

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
1	1	0	83	78	1	-3	4	1	145	146	8	-3	10	1	54	14	25	-3	6	2	212	192	11	-5	11	2	86	95	19
0	2	0	34	15	5	-2	4	1	274	304	2	-3	0	2	68	80	11	-2	6	2	296	273	5	-4	11	2	110	106	14
2	2	0	658	682	1	-1	4	1	122	135	15	0	0	2	1287	1313	1	-1	6	2	55	9	21	-4	1	3	208	213	4
2	3	0	103	102	4	0	4	1	544	539	3	1	0	2	447	443	3	0	6	2	850	899	3	-3	1	3	421	421	3
3	3	0	296	296	3	1	4	1	129	99	7	-3	1	2	48	65	13	1	6	2	163	150	12	-2	1	3	73	64	8
0	4	0	160	158	4	2	4	1	243	247	2	-2	1	2	59	46	7	2	6	2	378	380	6	-1	1	3	270	273	2
1	4	0	37	35	16	3	4	1	137	148	6	0	1	2	34	8	13	3	6	2	232	230	9	0	1	3	209	188	5
2	4	0	367	380	4	-5	5	1	109	116	9	1	1	2	461	438	3	4	6	2	335	342	5	1	1	3	81	76	12
3	4	0	80	12	10	-4	5	1	52	23	24	-3	2	2	231	241	4	-6	7	2	67	37	16	2	1	3	53	19	20
1	5	0	733	692	2	-1	5	1	158	158	7	-2	2	2	199	233	4	-5	7	2	326	324	5	-5	2	3	275	282	5
2	5	0	45	19	11	0	5	1	168	195	4	-1	2	2	34	28	12	-4	7	2	73	21	20	-4	2	3	114	115	7
3	5	0	603	584	2	1	5	1	162	165	4	0	2	2	371	354	3	-3	7	2	77	27	20	-3	2	3	107	117	8
4	5	0	76	69	12	2	5	1	39	26	12	1	2	2	100	39	15	-2	7	2	120	107	14	-2	2	3	884	903	2
1	6	0	80	79	9	3	5	1	366	355	5	2	2	2	619	595	4	-1	7	2	171	162	10	1	2	3	116	106	10
2	6	0	118	140	6	4	5	1	87	73	9	-5	3	2	167	176	5	0	7	2	65	39	20	2	2	3	412	400	4
3	6	0	76	68	9	-5	6	1	63	61	15	-4	3	2	116	124	5	1	7	2	143	157	8	-5	3	3	552	563	3
4	6	0	292	307	3	-4	6	1	176	176	7	-1	3	2	160	162	7	2	7	2	98	71	17	-4	3	3	82	85	13
1	7	0	117	125	8	-3	6	1	46	26	30	0	3	2	124	86	9	3	7	2	75	82	17	-3	3	3	329	326	3
2	7	0	156	165	10	1	6	1	93	105	11	2	3	2	62	35	12	4	7	2	50	18	30	-2	3	3	576	575	3
3	7	0	77	9	16	2	6	1	109	117	6	-5	4	2	170	172	6	-7	8	2	61	9	23	-1	3	3	957	928	3
4	7	0	63	30	15	3	6	1	84	83	10	-4	4	2	48	31	13	-6	8	2	86	93	14	1	3	3	590	566	4
2	8	0	171	157	8	-6	7	1	49	13	20	-3	4	2	68	72	5	-5	8	2	64	18	25	2	3	3	157	157	7
3	8	0	91	17	18	-5	7	1	301	295	6	-2	4	2	413	382	3	-4	8	2	65	27	23	3	3	3	92	96	13
4	8	0	63	12	16	-4	7	1	88	85	12	-1	4	2	156	158	5	-3	8	2	91	50	25	-6	4	3	193	177	8
-2	1	1	37	30	7	-3	7	1	272	250	8	0	4	2	231	227	3	-2	8	2	129	119	12	-5	4	3	91	94	11
-1	1	1	208	247	1	-2	7	1	70	15	24	1	4	2	111	113	4	1	8	2	59	58	20	-4	4	3	102	109	7
0	1	1	148	144	2	-1	7	1	102	75	14	2	4	2	391	382	5	2	8	2	149	151	10	-3	4	3	68	43	8
1	1	1	120	136	3	1	7	1	161	176	6	3	4	2	74	69	15	3	8	2	65	3	24	-1	4	3	51	13	16
-3	2	1	43	41	8	2	7	1	89	29	18	-6	5	2	217	220	7	4	8	2	72	44	18	0	4	3	353	349	3
-2	2	1	979	1032	1	3	7	1	205	214	6	-5	5	2	71	60	12	-7	9	2	49	6	35	2	4	3	57	68	17
-1	2	1	117	133	3	4	7	1	94	89	11	-4	5	2	73	72	9	-6	9	2	59	6	28	3	4	3	98	41	19
0	2	1	346	304	1	-6	8	1	199	199	6	-3	5	2	640	621	2	-5	9	2	133	129	11	-6	5	3	35	67	34
2	2	1	736	721	2	-5	8	1	204	209	7	-2	5	2	54	6	18	-4	9	2	51	5	33	-5	5	3	109	86	11
-4	3	1	281	260	8	-4	8	1	371	363	6	-1	5	2	281	289	5	-3	9	2	63	32	24	-4	5	3	180	194	7
-3	3	1	984	972	2	-3	8	1	128	112	14	0	5	2	314	348	4	-2	9	2	117	119	11	-3	5	3	369	348	7
-2	3	1	262	303	1	-2	8	1	824	799	4	1	5	2	390	408	3	2	9	2	55	23	23	-2	5	3	81	72	14
-1	3	1	802	882	2	-6	9	1	67	60	18	2	5	2	59	10	18	3	9	2	54	12	23	-1	5	3	210	213	5
0	3	1	172	172	3	-5	9	1	457	451	5	3	5	2	835	809	3	-7	10	2	83	99	16	0	5	3	114	91	11
2	3	1	99	91	10	-3	9	1	163	154	10	-6	6	2	608	596	4	-6	10	2	71	74	22	1	5	3	94	21	16
3	3	1	377	377	7	-2	9	1	82	94	16	-5	6	2	90	87	18	-5	10	2	110	110	14	2	5	3	58	53	24
-4	4	1	39	26	14	-4	10	1	111	115	11	-4	6	2	439	416	5	-3	10	2	95	67	15	3	5	3	217	207	8

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
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

4 5 3 85 79 19	1 9 3 121 112 11	-2 4 4 187 180 8	-6 8 4 84 59 21	-5 4 5 73 74 17
-7 6 3 70 48 19	2 9 3 111 74 16	-1 4 4 91 78 14	-5 8 4 111 98 15	-4 4 5 150 152 9
-6 6 3 66 8 22	3 9 3 127 131 11	0 4 4 138 144 9	-4 8 4 129 121 14	-3 4 5 136 151 10
-5 6 3 77 68 19	4 9 3 60 53 30	1 4 4 74 20 16	-3 8 4 90 77 19	-2 4 5 133 123 11
-4 6 3 156 151 10	-6 10 3 94 101 17	2 4 4 258 262 7	-1 8 4 49 17 32	-1 4 5 65 65 20
-3 6 3 189 184 8	-5 10 3 68 17 26	3 4 4 60 49 24	0 8 4 54 49 36	1 4 5 90 81 17
-2 6 3 119 98 14	-4 10 3 131 143 13	-7 5 4 414 398 5	1 8 4 71 81 20	2 4 5 109 125 15
-1 6 3 47 36 47	2 10 3 68 33 25	-6 5 4 228 211 7	2 8 4 158 154 10	-7 5 5 163 168 10
0 6 3 145 157 7	-5 0 4 177 184 6	-5 5 4 139 150 9	3 8 4 58 71 36	-6 5 5 96 97 13
1 6 3 54 15 53	-4 0 4 770 768 3	-4 5 4 359 342 7	-6 9 4 88 75 20	-5 5 5 58 8 24
2 6 3 78 38 22	-3 0 4 645 645 3	-3 5 4 489 471 6	-5 9 4 136 143 13	-4 5 5 112 101 12
3 6 3 66 77 24	-2 0 4 49 58 12	-2 5 4 63 8 23	-4 9 4 68 47 22	-3 5 5 58 32 22
4 6 3 187 173 8	-1 0 4 114 102 9	-1 5 4 92 89 13	-3 9 4 52 43 32	-2 5 5 71 65 17
-7 7 3 173 167 9	0 0 4 615 605 3	0 5 4 233 225 8	0 9 4 44 17 44	-1 5 5 64 82 20
-6 7 3 91 93 15	-5 1 4 48 45 20	1 5 4 178 170 10	1 9 4 91 110 18	0 5 5 182 196 10
-5 7 3 235 224 9	-4 1 4 145 161 6	2 5 4 87 74 13	2 9 4 115 101 15	1 5 5 139 133 10
-4 7 3 76 15 27	-3 1 4 350 355 4	3 5 4 554 554 5	-5 1 5 69 78 16	2 5 5 72 45 21
-3 7 3 114 58 22	-2 1 4 240 238 5	-7 6 4 372 346 7	-4 1 5 165 165 8	3 5 5 125 83 17
-2 7 3 76 68 22	-1 1 4 72 64 13	-6 6 4 313 302 7	-3 1 5 126 113 11	-7 6 5 99 108 17
-1 7 3 72 42 18	0 1 4 272 286 5	-5 6 4 113 120 15	-2 1 5 79 29 22	-6 6 5 108 89 15
0 7 3 142 160 11	1 1 4 52 44 24	-4 6 4 453 440 5	-1 1 5 103 101 13	-5 6 5 58 10 28
1 7 3 48 48 26	-5 2 4 299 299 5	-3 6 4 302 281 8	0 1 5 231 246 7	-4 6 5 87 61 17
2 7 3 77 83 16	-4 2 4 163 159 6	-2 6 4 65 68 22	1 1 5 89 92 15	-3 6 5 122 113 12
3 7 3 114 125 12	-3 2 4 52 24 20	-1 6 4 72 71 13	-6 2 5 178 163 9	-2 6 5 53 45 20
4 7 3 64 7 19	-2 2 4 278 277 5	0 6 4 363 366 5	-5 2 5 251 246 6	-1 6 5 80 76 15
-7 8 3 56 8 31	-1 2 4 119 124 9	1 6 4 95 112 19	-4 2 5 63 44 19	0 6 5 128 157 11
-6 8 3 196 182 9	0 2 4 70 47 20	2 6 4 101 92 16	-3 2 5 72 32 19	1 6 5 52 26 32
-5 8 3 277 248 8	1 2 4 257 245 6	3 6 4 289 289 8	-2 2 5 338 347 6	2 6 5 94 80 19
-4 8 3 113 115 14	2 2 4 296 297 5	-6 7 4 88 65 20	-1 2 5 245 244 9	3 6 5 52 20 36
-3 8 3 82 83 16	-6 3 4 135 141 8	-5 7 4 98 110 15	0 2 5 77 56 18	-7 7 5 77 55 24
-2 8 3 636 607 5	-5 3 4 72 61 16	-4 7 4 63 68 30	1 2 5 216 212 8	-6 7 5 82 57 22
0 8 3 121 135 10	-4 3 4 52 14 25	-3 7 4 64 51 25	-6 3 5 254 248 5	-5 7 5 189 187 10
1 8 3 127 130 10	-3 3 4 75 73 14	-2 7 4 171 148 11	-5 3 5 299 291 5	-4 7 5 84 94 18
2 8 3 423 413 5	-2 3 4 61 29 21	-1 7 4 207 213 9	-4 3 5 66 58 19	-3 7 5 81 83 18
3 8 3 62 15 23	0 3 4 108 104 15	0 7 4 60 8 20	-3 3 5 73 22 20	-1 7 5 57 31 24
4 8 3 129 104 16	1 3 4 92 55 20	1 7 4 95 106 15	-2 3 5 419 424 5	0 7 5 118 116 13
-7 9 3 140 145 12	2 3 4 103 78 12	2 7 4 88 81 18	-1 3 5 438 431 5	1 7 5 109 113 15
-6 9 3 62 17 29	-6 4 4 74 54 14	3 7 4 135 119 13	0 3 5 164 175 10	-4 8 5 58 35 36
-5 9 3 184 191 9	-5 4 4 199 188 7	4 7 4 65 20 24	1 3 5 404 410 5	-5 0 6 140 144 10
-4 9 3 54 22 53	-4 4 4 55 9 22	-8 8 4 60 15 23	2 3 5 356 344 6	-4 0 6 391 378 6
-3 9 3 109 97 15	-3 4 4 90 84 13	-7 8 4 64 5 28	-6 4 5 67 29 20	-3 0 6 488 460 6

Table 4. Observed and calculated structure factors for p12_totale

Page 3

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 6 87 71 17	-5 6 6 63 20 24	5 5 0 109 93 20	-7 3 1 166 162 10	-11 6 1 94 11 32
-6 1 6 43 35 42	-4 6 6 278 277 8	6 5 0 74 52 48	-6 3 1 73 63 19	-10 6 1 102 80 28
-5 1 6 76 81 16	-3 6 6 368 377 7	7 5 0 693 668 7	-5 3 1 1045 960 3	-9 6 1 75 32 51
-4 1 6 230 219 9	-2 6 6 75 32 20	8 5 0 81 3 31	-4 3 1 234 232 11	5 6 1 94 44 30
-3 1 6 238 234 8	-1 6 6 162 147 10	9 5 0 166 172 15	-3 3 1 884 865 3	6 6 1 121 105 30
-2 1 6 53 3 31	-3 7 6 65 46 27	10 5 0 108 109 24	-2 3 1 272 270 4	7 6 1 79 4 39

-1 1 6 64 25 22	-5 1 7 55 38 25	11 5 0 122 111 26	2 3 1 73 81 57	8 6 1 88 73 29
0 1 6 104 113 13	-4 1 7 160 163 11	5 6 0 69 56 27	5 3 1 1287 1227 4	9 6 1 81 67 32
-6 2 6 59 33 25	-3 1 7 76 48 24	6 6 0 318 307 12	7 3 1 118 77 24	10 6 1 105 109 26
-5 2 6 156 158 9	-5 2 7 307 293 7	7 6 0 69 88 50	8 3 1 82 71 25	-10 7 1 114 107 32
-4 2 6 67 44 21	-4 2 7 70 12 22	8 6 0 216 227 13	-11 4 1 95 44 26	-9 7 1 83 55 46
-3 2 6 145 154 10	-3 2 7 67 48 22	9 6 0 72 35 33	-10 4 1 176 171 18	6 7 1 79 48 29
-2 2 6 173 172 9	-5 3 7 201 221 8	10 6 0 390 399 11	-9 4 1 73 11 40	7 7 1 101 121 23
-1 2 6 145 140 12	-4 3 7 76 68 17	8 7 0 74 65 33	-8 4 1 94 57 31	8 7 1 82 48 34
0 2 6 62 39 23	2 1 0 42 37 6	9 7 0 106 100 28	-7 4 1 95 66 22	9 7 1 109 85 29
-6 3 6 55 6 27	3 1 0 663 636 2	10 7 0 86 28 35	-6 4 1 55 33 27	-10 8 1 84 67 42
-5 3 6 59 17 24	4 1 0 75 17 16	9 8 0 101 35 31	-5 4 1 61 8 24	8 8 1 284 282 14
-4 3 6 58 47 25	5 1 0 310 315 9	-6 1 1 134 150 10	-4 4 1 45 23 19	9 8 1 110 12 28
-3 3 6 64 44 25	6 1 0 85 10 16	-4 1 1 70 57 14	2 4 1 256 220 11	-4 0 2 782 798 4
-2 3 6 96 99 15	1 2 0 42 16 14	-1 1 1 212 220 3	3 4 1 132 131 16	-3 0 2 62 71 11
-1 3 6 67 41 24	2 2 0 624 607 2	0 1 1 122 128 3	4 4 1 100 88 22	0 0 2 1137 1169 2
0 3 6 59 21 30	4 2 0 283 280 9	2 1 1 37 52 15	5 4 1 65 19 35	1 0 2 397 395 4
1 3 6 69 34 27	5 2 0 98 98 14	3 1 1 510 522 3	6 4 1 85 20 27	2 0 2 713 741 6
-6 4 6 60 13 25	6 2 0 116 125 17	5 1 1 59 65 17	7 4 1 120 117 19	3 0 2 134 154 9
-5 4 6 202 206 8	7 2 0 81 21 25	-8 2 1 279 283 10	8 4 1 114 112 18	-7 1 2 599 595 5
-4 4 6 64 55 24	2 3 0 93 91 10	-6 2 1 217 212 9	9 4 1 67 4 38	-6 1 2 55 4 32
-3 4 6 65 30 23	3 3 0 269 264 5	-5 2 1 183 180 7	-11 5 1 88 113 39	-5 1 2 114 107 13
-2 4 6 100 113 16	4 3 0 85 26 12	-4 2 1 405 405 3	-10 5 1 97 21 34	-4 1 2 185 187 14
-1 4 6 86 80 18	5 3 0 167 163 8	-3 2 1 47 36 11	-9 5 1 87 44 34	-3 1 2 87 58 22
0 4 6 73 70 25	6 3 0 70 4 27	-2 2 1 953 918 2	-8 5 1 177 100 25	-2 1 2 49 41 21
1 4 6 112 119 18	7 3 0 85 64 22	-1 2 1 112 119 5	-7 5 1 175 171 11	-1 1 2 68 68 11
-7 5 6 191 193 9	8 3 0 95 61 25	0 2 1 316 271 3	-6 5 1 95 95 16	0 1 2 45 7 11
-6 5 6 166 174 10	3 4 0 81 11 16	1 2 1 100 90 9	-5 5 1 98 103 11	1 1 2 333 390 3
-5 5 6 60 6 26	4 4 0 153 157 9	3 2 1 56 36 30	3 5 1 328 316 9	3 1 2 390 382 6
-4 5 6 331 320 7	5 4 0 146 145 14	4 2 1 301 305 5	4 5 1 105 65 25	4 1 2 154 149 17
-3 5 6 271 272 8	6 4 0 173 156 14	5 2 1 75 11 26	5 5 1 95 83 47	5 1 2 328 330 7
-2 5 6 61 18 27	7 4 0 73 3 33	6 2 1 289 293 8	6 5 1 88 83 27	-9 2 2 173 176 15
-1 5 6 145 134 13	8 4 0 250 261 11	7 2 1 78 45 27	7 5 1 202 203 13	-8 2 2 232 236 12
0 5 6 223 245 10	9 4 0 79 29 25	-10 3 1 85 54 32	8 5 1 77 10 36	-7 2 2 69 43 31
1 5 6 70 32 28	10 4 0 135 144 19	-9 3 1 450 441 8	9 5 1 88 62 31	-6 2 2 397 363 7
-6 6 6 73 34 21	4 5 0 78 61 29	-8 3 1 140 129 23	10 5 1 86 71 31	-5 2 2 144 182 4

Table 4. Observed and calculated structure factors for p12_totale

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 2 2 213 208 7	-10 5 2 154 145 23	2 1 3 78 16 26	1 4 3 78 30 28	-4 0 4 621 684 5
-1 2 2 61 25 30	-9 5 2 110 100 28	3 1 3 327 295 8	2 4 3 87 60 35	-3 0 4 587 574 6
0 2 2 334 316 5	-8 5 2 106 106 25	4 1 3 84 62 30	3 4 3 83 37 26	-1 0 4 87 91 14
2 2 2 535 529 3	-7 5 2 601 600 6	5 1 3 93 43 25	4 4 3 106 75 28	0 0 4 524 539 5
3 2 2 102 109 9	-6 5 2 203 195 12	-9 2 3 212 211 14	6 4 3 90 5 34	1 0 4 68 50 23
4 2 2 62 25 27	-5 5 2 56 54 33	-8 2 3 341 343 10	7 4 3 80 23 38	-7 1 4 260 268 13
5 2 2 63 22 27	-4 5 2 66 64 17	-7 2 3 103 117 22	8 4 3 95 79 34	-5 1 4 98 40 20
6 2 2 145 155 19	2 5 2 61 9 37	-6 2 3 65 43 27	-11 5 3 105 62 31	-4 1 4 149 143 16
7 2 2 91 66 24	3 5 2 762 720 6	-5 2 3 260 251 9	-10 5 3 119 116 26	-3 1 4 312 316 10
-10 3 2 84 76 30	5 5 2 112 43 40	-3 2 3 120 104 17	-9 5 3 129 131 21	-2 1 4 191 211 9
-9 3 2 52 20 51	6 5 2 82 59 33	-2 2 3 857 804 4	-8 5 3 87 42 27	-1 1 4 80 57 20
-8 3 2 113 57 23	7 5 2 368 355 11	0 2 3 52 30 18	-7 5 3 100 109 26	0 1 4 232 254 8

```

-7 3 2 102 86 21 8 5 2 137 26 22 3 2 3 85 9 28 -6 5 3 110 60 24 1 1 4 73 39 28
-4 3 2 105 111 19 9 5 2 126 145 28 4 2 3 133 105 18 -5 5 3 85 76 29 2 1 4 98 20 20
0 3 2 120 77 22 -11 6 2 102 86 37 5 2 3 120 147 17 -4 5 3 158 172 13 3 1 4 361 361 9
1 3 2 273 247 8 -10 6 2 184 206 17 6 2 3 202 205 14 1 5 3 75 19 35 -9 2 4 98 109 31
2 3 2 50 31 49 -9 6 2 69 17 68 -10 3 3 83 70 31 2 5 3 103 47 24 -8 2 4 86 76 25
4 3 2 57 20 23 -7 6 2 209 234 10 -9 3 3 494 483 8 3 5 3 215 184 20 -7 2 4 96 102 28
5 3 2 86 83 22 3 6 2 197 205 15 -8 3 3 348 336 11 4 5 3 94 70 37 -6 2 4 101 92 22
6 3 2 103 33 26 4 6 2 320 305 12 -7 3 3 85 18 30 5 5 3 114 105 30 -5 2 4 237 266 12
7 3 2 95 89 22 5 6 2 86 43 48 -5 3 3 532 501 6 6 5 3 93 57 35 -4 2 4 160 141 14
8 3 2 89 35 30 6 6 2 122 128 24 -4 3 3 89 76 26 7 5 3 129 151 28 -3 2 4 0 21 1
-11 4 2 94 73 34 7 6 2 76 13 37 -3 3 3 300 290 10 8 5 3 92 9 33 -2 2 4 218 246 8
-10 4 2 96 99 27 8 6 2 116 110 27 -2 3 3 542 512 6 -11 6 3 113 89 34 -1 2 4 138 110 16
-9 4 2 107 104 24 9 6 2 80 72 36 0 3 3 188 169 13 -10 6 3 115 102 24 0 2 4 142 42 22
-8 4 2 150 143 21 -10 7 2 85 16 41 1 3 3 536 504 6 -9 6 3 74 51 38 1 2 4 214 218 11
-7 4 2 81 34 36 5 7 2 289 274 13 2 3 3 137 140 21 -8 6 3 69 38 37 2 2 4 267 264 14
-6 4 2 97 43 18 6 7 2 80 50 34 4 3 3 119 47 26 -7 6 3 71 42 29 3 2 4 75 25 36
-5 4 2 150 153 15 7 7 2 75 29 46 5 3 3 693 655 7 -6 6 3 80 8 31 4 2 4 142 145 18
-4 4 2 66 28 20 8 7 2 86 31 38 6 3 3 154 166 18 3 6 3 90 68 37 5 2 4 79 58 32
-3 4 2 68 64 19 7 8 2 76 25 52 7 3 3 218 225 15 4 6 3 166 154 21 -11 3 4 97 9 39
1 4 2 108 101 16 -8 1 3 119 56 19 -11 4 3 81 10 37 5 6 3 94 3 34 -10 3 4 77 34 36
2 4 2 351 340 7 -7 1 3 216 227 12 -10 4 3 84 44 29 6 6 3 94 101 32 -8 3 4 95 72 26
3 4 2 65 61 35 -6 1 3 129 145 13 -9 4 3 91 87 29 7 6 3 86 31 45 -7 3 4 117 10 29
4 4 2 159 78 30 -5 1 3 143 135 12 -8 4 3 139 134 23 -10 7 3 105 62 37 -6 3 4 144 125 24
5 4 2 85 11 22 -4 1 3 192 190 8 -7 4 3 198 194 15 4 7 3 83 7 41 -5 3 4 111 54 22
6 4 2 75 24 44 -3 1 3 362 375 4 -6 4 3 179 158 19 5 7 3 154 166 19 -4 3 4 0 12 1
7 4 2 64 13 44 -2 1 3 52 57 20 -5 4 3 78 83 20 6 7 3 79 38 36 -3 3 4 63 65 32
8 4 2 129 173 22 -1 1 3 242 243 7 -4 4 3 91 97 20 -7 0 4 386 360 10 -2 3 4 73 26 27
9 4 2 90 3 29 0 1 3 165 168 7 -3 4 3 57 39 29 -6 0 4 509 488 8 0 3 4 84 93 28
-11 5 2 111 99 30 1 1 3 82 67 18 0 4 3 301 310 7 -5 0 4 182 164 17 1 3 4 91 49 24

```

Table 4. Observed and calculated structure factors for p12_totale

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 3 4 121 69 26 1 5 4 172 152 17 -8 2 5 239 249 13 -9 4 5 92 113 30 -8 1 6 99 67 30
3 3 4 100 39 25 2 5 4 83 66 41 -7 2 5 79 6 26 -8 4 5 105 119 27 -7 1 6 93 106 27
4 3 4 80 66 40 3 5 4 473 493 10 -6 2 5 137 145 22 -7 4 5 102 95 28 -6 1 6 73 31 38
5 3 4 104 105 30 4 5 4 184 183 20 -5 2 5 234 219 13 -6 4 5 72 26 33 -5 1 6 82 72 28
-12 4 4 106 113 27 5 5 4 70 14 66 -4 2 5 106 40 26 -5 4 5 76 66 35 -4 1 6 178 195 16
-11 4 4 91 88 34 6 5 4 97 53 41 -3 2 5 93 28 25 -4 4 5 139 135 19 -3 1 6 189 208 15
-10 4 4 102 101 27 -10 6 4 144 167 24 -2 2 5 283 309 9 1 4 5 92 72 27 -8 2 6 86 31 35
-9 4 4 168 179 17 -9 6 4 77 30 44 0 2 5 86 50 26 2 4 5 94 111 27 -7 2 6 83 12 36
-8 4 4 75 23 37 -8 6 4 94 26 34 1 2 5 180 189 16 3 4 5 120 109 24 -6 2 6 74 30 74
-7 4 4 94 81 28 -7 6 4 312 308 11 2 2 5 293 296 12 4 4 5 121 142 27 -5 2 6 114 140 24
-6 4 4 82 48 28 -6 6 4 235 269 13 3 2 5 75 50 35 -10 5 5 89 94 37 -4 2 6 57 39 56
-5 4 4 161 168 17 2 6 4 86 82 31 4 2 5 89 17 29 -9 5 5 79 3 46 -3 2 6 128 137 19
-4 4 4 104 8 26 3 6 4 257 257 14 -10 3 5 87 51 33 -8 5 5 91 90 33 -8 3 6 92 63 37
-3 4 4 77 75 35 4 6 4 335 348 13 -9 3 5 329 335 12 -7 5 5 162 150 20 -7 3 6 77 22 41
0 4 4 139 128 22 5 6 4 85 35 36 -8 3 5 379 373 11 -6 5 5 93 87 31 -6 3 6 74 6 53
1 4 4 74 18 54 -9 7 4 116 125 26 -7 3 5 93 71 27 -5 5 5 90 7 30 -5 3 6 94 15 29
2 4 4 243 233 17 4 7 4 75 18 74 -6 3 5 220 221 12 1 5 5 94 118 26 -4 3 6 73 42 48
3 4 4 91 43 34 -8 1 5 62 57 61 -5 3 5 240 259 12 2 5 5 63 40 62 3 3 6 87 22 35

```

4 4 4 82 21 39 -7 1 5 187 178 18 -4 3 5 84 52 28 3 5 5 100 74 28 -8 4 6 96 4 36
5 4 4 112 106 29 -6 1 5 97 129 36 -3 3 5 75 20 27 4 5 5 89 39 37 -7 4 6 87 22 38
6 4 4 81 16 41 -5 1 5 105 69 31 -1 3 5 341 383 8 -9 6 5 90 66 37 -6 4 6 73 12 72
-11 5 4 125 136 25 -4 1 5 135 147 23 0 3 5 161 156 18 -8 6 5 88 5 35 -5 4 6 152 184 21
-10 5 4 229 225 16 -3 1 5 104 101 23 1 3 5 357 365 10 -7 6 5 114 96 26 2 4 6 107 92 26
-9 5 4 81 28 38 -2 1 5 86 26 23 2 3 5 309 307 12 3 6 5 81 18 41 -7 5 6 166 172 20
-8 5 4 86 21 30 1 1 5 81 81 21 3 3 5 90 21 30 -7 0 6 330 329 12 -6 1 7 88 105 35
-7 5 4 359 355 11 2 1 5 76 17 25 4 3 5 74 44 42 -6 0 6 108 109 27 -5 1 7 95 34 31
-6 5 4 189 188 15 -10 2 5 81 31 39 5 3 5 284 296 15 -5 0 6 123 128 21 -5 2 7 254 261 15
-5 5 4 142 134 19 -9 2 5 271 261 13 -10 4 5 109 89 31 -4 0 6 324 336 10