

The structures of high-spin (298, 150 K) and low-spin (90 K) states and the spin phase-transition mechanism of a spin crossover complex; tris(α -picolylamine)iron(II) chloride–ethanol

M. Mikami, M. Konno and Y. Saito

This electronic document was scanned from an archival copy of material deposited to accompany a paper published in an IUCr journal. In many cases the only accessible copy was a microfilm of a poor-quality original.

34780

298 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (X10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L= 0, 0			K.L= 4, 0			K.L= 8, 0			K.L= 13, 0		
1	1946	2207	0	1152	1052	0	572	583	2	188	184
2	259	167	1	266	277	1	699	684	3	420	445
3	290	250	2	1506	1523	2	487	485	4	147	162
4	625	613	3	882	888	3	1198	1204	5	284	283
7	301	289	4	705	690	4	720	750			
8	301	308	6	209	214	5	430	450	2	492	473
10	278	265	7	176	191	10	98	60	3	348	329
11	109	126	9	129	145	K.L= 9, 0			4	333	330
K.L= 1, 0			K.L= 5, 0			2	611	581	5	400	406
1	173	137	1	1122	1095	3	452	450	6	441	451
2	415	325	2	1229	1248	4	617	618	7	216	211
3	435	420	3	1179	1231	5	251	242	8	171	173
4	317	336	4	340	337	6	114	121	11	94	103
5	559	472	5	314	324	8	257	267	12	126	112
6	96	117	6	265	250	9	335	336	K.L= 14, 0		
10	172	208	7	418	413	10	157	156	0	347	375
12	117	69	8	370	353	11	110	102	1	203	226
13	109	100	9	286	292	13	84	63	2	409	390
K.L= 2, 0			10	157	163	K.L= 10, 0			3	106	82
0	155	134	11	186	157	1	790	770	4	207	194
1	135	130	K.L= 6, 0			2	538	540	K.L= 15, 0		
2	334	337	0	2170	2217	3	81	75	1	191	227
3	462	457	1	113	112	4	216	189	2	314	317
4	338	375	2	105	124	5	144	142	3	98	68
6	324	322	3	191	178	6	217	230	5	162	180
7	116	92	4	134	158	7	183	155	K.L= 16, 0		
8	279	235	5	418	405	8	114	101			
K.L= 3, 0			6	175	192	K.L= 11, 0			1	428	416
1	279	249	10	104	103	1	264	282	2	405	419
2	1754	1829	11	122	63	2	208	212	6	241	255
3	222	207	K.L= 7, 0			3	127	138	7	267	278
5	246	241	1	1630	1595	4	95	109	K.L= 17, 0		
6	228	226	2	202	185	5	91	106			
7	383	382	3	564	549	6	161	154	1	223	257
8	96	120	4	204	197	K.L= 12, 0			3	340	354
11	128	121	5	226	249	0	425	425	4	291	308
			6	159	142	1	688	666	5	228	206
			9	133	95				6	309	306
									7	217	243

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-12	120	117	2	174	179	K,L= 12,	1		-3	348	350
-11	111	122	3	314	330				-2	278	282
-10	156	141	4	405	419	-8	159	146	-1	631	613
-9	239	267	6	93	38	-6	193	184	0	459	448
-8	244	259	7	123	91	-5	199	195	2	408	405
-7	185	192				-3	554	548	3	214	213
-6	333	368	K,L= 10,	1		-2	922	914	4	139	174
-5	447	462				-1	76	109	5	191	213
-4	745	743	-7	92	91	0	235	243	6	127	144
-2	314	323	-6	410	402	1	162	142	8	142	143
-1	556	542	-5	143	167	2	573	581	9	201	190
0	911	926	-4	195	172	3	244	262	10	134	135
1	139	156	-3	189	188						
2	117	151	-2	725	731	K,L= 13,	1		K,L= 16,	1	
5	680	706	-1	832	810						
6	546	549	0	148	663	-7	171	152	-7	121	119
7	212	222	1	1147	1143	-5	193	205	-5	82	50
8	169	181	2	716	700	-3	559	563	-4	236	234
9	164	151	3	139	147	-2	329	336	-3	523	522
			4	183	171	-1	360	363	0	263	257
K,L= 8,	1		5	101	87	0	318	314	1	255	273
			6	233	219	2	308	334	2	238	262
-10	180	167	7	201	202	3	348	376	3	213	210
-8	139	190	8	136	142	4	102	104	4	488	501
-7	150	153				5	242	267	5	328	346
-6	305	302	K,L= 11,	1		6	185	212			
-5	362	350							K,L= 17,	1	
-4	394	411	-12	113	97	K,L= 14,	1				
-3	118	120	-11	143	145				-5	194	205
-2	64	57	-10	178	173	-10	108	129	-4	86	105
0	828	821	-9	160	171	-8	112	103	-2	153	137
1	621	628	-8	93	99	-4	297	308	-1	128	147
2	165	149	-7	328	355	-3	343	348	0	101	90
3	82	73	-6	393	397	-2	425	429	3	157	135
4	74	55	-4	409	409	-1	303	305	4	116	117
5	104	139	-3	937	921	0	366	377			
7	85	92	-2	778	767	1	391	396	K,L= 18,	1	
8	141	157	-1	249	244	2	170	175			
			0	214	214	3	165	191	-5	193	192
K,L= 9,	1		1	440	422	4	279	289	-4	113	85
			2	256	235	5	234	212	-3	116	125
-7	193	205	3	330	523	7	138	122	-2	376	382
-6	469	456	4	368	375				0	187	179
-5	249	254	5	227	246	K,L= 15,	1		1	139	114
-4	70	75	6	245	237				2	131	134
-3	96	102	7	345	355	-9	267	260	3	225	231
-2	328	309	8	319	324	-8	336	307	4	160	148
-1	599	603	9	124	80	-7	195	210	5	172	160
0	760	766	11	134	125	-6	135	106	6	136	129
1	137	126	12	129	126	-5	109	127			

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 19, 1			7	145	137	-2	85	17	K,L= 3, 2		
						-1	1388	1309			
-9	142	143	K,L= 24, 1			0	665	681	-11	278	306
-8	157	186				1	1911	1926	-7	105	105
-7	247	256	-3	143	120	2	408	441	-6	632	671
-6	166	152	-1	251	248	3	407	410	-5	590	569
-5	187	159	0	306	301	4	269	269	-4	268	251
-4	288	283	1	335	345	5	415	412	-3	741	735
-3	364	379	2	295	310	6	334	324	-2	1071	1046
-2	105	101	3	140	178	7	162	149	-1	774	765
0	124	143				8	169	164	0	453	424
1	143	165	K,L= 25, 1			9	241	252	1	703	716
2	234	267				K,L= 1, 2			2	952	962
3	265	276	-8	95	79				3	178	178
4	186	187	-2	120	125	-12	124	123	4	358	353
9	89	85				-9	249	258	5	212	210
10	130	129	K,L= 26, 1			-8	335	333	6	317	307
K,L= 20, 1			-7	104	77	-7	225	249	7	577	568
			0	124	95	-6	432	445	8	190	197
-5	171	147				-5	682	697	K,L= 4, 2		
-1	311	331	K,L= 27, 1			-4	970	982			
0	402	398				-3	1077	1057	-12	151	132
1	245	253	-5	112	109	-2	162	232	-11	116	126
2	216	225	-1	81	94	-1	1012	1054	-8	122	131
3	130	191				0	310	284	-7	107	73
6	166	165	K,L= 28, 1			1	329	310	-6	361	365
K,L= 21, 1						2	290	291	-5	492	501
			-4	104	107	3	167	154	-4	82	77
-6	153	150	0	112	141	5	397	408	-3	170	211
-5	137	160	3	106	116	6	312	316	-2	852	818
-4	146	146	4	136	134	9	201	178	-1	806	741
-3	114	123	5	106	120	K,L= 2, 2			0	177	215
2	115	123	K,L= 29, 1						1	256	298
6	154	160				-7	96	78	2	1280	1277
K,L= 22, 1			-5	85	57	-6	507	506	3	1033	1050
			-2	103	116	-5	73	430	4	273	259
-8	75	63	K,L= 0, 2			-4	229	246	5	291	291
-3	177	161				-3	516	533	6	252	227
-2	111	98	-12	180	194	-2	1401	1392	7	246	243
2	132	134	-11	315	295	-1	65	49	8	97	122
4	109	102	-10	300	298	0	160	159	K,L= 5, 2		
K,L= 23, 1			-9	305	322	1	278	270			
			-7	409	443	2	376	368	-11	110	123
-4	200	184	-6	224	224	4	587	574	-10	369	358
-3	131	140	-5	231	231	6	98	129	-9	475	484
6	128	119	-4	216	237	7	165	170	-8	539	536
			-3	590	573	8	111	119	-7	554	549
									-6	572	572

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-5	80	57	K,L= 8,	2		-2	219	215	-5	529	536
-4	318	292				-1	207	211	-4	688	686
-3	509	497	-13	115	86	0	655	636	-3	501	492
-2	1484	1453	-7	156	158	1	649	633	-2	96	93
-1	282	269	-6	258	254	2	317	324	-1	338	329
0	329	324	-5	73	79	4	152	150	0	243	248
1	255	267	-4	471	466	7	112	98	1	202	207
2	397	424	-3	315	322	8	135	154	3	128	121
4	520	514	-2	391	384				5	291	301
5	74	61	-1	449	437	K,L= 11,	2		6	391	419
7	221	201	0	594	555				7	281	277
8	227	228	1	325	367	-9	213	213	8	136	125
9	155	146	2	421	408	-8	230	239			
			3	588	590	-7	176	192	K,L= 14,	2	
K,L= 6,	2		4	867	860	-5	84	101			
			5	528	552	-4	105	87	-10	121	137
-10	97	86	6	244	236	-2	474	480	-9	88	88
-9	133	132				-1	474	435	-7	186	211
-7	258	273	K,L= 9,	2		0	79	47	-6	104	107
-6	270	211				1	111	111	-5	317	329
-5	98	87	-11	137	111	2	391	364	-1	151	135
-4	195	165	-10	144	135	3	255	291	0	510	526
-3	334	355	-9	281	285	4	122	120	1	691	694
-2	738	716	-8	370	386	5	100	96	2	315	317
-1	258	235	-7	441	447	7	146	148	3	184	169
0	347	352	-6	243	253				6	90	81
1	438	440	-5	89	104	K,L= 12,	2		7	96	106
2	405	380	-4	195	204				8	125	118
3	319	318	-3	478	462	-7	153	144			
4	257	280	-2	366	384	-5	250	262	K,L= 15,	2	
5	219	227	-1	464	454	-4	375	379			
6	107	122	0	570	569	-3	224	234	-6	86	98
8	134	106	1	356	353	-2	564	568	-5	103	120
			3	152	205	-1	216	233	-4	399	398
K,L= 7,	2		4	201	189	0	192	199	-2	130	135
			5	236	238	1	73	81	-1	88	47
-9	179	172	6	168	185	2	300	302	1	176	178
-8	233	258	8	150	149	3	203	209	2	93	83
-7	172	151	10	172	149	4	265	252	4	189	168
-6	185	204	11	90	93	5	101	112			
-5	254	257				6	119	110	K,L= 16,	2	
-4	364	368	K,L= 10,	2							
-3	265	250				K,L= 13,	2		-11	97	80
-2	218	195	-10	198	215				-7	137	133
0	336	311	-9	95	118	-12	116	108	-6	278	289
1	142	148	-7	301	304	-10	139	132	-4	194	177
2	317	323	-6	334	336	-9	177	162	-2	145	139
3	303	290	-5	188	192	-8	160	158	-1	284	290
6	88	97	-4	114	117	-7	256	268	0	240	242
7	87	62	-3	254	253	-6	264	268	1	214	238

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
2	343	380	K,L= 21,	2		K,L= 27,	2		K,L= 3,	3	
3	155	154									
7	86	115	-9	159	147	-6	111	117	-11	160	152
			-8	166	167	-5	103	122	-9	278	308
K,L= 17,	2		-7	126	132				-8	347	351
			-5	236	205	K,L= 28,	2		-7	602	624
-8	203	191	-4	322	325				-6	616	615
-7	318	268	-3	119	97	-4	101	97	-5	401	401
-6	364	370	-1	300	298				-4	394	376
-5	253	251	0	164	164	K,L= 30,	2		-3	1173	1173
-3	278	293	6	107	116				-2	327	323
-2	143	148				0	137	131	-1	141	159
0	111	117	K,L= 22,	2		1	135	139	0	90	94
1	259	244							1	321	317
2	205	209	-4	301	293	K,L= 1,	3		2	368	396
4	192	226	-3	330	318				4	101	112
7	184	196	-2	203	215	-10	111	132	7	227	237
			0	142	157	-9	118	116	8	180	184
K,L= 18,	2		1	242	242	-8	504	504	11	76	76
			3	122	168	-7	702	735			
-6	107	98	4	207	207	-6	701	699	K,L= 4,	3	
-3	280	287	5	171	158	-5	98	103			
-2	224	236				-3	526	505	-9	121	107
-1	265	302	K,L= 23,	2		-2	567	579	-8	111	132
0	143	176				-1	1039	1058	-7	184	185
1	146	140	-9	79	105	0	797	793	-6	149	164
2	312	318	-4	119	111	1	400	397	-5	359	379
3	397	414	-1	150	139	3	335	346	-4	510	488
4	276	298				4	338	338	-3	257	257
5	291	297	K,L= 24,	2		6	132	125	-2	756	752
6	163	177				7	147	151	-1	408	394
			-2	114	75	8	140	99	0	241	252
K,L= 19,	2		3	93	91				1	431	434
						K,L= 2,	3		2	154	170
-7	148	100	K,L= 25,	2					3	375	362
-5	155	142				-12	123	116	6	227	230
-4	286	283	-8	123	101	-8	218	234	8	108	109
-2	252	251				-7	191	173			
-1	178	178	K,L= 26,	2		-6	290	307	K,L= 5,	3	
0	233	237				-4	276	277			
3	185	186	-4	95	78	-3	1438	1398	-10	156	161
4	150	171	-2	123	122	-2	596	624	-9	278	277
			-1	135	168	-1	415	379	-8	425	435
K,L= 20,	2		0	147	154	0	206	210	-7	164	168
			1	121	133	1	139	149	-6	66	56
-9	78	68	2	182	197	2	288	280	-5	261	277
0	163	173	3	160	170	3	629	661	-4	615	625
1	352	361	5	107	106	4	757	757	-3	178	165
			6	122	114	6	366	372	-2	589	577
						7	209	216	-1	636	634

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
0	713	692	K,L= 8, 3	0	322	306	-7	92	67		
1	204	204		1	143	143	-6	81	104		
5	224	249	-11	115	120	2	430	406	-5	122	125
6	81	64	-10	194	203	3	517	518	-4	251	254
			-9	181	169	4	96	77	-3	197	209
K,L= 6, 3			-8	211	211	6	96	57	-2	110	117
			-7	350	342	7	277	285	0	109	101
-12	102	87	-6	129	128	8	119	106	2	117	127
-10	156	127	-4	135	124				3	139	128
-9	292	266	-3	243	245	K,L= 11, 3			4	154	153
-8	249	272	-1	210	217				6	134	116
-7	103	98	1	798	792	-7	440	433			
-6	224	208	2	157	147	-6	854	860	K,L= 14, 3		
-5	172	197	3	114	104	-5	768	761			
-4	239	221	4	164	177	-4	387	369	-13	112	97
-2	202	174	5	386	371	-3	596	568	-12	71	76
-1	208	177	6	74	47	-2	606	611	-9	150	116
0	883	664	9	178	139	-1	319	315	-6	84	97
1	1310	1294				0	268	258	-5	103	103
2	765	754	K,L= 9, 3			1	200	190	-4	166	165
3	467	498				2	262	280	-3	326	326
4	362	362	-11	97	116	4	193	181	-2	179	177
5	339	326	-10	173	164	5	135	130	-1	92	82
6	300	314	-9	116	85	6	134	148	0	154	157
7	165	153	-7	310	303	7	162	130	1	374	355
			-6	433	434	8	185	163	2	80	92
K,L= 7, 3			-5	258	251	9	130	130	3	167	188
			-3	745	723	10	86	75	4	314	293
-12	201	171	-1	446	422				5	303	289
-11	168	121	0	408	412	K,L= 12, 3			8	112	92
-9	252	278	1	159	128						
-8	211	202	2	366	355	-11	128	129	K,L= 15, 3		
-7	376	367	3	207	199	-8	99	111			
-6	267	273	4	100	99	-7	147	147	-10	103	96
-5	842	831	5	99	100	-5	294	290	-9	261	244
-4	971	949	7	117	87	-4	269	271	-8	413	411
-3	325	324	8	121	96	-3	131	132	-7	262	263
-2	88	93				-2	308	329	-5	161	139
-1	304	302	K,L= 10, 3			-1	835	793	-4	374	382
0	309	296				1	264	265	-3	165	167
1	253	259	-12	92	81	2	79	70	-2	345	342
2	286	272	-11	248	245	3	218	212	-1	455	450
3	461	455	-10	212	236	4	200	210	0	485	493
4	256	252	-8	118	108	5	198	188	1	202	194
5	275	262	-6	387	369	6	220	182	2	136	136
6	443	430	-5	384	373	7	136	132	6	167	140
7	158	174	-4	99	113				8	112	124
			-3	209	219	K,L= 13, 3					
			-2	238	236						
			-1	605	610	-8	109	119			

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 16, 3			1	113	119	K,L= 25, 3			-9	195	212
			2	121	94				-8	542	532
-9	143	155	4	87	49	-7	134	149	-7	420	403
-8	90	96				-6	103	110	-6	324	303
-7	129	125	K,L= 20, 3						-5	675	662
-6	225	214				K,L= 26, 3			-4	1145	1138
-4	307	306	-11	113	87				-3	972	962
-3	455	455	-10	122	118	-7	89	78	-2	405	418
-2	176	184	-4	95	137				-1	187	196
-1	95	103	-3	108	98	K,L= 27, 3			0	86	78
0	242	269	-1	144	163				1	80	21
1	306	292	0	158	177	-5	158	162	2	174	195
2	296	299	1	185	194	-4	163	155	3	136	163
3	211	217	2	238	257				4	264	275
4	341	340	3	180	195	K,L= 28, 3			5	328	319
5	341	333	4	181	171				6	196	195
6	195	194	6	85	100	0	110	78	7	207	216
						3	140	133			
K,L= 17, 3			K,L= 21, 3			K,L= 29, 3			K,L= 2, 4		
-8	123	114	-5	211	220	0	106	115	-13	125	119
-6	165	174	-4	159	138				-11	93	75
-4	110	93	2	104	107				-8	442	442
-3	88	101	7	114	102	K,L= 0, 4			-7	256	234
-2	159	165	8	98	76				-6	249	245
2	83	57				-11	168	191	-5	60	118
4	92	131	K,L= 22, 3			-10	206	228	-4	470	454
						-9	576	605	-3	1005	1007
K,L= 18, 3			-3	128	116	-8	279	258	-2	634	657
			-1	115	141	-7	300	306	0	147	148
-7	156	145	0	99	124	-6	410	407	1	139	124
-6	133	133				-5	396	373	3	265	262
-4	192	172	K,L= 23, 3			-4	304	305	4	209	193
-3	207	206				-3	728	690			
-2	181	175	-6	91	128	-1	185	221	K,L= 3, 4		
-1	224	202	-5	259	241	0	317	307			
4	169	169	-4	243	233	1	958	982	-11	210	218
6	117	87	-3	101	136	2	1249	1214	-8	105	43
			2	98	89	3	480	479	-7	255	258
K,L= 19, 3						4	284	300	-6	728	746
			K,L= 24, 3			5	271	260	-5	1067	1083
-10	107	99				6	313	331	-4	1197	1165
-9	192	175	-9	133	124	7	219	199	-3	623	620
-8	257	263	-6	86	84	8	220	218	-2	673	678
-7	174	191	-1	162	139	9	187	189	-1	150	131
-6	287	277	0	256	264				0	708	700
-5	160	151	1	196	224	K,L= 1, 4			1	561	530
-2	354	361	2	199	209				2	469	452
-1	327	357	3	139	151	-11	107	124	3	322	331
0	146	154				-10	83	67	4	161	159

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
5	73	10	-7	399	399	K,L= 9, 4			-7	106	95
6	142	97	-6	426	431				-6	94	107
7	168	142	-5	488	475	-9	99	97	-5	157	153
8	178	153	-4	519	303	-8	259	244	-4	236	233
K,L= 4, 4			-3	232	226	-7	655	661	-3	250	261
-15	105	93	-2	504	495	-6	600	583	-2	419	409
-14	89	81	-1	397	389	-5	435	428	-1	135	136
-11	100	102	0	272	262	-3	393	396	0	202	202
-9	203	195	1	279	291	-2	509	504	1	260	248
-8	143	140	2	278	287	-1	667	653	2	101	96
-7	274	268	3	182	191	0	540	830	4	152	174
-6	80	63	4	185	193	1	196	190	5	277	281
-5	469	454	5	143	124	2	93	72	6	110	139
-3	374	395	7	124	130	5	176	180	7	129	157
-2	254	252	K,L= 7, 4			9	101	114	8	88	76
-1	986	941	-9	165	163	K,L= 10, 4			K,L= 13, 4		
0	634	637	-8	418	449	-11	185	171	-10	174	160
1	236	247	-7	342	337	-10	249	250	-9	204	197
2	513	533	-6	78	75	-9	125	128	-6	526	531
3	192	774	-4	183	177	-6	125	133	-5	762	761
4	253	295	-1	122	111	-5	195	205	-4	722	713
5	99	108	0	179	169	-2	209	195	-3	618	603
6	345	358	1	224	228	-1	153	145	-2	268	281
7	217	211	2	74	15	0	307	305	-1	160	140
K,L= 5, 4			3	156	139	1	244	241	0	195	207
-10	204	228	5	246	242	2	108	61	1	168	156
-9	364	372	K,L= 8, 4			4	224	228	2	322	327
-8	320	317	-13	178	176	5	227	234	3	286	274
-7	545	571	-12	231	223	8	120	118	4	152	143
-6	390	400	-8	227	219	K,L= 11, 4			6	138	143
-5	443	473	-7	253	272	-9	106	111	K,L= 14, 4		
-4	76	49	-6	454	439	-8	159	175	-11	114	117
-3	525	521	-5	429	428	-7	261	264	-10	180	173
-2	773	772	-4	181	174	-6	122	134	-9	333	336
-1	827	813	-3	1019	987	-4	171	182	-8	181	201
0	645	624	-2	1160	1142	-2	304	291	-6	172	175
1	600	605	-1	549	528	-1	281	291	-5	111	95
2	394	381	0	142	153	0	238	253	-4	232	251
5	130	172	1	155	157	2	86	112	-3	150	143
10	98	102	2	216	228	3	192	184	0	254	254
K,L= 6, 4			3	230	224	6	121	115	1	549	555
-14	129	82	4	421	432	K,L= 12, 4			2	238	243
-11	139	116	5	556	571	-10	178	178	4	119	98
-9	237	235	6	302	302	-8	146	136	8	143	117
			7	127	122						

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 15, 4			-1	205	228	-5	141	146	-12	219	221
			0	88	140	-4	239	237	-9	276	275
-8	116	155	2	171	194	-3	127	131	-7	153	169
-6	108	121	3	376	394				-6	92	92
-3	118	123	4	259	249	K,L= 25, 4			-2	444	445
-2	118	134							-1	574	583
0	94	93	K,L= 19, 4			-7	98	110	0	77	102
3	116	95				-6	161	166	1	119	108
5	106	118	-8	120	121	-5	156	161	2	319	335
			-7	137	158	-2	182	163	3	482	488
			-6	120	100	-1	156	152	6	417	415
K,L= 16, 4			-2	167	175				7	284	281
			-1	177	148	K,L= 26, 4			8	121	108
-11	102	96	0	132	131						
-10	102	119				-6	130	116	K,L= 3, 5		
-7	240	243	K,L= 20, 4			3	135	133			
-6	124	110				4	118	100	-9	199	198
-5	448	450	-11	111	90				-8	163	172
-4	157	155	-10	125	95	K,L= 27, 4			-6	210	221
-3	184	185	-4	104	131				-5	947	948
-1	152	154	-3	169	170	-7	79	95	-4	778	781
0	330	324	-2	121	120	-6	114	113	-3	398	408
1	202	196	0	88	90	-3	79	62	-2	438	463
2	212	231	1	222	214	-2	71	81	-1	328	332
3	291	298							0	91	81
4	169	161	K,L= 21, 4			K,L= 29, 4			1	192	187
									2	307	309
K,L= 17, 4			-8	204	205	-4	114	71	3	259	254
			-7	162	165				4	97	112
-11	83	85	-6	215	193	K,L= 1, 5			9	88	89
-10	138	161	-5	216	226						
-7	119	118	-4	264	244	-10	188	185	K,L= 4, 5		
-6	186	183	-1	167	157	-9	146	135			
-5	165	162	0	242	255	-8	394	407	-11	171	165
-4	246	246	1	118	131	-7	639	624	-9	135	129
-3	343	353				-6	465	463	-8	353	345
-2	468	462	K,L= 22, 4			-5	753	744	-7	378	365
-1	204	227				-4	498	489	-6	178	181
3	273	267	-9	98	93	-3	333	306	-5	863	842
4	132	156	-3	154	119	-2	648	669	-4	147	147
7	87	65	-2	115	95	-1	177	190	0	474	461
8	146	136	-1	149	159	1	125	123	1	76	40
			4	113	120	2	144	158	2	201	199
K,L= 18, 4			5	187	196	3	136	124	4	123	111
			6	175	162	4	134	116	5	220	208
-11	138	111									
-9	119	78	K,L= 23, 4			K,L= 2, 5			K,L= 5, 5		
-7	282	281									
-6	258	234	-8	184	180	-14	118	122	-10	273	266
-3	104	90	-7	120	127	-13	181	169	-8	375	369
-2	132	123									

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-7	410	406	3	112	129	K,L= 11,	5		K,L= 14,	5	
-6	72	99	4	279	295						
-5	81	44	5	154	176	-10	289	291	-11	141	122
-4	567	558	7	166	178	-9	133	116	-9	181	148
-3	433	410	8	73	63	-8	98	104	-8	310	318
-2	158	163				-7	269	275	-5	120	79
0	469	472	K,L= 8,	5		-6	586	583	-4	209	208
1	526	488				-5	610	604	-2	163	152
3	539	579	-10	120	122	-4	305	298	-1	169	150
4	169	185	-8	306	265	-3	310	313	0	318	319
5	209	224	-6	208	182	-2	488	476	1	469	476
			-5	257	278	-1	411	402	2	302	291
K,L= 6,	5		-4	100	76	2	199	186	4	192	190
			-3	223	222	3	395	408	5	167	150
-14	94	115	-2	195	207	4	125	108	6	164	160
-13	197	185	-1	164	162	6	120	115			
-12	166	147	0	236	232				K,L= 15,	5	
-10	113	107	1	544	546	K,L= 12,	5				
-9	404	420	2	361	363				-11	117	51
-8	384	386	4	253	256	-11	146	150	-9	164	119
-6	214	193				-10	121	142	-7	290	281
-5	514	511	K,L= 9,	5		-9	92	96	-6	298	298
-4	201	204				-7	477	469	-5	166	160
-3	373	361	-8	122	114	-6	306	318	-4	248	247
-2	501	495	-5	261	254	-5	103	93	-3	237	260
-1	374	349	-4	128	133	-4	95	94	-1	335	329
0	250	272	-2	532	540	-3	83	101	0	492	496
1	517	497	-1	99	82	-2	189	177	1	330	334
2	501	529	0	221	216	-1	463	487			
3	234	240	2	124	154	0	464	459	K,L= 16,	5	
4	251	263	3	134	101	1	100	109			
5	321	337	4	112	126	2	350	357	-13	81	81
6	213	189				3	126	109	-12	113	110
9	135	111	K,L= 10,	5		4	287	283	-8	156	150
						5	179	157	-7	200	199
K,L= 7,	5		-11	225	221	7	124	123	-6	170	174
			-10	238	332				-5	254	236
-12	167	165	-9	176	164	K,L= 13,	5		-3	191	205
-11	171	132	-8	84	134				-2	364	351
-10	166	158	-7	302	314	-9	116	111	-1	224	254
-8	98	74	-6	170	160	-7	194	203	1	209	228
-7	119	119	-5	409	399	-6	130	150	5	131	168
-6	282	275	-4	274	268	-4	399	389	7	95	97
-5	72	103	-3	151	133	-3	293	314			
-4	626	624	-1	120	117	-2	216	213	K,L= 17,	5	
-3	1007	989	0	428	424	-1	237	239			
-2	339	340	2	340	353	0	146	158	-4	228	214
-1	435	422	3	425	429	1	123	89	-3	207	192
0	267	265	4	263	279	4	162	166	-2	123	105
1	148	155	8	182	178	6	98	103	4	89	76

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 18, 5			-4 243 249			1 535 567			-3 731 731		
			-3 164 172			2 789 804			-2 850 869		
-11 108 99						3 273 301			-1 395 396		
-7 213 213	K,L= 24, 5					4 97 65			1 286 301		
-6 203 216						5 217 222			3 145 132		
-3 242 251	-10 113 85					6 162 165			4 210 223		
-2 260 275	2 149 131					7 128 133					
-1 282 283	3 142 139					8 189 158	K,L= 4, 6				
0 195 187						9 179 164					
4 126 134	K,L= 25, 5								-14 146 127		
						K,L= 1, 6			-13 184 160		
K,L= 19, 5			-8 82 100						-12 176 154		
			-7 90 103			-13 113 85			-11 145 158		
-10 114 66			-6 124 123			-11 233 209			-10 317 324		
-9 189 161			-5 121 132			-10 116 110			-9 264 259		
-7 144 159			-1 75 82			-8 185 197			-8 109 113		
-6 230 222						-7 312 301			-7 216 208		
-5 224 209	K,L= 26, 5					-4 664 659			-6 362 351		
-3 181 181						-3 998 1009			-5 229 220		
-2 363 384	-3 88 68					-2 399 391			-4 95 89		
-1 365 370						-1 441 428			-3 240 230		
0 253 246	K,L= 27, 5					0 106 135			-2 153 139		
2 110 122			-4 183 172			1 315 309			-1 354 348		
3 164 157			-3 186 177			4 227 223			0 363 372		
						5 109 146			1 256 245		
K,L= 20, 5						7 152 141			2 81 76		
			K,L= 28, 5						4 307 289		
-9 173 152						K,L= 2, 6			5 175 201		
-4 106 97			-5 76 94						6 126 106		
1 165 168						-12 132 118			7 96 114		
2 156 168	K,L= 29, 5					-11 112 113					
3 158 154						-8 75 35	K,L= 5, 6				
			-1 110 126			-7 90 64					
K,L= 21, 5						-6 162 132			-11 124 100		
			K,L= 0, 6			-4 304 297			-8 93 117		
-6 103 101						-3 191 152			-7 214 215		
-5 318 308	-16 138 111					-2 293 302			-6 712 698		
-4 365 377	-14 97 109					-1 193 164			-5 638 650		
-3 307 298	-13 184 183					0 124 105			-4 304 307		
-2 159 167	-12 181 188					2 106 116			-2 402 414		
0 117 113	-10 379 388					3 154 176			-1 918 909		
	-9 698 675					6 191 179			0 679 687		
K,L= 22, 5	-8 566 575								1 480 467		
	-7 108 105	K,L= 3, 6							2 236 253		
-7 105 138	-6 68 48								4 229 226		
-2 144 119	-5 224 197					-9 267 264			7 139 120		
	-4 143 195					-7 252 228					
K,L= 23, 5	-2 145 108					-6 66 66	K,L= 6, 6				
	-1 657 661					-5 629 610					
-5 227 236	0 231 235					-4 674 679	-13 118 59				

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-11	219	208	K,L= 9, 6	-5	299	307	-8	227	223		
-9	135	126		-4	231	219	-7	216	221		
-8	229	205	-10	154	176	-1	202	195	-6	120	108
-7	161	144	-9	174	180	0	240	265	-3	138	125
-6	380	361	-8	349	344	1	263	264	-2	195	197
-5	553	570	-7	395	395	2	115	115	0	230	243
-4	115	85	-6	328	317	4	152	127	1	291	303
-3	68	66	-5	115	110	5	125	112	3	214	190
-2	142	154	-4	327	323	6	156	155	4	148	146
-1	477	452	-3	306	317	7	160	135			
0	549	555	-2	333	327				K,L= 17, 6		
1	129	89	-1	496	482	K,L= 13, 6			-11	110	111
2	223	235	0	224	224	-11	175	148	-10	111	169
4	161	151	1	101	123	-10	156	173	-8	151	122
			3	200	209	-8	163	185	-6	194	183
K,L= 7, 6			K,L= 10, 6			-7	194	200	-5	315	310
-8	162	202	-8	363	368	-6	198	193	-4	287	302
-7	122	121	-7	459	472	-5	278	300	-3	247	240
-4	261	251	-6	162	166	-4	591	583	-2	425	425
-3	393	403	-2	168	157	-3	424	446	-1	379	376
-2	146	141	0	166	204	-2	175	163	2	192	165
0	342	353	1	324	301	-1	119	140	3	133	139
1	300	278	2	333	314	0	207	198			
2	174	166	3	344	334	1	156	159	K,L= 18, 6		
3	175	192	4	95	116	2	141	165	-11	89	114
						3	220	235	-10	121	122
K,L= 8, 6			K,L= 11, 6			4	92	131	-7	138	144
-14	126	133	-10	110	148	K,L= 14, 6			-6	223	188
-13	244	235	-8	199	199	-11	100	119	-1	173	172
-12	270	252	-7	232	233	-10	205	199	0	202	198
-11	227	234	-6	266	266	-9	168	164	3	93	118
-8	222	217	-4	155	124	-8	218	199	K,L= 19, 6		
-7	380	387	-3	122	137	-4	84	49	-6	107	116
-6	413	401	-2	200	190	0	128	150	-5	162	173
-5	468	448	-1	100	86	2	178	158	-2	135	137
-4	364	361	0	316	326	3	229	231	-1	171	174
-3	202	208	1	308	300						
-2	507	509				K,L= 15, 6			K,L= 20, 6		
-1	268	261	K,L= 12, 6			-10	114	104	-12	94	84
1	75	83	-13	129	121	-2	97	90	-11	77	60
2	133	133	-11	193	165	0	232	239	-9	126	106
3	100	104	-10	109	117	1	92	126	-8	127	130
4	150	163	-9	93	84				-3	160	140
5	232	226	-8	95	73	K,L= 16, 6					
6	232	249	-7	203	193	-10	179	135			
7	128	139	-6	226	235						

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 21, 6			K,L= 22, 6			-3	97	126	K,L= 26, 6		
						0	100	86			
-7	169	201	-5	97	132	1	198	180	-6	109	92
-6	130	125	-4	101	109	K,L= 25, 6			K,L= 27, 6		
-3	236	198	-2	188	157						
-2	214	206	0	110	91						
0	157	166	K,L= 23, 6			-8	91	101	-3	177	166
1	188	180				-6	110	110	-1	116	108
2	106	138				-5	141	132			
			-7	102	110	-1	159	148			
			-6	114	125	0	113	93			
			-4	135	91						

298 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (X10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 1, 7			K,L= 4, 7			K,L= 7, 7			-9	325	341
-9	112	125	-11	129	132	-14	90	87	-8	211	220
-8	312	301	-10	119	109	-13	94	87	-7	148	131
-7	303	320	-6	86	27	-11	198	178	-6	274	247
-6	456	451	-5	212	205	-10	156	175	-5	79	56
-5	268	301	-4	286	261	-8	138	149	-4	130	151
-4	150	159	-2	265	285	-5	207	198	-2	321	339
-2	156	172	-1	173	184	-4	610	622	-1	335	334
-1	376	368	2	85	70	-3	666	676	1	232	235
0	429	417	3	185	183	-2	666	679	2	112	106
1	380	387	4	189	191	-1	277	250	3	208	224
2	237	217				0	262	250	4	216	235
3	109	128	K,L= 5, 7			3	109	42	K,L= 11, 7		
						4	123	120			
K,L= 2, 7			-8	261	252	5	134	156	-10	200	211
			-7	216	220				-9	331	333
-13	218	201	-6	220	207	K,L= 8, 7			-8	143	114
-12	253	268	-5	216	215				-6	190	201
-11	228	234	-4	208	193	-9	130	124	-5	351	362
-9	166	174	-3	454	454	-8	354	354	-4	351	351
-7	132	151	-2	216	219	-7	341	348	-3	148	157
-6	572	568	-1	146	143	-5	163	177	-2	376	379
-4	425	417	0	289	290	-4	268	269	-1	510	508
-3	276	310	1	306	311	-1	100	94	0	103	140
-1	229	255				2	376	375	2	273	266
0	372	368	K,L= 6, 7			3	260	262	3	236	228
1	157	182							4	154	147
4	199	200	-15	116	97	K,L= 9, 7			7	85	53
6	163	165	-14	133	108						
8	129	125	-13	197	178	-11	99	76	K,L= 12, 7		
			-12	154	154	-10	85	113			
K,L= 3, 7			-11	99	116	-9	281	291	-12	124	141
			-10	193	213	-7	173	178	-11	166	178
-9	154	155	-9	277	308	-5	295	299	-10	114	121
-8	167	172	-8	429	431	-4	218	218	-6	285	269
-7	166	154	-7	333	330	-3	90	107	-5	227	216
-6	348	333	-5	108	125	-2	247	252	-3	150	155
-5	332	348	-4	310	305	-1	471	491	0	292	291
-4	513	518	-2	79	60	1	191	88	1	196	187
-3	384	380	-1	93	63	3	154	144	4	128	122
-2	450	495	0	94	86				6	105	91
-1	576	572	1	132	95	K,L= 10, 7					
0	418	426	2	334	347				K,L= 13, 7		
1	272	277	3	176	165	-14	126	127	-3	312	300
2	145	154	6	88	95	-11	97	116	-1	163	153
						-10	197	150			

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
2	113	134	-2	148	158	1	103	85	-1	126	111
									0	212	208
K,L= 14,	7		K,L= 18,	7		K,L= 25,	7		1	113	105
									6	139	139
-12	119	128	-6	137	125	-1	101	108			
-11	193	198	-5	161	146				K,L= 3,	8	
-8	133	173	0	136	139	K,L= 0,	8				
-7	176	191							-14	118	113
-6	136	132	K,L= 19,	7		-15	111	119	-9	194	175
-5	274	291				-10	133	113	-7	83	120
-4	317	339	-8	115	132	-12	161	173	-6	116	79
-1	129	127	-7	143	128	-11	157	193	-5	383	407
0	102	94	-5	161	165	-10	226	241	-4	370	383
1	107	90	-4	209	199	-9	347	320	-3	341	356
2	165	151	-3	168	166	-8	665	691	-2	468	469
5	137	115	-2	194	187	-7	381	398	-1	524	538
			-1	222	212	-6	119	134	0	225	220
K,L= 15,	7		0	223	216	-5	161	171	1	151	111
			1	149	173	-4	201	213	3	178	181
-8	102	94				-3	417	411	4	167	180
-7	366	351	K,L= 20,	7		-2	114	117	5	107	109
-6	374	363				-1	131	130			
-5	198	210	-10	90	85	0	195	187	K,L= 4,	8	
-4	144	95	-9	89	94	2	312	325			
-3	167	178	-8	120	122	3	394	366	-13	163	159
-2	184	183	-7	180	154				-12	194	167
-1	129	132	-6	96	120	K,L= 1,	8		-11	172	196
0	349	336	0	96	87				-10	277	292
1	344	338	2	136	133	-10	125	137	-9	184	183
2	172	188	3	149	123	-9	95	96	-7	86	115
						-8	153	139	-6	434	435
K,L= 16,	7		K,L= 21,	7		-7	181	164	-5	243	258
						-6	99	108	-4	181	164
-12	200	190	-4	174	149	-5	129	93	-3	93	52
-11	118	133	-3	180	185	-4	170	172	-2	222	241
-8	126	141				-3	354	373	-1	135	131
-5	253	254	K,L= 22,	7		-2	435	435	0	192	197
-4	292	286				-1	297	310	1	103	111
-3	100	89	-7	83	89	0	247	250	3	129	119
-2	208	223				1	212	221	4	165	176
-1	201	206	K,L= 23,	7		2	190	211	5	126	129
0	86	64									
2	125	137	-9	124	94	K,L= 2,	8		K,L= 5,	8	
5	110	89	-3	130	140						
6	126	120	-2	176	179	-12	191	185	-11	225	240
						-11	201	184	-10	221	218
K,L= 17,	7		K,L= 24,	7		-9	193	198	-8	291	297
						-4	462	463	-7	357	355
-8	92	37	-3	157	137	-3	172	184	-6	405	404
-3	130	143	-2	64	103	-2	143	157	-5	432	415

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-4	323	349	K,L= 9,	8		-6	111	108	-4	221	194
-3	78	76				-5	225	232	-3	266	263
-2	297	299	-10	138	129	-4	214	228	-2	253	255
-1	563	561	-7	175	170	0	102	86	-1	251	244
0	536	536	-6	330	329				0	119	123
1	249	262	-5	254	247	K,L= 13,	8				
2	184	173	-4	299	312				K,L= 18,	8	
3	134	128	-3	251	254	-10	90	87			
			-2	136	131	-9	96	108	-10	132	133
K,L= 6,	8		0	255	266	-8	204	189	-9	147	142
			1	422	399	-7	168	156	-7	115	120
-8	90	73	2	313	317	-4	185	156	-6	193	203
-6	253	249	3	123	112	-3	342	352	-5	142	158
-5	311	327				-2	337	355			
-4	291	294	K,L= 10,	8		-1	258	261	K,L= 19,	8	
-2	82	90				0	237	230			
-1	201	192	-11	127	103	1	228	221	-11	77	61
0	154	152	-10	248	245	2	109	126	-6	125	126
			-9	339	332	3	99	116	-5	149	148
K,L= 7,	8		-8	342	339	5	100	103	-3	106	105
			-7	233	224				0	73	75
-7	181	217	-6	118	130	K,L= 14,	8				
-6	206	211	-5	125	48				K,L= 20,	8	
-5	173	187	-4	121	128	-9	193	163			
-4	136	133	-3	153	157	-8	234	236	-8	134	134
-3	290	304	-2	150	143	-7	177	202	0	110	125
-2	272	261	1	157	172	-1	153	172			
1	92	107	2	196	197	0	195	179	K,L= 21,	8	
2	196	176				2	213	210			
			K,L= 11,	8		3	189	186	-7	138	138
						4	136	116	-6	153	128
K,L= 8,	8		-11	146	123				-3	131	141
			-10	141	142	K,L= 15,	8		-2	130	113
-13	135	133	-7	190	181				0	123	130
-12	174	172	-6	179	157	-5	89	71	1	189	187
-11	260	248	-5	190	178	-3	87	83	2	87	113
-10	278	237	-3	143	178						
-9	142	144	-1	154	167	K,L= 16,	8		K,L= 22,	8	
-8	104	103	0	261	256						
-7	105	43	1	184	159	-8	199	194	-4	193	178
-6	123	124				-7	205	188	-3	127	129
-5	278	284	K,L= 12,	8		-6	161	180	-1	90	106
-4	333	348				-1	120	115			
-3	311	315				4	78	97	K,L= 25,	8	
-2	144	161	-13	72	74						
-1	109	78	-12	132	143				-6	98	88
0	191	187	-11	160	164	K,L= 17,	8		-5	119	128
1	94	114	-10	145	129						
5	83	85	-9	126	143	-8	90	95			
6	154	137	-8	92	142	-6	85	77			
			-7	100	111	-5	205	165			

298 K														
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 1, 9			-5	286	282	-1	196	201	K,L= 12, 9					
			-4	163	168	0	98	91						
-9	109	103	-3	265	256	1	135	141	-11	141	167			
-8	266	256	-2	127	136	2	131	99	-10	214	223			
-7	156	175	-1	312	329	5	134	123	-9	127	129			
-6	201	229	0	224	240				-7	109	95			
-5	432	444	4	163	151	K,L= 8, 9			-6	82	130			
-4	168	168							-5	319	340			
-1	183	182	K,L= 5, 9			-9	260	284	-4	247	236			
0	261	264				-8	430	429	-3	105	110			
1	374	345	-11	134	118	-7	231	234	-2	184	179			
2	310	308	-10	162	168	-5	102	57	1	155	137			
3	152	163	-9	210	226	-4	324	331						
			-8	156	153	3	97	109	K,L= 13, 9					
K,L= 2, 9			-7	133	121	K,L= 9, 9			-10	100	130			
			-6	295	309				-2	258	248			
-13	179	187	-5	261	246	-10	108	80	0	104	104			
-12	250	221	-2	240	245	-9	119	119						
-11	315	300	-1	86	96	-7	147	141	K,L= 14, 9					
-9	295	307	1	252	227	-6	87	97						
-8	156	166	2	195	194	-4	99	64	-10	94	103			
-6	172	182	3	117	74	-2	100	146	-9	150	155			
-4	126	99				-1	245	243	-8	238	214			
-3	210	214	K,L= 6, 9			0	210	207	-7	243	247			
-2	201	190							-6	135	103			
0	113	133	-12	240	231	K,L= 10, 9			-5	151	114			
1	130	97	-11	251	245				-4	128	135			
5	113	106	-10	158	170	-10	195	192	3	96	96			
			-9	117	146	-9	316	310	K,L= 15, 9					
K,L= 3, 9			-8	247	240	-8	212	239						
			-7	446	454	-7	209	185						
-12	130	136	-6	261	275	-6	93	119	-11	75	70			
-11	134	148	-5	112	57	-5	192	160	-7	311	329			
-8	212	196	-4	134	118	-4	104	137	-6	239	244			
-7	178	171	-3	108	114	-2	243	235	-5	122	103			
-6	127	119	0	154	140	-1	123	115	-4	94	104			
-3	231	235	1	102	79	4	175	172	-3	133	138			
-2	363	387	3	187	174				1	193	197			
-1	402	410				K,L= 11, 9			2	173	161			
0	280	274	K,L= 7, 9											
1	93	90												
3	119	140	-14	107	124	-13	88	80	K,L= 16, 9					
4	121	114	-12	190	193	-8	116	129						
			-10	98	95	-5	145	148	-12	114	110			
K,L= 4, 9			-8	132	124	-4	380	385	-8	124	114			
			-7	243	246	-3	192	176	-7	172	181			
-11	127	114	-6	130	113	-1	195	184	-5	135	129			
-8	109	120	-4	198	218	0	429	404	-4	250	257			
-7	171	165	-3	269	287	1	220	210	-3	199	186			
-6	290	282	-2	407	434	3	185	178						

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 18, 9			-6	304	326	K,L= 4, 10			K,L= 8, 10		
			-5	239	240						
-5	232	230	-3	159	179	-13	110	120	-12	179	185
-4	214	202	-2	157	168	-11	221	234	-11	292	294
1	124	103	0	133	147	-10	273	284	-10	269	265
			1	135	137	-9	320	320	-9	169	161
K,L= 19, 9			3	158	145	-8	277	298	-7	148	153
			4	163	158	-7	343	367	-6	156	172
-5	151	160				-6	427	434	-5	288	296
-4	141	143	K,L= 1, 10			-5	179	186	-4	446	448
-1	87	101				-1	126	76	-3	364	373
0	133	130	-13	99	93				-1	116	116
1	153	127	-12	142	140	K,L= 5, 10			0	121	87
2	106	113	-10	120	142						
			-8	162	186	-15	85	92	K,L= 9, 10		
K,L= 20, 9			-6	92	102	-11	154	137			
			-4	129	106	-10	304	307	-15	102	100
-9	156	175	-3	204	216	-9	143	150	-11	98	97
-8	197	198	-2	339	387	-8	84	84	-10	178	143
-7	135	126	-1	188	165	-7	235	251	-9	98	92
-6	68	72	1	177	195	-6	219	180	-6	219	224
			2	139	156	-5	237	245	-5	416	413
K,L= 21, 9						-4	230	215	-4	276	260
			K,L= 2, 10			-3	96	91	0	162	163
-2	167	175				0	170	179	1	196	192
-1	110	114	-13	136	125	1	170	164	2	219	226
			-8	140	152	2	151	164			
K,L= 22, 9			-6	97	69	3	169	164	K,L= 10, 10		
			-4	279	264	4	123	131			
-5	110	46	-3	278	281				-9	134	120
			0	89	72	K,L= 6, 10			-8	139	154
K,L= 23, 9									-5	165	148
			K,L= 3, 10			-10	88	58	0	108	97
-3	116	121				-9	145	129	1	95	88
-2	128	114	-14	72	81	-7	164	165			
			-13	101	137	-5	274	254	K,L= 11, 10		
K,L= 24, 9			-12	124	132	-4	117	123			
			-11	153	124	-3	86	113	-8	99	149
-9	142	126	-9	130	105	-2	129	108	1	107	93
-7	110	117	-7	316	299	0	101	96			
			-6	202	197				K,L= 12, 10		
K,L= 25, 10			-5	110	127	K,L= 7, 10					
			-3	162	169				-14	78	67
-15	132	132	-2	158	193	-6	255	257	-12	123	116
-14	121	119	-1	278	215	-5	89	51	-9	198	198
-11	156	163	0	236	214	-4	207	208	-8	219	216
-10	245	255	3	103	96	3	74	77	-2	113	91
-9	374	400	4	152	123						
-8	563	573									
-7	668	700									

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 1, 9			-5	286	282	-1	196	201	K,L= 12, 9		
			-4	163	168	0	98	91			
-9	109	103	-3	265	256	1	135	141	-11	141	167
-8	266	256	-2	127	136	2	131	99	-10	214	223
-7	356	175	-1	312	329	5	134	123	-9	127	129
-6	201	229	0	224	240				-7	109	95
-5	432	444	4	163	151	K,L= 8, 9			-6	82	130
-4	158	168							-5	319	340
-1	183	182	K,L= 5, 9			-9	260	284	-4	247	236
0	281	264				-8	430	429	-3	105	110
1	374	365	-11	134	118	-7	231	234	-2	184	179
2	310	308	-10	162	168	-5	102	57	1	155	137
3	152	163	-9	210	226	-4	324	331			
			-8	156	153	3	97	109	K,L= 13, 9		
K,L= 2, 9			-7	133	121				-10	100	130
			-6	295	309	K,L= 9, 9			-2	258	248
-13	179	187	-5	261	246				0	104	104
-12	250	221	-2	240	245	-10	108	80			
-11	315	300	-1	86	96	-9	119	119			
-9	295	307	1	252	227	-7	147	141	K,L= 14, 9		
-8	156	166	2	195	194	-6	87	97			
-6	172	182	3	117	74	-4	99	64	-10	94	103
-4	126	99				-2	100	146	-9	150	155
-3	210	214	K,L= 6, 9			-1	245	243	-8	238	214
-2	201	196				0	210	207	-7	243	247
0	113	139	-12	249	231				-6	135	103
1	130	97	-11	251	245	K,L= 10, 9			-5	151	114
5	113	106	-10	158	170				-4	128	135
			-9	117	146	-10	195	192	3	96	96
K,L= 3, 9			-8	242	240	-9	316	310			
			-7	446	454	-8	212	239	K,L= 15, 9		
-12	130	136	-6	261	275	-7	209	185			
-11	134	148	-5	112	57	-6	93	119	-11	75	70
-8	212	196	-4	134	118	-5	192	160	-7	311	329
-7	178	171	-3	108	116	-4	104	137	-6	239	244
-6	127	119	0	154	140	-2	243	235	-5	122	103
-3	231	235	1	102	79	-1	123	115	-4	94	104
-2	363	387	3	187	174	4	175	172	-3	133	138
-1	402	410							1	193	197
0	280	274	K,L= 7, 9			K,L= 11, 9			2	173	161
1	93	90									
3	119	140	-14	107	124	-13	88	80	K,L= 16, 9		
4	121	114	-12	190	195	-4	110	129			
			-10	98	85	-5	145	140	-12	114	110
K,L= 4, 9			-8	132	124	-4	380	385	-8	124	114
			-7	243	245	-3	192	176	-7	172	181
-11	127	114	-6	130	113	-1	195	184	-5	135	129
-8	109	120	-4	198	218	0	429	404	-4	250	257
-7	171	185	-3	269	287	1	220	210	-3	199	186
-6	290	282	-2	407	434	2	185	178			

298 K			H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 18, 9			-6	304	326	K,L= 4, 10			K,L= 8, 10		
			-5	239	240						
-5			232	230		-13			-12		
-4			214	202		-11			-11		
1			124	103		-10			-10		
						-9			-9		
						-8			-7		
K,L= 19, 9			3	158	145	-7			-6		
			4	163	158	-6			-5		
-5			151	160		-5			-4		
-4			141	143		-4			-3		
-1			87	101		-3			-2		
0			133	130		-2			-1		
1			153	127		-1			0		
2			106	113		0			1		
						1			2		
K,L= 20, 9						2			3		
						3			4		
-9			156	176		4			5		
-8			197	128		5			6		
-7			135	126		6			7		
-6			68	72		7			8		
						8			9		
K,L= 21, 9						9			10		
						10			11		
-2			167	175		11			12		
-1			110	114		12			13		
						13			14		
K,L= 22, 9						14			15		
						15			16		
-5			110	66		16			17		
						17			18		
K,L= 23, 9						18			19		
						19			20		
-3			116	121		20			21		
-2			128	114		21			22		
						22			23		
K,L= 24, 9						23			24		
						24			25		
-9			142	126		25			26		
-7			110	117		26			27		
						27			28		
K,L= 25, 10						28			29		
						29			30		
-15			132	132		30			31		
-14			121	119		31			32		
-11			156	163		32			33		
-10			245	255		33			34		
-9			374	400		34			35		
-8			563	573		35			36		
-7			688	700		36			37		

298 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 13, 10			K,L= 20, 10			K,L= 5, 11			-4 135 138		
-12	141	143	-5	76	68	-8	142	159	-1	122	131
-11	129	97	-4	82	81	-6	251	259	K,L= 11, 11		
-8	88	73	K,L= 22, 10			-4	115	80	-14	92	88
-4	148	146	-10	152	126	2	130	143	-10	232	201
-3	221	240	-3	114	98	K,L= 6, 11			-4	210	197
-2	295	286	K,L= 1, 11			-11	160	152	-3	177	197
-1	217	217	-9	135	127	-10	146	165	-2	122	150
0	87	102	-8	173	184	-9	164	158	-1	181	170
K,L= 14, 10			-7	106	73	-8	307	309	0	186	165
-8	216	214	-6	106	114	-7	452	456	1	153	133
-7	200	200	-4	192	211	-6	436	428	K,L= 12, 11		
-6	139	153	-3	116	106	-5	220	223	-9	148	157
-5	134	126	3	140	134	-3	138	112	-5	211	210
-1	117	141	K,L= 2, 11			K,L= 7, 11			-4	131	154
0	151	152	-11	237	242	-13	130	155	-1	96	105
K,L= 16, 10			-9	253	249	-12	188	191	K,L= 14, 11		
-8	97	124	-8	264	262	-11	116	143	-11	106	95
-7	127	109	-7	353	330	-9	87	37	-10	115	121
-6	187	183	-6	185	174	-3	123	127	-8	168	139
-5	149	149	-4	304	324	-2	239	230	-3	146	149
-1	127	132	-3	286	292	-1	242	230	-2	129	135
K,L= 17, 10			-2	136	150	1	72	84	1	90	60
-8	155	174	K,L= 3, 11			K,L= 8, 11			K,L= 15, 11		
-4	222	198	-14	77	95	-8	97	114	-9	96	97
-1	100	117	-5	100	71	-7	138	98	-5	246	232
0	110	137	-4	99	111	-6	110	117	-4	154	170
1	83	46	-3	128	109	0	113	93	K,L= 16, 11		
K,L= 18, 10			-1	110	117	1	156	139	-11	94	79
-10	162	144	0	157	152	K,L= 9, 11			-7	95	110
-8	178	182	2	100	64	-6	116	125	-6	120	118
-8	136	136	3	121	105	K,L= 10, 11			-4	129	117
-6	128	133	K,L= 4, 11			-14	82	64	-3	148	161
-5	143	136	-11	135	110	-13	100	112	-2	86	109
K,L= 19, 10			-8	138	134	-9	171	153	K,L= 18, 11		
-5	116	107	-6	109	113	-8	234	257	-9	79	92
-4	118	98	-5	120	110	-7	210	213	-5	73	87
			-3	110	110	-6	244	242	-4	112	127
			-2	101	37	-5	265	246			

298 K			H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-3	112	117	-5	252	237	K,L= 12, 12	-2	138	144		
			-4	214	210						
K,L= 20, 11			-1	123	116	-11	111	93	K,L= 3, 13		
						-10	78	104			
-8	90	108	K,L= 5, 12			-4	125	130	-13	100	88
-7	127	131				-3	171	171	-12	135	107
			-9	170	166	-2	114	121	-9	120	124
K,L= 22, 11			-7	109	114						
			-4	171	179	K,L= 13, 12			K,L= 4, 13		
-5	100	91	-3	127	115	-13	139	149	-13	115	105
			1	111	123	-12	101	124			
K,L= 0, 12			2	122	128	-9	70	90	K,L= 5, 13		
-11	118	112	K,L= 6, 12			-2	164	146			
-8	103	95				-1	125	129	-7	151	149
-7	388	382	-9	133	142				-4	90	78
-6	438	443	-5	107	34	K,L= 14, 12					
-5	317	321	-4	123	120				K,L= 6, 13		
-4	192	177				-7	224	223			
-3	174	171	K,L= 8, 12			-6	208	208	-7	188	197
0	100	107							-6	181	178
1	159	153	-11	140	126	K,L= 16, 12			-3	107	109
			-10	153	160				0	106	66
K,L= 1, 12			-9	154	129	-8	93	96			
			-8	165	131	-5	111	121	K,L= 7, 13		
-11	144	111	-7	177	159						
-6	83	109	-6	152	135	K,L= 17, 12			-13	137	113
-2	161	165	-5	190	165				-12	158	154
-1	181	198	-4	181	183	-11	105	95	-11	172	168
			-3	237	228				-4	110	84
K,L= 2, 12			-2	160	156	K,L= 18, 12			-1	195	175
									0	149	122
-3	194	188	K,L= 9, 12			-5	130	145			
-1	88	72							K,L= 8, 13		
			-15	90	100	K,L= 20, 12					
K,L= 3, 12			-5	128	105				-6	146	130
			-2	92	118	-7	111	99	-2	87	106
-14	124	89	-1	92	87						
-13	79	104				K,L= 1, 13			K,L= 9, 13		
-8	132	124	K,L= 10, 12								
-6	90	94				-15	124	132	-5	92	106
-3	107	123	-6	170	183	-14	107	115			
0	132	109	-1	79	85	-9	151	139	K,L= 10, 13		
			0	111	88						
K,L= 4, 12						K,L= 2, 13			-7	133	142
			K,L= 11, 12						-6	156	174
-9	218	229				-11	115	77	-5	203	207
-8	288	289	-9	119	116	-9	203	192	-4	131	145
-7	224	217				-4	204	218			
-6	131	116				-3	179	175			

298 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 11, 13			K,L= 0, 14			K,L= 5, 14			K,L= 2, 15		
-14	121	129	-8	72	82	-13	115	91	-8	166	165
-13	171	153	-7	249	255	-9	186	192	-4	113	103
-9	101	118	-6	329	335	-8	171	188	K,L= 3, 15		
			-5	258	270	-7	97	117			
K,L= 12, 13			K,L= 1, 14			K,L= 8, 14			-12 91 103		
-9	112	110				-10 133 124			K,L= 5, 15		
-8	118	135	-11	139	159				-4	100	79
-4	142	137	K,L= 3, 14			K,L= 9, 14			-7 72 60		
-3	126	130				-9 104 105			K,L= 6, 15		
-2	88	87	-10	62	32				-7	112	125
K,L= 13, 13			-5	181	165	K,L= 13, 14			-5 138 149		
-8	80	79	K,L= 4, 14						K,L= 7, 15		
K,L= 14, 13			-11	79	39	-12 132 141			-11 145 138		
			-10	72	80				-10 112 140		
-3	125	117	-9	118	118	K,L= 14, 14			K,L= 10, 15		
			-8	89	112						
K,L= 15, 13			-5	128	131	-5 99 105			-7 110 107		
			-4	199	199						
-8	136	121									
-7	103	103									

150 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (x10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 0, 0			4	93	98	10	303	284	3	198	187
1	1996	2045	5	310	303	11	96	74	4	312	297
2	236	220	6	264	266	12	72	40	5	198	194
3	274	275	7	514	504	K,L= 7, 0			6	344	330
4	874	852	10	340	323	1	1764	1789	7	199	211
5	192	171	11	299	285	2	179	173	8	212	195
6	197	193	12	191	198	3	664	640	9	147	155
7	478	465	K,L= 4, 0			4	226	200	10	91	62
8	374	351	0	1168	1141	5	244	246	K,L= 11, 0		
9	194	171	1	303	271	6	336	315	1	378	392
10	586	563	2	1616	1598	8	133	116	2	207	210
11	126	147	3	964	947	9	105	90	3	127	116
K,L= 1, 0			4	914	851	11	81	54	4	150	151
1	181	163	6	294	294	K,L= 8, 0			5	169	147
2	434	429	7	161	173	0	496	507	6	334	327
3	489	482	8	195	202	1	772	773	8	104	106
4	490	492	9	254	244	2	472	473	9	220	199
5	1042	1026	10	112	117	3	1455	1440	10	182	160
6	64	62	11	310	296	4	883	879	K,L= 12, 0		
7	60	75	12	267	246	5	492	491	0	481	485
10	225	230	K,L= 5, 0			7	76	68	1	771	774
11	206	199	1	1087	1098	9	72	40	2	147	149
12	279	252	2	1395	1399	10	148	157	3	540	549
K,L= 2, 0			3	1341	1325	11	90	77	4	133	156
0	133	114	4	379	299	K,L= 9, 0			5	323	323
1	183	159	5	407	376	1	67	72	6	107	95
2	308	307	6	369	357	2	629	628	7	106	96
3	1004	974	7	684	662	3	520	518	8	99	110
4	403	409	8	545	527	4	758	722	9	105	64
5	75	45	9	442	424	5	371	361	K,L= 13, 0		
6	464	446	10	296	255	6	172	162	1	213	212
7	514	496	11	250	233	8	447	438	2	546	535
8	98	74	K,L= 6, 0			9	542	529	3	398	380
10	158	155	0	2246	2295	10	260	230	4	467	460
11	167	171	1	124	142	11	145	125	5	621	603
12	137	135	2	191	195	K,L= 10, 0			6	660	636
K,L= 3, 0			3	120	132	0	62	34	7	307	292
1	243	278	4	147	163	1	900	904	8	307	295
2	1821	1817	5	505	501	2	649	656	9	154	131
3	246	222	6	182	186				10	162	140
			7	150	144				11	191	185

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 14, 0			2	560	567	3	155	144	5	172	158
			4	125	123	4	102	76	8	157	158
0	421	435	5	286	295	5	190	179	9	350	344
1	239	266	6	333	330				10	333	317
2	461	481	7	154	132	K,L= 24, 0			11	223	212
3	97	100	8	159	175						
4	58	21	9	112	52	0	263	271	K,L= 2, 1		
7	165	142				2	290	291			
8	412	376	K,L= 19, 0			6	117	109	-13	120	139
9	87	90							-12	211	204
10	119	105	2	75	78	K,L= 25, 0			-11	280	275
			3	151	168				-8	194	193
K,L= 15, 0			5	227	227	2	153	134	-7	350	358
			7	157	152	3	214	220	-6	99	67
1	288	289	9	160	142	5	145	137	-5	234	233
2	643	645							-4	376	406
3	93	97	K,L= 20, 0			K,L= 26, 0			-3	90	79
4	77	66							-2	791	798
5	256	251	0	316	336	0	233	231	-1	1304	1315
6	88	59	4	179	166	1	366	373	0	1433	1352
8	170	167	5	108	102	2	216	220	1	1077	1067
9	122	130	6	69	30	3	215	223	2	1216	1193
			7	101	70	4	138	137	3	1036	1040
K,L= 16, 0			8	283	258	5	105	133	4	806	782
									5	663	643
1	549	549	K,L= 21, 0			K,L= 27, 0			6	367	368
2	543	539							7	80	67
3	72	72	1	246	251	1	113	108	8	123	107
4	174	159	2	452	395	3	195	189			
5	154	155	3	164	190				K,L= 3, 1		
6	409	403	4	168	166	K,L= 28, 0					
7	467	468	5	328	323				-12	165	171
8	161	169	7	117	126	0	109	92	-11	215	194
10	82	104	8	340	329				-10	231	222
						K,L= 1, 1			-9	188	189
K,L= 17, 0			K,L= 22, 0						-8	259	255
						-11	151	137	-7	491	498
1	392	404	0	493	481	-10	435	436	-6	819	830
3	548	550	1	305	305	-9	445	444	-5	401	411
4	394	380	2	163	144	-8	356	365	-4	253	264
5	276	260	3	525	509	-7	185	187	-3	129	138
6	580	571	4	394	370	-5	111	98	-2	780	803
7	405	382	5	101	76	-4	70	63	-1	166	181
8	167	165	6	253	225	-3	125	124	0	573	538
10	97	95	7	157	144	-2	83	89	1	613	635
						-1	536	573	2	431	436
K,L= 18, 0			K,L= 23, 0			0	189	197	3	836	827
						2	347	337	4	399	389
0	127	131	1	332	330	3	381	396	5	418	421
1	436	457	2	198	204	4	419	417	6	357	346

150 K			H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
7	288	289	9	277	253	9	318	301	K.L= 10, 1		
8	130	126	10	117	125	10	125	129	-12	206	208
9	111	90	K.L= 6, 1			K.L= 8, 1			-11	234	217
10	188	168							-10	145	129
11	281	264							-9	69	64
K.L= 4, 1			-12	154	147	-12	77	45	-8	146	160
			-11	130	143	-10	269	273	-6	519	523
			-10	347	336	-9	222	216	-5	347	366
-12	144	156	-9	115	102	-8	183	192	-4	222	241
-11	188	187	-8	308	314	-7	278	285	-3	283	274
-9	107	114	-7	218	219	-6	412	415	-2	725	733
-8	190	172	-5	92	95	-5	385	378	-1	916	933
-7	253	258	-4	503	515	-4	493	507	0	567	568
-6	534	549	-3	300	323	-3	193	198	1	1345	1322
-5	183	181	-2	274	285	0	937	936	2	824	826
-4	797	835	-1	300	291	1	594	590	3	112	115
-3	483	502	0	995	987	2	222	209	4	326	330
-2	1135	1145	1	1111	1106	4	151	167	5	213	210
-1	545	565	2	825	813	6	70	86	6	380	371
0	341	355	3	1212	1224	7	147	155	7	248	247
1	96	60	4	1152	1128	8	272	257	8	167	165
2	402	413	5	586	573	9	69	22	9	132	117
3	169	184	7	244	238	10	70	63	10	172	181
4	533	517	8	504	501	11	77	27	11	118	71
5	138	138	10	153	150	K.L= 9, 1			K.L= 11, 1		
6	264	252	11	334	139						
7	264	259	K.L= 7, 1			-11	166	136	-12	129	113
8	119	111				-10	158	151	-11	306	289
11	86	89				-9	80	55	-10	381	356
K.L= 5, 1			-12	273	268	-8	276	287	-9	232	229
			-11	248	233	-7	244	259	-8	59	73
			-10	117	118	-6	630	642	-7	399	432
-11	94	107	-9	333	353	-5	204	196	-6	524	531
-10	274	289	-8	412	422	-4	49	9	-4	414	409
-9	383	376	-7	174	175	-3	203	210	-3	1102	1119
-8	378	375	-6	296	308	-2	375	373	-2	906	911
-7	111	121	-5	470	503	-1	712	728	-1	256	252
-6	104	109	-4	938	956	0	814	798	0	191	190
-5	184	180	-3	51	51	1	123	90	1	563	552
-4	391	384	-2	332	329	2	114	104	2	270	245
-3	446	466	-1	595	596	3	444	456	3	672	653
-2	73	63	0	945	943	4	417	421	4	445	429
-1	947	940	1	148	152	5	97	85	5	259	248
0	444	419	2	206	219	6	90	82	6	391	391
1	891	902	3	64	54	7	227	220	7	609	603
2	965	960	4	138	148	8	129	133	8	469	466
3	320	322	5	937	947				9	147	127
4	142	125	6	707	703				10	203	177
5	206	202	7	245	244						
6	164	165	8	264	284						

150 K			H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L = 12, 1			-6	128	132	6	162	165	-3	565	576
			-4	333	352	7	91	31	-2	82	81
			-3	436	460	8	96	75	-1	323	322
-10	179	158	-2	543	535	K.L = 17, 1			0	113	126
-9	76	54	-1	327	322				1	238	252
-8	196	201	0	416	413				2	369	368
-6	157	158	1	484	485	-10	98	102	3	360	363
-5	232	238	2	158	150	-8	176	158	4	324	313
-4	86	79	3	255	258	-7	93	90	5	171	166
-3	586	580	4	407	400	-6	81	69	6	159	171
-2	1030	1046	5	293	286	-5	366	383	7	232	223
-1	201	208	6	169	150	-4	232	241	8	147	134
0	243	245	7	181	172	-3	86	100	K.L = 20, 1		
1	52	60	8	293	276	-2	187	189			
2	763	761	10	118	100	-1	237	243	-7	253	243
3	345	359	K.L = 15, 1			0	163	153	-6	172	166
4	66	43				1	68	64	-5	224	225
5	89	69	-10	119	81	2	138	139	-4	62	83
6	124	95	-9	412	400	3	229	227	-1	464	477
7	114	101	-8	549	537	4	257	245	0	565	588
8	201	189	-7	364	373	5	132	112	1	367	376
9	151	146	-5	188	192	7	82	53	2	331	334
10	204	200	-3	400	407	K.L = 18, 1			3	270	276
K.L = 13, 1			-2	298	297				4	91	77
			-1	856	873	-10	112	94	6	357	325
-10	209	189	0	496	476	-9	172	162	7	164	155
-8	92	105	2	520	511	-7	212	226	K.L = 21, 1		
-7	292	283	3	212	210	-5	229	223			
-6	77	78	4	272	276	-4	116	114	-8	86	74
-5	224	229	5	311	304	-3	199	184	-7	110	123
-4	108	128	6	143	148	-2	529	545	-6	259	244
-3	645	656	7	127	124	-1	66	45	-5	321	322
-2	429	429	8	332	324	0	293	301	-4	275	274
-1	496	482	9	445	436	1	203	210	-3	171	184
0	371	371	10	265	258	2	218	207	-2	94	88
1	73	53	K.L = 16, 1			3	319	318	0	90	104
2	389	384				4	202	199	1	157	174
3	484	480	-8	70	73	5	224	209	2	205	207
4	102	109	-7	235	245	6	148	147	3	156	172
5	477	479	-4	320	318	8	172	167	5	189	180
6	297	308	-3	690	705	K.L = 19, 1			6	348	330
7	225	224	-2	134	129				7	200	188
8	118	100	0	398	409	-9	242	243	K.L = 22, 1		
K.L = 14, 1			1	321	334	-8	363	367			
			2	316	314	-7	430	437	-8	156	147
-10	272	279	3	345	328	-6	210	205	-6	109	136
-9	176	172	4	728	721	-5	274	263	-3	181	187
-8	129	128	5	456	450	-4	358	368			
-7	113	125									

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-2	112	134	0	201	194	-8	495	517	-5	761	800
1	143	147	1	139	162	-7	210	210	-4	186	202
2	208	196	2	97	95	-6	352	366	-3	735	758
4	114	117	3	221	201	-5	680	717	-2	1068	1072
5	94	77	4	129	103	-4	1061	1125	-1	648	641
K,L= 23, 1			K,L= 27, 1			-3	1006	1053	0	530	503
-7	102	95	-4	212	220	-2	195	242	1	906	881
-6	200	206	-3	104	98	-1	1116	1105	2	1006	1013
-5	268	281	2	134	133	0	322	302	3	157	168
-4	342	342	3	130	128	1	349	356	4	522	512
-3	223	214	K,L= 28, 1			2	233	224	5	173	179
0	90	102	-1	113	125	3	128	118	6	497	485
2	83	85	0	274	272	5	573	562	7	972	948
3	89	84	1	168	191	6	429	407	8	279	266
4	93	107	K,L= 0, 2			7	157	151	9	134	124
5	119	97	K,L= 2, 2			8	80	71	10	98	109
6	261	244	K,L= 4, 2			9	383	373	11	109	114
K,L= 24, 1			-13	131	139	-13	150	155	-13	120	112
-7	98	93	-12	345	337	-12	100	90	-12	198	182
-6	145	117	-11	443	428	-11	200	195	-11	299	287
-5	136	123	-10	395	401	-10	183	169	-10	183	182
-4	80	92	-9	637	641	-9	88	100	-9	82	80
-3	155	149	-8	63	43	-8	562	568	-8	99	115
-2	130	147	-7	552	561	-7	628	657	-7	152	158
-1	450	460	-6	304	283	-6	49	69	-6	274	275
0	487	487	-5	186	209	-5	570	589	-5	530	573
1	542	544	-4	205	220	-4	1465	1500	-4	56	33
2	488	496	-3	591	620	-3	70	67	-3	281	282
3	330	323	-2	114	134	-2	190	211	-2	935	960
5	101	77	-1	1483	1422	0	330	306	-1	913	869
6	151	158	0	642	599	1	449	461	0	218	267
K,L= 25, 1			1	1958	1926	2	151	94	1	245	246
-4	109	95	2	272	261	3	765	748	2	1319	1293
-3	121	107	3	559	550	4	475	468	3	1135	1151
-2	250	260	4	286	277	5	197	183	4	158	137
-1	126	100	5	480	465	7	134	133	5	364	350
1	84	74	6	458	434	8	87	84	6	426	405
3	139	134	7	291	280	K,L= 3, 2			7	304	291
5	93	49	8	306	298	-13	112	113	8	67	92
K,L= 26, 1			9	397	384	-11	493	495	10	99	95
-4	109	92	K,L= 1, 2			-10	462	457	K,L= 5, 2		
-2	221	219	-13	170	161	-9	65	51	-12	138	140
			-12	343	314	-7	66	51	-11	126	131
			-9	258	247	-6	705	745	-10	557	546
									-9	637	639

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-8	700	715	-9	210	206	-3	474	473	1	140	112
-7	625	630	-8	346	346	-2	441	451	2	512	497
-6	773	786	-7	151	162	-1	435	445	3	322	322
-5	115	96	-6	160	171	0	609	612	4	153	179
-4	383	407	-5	318	340	1	319	315	5	196	193
-3	381	404	-4	355	351	3	198	203	6	93	97
-2	1543	1556	-3	342	320	4	201	212	7	263	261
-1	239	235	-2	145	143	5	246	253	8	137	142
0	404	372	0	500	474	6	226	227	9	231	218
1	211	214	1	68	53	7	128	133	10	243	225
2	112	108	2	349	359	8	286	273	K,L = 12, 2		
3	471	469	3	267	268	9	330	315			
4	570	585	4	96	72	10	331	314	-12	114	120
7	373	374	5	86	34	K,L = 10, 2			-11	81	66
8	387	373	6	187	175				-10	119	108
9	236	223	7	113	91	-12	117	106	-9	159	159
10	329	321	10	173	87	-11	151	152	-7	203	198
11	253	257	K,L = 8, 2			-10	365	374	-6	84	69
K,L = 6, 2						-9	169	180	-5	195	212
-13	129	131	-12	215	199	-8	89	81	-4	410	421
-12	108	109	-11	67	56	-7	353	367	-3	162	177
-11	70	80	-9	174	134	-6	453	449	-2	652	656
-10	107	113	-7	227	224	-5	254	249	-1	252	263
-9	303	305	-6	428	439	-4	50	46	0	211	193
-8	149	140	-5	217	217	-3	290	299	1	64	57
-7	354	354	-4	500	523	-2	256	243	2	351	327
-6	197	198	-3	284	304	-1	149	152	3	304	308
-5	98	100	-2	402	404	0	783	767	4	382	384
-4	147	146	-1	461	439	1	719	703	5	97	86
-3	356	361	0	520	591	2	385	378	6	116	106
-2	766	770	1	350	348	3	80	87	8	108	85
-1	295	292	2	450	433	4	245	254	9	75	97
0	403	393	3	714	723	7	160	174	10	101	81
1	448	437	4	1051	1058	8	252	244	K,L = 13, 2		
2	525	509	5	673	677	9	138	122			
3	434	437	6	302	304	10	85	34	-12	274	272
4	310	317	9	93	77	K,L = 11, 2			-11	189	181
5	334	336	K,L = 9, 2						-10	158	170
6	93	86				-12	75	50	-9	253	239
7	115	94	-12	175	179	-9	313	316	-8	211	205
8	281	265	-11	157	152	-8	432	441	-7	365	365
9	140	143	-10	194	182	-7	200	220	-6	251	261
10	111	139	-9	375	379	-5	123	135	-5	651	661
11	116	126	-8	520	531	-4	126	141	-4	865	891
K,L = 7, 2			-7	577	597	-3	97	95	-3	660	671
			-6	312	315	-2	567	572	-1	387	384
-11	173	147	-5	96	117	-1	522	527	0	282	280
			-4	183	186	0	179	137	1	267	261

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
2	88	96	K.L= 16, 2			0	219	220	-4	540	532
3	219	211				1	121	122	-3	157	152
4	68	92	-11	227	215	2	493	499	-2	113	102
5	475	483	-10	227	225	3	600	595	-1	522	533
6	606	626	-8	86	75	4	419	408	0	322	308
7	405	404	-7	107	107	5	498	499	1	175	182
8	218	224	-6	375	382	6	353	334	2	209	212
9	224	228	-5	157	145	8	185	156	3	81	85
			-4	255	246				4	81	55
			-3	58	85	K.L= 19, 2			5	151	145
K.L= 14, 2			-2	107	113				6	191	183
			-1	393	393	-10	120	138			
-11	127	123	0	313	313	-9	99	101	K.L= 22, 2		
-10	258	256	1	259	258	-8	138	147			
-9	184	187	2	562	555	-7	221	211	-7	81	61
-7	318	335	3	167	154	-6	166	173	-5	80	85
-6	224	218	4	66	22	-5	209	201	-4	480	481
-5	375	375	6	220	207	-4	429	449	-3	572	561
-4	85	86	7	184	177	-2	392	396	-2	393	390
-3	127	128	8	101	124	-1	258	250	0	270	264
0	673	677				0	410	417	1	386	389
1	931	916	K.L= 17, 2			1	151	148	2	119	94
2	359	347				3	372	351	3	272	261
3	155	154	-10	232	216	4	297	294	4	451	452
4	151	129	-9	148	138	5	242	231	5	344	320
5	91	84	-8	178	173	6	243	238			
6	91	84	-7	445	433	7	124	116	K.L= 23, 2		
7	231	236	-6	503	526	8	147	158			
8	246	232	-5	382	391				-8	169	165
9	225	211	-3	466	473	K.L= 20, 2			-7	75	78
			-2	144	143				-5	123	125
K.L= 15, 2			0	113	117	-9	230	238	-4	235	250
			1	353	364	-8	86	54	-2	135	125
-10	82	65	2	322	314	-7	255	256	-1	248	240
-8	153	149	3	69	30	-6	69	39	0	110	112
-7	114	119	4	359	362	-3	163	174	1	100	88
-6	173	175	5	232	235	-2	121	112	5	172	176
-5	132	109	6	120	104	-1	164	158	6	209	180
-4	609	609	7	442	425	0	277	277			
-3	110	114	8	143	149	1	555	551	K.L= 24, 2		
-2	198	212				3	123	122			
-1	108	105	K.L= 18, 2			4	86	67	-7	157	142
0	58	76							-3	115	108
1	260	269	-10	90	66	K.L= 21, 2			-2	147	159
2	81	91	-9	210	200				-1	130	152
3	82	58	-7	69	35	-8	285	280	0	124	161
4	293	289	-6	164	179	-8	309	306	1	240	308
5	125	118	-3	362	361	-7	279	269	3	193	191
6	88	107	-2	336	347	-6	73	87	4	86	39
8	109	118	-1	360	357	-5	290	277			

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 25, 2			4	375	369	3	137	127	10	77	77
-6	133	131	6	269	259	4	121	115			
-4	78	100	7	235	238	5	88	94	K,L= 6, 3		
-3	133	150	8	222	213	7	374	377			
-2	280	297	9	207	197	8	342	335	-13	154	129
-1	180	177	10	139	132	9	121	117	-12	208	195
0	261	269	K,L= 2, 3			10	80	112	-10	155	149
1	95	64				K,L= 4, 3			-9	442	471
3	159	148	-13	170	165				-8	476	480
4	181	181	-12	219	206	-12	131	125	-7	84	98
			-11	272	247	-10	198	195	-6	355	363
K,L= 26, 2			-10	269	260	-9	166	169	-5	102	102
			-9	80	50	-8	128	125	-4	345	325
-5	164	184	-8	324	350	-7	288	290	-3	61	40
-4	122	138	-7	217	236	-6	82	96	-2	256	262
-2	238	241	-6	392	424	-5	411	438	-1	399	390
-1	292	289	-5	87	93	-4	667	666	0	1055	999
0	281	284	-4	144	164	-3	301	313	1	1521	1438
1	239	228	-3	1436	1475	-2	562	843	2	857	834
2	402	400	-2	644	638	-1	493	467	3	494	481
3	308	322	-1	432	395	0	158	172	4	538	543
			0	252	251	1	557	551	5	418	411
K,L= 27, 2			1	135	142	2	128	118	6	333	344
			2	287	299	3	440	446	7	283	264
-4	74	73	3	723	716	4	78	104	8	113	108
-3	111	109	4	1053	1006	6	280	279	9	104	125
-1	134	122	5	383	382	7	193	187	10	98	93
0	95	87	6	474	475	8	138	163	K,L= 7, 3		
1	150	137	7	315	315	9	138	102			
2	160	144	9	72	77				-12	356	356
			10	105	114	K,L= 5, 3			-11	292	265
K,L= 28, 2			K,L= 3, 3			-12	153	155	-10	137	150
-1	213	193				-10	189	198	-9	281	296
			-12	109	106	-9	302	308	-8	302	317
K,L= 1, 3			-11	186	186	-8	496	517	-7	479	480
			-10	449	456	-7	315	334	-6	247	265
-10	168	175	-9	409	415	-6	105	122	-5	806	829
-9	130	127	-8	367	384	-5	165	174	-4	1099	1122
-8	327	547	-7	639	681	-4	681	656	-3	398	410
-7	844	891	-6	664	704	-3	115	106	-2	67	74
-6	753	791	-5	427	449	-2	742	737	-1	302	282
-5	138	146	-4	370	384	-1	672	651	0	367	346
-3	574	597	-3	1273	1314	0	782	742	1	246	248
-2	473	456	-2	351	334	1	167	176	2	283	266
-1	1147	1098	-1	164	176	2	49	29	3	655	656
0	842	842	0	65	73	3	122	103	4	325	338
1	421	417	1	373	363	5	418	416	5	466	473
3	321	319	2	436	420	9	159	152	6	688	686
									7	164	167

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
8	219	204	K,L= 10,	3		-10	131	129	3	144	154
9	177	177				-9	61	85	4	528	539
10	124	131	-11	450	453	-7	244	253	5	456	460
K,L= 8,	3		-10	383	384	-5	389	392	7	101	78
			-8	93	95	-4	336	343	8	230	211
			-7	265	272	-3	120	128			
-13	177	156	-6	403	410	-2	322	344	K,L= 15,	3	
-12	254	258	-5	403	403	-1	1054	1062			
-11	139	128	-4	192	189	1	353	348	-9	305	304
-10	187	186	-3	336	342	2	112	121	-8	677	698
-9	358	360	-2	259	267	3	278	292	-7	404	416
-8	188	204	-1	627	622	4	172	176	-6	122	109
-7	482	440	0	386	372	5	326	324	-5	146	138
-6	177	187	1	80	98	6	365	369	-4	491	513
-4	72	92	2	512	512	7	161	183	-3	177	178
-3	279	294	3	568	565	8	113	92	-2	420	427
-1	186	176	4	77	79				-1	566	571
1	958	919	5	81	82	K,L= 13,	3		0	644	647
2	78	62	6	135	132				1	264	260
3	161	160	7	542	532	-12	240	225	2	223	225
4	212	218	8	159	153	-11	153	138	3	68	69
5	646	643				-9	150	168	4	120	121
7	100	98	K,L= 11,	3		-8	129	108	5	183	177
8	195	198				-7	135	136	6	287	285
9	312	296	-11	81	88	-6	161	176			
10	81	80	-10	113	109	-4	330	363	K,L= 16,	3	
			-9	155	166	-3	266	264			
K,L= 9,	3		-8	112	122	-2	252	270	-9	278	269
			-7	427	433	-1	89	100	-8	147	147
-11	151	162	-6	1086	1121	0	158	170	-7	97	113
-10	336	344	-5	965	964	1	76	63	-6	317	322
-9	177	176	-4	428	438	2	266	262	-5	107	100
-8	90	71	-3	584	590	3	193	211	-4	400	411
-7	254	260	-2	753	778	4	235	230	-3	583	586
-6	525	529	-1	378	381	5	152	138	-2	242	240
-5	295	311	0	313	300	6	194	177	-1	181	162
-3	820	810	1	290	282				0	316	319
-1	429	419	2	318	323	K,L= 14,	3		1	420	419
0	528	528	3	76	52				2	424	434
1	205	185	4	276	278	-12	189	197	3	330	335
2	451	451	5	98	110	-9	257	252	4	485	495
3	265	282	6	197	214	-7	121	142	5	511	503
4	87	93	7	268	251	-6	136	125	6	302	304
5	96	107	8	324	312	-5	62	15	7	77	78
6	252	248	9	206	208	-4	157	159	8	107	104
7	233	237				-3	399	422			
8	157	156	K,L= 12,	3		-2	215	208	K,L= 17,	3	
9	96	91				-1	144	160			
			-12	116	138	0	228	210	-11	147	130
			-11	246	242	1	410	402	-8	117	116

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-6	248	247	K,L= 20,	3		K,L= 24,	3		0	346	331
-5	75	50							1	995	993
-4	122	136	-10	263	245	-6	187	180	2	1542	1503
-3	107	111	-9	265	261	-5	89	120	3	524	529
-2	224	223	-7	78	72	-4	218	227	4	392	412
-1	93	106	-4	225	237	-1	231	227	5	412	421
0	88	67	-2	201	205	0	423	433	6	481	486
3	65	32	-1	203	228	1	361	363	7	371	351
4	254	264	0	268	272	2	422	414	8	540	536
6	177	150	1	265	255	3	277	277	9	454	442
7	121	135	2	450	434						
			3	324	332	K,L= 25,	3		K,L= 1,	4	
K,L= 18,	3		4	207	205						
			5	193	193	-7	243	234	-14	115	130
-10	115	107	6	210	202	-6	266	269	-13	162	150
-9	176	157				-3	204	207	-12	116	126
-7	181	196	K,L= 21,	3		-2	104	111	-11	208	218
-6	252	262				-1	142	154	-9	166	180
-5	68	54	-9	159	135	0	119	126	-8	579	604
-4	203	199	-5	350	356	2	126	112	-7	499	529
-3	296	289	-4	242	236				-6	339	356
-2	193	204	-3	160	164	K,L= 26,	3		-5	580	608
-1	260	256	-1	77	8				-4	1085	1134
2	67	32	1	63	68	-3	114	85	-3	1225	1231
3	64	47	2	204	214	-2	155	160	-2	378	366
4	233	228	5	93	71	-1	163	148	-1	220	214
5	199	186	6	171	160	0	111	93	0	163	151
6	177	171				1	178	161	1	83	67
7	91	97	K,L= 22,	3					2	241	236
						K,L= 27,	3		3	199	210
K,L= 19,	3		-9	109	107				4	349	343
			-7	80	57	-4	338	345	5	413	412
-10	136	153	-4	72	71	-3	149	147	6	333	333
-9	283	280	-3	166	159	-1	109	118	7	256	245
-8	431	427	-1	245	247				8	116	139
-7	290	292	0	170	183	K,L= 0,	4				
-6	403	404	2	65	49				K,L= 2,	4	
-5	246	247	5	82	64	-13	69	72			
-4	175	172				-12	110	104	-13	313	293
-3	98	96	K,L= 23,	3		-11	168	174	-12	250	236
-2	530	541				-10	284	295	-11	118	121
-1	447	458	-6	200	196	-9	702	754	-10	210	196
0	194	211	-5	436	465	-8	575	620	-8	579	597
1	190	192	-4	368	370	-7	272	281	-7	297	301
2	166	178	-3	183	196	-6	407	423	-6	193	208
3	80	96	-2	77	58	-5	345	327	-5	268	299
7	166	155	-1	64	102	-4	148	155	-4	475	473
			0	74	16	-3	648	649	-3	1049	1059
			1	187	158	-2	204	218	-2	732	713
			2	203	239	-1	246	252	-1	127	130

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
0	201	187	3	983	992	9	115	126	-7	788	822
1	175	187	4	344	327				-6	696	715
2	123	156	5	142	144	K,L=	7,	4	-5	557	562
3	358	356	6	551	557				-4	50	45
4	335	350	7	388	385	-13	87	51	-3	378	389
5	596	613				-9	170	177	-2	584	577
7	140	134	K,L=	5,	4	-8	519	542	-1	779	748
8	74	73				-7	400	419	0	1057	998
9	126	117	-14	88	103	-6	152	168	1	218	203
			-13	113	106	-5	110	116	2	83	56
K,L=	3,	4	-12	136	124	-4	137	125	3	76	71
			-11	98	99	-3	113	108	4	163	162
-14	155	151	-10	201	219	-1	205	199	5	227	245
-12	168	165	-9	539	576	0	260	248	6	277	252
-11	212	209	-8	290	311	1	196	184			
-10	372	378	-7	705	647	3	312	313	K,L=	10,	4
-7	99	110	-6	405	460	4	66	40			
-6	784	818	-5	651	673	5	271	271	-13	121	114
-5	1112	1156	-3	508	474	6	150	171	-12	147	172
-4	1186	1191	-2	923	898	9	123	122	-11	302	308
-3	687	705	-1	937	897				-10	353	347
-2	872	852	0	735	706	K,L=	8,	4	-9	234	239
-1	166	157	1	723	706				-8	69	61
0	894	869	2	492	468	-13	359	345	-7	72	70
1	603	582	5	121	137	-12	426	413	-6	106	125
2	546	631	6	171	175	-11	145	142	-5	183	189
3	299	309	8	212	243	-10	49	93	-4	95	93
4	223	232	9	217	224	-8	221	218	-3	88	70
6	124	135				-7	339	340	-2	120	104
7	272	277	K,L=	6,	4	-6	535	542	-1	221	216
8	320	309				-5	530	551	0	413	391
9	166	151	-12	127	119	-4	129	134	1	390	380
			-11	197	211	-3	939	932	3	87	90
K,L=	4,	4	-10	236	227	-2	1378	1342	4	279	269
			-9	252	263	-1	667	634	5	304	311
-14	238	221	-8	136	122	0	158	162	6	76	82
-13	106	75	-7	427	451	1	166	155	7	183	182
-11	144	135	-6	453	467	2	273	249	8	240	232
-10	224	260	-5	376	370	3	333	323	9	169	159
-9	145	153	-4	389	395	4	557	569			
-3	126	137	-3	248	251	5	868	900	K,L=	11,	4
-7	399	419	-2	489	477	6	417	427			
-6	84	80	-1	554	537	7	206	204	-13	93	24
-5	578	602	0	257	250				-11	99	106
-3	515	515	1	215	211	K,L=	9,	4	-10	118	109
-2	269	272	2	309	363				-9	143	134
-1	1085	1030	3	268	261	-13	126	104	-8	131	157
0	753	726	4	202	196	-10	94	105	-7	415	413
1	162	158	5	143	124	-9	121	128	-6	272	232
2	664	648	7	178	132	-8	220	249	-5	61	46

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-4	319	340	4	228	236	-3	335	326	-8	198	209
-3	55	59	5	152	167	-1	170	155	-7	237	247
-2	373	385	6	291	297	0	444	448	-6	179	180
-1	222	221	7	232	213	1	283	284	-5	107	119
0	397	400	8	164	194	2	320	327	-4	142	137
2	202	204	K.L = 14, 4			3	436	448	-3	190	186
3	331	329	-11	146	155	4	177	186	-2	243	272
6	217	209	-10	208	203	5	64	80	-1	297	306
8	93	98	-9	620	620	6	70	46	0	86	90
K.L = 12, 4			-8	411	416	7	158	147	3	260	266
-13	143	138	-6	258	265	K.L = 17, 4			4	341	331
-12	166	162	-5	86	72	-10	328	329	5	85	21
-11	155	116	-4	288	291	-9	184	182	6	251	238
-10	235	248	-3	268	286	-8	149	138	K.L = 20, 4		
-9	121	129	-2	64	80	-6	261	271	-10	150	133
-8	145	140	0	361	354	-5	231	240	-9	192	191
-7	68	72	1	777	781	-4	378	382	-8	91	69
-6	155	167	2	377	374	-3	335	348	-6	89	94
-5	125	108	3	127	135	-2	670	696	-4	172	169
-4	252	252	4	143	140	-1	353	362	-3	285	274
-3	211	230	5	170	177	1	113	106	-2	144	152
-2	518	532	6	77	80	2	153	139	0	102	110
-1	145	143	7	78	43	3	435	434	1	366	378
0	242	235	8	271	282	4	215	237	2	225	209
1	363	345	K.L = 15, 4			6	136	146	3	190	189
2	129	129	-10	100	66	7	170	180	5	78	89
4	195	205	-8	290	312	K.L = 18, 4			6	98	86
5	460	486	-7	105	101	-11	264	266	K.L = 21, 4		
6	158	149	-6	160	155	-10	153	149	-8	435	443
7	255	252	-4	118	135	-9	117	114	-7	295	304
8	165	155	-3	70	89	-7	410	410	-6	279	274
K.L = 13, 4			-2	231	245	-6	452	463	-5	246	238
-11	110	125	-1	82	85	-4	100	105	-4	451	452
-10	214	221	0	132	124	-3	164	193	-3	179	175
-9	210	209	5	228	219	-2	129	130	-2	90	108
-8	89	82	5	203	208	-1	373	371	-1	245	240
-6	622	637	K.L = 16, 4			0	233	236	0	489	481
-5	888	907	-11	166	180	2	309	296	1	242	236
-4	937	969	-10	248	247	3	690	688	2	134	130
-3	748	757	-9	83	67	4	426	433	3	74	81
-2	376	378	-7	383	380	6	242	241	4	102	108
-1	124	130	-6	106	103	K.L = 19, 4			5	121	100
0	271	257	-5	638	637	-10	100	111	K.L = 22, 4		
1	174	188	-4	282	285	-9	124	131	-9	187	184
2	440	444									
3	454	459									

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-8	231	243	K,L= 27,	4		K,L= 3,	5		-4	744	706
-7	72	51							-3	415	394
-6	83	103	-4	80	123	-14	125	78	-2	250	257
-5	253	256	-3	127	147	-10	144	155	0	435	430
-4	88	86	-2	231	230	-9	286	291	1	615	585
-3	269	269	-1	100	88	-8	191	204	3	722	742
-2	135	148				-7	56	40	4	440	443
-1	273	271	K,L= 1,	5		-6	100	130	5	331	342
0	139	145				-5	1016	1048	6	156	137
1	120	114	-14	109	114	-4	954	958	8	106	106
2	71	59	-12	100	99	-3	392	383			
3	78	46	-10	280	303	-2	542	519	K,L= 6,	5	
4	301	298	-8	444	481	-1	436	427			
			-7	675	710	0	99	86	-14	198	192
K,L= 23,	4		-6	512	537	1	198	219	-13	341	320
			-5	737	747	2	380	386	-12	330	325
-8	325	328	-4	680	667	3	326	326	-11	151	131
-7	340	312	-3	217	199	8	246	249	-9	488	528
-5	189	197	-2	856	811				-8	606	627
-4	455	460	-1	421	423	K,L= 4,	5		-6	179	155
-3	290	295	0	127	113				-5	655	661
-2	209	196	1	91	88	-13	84	113	-4	135	116
-1	99	87	2	143	143	-11	112	110	-3	361	349
0	225	209	3	92	74	-10	439	455	-2	428	408
3	185	90	4	260	302	-9	174	170	-1	489	461
			5	91	88	-8	415	424	0	348	326
K,L= 24,	4		6	151	127	-7	478	468	1	625	631
						-6	70	75	2	549	537
-6	152	171	K,L= 2,	5		-5	973	997	3	300	292
-2	70	78				-4	196	201	4	364	378
-1	223	231	-14	201	204	-3	55	55	5	519	537
0	85	92	-13	294	283	-2	144	125	6	330	329
1	108	88	-12	313	313	0	643	633	7	102	107
2	134	107	-11	254	267	1	63	55	8	128	134
			-9	412	438	2	312	334			
K,L= 25,	4		-8	54	17	4	138	135	K,L= 7,	5	
			-7	198	230	5	338	332			
-7	189	200	-5	723	733	6	96	80	-13	103	122
-6	294	291	-4	56	73	8	106	120	-12	219	226
-5	284	295	-2	275	269				-11	331	313
-2	257	264	-1	767	751	K,L= 5,	5		-10	231	232
-1	324	320	1	59	41				-8	59	17
1	167	163	2	316	318	-13	119	127	-7	173	185
2	159	151	3	732	755	-11	139	139	-6	250	253
			4	99	87	-10	359	371	-4	614	648
K,L= 26,	4		5	528	528	-9	148	146	-3	1222	1200
			6	707	715	-8	427	466	-2	360	351
-3	78	70	7	543	537	-7	546	567	-1	492	470
-1	151	147	8	271	269	-6	111	137	0	445	417
0	119	139				-5	172	176	1	168	148

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
2	77	65	K,L= 10, 5			-11	246	249	-2	201	188
3	173	158				-10	321	339	-1	148	129
4	504	507	-11	215	217	-9	77	101	0	380	376
5	218	221	-10	630	631	-8	219	219	1	730	726
6	199	183	-9	231	249	-7	597	609	2	426	429
7	328	311	-8	191	187	-6	513	519	3	71	57
			-7	366	387	-5	85	91	4	290	284
K,L= 8, 5			-6	368	382	-4	109	104	5	346	347
			-5	443	456	-3	72	78	6	295	269
-13	82	71	-4	329	360	-2	246	248	7	112	114
-12	92	78	-3	212	188	-1	548	536			
-11	155	160	-2	173	183	0	678	671	K,L= 15, 5		
-10	198	185	-1	126	133	1	118	114			
-9	104	91	0	596	574	2	467	456	-12	86	65
-8	442	460	1	114	76	3	122	128	-10	65	33
-7	109	99	2	452	439	4	467	459	-9	111	100
-6	250	240	3	683	679	5	278	287	-8	120	118
-5	285	299	4	334	334	6	163	153	-7	364	382
-4	133	177	5	133	126	7	223	238	-6	416	429
-3	177	168	6	75	113				-5	203	199
-2	414	401	7	295	308	K,L= 13, 5			-4	284	296
-1	342	332	8	409	384				-3	359	373
0	295	278				-13	200	191	-1	406	406
1	796	735	K,L= 11, 5			-12	146	150	0	765	762
2	626	605				-11	257	253	1	481	467
3	258	236	-13	84	88	-9	156	153	6	84	94
4	376	399	-11	134	137	-8	107	109	7	135	123
6	78	47	-10	350	365	-7	208	201			
8	115	120	-9	271	280	-6	295	318	K,L= 16, 5		
			-8	116	116	-5	194	200			
K,L= 9, 5			-7	211	227	-4	463	471	-12	229	239
			-6	624	634	-3	360	370	-11	276	290
10	77	94	-5	818	837	-2	223	209	-10	90	108
-8	160	163	-4	262	274	-1	333	339	-9	181	171
-7	87	84	-3	378	382	0	181	172	-8	192	189
-6	61	53	-2	620	606	1	240	246	-7	284	290
-5	395	398	-1	488	477	4	315	329	-6	222	225
-4	252	253	0	113	95	6	272	276	-5	330	339
-3	292	240	1	102	86	7	242	228	-4	175	174
-2	732	712	2	292	276				-3	235	244
-1	133	110	3	541	548	K,L= 14, 5			-2	527	532
0	288	280	4	212	216				-1	322	330
1	140	124	5	76	110	-12	193	204	1	370	372
2	341	355	6	255	254	-11	171	169	2	95	81
3	144	144	8	228	238	-10	122	102	4	199	191
6	148	160				-9	149	156	5	374	371
7	161	154	K,L= 12, 5			-8	505	516	6	187	193
8	264	267				-7	91	69			
			-13	109	107	-5	120	107			
			-12	90	91	-4	303	307			

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 17, 5			-8	95	105	-6	152	130	K,L= 24, 5		
			-7	183	175	-5	391	398			
-11	160	166	-6	382	377	-4	632	631	-7	93	99
-9	74	64	-5	293	284	-3	560	566	-5	122	118
-7	107	120	-4	79	96	-2	315	317	-4	80	104
-4	340	350	-3	249	258	-1	91	101	-3	146	163
-3	369	366	-2	532	546	0	153	187	-1	69	33
-2	163	151	-1	550	551	2	196	203	0	117	129
-1	70	75	0	361	360				1	76	60
4	154	152	1	150	147	K,L= 22, 5			2	270	266
6	232	202	2	164	173						
			3	271	270	-7	272	268	K,L= 25, 5		
K,L= 18, 5			4	71	33	-6	109	75			
			5	86	19	-4	77	58	-6	262	269
-11	188	203				-3	79	76	-5	290	307
-10	151	152	K,L= 20, 5			-2	150	140	-4	78	98
-9	109	87				-1	93	120	-2	199	201
-8	114	119	-10	134	162	0	93	93	-1	185	183
-7	245	253	-9	289	278	1	96	89	0	74	66
-6	345	343	-8	201	207	3	160	158	1	91	70
-5	183	185	-7	82	99						
-3	286	286	-4	104	108	K,L= 23, 5			K,L= 26, 5		
-2	370	372	-2	133	153						
-1	423	431	0	131	105	-8	119	83	-5	103	114
0	280	283	1	311	301	-6	141	133	-3	173	165
2	203	201	2	330	323	-5	394	385	-2	206	219
3	102	80	3	270	270	-4	416	424	-1	155	156
4	280	270	4	123	94	-3	312	304			
5	190	199				-2	275	265			
			K,L= 21, 5			0	80	66			
K,L= 19, 5						1	86	18			
			-10	146	154	2	117	117			
-9	219	225	-7	86	96	3	141	186			

150 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (X10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 0, 6			K,L= 2, 6			-11	230	233	-10	162	145
						-10	374	407	-9	133	140
-14	165	161	-14	75	70	-9	376	395	-8	377	380
-13	264	257	-13	131	128	-8	116	107	-6	471	507
-12	281	281	-12	250	255	-7	215	230	-5	700	690
-11	90	85	-11	233	250	-6	447	458	-4	145	126
-10	353	354	-8	91	95	-5	305	289	-2	198	205
-9	848	897	-7	54	22	-4	161	173	-1	457	437
-8	801	854	-6	220	220	-3	335	316	0	764	742
-7	336	377	-5	272	275	-2	79	81	2	229	231
-6	123	140	-4	399	394	-1	420	398	4	300	304
-5	193	179	-3	105	85	0	421	441	6	144	164
-4	345	364	-2	385	387	1	279	290	7	160	154
-2	180	152	-1	102	92	2	76	77			
-1	770	747	0	192	183	3	138	116	K,L= 7, 6		
0	401	387	1	73	47	4	397	399	-10	107	138
1	661	674	2	73	95	5	215	200	-8	204	211
2	1016	1032	3	336	347	6	123	155	-7	190	204
3	395	404	5	342	367	7	226	249	-6	106	75
5	289	294	6	353	376	8	233	233	-4	241	230
6	199	203	7	82	5				-3	528	520
7	190	218				K,L= 5, 6			-2	82	84
8	665	660	K,L= 3, 6			-13	156	176	0	433	419
						-11	272	275	1	449	449
K,L= 1, 6			-14	281	256	-10	95	78	2	200	223
			-12	73	103	-9	125	113	3	225	244
-14	150	133	-11	65	41	-7	107	126	6	124	100
-13	232	251	-9	401	431	-6	839	848	7	112	84
-11	368	386	-7	289	302	-5	746	738			
-10	187	196	-6	90	68	-4	384	390	K,L= 8, 6		
-8	174	173	-5	623	592	-2	412	407	-14	200	198
-7	414	435	-4	703	681	-1	1111	1083	-13	389	380
-6	111	142	-3	836	804	0	831	842	-12	467	460
-5	115	133	-2	1058	1017	1	657	670	-11	432	435
-4	645	626	-1	596	575	2	389	390	-10	137	128
-3	1246	1211	0	73	55	3	90	51	-9	85	92
-2	558	527	1	345	349	4	372	406	-8	277	290
-1	551	508	2	147	168	5	180	206	-7	422	428
0	176	176	3	231	254	6	174	182	-6	452	445
1	400	432	4	241	248	7	280	291	-5	532	517
3	71	43	8	168	188				-4	644	650
4	364	375				K,L= 4, 6			-3	155	159
5	201	190	K,L= 4, 6			-14	95	67	-2	652	626
6	235	152				-13	93	121	-1	270	260
7	328	328	-14	281	259	-11	287	307	0	70	28
			-13	309	310						
			-12	206	190						

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
1	89	63	K.L= 11,	6		-6	206	216	K.L= 16,	6	
2	146	192				-5	298	303			
3	66	37	-11	155	143	-4	737	721	-12	114	110
4	246	303	-10	214	220	-3	646	636	-11	127	139
5	388	398	-9	259	254	-2	259	266	-10	285	276
6	438	460	-8	217	228	-1	145	127	-9	280	297
7	211	233	-7	338	362	0	279	280	-8	287	307
			-6	431	438	1	209	215	-7	291	296
K.L= 9,	6		-5	63	19	2	158	169	-6	196	211
			-4	172	179	3	333	338	-3	137	153
-12	87	73	-3	56	108	4	259	275	-2	443	433
-11	132	131	-2	339	324	5	251	246	0	287	298
-10	240	240	-1	112	109				1	511	512
-9	164	172	0	428	423	K.L= 14,	6		2	150	162
-8	427	434	1	504	503				3	330	330
-7	388	411	2	133	134	-12	111	130	4	264	278
-6	416	422	4	202	184	-11	171	185			
-5	83	112	5	126	132	-10	284	289	K.L= 17,	6	
-4	360	347	6	118	113	-9	274	272			
-3	414	410				-8	352	367	-11	171	162
-2	392	378	K.L= 12,	6		-7	177	190	-10	222	225
-1	686	654				-6	122	119	-9	248	240
0	382	364	-13	186	179	-5	80	74	-8	218	237
1	146	149	-12	180	160	-3	91	66	-7	112	137
2	137	136	-11	303	306	-2	100	78	-6	123	136
3	235	234	-10	259	199	-1	204	202	-5	487	496
4	128	136	-9	70	54	0	216	215	-4	432	445
5	137	131	-8	138	147	1	195	174	-3	275	267
			-7	261	282	2	234	220	-2	585	593
K.L= 10,	6		-6	328	337	3	407	408	-1	572	562
			-5	286	297	4	98	88	0	122	113
-13	70	9	-4	401	389	5	141	151	1	168	164
-11	146	118	-2	79	77				2	316	321
-9	107	122	-1	141	131	K.L= 15,	6		3	230	241
-8	462	471	0	270	269						
-7	642	647	1	341	336	-11	136	144	K.L= 18,	6	
-6	256	270	2	195	202	-10	193	196			
-5	73	72	3	142	132	-9	183	195	-11	173	179
-3	85	85	4	246	248	-7	191	200	-10	262	284
-2	254	233	5	198	197	-5	76	32	-9	135	130
-1	161	167	6	253	275	-4	62	23	-7	167	173
0	216	200				-3	77	91	-6	409	401
1	442	447	K.L= 13,	6		-2	170	167	-5	202	186
2	541	540				-1	75	92	-4	158	149
3	540	541	-13	98	98	0	377	391	-1	344	344
4	209	223	-11	228	223	1	238	254	0	364	363
5	87	59	-10	302	301	2	89	100	1	91	87
7	106	81	-9	130	144	3	127	151	3	314	318
			-8	179	196	4	133	141	4	184	177
			-7	242	253	5	136	127			

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L = 19, 6			-3	77	10	1	476	499	-11	143	148
			-2	319	321	2	381	411	-10	115	134
-11	190	189	-1	172	178	3	94	103	-9	256	258
-10	176	193	0	159	160	5	79	88	-8	77	40
-9	94	94	2	194	198				-6	60	53
-8	115	129				K.L = 2, 7			-5	190	166
-6	107	104	K.L = 23, 6			-14	147	144	-4	369	359
-5	292	297				-13	318	301	-3	62	46
-2	270	274	-7	217	221	-12	424	426	-2	344	329
-1	387	384	-6	231	230	-11	296	295	-1	277	301
0	76	54	-5	174	197	-10	493	500	0	85	50
1	70	78	-4	158	158	-9	299	292	1	116	117
2	235	247	-3	261	269	-8	86	78	2	128	121
4	156	169	-2	99	107	-6	773	772	3	244	255
			0	186	177	-5	521	523	4	293	313
K.L = 20, 6			1	413	408	-4	466	469	7	102	88
-9	153	159	K.L = 24, 6			-3	490	490	K.L = 5, 7		
-8	273	278				-1	270	263			
-7	94	45	-7	173	165	0	464	471	-11	109	89
-6	165	170	-6	238	240	1	168	168	-10	117	98
-5	71	49	-5	71	76	4	287	297	-9	120	125
-3	225	230	-4	195	198	5	220	228	-8	251	242
-2	115	121	-3	94	84	6	269	262	-7	238	253
-1	129	108	-2	114	114	7	179	197	-6	223	238
0	167	148	-1	149	143				-5	323	319
1	97	119	0	200	212	K.L = 3, 7			-4	121	91
2	140	132	1	85	105				-3	580	556
3	153	161				-14	189	180	-2	367	355
			K.L = 25, 6			-13	92	95	-1	123	105
K.L = 21, 6						-11	111	104	0	366	367
			-6	145	156	-9	188	193	1	406	411
-8	151	139	-5	271	285	-8	240	247	2	90	87
-7	440	441	-2	204	197	-7	142	124			
-6	158	158	-1	340	331	-6	323	323	K.L = 6, 7		
-5	74	88				-5	414	404			
-4	126	90	K.L = 1, 7			-4	592	585	-14	117	130
-3	273	271				-3	433	408	-13	262	246
-2	364	347	-12	165	156	-2	629	625	-12	233	235
-1	104	198	-10	96	103	-1	720	725	-11	157	164
0	305	308	-9	63	82	0	519	526	-10	260	266
1	314	326	-8	355	355	1	340	375	-9	297	298
2	271	271	-7	337	337	2	317	343	-8	608	614
			-6	520	514	3	105	140	-7	511	515
K.L = 22, 6			-5	432	419	4	108	120	-6	84	87
			-4	185	174				-5	97	96
-9	105	95	-3	72	93	K.L = 4, 7			-4	371	361
-8	165	160	-2	249	246				-3	157	163
-5	281	273	-1	431	416	-14	181	166	-2	97	83
-4	232	237	0	583	590	-12	103	106	-1	148	124

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
0	174	174	-7	258	249	K,L= 12, 7			K,L= 15, 7		
1	89	65	-6	79	88						
2	573	591	-5	461	457	-12	238	227	-12	82	93
3	223	218	-4	222	220	-11	280	283	-11	130	105
5	180	189	-3	149	137	-10	256	243	-9	147	171
6	165	185	-2	272	263	-9	189	194	-8	68	16
			-1	741	725	-6	362	378	-7	505	494
K,L= 7, 7			0	95	98	-5	351	357	-6	557	567
			1	127	93	-4	63	64	-5	269	280
-13	272	248	2	126	98	-3	169	185	-4	112	126
-12	207	209	3	274	269	-2	84	78	-3	225	228
-11	224	220	4	148	138	-1	107	95	-2	255	261
-10	322	304	K,L= 10, 7			0	397	396	-1	124	110
-6	143	144				1	312	310	0	564	541
-5	195	177				3	176	161	1	574	570
-4	614	604	-13	263	259	4	300	304	2	306	306
-3	1293	1257	-11	101	73	5	122	144	3	132	115
-2	878	647	-10	284	282	K,L= 13, 7			4	179	193
-1	348	331	-9	571	589				K,L= 16, 7		
0	415	402	-8	245	251						
1	223	233	-7	124	121	-11	165	180			
2	122	111	-6	403	400	-10	72	90	-12	388	392
4	205	216	-4	267	278	-7	107	112	-11	295	293
5	297	295	-2	412	402	-6	69	70	-10	112	143
			-1	506	491	-4	74	65	-8	282	266
K,L= 8, 7			0	84	62	-3	560	547	-7	161	170
			1	270	272	-2	110	44	-5	382	399
-11	234	229	2	97	107	-1	230	236	-4	512	518
-8	470	474	3	352	343	1	73	72	-3	153	166
-7	630	625	4	416	427	2	261	270	-2	231	226
-6	121	105	K,L= 11, 7			3	115	111	-1	296	300
-5	221	215				4	100	82	0	115	102
-4	422	417				5	180	204	1	98	64
-3	90	87	-11	150	148	K,L= 14, 7			2	215	228
-2	66	45	-10	190	180				3	92	93
-1	102	115	-9	537	530				K,L= 17, 7		
0	75	60	-8	159	179	-12	209	213			
1	154	155	-7	80	70	-11	369	353			
2	539	552	-6	177	174	-10	222	203	-10	109	101
3	394	384	-5	421	418	-8	240	238	-9	69	39
4	87	81	-4	467	463	-7	351	356	-8	72	41
5	93	103	-3	149	137	-6	135	122	-5	156	133
6	119	96	-2	464	451	-5	384	383	-4	97	94
			-1	810	793	-4	495	498	-3	185	197
K,L= 9, 7			0	232	249	-3	176	161	-2	278	268
			1	99	84	-2	69	102	K,L= 18, 7		
-14	218	204	2	414	413	-1	126	121			
-12	79	48	3	400	421	1	129	133			
-11	191	197	4	200	211	2	272	283	-11	191	195
-9	487	482	6	97	111	5	229	250	-10	254	235

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-8	159	144	K,L= 22,	7		-13	255	243	-3	317	311
-6	159	162				-12	211	201	-2	582	566
-5	222	225	-8	140	124	-10	225	254	-1	706	725
-4	114	107	-7	148	147	-9	142	141	0	377	386
-3	207	205	-6	155	154	-8	110	102	1	218	225
-1	214	218				-7	224	227	2	115	125
0	239	247	K,L= 23,	7		-6	141	158	3	342	379
1	93	83				-5	82	53	4	310	329
2	176	184	-8	133	129	-4	236	234	5	197	208
			-4	110	108	-3	369	378			
K,L= 19,	7		-3	220	221	-2	533	532	K,L= 4,	8	
			-2	305	319	-1	360	369			
-10	109	67	-1	238	223	0	360	381	-14	187	176
-8	187	174	0	135	116	1	339	335	-13	226	227
-7	201	201				2	329	343	-12	233	228
-6	174	155	K,L= 24,	7		3	128	136	-11	155	158
-5	235	244				4	133	151	-10	351	351
-4	306	309	-7	160	157	5	191	165	-9	329	327
-3	198	190	-6	164	182				-7	101	104
-2	317	303	-2	186	176	K,L= 2,	8		-6	510	500
-1	335	346							-5	526	516
0	380	380	K,L= 25,	7		-14	102	88	-4	260	252
1	284	281				-12	284	291	-3	183	201
2	238	229	-4	167	167	-11	414	418	-2	384	368
3	119	136				-6	332	343	-1	248	257
			K,L= 0,	8		-7	78	71	0	256	274
K,L= 20,	7					-6	70	51	1	184	178
			-14	176	195	-5	87	33	2	97	110
-10	130	133	-12	302	296	-4	682	676	3	213	240
-9	159	174	-11	299	291	-3	276	261	4	296	344
-8	229	260	-10	212	211	-2	245	230	5	231	231
-7	311	309	-9	306	312	-1	184	182			
-6	222	219	-8	964	956	0	360	381	K,L= 5,	8	
-4	73	63	-7	727	722	1	127	146			
-3	84	67	-6	213	221	2	164	167	-14	152	129
-2	164	161	-5	179	182	4	159	168	-11	370	368
-1	86	88	-4	169	160	6	336	353	-10	439	442
0	132	146	-3	571	550				-9	88	77
1	153	145	-2	186	204	K,L= 3,	8		-8	332	347
2	260	271	-1	239	235				-7	447	461
			0	285	282	-14	252	238	-6	470	464
K,L= 21,	7		2	433	449	-13	267	265	-5	544	521
			3	575	595	-12	122	128	-4	452	444
-8	90	90	4	142	102	-11	84	82	-2	328	304
-7	72	53	5	209	228	-9	270	261	-1	788	773
-6	149	157	6	207	217	-8	94	89	0	769	805
-4	171	194				-7	127	138	1	357	383
-3	350	347	K,L= 1,	8		-6	255	263	2	277	299
-2	173	183				-5	385	376	3	262	279
-1	173	192	-14	102	109	-4	647	635	5	97	103

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L = 6, 8			-3	350	344	-9	140	138	K,L = 14, 8		
			-2	252	254	-7	256	244			
-13	187	177	-1	7	75	-6	205	201	-12	188	195
-12	202	197	0	234	228	-5	261	255	-11	86	123
-11	154	145	1	168	185	-4	108	127	-10	113	122
-10	190	209	4	77	63	-3	290	284	-9	194	180
-9	85	84	5	163	182	-2	223	201	-8	376	358
-8	82	48				-1	245	246	-7	404	406
-7	154	154	K,L = 9, 8			0	454	436	-6	166	168
-6	370	364				1	285	279	-5	70	30
-5	292	291	-14	76	86	2	204	215	-3	143	153
-4	508	506	-13	86	74	4	140	115	-1	290	282
-3	106	89	-12	120	95				0	381	381
-2	95	94	-11	99	109	K,L = 12, 8			1	85	77
-1	345	339	-10	162	174				2	448	464
0	195	180	-8	94	69	-13	114	101	3	377	386
1	105	121	-7	193	194	-12	237	216	4	273	263
2	108	125	-6	388	386	-11	313	302			
3	92	105	-5	311	302	-10	214	213	K,L = 15, 8		
4	135	122	-4	351	361	-9	178	170			
			-3	428	414	-8	235	241	-12	175	136
K,L = 7, 8			-2	121	106	-7	192	185	-7	77	72
			0	379	382	-6	116	95	-6	104	119
-13	94	108	1	720	713	-5	265	253	-4	187	169
-12	169	156	2	557	558	-4	347	339	-3	130	90
-9	81	92	3	174	190	-2	112	114	-2	220	215
-8	126	113				-1	81	90	1	113	139
-7	322	323	K,L = 10, 8			0	100	112	3	173	165
-6	270	271				1	93	104			
-5	163	165	-11	96	92	2	133	132	K,L = 16, 8		
-4	250	224	-10	400	391	3	92	81			
-3	298	293	-9	477	488	4	93	94	-10	185	189
-2	372	357	-8	524	532				-9	330	330
-1	161	156	-7	307	308	K,L = 13, 8			-8	319	315
0	116	105	-6	266	258				-7	285	277
1	110	103	-4	190	197	-13	178	171	-6	306	301
2	261	264	-3	226	223	-12	78	82	-5	194	178
			-2	206	204	-10	125	136	-4	146	141
K,L = 8, 8			-1	129	102	-9	174	164	-3	88	101
			1	278	275	-8	237	227	-2	84	66
-14	102	106	2	369	375	-7	206	216	-1	271	264
-13	162	148	3	164	152	-5	66	70	1	88	74
-12	262	246	4	141	124	-3	563	548	2	174	177
-11	426	420				-2	544	525	3	168	167
-10	370	363	K,L = 11, 8			-1	403	390			
-9	250	236				0	235	296	K,L = 17, 8		
-8	153	138	-13	136	128	1	406	392			
-6	122	93	-12	103	83	2	248	254	-11	130	129
-5	391	395	-11	149	149	3	227	255	-9	269	253
-4	526	518	-10	225	243	4	268	279	-8	215	208

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-6	84	36	K,L= 21,	8		-12	320	315	4	386	400
-5	303	294				-11	383	370			
-4	292	279	-8	75	57	-10	560	573	K,L= 5,	9	
-3	387	385	-7	244	235	-9	468	465			
-2	394	389	-6	352	342	-8	248	231	-12	82	69
-1	424	410	-5	91	111	-7	101	93	-11	174	177
0	214	196	-3	219	230	-6	265	274	-10	190	192
2	93	31	-2	246	253	-5	129	116	-9	336	321
3	117	134	0	189	199	-3	248	249	-8	348	351
						-2	299	292	-7	100	70
K,L= 18,	8		K,L= 22,	8		0	183	196	-6	367	369
						1	141	167	-5	451	444
-11	89	94	-7	176	185	4	103	96	-2	353	352
-10	222	224	-6	151	135				-1	170	178
-9	326	342	-5	132	144	K,L= 3,	9		1	364	387
-8	110	103	-4	369	374				2	300	322
-7	151	153	-3	316	316	-14	184	182	3	117	105
-6	361	345	-1	238	236	-13	151	170	4	159	175
-5	290	303				-12	200	204			
-4	137	141	K,L= 23,	8		-11	211	206	K,L= 6,	9	
-3	270	275				-10	257	273			
-2	173	174	-7	105	104	-8	232	242	-13	84	18
0	124	117	-6	196	186	-7	220	219	-12	273	278
			-4	78	65	-6	170	160	-11	400	403
K,L= 19,	8		-2	163	142	-3	250	255	-10	221	213
						-2	442	442	-9	160	159
-10	225	223	K,L= 3,	9		-1	566	594	-8	252	239
-6	191	198				0	401	426	-7	680	677
-5	321	318	-13	126	120	1	148	139	-6	469	466
-4	127	110	-12	70	107	2	126	137	-5	75	59
-3	237	236	-11	94	92	3	281	306	-4	225	225
-1	125	120	-10	148	153	4	268	270	-3	148	147
0	145	150	-9	113	107				0	276	288
1	114	90	-8	391	371	K,L= 4,	9		1	156	146
2	136	119	-7	303	301				2	178	164
			-6	83	86	-14	190	156	3	330	342
K,L= 20,	8		-5	641	637	-13	168	168	4	138	133
			-4	223	208	-11	216	210			
-10	65	60	-3	100	101	-10	175	155	K,L= 7,	9	
-8	224	229	-1	242	250	-8	179	176			
-7	211	210	0	386	387	-7	155	149	-14	204	203
-6	119	104	1	560	534	-6	359	362	-13	209	202
-5	123	123	2	506	521	-5	424	424	-12	467	451
-4	102	88	3	298	309	-4	85	87	-11	248	230
-3	211	197	4	152	156	-3	421	413	-10	182	194
-2	123	122				-2	189	179	-9	124	127
0	258	261	K,L= 2,	9		-1	403	419	-8	110	91
1	136	147				0	393	422	-7	267	273
			-14	100	95	2	90	108	-6	272	269
			-13	243	252	3	250	289	-4	256	264

150 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-3	344	338	-5	243	251	-2	461	436	-9	125	128
-2	655	647	-4	158	149	0	229	227	-3	176	165
-1	212	210	-2	421	414	3	97	95	-2	209	195
1	285	270	-1	177	181				1	98	70
2	164	161	1	139	143	K,L= 14, 9			K,L= 18, 9		
4	110	134	3	142	152						
K,L= 8, 9			K,L= 11, 9			-11	284	260			
						-10	181	159	-9	87	77
						-9	192	168	-8	71	31
-13	110	128	-13	225	210	-8	278	275	-7	166	157
-9	302	303	-11	84	68	-7	478	470	-5	399	402
-8	620	629	-10	143	131	-6	139	137	-4	428	423
-7	483	485	-8	244	240	-5	88	92	-2	105	63
-5	84	102	-6	80	63	-4	340	322	0	86	115
-4	572	561	-5	77	68	-3	123	116	1	197	212
-3	210	214	-4	594	596	0	138	107			
-2	77	78	-3	330	323	2	111	138	K,L= 19, 9		
-1	75	41	-2	123	129						
0	151	153	-1	214	192	K,L= 15, 9			-10	113	105
3	239	230	0	638	622				-8	72	55
			1	314	309	-12	99	88	-7	194	183
K,L= 9, 9			2	324	319	-11	155	144	-6	170	172
			3	453	463	-10	105	78	-5	317	314
-14	160	136				-9	200	201	-4	200	198
-13	176	176	K,L= 12, 9			-7	525	532	-3	213	206
-11	97	101				-6	444	438	-2	90	67
-10	232	234	-12	99	113	-5	152	152	-1	204	199
-9	151	131	-11	253	252	-4	88	78	0	234	246
-8	308	303	-10	398	406	-3	266	253	K,L= 20, 9		
-7	252	242	-9	271	252	-2	170	157			
-6	172	173	-8	91	101	0	136	152	-9	322	326
-5	106	115	-7	222	218	1	402	405	-8	384	364
-4	191	172	-6	106	109	2	318	315	-7	258	267
-2	98	120	-5	548	543	K,L= 16, 9			-6	161	176
-1	365	353	-4	340	357				-1	303	262
0	439	429	-3	169	158	-11	272	274	K,L= 21, 9		
1	122	128	-2	259	266	-10	215	213			
2	129	140	-1	141	120	-9	73	44	-7	121	130
3	104	127	0	141	149	-8	200	176	-6	102	107
4	221	233	1	213	215	-7	325	326	-3	92	103
K,L= 10, 9			K,L= 13, 9			-6	274	292	-2	413	418
						-5	195	188			
-13	269	264	-13	82	72	-4	379	383	K,L= 22, 9		
-12	110	101	-12	269	275	-3	427	428			
-10	129	144	-10	344	341	1	206	188	-5	116	110
-9	451	458	-9	117	94	K,L= 17, 9			-4	167	158
-8	374	390	-8	106	119				-3	162	162
-7	263	266	-7	165	171	-10	116	102			
-6	172	165	-5	304	298						

150 K			H			FO			FC			H			FO			FC		
K	L		H	FO	FC	K	L		H	FO	FC	K	L		H	FO	FC	K	L	
0	10		0	74	88	-2	176	178	-6	227	231									
			3	113	141	-1	96	84	-5	438	437									
-14	261	264				0	287	287	-4	665	647									
-13	206	200	K,L=	3	10	1	244	255	-3	691	675									
-12	93	90				2	230	253	-2	185	174									
-11	145	139	-13	373	362	3	374	390	-1	210	216									
-10	359	361	-12	176	183				0	168	169									
-9	407	398	-11	261	270	K,L=	6	10				K,L=	9	10						
-8	684	683	-10	157	160															
-7	955	953	-9	136	137	-12	73	38												
-6	818	820	-8	200	206	-9	235	248	-12	180	164									
-5	329	321	-7	424	419	-8	108	91	-11	157	149									
-4	110	79	-6	473	463	-7	139	111	-10	263	256									
-3	242	246	-5	117	104	-6	272	273	-9	225	217									
-2	321	335	-4	87	47	-5	423	402	-8	168	155									
0	218	217	-3	225	210	-4	175	173	-7	129	124									
1	307	301	-2	161	173	-3	182	165	-6	303	288									
3	187	226	-1	492	483	-2	131	127	-5	465	461									
			0	310	302	-1	184	204	-4	468	470									
K,L=	1	10	2	138	135	0	143	137	-3	153	130									
			3	181	202	1	164	167	0	265	249									
						2	95	97	1	310	316									
-13	102	122							2	409	423									
-12	297	295	K,L=	4	10															
-11	115	136				K,L=	7	10												
-10	233	238	-13	193	201							K,L=	10	10						
-8	305	290	-12	216	198	-13	109	123												
-7	195	202	-11	233	237	-12	122	111	-10	68	25									
-6	83	86	-10	386	380	-11	121	105	-9	110	150									
-4	307	295	-9	496	501	-9	146	150	-8	292	286									
-3	244	243	-8	431	443	-8	144	130	-7	255	251									
-2	551	559	-7	348	344	-7	156	146	-5	236	236									
-1	285	271	-6	721	722	-6	353	350	-4	197	184									
1	339	364	-5	375	377	-5	260	242	-3	95	84									
2	282	302	-3	142	136	-4	340	339	-2	97	74									
3	88	103	-2	106	83	-3	306	319	-1	214	230									
			-1	124	107	-2	96	80	0	246	249									
K,L=	2	10	0	107	91	-1	115	131	1	191	214									
						1	192	193												
-14	86	73	K,L=	5	10	2	168	173	K,L=	11	10									
-13	206	197				3	92	112												
-11	262	251	-14	237	230							-9	165	149						
-10	178	168	-13	154	140	K,L=	8	10				-8	214	204						
-9	126	125	-11	121	121							-7	228	237						
-8	310	309	-10	546	549	-14	110	108	-5	136	130									
-7	95	43	-9	375	360	-12	246	248	-3	103	99									
-6	76	12	-7	290	283	-11	487	487	-1	156	170									
-5	227	237	-6	219	204	-10	425	428	1	185	175									
-4	393	395	-5	335	331	-9	284	267	2	213	224									
-3	505	482	-4	385	367	-8	101	89												
-2	114	130	-3	89	106	-7	223	214												

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 12, 10			K,L= 16, 10			K,L= 1, 11			K,L= 4, 11		
-13	165	141	-9	194	190	-14	135	124	-13	81	87
-12	151	105	-8	271	289	-11	98	110	-11	148	154
-11	117	107	-7	149	167	-10	118	97	-10	240	225
-10	99	76	-6	246	248	-9	211	198	-9	92	72
-9	301	306	-5	303	320	-8	255	257	-8	238	247
-8	302	297	-3	155	150	-7	215	217	-7	214	217
-7	212	212	-2	132	114	-6	149	146	-6	70	57
-5	152	160	-1	314	292	-5	251	246	-5	224	235
-4	132	138	0	221	216	-4	342	329	-3	147	167
-3	233	217	K,L= 17, 10			-3	171	177	-2	87	104
-2	175	166	-10	208	182	-1	94	96	-1	106	118
-1	170	166	-8	290	292	0	138	141	0	93	101
K,L= 13, 10			-7	213	220	1	140	175	K,L= 5, 11		
-12	361	349	-6	376	364	2	194	196	-14	80	42
-11	226	228	-3	271	278	K,L= 2, 11			-12	101	84
-8	72	14	-1	145	183	-12	102	78	-11	136	147
-7	129	130	K,L= 18, 10			-11	314	307	-10	122	127
-5	118	114	-10	208	217	-10	414	415	-8	313	308
-4	179	181	-9	330	333	-9	367	353	-6	469	463
-3	389	381	-8	310	322	-8	335	318	-5	85	71
-2	582	570	-7	135	130	-7	447	459	-4	113	104
-1	372	376	-6	243	237	-6	253	263	-2	84	75
0	174	176	-5	299	300	-5	356	359	-1	76	71
K,L= 14, 10			-4	244	242	-4	543	537	0	85	86
-8	347	333	-3	111	84	-3	490	432	2	259	270
-7	401	387	-2	125	151	-2	240	257	K,L= 6, 11		
-6	289	271	-1	116	101	-1	233	213	-14	151	147
-5	169	175	K,L= 19, 10			1	86	104	-11	247	232
-4	188	181	-9	88	84	K,L= 3, 11			-10	296	293
-3	78	81	-8	90	77	-14	209	201	-9	195	182
-1	246	253	-7	130	107	-13	145	152	-8	360	346
0	318	327	-6	226	248	-12	70	83	-7	708	694
1	137	143	-5	271	261	-10	161	152	-6	731	716
K,L= 15, 10			-4	196	189	-9	96	107	-5	392	374
-11	82	81	K,L= 20, 10			-7	70	47	-4	162	153
-10	163	149	-8	114	117	-6	145	147	-3	308	289
-9	108	108	-7	208	213	-5	95	75	-2	100	83
-8	117	120	-6	141	155	-4	174	165	0	147	143
-4	166	169	-4	197	203	-3	177	175	1	196	201
-1	86	71	-3	150	121	-2	103	96	K,L= 7, 11		
						-1	173	168	-13	199	199
						0	269	289	-12	396	393
						1	141	131			
						2	87	85			

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-11	317	323	K,L= 11, 11			K,L= 15, 11			0	244	254
-10	96	102							K,L= 1, 12		
-9	102	99	-12	140	151	-11	95	120			
-7	179	177	-10	357	345	-10	122	109	-12	117	106
-6	90	95	-9	430	428	-9	216	220	-11	321	305
-4	153	152	-6	234	226	-8	211	218	-8	170	168
-3	209	201	-4	293	293	-7	186	181	-6	187	180
-2	391	384	-3	347	339	-5	205	197	-5	99	95
-1	426	433	-2	253	239	-5	384	375	-3	80	17
0	87	83	-1	320	333	-4	327	333	-2	340	351
1	105	112	0	375	389	-3	162	164	-1	401	396
						-2	143	152			
						-1	105	101			
K,L= 6, 11			K,L= 12, 11						K,L= 2, 12		
-11	132	120	-12	127	147	K,L= 16, 11			-13	125	111
-9	95	69	-11	77	11				-12	110	116
-8	93	124	-10	83	71	-10	190	188	-10	177	178
-7	204	195	-9	308	322	-9	189	217	-9	102	78
-6	243	242	-8	94	110	-8	141	158	-6	139	151
-4	190	207	-7	250	236	-7	169	162	-3	379	380
-3	177	157	-5	373	373	-6	291	260	-2	212	222
0	143	143	-4	328	343	-5	136	152	-1	103	148
1	352	366	-3	91	17	-4	241	233	0	215	213
			-2	163	173	-3	345	343			
			-1	215	211	-2	275	270			
K,L= 9, 11									K,L= 3, 12		
-9	92	65	K,L= 13, 11			K,L= 17, 11			-13	266	244
-8	158	151							-12	266	287
-7	94	72	-12	150	132	-9	173	166	-11	149	161
-6	262	262	-10	139	133	-6	139	132	-10	166	166
-5	222	208	-9	261	276				-9	91	71
-4	90	106	-8	115	86	K,L= 18, 11			-8	208	207
0	234	306	-4	206	202				-7	158	149
			-2	175	163	-8	162	147	-6	106	111
K,L= 10, 11			-1	198	194	-7	142	133	-5	237	247
						-5	125	127	-3	223	228
-13	233	244	K,L= 14, 11			-4	255	242	-2	140	185
-12	297	284							0	254	266
-9	144	153	-11	196	179	K,L= 0, 12					
-8	421	421	-10	226	234				K,L= 4, 12		
-7	337	342	-9	155	148	-14	188	161			
-6	308	307	-8	277	270	-11	174	181	-13	134	131
-5	516	507	-7	139	142	-9	76	61	-12	148	136
-4	319	304	-6	159	145	-8	104	114	-9	325	324
-3	176	165	-4	101	114	-7	547	535	-3	457	448
-1	287	312	-3	334	320	-6	746	737	-7	358	359
0	143	172	-2	255	252	-5	522	522	-5	379	374
			-1	117	90	-4	245	250	-4	369	383
						-3	419	413	-3	143	146
						-2	97	120			

150 K			H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-1	231	253	-6	326	313	K,L= 13, 12			-4	444	440	-4	444	440
0	166	192	-5	249	246				-3	313	318	-3	313	318
K,L= 5, 12			-4	310	315	-11 226 204			-2	306	312			
			-3	452	452	-9 109 124			K,L= 3, 13					
			-2	346	353	-8 98 115								
-13	205	210	K,L= 9, 12			-7 105 107			-13	209	188			
-11	74	75				-3 170 193			-12	217	214			
-9	295	301				-2 263 257			-11	163	174			
-8	265	266	-11	129	126	K,L= 14, 12			-10	141	141			
-7	216	231	-10	187	203				-9	278	282			
-6	101	131	-9	235	230				-8	135	146			
-5	99	86	-8	166	159				-7	89	58			
-4	245	298	-5	152	152				-5	211	192			
-3	232	219	-4	143	153				-2	136	143			
-1	149	143	-3	119	120									
0	100	145	-2	229	224	K,L= 15, 12			K,L= 4, 13					
K,L= 6, 12			-1	203	215									
			K,L= 10, 12			-8 105 85			-12	266	245			
-12	99	122				-7 139 152			-10	174	157			
-11	116	105	-10	95	56				-9	170	158			
-10	146	144	-7	159	168				-7	75	80			
-9	247	241	-6	321	324				-6	207	222			
-8	251	252	-5	260	270	K,L= 16, 12			-5	289	287			
-7	121	103	-4	178	122				-4	119	112			
-6	224	217	-1	177	154				-3	103	106			
-4	231	234	K,L= 11, 12			-8 223 231			-2	206	197			
-3	91	107				-7 185 169			K,L= 5, 13					
-2	175	142				-6 112 112								
0	106	80				-5 223 236								
K,L= 7, 12			-12	145	149	K,L= 1, 13			-10	76	19			
			-11	205	211				-9	98	65			
			-9	136	141				-7	322	322			
-12	99	59	-8	295	291				-6	169	165			
-9	158	141	-7	71	32				-5	93	102			
-8	36	73	-5	114	131				-4	114	97			
-7	92	26	-4	149	154				K,L= 6, 13					
-3	104	51	-3	113	82									
-2	112	122	K,L= 12, 12			-7 170 161								
-1	116	94				-4 139 158								
K,L= 8, 12						-3 187 205								
						-2 92 88								
			-11	118	130	K,L= 2, 13			-11	104	91			
			-10	191	211				-10	82	106			
-13	126	95	-9	139	107				-8	145	162			
-12	76	48	-8	90	119				-7	247	272			
-11	195	187	-7	121	97				-6	309	327			
-10	317	297	-6	178	186				-5	205	207			
-9	166	174	-5	144	138				-4	98	121			
-8	158	168	-4	238	243				-3	223	212			
-7	265	251	-3	337	347				-2	210	224			
			-2	290	296									
						-5 243 252								

150 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 7, 13			-10	221	224	-11	150	139	-5	97	130
-12	286	272	-8	190	190	-9	114	117	-4	490	494
-11	400	394	-7	227	209	-7	402	393	K,L= 5, 14		
-10	241	241	-6	240	253	-6	667	664			
-8	105	91	-5	389	400	-5	517	534	-9	421	412
-7	105	92	-4	310	320	-4	249	266	-8	444	441
-6	143	175				K,L= 1, 14			-7	227	227
-3	142	163	K,L= 11, 13						-6	194	186
-2	151	202	-10	130	135	-11	329	332	K,L= 6, 14		
K,L= 8, 13			-9	244	244	-10	363	353			
-10	186	166	-8	211	211	-8	143	144	-10	187	169
-9	134	121	-6	104	116	-7	79	135	-6	108	120
-8	121	124	-5	92	83	K,L= 2, 14			-5	146	142
-7	131	138	-4	137	138						
-6	250	258	K,L= 12, 13			-10	150	144	K,L= 7, 14		
-5	148	136	-9	191	184	-7	91	86	-10	123	98
-3	150	182	-8	284	284	-4	129	134	-7	165	165
K,L= 9, 13			-7	133	128	K,L= 3, 14			K,L= 8, 14		
-10	170	166	-6	121	112	-11	111	110	-9	280	282
-8	210	208	K,L= 13, 13			-10	96	90	-8	179	161
-8	101	54	-9	83	86	-9	96	100	K,L= 9, 14		
-7	220	206	-8	177	172	-7	257	251			
-6	100	116	-7	133	130	-5	415	428	-9	178	187
-5	271	288	-6	92	129	-4	314	312	-8	217	225
-4	90	116				K,L= 4, 14			-7	246	248
-3	101	60							620	****	****
			K,L= 0, 14			-9	177	192			
K,L= 10, 13						-8	223	223			
						-7	111	144			
						-6	87	51			

90 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (X10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L= 0, 0			7	448	460	K.L= 7, 0			K.L= 11, 0		
			8	82	76				0	64	0
2	353	328	9	85	88	1	1701	1711	1	565	539
3	110	111	10	359	346	2	119	116	2	420	424
4	887	929	11	307	300	3	671	680	4	98	90
5	88	55	K.L= 4, 0			4	398	372	5	179	188
6	298	315				5	225	213	6	311	324
7	790	790	0	1462	1424	6	295	280	7	283	321
8	459	470	1	566	564	7	147	171	8	236	226
9	301	301	2	1515	1531	8	265	274			
10	318	314	3	739	767	K.L= 8, 0			K.L= 12, 0		
K.L= 1, 0			4	934	930	0	353	352	0	263	257
			5	238	251	1	812	808	1	861	841
1	200	234	6	263	284	2	520	509	2	271	263
2	401	418	7	109	84	3	1576	1562	3	691	684
3	452	494	8	208	200	4	1125	1154	4	299	317
4	479	522	9	301	293	5	650	657	5	394	411
5	971	1005	10	222	217	6	195	195	6	216	202
6	145	129	11	318	315	10	260	248	K.L= 13, 0		
7	102	115	K.L= 5, 0			K.L= 9, 0			1	244	220
8	154	157				1	204	197	2	524	488
9	279	281	1	838	869	2	609	608	3	378	375
10	67	49	2	1472	1492	3	460	479	4	530	520
11	315	316	3	1135	1176	4	758	754	5	485	511
K.L= 2, 0			4	318	319	5	155	174	9	316	299
			5	372	362	6	195	201	K.L= 14, 0		
0	117	135	6	506	524	8	347	339	0	420	442
1	155	170	7	639	621	9	549	578	1	130	140
2	275	286	8	428	415	10	274	262	2	538	508
3	994	1024	9	499	493	K.L= 10, 0			3	156	141
4	381	421	10	397	381	1	853	828	5	201	191
5	215	199	11	256	242	2	698	704	9	106	83
6	366	375	K.L= 6, 0			3	91	57	K.L= 15, 0		
8	536	522				4	190	165	1	464	439
9	77	63	0	2298	2277	5	137	155	2	362	340
11	360	355	1	178	180	6	377	384	3	226	236
K.L= 3, 0			2	311	313	7	174	201	4	154	158
			3	117	125	8	328	328	5	270	301
1	295	262	4	110	110	10	106	113	8	264	274
2	1719	1781	5	323	345						
3	191	214	6	155	158						
4	205	186	7	374	363						
5	439	452	9	151	135						
6	408	435	10	183	165						

90 K														
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 16, 0			1	237	254	2	1235	1295	6	268	296			
			4	487	483	3	812	837	7	136	145			
0	172	167	K,L= 23, 0			4	934	968	8	215	199			
1	658	657				5	743	760	9	65	76			
2	773	783				6	509	510	10	121	109			
3	95	97	1	327	393	7	170	179	K,L= 5, 1					
4	165	181	3	306	329	8	159	161						
8	252	289	4	93	61	10	158	154						
K,L= 17, 0			5	154	133	K,L= 3, 1			-11	281	297			
			K,L= 24, 0						-9	397	388			
1	450	451				-11	214	206	-8	459	472			
2	98	110	0	191	196	-10	268	271	-7	170	172			
3	453	474	2	385	375	-9	191	184	-6	81	84			
4	267	308	3	158	170	-8	174	204	-5	55	50			
7	408	416	K,L= 25, 0			-7	388	401	-4	360	372			
8	162	177				-6	833	862	-3	452	428			
K,L= 18, 0			2	223	221	-5	309	312	-2	73	45			
			K,L= 1, 1			-4	134	152	-1	876	886			
0	60	75				-3	42	41	0	441	439			
1	300	305	-11	259	263	-2	705	713	1	984	1009			
2	672	707	-10	322	315	0	613	627	2	966	970			
3	64	91	-9	419	414	1	671	669	3	326	319			
4	72	40	-8	257	270	2	502	509	4	198	193			
7	176	167	-7	99	147	3	768	786	5	166	179			
8	92	97	-6	146	178	4	263	280	7	66	61			
K,L= 19, 0			-5	237	250	5	397	410	8	387	372			
			-4	473	487	6	399	407	9	199	182			
1	132	134	-3	116	121	7	364	361	K,L= 6, 1					
2	89	84	-2	314	337	9	88	76	-10	173	142			
3	135	124	0	296	327	10	201	203	-9	105	102			
K,L= 20, 0			2	307	275	K,L= 4, 1			-8	264	257			
			5	255	239	-11	241	254	-7	156	183			
0	372	378	8	125	130	-10	92	98	-6	73	72			
4	95	122	9	278	251	-9	333	333	-5	174	184			
7	386	387	10	425	421	-8	226	232	-4	607	566			
K,L= 21, 0			K,L= 2, 1			-7	256	272	-3	404	392			
						-6	373	379	-1	145	119			
1	107	139	-11	142	156	-5	494	494	0	1072	1062			
4	394	365	-7	442	439	-4	829	857	1	957	961			
5	483	474	-5	498	536	-3	567	572	2	720	703			
6	104	99	-4	381	387	-2	1079	1092	3	1347	1327			
K,L= 22, 0			-3	65	61	-1	521	529	4	1334	1332			
			-2	899	927	0	233	242	5	618	611			
0	483	467	-1	1624	1581	1	94	109	6	88	94			
			0	1483	1484	2	438	453	7	416	416			
			1	1052	1052	3	254	267	8	522	490			
						4	540	552						

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L. = 7, 1			-8	396	415	4	267	273	-7	313	311
			-7	289	286	5	187	181	-6	245	257
-11	251	255	-6	841	854	6	570	567	-4	554	544
-10	142	130	-5	252	241	7	613	599	-3	734	735
-9	173	202	-4	339	321	8	367	374	-2	457	444
-8	528	545	-3	160	181	9	214	217	-1	332	342
-7	335	340	-2	411	399				0	485	482
-6	177	199	-1	813	766	K.L. = 12, 1			1	694	707
-5	576	620	0	826	807				2	233	244
-4	1216	1142	3	462	471	-10	134	110	3	252	262
-3	104	86	5	112	136	-9	153	134	4	405	387
-2	60	76	6	106	130	-8	66	92	5	230	228
-1	560	523	7	124	185	-6	103	111	6	195	191
0	1078	1068	9	243	245	-5	342	340	7	283	279
1	230	208				-3	645	625	8	426	431
3	55	60	K.L. = 10, 1			-2	979	937			
4	163	107				-1	221	232	K.L. = 15, 1		
5	985	992	-10	211	205	0	263	266			
6	707	703	-9	120	113	1	87	76	-9	440	445
7	292	298	-6	564	563	2	863	838	-8	653	606
8	353	350	-5	351	369	3	359	375	-7	287	284
9	389	365	-4	186	175	4	52	52	-5	99	111
			-3	232	223	5	85	83	-4	250	243
K.L. = 8, 1			-2	920	896	6	189	187	-3	683	646
			-1	781	737	7	282	279	-2	254	260
-10	209	235	0	710	691	8	131	121	-1	838	842
-9	97	111	1	1487	1476	9	266	242	0	295	278
-8	185	190	2	860	834				1	166	176
-7	506	509	3	82	70	K.L. = 13, 1			2	476	463
-6	408	410	4	294	286				3	112	91
-5	118	110	7	164	188	-10	255	251	4	339	350
-4	380	396	8	140	195	-8	84	63	5	138	128
-3	246	256	9	293	312	-7	67	70	6	148	148
-2	54	34				-5	311	299	7	252	250
0	958	937	K.L. = 11, 1			-4	238	215	8	507	512
1	501	480				-3	432	404			
2	166	140	-10	576	554	-2	679	656	K.L. = 16, 1		
3	144	157	-9	246	222	-1	608	598			
4	155	172	-8	141	150	0	350	342	-7	278	247
5	178	156	-7	330	325	1	301	291	-6	133	136
6	82	57	-6	483	472	2	331	326	-5	97	68
7	183	192	-5	165	178	3	534	531	-4	516	504
8	327	332	-4	530	526	5	429	419	-3	906	898
9	219	249	-3	1040	966	6	240	261	-1	161	155
10	88	101	-2	728	714	7	170	161	0	149	185
			-1	420	404				1	73	83
K.L. = 9, 1			0	67	72	K.L. = 14, 1			2	430	436
			1	665	634				3	385	380
-11	154	131	2	315	284	-10	238	235	4	789	784
-10	284	280	3	491	475	-9	154	139	5	297	297

90 K														
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L= 17, 1			K.L= 20, 1			K.L= 24, 1			-2 187 219			-1 1124 1074		
-8	185	190	-7	357	331	-4	171	164	0	299	299	1	406	421
-7	233	235	-6	89	99	-2	241	240	2	77	67	4	85	95
-5	237	234	-5	258	259	-1	571	584	5	667	668	6	358	383
-4	207	211	-1	467	461	0	506	514	7	158	176	8	164	180
-3	146	141	0	602	607	1	478	487	9	512	490	K.L= 2, 2		
-2	94	69	1	212	216	2	509	526	-2	269	281	-12	123	114
-1	292	292	2	146	166	3	308	320	1	90	123	-11	239	236
0	136	187	3	284	291	K.L= 25, 1			-10	385	370	-8	155	144
1	260	286	4	185	202	K.L= 0, 2			-7	54	62	-6	496	512
2	149	156	5	150	148	-12	712	711	-5	632	652	-4	40	18
3	116	111	6	452	447	-11	361	327	-3	596	620	-2	1288	1376
4	348	339	K.L= 21, 1			-10	136	152	-1	175	192	0	251	272
5	91	62	-7	171	161	-9	356	412	1	166	171	2	522	530
6	201	223	-6	300	293	-8	61	96	3	132	120	4	821	846
K.L= 18, 1			-5	380	383	-7	768	815	5	361	372	6	92	97
-5	330	323	-4	187	181	-5	172	128	9	76	86	K.L= 3, 2		
-4	85	74	-3	350	354	-4	55	43	-12	157	161	-11	462	480
-3	547	521	-1	109	81	-3	575	550	-10	430	418	-6	939	965
-2	635	675	2	179	205	-2	113	76	-5	796	831	-4	122	133
-1	114	109	3	406	420	-1	1585	1539	-3	619	606	-2	1203	1268
0	235	248	5	192	198	0	699	744	-1	748	738	0	479	500
1	120	136	6	277	287	1	1617	1751	1	856	911	2	923	972
2	139	121	K.L= 22, 1			2	132	145	3	196	189	4	410	401
3	316	315	-6	97	104	3	613	630	K.L= 1, 2					
4	240	257	-5	147	143	4	338	352	-12	498	486			
5	309	305	-4	113	105	5	404	429	-11	189	184			
6	354	346	-3	434	411	6	493	491	-10	93	125			
K.L= 19, 1			-2	240	234	7	516	506	-8	470	505			
-8	506	501	-1	199	176	8	456	446	-7	247	271			
-7	544	520	0	111	131	9	369	370	-6	223	218			
-6	225	217	2	294	296	K.L= 23, 1			-5	470	507			
-5	311	302	4	167	189	-12	498	486	-4	1096	1159			
-4	276	269	5	125	132	-11	189	184	-3	1059	1073			
-3	354	333	K.L= 23, 1			-10	93	125						
-2	63	52	-5	404	403	-8	470	505						
-1	329	412	-4	299	320	-7	247	271						
1	504	519	-3	278	269	-6	223	218						
2	307	305	0	184	214	-5	470	507						
3	452	454	2	84	101	-4	1096	1159						
4	396	425	4	183	182	-3	1059	1073						
5	252	265												
6	128	121												

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
6	609	590	-9	342	340	4	1090	1101	K,L= 11.	2	
7	1010	982	-8	58	51	5	767	768			
8	199	204	-7	331	341	6	522	516	-10	74	80
9	132	120	-4	86	82	7	127	156	-9	262	281
			-3	403	427	8	99	121	-8	468	465
K,L= 4.	2		-2	814	744				-7	293	299
			0	375	371	K,L= 9.	2		-5	87	48
-12	184	180	1	503	518				-4	135	120
-11	220	216	2	443	435	-11	209	201	-3	154	156
-10	259	266	3	297	304	-10	311	303	-2	440	412
-8	66	32	4	340	357	-9	483	482	-1	475	506
-7	119	115	5	471	464	-8	622	602	0	287	263
-6	266	269	6	180	167	-7	524	536	1	163	148
-5	580	595	7	214	219	-6	153	158	2	666	629
-3	148	170	8	412	414	-4	145	155	3	369	384
-2	769	804	9	203	189	-3	472	443	4	145	154
-1	861	819				-2	358	342	5	217	254
0	189	208	K,L= 7.	2		-1	544	556	6	133	126
1	264	304				0	737	712	7	283	281
2	1282	1343	-11	317	321	1	65	67			
3	976	1012	-9	112	115	2	52	33	K,L= 12.	2	
5	488	495	-8	259	265	3	220	230			
6	544	542	-6	120	112	4	187	185	-11	83	51
7	176	163	-5	287	283	5	271	289	-9	176	159
8	93	108	-4	410	387	6	114	105	-7	206	202
9	162	146	-3	208	193	7	140	149	-6	133	129
			-2	293	247	8	315	313	-5	100	109
K,L= 5.	2		0	599	571	9	402	384	-4	590	545
			1	162	153				-3	456	430
-10	850	822	2	366	354	K,L= 10.	2		-2	721	674
-9	859	836	3	196	187				-1	139	165
-8	701	692	4	170	186	-11	202	201	0	444	449
-7	462	478	6	229	266	-10	262	267	1	145	138
-6	650	644	9	86	50	-7	456	465	2	209	229
-5	166	159				-6	484	454	3	262	284
-4	453	453	K,L= 8.	2		-5	158	170	4	375	376
-3	337	329				-4	52	30	5	107	107
-1	398	383	-9	201	186	-3	271	282	6	76	115
0	446	441	-8	126	125	-2	295	260	8	121	107
1	178	182	-7	110	134	0	506	488			
3	587	601	-6	330	319	1	682	669	K,L= 13.	2	
4	431	422	-5	211	198	2	451	446			
6	54	40	-4	574	570	3	142	137	-10	231	238
7	464	452	-3	473	456	4	261	278	-9	228	232
8	268	251	-2	412	386	5	166	170	-8	271	274
9	223	220	-1	402	399	7	186	187	-7	403	387
			0	686	635	8	137	102	-6	220	216
K,L= 6.	2		1	363	367				-5	790	743
			2	512	498				-4	1163	1106
-11	115	74	3	705	711				-3	785	728

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-2	75	43	-6	679	665	-7	250	260	K,L= 1, 3		
-1	222	237	-5	328	401	-5	225	202			
0	349	339	-4	121	108	-4	109	99	-12	129	99
1	88	85	-3	451	490	0	369	374	-9	150	192
2	68	75	-2	137	118	1	565	566	-8	778	777
8	367	383	-1	278	275	3	117	134	-7	905	901
K,L= 14, 2			1	443	452	5	88	45	-6	722	713
			2	337	334	K,L= 21, 2			-5	52	69
-10	239	246	4	242	251				-4	53	36
-9	147	174	6	269	249	-7	451	422	-3	573	564
-7	410	408	7	500	483	-6	207	206	-2	564	538
-6	349	319	K,L= 18, 2			-4	433	496	-1	1154	1130
-5	311	305				-1	453	476	0	822	789
-4	100	87	-9	249	238	0	306	346	1	376	367
-3	59	20	-8	156	161	1	155	171	3	267	291
-2	86	59	-7	67	58	2	187	221	4	306	293
-1	67	78	-6	112	109	5	263	265	5	78	95
0	667	685	-5	230	262	K,L= 22, 2			6	372	363
1	915	928	-4	70	64				7	173	183
7	392	367	-3	87	116				8	245	231
8	385	358	-2	290	310				9	379	338
K,L= 15, 2			-1	472	477	-2	421	444	K,L= 2, 3		
			0	289	292	0	141	167			
-6	181	172	1	254	267	1	127	86	-12	252	239
-5	136	131	2	476	485	3	241	249	-11	115	239
-4	624	592	3	496	495	4	634	631	-10	135	174
-3	106	85	4	355	368	K,L= 23, 2			-9	100	87
-2	174	178	5	461	460				-8	194	212
1	209	196	6	388	396	-4	109	115	-7	126	138
7	143	136	K,L= 19, 2			-3	123	87	-6	408	424
						-2	153	136	-4	150	170
K,L= 16, 2			-7	109	131	-1	479	471	-3	1696	1760
			-6	173	161	0	304	307	-2	595	585
-6	241	272	-5	316	314	2	121	119	-1	440	406
-5	112	136	-4	526	523	K,L= 24, 2			0	239	206
-2	316	323	-2	449	447				1	152	149
-1	407	421	-1	112	115	-2	358	342	2	215	235
0	396	405	0	80	110	-1	197	201	3	685	726
1	364	376	1	297	307	0	88	88	4	974	1016
5	137	137	2	67	72	2	147	163	5	533	522
6	209	207	3	422	423	K,L= 25, 2			6	423	417
7	241	224	4	236	227				7	395	380
K,L= 17, 2			5	270	276				8	107	91
			6	154	141	-3	311	311	K,L= 3, 3		
-9	250	246	K,L= 20, 2			-2	498	496			
-8	92	83				-1	252	248	-11	196	330
-7	446	442	-8	160	103	0	84	16	-10	499	600
									-9	511	546

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-8	404	421	-2	721	714	2	266	307	K.L= 10, 3		
-7	596	597	-1	834	838	3	659	682	-11	518	514
-6	562	564	0	667	681	4	296	304	-10	542	544
-5	108	400	1	99	65	5	348	359	-8	100	102
-4	357	246	2	53	53	6	656	652	-7	93	180
-3	1030	1043	3	191	196	7	109	108	-6	209	215
-2	368	359	4	94	87	8	266	254	-5	318	318
-1	189	189	5	580	574	K.L= 8, 3			-4	189	197
0	51	9	7	127	145	-12	404	409	-3	433	426
1	409	409	9	352	314	-9	140	166	-2	204	207
2	367	390	K.L= 6, 3			-8	257	259	-1	882	871
3	49	63	-12	337	330	-7	645	645	0	467	487
4	104	87	-11	79	115	-6	365	365	1	341	357
5	187	181	-10	128	118	-5	74	74	2	684	684
6	95	78	-9	547	566	-4	154	161	3	538	535
7	367	379	-8	543	547	-3	182	170	4	109	93
8	291	286	-7	364	368	-2	189	176	5	88	54
9	115	108	-6	491	507	-1	408	395	6	415	409
K.L= 4, 3			-5	89	99	0	71	90	7	520	490
-12	234	218	-4	295	298	1	928	943	8	181	176
-10	335	384	-3	236	260	2	65	42	K.L= 11, 3		
-9	108	117	-2	92	78	3	145	143	-11	154	114
-7	248	253	-1	240	235	4	196	175	-10	147	135
-6	91	70	0	990	1010	5	557	571	-9	373	407
-5	445	440	1	1443	1491	6	61	52	-8	145	115
-3	333	358	2	742	740	7	94	95	-6	1172	1174
-2	705	730	3	530	524	8	236	198	-5	1052	1063
-1	551	541	4	685	683	K.L= 9, 3			-4	432	400
1	455	483	5	327	333	-12	135	137	-3	605	578
2	169	196	6	231	256	-11	215	199	-2	798	823
3	385	403	7	372	360	-10	371	358	-1	237	230
4	236	250	8	381	349	-9	130	218	0	266	249
5	112	140	K.L= 7, 3			-6	402	410	1	411	420
7	153	133	-12	422	404	-5	378	379	2	352	393
8	105	107	-11	555	581	-4	219	225	3	124	107
9	131	129	-10	312	322	-3	716	684	4	132	144
K.L= 5, 3			-9	434	444	-2	169	153	5	163	197
-12	290	271	-8	337	344	-1	401	380	6	291	312
-11	156	211	-7	600	592	0	479	500	7	431	425
-10	324	352	-6	136	150	1	92	65	8	216	221
-9	229	231	-5	681	694	2	350	343	K.L= 12, 3		
-8	619	658	-4	1050	1032	3	198	182	-11	171	179
-7	326	336	-3	370	360	4	146	141	-10	160	160
-6	169	167	-1	203	177	5	200	217	-9	285	270
-4	870	850	0	317	328	6	145	139	-8	290	274
-3	66	33	1	199	189	7	223	211			

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-7	106	114	5	349	373	5	229	207	3	182	176
-6	70	54									
-5	494	485	K,L= 15,	3		K,L= 18,	3		K,L= 22,	3	
-4	413	420									
-3	154	146	-10	210	208	-9	176	191	-7	192	197
-2	349	360	-9	367	348	-7	287	277	-6	196	190
-1	933	938	-8	715	686	-6	355	350	-4	194	183
0	113	132	-7	442	442	-4	381	391	-3	204	204
1	332	350	-6	240	222	-3	154	139	-2	99	115
2	119	101	-5	479	494	-2	395	378	0	237	281
3	221	267	-4	637	619	-1	222	254			
4	95	100	-3	258	267	2	148	164	K,L= 23,	3	
5	400	417	-2	546	521	3	128	137			
6	451	427	-1	487	489	4	311	347	-6	423	403
7	186	189	0	708	690	5	334	331	-5	505	488
			1	165	138				-4	413	396
			2	240	245	K,L= 19,	3		-3	429	416
			4	138	166				-2	339	325
			5	267	256	-8	601	585	-1	82	62
			6	136	159	-7	373	357	1	214	204
-11	272	253				-6	496	470	2	144	146
-10	124	81				-5	109	62			
-9	255	232	K,L= 16,	3		-4	128	107	K,L= 24,	3	
-7	209	211				-3	243	252			
-5	302	294	-9	168	161	-2	730	703	-4	204	175
-4	599	581	-8	138	148	-1	700	684	-3	102	36
-3	237	229	-7	184	211	0	303	343	-2	80	72
-2	257	255	-5	143	152	1	91	83	-1	333	333
-1	75	75	-4	291	304	2	79	90	0	503	516
0	93	113	-3	542	529	3	233	261	1	357	373
1	156	150	-2	287	291						
2	282	266	-1	159	169	K,L= 20,	3		K,L= 0,	4	
3	380	429	0	360	365						
4	155	146	1	264	264	-7	120	112	-11	200	238
5	173	213	2	294	319	-4	213	193	-10	225	244
6	193	195	3	260	274	-2	313	323	-9	794	806
			4	387	388	-1	269	306	-8	347	374
			5	514	520	0	158	159	-7	328	318
			6	297	296	1	259	259	-6	471	474
-9	201	173				2	392	427	-5	527	484
-7	116	137	K,L= 17,	3		3	316	312	-4	375	382
-6	349	344				4	363	355	-3	733	696
-5	68	51	-9	162	161				-2	139	174
-4	94	88	-8	128	133	K,L= 21,	3		-1	107	123
-3	349	344	-6	262	263				0	167	155
-2	280	286	-4	60	53	-5	217	245	1	828	920
-1	55	41	-3	71	100	-4	159	176	2	1101	1154
0	313	363	-2	272	273	-2	184	191	3	452	429
1	415	435	-1	198	221	1	80	70	4	769	735
2	127	145	3	291	297	2	223	204	5	314	335
3	178	191	4	216	223						
4	315	312									

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
6	235	220	K,L= 3, 4			-9	860	849	0	255	277
7	563	536				-8	590	581	3	154	161
8	849	804	-13	339	317	-7	672	661	4	153	153
			-12	434	447	-6	341	359	5	72	68
K,L= 1, 4			-11	320	347	-5	608	632	6	243	265
			-10	257	267	-4	113	80	7	137	163
-13	147	147	-9	426	430	-3	537	531			
-12	117	109	-8	176	175	-2	784	823	K,L= 8, 4		
-11	398	446	-7	162	169	-1	718	732			
-9	321	308	-6	773	787	0	596	594	-12	468	467
-8	722	691	-5	1345	1358	1	711	700	-11	99	90
-7	698	691	-4	1194	1167	2	344	359	-10	91	86
-6	409	415	-3	540	569	3	146	143	-9	119	129
-5	568	591	-2	711	708	4	83	50	-8	267	253
-4	1055	1006	-1	234	255	5	171	184	-7	273	261
-3	1132	1155	0	674	885	6	182	175	-6	487	465
-2	475	446	1	714	654	8	147	153	-5	386	389
-1	199	206	2	705	701				-4	103	99
0	133	99	3	322	325	K,L= 6, 4			-3	988	957
1	173	164	4	136	137				-2	1218	1219
2	230	219	5	77	73	-12	81	77	-1	618	596
3	354	359	7	366	361	-11	191	185	0	212	226
4	289	301	8	262	263	-10	164	169	1	245	245
5	146	153	K,L= 4, 4			-9	441	427	2	318	371
6	194	197				-7	404	420	3	420	471
7	87	72	-11	103	100	-6	485	490	4	610	620
K,L= 2, 4			-10	453	451	-5	769	761	5	967	965
			-9	350	361	-4	597	621	6	367	361
-13	291	279	-8	176	161	-3	419	428	7	291	283
-12	276	247	-7	217	207	-2	489	451			
-11	108	135	-6	56	16	-1	416	448	K,L= 9, 4		
-10	261	291	-5	724	745	1	181	208			
-9	59	22	-4	158	191	2	299	307	-10	133	138
-8	868	826	-3	599	600	3	321	361	-9	206	205
-7	245	250	-2	256	273	5	229	235	-8	567	561
-5	147	175	-1	1134	1067	6	121	99	-7	953	965
-4	470	469	0	666	643	7	123	117	-6	659	646
-3	1200	1205	1	223	212	8	224	208	-5	407	412
-2	681	686	2	775	783	K,L= 7, 4			-4	187	170
-1	69	64	3	1065	1067				-3	459	453
0	210	228	4	362	352	-11	178	152	-2	670	630
1	171	175	5	57	46	-10	65	99	-1	759	760
2	278	298	6	565	528	-9	349	333	0	1054	1051
3	314	329	7	551	520	-8	558	570	1	231	252
4	401	391	8	201	167	-7	189	195	3	127	117
5	740	728	K,L= 5, 4			-6	53	53	4	110	101
6	136	121				-4	148	143	5	83	106
7	100	110	-10	453	452	-3	89	106	6	114	109
						-1	216	214	7	111	77

90 X														
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 10, 4			6	252	242	-5	105	84	-2	95	96			
			7	213	228	-4	190	207	-1	453	443			
-12	226	229	K,L= 13, 4			-3	149	144	0	227	242			
-11	442	445				-2	325	344	2	378	413			
-10	304	302				-1	66	56	3	619	645			
-9	83	74	-11	234	228	0	217	208	4	357	363			
-8	346	361	-10	380	359	1	95	87	K,L= 19, 4					
-5	378	344	-8	114	113	3	339	425	-9	271	248			
-3	169	168	-7	347	339	4	72	83	-8	263	267			
-1	283	276	-6	1011	986	5	162	145	-7	166	163			
0	403	409	-5	1047	1007	K,L= 16, 4			-6	155	136			
1	284	305	-4	957	985	-10	301	303	-4	343	340			
4	104	101	-3	720	690	-7	217	217	-3	397	394			
5	339	340	-2	228	232	-6	274	275	-2	180	198			
6	157	181	-1	299	318	-5	715	700	-1	220	260			
7	148	137	0	337	330	-4	171	157	0	159	157			
K,L= 11, 4			1	254	331	-3	417	422	2	63	97			
			2	422	427	-2	65	63	3	270	271			
-11	207	205	3	387	404	-1	277	281	4	410	408			
-9	309	309	4	236	253	0	456	496	K,L= 20, 4					
-8	409	411	5	108	91	1	276	347	-8	125	116			
-7	444	447	6	345	338	2	396	512	-6	326	323			
-6	265	252	K,L= 14, 4			3	423	405	-5	115	112			
-5	101	93				K,L= 17, 4			-4	174	194			
-4	260	279	-11	322	310	-10	447	427	-3	356	387			
-3	130	110	-10	106	100	-9	244	243	0	224	228			
-2	498	459	-9	628	612	-7	104	113	1	518	578			
-1	302	306	-8	355	337	-6	377	375	2	376	360			
0	377	383	-7	249	219	-5	317	301	3	105	92			
2	184	201	-6	692	667	-4	450	465	K,L= 21, 4					
3	317	342	-5	247	233	-3	391	406	-7	369	363			
6	238	247	-4	239	249	-2	723	742	-6	238	244			
7	232	229	-3	279	289	-1	468	457	-5	102	68			
K,L= 12, 4			-2	59	76	2	215	201	-4	535	526			
			-1	66	77	3	427	399	-2	281	300			
-10	104	95	0	382	461	4	117	162	-1	527	519			
-8	137	136	1	752	800	5	99	109	0	484	523			
-7	229	244	2	272	196	K,L= 18, 4			1	164	154			
-4	128	141	3	211	313	-7	167	142	2	177	169			
-3	332	352	4	115	121	-6	398	405	3	341	311			
-2	765	766	5	135	127	-5	255	234	K,L= 22, 4					
-1	132	146	6	190	191	-4	157	147	-5	280	263			
0	211	172	K,L= 15, 4			-3	256	267						
1	418	450												
2	168	169	-10	185	184									
3	83	62	-8	138	124									
4	198	209	-7	147	142									
5	633	637	-6	65	77									

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-4	94	48	-1	775	795	-8	503	504	-4	730	752
-3	473	446	1	57	65	-7	662	688	-3	1219	1222
-2	188	166	2	297	273	-6	134	142	-2	129	141
-1	182	166	3	954	940	-5	90	60	-1	422	439
0	265	257	4	150	164	-4	627	621	0	434	426
1	167	192	5	372	350	-3	344	323	1	107	125
			6	824	782	-2	257	255	3	252	249
K,L= 23, 4			7	643	621	-1	82	96	4	592	592
						0	477	488	6	192	193
-5	218	209	K,L= 3, 5			1	479	484	7	140	144
-4	325	307				2	134	118			
-3	201	189	-13	131	120	3	529	529	K,L= 8, 5		
0	287	271	-10	170	169	4	661	674			
			-9	455	481	5	135	159	-12	162	174
K,L= 24, 4			-8	359	364	7	133	126	-11	508	473
			-7	90	107				-9	113	109
-1	470	459	-6	233	262	K,L= 6, 5			-8	630	624
			-5	1294	1277				-7	107	92
K,L= 1, 5			-4	1017	1008	-13	314	305	-6	141	136
			-3	362	363	-12	316	294	-5	57	14
-13	87	109	-2	434	440	-11	235	223	-4	194	192
-10	290	321	-1	372	386	-10	74	93	-3	264	275
-9	536	569	1	206	179	-9	500	503	-2	354	355
-8	652	683	2	375	374	-8	444	435	-1	391	412
-7	936	902	3	288	308	-7	257	256	0	346	332
-6	390	419	6	155	149	-6	118	157	1	923	923
-5	959	930				-5	531	536	2	628	629
-4	576	555	K,L= 4, 5			-4	142	140	3	449	454
-3	217	189				-3	347	338	4	288	292
-2	842	815	-11	279	278	-2	460	445	5	160	158
-1	362	280	-10	306	327	-1	422	437	6	212	214
0	205	186	-9	352	368	0	423	427			
2	159	157	-8	442	450	1	624	647	K,L= 9, 5		
4	463	462	-7	432	454	2	474	479			
5	101	121	-6	285	290	3	283	297	-11	210	217
6	104	100	-5	1226	1205	4	466	477	-9	264	242
			-4	231	227	5	542	536	-8	382	376
K,L= 2, 5			-3	57	48	6	241	227	-7	133	140
			-2	213	181	7	193	164	-6	74	27
-13	227	241	0	530	522				-5	469	471
-12	238	231	1	52	48	K,L= 7, 5			-4	247	251
-10	174	214	2	391	400				-3	235	246
-9	397	424	5	263	247	-12	205	218	-2	835	819
-8	62	93				-11	469	443	-1	147	163
-7	201	228	K,L= 5, 5			-10	422	414	0	256	263
-6	107	116				-9	190	201	2	506	503
-5	584	580	-13	131	116	-8	108	97	4	183	178
-4	330	338	-11	193	182	-7	247	256	6	318	309
-3	124	131	-10	312	313	-6	516	499			
-2	367	360	-9	259	255	-5	59	75			

90 K			90 K			90 K			90 K		
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 10, 5			2	207	199	-3	350	352	-6	320	282
			4	305	301	-1	345	370	-5	99	94
			5	352	331	0	801	806	-4	106	114
-11	318	298	6	307	310	1	594	600	-3	261	256
-10	612	597				4	190	194	-2	682	672
-9	331	323	K,L= 13, 5			K,L= 16, 5			-1	638	636
-7	252	247							0	583	566
-6	317	308							1	218	223
-5	483	497	-11	339	332	-10	122	105	3	258	251
-4	404	421	-10	273	267	-9	80	67	K,L= 20, 5		
-3	263	245	-9	360	327	-8	205	196			
-1	150	165	-7	96	108	-7	344	316	-8	106	118
0	497	519	-6	149	126	-6	252	239	-7	141	114
2	636	641	-5	254	244	-5	238	221	-1	85	104
3	792	793	-4	606	615	-3	465	456	0	171	177
4	329	333	-3	491	481	-2	685	681	1	374	370
6	183	175	-2	160	153	-1	391	382	2	381	402
			-1	348	341	0	157	142	K,L= 21, 5		
K,L= 11, 5			0	118	141	1	422	413			
			1	172	192	2	157	155			
			4	425	420	4	320	325	-7	188	175
-10	474	437	5	193	181	K,L= 17, 5			-6	83	90
-9	241	233							-5	374	365
-8	324	318	K,L= 14, 5			-10	173	184	-4	629	630
-7	282	278				-7	356	332	-3	596	597
-6	796	805	-11	335	336	-6	84	78	-1	282	285
-5	794	810	-10	93	38	-4	132	134	0	266	258
-4	192	197	-9	205	186	-3	78	63	2	192	210
-3	403	408	-8	508	484	-2	102	99	K,L= 22, 5		
-2	549	546	-7	114	83	4	139	119			
-1	501	507	-6	171	143	K,L= 18, 5			-6	94	78
0	101	79	-5	91	109				-5	142	121
1	98	111	-4	297	294	-9	270	236	-4	99	116
2	251	271	-3	87	71	-7	286	261	-3	148	143
3	401	396	-2	154	114	-6	244	231	-2	351	349
4	299	283	0	532	537	-5	77	56	-1	273	279
6	220	220	1	842	844	-4	89	79	1	197	196
			2	392	380	-3	290	306	K,L= 23, 5		
K,L= 12, 5			3	117	97	-2	272	293			

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 0, 6			-3	266	263	K,L= 5, 6			-3	520	528
			-2	415	430				-2	213	177
-11	213	227	-1	63	36	-13	254	261	-1	68	54
-10	733	747	0	178	151	-12	81	87	0	480	480
-9	855	861	1	66	33	-11	223	227	1	455	465
-8	900	916	2	158	152	-10	166	183	2	188	194
-7	400	410	3	455	448	-9	140	147	3	238	233
-6	214	233	4	88	95	-8	228	243	5	73	44
-5	62	52	5	452	435	-7	244	250	6	101	127
-4	299	334	6	239	250	-6	991	986	K,L= 8, 6		
-3	61	35	K,L= 3, 6			-5	844	843			
-2	125	106				-4	358	345	-12	498	487
-1	749	786	-13	167	181	-3	113	129	-11	500	475
0	263	253	-12	410	417	-2	448	472	-9	95	132
1	765	782	-11	134	119	-1	1082	1070	-8	139	158
2	910	953	-10	145	151	0	645	653	-7	580	582
3	392	412	-9	584	579	1	644	638	-6	456	452
5	297	283	-8	83	76	2	505	509	-5	487	466
6	101	78	-7	425	407	4	544	538	-4	425	411
K,L= 1, 6			-6	184	198	5	136	140	-3	386	393
			-5	786	747	6	286	282	-2	733	729
-13	167	166	-4	821	804	K,L= 6, 6			-1	302	308
-11	296	296	-3	809	798				3	80	103
-10	383	393	-2	929	907	-13	252	249	4	428	428
-8	117	133	-1	383	388	-11	225	227	5	420	391
-7	418	421	0	179	193	-10	157	152	K,L= 9, 6		
-6	282	299	1	297	295	-9	78	14			
-4	792	774	2	384	384	-8	287	293	-12	165	149
-3	1256	1250	3	250	257	-6	364	358	-10	201	208
-2	417	422	K,L= 4, 6			-5	788	786	-9	130	134
-1	536	520				-4	83	82	-8	423	433
0	147	161	-13	406	402	-3	63	40	-7	666	675
1	271	292	-11	177	195	-2	264	250	-6	420	415
2	114	96	-10	569	562	-1	506	521	-5	117	137
3	100	103	-9	436	425	0	689	682	-4	300	309
4	396	379	-7	99	85	2	122	109	-3	282	280
5	113	111	-6	353	355	3	192	194	-2	433	426
6	293	285	-5	263	239	4	305	281	-1	746	738
K,L= 2, 6			-3	247	228	6	248	242	0	336	351
			-2	151	150	K,L= 7, 6			1	185	193
-12	305	313	-1	504	504				2	195	196
-11	281	296	0	408	432	-11	183	181	3	70	85
-10	177	156	1	253	259	-9	97	82	K,L= 10, 6		
-8	166	169	2	155	158	-8	245	244			
-7	181	168	3	259	261	-7	295	295	-12	198	201
-5	288	277	4	290	287	-6	57	37	-11	106	84
-5	262	273	6	254	262	-5	101	107	-10	90	119
-4	306	307				-4	362	354			

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-9	310	308	4	422	406	0	390	391	1	88	55
-8	490	489	5	292	286	1	164	160	2	215	196
-7	603	610				3	177	147			
-6	345	327	K,L= 13,	6		4	257	263	K,L= 19,	6	
-5	135	150									
-3	132	124	-11	471	468	K,L= 16,	6		-9	276	275
-2	107	90	-10	286	275				-8	232	226
-1	173	163	-9	133	113	-10	329	321	-7	146	145
0	385	390	-8	415	414	-9	403	389	-5	282	260
1	465	480	-7	479	504	-8	390	378	-4	85	63
2	407	407	-6	319	318	-7	171	180	-3	94	84
3	401	399	-5	359	364	-6	154	159	-2	294	277
4	255	259	-4	691	696	-5	86	71	-1	383	365
			-3	628	629	-4	98	62	2	99	150
			-2	130	150	-3	283	289			
K,L= 11,	6		-1	67	75	-2	487	479	K,L= 20,	6	
			0	343	342	0	403	400			
-12	122	130	1	121	124	1	459	452	-8	383	387
-11	146	146	2	124	117	2	236	234	-6	220	219
-10	308	313	3	355	346	3	435	435	-5	76	74
-8	424	428	4	402	399				-3	104	121
-7	463	465				K,L= 17,	6		-2	87	57
-6	456	442							-1	238	232
-5	112	110	K,L= 14,	6		-10	247	268	1	329	357
-4	155	155				-9	264	259			
-2	219	225	-11	188	178	-8	120	125	K,L= 21,	6	
-1	241	238	-10	298	298	-7	138	143			
0	576	565	-9	196	181	-6	136	137	-7	517	536
1	407	481	-8	553	549	-5	702	695	-6	222	217
4	190	199	-7	177	186	-4	439	447	-5	182	197
5	112	91	-5	180	168	-3	181	181	-4	193	194
			-4	185	207	-2	503	512	-3	325	339
K,L= 12,	6		-3	64	63	-1	446	447	-2	297	299
			-2	77	71	1	211	215	-1	160	146
-12	290	271	-1	106	100	2	363	337	0	393	403
-11	444	431	0	257	263	3	239	243			
-10	92	92	1	306	303				K,L= 22,	6	
-8	252	257	2	342	329	K,L= 18,	6				
-7	379	384	3	309	306				-5	114	122
-6	167	186	4	151	162	-9	169	151	-4	212	208
-5	263	263				-8	134	125	-2	339	370
-4	177	149	K,L= 15,	6		-7	151	144	-1	192	185
-3	169	158				-6	451	435			
-1	246	231	-10	141	128	-4	250	238			
0	168	181	-9	234	232	-3	121	106			
1	155	160	-7	161	170	-1	362	350			
2	198	204	-3	237	221	0	279	276			
3	167	172	-2	84	104						

90 K

TABLE . OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS (X10)

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K.L= 1, 7			-6	477	470	-11	249	246	3	300	277
-13	97	100	-5	532	522	-10	261	254	K.L= 9, 7		
-12	265	243	-4	683	674	-9	158	123	-11	184	170
-11	162	152	-3	477	462	-8	566	579	-10	122	110
-10	85	32	-2	624	645	-7	623	629	-9	664	661
-9	123	130	-1	623	624	-6	144	131	-8	129	99
-8	457	462	0	398	409	-5	120	126	-7	199	209
-7	321	325	1	395	396	-4	370	362	-5	632	615
-6	637	624	2	466	465	-3	140	132	-4	250	249
-5	416	417	3	117	115	1	136	109	-3	151	131
-4	197	195	K.L= 4, 7			2	515	514	-2	391	395
-2	266	273	-12	77	66	5	291	285	-1	647	631
-1	417	424	-10	175	169	K.L= 7, 7			0	287	272
0	520	531	-9	366	365	-13	167	146	1	72	56
1	500	503	-7	201	192	-12	117	111	2	311	313
2	358	378	-5	221	226	-11	500	491	3	335	330
5	100	56	-4	385	381	-10	373	366	K.L= 10, 7		
K.L= 2, 7			-3	104	78	-7	99	119	-11	102	84
-13	441	429	-2	431	433	-6	101	121	-10	388	374
-12	371	354	-1	220	224	-5	314	309	-9	852	851
-11	374	378	0	83	86	-4	776	781	-8	477	469
-10	509	519	1	145	137	-3	1322	1325	-7	83	99
-9	332	333	2	109	112	-2	848	835	-5	332	328
-8	79	28	3	277	279	-1	234	243	-5	199	196
-7	136	125	4	246	263	0	470	465	-4	385	373
-6	892	873	5	138	87	1	269	268	-3	91	69
-5	573	589	K.L= 5, 7			2	136	139	-2	466	454
-4	547	333	-13	105	80	4	291	287	-1	335	328
-3	403	410	-8	408	407	5	265	256	0	61	87
-2	123	113	-7	319	328	K.L= 8, 7			1	176	171
-1	348	268	-6	377	357	-12	122	116	2	188	186
0	487	487	-5	296	293	-11	244	245	3	563	539
1	88	137	-4	99	71	-9	98	59	4	356	357
2	158	144	-3	517	508	-8	466	447	K.L= 11, 7		
4	327	320	-2	326	337	-7	592	586	-12	166	144
5	202	206	-1	180	171	-6	187	202	-10	196	201
K.L= 3, 7			0	514	523	-5	228	213	-9	574	579
-12	231	230	1	500	487	-4	439	429	-8	276	254
-10	95	92	4	141	157	-3	93	80	-6	186	191
-9	205	217	K.L= 6, 7			-2	94	70	-5	534	530
-8	292	249	-13	211	187	-1	92	56	-4	593	597
-7	222	221	0	514	523	1	247	231			
			1	500	487	2	425	442			

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-3	235	238	K.L= 15.	7		-5	422	429	-3	439	466
-2	637	624				-4	445	448	-2	406	441
-1	771	770	-8	222	217	-3	216	207	-1	286	298
1	66	59	-7	662	657	-2	272	266	0	483	495
2	439	425	-6	654	685	-1	373	364	1	373	379
3	466	457	-5	259	250	0	461	452	2	241	246
K.L= 12.	7		-4	197	206	K.L= 20.	7		3	96	106
			-3	242	241				4	344	325
			-2	223	218						
-12	303	301	-1	245	247	-8	308	294	K.L= 2.	8	
-11	160	161	0	634	622	-7	271	279			
-10	147	112	1	498	488	-6	125	103	-12	346	371
-9	239	233	2	238	234				-11	521	517
-7	125	109	K.L= 16.	7		K.L= 21.	7		-9	444	453
-6	450	455							-7	184	149
-5	426	408	-8	235	209	-6	252	262	-4	657	640
-1	111	101	-7	202	190	-4	280	265	-3	211	211
0	410	411	-5	397	396	-3	348	357	-2	269	294
1	208	197	-4	450	453	-2	163	170	-1	102	103
3	300	325	-2	359	355	K.L= 0.	8		0	423	430
4	397	379	-1	204	191				1	72	88
K.L= 13.	7		1	107	121	-12	321	328	2	145	179
			2	139	141	-11	482	489	4	181	184
-11	306	312				-10	387	407	K.L= 3.	8	
-10	160	152	K.L= 17.	7		-9	295	313			
-7	134	132				-8	948	953	-13	274	268
-5	71	54	-10	230	171	-7	547	561	-12	97	83
-3	517	512	-8	93	93	-6	312	317	-11	172	177
-1	214	197	-5	151	151	-5	189	185	-10	104	100
1	121	100	-3	163	156	-4	269	257	-9	248	260
2	214	200	-2	103	99	-3	613	633	-8	78	69
K.L= 14.	7		K.L= 18.	7		-2	116	132	-7	81	89
						-1	285	301	-6	262	242
-11	542	526	-9	99	86	0	165	167	-5	710	695
-10	206	218	-8	118	117	1	198	189	-4	661	652
-8	429	406	-6	197	209	2	542	539	-3	360	345
-7	388	393	-5	306	301	3	486	488	-2	547	570
-5	241	229	-4	167	177	K.L= 1.	8		-1	705	725
-4	434	450	-3	107	105				0	294	302
-3	105	103	-1	265	259	-13	146	129	1	315	276
-2	130	115	0	245	259	-11	221	212	2	219	219
-1	93	98	1	86	103	-10	438	435	3	429	426
0	135	121				-9	216	227	4	272	262
1	184	162	K.L= 12.	7		-8	64	76	K.L= 4.	8	
2	245	267				-7	300	298			
3	112	88	-8	196	212	-6	218	241	-13	379	371
			-7	307	304	-5	227	208	-12	356	329
			-6	345	334	-4	381	383	-10	235	240

90 K														
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-9	188	194	4	149	149	0	428	422	1	124	111			
-2	84	72				1	654	630	2	148	134			
-7	102	103	K.L=	7.	8	2	496	499				K.L=	13.	8
-6	574	564				3	156	151						
-5	498	487	-13	162	156				-11	194	195			
-4	291	281	-12	147	158	K.L=	10.	8	-10	321	325			
-3	107	111	-10	120	124				-9	167	144			
-2	366	366	-9	129	130	-10	395	400	-8	189	195			
-1	130	140	-8	71	58	-9	450	509	-7	177	181			
0	406	397	-7	430	421	-8	493	498	-6	155	147			
1	115	104	-6	300	296	-7	235	213	-4	210	217			
3	345	342	-5	275	265	-6	207	202	-3	622	632			
4	366	360	-4	284	282	-4	262	256	-2	604	598			
			-3	472	484	-3	209	197	-1	277	262			
K.L=	5.	8	-2	383	364	-2	92	71	0	267	275			
			-1	246	243	-1	118	114	1	566	562			
-12	60	56	1	72	15	0	75	74	2	318	319			
-11	243	274	2	181	161	1	296	299						
-10	341	355				2	358	343	K.L=	14.	8			
-9	61	38	K.L=	8.	8	3	113	140						
-8	707	700							-11	164	169			
-7	570	564	-13	261	245	K.L=	11.	8	-10	217	204			
-6	521	527	-12	334	345				-9	269	258			
-5	489	474	-11	452	396	-12	254	267	-8	377	372			
-4	441	445	-10	197	202	-11	143	154	-7	384	378			
-3	74	93	-9	135	141	-10	130	141	-5	187	169			
-2	527	517	-8	274	262	-9	108	144	-4	63	45			
-1	850	849	-7	143	123	-8	158	162	-1	347	332			
0	822	818	-6	294	303	-7	462	448	0	344	340			
1	383	397	-5	416	400	-6	393	392	2	579	537			
2	359	353	-4	428	435	-5	392	390						
3	235	234	-3	263	262	-3	212	219	K.L=	15.	8			
			-2	10	100	-1	243	232						
K.L=	6.	8	-1	99	86	0	416	399	-10	251	239			
			0	65	94	1	407	401	-9	111	118			
-13	292	303	1	168	179	2	192	192	-6	113	116			
-12	325	331	2	75	23				-5	95	116			
-11	95	87				K.L=	12.	8	-4	123	112			
-10	101	98	K.L=	9.	8	-12	380	384	-3	111	125			
-9	117	89				-11	373	367	-2	188	191			
-8	283	264	-11	186	181	-10	280	262	-1	139	119			
-7	147	154	-10	255	221	-9	251	236						
-6	383	372	-9	86	81	-8	149	169	K.L=	16.	8			
-5	306	299	-7	165	158	-7	145	152						
-4	537	522	-6	602	604	-5	163	174	-10	324	313			
-3	123	133	-5	246	252	-4	451	451	-9	566	546			
-2	144	139	-4	482	483	-3	154	157	-8	309	302			
-1	510	509	-3	438	438	-2	182	186	-7	282	278			
0	214	223	-2	225	225	-1	187	177	-6	391	380			
2	197	184	-1	246	234	0								

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-5	253	225	-4	134	144	-6	223	220	-7	290	304
-4	165	170	-1	335	356	-5	416	409	-6	254	246
-3	118	124	0	542	532	-4	212	209	-4	339	354
-2	108	104	1	598	583	-3	345	353	-3	489	497
-1	126	91	2	546	541	-2	258	262	-2	807	801
0	83	72	3	247	257	-1	389	384	-1	221	221
						0	381	404	0	110	95
						2	125	121	1	296	289
K,L= 17, 8			K,L= 2, 9			K,L= 5, 9			K,L= 8, 9		
-9	341	312	-13	542	556	-13	125	104	-10	96	97
-8	239	222	-12	537	530	-12	111	106	-9	376	381
-5	327	312	-11	465	471	-11	291	293	-8	615	622
-4	423	399	-10	542	555	-11	271	279	-7	361	363
-3	583	561	-9	218	223	-9	356	351	-6	159	178
-2	506	507	-8	90	95	-8	193	179	-4	584	585
-1	404	414	-7	106	92	-7	544	531	-3	86	88
0	94	86	-6	243	269	-6	481	476	-2	225	219
			-4	104	124	-5	222	221	0	265	263
			-3	226	217	-3	436	436	2	166	170
			-2	208	208	-2	159	178	K,L= 9, 9		
			-1	153	156	0	155	135	-10	220	235
			0	212	233	1	453	437	-9	110	108
			1	215	194	2	270	262	-8	283	293
			K,L= 3, 9			K,L= 6, 9			-7	162	178
-9	472	465	-13	168	190	-13	143	109	-4	316	310
-8	127	116	-10	137	145	-12	354	354	-3	169	160
-7	78	95	-9	318	309	-11	378	369	-2	174	179
-6	405	396	-8	431	433	-10	137	161	-1	388	376
-5	404	389	-7	272	273	-9	89	63	0	410	383
-3	130	139	-6	213	215	-8	228	230	1	149	161
-2	235	242	-5	81	64	-7	785	785	2	128	104
			-4	94	70	-6	402	408	K,L= 10, 9		
			-3	266	262	-5	104	88	-10	266	293
			-2	496	505	-4	192	177	-9	614	614
			-1	642	660	-3	65	78	-8	353	361
			0	478	478	-2	110	120	-7	235	237
			1	132	98	-1	161	157	-5	212	203
			2	193	198	0	339	325	-4	254	262
			3	344	331	2	273	243	-3	94	85
K,L= 19, 8			K,L= 4, 9			K,L= 7, 9			-2	485	485
-8	115	72	-13	138	135	-13	128	127	-1	140	124
-6	106	103	-11	208	200	-12	435	422	0	154	137
-5	300	286	-10	167	164	-10	497	485	1	193	190
-3	302	295	-9	99	86	-9	356	344			
-2	69	71	-8	266	269						
			-7	166	158						

90 K											
H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
K,L= 11, 9			K,L= 15, 9			-3	160	172	0	227	218
						-2	338	356	K,L= 4, 10		
-12	178	172	-8	205	195	-1	84	43			
-11	420	409	-7	649	657	0	329	322	-13	379	380
-9	84	67	-6	350	344	1	117	149	-12	381	383
-8	286	274	-5	107	84	K,L= 1, 10			-11	379	376
-6	127	119	-4	92	80				-10	295	301
-5	179	178	-3	381	362	-13	125	114	-9	496	503
-4	727	737	-2	165	152	-12	381	393	-8	438	454
-3	362	358	-1	130	100	-11	95	70	-7	381	394
-1	220	217	K,L= 16, 9			-10	441	457	-6	651	646
0	525	514				-9	135	138	-5	157	154
1	258	289	-8	109	127	-8	265	279	-4	168	150
K,L= 12, 9			-7	138	153	-7	149	144	-3	255	241
			-6	429	419	-6	284	291	-2	159	161
-11	299	301	-5	271	250	-5	68	19	-1	96	72
-10	487	477	-4	457	465	-4	271	252	1	83	01
-9	342	527	-3	378	361	-3	351	357	K,L= 5, 10		
-8	121	141	-1	77	58	-2	591	610			
-7	408	382	K,L= 17, 9			-1	229	232	-13	194	206
-6	158	168				1	492	494	-10	534	538
-5	546	534	-9	176	105	K,L= 2, 10			-9	140	136
-4	280	287	-5	100	58				-8	217	210
-2	320	307	-4	131	111	-12	100	121	-7	563	554
0	309	313	K,L= 18, 9			-11	287	275	-6	146	138
1	166	180				-10	231	225	-5	291	295
K,L= 13, 9			-8	158	153	-9	217	202	-4	234	220
			-6	172	176	-8	281	288	-2	112	119
-10	347	342	-5	553	541	-7	112	98	-1	262	265
-8	310	310	-4	419	408	-6	105	101	0	318	334
-7	161	170	K,L= 19, 9			-5	305	317	1	231	221
-6	99	86				-4	371	377	K,L= 6, 10		
-5	259	249	-6	206	214	-3	383	390			
-4	131	114	-5	463	458	0	78	45	-12	193	195
-3	220	225	K,L= 20, 10			K,L= 3, 10			-9	203	228
-2	496	475							-7	264	267
K,L= 14, 9			-13	376	386	-13	513	529	-6	70	96
			-12	114	109	-12	222	215	-5	567	559
-10	194	196	-11	382	387	-11	148	131	-4	164	151
-9	194	205	-10	526	547	-8	147	123	-3	120	106
-8	280	299	-9	530	536	-7	569	574	-1	153	156
-7	537	524	-8	526	638	-6	323	325	0	215	199
-5	118	122	-7	826	841	-5	85	73	1	161	151
-4	268	265	-6	480	497	-4	291	289	K,L= 7, 10		
-3	116	91	-5	604	611	-3	272	250			
-2	221	233				-2	257	266	-11	87	116
						-1	562	560			

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-9	160	166	-1	258	245	-6	250	245	-7	198	189
-7	195	177	0	157	164	-5	385	380	-6	124	135
-6	442	435							-5	146	127
-5	207	180	K,L= 11, 10			K,L= 17, 10			-3	231	231
-4	279	279							-1	184	182
-3	161	175	-11	116	135	-6	119	89			
-2	194	174	-8	299	308				K,L= 5, 11		
-1	147	137	-7	74	84	K,L= 1, 11					
0	85	72	-6	158	123				-12	119	139
1	259	243	-5	161	156	-10	115	124	-11	173	191
			-3	292	290	-8	264	260	-10	99	101
K,L= 8, 10						-8	199	206	-9	91	86
-12	491	460	K,L= 12, 10			-6	236	247	-8	408	393
-11	680	686				-5	267	272	-6	562	563
-10	572	573	-11	272	248	-4	315	306	-4	95	91
-9	214	193	-10	171	173	-3	152	143			
-8	97	93	-9	277	282	0	226	201	K,L= 6, 11		
-7	260	262	-8	185	192						
-6	237	229	-5	253	242	K,L= 2, 11			-12	88	100
-5	540	536	-4	246	220				-11	447	450
-4	613	602	-3	356	350	-12	344	341	-10	466	481
-3	565	564	K,L= 13, 10			-11	592	617	-9	335	348
-1	275	291				-10	479	478	-8	556	554
0	184	201	-9	87	125	-9	406	405	-7	731	725
			-6	65	73	-8	393	383	-6	694	690
K,L= 9, 10			-4	308	310	-7	520	531	-5	265	252
-10	298	288	-3	428	428	-6	189	193	-4	141	141
-9	87	80	-2	550	516	-5	374	371	-3	288	283
-8	66	43	-1	332	334	-4	440	457	-1	93	35
-7	357	357	K,L= 14, 10			-3	395	388	K,L= 7, 11		
-6	330	318				-2	242	236			
-5	657	655	-9	164	156	-1	189	170	-12	386	376
-4	390	393	-8	322	304	K,L= 3, 11			-11	312	328
-3	150	146	-7	312	295				-9	290	294
-2	64	104	-6	193	205	-12	118	138	-7	176	164
0	377	360	-4	171	176	-8	93	90	-6	139	120
						-7	65	77	-5	74	48
K,L= 10, 10			K,L= 15, 10			-6	159	166	-3	325	328
-10	293	272				-5	143	122	-2	363	360
-9	296	301	-9	178	186	-4	209	182	-1	354	340
-8	350	354	-6	217	234	-3	229	218			
-7	84	94	-5	100	100	-1	221	213	K,L= 8, 11		
-6	129	111	-4	268	253	K,L= 4, 11			-10	159	154
-5	242	234	K,L= 16, 10						-8	130	148
-4	154	145				-11	259	263	-7	247	242
-3	126	115	-8	463	463	-10	122	109	-6	299	284
-2	198	193	-7	225	237	-9	210	202	-5	135	159
						-8	337	340	-4	271	283

90 K

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC
-3	199	191	K,L= 14, 11			K,L= 4, 12			K,L= 9, 12		
K,L= 9, 11			-8	268	266	-11	142	136	-10	204	212
			-7	164	172	-10	201	185	-9	205	218
-10	137	116	-6	312	294	-9	533	545	-7	156	147
-8	144	131	K,L= 0, 12			-8	623	628	-6	296	304
-6	292	306				-7	396	416	-5	337	321
-5	145	144				-6	94	119	-4	231	229
-4	103	106	-11	253	257	-5	436	451	K,L= 10, 12		
-3	123	103	-10	122	125	-4	312	308			
K,L= 10, 11			-9	132	135	K,L= 5, 12			-9	101	110
			-8	157	148				-7	242	253
			-7	762	770	-10	146	145	-6	308	284
-10	97	63	-6	709	710	-9	326	345	-5	232	219
-9	322	337	-5	350	356	-8	211	197	K,L= 11, 12		
-8	607	595	-4	177	168	-7	146	165			
-7	282	266	-3	489	496	-5	259	258	-8	237	220
-6	347	366	K,L= 1, 12			-4	402	383	-6	109	75
-5	516	511				-3	172	167			
-4	315	301	-11	277	286	K,L= 6, 12			K,L= 1, 13		
-3	203	199	-9	190	199						
-2	111	104	-8	87	108	-11	209	201	-10	195	194
K,L= 11, 11			-7	94	98	-10	143	163	-9	270	282
			-6	211	211	-9	253	262	-8	184	181
-10	358	351	-5	207	198	-8	242	263	-7	115	109
-9	236	249	-3	211	188	-7	108	102	-5	123	100
-8	254	259	-2	440	433	-6	210	208	K,L= 2, 13		
-7	126	148	K,L= 2, 12			-5	155	142			
-6	131	151				-4	222	221	-10	321	318
-5	257	255	-12	132	133	K,L= 7, 12			-9	529	519
-4	378	365	-11	164	175				-8	215	215
-3	221	217	-10	254	271	-9	122	99	-6	155	163
K,L= 12, 11			-9	84	62	-7	93	84	-5	360	361
			-8	115	138	-6	106	95	K,L= 3, 13		
-10	142	112	-6	153	131	K,L= 8, 12			-9	301	302
-9	403	400	-4	151	125				-8	182	183
-7	247	246	-3	429	435	-10	510	519	K,L= 4, 13		
-5	450	437	-2	120	107	-9	300	306			
-4	324	308	K,L= 3, 12			-8	163	146	-8	101	122
K,L= 13, 11						-7	295	290	-6	211	211
			-10	151	147	-6	417	421	K,L= 5, 13		
-9	307	294	-8	261	254	-5	324	326			
-7	140	147	-7	199	200	-4	405	407	-7	285	299
-5	148	162	-6	172	176						
-4	221	227	-5	165	152						
			-3	306	300						

Table 2. Anisotropic thermal parameters ($\times 10^4$) for the non-hydrogen atoms in the high spin state (298 K)

The temperature factor is of the form $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)]$.

Estimated standard deviations are in parentheses.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Fe	394(4)	317(4)	318(4)	5(4)	196(3)	- 3(4)
Cl(1)	718(12)	643(11)	521(9)	-132(9)	269(9)	58(8)
Cl(2)	579(10)	522(9)	361(7)	- 79(7)	242(7)	- 27(6)
N(1)	507(30)	513(29)	441(26)	- 75(26)	256(24)	37(24)
N(2)	432(30)	479(29)	383(26)	83(24)	139(24)	27(22)
N(3)	568(33)	444(28)	390(25)	- 54(25)	240(25)	- 60(22)
N(4)	517(31)	397(27)	416(26)	49(23)	261(25)	- 5(21)
N(5)	517(31)	375(26)	435(26)	46(22)	279(24)	- 19(21)
N(6)	572(32)	379(26)	468(27)	- 27(24)	359(26)	- 50(22)
C(1)	669(47)	643(44)	680(44)	- 72(37)	468(40)	- 27(35)
C(2)	394(34)	441(35)	661(40)	- 34(28)	288(32)	- 19(30)
C(3)	521(45)	602(45)	1032(62)	43(36)	443(46)	138(42)
C(4)	537(51)	628(51)	960(68)	- 6(40)	108(49)	155(47)
C(5)	676(56)	703(53)	548(45)	75(44)	- 51(41)	19(38)
C(6)	709(50)	570(42)	472(37)	118(36)	189(36)	- 11(31)
C(7)	737(47)	404(33)	542(36)	77(34)	348(35)	- 52(30)
C(8)	626(42)	367(32)	498(34)	43(29)	330(32)	- 30(26)
C(9)	698(47)	412(36)	631(41)	107(33)	333(38)	- 66(30)
C(10)	549(44)	585(43)	720(46)	263(36)	210(38)	62(37)
C(11)	520(41)	606(44)	572(39)	58(35)	164(34)	- 7(34)

Table 2. (cont'd) 298 K

C(12)	460(37)	488(35)	446(32)	50(29)	184(30)	- 34(27)
C(13)	687(46)	571(41)	565(38)	-209(34)	418(37)	-163(31)
C(14)	502(37)	440(32)	515(34)	8(29)	316(31)	14(28)
C(15)	787(51)	567(42)	728(46)	-127(37)	529(43)	- 23(36)
C(16)	857(56)	688(48)	778(50)	- 56(41)	647(47)	47(39)
C(17)	1059(64)	586(43)	659(45)	- 15(43)	636(48)	- 25(35)
C(18)	804(50)	458(36)	545(38)	- 44(33)	449(38)	- 65(28)
CT(1)	1769(159)	1835(148)	1475(128)	133(11)	1069(129)	-144(106)

Isotropic temperature factor

	$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$		$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$
O(a)	847(84)	CT(2a)	912(90)
O(b)	915(104)	CT(2b)	882(119)
O(c)	1259(150)	CT(2c)	745(119)

Table 2. Fractional atomic coordinates for the non-hydrogen($\times 10^4$; for Fe $\times 10^5$) and for the hydrogen atoms($\times 10^3$) in the high spin state (150 K)

	x	y	z	population
Fe(II)	2833(4)	13453(2)	22108(4)	1.0
Cl(1)	2571(1)	2733(1)	1781(1)	1.0
Cl(2)	-1397(1)	4321(1)	3019(1)	1.0
N(1)	1076(3)	1381(1)	872(3)	1.0
N(2)	2415(3)	1029(1)	3585(3)	1.0
N(3)	896(3)	2222(1)	3261(3)	1.0
N(4)	-1474(3)	1943(1)	844(3)	1.0
N(5)	-686(3)	491(1)	1190(3)	1.0
N(6)	-556(3)	991(1)	3397(3)	1.0
C(1)	2180(4)	925(2)	1354(3)	1.0
C(2)	3065(3)	908(1)	2931(3)	1.0
C(3)	4456(4)	759(2)	3659(4)	1.0
C(4)	5218(4)	746(2)	5109(4)	1.0
C(5)	4559(4)	882(2)	5775(4)	1.0
C(6)	3162(4)	1022(2)	4991(3)	1.0
C(7)	-320(4)	2593(1)	2904(3)	1.0
C(8)	-1514(3)	2472(1)	1420(3)	1.0
C(9)	-2593(4)	2886(2)	710(3)	1.0
C(10)	-3669(4)	2748(2)	-646(4)	1.0
C(11)	-3612(3)	2214(2)	-1268(3)	1.0
C(12)	-2509(3)	1825(2)	-496(3)	1.0
C(13)	-1790(3)	320(2)	1391(3)	1.0
C(14)	-1427(3)	515(1)	2827(3)	1.0

Table 2. (cont'd) 150 K

C(15)	-1958(4)	214(2)	3501(4)	1.0
C(16)	-1598(4)	413(2)	4813(4)	1.0
C(17)	- 693(4)	902(2)	5414(4)	1.0
C(18)	- 207(4)	1181(2)	4683(3)	1.0
O(a)	3025(4)	3872(2)	3703(4)	0.8
O(b)	4323(48)	3922(21)	3565(49)	0.1
O(c)	3175(28)	3940(12)	3631(28)	0.1
CT(1)	4469(5)	3897(2)	4708(5)	1.0
CT(2a)	4989(6)	3374(3)	5705(6)	0.8
CT(2b)	4545(48)	3218(21)	5560(47)	0.1
CT(2c)	5245(43)	3530(19)	5875(43)	0.1
				$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$
HN(1)	40(4)	134(2)	4(4)	37
HN(2)	138(4)	176(2)	99(4)	37
HN(3)	146(5)	223(2)	411(5)	49
HN(4)	138(4)	239(2)	292(4)	38
HN(5)	0(3)	21(2)	155(3)	22
HN(6)	-103(4)	52(2)	33(4)	47
H(1)	169(4)	50(2)	99(4)	26
H(2)	294(4)	100(2)	105(4)	30
H(3)	491(4)	69(2)	318(4)	35
H(4)	619(4)	66(2)	563(4)	48
H(5)	498(5)	88(2)	669(5)	72
H(6)	267(3)	112(1)	539(3)	13
H(7)	- 66(4)	248(2)	348(4)	29

Table 2. (cont'd 2) 150 K

H(8)	- 14(4)	304(2)	300(4)	32
H(9)	-256(4)	326(2)	118(4)	24
H(10)	-444(4)	303(2)	-109(4)	37
H(11)	-437(4)	209(2)	-218(4)	37
H(12)	-240(4)	146(2)	- 88(4)	25
H(13)	-264(4)	54(2)	75(3)	21
H(14)	-202(4)	- 12(2)	125(4)	25
H(15)	-255(3)	- 13(2)	311(3)	17
H(16)	-193(4)	23(2)	533(4)	31
H(17)	- 44(4)	107(2)	635(4)	27
H(18)	42(3)	152(1)	505(3)	11
HO	285(5)	356(2)	324(5)	36
HT(1)	514(5)	390(2)	436(5)	68
HT(2)	462(5)	432(2)	525(5)	65
HT(3)	605(5)	343(2)	629(6)	45
HT(4)	450(6)	336(3)	621(6)	59
HT(5)	488(5)	302(2)	532(5)	35

Table 2. Anisotropic thermal parameters($\times 10^4$) for the non-hydrogen atoms in the high spin state(150 K)

The temperature factor is of the form $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+U_{22}k^2b^{*2}+U_{33}l^2c^{*2}+2U_{12}hka^*b^*+2U_{13}hla^*c^*+2U_{23}klb^*c^*)]$.

Fe	171(2)	117(2)	102(2)	5(2)	62(2)	1(2)
Cl(1)	294(4)	257(4)	201(4)	- 45(4)	103(4)	15(3)
Cl(2)	285(4)	222(4)	138(3)	- 43(3)	105(3)	- 16(3)
N(1)	315(14)	255(13)	167(12)	- 63(11)	92(11)	32(10)
N(2)	319(14)	187(12)	164(11)	20(10)	91(11)	7(9)
N(3)	253(13)	204(12)	150(11)	- 16(10)	82(10)	- 13(9)
N(4)	197(12)	224(12)	183(12)	5(10)	86(10)	- 40(9)
N(5)	267(13)	189(12)	160(11)	21(10)	118(10)	9(9)
N(6)	246(13)	199(12)	163(11)	44(10)	106(10)	27(9)
C(1)	286(16)	338(13)	221(15)	- 30(13)	161(13)	- 8(13)
C(2)	260(15)	187(14)	225(14)	- 54(12)	107(13)	- 19(11)
C(3)	276(17)	256(16)	389(19)	- 22(13)	155(15)	24(14)
C(4)	296(19)	283(18)	403(20)	- 9(14)	46(16)	20(15)
C(5)	388(20)	272(18)	270(17)	31(15)	33(15)	16(14)
C(6)	411(19)	260(16)	174(14)	86(14)	97(14)	- 2(12)
C(7)	347(17)	200(14)	177(14)	30(13)	98(13)	- 32(11)
C(8)	273(15)	174(13)	197(14)	0(11)	135(12)	- 21(11)
C(9)	309(16)	198(14)	248(15)	25(12)	125(13)	- 44(12)
C(10)	278(16)	242(16)	301(17)	77(13)	93(14)	30(13)
C(11)	249(16)	264(16)	221(15)	13(13)	71(13)	- 20(12)

Table 2. (cont'd) 150 K

C(12)	252(16)	243(15)	216(14)	0(12)	89(13)	- 64(12)
C(13)	276(16)	258(15)	197(14)	- 55(12)	136(13)	- 34(12)
C(14)	229(14)	204(14)	221(14)	27(11)	131(12)	0(11)
C(15)	320(17)	259(16)	312(17)	- 13(13)	212(15)	- 6(13)
C(16)	404(19)	306(17)	312(17)	29(14)	279(16)	38(14)
C(17)	411(19)	303(17)	242(16)	42(14)	221(15)	- 13(13)
C(18)	316(17)	234(15)	202(14)	9(12)	147(13)	- 23(11)
O(a)	467(21)	354(18)	462(20)	110(15)	168(17)	- 55(15)
CT(1)	536(27)	488(25)	506(26)	54(21)	271(22)	- 53(20)
CT(2a)	523(32)	604(35)	423(29)	161(27)	292(27)	32(25)

Isotropic temperature factor

	$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$		$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$
O(b)	90(13)	CT(2b)	47(10)
O(c)	37(6)	CT(2c)	40(9)

Table 2. Anisotropic thermal parameters($\times 10^4$) for the non-hydrogen atoms in the high spin state(150 K)

The temperature factor is of the form $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+U_{22}k^2b^{*2}+U_{33}l^2c^{*2}+2U_{12}hka^*b^*+2U_{13}hla^*c^*+2U_{23}klb^*c^*)]$.

Fe	171(2)	117(2)	102(2)	5(2)	62(2)	1(2)
C1(1)	294(4)	257(4)	201(4)	- 45(4)	103(4)	15(3)
C1(2)	285(4)	222(4)	138(3)	- 43(3)	105(3)	- 16(3)
N(1)	315(14)	255(13)	167(12)	- 63(11)	92(11)	32(10)
N(2)	319(14)	187(12)	164(11)	20(10)	91(11)	7(9)
N(3)	253(13)	204(12)	150(11)	- 16(10)	82(10)	- 13(9)
N(4)	197(12)	224(12)	183(12)	5(10)	86(10)	- 40(9)
N(5)	267(13)	189(12)	160(11)	21(10)	118(10)	9(9)
N(6)	246(13)	199(12)	163(11)	44(10)	106(10)	27(9)
C(1)	286(16)	338(18)	221(15)	- 30(13)	161(13)	- 8(13)
C(2)	260(15)	187(14)	225(14)	- 54(12)	107(13)	- 19(11)
C(3)	276(17)	256(16)	389(19)	- 22(13)	155(15)	24(14)
C(4)	296(19)	283(18)	403(20)	- 9(14)	46(16)	20(15)
C(5)	388(20)	272(18)	270(17)	31(15)	33(15)	16(14)
C(6)	411(19)	260(16)	174(14)	86(14)	97(14)	- 2(12)
C(7)	347(17)	200(14)	177(14)	30(13)	98(13)	- 32(11)
C(8)	273(15)	174(13)	197(14)	0(11)	135(12)	- 21(11)
C(9)	309(16)	198(14)	248(15)	25(12)	125(13)	- 44(12)
C(10)	278(16)	242(16)	301(17)	77(13)	93(14)	30(13)
C(11)	249(15)	264(16)	221(15)	13(13)	71(13)	- 20(12)

Table 2. (cont'd) 150 K

C(12)	252(16)	243(15)	216(14)	0(12)	89(13)	- 64(12)
C(13)	276(16)	258(15)	197(14)	- 55(12)	136(13)	- 34(12)
C(14)	229(14)	204(14)	221(14)	27(11)	131(12)	0(11)
C(15)	320(17)	259(16)	312(17)	- 13(13)	212(15)	- 6(13)
C(16)	404(19)	306(17)	312(17)	29(14)	279(16)	38(14)
C(17)	411(19)	303(17)	242(16)	42(14)	221(15)	- 13(13)
C(18)	316(17)	234(15)	202(14)	9(12)	147(13)	- 23(11)
O(a)	467(21)	354(18)	462(20)	110(15)	168(17)	- 55(15)
CT(1)	536(27)	488(25)	506(26)	54(21)	271(22)	- 53(20)
CT(2a)	523(32)	604(35)	423(29)	161(27)	292(27)	32(25)

Isotropic temperature factor

	$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$		$U(\text{\AA}^2 \times 10^3)$
O(b)	90(13)	CT(2b)	47(10)
O(c)	37(6)	CT(2c)	40(9)

Table 3. Anisotropic thermal parameters($\times 10^4$) for the non-hydrogen atoms in the low spin phase(90 K)

The temperature factor is of the form $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+U_{22}k^2b^{*2}+U_{33}l^2c^{*2}+2U_{12}hka^*b^*+2U_{13}hla^*c^*+2U_{23}klb^*c^*)]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Fe	113(3)	63(3)	77(3)	2(2)	56(2)	5(2)
Cl(1)	177(5)	186(5)	168(5)	- 33(4)	80(4)	14(4)
Cl(2)	208(5)	154(4)	133(4)	- 35(4)	102(4)	- 12(4)
N(1)	205(17)	183(17)	156(16)	7(14)	108(14)	31(13)
N(2)	186(17)	100(15)	19(17)	- 49(13)	117(14)	- 13(13)
N(3)	165(16)	121(15)	152(16)	- 31(13)	90(14)	- 22(13)
N(4)	139(16)	115(16)	173(16)	6(12)	107(14)	- 0(13)
N(5)	178(16)	122(15)	129(15)	- 2(13)	103(13)	2(12)
N(6)	158(16)	134(16)	170(16)	24(13)	105(14)	22(13)
C(1)	234(21)	208(21)	215(21)	- 27(17)	149(18)	- 15(17)
C(2)	193(19)	129(18)	27(21)	- 11(16)	134(17)	- 5(16)
C(3)	264(22)	141(20)	208(23)	- 5(17)	171(19)	11(17)
C(4)	186(21)	163(21)	342(24)	14(17)	90(19)	20(18)
C(5)	279(23)	176(21)	213(21)	- 1(18)	66(19)	23(17)
C(6)	264(21)	132(19)	154(19)	- 2(16)	107(17)	- 8(15)
C(7)	199(20)	132(19)	185(19)	8(15)	109(17)	- 1(15)
C(8)	186(19)	132(18)	195(19)	9(15)	132(17)	12(15)
C(9)	188(19)	125(18)	240(20)	31(15)	132(17)	6(16)
C(10)	202(20)	177(20)	258(21)	47(17)	134(18)	47(17)
C(11)	207(20)	236(21)	181(20)	- 11(17)	107(17)	- 2(16)

Table 3. (cont'd) 90 K

C(12)	184(20)	171(19)	149(19)	9(16)	92(16)	- 20(15)
C(13)	204(20)	162(19)	177(19)	- 79(16)	120(17)	- 42(15)
C(14)	104(19)	130(18)	183(19)	41(15)	113(17)	26(15)
C(15)	263(22)	160(20)	259(22)	- 19(17)	186(19)	- 11(17)
C(16)	296(23)	215(21)	231(21)	- 3(18)	191(19)	9(17)
C(17)	290(22)	153(19)	178(20)	3(17)	164(18)	- 41(16)
C(18)	233(21)	198(21)	120(18)	5(16)	103(17)	- 17(15)
O	412(20)	321(19)	390(20)	108(16)	155(17)	- 30(15)
CT(1)	371(27)	333(26)	323(26)	10(22)	150(23)	- 27(21)
CT(2)	342(26)	533(32)	308(26)	146(24)	202(23)	33(23)