

Deposited material 2

Observed and modelled relative variations, reduced to the unit electric field. The general model with constraint (16 parameters) was used.

(hkl)	Cut	$\lambda, \text{\AA}$	$\langle \Delta I/I/E \rangle_{OBS}, \%$	$\langle \Delta I/I/E \rangle_{MOD}, \%$	$\sigma(\Delta I/I/E), \%$	$(OBS-SIM)/\sigma$
3, 4, -1	1 1 0	1.25	-0.50	-0.48	0.04	0.49
3, 4, -1	1 1 0	1.23	-0.54	-0.53	0.04	0.41
3, 4, -1	1 1 0	1.31	-0.05	-0.02	0.02	1.51
3, 4, -1	1 1 0	1.21	-0.16	-0.12	0.02	2.62
3, 4, -1	1 1 0	1.15	0.05	0.14	0.02	4.32
3, 4, 1	1 1 0	1.23	0.44	0.52	0.05	1.77
3, 4, 1	1 1 0	1.21	0.11	0.07	0.02	2.50
3, 4, 1	1 1 0	1.15	0.08	0.08	0.02	0.17
3, 4, 1	1 1 0	1.05	0.07	0.05	0.02	0.86
4, 3, -1	1 1 0	1.23	0.52	0.52	0.05	0.01
4, 3, -1	1 1 0	1.27	0.25	0.28	0.03	0.89
4, 3, -1	1 1 0	1.21	0.11	0.07	0.02	2.18
4, 3, -1	1 1 0	1.15	0.07	0.08	0.02	0.96
4, 3, -1	1 1 0	1.05	0.09	0.05	0.02	2.26
6, -1, 5	1 1 0	0.78	0.14	0.17	0.03	1.05
-2, -1, 15	1 1 0	1.00	-0.06	-0.05	0.02	0.81
-2, -5, 1	1 1 0	1.25	0.30	0.32	0.01	2.10
-2, -5, 1	1 1 0	1.21	0.17	0.14	0.01	4.28
-3, -3, -4	1 1 0	1.25	0.05	0.07	0.01	1.90
-4, -2, -7	1 1 0	1.25	0.04	0.03	0.01	1.76
-4, -2, -7	1 1 0	1.21	0.07	0.05	0.01	1.18
-6, 0, 9	1 1 0	0.95	-0.05	-0.06	0.02	0.49
1, 3, 13	1 1 0	1.00	0.12	0.10	0.02	0.85
3, 4, -1	1 1 0	1.25	-0.47	-0.48	0.04	0.46
5, 4, -3	1 1 0	1.00	0.10	0.14	0.01	2.64
5, -3, -3	1 0 0	0.95	0.12	0.21	0.05	2.01
5, -3, 3	1 0 0	0.95	-0.04	-0.05	0.03	0.47
-2, -3, 3	1 0 0	0.95	-0.16	-0.21	0.03	1.93
-3, -3, -5	1 0 0	0.95	-0.10	-0.13	0.02	1.27
-3, -2, -3	1 0 0	0.95	-0.15	-0.14	0.02	0.26
6, -3, 5	1 0 0	1.10	0.14	0.12	0.03	0.82
-2, -4, 1	1 0 0	1.10	-0.09	-0.06	0.02	1.67
6, -4, -1	1 0 0	1.13	0.11	0.06	0.03	1.88
7, -5, 1	1 0 0	1.13	0.04	0.00	0.01	3.56
-6, -1, 3	1 0 0	1.13	-0.10	-0.10	0.02	0.56
-4, -1, 9	1 0 0	0.98	-0.15	-0.16	0.04	0.11
5, -1, -9	1 0 0	0.98	0.12	0.16	0.03	1.35
-6, -3, 3	1 0 0	0.98	-0.23	-0.25	0.03	0.87
-1, -4, -9	1 1 0	1.00	-0.11	-0.14	0.02	1.24
-6, 3, 11	1 1 0	1.10	0.03	0.04	0.02	0.65
5, 4, -3	1 1 0	0.98	0.09	0.13	0.02	1.80
3, 4, -9	1 1 0	1.10	0.05	0.07	0.01	1.69
-1, 6, 7	1 1 0	1.10	0.07	0.08	0.03	0.29

-1, 6, 7	1 1 0	1.23	0.21	0.19	0.03	0.71
-5, -2, 3	1 1 0	1.23	-0.09	-0.06	0.01	2.07
-5, 0, -8	1 1 0	1.23	-0.02	-0.04	0.01	1.52
-1, 5, 11	1 1 0	1.23	-0.02	-0.05	0.01	3.39
0, 4, 11	1 1 0	1.23	0.04	0.09	0.03	1.80
-3, -4, 3	1 1 0	1.23	0.06	0.09	0.01	2.58
-4, -1, 5	1 1 0	1.23	0.09	0.03	0.01	6.08
-5, -2, -1	1 1 0	1.23	0.32	0.31	0.01	0.84
-3, -3, 9	1 1 0	1.23	0.48	0.49	0.03	0.22
-2, 2, 10	1 1 0	1.23	0.06	0.06	0.03	0.18
-4, 6, 1	1 1 0	1.23	0.08	0.06	0.03	0.67