	0	1	1
-14	2	-2	8	20	8	-26	-2	2	0	23	1	-66	-2	2	59	78	33	-29	1	-2	55	6	13	-21	-1	2	40	5	40
-14	2	-2	37	20	36	-26	-2	2	40	23	39	-66	-2	2	68	78	31	-29	1	-2	31	6	31	-21	-1	2	0	5	1
14	-2	2	36	20	36	-26	-2	2	24	23	24	-68	-2	2	2	40	2	-29	1	-2	29	6	29	-21	-1	2	0	5	1
-12	2	-2	19	4	19	-28	-2	2	25	9	24	-68	-2	2	39	40	39	-29	1	-2	46	6	36	21	1	-2	0	5	1
-12	2	-2	0	4	1	-28	-2	2	46	9	33	-68	-2	2	75	40	26	-27	1	-2	0	9	1	-23	-1	2	34	24	34
-12	2	-2	57	4	19	-28	-2	2	27	9	26	-70	-2	2	66	51	33	-27	1	-2	0	9	1	-23	-1	2	43	24	12
12	-2	2	18	4	17	-28	-2	2	23	9	22	-70	-2	2	25	51	24	-27	1	-2	2	9	2	-23	-1	2	40	24	16
-12	2	-2	30	4	29	-28	-2	2	22	9	22	-72	-2	2	34	44	33	-27	1	-2	0	9	1	-23	-1	2	34	24	34
10	-2	2	50	25	19	28	2	-2	10	9	9	-72	-2	2	0	44	1	-27	1	-2	0	9	1	23	1	-2	53	24	16
-10	2	-2	37	25	37	-30	-2	2	79	70	8	-74	-2	2	0	29	1	25	-1	2	62	4	12	-23	-1	2	61	24	16

-10 2 -2 52 25 22 -30 -2 2 65 70 8 -76 -2 2 38 20 38 23 -1 2 23 43 23 -25 -1 2 20 15 19
 8 -2 2 0 15 1 -30 -2 2 76 70 11 -77 1 -2 103 93 18 -23 1 -2 0 43 1 -25 -1 2 0 15 1
 8 -2 2 44 15 16 -30 -2 2 82 70 5 -75 1 -2 9 7 8 -23 1 -2 0 43 1 -25 -1 2 0 15 1
 -8 2 -2 34 15 33 -30 -2 2 74 70 8 -73 1 -2 0 19 1 -23 1 -2 0 43 1 25 1 -2 22 15 22
 -8 2 -2 35 15 34 30 2 -2 78 70 7 -73 1 -2 0 19 1 -23 1 -2 28 43 27 -25 -1 2 17 15 16
 -6 2 -2 69 57 12 -32 -2 2 224 240 9 -71 1 -2 0 5 1 -21 1 -2 64 79 11 -27 -1 2 0 12 1
 -6 2 -2 76 57 9 -32 -2 2 218 240 8 -71 1 -2 82 5 37 -21 1 -2 79 79 14 -27 -1 2 16 12 16
 6 -2 2 58 57 8 -32 -2 2 228 240 7 -69 1 -2 0 15 1 21 -1 2 66 79 7 -27 -1 2 43 12 20
 6 -2 2 59 57 9 -34 -2 2 86 97 6 -69 1 -2 0 15 1 -21 1 -2 82 79 8 -27 -1 2 0 12 1
 4 -2 2 64 60 8 -34 -2 2 102 97 9 -67 1 -2 0 0 1 -21 1 -2 63 79 9 -27 -1 2 15 12 15
 -4 2 -2 56 60 15 -34 -2 2 92 97 7 -67 1 -2 27 0 26 -21 1 -2 78 79 12 27 1 -2 32 12 31
 -4 2 -2 77 60 15 -34 -2 2 97 97 7 -65 1 -2 0 24 1 -19 1 -2 67 78 16 -29 -1 2 37 10 20
 4 -2 2 65 60 7 -36 -2 2 50 22 7 -65 1 -2 18 24 18 -19 1 -2 59 78 9 29 1 -2 10 10 9
 2 -2 2 154 158 7 -36 -2 2 50 22 31 -63 1 -2 0 28 1 -19 1 -2 49 78 25 -29 -1 2 26 10 26
 -2 2 -2 159 158 7 -36 -2 2 43 22 20 -63 1 -2 0 28 1 -19 1 -2 75 78 12 -29 -1 2 16 10 15
 -2 2 -2 147 158 6 -36 -2 2 61 22 18 -61 1 -2 33 1 33 -19 1 -2 76 78 9 -29 -1 2 6 10 6
 2 -2 2 141 158 7 -36 -2 2 15 22 15 -61 1 -2 0 1 1 19 -1 2 65 78 7 -29 -1 2 0 10 1
 0 2 -2 105 93 7 -36 -2 2 50 22 49 -59 1 -2 0 2 1 17 -1 2 62 83 7 -31 -1 2 0 14 1
 0 -2 2 99 93 6 -38 -2 2 39 6 38 -59 1 -2 0 2 1 -17 1 -2 64 83 18 31 1 -2 43 14 22
 0 -2 2 96 93 6 -38 -2 2 0 6 1 -59 1 -2 48 2 48 -17 1 -2 70 83 7 -31 -1 2 0 14 1
 0 2 -2 96 93 7 -38 -2 2 42 6 19 -57 1 -2 35 10 35 -17 1 -2 65 83 15 -31 -1 2 33 14 32
 2 2 -2 181 172 6 -38 -2 2 20 6 20 -57 1 -2 0 10 1 -17 1 -2 82 83 11 -31 -1 2 17 14 17
 -2 -2 2 170 172 7 -38 -2 2 0 6 1 -57 1 -2 0 10 1 -15 1 -2 273 301 10 -31 -1 2 41 14 25
 -2 -2 2 171 172 7 -40 -2 2 32 9 31 -55 1 -2 0 36 1 -15 1 -2 279 301 9 -33 -1 2 0 9 1
 2 2 -2 162 172 8 -40 -2 2 23 9 22 -55 1 -2 23 36 23 -15 1 -2 259 301 10 -33 -1 2 13 9 13
 -4 -2 2 66 71 7 -40 -2 2 26 9 25 -55 1 -2 11 36 11 -15 1 -2 284 301 9 33 1 -2 43 9 22
 4 2 -2 68 71 9 -42 -2 2 73 9 17 -55 1 -2 36 36 35 -13 1 -2 52 7 27 -33 -1 2 21 9 21

4 2 -2 66 71 9 -42 -2 2 51 9 50 -55 1 -2 54 36 54 -13 1 -2 31 7 30 -33 -1 2 0 9 1
 -4 -2 2 79 71 8 -42 -2 2 0 9 1 -53 1 -2 86 17 13 -13 1 -2 47 7 22 -33 -1 2 0 9 1
 -6 -2 2 65 67 7 -44 -2 2 46 7 46 -53 1 -2 0 17 1 13 -1 2 35 7 29 -35 -1 2 12 1 11
 -6 -2 2 69 67 9 -44 -2 2 0 7 1 -53 1 -2 35 17 34 -13 1 -2 52 7 40 -35 -1 2 0 1 1
 6 2 -2 72 67 8 -44 -2 2 0 7 1 -53 1 -2 0 17 1 11 -1 2 0 2 1 35 1 -2 34 1 33
 -6 -2 2 80 67 8 -44 -2 2 41 7 40 -53 1 -2 72 17 29 -11 1 -2 55 2 22 -35 -1 2 0 1 1
 6 2 -2 58 67 16 -46 -2 2 0 22 1 -51 1 -2 61 8 33 -11 1 -2 0 2 1 -35 -1 2 0 1 1
 -8 -2 2 24 16 24 -46 -2 2 0 22 1 -51 1 -2 12 8 12 -11 1 -2 15 2 14 -35 -1 2 47 1 46
 -8 -2 2 28 16 27 -46 -2 2 47 22 34 -51 1 -2 0 8 1 -11 1 -2 28 2 28 -35 -1 2 21 1 21
 -8 -2 2 0 16 1 -46 -2 2 38 22 37 -51 1 -2 0 8 1 9 -1 2 42 35 16 -37 -1 2 0 18 1
 8 2 -2 58 16 16 -46 -2 2 0 22 1 -49 1 -2 0 29 1 -9 1 -2 27 35 27 -37 -1 2 40 18 39
 10 2 -2 60 58 18 -48 -2 2 18 20 18 -49 1 -2 0 29 1 -9 1 -2 0 35 1 -37 -1 2 0 18 1
 -10 -2 2 65 58 11 -48 -2 2 13 20 12 -49 1 -2 38 29 37 -9 1 -2 13 35 13 -37 -1 2 0 18 1
 -10 -2 2 69 58 14 -48 -2 2 14 20 13 -49 1 -2 89 29 19 7 -1 2 29 11 28 -37 -1 2 33 18 33
 -10 -2 2 54 58 16 -48 -2 2 0 20 1 -47 1 -2 276 286 9 -7 1 -2 57 11 14 -37 -1 2 51 18 16
 12 2 -2 52 1 20 -48 -2 2 7 20 7 -47 1 -2 253 286 13 -7 1 -2 28 11 28 37 1 -2 48 18 24
 -12 -2 2 0 1 1 -50 -2 2 37 18 37 -47 1 -2 262 286 10 -7 1 -2 0 11 1 -39 -1 2 59 33 26
 -12 -2 2 12 1 11 -50 -2 2 0 18 1 -47 1 -2 275 286 7 -5 1 -2 48 19 16 -39 -1 2 26 33 26
 -12 -2 2 26 1 25 -50 -2 2 0 18 1 -45 1 -2 83 73 7 5 -1 2 49 19 12 -39 -1 2 39 33 39
 -14 -2 2 24 22 24 -50 -2 2 0 18 1 -45 1 -2 97 73 9 -5 1 -2 49 19 18 -39 -1 2 41 33 40
 -14 -2 2 0 22 1 -50 -2 2 66 18 32 -45 1 -2 86 73 13 -5 1 -2 37 19 37 -39 -1 2 6 33 6
 -14 -2 2 18 22 17 -52 -2 2 38 17 37 -45 1 -2 91 73 10 3 -1 2 26 7 26 -39 -1 2 40 33 40
 14 2 -2 43 22 24 -52 -2 2 0 17 1 -45 1 -2 95 73 11 -3 1 -2 0 7 1 -41 -1 2 71 10 29
 -14 -2 2 24 22 24 -52 -2 2 69 17 28 -43 1 -2 53 12 30 -3 1 -2 0 7 1 -41 -1 2 38 10 20
 -16 -2 2 0 1 1 -52 -2 2 0 17 1 -43 1 -2 39 12 39 -1 1 -2 43 19 28 -41 -1 2 33 10 32
 -16 -2 2 62 1 11 -52 -2 2 19 17 19 -43 1 -2 0 12 1 1 -1 2 58 19 14 -41 -1 2 28 10 27
 16 2 -2 51 1 18 -54 -2 2 0 24 1 -43 1 -2 0 12 1 -1 1 -2 22 19 21 -41 -1 2 30 10 29

-16-2 2 0 1 1 -54-2 2 77 24 27 -41 1-2 39 15 39 -1-1 2 0 2 1 -41-1 2 0 10 1
 -16-2 2 43 1 23 -54-2 2 32 24 31 -41 1-2 0 15 1 1 1-2 27 2 26 -43-1 2 34 24 34
 -18-2 2 37 39 37 -54-2 2 0 24 1 -41 1-2 50 15 50 1 1-2 0 2 1 -43-1 2 47 24 47
 -18-2 2 38 39 20 -54-2 2 36 24 35 -41 1-2 45 15 18 3 1-2 0 21 1 -43-1 2 36 24 36
 18 2-2 31 39 31 -56-2 2 18 12 17 -39 1-2 30 8 29 3 1-2 21 21 20 -43-1 2 35 24 35
 -18-2 2 20 39 20 -56-2 2 16 12 15 -39 1-2 0 8 1 5 1-2 78 0 11 -43-1 2 31 24 31
 -18-2 2 62 39 10 -56-2 2 0 12 1 -39 1-2 0 8 1 7 1-2 73 53 8 -43-1 2 28 24 27
 20 2-2 48 19 20 -56-2 2 0 12 1 -39 1-2 21 8 20 9 1-2 52 36 17 -45-1 2 121 117 10
 -20-2 2 29 19 28 -58-2 2 33 38 33 -37 1-2 39 8 38 -9-1 2 38 36 17 -45-1 2 121 117 8
 -20-2 2 31 19 30 -58-2 2 39 38 39 -37 1-2 43 8 42 11 1-2 98 99 7 -45-1 2 147 117 9
 -20-2 2 40 19 18 -58-2 2 56 38 44 -37 1-2 0 8 1 -11-1 2 97 99 5 -45-1 2 127 117 9
 -22-2 2 29 33 28 -58-2 2 53 38 39 -37 1-2 0 8 1 -13-1 2 137 144 5 -45-1 2 115 117 8
 -22-2 2 53 33 15 -60-2 2 50 54 22 -35 1-2 0 30 1 13 1-2 137 144 7 -47-1 2 180 185 8
 22 2-2 34 33 33 -60-2 2 77 54 21 -35 1-2 31 30 30 -13-1 2 142 144 6 -47-1 2 194 185 8
 -22-2 2 35 33 22 -60-2 2 71 54 27 -35 1-2 0 30 1 -15-1 2 177 192 6 -47-1 2 176 185 10
 -22-2 2 45 33 33 -60-2 2 65 54 10 -33 1-2 0 23 1 -15-1 2 171 192 6 -47-1 2 198 185 8
 -24-2 2 0 8 1 -62-2 2 256 235 10 -33 1-2 19 23 18 15 1-2 160 192 7 -47-1 2 182 185 8
 24 2-2 41 8 31 -62-2 2 241 235 11 -33 1-2 69 23 20 17 1-2 214 229 8 -47-1 2 173 185 10
 -24-2 2 0 8 1 -62-2 2 265 235 10 -31 1-2 0 27 1 -17-1 2 215 229 7 -49-1 2 105 77 9

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 31

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-49-1 2 91 77 12 -53-1-2 18 18 17 -3-1-2 44 7 40 -37 1 2 62 17 14 -58-2-2 73 42 28
 -49-1 2 89 77 8 -51-1-2 28 8 28 -3-1-2 0 7 1 37-1-2 0 17 1 -58-2-2 54 42 29
 -49-1 2 94 77 14 -51-1-2 73 8 14 3 1 2 0 7 1 -37 1 2 51 17 29 -56-2-2 52 8 52
 -49-1 2 80 77 23 -51-1-2 0 8 1 -3-1-2 19 7 19 -37 1 2 0 17 1 -56-2-2 0 8 1

-49 -1 2 93 77 10 -51 -1 -2 87 8 14 -1 -1 -2 6 19 6 -39 1 2 44 32 29 -54 -2 -2 0 11 1
-51 -1 2 0 7 1 -49 -1 -2 80 30 22 1 1 2 35 19 20 -39 1 2 0 32 1 -54 -2 -2 74 11 25
-51 -1 2 0 7 1 -49 -1 -2 43 30 43 -1 -1 -2 34 19 33 39 -1 -2 0 32 1 -52 -2 -2 7 24 6
-51 -1 2 68 7 30 -49 -1 -2 90 30 11 -1 -1 -2 0 19 1 -39 1 2 50 32 18 -52 -2 -2 60 24 38
-51 -1 2 50 7 49 -49 -1 -2 28 30 27 -1 -1 -2 0 19 1 -39 1 2 24 32 23 -52 -2 -2 0 24 1
-51 -1 2 0 7 1 -47 -1 -2 286 298 10 1 -1 -2 0 2 1 -41 1 2 42 9 24 -50 -2 -2 0 4 1
-51 -1 2 0 7 1 -47 -1 -2 287 298 10 1 -1 -2 3 2 3 -41 1 2 0 9 1 -50 -2 -2 0 4 1
-53 -1 2 29 7 28 -45 -1 -2 94 76 10 1 -1 -2 68 2 9 -41 1 2 0 9 1 -50 -2 -2 0 4 1
-53 -1 2 0 7 1 -45 -1 -2 98 76 10 -1 1 2 0 2 1 -41 1 2 20 9 19 -50 -2 -2 33 4 32
-53 -1 2 51 7 51 -45 -1 -2 102 76 10 -3 1 2 52 21 12 41 -1 -2 22 9 22 -50 -2 -2 0 4 1
-53 -1 2 0 7 1 -43 -1 -2 67 12 13 3 -1 -2 29 21 28 -43 1 2 60 23 15 -48 -2 -2 0 15 1
-53 -1 2 0 7 1 -43 -1 -2 29 12 28 3 -1 -2 63 21 12 43 -1 -2 60 23 22 -48 -2 -2 65 15 30
-53 -1 2 73 7 25 -43 -1 -2 33 12 32 -5 1 2 51 0 7 -43 1 2 29 23 28 -48 -2 -2 72 15 23
-55 -1 2 0 13 1 -43 -1 -2 63 12 25 -7 1 2 71 51 6 -43 1 2 0 23 1 -46 -2 -2 0 14 1
-55 -1 2 79 13 24 -41 -1 -2 48 16 47 7 -1 -2 65 51 8 -43 1 2 32 23 31 -46 -2 -2 0 14 1
-55 -1 2 0 13 1 -41 -1 -2 29 16 29 -7 1 2 58 51 7 45 -1 -2 107 112 8 -46 -2 -2 52 14 52
-55 -1 2 28 13 27 -41 -1 -2 44 16 44 7 -1 -2 60 51 12 -45 1 2 118 112 9 -44 -2 -2 67 17 27
-55 -1 2 8 13 8 -41 -1 -2 38 16 37 7 -1 -2 63 51 18 -45 1 2 110 112 7 -44 -2 -2 0 17 1
-57 -1 2 83 47 13 -39 -1 -2 0 8 1 -9 1 2 67 34 10 -45 1 2 103 112 9 -44 -2 -2 0 17 1
-57 -1 2 63 47 37 -39 -1 -2 72 8 11 9 -1 -2 39 34 33 -45 1 2 110 112 7 -42 -2 -2 0 21 1
-57 -1 2 31 47 31 -39 -1 -2 23 8 23 -9 1 2 29 34 29 -47 1 2 158 178 8 -42 -2 -2 0 21 1
-57 -1 2 0 47 1 -39 -1 -2 20 8 20 9 -1 -2 20 34 19 -47 1 2 167 178 8 -42 -2 -2 0 21 1
-57 -1 2 26 47 25 -37 -1 -2 27 9 27 9 -1 -2 16 34 16 -47 1 2 152 178 9 -40 -2 -2 41 27 41
-59 -1 2 0 14 1 -37 -1 -2 67 9 12 11 -1 -2 95 93 6 -47 1 2 163 178 7 -40 -2 -2 32 27 32
-59 -1 2 0 14 1 -37 -1 -2 64 9 24 11 -1 -2 67 93 7 47 -1 -2 156 178 8 -40 -2 -2 79 27 21
-59 -1 2 51 14 50 -37 -1 -2 26 9 25 -11 1 2 73 93 6 -49 1 2 89 74 10 -38 -2 -2 68 52 31
-59 -1 2 0 14 1 -35 -1 -2 57 31 25 -11 1 2 85 93 5 -49 1 2 78 74 9 -38 -2 -2 80 52 16

-59 -1 2 23 14 22 -35 -1 -2 0 31 1 11 -1 -2 65 93 10 -49 1 2 79 74 10 -38 -2 -2 87 52 16
-61 -1 2 0 25 1 -35 -1 -2 46 31 42 13 -1 -2 136 136 6 -49 1 2 96 74 7 -38 -2 -2 77 52 21
-61 -1 2 67 25 35 -33 -1 -2 17 24 16 13 -1 -2 114 136 6 -49 1 2 83 74 12 -36 -2 -2 89 85 10
-61 -1 2 0 25 1 -33 -1 -2 0 24 1 -13 1 2 127 136 5 -55 1 2 0 12 1 -36 -2 -2 94 85 10
-61 -1 2 13 25 12 -33 -1 -2 0 24 1 15 -1 -2 154 181 6 -55 1 2 50 12 50 -36 -2 -2 87 85 9
-63 -1 2 19 18 19 -31 -1 -2 35 28 35 -15 1 2 150 181 6 -55 1 2 0 12 1 -36 -2 -2 95 85 8
-63 -1 2 33 18 32 -31 -1 -2 0 28 1 -15 1 2 139 181 7 -55 1 2 13 12 13 -34 -2 -2 171 166 7
-63 -1 2 58 18 38 -31 -1 -2 0 28 1 15 -1 -2 133 181 6 -57 1 2 39 46 38 -34 -2 -2 145 166 8
-63 -1 2 0 18 1 -23 -1 -2 62 45 17 -17 1 2 187 216 6 -57 1 2 0 46 1 -34 -2 -2 150 166 9
-65 -1 2 0 34 1 -23 -1 -2 52 45 25 17 -1 -2 191 216 6 -57 1 2 0 46 1 -34 -2 -2 149 166 8
-65 -1 2 25 34 24 -23 -1 -2 71 45 18 17 -1 -2 182 216 7 -57 1 2 60 46 31 -34 -2 -2 170 166 7
-65 -1 2 43 34 43 -23 -1 -2 64 45 10 19 -1 -2 27 1 26 -59 1 2 0 14 1 -32 -2 -2 197 186 7
-67 -1 2 0 24 1 -21 -1 -2 76 82 5 19 -1 -2 0 1 1 -59 1 2 0 14 1 -32 -2 -2 178 186 8
-67 -1 2 70 24 31 -21 -1 -2 71 82 14 -19 1 2 32 1 32 -59 1 2 55 14 46 -32 -2 -2 180 186 8
-67 -1 2 29 24 29 -21 -1 -2 77 82 11 -19 1 2 35 1 25 -61 1 2 28 24 27 -30 -2 -2 167 171 8
-69 -1 2 0 13 1 -21 -1 -2 77 82 9 -21 1 2 20 5 19 -61 1 2 0 24 1 -30 -2 -2 181 171 7
-69 -1 2 86 13 16 -19 -1 -2 97 81 6 -21 1 2 0 5 1 -61 1 2 34 24 33 -30 -2 -2 173 171 8
-69 -1 2 0 13 1 -19 -1 -2 102 81 8 -21 1 2 0 5 1 -63 1 2 18 17 18 -30 -2 -2 181 171 7
-71 -1 2 0 7 1 -19 -1 -2 86 81 8 21 -1 -2 23 5 22 -63 1 2 0 17 1 -28 -2 -2 31 20 31
-71 -1 2 0 7 1 -19 -1 -2 75 81 14 -21 1 2 14 5 13 -63 1 2 0 17 1 -28 -2 -2 0 20 1
-73 -1 2 34 6 33 -19 -1 -2 92 81 7 23 -1 -2 45 22 23 -65 1 2 20 34 19 -28 -2 -2 29 20 29
-73 -1 2 68 6 45 -17 -1 -2 98 86 5 -23 1 2 47 22 12 -65 1 2 0 34 1 -28 -2 -2 8 20 7
-75 -1 2 0 16 1 -17 -1 -2 71 86 14 -23 1 2 53 22 23 -65 1 2 0 34 1 -28 -2 -2 0 20 1
-77 -1 2 96 79 14 -17 -1 -2 74 86 11 -23 1 2 49 22 15 -67 1 2 0 23 1 -28 -2 -2 68 20 16
-77 -1 -2 114 96 12 -17 -1 -2 89 86 7 -23 1 2 53 22 14 -67 1 2 23 23 22 -26 -2 -2 13 10 12
-75 -1 -2 0 7 1 -17 -1 -2 77 86 10 -25 1 2 55 14 14 -67 1 2 44 23 44 -26 -2 -2 35 10 34
-75 -1 -2 98 7 31 -15 -1 -2 296 310 10 -25 1 2 28 14 28 -69 1 2 0 13 1 -26 -2 -2 40 10 39

-73 -1 -2 0 19 1 15 1 2 310 310 9 25 -1 -2 31 14 31 -69 1 2 0 13 1 -26 -2 -2 24 10 24
-73 -1 -2 65 19 64 -15 -1 -2 298 310 10 -25 1 2 43 14 19 -69 1 2 63 13 43 -26 -2 -2 0 10 1
-71 -1 -2 28 5 27 -15 -1 -2 293 310 10 -25 1 2 25 14 25 -71 1 2 0 7 1 -26 -2 -2 54 10 20
-71 -1 -2 93 5 16 -13 -1 -2 60 7 12 -27 1 2 51 11 22 -71 1 2 67 7 36 -26 -2 -2 0 10 1
-69 -1 -2 0 16 1 -13 -1 -2 61 7 15 -27 1 2 33 11 33 -71 1 2 22 7 21 -24 -2 -2 69 9 15
-69 -1 -2 0 16 1 -13 -1 -2 43 7 29 -27 1 2 49 11 16 -73 1 2 0 6 1 -24 -2 -2 30 9 29
-67 -1 -2 0 1 1 -13 -1 -2 31 7 30 27 -1 -2 53 11 18 -73 1 2 40 6 40 -24 -2 -2 24 9 24
-67 -1 -2 55 1 55 11 1 2 29 2 20 -27 1 2 24 11 24 -73 1 2 21 6 21 -24 -2 -2 0 9 1
-65 -1 -2 20 24 20 -11 -1 -2 46 2 14 -29 1 2 37 10 30 -75 1 2 0 15 1 -24 -2 -2 0 9 1
-65 -1 -2 30 24 30 -11 -1 -2 0 2 1 -29 1 2 0 10 1 -75 1 2 0 15 1 -24 -2 -2 0 9 1
-65 -1 -2 5 24 5 -11 -1 -2 0 2 1 29 -1 -2 25 10 25 -77 1 2 86 77 19 -24 -2 -2 34 9 34
-63 -1 -2 0 29 1 -11 -1 -2 11 2 11 -29 1 2 0 10 1 -77 1 2 84 77 14 -20 -2 -2 59 0 9
-63 -1 -2 0 29 1 -11 -1 -2 0 2 1 -29 1 2 48 10 18 -76 -2 -2 0 15 1 -20 -2 -2 0 0 1
-63 -1 -2 47 29 46 9 1 2 33 36 17 -31 1 2 49 14 33 -76 -2 -2 62 15 62 -20 -2 -2 51 0 19
-61 -1 -2 0 1 1 -9 -1 -2 45 36 14 -31 1 2 0 14 1 -74 -2 -2 0 10 1 -20 -2 -2 0 0 1
-61 -1 -2 21 1 20 -9 -1 -2 0 36 1 -31 1 2 0 14 1 -72 -2 -2 80 3 35 -20 -2 -2 51 0 9
-61 -1 -2 0 1 1 -9 -1 -2 29 36 28 -31 1 2 38 14 35 -72 -2 -2 0 3 1 -20 -2 -2 35 0 35
-59 -1 -2 0 2 1 -9 -1 -2 48 36 19 31 -1 -2 0 14 1 -70 -2 -2 99 43 16 -18 -2 -2 0 4 1
-59 -1 -2 0 2 1 7 1 2 41 11 13 33 -1 -2 31 9 31 -70 -2 -2 0 43 1 -18 -2 -2 13 4 12
-59 -1 -2 37 2 36 -7 -1 -2 31 11 30 -33 1 2 0 9 1 -68 -2 -2 96 2 25 -18 -2 -2 54 4 16
-57 -1 -2 0 10 1 -7 -1 -2 25 11 24 -33 1 2 0 9 1 -68 -2 -2 0 2 1 -18 -2 -2 0 4 1
-57 -1 -2 0 10 1 -7 -1 -2 63 11 18 -33 1 2 27 9 27 -66 -2 -2 80 12 30 -18 -2 -2 0 4 1
-57 -1 -2 36 10 35 -7 -1 -2 39 11 21 -33 1 2 0 9 1 -66 -2 -2 44 12 44 -16 -2 -2 29 4 28
-55 -1 -2 0 37 1 -5 -1 -2 57 19 21 -35 1 2 0 1 1 -64 -2 -2 86 88 16 -16 -2 -2 45 4 14
-55 -1 -2 0 37 1 -5 -1 -2 57 19 13 -35 1 2 29 1 28 -64 -2 -2 140 88 11 -16 -2 -2 0 4 1
-55 -1 -2 0 37 1 5 1 2 57 19 10 35 -1 -2 39 1 39 -62 -2 -2 147 129 11 -16 -2 -2 41 4 40
-53 -1 -2 89 18 12 -5 -1 -2 52 19 20 -35 1 2 18 1 18 -62 -2 -2 135 129 10 -16 -2 -2 0 4 1

-53 -1 -2 50 18 28 -5 -1 -2 46 19 16 -35 1 2 24 1 24 -60 -2 -2 121 106 10 -14 -2 -2 33 21 28

-53 -1 -2 32 18 31 -3 -1 -2 21 7 20 -37 1 2 57 17 18 -60 -2 -2 120 106 11 -14 -2 -2 0 21 1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 32

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-14 -2 -2 24 21 23 -28 2 2 6 8 6 -68 2 2 59 38 27 -2 4 2 108 127 6 -50 4 2 17 38 17

-14 -2 -2 0 21 1 -28 2 2 41 8 26 -68 2 2 12 38 12 2 -4 -2 104 127 8 -52 4 2 36 31 36

-14 -2 -2 0 21 1 28 -2 -2 24 8 23 -68 2 2 30 38 29 2 -4 -2 108 127 9 -52 4 2 0 31 1

-12 -2 -2 0 4 1 -30 2 2 67 64 8 -70 2 2 43 48 43 2 -4 -2 98 127 9 -54 4 2 24 29 24

12 2 2 43 4 13 30 -2 -2 74 64 9 -70 2 2 0 48 1 -4 4 2 50 22 21 -54 4 2 39 29 39

-12 -2 -2 19 4 18 -30 2 2 82 64 7 -70 2 2 24 48 24 4 -4 -2 49 22 28 -56 4 2 0 5 1

-12 -2 -2 33 4 32 -32 2 2 212 221 7 -70 2 2 39 48 39 4 -4 -2 0 22 1 -56 4 2 25 5 25

-12 -2 -2 0 4 1 -32 2 2 200 221 9 -72 2 2 40 42 40 4 -4 -2 60 22 19 -58 4 2 18 32 18

-12 -2 -2 48 4 22 32 -2 -2 207 221 8 -72 2 2 47 42 47 4 -4 -2 49 22 48 -58 4 2 0 32 1

-10 -2 -2 49 26 24 -34 2 2 82 89 8 -72 2 2 42 42 42 -6 4 2 48 6 22 -58 4 2 56 32 55

10 2 2 53 26 6 34 -2 -2 76 89 9 -72 2 2 88 42 27 6 -4 -2 24 6 24 -60 4 2 68 61 26

-10 -2 -2 56 26 13 -34 2 2 82 89 8 -74 2 2 0 28 1 6 -4 -2 45 6 45 -60 4 2 78 61 16

-10 -2 -2 44 26 44 36 -2 -2 43 21 42 -74 2 2 0 28 1 6 -4 -2 0 6 1 -60 4 2 114 61 37

-10 -2 -2 75 26 20 -36 2 2 0 21 1 -74 2 2 0 28 1 -8 4 2 0 9 1 -62 4 2 69 54 26

-10 -2 -2 42 26 38 -36 2 2 26 21 26 -76 2 2 27 19 26 8 -4 -2 50 9 25 -62 4 2 73 54 20

-8 -2 -2 53 15 7 -36 2 2 21 21 20 -76 2 2 39 19 39 8 -4 -2 49 9 48 -62 4 2 115 54 20

8 2 2 42 15 14 -38 2 2 15 6 14 -46 -4 -2 0 18 1 8 -4 -2 0 9 1 -64 4 2 119 107 12

-8 -2 -2 0 15 1 -38 2 2 31 6 31 -46 -4 -2 0 18 1 -10 4 2 26 16 26 -64 4 2 171 107 14

-8 -2 -2 0 15 1 38 -2 -2 39 6 38 -44 -4 -2 65 24 65 10 -4 -2 44 16 44 -64 4 2 119 107 13

-8 -2 -2 0 15 1 -38 2 2 0 6 1 -44 -4 -2 0 24 1 10 -4 -2 0 16 1 -66 4 2 13 24 13

-8 -2 -2 46 15 45 -38 2 2 0 6 1 -42 -4 -2 43 9 42 -10 4 2 37 16 36 -66 4 2 0 24 1
-6 -2 -2 61 58 8 -40 2 2 46 8 29 -42 -4 -2 0 9 1 10 -4 -2 0 16 1 -66 4 2 46 24 45
-6 -2 -2 71 58 15 40 -2 -2 0 8 1 -42 -4 -2 0 9 1 12 -4 -2 0 4 1 -68 4 2 0 4 1
-6 -2 -2 81 58 18 -40 2 2 82 8 26 -38 -4 -2 0 2 1 -12 4 2 21 4 20 -68 4 2 11 4 10
6 2 2 59 58 7 -40 2 2 0 8 1 -38 -4 -2 51 2 50 12 -4 -2 0 4 1 -70 4 2 0 4 1
-6 -2 -2 60 58 25 -40 2 2 0 8 1 -38 -4 -2 0 2 1 -12 4 2 25 4 24 -70 4 2 43 4 43
-6 -2 -2 62 58 16 -42 2 2 0 9 1 -38 -4 -2 54 2 54 12 -4 -2 47 4 29 -51 -5 -2 110 8 43
-4 -2 -2 79 60 17 -42 2 2 30 9 30 -36 -4 -2 14 27 13 14 -4 -2 40 20 40 -49 -5 -2 45 26 44
-4 -2 -2 65 60 24 -42 2 2 29 9 28 -36 -4 -2 39 27 38 14 -4 -2 0 20 1 -49 -5 -2 0 26 1
-4 -2 -2 76 60 13 42 -2 -2 25 9 25 -36 -4 -2 47 27 47 -14 4 2 0 20 1 -45 -5 -2 134 111 20
-4 -2 -2 61 60 8 -42 2 2 39 9 38 -36 -4 -2 71 27 23 -14 4 2 0 20 1 -45 -5 -2 117 111 14
-4 -2 -2 72 60 15 -44 2 2 55 7 22 -34 -4 -2 87 37 12 14 -4 -2 40 20 40 -43 -5 -2 20 12 19
4 2 2 58 60 7 -44 2 2 39 7 39 -34 -4 -2 30 37 29 16 -4 -2 3 12 2 -43 -5 -2 85 12 58
-2 -2 -2 138 156 8 -44 2 2 0 7 1 -32 -4 -2 124 104 10 -16 4 2 0 12 1 -43 -5 -2 0 12 1
2 2 2 139 156 5 -44 2 2 0 7 1 -32 -4 -2 120 104 11 16 -4 -2 0 12 1 -41 -5 -2 0 1 1
-2 -2 -2 137 156 6 44 -2 -2 0 7 1 -30 -4 -2 189 160 9 -16 4 2 14 12 13 -41 -5 -2 0 1 1
-2 -2 -2 147 156 6 -46 2 2 71 21 38 -28 -4 -2 103 85 9 18 -4 -2 38 41 38 -41 -5 -2 18 1 18
-2 -2 -2 134 156 7 46 -2 -2 32 21 32 -28 -4 -2 99 85 12 18 -4 -2 18 41 17 -39 -5 -2 76 14 47
0 2 2 81 90 5 -46 2 2 57 21 11 -28 -4 -2 130 85 11 -18 4 2 32 41 32 -39 -5 -2 31 14 30
0 -2 -2 74 90 9 -46 2 2 0 21 1 -26 -4 -2 92 44 23 -18 4 2 19 41 18 -39 -5 -2 0 14 1
0 -2 -2 78 90 9 -46 2 2 0 21 1 -26 -4 -2 94 44 16 -20 4 2 0 14 1 -39 -5 -2 101 14 14
0 -2 -2 86 90 6 -46 2 2 21 21 21 -26 -4 -2 83 44 24 -20 4 2 43 14 32 -37 -5 -2 14 11 13
-2 2 2 150 165 6 -48 2 2 0 19 1 -24 -4 -2 0 2 1 20 -4 -2 0 14 1 -37 -5 -2 48 11 48
2 -2 -2 164 165 6 -48 2 2 28 19 27 -24 -4 -2 0 2 1 20 -4 -2 0 14 1 -37 -5 -2 42 11 41
2 -2 -2 137 165 7 -48 2 2 0 19 1 -24 -4 -2 0 2 1 22 -4 -2 40 40 39 -37 -5 -2 66 11 39
2 -2 -2 150 165 7 -48 2 2 17 19 17 -22 -4 -2 0 9 1 -22 4 2 37 40 37 -35 -5 -2 0 38 1
4 -2 -2 60 68 23 48 -2 -2 45 19 44 -22 -4 -2 62 9 33 22 -4 -2 0 40 1 -35 -5 -2 18 38 18

-4 2 2 60 68 7 -48 2 2 58 19 24 -22 -4 -2 0 9 1 -22 4 2 14 40 14 -35 -5 -2 0 38 1
 4 -2 -2 72 68 8 -50 2 2 22 17 22 -20 -4 -2 58 26 31 -24 4 2 0 3 1 -35 -5 -2 0 38 1
 4 -2 -2 60 68 16 -50 2 2 84 17 16 -20 -4 -2 0 26 1 24 -4 -2 71 3 18 -33 -5 -2 0 21 1
 6 -2 -2 60 64 17 -50 2 2 32 17 32 -20 -4 -2 70 26 23 -24 4 2 0 3 1 -33 -5 -2 33 21 32
 6 -2 -2 67 64 8 -50 2 2 65 17 20 -18 -4 -2 65 41 25 -26 4 2 76 68 15 -33 -5 -2 0 21 1
 6 -2 -2 72 64 18 -50 -2 -2 31 17 30 -18 -4 -2 2 41 2 -26 4 2 64 68 12 -31 -5 -2 30 15 29
 -6 2 2 57 64 8 -50 2 2 0 17 1 -18 -4 -2 0 41 1 26 -4 -2 79 68 11 -31 -5 -2 0 15 1
 8 -2 -2 53 15 17 -50 2 2 0 17 1 -16 -4 -2 47 4 46 -28 4 2 66 67 11 -31 -5 -2 101 15 15
 8 -2 -2 35 15 34 -52 2 2 30 16 30 -16 -4 -2 37 4 37 28 -4 -2 79 67 11 -31 -5 -2 0 15 1
 -8 2 2 37 15 24 -52 2 2 0 16 1 -16 -4 -2 9 4 9 -28 4 2 84 67 8 -29 -5 -2 0 5 1
 8 -2 -2 32 15 32 -52 -2 -2 61 16 30 -14 -4 -2 13 1 13 30 -4 -2 204 202 9 -29 -5 -2 54 5 53
 10 -2 -2 63 54 16 -52 2 2 0 16 1 -14 -4 -2 0 1 1 -30 4 2 204 202 9 -29 -5 -2 91 5 39
 -10 2 2 62 54 12 -52 2 2 0 16 1 -14 -4 -2 56 1 43 -30 4 2 201 202 8 -29 -5 -2 40 5 39
 10 -2 -2 62 54 14 -52 2 2 30 16 29 -12 -4 -2 83 14 22 32 -4 -2 71 54 21 -27 -5 -2 0 5 1
 12 -2 -2 0 1 1 -54 2 2 62 23 45 -12 -4 -2 23 14 22 -32 4 2 72 54 10 -27 -5 -2 0 5 1
 -12 2 2 27 1 26 -54 2 2 0 23 1 -12 -4 -2 16 14 15 -32 4 2 60 54 15 -27 -5 -2 58 5 48
 12 -2 -2 30 1 29 -54 2 2 0 23 1 -10 -4 -2 41 9 41 -34 4 2 99 95 9 -27 -5 -2 40 5 40
 14 -2 -2 36 20 36 -54 2 2 56 23 55 -10 -4 -2 4 9 4 -34 4 2 93 95 9 -25 -5 -2 89 3 45
 -14 2 2 17 20 17 -54 2 2 0 23 1 -8 -4 -2 0 7 1 34 -4 -2 103 95 10 -25 -5 -2 27 3 27
 14 -2 -2 27 20 26 -58 2 2 34 36 34 -8 -4 -2 79 7 21 -36 4 2 37 52 33 -25 -5 -2 39 3 39
 16 -2 -2 15 1 14 -58 2 2 53 36 53 -8 -4 -2 65 7 27 -36 4 2 41 52 41 -25 -5 -2 113 3 24
 16 -2 -2 0 1 1 -58 2 2 27 36 26 -6 -4 -2 0 11 1 36 -4 -2 69 52 23 -23 -5 -2 0 25 1
 -16 2 2 0 1 1 -58 2 2 41 36 41 -6 -4 -2 49 11 28 -36 4 2 53 52 28 -23 -5 -2 35 25 35
 18 -2 -2 22 36 22 -60 2 2 72 51 15 -6 -4 -2 0 11 1 -38 4 2 76 55 16 -23 -5 -2 0 25 1
 -18 2 2 0 36 1 -60 2 2 71 51 20 -6 -4 -2 0 11 1 38 -4 -2 65 55 27 -23 -5 -2 94 25 21
 18 -2 -2 52 36 18 -60 2 2 73 51 29 -4 -4 -2 0 39 1 -38 4 2 53 55 24 -21 -5 -2 90 57 40
 -18 2 2 0 36 1 -60 2 2 58 51 25 -4 -4 -2 45 39 41 -38 4 2 45 55 25 -21 -5 -2 63 57 27

-20 2 2 38 18 25 -62 2 2 259 222 9 -4 -4 -2 67 39 19 -40 4 2 0 25 1 -21 -5 -2 66 57 33
20 -2 -2 29 18 28 -62 2 2 240 222 11 -4 -4 -2 78 39 21 40 -4 -2 44 25 43 -21 -5 -2 75 57 37
-20 2 2 26 18 26 -62 2 2 243 222 11 -2 -4 -2 99 116 9 -40 4 2 50 25 30 -21 -5 -2 89 57 24
20 -2 -2 12 18 11 -62 2 2 220 222 12 -2 -4 -2 96 116 8 -40 4 2 36 25 36 -19 -5 -2 95 77 23
-22 2 2 52 31 16 -64 2 2 0 9 1 -2 -4 -2 101 116 9 -42 4 2 0 14 1 -19 -5 -2 142 77 21
-22 2 2 31 31 24 -64 2 2 0 9 1 2 4 2 90 116 7 -42 4 2 52 14 27 -19 -5 -2 99 77 20
22 -2 -2 52 31 20 -64 2 2 72 9 35 -2 -4 -2 115 116 8 -44 4 2 0 20 1 -19 -5 -2 40 77 39
24 -2 -2 0 7 1 -64 2 2 20 9 20 0 -4 -2 196 208 8 -44 4 2 0 20 1 -19 -5 -2 96 77 27
-24 2 2 20 7 19 -66 2 2 76 74 15 0 4 2 185 208 7 -46 4 2 0 19 1 -17 -5 -2 74 66 31
-24 2 2 0 7 1 -66 2 2 73 74 19 0 -4 -2 190 208 8 -46 4 2 0 19 1 -17 -5 -2 44 66 44
-26 2 2 28 21 27 -66 2 2 78 74 31 0 -4 -2 193 208 8 -48 4 2 49 7 25 -17 -5 -2 76 66 75
26 -2 -2 34 21 34 -66 2 2 77 74 18 0 -4 -2 197 208 8 -48 4 2 15 7 14 -17 -5 -2 83 66 24
-26 2 2 0 21 1 -68 2 2 37 38 37 2 -4 -2 99 127 9 -50 4 2 7 38 6 -17 -5 -2 99 66 26

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 33

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-15 -5 -2 177 197 10 -41 5 2 0 5 1 -3 -7 -2 85 10 41 12 -8 3 37 7 36 -25 -7 3 34 3 34
-15 -5 -2 183 197 9 -41 5 2 0 5 1 -3 -7 -2 22 10 21 10 -8 3 0 6 1 -25 -7 3 0 3 1
-15 -5 -2 187 197 10 -43 5 2 28 7 28 -3 -7 -2 0 10 1 8 -8 3 0 13 1 -27 -7 3 44 46 43
-15 -5 -2 190 197 10 -43 5 2 0 7 1 -1 -7 -2 0 1 1 6 -8 3 16 9 16 -27 -7 3 37 46 37
-13 -5 -2 0 22 1 -45 5 2 89 98 11 -1 -7 -2 0 1 1 4 -8 3 56 33 48 -27 -7 3 55 46 41
-13 -5 -2 79 22 36 -45 5 2 86 98 15 -1 -7 -2 80 1 30 2 -8 3 137 116 14 -27 -7 3 29 46 28
-13 -5 -2 0 22 1 -47 5 2 134 133 11 -1 -7 -2 44 1 44 2 -8 3 133 116 12 -29 -7 3 62 9 61
-13 -5 -2 0 22 1 -47 5 2 130 133 9 1 -7 -2 37 10 37 0 -8 3 91 57 22 -29 -7 3 0 9 1
-11 -5 -2 10 20 10 -49 5 2 25 46 25 1 -7 -2 56 10 55 0 -8 3 115 57 16 -29 -7 3 24 9 23
-11 -5 -2 0 20 1 -49 5 2 16 46 16 1 -7 -2 0 10 1 -2 -8 3 129 110 12 -31 -7 3 20 16 19

-9 -5 -2 70 47 35 -51 5 2 32 9 32 3 -7 -2 66 5 65 -2 -8 3 136 110 13 -31 -7 3 0 16 1
 -9 -5 -2 0 47 1 -51 5 2 0 9 1 3 -7 -2 66 5 45 -4 -8 3 65 37 64 -31 -7 3 0 16 1
 -9 -5 -2 68 47 23 -53 5 2 24 19 24 3 -7 -2 28 5 28 -4 -8 3 47 37 47 -33 -7 3 23 8 23
 -7 -5 -2 57 5 56 -53 5 2 27 19 27 5 -7 -2 15 27 15 -6 -8 3 34 2 33 -33 -7 3 0 8 1
 -7 -5 -2 0 5 1 -55 5 2 35 10 34 5 -7 -2 67 27 66 -6 -8 3 0 2 1 -33 -7 3 25 8 24
 -7 -5 -2 22 5 21 -55 5 2 21 10 21 5 -7 -2 26 27 25 -8 -8 3 0 15 1 -35 -7 3 31 12 30
 -5 -5 -2 0 38 1 -57 5 2 31 37 31 7 -7 -2 24 45 23 -8 -8 3 57 15 57 -35 -7 3 0 12 1
 -5 -5 -2 67 38 22 -57 5 2 0 37 1 7 -7 -2 0 45 1 -8 -8 3 0 15 1 -35 -7 3 0 12 1
 -5 -5 -2 45 38 45 -59 5 2 0 23 1 9 -7 -2 67 7 34 -10 -8 3 0 2 1 -37 -7 3 0 22 1
 -3 -5 -2 0 10 1 -59 5 2 0 23 1 11 -7 -2 73 43 28 -10 -8 3 33 2 33 -37 -7 3 0 22 1
 -3 -5 -2 31 10 31 -61 5 2 0 21 1 13 -7 -2 112 89 18 -12 -8 3 51 14 50 -39 -7 3 28 8 27
 -3 -5 -2 20 10 19 -61 5 2 0 21 1 -33 7 2 0 9 1 -12 -8 3 0 14 1 -39 -7 3 41 8 41
 -1 -5 -2 0 10 1 -63 5 2 0 10 1 -35 7 2 0 11 1 -14 -8 3 10 9 9 -41 -7 3 55 47 38
 -1 -5 -2 0 10 1 -63 5 2 24 10 24 -37 7 2 0 11 1 -14 -8 3 0 9 1 -41 -7 3 64 47 32
 -1 -5 -2 0 10 1 -65 5 2 23 17 22 -39 7 2 26 27 26 -16 -8 3 6 8 5 -59 5 -3 16 25 16
 -1 -5 -2 72 10 16 -65 5 2 54 17 34 -41 7 2 19 19 19 -16 -8 3 7 8 7 -59 5 -3 0 25 1
 1 -5 -2 0 17 1 -45 -7 -2 106 15 55 -43 7 2 49 31 38 -18 -8 3 0 25 1 -57 5 -3 0 5 1
 1 -5 -2 30 17 30 -45 -7 -2 60 15 59 -45 7 2 82 93 14 -18 -8 3 0 25 1 -57 5 -3 53 5 52
 1 -5 -2 74 17 20 -45 -7 -2 122 15 17 -47 7 2 97 116 12 -20 -8 3 35 13 35 -57 5 -3 22 5 21
 1 -5 -2 50 17 50 -43 -7 -2 0 4 1 -47 7 2 115 116 13 -20 -8 3 0 13 1 -55 5 -3 26 20 25
 -3 5 2 19 34 19 -43 -7 -2 0 4 1 -49 7 2 113 104 15 -22 -8 3 0 10 1 -55 5 -3 0 20 1
 3 -5 -2 70 34 25 -43 -7 -2 123 4 34 -34 -8 -2 96 35 56 -22 -8 3 46 10 46 -55 5 -3 41 20 40
 3 -5 -2 37 34 36 -41 -7 -2 59 29 59 -32 -8 -2 120 94 19 -24 -8 3 12 36 11 -53 5 -3 0 40 1
 3 -5 -2 41 34 40 -41 -7 -2 0 29 1 -32 -8 -2 167 94 18 -24 -8 3 0 36 1 -53 5 -3 62 40 61
 3 -5 -2 40 34 40 -41 -7 -2 0 29 1 -30 -8 -2 116 90 21 -39 7 -3 12 5 11 -53 5 -3 8 40 7
 5 -5 -2 0 21 1 -39 -7 -2 12 6 12 -30 -8 -2 143 90 35 -37 7 -3 4 8 3 -51 5 -3 64 52 63
 5 -5 -2 47 21 34 -39 -7 -2 76 6 76 -28 -8 -2 122 57 37 -35 7 -3 0 20 1 -51 5 -3 13 52 12

-5 5 2 48 21 28 -39 -7 -2 0 6 1 -28 -8 -2 47 57 47 -33 7 -3 0 19 1 -51 5 -3 62 52 22
 5 -5 -2 34 21 34 -37 -7 -2 46 9 46 -26 -8 -2 66 32 66 -31 7 -3 0 26 1 -51 5 -3 44 52 43
 5 -5 -2 54 21 54 -37 -7 -2 39 9 39 -26 -8 -2 72 32 41 -29 7 -3 0 5 1 -49 5 -3 131 128 8
 -7 5 2 18 26 18 -37 -7 -2 83 9 57 -24 -8 -2 0 2 1 -27 7 -3 69 40 23 -49 5 -3 109 128 15
 7 -5 -2 0 26 1 -35 -7 -2 0 16 1 -24 -8 -2 42 2 42 -25 7 -3 0 21 1 -49 5 -3 125 128 11
 7 -5 -2 63 26 20 -35 -7 -2 39 16 38 -22 -8 -2 0 18 1 -23 7 -3 39 3 38 -49 5 -3 120 128 15
 7 -5 -2 19 26 19 -35 -7 -2 0 16 1 -22 -8 -2 0 18 1 -21 7 -3 0 3 1 -47 5 -3 83 75 11
 9 -5 -2 70 40 19 -33 -7 -2 0 19 1 -22 -8 -2 48 18 47 -19 7 -3 0 17 1 -47 5 -3 84 75 21
 -9 5 2 19 40 18 -33 -7 -2 0 19 1 -20 -8 -2 0 4 1 19 -7 3 0 17 1 -47 5 -3 86 75 29
 9 -5 -2 66 40 31 -33 -7 -2 0 19 1 -20 -8 -2 0 4 1 17 -7 3 123 119 11 -47 5 -3 90 75 18
 9 -5 -2 0 40 1 -31 -7 -2 0 22 1 -20 -8 -2 49 4 49 -17 7 -3 146 119 9 -45 5 -3 139 129 8
 11 -5 -2 74 75 10 -31 -7 -2 0 22 1 -18 -8 -2 143 4 29 15 -7 3 138 120 10 -45 5 -3 107 129 14
 11 -5 -2 79 75 18 -29 -7 -2 68 6 67 -18 -8 -2 0 4 1 13 -7 3 126 111 11 -45 5 -3 124 129 11
 11 -5 -2 99 75 19 -29 -7 -2 102 6 36 -18 -8 -2 74 4 73 11 -7 3 98 63 18 -43 5 -3 77 61 31
 -11 5 2 78 75 9 -29 -7 -2 27 6 27 -16 -8 -2 17 1 17 9 -7 3 17 25 17 -43 5 -3 96 61 14
 -13 5 2 102 104 8 -27 -7 -2 0 23 1 -16 -8 -2 0 1 1 7 -7 3 45 23 44 -41 5 -3 0 22 1
 13 -5 -2 101 104 11 -27 -7 -2 0 23 1 -16 -8 -2 81 1 81 5 -7 3 0 11 1 -41 5 -3 13 22 12
 13 -5 -2 95 104 9 -27 -7 -2 23 23 22 -14 -8 -2 34 35 33 5 -7 3 0 11 1 -39 5 -3 0 18 1
 15 -5 -2 88 105 12 -25 -7 -2 32 9 31 -14 -8 -2 0 35 1 3 -7 3 33 18 32 -39 5 -3 0 18 1
 -15 5 2 77 105 10 -25 -7 -2 0 9 1 -14 -8 -2 0 35 1 3 -7 3 57 18 57 -37 5 -3 0 0 1
 15 -5 -2 91 105 9 -25 -7 -2 35 9 35 -12 -8 -2 75 4 74 1 -7 3 0 14 1 -37 5 -3 43 0 43
 -17 5 2 185 207 8 -23 -7 -2 0 26 1 -12 -8 -2 29 4 28 1 -7 3 39 14 38 -35 5 -3 0 31 1
 -17 5 2 166 207 9 -23 -7 -2 53 26 52 -12 -8 -2 0 4 1 -1 -7 3 0 16 1 -35 5 -3 0 31 1
 17 -5 -2 181 207 9 -23 -7 -2 43 26 42 -10 -8 -2 0 23 1 -1 -7 3 0 16 1 -33 5 -3 0 7 1
 17 -5 -2 183 207 8 -21 -7 -2 114 59 31 -10 -8 -2 27 23 26 -3 -7 3 0 6 1 -33 5 -3 47 7 36
 -19 5 2 12 21 11 -21 -7 -2 72 59 32 -10 -8 -2 0 23 1 -3 -7 3 0 6 1 -31 5 -3 36 31 35
 19 -5 -2 72 21 20 -21 -7 -2 61 59 60 -8 -8 -2 39 7 38 -5 -7 3 0 16 1 -31 5 -3 35 31 34

19 -5 -2 50 21 40 -19 -7 -2 50 38 50 -8 -8 -2 0 7 1 -5 -7 3 50 16 49 -29 5 -3 0 0 1
 -19 5 2 61 21 21 -19 -7 -2 0 38 1 -8 -8 -2 0 7 1 -7 -7 3 16 19 15 -29 5 -3 0 0 1
 -21 5 2 26 21 25 -19 -7 -2 60 38 60 -6 -8 -2 0 6 1 -7 -7 3 0 19 1 -27 5 -3 37 15 36
 -21 5 2 26 21 26 -17 -7 -2 53 5 53 -6 -8 -2 0 6 1 -9 -7 3 30 20 30 -27 5 -3 0 15 1
 -23 5 2 39 1 39 -17 -7 -2 40 5 39 -6 -8 -2 0 6 1 -9 -7 3 38 20 38 -25 5 -3 0 15 1
 23 -5 -2 61 1 28 -17 -7 -2 0 5 1 -4 -8 -2 0 7 1 -11 -7 3 0 22 1 -25 5 -3 50 15 50
 -23 5 2 26 1 26 -15 -7 -2 352 278 13 -4 -8 -2 0 7 1 -11 -7 3 21 22 21 -23 5 -3 35 14 34
 25 -5 -2 0 2 1 -15 -7 -2 366 278 14 -4 -8 -2 0 7 1 -13 -7 3 0 38 1 -23 5 -3 36 14 35
 -25 5 2 0 2 1 -13 -7 -2 136 61 28 -2 -8 -2 40 36 40 -13 -7 3 35 38 35 -21 5 -3 37 2 36
 -25 5 2 0 2 1 -13 -7 -2 69 61 69 -2 -8 -2 112 36 17 -15 -7 3 67 41 23 -21 5 -3 0 2 1
 -27 5 2 0 22 1 -13 -7 -2 91 61 23 0 -8 -2 173 161 13 -15 -7 3 76 41 63 -19 5 -3 36 4 35
 -27 5 2 49 22 35 -11 -7 -2 51 28 51 0 -8 -2 197 161 12 -17 -7 3 92 84 12 -19 5 -3 0 4 1
 27 -5 -2 32 22 32 -11 -7 -2 54 28 54 2 -8 -2 48 40 47 -17 -7 3 137 84 25 17 -5 3 74 85 16
 -29 5 2 65 3 22 -11 -7 -2 75 28 58 2 -8 -2 86 40 45 -19 -7 3 53 36 52 -17 5 -3 77 85 12
 -29 5 2 16 3 16 -9 -7 -2 0 2 1 4 -8 -2 0 2 1 -19 -7 3 105 36 32 -17 5 -3 74 85 14
 29 -5 -2 20 3 19 -9 -7 -2 0 2 1 6 -8 -2 24 19 23 -19 -7 3 55 36 31 -17 5 -3 75 85 25
 -31 5 2 33 9 32 -9 -7 -2 58 2 42 8 -8 -2 0 5 1 -21 -7 3 0 27 1 17 -5 3 92 85 11
 -31 5 2 39 9 39 -7 -7 -2 50 3 49 10 -8 -2 0 49 1 -21 -7 3 53 27 53 -15 5 -3 88 96 12
 -33 5 2 17 2 16 -7 -7 -2 49 3 48 12 -8 -2 0 4 1 -21 -7 3 0 27 1 -15 5 -3 89 96 13
 -35 5 2 0 10 1 -7 -7 -2 0 3 1 20 -8 3 0 21 1 -23 -7 3 0 2 1 -15 5 -3 84 96 11
 -37 5 2 29 25 29 -5 -7 -2 80 7 40 18 -8 3 0 15 1 -23 -7 3 0 2 1 15 -5 3 96 96 10
 -39 5 2 0 21 1 -5 -7 -2 0 7 1 16 -8 3 19 11 19 -23 -7 3 7 2 6 15 -5 3 73 96 11
 -39 5 2 47 21 46 -5 -7 -2 8 7 7 14 -8 3 0 9 1 -25 -7 3 65 3 64 -13 5 -3 31 73 31

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-13 5 -3 72 73 15 -29 -5 3 31 16 30 -44 4 -3 0 11 1 0 -4 3 125 102 8 -40 -4 3 23 29 22
 13 -5 3 73 73 16 -29 -5 3 75 16 12 -42 4 -3 0 9 1 -2 -4 3 222 201 9 -40 -4 3 0 29 1
 11 -5 3 0 39 1 -31 -5 3 0 20 1 -42 4 -3 0 9 1 -2 -4 3 219 201 10 -40 -4 3 80 29 37
 -11 5 -3 0 39 1 -31 -5 3 0 20 1 -42 4 -3 0 9 1 2 4 -3 216 201 10 -40 -4 3 30 29 30
 9 -5 3 56 4 38 -31 -5 3 0 20 1 -40 4 -3 50 3 50 -4 -4 3 115 92 8 -42 -4 3 38 34 37
 -9 5 -3 25 4 24 -31 -5 3 0 20 1 -40 4 -3 0 3 1 4 4 -3 100 92 10 -42 -4 3 36 34 35
 9 -5 3 21 4 21 -33 -5 3 0 21 1 -40 4 -3 33 3 32 -4 -4 3 93 92 8 -42 -4 3 0 34 1
 -9 5 -3 33 4 33 -33 -5 3 21 21 20 -40 4 -3 52 3 37 6 4 -3 39 43 39 -42 -4 3 20 34 19
 7 -5 3 47 4 46 -33 -5 3 0 21 1 -36 4 -3 0 20 1 -6 -4 3 64 43 19 -42 -4 3 59 34 25
 -7 5 -3 0 4 1 -33 -5 3 0 21 1 -36 4 -3 0 20 1 -6 -4 3 54 43 18 -44 -4 3 32 23 31
 -7 5 -3 47 4 47 -35 -5 3 0 0 1 -36 4 -3 0 20 1 -8 -4 3 29 1 28 -44 -4 3 0 23 1
 7 -5 3 36 4 35 -35 -5 3 0 0 1 36 -4 3 17 20 16 -8 -4 3 0 1 1 -44 -4 3 0 23 1
 5 -5 3 0 2 1 -35 -5 3 0 0 1 -34 4 -3 54 35 53 8 4 -3 12 1 12 -44 -4 3 71 23 54
 -5 5 -3 66 2 34 -35 -5 3 42 0 42 -34 4 -3 30 35 30 10 4 -3 52 18 37 -44 -4 3 27 23 26
 5 -5 3 49 2 49 -37 -5 3 0 3 1 34 -4 3 60 35 42 -10 -4 3 43 18 43 -46 -4 3 0 34 1
 -5 5 -3 23 2 23 -37 -5 3 15 3 15 -34 4 -3 43 35 42 -10 -4 3 0 18 1 -46 -4 3 0 34 1
 3 -5 3 0 2 1 -37 -5 3 0 3 1 -34 4 -3 27 35 26 -12 -4 3 50 1 25 -46 -4 3 0 34 1
 -3 5 -3 14 2 14 -37 -5 3 0 3 1 -32 4 -3 139 125 9 -12 -4 3 0 1 1 -46 -4 3 40 34 40
 -3 5 -3 0 2 1 -39 -5 3 66 1 28 -32 4 -3 138 125 8 12 4 -3 0 1 1 -48 -4 3 40 20 39
 3 -5 3 25 2 25 -39 -5 3 0 1 1 32 -4 3 158 125 8 -12 -4 3 0 1 1 -48 -4 3 0 20 1
 -1 5 -3 49 22 49 -39 -5 3 0 1 1 -32 4 -3 147 125 8 -14 -4 3 19 12 18 -48 -4 3 0 20 1
 -1 5 -3 11 22 10 -39 -5 3 68 1 67 -32 4 -3 128 125 11 14 4 -3 14 12 14 -48 -4 3 11 20 10
 1 -5 3 15 22 15 -41 -5 3 0 22 1 30 -4 3 66 6 26 -14 -4 3 0 12 1 -50 -4 3 35 14 35
 1 -5 3 19 22 18 -41 -5 3 0 22 1 -30 4 -3 0 6 1 -14 -4 3 0 12 1 -50 -4 3 0 14 1
 1 5 -3 52 12 52 -41 -5 3 39 22 39 -30 4 -3 0 6 1 -16 -4 3 0 20 1 -50 -4 3 0 14 1
 -1 -5 3 38 12 37 -41 -5 3 0 22 1 -30 4 -3 0 6 1 -16 -4 3 21 20 20 -50 -4 3 0 14 1

1 5 -3 0 12 1 -43 -5 3 25 49 24 -30 4 -3 77 6 19 16 4 -3 49 20 42 -52 -4 3 15 38 14
-1 -5 3 33 12 32 -43 -5 3 75 49 23 -28 4 -3 22 41 21 -16 -4 3 0 20 1 -52 -4 3 8 38 8
-3 -5 3 0 2 1 -43 -5 3 65 49 29 28 -4 3 83 41 19 -18 -4 3 0 10 1 -52 -4 3 17 38 17
-3 -5 3 73 2 20 -43 -5 3 60 49 60 -28 4 -3 37 41 36 -18 -4 3 32 10 31 -54 -4 3 0 27 1
3 5 -3 48 2 32 -45 -5 3 105 75 16 -28 4 -3 77 41 29 18 4 -3 65 10 24 -54 -4 3 33 27 33
3 5 -3 48 2 47 -45 -5 3 83 75 18 -28 4 -3 55 41 22 -18 -4 3 28 10 28 -54 -4 3 30 27 30
-5 -5 3 43 15 42 -45 -5 3 79 75 13 -26 4 -3 70 42 21 -20 -4 3 54 14 20 -56 -4 3 31 19 31
-5 -5 3 18 15 17 -45 -5 3 75 75 11 26 -4 3 58 42 28 20 4 -3 27 14 26 -56 -4 3 0 19 1
5 5 -3 27 15 27 -45 -5 3 78 75 14 -26 4 -3 38 42 37 -20 -4 3 80 14 20 -56 -4 3 27 19 26
7 5 -3 66 20 31 -47 -5 3 0 2 1 -26 4 -3 95 42 22 -20 -4 3 20 14 19 -58 -4 3 53 56 35
-7 -5 3 37 20 37 -47 -5 3 118 2 32 -26 4 -3 36 42 35 22 4 -3 82 31 19 -58 -4 3 47 56 26
-7 -5 3 61 20 26 -47 -5 3 0 2 1 -24 4 -3 0 41 1 -22 -4 3 57 31 17 -58 -4 3 60 56 41
-9 -5 3 50 35 41 -47 -5 3 32 2 31 24 -4 3 59 41 25 -22 -4 3 65 31 12 -60 -4 3 33 31 32
-9 -5 3 49 35 31 -47 -5 3 0 2 1 -24 4 -3 71 41 19 -22 -4 3 48 31 48 -60 -4 3 0 31 1
9 5 -3 0 35 1 -49 -5 3 59 81 41 -24 4 -3 46 41 26 24 4 -3 87 26 13 -60 -4 3 69 31 26
-11 -5 3 64 49 20 -49 -5 3 70 81 14 -24 4 -3 20 41 20 -24 -4 3 54 26 19 -62 -4 3 73 69 28
11 5 -3 82 49 14 -49 -5 3 70 81 28 22 -4 3 69 16 12 -24 -4 3 60 26 30 -62 -4 3 93 69 20
-11 -5 3 78 49 20 -51 -5 3 46 31 32 -22 4 -3 40 16 39 -24 -4 3 68 26 15 -62 -4 3 64 69 18
-11 -5 3 44 49 43 -51 -5 3 44 31 43 -22 4 -3 0 16 1 -24 -4 3 60 26 20 -64 -4 3 163 129 9
13 5 -3 67 54 28 -51 -5 3 71 31 23 -22 4 -3 58 16 23 -26 -4 3 84 61 12 -64 -4 3 135 129 10
-13 -5 3 69 54 22 -53 -5 3 32 27 31 -22 4 -3 0 16 1 -26 -4 3 76 61 16 -66 -4 3 92 104 14
-13 -5 3 50 54 49 -53 -5 3 62 27 37 -20 4 -3 22 21 22 -26 -4 3 104 61 9 -66 -4 3 93 104 11
-13 -5 3 22 54 21 -53 -5 3 63 27 35 -20 4 -3 0 21 1 -26 -4 3 95 61 12 -70 2 -3 0 30 1
-15 -5 3 102 87 10 -55 -5 3 0 27 1 -18 4 -3 38 23 37 26 4 -3 83 61 14 -68 2 -3 44 7 43
-15 -5 3 94 87 14 -55 -5 3 61 27 30 18 -4 3 0 23 1 -26 -4 3 71 61 15 -66 2 -3 72 31 49
15 5 -3 124 87 10 -55 -5 3 40 27 40 -18 4 -3 31 23 31 -28 -4 3 84 50 11 -66 2 -3 43 31 43
-15 -5 3 96 87 10 -57 -5 3 25 10 24 -18 4 -3 0 23 1 28 4 -3 84 50 14 -64 2 -3 46 64 46

17 5-3 139 150 10 -57-5 3 0 10 1 -16 4-3 0 26 1 -28-4 3 98 50 9 -64 2-3 87 64 33
 -17-5 3 154 150 10 -57-5 3 28 10 27 -16 4-3 0 26 1 -28-4 3 0 50 1 -62 2-3 29 21 29
 -17-5 3 124 150 11 -59-5 3 41 10 41 -16 4-3 0 26 1 -28-4 3 48 50 25 -62 2-3 0 21 1
 -17-5 3 148 150 8 -59-5 3 63 10 38 16-4 3 0 26 1 -28-4 3 63 50 22 -60 2-3 55 57 54
 -17-5 3 148 150 8 -64 4-3 0 8 1 16-4 3 0 26 1 -30-4 3 60 36 60 -60 2-3 69 57 24
 -17-5 3 131 150 9 -64 4-3 0 8 1 -14 4-3 16 11 15 -30-4 3 0 36 1 -60 2-3 55 57 54
 -19-5 3 79 90 12 -62 4-3 161 143 10 -14 4-3 26 11 25 -30-4 3 25 36 25 -58 2-3 32 51 32
 19 5-3 105 90 11 -62 4-3 154 143 8 14-4 3 0 11 1 -30-4 3 26 36 26 -58 2-3 77 51 23
 -19-5 3 107 90 9 -60 4-3 53 67 53 -14 4-3 0 11 1 -30-4 3 27 36 27 -58 2-3 106 51 14
 -19-5 3 96 90 15 -60 4-3 60 67 22 14-4 3 42 11 41 -30-4 3 22 36 22 -56 2-3 64 42 30
 -19-5 3 82 90 14 -60 4-3 55 67 55 12-4 3 47 26 43 -32-4 3 217 191 10 -56 2-3 40 42 40
 -19-5 3 83 90 11 -58 4-3 0 4 1 -12 4-3 63 26 31 -32-4 3 200 191 9 -56 2-3 48 42 48
 21 5-3 90 70 14 -58 4-3 0 4 1 -12 4-3 0 26 1 -32-4 3 202 191 9 -54 2-3 44 15 44
 -21-5 3 58 70 28 -58 4-3 26 4 26 12-4 3 0 26 1 -32-4 3 200 191 10 -54 2-3 24 15 24
 -21-5 3 92 70 10 -56 4-3 0 16 1 10-4 3 31 1 31 -32-4 3 207 191 9 -54 2-3 0 15 1
 -21-5 3 85 70 33 -56 4-3 45 16 45 -10 4-3 43 1 43 -32-4 3 213 191 9 -54 2-3 21 15 20
 -21-5 3 89 70 12 -56 4-3 0 16 1 10-4 3 67 1 20 -32-4 3 226 191 9 -52 2-3 51 2 37
 -21-5 3 53 70 23 -54 4-3 62 10 62 -10 4-3 50 1 27 -34-4 3 0 4 1 -52 2-3 16 2 16
 -23-5 3 0 15 1 -54 4-3 38 10 38 -8 4-3 74 33 23 -34-4 3 58 4 27 -52 2-3 0 2 1
 -23-5 3 17 15 17 -54 4-3 11 10 10 -8 4-3 0 33 1 -34-4 3 72 4 12 -52 2-3 0 2 1
 -23-5 3 60 15 32 -52 4-3 72 8 21 8-4 3 32 33 31 -34-4 3 0 4 1 -50 2-3 30 18 29
 -23-5 3 20 15 20 -52 4-3 0 8 1 8-4 3 54 33 26 -34-4 3 64 4 64 -50 2-3 53 18 53
 23 5-3 59 15 35 -52 4-3 0 8 1 -6 4-3 81 48 12 -34-4 3 0 4 1 -50 2-3 0 18 1
 -23-5 3 75 15 17 -50 4-3 0 12 1 6-4 3 52 48 21 -36-4 3 0 25 1 -50 2-3 0 18 1
 -25-5 3 21 39 21 -50 4-3 24 12 24 6-4 3 69 48 18 -36-4 3 26 25 26 -48 2-3 0 32 1
 -25-5 3 48 39 29 -50 4-3 44 12 43 -6 4-3 0 48 1 -36-4 3 0 25 1 -48 2-3 39 32 38
 -25-5 3 0 39 1 -48 4-3 50 26 27 4-4 3 98 104 9 -36-4 3 50 25 49 -48 2-3 8 32 7

-25 -5 3 0 39 1 -48 4 -3 0 26 1 -4 4 -3 122 104 9 -36 -4 3 19 25 18 -48 2 -3 0 32 1
-27 -5 3 28 12 27 -48 4 -3 53 26 52 4 -4 3 115 104 8 -38 -4 3 39 18 39 -46 2 -3 0 8 1
-27 -5 3 27 12 27 -46 4 -3 0 7 1 2 -4 3 205 203 9 -38 -4 3 0 18 1 -46 2 -3 0 8 1
-27 -5 3 0 12 1 -46 4 -3 26 7 25 2 -4 3 203 203 9 -38 -4 3 44 18 35 -46 2 -3 0 8 1
-29 -5 3 48 16 31 -46 4 -3 46 7 38 -2 4 -3 219 203 9 -38 -4 3 69 18 62 -46 2 -3 0 8 1
-29 -5 3 21 16 21 -44 4 -3 78 11 31 0 -4 3 119 102 8 -38 -4 3 28 18 27 -44 2 -3 0 29 1
-29 -5 3 73 16 44 -44 4 -3 28 11 27 0 4 -3 118 102 10 -40 -4 3 0 29 1 -44 2 -3 37 29 36

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 35

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-44	2	-3	0	29	1	8	-2	3	58	39	9	-32	-2	3	152	157	7	-71	1	-3	0	8	1	-25	1	-3	71	32	19
-44	2	-3	43	29	42	-8	2	-3	47	39	27	-32	-2	3	151	157	9	-69	1	-3	0	11	1	-25	1	-3	42	32	42
-44	2	-3	0	29	1	-8	2	-3	72	39	16	-32	-2	3	169	157	7	-69	1	-3	32	11	32	-23	1	-3	61	12	21
-42	2	-3	44	12	43	8	-2	3	57	39	9	-32	-2	3	161	157	7	-69	1	-3	0	11	1	-23	1	-3	59	12	44
-42	2	-3	26	12	26	6	-2	3	41	41	20	-34	-2	3	179	180	9	-67	1	-3	0	23	1	-23	1	-3	67	12	22
-42	2	-3	0	12	1	-6	2	-3	36	41	36	-34	-2	3	182	180	8	-67	1	-3	0	23	1	-23	1	-3	63	12	9
-42	2	-3	0	12	1	6	-2	3	60	41	8	-34	-2	3	165	180	7	-67	1	-3	76	23	41	-23	1	-3	11	12	11
-42	2	-3	31	12	30	-6	2	-3	38	41	37	-34	-2	3	186	180	8	-65	1	-3	14	8	13	-21	1	-3	13	14	13
-42	2	-3	0	12	1	-6	2	-3	28	41	27	-36	-2	3	100	89	9	-65	1	-3	25	8	25	-21	1	-3	69	14	16
-40	2	-3	43	43	30	-4	2	-3	31	32	30	-36	-2	3	96	89	9	-65	1	-3	45	8	45	-21	1	-3	0	14	1
-40	2	-3	48	43	47	-4	2	-3	44	32	27	36	2	-3	88	89	9	-63	1	-3	0	28	1	21	-1	3	41	14	34
-40	2	-3	55	43	39	4	-2	3	42	32	20	-36	-2	3	102	89	6	-63	1	-3	0	28	1	-21	1	-3	37	14	36
-40	2	-3	75	43	31	4	-2	3	52	32	10	-36	-2	3	103	89	11	-63	1	-3	76	28	38	-21	1	-3	0	14	1
-40	2	-3	52	43	37	-4	2	-3	61	32	18	-36	-2	3	83	89	10	-61	1	-3	60	16	60	-19	1	-3	0	1	1
-40	2	-3	56	43	24	2	-2	3	0	12	1	-36	-2	3	96	89	8	-61	1	-3	0	16	1	19	-1	3	43	1	24
-38	2	-3	66	83	22	-2	2	-3	48	12	27	-38	-2	3	45	51	22	-61	1	-3	29	16	29	-19	1	-3	34	1	33

-38 2-3 71 83 25 2-2 3 0 12 1 -38-2 3 0 51 1 -59 1-3 0 31 1 -19 1-3 0 1 1
 -38 2-3 86 83 24 -2 2-3 0 12 1 38 2-3 74 51 18 -59 1-3 0 31 1 -17 1-3 117 114 8
 -38 2-3 76 83 14 -2 2-3 0 12 1 -38-2 3 42 51 41 -59 1-3 0 31 1 17-1 3 120 114 6
 -38 2-3 79 83 17 0 2-3 161 175 7 -38-2 3 39 51 38 -57 1-3 34 7 34 -17 1-3 116 114 7
 -38 2-3 73 83 9 0 2-3 167 175 8 -38-2 3 33 51 32 -57 1-3 0 7 1 -17 1-3 113 114 7
 -36 2-3 94 108 7 0-2 3 177 175 7 -38-2 3 92 51 19 -57 1-3 0 7 1 -17 1-3 109 114 11
 -36 2-3 116 108 11 0-2 3 179 175 7 -40-2 3 18 17 17 -55 1-3 39 12 38 -15 1-3 133 165 9
 -36 2-3 121 108 10 0-2 3 171 175 8 -40-2 3 31 17 31 -55 1-3 0 12 1 -15 1-3 141 165 7
 -36 2-3 97 108 12 -2-2 3 21 14 21 -40-2 3 40 17 39 -55 1-3 47 12 47 -15 1-3 155 165 7
 -36 2-3 96 108 12 2 2-3 37 14 36 -40-2 3 0 17 1 -53 1-3 64 37 27 15-1 3 144 165 7
 -36 2-3 93 108 13 2 2-3 0 14 1 -40-2 3 50 17 18 -53 1-3 29 37 29 -15 1-3 148 165 7
 -34 2-3 164 150 8 -2-2 3 24 14 24 -40-2 3 44 17 43 -53 1-3 69 37 42 -13 1-3 110 111 7
 -34 2-3 130 150 10 -2-2 3 38 14 23 -42-2 3 23 15 22 -51 1-3 96 55 24 -13 1-3 113 111 8
 -34 2-3 137 150 11 -4-2 3 65 54 9 -42-2 3 33 15 32 -51 1-3 45 55 44 -13 1-3 109 111 7
 -34 2-3 143 150 8 -4-2 3 48 54 15 -42-2 3 45 15 45 -51 1-3 59 55 24 13-1 3 98 111 7
 -34 2-3 147 150 6 4 2-3 75 54 15 -42-2 3 20 15 19 -49 1-3 140 142 10 -13 1-3 94 111 10
 -32 2-3 27 25 26 -4-2 3 63 54 17 -42-2 3 21 15 21 -49 1-3 165 142 9 -11 1-3 58 51 17
 -32 2-3 13 25 13 4 2-3 68 54 15 -42-2 3 0 15 1 -49 1-3 147 142 12 -11 1-3 59 51 18
 -32 2-3 52 25 51 -6-2 3 24 42 23 -42-2 3 35 15 35 -47 1-3 100 93 11 11-1 3 49 51 10
 -32 2-3 21 25 21 6 2-3 60 42 19 -44-2 3 40 17 40 -47 1-3 120 93 12 -11 1-3 78 51 16
 -30 2-3 253 220 10 6 2-3 66 42 11 -44-2 3 49 17 20 -47 1-3 104 93 12 9-1 3 17 2 16
 -30 2-3 248 220 11 -6-2 3 32 42 31 -44-2 3 66 17 33 -45 1-3 163 150 10 -9 1-3 0 2 1
 -30 2-3 239 220 8 -8-2 3 35 53 35 -44-2 3 0 17 1 -45 1-3 171 150 9 -9 1-3 49 2 26
 -30 2-3 241 220 9 8 2-3 60 53 20 -44-2 3 33 17 33 -45 1-3 144 150 10 -9 1-3 31 2 30
 -28 2-3 135 112 11 -8-2 3 57 53 24 -44-2 3 0 17 1 -45 1-3 172 150 9 -7 1-3 39 4 38
 -28 2-3 118 112 12 -8-2 3 38 53 22 -44-2 3 0 17 1 -43 1-3 96 70 11 -7 1-3 0 4 1
 -28 2-3 126 112 6 8 2-3 17 53 16 -46-2 3 0 13 1 -43 1-3 92 70 12 7-1 3 0 4 1

-28 2 -3 122 112 9 10 2 -3 31 7 31 -46 -2 3 0 13 1 -43 1 -3 80 70 12 -7 1 -3 0 4 1
 -28 2 -3 115 112 9 -10 -2 3 40 7 19 -46 -2 3 0 13 1 -43 1 -3 87 70 25 -5 1 -3 0 3 1
 -26 2 -3 47 31 41 -10 -2 3 77 7 11 -46 -2 3 0 13 1 -43 1 -3 105 70 12 5 -1 3 66 3 14
 -26 2 -3 57 31 26 -10 -2 3 0 7 1 -46 -2 3 54 13 30 -41 1 -3 0 14 1 -5 1 -3 14 3 14
 -26 2 -3 37 31 36 -12 -2 3 67 38 17 -48 -2 3 0 8 1 -41 1 -3 33 14 32 -5 1 -3 0 3 1
 -26 2 -3 55 31 55 -12 -2 3 33 38 33 -48 -2 3 0 8 1 -41 1 -3 0 14 1 -3 1 -3 14 8 14
 -24 2 -3 39 7 32 -12 -2 3 68 38 13 -48 -2 3 23 8 23 -41 1 -3 23 14 22 3 -1 3 0 8 1
 -24 2 -3 69 7 32 12 2 -3 47 38 28 -48 -2 3 63 8 28 -41 1 -3 0 14 1 -3 1 -3 40 8 40
 -24 2 -3 23 7 22 -14 -2 3 48 12 29 -50 -2 3 0 12 1 -39 1 -3 8 26 8 -3 1 -3 0 8 1
 -24 2 -3 0 7 1 -14 -2 3 25 12 25 -50 -2 3 0 12 1 -39 1 -3 48 26 36 1 -1 3 18 17 18
 24 -2 3 39 7 39 -14 -2 3 63 12 18 -50 -2 3 30 12 29 -39 1 -3 51 26 18 1 -1 3 60 17 16
 -22 2 -3 0 19 1 14 2 -3 0 12 1 -50 -2 3 0 12 1 -39 1 -3 40 26 40 -1 1 -3 12 17 11
 -22 2 -3 28 19 28 -16 -2 3 48 31 30 -52 -2 3 43 40 43 -39 1 -3 81 26 24 -1 1 -3 43 17 31
 -22 2 -3 0 19 1 -16 -2 3 0 31 1 -52 -2 3 0 40 1 -37 1 -3 0 10 1 -1 1 -3 30 17 30
 -22 2 -3 51 19 51 16 2 -3 0 31 1 -52 -2 3 34 40 34 -37 1 -3 0 10 1 1 1 -3 55 7 21
 22 -2 3 21 19 21 -18 -2 3 0 10 1 -52 -2 3 8 40 8 -37 1 -3 22 10 21 -1 -1 3 59 7 16
 -20 2 -3 39 15 38 18 2 -3 11 10 10 -54 -2 3 50 28 49 -37 1 -3 18 10 17 -1 -1 3 31 7 31
 -20 2 -3 0 15 1 -18 -2 3 35 10 35 -54 -2 3 43 28 42 -37 1 -3 0 10 1 1 1 -3 41 7 40
 -20 2 -3 68 15 27 -20 -2 3 40 2 40 -54 -2 3 20 28 19 -35 1 -3 41 38 41 1 1 -3 46 7 28
 20 -2 3 18 15 17 -20 -2 3 23 2 22 -56 -2 3 0 19 1 -35 1 -3 0 38 1 -3 -1 3 32 8 32
 -20 2 -3 18 15 17 -20 -2 3 31 2 31 -56 -2 3 20 19 19 -35 1 -3 41 38 40 3 1 -3 37 8 36
 -18 2 -3 63 2 36 20 2 -3 45 2 33 -56 -2 3 34 19 33 -33 1 -3 0 18 1 3 1 -3 62 8 18
 18 -2 3 25 2 24 22 2 -3 70 5 17 -58 -2 3 96 68 13 -33 1 -3 48 18 48 3 1 -3 39 8 39
 -18 2 -3 33 2 33 -22 -2 3 57 5 14 -58 -2 3 70 68 12 -33 1 -3 10 18 10 5 1 -3 61 24 18
 16 -2 3 62 7 16 -22 -2 3 77 5 17 -58 -2 3 81 68 22 -33 1 -3 4 18 3 5 1 -3 0 24 1
 -16 2 -3 64 7 28 -22 -2 3 61 5 14 -60 -2 3 96 83 11 -31 1 -3 53 38 32 -5 -1 3 32 24 32
 -16 2 -3 41 7 41 -24 -2 3 0 10 1 -60 -2 3 74 83 11 -31 1 -3 39 38 38 5 1 -3 73 24 15

-16 2 -3 0 7 1 24 2 -3 15 10 14 -60 -2 3 107 83 11 -31 1 -3 0 38 1 -7 -1 3 44 15 17

-14 2 -3 52 4 50 -24 -2 3 37 10 37 -62 -2 3 129 96 11 -31 1 -3 0 38 1 9 1 -3 46 41 26

-14 2 -3 0 4 1 -24 -2 3 0 10 1 -62 -2 3 106 96 11 -31 1 -3 0 38 1 9 1 -3 54 41 20

14 -2 3 25 4 24 -24 -2 3 31 10 30 -64 -2 3 152 156 10 -29 1 -3 28 14 27 -9 -1 3 34 41 34

-14 2 -3 46 4 39 -26 -2 3 27 6 26 -64 -2 3 145 156 9 -29 1 -3 28 14 27 -9 -1 3 38 41 22

-14 2 -3 0 4 1 26 2 -3 28 6 27 -64 -2 3 123 156 10 -29 1 -3 0 14 1 -11 -1 3 68 58 7

-12 2 -3 54 4 26 -26 -2 3 0 6 1 -66 -2 3 28 9 27 -29 1 -3 0 14 1 11 1 -3 69 58 10

12 -2 3 46 4 21 -26 -2 3 32 6 31 -66 -2 3 13 9 13 -29 1 -3 0 14 1 -11 -1 3 64 58 9

-12 2 -3 48 4 27 -26 -2 3 23 6 22 -66 -2 3 30 9 29 -27 1 -3 66 41 20 -13 -1 3 71 76 7

12 -2 3 32 4 31 -28 -2 3 52 59 13 -68 -2 3 0 8 1 -27 1 -3 39 41 39 -13 -1 3 67 76 9

-12 2 -3 50 4 25 -28 -2 3 75 59 8 -68 -2 3 0 8 1 -27 1 -3 72 41 28 13 1 -3 74 76 9

-10 2 -3 41 12 41 -28 -2 3 64 59 10 -68 -2 3 0 8 1 -27 1 -3 0 41 1 -13 -1 3 62 76 10

-10 2 -3 70 12 16 -28 -2 3 78 59 14 -70 -2 3 18 20 17 -27 1 -3 20 41 19 -15 -1 3 73 60 7

10 -2 3 45 12 22 28 2 -3 69 59 10 -70 -2 3 0 20 1 -25 1 -3 91 32 21 15 1 -3 80 60 9

-10 2 -3 0 12 1 -28 -2 3 65 59 9 -72 -2 3 0 42 1 -25 1 -3 0 32 1 -15 -1 3 65 60 9

10 -2 3 55 12 14 -30 -2 3 205 203 10 -72 -2 3 0 42 1 -25 1 -3 62 32 10 -15 -1 3 80 60 8

-8 2 -3 69 39 16 -30 -2 3 201 203 7 -73 1 -3 0 17 1 -25 1 -3 46 32 23 -17 -1 3 177 171 6

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 36

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-17 -1 3 164 171 6 -49 -1 3 118 99 7 -51 -1 -3 82 57 25 3 1 3 21 8 20 -39 1 3 0 9 1

17 1 -3 160 171 8 -49 -1 3 104 99 11 -51 -1 -3 24 57 24 -3 -1 -3 24 8 23 -39 1 3 22 9 22

-17 -1 3 163 171 9 -49 -1 3 100 99 9 -51 -1 -3 59 57 24 -3 -1 -3 39 8 31 41 -1 -3 66 37 22

-19 -1 3 76 80 9 -49 -1 3 105 99 9 -49 -1 -3 137 148 9 -1 -1 -3 52 17 19 -41 1 3 54 37 21

-19 -1 3 83 80 6 -49 -1 3 95 99 11 -49 -1 -3 141 148 9 -1 -1 -3 0 17 1 -41 1 3 53 37 18

-19 -1 3 95 80 7 -51 -1 3 51 43 21 -49 -1 -3 137 148 9 1 1 3 23 17 23 -41 1 3 50 37 37
-19 -1 3 77 80 9 -51 -1 3 53 43 25 -49 -1 -3 158 148 10 -1 -1 -3 0 17 1 -43 1 3 73 68 11
19 1 -3 77 80 9 -51 -1 3 86 43 22 -47 -1 -3 115 96 11 1 -1 -3 40 7 39 -43 1 3 69 68 13
-21 -1 3 60 58 10 -51 -1 3 38 43 37 -47 -1 -3 94 96 11 1 -1 -3 57 7 26 43 -1 -3 37 68 37
-21 -1 3 72 58 9 -51 -1 3 52 43 39 -47 -1 -3 89 96 15 -1 1 3 40 7 21 -43 1 3 89 68 7
-21 -1 3 68 58 8 -53 -1 3 44 30 44 -47 -1 -3 99 96 12 1 -1 -3 48 7 16 45 -1 -3 111 108 9
-21 -1 3 63 58 7 -53 -1 3 69 30 29 -47 -1 -3 99 96 12 1 -1 -3 41 7 40 -45 1 3 101 108 8
21 1 -3 68 58 10 -53 -1 3 38 30 38 -45 -1 -3 160 156 9 3 -1 -3 46 7 18 -45 1 3 109 108 8
-23 -1 3 24 9 24 -53 -1 3 21 30 20 -45 -1 -3 179 156 8 3 -1 -3 56 7 18 -45 1 3 102 108 9
23 1 -3 30 9 30 -53 -1 3 41 30 41 -45 -1 -3 171 156 9 -3 1 3 47 7 17 -47 1 3 55 8 33
-23 -1 3 0 9 1 -55 -1 3 56 14 48 -45 -1 -3 166 156 8 3 -1 -3 54 7 30 47 -1 -3 65 8 25
-23 -1 3 0 9 1 -55 -1 3 0 14 1 -45 -1 -3 161 156 9 5 -1 -3 67 24 12 -47 1 3 34 8 34
-23 -1 3 0 9 1 -55 -1 3 0 14 1 -43 -1 -3 89 73 12 -5 1 3 62 24 14 -47 1 3 0 8 1
-25 -1 3 15 18 14 -55 -1 3 21 14 21 -43 -1 -3 98 73 13 5 -1 -3 20 24 20 -49 1 3 81 97 12
-25 -1 3 35 18 35 -57 -1 3 35 11 35 -43 -1 -3 102 73 11 5 -1 -3 43 24 43 49 -1 -3 97 97 10
-25 -1 3 25 18 24 -57 -1 3 13 11 12 -43 -1 -3 93 73 11 -7 1 3 62 15 9 -49 1 3 107 97 9
25 1 -3 0 18 1 -57 -1 3 0 11 1 -43 -1 -3 101 73 11 9 -1 -3 56 40 13 -49 1 3 102 97 8
-27 -1 3 47 23 29 -57 -1 3 37 11 37 -41 -1 -3 44 15 43 -9 1 3 45 40 21 -51 1 3 60 42 27
27 1 -3 0 23 1 -59 -1 3 0 7 1 -41 -1 -3 68 15 29 9 -1 -3 0 40 1 -51 1 3 55 42 23
-27 -1 3 0 23 1 -59 -1 3 0 7 1 -41 -1 -3 60 15 39 11 -1 -3 0 57 1 -51 1 3 29 42 29
-27 -1 3 23 23 23 -59 -1 3 0 7 1 -41 -1 -3 61 15 35 -11 1 3 58 57 16 51 -1 -3 36 42 36
-29 -1 3 33 1 32 -59 -1 3 0 7 1 -39 -1 -3 57 27 38 11 -1 -3 78 57 9 -51 1 3 26 42 25
-29 -1 3 26 1 25 -61 -1 3 0 21 1 -39 -1 -3 53 27 53 11 -1 -3 57 57 9 -53 1 3 34 30 34
29 1 -3 30 1 30 -61 -1 3 34 21 33 -39 -1 -3 0 27 1 13 -1 -3 68 74 9 53 -1 -3 72 30 24
-29 -1 3 0 1 1 -61 -1 3 0 21 1 -39 -1 -3 51 27 50 13 -1 -3 79 74 9 -53 1 3 14 30 13
-31 -1 3 46 14 46 -61 -1 3 21 21 21 -37 -1 -3 83 11 22 -13 1 3 69 74 8 -53 1 3 32 30 32
31 1 -3 0 14 1 -63 -1 3 0 10 1 -37 -1 -3 40 11 39 -13 1 3 63 74 10 -53 1 3 44 30 43

-31 -1 3 11 14 10 -63 -1 3 0 10 1 -37 -1 -3 0 11 1 13 -1 -3 70 74 7 -55 1 3 35 13 34
-31 -1 3 47 14 18 -63 -1 3 38 10 37 -35 -1 -3 0 40 1 -15 1 3 69 59 8 -55 1 3 0 13 1
-31 -1 3 22 14 21 -63 -1 3 7 10 6 -35 -1 -3 55 40 44 -15 1 3 63 59 9 -55 1 3 0 13 1
-33 -1 3 0 11 1 -65 -1 3 59 10 59 -35 -1 -3 68 40 27 15 -1 -3 49 59 28 -57 1 3 0 10 1
33 1 -3 55 11 24 -65 -1 3 52 10 51 -33 -1 -3 0 18 1 15 -1 -3 81 59 9 -57 1 3 18 10 17
-33 -1 3 55 11 28 -65 -1 3 0 10 1 -33 -1 -3 48 18 48 17 -1 -3 167 166 7 -57 1 3 0 10 1
-33 -1 3 0 11 1 -65 -1 3 0 10 1 -33 -1 -3 7 18 6 -17 1 3 170 166 6 -59 1 3 0 7 1
-33 -1 3 53 11 16 -67 -1 3 0 13 1 -31 -1 -3 0 39 1 -17 1 3 171 166 7 -59 1 3 0 7 1
-33 -1 3 0 11 1 -67 -1 3 30 13 29 -31 -1 -3 62 39 28 17 -1 -3 143 166 8 -59 1 3 7 7 6
-35 -1 3 51 3 18 -67 -1 3 0 13 1 -31 -1 -3 0 39 1 19 -1 -3 73 78 9 -61 1 3 1 21 1
-35 -1 3 0 3 1 -67 -1 3 0 13 1 -29 -1 -3 0 14 1 -19 1 3 69 78 11 -61 1 3 0 21 1
-35 -1 3 4 3 3 -69 -1 3 52 9 51 -29 -1 -3 0 14 1 -19 1 3 94 78 7 -61 1 3 0 21 1
-35 -1 3 28 3 27 -69 -1 3 11 9 10 -29 -1 -3 0 14 1 19 -1 -3 80 78 10 -63 1 3 29 10 28
-35 -1 3 33 3 33 -69 -1 3 25 9 25 -27 -1 -3 56 43 28 -19 1 3 79 78 8 -63 1 3 9 10 8
35 1 -3 0 3 1 -69 -1 3 17 9 16 -27 -1 -3 77 43 21 -21 1 3 57 56 11 -63 1 3 21 10 21
-37 -1 3 63 14 62 -71 -1 3 60 10 59 -27 -1 -3 0 43 1 -21 1 3 73 56 9 -65 1 3 0 10 1
-37 -1 3 49 14 44 -71 -1 3 21 10 20 -25 -1 -3 83 34 21 21 -1 -3 65 56 21 -65 1 3 0 10 1
-37 -1 3 36 14 36 -71 -1 3 0 10 1 -25 -1 -3 0 34 1 -21 1 3 78 56 8 -65 1 3 0 10 1
37 1 -3 0 14 1 -73 -1 3 17 29 17 -25 -1 -3 82 34 16 21 -1 -3 84 56 9 -67 1 3 41 13 40
-37 -1 3 48 14 15 -73 -1 3 0 29 1 -23 -1 -3 41 12 41 23 -1 -3 0 9 1 -67 1 3 0 13 1
-37 -1 3 32 14 32 -73 -1 3 42 29 42 -23 -1 -3 66 12 28 -23 1 3 0 9 1 -67 1 3 25 13 24
-39 -1 3 74 10 12 -73 -1 -3 0 18 1 -23 -1 -3 0 12 1 -23 1 3 33 9 32 -69 1 3 18 9 18
39 1 -3 29 10 29 -73 -1 -3 20 18 19 -21 -1 -3 0 14 1 23 -1 -3 0 9 1 -69 1 3 37 9 36
-39 -1 3 50 10 21 -71 -1 -3 0 8 1 -21 -1 -3 0 14 1 -23 1 3 33 9 32 -69 1 3 22 9 21
-39 -1 3 52 10 52 -71 -1 -3 95 8 34 -21 -1 -3 0 14 1 -25 1 3 24 17 24 -71 1 3 0 10 1
-39 -1 3 17 10 17 -71 -1 -3 0 8 1 -19 -1 -3 0 1 1 25 -1 -3 19 17 19 -71 1 3 0 10 1
-39 -1 3 25 10 24 -69 -1 -3 60 11 59 -19 -1 -3 13 1 12 25 -1 -3 0 17 1 -73 1 3 0 28 1

-39 -1 3 8 10 7 -69 -1 -3 0 11 1 -19 -1 -3 45 1 45 -25 1 3 45 17 37 -73 1 3 0 28 1
 -41 -1 3 74 39 12 -69 -1 -3 0 11 1 -17 -1 -3 129 117 10 -25 1 3 0 17 1 -62 -2 -3 43 22 42
 -41 -1 3 10 39 9 -67 -1 -3 0 23 1 -17 -1 -3 123 117 8 27 -1 -3 12 22 11 -60 -2 -3 62 61 30
 41 1 -3 43 39 42 -67 -1 -3 20 23 19 -15 -1 -3 189 169 9 -27 1 3 0 22 1 -58 -2 -3 48 55 47
 -41 -1 3 30 39 30 -67 -1 -3 40 23 40 -15 -1 -3 199 169 7 -27 1 3 8 22 8 -58 -2 -3 66 55 26
 -41 -1 3 47 39 36 -65 -1 -3 100 8 30 -15 -1 -3 164 169 8 -27 1 3 0 22 1 -56 -2 -3 27 45 27
 -41 -1 3 75 39 38 -65 -1 -3 0 8 1 -13 -1 -3 120 114 7 -29 1 3 0 1 1 -56 -2 -3 46 45 45
 -41 -1 3 56 39 19 -65 -1 -3 0 8 1 -13 -1 -3 145 114 7 -29 1 3 22 1 22 -54 -2 -3 32 16 32
 -43 -1 3 74 70 12 -63 -1 -3 43 29 42 -13 -1 -3 141 114 9 -29 1 3 6 1 5 -54 -2 -3 35 16 35
 -43 -1 3 71 70 9 -63 -1 -3 30 29 30 11 1 3 57 52 7 29 -1 -3 46 1 34 -54 -2 -3 21 16 20
 -43 -1 3 80 70 17 -63 -1 -3 0 29 1 -11 -1 -3 72 52 28 31 -1 -3 18 14 17 -52 -2 -3 47 2 47
 43 1 -3 86 70 10 -61 -1 -3 0 16 1 -11 -1 -3 80 52 10 -31 1 3 0 14 1 -52 -2 -3 0 2 1
 -43 -1 3 67 70 12 -61 -1 -3 36 16 36 -11 -1 -3 18 52 18 -31 1 3 0 14 1 -52 -2 -3 41 2 40
 -43 -1 3 111 70 15 -61 -1 -3 0 16 1 -11 -1 -3 67 52 9 -31 1 3 22 14 21 -50 -2 -3 48 20 37
 -43 -1 3 102 70 16 -59 -1 -3 27 32 26 -9 -1 -3 12 2 12 33 -1 -3 33 11 33 -50 -2 -3 47 20 46
 -45 -1 3 123 111 8 -59 -1 -3 43 32 42 -9 -1 -3 24 2 23 -33 1 3 6 11 6 -50 -2 -3 48 20 47
 -45 -1 3 113 111 9 -59 -1 -3 0 32 1 9 1 3 0 2 1 -33 1 3 25 11 24 -48 -2 -3 28 35 27
 -45 -1 3 128 111 7 -57 -1 -3 7 7 7 -9 -1 -3 75 2 21 -33 1 3 30 11 30 -48 -2 -3 60 35 33
 -45 -1 3 122 111 9 -57 -1 -3 62 7 61 -9 -1 -3 33 2 32 -35 1 3 0 3 1 -48 -2 -3 0 35 1
 -45 -1 3 109 111 9 -57 -1 -3 33 7 33 -7 -1 -3 33 4 32 -35 1 3 30 3 29 -48 -2 -3 44 35 44
 -47 -1 3 67 9 67 -55 -1 -3 61 12 61 -7 -1 -3 59 4 23 35 -1 -3 48 3 35 -46 -2 -3 39 9 39
 -47 -1 3 15 9 14 -55 -1 -3 0 12 1 7 1 3 46 4 15 -35 1 3 45 3 28 -46 -2 -3 0 9 1
 -47 -1 3 43 9 29 -55 -1 -3 40 12 39 -7 -1 -3 26 4 25 37 -1 -3 48 13 35 -46 -2 -3 0 9 1
 -47 -1 3 0 9 1 -53 -1 -3 0 39 1 -5 -1 -3 0 3 1 -37 1 3 42 13 36 -46 -2 -3 0 9 1
 -47 -1 3 73 9 22 -53 -1 -3 55 39 33 5 1 3 0 3 1 -37 1 3 25 13 24 -44 -2 -3 35 31 34
 -47 -1 3 47 9 46 -53 -1 -3 44 39 44 -5 -1 -3 0 3 1 -37 1 3 37 13 37 -44 -2 -3 16 31 15
 -47 -1 3 44 9 22 -53 -1 -3 0 39 1 -5 -1 -3 41 3 26 39 -1 -3 53 9 26 -44 -2 -3 45 31 44

-49 -1 3 115 99 9 -51 -1 -3 98 57 22 -3 -1 -3 21 8 21 -39 1 3 0 9 1 -44 -2 -3 32 31 31

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 37

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-44	-2	-3	0	31	1	8	-2	-3	46	51	45	-60	2	3	90	80	15	-12	-4	-3	86	29	24	-56	4	3	71	18	70
-42	-2	-3	79	13	25	-10	2	3	44	6	24	-60	2	3	91	80	13	-12	-4	-3	50	29	49	-56	4	3	0	18	1
-42	-2	-3	47	13	47	10	-2	-3	67	6	18	-60	2	3	75	80	12	-10	-4	-3	0	1	1	-58	4	3	61	52	20
-42	-2	-3	76	13	26	10	-2	-3	39	6	38	-62	2	3	86	92	14	-10	-4	-3	58	1	38	-58	4	3	64	52	64
-42	-2	-3	28	13	28	-10	2	3	18	6	18	-62	2	3	94	92	24	-10	-4	-3	71	1	31	-60	4	3	0	29	1
-40	-2	-3	53	47	27	10	-2	-3	32	6	31	-62	2	3	93	92	10	-8	-4	-3	0	35	1	-60	4	3	35	29	34
-40	-2	-3	80	47	24	-12	2	3	0	36	1	-64	2	3	123	150	13	-8	-4	-3	46	35	46	-62	4	3	48	64	39
-40	-2	-3	54	47	53	12	-2	-3	31	36	31	-64	2	3	145	150	9	-8	-4	-3	16	35	15	-64	4	3	128	121	10
-38	-2	-3	83	90	12	-12	2	3	47	36	22	-64	2	3	129	150	10	-6	-4	-3	57	51	56	-66	4	3	72	97	14
-38	-2	-3	83	90	15	12	-2	-3	28	36	28	-66	2	3	0	9	1	-6	-4	-3	35	51	35	-49	-5	-3	144	147	13
-38	-2	-3	106	90	11	12	-2	-3	37	36	37	-66	2	3	32	9	31	-6	-4	-3	14	51	13	-47	-5	-3	99	86	23
-36	-2	-3	112	117	10	14	-2	-3	64	12	19	-66	2	3	8	9	8	-4	-4	-3	100	109	12	-47	-5	-3	123	86	14
-36	-2	-3	113	117	10	14	-2	-3	34	12	34	-68	2	3	41	8	41	-4	-4	-3	119	109	10	-45	-5	-3	163	148	12
-34	-2	-3	155	161	9	-14	2	3	0	12	1	-68	2	3	0	8	1	-2	-4	-3	210	211	9	-45	-5	-3	161	148	12
-34	-2	-3	165	161	8	14	-2	-3	43	12	42	-68	2	3	0	8	1	-2	-4	-3	203	211	9	-43	-5	-3	109	71	20
-32	-2	-3	0	27	1	-14	2	3	7	12	6	-70	2	3	0	19	1	-2	-4	-3	203	211	9	-43	-5	-3	118	71	28
-32	-2	-3	0	27	1	16	-2	-3	0	30	1	-70	2	3	0	19	1	0	-4	-3	87	105	13	-43	-5	-3	82	71	73
-30	-2	-3	274	236	10	-16	2	3	26	30	26	-72	2	3	24	40	23	0	-4	-3	121	105	9	-41	-5	-3	0	25	1
-30	-2	-3	287	236	10	16	-2	-3	70	30	19	-72	2	3	0	40	1	0	-4	-3	110	105	8	-41	-5	-3	73	25	66
-28	-2	-3	151	120	8	-16	2	3	43	30	27	-46	-4	-3	52	8	51	0	-4	-3	116	105	11	-41	-5	-3	0	25	1
-28	-2	-3	127	120	9	-18	2	3	0	9	1	-46	-4	-3	47	8	46	2	-4	-3	202	205	8	-39	-5	-3	0	21	1
-26	-2	-3	73	33	24	18	-2	-3	0	9	1	-44	-4	-3	0	13	1	2	-4	-3	189	205	9	-39	-5	-3	84	21	41

-26-2-3 80 33 15 18-2-3 15 9 15 -44-4-3 75 13 28 2-4-3 201 205 9 -39-5-3 111 21 35
 -26-2-3 0 33 1 -18 2 3 17 9 16 -42-4-3 48 10 48 2-4-3 198 205 9 -37-5-3 17 0 17
 -24-2-3 29 7 29 20-2-3 41 2 40 -42-4-3 10 10 9 4-4-3 93 93 13 -37-5-3 0 0 1
 -24-2-3 0 7 1 20-2-3 0 2 1 -40-4-3 16 4 15 4-4-3 111 93 10 -37-5-3 72 0 71
 -24-2-3 0 7 1 -20 2 3 39 2 38 -40-4-3 74 4 43 -4 4 3 94 93 7 -35-5-3 90 36 34
 -22-2-3 0 20 1 -20 2 3 0 2 1 -38-4-3 0 12 1 4-4-3 95 93 8 -35-5-3 69 36 68
 -22-2-3 0 20 1 -22 2 3 75 4 14 -38-4-3 75 12 41 4-4-3 95 93 12 -35-5-3 35 36 34
 -22-2-3 0 20 1 22-2-3 61 4 21 -38-4-3 45 12 45 6-4-3 74 43 27 -33-5-3 0 7 1
 -20-2-3 0 15 1 -22 2 3 36 4 24 -36-4-3 0 23 1 -6 4 3 34 43 33 -33-5-3 0 7 1
 -20-2-3 54 15 26 -24 2 3 13 9 13 -36-4-3 76 23 35 6-4-3 54 43 39 -33-5-3 35 7 35
 -20-2-3 0 15 1 -24 2 3 20 9 20 -36-4-3 17 23 16 6-4-3 66 43 19 -31-5-3 52 35 52
 -18-2-3 34 2 33 24-2-3 21 9 20 -36-4-3 49 23 49 8-4-3 36 1 35 -31-5-3 0 35 1
 -18-2-3 16 2 16 26-2-3 67 6 19 -36-4-3 0 23 1 8-4-3 3 1 3 -31-5-3 33 35 33
 -18-2-3 34 2 33 -26 2 3 0 6 1 -34-4-3 0 39 1 8-4-3 0 1 1 -29-5-3 0 0 1
 -16-2-3 56 7 22 -26 2 3 0 6 1 -34-4-3 0 39 1 -8 4 3 0 1 1 -29-5-3 0 0 1
 -16-2-3 0 7 1 -28 2 3 77 56 14 -34-4-3 34 39 33 10-4-3 0 18 1 -29-5-3 46 0 46
 -16-2-3 0 7 1 -28 2 3 56 56 10 -34-4-3 0 39 1 10-4-3 0 18 1 -29-5-3 84 0 42
 -14-2-3 61 4 23 28-2-3 75 56 11 -34-4-3 79 39 45 10-4-3 54 18 53 -27-5-3 83 17 27
 -14-2-3 0 4 1 30-2-3 195 192 9 -34-4-3 49 39 49 -10 4 3 36 18 36 -27-5-3 0 17 1
 -14-2-3 41 4 40 -30 2 3 193 192 8 -32-4-3 137 141 12 12-4-3 30 1 29 -27-5-3 29 17 29
 -12-2-3 36 4 36 -30 2 3 201 192 8 -32-4-3 194 141 11 12-4-3 0 1 1 -27-5-3 0 17 1
 -12-2-3 46 4 45 32-2-3 142 148 8 -32-4-3 162 141 9 12-4-3 37 1 37 -25-5-3 0 17 1
 -12-2-3 0 4 1 -32 2 3 146 148 7 -32-4-3 164 141 10 -12 4 3 0 1 1 -25-5-3 36 17 35
 -10-2-3 49 13 49 -32 2 3 146 148 7 -32-4-3 157 141 11 14-4-3 0 11 1 -25-5-3 65 17 65
 -10-2-3 47 13 41 34-2-3 163 171 8 -30-4-3 63 7 63 -14 4 3 17 11 16 -25-5-3 25 17 24
 -10-2-3 61 13 16 -34 2 3 160 171 8 -30-4-3 0 7 1 14-4-3 63 11 22 -23-5-3 0 16 1
 -10-2-3 49 13 23 -34 2 3 171 171 9 -30-4-3 47 7 46 14-4-3 35 11 34 -23-5-3 0 16 1

-8-2-3 66 40 10 -34 2 3 159 171 7 -30-4-3 0 7 1 16-4-3 24 19 23 -23-5-3 0 16 1
-8-2-3 80 40 19 -36 2 3 99 84 8 -30-4-3 0 7 1 -16 4 3 41 19 41 -23-5-3 51 16 51
-8-2-3 72 40 9 -36 2 3 81 84 9 -30-4-3 46 7 45 16-4-3 29 19 29 -23-5-3 0 16 1
-8-2-3 63 40 21 -36 2 3 98 84 12 -28-4-3 57 46 38 16-4-3 52 19 51 -21-5-3 59 3 58
-6-2-3 38 42 38 36-2-3 94 84 10 -28-4-3 63 46 63 18-4-3 14 10 13 -21-5-3 0 3 1
-6-2-3 0 42 1 -38 2 3 38 48 38 -28-4-3 76 46 37 -18 4 3 6 10 6 -21-5-3 0 3 1
-6-2-3 62 42 16 -38 2 3 32 48 32 -28-4-3 67 46 30 -20 4 3 32 13 32 -21-5-3 0 3 1
6 2 3 36 42 36 -38 2 3 60 48 46 -28-4-3 89 46 13 20-4-3 53 13 32 -21-5-3 0 3 1
-6-2-3 43 42 29 38-2-3 80 48 17 -26-4-3 0 47 1 -22 4 3 62 29 19 -19-5-3 0 5 1
4 2 3 43 32 23 40-2-3 52 17 39 -26-4-3 59 47 30 22-4-3 66 29 22 -19-5-3 35 5 35
-4-2-3 51 32 47 -40 2 3 0 17 1 -26-4-3 43 47 43 -22 4 3 37 29 36 -19-5-3 0 5 1
-4-2-3 31 32 30 -40 2 3 24 17 23 -26-4-3 68 47 30 -24 4 3 36 24 35 -19-5-3 33 5 32
-4-2-3 0 32 1 -40 2 3 56 17 56 -26-4-3 64 47 33 -24 4 3 35 24 35 -19-5-3 0 5 1
-4-2-3 64 32 16 -42 2 3 28 15 27 -24-4-3 84 46 28 24-4-3 58 24 28 -17-5-3 98 94 18
-2-2-3 0 12 1 42-2-3 31 15 31 -24-4-3 61 46 60 -26 4 3 58 58 15 -17-5-3 87 94 12
2 2 3 0 12 1 -42 2 3 9 15 8 -24-4-3 44 46 43 -26 4 3 70 58 9 -17-5-3 101 94 14
-2-2-3 20 12 19 -42 2 3 0 15 1 -24-4-3 74 46 25 26-4-3 59 58 28 -17-5-3 121 94 25
-2-2-3 27 12 27 44-2-3 0 16 1 -24-4-3 68 46 27 -28 4 3 57 47 22 -17-5-3 97 94 23
-2-2-3 20 12 20 -44 2 3 63 16 20 -22-4-3 29 18 29 28-4-3 77 47 12 -15-5-3 113 106 11
0-2-3 152 175 7 -44 2 3 28 16 27 -22-4-3 73 18 33 -28 4 3 40 47 31 -15-5-3 99 106 10
0 2 3 172 175 6 -44 2 3 0 16 1 -22-4-3 81 18 24 -30 4 3 60 34 22 -15-5-3 95 106 15
0-2-3 154 175 8 46-2-3 58 13 34 -22-4-3 0 18 1 30-4-3 75 34 12 -15-5-3 98 106 15
0-2-3 157 175 7 -46 2 3 25 13 25 -20-4-3 0 23 1 -30 4 3 0 34 1 -15-5-3 124 106 21
0-2-3 158 175 8 -46 2 3 38 13 38 -20-4-3 36 23 35 -32 4 3 175 179 9 -13-5-3 81 80 15
-2 2 3 11 14 10 -46 2 3 0 13 1 -20-4-3 42 23 42 32-4-3 184 179 9 -13-5-3 78 80 27
2-2-3 47 14 22 -48 2 3 38 7 38 -20-4-3 31 23 30 -32 4 3 172 179 8 -13-5-3 90 80 28
2-2-3 51 14 51 -48 2 3 39 7 39 -18-4-3 33 25 32 -34 4 3 0 3 1 -13-5-3 95 80 13

2 -2 -3 38 14 37 -48 2 3 68 7 35 -18 -4 -3 0 25 1 -36 4 3 0 23 1 -13 -5 -3 74 80 20
-4 2 3 64 53 14 -50 2 3 30 12 30 -18 -4 -3 0 25 1 -38 4 3 0 17 1 -11 -5 -3 0 43 1
4 -2 -3 50 53 22 -50 2 3 14 12 13 -18 -4 -3 0 25 1 -40 4 3 7 27 7 -11 -5 -3 43 43 42
4 -2 -3 75 53 9 -52 2 3 14 38 13 -16 -4 -3 10 28 10 -42 4 3 15 32 14 -11 -5 -3 0 43 1
6 -2 -3 55 41 20 -52 2 3 40 38 40 -16 -4 -3 24 28 24 -44 4 3 0 22 1 -11 -5 -3 84 43 29
-6 2 3 58 41 15 -54 2 3 0 26 1 -16 -4 -3 0 28 1 -46 4 3 30 32 29 -11 -5 -3 61 43 60
6 -2 -3 44 41 43 -54 2 3 37 26 37 -16 -4 -3 0 28 1 -48 4 3 0 19 1 -9 -5 -3 18 5 17
6 -2 -3 61 41 16 -56 2 3 61 18 19 -14 -4 -3 13 12 13 -50 4 3 48 13 28 -9 -5 -3 16 5 16
-8 2 3 49 51 21 -56 2 3 26 18 25 -14 -4 -3 50 12 49 -52 4 3 23 35 22 -9 -5 -3 27 5 26
8 -2 -3 52 51 26 -58 2 3 89 65 15 -14 -4 -3 22 12 22 -54 4 3 48 25 27 -9 -5 -3 15 5 14
8 -2 -3 57 51 17 -58 2 3 72 65 14 -12 -4 -3 49 29 49 -54 4 3 63 25 63 -9 -5 -3 22 5 22

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 38

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-7	-5	-3	41	4	40	-35	-7	-3	0	24	1	-2	-8	-3	115	125	31	-29	5	-4	0	7	1	-53	-5	4	46	1	45
-7	-5	-3	57	4	56	-35	-7	-3	94	24	52	0	-8	-3	113	61	17	-29	5	-4	42	7	41	-53	-5	4	40	1	40
-7	-5	-3	0	4	1	-33	-7	-3	0	22	1	0	-8	-3	88	61	27	-27	5	-4	0	13	1	-53	-5	4	0	1	1
-7	-5	-3	0	4	1	-33	-7	-3	120	22	34	2	-8	-3	149	117	15	-27	5	-4	47	13	46	-56	4	-4	16	14	16
-5	-5	-3	40	2	40	-31	-7	-3	51	30	51	2	-8	-3	162	117	12	-27	5	-4	0	13	1	-56	4	-4	0	14	1
-5	-5	-3	0	2	1	-31	-7	-3	0	30	1	2	-8	-3	130	117	15	-25	5	-4	0	16	1	-54	4	-4	0	12	1
-5	-5	-3	0	2	1	-31	-7	-3	0	30	1	4	-8	-3	69	39	66	-25	5	-4	0	16	1	-54	4	-4	38	12	37
-5	-5	-3	0	2	1	-29	-7	-3	32	6	31	4	-8	-3	0	39	1	-25	5	-4	0	16	1	-52	4	-4	0	19	1
-3	-5	-3	28	2	27	-29	-7	-3	14	6	13	6	-8	-3	105	2	16	-23	5	-4	0	3	1	-52	4	-4	0	19	1
-3	-5	-3	0	2	1	-29	-7	-3	0	6	1	6	-8	-3	59	2	51	-23	5	-4	26	3	26	-52	4	-4	40	19	40
-3	-5	-3	0	2	1	-27	-7	-3	11	46	11	8	-8	-3	39	15	38	-23	5	-4	58	3	57	-50	4	-4	0	10	1

-3 -5 -3 0 2 1 -27 -7 -3 0 46 1 8 -8 -3 83 15 37 -21 5 -4 32 24 31 -50 4 -4 82 10 39
-3 -5 -3 0 2 1 -27 -7 -3 49 46 48 10 -8 -3 64 2 63 -21 5 -4 0 24 1 -50 4 -4 14 10 14
-1 -5 -3 27 24 26 -25 -7 -3 85 24 41 12 -8 -3 67 14 67 -21 5 -4 29 24 29 -48 4 -4 0 34 1
-1 -5 -3 0 24 1 -25 -7 -3 0 24 1 14 -8 -3 62 9 61 -19 5 -4 57 47 56 -48 4 -4 0 34 1
-1 -5 -3 15 24 14 -25 -7 -3 65 24 46 16 -8 -3 90 8 35 -19 5 -4 52 47 29 -48 4 -4 0 34 1
-1 -5 -3 0 24 1 -23 -7 -3 0 4 1 -27 7 -4 0 16 1 -19 5 -4 61 47 27 -46 4 -4 0 7 1
-1 -5 -3 52 24 51 -23 -7 -3 69 4 69 -25 7 -4 0 15 1 -17 5 -4 81 92 26 -46 4 -4 41 7 40
1 -5 -3 0 12 1 -23 -7 -3 51 4 50 -23 7 -4 0 19 1 -17 5 -4 76 92 17 -46 4 -4 51 7 51
1 -5 -3 24 12 24 -21 -7 -3 0 3 1 -21 7 -4 45 60 44 -17 5 -4 75 92 21 -44 4 -4 21 12 20
1 -5 -3 35 12 34 -21 -7 -3 0 3 1 -19 7 -4 91 64 19 -15 5 -4 50 17 49 -44 4 -4 0 12 1
1 -5 -3 43 12 42 -21 -7 -3 88 3 47 -17 7 -4 136 112 10 -15 5 -4 0 17 1 -44 4 -4 29 12 29
1 -5 -3 23 12 23 -19 -7 -3 69 19 68 -15 7 -4 23 36 22 -15 5 -4 0 17 1 -44 4 -4 18 12 18
3 -5 -3 67 2 40 -19 -7 -3 38 19 38 -13 7 -4 95 67 18 -13 5 -4 24 41 23 -42 4 -4 0 15 1
3 -5 -3 0 2 1 -19 -7 -3 69 19 68 13 -7 4 76 67 23 -13 5 -4 22 41 21 -42 4 -4 0 15 1
3 -5 -3 0 2 1 -17 -7 -3 184 133 14 11 -7 4 70 77 25 -13 5 -4 0 41 1 -42 4 -4 0 15 1
3 -5 -3 39 2 38 -17 -7 -3 155 133 13 9 -7 4 57 58 31 -11 5 -4 23 45 22 -42 4 -4 38 15 37
3 -5 -3 47 2 47 -17 -7 -3 138 133 13 7 -7 4 108 53 24 11 -5 4 39 45 38 -40 4 -4 34 28 33
5 -5 -3 0 15 1 -15 -7 -3 152 134 12 7 -7 4 44 53 43 -11 5 -4 53 45 40 -40 4 -4 40 28 39
5 -5 -3 0 15 1 -15 -7 -3 130 134 13 5 -7 4 0 36 1 -9 5 -4 36 22 36 -40 4 -4 35 28 34
5 -5 -3 0 15 1 -13 -7 -3 135 123 12 5 -7 4 0 36 1 9 -5 4 25 22 25 -40 4 -4 0 28 1
5 -5 -3 48 15 47 -13 -7 -3 150 123 13 3 -7 4 38 6 38 -9 5 -4 44 22 43 -38 4 -4 0 28 1
5 -5 -3 0 15 1 -11 -7 -3 115 69 27 3 -7 4 75 6 42 7 -5 4 0 21 1 -38 4 -4 0 28 1
7 -5 -3 0 20 1 -11 -7 -3 93 69 21 1 -7 4 36 2 36 -7 5 -4 45 21 45 -38 4 -4 58 28 25
7 -5 -3 0 20 1 -9 -7 -3 59 27 48 1 -7 4 7 2 7 -7 5 -4 0 21 1 -38 4 -4 61 28 60
7 -5 -3 76 20 17 -9 -7 -3 40 27 39 -1 -7 4 57 21 57 -5 5 -4 49 2 35 -36 4 -4 37 40 36
7 -5 -3 28 20 27 -7 -7 -3 43 25 42 -1 -7 4 0 21 1 5 -5 4 0 2 1 -36 4 -4 37 40 37
7 -5 -3 72 20 12 -7 -7 -3 54 25 53 -3 -7 4 40 10 39 3 -5 4 24 8 24 -36 4 -4 39 40 38

7-5-3 0 20 1 -5-7-3 0 12 1 -3-7 4 45 10 44 1-5 4 15 10 15 -34 4-4 81 63 38
9-5-3 0 35 1 -5-7-3 0 12 1 -5-7 4 73 17 45 -1-5 4 23 6 22 -34 4-4 63 63 21
9-5-3 52 35 51 -5-7-3 0 12 1 -5-7 4 0 17 1 -3-5 4 0 23 1 -34 4-4 64 63 25
-9 5 3 59 35 21 -3-7-3 0 20 1 -7-7 4 0 2 1 -5-5 4 0 16 1 -32 4-4 30 0 30
9-5-3 0 35 1 -3-7-3 60 20 59 -7-7 4 0 2 1 -7-5 4 0 37 1 -32 4-4 0 0 1
9-5-3 0 35 1 -3-7-3 0 20 1 -9-7 4 82 1 40 -9-5 4 25 13 24 -32 4-4 0 0 1
9-5-3 61 35 24 -1-7-3 0 15 1 -9-7 4 19 1 18 -11-5 4 0 8 1 -30 4-4 75 81 19
11-5-3 44 49 43 -1-7-3 0 15 1 -11-7 4 51 12 50 -13-5 4 63 59 20 -30 4-4 97 81 10
11-5-3 50 49 42 -1-7-3 0 15 1 -11-7 4 29 12 29 -15-5 4 118 121 9 -30 4-4 119 81 22
11-5-3 110 49 22 1-7-3 0 17 1 -13-7 4 27 44 27 -17-5 4 0 3 1 -28 4-4 0 14 1
11-5-3 77 49 31 1-7-3 58 17 49 -13-7 4 48 44 47 -19-5 4 78 72 13 -28 4-4 0 14 1
-11 5 3 42 49 42 1-7-3 35 17 34 -15-7 4 87 93 13 -21-5 4 70 54 18 -28 4-4 35 14 34
11-5-3 36 49 35 3-7-3 58 7 47 -15-7 4 112 93 14 -23-5 4 0 65 1 -26 4-4 7 25 7
13-5-3 0 53 1 3-7-3 86 7 37 -17-7 4 26 11 25 -25-5 4 11 16 11 -26 4-4 0 25 1
-13 5 3 25 53 24 3-7-3 41 7 40 -19-7 4 48 23 47 -25-5 4 50 16 34 -26 4-4 17 25 17
13-5-3 76 53 20 3-7-3 77 7 37 -21-7 4 19 22 19 -27-5 4 36 25 35 -24 4-4 20 1 19
13-5-3 38 53 37 5-7-3 31 17 30 -23-7 4 0 8 1 -27-5 4 52 25 29 -24 4-4 39 1 38
-15 5 3 95 86 8 5-7-3 0 17 1 -25-7 4 0 16 1 -29-5 4 0 19 1 -24 4-4 60 1 60
15-5-3 96 86 11 5-7-3 0 17 1 -27-7 4 0 20 1 -29-5 4 0 19 1 -22 4-4 0 27 1
15-5-3 102 86 12 5-7-3 89 17 34 -29-7 4 0 12 1 -31-5 4 48 29 47 -22 4-4 0 27 1
15-5-3 98 86 10 7-7-3 29 20 29 -49 5-4 63 54 25 -31-5 4 0 29 1 -22 4-4 0 27 1
-17 5 3 121 147 8 7-7-3 48 20 47 -49 5-4 52 54 52 -31-5 4 30 29 30 -20 4-4 87 8 30
17-5-3 119 147 9 7-7-3 19 20 18 -47 5-4 84 77 23 -33-5 4 0 15 1 -20 4-4 0 8 1
17-5-3 118 147 9 9-7-3 0 21 1 -47 5-4 71 77 21 -33-5 4 27 15 26 -20 4-4 0 8 1
-19 5 3 80 87 17 9-7-3 0 21 1 -45 5-4 90 79 32 -33-5 4 106 15 15 -18 4-4 40 14 40
19-5-3 84 87 12 9-7-3 38 21 37 -45 5-4 83 79 23 -35-5 4 0 8 1 -18 4-4 40 14 39
-21 5 3 58 68 23 11-7-3 0 23 1 -45 5-4 96 79 14 -35-5 4 14 8 14 -18 4-4 30 14 30

21 -5 -3 80 68 12 11 -7 -3 0 23 1 -43 5 -4 95 87 15 -35 -5 4 60 8 59 -16 4 -4 79 12 28
-23 5 3 22 14 21 13 -7 -3 0 39 1 -43 5 -4 98 87 31 -37 -5 4 0 24 1 -16 4 -4 41 12 40
-31 5 3 0 19 1 15 -7 -3 26 42 25 -43 5 -4 87 87 21 -37 -5 4 17 24 16 -16 4 -4 0 12 1
-33 5 3 0 20 1 17 -7 -3 96 85 16 -41 5 -4 93 69 33 -37 -5 4 0 24 1 -14 4 -4 0 12 1
-35 5 3 0 0 1 -22 -8 -3 0 7 1 -41 5 -4 48 69 47 -39 -5 4 25 25 24 -14 4 -4 0 12 1
-37 5 3 0 3 1 -22 -8 -3 0 7 1 -41 5 -4 35 69 35 -39 -5 4 0 25 1 -14 4 -4 5 12 5
-39 5 3 31 1 31 -20 -8 -3 0 24 1 -39 5 -4 35 49 35 -39 -5 4 43 25 42 -14 4 -4 57 12 45
-41 5 3 0 21 1 -20 -8 -3 1 24 1 -39 5 -4 25 49 25 -41 -5 4 37 25 36 -12 4 -4 0 12 1
-43 5 3 0 46 1 -18 -8 -3 0 17 1 -39 5 -4 20 49 19 -41 -5 4 105 25 16 -12 4 -4 35 12 34
-45 5 3 78 70 16 -18 -8 -3 0 17 1 -37 5 -4 86 33 31 -41 -5 4 0 25 1 -12 4 -4 0 12 1
-47 5 3 38 2 38 -16 -8 -3 0 13 1 -37 5 -4 0 33 1 -43 -5 4 0 16 1 12 -4 4 58 12 27
-49 5 3 45 75 45 -14 -8 -3 0 10 1 -37 5 -4 20 33 19 -43 -5 4 0 16 1 -10 4 -4 37 42 36
-51 5 3 35 29 34 -12 -8 -3 0 8 1 -35 5 -4 36 20 36 -43 -5 4 19 16 19 -10 4 -4 29 42 28
-53 5 3 0 25 1 -10 -8 -3 59 7 59 -35 5 -4 59 20 58 -45 -5 4 111 3 29 10 -4 4 53 42 35
-55 5 3 37 25 36 -10 -8 -3 49 7 49 -35 5 -4 0 20 1 -45 -5 4 62 3 28 -8 4 -4 37 63 36
-57 5 3 28 9 27 -8 -8 -3 0 14 1 -33 5 -4 12 22 12 -47 -5 4 92 85 20 -8 4 -4 83 63 13
-59 5 3 14 9 14 -8 -8 -3 105 14 15 -33 5 -4 0 22 1 -47 -5 4 69 85 21 8 -4 4 64 63 19
-41 -7 -3 0 3 1 -6 -8 -3 51 10 51 -33 5 -4 20 22 20 -47 -5 4 73 85 72 8 -4 4 69 63 14
-39 -7 -3 0 6 1 -6 -8 -3 76 10 56 -31 5 -4 50 7 50 -49 -5 4 0 15 1 6 -4 4 107 101 9
-39 -7 -3 87 6 86 -4 -8 -3 71 35 70 -31 5 -4 0 7 1 -49 -5 4 0 15 1 -6 4 -4 106 101 11
-37 -7 -3 87 10 64 -4 -8 -3 85 35 28 -31 5 -4 10 7 10 -51 -5 4 60 3 31 6 -4 4 86 101 10
-37 -7 -3 0 10 1 -2 -8 -3 136 125 15 -29 5 -4 0 7 1 -51 -5 4 0 3 1 -4 4 -4 131 120 10

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

4 -4 4 112 120 9 -56 2 -4 0 27 1 -16 2 -4 38 36 38 -28 -2 4 127 123 8 -57 1 -4 0 50 1

4 -4 4 138 120 8 -54 2 -4 25 24 25 -16 2 -4 0 36 1 30 2 -4 177 179 9 -55 1 -4 16 22 16
 2 -4 4 126 131 8 -54 2 -4 69 24 68 -16 2 -4 0 36 1 -30 -2 4 184 179 8 -55 1 -4 0 22 1
 -2 4 -4 137 131 9 -54 2 -4 0 24 1 -14 2 -4 39 16 38 -30 -2 4 201 179 10 -55 1 -4 36 22 35
 2 -4 4 140 131 9 -52 2 -4 43 31 42 -14 2 -4 18 16 17 -32 -2 4 52 44 37 -53 1 -4 89 49 20
 0 4 -4 133 105 10 -52 2 -4 63 31 62 -14 2 -4 48 16 47 -32 -2 4 89 44 24 -53 1 -4 71 49 27
 0 -4 4 111 105 9 -52 2 -4 47 31 46 -14 2 -4 54 16 29 -32 -2 4 59 44 24 -53 1 -4 110 49 28
 0 -4 4 127 105 9 -50 2 -4 35 0 35 14 -2 4 25 16 25 -32 -2 4 40 44 39 -51 1 -4 56 45 38
 2 4 -4 174 141 9 -50 2 -4 0 0 1 -12 2 -4 74 22 19 32 2 -4 72 44 22 -51 1 -4 26 45 26
 -2 -4 4 158 141 8 -50 2 -4 0 0 1 -12 2 -4 0 22 1 -32 -2 4 46 44 26 -51 1 -4 102 45 28
 -2 -4 4 160 141 9 -50 2 -4 0 0 1 -12 2 -4 47 22 46 -34 -2 4 150 154 10 -49 1 -4 94 77 18
 -4 -4 4 150 148 8 -48 2 -4 35 0 35 12 -2 4 0 22 1 -34 -2 4 153 154 7 -49 1 -4 73 77 24
 4 4 -4 145 148 10 -48 2 -4 0 0 1 -10 2 -4 11 1 10 -34 -2 4 147 154 8 -49 1 -4 113 77 16
 -4 -4 4 150 148 9 -48 2 -4 0 0 1 -10 2 -4 0 1 1 34 2 -4 141 154 9 -47 1 -4 120 81 16
 6 4 -4 103 73 11 -48 2 -4 0 0 1 -10 2 -4 52 1 31 -34 -2 4 181 154 10 -47 1 -4 108 81 15
 -6 -4 4 73 73 11 -46 2 -4 0 15 1 10 -2 4 0 1 1 -34 -2 4 156 154 8 -47 1 -4 95 81 18
 -6 -4 4 77 73 12 -46 2 -4 55 15 46 8 -2 4 46 13 24 -36 -2 4 133 139 8 -45 1 -4 84 78 19
 -8 -4 4 48 65 26 -46 2 -4 0 15 1 -8 2 -4 18 13 18 -36 -2 4 135 139 7 -45 1 -4 89 78 19
 -8 -4 4 87 65 10 -46 2 -4 16 15 16 -8 2 -4 53 13 29 36 2 -4 119 139 9 -45 1 -4 107 78 16
 8 4 -4 63 65 30 -44 2 -4 62 37 62 -6 2 -4 0 18 1 -36 -2 4 115 139 9 -43 1 -4 119 89 14
 10 4 -4 57 12 37 -44 2 -4 57 37 32 6 -2 4 28 18 27 -36 -2 4 114 139 10 -43 1 -4 106 89 11
 -10 -4 4 40 12 39 -44 2 -4 7 37 7 -6 2 -4 7 18 6 -38 -2 4 84 88 11 -43 1 -4 98 89 14
 -10 -4 4 2 12 2 -44 2 -4 55 37 23 6 -2 4 0 18 1 -38 -2 4 80 88 8 -41 1 -4 53 58 53
 12 4 -4 0 6 1 -42 2 -4 45 57 45 -4 2 -4 35 40 35 -38 -2 4 67 88 15 -41 1 -4 74 58 24
 -12 -4 4 29 6 28 -42 2 -4 63 57 63 -4 2 -4 19 40 18 -38 -2 4 69 88 12 -41 1 -4 44 58 44
 14 4 -4 0 11 1 -42 2 -4 13 57 12 4 -2 4 35 40 35 38 2 -4 81 88 12 -39 1 -4 0 43 1
 -14 -4 4 0 11 1 -42 2 -4 77 57 20 4 -2 4 0 40 1 -40 -2 4 51 49 24 -39 1 -4 41 43 41
 -16 -4 4 0 13 1 -40 2 -4 82 85 19 -2 2 -4 89 90 10 -40 -2 4 62 49 17 -39 1 -4 19 43 19

-18 -4 4 0 24 1 -40 2 -4 117 85 23 2 -2 4 73 90 9 40 2 -4 64 49 30 -39 1 -4 74 43 26
 -20 -4 4 47 8 47 -40 2 -4 66 85 18 2 -2 4 86 90 8 -40 -2 4 74 49 22 -39 1 -4 89 43 29
 -20 -4 4 0 8 1 -40 2 -4 83 85 19 -2 2 -4 87 90 10 -40 -2 4 72 49 9 -37 1 -4 45 33 45
 -20 -4 4 0 8 1 -38 2 -4 84 106 19 0 -2 4 87 76 7 -42 -2 4 0 26 1 -37 1 -4 21 33 21
 -22 -4 4 0 6 1 -38 2 -4 101 106 9 0 2 -4 83 76 10 -42 -2 4 28 26 28 -37 1 -4 0 33 1
 -22 -4 4 17 6 16 -38 2 -4 98 106 12 0 2 -4 97 76 10 -42 -2 4 8 26 8 -37 1 -4 0 33 1
 -22 -4 4 40 6 40 -38 2 -4 111 106 15 0 -2 4 86 76 8 -44 -2 4 29 24 28 -37 1 -4 25 33 24
 -24 -4 4 53 24 38 -36 2 -4 107 103 16 -2 -2 4 73 91 9 -44 -2 4 9 24 8 -35 1 -4 32 14 31
 -24 -4 4 0 24 1 -36 2 -4 108 103 9 -2 -2 4 94 91 8 -44 -2 4 27 24 26 -35 1 -4 0 14 1
 -24 -4 4 0 24 1 -36 2 -4 95 103 13 2 2 -4 96 91 10 -46 -2 4 3 2 3 -35 1 -4 35 14 34
 -26 -4 4 25 17 25 -36 2 -4 91 103 15 2 2 -4 95 91 10 -46 -2 4 0 2 1 -35 1 -4 33 14 32
 -26 -4 4 53 17 24 -34 2 -4 94 70 16 4 2 -4 0 33 1 -46 -2 4 50 2 50 -35 1 -4 30 14 30
 -28 -4 4 40 12 40 -34 2 -4 98 70 28 -4 -2 4 49 33 41 -48 -2 4 0 7 1 -35 1 -4 79 14 35
 -28 -4 4 29 12 29 -34 2 -4 75 70 19 -4 -2 4 10 33 9 -48 -2 4 0 7 1 -33 1 -4 0 10 1
 -30 -4 4 80 85 11 -34 2 -4 89 70 13 4 2 -4 0 33 1 -48 -2 4 77 7 22 -33 1 -4 0 10 1
 -30 -4 4 90 85 9 -34 2 -4 88 70 21 6 2 -4 53 10 32 -48 -2 4 0 7 1 -33 1 -4 0 10 1
 -32 -4 4 108 111 8 -32 2 -4 197 173 7 -6 -2 4 33 10 32 -50 -2 4 21 12 20 -33 1 -4 109 10 23
 -32 -4 4 121 111 8 -32 2 -4 189 173 9 6 2 -4 42 10 42 -50 -2 4 0 12 1 -33 1 -4 0 10 1
 -34 -4 4 99 91 9 -32 2 -4 189 173 8 -6 -2 4 31 10 31 -50 -2 4 0 12 1 -33 1 -4 0 10 1
 -34 -4 4 81 91 10 -32 2 -4 190 173 11 -8 -2 4 41 7 21 -50 -2 4 25 12 25 -31 1 -4 0 0 1
 -36 -4 4 0 49 1 -30 2 -4 143 128 10 8 2 -4 0 7 1 -52 -2 4 0 14 1 -31 1 -4 0 0 1
 -36 -4 4 66 49 22 -30 2 -4 144 128 13 -8 -2 4 48 7 48 -52 -2 4 0 14 1 -31 1 -4 0 0 1
 -38 -4 4 0 14 1 -30 2 -4 138 128 9 8 2 -4 38 7 38 -52 -2 4 40 14 40 -31 1 -4 23 0 22
 -38 -4 4 37 14 37 -30 2 -4 151 128 9 -10 -2 4 27 22 27 -52 -2 4 92 14 13 -31 1 -4 40 0 39
 -40 -4 4 0 3 1 -30 2 -4 143 128 7 -10 -2 4 10 22 10 -54 -2 4 26 30 25 -29 1 -4 39 2 39
 -40 -4 4 0 3 1 -28 2 -4 173 158 12 -10 -2 4 45 22 45 -54 -2 4 33 30 33 -29 1 -4 0 2 1
 -42 -4 4 0 17 1 -28 2 -4 170 158 9 10 2 -4 58 22 26 -54 -2 4 32 30 32 -29 1 -4 24 2 23

-42 -4 4 0 17 1 -28 2 -4 170 158 8 10 2 -4 0 22 1 -54 -2 4 61 30 32 -29 1 -4 0 2 1
-44 -4 4 45 21 42 -26 2 -4 73 73 22 12 2 -4 0 7 1 -56 -2 4 74 40 25 -29 1 -4 0 2 1
-44 -4 4 84 21 38 -26 2 -4 91 73 11 12 2 -4 0 7 1 -56 -2 4 63 40 22 -29 1 -4 46 2 46
-44 -4 4 28 21 27 -26 2 -4 96 73 12 -12 -2 4 0 7 1 -56 -2 4 45 40 44 -27 1 -4 28 4 28
-46 -4 4 63 7 28 -26 2 -4 67 73 20 -12 -2 4 0 7 1 -56 -2 4 37 40 37 -27 1 -4 50 4 50
-46 -4 4 30 7 29 -26 2 -4 121 73 20 -12 -2 4 47 7 46 -58 -2 4 86 64 16 -27 1 -4 57 4 37
-48 -4 4 18 3 17 -24 2 -4 51 63 50 -14 -2 4 26 26 26 -58 -2 4 69 64 31 -27 1 -4 0 4 1
-48 -4 4 0 3 1 -24 2 -4 76 63 11 -14 -2 4 0 26 1 -58 -2 4 53 64 22 -27 1 -4 0 4 1
-50 -4 4 0 12 1 -24 2 -4 38 63 37 -14 -2 4 31 26 30 -58 -2 4 78 64 18 -25 1 -4 0 15 1
-50 -4 4 0 12 1 -24 2 -4 53 63 29 14 2 -4 0 26 1 -60 -2 4 0 31 1 -25 1 -4 0 15 1
-52 -4 4 29 23 29 -24 2 -4 65 63 25 -16 -2 4 24 10 23 -60 -2 4 49 31 48 -25 1 -4 92 15 29
-52 -4 4 0 23 1 -24 2 -4 90 63 26 -16 -2 4 35 10 35 -60 -2 4 26 31 25 -25 1 -4 0 15 1
-54 -4 4 82 27 21 -22 2 -4 61 14 24 16 2 -4 47 10 47 -62 -2 4 78 58 30 -25 1 -4 44 15 43
-54 -4 4 38 27 38 -22 2 -4 0 14 1 -18 -2 4 36 4 36 -62 -2 4 88 58 16 -23 1 -4 0 13 1
-54 -4 4 25 27 25 -22 2 -4 34 14 33 -18 -2 4 0 4 1 -62 -2 4 40 58 40 -23 1 -4 0 13 1
-56 -4 4 40 19 40 -22 2 -4 10 14 9 18 2 -4 52 4 32 -64 -2 4 164 129 11 -23 1 -4 0 13 1
-56 -4 4 29 19 28 -22 2 -4 0 14 1 -20 -2 4 45 21 45 -64 -2 4 135 129 10 -23 1 -4 0 13 1
-56 -4 4 0 19 1 20 -2 4 55 40 24 -20 -2 4 28 21 27 -66 -2 4 90 68 25 -21 1 -4 76 44 20
-58 -4 4 0 27 1 -20 2 -4 73 40 11 20 2 -4 59 21 28 -66 -2 4 41 68 40 -21 1 -4 75 44 9
-58 -4 4 7 27 6 -20 2 -4 0 40 1 22 2 -4 56 6 29 -65 1 -4 49 29 48 -21 1 -4 0 44 1
-64 2 -4 64 29 34 -20 2 -4 66 40 23 -22 -2 4 24 6 23 -65 1 -4 0 29 1 -19 1 -4 94 64 25
-64 2 -4 27 29 26 -20 2 -4 65 40 54 -22 -2 4 37 6 37 -63 1 -4 52 12 51 -19 1 -4 78 64 19
-62 2 -4 80 79 24 -20 2 -4 0 40 1 -24 -2 4 71 39 16 -63 1 -4 46 12 46 -19 1 -4 79 64 9
-62 2 -4 77 79 25 -18 2 -4 0 5 1 -24 -2 4 74 39 26 -63 1 -4 0 12 1 -19 1 -4 72 64 20
-60 2 -4 0 3 1 -18 2 -4 29 5 29 -24 -2 4 29 39 28 -61 1 -4 81 45 38 -17 1 -4 120 134 11
-60 2 -4 98 3 33 18 -2 4 43 5 32 24 2 -4 62 39 26 -61 1 -4 71 45 28 -17 1 -4 144 134 8
-60 2 -4 0 3 1 -18 2 -4 0 5 1 -26 -2 4 58 57 16 -61 1 -4 0 45 1 -17 1 -4 130 134 8

-58 2 -4 0 18 1 -18 2 -4 0 5 1 -26 -2 4 46 57 45 -59 1 -4 0 8 1 -17 1 -4 117 134 8

-58 2 -4 7 18 7 -18 2 -4 55 5 55 26 2 -4 74 57 13 -59 1 -4 66 8 65 -15 1 -4 0 11 1

-58 2 -4 60 18 60 -16 2 -4 13 36 12 -26 -2 4 53 57 53 -59 1 -4 48 8 47 -15 1 -4 0 11 1

-56 2 -4 0 27 1 -16 2 -4 43 36 43 -28 -2 4 124 123 8 -57 1 -4 63 50 63 15 -1 4 56 11 10

-56 2 -4 105 27 29 16 -2 4 0 36 1 28 2 -4 137 123 8 -57 1 -4 55 50 50 -15 1 -4 45 11 35

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 40

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-15	1	-4	51	11	50	-31	-1	4	0	32	1	-53	-1	-4	118	51	14	-11	-1	-4	87	80	18	-45	1	4	0	0	1
-13	1	-4	76	74	10	-31	-1	4	16	32	16	-51	-1	-4	44	47	44	-9	-1	-4	46	44	45	-45	1	4	0	0	1
-13	1	-4	80	74	12	31	1	-4	0	32	1	-51	-1	-4	50	47	49	-9	-1	-4	39	44	39	-47	1	4	79	100	12
13	-1	4	83	74	8	-33	-1	4	11	9	10	-51	-1	-4	70	47	50	-9	-1	-4	29	44	29	-47	1	4	99	100	10
-13	1	-4	90	74	13	-33	-1	4	16	9	15	-51	-1	-4	74	47	24	-9	-1	-4	54	44	27	-49	1	4	0	7	1
-13	1	-4	81	74	9	-33	-1	4	45	9	44	-49	-1	-4	80	80	21	-7	-1	-4	0	45	1	-49	1	4	0	7	1
11	-1	4	89	78	7	33	1	-4	41	9	41	-49	-1	-4	126	80	13	-7	-1	-4	68	45	11	-51	1	4	0	27	1
-11	1	-4	96	78	10	35	1	-4	53	24	35	-49	-1	-4	103	80	12	-7	-1	-4	36	45	36	-51	1	4	0	27	1
-11	1	-4	86	78	9	-35	-1	4	0	24	1	-49	-1	-4	81	80	19	5	1	4	27	12	26	-53	1	4	55	8	41
-11	1	-4	73	78	21	-35	-1	4	40	24	40	-47	-1	-4	122	84	13	-5	-1	-4	42	12	42	-53	1	4	13	8	13
9	-1	4	71	43	9	37	1	-4	60	10	28	-47	-1	-4	111	84	12	-5	-1	-4	11	12	11	-55	1	4	0	19	1
-9	1	-4	63	43	21	-37	-1	4	58	10	25	-47	-1	-4	101	84	12	-5	-1	-4	53	12	34	-55	1	4	0	19	1
-9	1	-4	74	43	19	-37	-1	4	56	10	21	-47	-1	-4	111	84	13	-3	-1	-4	50	7	49	-57	1	4	0	12	1
-9	1	-4	50	43	34	-39	-1	4	56	29	21	-45	-1	-4	79	81	31	-3	-1	-4	0	7	1	-57	1	4	36	12	35
-7	1	-4	43	45	42	39	1	-4	35	29	34	-45	-1	-4	106	81	15	-3	-1	-4	69	7	10	-59	1	4	25	19	25
7	-1	4	0	45	1	-39	-1	4	30	29	30	-45	-1	-4	103	81	16	3	1	4	31	7	30	-59	1	4	62	19	37
-7	1	-4	61	45	24	41	1	-4	40	19	40	-45	-1	-4	109	81	14	1	1	4	30	4	30	-61	1	4	0	4	1

-7 1 -4 58 45 27 -41 -1 4 34 19 33 -43 -1 -4 119 92 12 -1 -1 -4 37 4 36 -61 1 4 0 4 1
-5 1 -4 0 12 1 -41 -1 4 0 19 1 -43 -1 -4 102 92 14 -1 -1 -4 54 4 26 -63 1 4 35 1 34
-5 1 -4 0 12 1 -41 -1 4 41 19 41 -43 -1 -4 132 92 12 -1 -1 -4 67 4 24 -63 1 4 0 1 1
5 -1 4 50 12 31 -43 -1 4 0 20 1 -43 -1 -4 95 92 12 -1 1 4 39 24 38 -65 1 4 44 17 43
-5 1 -4 38 12 37 -43 -1 4 35 20 34 -41 -1 -4 50 60 49 1 -1 -4 0 24 1 -65 1 4 0 17 1
5 -1 4 0 12 1 -45 -1 4 18 0 17 -41 -1 -4 40 60 40 1 -1 -4 0 24 1 -67 1 4 0 14 1
-3 1 -4 63 7 23 -45 -1 4 45 0 44 -41 -1 -4 74 60 21 1 -1 -4 19 24 19 -64 -2 -4 45 31 44
-3 1 -4 0 7 1 -45 -1 4 0 0 1 -39 -1 -4 63 44 25 3 -1 -4 32 15 31 -64 -2 -4 60 31 41
-3 1 -4 0 7 1 -47 -1 4 113 102 9 -39 -1 -4 64 44 41 3 -1 -4 0 15 1 -62 -2 -4 122 85 22
3 -1 4 46 7 16 -47 -1 4 117 102 10 -39 -1 -4 50 44 50 3 -1 -4 40 15 40 -62 -2 -4 63 85 33
3 -1 4 0 7 1 -47 -1 4 98 102 11 -39 -1 -4 6 44 6 -3 1 4 0 15 1 -60 -2 -4 0 3 1
1 -1 4 18 4 18 -47 -1 4 130 102 9 -39 -1 -4 35 44 34 -5 1 4 30 23 30 -60 -2 -4 112 3 23
-1 1 -4 59 4 26 -49 -1 4 0 7 1 -37 -1 -4 0 35 1 5 -1 -4 25 23 25 -58 -2 -4 0 19 1
-1 1 -4 45 4 44 -49 -1 4 12 7 11 -37 -1 -4 0 35 1 5 -1 -4 42 23 41 -58 -2 -4 53 19 52
-1 1 -4 48 4 37 -49 -1 4 0 7 1 -37 -1 -4 58 35 57 5 -1 -4 30 23 29 -56 -2 -4 84 29 29
1 -1 4 14 4 14 -49 -1 4 0 7 1 -37 -1 -4 0 35 1 7 -1 -4 49 28 29 -56 -2 -4 40 29 39
1 1 -4 0 24 1 -51 -1 4 0 27 1 -37 -1 -4 39 35 38 7 -1 -4 0 28 1 -54 -2 -4 56 26 56
1 1 -4 0 24 1 -51 -1 4 0 27 1 -37 -1 -4 48 35 37 -7 1 4 37 28 36 -54 -2 -4 0 26 1
-1 -1 4 0 24 1 -51 -1 4 32 27 31 -35 -1 -4 32 15 32 9 -1 -4 56 17 26 -52 -2 -4 42 34 41
-1 -1 4 0 24 1 -51 -1 4 48 27 47 -35 -1 -4 41 15 40 9 -1 -4 0 17 1 -52 -2 -4 44 34 44
3 1 -4 0 14 1 -53 -1 4 0 8 1 -35 -1 -4 52 15 51 -9 1 4 0 17 1 -50 -2 -4 81 0 28
-3 -1 4 0 14 1 -53 -1 4 13 8 12 -35 -1 -4 36 15 36 11 -1 -4 0 1 1 -50 -2 -4 17 0 16
3 1 -4 54 14 28 -53 -1 4 53 8 21 -35 -1 -4 72 15 29 11 -1 -4 32 1 31 -48 -2 -4 45 0 44
5 1 -4 46 23 46 -53 -1 4 58 8 34 -35 -1 -4 95 15 23 -11 1 4 0 1 1 -48 -2 -4 64 0 29
-5 -1 4 42 23 22 -55 -1 4 0 20 1 -33 -1 -4 57 10 41 -13 1 4 65 54 12 -48 -2 -4 44 0 44
5 1 -4 16 23 16 -55 -1 4 0 20 1 -33 -1 -4 0 10 1 13 -1 -4 82 54 21 -46 -2 -4 30 16 29
7 1 -4 16 28 16 -55 -1 4 23 20 23 -33 -1 -4 24 10 24 13 -1 -4 78 54 18 -46 -2 -4 55 16 54

-7 -1 4 0 28 1 -55 -1 4 80 20 21 -33 -1 -4 0 10 1 -13 1 4 63 54 18 -46 -2 -4 46 16 45
 7 1 -4 0 28 1 -57 -1 4 0 12 1 -33 -1 -4 0 10 1 -15 1 4 160 137 8 -44 -2 -4 0 40 1
 9 1 -4 0 18 1 -57 -1 4 0 12 1 -33 -1 -4 0 10 1 15 -1 -4 143 137 9 -44 -2 -4 0 40 1
 -9 -1 4 34 18 34 -57 -1 4 0 12 1 -31 -1 -4 25 0 24 15 -1 -4 132 137 10 -44 -2 -4 96 40 13
 9 1 -4 40 18 40 -57 -1 4 32 12 31 -31 -1 -4 0 0 1 -15 1 4 147 137 7 -42 -2 -4 11 61 10
 11 1 -4 12 1 12 -59 -1 4 0 19 1 -31 -1 -4 0 0 1 -17 1 4 0 15 1 -42 -2 -4 57 61 31
 -11 -1 4 6 1 5 -59 -1 4 17 19 17 -31 -1 -4 60 0 37 17 -1 -4 33 15 32 -42 -2 -4 0 61 1
 -11 -1 4 37 1 37 -59 -1 4 0 19 1 -31 -1 -4 38 0 38 -17 1 4 14 15 14 -40 -2 -4 86 91 20
 -13 -1 4 64 54 11 -59 -1 4 0 19 1 -29 -1 -4 23 2 22 -19 1 4 82 72 11 -40 -2 -4 93 91 15
 -13 -1 4 61 54 17 -61 -1 4 0 4 1 -29 -1 -4 27 2 27 19 -1 -4 87 72 12 -40 -2 -4 101 91 23
 13 1 -4 74 54 10 -61 -1 4 26 4 25 -29 -1 -4 49 2 35 -19 1 4 75 72 10 -38 -2 -4 123 113 11
 -15 -1 4 150 138 6 -61 -1 4 0 4 1 -29 -1 -4 0 2 1 -21 1 4 58 49 23 -38 -2 -4 92 113 15
 15 1 -4 122 138 9 -63 -1 4 0 1 1 -29 -1 -4 101 2 23 -21 1 4 62 49 16 -38 -2 -4 97 113 13
 -15 -1 4 124 138 7 -63 -1 4 4 1 4 -27 -1 -4 0 4 1 21 -1 -4 85 49 13 -36 -2 -4 115 111 13
 -17 -1 4 21 15 20 -63 -1 4 48 1 48 -27 -1 -4 0 4 1 23 -1 -4 39 45 39 -36 -2 -4 91 111 16
 17 1 -4 16 15 16 -65 -1 4 77 18 27 -27 -1 -4 20 4 19 -23 1 4 63 45 16 -36 -2 -4 97 111 13
 -17 -1 4 39 15 39 -65 -1 4 25 18 25 -27 -1 -4 0 4 1 -23 1 4 52 45 28 -36 -2 -4 115 111 12
 -17 -1 4 0 15 1 -65 -1 4 0 18 1 -27 -1 -4 44 4 43 25 -1 -4 81 4 14 -34 -2 -4 118 75 11
 -19 -1 4 67 73 15 -67 -1 4 0 14 1 -25 -1 -4 60 16 34 -25 1 4 75 4 18 -34 -2 -4 88 75 19
 19 1 -4 80 73 18 -67 -1 4 42 14 41 -25 -1 -4 0 16 1 -27 1 4 0 30 1 -34 -2 -4 92 75 15
 -19 -1 4 56 73 13 -65 -1 -4 0 30 1 -25 -1 -4 0 16 1 27 -1 -4 23 30 22 -34 -2 -4 96 75 13
 -19 -1 4 78 73 8 -65 -1 -4 109 30 28 -25 -1 -4 25 16 24 -27 1 4 12 30 12 -32 -2 -4 195 185 10
 -21 -1 4 55 49 19 -65 -1 -4 0 30 1 -25 -1 -4 0 16 1 29 -1 -4 63 8 30 -32 -2 -4 211 185 9
 -21 -1 4 60 49 12 -63 -1 -4 20 12 19 -23 -1 -4 26 13 26 -29 1 4 45 8 44 -32 -2 -4 190 185 9
 -21 -1 4 68 49 12 -63 -1 -4 0 12 1 -23 -1 -4 68 13 30 -29 1 4 33 8 33 -32 -2 -4 203 185 9
 21 1 -4 80 49 19 -63 -1 -4 87 12 39 -23 -1 -4 19 13 19 31 -1 -4 47 32 47 -30 -2 -4 164 137 9
 23 1 -4 39 46 38 -61 -1 -4 55 46 45 -23 -1 -4 0 13 1 -31 1 4 0 32 1 -30 -2 -4 159 137 9

-23 -1 4 34 46 34 -61 -1 -4 73 46 72 -23 -1 -4 49 13 48 -31 1 4 58 32 26 -30 -2 -4 162 137 10

-23 -1 4 58 46 18 -61 -1 -4 43 46 42 -21 -1 -4 116 46 20 -33 1 4 0 9 1 -30 -2 -4 163 137 9

-23 -1 4 46 46 33 -59 -1 -4 0 8 1 -21 -1 -4 100 46 19 33 -1 -4 0 9 1 -28 -2 -4 163 169 10

-25 -1 4 51 5 28 -59 -1 -4 29 8 29 -21 -1 -4 55 46 38 -33 1 4 63 9 22 -28 -2 -4 179 169 9

25 1 -4 0 5 1 -59 -1 -4 0 8 1 -17 -1 -4 145 138 10 -35 1 4 23 24 23 -28 -2 -4 192 169 9

-25 -1 4 21 5 20 -57 -1 -4 65 51 39 -17 -1 -4 175 138 10 35 -1 -4 0 24 1 -28 -2 -4 184 169 8

-25 -1 4 35 5 34 -57 -1 -4 4 51 4 -17 -1 -4 160 138 9 -35 1 4 30 24 30 -26 -2 -4 78 78 19

-27 -1 4 30 30 30 -57 -1 -4 0 51 1 -15 -1 -4 0 11 1 -37 1 4 0 10 1 -26 -2 -4 99 78 13

-27 -1 4 28 30 28 -57 -1 -4 25 51 25 -15 -1 -4 73 11 37 -37 1 4 59 10 26 -26 -2 -4 105 78 13

27 1 -4 30 30 30 -55 -1 -4 0 22 1 -15 -1 -4 49 11 48 37 -1 -4 79 10 23 -26 -2 -4 77 78 20

-27 -1 4 11 30 10 -55 -1 -4 109 22 15 -13 -1 -4 90 76 13 -39 1 4 50 29 34 -24 -2 -4 72 67 21

-29 -1 4 14 8 14 -55 -1 -4 18 22 17 -13 -1 -4 111 76 12 -39 1 4 0 29 1 -24 -2 -4 97 67 14

29 1 -4 59 8 30 -55 -1 -4 36 22 35 -13 -1 -4 100 76 11 -41 1 4 33 18 33 -24 -2 -4 80 67 22

-29 -1 4 0 8 1 -53 -1 -4 99 51 25 -11 -1 -4 92 80 12 -41 1 4 13 18 12 -24 -2 -4 58 67 31

-29 -1 4 23 8 22 -53 -1 -4 70 51 23 -11 -1 -4 100 80 8 -43 1 4 0 19 1 -22 -2 -4 0 14 1

-31 -1 4 9 32 8 -53 -1 -4 65 51 28 -11 -1 -4 99 80 12 -43 1 4 0 19 1 -22 -2 -4 0 14 1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-22 -2 -4 89 14 24 -26 2 4 47 56 23 -16 -4 -4 0 13 1 -48 4 4 0 3 1 11 -5 -4 0 8 1

-22 -2 -4 0 14 1 26 -2 -4 0 56 1 -14 -4 -4 58 13 32 -50 4 4 24 11 23 11 -5 -4 0 8 1

-20 -2 -4 42 42 41 -28 2 4 127 120 8 -14 -4 -4 41 13 41 -50 4 4 51 11 29 13 -5 -4 46 60 46

-20 -2 -4 0 42 1 28 -2 -4 128 120 10 -14 -4 -4 0 13 1 -52 4 4 0 22 1 13 -5 -4 77 60 34

-20 -2 -4 53 42 52 -28 2 4 131 120 8 -12 -4 -4 0 13 1 -52 4 4 0 22 1 15 -5 -4 116 123 13

-20 -2 -4 0 42 1 28 -2 -4 128 120 9 -12 -4 -4 33 13 32 -54 4 4 76 25 75 15 -5 -4 121 123 12

-18 -2 -4 0 6 1 -30 2 4 187 174 8 -12 -4 -4 46 13 46 -54 4 4 0 25 1 17 -5 -4 0 3 1

-18-2-4 0 6 1 -30 2 4 178 174 8 -10-4-4 0 46 1 -56 4 4 23 18 23 17-5-4 26 3 26
-18-2-4 0 6 1 30-2-4 162 174 10 -10-4-4 39 46 38 -58 4 4 30 25 30 19-5-4 87 72 20
-16-2-4 44 38 44 32-2-4 96 43 18 -10-4-4 0 46 1 -49-5-4 86 62 27 19-5-4 31 72 30
-16-2-4 74 38 24 -32 2 4 43 43 33 -10-4-4 45 46 45 -47-5-4 118 89 20 21-5-4 81 54 29
-16-2-4 53 38 53 -32 2 4 74 43 11 -8-4-4 57 67 34 -45-5-4 94 91 25 21-5-4 55 54 43
-14-2-4 51 17 51 -34 2 4 152 150 8 -8-4-4 85 67 22 -43-5-4 117 100 20 23-5-4 72 65 40
-14-2-4 26 17 26 -36 2 4 130 135 10 -8-4-4 91 67 24 -41-5-4 76 79 29 25-5-4 48 15 48
-12-2-4 0 24 1 -36 2 4 115 135 9 -8-4-4 44 67 44 -39-5-4 55 56 54 27-5-4 47 24 47
-12-2-4 0 24 1 -38 2 4 93 85 10 -6-4-4 116 109 9 -39-5-4 37 56 37 29-5-4 0 19 1
-12-2-4 41 24 40 -38 2 4 103 85 12 -6-4-4 116 109 13 -37-5-4 68 38 67 31-5-4 37 28 37
-10-2-4 49 1 28 -40 2 4 34 47 33 -6-4-4 102 109 13 -37-5-4 86 38 39 -43 5 4 21 16 20
-10-2-4 0 1 1 -40 2 4 80 47 26 -6-4-4 118 109 13 -37-5-4 45 38 44 -45 5 4 0 3 1
-10-2-4 47 1 46 -42 2 4 28 25 28 -4-4-4 127 128 9 -35-5-4 76 22 44 -47 5 4 41 82 40
-8-2-4 0 13 1 -42 2 4 50 25 49 -4-4-4 138 128 11 -35-5-4 23 22 22 -49 5 4 0 14 1
-8-2-4 35 13 34 -44 2 4 0 24 1 -4-4-4 140 128 11 -35-5-4 0 22 1 -51 5 4 0 3 1
-8-2-4 56 13 38 -44 2 4 42 24 42 -4-4-4 116 128 13 -33-5-4 82 25 34 -27-7-4 0 18 1
-6-2-4 0 19 1 -46 2 4 0 2 1 -2-4-4 146 138 11 -33-5-4 82 25 39 -25-7-4 62 17 62
-6-2-4 56 19 34 -46 2 4 39 2 38 -2-4-4 150 138 11 -33-5-4 0 25 1 -23-7-4 20 22 20
-6-2-4 27 19 26 -48 2 4 0 6 1 -2-4-4 140 138 9 -31-5-4 0 8 1 -21-7-4 73 68 40
-6-2-4 44 19 44 -48 2 4 63 6 29 -2-4-4 153 138 11 -31-5-4 0 8 1 -19-7-4 99 73 23
-4-2-4 61 42 23 -50 2 4 31 12 30 0-4-4 118 110 13 -31-5-4 48 8 48 -17-7-4 144 127 12
-4-2-4 47 42 46 -50 2 4 0 12 1 0-4-4 133 110 9 -31-5-4 11 8 10 -17-7-4 157 127 15
-4-2-4 0 42 1 -52 2 4 59 14 43 0-4-4 136 110 10 -29-5-4 0 8 1 -15-7-4 47 41 47
-4-2-4 49 42 30 -52 2 4 26 14 25 0-4-4 126 110 12 -29-5-4 0 8 1 -15-7-4 89 41 39
-2-2-4 95 92 11 -54 2 4 0 29 1 0-4-4 113 110 13 -29-5-4 0 8 1 -13-7-4 114 76 19
-2-2-4 82 92 10 -54 2 4 0 29 1 2-4-4 183 147 10 -27-5-4 0 14 1 -13-7-4 120 76 15
-2-2-4 98 92 8 -56 2 4 0 39 1 2-4-4 179 147 8 -27-5-4 0 14 1 -13-7-4 129 76 13

-2 -2 -4 71 92 24 -56 2 4 0 39 1 2 -4 -4 171 147 10 -27 -5 -4 0 14 1 -11 -7 -4 119 87 15
 0 -2 -4 104 78 10 -58 2 4 69 62 17 2 -4 -4 163 147 10 -25 -5 -4 0 18 1 -11 -7 -4 105 87 16
 0 -2 -4 92 78 9 -58 2 4 50 62 50 4 -4 -4 141 154 11 -25 -5 -4 68 18 41 -11 -7 -4 95 87 23
 0 -2 -4 94 78 9 -60 2 4 56 30 56 4 -4 -4 172 154 10 -25 -5 -4 0 18 1 -9 -7 -4 49 65 49
 0 2 4 82 78 9 -60 2 4 29 30 29 4 -4 -4 155 154 9 -25 -5 -4 66 18 52 -9 -7 -4 117 65 15
 0 -2 -4 91 78 13 -62 2 4 31 56 31 4 -4 -4 160 154 9 -23 -5 -4 34 4 34 -9 -7 -4 84 65 28
 2 -2 -4 89 92 12 -62 2 4 71 56 18 4 -4 -4 164 154 10 -23 -5 -4 64 4 21 -7 -7 -4 73 59 53
 2 -2 -4 89 92 13 -64 2 4 136 125 10 6 -4 -4 81 75 17 -23 -5 -4 61 4 61 -7 -7 -4 0 59 1
 2 -2 -4 100 92 9 -66 2 4 66 66 23 6 -4 -4 87 75 21 -23 -5 -4 70 4 39 -7 -7 -4 95 59 38
 2 -2 -4 122 92 9 -50 -4 -4 9 11 9 6 -4 -4 81 75 28 -21 -5 -4 92 27 29 -7 -7 -4 43 59 42
 -2 2 4 101 92 8 -48 -4 -4 82 39 29 6 -4 -4 126 75 10 -21 -5 -4 35 27 35 -5 -7 -4 0 39 1
 -4 2 4 0 33 1 -48 -4 -4 61 39 60 6 -4 -4 75 75 19 -21 -5 -4 36 27 35 -5 -7 -4 19 39 18
 4 -2 -4 0 33 1 -46 -4 -4 38 8 38 8 -4 -4 75 67 25 -21 -5 -4 0 27 1 -5 -7 -4 44 39 43
 4 -2 -4 35 33 34 -46 -4 -4 73 8 39 8 -4 -4 58 67 27 -19 -5 -4 0 53 1 -5 -7 -4 35 39 35
 4 -2 -4 53 33 25 -44 -4 -4 43 13 42 8 -4 -4 55 67 55 -19 -5 -4 0 53 1 -3 -7 -4 31 7 30
 4 -2 -4 0 33 1 -44 -4 -4 0 13 1 8 -4 -4 103 67 13 -19 -5 -4 63 53 56 -3 -7 -4 62 7 61
 -6 2 4 60 10 22 -44 -4 -4 50 13 50 8 -4 -4 69 67 20 -17 -5 -4 98 103 12 -3 -7 -4 0 7 1
 6 -2 -4 34 10 33 -42 -4 -4 0 17 1 -10 4 4 0 12 1 -17 -5 -4 91 103 15 -1 -7 -4 0 3 1
 6 -2 -4 69 10 21 -42 -4 -4 66 17 41 10 -4 -4 49 12 49 -17 -5 -4 102 103 16 -1 -7 -4 27 3 26
 6 -2 -4 53 10 53 -42 -4 -4 0 17 1 10 -4 -4 43 12 43 -15 -5 -4 32 19 32 -1 -7 -4 0 3 1
 -8 2 4 20 7 19 -40 -4 -4 82 32 38 10 -4 -4 91 12 15 -15 -5 -4 18 19 18 1 -7 -4 18 23 18
 8 -2 -4 51 7 24 -40 -4 -4 38 32 37 10 -4 -4 53 12 35 -15 -5 -4 87 19 30 1 -7 -4 63 23 35
 8 -2 -4 28 7 27 -40 -4 -4 0 32 1 -12 4 4 55 6 33 -13 -5 -4 0 45 1 1 -7 -4 107 23 29
 8 -2 -4 62 7 44 -36 -4 -4 63 45 63 12 -4 -4 0 6 1 -13 -5 -4 0 45 1 3 -7 -4 0 11 1
 10 -2 -4 72 22 21 -36 -4 -4 31 45 31 12 -4 -4 98 6 14 -13 -5 -4 0 45 1 3 -7 -4 76 11 37
 -10 2 4 75 22 17 -36 -4 -4 68 45 32 12 -4 -4 28 6 28 -11 -5 -4 76 50 19 3 -7 -4 0 11 1
 12 -2 -4 67 7 23 -34 -4 -4 52 72 52 14 -4 -4 0 11 1 -11 -5 -4 61 50 38 3 -7 -4 0 11 1

-12 2 4 26 7 25 -34 -4 -4 57 72 57 14 -4 -4 96 11 14 -11 -5 -4 50 50 49 5 -7 -4 0 18 1
 14 -2 -4 57 26 33 -34 -4 -4 69 72 27 14 -4 -4 40 11 39 -9 -5 -4 0 25 1 5 -7 -4 62 18 61
 14 -2 -4 57 26 30 -32 -4 -4 0 0 1 -14 4 4 52 11 42 -9 -5 -4 19 25 18 5 -7 -4 39 18 39
 -14 2 4 0 26 1 -32 -4 -4 51 0 50 16 -4 -4 0 13 1 -9 -5 -4 62 25 33 7 -7 -4 49 2 49
 16 -2 -4 26 10 25 -32 -4 -4 25 0 24 16 -4 -4 0 13 1 -7 -5 -4 0 23 1 7 -7 -4 0 2 1
 -16 2 4 40 10 40 -30 -4 -4 130 91 11 -16 4 4 50 13 49 -7 -5 -4 0 23 1 7 -7 -4 20 2 20
 16 -2 -4 0 10 1 -30 -4 -4 120 91 12 18 -4 -4 0 23 1 -7 -5 -4 75 23 24 9 -7 -4 0 1 1
 18 -2 -4 0 4 1 -30 -4 -4 107 91 15 -18 4 4 0 23 1 -5 -5 -4 84 3 34 9 -7 -4 60 1 59
 18 -2 -4 77 4 22 -28 -4 -4 0 16 1 18 -4 -4 25 23 24 -5 -5 -4 48 3 47 11 -7 -4 0 13 1
 -18 2 4 37 4 37 -28 -4 -4 63 16 31 18 -4 -4 90 23 15 -5 -5 -4 0 3 1 11 -7 -4 72 13 56
 20 -2 -4 33 20 32 -28 -4 -4 25 16 24 20 -4 -4 71 8 27 -3 -5 -4 57 9 28 13 -7 -4 24 46 24
 -20 2 4 0 20 1 -26 -4 -4 70 29 43 20 -4 -4 0 8 1 -3 -5 -4 0 9 1 13 -7 -4 57 46 57
 -20 2 4 16 20 16 -26 -4 -4 0 29 1 20 -4 -4 10 8 9 -3 -5 -4 0 9 1 15 -7 -4 101 96 15
 20 -2 -4 0 20 1 -24 -4 -4 8 1 8 -20 4 4 54 8 31 -1 -5 -4 34 11 33 15 -7 -4 105 96 16
 -22 2 4 19 6 19 -24 -4 -4 33 1 33 22 -4 -4 0 6 1 -1 -5 -4 0 11 1 17 -7 -4 35 12 34
 22 -2 -4 50 6 49 -22 -4 -4 48 31 47 24 -4 -4 66 24 43 1 -5 -4 21 7 21 17 -7 -4 57 12 57
 -22 2 4 0 6 1 -22 -4 -4 31 31 31 26 -4 -4 0 17 1 1 -5 -4 0 7 1 19 -7 -4 54 24 54
 22 -2 -4 35 6 35 -22 -4 -4 0 31 1 28 -4 -4 38 12 37 3 -5 -4 34 24 34 21 -7 -4 25 22 24
 24 -2 -4 38 38 38 -20 -4 -4 0 8 1 30 -4 -4 97 83 24 3 -5 -4 0 24 1 23 -7 -4 48 8 47
 -24 2 4 48 38 31 -20 -4 -4 28 8 28 32 -4 -4 113 108 12 5 -5 -4 0 17 1 -37 5 -5 32 48 31
 24 -2 -4 0 38 1 -20 -4 -4 15 8 14 -36 4 4 40 47 40 5 -5 -4 21 17 21 -37 5 -5 0 48 1
 -24 2 4 5 38 5 -18 -4 -4 46 16 46 -38 4 4 0 14 1 5 -5 -4 0 17 1 -35 5 -5 0 21 1
 24 -2 -4 56 38 36 -18 -4 -4 48 16 48 -40 4 4 0 3 1 7 -5 -4 0 39 1 -35 5 -5 11 21 11
 26 -2 -4 21 56 20 -18 -4 -4 49 16 48 -42 4 4 45 17 39 7 -5 -4 59 39 58 -33 5 -5 37 15 36
 -26 2 4 77 56 17 -16 -4 -4 66 13 41 -44 4 4 0 20 1 9 -5 -4 0 14 1 -33 5 -5 44 15 43
 26 -2 -4 62 56 33 -16 -4 -4 39 13 39 -46 4 4 0 7 1 9 -5 -4 0 14 1 -31 5 -5 0 13 1

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-31	5	-5	24	13	23	-28	4	-5	44	37	43	-38	2	-5	31	38	31	-18	-2	5	31	7	30	-35	1	-5	0	32	1
-29	5	-5	0	36	1	-26	4	-5	35	47	34	-38	2	-5	0	38	1	-18	-2	5	0	7	1	-35	1	-5	24	32	24
-29	5	-5	0	36	1	-26	4	-5	0	47	1	-38	2	-5	23	38	22	-20	-2	5	34	22	33	-35	1	-5	71	32	29
-29	5	-5	0	36	1	-26	4	-5	52	47	31	-36	2	-5	0	0	1	-20	-2	5	62	22	28	-35	1	-5	21	32	21
-27	5	-5	0	14	1	-24	4	-5	43	5	43	-36	2	-5	22	0	22	-20	-2	5	0	22	1	-35	1	-5	52	32	51
-27	5	-5	32	14	31	-24	4	-5	0	5	1	-36	2	-5	0	0	1	-22	-2	5	39	23	38	-33	1	-5	56	18	35
-27	5	-5	0	14	1	-24	4	-5	26	5	25	-36	2	-5	31	0	30	-22	-2	5	37	23	37	-33	1	-5	57	18	40
-25	5	-5	0	37	1	-22	4	-5	57	38	30	-34	2	-5	112	95	29	-24	-2	5	46	74	46	-33	1	-5	82	18	45
-25	5	-5	49	37	49	-22	4	-5	26	38	26	-34	2	-5	74	95	19	-24	-2	5	48	74	26	-33	1	-5	0	18	1
-25	5	-5	24	37	23	-22	4	-5	0	38	1	-34	2	-5	97	95	13	-26	-2	5	108	113	8	-33	1	-5	54	18	53
-23	5	-5	0	19	1	-20	4	-5	0	16	1	-34	2	-5	104	95	15	-26	-2	5	103	113	9	-31	1	-5	0	12	1
-23	5	-5	0	19	1	-20	4	-5	40	16	40	-32	2	-5	221	209	13	-28	-2	5	135	152	8	-31	1	-5	0	12	1
-23	5	-5	38	19	38	-20	4	-5	0	16	1	-30	2	-5	20	40	19	-28	-2	5	144	152	8	-31	1	-5	0	12	1
-21	5	-5	0	39	1	-18	4	-5	39	12	39	-30	2	-5	26	40	26	-30	-2	5	48	64	29	-31	1	-5	121	12	17
-21	5	-5	46	39	46	-18	4	-5	0	12	1	-30	2	-5	91	40	41	-30	-2	5	77	64	22	-29	1	-5	55	38	55
-21	5	-5	61	39	61	-18	4	-5	17	12	17	-30	2	-5	34	40	34	-32	-2	5	202	190	8	-29	1	-5	34	38	34
-19	5	-5	57	5	56	-16	4	-5	56	49	38	-30	2	-5	23	40	23	-32	-2	5	181	190	9	-29	1	-5	70	38	29
-19	5	-5	36	5	36	-16	4	-5	37	49	36	-28	2	-5	138	123	14	-34	-2	5	40	15	39	-29	1	-5	51	38	51
-19	5	-5	25	5	24	-14	4	-5	29	43	28	-28	2	-5	152	123	9	-34	-2	5	21	15	20	-27	1	-5	0	3	1
-17	5	-5	60	27	60	-14	4	-5	88	43	30	-28	2	-5	112	123	10	-36	-2	5	108	94	9	-27	1	-5	0	3	1
-17	5	-5	49	27	49	-12	4	-5	5	57	4	-28	2	-5	142	123	12	-36	-2	5	100	94	10	-27	1	-5	0	3	1
-17	5	-5	49	27	37	-10	4	-5	35	43	35	-26	2	-5	180	152	9	-38	-2	5	87	99	11	-27	1	-5	0	3	1
-15	5	-5	97	74	16	-8	4	-5	90	73	19	-26	2	-5	157	152	13	-38	-2	5	85	99	11	-25	1	-5	86	41	21

-15 5 -5 50 74 49 2 -4 5 0 7 1 -26 2 -5 178 152 11 -38 -2 5 88 99 12 -25 1 -5 46 41 45
-15 5 -5 74 74 22 0 -4 5 232 207 10 -24 2 -5 74 63 24 -40 -2 5 76 76 24 -25 1 -5 47 41 47
-13 5 -5 45 44 44 -2 -4 5 0 14 1 -24 2 -5 102 63 29 -40 -2 5 72 76 13 -25 1 -5 35 41 34
-13 5 -5 55 44 41 -4 -4 5 101 117 9 -24 2 -5 84 63 20 -40 -2 5 60 76 20 -23 1 -5 107 32 15
-13 5 -5 86 44 29 -6 -4 5 96 114 9 -24 2 -5 87 63 22 -42 -2 5 45 54 32 -23 1 -5 34 32 34
-11 5 -5 51 10 51 -8 -4 5 73 81 12 -22 2 -5 72 92 27 -42 -2 5 72 54 25 -23 1 -5 0 32 1
-11 5 -5 0 10 1 -10 -4 5 47 53 29 -22 2 -5 70 92 26 -42 -2 5 27 54 27 -23 1 -5 56 32 56
-9 5 -5 29 3 28 -12 -4 5 53 38 25 -22 2 -5 67 92 31 -44 -2 5 45 38 30 -21 1 -5 80 50 12
-9 5 -5 50 3 50 -14 -4 5 41 20 41 -22 2 -5 68 92 67 -44 -2 5 54 38 28 -21 1 -5 62 50 24
-7 5 -5 53 17 52 -16 -4 5 26 30 26 -20 2 -5 0 13 1 -44 -2 5 60 38 36 -21 1 -5 110 50 16
-5 5 -5 49 2 49 -18 -4 5 0 20 1 -20 2 -5 53 13 53 -46 -2 5 42 26 41 -21 1 -5 67 50 31
3 -5 5 0 7 1 -20 -4 5 0 16 1 -20 2 -5 0 13 1 -46 -2 5 0 26 1 -19 1 -5 27 27 27
1 -5 5 0 7 1 -22 -4 5 0 7 1 -20 2 -5 0 13 1 -46 -2 5 51 26 50 -19 1 -5 30 27 29
-1 -5 5 0 11 1 -24 -4 5 0 23 1 -18 2 -5 40 30 39 -48 -2 5 0 36 1 -19 1 -5 0 27 1
-3 -5 5 37 11 36 -26 -4 5 47 39 35 -18 2 -5 63 30 63 -48 -2 5 41 36 41 -19 1 -5 58 27 38
-5 -5 5 14 9 14 -28 -4 5 77 82 11 -18 2 -5 64 30 25 -48 -2 5 0 36 1 -17 1 -5 42 22 42
-7 -5 5 0 40 1 -28 -4 5 71 82 18 -16 2 -5 80 14 12 -50 -2 5 0 13 1 -17 1 -5 43 22 42
-9 -5 5 49 19 40 -30 -4 5 84 87 11 -16 2 -5 67 14 44 -50 -2 5 0 13 1 -17 1 -5 34 22 33
-11 -5 5 61 57 24 -30 -4 5 78 87 19 -16 2 -5 68 14 25 -50 -2 5 0 13 1 -17 1 -5 54 22 54
-13 -5 5 63 61 23 -32 -4 5 57 34 25 -14 2 -5 90 30 18 -52 -2 5 64 35 39 -15 1 -5 105 98 13
-15 -5 5 20 39 19 -32 -4 5 63 34 25 -14 2 -5 43 30 43 -52 -2 5 0 35 1 -15 1 -5 100 98 10
-17 -5 5 70 85 21 -34 -4 5 0 54 1 -14 2 -5 0 30 1 -52 -2 5 0 35 1 -15 1 -5 94 98 15
-19 -5 5 42 47 41 -34 -4 5 54 54 28 14 -2 5 44 30 43 -54 -2 5 0 3 1 -15 1 -5 97 98 10
-21 -5 5 23 28 22 -36 -4 5 47 48 47 -14 2 -5 37 30 36 -54 -2 5 0 3 1 -15 1 -5 109 98 10
-23 -5 5 46 10 45 -36 -4 5 72 48 21 12 -2 5 21 13 21 -54 -2 5 0 3 1 -13 1 -5 64 41 48
-25 -5 5 0 46 1 -38 -4 5 88 34 17 -10 2 -5 0 19 1 -56 -2 5 0 11 1 -13 1 -5 60 41 38
-27 -5 5 0 14 1 -38 -4 5 16 34 15 -10 2 -5 0 19 1 -56 -2 5 0 11 1 -13 1 -5 71 41 21

-29 -5 5 0 34 1 -40 -4 5 49 12 40 10 -2 5 50 19 30 -56 -2 5 0 11 1 -13 1 -5 65 41 20
 -31 -5 5 0 3 1 -40 -4 5 61 12 31 -10 2 -5 40 19 39 -58 -2 5 0 9 1 -13 1 -5 49 41 49
 -33 -5 5 34 9 33 -42 -4 5 0 30 1 -8 2 -5 0 11 1 -57 1 -5 48 7 47 -13 1 -5 25 41 25
 -33 -5 5 0 9 1 -42 -4 5 0 30 1 -8 2 -5 49 11 49 -57 1 -5 36 7 36 -11 1 -5 85 34 12
 -35 -5 5 0 20 1 -44 -4 5 36 21 35 8 -2 5 58 11 22 -55 1 -5 28 4 27 -11 1 -5 17 34 17
 -35 -5 5 18 20 17 -44 -4 5 0 21 1 -6 2 -5 40 41 40 -55 1 -5 0 4 1 -11 1 -5 0 34 1
 -37 -5 5 0 19 1 -46 -4 5 0 9 1 6 -2 5 61 41 21 -53 1 -5 0 48 1 -11 1 -5 0 34 1
 -37 -5 5 0 19 1 -46 -4 5 26 9 26 -6 2 -5 44 41 43 -53 1 -5 80 48 48 -11 1 -5 38 34 38
 -39 -5 5 44 38 43 -48 -4 5 29 12 28 -4 2 -5 65 53 27 -53 1 -5 33 48 33 -9 1 -5 73 11 24
 -39 -5 5 0 38 1 -48 -4 5 0 12 1 4 -2 5 65 53 13 -51 1 -5 0 31 1 -9 1 -5 0 11 1
 -41 -5 5 41 6 40 -54 2 -5 0 28 1 -4 2 -5 69 53 26 -51 1 -5 123 31 18 -9 1 -5 56 11 27
 -46 4 -5 0 12 1 -54 2 -5 0 28 1 2 -2 5 57 43 21 -51 1 -5 0 31 1 9 -1 5 72 11 12
 -46 4 -5 27 12 27 -52 2 -5 41 23 40 -2 2 -5 53 43 40 -49 1 -5 70 48 70 -9 1 -5 0 11 1
 -46 4 -5 36 12 36 -52 2 -5 17 23 17 -2 2 -5 58 43 36 -49 1 -5 44 48 44 -9 1 -5 0 11 1
 -44 4 -5 0 14 1 -50 2 -5 37 27 36 0 2 -5 82 58 20 -49 1 -5 17 48 17 7 -1 5 83 29 14
 -44 4 -5 60 14 39 -50 2 -5 0 27 1 0 2 -5 94 58 12 -47 1 -5 116 118 16 -7 1 -5 15 29 15
 -42 4 -5 0 9 1 -50 2 -5 0 27 1 0 -2 5 67 58 13 -47 1 -5 101 118 14 -7 1 -5 62 29 25
 -42 4 -5 0 9 1 -48 2 -5 47 40 47 0 -2 5 52 58 21 -47 1 -5 142 118 15 -7 1 -5 66 29 30
 -40 4 -5 26 0 26 -48 2 -5 0 40 1 -2 -2 5 65 43 16 -45 1 -5 69 53 37 -5 1 -5 0 3 1
 -40 4 -5 24 0 24 -48 2 -5 0 40 1 2 2 -5 84 43 24 -45 1 -5 73 53 24 -5 1 -5 0 3 1
 -38 4 -5 14 15 13 -46 2 -5 57 38 38 -2 -2 5 45 43 45 -45 1 -5 128 53 15 5 -1 5 55 3 41
 -38 4 -5 0 15 1 -46 2 -5 0 38 1 2 2 -5 78 43 22 -43 1 -5 0 25 1 3 -1 5 57 35 36
 -38 4 -5 15 15 15 -46 2 -5 45 38 45 4 2 -5 55 49 45 -43 1 -5 0 25 1 -3 1 -5 82 35 14
 -36 4 -5 0 4 1 -46 2 -5 37 38 36 -4 -2 5 40 49 40 -43 1 -5 0 25 1 -3 1 -5 72 35 26
 -36 4 -5 0 4 1 -44 2 -5 82 52 47 6 2 -5 45 36 45 -43 1 -5 79 25 46 -1 1 -5 0 11 1
 -36 4 -5 25 4 24 -44 2 -5 27 52 27 -6 -2 5 43 36 28 -41 1 -5 75 48 64 -1 1 -5 42 11 42
 -34 4 -5 31 14 31 -44 2 -5 79 52 17 -8 -2 5 0 20 1 -41 1 -5 73 48 28 1 -1 5 34 11 33

-34	4	-5	0	14	1	-44	2	-5	58	52	45	8	2	-5	0	20	1	-41	1	-5	33	48	32	1	1	-5	0	11	1
-34	4	-5	0	14	1	-42	2	-5	58	44	25	-10	-2	5	35	14	34	-41	1	-5	22	48	22	-1	-1	5	39	11	39
-32	4	-5	88	67	20	-42	2	-5	77	44	52	10	2	-5	0	14	1	-39	1	-5	99	32	33	1	1	-5	83	11	22
-32	4	-5	110	67	17	-42	2	-5	36	44	35	12	2	-5	33	3	32	-39	1	-5	29	32	28	-1	-1	5	0	11	1
-32	4	-5	79	67	18	-42	2	-5	43	44	42	-12	-2	5	27	3	27	-39	1	-5	65	32	35	3	1	-5	0	18	1
-30	4	-5	40	17	40	-40	2	-5	49	59	49	14	2	-5	67	16	28	-39	1	-5	21	32	20	-3	-1	5	0	18	1
-30	4	-5	0	17	1	-40	2	-5	39	59	39	-14	-2	5	0	16	1	-37	1	-5	37	45	37	3	1	-5	65	18	29
-30	4	-5	0	17	1	-40	2	-5	66	59	22	-16	-2	5	0	6	1	-37	1	-5	37	45	37	-3	-1	5	31	18	31
-28	4	-5	70	37	50	-40	2	-5	100	59	34	16	2	-5	0	6	1	-37	1	-5	78	45	56	5	1	-5	22	10	21
-28	4	-5	24	37	23	-38	2	-5	73	38	26	18	2	-5	0	7	1	-37	1	-5	55	45	40	5	1	-5	0	10	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-5	-1	5	25	10	24	-33	-1	-5	0	18	1	15	-1	-5	73	36	25	-6	-2	-5	0	43	1	-34	-4	-5	75	16	30
-7	-1	5	12	35	12	-33	-1	-5	20	18	20	17	-1	-5	92	71	13	-4	-2	-5	36	55	36	-32	-4	-5	86	75	24
7	1	-5	49	35	49	-33	-1	-5	0	18	1	-17	1	5	86	71	10	-4	-2	-5	74	55	30	-32	-4	-5	137	75	14
7	1	-5	0	35	1	-31	-1	-5	44	12	44	17	-1	-5	87	71	12	-4	-2	-5	69	55	25	-32	-4	-5	100	75	23
9	1	-5	0	20	1	-31	-1	-5	30	12	29	19	-1	-5	31	54	30	-4	-2	-5	34	55	33	-30	-4	-5	44	19	44
9	1	-5	20	20	19	-31	-1	-5	0	12	1	-25	1	5	37	42	37	-2	-2	-5	66	44	34	-30	-4	-5	24	19	24
-9	-1	5	22	20	22	-29	-1	-5	67	40	24	-27	1	5	33	3	33	-2	-2	-5	45	44	45	-30	-4	-5	114	19	17
11	1	-5	86	51	13	-29	-1	-5	0	40	1	-29	1	5	0	33	1	-2	-2	-5	28	44	27	-28	-4	-5	0	41	1
-11	-1	5	55	51	21	-29	-1	-5	60	40	59	-31	1	5	35	10	34	-2	-2	-5	53	44	30	-28	-4	-5	66	41	65
11	1	-5	71	51	28	-27	-1	-5	0	3	1	-33	1	5	32	11	32	0	-2	-5	55	60	27	-28	-4	-5	67	41	33
13	1	-5	79	57	13	-27	-1	-5	51	3	50	-35	1	5	0	20	1	0	-2	-5	80	60	29	-26	-4	-5	80	53	29
13	1	-5	60	57	41	-27	-1	-5	0	3	1	-37	1	5	27	19	26	0	-2	-5	23	60	22	-26	-4	-5	90	53	21
-13	-1	5	57	57	21	-25	-1	-5	21	42	20	-39	1	5	0	20	1	0	-2	-5	83	60	12	-26	-4	-5	86	53	37

-15 -1 5 0 36 1 -25 -1 -5 85 42 27 -41 1 5 38 6 37 0 -2 -5 20 60 19 -24 -4 -5 51 6 50
-17 -1 5 78 71 11 -25 -1 -5 65 42 32 -43 1 5 0 29 1 2 -2 -5 59 44 27 -24 -4 -5 0 6 1
-19 -1 5 51 54 32 -23 -1 -5 0 33 1 -45 1 5 36 59 35 2 -2 -5 63 44 44 -22 -4 -5 50 43 50
-21 -1 5 18 32 18 -23 -1 -5 38 33 38 -47 1 5 45 38 44 2 -2 -5 78 44 13 -22 -4 -5 17 43 16
-23 -1 5 0 16 1 -23 -1 -5 49 33 48 -49 1 5 54 54 25 2 -2 -5 51 44 31 -20 -4 -5 0 18 1
-23 -1 5 18 16 18 -21 -1 -5 60 51 41 -51 1 5 34 47 33 2 -2 -5 67 44 42 -20 -4 -5 11 18 10
-25 -1 5 19 42 18 -21 -1 -5 63 51 59 -53 1 5 47 0 47 4 -2 -5 72 51 23 -18 -4 -5 0 14 1
-25 -1 5 21 42 20 -21 -1 -5 85 51 18 -55 1 5 32 3 32 4 -2 -5 72 51 23 -18 -4 -5 35 14 34
-27 -1 5 0 3 1 -19 -1 -5 0 28 1 -57 1 5 0 1 1 4 -2 -5 64 51 38 -18 -4 -5 49 14 41
-27 -1 5 42 3 41 -19 -1 -5 45 28 45 -59 1 5 0 11 1 4 -2 -5 98 51 23 -16 -4 -5 0 54 1
-29 -1 5 14 33 14 -19 -1 -5 0 28 1 -54 -2 -5 0 30 1 4 -2 -5 62 51 23 -16 -4 -5 17 54 17
-31 -1 5 0 10 1 -17 -1 -5 9 23 9 -52 -2 -5 52 24 52 6 -2 -5 67 37 24 -16 -4 -5 49 54 49
-31 -1 5 42 10 34 -17 -1 -5 80 23 29 -50 -2 -5 0 29 1 6 -2 -5 42 37 41 -14 -4 -5 46 48 45
-33 -1 5 29 11 29 -17 -1 -5 0 23 1 -50 -2 -5 18 29 18 6 -2 -5 60 37 54 -14 -4 -5 19 48 18
-33 -1 5 0 11 1 -15 -1 -5 86 101 22 -50 -2 -5 0 29 1 6 -2 -5 46 37 46 -14 -4 -5 50 48 50
-35 -1 5 0 20 1 -15 -1 -5 114 101 12 -48 -2 -5 20 43 20 -6 2 5 33 37 33 -12 -4 -5 72 63 22
-35 -1 5 38 20 37 -15 -1 -5 146 101 11 -48 -2 -5 54 43 53 6 -2 -5 87 37 22 -12 -4 -5 33 63 33
-37 -1 5 0 19 1 -13 -1 -5 0 42 1 -48 -2 -5 41 43 40 8 -2 -5 46 20 46 -12 -4 -5 109 63 24
-37 -1 5 0 19 1 -13 -1 -5 49 42 49 -46 -2 -5 0 40 1 8 -2 -5 0 20 1 -10 -4 -5 86 47 32
-39 -1 5 0 20 1 -13 -1 -5 59 42 30 -46 -2 -5 95 40 30 8 -2 -5 22 20 22 -10 -4 -5 32 47 31
-39 -1 5 0 20 1 -11 -1 -5 0 34 1 -46 -2 -5 37 40 37 -8 2 5 44 20 43 -10 -4 -5 71 47 29
-41 -1 5 31 6 31 -11 -1 -5 25 34 24 -44 -2 -5 88 55 29 10 -2 -5 38 14 38 -8 -4 -5 103 80 14
-41 -1 5 0 6 1 -11 -1 -5 51 34 51 -44 -2 -5 70 55 26 10 -2 -5 54 14 27 -8 -4 -5 93 80 15
-43 -1 5 22 29 22 -11 -1 -5 45 34 44 -44 -2 -5 81 55 25 10 -2 -5 7 14 6 -8 -4 -5 82 80 19
-43 -1 5 36 29 35 -9 -1 -5 0 12 1 -42 -2 -5 53 47 53 -10 2 5 62 14 26 -6 -4 -5 111 115 12
-45 -1 5 47 59 31 -9 -1 -5 57 12 57 -42 -2 -5 90 47 30 -12 2 5 64 3 25 -6 -4 -5 136 115 12
-45 -1 5 22 59 21 -9 -1 -5 58 12 57 -42 -2 -5 61 47 40 12 -2 -5 27 3 26 -6 -4 -5 106 115 14

-45 -1 5 70 59 24 -7 -1 -5 30 29 30 -40 -2 -5 69 63 25 12 -2 -5 64 3 36 -4 -4 -5 96 99 14
-47 -1 5 33 38 32 -7 -1 -5 51 29 50 -40 -2 -5 57 63 57 12 -2 -5 0 3 1 -4 -4 -5 118 99 24
-47 -1 5 44 38 43 -5 -1 -5 17 3 17 -38 -2 -5 47 41 46 14 -2 -5 60 16 59 -4 -4 -5 111 99 14
-47 -1 5 53 38 44 -5 -1 -5 19 3 18 -38 -2 -5 0 41 1 14 -2 -5 33 16 33 -2 -4 -5 0 8 1
-49 -1 5 49 55 28 -5 -1 -5 36 3 36 -38 -2 -5 52 41 52 14 -2 -5 47 16 46 -2 -4 -5 0 8 1
-49 -1 5 82 55 21 -5 -1 -5 72 3 24 -36 -2 -5 42 0 42 -14 2 5 34 16 34 -2 -4 -5 0 8 1
-49 -1 5 68 55 31 -3 -1 -5 84 36 11 -36 -2 -5 0 0 1 16 -2 -5 0 6 1 0 -4 -5 225 222 12
-51 -1 5 55 47 55 -3 -1 -5 21 36 20 -36 -2 -5 0 0 1 16 -2 -5 26 6 26 0 -4 -5 257 222 10
-51 -1 5 46 47 46 -3 -1 -5 45 36 33 -34 -2 -5 109 102 14 18 -2 -5 36 8 35 0 -4 -5 258 222 9
-51 -1 5 26 47 25 -3 -1 -5 0 36 1 -34 -2 -5 124 102 13 18 -2 -5 53 8 36 2 -4 -5 0 15 1
-53 -1 5 55 0 55 -1 -1 -5 62 11 32 -34 -2 -5 109 102 13 20 -2 -5 8 22 8 2 -4 -5 57 15 37
-53 -1 5 66 0 28 -1 -1 -5 35 11 35 -32 -2 -5 232 224 10 22 -2 -5 5 23 4 2 -4 -5 87 15 36
-53 -1 5 44 0 31 -1 -1 -5 0 11 1 -32 -2 -5 244 224 9 24 -2 -5 35 74 34 4 -4 -5 140 124 12
-55 -1 5 42 3 41 -1 -1 -5 77 11 26 -30 -2 -5 62 43 30 26 -2 -5 130 113 12 4 -4 -5 157 124 11
-55 -1 5 45 3 44 1 -1 -5 0 11 1 -30 -2 -5 48 43 48 28 -2 -5 151 152 11 4 -4 -5 135 124 11
-57 -1 5 0 1 1 1 -1 -5 41 11 40 -30 -2 -5 42 43 41 30 -2 -5 63 64 32 6 -4 -5 114 121 15
-57 -1 5 12 1 11 -1 1 5 42 11 42 -28 -2 -5 152 131 10 32 -2 -5 202 188 10 6 -4 -5 119 121 13
-59 -1 5 30 11 29 1 -1 -5 66 11 27 -28 -2 -5 157 131 11 -34 2 5 18 15 17 6 -4 -5 120 121 11
-59 -1 5 21 11 21 1 -1 -5 0 11 1 -26 -2 -5 188 162 10 -36 2 5 106 93 11 8 -4 -5 104 86 32
-57 -1 -5 0 7 1 3 -1 -5 80 19 12 -26 -2 -5 197 162 10 -38 2 5 92 97 13 8 -4 -5 112 86 12
-55 -1 -5 0 4 1 3 -1 -5 0 19 1 -24 -2 -5 79 67 24 -40 2 5 79 74 15 10 -4 -5 35 55 34
-53 -1 -5 16 49 15 -3 1 5 58 19 23 -24 -2 -5 66 67 33 -42 2 5 16 53 15 10 -4 -5 39 55 39
-51 -1 -5 45 32 44 3 -1 -5 55 19 24 -24 -2 -5 60 67 59 -44 2 5 51 37 33 12 -4 -5 0 40 1
-51 -1 -5 0 32 1 3 -1 -5 0 19 1 -22 -2 -5 89 98 20 -46 2 5 0 25 1 14 -4 -5 17 21 17
-49 -1 -5 46 50 45 5 -1 -5 23 10 23 -22 -2 -5 123 98 13 -48 2 5 42 35 41 16 -4 -5 0 31 1
-49 -1 -5 92 50 29 5 -1 -5 45 10 44 -22 -2 -5 85 98 22 -50 2 5 0 13 1 18 -4 -5 60 20 60
-47 -1 -5 139 123 13 5 -1 -5 17 10 17 -20 -2 -5 0 13 1 -52 2 5 26 35 26 18 -4 -5 35 20 35

-47 -1 -5 125 123 11 5 -1 -5 33 10 32 -20 -2 -5 49 13 48 -54 2 5 0 3 1 20 -4 -5 0 16 1
 -47 -1 -5 133 123 13 -5 1 5 0 10 1 -20 -2 -5 0 13 1 -56 2 5 10 10 10 20 -4 -5 0 16 1
 -45 -1 -5 72 55 28 7 -1 -5 29 35 29 -18 -2 -5 53 31 52 -46 -4 -5 0 13 1 22 -4 -5 56 7 56
 -45 -1 -5 43 55 42 7 -1 -5 1 35 1 -18 -2 -5 79 31 38 -46 -4 -5 53 13 52 22 -4 -5 0 7 1
 -45 -1 -5 75 55 30 7 -1 -5 54 35 53 -18 -2 -5 0 31 1 -44 -4 -5 16 16 15 24 -4 -5 0 23 1
 -43 -1 -5 0 26 1 7 -1 -5 0 35 1 -16 -2 -5 0 15 1 -44 -4 -5 38 16 37 24 -4 -5 0 23 1
 -43 -1 -5 0 26 1 -7 1 5 33 35 32 -16 -2 -5 56 15 55 -42 -4 -5 26 11 25 26 -4 -5 25 39 24
 -43 -1 -5 0 26 1 9 -1 -5 43 20 42 -14 -2 -5 79 32 32 -42 -4 -5 68 11 68 26 -4 -5 86 39 29
 -41 -1 -5 79 49 27 9 -1 -5 42 20 41 -14 -2 -5 50 32 49 -42 -4 -5 45 11 45 28 -4 -5 97 82 25
 -41 -1 -5 0 49 1 -9 1 5 13 20 12 -12 -2 -5 20 14 20 -40 -4 -5 89 0 39 28 -4 -5 58 82 42
 -41 -1 -5 49 49 48 9 -1 -5 40 20 39 -12 -2 -5 58 14 37 -40 -4 -5 0 0 1 30 -4 -5 108 87 13
 -39 -1 -5 78 33 36 9 -1 -5 52 20 30 -10 -2 -5 34 20 33 -40 -4 -5 0 0 1 30 -4 -5 75 87 27
 -39 -1 -5 80 33 29 -11 1 5 81 51 10 -10 -2 -5 30 20 30 -38 -4 -5 27 17 27 32 -4 -5 60 34 59
 -39 -1 -5 48 33 47 11 -1 -5 46 51 45 -10 -2 -5 57 20 36 -38 -4 -5 0 17 1 32 -4 -5 48 34 48
 -37 -1 -5 50 47 50 11 -1 -5 86 51 20 -8 -2 -5 0 12 1 -38 -4 -5 69 17 68 34 -4 -5 41 54 40
 -37 -1 -5 0 47 1 -13 1 5 46 58 46 -8 -2 -5 0 12 1 -36 -4 -5 0 5 1 34 -4 -5 44 54 43
 -37 -1 -5 54 47 53 13 -1 -5 87 58 21 -8 -2 -5 1 12 1 -36 -4 -5 81 5 52 36 -4 -5 64 48 36
 -35 -1 -5 27 33 27 13 -1 -5 65 58 20 -8 -2 -5 0 12 1 -36 -4 -5 11 5 11 36 -4 -5 103 48 24
 -35 -1 -5 61 33 60 15 -1 -5 38 36 38 -6 -2 -5 57 43 36 -34 -4 -5 101 16 35 38 -4 -5 45 34 45
 -35 -1 -5 62 33 29 -15 1 5 61 36 23 -6 -2 -5 34 43 34 -34 -4 -5 0 16 1 40 -4 -5 75 12 34

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-48 4 5 0 12 1 33 -5 -5 68 9 34 -8 -2 6 8 1 7 -11 -1 6 23 34 22 -24 -2 -6 119 88 16
 -37 -5 -5 44 56 43 35 -5 -5 0 20 1 -10 -2 6 0 26 1 -13 -1 6 44 18 43 -24 -2 -6 121 88 15

-37 -5 -5 81 56 26 35 -5 -5 80 20 32 -12 -2 6 14 12 13 -15 -1 6 57 59 23 -22 -2 -6 32 51 32
-35 -5 -5 0 25 1 -11 5 -6 61 76 42 -14 -2 6 32 32 31 -17 -1 6 37 13 36 -22 -2 -6 67 51 28
-35 -5 -5 0 25 1 -9 5 -6 41 2 40 -16 -2 6 0 26 1 -19 -1 6 33 33 33 -22 -2 -6 82 51 28
-35 -5 -5 99 25 36 -7 5 -6 15 47 14 -18 -2 6 50 48 27 -21 -1 6 42 51 42 -20 -2 -6 55 55 54
-33 -5 -5 0 18 1 -5 5 -6 0 6 1 -20 -2 6 0 45 1 -23 -1 6 0 2 1 -20 -2 -6 79 55 25
-33 -5 -5 42 18 42 -3 5 -6 7 13 7 -22 -2 6 69 83 17 -25 -1 6 0 18 1 -20 -2 -6 132 55 24
-33 -5 -5 38 18 38 -3 -5 6 0 5 1 -24 -2 6 53 56 24 -27 -1 6 38 3 37 -18 -2 -6 59 37 59
-31 -5 -5 0 15 1 -5 -5 6 55 5 38 -26 -2 6 85 87 12 -29 -1 6 37 24 36 -18 -2 -6 0 37 1
-31 -5 -5 26 15 26 -7 -5 6 0 9 1 -26 -2 6 69 87 13 -31 -1 6 0 6 1 -18 -2 -6 42 37 42
-31 -5 -5 104 15 31 -9 -5 6 16 22 16 -28 -2 6 37 17 37 -31 -1 6 0 6 1 -16 -2 -6 36 45 36
-29 -5 -5 99 41 33 -11 -5 6 46 25 46 -28 -2 6 37 17 37 -33 -1 6 26 5 25 -16 -2 -6 34 45 34
-29 -5 -5 0 41 1 -13 -5 6 50 11 50 -30 -2 6 79 94 12 -35 -1 6 33 3 32 -16 -2 -6 38 45 37
-29 -5 -5 33 41 33 -26 4 -6 37 8 36 -30 -2 6 78 94 12 -35 -1 6 30 3 30 -14 -2 -6 30 44 29
-27 -5 -5 70 16 69 -26 4 -6 69 8 30 -32 -2 6 130 136 9 -37 -1 6 44 19 43 -14 -2 -6 43 44 43
-27 -5 -5 40 16 39 -24 4 -6 80 21 23 -32 -2 6 131 136 10 -37 -1 6 0 19 1 -14 -2 -6 0 44 1
-25 -5 -5 58 42 52 -24 4 -6 0 21 1 -34 -2 6 143 144 9 -39 -1 6 63 34 29 -12 -2 -6 0 13 1
-25 -5 -5 0 42 1 -22 4 -6 57 6 51 -34 -2 6 118 144 10 -39 -1 6 0 34 1 -12 -2 -6 55 13 55
-23 -5 -5 40 22 39 -22 4 -6 12 6 11 -36 -2 6 0 6 1 -41 -1 6 0 41 1 -10 -2 -6 0 43 1
-23 -5 -5 0 22 1 -20 4 -6 61 9 41 -36 -2 6 0 6 1 -41 -1 6 78 41 21 -10 -2 -6 0 43 1
-21 -5 -5 0 44 1 -20 4 -6 40 9 39 -38 -2 6 29 27 29 -43 -1 6 33 50 32 -8 -2 -6 29 0 28
-21 -5 -5 20 44 20 -18 4 -6 32 27 32 -38 -2 6 31 27 31 -43 -1 6 22 50 21 -8 -2 -6 0 0 1
-21 -5 -5 48 44 48 -16 4 -6 42 15 42 -40 -2 6 58 78 57 -45 -1 6 30 11 30 -6 -2 -6 0 17 1
-19 -5 -5 0 5 1 -14 4 -6 67 39 31 -40 -2 6 55 78 29 -45 -1 6 33 11 33 -6 -2 -6 0 17 1
-19 -5 -5 0 5 1 -12 4 -6 0 16 1 -42 -2 6 0 50 1 -45 -1 6 81 11 30 -6 -2 -6 0 17 1
-19 -5 -5 0 5 1 -12 4 -6 73 16 27 -42 -2 6 76 50 30 -43 -1 -6 92 71 23 -4 -2 -6 75 45 19
-17 -5 -5 111 30 27 -10 4 -6 39 70 39 -44 -2 6 47 53 46 -41 -1 -6 0 15 1 -4 -2 -6 58 45 57
-17 -5 -5 49 30 49 -8 4 -6 0 51 1 -44 -2 6 65 53 46 -39 -1 -6 42 1 42 -4 -2 -6 43 45 42

-17-5-5 0 30 1 -6 4-6 0 21 1 -41 1-6 0 14 1 -37-1-6 49 0 48 -2-2-6 103 63 26
 -15-5-5 75 83 21 -4-4 6 37 16 37 -41 1-6 42 14 42 -35-1-6 82 3 36 -2-2-6 68 63 28
 -15-5-5 71 83 32 -6-4 6 0 51 1 -41 1-6 0 14 1 -35-1-6 30 3 29 -2-2-6 70 63 23
 -15-5-5 82 83 37 -8-4 6 59 60 24 -39 1-6 106 1 36 -33-1-6 0 29 1 0-2-6 81 63 36
 -13-5-5 73 50 25 -10-4 6 64 50 22 -39 1-6 44 1 43 -33-1-6 36 29 35 0-2-6 72 63 23
 -13-5-5 0 50 1 -12-4 6 40 47 39 -39 1-6 17 1 16 -31-1-6 0 35 1 0-2-6 69 63 25
 -13-5-5 39 50 39 -14-4 6 53 55 27 -37 1-6 51 0 50 -31-1-6 0 35 1 2-2-6 59 60 59
 -11-5-5 0 11 1 -16-4 6 0 13 1 -37 1-6 40 0 39 -29-1-6 24 4 23 2-2-6 65 60 30
 -11-5-5 0 11 1 -18-4 6 36 36 35 -37 1-6 0 0 1 -29-1-6 44 4 44 2-2-6 80 60 20
 -11-5-5 0 11 1 -20-4 6 0 14 1 -37 1-6 0 0 1 -27-1-6 64 19 64 4-2-6 0 20 1
 -9-5-5 59 4 47 -22-4 6 43 52 43 -35 1-6 0 2 1 -27-1-6 0 19 1 4-2-6 0 20 1
 -9-5-5 0 4 1 -24-4 6 0 5 1 -35 1-6 0 2 1 -25-1-6 54 4 53 6-2-6 0 18 1
 -9-5-5 68 4 68 -26-4 6 38 52 38 -35 1-6 45 2 45 -25-1-6 0 4 1 6-2-6 0 18 1
 -7-5-5 0 19 1 -28-4 6 0 8 1 -35 1-6 37 2 37 -23-1-6 22 23 22 8-2-6 68 1 46
 -7-5-5 34 19 34 -30-4 6 0 15 1 -33 1-6 0 28 1 -23-1-6 18 23 18 8-2-6 0 1 1
 -7-5-5 0 19 1 -40 2-6 0 19 1 -33 1-6 0 28 1 -21-1-6 0 2 1 10-2-6 100 26 27
 -5-5-5 0 2 1 -40 2-6 55 19 49 -33 1-6 84 28 29 -21-1-6 0 2 1 10-2-6 0 26 1
 -5-5-5 36 2 36 -40 2-6 44 19 43 -33 1-6 0 28 1 -19-1-6 114 52 24 12-2-6 49 12 49
 -5-5-5 0 2 1 -38 2-6 0 12 1 -31 1-6 0 34 1 -19-1-6 35 52 35 14-2-6 20 33 19
 -3-5-5 0 8 1 -38 2-6 40 12 40 -31 1-6 44 34 43 -17-1-6 67 35 32 16-2-6 2 26 2
 -3-5-5 0 8 1 -38 2-6 0 12 1 -31 1-6 0 34 1 -17-1-6 0 35 1 18-2-6 64 50 27
 -3-5-5 0 8 1 -36 2-6 101 96 17 -31 1-6 0 34 1 -15-1-6 0 11 1 20-2-6 46 46 45
 -1-5-5 44 7 44 -36 2-6 73 96 30 -29 1-6 0 4 1 -15-1-6 42 11 41 22-2-6 80 84 21
 -1-5-5 31 7 31 -36 2-6 61 96 38 -29 1-6 75 4 35 -13-1-6 146 50 20 -28-4-6 52 29 51
 -1-5-5 0 7 1 -36 2-6 121 96 20 -29 1-6 104 4 37 -13-1-6 69 50 31 -26-4-6 62 9 62
 1-5-5 57 12 57 -34 2-6 128 135 11 -29 1-6 0 4 1 -11-1-6 65 82 35 -26-4-6 41 9 41
 1-5-5 0 12 1 -34 2-6 145 135 10 -27 1-6 0 18 1 -11-1-6 115 82 15 -24-4-6 0 24 1

1 -5 -5 0 12 1 -34 2 -6 173 135 15 -27 1 -6 0 18 1 -9 -1 -6 0 0 1 -24 -4 -6 44 24 44
3 -5 -5 23 12 23 -34 2 -6 123 135 16 -27 1 -6 38 18 37 -9 -1 -6 0 0 1 -22 -4 -6 58 7 57
3 -5 -5 0 12 1 -32 2 -6 71 73 31 -27 1 -6 0 18 1 -7 -1 -6 65 34 64 -22 -4 -6 28 7 27
3 -5 -5 57 12 56 -32 2 -6 84 73 20 -25 1 -6 85 3 27 -5 -1 -6 0 21 1 -20 -4 -6 11 10 10
5 -5 -5 54 10 54 -32 2 -6 54 73 54 -25 1 -6 49 3 49 -3 -1 -6 0 12 1 -18 -4 -6 20 31 19
5 -5 -5 0 10 1 -32 2 -6 113 73 34 -25 1 -6 0 3 1 -1 -1 -6 35 30 35 -16 -4 -6 39 16 38
5 -5 -5 0 10 1 -32 2 -6 100 73 12 -25 1 -6 0 3 1 -1 -1 -6 46 30 46 -16 -4 -6 14 16 14
7 -5 -5 31 43 31 -30 2 -6 199 181 12 -23 1 -6 68 23 32 1 -1 -6 46 16 45 -14 -4 -6 53 43 38
7 -5 -5 32 43 32 -30 2 -6 205 181 9 -23 1 -6 0 23 1 1 -1 -6 56 16 55 -14 -4 -6 67 43 33
9 -5 -5 7 20 7 -30 2 -6 238 181 13 -23 1 -6 0 23 1 3 -1 -6 27 8 26 -12 -4 -6 0 18 1
11 -5 -5 65 60 30 -28 2 -6 59 34 54 -23 1 -6 12 23 11 5 -1 -6 46 0 45 -12 -4 -6 36 18 35
13 -5 -5 62 64 35 -28 2 -6 0 34 1 -21 1 -6 95 2 37 7 -1 -6 26 30 26 -12 -4 -6 43 18 43
15 -5 -5 43 40 42 -26 2 -6 58 60 57 -21 1 -6 57 2 57 9 -1 -6 58 21 30 -10 -4 -6 32 77 32
15 -5 -5 78 40 24 -26 2 -6 70 60 35 -21 1 -6 0 2 1 -41 1 6 31 41 31 -10 -4 -6 97 77 16
17 -5 -5 74 89 42 -24 2 -6 65 82 65 -21 1 -6 0 2 1 -43 1 6 30 49 30 -10 -4 -6 31 77 31
17 -5 -5 78 89 25 -24 2 -6 92 82 22 -19 1 -6 73 50 32 -45 1 6 0 11 1 -8 -4 -6 55 57 55
19 -5 -5 31 49 31 -22 2 -6 68 48 67 -19 1 -6 27 50 26 -40 -2 -6 23 20 23 -8 -4 -6 0 57 1
19 -5 -5 0 49 1 -22 2 -6 84 48 27 -19 1 -6 58 50 57 -38 -2 -6 0 13 1 -8 -4 -6 0 57 1
21 -5 -5 21 29 21 -20 2 -6 0 52 1 -17 1 -6 0 34 1 -36 -2 -6 103 103 18 -6 -4 -6 47 23 46
21 -5 -5 77 29 38 -20 2 -6 34 52 33 -17 1 -6 108 34 16 -34 -2 -6 137 144 12 -6 -4 -6 35 23 35
23 -5 -5 0 11 1 -18 2 -6 0 35 1 -17 1 -6 30 34 29 -32 -2 -6 66 78 33 -6 -4 -6 102 23 30
23 -5 -5 0 11 1 -18 2 -6 81 35 42 -15 1 -6 0 11 1 -32 -2 -6 69 78 57 -4 -4 -6 0 52 1
25 -5 -5 63 47 62 -16 2 -6 0 42 1 -15 1 -6 12 11 11 -30 -2 -6 200 194 11 -4 -4 -6 23 52 23
25 -5 -5 36 47 36 -16 2 -6 103 42 27 -13 1 -6 32 48 31 -30 -2 -6 195 194 10 -4 -4 -6 80 52 23
27 -5 -5 41 15 41 -14 2 -6 30 42 30 -13 1 -6 111 48 24 -28 -2 -6 95 37 31 -2 -4 -6 173 150 11
27 -5 -5 33 15 33 -14 2 -6 77 42 41 -11 1 -6 94 80 31 -28 -2 -6 0 37 1 -2 -4 -6 170 150 11
29 -5 -5 93 35 32 -12 2 -6 44 12 43 -11 1 -6 79 80 25 -28 -2 -6 65 37 31 -2 -4 -6 161 150 13

29 -5 -5 0 35 1 -12 2 -6 18 12 18 -9 1 -6 8 0 8 -26 -2 -6 65 65 37 0 -4 -6 146 125 12
 31 -5 -5 0 3 1 -10 2 -6 58 41 43 -7 1 -6 47 33 47 -26 -2 -6 104 65 30 0 -4 -6 172 125 10
 31 -5 -5 0 3 1 -8 2 -6 0 0 1 -7 -1 6 38 29 38 -26 -2 -6 84 65 26 0 -4 -6 163 125 12
 33 -5 -5 22 9 22 -6 -2 6 0 18 1 -9 -1 6 0 20 1 -24 -2 -6 117 88 15 2 -4 -6 195 168 10

Table 6. Observed and calculated structure factors for A11

Page 45

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
2	-4	-6	186	168	12	18	-4	-6	11	38	11	-3	-5	-6	0	15	1	-17	1	-7	50	11	49	-9	-1	-7	42	53	42
2	-4	-6	197	168	11	20	-4	-6	25	14	24	-3	-5	-6	54	15	53	-15	1	-7	30	54	30	-7	-1	-7	25	4	25
4	-4	-6	79	17	52	20	-4	-6	0	14	1	-1	-5	-6	48	25	48	-13	1	-7	0	7	1	-5	-1	-7	33	31	32
4	-4	-6	0	17	1	22	-4	-6	78	54	77	-1	-5	-6	0	25	1	-11	1	-7	0	7	1	-3	-1	-7	0	3	1
6	-4	-6	70	55	28	22	-4	-6	31	54	30	1	-5	-6	0	16	1	-9	1	-7	50	51	49	-10	-2	-7	37	4	37
6	-4	-6	114	55	15	24	-4	-6	33	5	32	1	-5	-6	0	16	1	-7	1	-7	0	4	1	0	-2	-7	0	12	1
8	-4	-6	49	64	49	26	-4	-6	69	54	32	3	-5	-6	0	6	1	-5	1	-7	0	30	1	0	-2	-7	71	12	71
8	-4	-6	105	64	35	28	-4	-6	0	8	1	5	-5	-6	55	5	54	-15	-1	7	81	2	18	2	-2	-7	54	18	42
10	-4	-6	62	53	32	30	-4	-6	0	15	1	7	-5	-6	0	10	1	-17	-1	7	87	49	11	2	-2	-7	0	18	1
10	-4	-6	79	53	57	-11	-5	-6	63	86	36	9	-5	-6	0	24	1	-19	-1	7	50	12	39	4	-2	-7	91	69	20
12	-4	-6	29	50	29	-11	-5	-6	89	86	27	11	-5	-6	0	27	1	-21	-1	7	0	9	1	6	-2	-7	0	23	1
12	-4	-6	46	50	46	-9	-5	-6	36	2	35	13	-5	-6	13	12	13	-17	-1	-7	0	12	1	8	-2	-7	0	23	1
14	-4	-6	72	58	72	-9	-5	-6	0	2	1	-10	2	-7	0	3	1	-15	-1	-7	0	56	1	10	-2	-7	0	15	1
14	-4	-6	74	58	25	-7	-5	-6	37	52	37	-8	2	-7	9	41	9	-13	-1	-7	41	7	40	12	-2	-7	0	10	1
16	-4	-6	69	14	69	-7	-5	-6	41	52	40	-6	2	-7	39	8	39	-11	-1	-7	7	7	6						
16	-4	-6	0	14	1	-5	-5	-6	0	7	1	-4	2	-7	0	48	1	-11	-1	-7	16	7	16						
18	-4	-6	0	38	1	-5	-5	-6	0	7	1	-14	-2	7	41	18	41	-9	-1	-7	0	53	1						

E