

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 69 53 3	-2 0 2 425 335 4	-1 1 3 161 198 6	-4 0 4 820 786 6	1 9 4 113 150 37
0 2 0 36 32 12	0 0 2 1576 1698 4	1 1 3 302 312 7	-2 0 4 667 653 5	-5 1 5 78 22 29
2 2 0 880 886 2	-3 1 2 356 380 8	-4 2 3 580 535 7	0 0 4 717 657 5	-3 1 5 361 334 12
3 3 0 396 387 5	-1 1 2 83 53 14	-2 2 3 1181 1084 4	-3 1 4 590 567 7	-1 1 5 92 57 40
0 4 0 73 53 21	1 1 2 533 487 5	0 2 3 66 47 24	-1 1 4 514 530 8	1 1 5 397 392 9
2 4 0 478 499 7	-4 2 2 97 125 11	2 2 3 784 749 5	1 1 4 439 413 10	-4 2 5 292 268 12
1 5 0 979 930 3	-2 2 2 564 535 5	-5 3 3 766 741 6	-4 2 4 506 503 8	-2 2 5 337 287 13
3 5 0 1107 993 4	0 2 2 465 407 5	-1 3 3 1934 1745 4	-2 2 4 152 147 19	0 2 5 316 306 12
2 6 0 55 44 29	2 2 2 621 601 7	3 3 3 69 48 32	0 2 4 67 38 66	2 2 5 616 578 8
4 6 0 182 182 10	-3 3 2 67 90 36	-4 4 3 95 44 24	2 2 4 637 584 8	-5 3 5 626 606 8
1 7 0 328 328 7	-1 3 2 550 509 7	-2 4 3 335 329 9	-5 3 4 292 296 12	-3 3 5 109 113 27
3 7 0 112 101 20	3 3 2 70 55 23	0 4 3 623 550 6	-3 3 4 87 66 26	-1 3 5 938 854 7
2 8 0 101 75 29	-4 4 2 197 184 14	2 4 3 156 186 14	-1 3 4 168 156 17	1 3 5 419 410 11
1 1 1 369 374 3	0 4 2 307 263 6	4 4 3 272 272 16	1 3 4 210 203 18	-4 4 5 105 113 26
-2 2 1 1346 1241 2	2 4 2 668 652 6	-3 5 3 533 504 8	3 3 4 166 160 13	-2 4 5 89 60 32
0 2 1 335 283 3	4 4 2 150 166 13	-1 5 3 123 127 21	-4 4 4 220 235 12	0 4 5 78 34 42
2 2 1 1195 1224 3	-5 5 2 235 241 13	1 5 3 88 20 31	-2 4 4 197 194 16	2 4 5 107 141 30
-3 3 1 1470 1305 4	-3 5 2 933 955 4	3 5 3 171 195 15	0 4 4 181 171 20	-5 5 5 77 33 44
3 3 1 490 548 11	-1 5 2 197 240 14	-6 6 3 182 168 17	2 4 4 366 350 11	-3 5 5 97 59 31
-4 4 1 59 14 36	1 5 2 1097 993 4	-4 6 3 286 294 18	-5 5 4 315 313 11	-1 5 5 146 147 25
0 4 1 715 664 6	3 5 2 1057 977 5	-2 6 3 304 297 11	-3 5 4 1087 972 8	1 5 5 259 245 17
2 4 1 415 436 3	-6 6 2 980 875 7	0 6 3 257 227 12	-1 5 4 98 53 32	3 5 5 70 46 69
-5 5 1 200 202 12	-4 6 2 437 433 9	2 6 3 100 91 33	1 5 4 682 588 9	-6 6 5 255 276 18
-1 5 1 53 16 36	-2 6 2 282 268 15	4 6 3 434 406 8	3 5 4 645 581 9	-4 6 5 66 29 65
1 5 1 282 295 5	0 6 2 1044 948 6	-5 7 3 368 370 14	-6 6 4 624 614 10	-2 6 5 183 188 19
3 5 1 316 300 8	4 6 2 644 639 7	-3 7 3 106 101 40	-4 6 4 419 413 12	0 6 5 322 309 14
-4 6 1 423 353 10	-5 7 2 549 481 9	-1 7 3 339 296 13	-2 6 4 250 195 17	2 6 5 96 20 36
-2 6 1 53 19 52	-3 7 2 91 20 33	1 7 3 81 62 48	0 6 4 370 323 12	-5 7 5 156 175 26
2 6 1 307 310 6	-1 7 2 336 322 11	3 7 3 113 109 28	2 6 4 83 16 41	-3 7 5 176 179 22
4 6 1 199 218 10	1 7 2 105 119 30	-6 8 3 111 97 34	4 6 4 845 784 9	-1 7 5 342 348 15
-5 7 1 636 570 8	-6 8 2 74 60 43	-4 8 3 471 413 11	-7 7 4 88 70 38	1 7 5 77 80 76
-3 7 1 361 322 10	-4 8 2 124 129 26	-2 8 3 824 780 8	-5 7 4 198 190 23	-4 0 6 304 279 14
-1 7 1 251 249 11	-2 8 2 80 18 48	0 8 3 306 331 12	-3 7 4 78 75 62	-2 0 6 664 599 10
1 7 1 360 354 9	2 8 2 94 37 30	2 8 3 767 667 8	-1 7 4 487 470 10	-3 1 6 589 530 11
3 7 1 128 118 20	4 8 2 85 83 30	4 8 3 67 23 54	1 7 4 99 13 34	-1 1 6 164 167 25
-4 8 1 679 607 8	-5 9 2 229 226 17	-7 9 3 108 107 30	-6 8 4 107 33 38	-4 2 6 327 303 15
-2 8 1 1231 1145 6	-3 9 2 77 28 45	-5 9 3 143 163 24	-4 8 4 121 126 28	-2 2 6 322 268 15
2 8 1 791 791 7	3 9 2 77 14 31	1 9 3 106 37 30	-2 8 4 112 108 29	0 2 6 85 27 38
-5 9 1 551 499 9	-6 10 2 319 324 15	3 9 3 152 151 23	0 8 4 97 103 32	-5 3 6 84 92 47
-3 9 1 80 93 37	-4 10 2 110 138 28	-4 10 3 95 96 41	2 8 4 162 139 23	-3 3 6 114 119 29
-4 10 1 147 143 23	-3 1 3 809 762 5	2 10 3 97 14 36	-3 9 4 94 19 44	-1 3 6 161 155 22

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 3 6 90 15 43 -9 3 1 675 660 17 5 1 2 226 234 25 -3 1 3 768 762 8 -7 1 4 186 181 42
-6 4 6 123 129 27 -7 3 1 192 257 24 -8 2 2 565 515 18 -1 1 3 158 198 23 -5 1 4 144 121 49
-4 4 6 198 201 19 -5 3 1 1218 1233 7 -6 2 2 343 330 23 1 1 3 262 312 14 -3 1 4 552 567 17
-2 4 6 104 45 33 -3 3 1 1394 1305 6 -2 2 2 561 535 11 3 1 3 285 312 19 -1 1 4 470 530 16
0 4 6 98 9 39 3 3 1 516 548 15 0 2 2 357 407 15 5 1 3 181 90 40 1 1 4 336 413 18
-5 5 6 160 137 23 5 3 1 1927 1907 8 2 2 2 493 601 10 -8 2 3 808 753 14 3 1 4 308 311 26
-3 5 6 749 690 10 7 3 1 184 43 38 4 2 2 126 67 42 -6 2 3 229 215 31 -8 2 4 169 184 45
-1 5 6 86 70 42 -10 4 1 352 334 30 6 2 2 309 332 28 -2 2 3 1063 1084 9 -6 2 4 180 176 45
-4 6 6 126 125 25 -8 4 1 169 10 42 -9 3 2 147 150 45 0 2 3 91 47 31 -4 2 4 535 503 21
-2 6 6 398 394 14 -6 4 1 122 101 49 -7 3 2 200 202 35 4 2 3 126 14 58 -2 2 4 152 147 26
1 1 0 57 53 6 -4 4 1 87 14 36 -3 3 2 76 90 76 6 2 3 527 537 19 0 2 4 124 38 96
3 1 0 932 932 5 2 4 1 468 436 15 1 3 2 204 221 20 -9 3 3 606 576 19 2 2 4 551 584 18
5 1 0 500 529 22 4 4 1 401 434 16 3 3 2 92 55 21 -7 3 3 330 288 30 4 2 4 141 48 56
2 2 0 787 886 4 6 4 1 134 10 48 5 3 2 284 303 22 1 3 3 505 578 14 -9 3 4 195 41 37
4 2 0 319 329 21 8 4 1 161 169 37 7 3 2 135 108 54 3 3 3 194 48 45 -7 3 4 147 93 50
6 2 0 178 158 35 -11 5 1 158 161 53 -10 4 2 182 195 46 5 3 3 825 836 14 -5 3 4 253 296 37
3 3 0 353 387 12 -9 5 1 84 41 84 -8 4 2 265 280 33 7 3 3 353 363 27 -3 3 4 139 66 48
5 3 0 271 315 12 -5 5 1 148 202 21 -6 4 2 193 10 39 -10 4 3 138 110 55 1 3 4 149 203 38
7 3 0 118 10 46 3 5 1 290 300 23 -4 4 2 213 184 28 -8 4 3 209 254 41 3 3 4 176 160 46
9 3 0 147 188 45 5 5 1 118 31 80 2 4 2 600 652 12 -6 4 3 579 562 22 5 3 4 124 81 72
6 4 0 139 127 45 7 5 1 260 290 32 4 4 2 299 166 44 -4 4 3 95 44 94 7 3 4 137 60 61
8 4 0 325 333 23 9 5 1 133 19 59 6 4 2 187 70 43 2 4 3 125 186 64 -10 4 4 139 99 61
10 4 0 178 216 39 -10 6 1 156 193 65 8 4 2 155 184 43 4 4 3 259 272 42 -8 4 4 257 287 36
5 5 0 93 71 93 4 6 1 196 218 37 -11 5 2 119 45 119 6 4 3 130 80 58 -6 4 4 118 161 118
7 5 0 981 991 14 6 6 1 187 167 48 -9 5 2 287 237 29 8 4 3 143 27 71 -4 4 4 191 235 44
9 5 0 331 297 28 8 6 1 201 207 41 -7 5 2 979 952 14 -11 5 3 160 62 56 2 4 4 318 350 27
11 5 0 158 191 48 10 6 1 180 175 46 -5 5 2 207 241 31 -9 5 3 223 257 36 4 4 4 142 103 61
6 6 0 484 459 20 -9 7 1 143 61 54 3 5 2 927 977 12 -7 5 3 139 64 50 6 4 4 169 176 57
8 6 0 291 321 29 7 7 1 128 107 55 5 5 2 195 30 50 3 5 3 145 195 73 -9 5 4 239 241 37
10 6 0 462 458 26 9 7 1 246 272 38 7 5 2 654 648 20 5 5 3 167 117 53 -7 5 4 402 458 24
9 7 0 107 137 106 8 8 1 332 333 33 9 5 2 173 139 52 7 5 3 166 141 60 -5 5 4 229 313 35
-5 1 1 198 78 38 -4 0 2 1247 1219 10 -10 6 2 264 318 36 -10 6 3 274 296 43 3 5 4 511 581 20
3 1 1 559 694 9 -2 0 2 414 335 8 -6 6 2 930 875 12 -8 6 3 191 76 34 5 5 4 188 210 49
5 1 1 80 55 46 0 0 2 1481 1698 5 4 6 2 602 639 18 -6 6 3 125 168 50 -8 6 4 216 238 35
-8 2 1 513 462 21 2 0 2 1286 1389 9 6 6 2 158 116 60 4 6 3 365 406 27 -6 6 4 475 614 18
-6 2 1 274 290 25 -7 1 2 830 779 13 8 6 2 218 172 41 6 6 3 134 77 67 4 6 4 707 784 19
-4 2 1 778 801 8 -5 1 2 477 403 12 -9 7 2 163 144 61 -9 7 3 110 87 110 -7 1 5 289 298 37
-2 2 1 1320 1241 4 -3 1 2 372 380 16 5 7 2 330 343 29 5 7 3 268 275 36 -5 1 5 107 22 106
0 2 1 259 283 8 -1 1 2 68 53 33 7 7 2 123 84 76 -6 0 4 1081 976 14 -3 1 5 294 334 25
4 2 1 281 283 18 1 1 2 386 487 6 -7 1 3 332 332 27 -4 0 4 816 786 14 -1 1 5 107 57 40
6 2 1 527 574 14 3 1 2 309 340 19 -5 1 3 106 116 59 0 0 4 623 657 10 -8 2 5 744 701 20

Table 4. Observed and calculated structure factors for 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

-6 2 5 143 24 72 -7 3 5 443 447 29 -8 4 5 256 327 36 -5 5 5 125 33 56 -3 1 6 481 530 19
-4 2 5 221 268 35 -5 3 5 586 606 21 -6 4 5 190 237 45 3 5 5 137 46 54 -6 2 6 151 99 54
-2 2 5 247 287 22 -3 3 5 119 113 41 -4 4 5 260 113 37 -8 6 5 134 120 64 -4 2 6 240 303 34
2 2 5 526 578 18 1 3 5 337 410 23 2 4 5 158 141 47 -6 0 6 516 589 18 -7 3 6 130 64 82
4 2 5 154 214 53 3 3 5 375 394 26 4 4 5 356 383 29 -4 0 6 247 279 30 -5 3 6 131 92 72
-9 3 5 231 295 46 5 3 5 231 199 41 -7 5 5 202 266 43 -7 1 6 155 83 56 -6 4 6 108 129 108

