SUPPORTING INFORMATION

for

N-Methylated 4-Alkenyloxazolium Salt Transformations

by

David Wenkert, Tse-Fang Chen, Kishore Ramachandran, Lucy Valasinas, Ling-ling Weng, and Andrew T. McPhail

Crystallographic data for **7**

Table 1

Crystallographic Data[a]

Molecular formula	$[C_9H_{14}NO^+][CF_3SO_3^-]$
Formula weight	301.29
Crystal system	monoclinic
Space group	$\underline{P}2_1/\underline{c}(C^5_{2\underline{h}})$ -No.14
$\underline{a}$(Å)	7.057(1)
$\underline{b}$(Å)	16.398(2)
$\underline{c}$(Å)	11.497(2)
β(°)	95.64(1)
No. of orientation refls.; θ(°) range	25; 32-44
$\underline{V}$(Å^3)	1324.0(6)
$\underline{Z}$	4
$\underline{D}_{calcd.}$ (g cm^{-3})	1.511
μ(Cu-$\underline{K}$α radiation, λ = 1.5418 Å) (cm^{-1})	26.1
Temp. (°C)	25
Crystal dimensions (mm)	0.20 x 0.24 x 0.40
$T_{max.}$:$T_{min.}$	1.00:0.90
Scan type	ω-2θ
Scanwidth (°)	1.10 + 0.14tanθ
$\theta_{max.}$ (°)	67
Intensity control refls.;	1 2 2 , 1 1 $\bar{3}$;
variation; repeat time (hr)	<2%; 2
Total no. of refls. (+$\underline{h}$,+$\underline{k}$,±$\underline{\ell}$) recorded	2558
No. of non-equivalent refls. recorded	2359
$\underline{R}_{merge}$ (on $\underline{I}$)	0.027
No. of refls. retained [$\underline{I}$> 2.0σ($\underline{I}$)]	1084
No. of parameters refined	172
$\underline{R}$ ($\underline{R}_w$)[b]	0.106 (0.144)

Table 1 (continued)

Goodness-of-fit[b]	2.8
Max. shift:esd in final least-squares cycle	0.03
Final $\Delta\rho$ (e/Å^3) max.; min.	0.85[c] ; -0.44

[a]An Enraf-Nonius CAD-4 diffractometer (Cu-Kα radiation, incident-beam graphite monochromator) was used for all measurements.

[b]$R = \sum \big| |F_o| - |F_c| \big| / \sum |F_o|$; $R_w = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}$; $w = 1/\sigma^2(|F_o|)$; $\sum w\Delta^2$ ($\Delta = |F_o| - |F_c|$) was minimized; Goodness-of-fit = $[\sum w\Delta^2/(N_{observations} - N_{parameters})]^{1/2}$.

[c]Located 1.64 Å from S(10).

Table 2

Non-hydrogen Atom Fractional Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters for (**7**), with Estimated Standard Deviations in Parentheses

Atom	x	y	z	B_{eq}(Å^2)
N(l)	0.1251(12)	0.3518(5)	-0.0361(8)	5.5(2)
C(2)	0.2897(14)	0.3900(7)	-0.0342(10)	6.6(3)
C(3)	0.3215(14)	0.4273(7)	-0.1411(10)	5.8(3)
C(3a)	0.1777(14)	0.3846(6)	-0.2275(9)	5.1(2)
C(4)	0.1002(18)	0.4313(8)	-0.3405(11)	7.4(3)
C(5)	-0.0394(19)	0.4975(8)	-0.3212(11)	7.9(3)
C(6)	-0.2087(15)	0.4628(7)	-0.2614(10)	5.8(3)
C(7)	-0.1341(12)	0.4286(5)	-0.1432(8)	4.3(2)
C(7a)	0.0211(13)	0.3622(5)	-0.1509(8)	4.0(2)
C(8)	0.0461(22)	0.3103(7)	0.0639(11)	8.7(4)
O(9)	-0.1860(10)	0.4491(4)	-0.0554(6)	5.7(2)
S(10)	0.6031(5)	0.3112(2)	0.2947(3)	6.13(7)
O(11)	0.8115(15)	0.3243(7)	0.3369(15)	16.3(5)
O(12)	0.5506(15)	0.3715(6)	0.2154(8)	10.3(3)
O(13)	0.5831(14)	0.2276(5)	0.2877(10)	10.5(3)
C(14)	0.5317(22)	0.3415(8)	0.4260(12)	8.7(4)
F(15)	0.5531(20)	0.2929(7)	0.5060(8)	16.3(4)
F(16)	0.5228(16)	0.4165(5)	0.4495(8)	12.6(3)
F(17)	0.3223(16)	0.3274(7)	0.4065(11)	16.4(4)

Table 3

Anisotropic Temperature Factor Parameters[a] ($x10^3$) for (**7**), with Estimated Standard Deviations in Parentheses

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
N(l)	75(6)	47(4)	86(6)	8(4)	-1(5)	11(4)
C(2)	62(6)	65(6)	115(9)	16(5)	-36(6)	-11(7)
C(3)	42(6)	88(7)	91(7)	-12(5)	9(5)	6(6)
C(3a)	58(6)	56(5)	79(6)	0(5)	10(5)	-25(5)
C(4)	91(8)	105(9)	92(7)	11(7)	37(6)	9(7)
C(5)	115(10)	91(8)	99(8)	11(7)	29(7)	37(7)
C(6)	57(6)	81(7)	81(7)	10(5)	1(6)	17(6)
C(7)	36(5)	55(5)	71(6)	-15(4)	2(4)	2(5)
C(7a)	55(5)	36(4)	58(5)	-4(4)	-4(5)	-2(4)
C(8)	147(12)	89(8)	89(8)	-27(8)	-19(8)	35(7)
O(9)	66(4)	89(5)	63(4)	10(4)	14(3)	-6(4)
S(10)	101(2)	57(1)	73(2)	5(2)	0(2)	6(1)
O(11)	71(6)	144(8)	391(17)	-12(6)	-47(8)	99(9)
O(12)	146(8)	141(7)	99(6)	33(6)	-1(6)	43(6)
O(13)	139(8)	68(5)	194(10)	2(5)	27(7)	-27(6)
C(14)	154(13)	85(8)	90(8)	19(8)	12(9)	24(7)
F(15)	307(14)	224(10)	87(5)	6(10)	8(7)	55(6)
F(16)	231(10)	96(5)	151(7)	9(6)	10(7)	-48(5)
F(17)	188(9)	181(9)	268(12)	32(7)	89(8)	35(9)

[a]In the form: $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}\ell^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}h\ell a^*c^* + 2U_{23}k\ell b^*c^*)]$

Table 4

Hydrogen Atom Fractional Coordinates[a] and Isotropic Thermal Parameters for (**7**)

Atom	x	y	z	B(Å^2)
H(2)	0.3837	0.3923	0.0367	6.6
H(3A)	0.4613	0.4172	-0.1617	5.8
H(3B)	0.2952	0.4903	-0.1388	5.8
H(3a)	0.2430	0.3356	-0.2667	5.1
H(4A)	0.0361	0.3910	-0.3966	7.4
H(4B)	0.2108	0.4563	-0.3754	7.4
H(5A)	-0.0901	0.5230	-0.4021	7.9
H(5B)	0.0287	0.5428	-0.2677	7.9
H(6A)	-0.2752	0.4163	-0.3133	5.8
H(6B)	-0.3073	0.5094	-0.2503	5.8
H(7a)	-0.0545	0.3110	-0.1851	4.0
H(8A)	-0.0876	0.2854	0.0358	8.7
H(8B)	0.1389	0.2635	0.0956	8.7
H(8C)	0.0314	0.3528	0.1308	8.7

[a]Hydrogen atoms bear the same labels as the atoms to which they are bonded and were assigned the equivalent isotropic thermal parameters of these atoms.

Table 5

Interatomic Distances (Å) and Angles (deg.) in (**7**), with Estimated Standard Deviations in Parentheses

(a) Bond Lengths

N(1)-C(2)	1.318(13)	C(7)-C(7a)	1.553(12)
N(1)-C(7a)	1.456(12)	C(7)-O(9)	1.157(12)
N(1)-C(8)	1.491(16)	S(10)-O(11)	1.518(11)
C(2)-C(3)	1.410(16)	S(10)-O(12)	1.371(10)
C(3)-C(3a)	1.519(14)	S(10)-O(13)	1.380(9)
C(3a)-C(4)	1.560(16)	S(10)-C(14)	1.711(15)
C(3a)-C(7a)	1.524(14)	C(14)-F(15)	1.215(17)
C(4)-C(5)	1.497(19)	C(14)-F(16)	1.262(16)
C(5)-C(6)	1.545(18)	C(14)-F(17)	1.491(19)
C(6)-C(7)	1.516(14)		

(b) Bond Angles

C(2)-N(1)-C(7a)	109(1)	N(1)-C(7a)-C(7)	109(1)
C(2)-N(1)-C(8)	127(1)	C(3a)-C(7a)-C(7)	115(1)
C(7a)-N(1)-C(8)	124(1)	O(11)-S(10)-O(12)	108(1)
N(1)-C(2)-C(3)	114(1)	O(11)-S(10)-O(13)	105(1)
C(2)-C(3)-C(3a)	103(1)	O(11)-S(10)-C(14)	92(1)
C(3)-C(3a)-C(4)	118(1)	O(12)-S(10)-O(13)	131(1)
C(3)-C(3a)-C(7a)	102(1)	O(12)-S(10)-C(14)	107(1)
C(4)-C(3a)-C(7a)	113(1)	O(13)-S(10)-C(14)	108(1)
C(3a)-C(4)-C(5)	114(1)	S(10)-C(14)-F(15)	117(1)
C(4)-C(5)-C(6)	110(1)	S(10)-C(14)-F(16)	120(1)
C(5)-C(6)-C(7)	109(1)	S(10)-C(14)-F(17)	101(1)
C(6)-C(7)-C(7a)	113(1)	F(15)-C(14)-F(16)	119(1)
C(6)-C(7)-O(9)	124(1)	F(15)-C(14)-F(17)	93(1)
C(7a)-C(7)-O(9)	123(1)	F(16)-C(14)-C(17)	97(1)
N(1)-C(7a)-C(3a)	103(1)		

(c) Torsion Angles[a]

C(7a)-N(1)-C(2)-C(3)	-2(1)	C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	62(1)
C(8)-N(1)-C(2)-C(3)	-177(1)	C(5)-C(6)-C(7)-C(7a)	-57(1)
C(2)-N(1)-C(7a)-C(3a)	20(1)	C(5)-C(6)-C(7)-O(9)	123(1)
C(2)-N(1)-C(7a)-C(7)	-102(1)	C(6)-C(7)-C(7a)-N(1)	162(1)
C(8)-N(1)-C(7a)-C(3a)	-164(1)	C(6)-C(7)-C(7a)-C(3a)	47(1)
C(8)-N(1)-C(7a)-C(7)	73(1)	O(9)-C(7)-C(7a)-N(1)	-18(1)
N(1)-C(2)-C(3)-C(3a)	-18(1)	O(9)-C(7)-C(7a)-C(3a)	-133(1)
C(2)-C(3)-C(3a)-C(4)	153(1)	O(11)-S(10)-C(14)-F(15)	-76(1)
C(2)-C(3)-C(3a)-C(7a)	28(1)	O(11)-S(10)-C(14)-F(16)	80(1)
C(3)-C(3a)-C(4)-C(5)	-74(1)	O(11)-S(10)-C(14)-F(17)	-176(1)
C(7a)-C(3a)-C(4)-C(5)	45(1)	O(12)-S(10)-C(14)-F(15)	175(1)
C(3)-C(3a)-C(7a)-N(1)	-29(1)	O(12)-S(10)-C(14)-F(16)	-29(1)
C(3)-C(3a)-C(7a)-C(7)	89(1)	O(12)-S(10)-C(14)-F(17)	75(1)
C(4)-C(3a)-C(7a)-N(1)	-157(1)	O(13)-S(10)-C(14)-F(15)	30(1)
C(4)-C(3a)-C(7a)-C(7)	-39(1)	O(13)-S(10)-C(14)-F(16)	-175(1)
C(3a)-C(4)-C(5)-C(6)	-56(1)	O(13)-S(10)-C(14)-F(17)	-70(1)

[a]The torsion angle A-B-C-D is defined as positive if, when viewed along the B-C bond, atom A must be rotated clockwise to eclipse atom D.

Table 6

Observed and Calculated Structure Amplitudes (xl0) for (7)

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
0	0	2	371	346	0	6	1	67	53	0	12	7	88	90
0	0	4	625	440	0	6	2	159	168	0	13	3	172	171
0	0	6	99	83	0	6	3	75	18	0	13	5	118	123
0	0	8	149	155	0	6	8	124	135	0	13	9	49	52
0	0	10	44	41	0	6	9	61	58	0	14	1	112	97
0	0	12	54	55	0	6	10	103	104	0	14	2	83	81
0	1	1	121	121	0	6	11	59	58	0	14	3	131	135
0	1	2	1075	1168	0	7	1	124	129	0	14	4	110	118
0	1	3	132	150	0	7	2	230	278	0	14	6	91	92
0	1	4	240	215	0	7	3	89	102	0	14	9	45	28
0	1	5	105	84	0	7	4	197	165	0	15	4	99	105
0	1	6	313	310	0	7	5	281	276	0	15	5	62	53
0	1	7	80	79	0	7	6	70	85	0	15	6	58	54
0	1	8	43	42	0	7	8	153	138	0	15	7	78	68
0	1	10	46	45	0	7	9	79	88	0	15	8	39	52
0	1	11	84	94	0	8	0	514	517	0	16	0	140	119
0	2	0	390	344	0	8	1	153	155	0	16	2	119	121
0	2	1	41	41	0	8	4	154	137	0	16	5	111	119
0	2	3	95	55	0	8	5	168	169	0	17	4	97	106
0	2	4	425	351	0	8	7	81	63	0	18	0	64	60
0	2	5	290	244	0	8	8	114	107	0	18	5	35	44
0	2	6	59	70	0	8	9	56	64	1	0	-10	264	259
0	2	7	72	77	0	8	12	37	37	1	0	-6	246	206
0	2	9	266	275	0	9	1	56	48	1	0	-4	806	813
0	2	10	158	177	0	9	2	134	149	1	0	-2	283	199
0	2	11	65	74	0	9	3	207	207	1	0	0	534	461
0	2	12	42	32	0	9	4	329	286	1	0	2	138	179
0	2	13	50	24	0	9	5	77	92	1	0	4	427	388
0	3	1	233	234	0	9	6	94	95	1	0	6	34	17
0	3	2	420	403	0	9	7	110	133	1	0	10	100	123
0	3	3	104	37	0	9	8	140	126	1	0	12	72	50
0	3	4	784	757	0	10	0	66	77	1	1	-11	95	80
0	3	7	66	81	0	10	1	303	314	1	1	-8	229	214
0	3	8	260	225	0	10	2	160	167	1	1	-7	131	125
0	3	9	76	85	0	10	4	150	162	1	1	-6	290	265
0	4	0	756	726	0	10	5	155	151	1	1	-4	223	248
0	4	1	1383	1302	0	10	6	61	47	1	1	-3	541	555
0	4	2	370	284	0	10	9	46	71	1	1	-2	56	109
0	4	4	58	63	0	10	10	74	77	1	1	-1	356	360
0	4	5	72	90	0	11	1	265	281	1	1	0	250	205
0	4	9	111	91	0	11	2	130	133	1	1	1	870	744
0	4	10	51	57	0	11	3	192	206	1	1	2	839	911
0	4	13	59	62	0	11	4	183	200	1	1	3	358	306
0	5	1	455	478	0	11	5	235	230	1	1	4	78	98
0	5	2	155	169	0	11	6	66	69	1	1	5	166	189
0	5	3	469	470	0	11	7	114	104	1	1	6	109	128
0	5	4	110	112	0	11	8	85	82	1	1	8	81	85
0	5	5	476	437	0	12	1	318	323	1	1	10	95	107
0	5	9	155	152	0	12	3	57	47	1	2	-13	45	39
0	6	0	332	309	0	12	4	150	148	1	2	-10	45	50

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
1	2	-9	42	48	1	4	3	316	210	1	7	2	290	306
1	2	-8	106	99	1	4	4	32	41	1	7	4	415	383
1	2	-7	76	63	1	4	5	271	261	1	7	6	83	83
1	2	-6	39	55	1	4	6	262	293	1	7	7	153	135
1	2	-5	491	466	1	4	8	92	109	1	7	8	95	100
1	2	-4	699	684	1	4	9	76	84	1	8	-10	60	50
1	2	-3	75	69	1	4	11	82	86	1	8	-7	60	70
1	2	-2	620	560	1	5	-9	187	175	1	8	-6	126	142
1	2	-1	1421	1285	1	5	-8	97	91	1	8	-5	60	39
1	2	0	1093	907	1	5	-7	136	147	1	8	-4	163	131
1	2	1	639	606	1	5	-6	96	88	1	8	-2	343	349
1	2	2	530	380	1	5	-5	329	280	1	8	-1	78	90
1	2	3	100	33	1	5	-3	186	180	1	8	0	219	213
1	2	4	168	203	1	5	-2	409	415	1	8	1	194	206
1	2	5	173	136	1	5	-1	352	313	1	8	2	169	176
1	2	6	196	237	1	5	0	430	451	1	8	3	134	141
1	2	7	168	167	1	5	1	80	92	1	8	4	87	104
1	2	8	137	129	1	5	3	82	94	1	8	6	236	280
1	2	9	84	80	1	5	4	405	412	1	8	8	63	58
1	2	10	116	117	1	5	6	221	160	1	8	10	65	81
1	3	-10	96	95	1	5	7	89	85	1	9	-12	48	47
1	3	-8	63	60	1	5	8	83	86	1	9	-10	66	68
1	3	-7	170	151	1	5	10	105	109	1	9	-8	85	73
1	3	-6	292	301	1	6	-8	73	72	1	9	-7	177	155
1	3	-4	230	178	1	6	-7	52	34	1	9	-6	281	265
1	3	-3	183	219	1	6	-6	44	59	1	9	-5	133	149
1	3	-2	75	62	1	6	-4	153	139	1	9	-4	38	16
1	3	-1	237	179	1	6	-3	296	199	1	9	-2	251	251
1	3	0	327	372	1	6	-2	112	127	1	9	-1	154	169
1	3	1	1558	1483	1	6	-1	398	408	1	9	0	103	139
1	3	2	321	287	1	6	0	163	177	1	9	1	194	193
1	3	3	371	384	1	6	1	199	138	1	9	2	326	339
1	3	4	364	376	1	6	2	234	228	1	9	3	160	160
1	3	5	484	429	1	6	3	164	149	1	9	4	123	154
1	3	8	125	122	1	6	4	252	245	1	9	5	139	133
1	3	11	40	37	1	6	5	153	167	1	9	6	114	115
1	4	-11	65	68	1	6	8	89	101	1	9	7	98	95
1	4	-10	66	54	1	6	9	149	147	1	9	9	58	66
1	4	-9	184	159	1	6	10	61	69	1	10	-5	90	82
1	4	-8	116	116	1	7	-12	46	38	1	10	-4	181	191
1	4	-7	117	107	1	7	-9	95	79	1	10	-3	114	94
1	4	-6	71	74	1	7	-8	173	181	1	10	-1	94	96
1	4	-5	121	100	1	7	-7	51	47	1	10	0	235	235
1	4	-4	94	101	1	7	-6	60	47	1	10	1	152	148
1	4	-3	426	380	1	7	-5	312	250	1	10	3	125	109
1	4	-2	274	245	1	7	-3	160	195	1	10	6	115	123
1	4	-1	447	366	1	7	-2	85	20	1	10	7	97	94
1	4	0	67	73	1	7	-1	186	151	1	11	-9	74	77
1	4	1	260	247	1	7	0	447	456	1	11	-7	143	149
1	4	2	114	131	1	7	1	50	58	1	11	-4	75	49

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
1	11	-2	45	59	1	16	-6	40	45	2	2	0	538	433
1	11	-1	119	140	1	16	-4	71	59	2	2	1	168	176
1	11	1	179	196	1	16	-2	95	90	2	2	2	383	324
1	11	3	175	159	1	16	-1	79	81	2	2	3	151	140
1	11	4	64	63	1	16	1	42	48	2	2	5	345	339
1	11	5	146	148	1	17	-6	52	49	2	2	6	78	93
1	11	7	129	132	1	17	-1	68	63	2	3	-9	204	218
1	12	-10	59	50	1	17	0	41	39	2	3	-8	40	35
1	12	-7	87	98	1	17	2	44	34	2	3	-6	94	91
1	12	-6	61	49	1	17	3	53	55	2	3	-5	144	130
1	12	-5	136	123	1	18	-4	50	57	2	3	-4	114	107
1	12	-4	57	45	1	18	-3	47	48	2	3	-3	692	749
1	12	-3	338	323	1	18	-2	42	45	2	3	-2	137	108
1	12	-2	81	84	1	19	1	48	42	2	3	-1	161	178
1	12	-1	156	160	2	0	-8	112	100	2	3	0	461	422
1	12	2	80	86	2	0	-6	177	201	2	3	1	381	283
1	12	3	124	118	2	0	-4	325	381	2	3	2	50	71
1	12	4	75	64	2	0	-2	328	376	2	3	3	52	49
1	12	5	88	91	2	0	0	338	367	2	3	4	58	86
1	12	9	64	62	2	0	2	320	286	2	3	5	63	38
1	13	-9	57	60	2	0	4	223	214	2	3	9	76	58
1	13	-7	86	73	2	0	6	403	435	2	3	11	50	66
1	13	-6	71	63	2	0	8	276	252	2	4	-9	63	69
1	13	-5	145	129	2	0	10	102	94	2	4	-8	71	38
1	13	-1	113	126	2	1	-12	55	38	2	4	-7	176	172
1	13	1	92	87	2	1	-10	65	72	2	4	-6	116	103
1	13	2	142	147	2	1	-8	97	99	2	4	-5	180	197
1	13	3	246	257	2	1	-7	71	76	2	4	-4	334	302
1	13	5	112	116	2	1	-4	293	318	2	4	-3	80	104
1	13	7	62	59	2	1	-3	120	155	2	4	-2	79	109
1	14	-7	42	48	2	1	-2	403	484	2	4	-1	879	832
1	14	-5	38	49	2	1	-1	125	145	2	4	0	77	38
1	14	-3	180	197	2	1	0	741	685	2	4	1	216	195
1	14	-2	78	61	2	1	1	796	718	2	4	2	182	146
1	14	-1	127	114	2	1	2	175	190	2	4	3	155	157
1	14	0	93	105	2	1	3	270	262	2	4	4	81	103
1	14	1	146	138	2	1	4	521	503	2	4	5	287	336
1	14	3	73	73	2	1	6	80	36	2	4	6	41	36
1	14	4	38	45	2	1	8	61	73	2	4	7	146	144
1	14	5	78	99	2	1	9	60	70	2	4	9	230	234
1	14	6	92	101	2	1	10	109	103	2	5	-12	63	65
1	14	9	59	67	2	2	-9	65	66	2	5	-10	73	75
1	15	-8	43	43	2	2	-8	41	29	2	5	-9	145	134
1	15	-6	46	37	2	2	-7	81	72	2	5	-8	56	58
1	15	0	64	62	2	2	-6	203	217	2	5	-6	100	104
1	15	1	92	88	2	2	-5	495	512	2	5	-5	58	62
1	15	2	55	59	2	2	-4	470	471	2	5	-4	149	149
1	15	3	82	99	2	2	-3	167	160	2	5	-3	103	126
1	15	4	59	67	2	2	-2	262	280	2	5	-2	47	43
1	15	5	52	43	2	2	-1	452	459	2	5	-1	330	380

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
2	5	0	399	364	2	8	1	180	210	2	12	-9	59	48
2	5	1	85	77	2	8	3	61	76	2	12	-7	86	84
2	5	3	355	340	2	8	5	88	67	2	12	-6	115	89
2	5	4	52	28	2	8	6	64	76	2	12	-5	181	173
2	5	5	152	157	2	8	8	168	160	2	12	-3	88	91
2	5	6	91	81	2	9	-8	115	119	2	12	-2	98	93
2	5	8	118	124	2	9	-6	58	58	2	12	-1	116	117
2	5	9	45	56	2	9	-5	111	100	2	12	0	39	64
2	5	11	59	66	2	9	-4	75	95	2	12	4	138	122
2	6	-11	59	63	2	9	-3	70	84	2	12	5	116	121
2	6	-8	111	106	2	9	-2	148	172	2	12	7	90	82
2	6	-7	95	76	2	9	-1	167	168	2	13	-9	71	64
2	6	-5	180	175	2	9	0	38	46	2	13	-3	57	57
2	6	-4	122	133	2	9	1	96	92	2	13	-1	118	132
2	6	-2	279	277	2	9	2	68	78	2	13	1	99	108
2	6	-1	340	310	2	9	3	96	97	2	13	3	60	67
2	6	0	95	100	2	9	4	111	120	2	13	5	129	134
2	6	1	193	222	2	9	5	54	44	2	13	6	49	61
2	6	2	177	203	2	9	6	133	122	2	13	7	45	46
2	6	3	269	238	2	9	7	68	49	2	14	-8	34	25
2	6	4	197	177	2	9	10	39	46	2	14	-5	84	81
2	6	5	202	218	2	10	-11	51	47	2	14	-4	107	93
2	6	6	95	103	2	10	-6	43	56	2	14	-3	81	80
2	6	7	78	62	2	10	-5	141	116	2	14	-1	97	99
2	7	-12	44	30	2	10	-4	220	204	2	14	0	106	104
2	7	-11	42	45	2	10	-3	152	146	2	14	4	106	118
2	7	-10	103	105	2	10	-2	40	55	2	14	7	45	39
2	7	-8	170	170	2	10	-1	144	131	2	15	-2	161	173
2	7	-6	150	146	2	10	0	83	92	2	15	-1	89	90
2	7	-4	127	121	2	10	1	82	86	2	15	1	68	68
2	7	-3	206	196	2	10	2	80	90	2	15	2	76	87
2	7	-2	74	92	2	10	3	306	317	2	15	3	51	52
2	7	-1	90	69	2	10	4	108	103	2	15	4	46	55
2	7	0	49	57	2	10	5	164	186	2	16	-6	53	47
2	7	1	355	326	2	10	7	70	59	2	16	-4	67	73
2	7	2	125	125	2	10	8	94	92	2	16	-3	68	69
2	7	3	166	129	2	11	-11	36	42	2	16	4	52	69
2	7	4	85	120	2	11	-9	45	47	2	17	0	69	55
2	7	5	64	63	2	11	-7	66	59	3	0	-10	81	77
2	7	7	121	95	2	11	-6	56	40	3	0	-8	82	84
2	8	-12	35	36	2	11	-5	109	98	3	0	-6	214	236
2	8	-8	142	129	2	11	-4	91	76	3	0	-4	517	514
2	8	-7	121	127	2	11	-2	132	128	3	0	-2	180	203
2	8	-6	166	177	2	11	-1	150	152	3	0	0	310	322
2	8	-5	49	26	2	11	0	120	118	3	0	2	369	337
2	8	-4	233	234	2	11	1	208	222	3	0	8	83	67
2	8	-3	103	114	2	11	2	125	120	3	1	-12	54	44
2	8	-2	323	305	2	11	3	183	185	3	1	-10	78	85
2	8	-1	167	162	2	11	4	70	68	3	1	-7	107	95
2	8	0	95	104	2	11	5	84	75	3	1	-6	78	69

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
3	1	-5	174	201	3	4	-4	42	35	3	7	8	103	103
3	1	-4	322	398	3	4	-3	267	277	3	7	10	70	93
3	1	-3	86	89	3	4	-2	91	92	3	8	-10	51	54
3	1	-2	332	344	3	4	-1	290	309	3	8	-5	121	121
3	1	-1	177	205	3	4	0	95	81	3	8	-4	112	115
3	1	0	382	432	3	4	1	136	127	3	8	-3	133	126
3	1	1	190	202	3	4	2	138	119	3	8	-2	126	119
3	1	2	335	315	3	4	3	170	105	3	8	-1	105	78
3	1	3	117	117	3	4	4	158	173	3	8	0	67	54
3	1	4	113	31	3	4	5	217	200	3	8	1	105	97
3	1	7	78	95	3	4	6	91	69	3	8	2	320	281
3	1	10	84	101	3	4	7	61	37	3	8	4	316	290
3	2	-10	45	49	3	5	-11	50	55	3	8	5	115	120
3	2	-8	149	146	3	5	-9	70	68	3	8	6	160	140
3	2	-7	76	90	3	5	-8	79	88	3	8	8	61	54
3	2	-6	46	56	3	5	-6	55	69	3	9	-7	83	77
3	2	- 5	183	145	3	5	- 3	104	120	3	9	-5	51	55
3	2	-4	87	99	3	5	-2	230	207	3	9	-3	132	100
3	2	-3	155	193	3	5	-1	130	143	3	9	-2	56	60
3	2	-2	140	155	3	5	1	73	45	3	9	-1	234	218
3	2	0	232	166	3	5	2	57	49	3	9	0	214	199
3	2	1	169	150	3	5	3	43	85	3	9	1	53	53
3	2	2	119	79	3	5	4	59	90	3	9	2	101	101
3	2	4	177	143	3	5	6	51	32	3	9	3	114	113
3	2	5	166	183	3	6	-8	132	140	3	9	4	84	76
3	2	6	219	235	3	6	-7	152	160	3	9	5	55	50
3	2	7	99	95	3	6	-6	38	49	3	9	6	73	77
3	2	8	67	55	3	6	-3	38	55	3	9	7	42	42
3	3	-11	43	40	3	6	-2	171	160	3	10	-9	57	40
3	3	-6	100	80	3	6	-1	72	78	3	10	-8	82	81
3	3	-4	75	76	3	6	0	187	148	3	10	-7	155	162
3	3	-3	73	79	3	6	1	297	253	3	10	-6	81	85
3	3	-2	203	236	3	6	3	69	77	3	10	-5	157	153
3	3	-1	58	82	3	6	4	48	19	3	10	-3	57	42
3	3	0	189	211	3	6	5	169	156	3	10	-2	140	148
3	3	1	327	335	3	6	7	76	65	3	10	-1	39	31
3	3	2	94	90	3	6	8	81	83	3	10	0	172	162
3	3	3	78	92	3	6	9	46	50	3	10	1	66	51
3	3	4	188	184	3	7	-9	72	64	3	10	4	66	45
3	3	5	156	132	3	7	-5	81	86	3	10	6	130	119
3	3	6	105	101	3	7	-4	54	72	3	10	7	79	79
3	3	7	117	142	3	7	-3	102	84	3	10	8	35	54
3	3	9	153	143	3	7	-2	64	52	3	11	-3	209	213
3	3	11	58	56	3	7	-1	62	28	3	11	-2	76	69
3	4	-11	72	63	3	7	0	46	44	3	11	0	123	120
3	4	-9	68	74	3	7	1	59	52	3	11	1	118	127
3	4	-8	75	54	3	7	2	173	166	3	11	4	133	118
3	4	-7	45	49	3	7	4	204	178	3	11	6	53	52
3	4	-6	44	34	3	7	5	83	71	3	12	-9	38	44
3	4	-5	128	149	3	7	6	59	84	3	12	-5	79	92

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
3	12	-4	55	60	4	1	9	61	68	4	6	-2	119	119
3	12	-3	81	77	4	2	-10	78	70	4	6	-1	79	84
3	12	-1	75	70	4	2	-9	107	103	4	6	3	183	166
3	12	1	74	73	4	2	-8	136	124	4	6	4	245	223
3	12	2	45	61	4	2	-7	46	50	4	6	5	204	185
3	12	3	197	208	4	2	-5	42	48	4	7	-7	83	86
3	12	5	70	63	4	2	-2	116	135	4	7	-6	145	163
3	12	7	83	84	4	2	-1	75	52	4	7	-5	76	75
3	13	-7	54	49	4	2	0	126	136	4	7	-4	51	62
3	13	-3	160	165	4	2	2	117	100	4	7	-2	157	153
3	13	-1	152	131	4	2	3	255	205	4	7	-1	110	129
3	13	0	45	49	4	2	4	295	279	4	7	0	224	224
3	13	1	120	124	4	2	7	60	38	4	7	1	105	90
3	13	3	86	86	4	3	-10	66	86	4	7	3	96	99
3	14	-6	68	62	4	3	-7	78	73	4	7	6	45	51
3	14	-2	89	81	4	3	-6	99	93	4	7	7	63	65
3	14	1	48	51	4	3	-5	200	218	4	8	-10	33	35
3	14	5	69	65	4	3	-4	119	137	4	8	-8	70	67
3	14	6	43	55	4	3	-3	189	192	4	8	-6	154	146
3	15	-4	35	35	4	3	-2	175	169	4	8	-4	78	78
3	15	-1	55	66	4	3	-1	283	319	4	8	0	205	187
3	15	0	69	65	4	3	0	153	161	4	8	1	68	69
3	15	3	35	40	4	3	1	298	259	4	8	2	243	216
3	15	4	45	49	4	3	2	89	107	4	8	3	41	41
3	16	-1	44	66	4	3	3	189	160	4	8	4	52	38
3	16	0	52	42	4	3	4	42	41	4	8	5	78	74
3	16	2	44	43	4	3	6	71	61	4	9	-4	113	101
3	16	4	35	42	4	4	-8	38	54	4	9	-2	121	91
3	16	5	30	36	4	4	-7	97	73	4	9	-1	72	69
3	17	-2	65	66	4	4	-6	82	73	4	9	0	78	81
3	17	0	40	48	4	4	-5	87	104	4	9	2	63	77
4	0	-6	95	105	4	4	-4	127	140	4	9	3	105	91
4	0	-2	228	272	4	4	1	439	394	4	9	4	134	125
4	0	0	152	175	4	4	3	196	144	4	9	5	59	56
4	0	2	527	474	4	4	4	59	66	4	10	-9	45	35
4	0	8	74	95	4	4	5	57	49	4	10	-4	66	86
4	1	-11	48	54	4	4	8	50	55	4	10	-3	67	58
4	1	-9	65	73	4	5	-6	67	74	4	10	-2	149	149
4	1	-6	123	129	4	5	-4	84	89	4	10	1	43	36
4	1	-4	93	104	4	5	-3	49	45	4	10	2	114	106
4	1	-3	175	190	4	5	-1	158	158	4	10	3	155	139
4	1	-2	129	135	4	5	0	103	68	4	10	4	84	74
4	1	-1	60	42	4	5	1	74	79	4	10	5	94	84
4	1	0	565	562	4	5	3	176	183	4	10	6	44	57
4	1	1	125	94	4	5	5	129	120	4	11	-7	48	52
4	1	3	75	86	4	5	6	143	136	4	11	-5	110	88
4	1	4	118	103	4	5	7	132	136	4	11	-4	81	96
4	1	5	40	50	4	6	-10	37	30	4	11	-1	147	138
4	1	6	155	149	4	6	-9	76	72	4	11	1	106	107
4	1	8	96	103	4	6	-8	76	76	4	11	5	46	52

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
4	11	7	70	76	5	3	1	82	81	5	9	6	60	85
4	11	8	43	51	5	3	2	82	93	5	10	-5	50	42
4	12	-7	58	51	5	3	4	77	83	5	10	-3	63	50
4	12	-4	68	51	5	3	5	108	121	5	10	-2	75	49
4	12	-3	53	58	5	3	6	68	69	5	10	-1	132	142
4	12	-1	73	73	5	4	-5	177	198	5	10	1	121	148
4	12	1	120	120	5	4	-3	138	112	5	10	2	77	86
4	12	3	117	116	5	4	-1	134	121	5	10	3	49	52
4	12	5	66	72	5	4	0	92	75	5	10	5	48	40
4	13	-7	44	30	5	4	2	61	66	5	11	-7	42	33
4	13	-5	41	28	5	4	4	100	98	5	11	-5	74	68
4	13	-3	96	89	5	4	5	104	73	5	11	-3	96	96
4	13	-1	157	152	5	5	-9	38	25	5	11	-2	78	79
4	13	5	69	66	5	5	-7	112	102	5	11	1	86	83
4	14	-7	37	36	5	5	-5	148	130	5	11	3	61	71
4	14	-2	69	72	5	5	-4	138	143	5	11	4	54	48
4	14	-1	80	88	5	5	-3	108	100	5	12	-3	80	66
4	14	1	52	43	5	5	-1	72	53	5	12	-1	69	55
4	15	-6	30	25	5	5	2	84	95	5	12	0	77	82
4	15	-5	49	61	5	5	3	82	102	5	12	1	58	54
4	15	-4	56	45	5	5	4	88	113	5	13	-5	45	47
4	15	-3	52	56	5	5	5	66	84	5	14	0	54	60
4	16	-3	48	44	5	5	6	40	54	5	15	-2	46	60
4	16	2	56	64	5	6	-6	78	74	6	0	-6	63	61
4	17	-2	34	48	5	6	-5	98	114	6	0	-2	80	70
5	0	-10	35	39	5	6	-3	96	100	6	0	0	77	83
5	0	-8	88	86	5	6	-2	106	90	6	0	4	98	111
5	0	-4	242	249	5	6	-1	65	43	6	0	6	84	91
5	0	-2	300	284	5	6	0	148	145	6	1	-8	41	52
5	0	0	163	182	5	6	1	121	117	6	1	-5	71	86
5	0	2	190	198	5	6	2	91	78	6	1	-2	60	50
5	0	6	71	61	5	6	3	66	67	6	1	0	105	76
5	1	-9	47	56	5	6	4	97	105	6	1	3	64	77
5	1	-8	38	45	5	6	5	78	82	6	1	5	76	81
5	1	-6	143	119	5	7	-6	65	45	6	2	-4	110	96
5	1	-4	229	228	5	7	-3	71	73	6	2	-3	154	160
5	1	-2	81	82	5	7	0	76	57	6	2	-2	80	72
5	1	2	70	86	5	7	2	123	107	6	2	-1	68	65
5	1	3	72	100	5	7	3	115	112	6	2	0	74	87
5	1	4	105	113	5	7	6	88	85	6	2	1	93	97
5	1	5	62	63	5	8	-4	121	97	6	2	3	132	129
5	2	-6	115	117	5	8	1	55	40	6	3	-5	59	76
5	2	0	103	106	5	8	4	84	78	6	3	-4	68	82
5	2	1	112	130	5	8	8	31	48	6	3	-1	146	134
5	2	2	186	160	5	9	-9	45	40	6	3	1	110	77
5	2	4	50	63	5	9	-6	74	64	6	3	2	174	164
5	2	7	98	94	5	9	-5	67	40	6	3	3	75	95
5	3	-10	50	37	5	9	-3	71	66	6	4	-6	40	33
5	3	-7	71	68	5	9	3	75	85	6	4	-3	81	73
5	3	-5	55	35	5	9	4	51	62	6	4	1	82	53

H	K	L	Fobs	Fcalc
6	4	2	70	46
6	4	6	42	40
6	4	7	39	41
6	5	-7	38	48
6	5	-3	48	35
6	5	-1	63	40
6	6	2	58	35
6	7	-2	85	80
6	7	0	109	93
6	7	2	84	87
6	8	-4	69	59
6	8	-2	92	90
6	9	-2	42	31
6	9	1	40	34
6	10	4	43	39
6	11	-1	61	51
6	12	-5	50	46
7	0	-4	69	93
7	0	-2	42	58
7	0	2	88	80
7	0	4	115	101
7	1	-8	35	19
7	1	0	65	46
7	1	2	67	76
7	2	-7	58	58
7	2	3	64	99
7	3	-8	44	56
7	4	1	47	19
7	4	3	70	54
7	4	5	51	52
7	5	-1	43	48
7	5	1	87	101
7	6	-6	39	33
7	9	0	44	50