

Table 1. Observed and calculated structure factors for Ilmaussite

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s
1	1	0	96	102	1	7	13	1	0	14	1	13	8	3	76	128	35	9	14	4	111	30	111	7	8	6	140	123	5
1	2	0	59	119	1	4	13	1	77	73	45	10	8	3	529	496	5	6	14	4	0	11	1	4	8	6	144	124	10
2	2	0	1018	1189	8	3	14	1	84	48	64	7	8	3	310	302	4	2	2	5	16	62	5	1	8	6	138	127	13
3	3	0	1623	1419	25	4	14	1	87	63	87	4	8	3	1072	859	6	1	2	5	99	87	2	2	8	6	154	135	54
2	4	0	1026	1156	13	2	2	2	287	381	3	1	8	3	310	304	5	4	3	5	77	76	9	5	8	6	18	44	18
1	4	0	380	403	2	1	2	2	238	204	28	2	8	3	541	494	25	1	3	5	99	87	3	12	9	6	199	193	11
4	4	0	704	712	8	4	3	2	205	215	30	5	8	3	128	129	27	2	3	5	87	88	3	9	9	6	338	284	5
1	5	0	391	401	5	1	3	2	248	207	35	12	9	3	42	30	42	6	4	5	143	160	14	6	9	6	444	384	5
2	5	0	134	183	5	2	3	2	193	162	18	9	9	3	79	30	14	3	4	5	77	77	3	3	9	6	483	371	5
4	5	0	194	218	7	6	4	2	336	233	7	6	9	3	90	49	30	0	4	5	240	166	4	0	9	6	335	304	4
3	6	0	1690	1434	27	3	4	2	183	216	34	3	9	3	60	51	15	3	4	5	94	76	5	3	9	6	182	193	12
3	6	0	841	835	6	0	4	2	101	67	2	0	9	3	54	6	25	8	5	5	52	57	51	11	10	6	25	22	25
6	6	0	982	872	11	3	4	2	179	200	10	3	9	3	74	25	74	5	5	5	41	31	8	8	10	6	75	61	26
2	7	0	132	180	11	8	5	2	68	31	8	11	10	3	153	150	11	2	5	5	92	86	2	5	10	6	0	33	1
1	7	0	94	42	13	5	5	2	109	137	17	8	10	3	540	501	37	1	5	5	108	97	7	2	10	6	103	67	11
4	7	0	137	150	14	2	5	2	186	162	19	5	10	3	208	223	5	4	5	5	99	111	11	1	10	6	67	12	66
7	7	0	65	15	14	1	5	2	174	192	9	2	10	3	546	499	8	10	6	5	54	51	24	13	11	6	78	14	77
4	8	0	731	734	8	4	5	2	109	75	7	1	10	3	155	149	14	1	6	5	102	78	14	10	11	6	0	21	1
1	8	0	46	39	45	10	6	2	131	130	9	13	11	3	0	194	1	4	6	5	144	159	15	7	11	6	0	21	1
2	8	0	371	428	6	7	6	2	107	112	25	10	11	3	146	143	31	1	6	5	108	101	9	4	11	6	0	30	1
5	8	0	56	54	56	4	6	2	340	238	13	7	11	3	169	185	8	2	6	5	115	135	12	1	11	6	0	10	1
3	9	0	842	827	6	1	6	2	174	196	4	4	11	3	155	177	9	5	6	5	70	47	56	2	11	6	62	7	61
0	9	0	295	703	6	2	8	2	260	175	48	1	11	3	176	145	16	12	7	5	57	66	48	12	12	6	155	138	22
3	9	0	499	414	7	5	6	2	57	74	29	2	11	3	137	98	37	9	7	5	107	72	11	9	12	6	216	193	17
5	10	0	136	225	8	12	7	2	0	85	1	12	12	3	0	30	1	6	7	5	76	83	5	6	12	6	264	325	19
2	10	0	166	419	6	9	7	2	185	161	12	9	12	3	0	29	1	3	7	5	111	76	13	3	12	6	195	193	12
1	10	0	119	159	19	6	7	2	103	107	7	6	12	3	0	47	1	0	7	5	37	32	24	0	12	6	146	139	26
4	11	0	128	147	17	3	7	2	178	197	7	3	12	3	0	25	1	3	7	5	34	42	34	11	13	6	104	14	50
1	11	0	148	156	16	0	7	2	88	93	7	0	12	3	0	41	1	6	7	5	0	39	1	8	13	6	51	37	50
3	11	0	0	49	1	3	7	2	97	75	23	11	13	3	95	100	64	14	8	5	66	28	66	5	13	6	0	45	1
6	12	0	980	868	13	6	7	2	52	31	51	8	13	3	118	127	21	11	8	5	56	28	56	2	13	6	0	1	1
3	12	0	504	422	13	14	8	2	0	47	1	5	13	3	132	127	17	8	8	5	33	22	32	7	14	6	117	35	39
0	12	0	656	594	10	11	8	2	26	30	25	2	13	3	105	94	37	5	8	5	62	54	9	3	2	7	99	91	2
5	13	0	0	49	1	8	8	2	81	63	10	7	14	3	123	119	27	2	8	5	109	133	15	0	2	7	156	128	5
2	13	0	0	49	1	5	8	2	70	92	13	3	2	4	127	113	1	1	8	5	80	93	11	5	3	7	62	52	4
7	14	0	0	33	1	2	8	2	282	183	82	0	2	4	130	156	1	4	8	5	62	76	38	2	3	7	91	95	2
-3	2	1	272	239	43	1	8	2	109	103	9	5	3	4	99	90	2	13	9	5	60	31	59	1	3	7	76	69	3
0	2	1	404	442	4	4	8	2	102	87	17	2	3	4	125	110	1	10	9	5	68	65	48	7	4	7	74	67	5
-5	3	1	247	189	26	13	9	2	71	74	48	1	3	4	108	110	12	7	9	5	70	73	17	4	4	7	227	299	13
2	3	1	280	247	50	10	9	2	106	85	18	7	4	4	127	113	11	4	9	5	93	108	7	1	4	7	73	62	3
1	3	1	226	241	42	7	9	2	176	165	17	4	4	4	205	128	3	1	9	5	84	95	30	2	4	7	166	169	26
-7	4	1	222	191	37	4	9	2	92	81	8	1	4	4	106	113	5	2	9	5	74	57	18	9	5	7	79	64	12
4	4	1	81	40	9	1	9	2	94	103	16	2	4	4	167	189	16	5	9	5	168	42	42	6	5	7	79	66	14
1	4	1	233	237	35	2	9	2	58	47	58	9	5	4	81	86	11	12	10	5	60	50	60	3	5	7	53	44	4
2	4	1	329	271	42	5	9	2	0	32	1	6	5	4	129	103	6	9	10	5	67	67	25	0	5	7	0	7	1
-9	5	1	111	106	8	12	10	2	104	110	24	3	5	4	99	93	3	6	10	5	60	55	15	3	5	7	18	34	18
6	5	1	201	224	14	9	10	2	95	81	15	0	5	4	38	59	13	3	10	5	22	46	22	11	6	7	32	39	21
3	5	1	245	185	27	6	10	2	132	124	11	3	5	4	10	52	9	0	10	5	32	46	31	8	6	7	72	78	10
0	5	1	142	161	2	3	10	2	89	73	11	11	6	4	65	42	23	3	10	5	77	43	77	5	6	7	77	73	4
3	5	1	109	126	11	0	10	2	95	75	16	8	6	4	135	131	6	11	11	5	54	27	54	2	6	7	165	171	28
11	6	1	95	106	16	3	10	2	101	58	41	5	6	4	117	105	8	8	11	5	0	25	1	1	6	7	87	64	7
8	6	1	264	209	33	8	11	2	0	39	1	2	6	4	152	183	14	5	11	5	24	43	23	4	6	7	105	99	10
5	6	1	189	229	4	11	11	2	19	28	19	1	6	4	89	84	5	2	11	5	65	56	46	13	7	7	62	23	61
-2	6	1	310	245	38	5	11	2	68	71	20	4	6	4	100	74	10	1	11	5	0	54	1	10	7	7	35	34	34
1	6	1	131	113	4	2	11	2	0	39	1	13	7	4	65	49	51	10	12	5	82	51	33	7	7	7	0	14	1
4	6	1	143	137	8	1	11	2	54	69	54	10	7	4	74	49	23	7	12	5	94	66	20	4	7	7	56	64	9
13	7	1	49	16	48	10	12	2	88	114	28	7	7	4	50	64	49	4	12	5	50	76	49	1	7	7	91	60	5
10	7	1	20	66	19	7	12	2	85	89	52	4	7	4	131	114	3	1	12	5	0	57	1	2	7	7	70	55	16
7	7	1	62	65	10	4	12	2	101	90	21	1	7	4	83	92	4	9	13	5	24	33	23						

Table 1. Observed and calculated structure factors for  $111299$ 

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s
0	1	8	15	42	15	4	8	9	548	483	4	2	2	11	254	269	3	5	8	12	63	55	63	6	4	14	54	46	7
2	2	8	103	240	2	1	8	9	114	125	9	1	2	11	104	72	5	12	9	12	376	356	18	3	4	14	230	289	26
1	2	8	80	78	4	2	8	9	344	309	5	4	3	11	61	92	4	9	9	12	603	527	16	0	4	14	435	257	4
4	3	8	84	67	2	5	8	9	55	67	54	1	3	11	107	76	3	6	9	12	788	680	6	3	4	14	233	206	4
1	3	8	82	81	2	10	9	9	0	49	1	2	3	11	92	86	7	3	9	12	798	685	14	8	5	14	61	66	10
2	3	8	47	41	5	9	9	9	32	25	31	6	4	11	204	186	3	0	9	12	615	532	17	5	9	14	164	100	3
6	4	8	198	178	16	6	9	9	65	61	15	3	4	11	70	81	4	3	9	12	383	358	10	2	5	14	211	162	3
8	4	8	82	62	2	3	9	9	50	64	19	0	4	11	93	77	3	11	10	12	0	43	1	1	5	14	131	122	4
0	4	8	886	295	4	0	9	9	32	20	32	3	4	11	50	42	17	8	10	12	95	103	14	4	5	14	215	167	30
3	4	8	77	98	5	3	9	9	23	51	23	8	5	11	42	57	15	5	10	12	56	66	19	10	6	14	95	78	18
8	5	8	13	33	12	11	10	9	0	43	1	5	5	11	45	48	16	3	10	12	69	96	23	7	6	14	277	249	12
5	5	8	0	12	1	8	10	9	332	212	5	2	5	11	85	82	5	1	10	12	0	39	1	4	6	14	56	71	7
1	5	8	56	42	6	5	10	9	31	51	30	1	5	11	75	90	5	13	11	12	55	56	54	1	6	14	129	122	3
2	5	8	45	32	18	2	10	9	328	310	7	4	5	11	138	123	7	10	11	12	0	50	1	2	6	14	96	78	7
4	5	8	63	32	15	1	10	9	23	37	22	10	6	11	77	88	18	7	11	12	38	64	38	5	6	14	70	28	30
10	6	8	95	121	13	13	11	9	63	48	62	7	6	11	90	96	6	4	11	12	77	68	21	12	7	14	0	75	1
7	6	8	72	55	8	10	11	9	0	37	1	4	6	11	214	194	3	1	11	12	65	47	65	9	7	14	127	96	8
4	6	8	191	179	26	7	11	9	96	61	13	1	6	11	66	94	5	2	11	12	81	55	81	6	7	14	298	244	14
1	6	8	62	35	9	4	11	9	52	62	52	2	6	11	139	137	5	12	12	12	35	75	35	3	7	14	222	207	17
2	6	8	97	75	7	1	11	9	0	30	1	5	6	11	42	33	41	9	12	12	388	353	7	0	7	14	376	260	25
5	6	8	0	6	1	2	11	9	0	50	1	12	7	11	61	86	61	6	12	12	174	156	16	3	7	14	167	172	26
12	7	8	55	23	54	12	12	9	0	3	1	9	7	11	117	81	15	3	12	12	367	355	21	6	7	14	98	124	34
9	7	8	96	59	9	9	12	9	0	47	1	6	7	11	105	97	9	0	12	12	0	77	1	14	8	14	107	36	40
6	7	8	87	52	5	6	12	9	49	11	48	3	7	11	50	42	16	11	13	12	0	53	1	11	8	14	12	32	11
3	7	8	82	94	6	3	12	9	64	49	64	0	7	11	75	36	19	8	13	12	45	54	45	8	8	14	50	31	22
0	7	8	39	40	39	0	12	9	91	14	20	3	7	11	41	21	40	5	13	12	0	53	1	5	8	14	74	64	11
3	7	8	77	63	19	11	13	9	0	47	1	6	7	11	59	41	59	2	13	12	0	53	1	2	8	14	93	74	13
6	7	8	21	24	20	8	13	9	85	63	84	14	8	11	0	28	1	1	1	13	330	289	6	1	8	14	83	59	14
14	8	8	0	8	1	5	13	9	64	65	64	11	8	11	91	43	17	3	2	13	209	186	3	4	8	14	68	18	47
11	8	8	72	39	30	2	13	9	0	49	1	8	8	11	68	53	13	0	2	13	211	171	2	13	9	14	71	72	50
8	8	8	36	55	36	7	14	9	109	57	75	5	8	11	58	52	14	5	3	13	138	148	19	10	9	14	129	139	13
5	8	8	0	34	1	1	1	10	74	19	3	2	8	11	137	129	12	2	3	13	212	186	8	7	9	14	116	98	9
2	8	8	65	73	11	3	2	10	86	66	7	1	8	11	82	88	21	1	3	13	193	238	18	4	9	14	200	170	6
1	8	8	67	9	15	0	2	10	442	297	4	4	8	11	0	64	1	7	4	13	174	169	5	1	9	14	82	64	47
4	8	8	19	39	18	5	3	10	69	57	6	13	9	11	0	37	1	4	4	13	239	218	4	2	9	14	51	69	50
13	9	8	0	54	1	2	3	10	78	66	2	10	9	11	72	65	30	1	4	13	201	235	20	12	10	14	21	33	20
10	9	8	37	47	37	1	3	10	56	79	5	7	9	11	79	85	11	2	4	13	77	69	8	9	10	14	135	136	11
7	9	8	53	61	20	7	4	10	46	52	10	4	9	11	139	122	9	9	5	13	194	154	6	6	10	14	68	78	17
4	9	8	55	37	14	4	4	10	237	187	7	1	9	11	105	92	14	6	5	13	104	101	19	3	10	14	163	171	8
1	9	8	0	9	1	1	4	10	79	83	5	2	9	11	48	76	47	3	5	13	157	143	24	0	10	14	135	86	36
2	9	8	98	26	23	2	4	10	192	199	16	5	9	11	0	37	1	0	5	13	121	91	3	3	10	14	62	74	62
5	9	8	76	18	75	9	5	10	119	114	10	12	10	11	103	55	28	3	5	13	65	67	10	11	11	14	0	12	1
12	10	8	45	54	45	6	5	10	69	82	7	9	10	11	90	68	21	11	6	13	0	10	1	8	11	14	47	33	47
9	10	8	58	43	30	3	5	10	67	54	4	6	10	11	70	85	17	8	6	13	112	112	23	5	11	14	78	35	19
6	10	8	101	121	39	0	5	10	37	32	10	3	10	11	56	23	27	5	6	13	107	109	5	2	11	14	80	69	28
3	10	8	83	63	16	3	5	10	51	52	12	0	10	11	39	55	39	2	6	13	74	88	5	1	11	14	52	38	51
0	10	8	96	89	19	11	6	10	0	37	1	3	10	11	66	27	66	1	6	13	223	215	19	10	12	14	77	27	30
3	10	8	0	49	1	8	6	10	128	141	6	11	11	11	0	8	1	4	6	13	45	48	44	7	12	14	85	76	22
11	11	8	0	3	1	5	6	10	85	81	5	8	11	11	34	42	34	13	7	13	78	102	38	4	12	14	54	14	54
8	11	8	35	40	35	2	6	10	198	205	18	5	11	11	45	27	45	10	7	13	87	139	67	1	12	14	0	34	1
5	11	8	0	5	1	1	6	10	68	56	7	2	11	11	89	76	24	7	7	13	231	230	28	9	13	14	0	71	1
2	11	8	0	28	1	4	6	10	111	112	10	1	11	11	0	32	1	4	7	13	157	169	4	6	13	14	120	121	47
1	11	8	57	8	57	13	7	10	55	21	55	10	12	11	71	60	71	1	7	13	221	209	4	3	13	14	95	73	94
10	12	8	75	55	38	10	7	10	55	35	25	7	12	11	74	66	24	2	7	13	94	96	11	0	0	15	40	44	3
7	12	8	106	25	15	7	7	10	48	23	21	4	12	11	75	70	28	5	7	13	78	62	32	2	2	15	1619	1595	19
4	12	8	63	40	37	4	7	10	41	54	18	1	12	11	53	35	52	12	8	13	70	9	69	3	3	15	0	65	1
1	12	8	0	10	1	1	7	10	78	60	26	9	13	11	38	36	38	9	8	13	99	68	15	0	3	15	0	59	1
9	13	8	60	52	59	2	7	10	74	76	15	6	13	11	0	44	1	6	8	13	106	105	24	3	3	15	85	120	6
6	13	8	0	21	1	5	7	10	58	58	54	3	13	11	0</														

Table 1. Observed and calculated structure factors for ill1299

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s
11	10	15	362	391	8	4	5	17	198	168	19	10	11	18	193	193	26	9	7	20	98	25	26	1	1	22	153	118	7
8	10	18	382	411	6	-10	6	17	91	74	25	-7	11	18	226	251	7	-6	7	20	0	3	1	-3	2	22	100	73	3
5	10	15	666	578	9	7	6	17	190	197	6	-4	11	18	242	254	11	-3	7	20	40	38	20	0	2	22	66	91	12
2	10	15	378	410	6	4	6	17	98	76	4	1	11	18	195	202	13	0	7	20	75	64	21	5	3	22	110	105	5
1	10	15	369	388	15	1	6	17	153	188	34	3	11	18	98	146	97	3	7	20	84	37	14	2	3	22	86	72	3
13	11	15	291	293	25	2	6	17	91	86	8	-12	12	18	0	45	1	6	7	20	88	40	26	1	3	22	112	101	6
10	11	15	363	393	7	5	6	17	102	110	30	9	12	18	117	148	16	-11	8	20	84	84	24	7	4	22	70	66	11
-7	11	15	452	503	5	-12	7	17	101	75	20	6	12	18	96	100	47	-8	8	20	188	167	13	4	4	22	217	157	4
4	11	15	498	508	14	9	7	17	96	125	46	-3	12	18	159	146	16	5	8	20	113	108	6	1	4	22	114	100	4
1	11	15	353	390	8	6	7	17	173	194	30	11	13	18	146	145	31	-2	8	20	85	116	19	2	4	22	46	76	13
5	11	15	291	292	27	3	7	17	152	158	4	8	13	18	159	162	17	1	8	20	30	72	14	9	5	22	76	48	14
12	12	15	57	5	57	0	7	17	178	180	5	-5	13	18	113	151	27	4	8	20	84	51	23	6	5	22	120	109	5
9	12	15	36	32	35	3	7	17	116	117	9	-2	13	18	191	147	32	13	9	20	87	15	51	3	5	22	142	107	18
6	12	15	0	24	1	6	7	17	97	75	23	1	1	19	207	139	6	-10	9	20	0	32	1	0	5	22	83	100	25
3	12	15	0	25	1	14	8	17	117	50	26	3	2	19	200	172	16	7	9	20	0	21	1	3	5	22	85	76	9
0	12	15	0	1	1	11	8	17	98	122	13	0	2	19	91	94	2	4	9	20	70	61	12	11	6	22	61	58	60
11	13	15	304	297	23	8	8	17	161	154	18	-5	3	19	197	189	8	1	9	20	69	68	26	8	6	22	66	67	38
8	13	15	362	350	13	5	8	17	186	193	39	-2	3	19	184	169	21	2	9	20	47	71	46	5	6	22	113	108	20
5	13	15	363	352	32	2	8	17	90	73	8	1	3	19	66	59	5	-12	10	20	59	28	58	2	6	22	48	70	10
2	13	15	300	295	32	1	8	17	121	130	11	-7	4	19	59	20	10	9	10	20	59	21	44	1	6	22	73	58	9
1	1	16	319	396	9	4	8	17	103	58	17	-4	4	19	251	241	4	6	10	20	0	30	1	4	6	22	34	26	33
3	2	16	318	319	72	13	9	17	0	61	1	-1	4	19	35	64	10	3	10	20	70	33	33	13	7	22	62	40	51
0	2	16	62	32	4	10	9	17	96	90	17	2	4	19	69	69	8	0	10	20	0	14	1	-10	7	22	18	24	17
5	3	16	251	231	48	-7	9	17	167	117	16	-9	5	19	89	92	14	3	10	20	49	27	49	-7	7	22	97	70	9
2	3	16	292	317	67	-4	9	17	185	167	16	-6	5	19	98	110	5	-11	11	20	53	91	52	4	7	22	94	67	10
1	3	16	297	288	42	-1	9	17	156	130	19	-3	5	19	203	187	9	8	11	20	43	64	42	1	7	22	61	62	12
7	4	16	209	195	28	2	9	17	126	112	16	0	5	19	192	230	17	5	11	20	118	104	29	2	7	22	24	28	23
4	4	16	607	371	16	12	10	17	47	64	46	3	5	19	163	153	4	-2	11	20	103	73	21	5	7	22	82	55	21
1	4	16	265	289	50	9	10	17	71	94	24	-11	6	19	140	112	35	1	11	20	65	51	64	12	8	22	40	52	40
2	4	16	108	72	8	-6	10	17	60	82	21	-8	6	19	132	135	6	10	12	20	40	26	39	9	8	22	52	30	34
9	5	16	167	177	13	-3	10	17	91	120	15	5	6	19	102	110	5	7	12	20	0	16	1	-6	8	22	56	72	21
6	5	16	194	195	3	0	10	17	0	58	1	-2	6	19	59	75	7	4	12	20	60	48	60	-3	8	22	91	73	9
-3	5	16	269	231	70	3	10	17	0	46	1	1	6	19	76	44	7	1	12	20	102	51	102	0	8	22	54	23	34
0	5	16	387	235	13	11	11	17	101	87	28	4	6	19	0	24	1	9	13	20	0	13	1	3	8	22	44	67	44
3	5	16	144	158	6	-8	11	17	121	123	13	-13	7	19	0	29	1	-6	13	20	54	40	54	-11	9	22	62	50	55
-11	6	16	133	89	25	5	11	17	124	111	11	-10	7	19	5	37	5	3	13	20	107	29	106	-8	9	22	0	30	1
-8	6	16	62	65	22	-2	11	17	104	114	22	-7	7	19	32	19	32	0	0	21	19	70	19	-5	9	22	55	48	16
-5	6	16	174	193	4	-1	11	17	47	54	47	-4	7	19	30	17	30	1	1	21	245	316	13	-2	9	22	62	29	21
-2	6	16	100	80	10	-10	12	17	0	55	1	-1	7	19	45	45	19	1	2	21	250	309	2	1	9	22	0	33	1
1	6	16	246	235	22	-7	12	17	35	72	34	2	7	19	0	23	1	2	2	21	300	283	3	4	9	22	77	9	61
4	6	16	127	105	13	-4	12	17	87	55	25	5	7	19	82	27	24	3	3	21	24	18	16	-13	10	22	0	23	1
13	7	16	78	98	78	-1	12	17	0	52	1	-12	8	19	86	68	20	0	3	21	0	14	1	-10	10	22	79	29	24
-10	7	16	130	156	28	-9	13	17	0	65	1	-9	8	19	85	80	15	3	3	21	39	64	19	-7	10	22	0	22	1
7	7	16	329	326	13	-6	13	17	112	75	28	6	8	19	137	129	15	-5	4	21	227	211	2	-4	10	22	40	27	39
4	7	16	203	198	26	-3	13	17	0	47	1	-3	8	19	153	156	4	2	4	21	293	275	9	-1	10	22	0	34	1
1	7	16	221	235	70	0	0	18	409	145	4	0	8	19	199	208	21	1	4	21	238	218	17	2	10	22	63	31	62
2	7	16	116	130	8	1	1	18	966	1010	12	3	8	19	111	114	16	4	4	21	279	204	9	-12	11	22	0	50	1
5	7	16	110	81	22	2	2	18	964	1013	14	-11	9	19	71	89	34	-7	5	21	181	178	8	9	11	22	68	49	27
12	8	16	70	63	27	1	2	18	964	848	8	8	9	19	85	75	13	4	5	21	222	211	3	-6	11	22	74	58	28
-9	8	16	144	113	9	-3	3	18	618	541	4	5	9	19	100	89	20	-1	5	21	243	218	2	-3	11	22	0	68	1
-6	8	16	87	52	8	0	3	18	607	528	4	-2	9	19	46	17	33	2	5	21	204	174	7	0	11	22	0	46	1
-3	8	16	139	158	14	3	3	18	424	398	3	1	9	19	0	26	1	5	5	21	80	98	14	-11	12	22	0	50	1
0	8	16	143	126	21	-5	4	18	688	662	5	4	9	19	91	19	38	-9	6	21	59	41	24	-8	12	22	0	49	1
3	8	16	86	96	27	-2	4	18	969	856	15	-13	10	19	117	35	53	-6	6	21	0	57	1	5	12	22	66	54	59
6	8	16	0	45	1	1	4	18	685	668	5	-10	10	19	66	8	65	-3	6	21	32	62	22	-10	13	22	0	24	1
-11	9	16	70	101	69	4	4	18	299	372	10	-7	10	19	0	36	1	0	6	21	31	63	30	7	13	22	66	42	65
-8	9	16	115	111	11	7	5	18	458	503	7	4	10	19	45	26	44	3	6	21	67	33	26	4	13	22	17	11	16
-5	9	16	197	175	5	4	5	18	682	665	8	-1	10	19															

Table 1. Observed and calculated structure factors for 111299

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s						
7	9	23	54	32	53	5	6	25	151	104	6	4	12	26	0	36	1	3	8	28	71	47	32	6	6	30	1222	1089	9
4	9	23	86	83	20	2	6	25	68	27	12	1	12	26	105	30	104	11	9	28	46	32	45	3	6	30	618	557	8
1	9	23	60	63	24	1	6	25	50	15	15	9	13	26	122	32	84	8	9	28	0	65	1	0	6	30	1226	1026	25
2	9	23	77	77	28	4	6	25	75	87	20	6	13	26	0	10	1	5	9	28	31	22	31	3	6	30	372	364	6
12	10	23	23	21	23	13	7	25	32	15	31	3	13	26	0	33	1	2	9	28	37	61	36	6	6	30	441	445	8
9	10	23	29	44	29	10	7	25	47	44	46	0	0	27	0	49	1	1	9	28	86	10	21	11	7	30	270	280	8
6	10	23	59	41	23	7	7	25	53	9	20	1	1	27	547	487	14	10	10	28	31	35	30	8	7	30	343	353	4
3	10	23	26	10	26	4	7	25	42	42	16	1	2	27	542	485	2	7	10	28	0	19	1	5	7	30	468	504	4
0	10	23	75	38	33	1	7	25	57	16	14	2	2	27	1214	994	16	4	10	28	104	52	21	2	7	30	473	504	4
3	10	23	0	26	1	2	7	25	32	22	31	3	3	27	0	46	1	1	10	28	0	8	1	1	7	30	341	360	4
11	11	23	63	38	62	5	7	25	82	30	29	0	3	27	25	60	25	2	10	28	93	45	93	4	7	30	274	284	16
8	11	23	114	91	12	12	8	25	0	13	1	3	3	27	17	61	17	12	11	28	0	39	1	10	8	30	418	461	7
5	11	23	19	52	39	9	8	25	88	83	16	5	4	27	411	392	8	9	11	28	13	31	12	7	8	30	340	353	12
2	11	23	0	78	1	6	8	25	48	54	32	2	4	27	1190	998	12	6	11	28	62	75	61	4	8	30	706	737	5
1	11	23	0	42	1	3	8	25	166	163	5	1	4	27	414	387	16	3	11	28	32	46	31	1	8	30	352	360	11
10	12	23	56	18	56	0	8	25	3	52	2	4	4	27	726	649	36	0	11	28	109	63	55	2	8	30	430	457	6
7	12	23	63	49	62	3	8	25	129	128	14	7	5	27	296	275	13	11	12	28	0	39	1	12	9	30	235	190	14
4	12	23	44	15	43	11	9	25	89	110	25	4	5	27	413	388	15	8	12	28	38	58	38	9	9	30	324	320	8
9	13	23	0	29	1	8	9	25	79	79	25	1	5	27	441	383	3	5	12	28	44	21	44	6	9	30	369	364	10
6	13	23	0	30	1	5	9	25	83	104	16	2	5	27	297	286	5	7	13	28	91	29	91	3	9	30	374	359	5
3	13	23	146	27	38	2	9	25	0	19	1	5	5	27	228	178	6	4	13	28	0	21	1	0	9	30	309	320	6
0	0	24	141	30	12	1	9	25	3	18	3	9	6	27	0	33	1	0	1	29	97	101	9	3	9	30	204	190	15
1	1	24	400	455	6	4	9	25	0	33	1	6	6	27	0	29	1	2	2	29	246	271	5	11	10	30	240	251	11
2	2	24	394	451	2	13	10	25	119	43	98	3	6	27	47	59	27	1	2	29	223	190	3	8	10	30	430	457	8
2	2	24	344	372	2	10	10	25	68	94	32	0	6	27	0	43	1	4	3	29	102	99	4	5	10	30	351	381	12
3	3	24	126	129	3	7	10	25	41	46	41	3	6	27	0	29	1	1	3	29	212	189	4	2	10	30	403	453	10
0	3	24	125	114	3	4	10	25	94	86	16	6	6	27	0	9	1	2	3	29	170	185	4	1	10	30	252	244	11
3	3	24	24	23	24	1	10	25	103	18	47	11	7	27	148	143	12	6	4	29	165	162	6	10	11	30	241	251	19
5	4	24	455	457	4	2	10	25	80	41	79	8	7	27	234	231	22	3	4	29	78	103	10	7	11	30	269	280	7
2	4	24	340	376	4	12	11	25	87	40	67	5	7	27	289	276	6	0	4	29	85	56	5	4	11	30	267	284	8
1	4	24	443	453	6	9	11	25	140	113	47	2	7	27	298	286	18	3	4	29	82	56	11	1	11	30	242	244	31
4	4	24	198	210	4	6	11	25	102	73	19	1	7	27	249	229	6	8	5	29	149	143	12	9	12	30	185	195	19
7	5	24	319	322	3	3	11	25	136	130	16	4	7	27	148	140	14	5	5	29	140	173	6	6	12	30	435	442	7
4	5	24	452	454	3	0	11	25	98	62	42	13	8	27	138	98	46	2	5	29	175	183	4	3	12	30	175	193	83
1	5	24	451	451	2	11	12	25	45	36	44	10	8	27	426	425	6	1	5	29	121	137	19	8	13	30	120	152	120
2	5	24	324	312	3	8	12	25	0	18	1	7	8	27	247	229	5	4	5	29	52	52	24	5	13	30	132	164	51
5	5	24	194	227	7	5	12	25	0	27	1	4	8	27	721	645	7	10	6	29	72	57	21	1	1	31	278	251	3
9	6	24	49	27	25	2	12	25	23	43	22	1	8	27	244	226	5	7	6	29	57	25	17	3	2	31	303	304	32
6	6	24	246	174	3	10	13	25	141	39	63	2	8	27	444	428	6	4	6	29	194	156	4	0	2	31	238	302	3
3	6	24	38	14	25	7	13	25	0	11	1	5	8	27	86	93	85	1	6	29	128	135	12	5	3	31	305	284	14
0	6	24	252	180	3	4	13	25	60	30	60	12	9	27	55	18	55	2	6	29	204	190	34	2	3	31	306	305	4
3	6	24	63	34	17	0	1	26	131	121	2	9	9	27	0	19	1	5	6	29	117	109	15	1	3	31	182	197	3
6	6	24	135	109	17	2	2	26	41	8	9	6	9	27	0	35	1	12	7	29	72	34	33	7	4	31	134	125	16
11	7	24	182	184	12	1	2	26	62	55	5	3	9	27	17	30	16	9	7	29	92	81	16	4	4	31	36	19	12
8	7	24	186	198	6	4	3	26	73	68	6	0	9	27	0	21	1	6	7	29	41	30	26	1	4	31	188	199	4
5	7	24	313	323	3	1	3	26	74	53	4	3	9	27	0	13	1	3	7	29	69	55	9	2	4	31	209	185	37
2	7	24	314	313	3	2	3	26	186	163	4	11	10	27	114	115	20	0	7	29	0	24	1	9	5	31	114	109	14
1	7	24	187	197	6	6	4	26	81	76	18	8	10	27	433	429	9	3	7	29	0	9	1	6	5	31	246	238	26
4	7	24	169	186	10	3	4	26	82	71	5	5	10	27	213	187	12	6	7	29	91	31	64	3	5	31	297	288	21
13	8	24	118	107	27	0	4	26	147	143	11	2	10	27	466	431	18	11	8	29	73	89	34	0	5	31	199	272	17
10	8	24	101	107	17	3	4	26	27	44	27	1	10	27	136	114	22	8	8	29	187	164	38	3	5	31	189	228	6
7	8	24	193	196	5	8	5	26	143	137	6	10	11	27	140	108	16	5	8	29	144	148	9	11	6	31	115	148	19
4	8	24	203	211	5	5	5	26	124	132	6	7	11	27	147	138	20	2	8	29	224	195	38	8	6	31	253	206	30
1	8	24	189	195	6	2	5	26	180	165	6	4	11	27	106	136	27	1	8	29	81	100	17	5	6	31	267	233	39
2	8	24	110	111	14	1	5	26	113	77	7	1	11	27	121	108	25	4	8	29	117	83	55	2	6	31	211	177	36
5	8	24	154	106	22	4	5	26	60	84	30	9	12	27	22	16	22	13	9	29	0	12	1	1	6	31	95	107	9
12	9	24	0	34	1	10	6	26	108	100	12	6	12	27	0	10	1	10	9	29	67	10	40	4	6	31	77	39	18
9	9	24	53	57	52	7	6	26	67	25	33	3	12	27	0	11	1	7											

Table 1. Observed and calculated structure factors for 111299

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s						
2	3	32	301	263	24	1	11	33	159	144	22	6	10	35	40	22	40	3	8	37	0	10	1	4	8	39	319	324	12
6	4	32	163	166	20	9	12	33	0	14	1	3	10	35	88	100	24	-11	9	37	48	15	48	-1	8	39	50	50	50
3	4	32	193	225	31	6	12	33	0	35	1	0	10	35	36	27	36	8	9	37	0	31	1	2	8	39	223	248	12
0	4	32	58	13	8	-3	12	33	0	8	1	-11	11	35	0	12	1	-5	9	37	0	27	1	9	9	39	0	3	1
3	4	32	172	157	20	1	1	34	231	201	12	8	11	35	58	25	57	2	9	37	92	36	22	-6	9	39	82	40	43
8	5	32	172	198	7	3	2	34	163	154	4	5	11	35	91	28	25	1	9	37	0	51	1	-3	9	39	26	33	25
5	5	32	264	259	4	0	2	34	102	53	4	-2	11	35	92	31	39	10	10	37	52	59	51	0	9	39	0	4	1
2	5	32	328	267	13	-5	3	34	129	133	6	-10	12	35	95	19	95	-7	10	37	59	44	59	3	9	39	0	32	1
1	5	32	202	241	16	2	3	34	146	156	12	-7	12	35	101	56	35	4	10	37	62	90	62	11	10	39	0	33	1
4	5	32	127	111	14	1	3	34	189	186	13	4	13	35	97	34	59	-1	10	37	63	54	62	8	10	39	257	247	9
10	6	32	49	57	49	7	4	34	158	157	6	0	0	36	251	78	4	9	11	37	34	19	33	-5	10	39	0	50	1
-7	6	32	121	143	16	-4	4	34	58	61	19	1	1	36	266	322	5	-6	11	37	97	59	24	2	10	39	227	248	10
-4	6	32	166	158	13	1	4	34	183	186	17	1	2	36	328	326	11	-3	11	37	0	12	1	1	10	39	0	33	1
1	6	32	210	238	3	2	4	34	101	89	8	2	2	36	524	517	3	0	11	37	0	33	1	-10	11	39	0	36	1
2	6	32	211	177	10	9	5	34	107	86	40	3	3	36	263	208	4	8	12	37	0	87	1	-7	11	39	33	28	33
5	6	32	129	135	17	6	5	34	143	129	6	0	3	36	258	213	3	5	12	37	121	11	49	4	11	39	52	28	51
12	7	32	116	83	29	-3	5	34	148	133	9	3	3	36	240	186	16	0	1	38	0	21	1	1	11	39	0	35	1
-9	7	32	146	126	19	0	5	34	65	73	10	5	4	36	210	241	4	-2	2	38	270	297	3	-9	12	39	0	35	1
-6	7	32	111	148	9	3	5	34	29	52	29	2	4	36	533	517	3	1	2	38	64	56	10	-6	12	39	0	34	1
-3	7	32	172	157	5	-11	6	34	0	36	1	1	4	36	203	242	9	-4	3	38	51	46	17	-3	12	39	0	23	1
0	7	32	124	115	9	-8	6	34	51	65	50	4	4	36	228	265	8	-1	3	38	40	55	21	1	1	40	15	29	14
3	7	32	49	75	49	5	6	34	116	130	13	7	5	36	116	159	9	2	3	38	0	15	1	-3	2	40	68	61	9
11	8	32	100	122	25	2	6	34	99	82	22	4	5	36	218	344	4	-6	4	38	169	194	6	0	2	40	237	223	4
-8	8	32	160	136	14	1	6	34	133	144	23	1	5	36	224	245	3	-3	4	38	50	52	13	5	3	40	50	13	47
5	8	32	190	198	6	4	6	34	86	46	27	2	5	36	131	163	14	0	4	38	354	352	11	2	3	40	62	62	10
-2	8	32	199	183	43	-10	7	34	109	102	27	5	5	36	147	135	12	3	4	38	50	16	49	1	3	40	41	39	41
1	8	32	126	130	14	-7	7	34	171	168	21	9	6	36	84	92	20	-8	5	38	35	41	34	-7	4	40	93	77	12
4	8	32	105	63	54	4	7	34	149	155	6	6	6	36	187	140	6	-5	5	38	114	98	7	4	4	40	386	344	9
-10	9	32	0	72	1	-1	7	34	130	143	9	-3	6	36	225	186	5	-2	5	38	24	19	24	-1	4	40	78	39	14
-7	9	32	132	125	12	2	7	34	117	98	14	0	6	36	211	141	5	1	5	38	29	28	26	2	4	40	182	193	7
-4	9	32	99	106	19	5	7	34	0	71	1	3	6	36	88	93	19	4	5	38	61	47	60	9	5	40	52	18	51
-1	9	32	98	128	20	-12	8	34	43	28	43	6	6	36	107	99	31	10	6	38	115	124	25	-6	5	40	0	20	1
2	9	32	92	91	38	-9	8	34	51	47	50	-11	7	36	83	96	26	-7	6	38	73	13	23	-3	5	40	0	15	1
-12	10	32	0	48	1	-6	8	34	47	71	46	-8	7	36	100	119	14	-4	6	38	156	195	6	0	5	40	19	14	18
-9	10	32	86	76	28	-3	8	34	81	51	14	-5	7	36	128	157	7	-1	6	38	0	29	1	3	5	40	64	33	20
-6	10	32	66	59	28	0	8	34	112	83	15	-2	7	36	131	162	7	2	6	38	133	169	12	11	6	40	0	14	1
-3	10	32	45	75	45	3	8	34	93	29	31	1	7	36	123	118	16	5	6	38	93	63	34	8	6	40	67	106	25
0	10	32	0	33	1	-11	9	34	67	43	67	4	7	36	86	96	24	-12	7	38	65	16	65	5	6	40	69	17	14
-11	11	32	122	103	27	-8	9	34	77	50	29	10	8	36	178	171	12	-9	7	38	0	49	1	-2	6	40	159	196	10
-8	11	32	116	123	19	5	9	34	89	87	15	-7	8	36	96	121	25	-6	7	38	0	17	1	1	6	40	15	43	14
-5	11	32	124	136	22	2	9	34	64	103	31	-4	8	36	238	263	5	-3	7	38	0	12	1	4	6	40	122	151	19
-2	11	32	139	92	19	1	9	34	95	96	29	-1	8	36	132	121	31	0	7	38	0	19	1	-10	7	40	80	73	30
-10	12	32	66	49	65	-10	10	34	0	42	1	2	8	36	186	170	27	3	7	38	90	46	22	-7	7	40	86	34	16
-7	12	32	95	81	41	7	10	34	85	100	31	-12	9	36	160	49	57	-11	8	38	0	17	1	-4	7	40	69	76	16
4	12	32	5	61	5	4	10	34	44	43	43	-9	9	36	119	88	46	-8	8	38	162	206	10	-1	7	40	0	42	1
6	13	32	123	52	96	1	10	34	102	93	60	-6	9	36	123	92	11	-5	8	38	73	44	18	-2	7	40	60	47	54
1	1	33	583	558	11	2	10	34	113	24	54	-3	9	36	106	93	13	-2	8	38	141	166	9	-12	8	40	116	72	57
1	2	33	579	560	10	-9	11	34	0	41	1	0	9	36	47	86	46	1	8	38	54	49	53	-9	9	40	69	31	35
2	2	33	761	690	6	6	11	34	81	35	25	3	9	36	67	50	67	4	8	38	100	82	42	-6	8	40	99	102	14
3	3	33	0	9	1	-3	11	34	0	28	1	-11	10	36	53	78	52	-10	9	38	70	52	42	-3	8	40	0	34	1
0	3	33	0	19	1	0	11	34	0	11	1	-8	10	36	175	169	11	-7	9	38	0	47	1	0	8	40	116	102	20
3	3	33	53	38	52	-8	12	34	29	23	29	-5	10	36	145	133	10	-4	9	38	50	43	50	3	8	40	0	40	1
-5	4	33	469	449	13	5	12	34	0	73	1	-2	10	36	174	168	14	-1	9	38	0	47	1	-11	9	40	0	42	1
2	4	33	750	679	17	2	12	34	27	27	26	1	10	36	136	81	37	2	9	38	103	22	29	-8	9	40	0	32	1
1	4	33	468	456	5	0	1	35	138	152	3	-10	11	36	48	79	47	9	10	38	0	55	1	-5	9	40	17	14	17
4	4	33	538	467	10	-2	2	35	50	48	24	-7	11	36	126	97	38	6	10	38	107	124	16	-2	9	40	79	48	25
-7	5	33	337	341	7	1	2	35	101	116	7	-4	11	36	54	96	53	3	10	38	0	50	1	1	9	40	18	20	18
4	5	33	461	456	3	4	3	35	172	160	4	-1	11	36	114	82	42	0	10	38	85	102	37	-10	10	40	121	139	27
1																													

Table 1. Observed and calculated structure factors for ill299

Page 6

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
11	8	41	94	56	34	6	8	43	0	41	1	3	9	45	37	28	36	1	2	48	0	18	1	4	5	50	105	46	22
8	8	41	56	62	55	3	8	43	120	108	23	0	9	45	0	12	1	2	2	48	161	204	6	10	6	50	39	80	31
5	8	41	43	57	42	0	8	43	91	14	26	-8	10	45	311	284	20	3	3	48	632	553	10	7	6	50	23	60	23
3	8	41	71	75	20	3	8	43	84	79	50	-5	10	45	253	272	13	0	3	48	630	556	13	-4	6	50	150	132	20
1	8	41	72	29	72	11	9	43	0	63	1	2	10	45	280	284	29	3	3	48	506	445	12	-1	6	50	52	73	30
4	8	41	64	65	64	-8	9	43	70	66	69	7	11	45	241	243	14	5	4	48	0	47	1	2	6	50	123	91	13
10	9	41	89	13	32	-5	9	43	79	90	27	-4	11	45	246	250	20	-2	4	48	159	201	7	5	6	50	0	41	1
7	9	41	0	50	1	2	9	43	65	53	46	-1	1	46	259	248	4	1	4	48	0	47	1	9	7	50	0	48	1
4	9	41	34	20	34	1	9	43	47	56	46	-3	2	46	164	199	18	4	4	48	87	102	17	6	7	50	78	56	30
1	9	41	0	32	1	10	10	43	27	7	27	0	2	46	251	164	7	-7	5	48	36	12	35	-3	7	50	57	48	34
2	9	41	0	45	1	7	10	43	91	34	29	5	3	46	113	137	9	4	5	48	0	30	1	0	7	50	47	2	46
9	10	41	0	11	1	-4	10	43	65	36	64	2	3	46	168	198	14	1	5	48	0	33	1	3	7	50	0	22	1
6	10	41	138	129	15	-1	10	43	0	59	1	2	5	48	219	227	16	2	5	48	57	7	34	-8	8	50	96	78	23
0	10	41	0	58	1	9	11	43	0	63	1	7	4	46	163	181	16	5	5	48	106	27	46	5	8	50	0	1	1
3	10	41	97	110	46	-6	11	43	82	55	45	4	4	46	351	219	6	-9	6	48	323	282	7	-2	8	50	78	89	26
8	11	41	111	58	25	3	11	43	0	79	1	1	4	46	221	225	17	6	6	48	624	623	8	1	8	50	25	39	24
5	11	41	92	17	91	-5	12	43	121	41	94	2	4	46	187	148	7	3	6	48	499	444	20	-10	9	50	0	21	1
2	11	41	64	47	63	0	1	44	188	182	6	9	5	46	91	106	22	0	6	48	618	618	13	-7	9	50	63	49	63
7	12	41	35	12	34	2	2	44	99	59	8	6	5	46	139	138	9	3	6	48	312	288	12	-4	9	50	0	49	1
4	12	41	41	68	41	1	2	44	140	141	10	-3	5	46	127	137	9	-11	7	48	104	31	51	-1	9	50	82	39	46
0	9	42	39	59	29	4	3	44	129	155	7	0	5	46	116	146	20	8	7	48	50	19	50	9	10	50	29	20	59
1	1	42	516	539	6	-1	3	44	133	136	5	3	5	46	100	94	21	5	7	48	0	17	1	6	10	50	116	81	32
1	2	42	515	543	2	2	3	44	123	149	19	-11	6	46	0	47	1	2	7	48	0	20	1	-3	10	50	37	24	36
2	2	42	263	292	13	6	4	44	56	71	24	8	6	46	108	95	16	1	7	48	0	22	1	-5	11	50	93	38	92
3	3	42	392	316	3	-3	4	44	147	154	8	5	6	46	127	141	12	4	7	48	64	31	63	0	0	51	0	47	1
0	3	42	330	333	3	0	4	44	130	56	17	-2	6	46	182	151	9	-10	8	48	0	73	1	1	1	51	57	65	20
3	3	42	356	299	4	3	4	44	106	114	10	1	6	46	144	145	11	7	8	48	38	20	37	-1	2	51	56	62	56
5	4	42	391	414	3	-8	5	44	90	112	16	4	6	46	98	124	29	4	8	48	0	103	1	2	2	51	168	217	10
-2	4	42	271	286	3	5	5	44	133	127	7	-10	7	46	104	120	25	1	8	48	0	25	1	-3	3	51	0	33	1
1	4	42	395	414	4	-2	5	44	116	149	8	-7	7	46	158	160	14	2	8	48	0	77	1	0	3	51	0	29	1
4	4	42	189	180	14	1	5	44	141	107	11	-4	7	46	158	182	9	-9	9	48	240	224	29	3	3	51	33	28	32
7	5	42	336	349	4	4	5	44	77	99	24	-1	7	46	142	142	10	-6	9	48	315	283	6	-5	4	51	60	83	23
-4	5	42	390	416	3	10	6	44	18	43	18	2	7	46	68	111	57	-3	9	48	310	287	8	-2	4	51	193	218	9
-1	5	42	396	418	5	-7	6	44	108	93	13	-9	8	46	0	88	1	0	9	48	245	218	28	1	4	51	62	80	31
2	5	42	332	348	8	-4	6	44	114	61	27	-6	8	46	145	91	11	8	10	48	0	69	1	4	4	51	80	109	27
5	5	42	177	202	14	-1	6	44	109	105	8	-3	8	46	23	94	23	-5	10	48	50	34	49	-7	5	51	66	48	65
-9	6	42	203	190	10	2	6	44	57	39	39	0	8	46	122	90	21	-2	10	48	15	73	15	-4	5	51	75	80	17
-6	6	42	112	132	10	5	6	44	14	53	13	3	8	46	0	43	1	-7	11	48	103	23	68	-1	5	51	56	77	55
-3	6	42	356	296	4	9	7	44	0	72	1	-11	9	46	120	41	119	-4	11	48	0	22	1	2	5	51	70	51	70
3	6	42	203	190	8	-3	7	44	113	119	10	8	9	46	68	87	57	-1	1	49	89	101	10	5	5	51	0	47	1
6	6	42	52	34	52	0	7	44	91	110	36	-2	9	46	123	110	15	-3	2	49	86	66	29	-9	6	51	28	13	27
11	7	42	210	175	14	3	7	44	61	67	60	1	9	46	87	93	50	-5	3	49	51	49	26	-3	6	51	0	7	1
8	7	42	264	265	11	-11	8	44	58	78	57	-10	10	46	0	106	1	-2	3	49	75	68	50	0	6	51	8	8	8
-5	7	42	332	345	4	8	8	44	51	40	50	-7	10	46	108	121	27	1	3	49	54	76	20	3	6	51	71	11	70
-2	7	42	330	345	5	-5	8	44	51	111	51	4	10	46	145	124	18	-7	4	49	57	72	35	-11	7	51	137	48	54
1	7	42	352	259	6	2	8	44	59	45	36	1	10	46	0	94	1	-4	4	49	225	214	21	8	7	51	79	41	35
4	7	42	166	175	15	1	8	44	0	67	1	6	11	46	46	45	46	-1	4	49	57	76	21	-5	7	51	94	51	17
-10	8	42	99	106	45	-10	9	44	0	72	1	3	11	46	0	43	1	2	4	49	159	143	25	-2	7	51	85	53	23
-7	8	42	265	268	7	-7	9	44	90	67	29	0	1	47	179	230	5	-9	5	49	8	59	8	1	7	51	36	40	35
-4	8	42	171	186	26	-4	9	44	92	99	21	-2	2	47	197	200	5	-6	5	49	86	88	20	4	7	51	79	51	78
-1	8	42	254	261	9	-1	9	44	102	66	24	1	2	47	182	175	4	-3	5	49	0	42	1	-10	8	51	49	104	48
2	8	42	92	109	33	2	9	44	50	68	50	4	3	47	194	190	24	0	5	49	94	84	13	7	8	51	73	39	24
-9	9	42	172	157	13	-9	10	44	21	74	20	-1	3	47	168	174	11	3	5	49	24	32	24	4	8	51	0	110	1
-6	9	42	189	191	9	6	10	44	0	50	1	2	3	47	133	137	9	11	6	49	42	49	41	-1	8	51	94	38	23
-3	9	42	192	190	9	-3	10	44	106	69	25	6	4	47	198	175	10	-8	6	49	115	108	16	2	8	51	0	105	1
0	9	42	210	165	11	0	10	44	34	37	33	-3	4	47	180	188	18	-5	6	49	76	93	17	9	9	51	0	15	1
-8	10	42	0	103	1	8	11	44	85	78	56	0	4	47	237	256	15	-2	6	49	182	145	8	-6	9	51	0	13	1
-5	10	42	179	199	23	-5	11	44	54	53	54	3	4	47	161	163	9	1	6	49	89	80	22	-3	9	51	0	12	1
-2	10	42	141	106	20																								

Table 1. Observed and calculated structure factors for 111299

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s
-3	8	52	61	39	61	3	5	55	57	46	56	1	4	58	42	54	42	-3	5	61	97	136	23	-1	3	65	105	68	36
0	8	52	0	53	1	8	6	55	9	15	9	2	4	58	67	71	40	0	5	61	72	87	72	2	3	65	73	75	47
8	9	52	68	24	67	5	6	55	81	66	20	-9	5	58	71	39	71	3	5	61	98	87	23	-6	4	65	0	49	1
5	9	52	102	53	49	2	6	55	42	26	42	-6	5	58	59	49	34	-8	6	61	73	65	73	-3	4	65	14	56	13
2	9	52	83	45	82	1	6	55	47	61	47	3	5	58	39	60	39	5	6	61	97	102	20	0	4	65	29	62	29
7	10	52	69	43	69	4	6	55	0	28	1	0	5	58	104	53	25	2	6	61	98	95	18	3	4	65	22	32	22
4	10	52	64	25	64	10	7	55	0	32	1	3	5	58	49	38	49	1	6	61	115	112	23	8	5	65	80	49	63
1	10	52	77	48	76	-7	7	55	0	55	1	8	6	58	37	55	37	-7	7	61	111	95	24	5	5	65	88	43	29
0	1	53	112	119	11	4	7	55	90	55	18	-5	6	58	0	50	1	4	7	61	99	114	40	2	5	65	28	75	28
3	2	53	33	2	33	1	7	55	73	63	33	-2	6	58	73	73	31	-1	7	61	133	112	19	1	5	65	66	62	66
4	3	53	130	102	10	2	7	55	47	61	47	1	6	58	0	51	1	6	8	61	0	62	1	7	6	65	0	62	1
1	2	53	91	89	26	9	8	55	28	51	87	-7	7	58	0	31	1	3	8	61	39	87	38	4	6	65	63	45	62
1	3	53	84	89	15	6	8	55	17	12	16	-4	7	58	44	50	43	0	8	61	50	46	49	1	6	65	98	61	36
2	3	53	70	93	26	3	8	55	37	47	36	1	7	58	0	51	1	5	9	61	106	95	39	2	6	65	72	34	72
6	4	53	47	6	47	0	8	55	0	38	1	2	7	58	0	41	1	2	9	61	98	91	71	6	7	65	100	63	100
3	4	53	115	101	10	8	9	55	114	50	44	-9	8	58	17	37	17	0	1	62	177	151	11	3	7	65	0	33	1
0	4	53	68	66	34	5	9	55	57	78	57	1	6	58	0	52	1	2	2	62	116	69	15	0	7	65	0	60	1
3	4	53	88	65	18	2	9	55	103	59	49	3	8	58	108	38	25	1	2	62	157	154	10	5	8	65	33	47	33
8	5	53	77	57	77	7	10	55	21	33	20	0	8	58	59	52	58	4	3	62	122	141	16	2	8	65	0	38	1
5	5	53	64	47	64	4	10	55	61	28	61	-8	9	58	0	39	1	1	3	62	123	157	16	0	0	66	175	197	19
8	5	53	68	94	24	0	1	56	11	55	11	-5	9	58	61	41	61	2	3	62	109	121	19	1	1	66	141	165	14
1	5	53	102	82	14	2	2	56	0	32	1	2	9	58	0	42	1	6	4	62	83	67	38	1	2	66	150	165	14
4	5	53	89	72	32	1	2	56	0	44	1	4	10	58	0	44	1	3	4	62	172	141	13	2	2	66	0	36	1
10	6	53	0	22	1	-4	3	56	89	75	21	0	1	59	92	79	19	0	4	62	109	70	21	3	3	66	0	41	1
7	6	53	83	85	44	-1	3	56	40	42	39	-2	2	59	77	84	21	3	4	62	140	106	16	0	3	66	0	38	1
4	6	53	37	4	36	2	3	56	76	58	27	-1	2	59	97	114	14	8	5	62	70	70	69	3	3	66	56	26	55
-1	6	53	64	81	24	-6	4	56	61	38	29	-4	3	59	94	91	36	5	5	62	50	87	50	5	4	66	114	134	20
2	6	53	0	21	1	-3	4	56	49	78	49	-1	3	59	138	115	13	2	5	62	103	121	22	-2	4	66	0	28	1
9	7	53	0	56	1	0	4	56	66	71	27	2	3	59	57	94	56	1	5	62	120	112	20	1	4	66	133	132	42
6	7	53	67	36	33	3	4	56	48	39	48	-6	4	59	77	76	30	4	5	62	100	87	61	4	4	66	41	31	41
3	7	53	57	65	34	-8	5	56	71	35	44	-3	4	59	66	91	35	7	6	62	129	123	24	-7	5	66	102	107	35
0	7	53	91	91	24	-5	5	56	0	18	1	0	4	59	82	101	23	4	6	62	67	70	36	-4	5	66	142	135	18
3	7	53	26	46	26	-2	5	56	94	60	22	3	4	59	96	63	23	1	6	62	136	111	20	-1	5	66	116	133	26
8	8	53	58	54	58	1	5	56	50	43	49	-8	5	59	70	56	41	2	6	62	90	43	30	2	5	66	128	113	30
-5	8	53	41	57	40	4	5	56	107	73	29	-5	5	59	49	66	49	-6	7	62	75	123	74	-6	6	66	189	169	14
2	8	53	0	21	1	-10	6	56	0	40	1	-2	5	59	64	92	34	3	7	62	117	104	27	-3	6	66	68	26	68
1	8	53	96	49	85	-7	6	56	78	36	25	1	5	59	67	67	49	0	7	62	55	107	55	0	6	66	120	166	29
7	9	53	91	57	37	-4	6	56	57	30	56	4	5	59	28	61	28	8	8	62	0	22	1	5	7	66	90	108	90
-4	9	53	110	71	37	-1	6	56	48	40	47	7	6	59	49	64	49	-2	8	62	83	42	45	-4	8	66	0	36	1
-1	9	53	98	50	45	2	6	56	69	25	68	-4	6	59	77	78	26	-4	9	62	61	88	61	-1	1	67	0	36	1
-6	10	53	0	20	1	-9	7	56	95	54	52	2	6	59	30	66	29	0	0	63	0	2	1	-3	2	67	49	21	48
3	10	53	128	45	128	-6	7	56	0	40	1	1	6	59	47	68	46	-4	9	62	61	88	61	-1	1	67	0	36	1
0	0	54	289	175	11	-3	7	56	0	39	1	2	6	59	30	66	29	0	0	63	0	2	1	-3	2	67	49	21	48
1	1	54	164	164	13	0	7	56	59	34	59	6	7	59	0	63	1	1	1	63	301	305	6	0	2	67	29	96	29
-1	2	54	166	168	7	3	7	56	83	34	82	6	7	59	79	62	27	-1	2	63	315	303	6	-5	3	67	54	22	54
2	2	54	184	219	10	8	8	56	53	48	52	0	7	59	107	39	23	-3	3	63	0	8	1	1	3	67	41	21	40
-3	3	54	203	190	10	5	8	56	0	35	1	8	8	59	71	58	71	0	3	63	0	9	1	-7	4	67	77	33	77
0	3	54	198	197	6	-2	8	56	0	22	1	-5	8	59	139	57	27	3	3	63	80	30	30	-4	4	67	99	137	28
3	3	54	191	167	7	1	8	56	0	41	1	2	8	59	0	64	1	-5	4	63	256	258	8	-1	4	67	56	21	55
-5	4	54	49	76	48	-7	9	56	0	51	1	-7	9	59	80	56	80	-2	4	63	210	182	10	2	4	67	103	91	30
2	4	54	176	216	7	4	9	56	61	70	60	-4	9	59	0	63	1	1	4	63	238	255	12	6	5	67	76	31	75
1	4	54	78	76	19	-1	9	56	83	40	82	-1	9	59	0	52	1	4	4	63	136	112	20	-3	5	67	0	21	1
4	4	54	71	123	38	-6	10	56	0	40	1	0	0	60	803	679	34	-7	5	63	196	204	12	0	5	67	81	23	55
7	5	54	107	80	14	-3	10	56	81	36	69	1	1	60	133	113	22	-4	5	63	255	257	10	3	5	67	44	25	44
4	5	54	57	80	27	0	0	57	0	88	1	-1	2	60	88	107	24	-1	5	63	243	255	19	5	6	67	66	32	65
-1	5	54	68	80	19	1	1	57	239	235	9	2	2	60	108	130	16	2	5	63	165	206	15	-2	6	67	124	91	27
2	5	54	69	77	24	1	2	57	245	236	6	-3	3	60	663	576	13	-6	6	63	0	12	1	1	6	67	29	27	29
5	5	54	68	32	68	2	2	57	314	323	13	0	3	60	660	569	7	-3	6	63	0	30	1	-7	7	67	88	22	87
-9	6	54	154	115	17	-3	3	57	0	10	1	3	3	60	494	441													

Table 1. Observed and calculated structure factors for ill1099

h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s	h	k	l	F <sub>o</sub>	F <sub>c</sub>	s
6	6	69	0	24	1	0	1	71	66	15	52	3	3	72	207	196	33	4	3	74	81	70	81
3	6	69	0	18	1	2	2	71	98	31	31	-5	4	72	0	46	1	1	3	74	59	56	59
0	6	69	0	23	1	1	2	71	18	18	17	-2	4	72	34	15	33	2	3	74	0	39	1
5	7	69	110	50	41	4	3	71	27	2	26	1	4	72	66	44	66	-3	4	74	67	69	66
2	7	69	88	51	71	1	3	71	44	19	44	-4	5	72	0	39	1	0	4	74	0	61	1
1	1	70	0	8	1	2	3	71	0	7	1	-1	5	72	108	37	33	5	5	74	0	31	1
3	2	70	40	12	39	6	4	71	12	31	12	-3	6	72	215	197	19	2	6	74	104	38	47
0	2	70	0	67	1	3	4	71	0	1	1	-1	1	73	0	78	1	0	0	75	0	26	1
5	3	70	4	6	3	0	4	71	0	64	1	-3	2	73	125	54	65	1	1	75	202	192	14
2	3	70	73	13	51	5	5	71	0	6	1	0	2	73	64	39	64	1	2	75	233	193	11
1	3	70	94	11	32	2	5	71	24	8	24	-5	3	73	58	38	58	2	2	75	272	325	15
7	4	70	91	17	91	1	5	71	69	18	68	-2	3	73	34	55	34	3	3	75	0	60	1
4	4	70	78	103	40	4	6	71	0	33	1	1	3	73	66	68	66	0	3	75	46	61	45
1	4	70	30	10	30	1	6	71	142	17	44	-4	4	73	76	28	76	5	4	75	101	141	56
2	4	70	99	56	61	3	7	71	59	15	59	-1	4	73	51	68	50	2	4	75	304	328	14
6	5	70	169	11	35	0	0	72	329	281	25	2	4	73	0	34	1	4	5	75	158	140	39
3	5	70	107	7	48	1	1	72	0	51	1	-3	5	73	75	39	75	1	5	75	156	141	36
0	5	70	74	10	74	1	2	72	39	41	38	0	5	73	128	43	127	1	1	76	0	74	1
5	6	70	52	11	51	2	2	72	25	9	25	0	1	74	53	68	52	3	2	76	133	83	28
2	6	70	0	68	1	3	3	72	254	235	20	2	2	74	114	62	62	0	2	76	126	93	24
4	7	70	0	17	1	0	3	72	248	238	10	1	2	74	0	57	1	2	3	76	51	81	50