

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-13	1	1	234	244	16	-9	9	4	754	760	14	-7	9	2	1011	1039	17	-4	10	1	1513	1436	32
-3	7	2	101	75	17	-3	9	4	271	248	11	-7	11	2	226	217	13	-4	8	1	140	70	14
-3	5	2	483	462	7	-3	7	4	200	188	12	-6	12	2	430	409	10	-4	6	1	492	471	8
-13	1	2	178	177	15	-9	5	1	1063	1031	18	-6	10	2	727	775	12	-4	4	1	2586	2445	20
-3	3	2	312	287	6	-9	7	1	423	417	9	-6	8	2	795	742	16	-4	2	1	2281	2282	18
-3	1	2	213	272	7	-9	9	1	246	207	13	-6	6	2	1157	1139	28	-4	0	1	707	769	11
-3	11	-1	344	337	10	-9	1	3	193	172	12	-6	4	2	756	799	15	-4	12	2	603	638	11
-13	1	3	327	308	10	-9	3	3	221	191	11	-6	2	2	636	681	11	-4	10	2	524	568	9
-13	3	3	204	188	15	-9	5	3	474	461	8	-6	0	2	608	581	10	-4	8	2	1648	1624	28
-12	6	3	213	211	14	-9	7	3	255	255	11	-6	10	3	479	492	9	-4	6	2	768	721	14
-12	6	3	226	211	13	-9	9	3	419	412	10	-6	8	3	184	190	13	-4	4	2	436	441	7
-12	4	3	1967	1942	33	-9	1	2	188	141	11	-6	6	3	744	712	15	-4	2	2	1466	1516	20
-12	2	3	299	276	11	-9	3	2	143	109	14	-6	4	3	401	419	7	-4	0	2	3402	3409	18
-12	0	3	849	837	16	-9	5	2	893	848	17	-6	2	3	412	350	8	-4	12	3	625	616	11
-12	6	4	473	464	10	-9	7	2	376	373	9	-6	0	3	1186	1117	24	-4	10	3	266	283	11
-12	4	4	853	806	16	-3	5	4	863	892	15	-6	10	4	885	839	18	-4	8	3	2306	2177	29
-12	2	4	517	508	9	-8	8	2	1811	1769	30	-6	8	4	852	873	14	-4	6	3	1827	1754	26
-12	0	4	792	799	16	-8	6	2	1464	1369	28	-6	6	4	696	658	11	-4	4	3	1862	1706	23
-12	4	5	141	177	22	-8	4	2	778	750	15	-6	4	4	1258	1172	28	-4	2	3	154	137	11
-12	2	5	523	546	11	-8	2	2	942	964	17	-6	2	4	384	419	12	-4	0	3	2436	2527	21
-12	0	5	1770	1756	32	-8	0	2	3218	3346	23	-6	0	4	1433	1710	28	-4	10	4	978	973	18
-12	2	6	707	734	16	-8	10	3	626	609	12	-6	8	5	444	399	13	-4	8	4	1121	1116	21
-12	0	6	1140	1188	21	-8	8	3	986	940	18	-6	6	5	617	583	12	-4	6	4	569	534	13
-11	1	-1	205	225	14	-8	6	3	977	913	16	-6	4	5	311	308	10	-4	4	4	2412	2319	26
-3	9	-1	570	556	12	-8	4	3	2346	2246	26	-6	2	5	449	445	8	-4	2	4	1287	1149	26
-3	7	-1	149	151	13	-8	2	3	1075	972	18	-6	0	5	657	637	11	-4	0	4	1723	1714	24
-11	3	6	311	296	11	-8	0	3	1103	1052	27	-6	8	6	908	859	19	-4	10	5	950	936	22
-11	5	6	134	166	25	-8	10	4	1035	980	19	-6	6	6	670	587	16	-4	8	5	458	377	9
-11	3	0	280	253	11	-8	4	4	1955	1906	29	-6	0	6	1285	1311	22	-4	4	5	2613	2480	28
-11	5	0	652	616	14	-8	2	4	1401	1401	28	-6	4	7	298	270	12	-4	2	5	1489	1500	29
-11	1	5	231	267	12	-8	0	4	1023	1009	19	-6	2	7	270	230	12	-4	0	5	689	677	12
-3	3	-1	352	330	6	-8	8	5	1182	1126	20	-6	0	7	246	210	13	-4	8	6	1212	1202	23
-11	5	5	102	119	27	-8	6	5	1045	1011	19	-3	1	-3	232	206	10	-4	6	6	853	897	16
-11	1	1	569	614	12	-8	4	5	618	585	16	-3	9	5	684	680	11	-4	4	6	584	580	9
-11	3	1	407	423	9	-8	2	5	673	721	16	-5	1	-4	152	129	18	-4	2	6	1143	1117	22
-3	1	-1	837	778	14	-8	0	5	1325	1415	34	-5	3	-4	203	165	14	-4	0	6	2340	2313	30
-11	7	1	135	103	22	-8	6	6	791	808	13	-5	5	-4	500	513	9	-4	4	7	870	852	19
-11	3	4	296	271	10	-8	2	6	560	536	13	-5	1	6	434	418	9	-4	2	7	617	586	13
-11	5	4	271	271	12	-8	0	6	1796	1843	31	-5	3	6	539	495	9	-4	0	7	1257	1366	23
-11	7	4	143	130	19	-8	4	7	1368	1322	24	-5	5	6	127	20	20	-3	1	7	147	78	18
-11	3	2	144	103	17	-8	2	7	399	441	10	-5	1	-3	1130	1136	18	-3	1	-5	390	375	10
-11	5	2	135	111	18	-8	0	7	378	359	11	-5	3	-3	243	261	12	-3	3	-5	194	186	14
-3	9	3	239	232	11	-7	1	-4	167	144	18	-3	1	5	501	534	10	-3	5	-5	313	262	12

-11	1	3	108	50	21	-7	1	7	163	202	18	-5	7	-3	110	135	24	-3	1	6	160	189	17	-2	6	6	548	509	9
-3	7	3	208	204	10	-3	1	4	207	182	10	-5	9	-3	1128	1154	20	-3	3	6	562	543	9	-2	4	6	330	348	11
-11	5	3	441	439	9	-7	1	-3	259	255	12	-5	1	5	296	301	9	-3	5	6	475	490	9	-2	2	6	293	256	11
-3	5	3	783	747	15	-7	3	-3	351	376	10	-5	3	5	105	82	23	-3	7	6	328	325	11	-2	0	6	667	695	8
-10	8	3	260	250	12	-7	5	-3	662	609	13	-5	5	5	1051	991	18	-3	1	-4	742	711	12	-2	2	7	206	235	15
-10	6	3	621	598	10	-7	1	6	288	272	11	-5	9	5	170	162	16	-3	3	-4	110	90	22	-2	0	7	509	455	12
-10	4	3	1119	1046	20	-7	3	6	533	532	8	-5	7	5	180	169	16	-3	3	7	0	11	-1	-1	-1	-6	521	504	9
-10	2	3	223	235	11	-7	5	6	638	633	12	-5	1	-2	482	457	9	-3	7	-4	66	20	-66	-1	3	-6	168	184	21
-10	0	3	519	475	7	-7	7	6	185	159	16	-5	3	-2	148	170	15	-5	5	-3	89	44	-32	-1	1	6	382	374	9
-10	8	4	253	221	12	-7	1	-2	186	174	14	-5	5	-2	162	166	15	-3	3	5	35	50	-34	-1	1	1	308	304	10
-10	6	4	228	236	13	-7	5	-2	370	352	9	-5	7	-2	119	74	23	-5	7	6	95	21	-38	-1	5	-5	229	249	12
-10	4	4	1276	1245	21	-7	3	-2	183	170	15	-5	9	4	728	691	13	-3	7	5	98	99	-31	-1	1	5	185	120	13
-10	2	4	365	358	9	-3	9	-3	284	280	11	-5	1	-2	490	473	9	-5	3	7	81	26	-42	-1	3	5	230	252	11
-10	0	4	695	719	13	-7	1	5	190	165	13	-5	3	4	182	174	11	-5	1	7	115	20	-49	-1	5	5	803	702	18
-10	6	5	669	620	12	-7	3	5	211	189	12	-5	5	4	514	495	9	-7	7	2	84	33	-30	-1	1	4	510	544	8
-10	4	5	431	430	9	-7	5	5	371	348	10	-5	7	4	93	3	26	-7	7	-1	97	88	-29	-1	3	-4	165	155	14
-10	2	5	470	460	9	-7	7	5	225	192	13	-5	9	4	674	635	11	-7	5	-1	53	42	-52	-1	5	-4	460	467	10
-10	0	5	1072	1131	19	-7	9	5	150	159	19	-5	11	4	317	340	11	-7	7	-2	0	57	-1	-1	7	-4	298	314	11
-10	6	6	478	465	10	-7	1	-1	572	626	17	-5	1	-1	551	607	13	-7	3	7	91	61	-32	-1	1	4	286	265	8
-10	4	6	169	174	15	-7	3	-1	261	285	10	-5	3	-1	83	11	23	-8	6	4	75	88	-39	-1	3	4	115	113	18
-10	2	6	484	525	13	-3	7	-3	444	416	9	-5	5	-1	791	732	16	-8	10	2	0	19	-1	-1	9	4	125	119	19
-10	0	6	467	472	9	-3	5	-3	656	600	12	-5	7	-1	406	342	9	-3	3	4	70	64	-29	-1	9	4	579	529	10
-10	2	7	208	177	15	-7	1	4	135	147	14	-5	9	-1	205	202	14	-9	9	2	55	88	-55	-1	1	3	464	506	6
-3	3	3	469	471	8	-7	3	4	104	91	20	-5	11	-1	331	327	11	-9	3	1	63	28	-53	-1	3	-3	384	409	7
-9	3	7	178	171	17	-7	5	4	280	280	10	-5	3	3	92	85	16	-9	1	1	75	22	-33	-1	5	-3	896	855	15
-3	1	3	513	535	7	-7	7	4	367	373	9	-5	5	3	260	244	9	-9	7	0	69	58	-53	-1	9	-3	187	133	13
-3	11	-2	227	240	13	-7	9	4	416	356	10	-5	7	3	413	396	8	-9	9	3	91	106	-31	-1	7	-3	207	207	13
-9	2	2	494	495	10	-7	1	0	159	154	12	-5	9	3	628	604	12	-9	5	5	0	39	-1	-1	11	-3	139	155	21
-9	1	6	209	252	14	-7	5	0	906	825	15	-5	11	3	211	233	14	-9	5	5	0	14	1	-1	1	3	242	216	8
-9	3	6	445	402	9	-7	7	0	330	307	9	-5	1	0	129	156	12	-9	5	6	82	95	-37	-1	3	3	242	216	8
-3	9	-2	173	138	14	-7	9	0	246	200	12	-5	3	0	313	295	7	-9	3	-2	23	13	-23	-1	5	3	492	491	8
-9	1	-1	114	137	21	-7	11	0	153	135	20	-5	5	0	435	387	7	-9	1	-2	81	6	-42	-1	7	3	298	280	9
-9	3	-1	152	162	15	-7	1	3	790	771	14	-5	7	0	111	107	20	-9	1	7	80	68	-43	-1	9	3	267	256	11
-9	5	-1	353	317	10	-7	3	3	202	182	12	-5	9	0	325	315	10	-11	7	3	44	33	-44	-1	1	1	123	130	23
-9	7	-1	211	162	15	-7	5	3	336	317	8	-5	11	0	124	113	21	-11	3	3	0	23	-1	-1	5	-2	731	705	15
-9	1	5	160	180	14	-7	7	3	149	182	18	-5	1	2	242	234	7	-11	7	2	63	64	-63	-1	9	-2	950	896	18
-3	7	-2	508	522	9	-7	9	3	899	868	16	-5	3	2	119	68	14	-3	11	3	63	3	-48	-1	11	-2	163	184	16
-3	5	-2	1224	1141	25	-7	11	3	326	357	12	-5	5	2	137	117	13	-3	11	3	65	3	-48	-1	11	-2	155	141	9
-3	3	-2	458	475	8	-7	1	1	352	311	7	-5	7	2	116	76	18	-11	5	1	95	32	-32	-1	1	2	255	252	7
-9	1	0	628	648	14	-7	3	1	302	300	8	-5	9	2	628	644	14	-11	3	5	96	70	-29	-1	3	2	255	252	7
-3	1	-2	304	295	7	-7	5	1	628	627	11	-5	11	2	296	272	12	-11	1	0	0	12	-1	-1	5	2	806	701	13
-9	5	0	120	79	21	-7	7	1	94	69	26	-5	3	1	661	603	12	-11	3	-1	86	18	-29	-1	9	2	304	274	8
-3	11	4	156	142	17	-7	9	1	257	205	11	-5	1	1	404	381	7	-13	3	4	70	103	-70	-1	11	2	138	151	19
-9	9	0	1056	1017	18	-7	11	1	307	321	12	-5	5	1	972	890	17	-13	1	4	0	66	-1	-1	3	-1	491	505	7
-9	1	4	500	472	13	-7	1	2	446	456	7	-5	7	1	135	122	15	-13	3	2	60	16	-60	-1	3	-1	78	68	19
-9	3	4	323	326	9	-7	3	2	528	488	8	-5	9	1	462	425	8	-13	3	5	103	114	-30	-1	5	-1	627	684	11
-9	5	4	204	180	13	-7	5	2	259	267	9	-5	11	1	282	247	11	-13	1	5	74	42	-44	-1	7	-1	135	149	12
-9	7	4	238	235	12	-3	3	-3	427	414	8	-4	12	1	1123	1200	22	-3	9	2	685	655	15	-1	9	-1	855	908	19





Table 1. Observed and calculated structure factors for 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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
9	7	-4	242	234	12	-11	5	4	286	271	11	-9	9	0	1004	1019	18	-6	6	0	738	711	17	-3	11	0	123	77	22						
9	9	-4	717	759	18	-11	7	4	150	130	18	-9	1	5	167	180	12	-6	4	0	413	418	7	-3	13	0	399	406	12						
9	5	-1	1014	1033	19	-11	1	1	578	615	16	-9	3	5	120	95	17	-6	2	0	427	351	7	-3	1	2	236	271	6						
9	7	-1	408	418	10	-11	3	1	399	424	9	-9	3	-1	72	15	20	-6	0	0	1130	1117	23	-3	3	2	319	287	6						
9	9	-1	198	208	16	-11	5	1	116	32	24	-9	1	1	511	542	7	-6	12	1	438	409	10	-3	5	2	485	461	8						
9	1	-3	191	171	12	-11	1	5	237	267	11	-9	1	13	0	606	618	14	-6	10	1	719	777	14	-3	7	2	106	75	17					
9	3	-3	202	190	12	-11	3	0	238	254	13	-9	3	-1	151	162	15	-6	8	1	787	742	16	-3	9	2	690	654	14						
9	5	-3	440	460	9	-11	5	0	636	618	12	-9	5	-1	310	318	10	-6	6	1	1191	1138	26	-3	11	2	446	415	11						
9	7	-3	239	255	12	-11	3	6	314	295	11	-9	7	-1	193	162	15	-6	4	1	773	799	14	-3	1	-1	784	780	12						
9	9	-3	380	411	11	-11	5	6	133	166	21	-9	1	6	219	252	14	-6	2	1	619	682	12	-3	3	1	342	331	7						
9	1	-2	187	142	12	-11	1	-1	241	225	16	-9	3	6	427	401	9	-6	0	1	642	580	10	-3	5	-1	1323	1336	24						
9	3	-2	124	109	17	-10	6	-1	483	464	10	-8	1	11	0	566	550	11	-5	1	1	653	605	9	-3	7	-1	126	152	17					
9	5	-2	885	850	16	-10	4	-1	193	174	22	-8	6	-2	805	808	15	-5	3	1	393	382	6	-3	9	-1	558	557	9						
9	7	-2	343	373	10	-10	2	-1	477	524	14	-8	4	-2	287	262	11	-5	5	1	908	892	17	-3	11	-1	340	338	10						
9	9	-2	246	250	14	-10	6	0	688	619	12	-8	2	-2	545	537	9	-5	7	1	161	122	13	-3	1	3	532	533	9						
10	6	-2	591	599	9	-10	6	0	434	429	10	-8	8	-2	1823	1844	30	-5	9	1	425	426	8	-3	3	3	490	470	10						
10	4	-2	1045	1047	17	-10	4	0	457	460	13	-8	6	-1	1040	1012	20	-5	11	2	227	234	8	-3	5	3	799	746	15						
10	2	-2	261	235	10	-10	2	0	1064	1132	21	-8	4	-1	584	585	11	-5	3	2	111	68	14	-3	9	3	223	203	11						
10	0	-2	466	475	8	-10	0	0	1064	1132	21	-8	4	-1	584	585	11	-5	3	2	111	68	14	-3	9	3	223	203	11						
10	8	-1	217	221	15	-10	8	1	234	221	14	-8	2	-1	669	721	18	-5	5	2	149	117	12	-3	1	-2	250	296	10						
10	6	-1	188	236	14	-10	6	1	211	236	14	-8	0	-1	1218	1415	33	-5	7	2	131	75	15	-3	3	-2	459	476	10						
10	4	-1	1154	1245	21	-10	4	1	1253	1245	22	-8	10	0	980	980	20	-5	9	2	646	642	12	-3	5	-2	1150	1143	26						
10	2	-1	387	359	9	-10	2	1	339	359	9	-8	8	0	554	557	14	-5	11	2	322	271	11	-3	7	-2	495	523	8						
10	0	-1	630	718	11	-10	0	1	695	718	13	-8	6	0	106	87	23	-5	1	0	136	156	11	-3	9	-2	130	138	20						
10	6	0	600	619	12	-10	8	2	270	250	12	-8	4	0	1900	1906	28	-5	3	0	296	296	7	-3	11	-2	225	240	13						
10	4	0	402	429	9	-10	6	2	602	599	11	-8	2	0	1388	1400	28	-5	5	0	409	388	7	-3	1	4	219	181	9						
10	2	0	428	460	9	-10	4	2	1099	1047	19	-8	0	0	947	1010	18	-5	7	0	125	107	16	-3	3	4	92	64	22						
10	0	0	1007	1132	20	-10	2	2	247	235	10	-8	10	1	644	610	14	-5	9	0	310	316	10	-3	5	4	871	890	14						
10	6	1	433	464	10	-10	2	2	505	475	8	-8	8	1	1039	939	19	-5	5	3	246	243	9	-3	7	4	159	188	15						
10	4	1	166	174	15	-11	3	-1	30	19	-29	-8	6	1	977	913	19	-5	7	3	418	395	8	-3	9	4	273	247	13						
10	2	1	455	524	12	-11	1	6	58	66	-57	-8	4	1	2271	2247	27	-5	9	3	626	602	14	-3	11	4	164	142	17						
10	0	1	465	473	11	-11	1	0	40	12	-39	-8	2	1	1062	972	17	-5	11	3	201	232	15	-3	1	-3	226	206	10						
10	0	2	425	414	11	-11	5	5	73	119	-72	-8	0	1	1065	1052	17	-5	1	-1	481	608	16	-3	3	-3	420	415	7						
10	2	2	221	176	14	-11	3	5	84	70	-32	-8	8	2	1870	1769	30	-5	5	-1	748	733	14	-3	5	-3	625	601	11						
11	1	1	229	225	14	-11	7	1	94	104	-38	-8	6	2	1517	1369	29	-5	7	-1	364	343	9	-3	7	-3	438	417	9						
11	3	-6	265	295	13	-11	1	4	0	79	-1	-8	4	2	803	750	14	-5	9	-1	217	202	13	-3	9	-3	298	281	11						
11	5	-6	128	166	21	-11	7	2	100	64	-37	-8	2	2	1014	964	16	-5	11	-1	333	328	11	-2	10	-3	365	413	10						
11	3	0	283	254	11	-11	7	3	93	32	-32	-8	0	2	3280	3346	24	-5	1	4	496	472	7	-2	8	-3	392	353	10						
11	5	0	680	618	13	-11	3	3	79	23	-38	-7	1	2	447	455	6	-5	3	4	524	494	8	-2	6	-3	393	399	8						
11	1	-5	228	267	13	-11	1	3	84	50	-34	-7	3	2	522	487	10	-5	5	4	680	634	15	-2	4	-3	217	218	11						
11	3	-1	625	615	15	-13	1	5	48	42	-47	-7	5	2	290	267	8	-5	9	4	680	634	15	-2	2	-3	559	558	9						
11	1	-1	437	424	9	-13	1	4	35	66	-34	-7	7	2	96	33	26	-5	11	4	351	339	11	-2	0	-3	571	616	12						
11	7	-1	117	104	26	-13	1	-4	22	66	-22	-7	9	2	1068	1037	19	-5	1	-2	460	458	9	-2	12	-2	219	205	14						
11	3	-4	248	270	13	-13	3	-2	0	16	-1	-7	11	2	245	216	14	-5	3	-2	165	170	12	-2	10	-2	958	935	18						
11	5	-4	235	271	13	-13	3	-5	96	113	-31	-7	1	1	347	312	7	-5	5	-2	139	166	17	-2	8	-2	679	677	9						

11	7	-4	114	130	26	13	1	-5	0	42	-1	-7	3	1	288	301	8	-5	9	-2	719	693	16	-2	6	-2	690	631	11	
11	1	-2	164	149	16	11	7	-3	31	32	-31	-7	5	1	593	629	12	-5	1	5	299	300	8	-2	4	-2	436	426	9	
11	5	-2	108	111	29	11	7	-2	45	64	-45	1	9	0	1055	1109	20	-5	3	5	91	82	26	-2	2	-2	435	414	7	
11	1	-3	109	50	23	11	3	-2	82	103	-43	-7	9	1	257	205	11	-5	5	5	1068	989	20	-2	0	-2	1949	1940	20	
11	5	-3	442	438	9	11	5	-1	0	79	-1	-7	11	1	305	322	11	-5	7	5	182	162	14	-2	12	-1	207	157	15	
12	6	-3	201	211	16	11	5	-5	82	119	-37	-7	3	3	196	181	10	-4	10	-3	965	935	16	-2	8	-1	198	156	11	
12	4	-3	1861	1942	35	11	3	-5	0	70	-1	-7	5	3	354	316	8	-4	8	-3	430	378	10	-2	6	-1	732	690	14	
12	2	-3	289	276	12	11	1	0	35	12	-35	-7	7	3	188	182	13	-4	6	-3	682	633	10	-2	4	-1	1531	1650	21	
12	0	-3	469	464	10	11	1	6	103	66	34	-7	9	3	901	867	16	4	4	3	2521	2480	28	-2	2	1	489	510	7	
12	6	-2	469	464	10	11	3	1	49	19	-49	-7	11	3	348	356	11	-4	2	-3	1474	1499	28	-2	0	-1	1286	1177	18	
12	4	-2	768	806	20	9	3	-2	86	88	-34	-7	1	0	156	155	12	-4	0	-3	690	678	13	-2	12	0	464	425	9	
12	2	-2	523	508	10	9	3	-1	72	28	-36	1	7	0	233	183	9	-4	10	-2	993	973	17	-2	10	0	1100	1191	20	
12	0	-2	780	800	14	9	1	-1	75	22	-32	-7	5	0	807	826	16	-4	8	-2	1051	1116	18	-2	8	0	1008	1012	20	
12	4	-1	163	177	24	9	7	0	91	58	-34	-7	7	0	307	308	10	-4	6	-2	579	534	8	-2	6	0	607	671	11	
12	2	-1	526	546	15	9	7	-5	0	39	-1	-7	9	0	221	200	13	-4	4	-2	2374	2318	25	-2	4	0	1677	1698	19	
12	0	-1	1720	1755	35	9	5	-5	0	13	-50	-7	11	0	165	136	17	-4	2	-2	1240	1148	25	-2	2	0	740	719	11	
12	2	0	658	734	14	9	3	-6	51	13	-50	-7	11	0	149	147	12	-4	0	-2	1718	1714	24	-2	0	0	1269	1598	13	
12	0	0	1135	1188	22	9	5	-6	74	6	-73	-7	3	4	101	91	19	-4	12	-1	620	616	12	-1	3	0	155	175	8	
13	1	-1	250	244	13	9	1	-7	0	19	-1	-7	5	4	271	279	10	-4	10	-1	278	282	11	-1	5	0	165	135	9	
13	1	-2	163	177	18	7	7	-2	87	33	-27	-7	7	4	385	372	9	-4	8	-1	1839	1754	26	-1	7	0	240	183	9	
13	3	-4	134	103	22	7	7	-1	74	69	-38	-7	9	4	411	355	10	-4	6	-1	1749	1706	23	-1	11	0	565	551	13	
13	1	-3	333	309	11	7	3	0	78	41	-26	-7	1	-1	506	627	13	-4	4	-1	1749	1706	23	-1	11	0	565	551	13	
13	3	-3	219	189	10	7	7	-4	0	88	-1	1	5	0	163	135	9	-4	0	-1	2416	2526	20	-1	1	1	528	541	7	
13	1	3	342	309	10	7	7	1	26	42	-25	-7	3	0	183	174	6	-4	12	0	594	638	12	-1	5	1	858	879	15	
13	3	3	189	189	15	7	5	1	26	42	-25	-7	3	0	183	174	6	-4	12	0	594	638	12	-1	5	1	858	879	15	
13	4	4	154	103	18	7	7	2	96	57	-66	-7	1	-1	592	589	11	-4	10	0	504	569	12	-1	7	1	323	348	8	
13	1	2	190	177	15	7	3	-7	56	60	-55	-7	1	5	216	165	11	-4	8	0	1665	1624	27	-1	9	1	580	563	9	
13	3	2	103	16	28	5	3	1	47	11	-46	-7	3	5	183	189	12	-4	6	0	761	721	14	-1	13	1	473	475	10	
13	3	5	174	113	16	-9	9	2	47	88	-46	-7	5	5	393	347	9	-4	4	0	410	440	6	-1	1	-1	482	506	8	
12	2	1	517	546	10	-9	9	3	438	411	9	-7	5	-2	156	170	17	-4	6	1	481	471	10	-1	11	-1	482	508	9	
12	0	1	1819	1755	33	-9	1	1	103	22	20	1	1	0	266	269	4	-4	4	1	2625	2445	20	-1	13	-1	615	689	12	
12	6	2	492	464	10	-9	1	-1	549	564	19	-6	8	-2	476	399	9	-4	2	1	2336	2282	18	-1	1	2	180	140	8	
12	4	2	885	806	17	-9	5	1	1014	1033	19	-6	6	-2	620	585	15	-4	0	1	608	769	10	-1	3	2	266	251	7	
12	2	2	519	508	10	-9	7	1	404	418	9	-6	4	-2	275	309	10	-3	1	1	465	393	7	-1	5	2	813	700	13	
12	0	2	782	800	17	-9	9	1	219	208	14	-6	2	-2	442	444	8	-3	3	3	1	128	65	11	-1	7	2	307	274	8
12	6	3	199	211	16	-9	1	4	505	471	7	-6	0	-2	608	638	11	-3	5	1	548	492	11	-1	9	2	222	198	12	
12	4	3	1988	1942	33	-9	3	4	326	325	9	-6	10	-1	851	838	16	-3	7	1	140	109	13	-1	11	2	145	150	18	
12	3	3	321	276	11	-9	5	4	190	180	13	-6	8	-1	875	872	14	-3	9	1	664	594	12	-1	1	-2	1156	1122	21	
12	0	3	846	837	16	-9	7	4	262	234	12	-6	6	-1	774	660	13	-3	11	1	638	665	17	-1	3	-2	136	69	12	
11	5	3	468	438	9	-9	9	4	788	759	16	-6	4	-1	1192	1173	26	-3	13	1	218	226	15	-1	5	-2	732	706	14	
11	1	2	140	149	18	-9	1	0	609	649	12	-6	2	-1	333	419	11	-3	3	0	440	499	5	-1	9	-2	949	898	18	
11	3	2	118	103	21	-1	7	-1	307	349	8	-6	0	-1	1343	1708	28	-3	3	0	149	121	10	-1	11	-2	191	185	16	
11	5	2	116	111	24	-9	5	0	113	79	23	-6	10	0	491	492	9	-3	5	0	462	448	7	-1	1	3	112	70	15	
11	3	4	278	270	11	1	5	-1	868	880	15	-6	8	0	203	190	14	-3	9	0	679	696	14	-1	3	3	259	215	8	

Table 1. Observed and calculated structure factors for 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	5	3	516	490	9	1	5	-3	491	491	6	4	10	-4	952	973	18	6	2	-2	612	681	11	9	5	1	326	317	11
-1	7	3	319	279	9	1	7	-3	302	280	9	4	8	-4	1089	1116	19	6	0	-2	591	581	11	9	7	1	199	162	15
-1	9	3	257	255	12	1	9	-3	258	256	11	4	6	-4	555	534	7	7	1	-2	429	456	6	9	1	-6	254	252	12
-1	11	3	156	130	18	1	11	-3	161	130	19	4	4	-4	2302	2319	26	7	3	-2	493	488	7	9	3	-6	430	402	10
-1	1	-3	471	507	7	1	1	3	463	506	6	4	2	-4	1156	1149	25	7	5	-2	273	267	9	10	6	-6	490	465	10
-1	3	-3	399	410	7	1	3	3	365	409	7	4	0	-4	1717	1714	24	7	9	-2	1004	1039	19	10	4	-6	164	174	17
-1	5	-3	909	857	14	1	5	3	895	855	15	4	12	-3	606	616	12	7	11	-2	235	217	13	10	0	-6	489	525	11
-1	7	-3	159	133	16	1	9	3	224	207	13	4	10	-3	275	283	11	7	1	-1	360	311	7	10	0	-6	475	472	10
-1	9	-3	206	207	14	1	11	3	154	155	17	4	8	-3	2214	2177	28	7	3	-1	298	300	8	10	6	-5	680	620	16
-1	11	-3	112	155	28	1	1	-4	297	265	8	4	6	-3	1815	1754	26	7	5	-1	605	627	13	10	4	-5	420	430	9
-1	1	4	316	264	8	1	3	-4	103	113	22	4	4	-3	1686	1706	23	7	7	-1	95	69	25	10	2	-5	493	460	9
-1	3	4	101	113	19	1	5	-4	108	119	23	4	2	-3	145	137	12	7	9	-1	267	205	11	10	0	-5	1111	1131	21
0	2	0	1858	1636	12	2	10	-4	352	412	10	4	12	-2	562	638	13	7	11	-1	264	321	13	10	8	-4	197	221	16
0	8	-4	1258	1273	22	2	8	-4	396	352	9	4	10	-2	511	568	8	7	3	-3	190	182	10	10	4	-4	1230	1245	21
0	6	-4	588	529	10	2	6	-4	403	400	8	4	8	-2	1621	1624	28	7	5	-3	320	317	9	10	2	-4	354	358	9
0	4	-4	858	808	17	2	4	-4	403	400	8	4	6	-2	740	721	16	7	7	-3	185	182	13	10	0	-4	672	719	12
0	2	-4	3019	2889	25	2	2	-4	213	218	11	4	4	-2	405	441	7	7	9	-3	865	868	16	10	8	-3	257	250	12
0	10	-3	305	313	11	2	0	-4	579	616	10	4	2	-2	1544	1516	20	7	11	-3	338	357	11	10	6	-3	575	598	10
0	8	-3	1282	1163	21	2	12	-3	214	206	15	4	12	-2	3544	3409	17	7	1	0	156	154	12	10	4	-3	1101	1046	19
0	6	-3	1823	1729	26	2	10	-3	924	933	19	4	10	-1	1104	1200	22	7	5	0	793	825	15	10	2	-3	241	235	11
0	4	-3	2096	2010	24	2	8	-3	638	678	12	12	2	-4	507	508	13	7	9	0	229	200	13	10	0	-3	506	475	11
0	2	-3	750	802	14	2	6	-3	669	632	12	4	6	-1	472	471	8	7	11	0	130	135	21	11	5	-3	441	439	9
0	12	-2	832	896	18	2	2	-3	433	427	9	4	4	-1	2505	2445	20	7	1	-4	109	147	19	11	1	-2	124	149	21
0	10	-2	1894	1911	31	2	0	-3	1966	1941	20	4	0	-1	2209	2282	18	7	3	-4	98	91	19	11	3	-2	157	103	19
0	8	-2	1001	881	16	2	12	-2	184	157	18	5	1	-1	698	603	11	7	5	-4	266	280	10	11	5	-2	137	111	19
0	6	-2	1321	1183	26	2	10	-2	895	944	16	5	3	-1	375	381	6	7	9	-4	355	373	9	11	3	-4	272	271	11
0	4	-2	2435	2291	21	2	8	-2	173	156	12	5	5	-1	909	890	16	7	1	1	631	626	14	11	5	-4	287	271	12
0	2	-2	2478	2472	18	2	6	-2	695	691	14	5	7	-1	131	122	16	7	3	1	249	285	11	11	1	-1	624	614	12
0	0	-2	201	161	8	2	4	-2	1599	1648	20	5	9	-1	429	425	9	7	9	1	568	588	9	11	3	-1	400	423	10
0	12	-1	1008	1001	21	2	2	-2	478	509	7	5	11	-1	242	247	12	7	1	-5	183	165	14	11	7	-1	137	103	20
0	10	-1	811	734	17	2	0	-2	1229	1179	18	5	1	-2	223	234	8	7	3	-5	195	189	13	11	5	-5	245	267	12
0	8	-1	1536	1537	27	2	12	-1	459	426	9	5	3	-2	109	68	15	7	5	-5	363	348	9	11	1	-5	110	119	26
0	6	-1	1328	1373	24	2	10	-1	1070	1194	21	5	5	-2	99	117	19	7	7	-5	220	192	14	11	3	0	245	253	13
0	4	1	3110	3165	18	2	8	1	957	1012	18	5	7	?	87	76	25	7	9	-5	152	159	21	11	5	0	626	616	11
0	2	-1	1878	1815	15	2	6	-1	610	670	13	5	9	-2	593	644	9	7	1	2	187	174	14	11	3	-6	309	296	12
0	0	-1	2409	2659	12	2	4	-1	1637	1697	18	5	11	-2	289	272	11	7	3	2	348	352	10	11	5	-6	144	166	19
0	12	0	586	522	15	2	2	-1	707	720	11	5	1	0	139	156	12	7	5	2	165	170	16	11	1	1	245	225	13
0	10	0	542	497	12	2	0	-1	1283	1599	13	5	3	0	295	295	7	7	7	2	105	57	30	12	2	-6	690	734	17
0	8	0	3584	3429	24	3	1	-1	376	394	5	5	5	0	416	387	7	8	6	-6	806	808	16	12	0	-6	1185	1188	23
0	6	0	590	533	12	3	5	-1	533	493	9	5	7	0	128	107	16	8	4	-6	275	263	12	12	4	-5	161	177	18
0	4	0	170	152	8	3	7	-1	112	109	15	5	9	0	305	315	10	8	2	-6	544	536	9	12	2	-5	527	546	10
0	10	-4	52	54	-52	3	9	-1	596	595	13	5	11	0	143	113	18	8	0	-6	1796	1843	31	12	0	-5	1869	1756	33

