

Acta Crystallographica Section B

**Structural
Science**

ISSN 0108-7681

Editor: **Carolyn P. Brock**

Electron density study by X-ray and neutron diffraction of an NLO compound: *N*-(4-nitrophenyl)-*L*-prolinol. Description of quadratic hyperpolarizability

A. Fkyerat, A. Guelzim, E. Baert, W. Paulus, G. Heger, J. Zyss and A. Périgaud

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.

B940739-PA296
/SUP 80751

Table 14

Multipolar atomic electron density parameters. See Fig. 3 for the directions of local orthonormal reference axes for the atom-centered multipole functions.

	P11-	P10	P20	P21-	P22+	P30	P31-	P32+	P33-
C1	-.016	0.071	0.093	-.048	-.150	0.186	-.010	-.117	-.010
C2	0.022	0.023	0.125	-.004	-.169	0.250	0.010	0.219	-.020
C3	-.034	-.013	0.058	0.024	-.1490	0.200	-.021	0.172	-.005
C4	0.054	0.002	0.053	-.020	-.169	0.288	0.007	0.181	-.011
C5	-.117	-.034	0.041	0.017	-.202	0.230	-.017	0.215	-.014
C6	0.005	-.012	-.092	-.003	-.194	0.262	0.036	0.230	-.007
C7	-.057	-.042	0.016	0.053	0.070	0.295	-.044	-.040	0.327
C8	-.091	-.076	0.005	0.074	0.059	0.285	-.084	0.007	0.271
C9	-.089	-.135	-.049	0.063	0.050	0.280	-.003	-.022	0.267
C10	-.086	-.053	0.039	0.086	0.059	0.323	-.076	0.010	0.283
C11	-.176	-.092	-.031	0.096	-.011	0.228	0.012	0.018	0.286
N1	-.040	0.082	0.154	-.027	-.148	0.248	0.127	0.177	-.056
N2	-.001	0.028	-.029	0.033	0.050	0.118	0.003	0.082	0.014
O1	-.048	-.004	-.008	-.060	-.010	0.079	-.036	0.045	0.010
O2	0.068	-.004	-.107	0.098	-.084	0.067	0.049	0.046	-.004
O3	-.029	-.020	-.040	0.026	-.077	0.088	0.004	0.004	-.004

80751

	P40	P42+	P42-	P44+	P44-
C1	0.005	0.052	-.012	0.030	0.003
C2	0.250	-.075	0.006	0.024	0.038
C3	0.064	0.029	-.051	0.007	0.068
C4	0.079	0.016	0.046	0.007	0.026
C5	0.029	0.017	-.030	0.026	0.016
C6	0.005	0.013	-.010	-.054	0.002
C7	0.047	-.005	0.059	-.196	0.084
C8	0.104	-.039	-.032	-.084	0.030
C9	0.058	-.002	-.004	-.028	0.004
C10	0.128	0.027	0.029	-.134	0.010
C11	0.067	-.031	-.063	-.055	0.058
N1	0.077	-.082	-.017	0.035	0.011
N2	0.012	-.014	-.026	-.027	0.011
O1	0.047	-.047	-.006	-.015	-.004
O2	0.010	0.024	0.015	-0.01	0.035
O3	0.018	0.012	0.006	-.009	-.023

	HC2	HC3	HC5	HC6	HC7	HC8	H'C8	HC9	H'C9
P10	0.073	0.063	0.056	0.057	0.078	0.045	0.044	0.027	0.074
	HC10	H'C10	HC11	H'C11	HO3				
P10	0.065	0.071	0.051	0.080	0.115				

Saert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-11	0	5	222	242	-11	1	4	110	150	-11	1	6	279	274
-11	2	5	201	231	-11	4	6	189	174	-11	9	6	195	208
-10	0	2	222	232	-10	0	6	503	507	-10	1	7	406	428
-10	1	8	222	216	-10	2	3	299	285	-10	4	7	219	225
-10	6	6	274	249	-10	7	7	204	244	-10	9	3	206	228
-10	9	8	149	161	-10	10	3	302	290	-10	11	2	309	321
-10	11	3	216	244	-10	11	10	340	357	-10	13	7	219	221
-10	14	6	269	258	-9	0	1	54	10*	-9	0	2	48	37*
-9	0	3	129	158	-9	0	4	143	193	-9	0	5	313	318
-9	0	7	644	644	-9	0	13	222	219	-9	1	1	111	61
-9	1	3	61	111	-9	1	4	261	258	-9	1	5	233	235
-9	1	6	188	185	-9	1	7	200	223	-9	1	8	576	577
-9	2	1	228	218	-9	2	3	78	89	-9	2	4	299	312
-9	2	6	141	162	-9	2	7	228	235	-9	2	8	236	235
-9	2	10	205	213	-9	3	1	132	108	-9	3	2	46	29*
-9	3	3	280	305	-9	3	4	126	136	-9	3	5	121	114
-9	3	11	276	294	-9	4	1	87	119	-9	4	2	240	225
-9	4	3	173	184	-9	4	4	250	258	-9	4	5	87	83
-9	4	6	117	86	-9	4	7	165	211	-9	5	2	236	209
-9	5	3	157	121	-9	5	4	157	149	-9	5	5	50	74*
-9	5	8	162	204	-9	6	3	129	137	-9	6	4	51	83*
-9	6	5	72	56	-9	6	7	281	283	-9	7	3	115	126
-9	7	4	258	249	-9	7	6	221	176	-9	7	8	327	361
-9	8	3	279	268	-9	8	6	192	183	-9	8	7	268	275
-9	8	8	138	164	-9	9	2	283	294	-9	9	3	324	308
-9	9	4	337	329	-9	10	4	472	488	-9	10	12	411	441
-9	11	3	507	523	-9	11	11	422	419	-9	12	3	353	350
-9	12	8	181	164	-9	12	12	89	153	-9	13	4	253	263
-9	13	8	316	302	-9	14	7	376	366	-9	17	3	196	214
-9	19	8	188	204	-9	20	7	377	361	-8	0	1	285	293
-8	0	2	138	151	-8	0	3	131	161	-8	0	4	99	88
-8	0	6	488	480	-8	0	7	155	167	-8	0	8	564	572
-8	0	9	109	56	-8	0	10	253	228	-8	0	14	210	199
-8	1	1	223	234	-8	1	2	153	163	-8	1	3	122	171
-8	1	4	172	153	-8	1	5	497	485	-8	1	7	261	252
-8	1	8	333	347	-8	1	9	666	663	-8	2	1	580	585
-8	2	2	109	111	-8	2	3	180	169	-8	2	4	263	275
-8	2	5	279	281	-8	2	6	82	56	-8	2	7	183	174
-8	2	8	372	364	-8	2	9	314	326	-8	2	11	218	205
-8	2	13	269	273	-8	3	1	285	295	-8	3	2	261	264
-8	3	3	86	99	-8	3	4	431	438	-8	3	5	138	145
-8	3	6	190	189	-8	3	7	159	139	-8	3	8	82	103
-8	3	10	253	270	-8	4	1	208	232	-8	4	2	181	184
-8	4	3	242	247	-8	4	4	175	184	-8	4	5	362	362
-8	4	6	170	157	-8	4	7	97	84	-8	4	8	154	126
-8	4	9	198	194	-8	4	13	191	196	-8	5	1	186	219
-8	5	2	155	139	-8	5	3	324	328	-8	5	4	90	101
-8	5	5	185	188	-8	5	6	85	95	-8	5	7	193	206
-8	5	8	138	116	-8	5	9	286	294	-8	6	2	47	72
-8	6	4	206	196	-8	6	5	129	132	-8	6	6	69	37
-8	6	7	118	122	-8	6	8	351	361	-8	6	9	178	179
-8	7	1	110	23	-8	7	3	161	169	-8	7	4	261	267
-8	7	5	233	237	-8	7	6	126	140	-8	7	7	180	177
-8	7	8	45	64*	-8	7	9	261	263	-8	8	1	260	251
-8	8	3	145	145	-8	8	4	299	308	-8	8	5	384	402
-8	8	6	188	190	-8	8	7	161	182	-8	8	8	440	439
-8	8	9	173	189	-8	8	11	169	187	-8	8	12	191	177
-8	8	13	188	195	-8	9	1	128	145	-8	9	2	246	245
-8	9	3	367	366	-8	9	4	445	455	-8	9	5	456	459
-8	9	6	68	70	-8	9	7	260	263	-8	9	8	181	205
-8	9	12	256	253	-8	10	1	106	84	-8	10	3	119	105
-8	10	4	427	440	-8	10	5	322	332	-8	10	6	200	201
-8	10	7	189	177	-8	10	8	322	310	-8	10	13	356	386
-8	11	1	182	188	-8	11	2	319	327	-8	11	3	245	245

Baert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-8	11	4	579	595	-8	11	5	226	228	-8	11	7	201	221
-8	11	9	243	224	-8	11	12	441	425	-8	12	1	323	306
-8	12	3	258	265	-8	12	4	479	475	-8	12	5	358	364
-8	12	6	201	218	-8	12	7	245	230	-8	12	9	297	274
-8	12	12	156	181	-8	12	13	197	230	-8	13	1	72	87
-8	13	3	190	181	-8	13	4	100	87	-8	13	5	359	372
-8	14	8	304	317	-8	17	1	255	257	-8	18	1	232	219
-8	18	5	279	278	-8	19	5	227	257	-8	19	9	261	255
-8	20	6	226	237	-8	20	8	349	358	-8	21	8	137	194
-8	21	9	367	356	-8	22	7	232	230	-8	22	8	408	403
-8	23	7	199	197	-8	24	5	154	155	-7	0	1	230	238
-7	0	2	711	726	-7	0	3	584	593	-7	0	4	49	2
-7	0	5	313	310	-7	0	6	100	129	-7	0	7	203	234
-7	0	8	292	280	-7	0	9	675	665	-7	0	10	381	378
-7	0	11	188	199	-7	0	12	210	190	-7	1	1	752	756
-7	1	2	410	419	-7	1	3	129	105	-7	1	4	485	492
-7	1	5	77	86	-7	1	6	203	209	-7	1	7	227	234
-7	1	8	301	295	-7	1	9	370	361	-7	1	10	731	731
-7	1	11	198	203	-7	2	1	193	187	-7	2	2	570	575
-7	2	3	262	266	-7	2	4	364	371	-7	2	5	250	244
-7	2	6	313	314	-7	2	7	195	198	-7	2	8	276	286
-7	2	9	347	345	-7	2	10	130	145	-7	3	1	395	406
-7	3	2	395	404	-7	3	3	192	196	-7	3	4	374	366
-7	3	5	410	400	-7	3	6	415	411	-7	3	7	359	368
-7	3	8	89	78	-7	3	9	303	298	-7	3	13	233	215
-7	4	1	242	235	-7	4	2	256	258	-7	4	3	116	88
-7	4	4	109	96	-7	4	5	390	387	-7	4	6	510	518
-7	4	7	54	33	-7	4	8	189	208	-7	4	9	164	162
-7	4	10	127	122	-7	4	14	323	328	-7	5	1	305	313
-7	5	2	345	349	-7	5	3	230	230	-7	5	4	338	336
-7	5	5	220	217	-7	5	6	317	321	-7	5	8	124	130
-7	5	9	36	73*	-7	5	10	307	325	-7	5	13	166	205
-7	6	1	58	65	-7	6	2	165	154	-7	6	3	96	46
-7	6	4	212	219	-7	6	5	218	225	-7	6	6	167	168
-7	6	7	73	65	-7	6	8	158	170	-7	6	9	471	473
-7	6	10	168	142	-7	7	1	654	649	-7	7	2	195	192
-7	7	3	205	193	-7	7	4	237	239	-7	7	5	223	235
-7	7	6	284	284	-7	7	7	265	274	-7	7	8	193	203
-7	7	9	381	380	-7	7	10	300	298	-7	7	10	284	277
-7	8	2	255	257	-7	8	3	215	201	-7	8	4	201	209
-7	8	5	109	105	-7	8	6	391	398	-7	8	7	319	305
-7	8	8	232	237	-7	8	9	349	334	-7	8	13	213	256
-7	9	1	44	122*	-7	9	2	178	166	-7	9	3	259	253
-7	9	4	186	195	-7	9	5	360	360	-7	9	6	504	492
-7	9	7	113	122	-7	9	8	207	222	-7	9	9	170	175
-7	9	11	148	157	-7	9	13	314	322	-7	10	1	193	214
-7	10	2	285	295	-7	10	3	112	126	-7	10	4	171	182
-7	10	5	1066	1079	-7	10	6	370	388	-7	10	7	89	70
-7	10	8	361	359	-7	10	9	220	231	-7	10	10	189	179
-7	10	14	349	332	-7	11	1	168	178	-7	11	2	288	290
-7	11	3	300	314	-7	11	4	274	275	-7	11	5	638	635
-7	11	6	438	440	-7	11	7	199	192	-7	11	8	183	183
-7	11	9	164	179	-7	11	13	394	396	-7	12	1	226	199
-7	12	2	337	328	-7	12	3	98	128	-7	12	4	250	240
-7	12	5	343	346	-7	12	6	518	521	-7	12	7	207	210
-7	12	8	262	253	-7	12	13	179	197	-7	12	14	228	236
-7	13	1	396	397	-7	13	2	109	107	-7	13	3	62	67
-7	13	4	408	406	-7	13	5	150	157	-7	13	6	276	280
-7	13	7	248	251	-7	13	8	250	251	-7	13	9	276	276
-7	13	10	169	174	-7	13	12	228	245	-7	14	1	264	242
-7	14	2	184	187	-7	14	3	177	201	-7	14	4	22	51*
-7	14	5	167	169	-7	14	6	278	282	-7	14	8	192	196
-7	14	9	348	346	-7	15	1	274	264	-7	15	2	148	172
-7	15	3	172	174	-7	15	4	170	155	-7	15	5	155	163

Ernst et al. Struct. factors of NPF (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-7	15	7	69	63	-7	15	10	276	277					
-7	16	2	122	105	-7	16	3	214	193					
-7	16	5	329	331	-7	16	6	181	193					
-7	17	1	124	146	-7	17	2	250	257					
-7	17	4	104	40	-7	17	6	271	280					
-7	17	8	75	87	-7	18	5	279	293					
-7	18	7	222	214	-7	18	9	203	210					
-7	19	5	232	239	-7	19	8	125	146					
-7	20	2	447	436	-7	20	3	266	239					
-7	20	9	385	391	-7	20	10	241	232					
-7	21	2	262	258	-7	21	3	209	218					
-7	21	9	334	337	-7	21	10	370	400					
-7	22	2	281	275	-7	22	9	353	368					
-7	23	9	243	229	-7	24	2	226	244					
-7	25	5	210	215	-6	0	1	665	674					
-6	0	3	1243	1250	-6	0	4	460	464					
-6	0	6	158	191	-6	0	7	42	50*					
-6	0	10	617	604	-6	0	11	418	406					
-6	1	2	1129	1128	-6	1	3	282	279					
-6	1	5	172	167	-6	1	6	417	413					
-6	1	8	298	287	-6	1	9	540	530					
-6	1	11	626	618	-6	1	12	278	268					
-6	2	2	374	372	-6	2	3	626	634					
-6	2	5	638	635	-6	2	6	488	485					
-6	2	8	344	343	-6	2	9	251	251					
-6	2	11	209	208	-6	2	13	265	293					
-6	3	1	280	277	-6	3	2	410	411					
-6	3	4	194	190	-6	3	5	312	292					
-6	3	7	579	563	-6	3	8	274	281					
-6	3	10	243	248	-6	3	11	94	85					
-6	4	2	268	268	-6	4	3	83	61					
-6	4	5	239	238	-6	4	6	432	426					
-6	4	8	235	248	-6	4	9	226	209					
-6	4	11	101	109	-6	4	15	270	260					
-6	5	2	493	511	-6	5	3	349	354					
-6	5	5	236	242	-6	5	6	346	351					
-6	5	8	205	210	-6	5	9	180	169					
-6	5	11	319	331	-6	6	1	219	218					
-6	6	3	377	376	-6	6	4	114	130					
-6	6	6	237	237	-6	6	7	224	224					
-6	6	9	146	164	-6	6	10	360	352					
-6	7	1	283	278	-6	7	2	704	701					
-6	7	4	192	219	-6	7	5	88	80					
-6	7	7	307	313	-6	7	8	74	68					
-6	7	10	522	532	-6	7	11	342	343					
-6	8	2	107	93	-6	8	3	395	400					
-6	8	5	151	152	-6	8	6	220	220					
-6	8	8	264	255	-6	8	9	194	183					
-6	8	11	225	228	-6	8	15	199	189					
-6	9	2	279	288	-6	9	3	231	240					
-6	9	5	240	240	-6	9	6	217	211					
-6	9	8	120	113	-6	9	9	283	271					
-6	9	11	136	186	-6	9	12	301	279					
-6	9	14	277	271	-6	10	1	176	193					
-6	10	3	285	296	-6	10	4	408	406					
-6	10	6	1159	1151	-6	10	7	813	802					
-6	10	9	130	146	-6	10	10	114	124					
-6	10	14	166	161	-6	10	15	241	259					
-6	11	2	253	248	-6	11	3	146	129					
-6	11	5	235	224	-6	11	6	687	684					
-6	11	8	49	32*	-6	11	9	169	176					
-6	11	14	301	311	-6	12	1	149	169					
-6	12	3	457	457	-6	12	4	204	208					
-6	12	6	708	712	-6	12	7					
6	12	5	458	461										

Saert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	12	9	131	99	-6	12	14	168	166					
-6	13	2	511	510	-6	13	3	197	201					
-6	13	5	300	304	-6	13	6	199	189					
-6	13	8	280	278	-6	13	9	333	328					
-6	13	11	260	250	-6	13	14	242	230					
-6	14	2	456	458	-6	14	3	240	229					
-6	14	5	202	204	-6	14	6	211	202					
-6	14	8	139	143	-6	14	9	118	113					
-6	14	14	127	140	-6	15	1	197	200					
-6	15	3	276	286	-6	15	4	141	153					
-6	15	7	123	131	-6	15	8	95	95					
-6	15	10	197	175	-6	15	11	231	241					
-6	16	1	225	231	-6	16	2	149	161					
-6	16	4	314	306	-6	16	5	165	175					
-6	16	7	241	235	-6	16	9	155	182					
-6	17	1	164	142	-6	17	2	92	45					
-6	17	4	149	125	-6	17	5	115	98					
-6	17	7	355	355	-6	17	8	182	176					
-6	18	2	254	244	-6	18	3	123	47					
-6	18	5	375	381	-6	18	6	346	357					
-6	18	8	277	279	-6	18	9	159	189					
-6	19	2	427	414	-6	19	3	177	142					
-6	19	5	94	68	-6	19	7	229	209					
-6	19	10	223	231	-6	20	1	215	231					
-6	20	3	663	664	-6	20	4	92	99					
-6	20	10	377	370	-6	20	11	203	195					
-6	21	4	288	299	-6	21	6	176	196					
-6	21	10	310	330	-6	21	11	364	373					
-6	22	9	245	218	-6	22	10	302	299					
-6	23	10	246	227	-6	24	3	295	306					
-6	24	7	185	184	-6	24	10	164	190					
-6	26	7	238	228	-6	27	2	193	215					
-6	28	3	301	302	-6	29	2	150	192					
-5	0	3	422	422	-5	0	4	1014	1004					
-5	0	6	418	420	-5	0	7	156	135					
-5	0	11	221	219	-5	0	12	437	426					
-5	1	2	410	410	-5	1	3	1802	1808					
-5	1	5	471	477	-5	1	6	522	523					
-5	1	8	622	621	-5	1	9	400	399					
-5	1	11	587	583	-5	1	12	488	486					
-5	2	2	563	548	-5	2	3	613	625					
-5	2	5	122	99	-5	2	6	508	513					
-5	2	8	228	227	-5	2	9	170	171					
-5	2	11	478	471	-5	2	12	218	228					
-5	2	14	266	288	-5	2	15	228	211					
-5	3	3	245	251	-5	3	4	828	815					
-5	3	6	128	121	-5	3	7	298	302					
-5	3	9	128	106	-5	3	10	218	211					
-5	4	1	323	332	-5	4	2	149	143					
-5	4	4	448	451	-5	4	5	348	340					
-5	4	7	587	575	-5	4	8	379	365					
-5	4	10	331	332	-5	4	11	429	435					
-5	5	1	389	399	-5	5	2	83	96					
-5	5	4	401	394	-5	5	5	176	181					
-5	5	7	330	325	-5	5	8	204	199					
-5	5	10	150	150	-5	5	11	160	155					
-5	6	1	77	39	-5	6	2	259	264					
-5	6	4	502	513	-5	6	5	151	153					
-5	6	7	121	119	-5	6	8	318	310					
-5	6	10	110	115	-5	6	11	183	179					
-5	7	2	113	129	-5	7	3	685	691					
-5	7	5	211	220	-5	7	6	265	264					
-5	7	8	85	64	-5	7	9	227	237					
-5	7	11	358	355	-5	7	12	294	278					
-5	7	10	296	286										

Saert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-5	8	1	240	239	-5	8	2	292	287	-5	8	3	228	233
-5	8	4	455	454	-5	8	5	370	371	-5	8	6	304	311
-5	8	7	406	406	-5	8	8	266	255	-5	8	10	182	162
-5	8	11	146	146	-5	8	12	247	243	-5	9	1	194	188
-5	9	2	543	544	-5	9	3	687	687	-5	9	4	505	507
-5	9	5	296	294	-5	9	6	454	459	-5	9	7	230	227
-5	9	8	815	801	-5	9	9	168	164	-5	9	10	434	433
-5	9	11	339	331	-5	9	13	212	218	-5	10	1	321	316
-5	10	2	405	403	-5	10	3	334	337	-5	10	4	251	236
-5	10	5	501	501	-5	10	6	371	367	-5	10	7	918	912
-5	10	8	633	633	-5	10	9	268	263	-5	10	10	86	18
-5	10	11	168	177	-5	11	1	512	512	-5	11	3	324	326
-5	11	4	318	322	-5	11	5	276	256	-5	11	6	197	197
-5	11	7	403	412	-5	11	8	548	546	-5	11	9	70	95
-5	11	10	215	209	-5	12	1	279	286	-5	12	2	148	145
-5	12	3	157	176	-5	12	4	794	795	-5	12	5	227	225
-5	12	6	485	480	-5	12	7	1175	1163	-5	12	8	580	570
-5	12	9	232	224	-5	12	10	326	322	-5	12	12	214	227
-5	13	1	370	367	-5	13	2	536	538	-5	13	3	654	652
-5	13	4	281	277	-5	13	5	351	351	-5	13	6	172	160
-5	13	7	362	361	-5	13	8	66	41	-5	13	9	349	354
-5	13	10	212	198	-5	13	11	281	286	-5	14	1	21	37*
-5	14	2	301	300	-5	14	3	420	429	-5	14	5	111	138
-5	14	6	263	267	-5	14	7	303	298	-5	14	8	128	114
-5	14	9	141	107	-5	14	10	130	105	-5	14	11	182	173
-5	15	1	159	162	-5	15	2	303	303	-5	15	3	632	626
-5	15	4	435	434	-5	15	5	314	316	-5	15	6	175	170
-5	15	7	13	99*	-5	15	8	129	104	-5	15	9	196	200
-5	15	10	240	233	-5	15	11	296	295	-5	15	12	271	268
-5	16	1	106	129	-5	16	2	253	251	-5	16	3	210	204
-5	16	4	205	211	-5	16	5	272	277	-5	16	6	226	232
-5	16	7	340	346	-5	16	8	175	163	-5	16	9	239	245
-5	16	11	341	322	-5	17	1	164	172	-5	17	2	120	134
-5	17	3	67	67	-5	17	4	162	162	-5	17	5	209	189
-5	17	6	103	127	-5	17	7	171	197	-5	17	8	356	352
-5	18	1	170	163	-5	18	2	188	183	-5	18	3	208	207
-5	18	4	217	216	-5	18	5	267	259	-5	18	6	278	278
-5	18	7	380	383	-5	18	8	186	198	-5	19	1	353	356
-5	19	2	171	166	-5	19	3	676	672	-5	19	4	128	128
-5	19	5	167	168	-5	19	6	194	182	-5	19	7	253	245
-5	19	8	366	360	-5	19	10	158	195	-5	19	11	277	296
-5	20	2	195	214	-5	20	4	521	531	-5	20	5	126	137
-5	20	6	232	232	-5	20	8	273	268	-5	20	9	196	220
-5	20	11	247	239	-5	21	1	411	415	-5	21	2	105	103
-5	21	3	872	869	-5	21	4	213	217	-5	21	5	86	66
-5	21	9	194	192	-5	21	11	305	296	-5	21	12	211	245
-5	22	2	514	527	-5	22	3	141	148	-5	22	4	475	481
-5	22	6	240	249	-5	22	10	154	178	-5	22	11	280	275
-5	23	2	454	457	-5	23	3	381	364	-5	23	4	504	503
-5	23	5	221	227	-5	24	5	301	297	-5	24	7	335	331
-5	25	4	211	225	-5	26	6	233	229	-5	26	8	273	305
-5	27	3	296	290	-5	27	6	210	188	-5	28	4	257	268
-5	29	3	323	329	-5	30	2	152	166	-5	30	5	132	176
-4	0	1	138	137	-4	0	2	472	467	-4	0	3	204	215
-4	0	4	1001	1003	-4	0	5	1131	1123	-4	0	6	197	199
-4	0	7	192	178	-4	0	9	77	88	-4	0	10	124	97
-4	0	11	167	158	-4	0	12	76	104	-4	0	13	571	573
-4	1	1	763	761	-4	1	2	489	492	-4	1	3	177	174
-4	1	4	2161	2136	-4	1	5	1455	1460	-4	1	6	426	428
-4	1	7	202	190	-4	1	8	731	722	-4	1	9	288	288
-4	1	10	130	97	-4	1	11	149	172	-4	1	12	447	429
-4	1	13	335	354	-4	2	1	1109	1116	-4	2	2	278	277
-4	2	3	387	391	-4	2	4	884	887	-4	2	5	968	972
-4	2	6	375	378	-4	2	7	346	354	-4	2	8	635	621

Esent et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	2	9	243	243	-4	2	10	363	360	-4	2	11	150	160
-4	2	12	577	573	-4	2	14	116	186	-4	3	1	52	51
-4	3	2	579	578	-4	3	3	220	214	-4	3	4	333	330
-4	3	5	417	419	-4	3	6	152	150	-4	3	7	229	231
-4	3	8	125	104	-4	3	9	631	610	-4	3	10	161	142
-4	3	11	208	204	-4	3	12	282	283	-4	4	1	791	803
-4	4	2	221	220	-4	4	3	246	242	-4	4	4	216	203
-4	4	5	329	322	-4	4	6	108	105	-4	4	7	365	364
-4	4	8	730	723	-4	4	9	601	604	-4	4	10	232	237
-4	4	11	274	270	-4	4	12	251	238	-4	4	13	240	232
-4	5	1	781	778	-4	5	2	680	692	-4	5	3	245	250
-4	5	4	485	472	-4	5	5	246	244	-4	5	6	227	221
-4	5	7	419	416	-4	5	8	505	510	-4	5	9	259	251
-4	5	10	47	78	-4	5	11	207	206	-4	5	12	187	201
-4	5	13	222	223	-4	6	1	821	822	-4	6	2	274	279
-4	6	3	265	263	-4	6	4	262	267	-4	6	5	766	757
-4	6	6	233	217	-4	6	7	230	230	-4	6	8	55	50
-4	6	9	185	183	-4	6	10	121	112	-4	6	11	108	98
-4	6	12	232	226	-4	6	13	195	189	-4	7	1	309	309
-4	7	2	129	130	-4	7	3	140	138	-4	7	4	993	982
-4	7	5	254	251	-4	7	6	265	268	-4	7	7	177	179
-4	7	8	496	489	-4	7	9	109	111	-4	7	10	200	206
-4	7	11	230	221	-4	7	12	288	294	-4	8	1	483	487
-4	8	2	299	296	-4	8	3	189	196	-4	8	4	399	397
-4	8	5	375	373	-4	8	6	261	258	-4	8	7	510	512
-4	8	8	257	254	-4	8	9	273	281	-4	8	10	109	82
-4	8	11	67	103	-4	9	1	748	756	-4	9	2	409	410
-4	9	3	1035	1053	-4	9	4	452	449	-4	9	5	579	590
-4	9	6	374	370	-4	9	7	250	259	-4	9	8	368	362
-4	9	9	743	738	-4	9	10	173	169	-4	9	11	392	401
-4	10	1	441	448	-4	10	2	604	618	-4	10	3	344	347
-4	10	4	593	606	-4	10	5	110	106	-4	10	6	92	93
-4	10	7	276	267	-4	10	8	1200	1202	-4	10	9	130	127
-4	10	10	258	273	-4	10	11	190	183	-4	10	12	176	169
-4	11	1	887	892	-4	11	2	523	529	-4	11	3	633	638
-4	11	4	320	328	-4	11	5	317	316	-4	11	6	125	113
-4	11	7	204	213	-4	11	8	257	264	-4	11	9	677	671
-4	11	10	183	191	-4	11	11	98	101	-4	12	1	922	929
-4	12	2	312	321	-4	12	3	312	324	-4	12	4	374	367
-4	12	5	444	440	-4	12	6	452	448	-4	12	7	619	625
-4	12	8	820	811	-4	12	9	709	700	-4	12	10	262	274
-4	12	11	184	171	-4	12	12	179	187	-4	13	1	516	515
-4	13	2	203	214	-4	13	3	300	296	-4	13	4	889	885
-4	13	5	162	162	-4	13	6	448	448	-4	13	7	304	309
-4	13	8	511	502	-4	13	9	254	251	-4	13	10	155	167
-4	14	1	617	611	-4	14	2	178	180	-4	14	3	366	355
-4	14	4	402	392	-4	14	5	482	480	-4	14	6	308	298
-4	14	7	288	288	-4	14	9	250	243	-4	14	10	57	62
-4	15	1	354	353	-4	15	2	331	322	-4	15	3	360	360
-4	15	4	521	511	-4	15	5	646	631	-4	15	6	345	349
-4	15	8	336	332	-4	15	9	105	93	-4	15	10	104	93
-4	15	13	211	228	-4	16	1	254	248	-4	16	2	170	159
-4	16	3	338	334	-4	16	5	147	136	-4	16	6	112	141
-4	16	7	229	219	-4	16	8	491	487	-4	16	9	236	241
-4	16	10	313	315	-4	16	12	216	218	-4	17	1	276	278
-4	17	2	175	172	-4	17	3	77	93	-4	17	4	128	133
-4	17	5	144	154	-4	17	6	298	284	-4	17	7	176	172
-4	17	8	64	110	-4	17	9	334	343	-4	18	1	375	364
-4	18	2	117	120	-4	18	4	280	283	-4	18	5	95	102
-4	18	6	95	84	-4	18	7	182	188	-4	18	8	328	323
-4	18	10	196	190	-4	18	12	227	229	-4	19	1	324	322
-4	19	2	215	218	-4	19	3	406	387	-4	19	4	711	705
-4	19	5	225	238	-4	19	6	266	260	-4	19	7	67	67
-4	19	8	242	251	-4	19	9	306	280	-4	19	11	210	223

Went et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	19	12	198	223	-4	20	1	322	316	-4	20	2	205	217
-4	20	3	314	298	-4	20	4	464	466	-4	20	5	541	536
-4	20	6	200	181	-4	20	7	321	344	-4	20	13	217	211
-4	21	1	149	121	-4	21	2	174	177	-4	21	3	246	246
-4	21	4	990	987	-4	21	5	351	350	-4	21	6	163	149
-4	21	7	210	190	-4	21	12	313	322	-4	22	1	103	87
-4	22	2	270	267	-4	22	3	391	387	-4	22	4	120	89
-4	22	5	649	650	-4	22	6	246	250	-4	22	7	300	295
-4	22	12	207	208	-4	23	1	287	278	-4	23	2	162	170
-4	23	3	639	631	-4	23	4	415	406	-4	23	6	247	237
-4	23	7	185	182	-4	23	11	218	241	-4	24	1	98	82
-4	24	2	276	286	-4	24	8	356	350	-4	24	11	163	203
-4	25	5	295	290	-4	25	6	224	212	-4	25	9	244	259
-4	26	5	168	183	-4	26	7	331	320	-4	27	4	406	407
-4	27	6	217	193	-4	27	8	229	224	-4	28	5	174	202
-4	29	5	129	177	-4	30	1	214	238	-4	30	2	190	214
-4	31	1	279	267	-4	31	3	160	184	-4	32	1	270	265
-3	0	2	490	491	-3	0	3	624	620	-3	0	4	655	647
-3	0	5	1591	1581	-3	0	6	1770	1776	-3	0	8	186	198
-3	0	9	199	207	-3	0	10	186	181	-3	0	11	183	169
-3	0	13	161	161	-3	0	14	440	443	-3	1	1	647	643
-3	1	2	731	724	-3	1	3	363	354	-3	1	4	949	934
-3	1	5	2063	2066	-3	1	6	896	896	-3	1	7	542	547
-3	1	8	190	197	-3	1	9	366	368	-3	1	10	174	165
-3	1	11	84	70	-3	1	12	136	148	-3	1	13	296	300
-3	2	1	536	526	-3	2	2	1402	1392	-3	2	3	906	896
-3	2	4	429	430	-3	2	5	962	969	-3	2	6	703	696
-3	2	7	364	366	-3	2	8	331	325	-3	2	9	498	493
-3	2	10	246	244	-3	2	11	255	255	-3	2	12	109	100
-3	2	13	486	488	-3	3	1	1509	1511	-3	3	2	971	967
-3	3	3	646	642	-3	3	4	114	94	-3	3	5	199	196
-3	3	6	687	682	-3	3	7	335	334	-3	3	8	134	131
-3	3	9	384	378	-3	3	10	643	635	-3	3	11	97	91
-3	3	12	146	139	-3	3	13	248	249	-3	4	1	1700	1699
-3	4	2	1031	1024	-3	4	3	700	698	-3	4	4	415	408
-3	4	5	400	396	-3	4	6	377	370	-3	4	7	198	204
-3	4	8	136	133	-3	4	9	663	662	-3	4	10	521	522
-3	4	11	121	103	-3	4	13	259	243	-3	5	1	480	478
-3	5	2	848	844	-3	5	3	1134	1129	-3	5	4	368	363
-3	5	5	411	405	-3	5	6	188	203	-3	5	7	169	172
-3	5	8	137	132	-3	5	9	658	647	-3	5	10	380	371
-3	5	11	164	153	-3	5	12	238	254	-3	5	14	237	235
-3	6	1	555	544	-3	6	2	1105	1100	-3	6	3	466	464
-3	6	4	465	475	-3	6	5	250	243	-3	6	6	700	695
-3	6	7	66	87	-3	6	8	356	349	-3	6	9	219	225
-3	6	10	43	35*	-3	6	11	57	113	-3	6	12	173	155
-3	6	13	171	175	-3	7	1	179	181	-3	7	2	459	458
-3	7	3	319	321	-3	7	4	539	547	-3	7	5	1070	1055
-3	7	6	310	303	-3	7	7	136	137	-3	7	8	166	167
-3	7	9	366	366	-3	7	10	246	235	-3	7	11	102	90
-3	7	12	235	231	-3	7	13	416	427	-3	8	1	530	515
-3	8	2	428	429	-3	8	3	206	210	-3	8	4	695	700
-3	8	5	1048	1043	-3	8	6	381	379	-3	8	7	378	374
-3	8	8	554	562	-3	8	9	283	281	-3	8	11	146	155
-3	8	12	45	56*	-3	9	1	1482	1479	-3	9	2	517	544
-3	9	3	556	555	-3	9	4	577	563	-3	9	5	175	178
-3	9	6	363	374	-3	9	7	386	388	-3	9	8	328	333
-3	9	9	338	330	-3	9	10	423	424	-3	9	11	140	155
-3	9	12	247	242	-3	10	1	2106	2112	-3	10	2	494	507
-3	10	3	160	166	-3	10	4	472	471	-3	10	5	215	201
-3	10	6	439	434	-3	10	7	120	120	-3	10	8	502	502
-3	10	9	1239	1242	-3	10	10	174	185	-3	11	1	1448	1453
-3	11	2	1106	1092	-3	11	3	594	590	-3	11	4	327	326
-3	11	5	142	152	-3	11	6	235	238	-3	11	7	249	256

Baert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	11	8	290	281	-3	11	9	432	423	-3	11	10	668	664
-3	11	11	147	133	-3	12	1	612	609	-3	12	2	1015	1019
-3	12	3	421	415	-3	12	4	654	654	-3	12	5	230	229
-3	12	6	280	281	-3	12	7	528	524	-3	12	8	445	450
-3	12	9	446	431	-3	12	10	378	375	-3	12	11	88	77
-3	13	1	419	410	-3	13	2	690	695	-3	13	3	400	397
-3	13	4	375	373	-3	13	5	892	886	-3	13	6	240	247
-3	13	7	314	317	-3	13	8	473	482	-3	13	9	430	421
-3	13	10	318	332	-3	13	11	63	108	-3	13	12	204	201
-3	13	13	257	242	-3	14	1	137	131	-3	14	2	663	644
-3	14	3	575	582	-3	14	4	213	215	-3	14	5	285	273
-3	14	6	803	793	-3	14	8	238	230	-3	14	9	179	172
-3	15	1	354	358	-3	15	2	377	375	-3	15	3	275	279
-3	15	4	556	550	-3	15	5	345	341	-3	15	6	475	470
-3	15	7	119	114	-3	15	8	151	160	-3	15	9	376	370
-3	15	10	241	243	-3	15	11	280	288	-3	15	14	232	209
-3	16	1	333	326	-3	16	2	27	73*	-3	16	3	223	228
-3	16	4	417	414	-3	16	5	359	356	-3	16	6	227	222
-3	16	7	162	155	-3	16	8	248	244	-3	16	9	347	360
-3	17	10	343	335	-3	17	1	772	756	-3	17	2	500	490
-3	17	3	312	301	-3	17	4	149	145	-3	17	5	73	42
-3	17	6	108	77	-3	17	7	254	269	-3	17	8	186	165
-3	17	9	117	129	-3	17	10	179	186	-3	18	1	652	655
-3	18	2	308	309	-3	18	3	159	150	-3	18	5	355	347
-3	18	6	159	170	-3	18	7	130	134	-3	18	8	378	381
-3	18	9	420	423	-3	18	10	188	164	-3	18	11	187	182
-3	19	13	269	250	-3	19	1	206	193	-3	19	2	186	169
-3	19	3	410	396	-3	19	4	382	376	-3	19	5	502	506
-3	19	6	158	157	-3	19	7	113	111	-3	19	8	110	87
-3	19	10	200	190	-3	19	12	208	228	-3	20	1	431	416
-3	20	2	466	459	-3	20	3	136	134	-3	20	4	627	627
-3	20	5	496	490	-3	20	6	679	682	-3	20	7	201	183
-3	20	8	93	48	-3	21	1	165	172	-3	21	2	124	141
-3	21	3	122	104	-3	21	4	289	287	-3	21	5	1114	1115
-3	21	6	218	220	-3	21	7	184	190	-3	21	8	230	224
-3	22	9	206	186	-3	22	1	332	335	-3	22	2	109	93
-3	22	3	245	238	-3	22	4	401	395	-3	22	5	272	253
-3	23	6	490	490	-3	23	1	198	211	-3	23	2	346	345
-3	23	3	209	204	-3	23	4	447	442	-3	23	5	475	479
-3	23	6	306	314	-3	23	8	317	326	-3	23	9	190	184
-3	24	11	171	164	-3	24	1	550	542	-3	24	2	230	221
-3	24	3	163	167	-3	24	4	334	332	-3	24	5	279	266
-3	25	9	297	300	-3	25	1	162	165	-3	25	2	191	165
-3	25	5	257	259	-3	25	7	178	151	-3	26	1	280	282
-3	26	7	240	208	-3	26	8	249	237	-3	27	5	421	416
-3	27	7	240	222	-3	27	9	193	174	-3	28	2	207	172
-3	28	4	287	288	-3	28	5	130	141	-3	28	8	151	126
-3	29	1	223	231	-3	29	5	206	192	-3	30	1	458	457
-3	31	2	254	278	-3	31	1	341	346	-3	31	2	340	345
-3	32	5	143	134	-3	32	1	372	376	-3	32	2	305	305
-2	0	1	2381	2371	-2	0	2	750	744	-2	0	3	1174	1176
-2	0	4	1282	1283	-2	0	6	1211	1216	-2	0	7	1518	1531
-2	0	8	452	455	-2	0	9	65	36	-2	0	10	97	140
-2	0	11	229	204	-2	0	15	199	201	-2	1	1	1697	1699
-2	1	2	1355	1354	-2	1	3	581	588	-2	1	4	986	982
-2	1	5	651	646	-2	1	6	1518	1536	-2	1	7	248	242
-2	1	8	285	278	-2	1	9	448	446	-2	1	10	252	253
-2	1	11	89	66	-2	1	12	188	145	-2	1	14	213	236
-2	2	1	2104	2092	-2	2	2	990	975	-2	2	3	666	664
-2	2	4	1207	1211	-2	2	5	1172	1170	-2	2	6	1028	1047
-2	2	7	733	736	-2	2	8	48	74	-2	2	9	358	366
-2	2	10	467	469	-2	2	11	156	145	-2	2	12	70	21
-2	2	14	274	276	-2	3	1	456	461	-2	3	2	2032	2022
-2	3	3	1407	1400	-2	3	4	564	566	-2	3	5	316	309

... (Principal Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	3	7	662	666	-2	3	8	338	337					
-2	3	10	391	387	-2	3	11	392	396					
-2	4	1	566	559	-2	4	2	2032	2029					
-2	4	4	560	561	-2	4	5	416	431					
-2	4	7	371	386	-2	4	8	562	562					
-2	4	10	444	446	-2	4	11	65	53					
-2	4	14	342	351	-2	5	1	631	625					
-2	5	3	1335	1341	-2	5	4	737	734					
-2	5	6	686	693	-2	5	7	92	93					
-2	5	9	178	186	-2	5	10	352	358					
-2	5	12	102	86	-2	6	1	584	580					
-2	6	3	696	698	-2	6	4	912	910					
-2	6	6	379	370	-2	6	7	320	330					
-2	6	9	21	50*	-2	6	10	300	299					
-2	6	12	176	190	-2	7	1	691	690					
-2	7	3	402	401	-2	7	4	730	718					
-2	7	6	517	508	-2	7	7	319	319					
-2	7	9	203	192	-2	7	10	638	627					
-2	7	12	132	138	-2	7	13	244	245					
-2	8	1	683	660	-2	8	2	720	724					
-2	8	4	731	741	-2	8	5	750	752					
-2	8	7	692	696	-2	8	8	238	248					
-2	8	10	483	488	-2	8	11	52	83*					
-2	9	1	1075	1069	-2	9	2	2061	2054					
-2	9	4	406	408	-2	9	5	105	106					
-2	9	7	257	266	-2	9	8	262	256					
-2	9	10	343	330	-2	9	11	406	393					
-2	10	1	521	512	-2	10	2	1399	1394					
-2	10	4	450	451	-2	10	5	688	690					
-2	10	7	219	227	-2	10	8	437	443					
-2	10	10	697	693	-2	10	11	257	261					
-2	11	2	2173	2158	-2	11	3	1331	1319					
-2	11	5	155	155	-2	11	6	170	169					
-2	11	8	212	217	-2	11	9	223	234					
-2	11	11	523	525	-2	12	1	1134	1133					
-2	12	3	1192	1177	-2	12	4	209	215					
-2	12	6	570	570	-2	12	7	119	103					
-2	12	9	213	218	-2	12	10	499	507					
-2	13	1	917	925	-2	13	2	163	153					
-2	13	4	178	171	-2	13	5	425	424					
-2	13	7	296	292	-2	13	9	417	417					
-2	13	11	260	241	-2	14	1	189	177					
-2	14	3	181	183	-2	14	4	577	570					
-2	14	6	373	367	-2	14	7	503	502					
-2	14	9	410	412	-2	14	10	170	161					
-2	15	2	404	407	-2	15	3	422	428					
-2	15	5	484	488	-2	15	6	398	388					
-2	15	8	135	137	-2	15	9	158	152					
-2	15	11	316	327	-2	16	1	367	357					
-2	16	3	113	97	-2	16	4	297	289					
-2	16	6	338	343	-2	16	7	520	525					
-2	16	9	117	132	-2	16	10	199	173					
-2	17	1	399	400	-2	17	2	517	516					
-2	17	4	301	306	-2	17	5	452	447					
-2	17	7	153	145	-2	17	8	270	266					
-2	18	1	65	41	-2	18	2	612	599					
-2	18	4	156	141	-2	18	5	390	383					
-2	18	7	319	307	-2	18	8	87	103					
-2	18	10	387	389	-2	18	12	167	179					
-2	19	2	866	868	-2	19	3	132	133					
-2	19	5	340	335	-2	19	6	392	392					
-2	19	8	213	217	-2	19	9	249	264					
-2	20	2	319	334	-2	20	3	677	677					
-2	20	5	425	422	-2	20	6	509	517					

COEFFICIENTS OF THE (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	20	7	496	497	-2	20	8	170	170	-2	21	1	91	71
-2	20	2	404	399	-2	21	3	254	259	-2	21	4	344	342
-2	21	5	264	273	-2	21	6	821	823	-2	21	7	152	157
-2	21	10	211	232	-2	22	1	345	334	-2	22	2	176	175
-2	22	3	372	363	-2	22	4	340	333	-2	22	5	330	320
-2	22	6	552	548	-2	22	7	505	503	-2	22	10	209	199
-2	23	1	251	253	-2	23	2	315	301	-2	23	3	177	154
-2	23	4	37	81*	-2	23	5	271	269	-2	23	6	538	534
-2	23	7	381	393	-2	23	8	180	190	-2	23	9	207	216
-2	24	1	48	40	-2	24	2	344	356	-2	24	3	102	87
-2	24	4	118	102	-2	24	5	232	252	-2	24	6	438	440
-2	25	1	153	155	-2	25	2	413	405	-2	25	3	292	280
-2	25	4	124	121	-2	25	5	303	289	-2	26	1	422	417
-2	26	6	170	212	-2	27	10	205	216	-2	28	3	215	236
-2	28	5	260	268	-2	28	9	196	214	-2	29	2	382	371
-2	29	7	263	252	-2	30	2	400	378	-2	31	2	367	350
-2	31	3	194	200	-2	32	1	356	371	-2	32	2	385	386
-2	32	3	302	322	-2	33	2	309	310	-2	33	3	319	354
-1	0	1	2790	2769	-1	0	2	573	571	-1	0	3	2262	2271
-1	0	4	1493	1491	-1	0	5	133	137	-1	0	6	361	359
-1	0	7	1368	1389	-1	0	8	852	854	-1	0	9	375	360
-1	0	10	186	178	-1	0	11	255	248	-1	0	12	66	75
-1	1	1	179	179	-1	1	2	2593	2594	-1	1	3	984	988
-1	1	4	298	298	-1	1	5	730	715	-1	1	6	508	506
-1	1	7	1160	1170	-1	1	8	459	458	-1	1	9	407	406
-1	1	10	334	334	-1	1	11	284	281	-1	1	12	92	76
-1	2	1	1818	1810	-1	2	2	710	709	-1	2	3	1805	1813
-1	2	4	788	788	-1	2	5	446	438	-1	2	6	1082	1099
-1	2	7	843	847	-1	2	8	582	587	-1	2	9	80	54
-1	2	10	142	128	-1	2	11	179	174	-1	2	12	128	98
-1	3	1	1529	1527	-1	3	2	1488	1485	-1	3	3	3030	3048
-1	3	4	366	373	-1	3	5	1110	1115	-1	3	6	598	608
-1	3	7	716	721	-1	3	8	415	406	-1	3	9	330	325
-1	3	10	131	114	-1	3	11	227	245	-1	3	12	192	183
-1	4	1	1424	1416	-1	4	2	797	800	-1	4	3	1332	1340
-1	4	4	793	790	-1	4	5	103	84	-1	4	6	432	431
-1	4	7	376	378	-1	4	8	214	209	-1	4	9	498	497
-1	4	10	211	201	-1	4	11	369	373	-1	4	12	189	185
-1	4	15	294	307	-1	5	1	759	760	-1	5	2	1559	1559
-1	5	3	1207	1210	-1	5	4	1117	1117	-1	5	5	400	414
-1	5	6	167	163	-1	5	7	571	580	-1	5	8	239	232
-1	5	9	205	198	-1	5	10	313	310	-1	5	11	134	124
-1	5	12	261	246	-1	6	1	1816	1814	-1	6	2	802	796
-1	6	3	276	270	-1	6	4	211	211	-1	6	5	656	660
-1	6	6	424	433	-1	6	7	539	548	-1	6	8	455	454
-1	6	9	287	291	-1	6	10	160	162	-1	6	11	256	257
-1	6	12	239	246	-1	7	1	1611	1613	-1	7	2	751	752
-1	7	3	635	629	-1	7	4	523	518	-1	7	5	641	650
-1	7	6	336	337	-1	7	7	138	133	-1	7	8	254	245
-1	7	9	250	258	-1	7	10	229	233	-1	7	11	606	589
-1	7	12	124	87	-1	8	1	540	542	-1	8	2	485	483
-1	8	3	1198	1197	-1	8	4	848	850	-1	8	5	504	510
-1	8	6	453	463	-1	8	7	655	650	-1	8	8	481	494
-1	8	9	167	164	-1	8	10	268	272	-1	8	11	389	385
-1	8	12	153	159	-1	9	1	50	54	-1	9	2	938	931
-1	9	3	1669	1662	-1	9	4	1011	1017	-1	9	5	313	308
-1	9	6	294	297	-1	9	7	370	374	-1	9	8	105	79
-1	9	9	188	185	-1	9	10	425	430	-1	9	11	242	238
-1	10	1	405	410	-1	10	2	910	914	-1	10	3	701	694
-1	10	4	778	785	-1	10	5	845	857	-1	10	6	654	650
-1	10	7	370	371	-1	10	8	324	322	-1	10	9	206	205
-1	10	10	44	50*	-1	10	11	341	349	-1	11	1	689	684
-1	11	2	170	173	-1	11	3	2320	2333	-1	11	4	1478	1474
-1	11	5	481	479	-1	11	6	288	288	-1	11	7	379	379

Sart et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	11	8	85	75	-1	11	9	102	109	-1	11	10	331	325
-1	11	11	315	305	-1	11	12	341	346	-1	12	1	250	247
-1	12	2	525	519	-1	12	3	963	957	-1	12	4	750	749
-1	12	5	399	393	-1	12	6	470	472	-1	12	7	202	215
-1	12	8	183	200	-1	12	9	166	168	-1	12	10	198	185
-1	12	11	472	463	-1	13	1	631	629	-1	13	2	1544	1540
-1	13	3	562	575	-1	13	4	305	303	-1	13	5	287	290
-1	13	6	81	58	-1	13	7	222	214	-1	13	8	273	275
-1	13	9	161	169	-1	13	10	215	222	-1	13	11	392	393
-1	14	1	668	677	-1	14	2	355	358	-1	14	3	165	169
-1	14	4	280	276	-1	14	5	199	188	-1	14	6	243	240
-1	14	7	641	636	-1	14	8	461	449	-1	14	9	279	287
-1	14	10	432	435	-1	14	11	160	163	-1	15	1	339	339
-1	15	2	142	134	-1	15	3	515	507	-1	15	4	471	470
-1	15	5	335	339	-1	15	6	251	250	-1	15	7	474	477
-1	15	8	162	173	-1	15	9	198	197	-1	15	10	353	347
-1	15	1	97	76	-1	16	2	329	328	-1	16	3	482	486
-1	16	4	383	379	-1	16	5	150	145	-1	16	6	286	281
-1	16	7	239	243	-1	16	8	418	409	-1	16	9	75	97
-1	16	10	77	77	-1	17	1	361	357	-1	17	2	192	196
-1	17	3	646	628	-1	17	4	308	294	-1	17	5	410	400
-1	17	6	451	445	-1	17	7	151	138	-1	17	8	296	288
-1	17	9	130	129	-1	18	1	175	170	-1	18	2	196	194
-1	18	3	481	482	-1	18	4	364	360	-1	18	5	350	348
-1	18	6	461	456	-1	18	7	278	278	-1	18	8	342	340
-1	18	9	17	73*	-1	18	10	153	172	-1	18	11	243	218
-1	19	1	346	348	-1	19	2	549	549	-1	19	3	804	800
-1	19	4	256	248	-1	19	5	83	82	-1	19	6	160	146
-1	19	7	469	463	-1	19	9	200	203	-1	20	1	282	274
-1	20	2	115	110	-1	20	3	392	388	-1	20	4	306	299
-1	20	5	252	253	-1	20	6	263	271	-1	20	7	562	562
-1	20	8	391	396	-1	21	1	486	489	-1	21	2	249	248
-1	21	3	72	82	-1	21	4	509	500	-1	21	5	8	101*
-1	21	6	168	163	-1	21	7	574	575	-1	21	8	329	310
-1	22	1	282	288	-1	22	2	93	103	-1	22	3	298	300
-1	22	4	233	238	-1	22	5	164	170	-1	22	6	424	427
-1	22	7	428	425	-1	22	8	504	490	-1	23	1	363	354
-1	23	2	229	229	-1	23	3	181	181	-1	23	4	241	230
-1	23	5	122	128	-1	23	6	306	294	-1	23	7	512	522
-1	23	9	196	196	-1	24	1	158	150	-1	24	2	279	286
-1	24	3	73	99	-1	24	4	137	113	-1	24	5	203	204
-1	24	6	175	163	-1	24	7	366	357	-1	25	1	237	239
-1	25	2	140	141	-1	25	3	452	449	-1	25	4	470	471
-1	25	6	309	301	-1	26	1	142	143	-1	26	2	244	256
-1	26	8	266	245	-1	27	3	248	238	-1	27	7	292	280
-1	28	3	223	229	-1	29	3	309	309	-1	29	6	195	172
-1	29	7	230	231	-1	30	4	289	285	-1	30	6	240	237
-1	31	3	515	528	-1	32	2	211	210	-1	32	3	347	338
-1	32	4	269	269	-1	33	2	326	357	-1	33	3	215	236
-1	33	4	305	315	0	0	1	98	90	0	0	2	486	486
0	0	3	2054	2055	0	0	4	164	149	0	0	5	163	160
0	0	6	450	449	0	0	7	296	307	0	0	8	1170	1177
0	0	9	496	490	0	0	10	263	279	0	0	11	65	49
0	0	12	207	207	0	1	1	1805	1814	0	1	2	571	575
0	1	3	544	543	0	1	4	451	460	0	1	5	882	879
0	1	6	392	391	0	1	7	336	335	0	1	8	1044	1042
0	1	9	391	382	0	1	10	205	197	0	1	11	177	180
0	1	12	187	221	0	2	0	1686	1678	0	2	1	3639	3653
0	2	2	575	577	0	2	3	1140	1142	0	2	4	990	989
0	2	5	250	256	0	2	6	352	357	0	2	7	471	469
0	2	8	692	696	0	2	9	422	424	0	2	10	243	228
0	2	11	178	158	0	2	12	164	129	0	3	1	1806	1807
0	3	2	1212	1210	0	3	3	576	581	0	3	4	2815	2843
0	3	5	481	493	0	3	6	701	702	0	3	7	560	558

Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	3	8	390	396	0	3	9	258	258	0	3	10	124	102
0	3	11	114	124	0	3	12	249	238	0	4	0	1176	1174
0	4	1	440	437	0	4	2	1048	1056	0	4	3	1042	1034
0	4	4	926	934	0	4	5	590	604	0	4	6	292	297
0	4	7	653	656	0	4	8	267	268	0	4	9	86	79
0	4	10	53	60	0	4	11	283	291	0	4	12	268	263
0	5	1	1081	1077	0	5	2	815	824	0	5	3	877	880
0	5	4	649	649	0	5	5	815	827	0	5	6	359	366
0	5	7	203	204	0	5	8	397	404	0	5	9	132	132
0	5	10	229	222	0	5	11	191	195	0	5	12	128	132
0	6	0	1766	1767	0	6	1	1173	1170	0	6	2	819	819
0	6	3	1135	1153	0	6	4	462	454	0	6	5	359	360
0	6	6	464	469	0	6	7	191	193	0	6	8	244	260
0	6	9	586	590	0	6	10	202	204	0	6	11	211	218
0	6	12	248	250	0	7	1	1337	1332	0	7	2	988	986
0	7	3	484	495	0	7	4	626	619	0	7	5	170	167
0	7	6	474	472	0	7	7	519	519	0	7	8	287	289
0	7	9	280	288	0	7	10	318	312	0	7	11	166	160
0	8	0	2699	2715	0	8	1	1051	1046	0	8	2	993	991
0	8	3	455	445	0	8	4	693	689	0	8	5	294	296
0	8	6	196	199	0	8	7	400	399	0	8	8	520	527
0	8	9	34	46*	0	8	10	140	154	0	8	11	151	140
0	9	1	505	502	0	9	2	77	66	0	9	3	1159	1160
0	9	4	1425	1422	0	9	5	438	444	0	9	6	208	201
0	9	7	198	192	0	9	8	143	129	0	9	10	278	301
0	9	11	286	270	0	9	13	267	270	0	10	0	1490	1493
0	10	1	376	374	0	10	2	977	979	0	10	3	1000	993
0	10	4	699	705	0	10	5	1115	1116	0	10	6	448	448
0	10	7	370	366	0	10	8	401	407	0	10	9	45	60*
0	10	10	138	137	0	11	1	997	1003	0	11	2	534	527
0	11	3	826	826	0	11	4	2086	2090	0	11	5	1156	1170
0	11	6	197	188	0	11	7	265	262	0	11	8	377	373
0	11	9	51	59	0	11	10	153	142	0	11	11	305	297
0	12	0	262	266	0	12	1	742	754	0	12	2	496	499
0	12	3	541	538	0	12	4	560	562	0	12	5	227	233
0	12	6	80	56	0	12	7	287	298	0	12	8	173	175
0	12	9	119	124	0	12	10	264	271	0	12	11	131	144
0	13	1	719	718	0	13	2	739	742	0	13	3	844	852
0	13	4	892	895	0	13	5	330	338	0	13	6	237	229
0	13	7	230	227	0	13	8	203	201	0	13	9	379	386
0	13	10	127	118	0	13	11	198	192	0	14	0	1068	1070
0	14	1	803	803	0	14	2	345	345	0	14	3	591	594
0	14	4	497	496	0	14	5	185	188	0	14	6	215	213
0	14	7	356	362	0	14	8	468	461	0	14	9	544	544
0	14	10	201	197	0	14	11	205	212	0	15	1	652	664
0	15	2	230	239	0	15	3	271	281	0	15	4	363	366
0	15	5	550	548	0	15	6	343	348	0	15	7	79	56
0	15	8	313	312	0	15	9	76	116	0	15	10	183	168
0	15	11	217	222	0	15	12	265	269	0	16	0	588	591
0	16	1	160	168	0	16	2	132	118	0	16	3	320	320
0	16	4	515	505	0	16	5	158	162	0	16	6	267	267
0	16	7	344	342	0	16	8	135	153	0	16	9	203	207
0	17	1	230	233	0	17	2	342	336	0	17	3	255	265
0	17	4	962	948	0	17	5	354	352	0	17	6	279	262
0	17	7	215	221	0	17	8	198	200	0	17	9	113	97
0	17	12	173	163	0	18	0	313	324	0	18	1	216	217
0	18	2	448	449	0	18	3	139	137	0	18	4	190	192
0	18	5	480	479	0	18	6	62	95	0	18	7	282	276
0	18	8	396	399	0	18	9	141	138	0	19	1	148	142
0	19	2	209	213	0	19	3	372	367	0	19	4	424	424
0	19	5	316	311	0	19	6	254	248	0	19	7	142	141
0	19	8	434	430	0	20	0	1539	1521	0	20	1	194	190
0	20	2	220	224	0	20	3	56	79	0	20	4	84	113
0	20	5	149	127	0	20	6	164	178	0	20	7	200	200

Beetle et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	20	8	542	545	0	20	9	311	324	0	21	1	895	893
0	21	2	318	318	0	21	3	276	272	0	21	4	185	182
0	21	5	119	141	0	21	6	238	236	0	21	7	169	159
0	21	8	357	346	0	21	9	347	346	0	22	0	807	809
0	22	1	645	647	0	22	2	306	315	0	22	3	51	43
0	22	4	123	123	0	22	5	146	147	0	22	6	243	236
0	22	7	445	447	0	22	8	275	283	0	22	9	279	274
0	23	1	289	287	0	23	2	261	260	0	23	3	349	334
0	23	4	265	265	0	23	5	70	91	0	23	6	305	306
0	23	7	188	192	0	23	8	286	269	0	24	0	305	311
0	24	1	432	418	0	24	2	295	299	0	24	3	419	409
0	24	4	227	210	0	24	5	356	358	0	24	6	124	154
0	25	1	70	18	0	25	2	295	292	0	25	3	216	232
0	25	4	200	223	0	25	5	430	436	0	25	8	347	340
0	26	0	632	634	0	26	1	114	99	0	26	2	224	214
0	26	5	203	214	0	26	9	198	208	0	27	2	214	214
0	27	5	151	166	0	27	8	260	277	0	28	0	530	530
0	28	1	299	290	0	28	3	237	237	0	28	4	231	242
0	28	8	265	276	0	29	3	173	195	0	29	4	274	254
0	30	2	183	187	0	30	3	181	182	0	30	4	256	247
0	30	5	223	218	0	31	3	207	238	0	31	4	569	594
0	31	5	156	176	0	32	2	176	192	0	32	3	155	177
0	32	5	233	239	0	33	3	172	228	0	34	0	175	229
1	0	0	1295	1293	1	0	1	8434	8663	1	0	2	2572	2583
1	0	3	52	23	1	0	4	301	301	1	0	5	752	741
1	0	6	220	218	1	0	7	134	139	1	0	8	364	371
1	0	9	772	778	1	0	10	120	117	1	0	11	226	218
1	1	0	2132	2123	1	1	1	2618	2601	1	1	2	1436	1429
1	1	3	780	776	1	1	4	569	569	1	1	5	746	741
1	1	6	678	671	1	1	7	74	78	1	1	8	203	214
1	1	9	601	595	1	1	10	296	288	1	1	11	115	117
1	2	0	3574	3574	1	2	1	3579	3581	1	2	2	2428	2431
1	2	3	304	306	1	2	4	268	275	1	2	5	1028	1028
1	2	6	296	295	1	2	8	307	292	1	2	9	468	464
1	2	10	458	455	1	2	11	234	233	1	2	13	237	212
1	3	0	1036	1035	1	3	1	1997	2000	1	3	2	927	930
1	3	3	463	459	1	3	4	716	714	1	3	5	1505	1519
1	3	6	319	318	1	3	7	62	52	1	3	8	330	326
1	3	9	572	570	1	3	10	77	32	1	3	11	108	65
1	4	0	872	874	1	4	1	1638	1641	1	4	2	337	345
1	4	3	532	532	1	4	4	533	528	1	4	5	376	384
1	4	6	399	400	1	4	7	247	255	1	4	8	607	613
1	4	9	401	405	1	4	10	199	195	1	4	11	155	145
1	5	0	719	717	1	5	1	840	837	1	5	2	627	629
1	5	3	490	476	1	5	4	560	560	1	5	5	431	424
1	5	6	593	595	1	5	7	371	372	1	5	8	111	108
1	5	9	195	196	1	5	10	196	208	1	6	0	1090	1086
1	6	1	1700	1703	1	6	2	78	97	1	6	3	306	311
1	6	4	583	570	1	6	5	858	859	1	6	6	455	458
1	6	7	337	343	1	6	8	282	277	1	6	9	254	256
1	6	10	291	296	1	6	11	209	202	1	7	0	1149	1145
1	7	1	277	276	1	7	2	563	573	1	7	3	67	66
1	7	4	872	879	1	7	5	202	195	1	7	6	144	160
1	7	7	144	138	1	7	8	275	274	1	7	9	199	195
1	7	10	147	134	1	7	12	262	265	1	7	13	230	226
1	8	0	1509	1510	1	8	1	2138	2144	1	8	2	277	277
1	8	3	539	543	1	8	4	407	406	1	8	5	422	420
1	8	6	170	178	1	8	7	137	100	1	8	8	548	549
1	8	9	483	484	1	8	11	93	60	1	8	13	240	231
1	9	0	1567	1565	1	9	1	754	743	1	9	2	169	170
1	9	3	750	746	1	9	4	790	789	1	9	5	1535	1549
1	9	6	119	112	1	9	7	174	160	1	9	8	310	319
1	9	9	179	184	1	9	10	89	28	1	9	11	105	107
1	10	0	286	292	1	10	1	466	478	1	10	2	954	957

ent et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	10	3	554	566	1	10	4	363	368	1	10	5	483	481
1	10	6	516	515	1	10	7	367	360	1	10	8	100	87
1	10	9	86	93	1	10	10	178	166	1	11	0	467	467
1	11	1	1031	1038	1	11	2	779	782	1	11	3	661	658
1	11	4	946	944	1	11	5	1327	1331	1	11	6	557	568
1	11	7	196	214	1	11	8	78	85	1	11	9	237	234
1	11	10	119	71	1	12	0	512	501	1	12	1	664	659
1	12	2	649	650	1	12	3	354	357	1	12	4	929	932
1	12	5	444	440	1	12	6	739	746	1	12	7	233	238
1	12	8	177	178	1	12	9	494	499	1	12	10	174	188
1	13	0	164	175	1	13	1	909	915	1	13	2	374	365
1	13	3	189	192	1	13	4	438	437	1	13	5	410	422
1	13	6	441	446	1	13	7	213	209	1	13	8	103	111
1	13	9	187	181	1	13	10	236	249	1	13	11	128	164
1	14	0	757	756	1	14	1	776	777	1	14	2	400	392
1	14	3	578	585	1	14	4	301	305	1	14	5	669	670
1	14	6	450	442	1	14	7	180	176	1	14	8	107	140
1	14	9	281	297	1	14	10	290	296	1	15	0	377	375
1	15	1	208	203	1	15	2	781	793	1	15	3	201	207
1	15	4	386	395	1	15	5	164	161	1	15	6	466	459
1	15	7	270	267	1	15	8	139	139	1	15	9	44	56*
1	15	10	173	178	1	16	0	213	214	1	16	1	358	355
1	16	2	374	376	1	16	3	288	291	1	16	4	170	174
1	16	5	120	115	1	16	6	207	187	1	16	7	271	270
1	16	8	90	79	1	16	9	169	185	1	16	10	303	294
1	17	0	667	663	1	17	1	294	287	1	17	2	256	266
1	17	3	150	148	1	17	4	266	265	1	17	5	868	865
1	17	6	165	165	1	17	7	72	87	1	17	8	71	54
1	17	9	364	355	1	18	0	235	228	1	18	1	417	420
1	18	2	183	176	1	18	3	312	300	1	18	4	252	260
1	18	5	109	117	1	18	6	271	267	1	18	7	108	115
1	18	8	336	342	1	18	9	232	229	1	19	0	606	592
1	19	1	386	384	1	19	2	194	174	1	19	3	328	332
1	19	4	502	490	1	19	5	474	472	1	19	6	241	246
1	19	7	129	119	1	19	8	95	101	1	19	9	252	235
1	20	0	287	281	1	20	1	1137	1134	1	20	2	176	174
1	20	4	343	344	1	20	5	92	96	1	20	6	63	45
1	20	7	276	272	1	20	9	417	410	1	20	10	206	215
1	21	0	457	456	1	21	1	90	76	1	21	2	694	695
1	21	3	161	177	1	21	4	123	125	1	21	5	127	143
1	21	6	92	102	1	21	7	44	80*	1	21	9	181	160
1	21	10	197	173	1	22	0	760	753	1	22	1	1109	1111
1	22	2	408	402	1	22	3	309	315	1	22	4	419	418
1	22	5	120	112	1	22	6	138	126	1	22	7	266	258
1	22	8	309	298	1	22	9	235	229	1	23	0	471	464
1	23	1	143	117	1	23	2	396	389	1	23	3	276	270
1	23	4	155	137	1	23	5	324	328	1	23	6	184	189
1	23	9	256	265	1	24	0	477	475	1	24	1	38	43*
1	24	2	327	316	1	24	3	348	345	1	24	4	131	126
1	24	8	245	241	1	25	0	260	259	1	25	2	184	193
1	25	3	206	223	1	25	8	272	253	1	25	9	208	241
1	26	0	50	63*	1	26	1	478	488	1	26	2	175	182
1	26	3	217	202	1	26	6	268	252	1	27	0	214	233
1	27	1	165	125	1	27	5	158	176	1	28	0	296	318
1	28	1	471	488	1	28	5	173	162	1	29	0	245	242
1	29	2	173	168	1	29	5	317	313	1	30	2	327	337
1	30	3	194	198	1	30	5	198	194	1	31	5	368	408
1	33	0	141	158	2	0	0	502	503	2	0	1	1465	1467
2	0	2	3010	2987	2	0	3	552	533	2	0	4	612	611
2	0	5	56	15	2	0	6	216	210	2	0	7	203	207
2	0	8	98	100	2	0	9	313	297	2	0	10	562	550
2	0	11	122	5	2	1	0	1638	1646	2	1	1	1796	1781
2	1	2	1593	1586	2	1	3	1610	1606	2	1	4	209	222
2	1	5	589	583	2	1	6	657	651	2	1	7	144	137

Esert et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

3.00

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	1	8	130	128	2	1	10	150	156	2	1	11	221	238
2	2	0	605	609	2	2	1	1704	1710	2	2	2	2741	2721
2	2	3	673	674	2	2	4	538	533	2	2	5	420	431
2	2	6	369	375	2	2	7	404	394	2	2	8	175	155
2	2	9	381	373	2	2	10	258	265	2	2	11	252	272
2	3	0	1450	1455	2	3	1	1044	1049	2	3	2	1130	1124
2	3	3	501	487	2	3	4	674	677	2	3	5	330	326
2	3	6	541	539	2	3	7	165	164	2	3	9	100	99
2	3	10	584	575	2	3	11	116	126	2	4	0	1033	1025
2	4	1	1163	1157	2	4	2	701	698	2	4	3	297	295
2	4	4	346	344	2	4	5	342	345	2	4	6	200	208
2	4	7	492	486	2	4	8	102	63	2	4	9	332	310
2	4	10	368	347	2	4	11	98	109	2	5	0	1136	1142
2	5	1	812	814	2	5	2	149	146	2	5	3	617	631
2	5	4	159	156	2	5	5	321	308	2	5	6	716	713
2	5	7	357	366	2	5	8	128	111	2	5	9	381	379
2	5	10	199	195	2	5	11	129	141	2	6	0	803	799
2	6	1	663	657	2	6	2	1720	1724	2	6	3	148	137
2	6	4	514	520	2	6	5	221	211	2	6	6	711	717
2	6	7	156	167	2	6	8	305	299	2	6	9	230	210
2	6	10	303	307	2	6	11	106	122	2	7	0	708	707
2	7	1	487	477	2	7	2	675	675	2	7	3	430	430
2	7	4	134	152	2	7	5	853	839	2	7	6	267	263
2	7	7	126	137	2	7	8	54	60	2	7	10	107	98
2	8	0	410	405	2	8	1	248	241	2	8	2	1261	1259
2	8	3	168	160	2	8	4	282	284	2	8	5	664	662
2	8	6	527	528	2	8	8	198	191	2	8	9	375	380
2	8	10	205	200	2	9	0	991	998	2	9	1	1369	1369
2	9	2	591	587	2	9	3	401	407	2	9	4	409	420
2	9	5	143	160	2	9	6	1180	1186	2	9	7	261	276
2	9	8	241	240	2	9	9	290	275	2	9	10	79	71
2	10	0	276	289	2	10	1	422	423	2	10	2	188	199
2	10	3	326	331	2	10	4	127	124	2	10	5	384	388
2	10	6	464	460	2	10	7	367	377	2	10	8	146	145
2	10	9	192	189	2	10	10	144	156	2	11	0	1149	1148
2	11	1	629	627	2	11	2	75	83	2	11	3	651	655
2	11	4	388	391	2	11	5	266	264	2	11	6	874	864
2	11	7	229	235	2	11	8	142	128	2	11	9	105	72
2	11	10	115	86	2	12	0	91	106	2	12	1	265	259
2	12	2	727	734	2	12	3	149	158	2	12	4	318	317
2	12	5	708	715	2	12	6	415	411	2	12	7	636	640
2	12	8	200	197	2	12	9	139	137	2	13	0	495	490
2	13	1	92	79	2	13	2	628	636	2	13	3	351	361
2	13	4	317	316	2	13	5	553	555	2	13	6	218	232
2	13	7	284	285	2	13	8	104	89	2	13	9	59	94
2	14	0	533	543	2	14	1	341	338	2	14	2	625	634
2	14	3	133	130	2	14	4	422	432	2	14	5	354	347
2	14	6	620	625	2	14	7	188	207	2	14	8	207	199
2	14	9	69	66	2	14	10	149	144	2	15	0	424	430
2	15	1	368	373	2	15	2	72	76	2	15	3	851	860
2	15	5	374	375	2	15	6	29	34*	2	15	7	188	188
2	15	9	178	166	2	16	0	236	226	2	16	1	408	403
2	16	2	57	82	2	16	3	355	352	2	16	4	35	34*
2	16	5	261	262	2	16	6	150	143	2	16	7	265	257
2	16	8	194	215	2	17	0	29	31*	2	17	1	615	618
2	17	2	439	449	2	17	3	323	322	2	17	4	326	310
2	17	6	521	521	2	17	7	183	186	2	17	8	138	135
2	17	10	303	303	2	18	0	63	74	2	18	1	278	282
2	18	2	329	324	2	18	3	183	188	2	18	4	147	159
2	18	5	155	173	2	18	7	126	89	2	18	8	170	170
2	18	9	337	356	2	19	0	458	451	2	19	1	641	631
2	19	2	75	52	2	19	3	508	501	2	19	4	310	305
2	19	5	479	483	2	19	6	439	444	2	19	7	141	148
2	20	0	204	204	2	20	1	423	432	2	20	2	825	819

Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	20	4	305	315	2	20	5	198	206					
2	21	0	148	153	2	21	1	318	319					
2	21	3	370	378	2	21	4	152	127					
2	21	6	62	56	2	22	0	190	183					
2	22	2	1110	1113	2	22	3	436	433					
2	22	5	384	388	2	23	0	266	274					
2	23	2	342	335	2	23	3	360	347					
2	23	6	190	178	2	23	10	270	264					
2	24	1	422	422	2	24	2	122	114					
2	25	0	141	135	2	25	1	366	365					
2	25	6	171	192	2	25	9	205	199					
2	26	9	124	162	2	27	1	263	271					
2	27	5	148	137	2	28	2	400	405					
2	29	1	260	256	2	29	5	223	218					
2	30	1	296	307	2	30	3	150	185					
3	0	1	1289	1282	3	0	2	744	733					
3	0	4	499	505	3	0	5	145	157					
3	0	7	53	33	3	0	10	246	222					
3	1	0	268	266	3	1	1	614	602					
3	1	3	973	977	3	1	4	733	734					
3	1	6	154	148	3	1	7	343	335					
3	1	9	164	177	3	1	10	136	126					
3	2	1	1214	1211	3	2	2	830	822					
3	2	4	477	474	3	2	5	198	195					
3	2	7	184	182	3	2	8	130	137					
3	2	10	272	283	3	2	11	159	185					
3	3	1	732	727	3	3	2	884	879					
3	3	4	342	346	3	3	5	419	419					
3	3	7	389	374	3	3	8	146	147					
3	3	10	33	51*	3	3	11	301	316					
3	4	1	336	338	3	4	2	779	781					
3	4	4	173	164	3	4	5	115	133					
3	4	7	264	245	3	4	8	283	279					
3	4	10	223	219	3	5	0	410	410					
3	5	2	441	442	3	5	3	594	602					
3	5	5	348	342	3	5	6	431	421					
3	5	8	211	215	3	5	10	339	339					
3	6	0	361	363	3	6	1	263	262					
3	6	3	1122	1120	3	6	4	294	305					
3	6	6	181	180	3	6	7	345	340					
3	6	9	190	177	3	6	10	174	169					
3	7	1	391	384	3	7	2	264	266					
3	7	4	518	520	3	7	5	130	114					
3	7	7	336	331	3	7	8	59	51					
3	7	10	195	167	3	8	0	225	226					
3	8	2	305	306	3	8	3	397	396					
3	8	5	388	391	3	8	6	461	467					
3	8	9	134	92	3	9	0	1013	1024					
3	9	2	356	358	3	9	3	574	576					
3	9	5	251	238	3	9	6	82	36					
3	9	8	226	246	3	9	9	189	172					
3	10	1	338	334	3	10	2	235	234					
3	10	4	40	77	3	10	5	424	422					
3	10	7	256	249	3	10	8	467	461					
3	10	11	179	211	3	11	0	1094	1093					
3	11	2	315	307	3	11	3	338	335					
3	11	5	232	221	3	11	6	108	126					
3	11	8	113	143	3	11	9	79	19					
3	12	1	493	495	3	12	2	313	314					
3	12	4	240	230	3	12	5	303	304					
3	12	7	322	309	3	12	8	210	213					
3	13	0	233	235	3	13	1	176	172					
3	13	3	626	613	3	13	4	122	104					
3	13	6	400	389	3	13	7	265	266					

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	10	4	263	259	4	10	5	315	308	4	10	6	376	364
4	10	7	163	162	4	10	8	95	78	4	11	0	899	903
4	11	1	548	546	4	11	2	337	349	4	11	3	105	120
4	11	4	169	182	4	11	5	314	322	4	11	6	83	74
4	11	7	136	138	4	11	8	293	283	4	12	0	835	836
4	12	1	616	623	4	12	2	257	254	4	12	3	399	394
4	12	4	427	431	4	12	5	74	75	4	12	6	202	205
4	12	7	281	280	4	12	8	177	189	4	12	9	217	183
4	13	0	464	467	4	13	1	324	323	4	13	2	431	419
4	13	3	323	317	4	13	4	581	580	4	13	5	206	200
4	13	6	124	125	4	13	7	161	173	4	13	8	284	267
4	14	0	318	317	4	14	1	283	275	4	14	2	91	106
4	14	3	100	94	4	14	4	147	140	4	14	5	87	110
4	14	6	87	74	4	14	7	280	300	4	14	8	327	296
4	15	0	314	321	4	15	1	277	263	4	15	2	174	178
4	15	3	175	166	4	15	4	92	14	4	15	5	428	423
4	15	6	97	90	4	15	7	268	275	4	16	0	415	414
4	16	1	112	107	4	16	2	329	320	4	16	3	211	221
4	16	4	334	329	4	16	5	225	216	4	16	6	122	123
4	16	7	231	221	4	17	0	639	636	4	17	1	140	158
4	17	2	177	183	4	17	3	310	306	4	17	4	270	283
4	17	5	116	126	4	17	6	94	107	4	18	0	688	682
4	18	1	40	75*	4	18	2	117	139	4	18	3	159	172
4	18	4	301	292	4	18	5	159	140	4	18	8	274	255
4	19	0	121	125	4	19	1	296	292	4	19	2	146	140
4	19	3	318	322	4	19	4	292	313	4	19	5	135	135
4	20	0	114	90	4	20	1	345	350	4	20	2	91	85
4	20	3	164	156	4	20	4	650	638	4	20	5	256	232
4	21	0	218	232	4	21	1	173	150	4	21	2	295	287
4	21	3	375	373	4	21	4	428	422	4	21	5	294	327
4	22	0	143	159	4	22	1	404	395	4	22	2	50	62*
4	22	3	248	238	4	23	0	323	319	4	23	1	124	131
4	23	3	423	422	4	23	5	247	249	4	24	0	280	269
4	24	1	343	352	4	24	4	343	326	4	25	4	184	188
4	26	0	326	314	4	26	1	274	292	4	28	3	141	181
4	28	4	252	261	4	29	3	232	258	4	29	4	156	165
4	30	0	373	350	4	31	0	294	302	5	0	0	853	840
5	0	1	439	437	5	0	2	270	255	5	0	3	140	155
5	0	4	16	16*	5	0	5	294	281	5	0	7	44	123*
5	0	8	67	9	5	1	0	700	710	5	1	1	539	543
5	1	2	109	100	5	1	3	101	102	5	1	4	437	430
5	1	5	657	649	5	1	6	323	311	5	1	7	115	130
5	1	8	208	196	5	1	9	172	165	5	2	0	651	653
5	2	1	841	844	5	2	2	168	151	5	2	3	147	148
5	2	4	244	234	5	2	5	601	594	5	2	6	193	179
5	2	7	97	68	5	2	8	190	161	5	3	0	126	126
5	3	1	184	183	5	3	2	87	87	5	3	3	266	273
5	3	4	751	745	5	3	5	353	355	5	3	6	296	295
5	3	8	62	69	5	4	0	324	322	5	4	1	709	717
5	4	2	250	238	5	4	3	135	137	5	4	4	396	386
5	4	5	209	226	5	4	6	86	69	5	4	7	114	117
5	4	8	44	48*	5	5	0	392	395	5	5	1	427	429
5	5	2	270	271	5	5	3	276	275	5	5	4	299	296
5	5	5	77	73	5	5	6	392	391	5	5	7	99	84
5	5	8	122	102	5	6	0	465	471	5	6	1	234	232
5	6	2	442	448	5	6	3	40	71*	5	6	4	177	176
5	6	5	242	237	5	6	6	140	122	5	6	7	148	148
5	6	8	240	239	5	6	9	192	208	5	7	0	256	257
5	7	1	282	292	5	7	2	176	182	5	7	3	288	285
5	7	4	112	83	5	7	5	338	323	5	7	6	92	57
5	7	7	224	229	5	7	8	280	270	5	8	0	910	919
5	8	1	493	495	5	8	2	330	342	5	8	3	288	286
5	8	4	177	195	5	8	5	277	283	5	8	6	124	107
5	8	7	184	168	5	9	0	743	740	5	9	1	547	535

Table of str. factors of NPP (Multipolar Refinement)

0.0. A

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	9	2	301	306	5	9	3	156	150	5	9	4	348	334
5	9	5	156	130	5	9	7	15	93*	5	10	0	250	249
5	10	1	1124	1121	5	10	2	157	175	5	10	3	415	410
5	10	4	268	276	5	10	5	101	127	5	10	6	144	113
5	10	7	147	129	5	11	0	465	470	5	11	1	502	488
5	11	2	557	538	5	11	3	37	79*	5	11	4	259	248
5	11	5	277	268	5	11	6	101	93	5	11	7	90	62
5	12	0	668	670	5	12	1	714	712	5	12	2	498	496
5	12	3	66	97	5	12	4	154	150	5	12	5	341	322
5	12	8	207	213	5	13	0	290	291	5	13	1	723	719
5	13	2	232	230	5	13	3	126	124	5	13	4	263	273
5	13	5	339	338	5	14	0	297	305	5	14	1	301	303
5	14	2	153	124	5	14	3	220	221	5	14	4	206	190
5	14	8	230	203	5	14	9	311	278	5	15	0	198	186
5	15	1	283	276	5	15	2	217	223	5	15	3	110	108
5	15	5	115	128	5	15	6	281	277	5	16	0	376	366
5	16	1	448	436	5	16	3	72	76	5	16	4	115	104
5	16	5	260	279	5	17	0	324	318	5	17	1	206	206
5	17	2	239	238	5	17	3	124	103	5	17	4	257	244
5	18	0	284	283	5	18	1	496	486	5	18	2	117	103
5	18	3	152	91	5	18	4	132	121	5	18	5	320	326
5	19	0	239	250	5	19	1	100	91	5	19	2	248	239
5	19	3	118	116	5	19	4	275	261	5	19	5	308	310
5	20	0	374	378	5	20	1	163	141	5	20	2	116	63
5	20	5	236	244	5	21	0	41	69*	5	21	5	272	281
5	21	6	220	213	5	22	0	165	172	5	22	1	254	263
5	22	5	174	202	5	23	1	194	200	5	24	3	231	236
5	25	2	272	248	5	26	2	289	288	5	27	5	173	180
5	28	0	220	253	5	30	1	280	324	6	0	0	217	216
6	0	1	397	395	6	0	2	366	378	6	0	3	225	215
6	0	4	71	81	6	0	5	278	263	6	0	7	67	48
6	1	0	187	179	6	1	1	259	266	6	1	2	336	332
6	1	3	245	257	6	1	4	160	158	6	1	5	423	422
6	1	6	400	386	6	1	7	146	150	6	2	0	341	348
6	2	1	180	170	6	2	2	149	165	6	2	3	3	85*
6	2	4	34	80*	6	2	6	328	307	6	2	7	170	174
6	3	0	177	175	6	3	1	487	477	6	3	2	387	382
6	3	3	195	181	6	3	4	78	60	6	3	5	388	396
6	3	6	244	237	6	4	0	186	188	6	4	1	213	209
6	4	2	590	583	6	4	3	222	221	6	4	4	189	181
6	4	5	222	218	6	4	6	308	302	6	4	7	84	54
6	5	0	207	210	6	5	1	168	169	6	5	2	294	300
6	5	3	153	153	6	5	4	29	35*	6	5	5	388	389
6	6	0	62	47	6	6	1	549	558	6	6	2	89	86
6	6	3	152	157	6	6	4	152	188	6	6	5	124	117
6	6	6	243	238	6	7	0	311	313	6	7	1	69	111
6	7	2	187	216	6	7	3	110	136	6	7	4	66	102
6	7	5	193	181	6	7	6	246	226	6	8	0	411	412
6	8	1	635	624	6	8	2	341	345	6	8	3	233	216
6	8	4	53	42	6	8	5	180	179	6	8	6	52	26*
6	9	0	229	237	6	9	1	606	597	6	9	2	325	315
6	9	3	103	105	6	9	4	153	161	6	9	5	114	86
6	10	0	138	133	6	10	1	140	158	6	10	2	909	909
6	10	3	87	108	6	10	4	165	191	6	10	5	195	192
6	10	6	189	179	6	11	0	280	275	6	11	1	531	534
6	11	2	271	267	6	11	3	370	363	6	11	4	198	195
6	11	5	78	88	6	12	0	80	72	6	12	1	479	468
6	12	2	403	393	6	12	4	150	126	6	12	5	151	123
6	13	0	274	279	6	13	1	196	203	6	13	2	512	510
6	13	3	123	140	6	13	5	69	120	6	14	0	169	156
6	14	1	299	293	6	14	2	97	106	6	14	3	143	130
6	14	4	201	177	6	14	6	223	245	6	15	0	130	117
6	15	1	165	192	6	15	2	231	206	6	15	3	183	177
6	16	0	121	101	6	16	1	289	279	6	16	2	310	318

ent et al. Struct. factors of NPP (Multipolar Refinement)

...

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
6	16	6	84	87	6	17	0	41	45	6	17	3	115	117
6	17	2	79	66	6	18	0	89	89	6	18	1	39	42
6	18	0	89	89	6	19	0	62	51	6	19	1	22	17
6	19	0	62	51	6	19	5	143	131	6	20	0	51	49
6	21	1	55	68	6	21	6	70	84	6	21	6	70	84
6	23	1	50	88	6	24	2	140	139	6	24	2	140	139
7	0	0	652	674	7	0	1	98	103	7	0	1	98	103
7	0	4	16	23	7	0	5	38	39	7	0	5	38	39
7	1	1	45	41	7	1	2	113	113	7	1	2	113	113
7	1	4	27	17	7	1	5	51	57	7	1	5	51	57
7	2	1	28	16	7	2	2	43	61	7	2	2	43	61
7	2	4	17	34	7	2	5	12	11*	7	2	5	12	11*
7	3	1	108	110	7	3	2	272	268	7	3	2	272	268
7	3	4	36	38	7	3	6	146	154	7	3	6	146	154
7	4	1	59	74	7	4	2	47	62	7	4	2	47	62
7	4	4	83	94	7	4	5	4	18*	7	4	5	4	18*
7	5	0	125	130	7	5	1	32	28	7	5	1	32	28
7	5	4	62	63	7	5	5	17	19	7	5	5	17	19
7	6	1	48	59	7	6	2	485	494	7	6	2	485	494
7	6	4	31	24	7	6	5	50	48	7	6	5	50	48
7	7	1	45	42	7	7	2	116	109	7	7	2	116	109
7	7	0	31	29	7	7	1	85	107	7	7	1	85	107
7	8	3	250	243	7	8	4	34	25	7	8	4	34	25
7	9	0	237	232	7	9	1	152	168	7	9	1	152	168
7	9	3	176	188	7	9	4	47	33	7	9	4	47	33
7	10	1	1	2*	7	10	2	9	19*	7	10	2	9	19*
7	10	4	10	19*	7	11	0	144	139	7	11	0	144	139
7	11	2	174	169	7	11	3	14	19	7	11	3	14	19
7	12	1	11	16*	7	12	2	101	112	7	12	2	101	112
7	13	0	2	7*	7	13	1	34	33	7	13	1	34	33
7	14	0	98	93	7	14	1	15	27	7	14	1	15	27
7	15	0	64	58	7	15	1	0	6*	7	15	1	0	6*
7	16	0	105	94	7	17	1	60	71	7	17	1	60	71
7	17	3	109	102	7	19	2	75	90	7	19	2	75	90
8	0	0	177	184	8	0	1	23	20	8	0	1	23	20
8	1	1	34	22	8	1	2	52	51	8	1	2	52	51
8	2	1	192	197	8	2	2	7	28*	8	2	2	7	28*
8	3	1	60	48	8	3	3	39	50	8	3	3	39	50
8	4	0	124	104	8	4	1	122	125	8	4	1	122	125
8	4	3	2	0*	8	5	0	52	55	8	5	0	52	55
8	5	2	14	5	8	6	0	28	53	8	6	0	28	53
8	6	2	76	54	8	6	3	165	182	8	6	3	165	182
8	7	1	18	26	8	7	2	19	3	8	7	2	19	3
8	8	0	75	78	8	8	1	29	21	8	8	1	29	21
8	9	0	165	173	8	9	1	58	58	8	9	1	58	58
8	10	1	6	3*	8	10	4	100	111	8	10	4	100	111
8	12	0	89	72	8	14	3	168	183	8	14	3	168	183
8	19	3	72	96	8	21	0	100	123	8	21	0	100	123
9	0	0	213	238	9	0	1	250	256	9	0	1	250	256
9	2	0	262	249	9	3	0	89	92	9	3	0	89	92
9	8	0	71	63	9	18	0	93	89	9	18	0	93	89
10	0	1	78	93	10	0	1	65	124	10	0	1	65	124