

Table 5. Observed and calculated structure factors of FR12 and DL5 samples at different pressures. (To be deposited as supplementary material)

TABLE 5: OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR FR12 in air, and at 0.26, 2.85, 3.74,4.31, 4.84, 6.35 GPa, AND for DL5 in air, and at 0.67,3.65, 4.54, 5.42 GPa

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	410	382	6	6	10	0	100	81	10	9	21	0	126	143	12	11	1	1	63	39	-22	-17	7	1	274	266	10
6	0	0	1678	1619	26	8	10	0	180	177	6	11	21	0	148	121	14	13	1	1	125	114	16	-15	7	1	0	6	-1
8	0	0	1361	1402	5	10	10	0	459	450	8	13	21	0	93	8	-34	15	1	1	168	150	15	-13	7	1	247	256	8
10	0	0	1260	1255	6	12	10	0	149	163	12	0	22	0	840	833	7	-16	2	1	102	96	16	-11	7	1	317	313	5
12	0	0	102	64	17	14	10	0	89	86	-25	2	22	0	125	122	10	-14	2	1	79	55	-18	-9	7	1	302	298	3
14	0	0	957	967	7	16	10	0	0	45	-1	4	22	0	495	495	6	-12	2	1	361	360	5	-7	7	1	636	646	3
16	0	0	69	51	-68	1	11	0	1469	1461	16	6	22	0	162	183	10	-10	2	1	220	226	5	-5	7	1	260	270	13
3	1	0	1935	1904	8	3	11	0	1264	1286	12	8	22	0	207	228	8	-8	2	1	443	439	3	-3	7	1	524	542	13
5	1	0	820	780	12	5	11	0	330	341	7	10	22	0	445	459	9	-6	2	1	310	328	20	-1	7	1	991	981	12
7	1	0	897	932	30	7	11	0	1730	1723	4	12	22	0	87	83	-34	-4	2	1	1182	1159	6	1	7	1	795	815	10
9	1	0	423	430	4	9	11	0	356	346	6	1	23	0	120	130	11	-2	2	1	71	5	-15	3	7	1	385	393	17
11	1	0	767	768	4	11	11	0	775	773	6	3	23	0	448	462	5	0	2	1	183	193	10	5	7	1	443	429	15
13	1	0	91	83	14	13	11	0	306	294	9	5	23	0	580	583	6	2	2	1	1397	1362	9	7	7	1	34	14	-33
15	1	0	87	45	-19	15	11	0	132	142	15	7	23	0	566	569	6	4	2	1	544	519	12	9	7	1	279	281	6
17	1	0	458	471	10	0	12	0	2493	2561	29	9	23	0	81	41	-23	6	2	1	488	501	18	11	7	1	679	672	7
2	2	0	82	78	9	2	12	0	189	161	27	11	23	0	272	299	10	8	2	1	174	165	5	13	7	1	39	72	-38
4	2	0	70	71	-14	4	12	0	624	612	6	0	24	0	976	968	7	10	2	1	242	244	6	15	7	1	91	93	-38
6	2	0	272	314	16	6	12	0	116	120	7	2	24	0	255	240	6	12	2	1	69	26	-31	-16	8	1	0	49	-1
8	2	0	158	153	5	8	12	0	434	443	4	4	24	0	80	93	-18	14	2	1	90	88	-23	-14	8	1	0	10	-1
10	2	0	62	52	-17	10	12	0	961	958	5	6	24	0	46	35	-46	16	2	1	267	260	13	-12	8	1	59	86	-24
12	2	0	134	118	9	12	12	0	387	395	7	8	24	0	172	178	11	-17	3	1	192	198	10	-10	8	1	125	110	6
14	2	0	185	173	9	14	12	0	377	379	10	10	24	0	325	344	9	-15	3	1	59	37	-33	-8	8	1	380	388	3
16	2	0	172	166	14	16	12	0	0	31	-1	1	25	0	290	286	7	-13	3	1	475	481	5	-6	8	1	221	226	22
1	3	0	294	295	6	1	13	0	257	281	26	3	25	0	253	250	7	-11	3	1	89	70	10	-4	8	1	253	271	12
3	3	0	837	819	6	3	13	0	219	212	8	5	25	0	92	91	-17	-9	3	1	373	368	3	-2	8	1	404	403	25
5	3	0	799	782	10	5	13	0	477	477	4	7	25	0	257	253	8	-7	3	1	324	403	24	0	8	1	127	103	-56
7	3	0	410	418	35	7	13	0	473	484	5	9	25	0	200	218	10	-5	3	1	437	429	11	2	8	1	233	232	13
9	3	0	216	216	5	9	13	0	17	11	-17	11	25	0	195	209	13	-3	3	1	1398	1397	8	4	8	1	0	9	-1
11	3	0	77	84	-15	11	13	0	248	244	7	0	26	0	173	183	15	-1	3	1	522	499	8	6	8	1	348	353	7
13	3	0	140	131	10	13	13	0	34	54	-34	2	26	0	276	268	8	1	3	1	1558	1550	10	8	8	1	50	52	-27
15	3	0	132	149	15	15	13	0	58	35	-57	4	26	0	82	74	-23	3	3	1	523	522	9	10	8	1	90	105	-19
17	3	0	277	275	11	2	14	0	652	651	5	6	26	0	96	90	-27	5	3	1	113	131	-55	12	8	1	173	162	11
0	4	0	752	760	16	4	14	0	298	312	4	8	26	0	26	51	-26	7	3	1	507	496	4	14	8	1	47	54	-46
2	4	0	1332	1332	7	6	14	0	277	277	5	10	26	0	35	67	-34	9	3	1	44	42	-43	16	8	1	76	88	-75
4	4	0	282	286	8	8	14	0	255	261	7	1	27	0	83	72	-21	11	3	1	568	572	7	-17	9	1	77	25	-76
6	4	0	162	179	-29	10	14	0	63	40	-20	3	27	0	0	13	-1	13	3	1	113	122	14	-15	9	1	245	241	15
8	4	0	279	264	4	12	14	0	433	432	6	5	27	0	224	220	10	15	3	1	114	115	20	-13	9	1	92	83	-17
10	4	0	37	34	-36	14	14	0	43	27	-42	7	27	0	233	258	10	-16	4	1	70	54	-32	-11	9	1	500	498	5
12	4	0	315	317	6	1	15	0	53	46	-20	9	27	0	75	99	-38	-14	4	1	79	56	-19	-9	9	1	65	65	-13

14	4	0	113	138	13	3	15	0	199	204	6	0	28	0	334	321	13	-12	4	1	227	229	5	-7	9	1	225	227	5
16	4	0	259	242	9	5	15	0	723	723	3	2	28	0	286	266	9	-10	4	1	184	176	5	-5	9	1	550	545	18
1	5	0	194	209	13	7	15	0	451	453	5	4	28	0	111	102	19	-8	4	1	62	72	10	-3	9	1	473	456	13
3	5	0	824	801	7	9	15	0	407	419	5	6	28	0	355	335	12	-6	4	1	100	96	-46	-1	9	1	1345	1350	41
5	5	0	222	231	12	11	15	0	153	146	9	8	28	0	228	221	15	-4	4	1	48	42	-48	1	9	1	183	177	19
7	5	0	111	120	9	13	15	0	59	45	-58	1	29	0	220	221	9	-2	4	1	64	47	-44	3	9	1	184	229	25
9	5	0	46	23	-23	15	15	0	204	162	21	3	29	0	248	232	10	0	4	1	186	178	9	5	9	1	422	433	8
11	5	0	331	336	6	0	16	0	68	70	-20	5	29	0	192	161	13	2	4	1	60	22	-35	7	9	1	204	226	6
13	5	0	54	67	-34	2	16	0	153	157	6	7	29	0	225	216	11	4	4	1	211	208	19	9	9	1	447	450	6
15	5	0	120	107	21	4	16	0	409	404	4	0	30	0	273	270	14	6	4	1	0	15	-1	11	9	1	279	282	8
17	5	0	81	51	-44	6	16	0	244	253	5	2	30	0	43	29	-42	8	4	1	0	4	-1	13	9	1	437	430	9
0	6	0	141	107	-37	8	16	0	51	66	-34	4	30	0	138	135	19	10	4	1	248	247	9	15	9	1	92	89	-38
2	6	0	71	40	-34	10	16	0	307	310	7	6	30	0	42	101	-41	12	4	1	169	166	10	-16	10	1	58	18	-57
4	6	0	215	209	9	12	16	0	85	86	-20	1	31	0	186	162	14	14	4	1	107	88	16	-14	10	1	102	105	17
6	6	0	114	127	-51	14	16	0	0	6	-1	3	31	0	331	329	9	16	4	1	70	70	-70	-12	10	1	184	183	9
8	6	0	244	242	4	1	17	0	107	106	10	5	31	0	80	13	-79	-17	5	1	552	541	7	-10	10	1	96	96	11
10	6	0	45	21	-37	3	17	0	223	221	5	0	32	0	75	107	-49	-15	5	1	247	246	8	-8	10	1	236	238	6
12	6	0	66	88	-23	5	17	0	78	67	12	2	32	0	221	217	9	-13	5	1	762	760	5	-6	10	1	402	387	6
14	6	0	27	81	-27	7	17	0	120	110	10	-16	0	1	51	63	-50	-11	5	1	101	77	9	-4	10	1	649	671	14
16	6	0	0	9	-1	9	17	0	236	233	6	-14	0	1	255	247	9	-9	5	1	967	958	3	-2	10	1	108	155	-107
1	7	0	343	320	12	11	17	0	21	26	-21	-12	0	1	122	112	16	-7	5	1	1568	1576	9	0	10	1	408	368	18
3	7	0	604	567	10	13	17	0	104	108	-20	-10	0	1	213	229	7	-5	5	1	412	420	9	2	10	1	579	596	13
5	7	0	351	388	12	0	18	0	155	145	19	-8	0	1	179	180	5	-3	5	1	1848	1853	8	4	10	1	178	143	-65
7	7	0	515	525	5	2	18	0	356	354	4	-6	0	1	205	203	15	-1	5	1	411	399	11	6	10	1	198	202	5
9	7	0	519	513	4	4	18	0	207	209	5	-4	0	1	370	363	7	1	5	1	2394	2381	9	8	10	1	220	221	7
11	7	0	49	39	-37	6	18	0	268	271	6	-2	0	1	230	224	6	3	5	1	1475	1416	8	10	10	1	263	276	7
13	7	0	60	16	-31	8	18	0	14	49	-13	0	0	1	250	241	12	5	5	1	1235	1220	17	12	10	1	74	70	-28
15	7	0	64	56	-63	10	18	0	212	214	8	2	0	1	401	376	9	7	5	1	670	655	4	14	10	1	158	124	18
0	8	0	55	18	-54	12	18	0	152	143	12	4	0	1	322	313	12	9	5	1	42	52	-41	-15	11	1	0	32	-1
2	8	0	159	161	17	14	18	0	48	8	-47	8	0	1	268	270	5	11	5	1	1262	1272	6	-13	11	1	69	66	-26
4	8	0	1262	1257	10	1	19	0	273	271	6	10	0	1	31	29	-31	13	5	1	116	125	14	-11	11	1	215	208	7
6	8	0	300	296	5	3	19	0	489	494	6	12	0	1	302	292	8	15	5	1	394	374	11	-9	11	1	91	94	11
8	8	0	106	103	8	5	19	0	61	32	-18	14	0	1	0	43	-1	-16	6	1	481	489	7	-7	11	1	99	102	8
10	8	0	845	844	4	7	19	0	520	532	5	16	0	1	184	182	17	-14	6	1	589	584	6	-5	11	1	51	29	-18
12	8	0	261	275	8	9	19	0	0	22	-1	-17	1	1	144	120	15	-12	6	1	152	165	7	-3	11	1	507	477	14
14	8	0	135	150	15	11	19	0	278	275	9	-15	1	1	122	93	13	-10	6	1	976	980	4	-1	11	1	125	137	-55
16	8	0	129	94	-24	13	19	0	112	104	-27	-13	1	1	17	12	-17	-8	6	1	105	105	6	1	11	1	147	146	26
1	9	0	952	959	13	0	20	0	811	815	17	-11	1	1	47	39	-31	-6	6	1	3192	3159	15	3	11	1	127	107	-45
3	9	0	563	608	11	2	20	0	65	28	-19	-9	1	1	24	37	-23	-4	6	1	792	777	8	5	11	1	258	263	12
5	9	0	98	76	-98	4	20	0	688	684	5	-7	1	1	122	107	-60	0	6	1	2078	2097	10	7	11	1	56	49	-18
7	9	0	1112	1113	3	6	20	0	292	299	6	-5	1	1	51	32	-51	2	6	1	2113	2036	10	9	11	1	112	96	13
9	9	0	14	27	-14	8	20	0	171	166	9	-3	1	1	552	557	5	4	6	1	2482	2467	11	11	11	1	0	56	-1
11	9	0	194	198	10	10	20	0	564	571	13	-1	1	1	357	386	5	6	6	1	706	694	19	13	11	1	0	20	-1
13	9	0	330	334	9	12	20	0	63	23	-62	1	1	1	552	558	7	8	6	1	1335	1339	8	15	11	1	104	120	-28
15	9	0	79	65	-34	1	21	0	122	114	10	3	1	1	0	54	-1	10	6	1	503	505	6	-16	12	1	150	165	13
0	10	0	868	861	25	3	21	0	28	6	-28	5	1	1	0	9	-1	12	6	1	506	507	7	-14	12	1	18	43	-18
2	10	0	331	367	16	5	21	0	222	219	7	7	1	1	0	4	-1	14	6	1	580	584	8	-12	12	1	200	190	7
4	10	0	679	680	12	7	21	0	106	105	12	9	1	1	55	17	-16	16	6	1	81	86	-80	-10	12	1	66	44	-15

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

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

-8	12	1	155	155	7	11	17	1	743	746	8	-2	24	1	173	160	10	-17	1	2	47	31	-47	-6	6	2	0	15	-1
-6	12	1	266	267	4	13	17	1	72	72	-72	0	24	1	54	34	-33	-15	1	2	241	249	7	-4	6	2	72	25	-43
-4	12	1	211	210	6	-14	18	1	158	151	13	2	24	1	81	41	-22	-13	1	2	686	696	6	-2	6	2	151	174	27
-2	12	1	223	237	22	-12	18	1	276	275	7	4	24	1	40	50	-40	-11	1	2	208	201	5	0	6	2	97	10	-97
0	12	1	390	404	27	-10	18	1	407	406	6	6	24	1	112	115	15	-9	1	2	853	856	3	2	6	2	45	55	-45
2	12	1	247	258	20	-8	18	1	356	351	5	8	24	1	86	112	-36	-7	1	2	200	193	29	4	6	2	70	8	-69
4	12	1	70	67	11	-6	18	1	901	899	5	10	24	1	84	119	-36	-5	1	2	1063	1053	6	6	6	2	288	287	5
6	12	1	259	258	4	-4	18	1	72	80	-13	-11	25	1	117	136	-23	-3	1	2	1326	1296	6	8	6	2	101	81	10
8	12	1	66	71	-18	-2	18	1	56	28	-17	-9	25	1	364	366	8	-1	1	2	287	288	10	10	6	2	79	59	-32
10	12	1	162	153	9	0	18	1	225	201	13	-7	25	1	275	281	8	3	1	2	250	255	13	12	6	2	140	144	17
12	12	1	54	31	-54	2	18	1	101	97	11	-5	25	1	112	132	16	5	1	2	2047	2008	20	14	6	2	0	88	-1
14	12	1	205	201	19	4	18	1	1119	1122	5	-3	25	1	735	738	8	7	1	2	90	81	11	-17	7	2	0	3	-1
-15	13	1	190	200	9	6	18	1	812	807	4	-1	25	1	46	16	-46	9	1	2	186	178	7	-15	7	2	211	210	9
-13	13	1	225	220	8	8	18	1	257	264	7	1	25	1	500	501	5	11	1	2	338	323	9	-13	7	2	112	101	10
-11	13	1	0	35	-1	10	18	1	182	194	11	3	25	1	306	318	8	13	1	2	221	199	19	-11	7	2	189	189	5
-9	13	1	168	172	7	12	18	1	185	180	12	5	25	1	326	329	7	15	1	2	398	383	17	-9	7	2	34	9	-33
-7	13	1	208	211	5	-13	19	1	210	206	9	7	25	1	239	239	9	-16	2	2	37	17	-36	-7	7	2	336	330	4
-5	13	1	63	67	-13	-11	19	1	23	15	-23	9	25	1	138	125	-37	-14	2	2	118	122	10	-5	7	2	299	348	18
-3	13	1	177	187	6	-9	19	1	148	140	12	-10	26	1	163	185	15	-12	2	2	243	250	5	-3	7	2	114	130	-22
-1	13	1	431	469	17	-7	19	1	426	425	4	-8	26	1	79	95	-24	-10	2	2	155	157	5	-1	7	2	582	604	17
1	13	1	762	803	25	-5	19	1	117	133	9	-6	26	1	423	429	8	-8	2	2	34	7	-24	1	7	2	383	413	27
3	13	1	263	246	4	-3	19	1	226	225	6	-4	26	1	179	140	13	-6	2	2	0	93	-1	3	7	2	317	319	22
5	13	1	175	167	6	-1	19	1	85	83	-18	-2	26	1	144	144	11	-4	2	2	40	21	-40	5	7	2	70	91	-20
7	13	1	270	264	5	1	19	1	514	511	5	0	26	1	347	343	6	-2	2	2	139	141	10	7	7	2	291	291	5
9	13	1	81	97	-19	3	19	1	216	213	6	2	26	1	132	146	14	0	2	2	0	39	-1	9	7	2	182	186	13
11	13	1	52	37	-52	5	19	1	243	236	6	4	26	1	328	318	12	2	2	2	176	148	14	11	7	2	191	216	13
13	13	1	106	93	-21	7	19	1	139	138	9	6	26	1	38	60	-37	4	2	2	257	284	20	13	7	2	128	115	-31
15	13	1	146	183	-35	9	19	1	0	40	-1	8	26	1	268	271	13	6	2	2	57	56	-44	15	7	2	0	111	-1
-16	14	1	447	425	8	11	19	1	274	288	10	10	26	1	109	6	-61	8	2	2	58	35	-21	-16	8	2	293	297	8
-14	14	1	289	283	7	13	19	1	100	93	-29	-9	27	1	87	119	-29	10	2	2	104	59	13	-14	8	2	27	9	-27
-12	14	1	20	50	-19	-14	20	1	68	85	-62	-7	27	1	183	207	10	12	2	2	173	177	15	-12	8	2	276	280	5
-10	14	1	748	750	5	-12	20	1	204	212	9	-5	27	1	155	162	16	14	2	2	109	48	-40	-10	8	2	38	11	-37
-8	14	1	169	157	7	-10	20	1	130	118	14	-3	27	1	82	105	-24	-17	3	2	166	166	10	-8	8	2	185	191	4
-6	14	1	667	684	4	-8	20	1	427	434	5	-1	27	1	225	229	7	-15	3	2	65	40	-31	-6	8	2	600	609	6
-4	14	1	74	78	10	-6	20	1	0	39	-1	1	27	1	120	134	12	-13	3	2	59	64	-20	-4	8	2	784	741	18
-2	14	1	1029	1032	4	-4	20	1	396	406	6	3	27	1	171	189	14	-11	3	2	403	407	4	-2	8	2	1166	1175	16
0	14	1	611	617	7	-2	20	1	293	289	6	5	27	1	222	226	11	-9	3	2	703	705	3	0	8	2	157	158	-42
2	14	1	216	211	6	0	20	1	320	321	7	7	27	1	23	81	-22	-7	3	2	634	635	20	2	8	2	203	194	-48
4	14	1	1347	1364	4	2	20	1	437	440	5	9	27	1	128	135	-28	-5	3	2	37	38	-37	4	8	2	443	435	18
6	14	1	21	18	-21	4	20	1	109	87	15	-8	28	1	95	62	-22	-3	3	2	762	723	5	6	8	2	74	80	12
8	14	1	436	437	7	6	20	1	566	564	5	-6	28	1	409	421	16	-1	3	2	47	90	-46	8	8	2	443	431	6
10	14	1	315	323	7	8	20	1	181	163	11	-4	28	1	84	78	-24	1	3	2	350	285	11	10	8	2	244	267	11
12	14	1	323	327	9	10	20	1	0	17	-1	-2	28	1	0	27	-1	3	3	2	548	523	19	12	8	2	467	457	10
14	14	1	234	221	13	12	20	1	197	191	12	0	28	1	273	273	7	5	3	2	968	952	19	14	8	2	0	9	-1
-15	15	1	0	18	-1	-13	21	1	253	254	9	2	28	1	45	7	-45	7	3	2	584	590	4	-17	9	2	91	42	-26
-13	15	1	363	359	6	-11	21	1	176	163	11	4	28	1	296	328	10	9	3	2	219	216	6	-15	9	2	116	114	15
-11	15	1	43	34	-43	-9	21	1	151	153	11	6	28	1	141	122	-45	11	3	2	307	315	10	-13	9	2	381	376	6
-9	15	1	139	144	11	-7	21	1	141	159	9	8	28	1	207	231	20	13	3	2	149	162	-27	-11	9	2	201	198	5
-7	15	1	220	224	5	-5	21	1	43	38	-42	-7	29	1	212	220	11	15	3	2	126	54	-39	-9	9	2	672	671	3
-5	15	1	228	239	5	-3	21	1	69	56	-18	-5	29	1	270	236	10	-16	4	2	61	69	-27	-7	9	2	45	20	-15
-3	15	1	474	482	4	-1	21	1	503	506	12	-3	29	1	341	367	7	-14	4	2	253	244	7	-5	9	2	979	1004	15
-1	15	1	124	122	7	1	21	1	560	562	9	-1	29	1	486	451	6	-12	4	2	301	314	5	-3	9	2	717	726	19
1	15	1	729	731	5	3	21	1	155	150	9	1	29	1	310	321	7	-10	4	2	421	424	3	-1	9	2	171	190	-55
3	15	1	99	110	8	5	21	1	244	243	7	3	29	1	0	39	-1	-8	4	2	738	750	3	1	9	2	1056	1086	26

5 15 1 26 34 -26	7 21 1 149 176 12	5 29 1 98 114 -30	-6 4 2 734 731 14	3 9 2 197 195 -61
7 15 1 401 400 5	9 21 1 151 133 13	7 29 1 51 41 -50	-4 4 2 855 881 9	5 9 2 694 691 5
9 15 1 61 21 -32	11 21 1 110 82 -22	-6 30 1 569 580 9	-2 4 2 944 892 6	7 9 2 57 95 -22
11 15 1 269 243 11	-12 22 1 287 270 8	-4 30 1 71 53 -34	0 4 2 358 402 10	9 9 2 268 270 7
13 15 1 98 45 -35	-10 22 1 68 119 -33	-2 30 1 82 56 -22	2 4 2 591 550 11	11 9 2 347 348 9
-14 16 1 226 230 16	-8 22 1 28 6 -27	0 30 1 264 274 8	4 4 2 798 795 18	13 9 2 66 44 -65
-12 16 1 46 32 -45	-6 22 1 189 185 8	2 30 1 213 230 10	6 4 2 445 454 7	15 9 2 257 300 18
-10 16 1 609 608 5	-4 22 1 213 212 7	4 30 1 367 379 10	8 4 2 550 551 4	-16 10 2 246 246 9
-8 16 1 317 318 7	-2 22 1 129 126 11	6 30 1 222 198 -51	10 4 2 551 549 7	-14 10 2 238 233 8
-6 16 1 673 670 4	0 22 1 175 170 8	-5 31 1 133 114 18	12 4 2 114 45 -34	-12 10 2 130 134 9
-4 16 1 368 358 4	2 22 1 358 350 8	-3 31 1 14 70 -13	14 4 2 0 24 -1	-10 10 2 143 140 6
-2 16 1 667 655 4	4 22 1 191 203 8	-1 31 1 90 90 -23	-17 5 2 145 145 13	-8 10 2 233 232 4
0 16 1 633 626 10	6 22 1 146 130 10	1 31 1 115 128 -21	-15 5 2 140 137 12	-6 10 2 656 651 3
2 16 1 375 365 5	8 22 1 140 144 14	3 31 1 142 139 21	-13 5 2 121 129 9	-4 10 2 279 267 31
4 16 1 967 967 4	10 22 1 77 87 -35	-2 32 1 75 70 -30	-11 5 2 101 97 8	-2 10 2 818 823 43
6 16 1 151 136 8	12 22 1 105 96 -29	0 32 1 106 114 -21	-9 5 2 504 496 3	0 10 2 118 136 -117
8 16 1 416 408 8	-11 23 1 85 99 -26	2 32 1 0 13 -1	-7 5 2 254 242 6	2 10 2 360 372 36
10 16 1 172 172 14	-9 23 1 279 286 8	-16 0 2 640 636 7	-5 5 2 89 34 -51	4 10 2 368 345 13
12 16 1 368 378 9	-7 23 1 216 215 8	-14 0 2 104 117 18	-3 5 2 754 711 8	6 10 2 333 326 6
14 16 1 256 275 13	-5 23 1 297 293 8	-12 0 2 1451 1473 7	-1 5 2 658 625 15	8 10 2 372 359 6
-15 17 1 0 16 -1	-3 23 1 301 300 8	-10 0 2 732 749 4	1 5 2 91 47 -42	10 10 2 66 18 -30
-13 17 1 647 648 6	-1 23 1 276 275 7	-8 0 2 65 66 -17	3 5 2 149 132 -39	12 10 2 180 169 15
-11 17 1 221 211 8	1 23 1 281 271 7	-6 0 2 2610 2583 18	5 5 2 536 534 9	14 10 2 71 75 -71
-9 17 1 333 325 7	3 23 1 361 358 6	-4 0 2 2068 2032 11	7 5 2 179 179 8	-15 11 2 199 207 9
-7 17 1 975 970 4	5 23 1 235 214 7	-2 0 2 3034 3216 36	9 5 2 201 205 8	-13 11 2 1016 1016 6
-5 17 1 181 171 6	7 23 1 281 262 8	0 0 2 768 667 14	11 5 2 73 78 -52	-11 11 2 161 155 6
-3 17 1 801 776 4	9 23 1 171 166 13	2 0 2 2248 2230 19	13 5 2 68 75 -68	-9 11 2 828 825 4
-1 17 1 522 522 5	11 23 1 271 263 14	4 0 2 2018 2016 27	15 5 2 76 9 -75	-7 11 2 40 30 -23
1 17 1 1582 1570 9	-12 24 1 95 16 -34	6 0 2 697 708 6	-16 6 2 72 79 -28	-5 11 2 1898 1893 3
3 17 1 275 270 5	-10 24 1 0 29 -1	8 0 2 1526 1528 7	-14 6 2 64 87 -21	-3 11 2 1086 1062 20
5 17 1 385 378 5	-8 24 1 133 136 12	10 0 2 223 229 11	-12 6 2 66 71 -15	-1 11 2 125 142 -88
7 17 1 564 574 5	-6 24 1 111 113 16	12 0 2 894 924 13	-10 6 2 255 259 4	1 11 2 1734 1704 28
9 17 1 151 155 11	-4 24 1 122 93 12	14 0 2 405 414 16	-8 6 2 61 47 10	3 11 2 92 56 -28

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

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
5 11 2 1685 1666 6	11 17 2 248 218 18	6 24 2 0 57 -1	5 1 3 76 96 -20	-3 7 3 174 212 -67
7 11 2 425 430 6	-14 18 2 134 115 16	8 24 2 189 188 21	7 1 3 118 122 11	-1 7 3 1022 1065 28
9 11 2 564 560 7	-12 18 2 166 151 8	10 24 2 236 254 22	9 1 3 63 79 -33	1 7 3 0 10 -1
11 11 2 282 282 15	-10 18 2 68 72 -22	-11 25 2 115 133 19	11 1 3 96 82 -25	3 7 3 206 221 6
13 11 2 277 269 17	-8 18 2 309 313 5	-9 25 2 142 153 13	-16 2 3 59 34 -32	5 7 3 407 408 4
-16 12 2 443 452 6	-6 18 2 133 137 8	-7 25 2 150 154 9	-14 2 3 378 372 5	7 7 3 42 19 -42
-14 12 2 81 47 -18	-4 18 2 294 299 5	-5 25 2 312 308 6	-12 2 3 350 357 3	9 7 3 522 532 12
-12 12 2 573 570 5	-2 18 2 213 208 5	-3 25 2 264 270 9	-10 2 3 396 397 3	-16 8 3 62 68 -37
-10 12 2 274 278 4	0 18 2 297 309 6	-1 25 2 172 180 12	-8 2 3 75 63 7	-14 8 3 139 140 8
-8 12 2 73 81 11	2 18 2 139 137 11	1 25 2 222 211 10	-6 2 3 450 484 22	-12 8 3 78 90 12
-6 12 2 876 871 3	4 18 2 262 271 8	3 25 2 173 163 25	-4 2 3 74 57 -40	-10 8 3 139 136 6
-4 12 2 226 227 4	6 18 2 107 107 12	5 25 2 315 333 12	-2 2 3 14 36 -13	-8 8 3 117 110 5
-2 12 2 2190 2190 7	8 18 2 137 150 21	7 25 2 157 168 25	0 2 3 1021 1032 18	-6 8 3 312 321 3
0 12 2 1044 1031 5	10 18 2 161 149 22	9 25 2 158 150 -30	2 2 3 749 752 20	-4 8 3 219 235 6
2 12 2 395 375 6	12 18 2 0 37 -1	-10 26 2 94 73 -30	4 2 3 556 546 7	-2 8 3 101 11 -100

4	12	2	1277	1263	4	-13	19	2	227	227	9	-8	26	2	181	173	10	6	2	3	0	32	-1	0	8	3	291	286	36
6	12	2	255	255	6	-11	19	2	15	19	-15	-6	26	2	29	6	-29	8	2	3	38	15	-37	2	8	3	20	47	-19
8	12	2	459	459	8	-9	19	2	532	529	5	-4	26	2	227	210	10	10	2	3	95	87	-19	4	8	3	191	210	8
10	12	2	367	370	13	-7	19	2	0	31	-1	-2	26	2	144	148	12	-17	3	3	23	27	-22	6	8	3	54	48	-43
-15	13	2	73	30	-26	-5	19	2	341	347	5	0	26	2	315	310	8	-15	3	3	345	348	8	8	8	3	0	49	-1
-13	13	2	341	335	6	-3	19	2	443	441	4	2	26	2	72	82	-48	-13	3	3	56	56	-19	-17	9	3	305	304	10
-11	13	2	99	99	10	-1	19	2	153	147	9	4	26	2	65	64	-64	-11	3	3	268	264	4	-15	9	3	74	83	-23
-9	13	2	100	93	9	1	19	2	406	415	7	6	26	2	121	144	-42	-9	3	3	586	596	2	-13	9	3	338	336	5
-7	13	2	265	262	4	3	19	2	0	11	-1	8	26	2	0	24	-1	-7	3	3	115	112	16	-11	9	3	237	243	5
-5	13	2	537	548	3	5	19	2	580	576	8	-9	27	2	104	117	-20	-5	3	3	797	787	11	-9	9	3	116	109	6
-3	13	2	173	180	4	7	19	2	50	79	-49	-7	27	2	239	211	8	-3	3	3	127	65	17	-7	9	3	431	435	2
-1	13	2	269	260	4	9	19	2	203	217	19	-5	27	2	132	159	15	-1	3	3	1184	1192	19	-5	9	3	61	47	-12
1	13	2	336	337	6	11	19	2	215	210	19	-3	27	2	96	112	-20	1	3	3	153	154	-44	-3	9	3	814	838	5
3	13	2	250	263	5	-14	20	2	61	76	-61	-1	27	2	168	152	11	3	3	3	178	101	-52	-1	9	3	560	560	29
5	13	2	595	592	6	-12	20	2	513	499	7	1	27	2	83	77	-35	5	3	3	804	803	5	1	9	3	590	589	5
7	13	2	52	30	-32	-10	20	2	136	140	11	3	27	2	101	107	-31	7	3	3	64	66	-26	3	9	3	754	768	5
9	13	2	0	69	-1	-8	20	2	192	187	8	5	27	2	124	196	-26	9	3	3	336	345	8	5	9	3	321	326	6
11	13	2	24	61	-23	-6	20	2	765	765	5	7	27	2	172	142	26	11	3	3	85	93	-24	7	9	3	439	440	12
-16	14	2	92	73	-22	-4	20	2	54	70	-25	-8	28	2	234	205	18	-16	4	3	93	84	-18	-16	10	3	0	7	-1
-14	14	2	378	361	7	-2	20	2	701	700	5	-6	28	2	111	115	-20	-14	4	3	81	76	14	-14	10	3	292	289	6
-12	14	2	0	12	-1	0	20	2	183	188	9	-4	28	2	366	336	11	-12	4	3	192	199	5	-12	10	3	349	357	6
-10	14	2	185	182	6	2	20	2	585	578	7	-2	28	2	243	227	10	-10	4	3	40	8	-20	-10	10	3	129	132	7
-8	14	2	374	376	4	4	20	2	329	328	9	0	28	2	239	214	9	-8	4	3	78	83	6	-8	10	3	192	200	4
-6	14	2	301	315	4	6	20	2	100	134	-33	2	28	2	230	210	11	-6	4	3	57	45	-24	-6	10	3	208	228	4
-4	14	2	530	538	3	8	20	2	599	611	14	4	28	2	280	301	50	-4	4	3	211	182	27	-4	10	3	285	283	3
-2	14	2	0	17	-1	10	20	2	116	83	-39	6	28	2	133	130	-35	-2	4	3	173	167	-35	-2	10	3	133	136	8
0	14	2	673	671	5	12	20	2	362	356	17	-7	29	2	135	126	17	0	4	3	83	36	-83	0	10	3	667	678	4
2	14	2	357	362	4	-13	21	2	31	35	-30	-5	29	2	250	243	10	2	4	3	103	120	-103	2	10	3	691	692	5
4	14	2	50	42	-29	-11	21	2	96	107	-17	-3	29	2	226	217	10	4	4	3	184	168	21	4	10	3	330	342	7
6	14	2	360	362	6	-9	21	2	104	85	11	-1	29	2	195	191	11	6	4	3	26	26	-26	6	10	3	81	99	-25
8	14	2	184	185	11	-7	21	2	220	229	6	1	29	2	241	224	9	8	4	3	15	34	-14	-15	11	3	90	73	-18
10	14	2	331	318	14	-5	21	2	31	11	-30	3	29	2	213	188	15	10	4	3	170	169	14	-13	11	3	215	217	6
-15	15	2	178	174	10	-3	21	2	66	49	-17	5	29	2	164	211	-42	12	4	3	0	41	-1	-11	11	3	71	58	-13
-13	15	2	78	77	-18	-1	21	2	152	162	9	-6	30	2	184	183	20	-17	5	3	67	32	-34	-9	11	3	207	214	5
-11	15	2	274	276	5	1	21	2	0	32	-1	-4	30	2	70	79	-37	-15	5	3	480	489	5	-7	11	3	227	216	4
-9	15	2	94	92	10	3	21	2	164	171	10	-2	30	2	152	180	12	-13	5	3	259	262	5	-5	11	3	140	136	5
-7	15	2	614	618	3	5	21	2	0	26	-1	0	30	2	0	36	-1	-11	5	3	738	742	3	-3	11	3	76	59	9
-5	15	2	210	212	5	7	21	2	200	192	16	2	30	2	181	181	14	-9	5	3	1114	1120	4	-1	11	3	356	352	4
-3	15	2	65	68	10	9	21	2	98	85	-48	4	30	2	83	90	-42	-7	5	3	158	170	4	1	11	3	42	31	-41
-1	15	2	597	601	5	11	21	2	138	78	-34	-5	31	2	227	220	11	-5	5	3	1376	1364	25	3	11	3	100	79	17
1	15	2	139	133	7	-12	22	2	296	293	8	-3	31	2	300	268	11	-3	5	3	414	421	37	5	11	3	89	88	-19
3	15	2	534	528	4	-10	22	2	97	133	-19	-1	31	2	123	125	18	-1	5	3	2132	2252	27	7	11	3	70	72	-55
5	15	2	190	191	9	-8	22	2	143	151	8	1	31	2	266	266	11	1	5	3	652	702	29	-16	12	3	32	54	-31
7	15	2	403	406	7	-6	22	2	627	635	5	3	31	2	87	14	-41	3	5	3	342	328	10	-14	12	3	74	77	-19
9	15	2	124	112	-24	-4	22	2	126	128	9	-2	32	2	94	45	-25	5	5	3	1174	1145	6	-12	12	3	145	144	8
11	15	2	55	42	-54	-2	22	2	674	669	5	0	32	2	144	140	25	7	5	3	314	318	7	-10	12	3	155	155	7
-14	16	2	113	74	14	0	22	2	74	64	-27	-16	0	3	281	280	9	9	5	3	1105	1102	7	-8	12	3	122	116	6
-12	16	2	61	66	-22	2	22	2	423	425	8	-14	0	3	118	110	12	11	5	3	0	40	-1	-6	12	3	184	178	4
-10	16	2	64	56	-22	4	22	2	338	343	10	-12	0	3	87	99	13	13	5	3	350	354	17	-4	12	3	351	357	3
-8	16	2	49	6	-23	6	22	2	226	227	19	-10	0	3	232	232	5	-16	6	3	390	378	6	-2	12	3	152	156	5
-6	16	2	266	264	5	8	22	2	444	447	15	-8	0	3	134	135	6	-14	6	3	81	96	14	0	12	3	111	107	8
-4	16	2	339	348	4	10	22	2	7	33	-7	-6	0	3	210	207	29	-12	6	3	1198	1184	4	2	12	3	187	188	10
-2	16	2	245	236	4	-11	23	2	231	213	9	-4	0	3	143	134	19	-10	6	3	308	306	4	4	12	3	237	233	10
0	16	2	94	100	11	-9	23	2	297	296	6	-2	0	3	174	212	-37	-8	6	3	1557	1560	3	6	12	3	43	45	-43

2	16	2	64	74	-19	-7	23	2	374	370	5	0	0	3	366	394	27	-6	6	3	129	127	6	-15	13	3	36	20	-36
4	16	2	38	38	-38	-5	23	2	535	545	5	2	0	3	282	279	37	-4	6	3	828	799	21	-13	13	3	55	36	-26
6	16	2	71	42	-20	-3	23	2	239	238	8	4	0	3	78	94	-31	-2	6	3	2491	2606	28	-11	13	3	48	62	-24
8	16	2	173	152	19	-1	23	2	267	259	7	6	0	3	297	321	12	0	6	3	551	595	29	-9	13	3	142	140	6
10	16	2	203	158	20	1	23	2	407	435	8	8	0	3	40	24	-39	2	6	3	1555	1560	30	-7	13	3	270	273	4
-15	17	2	109	92	-22	3	23	2	396	392	15	10	0	3	239	240	17	4	6	3	441	439	4	-5	13	3	492	495	3
-13	17	2	27	41	-27	5	23	2	746	742	12	12	0	3	73	18	-72	6	6	3	1457	1457	7	-3	13	3	250	238	4
-11	17	2	128	131	9	7	23	2	132	102	-27	-17	1	3	114	96	14	8	6	3	769	786	8	-1	13	3	159	152	5
-9	17	2	92	95	13	9	23	2	0	46	-1	-15	1	3	12	34	-12	10	6	3	207	189	17	1	13	3	14	33	-14
-7	17	2	63	46	-15	-12	24	2	290	299	8	-13	1	3	108	104	7	12	6	3	445	462	15	3	13	3	63	50	-31
-5	17	2	152	152	6	-10	24	2	0	64	-1	-11	1	3	98	107	7	14	6	3	57	16	-56	5	13	3	76	56	-29
-3	17	2	121	121	7	-8	24	2	191	184	7	-9	1	3	172	178	3	-17	7	3	138	125	14	7	13	3	209	189	16
-1	17	2	122	128	9	-6	24	2	348	343	5	-7	1	3	40	27	-19	-15	7	3	115	128	12	-16	14	3	236	227	8
1	17	2	134	143	9	-4	24	2	27	4	-26	-5	1	3	247	276	13	-13	7	3	88	68	11	-14	14	3	67	89	-22
3	17	2	130	142	11	-2	24	2	690	691	8	-3	1	3	200	201	12	-11	7	3	212	216	5	-12	14	3	571	571	5
5	17	2	158	156	9	0	24	2	493	482	7	-1	1	3	384	398	17	-9	7	3	445	444	3	-10	14	3	50	15	-23
7	17	2	158	173	12	2	24	2	143	143	14	1	1	3	87	158	-86	-7	7	3	560	562	2	-8	14	3	736	743	3
9	17	2	71	52	-71	4	24	2	400	400	15	3	1	3	140	34	-140	-5	7	3	369	373	5	-6	14	3	174	178	5

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

Page 4

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	14	3	352	359	3	-10	22	3	118	123	13	0	0	4	1550	1546	8	-6	6	4	96	106	6	6	12	4	686	683	7
-2	14	3	890	893	4	-8	22	3	36	11	-36	2	0	4	2159	2192	7	-4	6	4	41	11	-21	8	12	4	100	107	-37
0	14	3	40	14	-39	-6	22	3	138	129	10	4	0	4	7	56	-7	-2	6	4	30	8	-30	-15	13	4	153	159	9
2	14	3	878	876	8	-4	22	3	114	112	11	6	0	4	866	880	11	0	6	4	192	198	5	-13	13	4	253	266	6
4	14	3	91	60	-35	-2	22	3	40	15	-39	8	0	4	212	206	18	2	6	4	50	12	-30	-11	13	4	183	182	8
6	14	3	626	640	12	0	22	3	196	172	9	10	0	4	1200	1218	13	4	6	4	168	164	7	-9	13	4	21	37	-20
-15	15	3	187	179	9	2	22	3	0	16	-1	12	0	4	101	131	-52	6	6	4	18	7	-18	-7	13	4	179	171	5
-13	15	3	62	39	-24	4	22	3	164	149	26	-17	1	4	122	91	17	8	6	4	0	27	-1	-5	13	4	46	44	-27
-11	15	3	241	229	6	6	22	3	70	39	-56	-15	1	4	510	507	4	10	6	4	91	108	-30	-3	13	4	223	214	4
-9	15	3	256	257	4	8	22	3	117	146	-39	-13	1	4	197	194	5	-17	7	4	0	35	-1	-1	13	4	383	380	4
-7	15	3	0	33	-1	-11	23	3	235	240	10	-11	1	4	427	433	3	-15	7	4	0	36	-1	1	13	4	69	43	-15
-5	15	3	515	516	3	-9	23	3	225	223	7	-9	1	4	200	196	4	-13	7	4	251	259	5	3	13	4	499	508	14
-3	15	3	24	26	-24	-7	23	3	229	237	8	-7	1	4	987	965	3	-11	7	4	243	238	4	5	13	4	208	204	14
-1	15	3	378	379	4	-5	23	3	233	227	6	-5	1	4	260	254	5	-9	7	4	168	160	5	7	13	4	48	10	-48
1	15	3	141	138	9	-3	23	3	267	263	7	-3	1	4	477	476	8	-7	7	4	214	216	4	-14	14	4	56	33	-34
3	15	3	64	71	-42	-1	23	3	299	300	8	-1	1	4	1594	1570	25	-5	7	4	177	184	4	-12	14	4	268	272	5
5	15	3	384	376	8	1	23	3	301	294	11	1	1	4	220	208	6	-3	7	4	158	143	4	-10	14	4	428	430	4
7	15	3	30	71	-29	3	23	3	136	158	-25	3	1	4	925	904	5	-1	7	4	143	138	6	-8	14	4	67	47	-14
-14	16	3	147	158	9	5	23	3	311	319	18	5	1	4	0	17	-1	1	7	4	374	355	5	-6	14	4	390	396	4
-12	16	3	560	555	4	7	23	3	184	191	15	7	1	4	312	321	10	3	7	4	313	315	7	-4	14	4	202	210	5
-10	16	3	162	174	7	-12	24	3	58	35	-57	9	1	4	407	408	10	5	7	4	370	374	5	-2	14	4	437	434	3
-8	16	3	533	537	4	-10	24	3	35	29	-34	11	1	4	131	142	20	7	7	4	79	72	-28	0	14	4	163	168	7
-6	16	3	334	330	4	-8	24	3	68	67	-26	13	1	4	421	415	17	9	7	4	0	41	-1	2	14	4	96	110	-23
-4	16	3	417	412	4	-6	24	3	39	47	-39	-16	2	4	0	19	-1	-16	8	4	0	16	-1	4	14	4	491	485	9
-2	16	3	833	822	4	-4	24	3	0	17	-1	-14	2	4	242	249	5	-14	8	4	276	279	5	6	14	4	47	26	-46
0	16	3	324	308	5	-2	24	3	43	56	-42	-12	2	4	29	18	-29	-12	8	4	32	8	-31	-15	15	4	0	21	-1
2	16	3	608	597	6	0	24	3	111	111	-23	-10	2	4	79	80	8	-10	8	4	156	152	5	-13	15	4	352	347	5
4	16	3	114	106	-26	2	24	3	96	111	-43	-8	2	4	19	32	-19	-8	8	4	769	772	3	-11	15	4	146	161	8
6	16	3	542	529	9	4	24	3	190	145	22	-6	2	4	85	87	8	-6	8	4	426	415	3	-9	15	4	350	343	4
-15	17	3	197	203	9	6	24	3	92	4	-36	-4	2	4	145	142	7	-4	8	4	378	365	3	-7	15	4	35	28	-35

-13	17	3	0	23	-1	-11	25	3	73	111	-66	-2	2	4	72	34	-45	-2	8	4	130	134	5	-5	15	4	26	16	-25
-11	17	3	620	622	5	-9	25	3	449	440	7	0	2	4	79	55	-25	0	8	4	489	488	4	-3	15	4	519	512	4
-9	17	3	610	611	4	-7	25	3	209	224	9	2	2	4	199	187	9	2	8	4	146	129	8	-1	15	4	93	86	11
-7	17	3	509	511	4	-5	25	3	394	394	6	4	2	4	83	65	13	4	8	4	187	186	7	1	15	4	389	397	15
-5	17	3	1095	1086	4	-3	25	3	65	59	-35	6	2	4	92	104	-22	6	8	4	713	724	8	3	15	4	169	164	14
-3	17	3	35	17	-35	-1	25	3	678	684	9	8	2	4	148	137	15	8	8	4	245	258	12	5	15	4	435	437	10
-1	17	3	961	949	5	1	25	3	154	158	17	10	2	4	31	40	-31	10	8	4	226	223	18	-14	16	4	51	41	-50
1	17	3	342	338	7	3	25	3	62	90	-61	12	2	4	0	45	-1	-17	9	4	218	218	13	-12	16	4	44	19	-43
3	17	3	176	216	18	5	25	3	528	528	15	-17	3	4	113	117	19	-15	9	4	335	339	6	-10	16	4	0	17	-1
5	17	3	511	511	22	7	25	3	78	101	-78	-15	3	4	215	207	6	-13	9	4	7	14	-7	-8	16	4	295	297	4
7	17	3	0	21	-1	-10	26	3	0	27	-1	-13	3	4	196	205	6	-11	9	4	600	601	4	-6	16	4	265	269	5
-14	18	3	154	155	11	-8	26	3	137	141	11	-11	3	4	146	145	5	-9	9	4	133	137	7	-4	16	4	105	103	9
-12	18	3	358	348	7	-6	26	3	36	12	-36	-9	3	4	350	349	3	-7	9	4	497	510	3	-2	16	4	52	54	-22
-10	18	3	206	204	7	-4	26	3	234	241	8	-7	3	4	531	532	3	-5	9	4	629	629	3	0	16	4	103	108	11
-8	18	3	738	733	4	-2	26	3	169	176	14	-5	3	4	66	53	10	-3	9	4	178	182	4	2	16	4	87	75	-49
-6	18	3	348	362	5	0	26	3	227	222	11	-3	3	4	831	826	6	-1	9	4	707	706	3	4	16	4	55	3	-55
-4	18	3	245	254	5	2	26	3	503	511	16	-1	3	4	791	785	6	1	9	4	89	92	9	6	16	4	187	212	22
-2	18	3	1032	1027	6	4	26	3	111	90	-40	1	3	4	321	316	6	3	9	4	618	621	5	-15	17	4	98	73	-82
0	18	3	84	55	-19	6	26	3	121	97	-42	3	3	4	0	11	-1	5	9	4	31	68	-31	-13	17	4	67	62	-24
2	18	3	216	238	17	-9	27	3	134	127	14	5	3	4	254	248	8	7	9	4	173	196	14	-11	17	4	0	32	-1
4	18	3	564	572	13	-7	27	3	99	134	-18	7	3	4	75	101	-48	9	9	4	508	483	14	-9	17	4	44	30	-44
6	18	3	770	747	9	-5	27	3	114	122	14	9	3	4	129	127	19	-16	10	4	127	111	13	-7	17	4	151	159	7
-13	19	3	113	91	15	-3	27	3	217	220	13	11	3	4	315	312	12	-14	10	4	53	37	-31	-5	17	4	18	51	-18
-11	19	3	262	253	7	-1	27	3	120	135	17	-16	4	4	58	39	-33	-12	10	4	187	194	7	-3	17	4	77	80	12
-9	19	3	258	254	6	1	27	3	175	186	16	-14	4	4	248	242	6	-10	10	4	235	231	5	-1	17	4	187	185	8
-7	19	3	94	103	11	3	27	3	181	183	24	-12	4	4	198	202	5	-8	10	4	560	554	3	1	17	4	127	128	15
-5	19	3	314	314	7	5	27	3	110	39	-54	-10	4	4	71	53	9	-6	10	4	84	81	9	3	17	4	52	61	-52
-3	19	3	107	113	9	7	27	3	182	173	27	-8	4	4	45	34	-14	-4	10	4	373	363	3	5	17	4	207	191	19
-1	19	3	399	395	6	-8	28	3	89	113	-22	-6	4	4	1049	1062	4	-2	10	4	207	197	4	-14	18	4	142	144	12
1	19	3	177	172	11	-6	28	3	0	12	-1	-4	4	4	497	502	7	0	10	4	463	450	5	-12	18	4	70	42	-20
3	19	3	128	132	-29	-4	28	3	176	150	12	-2	4	4	323	330	5	2	10	4	304	293	6	-10	18	4	253	256	6
5	19	3	156	143	19	-2	28	3	244	261	11	0	4	4	538	548	8	4	10	4	144	138	8	-8	18	4	160	166	7
7	19	3	124	143	19	0	28	3	120	109	-26	2	4	4	87	90	13	6	10	4	324	324	8	-6	18	4	203	209	6
-14	20	3	201	213	8	2	28	3	361	365	34	4	4	4	159	161	10	8	10	4	66	34	-66	-4	18	4	124	128	8
-12	20	3	164	165	9	4	28	3	183	158	-44	6	4	4	48	35	-48	-15	11	4	624	614	5	-2	18	4	282	285	6
-10	20	3	343	340	6	6	28	3	145	155	-38	8	4	4	410	417	11	-13	11	4	228	213	7	0	18	4	154	157	10
-8	20	3	58	64	-23	-7	29	3	332	320	9	10	4	4	303	291	11	-11	11	4	920	918	4	2	18	4	162	151	13
-6	20	3	435	442	5	-5	29	3	177	196	13	-17	5	4	59	34	-47	-9	11	4	447	443	6	4	18	4	125	107	-28
-4	20	3	441	444	5	-3	29	3	235	219	11	-15	5	4	148	148	8	-7	11	4	843	838	3	6	18	4	162	175	25
-2	20	3	54	14	-26	-1	29	3	470	469	8	-13	5	4	180	174	7	-5	11	4	771	763	3	-13	19	4	70	30	-31
0	20	3	389	384	8	1	29	3	116	115	-42	-11	5	4	160	159	5	-3	11	4	155	154	5	-11	19	4	315	316	7
2	20	3	196	190	18	3	29	3	203	201	22	-9	5	4	149	142	4	-1	11	4	1429	1416	8	-9	19	4	70	68	-18
4	20	3	400	406	14	-6	30	3	117	43	-34	-7	5	4	382	386	3	1	11	4	257	244	5	-7	19	4	342	340	5
6	20	3	68	28	-52	-4	30	3	87	100	-28	-5	5	4	261	260	3	3	11	4	1487	1496	5	-5	19	4	312	311	5
8	20	3	156	143	26	-2	30	3	417	412	8	-3	5	4	47	39	-27	5	11	4	80	58	-16	-3	19	4	48	22	-28
-13	21	3	137	129	12	0	30	3	43	65	-42	-1	5	4	430	444	5	7	11	4	260	275	16	-1	19	4	529	526	6
-11	21	3	131	137	13	2	30	3	261	266	12	1	5	4	115	112	10	-16	12	4	52	21	-52	1	19	4	76	9	-28
-9	21	3	64	102	-22	-3	31	3	122	126	19	3	5	4	77	69	-14	-14	12	4	375	371	5	3	19	4	369	345	15
-7	21	3	301	301	6	-1	31	3	136	141	18	5	5	4	43	21	-43	-12	12	4	137	131	8	5	19	4	0	34	-1
-5	21	3	300	308	6	-16	0	4	329	316	9	7	5	4	326	320	10	-10	12	4	185	185	6	7	19	4	212	226	21
-3	21	3	245	240	6	-14	0	4	516	516	5	9	5	4	77	127	-35	-8	12	4	1293	1298	4	-12	20	4	182	180	9
-1	21	3	138	155	11	-12	0	4	592	594	6	11	5	4	120	68	-34	-6	12	4	41	22	-36	-10	20	4	212	210	7
1	21	3	107	62	-25	-10	0	4	572	572	4	-16	6	4	75	83	-23	-4	12	4	604	595	3	-8	20	4	583	586	5
3	21	3	101	112	-32	-8	0	4	1979	1947	10	-14	6	4	62	37	-20	-2	12	4	379	384	4	-6	20	4	96	103	12

5 21 3 102 62 -34 -6 0 4 358 351 7 -12 6 4 159 160 6 0 12 4 1086 1065 4 -4 20 4 683 672 4
 7 21 3 188 159 18 -4 0 4 2032 2056 13 -10 6 4 100 105 7 2 12 4 873 872 6 -2 20 4 219 222 7
 -12 22 3 62 41 -34 -2 0 4 0 33 -1 -8 6 4 69 67 10 4 12 4 476 480 11 0 20 4 340 330 8

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

Page 5

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 20 4 430 436 15	12 0 5 47 80 -47	6 6 5 366 366 10	-5 13 5 197 207 5	1 21 5 250 241 12
4 20 4 95 76 -47	-17 1 5 57 44 -56	8 6 5 119 129 -26	-3 13 5 337 328 4	3 21 5 363 350 18
6 20 4 486 503 15	-15 1 5 88 59 13	10 6 5 756 751 10	-1 13 5 109 114 10	5 21 5 209 176 -39
-13 21 4 104 100 -20	-13 1 5 31 60 -30	-15 7 5 80 103 -21	1 13 5 210 208 8	-10 22 5 197 169 19
-11 21 4 15 23 -15	-11 1 5 181 187 5	-13 7 5 69 73 -20	3 13 5 322 316 9	-8 22 5 0 20 -1
-9 21 4 168 178 9	-9 1 5 56 44 -17	-11 7 5 66 73 -16	5 13 5 133 152 15	-6 22 5 38 64 -37
-7 21 4 24 15 -23	-7 1 5 163 163 12	-9 7 5 460 464 5	7 13 5 115 36 -36	-4 22 5 169 151 8
-5 21 4 52 33 -30	-5 1 5 65 75 -16	-7 7 5 657 664 3	-14 14 5 602 581 6	-2 22 5 211 197 8
-3 21 4 155 177 8	-3 1 5 129 149 9	-5 7 5 51 23 -15	-12 14 5 61 53 -26	0 22 5 181 201 14
-1 21 4 77 63 -25	-1 1 5 105 100 10	-3 7 5 252 243 4	-10 14 5 267 262 7	2 22 5 197 184 25
1 21 4 199 192 13	1 1 5 40 21 -39	-1 7 5 72 41 -14	-8 14 5 340 340 6	4 22 5 106 114 -46
3 21 4 85 49 -75	3 1 5 77 82 -16	1 7 5 36 14 -36	-6 14 5 436 442 5	6 22 5 0 20 -1
5 21 4 79 88 -78	5 1 5 93 123 -30	3 7 5 536 532 6	-4 14 5 490 489 4	-9 23 5 154 139 11
7 21 4 0 53 -1	7 1 5 113 111 20	5 7 5 98 87 15	-2 14 5 142 141 6	-7 23 5 242 245 8
-12 22 4 207 221 9	9 1 5 102 109 -27	7 7 5 344 352 11	0 14 5 1015 1005 5	-5 23 5 228 228 9
-10 22 4 187 204 17	11 1 5 75 75 -75	9 7 5 217 215 13	2 14 5 87 65 -22	-3 23 5 204 193 9
-8 22 4 513 530 8	-16 2 5 186 174 8	11 7 5 202 160 23	4 14 5 207 223 14	-1 23 5 267 264 9
-6 22 4 0 37 -1	-14 2 5 243 240 5	-16 8 5 147 147 11	6 14 5 419 414 9	1 23 5 194 181 23
-4 22 4 451 463 6	-12 2 5 435 430 4	-14 8 5 38 16 -37	-15 15 5 0 47 -1	3 23 5 234 246 23
-2 22 4 130 126 11	-10 2 5 26 50 -26	-12 8 5 84 86 13	-13 15 5 147 133 9	5 23 5 151 150 -34
0 22 4 386 385 8	-8 2 5 79 82 9	-10 8 5 19 18 -18	-11 15 5 260 263 6	-10 24 5 62 33 -61
2 22 4 396 402 16	-6 2 5 220 212 5	-8 8 5 217 226 4	-9 15 5 50 28 -50	-8 24 5 49 52 -49
4 22 4 123 99 -33	-4 2 5 80 89 8	-6 8 5 175 173 5	-7 15 5 301 302 6	-6 24 5 152 129 12
6 22 4 303 343 19	-2 2 5 558 556 5	-4 8 5 105 112 7	-5 15 5 0 5 -1	-4 24 5 84 83 -23
-11 23 4 266 265 8	0 2 5 480 477 6	-2 8 5 210 213 5	-3 15 5 326 326 4	-2 24 5 39 34 -38
-9 23 4 0 8 -1	2 2 5 439 434 6	0 8 5 0 6 -1	-1 15 5 123 109 9	0 24 5 71 60 -42
-7 23 4 287 295 7	4 2 5 70 53 -23	2 8 5 80 70 -20	1 15 5 84 14 -34	2 24 5 100 90 -55
-5 23 4 59 43 -28	6 2 5 68 32 -35	4 8 5 59 30 -26	3 15 5 402 405 10	4 24 5 0 124 -1
-3 23 4 335 332 7	8 2 5 214 218 14	6 8 5 0 60 -1	5 15 5 108 106 -20	-9 25 5 76 21 -34
-1 23 4 614 614 7	10 2 5 76 127 -52	8 8 5 193 191 15	7 15 5 43 107 -43	-7 25 5 483 498 7
1 23 4 208 223 21	12 2 5 135 130 -48	10 8 5 139 151 -33	-14 16 5 436 428 6	-5 25 5 126 161 17
3 23 4 506 514 15	-17 3 5 210 196 10	-15 9 5 210 202 8	-12 16 5 109 116 13	-3 25 5 278 273 9
5 23 4 185 180 22	-15 3 5 105 85 12	-13 9 5 72 54 -19	-10 16 5 258 271 8	-1 25 5 257 250 8
7 23 4 0 13 -1	-13 3 5 243 240 7	-11 9 5 33 19 -32	-8 16 5 406 413 6	1 25 5 234 230 16
-10 24 4 113 109 16	-11 3 5 410 410 4	-9 9 5 624 618 4	-6 16 5 441 439 5	3 25 5 340 326 20
-8 24 4 478 497 6	-9 3 5 102 99 8	-7 9 5 249 246 4	-4 16 5 498 503 4	-8 26 5 88 92 -27
-6 24 4 50 72 -49	-7 3 5 681 679 4	-5 9 5 383 399 3	-2 16 5 60 54 -21	-6 26 5 73 7 -42
-4 24 4 236 243 8	-5 3 5 0 45 -1	-3 9 5 137 143 5	0 16 5 608 595 5	-4 26 5 247 253 14
-2 24 4 311 303 8	-3 3 5 451 451 4	-1 9 5 339 343 4	2 16 5 168 174 16	-2 26 5 52 83 -51
0 24 4 372 376 7	-1 3 5 165 167 6	1 9 5 323 329 9	4 16 5 377 378 9	0 26 5 315 290 17
2 24 4 420 412 17	1 3 5 56 65 -28	3 9 5 191 182 9	6 16 5 304 309 9	2 26 5 0 40 -1
4 24 4 282 287 20	3 3 5 649 641 6	5 9 5 561 556 5	-13 17 5 110 129 13	-5 27 5 155 178 16
6 24 4 156 194 -31	5 3 5 249 240 8	7 9 5 36 67 -36	-11 17 5 354 362 7	-3 27 5 81 129 -35
-9 25 4 181 204 10	7 3 5 291 309 23	9 9 5 242 226 18	-9 17 5 175 185 9	-1 27 5 93 126 -33
-7 25 4 242 245 9	9 3 5 24 64 -24	-16 10 5 0 8 -1	-7 17 5 833 831 5	1 27 5 131 136 21


```

-5 25 4 164 173 10 11 3 5 67 119 -67 -14 10 5 160 170 10 -5 17 5 58 40 -22 -4 28 5 262 281 19
-3 25 4 147 136 12 -16 4 5 71 69 -27 -12 10 5 293 292 8 -3 17 5 707 699 5 -2 28 5 158 125 16
-1 25 4 264 254 8 -14 4 5 82 68 -17 -10 10 5 30 53 -29 -1 17 5 139 134 9 -16 0 6 472 461 8
1 25 4 221 205 13 -12 4 5 145 143 7 -8 10 5 25 33 -24 1 17 5 74 40 -26 -14 0 6 652 635 7
3 25 4 287 286 18 -10 4 5 0 27 -1 -6 10 5 185 184 6 3 17 5 928 944 10 -12 0 6 230 239 9
5 25 4 71 84 -70 -8 4 5 159 162 5 -4 10 5 103 110 7 5 17 5 65 27 -55 -10 0 6 1447 1442 9
-8 26 4 84 96 -23 -6 4 5 54 44 -18 -2 10 5 220 219 5 -12 18 5 130 115 15 -8 0 6 48 64 -48
-6 26 4 159 155 12 -4 4 5 48 17 -17 0 10 5 225 232 6 -10 18 5 68 70 -28 -6 0 6 791 820 7
-4 26 4 18 5 -18 -2 4 5 93 102 11 2 10 5 299 300 8 -8 18 5 81 88 -17 -4 0 6 702 721 7
-2 26 4 237 230 9 0 4 5 51 56 -21 4 10 5 177 167 8 -6 18 5 249 249 6 -2 0 6 1317 1350 10
0 26 4 61 11 -60 2 4 5 98 89 13 6 10 5 0 22 -1 -4 18 5 622 614 4 0 0 6 840 833 11
2 26 4 0 57 -1 4 4 5 101 92 14 8 10 5 111 151 -36 -2 18 5 641 636 6 2 0 6 409 414 9
4 26 4 233 264 22 6 4 5 0 6 -1 -15 11 5 148 155 11 0 18 5 442 427 8 4 0 6 1444 1448 13
-7 27 4 100 90 -21 8 4 5 58 64 -58 -13 11 5 32 56 -32 2 18 5 69 76 -34 6 0 6 351 355 15
-5 27 4 54 45 -53 10 4 5 106 92 -28 -11 11 5 170 164 8 4 18 5 383 387 11 8 0 6 508 496 15
-3 27 4 147 148 14 12 4 5 66 39 -66 -9 11 5 96 110 11 6 18 5 77 86 -77 10 0 6 222 206 22
-1 27 4 130 135 18 -17 5 5 377 374 12 -7 11 5 185 188 7 -13 19 5 89 94 -24 -15 1 6 208 198 7
1 27 4 129 86 22 -15 5 5 390 393 6 -5 11 5 119 106 7 -11 19 5 117 130 19 -13 1 6 608 593 4
3 27 4 181 131 27 -13 5 5 446 444 5 -3 11 5 93 92 9 -9 19 5 0 13 -1 -11 1 6 243 240 5
-6 28 4 294 284 9 -11 5 5 566 566 4 -1 11 5 54 32 -18 -7 19 5 284 300 6 -9 1 6 27 17 -27
-4 28 4 187 195 11 -9 5 5 208 213 5 1 11 5 198 186 8 -5 19 5 132 135 9 -7 1 6 345 353 5
-2 28 4 190 190 17 -7 5 5 1433 1441 5 3 11 5 46 27 -46 -3 19 5 287 281 6 -5 1 6 162 171 8
0 28 4 203 178 16 -5 5 5 440 441 3 5 11 5 19 11 -18 -1 19 5 62 55 -31 -3 1 6 929 942 7
2 28 4 271 248 21 -3 5 5 888 886 5 7 11 5 158 161 23 1 19 5 69 76 -32 -1 1 6 107 114 13
-5 29 4 189 174 12 -1 5 5 487 482 4 9 11 5 0 41 -1 3 19 5 348 332 12 1 1 6 669 668 7
-3 29 4 176 162 15 1 5 5 434 415 6 -14 12 5 108 118 15 5 19 5 149 137 21 3 1 6 0 28 -1
-1 29 4 191 217 14 3 5 5 1205 1190 6 -12 12 5 27 12 -26 -12 20 5 217 188 12 5 1 6 206 210 13
1 29 4 232 189 21 5 5 5 179 171 10 -10 12 5 173 187 8 -10 20 5 186 191 12 7 1 6 645 629 11
-16 0 5 105 95 -20 7 5 5 770 768 10 -8 12 5 153 159 8 -8 20 5 331 323 6 9 1 6 0 20 -1
-14 0 5 38 69 -38 9 5 5 42 57 -42 -6 12 5 131 127 8 -6 20 5 188 180 7 -16 2 6 141 124 13
-12 0 5 223 220 6 11 5 5 433 408 16 -4 12 5 126 117 7 -4 20 5 77 62 -15 -14 2 6 51 70 -51
-10 0 5 98 100 13 -16 6 5 154 145 10 -2 12 5 141 142 6 -2 20 5 483 481 5 -12 2 6 16 23 -16
-8 0 5 138 163 14 -14 6 5 911 902 5 0 12 5 85 72 13 0 20 5 70 26 -69 -10 2 6 175 173 9
-6 0 5 131 139 13 -12 6 5 75 57 12 2 12 5 182 199 11 2 20 5 243 243 20 -8 2 6 84 75 -15
-4 0 5 216 220 8 -10 6 5 836 832 4 4 12 5 36 3 -35 4 20 5 150 161 -31 -6 2 6 39 35 -39
-2 0 5 276 280 10 -8 6 5 417 412 4 6 12 5 174 154 15 6 20 5 133 115 -38 -4 2 6 66 55 -18
0 0 5 165 171 11 -6 6 5 665 660 5 8 12 5 0 5 -1 -11 21 5 140 142 -27 -2 2 6 93 80 16
2 0 5 99 86 14 -4 6 5 1830 1843 6 -15 13 5 0 53 -1 -9 21 5 129 115 12 0 2 6 120 124 13
4 0 5 278 300 15 -2 6 5 316 311 5 -13 13 5 146 158 11 -7 21 5 88 92 -17 2 2 6 36 21 -35
6 0 5 0 8 -1 0 6 5 971 968 6 -11 13 5 199 204 7 -5 21 5 148 149 8 4 2 6 133 137 19
8 0 5 210 217 20 2 6 5 327 323 7 -9 13 5 48 42 -37 -3 21 5 257 255 7 6 2 6 91 65 -26
10 0 5 0 10 -1 4 6 5 1305 1293 8 -7 13 5 95 105 12 -1 21 5 197 176 11 8 2 6 113 89 -24

```

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

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

```

10 2 6 0 27 -1 -1 9 6 62 40 -33 -13 17 6 87 61 -25 3 1 7 86 111 -53 -9 9 7 21 74 -21
-15 3 6 308 302 7 1 9 6 227 244 12 -11 17 6 0 39 -1 5 1 7 63 91 -62 -7 9 7 365 372 5
-13 3 6 295 292 8 3 9 6 289 282 7 -9 17 6 45 58 -45 7 1 7 94 78 -36 -5 9 7 108 100 9
-11 3 6 58 74 -23 5 9 6 227 212 8 -7 17 6 39 58 -39 -14 2 7 299 303 7 -3 9 7 147 143 8
-9 3 6 74 103 -20 7 9 6 225 233 14 -5 17 6 82 89 -16 -12 2 7 0 30 -1 -1 9 7 361 358 9
-7 3 6 132 118 9 9 9 6 13 100 -13 -3 17 6 84 94 -15 -10 2 7 40 46 -39 1 9 7 206 175 9

```

-5	3	6	252	257	6	-14	10	6	278	297	9	-1	17	6	96	99	13	-8	2	7	243	245	6	3	9	7	423	428	8
-3	3	6	296	295	7	-12	10	6	207	199	8	1	17	6	72	58	-36	-6	2	7	40	71	-40	5	9	7	0	35	-1
-1	3	6	433	436	7	-10	10	6	210	206	7	3	17	6	129	140	-24	-4	2	7	326	326	6	7	9	7	38	63	-38
1	3	6	206	207	8	-8	10	6	37	10	-36	5	17	6	23	7	-23	-2	2	7	297	308	9	-14	10	7	129	133	-24
3	3	6	109	106	13	-6	10	6	380	372	4	7	17	6	171	161	30	0	2	7	293	287	11	-12	10	7	25	27	-24
5	3	6	146	149	17	-4	10	6	215	213	5	-12	18	6	206	203	9	2	2	7	56	56	-38	-10	10	7	105	88	14
7	3	6	204	234	15	-2	10	6	187	182	6	-10	18	6	42	63	-42	4	2	7	64	91	-64	-8	10	7	60	46	-24
9	3	6	267	271	13	0	10	6	238	248	8	-8	18	6	151	147	10	6	2	7	185	181	17	-6	10	7	35	18	-34
-16	4	6	79	62	-27	2	10	6	101	89	-20	-6	18	6	190	184	9	8	2	7	141	122	25	-4	10	7	209	209	7
-14	4	6	28	36	-27	4	10	6	214	207	9	-4	18	6	163	170	10	-15	3	7	72	87	-37	-2	10	7	324	309	6
-12	4	6	311	314	6	6	10	6	0	50	-1	-2	18	6	72	63	-21	-13	3	7	277	286	7	0	10	7	181	177	17
-10	4	6	128	132	11	8	10	6	270	296	19	0	18	6	147	155	12	-11	3	7	0	31	-1	2	10	7	0	63	-1
-8	4	6	450	444	7	-15	11	6	12	23	-11	2	18	6	153	148	13	-9	3	7	441	438	6	4	10	7	63	78	-54
-6	4	6	0	9	-1	-13	11	6	670	661	6	4	18	6	0	80	-1	-7	3	7	0	14	-1	6	10	7	0	59	-1
-4	4	6	161	170	7	-11	11	6	370	371	7	6	18	6	123	116	-32	-5	3	7	226	215	7	-13	11	7	164	163	11
-2	4	6	25	52	-24	-9	11	6	420	435	6	-11	19	6	77	87	-27	-3	3	7	228	235	8	-11	11	7	131	151	17
0	4	6	88	98	-23	-7	11	6	492	493	5	-9	19	6	169	162	10	-1	3	7	0	8	-1	-9	11	7	44	56	-44
2	4	6	393	388	9	-5	11	6	114	121	8	-7	19	6	326	306	6	1	3	7	427	427	8	-7	11	7	88	72	-16
4	4	6	304	294	15	-3	11	6	1417	1419	4	-5	19	6	58	10	-36	3	3	7	161	172	12	-5	11	7	185	171	7
6	4	6	314	302	14	-1	11	6	92	99	15	-3	19	6	353	359	5	5	3	7	227	240	14	-3	11	7	53	16	-37
8	4	6	67	31	-67	1	11	6	579	590	8	-1	19	6	40	24	-39	7	3	7	132	127	-25	-1	11	7	43	52	-43
10	4	6	119	31	-30	3	11	6	275	283	8	1	19	6	299	282	11	-14	4	7	0	53	-1	1	11	7	91	84	-22
-15	5	6	94	96	-19	5	11	6	500	498	14	3	19	6	75	52	-75	-12	4	7	23	51	-22	3	11	7	63	58	-48
-13	5	6	233	228	6	7	11	6	616	618	15	5	19	6	120	143	-78	-10	4	7	98	81	-18	5	11	7	45	41	-44
-11	5	6	184	180	7	9	11	6	17	18	-17	-10	20	6	447	440	8	-8	4	7	76	74	-15	-12	12	7	99	114	-22
-9	5	6	47	59	-30	-14	12	6	301	287	7	-8	20	6	34	55	-33	-6	4	7	74	49	-17	-10	12	7	84	90	-22
-7	5	6	252	254	5	-12	12	6	152	128	11	-6	20	6	492	495	6	-4	4	7	68	58	-19	-8	12	7	110	104	12
-5	5	6	170	168	5	-10	12	6	691	694	6	-4	20	6	277	270	6	-2	4	7	51	68	-50	-6	12	7	48	42	-45
-3	5	6	88	94	10	-8	12	6	389	410	5	-2	20	6	189	176	8	0	4	7	32	50	-31	-4	12	7	102	83	12
-1	5	6	54	18	-36	-6	12	6	577	565	4	0	20	6	376	367	9	2	4	7	79	68	-25	-2	12	7	119	119	13
1	5	6	314	307	7	-4	12	6	207	202	5	2	20	6	82	80	-37	4	4	7	0	20	-1	0	12	7	102	113	-20
3	5	6	60	55	-29	-2	12	6	448	442	5	4	20	6	456	452	11	6	4	7	0	29	-1	2	12	7	57	62	-57
5	5	6	98	89	-19	0	12	6	513	517	7	-9	21	6	51	14	-50	8	4	7	0	6	-1	4	12	7	161	176	15
7	5	6	71	71	-50	2	12	6	436	448	9	-7	21	6	56	30	-55	-15	5	7	87	57	-87	6	12	7	0	34	-1
9	5	6	95	88	-37	4	12	6	657	662	9	-5	21	6	130	151	12	-13	5	7	443	423	6	-13	13	7	111	134	-23
-16	6	6	72	26	-33	6	12	6	118	118	-25	-3	21	6	73	35	-21	-11	5	7	160	179	11	-11	13	7	205	184	9
-14	6	6	92	79	-19	8	12	6	409	414	16	-1	21	6	145	159	16	-9	5	7	923	930	5	-9	13	7	188	185	7
-12	6	6	0	10	-1	-13	13	6	158	162	12	1	21	6	50	41	-50	-7	5	7	104	112	13	-7	13	7	48	22	-47
-10	6	6	30	56	-29	-11	13	6	57	24	-36	3	21	6	0	20	-1	-5	5	7	445	461	6	-5	13	7	62	62	-20
-8	6	6	84	102	15	-9	13	6	0	8	-1	-8	22	6	0	31	-1	-3	5	7	567	582	6	-3	13	7	40	7	-39
-6	6	6	59	58	-17	-7	13	6	0	10	-1	-6	22	6	364	362	7	-1	5	7	323	322	9	-1	13	7	0	30	-1
-4	6	6	41	26	-40	-5	13	6	99	98	9	-4	22	6	240	253	7	1	5	7	923	924	8	1	13	7	79	92	-37
-2	6	6	147	143	10	-3	13	6	479	474	4	-2	22	6	232	242	8	3	5	7	58	36	-47	3	13	7	211	208	13
0	6	6	0	51	-1	-1	13	6	102	103	12	0	22	6	307	273	18	5	5	7	478	459	11	5	13	7	211	202	13
2	6	6	120	111	12	1	13	6	117	122	15	2	22	6	0	32	-1	7	5	7	213	198	20	-12	14	7	355	365	7
4	6	6	53	25	-40	3	13	6	71	62	-70	4	22	6	341	339	16	-14	6	7	91	60	-21	-10	14	7	392	376	6
6	6	6	36	23	-36	5	13	6	129	148	17	-9	23	6	91	34	-47	-12	6	7	446	445	7	-8	14	7	19	16	-19
8	6	6	185	156	14	7	13	6	223	206	23	-7	23	6	85	103	-28	-10	6	7	589	591	5	-6	14	7	475	484	5
10	6	6	79	102	-78	-14	14	6	226	215	10	-5	23	6	174	162	10	-8	6	7	449	443	6	-4	14	7	149	141	8
-15	7	6	0	17	-1	-12	14	6	260	252	7	-3	23	6	557	561	6	-6	6	7	838	833	5	-2	14	7	486	486	7
-13	7	6	66	48	-21	-10	14	6	12	40	-12	-1	23	6	234	204	9	-4	6	7	403	402	5	0	14	7	104	44	18
-11	7	6	126	128	9	-8	14	6	364	359	5	1	23	6	182	208	18	-2	6	7	1126	1134	7	2	14	7	322	323	13
-9	7	6	88	76	12	-6	14	6	131	138	9	3	23	6	0	79	-1	0	6	7	513	503	8	4	14	7	293	298	10
-7	7	6	0	30	-1	-4	14	6	259	252	5	-6	24	6	142	147	16	2	6	7	390	397	9	-11	15	7	55	35	-55

-5 7 6 392 394 4	-2 14 6 247 233 6	-4 24 6 98 91 -20	4 6 7 276 268 10	-9 15 7 296 294 6
-3 7 6 241 241 5	0 14 6 70 76 -23	-2 24 6 265 244 7	6 6 7 77 118 -77	-7 15 7 47 48 -46
-1 7 6 199 201 8	2 14 6 349 352 9	0 24 6 143 131 16	8 6 7 705 718 16	-5 15 7 99 90 12
1 7 6 127 124 22	4 14 6 74 25 -36	-5 25 6 154 163 14	-13 7 7 137 82 13	-3 15 7 184 166 8
3 7 6 152 128 10	6 14 6 152 161 19	-3 25 6 281 260 7	-11 7 7 77 90 -26	-1 15 7 67 61 -35
5 7 6 103 100 16	8 14 6 184 135 28	-1 25 6 169 158 12	-9 7 7 401 392 5	1 15 7 183 192 18
7 7 6 85 126 -37	-13 15 6 73 34 -33	-14 0 7 224 225 12	-7 7 7 172 171 6	3 15 7 109 112 -25
9 7 6 148 132 23	-11 15 6 153 159 14	-12 0 7 97 67 -23	-5 7 7 49 73 -32	5 15 7 244 211 12
-14 8 6 143 147 12	-9 15 6 0 12 -1	-10 0 7 140 118 13	-3 7 7 141 132 8	-10 16 7 392 387 7
-12 8 6 139 118 9	-7 15 6 126 116 9	-8 0 7 180 201 12	-1 7 7 55 16 -55	-8 16 7 121 123 12
-10 8 6 260 260 5	-5 15 6 444 444 4	-6 0 7 209 196 11	1 7 7 444 449 8	-6 16 7 336 348 6
-8 8 6 418 411 5	-3 15 6 310 307 5	-4 0 7 171 169 13	3 7 7 186 178 10	-4 16 7 140 144 9
-6 8 6 661 667 4	-1 15 6 369 367 5	-2 0 7 102 127 -25	5 7 7 137 133 17	-2 16 7 411 403 6
-4 8 6 103 100 9	1 15 6 140 152 16	0 0 7 82 108 -28	7 7 7 0 8 -1	0 16 7 143 185 25
-2 8 6 164 157 9	3 15 6 141 133 20	2 0 7 263 268 11	-14 8 7 82 63 -37	2 16 7 326 317 14
0 8 6 451 456 10	5 15 6 58 34 -57	4 0 7 0 22 -1	-12 8 7 83 99 -27	4 16 7 191 185 14
2 8 6 14 13 -13	7 15 6 50 11 -50	6 0 7 132 127 -29	-10 8 7 139 113 14	-11 17 7 77 86 -42
4 8 6 277 275 7	-12 16 6 80 86 -22	8 0 7 0 40 -1	-8 8 7 0 27 -1	-9 17 7 757 752 6
6 8 6 146 131 16	-10 16 6 39 50 -39	-15 1 7 43 32 -42	-6 8 7 52 67 -30	-7 17 7 0 15 -1
8 8 6 330 329 12	-8 16 6 191 182 8	-13 1 7 124 131 12	-4 8 7 203 202 7	-5 17 7 74 84 -24
-15 9 6 97 68 -24	-6 16 6 291 290 7	-11 1 7 76 15 -23	-2 8 7 31 34 -30	-3 17 7 367 366 6
-13 9 6 369 365 6	-4 16 6 0 12 -1	-9 1 7 81 75 -20	0 8 7 61 38 -61	-1 17 7 249 253 9
-11 9 6 169 172 7	-2 16 6 68 80 -18	-7 1 7 65 40 -20	2 8 7 119 120 18	1 17 7 544 555 9
-9 9 6 431 423 5	0 16 6 121 137 -22	-5 1 7 60 59 -27	4 8 7 30 5 -29	3 17 7 223 209 13
-7 9 6 355 359 4	2 16 6 0 5 -1	-3 1 7 58 41 -25	6 8 7 104 87 -31	-10 18 7 166 174 12
-5 9 6 0 17 -1	4 16 6 35 33 -34	-1 1 7 71 20 -35	-13 9 7 24 6 -24	-8 18 7 69 61 -31
-3 9 6 704 707 4	6 16 6 37 93 -37	1 1 7 57 85 -36	-11 9 7 282 288 8	-6 18 7 332 325 7

Table 5-1. Observed and calculated structure factors for FR12 in air

Page 7

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 18 7 385 395 6	-6 2 8 110 97 13	-7 7 8 90 95 -18	2 12 8 778 785 9	-6 2 9 133 126 12
-2 18 7 344 346 8	-4 2 8 94 56 15	-5 7 8 12 16 -11	-9 13 8 122 145 18	-4 2 9 71 83 -34
0 18 7 100 103 -26	-2 2 8 119 93 17	-3 7 8 220 213 12	-7 13 8 78 47 -31	-2 2 9 179 178 12
2 18 7 186 199 14	0 2 8 64 11 -53	-1 7 8 110 96 -22	-5 13 8 196 191 7	0 2 9 0 16 -1
-9 19 7 288 283 8	2 2 8 47 57 -47	1 7 8 111 98 -26	-3 13 8 158 156 12	-9 3 9 0 20 -1
-7 19 7 100 68 17	4 2 8 24 5 -23	3 7 8 85 106 -40	-1 13 8 126 134 18	-7 3 9 86 83 -23
-5 19 7 92 78 -25	-13 3 8 124 100 15	-12 8 8 224 221 13	1 13 8 73 67 -43	-5 3 9 232 240 9
-3 19 7 131 134 13	-11 3 8 0 5 -1	-10 8 8 71 40 -33	-10 14 8 287 277 10	-3 3 9 0 15 -1
-1 19 7 183 186 14	-9 3 8 86 64 -21	-8 8 8 236 239 11	-8 14 8 138 153 14	-1 3 9 220 225 10
1 19 7 211 226 12	-7 3 8 313 320 6	-6 8 8 0 63 -1	-6 14 8 114 113 15	1 3 9 114 80 -54
3 19 7 0 9 -1	-5 3 8 299 306 6	-4 8 8 0 46 -1	-4 14 8 171 178 10	-10 4 9 109 110 -25
-8 20 7 246 232 9	-3 3 8 250 248 10	-2 8 8 272 272 8	-2 14 8 128 110 21	-8 4 9 0 8 -1
-6 20 7 39 33 -39	-1 3 8 37 82 -36	0 8 8 124 141 16	0 14 8 263 257 9	-6 4 9 67 14 -34
-4 20 7 323 314 7	1 3 8 118 89 18	2 8 8 361 361 13	2 14 8 79 20 -50	-4 4 9 74 31 -35
-2 20 7 106 96 -20	3 3 8 47 55 -46	4 8 8 0 66 -1	-9 15 8 80 26 -32	-2 4 9 0 48 -1
0 20 7 158 161 18	5 3 8 57 2 -56	-11 9 8 129 122 16	-7 15 8 192 198 11	0 4 9 65 21 -65
2 20 7 96 130 -51	-12 4 8 94 92 -22	-9 9 8 310 311 7	-5 15 8 70 57 -32	-9 5 9 87 97 -28
-7 21 7 58 52 -58	-10 4 8 325 324 7	-7 9 8 127 109 11	-3 15 8 331 313 7	-7 5 9 299 304 8
-5 21 7 126 120 17	-8 4 8 218 241 7	-5 9 8 365 360 6	-1 15 8 24 7 -24	-5 5 9 574 587 7
-3 21 7 0 7 -1	-6 4 8 115 127 13	-3 9 8 68 9 -31	1 15 8 100 45 -31	-3 5 9 194 205 13
-1 21 7 0 31 -1	-4 4 8 358 370 9	-1 9 8 304 296 6	-8 16 8 149 133 12	-1 5 9 473 469 8

-6 22 7 0 8 -1 -2 4 8 157 171 21 1 9 8 236 238 9 -6 16 8 41 17 -40 1 5 9 46 39 -46
 -4 22 7 0 4 -1 0 4 8 137 126 20 3 9 8 51 5 -50 -4 16 8 0 1 -1 -8 6 9 515 511 7
 -2 22 7 0 27 -1 2 4 8 95 49 -33 -12 10 8 75 123 -75 -2 16 8 94 71 -23 -6 6 9 71 66 -34
 -12 0 8 641 644 11 4 4 8 206 199 36 -10 10 8 84 105 -28 0 16 8 106 40 -31 -4 6 9 749 767 7
 -10 0 8 0 66 -1 -13 5 8 151 100 12 -8 10 8 222 229 10 -7 17 8 71 44 -37 -2 6 9 215 210 11
 -8 0 8 937 952 9 -11 5 8 186 186 10 -6 10 8 157 137 8 -5 17 8 96 82 -24 0 6 9 145 123 18
 -6 0 8 687 692 9 -9 5 8 116 125 17 -4 10 8 90 103 -17 -3 17 8 102 62 -19 -9 7 9 104 116 -21
 -4 0 8 180 191 26 -7 5 8 0 7 -1 -2 10 8 149 154 11 -1 17 8 90 24 -34 -7 7 9 60 33 -60
 -2 0 8 643 647 15 -5 5 8 211 217 10 0 10 8 69 55 -33 -6 18 8 0 105 -1 -5 7 9 247 236 9
 0 0 8 146 159 -29 -3 5 8 84 76 -33 2 10 8 241 244 10 -4 18 8 52 71 -51 -3 7 9 54 22 -53
 2 0 8 967 971 10 -1 5 8 0 53 -1 4 10 8 79 78 -54 -2 18 8 122 103 -33 -1 7 9 164 164 12
 4 0 8 125 138 -38 1 5 8 100 33 -37 -11 11 8 0 62 -1 -10 0 9 178 189 18 -8 8 9 0 9 -1
 -13 1 8 0 26 -1 3 5 8 191 177 15 -9 11 8 630 632 7 -8 0 9 95 109 -28 -6 8 9 139 118 12
 -11 1 8 64 79 -32 5 5 8 78 24 -78 -7 11 8 303 312 8 -6 0 9 94 111 -27 -4 8 9 74 7 -40
 -9 1 8 392 400 8 -12 6 8 124 93 14 -5 11 8 676 678 5 -4 0 9 152 145 23 -2 8 9 21 33 -21
 -7 1 8 0 42 -1 -10 6 8 104 92 16 -3 11 8 53 63 -52 -2 0 9 100 115 -99 0 8 9 106 96 -23
 -5 1 8 616 636 8 -8 6 8 0 8 -1 -1 11 8 570 565 8 0 0 9 134 150 -34 -7 9 9 216 203 9
 -3 1 8 92 108 -21 -6 6 8 61 76 -32 1 11 8 404 401 8 -9 1 9 21 5 -20 -5 9 9 89 10 -26
 -1 1 8 226 233 13 -4 6 8 160 173 10 3 11 8 223 234 11 -7 1 9 25 9 -24 -3 9 9 207 194 11
 1 1 8 304 303 9 -2 6 8 49 15 -48 -10 12 8 179 171 12 -5 1 9 0 6 -1 -1 9 9 0 14 -1
 3 1 8 287 294 12 0 6 8 81 30 -41 -8 12 8 372 360 8 -3 1 9 0 3 -1 -6 10 9 34 17 -34
 5 1 8 275 264 13 2 6 8 103 78 -31 -6 12 8 317 321 7 -1 1 9 34 50 -33 -4 10 9 0 36 -1
 -12 2 8 117 136 19 4 6 8 0 32 -1 -4 12 8 109 119 14 1 1 9 0 75 -1 -2 10 9 179 142 13
 -10 2 8 53 6 -53 -11 7 8 150 146 12 -2 12 8 152 170 16 -10 2 9 266 263 9 -5 11 9 11 33 -11
 -8 2 8 0 36 -1 -9 7 8 31 26 -31 0 12 8 209 179 10 -8 2 9 111 116 15 -3 11 9 106 120 -26

Table 5-2. Observed and calculated structure factors for FR12 in DAC at 0.26 GPa

Page 1

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

2 2 0 85 45 9 -1 9 1 1358 1326 21 2 4 2 632 555 15 -6 2 3 455 434 27 3 19 3 86 144 -85
 1 3 0 298 319 1 1 9 1 193 195 7 -5 5 2 46 66 -16 -4 2 3 62 76 8 -6 0 4 329 298 15
 3 3 0 801 801 9 3 9 1 209 211 3 -3 5 2 725 698 2 -2 2 3 23 56 -22 -4 0 4 1966 1991 27
 0 4 0 771 795 8 5 9 1 410 431 12 -1 5 2 662 640 3 0 2 3 1034 1028 4 -2 0 4 27 32 -27
 2 4 0 1321 1300 6 -6 10 1 397 397 8 1 5 2 38 26 -14 2 2 3 717 760 13 0 0 4 1489 1517 15
 4 4 0 304 271 10 -4 10 1 650 658 8 3 5 2 136 125 5 -5 3 3 766 740 8 -5 1 4 265 256 4
 1 5 0 225 212 1 -2 10 1 157 153 3 -4 6 2 18 14 -18 -3 3 3 82 75 5 -3 1 4 486 498 2
 3 5 0 794 808 7 0 10 1 398 381 4 -2 6 2 162 177 6 -1 3 3 1189 1189 5 -1 1 4 1546 1546 11
 4 6 0 259 214 15 2 10 1 583 578 3 0 6 2 17 15 -16 1 3 3 136 143 5 1 1 4 226 224 11
 1 7 0 354 331 2 4 10 1 153 150 14 2 6 2 47 48 12 -6 4 3 27 16 -26 -6 2 4 56 113 -56
 3 7 0 582 556 3 6 10 1 171 174 37 -7 7 2 379 358 19 -4 4 3 173 164 4 -4 2 4 138 158 7
 5 7 0 391 417 4 -7 11 1 125 117 -49 -5 7 2 340 341 2 -2 4 3 170 165 2 -2 2 4 36 49 -35
 2 8 0 197 173 4 -3 11 1 502 517 7 -3 7 2 132 128 3 0 4 3 41 49 -26 0 2 4 45 92 -44
 4 8 0 1242 1256 14 1 11 1 161 191 4 -1 7 2 658 614 8 2 4 3 118 89 11 2 2 4 70 250 -70
 6 8 0 282 294 11 3 11 1 126 162 18 1 7 2 407 408 4 -7 5 3 158 155 17 -7 3 4 503 507 20
 1 9 0 962 968 9 5 11 1 270 296 12 3 7 2 325 324 4 -5 5 3 1352 1371 13 -5 3 4 42 53 -41
 3 9 0 593 614 3 -8 12 1 164 144 23 -6 8 2 570 619 18 -3 5 3 423 419 2 -3 3 4 810 833 5
 5 9 0 68 89 19 -6 12 1 267 258 9 -4 8 2 766 763 2 -1 5 3 2213 2225 15 -1 3 4 774 774 4
 2 10 0 377 391 2 -4 12 1 216 195 9 -2 8 2 1172 1167 5 1 5 3 693 694 3 1 3 4 289 316 16
 4 10 0 684 697 3 -2 12 1 249 219 7 0 8 2 161 154 2 3 5 3 298 363 12 -6 4 4 1013 1059 12
 6 10 0 124 102 -37 2 12 1 260 253 8 2 8 2 184 166 4 -6 6 3 122 98 19 -4 4 4 476 511 7
 1 11 0 1518 1463 6 4 12 1 77 51 -59 4 8 2 404 418 15 -4 6 3 799 758 3 -2 4 4 295 300 4
 3 11 0 1288 1268 6 6 12 1 261 240 16 -7 9 2 23 31 -22 -2 6 3 2576 2602 16 0 4 4 541 560 11

5	11	0	322	322	7	-7	13	1	323	236	13	-5	9	2	982	976	5	0	6	3	573	594	3	2	4	4	72	97	-72
2	12	0	171	118	8	-5	13	1	50	79	-50	-3	9	2	713	729	6	2	6	3	1528	1514	8	-7	5	4	362	335	7
4	12	0	598	639	4	-3	13	1	167	193	12	-1	9	2	165	193	9	-7	7	3	537	561	10	-5	5	4	262	257	6
3	13	0	201	188	8	1	13	1	806	843	20	1	9	2	1091	1095	12	-5	7	3	355	372	5	-3	5	4	29	61	-29
5	13	0	471	476	9	3	13	1	265	217	14	3	9	2	194	216	7	-3	7	3	226	196	3	-1	5	4	427	437	7
7	13	0	475	489	12	5	13	1	173	151	19	5	9	2	636	676	11	-1	7	3	1069	1030	10	1	5	4	122	128	27
2	14	0	661	682	13	7	13	1	267	241	21	-8	10	2	270	236	24	3	7	3	216	222	13	3	5	4	67	47	-67
4	14	0	285	326	12	-8	14	1	135	157	-49	-6	10	2	648	642	6	-8	8	3	105	146	-39	-8	6	4	69	79	-68
6	14	0	278	272	17	-6	14	1	679	662	5	-4	10	2	273	273	3	-6	8	3	298	300	5	-6	6	4	106	100	24
8	14	0	264	277	22	-4	14	1	55	87	-55	-2	10	2	841	847	7	-4	8	3	224	219	6	-4	6	4	18	11	-17
3	15	0	186	184	19	-2	14	1	1050	1021	12	0	10	2	153	168	8	0	8	3	296	289	8	-2	6	4	10	10	-9
5	15	0	738	711	9	2	14	1	219	213	13	2	10	2	375	387	3	2	8	3	45	76	-45	0	6	4	211	195	15
7	15	0	452	449	14	4	14	1	1354	1364	8	4	10	2	374	345	9	4	8	3	194	174	26	-7	7	4	211	243	12
2	16	0	96	140	-78	6	14	1	17	43	-17	-7	11	2	32	30	-31	-7	9	3	405	446	11	-5	7	4	190	159	11
4	16	0	427	407	27	-9	15	1	145	136	-52	-5	11	2	1869	1889	7	-5	9	3	51	54	-51	-3	7	4	151	141	9
6	16	0	238	228	19	-7	15	1	205	237	27	-3	11	2	1060	1070	10	-3	9	3	815	795	5	-1	7	4	189	140	18
8	16	0	92	34	-92	-5	15	1	245	236	12	1	11	2	1733	1684	12	-1	9	3	564	585	7	1	7	4	386	393	8
3	17	0	221	170	21	-3	15	1	484	496	7	3	11	2	82	102	-81	1	9	3	567	592	9	3	7	4	301	258	20
5	17	0	75	16	-74	3	15	1	118	122	28	5	11	2	1660	1676	32	3	9	3	756	777	4	-8	8	4	732	761	18
7	17	0	108	89	-87	5	15	1	33	9	-33	-8	12	2	96	88	-42	5	9	3	287	285	30	-6	8	4	431	413	8
4	18	0	216	188	20	7	15	1	389	390	15	-6	12	2	875	885	5	-8	10	3	199	198	25	-4	8	4	375	353	6
6	18	0	330	244	63	-8	16	1	306	325	21	-2	12	2	2176	2206	46	-6	10	3	208	182	8	-2	8	4	90	94	17
5	19	0	32	13	-31	-6	16	1	679	681	8	0	12	2	1034	975	6	-4	10	3	290	285	10	0	8	4	481	482	7
7	19	0	489	527	15	-4	16	1	387	370	8	2	12	2	410	386	9	-2	10	3	125	148	18	2	8	4	172	157	22
4	20	0	707	692	30	4	16	1	980	986	12	4	12	2	1271	1248	16	0	10	3	674	659	11	4	8	4	179	157	33
6	20	0	307	312	18	6	16	1	126	148	-48	6	12	2	251	250	16	2	10	3	696	706	5	-9	9	4	141	103	-59
5	21	0	209	189	27	8	16	1	400	392	18	-9	13	2	43	86	-42	-9	11	3	213	209	20	-7	9	4	488	461	7
-2	0	1	229	252	1	-7	17	1	954	976	15	-7	13	2	252	254	13	-7	11	3	220	208	19	-5	9	4	618	611	5
0	0	1	254	267	1	-5	17	1	194	201	15	-5	13	2	541	558	5	-5	11	3	147	136	12	-3	9	4	201	192	12
-1	1	1	352	421	1	-3	17	1	818	765	15	-3	13	2	209	206	10	-3	11	3	74	94	-35	-1	9	4	735	708	6
1	1	1	527	530	4	3	17	1	284	282	14	1	13	2	361	308	11	-1	11	3	389	386	14	1	9	4	49	83	-49
0	2	1	194	206	1	5	17	1	370	369	12	3	13	2	275	241	10	1	11	3	36	18	-35	3	9	4	614	615	8
2	2	1	1316	1358	22	7	17	1	599	602	12	5	13	2	577	591	7	3	11	3	39	96	-38	-8	10	4	540	533	10
-3	3	1	1327	1365	8	-8	18	1	350	323	20	-8	14	2	371	357	11	5	11	3	132	93	-94	-6	10	4	72	82	-50
-1	3	1	519	530	1	-6	18	1	903	908	8	-6	14	2	306	324	10	-8	12	3	125	100	29	-4	10	4	364	372	7
1	3	1	1570	1537	7	-4	18	1	60	28	-59	-4	14	2	544	560	7	-6	12	3	137	166	33	-2	10	4	184	199	23
-4	4	1	47	59	-18	2	18	1	80	146	-80	2	14	2	365	380	11	-4	12	3	353	347	5	0	10	4	447	452	8
-2	4	1	59	33	3	4	18	1	1121	1139	18	4	14	2	37	56	-37	0	12	3	130	102	25	2	10	4	313	284	11
0	4	1	182	174	1	6	18	1	791	782	10	6	14	2	347	366	23	-9	13	3	143	120	38	-9	11	4	434	455	19
2	4	1	26	9	-26	-7	19	1	424	465	13	-9	15	2	113	89	-48	-7	13	3	264	277	34	-7	11	4	834	824	9
-5	5	1	392	448	6	-5	19	1	109	153	-53	-7	15	2	611	622	7	-5	13	3	511	507	17	-5	11	4	743	735	5
-3	5	1	1815	1886	6	5	19	1	241	254	19	-5	15	2	249	235	12	-1	13	3	164	172	31	-3	11	4	163	160	23
-1	5	1	406	391	2	7	19	1	143	138	-56	-3	15	2	54	36	-54	1	13	3	36	9	-35	-1	11	4	1453	1404	18
1	5	1	2457	2386	9	-6	20	1	43	63	-43	1	15	2	39	153	-38	3	13	3	66	46	-65	1	11	4	249	240	14
3	5	1	1420	1420	13	4	20	1	72	70	-72	3	15	2	526	492	7	5	13	3	78	14	-77	-8	12	4	1290	1284	26
-6	6	1	3164	3144	6	6	20	1	553	570	14	5	15	2	163	175	-52	-8	14	3	707	731	9	-6	12	4	29	19	-28
-4	6	1	772	763	6	-5	21	1	35	45	-34	-6	16	2	267	279	11	-6	14	3	112	167	-38	-4	12	4	597	582	5
0	6	1	2138	2112	20	5	21	1	256	252	21	-4	16	2	346	346	9	-4	14	3	338	340	22	0	12	4	1086	1080	6
2	6	1	2126	2046	19	-2	0	2	3230	3167	18	2	16	2	72	69	-71	6	14	3	571	668	17	-9	13	4	32	87	-32
4	6	1	2378	2440	28	0	0	2	776	713	2	4	16	2	50	3	-49	-9	15	3	271	241	16	-7	13	4	180	173	20
-5	7	1	266	255	2	-3	1	2	1276	1314	8	-7	17	2	36	18	-35	-7	15	3	33	27	-33	-5	13	4	35	30	-34
-3	7	1	512	543	2	-1	1	2	299	293	1	-5	17	2	165	121	19	-5	15	3	516	522	7	-1	13	4	389	373	11
-1	7	1	993	989	7	1	1	2	378	457	3	-6	18	2	146	116	23	3	15	3	12	87	-11	1	13	4	66	44	-65
1	7	1	792	808	5	-4	2	2	22	55	-22	-4	18	2	306	260	16	5	15	3	372	358	21	5	13	4	162	196	-80

3	7	1	403	380	2	-2	2	2	142	165	1	-7	19	2	35	11	-35	-8	16	3	533	540	8	-8	14	4	36	41	-36
5	7	1	416	414	27	0	2	2	38	58	6	-5	19	2	358	370	12	-6	16	3	327	310	10	-6	14	4	393	379	33
-6	8	1	208	234	12	2	2	2	135	178	8	-6	20	2	759	758	23	-4	16	3	422	417	21	-4	14	4	183	201	18
-4	8	1	270	270	2	-5	3	2	46	67	-22	-4	0	3	137	135	4	4	16	3	122	116	-103	-7	15	4	38	22	-37
-2	8	1	391	394	2	-3	3	2	750	699	2	-2	0	3	215	210	3	6	16	3	487	520	21	-8	16	4	319	289	21
0	8	1	136	110	8	-1	3	2	74	91	2	0	0	3	412	399	4	-7	17	3	504	483	7	-6	16	4	263	240	13
2	8	1	274	251	7	1	3	2	326	279	1	-5	1	3	250	225	5	-5	17	3	1087	1095	15	2	16	4	87	12	-86
-7	9	1	211	229	21	-4	4	2	857	852	6	-3	1	3	204	225	1	5	17	3	508	531	18	-7	17	4	158	153	35
-5	9	1	539	534	6	-2	4	2	951	873	3	-1	1	3	405	390	2	-6	18	3	363	339	10	-5	17	4	43	20	-42
-3	9	1	480	472	3	0	4	2	369	406	2	1	1	3	156	177	4	4	18	3	573	558	17	1	17	4	68	99	-68

Table 5-2. Observed and calculated structure factors for FR12 in DAC at 0.26 GPa

Page 2

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	18	4	232	192	51	-7	5	5	1385	1432	22	-1	9	5	360	333	11	-7	1	6	320	328	12	0	6	6	50	74	-50
-6	0	5	149	113	18	-5	5	5	443	406	5	1	9	5	314	342	12	-5	1	6	161	160	12	-7	7	6	40	38	-39
-4	0	5	216	199	12	-3	5	5	871	848	7	-8	10	5	29	48	-28	-3	1	6	930	913	5	-5	7	6	387	420	7
-2	0	5	286	273	8	-1	5	5	516	494	6	-6	10	5	197	190	14	-1	1	6	88	130	-28	-3	7	6	224	216	11
0	0	5	182	180	18	1	5	5	404	439	9	-4	10	5	101	112	29	-6	2	6	36	46	-35	-1	7	6	173	213	25
-7	1	5	160	115	19	-8	6	5	405	347	15	-2	10	5	198	212	19	-4	2	6	65	68	-48	1	7	6	122	180	-45
-5	1	5	84	93	-29	-6	6	5	644	630	7	0	10	5	218	245	18	-2	2	6	68	117	-35	-6	8	6	655	650	8
-3	1	5	137	127	12	-4	6	5	1811	1835	11	2	10	5	304	246	13	0	2	6	102	181	-53	-4	8	6	106	98	28
-1	1	5	91	132	20	-2	6	5	321	349	10	-7	11	5	199	173	14	-7	3	6	105	112	-43	-2	8	6	166	176	46
1	1	5	34	72	-33	0	6	5	971	912	9	-5	11	5	106	110	27	-5	3	6	237	247	8	0	8	6	453	443	10
-6	2	5	215	215	9	2	6	5	325	314	13	-1	11	5	36	54	-35	-3	3	6	298	297	6	-7	9	6	380	356	24
-4	2	5	63	68	-33	-7	7	5	632	679	6	1	11	5	205	178	19	-1	3	6	428	456	12	-3	9	6	706	687	13
-2	2	5	544	551	4	-5	7	5	31	32	-31	3	11	5	43	9	-42	-8	4	6	429	426	19	-1	9	6	30	54	-30
0	2	5	473	479	7	-3	7	5	216	197	7	-6	12	5	133	127	22	-4	4	6	169	181	11	1	9	6	247	234	23
-7	3	5	658	641	22	-1	7	5	36	48	-36	-4	12	5	100	128	-47	-2	4	6	47	58	-46	-6	10	6	376	368	10
-5	3	5	39	32	-39	-8	8	5	213	212	13	-2	12	5	112	138	-85	0	4	6	101	62	-56	-4	10	6	205	210	30
-3	3	5	440	449	3	-6	8	5	228	154	12	0	12	5	92	64	-60	-7	5	6	246	226	12	-2	10	6	172	174	27
-1	3	5	160	150	11	-4	8	5	127	112	27	-7	13	5	101	89	-35	-5	5	6	169	144	15	0	10	6	264	218	18
1	3	5	33	43	-33	-2	8	5	197	193	18	-5	13	5	190	184	15	-3	5	6	91	88	-27	-5	11	6	89	94	-89
-6	4	5	34	33	-34	2	8	5	72	31	-71	-1	13	5	107	137	-62	1	5	6	297	269	15	-1	11	6	114	128	-50
-4	4	5	22	19	-22	-9	9	5	596	615	27	-6	14	5	423	417	7	-8	6	6	102	74	-57	-2	12	6	401	414	20
-2	4	5	111	119	16	-7	9	5	241	257	11	-6	0	6	786	750	17	-6	6	6	54	29	-54	-2	0	7	106	132	-105
0	4	5	74	8	-73	-5	9	5	365	375	7	-4	0	6	712	683	6	-4	6	6	30	15	-30	-3	1	7	44	80	-44
2	4	5	124	140	-61	-3	9	5	114	133	21	-2	0	6	1305	1308	8	-2	6	6	138	136	32	-4	2	7	318	310	22

Table 5-3. Observed and calculated structure factors for FR12 at 2.86 GPa

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	2	0	39	51	-38	2	10	1	519	535	27	5	11	2	1653	1672	44	-7	13	3	340	342	27	2	0	5	91	197	-90
1	3	0	299	349	4	4	10	1	110	122	-50	7	11	2	347	440	62	-5	13	3	553	507	47	-3	1	5	100	97	-100
3	3	0	802	750	7	6	10	1	148	143	-148	-6	12	2	909	842	38	-3	13	3	54	237	-53	-1	1	5	158	148	-90
2	4	0	1288	1302	9	-3	11	1	475	491	22	-4	12	2	358	284	81	5	13	3	60	50	-59	1	1	5	59	87	-58
4	4	0	401	300	50	3	11	1	166	191	29	2	12	2	457	409	32	-8	14	3	703	758	45	-2	2	5	589	508	25
1	5	0	241	245	12	-6	12	1	315	256	28	4	12	2	1350	1257	92	-6	14	3	143	205	-92	0	2	5	504	465	39
3	5	0	824	798	10	-4	12	1	206	184	35	-7	13	2	251	279	-165	2	14	3	875	907	26	2	2	5	458	442	36
5	5	0	188	198	29	-2	12	1	237	164	49	-5	13	2	544	546	19	6	14	3	649	676	44	-3	3	5	531	420	18

2 6 0 23 53 -22	2 12 1 348 288 20	3 13 2 54 221 -53	-9 15 3 175 289-174	-1 3 5 233 154 55
6 6 0 40 31 -40	-9 13 1 194 213-193	5 13 2 708 607 35	-5 15 3 563 497 49	1 3 5 52 69 -52
1 7 0 323 282 19	-7 13 1 60 248 -60	-8 14 2 307 336-199	3 15 3 59 92 -58	3 3 5 632 633 49
3 7 0 648 560 22	7 13 1 143 274-143	-6 14 2 382 319 64	-8 16 3 600 579 79	2 4 5 96 196 -95
5 7 0 502 537 39	-6 14 1 738 687 116	-4 14 2 549 563 76	-4 16 3 353 357 40	-5 5 5 409 421 35
2 8 0 34 218 -33	4 14 1 1356 1435 19	4 14 2 44 95 -44	-7 17 3 444 490 86	-3 5 5 1052 835 61
4 8 0 1205 1211 17	8 14 1 67 430 -67	-7 15 2 596 614 78	-4 0 4 1932 1946 11	-1 5 5 539 547 31
6 8 0 46 243 -45	-7 15 1 277 272 55	-5 15 2 60 142 -59	-2 0 4 192 57 43	1 5 5 416 434 29
1 9 0 1023 982 31	7 15 1 351 358 54	-6 16 2 271 324 67	0 0 4 1472 1492 9	3 5 5 1173 1189 22
3 9 0 619 682 14	-8 16 1 75 307 -75	-4 16 2 225 291 -94	2 0 4 2070 2084 30	-6 6 5 633 604 20
7 9 0 1225 1105 23	-6 16 1 650 647 44	6 16 2 99 96 -98	-3 1 4 483 500 15	-4 6 5 1864 1858 45
2 10 0 396 362 18	-4 16 1 409 325 67	-8 18 2 191 245-190	-1 1 4 1527 1534 8	-2 6 5 410 367 24
4 10 0 735 629 16	4 16 1 1001 1030 30	-6 18 2 234 172-113	1 1 4 257 254 52	0 6 5 908 876 25
6 10 0 65 73 -64	8 16 1 73 314 -72	-7 19 2 66 78 -66	3 1 4 815 864 67	2 6 5 369 373 21
3 11 0 1370 1356 16	-7 17 1 926 939 19	-6 20 2 855 772 46	-4 2 4 236 205 25	4 6 5 1494 1178 214
5 11 0 286 298 55	5 17 1 435 296 51	-2 0 3 279 258 19	-2 2 4 87 126 -86	-7 7 5 664 657 78
7 11 0 1657 1710 65	7 17 1 622 641 41	0 0 3 442 429 10	0 2 4 82 163 -81	-1 7 5 54 55 -54
4 12 0 527 520 18	-8 18 1 241 377-137	2 0 3 337 359 26	2 2 4 169 229 26	3 7 5 527 536 30
6 12 0 293 243 66	-6 18 1 946 927 27	-3 1 3 180 239 12	-3 3 4 804 880 13	-6 8 5 172 193 -65
3 13 0 265 217 53	4 18 1 1170 1094 24	-1 1 3 452 394 7	-1 3 4 778 738 12	-4 8 5 119 135-119
5 13 0 569 481 20	6 18 1 871 802 32	1 1 3 198 206 14	1 3 4 249 289 -88	-2 8 5 70 145 -69
7 13 0 424 495 33	-7 19 1 394 446 64	3 1 3 21 187 -20	-6 4 4 1034 1065 26	0 8 5 63 12 -62
2 14 0 787 691 30	6 20 1 617 507 44	-4 2 3 40 73 -39	-4 4 4 558 529 36	-7 9 5 59 228 -59
4 14 0 338 313 32	-2 0 2 3356 3199 15	-2 2 3 72 91 -22	-2 4 4 251 246 14	-5 9 5 264 333 41
6 14 0 204 212 -78	0 0 2 822 729 5	0 2 3 1059 1035 4	0 4 4 662 602 17	-3 9 5 89 220 -89
8 14 0 66 280 -66	2 0 2 2186 2266 22	2 2 3 776 788 13	4 4 4 210 92-122	-1 9 5 240 337 -97
3 15 0 128 147-127	-3 1 2 1267 1307 6	4 2 3 633 530 65	-5 5 4 253 240 38	1 9 5 291 288 63
5 15 0 979 669 107	-1 1 2 311 329 5	-5 3 3 684 726 15	-1 5 4 500 434 24	3 9 5 259 115 48
7 15 0 325 402 48	1 1 2 447 516 9	-3 3 3 44 53 -43	1 5 4 195 146 40	-6 10 5 207 197 50
4 16 0 363 365 71	3 1 2 186 237 30	-1 3 3 1172 1177 5	3 5 4 52 60 -51	-4 10 5 52 117 -52
6 16 0 191 143-130	-2 2 2 147 201 8	1 3 3 189 140 12	0 6 4 143 255-112	-2 10 5 232 123-110
4 18 0 124 173-124	0 2 2 100 110 13	3 3 3 61 116 -61	-5 7 4 59 90 -58	0 10 5 301 242 60
0 0 1 262 360 2	2 2 2 343 323 14	-4 4 3 39 140 -39	-3 7 4 255 222 73	2 10 5 349 260 44
2 0 1 336 456 16	4 2 2 360 365 63	0 4 3 56 109 15	-1 7 4 83 108 -82	4 10 5 63 201 -63
-1 1 1 330 443 3	-3 3 2 759 679 22	-5 5 3 1348 1358 6	1 7 4 419 436 23	-7 11 5 70 180 -69
1 1 1 511 496 7	-1 3 2 63 123 -34	-3 5 3 379 391 10	3 7 4 262 221 -77	-5 11 5 159 118-159
-2 2 1 29 40 -29	1 3 2 305 292 19	-1 5 3 2236 2269 14	5 7 4 60 405 -59	-6 12 5 160 79-106
0 2 1 206 181 4	3 3 2 561 586 11	1 5 3 755 748 23	-6 8 4 478 416 77	-4 12 5 199 107 -61
2 2 1 1410 1377 14	-4 4 2 1024 879 48	3 5 3 240 311 25	-4 8 4 470 426 30	-2 12 5 219 223-106
-3 3 1 1332 1375 12	-2 4 2 937 858 5	5 5 3 1131 1280 15	0 8 4 448 441 21	2 12 5 61 157 -61
-1 3 1 524 499 14	0 4 2 412 414 8	-6 6 3 115 61-114	2 8 4 262 238 -84	-7 13 5 59 73 -58
1 3 1 1559 1527 11	2 4 2 699 516 32	-4 6 3 786 767 14	4 8 4 228 164 55	-5 13 5 249 209 67
3 3 1 575 517 17	4 4 2 709 687 15	-2 6 3 2813 2613 11	-7 9 4 488 491 49	-3 13 5 381 365 63
-4 4 1 157 189 43	-3 5 2 783 679 8	0 6 3 469 509 11	-5 9 4 686 615 35	-4 14 5 440 483 45
0 4 1 135 114 5	-1 5 2 739 624 24	2 6 3 1582 1492 19	-3 9 4 245 180 40	-4 0 6 709 690 31
2 4 1 26 79 -25	3 5 2 33 104 -33	4 6 3 209 367 -68	-1 9 4 761 753 94	-2 0 6 1254 1304 24
4 4 1 133 170-133	5 5 2 517 537 54	-7 7 3 528 525 76	3 9 4 624 611 25	0 0 6 918 799 19
-5 5 1 427 469 33	-4 6 2 34 16 -33	-5 7 3 324 361 24	5 9 4 157 118-117	2 0 6 404 472 74
-3 5 1 1934 2010 8	2 6 2 108 94 20	-3 7 3 312 234 20	-8 10 4 547 519 43	-3 1 6 936 920 23
-1 5 1 378 362 9	4 6 2 75 155 -74	-1 7 3 1027 1051 18	-4 10 4 462 361 30	-1 1 6 160 142 41
1 5 1 2387 2322 7	-7 7 2 582 481 34	5 7 3 193 437 -98	-2 10 4 143 147-142	1 1 6 555 613 15
3 5 1 1541 1457 29	-5 7 2 381 351 26	-6 8 3 208 196 57	0 10 4 448 372-229	-4 2 6 57 112 -57
5 5 1 1193 1211 41	-3 7 2 110 123 -59	-4 8 3 260 179 22	2 10 4 375 313 44	-2 2 6 110 141-110
-6 6 1 3868 3222 169	-1 7 2 637 690 32	0 8 3 276 298 14	4 10 4 63 90 -62	0 2 6 172 162 39

-4 6 1 1002 785 34	1 7 2 379 336 15	2 8 3 76 105 -76	6 10 4 189 262-106	-3 3 6 330 294 27
0 6 1 12187 2214 19	3 7 2 363 351 23	-7 9 3 313 401 32	-7 11 4 825 860 32	-1 3 6 466 465 19
2 6 1 2195 2081 19	5 7 2 120 96-119	-5 9 3 54 159 -53	-5 11 4 795 741 18	1 3 6 210 138 38
4 6 1 2489 2335 23	-6 8 2 693 661 63	-3 9 3 800 808 17	-3 11 4 209 162-104	-4 4 6 194 209 51
6 6 1 704 740 37	-4 8 2 735 767 20	-1 9 3 548 582 38	3 11 4 1418 1430 32	-2 4 6 134 80-133
-5 7 1 170 219 -50	-2 8 2 1104 1143 10	1 9 3 635 624 20	5 11 4 137 185-110	2 4 6 477 400 33
-3 7 1 548 562 24	0 8 2 111 113 -92	3 9 3 845 842 15	-8 12 4 1261 1239 41	-5 5 6 151 140-114
-1 7 1 947 1012 5	2 8 2 81 180 -37	5 9 3 296 320 35	-6 12 4 55 28 -55	1 5 6 221 265 -67
1 7 1 807 796 15	4 8 2 485 411 25	-8 10 3 137 206-137	-4 12 4 654 568 56	-2 6 6 61 167 -61
3 7 1 456 408 27	-5 9 2 968 980 17	-6 10 3 182 155 -57	-2 12 4 400 412 43	-5 7 6 423 465 28
5 7 1 325 347 70	-3 9 2 736 792 18	-4 10 3 424 351 46	2 12 4 886 890 15	-3 7 6 213 231 45
-6 8 1 198 207-148	-1 9 2 76 219 -76	-2 10 3 200 175 -85	4 12 4 576 597 27	-1 7 6 166 227 -58
-4 8 1 279 211 12	1 9 2 1032 1068 7	0 10 3 679 654 14	6 12 4 624 618 31	1 7 6 138 199-120
-2 8 1 468 393 12	3 9 2 155 244 -53	2 10 3 728 757 22	-7 13 4 237 216 58	-6 8 6 698 668 63
2 8 1 47 203 -47	5 9 2 705 725 18	4 10 3 257 251 -81	-3 13 4 245 251 69	-2 8 6 187 181 -66
6 8 1 194 269-147	7 9 2 206 97 -90	6 10 3 186 107-110	3 13 4 494 462 139	0 8 6 506 463 64
-5 9 1 502 553 18	-6 10 2 586 614 22	-7 11 3 148 208-105	5 13 4 202 196-179	-3 9 6 675 694 31
-3 9 1 512 501 4	-2 10 2 794 801 14	5 11 3 178 136 -63	-8 14 4 58 109 -58	-4 10 6 168 186 -79
-1 9 1 1792 1311 218	2 10 2 359 298 38	-8 12 3 61 4 -60	-6 14 4 389 358 25	-3 11 6 1267 1326 65
3 9 1 202 213 24	4 10 2 409 314 78	-6 12 3 256 220-101	4 14 4 560 463 69	-4 2 7 323 290-323
5 9 1 373 435 18	6 10 2 347 285 100	-4 12 3 433 388 23	-3 15 4 527 503 32	
-6 10 1 467 438 104	-5 11 2 1962 1832 11	-2 12 3 195 87 -66	-6 16 4 222 233 56	
-4 10 1 736 649 22	-3 11 2 991 1097 20	2 12 3 137 229-136	-4 0 5 61 282 -61	
-2 10 1 172 169 13	1 11 2 1604 1681 18	4 12 3 233 221 -93	-2 0 5 310 265 45	

Table 5-4. Observed and calculated structure factors for FR12 at 3.74 GPa

Page 1

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

1 3 0 297 283 1	-5 11 1 44 61 -43	-5 7 2 359 342 9	-2 2 3 34 85 -33	-4 20 3 452 392 23
0 4 0 716 747 2	-3 11 1 515 488 4	-3 7 2 80 105 9	0 2 3 1015 1033 9	-4 0 4 2105 1910 30
2 4 0 1238 1268 4	-1 11 1 200 209 7	-1 7 2 717 641 6	-5 3 3 749 734 15	0 0 4 1458 1428 50
1 5 0 230 234 1	1 11 1 140 154 8	1 7 2 353 365 4	-3 3 3 60 44 13	-5 1 4 320 284 20
3 5 0 777 815 8	3 11 1 134 169 11	3 7 2 285 305 7	-1 3 3 1190 1191 8	-3 1 4 554 520 7
2 6 0 49 17 11	5 11 1 191 259 16	-6 8 2 557 617 18	1 3 3 179 185 8	-1 1 4 1584 1475 19
4 6 0 268 202 12	-6 12 1 274 289 11	-4 8 2 798 786 6	-4 4 3 167 149 8	1 1 4 199 236 43
1 7 0 339 320 1	-4 12 1 195 202 11	-2 8 2 1130 1104 8	-2 4 3 155 151 4	-6 2 4 43 75 -42
3 7 0 517 513 5	-2 12 1 208 196 7	0 8 2 111 120 5	0 4 3 50 66 -24	-4 2 4 133 152 22
0 8 0 32 32 -31	0 12 1 417 399 7	2 8 2 93 110 14	2 4 3 108 81 -75	-2 2 4 46 53 -45
2 8 0 218 208 10	2 12 1 285 292 5	4 8 2 333 367 11	-5 5 3 1291 1322 17	0 2 4 53 97 -52
4 8 0 1147 1191 12	4 12 1 54 73 -53	-5 9 2 1072 982 35	-3 5 3 361 339 4	-5 3 4 50 94 -49
1 9 0 950 975 5	6 12 1 228 205 26	-3 9 2 765 755 4	-1 5 3 2203 2129 14	-3 3 4 858 830 13
3 9 0 643 668 3	-7 13 1 118 191 -41	-1 9 2 174 193 5	1 5 3 715 699 17	-1 3 4 763 740 11
5 9 0 52 45 -51	-5 13 1 24 70 -16	1 9 2 1040 1049 10	3 5 3 122 275-122	1 3 4 297 253 18
0 10 0 793 822 7	-3 13 1 85 124 -32	3 9 2 191 203 11	-6 6 3 86 74 -85	-6 4 4 987 1062 10
2 10 0 357 346 2	-1 13 1 494 469 4	-6 10 2 564 562 12	-4 6 3 803 767 12	-4 4 4 507 478 8
4 10 0 618 625 8	1 13 1 786 821 10	-4 10 2 246 231 8	-2 6 3 2691 2588 20	-2 4 4 238 241 10
6 10 0 108 112 -56	3 13 1 261 211 11	-2 10 2 814 799 7	0 6 3 480 500 8	0 4 4 578 599 11
1 11 0 1425 1348 9	5 13 1 172 242 33	0 10 2 148 166 9	2 6 3 1385 1469 45	2 4 4 46 75 -46
3 11 0 1327 1292 8	-6 14 1 604 626 31	2 10 2 319 334 7	-5 7 3 347 340 11	-5 5 4 236 252 17
5 11 0 312 307 14	-4 14 1 55 59 -54	4 10 2 319 326 9	-3 7 3 227 213 5	-3 5 4 60 62 -60
2 12 0 178 130 11	-2 14 1 1002 999 9	-7 11 2 45 22 -44	-1 7 3 1054 1013 9	-1 5 4 420 406 8
4 12 0 545 563 7	0 14 1 573 559 8	-5 11 2 1809 1771 20	1 7 3 43 15 -42	1 5 4 89 152 -89

1	13	0	269	297	7	2	14	1	261	249	26	-3	11	2	1085	1029	10	3	7	3	272	266	21	-6	6	4	101	67-100
3	13	0	181	193	13	4	14	1	1269	1347	14	-1	11	2	146	119	15	-6	8	3	249	255	14	0	6	4	189	177 27
5	13	0	428	452	16	6	14	1	6	57	-6	1	11	2	1683	1649	19	-4	8	3	216	190	7	-7	7	4	233	215 48
2	14	0	665	656	6	-7	15	1	222	262	20	3	11	2	103	108	-47	-2	8	3	10	36	-9	-5	7	4	132	105 -38
4	14	0	228	263	11	-5	15	1	236	232	20	5	11	2	1518	1571	46	0	8	3	311	313	12	-3	7	4	154	155 24
6	14	0	231	226	17	-3	15	1	468	477	14	-6	12	2	841	841	9	2	8	3	47	103	-47	-1	7	4	66	98 -66
1	15	0	29	37	-28	1	15	1	705	747	10	-4	12	2	283	261	10	-7	9	3	347	403	13	1	7	4	398	418 12
3	15	0	112	124	26	3	15	1	90	160	-90	-2	12	2	2130	2106	23	-5	9	3	78	55	-77	-6	8	4	452	425 13
5	15	0	672	683	22	-6	16	1	613	620	29	0	12	2	915	897	11	-3	9	3	783	775	10	-4	8	4	395	369 11
7	15	0	378	400	23	-4	16	1	303	326	21	2	12	2	370	393	8	-1	9	3	568	598	8	-2	8	4	55	39 -55
2	16	0	122	124	30	-2	16	1	631	646	25	4	12	2	1176	1231	24	1	9	3	511	517	12	0	8	4	391	399 12
4	16	0	340	357	15	2	16	1	267	296	16	-7	13	2	234	264	16	3	9	3	750	795	28	-7	9	4	475	469 13
6	16	0	138	159	32	4	16	1	892	909	19	-5	13	2	523	522	6	-6	10	3	204	174	15	-5	9	4	625	573 13
3	17	0	165	157	22	6	16	1	111	107	-43	-3	13	2	281	242	9	-4	10	3	345	303	11	-3	9	4	221	174 19
5	17	0	19	33	-19	-7	17	1	837	877	17	1	13	2	341	278	8	-2	10	3	116	152	27	-1	9	4	748	723 18
7	17	0	77	113	-77	-5	17	1	176	205	24	3	13	2	208	184	15	0	10	3	687	663	12	1	9	4	106	77-105
2	18	0	297	316	16	-3	17	1	754	760	19	5	13	2	506	569	21	2	10	3	673	697	14	3	9	4	530	596 20
4	18	0	191	173	22	1	17	1	1490	1516	27	-8	14	2	283	291	21	4	10	3	213	247	38	-8	10	4	448	468 20
6	18	0	239	230	18	3	17	1	244	278	16	-6	14	2	240	260	16	-7	11	3	227	208	18	-6	10	4	49	78 -49
3	19	0	372	434	18	5	17	1	257	292	15	-4	14	2	550	555	6	-5	11	3	135	112	31	-4	10	4	374	355 14
4	20	0	662	678	7	7	17	1	595	626	17	0	14	2	607	613	11	-3	11	3	79	97	-79	-2	10	4	205	168 18
6	20	0	292	268	31	-8	18	1	259	332	47	2	14	2	325	317	10	-1	11	3	405	355	17	0	10	4	415	373 14
5	21	0	187	186	47	-6	18	1	841	874	17	4	14	2	51	72	-51	3	11	3	107	56	-107	2	10	4	277	270 20
0	0	1	255	263	3	-4	18	1	47	24	-46	-7	15	2	564	591	14	-8	12	3	63	107	-63	-7	11	4	791	783 12
-1	1	1	349	379	3	2	18	1	15	118	-15	-5	15	2	189	200	21	-6	12	3	167	166	23	-5	11	4	749	695 21
1	1	1	468	533	15	4	18	1	1050	1062	7	-3	15	2	54	9	-53	-4	12	3	379	339	7	-3	11	4	159	150 42
-2	2	1	46	12	9	6	18	1	676	721	17	1	15	2	97	115	-41	-2	12	3	138	165	26	-1	11	4	1437	1381 28
0	2	1	205	180	1	-7	19	1	359	412	14	3	15	2	461	462	8	0	12	3	92	123	-92	1	11	4	179	179 33
-3	3	1	1240	1357	21	-5	19	1	167	177	27	5	15	2	175	192	23	2	12	3	175	200	39	3	11	4	1180	1340 46
-1	3	1	510	493	3	-3	19	1	162	199	26	-8	16	2	15	17	-14	4	12	3	178	180	34	-8	12	4	1135	1188 35
1	3	1	1459	1510	7	3	19	1	241	256	16	-6	16	2	256	286	16	-7	13	3	281	304	12	-4	12	4	621	584 10
-4	4	1	72	59	-28	5	19	1	165	200	28	-4	16	2	280	304	14	-5	13	3	478	459	8	-2	12	4	352	352 19
-2	4	1	9	49	-9	-6	20	1	57	66	-56	-2	16	2	242	189	26	-3	13	3	228	211	13	0	12	4	980	986 26
0	4	1	177	183	1	-4	20	1	386	374	11	0	16	2	63	23	-63	-1	13	3	113	117	-64	2	12	4	895	870 25
-3	5	1	1842	1912	9	2	20	1	406	466	20	2	16	2	51	86	-50	1	13	3	14	48	-14	-7	13	4	193	187 33
-1	5	1	401	396	2	4	20	1	57	87	-56	6	16	2	53	84	-52	3	13	3	60	6	-59	-5	13	4	45	24 -44
1	5	1	2322	2285	9	-5	21	1	31	57	-31	-5	17	2	139	132	33	-8	14	3	616	685	23	-3	13	4	257	231 19
3	5	1	1268	1361	22	3	21	1	86	105	-85	-3	17	2	83	78	-83	-6	14	3	188	159	18	-1	13	4	411	384 14
-4	6	1	759	763	9	-2	0	2	3156	3165	34	1	17	2	84	117	-84	-4	14	3	302	296	11	1	13	4	77	32 -76
0	6	1	2200	2181	9	0	0	2	828	733	6	3	17	2	109	90	-46	-2	14	3	846	836	13	3	13	4	404	411 15
2	6	1	2106	2042	9	-3	1	2	1234	1260	16	5	17	2	111	146	-47	2	14	3	813	840	19	-8	14	4	54	35 -53
4	6	1	2245	2341	46	-1	1	2	312	284	1	-8	18	2	208	231	43	4	14	3	53	39	-53	-6	14	4	425	371 13
-5	7	1	196	199	7	1	1	2	414	497	8	-6	18	2	119	143	-118	-5	15	3	548	508	7	-4	14	4	201	146 27
-3	7	1	504	568	6	-4	2	2	35	8	-35	-4	18	2	317	283	13	-3	15	3	50	19	-49	0	14	4	184	166 34
-1	7	1	991	993	5	-2	2	2	119	128	3	2	18	2	135	138	-55	-1	15	3	530	401	20	2	14	4	123	82 -76
1	7	1	784	801	4	0	2	2	37	35	-11	4	18	2	235	217	18	1	15	3	153	166	40	-7	15	4	43	18 -42
3	7	1	403	405	5	2	2	2	86	192	-50	6	18	2	58	126	-58	3	15	3	66	77	-65	-3	15	4	536	469 19
-4	8	1	275	277	3	-3	3	2	714	692	9	-5	19	2	340	364	12	5	15	3	309	336	41	-1	15	4	93	151 -92
-2	8	1	358	379	5	-1	3	2	59	54	6	-3	19	2	376	372	20	-8	16	3	506	524	20	1	15	4	364	375 17
0	8	1	109	101	-84	1	3	2	260	223	3	1	19	2	398	428	14	-6	16	3	289	270	14	3	15	4	111	101-110
2	8	1	296	270	5	-4	4	2	895	856	10	5	19	2	481	483	14	-4	16	3	377	347	9	-6	16	4	255	226 26
-5	9	1	511	516	8	-2	4	2	924	854	5	-6	20	2	712	700	14	0	16	3	282	282	21	-4	16	4	112	132 -67
-3	9	1	512	496	4	0	4	2	405	448	2	-4	20	2	33	59	-32	2	16	3	544	534	15	0	16	4	97	82 -96
-1	9	1	1372	1269	9	2	4	2	523	503	9	2	20	2	541	512	10	4	16	3	119	79	-118	-5	17	4	51	52 -50

1	9	1	160	150	7	-5	5	2	52	17	-51	4	20	2	343	370	15	-7	17	3	448	430	12	1	17	4	86	103	-86
3	9	1	158	175	7	-3	5	2	662	663	7	3	21	2	107	147	-86	-5	17	3	1074	1063	15	-4	18	4	57	135	-56
5	9	1	324	390	23	-1	5	2	696	641	3	-4	0	3	140	136	14	1	17	3	342	347	17	0	18	4	151	145	-58
-6	10	1	408	400	11	1	5	2	32	29	-32	-2	0	3	197	192	8	3	17	3	196	232	41	-4	0	5	146	138	-63
-4	10	1	679	654	7	3	5	2	84	88	22	0	0	3	323	320	8	-6	18	3	319	318	14	-2	0	5	237	236	23
-2	10	1	182	173	8	-4	6	2	15	49	-14	-3	1	3	180	195	2	-4	18	3	216	230	27	-5	1	5	88	78	-87
0	10	1	398	391	2	-2	6	2	121	136	5	-1	1	3	383	383	3	2	18	3	212	200	41	-3	1	5	111	96	-50
2	10	1	533	540	4	0	6	2	30	8	-30	1	1	3	108	148	14	-5	19	3	248	260	19	-1	1	5	100	123	-60
4	10	1	119	136	17	2	6	2	46	57	-18	-4	2	3	58	61	-20	1	19	3	121	160	-121	-6	2	5	222	250	46

Table 5-4. Observed and calculated structure factors for FR12 at 3.74 GPa

Page 2

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	2	5	55	52	-54	-5	7	5	47	26	-46	2	10	5	281	256	27	-2	14	5	165	157	-165	-4	4	6	231	221	30
-2	2	5	552	522	11	-3	7	5	163	164	43	-7	11	5	211	146	32	0	14	5	893	916	9	-2	4	6	70	90	-70
0	2	5	413	430	22	-1	7	5	59	31	-58	-5	11	5	138	114	-60	2	14	5	50	87	-50	0	4	6	91	14	-90
-3	3	5	426	425	17	1	7	5	53	13	-52	-3	11	5	87	69	-86	-5	15	5	0	22	-1	-7	5	6	217	177	61
-1	3	5	186	163	45	-8	8	5	172	154	-75	-1	11	5	60	46	-60	-1	15	5	135	119	-135	-5	5	6	199	147	57
1	3	5	86	21	-85	-6	8	5	188	153	32	1	11	5	204	165	31	1	15	5	7	24	-6	-3	5	6	133	93	-65
-6	4	5	50	14	-50	-4	8	5	107	102	-63	-8	12	5	130	145	-129	-6	0	6	789	709	15	-2	6	6	91	86	-91
-2	4	5	116	103	-116	-2	8	5	217	171	31	-6	12	5	119	119	-67	-4	0	6	760	642	30	-5	7	6	435	410	21
0	4	5	37	7	-36	2	8	5	89	36	-89	-4	12	5	124	154	-54	-2	0	6	1268	1184	42	-3	7	6	239	169	31
-7	5	5	1302	1331	9	-7	9	5	274	251	22	-2	12	5	181	163	-96	-5	1	6	161	133	-47	-1	7	6	170	192	-113
-5	5	5	421	367	27	-5	9	5	328	315	16	0	12	5	58	56	-58	-3	1	6	961	863	27	1	7	6	110	187	-110
-3	5	5	911	769	10	-3	9	5	153	137	34	2	12	5	121	140	-74	-1	1	6	137	160	-117	-6	8	6	632	581	44
-1	5	5	539	498	15	-1	9	5	340	313	39	-7	13	5	76	63	-75	-6	2	6	44	65	-44	-4	8	6	83	103	-82
1	5	5	341	390	34	1	9	5	267	315	47	-5	13	5	230	214	25	-4	2	6	54	77	-54	-2	8	6	199	192	-84
-6	6	5	636	584	9	-8	10	5	56	65	-56	-3	13	5	271	289	62	-2	2	6	96	114	-96	0	8	6	405	405	35
-4	6	5	1975	1769	56	-6	10	5	219	212	27	-1	13	5	90	120	-90	-7	3	6	91	96	-90	-3	9	6	723	650	17
-2	6	5	398	334	31	-4	10	5	116	86	-58	1	13	5	245	274	28	-5	3	6	213	226	53	-1	9	6	88	79	-87
0	6	5	924	879	59	-2	10	5	157	157	-86	-6	14	5	415	377	15	left	33	6	335	329	20	-4	10	6	213	169	49
-7	7	5	605	622	12	0	10	5	171	218	-92	-4	14	5	499	438	13	-1	3	6	398	436	23	-2	10	6	223	129	-87

Table 5-5. Observed and calculated structure factors for FR12 at 4.31 GPa

Page 1

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

1	3	0	301	333	3	1	13	1	845	919	57	2	16	2	150	97	-150	-6	0	4	312	316	23	-1	11	5	42	69	-42
0	4	0	703	722	8	-8	14	1	282	174	-55	-7	17	2	42	40	-42	-4	0	4	2115	1984	22	1	11	5	220	185	24
2	4	0	1306	1308	9	-4	14	1	91	63	-91	5	17	2	69	102	-68	0	0	4	1463	1532	22	3	11	5	71	53	-71
1	5	0	235	256	5	1	15	1	722	739	23	-8	18	2	341	270	61	-3	1	4	587	580	7	-8	12	5	197	213	-197
3	5	0	882	859	13	7	15	1	346	394	54	-6	18	2	187	166	-106	-1	1	4	1560	1540	16	-6	12	5	116	131	-58
0	6	0	159	86	10	-8	16	1	376	312	50	-4	18	2	397	355	16	-6	2	4	106	98	-64	-4	12	5	63	125	-63
2	6	0	15	46	-14	6	16	1	148	87	-148	4	18	2	208	192	-38	-4	2	4	122	169	-50	-2	12	5	314	237	39
1	7	0	332	282	9	-7	17	1	1063	1013	48	6	18	2	40	157	-39	-2	2	4	117	69	10	0	12	5	65	35	-64
3	7	0	582	563	49	5	17	1	312	316	47	-7	19	2	61	89	-61	0	2	4	33	92	-33	2	12	5	201	164	21
5	7	0	504	524	38	7	17	1	792	690	41	-5	19	2	424	465	-152	2	2	4	155	215	-55	-7	13	5	121	107	-120
0	8	0	62	48	-51	-6	18	1	1011	1013	36	-3	19	2	495	446	21	-3	3	4	971	900	10	-5	13	5	266	231	25
2	8	0	190	223	-45	4	18	1	1148	1197	34	5	19	2	560	562	-182	-1	3	4	771	771	9	-3	13	5	545	352	-156
4	8	0	1262	1174	14	6	18	1	811	784	28	-6	20	2	649	731	28	-2	4	4	247	253	16	-1	13	5	202	131	-37
3	9	0	709	735	6	-7	19	1	433	479	30	2	20	2	510	528	-130	-5	5	4	357	299	27	1	13	5	287	335	17

5	9	0	145	143	-35	-5	19	1	275	229	35	4	20	2	378	419	29	1	5	4	180	168	16	-6	14	5	325	407	-89
2	10	0	350	364	8	3	19	1	230	336	-230	3	21	2	229	111	-49	-4	6	4	53	22	-52	-4	14	5	389	471	25
1	11	0	1393	1409	14	5	19	1	196	239	-129	-4	0	3	111	164	9	0	6	4	255	218	-104	0	14	5	928	1008	20
4	12	0	656	559	25	-6	20	1	233	148	-57	-2	0	3	274	232	12	-3	7	4	207	191	35	2	14	5	181	142	-181
1	13	0	296	305	12	-4	20	1	461	444	24	0	0	3	365	398	5	-1	7	4	76	69	-39	1	15	5	70	22	-69
3	13	0	213	183	20	-2	0	2	3583	3216	13	-3	1	3	223	210	4	-2	8	4	89	38	-22	0	16	5	584	627	-164
7	15	0	499	416	50	0	0	2	849	713	8	-1	1	3	507	413	7	-8	10	4	787	611	41	-6	0	6	892	802	59
7	17	0	48	92	-47	-3	1	2	1366	1285	7	1	1	3	171	161	13	4	10	4	70	38	-69	-4	0	6	773	791	14
6	18	0	268	260	32	-1	1	2	328	290	3	-4	2	3	64	35	-20	-9	11	4	611	504	32	-2	0	6	1279	1329	18
5	19	0	82	85	-82	1	1	2	488	497	8	-2	2	3	97	110	5	-7	11	4	902	875	20	0	0	6	1159	897	126
7	19	0	676	634	26	-2	2	2	151	184	5	0	2	3	1097	1120	8	-5	11	4	730	729	60	-5	1	6	130	158	21
4	20	0	742	732	84	0	2	2	48	75	6	-3	3	3	36	13	-35	1	11	4	23	233	-22	-3	1	6	979	1004	10
6	20	0	294	289	37	-5	3	2	51	70	-50	-1	3	3	1286	1188	11	3	11	4	1399	1485	46	-1	1	6	177	147	22
5	21	0	230	114	-57	-1	3	2	94	115	3	1	3	3	197	198	10	-8	12	4	1437	1364	19	-6	2	6	50	32	-50
4	22	0	543	511	26	-2	4	2	932	888	7	-6	4	3	46	61	-45	4	12	4	629	619	34	-4	2	6	84	53	-38
0	0	1	272	337	3	0	4	2	441	496	9	-4	4	3	221	162	8	-7	13	4	251	239	17	-2	2	6	106	105	-28
-1	1	1	358	431	2	-5	5	2	46	47	-45	-2	4	3	139	167	8	3	13	4	433	472	37	0	2	6	116	172	-49
-2	2	1	36	55	-23	3	5	2	104	119	16	0	4	3	76	80	9	-8	14	4	155	117	-50	-5	3	6	236	232	14
0	2	1	207	174	2	-4	6	2	65	44	-14	-5	5	3	1419	1399	22	-6	14	4	446	441	30	-3	3	6	370	326	10
2	2	1	1554	1421	68	2	6	2	72	45	-35	-3	5	3	390	390	9	-4	14	4	248	221	-65	-1	3	6	499	520	19
-3	3	1	1459	1382	15	4	6	2	44	111	-43	-1	5	3	2290	2244	13	0	14	4	171	233	-81	1	3	6	39	91	-38
1	3	1	1554	1515	10	-3	7	2	104	98	9	-2	6	3	2845	2743	16	2	14	4	136	131	-38	-8	4	6	98	451	-98
-2	4	1	62	27	11	1	7	2	404	351	7	0	6	3	494	530	12	4	14	4	539	507	70	-4	4	6	236	259	13
0	4	1	173	144	2	-6	8	2	621	648	40	2	6	3	1577	1549	21	-7	15	4	44	29	-44	-2	4	6	122	123	20
2	4	1	27	44	-27	-4	8	2	832	826	9	-5	7	3	352	326	10	-3	15	4	654	545	61	0	4	6	29	14	-28
-5	5	1	473	455	69	-2	8	2	1110	1087	5	-6	8	3	302	271	20	-1	15	4	52	179	-51	-7	5	6	266	209	43
-3	5	1	2038	1991	14	0	8	2	133	125	7	-4	8	3	292	235	10	1	15	4	407	393	39	-5	5	6	193	180	18
-1	5	1	391	350	3	2	8	2	144	109	13	0	8	3	348	358	9	3	15	4	57	40	-56	-3	5	6	154	180	17
1	5	1	2404	2329	14	4	8	2	447	391	36	-3	9	3	803	819	11	-6	16	4	283	283	29	1	5	6	397	262	-73
3	5	1	1498	1470	251	-5	9	2	1090	995	19	-1	9	3	581	618	11	-4	16	4	169	141	-52	-6	6	6	55	55	-55
0	6	1	2316	2254	17	-3	9	2	761	792	7	-2	10	3	12	158	-11	2	16	4	55	61	-54	-2	6	6	138	146	19
4	6	1	2706	2427	81	-1	9	2	284	253	20	2	10	3	726	723	11	1	17	4	58	129	-58	0	6	6	57	92	-57
-5	7	1	208	208	12	1	9	2	1080	1130	7	-7	11	3	222	232	-52	-4	18	4	206	139	-44	-5	7	6	422	476	18
-3	7	1	429	532	31	3	9	2	211	266	21	-2	12	3	140	152	-80	-6	2	5	347	306	28	-3	7	6	252	228	21
-1	7	1	987	1024	8	-6	10	2	579	662	93	5	13	3	36	46	-36	-5	5	5	478	448	18	-1	7	6	202	229	23
3	7	1	493	426	7	-4	10	2	291	263	12	-8	14	3	819	734	59	-8	6	5	475	415	46	1	7	6	197	226	-67
-6	8	1	164	189	22	-2	10	2	673	878	-137	4	14	3	70	69	-70	-4	6	5	1977	1950	52	-6	8	6	613	611	9
-4	8	1	308	269	5	0	10	2	147	152	-45	-7	15	3	40	58	-40	2	6	5	445	428	55	-4	8	6	89	135	-62
-2	8	1	522	425	-110	2	10	2	347	347	22	3	15	3	99	139	-63	-7	7	5	656	686	27	-2	8	6	213	240	31
-3	9	1	505	483	5	4	10	2	367	384	42	5	15	3	462	360	73	-3	7	5	153	168	-40	0	8	6	469	439	25
3	9	1	191	181	13	-3	11	2	1075	1120	9	-8	16	3	620	628	51	-6	8	5	249	244	24	-7	9	6	373	426	43
5	9	1	168	458	-51	1	11	2	1714	1711	27	-6	16	3	328	275	-64	2	8	5	36	28	-35	-3	9	6	713	669	21
-2	10	1	208	215	8	-2	12	2	2153	2170	27	2	16	3	612	607	23	-9	9	5	744	689	37	-1	9	6	126	82	-37
0	10	1	456	407	19	0	12	2	888	913	11	4	16	3	120	50	-46	-7	9	5	257	250	43	1	9	6	311	240	-72
2	10	1	528	546	4	-8	14	2	393	379	-86	-7	17	3	511	559	17	-5	9	5	276	316	-53	-6	10	6	345	391	16
4	10	1	89	119	-40	-2	14	2	140	90	-35	-5	17	3	1166	1157	33	1	9	5	301	341	25	-4	10	6	269	255	23
-1	11	1	253	267	16	0	14	2	641	707	26	1	17	3	310	385	-117	3	9	5	88	127	-87	-2	10	6	172	174	-36
1	11	1	175	210	17	4	14	2	127	114	-44	3	17	3	192	221	27	-8	10	5	56	74	-55	0	10	6	216	242	33
3	11	1	271	205	14	6	14	2	511	427	89	-6	18	3	392	328	30	-6	10	5	233	253	18	-5	11	6	88	97	-87
5	11	1	345	309	-104	-7	15	2	675	663	14	-4	18	3	380	214	62	-4	10	5	72	80	-71	-3	11	6	1448	1427	12
-4	12	1	270	236	17	-5	15	2	99	184	-60	2	18	3	157	223	-128	0	10	5	242	228	15	-1	11	6	160	170	-74
2	12	1	329	337	11	3	15	2	217	474	-81	-5	19	3	272	258	-53	2	10	5	339	272	28	-2	12	6	467	446	36
-7	13	1	119	216	-119	5	15	2	199	210	-99	1	19	3	245	195	-52	-7	11	5	247	244	31	-4	0	7	57	109	-56
-5	13	1	92	120	-58	-6	16	2	325	319	31	3	19	3	110	93	-110	-5	11	5	138	146	-31						

Table 5-6. Observed and calculated structure factors for FR12 at 4.84 GPa

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	0	300	326	3	-4	12	1	300	204	38	5	15	2	195	231	-62	-4	18	3	277	213	-136	-1	11	5	39	66	-38
0	4	0	716	712	6	2	12	1	353	342	44	-6	16	2	290	333	22	-5	19	3	296	291	49	1	11	5	194	193	24
2	4	0	1301	1242	17	-7	13	1	50	224	-49	-4	16	2	249	288	33	2	20	3	210	238	-65	3	11	5	42	63	-42
1	5	0	237	245	4	-3	13	1	243	108	29	-7	17	2	47	69	-46	-4	0	4	2039	1978	37	-6	12	5	185	121	-46
3	5	0	879	820	23	-1	13	1	512	516	9	5	17	2	114	116	-101	-2	0	4	189	221	21	-4	12	5	76	114	-76
0	6	0	141	78	12	6	16	1	50	113	-49	-6	18	2	204	173	-58	0	0	4	1477	1490	19	-2	12	5	226	235	38
1	7	0	326	268	3	-7	17	1	1115	996	21	-4	18	2	293	340	-68	-3	1	4	598	575	5	0	12	5	72	53	-71
3	7	0	452	517	-136	-6	18	1	1097	998	19	4	18	2	258	172	40	-1	1	4	1545	1489	7	2	12	5	208	152	-39
0	8	0	24	76	-24	-7	19	1	440	478	42	-5	19	2	462	497	30	-4	2	4	35	195	-34	-5	13	5	270	241	32
2	8	0	211	240	-155	-5	19	1	228	233	-54	-3	19	2	504	415	28	-2	2	4	42	78	-41	-3	13	5	142	343	-142
4	8	0	1251	1198	30	-3	19	1	323	261	38	5	19	2	379	519	25	0	2	4	60	100	-60	-1	13	5	132	109	-46
3	9	0	747	774	8	-6	20	1	251	123	-64	-4	0	3	107	178	17	2	2	4	132	261	-49	1	13	5	306	353	26
5	9	0	88	80	-47	-4	20	1	467	401	31	-2	0	3	290	251	12	-1	3	4	777	747	5	-4	14	5	525	462	25
2	10	0	348	355	6	-2	0	2	3348	3216	14	0	0	3	364	397	5	-2	4	4	241	254	13	0	14	5	955	990	27
1	11	0	1347	1374	5	0	0	2	844	719	3	-3	1	3	222	216	7	-5	5	4	309	277	24	-6	0	6	884	792	55
4	12	0	128	518	-44	-3	1	2	1408	1294	20	-1	1	3	440	409	4	1	5	4	180	196	24	-4	0	6	776	794	21
1	13	0	282	304	18	-1	1	2	327	320	2	1	1	3	111	141	16	-3	7	4	153	212	-38	-2	0	6	1256	1332	18
3	13	0	257	240	25	1	1	2	493	517	8	-4	2	3	70	48	-31	-1	7	4	65	59	-64	0	0	6	1291	965	-312
7	17	0	50	113	-50	-2	2	2	144	189	6	-2	2	3	84	127	8	-7	11	4	944	894	44	-5	1	6	135	139	-35
6	18	0	241	238	-51	0	2	2	22	98	-22	0	2	3	1084	1119	5	1	11	4	77	253	-76	-3	1	6	991	977	7
7	19	0	664	648	29	-1	3	2	93	129	5	-3	3	3	28	17	-28	3	11	4	1398	1448	61	-1	1	6	121	135	-30
4	20	0	836	756	20	-2	4	2	946	885	10	-1	3	3	1219	1188	4	-7	13	4	194	247	-38	-6	2	6	48	67	-48
6	20	0	322	254	42	0	4	2	454	522	15	1	3	3	216	191	13	3	13	4	407	459	-89	-4	2	6	41	76	-41
4	22	0	589	474	30	-5	5	2	29	59	-28	-4	4	3	221	146	10	-8	14	4	152	113	-83	-2	2	6	88	132	-88
0	0	1	278	314	3	3	5	2	96	75	-22	-2	4	3	189	174	7	-6	14	4	494	431	33	0	2	6	42	201	-41
-1	1	1	360	417	2	-4	6	2	42	27	-41	0	4	3	77	135	11	-4	14	4	250	216	30	-5	3	6	268	229	15
-2	2	1	35	53	-34	-3	7	2	110	117	13	-5	5	3	1451	1380	82	0	14	4	167	247	-139	-3	3	6	378	323	11
0	2	1	210	182	3	1	7	2	394	341	4	-3	5	3	381	365	10	2	14	4	131	114	-67	-1	3	6	505	510	29
2	2	1	1496	1421	112	-6	8	2	677	666	60	-1	5	3	2233	2248	10	4	14	4	563	460	-150	-4	4	6	240	277	25
-3	3	1	1511	1364	35	-4	8	2	858	815	11	-2	6	3	2760	2716	11	-7	15	4	51	45	-50	-2	4	6	143	146	20
1	3	1	1487	1480	11	-2	8	2	1090	1064	6	0	6	3	497	523	6	-3	15	4	653	568	67	-7	5	6	245	188	-77
0	4	1	178	136	4	0	8	2	132	85	8	2	6	3	1588	1566	40	3	15	4	41	24	-41	-5	5	6	238	191	17
2	4	1	19	18	-18	2	8	2	109	102	14	-5	7	3	369	326	17	-6	16	4	324	286	30	-3	5	6	162	211	-32
-3	5	1	2034	2010	21	-5	9	2	1094	991	30	-6	8	3	293	239	24	-5	17	4	43	83	-43	-1	5	6	15	47	-14
-1	5	1	394	347	5	-3	9	2	785	772	9	-4	8	3	320	205	13	-4	18	4	234	134	-60	1	5	6	335	252	-110
1	5	1	2277	2265	15	-1	9	2	184	231	16	0	8	3	352	333	17	-6	2	5	123	321	-122	-2	6	6	63	162	-63
0	6	1	2302	2264	13	1	9	2	1089	1108	10	-3	9	3	806	797	12	-5	5	5	429	464	-105	-5	7	6	437	474	12
4	6	1	2703	2428	302	3	9	2	201	252	25	-1	9	3	603	624	18	-4	6	5	2006	1951	43	-3	7	6	218	209	31
-5	7	1	188	197	20	-6	10	2	618	611	22	2	10	3	686	713	22	2	6	5	355	419	27	-1	7	6	133	239	-79
-1	7	1	989	1025	8	-4	10	2	298	278	12	-7	11	3	200	213	31	-7	7	5	680	671	36	1	7	6	193	227	-78
3	7	1	521	460	14	-2	10	2	27	833	-27	1	11	3	77	55	-77	-6	8	5	243	229	31	-6	8	6	628	598	19
-6	8	1	170	206	-40	2	10	2	342	345	10	-8	12	3	46	14	-46	2	8	5	39	52	-38	-4	8	6	127	125	-56
-4	8	1	321	281	8	4	10	2	378	379	-71	-2	12	3	192	153	21	-7	9	5	294	246	47	-2	8	6	217	243	34
-3	9	1	516	465	4	-3	11	2	1078	1113	13	-8	14	3	825	734	94	1	9	5	303	342	19	0	8	6	478	414	15
3	9	1	161	173	20	1	11	2	1698	1657	10	-7	15	3	45	23	-44	3	9	5	42	130	-41	-3	9	6	726	667	23
-2	10	1	235	245	5	-2	12	2	2133	2121	25	3	15	3	163	132	-38	-6	10	5	245	248	16	-1	9	6	76	109	-76
0	10	1	473	410	31	0	12	2	935	884	7	5	15	3	436	353	-91	-4	10	5	75	78	-75	-6	10	6	347	358	20

2 10 1 532 506 3 -8 14 2 410 366 29 -8 16 3 656 606 42 0 10 5 226 191 20 -4 10 6 237 241 37
 4 10 1 64 118 -63 -6 14 2 281 306 36 -7 17 3 486 521 16 2 10 5 352 291 47 -2 10 6 172 170 -57
 -1 11 1 311 233 22 -2 14 2 125 105 -44 -5 17 3 1212 1132 11 -7 11 5 146 245-145 0 10 6 227 235 -51
 1 11 1 176 182 17 6 14 2 565 396 39 3 17 3 218 205 32 -5 11 5 177 155 24 -5 11 6 48 114 -48
 3 11 1 178 197 23 -7 15 2 674 633 20 -6 18 3 384 347 19 -3 11 5 41 114 -40 -1 11 6 178 200 -83

Table 5-7. Observed and calculated structure factors for FR12 at 6.36 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s				
1 3 0	334	316	3		2 12 1	381	365	51		-4 18 2	336	345	-107		-4 20 3	547	491	45		1 11 5	239	175	-51	
0 4 0	815	654	13		-1 13 1	492	519	24		2 18 2	219	208	-111		2 20 3	284	266	-131		-6 12 5	123	68	-122	
2 4 0	1379	1285	13		-7 17 1	943	900	57		4 18 2	170	160	-170		-4 0 4	2608	1961	53		-4 12 5	64	147	-63	
1 5 0	258	210	8		5 17 1	265	198	-123		-5 19 2	351	605	-92		-2 0 4	196	214	27		-2 12 5	283	260	-81	
3 5 0	918	763	20		-6 18 1	1040	1012	48		-3 19 2	524	465	36		0 0 4	1471	1460	41		0 12 5	121	33	-121	
0 6 0	101	98	-38		-7 19 1	205	525	-204		1 19 2	299	642	-103		-3 1 4	614	551	16		2 12 5	73	173	-73	
1 7 0	387	310	21		-5 19 1	367	271	-87		3 19 2	61	19	-60		-1 1 4	1587	1485	25		-5 13 5	224	242	-82	
3 7 0	212	469	-44		-6 20 1	193	110	-192		-4 0 3	83	259	-54		-4 2 4	102	169	-101		-3 13 5	69	398	-68	
0 8 0	63	167	-63		-4 20 1	428	373	77		-2 0 3	251	248	45		-3 3 4	972	909	40		1 13 5	253	326	-52	
2 8 0	460	293	28		-2 0 2	4035	3206	11		0 0 3	396	408	14		-1 3 4	846	723	17		-6 14 5	353	384	-107	
4 8 0	1385	1213	57		0 0 2	889	723	6		-3 1 3	217	213	12		-2 4 4	244	226	28		-4 14 5	449	503	-240	
3 9 0	762	769	18		-3 1 2	1840	1251	29		-1 1 3	491	421	10		-5 5 4	255	226	46		0 14 5	834	1020	55	
2 10 0	316	315	12		-1 1 2	394	343	6		1 1 3	93	171	-26		1 5 4	177	169	-36		-1 15 5	325	177	-69	
1 11 0	1474	1290	29		1 1 2	507	536	15		-4 2 3	96	45	-40		0 6 4	271	240	-93		-6 0 6	1027	819	37	
4 12 0	603	496	-150		-2 2 2	129	172	12		-2 2 3	39	114	-38		-3 7 4	270	181	-103		-4 0 6	730	755	25	
1 13 0	364	357	23		-1 3 2	96	103	13		0 2 3	1099	1141	9		-2 8 4	52	13	-51		-2 0 6	1263	1337	35	
3 13 0	257	375	-61		-2 4 2	1112	895	17		-1 3 3	1293	1181	8		-7 11 4	818	852	46		0 0 6	1417	981	20	
6 18 0	95	267	-95		0 4 2	467	528	15		1 3 3	140	166	23		-5 11 4	384	637	57		-5 1 6	65	168	-65	
3 19 0	153	510	-152		-5 5 2	40	47	-39		-4 4 3	277	157	24		1 11 4	248	217	-118		-3 1 6	1058	988	26	
7 19 0	360	739	-177		3 5 2	44	62	-43		-2 4 3	201	162	11		3 11 4	1299	1387	105		-1 1 6	81	137	-80	
4 20 0	819	771	51		-4 6 2	41	12	-41		0 4 3	73	172	-72		-7 13 4	155	309	-155		-4 2 6	54	87	-54	
6 20 0	299	273	-138		-3 7 2	97	83	-46		-5 5 3	1558	1345	60		3 13 4	395	533	-92		-2 2 6	79	127	-79	
5 21 0	198	158	-197		1 7 2	393	373	14		-3 5 3	405	329	25		-6 14 4	430	405	37		0 2 6	62	231	-62	
4 22 0	470	388	69		-6 8 2	691	675	38		-1 5 3	2329	2238	15		-4 14 4	198	271	-84		-5 3 6	300	231	42	
0 0 1	331	299	10		-4 8 2	930	850	16		-2 6 3	3023	2689	25		2 14 4	121	92	-121		-3 3 6	414	323	34	
-1 1 1	455	408	5		-2 8 2	1166	1104	14		0 6 3	509	536	10		4 14 4	323	439	-84		-1 3 6	495	500	53	
-2 2 1	42	45	-42		0 8 2	115	107	-25		2 6 3	1657	1589	84		-3 15 4	740	511	32		-4 4 6	272	291	32	
0 2 1	229	219	4		2 8 2	81	196	-80		-5 7 3	411	395	68		-1 15 4	211	181	-120		-2 4 6	154	141	-59	
2 2 1	1913	1393	55		4 8 2	216	394	-81		-6 8 3	353	287	39		-6 16 4	313	282	54		0 4 6	62	14	-61	
-3 3 1	1678	1397	49		-5 9 2	1221	926	37		-4 8 3	371	233	25		2 16 4	65	27	-64		-7 5 6	335	145	-91	
1 3 1	1565	1482	13		-3 9 2	879	777	13		0 8 3	429	324	60		-5 17 4	67	189	-66		-3 5 6	109	185	-108	
-2 4 1	28	73	-27		-1 9 2	212	221	28		-3 9 3	941	763	43		-4 18 4	243	134	-163		1 5 6	65	228	-64	
0 4 1	159	123	10		1 9 2	1162	1098	20		-1 9 3	484	635	16		1 1 5	55	68	-54		-6 6 6	57	115	-57	
-3 5 1	2245	1948	24		3 9 2	123	217	-109		2 10 3	689	653	68		-6 2 5	189	330	-90		-2 6 6	149	170	-148	
-1 5 1	450	396	7		-6 10 2	416	553	56		-7 11 3	221	189	-160		0 4 5	52	8	-51		0 6 6	118	111	-117	
1 5 1	2417	2207	24		-4 10 2	305	253	21		1 11 3	78	37	-78		-5 5 5	464	442	38		-5 7 6	598	440	66	
-2 6 1	212	187	11		2 10 2	285	308	19		-2 12 3	275	156	-56		-4 6 5	2123	1915	39		-3 7 6	179	234	-83	
0 6 1	2478	2241	30		4 10 2	57	360	-57		3 15 3	142	93	-141		2 6 5	307	362	-307		-1 7 6	186	249	-98	
-5 7 1	84	172	-83		-3 11 2	1075	1040	33		5 15 3	285	366	-284		-7 7 5	687	711	81		-6 8 6	563	603	33	
-1 7 1	1069	936	25		1 11 2	1779	1549	26		-8 16 3	553	559	47		-3 7 5	251	215	-64		-4 8 6	166	136	-111	
3 7 1	563	514	23		-2 12 2	2278	2085	36		-6 16 3	381	193	65		-6 8 5	257	239	-69		-2 8 6	278	221	-86	
-4 8 1	364	307	14		0 12 2	918	860	14		2 16 3	502	458	37		2 8 5	60	69	-59		0 8 6	532	392	39	

-3 9 1 560 471 17	-6 14 2 182 311-135	4 16 3 157 24-156	-7 9 5 306 228-73	-7 9 6 414 449-85
3 9 1 201 126-75	-2 14 2 192 144-87	-7 17 3 360 597-84	-5 9 5 177 241-177	-3 9 6 743 645 68
-2 10 1 305 246 11	4 14 2 235 88-136	-5 17 3 1232 1030 51	1 9 5 294 315 45	-1 9 6 96 85-95
0 10 1 403 389 28	-7 15 2 614 568 86	3 17 3 132 130-131	-6 10 5 259 256 43	-6 10 6 286 356-54
2 10 1 553 493 14	-5 15 2 60 169-59	5 17 3 153 529-152	-4 10 5 62 20-61	-4 10 6 278 226-63
4 10 1 54 11-53	5 15 2 200 243-200	-6 18 3 265 332-63	0 10 5 177 181-85	-2 10 6 163 158-163
-1 11 1 239 195 30	-6 16 2 266 259-105	-4 18 3 272 161-102	2 10 5 334 252-96	0 10 6 270 178-131
1 11 1 152 100-36	-4 16 2 315 291-90	2 18 3 217 280-145	-7 11 5 182 191-106	-5 11 6 72 92-71
3 11 1 219 108-66	3 17 2 60 181-59	4 18 3 493 565 47	-5 11 5 156 86-111	-1 11 6 230 153-215
5 11 1 444 186 64	5 17 2 150 227-150	-5 19 3 300 372-91	-3 11 5 67 69-66	-4 2 7 254 369-226
-4 12 1 265 273-49	-6 18 2 289 149-97	3 19 3 65 185-65	-1 11 5 129 7-128	

Table 5-8. Observed and calculated structure factors for DL5 in air

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 0 0 1609 1587 4	9 13 0 102 100 8	4 2 1 505 498 5	-3 9 1 573 564 1	6 16 1 201 200 4
8 0 0 1417 1446 3	11 13 0 213 211 6	6 2 1 535 539 3	-1 9 1 1215 1197 1	8 16 1 533 528 3
10 0 0 1247 1231 4	0 14 0 124 119 4	8 2 1 177 175 5	1 9 1 324 322 1	10 16 1 206 215 8
12 0 0 0 24 -1	2 14 0 486 483 1	10 2 1 286 290 4	3 9 1 136 124 4	-9 17 1 288 300 5
3 1 0 1824 1857 11	4 14 0 200 213 2	12 2 1 0 15 -1	5 9 1 336 339 3	-7 17 1 1049 1056 4
5 1 0 840 783 8	6 14 0 168 167 4	-13 3 1 458 460 5	7 9 1 137 140 7	-5 17 1 231 231 3
7 1 0 955 963 2	8 14 0 132 132 5	-11 3 1 66 59 11	9 9 1 399 392 3	-3 17 1 858 851 6
9 1 0 430 432 4	10 14 0 77 93 11	-9 3 1 396 380 3	11 9 1 318 321 5	-1 17 1 470 475 2
11 1 0 777 766 3	1 15 0 94 90 3	-7 3 1 352 356 5	-12 10 1 165 152 6	1 17 1 1617 1640 7
13 1 0 154 142 8	3 15 0 49 53 9	-5 3 1 389 379 3	-10 10 1 180 188 4	3 17 1 343 332 2
2 2 0 83 96 14	5 15 0 602 603 3	-3 3 1 1412 1391 3	-8 10 1 188 192 5	5 17 1 467 467 2
4 2 0 23 12 -22	7 15 0 519 526 4	1 3 1 1495 1518 15	-6 10 1 422 432 7	7 17 1 563 568 4
6 2 0 384 390 2	9 15 0 350 357 4	3 3 1 486 473 4	-4 10 1 575 582 1	9 17 1 75 71 12
8 2 0 225 226 3	11 15 0 54 23 -20	5 3 1 94 103 5	-2 10 1 81 72 2	-10 18 1 412 407 4
10 2 0 145 146 6	0 16 0 5 17 -5	7 3 1 525 509 6	0 10 1 464 454 1	-8 18 1 362 352 5
12 2 0 113 109 9	2 16 0 91 81 4	9 3 1 75 67 21	2 10 1 533 534 3	-6 18 1 815 814 11
1 3 0 220 193 19	4 16 0 512 507 2	11 3 1 579 570 4	4 10 1 229 227 3	-4 18 1 58 66 13
3 3 0 913 905 8	6 16 0 218 228 4	-12 4 1 258 256 4	6 10 1 124 125 7	-2 18 1 26 16 -25
5 3 0 783 761 3	8 16 0 0 7 -1	-10 4 1 214 209 3	8 10 1 288 289 3	0 18 1 192 184 3
7 3 0 448 448 2	10 16 0 299 312 6	-8 4 1 48 55 12	10 10 1 294 291 4	2 18 1 55 61 11
9 3 0 191 195 4	1 17 0 101 101 5	-6 4 1 63 67 8	12 10 1 136 118 11	4 18 1 1044 1064 8
11 3 0 137 138 6	3 17 0 235 241 2	-4 4 1 62 66 5	-11 11 1 241 243 4	6 18 1 789 800 3
13 3 0 104 109 11	5 17 0 52 43 15	-2 4 1 43 40 6	-9 11 1 73 69 10	8 18 1 286 290 4
0 4 0 744 730 4	7 17 0 136 138 6	0 4 1 188 196 3	-7 11 1 100 104 10	-9 19 1 64 44 -24
2 4 0 1343 1314 2	9 17 0 273 283 6	2 4 1 77 78 6	-5 11 1 30 42 -24	-7 19 1 336 334 5
4 4 0 228 215 4	0 18 0 180 170 6	4 4 1 184 185 3	-3 11 1 491 488 2	-5 19 1 44 32 -16
6 4 0 156 169 3	2 18 0 362 361 4	6 4 1 45 34 -16	-1 11 1 129 129 2	-3 19 1 165 162 3
8 4 0 263 238 11	4 18 0 212 215 3	8 4 1 34 19 -34	1 11 1 123 114 2	-1 19 1 108 100 6
10 4 0 31 3 -30	6 18 0 335 340 7	10 4 1 288 281 4	3 11 1 71 66 6	1 19 1 382 386 4
12 4 0 256 254 3	8 18 0 0 13 -1	12 4 1 227 224 5	5 11 1 302 308 2	3 19 1 64 60 15
1 5 0 170 179 3	1 19 0 210 215 4	-13 5 1 816 797 3	7 11 1 100 103 7	5 19 1 195 196 3
3 5 0 788 781 4	3 19 0 415 423 2	-11 5 1 35 25 -35	9 11 1 88 93 10	7 19 1 108 99 8
5 5 0 186 186 4	5 19 0 62 63 12	-9 5 1 909 907 2	11 11 1 43 4 -33	-8 20 1 299 310 6
7 5 0 46 40 -18	7 19 0 466 464 3	-7 5 1 1722 1748 6	-12 12 1 246 250 9	-6 20 1 163 146 8
9 5 0 41 30 -17	9 19 0 64 70 -23	-5 5 1 493 485 3	-10 12 1 88 94 10	-4 20 1 304 310 3
11 5 0 375 374 3	0 20 0 643 665 4	-3 5 1 1860 1912 5	-8 12 1 159 160 6	-2 20 1 205 209 3

13	5	0	136	127	6	2	20	0	89	80	9	-1	5	1	379	383	1	-6	12	1	305	305	5	0	20	1	163	166	4
0	6	0	229	223	3	4	20	0	583	582	2	1	5	1	2476	2522	81	-4	12	1	280	284	2	2	20	1	268	274	4
2	6	0	25	21	-12	6	20	0	206	214	6	3	5	1	1563	1513	8	-2	12	1	330	331	2	4	20	1	242	235	4
4	6	0	144	148	4	8	20	0	101	98	13	5	5	1	1295	1312	2	0	12	1	467	467	1	6	20	1	477	485	4
6	6	0	282	273	3	1	21	0	268	264	4	7	5	1	640	631	2	2	12	1	281	292	2	8	20	1	70	74	14
8	6	0	257	258	2	3	21	0	139	124	7	9	5	1	170	173	5	4	12	1	108	107	5	-7	21	1	238	234	6
10	6	0	108	101	7	5	21	0	311	304	3	11	5	1	1305	1293	3	6	12	1	306	310	2	-5	21	1	97	88	7
12	6	0	101	94	7	7	21	0	17	19	-16	13	5	1	122	109	10	8	12	1	112	101	5	-3	21	1	179	177	5
1	7	0	214	190	3	0	22	0	978	969	4	-12	6	1	110	105	9	10	12	1	238	235	6	-1	21	1	392	397	2
3	7	0	714	686	2	2	22	0	211	202	4	-10	6	1	1015	1009	3	-11	13	1	0	33	-1	1	21	1	645	645	7
5	7	0	452	462	3	4	22	0	585	574	5	-8	6	1	113	108	4	-9	13	1	240	240	5	3	21	1	75	78	11
7	7	0	375	387	3	6	22	0	243	241	4	-6	6	1	3111	3095	23	-7	13	1	150	151	7	5	21	1	129	120	11
9	7	0	620	622	2	1	23	0	190	192	8	-4	6	1	848	854	2	-5	13	1	48	41	11	7	21	1	256	249	4
11	7	0	15	13	-15	3	23	0	487	488	5	0	6	1	2090	2116	5	-3	13	1	110	114	3	-6	22	1	161	177	6
13	7	0	72	67	14	5	23	0	531	515	5	2	6	1	2081	2046	36	-1	13	1	532	542	1	-4	22	1	186	175	7
2	8	0	213	224	1	0	24	0	903	895	4	4	6	1	2419	2423	4	1	13	1	679	698	2	-2	22	1	187	185	4
4	8	0	1175	1175	5	2	24	0	264	251	7	6	6	1	683	676	3	3	13	1	361	354	2	0	22	1	123	130	7
6	8	0	380	384	3	4	24	0	111	131	13	8	6	1	1367	1373	3	5	13	1	183	185	3	2	22	1	326	325	4
8	8	0	94	89	7	1	25	0	142	159	7	10	6	1	445	441	5	7	13	1	176	173	4	4	22	1	249	244	4
10	8	0	760	761	6	3	25	0	180	191	8	12	6	1	606	592	3	9	13	1	153	152	6	6	22	1	65	94	-22
12	8	0	310	311	4	0	26	0	317	314	6	-13	7	1	210	204	6	11	13	1	0	13	-1	-7	23	1	181	193	8
1	9	0	840	828	3	2	26	0	142	170	10	-11	7	1	290	293	3	-10	14	1	698	695	8	-5	23	1	297	280	4
3	9	0	462	484	1	-12	0	1	44	36	-43	-9	7	1	191	185	3	-8	14	1	106	101	9	-3	23	1	277	278	9
5	9	0	57	37	13	-10	0	1	213	214	6	-7	7	1	611	611	12	-6	14	1	577	584	4	-1	23	1	251	262	4
7	9	0	1010	1019	5	-8	0	1	166	171	4	-5	7	1	394	386	2	-4	14	1	19	20	-19	1	23	1	224	230	6
9	9	0	79	79	10	-6	0	1	137	140	3	-3	7	1	481	497	1	-2	14	1	906	926	2	3	23	1	366	368	4
11	9	0	182	177	6	-4	0	1	277	265	5	-1	7	1	1031	1045	2	0	14	1	506	511	2	5	23	1	176	179	9
0	10	0	1078	1108	3	2	0	1	306	287	4	1	7	1	650	676	5	2	14	1	285	297	2	-4	24	1	92	79	10
2	10	0	454	454	1	4	0	1	332	326	5	3	7	1	268	252	4	4	14	1	1234	1256	6	-2	24	1	164	153	9
4	10	0	770	778	7	6	0	1	191	191	4	5	7	1	446	424	3	6	14	1	62	77	9	0	24	1	51	21	-20
6	10	0	162	159	4	8	0	1	201	199	6	7	7	1	96	102	9	8	14	1	405	408	3	2	24	1	36	31	-36
8	10	0	286	286	2	10	0	1	57	75	-24	9	7	1	277	275	5	10	14	1	280	282	6	4	24	1	0	25	-1
10	10	0	484	486	3	12	0	1	355	338	6	11	7	1	619	612	3	-11	15	1	90	89	10	-3	25	1	672	667	5
12	10	0	227	229	5	-13	1	1	82	85	12	-12	8	1	148	151	5	-9	15	1	51	52	-26	-1	25	1	41	29	-41
1	11	0	1577	1592	2	-11	1	1	45	31	-25	-10	8	1	44	25	-18	-7	15	1	68	63	17	1	25	1	436	444	4
3	11	0	1297	1330	3	-9	1	1	112	117	5	-8	8	1	268	271	2	-5	15	1	100	109	5	3	25	1	247	251	7
5	11	0	249	258	2	-7	1	1	78	76	4	-6	8	1	415	422	2	-3	15	1	326	325	2	-14	0	2	158	155	10
7	11	0	1797	1824	4	-5	1	1	199	203	2	-4	8	1	175	173	1	-1	15	1	242	241	2	-12	0	2	1429	1420	4
9	11	0	392	389	3	-3	1	1	450	451	2	-2	8	1	311	294	1	1	15	1	558	564	1	-10	0	2	844	847	4
11	11	0	845	842	8	1	1	1	424	429	6	0	8	1	53	54	3	3	15	1	69	65	7	-8	0	2	128	141	5
0	12	0	2396	2497	5	3	1	1	181	185	2	2	8	1	56	57	8	5	15	1	179	185	3	-6	0	2	2615	2615	5
2	12	0	197	195	1	5	1	1	21	23	-20	4	8	1	217	214	2	7	15	1	336	342	3	-4	0	2	2150	2058	12
4	12	0	631	639	2	7	1	1	102	106	7	6	8	1	263	272	4	9	15	1	79	74	12	-2	0	2	3312	3272	20
6	12	0	53	49	13	9	1	1	70	50	12	8	8	1	105	100	10	-10	16	1	672	672	5	2	0	2	2327	2284	30
8	12	0	473	475	2	11	1	1	44	52	-29	10	8	1	211	216	4	-8	16	1	393	402	5	4	0	2	1994	1960	10
10	12	0	893	896	5	-12	2	1	386	376	4	12	8	1	108	95	9	-6	16	1	800	804	4	6	0	2	788	790	3
12	12	0	391	394	4	-10	2	1	241	239	3	-13	9	1	120	118	8	-4	16	1	504	495	3	8	0	2	1545	1529	4
1	13	0	126	126	2	-8	2	1	475	468	2	-11	9	1	453	451	2	-2	16	1	721	723	3	10	0	2	232	232	7
3	13	0	120	117	2	-6	2	1	290	294	1	-9	9	1	28	24	-28	0	16	1	777	770	4	12	0	2	972	967	5
5	13	0	473	477	2	-4	2	1	1215	1211	10	-7	9	1	101	101	9	2	16	1	549	541	4	-13	1	2	738	733	9
7	13	0	396	395	6	2	2	1	1418	1409	7	-5	9	1	504	495	3	4	16	1	1040	1062	4	-11	1	2	208	201	5

Table 5-8. Observed and calculated structure factors for DL5 in air

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

-9 1 2 827 833 2	-12 8 2 220 213 4	-7 17 2 10 28 -10	-6 2 3 482 490 2	-3 9 3 713 716 1
-7 1 2 169 154 3	-10 8 2 16 19 -16	-5 17 2 177 180 4	-4 2 3 35 28 8	-1 9 3 628 639 1
-5 1 2 993 988 3	-8 8 2 141 135 5	-3 17 2 113 114 6	-2 2 3 51 54 6	1 9 3 517 506 4
-3 1 2 1334 1314 1	-6 8 2 583 582 3	-1 17 2 122 126 5	0 2 3 1100 1079 1	3 9 3 643 671 3
-1 1 2 287 277 1	-4 8 2 845 827 4	1 17 2 150 149 4	2 2 3 740 721 8	5 9 3 400 410 4
3 1 2 235 225 2	-2 8 2 1066 1048 1	3 17 2 159 161 7	4 2 3 574 579 7	7 9 3 409 408 5
5 1 2 2060 2028 3	0 8 2 237 227 1	5 17 2 167 168 3	6 2 3 52 42 14	9 9 3 71 55 -21
7 1 2 48 26 -18	2 8 2 147 139 4	7 17 2 187 180 4	8 2 3 67 64 11	-12 10 3 385 384 4
9 1 2 227 225 4	-13 9 2 325 316 4	-8 18 2 357 360 6	10 2 3 87 96 16	-10 10 3 92 89 12
11 1 2 290 295 4	-11 9 2 143 134 5	-6 18 2 140 130 5	-13 3 3 44 35 -34	-8 10 3 180 171 4
-14 2 2 119 105 10	-9 9 2 630 626 6	-4 18 2 316 312 3	-11 3 3 259 243 8	-6 10 3 136 148 3
-12 2 2 330 334 4	-7 9 2 78 83 7	-2 18 2 237 229 3	-9 3 3 565 564 2	-4 10 3 333 347 2
-10 2 2 178 187 4	-5 9 2 894 897 1	0 18 2 334 334 6	-7 3 3 90 83 3	-2 10 3 70 62 4
-8 2 2 64 74 8	-3 9 2 615 603 3	2 18 2 154 153 4	-5 3 3 800 800 1	0 10 3 602 617 3
-6 2 2 34 22 8	-1 9 2 63 71 3	4 18 2 308 309 4	-3 3 3 65 48 4	2 10 3 767 773 2
-4 2 2 149 154 1	1 9 2 999 1017 4	6 18 2 69 72 13	-1 3 3 1151 1131 2	4 10 3 302 311 4
-2 2 2 204 189 1	3 9 2 112 111 5	8 18 2 194 192 4	1 3 3 101 114 4	6 10 3 52 38 -32
0 2 2 122 140 2	-12 10 2 168 161 5	-9 19 2 469 469 5	3 3 3 230 126 62	8 10 3 34 57 -34
2 2 2 221 208 1	-10 10 2 226 234 4	-7 19 2 51 42 -15	5 3 3 820 826 4	-11 11 3 115 125 7
4 2 2 429 420 6	-8 10 2 257 257 5	-5 19 2 272 279 3	7 3 3 86 89 6	-9 11 3 188 195 6
6 2 2 15 11 -14	-6 10 2 741 751 2	-3 19 2 390 387 3	9 3 3 335 337 5	-7 11 3 197 202 4
8 2 2 91 91 8	-4 10 2 398 395 2	-1 19 2 85 85 7	11 3 3 72 80 19	-5 11 3 136 133 4
10 2 2 69 75 14	-2 10 2 968 973 2	1 19 2 348 355 3	-12 4 3 193 184 7	-3 11 3 43 32 7
12 2 2 218 222 7	0 10 2 196 197 2	3 19 2 0 34 -1	-10 4 3 18 10 -18	-1 11 3 352 352 1
-13 3 2 136 125 7	2 10 2 502 503 4	5 19 2 513 516 3	-8 4 3 72 76 6	1 11 3 55 59 8
-11 3 2 435 438 3	-11 11 2 213 223 6	7 19 2 139 126 9	-6 4 3 71 76 4	3 11 3 91 90 11
-9 3 2 716 722 6	-9 11 2 870 875 4	-8 20 2 100 103 9	-4 4 3 140 145 2	5 11 3 0 29 -1
-7 3 2 528 536 2	-7 11 2 91 82 7	-6 20 2 667 664 2	-2 4 3 200 203 1	7 11 3 70 63 18
-5 3 2 7 22 -6	-5 11 2 1911 1936 7	-4 20 2 179 167 6	0 4 3 15 5 -14	9 11 3 0 6 -1
-3 3 2 778 753 4	-3 11 2 1232 1219 3	-2 20 2 550 558 3	2 4 3 110 114 4	-12 12 3 156 166 7
-1 3 2 64 64 4	-1 11 2 201 209 2	0 20 2 99 104 7	4 4 3 163 168 4	-10 12 3 158 164 8
3 3 2 457 460 2	1 11 2 1735 1753 7	2 20 2 482 482 2	6 4 3 76 71 9	-8 12 3 202 204 4
5 3 2 975 977 3	3 11 2 163 147 3	4 20 2 223 231 4	8 4 3 51 59 -27	-6 12 3 208 211 2
7 3 2 573 575 3	-12 12 2 509 505 3	6 20 2 44 54 -44	10 4 3 200 204 7	-4 12 3 394 403 1
9 3 2 156 146 8	-10 12 2 297 299 5	-7 21 2 310 308 3	-13 5 3 346 337 6	-2 12 3 218 216 2
11 3 2 335 337 6	-8 12 2 134 130 8	-5 21 2 168 157 5	-11 5 3 710 718 11	0 12 3 146 142 3
-14 4 2 254 249 7	-6 12 2 868 880 2	-3 21 2 193 191 5	-9 5 3 1215 1234 14	2 12 3 212 212 3
-12 4 2 258 258 4	-4 12 2 160 162 3	-1 21 2 276 274 5	-7 5 3 141 146 2	4 12 3 306 315 4
-10 4 2 335 327 2	-2 12 2 2135 2159 3	1 21 2 91 88 8	-5 5 3 1388 1408 5	6 12 3 43 10 -43
-8 4 2 754 760 6	0 12 2 1018 1026 4	3 21 2 275 265 4	-3 5 3 484 482 1	8 12 3 280 284 6
-6 4 2 760 774 3	2 12 2 390 388 2	5 21 2 124 124 8	-1 5 3 2347 2342 4	-11 13 3 0 17 -1
-4 4 2 837 842 3	4 12 2 1171 1195 7	-6 22 2 737 726 2	1 5 3 748 758 5	-9 13 3 107 107 11
-2 4 2 967 909 3	10 12 2 346 345 6	-4 22 2 236 223 8	3 5 3 410 410 6	-7 13 3 352 356 5
0 4 2 340 356 2	-11 13 2 125 130 7	-2 22 2 783 776 3	5 5 3 1171 1171 3	-5 13 3 424 424 6
2 4 2 611 579 5	-9 13 2 51 46 -30	0 22 2 123 118 6	7 5 3 392 387 5	-3 13 3 291 282 2
4 4 2 826 806 3	-7 13 2 294 307 3	2 22 2 530 520 3	9 5 3 1122 1125 4	-1 13 3 79 77 5
6 4 2 390 384 3	-5 13 2 394 402 4	4 22 2 431 430 11	-12 6 3 1184 1182 4	1 13 3 121 124 4
8 4 2 568 545 4	-3 13 2 57 53 6	-5 23 2 569 559 3	-10 6 3 338 333 5	3 13 3 25 1 -25
10 4 2 549 544 5	-1 13 2 326 322 2	-3 23 2 317 315 4	-8 6 3 1486 1501 5	5 13 3 26 25 -25
12 4 2 0 22 -1	1 13 2 312 304 2	-1 23 2 208 209 5	-6 6 3 189 185 2	7 13 3 204 213 7
-13 5 2 144 142 7	3 13 2 353 360 2	1 23 2 484 476 3	-4 6 3 736 750 2	9 13 3 243 222 7

-11	5	2	185	185	4	5	13	2	466	472	4	3	23	2	343	327	18	-2	6	3	2630	2618	3	-10	14	3	58	76	-22
-9	5	2	436	440	2	7	13	2	41	34	-28	-4	24	2	0	46	-1	0	6	3	578	583	3	-8	14	3	645	652	5
-7	5	2	296	291	2	9	13	2	50	53	-32	-2	24	2	664	660	8	2	6	3	1576	1563	20	-6	14	3	150	138	4
-5	5	2	134	116	1	-10	14	2	108	100	10	0	24	2	449	436	5	4	6	3	419	433	4	-4	14	3	263	267	2
-3	5	2	684	664	2	-8	14	2	312	308	5	2	24	2	154	156	7	6	6	3	1474	1487	4	-2	14	3	805	799	3
-1	5	2	630	608	2	-6	14	2	143	147	4	-3	25	2	144	145	10	8	6	3	738	743	4	0	14	3	99	97	4
3	5	2	101	84	3	-4	14	2	346	346	2	-14	0	3	100	78	16	10	6	3	240	248	6	2	14	3	782	777	5
5	5	2	495	494	3	-2	14	2	125	124	4	-12	0	3	50	45	-39	-13	7	3	73	72	-24	4	14	3	35	19	-35
7	5	2	237	230	5	0	14	2	559	566	5	-10	0	3	233	238	6	-11	7	3	112	102	18	6	14	3	587	596	6
9	5	2	280	269	6	2	14	2	235	240	2	-8	0	3	44	55	-27	-9	7	3	442	446	2	8	14	3	163	164	9
11	5	2	16	19	-15	4	14	2	115	125	4	-6	0	3	138	140	4	-7	7	3	605	614	2	-11	15	3	155	140	8
-12	6	2	165	161	4	6	14	2	234	228	4	-4	0	3	70	73	5	-5	7	3	297	308	2	-9	15	3	129	130	9
-10	6	2	259	265	3	8	14	2	93	90	9	-2	0	3	147	154	4	-3	7	3	295	303	1	-7	15	3	57	60	15
-8	6	2	164	158	4	10	14	2	288	284	6	0	0	3	386	376	2	-1	7	3	944	954	1	-5	15	3	417	415	4
-6	6	2	15	19	-14	-11	15	2	252	247	4	2	0	3	248	250	4	1	7	3	66	60	6	-3	15	3	145	142	4
-4	6	2	69	68	3	-9	15	2	168	175	7	4	0	3	42	32	-30	3	7	3	211	222	5	-1	15	3	189	192	3
-2	6	2	56	50	3	-7	15	2	480	479	3	6	0	3	291	299	4	5	7	3	323	325	4	1	15	3	0	16	-1
0	6	2	70	61	4	-5	15	2	323	326	4	8	0	3	64	40	-21	7	7	3	19	12	-19	3	15	3	33	30	-32
2	6	2	33	23	6	-3	15	2	67	58	10	10	0	3	267	268	6	9	7	3	458	468	5	5	15	3	280	286	4
4	6	2	132	124	3	-1	15	2	482	483	2	-13	1	3	149	140	12	-12	8	3	42	11	-29	7	15	3	174	175	4
6	6	2	341	339	4	1	15	2	266	270	2	-11	1	3	187	195	12	-10	8	3	23	28	-22	-10	16	3	250	263	6
8	6	2	145	154	8	3	15	2	428	429	2	-9	1	3	101	101	7	-8	8	3	213	218	3	-8	16	3	587	597	3
10	6	2	62	11	-33	5	15	2	287	291	3	-7	1	3	62	61	5	-6	8	3	275	281	3	-6	16	3	440	441	6
12	6	2	106	96	15	7	15	2	307	313	4	-5	1	3	227	231	1	-4	8	3	97	88	3	-4	16	3	502	496	3
-13	7	2	70	68	15	9	15	2	34	13	-33	-3	1	3	282	279	1	-2	8	3	192	191	1	-2	16	3	962	957	4
-11	7	2	277	282	7	-10	16	2	0	15	-1	-1	1	3	313	301	2	0	8	3	162	161	2	0	16	3	415	418	2
-9	7	2	71	80	8	-8	16	2	46	44	-37	1	1	3	278	257	2	2	8	3	146	144	7	2	16	3	686	695	3
-7	7	2	371	375	2	-6	16	2	351	350	4	3	1	3	81	66	6	4	8	3	145	144	6	4	16	3	183	178	4
-5	7	2	215	218	1	-4	16	2	309	313	2	5	1	3	19	20	-19	6	8	3	149	156	8	6	16	3	635	636	2
-3	7	2	230	229	1	-2	16	2	300	298	2	7	1	3	180	171	5	8	8	3	155	165	8	8	16	3	289	292	4
-1	7	2	729	717	1	0	16	2	29	19	-28	9	1	3	68	61	12	10	8	3	278	272	6	-9	17	3	738	734	4
1	7	2	294	281	2	2	16	2	162	152	4	11	1	3	93	96	14	-13	9	3	231	232	7	-7	17	3	484	482	3
3	7	2	450	437	2	4	16	2	21	10	-20	-14	2	3	378	367	4	-11	9	3	187	183	4	-5	17	3	1114	1103	6
5	7	2	188	176	4	6	16	2	103	106	6	-12	2	3	346	343	4	-9	9	3	141	143	7	-3	17	3	61	59	10
7	7	2	358	360	4	8	16	2	180	187	9	-10	2	3	417	416	3	-7	9	3	387	385	2	-1	17	3	1037	1024	2
9	7	2	180	179	8	-9	17	2	103	102	12	-8	2	3	114	111	3	-5	9	3	100	102	6	1	17	3	382	385	2

Table 5-8. Observed and calculated structure factors for DL5 in air

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

3	17	3	260	265	4	-8	4	4	74	73	6	-4	12	4	588	584	3	1	1	5	67	64	10	-4	10	5	146	150	3
5	17	3	547	553	7	-6	4	4	1051	1077	5	-2	12	4	367	376	3	3	1	5	36	12	-35	-2	10	5	172	170	4
7	17	3	90	105	8	-4	4	4	480	503	3	0	12	4	1027	1023	2	5	1	5	127	134	10	0	10	5	281	287	3
-8	18	3	678	681	3	-2	4	4	272	273	2	2	12	4	804	815	4	7	1	5	96	93	9	2	10	5	276	271	5
-6	18	3	301	293	4	0	4	4	511	520	1	4	12	4	442	449	5	-12	2	5	428	436	4	4	10	5	213	215	7
-4	18	3	289	293	6	2	4	4	104	110	6	6	12	4	667	688	5	-10	2	5	87	81	6	6	10	5	0	15	-1
-2	18	3	982	978	5	4	4	4	137	150	6	-11	13	4	108	103	11	-8	2	5	55	58	10	-11	11	5	162	161	8
0	18	3	87	80	8	6	4	4	57	37	-24	-9	13	4	23	13	-23	-6	2	5	256	255	2	-9	11	5	107	106	9
2	18	3	236	237	4	8	4	4	392	389	5	-7	13	4	55	52	12	-4	2	5	59	58	8	-7	11	5	185	170	4
4	18	3	554	546	3	-13	5	4	165	157	10	-5	13	4	20	8	-20	-2	2	5	582	588	2	-5	11	5	95	91	5
6	18	3	721	727	3	-11	5	4	134	145	11	-3	13	4	245	240	3	0	2	5	476	469	2	-3	11	5	87	83	5
-7	19	3	157	148	7	-9	5	4	135	133	5	-1	13	4	280	276	2	2	2	5	447	444	3	-1	11	5	15	2	-15

-5	19	3	264	272	4	-7	5	4	299	309	2	1	13	4	143	146	4	4	2	5	49	42	-21	1	11	5	179	180	5
-3	19	3	36	23	-36	-5	5	4	254	260	2	3	13	4	444	455	3	6	2	5	0	13	-1	3	11	5	58	72	-23
-1	19	3	243	237	3	-3	5	4	76	77	4	5	13	4	249	249	6	8	2	5	202	216	8	5	11	5	6	21	-5
1	19	3	114	123	6	-1	5	4	381	395	2	7	13	4	51	17	-50	-11	3	5	385	396	4	-10	12	5	237	240	7
3	19	3	144	141	6	1	5	4	74	72	7	-8	14	4	101	104	9	-9	3	5	76	79	7	-8	12	5	186	189	4
5	19	3	36	41	-35	3	5	4	56	67	12	-6	14	4	313	315	8	-7	3	5	694	697	3	-6	12	5	170	174	7
-8	20	3	146	141	10	5	5	4	0	12	-1	-4	14	4	128	128	5	-5	3	5	23	22	-22	-4	12	5	146	142	4
-6	20	3	371	361	6	7	5	4	308	317	5	-2	14	4	312	309	2	-3	3	5	393	391	3	-2	12	5	181	173	3
-4	20	3	308	307	4	9	5	4	221	226	7	0	14	4	38	32	-21	-1	3	5	173	174	3	0	12	5	126	128	6
-2	20	3	166	162	5	-12	6	4	170	159	9	2	14	4	37	42	-37	1	3	5	75	71	10	2	12	5	267	267	6
0	20	3	264	272	3	-10	6	4	161	167	7	4	14	4	424	421	3	3	3	5	646	642	4	4	12	5	49	26	-49
2	20	3	72	71	10	-8	6	4	41	40	-13	6	14	4	0	43	-1	5	3	5	269	275	6	-9	13	5	77	75	9
4	20	3	333	332	4	-6	6	4	45	46	11	-9	15	4	227	224	7	7	3	5	305	320	6	-7	13	5	83	81	11
-7	21	3	244	245	5	-4	6	4	63	63	5	-7	15	4	46	28	-21	-12	4	5	127	130	11	-5	13	5	253	260	6
-5	21	3	418	408	3	-2	6	4	55	63	8	-5	15	4	117	112	6	-10	4	5	50	45	-16	-3	13	5	252	244	3
-3	21	3	149	145	6	0	6	4	144	148	3	-3	15	4	421	413	5	-8	4	5	180	189	4	-1	13	5	167	167	6
-1	21	3	243	236	3	2	6	4	69	60	9	-1	15	4	211	214	3	-6	4	5	41	34	-13	1	13	5	232	230	4
1	21	3	5	18	-5	4	6	4	180	180	7	1	15	4	309	311	3	-4	4	5	57	50	9	3	13	5	254	252	6
3	21	3	0	29	-1	6	6	4	102	101	12	3	15	4	248	247	4	-2	4	5	97	86	5	5	13	5	194	194	8
-6	22	3	81	58	12	8	6	4	54	31	-30	5	15	4	350	352	4	0	4	5	55	61	11	-10	14	5	213	212	5
-4	22	3	72	87	14	-13	7	4	318	321	6	-8	16	4	327	327	6	2	4	5	96	85	10	-8	14	5	308	300	4
-2	22	3	37	39	-36	-11	7	4	178	171	8	-6	16	4	233	230	4	4	4	5	107	119	12	-6	14	5	362	361	3
0	22	3	140	141	5	-9	7	4	170	168	5	-4	16	4	159	161	5	6	4	5	0	9	-1	-4	14	5	419	413	7
2	22	3	39	36	-33	-7	7	4	321	329	2	-2	16	4	116	117	5	-11	5	5	647	652	4	-2	14	5	216	209	3
-3	23	3	252	253	4	-5	7	4	111	103	5	0	16	4	148	151	5	-9	5	5	224	223	3	0	14	5	954	947	3
-1	23	3	287	286	3	-3	7	4	234	226	1	2	16	4	42	42	-19	-7	5	5	1419	1444	5	2	14	5	52	24	-20
1	23	3	287	276	3	-1	7	4	211	217	2	4	16	4	73	75	13	-5	5	5	507	516	2	4	14	5	156	161	6
-12	0	4	619	620	4	1	7	4	441	428	3	6	16	4	240	241	7	-3	5	5	915	923	2	-9	15	5	66	14	-22
-10	0	4	525	528	8	3	7	4	243	252	5	-9	17	4	0	21	-1	-1	5	5	527	528	4	-7	15	5	213	199	11
-8	0	4	1995	2006	5	5	7	4	446	457	4	-7	17	4	201	196	7	1	5	5	463	456	3	-5	15	5	107	113	8
-6	0	4	350	346	3	7	7	4	91	83	13	-5	17	4	0	34	-1	3	5	5	1212	1221	4	-3	15	5	222	211	3
-4	0	4	2025	2050	8	9	7	4	68	52	-21	-3	17	4	75	83	12	5	5	5	207	215	7	-1	15	5	35	29	-34
-2	0	4	44	49	-15	-12	8	4	29	45	-28	-1	17	4	210	210	4	7	5	5	779	787	5	1	15	5	107	104	8
0	0	4	1580	1554	4	-10	8	4	216	209	6	1	17	4	128	133	6	-12	6	5	74	76	13	3	15	5	319	321	4
2	0	4	2204	2184	3	-8	8	4	709	712	3	3	17	4	52	44	-36	-10	6	5	757	768	5	-8	16	5	496	491	7
4	0	4	86	84	12	-6	8	4	463	468	4	5	17	4	223	223	7	-8	6	5	472	477	2	-6	16	5	499	497	6
6	0	4	903	900	4	-4	8	4	300	288	2	-8	18	4	159	167	9	-6	6	5	590	602	5	-4	16	5	625	624	5
8	0	4	222	231	6	-2	8	4	107	112	3	-6	18	4	227	220	6	-4	6	5	1852	1852	2	-2	16	5	116	122	8
-13	1	4	179	173	5	0	8	4	437	436	2	-4	18	4	157	160	6	-2	6	5	305	307	2	0	16	5	665	653	6
-11	1	4	391	396	3	2	8	4	67	60	15	-2	18	4	304	302	3	0	6	5	986	980	7	2	16	5	259	252	4
-9	1	4	196	202	2	4	8	4	228	227	6	0	18	4	163	157	4	2	6	5	319	317	5	-7	17	5	869	864	6
-7	1	4	905	920	2	6	8	4	680	689	4	2	18	4	181	176	4	4	6	5	1276	1295	4	-5	17	5	101	101	14
-5	1	4	307	308	2	8	8	4	275	284	6	4	18	4	86	88	18	6	6	5	340	347	6	-3	17	5	725	722	13
-3	1	4	489	502	1	-11	9	4	577	571	4	-7	19	4	269	266	7	-11	7	5	84	79	17	-1	17	5	197	188	5
-1	1	4	1581	1563	1	-9	9	4	102	102	11	-5	19	4	265	265	4	-9	7	5	511	521	6	1	17	5	43	27	-32
1	1	4	195	194	4	-7	9	4	396	401	2	-3	19	4	59	59	-17	-7	7	5	574	584	4	3	17	5	974	978	5
3	1	4	924	921	2	-5	9	4	556	551	3	-1	19	4	485	481	3	-5	7	5	60	71	8	-6	18	5	201	186	8
5	1	4	24	18	-24	-3	9	4	135	131	2	1	19	4	48	46	-18	-3	7	5	188	189	3	-4	18	5	620	600	16
7	1	4	348	349	3	-1	9	4	639	632	2	3	19	4	302	294	4	-1	7	5	47	52	13	-2	18	5	625	618	4
9	1	4	374	367	5	1	9	4	0	16	-1	-6	20	4	187	186	5	1	7	5	50	24	-26	0	18	5	436	432	3
-12	2	4	36	47	-35	3	9	4	528	520	4	-4	20	4	569	568	8	3	7	5	438	444	4	-3	19	5	234	231	5
-10	2	4	27	11	-26	5	9	4	44	27	-44	-2	20	4	161	161	6	5	7	5	123	116	11	-1	19	5	47	39	-27
-8	2	4	117	114	4	7	9	4	175	171	8	0	20	4	232	237	4	7	7	5	340	337	6	-10	0	6	1570	1438	91
-6	2	4	120	124	3	-12	10	4	248	247	4	2	20	4	345	340	3	-12	8	5	31	41	-31	-8	0	6	99	92	8

-4 2 4 174 174 2	-8 10 4 627 642 2	-5 21 4 127 125 8	-10 8 5 63 62 16	-6 0 6 803 809 6
-2 2 4 135 136 3	-6 10 4 162 168 3	-3 21 4 260 256 4	-8 8 5 131 132 5	-4 0 6 738 738 8
0 2 4 153 133 6	-4 10 4 450 450 3	-1 21 4 39 53 -28	-6 8 5 53 46 10	-2 0 6 1317 1324 6
2 2 4 276 273 4	-2 10 4 250 250 2	1 21 4 306 300 3	-4 8 5 190 193 3	0 0 6 861 851 4
4 2 4 43 43 -20	0 10 4 551 552 2	-2 22 4 176 187 8	-2 8 5 169 165 3	2 0 6 377 372 5
6 2 4 153 144 10	2 10 4 374 376 4	-12 0 5 213 211 8	0 8 5 94 97 11	4 0 6 1448 1463 4
8 2 4 185 174 7	4 10 4 212 208 7	-10 0 5 45 14 -20	2 8 5 39 34 -39	-11 1 6 279 282 3
-13 3 4 194 200 5	6 10 4 363 373 5	-8 0 5 146 145 5	4 8 5 29 38 -28	-9 1 6 30 31 -30
-11 3 4 215 213 4	8 10 4 28 25 -28	-6 0 5 92 94 8	6 8 5 41 13 -41	-7 1 6 356 360 2
-9 3 4 293 296 2	-11 11 4 923 909 4	-4 0 5 167 171 4	-11 9 5 70 81 18	-5 1 6 135 140 4
-7 3 4 503 518 1	-9 11 4 520 526 4	-2 0 5 246 242 3	-9 9 5 558 541 3	-3 1 6 936 936 4
-5 3 4 108 99 3	-7 11 4 862 869 2	0 0 5 116 114 6	-7 9 5 332 337 2	-1 1 6 110 109 5
-3 3 4 773 783 2	-5 11 4 862 854 5	2 0 5 39 4 -38	-5 9 5 315 323 2	1 1 6 689 681 3
-1 3 4 840 860 3	-3 11 4 176 174 2	4 0 5 308 314 5	-3 9 5 105 99 4	3 1 6 38 16 -38
1 3 4 293 289 2	-1 11 4 1514 1493 2	6 0 5 68 63 -19	-1 9 5 265 260 4	5 1 6 232 226 6
3 3 4 39 5 -20	1 11 4 326 324 3	-11 1 5 156 161 6	1 9 5 256 258 6	-10 2 6 191 203 4
5 3 4 198 195 4	3 11 4 1530 1559 4	-9 1 5 71 74 7	3 9 5 240 257 6	-8 2 6 88 86 6
7 3 4 124 132 9	5 11 4 69 66 -21	-7 1 5 110 111 4	5 9 5 498 507 5	-6 2 6 94 94 6
9 3 4 148 144 9	7 11 4 355 367 6	-5 1 5 119 124 4	-10 10 5 72 75 19	-4 2 6 125 131 5
-12 4 4 147 145 6	-8 12 4 1280 1274 5	-3 1 5 95 88 5	-8 10 5 122 117 6	-2 2 6 107 106 5
-10 4 4 56 55 16	-6 12 4 46 27 -15	-1 1 5 177 172 3	-6 10 5 172 166 3	0 2 6 154 162 6

Table 5-8. Observed and calculated structure factors for DL5 in air

Page 4

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 6 20 0 -20	-8 6 6 75 60 9	-8 10 6 62 55 14	-3 15 6 397 384 4	-4 4 7 79 63 8
4 2 6 179 178 5	-6 6 6 34 4 -33	-6 10 6 408 405 3	-1 15 6 301 309 4	-2 4 7 62 64 10
-11 3 6 22 43 -22	-4 6 6 24 16 -23	-4 10 6 270 269 3	1 15 6 78 77 17	0 4 7 59 40 -28
-9 3 6 118 110 6	-2 6 6 129 129 5	-2 10 6 264 264 3	-4 16 6 46 49 -45	-7 5 7 149 162 5
-7 3 6 173 175 3	0 6 6 0 1 -1	0 10 6 299 295 4	-8 0 7 157 160 6	-5 5 7 453 458 7
-5 3 6 205 211 3	2 6 6 49 72 -32	2 10 6 127 136 11	-6 0 7 170 159 6	-3 5 7 617 621 5
-3 3 6 332 334 3	4 6 6 92 98 14	-9 11 6 434 433 5	-4 0 7 113 121 8	-1 5 7 339 340 4
-1 3 6 428 428 2	-9 7 6 7 13 -6	-7 11 6 557 556 5	-2 0 7 82 81 12	1 5 7 960 944 5
1 3 6 220 222 4	-7 7 6 38 51 -27	-5 11 6 135 140 6	0 0 7 60 61 -24	-8 6 7 416 398 6
3 3 6 59 51 15	-5 7 6 436 441 4	-3 11 6 1482 1467 4	2 0 7 281 284 6	-6 6 7 867 857 6
5 3 6 113 121 13	-3 7 6 182 175 3	-1 11 6 133 144 7	-9 1 7 0 31 -1	-4 6 7 392 395 8
-10 4 6 102 113 7	-1 7 6 265 262 5	1 11 6 635 638 10	-7 1 7 71 78 10	-2 6 7 1132 1115 4
-8 4 6 421 417 3	1 7 6 158 163 8	3 11 6 312 313 6	-5 1 7 35 12 -34	0 6 7 497 491 4
-6 4 6 0 15 -1	3 7 6 178 189 8	-8 12 6 388 399 6	-3 1 7 79 83 8	-7 7 7 171 174 5
-4 4 6 151 140 5	-10 8 6 233 228 8	-6 12 6 542 531 7	-1 1 7 56 44 -39	-5 7 7 51 44 -17
-2 4 6 50 57 12	-8 8 6 441 442 3	-4 12 6 201 196 5	1 1 7 34 47 -34	-3 7 7 96 103 12
0 4 6 86 89 10	-6 8 6 619 624 2	-2 12 6 405 399 3	-8 2 7 295 292 3	-1 7 7 39 45 -38
2 4 6 373 368 5	-4 8 6 95 95 6	0 12 6 518 520 6	-6 2 7 63 62 10	-6 8 7 114 116 7
4 4 6 305 305 6	-2 8 6 214 217 4	2 12 6 426 428 5	-4 2 7 324 325 3	-4 8 7 145 138 5
-11 5 6 174 177 8	0 8 6 416 410 3	-7 13 6 31 15 -31	-2 2 7 308 302 3	-2 8 7 107 117 18
-9 5 6 0 15 -1	2 8 6 27 44 -27	-5 13 6 172 167 5	0 2 7 295 303 4	0 8 7 45 33 -45
-7 5 6 238 244 5	4 8 6 261 256 7	-3 13 6 391 381 5	2 2 7 74 78 13	-5 9 7 68 66 15
-5 5 6 143 137 4	-9 9 6 358 357 5	-1 13 6 150 146 5	-7 3 7 41 7 -20	-3 9 7 64 45 -24
-3 5 6 71 65 8	-7 9 6 358 348 3	1 13 6 109 109 8	-5 3 7 199 201 4	-1 9 7 305 305 4
-1 5 6 39 3 -27	-5 9 6 45 59 -21	-6 14 6 46 46 -33	-3 3 7 270 265 3	-6 10 7 53 65 -37
1 5 6 297 298 5	-3 9 6 640 633 3	-4 14 6 122 119 8	-1 3 7 29 22 -28	-4 10 7 189 171 9
3 5 6 133 122 10	-1 9 6 23 28 -23	-2 14 6 154 142 5	1 3 7 406 410 4	-2 10 7 335 338 3

5 5 6 101 96 15 1 9 6 192 180 8 0 14 6 36 4 -35 -8 4 7 54 68 -17
 -10 6 6 19 18 -19 3 9 6 291 284 6 -5 15 6 366 355 4 -6 4 7 42 18 -23

Table 5-9. Observed and calculated structure factors for DL5 in DAC at 0.67 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s
1 3 0 222 248 4	4 10 1 251 241 24	-5 9 2 889 875 28	-1 9 3 644 657 14	2 10 5 179 248-178
0 4 0 706 815 17	-5 11 1 41 56 -41	-3 9 2 645 637 12	1 9 3 536 488 20	-5 11 5 58 92 -57
2 4 0 1332 1268 6	-4 12 1 196 271 42	1 9 2 1041 1017 9	3 9 3 707 641 69	1 11 5 161 177 -72
1 5 0 178 157 6	2 12 1 267 271 15	3 9 2 158 152-101	-2 10 3 47 69 -46	-2 12 5 147 161-147
3 5 0 821 779 11	-3 13 1 83 90 -82	-2 10 2 967 971 37	2 10 3 808 791 11	2 12 5 186 286 -79
0 6 0 162 152 18	-1 13 1 513 506 9	0 10 2 179 222 32	-2 12 3 182 226 36	-5 13 5 232 220 -76
1 7 0 212 201 8	1 13 1 694 741 8	2 10 2 575 534 26	0 12 3 113 113-112	-3 13 5 267 261 70
3 7 0 764 680 15	0 14 1 507 487 28	-3 11 2 1264 1284 33	2 14 3 796 746 15	1 13 5 225 239 58
4 8 0 1223 1154 6	4 16 1 1022 1070 29	1 11 2 1800 1733 15	2 16 3 679 682 85	0 14 5 913 929 28
3 9 0 433 479 12	3 17 1 456 367 42	0 12 2 967 941 14	1 17 3 469 422 34	1 15 5 62 92 -61
2 10 0 449 449 12	5 17 1 396 466 26	5 13 2 490 503 52	3 17 3 220 273 61	-6 0 6 771 742 76
1 11 0 1527 1631 31	4 18 1 1256 1127 106	0 14 2 563 553 23	2 18 3 255 256 -99	-4 0 6 724 704 27
4 12 0 697 698 25	6 18 1 756 782 20	-7 15 2 412 463 45	4 18 3 524 530 39	-2 0 6 1255 1266 16
3 13 0 145 122 -78	5 19 1 215 215 49	6 16 2 120 154-119	-4 0 4 2033 2006 22	-5 1 6 172 101 -79
6 20 0 208 196-136	4 20 1 245 236 52	4 18 2 281 301 61	0 0 4 1488 1495 15	-3 1 6 929 897 12
0 0 1 111 122 6	5 21 1 137 96-137	5 19 2 440 519 34	-3 1 4 545 556 9	-4 2 6 91 118 -90
-1 1 1 463 530 3	4 22 1 299 309 78	2 20 2 516 482 39	-1 1 4 1568 1510 8	0 2 6 183 226-138
0 2 1 176 177 5	-2 0 2 3168 3222 8	4 20 2 267 274 48	-4 2 4 200 181 29	-5 3 6 186 169 -76
-3 3 1 1400 1326 18	0 0 2 769 666 3	3 21 2 222 258-113	-2 2 4 149 134 -57	-3 3 6 364 374 18
1 3 1 1537 1523 8	-3 1 2 1329 1357 9	0 0 3 382 383 6	0 2 4 112 109-112	-1 3 6 417 448 20
-2 4 1 20 5 -19	-1 1 2 322 314 4	-3 1 3 295 294 6	-3 3 4 820 805 10	-4 4 6 133 155-132
0 4 1 193 172 6	1 1 2 383 445 12	1 1 3 233 258 13	-1 3 4 871 898 13	0 4 6 56 49 -56
2 4 1 33 48 -33	-2 2 2 223 231 5	-4 2 3 92 76 -38	-6 4 4 1008 1133 32	-5 5 6 123 124-123
-3 5 1 1880 1959 27	0 2 2 122 157 -41	0 2 3 1122 1102 10	-2 4 4 199 224 18	-3 5 6 63 76 -62
-1 5 1 344 332 5	-1 3 2 100 87 -30	-3 3 3 74 38 -68	2 10 4 355 341 27	1 5 6 307 268 51
1 5 1 2468 2505 13	-2 4 2 991 900 7	-1 3 3 1196 1149 8	-8 12 4 1294 1280 100	-2 6 6 69 98 -69
3 5 1 1587 1524 27	0 4 2 389 390 7	-4 4 3 89 104 -89	0 12 4 1165 1054 50	-5 7 6 407 443 22
0 6 1 2134 2134 6	3 5 2 67 65 -66	-2 4 3 187 205 7	4 12 4 512 493 30	-3 7 6 189 183-188
-5 7 1 318 346 22	-4 6 2 33 46 -33	-3 5 3 481 468 12	3 13 4 483 462 43	-1 7 6 232 250 48
-1 7 1 1005 998 15	-3 7 2 234 218 17	-1 5 3 2316 2280 14	-6 14 4 291 314 45	-6 8 6 567 578 21
-4 8 1 134 164 38	1 7 2 301 287 18	1 5 3 801 752 12	4 14 4 432 397 45	-4 8 6 147 145-147
4 8 1 196 217 17	3 7 2 412 428 13	-2 6 3 2632 2640 17	-3 15 4 339 360 57	-2 8 6 245 265 34
-3 9 1 627 597 8	-6 8 2 707 667 27	0 6 3 590 593 6	1 15 4 284 349 35	0 8 6 375 388 23
3 9 1 165 135 35	-4 8 2 833 816 23	2 6 3 1591 1562 20	3 15 4 289 230 52	-3 9 6 615 652 24
5 9 1 323 295 24	-2 8 2 1058 1026 10	-5 7 3 336 337 40	1 17 4 63 105 -63	-2 10 6 276 256 40
-2 10 1 34 60 -33	0 8 2 245 240 10	1 7 3 36 67 -35	-7 7 5 532 611 30	-3 11 6 1355 1409 17
0 10 1 489 490 11	2 8 2 129 72-128	-4 8 3 47 63 -46	1 9 5 184 253 -73	-2 2 7 288 303 -93
2 10 1 560 552 11	4 8 2 377 365 20	-3 9 3 729 675 16	0 10 5 285 292 24	-3 3 7 245 278 -76

Table 5-10. Observed and calculated structure factors for DL5 at 3.65 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s
1 3 0 207 247 2	-1 13 1 584 570 21	2 18 2 158 197 -56	-1 1 4 1526 1508 7	-5 13 5 295 260 41
0 4 0 712 792 6	1 13 1 695 775 9	4 18 2 318 307 17	-4 2 4 93 180 -33	-3 13 5 371 281 64

2	4	0	1276	1248	9	-1	15	1	50	189	-50	-3	19	2	442	367	37	-2	2	4	116	134	18	-1	13	5	57	159	-56
1	5	0	194	163	3	1	15	1	583	636	18	1	19	2	468	435	-217	-3	3	4	803	843	9	1	13	5	345	303	29
3	5	0	848	792	15	7	15	1	378	360	35	3	19	2	153	49	-59	-1	3	4	839	867	5	3	13	5	134	238	-133
0	6	0	246	165	9	6	16	1	169	216	-39	5	19	2	458	497	81	-2	4	4	210	203	10	-6	14	5	333	336	49
2	6	0	112	38	8	5	17	1	379	393	15	-6	20	2	710	678	38	-5	5	4	216	220	19	-4	14	5	460	412	25
1	7	0	203	167	5	7	17	1	647	674	25	2	20	2	426	455	51	1	5	4	148	124	-29	0	14	5	895	929	19
3	7	0	630	635	95	4	18	1	1107	1130	23	4	20	2	321	339	23	-3	7	4	69	220	-69	2	14	5	51	76	-51
5	7	0	479	515	14	6	18	1	785	750	35	-5	21	2	191	96	-155	-1	7	4	238	163	43	-3	15	5	266	227	-54
0	8	0	102	12	-27	-7	19	1	69	347	-68	3	21	2	243	237	-97	-2	8	4	35	40	-35	-1	15	5	62	99	-61
2	8	0	349	246	25	3	19	1	128	114	-57	-4	22	2	405	262	45	4	10	4	102	134	-102	1	15	5	52	80	-51
4	8	0	1205	1146	13	5	19	1	190	177	32	-4	0	3	70	129	-69	-7	11	4	47	845	-47	-4	16	5	602	624	28
3	9	0	580	573	6	-6	20	1	56	56	-56	0	0	3	384	345	5	-5	11	4	886	811	27	0	16	5	545	659	49
5	9	0	38	37	-37	2	20	1	424	374	32	2	0	3	214	262	13	1	11	4	312	282	14	-6	0	6	899	748	21
2	10	0	437	449	7	4	20	1	191	205	-61	-3	1	3	288	315	6	3	11	4	1466	1469	39	-4	0	6	763	739	23
1	11	0	1523	1566	6	-5	21	1	161	119	-160	-1	1	3	435	332	9	4	12	4	607	540	28	-2	0	6	1200	1205	8
0	12	0	3222	2592	9	-2	0	2	3209	3140	10	1	1	3	179	208	8	-7	13	4	50	93	-49	0	0	6	933	858	19
4	12	0	608	622	17	0	0	2	799	697	3	-4	2	3	60	65	-29	3	13	4	401	396	17	-5	1	6	166	135	-47
1	13	0	95	154	-94	-3	1	2	1325	1304	13	-2	2	3	47	59	-14	-6	14	4	317	330	49	-3	1	6	939	900	6
3	13	0	87	138	-86	-1	1	2	307	303	2	0	2	3	1132	1101	4	0	14	4	45	117	-45	-1	1	6	154	167	18
4	14	0	186	236	-57	1	1	2	440	484	5	-3	3	3	80	27	14	2	14	4	72	31	-72	1	1	6	594	608	33
7	15	0	491	478	20	-2	2	2	199	234	5	-1	3	3	1148	1140	4	4	14	4	434	393	15	-4	2	6	80	132	-80
7	17	0	153	117	-76	0	2	2	138	156	5	1	3	3	142	157	13	-5	15	4	135	85	-69	-2	2	6	51	93	-51
2	18	0	413	348	37	-1	3	2	45	100	-10	3	3	3	116	108	-26	-3	15	4	475	415	26	0	2	6	192	222	25
6	18	0	368	332	21	3	3	2	499	500	15	-4	4	3	176	132	19	1	15	4	328	308	24	-5	3	6	178	189	32
3	19	0	36	426	-35	-2	4	2	928	843	8	-2	4	3	220	195	5	3	15	4	184	172	-50	-3	3	6	379	376	16
7	19	0	574	505	25	0	4	2	437	407	4	0	4	3	51	53	-27	-6	16	4	146	222	-146	-1	3	6	459	434	11
4	20	0	614	642	48	-5	5	2	32	89	-32	-5	5	3	1410	1431	62	-4	16	4	204	207	-50	1	3	6	65	147	-64
6	20	0	207	196	-106	3	5	2	61	42	-39	-3	5	3	452	464	9	0	16	4	215	122	-52	-4	4	6	171	198	20
0	0	1	120	110	2	-4	6	2	78	71	10	-1	5	3	2267	2260	7	2	16	4	44	62	-43	-2	4	6	91	98	-79
-1	1	1	440	538	2	2	6	2	122	77	7	3	5	3	369	293	36	-7	17	4	59	118	-59	0	4	6	66	9	-66
0	2	1	176	190	3	4	6	2	38	115	-37	-2	6	3	2718	2656	11	1	17	4	65	108	-64	2	4	6	459	395	28
2	2	1	1565	1412	37	-3	7	2	239	227	7	0	6	3	483	509	10	-6	18	4	247	243	-70	-5	5	6	179	136	-36
-3	3	1	1412	1335	63	1	7	2	301	265	7	2	6	3	1573	1563	15	0	18	4	61	166	-60	-3	5	6	66	91	-65
1	3	1	1506	1491	4	-6	8	2	781	647	39	4	6	3	331	353	31	2	18	4	85	165	-84	1	5	6	285	266	26
-2	4	1	86	9	9	-4	8	2	891	847	12	-5	7	3	331	336	41	1	1	5	48	94	-48	-6	6	6	44	10	-44
0	4	1	190	163	4	-2	8	2	1027	1043	7	1	7	3	111	89	-51	-6	2	5	54	288	-53	-4	6	6	99	107	-54
2	4	1	70	76	8	0	8	2	189	184	6	-6	8	3	91	212	-91	-5	5	5	509	459	42	-2	6	6	191	118	18
-3	5	1	1974	2010	13	2	8	2	123	61	-43	-4	8	3	125	92	18	3	5	5	1644	1243	64	0	6	6	128	23	-43
-1	5	1	359	297	3	4	8	2	339	333	28	0	8	3	245	223	13	-4	6	5	1475	1859	-498	-5	7	6	461	459	18
1	5	1	2442	2439	9	-5	9	2	936	877	37	-3	9	3	734	685	8	2	6	5	364	373	23	-3	7	6	130	170	-41
3	5	1	1603	1495	39	-3	9	2	684	678	7	-1	9	3	625	663	10	-7	7	5	731	630	43	-1	7	6	229	244	15
0	6	1	2229	2206	6	-1	9	2	34	67	-34	-2	10	3	99	103	-60	-3	7	5	106	110	-106	1	7	6	134	199	-44
4	6	1	2580	2410	133	1	9	2	1027	1028	6	2	10	3	802	781	6	3	7	5	504	456	46	-6	8	6	595	575	48
-5	7	1	384	356	14	3	9	2	207	197	19	1	11	3	42	11	-41	-6	8	5	67	91	-66	-4	8	6	114	138	-114
-1	7	1	1036	998	9	-4	10	2	389	352	19	-2	12	3	279	247	31	-7	9	5	252	355	-63	-2	8	6	277	271	19
3	7	1	357	311	10	-2	10	2	938	952	27	5	13	3	90	48	-89	1	9	5	246	258	16	0	8	6	427	401	12
-4	8	1	205	194	8	0	10	2	159	206	-34	-8	14	3	756	639	35	3	9	5	203	223	-44	-7	9	6	458	398	-173
4	8	1	140	158	-32	2	10	2	544	516	11	-7	15	3	54	74	-53	-6	10	5	166	220	-69	-5	9	6	103	64	-81
-3	9	1	609	582	6	4	10	2	41	477	-41	3	15	3	20	20	-20	-4	10	5	43	118	-43	-3	9	6	710	632	49
3	9	1	145	88	10	-3	11	2	1255	1250	6	5	15	3	288	303	27	0	10	5	323	250	18	1	9	6	126	173	-125
5	9	1	337	278	34	1	11	2	1749	1743	10	-6	16	3	429	404	27	2	10	5	252	250	21	-6	10	6	370	394	-122
-2	10	1	74	86	-31	0	12	2	888	901	12	2	16	3	724	681	22	-7	11	5	102	161	-101	-4	10	6	255	256	-87
0	10	1	525	508	8	-2	14	2	223	80	-70	4	16	3	162	197	27	-5	11	5	112	93	-111	-2	10	6	290	236	43
2	10	1	506	503	9	0	14	2	536	569	14	-7	17	3	426	469	35	-3	11	5	185	124	-49	0	10	6	245	254	-58

4 10 1 276 173 -56	4 14 2 48 73 -47	-3 17 3 100 106-100	-1 11 5 41 23 -40	-5 11 6 53 97 -53
-1 11 1 230 202 18	6 14 2 282 276 39	1 17 3 541 430 22	1 11 5 225 193 17	-3 11 6 1409 1375 25
1 11 1 115 146 15	-7 15 2 480 483 25	3 17 3 259 268 16	3 11 5 108 63 -76	-1 11 6 203 166-124
3 11 1 194 168 8	5 15 2 140 290-139	2 18 3 218 232 23	-6 12 5 109 140-108	-4 0 7 178 72-127
5 11 1 381 362 19	2 16 2 164 172 -64	4 18 3 536 513 63	-4 12 5 207 190 -48	-3 1 7 68 115 -68
-4 12 1 345 298 28	6 16 2 172 134 -50	-4 0 4 1988 1926 20	-2 12 5 55 189 -54	-4 2 7 266 314 -81
2 12 1 343 343 10	-7 17 2 51 30 -50	0 0 4 1447 1462 12	0 12 5 106 117 -51	
-5 13 1 104 13-104	5 17 2 107 117-107	2 0 4 2273 2113 18	2 12 5 250 277 26	
-3 13 1 174 48 -50	-6 18 2 125 149-124	-3 1 4 548 542 6	-7 13 5 46 76 -46	

Table 5-11. Observed and calculated structure factors for DL5 at 4.54 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s					
10s																													
1	3	0	206	246	9	2	12	1	433	346	23	2	18	2	178	212	-127	0	0	4	1458	1455	10	-3	13	5	301	303	67
0	4	0	719	762	3	1	13	1	770	795	16	4	18	2	287	275	40	-3	1	4	576	545	22	-1	13	5	56	109	-55
2	4	0	1228	1208	11	-1	15	1	262	181	74	1	19	2	374	519	67	-1	1	4	1491	1465	12	1	13	5	352	322	24
1	5	0	202	167	4	1	15	1	647	684	18	5	19	2	441	454	73	-4	2	4	104	170	-86	-4	14	5	503	416	56
3	5	0	798	790	14	6	16	1	186	219	-90	-4	20	2	214	165	-79	-2	2	4	96	139	-35	0	14	5	915	934	18
0	6	0	253	140	10	5	17	1	336	343	53	2	20	2	539	428	45	2	2	4	257	302	32	2	14	5	78	89	-77
2	6	0	117	62	11	4	18	1	1097	1116	16	4	20	2	300	362	81	-3	3	4	804	843	8	1	15	5	102	73	-101
1	7	0	233	160	7	6	18	1	704	746	33	3	21	2	247	211	67	-1	3	4	831	857	8	0	16	5	508	650	29
3	7	0	256	511	36	3	19	1	184	118	52	0	0	3	376	359	9	-2	4	4	240	204	16	-4	0	6	784	713	34
0	8	0	75	37	-74	5	19	1	63	136	-62	-3	1	3	269	301	10	-5	5	4	146	185	-132	-2	0	6	1200	1210	16
2	8	0	334	247	63	-6	20	1	70	29	-69	-1	1	3	412	341	13	1	5	4	143	143	-48	0	0	6	946	889	37
4	8	0	1381	1164	62	-2	20	1	361	234	50	1	1	3	135	176	18	-1	7	4	109	114	-72	-5	1	6	54	119	-53
3	9	0	603	615	12	2	20	1	482	401	33	-4	2	3	39	103	-39	-2	8	4	47	19	-46	-3	1	6	944	901	18
2	10	0	435	400	10	-2	0	2	3210	3154	22	-2	2	3	44	80	-43	1	11	4	309	266	36	-1	1	6	127	174	-52
1	11	0	1524	1512	7	0	0	2	831	737	5	0	2	3	1152	1095	4	3	11	4	1389	1425	20	1	1	6	611	591	56
0	12	0	2945	2654	149	-3	1	2	1284	1298	16	-3	3	3	38	14	-37	4	12	4	637	553	51	-4	2	6	63	135	-63
4	12	0	451	559	22	-1	1	2	324	345	3	-1	3	3	1152	1160	5	3	13	4	400	364	54	-2	2	6	52	84	-51
1	13	0	136	137	-55	1	1	2	433	507	7	1	3	3	124	173	19	-6	14	4	271	369	57	0	2	6	215	216	29
0	14	0	45	54	-44	-2	2	2	190	212	6	-4	4	3	136	114	31	-4	14	4	202	129	-62	-5	3	6	247	163	72
6	18	0	148	334	-148	0	2	2	133	153	8	-2	4	3	258	185	13	0	14	4	178	144	-59	-3	3	6	423	399	34
3	19	0	464	432	42	-1	3	2	44	111	-44	0	4	3	47	58	-47	2	14	4	54	34	-53	-1	3	6	456	456	20
4	20	0	731	710	38	-2	4	2	934	846	5	-5	5	3	1380	1412	84	4	14	4	301	381	87	-4	4	6	238	241	-72
0	0	1	124	100	3	0	4	2	409	464	12	-3	5	3	380	390	11	-5	15	4	174	18	-79	-2	4	6	85	107	-85
-1	1	1	440	513	2	3	5	2	39	23	-39	-1	5	3	2227	2267	9	-3	15	4	486	471	42	0	4	6	56	44	-56
-2	2	1	43	45	-42	-4	6	2	50	47	-49	3	5	3	208	253	-74	1	15	4	320	320	46	-5	5	6	54	148	-54
0	2	1	175	199	5	2	6	2	104	102	14	-2	6	3	2715	2651	14	3	15	4	125	114	-125	-3	5	6	80	112	-79
2	2	1	1437	1412	8	-3	7	2	281	231	17	0	6	3	456	471	12	-6	16	4	241	265	-71	1	5	6	269	246	-86
-3	3	1	1552	1320	15	1	7	2	301	281	11	2	6	3	1556	1575	13	-2	16	4	143	55	-143	-6	6	6	57	23	-56
1	3	1	1464	1462	6	-4	8	2	864	849	25	-5	7	3	326	308	60	0	16	4	60	58	-60	-4	6	6	87	115	-86
-2	4	1	79	9	13	-2	8	2	1003	1026	8	1	7	3	58	70	-58	2	16	4	140	73	-139	-2	6	6	234	125	34
0	4	1	184	157	7	0	8	2	191	132	10	-4	8	3	122	70	-46	1	17	4	78	83	-78	0	6	6	128	40	-128
2	4	1	28	41	-27	4	8	2	315	292	55	0	8	3	250	228	16	0	18	4	62	155	-62	-5	7	6	469	429	45
-3	5	1	1932	2062	19	-5	9	2	919	914	102	-3	9	3	758	689	26	-5	5	5	464	445	63	-3	7	6	73	170	-72
-1	5	1	361	303	4	-3	9	2	693	703	9	-1	9	3	641	660	17	-4	6	5	1796	1862	42	-1	7	6	278	221	27
1	5	1	2340	2389	10	-1	9	2	37	67	-37	2	10	3	786	751	9	2	6	5	378	370	34	-6	8	6	569	582	68
3	5	1	1202	1492	-375	1	9	2	1048	1018	4	-2	12	3	310	242	35	-3	7	5	94	118	-94	-4	8	6	98	131	-98
0	6	1	2229	2247	6	3	9	2	175	195	33	5	13	3	114	35	-113	-6	8	5	48	95	-47	-2	8	6	308	259	52
-3	7	1	513	591	23	-6	10	2	817	629	38	-1	15	3	99	275	-98	1	9	5	293	248	42	0	8	6	417	400	29
-1	7	1	1024	1007	7	-4	10	2	366	338	18	5	15	3	408	308	54	3	9	5	255	211	-110	-5	9	6	55	38	-54

3 7 1 322 317 11	-2 10 2 864 927-323	-6 16 3 264 393 55	-6 10 5 97 244-96	-3 9 6 634 638 38
-4 8 1 219 203 25	0 10 2 65 216-64	2 16 3 733 687 29	-4 10 5 51 78-50	-1 9 6 12 48-11
4 8 1 42 168-42	2 10 2 511 509 19	4 16 3 131 195-131	0 10 5 315 196 34	-6 10 6 212 379-123
-3 9 1 606 544 8	4 10 2 302 449 35	-5 17 3 1097 1168 38	-5 11 5 131 113-111	-4 10 6 227 229 48
3 9 1 136 91 25	-3 11 2 1331 1247 41	1 17 3 482 422 48	-3 11 5 179 106-111	-2 10 6 209 233-66
-2 10 1 67 183-66	1 11 2 1756 1701 18	3 17 3 267 270 51	-1 11 5 56 2-55	-5 11 6 116 90-116
0 10 1 498 468 7	-2 12 2 2110 2069 86	-6 18 3 253 307 68	1 11 5 242 189 28	-3 11 6 1250 1338

118

2 10 1 508 491 10	0 12 2 869 885 19	-4 18 3 308 269 58	-6 12 5 134 119-133	-1 11 6 194 175-139
4 10 1 224 134 42	0 14 2 581 561 20	-2 18 3 1077 1061 29	-4 12 5 137 178-74	-4 12 6 297 342 79
-1 11 1 258 180 24	4 14 2 53 25-52	2 18 3 279 217 38	0 12 5 55 115-54	-2 12 6 519 382 49
1 11 1 115 100 28	5 15 2 58 286-58	4 18 3 490 526 76	2 12 5 276 272 47	-4 0 7 61 64-61
3 11 1 190 194 36	2 16 2 204 143-103	3 19 3 180 89-179	-7 13 5 58 105-57	-3 1 7 56 106-56
5 11 1 322 373-202	5 17 2 225 93-76	-4 0 4 1963 1919 34	-5 13 5 234 276-116	

Table 5-12. Observed and calculated structure factors for DL5 at 5.42 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s
1 3 0 217 243 3	-1 13 1 603 608 11	3 19 2 109 70-108	-2 0 4 287 276 10	-6 12 5 120 118-120
0 4 0 708 768 2	1 13 1 714 808 12	5 19 2 487 467 44	0 0 4 1429 1406 13	-4 12 5 191 194-39
2 4 0 1301 1244 13	-1 15 1 126 148-126	2 20 2 478 414 71	2 0 4 2499 2128 42	-2 12 5 174 214-63
1 5 0 204 181 4	1 15 1 618 622 13	4 20 2 266 372-122	-3 1 4 577 577 8	0 12 5 45 101-45
3 5 0 871 783 25	6 16 1 159 187-73	-4 0 3 134 144 21	-1 1 4 1513 1443 5	2 12 5 322 297 18
0 6 0 246 178 7	5 17 1 390 360 29	-2 0 3 17 81-17	-6 2 4 102 77-102	-7 13 5 64 90-64
2 6 0 88 24 6	7 17 1 730 724 25	0 0 3 358 360 7	-4 2 4 172 158-36	-5 13 5 326 271 28
1 7 0 207 174 7	4 18 1 1100 1120 27	2 0 3 65 277-64	-2 2 4 194 149 10	-3 13 5 222 285-56
3 7 0 618 603-265	6 18 1 809 726 34	-5 1 3 128 150-127	0 2 4 124 71-46	-1 13 5 131 128-131
0 8 0 43 43-42	-5 19 1 59 74-59	-3 1 3 278 298 5	2 2 4 298 292 30	1 13 5 341 337 24
2 8 0 306 270-57	3 19 1 94 129-93	-1 1 3 402 350 12	-3 3 4 872 869 14	-6 14 5 394 303-91
4 8 0 1202 1124 27	5 19 1 169 166-45	1 1 3 215 217 12	-1 3 4 839 872 7	-2 14 5 274 272-80
3 9 0 622 631 6	-2 20 1 364 200 60	-4 2 3 77 51-25	-2 4 4 217 174 14	0 14 5 991 890 62
5 9 0 70 50-69	2 20 1 458 405 22	-2 2 3 93 75 7	-5 5 4 303 225-63	2 14 5 187 113-67
2 10 0 407 401 8	4 20 1 69 207-69	0 2 3 1155 1120 5	1 5 4 117 132-67	-5 15 5 45 19-44
1 11 0 1503 1516 6	-2 0 2 3188 3136 18	-3 3 3 58 18-35	0 6 4 51 127-50	-1 15 5 94 155-93
0 12 0 2618 2635 29	0 0 2 823 708 3	-1 3 3 1161 1129 3	-3 7 4 170 222-170	-6 0 6 954 730 89
4 12 0 532 555 27	-3 1 2 1331 1298 8	1 3 3 219 231 12	-1 7 4 68 107-67	-4 0 6 797 759 20
1 13 0 126 143-91	-1 1 2 316 333 3	3 3 3 152 159 26	-2 8 4 39 12-39	-2 0 6 1148 1175 12
3 13 0 171 137-55	1 1 2 487 503 7	-4 4 3 118 108 21	4 10 4 48 95-48	0 0 6 999 938 29
7 15 0 427 430 31	-2 2 2 183 196 5	-2 4 3 228 183 6	-7 11 4 778 843 111	-5 1 6 61 96-60
7 17 0 62 134-61	0 2 2 105 137 5	0 4 3 46 18-46	-5 11 4 202 830-90	-3 1 6 956 894 7
6 18 0 345 365 30	-1 3 2 80 109 6	-5 5 3 1470 1435 68	1 11 4 242 248 26	-1 1 6 161 163 23
3 19 0 289 380 52	3 3 2 560 541 21	-3 5 3 423 394 8	3 11 4 1646 1411 84	1 1 6 563 563 38
5 19 0 61 133-61	-2 4 2 928 808 15	-1 5 3 2253 2237 7	4 12 4 608 529 36	-6 2 6 61 74-61
7 19 0 670 532 33	0 4 2 465 439 5	1 5 3 143 798-45	-7 13 4 66 118-65	-4 2 6 118 139-40
2 20 0 64 17-64	-5 5 2 50 53-49	3 5 3 186 241-135	3 13 4 389 365 14	-2 2 6 64 65-64
4 20 0 654 682 46	3 5 2 54 35-53	-2 6 3 2804 2694 16	5 13 4 312 216 29	0 2 6 179 207 28
6 20 0 25 212-24	-4 6 2 96 65 10	0 6 3 485 470 13	-6 14 4 359 362 37	-5 3 6 175 161-43
0 0 1 107 114 5	2 6 2 77 92-52	2 6 3 1573 1580 15	-4 14 4 199 139-58	-3 3 6 410 417 14
-1 1 1 439 530 2	4 6 2 129 156-128	4 6 3 273 295-61	0 14 4 177 142-43	-1 3 6 436 434 17
-2 2 1 55 58-24	-3 7 2 228 199 7	-5 7 3 308 315 52	2 14 4 20 62-19	-6 4 6 49 43-49
0 2 1 182 199 4	1 7 2 286 245 7	-6 8 3 135 228-134	4 14 4 465 419 23	-4 4 6 228 249 30
2 2 1 1627 1415 48	-6 8 2 616 675 25	-4 8 3 115 64-36	-5 15 4 48 61-47	-2 4 6 128 129-31

-3 3 1 1526 1321 67	-4 8 2 911 880 12	0 8 3 259 250 22	-3 15 4 469 455 66	0 4 6 58 55 -58
1 3 1 1497 1451 7	-2 8 2 1028 1023 5	-3 9 3 717 674 14	-1 15 4 249 311 -50	2 4 6 454 425 36
-2 4 1 62 16 -17	0 8 2 174 150 7	-1 9 3 645 681 10	1 15 4 308 285 33	-7 5 6 202 117 -180
0 4 1 209 168 5	2 8 2 35 49 -34	-2 10 3 45 118 -44	-6 16 4 202 222 -129	-5 5 6 135 154 -43
2 4 1 56 30 -23	4 8 2 375 326 28	2 10 3 780 761 14	-4 16 4 214 232 -48	-3 5 6 135 127 -37
-3 5 1 2012 2067 24	-5 9 2 970 882 37	-7 11 3 191 225 -191	2 16 4 51 67 -50	-1 5 6 107 61 -46
-1 5 1 357 292 4	-3 9 2 717 700 9	-2 12 3 331 245 20	-1 17 4 127 113 -126	1 5 6 265 275 23
1 5 1 2398 2375 17	-1 9 2 105 76 15	5 13 3 58 36 -58	1 17 4 139 84 -139	-6 6 6 169 16 -86
-2 6 1 300 229 8	1 9 2 1039 1038 7	4 14 3 118 11 -83	2 18 4 65 195 -64	-4 6 6 134 120 -60
0 6 1 2268 2243 15	3 9 2 222 178 17	6 14 3 517 567 28	1 1 5 80 93 -80	-2 6 6 127 117 -39
4 6 1 2709 2409 157	-6 10 2 528 627 29	-7 15 3 58 72 -57	-6 2 5 296 338 -94	-5 7 6 474 453 31
-5 7 1 305 292 24	-4 10 2 415 340 17	-1 15 3 231 259 -89	-5 5 5 511 461 40	-3 7 6 156 175 -32
-1 7 1 1028 1003 6	0 10 2 59 219 -58	3 15 3 42 34 -42	3 5 5 1438 1226 96	-1 7 6 232 214 17
3 7 1 273 299 35	2 10 2 492 484 11	5 15 3 318 333 34	-4 6 5 1829 1880 68	1 7 6 222 177 26
-4 8 1 202 195 9	4 10 2 422 456 25	-6 16 3 424 394 52	2 6 5 386 392 41	-6 8 6 569 539 35
0 8 1 47 90 -47	-3 11 2 1224 1261 12	2 16 3 704 672 17	-7 7 5 496 602 52	-4 8 6 57 145 -57
4 8 1 123 145 -77	1 11 2 1765 1725 11	4 16 3 159 183 -45	-3 7 5 213 112 -107	-2 8 6 265 297 20
-3 9 1 606 563 7	-2 12 2 2050 2052 14	-7 17 3 473 449 44	3 7 5 484 483 28	0 8 6 399 393 18
1 9 1 25 189 -24	0 12 2 848 852 10	-1 17 3 854 935 28	-6 8 5 128 103 -61	-7 9 6 342 424 -74
3 9 1 99 29 -25	0 14 2 531 551 13	1 17 3 524 453 28	2 8 5 136 53 -52	-5 9 6 56 29 -55
5 9 1 323 288 25	6 14 2 267 257 -66	3 17 3 243 265 27	-7 9 5 267 354 -67	-3 9 6 637 630 28
-2 10 1 145 116 11	-7 15 2 533 494 34	-6 18 3 239 273 -206	1 9 5 284 249 22	1 9 6 98 169 -97
0 10 1 533 503 9	3 15 2 290 383 30	-4 18 3 353 261 -87	3 9 5 207 236 -52	-6 10 6 353 378 57
2 10 1 479 471 7	5 15 2 263 307 -49	2 18 3 265 244 -48	-6 10 5 135 262 -77	-4 10 6 229 253 -43
4 10 1 212 134 -211	-6 16 2 329 399 -226	4 18 3 480 504 -203	-4 10 5 61 90 -61	-2 10 6 265 234 32
-1 11 1 242 229 19	-4 16 2 118 255 -117	-5 19 3 226 199 -58	0 10 5 290 219 26	0 10 6 250 258 -51
1 11 1 102 133 12	2 16 2 249 191 29	1 19 3 131 91 -131	2 10 5 296 284 22	-5 11 6 62 64 -62
3 11 1 155 144 -50	6 16 2 155 98 -90	3 19 3 69 73 -68	4 10 5 331 203 39	-3 11 6 1386 1322 55
5 11 1 391 392 21	5 17 2 97 92 -96	-4 20 3 495 378 63	-7 11 5 206 165 -129	-1 11 6 285 196 -128
-4 12 1 379 311 24	2 18 2 146 209 -98	0 20 3 343 320 -100	-5 11 5 157 113 -68	-4 0 7 134 53 -134
2 12 1 364 356 18	4 18 2 326 289 28	2 20 3 179 128 -178	-3 11 5 207 141 -39	-3 1 7 72 106 -72
-3 13 1 119 15 -48	1 19 2 427 467 56	-4 0 4 1978 1871 24	1 11 5 216 219 23	

Table 5-13. Observed and calculated structure factors for DL5 at 5.87 GPa

Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s	h k l 10Fo 10Fc 10s
3 1 0 2678 1842 72	4 10 1 212 65 -50	8 10 2 133 385 -132	5 15 3 199 364 -198	-9 9 5 624 581 50
1 3 0 216 201 7	-9 11 1 158 203 -95	-9 11 2 982 942 97	-6 0 4 293 216 40	-7 9 5 366 361 48
3 3 0 1008 904 19	3 11 1 97 184 -96	7 11 2 434 365 -107	-4 0 4 2091 1818 28	1 9 5 285 238 -62
2 4 0 1345 1201 13	5 11 1 275 464 -69	-10 12 2 305 350 -56	-2 0 4 374 341 15	3 9 5 306 242 -63
6 4 0 86 290 -86	8 12 1 188 179 -170	8 12 2 177 564 -176	0 0 4 1498 1396 88	-8 10 5 151 159 -86
1 5 0 158 148 13	9 13 1 358 226 -84	-9 13 2 54 105 -53	2 0 4 2525 2063 144	-6 10 5 253 321 -253
3 5 0 871 785 19	8 14 1 259 311 -102	-10 14 2 116 182 -116	-3 1 4 640 584 8	0 10 5 58 156 -58
5 5 0 206 184 21	-7 15 1 199 235 -86	-8 14 2 369 379 48	-1 1 4 1649 1454 12	2 10 5 304 355 45
2 6 0 69 72 -69	7 15 1 336 461 -68	6 14 2 331 181 56	-6 2 4 44 60 -43	-7 11 5 208 154 -95
3 7 0 282 464 11	6 16 1 292 165 -81	-7 15 2 530 455 38	-2 2 4 182 140 19	1 11 5 54 192 -53
5 7 0 652 580 15	7 17 1 307 686 -74	5 15 2 222 316 -87	0 2 4 110 116 -110	-8 12 5 322 145 -73
2 8 0 36 348 -36	-4 0 2 2318 2076 24	7 15 2 293 306 -77	2 2 4 204 275 -54	2 12 5 60 261 -60
4 8 0 1163 1090 65	-2 0 2 3545 3104 10	-4 0 3 103 133 -20	-3 3 4 882 853 11	-6 0 6 810 710 44
6 8 0 317 332 35	0 0 2 889 759 5	0 0 3 412 368 10	-1 3 4 895 837 18	-4 0 6 887 771 11
3 9 0 622 663 52	2 0 2 2851 2296 129	2 0 3 188 301 -132	-2 4 4 197 153 20	-2 0 6 1254 1117 35
5 9 0 73 101 -73	-5 1 2 1070 972 36	-5 1 3 54 177 -53	-5 5 4 357 253 18	0 0 6 1112 963 72

9	11	0	67	449	-66	-3	1	2	1376	1330	6	-3	1	3	309	296	8	-10	6	4	55	84	-55	-5	1	6	109	103	-109
10	12	0	363	911	-93	-1	1	2	353	345	5	-1	1	3	423	324	9	-9	7	4	225	175	-71	-3	1	6	1025	920	9
8	14	0	321	202	-60	1	1	2	511	549	8	1	1	3	234	160	18	-1	7	4	60	49	-59	-1	1	6	145	169	-71
7	15	0	312	329	50	3	1	2	452	346	54	3	1	3	58	108	-58	5	7	4	206	280	-138	-8	2	6	55	15	-55
9	15	0	257	226	-95	-6	2	2	72	182	-71	-6	2	3	478	358	15	-10	8	4	190	167	-190	-6	2	6	56	114	-55
-3	1	1	412	351	11	-2	2	2	166	185	10	-4	2	3	36	50	-36	6	8	4	638	593	42	-4	2	6	147	146	-93
-1	1	1	463	512	1	0	2	2	100	103	12	-2	2	3	88	78	-25	-9	9	4	54	166	-54	-2	2	6	62	99	-61
3	1	1	66	51	-65	4	2	2	350	348	16	0	2	3	1240	1115	19	5	9	4	67	173	-67	0	2	6	157	190	-65
-6	2	1	284	252	-56	-7	3	2	600	510	74	-1	3	3	1214	1129	15	-10	10	4	208	154	-158	-5	3	6	252	157	27
-4	2	1	1358	1207	20	-1	3	2	63	98	-16	1	3	3	281	231	20	-8	10	4	598	531	17	-3	3	6	431	430	23
-2	2	1	92	78	-32	3	3	2	647	577	14	3	3	3	193	145	-55	4	10	4	126	35	-126	-1	3	6	608	452	29
0	2	1	202	196	7	5	3	2	1148	931	118	-2	4	3	193	178	11	6	10	4	546	300	49	1	3	6	78	112	-78
2	2	1	1645	1422	18	-8	4	2	722	655	66	0	4	3	35	39	-35	-9	11	4	548	474	96	-8	4	6	465	333	76
-7	3	1	458	366	42	-2	4	2	938	809	27	-9	5	3	1472	1161	20	-7	11	4	850	863	43	-4	4	6	261	258	33
-3	3	1	1466	1352	21	0	4	2	314	479	-160	-7	5	3	49	99	-48	3	11	4	1416	1341	207	-2	4	6	135	143	-135
1	3	1	1572	1406	8	-7	5	2	333	280	25	-5	5	3	1476	1381	10	5	11	4	289	266	45	0	4	6	61	119	-60
5	3	1	107	259	-45	-5	5	2	33	103	-32	-3	5	3	448	379	9	2	12	4	116	1018	-116	2	4	6	476	463	44
-6	4	1	42	84	-42	5	5	2	492	476	42	-1	5	3	2396	2220	63	4	12	4	596	500	84	-7	5	6	221	125	-101
-2	4	1	102	77	9	-6	6	2	42	71	-42	3	5	3	229	154	-59	3	13	4	349	334	38	-5	5	6	60	108	-59
0	4	1	169	135	10	-4	6	2	106	14	-27	-2	6	3	3373	2733	80	5	13	4	265	199	-60	-3	5	6	174	113	-56
-7	5	1	1682	1522	183	2	6	2	144	122	14	2	6	3	1696	1609	58	4	14	4	192	393	-130	-1	5	6	63	50	-63
-5	5	1	515	447	19	4	6	2	120	175	-65	4	6	3	284	187	51	1	15	67	138	-66	1	5	6	295	227	35	
-3	5	1	2170	2018	14	-3	7	2	199	168	16	-5	7	3	389	334	24	-6	2	5	396	358	61	-8	6	6	58	6	-57
1	5	1	2515	2335	57	1	7	2	233	255	13	0	8	3	156	176	26	-9	3	5	77	145	-76	-7	7	6	60	5	-60
3	5	1	390	1502	28	-10	8	2	64	131	-64	-11	9	3	56	139	-55	3	3	5	700	639	44	-5	7	6	464	461	-104
5	5	1	1345	1088	65	-6	8	2	626	647	75	-9	9	3	44	147	-43	-8	4	5	55	100	-55	-1	7	6	230	191	40
7	5	1	861	671	66	-4	8	2	928	929	18	-3	9	3	708	668	18	-9	5	5	58	271	-57	1	7	6	283	153	31
-2	6	1	282	229	15	0	8	2	37	138	-36	7	9	3	160	369	-160	-5	5	5	582	493	28	-6	8	6	623	529	48
4	6	1	2696	2397	56	8	8	2	423	477	35	-10	10	3	53	168	-53	3	5	5	1453	1235	76	0	8	6	434	388	39
6	6	1	760	634	18	-5	9	2	972	895	8	2	10	3	796	719	41	-10	6	5	859	706	-185	-7	9	6	547	431	56
-5	7	1	354	292	24	-3	9	2	696	678	15	6	10	3	66	216	-65	-8	6	5	524	490	42	1	9	6	86	203	-85
3	7	1	396	270	23	1	9	2	1301	1078	85	-9	11	3	226	182	-93	-4	6	5	1911	1879	15	-6	10	6	480	298	61
5	7	1	384	351	20	3	9	2	219	185	-54	7	11	3	68	91	-67	2	6	5	497	415	17	0	10	6	374	216	62
-4	8	1	217	235	17	-10	10	2	62	275	-62	-10	12	3	297	143	-54	-9	7	5	543	480	42	-3	1	7	58	79	-58
-7	9	1	185	79	-71	-6	10	2	39	555	-38	-8	12	3	221	204	-93	-7	7	5	612	618	19						
-3	9	1	553	535	95	-4	10	2	410	317	-158	7	13	3	272	381	-71	3	7	5	587	511	24						
3	9	1	38	15	-37	2	10	2	435	444	10	6	14	3	573	556	99	-6	8	5	51	9	-50						
9	9	1	361	505	-119	4	10	2	239	409	-48	-9	15	3	249	199	-116	2	8	5	57	51	-57						