

CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1997, 9(12), 2694-2696, DOI:[10.1021/cm9704286](https://doi.org/10.1021/cm9704286)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at

<http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	VOBOP01
Empirical formula	$C_4H_{25}B_2N_4O_{27.5}P_4V_5$
Formula weight	969.48
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	Fdd2
Unit cell dimensions	$a = 14.206(3)$ Å $\alpha = 90^\circ$ $b = 33.308(7)$ Å $\beta = 90^\circ$ $c = 11.587(2)$ Å $\gamma = 90^\circ$
Volume, Z	$5483(2)$ Å ³ , 8
Density (calculated)	2.349 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.997 mm ⁻¹
F(000)	3856
Crystal size	0.21 x 0.19 x 0.17 mm
θ range for data collection	2.92 to 30.06°
Limiting indices	$0 \leq h \leq 20$, $-46 \leq k \leq 0$, $-16 \leq l \leq 0$
Reflections collected	2101
Independent reflections	2101 ($R_{int} = 0.0324$)
Absorption correction	Psi
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	2100 / 1 / 215
Goodness-of-fit on F^2	1.106
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0382$, $wR2 = 0.1129$
R indices (all data)	$R1 = 0.0582$, $wR2 = 0.1234$
Absolute structure parameter	0.03(5)
Largest diff. peak and hole	0.957 and -0.765 eÅ ⁻³

Table 2. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
V(1)	497(1)	1101(1)	860(1)	12(1)
V(2)	2076(1)	1414(1)	-663(1)	12(1)
V(3)	-2500	2500	1520(1)	10(1)
P(1)	-1059(1)	1766(1)	595(1)	11(1)
P(2)	3713(1)	766(1)	-457(2)	11(1)
O(1)	-38(4)	698(2)	458(5)	23(1)
O(2)	2479(4)	1821(2)	-155(5)	23(1)
O(3)	1853(3)	1061(1)	659(4)	13(1)
O(4)	-2500	2500	2892(6)	17(1)
O(5)	-2500	2500	-473(7)	25(2)
O(6)	-434(3)	1502(2)	1350(4)	14(1)
O(7)	-439(3)	1947(1)	-397(5)	12(1)
O(8)	-1449(3)	2110(2)	1286(4)	14(1)
O(9)	-1814(4)	1503(2)	30(4)	16(1)
O(10)	3107(4)	1062(2)	-1152(4)	17(1)
O(11)	3075(3)	568(1)	494(4)	12(1)
O(12)	4070(3)	446(2)	-1254(4)	14(1)
O(13)	4499(3)	997(2)	165(5)	18(1)
O(14)	699(3)	1413(2)	-566(4)	13(1)
O(15)	2500	2500	1566(13)	59(7)
O(16)	2500	2500	-281(7)	28(2)
N(1)	-1152(5)	2474(2)	4752(7)	28(1)
N(2)	458(6)	1652(2)	3975(7)	42(2)
C(1)	-472(7)	2167(3)	4929(9)	39(2)
C(2)	-292(11)	1937(5)	3808(11)	71(4)
B(1)	36(5)	1666(2)	-1217(7)	11(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

V(1)-O(1)	1.610(6)	V(1)-O(3)	1.944(4)
V(1)-O(6)	1.964(5)	V(1)-O(14)	1.973(5)
V(1)-O(9)#1	1.983(5)	V(1)-V(2)	3.0391(14)
V(2)-O(2)	1.586(6)	V(2)-O(3)	1.956(5)
V(2)-O(10)	1.959(5)	V(2)-O(14)	1.960(4)
V(2)-O(13)#2	1.964(5)	V(3)-O(4)	1.590(7)
V(3)-O(8)#3	1.999(5)	V(3)-O(8)	1.999(5)
V(3)-O(12)#4	2.012(5)	V(3)-O(12)#5	2.012(5)
V(3)-O(5)	2.309(8)	P(1)-O(8)	1.502(5)
P(1)-O(6)	1.526(5)	P(1)-O(9)	1.533(5)
P(1)-O(7)	1.568(5)	P(2)-O(12)	1.498(5)
P(2)-O(13)	1.535(5)	P(2)-O(10)	1.537(5)
P(2)-O(11)	1.572(5)	O(3)-B(1)#1	1.428(9)
O(7)-B(1)	1.494(8)	O(9)-V(1)#2	1.983(5)
O(11)-B(1)#1	1.486(8)	O(12)-V(3)#6	2.012(5)
O(13)-V(2)#1	1.964(5)	O(14)-B(1)	1.474(8)
N(1)-C(1)	1.423(11)	N(2)-C(2)	1.44(2)
C(1)-C(2)	1.53(2)	B(1)-O(3)#2	1.428(9)
B(1)-O(11)#2	1.486(8)		
O(1)-V(1)-O(3)	112.2(3)	O(1)-V(1)-O(6)	109.4(3)
O(3)-V(1)-O(6)	138.4(2)	O(1)-V(1)-O(14)	105.4(3)
O(3)-V(1)-O(14)	77.9(2)	O(6)-V(1)-O(14)	89.0(2)
O(1)-V(1)-O(9)#1	101.6(3)	O(3)-V(1)-O(9)#1	88.4(2)
O(6)-V(1)-O(9)#1	85.8(2)	O(14)-V(1)-O(9)#1	152.7(2)
O(2)-V(2)-O(3)	106.4(3)	O(2)-V(2)-O(10)	110.5(3)
O(3)-V(2)-O(10)	89.3(2)	O(2)-V(2)-O(14)	109.9(3)
O(3)-V(2)-O(14)	78.0(2)	O(10)-V(2)-O(14)	139.6(2)
O(2)-V(2)-O(13)#2	104.9(3)	O(3)-V(2)-O(13)#2	148.7(2)
O(10)-V(2)-O(13)#2	81.2(2)	O(14)-V(2)-O(13)#2	90.0(2)
O(4)-V(3)-O(8)#3	97.80(14)	O(4)-V(3)-O(8)	97.80(14)
O(8)#3-V(3)-O(8)	164.4(3)	O(4)-V(3)-O(12)#4	99.1(2)
O(8)#3-V(3)-O(12)#4	89.4(2)	O(8)-V(3)-O(12)#4	88.2(2)
O(4)-V(3)-O(12)#5	99.1(2)	O(8)#3-V(3)-O(12)#5	88.2(2)
O(8)-V(3)-O(12)#5	89.4(2)	O(12)#4-V(3)-O(12)#5	161.9(3)
O(4)-V(3)-O(5)	180.000(2)	O(8)#3-V(3)-O(5)	82.20(14)
O(8)-V(3)-O(5)	82.20(14)	O(12)#4-V(3)-O(5)	80.9(2)
O(12)#5-V(3)-O(5)	80.9(2)	O(8)-P(1)-O(6)	110.4(3)
O(8)-P(1)-O(9)	113.9(3)	O(6)-P(1)-O(9)	108.7(3)
O(8)-P(1)-O(7)	107.8(3)	O(6)-P(1)-O(7)	108.4(3)
O(9)-P(1)-O(7)	107.4(3)	O(12)-P(2)-O(13)	113.6(3)
O(12)-P(2)-O(10)	108.9(3)	O(13)-P(2)-O(10)	109.3(3)
O(12)-P(2)-O(11)	109.2(3)	O(13)-P(2)-O(11)	107.5(3)
O(10)-P(2)-O(11)	108.3(3)	B(1)#1-O(3)-V(1)	130.4(4)
B(1)#1-O(3)-V(2)	127.2(4)	V(1)-O(3)-V(2)	102.4(2)
P(1)-O(6)-V(1)	128.2(3)	B(1)-O(7)-P(1)	118.7(4)
P(1)-O(8)-V(3)	147.5(3)	P(1)-O(9)-V(1)#2	127.7(3)
P(2)-O(10)-V(2)	130.7(3)	B(1)#1-O(11)-P(2)	118.6(4)
P(2)-O(12)-V(3)#6	130.5(3)	P(2)-O(13)-V(2)#1	125.4(3)
B(1)-O(14)-V(2)	127.4(4)	B(1)-O(14)-V(1)	129.7(4)
V(2)-O(14)-V(1)	101.2(2)	N(1)-C(1)-C(2)	110.6(9)
N(2)-C(2)-C(1)	109.8(10)	O(3)#2-B(1)-O(14)	112.9(5)
O(3)#2-B(1)-O(11)#2	110.8(6)	O(14)-B(1)-O(11)#2	109.1(6)

O(3)#2-B(1)-O(7) 110.3(6) O(14)-B(1)-O(7) 108.8(6)
O(11)#2-B(1)-O(7) 104.5(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 $x+1/4, -y+1/4, z+1/4$ #2 $x-1/4, -y+1/4, z-1/4$ #3 $-x-1/2, -y+1/2, z$
#4 $-x+1/4, y+1/4, z+1/4$ #5 $x-3/4, -y+1/4, z+1/4$ #6 $x+3/4, -y+1/4, z-1/4$

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
V(1)	10 (1)	14 (1)	11 (1)	1 (1)	1 (1)	2 (1)
V(2)	11 (1)	13 (1)	11 (1)	2 (1)	1 (1)	1 (1)
V(3)	9 (1)	10 (1)	12 (1)	0	0	0 (1)
P(1)	11 (1)	11 (1)	9 (1)	-1 (1)	1 (1)	1 (1)
P(2)	11 (1)	12 (1)	10 (1)	-1 (1)	0 (1)	2 (1)
O(1)	24 (3)	25 (3)	21 (3)	-1 (2)	0 (2)	-8 (2)
O(2)	27 (3)	18 (3)	24 (3)	-2 (2)	-4 (2)	-4 (2)
O(3)	12 (2)	18 (2)	10 (2)	6 (2)	1 (2)	2 (2)
O(4)	18 (3)	23 (4)	10 (3)	0	0	5 (3)
O(5)	43 (5)	21 (4)	11 (3)	0	0	2 (3)
O(6)	18 (2)	15 (2)	9 (2)	1 (2)	1 (2)	6 (2)
O(7)	13 (2)	9 (2)	15 (2)	-1 (2)	2 (2)	-2 (2)
O(8)	13 (2)	13 (2)	16 (2)	-5 (2)	0 (2)	5 (2)
O(9)	17 (2)	19 (2)	12 (2)	-3 (2)	1 (2)	-7 (2)
O(10)	20 (2)	18 (2)	13 (2)	5 (2)	5 (2)	7 (2)
O(11)	14 (2)	13 (2)	8 (2)	1 (2)	0 (2)	2 (2)
O(12)	12 (2)	13 (2)	17 (2)	-2 (2)	-3 (2)	5 (2)
O(13)	15 (2)	25 (3)	13 (2)	-6 (2)	1 (2)	-5 (2)
O(14)	8 (2)	18 (2)	13 (2)	2 (2)	0 (2)	4 (2)
O(15)	156 (24)	16 (7)	6 (7)	0	0	7 (12)
O(16)	36 (5)	27 (4)	21 (4)	0	0	9 (3)
N(1)	25 (3)	18 (3)	40 (4)	8 (3)	0 (3)	3 (2)
N(2)	64 (5)	31 (4)	30 (4)	-4 (3)	16 (4)	6 (4)
C(1)	39 (5)	36 (5)	43 (5)	-1 (4)	-6 (4)	9 (4)
C(2)	79 (9)	94 (10)	39 (6)	-15 (7)	-1 (7)	41 (8)
B(1)	10 (2)	11 (2)	12 (3)	2 (3)	0 (2)	3 (3)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	-1249(5)	2605(2)	5411(7)	42
H(1B)	-1690(5)	2365(2)	4514(7)	42
H(1C)	-943(5)	2645(2)	4220(7)	42
H(2A)	560(6)	1519(2)	3321(7)	62
H(2B)	298(6)	1480(2)	4528(7)	62
H(2C)	980(6)	1782(2)	4181(7)	62
H(1D)	-695(7)	1983(3)	5516(9)	47
H(1E)	112(7)	2285(3)	5199(9)	47
H(2D)	-860(11)	1797(5)	3575(11)	85
H(2E)	-122(11)	2124(5)	3200(11)	85

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
0	0-16	1820	1791	41	5	1-13	733	765	42	10	6-12	816	855	47	9	7-11	919	927	39	6	4-10	866	865	35
4	0-16	874	852	48	7	1-13	571	524	50	12	6-12	701	635	43	11	7-11	562	476	48	8	4-10	514	451	51
2	2-16	576	604	69	9	1-13	355	172	292	0	8-12	2981	3034	56	13	7-11	466	529	177	10	4-10	1879	1887	43
0	4-16	1604	1567	40	11	1-13	821	773	46	2	8-12	1541	1534	35	1	9-11	81	131	81	12	4-10	559	582	55
2	4-16	281	481	281	1	3-13	605	649	50	4	8-12	346	246	179	3	9-11	181	40	180	14	4-10	1220	1278	39
2	6-16	560	546	67	3	3-13	1249	1211	35	6	8-12	548	569	58	5	9-11	968	950	34	0	6-10	1663	1665	36
0	8-16	998	945	44	5	3-13	1450	1403	32	8	8-12	900	756	38	7	9-11	1030	1078	34	2	6-10	1433	1447	31
2	8-16	365	258	279	7	3-13	938	926	39	10	8-12	405	424	158	9	9-11	1471	1482	32	4	6-10	661	679	37
1	1-15	394	462	222	9	3-13	379	427	285	12	8-12	1449	1367	37	11	9-11	498	526	58	6	6-10	326	302	67
3	1-15	1420	1389	36	11	3-13	694	677	51	2	10-12	1655	1646	41	13	9-11	273	255	221	8	6-10	2250	2091	56
5	1-15	1100	1035	39	1	5-13	1787	1759	43	4	10-12	230	476	229	1	11-11	2194	2193	54	10	6-10	209	266	208
7	1-15	956	982	44	3	5-13	663	673	44	6	10-12	1081	975	34	3	11-11	1976	1922	41	12	6-10	1401	1377	32
1	3-15	389	638	333	5	5-13	1165	1138	36	8	10-12	0	336	1	5	11-11	372	449	179	14	6-10	379	328	77
3	3-15	811	800	47	7	5-13	1049	999	39	10	10-12	1619	1605	36	7	11-11	1880	1893	43	2	8-10	1854	1926	37
5	3-15	587	588	66	9	5-13	1112	1123	39	12	10-12	891	842	45	9	11-11	925	892	39	4	8-10	342	365	181
7	3-15	772	700	50	11	5-13	1374	1304	38	0	12-12	1826	1865	42	11	11-11	713	754	51	6	8-10	1013	979	32
1	5-15	942	921	40	1	7-13	730	709	41	2	12-12	391	445	188	13	11-11	1502	1524	40	8	8-10	746	684	38
3	5-15	956	1048	43	3	7-13	0	458	1	4	12-12	431	545	153	1	13-11	1315	1327	30	10	8-10	1498	1462	36
5	5-15	444	401	75	5	7-13	1625	1644	37	6	12-12	2191	2083	42	3	13-11	404	503	191	12	8-10	832	799	39
7	5-15	670	719	51	7	7-13	1588	1508	39	8	12-12	737	752	45	5	13-11	902	945	36	14	8-10	559	530	57
1	7-15	992	1059	44	9	7-13	824	870	50	10	12-12	518	555	69	7	13-11	207	382	207	0	10-10	3107	3158	49
3	7-15	593	481	53	11	7-13	698	670	54	12	12-12	959	868	41	9	13-11	402	308	157	2	10-10	2181	2228	53
5	7-15	646	696	55	1	9-13	892	793	34	2	14-12	2315	2344	42	11	13-11	129	479	129	4	10-10	2010	2035	37
7	7-15	700	750	55	3	9-13	1459	1515	33	4	14-12	0	158	1	13	13-11	889	927	46	6	10-10	1200	1192	31
1	9-15	1410	1443	37	5	9-13	1114	1187	37	6	14-12	933	922	37	1	15-11	1768	1804	41	8	10-10	2090	2097	42
3	9-15	588	589	60	7	9-13	634	637	50	8	14-12	412	214	162	3	15-11	876	908	36	10	10-10	1007	928	35
5	9-15	606	734	68	9	9-13	1154	1111	35	10	14-12	2183	2204	48	5	15-11	806	911	43	12	10-10	1653	1655	39
1	11-15	760	742	50	11	9-13	707	607	54	12	14-12	168	206	168	7	15-11	436	413	63	14	10-10	435	580	198
3	11-15	839	850	44	1	11-13	497	457	55	0	16-12	1291	1274	32	9	15-11	805	791	41	2	12-10	1231	1298	30
5	11-15	89	436	89	3	11-13	426	436	65	2	16-12	258	203	258	11	15-11	0	118	1	4	12-10	888	929	33
1	13-15	1170	1273	43	5	11-13	971	968	41	4	16-12	436	375	60	13	15-11	1035	974	41	6	12-10	990	963	35
3	13-15	620	679	52	7	11-13	1080	1076	37	6	16-12	2209	2153	43	1	17-11	1165	1123	33	8	12-10	661	684	47
5	13-15	383	395	233	9	11-13	530	357	52	8	16-12	793	749	45	3	17-11	1631	1595	35	10	12-10	862	809	39
1	15-15	611	573	60	11	11-13	693	727	58	10	16-12	1141	1164	38	5	17-11	387	166	147	12	12-10	851	741	42
3	15-15	582	630	64	1	13-13	374	511	199	2	18-12	1641	1669	37	7	17-11	943	977	36	14	12-10	839	830	45
1	17-15	602	540	56	3	13-13	1489	1494	34	4	18-12	530	540	58	9	17-11	1220	1231	35	0	14-10	4755	4814	50
3	17-15	734	625	52	5	13-13	351	331	135	6	18-12	932	917	43	11	17-11	567	537	65	2	14-10	219	121	219
2	0-14	1143	1166	36	7	13-13	511	495	65	8	18-12	194	249	194	1	19-11	500	482	55	4	14-10	815	790	37
6	0-14	959	923	41	9	13-13	901	858	44	10	18-12	2493	2441	48	3	19-11	575	485	43	6	14-10	1106	1131	33
10	0-14	1224	1270	41	1	15-13	878	868	37	0	20-12	766	848	46	5	19-11	610	707	54	8	14-10	1379	1362	31
0	2-14	1078	1155	38	3	15-13	1290	1203	33	2	20-12	344	647	343	7	19-11	582	552	52	10	14-10	599	604	52
2	2-14	1008	1076	39	5	15-13	590	514	56	4	20-12	701	689	49	9	19-11	877	925	44	12	14-10	1965	1953	47
4	2-14	1475	1434	35	7	15-13	495	487	66	6	20-12	911	954	41	11	19-11	618	551	57	14	14-10	323	211	137
6	2-14	1537	1560	34	9	15-13	240	619	240	8	20-12	831	796	46	1	21-11	754	735	39	2	16-10	520	465	43
8	2-14	546	601	60	1	17-13	676	671	44	10	20-12	382	475	139	3	21-11	1352	1354	33	4	16-10	598	633	47
10	2-14	384	436	98	3	17-13	1005	961	36	2	22-12	1234	1268	36	5	21-11	1341	1346	35	6	16-10	816	795	38
2	4-14	967	916	40	5	17-13	1018	1013	41	4	22-12	669	676	48	7	21-11	1023	1037	38	8	16-10	992	996	37
4	4-14	348	203	196	7	17-13	711	686	47	6	22-12	788	806	45	9	21-11	1643	1671	36	10	16-10	782	815	48
6	4-14	374	417																					

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	30	-10	858	921	43	7	19	-9	1536	1458	35	8	8	-8	2094	2097	37	2	32	-8	373	588	275	13	15	-7	448	536	74
4	30	-10	0	116	1	9	19	-9	735	739	37	10	8	-8	532	510	45	4	32	-8	0	298	1	15	15	-7	707	663	49
6	30	-10	1409	1443	38	11	19	-9	292	216	291	12	8	-8	462	461	144	6	32	-8	518	441	52	1	17	-7	612	654	35
8	30	-10	761	790	50	13	19	-9	999	1009	45	14	8	-8	275	398	275	8	32	-8	0	332	1	3	17	-7	739	686	33
2	32	-10	1521	1507	37	1	21	-9	1410	1406	34	16	8	-8	558	590	61	10	32	-8	413	246	163	5	17	-7	560	599	42
4	32	-10	96	130	96	3	21	-9	1080	1155	34	2	10	-8	2020	1931	44	2	34	-8	286	409	285	7	17	-7	954	961	29
6	32	-10	369	317	112	5	21	-9	1143	1165	33	4	10	-8	1127	1065	26	4	34	-8	713	689	49	9	17	-7	1002	977	33
8	32	-10	643	590	55	7	21	-9	1453	1390	35	6	10	-8	806	788	32	6	34	-8	1016	959	38	11	17	-7	496	414	59
0	34	-10	1016	1021	39	9	21	-9	962	879	37	8	10	-8	1282	1253	28	8	34	-8	951	941	41	13	17	-7	790	720	42
2	34	-10	606	532	51	11	21	-9	382	492	111	10	10	-8	1672	1666	40	0	36	-8	1553	1547	35	15	17	-7	782	830	47
4	34	-10	530	536	58	13	21	-9	469	437	72	12	10	-8	896	919	43	2	36	-8	485	538	71	1	19	-7	3264	3249	46
6	34	-10	0	144	1	1	23	-9	1513	1486	34	14	10	-8	1729	1790	39	4	36	-8	574	619	54	3	19	-7	722	798	36
2	36	-10	1815	1891	44	3	23	-9	1093	1090	33	16	10	-8	453	392	74	6	36	-8	772	788	46	5	19	-7	21	291	21
1	1	-9	1482	1468	34	5	23	-9	1032	1041	35	0	12	-8	1075	1206	26	8	36	-8	1623	1637	38	7	19	-7	935	924	33
3	1	-9	787	762	28	7	23	-9	102	251	102	2	12	-8	1649	1653	34	2	38	-8	624	645	52	9	19	-7	612	621	45
5	1	-9	1580	1543	36	9	23	-9	556	539	57	4	12	-8	3171	3140	46	4	38	-8	197	255	196	11	19	-7	1386	1308	33
7	1	-9	1298	1321	31	11	23	-9	750	736	45	6	12	-8	836	839	34	6	38	-8	493	474	69	13	19	-7	694	616	44
9	1	-9	1543	1533	33	13	23	-9	956	934	44	8	12	-8	1772	1737	38	0	40	-8	764	597	43	15	19	-7	401	391	95
11	1	-9	1398	1363	33	1	25	-9	1185	1219	33	10	12	-8	682	653	43	2	40	-8	728	769	54	1	21	-7	2544	2678	51
13	1	-9	1025	921	37	3	25	-9	1735	1679	34	12	12	-8	589	606	53	1	1	-7	3111	3003	38	3	21	-7	1252	1163	31
15	1	-9	739	789	52	5	25	-9	766	865	42	14	12	-8	1119	1141	38	3	1	-7	1741	1733	41	5	21	-7	1326	1214	31
1	3	-9	1390	1458	28	7	25	-9	1393	1387	32	16	12	-8	113	363	113	5	1	-7	1486	1400	31	7	21	-7	449	436	49
3	3	-9	2384	2354	46	9	25	-9	770	742	46	2	14	-8	2140	2102	47	7	1	-7	4440	4301	43	9	21	-7	1108	1123	33
5	3	-9	1013	996	29	11	25	-9	326	322	325	4	14	-8	513	527	41	9	1	-7	1439	1399	31	11	21	-7	781	832	46
7	3	-9	2143	2108	49	1	27	-9	323	342	322	6	14	-8	350	439	209	11	1	-7	0	228	1	13	21	-7	638	656	58
9	3	-9	1091	1080	32	3	27	-9	130	149	129	8	14	-8	0	347	1	13	1	-7	1450	1380	35	15	21	-7	1722	1726	41
11	3	-9	320	370	87	5	27	-9	908	882	37	10	14	-8	1107	1089	33	15	1	-7	412	465	211	1	23	-7	1273	1297	29
13	3	-9	1424	1354	34	7	27	-9	842	800	42	12	14	-8	299	114	299	17	1	-7	97	341	97	3	23	-7	835	829	35
15	3	-9	1143	1058	40	9	27	-9	933	966	42	14	14	-8	1858	1892	40	1	3	-7	2646	2634	38	5	23	-7	539	583	50
1	5	-9	1765	1672	34	11	27	-9	1319	1305	39	16	14	-8	221	287	220	3	3	-7	584	636	31	7	23	-7	1639	1660	41
3	5	-9	915	953	29	1	29	-9	1417	1483	33	0	16	-8	2024	2052	48	5	3	-7	943	928	25	9	23	-7	1845	1967	45
5	5	-9	2214	2313	50	3	29	-9	1654	1632	36	2	16	-8	2043	1984	50	7	3	-7	2543	2514	46	11	23	-7	1699	1757	37
7	5	-9	1529	1523	31	5	29	-9	1311	1344	35	4	16	-8	808	795	34	9	3	-7	1800	1785	36	13	23	-7	1465	1458	36
9	5	-9	918	914	32	7	29	-9	1107	1127	41	6	16	-8	1282	1309	29	11	3	-7	2243	2154	54	15	23	-7	1467	1470	39
11	5	-9	1478	1484	37	9	29	-9	1339	1273	38	8	16	-8	691	735	40	13	3	-7	1421	1438	32	1	25	-7	1158	1158	29
13	5	-9	367	509	254	11	29	-9	970	958	45	10	16	-8	737	741	43	15	3	-7	841	832	40	3	25	-7	2155	2140	38
15	5	-9	659	740	56	1	31	-9	500	691	151	12	16	-8	1008	1038	40	17	3	-7	441	576	181	5	25	-7	811	777	39
1	7	-9	1166	1178	27	3	31	-9	1149	1059	36	14	16	-8	1645	1640	35	1	5	-7	1042	1070	23	7	25	-7	914	941	39
3	7	-9	2452	2513	47	5	31	-9	527	598	56	16	16	-8	472	348	144	3	5	-7	322	476	141	9	25	-7	670	690	45
5	7	-9	818	810	32	7	31	-9	1309	1296	35	2	18	-8	791	817	33	5	5	-7	1215	1190	26	11	25	-7	964	1018	40
7	7	-9	1041	1106	30	9	31	-9	1097	1068	38	4	18	-8	214	262	214	7	5	-7	3263	3316	45	13	25	-7	427	662	312
9	7	-9	1203	1204	31	1	33	-9	479	427	65	6	18	-8	906	921	34	9	5	-7	2048	2066	51	1	27	-7	1041	1061	32
11	7	-9	986	998	34	3	33	-9	1099	1093	37	8	18	-8	672	671	42	11	5	-7	877	841	35	3	27	-7	1888	1861	41
13	7	-9	592	558	52	5	33	-9	1227	1228	38	10	18	-8	1438	1400	31	13	5	-7	1668	1644	42	5	27	-7	850	854	37
15	7	-9	2016	1940	49	7	33	-9	1473	1494	39	12	18	-8	741	757	43	15	5	-7	1114	1150	37	7	27	-7	1550	1604	37
1	9	-9	1073	1063	28	9	33	-9	813	839	50	14	18	-8	1757	1782	42	17	5	-7	738	613	48	9	27	-7	668	683	48
3	9	-9	1359	1418	30	1	35	-9	616	650	55	0	20	-8	1753	1730	36	1	7	-7	2595	2558	40	11	27	-7	264	318	263
5	9	-9	2153	2121	50	3	35	-9	1274	1300	38	2	20	-8	1132	1202	31	3	7	-7	1239	1313	26	13	27	-7	718	622	52
7	9	-9	192	390	191	5	35	-9	219	271	219	4	20	-8	1904	1944	37	5	7	-7	1284	1311	26	1	29	-7	834	746	35
9	9	-9	502	500	50	7	35	-9	153	196	153	6	20	-8	1495	1545	33	7	7	-7	1186	1236	29	3	29	-7	0	146	1
11	9	-9	774	752	46	1	37	-9	863	919	45	8	20	-8	1589	1542	35	9	7	-7	1054	1035	29	5	29	-7	1079	1057	34
13	9	-9	626	610	50	3	37	-9	367	384	168	10	20	-8	0	203	1	11	7	-7	791	809	38	7	29	-7	1872	1754	43
15	9	-9	1213	1256	40	5	37	-9	1029	1065	46	12	20	-8	285	87	285	13	7	-7	602	591	47	9	29	-7	408	339	70
1	11	-9	720	645	32	1	39	-9	372	268	101	14	20	-8	1163	1084	36	15	7	-7	1764	1778	40	11	29	-7	435	313	139
3	11	-9	892	858	31	0	0	-8	2692	2704	42	2	22	-															

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1 Page 3

h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s														
2	2	-6	3289	3193	35	16	20	-6	1632	1593	37	3	5	-5	3504	3581	33	3	25	-5	1174	1127	28	14	6	-4	1731	1623	40
4	2	-6	2756	2798	37	0	22	-6	1390	1398	35	5	5	-5	1292	1233	29	5	25	-5	326	402	169	16	6	-4	1696	1665	37
6	2	-6	5426	5518	40	2	22	-6	2159	2171	49	7	5	-5	420	337	39	7	25	-5	627	625	43	18	6	-4	367	587	366
8	2	-6	680	709	32	4	22	-6	1288	1359	32	9	5	-5	3139	3054	45	9	25	-5	531	546	49	0	8	-4	3264	3192	31
10	2	-6	945	970	32	6	22	-6	1146	1163	30	11	5	-5	2044	2062	49	11	25	-5	809	771	39	2	8	-4	4830	4886	32
12	2	-6	1163	1072	30	8	22	-6	1906	1896	40	13	5	-5	717	781	41	13	25	-5	331	374	330	4	8	-4	2456	2247	34
14	2	-6	2020	1946	41	10	22	-6	510	512	54	15	5	-5	666	656	43	15	25	-5	795	790	46	6	8	-4	2221	2297	38
16	2	-6	984	923	38	12	22	-6	454	406	141	17	5	-5	391	585	92	1	27	-5	1497	1405	32	8	8	-4	809	827	28
18	2	-6	1191	1235	43	14	22	-6	1138	1134	38	1	7	-5	1240	1254	26	3	27	-5	419	425	131	10	8	-4	949	886	29
2	4	-6	1716	1614	38	16	22	-6	0	285	1	3	7	-5	149	238	149	5	27	-5	498	477	50	12	8	-4	1170	1210	29
4	4	-6	1870	1792	40	2	24	-6	1873	1789	36	5	7	-5	652	599	27	7	27	-5	614	642	46	14	8	-4	1858	1899	41
6	4	-6	1398	1584	31	4	24	-6	1367	1419	32	7	7	-5	1782	1736	42	9	27	-5	1874	1891	43	16	8	-4	984	1010	39
8	4	-6	1408	1416	35	6	24	-6	662	685	38	9	7	-5	1239	1229	29	11	27	-5	2427	2290	61	18	8	-4	711	690	50
10	4	-6	1107	1079	27	8	24	-6	960	965	36	11	7	-5	947	926	31	13	27	-5	1108	1165	41	2	10	-4	1572	1610	36
12	4	-6	260	244	154	10	24	-6	804	818	44	13	7	-5	811	792	38	15	27	-5	526	454	65	4	10	-4	2023	2167	36
14	4	-6	1513	1479	35	12	24	-6	449	508	177	15	7	-5	898	936	35	1	29	-5	1841	1844	39	6	10	-4	2997	3013	39
16	4	-6	1085	1063	39	14	24	-6	752	735	48	17	7	-5	380	230	162	3	29	-5	862	783	32	8	10	-4	363	308	47
18	4	-6	344	254	343	0	26	-6	928	892	32	1	9	-5	2821	2917	34	5	29	-5	699	652	39	10	10	-4	846	813	30
0	6	-6	1361	1604	27	2	26	-6	1492	1448	31	3	9	-5	1555	1473	38	7	29	-5	500	523	52	12	10	-4	1165	1173	30
2	6	-6	3182	3045	36	4	26	-6	1732	1693	40	5	9	-5	897	854	24	9	29	-5	411	624	245	14	10	-4	409	320	155
4	6	-6	1928	1946	39	6	26	-6	2323	2415	57	7	9	-5	3634	3575	41	11	29	-5	1508	1508	33	16	10	-4	1884	1881	47
6	6	-6	3453	3347	40	8	26	-6	227	405	226	9	9	-5	4157	4155	45	13	29	-5	1173	1269	43	18	10	-4	369	435	167
8	6	-6	4102	4087	45	10	26	-6	225	290	224	11	9	-5	1833	1800	36	1	31	-5	2533	2501	54	0	12	-4	2703	2468	34
10	6	-6	613	528	35	12	26	-6	1395	1453	37	13	9	-5	1825	1843	42	3	31	-5	625	567	47	2	12	-4	2299	2049	35
12	6	-6	352	316	70	14	26	-6	1128	1197	42	15	9	-5	1087	1142	37	5	31	-5	314	523	313	4	12	-4	2517	2360	38
14	6	-6	1685	1714	36	2	28	-6	1704	1680	41	17	9	-5	239	316	239	7	31	-5	162	261	162	6	12	-4	5896	5805	40
16	6	-6	911	873	42	4	28	-6	501	484	52	1	11	-5	2236	2197	37	9	31	-5	212	104	212	8	12	-4	878	926	27
18	6	-6	877	831	44	6	28	-6	583	609	51	3	11	-5	2014	2063	37	11	31	-5	1160	1127	37	10	12	-4	788	774	32
2	8	-6	594	599	28	8	28	-6	0	345	1	5	11	-5	2552	2408	40	13	31	-5	1311	1318	39	12	12	-4	645	666	45
4	8	-6	3036	3071	39	10	28	-6	1365	1351	36	7	11	-5	376	562	114	1	33	-5	1747	1672	43	14	12	-4	1498	1524	37
6	8	-6	1945	1857	43	12	28	-6	298	164	297	9	11	-5	903	875	30	3	33	-5	352	373	78	16	12	-4	1369	1290	33
8	8	-6	1855	1896	34	14	28	-6	920	991	47	11	11	-5	730	633	34	5	33	-5	1143	1224	35	18	12	-4	1119	1129	41
10	8	-6	1538	1523	37	0	30	-6	2073	2046	41	13	11	-5	1404	1329	35	7	33	-5	453	599	198	2	14	-4	952	1059	21
12	8	-6	406	394	60	2	30	-6	891	847	36	15	11	-5	690	614	42	9	33	-5	368	412	235	4	14	-4	2092	1944	40
14	8	-6	1204	1183	34	4	30	-6	1373	1359	32	17	11	-5	409	202	137	11	33	-5	776	754	49	6	14	-4	884	747	26
16	8	-6	1668	1596	39	6	30	-6	2714	2664	59	1	13	-5	1615	1545	38	1	35	-5	355	265	186	8	14	-4	701	671	32
18	8	-6	545	437	60	8	30	-6	1181	1165	36	3	13	-5	2266	2365	38	3	35	-5	249	250	249	10	14	-4	952	872	29
0	10	-6	2657	2868	37	10	30	-6	337	310	84	5	13	-5	2154	2078	41	5	35	-5	561	633	57	12	14	-4	402	374	63
2	10	-6	2427	2487	38	12	30	-6	604	737	64	7	13	-5	1437	1420	32	7	35	-5	797	864	47	14	14	-4	714	755	43
4	10	-6	1837	1876	42	2	32	-6	329	418	150	9	13	-5	1664	1658	35	9	35	-5	519	525	60	16	14	-4	769	786	46
6	10	-6	1399	1349	34	4	32	-6	331	334	234	11	13	-5	353	413	128	11	35	-5	180	332	180	18	14	-4	809	873	52
8	10	-6	421	293	46	6	32	-6	1222	1217	34	13	13	-5	1058	1039	35	1	37	-5	760	752	39	0	16	-4	1265	1146	30
10	10	-6	756	793	34	8	32	-6	558	545	59	15	13	-5	0	477	1	3	37	-5	532	439	58	2	16	-4	129	263	129
12	10	-6	705	730	39	10	32	-6	387	453	249	17	13	-5	1245	1212	36	5	37	-5	0	422	1	4	16	-4	937	919	23
14	10	-6	1399	1325	33	12																							

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
8	26	-4	1915	1920	42	9	7	-3	1477	1419	32	1	27	-3	3114	3043	47	12	6	-2	1162	1218	26	4	26	-2	1563	1553	37
10	26	-4	822	862	39	11	7	-3	453	459	48	3	27	-3	696	666	35	14	6	-2	1530	1545	35	6	26	-2	1691	1693	36
12	26	-4	291	435	291	13	7	-3	400	399	67	5	27	-3	1364	1372	32	16	6	-2	1090	1103	36	8	26	-2	2065	2122	38
14	26	-4	668	692	48	15	7	-3	635	710	50	7	27	-3	0	25	1	18	6	-2	696	779	50	10	26	-2	529	515	57
0	28	-4	921	890	29	17	7	-3	1150	1148	39	9	27	-3	651	678	44	2	8	-2	3081	3137	27	12	26	-2	785	788	44
2	28	-4	1745	1727	38	19	7	-3	0	445	1	11	27	-3	0	116	1	4	8	-2	1642	1406	31	14	26	-2	893	865	43
4	28	-4	781	831	37	1	9	-3	523	785	27	13	27	-3	769	752	48	6	8	-2	1592	1493	37	16	26	-2	614	689	62
6	28	-4	456	560	57	3	9	-3	814	731	21	15	27	-3	389	514	231	8	8	-2	335	304	106	2	28	-2	2113	2103	50
8	28	-4	988	1016	35	5	9	-3	4961	4954	34	1	29	-3	2205	2207	51	10	8	-2	3747	3647	44	4	28	-2	1182	1082	29
10	28	-4	550	633	59	7	9	-3	1652	1618	29	3	29	-3	271	308	270	12	8	-2	1128	1153	28	6	28	-2	931	946	33
12	28	-4	474	428	59	9	9	-3	2505	2496	44	5	29	-3	354	446	177	14	8	-2	1457	1458	35	8	28	-2	0	197	1
14	28	-4	1171	1164	38	11	9	-3	884	860	31	7	29	-3	1372	1417	31	16	8	-2	1163	1155	35	10	28	-2	1880	1943	44
2	30	-4	910	924	34	13	9	-3	904	905	31	9	29	-3	911	935	38	18	8	-2	476	453	60	12	28	-2	346	176	164
4	30	-4	809	769	35	15	9	-3	767	792	40	11	29	-3	721	742	44	0	10	-2	3098	3381	28	14	28	-2	1412	1491	38
6	30	-4	692	675	39	17	9	-3	428	281	59	13	29	-3	706	845	55	2	10	-2	3871	3926	29	0	30	-2	1877	1788	37
8	30	-4	2045	2061	43	19	9	-3	433	435	201	15	29	-3	167	295	166	4	10	-2	1931	1829	33	2	30	-2	0	271	1
10	30	-4	1040	1033	38	1	11	-3	3188	3443	31	1	31	-3	1383	1376	33	6	10	-2	942	1001	23	4	30	-2	1222	1208	28
12	30	-4	451	767	243	3	11	-3	3021	2734	33	3	31	-3	397	371	63	8	10	-2	1932	1902	41	6	30	-2	3158	3156	54
14	30	-4	148	178	147	5	11	-3	2635	2619	36	5	31	-3	2196	2142	40	10	10	-2	1428	1416	34	8	30	-2	406	290	129
0	32	-4	1199	1111	31	7	11	-3	915	946	25	7	31	-3	0	194	1	12	10	-2	1392	1417	32	10	30	-2	946	881	36
2	32	-4	1162	1143	34	9	11	-3	1888	1880	45	9	31	-3	1050	1000	36	14	10	-2	1221	1242	32	12	30	-2	336	205	287
4	32	-4	435	558	176	11	11	-3	485	461	48	11	31	-3	735	769	49	16	10	-2	707	770	45	14	30	-2	960	962	44
6	32	-4	387	274	63	13	11	-3	1817	1816	40	13	31	-3	1324	1396	39	18	10	-2	484	339	55	2	32	-2	1987	1951	39
8	32	-4	1193	1199	33	15	11	-3	1355	1353	33	1	33	-3	1047	1027	32	2	12	-2	1216	1217	26	4	32	-2	677	714	40
10	32	-4	593	562	49	17	11	-3	345	500	344	3	33	-3	332	436	211	4	12	-2	1568	1348	37	6	32	-2	218	393	217
12	32	-4	906	928	44	19	11	-3	853	830	48	5	33	-3	439	423	134	6	12	-2	1966	1957	39	8	32	-2	503	664	157
2	34	-4	809	827	39	1	13	-3	2745	2652	33	7	33	-3	433	422	68	8	12	-2	2033	1945	42	10	32	-2	1084	1010	35
4	34	-4	1634	1591	35	3	13	-3	949	1000	20	9	33	-3	1548	1470	34	10	12	-2	1595	1619	35	12	32	-2	1001	1053	42
6	34	-4	870	868	40	5	13	-3	463	547	35	11	33	-3	990	1032	42	12	12	-2	566	478	43	14	32	-2	921	904	47
8	34	-4	1600	1523	38	7	13	-3	3330	3319	41	13	33	-3	1032	988	43	14	12	-2	1093	1107	34	0	34	-2	1106	1086	32
10	34	-4	532	482	156	9	13	-3	1600	1633	34	1	35	-3	502	541	61	16	12	-2	504	481	55	2	34	-2	1026	1003	35
12	34	-4	646	632	50	11	13	-3	825	758	36	3	35	-3	1222	1164	33	18	12	-2	293	402	293	4	34	-2	1621	1558	34
0	36	-4	1667	1696	39	13	13	-3	2340	2386	54	5	35	-3	1506	1560	32	0	14	-2	3707	3670	32	6	34	-2	1679	1597	35
2	36	-4	1944	1938	44	15	13	-3	987	1021	39	7	35	-3	1116	1075	36	2	14	-2	1149	1105	28	8	34	-2	343	263	342
4	36	-4	1239	1226	35	17	13	-3	283	386	282	9	35	-3	691	682	54	4	14	-2	998	1007	24	10	34	-2	0	320	1
6	36	-4	288	240	287	1	15	-3	2176	2140	35	11	35	-3	813	840	45	6	14	-2	1428	1429	29	12	34	-2	870	858	45
8	36	-4	827	790	45	3	15	-3	4187	4122	36	1	37	-3	764	573	40	8	14	-2	818	860	31	2	36	-2	285	200	86
10	36	-4	818	815	44	5	15	-3	702	618	28	3	37	-3	1574	1637	39	10	14	-2	380	348	129	4	36	-2	305	144	160
2	38	-4	697	798	51	7	15	-3	3777	3739	41	5	37	-3	703	697	47	12	14	-2	1892	1869	39	6	36	-2	875	910	42
4	38	-4	1918	1891	46	9	15	-3	822	832	30	7	37	-3	427	373	67	14	14	-2	460	404	52	8	36	-2	658	631	47
6	38	-4	799	765	43	11	15	-3	1032	996	31	9	37	-3	1969	1955	49	16	14	-2	684	721	48	10	36	-2	1297	1380	38
8	38	-4	339	485	338	13	15	-3	3380	3314	54	11	37	-3	999	1043	44	18	14	-2	508	494	62	12	36	-2	686	782	54
10	38	-4	223	107	222	15	15	-3	642	670	47	1	39	-3	740	782	45	2	16	-2	988	960	24	0	38	-2	639	522	45
0	40	-4	942	966	41	17	15	-3	861	851	47	3	39	-3	918	920	45	4	16	-2	1152	1233	24	2	38	-2	1428	1376	33
2	40	-4	659	650	53	1	17	-3	4050	4214	37	5	39	-3	899	921	43	6	16	-2	930	918	24	4	38	-2	435	262	143
4	40	-4	674	678	56	3	17	-3	803	813	26	7	39	-3	0	164	1	8	16	-2	2771	2636	43	6	38	-2	396	329	170
6	40	-4	1058	1048	43	5	17	-3	531	427	33	9	39	-3	1272	1163	38	10	16	-2	1049	1058	29	8	38	-2	1200	1211	39
8	40	-4	397	463	96	7	17	-3	270	206	66	1	41	-3	483	507	166	12	16	-2	1110	1112	31	10	38	-2	232	311	232
2	42	-4	199	126	198	9	17	-3	523	525	43	3	41	-3	859	904	42	14	16	-2	456	416	58	2	40	-2	768	778	44
4	42	-4	531	626	69	11	17	-3	859	951	36	5	41	-3	0	147	1	16	16	-2	741	740	44	4	40	-2	908	909	41
6	42	-4	354	232	353	13	17	-3	1290	1366	32	7	41	-3	1123	1119	42	18	16	-2	398	163	149	6	40	-2	471	540	176
0	44	-4	377	714	376	15	17	-3	362	383	284	9	41	-3	1380	1365	39	0	18	-2	3906	4024	36	8	40	-2	1115	980	38
2	44	-4	343	209	199	17	17	-3	883	827	43	1	43	-3	648	614	57	2	18	-2	1526	1441	28	10	40	-2	882	927	47
4	44	-4	131	485	131	1	19	-3	1787	1827	41	3	43	-3	1295	1245	39	4	18	-2	923	900	24	0	42	-2	2544	2383	47
1	1	-3	6085	6492	26	3	19	-3	855	820	26	5	43	-3	433	343	72	6	18	-2	1475	1435	31	2	42	-2	1481	1477</	

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

Page 5

h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s					h k l 10Fo 10Fc 10s									
13	5	-1	904	970	33	15	19	-1	1100	1137	36	9	37	-1	933	936	44	14	10	0	588	572	47	4	26	0	0	261	1
15	5	-1	1378	1304	30	17	19	-1	317	425	316	11	37	-1	734	693	49	16	10	0	434	438	64	6	26	0	1493	1611	31
17	5	-1	463	522	158	1	21	-1	660	751	30	1	39	-1	1571	1577	38	18	10	0	1117	1163	42	8	26	0	753	729	37
19	5	-1	785	807	45	3	21	-1	3504	3508	40	3	39	-1	661	699	55	0	12	0	3606	3439	29	10	26	0	1085	1050	32
1	7	-1	4108	3916	23	5	21	-1	818	837	28	5	39	-1	1752	1769	40	2	12	0	0	260	1	12	26	0	840	747	38
3	7	-1	8452	8213	29	7	21	-1	1929	1960	46	7	39	-1	570	671	64	4	12	0	983	1019	24	14	26	0	0	320	1
5	7	-1	1491	1603	35	9	21	-1	1015	1125	31	9	39	-1	582	567	62	6	12	0	576	502	28	16	26	0	588	544	53
7	7	-1	3730	3672	36	11	21	-1	1869	1921	39	11	39	-1	633	584	52	8	12	0	5271	5314	40	0	28	0	7397	7332	47
9	7	-1	647	697	30	13	21	-1	1034	1013	34	1	41	-1	700	705	50	10	12	0	594	641	38	2	28	0	638	692	39
11	7	-1	1452	1462	34	15	21	-1	1274	1280	36	3	41	-1	0	81	1	12	12	0	1247	1198	27	4	28	0	524	533	49
13	7	-1	1803	1687	38	17	21	-1	1372	1449	38	5	41	-1	567	578	61	14	12	0	826	797	36	6	28	0	357	203	151
15	7	-1	2313	2370	42	1	23	-1	1877	2012	43	7	41	-1	670	708	56	16	12	0	1596	1670	39	8	28	0	610	562	45
17	7	-1	2005	1956	45	3	23	-1	2273	2221	44	9	41	-1	0	341	1	18	12	0	1003	1017	38	10	28	0	446	437	64
19	7	-1	169	98	169	5	23	-1	980	929	27	1	43	-1	285	278	285	2	14	0	301	140	97	12	28	0	967	983	37
1	9	-1	1097	1300	21	7	23	-1	727	726	34	3	43	-1	892	888	46	4	14	0	225	135	224	14	28	0	0	48	1
3	9	-1	1889	1722	30	9	23	-1	539	513	47	5	43	-1	942	1001	47	6	14	0	4772	4868	37	16	28	0	988	1048	46
5	9	-1	2722	2725	32	11	23	-1	671	657	42	7	43	-1	1221	1280	40	8	14	0	0	49	-1	2	30	0	1798	1692	37
7	9	-1	803	809	23	13	23	-1	271	325	195	1	45	-1	449	327	186	10	14	0	2414	2396	47	4	30	0	235	185	234
9	9	-1	1911	1922	44	15	23	-1	818	822	44	3	45	-1	379	379	189	12	14	0	283	416	282	6	30	0	1880	1989	41
11	9	-1	1848	1925	35	17	23	-1	764	838	54	5	45	-1	985	885	43	14	14	0	4301	4344	54	8	30	0	302	259	301
13	9	-1	707	633	36	1	25	-1	2481	2374	45	4	0	0	3750	4204	25	16	14	0	372	370	222	10	30	0	1328	1305	33
15	9	-1	1725	1737	41	3	25	-1	1864	1889	33	8	0	0	1492	1415	27	18	14	0	707	746	52	12	30	0	732	829	47
17	9	-1	1052	1127	39	5	25	-1	787	864	35	12	0	0	2962	2911	48	0	16	0	2727	2593	33	14	30	0	1334	1330	37
19	9	-1	740	746	52	7	25	-1	150	313	150	16	0	0	2345	2249	58	2	16	0	352	296	39	0	32	0	3163	3002	51
1	11	-1	1397	1605	32	9	25	-1	2267	2203	52	20	0	0	2427	2520	52	4	16	0	1812	1909	38	2	32	0	724	795	39
3	11	-1	2179	2265	32	11	25	-1	585	574	47	2	2	0	2385	2375	19	6	16	0	0	8	1	4	32	0	1666	1625	42
5	11	-1	5472	5257	34	13	25	-1	637	617	47	4	2	0	249	112	47	8	16	0	3222	3271	43	6	32	0	714	660	44
7	11	-1	2877	2962	37	15	25	-1	1298	1298	36	6	2	0	3794	3626	31	10	16	0	743	758	34	8	32	0	1880	1758	42
9	11	-1	791	779	28	1	27	-1	0	232	1	8	2	0	1208	1194	29	12	16	0	1185	1184	29	10	32	0	0	287	1
11	11	-1	1160	1122	27	3	27	-1	516	454	41	10	2	0	2229	2170	43	14	16	0	1209	1206	33	12	32	0	2248	2329	47
13	11	-1	208	348	208	5	27	-1	1284	1330	32	12	2	0	1933	1971	48	16	16	0	959	972	40	14	32	0	0	154	1
15	11	-1	2845	2869	58	7	27	-1	2894	2899	52	14	2	0	1625	1557	39	18	16	0	1024	1061	42	2	34	0	0	21	1
17	11	-1	883	921	44	9	27	-1	1229	1195	30	16	2	0	722	776	49	2	18	0	4460	4612	36	4	34	0	553	538	51
19	11	-1	393	588	237	11	27	-1	202	179	201	18	2	0	0	175	1	4	18	0	403	335	38	6	34	0	317	362	138
1	13	-1	1068	1189	27	13	27	-1	909	958	40	20	2	0	1083	1065	42	6	18	0	2027	2106	43	8	34	0	0	58	1
3	13	-1	2279	2113	33	15	27	-1	251	288	250	2	4	0	45	75	45	8	18	0	1350	1365	30	10	34	0	1493	1437	35
5	13	-1	1788	1693	37	1	29	-1	668	779	37	4	4	0	647	373	21	10	18	0	0	94	1	12	34	0	335	521	334
7	13	-1	3068	3121	39	3	29	-1	1047	1010	31	6	4	0	0	163	1	12	18	0	696	731	42	0	36	0	2642	2558	56
9	13	-1	1468	1429	33	5	29	-1	1040	1095	32	8	4	0	7125	7026	38	14	18	0	861	890	40	2	36	0	655	672	46
11	13	-1	2127	2105	50	7	29	-1	1699	1701	40	10	4	0	408	407	44	16	18	0	340	48	158	4	36	0	2115	2071	44
13	13	-1	367	292	147	9	29	-1	682	652	45	12	4	0	4089	3996	47	18	18	0	1344	1307	37	6	36	0	214	209	214
15	13	-1	858	785	35	11	29	-1	498	492	53	14	4	0	511	458	54	0	20	0	4826	4735	38	8	36	0	1051	1139	39
17	13	-1	1151	1130	38	13	29	-1	1303	1321	35	16	4	0	338	144	134	2	20	0	260	211	148	10	36	0	653	707	54
19	13	-1	416	241	164	15	29	-1	414	459	162	18	4	0	1025	1035	41	4	20	0	3521	3677	40	12	36	0	960	1027	44
1	15	-1	1639	1342	35	1	31	-1	1163	1188	30	2	6	0	2263	2550	23	6	20	0	391	325	49	2	38	0	630	635	49
3	15	-1	1138	1088	27	3	31	-1	340	212	148	4	6	0	1861	2035	29	8	20	0	3104	3202	46	4	38	0	955	962	42
5	15	-1	1387	1488	28	5	31	-1	1441	1409	33	6	6	0	209	254	209	10	20	0	249	42	249	6	38	0	1069	1165	40
7	15	-1	4736	4688	40	7	31	-1	1453	1448	35	8	6	0	730	655	27	12	20	0	114	150	114	8	38	0	543	509	60
9	15	-1	214	350	214	9	31	-1	387	533	244	10	6	0	3165	3085	42	14	20	0	418	358	149	10	38	0	473	469	146
11	15	-1	1036	1064	32	11	31	-1	402	443	174	12	6	0	450	462	49	16	20	0	383	245	190	0	40	0	978	999	39
13	15	-1	1004	1020	34	13	31	-1	519	416	52	14	6	0	781	717	37	18	20	0	274	20	274	2	40	0	513	532	156
15	15	-1	475	598	140	1	33	-1	682	681	41	16	6	0	375	227	157	2	22	0	972	953	26	4	40	0	782	777	45
17	15	-1	1110	1124	37	3	33	-1	1395	1379	30	18	6	0	1114	966	35	4	22	0	185	214	184	6	40	0	370	15	286
1	17	-1	602	609	26	5	33	-1	2084	2024	41	0	8	0	2591	2026	24	6	22	0	752	740	33	8	40	0	2014	2008	40
3	17	-1	1453	1523	28	7	33	-1	1040	1078	36	2	8	0	1081	1305	21												