

Table 4a. Observed and calculated structure factors for G17

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1274	1296	10	3	7	0	141	139	1	10	1	1	327	328	1	5	8	1	97	105	1	13	2	2	227	225	1
4	0	0	1216	1231	5	4	7	0	29	30	1	11	1	1	137	137	1	6	8	1	21	19	1	1	3	2	768	712	1
6	0	0	301	294	1	5	7	0	55	52	1	12	1	1	164	168	1	7	8	1	272	275	1	2	3	2	255	251	1
8	0	0	589	590	2	6	7	0	123	124	1	13	1	1	107	103	1	8	8	1	112	114	1	3	3	2	95	101	1
10	0	0	577	576	2	7	7	0	320	322	1	0	2	1	276	271	1	9	8	1	105	106	1	4	3	2	9	23	2
12	0	0	455	461	3	8	7	0	203	204	1	1	2	1	559	549	1	10	8	1	211	210	1	5	3	2	311	310	1
1	1	0	74	77	2	9	7	0	283	285	1	2	2	1	340	335	1	11	8	1	79	78	1	6	3	2	475	477	1
2	1	0	0	1	1	10	7	0	38	40	1	3	2	1	563	580	1	1	9	1	202	206	1	7	3	2	628	634	1
3	1	0	253	251	1	11	7	0	298	298	1	4	2	1	364	357	1	2	9	1	330	324	1	8	3	2	135	141	1
4	1	0	83	97	1	12	7	0	216	214	1	5	2	1	232	236	1	3	9	1	231	238	1	9	3	2	15	7	2
5	1	0	845	819	2	0	8	0	981	966	4	6	2	1	152	155	1	4	9	1	32	29	1	10	3	2	87	89	1
6	1	0	428	421	1	1	8	0	11	9	2	7	2	1	85	91	1	5	9	1	73	72	1	11	3	2	213	210	1
7	1	0	457	450	1	2	8	0	718	724	2	8	2	1	67	72	1	6	9	1	193	192	1	12	3	2	456	449	1
8	1	0	261	250	1	3	8	0	58	53	1	9	2	1	317	319	1	7	9	1	145	147	1	13	3	2	272	264	1
9	1	0	246	260	1	4	8	0	97	99	1	10	2	1	155	155	1	8	9	1	484	479	1	0	4	2	7	15	7
10	1	0	11	3	4	5	8	0	57	60	1	11	2	1	245	242	1	9	9	1	261	259	1	1	4	2	235	240	1
11	1	0	113	111	1	6	8	0	419	425	2	12	2	1	64	66	1	10	9	1	94	96	1	2	4	2	540	535	1
12	1	0	169	163	2	7	8	0	159	158	1	13	2	1	71	71	1	0	10	1	191	193	1	3	4	2	0	4	1
13	1	0	56	56	2	8	8	0	73	73	3	1	3	1	308	304	1	1	10	1	298	294	1	4	4	2	833	834	2
0	2	0	1208	1241	18	9	8	0	44	46	1	2	3	1	190	201	1	2	10	1	102	101	1	5	4	2	233	231	1
1	2	0	353	344	1	10	8	0	192	190	1	3	3	1	119	113	1	3	10	1	152	148	1	6	4	2	1218	1219	2
2	2	0	375	363	1	11	8	0	119	123	1	4	3	1	23	20	1	4	10	1	133	133	1	7	4	2	76	78	1

3	2	0	311	309	1	1	9	0	55	38	1	5	3	1	220	220	1	5	10	1	112	114	1	8	4	2	194	195	1
4	2	0	418	467	1	2	9	0	121	123	1	6	3	1	29	33	1	6	10	1	29	31	1	9	4	2	20	20	1
5	2	0	367	362	1	3	9	0	328	336	1	7	3	1	467	468	1	7	10	1	127	127	1	10	4	2	319	318	1
6	2	0	998	1014	3	4	9	0	306	309	3	8	3	1	405	411	1	8	10	1	224	223	1	11	4	2	84	85	1
7	2	0	62	62	1	5	9	0	518	519	3	9	3	1	58	56	1	9	10	1	11	0	9	12	4	2	213	216	1
8	2	0	773	773	2	6	9	0	147	150	1	10	3	1	75	77	1	1	11	1	243	243	1	1	5	2	782	768	2
9	2	0	98	94	1	7	9	0	535	531	2	11	3	1	424	424	1	2	11	1	293	290	1	2	5	2	106	105	1
10	2	0	341	333	1	8	9	0	83	84	1	12	3	1	180	184	1	3	11	1	11	13	3	3	5	2	446	434	1
11	2	0	57	59	1	9	9	0	258	257	2	13	3	1	176	173	1	4	11	1	424	423	1	4	5	2	270	274	1
12	2	0	80	82	2	10	9	0	208	204	1	0	4	1	191	202	1	5	11	1	335	335	1	5	5	2	232	235	1
13	2	0	138	138	1	0	10	0	628	614	3	1	4	1	167	174	1	6	11	1	85	90	1	6	5	2	64	67	1
1	3	0	487	473	1	1	10	0	77	81	1	2	4	1	126	138	1	7	11	1	31	29	2	7	5	2	334	338	1
2	3	0	316	307	1	2	10	0	423	408	1	3	4	1	248	261	1	8	11	1	44	45	2	8	5	2	250	250	1
3	3	0	33	47	2	3	10	0	152	152	2	4	4	1	89	90	1	9	11	1	117	116	4	9	5	2	35	38	1
4	3	0	0	2	1	4	10	0	210	212	1	5	4	1	185	191	1	0	12	1	247	244	1	10	5	2	292	290	1
5	3	0	815	785	2	5	10	0	66	67	2	6	4	1	240	239	1	1	12	1	348	349	1	11	5	2	38	41	1
6	3	0	534	529	1	6	10	0	534	538	3	7	4	1	310	317	1	2	12	1	96	98	1	12	5	2	66	61	1
7	3	0	297	297	1	7	10	0	74	73	2	8	4	1	9	4	3	3	12	1	160	161	1	0	6	2	1439	1445	5
8	3	0	137	145	1	8	10	0	335	338	2	9	4	1	384	385	1	4	12	1	77	73	1	1	6	2	268	269	1
9	3	0	90	87	1	9	10	0	83	82	2	10	4	1	45	44	1	5	12	1	70	73	1	2	6	2	967	960	2
10	3	0	113	115	1	10	10	0	316	315	2	11	4	1	183	185	1	6	12	1	109	107	1	3	6	2	519	518	1
11	3	0	275	284	1	1	11	0	185	183	1	12	4	1	31	30	1	7	12	1	198	199	1	4	6	2	913	917	2
12	3	0	479	471	2	2	11	0	209	209	1	13	4	1	138	137	1	1	13	1	65	65	1	5	6	2	340	345	1
13	3	0	330	328	1	3	11	0	104	106	2	1	5	1	174	156	1	2	13	1	201	200	1	6	6	2	549	551	1
0	4	0	1962	2013	22	4	11	0	317	318	2	2	5	1	603	586	1	3	13	1	15	15	4	7	6	2	105	104	1
1	4	0	174	188	1	5	11	0	258	257	2	3	5	1	181	187	1	4	13	1	190	191	1	8	6	2	29	26	1
2	4	0	83	25	1	6	11	0	108	107	2	4	5	1	349	347	1	5	13	1	37	38	2	9	6	2	142	141	1

3	4	0	68	74	1	7	11	0	301	297	2	5	5	1	145	145	1	6	13	1	264	262	2	10	6	2	402	403	1
4	4	0	37	16	1	8	11	0	6	9	6	6	5	1	372	371	1	0	14	1	15	20	5	11	6	2	59	60	1
5	4	0	138	140	1	9	11	0	399	395	3	7	5	1	55	60	1	1	14	1	64	65	1	12	6	2	480	479	1
6	4	0	29	29	1	0	12	0	504	499	3	8	5	1	129	129	1	2	14	1	317	314	1	1	7	2	231	238	1
7	4	0	219	218	1	1	12	0	190	186	1	9	5	1	469	465	1	3	14	1	46	44	1	2	7	2	260	263	1
8	4	0	271	278	1	2	12	0	550	545	4	10	5	1	28	31	1	0	0	2	857	847	3	3	7	2	424	428	1
9	4	0	96	97	1	3	12	0	86	86	1	11	5	1	61	59	1	2	0	2	748	746	2	4	7	2	85	86	1
10	4	0	468	462	1	4	12	0	307	307	4	12	5	1	20	13	2	4	0	2	849	835	2	5	7	2	224	223	1
11	4	0	21	25	3	5	12	0	124	125	2	0	6	1	269	260	1	6	0	2	1821	1851	6	6	7	2	217	220	1
12	4	0	462	456	2	6	12	0	535	545	3	1	6	1	572	553	1	8	0	2	437	439	1	7	7	2	164	168	1
13	4	0	15	11	6	7	12	0	33	34	4	2	6	1	362	360	1	10	0	2	643	641	2	8	7	2	84	88	1
1	5	0	1116	1080	4	1	13	0	334	331	2	3	6	1	284	289	1	12	0	2	529	532	2	9	7	2	18	17	2
2	5	0	172	160	1	2	13	0	125	127	1	4	6	1	671	668	1	1	1	2	18	11	1	10	7	2	123	126	1
3	5	0	527	504	2	3	13	0	179	183	2	5	6	1	438	438	1	2	1	2	96	89	1	11	7	2	122	129	1
4	5	0	174	180	1	4	13	0	60	59	2	6	6	1	16	16	1	3	1	2	920	869	2	0	8	2	219	217	1
5	5	0	351	346	1	5	13	0	146	150	2	7	6	1	19	12	1	4	1	2	8	14	3	1	8	2	9	6	2
6	5	0	25	18	1	6	13	0	65	68	3	8	6	1	12	9	2	5	1	2	506	503	1	2	8	2	201	210	1
7	5	0	92	94	1	0	14	0	386	386	5	9	6	1	71	72	1	6	1	2	243	243	1	3	8	2	98	101	1
8	5	0	172	170	1	1	14	0	134	135	1	10	6	1	171	170	1	7	1	2	158	164	1	4	8	2	513	516	1
9	5	0	348	353	1	2	14	0	19	15	4	11	6	1	183	185	1	8	1	2	108	107	1	5	8	2	119	125	1
10	5	0	416	416	1	3	14	0	270	271	2	12	6	1	49	49	1	9	1	2	143	145	1	6	8	2	481	481	1
11	5	0	159	162	1	4	14	0	104	109	6	1	7	1	266	266	1	10	1	2	116	116	1	7	8	2	198	201	1
12	5	0	151	150	1	1	0	1	991	985	2	2	7	1	351	349	1	11	1	2	271	268	1	8	8	2	248	249	1
0	6	0	982	943	4	3	0	1	665	667	2	3	7	1	98	98	1	12	1	2	265	261	1	9	8	2	123	124	1
1	6	0	290	282	1	5	0	1	1069	1058	3	4	7	1	430	428	1	13	1	2	258	253	1	10	8	2	375	371	1
2	6	0	432	430	1	7	0	1	106	114	1	5	7	1	13	10	2	0	2	2	846	863	2	11	8	2	37	42	3
3	6	0	572	566	2	9	0	1	135	141	1	6	7	1	88	85	1	1	2	2	251	247	1	1	9	2	552	544	1

4	6	0	568	566	2	11	0	1	47	44	2	7	7	1	210	212	1	2	2	2	696	733	1	2	9	2	107	109	1
5	6	0	406	405	2	13	0	1	141	136	1	8	7	1	136	141	1	3	2	2	366	358	1	3	9	2	269	270	1
6	6	0	1163	1171	3	1	1	1	168	175	1	9	7	1	89	91	1	4	2	2	327	326	1	4	9	2	317	321	1
7	6	0	121	116	1	2	1	1	65	62	1	10	7	1	114	116	1	5	2	2	194	198	1	5	9	2	43	44	1
8	6	0	858	859	3	3	1	1	271	269	1	11	7	1	140	143	1	6	2	2	359	352	1	6	9	2	147	151	1
9	6	0	180	179	1	4	1	1	131	113	1	12	7	1	29	31	5	7	2	2	58	56	1	7	9	2	274	272	1
10	6	0	633	629	2	5	1	1	337	322	1	0	8	1	88	90	1	8	2	2	307	313	1	8	9	2	92	95	1
11	6	0	48	46	1	6	1	1	354	355	1	1	8	1	319	313	1	9	2	2	25	28	1	9	9	2	298	297	1
12	6	0	378	377	2	7	1	1	63	69	1	2	8	1	92	91	1	10	2	2	444	441	1	10	9	2	158	158	1
1	7	0	275	275	1	8	1	1	19	20	1	3	8	1	541	550	2	11	2	2	157	160	1	0	10	2	495	488	2
2	7	0	220	221	1	9	1	1	222	214	1	4	8	1	11	1	2	12	2	2	578	575	1	1	10	2	38	40	1
2	10	2	188	185	1	12	4	3	73	74	1	3	1	4	11	2	1	4	9	4	239	240	1	2	7	5	135	136	1
3	10	2	96	98	1	1	5	3	27	25	1	4	1	4	93	96	1	5	9	4	312	313	1	3	7	5	128	129	1
4	10	2	461	462	1	2	5	3	249	253	1	5	1	4	403	415	1	6	9	4	117	120	1	4	7	5	376	375	1
5	10	2	117	118	1	3	5	3	263	266	1	6	1	4	266	269	1	7	9	4	404	401	1	5	7	5	66	67	1
6	10	2	342	342	1	4	5	3	495	503	1	7	1	4	287	287	1	8	9	4	67	68	1	6	7	5	101	107	1
7	10	2	166	164	1	5	5	3	44	43	1	8	1	4	177	178	1	0	10	4	386	390	2	7	7	5	209	207	1
8	10	2	50	49	1	6	5	3	179	186	1	9	1	4	109	108	1	1	10	4	53	56	1	8	7	5	124	123	1
9	10	2	5	2	5	7	5	3	20	18	1	10	1	4	16	15	3	2	10	4	368	366	1	0	8	5	10	10	7
1	11	2	305	299	1	8	5	3	181	179	1	11	1	4	144	148	1	3	10	4	103	103	1	1	8	5	286	287	1
2	11	2	192	192	1	9	5	3	361	357	1	0	2	4	492	492	1	4	10	4	183	186	1	2	8	5	30	31	1
3	11	2	355	355	1	10	5	3	80	82	1	1	2	4	183	185	1	5	10	4	56	56	1	3	8	5	394	391	1
4	11	2	245	244	1	11	5	3	97	101	1	2	2	4	41	38	1	6	10	4	373	374	1	4	8	5	58	56	1
5	11	2	226	227	1	0	6	3	184	190	1	3	2	4	205	203	1	7	10	4	61	61	1	5	8	5	108	108	1
6	11	2	139	139	1	1	6	3	242	236	1	4	2	4	524	520	1	1	11	4	129	129	1	6	8	5	35	39	1
7	11	2	88	91	1	2	6	3	305	303	1	5	2	4	221	226	1	2	11	4	166	165	1	7	8	5	106	107	1
8	11	2	45	42	2	3	6	3	303	310	1	6	2	4	656	650	1	3	11	4	16	6	3	1	9	5	127	127	1

0	12	2	712	706	3	4	6	3	527	528	1	7	2	4	33	34	1	4	11	4	247	245	1	2	9	5	276	277	1
1	12	2	161	161	1	5	6	3	509	508	1	8	2	4	714	709	1	5	11	4	236	236	1	3	9	5	153	150	1
2	12	2	283	283	1	6	6	3	37	39	1	9	2	4	61	63	1	0	12	4	328	329	2	4	9	5	103	106	1
3	12	2	65	64	1	7	6	3	155	156	1	10	2	4	244	246	1	1	12	4	146	146	1	5	9	5	62	64	1
4	12	2	555	555	2	8	6	3	18	16	1	11	2	4	51	53	1	2	12	4	451	447	2	6	9	5	159	159	1
5	12	2	147	143	1	9	6	3	62	60	1	1	3	4	172	176	1	3	12	4	60	62	1	0	10	5	179	179	1
6	12	2	450	453	2	10	6	3	159	159	1	2	3	4	172	173	1	1	0	5	361	357	1	1	10	5	283	286	1
7	12	2	28	29	3	11	6	3	136	135	1	3	3	4	49	48	1	3	0	5	384	391	1	2	10	5	124	125	1
1	13	2	348	342	1	1	7	3	335	339	1	4	3	4	10	9	2	5	0	5	669	663	2	3	10	5	121	122	1
2	13	2	82	82	1	2	7	3	452	452	1	5	3	4	304	317	1	7	0	5	153	152	1	4	10	5	24	28	2
3	13	2	57	63	1	3	7	3	34	36	1	6	3	4	376	381	1	9	0	5	28	19	2	1	11	5	217	213	1
4	13	2	28	30	2	4	7	3	189	192	1	7	3	4	233	236	1	1	1	5	163	166	1	0	0	6	554	547	2
5	13	2	36	39	2	5	7	3	75	78	1	8	3	4	108	110	1	2	1	5	78	80	1	2	0	6	447	443	1
0	14	2	191	190	2	6	7	3	11	15	3	9	3	4	95	98	1	3	1	5	233	237	1	4	0	6	398	398	1
1	14	2	112	118	1	7	7	3	112	114	1	10	3	4	78	80	1	4	1	5	109	114	1	6	0	6	880	868	3
2	14	2	277	275	2	8	7	3	62	63	1	11	3	4	147	145	1	5	1	5	201	205	1	8	0	6	347	347	1
1	0	3	1045	1033	2	9	7	3	144	146	1	0	4	4	1168	1166	3	6	1	5	152	146	1	1	1	6	38	41	1
3	0	3	381	383	1	10	7	3	205	207	1	1	4	4	185	184	1	7	1	5	9	6	5	2	1	6	20	21	1
5	0	3	641	646	2	0	8	3	143	150	1	2	4	4	265	269	1	8	1	5	73	68	1	3	1	6	138	137	1
7	0	3	77	86	1	1	8	3	90	91	1	3	4	4	81	85	1	9	1	5	104	106	1	4	1	6	48	52	1
9	0	3	279	278	1	2	8	3	154	159	1	4	4	4	130	131	1	10	1	5	304	297	1	5	1	6	345	347	1
11	0	3	75	77	1	3	8	3	443	439	1	5	4	4	112	111	1	0	2	5	216	216	1	6	1	6	135	139	1
1	1	3	74	70	1	4	8	3	59	62	1	6	4	4	47	47	1	1	2	5	328	330	1	7	1	6	124	128	1
2	1	3	326	315	1	5	8	3	14	9	3	7	4	4	158	161	1	2	2	5	92	92	1	8	1	6	66	71	1
3	1	3	51	58	1	6	8	3	80	80	1	8	4	4	302	302	1	3	2	5	388	385	1	0	2	6	364	360	1
4	1	3	241	241	1	7	8	3	398	397	1	9	4	4	63	64	1	4	2	5	267	267	1	1	2	6	115	118	1
5	1	3	106	107	1	8	8	3	59	59	1	10	4	4	342	337	1	5	2	5	94	97	1	2	2	6	658	650	1

6	1	3	420	422	1	9	8	3	166	166	1	11	4	4	16	16	4	6	2	5	26	30	1	3	2	6	160	164	1
7	1	3	152	156	1	10	8	3	142	145	1	1	5	4	655	666	1	7	2	5	63	63	1	4	2	6	205	206	1
8	1	3	48	49	1	1	9	3	205	204	1	2	5	4	80	82	1	8	2	5	6	4	6	5	2	6	112	116	1
9	1	3	267	267	1	2	9	3	168	166	1	3	5	4	146	162	1	9	2	5	257	260	1	6	2	6	126	127	1
10	1	3	156	158	1	3	9	3	209	213	1	4	5	4	174	175	1	10	2	5	63	64	1	7	2	6	23	25	2
11	1	3	174	171	1	4	9	3	140	142	1	5	5	4	176	180	1	1	3	5	165	167	1	8	2	6	73	69	1
12	1	3	26	26	2	5	9	3	39	42	1	6	5	4	14	9	2	2	3	5	43	44	1	1	3	6	115	115	1
0	2	3	19	25	1	6	9	3	116	119	1	7	5	4	99	97	1	3	3	5	39	36	1	2	3	6	130	128	1
1	2	3	14	19	1	7	9	3	118	119	1	8	5	4	135	135	1	4	3	5	148	159	1	3	3	6	136	138	1
2	2	3	406	395	1	8	9	3	449	444	1	9	5	4	203	200	1	5	3	5	129	134	1	4	3	6	15	15	2
3	2	3	587	593	1	9	9	3	225	225	1	10	5	4	333	326	1	6	3	5	7	4	7	5	3	6	8	1	8
4	2	3	152	155	1	0	10	3	79	82	1	0	6	4	420	425	1	7	3	5	307	306	1	6	3	6	275	272	1
5	2	3	325	327	1	1	10	3	131	129	1	1	6	4	196	199	1	8	3	5	278	273	1	7	3	6	332	332	1
6	2	3	224	225	1	2	10	3	11	9	4	2	6	4	354	352	1	9	3	5	41	43	1	8	3	6	90	88	1
7	2	3	290	294	1	3	10	3	101	98	1	3	6	4	376	374	1	10	3	5	153	150	1	0	4	6	131	130	1
8	2	3	128	132	1	4	10	3	189	193	1	4	6	4	426	425	1	0	4	5	93	90	1	1	4	6	152	152	1
9	2	3	171	174	1	5	10	3	174	174	1	5	6	4	286	290	1	1	4	5	14	9	1	2	4	6	402	401	1
10	2	3	194	193	1	6	10	3	30	34	2	6	6	4	769	762	1	2	4	5	210	214	1	3	4	6	46	48	1
11	2	3	225	224	1	7	10	3	237	240	1	7	6	4	82	85	1	3	4	5	239	241	1	4	4	6	488	489	1
12	2	3	102	104	1	8	10	3	135	135	1	8	6	4	730	720	2	4	4	5	9	0	4	5	4	6	121	122	1
1	3	3	198	200	1	1	11	3	161	158	1	9	6	4	129	133	1	5	4	5	192	192	1	6	4	6	632	624	1
2	3	3	404	402	1	2	11	3	357	357	1	10	6	4	469	461	1	6	4	5	213	214	1	7	4	6	55	58	1
3	3	3	79	78	1	3	11	3	27	31	2	1	7	4	178	177	1	7	4	5	284	284	1	1	5	6	339	337	1
4	3	3	266	259	1	4	11	3	263	263	1	2	7	4	172	174	1	8	4	5	42	46	1	2	5	6	32	34	1
5	3	3	169	171	1	5	11	3	351	348	1	3	7	4	25	25	1	9	4	5	223	219	1	3	5	6	47	46	1
6	3	3	112	121	1	6	11	3	9	12	9	4	7	4	35	36	1	1	5	5	104	108	1	4	5	6	174	173	1
7	3	3	404	407	1	7	11	3	65	66	1	5	7	4	125	122	1	2	5	5	413	413	1	5	5	6	208	213	1

8	3	3	315	314	1	0	12	3	248	246	2	6	7	4	107	110	1	3	5	5	73	75	1	6	5	6	30	34	2
9	3	3	55	56	1	1	12	3	200	205	1	7	7	4	223	226	1	4	5	5	116	117	1	7	5	6	170	166	1
10	3	3	93	98	1	2	12	3	70	71	1	8	7	4	156	155	1	5	5	5	170	172	1	0	6	6	620	614	2
11	3	3	383	379	1	3	12	3	107	108	1	9	7	4	180	179	1	6	5	5	274	279	1	1	6	6	146	145	1
12	3	3	83	85	1	4	12	3	76	79	1	0	8	4	641	634	2	7	5	5	90	92	1	2	6	6	598	589	1
0	4	3	360	351	1	5	12	3	134	136	1	1	8	4	16	12	2	8	5	5	38	39	1	3	6	6	265	262	1
1	4	3	436	437	1	1	13	3	8	10	7	2	8	4	635	631	1	9	5	5	373	365	1	4	6	6	496	490	1
2	4	3	5	4	4	2	13	3	98	97	2	3	8	4	57	59	1	0	6	5	177	181	1	5	6	6	204	204	1
3	4	3	191	188	1	3	13	3	85	86	1	4	8	4	128	127	1	1	6	5	431	428	1	6	6	6	202	202	1
4	4	3	209	210	1	0	0	4	2420	2474	9	5	8	4	52	50	1	2	6	5	201	199	1	1	7	6	179	177	1
5	4	3	54	57	1	2	0	4	785	794	2	6	8	4	265	268	1	3	6	5	139	140	1	2	7	6	155	153	1
6	4	3	110	109	1	4	0	4	760	763	2	7	8	4	120	123	1	4	6	5	403	403	1	3	7	6	118	117	1
7	4	3	52	51	1	6	0	4	37	29	2	8	8	4	128	132	1	5	6	5	228	229	1	4	7	6	59	59	1
8	4	3	91	93	1	8	0	4	493	491	1	9	8	4	34	38	2	6	6	5	12	9	3	5	7	6	56	56	1
9	4	3	439	434	1	10	0	4	388	388	1	1	9	4	106	106	1	7	6	5	59	59	1	0	8	6	31	36	2
10	4	3	93	98	1	1	1	4	79	83	1	2	9	4	96	97	1	8	6	5	12	7	5	1	8	6	7	6	7
11	4	3	162	162	1	2	1	4	21	18	1	3	9	4	294	293	1	1	7	5	107	108	1	2	8	6	14	10	3
3	8	6	75	75	1	2	1	7	143	142	1	3	2	7	308	310	1	5	3	7	67	69	2	2	5	7	104	108	1
4	8	6	348	348	1	3	1	7	11	3	4	4	2	7	31	38	1	0	4	7	218	219	1	3	5	7	176	174	1
1	9	6	248	246	1	4	1	7	139	137	1	5	2	7	184	178	1	1	4	7	212	211	1	0	6	7	95	97	1
1	0	7	454	447	1	5	1	7	10	11	9	1	3	7	110	109	1	2	4	7	18	14	2	1	6	7	121	120	1
3	0	7	193	191	1	0	2	7	11	13	7	2	3	7	197	193	1	3	4	7	126	125	1						
5	0	7	297	296	2	1	2	7	9	5	6	3	3	7	28	29	1	4	4	7	164	159	1						
1	1	7	39	44	1	2	2	7	209	209	1	4	3	7	140	138	1	1	5	7	71	70	1						

Table 4b. Observed and calculated structure factors for G8

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

2	0	0	1272	1317	10	2	7	0	213	212	1	10	1	1	326	331	1	6	8	1	47	46	1	13	2	2	237	235	1
4	0	0	1186	1193	5	3	7	0	149	148	1	11	1	1	162	161	1	7	8	1	270	273	1	1	3	2	748	690	1
6	0	0	265	260	1	4	7	0	26	27	1	12	1	1	170	175	1	8	8	1	121	124	1	2	3	2	224	217	1
8	0	0	593	593	3	5	7	0	83	81	1	13	1	1	104	102	1	9	8	1	107	107	1	3	3	2	106	110	1
10	0	0	599	602	4	6	7	0	127	126	1	0	2	1	260	252	1	10	8	1	226	228	1	4	3	2	37	43	1
12	0	0	475	471	3	7	7	0	325	329	1	1	2	1	584	576	1	11	8	1	79	80	1	5	3	2	326	326	1
1	1	0	83	87	1	8	7	0	200	200	1	2	2	1	349	342	1	1	9	1	210	215	1	6	3	2	497	496	1
2	1	0	48	46	1	9	7	0	258	266	1	3	2	1	609	624	1	2	9	1	359	351	1	7	3	2	631	641	1
3	1	0	248	249	1	10	7	0	35	38	2	4	2	1	380	369	1	3	9	1	230	237	1	8	3	2	114	118	1
4	1	0	53	68	1	11	7	0	312	316	2	5	2	1	229	234	1	4	9	1	12	10	1	9	3	2	25	20	1
5	1	0	850	826	3	12	7	0	225	220	2	6	2	1	138	142	1	5	9	1	79	79	1	10	3	2	91	92	1
6	1	0	459	449	1	0	8	0	967	960	4	7	2	1	108	114	1	6	9	1	177	180	1	11	3	2	203	201	1
7	1	0	446	443	1	1	8	0	19	13	1	8	2	1	69	74	1	7	9	1	143	143	1	12	3	2	473	466	1
8	1	0	293	285	1	2	8	0	717	724	2	9	2	1	333	337	1	8	9	1	500	497	1	13	3	2	275	262	2
9	1	0	245	262	1	3	8	0	32	26	1	10	2	1	164	164	1	9	9	1	258	256	1	0	4	2	45	47	1
10	1	0	9	8	8	4	8	0	97	99	1	11	2	1	231	229	1	10	9	1	93	97	1	1	4	2	258	259	1
11	1	0	122	119	1	5	8	0	56	58	1	12	2	1	69	71	1	0	10	1	213	216	1	2	4	2	532	523	1
12	1	0	187	182	1	6	8	0	419	425	1	13	2	1	86	84	1	1	10	1	287	285	1	3	4	2	27	24	1
13	1	0	63	61	2	7	8	0	186	186	1	1	3	1	275	271	1	2	10	1	108	109	1	4	4	2	854	852	1
0	2	0	1235	1189	12	8	8	0	69	72	1	2	3	1	219	227	1	3	10	1	159	155	1	5	4	2	236	236	1
1	2	0	337	332	1	9	8	0	59	58	1	3	3	1	107	100	1	4	10	1	146	147	1	6	4	2	1233	1237	3
2	2	0	389	378	1	10	8	0	192	190	1	4	3	1	29	32	1	5	10	1	116	118	1	7	4	2	97	98	1
3	2	0	328	326	1	11	8	0	129	129	2	5	3	1	260	257	1	6	10	1	11	10	3	8	4	2	196	197	1
4	2	0	462	503	1	1	9	0	80	65	1	6	3	1	15	23	1	7	10	1	116	116	1	9	4	2	14	15	2
5	2	0	368	362	1	2	9	0	129	130	1	7	3	1	458	460	1	8	10	1	224	224	1	10	4	2	300	302	1

6	2	0	1029	1038	5	3	9	0	337	341	1	8	3	1	420	427	1	9	10	1	15	9	5	11	4	2	93	93	1
7	2	0	78	76	1	4	9	0	308	313	1	9	3	1	76	74	1	1	11	1	248	252	1	12	4	2	212	211	1
8	2	0	771	772	3	5	9	0	533	541	2	10	3	1	75	78	1	2	11	1	304	305	1	1	5	2	818	793	1
9	2	0	105	103	1	6	9	0	143	148	1	11	3	1	445	443	1	3	11	1	10	11	3	2	5	2	126	124	1
10	2	0	317	308	1	7	9	0	539	538	3	12	3	1	175	175	1	4	11	1	435	432	1	3	5	2	452	441	1
11	2	0	62	62	1	8	9	0	81	84	1	13	3	1	178	176	1	5	11	1	343	341	1	4	5	2	258	261	1
12	2	0	79	80	1	9	9	0	274	270	1	0	4	1	237	242	1	6	11	1	94	98	1	5	5	2	256	261	1
13	2	0	148	147	2	10	9	0	197	200	2	1	4	1	187	193	1	7	11	1	38	37	1	6	5	2	72	76	1
1	3	0	511	497	1	11	9	0	229	233	5	2	4	1	119	126	1	8	11	1	62	60	1	7	5	2	342	345	1
2	3	0	276	267	1	0	10	0	620	612	3	3	4	1	281	291	1	9	11	1	113	107	5	8	5	2	267	267	1
3	3	0	42	58	1	1	10	0	91	97	1	4	4	1	70	69	1	0	12	1	225	221	1	9	5	2	21	21	1
4	3	0	12	24	2	2	10	0	416	409	2	5	4	1	190	195	1	1	12	1	349	350	1	10	5	2	289	288	1
5	3	0	793	762	2	3	10	0	176	175	1	6	4	1	263	261	1	2	12	1	101	101	1	11	5	2	23	22	2
6	3	0	553	548	2	4	10	0	199	195	1	7	4	1	325	334	1	3	12	1	143	144	1	12	5	2	73	71	1
7	3	0	302	304	1	5	10	0	59	60	1	8	4	1	21	15	1	4	12	1	88	85	1	0	6	2	1464	1453	4
8	3	0	114	119	1	6	10	0	527	529	3	9	4	1	397	400	1	5	12	1	68	69	1	1	6	2	250	250	1
9	3	0	105	99	1	7	10	0	90	91	1	10	4	1	59	58	1	6	12	1	95	94	1	2	6	2	969	963	2
10	3	0	116	118	1	8	10	0	335	337	2	11	4	1	176	177	1	7	12	1	210	209	2	3	6	2	551	545	1
11	3	0	280	290	1	9	10	0	67	70	1	12	4	1	42	39	1	1	13	1	78	79	1	4	6	2	904	905	2
12	3	0	495	489	3	10	10	0	325	325	3	13	4	1	129	126	1	2	13	1	208	209	2	5	6	2	338	343	1
13	3	0	330	327	2	1	11	0	200	200	1	1	5	1	193	176	1	3	13	1	22	22	3	6	6	2	535	539	1
0	4	0	2079	2044	28	2	11	0	217	220	1	2	5	1	634	618	1	4	13	1	202	195	1	7	6	2	132	131	1
1	4	0	197	207	1	3	11	0	103	105	1	3	5	1	184	189	1	5	13	1	55	58	2	8	6	2	31	28	1
2	4	0	65	11	1	4	11	0	323	325	2	4	5	1	365	364	1	6	13	1	260	251	2	9	6	2	153	157	1
3	4	0	40	45	1	5	11	0	274	273	2	5	5	1	127	127	1	0	14	1	10	23	10	10	6	2	403	407	1
4	4	0	55	38	1	6	11	0	110	112	1	6	5	1	353	355	1	1	14	1	51	52	6	11	6	2	69	66	1
5	4	0	141	141	1	7	11	0	301	298	2	7	5	1	46	51	1	2	14	1	312	308	3	12	6	2	484	481	3

6	4	0	19	8	2	8	11	0	0	3	1	8	5	1	151	153	1	3	14	1	24	23	5	1	7	2	256	264	1
7	4	0	245	245	1	9	11	0	378	381	3	9	5	1	479	477	1	4	14	1	28	29	14	2	7	2	257	257	1
8	4	0	272	280	1	0	12	0	475	478	3	10	5	1	32	34	1	0	0	2	900	897	3	3	7	2	413	415	1
9	4	0	106	106	1	1	12	0	175	174	1	11	5	1	46	47	1	2	0	2	732	731	2	4	7	2	83	85	1
10	4	0	478	479	2	2	12	0	538	538	3	12	5	1	3	4	2	4	0	2	872	866	3	5	7	2	251	248	1
11	4	0	18	21	3	3	12	0	98	100	1	0	6	1	238	228	1	6	0	2	1832	1881	8	6	7	2	224	225	1
12	4	0	463	463	2	4	12	0	315	315	2	1	6	1	573	558	1	8	0	2	436	436	1	7	7	2	173	178	1
13	4	0	36	26	6	5	12	0	126	123	1	2	6	1	373	369	1	10	0	2	612	614	3	8	7	2	80	81	1
1	5	0	1145	1105	3	6	12	0	555	551	4	3	6	1	299	303	1	12	0	2	524	522	2	9	7	2	14	1	3
2	5	0	195	183	1	7	12	0	15	19	15	4	6	1	702	690	1	1	1	2	14	3	1	10	7	2	124	127	1
3	5	0	502	489	1	1	13	0	338	336	2	5	6	1	435	437	1	2	1	2	137	132	1	11	7	2	144	148	2
4	5	0	156	161	1	2	13	0	140	144	2	6	6	1	17	10	1	3	1	2	914	870	1	0	8	2	220	219	1
5	5	0	383	375	1	3	13	0	175	173	2	7	6	1	29	21	1	4	1	2	42	42	1	1	8	2	31	27	1
6	5	0	20	11	1	4	13	0	73	69	2	8	6	1	16	15	2	5	1	2	514	511	1	2	8	2	198	208	1
7	5	0	108	107	1	5	13	0	161	160	2	9	6	1	77	78	1	6	1	2	263	264	1	3	8	2	74	77	1
8	5	0	186	185	1	6	13	0	63	60	4	10	6	1	195	192	1	7	1	2	157	161	1	4	8	2	519	517	1
9	5	0	357	367	1	1	14	0	135	138	4	11	6	1	183	184	1	8	1	2	140	135	1	5	8	2	119	123	1
10	5	0	411	416	2	2	14	0	30	4	9	12	6	1	59	64	1	9	1	2	139	142	1	6	8	2	476	480	1
11	5	0	142	144	1	3	14	0	257	263	5	1	7	1	257	258	1	10	1	2	114	114	1	7	8	2	225	228	1
12	5	0	165	162	2	1	0	1	1009	1017	2	2	7	1	381	380	1	11	1	2	280	276	1	8	8	2	254	254	1
13	5	0	73	70	6	3	0	1	711	717	2	3	7	1	96	94	1	12	1	2	287	282	1	9	8	2	137	138	1
0	6	0	961	926	4	5	0	1	1073	1062	5	4	7	1	447	443	1	13	1	2	265	254	1	10	8	2	370	371	2
1	6	0	266	259	1	7	0	1	134	144	1	5	7	1	15	3	1	0	2	2	896	907	2	1	9	2	573	567	1
2	6	0	425	425	1	9	0	1	158	163	1	6	7	1	102	98	1	1	2	2	240	236	1	2	9	2	116	115	1
3	6	0	599	595	1	11	0	1	31	31	2	7	7	1	212	213	1	2	2	2	719	750	1	3	9	2	271	272	1
4	6	0	574	575	1	13	0	1	118	117	2	8	7	1	161	164	1	3	2	2	385	375	1	4	9	2	321	326	1
5	6	0	400	402	1	1	1	1	127	134	1	9	7	1	84	86	1	4	2	2	295	295	1	5	9	2	22	19	1

6	6	0	1162	1177	4	2	1	1	54	52	1	10	7	1	115	120	1	5	2	2	190	195	1	6	9	2	147	148	1
7	6	0	146	144	1	3	1	1	283	281	1	11	7	1	145	149	1	6	2	2	337	331	1	7	9	2	282	279	1
8	6	0	851	856	3	4	1	1	122	106	1	0	8	1	51	54	1	7	2	2	48	46	1	8	9	2	92	95	1
9	6	0	194	196	1	5	1	1	381	367	1	1	8	1	315	310	1	8	2	2	301	308	1	9	9	2	309	309	1
10	6	0	621	619	2	6	1	1	357	357	1	2	8	1	89	86	1	9	2	2	24	22	1	10	9	2	155	155	2
11	6	0	54	54	1	7	1	1	53	58	1	3	8	1	544	546	1	10	2	2	463	465	1	0	10	2	474	479	2
12	6	0	376	373	2	8	1	1	16	14	1	4	8	1	25	24	1	11	2	2	161	164	1	1	10	2	50	53	1
1	7	0	306	303	1	9	1	1	243	238	1	5	8	1	99	105	1	12	2	2	582	581	2	2	10	2	179	182	1
3	10	2	118	118	1	2	5	3	274	279	1	5	1	4	409	421	1	6	9	4	119	118	1	4	7	5	386	386	1
4	10	2	469	473	2	3	5	3	266	269	1	6	1	4	287	288	1	7	9	4	417	409	2	5	7	5	62	62	1
5	10	2	112	114	1	4	5	3	514	516	1	7	1	4	282	284	1	8	9	4	73	68	2	6	7	5	112	117	1
6	10	2	344	343	1	5	5	3	30	27	1	8	1	4	202	204	1	0	10	4	386	389	2	7	7	5	211	210	1
7	10	2	185	184	1	6	5	3	166	173	1	9	1	4	108	108	1	1	10	4	67	68	1	8	7	5	144	141	2
8	10	2	49	49	1	7	5	3	25	26	1	10	1	4	14	12	4	2	10	4	369	368	1	0	8	5	31	34	2
9	10	2	17	12	8	8	5	3	200	202	1	11	1	4	152	155	1	3	10	4	121	121	1	1	8	5	284	285	1
1	11	2	312	309	1	9	5	3	372	369	1	0	2	4	458	462	1	4	10	4	172	173	1	2	8	5	27	29	1
2	11	2	201	202	1	10	5	3	79	77	1	1	2	4	178	179	1	5	10	4	50	51	1	3	8	5	389	390	1
3	11	2	342	344	1	11	5	3	86	91	1	2	2	4	50	48	1	6	10	4	372	369	2	4	8	5	42	39	1
4	11	2	249	250	1	0	6	3	160	163	1	3	2	4	217	215	1	7	10	4	80	78	2	5	8	5	107	107	1
5	11	2	244	246	1	1	6	3	246	242	1	4	2	4	553	546	1	1	11	4	143	144	1	6	8	5	17	19	4
6	11	2	143	143	1	2	6	3	315	311	1	5	2	4	221	226	1	2	11	4	176	174	1	7	8	5	104	107	2
7	11	2	99	101	1	3	6	3	316	322	1	6	2	4	678	670	1	3	11	4	19	6	4	1	9	5	134	134	1
8	11	2	54	54	2	4	6	3	548	548	1	7	2	4	43	44	1	4	11	4	255	251	1	2	9	5	298	296	1
0	12	2	714	711	4	5	6	3	509	508	1	8	2	4	717	710	2	5	11	4	255	250	2	3	9	5	151	150	1
1	12	2	148	149	1	6	6	3	18	17	1	9	2	4	69	70	1	0	12	4	314	313	3	4	9	5	87	90	1
2	12	2	280	283	1	7	6	3	159	162	1	10	2	4	230	228	1	1	12	4	137	137	1	5	9	5	70	70	2
3	12	2	75	77	1	8	6	3	19	20	2	11	2	4	54	55	2	2	12	4	444	443	3	6	9	5	152	151	4

4 12 2 543 539 2 9 6 3 55 53 1 1 3 4 186 192 1 3 12 4 72 74 2 0 10 5 192 195 3
5 12 2 141 142 1 10 6 3 183 179 1 2 3 4 148 150 1 1 0 5 378 378 1 1 10 5 277 280 2
6 12 2 446 434 3 11 6 3 134 133 1 3 3 4 42 43 1 3 0 5 411 417 2 2 10 5 132 130 2
7 12 2 16 17 7 1 7 3 330 332 1 4 3 4 13 5 1 5 0 5 670 669 2 3 10 5 125 127 2
1 13 2 351 346 2 2 7 3 478 477 1 5 3 4 291 303 1 7 0 5 171 172 1 4 10 5 32 40 5
2 13 2 97 98 1 3 7 3 37 39 1 6 3 4 395 397 1 9 0 5 46 37 5 1 11 5 222 221 3
3 13 2 61 65 2 4 7 3 207 209 1 7 3 4 243 243 1 1 1 5 142 145 1 0 0 6 574 574 3
4 13 2 37 39 2 5 7 3 81 83 1 8 3 4 89 91 1 2 1 5 81 85 1 2 0 6 446 440 2
5 13 2 53 52 4 6 7 3 14 3 2 9 3 4 104 108 1 3 1 5 242 245 1 4 0 6 416 417 1
0 14 2 175 172 3 7 7 3 115 116 1 10 3 4 82 84 1 4 1 5 98 108 1 6 0 6 914 893 4
1 14 2 114 120 3 8 7 3 83 83 1 11 3 4 153 150 1 5 1 5 227 231 1 8 0 6 347 347 2
1 0 3 1069 1058 4 9 7 3 139 141 1 0 4 4 1191 1191 5 6 1 5 152 149 1 1 1 6 38 35 1
3 0 3 419 420 1 10 7 3 208 210 1 1 4 4 200 199 1 7 1 5 11 12 3 2 1 6 41 42 1
5 0 3 644 649 2 0 8 3 116 119 1 2 4 4 275 280 1 8 1 5 70 67 1 3 1 6 135 135 1
7 0 3 53 58 1 1 8 3 91 90 1 3 4 4 64 67 1 9 1 5 124 124 1 4 1 6 40 40 1
9 0 3 298 298 1 2 8 3 149 154 1 4 4 4 118 118 1 10 1 5 310 298 1 5 1 6 347 352 1
11 0 3 65 67 1 3 8 3 441 439 1 5 4 4 115 113 1 0 2 5 208 209 1 6 1 6 150 152 1
1 1 3 105 101 1 4 8 3 78 83 1 6 4 4 63 63 1 1 2 5 340 343 1 7 1 6 125 128 1
2 1 3 320 307 1 5 8 3 17 11 1 7 4 4 176 181 1 2 2 5 96 96 1 8 1 6 84 90 1
3 1 3 60 67 1 6 8 3 101 103 1 8 4 4 304 304 1 3 2 5 416 413 1 0 2 6 385 385 1
4 1 3 245 245 1 7 8 3 396 395 1 9 4 4 71 72 1 4 2 5 273 277 1 1 2 6 112 115 1
5 1 3 141 143 1 8 8 3 68 69 1 10 4 4 352 352 1 5 2 5 95 98 1 2 2 6 670 664 2
6 1 3 423 425 1 9 8 3 164 165 1 11 4 4 15 12 7 6 2 5 23 22 1 3 2 6 170 173 1
7 1 3 145 147 1 10 8 3 160 162 1 1 5 4 672 683 1 7 2 5 49 49 1 4 2 6 188 191 1
8 1 3 53 56 1 1 9 3 211 211 1 2 5 4 93 97 1 8 2 5 0 3 1 5 2 6 110 117 1
9 1 3 286 288 1 2 9 3 193 192 1 3 5 4 137 152 1 9 2 5 274 273 1 6 2 6 115 115 1
10 1 3 160 162 1 3 9 3 206 211 1 4 5 4 165 165 1 10 2 5 72 72 1 7 2 6 18 18 3

11 1 3 193 193 1 4 9 3 155 158 1 5 5 4 202 203 1 1 3 5 149 152 1 8 2 6 73 68 1
12 1 3 31 33 2 5 9 3 47 48 1 6 5 4 6 3 5 2 3 5 59 60 1 1 3 6 104 103 1
0 2 3 11 11 1 6 9 3 107 110 1 7 5 4 109 107 1 3 3 5 33 28 1 2 3 6 113 113 1
1 2 3 36 39 1 7 9 3 118 117 1 8 5 4 147 149 1 4 3 5 157 166 1 3 3 6 139 142 1
2 2 3 414 400 1 8 9 3 466 460 2 9 5 4 214 211 1 5 3 5 154 158 1 4 3 6 12 5 4
3 2 3 626 627 1 9 9 3 223 223 1 10 5 4 330 326 2 6 3 5 7 8 7 5 3 6 13 11 4
4 2 3 165 166 1 0 10 3 101 103 1 0 6 4 406 413 1 7 3 5 305 302 1 6 3 6 289 286 1
5 2 3 322 326 1 1 10 3 123 124 1 1 6 4 181 185 1 8 3 5 289 285 1 7 3 6 339 338 1
6 2 3 214 214 1 2 10 3 9 2 5 2 6 4 347 349 1 9 3 5 56 55 1 8 3 6 73 73 2
7 2 3 311 314 1 3 10 3 107 105 1 3 6 4 396 397 1 10 3 5 157 151 1 0 4 6 149 149 1
8 2 3 128 133 1 4 10 3 201 205 1 4 6 4 433 432 1 0 4 5 118 113 1 1 4 6 161 164 1
9 2 3 189 193 1 5 10 3 177 177 1 5 6 4 285 289 1 1 4 5 27 23 1 2 4 6 396 395 1
10 2 3 200 201 1 6 10 3 50 52 1 6 6 4 779 770 2 2 4 5 207 210 1 3 4 6 32 35 1
11 2 3 215 213 1 7 10 3 229 228 2 7 6 4 105 106 1 3 4 5 255 259 1 4 4 6 501 502 1
12 2 3 107 108 1 8 10 3 134 137 2 8 6 4 731 719 2 4 4 5 8 11 7 5 4 6 126 126 1
1 3 3 175 176 1 1 11 3 164 167 1 9 6 4 143 146 1 5 4 5 196 196 1 6 4 6 650 640 2
2 3 3 424 422 1 2 11 3 371 369 1 10 6 4 471 456 3 6 4 5 229 230 1 7 4 6 67 73 2
3 3 3 71 67 1 3 11 3 31 32 1 1 7 4 197 198 1 7 4 5 296 296 1 1 5 6 352 352 1
4 3 3 257 249 1 4 11 3 277 275 1 2 7 4 167 168 1 8 4 5 39 38 1 2 5 6 44 45 1
5 3 3 200 200 1 5 11 3 360 354 1 3 7 4 23 19 1 9 4 5 236 232 1 3 5 6 54 51 1
6 3 3 105 112 1 6 11 3 19 20 4 4 7 4 34 33 1 1 5 5 114 118 1 4 5 6 168 168 1
7 3 3 397 401 1 7 11 3 74 73 2 5 7 4 146 145 1 2 5 5 429 432 1 5 5 6 228 230 1
8 3 3 328 328 1 0 12 3 227 225 1 6 7 4 110 113 1 3 5 5 77 79 1 6 5 6 42 39 2
9 3 3 68 71 1 1 12 3 207 209 1 7 7 4 232 233 1 4 5 5 131 130 1 7 5 6 181 173 2
10 3 3 95 98 1 2 12 3 76 76 1 8 7 4 154 152 1 5 5 5 159 161 1 0 6 6 630 625 3
11 3 3 400 398 1 3 12 3 94 94 1 9 7 4 163 164 1 6 5 5 265 269 1 1 6 6 134 136 1
12 3 3 77 79 1 4 12 3 91 89 1 0 8 4 630 631 2 7 5 5 87 85 1 2 6 6 600 593 2

0	4	3	391	381	1	5	12	3	130	132	1	1	8	4	28	28	1	8	5	5	56	56	1	3	6	6	282	281	1
1	4	3	453	452	1	1	13	3	11	7	10	2	8	4	635	633	2	9	5	5	388	376	2	4	6	6	494	486	1
2	4	3	12	12	1	2	13	3	108	108	2	3	8	4	36	39	1	0	6	5	159	162	1	5	6	6	206	205	1
3	4	3	218	214	1	3	13	3	90	91	5	4	8	4	127	126	1	1	6	5	432	431	1	6	6	6	198	194	1
4	4	3	196	193	1	0	0	4	2373	2512	19	5	8	4	46	49	1	2	6	5	209	208	1	1	7	6	193	192	1
5	4	3	59	62	1	2	0	4	793	806	2	6	8	4	268	269	1	3	6	5	148	150	1	2	7	6	151	150	1
6	4	3	131	128	1	4	0	4	736	741	2	7	8	4	147	146	1	4	6	5	418	419	1	3	7	6	110	110	1
7	4	3	67	67	1	6	0	4	15	5	3	8	8	4	128	131	1	5	6	5	229	230	1	4	7	6	59	58	2
8	4	3	99	103	1	8	0	4	495	495	2	9	8	4	49	49	2	6	6	5	8	7	8	5	7	6	81	76	2
9	4	3	445	445	1	10	0	4	407	410	2	1	9	4	125	128	1	7	6	5	53	51	1	0	8	6	37	41	3
10	4	3	109	110	1	1	1	4	86	89	1	2	9	4	102	103	1	8	6	5	15	11	7	1	8	6	19	19	4
11	4	3	154	155	1	2	1	4	45	47	1	3	9	4	295	297	1	1	7	5	102	104	1	2	8	6	16	10	6
12	4	3	83	81	2	3	1	4	15	3	1	4	9	4	244	244	1	2	7	5	157	158	1	3	8	6	61	59	2
1	5	3	17	11	1	4	1	4	77	78	1	5	9	4	331	331	1	3	7	5	125	127	1	4	8	6	354	353	2
1	9	6	267	265	2	3	1	7	9	9	8	3	2	7	333	332	1	4	3	7	137	131	1	4	4	7	154	151	1
1	0	7	465	462	2	4	1	7	145	140	1	4	2	7	47	47	2	5	3	7	83	88	2	1	5	7	61	64	1
3	0	7	210	210	1	5	1	7	4	7	3	5	2	7	184	178	1	0	4	7	239	237	2	2	5	7	122	124	1
5	0	7	301	302	4	0	2	7	18	17	5	1	3	7	99	99	1	1	4	7	222	220	1	3	5	7	181	178	1
1	1	7	58	58	1	1	2	7	11	5	10	2	3	7	207	204	1	2	4	7	17	17	5	0	6	7	80	83	2
2	1	7	140	138	1	2	2	7	215	212	1	3	3	7	19	23	4	3	4	7	142	142	1	1	6	7	125	126	1

Table 4c. Observed and calculated structure factors for G4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	1352	1323	6	4	13	0	61	65	3	4	12	1	77	78	1	0	12	2	683	669	5	0	0	4	2481	2483	12
4	0	0	1201	1166	5	5	13	0	146	152	2	5	12	1	58	64	1	1	12	2	129	130	2	2	0	4	787	797	2

6	0	0	252	246	1	6	13	0	42	47	3	6	12	1	78	79	1	2	12	2	266	269	1	4	0	4	714	711	2
8	0	0	587	579	3	0	14	0	383	378	4	7	12	1	194	194	1	3	12	2	71	74	1	6	0	4	15	5	4
10	0	0	595	580	3	1	14	0	117	126	2	1	13	1	72	74	1	4	12	2	499	496	2	8	0	4	478	475	2
12	0	0	438	434	2	2	14	0	0	4	1	2	13	1	198	196	1	5	12	2	125	124	1	10	0	4	388	389	2
1	1	0	90	92	1	3	14	0	240	236	2	3	13	1	23	19	4	6	12	2	399	398	2	1	1	4	88	91	1
2	1	0	76	74	1	4	14	0	68	76	2	4	13	1	180	183	1	7	12	2	10	11	10	2	1	4	61	62	1
3	1	0	245	244	1	1	0	1	1051	1031	3	5	13	1	59	57	2	1	13	2	328	320	2	3	1	4	14	6	2
4	1	0	32	50	1	3	0	1	745	736	2	6	13	1	222	221	1	2	13	2	88	93	2	4	1	4	63	66	1
5	1	0	856	818	3	5	0	1	1091	1044	3	0	14	1	9	26	8	3	13	2	60	64	2	5	1	4	397	409	1
6	1	0	461	444	1	7	0	1	146	154	1	1	14	1	37	43	3	4	13	2	39	40	4	6	1	4	278	281	1
7	1	0	442	432	1	9	0	1	152	157	1	2	14	1	288	279	1	5	13	2	51	55	3	7	1	4	270	271	1
8	1	0	295	283	1	11	0	1	18	22	5	3	14	1	0	13	1	0	14	2	140	145	3	8	1	4	200	200	1
9	1	0	239	255	1	13	0	1	98	98	1	0	0	2	933	918	4	1	14	2	105	109	2	9	1	4	102	107	1
10	1	0	10	7	10	1	1	1	106	110	1	2	0	2	722	717	2	2	14	2	242	237	2	10	1	4	15	10	6
11	1	0	108	109	1	2	1	1	51	45	1	4	0	2	897	872	3	1	0	3	1095	1057	3	11	1	4	132	140	1
12	1	0	179	174	1	3	1	1	291	286	1	6	0	2	1883	1844	6	3	0	3	433	432	1	0	2	4	441	442	2
13	1	0	52	50	2	4	1	1	123	103	1	8	0	2	416	413	1	5	0	3	633	633	2	1	2	4	169	172	1
0	2	0	1157	1163	5	5	1	1	397	380	1	10	0	2	580	573	2	7	0	3	42	48	1	2	2	4	53	49	1
1	2	0	328	327	1	6	1	1	354	351	1	12	0	2	484	482	2	9	0	3	283	283	1	3	2	4	214	214	1
2	2	0	395	386	1	7	1	1	45	49	1	1	1	2	19	1	1	11	0	3	51	54	2	4	2	4	544	539	1
3	2	0	336	334	1	8	1	1	10	7	5	2	1	2	156	152	1	1	1	3	118	115	1	5	2	4	212	217	1
4	2	0	465	513	1	9	1	1	242	233	1	3	1	2	935	865	2	2	1	3	311	299	1	6	2	4	663	652	1
5	2	0	360	353	1	10	1	1	309	309	1	4	1	2	55	51	1	3	1	3	67	73	1	7	2	4	38	44	1
6	2	0	1043	1029	3	11	1	1	156	155	1	5	1	2	509	505	1	4	1	3	242	242	1	8	2	4	679	668	2
7	2	0	78	76	1	12	1	1	156	160	1	6	1	2	269	267	1	5	1	3	152	155	1	9	2	4	64	66	1
8	2	0	749	737	2	13	1	1	93	94	1	7	1	2	147	152	1	6	1	3	413	413	1	10	2	4	199	205	1
9	2	0	100	99	1	0	2	1	243	242	1	8	1	2	147	143	1	7	1	3	132	136	1	11	2	4	48	53	2

10 2 0 292 284 1 1 2 1 604 588 1 9 1 2 130 132 1 8 1 3 52 58 1 1 3 4 187 194 1
11 2 0 58 62 1 2 2 1 347 345 1 10 1 2 102 103 1 9 1 3 279 277 1 2 3 4 130 131 1
12 2 0 64 70 2 3 2 1 623 638 1 11 1 2 259 252 1 10 1 3 141 148 1 3 3 4 41 41 1
13 2 0 135 135 1 4 2 1 379 372 1 12 1 2 267 260 1 11 1 3 184 183 1 4 3 4 17 12 2
1 3 0 512 509 1 5 2 1 227 230 1 13 1 2 236 230 1 12 1 3 28 27 3 5 3 4 274 285 1
2 3 0 250 240 1 6 2 1 130 134 1 0 2 2 907 923 3 0 2 3 10 5 3 6 3 4 381 382 1
3 3 0 43 58 1 7 2 1 119 123 1 1 2 2 232 233 1 1 2 3 49 49 1 7 3 4 228 233 1
4 3 0 22 35 1 8 2 1 67 73 1 2 2 2 716 751 1 2 2 3 408 396 1 8 3 4 71 75 1
5 3 0 778 740 2 9 2 1 325 326 1 3 2 2 383 377 1 3 2 3 630 631 1 9 3 4 95 103 1
6 3 0 550 540 2 10 2 1 157 158 1 4 2 2 282 280 1 4 2 3 161 168 1 10 3 4 71 76 1
7 3 0 298 298 1 11 2 1 209 209 1 5 2 2 190 194 1 5 2 3 317 320 1 11 3 4 133 142 1
8 3 0 93 100 1 12 2 1 59 65 1 6 2 2 317 310 1 6 2 3 202 203 1 0 4 4 1177 1170 4
9 3 0 101 98 1 13 2 1 77 80 1 7 2 2 37 38 1 7 2 3 310 310 1 1 4 4 198 198 1
10 3 0 105 110 1 1 3 1 253 250 1 8 2 2 288 292 1 8 2 3 123 129 1 2 4 4 270 275 1
11 3 0 267 277 1 2 3 1 225 238 1 9 2 2 12 18 4 9 2 3 179 182 1 3 4 4 46 52 1
12 3 0 465 449 2 3 3 1 97 92 1 10 2 2 447 444 1 10 2 3 190 191 1 4 4 4 104 106 1
13 3 0 293 293 1 4 3 1 36 39 1 11 2 2 149 152 1 11 2 3 191 191 1 5 4 4 108 107 1
0 4 0 2011 2047 9 5 3 1 266 267 1 12 2 2 541 532 1 12 2 3 94 99 1 6 4 4 63 64 1
1 4 0 198 217 1 6 3 1 10 17 3 13 2 2 213 211 1 1 3 3 158 159 1 7 4 4 172 175 1
2 4 0 60 8 1 7 3 1 439 437 1 1 3 2 730 674 2 2 3 3 425 426 1 8 4 4 287 289 1
3 4 0 15 22 1 8 3 1 412 415 1 2 3 2 199 194 1 3 3 3 61 62 1 9 4 4 64 69 1
4 4 0 68 52 1 9 3 1 77 78 1 3 3 2 102 110 1 4 3 3 244 236 1 10 4 4 329 328 1
5 4 0 134 137 1 10 3 1 68 71 1 4 3 2 44 52 1 5 3 3 203 206 1 11 4 4 0 7 1
6 4 0 14 3 3 11 3 1 426 414 1 5 3 2 331 330 1 6 3 3 96 107 1 1 5 4 668 674 2
7 4 0 240 242 1 12 3 1 152 158 1 6 3 2 489 487 1 7 3 3 374 377 1 2 5 4 95 100 1
8 4 0 262 270 1 13 3 1 157 154 1 7 3 2 620 620 1 8 3 3 316 313 1 3 5 4 127 143 1
9 4 0 100 102 1 0 4 1 241 254 1 8 3 2 93 100 1 9 3 3 69 74 1 4 5 4 150 153 1

10	4	0	464	453	1	1	4	1	187	198	1	9	3	2	24	20	2	10	3	3	86	91	1	5	5	4	200	202	1
11	4	0	14	14	10	2	4	1	103	116	1	10	3	2	80	86	1	11	3	3	375	368	1	6	5	4	9	1	9
12	4	0	431	421	2	3	4	1	291	305	1	11	3	2	180	182	1	12	3	3	61	65	1	7	5	4	99	100	1
13	4	0	32	29	4	4	4	1	53	54	1	12	3	2	439	424	1	0	4	3	393	384	2	8	5	4	139	142	1
1	5	0	1148	1111	3	5	4	1	184	190	1	13	3	2	241	234	1	1	4	3	448	449	1	9	5	4	203	203	1
2	5	0	197	189	1	6	4	1	261	260	1	0	4	2	60	61	2	2	4	3	21	17	1	10	5	4	300	293	1
3	5	0	490	476	1	7	4	1	322	331	1	1	4	2	256	264	1	3	4	3	223	220	1	0	6	4	398	402	2
4	5	0	144	152	1	8	4	1	16	15	2	2	4	2	510	509	1	4	4	3	177	176	1	1	6	4	169	171	1
5	5	0	385	379	1	9	4	1	383	380	1	3	4	2	43	39	1	5	4	3	52	56	1	2	6	4	339	333	1
6	5	0	16	7	3	10	4	1	60	61	1	4	4	2	851	846	2	6	4	3	127	128	1	3	6	4	394	388	1
7	5	0	101	102	1	11	4	1	155	160	1	5	4	2	228	225	1	7	4	3	70	72	1	4	6	4	418	418	1
8	5	0	186	181	1	12	4	1	35	36	2	6	4	2	1223	1203	3	8	4	3	93	97	1	5	6	4	272	274	1
9	5	0	352	356	1	13	4	1	106	109	1	7	4	2	103	104	1	9	4	3	427	422	1	6	6	4	750	729	2
10	5	0	390	381	2	1	5	1	197	183	1	8	4	2	178	182	1	10	4	3	102	108	1	7	6	4	103	105	1
11	5	0	128	130	1	2	5	1	638	628	1	9	4	2	9	7	8	11	4	3	134	140	1	8	6	4	688	673	2
12	5	0	148	147	1	3	5	1	180	188	1	10	4	2	278	278	1	12	4	3	71	75	1	9	6	4	132	138	1
0	6	0	937	913	5	4	5	1	364	365	1	11	4	2	84	88	1	1	5	3	0	2	1	10	6	4	423	416	1
1	6	0	249	247	1	5	5	1	113	115	1	12	4	2	188	192	1	2	5	3	282	287	1	1	7	4	195	194	1
2	6	0	403	410	1	6	5	1	336	337	1	1	5	2	813	796	2	3	5	3	259	263	1	2	7	4	151	155	1
3	6	0	596	595	2	7	5	1	42	45	1	2	5	2	129	130	1	4	5	3	506	509	1	3	7	4	17	13	3
4	6	0	566	566	2	8	5	1	151	154	1	3	5	2	450	439	1	5	5	3	19	19	2	4	7	4	32	32	2
5	6	0	385	388	1	9	5	1	461	450	1	4	5	2	242	247	1	6	5	3	153	160	1	5	7	4	149	145	1
6	6	0	1139	1137	4	10	5	1	21	28	3	5	5	2	259	264	1	7	5	3	24	28	2	6	7	4	103	104	1
7	6	0	149	144	1	11	5	1	38	39	2	6	5	2	70	73	1	8	5	3	195	197	1	7	7	4	223	223	1
8	6	0	819	814	3	12	5	1	0	10	1	7	5	2	332	333	1	9	5	3	351	343	1	8	7	4	134	132	1
9	6	0	184	188	1	0	6	1	210	207	1	8	5	2	257	257	1	10	5	3	69	76	1	9	7	4	144	146	1
10	6	0	584	577	3	1	6	1	557	548	1	9	5	2	17	13	3	11	5	3	71	79	1	0	8	4	619	605	3

11	6	0	58	55	2	2	6	1	358	366	1	10	5	2	267	263	1	0	6	3	138	145	1	1	8	4	27	32	2
12	6	0	338	339	2	3	6	1	293	303	1	11	5	2	15	20	6	1	6	3	239	234	1	2	8	4	614	601	2
1	7	0	299	304	1	4	6	1	691	683	1	12	5	2	67	67	1	2	6	3	303	305	1	3	8	4	21	25	3
2	7	0	199	199	1	5	6	1	424	424	1	0	6	2	1431	1427	6	3	6	3	308	316	1	4	8	4	120	121	1
3	7	0	150	151	1	6	6	1	24	18	1	1	6	2	233	238	1	4	6	3	542	536	1	5	8	4	41	47	2
4	7	0	22	27	2	7	6	1	25	18	1	2	6	2	954	949	3	5	6	3	493	488	1	6	8	4	251	253	1
5	7	0	88	90	1	8	6	1	21	17	2	3	6	2	544	542	1	6	6	3	8	8	8	7	8	4	138	142	1
6	7	0	117	120	1	9	6	1	67	74	1	4	6	2	880	878	2	7	6	3	153	153	1	8	8	4	121	125	1
7	7	0	313	321	1	10	6	1	185	184	1	5	6	2	327	331	1	8	6	3	18	22	3	9	8	4	43	48	2
8	7	0	177	177	1	11	6	1	162	167	1	6	6	2	520	520	1	9	6	3	46	50	1	1	9	4	125	127	1
9	7	0	235	243	2	12	6	1	54	56	2	7	6	2	133	133	1	10	6	3	172	171	1	2	9	4	98	100	1
10	7	0	25	36	5	1	7	1	242	247	1	8	6	2	25	26	2	11	6	3	117	120	1	3	9	4	285	283	1
11	7	0	288	291	2	2	7	1	380	382	1	9	6	2	150	150	1	1	7	3	317	317	1	4	9	4	233	228	1
12	7	0	191	191	2	3	7	1	87	89	1	10	6	2	378	381	1	2	7	3	472	471	1	5	9	4	324	322	1
0	8	0	941	934	6	4	7	1	437	435	1	11	6	2	60	62	1	3	7	3	31	38	1	6	9	4	108	107	1
1	8	0	16	21	3	5	7	1	7	2	7	12	6	2	439	436	1	4	7	3	199	203	1	7	9	4	387	374	1
2	8	0	691	700	2	6	7	1	100	100	1	1	7	2	258	267	1	5	7	3	77	80	1	8	9	4	58	61	2
3	8	0	17	9	3	7	7	1	193	195	1	2	7	2	241	241	1	6	7	3	7	2	7	0	10	4	387	381	2
4	8	0	94	94	1	8	7	1	159	163	1	3	7	2	400	402	1	7	7	3	97	101	1	1	10	4	66	69	1
5	8	0	57	59	1	9	7	1	71	78	1	4	7	2	74	78	1	8	7	3	80	86	1	2	10	4	344	340	1
6	8	0	395	406	1	10	7	1	102	109	1	5	7	2	250	246	1	9	7	3	124	128	1	3	10	4	120	118	1
7	8	0	183	186	1	11	7	1	128	134	1	6	7	2	210	211	1	10	7	3	190	191	1	4	10	4	157	161	1
8	8	0	65	70	2	12	7	1	42	46	4	7	7	2	163	171	1	0	8	3	98	105	1	5	10	4	44	45	2
9	8	0	56	58	2	0	8	1	34	41	1	8	7	2	69	72	1	1	8	3	86	88	1	6	10	4	336	332	1
10	8	0	168	174	2	1	8	1	302	303	1	9	7	2	15	8	5	2	8	3	139	142	1	7	10	4	73	73	2
11	8	0	110	118	2	2	8	1	76	76	1	10	7	2	108	114	1	3	8	3	422	418	1	1	11	4	138	136	1
1	9	0	87	72	1	3	8	1	525	529	1	11	7	2	131	139	1	4	8	3	85	89	1	2	11	4	164	162	1

2	9	0	124	129	1	4	8	1	29	34	1	0	8	2	212	212	1	5	8	3	12	7	5	3	11	4	4	7	4
3	9	0	321	332	1	5	8	1	90	99	1	1	8	2	35	34	1	6	8	3	101	103	1	4	11	4	237	232	1
4	9	0	296	299	1	6	8	1	48	51	1	2	8	2	188	200	1	7	8	3	371	368	1	5	11	4	237	231	2
5	9	0	525	532	2	7	8	1	254	257	1	3	8	2	56	59	1	8	8	3	58	63	1	0	12	4	291	291	2
6	9	0	128	137	2	8	8	1	110	116	1	4	8	2	493	496	1	9	8	3	149	153	1	1	12	4	119	119	2
7	9	0	503	503	2	9	8	1	92	97	1	5	8	2	111	118	1	10	8	3	151	151	1	2	12	4	420	405	2
8	9	0	72	77	2	10	8	1	217	215	1	6	8	2	460	454	1	1	9	3	204	201	1	3	12	4	67	70	3
9	9	0	252	250	1	11	8	1	66	69	2	7	8	2	220	222	1	2	9	3	193	191	1	1	0	5	372	370	2
10	9	0	174	177	2	1	9	1	200	207	1	8	8	2	227	231	1	3	9	3	197	200	1	3	0	5	406	416	2
0	10	0	604	604	4	2	9	1	352	350	1	9	8	2	126	131	1	4	9	3	152	156	1	5	0	5	646	637	3
1	10	0	91	98	1	3	9	1	217	226	1	10	8	2	343	339	1	5	9	3	47	46	1	7	0	5	170	170	1
2	10	0	391	384	2	4	9	1	13	5	4	11	8	2	44	47	3	6	9	3	90	91	1	9	0	5	37	35	4
3	10	0	174	172	1	5	9	1	73	76	1	1	9	2	562	556	2	7	9	3	105	106	1	1	1	5	128	129	1
4	10	0	183	183	1	6	9	1	159	160	1	2	9	2	108	113	1	8	9	3	443	428	2	2	1	5	82	86	1
5	10	0	53	55	2	7	9	1	128	131	1	3	9	2	261	263	1	9	9	3	203	201	1	3	1	5	235	239	1
6	10	0	486	487	2	8	9	1	470	465	2	4	9	2	307	309	1	0	10	3	106	109	2	4	1	5	95	105	1
7	10	0	87	90	2	9	9	1	231	234	1	5	9	2	16	8	4	1	10	3	112	108	1	5	1	5	228	231	1
8	10	0	312	314	2	10	9	1	83	90	1	6	9	2	128	134	1	2	10	3	13	1	9	6	1	5	144	142	1
9	10	0	53	57	3	0	10	1	213	220	1	7	9	2	262	258	1	3	10	3	104	101	1	7	1	5	15	16	5
10	10	0	296	294	2	1	10	1	265	262	1	8	9	2	82	87	1	4	10	3	199	197	1	8	1	5	59	57	1
1	11	0	193	193	1	2	10	1	104	107	1	9	9	2	285	287	1	5	10	3	163	162	1	9	1	5	115	118	1
2	11	0	207	209	1	3	10	1	156	152	1	10	9	2	136	137	1	6	10	3	51	55	2	10	1	5	276	271	1
3	11	0	98	102	2	4	10	1	144	146	1	0	10	2	449	438	2	7	10	3	204	204	1	0	2	5	192	195	1
4	11	0	301	305	2	5	10	1	104	107	1	1	10	2	53	56	1	8	10	3	123	125	1	1	2	5	337	341	1
5	11	0	258	257	2	6	10	1	0	5	1	2	10	2	170	174	1	1	11	3	155	158	1	2	2	5	91	95	1
6	11	0	109	109	1	7	10	1	98	101	1	3	10	2	117	120	1	2	11	3	360	351	2	3	2	5	409	403	1
7	11	0	277	281	2	8	10	1	204	207	1	4	10	2	450	445	1	3	11	3	24	34	5	4	2	5	266	268	1

8 11 0 7 3 7 9 10 1 9 7 9 5 10 2 98 104 1 4 11 3 259 256 1 5 2 5 89 93 1
9 11 0 343 344 2 1 11 1 235 240 1 6 10 2 327 327 1 5 11 3 340 332 2 6 2 5 18 19 3
0 12 0 451 452 3 2 11 1 294 293 1 7 10 2 172 173 1 6 11 3 16 17 9 7 2 5 37 36 2
1 12 0 153 154 1 3 11 1 0 7 1 8 10 2 35 38 2 7 11 3 65 63 2 8 2 5 10 1 10
2 12 0 501 503 2 4 11 1 414 409 1 9 10 2 14 13 11 0 12 3 205 201 2 9 2 5 252 258 1
3 12 0 89 96 1 5 11 1 328 322 1 1 11 2 302 297 2 1 12 3 199 196 2 10 2 5 63 67 2
4 12 0 300 300 2 6 11 1 82 89 1 2 11 2 190 191 1 2 12 3 68 68 2 1 3 5 133 136 1
5 12 0 110 110 1 7 11 1 29 30 3 3 11 2 326 326 1 3 12 3 79 83 2 2 3 5 58 62 1
6 12 0 512 513 2 8 11 1 48 58 2 4 11 2 235 233 1 4 12 3 83 82 2 3 3 5 24 24 2
7 12 0 17 11 9 0 12 1 201 198 2 5 11 2 231 229 1 5 12 3 119 122 2 4 3 5 154 162 1
1 13 0 318 316 2 1 12 1 334 331 1 6 11 2 135 136 1 1 13 3 12 6 12 5 3 5 152 158 1
2 13 0 135 135 1 2 12 1 88 93 1 7 11 2 88 94 1 2 13 3 105 100 3 6 3 5 10 14 9
3 13 0 161 163 2 3 12 1 127 131 1 8 11 2 50 50 2 3 13 3 82 82 2 7 3 5 279 278 1
8 3 5 273 270 1 1 7 5 95 96 1 6 0 6 856 843 5 4 4 6 480 481 1 5 0 7 280 278 2
9 3 5 51 56 2 2 7 5 154 156 1 8 0 6 315 318 2 5 4 6 112 115 1 1 1 7 58 61 1
10 3 5 132 133 1 3 7 5 116 118 1 1 1 6 33 33 2 6 4 6 614 601 2 2 1 7 130 128 1
0 4 5 115 116 1 4 7 5 373 367 1 2 1 6 45 50 1 7 4 6 66 71 1 3 1 7 0 12 1
1 4 5 25 24 1 5 7 5 54 57 1 3 1 6 130 133 1 1 5 6 345 341 1 4 1 7 133 131 1
2 4 5 190 195 1 6 7 5 105 113 1 4 1 6 29 31 2 2 5 6 44 47 2 5 1 7 18 17 4
3 4 5 252 258 1 7 7 5 188 187 1 5 1 6 333 335 1 3 5 6 53 51 1 0 2 7 24 21 5
4 4 5 15 18 3 8 7 5 133 136 1 6 1 6 141 147 1 4 5 6 152 152 1 1 2 7 15 10 6
5 4 5 184 185 1 0 8 5 39 39 3 7 1 6 112 117 1 5 5 6 217 222 1 2 2 7 195 199 1
6 4 5 220 220 1 1 8 5 275 271 1 8 1 6 83 90 1 6 5 6 36 38 2 3 2 7 315 315 1
7 4 5 281 281 1 2 8 5 22 22 4 0 2 6 371 378 2 7 5 6 165 160 1 4 2 7 43 45 2
8 4 5 33 36 2 3 8 5 375 367 1 1 2 6 101 107 1 0 6 6 608 590 3 5 2 7 172 168 1
9 4 5 215 212 1 4 8 5 28 30 3 2 2 6 643 638 2 1 6 6 118 123 1 1 3 7 83 85 1
1 5 5 115 119 1 5 8 5 100 100 1 3 2 6 161 168 1 2 6 6 577 565 2 2 3 7 194 196 1

2	5	5	430	424	1	6	8	5	14	14	13	4	2	6	169	178	1	3	6	6	273	268	1	3	3	7	17	19	6
3	5	5	72	76	1	7	8	5	98	99	2	5	2	6	102	109	1	4	6	6	467	455	2	4	3	7	120	118	1
4	5	5	126	127	1	1	9	5	127	125	1	6	2	6	98	105	1	5	6	6	188	188	1	5	3	7	82	86	3
5	5	5	144	146	1	2	9	5	292	285	1	7	2	6	14	14	8	6	6	6	182	184	1	0	4	7	226	223	2
6	5	5	242	249	1	3	9	5	142	140	1	8	2	6	58	58	1	1	7	6	192	186	1	1	4	7	208	207	1
7	5	5	77	76	1	4	9	5	72	78	2	1	3	6	95	95	1	2	7	6	138	136	1	2	4	7	8	19	8
8	5	5	53	58	1	5	9	5	58	65	2	2	3	6	97	97	1	3	7	6	105	102	2	3	4	7	136	136	1
9	5	5	355	344	2	6	9	5	129	133	1	3	3	6	130	136	1	4	7	6	51	52	2	4	4	7	136	133	1
0	6	5	136	144	1	0	10	5	189	190	2	4	3	6	7	2	7	5	7	6	73	73	2	1	5	7	52	53	2
1	6	5	424	413	1	1	10	5	260	254	1	5	3	6	20	16	3	0	8	6	38	38	5	2	5	7	118	122	1
2	6	5	199	198	1	2	10	5	122	123	1	6	3	6	267	268	1	1	8	6	16	22	9	3	5	7	164	164	2
3	6	5	143	145	1	3	10	5	121	121	1	7	3	6	317	314	1	2	8	6	18	4	7	0	6	7	69	68	6
4	6	5	408	402	1	4	10	5	37	42	4	8	3	6	54	59	2	3	8	6	43	46	3	1	6	7	110	116	3
5	6	5	216	217	1	1	11	5	211	204	1	0	4	6	143	146	1	4	8	6	330	326	2						
6	6	5	12	14	9	0	0	6	561	558	4	1	4	6	154	158	1	1	9	6	256	250	1						
7	6	5	45	50	2	2	0	6	421	419	2	2	4	6	376	376	1	1	0	7	446	438	2						
8	6	5	21	13	4	4	0	6	399	406	2	3	4	6	20	24	4	3	0	7	202	207	1						

Table 4d. Observed and calculated structure factors for G12

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	1344	1343	6	2	13	0	163	157	4	0	12	1	197	198	3	5	11	2	263	261	2	5	12	3	130	131	2
4	0	0	1161	1141	5	3	13	0	167	169	4	1	12	1	356	357	2	6	11	2	151	155	2	6	12	3	47	46	25
6	0	0	214	220	2	4	13	0	76	77	5	2	12	1	97	102	2	7	11	2	104	107	2	1	13	3	17	15	17
8	0	0	598	597	3	5	13	0	176	175	4	3	12	1	122	127	2	8	11	2	60	63	3	2	13	3	116	116	2

10	0	0	631	627	4	6	13	0	19	40	18	4	12	1	92	92	2	0	12	2	730	718	3	3	13	3	96	94	3
12	0	0	471	467	3	0	14	0	422	423	8	5	12	1	65	68	3	1	12	2	131	130	2	0	0	4	2493	2553	21
1	1	0	104	101	1	1	14	0	139	142	5	6	12	1	74	74	3	2	12	2	278	282	2	2	0	4	812	822	3
2	1	0	119	118	1	2	14	0	0	11	1	7	12	1	221	223	2	3	12	2	87	90	2	4	0	4	710	706	3
3	1	0	241	244	1	3	14	0	255	252	3	1	13	1	84	90	3	4	12	2	514	516	2	6	0	4	24	24	7
4	1	0	0	27	1	4	14	0	65	68	6	2	13	1	215	218	2	5	12	2	133	132	2	8	0	4	496	497	2
5	1	0	868	833	3	1	0	1	1071	1061	3	3	13	1	31	26	6	6	12	2	420	412	2	10	0	4	426	429	3
6	1	0	488	475	2	3	0	1	787	783	2	4	13	1	198	201	2	7	12	2	0	5	1	1	1	4	98	96	1
7	1	0	442	437	2	5	0	1	1091	1059	3	5	13	1	72	73	3	1	13	2	349	348	2	2	1	4	87	89	1
8	1	0	331	321	2	7	0	1	171	180	1	6	13	1	233	230	3	2	13	2	111	113	2	3	1	4	11	9	10
9	1	0	248	269	2	9	0	1	175	181	2	0	14	1	30	37	12	3	13	2	66	70	3	4	1	4	49	53	1
10	1	0	0	11	1	11	0	1	16	11	16	1	14	1	27	34	9	4	13	2	46	50	4	5	1	4	409	426	1
11	1	0	122	120	2	13	0	1	95	94	3	2	14	1	311	304	2	5	13	2	63	70	4	6	1	4	304	306	1
12	1	0	206	203	2	1	1	1	69	75	1	3	14	1	12	8	12	0	14	2	130	138	4	7	1	4	275	277	1
13	1	0	52	55	4	2	1	1	39	37	1	0	0	2	992	967	5	1	14	2	118	124	2	8	1	4	228	231	1
0	2	0	1149	1122	4	3	1	1	302	302	1	2	0	2	709	706	2	2	14	2	249	246	2	9	1	4	108	114	2
1	2	0	323	319	1	4	1	1	116	101	1	4	0	2	922	909	3	1	0	3	1121	1090	4	10	1	4	0	9	1
2	2	0	410	400	1	5	1	1	439	425	1	6	0	2	1917	1906	6	3	0	3	470	470	2	11	1	4	143	154	3
3	2	0	352	352	2	6	1	1	356	360	1	8	0	2	423	423	2	5	0	3	648	646	2	0	2	4	426	423	1
4	2	0	494	548	2	7	1	1	34	41	2	10	0	2	576	576	2	7	0	3	14	30	14	1	2	4	172	170	1
5	2	0	360	357	1	8	1	1	0	5	1	12	0	2	517	506	3	9	0	3	307	313	2	2	2	4	59	59	1
6	2	0	1071	1068	3	9	1	1	266	263	1	1	1	2	12	8	3	11	0	3	40	49	6	3	2	4	232	229	1
7	2	0	90	90	2	10	1	1	324	325	1	2	1	2	192	189	1	1	1	3	149	144	1	4	2	4	579	573	1
8	2	0	753	753	3	11	1	1	188	186	1	3	1	2	934	874	2	2	1	3	309	297	1	5	2	4	217	223	1
9	2	0	108	108	2	12	1	1	168	173	2	4	1	2	73	73	1	3	1	3	78	83	1	6	2	4	695	689	2
10	2	0	283	274	2	13	1	1	97	101	2	5	1	2	518	519	1	4	1	3	248	250	1	7	2	4	50	54	2
11	2	0	61	67	4	0	2	1	235	226	1	6	1	2	294	292	1	5	1	3	186	188	1	8	2	4	702	696	2

12	2	0	68	72	4	1	2	1	627	613	1	7	1	2	147	153	1	6	1	3	423	428	1	9	2	4	70	73	3
13	2	0	154	154	3	2	2	1	355	352	1	8	1	2	177	175	1	7	1	3	129	133	1	10	2	4	196	201	3
1	3	0	544	533	2	3	2	1	662	680	1	9	1	2	130	132	1	8	1	3	54	64	2	11	2	4	53	59	4
2	3	0	218	206	1	4	2	1	392	388	1	10	1	2	103	105	2	9	1	3	309	309	2	1	3	4	207	211	1
3	3	0	48	67	2	5	2	1	224	234	1	11	1	2	279	273	1	10	1	3	153	158	2	2	3	4	113	113	1
4	3	0	47	56	2	6	2	1	119	125	1	12	1	2	307	295	2	11	1	3	209	214	2	3	3	4	35	38	1
5	3	0	766	732	3	7	2	1	142	149	1	13	1	2	262	247	2	12	1	3	28	32	8	4	3	4	25	25	3
6	3	0	576	571	2	8	2	1	76	79	1	0	2	2	962	964	4	0	2	3	13	10	6	5	3	4	264	281	1
7	3	0	310	310	2	9	2	1	349	353	1	1	2	2	228	226	1	1	2	3	64	65	1	6	3	4	412	411	1
8	3	0	72	81	2	10	2	1	173	173	1	2	2	2	730	769	2	2	2	3	421	408	1	7	3	4	243	246	1
9	3	0	113	112	2	11	2	1	209	209	1	3	2	2	398	395	1	3	2	3	670	670	1	8	3	4	57	61	3
10	3	0	115	117	2	12	2	1	70	74	2	4	2	2	254	256	1	4	2	3	174	179	1	9	3	4	110	117	2
11	3	0	292	299	2	13	2	1	97	102	2	5	2	2	189	195	1	5	2	3	321	327	1	10	3	4	76	83	3
12	3	0	508	496	3	1	3	1	228	223	1	6	2	2	297	297	1	6	2	3	194	200	1	11	3	4	152	159	2
13	3	0	315	313	3	2	3	1	253	264	1	7	2	2	31	30	2	7	2	3	335	341	1	0	4	4	1222	1214	7
0	4	0	2050	2089	15	3	3	1	90	82	1	8	2	2	291	298	1	8	2	3	134	138	1	1	4	4	221	216	1
1	4	0	224	238	1	4	3	1	44	53	1	9	2	2	6	14	5	9	2	3	200	204	1	2	4	4	284	291	1
2	4	0	53	11	1	5	3	1	300	302	1	10	2	2	487	485	1	10	2	3	203	208	2	3	4	4	30	35	2
3	4	0	0	8	1	6	3	1	0	11	1	11	2	2	157	164	2	11	2	3	194	194	2	4	4	4	91	95	1
4	4	0	88	73	2	7	3	1	439	441	1	12	2	2	590	571	2	12	2	3	111	111	3	5	4	4	113	113	1
5	4	0	140	141	1	8	3	1	437	444	1	13	2	2	240	237	2	1	3	3	139	140	1	6	4	4	79	81	2
6	4	0	26	19	4	9	3	1	98	99	2	1	3	2	721	660	2	2	3	3	450	450	1	7	4	4	196	198	1
7	4	0	272	269	2	10	3	1	68	76	2	2	3	2	171	166	1	3	3	3	54	54	1	8	4	4	300	305	1
8	4	0	270	281	2	11	3	1	461	455	2	3	3	2	112	118	1	4	3	3	239	233	1	9	4	4	77	79	3
9	4	0	112	116	2	12	3	1	154	158	2	4	3	2	60	70	1	5	3	3	236	236	1	10	4	4	353	360	2
10	4	0	494	489	2	13	3	1	172	168	2	5	3	2	350	352	1	6	3	3	92	103	1	11	4	4	0	2	1
11	4	0	0	5	1	0	4	1	283	287	1	6	3	2	520	516	1	7	3	3	379	384	1	1	5	4	704	709	2

12	4	0	462	456	3	1	4	1	207	216	1	7	3	2	642	643	2	8	3	3	344	341	1	2	5	4	111	117	1
13	4	0	44	46	6	2	4	1	96	106	1	8	3	2	73	81	2	9	3	3	85	93	2	3	5	4	125	138	1
1	5	0	1200	1149	4	3	4	1	321	335	1	9	3	2	34	31	3	10	3	3	90	97	2	4	5	4	152	150	1
2	5	0	220	213	1	4	4	1	31	35	2	10	3	2	87	92	2	11	3	3	416	408	2	5	5	4	228	230	1
3	5	0	479	470	2	5	4	1	187	194	1	11	3	2	186	186	2	12	3	3	55	63	4	6	5	4	2	3	1
4	5	0	134	142	1	6	4	1	285	284	1	12	3	2	489	471	2	0	4	3	425	415	3	7	5	4	117	116	2
5	5	0	420	413	2	7	4	1	346	354	1	13	3	2	264	250	2	1	4	3	473	470	2	8	5	4	154	162	2
6	5	0	0	5	1	8	4	1	21	22	4	0	4	2	88	90	2	2	4	3	28	26	2	9	5	4	227	226	2
7	5	0	115	119	2	9	4	1	407	406	1	1	4	2	283	283	1	3	4	3	250	247	1	10	5	4	317	315	2
8	5	0	201	203	2	10	4	1	79	79	2	2	4	2	507	502	1	4	4	3	164	165	1	0	6	4	401	402	3
9	5	0	377	387	2	11	4	1	154	163	2	3	4	2	69	65	1	5	4	3	54	59	1	1	6	4	156	166	2
10	5	0	409	401	2	12	4	1	42	45	4	4	4	2	879	877	2	6	4	3	150	148	1	2	6	4	337	339	2
11	5	0	116	124	3	13	4	1	108	109	3	5	4	2	235	231	1	7	4	3	82	86	1	3	6	4	428	421	1
12	5	0	166	167	3	1	5	1	224	207	1	6	4	2	1259	1250	3	8	4	3	101	107	2	4	6	4	443	437	2
13	5	0	51	64	10	2	5	1	680	667	1	7	4	2	123	127	1	9	4	3	454	452	2	5	6	4	287	287	1
0	6	0	943	913	5	3	5	1	188	195	1	8	4	2	184	186	1	10	4	3	129	128	2	6	6	4	783	765	2
1	6	0	239	235	1	4	5	1	388	386	1	9	4	2	0	4	1	11	4	3	138	143	2	7	6	4	131	130	2
2	6	0	403	409	1	5	5	1	99	101	1	10	4	2	280	278	2	12	4	3	83	86	3	8	6	4	721	712	2
3	6	0	634	632	2	6	5	1	330	334	1	11	4	2	100	100	2	1	5	3	10	15	9	9	6	4	150	159	2
4	6	0	582	584	2	7	5	1	33	39	3	12	4	2	198	200	2	2	5	3	313	318	1	10	6	4	450	440	2
5	6	0	398	400	2	8	5	1	177	179	1	1	5	2	858	834	2	3	5	3	274	274	1	1	7	4	217	220	2
6	6	0	1174	1174	4	9	5	1	495	481	2	2	5	2	152	151	1	4	5	3	529	535	1	2	7	4	156	158	2
7	6	0	182	175	2	10	5	1	22	32	6	3	5	2	467	454	1	5	5	3	8	6	8	3	7	4	10	10	9
8	6	0	844	847	3	11	5	1	35	32	4	4	5	2	235	242	1	6	5	3	148	154	1	4	7	4	29	32	4
9	6	0	211	210	2	12	5	1	17	24	16	5	5	2	291	294	1	7	5	3	31	36	3	5	7	4	178	171	1
10	6	0	616	601	3	0	6	1	188	182	2	6	5	2	75	80	1	8	5	3	221	224	1	6	7	4	112	115	2
11	6	0	61	63	4	1	6	1	575	560	1	7	5	2	348	355	1	9	5	3	378	372	2	7	7	4	237	240	2

12 6 0 373 364 3 2 6 1 377 379 1 8 5 2 279 282 1 10 5 3 79 78 3 8 7 4 137 136 2
1 7 0 328 333 1 3 6 1 317 321 1 9 5 2 10 3 10 11 5 3 67 75 3 9 7 4 141 144 2
2 7 0 202 197 2 4 6 1 731 722 2 10 5 2 279 277 1 0 6 3 122 126 3 0 8 4 639 624 3
3 7 0 164 163 1 5 6 1 433 435 1 11 5 2 0 8 1 1 6 3 249 243 2 1 8 4 39 48 3
4 7 0 22 24 5 6 6 1 37 41 2 12 5 2 83 78 3 2 6 3 318 319 1 2 8 4 635 629 2
5 7 0 120 118 2 7 6 1 29 25 3 0 6 2 1486 1459 5 3 6 3 328 336 1 3 8 4 13 11 13
6 7 0 131 130 2 8 6 1 26 27 4 1 6 2 226 228 1 4 6 3 576 573 1 4 8 4 126 125 2
7 7 0 332 340 2 9 6 1 80 84 2 2 6 2 981 971 2 5 6 3 509 507 1 5 8 4 46 49 3
8 7 0 179 179 2 10 6 1 214 215 2 3 6 2 579 577 1 6 6 3 13 11 12 6 8 4 263 267 1
9 7 0 234 241 3 11 6 1 171 175 2 4 6 2 888 890 2 7 6 3 164 164 1 7 8 4 174 173 2
10 7 0 30 40 8 12 6 1 65 73 3 5 6 2 339 343 1 8 6 3 26 31 5 8 8 4 125 133 2
11 7 0 332 328 3 1 7 1 247 248 1 6 6 2 523 530 1 9 6 3 44 48 4 9 8 4 57 62 4
12 7 0 207 212 4 2 7 1 417 417 1 7 6 2 163 161 1 10 6 3 204 201 2 1 9 4 152 154 3
0 8 0 964 949 5 3 7 1 88 88 1 8 6 2 23 25 5 11 6 3 123 125 2 2 9 4 110 109 2
1 8 0 45 41 2 4 7 1 468 463 1 9 6 2 174 173 2 1 7 3 319 324 1 3 9 4 305 302 2
2 8 0 710 719 2 5 7 1 13 2 10 10 6 2 409 408 2 2 7 3 511 508 1 4 9 4 247 247 2
3 8 0 16 16 8 6 7 1 115 116 1 11 6 2 71 74 3 3 7 3 38 43 2 5 9 4 360 357 2
4 8 0 98 94 2 7 7 1 198 200 1 12 6 2 479 469 2 4 7 3 220 225 1 6 9 4 114 112 2
5 8 0 53 59 3 8 7 1 187 193 1 1 7 2 288 294 1 5 7 3 82 88 2 7 9 4 421 410 2
6 8 0 416 422 2 9 7 1 68 76 2 2 7 2 240 241 1 6 7 3 15 12 14 8 9 4 63 67 3
7 8 0 220 221 2 10 7 1 110 119 2 3 7 2 404 403 1 7 7 3 102 104 2 0 10 4 409 404 3
8 8 0 67 73 3 11 7 1 141 148 2 4 7 2 76 78 1 8 7 3 103 109 2 1 10 4 77 84 3
9 8 0 71 73 4 12 7 1 57 66 6 5 7 2 284 279 1 9 7 3 128 132 2 2 10 4 365 362 2
10 8 0 179 185 3 0 8 1 17 17 8 6 7 2 222 223 1 10 7 3 207 208 2 3 10 4 141 142 2
11 8 0 138 137 4 1 8 1 317 314 1 7 7 2 182 186 2 0 8 3 79 87 2 4 10 4 155 160 2
1 9 0 113 101 2 2 8 1 75 73 1 8 7 2 67 69 2 1 8 3 91 92 1 5 10 4 45 47 4
2 9 0 132 139 2 3 8 1 544 544 1 9 7 2 23 21 7 2 8 3 134 144 1 6 10 4 353 348 2

3	9	0	342	348	2	4	8	1	47	55	2	10	7	2	116	122	2	3	8	3	438	435	1	7	10	4	89	93	3
4	9	0	320	318	2	5	8	1	90	99	1	11	7	2	158	164	2	4	8	3	108	110	1	1	11	4	160	159	2
5	9	0	574	574	2	6	8	1	75	74	2	0	8	2	222	224	2	5	8	3	8	5	8	2	11	4	179	181	2
6	9	0	128	139	2	7	8	1	265	268	2	1	8	2	51	52	2	6	8	3	124	127	2	3	11	4	0	6	1
7	9	0	545	540	3	8	8	1	127	132	2	2	8	2	196	207	1	7	8	3	396	388	2	4	11	4	259	253	2
8	9	0	79	83	4	9	8	1	103	102	2	3	8	2	38	40	2	8	8	3	69	75	2	5	11	4	270	261	2
9	9	0	285	281	3	10	8	1	257	248	2	4	8	2	516	516	1	9	8	3	157	162	2	0	12	4	294	295	4
10	9	0	187	190	3	11	8	1	72	77	3	5	8	2	116	123	1	10	8	3	183	181	2	1	12	4	119	121	3
0	10	0	635	633	4	1	9	1	216	220	1	6	8	2	478	473	2	1	9	3	215	214	1	2	12	4	443	432	2
1	10	0	109	115	2	2	9	1	397	389	1	7	8	2	260	260	1	2	9	3	222	223	1	3	12	4	80	84	3
2	10	0	407	401	2	3	9	1	228	236	1	8	8	2	239	244	2	3	9	3	205	210	2	1	0	5	405	396	2
3	10	0	201	201	2	4	9	1	17	17	6	9	8	2	152	151	2	4	9	3	175	179	1	3	0	5	451	453	2
4	10	0	173	178	3	5	9	1	79	82	2	10	8	2	368	363	2	5	9	3	51	52	3	5	0	5	677	665	3
5	10	0	53	55	4	6	9	1	159	159	1	11	8	2	50	57	5	6	9	3	84	90	2	7	0	5	189	193	3
6	10	0	502	503	3	7	9	1	134	139	2	1	9	2	602	599	2	7	9	3	114	113	2	9	0	5	56	49	8
7	10	0	110	111	3	8	9	1	517	510	2	2	9	2	119	122	1	8	9	3	486	472	2	1	1	5	112	117	1
8	10	0	333	335	3	9	9	1	245	248	3	3	9	2	277	278	1	9	9	3	219	216	2	2	1	5	90	94	1
9	10	0	41	51	8	10	9	1	89	98	3	4	9	2	326	328	1	0	10	3	134	138	2	3	1	5	253	256	1
10	10	0	329	328	4	0	10	1	251	256	2	5	9	2	19	16	7	1	10	3	108	107	2	4	1	5	97	106	1
1	11	0	217	218	2	1	10	1	267	265	1	6	9	2	133	139	2	2	10	3	0	8	1	5	1	5	260	263	1
2	11	0	230	228	3	2	10	1	117	118	2	7	9	2	285	283	1	3	10	3	115	116	2	6	1	5	151	151	2
3	11	0	100	106	3	3	10	1	168	168	1	8	9	2	84	93	2	4	10	3	222	221	1	7	1	5	18	23	11
4	11	0	322	327	2	4	10	1	167	167	2	9	9	2	316	320	2	5	10	3	178	174	2	8	1	5	60	59	3
5	11	0	291	287	2	5	10	1	113	115	2	10	9	2	149	148	2	6	10	3	70	74	2	9	1	5	143	141	2
6	11	0	115	123	4	6	10	1	9	16	9	0	10	2	452	447	2	7	10	3	213	209	2	10	1	5	299	293	3
7	11	0	308	303	3	7	10	1	98	97	2	1	10	2	64	73	2	8	10	3	138	139	2	0	2	5	194	193	2
8	11	0	17	12	16	8	10	1	223	224	2	2	10	2	170	177	1	1	11	3	174	175	2	1	2	5	364	361	2

9 11 0 368 365 4 9 10 1 20 15 18 3 10 2 148 145 2 2 11 3 392 384 2 2 2 5 97 100 2
 0 12 0 447 456 5 10 10 1 226 217 5 4 10 2 475 476 2 3 11 3 32 39 5 3 2 5 451 439 1
 1 12 0 157 153 3 1 11 1 251 260 2 5 10 2 102 105 2 4 11 3 289 284 1 4 2 5 285 285 1
 2 12 0 527 527 3 2 11 1 323 322 2 6 10 2 349 351 2 5 11 3 372 366 2 5 2 5 97 98 2
 3 12 0 100 112 4 3 11 1 10 4 9 7 10 2 200 197 2 6 11 3 23 24 9 6 2 5 0 12 1
 4 12 0 328 325 3 4 11 1 447 443 2 8 10 2 38 39 5 7 11 3 65 67 3 7 2 5 23 26 6
 5 12 0 117 116 4 5 11 1 362 356 2 9 10 2 21 25 14 0 12 3 207 204 2 8 2 5 0 1 1
 6 12 0 569 557 4 6 11 1 95 102 2 1 11 2 326 323 1 1 12 3 214 215 2 9 2 5 279 286 2
 7 12 0 0 5 1 7 11 1 29 31 7 2 11 2 209 210 2 2 12 3 73 75 2 10 2 5 73 78 3
 8 12 0 192 193 6 8 11 1 68 74 3 3 11 2 336 338 1 3 12 3 76 78 2 1 3 5 124 126 2
 1 13 0 348 341 3 9 11 1 90 91 4 4 11 2 254 252 1 4 12 3 97 96 2 2 3 5 73 76 1
 3 3 5 19 19 6 5 6 5 226 229 2 2 11 5 158 170 4 1 4 6 166 175 3 2 9 6 70 81 8
 4 3 5 167 177 1 6 6 5 27 30 7 0 0 6 622 605 14 2 4 6 390 387 2 1 0 7 489 474 3
 5 3 5 178 182 1 7 6 5 40 49 4 2 0 6 431 425 2 3 4 6 10 14 10 3 0 7 239 237 3
 6 3 5 8 17 8 8 6 5 20 19 13 4 0 6 438 437 2 4 4 6 520 515 2 5 0 7 300 298 2
 7 3 5 288 288 2 1 7 5 96 98 3 6 0 6 928 902 4 5 4 6 122 123 2 1 1 7 75 77 3
 8 3 5 301 296 2 2 7 5 184 180 3 8 0 6 335 339 4 6 4 6 654 646 3 2 1 7 136 131 2
 9 3 5 67 73 3 3 7 5 121 122 2 1 1 6 22 30 6 7 4 6 85 89 3 3 1 7 14 18 14
 10 3 5 148 145 2 4 7 5 401 398 2 2 1 6 63 69 2 1 5 6 368 374 4 4 1 7 149 141 2
 0 4 5 136 136 3 5 7 5 52 58 3 3 1 6 137 136 2 2 5 6 52 60 5 5 1 7 29 33 7
 1 4 5 34 34 5 6 7 5 121 129 2 4 1 6 23 24 5 3 5 6 47 54 5 0 2 7 35 29 9
 2 4 5 195 198 2 7 7 5 198 199 2 5 1 6 350 355 1 4 5 6 151 156 3 1 2 7 0 17 1
 3 4 5 279 284 1 8 7 5 165 162 3 6 1 6 164 167 2 5 5 6 240 248 4 2 2 7 218 214 3
 4 4 5 23 30 5 0 8 5 53 59 7 7 1 6 120 124 2 6 5 6 32 42 7 3 2 7 352 350 2
 5 4 5 192 194 2 1 8 5 283 285 4 8 1 6 106 115 2 7 5 6 184 176 3 4 2 7 40 52 5
 6 4 5 244 243 1 2 8 5 19 20 18 0 2 6 409 410 5 0 6 6 641 625 7 5 2 7 187 180 2
 7 4 5 310 308 2 3 8 5 391 388 2 1 2 6 101 108 3 1 6 6 97 122 4 1 3 7 82 81 3

8	4	5	27	33	6	4	8	5	22	19	13	2	2	6	685	673	3	2	6	6	604	596	5	2	3	7	211	215	3
9	4	5	237	235	2	5	8	5	100	104	3	3	2	6	182	182	2	3	6	6	299	297	4	3	3	7	17	16	17
1	5	5	132	135	2	6	8	5	23	6	11	4	2	6	168	172	2	4	6	6	479	475	3	4	3	7	124	121	3
2	5	5	461	460	2	7	8	5	105	105	3	5	2	6	111	115	2	5	6	6	208	203	3	5	3	7	104	105	3
3	5	5	81	82	2	1	9	5	145	137	3	6	2	6	90	97	2	6	6	6	183	188	4	0	4	7	253	250	5
4	5	5	140	144	2	2	9	5	320	321	3	7	2	6	14	9	14	1	7	6	209	209	11	1	4	7	221	228	3
5	5	5	144	142	2	3	9	5	148	150	3	8	2	6	61	60	4	2	7	6	145	142	10	2	4	7	15	23	14
6	5	5	247	254	3	4	9	5	62	71	4	1	3	6	90	89	3	3	7	6	100	102	4	3	4	7	153	158	3
7	5	5	79	77	3	5	9	5	60	71	5	2	3	6	90	88	3	4	7	6	36	53	11	4	4	7	144	135	4
8	5	5	71	75	3	6	9	5	129	135	4	3	3	6	144	147	2	5	7	6	95	96	5	1	5	7	41	49	8
9	5	5	388	377	2	0	10	5	219	222	4	4	3	6	15	10	14	0	8	6	36	42	15	2	5	7	139	144	4
0	6	5	130	134	4	1	10	5	260	265	3	5	3	6	29	26	6	1	8	6	36	34	11	3	5	7	186	178	4
1	6	5	435	432	2	2	10	5	133	135	4	6	3	6	295	295	2	2	8	6	22	7	22	0	6	7	54	61	10
2	6	5	212	210	2	3	10	5	139	136	3	7	3	6	338	339	2	3	8	6	30	37	14	1	6	7	123	126	5
3	6	5	160	160	2	4	10	5	55	56	5	8	3	6	50	49	4	4	8	6	357	351	4						
4	6	5	438	438	2	1	11	5	227	225	3	0	4	6	171	168	4	1	9	6	282	283	4						

Table 4e. Observed and calculated structure factors for G1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	1339	1356	7	4	13	0	85	86	2	4	12	1	104	105	1	0	12	2	753	743	3	0	0	4	2597	2602	9
4	0	0	1149	1121	3	5	13	0	182	184	1	5	12	1	70	69	1	1	12	2	128	127	1	2	0	4	823	836	1
6	0	0	209	202	1	6	13	0	35	37	2	6	12	1	68	68	1	2	12	2	290	293	1	4	0	4	698	702	1
8	0	0	610	613	2	0	14	0	449	450	3	7	12	1	242	240	1	3	12	2	100	100	1	6	0	4	44	38	1
10	0	0	664	660	2	1	14	0	147	148	1	1	13	1	102	103	1	4	12	2	524	520	1	8	0	4	515	514	2
12	0	0	482	488	3	2	14	0	22	23	2	2	13	1	233	233	1	5	12	2	140	140	1	10	0	4	454	459	2

1 1 0 74 107 1 3 14 0 260 257 4 3 13 1 34 32 1 6 12 2 422 422 1 1 1 4 99 101 1
2 1 0 149 148 1 4 14 0 62 63 3 4 13 1 213 212 1 7 12 2 18 15 3 2 1 4 106 108 1
3 1 0 245 243 1 1 0 1 1101 1082 3 5 13 1 91 91 1 1 13 2 366 362 1 3 1 4 23 7 1
4 1 0 0 11 1 3 0 1 814 813 2 6 13 1 238 236 1 2 13 2 128 129 1 4 1 4 44 44 1
5 1 0 870 844 2 5 0 1 1092 1067 2 0 14 1 35 37 1 3 13 2 73 78 1 5 1 4 422 437 1
6 1 0 508 497 1 7 0 1 194 202 1 1 14 1 31 30 1 4 13 2 58 57 1 6 1 4 321 325 1
7 1 0 449 440 1 9 0 1 190 198 1 2 14 1 320 315 1 5 13 2 80 84 1 7 1 4 284 284 1
8 1 0 355 346 1 11 0 1 15 4 3 3 14 1 25 25 1 0 14 2 131 131 1 8 1 4 252 254 1
9 1 0 261 278 1 13 0 1 89 87 1 0 0 2 1017 998 3 1 14 2 129 130 1 9 1 4 121 121 1
10 1 0 15 12 2 1 1 1 47 51 1 2 0 2 695 700 1 2 14 2 249 249 1 10 1 4 16 8 3
11 1 0 128 127 1 2 1 1 35 31 1 4 0 2 940 934 2 1 0 3 1118 1110 2 11 1 4 160 163 1
12 1 0 231 228 1 3 1 1 314 312 1 6 0 2 1984 1948 6 3 0 3 495 497 1 0 2 4 405 411 1
13 1 0 62 63 1 4 1 1 116 97 1 8 0 2 426 426 1 5 0 3 653 656 1 1 2 4 167 167 1
0 2 0 1077 1094 9 5 1 1 470 455 1 10 0 2 579 575 2 7 0 3 19 17 1 2 2 4 73 67 1
1 2 0 315 311 1 6 1 1 366 367 1 12 0 2 523 524 2 9 0 3 328 329 1 3 2 4 240 239 1
2 2 0 422 409 1 7 1 1 35 36 1 1 1 2 18 12 1 11 0 3 46 43 1 4 2 4 599 593 1
3 2 0 363 364 1 8 1 1 16 1 1 2 1 2 218 216 1 1 1 3 168 164 1 5 2 4 223 227 1
4 2 0 523 570 1 9 1 1 290 285 1 3 1 2 929 881 1 2 1 3 304 294 1 6 2 4 726 714 1
5 2 0 364 359 1 10 1 1 329 335 1 4 1 2 92 89 1 3 1 3 85 91 1 7 2 4 60 61 1
6 2 0 1099 1095 3 11 1 1 206 207 1 5 1 2 532 529 1 4 1 3 253 255 1 8 2 4 716 713 1
7 2 0 101 98 1 12 1 1 180 184 1 6 1 2 312 312 1 5 1 3 210 212 1 9 2 4 78 79 1
8 2 0 768 766 1 13 1 1 112 107 1 7 1 2 151 156 1 6 1 3 433 434 1 10 2 4 195 197 1
9 2 0 115 113 1 0 2 1 218 214 1 8 1 2 200 197 1 7 1 3 128 131 1 11 2 4 65 65 1
10 2 0 277 268 1 1 2 1 638 630 1 9 1 2 133 134 1 8 1 3 66 68 1 1 3 4 221 224 1
11 2 0 73 74 1 2 2 1 357 356 1 10 1 2 108 107 1 9 1 3 330 331 1 2 3 4 100 100 1
12 2 0 72 72 1 3 2 1 686 708 1 11 1 2 288 286 1 10 1 3 160 163 1 3 3 4 37 33 1
13 2 0 166 168 2 4 2 1 405 397 1 12 1 2 326 323 1 11 1 3 235 237 1 4 3 4 39 34 1

1	3	0	560	550	1	5	2	1	230	234	1	13	1	2	268	263	1	12	1	3	39	39	1	5	3	4	266	279	1
2	3	0	191	184	1	6	2	1	117	120	1	0	2	2	984	994	2	0	2	3	28	20	1	6	3	4	426	429	1
3	3	0	61	73	1	7	2	1	162	167	1	1	2	2	221	220	1	1	2	3	76	80	1	7	3	4	260	258	1
4	3	0	66	68	1	8	2	1	78	83	1	2	2	2	743	781	1	2	2	3	423	414	1	8	3	4	52	50	1
5	3	0	756	725	1	9	2	1	366	370	1	3	2	2	412	406	1	3	2	3	689	694	1	9	3	4	122	125	1
6	3	0	599	590	1	10	2	1	183	184	1	4	2	2	246	240	1	4	2	3	182	187	1	10	3	4	85	87	1
7	3	0	323	320	1	11	2	1	208	209	1	5	2	2	193	198	1	5	2	3	327	331	1	11	3	4	169	170	1
8	3	0	62	65	1	12	2	1	78	80	1	6	2	2	292	289	1	6	2	3	196	199	1	0	4	4	1246	1245	3
9	3	0	129	119	1	13	2	1	115	116	1	7	2	2	28	23	1	7	2	3	358	361	1	1	4	4	229	227	1
10	3	0	120	121	1	1	3	1	206	204	1	8	2	2	296	301	1	8	2	3	138	143	1	2	4	4	292	296	1
11	3	0	304	313	1	2	3	1	271	282	1	9	2	2	16	10	1	9	2	3	215	221	1	3	4	4	25	24	1
12	3	0	534	530	2	3	3	1	80	75	1	10	2	2	513	512	1	10	2	3	220	222	1	4	4	4	88	86	1
13	3	0	327	329	3	4	3	1	56	60	1	11	2	2	170	173	1	11	2	3	194	195	1	5	4	4	118	115	1
0	4	0	1901	2116	14	5	3	1	326	327	1	12	2	2	602	602	2	12	2	3	118	118	1	6	4	4	93	94	1
1	4	0	240	252	1	6	3	1	0	6	1	13	2	2	256	254	1	1	3	3	126	127	1	7	4	4	210	215	1
2	4	0	48	16	1	7	3	1	443	444	1	1	3	2	701	650	1	2	3	3	468	467	1	8	4	4	313	313	1
3	4	0	31	27	1	8	3	1	457	462	1	2	3	2	151	146	1	3	3	3	49	47	1	9	4	4	88	88	1
4	4	0	110	90	1	9	3	1	116	115	1	3	3	2	117	123	1	4	3	3	236	228	1	10	4	4	385	383	1
5	4	0	143	145	1	10	3	1	78	79	1	4	3	2	75	80	1	5	3	3	256	258	1	11	4	4	12	4	11
6	4	0	47	34	1	11	3	1	488	486	1	5	3	2	367	365	1	6	3	3	94	99	1	1	5	4	722	731	1
7	4	0	288	288	1	12	3	1	156	160	1	6	3	2	537	536	1	7	3	3	383	387	1	2	5	4	125	129	1
8	4	0	282	288	1	13	3	1	180	179	1	7	3	2	661	661	1	8	3	3	356	357	1	3	5	4	124	139	1
9	4	0	124	124	1	0	4	1	303	312	1	8	3	2	65	68	1	9	3	3	105	107	1	4	5	4	147	147	1
10	4	0	515	513	2	1	4	1	222	230	1	9	3	2	44	39	1	10	3	3	97	99	1	5	5	4	246	250	1
11	4	0	11	2	8	2	4	1	89	99	1	10	3	2	96	96	1	11	3	3	439	438	1	6	5	4	15	9	1
12	4	0	478	475	2	3	4	1	345	356	1	11	3	2	189	188	1	12	3	3	60	62	1	7	5	4	137	123	1
13	4	0	60	60	2	4	4	1	25	22	1	12	3	2	512	505	2	0	4	3	447	438	1	8	5	4	175	175	1

1 5 0 1234 1170 3 5 4 1 192 198 1 13 3 2 272 264 1 1 4 3 483 483 1 9 5 4 244 243 1
2 5 0 239 229 1 6 4 1 304 303 1 0 4 2 112 112 1 2 4 3 39 34 1 10 5 4 332 327 1
3 5 0 479 466 1 7 4 1 365 371 1 1 4 2 292 296 1 3 4 3 267 265 1 0 6 4 397 403 1
4 5 0 128 134 1 8 4 1 33 28 1 2 4 2 501 498 1 4 4 3 158 157 1 1 6 4 156 160 1
5 5 0 446 439 1 9 4 1 424 426 1 3 4 2 87 82 1 5 4 3 61 63 1 2 6 4 341 341 1
6 5 0 16 5 1 10 4 1 93 93 1 4 4 2 897 895 1 6 4 3 164 162 1 3 6 4 445 442 1
7 5 0 124 129 1 11 4 1 160 163 1 5 4 2 236 236 1 7 4 3 98 98 1 4 6 4 451 451 1
8 5 0 222 218 1 12 4 1 51 53 1 6 4 2 1289 1281 2 8 4 3 113 115 1 5 6 4 288 295 1
9 5 0 396 406 1 13 4 1 108 108 1 7 4 2 143 143 1 9 4 3 473 472 1 6 6 4 805 791 2
10 5 0 415 413 1 1 5 1 238 222 1 8 4 2 191 189 1 10 4 3 141 143 1 7 6 4 147 151 1
11 5 0 119 118 1 2 5 1 704 690 1 9 4 2 18 9 1 11 4 3 141 144 1 8 6 4 742 734 2
12 5 0 184 182 1 3 5 1 191 199 1 10 4 2 275 275 1 12 4 3 96 96 1 9 6 4 172 174 1
0 6 0 955 908 5 4 5 1 404 403 1 11 4 2 107 108 1 1 5 3 27 24 1 10 6 4 463 457 1
1 6 0 231 223 1 5 5 1 92 91 1 12 4 2 206 209 1 2 5 3 332 337 1 1 7 4 236 235 1
2 6 0 405 409 1 6 5 1 327 328 1 1 5 2 876 856 1 3 5 3 277 280 1 2 7 4 156 159 1
3 6 0 655 655 2 7 5 1 36 37 1 2 5 2 165 165 1 4 5 3 546 552 1 3 7 4 18 2 1
4 6 0 598 597 1 8 5 1 197 199 1 3 5 2 474 462 1 5 5 3 17 6 1 4 7 4 31 30 1
5 6 0 404 407 1 9 5 1 509 504 1 4 5 2 231 234 1 6 5 3 144 150 1 5 7 4 196 190 1
6 6 0 1196 1198 3 10 5 1 35 36 1 5 5 2 311 316 1 7 5 3 43 40 1 6 7 4 120 122 1
7 6 0 202 200 1 11 5 1 30 27 1 6 5 2 85 87 1 8 5 3 242 243 1 7 7 4 254 254 1
8 6 0 863 867 3 12 5 1 37 35 1 7 5 2 362 365 1 9 5 3 393 392 1 8 7 4 141 138 1
9 6 0 226 228 1 0 6 1 172 164 1 8 5 2 297 297 1 10 5 3 80 79 1 9 7 4 147 142 2
10 6 0 622 618 3 1 6 1 580 569 1 9 5 2 21 13 1 11 5 3 71 74 1 0 8 4 643 638 2
11 6 0 76 74 2 2 6 1 387 386 1 10 5 2 290 289 1 0 6 3 110 114 1 1 8 4 58 60 1
12 6 0 377 377 2 3 6 1 328 333 1 11 5 2 18 9 2 1 6 3 255 251 1 2 8 4 645 641 1
1 7 0 353 352 1 4 6 1 751 746 1 12 5 2 96 93 1 2 6 3 328 324 1 3 8 4 13 9 1
2 7 0 196 196 1 5 6 1 443 443 1 0 6 2 1516 1480 4 3 6 3 340 347 1 4 8 4 130 129 1

3 7 0 176 174 1 6 6 1 60 56 1 1 6 2 216 217 1 4 6 3 598 598 1 5 8 4 51 52 1
4 7 0 27 23 1 7 6 1 39 31 1 2 6 2 987 983 2 5 6 3 517 515 1 6 8 4 273 275 1
5 7 0 142 140 1 8 6 1 38 35 1 3 6 2 602 601 1 6 6 3 31 25 1 7 8 4 193 193 1
6 7 0 137 136 1 9 6 1 85 88 1 4 6 2 886 893 1 7 6 3 175 174 1 8 8 4 139 138 1
7 7 0 351 353 1 10 6 1 241 238 1 5 6 2 345 350 1 8 6 3 38 36 1 9 8 4 75 74 1
8 7 0 182 180 1 11 6 1 181 183 1 6 6 2 532 533 1 9 6 3 50 45 1 1 9 4 170 173 1
9 7 0 236 238 1 12 6 1 80 84 1 7 6 2 183 183 1 10 6 3 223 221 1 2 9 4 116 115 1
10 7 0 42 41 1 1 7 1 245 247 1 8 6 2 39 25 4 11 6 3 134 133 1 3 9 4 311 310 1
11 7 0 352 351 3 2 7 1 444 441 1 9 6 2 188 187 1 1 7 3 322 326 1 4 9 4 257 258 1
12 7 0 227 227 2 3 7 1 89 88 1 10 6 2 422 422 1 2 7 3 534 531 1 5 9 4 380 382 1
0 8 0 971 962 8 4 7 1 482 478 1 11 6 2 84 84 1 3 7 3 44 45 1 6 9 4 116 116 1
1 8 0 59 56 1 5 7 1 17 9 1 12 6 2 494 495 2 4 7 3 235 238 1 7 9 4 434 431 2
2 8 0 720 729 3 6 7 1 128 127 1 1 7 2 310 318 1 5 7 3 91 95 1 8 9 4 70 69 1
3 8 0 30 32 1 7 7 1 207 206 1 2 7 2 238 241 1 6 7 3 29 23 1 0 10 4 415 416 2
4 8 0 97 99 1 8 7 1 207 212 1 3 7 2 402 404 1 7 7 3 109 108 1 1 10 4 91 93 1
5 8 0 64 62 1 9 7 1 75 75 1 4 7 2 78 80 1 8 7 3 124 125 1 2 10 4 367 370 1
6 8 0 425 431 2 10 7 1 122 123 1 5 7 2 300 296 1 9 7 3 132 133 1 3 10 4 160 160 1
7 8 0 242 245 1 11 7 1 159 162 1 6 7 2 229 233 1 10 7 3 216 217 2 4 10 4 154 158 1
8 8 0 77 79 1 12 7 1 79 82 2 7 7 2 189 194 1 0 8 3 66 69 1 5 10 4 47 45 1
9 8 0 88 87 1 0 8 1 19 13 1 8 7 2 70 69 1 1 8 3 94 95 1 6 10 4 354 354 2
10 8 0 199 194 1 1 8 1 321 316 1 9 7 2 40 35 1 2 8 3 140 144 1 7 10 4 111 110 1
11 8 0 148 149 2 2 8 1 74 72 1 10 7 2 123 128 1 3 8 3 443 443 1 1 11 4 175 174 1
1 9 0 133 122 1 3 8 1 550 550 1 11 7 2 184 184 3 4 8 3 125 127 1 2 11 4 196 194 1
2 9 0 144 146 1 4 8 1 71 73 1 0 8 2 228 227 1 5 8 3 17 5 1 3 11 4 25 11 2
3 9 0 351 355 1 5 8 1 95 101 1 1 8 2 67 66 1 6 8 3 144 146 1 4 11 4 267 264 1
4 9 0 323 329 1 6 8 1 93 93 1 2 8 2 198 206 1 7 8 3 399 399 1 5 11 4 286 283 1
5 9 0 607 601 3 7 8 1 271 275 1 3 8 2 28 26 1 8 8 3 81 83 1 0 12 4 300 297 3

6	9	0	138	144	1	8	8	1	140	141	1	4	8	2	522	524	1	9	8	3	166	168	1	1	12	4	118	118	1
7	9	0	559	561	2	9	8	1	109	108	1	5	8	2	122	125	1	10	8	3	207	204	1	2	12	4	444	442	2
8	9	0	84	85	1	10	8	1	277	276	1	6	8	2	486	486	1	1	9	3	224	224	1	3	12	4	94	95	1
9	9	0	301	302	2	11	8	1	78	79	1	7	8	2	280	283	1	2	9	3	245	246	1	1	0	5	414	412	1
10	9	0	198	198	1	1	9	1	226	231	1	8	8	2	249	253	1	3	9	3	210	215	1	3	0	5	469	474	1
0	10	0	655	642	5	2	9	1	418	414	1	9	8	2	165	166	1	4	9	3	190	194	1	5	0	5	685	680	2
1	10	0	122	127	1	3	9	1	233	243	1	10	8	2	380	376	1	5	9	3	58	59	1	7	0	5	215	213	1
2	10	0	410	408	2	4	9	1	35	32	1	11	8	2	69	68	2	6	9	3	84	87	1	9	0	5	65	63	1
3	10	0	221	222	1	5	9	1	89	90	1	1	9	2	627	623	1	7	9	3	119	119	1	1	1	5	106	107	1
4	10	0	173	173	1	6	9	1	155	155	1	2	9	2	130	130	1	8	9	3	509	504	2	2	1	5	95	98	1
5	10	0	56	53	1	7	9	1	140	143	1	3	9	2	286	286	1	9	9	3	228	227	1	3	1	5	261	267	1
6	10	0	507	508	2	8	9	1	544	540	2	4	9	2	334	339	1	0	10	3	152	156	1	4	1	5	98	106	1
7	10	0	130	131	1	9	9	1	258	258	1	5	9	2	38	35	1	1	10	3	108	109	1	5	1	5	282	286	1
8	10	0	346	347	1	10	9	1	99	103	1	6	9	2	138	143	1	2	10	3	18	14	1	6	1	5	161	157	1
9	10	0	46	45	1	0	10	1	269	277	1	7	9	2	299	299	1	3	10	3	127	126	1	7	1	5	30	28	1
10	10	0	352	347	2	1	10	1	270	268	1	8	9	2	94	96	1	4	10	3	237	237	1	8	1	5	62	58	1
1	11	0	236	236	1	2	10	1	125	128	1	9	9	2	342	339	1	5	10	3	183	182	1	9	1	5	156	158	1
2	11	0	240	242	1	3	10	1	183	179	1	10	9	2	158	155	1	6	10	3	85	88	1	10	1	5	310	307	1
3	11	0	110	111	3	4	10	1	181	182	1	0	10	2	448	449	3	7	10	3	211	210	1	0	2	5	189	191	1
4	11	0	335	337	2	5	10	1	121	121	1	1	10	2	80	84	1	8	10	3	149	148	1	1	2	5	374	377	1
5	11	0	308	310	2	6	10	1	31	29	1	2	10	2	175	178	1	1	11	3	183	184	1	2	2	5	104	103	1
6	11	0	133	133	1	7	10	1	95	94	1	3	10	2	162	165	1	2	11	3	408	405	1	3	2	5	464	462	1
7	11	0	319	315	1	8	10	1	237	237	1	4	10	2	490	491	1	3	11	3	44	44	1	4	2	5	294	296	1
8	11	0	28	24	2	9	10	1	25	23	2	5	10	2	105	106	1	4	11	3	302	303	1	5	2	5	97	100	1
9	11	0	380	374	3	1	11	1	266	272	1	6	10	2	360	364	1	5	11	3	389	383	1	6	2	5	15	8	2
0	12	0	454	456	3	2	11	1	340	343	1	7	10	2	217	217	1	6	11	3	32	33	1	7	2	5	28	17	1
1	12	0	152	150	1	3	11	1	16	0	1	8	10	2	40	38	1	7	11	3	76	76	1	8	2	5	14	2	3

2 12 0 538 536 2 4 11 1 465 464 1 9 10 2 34 32 1 0 12 3 197 196 1 9 2 5 299 302 1
3 12 0 121 124 1 5 11 1 372 370 1 1 11 2 343 342 1 1 12 3 226 228 1 10 2 5 84 86 1
4 12 0 340 344 2 6 11 1 107 112 1 2 11 2 222 223 1 2 12 3 81 81 1 1 3 5 115 117 1
5 12 0 122 123 1 7 11 1 41 39 1 3 11 2 341 341 1 3 12 3 77 75 1 2 3 5 88 88 1
6 12 0 581 578 3 8 11 1 87 86 1 4 11 2 264 264 1 4 12 3 107 107 1 3 3 5 24 15 1
7 12 0 16 13 3 0 12 1 192 190 1 5 11 2 282 283 1 5 12 3 133 133 1 4 3 5 176 185 1
1 13 0 362 362 1 1 12 1 369 371 1 6 11 2 163 161 1 1 13 3 27 27 2 5 3 5 196 200 1
2 13 0 174 175 1 2 12 1 104 105 1 7 11 2 116 118 1 2 13 3 132 130 1 6 3 5 23 21 1
3 13 0 171 173 1 3 12 1 122 123 1 8 11 2 77 75 1 3 13 3 103 101 1 7 3 5 293 295 1
8 3 5 318 314 1 1 7 5 96 98 1 4 0 6 458 458 2 3 4 6 10 6 5 1 0 7 495 496 2
9 3 5 85 85 1 2 7 5 197 199 1 6 0 6 956 943 4 4 4 6 538 534 1 3 0 7 254 255 1
10 3 5 154 152 1 3 7 5 123 125 1 8 0 6 346 347 3 5 4 6 128 128 1 5 0 7 313 311 2
0 4 5 155 150 1 4 7 5 416 416 1 1 1 6 34 29 1 6 4 6 683 677 2 1 1 7 89 90 1
1 4 5 44 42 1 5 7 5 56 55 1 2 1 6 82 84 1 7 4 6 98 101 1 2 1 7 139 134 1
2 4 5 194 199 1 6 7 5 135 138 1 3 1 6 146 143 1 1 5 6 388 391 1 3 1 7 20 21 3
3 4 5 295 299 1 7 7 5 209 208 1 4 1 6 19 16 2 2 5 6 66 68 1 4 1 7 153 149 1
4 4 5 38 40 1 8 7 5 182 179 1 5 1 6 364 369 1 3 5 6 65 62 1 5 1 7 45 45 2
5 4 5 201 201 1 0 8 5 75 76 1 6 1 6 178 181 1 4 5 6 156 155 1 0 2 7 39 36 2
6 4 5 258 261 1 1 8 5 290 293 1 7 1 6 124 126 1 5 5 6 265 268 1 1 2 7 29 25 2
7 4 5 324 326 1 2 8 5 21 18 1 8 1 6 128 131 1 6 5 6 51 49 1 2 2 7 225 224 1
8 4 5 33 32 1 3 8 5 397 398 1 0 2 6 434 432 2 7 5 6 194 189 1 3 2 7 368 372 1
9 4 5 253 253 1 4 8 5 11 10 3 1 2 6 104 107 1 0 6 6 654 648 3 4 2 7 56 56 1
1 5 5 143 147 1 5 8 5 110 107 1 2 2 6 697 690 2 1 6 6 118 118 1 5 2 7 191 187 1
2 5 5 478 480 1 6 8 5 20 16 2 3 2 6 189 192 1 2 6 6 621 614 2 1 3 7 79 76 1
3 5 5 84 85 1 7 8 5 112 109 1 4 2 6 165 166 1 3 6 6 319 317 1 2 3 7 231 230 1
4 5 5 154 155 1 1 9 5 150 148 1 5 2 6 115 118 1 4 6 6 488 485 2 3 3 7 17 13 4
5 5 5 140 140 1 2 9 5 346 344 1 6 2 6 92 92 1 5 6 6 210 211 1 4 3 7 126 122 1

6	5	5	247	254	1	3	9	5	158	157	1	7	2	6	12	6	5	6	6	6	194	192	1	0	4	7	272	270	2
7	5	5	80	77	1	4	9	5	64	62	1	8	2	6	69	64	1	1	7	6	232	228	1	1	4	7	243	241	1
8	5	5	90	89	1	5	9	5	75	77	1	1	3	6	85	85	1	2	7	6	144	144	1	2	4	7	31	29	2
9	5	5	407	401	1	6	9	5	132	135	1	2	3	6	79	79	1	3	7	6	109	104	1	3	4	7	173	172	1
0	6	5	117	123	1	0	10	5	241	242	1	3	3	6	148	152	1	4	7	6	56	56	1	4	4	7	136	135	1
1	6	5	444	445	1	1	10	5	273	272	1	4	3	6	18	16	2	5	7	6	110	109	1	1	5	7	50	47	1
2	6	5	221	220	1	2	10	5	147	146	1	5	3	6	45	33	1	0	8	6	51	43	3	2	5	7	155	157	1
3	6	5	168	170	1	3	10	5	148	146	1	6	3	6	312	312	1	1	8	6	43	43	1	3	5	7	191	189	1
4	6	5	457	459	1	4	10	5	66	66	1	7	3	6	355	354	1	2	8	6	25	8	3	0	6	7	56	57	1
5	6	5	235	237	1	1	11	5	243	239	1	8	3	6	42	42	1	3	8	6	33	28	1						
6	6	5	41	39	1	2	11	5	182	187	3	0	4	6	183	184	1	4	8	6	363	362	1						
7	6	5	48	47	1	0	0	6	644	631	5	1	4	6	183	185	1	1	9	6	309	304	1						
8	6	5	36	26	3	2	0	6	439	432	2	2	4	6	390	391	1	2	9	6	90	88	4						

Table 4f. Observed and calculated structure factors for G2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	1373	1376	5	3	13	0	173	170	2	1	12	1	380	379	1	6	11	2	172	170	2	1	13	3	37	37	4
4	0	0	1094	1080	3	4	13	0	93	95	3	2	12	1	107	108	1	7	11	2	122	124	1	2	13	3	140	139	2
6	0	0	174	168	1	5	13	0	193	198	3	3	12	1	107	111	1	8	11	2	88	85	2	3	13	3	108	106	2
8	0	0	617	619	2	6	13	0	32	23	7	4	12	1	114	115	1	0	12	2	763	752	4	0	0	4	2550	2617	10
10	0	0	690	684	4	0	14	0	483	474	7	5	12	1	66	67	2	1	12	2	117	113	1	2	0	4	835	841	2
12	0	0	483	490	4	1	14	0	145	153	3	6	12	1	52	54	2	2	12	2	294	293	1	4	0	4	668	667	2
1	1	0	118	119	1	2	14	0	29	31	5	7	12	1	253	252	2	3	12	2	116	115	1	6	0	4	64	63	1
2	1	0	208	204	1	3	14	0	257	251	4	1	13	1	111	114	1	4	12	2	508	506	2	8	0	4	518	514	2
3	1	0	238	239	1	4	14	0	41	47	6	2	13	1	247	244	1	5	12	2	133	134	2	10	0	4	475	473	3

4 1 0 26 24 1 1 0 1 1121 1116 4 3 13 1 37 38 2 6 12 2 407 406 2 1 1 4 105 107 1
5 1 0 874 851 2 3 0 1 868 867 2 4 13 1 221 218 2 7 12 2 29 27 4 2 1 4 138 141 1
6 1 0 532 521 1 5 0 1 1089 1066 2 5 13 1 103 107 2 1 13 2 376 367 2 3 1 4 16 12 1
7 1 0 444 438 1 7 0 1 226 234 1 6 13 1 227 224 2 2 13 2 145 144 2 4 1 4 24 23 1
8 1 0 389 379 1 9 0 1 209 213 1 0 14 1 39 46 5 3 13 2 79 85 2 5 1 4 427 438 1
9 1 0 268 280 1 11 0 1 31 13 8 1 14 1 12 19 12 4 13 2 67 66 2 6 1 4 335 339 1
10 1 0 12 15 4 13 0 1 69 67 2 2 14 1 314 315 2 5 13 2 92 99 3 7 1 4 280 279 1
11 1 0 133 132 1 1 1 1 0 11 1 3 14 1 43 47 3 0 14 2 110 109 3 8 1 4 277 277 1
12 1 0 248 247 2 2 1 1 26 20 1 0 0 2 1060 1054 3 1 14 2 136 135 2 9 1 4 125 122 1
13 1 0 63 63 4 3 1 1 331 329 1 2 0 2 681 680 1 2 14 2 238 238 2 10 1 4 7 5 7
0 2 0 1031 1040 6 4 1 1 112 93 1 4 0 2 973 968 3 1 0 3 1146 1132 2 11 1 4 158 166 2
1 2 0 303 300 1 5 1 1 517 503 1 6 0 2 1956 1968 5 3 0 3 539 534 1 0 2 4 371 375 1
2 2 0 440 427 1 6 1 1 370 370 1 8 0 2 418 417 1 5 0 3 655 654 2 1 2 4 158 159 1
3 2 0 385 385 1 7 1 1 24 24 1 10 0 2 554 547 2 7 0 3 28 20 1 2 2 4 79 75 1
4 2 0 564 610 1 8 1 1 16 7 1 12 0 2 515 512 3 9 0 3 344 343 1 3 2 4 252 251 1
5 2 0 362 357 1 9 1 1 315 308 1 1 1 2 23 21 1 11 0 3 24 28 7 4 2 4 617 614 1
6 2 0 1115 1121 2 10 1 1 331 332 1 2 1 2 266 262 1 1 1 3 203 199 1 5 2 4 220 224 1
7 2 0 111 110 1 11 1 1 231 229 1 3 1 2 932 882 2 2 1 3 296 284 1 6 2 4 739 729 1
8 2 0 763 756 1 12 1 1 185 188 1 4 1 2 119 115 1 3 1 3 97 102 1 7 2 4 68 70 1
9 2 0 121 119 1 13 1 1 109 107 1 5 1 2 537 535 1 4 1 3 257 258 1 8 2 4 709 701 2
10 2 0 251 241 1 0 2 1 198 194 1 6 1 2 337 335 1 5 1 3 247 249 1 9 2 4 83 83 1
11 2 0 73 79 1 1 2 1 662 660 1 7 1 2 147 152 1 6 1 3 433 436 1 10 2 4 176 174 2
12 2 0 67 66 2 2 2 1 365 363 1 8 1 2 236 230 1 7 1 3 117 120 1 11 2 4 67 69 2
13 2 0 175 176 3 3 2 1 731 754 1 9 1 2 128 128 1 8 1 3 70 72 1 1 3 4 230 236 1
1 3 0 588 577 1 4 2 1 420 413 1 10 1 2 101 102 1 9 1 3 353 351 1 2 3 4 71 70 1
2 3 0 144 137 1 5 2 1 230 234 1 11 1 2 290 287 2 10 1 3 158 162 1 3 3 4 30 27 1
3 3 0 69 81 1 6 2 1 103 106 1 12 1 2 341 338 1 11 1 3 257 256 2 4 3 4 52 50 1

4 3 0 91 93 1 7 2 1 190 194 1 13 1 2 270 260 2 12 1 3 44 44 4 5 3 4 246 259 1
5 3 0 737 703 1 8 2 1 82 86 1 0 2 2 1014 1040 2 0 2 3 41 37 1 6 3 4 441 441 1
6 3 0 618 610 1 9 2 1 384 387 1 1 2 2 211 209 1 1 2 3 98 102 1 7 3 4 262 262 1
7 3 0 328 328 1 10 2 1 194 193 1 2 2 2 753 796 1 2 2 3 430 419 1 8 3 4 28 28 2
8 3 0 35 37 1 11 2 1 193 194 1 3 2 2 426 422 1 3 2 3 724 729 1 9 3 4 128 134 1
9 3 0 140 135 1 12 2 1 81 82 2 4 2 2 209 209 1 4 2 3 193 197 1 10 3 4 86 88 2
10 3 0 120 123 1 13 2 1 133 131 1 5 2 2 193 197 1 5 2 3 326 329 1 11 3 4 173 174 3
11 3 0 308 320 2 1 3 1 167 167 1 6 2 2 266 261 1 6 2 3 185 187 1 0 4 4 1246 1259 3
12 3 0 549 543 3 2 3 1 298 310 1 7 2 2 14 11 1 7 2 3 381 380 1 1 4 4 242 241 1
13 3 0 322 322 2 3 3 1 64 59 1 8 2 2 288 291 1 8 2 3 142 145 1 2 4 4 299 305 1
0 4 0 2111 2154 12 4 3 1 70 76 1 9 2 2 18 5 2 9 2 3 230 232 1 3 4 4 12 8 1
1 4 0 261 276 1 5 3 1 363 364 1 10 2 2 538 534 1 10 2 3 229 229 1 4 4 4 67 67 1
2 4 0 32 28 1 6 3 1 0 4 1 11 2 2 172 176 1 11 2 3 177 180 2 5 4 4 119 116 1
3 4 0 67 64 1 7 3 1 430 431 1 12 2 2 601 599 3 12 2 3 119 121 3 6 4 4 104 108 1
4 4 0 134 116 1 8 3 1 473 476 1 13 2 2 259 259 2 1 3 3 97 99 1 7 4 4 230 231 1
5 4 0 145 147 1 9 3 1 136 135 1 1 3 2 672 624 1 2 3 3 487 487 1 8 4 4 316 314 2
6 4 0 62 56 1 10 3 1 75 78 1 2 3 2 110 106 1 3 3 3 37 34 1 9 4 4 94 95 2
7 4 0 309 312 1 11 3 1 505 501 2 3 3 2 123 130 1 4 3 3 221 215 1 10 4 4 392 392 3
8 4 0 282 291 1 12 3 1 148 149 1 4 3 2 96 101 1 5 3 3 288 288 1 11 4 4 18 11 13
9 4 0 133 134 1 13 3 1 180 179 1 5 3 2 387 384 1 6 3 3 85 92 1 1 5 4 740 747 1
10 4 0 529 528 3 0 4 1 342 351 1 6 3 2 554 553 1 7 3 3 374 375 1 2 5 4 141 145 1
11 4 0 11 8 10 1 4 1 242 249 1 7 3 2 663 664 1 8 3 3 372 370 1 3 5 4 114 126 1
12 4 0 474 474 3 2 4 1 74 85 1 8 3 2 39 41 1 9 3 3 126 124 1 4 5 4 136 135 1
13 4 0 74 76 3 3 4 1 377 391 1 9 3 2 52 51 1 10 3 3 96 98 1 5 5 4 271 272 1
1 5 0 1230 1203 3 4 4 1 10 8 1 10 3 2 98 98 1 11 3 3 452 450 3 6 5 4 16 14 2
2 5 0 263 255 1 5 4 1 194 198 1 11 3 2 179 177 1 12 3 3 51 52 4 7 5 4 134 130 1
3 5 0 464 451 1 6 4 1 325 325 1 12 3 2 527 517 2 0 4 3 476 467 1 8 5 4 190 187 1

4 5 0 112 118 1 7 4 1 386 391 1 13 3 2 267 256 2 1 4 3 497 497 1 9 5 4 250 254 2
5 5 0 478 472 1 8 4 1 39 36 1 0 4 2 146 148 1 2 4 3 48 45 1 10 5 4 324 321 3
6 5 0 15 11 1 9 4 1 434 434 1 1 4 2 310 315 1 3 4 3 294 290 1 0 6 4 388 389 1
7 5 0 135 137 1 10 4 1 110 109 1 2 4 2 480 482 1 4 4 3 136 136 1 1 6 4 142 144 1
8 5 0 240 235 1 11 4 1 149 150 1 3 4 2 118 115 1 5 4 3 61 63 1 2 6 4 331 331 1
9 5 0 413 421 1 12 4 1 58 59 2 4 4 2 913 916 1 6 4 3 182 180 1 3 6 4 470 463 1
10 5 0 410 410 2 13 4 1 95 94 2 5 4 2 234 236 1 7 4 3 116 116 1 4 6 4 460 453 1
11 5 0 101 102 3 1 5 1 262 247 1 6 4 2 1284 1291 2 8 4 3 120 122 1 5 6 4 289 292 1
12 5 0 192 189 2 2 5 1 740 729 1 7 4 2 167 166 1 9 4 3 481 479 2 6 6 4 800 788 2
0 6 0 927 898 3 3 5 1 194 203 1 8 4 2 183 183 1 10 4 3 155 157 2 7 6 4 168 171 1
1 6 0 207 202 1 4 5 1 421 422 1 9 4 2 23 18 1 11 4 3 131 133 2 8 6 4 729 725 3
2 6 0 391 398 1 5 5 1 72 71 1 10 4 2 259 257 1 12 4 3 100 102 3 9 6 4 181 184 2
3 6 0 691 690 1 6 5 1 310 310 1 11 4 2 112 115 1 1 5 3 42 42 1 10 6 4 444 444 4
4 6 0 608 608 1 7 5 1 26 28 1 12 4 2 199 201 1 2 5 3 362 367 1 1 7 4 256 253 1
5 6 0 402 406 1 8 5 1 222 222 1 1 5 2 899 887 1 3 5 3 283 284 1 2 7 4 148 150 1
6 6 0 1199 1204 3 9 5 1 521 512 1 2 5 2 187 187 1 4 5 3 563 567 1 3 7 4 14 7 2
7 6 0 229 226 1 10 5 1 31 34 1 3 5 2 482 471 1 5 5 3 26 24 1 4 7 4 27 27 1
8 6 0 860 862 2 11 5 1 13 17 7 4 5 2 215 219 1 6 5 3 129 135 1 5 7 4 217 213 1
9 6 0 240 241 1 12 5 1 48 52 2 5 5 2 339 343 1 7 5 3 46 49 1 6 7 4 120 124 1
10 6 0 607 607 3 0 6 1 132 127 1 6 5 2 91 93 1 8 5 3 263 261 1 7 7 4 261 260 1
11 6 0 85 83 2 1 6 1 584 574 1 7 5 2 370 371 1 9 5 3 405 398 1 8 7 4 128 129 1
12 6 0 371 370 2 2 6 1 395 396 1 8 5 2 315 312 1 10 5 3 79 79 4 9 7 4 122 125 2
1 7 0 373 378 1 3 6 1 343 348 1 9 5 2 33 31 1 11 5 3 62 64 2 0 8 4 635 632 2
2 7 0 184 185 1 4 6 1 780 773 1 10 5 2 286 285 1 0 6 3 80 83 1 1 8 4 76 77 1
3 7 0 187 188 1 5 6 1 441 442 1 11 5 2 27 22 3 1 6 3 259 253 1 2 8 4 644 638 2
4 7 0 20 20 1 6 6 1 84 81 1 12 5 2 100 99 1 2 6 3 334 331 1 3 8 4 28 28 1
5 7 0 171 171 1 7 6 1 42 38 1 0 6 2 1464 1487 4 3 6 3 353 360 1 4 8 4 128 126 1

6 7 0 141 140 1 8 6 1 44 43 1 1 6 2 197 198 1 4 6 3 619 619 1 5 8 4 51 52 1
7 7 0 364 365 1 9 6 1 90 94 1 2 6 2 988 989 1 5 6 3 515 513 1 6 8 4 269 274 1
8 7 0 169 170 1 10 6 1 259 260 1 3 6 2 632 628 1 6 6 3 51 47 1 7 8 4 215 217 1
9 7 0 211 218 1 11 6 1 178 179 1 4 6 2 876 880 1 7 6 3 182 178 1 8 8 4 135 138 2
10 7 0 42 43 3 12 6 1 93 95 2 5 6 2 346 351 1 8 6 3 43 44 1 9 8 4 89 89 2
11 7 0 366 365 2 1 7 1 235 238 1 6 6 2 520 521 1 9 6 3 41 41 2 1 9 4 191 196 1
12 7 0 227 226 2 2 7 1 473 473 1 7 6 2 212 211 1 10 6 3 239 241 1 2 9 4 122 120 1
0 8 0 970 961 3 3 7 1 84 84 1 8 6 2 26 26 1 11 6 3 127 129 2 3 9 4 316 312 1
1 8 0 80 79 1 4 7 1 498 496 1 9 6 2 204 204 1 1 7 3 316 318 1 4 9 4 263 263 1
2 8 0 716 729 1 5 7 1 18 14 1 10 6 2 427 427 2 2 7 3 562 557 1 5 9 4 401 400 2
3 8 0 56 62 1 6 7 1 144 142 1 11 6 2 90 90 1 3 7 3 47 48 1 6 9 4 112 112 2
4 8 0 95 95 1 7 7 1 202 201 1 12 6 2 490 492 2 4 7 3 252 252 1 7 9 4 432 430 3
5 8 0 62 64 1 8 7 1 229 235 1 1 7 2 339 345 1 5 7 3 96 100 1 8 9 4 70 69 2
6 8 0 427 431 1 9 7 1 66 69 1 2 7 2 227 229 1 6 7 3 37 34 1 0 10 4 428 424 3
7 8 0 277 276 1 10 7 1 121 125 1 3 7 2 393 395 1 7 7 3 102 103 1 1 10 4 104 106 1
8 8 0 75 79 2 11 7 1 161 165 1 4 7 2 74 75 1 8 7 3 147 147 1 2 10 4 363 367 2
9 8 0 106 104 2 12 7 1 97 99 2 5 7 2 327 322 1 9 7 3 127 128 1 3 10 4 179 179 1
10 8 0 195 194 2 0 8 1 46 45 1 6 7 2 231 233 1 10 7 3 213 216 2 4 10 4 144 145 1
11 8 0 156 157 2 1 8 1 321 318 1 7 7 2 198 201 1 0 8 3 38 43 1 5 10 4 46 42 2
1 9 0 162 152 1 2 8 1 66 64 1 8 7 2 62 61 1 1 8 3 96 95 1 6 10 4 344 342 2
2 9 0 151 153 1 3 8 1 550 552 1 9 7 2 51 52 2 2 8 3 134 139 1 7 10 4 123 127 2
3 9 0 357 363 1 4 8 1 96 99 1 10 7 2 123 126 1 3 8 3 446 441 1 1 11 4 192 189 1
4 9 0 332 337 1 5 8 1 92 97 1 11 7 2 197 201 1 4 8 3 150 151 1 2 11 4 200 203 1
5 9 0 631 630 2 6 8 1 117 118 1 0 8 2 230 230 1 5 8 3 16 2 2 3 11 4 20 10 6
6 9 0 132 139 1 7 8 1 269 273 1 1 8 2 87 87 1 6 8 3 168 169 1 4 11 4 269 267 2
7 9 0 564 565 4 8 8 1 148 150 1 2 8 2 197 206 1 7 8 3 395 394 1 5 11 4 298 295 2
8 9 0 85 87 3 9 8 1 107 106 1 3 8 2 16 12 1 8 8 3 87 89 2 0 12 4 280 282 5

9	9	0	311	314	2	10	8	1	299	297	1	4	8	2	527	528	1	9	8	3	167	168	2	1	12	4	107	105	2
10	9	0	194	194	2	11	8	1	79	77	1	5	8	2	124	125	1	10	8	3	223	223	2	2	12	4	439	435	3
0	10	0	666	657	2	1	9	1	232	238	1	6	8	2	486	483	1	1	9	3	229	228	1	3	12	4	103	105	2
1	10	0	140	145	1	2	9	1	452	445	1	7	8	2	309	311	1	2	9	3	274	272	1	1	0	5	430	426	1
2	10	0	412	405	1	3	9	1	237	244	1	8	8	2	248	251	1	3	9	3	213	214	1	3	0	5	491	498	2
3	10	0	247	247	1	4	9	1	54	52	1	9	8	2	180	179	1	4	9	3	209	212	1	5	0	5	676	673	4
4	10	0	157	159	1	5	9	1	94	95	1	10	8	2	373	374	2	5	9	3	65	64	1	7	0	5	231	230	3
5	10	0	49	49	1	6	9	1	140	140	1	11	8	2	77	77	2	6	9	3	69	73	1	9	0	5	78	73	3
6	10	0	493	495	2	7	9	1	138	141	1	1	9	2	657	650	1	7	9	3	117	117	1	1	1	5	80	82	1
7	10	0	148	150	2	8	9	1	557	557	2	2	9	2	137	136	1	8	9	3	526	516	3	2	1	5	99	101	1
8	10	0	347	347	2	9	9	1	254	256	1	3	9	2	294	293	1	9	9	3	226	224	2	3	1	5	269	272	1
9	10	0	38	34	4	10	9	1	97	101	1	4	9	2	343	344	1	0	10	3	179	183	1	4	1	5	95	102	1
10	10	0	358	354	2	0	10	1	302	308	1	5	9	2	62	62	1	1	10	3	98	98	1	5	1	5	308	311	1
1	11	0	254	255	1	1	10	1	261	257	1	6	9	2	133	138	1	2	10	3	21	21	2	6	1	5	162	157	1
2	11	0	255	254	1	2	10	1	136	136	1	7	9	2	307	304	1	3	10	3	134	134	1	7	1	5	37	37	2
3	11	0	113	112	1	3	10	1	193	189	1	8	9	2	90	95	1	4	10	3	252	253	1	8	1	5	57	51	2
4	11	0	344	344	1	4	10	1	200	200	1	9	9	2	355	352	2	5	10	3	179	182	1	9	1	5	176	173	2
5	11	0	330	326	2	5	10	1	124	122	1	10	9	2	152	154	2	6	10	3	105	107	1	10	1	5	313	301	3
6	11	0	140	140	3	6	10	1	51	51	1	0	10	2	435	430	1	7	10	3	199	198	1	0	2	5	176	179	1
7	11	0	319	321	3	7	10	1	81	82	1	1	10	2	97	100	1	8	10	3	151	151	2	1	2	5	384	387	1
8	11	0	35	34	4	8	10	1	238	241	1	2	10	2	174	173	1	1	11	3	192	192	1	2	2	5	105	104	1
9	11	0	369	363	3	9	10	1	29	28	4	3	10	2	188	188	1	2	11	3	423	419	2	3	2	5	488	482	1
0	12	0	441	443	3	10	10	1	257	253	4	4	10	2	499	497	1	3	11	3	48	49	2	4	2	5	303	302	1
1	12	0	138	136	1	1	11	1	282	283	1	5	10	2	101	102	1	4	11	3	313	313	1	5	2	5	95	98	1
2	12	0	534	531	3	2	11	1	361	360	1	6	10	2	366	369	2	5	11	3	400	394	2	6	2	5	10	4	5
3	12	0	133	136	2	3	11	1	10	5	5	7	10	2	235	236	1	6	11	3	36	39	3	7	2	5	11	10	6
4	12	0	355	355	2	4	11	1	481	478	1	8	10	2	36	32	3	7	11	3	79	78	2	8	2	5	10	4	10

5 12 0 122 120 3 5 11 1 388 383 1 9 10 2 47 45 3 0 12 3 176 177 3 9 2 5 305 312 3
6 12 0 584 588 4 6 11 1 115 119 1 1 11 2 361 356 1 1 12 3 234 234 3 10 2 5 91 92 3
7 12 0 27 30 6 7 11 1 41 39 3 2 11 2 234 234 1 2 12 3 87 84 1 1 3 5 94 95 1
8 12 0 188 193 5 8 11 1 93 98 2 3 11 2 337 337 1 3 12 3 60 62 2 2 3 5 100 104 1
1 13 0 376 371 2 9 11 1 77 76 4 4 11 2 267 269 1 4 12 3 113 114 2 3 3 5 12 7 3
2 13 0 188 189 3 0 12 1 173 170 1 5 11 2 298 301 1 5 12 3 133 132 2 4 3 5 185 191 1
5 3 5 217 221 1 7 6 5 39 40 3 2 0 6 418 413 3 3 4 6 16 16 5 3 0 7 278 270 5
6 3 5 26 27 2 8 6 5 35 32 4 4 0 6 467 469 5 4 4 6 539 540 3 5 0 7 308 306 4
7 3 5 285 283 2 1 7 5 91 92 1 6 0 6 965 941 12 5 4 6 128 127 2 1 1 7 104 106 2
8 3 5 323 320 2 2 7 5 217 219 1 8 0 6 338 335 6 6 4 6 683 676 4 2 1 7 128 126 2
9 3 5 97 99 3 3 7 5 121 121 1 1 1 6 26 24 2 7 4 6 110 115 3 3 1 7 26 28 10
10 3 5 149 148 3 4 7 5 427 423 2 2 1 6 103 106 1 1 5 6 403 403 2 4 1 7 147 147 3
0 4 5 174 171 1 5 7 5 52 51 2 3 1 6 144 141 1 2 5 6 77 80 2 5 1 7 60 67 3
1 4 5 55 54 1 6 7 5 145 148 2 4 1 6 10 7 10 3 5 6 68 66 1 0 2 7 45 42 4
2 4 5 185 188 1 7 7 5 203 201 2 5 1 6 364 367 2 4 5 6 142 143 1 1 2 7 41 37 4
3 4 5 312 316 1 8 7 5 199 195 3 6 1 6 188 192 3 5 5 6 283 282 2 2 2 7 220 220 1
4 4 5 52 56 1 0 8 5 101 100 2 7 1 6 122 124 2 6 5 6 49 52 4 3 2 7 386 385 3
5 4 5 201 200 1 1 8 5 286 289 1 8 1 6 146 151 3 7 5 6 194 189 3 4 2 7 61 62 4
6 4 5 271 272 1 2 8 5 8 12 8 0 2 6 451 449 3 0 6 6 647 641 4 5 2 7 187 182 2
7 4 5 332 334 2 3 8 5 397 394 2 1 2 6 98 100 1 1 6 6 104 104 1 1 3 7 62 61 2
8 4 5 27 25 5 4 8 5 12 14 12 2 2 6 697 689 3 2 6 6 611 607 3 2 3 7 241 237 2
9 4 5 255 256 3 5 8 5 105 104 1 3 2 6 196 197 1 3 6 6 330 330 2 3 3 7 12 6 12
1 5 5 154 159 1 6 8 5 30 34 4 4 2 6 144 148 1 4 6 6 473 470 2 4 3 7 113 111 4
2 5 5 498 496 1 7 8 5 108 108 3 5 2 6 113 116 2 5 6 6 204 208 2 5 3 7 140 137 9
3 5 5 86 86 1 1 9 5 153 151 1 6 2 6 71 74 3 6 6 6 180 180 3 0 4 7 280 279 2
4 5 5 166 166 1 2 9 5 367 362 2 7 2 6 0 5 1 1 7 6 245 241 1 1 4 7 248 243 2
5 5 5 125 125 1 3 9 5 155 156 1 8 2 6 63 57 4 2 7 6 131 135 2 2 4 7 33 33 4

6	5	5	238	239	2	4	9	5	46	47	2	1	3	6	71	69	1	3	7	6	98	96	1	3	4	7	180	182	2
7	5	5	71	70	2	5	9	5	76	79	2	2	3	6	55	57	2	4	7	6	54	52	2	4	4	7	118	119	3
8	5	5	100	107	3	6	9	5	120	122	2	3	3	6	150	150	1	5	7	6	123	125	2	1	5	7	38	35	3
9	5	5	415	403	3	0	10	5	260	262	2	4	3	6	30	27	3	0	8	6	46	45	4	2	5	7	170	172	1
0	6	5	97	98	1	1	10	5	265	261	1	5	3	6	42	41	3	1	8	6	51	56	2	3	5	7	187	187	2
1	6	5	445	443	1	2	10	5	152	150	1	6	3	6	319	319	2	2	8	6	8	6	8	0	6	7	32	38	7
2	6	5	227	224	1	3	10	5	156	152	1	7	3	6	350	351	3	3	8	6	15	12	11	1	6	7	132	134	3
3	6	5	177	178	1	4	10	5	78	80	2	8	3	6	22	23	9	4	8	6	360	360	2						
4	6	5	471	471	2	1	11	5	248	246	2	0	4	6	198	199	2	1	9	6	321	316	2						
5	6	5	235	234	1	2	11	5	199	199	2	1	4	6	188	192	1	2	9	6	87	91	3						
6	6	5	53	57	3	0	0	6	651	651	5	2	4	6	375	378	2	1	0	7	509	497	4						

Table 4g. Observed and calculated structure factors for G9

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	1401	1388	8	4	13	0	97	98	2	5	12	1	64	66	2	1	12	2	104	103	1	2	0	4	845	846	2
4	0	0	1081	1054	4	5	13	0	198	199	2	6	12	1	41	43	3	2	12	2	289	289	1	4	0	4	652	650	2
6	0	0	164	150	1	6	13	0	20	14	15	7	12	1	256	251	1	3	12	2	122	120	1	6	0	4	79	75	1
8	0	0	613	620	5	0	14	0	473	472	4	1	13	1	119	118	1	4	12	2	491	488	1	8	0	4	508	513	2
10	0	0	704	696	3	1	14	0	152	152	2	2	13	1	246	245	1	5	12	2	129	129	1	10	0	4	476	483	2
12	0	0	493	486	4	2	14	0	33	34	5	3	13	1	42	40	2	6	12	2	393	389	1	1	1	4	106	109	1
1	1	0	127	125	1	3	14	0	236	237	2	4	13	1	218	216	1	7	12	2	31	34	5	2	1	4	161	162	1
2	1	0	244	239	1	4	14	0	30	35	7	5	13	1	115	115	2	1	13	2	366	363	1	3	1	4	22	13	2
3	1	0	236	236	1	1	0	1	1174	1138	3	6	13	1	211	208	2	2	13	2	148	148	1	4	1	4	17	12	2
4	1	0	55	47	1	3	0	1	910	899	2	0	14	1	37	49	5	3	13	2	71	85	2	5	1	4	426	440	1

5	1	0	883	852	2	5	0	1	1100	1063	3	1	14	1	0	11	1	4	13	2	66	71	2	6	1	4	341	346	1
6	1	0	542	532	1	7	0	1	244	255	1	2	14	1	309	303	1	5	13	2	98	103	2	7	1	4	274	275	1
7	1	0	437	433	1	9	0	1	216	223	1	3	14	1	57	59	2	0	14	2	87	89	3	8	1	4	288	288	1
8	1	0	406	394	1	11	0	1	19	23	8	0	0	2	1120	1087	4	1	14	2	129	133	1	9	1	4	122	125	1
9	1	0	267	283	1	13	0	1	54	54	4	2	0	2	674	668	1	2	14	2	222	225	2	10	1	4	0	3	1
10	1	0	20	18	4	1	1	1	30	28	1	4	0	2	1002	988	2	1	0	3	1191	1147	3	11	1	4	156	162	2
11	1	0	136	129	2	2	1	1	20	13	1	6	0	2	1996	1977	6	3	0	3	564	559	1	0	2	4	354	356	1
12	1	0	263	254	2	3	1	1	340	337	1	8	0	2	407	408	1	5	0	3	650	651	2	1	2	4	153	154	1
13	1	0	62	58	4	4	1	1	107	88	1	10	0	2	530	525	2	7	0	3	39	34	2	2	2	4	86	84	1
0	2	0	1010	1004	2	5	1	1	545	531	1	12	0	2	504	501	3	9	0	3	343	348	2	3	2	4	261	257	1
1	2	0	292	292	1	6	1	1	367	371	1	1	1	2	25	26	1	11	0	3	12	17	11	4	2	4	632	625	1
2	2	0	446	439	1	7	1	1	16	16	2	2	1	2	299	291	1	1	1	3	227	221	1	5	2	4	217	222	1
3	2	0	396	397	1	8	1	1	21	12	2	3	1	2	949	884	1	2	1	3	291	279	1	6	2	4	744	735	1
4	2	0	578	630	1	9	1	1	322	315	1	4	1	2	137	132	1	3	1	3	101	109	1	7	2	4	71	75	1
5	2	0	357	354	1	10	1	1	323	326	1	5	1	2	537	536	1	4	1	3	259	261	1	8	2	4	694	688	2
6	2	0	1139	1133	3	11	1	1	241	239	1	6	1	2	348	348	1	5	1	3	269	271	1	9	2	4	82	85	1
7	2	0	120	116	1	12	1	1	184	186	1	7	1	2	144	146	1	6	1	3	433	435	1	10	2	4	155	159	1
8	2	0	744	742	2	13	1	1	111	107	2	8	1	2	252	246	1	7	1	3	107	112	1	11	2	4	67	70	2
9	2	0	123	121	1	0	2	1	186	182	1	9	1	2	121	124	1	8	1	3	70	76	1	1	3	4	242	246	1
10	2	0	232	223	1	1	2	1	694	679	1	10	1	2	94	95	2	9	1	3	357	356	1	2	3	4	59	53	1
11	2	0	80	81	2	2	2	1	369	367	1	11	1	2	289	282	1	10	1	3	153	156	1	3	3	4	27	24	1
12	2	0	61	62	3	3	2	1	762	780	1	12	1	2	351	342	2	11	1	3	263	264	1	4	3	4	59	59	1
13	2	0	178	178	2	4	2	1	426	419	1	13	1	2	264	256	2	12	1	3	43	45	4	5	3	4	234	249	1
1	3	0	603	593	1	5	2	1	227	233	1	0	2	2	1068	1069	3	0	2	3	53	46	1	6	3	4	444	446	1
2	3	0	116	108	1	6	2	1	93	98	1	1	2	2	209	204	1	1	2	3	113	115	1	7	3	4	260	262	1
3	3	0	75	86	1	7	2	1	204	209	1	2	2	2	769	804	1	2	2	3	435	421	1	8	3	4	20	17	4
4	3	0	104	107	1	8	2	1	81	87	1	3	2	2	438	430	1	3	2	3	746	748	1	9	3	4	132	138	1

5 3 0 720 686 2 9 2 1 387 391 1 4 2 2 189 189 1 4 2 3 198 203 1 10 3 4 87 88 2
6 3 0 628 620 2 10 2 1 195 196 1 5 2 2 189 197 1 5 2 3 325 327 1 11 3 4 179 178 2
7 3 0 331 331 1 11 2 1 180 181 1 6 2 2 246 244 1 6 2 3 176 181 1 0 4 4 1286 1270 3
8 3 0 24 22 3 12 2 1 80 83 1 7 2 2 15 5 3 7 2 3 388 392 1 1 4 4 253 249 1
9 3 0 142 140 1 13 2 1 135 137 2 8 2 2 278 285 1 8 2 3 140 146 1 2 4 4 304 307 1
10 3 0 121 123 2 1 3 1 141 143 1 9 2 2 12 5 5 9 2 3 234 238 1 3 4 4 25 19 2
11 3 0 313 322 2 2 3 1 316 328 1 10 2 2 541 541 2 10 2 3 228 231 3 4 4 4 59 56 1
12 3 0 551 540 3 3 3 1 53 51 1 11 2 2 173 174 1 11 2 3 170 169 2 5 4 4 119 115 1
13 3 0 310 311 2 4 3 1 78 84 1 12 2 2 595 588 3 12 2 3 119 121 2 6 4 4 112 117 1
0 4 0 2150 2174 7 5 3 1 381 385 1 13 2 2 261 257 2 1 3 3 80 80 1 7 4 4 235 238 1
1 4 0 273 289 1 6 3 1 6 9 6 1 3 2 665 610 1 2 3 3 505 500 1 8 4 4 310 311 1
2 4 0 37 35 1 7 3 1 417 421 1 2 3 2 86 82 1 3 3 3 30 27 1 9 4 4 94 98 1
3 4 0 93 88 1 8 3 1 477 482 1 3 3 2 127 135 1 4 3 3 211 208 1 10 4 4 391 393 2
4 4 0 154 133 1 9 3 1 146 145 1 4 3 2 115 114 1 5 3 3 303 306 1 11 4 4 11 15 11
5 4 0 144 147 1 10 3 1 75 77 1 5 3 2 397 397 1 6 3 3 78 87 1 1 5 4 751 756 1
6 4 0 75 69 1 11 3 1 512 502 2 6 3 2 564 561 1 7 3 3 359 366 1 2 5 4 151 154 1
7 4 0 321 321 1 12 3 1 137 141 2 7 3 2 657 663 1 8 3 3 373 374 1 3 5 4 107 120 1
8 4 0 282 288 1 13 3 1 173 173 2 8 3 2 25 26 2 9 3 3 132 133 1 4 5 4 124 126 1
9 4 0 136 137 1 0 4 1 363 376 1 9 3 2 58 56 1 10 3 3 95 98 2 5 5 4 283 284 1
10 4 0 531 530 3 1 4 1 252 262 1 10 3 2 93 99 1 11 3 3 453 451 2 6 5 4 19 18 4
11 4 0 19 13 12 2 4 1 64 76 1 11 3 2 172 170 1 12 3 3 48 46 3 7 5 4 132 131 1
12 4 0 471 464 4 3 4 1 400 412 1 12 3 2 523 512 2 0 4 3 499 485 1 8 5 4 193 194 1
13 4 0 87 82 7 4 4 1 28 23 1 13 3 2 259 247 2 1 4 3 507 505 1 9 5 4 259 260 1
1 5 0 1254 1220 3 5 4 1 190 198 1 0 4 2 167 169 1 2 4 3 54 51 1 10 5 4 316 310 2
2 5 0 274 267 1 6 4 1 335 335 1 1 4 2 323 327 1 3 4 3 311 306 1 0 6 4 395 382 1
3 5 0 450 440 1 7 4 1 390 400 1 2 4 2 472 472 1 4 4 3 122 122 1 1 6 4 133 133 1
4 5 0 99 106 1 8 4 1 39 40 1 3 4 2 138 134 1 5 4 3 63 63 1 2 6 4 325 324 1

5 5 0 492 487 1 9 4 1 432 435 1 4 4 2 923 925 2 6 4 3 190 190 1 3 6 4 480 473 1
6 5 0 25 17 2 10 4 1 118 116 1 5 4 2 232 232 1 7 4 3 122 124 1 4 6 4 458 455 1
7 5 0 136 139 1 11 4 1 136 141 2 6 4 2 1303 1293 3 8 4 3 119 124 1 5 6 4 282 287 1
8 5 0 251 244 1 12 4 1 65 62 4 7 4 2 177 177 1 9 4 3 478 478 2 6 6 4 795 784 2
9 5 0 420 429 2 13 4 1 82 85 2 8 4 2 175 177 1 10 4 3 160 163 1 7 6 4 178 181 1
10 5 0 404 397 2 1 5 1 277 261 1 9 4 2 24 24 3 11 4 3 116 123 2 8 6 4 716 713 2
11 5 0 93 92 2 2 5 1 758 749 1 10 4 2 242 243 1 12 4 3 101 103 3 9 6 4 188 188 1
12 5 0 192 190 5 3 5 1 195 204 1 11 4 2 114 116 1 1 5 3 52 53 1 10 6 4 435 432 3
0 6 0 926 886 3 4 5 1 428 431 1 12 4 2 190 196 2 2 5 3 381 383 1 1 7 4 265 264 1
1 6 0 196 187 1 5 5 1 57 58 1 1 5 2 920 901 1 3 5 3 281 284 1 2 7 4 139 143 1
2 6 0 382 391 1 6 5 1 293 296 1 2 5 2 201 201 1 4 5 3 567 573 1 3 7 4 18 11 3
3 6 0 701 705 2 7 5 1 18 22 2 3 5 2 484 477 1 5 5 3 32 35 1 4 7 4 23 25 2
4 6 0 603 611 1 8 5 1 230 235 1 4 5 2 202 206 1 6 5 3 116 124 1 5 7 4 228 222 1
5 6 0 395 401 1 9 5 1 521 509 2 5 5 2 353 356 1 7 5 3 50 54 1 6 7 4 122 123 1
6 6 0 1201 1199 3 10 5 1 27 33 4 6 5 2 94 96 1 8 5 3 271 270 1 7 7 4 263 261 1
7 6 0 247 240 1 11 5 1 0 9 1 7 5 2 369 373 1 9 5 3 398 395 1 8 7 4 122 123 1
8 6 0 848 851 3 12 5 1 54 61 3 8 5 2 320 316 1 10 5 3 76 80 2 9 7 4 107 112 2
9 6 0 243 246 2 0 6 1 112 106 1 9 5 2 43 42 2 11 5 3 43 54 4 0 8 4 633 625 2
10 6 0 605 593 3 1 6 1 580 574 1 10 5 2 279 276 1 0 6 3 64 66 1 1 8 4 85 86 1
11 6 0 87 86 3 2 6 1 394 400 1 11 5 2 35 29 4 1 6 3 259 255 1 2 8 4 631 628 1
12 6 0 367 360 4 3 6 1 348 356 1 12 5 2 105 103 2 2 6 3 334 333 1 3 8 4 42 42 1
1 7 0 386 393 1 4 6 1 787 783 1 0 6 2 1495 1486 4 3 6 3 355 364 1 4 8 4 124 124 1
2 7 0 176 176 1 5 6 1 437 439 1 1 6 2 184 185 1 4 6 3 627 627 1 5 8 4 51 52 1
3 7 0 195 192 1 6 6 1 101 96 1 2 6 2 992 987 2 5 6 3 509 508 1 6 8 4 268 270 1
4 7 0 17 18 3 7 6 1 47 41 1 3 6 2 644 641 1 6 6 3 64 60 1 7 8 4 228 227 1
5 7 0 185 186 1 8 6 1 45 46 1 4 6 2 865 868 1 7 6 3 182 181 1 8 8 4 134 136 1
6 7 0 141 141 1 9 6 1 92 97 1 5 6 2 339 345 1 8 6 3 47 46 2 9 8 4 93 94 2

7 7 0 365 367 2 10 6 1 273 267 2 6 6 2 507 511 1 9 6 3 38 35 3 1 9 4 204 205 1
8 7 0 166 162 1 11 6 1 171 173 2 7 6 2 223 224 1 10 6 3 247 246 2 2 9 4 125 121 1
9 7 0 199 202 2 12 6 1 94 98 3 8 6 2 30 26 3 11 6 3 126 125 2 3 9 4 316 313 1
10 7 0 39 43 4 1 7 1 228 231 1 9 6 2 203 209 1 1 7 3 306 310 1 4 9 4 262 259 1
11 7 0 365 367 4 2 7 1 487 489 1 10 6 2 425 426 2 2 7 3 570 568 1 5 9 4 412 409 1
12 7 0 220 219 4 3 7 1 80 80 1 11 6 2 91 93 2 3 7 3 48 51 1 6 9 4 107 107 2
0 8 0 956 950 3 4 7 1 502 500 1 12 6 2 488 483 3 4 7 3 254 257 1 7 9 4 430 426 2
1 8 0 96 91 1 5 7 1 22 19 2 1 7 2 351 358 1 5 7 3 97 103 1 8 9 4 65 69 3
2 8 0 705 721 2 6 7 1 151 147 1 2 7 2 218 221 1 6 7 3 41 41 2 0 10 4 421 423 2
3 8 0 75 81 1 7 7 1 192 193 1 3 7 2 383 386 1 7 7 3 96 98 1 1 10 4 110 112 1
4 8 0 94 93 1 8 7 1 242 247 1 4 7 2 69 70 1 8 7 3 154 159 1 2 10 4 358 359 1
5 8 0 61 64 1 9 7 1 63 64 2 5 7 2 338 334 1 9 7 3 118 122 2 3 10 4 190 188 1
6 8 0 415 426 1 10 7 1 117 121 2 6 7 2 226 231 1 10 7 3 208 212 1 4 10 4 134 138 1
7 8 0 291 288 2 11 7 1 162 162 3 7 7 2 199 203 1 0 8 3 22 26 4 5 10 4 36 38 3
8 8 0 72 79 2 0 8 1 66 66 1 8 7 2 55 55 2 1 8 3 93 94 1 6 10 4 327 328 1
9 8 0 112 111 2 1 8 1 318 314 1 9 7 2 64 65 2 2 8 3 126 132 1 7 10 4 132 133 2
10 8 0 189 191 2 2 8 1 60 57 1 10 7 2 118 123 2 3 8 3 439 436 1 1 11 4 191 192 1
11 8 0 154 157 4 3 8 1 539 546 1 11 7 2 202 206 2 4 8 3 159 163 1 2 11 4 204 203 1
1 9 0 178 167 1 4 8 1 110 115 1 0 8 2 226 226 1 5 8 3 8 1 8 3 11 4 20 12 6
2 9 0 154 155 1 5 8 1 87 94 1 1 8 2 96 99 1 6 8 3 179 180 1 4 11 4 268 263 1
3 9 0 355 366 1 6 8 1 132 131 1 2 8 2 193 205 1 7 8 3 387 386 1 5 11 4 303 297 1
4 9 0 329 334 1 7 8 1 266 266 1 3 8 2 31 27 1 8 8 3 90 91 2 0 12 4 270 269 2
5 9 0 638 639 2 8 8 1 150 152 1 4 8 2 516 521 1 9 8 3 162 163 2 1 12 4 95 97 1
6 9 0 127 133 1 9 8 1 102 102 1 5 8 2 121 124 1 10 8 3 227 227 2 2 12 4 426 421 1
7 9 0 564 559 2 10 8 1 301 301 2 6 8 2 475 473 1 1 9 3 227 229 1 3 12 4 111 110 1
8 9 0 84 87 2 11 8 1 73 73 4 7 8 2 320 319 1 2 9 3 286 285 1 1 0 5 440 433 1
9 9 0 320 314 2 1 9 1 231 239 1 8 8 2 239 243 1 3 9 3 208 210 1 3 0 5 512 513 1

10	9	0	186	187	2	2	9	1	464	459	1	9	8	2	185	182	1	4	9	3	217	219	1	5	0	5	673	667	2
0	10	0	659	654	3	3	9	1	229	240	1	10	8	2	370	363	2	5	9	3	63	66	1	7	0	5	244	244	1
1	10	0	146	153	1	4	9	1	63	63	1	11	8	2	81	79	5	6	9	3	61	62	2	9	0	5	83	81	2
2	10	0	400	397	1	5	9	1	94	96	1	1	9	2	664	659	1	7	9	3	111	112	1	1	1	5	65	67	1
3	10	0	257	258	1	6	9	1	128	127	1	2	9	2	134	137	1	8	9	3	524	515	2	2	1	5	102	105	1
4	10	0	150	149	2	7	9	1	131	136	1	3	9	2	291	293	1	9	9	3	215	216	2	3	1	5	274	276	1
5	10	0	46	46	2	8	9	1	565	556	1	4	9	2	340	341	1	0	10	3	192	195	1	4	1	5	92	101	1
6	10	0	484	479	2	9	9	1	246	246	1	5	9	2	80	76	1	1	10	3	91	91	1	5	1	5	323	327	1
7	10	0	161	159	1	10	9	1	95	99	2	6	9	2	130	132	1	2	10	3	26	27	2	6	1	5	161	158	1
8	10	0	343	341	2	0	10	1	312	321	1	7	9	2	305	301	1	3	10	3	138	137	1	7	1	5	42	43	1
9	10	0	24	25	9	1	10	1	246	245	1	8	9	2	87	94	1	4	10	3	258	257	1	8	1	5	48	47	2
10	10	0	355	348	2	2	10	1	137	141	1	9	9	2	358	353	2	5	10	3	180	179	1	9	1	5	174	178	1
1	11	0	258	259	1	3	10	1	192	191	1	10	9	2	147	147	2	6	10	3	111	116	1	10	1	5	303	297	1
2	11	0	253	254	1	4	10	1	205	206	1	0	10	2	417	414	1	7	10	3	184	186	1	0	2	5	174	172	1
3	11	0	110	112	1	5	10	1	121	121	1	1	10	2	102	107	1	8	10	3	145	147	2	1	2	5	398	397	1
4	11	0	338	339	1	6	10	1	62	62	1	2	10	2	166	170	1	1	11	3	188	191	1	2	2	5	108	106	1
5	11	0	332	330	1	7	10	1	71	71	1	3	10	2	201	200	1	2	11	3	424	419	1	3	2	5	503	494	1
6	11	0	140	142	1	8	10	1	239	236	1	4	10	2	498	494	1	3	11	3	48	50	2	4	2	5	303	305	1
7	11	0	320	320	2	9	10	1	24	29	6	5	10	2	95	95	1	4	11	3	315	313	1	5	2	5	92	97	1
8	11	0	41	40	5	1	11	1	278	282	1	6	10	2	363	365	1	5	11	3	398	391	1	6	2	5	15	8	4
9	11	0	353	346	2	2	11	1	364	363	1	7	10	2	241	241	1	6	11	3	42	41	3	7	2	5	18	18	4
0	12	0	425	424	4	3	11	1	14	6	6	8	10	2	32	27	4	7	11	3	72	75	2	8	2	5	9	5	8
1	12	0	131	125	2	4	11	1	479	474	1	9	10	2	52	51	3	0	12	3	161	160	1	9	2	5	310	314	1
2	12	0	517	517	2	5	11	1	386	380	1	1	11	2	362	358	1	1	12	3	233	232	1	10	2	5	93	95	2
3	12	0	139	142	1	6	11	1	114	118	1	2	11	2	235	235	1	2	12	3	83	84	1	1	3	5	79	83	1
4	12	0	351	353	2	7	11	1	36	37	3	3	11	2	326	327	1	3	12	3	52	55	2	2	3	5	109	112	1
5	12	0	116	114	2	8	11	1	101	107	1	4	11	2	268	266	1	4	12	3	115	117	1	3	3	5	14	3	4

6 12 0 590 579 2 0 12 1 152 153 2 5 11 2 307 304 1 5 12 3 126 128 1 4 3 5 187 196 1
7 12 0 46 38 4 1 12 1 373 374 1 6 11 2 169 170 1 1 13 3 41 43 2 5 3 5 229 233 1
1 13 0 368 367 2 2 12 1 104 108 1 7 11 2 121 126 1 2 13 3 143 142 1 6 3 5 28 31 2
2 13 0 192 193 2 3 12 1 99 101 1 8 11 2 83 86 2 3 13 3 105 107 1 7 3 5 272 274 1
3 13 0 162 161 2 4 12 1 121 118 1 0 12 2 757 742 3 0 0 4 2658 2639 10 8 3 5 327 323 1
9 3 5 103 107 1 1 7 5 87 87 1 4 0 6 479 477 2 2 4 6 372 372 1 1 9 6 323 322 1
10 3 5 146 146 2 2 7 5 226 228 1 6 0 6 968 944 3 3 4 6 26 25 3 1 0 7 506 502 2
0 4 5 188 184 1 3 7 5 116 118 1 8 0 6 321 327 2 4 4 6 543 542 1 3 0 7 283 282 2
1 4 5 61 59 1 4 7 5 427 425 1 1 1 6 20 20 3 5 4 6 124 125 1 5 0 7 302 302 3
2 4 5 179 183 1 5 7 5 45 47 2 2 1 6 119 121 1 6 4 6 689 675 2 1 1 7 114 117 1
3 4 5 326 327 1 6 7 5 147 151 1 3 1 6 144 141 1 7 4 6 116 122 1 2 1 7 127 124 1
4 4 5 60 65 1 7 7 5 198 195 1 4 1 6 12 12 11 1 5 6 414 410 1 3 1 7 27 30 4
5 4 5 197 198 1 8 7 5 203 202 2 5 1 6 362 365 1 2 5 6 86 87 1 4 1 7 152 149 1
6 4 5 277 278 1 0 8 5 115 114 1 6 1 6 192 197 1 3 5 6 65 69 1 5 1 7 72 78 2
7 4 5 341 339 1 1 8 5 290 286 1 7 1 6 115 120 1 4 5 6 137 135 1 0 2 7 43 47 3
8 4 5 22 23 5 2 8 5 0 8 1 8 1 6 154 161 1 5 5 6 286 288 1 1 2 7 40 42 2
9 4 5 256 257 1 3 8 5 392 389 1 0 2 6 466 459 1 6 5 6 54 53 2 2 2 7 221 220 1
1 5 5 161 167 1 4 8 5 29 24 3 1 2 6 96 97 1 7 5 6 194 190 2 3 2 7 392 392 1
2 5 5 511 506 1 5 8 5 102 101 1 2 2 6 703 690 1 0 6 6 650 638 2 4 2 7 59 65 2
3 5 5 87 87 1 6 8 5 38 43 3 3 2 6 198 201 1 1 6 6 96 97 1 5 2 7 183 181 1
4 5 5 173 171 1 7 8 5 101 104 2 4 2 6 132 135 1 2 6 6 613 603 1 1 3 7 48 51 2
5 5 5 114 115 1 1 9 5 152 152 1 5 2 6 109 116 1 3 6 6 342 337 1 2 3 7 242 242 1
6 5 5 221 228 1 2 9 5 374 370 1 6 2 6 63 65 2 4 6 6 469 460 1 3 3 7 2 3 1
7 5 5 65 65 1 3 9 5 156 153 1 7 2 6 7 10 6 5 6 6 199 203 1 4 3 7 109 108 2
8 5 5 112 116 1 4 9 5 36 38 2 8 2 6 58 54 2 6 6 6 170 175 1 0 4 7 288 288 2
9 5 5 409 399 2 5 9 5 76 79 2 1 3 6 66 64 1 1 7 6 250 246 1 1 4 7 249 246 1
0 6 5 79 84 2 6 9 5 110 112 1 2 3 6 44 45 2 2 7 6 129 129 1 2 4 7 35 36 3

1	6	5	445	443	1	0	10	5	270	269	2	3	3	6	149	153	1	3	7	6	94	91	1	3	4	7	190	190	1
2	6	5	231	227	1	1	10	5	251	252	1	4	3	6	33	35	2	4	7	6	47	48	2	4	4	7	111	111	1
3	6	5	181	182	1	2	10	5	155	152	1	5	3	6	54	51	2	5	7	6	133	135	1	1	5	7	31	29	4
4	6	5	477	475	1	3	10	5	155	154	1	6	3	6	326	322	1	0	8	6	41	43	4	2	5	7	173	179	1
5	6	5	231	233	1	4	10	5	84	85	1	7	3	6	349	350	1	1	8	6	58	64	2	3	5	7	186	186	1
6	6	5	62	67	2	1	11	5	245	244	1	8	3	6	14	14	14	2	8	6	10	6	9	0	6	7	22	28	10
7	6	5	38	38	3	0	0	6	670	664	3	0	4	6	211	209	1	3	8	6	16	13	8						
8	6	5	31	34	4	2	0	6	410	406	1	1	4	6	195	198	1	4	8	6	348	352	1						