

University of Groningen

Iodine charge-transfer salts of benzene-bridged bis(1,2,3,5- diselenadiazolyl) diradicals. Electrocrystallization and solid- state characterization of 1,3- and 1,4- [(Se₂N₂C)₆H₄(CN₂Se₂)]^{••}[I]

Bryan, C.D.; Cordes, A.W.; George, N.A.; Haddon, R.C.; MacKinnon, C.D.; Oakley, R.T.; Palstra, Thomas; Perel, A.S.

Published in:
Chemistry of Materials

DOI:
[10.1021/cm950446s](https://doi.org/10.1021/cm950446s)

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version
Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:
1996

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Bryan, C. D., Cordes, A. W., George, N. A., Haddon, R. C., MacKinnon, C. D., Oakley, R. T., ... Perel, A. S. (1996). Iodine charge-transfer salts of benzene-bridged bis(1,2,3,5- diselenadiazolyl) diradicals. Electrocrystallization and solid- state characterization of 1,3- and 1,4- [(Se₂N₂C)₆H₄(CN₂Se₂)]^{••}[I]. *Chemistry of Materials*, 8(3), 762 - 768. DOI: 10.1021/cm950446s

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Table S1 Crystal and refinement data.

Compound	[1,4-Se][I]	[1,3-Se][I]	[1,4-Se][I][L ₃]
formula	ISe ₄ N ₄ C ₈ H ₄	ISe ₄ N ₄ C ₈ H ₄	I ₄ Se ₄ N ₄ C ₈ H ₄
fw	598.88	598.88	979.59
crystal size, mm	0.13 x 0.10 x 0.44	0.03 x 0.05 x 0.38	0.24 x 0.14 x 0.10
crystal color	very dark brown	black	golden brown
crystal mount	on fiber with silicone rubber	on fiber with silicone rubber	on fiber with silicone rubber
<i>a</i> , Å	10.586(2)	28.489(7)	12.862(3)
<i>b</i> , Å	16.713(2)	3.543(2)	15.063(2)
<i>c</i> , Å	3.5006(14)	12.283(2)	9.028(3)
β , deg	104.26(2)	---	100.62(2)
<i>V</i> , Å ³	600.2(3)	1239.8(8)	1719.1(7)
cell detn, refls	25	25	25
cell detn, 2θ range, deg	20-25	20-22	20-25
<i>d</i> (calcd), g cm ⁻³	3.314	3.21	3.785
space group	C2/m	Ima2	C2/c
<i>Z</i>	2	4	4
<i>F</i> ₀₀₀	535.83	1071.7	1699.33
radiation	MoK α , graphite monochromated	MoK α , graphite monochromated	MoK α , graphite monochromated
λ , Å	0.71073	0.71073	0.71073
temp, K	293	293	293
linear abs coeff, mm ⁻¹	14.63	14.2	15.56
diffractometer	Enraf-Nonius CAD-4	Enraf-Nonius CAD-4	Enraf-Nonius CAD-4
scan technique	$\theta - 2\theta$	$\theta - 2\theta$	$\theta - 2\theta$
scan speed, deg min ⁻¹	4-16 (in omega)	4-16 (in omega)	4-16 (in omega)
scan width, deg	1.0 + 0.35tan θ	1.0 + 0.35tan θ	1.0 + 0.35tan θ
2θ range, deg	4-50	4-50	4-50

h, k, l ranges	-12,12; -19,19; -4,0	0,33; 0,4; -14,14	-15,15; -17,17; -10,0
exposure time, hrs	14.2	13.5	35.9
std refl indices	5,-5,-1; 2,8,-1; -3,-5,-1	11,1,2; 6,0,6; 0,0,6	-3,-3,-3; -3,3,-3; -4,0,-4
drift of stds, %	2.2	1.9	3.1
absorption correction	empirical psi scans	analytical	empirical psi scans
absorption, range	0.57-1.00	0.49-0.68	0.71-1.00
refl meas	1193	1124	3149
unique refls	551	594	1510
R for merge	0.050	0.05	0.048
data with I > 3σ(I)	448	387	769
solution method	Direct Methods	Direct Methods	Direct Methods
parameters refined	48	56	95
R(F), R _w (F) ^a	0.028, 0.045	0.047, 0.061	0.059, 0.075
GOF	0.84	1.02	1.20
p, w ⁻¹ = [σ ² (I) + pI ²]/4F ²	0.05	0.05	0.05
largest Δ/σ	0.001	0.000	0.001
extinction correction	none	none	none
final diff map, e Å ⁻³	-0.6(1), +0.8(1)	-1.0(2), +1.2(2)	-1.1(4), +2.0(4)
programs	NRC386 ^b	NRC386 ^b	NRC386 ^b
H atom treatment	Idealized positions (C-H = 0.95Å)	Idealized positions (C-H = 0.95Å)	Idealized positions (C-H = 0.95Å)

Notes and footnotes

^aR = $[\Sigma ||F_o| - |F_c| |]/[\Sigma |F_o|]$; R_w = $\{[\Sigma w ||F_o| - |F_c| |]^2 / [\Sigma (w |F_o|^2)]\}^{1/2}$

^bNRC386 (PC version of NRCVAX), an interactive program system for structure analysis; see E.J. Gabe, Y. LePage, J.P. Charland, F.L. Lee, and P.S. White, *J. Appl. Cryst.* **22**, 383 (1989).

Scattering factors were taken from the International Tables for Crystallography, Volume 4.

Table S2 Interatomic distances (Å) and angles (deg). ESDs refer to the last digit printed.**[1,4-Se] [I]**

Distances		Angles	
Se-Se'	2.3050 (11)	Se-Se'-N	91.34 (13)
Se-N	1.778 (6)	Se-N-C1	116.1 (4)
N-C1	1.346 (6)	N-C1-N'	125.1 (7)
C1-C2	1.462 (11)	N-C1-C2	117.5 (4)
C2-C3	1.399 (7)	C1-C2-C3	122.1 (4)
C3-C3'	1.341 (13)	C3-C2-C3'	115.9 (6)
		C2-C3-C3'	122.1 (5)

[1,3-Se] [I]

Distances		Angles	
I1-I2	0.53 (6)	Se2-Se1-N1	90.7 (7)
I1-I2'	3.01 (6)	Se1-Se2-N2	91.8 (7)
Se1-Se2	2.316 (6)	Se1-N1-C1	115.4 (15)
Se1-N1	1.770 (19)	Se2-N2-C1	114.6 (17)
Se2-N2	1.758 (21)	N1-C1-N2	127.4 (21)
N1-C1	1.33 (3)	N1-C1-C2	113.5 (18)
N2-C1	1.34 (3)	N2-C1-C2	119.0 (19)
C1-C2	1.51 (3)	C1-C2-C3	117.8 (20)
C2-C3	1.39 (3)	C1-C2-C5	123.2 (20)
C2-C5	1.35 (3)	C3-C2-C5	119.0 (22)
C3-C4	1.36 (3)	C2-C3-C4	119.8 (23)
		C3-C4-C3'	120 (3)
		C2-C5-C2'	121 (3)

[1,4-Se] [I] [I₃]

Distances		Angles (deg)	
Se1-Se2	2.278 (3)	Se2-Se1-N1	91.6 (6)
Se1-N1	1.766 (17)	Se1-Se2-N2	91.1 (5)
Se2-N2	1.748 (15)	Se1-N1-C1	116.4 (14)
N1-C1	1.37 (3)	Se2-N2-C1	118.7 (13)
N2-C1	1.33 (3)	N1-C1-N2	122.1 (17)
C1-C2	1.483 (25)	N1-C1-C2	119.3 (17)
C2-C3	1.366 (24)	N2-C1-C2	118.5 (17)
C2-C4	1.391 (24)	C1-C2-C3	119.0 (16)
C3-C3'	1.38 (3)	C1-C2-C4	120.1 (16)
C4-C4'	1.34 (3)	C3-C2-C4	120.8 (15)
		C2-C3-C3'	119.2 (16)
		C2-C4-C4'	119.6 (16)

Table S3 Anisotropic thermal parameters $u(i,j)*100$. ESDs refer to the last digit printed.**[1,4-Se] [I]**

Atom	u11(U)	u22	u33	u12	u13	u23
I1	2.9 (5)	1.2 (6)	25.3 (25)	0.0	-4.0 (6)	0.0
I2	4.5 (3)	1.8 (4)	9.9 (4)	0.0	2.0 (4)	0.0
Se	2.47(4)	2.37(4)	5.78(5)	-0.186(20)	0.33(3)	-0.19(3)
N	2.56(25)	2.45(25)	4.7 (3)	-0.24 (20)	0.48(23)	-0.29(23)
C1	3.2 (4)	2.7 (4)	3.5 (5)	0.0	1.1 (4)	0.0
C2	2.8 (4)	2.3 (4)	2.5 (4)	0.0	0.5 (3)	0.0
C3	2.1 (3)	3.5 (3)	3.1 (3)	0.72 (22)	-0.13(22)	0.0 (3)

[1,3-Se] [I]

Atom	u11	u22	u33	u12	u13	u23
I1	3.1(10)	24.7(65)	2.2(7)	-4.7(11)	0.0(0)	0.0(0)
I2	2.8(10)	15.3(14)	7.1(13)	-1.3(12)	-1.1(5)	1.6(7)
Se1	3.70(12)	5.44(17)	2.74(11)	0.05(14)	0.33(11)	-0.31(24)
Se2	3.43(13)	5.81(19)	3.83(14)	0.24(15)	0.70(12)	-0.06(24)

[1,4-Se] [I] [I₃]

Atom	u11(U)	u22	u33	u12	u13	u23
I1	3.48(11)	5.75(15)	5.02(14)	0.0	1.71(10)	0.0
I2	9.3 (23)	5.5 (10)	6.8 (29)	0.2 (13)	-1.6 (13)	-1.7 (17)
I3	32.7 (57)	4.2 (6)	5.7 (18)	-3.0 (11)	-10.8 (30)	1.5 (8)
I4	18.3 (28)	7.9 (10)	4.9 (21)	0.0	-9.2 (24)	0.0
I5	35.5 (46)	9.2 (16)	10.8 (20)	-8.4 (23)	3.9 (19)	2.5 (13)
I6	14.1 (28)	3.3 (7)	4.2 (17)	-1.2 (13)	-2.8 (12)	0.7 (11)
I7	22.4 (35)	6.2 (8)	2.1 (10)	-2.7 (15)	-0.8 (12)	1.7 (7)
Se1	5.88(17)	3.23(13)	5.90(17)	-0.62(11)	3.49(14)	-0.73(11)
Se2	3.71(12)	3.50(12)	4.47(14)	-0.94(10)	1.33(10)	0.07(10)

Anisotropic temperature factors are of the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2U_{11}a^{*2} + k^2U_{22}b^{*2} + l^2U_{33}c^{*2} + 2hkU_{12}a^*b^* + 2hlU_{13}a^*c^* + 2klU_{23}b^*c^*)].$$

Table S4 Summary of intermolecular Se..Se, Se..N, Se..I, and I..I contacts (Å).**[1,4-Se] [I]**

Se-Se	3.7769(12)	(at 1.5-x, 0.5-y, 1-z)
Se-N	3.069(4)	(at 1.5-x, 0.5-y, 1-z)
Se-I1	3.7077(8)	
Se-I1	3.7484(7)	(at x, y, z-1)
Se-I2	3.915(7)	
Se-I2	3.588(2)	(at x, y, z-1)
Se-I2	3.533(6)	(at 2-x, -y, 2-z)
Se-I2	3.942(4)	(at 2-x, -y, 1-z)
I1-I2	3.107(9)	(at x, y, z-1)

[1,3-Se] [I]

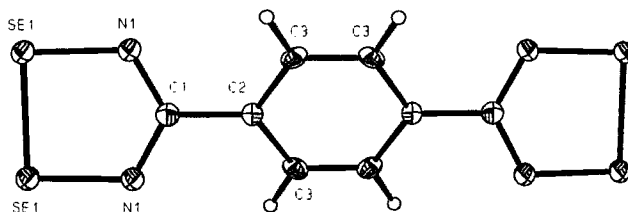
I1-Se1	4.085(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I1-Se1	3.497(3)	(at -0.5+x, -0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	4.321(4)	(at -0.5+x, 0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	3.824(4)	(at -0.5+x, -0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	3.743(4)	(at 1.5-x, y, z)
I2-Se1	3.80(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I2-Se1	3.71(3)	(at -0.5+x, -0.5+y, -0.5+z)
I2-Se1	3.361(11)	(at 1.5-x, 0.5-y, -0.5+z)
I2-Se2	4.06(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I2-Se2	4.02(3)	(at -0.5+x, -0.5+y, -0.5+z)
I2-Se2	3.699(4)	(at 1.5-x, y, z)
I2-Se2	3.861(17)	(at -0.5+x, -y, z)
I2-Se2	3.691(11)	(at 1.5-x, 0.5-y, -0.5+z)

[1,4-Se] [I] [I₃]

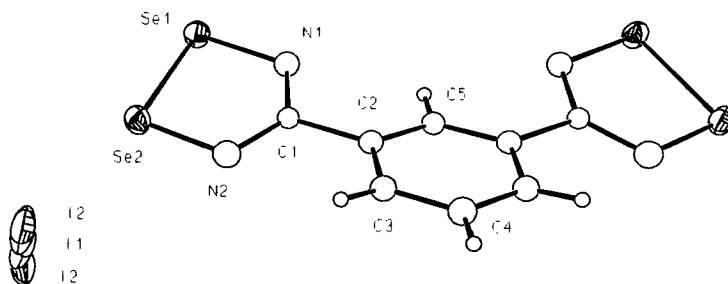
Se1-Se1	3.841(4)	(at 1.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I3	3.76(3)	(at 0.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I4	3.775(8)	(at 0.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I6	3.710(15)	(at 1-x, y, 0.5-z)
Se1-I7	3.524(22)	(at 1-x, y, 0.5-z)
Se2-I1	3.3574(25)	(at 1-x, -y, -z)
Se2-I2	3.7929(23)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I5	3.65(3)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I6	3.536(14)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I7	3.559(22)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
I2-I3	3.29(4)	
I5-I5	3.21(12)	(at -x, y, 0.5-z)

Figure S1 ORTEP drawings of molecular units in [1,4-Se] [I] and [1,3-Se] [I].

1. [1,4-Se] [I]



2. [1,3-Se] [I]



3. [1,4-Se] [I] [I₃]

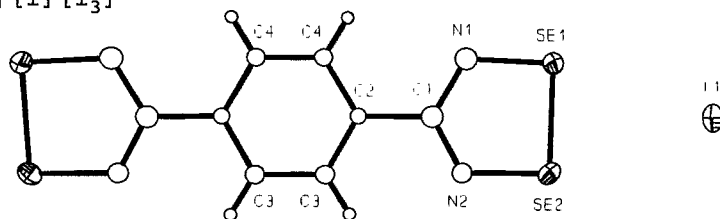


Table F1 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,4-Se][I]

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant				h kFo Fc Sig			
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 0, 0				3	778	793	59	5	300	307	65	2	232	237	46
2	1766	1814	38	5	746	755	48	7	360	345	59	4	779	737	77
4	1451	1489	55	7	403	396	38	h, 16, 0				6	266	256	67
6	203	159	58	9	199	192	81	0	1230	1197	117	8	896	895	76
8	1683	1702	85	11	219	217	81	2	515	499	46	10	350	351	82
10	1108	1117	105	h, 8, 0				4	346	335	59	h, 3, 1			
12	222	231	115	0	1595	1446	74	6	43	22	532*	-11	482	510	63
h, 1, 0				2	280	291	40	h, 17, 0				-9	962	996	92
1	1026	1049	24	4	2038	2087	62	1	892	901	62	-7	55	73	484*
3	447	431	32	6	994	1014	73	3	26	39	1483*	-5	1091	1100	65
5	89	82	69	8	568	578	47	5	223	212	91	-3	341	334	34
7	475	464	41	10	351	385	62	h, 18, 0				-1	2119	2199	57
9	549	557	47	h, 9, 0				0	26	27	2168*	1	976	994	63
11	188	193	84	1	79	47	139*	2	295	300	71	3	1024	974	70
h, 2, 0				3	1133	1122	65	4	572	588	58	5	576	549	59
0	859	805	38	5	1230	1256	70	h, 19, 0				7	882	875	72
2	640	629	37	7	291	286	49	1	221	226	92	9	812	830	85
4	1979	2063	45	9	155	158	111	3	709	709	60	h, 4, 1			
6	990	1028	59	h, 10, 0				h, 0, 1				-12	156	150	140
8	308	309	42	0	1663	1604	84	-12	171	161	173	-10	216	202	87
10	148	153	105	2	788	766	46	-10	842	870	102	-8	309	317	56
12	443	435	51	4	230	218	53	-8	438	433	63	-6	487	497	50
h, 3, 0				6	186	179	68	-6	1613	1699	95	-4	566	582	49
1	594	593	38	8	753	773	66	-4	1739	1835	79	-2	494	501	48
3	1912	1963	42	10	487	466	49	-2	1532	1492	67	0	550	566	54
5	2128	2208	52	h, 11, 0				0	2156	2152	72	2	717	704	72
7	268	272	41	1	1726	1694	72	2	1149	1141	85	4	549	526	62
9	596	603	53	3	348	334	48	4	2159	2167	99	6	273	284	71
11	174	154	91	5	827	834	58	6	65	147	332*	8	224	229	100
h, 4, 0				7	507	495	46	8	1052	1036	145	10	217	231	124
0	1075	1003	53	9	977	1007	69	10	153	137	223	h, 5, 1			
2	741	727	45	h, 12, 0				h, 1, 1				-11	119	130	219*
4	435	455	39	0	727	712	73	-11	133	129	139	-9	426	434	54
6	437	452	39	2	689	676	50	-9	22	28	834*	-7	458	482	50
8	378	385	40	4	562	557	48	-7	435	445	47	-5	1400	1444	70
10	219	225	69	6	414	411	45	-5	946	996	64	-3	580	590	49
h, 5, 0				8	330	339	58	-3	890	919	54	-1	752	753	72
1	2036	2026	45	h, 13, 0				-1	427	420	43	1	106	80	97
3	125	99	48	1	198	190	70	1	357	342	37	3	1309	1310	75
5	445	461	38	3	844	852	62	3	947	926	67	5	996	1009	90
7	653	643	53	5	953	997	64	5	838	810	84	7	244	220	84
9	1023	1054	82	7	112	134	191*	7	198	202	93	9	373	369	77
11	286	284	62	9	259	250	76	9	25	28	1905*	h, 6, 1			
h, 6, 0				h, 14, 0				11	193	187	146	-10	389	407	63
0	2488	2423	63	0	500	481	59	h, 2, 1				-8	122	114	128
2	1050	1037	51	2	291	285	55	-12	27	1	993*	-6	1143	1166	79
4	631	632	47	4	1145	1184	91	-10	742	752	74	-4	1236	1274	70
6	19	33	1022*	6	661	673	53	-8	700	739	63	-2	284	265	45
8	1004	1047	78	8	232	216	82	-6	380	399	41	0	747	748	65
10	681	701	57	h, 15, 0				-4	519	523	46	2	794	797	79
h, 7, 0				1	556	569	44	-2	1217	1249	51	4	1478	1471	82
1	813	740	51	3	389	397	51	0	1977	2017	57	6	322	321	66

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant															
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 6, 1			-7	571	575	56	4	838	835	84	-11	364	353	71
8	471	456	64	-5	1516	1541	94		h, 17, 1			-9	280	282	73
10	34	24	988*	-3	517	518	57	-5	705	709	76	-7	671	673	68
	h, 7, 1			-1	882	874	71	-3	282	275	98	-5	913	913	79
-11	188	162	115	1	98	44	183*	-1	329	335	87	-3	316	300	48
-9	320	309	66	3	1518	1475	101	1	26	12	1282*	-1	825	870	77
-7	217	229	74	5	1020	1025	79	3	669	662	73	1	269	258	65
-5	185	183	73	7	298	295	95		h, 18, 1			3	1063	1039	91
-3	345	358	43		h, 12, 1			-4	27	20	2081*	5	290	269	75
-1	500	526	53	-10	53	65	1476*	-2	410	404	82	7	486	501	64
1	488	490	50	-8	100	100	209*	0	503	489	72	9	160	179	215
3	211	211	74	-6	185	189	105	2	103	110	269*		h, 4, 2		
5	195	183	91	-4	272	273	76		h, 19, 1			-10	25	14	1656*
7	299	301	78	-2	267	259	80	-1	830	840	83	-8	23	18	1539*
9	248	237	106	0	185	164	145	1	424	446	88	-6	63	12	219*
	h, 8, 1			2	149	137	131		h, 0, 2			-4	90	67	136
-10	935	934	79	4	235	238	96	-12	293	281	121	-2	99	66	169*
-8	737	743	73	6	265	250	98	-10	860	841	104	0	62	53	336*
-6	626	636	61	8	124	109	276*	-8	150	127	144	2	123	72	129
-4	613	597	62		h, 13, 1			-6	998	995	114	4	86	51	199*
-2	1558	1542	78	-9	602	605	67	-4	108	118	161	6	24	79	2094*
0	2027	2043	81	-7	183	177	116	-2	1653	1646	94	8	27	4	1993*
2	18	23	1030*	-5	351	355	69	0	1067	1024	111		h, 5, 2		
4	944	936	96	-3	234	229	90	2	797	805	88	-11	390	369	69
6	343	321	68	-1	1098	1111	105	4	718	733	103	-9	410	418	59
8	1119	1117	117	1	704	707	74	6	600	614	87	-7	320	312	59
10	364	382	93	3	235	235	100	8	788	780	131	-5	585	585	59
	h, 9, 1			5	162	153	145		h, 1, 2			-3	368	356	49
-11	267	259	94	7	514	498	71	-11	133	132	153	-1	926	936	97
-9	573	596	66		h, 14, 1			-9	219	218	82	1	116	109	141
-7	100	131	210*	-8	395	392	78	-7	147	129	96	3	645	660	68
-5	413	421	53	-6	307	314	85	-5	387	390	44	5	152	157	131
-3	177	184	84	-4	209	214	106	-3	76	53	182*	7	506	506	66
-1	1135	1141	86	-2	837	812	82	-1	414	419	52		h, 6, 2		
1	739	749	69	0	1046	1049	94	1	91	105	156*	-10	501	497	59
3	305	293	65	2	23	57	1246*	3	367	365	57	-8	23	67	1721*
5	217	209	95	4	448	440	73	5	200	198	99	-6	614	629	59
7	457	467	65	6	230	202	119	7	189	168	121	-4	224	218	72
9	476	481	75		h, 15, 1			9	126	168	218*	-2	809	822	78
	h, 10, 1			-7	183	190	137		h, 2, 2			0	605	611	60
-10	195	204	118	-5	263	265	99	-12	28	13	1024*	2	461	487	55
-8	24	100	1744*	-3	210	197	111	-10	441	441	59	4	511	531	56
-6	711	728	72	-1	180	153	127	-8	22	50	878*	6	269	261	92
-4	890	905	92	1	241	246	105	-6	782	801	59	8	455	454	76
-2	19	53	800*	3	324	308	91	-4	510	512	54		h, 7, 2		
0	404	403	55	5	174	180	155	-2	689	707	55	-11	57	12	379*
2	530	531	54		h, 16, 1			0	641	638	66	-9	25	12	935*
4	951	956	85	-6	634	652	68	2	603	588	69	-7	139	149	121
6	217	234	108	-4	737	735	76	4	707	719	75	-5	211	206	79
8	232	246	122	-2	126	105	228*	6	129	135	200	-3	133	84	156
	h, 11, 1			0	364	360	80	8	411	407	78	-1	31	40	625*
-9	455	453	65	2	450	443	75		h, 3, 2			1	107	94	208*

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant

h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
				6	81	14	445*	-6	493	495	53	-8	188	163	149
3	220	207	95					-4	75	66	281*	-6	446	435	64
5	91	105	229*	-7	209	235	122	-2	479	487	55	-4	73	84	294*
7	26	18	1974*	-5	476	473	66	0	159	133	130	-2	531	544	68
				-3	119	118	227*	2	457	454	64	0	97	94	257*
-10	561	541	60	-1	517	542	66	4	301	281	89	2	427	459	80
-8	24	3	1575*	1	25	35	2284*	6	201	206	138	4	194	181	146
-6	875	871	70	3	492	480	73								
-4	293	303	67	5	175	172	160	-9	26	14	1716*	-7	280	282	93
-2	952	964	83					-7	449	458	58	-5	303	280	83
0	616	621	69	-6	493	474	68	-5	306	308	68	-3	128	134	238*
2	685	696	72	-4	175	159	136	-3	296	304	71	-1	244	232	116
4	676	700	76	-2	449	452	72	-1	302	288	88	1	156	158	217
6	330	324	81	0	271	268	99	1	331	340	78	3	323	327	97
8	519	521	100	2	382	393	85	3	467	458	67				
				4	367	380	95	5	27	45	2139*	-8	140	33	207
-9	211	194	103									-6	230	250	111
-7	318	324	70	-5	66	73	846*	-10	27	25	1790*	-4	66	45	482*
-5	588	588	60	-3	162	140	155	-8	25	22	960*	-2	372	388	88
-3	21	16	1139*	-1	124	102	203	-6	77	25	229*	0	183	148	188
-1	468	490	61	1	26	6	1318*	-4	23	43	1655*	2	243	229	121
1	91	39	267*	3	27	28	2293*	-2	101	13	252*				
3	562	575	58					0	23	56	2249*	-7	377	351	83
5	257	256	99	-4	168	160	160	2	24	7	2037*	-5	225	220	118
7	215	208	129	-2	435	438	80	4	60	49	906*	-3	316	315	97
				0	362	345	91					-1	297	301	104
-10	347	368	85	2	276	275	115	-9	135	128	197	1	217	255	146
-8	67	140	398*					-7	300	278	74				
-6	375	384	66	-3	157	186	235	-5	161	198	127	-6	28	25	1147*
-4	178	173	108	-1	412	440	86	-3	358	364	67	-4	56	42	976*
-2	535	558	58					-1	426	439	75	-2	142	150	198
0	482	477	62	-10	423	395	93	1	135	124	171	0	174	177	169
2	250	262	95	-8	178	143	150	3	336	338	85				
4	333	331	82	-6	439	434	80	5	79	61	712*	-5	47	201	2100*
6	221	194	116	-4	290	282	95					-3	186	197	158
				-2	824	836	98	-8	121	107	219*	-1	254	281	128
-9	327	314	83	0	216	204	148	-6	337	341	71				
-7	484	471	61	2	486	490	86	-4	108	75	219*	-6	154	132	215
-5	673	667	76	4	79	113	427*	-2	489	486	65	-4	178	183	178
-3	339	337	73	6	464	448	105	0	24	129	2393*	-2	247	263	175
-1	818	833	83					2	337	343	84	0	28	50	3180*
1	108	121	205*	-9	40	76	497*	4	176	166	143				
3	775	801	82	-7	193	179	99					-5	103	110	211*
5	142	153	171	-5	211	221	86	-9	80	26	590*	-3	71	57	396*
				-3	128	116	128	-7	26	108	1815*	-1	41	27	831*
-8	154	149	150	-1	255	247	94	-5	39	108	633*				
-6	117	82	241*	1	49	64	928*	-3	67	15	420*	-6	152	159	157
-4	24	47	1888*	3	256	255	97	-1	94	10	340*	-4	99	133	237*
-2	175	151	128	5	55	66	567*	1	101	93	320*	-2	258	261	114
0	231	256	110					3	142	111	178	0	105	16	319*
2	143	172	180	-10	269	261	92	5	29	37	1209*				
4	63	17	516*	-8	123	131	159					-5	28	14	1932*

I-768-m10

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant

h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
				-1	113	69	349*	-4	73	47	396*				
-3	169	177	153					-2	27	77	2504*	-3	164	167	239

Table F2 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,3-Se][I]

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant							
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
	0,	0,	1	2	336	344	435	1	1785	1770	183	0	44	152	8630*
2	1618	1573	152	4	239	204	788*	3	63	28	3876*	2	1558	1658	173
4	3438	3285	195	6	261	163	586*	5	1319	1416	160	4	1359	1486	144
6	2169	2041	180	8	210	127	831*	7	1094	1144	193	6	765	774	151
8	1844	1762	217	10	94	140	4494*	9	143	153	1288*	8	823	873	197
10	727	676	219		1,	4,	1	11	684	705	314	10	721	737	245
12	2400	2266	286	1	345	218	589*		3,	3,	1	12	272	113	560*
14	630	633	315	3	93	204	4718*	0	184	1	3135*	14	377	339	528
	0,	1,	1		2,	0,	1	2	244	186	773*		5,	2,	1
1	2814	3038	191	2	1274	1234	118	4	79	160	4359*	1	497	456	251
3	714	772	125	4	2710	2578	201	6	83	62	2414*	3	1101	1188	149
5	2029	2011	182	6	581	537	155	8	88	78	4360*	5	732	784	213
7	1140	1210	141	8	1841	1764	181	10	94	146	2124*	7	598	575	248
9	391	402	319	10	250	261	674*		3,	4,	1	9	587	589	290
11	889	818	218	12	955	962	231	1	454	437	522	11	248	240	883*
13	550	509	356	14	92	287	4169*	3	230	23	1061*		5,	3,	1
	0,	2,	1		2,	1,	1		4,	0,	1	0	151	95	3954*
0	1143	1061	217	1	482	503	158	0	1119	1027	188	2	166	70	1178*
2	796	898	156	3	1063	1106	114	2	2817	2782	164	4	79	55	3769*
4	345	382	303	5	810	815	133	4	3120	3053	207	6	83	98	4569*
6	1082	1108	180	7	1179	1148	136	6	2942	2856	252	8	88	89	4158*
8	583	621	277	9	461	445	286	8	1772	1719	182	10	241	62	980*
10	409	434	395	11	297	365	667*	10	945	952	202		5,	4,	1
12	358	401	551	13	247	172	814*	12	536	488	330	1	269	188	807*
	0,	3,	1		2,	2,	1	14	578	561	358	3	93	301	5137*
1	1056	1239	216	0	681	646	291		4,	1,	1		6,	0,	1
3	93	245	3595*	2	489	501	205	1	2218	2084	217	0	1136	1096	186
5	945	1009	232	4	233	269	562*	3	1028	1060	114	2	2903	2803	186
7	822	869	269	6	423	460	320	5	343	342	315	4	967	958	116
9	90	22	2678*	8	76	111	4131*	7	303	313	314	6	3587	3466	260
	0,	4,	1	10	83	148	3800*	9	488	503	295	8	1004	1032	153
0	218	460	3497*	12	253	187	730*	11	630	678	282	10	1147	1106	189
2	92	184	4951*		2,	3,	1	13	602	567	331	12	475	442	348
4	94	143	4413*	1	508	489	354		4,	2,	1	14	662	652	338
	1,	1,	1	3	318	343	603*	0	982	872	235		6,	1,	1
0	2604	2368	311	5	332	386	629*	2	638	678	185	1	1503	1419	158
2	1302	1562	145	7	365	359	633*	4	627	674	203	3	1046	1042	113
4	1038	1147	118	9	91	102	2544*	6	583	605	259	5	1124	1122	133
6	1169	1235	127		2,	4,	1	8	370	405	396	7	586	609	203
8	551	566	232	0	91	48	9156*	10	84	364	4620*	9	598	582	236
10	456	467	317	2	318	99	615*	12	373	387	497	11	487	526	356
12	696	709	282	4	221	122	1109*		4,	3,	1	13	504	499	382
14	392	342	478		3,	1,	1	1	908	838	240		6,	2,	1
	1,	2,	1	0	3936	3697	308	3	434	474	382	0	1122	1026	228
1	1424	1548	153	2	1200	1367	122	5	485	544	358	2	380	442	304
3	242	245	398	4	1117	1241	116	7	498	455	357	4	451	470	253
5	789	845	195	6	2152	2307	199	9	412	374	464	6	651	648	240
7	611	647	268	8	977	1063	176		4,	4,	1	8	362	341	508
9	216	62	803*	10	526	571	313	0	92	165	7447*	10	235	177	851*
11	503	514	472	12	1099	1096	233	2	222	100	1127*	12	435	382	562
	1,	3,	1	14	429	469	470	4	287	130	864*		6,	3,	1
0	280	178	857*		3,	2,	1		5,	1,	1	1	832	758	261

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant															
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
1	6,	3,	1	4	801	834	214	13	92	59	2517*	11	283	310	593*
3	307	228	639*	6	287	163	451	10,	2,	1		13	94	340	4527*
5	715	754	271	8	620	616	269	0	154	220	2712*	12,	2,	1	
7	540	599	375	10	501	463	367	2	734	649	195	0	92	62	5171*
9	92	113	4757*	12	93	28	4280*	4	589	559	248	2	546	558	293
	6,	4,	1		8,	3,	1	6	511	474	293	4	291	300	625*
0	218	133	1515*	1	482	392	385	8	230	357	860*	6	216	143	837*
2	96	101	2787*	3	959	961	242	10	426	397	438	8	161	118	1199*
	7,	1,	1	5	593	590	332	12	94	167	2754*	10	353	271	488
0	1727	1584	257	7	308	416	812*		10,	3,	1		12,	3,	1
2	1369	1415	154	9	632	621	340	1	474	385	410	1	424	381	477
4	1549	1655	172		8,	4,	1	3	694	661	292	3	584	565	346
6	1144	1194	136	0	93	42	8178*	5	388	358	454	5	85	157	4666*
8	1042	1114	180	2	229	140	967*	7	279	355	873*	7	156	181	1527*
10	883	889	214		9,	1,	1	9	520	429	398		13,	1,	1
12	628	650	306	0	1090	1045	179		10,	4,	1	0	153	126	837*
	7,	2,	1	2	750	751	145	0	94	63	8994*	2	903	885	156
1	859	786	180	4	1037	1058	133		11,	1,	1	4	1024	1053	154
3	958	980	164	6	690	692	177	0	54	269	5851*	6	210	176	550*
5	825	884	205	8	677	701	235	2	2394	2311	198	8	566	598	287
7	682	712	253	10	421	421	456	4	2322	2392	209	10	490	444	477
9	725	746	263	12	401	361	449	6	83	89	2957*	12	90	144	4457*
11	374	418	680*		9,	2,	1	8	1643	1686	179		13,	2,	1
	7,	3,	1	1	580	566	245	10	1241	1252	204	1	449	405	349
0	77	141	8008*	3	637	654	249	12	189	52	1167*	3	753	748	236
2	243	235	689*	5	570	620	268		11,	2,	1	5	297	185	470
4	175	87	1090*	7	453	492	353	1	1101	1002	176	7	79	90	2381*
6	84	113	4546*	9	377	433	436	3	1767	1740	183	9	465	433	369
8	89	67	2049*	11	158	228	1500*	5	1030	1002	199	11	92	264	5052*
	7,	4,	1		9,	3,	1	7	873	876	231		13,	3,	1
1	356	310	661*	0	153	105	3552*	9	1164	1146	216	0	82	67	6394*
3	167	252	3076*	2	220	60	961*	11	538	513	375	2	82	22	5134*
	8,	0,	1	4	81	26	2517*		11,	3,	1	4	213	175	1104*
0	1614	1491	226	6	85	62	5052*	0	80	335	3483*	6	88	104	4693*
2	4449	4379	205	8	116	66	2064*	2	81	170	4999*	8	267	178	881*
4	1884	1855	171		9,	4,	1	4	83	91	4597*		14,	0,	1
6	1583	1507	167	1	94	188	3630*	6	279	331	842*	0	1443	1375	215
8	1149	1066	165		10,	0,	1	8	91	148	4915*	2	1935	1877	206
10	2142	2047	212	0	2635	2410	329		12,	0,	1	4	3396	3368	290
12	311	472	725*	2	3375	3208	231	0	1812	1716	264	6	918	898	183
14	851	877	286	4	1491	1459	157	2	168	104	569*	8	2215	2200	254
	8,	1,	1	6	331	337	278	4	2996	2962	272	10	1184	1140	210
1	756	720	140	8	868	836	191	6	789	779	166	12	320	361	550*
3	1383	1344	149	10	1542	1523	182	8	2254	2153	247		14,	1,	1
5	1428	1424	162	12	898	877	253	10	470	390	306	1	1521	1450	154
7	1045	1014	168		10,	1,	1	12	412	411	424	3	1354	1334	155
9	917	922	200	1	583	563	172		12,	1,	1	5	344	300	340
11	176	189	871*	3	1093	1091	128	1	781	771	164	7	288	316	605*
13	276	183	781*	5	1134	1098	136	3	1549	1515	165	9	621	588	275
	8,	2,	1	7	829	859	197	5	497	478	215	11	730	698	276
0	63	97	6925*	9	879	841	208	7	571	558	252		14,	2,	1
2	816	810	183	11	84	207	3996*	9	999	980	211	0	386	352	543

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant							
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
14,	2,	1		10	92	161	4543*	0	1479	1486	257	7	374	446	713*
2	910	856	215	16,	3,	1		2	909	869	211	9	362	213	675*
4	858	800	224	1	85	416	5624*	4	499	471	305		21,	3,	1
6	154	86	1042*	3	301	306	861*	6	1047	1099	220	0	91	42	3417*
8	600	569	304	5	305	349	660*	8	448	490	381	2	91	119	5028*
10	486	514	390	7	336	254	759*	10	342	324	536	4	246	101	1040*
14,	3,	1		17,	1,	1		19,	2,	1			22,	0,	1
1	568	480	349	0	65	66	5259*	1	992	969	235	0	1634	1659	247
3	969	955	262	2	1679	1692	191	3	196	186	1023*	2	1790	1788	197
5	558	524	399	4	1229	1221	184	5	603	593	327	4	709	695	255
7	384	366	490	6	343	318	387	7	611	527	318	6	2280	2252	233
15,	1,	1		8	753	823	262	9	287	184	636*	8	589	616	328
0	862	825	234	10	809	832	275	19,	3,	1		10	743	766	312
2	1207	1172	149	12	94	56	2586*	0	238	64	2882*		22,	1,	1
4	1073	1112	162	17,	2,	1		2	89	83	2260*	1	1183	1243	216
6	477	458	298	1	623	577	299	4	91	44	5178*	3	492	517	339
8	831	815	225	3	1130	1148	221	6	94	53	4839*	5	633	652	290
10	684	686	279	5	624	589	275	20,	0,	1		7	413	481	462
12	442	377	536	7	437	452	402	0	222	395	916*	9	295	316	796*
15,	2,	1		9	578	585	380	2	2253	2193	256		22,	2,	1
1	396	442	558	17,	3,	1		4	267	206	636*	0	591	580	493
3	906	895	222	0	86	71	3163*	6	1120	1100	202	2	357	403	537
5	458	467	347	2	139	42	1755*	8	143	161	2356*	4	432	232	526
7	408	415	409	4	89	74	4900*	10	1011	1000	260	6	475	452	425
9	600	638	351	6	92	100	4463*	20,	1,	1		8	250	313	815*
11	94	183	2814*	18,	0,	1		1	650	655	264		22,	3,	1
15,	3,	1		0	2583	2543	326	3	742	754	251	1	672	623	378
0	190	61	1387*	2	2181	2101	241	5	576	590	295	3	93	78	5210*
2	84	154	3166*	4	974	984	184	7	379	464	453		23,	1,	1
4	86	71	2889*	6	157	104	824*	9	476	517	510	0	954	979	319
6	90	75	2815*	8	727	720	253	11	203	200	1171*	2	539	532	312
16,	0,	1		10	917	952	259	20,	2,	1		4	490	513	356
0	2532	2414	303	12	923	929	273	0	169	210	1363*	6	347	391	656*
2	60	279	2131*	18,	1,	1		2	304	329	583*	8	412	420	444
4	2082	2006	233	1	236	346	763*	4	345	334	643*	10	262	196	1008*
6	69	147	4097*	3	816	806	216	6	85	69	2585*		23,	2,	1
8	1301	1323	190	5	845	852	217	8	90	275	4887*	1	676	688	310
10	384	214	500	7	713	727	254	20,	3,	1		3	379	420	510
12	777	718	291	9	522	484	321	1	271	315	1022*	5	438	410	463
16,	1,	1		11	91	225	4494*	3	519	441	393	7	92	316	4822*
1	807	785	181	18,	2,	1		5	323	179	840*		23,	3,	1
3	725	715	192	0	365	384	659*	21,	1,	1		0	256	177	1132*
5	735	713	225	2	545	490	323	0	788	831	358	2	134	213	1992*
7	723	734	244	4	481	492	359	2	795	811	243		24,	0,	1
9	322	268	453	6	453	439	385	4	699	726	253	0	362	452	645*
11	359	317	482	8	424	412	554	6	882	906	236	2	909	940	237
16,	2,	1		10	94	249	5104*	8	532	529	358	4	674	684	277
0	72	415	7612*	18,	3,	1		10	308	333	783*	6	1399	1409	210
2	358	335	459	1	548	471	399	21,	2,	1		8	666	671	311
4	331	227	444	3	460	479	632	1	714	721	290	10	429	437	615
6	379	337	412	5	91	334	5619*	3	81	246	5099*		24,	1,	1
8	241	161	937*	19,	1,	1		5	485	432	383	1	730	772	277

I-7608-m14

Columns are 10Fo			10Fc			100Sig, * for Insignificant					
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
24,	1,	1		2	795	781	244	3	91	237	4795*
3	385	349	427	4	856	869	258	5	94	244	4902*
5	399	454	596	6	316	206	701*		28,	0,	1
7	302	215	762*	8	639	670	345	0	1837	1889	292
9	182	290	1371*		26,	1,	1	2	538	558	361
	24,	2,	1	1	221	256	981*	4	1060	1047	258
0	447	514	672	3	406	398	417	6	578	608	368
2	85	134	4729*	5	562	554	362	8	723	709	327
4	87	246	2684*	7	488	557	434		28,	1,	1
6	91	225	3034*		26,	2,	1	1	457	443	423
	25,	1,	1	0	255	298	1119*	3	193	350	1337*
0	1412	1467	305	2	89	143	4687*	5	582	606	386
2	552	544	344	4	190	224	1356*	7	494	552	592
4	590	578	334	6	136	283	1996*		28,	2,	1
6	971	1030	265		27,	1,	1	0	235	391	1276*
8	594	598	361	0	489	448	567	2	233	242	1065*
	25,	2,	1	2	287	233	752*	4	363	166	715*
1	601	658	385	4	340	427	757*		29,	1,	1
3	88	138	4824*	6	90	278	4630*	0	398	369	679*
5	755	744	317	8	345	308	753*	2	414	397	571
	26,	0,	1		27,	2,	1	4	484	542	429
0	1470	1464	290	1	90	200	2904*	6	608	618	391
								3	144	376	3341*

Table F3 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,4-Se][I][I3]

Columns are				1Fo	1Fc	10Sig,	* for Insignificant								
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
2	190	175	17	4	55	60	24	1	134	136	21	8	10	6	578*
4	319	320	30	6	54	55	31	3	92	93	26	10	109	100	36
6	314	327	27	8	237	244	18	5	132	138	23	12	39	35	128*
8	169	170	22	10	41	45	62	7	27	4	101*	14	14	19	659*
10	222	229	26	12	85	93	36	9	14	9	430*	h,	3,	1	
12	22	15	202*	14	68	72	52	h,	14,	0	-15	14	33	291*	
14	17	9	295*	h,	7,	0		0	271	226	29	-13	62	59	60
1	242	230	13	1	203	198	15	2	12	8	278*	-11	69	71	47
3	122	125	13	3	421	405	24	4	47	48	64	-9	108	119	30
5	358	370	27	5	85	81	20	6	101	100	29	-7	57	61	36
7	42	39	36	7	176	179	17	8	67	74	45	-5	162	168	17
9	68	63	41	9	93	102	27	h,	15,	0	-3	163	160	18	
11	158	168	22	11	60	53	41	1	13	4	414*	-1	102	104	15
13	13	23	320*	13	85	76	37	3	13	23	245*	1	928	795	22
h,	2,	0		h,	8,	0		5	83	91	35	3	64	64	26
0	99	126	11	0	438	363	34	7	33	8	104*	5	216	211	22
2	5	4	339*	2	380	370	25	h,	16,	0	7	104	102	28	
4	40	37	27	4	19	8	95*	0	77	69	50	9	65	63	49
6	182	186	16	6	34	30	67*	2	47	47	61	11	77	71	63
8	66	66	27	8	187	195	21	4	14	21	245*	13	20	46	483*
10	96	97	26	10	37	33	106*	6	34	35	130*	h,	4,	1	
12	49	51	57	12	80	80	37	h,	17,	0	-14	14	22	664*	
14	39	9	85*	1	132	133	16	1	41	42	73*	-12	69	70	55
h,	3,	0		3	176	169	15	3	14	4	253*	-10	11	28	610*
1	61	66	14	5	12	23	344*	h,	1,	1	-8	97	107	30	
3	7	11	196*	7	65	62	32	-15	14	20	669*	-6	164	164	18
5	35	39	44	9	81	87	31	-13	13	27	649*	-4	72	68	24
7	87	89	21	11	42	30	79*	-11	30	15	132*	-2	314	310	26
9	61	58	38	h,	10,	0		-9	116	119	30	0	274	267	26
11	82	88	32	0	181	159	21	-7	71	76	33	2	275	264	29
13	29	18	97*	2	66	60	26	-5	132	136	18	4	260	255	24
h,	4,	0		4	87	80	23	-3	93	91	17	6	78	80	31
0	534	451	23	6	17	11	148*	-1	57	59	18	8	136	128	27
2	45	50	22	8	34	39	86*	1	181	194	17	10	75	69	48
4	8	16	153*	10	27	30	102*	3	60	55	29	12	38	23	96*
6	50	54	34	12	14	14	319*	5	39	37	49	14	19	34	599*
8	47	51	37	h,	11,	0		7	59	59	41	h,	5,	1	
10	24	19	138*	1	116	115	20	9	11	32	583*	-13	69	50	83
12	32	30	90*	3	16	1	141*	11	72	65	51	-11	130	139	32
14	47	51	85*	5	20	29	98*	13	13	8	700*	-9	48	50	58
h,	5,	0		7	42	48	73*	h,	2,	1	-7	225	234	23	
1	147	144	11	9	58	55	43	-14	65	68	64	-5	9	4	479*
3	231	216	16	11	46	42	68	-12	12	9	632*	-3	8	19	258*
5	24	28	70*	h,	12,	0		-10	92	91	38	-1	364	344	27
7	55	54	33	0	215	189	23	-8	108	114	28	1	606	508	27
9	107	111	23	2	91	92	25	-6	31	33	59*	3	353	337	32
11	64	62	39	4	12	25	211*	-4	266	266	24	5	58	62	36
13	53	52	55	6	77	76	32	-2	20	29	78*	7	35	32	90*
h,	6,	0		8	39	48	81*	0	81	74	15	9	139	135	30
0	54	72	30	10	22	29	164*	2	27	21	51*	11	12	19	651*
								4	21	22	192*	13	78	86	62

Columns are															
1Fo				1Fc				10Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 6,	1		1	148	135	21	3	126	126	32	h, 1,	2		
-14	14	17	275*	3	61	59	40	5	62	75	77	-15	14	58	401*
-12	59	65	64	5	26	20	130*	7	51	39	91*	-13	108	121	42
-10	12	19	319*	7	40	41	94*	9	19	35	281*	-11	55	59	61
-8	14	38	397*	9	49	42	86*	h, 14,	1			-9	228	247	24
-6	149	149	21	11	25	4	189*	-8	14	14	623*	-7	90	92	27
-4	79	76	26	h, 10,	1			-6	13	20	353*	-5	34	33	63*
-2	256	245	23	-12	32	14	155*	-4	44	63	79*	-3	437	426	27
0	181	179	19	-10	13	53	604*	-2	48	51	68	-1	129	126	16
2	106	111	20	-8	58	52	51	0	87	92	42	1	189	195	19
4	166	159	19	-6	70	71	55	2	84	84	42	3	180	182	19
6	73	74	36	-4	60	71	45	4	45	35	97*	5	80	72	27
8	114	109	32	-2	82	73	30	6	46	59	115*	7	233	225	28
10	41	12	93*	0	168	170	21	8	14	12	654*	9	54	46	57
12	13	0	661*	2	191	187	21	h, 15,	1			11	26	30	178*
h, 7,	1			4	30	57	234*	-7	14	8	346*	13	100	92	46
-13	22	4	206*	6	85	84	38	-5	13	14	623*	h, 2,	2		
-11	24	25	325*	8	66	62	52	-3	31	13	107*	-14	57	71	98*
-9	11	18	326*	10	26	26	331*	-1	54	56	63	-12	40	3	87*
-7	48	47	67	12	43	45	100*	1	31	41	157*	-10	41	44	98*
-5	9	6	481*	h, 11,	1			3	69	64	55	-8	146	156	24
-3	9	15	248*	-11	14	10	618*	5	14	26	636*	-6	77	75	27
-1	8	8	422*	-9	90	100	43	7	36	11	138*	-4	194	193	20
1	242	215	24	-7	37	43	107*	h, 16,	1			-2	183	186	19
3	9	16	260*	-5	104	106	33	-6	14	2	576*	0	58	54	26
5	52	44	44	-3	81	78	36	-4	14	50	674*	2	65	86	26
7	11	1	567*	-1	62	70	56	-2	14	31	656*	4	42	45	55
9	42	33	100*	1	193	150	22	0	71	72	56	6	60	58	37
11	13	10	624*	3	76	74	39	2	14	32	370*	8	148	139	27
13	14	13	682*	5	54	54	57	4	14	1	362*	10	54	46	60
h, 8,	1			7	97	93	40	6	22	42	243*	12	49	45	80
-12	45	10	96*	9	25	29	188*	h, 17,	1			14	14	38	740*
-10	25	0	123*	11	62	64	72	-3	14	5	563*	h, 3,	2		
-8	17	16	364*	h, 12,	1			-1	67	70	60	-15	14	42	661*
-6	55	59	47	-10	68	74	64	1	14	10	547*	-13	13	5	578*
-4	10	20	498*	-8	49	51	87*	3	19	57	300*	-11	12	6	612*
-2	114	110	22	-6	24	16	164*	h, 0,	2			-9	71	66	41
0	184	182	20	-4	161	161	27	-14	108	120	62	-7	21	9	88*
2	115	111	22	-2	37	47	74*	-12	12	13	947*	-5	45	43	36
4	56	45	42	0	11	18	538*	-10	11	2	847*	-3	71	81	24
6	32	32	79*	2	11	36	577*	-8	334	355	44	-1	79	78	21
8	56	52	55	4	48	38	76	-6	281	279	37	1	178	178	20
10	19	9	234*	6	106	108	37	-4	407	400	39	3	79	78	24
12	14	17	639*	8	13	13	626*	-2	244	234	26	5	84	74	27
h, 9,	1			10	14	43	655*	0	146	142	22	7	28	22	106*
-13	46	17	87*	h, 13,	1			2	1360	1248	38	9	72	79	48
-11	71	69	54	-9	87	88	50	4	109	107	31	11	60	63	62
-9	15	6	243*	-7	67	64	50	6	254	254	42	13	58	67	74
-7	92	92	34	-5	84	80	42	8	218	199	36	h, 4,	2		
-5	28	20	116*	-3	66	67	48	10	65	67	70	-14	14	25	359*
-3	33	46	87*	-1	124	123	30	12	120	105	55	-12	60	53	59
-1	49	46	42	1	239	211	25	14	14	23	1100*	-10	11	14	570*

Columns are				lFo	lFc	10Sig,	* for Insignificant								
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 4, 2			5	297	290	30	-1	56	51	48	0	58	46	63
-8	29	14	103*	7	11	13	584*	1	171	172	24	2	32	62	290*
-6	28	34	79*	9	100	102	39	3	40	24	68*	4	47	31	110*
-4	8	21	440*	11	63	69	66	5	51	48	59		h, 17, 2		
-2	7	14	243*	13	14	25	674*	7	13	28	618*	-3	14	13	609*
0	108	106	17		h, 8, 2			9	55	46	68	-1	14	4	275*
2	426	368	30	-12	83	87	48		h, 12, 2			1	14	18	646*
4	8	12	467*	-10	113	127	36	-10	37	16	102*	3	60	57	70
6	22	26	126*	-8	68	72	44	-8	44	48	100*		h, 1, 3		
8	72	77	43	-6	262	264	26	-6	31	49	135*	-15	14	12	653*
10	52	45	61	-4	54	57	42	-4	79	72	39	-13	13	47	641*
12	13	12	596*	-2	37	42	52	-2	61	57	47	-11	21	17	321*
	h, 5, 2			0	333	331	26	0	100	104	34	-9	11	6	345*
-13	13	10	329*	2	350	295	27	2	192	171	25	-7	146	142	23
-11	76	80	44	4	277	276	31	4	38	55	109*	-5	113	105	19
-9	62	62	47	6	11	7	544*	6	13	4	591*	-3	183	188	21
-7	97	101	27	8	26	9	144*	8	50	60	100*	-1	104	108	20
-5	112	119	22	10	101	104	43	10	14	34	653*	1	7	6	219*
-3	8	11	430*	12	14	2	656*		h, 13, 2			3	136	134	20
-1	214	201	22		h, 9, 2			-9	88	101	48	5	9	18	525*
1	56	55	28	-13	18	15	204*	-7	24	15	182*	7	10	3	578*
3	166	158	19	-11	66	71	57	-5	12	7	551*	9	12	19	644*
5	172	174	20	-9	21	28	182*	-3	140	142	28	11	33	8	133*
7	10	28	580*	-7	77	82	41	-1	98	103	36	13	38	25	134*
9	12	13	545*	-5	105	109	30	1	119	122	33		h, 2, 3		
11	89	83	45	-3	15	6	145*	3	107	106	36	-14	62	34	64
13	48	44	119*	-1	175	168	20	5	52	58	69	-12	97	103	41
	h, 6, 2			1	80	80	30	7	98	96	43	-10	11	18	565*
-14	26	23	197*	3	130	130	25	9	14	12	625*	-8	169	164	22
-12	100	101	39	5	128	128	28		h, 14, 2			-6	71	72	28
-10	138	150	30	7	29	21	131*	-8	114	115	40	-4	94	95	21
-8	85	87	33	9	13	21	576*	-6	99	108	43	-2	244	253	23
-6	317	325	27	11	62	67	67	-4	110	112	37	0	41	37	38
-4	52	57	40		h, 10, 2			-2	13	43	572*	2	124	124	19
-2	8	3	251*	-12	34	41	116*	0	12	7	556*	4	56	50	43
0	284	282	23	-10	13	2	636*	2	225	189	26	6	56	48	43
2	62	68	30	-8	24	31	128*	4	15	9	284*	8	90	81	37
4	183	185	19	-6	43	31	61	6	32	35	138*	10	31	6	139*
6	92	90	32	-4	35	49	96*	8	68	68	82	12	57	61	74
8	46	40	62	-2	13	10	173*		h, 15, 2				h, 3, 3		
10	132	139	35	0	20	5	134*	-7	38	17	120*	-13	60	60	78
12	30	8	129*	2	141	132	26	-5	15	4	288*	-11	54	66	57
	h, 7, 2			4	75	70	40	-3	105	114	40	-9	92	101	34
-13	25	20	145*	6	100	105	35	-1	13	17	537*	-7	148	144	20
-11	142	147	32	8	13	39	582*	1	13	4	630*	-5	40	49	56
-9	95	94	36	10	41	36	118*	3	13	3	570*	-3	182	187	19
-7	134	138	25		h, 11, 2			5	14	17	271*	-1	42	43	37
-5	213	212	22	-11	14	5	544*	7	16	49	358*	1	110	115	19
-3	136	138	20	-9	29	22	143*		h, 16, 2			3	575	495	34
-1	398	394	34	-7	12	22	554*	-6	14	12	616*	5	41	40	66
1	170	165	19	-5	32	16	86*	-4	14	44	600*	7	169	166	24
3	165	160	20	-3	11	1	510*	-2	14	34	573*	9	58	48	57

Columns are															
1Fo				1Fc				10Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 3, 3			-7	11	22	509*	-9	13	11	319*	0	14	42	604*
11	53	46	94*	-5	54	54	42	-7	119	119	33	2	86	83	49
13	40	33	106*	-3	9	12	487*	-5	50	51	58	4	42	4	118*
	h, 4, 3			-1	9	19	257*	-3	94	89	33		h, 17, 3		
-14	55	51	99*	1	9	4	466*	-1	83	82	37	-1	41	24	117*
-12	33	30	120*	3	160	154	22	1	51	48	55	1	52	68	107*
-10	111	106	32	5	11	14	528*	3	145	111	27		h, 0, 4		
-8	32	21	76*	7	56	49	54	5	61	58	52	-14	41	63	148*
-6	138	138	20	9	33	5	96*	7	13	26	573*	-12	183	183	42
-4	150	150	18	11	14	21	693*	9	72	62	57	-10	11	7	372*
-2	29	35	72*		h, 8, 3				h, 12, 3			-8	20	2	176*
0	235	241	24	-12	14	3	302*	-10	48	39	79	-6	386	380	50
2	169	172	19	-10	27	33	149*	-8	107	106	37	-4	275	271	35
4	175	175	20	-8	45	37	62	-6	35	37	115*	-2	320	323	35
6	163	156	24	-6	62	58	42	-4	12	5	323*	0	87	91	35
8	62	66	52	-4	42	36	67	-2	158	166	27	2	67	61	45
10	80	75	50	-2	10	21	477*	0	12	33	542*	4	752	651	57
12	14	40	686*	0	137	133	22	2	28	5	131*	6	10	23	809*
	h, 5, 3			2	168	167	21	4	12	37	336*	8	139	143	41
-13	13	6	576*	4	12	26	472*	6	13	20	588*	10	105	102	55
-11	90	83	40	6	34	5	103*	8	54	51	96*	12	22	17	549*
-9	162	165	25	8	12	17	608*		h, 13, 3				h, 1, 4		
-7	65	62	37	10	13	32	644*	-9	14	22	329*	-13	57	67	71
-5	279	278	26		h, 9, 3			-7	103	104	41	-11	172	170	28
-3	23	36	77*	-13	14	9	580*	-5	70	77	50	-9	84	86	39
-1	117	119	19	-11	68	43	68	-3	101	110	38	-7	282	277	29
1	216	219	23	-9	76	69	43	-1	29	38	131*	-5	95	98	24
3	347	313	31	-7	20	5	180*	1	75	74	45	-3	11	29	214*
5	217	218	24	-5	127	126	25	3	167	155	29	-1	312	319	25
7	72	69	42	-3	29	8	100*	5	78	81	49	1	62	65	41
9	49	32	84*	-1	72	71	33	7	44	54	117*	3	110	109	24
11	63	57	63	1	10	11	479*		h, 14, 3			5	121	118	27
13	14	2	717*	3	136	123	27	-8	14	26	573*	7	25	31	143*
	h, 6, 3			5	44	43	62	-6	43	19	100*	9	105	102	39
-14	14	36	638*	7	12	11	312*	-4	25	18	133*	11	44	43	113*
-12	14	31	309*	9	48	36	72	-2	48	45	66		h, 2, 4		
-10	110	106	31	11	14	11	629*	0	61	48	54	-14	14	8	674*
-8	42	56	82*		h, 10, 3			2	73	72	50	-12	78	87	66
-6	78	79	32	-12	50	42	97*	4	61	60	60	-10	44	25	68
-4	128	134	21	-10	44	31	75*	6	14	16	649*	-8	10	13	302*
-2	9	27	481*	-8	22	44	179*		h, 15, 3			-6	197	185	22
0	245	239	26	-6	78	87	41	-7	25	7	195*	-4	69	67	30
2	152	151	20	-4	49	51	70	-5	14	17	354*	-2	132	134	20
4	36	28	74*	-2	43	48	60	-3	13	40	604*	0	231	240	24
6	83	71	36	0	56	58	47	-1	37	6	90*	2	63	62	33
8	49	37	62	2	110	109	30	1	22	26	199*	4	24	32	191*
10	54	56	73	4	146	145	27	3	30	30	144*	6	54	51	68
12	14	6	707*	6	45	30	64	5	14	46	671*	8	67	69	51
	h, 7, 3			8	70	72	53		h, 16, 3			10	87	81	45
-13	37	3	122*	10	45	39	111*	-6	14	2	527*	12	28	25	304*
-11	23	4	170*		h, 11, 3			-4	50	22	72		h, 3, 4		
-9	34	34	111*	-11	23	24	202*	-2	14	35	606*	-13	13	31	702*

Columns are 1Fo 1Fc 10Sig, * for Insignificant

h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 3, 4			4	60	57	44	4	82	78	38	3	17	12	301*
-11	32	21	121*	6	77	86	43	6	51	45	67	h, 16, 4			
-9	27	11	101*	8	76	76	48	8	75	80	55	-4	14	11	587*
-7	36	5	79*	10	43	25	102*	10	38	31	136*	-2	50	41	97*
-5	98	103	24	h, 7, 4				h, 11, 4				0	47	37	106*
-3	38	39	64*	-13	42	31	114*	-11	14	9	584*	2	45	31	86*
-1	106	113	22	-11	13	37	574*	-9	13	5	255*	h, 1, 5			
1	96	95	23	-9	200	196	25	-7	22	16	187*	-13	14	22	678*
3	164	163	21	-7	129	121	28	-5	12	31	528*	-11	67	75	76
5	108	115	28	-5	150	152	23	-3	23	35	280*	-9	11	13	548*
7	77	76	43	-3	170	174	21	-1	52	40	53	-7	25	22	125*
9	27	15	156*	-1	124	126	24	1	63	64	48	-5	108	105	26
11	46	50	109*	1	254	258	28	3	151	151	28	-3	82	85	29
	h, 4, 4			3	113	112	27	5	28	27	115*	-1	153	151	22
-14	39	12	98*	5	86	92	38	7	29	56	294*	1	79	84	33
-12	13	9	255*	7	164	162	29	9	21	16	239*	3	16	27	198*
-10	12	17	306*	9	41	29	85*	h, 12, 4				5	79	78	39
-8	31	37	81*	11	20	40	274*	-10	14	11	618*	7	12	5	330*
-6	10	20	500*	h, 8, 4				-8	18	7	194*	9	28	13	155*
-4	24	16	104*	-12	42	37	85*	-6	62	63	56	11	14	7	588*
-2	73	78	30	-10	109	108	36	-4	12	42	587*	h, 2, 5			
0	46	39	39	-8	140	149	28	-2	52	51	58	-14	14	11	615*
2	121	125	23	-6	87	80	34	0	64	70	50	-12	54	59	70
4	253	229	29	-4	240	249	25	2	84	84	41	-10	108	107	34
6	25	3	140*	-2	54	56	45	4	130	126	35	-8	43	33	77*
8	19	17	207*	0	65	60	37	6	13	21	575*	-6	197	193	22
10	46	53	109*	2	203	209	22	8	14	4	335*	-4	22	9	99*
12	39	24	129*	4	173	164	25	h, 13, 4				-2	125	127	24
	h, 5, 4			6	137	143	31	-9	34	50	157*	0	146	153	23
-13	55	10	84	8	13	4	329*	-7	105	112	40	2	10	10	526*
-11	28	4	135*	10	20	3	244*	-5	13	21	320*	4	93	91	33
-9	98	91	33	h, 9, 4				-3	13	6	534*	6	11	42	341*
-7	37	39	91*	-11	14	6	319*	-1	97	103	38	8	46	40	72
-5	39	47	68*	-9	87	84	39	1	71	79	50	10	13	27	688*
-3	156	160	19	-7	19	14	182*	3	78	75	47	h, 3, 5			
-1	9	7	482*	-5	26	49	147*	5	58	62	66	-13	50	28	74
1	136	140	22	-3	129	127	26	7	14	25	607*	-11	79	83	46
3	19	16	262*	-1	11	19	524*	h, 14, 4				-9	61	53	45
5	114	115	29	1	124	123	28	-8	14	1	605*	-7	114	122	30
7	106	110	35	3	11	17	532*	-6	120	123	38	-5	120	119	25
9	35	14	100*	5	86	93	38	-4	98	108	41	-3	39	46	56
11	14	3	640*	7	63	75	61	-2	83	90	47	-1	132	143	23
	h, 6, 4			9	14	8	600*	0	40	29	105*	1	45	26	62
-14	100	105	47	h, 10, 4				2	13	4	329*	3	89	92	33
-12	40	41	114*	-12	14	6	657*	4	137	113	36	5	264	248	28
-10	125	119	31	-10	36	20	119*	6	14	21	593*	7	25	33	129*
-8	176	181	25	-8	35	31	90*	h, 15, 4				9	90	93	46
-6	99	100	30	-6	12	10	519*	-7	76	77	57	11	14	20	396*
-4	300	313	28	-4	14	24	258*	-5	22	14	207*	h, 4, 5			
-2	25	31	100*	-2	78	90	41	-3	14	4	334*	-14	55	64	76
0	9	36	497*	0	47	51	59	-1	96	98	43	-12	60	56	61
2	183	198	22	2	47	44	59	1	25	6	191*	-10	23	37	129*

I-768-m20

Columns are				lFo	lFc	10Sig, * for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 4, 5			-12	14	3	333*	4	24	4	197*	-8	30	47	101*
-8	118	116	30	-10	13	1	556*	6	25	27	152*	-6	13	21	285*
-6	40	11	59	-8	12	45	597*		h, 13, 5			-4	165	164	24
-4	135	136	23	-6	67	67	45	-7	14	10	613*	-2	32	50	100*
-2	97	103	27	-4	77	82	39	-5	81	82	47	0	53	61	56
0	10	17	309*	-2	11	2	546*	-3	48	61	76	2	189	195	24
2	126	137	29	0	55	51	64	-1	93	97	44	4	53	46	56
4	88	90	37	2	93	101	35	1	13	14	344*	6	12	5	588*
6	82	91	43	4	98	104	38	3	14	26	658*	8	13	33	622*
8	83	81	49	6	17	11	241*	5	90	88	45	10	55	47	75
10	56	43	89	8	13	19	596*		h, 14, 5				h, 3, 6		
	h, 5, 5			10	14	3	662*	-6	16	21	510*	-13	23	17	203*
-13	110	110	41		h, 9, 5			-4	14	19	356*	-11	13	5	618*
-11	13	26	587*	-11	14	11	573*	-2	14	11	573*	-9	54	48	70
-9	117	114	31	-9	75	76	47	0	14	17	359*	-7	11	14	577*
-7	134	136	27	-7	43	36	73*	2	19	33	260*	-5	48	43	59
-5	27	31	93*	-5	18	15	160*	4	14	38	363*	-3	142	140	25
-3	210	216	22	-3	101	105	33		h, 15, 5			-1	79	84	37
-1	10	37	520*	-1	28	15	122*	-5	14	2	621*	1	103	103	31
1	137	140	24	1	62	64	60	-3	14	16	593*	3	62	65	66
3	92	99	33	3	21	13	176*	-1	18	47	483*	5	101	103	36
5	135	138	30	5	106	94	37	1	26	16	184*	7	75	79	50
7	100	99	39	7	27	19	152*		h, 0, 6			9	38	47	105*
9	41	43	92*	9	14	9	654*	-14	105	100	68		h, 4, 6		
11	33	15	120*		h, 10, 5			-12	94	83	60	-12	14	18	331*
	h, 6, 5			-10	42	52	111*	-10	211	203	36	-10	13	13	558*
-12	26	33	321*	-8	40	39	85*	-8	15	6	242*	-8	48	35	72
-10	15	30	256*	-6	12	25	309*	-6	11	17	789*	-6	92	90	36
-8	115	115	32	-4	103	104	34	-4	281	277	46	-4	50	57	56
-6	72	78	52	-2	12	21	583*	-2	145	154	34	-2	24	12	221*
-4	90	96	32	0	40	32	89*	0	175	181	34	0	76	73	39
-2	72	74	38	2	12	26	312*	2	17	24	500*	2	36	34	79*
0	37	25	61	4	57	53	75	4	11	11	827*	4	92	94	38
2	152	157	25	6	86	83	46	6	297	292	45	6	116	120	36
4	78	80	41	8	29	14	277*	8	13	26	1011*	8	13	3	268*
6	12	3	610*		h, 11, 5			10	64	63	93	10	23	4	394*
8	45	24	106*	-9	30	26	146*		h, 1, 6				h, 5, 6		
10	14	10	381*	-7	13	14	340*	-13	42	16	112*	-13	63	54	61
	h, 7, 5			-5	105	108	37	-11	63	67	74	-11	50	35	89*
-13	14	21	631*	-3	43	43	70	-9	173	174	26	-9	35	23	81*
-11	20	4	216*	-1	46	55	88*	-7	84	76	37	-7	84	80	39
-9	12	4	311*	1	63	66	54	-5	216	220	24	-5	11	11	559*
-7	35	32	86*	3	27	26	116*	-3	83	85	34	-3	19	8	157*
-5	32	19	77*	5	87	66	46	-1	10	22	553*	-1	140	142	26
-3	11	46	560*	7	45	40	115*	1	174	177	25	1	11	6	332*
-1	27	16	111*		h, 12, 5			3	30	12	115*	3	70	78	50
1	43	36	81*	-8	29	43	155*	5	50	33	62	5	43	35	70
3	30	10	110*	-6	106	111	39	7	70	61	51	7	51	67	95*
5	86	85	40	-4	17	15	225*	9	13	10	279*	9	47	53	88*
7	13	7	587*	-2	35	22	91*		h, 2, 6				h, 6, 6		
9	51	36	91*	0	117	123	35	-12	41	15	107*	-12	132	125	36
	h, 8, 5			2	13	7	343*	-10	85	82	41	-10	36	48	127*

Columns are															
1Fo				1Fc				10Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 6, 6			2	42	64	107*	0	107	105	33	h, 7, 7			
-8	113	112	33	4	51	50	68	2	69	68	50	-11	14	19	362*
-6	157	163	27	6	27	36	138*	4	35	11	88*	-9	49	2	83*
-4	73	73	40	h, 11, 6				6	13	40	609*	-7	13	4	593*
-2	198	216	24	-9	14	9	354*	8	14	27	658*	-5	36	22	114*
0	11	3	296*	-7	14	7	574*	h, 3, 7				-3	12	14	572*
2	46	50	63	-5	40	39	101*	-11	40	27	116*	-1	19	29	215*
4	98	107	38	-3	57	63	74	-9	77	82	49	1	34	15	117*
6	49	41	70	-1	13	61	639*	-7	31	35	101*	3	13	36	637*
8	14	27	369*	1	45	58	79*	-5	109	111	34	5	13	9	631*
h, 7, 6				3	58	49	59	-3	71	66	45	7	14	40	697*
-11	36	26	133*	5	90	94	47	-1	52	45	57	h, 8, 7			
-9	49	34	65	h, 12, 6				1	71	80	47	-10	14	18	361*
-7	181	178	27	-8	32	8	143*	3	34	38	95*	-8	13	10	581*
-5	97	103	37	-6	14	30	347*	5	43	56	85*	-6	13	36	590*
-3	120	122	30	-4	49	62	97*	7	97	110	46	-4	63	62	53
-1	106	108	32	-2	14	32	565*	9	28	26	191*	-2	69	70	48
1	63	71	50	0	13	28	581*	h, 4, 7				0	25	20	128*
3	116	118	36	2	19	54	255*	-12	72	73	55	2	54	53	64
5	68	74	53	4	43	49	118*	-10	54	44	70	4	38	57	130*
7	43	40	85*	h, 13, 6				-8	46	41	86*	6	60	50	84
9	77	78	80	-7	27	49	185*	-6	94	89	37	h, 9, 7			
h, 8, 6				-5	93	91	44	-4	43	4	93*	-9	14	22	615*
-12	114	115	44	-3	41	24	90*	-2	91	100	38	-7	83	88	47
-10	59	45	73	-1	14	4	345*	0	58	59	56	-5	13	4	602*
-8	108	105	36	1	58	51	77	2	39	10	100*	-3	42	33	79*
-6	120	131	33	3	52	45	74	4	61	63	79	-1	56	56	62
-4	51	49	58	h, 14, 6				6	50	43	74	1	25	5	164*
-2	153	164	28	-4	87	92	51	8	17	40	306*	3	38	33	94*
0	40	25	64	-2	68	74	59	h, 5, 7				5	14	13	581*
2	51	46	58	0	40	46	124*	-11	114	106	39	h, 10, 7			
4	94	103	42	2	49	19	95*	-9	13	30	349*	-8	52	58	91*
6	44	66	111*	h, 1, 7				-7	107	112	36	-6	13	27	598*
8	53	52	80	-13	14	27	657*	-5	75	81	54	-4	13	10	545*
h, 9, 6				-11	39	18	116*	-3	12	13	571*	-2	80	87	49
-11	21	38	240*	-9	81	78	44	-1	109	111	36	0	13	4	562*
-9	13	6	555*	-7	12	37	327*	1	13	14	490*	2	22	17	200*
-7	65	73	72	-5	45	45	96*	3	100	97	37	4	38	3	121*
-5	12	5	329*	-3	44	46	91*	5	34	34	138*	h, 11, 7			
-3	29	11	97*	-1	38	46	97*	7	14	49	373*	-7	14	20	332*
-1	105	107	35	1	81	80	44	h, 6, 7				-5	14	14	354*
1	38	29	94*	3	44	59	97*	-12	69	60	58	-3	73	75	72
3	67	69	55	5	37	24	87*	-10	14	16	611*	-1	13	28	609*
5	13	14	600*	7	13	39	631*	-8	29	12	133*	1	31	23	150*
7	21	56	190*	9	14	7	365*	-6	85	82	43	3	14	44	675*
h, 10, 6				h, 2, 7				-4	60	61	52	h, 12, 7			
-10	14	20	664*	-12	14	13	339*	-2	70	72	46	-6	47	26	98*
-8	13	12	319*	-10	81	84	46	0	36	27	81*	-4	85	85	50
-6	63	61	55	-8	71	71	47	2	37	41	88*	-2	14	6	571*
-4	12	20	515*	-6	29	20	141*	4	75	77	52	0	14	28	654*
-2	12	22	574*	-4	152	150	28	6	29	28	156*	2	71	72	58
0	79	81	44	-2	20	19	194*	8	14	2	641*	h, 13, 7			

Columns are				1Fo	1Fc	10Sig,	* for Insignificant								
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 13,	7		-4	102	103	38	-4	62	67	63	h,	6,	9	
-5	21	5	247*	-2	59	62	76	-2	34	33	105*	-8	24	1	166*
-3	36	43	107*	0	12	9	318*	0	37	21	136*	-6	28	2	129*
-1	14	29	641*	2	43	41	110*	2	60	50	65	-4	49	38	77
1	44	59	97*	4	50	14	86*	h,	11,	8		-2	13	29	374*
	h,	0,	8	6	26	46	162*	-5	14	1	623*	0	38	31	127*
-12	101	91	62	h,	5,	8		-3	40	33	123*	2	14	8	621*
-10	68	70	80	-11	43	35	118*	-1	45	54	86*	4	42	31	123*
-8	157	157	45	-9	14	52	678*	1	56	49	89	h,	7,	9	
-6	12	5	372*	-7	13	37	613*	h,	1,	9		-7	17	0	287*
-4	41	18	106*	-5	58	56	84	-9	14	2	642*	-5	31	7	162*
-2	154	145	43	-3	12	6	674*	-7	13	53	710*	-3	24	12	212*
0	39	49	124*	-1	31	30	141*	-5	39	40	92*	-1	22	7	225*
2	28	68	439*	1	90	91	44	-3	49	45	78	1	36	19	140*
4	13	6	841*	3	13	9	584*	-1	13	7	380*	3	14	11	293*
6	14	8	944*	5	48	35	83*	1	13	23	672*	h,	8,	9	
	h,	1,	8	h,	6,	8		3	14	28	704*	-6	36	13	133*
-11	14	15	558*	-10	114	108	42	5	33	36	276*	-4	14	18	537*
-9	68	56	54	-8	14	35	588*	h,	2,	9		-2	56	38	97*
-7	133	131	34	-6	83	83	46	-10	47	23	97*	0	42	38	93*
-5	35	38	124*	-4	109	115	37	-8	85	83	50	2	14	17	626*
-3	121	122	35	-2	49	34	67	-6	32	28	248*	h,	9,	9	
-1	72	69	47	0	102	112	40	-4	33	3	105*	-5	65	72	88
1	12	15	633*	2	13	19	282*	-2	86	81	46	-3	19	11	504*
3	73	76	53	4	42	45	90*	0	13	13	624*	-1	43	35	125*
5	13	12	349*	6	41	47	141*	2	46	62	111*	h,	0,	10	
7	14	4	636*	h,	7,	8		4	14	26	370*	-8	35	40	170*
	h,	2,	8	-9	14	13	631*	h,	3,	9		-6	97	84	63
-10	50	18	97*	-7	13	12	651*	-9	14	24	632*	-4	29	21	185*
-8	63	58	58	-5	109	107	41	-7	64	57	81	-2	14	4	1089*
-6	61	47	74	-3	46	59	76*	-5	57	28	62	0	62	64	96
-4	18	31	197*	-1	65	67	58	-3	77	74	55	2	14	1	895*
-2	107	112	38	1	56	56	82	-1	13	30	625*	h,	1,	10	
0	24	35	169*	3	26	28	143*	1	33	37	136*	-7	53	36	101*
2	12	18	622*	5	49	37	106*	3	14	34	711*	-5	83	77	52
4	118	118	38	h,	8,	8		5	35	26	149*	-3	14	7	355*
6	32	25	150*	-8	50	32	94*	h,	4,	9		-1	47	46	90*
	h,	3,	8	-6	80	72	51	-8	47	26	121*	1	59	51	91
-11	54	44	96*	-4	85	93	45	-6	48	38	74	h,	2,	10	
-9	53	40	70	-2	35	14	116*	-4	43	46	90*	-6	59	31	69
-7	65	63	71	0	67	73	59	-2	15	0	573*	-4	42	27	101*
-5	18	4	178*	2	30	0	150*	0	30	57	163*	-2	19	20	467*
-3	57	45	57	4	14	23	566*	2	47	30	104*	0	32	53	170*
-1	105	109	38	h,	9,	8		4	14	6	688*	2	14	27	687*
1	68	71	52	-7	14	14	332*	h,	5,	9		h,	3,	10	
3	54	66	71	-5	59	48	65	-9	74	71	57	-7	57	47	104*
5	37	35	135*	-3	13	19	579*	-7	14	15	636*	-5	63	52	87
7	29	53	193*	-1	13	12	358*	-5	81	72	65	-3	14	2	373*
	h,	4,	8	1	77	70	67	-3	29	45	164*	-1	37	30	138*
-10	14	30	679*	3	29	28	166*	-1	30	27	269*	1	45	58	98*
-8	13	21	630*	h,	10,	8		1	14	34	702*	h,	4,	10	
-6	53	62	85	-6	14	26	676*	3	14	2	387*	-6	14	12	665*

I-768-m23

Columns are															
1Fo				1Fc				10Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 4, 10			0	50	47	101*	-3	14	30	618*	-4	56	52	76
-4	58	56	92		h, 5, 10			-1	19	8	217*	-2	68	68	61
-2	53	75	112*	-5	28	36	170*		h, 6, 10						