



NEW ASPECTS OF ORGANOMETALLIC
CHEMISTRY

by

Michael Lloyd Williams
B.Sc. (Hons)

A Thesis presented for the
Degree of Doctor of Philosophy

The Department of Physical and Inorganic Chemistry
The University of Adelaide

August 1985

Accepted for publication 1985

Chapter 1. Positional ($\times 10^5$ for Ru and P all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Ru and P all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh}_2)(\text{PPh}_2)(\text{CO})_{15}$ (23)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	53953(3)	22253(2)	87452(2)	226(2)	408(2)	376(2)	64(2)	28(2)	-15(1)
Ru(2)	37987(3)	25195(2)	97406(2)	249(2)	351(2)	300(2)	18(1)	-15(2)	-2(1)
Ru(3)	13245(3)	27436(2)	95089(2)	298(2)	463(2)	287(2)	-52(2)	-21(2)	99(2)
Ru(4)	9771(3)	12669(2)	88805(2)	232(2)	386(2)	323(2)	26(2)	14(1)	-26(1)
Ru(5)	12467(3)	25598(2)	82514(2)	309(2)	354(2)	283(2)	26(1)	-30(2)	64(1)
P(1)	39039(9)	14719(6)	82482(5)	259(6)	353(6)	323(6)	26(5)	44(5)	27(5)
P(2)	23226(9)	27895(7)	03980(5)	315(6)	387(6)	291(6)	-33(5)	-30(5)	25(5)
O(11)	6087(3)	844(2)	9556(2)	47(2)	66(3)	75(3)	27(2)	0(2)	10(2)
O(12)	4602(4)	3747(2)	8155(2)	78(3)	48(2)	71(3)	17(2)	-7(2)	0(2)
O(13)	7089(3)	1710(3)	7809(2)	58(2)	96(3)	63(2)	-1(2)	32(2)	6(2)
O(14)	7073(4)	3297(3)	9441(2)	66(3)	97(3)	75(3)	-7(3)	-6(2)	-37(3)
O(21)	5827(3)	2694(3)	10613(2)	49(2)	102(3)	58(3)	-4(2)	-24(2)	-7(2)
O(22)	3672(3)	808(2)	10106(2)	60(2)	46(2)	67(3)	14(2)	-4(2)	2(2)
O(23)	3879(4)	4240(2)	9403(2)	102(3)	48(3)	87(3)	13(2)	13(3)	2(2)
O(31)	942(5)	4473(3)	9404(2)	147(5)	53(3)	112(4)	8(3)	-23(4)	35(3)
O(32)	-972(4)	2444(4)	10024(2)	41(3)	202(7)	81(4)	-47(3)	19(2)	-8(3)
O(41)	1299(3)	-67(2)	9773(2)	75(3)	68(3)	72(3)	29(2)	2(2)	-4(2)
O(42)	648(4)	227(3)	7796(2)	108(4)	97(3)	66(3)	-36(3)	21(3)	-46(3)
O(43)	-1593(3)	1344(3)	9024(2)	31(2)	110(3)	94(3)	5(3)	12(2)	0(2)
O(51)	-1154(3)	3196(3)	8373(2)	41(2)	95(3)	74(3)	-2(2)	-6(2)	32(2)
O(52)	596(4)	1933(3)	7018(2)	116(4)	89(3)	45(2)	-18(2)	-28(2)	22(3)
O(53)	2256(4)	4082(3)	7839(3)	79(3)	67(3)	172(5)	56(3)	-25(3)	-15(3)
C(11)	5778(4)	1338(3)	9267(2)	31(3)	50(3)	43(3)	10(2)	5(2)	0(2)
C(12)	4803(4)	3173(3)	8363(2)	38(3)	47(3)	53(3)	1(3)	1(2)	-4(2)
C(13)	6453(4)	1908(3)	8141(2)	41(3)	58(3)	46(3)	13(3)	2(2)	1(2)
C(14)	6487(4)	2894(3)	9199(2)	37(3)	58(3)	52(3)	10(3)	1(2)	-13(2)
C(21)	5075(4)	2640(3)	10287(2)	34(3)	52(3)	44(3)	2(2)	-3(2)	-4(2)
C(22)	3728(3)	1422(3)	9954(2)	22(2)	44(3)	38(3)	1(2)	-4(2)	1(2)
C(23)	3847(4)	3599(3)	9506(2)	52(3)	41(3)	51(3)	6(2)	5(2)	-4(2)
C(31)	1106(5)	3822(3)	9453(2)	71(4)	59(4)	51(3)	-7(3)	-13(3)	23(3)
C(32)	-100(5)	2559(4)	9820(2)	30(3)	128(6)	39(3)	-23(3)	1(3)	8(3)
C(41)	1234(4)	453(3)	9462(2)	42(3)	49(3)	37(3)	0(2)	0(2)	1(2)
C(42)	759(4)	613(3)	8211(2)	49(3)	62(3)	46(3)	1(3)	8(2)	-18(3)
C(43)	-617(4)	1325(3)	8992(2)	36(3)	67(3)	50(3)	9(3)	3(2)	-3(2)
C(51)	-229(4)	2968(3)	8346(2)	47(3)	63(3)	36(3)	0(2)	-15(2)	13(3)
C(52)	874(5)	2174(3)	7473(2)	54(3)	60(3)	33(3)	2(3)	-7(2)	9(3)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(53)	1916(4)	3506(3)	7995(3)	41(3)	48(3)	77(4)	22(3)	-14(3)	2(2)
C(1)	2564(3)	1715(2)	8542(2)	25(2)	30(2)	34(2)	1(2)	-2(2)	0(2)
C(2)	2409(3)	2155(2)	9018(2)	23(2)	31(2)	32(2)	2(2)	0(2)	0(2)
C(112)	3660(2)	-16(2)	8741(1)	48(1)					
C(113)	3957(2)	-793(2)	8808(1)	66(2)					
C(114)	4810(2)	-1109(2)	8466(1)	65(2)					
C(115)	5367(2)	-649(2)	8057(1)	69(2)					
C(116)	5070(2)	127(2)	7990(1)	55(1)					
C(111)	4217(2)	444(2)	8333(1)	36(1)					
C(122)	3106(3)	967(2)	7135(1)	53(1)					
C(123)	2894(3)	1013(2)	6518(1)	67(2)					
C(124)	3302(3)	1642(2)	6200(1)	69(2)					
C(125)	3922(3)	2224(2)	6500(1)	75(2)					
C(126)	4134(3)	2178(2)	7118(1)	57(1)					
C(121)	3726(3)	1549(2)	7435(1)	37(1)					
C(212)	1409(2)	4071(2)	10954(2)	60(1)					
C(213)	1451(2)	4736(2)	11306(2)	78(2)					
C(214)	2505(2)	5017(2)	11531(2)	79(2)					
C(215)	3517(2)	4634(2)	11403(2)	81(2)					
C(216)	3476(2)	3969(2)	11051(2)	60(1)					
C(211)	2422(2)	3688(2)	10826(2)	42(1)					
C(222)	2356(3)	2222(1)	11585(1)	43(1)					
C(223)	2087(3)	1682(1)	12020(1)	51(1)					
C(224)	1483(3)	1013(1)	11856(1)	60(1)					
C(225)	1148(3)	885(1)	11258(1)	70(2)					
C(226)	1417(3)	1425(1)	10823(1)	57(1)					
C(221)	2021(3)	2094(1)	10987(1)	33(1)					

Chapter 1. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh}_2)(\mu\text{-PPh})_2(\text{CO})_4$ (23)

	x	y	z	U(11)
H(112)	2999(2)	229(2)	9006(1)	112(5)
H(113)	3526(2)	-1149(2)	9125(1)	112(5)
H(114)	5040(2)	-1711(2)	8517(1)	112(5)
H(115)	6028(2)	-895(2)	7792(1)	112(5)
H(116)	5501(2)	484(2)	7674(1)	112(5)
H(122)	2790(3)	480(2)	7381(1)	112(5)
H(123)	2414(3)	563(2)	6286(1)	112(5)
H(124)	3138(3)	1678(2)	5722(1)	112(5)
H(125)	4238(3)	2711(2)	6255(1)	112(5)
H(126)	4614(3)	2629(2)	7350(1)	112(5)
H(212)	593(2)	3853(2)	10779(2)	112(5)
H(213)	667(2)	5033(2)	11405(2)	112(5)
H(214)	2537(2)	5532(2)	11804(2)	112(5)
H(215)	4333(2)	4851(2)	11578(2)	112(5)
H(216)	4259(2)	3672(2)	10952(2)	112(5)
H(222)	2824(3)	2739(1)	11712(1)	112(5)
H(223)	2347(3)	1781(1)	12483(1)	112(5)
H(224)	1275(3)	595(1)	12192(1)	112(5)
H(225)	680(3)	368(1)	11132(1)	112(5)
H(226)	1158(3)	1326(1)	10361(1)	112(5)

Chapter 1. For $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh}_2)(\mu\text{-PPh}_2)(\text{CO})_{16}$ (23)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 1

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	1509	1495	7	3	0	644	648	8	6	0	1672	1626	2	10	0	53	-364	2	14	0	164	192
4	0	0	5484	5577	8	3	0	1636	1625	9	6	0	751	734	3	10	0	197	200	3	14	0	1699	1710
6	0	0	1747	1731	10	3	0	841	829	10	6	0	190	173	4	10	0	2020	2049	4	14	0	692	675
8	0	0	3168	3236	11	3	0	927	934	11	6	0	738	730	6	10	0	497	484	5	14	0	232	-232
10	0	0	250	227	12	3	0	817	-827	12	6	0	1110	1121	7	10	0	789	789	6	14	0	108	-158
12	0	0	1528	1567	0	4	0	2713	2818	1	7	0	2391	2504	8	10	0	1065	-1068	7	14	0	420	-451
1	1	0	284	-270	1	4	0	296	258	2	7	0	1218	1241	9	10	0	1551	1543	8	14	0	554	-522
2	1	0	3119	3102	2	4	0	988	985	3	7	0	285	-310	10	10	0	558	-564	1	15	0	636	670
3	1	0	109	103	3	4	0	382	-371	4	7	0	800	776	1	11	0	686	758	2	15	0	139	-122
4	1	0	411	-402	4	4	0	965	-964	5	7	0	639	-631	2	11	0	1077	-1127	3	15	0	363	-417
5	1	0	636	-609	5	4	0	203	-217	6	7	0	716	-696	4	11	0	546	-557	5	15	0	497	-504
6	1	0	647	-619	6	4	0	616	575	7	7	0	282	286	5	11	0	159	149	6	15	0	592	-582
7	1	0	347	-349	7	4	0	805	-804	10	7	0	422	426	6	11	0	380	401	0	16	0	293	243
8	1	0	213	-198	8	4	0	1784	1758	11	7	0	732	-744	7	11	0	461	505	1	16	0	511	-494
10	1	0	673	-646	9	4	0	862	-823	0	8	0	3724	3940	8	11	0	230	238	2	16	0	246	280
11	1	0	457	492	10	4	0	1044	-1045	1	8	0	1511	-1554	9	11	0	207	-186	3	16	0	640	-660
12	1	0	410	407	12	4	0	1493	-1492	2	8	0	700	770	10	11	0	326	-292	4	16	0	998	-998
0	2	0	5550	-5063	1	5	0	1942	-2027	3	8	0	1496	-1516	0	12	0	208	188	5	16	0	351	340
1	2	0	805	-821	2	5	0	1375	-1395	4	8	0	2883	-2785	1	12	0	763	-793	6	16	0	442	-429
2	2	0	715	-668	3	5	0	278	264	6	8	0	738	-745	2	12	0	566	-576	2	17	0	348	325
3	2	0	869	-838	4	5	0	303	-318	7	8	0	281	269	3	12	0	518	-492	1	18	0	305	313
4	2	0	1928	1917	5	5	0	862	868	8	8	0	1667	1685	4	12	0	917	-955	3	18	0	153	166
5	2	0	234	233	6	5	0	122	116	9	8	0	1175	-1182	6	12	0	455	438	4	18	0	875	872
6	2	0	339	271	7	5	0	639	-644	10	8	0	658	608	7	12	0	171	-211	-11	0	1	430	-435
7	2	0	1372	1342	8	5	0	1215	-1190	11	8	0	488	-464	8	12	0	945	925	-9	0	1	1032	1053
8	2	0	1311	1083	10	5	0	955	-950	1	9	0	798	-836	9	12	0	714	-750	-7	0	1	2592	2523
9	2	0	1052	1028	11	5	0	539	571	2	9	0	232	-238	1	13	0	1494	-1545	-5	0	1	461	459
10	2	0	397	351	12	5	0	523	524	3	9	0	153	-171	2	13	0	473	487	-3	0	1	4672	-5550
11	2	0	407	-390	0	6	0	3575	-3744	4	9	0	308	-285	3	13	0	482	507	-1	0	1	2021	-2002
12	2	0	1339	1570	1	6	0	1225	1267	5	9	0	718	-703	4	13	0	404	385	1	0	1	2114	2075
1	3	0	513	535	2	6	0	997	-984	7	9	0	689	-667	5	13	0	596	591	3	0	1	788	736
2	3	0	951	939	3	6	0	1747	1817	8	9	0	178	188	7	13	0	143	-146	5	0	1	1838	-1876
3	3	0	659	-629	4	6	0	2377	2396	9	9	0	272	265	8	13	0	172	-170	7	0	1	2411	-2338
4	3	0	673	-653	5	6	0	824	-789	11	9	0	1180	1217	9	13	0	343	-335	9	0	1	206	196
5	3	0	96	99	6	6	0	207	240	0	10	0	1574	-1659	0	14	0	286	296	-11	0	1	633	645
6	3	0	891	878	7	6	0	846	-854	1	10	0	927	973	1	14	0	951	513	-11	1	1	1085	1082

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-10	1	1	380	417	3	2	1	112	85	-9	4	1	329	-299	8	5	1	249	-259	-1	7	1	2510	-2616					
-9	1	1	1552	1536	4	2	1	2119	-2080	-7	4	1	1263	1289	9	5	1	358	-365	0	7	1	1868	1925					
-8	1	1	235	220	5	2	1	1894	1864	-6	4	1	487	-461	10	5	1	233	-226	1	7	1	1145	1214					
-7	1	1	2414	-2402	6	2	1	1038	-1003	-5	4	1	2158	2099	11	5	1	663	-678	2	7	1	167	-176					
-6	1	1	804	-767	7	2	1	1127	1104	-4	4	1	1034	-888	-11	6	1	389	395	3	7	1	2295	2420					
-5	1	1	4136	-4166	8	2	1	418	402	-3	4	1	1404	-1339	-10	6	1	680	-692	4	7	1	2401	-2422					
-4	1	1	2555	-2493	9	2	1	678	-696	-2	4	1	240	244	-8	6	1	83	73	5	7	1	797	-806					
-3	1	1	594	561	10	2	1	476	470	-1	4	1	1093	-1102	-7	6	1	830	-827	6	7	1	1152	-1168					
-2	1	1	1349	1297	11	2	1	199	-182	0	4	1	705	-715	-6	6	1	1541	1561	7	7	1	1674	-1677					
-1	1	1	3834	3708	12	2	1	355	-373	1	4	1	560	-520	-5	6	1	1311	-1260	8	7	1	412	392					
1	1	1	3288	-3396	-11	3	1	166	-164	2	4	1	1274	-1270	-4	6	1	1506	1506	9	7	1	241	-214					
2	1	1	995	980	-10	3	1	282	-288	3	4	1	188	-208	-3	6	1	460	496	11	7	1	657	668					
3	1	1	2196	-2197	-9	3	1	1368	-1376	4	4	1	225	221	-2	6	1	834	-678	-11	8	1	465	-450					
4	1	1	542	481	-8	3	1	437	411	5	4	1	1415	-1402	-1	6	1	1827	1874	-10	8	1	386	388					
5	1	1	841	855	-7	3	1	319	298	6	4	1	1457	1486	1	6	1	540	-567	-8	8	1	604	604					
6	1	1	342	-337	-6	3	1	1156	1166	8	4	1	517	534	2	6	1	2273	2260	-7	8	1	852	879					
7	1	1	3739	3733	-5	3	1	2445	2526	9	4	1	560	569	3	6	1	133	111	-6	8	1	1124	-1108					
8	1	1	240	-238	-4	3	1	1103	1080	11	4	1	591	-598	4	6	1	1276	1280	-5	8	1	538	-507					
10	1	1	348	300	-3	3	1	2639	2555	12	4	1	285	300	5	6	1	548	532	-4	8	1	1689	-1751					
11	1	1	502	-478	-2	3	1	764	-753	-10	5	1	508	-519	6	6	1	1125	-1108	-3	8	1	1898	-1939					
12	1	1	262	259	-1	3	1	626	-643	-9	5	1	1431	1428	7	6	1	885	878	-2	8	1	87	-88					
-12	2	1	722	785	0	3	1	97	82	-8	5	1	1484	-1524	8	6	1	1501	-1471	-1	8	1	889	-915					
-11	2	1	347	347	1	3	1	1202	1211	-7	5	1	220	-222	9	6	1	254	-264	0	8	1	570	552					
-10	2	1	148	149	2	3	1	444	-483	-6	5	1	920	-876	10	6	1	579	-590	1	8	1	1695	1761					
-9	2	1	114	-74	3	3	1	453	443	-5	5	1	2418	-2377	11	6	1	175	-183	2	8	1	877	-959					
-8	2	1	648	-654	4	3	1	1466	-1452	-4	5	1	1459	1431	12	6	1	184	-225	3	8	1	954	989					
-7	2	1	1876	-1915	5	3	1	1119	-1147	-3	5	1	860	-873	-11	7	1	888	-733	4	8	1	345	-336					
-6	2	1	948	-931	6	3	1	225	138	-1	5	1	2303	2345	-10	7	1	500	489	5	8	1	1341	-1362					
-5	2	1	1821	-1814	7	3	1	2379	-2374	0	5	1	1666	-1713	-9	7	1	1202	-1204	6	8	1	1137	1137					
-4	2	1	223	243	8	3	1	538	529	1	5	1	1351	-1379	-8	7	1	1747	1734	7	8	1	1320	-1315					
-3	2	1	2627	2897	9	3	1	426	405	2	5	1	149	130	-7	7	1	1243	1244	8	8	1	912	898					
-2	2	1	1421	1354	10	3	1	218	-207	3	5	1	1642	-1665	-6	7	1	634	644	9	8	1	271	257					
-1	2	1	1541	1542	11	3	1	569	586	4	5	1	1953	1986	-5	7	1	2149	2218	11	8	1	872	985					
0	2	1	1819	1876	12	3	1	354	-351	5	5	1	1476	1485	-4	7	1	1572	-1577	-11	9	1	810	826					
1	2	1	393	-349	-11	4	1	387	-350	6	5	1	1510	1504	-3	7	1	231	-248	-10	9	1	285	273					
2	2	1	902	-874	-10	4	1	382	386	7	5	1	1766	1729	-2	7	1	410	-484	-9	9	1	562	546					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-8	9	1	846	-830	10	10	1	514	527	-8	13	1	813	-841	-3	15	1	862	-851	3	18	1	999	-967	-12	0	2	634	-643
-7	9	1	1308	-1286	-10	11	1	291	-311	-7	13	1	385	355	-2	15	1	878	-729	-12	0	2	634	-643	-10	0	2	634	-643
-8	9	1	925	-841	-9	11	1	464	-421	-6	13	1	703	-889	-1	15	1	1019	-1053	-10	0	2	634	-643	-10	0	2	634	-643
-5	9	1	1427	-1420	-8	11	1	820	791	-5	13	1	318	-350	0	15	1	922	853	-8	0	2	1299	1298	-8	0	2	1299	1298
-4	9	1	192	-187	-8	11	1	1208	1228	-4	13	1	556	576	1	15	1	557	-586	-6	0	2	157	143	-6	0	2	157	143
-3	9	1	803	931	-5	11	1	331	326	-3	13	1	571	582	2	15	1	494	515	-4	0	2	3873	-3712	-4	0	2	3873	-3712
-2	9	1	797	804	-3	11	1	864	-884	-2	13	1	1111	1122	3	15	1	1128	1125	-2	0	2	3060	-3074	-2	0	2	3060	-3074
-1	9	1	2017	2127	-2	11	1	859	-900	-1	13	1	187	180	4	15	1	950	-989	0	0	2	2003	2050	0	0	2	2003	2050
0	9	1	307	-300	-1	11	1	639	-632	0	13	1	889	-560	5	15	1	473	489	2	0	2	2547	2519	2	0	2	2547	2519
1	9	1	931	-925	0	11	1	224	201	1	13	1	275	304	6	15	1	550	-542	4	0	2	1640	-1593	4	0	2	1640	-1593
2	9	1	1016	1062	1	11	1	307	304	2	13	1	418	-442	7	15	1	320	-306	6	0	2	566	-533	6	0	2	566	-533
3	9	1	2445	-2533	2	11	1	612	-598	3	13	1	405	-403	-6	16	1	328	-318	8	0	2	1733	1707	8	0	2	1733	1707
4	9	1	1629	1679	3	11	1	913	917	4	13	1	862	916	-5	16	1	176	-192	10	0	2	548	527	10	0	2	548	527
5	9	1	315	333	4	11	1	1267	-1232	5	13	1	197	156	-4	16	1	485	-457	-12	1	2	1379	-1302	-12	1	2	1379	-1302
6	9	1	500	507	5	11	1	880	-883	6	13	1	982	998	-3	16	1	160	-109	-10	1	2	411	-402	-10	1	2	411	-402
7	9	1	1631	1645	6	11	1	502	-543	8	13	1	183	-187	-2	16	1	305	286	-9	1	2	626	571	-9	1	2	626	571
8	9	1	963	-982	7	11	1	544	-586	9	13	1	410	-421	-1	16	1	221	-214	-8	1	2	1412	1377	-8	1	2	1412	1377
11	9	1	821	-825	8	11	1	919	885	-7	14	1	291	284	0	16	1	332	305	-7	1	2	1151	1117	-7	1	2	1151	1117
-9	10	1	736	772	9	11	1	644	638	-6	14	1	1004	1004	1	16	1	555	521	-6	1	2	256	241	-6	1	2	256	241
-8	10	1	476	-505	-8	12	1	1400	-1375	-5	14	1	185	164	2	16	1	248	-246	-5	1	2	418	399	-5	1	2	418	399
-7	10	1	615	-574	-8	12	1	113	117	-4	14	1	885	864	3	16	1	1232	1225	-4	1	2	2459	-2465	-4	1	2	2459	-2465
-6	10	1	331	280	-7	12	1	185	-193	-3	14	1	332	-336	4	16	1	454	-452	-3	1	2	1077	-1053	-3	1	2	1077	-1053
-5	10	1	808	-907	-6	12	1	418	-408	-2	14	1	547	-493	-5	17	1	193	-175	-2	1	2	1552	1499	-2	1	2	1552	1499
-4	10	1	1186	1213	-5	12	1	1103	1141	-1	14	1	268	268	-4	17	1	144	155	-1	1	2	403	-399	-1	1	2	403	-399
-3	10	1	624	688	-4	12	1	966	-953	0	14	1	368	-344	-3	17	1	770	791	0	1	2	4530	4561	0	1	2	4530	4561
-2	10	1	628	653	-3	12	1	806	848	1	14	1	185	-180	-1	17	1	778	813	1	1	2	1001	993	1	1	2	1001	993
-1	10	1	1064	1110	-1	12	1	1159	-1176	2	14	1	1025	1017	0	17	1	306	-318	2	1	2	2670	2667	2	1	2	2670	2667
0	10	1	1127	1126	0	12	1	198	-204	3	14	1	710	-723	1	17	1	351	358	3	1	2	219	263	3	1	2	219	263
1	10	1	713	-730	1	12	1	481	-471	4	14	1	689	675	3	17	1	785	-828	4	1	2	2399	-2379	4	1	2	2399	-2379
2	10	1	1112	1144	2	12	1	1088	-1111	5	14	1	343	-372	4	17	1	439	460	5	1	2	211	188	5	1	2	211	188
3	10	1	1402	-1491	3	12	1	932	877	6	14	1	429	-418	5	17	1	264	-272	6	1	2	1262	-1225	6	1	2	1262	-1225
4	10	1	694	-735	5	12	1	552	546	8	14	1	693	-665	-4	18	1	448	457	7	1	2	1136	-1125	7	1	2	1136	-1125
5	10	1	389	394	6	12	1	1041	1046	-7	15	1	142	102	-3	18	1	320	-335	8	1	2	1224	1147	8	1	2	1224	1147
6	10	1	1483	-1523	8	12	1	294	319	-6	15	1	295	266	-2	18	1	111	155	9	1	2	145	-122	9	1	2	145	-122
7	10	1	762	774	9	12	1	116	-129	-5	15	1	414	426	-1	18	1	511	479	10	1	2	202	207	10	1	2	202	207
8	10	1	226	-217	-9	13	1	407	412	-4	15	1	941	-609	0	18	1	180	-170	11	1	2	247	251	11	1	2	247	251

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
12	1	2	735	-737	2	3	2	1701	-1718	-7	5	2	337	359	4	8	2	553	574	-4	8	2	1418	-1445
-11	2	2	739	734	3	3	2	848	915	-8	5	2	2095	2088	5	6	2	797	788	-3	8	2	372	359
-10	2	2	781	809	4	3	2	156	-139	-5	5	2	147	143	6	6	2	503	539	-2	8	2	1061	-1099
-9	2	2	206	215	5	3	2	515	-468	-4	5	2	1144	-1107	7	6	2	252	-236	-1	8	2	2087	2200
-8	2	2	275	240	7	3	2	1787	1706	-3	5	2	1893	1906	8	8	2	1348	-1354	0	8	2	1425	1457
-8	2	2	384	-380	8	3	2	567	-551	-2	5	2	993	-1013	9	8	2	186	199	1	8	2	512	547
-5	2	2	385	-397	9	3	2	614	648	-1	5	2	493	489	10	6	2	981	-982	2	6	2	1532	1580
-4	2	2	782	805	10	3	2	766	750	0	5	2	709	726	11	6	2	188	213	3	8	2	142	150
-3	2	2	1166	-1138	11	3	2	473	-486	1	5	2	196	-230	12	6	2	294	326	5	8	2	487	497
-2	2	2	2180	2120	12	3	2	667	690	2	5	2	1883	1908	-11	7	2	893	-914	6	8	2	940	-927
-1	2	2	419	-418	-11	4	2	484	-512	3	5	2	1694	-1677	-10	7	2	480	483	7	8	2	524	574
0	2	2	2127	-2185	-10	4	2	924	-936	4	5	2	324	318	-8	7	2	798	-752	8	8	2	98	-114
1	2	2	1431	1473	-9	4	2	372	347	5	5	2	439	-420	-7	7	2	788	807	9	8	2	759	-737
2	2	2	2085	-2093	-8	4	2	757	-778	6	5	2	451	-413	-6	7	2	911	-929	10	8	2	460	442
3	2	2	1165	1130	-7	4	2	303	-307	7	5	2	89	-35	-5	7	2	748	-742	-11	8	2	714	-716
4	2	2	308	-299	-6	4	2	322	303	8	5	2	265	262	-4	7	2	1820	1794	-11	9	2	624	607
5	2	2	597	-587	-5	4	2	374	-356	9	5	2	304	-277	-3	7	2	2933	-3043	-9	8	2	628	631
6	2	2	521	485	-4	4	2	973	-900	10	5	2	305	-333	-2	7	2	455	456	-8	9	2	608	609
7	2	2	947	-936	-3	4	2	247	236	11	5	2	260	-272	-1	7	2	985	-942	-7	9	2	465	450
8	2	2	1899	-1902	-2	4	2	1761	-1671	12	5	2	561	-578	0	7	2	1548	-1666	-6	9	2	148	93
9	2	2	478	466	-1	4	2	1879	2009	-12	6	2	359	364	1	7	2	2308	2386	-5	9	2	319	307
10	2	2	718	-718	0	4	2	1784	1808	-11	6	2	228	202	2	7	2	1758	-1633	-4	9	2	1881	-1680
11	2	2	686	684	1	4	2	1411	1440	-10	6	2	480	478	3	7	2	1131	1193	-3	9	2	1411	1448
12	2	2	424	422	2	4	2	714	673	-9	6	2	257	-261	4	7	2	1544	1576	-2	9	2	389	-441
-12	3	2	1834	1892	4	4	2	144	-188	-8	6	2	449	-482	5	7	2	153	-138	-1	9	2	222	239
-10	3	2	1491	1510	6	4	2	62	61	-7	6	2	386	402	6	7	2	1507	1498	0	9	2	2177	2281
-9	3	2	805	-837	7	4	2	739	734	-6	6	2	180	-178	8	7	2	531	-546	1	9	2	655	-684
-8	3	2	1488	-1531	8	4	2	2543	2518	-5	6	2	435	438	9	7	2	788	772	2	9	2	1459	1478
-7	3	2	1070	-1072	9	4	2	494	-487	-4	6	2	1593	1564	10	7	2	782	-820	3	9	2	283	-291
-6	3	2	2537	-2539	10	4	2	1035	1058	-3	6	2	785	-788	11	7	2	435	430	4	9	2	1776	-1832
-5	3	2	381	321	11	4	2	588	-587	-2	6	2	1087	1091	-11	8	2	631	-627	6	9	2	1421	-1465
-4	3	2	1584	1528	12	4	2	927	-898	-1	6	2	3411	-3578	-9	8	2	122	-135	7	9	2	744	-777
-2	3	2	1083	1049	-12	5	2	1484	-1473	0	6	2	2302	-2333	-8	8	2	1057	1063	8	9	2	655	626
-1	3	2	1218	-1206	-11	5	2	601	641	1	6	2	1555	-2028	-7	8	2	228	244	9	9	2	948	-957
0	3	2	2335	-2394	-10	5	2	1375	-1403	2	6	2	1417	-1875	-6	8	2	448	442	10	9	2	1226	1224
1	3	2	851	842	-8	5	2	1024	1028	3	6	2	483	472	-5	8	2	316	-325	-9	10	2	204	225

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 5

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-8	10	2	270	-237	9	11	2	887	895	-5	14	2	885	833	6	16	2	778	-777	-2	1	3	1672	-1611
-7	10	2	338	-354	10	11	2	696	-714	-4	14	2	379	-367	-5	17	2	250	-221	-1	1	3	1554	428
-6	10	2	153	-170	-9	12	2	208	222	-2	14	2	285	-280	-4	17	2	546	-558	0	1	3	1028	-991
-5	10	2	293	-315	-8	12	2	169	-168	-1	14	2	1534	-1560	-3	17	2	195	210	1	1	3	540	-531
-4	10	2	187	152	-6	12	2	232	-219	0	14	2	252	280	-2	17	2	1103	-1351	2	1	3	742	-703
-3	10	2	323	-304	-5	12	2	155	-136	1	14	2	420	-799	-1	17	2	88	114	3	1	3	1590	-1529
-1	10	2	1392	-1401	-4	12	2	388	432	2	14	2	310	-329	0	17	2	385	409	4	1	3	848	831
0	10	2	585	-631	-3	12	2	284	322	3	14	2	381	372	2	17	2	815	801	5	1	3	1073	-1036
2	10	2	602	-600	-2	12	2	1202	1199	4	14	2	581	571	3	17	2	210	-209	6	1	3	264	244
3	10	2	388	-394	-1	12	2	1502	1513	5	14	2	373	367	4	17	2	710	-703	7	1	3	280	-244
4	10	2	183	209	0	12	2	128	-30	6	14	2	604	619	5	17	2	164	113	8	1	3	728	-876
5	10	2	848	-882	1	12	2	458	447	7	14	2	387	-405	-2	18	2	427	-420	9	1	3	842	-824
6	10	2	308	328	2	12	2	279	-257	8	14	2	375	384	-1	18	2	267	277	10	1	3	200	-198
7	10	2	944	-930	3	12	2	211	-188	-7	15	2	419	423	1	18	2	233	210	11	1	3	445	447
8	10	2	215	-217	4	12	2	947	-992	-6	15	2	408	-388	-11	0	3	978	-979	12	1	3	232	247
9	10	2	855	898	5	12	2	213	221	-4	15	2	624	638	-9	0	3	1009	-990	-12	2	3	289	287
-10	11	2	307	-289	6	12	2	731	739	-3	15	2	870	-849	-7	0	3	1789	1786	-11	2	3	189	201
-9	11	2	520	523	7	12	2	313	299	-2	15	2	1186	1218	-5	0	3	3780	3856	-9	2	3	1180	1202
-8	11	2	882	-911	8	12	2	283	-272	-1	15	2	529	-554	-3	0	3	1692	1682	-8	2	3	220	-208
-7	11	2	680	-722	-9	13	2	388	351	0	15	2	349	-378	-1	0	3	928	-921	-7	2	3	128	-157
-6	11	2	710	-705	-8	13	2	597	643	1	15	2	636	669	1	0	3	332	-268	-6	2	3	1637	-1642
-5	11	2	886	-892	-6	13	2	925	936	2	15	2	584	-653	3	0	3	4445	4494	-5	2	3	3025	-3050
-4	11	2	279	279	-5	13	2	78	-84	3	15	2	635	638	5	0	3	251	240	-3	2	3	1735	-1634
-3	11	2	480	480	-3	13	2	1215	1230	4	15	2	605	617	7	0	3	2501	-2490	-2	2	3	1783	-1673
-2	11	2	717	-764	-2	13	2	2053	-2055	5	15	2	140	-159	9	0	3	1573	-1572	-1	2	3	1414	1357
-1	11	2	1772	1832	-1	13	2	767	830	6	15	2	1101	1140	11	0	3	118	120	0	2	3	1392	1457
0	11	2	353	-329	0	13	2	635	-650	7	15	2	267	-254	-12	1	3	447	-453	1	2	3	334	347
1	11	2	444	-440	1	13	2	631	-646	-6	16	2	386	363	-11	1	3	715	716	2	2	3	2048	2041
2	11	2	319	303	2	13	2	714	762	-5	16	2	382	-365	-10	1	3	341	-351	3	2	3	1829	-1840
3	11	2	718	-763	3	13	2	869	-852	-4	16	2	244	-243	-9	1	3	1335	1322	4	2	3	488	518
4	11	2	224	248	4	13	2	130	148	-3	16	2	191	-188	-8	1	3	627	674	5	2	3	627	-658
5	11	2	767	766	5	13	2	698	-711	-2	16	2	122	-114	-7	1	3	1156	1126	6	2	3	1944	1959
6	11	2	308	295	6	13	2	327	331	-1	16	2	539	559	-6	1	3	1075	1035	7	2	3	151	-132
7	11	2	838	830	7	13	2	392	-409	1	16	2	380	280	-5	1	3	1043	-1000	8	2	3	1053	1022
8	11	2	824	788	-8	14	2	364	-333	2	16	2	401	388	-4	1	3	213	-185	9	2	3	412	431
9	11	2	351	-375	-6	14	2	412	-395	4	16	2	173	-176	-3	1	3	111	-83	10	2	3	427	421

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-12	3	3	187	270	2	4	3	1417	-1425	-5	6	3	2225	-2231	11	7	3	352	-349	6	9	3	925	909
-11	3	3	277	-242	3	4	3	144	143	-4	6	3	1751	1724	-11	8	3	371	-379	7	9	3	525	-503
-9	3	3	258	-284	4	4	3	1308	-1298	-3	6	3	841	-833	-10	8	3	663	682	8	9	3	527	-510
-8	3	3	227	-206	5	4	3	607	-589	-2	6	3	451	-481	-9	8	3	533	-513	10	9	3	180	210
-7	3	3	445	-444	6	4	3	173	-157	-1	6	3	1889	1744	-8	8	3	636	630	11	9	3	372	361
-6	3	3	231	-213	7	4	3	1107	-1077	0	6	3	1786	-1823	-7	8	3	612	574	-10	10	3	125	-124
-5	3	3	898	-890	8	4	3	172	157	1	6	3	1112	1153	-6	8	3	635	633	-9	10	3	484	429
-4	3	3	1282	1205	10	4	3	309	-312	2	6	3	548	563	-5	8	3	1888	1876	-8	10	3	482	-458
-3	3	3	1703	-1612	-12	5	3	484	439	3	6	3	2485	-2513	-4	8	3	861	-864	-7	10	3	483	439
-2	3	3	719	-687	-11	5	3	448	451	4	6	3	1733	1782	-2	8	3	820	597	-6	10	3	1265	-1248
-1	3	3	178	187	-10	5	3	595	-570	5	6	3	777	-735	-1	8	3	1635	-1740	-5	10	3	858	-689
0	3	3	1677	1757	-8	5	3	616	-581	6	6	3	1005	1023	0	8	3	167	-184	-4	10	3	253	-235
1	3	3	2583	2665	-7	5	3	71	39	7	6	3	1582	1562	1	8	3	740	-762	-3	10	3	372	-375
2	3	3	1230	-1197	-6	5	3	1509	-1452	8	6	3	256	242	2	8	3	1510	-1537	-2	10	3	154	-153
3	3	3	1955	1949	-5	5	3	983	980	9	6	3	979	987	3	8	3	2184	2272	-1	10	3	1504	1587
4	3	3	1782	-1768	-4	5	3	1477	-1479	11	6	3	407	-378	4	8	3	1688	-1712	0	10	3	1163	1105
5	3	3	188	178	-3	5	3	608	581	-11	7	3	470	-515	5	8	3	854	871	1	10	3	607	616
6	3	3	737	-759	-2	5	3	2084	2023	-10	7	3	758	-756	6	8	3	126	-105	2	10	3	1282	1331
7	3	3	538	-535	-1	5	3	628	-620	-9	7	3	138	-158	7	8	3	1397	-1406	3	10	3	1131	-1173
8	3	3	1060	1045	0	5	3	730	-759	-8	7	3	535	542	8	8	3	1020	-1039	4	10	3	1267	1304
9	3	3	587	556	1	5	3	2075	-2114	-6	7	3	1783	1711	9	8	3	231	-215	5	10	3	727	-705
11	3	3	350	359	2	5	3	722	-740	-4	7	3	962	953	10	8	3	605	608	6	10	3	289	-292
12	3	3	574	-553	3	5	3	751	-740	-3	7	3	326	304	-11	9	3	284	291	7	10	3	958	971
-12	4	3	212	-216	4	5	3	527	-530	-2	7	3	707	-676	-10	9	3	278	306	8	10	3	275	-294
-11	4	3	293	303	5	5	3	311	309	-1	7	3	403	-370	-9	9	3	322	311	9	10	3	504	488
-10	4	3	544	549	6	5	3	860	864	0	7	3	783	787	-8	9	3	1166	-1188	10	10	3	485	443
-9	4	3	1405	-1456	7	5	3	758	746	1	7	3	129	-105	-5	9	3	242	-254	-9	11	3	676	641
-8	4	3	751	765	8	5	3	677	663	2	7	3	906	955	-4	9	3	913	-903	-8	11	3	202	-174
-7	4	3	525	-535	9	5	3	530	-509	3	7	3	225	-226	-3	9	3	671	-637	-7	11	3	854	589
-6	4	3	1067	1060	10	5	3	649	639	4	7	3	761	742	-2	9	3	727	-713	-6	11	3	209	241
-5	4	3	2578	2575	11	5	3	533	-523	5	7	3	467	475	0	9	3	1066	-1088	-5	11	3	405	-411
-4	4	3	380	-954	12	5	3	259	261	6	7	3	1047	-1062	1	9	3	1094	1071	-4	11	3	863	712
-3	4	3	730	743	-10	6	3	1042	-1062	7	7	3	442	430	2	9	3	469	-435	-3	11	3	668	-685
-2	4	3	558	-584	-9	6	3	1162	1194	8	7	3	771	-762	3	9	3	875	845	-2	11	3	661	690
0	4	3	241	264	-8	6	3	867	-915	9	7	3	254	266	4	9	3	786	758	-1	11	3	652	675
1	4	3	831	816	-7	6	3	227	220	10	7	3	671	-965	5	9	3	373	-377	0	11	3	1575	1639

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 7

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
1	11	3	388	411	4	13	3	164	-184	9	16	3	1086	1080	-4	1	4	3277	-3230	8	2	4	1521	-1514
2	11	3	268	275	5	13	3	989	988	4	16	3	233	-230	-3	1	4	1911	1889	9	2	4	280	-266
3	11	3	486	-482	6	13	3	617	617	5	16	3	1124	1106	-2	1	4	2517	-2447	10	2	4	175	-182
4	11	3	863	-870	8	13	3	142	158	6	16	3	308	-358	-1	1	4	662	-647	11	2	4	383	385
5	11	3	924	-941	-8	14	3	706	-669	-4	17	3	238	-244	0	1	4	852	807	-12	3	4	185	182
6	11	3	1009	-1034	-7	14	3	638	630	-3	17	3	214	182	1	1	4	234	-268	-11	3	4	195	193
8	11	3	517	539	-6	14	3	118	-181	-1	17	3	195	-189	2	1	4	2713	2720	-10	3	4	1007	1027
-9	12	3	610	-639	-5	14	3	318	-295	0	17	3	178	-175	3	1	4	586	-545	-9	3	4	188	188
-6	12	3	703	700	-4	14	3	926	922	1	17	3	324	332	4	1	4	585	551	-8	3	4	687	657
-7	12	3	1076	-1094	-3	14	3	559	-559	3	17	3	829	841	5	1	4	780	772	-7	3	4	194	203
-8	12	3	749	722	-2	14	3	180	173	5	17	3	419	434	6	1	4	528	-511	-6	3	4	474	440
-5	12	3	193	181	-1	14	3	1245	1250	-3	18	3	256	-271	7	1	4	524	528	-4	3	4	618	572
-4	12	3	702	-672	0	14	3	532	-516	-1	18	3	852	816	8	1	4	213	202	-3	3	4	2479	-2340
-3	12	3	1062	1064	1	14	3	838	841	0	18	3	253	262	9	1	4	371	-380	-2	3	4	897	872
-2	12	3	529	-521	2	14	3	271	-248	1	18	3	918	915	10	1	4	780	762	0	3	4	1291	1293
-1	12	3	899	-1070	3	14	3	744	-765	2	18	3	218	189	11	1	4	283	-290	-1	3	4	853	823
1	12	3	1098	-1126	4	14	3	609	781	3	18	3	461	-464	12	1	4	489	485	1	3	4	118	-124
2	12	3	303	-249	5	14	3	1033	-1002	-12	0	4	228	-230	-12	2	4	407	-411	2	3	4	248	-280
3	12	3	495	489	6	14	3	782	794	-10	0	4	552	562	-9	2	4	1088	-1088	3	3	4	486	-547
4	12	3	1212	-1269	7	14	3	411	418	-8	0	4	875	842	-8	2	4	1214	1257	4	3	4	375	-377
5	12	3	788	807	-7	15	3	855	850	-6	0	4	641	636	-8	2	4	378	-412	5	3	4	1952	-1933
6	12	3	314	-324	-6	15	3	580	592	-4	0	4	1250	-1202	-7	2	4	1121	1169	6	3	4	903	-802
7	12	3	157	-135	-4	15	3	412	396	-2	0	4	1022	-1027	-6	2	4	1180	1154	7	3	4	277	-255
8	12	3	278	275	-2	15	3	288	-287	0	0	4	2472	-2488	-5	2	4	280	-225	8	3	4	1056	-1058
-9	13	3	883	-865	0	15	3	111	59	2	0	4	1186	-1236	-4	2	4	1581	1494	9	3	4	893	855
-8	13	3	359	-356	1	15	3	542	-541	6	0	4	362	385	-3	2	4	1422	-1381	10	3	4	379	-368
-7	13	3	888	-884	2	15	3	384	339	8	0	4	1018	974	-2	2	4	262	-240	11	3	4	482	501
-6	13	3	831	-766	3	15	3	618	-607	12	0	4	122	-122	-1	2	4	496	-450	12	3	4	185	180
-5	13	3	795	812	4	15	3	534	528	-12	1	4	735	-751	0	2	4	430	-413	-12	4	4	958	958
-4	13	3	504	-522	5	15	3	417	-397	-11	1	4	408	-423	1	2	4	1228	1250	-11	4	4	180	-179
-3	13	3	738	719	6	15	3	379	-375	-10	1	4	860	-870	2	2	4	2218	2197	-10	4	4	1592	1650
-1	13	3	690	-719	7	15	3	262	243	-9	1	4	422	-400	3	2	4	1086	-1034	-9	4	4	278	-262
0	13	3	573	-561	-5	16	3	533	540	-8	1	4	177	156	4	2	4	1842	1825	-8	4	4	81	104
1	13	3	302	-332	-2	16	3	129	-86	-7	1	4	268	-247	5	2	4	202	-194	-7	4	4	107	-72
2	13	3	585	-828	-1	16	3	1806	-1814	-6	1	4	691	643	6	2	4	738	-693	-6	4	4	1875	-1799
3	13	3	519	544	1	16	3	611	-584	-5	1	4	344	376	7	2	4	1690	-1675	-5	4	4	1424	-1355

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 8

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-4	4	4	882	-948	12	5	4	284	-285	2	7	4	2441	-2484	-4	9	4	485	-435	-10	11	4	415	416
-3	4	4	558	-553	-12	6	4	379	-407	3	7	4	382	-389	-3	9	4	986	1032	-9	11	4	337	342
-2	4	4	2226	2163	-11	6	4	301	294	4	7	4	474	-444	-2	9	4	1446	-1441	-8	11	4	290	301
-1	4	4	492	504	-10	6	4	998	-992	5	7	4	86	-59	-1	9	4	336	329	-7	11	4	145	-172
0	4	4	2008	2047	-9	6	4	440	-413	6	7	4	749	753	0	9	4	304	-325	-6	11	4	831	-804
1	4	4	1343	-1343	-8	6	4	225	-217	7	7	4	390	408	1	9	4	700	712	-4	11	4	819	-809
2	4	4	1442	-1442	-7	6	4	139	-127	8	7	4	192	189	2	9	4	1293	1358	-3	11	4	1412	-1439
3	4	4	731	714	-6	6	4	822	877	9	7	4	212	207	3	9	4	905	925	-2	11	4	333	327
4	4	4	3176	-3207	-5	6	4	1754	1865	10	7	4	786	-802	4	9	4	470	493	-1	11	4	522	-536
5	4	4	571	609	-4	6	4	614	566	-10	8	4	417	444	5	9	4	1071	1081	0	11	4	407	420
6	4	4	125	-118	-3	6	4	2363	2395	-8	8	4	522	478	6	9	4	958	-976	2	11	4	561	-524
7	4	4	1320	1320	-2	6	4	1214	-1226	-7	8	4	562	-605	7	9	4	194	-189	3	11	4	350	-327
8	4	4	1777	1752	-1	6	4	445	-414	-6	8	4	111	-193	8	9	4	599	-583	4	11	4	408	-442
10	4	4	487	505	0	6	4	767	-769	-5	8	4	1140	-1156	9	9	4	816	-821	5	11	4	1139	-1123
11	4	4	123	14	1	6	4	712	-755	-4	8	4	181	-166	10	9	4	546	568	6	11	4	694	685
-12	5	4	340	-355	2	6	4	2052	2066	-3	8	4	1418	-1472	11	9	4	840	-847	7	11	4	123	119
-10	5	4	784	-813	3	6	4	1220	-1229	-2	8	4	788	810	-10	10	4	630	-602	8	11	4	591	601
-8	5	4	181	-159	4	6	4	1168	1225	-1	8	4	1008	1029	-9	10	4	487	637	10	11	4	376	-396
-7	5	4	158	-130	5	6	4	399	-419	0	8	4	826	-498	-8	10	4	873	-692	-9	12	4	427	-461
-5	5	4	1408	-1367	7	6	4	372	-368	1	8	4	494	542	-7	10	4	1023	585	-7	12	4	281	-260
-4	5	4	687	-691	8	6	4	1319	-1334	2	8	4	1169	-1163	-6	10	4	701	746	-6	12	4	1431	-1425
-3	5	4	344	364	10	6	4	318	327	3	8	4	316	308	-5	10	4	752	778	-5	12	4	587	-584
-2	5	4	1215	-1198	11	6	4	614	-617	4	8	4	172	157	-4	10	4	257	270	-4	12	4	318	-285
-1	5	4	2317	2420	-11	7	4	227	-215	5	8	4	399	374	-3	10	4	268	248	-3	12	4	182	-161
0	5	4	663	660	-10	7	4	336	346	6	8	4	1210	1203	-2	10	4	1248	-1259	-2	12	4	1986	2006
1	5	4	2029	2103	-9	7	4	198	214	7	8	4	1075	1063	-1	10	4	770	-804	-1	12	4	288	289
2	5	4	878	897	-8	7	4	580	-567	8	8	4	438	423	0	10	4	749	-729	0	12	4	1530	1554
3	5	4	173	-167	-7	7	4	258	231	9	8	4	285	295	1	10	4	164	138	2	12	4	900	-848
4	5	4	606	-590	-6	7	4	592	-558	10	8	4	798	-800	2	10	4	955	942	3	12	4	333	304
5	5	4	428	-448	-5	7	4	878	940	11	8	4	240	256	3	10	4	483	492	4	12	4	914	-900
6	5	4	498	475	-4	7	4	1424	1413	-11	9	4	387	-374	4	10	4	248	244	5	12	4	413	424
7	5	4	163	-163	-3	7	4	1600	-1583	-10	9	4	454	-429	5	10	4	701	-669	6	12	4	624	640
8	5	4	1316	1270	-2	7	4	1869	1939	-9	9	4	385	-369	6	10	4	1028	-1036	7	12	4	754	751
9	5	4	219	-194	-1	7	4	1450	-1504	-8	9	4	458	467	7	10	4	1597	-1597	8	12	4	252	228
10	5	4	618	612	0	7	4	697	-714	-7	9	4	569	544	8	10	4	392	-391	-8	13	4	305	-326
11	5	4	109	-83	1	7	4	1479	-1498	-6	9	4	914	905	10	10	4	582	571	-7	13	4	434	-436

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUB CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-8	13	4	794	779	4	15	4	187	-196	-11	1	5	261	194	2	2	5	1876	1819	-5	4	5	1649	-1581
-5	13	4	588	-593	5	15	4	244	257	-10	1	5	358	-368	3	2	5	2902	-2810	-3	4	5	2164	-2164
-4	13	4	1039	1010	6	15	4	1084	1097	-9	1	5	266	240	4	2	5	1966	1988	-2	4	5	494	493
-3	13	4	882	908	-6	16	4	561	-565	-8	1	5	351	354	8	2	5	413	-398	-1	4	5	875	884
-2	13	4	282	-308	-5	16	4	225	-239	-7	1	5	424	423	7	2	5	298	-308	0	4	5	544	531
-1	13	4	1028	1036	-4	16	4	199	196	-6	1	5	882	874	8	2	5	923	-911	1	4	5	4274	4401
0	13	4	514	-543	-2	18	4	1108	1056	-5	1	5	414	421	8	2	5	371	-356	3	4	5	1675	1733
1	13	4	507	489	-1	18	4	213	231	-4	1	5	97	61	12	2	5	862	854	4	4	5	959	-967
3	13	4	416	-410	2	16	4	536	-541	-3	1	5	2709	2677	-11	3	5	827	-817	5	4	5	1236	-1217
4	13	4	182	181	3	16	4	161	194	-2	1	5	784	-730	-10	3	5	140	-159	7	4	5	304	-321
6	13	4	808	-813	4	16	4	374	369	-1	1	5	1814	1586	-8	3	5	756	-738	9	4	5	897	701
7	13	4	177	169	5	16	4	1147	1159	0	1	5	214	-204	-7	3	5	960	982	10	4	5	415	-402
8	13	4	216	-210	-5	17	4	278	270	1	1	5	804	-819	-6	3	5	308	-299	11	4	5	442	419
9	13	4	93	-116	-4	17	4	428	390	2	1	5	371	332	-5	3	5	372	344	12	4	5	496	-489
-7	14	4	135	-107	-3	17	4	241	-232	3	1	5	253	241	-4	3	5	589	-597	-12	5	5	366	362
-6	14	4	1134	1149	-2	17	4	695	-680	4	1	5	140	-104	-3	3	5	2937	-2876	-11	5	5	621	646
-5	14	4	509	536	0	17	4	278	-262	5	1	5	1377	1335	-2	3	5	328	300	-10	5	5	1095	1153
-4	14	4	92	-85	2	17	4	110	806	6	1	5	361	343	-1	3	5	2454	-2476	-9	5	5	171	-108
-3	14	4	822	833	3	17	4	103	105	7	1	5	174	-166	0	3	5	2435	2431	-8	5	5	874	863
-2	14	4	1352	-1372	-3	18	4	536	-541	9	1	5	2269	-2267	1	3	5	525	533	-7	5	5	1378	-1352
0	14	4	651	-642	-2	18	4	1062	-1031	10	1	5	312	-304	2	3	5	2762	2625	-6	5	5	466	-470
1	14	4	312	-305	0	18	4	403	-402	11	1	5	863	-870	3	3	5	724	727	-5	5	5	352	347
2	14	4	597	581	1	18	4	130	147	12	1	5	175	-168	4	3	5	211	217	-4	5	5	431	-415
3	14	4	711	-722	2	18	4	455	470	-12	2	5	387	-413	5	3	5	1083	-1046	-3	5	5	2589	2612
5	14	4	842	-854	-11	0	5	1101	-1072	-11	2	5	755	766	6	3	5	812	-770	-2	5	5	484	503
7	14	4	191	-187	-9	0	5	2024	-2062	-10	2	5	242	-236	7	3	5	811	-816	-1	5	5	2002	2048
-7	15	4	210	242	-7	0	5	505	-467	-9	2	5	912	828	8	3	5	413	406	0	5	5	223	-230
-6	15	4	618	-630	-5	0	5	1840	1950	-8	2	5	646	651	9	3	5	1411	1379	1	5	5	734	-775
-5	15	4	258	247	-3	0	5	1465	-1423	-7	2	5	160	194	10	3	5	432	432	2	5	5	1154	-1159
-4	15	4	320	-371	-1	0	5	1834	-1880	-6	2	5	1012	1012	11	3	5	739	737	3	5	5	1171	-1168
-3	15	4	382	-383	1	0	5	173	180	-5	2	5	307	-330	-12	4	5	316	-365	4	5	5	781	-784
-2	15	4	531	527	3	0	5	2765	2728	-3	2	5	1085	1043	-11	4	5	505	-507	5	5	5	592	621
-1	15	4	518	-525	5	0	5	525	580	-2	2	5	1488	-1444	-10	4	5	220	-222	6	5	5	784	-310
1	15	4	677	-717	7	0	5	342	338	-1	2	5	784	-789	-9	4	5	173	-197	7	5	5	674	659
2	15	4	539	-511	9	0	5	344	299	0	2	5	1261	-1268	-8	4	5	365	378	8	5	5	1054	-1038
3	15	4	109	112	11	0	5	475	-466	1	2	5	1253	-1275	-6	4	5	845	796	9	5	5	1097	-1127

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	5	5	179	201	4	7	5	1217	1233	-1	9	5	204	169	-3	11	5	1818	-1791	2	13	5	185	166
11	5	5	554	-555	5	7	5	1847	-1866	0	9	5	1961	-2050	-2	11	5	200	-184	4	13	5	314	-309
-11	5	5	425	425	6	7	5	382	337	1	9	5	1424	-1466	-1	11	5	396	-410	5	13	5	1092	1107
-10	6	5	462	464	8	7	5	1163	1175	2	9	5	1214	-1271	0	11	5	1591	1617	6	13	5	585	-597
-8	6	5	462	439	9	7	5	1540	1534	4	9	5	358	-364	1	11	5	2148	2187	7	13	5	410	403
-6	6	5	1015	-1010	11	7	5	394	377	5	9	5	1358	1365	2	11	5	1177	1208	8	13	5	590	-586
-5	6	5	2035	-2030	-11	8	5	558	-545	6	9	5	642	641	3	11	5	417	384	-8	14	5	650	-666
-4	6	5	151	-172	-10	8	5	154	-130	7	9	5	174	-163	5	11	5	1330	-1341	-7	14	5	555	-473
-3	6	5	514	478	-9	8	5	764	-780	8	9	5	657	-646	6	11	5	271	-281	-6	14	5	518	-553
-2	6	5	514	504	-8	8	5	418	403	9	9	5	951	-877	7	11	5	578	-545	-3	14	5	128	115
0	6	5	137	151	-7	8	5	229	223	10	9	5	336	-332	8	11	5	616	602	0	14	5	218	-214
1	6	5	635	-642	-6	8	5	1363	1312	-10	10	5	189	-215	9	11	5	332	320	2	14	5	234	-249
2	6	5	1625	-1669	-5	8	5	762	805	-9	10	5	162	145	10	11	5	137	150	3	14	5	449	460
3	6	5	1345	-1374	-3	8	5	371	373	-7	10	5	186	-124	-9	12	5	697	693	4	14	5	200	-187
4	6	5	692	-729	-2	8	5	909	919	-6	10	5	337	-308	-8	12	5	157	349	5	14	5	309	292
5	6	5	149	134	-1	8	5	680	-686	-5	10	5	511	-452	-7	12	5	188	208	7	14	5	332	324
6	6	5	147	-149	0	8	5	445	519	-4	10	5	488	480	-6	12	5	273	287	8	14	5	480	465
7	6	5	454	439	1	8	5	371	-362	-3	10	5	233	-235	-5	12	5	656	-599	-7	15	5	703	743
8	6	5	1145	1137	2	8	5	420	447	-2	10	5	1749	-1803	-4	12	5	256	-287	-6	15	5	258	248
9	6	5	212	-191	3	8	5	120	-100	-1	10	5	293	275	-3	12	5	377	-383	-4	15	5	144	125
10	6	5	1030	1043	4	8	5	641	-681	0	10	5	1136	-1149	-2	12	5	1514	1515	-3	15	5	432	-433
-11	6	5	187	-153	5	8	5	811	810	1	10	5	478	474	-1	12	5	515	500	-1	15	5	889	856
-10	7	5	321	-300	6	8	5	207	-200	2	10	5	152	151	0	12	5	870	879	1	15	5	1028	1040
-9	7	5	813	-771	7	8	5	313	293	3	10	5	271	-236	1	12	5	335	349	3	15	5	481	-446
-8	7	5	323	-321	8	8	5	347	-312	4	10	5	1596	1630	3	12	5	459	-454	4	15	5	173	155
-7	7	5	823	-815	9	8	5	324	-318	5	10	5	172	-175	4	12	5	805	-795	5	15	5	1124	-1116
-6	7	5	468	449	10	8	5	854	-873	6	10	5	271	-269	5	12	5	400	-407	6	15	5	261	274
-5	7	5	113	92	-11	8	5	414	-401	7	10	5	212	218	7	12	5	685	-686	-5	16	5	163	175
-4	7	5	521	-531	-10	8	5	550	588	8	10	5	564	-549	-5	13	5	324	-311	-4	16	5	107	127
-3	7	5	659	667	-9	8	5	207	190	-10	10	5	343	352	-8	13	5	534	547	-3	16	5	401	372
-2	7	5	1236	-1237	-8	9	5	821	593	-10	11	5	240	-253	-7	13	5	1573	-1559	-1	16	5	420	-424
-1	7	5	477	-460	-7	9	5	618	-615	-9	11	5	169	167	-4	13	5	174	-204	1	16	5	857	-887
0	7	5	72	-89	-6	9	5	412	374	-8	11	5	456	-466	-3	13	5	1068	1095	3	16	5	631	-624
1	7	5	571	552	-4	9	5	569	598	-7	11	5	1450	1490	-1	13	5	251	-231	-5	17	5	180	150
2	7	5	1478	1532	-3	9	5	1467	1479	-5	11	5	134	153	0	13	5	158	-170	-4	17	5	724	717
3	7	5	445	495	-2	9	5	201	209	-4	11	5	686	-712	1	13	5	1543	-1595	-3	17	5	482	490

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDECT NO.1 JAN 84

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	17	5	895	-806	2	1	6	205	180	-10	3	6	802	-836	4	4	6	1832	-1848	-2	6	6	202	-207
0	17	5	535	-529	3	1	6	771	-749	-9	3	6	736	785	5	4	6	431	-435	-1	6	6	720	749
1	17	5	1154	-1164	4	1	6	2441	-2384	-8	3	6	1191	-1166	6	4	6	2073	-2067	0	6	6	1293	-1297
2	17	5	388	-412	5	1	6	882	882	-7	3	6	1143	1142	7	4	6	541	527	1	6	6	1647	1663
3	17	5	394	406	6	1	6	711	662	-6	3	6	178	189	8	4	6	417	445	2	6	6	164	125
4	17	5	304	283	7	1	6	735	731	-4	3	6	2809	2761	9	4	6	177	165	3	6	6	331	346
5	17	5	1195	1191	8	1	6	1027	1047	-3	3	6	2041	-1972	11	4	6	263	252	4	6	6	1264	1302
-3	18	5	435	-424	10	1	6	357	372	-2	3	6	377	320	-10	5	6	806	823	5	6	6	369	-365
-2	18	5	331	-327	11	1	6	343	-340	-1	3	6	113	87	-9	5	6	374	395	6	6	6	585	551
-1	18	5	250	282	12	1	6	366	-353	0	3	6	189	-196	-8	5	6	1084	1074	7	6	6	1052	-1057
1	18	5	602	549	-12	2	6	194	221	1	3	6	1932	1972	-7	5	6	159	-163	8	6	6	545	-489
2	18	5	308	312	-11	2	6	634	-671	2	3	6	1345	1345	-6	5	6	875	-881	9	6	6	340	323
3	18	5	411	411	-10	2	6	722	-781	3	3	6	185	189	-5	5	6	1511	-1488	10	6	6	130	147
-10	0	6	378	384	-9	2	6	436	-480	4	3	6	3081	3137	-4	5	6	2941	-2900	-9	7	6	467	-453
-9	0	6	942	1005	-8	2	6	1318	-1338	5	3	6	1323	-1342	-3	5	6	826	-837	-8	7	6	1340	-1369
-8	0	6	1216	1244	-7	2	6	139	-136	6	3	6	530	-559	-2	5	6	280	266	-7	7	6	539	506
-4	0	6	1282	1305	-6	2	6	1062	-1052	7	3	6	994	-960	-1	5	6	543	-533	-5	7	6	2173	2169
-2	0	6	774	781	-5	2	6	1089	1020	8	3	6	1676	-1663	0	5	6	2004	2086	-4	7	6	1285	1340
0	0	6	2011	1872	-4	2	6	364	-351	10	3	6	468	-420	1	5	6	548	570	-3	7	6	129	101
2	0	6	962	923	-3	2	6	1400	1353	11	3	6	264	258	2	4	6	506	-526	-2	7	6	242	185
4	0	6	2777	-2781	-2	2	6	1927	-1978	12	3	6	377	374	3	5	6	559	542	-1	7	6	289	-128
6	0	6	819	-628	-1	2	6	442	-409	-12	4	6	330	-328	4	5	6	3017	-3142	0	7	6	422	-392
8	0	6	1758	1785	0	2	6	1728	-1759	-10	4	6	575	566	5	5	6	1104	1088	1	7	6	178	-180
12	0	6	1457	-1453	1	2	6	2113	-2085	-9	4	6	132	121	6	5	6	131	-146	2	7	6	420	420
-12	1	6	1000	-1030	2	2	6	647	645	-8	4	6	1637	1633	7	5	6	339	318	3	7	6	307	281
-9	1	6	499	-486	3	2	6	1068	1035	-7	4	6	705	672	8	5	6	1872	1884	4	7	6	950	925
-8	1	6	2314	2378	4	2	6	2928	3003	-6	4	6	1253	1233	10	5	6	298	303	5	7	6	1181	-1182
-7	1	6	728	-759	5	2	6	1367	1370	-5	4	6	611	-566	11	5	6	420	415	6	7	6	161	-171
-6	1	6	1141	1146	6	2	6	1241	1255	-4	4	6	1620	-1597	-11	6	6	255	288	7	7	6	460	-433
-5	1	6	109	90	7	2	6	265	266	-3	4	6	764	-771	-10	6	6	374	-385	8	7	6	788	-792
-4	1	6	3793	-3800	8	2	6	1115	-1130	-2	4	6	883	-879	-9	6	6	177	-166	10	7	6	271	270
-3	1	6	1488	1458	9	2	6	853	-859	-1	4	6	828	801	-8	6	6	801	-795	11	7	6	395	-403
-2	1	6	3212	-3171	10	2	6	138	120	0	4	6	2750	2847	-7	6	6	1219	-1209	-11	8	6	145	158
-1	1	6	808	805	11	2	6	437	-443	1	4	6	328	-337	-6	6	6	666	-648	-10	8	6	325	292
0	1	6	1140	1139	12	2	6	952	953	2	4	6	970	989	-4	6	6	788	760	-9	8	6	238	240
1	1	6	2577	-2584	-12	3	6	178	201	3	4	6	1330	-1340	-3	6	6	1111	1119	-8	8	6	242	218

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-7	8	8	527	528	-9	10	8	603	-554	8	11	6	540	-524	-3	14	8	444	449	0	17	8	423	431
-5	8	8	617	-563	-8	10	8	548	-571	-9	12	6	342	334	-2	14	8	318	-325	1	17	8	228	-224
-4	8	8	187	-162	-7	10	8	328	-278	-8	12	6	1119	1087	-1	14	6	383	404	3	17	8	308	-289
-3	8	8	761	-758	-6	10	8	669	852	-7	12	8	355	401	0	14	8	919	-580	4	17	8	426	424
-2	8	8	1014	1017	-5	10	8	1353	1348	-6	12	8	769	-774	1	14	6	333	335	-2	18	8	360	-370
-1	8	8	286	-312	-4	10	8	1262	1250	-5	12	6	797	-755	2	14	6	231	268	-1	18	8	588	-582
0	8	8	823	851	-3	10	8	570	541	-4	12	8	1636	-1664	3	14	6	373	394	0	18	8	539	-527
1	8	8	448	-462	-2	10	8	836	-826	-3	12	6	924	-856	4	14	6	355	344	1	18	6	98	-111
2	8	8	1304	-1344	-1	10	8	882	-865	-2	12	6	380	-372	5	14	6	210	-286	2	18	8	325	333
3	8	8	1101	-1128	0	10	8	1088	-1136	0	12	8	1560	1584	6	14	6	855	-659	-9	0	7	1545	-1606
4	8	8	1542	-1581	1	10	8	142	106	1	12	8	228	-221	7	14	6	512	-482	-7	0	7	580	-628
5	8	8	1011	-895	2	10	8	713	692	2	12	6	290	281	-7	15	8	154	125	-5	0	7	1584	1616
6	8	8	534	551	3	10	8	1744	1778	3	12	6	680	-670	-8	15	6	335	326	-3	0	7	2721	-2771
7	8	8	1112	1106	4	10	8	1141	1155	4	12	8	677	-672	-8	15	8	700	678	-1	0	7	3293	-3359
8	8	8	1493	1495	5	10	8	1183	1212	5	12	6	403	-375	-3	15	8	287	328	1	0	7	888	952
9	8	8	501	509	6	10	8	439	-412	7	12	6	437	422	-2	15	6	459	-456	3	0	7	3544	3508
10	8	8	183	-179	7	10	8	834	-868	8	12	6	501	507	-1	15	6	204	-227	5	0	7	1881	-1837
-9	9	8	185	-177	8	10	8	934	-936	9	12	6	218	209	0	15	8	420	-445	7	0	7	702	-690
-8	9	8	1109	1085	9	10	8	732	-747	-8	13	8	185	184	4	15	6	358	-374	9	0	7	1874	1852
-7	9	8	1025	-1023	-10	11	8	408	-412	-7	13	8	471	-464	5	15	8	568	-556	-11	0	7	1758	1802
-6	9	8	442	411	-9	11	8	436	458	-8	13	6	904	-927	6	15	6	187	-208	-12	1	7	232	241
-5	9	8	1622	-1576	-8	12	8	444	-433	-8	13	6	791	-785	-8	15	6	724	-674	-11	1	7	1034	-1085
-4	9	8	1114	-1158	-7	11	8	937	969	-4	13	6	209	-238	-5	16	8	343	-329	-9	1	7	1365	-1421
-3	9	8	769	793	-6	11	8	828	772	-2	13	6	1048	1074	-4	16	8	588	-553	-8	1	7	368	-387
-2	9	8	284	-284	-5	11	8	738	721	0	13	6	1391	1412	-2	16	8	629	621	-7	1	7	374	332
-1	9	8	337	330	-4	11	8	925	865	1	13	6	186	-183	-1	16	6	167	119	-6	1	7	466	-425
0	9	8	706	768	-3	12	6	1035	-1015	2	13	6	251	-261	0	16	6	551	567	-5	1	7	280	249
1	9	8	797	-740	-2	12	6	611	-622	3	13	8	222	226	1	16	8	213	-181	-4	1	7	124	-87
2	9	8	373	373	-1	11	8	252	278	4	13	8	515	-511	2	16	6	645	-667	-3	1	7	220	189
3	9	8	818	-852	0	12	8	1947	-1582	5	13	6	884	906	3	16	8	515	-530	-2	1	7	236	258
4	9	8	1602	1606	1	11	8	734	758	7	13	8	237	228	4	16	6	355	-371	-1	1	7	716	704
5	9	8	179	188	3	11	8	512	493	8	13	6	416	429	6	16	8	1107	1099	0	1	7	812	656
6	9	8	1214	1186	4	11	8	962	983	-8	14	6	451	-456	-4	17	6	188	203	1	1	7	87	796
7	9	8	216	216	5	11	8	1524	-1518	-7	14	6	598	-627	-3	17	8	487	434	2	1	7	248	-262
8	9	8	331	-338	6	11	8	457	446	-6	14	6	770	759	-2	17	8	221	238	3	1	7	830	532
-10	10	8	426	-457	7	11	8	972	-940	-4	14	6	1062	1052	-1	17	8	377	358	4	1	7	871	-863

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	1	7	1244	1251	-1	3	7	2766	-2740	-10	5	7	284	-259	7	8	7	1028	1048	4	8	7	300	-314
7	1	7	2044	2033	0	3	7	1582	-1647	-8	5	7	760	730	8	8	7	1080	-1081	5	8	7	1138	-1147
8	1	7	779	788	1	3	7	2495	-2530	-6	5	7	267	253	9	8	7	850	-1859	6	8	7	489	476
9	1	7	122	-108	2	3	7	954	956	-5	5	7	1576	-1565	10	8	7	327	327	7	8	7	723	-721
11	1	7	858	-880	4	3	7	408	440	-4	5	7	202	201	11	8	7	1102	-1301	8	8	7	646	951
12	1	7	412	-402	5	3	7	746	733	-3	5	7	786	-744	-11	7	7	361	356	9	8	7	1054	1116
-11	1	7	469	506	6	3	7	374	-392	-2	5	7	644	688	-9	7	7	528	526	-10	8	7	110	119
-9	2	7	1302	1362	7	3	7	1180	-1210	-1	5	7	2031	2070	-8	7	7	1259	-1261	-9	9	7	287	-259
-7	2	7	130	-144	8	3	7	629	-612	1	5	7	2428	2580	-6	7	7	237	-198	-6	8	7	456	431
-6	2	7	459	459	9	3	7	418	-414	2	5	7	263	212	-4	7	7	170	157	-6	9	7	514	-466
-5	2	7	1287	-1315	10	3	7	540	518	3	5	7	98	102	-3	7	7	840	-786	-5	9	7	444	446
-4	2	7	1344	1296	11	3	7	188	188	4	5	7	130	-112	-2	7	7	610	-627	-4	9	7	512	518
-3	2	7	3249	3179	-12	4	7	318	-319	5	5	7	230	-239	-1	7	7	162	183	-3	9	7	507	481
-2	2	7	300	-261	-11	4	7	730	-786	7	5	7	785	765	0	7	7	1439	-1444	-2	9	7	1855	1931
-1	2	7	2585	2624	-10	4	7	485	-455	8	5	7	1022	-1049	2	7	7	353	-355	-1	9	7	354	-362
0	2	7	2614	-2977	-9	4	7	785	-700	9	5	7	479	464	3	7	7	188	187	0	9	7	1342	1342
1	2	7	1234	-1253	-8	4	7	377	-390	10	5	7	833	-832	4	7	7	116	-115	1	9	7	956	-871
2	2	7	1070	-1071	-7	4	7	1542	1499	11	5	7	152	-130	5	7	7	1008	-1003	2	9	7	859	-983
3	2	7	2690	-2707	-6	4	7	2119	2034	-11	6	7	416	406	7	7	7	884	-880	3	9	7	395	-383
4	2	7	556	544	-4	4	7	1030	-964	-10	6	7	1239	1250	8	7	7	1461	1472	4	8	7	642	-697
5	2	7	1573	1579	-3	4	7	3355	-3503	-9	6	7	884	1000	10	7	7	495	511	5	8	7	947	922
6	2	7	171	-142	-2	4	7	350	-323	-8	6	7	328	304	11	7	7	600	633	6	8	7	706	743
7	2	7	1227	1162	-1	4	7	3059	-3137	-7	6	7	593	-495	-11	8	7	255	-272	7	8	7	671	708
8	2	7	281	-281	0	4	7	1435	1420	-6	6	7	764	-727	-10	8	7	1024	-1055	8	9	7	255	-283
9	2	7	1301	-1311	1	4	7	1304	1328	-5	6	7	1164	-1158	-9	8	7	1251	-1284	9	9	7	301	-289
10	2	7	298	-243	2	4	7	1544	1593	-4	6	7	282	295	-8	8	7	149	154	-10	9	7	731	-753
-11	3	7	1738	-1748	3	4	7	3334	3414	-3	6	7	1743	1717	-6	8	7	120	97	-10	10	7	476	495
-12	3	7	194	-231	4	4	7	75	57	-2	6	7	568	591	-5	8	7	1197	1198	-9	10	7	780	767
-11	3	7	250	255	5	4	7	1082	-1066	-1	6	7	2396	2507	-4	8	7	1379	-1350	-8	10	7	1073	-1021
-9	3	7	218	206	6	4	7	140	133	0	6	7	158	122	-3	8	7	688	-697	-7	10	7	1073	-1021
-8	3	7	324	291	7	4	7	1484	-1496	1	6	7	981	-1044	-2	8	7	279	-270	-6	10	7	462	498
-6	3	7	841	905	8	4	7	874	703	2	6	7	1001	-1029	-1	8	7	1518	-1527	-5	10	7	1105	-1118
-5	3	7	1170	1131	9	4	7	623	834	3	6	7	2132	-2192	0	8	7	1272	1268	-4	10	7	1630	1567
-4	3	7	804	-737	10	4	7	106	95	4	6	7	455	-486	1	8	7	1001	1023	-3	10	7	922	946
-3	3	7	963	909	11	4	7	1542	1532	5	6	7	1233	1244	2	8	7	1813	1851	-1	10	7	1516	1557
-2	3	7	1634	-1814	-11	5	7	144	-175	6	6	7	979	-978	3	8	7	1247	1258	0	10	7	2174	-2210

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	10	7	1114	-1147	5	12	7	295	-248	-2	15	7	422	-387	-11	1	8	478	527	3	2	8	355	-348
2	10	7	1888	-1703	5	12	7	368	398	0	15	7	130	-115	-10	1	8	873	-592	4	2	8	1643	-1555
3	10	7	1543	-1552	7	12	7	1280	-1312	1	15	7	682	801	-9	1	8	349	354	5	2	8	1747	1788
4	10	7	1110	1122	8	12	7	505	526	2	15	7	250	244	-8	1	8	1563	1593	6	2	8	247	225
5	10	7	516	508	-8	13	7	731	691	3	15	7	394	385	-7	1	8	570	-591	7	2	8	860	859
6	10	7	350	351	-7	13	7	198	-202	4	15	7	303	-303	-6	1	8	2567	2566	8	2	8	753	738
7	10	7	1405	1401	-5	13	7	485	-506	-6	15	7	218	257	-5	1	8	835	-857	10	2	8	316	322
8	10	7	707	-708	-4	13	7	210	-159	-5	16	7	258	263	-4	1	8	840	-849	11	2	8	335	-325
9	10	7	326	-314	-3	13	7	118	89	-4	16	7	679	-636	-3	1	8	535	502	-12	3	8	835	805
10	10	7	305	-319	-2	13	7	524	493	-3	16	7	326	312	-2	1	8	1336	-1283	-11	3	8	434	-419
-9	11	7	539	-501	-1	13	7	542	538	-2	16	7	218	-205	-1	1	8	131	141	-10	3	8	244	-245
-7	11	7	181	183	0	13	7	683	657	-1	16	7	252	235	0	1	8	2409	2494	-9	3	8	860	-891
-8	11	7	878	839	1	13	7	306	-315	0	16	7	628	552	1	1	8	770	756	-8	3	8	2139	-2125
-5	11	7	231	234	2	13	7	277	-267	1	16	7	634	653	2	1	8	2465	2474	-7	3	8	334	309
-4	11	7	861	-847	3	13	7	406	-424	2	16	7	369	385	3	1	8	698	-721	-6	3	8	2400	-2389
-2	11	7	2145	-2164	4	13	7	135	-107	3	16	7	142	-147	4	1	8	4394	-4207	-5	3	8	1785	1728
-1	11	7	853	-853	5	13	7	478	-474	4	16	7	405	-380	5	1	8	565	-534	-4	3	8	2175	2147
0	11	7	808	-848	6	13	7	245	219	5	16	7	155	-173	6	1	8	1685	-1710	-3	3	8	480	487
2	11	7	1312	1304	7	13	7	295	-277	-3	17	7	554	563	7	1	8	153	132	-2	3	8	1585	1552
3	11	7	378	369	8	13	7	492	-516	-2	17	7	507	494	8	1	8	1300	1311	-1	3	8	189	-241
4	11	7	650	690	-7	14	7	774	-775	-1	17	7	376	-344	9	1	8	494	596	0	3	8	2501	-2525
5	11	7	144	181	-6	14	7	510	-458	1	17	7	1044	-1077	10	1	8	835	852	1	3	8	216	-212
6	11	7	868	-675	-5	14	7	434	-448	2	17	7	368	-376	11	1	8	327	312	2	3	8	2788	-2855
9	11	7	232	226	-4	14	7	355	361	3	17	7	368	-376	-12	2	8	262	-278	3	3	8	1680	1772
-9	12	7	267	-258	-3	14	7	225	223	0	18	7	920	-883	-10	2	8	198	-212	4	3	8	2420	2447
-7	12	7	1347	1325	-2	14	7	202	234	1	18	7	668	-665	-9	2	8	471	-510	5	3	8	838	849
-6	12	7	114	-86	-1	14	7	311	303	-12	0	8	731	773	-8	2	8	1585	1620	6	3	8	2277	2273
-5	12	7	755	726	0	14	7	289	-304	-10	0	8	222	216	-7	2	8	1288	-1271	7	3	8	617	-586
-4	12	7	637	-663	1	14	7	687	-693	-8	0	8	2027	-2034	-6	2	8	186	224	8	3	8	266	-248
-3	12	7	750	-739	3	14	7	318	-313	-4	0	8	2025	2033	-5	2	8	873	889	9	3	8	504	-471
-1	12	7	812	-760	4	14	7	294	290	-2	0	8	1768	1726	-4	2	8	1976	-1982	10	3	8	889	-951
0	12	7	956	893	5	14	7	152	167	0	0	8	865	-868	-3	2	0	1367	1391	11	3	8	290	-292
1	12	7	1090	1070	6	14	7	647	-647	2	0	8	571	572	-2	2	8	1787	-1607	-11	4	8	113	101
2	12	7	671	691	7	14	7	820	785	4	0	8	358	361	0	2	8	767	777	-10	4	8	370	-391
3	12	7	1114	1128	-5	15	7	158	-175	6	0	8	615	-660	1	2	8	2018	-2073	-8	4	8	784	-764
4	12	7	397	-355	-3	15	7	391	-391	-12	1	8	385	-403	2	2	8	1365	-1350	-7	4	8	1135	1109

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUB CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 15

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	4	8	1041	1018	8	5	8	92	-33	2	7	8	571	-600	-2	9	8	470	-872	-2	11	8	1001	995
-5	4	8	558	531	9	5	8	188	-175	3	7	8	1498	1517	-1	9	8	1124	1134	-1	11	8	978	-1004
-4	4	8	1702	1654	10	5	8	974	934	4	7	8	1907	1945	0	9	8	648	685	0	11	8	1616	-1618
-3	4	8	102	95	-11	6	8	200	202	5	7	8	1105	-1084	1	9	8	783	-798	1	11	8	182	198
-2	4	8	189	-164	-9	6	8	697	649	6	7	8	811	817	2	9	8	101	87	2	11	8	1064	-1111
0	4	8	600	-628	-8	6	8	682	659	7	7	8	838	-854	3	9	8	2295	-2343	3	11	8	1568	1597
1	4	8	598	623	-7	6	8	1071	-1041	8	7	8	989	-973	4	9	8	1232	-1251	4	11	8	717	780
2	4	8	1409	1454	-6	6	8	305	-325	9	7	8	408	419	5	9	8	140	-143	5	11	8	618	580
3	4	8	603	-612	-5	6	8	1707	-1646	10	7	8	397	-441	6	9	8	578	-578	6	11	8	834	857
4	4	8	2018	2007	-4	6	8	1132	-1115	-11	8	8	234	-251	7	9	8	985	1003	7	11	8	583	-661
5	4	8	1450	-1437	-3	6	8	1285	-1243	-10	8	8	340	342	8	9	8	1222	1223	8	11	8	669	-712
6	4	8	214	-225	-2	6	8	257	-239	-8	8	8	936	-874	9	9	8	528	532	9	11	8	483	-446
7	4	8	78	61	-1	6	8	231	-256	-7	8	8	1706	1674	10	9	8	461	455	-8	12	8	308	324
8	4	8	1182	-1176	0	6	8	470	426	-6	8	8	733	-720	-9	10	8	462	-481	-7	12	8	954	853
9	4	8	223	242	1	6	8	93	111	-5	8	8	1244	1273	-8	10	8	443	455	-6	12	8	313	318
10	4	8	462	-472	2	6	8	918	-942	-4	8	8	618	597	-7	10	8	1395	-1382	-5	12	8	742	678
11	4	8	402	-391	3	6	8	1204	1233	-3	8	8	241	-157	-5	10	8	174	-192	-2	12	8	446	-421
-11	5	8	321	-309	4	6	8	1241	-1298	-2	8	8	1083	1110	-4	10	8	778	-738	0	12	8	640	-626
-10	5	8	222	-217	5	6	8	1108	1096	-1	8	8	353	-347	-3	10	8	788	830	1	12	8	992	959
-9	5	8	643	654	6	6	8	311	328	0	8	8	518	487	-2	10	8	486	-452	2	12	8	344	-350
-8	5	8	1780	1780	7	6	8	269	-274	1	8	8	908	926	-1	10	8	269	-234	3	12	8	263	-254
-7	5	8	1212	1199	8	6	8	631	616	2	8	8	179	-187	0	10	8	757	750	4	12	8	476	464
-6	5	8	2088	2058	11	6	8	652	653	3	8	8	432	-432	1	10	8	1561	-1623	5	12	8	1070	-1086
-5	5	8	472	-431	-11	7	8	326	315	4	8	8	400	-415	2	10	8	559	592	6	12	8	398	393
-4	5	8	2533	-2498	-10	7	8	577	597	5	8	8	1347	-1349	3	10	8	168	149	7	12	8	251	-271
-3	5	8	936	-913	-9	7	8	889	-903	6	8	8	90	-119	4	10	8	325	-303	8	12	8	258	-232
-2	5	8	1478	-1532	-8	7	8	849	-848	7	8	8	440	-450	5	10	8	1266	1307	-8	13	8	754	788
-1	5	8	1218	-1241	-7	7	8	858	-800	8	8	8	151	171	6	10	8	592	-591	-7	13	8	431	360
0	5	8	1927	2048	-6	7	8	1485	-1470	10	8	8	247	244	7	10	8	866	880	-6	13	8	278	-254
1	5	8	124	-130	-5	7	8	831	808	-10	9	8	482	-482	-9	11	8	911	-926	-5	13	8	548	-551
2	5	8	2835	2836	-4	7	8	1231	1234	-9	9	8	1058	1017	-8	11	8	1131	-1110	-4	13	8	1386	-1327
3	5	8	886	-884	-3	7	8	774	788	-8	9	8	808	801	-7	11	8	273	254	-3	13	8	260	-261
4	5	8	2010	-2094	-2	7	8	791	810	-6	9	8	412	412	-6	11	8	223	203	-2	13	8	969	-980
5	5	8	375	378	-1	7	8	151	156	-5	9	8	1500	-1472	-5	11	8	1266	1233	0	13	8	1019	1044
6	5	8	2371	-2395	0	7	8	976	-985	-4	9	8	784	-786	-4	11	8	1527	1522	1	13	8	358	-361
7	5	8	454	450	1	7	8	1358	1389	-3	9	8	556	-555	-3	11	8	821	800	2	13	8	606	619

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO. 1 JAN 84

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	13	8	833	-809	-1	17	8	542	552	-11	2	9	905	-856	9	3	9	438	-435	5	5	8	523	519
4	13	8	205	-212	0	17	8	318	230	-8	2	9	819	-854	10	3	9	234	-231	6	5	9	1304	1306
5	13	8	331	321	3	17	8	705	-686	-7	2	9	80	-97	-11	3	9	1178	-1194	7	5	9	911	-898
6	13	8	598	-581	-11	0	9	1574	1642	-6	2	9	228	-264	-10	4	9	338	-370	8	5	9	503	482
7	13	8	441	442	-7	0	9	814	-829	-5	2	9	2172	-2177	-9	4	9	831	-814	10	5	9	454	-466
8	13	8	451	470	-5	0	9	1428	1400	-4	2	9	603	679	-7	4	9	184	173	-11	5	9	873	985
9	13	8	581	-570	-3	0	9	240	257	-3	2	9	444	-439	-6	4	9	114	114	-11	6	9	313	-342
10	13	8	208	205	-1	0	9	1383	-1365	-2	2	9	1330	1340	-5	4	9	2879	2794	-10	6	9	303	288
11	13	8	551	-600	1	0	9	450	337	-1	2	9	2487	2545	-4	4	9	226	-265	-9	6	9	280	320
12	13	8	192	-186	3	0	9	1125	1129	0	2	9	280	247	-3	4	9	591	609	-8	6	9	263	258
13	13	8	259	268	5	0	9	1838	-1828	1	2	9	1285	1326	-2	4	9	1325	-1353	-7	5	9	158	136
14	13	8	78	-108	7	0	9	2503	-2510	2	2	9	1572	-1544	-1	4	9	2791	-2873	-6	6	9	426	458
15	13	8	844	857	11	0	9	1848	1882	3	2	9	1311	-1298	0	4	9	412	-374	-5	6	9	1401	-1383
16	13	8	465	493	-11	1	9	337	355	5	2	9	746	748	1	4	9	2919	-2955	-4	6	9	325	310
17	13	8	831	861	-10	1	9	199	276	6	2	9	576	556	2	4	9	1124	1136	-3	6	9	529	-521
18	13	8	236	-234	-9	1	9	1784	-1803	7	2	9	1876	1863	3	4	9	1971	1992	-2	6	9	683	625
19	13	8	219	-220	-8	1	9	201	220	8	2	9	643	624	4	4	9	727	-736	-1	6	9	1486	1543
20	13	8	217	207	-7	1	9	147	-107	9	2	9	474	482	5	4	9	338	321	0	6	9	769	723
21	13	8	529	530	-6	1	9	386	-398	10	2	9	182	-185	6	4	9	258	-218	1	6	9	1471	1405
22	13	8	521	523	-5	1	9	1042	1061	11	2	9	1309	-1332	7	4	9	1388	-1354	2	6	9	155	-126
23	13	8	197	170	-4	1	9	417	-418	-9	3	9	1335	1390	8	4	9	276	255	3	6	9	1415	-1452
24	13	8	570	545	-3	1	9	963	-958	-7	3	9	567	-537	9	4	9	1099	-1100	4	6	9	774	814
25	13	8	585	-586	-2	1	9	167	160	-6	3	9	709	675	10	4	9	875	677	5	6	9	186	-150
26	13	8	261	275	-1	1	9	2865	-2827	-5	3	9	1216	-1177	-11	4	9	825	853	6	6	9	822	-688
27	13	8	161	-162	0	1	9	1812	1863	-4	3	9	720	740	-10	5	9	910	-850	7	6	9	1114	1133
28	13	8	650	645	1	1	9	169	127	-3	3	9	1322	1334	-9	5	9	1034	-1027	8	6	9	1144	-1148
29	13	8	209	-208	2	1	9	710	715	-2	3	9	89	70	-8	5	9	145	140	9	6	9	458	507
30	13	8	253	-259	3	1	9	1408	1455	-1	3	9	3377	3510	-7	5	9	786	747	10	6	9	788	-767
31	13	8	272	240	4	1	9	833	-858	0	3	9	2035	-2111	-6	5	9	1213	1188	-11	6	9	92	-948
32	13	8	242	-248	5	1	9	156	125	1	3	9	401	-430	-3	5	9	1358	-1346	-11	7	9	167	-179
33	13	8	224	-202	6	1	9	615	-594	2	3	9	628	-645	-2	5	9	332	-367	-10	7	9	971	956
34	13	8	858	-859	7	1	9	226	220	3	3	9	1988	-2020	-1	5	9	3034	-3037	-9	7	9	1320	1306
35	13	8	623	-618	8	1	9	1085	1108	4	3	9	494	467	0	5	9	1435	1488	-8	7	9	263	-245
36	13	8	395	-386	9	1	9	278	274	5	3	9	298	-278	1	5	9	185	176	-7	7	9	458	440
37	13	8	325	-312	10	1	9	1008	1018	6	3	9	962	968	3	5	9	2127	2158	-6	7	9	193	167
38	13	8	214	-212	11	1	9	260	274	7	3	9	345	-329	4	5	9	866	857	-5	7	9	1171	-1156

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 17

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	7	9	584	525	-5	9	9	1328	1306	3	11	9	1482	-1483	-4	14	9	230	188	0	0	10	536	-521
-3	7	9	501	-537	-4	9	9	1328	-1343	4	11	9	393	380	-3	14	9	281	-284	2	0	10	318	297
-1	7	9	1178	1212	-3	9	9	862	845	5	11	9	383	-380	-2	14	9	420	410	4	0	10	1588	1608
0	7	9	1065	-1032	-2	9	9	157	136	6	11	9	204	-208	-1	14	9	428	471	6	0	10	1902	1831
1	7	9	311	312	-1	9	9	1121	-1141	7	11	9	1130	1152	0	14	9	186	205	8	0	10	680	-663
2	7	9	202	-205	0	9	9	2211	2314	8	11	9	522	-533	1	14	9	280	-281	10	0	10	230	-217
3	7	9	991	-978	2	9	9	878	909	9	11	9	484	487	2	14	9	347	-353	-10	1	10	471	-530
4	7	9	337	-348	3	9	9	1150	1205	-7	12	9	170	152	3	14	9	588	-582	-9	1	10	268	265
5	7	9	225	-218	4	9	9	554	-569	-6	12	9	173	143	4	14	9	477	452	-8	1	10	834	-859
6	7	9	1221	-1229	5	9	9	186	113	-5	12	9	781	751	5	14	9	911	-908	-5	1	10	460	-380
7	7	9	220	213	7	9	9	723	-750	-4	12	9	781	-770	7	14	9	208	179	-4	1	10	781	784
8	7	9	705	-717	8	9	9	837	839	-3	12	9	150	128	-5	15	9	818	-777	-3	1	10	835	-818
9	7	9	237	-231	9	9	9	211	238	-2	12	9	1377	-1402	-4	15	9	170	183	-2	1	10	227	190
-10	7	9	454	449	-10	10	9	398	402	-1	12	9	915	-932	-3	15	9	882	-887	-1	1	10	572	552
-10	8	9	464	-488	-9	10	9	478	475	0	12	9	392	-388	0	15	9	134	-214	0	1	10	547	585
-8	8	9	431	-398	-8	10	9	381	-348	1	12	9	254	-253	1	15	9	467	462	1	1	10	849	943
-7	8	9	244	-252	-5	10	9	584	-598	2	12	9	772	782	3	15	9	386	-382	2	1	10	1424	1505
-6	8	9	358	381	-2	10	9	2397	2423	3	12	9	680	640	5	15	9	480	-483	3	1	10	443	432
-4	8	9	784	-741	-1	10	9	507	500	4	12	9	197	-178	6	15	9	385	-403	4	1	10	350	281
-3	8	9	241	-208	0	10	9	991	990	5	12	9	883	1011	-5	16	9	276	-278	5	2	10	985	-888
-2	8	9	1401	-1460	1	10	9	167	-149	6	12	9	491	-488	-4	16	9	87	-115	6	1	10	800	-788
-1	8	9	341	-350	2	10	9	1504	-1527	8	12	9	381	380	-2	16	9	537	-567	7	1	10	506	-494
0	8	9	393	-451	3	10	9	675	-700	-8	13	9	171	185	0	16	9	207	-186	10	1	10	379	343
1	8	9	698	720	4	10	9	424	-440	-5	13	9	983	985	1	16	9	758	713	-11	2	10	759	823
2	8	9	359	384	5	10	9	438	-398	-4	13	9	418	-381	2	16	9	453	457	-10	2	10	549	-939
3	8	9	1183	1185	6	10	9	831	787	-3	13	9	525	512	3	16	9	383	385	-9	2	10	476	479
4	8	9	524	-534	7	10	9	595	631	-2	13	9	264	-250	-3	17	9	921	917	-8	2	10	1441	1420
5	8	9	775	-788	8	10	9	152	-139	-1	13	9	433	-454	-1	17	9	201	177	-7	2	10	732	-719
7	8	9	1297	-1309	-9	11	9	333	344	0	13	9	712	716	0	17	9	775	760	-6	2	10	2370	2349
8	8	9	816	809	-8	11	9	205	-175	1	13	9	311	-310	1	17	9	519	-519	-5	2	10	1521	-1478
-10	8	9	705	710	-7	11	9	234	-257	2	13	9	259	257	3	17	9	171	162	-4	2	10	298	256
-9	8	9	398	-408	-6	11	9	461	488	3	13	9	1005	1028	-10	0	10	1073	1126	-3	2	10	362	361
-8	8	9	1012	-1006	-5	11	9	935	-944	5	13	9	549	548	-8	0	10	1202	-1205	-2	2	10	1511	-1551
-6	8	9	322	314	-4	11	9	973	990	6	13	9	589	623	-6	0	10	2101	-2112	-1	2	10	1282	1220
-7	8	9	333	-361	-1	11	9	1294	1314	7	13	9	881	-885	-4	0	10	862	-893	0	2	10	1174	1215
-8	8	9	901	-828	0	11	9	1737	-1741	-5	14	9	211	-235	-2	0	10	506	548	2	2	10	1389	1430

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	2	10	2109	-2072	-4	4	10	901	910	-4	6	10	471	-440	-3	8	10	641	618	-1	10	10	1068	1072
4	2	10	1403	-1388	-3	4	10	819	798	-3	6	10	904	-830	-2	8	10	1109	1132	-1	10	10	942	-838
5	2	10	1022	-1012	-2	4	10	2884	2879	-2	6	10	1789	-1786	0	8	10	581	548	2	10	10	1127	1161
6	2	10	2031	-2002	0	4	10	2153	-2234	-1	6	10	538	-570	1	8	10	1717	1768	3	10	10	1287	-1260
7	2	10	625	629	1	4	10	531	553	0	8	10	772	746	2	8	10	410	-412	4	10	10	149	-148
8	2	10	646	638	2	4	10	2323	-2398	1	8	10	1571	-1633	3	8	10	937	817	5	10	10	320	-339
10	2	10	490	496	3	4	10	650	654	2	8	10	1913	1916	4	8	10	153	176	6	10	10	766	-772
11	2	10	200	168	4	4	10	1689	1687	4	6	10	610	-563	5	8	10	292	-382	7	10	10	575	566
-11	3	10	152	-143	5	4	10	343	340	5	8	10	616	626	6	8	10	892	886	8	10	10	150	120
-10	3	10	630	659	6	4	10	2731	2769	6	6	10	1831	-1803	7	8	10	375	-375	9	10	10	343	340
-9	3	10	745	-747	7	4	10	273	-255	7	6	10	196	-195	8	8	10	221	-222	-9	11	10	671	-678
-8	3	10	111	-130	8	4	10	410	402	8	6	10	265	-268	8	8	10	183	190	-8	11	10	288	-268
-7	3	10	700	-715	10	4	10	902	-932	9	6	10	630	-620	10	8	10	516	-503	-7	11	10	849	-812
-6	3	10	830	-867	-11	5	10	363	-368	10	6	10	879	883	-9	9	10	821	840	-6	11	10	382	-341
-5	3	10	423	434	-10	5	10	653	-653	-9	7	10	258	-244	-8	9	10	180	-155	-3	11	10	328	310
-4	3	10	73	-85	-8	5	10	268	289	-7	7	10	1156	-1102	-7	8	10	1366	1373	-2	11	10	418	433
-3	3	10	315	300	-7	5	10	801	864	-6	7	10	259	267	-6	8	10	393	-365	-1	11	10	546	-519
-2	3	10	283	304	-6	5	10	1010	976	-5	7	10	875	-973	-5	9	10	307	287	0	11	10	434	472
-1	3	10	1542	-1561	-5	5	10	779	777	-4	7	10	306	299	-3	9	10	873	-893	1	11	10	985	-998
0	3	10	757	-791	-4	5	10	239	211	-3	7	10	663	-646	-2	9	10	324	318	2	11	10	178	175
1	3	10	814	-858	-3	5	10	318	328	-1	7	10	289	-226	-1	9	10	417	428	3	11	10	734	729
2	3	10	2077	-2138	-2	5	10	641	-690	0	7	10	1074	-1120	0	9	10	518	517	4	11	10	364	-403
3	3	10	585	570	0	5	10	148	114	1	7	10	285	243	1	9	10	1453	1463	5	11	10	822	825
4	3	10	238	-238	2	5	10	2094	2180	2	7	10	867	-821	3	9	10	820	-810	6	11	10	184	-174
5	3	10	615	592	3	5	10	1478	-1505	3	7	10	1547	1589	4	9	10	375	-385	7	11	10	400	392
6	3	10	600	606	4	5	10	657	681	4	7	10	516	515	5	9	10	1003	-995	8	11	10	145	149
7	3	10	315	287	5	5	10	497	-485	5	7	10	216	226	6	9	10	155	-132	-8	12	10	143	-160
8	3	10	771	778	6	5	10	488	-472	6	7	10	342	368	7	9	10	524	-550	-7	12	10	257	254
11	3	10	311	316	8	5	10	622	-598	8	7	10	413	-431	8	9	10	375	371	-6	12	10	266	-275
-11	4	10	209	-219	10	5	10	226	208	10	7	10	429	-451	-9	10	10	905	109	-5	12	10	849	842
-10	4	10	897	895	-11	6	10	344	-356	-10	8	10	1057	1024	-7	10	10	880	-884	-4	12	10	838	840
-9	4	10	722	-734	-10	6	10	781	-764	-9	8	10	662	-849	-6	10	10	771	736	-3	12	10	422	454
-8	4	10	1619	-1590	-8	6	10	747	762	-7	8	10	126	131	-5	10	10	1194	-1199	-2	12	10	1342	1319
-7	4	10	125	-109	-6	6	10	890	857	-6	8	10	1326	-1317	-4	10	10	443	-443	-1	12	10	492	-485
-6	4	10	2183	-2113	-7	6	10	668	663	-5	8	10	313	304	-3	10	10	436	-398	0	12	10	181	-167
-5	4	10	790	799	-6	6	10	1766	1702	-4	8	10	638	-641	-2	10	10	1235	-1200	1	12	10	663	661

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 19

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	12	10	1538	-1538	1	15	10	120	162	-1	1	11	840	-808	-8	3	11	163	-152	-10	5	11	275	-280
3	12	10	952	923	2	15	10	781	747	0	1	11	749	728	-5	3	11	2378	-2374	-9	5	11	745	-730
4	12	10	494	-488	3	15	10	875	892	1	1	11	1370	-1325	-4	3	11	1587	1562	-8	5	11	169	-138
6	12	10	1173	1160	4	15	10	518	525	2	1	11	547	550	-3	3	11	1322	-1217	-7	5	11	241	209
7	12	10	491	-491	5	15	10	210	197	3	1	11	114	-97	-2	3	11	1283	1307	-6	5	11	434	-398
-8	13	10	481	445	-3	16	10	288	300	5	1	11	270	-267	-1	3	11	2914	3002	-5	5	11	2158	2111
-7	13	10	522	548	-2	16	10	894	804	6	1	11	323	-346	0	3	11	790	-741	-4	5	11	233	-222
-5	13	10	300	315	0	16	10	660	654	7	1	11	1183	-1171	1	3	11	1918	2008	-3	5	11	1201	1223
-4	13	10	157	-174	1	16	10	118	93	8	1	11	223	-199	2	3	11	322	-328	-2	5	11	923	-937
-3	13	10	222	216	2	16	10	707	-742	10	1	11	218	197	3	3	11	878	-911	-1	5	11	2804	-2861
-2	13	10	252	-242	3	16	10	272	283	11	1	11	558	552	4	3	11	525	532	0	5	11	123	118
0	13	10	254	-273	4	16	10	587	-596	-10	2	11	166	165	5	3	11	1001	-1030	1	5	11	1681	-1758
1	13	10	190	-190	-2	17	10	202	228	-9	2	11	267	-282	6	3	11	427	450	2	5	11	571	-565
2	13	10	375	-382	1	17	10	511	505	-7	2	11	448	-368	7	3	11	674	674	3	5	11	840	840
3	13	10	838	-851	2	17	10	783	-788	-8	2	11	186	-277	8	3	11	186	-170	4	5	11	568	-525
5	13	10	351	-357	-11	0	11	215	-211	-5	2	11	641	-641	9	3	11	714	728	5	5	11	1132	1154
7	13	10	125	159	-9	0	11	645	662	-4	2	11	865	-833	10	3	11	504	-478	6	5	11	366	341
-7	14	10	344	347	-7	0	11	988	1069	-3	2	11	559	-570	11	3	11	239	-245	7	5	11	700	-699
-6	14	10	541	519	-5	0	11	578	592	-2	2	11	182	170	-7	4	11	238	224	8	5	11	1094	1078
-5	14	10	319	-313	-3	0	11	127	101	-1	2	11	1075	-1109	-6	4	11	428	440	9	5	11	828	-815
-4	14	10	324	-290	-1	0	11	288	316	0	2	11	1483	1532	-5	4	11	413	413	-10	5	11	331	346
-3	14	10	535	-530	1	0	11	1123	1145	1	2	11	988	-975	-4	4	11	381	386	-10	6	11	579	-591
-2	14	10	1038	-1052	3	0	11	817	855	2	2	11	1110	1088	-3	4	11	1118	1143	-9	6	11	293	-317
-1	14	10	283	-242	5	0	11	357	-402	3	2	11	656	-682	-2	4	11	754	-788	-8	6	11	322	-308
1	14	10	402	-393	7	0	11	1416	-1412	4	2	11	319	-312	-1	4	11	974	988	-7	6	11	740	-747
2	14	10	1220	1208	8	0	11	802	-798	5	2	11	576	571	0	4	11	1200	-1171	-6	6	11	149	-136
3	14	10	280	-248	11	0	11	226	246	6	2	11	388	-361	1	4	11	588	590	-5	6	11	357	404
4	14	10	501	532	-11	1	11	1415	1470	7	2	11	792	777	2	4	11	72	63	-4	6	11	168	145
5	14	10	280	268	-9	1	11	185	-168	8	2	11	201	204	3	4	11	374	-378	-3	6	11	451	-451
6	14	10	688	-720	-8	1	11	531	513	9	2	11	241	244	4	4	11	673	-687	-2	6	11	331	300
-3	15	10	528	508	-7	1	11	180	-174	10	2	11	315	338	5	4	11	981	-1012	-1	6	11	1016	-1083
-5	15	10	281	-273	-6	1	11	235	201	-11	3	11	581	-539	6	4	11	514	-504	0	6	11	115	121
-4	15	10	453	425	-5	1	11	1030	1055	-10	3	11	153	125	8	4	11	320	-308	1	6	11	873	-690
-3	15	10	108	-120	-4	1	11	1167	-1173	-9	3	11	725	735	9	4	11	585	557	2	6	11	358	-346
-2	15	10	93	-87	-3	1	11	1197	1187	-8	3	11	848	-809	10	4	11	485	493	3	6	11	258	287
-1	15	10	112	-110	-2	1	11	1187	-1186	-7	3	11	440	-456	-11	5	11	148	159	4	6	11	1674	1702

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 20

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	8	11	951	956	2	8	11	196	196	-5	11	11	403	-360	3	13	11	682	692	8	0	12	235	-239
6	8	11	1224	1239	3	8	11	443	444	-4	11	11	1316	1257	4	13	11	262	-268	10	0	12	347	-337
7	8	11	150	169	4	8	11	789	-738	-3	11	11	955	-958	5	13	11	1502	1517	-11	1	12	462	-456
8	8	11	418	398	5	8	11	591	-601	-2	11	11	1455	1428	-6	14	11	247	235	-8	1	12	475	465
-10	8	11	970	-977	6	8	11	726	-730	-1	11	11	126	98	-5	14	11	389	397	-7	1	12	800	841
10	7	11	448	443	7	8	11	481	-473	0	11	11	587	-608	-3	14	11	169	184	-6	1	12	1593	-1551
-8	7	11	489	529	8	8	11	487	-480	1	11	11	983	1010	-4	14	11	1039	1057	-5	1	12	620	639
-7	7	11	453	454	9	8	11	462	444	2	11	11	655	-645	-2	14	11	153	-144	-4	1	12	2224	-2201
-6	7	11	690	626	-7	8	11	989	-993	3	11	11	328	-329	0	14	11	210	-197	-3	1	12	610	-583
-5	7	11	311	-309	-4	8	11	689	-727	4	11	11	293	275	1	14	11	394	-408	-2	1	12	462	-465
-4	7	11	219	-211	-3	8	11	661	665	5	11	11	1408	-1430	3	14	11	371	331	-1	1	12	729	-711
-3	7	11	770	-769	-2	8	11	1913	-1891	6	11	11	416	451	4	14	11	723	743	0	1	12	1533	1542
-2	7	11	735	738	1	8	11	511	-512	7	11	11	211	-205	5	14	11	526	545	1	1	12	240	246
-1	7	11	434	403	3	8	11	230	206	8	11	11	468	-469	6	14	11	494	507	2	1	12	1528	1573
1	7	11	898	911	5	8	11	421	438	-6	12	11	226	220	-3	15	11	425	-438	3	1	12	868	886
2	7	11	874	1015	6	8	11	207	-225	-6	12	11	230	186	-1	15	11	250	240	4	1	12	565	-579
3	7	11	125	116	7	8	11	290	-305	-5	12	11	357	-332	-1	15	11	155	-170	5	1	12	526	507
4	7	11	171	158	8	8	11	521	542	-4	12	11	203	216	0	15	11	151	134	6	1	12	169	181
5	7	11	491	-502	9	8	11	417	-448	-3	12	11	606	-557	1	15	11	179	198	7	1	12	532	-537
6	7	11	468	-477	-9	10	11	135	-128	-1	12	11	372	393	2	15	11	173	172	8	1	12	892	1601
7	7	11	547	563	-7	10	11	377	-380	0	12	11	268	-285	3	15	11	642	-630	9	1	12	608	-590
8	7	11	1091	-1079	-6	10	11	873	-989	1	12	11	486	483	5	15	11	691	-694	10	1	12	936	946
9	7	11	543	495	-4	10	11	730	-706	-3	12	11	198	-205	-3	16	11	1480	-1490	-11	2	12	313	378
-10	7	11	263	-261	-3	10	11	638	650	3	12	11	756	-780	-2	16	11	223	-216	-10	2	12	1022	-1031
-8	8	11	228	224	-2	10	11	718	751	4	12	11	449	-432	-1	16	11	307	-289	-9	2	12	656	676
-6	8	11	434	435	0	10	11	1464	1393	5	12	11	620	-642	0	16	11	190	-191	-8	2	12	252	-256
-5	8	11	232	235	1	10	11	497	-485	7	12	11	827	846	1	16	11	484	479	-7	2	12	554	-548
-4	8	11	1371	1357	3	10	11	336	352	-7	13	11	425	-391	0	17	11	193	-192	-6	2	12	558	529
-3	8	11	623	624	4	10	11	214	228	-6	13	11	143	-175	-10	0	12	771	753	-5	2	12	894	-896
-2	8	11	270	-240	5	10	11	449	423	-5	13	11	287	266	-8	0	12	512	516	-4	2	12	701	728
-1	8	11	422	418	6	10	11	279	282	-4	13	11	243	-274	-4	0	12	671	-696	-3	2	12	177	111
0	8	11	1223	-1228	7	10	11	171	-168	-3	13	11	660	769	-2	0	12	124	82	-2	2	12	535	-542
0	8	11	638	-676	8	10	11	519	527	-2	13	11	362	-360	0	0	12	1838	-1890	-1	2	12	1148	1189
0	8	11	250	-279	9	10	11	245	-244	-1	13	11	367	-360	2	0	12	1205	-1140	0	2	12	740	783
0	8	11	949	-942	-8	11	11	609	-592	0	13	11	261	279	4	0	12	382	309	1	2	12	290	315
1	8	11	1346	1370	-7	11	11	464	467	1	13	11	934	-938	6	0	12	513	302	2	2	12	1169	1169

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PUB CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 21

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	2	12	183	-184	-1	4	12	851	-839	-3	6	12	553	-558	-2	8	12	452	-486	2	10	12	283	-256
4	2	12	558	-562	0	4	12	888	-816	-1	6	12	648	-674	-1	8	12	923	-908	3	10	12	330	-334
5	2	12	804	-584	1	4	12	869	-650	0	6	12	612	-648	0	8	12	325	-200	4	10	12	515	-506
6	2	12	555	-527	2	4	12	1383	-1427	1	6	12	1488	-1521	1	8	12	375	-364	5	10	12	778	-841
7	2	12	291	-291	3	4	12	389	-401	2	6	12	789	-763	2	8	12	299	-311	6	10	12	232	-219
8	2	12	174	-177	4	4	12	821	-774	3	6	12	837	-831	3	8	12	425	-418	7	10	12	871	-825
9	2	12	361	-335	5	4	12	182	-172	5	6	12	222	-204	4	8	12	302	-267	8	10	12	268	-264
-11	3	12	749	-742	6	4	12	362	-370	6	6	12	599	-594	5	8	12	885	-873	-8	11	12	624	-597
-10	3	12	250	-251	8	4	12	182	-188	7	6	12	325	-308	6	8	12	197	-198	-7	11	12	558	-575
-9	3	12	348	-372	9	4	12	619	-604	8	6	12	237	-211	7	8	12	177	-170	-6	11	12	203	-193
-8	3	12	235	-253	10	4	12	424	-407	9	6	12	542	-552	8	8	12	320	-342	-5	11	12	404	-410
-7	3	12	883	-655	-9	5	12	284	-306	10	6	12	163	-168	9	8	12	439	-451	-4	11	12	449	-441
-6	3	12	1418	-1405	-8	5	12	284	-298	-10	7	12	623	-629	-8	9	12	188	-175	-3	11	12	210	-231
-5	3	12	739	-725	-7	5	12	258	-298	-9	7	12	115	-127	-8	9	12	945	-924	-2	11	12	721	-713
-4	3	12	1048	-1050	-6	5	12	908	-908	-8	7	12	535	-507	-7	9	12	487	-474	-1	11	12	108	-84
-3	3	12	845	-616	-4	5	12	363	-327	-7	7	12	648	-623	-6	9	12	868	-676	0	11	12	665	-656
-2	3	12	864	-829	-3	5	12	181	-183	-6	7	12	1015	-978	-5	9	12	281	-255	1	11	12	746	-773
-1	3	12	479	-489	-2	5	12	258	-286	-5	7	12	613	-572	-4	9	12	1455	-1489	2	11	12	732	-762
0	3	12	832	-851	-1	5	12	1486	-1502	-4	7	12	1165	-1115	-3	9	12	274	-258	3	11	12	614	-635
1	3	12	472	-485	0	5	12	286	-250	-3	7	12	411	-402	-2	9	12	540	-506	4	11	12	1104	-1085
2	3	12	732	-721	1	5	12	792	-798	-2	7	12	571	-617	-1	9	12	909	-921	5	11	12	482	-455
3	3	12	925	-922	2	5	12	1056	-1085	-1	7	12	1360	-1368	0	9	12	1937	-1872	6	11	12	485	-478
4	3	12	762	-764	3	5	12	958	-361	0	7	12	1738	-1775	1	9	12	1445	-1437	7	11	12	486	-489
5	3	12	639	-619	4	5	12	151	-137	1	7	12	1468	-1457	3	9	12	188	-176	8	11	12	486	-471
6	3	12	1345	-1364	5	5	12	177	-189	2	7	12	151	-152	4	9	12	1188	-1188	-8	12	12	273	-280
7	3	12	593	-623	6	5	12	1130	-1107	3	7	12	811	-822	7	9	12	284	-256	-7	12	12	104	-111
8	3	12	1636	-1881	7	5	12	370	-401	4	7	12	630	-674	8	9	12	611	-608	-6	12	12	437	-443
9	3	12	584	-593	8	5	12	1195	-1193	5	7	12	251	-257	-8	10	12	1037	-1018	-5	12	12	246	-184
-10	4	12	984	-1732	9	5	12	455	-438	6	7	12	134	-93	-7	10	12	528	-502	-4	12	12	181	-154
-9	4	12	628	-609	10	5	12	189	-177	7	7	12	120	-106	-6	10	12	822	-587	-3	12	12	384	-372
-8	4	12	827	-813	-10	6	12	421	-445	8	7	12	657	-676	-5	10	12	336	-282	-2	12	12	540	-562
-7	4	12	204	-205	-9	6	12	277	-287	9	7	12	528	-531	-4	10	12	909	-297	-1	12	12	870	-884
-6	4	12	1151	-1170	-8	6	12	193	-193	-8	8	12	847	-825	-3	10	12	282	-300	0	12	12	820	-590
-5	4	12	190	-200	-7	6	12	463	-477	-8	8	12	358	-348	-2	10	12	442	-480	1	12	12	341	-358
-4	4	12	184	-211	-6	6	12	351	-379	-7	8	12	698	-654	-1	10	12	855	-899	3	12	12	581	-565
-3	4	12	500	-497	-5	6	12	1052	-1031	-5	8	12	412	-374	0	10	12	586	-590	4	12	12	599	-570

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 22

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
5	12	12	380	346	-1	0	13	848	-724	1	2	13	1360	-1386	-1	4	13	388	375	-3	6	13	588	577
-7	13	12	188	-182	1	0	13	848	698	2	2	13	828	823	0	4	13	361	314	-2	6	13	287	332
-4	13	12	189	-201	3	0	13	2320	2398	3	2	13	1617	-1652	1	4	13	2032	2615	0	6	13	1066	-1094
-2	13	12	948	941	5	0	13	821	834	4	2	13	192	-200	2	4	13	948	875	1	6	13	737	-712
-1	13	12	558	554	7	0	13	558	-509	5	2	13	156	140	3	4	13	1062	1064	2	6	13	1448	-1451
0	13	12	339	346	-11	1	13	401	-417	6	2	13	682	-670	4	4	13	343	333	3	8	13	1098	-1080
1	13	12	631	639	-10	1	13	328	-328	7	2	13	847	855	5	4	13	176	-839	5	6	13	81	71
2	13	12	849	-876	-9	1	13	204	-203	9	2	13	358	-351	6	4	13	647	-664	6	6	13	855	925
3	13	12	130	102	-7	1	13	893	867	-10	2	13	146	170	7	4	13	500	-478	7	8	13	608	606
4	13	12	781	-775	-6	1	13	543	559	-10	3	13	192	209	8	4	13	602	-587	8	8	13	733	712
6	13	12	673	677	-5	1	13	1695	1679	-9	3	13	732	713	6	4	13	867	842	9	8	13	435	-449
-5	14	12	512	502	-4	1	13	569	610	-8	3	13	371	-410	-10	5	13	319	342	-9	7	13	325	-301
-3	14	12	400	366	-3	1	13	160	-142	-7	3	13	603	-600	-9	5	13	677	-696	-8	7	13	157	161
-2	14	12	337	-338	-2	1	13	339	-322	-6	3	13	606	-589	-8	5	13	442	423	-7	7	13	803	-781
-1	14	12	126	81	-1	1	13	1082	-1081	-5	3	13	1626	-1609	-7	5	13	506	476	-6	7	13	855	-830
0	14	12	568	-548	0	1	13	835	-829	-4	3	13	465	-480	-6	5	13	149	133	-5	7	13	342	-346
1	14	12	871	-846	1	1	13	1790	1830	-3	3	13	1052	-1082	-5	5	13	1068	1084	-4	7	13	531	-474
2	14	12	218	-195	3	1	13	1428	1413	-2	3	13	586	586	-4	5	13	181	-189	-3	7	13	225	224
3	14	12	452	-489	4	1	13	148	189	-1	3	13	433	438	-3	5	13	1020	1021	-2	7	13	710	711
-4	15	12	638	653	5	1	13	368	-374	0	3	13	224	242	-2	5	13	684	-643	-1	7	13	907	851
-3	15	12	429	-428	6	1	13	356	331	1	3	13	878	-878	-1	5	13	180	-200	0	7	13	566	557
-2	15	12	849	-848	7	1	13	1898	-1861	2	3	13	651	652	0	5	13	641	629	0	7	13	446	-475
-1	15	12	580	-565	8	1	13	249	-233	3	3	13	788	-781	1	5	13	514	532	1	7	13	1253	-1265
0	15	12	805	-882	9	1	13	371	-376	5	3	13	516	525	2	5	13	483	-479	2	7	13	220	205
2	15	12	616	606	10	1	13	361	-335	6	3	13	211	-216	3	5	13	236	253	3	7	13	1135	-1093
3	15	12	347	334	-11	2	13	860	678	7	3	13	951	858	4	5	13	1047	-1055	4	7	13	788	826
4	15	12	859	874	-10	2	13	341	332	9	3	13	284	-288	5	5	13	505	-489	5	7	13	471	462
-5	16	12	173	130	-9	2	13	726	730	-10	3	13	463	374	6	5	13	1265	-1280	6	7	13	1263	1241
-2	16	12	310	-320	-8	2	13	718	746	-9	4	13	235	-222	7	5	13	343	-341	7	7	13	864	783
0	16	12	488	491	-7	2	13	277	-278	-8	4	13	456	-473	8	5	13	388	364	8	7	13	804	-809
2	16	12	404	413	-6	2	13	221	212	-7	4	13	334	-318	9	5	13	462	492	9	7	13	585	-575
-11	0	13	1184	-1243	-4	2	13	1492	-1491	-6	4	13	349	348	10	5	13	387	372	-7	8	13	1055	1622
-9	0	13	786	-800	-3	2	13	367	355	-5	4	13	424	-380	-9	6	13	493	486	-6	8	13	228	200
-7	0	13	738	741	-2	2	13	987	-1009	-4	4	13	785	825	-8	6	13	637	-647	-5	8	13	1250	1228
-5	0	13	370	351	-1	2	13	382	361	-3	4	13	181	-186	-6	6	13	131	-577	-4	8	13	763	685
-3	0	13	158	-158	0	2	13	572	609	-2	4	13	267	205	-5	6	13	237	-225	-3	8	13	892	-503

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 23

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	8	13	466	466	2	10	13	162	-178	-2	14	13	305	318	3	1	14	297	-299	0	3	14	213	-223
-1	8	13	1226	-1237	3	10	13	962	-862	-1	14	13	504	462	4	1	14	274	-257	2	3	14	116	131
0	8	13	576	579	4	10	13	330	337	0	14	13	316	-360	5	1	14	346	-351	3	3	14	256	-251
1	8	13	874	869	5	10	13	920	890	1	14	13	522	-531	6	1	14	316	-352	4	3	14	997	1022
2	8	13	546	532	7	10	13	578	590	2	14	13	703	-670	7	1	14	399	382	5	3	14	116	-114
3	8	13	1275	1283	8	10	13	215	-218	-5	14	13	906	889	10	1	14	744	761	6	3	14	553	533
4	8	13	228	-230	-8	11	13	682	-670	-4	15	13	182	176	-10	2	14	814	-649	7	3	14	747	-692
5	8	13	585	-550	-9	11	13	652	-649	-3	15	13	1081	1032	-9	2	14	178	213	8	3	14	761	-796
6	8	13	859	-875	-5	11	13	252	-251	-1	15	13	272	263	-8	2	14	521	520	9	3	14	502	-480
7	8	13	652	-609	-3	11	13	310	313	0	15	13	481	-448	-7	2	14	901	920	10	3	14	1028	-1040
8	8	13	233	234	-2	11	13	368	374	2	15	13	160	150	-6	2	14	272	284	-10	4	14	1141	1108
-8	9	13	741	751	1	11	13	359	352	3	15	13	162	-157	-5	2	14	168	159	-8	4	14	198	-205
-7	9	13	772	791	2	11	13	708	700	-1	16	13	788	-737	-4	2	14	1606	-1623	-6	4	14	448	-430
-6	9	13	1156	1116	4	11	13	299	301	0	16	13	347	335	-3	2	14	689	-676	-5	4	14	186	171
-5	9	13	579	565	7	11	13	211	-180	1	16	13	280	292	-2	2	14	1806	-1617	-4	4	14	552	554
-4	9	13	103	88	-7	12	13	562	545	-10	0	14	358	357	0	2	14	1973	2619	-3	4	14	210	-171
-3	9	13	849	-838	-6	12	13	467	507	-8	0	14	667	-665	1	2	14	422	413	-2	4	14	1291	1267
-2	9	13	943	-921	-4	12	13	781	787	-6	0	14	327	374	2	2	14	1367	1323	-1	4	14	587	-986
-1	9	13	823	-798	-3	12	13	479	-862	-4	0	14	2878	2960	3	2	14	839	831	0	4	14	714	-715
0	9	13	263	-304	0	12	13	188	-180	-2	0	14	1548	1550	4	2	14	900	-890	1	4	14	366	-421
1	9	13	499	503	1	12	13	1117	1143	0	0	14	2577	-2705	5	2	14	499	483	3	4	14	167	-169
3	9	13	1119	1109	2	12	13	262	260	2	0	14	2147	-2186	6	2	14	171	-271	6	4	14	366	-371
4	9	13	328	-284	6	12	13	1427	-1454	4	0	14	1463	1435	7	2	14	325	-311	7	4	14	347	-336
6	9	13	594	-623	8	12	13	368	-352	6	0	14	809	804	8	2	14	1808	1803	8	4	14	1488	-1538
7	9	13	675	-698	-5	13	13	228	188	8	0	14	1852	-1832	9	2	14	788	-798	9	4	14	521	526
8	9	13	105	117	-4	13	13	267	-199	-10	0	14	1255	-1263	10	2	14	857	880	-9	5	14	162	-166
-8	10	13	398	399	-3	13	13	354	-363	-10	1	14	213	248	-10	3	14	315	-330	-7	5	14	225	-186
-7	10	13	948	-943	-2	13	13	237	-240	-9	1	14	331	-344	-6	3	14	508	537	-6	5	14	219	-228
-6	10	13	428	-420	0	13	13	404	407	-8	1	14	691	704	-8	3	14	302	-296	-5	5	14	571	-574
-5	10	13	711	-723	1	13	13	268	-284	-6	1	14	428	431	-7	3	14	240	-226	-4	5	14	245	-221
-4	10	13	1185	-1169	2	13	13	503	-502	-4	1	14	305	-301	-6	3	14	358	367	-3	5	14	1374	-1357
-3	10	13	1003	973	3	13	13	437	-446	-2	1	14	1451	-1459	-5	3	14	254	-275	-2	5	14	793	-842
-2	10	13	848	-839	4	13	13	778	-770	-1	1	14	715	-688	-4	3	14	483	441	-1	5	14	260	226
-1	10	13	1004	1008	6	13	13	267	-254	0	1	14	684	-689	-3	3	14	592	590	1	5	14	1221	1247
0	10	13	179	-173	-5	14	13	555	-537	1	1	14	287	-279	-2	3	14	688	646	2	5	14	305	322
1	10	13	1088	-1067	-3	14	13	738	731	2	1	14	553	531	-1	3	14	668	651	3	5	14	381	384

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CD ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 24

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	5	14	818	-835	3	7	14	727	-712	-5	10	14	116	-144	-1	13	14	258	228	2	1	15	233	-202
5	5	14	168	-194	7	7	14	288	278	-4	10	14	988	-977	0	13	14	1081	1076	3	1	15	3077	3113
6	5	14	607	-578	5	7	14	305	263	-3	10	14	189	-148	1	13	14	624	799	5	1	15	1742	1705
7	5	14	228	210	6	7	14	439	430	-2	10	14	248	-242	4	13	14	643	-647	6	1	15	153	157
8	5	14	573	547	7	7	14	403	-391	-1	10	14	794	758	5	13	14	338	-327	7	1	15	1458	-1462
9	5	14	553	568	9	7	14	721	-708	0	10	14	1129	1135	-5	14	14	345	-337	8	1	15	412	410
-10	6	14	830	-838	-9	8	14	1070	-1051	1	10	14	450	455	-4	14	14	437	-461	9	1	15	427	-364
-11	6	14	120	-128	-5	8	14	722	715	2	10	14	708	737	-3	14	14	455	445	-10	2	15	340	-372
-12	6	14	532	532	-4	8	14	1735	1718	3	10	14	348	330	-2	14	14	233	232	-9	2	15	379	-376
-13	6	14	681	-672	-3	8	14	214	-177	4	10	14	848	-851	-1	14	14	1190	1152	-8	2	15	194	188
-14	6	14	161	-178	-2	8	14	419	451	5	10	14	328	333	0	14	14	308	317	-7	2	15	188	202
-15	6	14	580	-603	-1	8	14	1828	-1855	6	10	14	577	-568	3	14	14	544	-538	-6	2	15	686	656
-16	6	14	1141	-1139	0	8	14	1872	-1871	-7	11	14	111	88	4	14	14	650	-640	-5	2	15	1332	1346
-17	6	14	818	808	1	8	14	382	-386	-4	11	14	510	527	-3	15	14	548	504	-4	2	15	485	469
-18	6	14	888	-885	2	8	14	885	-856	-3	11	14	735	717	-1	15	14	399	-376	-3	2	15	109	-115
-19	6	14	1813	1830	3	8	14	825	825	-2	11	14	404	-400	0	15	14	801	-797	-2	2	15	638	-641
0	6	14	1414	1465	4	8	14	1249	1192	-1	11	14	312	305	1	15	14	558	-559	0	2	15	524	-561
1	6	14	293	306	5	8	14	787	794	0	11	14	852	-812	2	15	14	438	-454	1	2	15	959	969
2	6	14	560	592	7	8	14	840	-821	1	11	14	88	-73	-7	0	15	1078	-1132	2	2	15	392	-367
3	6	14	703	-682	8	8	14	784	-730	4	11	14	547	-552	-8	0	15	1330	-1326	3	2	15	501	486
4	6	14	494	-505	-8	9	14	345	350	5	11	14	485	-483	-3	0	15	1048	1094	4	2	15	471	488
5	6	14	289	-241	-7	9	14	288	-304	7	11	14	703	-712	1	0	15	2102	-2207	5	2	15	851	-863
6	6	14	303	-313	-6	9	14	249	238	-6	12	14	470	-455	3	0	15	1480	-1511	6	2	15	268	325
7	6	14	1078	1074	-4	9	14	888	-878	-5	12	14	280	298	5	0	15	1167	1183	7	2	15	685	-673
8	6	14	1178	1173	-3	9	14	897	-872	-4	12	14	359	369	7	0	15	1430	1408	8	2	15	272	-255
-9	7	14	293	273	-2	9	14	303	-316	-2	12	14	494	-456	-10	1	15	328	-331	-10	3	15	532	518
-10	7	14	635	-632	-1	9	14	519	-548	-1	12	14	642	-643	-9	1	15	1463	-1483	-9	3	15	1361	1361
-11	7	14	358	327	0	9	14	319	312	0	12	14	155	-142	-8	1	15	180	-166	-8	3	15	155	154
-12	7	14	448	-432	3	9	14	332	325	1	12	14	285	-233	-6	1	15	444	424	-7	3	15	808	819
-13	7	14	450	461	4	9	14	388	-375	2	12	14	233	202	-5	1	15	1551	1570	-6	3	15	518	-515
-14	7	14	580	568	5	9	14	297	271	4	12	14	788	775	-4	1	15	669	707	-5	3	15	1154	-1115
-15	7	14	1402	1420	7	9	14	888	717	6	12	14	227	-220	-3	1	15	493	482	-4	3	15	878	-857
-16	7	14	1314	1297	8	9	14	191	205	-5	13	14	508	-512	-2	1	15	193	200	-3	3	15	574	-584
0	7	14	258	250	-8	10	14	786	804	-4	13	14	482	-471	-1	1	15	2815	-2617	-2	3	15	322	-303
1	7	14	1023	-1019	-7	10	14	470	479	-3	13	14	813	-819	0	1	15	248	-245	-1	3	15	1683	1690
2	7	14	621	-642	-6	10	14	170	191	-2	13	14	420	360	1	1	15	393	387	0	3	15	130	-123

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	3	15	733	-762	1	5	15	357	334	-1	8	15	815	-811	0	10	15	268	-265	-1	14	15	138	-125
3	3	15	2270	-2303	2	5	15	1209	1225	-7	8	15	521	-541	1	10	15	152	-139	0	14	15	430	416
4	3	15	235	-261	3	5	15	1758	1800	-6	8	15	513	-489	2	10	15	534	-513	1	14	15	716	-674
5	3	15	835	-768	5	5	15	874	859	-4	8	15	872	875	3	10	15	283	-258	2	14	15	469	-471
6	3	15	166	-162	6	5	15	815	-800	-3	8	15	569	585	4	10	15	627	-687	3	14	15	250	-235
7	3	15	1555	1551	7	5	15	1257	-1288	-1	8	15	266	341	6	10	15	200	211	-1	15	15	754	767
8	3	15	314	-310	-9	6	15	304	-284	0	8	15	223	-196	-7	11	15	233	-239	0	15	15	543	-533
9	3	15	198	-225	-6	6	15	591	580	1	8	15	750	-741	-6	11	15	752	-759	-10	0	16	408	446
-10	4	15	580	639	-6	6	15	127	-134	2	8	15	473	471	-5	11	15	729	-700	-8	0	16	514	-561
-11	4	15	467	-468	-5	6	15	709	704	3	8	15	469	-500	-4	11	15	704	-717	-6	0	16	1544	-1563
-12	4	15	189	178	-4	6	15	924	-879	4	8	15	1247	1249	-3	11	15	425	415	-2	0	16	3028	3098
-13	4	15	280	-312	-2	6	15	415	416	5	8	15	285	279	-1	11	15	441	436	0	0	16	509	535
-14	4	15	1445	-1450	0	6	15	563	549	7	8	15	879	660	0	11	15	202	-171	2	0	16	1092	-1088
-15	4	15	150	137	1	6	15	183	146	8	8	15	252	-235	2	11	15	158	-133	4	0	16	562	-597
-16	4	15	961	-967	2	6	15	388	-398	-8	9	15	201	-222	3	11	15	639	-620	6	0	16	1733	1758
-17	4	15	168	223	3	6	15	154	170	-7	9	15	538	551	4	11	15	281	315	8	0	16	217	-188
-18	4	15	429	-401	4	6	15	1483	-1458	-6	9	15	961	956	5	11	15	562	559	-10	1	16	301	290
0	4	15	112	95	5	6	15	303	-302	-5	8	15	1397	1399	6	11	15	420	418	-9	1	16	223	-235
2	4	15	461	441	6	6	15	184	-234	-4	9	15	650	650	-8	12	15	355	-345	-8	1	16	282	-300
3	4	15	598	553	7	6	15	277	-301	-3	9	15	168	-229	-5	12	15	133	118	-7	1	16	528	-540
4	4	15	559	572	8	6	15	472	485	-2	9	15	168	153	-4	12	15	283	235	-6	1	16	109	-124
5	4	15	329	334	-9	7	15	1082	1088	-1	9	15	1463	-1473	-3	12	15	307	-340	-5	1	16	198	-207
6	4	15	125	78	-8	7	15	267	-260	0	9	15	854	859	1	12	15	715	757	-4	1	16	2494	2522
7	4	15	219	-232	-7	7	15	256	-242	1	9	15	117	-140	2	12	15	498	528	-3	1	16	443	494
8	4	15	194	-159	-6	7	15	943	-945	2	9	15	428	437	3	12	15	444	485	-2	1	16	1158	1154
9	4	15	302	-308	-9	7	15	1725	1740	3	9	15	1687	1725	4	12	15	746	732	-1	1	16	204	171
-10	5	15	1122	-1128	-3	7	15	339	-333	4	9	15	401	-356	-5	13	15	548	579	0	1	16	1814	-1816
-11	5	15	491	478	-2	7	15	100	81	5	9	15	491	486	-3	13	15	218	-222	1	1	16	432	-439
-12	5	15	760	-739	-1	7	15	1938	1979	6	9	15	763	-735	-2	13	15	567	-551	2	1	16	1812	-1841
-13	5	15	667	663	0	7	15	1013	-1092	7	9	15	1144	-1130	-1	13	15	206	-186	3	1	16	827	-523
-14	5	15	1077	1038	2	7	15	917	-828	-7	10	15	210	222	0	13	15	662	621	4	1	16	776	751
-15	5	15	236	223	3	7	15	2009	-2004	-8	10	15	886	869	2	13	15	915	820	5	1	16	145	-178
-16	5	15	719	661	4	7	15	277	281	-4	10	15	323	-308	3	13	15	342	357	6	1	16	622	624
-17	5	15	293	-291	5	7	15	658	-662	-3	10	15	284	-267	4	13	15	247	-239	8	1	16	1040	-1047
-18	5	15	1545	-1550	6	7	15	1005	1010	-2	10	15	122	-126	-4	14	15	538	-526	9	1	16	568	478
0	5	15	808	832	7	7	15	1141	1135	-1	10	15	577	-579	-2	14	15	410	388	-10	2	16	309	-345

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 26

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-9	2	16	300	-360	-3	4	16	732	752	7	6	16	548	542	-2	9	16	527	542	-4	13	16	606	-621
-8	2	16	370	375	-2	4	16	1354	1371	8	6	16	369	366	-1	9	16	686	-720	-3	13	16	636	-626
-7	2	16	171	185	0	4	16	234	-225	-8	7	16	479	455	0	9	16	845	-874	-2	13	16	415	-397
-6	2	16	1130	1171	1	4	16	372	-370	-7	7	16	472	-502	-2	9	16	859	-871	-1	13	16	814	-871
-4	2	16	215	-225	2	4	16	616	-617	-5	7	16	214	228	3	9	16	124	136	0	13	16	364	331
-2	2	16	2281	-2329	4	4	16	740	783	-6	7	16	472	-428	4	9	16	711	693	3	13	16	457	481
-1	2	16	157	-173	5	4	16	265	252	-4	7	16	917	-909	5	9	16	775	-783	-1	14	16	611	651
0	2	16	98	-74	6	4	16	1427	1421	-3	7	16	1324	1327	6	9	16	857	856	0	14	16	608	582
1	2	16	539	-588	7	4	16	742	-779	-2	7	16	911	-884	-6	10	16	524	503	1	14	16	748	734
2	2	16	998	987	8	4	16	988	-978	-1	7	16	872	864	-5	10	16	250	-259	2	14	16	947	908
4	2	16	351	-340	-7	5	16	245	236	0	7	16	726	756	-4	10	16	286	-293	-9	0	17	1238	1305
5	2	16	471	458	-6	5	16	1650	-987	1	7	16	164	-167	-3	10	16	864	-880	-7	0	17	930	928
6	2	16	1545	-1522	-5	5	16	614	624	2	7	16	945	929	-2	10	16	611	-584	-5	0	17	1517	-1534
7	2	16	804	821	-4	5	16	826	832	3	7	16	528	-513	0	10	16	103	79	-1	0	17	1526	1521
8	2	16	750	775	-3	5	16	789	-833	4	7	16	485	-505	1	10	16	191	188	1	0	17	576	591
-9	3	16	232	237	-2	5	16	1263	1253	5	7	16	928	922	2	10	16	974	934	3	0	17	2175	-2234
-8	3	16	1	-184	-1	5	16	1370	-1409	-1	7	16	683	-647	3	10	16	214	-201	5	0	17	1346	-1350
-7	3	16	601	576	0	5	16	111	-116	6	7	16	550	530	4	10	16	234	-223	7	0	17	881	872
-6	3	16	974	955	1	5	16	183	-149	8	7	16	353	377	5	10	16	282	323	-9	1	17	220	-184
-5	3	16	238	-255	2	5	16	1075	-1033	-8	8	16	472	-501	6	10	16	484	-496	-8	1	17	241	-244
-4	3	16	1154	-1157	3	5	16	683	659	-7	8	16	145	-180	-6	11	16	428	423	-7	1	17	1317	-1315
-3	3	16	271	-240	4	5	16	785	-775	-6	8	16	1033	-1059	-5	11	16	604	-411	-6	1	17	629	-688
-2	3	16	1184	-1204	5	5	16	554	-585	-5	8	16	569	549	-2	11	16	227	-215	-4	1	17	319	-354
1	3	16	494	453	6	5	16	559	-528	-4	8	16	577	556	-1	11	16	551	577	-3	1	17	1198	1187
2	3	16	993	987	-8	8	16	348	327	-3	8	16	1110	1088	2	11	16	363	362	-2	1	17	269	241
3	3	16	398	444	-7	8	16	1205	1207	-2	8	16	1556	1558	2	11	16	165	149	-1	1	17	1035	-1056
4	3	16	155	137	8	8	16	1222	-1204	-1	8	16	305	-323	1	11	16	704	685	0	1	17	582	568
5	3	16	382	397	-4	8	16	580	-545	0	8	16	134	-134	-5	12	16	618	605	1	1	17	1633	-1652
6	3	16	228	239	-3	8	16	1400	-1340	1	8	16	913	-910	-4	12	16	194	171	2	1	17	145	54
7	3	16	910	888	-2	8	16	1775	-1750	2	8	16	1285	-1273	-3	12	16	582	577	3	1	17	326	-337
8	3	16	695	-664	-1	8	16	468	449	3	8	16	403	370	-1	12	16	377	-382	4	1	17	371	-359
-9	4	16	283	289	1	8	16	1356	1353	6	8	16	1025	1021	0	12	16	507	-497	5	1	17	1580	1607
-7	4	16	149	-157	2	8	16	923	957	7	8	16	977	-993	1	12	16	468	-475	6	1	17	184	-168
-6	4	16	647	-625	4	8	16	203	-175	-5	9	16	410	446	2	12	16	495	-503	8	1	17	287	299
-5	4	16	809	592	5	8	16	572	-692	-4	9	16	783	804	4	12	16	413	427	-9	2	17	1294	-1310
-4	4	16	288	302	6	8	16	1584	-1277	-3	9	16	513	-515	5	12	16	161	163	-7	2	17	1249	-1240

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 27

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
18	2	17	423	405	-4	4	17	227	209	0	6	17	1105	1105	7	8	17	617	641	3	12	17	271	268
15	2	17	1303	1333	-3	4	17	945	-952	1	6	17	824	-830	-7	8	17	938	-374	4	12	17	445	458
14	2	17	894	727	-1	4	17	454	481	2	6	17	1068	1068	-6	8	17	225	-212	3	13	17	251	-224
13	2	17	882	721	0	4	17	885	-900	3	6	17	1310	1303	-5	8	17	384	395	-2	13	17	360	-324
12	2	17	445	467	1	4	17	627	611	4	6	17	579	-558	-4	8	17	320	334	1	13	17	473	463
11	2	17	856	-883	2	4	17	831	-836	5	6	17	874	863	-3	8	17	680	697	2	13	17	650	650
0	2	17	271	-268	3	4	17	1443	-1423	6	6	17	542	-516	-2	8	17	435	-452	-8	0	18	168	-138
1	2	17	574	-594	4	4	17	517	540	7	6	17	578	-573	-1	8	17	285	-281	-6	0	18	1214	-1258
3	2	17	1863	1886	5	4	17	408	-431	-8	7	17	600	612	0	8	17	228	245	-4	0	18	1358	-1401
4	2	17	215	-213	6	4	17	359	381	-7	7	17	462	370	1	8	17	615	-651	0	0	18	1073	1122
5	2	17	883	868	7	4	17	489	491	-8	7	17	510	-504	2	8	17	774	782	2	0	18	440	408
6	2	17	158	167	-9	5	17	189	196	-5	7	17	178	-186	4	8	17	848	597	4	0	18	539	-578
7	2	17	774	-750	-8	5	17	488	-488	-4	7	17	398	-432	5	8	17	581	581	6	0	18	286	301
8	2	17	200	215	-7	5	17	289	-308	-3	7	17	360	-358	6	8	17	330	-308	8	0	18	497	482
9	3	17	280	-298	-6	5	17	461	506	-2	7	17	783	746	-6	10	17	928	605	-8	1	18	368	288
10	3	17	437	466	-5	5	17	454	-414	-1	7	17	273	314	-5	10	17	501	484	-8	1	18	268	-245
11	3	17	497	508	-4	5	17	250	258	0	7	17	265	247	-4	10	17	267	254	-6	1	18	1462	-1424
12	3	17	462	480	-3	5	17	376	-381	1	7	17	891	895	-3	10	17	481	517	-4	1	18	316	325
13	3	17	451	421	-2	5	17	461	-448	2	7	17	1186	-1163	-1	10	17	819	-608	-2	1	18	2618	2657
14	3	17	280	278	-1	5	17	373	-379	3	7	17	162	-167	0	10	17	978	391	-1	1	18	151	148
15	3	17	284	301	0	5	17	472	-442	4	7	17	1088	-1142	1	10	17	554	-570	0	1	18	1215	1256
16	3	17	393	-339	1	5	17	208	-201	5	7	17	768	-765	2	10	17	353	341	1	1	18	363	333
17	3	17	1049	1051	2	5	17	1077	1055	-7	8	17	122	128	3	10	17	574	580	2	1	18	1080	-1104
0	3	17	386	-358	3	5	17	756	764	-6	8	17	864	-863	4	10	17	566	-552	3	1	18	216	211
1	3	17	507	272	4	5	17	1020	1004	-5	8	17	886	-889	5	10	17	584	572	4	1	18	122	28
2	3	17	582	-804	5	5	17	545	581	-4	8	17	181	-160	-5	11	17	158	-152	5	1	18	336	-335
3	3	17	847	-870	6	5	17	179	-172	-3	8	17	460	-467	0	11	17	363	-401	6	1	18	1087	1110
4	3	17	955	-946	7	5	17	704	-711	-2	8	17	287	-267	1	11	17	423	-395	7	1	18	339	-336
5	3	17	250	258	8	5	17	185	-181	1	8	17	1158	1127	2	11	17	782	-781	8	1	18	459	446
6	3	17	748	760	-8	8	17	498	498	0	8	17	828	-814	3	11	17	431	-408	-8	2	18	356	-359
7	3	17	331	-321	-7	8	17	884	-898	1	8	17	740	734	4	11	17	505	-507	-8	2	18	138	147
8	4	17	1141	1162	-6	8	17	855	835	2	8	17	848	-717	-3	12	17	723	-705	-7	2	18	360	-418
9	4	17	331	-341	-5	8	17	1161	1123	3	8	17	1173	-1134	-2	12	17	232	229	-6	2	18	460	379
10	4	17	1833	1852	4	8	17	542	-491	4	8	17	461	463	0	12	17	421	-408	-5	2	18	213	155
11	4	17	807	-791	-3	8	17	882	882	5	8	17	1071	-1047	1	12	17	581	582	-4	2	18	454	466
12	4	17	725	-755	-1	8	17	1082	-1073	6	8	17	460	388	2	12	17	806	-596	-3	2	18	402	381

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 28

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	2	18	451	463	-5	5	18	1266	1280	-4	8	18	468	-412	-1	12	18	475	495	-5	3	18	530	-542
0	2	18	124	-150	-3	5	18	405	439	-3	8	18	846	890	0	12	18	570	-587	-4	3	18	184	160
1	2	18	490	-509	-2	5	18	1190	1188	-1	8	18	711	717	1	12	18	196	187	-3	3	18	864	843
2	2	18	223	-228	-1	5	18	484	-502	0	8	18	301	350	-7	0	18	1114	1150	-2	3	18	538	496
3	2	18	633	-620	0	5	18	697	672	1	8	18	168	-166	-5	0	18	328	-354	-1	3	18	464	486
5	2	18	207	-204	1	5	18	714	-718	2	8	18	224	202	-3	0	18	1011	1045	0	3	18	246	222
6	2	18	782	-791	2	5	18	903	-921	3	8	18	117	-66	-1	0	18	717	734	1	3	18	95	62
7	2	18	476	455	3	5	18	494	489	4	8	18	245	-254	1	0	18	2204	2228	2	3	18	87	-81
8	2	18	355	-347	4	5	18	287	303	5	8	18	877	874	5	0	18	1204	-1191	3	3	18	226	-211
11	3	18	382	-377	6	5	18	982	942	6	8	18	352	-399	7	0	18	745	-728	4	3	18	285	-296
11	3	18	1005	994	7	5	18	341	-320	-6	9	18	820	-843	-8	1	18	138	108	5	3	18	343	364
11	3	18	193	-192	-7	6	18	846	817	-5	9	18	692	669	-7	1	18	495	490	6	3	18	186	187
14	3	18	246	220	-4	6	18	313	300	-3	9	18	377	366	-6	1	18	227	-239	7	3	18	661	698
12	3	18	1282	-1245	-3	6	18	1225	-1214	-2	9	18	1213	1227	-4	1	18	156	-159	-8	4	18	489	457
0	3	18	807	-908	-2	6	18	289	309	0	9	18	501	478	-3	1	18	449	-426	-7	4	18	659	557
2	3	18	704	715	-1	6	18	729	-720	2	9	18	995	-1037	-2	1	18	219	-187	-6	4	18	253	-207
3	3	18	220	-168	1	6	18	333	350	3	9	18	216	223	0	1	18	100	-7	-5	4	18	281	281
4	3	18	484	-453	4	6	18	187	-155	4	9	18	799	-775	2	1	18	287	291	-4	4	18	283	289
5	3	18	498	472	5	6	18	480	-518	5	9	18	692	-646	3	1	18	584	-593	-3	4	18	229	222
6	3	18	907	-929	6	6	18	187	-179	-5	10	18	320	300	5	1	18	713	-697	-2	4	18	207	210
7	3	18	654	643	7	6	18	235	-211	-3	10	18	174	-178	6	1	18	164	-198	-1	4	18	526	510
11	4	18	223	-239	-6	7	18	964	952	-1	10	18	350	-255	7	1	18	406	-392	0	4	18	168	-143
17	4	18	246	-217	-5	7	18	1009	-1012	1	10	18	462	-468	-8	2	18	642	-624	1	4	18	562	544
15	4	18	384	-334	-4	7	18	283	-301	2	10	18	242	-235	-7	2	18	897	-901	2	4	18	508	-516
14	4	18	218	223	-3	7	18	618	-635	3	10	18	462	-456	-6	2	18	338	-416	3	4	18	760	-776
13	4	18	526	496	-2	7	18	1378	-1399	4	10	18	667	-651	-4	2	18	239	-294	4	4	18	150	161
12	4	18	577	-555	-1	7	18	370	397	-5	11	18	575	-567	-2	2	18	419	438	5	4	18	274	-289
11	4	18	816	807	0	7	18	697	-698	-4	11	18	479	468	-1	2	18	961	-970	6	4	18	122	-109
0	4	18	571	-619	1	7	18	682	908	-3	11	18	169	-181	0	2	18	508	485	7	4	18	434	421
1	4	18	140	162	2	7	18	1166	1190	-2	11	18	314	-339	1	2	18	1300	1290	-7	5	18	915	901
3	4	18	169	198	3	7	18	197	-220	0	11	18	154	-148	2	2	18	211	211	-6	5	18	112	-141
4	4	18	589	585	4	7	18	401	438	2	11	18	343	354	3	2	18	821	827	-5	5	18	354	357
5	4	18	242	244	5	7	18	117	-80	3	11	18	273	-271	4	2	18	438	-454	-4	5	18	241	226
6	4	18	793	810	6	7	18	945	-840	4	11	18	503	483	5	2	18	887	851	-3	5	18	948	-921
11	5	18	338	323	-7	8	18	532	-521	-3	12	18	478	459	-7	3	18	1062	-1052	-2	5	18	418	-410
11	5	18	910	-905	-6	8	18	348	-329	-2	12	18	202	-197	-6	3	18	401	426	-1	5	18	328	-294

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 84

PAGE 28

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	5	19	721	-752	2	8	19	861	-847	-2	1	20	423	404	5	4	20	588	583	2	8	20	457	456
1	5	19	725	269	3	8	19	287	278	0	1	20	448	461	6	4	20	148	141	3	8	20	222	218
2	5	19	470	-447	4	8	19	439	-443	1	1	20	247	245	-7	5	20	630	-618	4	8	20	1002	988
3	5	19	162	161	5	8	19	827	-849	2	1	20	364	-366	-5	5	20	405	350	-3	8	20	168	167
4	5	19	288	301	-4	9	19	295	-297	3	1	20	467	478	-4	8	20	186	183	-2	9	20	270	244
5	5	19	439	-473	-3	9	19	309	-290	4	1	20	365	392	-3	5	20	543	557	0	9	20	355	373
6	5	19	220	256	-2	9	19	490	-488	5	1	20	359	420	-1	5	20	499	503	3	8	20	257	224
-7	6	19	612	-596	0	9	19	412	-396	-6	2	20	167	153	0	5	20	451	-408	-1	10	20	247	224
-8	6	19	577	600	1	9	19	611	608	-4	2	20	260	-271	2	5	20	205	-238	0	10	20	247	224
-9	6	19	252	225	2	9	19	248	285	-3	2	20	468	-363	3	5	20	254	270	-1	11	20	208	-212
-10	6	19	549	-553	4	9	19	583	595	-2	2	20	564	599	4	5	20	732	774	0	11	20	287	279
-11	6	19	326	-295	-4	10	19	354	-359	-1	2	20	368	372	5	5	20	151	122	-7	0	21	187	152
0	6	19	425	-404	-3	10	19	536	525	0	2	20	855	856	6	5	20	736	724	-5	0	21	748	-735
1	6	19	765	-785	-2	10	19	271	279	1	2	20	476	473	-5	6	20	804	785	-3	0	21	488	-484
2	6	19	861	873	-1	10	19	166	129	2	2	20	560	560	-4	6	20	372	-355	-1	0	21	435	460
3	6	19	237	241	0	10	19	823	804	4	2	20	285	-257	-3	8	20	447	382	1	0	21	824	802
4	6	19	689	644	1	10	19	410	-412	5	2	20	840	-821	-2	6	20	321	313	3	0	21	198	-209
5	6	19	353	372	2	10	19	649	650	-6	3	20	272	291	-1	6	20	308	-294	5	0	21	517	513
6	6	19	201	209	3	10	19	361	-343	-5	3	20	275	-282	0	6	20	833	816	-7	1	21	448	429
-7	7	19	281	-283	4	10	19	257	-228	-4	3	20	168	-192	1	6	20	423	-439	-6	1	21	832	816
-8	7	19	133	-135	-3	11	19	721	732	-3	3	20	264	268	2	6	20	211	236	-5	1	21	272	273
-9	7	19	567	568	-2	11	19	431	442	0	3	20	219	-234	4	6	20	285	-278	-3	1	21	205	-195
-10	7	19	379	405	-1	11	19	560	582	1	3	20	435	438	5	6	20	123	-98	-2	1	21	435	-410
0	7	19	853	870	1	11	19	648	-653	2	3	20	465	-464	-6	7	20	570	514	-1	1	21	690	685
1	7	19	439	-835	-1	12	19	384	-392	3	3	20	475	492	-5	7	20	490	-498	0	1	21	360	-404
2	7	19	463	461	0	12	19	268	-280	4	3	20	814	-846	-3	7	20	873	-851	2	1	21	872	851
3	7	19	236	221	-6	0	20	290	261	5	3	20	850	-834	-2	7	20	116	-114	3	1	21	132	151
4	7	19	350	-334	-4	0	20	313	327	6	3	20	768	-814	-1	7	20	478	-431	4	1	21	814	196
5	7	19	762	824	-2	0	20	1347	-1313	-7	4	20	260	-284	1	7	20	442	386	5	1	21	485	-456
-6	8	19	433	-438	0	0	20	846	-832	-6	4	20	249	-278	3	7	20	399	-383	-7	2	21	183	197
-7	8	19	349	-369	2	0	20	184	-184	-5	4	20	518	-535	5	7	20	324	-327	-6	2	21	136	-153
-8	8	19	746	-689	4	0	20	838	814	-4	4	20	844	867	-5	8	20	485	-494	-5	2	21	836	833
-9	8	19	215	235	6	0	20	142	-108	-3	4	20	218	-208	-4	8	20	284	258	-4	2	21	845	-858
-10	8	19	164	165	-8	1	20	1086	-1099	0	4	20	865	-876	-3	8	20	289	-270	-3	2	21	203	195
0	8	19	254	242	-4	1	20	469	-431	2	4	20	976	-962	-2	8	20	859	-834	-4	2	21	845	-858
1	8	19	1203	1204	-3	1	20	506	-529	4	4	20	205	193	0	8	20	903	-899	-3	2	21	203	195

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 34

PAGE 30

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	2	21	367	-372	-5	6	21	639	666	0	1	22	693	-686	1	5	22	201	-213	-2	3	23	566	-581
-1	2	21	909	-904	-2	6	21	351	-339	1	1	22	354	-337	2	5	22	1821	-1616	-1	3	23	995	-1003
1	2	21	698	-703	-1	6	21	721	-735	2	1	22	1344	-1357	3	5	22	222	235	0	3	23	230	229
2	2	21	442	468	0	6	21	676	-662	3	1	22	165	131	-3	6	22	531	553	1	3	23	253	-241
3	2	21	532	530	1	6	21	312	-298	4	1	22	679	676	0	6	22	167	-155	2	3	23	268	256
4	2	21	174	-168	3	6	21	549	547	5	1	22	378	395	1	6	22	194	190	3	3	23	468	478
5	2	21	482	-430	-5	7	21	313	-239	-5	2	22	427	-407	2	6	22	307	335	-4	4	23	287	-288
6	2	21	249	-243	-4	7	21	248	-225	-5	2	22	266	-162	3	6	22	283	265	-3	4	23	1165	-1155
7	2	21	636	-621	-3	7	21	147	133	-4	2	22	175	-165	-2	7	22	442	-435	-2	4	23	400	362
8	2	21	1034	-981	-2	7	21	447	-408	-3	2	22	360	-303	0	7	22	462	461	-1	4	23	678	697
9	2	21	475	-455	-1	7	21	190	190	0	2	22	251	-259	1	7	22	145	148	0	4	23	319	317
10	2	21	364	367	1	7	21	469	-485	1	2	22	748	757	2	7	22	575	587	1	4	23	1195	1201
11	3	21	129	65	2	7	21	374	369	2	2	22	528	503	-1	8	22	283	256	3	4	23	620	-602
12	3	21	377	369	3	7	21	569	-544	3	2	22	468	524	0	8	22	343	-332	-3	5	23	147	-165
13	3	21	258	218	4	7	21	361	362	4	2	22	469	484	1	8	22	490	-492	-2	5	23	504	593
14	3	21	437	-458	-4	8	21	462	498	5	2	22	164	-156	-5	0	23	492	-486	-1	5	23	563	582
15	4	21	509	-519	-2	8	21	702	710	-5	3	22	165	-112	-3	0	23	844	-656	0	5	23	124	114
16	4	21	908	-934	-1	8	21	307	313	-4	3	22	463	-475	1	0	23	411	368	1	5	23	359	367
17	4	21	348	343	0	8	21	216	255	-2	3	22	878	-887	3	0	23	846	-831	2	5	23	266	216
18	4	21	286	330	2	8	21	354	-397	-1	3	22	474	469	-5	1	23	643	-645	-1	6	23	658	-649
19	4	21	1278	1259	3	8	21	266	-253	0	3	22	779	755	-4	1	23	203	173	0	6	23	194	-201
20	4	21	341	304	-3	9	21	399	-401	1	3	22	555	570	-3	1	23	377	-368	1	6	23	707	-719
21	4	21	372	415	-2	9	21	196	-198	2	3	22	1601	1705	-2	1	23	107	120	-2	0	24	457	-467
22	4	21	436	-411	-1	9	21	400	-422	3	3	22	337	-328	-1	1	23	769	810	0	0	24	468	441
23	4	21	812	-856	0	9	21	666	-681	4	3	22	355	-250	0	1	23	169	-150	2	0	24	773	812
24	5	21	882	845	1	9	21	452	465	-2	4	22	246	248	1	1	23	278	275	-3	1	24	248	255
25	5	21	191	176	-6	0	22	981	993	-1	4	22	153	134	2	1	23	145	-125	-2	1	24	453	476
26	5	21	367	365	-4	0	22	246	255	0	4	22	469	466	3	1	23	216	-201	-1	1	24	150	-166
27	5	21	324	320	-2	0	22	509	-533	1	4	22	822	-848	-3	2	23	1008	1021	0	1	24	586	576
28	5	21	344	-331	2	0	22	300	-306	2	4	22	371	-367	-2	2	23	635	-667	1	1	24	416	-423
29	5	21	188	-192	4	0	22	346	-347	3	4	22	460	-469	-1	2	23	241	-227	2	1	24	767	-758
30	5	21	295	-307	-6	1	22	676	-673	4	4	22	760	-867	0	2	23	351	-347	-3	2	24	225	216
31	5	21	309	-269	-5	1	22	292	286	-5	5	22	532	-528	1	2	23	812	-792	-2	2	24	762	772
32	5	21	379	380	-3	1	22	231	288	-4	5	22	525	514	2	2	23	445	418	-1	2	24	599	-580
33	5	21	151	-131	-2	1	22	273	231	-2	5	22	1076	1068	3	2	23	876	883	0	2	24	466	-475
34	5	21	275	252	-1	1	22	224	-208	0	5	22	684	-682	-4	3	23	432	-430	1	2	24	327	-300

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.1 JAN 64

PAGE 31

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	3	24	761	-763	0	3	24	654	-663	1	3	24	525	540	-1	4	24	467	480
-1	3	24	117	76											0	4	24	421	449

Chapter 1. Positional ($\times 10^5$ for Ru, all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Ru, all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh})(\mu\text{-PPh}_2)(\text{CO})_{15}$ (24)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	16738(5)	42400(3)	19758(4)	218(4)	310(4)	342(4)	-26(3)	-1(3)	-6(3)
Ru(2)	37265(5)	47765(3)	27066(4)	271(4)	290(4)	426(4)	14(3)	-54(3)	-37(3)
Ru(3)	60518(5)	42596(3)	30458(4)	236(4)	384(4)	453(4)	31(3)	-80(3)	-77(3)
Ru(4)	59881(5)	34454(3)	17875(4)	221(4)	562(5)	438(4)	-15(4)	67(3)	-8(3)
Ru(5)	51248(5)	31567(3)	31815(4)	276(4)	320(4)	373(4)	30(3)	-29(3)	-4(3)
P(1)	2733(2)	3414(1)	1617(1)	22(1)	37(1)	32(1)	-8(1)	-1(1)	-1(1)
P(2)	1870(2)	5144(1)	2487(1)	33(1)	30(1)	49(1)	-2(1)	-5(1)	3(1)
O(11)	1895(6)	4740(3)	300(4)	74(5)	69(5)	47(4)	16(4)	0(3)	8(4)
O(12)	1219(5)	3697(3)	3601(4)	58(4)	69(4)	40(4)	5(4)	9(3)	-13(3)
O(13)	-858(6)	4069(4)	1409(5)	37(4)	159(8)	84(6)	31(6)	-18(4)	-21(5)
O(21)	4464(6)	5080(3)	1026(5)	67(5)	102(6)	64(5)	21(5)	3(4)	-18(4)
O(22)	3095(6)	4427(3)	4409(4)	73(5)	65(4)	41(4)	-6(3)	3(3)	-4(4)
O(23)	4937(6)	5815(3)	3429(5)	68(5)	57(5)	108(6)	-6(4)	-18(4)	-19(4)
O(31)	6012(7)	4537(4)	4828(5)	106(7)	108(7)	63(5)	-38(5)	-21(5)	10(5)
O(32)	8490(6)	3827(3)	3361(5)	35(4)	91(6)	112(6)	12(5)	-4(4)	3(4)
O(33)	7125(7)	5278(4)	2270(6)	78(6)	97(6)	164(9)	64(6)	-11(6)	-41(5)
O(41)	6667(7)	4302(4)	538(5)	66(6)	166(9)	101(7)	65(6)	17(5)	-3(5)
O(42)	5465(7)	2515(4)	618(6)	77(6)	141(8)	124(8)	-88(7)	29(5)	-5(5)
O(43)	8346(7)	2898(4)	2128(7)	45(5)	107(7)	211(11)	-16(7)	-11(6)	30(5)
O(51)	7163(6)	2935(3)	4382(4)	66(5)	79(5)	79(5)	15(4)	-34(4)	-7(4)
O(52)	5089(6)	1922(3)	2705(4)	72(5)	41(4)	85(5)	-15(4)	-10(4)	8(3)
O(53)	3437(6)	3174(3)	4523(5)	76(5)	69(5)	79(5)	21(4)	35(4)	9(4)
C(11)	1891(7)	4558(3)	921(5)	38(5)	36(5)	44(6)	2(5)	2(4)	-5(4)
C(12)	1429(6)	3905(3)	3021(6)	24(4)	39(5)	53(6)	-12(5)	5(4)	4(4)
C(13)	99(8)	4113(4)	1624(5)	36(6)	64(6)	49(6)	2(5)	-2(4)	-16(5)
C(21)	4158(7)	4961(4)	1642(6)	29(5)	49(6)	63(7)	6(5)	-8(5)	-6(4)
C(22)	3323(7)	4535(3)	3770(6)	33(5)	39(5)	54(6)	-11(5)	-10(4)	6(4)
C(23)	4529(8)	5414(4)	3163(6)	45(5)	36(5)	63(6)	10(5)	-18(5)	-18(4)
C(31)	6006(7)	4449(4)	4158(6)	40(5)	54(6)	51(6)	-14(5)	-8(5)	-6(4)
C(32)	7554(8)	3970(4)	3220(6)	32(6)	52(6)	64(7)	7(5)	-9(5)	-8(4)
C(33)	6708(8)	4907(4)	2557(7)	30(5)	52(6)	122(10)	17(7)	-11(6)	-12(5)
C(41)	6368(8)	3992(5)	983(7)	27(5)	106(9)	76(8)	28(7)	13(5)	-2(5)
C(42)	5654(8)	2873(5)	1073(7)	40(6)	105(9)	66(7)	-27(7)	19(5)	4(6)
C(43)	7496(9)	3126(5)	2006(7)	39(6)	79(8)	87(8)	2(6)	13(5)	3(6)
C(51)	6405(8)	3027(3)	3925(6)	44(6)	39(5)	57(6)	5(5)	-7(5)	-11(4)
C(52)	5052(7)	2381(4)	2884(5)	33(5)	38(6)	53(5)	2(5)	-13(4)	0(4)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(53)	4044(8)	3183(4)	4027(6)	44(6)	65(7)	53(6)	13(5)	10(5)	5(5)
C(1)	4172(6)	3487(3)	2086(4)	24(4)	36(5)	19(4)	8(4)	2(3)	8(3)
C(2)	4585(6)	3939(3)	2487(4)	27(4)	31(4)	21(4)	-9(4)	1(3)	5(3)
C(112)	3648(4)	3727(2)	175(3)	57(2)					
C(113)	3684(4)	3730(2)	-658(3)	82(3)					
C(114)	2950(4)	3376(2)	-1124(3)	82(3)					
C(115)	2180(4)	3019(2)	-756(3)	76(3)					
C(116)	2144(4)	3016(2)	77(3)	57(2)					
C(111)	2878(4)	3370(2)	542(3)	36(2)					
C(122)	2788(3)	2246(2)	1601(3)	41(2)					
C(123)	2329(3)	1708(2)	1701(3)	53(2)					
C(124)	1251(3)	1643(2)	2030(3)	54(2)					
C(125)	631(3)	2115(2)	2260(3)	53(2)					
C(126)	1089(3)	2653(2)	2161(3)	41(2)					
C(121)	2168(3)	2718(2)	1831(3)	30(2)					
C(212)	7(5)	5139(2)	3491(3)	59(2)					
C(213)	-627(5)	5343(2)	4116(3)	75(3)					
C(214)	-184(5)	5784(2)	4595(3)	83(3)					
C(215)	893(5)	6021(2)	4449(3)	85(3)					
C(216)	1527(5)	5817(2)	3824(3)	70(3)					
C(211)	1084(5)	5377(2)	3345(3)	44(2)					
C(222)	574(4)	5766(2)	1353(4)	61(3)					
C(223)	386(4)	6198(2)	793(4)	75(3)					
C(224)	1263(4)	6590(2)	677(4)	98(4)					
C(225)	2328(4)	6551(2)	1120(4)	103(4)					
C(226)	2516(4)	6120(2)	1679(4)	73(3)					
C(221)	1639(4)	5728(2)	1796(4)	46(2)					

Chapter 1. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh}_2)(\mu\text{-PPh}_2)(\text{CO})_{15}$ (24)

	x	y	z	U(11)
H(112)	4217(4)	4001(2)	535(3)	108(8)
H(113)	4280(4)	4007(2)	-943(3)	108(8)
H(114)	2977(4)	3378(2)	-1769(3)	108(8)
H(115)	1611(4)	2745(2)	-1117(3)	108(8)
H(116)	1548(4)	2739(2)	362(3)	108(8)
H(122)	3623(3)	2297(2)	1346(3)	108(8)
H(123)	2809(3)	1343(2)	1522(3)	108(8)
H(124)	896(3)	1227(2)	2107(3)	108(8)
H(125)	-204(3)	2064(2)	2515(3)	108(8)
H(126)	609(3)	3018(2)	2339(3)	108(8)
H(212)	-336(5)	4798(2)	3120(3)	108(8)
H(213)	-1461(5)	5159(2)	4229(3)	108(8)
H(214)	-675(5)	5941(2)	5078(3)	108(8)
H(215)	1236(5)	6362(2)	4819(3)	108(8)
H(216)	2361(5)	6001(2)	3711(3)	108(8)
H(222)	-105(4)	5463(2)	1443(4)	108(8)
H(223)	-438(4)	6228(2)	450(4)	108(8)
H(224)	1117(4)	6924(2)	243(4)	108(8)
H(225)	3006(4)	6855(2)	1029(4)	108(8)
H(226)	3340(4)	6090(2)	2022(4)	108(8)

Chapter 1. For $\text{Ru}_5(\mu_5\text{-C}_2\text{PPh}_2)(\mu\text{-PPh}_2)(\text{CO})_{15}$ (24)OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $\text{Ru}_5 \text{ C}_2 \text{ ADDUCT NO.2 JAN 84$

PAGE 1

H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC			
1	0	0	4618-4147	7	3	0	2389-2287	4	7	0	1432-1559	0	10	0	190 193
2	0	0	237 237	9	3	0	781 -779	5	7	0	493 540	10	10	0	985 -975
3	0	0	1334-1305	10	3	0	789 781	6	7	0	1015-1016	1	11	0	341 -347
4	0	0	2897-2814	11	3	0	831 862	7	7	0	700 693	2	11	0	3230 3377
5	0	0	2367 2338	9	4	0	1084-1081	8	7	0	197 -164	3	11	0	2848-2498
6	0	0	852 840	1	4	0	684 -679	10	7	0	195 193	4	11	0	378 372
7	0	0	267 -257	3	4	0	299 249	11	7	0	194 240	5	11	0	326 314
8	0	0	1598 1644	4	4	0	851 801	0	8	0	2088-2074	6	11	0	2043-2085
9	0	0	3158-3191	5	4	0	797 833	1	8	0	1595 1621	7	11	0	2774 2782
10	0	0	1285 1364	7	4	0	1129-1149	2	8	0	944 -947	8	11	0	280 -269
1	1	0	3417 -4435	8	4	0	748 -788	3	8	0	1308 1320	0	12	0	2424 2493
2	1	0	2194-2188	9	4	0	889 784	4	8	0	548 -549	1	12	0	917 -833
3	1	0	2818 2542	10	4	0	254 -245	5	8	0	244 240	2	12	0	243 274
4	1	0	1488-1449	11	4	0	789 785	6	8	0	986-1020	3	12	0	730 -887
5	1	0	883 843	1	5	0	789 -772	7	8	0	175 184	4	12	0	571 -540
6	1	0	232 211	2	5	0	797 -736	8	8	0	310 -290	5	12	0	1071 1084
7	1	0	845 -895	4	5	0	884 843	9	8	0	1437 1433	7	12	0	517 558
8	1	0	218 -204	5	5	0	980 953	10	8	0	847 -720	8	12	0	282 265
9	1	0	714 736	6	5	0	971 -837	1	9	0	1184-1185	9	12	0	1504-1319
10	1	0	2270 2449	7	5	0	492 -471	2	9	0	2481 2517	10	12	0	847 896
1	2	0	198 149	8	5	0	198 -210	3	9	0	1153-1151	1	13	0	547 -581
2	2	0	721 -723	9	5	0	204 -230	4	9	0	1209-1212	2	13	0	1328 1320
3	2	0	1784 1752	10	5	0	984 877	5	9	0	414 -436	3	13	0	521 -534
4	2	0	3434-3352	0	6	0	1130 1171	7	9	0	1275 1350	5	13	0	570 567
5	2	0	2828 2773	1	6	0	2018-2011	8	9	0	685 851	6	13	0	841 -840
6	2	0	841 801	3	6	0	883 972	9	9	0	1013-1008	7	13	0	987 842
7	2	0	355 -349	4	6	0	1034 1020	10	9	0	734 780	8	13	0	543 -584
8	2	0	584 -542	5	6	0	577 -587	0	10	0	489 504	9	13	0	312 -259
9	2	0	277 -271	6	6	0	718 -674	1	10	0	494 522	0	14	0	870 788
10	2	0	884 939	7	6	0	803 -791	2	10	0	549 534	1	14	0	841 841
11	2	0	283 276	8	6	0	1042 1087	3	10	0	1170 -1149	2	14	0	833 -843
1	3	0	1239-1141	9	6	0	588 586	4	10	0	1278 1214	3	14	0	229 200
2	3	0	1498 1364	10	6	0	248 -253	5	10	0	751 -787	4	14	0	1808-1588
3	3	0	854 804	11	6	0	1324-1333	6	10	0	1428 1493	5	14	0	1984 1880
4	3	0	1081 1013	2	7	0	458 455	7	10	0	1878-1120	6	14	0	420 -446
5	3	0	1155 1123	3	7	0	865 864	8	10	0	229 275	7	14	0	1211 1240

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
7	19	0	198	138	9	1	1	888	708	0	3	1	1247	1344	-2	5	1	3138	3044	-6	7	1	240	274					
0	20	0	1580	-1538	10	1	1	897	-888	1	3	1	2389	2452	-1	4	1	214	-212	-5	7	1	845	-808					
1	20	0	178	177	11	1	1	982	-977	2	3	1	2104	-2077	0	4	1	358	382	-4	7	1	448	-447					
3	20	0	411	340	-11	2	1	448	-472	3	3	1	3538	3553	1	4	1	448	-474	-3	7	1	1043	-1040					
4	20	0	827	433	-10	2	1	1403	1504	4	3	1	2484	-2497	2	4	1	2064	-2067	-2	7	1	1918	1882					
5	20	0	888	-843	-9	2	1	2249	-2230	5	3	1	244	285	3	4	1	2109	2058	-1	7	1	1903	1499					
6	20	0	748	-760	-8	2	1	728	753	10	3	1	744	-784	4	5	1	201	201	0	7	1	1884	-1819					
1	21	0	724	448	-7	2	1	216	202	11	3	1	643	863	5	5	1	1180	-1125	1	7	1	2241	2348					
2	21	0	318	318	-6	2	1	229	215	-11	4	1	724	714	6	5	1	2433	2852	2	7	1	2504	-2517					
4	21	0	448	-468	-5	2	1	2034	2025	-10	4	1	559	-574	7	5	1	2361	-2363	3	7	1	425	-442					
5	21	0	388	-422	-4	2	1	1433	-1495	-8	4	1	1139	-1048	8	5	1	175	152	4	7	1	841	841					
0	22	0	1147	-1137	-3	2	1	220	194	-7	4	1	897	903	9	5	1	522	-558	5	7	1	423	474					
2	22	0	893	890	-2	2	1	448	444	-6	4	1	474	-415	11	4	1	421	448	6	7	1	1534	1544					
3	22	0	898	-775	-1	2	1	3888	-3441	-5	4	1	2473	2811	-11	6	1	154	-148	7	7	1	1480	-1480					
4	22	0	1344	1320	0	2	1	4651	4407	-4	4	1	815	-793	-9	6	1	442	-474	1	7	1	784	-780					
1	23	0	323	331	1	2	1	2438	-2520	-3	4	1	478	-463	-8	6	1	614	644	8	7	1	789	808					
2	23	0	880	827	2	2	1	559	574	-2	4	1	1731	-1840	-7	6	1	853	-821	-10	7	1	948	-934					
3	23	0	480	-508	3	2	1	1198	-1228	-1	4	1	719	898	-6	6	1	444	585	-9	8	1	452	445					
-11	1	1	357	347	4	2	1	3222	-3151	0	4	1	644	585	-5	6	1	248	240	-4	8	1	898	-814					
-10	1	1	1071	1121	5	2	1	1894	1889	1	4	1	1497	1544	-4	6	1	378	361	-8	8	1	1273	1218					
-9	1	1	588	-808	6	2	1	270	-272	2	4	1	1810	-1854	-3	6	1	342	326	-7	8	1	988	-1039					
-8	1	1	848	887	7	2	1	793	740	3	4	1	2444	2421	-2	6	1	775	-757	-6	8	1	341	-354					
-7	1	1	1822	-1894	8	2	1	1152	1120	4	4	1	4480	-4380	-1	6	1	2194	-2112	-5	8	1	238	-243					
-6	1	1	174	-172	9	2	1	1439	-1478	5	4	1	1337	1340	0	6	1	1170	1252	-4	8	1	1014	-1011					
-5	1	1	1008	1014	10	2	1	311	289	6	4	1	904	873	1	6	1	944	-1047	-3	8	1	2815	2503					
-4	1	1	868	778	11	2	1	244	-218	7	4	1	518	-487	2	6	1	345	334	-2	8	1	715	679					
-3	1	1	1084	1073	-11	3	1	588	-882	8	4	1	753	718	3	6	1	530	538	-1	8	1	1811	-1808					
-2	1	1	1141	-1139	-10	3	1	1129	1159	9	4	1	898	-889	4	6	1	1849	-1859	0	8	1	287	307					
-1	1	1	2401	-2247	-9	3	1	851	-946	10	4	1	380	-400	5	6	1	780	711	1	8	1	2858	-2848					
0	1	1	227	-173	-8	3	1	625	655	11	4	1	444	479	6	6	1	873	1010	2	8	1	1865	1772					
1	1	1	1334	1329	-7	3	1	2381	-2371	-11	5	1	402	-404	7	6	1	1241	-1204	3	8	1	1162	1179					
2	1	1	3491	3394	-6	3	1	1708	1725	0	5	1	284	282	8	6	1	910	920	4	8	1	982	813					
4	1	1	1318	-1235	-5	3	1	1317	1318	-7	5	1	1244	1242	9	6	1	757	-751	5	8	1	1408	-1402					
5	1	1	2094	-2078	-4	3	1	879	-895	8	5	1	987	-988	11	6	1	417	432	6	8	1	634	876					
7	1	1	1414	1375	-3	3	1	1162	1113	-6	5	1	239	-239	-11	7	1	453	-460	8	8	1	528	-484					
8	1	1	455	436	-2	3	1	2408	-2533	-5	5	1	394	-324	-7	7	1	987	933	10	8	1	318	307					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PUS CO ADDUCT NO.2 JAN 44

PAGE 3

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-8	9	1	170	-192	10	10	1	400	-431	-8	19	1	920	934	0	19	1	257	261	1	14	1	907	-400
-17	4	1	1504	1501	-10	11	1	278	299	-5	13	1	134	374	1	15	1	533	-500	2	10	1	371	310
1	9	1	993	-1000	-9	11	1	267	288	-4	13	1	505	460	2	15	1	1166	1101	4	10	1	972	-930
-15	9	1	365	-361	-8	11	1	912	-864	-3	15	1	2040	1907	3	15	1	101	-103	5	10	1	321	-350
14	9	1	1015	900	-7	11	1	893	-946	-2	15	1	2500	-2813	4	15	1	320	-200	6	10	1	750	617
-13	9	1	1051	-1047	-5	11	1	840	800	0	13	1	1317	-1313	5	15	1	564	-601	7	10	1	400	-505
12	9	1	777	792	-4	11	1	840	876	1	13	1	847	867	7	15	1	605	611	-6	10	1	1021	1007
-11	9	1	508	445	-3	11	1	782	-812	-2	13	1	2308	2394	8	15	1	402	360	-5	10	1	1113	-1081
0	9	1	298	-311	0	11	1	342	368	2	13	1	1248	-1248	-4	10	1	261	-245	-4	10	1	414	-453
1	9	1	1250	1330	1	11	1	483	-649	3	13	1	207	294	-3	10	1	1540	1474	-3	10	1	279	923
2	9	1	7594	-2888	2	11	1	1087	1244	0	13	1	1206	-1253	-2	10	1	1551	-1508	-1	10	1	1400	1403
3	9	1	1718	1794	3	11	1	454	-491	7	13	1	1824	1800	-1	10	1	867	854	0	10	1	822	-808
4	9	1	1087	-1041	4	11	1	950	-957	8	13	1	387	-356	-2	10	1	243	-206	1	10	1	210	-34
5	9	1	228	188	5	11	1	860	838	9	13	1	801	813	-1	10	1	918	-847	2	10	1	606	-706
6	9	1	706	714	6	11	1	1289	1330	-9	14	1	813	-814	0	10	1	1300	1324	3	10	1	955	-514
7	9	1	501	-472	7	11	1	712	-724	-8	14	1	300	307	2	10	1	302	-330	4	10	1	342	311
8	9	1	370	-351	8	11	1	667	-684	-6	14	1	406	-367	3	10	1	404	408	5	10	1	1000	1004
-10	10	1	1309	-1370	-10	12	1	1387	1408	-5	14	1	1309	1300	4	10	1	1400	-1400	6	10	1	565	-514
-11	10	1	1846	1810	-7	12	1	1644	-1677	-4	14	1	1076	-1050	5	10	1	803	800	-6	20	1	404	-370
-12	10	1	650	658	-6	12	1	1300	1289	-3	14	1	1004	1004	6	10	1	840	830	-4	20	1	607	-634
-13	10	1	530	-529	-5	12	1	1052	-1070	-2	14	1	753	-700	-8	17	1	230	-240	-3	20	1	1001	1013
-14	10	1	552	-550	-4	12	1	753	778	-1	14	1	753	-700	-7	17	1	315	311	-2	20	1	733	-723
-15	10	1	279	-301	-3	12	1	296	308	0	14	1	1210	1221	-6	17	1	14	131	-1	20	1	742	-703
-16	10	1	993	-1031	-2	12	1	924	917	1	14	1	883	-878	-5	17	1	217	-241	1	20	1	414	-374
-17	10	1	1430	1518	-1	12	1	940	-910	2	14	1	306	330	0	17	1	931	447	2	20	1	203	-213
0	10	1	980	-925	2	12	1	1125	1140	3	14	1	090	094	1	17	1	502	-536	3	20	1	504	523
1	10	1	843	878	3	12	1	101	30	4	14	1	1144	-1173	2	17	1	300	-314	4	20	1	301	-360
2	10	1	2183	-2204	4	12	1	806	891	5	14	1	1317	1304	3	17	1	100	221	5	20	1	344	306
3	10	1	883	898	5	12	1	606	691	6	14	1	1102	-1200	4	17	1	203	348	6	20	1	712	-702
4	10	1	454	-460	6	12	1	1120	-1200	7	14	1	000	344	5	17	1	226	242	-5	21	1	707	-624
5	10	1	981	1041	7	12	1	806	773	8	14	1	000	840	-7	14	1	478	-478	-3	21	1	303	-300
6	10	1	274	-279	8	12	1	1229	-1211	9	14	1	000	-800	-4	10	1	517	400	-1	21	1	502	520
7	10	1	908	-490	9	12	1	830	850	-7	15	1	754	-520	-3	10	1	934	-932	0	21	1	277	230
8	10	1	146	-153	9	12	1	241	200	-6	15	1	267	310	-2	10	1	678	645	1	21	1	510	-510
9	10	1	648	-703	-8	13	1	303	373	-5	15	1	020	042	-1	10	1	602	-600	2	21	1	202	-201
0	10	1	1257	1260	-7	13	1	2075	-2071	-2	15	1	1237	-1236	0	10	1	1077	1066	4	21	1	330	342

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

BUS CO ADDUCT NO.2 JAN 44

PAGE 4

H K L 10FO 10FC					H K L 10FO 10FC					H K L 10FO 10FC					H K L 10FO 10FC					H K L 10FO 10FC				
5	21	1	317	292	-2	1	2	1143-1091	-7	3	2	1045-992	4	4	2	104-302	4	6	2	1535-1544	4	6	2	1535-1544
-16	22	1	188	214	-1	1	2	735-709	-6	3	2	1047-1045	4	4	2	354-309	4	6	2	708-804	4	6	2	708-804
-13	22	1	445	471	-1	1	2	1237-1177	-5	3	2	1724-1740	10	4	2	211-145	6	6	2	1402-1400	6	6	2	1402-1400
0	22	1	274	269	2	1	2	2643-2594	-4	3	2	205-144	11	4	2	400-794	7	4	2	162-42	7	4	2	162-42
0	22	1	248	-288	3	1	2	802-494	-3	3	2	1744-1081	-11	5	2	344-415	8	6	2	826-462	8	6	2	826-462
1	22	1	536	-548	4	1	2	1471-1515	-2	3	2	1744-1702	-10	5	2	1275-1312	9	6	2	650-714	9	6	2	650-714
2	22	1	479	492	5	1	2	1411-1427	-1	3	2	1818-984	-9	5	2	1080-1027	-10	6	2	400-444	-10	6	2	400-444
3	22	1	284	248	6	1	2	444-487	0	3	2	217-231	-7	5	2	487-414	-10	7	2	271-240	-10	7	2	271-240
-1	23	1	541	535	7	1	2	832-488	1	3	2	304-733	-6	4	2	2435-2423	-9	7	2	441-444	-9	7	2	441-444
-1	23	1	267	279	8	1	2	683-670	2	3	2	882-679	-4	4	2	2183-2173	-8	7	2	383-371	-8	7	2	383-371
1	23	1	416	-352	11	1	2	987-1022	3	3	2	937-880	-4	4	2	471-831	-4	7	2	174-210	-4	7	2	174-210
-16	0	2	1874-1744		-11	2	2	1070-1148	4	3	2	1300-1284	-3	5	2	1855-1844	-4	7	2	424-484	-4	7	2	424-484
-16	0	2	2817-2844		-10	2	2	433-487	4	3	2	140-380	-2	5	2	1340-1313	-3	7	2	421-413	-3	7	2	421-413
-16	0	2	880-860		-9	2	2	234-239	4	3	2	1784-1744	-1	4	2	3100-3114	-2	7	2	2282-2382	-2	7	2	2282-2382
-16	0	2	1144-1144		-8	2	2	1100-1102	7	3	2	1445-1472	0	4	2	130-240	-1	7	2	1362-1342	-1	7	2	1362-1342
-16	0	2	733-745		-7	2	2	184-175	10	3	2	800-804	1	4	2	701-817	0	7	2	832-470	0	7	2	832-470
-16	0	2	770-747		-6	2	2	603-611	11	3	2	970-987	2	4	2	1414-1401	1	7	2	1641-1644	1	7	2	1641-1644
-16	0	2	547-585		-5	2	2	1979-1931	-11	4	2	434-444	3	4	2	1430-1421	2	7	2	357-352	2	7	2	357-352
-16	0	2	1071-919		-4	2	2	172-184	-10	4	2	541-514	4	4	2	1430-1402	3	7	2	740-244	3	7	2	740-244
-16	0	2	840-747		-3	2	2	1538-1487	-9	4	2	717-734	5	4	2	842-814	4	7	2	1521-1548	4	7	2	1521-1548
-16	0	2	3462-3484		-2	2	2	775-728	-8	4	2	340-379	4	4	2	1402-1410	5	7	2	1637-1654	5	7	2	1637-1654
0	0	2	9373-9457		-1	2	2	1701-1754	-7	4	2	784-754	7	4	2	144-340	6	7	2	2050-2084	6	7	2	2050-2084
1	0	2	1138-1044		0	2	2	247-219	-6	4	2	923-951	11	4	2	408-410	7	7	2	2114-2152	7	7	2	2114-2152
3	0	2	2777-2599		1	2	2	1745-1682	-5	4	2	299-248	-10	6	2	247-252	8	7	2	280-313	8	7	2	280-313
4	0	2	2744-2434		3	2	2	2524-2476	-4	4	2	420-384	-9	6	2	473-450	-10	8	2	1112-1117	-10	8	2	1112-1117
5	0	2	2478-2429		4	2	2	4103-3961	-3	4	2	441-344	-8	6	2	2373-2244	-9	8	2	1770-1289	-9	8	2	1770-1289
6	0	2	305-324		5	2	2	1734-1733	-2	4	2	245-214	-7	6	2	1743-1712	-8	8	2	177-146	-8	8	2	177-146
7	0	2	580-585		6	2	2	1133-1047	-1	4	2	371-393	-6	6	2	1412-1420	-4	8	2	251-244	-4	8	2	251-244
8	0	2	2025-2045		7	2	2	168-156	0	4	2	444-480	-5	6	2	1850-1841	-4	8	2	1344-1303	-4	8	2	1344-1303
9	0	2	1928-1856		8	2	2	1280-1289	2	4	2	784-720	-4	6	2	504-527	-3	8	2	2410-2740	-3	8	2	2410-2740
-11	1	2	248-257		9	2	2	1277-1282	3	4	2	2574-2504	-3	6	2	2144-2102	-2	8	2	1474-1433	-2	8	2	1474-1433
-11	1	2	751-748		11	2	2	638-524	4	4	2	531-547	-1	6	2	774-700	-1	8	2	1382-1393	-1	8	2	1382-1393
-17	1	2	1514-1525		-10	3	2	670-653	5	4	2	211-188	0	6	2	772-810	0	8	2	467-840	0	8	2	467-840
-18	1	2	1795-1747		-9	3	2	360-403	6	4	2	770-781	1	6	2	2743-2810	2	8	2	1402-1374	2	8	2	1402-1374
-19	1	2	1054-994		-8	3	2	415-418	7	4	2	1014-1009	2	6	2	1011-1031	3	8	2	678-714	3	8	2	678-714

M K L 10FN 10FC				M K L 10FN 10FC				M K L 10FN 10FC				M K L 10FN 10FC												
4	0	2	511	-474	5	10	2	1044	-1110	7	12	2	387	-327	-7	15	2	895	-893	5	10	2	457	-412
4	0	2	530	-502	7	10	2	444	487	8	12	2	348	-348	-8	15	2	379	-412	-7	10	2	625	-434
6	0	2	745	722	10	10	2	243	210	9	12	2	775	758	-9	15	2	560	850	-8	10	2	304	300
6	0	2	653	649	-8	11	2	710	-680	-9	13	2	630	-624	-6	15	2	619	-680	-5	10	2	670	449
6	0	2	747	-764	-7	11	2	2103	2140	-7	13	2	257	278	-4	15	2	1046	1080	-4	10	2	322	-301
-10	0	2	575	-564	-6	11	2	490	-474	-5	13	2	331	352	-2	15	2	547	-535	-3	10	2	364	-36
-10	0	2	601	-611	-5	11	2	171	194	-9	13	2	1227	-1140	0	15	2	1770	-1782	-1	10	2	641	-643
-10	0	2	357	-375	-4	11	2	831	-820	-2	13	2	1277	1317	1	15	2	1085	1093	0	10	2	1130	-1214
-7	0	2	1624	1812	-3	11	2	2456	-2440	-1	15	2	1045	-1094	2	15	2	465	-470	1	10	2	684	684
-7	0	2	384	347	-2	11	2	2910	2817	1	15	2	236	-227	3	15	2	848	717	2	10	2	243	204
-7	0	2	439	-433	-1	11	2	609	-627	2	15	2	612	-679	4	15	2	347	-303	3	10	2	359	379
-4	0	2	871	-892	0	11	2	1901	1732	3	15	2	121	163	4	15	2	854	-905	4	10	2	635	614
-3	0	2	1451	-1432	1	11	2	308	-282	4	15	2	904	518	7	15	2	223	241	4	10	2	633	-325
-2	0	2	1441	1393	2	11	2	3494	-3021	5	15	2	444	-477	4	15	2	424	-547	-6	10	2	317	-282
-1	0	2	1499	1549	3	11	2	1419	1488	6	15	2	1000	604	-2	10	2	246	282	-5	10	2	424	-342
0	0	2	1019	-1082	4	11	2	824	440	7	15	2	1147	-1203	-6	10	2	341	-381	-4	10	2	400	-387
1	0	2	2258	2364	5	11	2	1454	1462	8	15	2	281	265	-5	10	2	616	611	-2	10	2	326	283
2	0	2	3316	-3443	6	11	2	1353	-1441	9	15	2	267	240	-4	10	2	1739	-1728	-1	10	2	600	-394
3	0	2	821	842	7	11	2	638	644	-9	10	2	400	385	-3	10	2	2430	2457	0	10	2	327	387
4	0	2	242	254	8	11	2	420	-405	-9	10	2	1302	1241	-2	10	2	1103	-1100	2	10	2	413	427
5	0	2	1433	1442	9	11	2	309	-317	-9	10	2	644	-626	0	10	2	330	357	3	10	2	197	185
6	0	2	1064	-1034	10	11	2	771	-782	-9	10	2	831	588	1	10	2	390	-418	4	10	2	268	-304
7	0	2	1011	-987	-10	12	2	1144	-1169	-9	10	2	2050	-2070	2	10	2	264	260	5	10	2	124	119
8	0	2	1011	-987	-9	12	2	146	119	-6	10	2	1040	1094	4	10	2	605	674	6	10	2	900	-268
9	0	2	1316	-1212	-8	12	2	424	-423	-3	10	2	417	454	5	10	2	969	-959	-6	10	2	235	231
-10	0	2	1254	-1245	-8	12	2	1402	-1400	-7	10	2	440	478	-4	17	2	385	345	-5	10	2	624	765
-7	10	2	415	407	-5	12	2	365	393	-1	10	2	247	259	-7	17	2	380	-403	-3	10	2	628	-430
-7	10	2	612	546	-4	12	2	932	928	0	10	2	682	-747	-6	17	2	954	-912	-2	10	2	311	-288
-7	10	2	1137	-1120	-3	12	2	671	660	1	10	2	1327	-1336	-5	17	2	654	706	-1	10	2	621	-673
-5	10	2	644	653	-2	12	2	1430	1423	2	10	2	656	710	-2	17	2	440	502	0	10	2	1457	1403
-4	10	2	1027	-1007	-1	12	2	2664	-2159	3	10	2	364	-333	-1	17	2	1412	-1433	1	10	2	230	215
-3	10	2	1586	1544	0	12	2	266	-225	4	10	2	1642	1640	0	17	2	1300	1377	2	10	2	226	-231
-2	10	2	1328	-1305	1	12	2	433	423	4	10	2	944	-917	1	17	2	1298	-1200	3	10	2	364	268
-1	10	2	167	230	2	12	2	1180	1178	7	10	2	571	-517	2	17	2	637	617	4	10	2	1317	-1320
0	10	2	633	-639	3	12	2	677	-695	9	10	2	863	944	3	17	2	395	400	5	10	2	421	437
2	10	2	662	641	5	12	2	114	114	-9	15	2	203	-224	5	17	2	625	-592	6	10	2	692	607
3	10	2	502	440																				

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 7

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
0	1	3	686	-731	0	11	3	738	-744	9	13	3	588	-600	-7	18	3	175	158	-1	10	3	7446	-7404
1	9	3	1754	-1585	1	11	3	1578	1609	-9	14	3	314	344	-1	19	3	1104	1145	0	10	3	1203	1343
2	9	3	1431	1073	2	11	3	1603	-1609	-10	14	3	370	-165	0	10	3	1157	-1173	1	10	3	1244	-1254
3	9	3	910	-970	3	11	3	1060	1099	-11	14	3	922	500	1	10	3	167	81	2	10	3	1012	1017
4	9	3	1077	1091	4	11	3	709	-894	-12	14	3	287	-244	3	10	3	750	-730	3	10	3	465	494
5	9	3	852	-851	5	11	3	702	788	-13	14	3	544	-541	4	10	3	1030	1017	4	10	3	422	-502
6	9	3	412	-431	6	11	3	163	-167	-14	14	3	1537	1496	5	10	3	200	-240	5	10	3	217	-140
7	9	3	239	190	7	11	3	301	271	-15	14	3	1777	-1757	6	10	3	412	-411	-4	20	3	782	840
8	9	3	489	421	8	11	3	801	-891	-16	14	3	404	821	7	10	3	1100	-1206	-3	20	3	831	-894
-10	10	3	932	497	9	11	3	900	814	-17	14	3	941	980	-7	17	3	238	-287	1	20	3	414	422
-10	10	3	1454	1512	-9	12	3	1120	-1093	0	14	3	1470	-1437	-8	17	3	455	-445	2	20	3	232	-793
-10	10	3	1038	-1011	-10	12	3	884	844	1	14	3	792	-843	-1	17	3	375	340	-5	21	3	1077	1047
-10	10	3	1207	-1154	-11	12	3	725	-730	2	14	3	855	-897	-4	17	3	280	-310	-4	21	3	525	-715
-10	10	3	209	223	-12	12	3	1214	1199	4	14	3	1017	1004	0	17	3	802	-727	-2	21	3	744	847
-10	10	3	1178	1124	-13	12	3	482	-482	5	14	3	534	-533	1	17	3	700	401	-3	21	3	203	180
-10	10	3	1546	1461	-14	12	3	770	-776	6	14	3	378	378	2	17	3	907	-1003	-1	21	3	696	-714
-10	10	3	2581	-2581	1	12	3	1674	1511	7	14	3	870	-850	3	17	3	705	770	1	21	3	210	711
-10	10	3	604	740	2	12	3	1028	-1028	8	14	3	270	240	4	17	3	274	-283	3	21	3	867	870
-10	10	3	1193	-1277	3	12	3	163	-80	-7	14	3	573	588	5	17	3	148	150	-4	21	3	844	-803
0	10	3	467	461	4	12	3	432	430	-8	14	3	547	512	6	17	3	254	-257	-3	22	3	498	-540
1	10	3	2210	2397	5	12	3	250	334	-9	14	3	317	-344	7	17	3	399	-370	-1	22	3	377	-370
2	10	3	994	-975	6	12	3	304	-285	-10	14	3	1517	-1498	-10	18	3	505	-501	0	22	3	490	440
3	10	3	954	-975	7	12	3	221	-222	-11	14	3	348	345	-11	18	3	703	682	1	22	3	558	546
4	10	3	240	-252	8	12	3	810	-816	-12	14	3	804	800	-12	18	3	430	-542	2	22	3	257	-230
5	10	3	688	-674	-10	13	3	1127	1134	0	14	3	328	-305	-1	18	3	1044	1000	-2	23	3	318	277
6	10	3	600	640	-11	13	3	514	321	1	14	3	774	843	0	18	3	870	-870	-1	23	3	310	-308
7	10	3	935	902	-12	13	3	248	-185	2	14	3	1211	-1235	1	18	3	203	-241	1	23	3	578	555
-10	10	3	137	-787	-13	13	3	2380	-2321	4	14	3	314	300	2	18	3	308	280	2	23	3	307	-717
-10	11	3	850	-881	-14	13	3	1510	1510	5	14	3	277	-280	3	18	3	1100	-1227	-11	0	4	600	747
-10	11	3	279	290	0	13	3	2335	2309	6	14	3	1481	1458	4	18	3	1398	1374	-10	0	4	680	757
-10	11	3	674	-693	2	13	3	1054	-1131	7	14	3	430	-405	5	18	3	450	-440	-9	0	4	932	-980
-10	11	3	1270	1207	3	13	3	723	-710	8	14	3	520	-540	6	18	3	180	177	-7	0	4	2172	-2223
-10	11	3	252	-270	4	13	3	260	304	-10	14	3	613	403	7	18	3	1038	-1011	-6	0	4	1001	1040
-10	11	3	851	-847	5	13	3	244	271	-11	14	3	1200	-1198	-10	18	3	710	700	-5	0	4	1388	1340
-10	11	3	247	-237	6	13	3	1180	1180	-14	14	3	502	511	-13	18	3	321	305	-4	0	4	321	-327
1	11	3	2047	2080	7	13	3	882	-842	-15	14	3	205	-230	-12	18	3	700	702	-3	0	4	608	580

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR BUS CO ADDUCT NO.2 JAN 64

PAGE 1

M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC
-2	0	4	1310	-1272	-9	2	4	1497	-1457	-4	4	4	769	-712	-9	4	4	499	-502	-10	0	4	847	-811
-1	0	4	2721	-2703	-1	2	4	1498	-1495	-3	4	4	270	-269	-9	4	4	1913	1971	-9	0	4	808	801
0	0	4	423	431	0	2	4	1497	1526	-2	4	4	760	-751	-7	4	4	1731	-1741	-8	0	4	637	606
1	0	4	1264	1204	1	2	4	1164	-1123	-1	4	4	1905	1270	-7	4	4	1023	1019	-9	0	4	779	-809
3	0	4	338	-344	2	2	4	1278	-1251	0	4	4	2204	2275	-6	4	4	1988	-1988	-4	0	4	1217	-1212
4	0	4	2532	-2453	3	2	4	725	720	1	4	4	1272	-1137	-4	4	4	2120	-2191	-3	4	4	1328	1341
5	0	4	1045	1005	4	2	4	1589	-1591	2	4	4	1040	-1041	-3	4	4	2245	2174	-2	4	4	763	-604
6	0	4	142	179	5	2	4	658	645	3	4	4	804	851	-2	4	4	1482	-1494	-1	4	4	1078	1041
7	0	4	385	363	7	2	4	476	-724	4	4	4	721	-744	-1	4	4	3254	3263	0	4	4	409	424
8	0	4	289	302	8	2	4	2057	2010	5	4	4	1102	1067	0	4	4	225	247	1	4	4	1898	-2088
10	0	4	801	-828	9	2	4	1581	-1581	6	4	4	143	-84	1	4	4	2495	-2700	2	4	4	300	454
11	0	4	367	349	10	2	4	279	244	7	4	4	479	-448	2	4	4	462	705	3	4	4	871	-827
-7	1	4	857	-854	-11	3	4	172	153	8	4	4	428	-453	3	4	4	1447	-1453	4	4	4	909	894
-7	1	4	1256	1276	-10	3	4	747	-756	9	4	4	1143	-1138	4	4	4	1023	1051	4	4	4	744	785
-8	1	4	838	-813	-9	3	4	543	-581	10	4	4	898	925	5	4	4	1814	1846	7	4	4	1014	-1026
-8	1	4	1442	1444	-7	3	4	479	492	-11	5	4	473	510	6	4	4	1069	-1110	8	4	4	937	-941
-4	1	4	1778	-1728	-6	3	4	1881	1876	-10	5	4	1157	-1202	7	4	4	1711	-1802	9	4	4	205	-207
-3	1	4	2354	2291	-5	3	4	1125	-1108	-9	5	4	950	942	8	4	4	772	764	10	4	4	958	849
-2	1	4	2341	-2287	-4	3	4	985	950	-8	5	4	805	-848	-10	7	4	374	-368	-10	0	4	1007	1006
-1	1	4	2117	2084	-3	3	4	1073	-1088	-7	5	4	174	-166	-9	7	4	700	769	-7	4	4	1239	-1160
0	1	4	1223	1247	-2	3	4	1508	1497	-6	5	4	2020	1987	-8	7	4	215	-244	-6	0	4	907	-907
1	1	4	1010	982	-1	3	4	852	884	-5	5	4	2308	-2367	-7	7	4	822	829	-5	0	4	418	-418
2	1	4	2374	-2243	0	3	4	440	-484	-4	5	4	2235	2230	-6	7	4	1622	-1655	-4	0	4	395	382
3	1	4	129	178	1	3	4	993	-977	-3	5	4	2337	-2237	-5	7	4	370	370	-3	0	4	1121	1077
4	1	4	1091	-1085	2	3	4	978	924	-1	5	4	2380	2291	-4	7	4	1153	-1154	-2	0	4	309	306
5	1	4	1039	1598	3	3	4	2353	-7351	0	5	4	1643	-1703	-3	7	4	1684	1611	-1	0	4	1055	-1086
6	1	4	1600	-1515	4	3	4	1415	1424	1	5	4	1286	1314	-2	7	4	2269	-2276	0	4	4	643	660
7	1	4	1178	1191	5	3	4	838	-584	2	5	4	571	-565	-1	7	4	362	377	1	4	4	2101	-2294
8	1	4	559	-563	6	3	4	1511	1510	3	5	4	2275	-2261	0	7	4	369	381	2	4	4	350	366
11	1	4	361	343	7	3	4	875	-873	4	5	4	1306	1337	1	7	4	268	270	3	4	4	247	-264
-11	2	4	785	881	8	3	4	483	-481	5	5	4	1809	-1814	2	7	4	463	484	4	4	4	354	291
-9	2	4	1172	-1177	-10	4	4	483	-547	6	5	4	2243	2263	3	7	4	1284	-1273	5	4	4	224	245
-8	2	4	349	-323	-9	4	4	488	498	7	5	4	709	-688	4	7	4	1934	1951	6	4	4	1650	-1680
-6	2	4	2294	2276	-7	4	4	318	-343	10	6	4	377	-369	5	7	4	2221	-2168	7	4	4	720	756
-4	2	4	741	-733	-6	4	4	369	338	-11	6	4	350	357	6	7	4	1628	1510	8	4	4	734	780
-3	2	4	945	934	-5	4	4	304	-307	-10	6	4	847	-876	7	7	4							

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 9

M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC
0	0	A	692	-630	-5	12	A	750	701	4	14	A	947	-582	-1	17	A	2131	2153	-3	21	A	443	442
-10	0	A	1345	1349	-6	12	A	295	321	5	14	A	917	-902	0	17	A	1467	-1452	-2	21	A	214	230
-10	10	A	289	-274	-3	12	A	533	-580	6	14	A	883	891	1	17	A	1771	1553	-1	21	A	937	-954
-7	10	A	227	248	-2	12	A	711	-715	7	14	A	148	-149	2	17	A	682	-724	0	21	A	918	917
-10	10	A	457	-435	-1	12	A	1057	-1080	8	14	A	402	741	3	17	A	914	-903	1	21	A	795	-740
-4	10	A	719	773	1	12	A	1748	1780	-6	14	A	1316	1245	6	17	A	997	620	2	21	A	974	977
-3	10	A	1205	-1193	4	12	A	1123	-1180	-5	15	A	874	-883	7	17	A	403	401	-3	22	A	192	-300
-1	10	A	333	-343	4	12	A	484	-448	-4	15	A	897	884	-7	18	A	471	488	-2	22	A	439	454
0	10	A	663	677	5	12	A	448	498	-3	15	A	1158	-1162	-3	18	A	687	-700	-1	22	A	417	342
1	10	A	399	420	7	12	A	365	321	-2	15	A	250	88	-4	18	A	408	-408	0	22	A	716	-674
2	10	A	1118	-1174	4	12	A	380	338	0	15	A	1364	1371	-7	18	A	373	475	1	22	A	259	279
3	10	A	1078	1088	6	12	A	284	275	1	15	A	841	-851	-1	18	A	946	948	2	22	A	917	-945
4	10	A	823	-834	-6	13	A	900	917	2	15	A	1044	1068	0	18	A	814	-820	-1	23	A	307	-245
5	10	A	338	284	-5	13	A	479	-472	3	15	A	2445	-2518	1	18	A	288	297	0	23	A	884	-893
6	10	A	603	543	-4	13	A	347	-384	4	15	A	965	872	3	18	A	748	-743	1	23	A	283	260
7	10	A	381	-389	-4	13	A	249	-243	5	15	A	230	-218	4	18	A	1080	1100	-11	1	S	614	-674
8	10	A	350	-332	-3	13	A	982	982	6	15	A	373	354	5	18	A	178	-188	-10	1	S	974	1012
-10	11	A	295	-299	-4	13	A	953	-928	7	15	A	438	430	-6	18	A	408	491	-8	1	S	1199	1277
-10	11	A	1334	1333	-1	13	A	1222	1210	-8	18	A	443	-441	-5	18	A	491	-448	-7	1	S	861	-682
-7	11	A	354	-354	0	13	A	988	-1088	-7	18	A	410	380	-4	18	A	840	823	-8	1	S	1897	-1871
-7	11	A	642	-859	1	13	A	131	200	-6	18	A	444	-438	-2	18	A	410	-435	-9	1	S	928	945
-4	11	A	472	-478	2	13	A	413	442	-4	18	A	1255	1240	-1	18	A	485	461	-4	1	S	944	991
-4	11	A	1102	1130	3	13	A	388	-411	-3	18	A	1371	-1328	0	18	A	355	-337	-3	1	S	349	317
-3	11	A	1344	1242	4	13	A	402	-398	-2	18	A	764	705	1	18	A	802	815	-7	1	S	2974	2929
-2	11	A	929	-920	5	13	A	971	957	-1	18	A	884	-712	3	18	A	570	-592	-1	1	S	3014	2884
-1	11	A	727	674	6	13	A	914	-917	1	18	A	1084	1072	4	18	A	278	270	0	1	S	779	815
0	11	A	1079	-1008	7	13	A	1129	1097	2	18	A	1162	-1207	5	18	A	310	334	1	1	S	1089	-1033
1	11	A	591	-588	8	13	A	202	-204	3	18	A	1091	1148	-5	20	A	902	-957	2	1	S	884	829
2	11	A	2072	2107	-6	14	A	1278	-1234	4	18	A	463	-459	-4	20	A	347	-280	3	1	S	2955	2181
3	11	A	431	920	-5	14	A	391	-388	5	18	A	459	-445	-2	20	A	921	308	4	1	S	1197	-1184
4	11	A	154	152	-5	14	A	1074	1034	-7	17	A	343	353	-1	20	A	1284	1201	5	1	S	648	-477
5	11	A	974	-947	-4	14	A	817	807	-8	17	A	1012	1018	0	20	A	788	-800	6	1	S	278	312
6	11	A	453	476	-3	14	A	742	-703	-5	17	A	497	-463	1	20	A	408	-445	7	1	S	1893	-1814
-7	12	A	710	-681	-2	14	A	379	-388	4	17	A	544	488	2	20	A	288	277	8	1	S	1214	1212
-7	12	A	404	-382	-1	14	A	889	-899	-3	17	A	453	-818	3	20	A	1027	-1000	10	1	S	241	-225
-8	12	A	344	351	1	14	A	1453	1488	-2	17	A	1318	-1352	4	20	A	1492	1444	-11	2	S	447	447

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR BUS CO ADDUCT NO.2 JAN 64

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	2	5	428	408	7	3	5	292	295	10	5	5	950	-954	-8	5	5	1745	1719	1	10	5	2462	-2508
5	2	5	840	-854	8	3	5	239	234	-9	5	5	229	241	-9	5	5	859	-848	2	10	5	1408	1421
5	2	5	1031	-1022	10	3	5	384	-359	-10	5	5	719	-729	-10	5	5	1888	-1846	3	10	5	530	-548
5	2	5	823	905	-10	4	5	552	544	-10	5	5	481	444	-10	5	5	2078	2048	4	10	5	794	815
5	2	5	918	938	-10	4	5	902	-848	-10	5	5	478	-343	-10	5	5	893	-844	5	10	5	1216	1244
5	2	5	249	244	-10	4	5	717	-709	-10	5	5	145	-107	-10	5	5	1785	1734	6	10	5	739	-729
5	2	5	1580	-1492	-10	4	5	800	785	0	5	5	1547	1543	1	5	5	885	-843	7	10	5	432	-340
5	2	5	1458	-1381	-10	4	5	777	409	1	5	5	445	454	2	5	5	1459	1452	8	10	5	239	240
5	2	5	958	-1253	-10	4	5	1784	-1745	2	5	5	734	-703	3	5	5	857	-884	9	10	5	873	-875
5	2	5	813	817	-10	4	5	1457	1447	3	5	5	1789	1790	4	5	5	444	448	-9	11	5	448	-404
5	2	5	431	-787	-10	4	5	4281	-4014	4	5	5	2286	-2290	5	5	5	1441	1445	-10	11	5	1244	1244
5	2	5	1185	1140	0	4	5	1432	2020	5	5	5	878	904	6	5	5	1100	-1129	-7	11	5	854	-925
5	2	5	782	-778	1	4	5	235	254	6	5	5	874	-887	7	5	5	488	-488	-5	11	5	890	-878
5	2	5	271	-276	2	4	5	784	825	7	5	5	902	443	8	5	5	488	482	-4	11	5	483	524
5	2	5	311	278	3	4	5	940	860	8	5	5	880	891	9	5	5	309	255	-2	11	5	874	874
5	2	5	454	519	4	4	5	938	-952	9	5	5	800	-888	10	5	5	988	-941	-1	11	5	1722	-1804
5	2	5	208	-188	5	4	5	1124	-1131	-10	7	5	1357	-1089	-7	5	5	911	310	0	11	5	891	885
5	2	5	788	774	6	4	5	1137	1142	-9	7	5	444	455	-5	5	5	888	847	1	11	5	1082	-1100
5	2	5	1228	-1269	7	4	5	1142	1153	-8	7	5	980	-920	-6	5	5	1110	-1095	2	11	5	1146	1216
5	2	5	400	846	8	4	5	2467	2464	-6	7	5	1052	1014	-3	5	5	814	802	3	11	5	131	181
5	2	5	822	-555	9	4	5	1408	-1399	-5	7	5	242	-141	-2	5	5	1054	-1049	4	11	5	309	281
5	2	5	384	341	-9	5	5	757	-780	-4	7	5	817	854	0	5	5	245	281	5	11	5	479	-478
5	2	5	900	448	-7	5	5	588	-548	-3	7	5	2245	-2229	1	5	5	400	414	6	11	5	709	-203
5	2	5	2259	-2247	-8	5	5	988	1084	-2	7	5	1257	-1230	2	5	5	301	288	7	11	5	522	-475
5	2	5	2891	2758	-6	5	5	1165	1072	-1	7	5	1215	1247	4	5	5	849	-879	8	11	5	328	294
5	2	5	2284	-2278	-5	5	5	1638	-1925	1	7	5	2911	3003	5	5	5	908	495	-6	12	5	861	880
5	2	5	2083	2845	-2	5	5	1082	1039	2	7	5	1789	-1431	7	5	5	780	780	-7	12	5	258	-238
5	2	5	888	-855	-1	5	5	423	-451	3	7	5	881	-843	8	5	5	439	-461	-4	12	5	1349	-1348
5	2	5	1709	-1835	0	5	5	598	828	4	7	5	400	-372	-10	10	5	927	-934	-3	12	5	1349	1354
5	2	5	988	953	1	5	5	885	870	5	7	5	1205	-1230	-9	10	5	240	-240	-2	12	5	336	-344
5	2	5	1185	-1149	2	5	5	202	-191	6	7	5	3044	3032	-1	10	5	1837	1847	-1	12	5	443	402
5	2	5	410	397	3	5	5	1235	-1241	7	5	5	928	-308	-6	10	5	854	880	0	12	5	484	449
5	2	5	593	828	4	5	5	1504	-1486	-10	7	5	1463	-1479	-5	10	5	882	-821	1	12	5	1344	-1388
5	2	5	1884	-1800	5	5	5	2400	2409	-9	8	5	772	-795	-4	10	5	1388	-1388	2	12	5	207	-200
5	2	5	1494	1414	6	5	5	310	-274	-8	8	5	1292	1245	-3	10	5	1396	1389	3	12	5	987	1039
5	2	5	720	-721	7	5	5	214	177	-7	8	5	1460	-1404	0	10	5	1130	1107	4	12	5	1130	-1150

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUM CO ADDUCT NO. 2 JAN 84

PAGE 11

H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC			
4 12	5	2014	2002	2 15	5	879	923	8 18	5	242	-303	-2 0	8	2483	2700	-2 2	8	1088	1091
5 12	5	1420	-1325	5 15	5	454	484	-8 18	5	750	771	-1 0	8	441	390	-1 2	8	1768	1720
6 12	5	574	534	4 15	5	1188	-1188	-4 18	5	284	295	0 0	8	1998	2147	0 2	8	1005	-1272
-5 13	5	1903	1263	-4 14	5	411	-431	-3 18	5	888	-803	1 0	8	1995	-1812	1 2	8	1011	968
-6 13	5	250	-234	-7 18	5	478	-490	-2 18	5	1427	-1359	2 0	8	854	-891	2 2	8	265	-248
-7 13	5	540	407	-4 14	5	786	736	-1 18	5	2001	1948	3 0	8	2771	-2178	4 2	8	848	874
-8 13	5	1307	-1243	-3 18	5	247	210	0 18	5	895	-888	4 0	8	2118	2080	5 2	8	470	561
-9 13	5	1334	1340	-1 18	5	988	-985	1 18	5	1244	1311	5 0	8	450	224	6 2	8	771	-754
0 13	5	1343	-1473	0 18	5	147	171	2 18	5	419	-459	6 0	8	700	-714	7 2	8	840	880
2 13	5	401	-414	1 18	5	270	258	3 18	5	782	-808	10 0	8	1227	1274	8 2	8	1470	-1428
3 13	5	1422	1998	2 18	5	884	808	-5 20	5	447	-490	-11 1	8	705	-890	9 2	8	865	1018
4 13	5	777	-788	3 18	5	586	577	-3 20	5	472	472	-10 1	8	370	484	10 2	8	375	-384
5 13	5	947	-887	4 18	5	1015	-1045	1 20	5	871	-858	-8 1	8	470	487	-10 3	8	430	461
7 13	5	711	-687	5 18	5	539	-569	2 20	5	494	469	-7 1	8	222	-188	-9 3	8	165	161
8 13	5	454	484	6 18	5	387	347	3 20	5	342	-330	-5 1	8	824	-825	-8 3	8	494	854
-5 14	5	383	348	7 18	5	201	-208	4 20	5	493	479	-6 1	8	1540	1455	-7 3	8	565	568
-6 14	5	988	-954	-7 17	5	248	-250	5 20	5	247	-260	-3 1	8	1570	-1459	-8 3	8	1830	-1745
-7 14	5	400	777	-8 17	5	887	817	-4 21	5	894	587	-2 1	8	2331	2311	-9 3	8	241	280
-8 14	5	353	-386	-9 17	5	488	-467	-3 21	5	821	-750	-1 1	8	1487	-1587	-4 3	8	730	-717
-9 14	5	818	820	-2 17	5	348	-322	-2 21	5	882	-879	0 1	8	192	-240	-3 3	8	751	826
-2 14	5	422	-540	0 17	5	407	502	-1 21	5	747	779	1 1	8	1492	-1431	-2 3	8	1712	1672
-1 14	5	348	-331	2 17	5	882	801	2 21	5	938	350	2 1	8	148	-393	-1 3	8	1055	-1094
1 14	5	434	-444	3 17	5	1121	-1131	3 21	5	1354	-1354	3 1	8	1041	1028	2 3	8	1248	-1256
2 14	5	1481	1484	4 17	5	583	575	4 21	5	793	774	4 1	8	133	105	3 3	8	2142	2177
3 14	5	871	-886	5 17	5	285	270	-3 22	5	720	882	5 1	8	811	-827	4 3	8	1181	-1116
4 14	5	247	-259	6 17	5	344	-351	-1 22	5	727	896	6 1	8	883	829	5 3	8	1101	1094
5 14	5	283	-270	7 17	5	738	708	0 22	5	254	-286	7 1	8	1135	-1120	6 3	8	1044	-1111
6 14	5	304	324	-8 18	5	887	-818	1 22	5	479	-441	8 1	8	716	735	7 3	8	1310	-1242
7 14	5	347	-344	-9 18	5	538	495	-11 0	8	973	-978	9 1	8	925	-927	8 3	8	1020	988
8 14	5	642	695	-4 18	5	387	353	-10 0	8	883	580	-11 2	8	437	-450	10 3	8	574	750
-9 15	5	138	182	-3 18	5	252	278	-9 0	8	1494	-1497	-10 2	8	308	-311	-10 4	8	272	274
-8 15	5	604	-600	-1 18	5	808	-835	-8 0	8	1403	1584	-9 2	8	387	381	-9 4	8	493	507
-7 15	5	1153	1035	2 18	5	843	880	-7 0	8	1368	1374	-7 2	8	1030	1013	-8 4	8	523	-543
-2 15	5	455	480	3 18	5	309	-364	-6 0	8	945	-934	-5 2	8	978	-933	-5 4	8	330	-303
-1 15	5	388	-305	4 18	5	1777	1753	-4 0	8	720	-784	-4 2	8	1182	-1144	-4 4	8	1370	1317
1 15	5	1148	-1202	5 18	5	1422	-1448	-3 0	8	1189	-1138	-3 2	8	390	-390	-3 4	8	835	-830

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RU5 CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 12

H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC								
1	4	R	929	805	-2	8	R	1935	1884	-4	8	R	1079	1074	1	10	R	807	502	4	12	R	298	-291
1	4	R	2822	-2809	-1	8	R	3107	-3130	-2	8	R	552	-545	2	10	R	444	484	-8	13	R	771	-765
1	4	R	1434	1427	0	8	R	284	-261	0	8	R	1746	-1402	3	10	R	874	-590	-8	13	R	728	737
2	4	R	222	-214	1	8	R	820	884	1	8	R	2138	2278	4	10	R	1110	1144	-7	13	R	332	-332
3	4	R	583	558	2	8	R	250	232	2	8	R	1345	-1444	5	10	R	1243	-1274	-6	13	R	481	433
4	4	R	776	782	3	8	R	1095	1110	3	8	R	2079	2113	6	10	R	750	750	-4	13	R	375	-402
4	4	R	1550	-1481	4	8	R	204	-172	4	8	R	1412	-1424	7	10	R	491	-454	-3	13	R	400	-433
4	4	R	418	417	5	8	R	2033	-2016	5	8	R	524	-529	8	10	R	318	335	-2	13	R	1017	886
4	4	R	388	-354	6	8	R	835	807	6	8	R	448	-420	-8	11	R	1285	-1310	-1	13	R	582	-512
9	4	R	1308	1303	7	8	R	836	-815	7	8	R	695	683	-8	11	R	498	513	0	13	R	724	747
0	4	R	457	-874	8	8	R	1497	1497	8	8	R	344	339	-7	11	R	318	-279	2	13	R	499	-522
0	5	R	918	919	-10	8	R	304	-327	9	8	R	924	910	-6	11	R	1110	1080	1	13	R	881	841
9	5	R	784	-830	-10	7	R	420	434	-10	4	R	476	-785	-5	11	R	425	404	6	13	R	883	855
8	5	R	1173	1155	-9	7	R	840	-843	-9	4	R	185	-188	-4	11	R	848	-843	7	13	R	884	-840
7	5	R	518	500	-8	7	R	414	402	-8	9	R	830	-849	-3	11	R	485	401	-8	14	R	898	875
5	5	R	1548	-1542	-7	7	R	418	-429	-7	9	R	530	537	-2	11	R	813	-880	-7	14	R	392	356
5	5	R	1097	1117	-6	7	R	359	341	-5	9	R	1282	1244	0	11	R	1349	1371	-5	14	R	386	376
4	5	R	2580	-2484	-5	7	R	285	-222	-4	9	R	448	-443	1	11	R	268	233	-4	14	R	1892	-1876
3	5	R	1928	1905	-4	7	R	220	237	-3	9	R	381	-340	1	11	R	811	-839	-3	14	R	1281	1242
1	5	R	1794	-1720	-3	7	R	1758	-1747	-2	9	R	584	-603	8	11	R	344	349	-2	14	R	249	-271
0	5	R	822	979	-2	7	R	1417	1754	-1	9	R	1004	952	7	11	R	299	324	-1	14	R	884	968
1	5	R	1424	-1450	-1	7	R	1151	-1133	0	9	R	677	-264	8	11	R	489	-451	0	14	R	432	564
2	5	R	355	342	0	7	R	842	851	1	9	R	1791	1848	9	11	R	572	584	1	14	R	1083	-1083
3	5	R	1418	1402	2	7	R	887	-883	2	9	R	1441	-1447	-9	12	R	746	-798	2	14	R	261	-282
5	5	R	909	910	3	7	R	1234	1263	3	9	R	681	688	-8	12	R	881	880	4	14	R	508	-490
6	5	R	1388	-1388	5	7	R	573	-583	4	9	R	331	-314	-7	12	R	355	325	5	14	R	1824	1832
7	5	R	418	-423	6	7	R	1108	1112	5	9	R	432	-490	-5	12	R	220	-195	6	14	R	1011	-1037
8	5	R	528	541	7	7	R	784	-744	6	9	R	1432	1507	-4	12	R	845	-874	7	14	R	884	884
0	5	R	590	813	8	7	R	384	357	7	9	R	431	-393	-3	12	R	490	489	8	14	R	842	-854
0	5	R	1148	1231	-10	7	R	402	-376	-7	10	R	398	-338	-2	12	R	841	844	-7	14	R	969	942
-2	5	R	805	-788	-10	8	R	484	517	-6	10	R	909	864	-1	12	R	241	284	-6	15	R	1738	-1688
-7	5	R	921	884	-9	8	R	581	549	-5	10	R	539	-500	0	12	R	1571	1552	-5	15	R	758	712
-8	5	R	1850	-1842	-8	8	R	1145	-1131	-4	10	R	756	739	1	12	R	1484	-1444	-4	15	R	889	-874
-8	5	R	413	378	-7	8	R	585	560	-3	10	R	508	-480	4	12	R	703	651	-3	15	R	245	257
-4	5	R	2389	2253	-6	8	R	1007	-977	-1	10	R	421	609	5	12	R	1307	1270	-2	15	R	980	957
-3	5	R	1405	-1351	-5	8	R	337	357	0	10	R	741	-824	6	12	R	413	-412	0	15	R	427	-433

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 13

M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC			
1	15	6	504 -463	4	18	6	863 -901	1	1	7	683 640	0	3	7	800 -748	2	4	7	105 85
2	15	6	1274 -1321	5	18	6	805 -878	2	1	7	1784 1748	1	7	7	488 530	4	4	7	1254 1255
3	15	6	2291 2321	-1	19	6	419 438	3	1	7	3508 -3380	2	3	7	278 -280	5	4	7	245 240
4	15	6	375 -384	-4	19	6	583 -583	4	1	7	1504 1517	3	3	7	410 383	6	4	7	777 -776
5	15	6	242 209	-3	19	6	365 286	5	1	7	887 -843	4	3	7	188 184	7	4	7	456 -425
6	15	6	1224 -1244	-7	19	6	572 574	6	1	7	130 -88	5	3	7	508 -443	-10	4	7	735 197
7	15	6	944 -880	0	19	6	306 241	7	1	7	1857 1818	7	3	7	422 434	-9	6	7	288 -293
8	15	6	1031 982	1	19	6	715 -725	8	1	7	1041 -983	8	3	7	333 -308	-8	6	7	302 289
-1	16	6	558 -572	2	19	6	281 -247	9	1	7	278 281	-10	4	7	882 -881	-5	6	7	488 -483
4	16	6	731 -244	3	19	6	692 681	-10	2	7	854 850	-7	4	7	821 844	-4	6	7	819 863
1	16	6	154 148	4	19	6	248 243	-9	2	7	1804 -1885	-5	4	7	975 940	-3	6	7	1882 -1750
0	16	6	205 208	-5	20	6	479 547	-8	2	7	898 847	-4	4	7	2145 -2129	-2	6	7	852 815
1	16	6	710 -680	-4	20	6	404 401	-7	2	7	378 384	-3	4	7	488 502	-1	6	7	215 -227
2	16	6	1005 1012	-3	20	6	448 452	-6	2	7	250 267	-2	4	7	888 -828	0	6	7	402 431
3	16	6	1140 -1175	-2	20	6	522 -491	-5	2	7	582 618	-1	4	7	2704 2671	1	6	7	740 -720
4	16	6	558 588	-1	20	6	788 -771	-4	2	7	1244 -1211	0	4	7	1091 -1093	4	6	7	1388 1400
5	16	6	251 -222	0	20	6	150 -152	-2	2	7	422 483	1	4	7	1032 1070	5	6	7	911 -958
6	16	6	387 400	1	20	6	383 416	-1	2	7	1098 -1063	2	4	7	2083 -2087	6	6	7	1123 1111
7	16	6	438 -341	2	20	6	325 328	0	2	7	3350 3484	3	4	7	265 -235	7	6	7	880 -828
-8	17	6	503 -512	3	20	6	455 425	1	2	7	2182 -2088	4	4	7	510 -558	8	6	7	585 -824
-4	17	6	756 -745	4	20	6	1154 -1143	3	2	7	1288 -1235	5	4	7	1856 1825	-10	7	7	329 372
-3	17	6	731 746	-3	21	6	325 -323	4	2	7	505 487	6	4	7	365 -362	-8	7	7	548 493
-2	17	6	1350 1291	-1	21	6	647 594	5	2	7	879 912	7	4	7	870 858	-7	7	7	329 349
-1	17	6	1323 -1293	1	21	6	557 554	6	2	7	117 -193	8	4	7	1835 -1842	-4	7	7	428 -384
0	17	6	743 784	2	21	6	813 -813	7	2	7	400 399	8	4	7	504 472	-5	7	7	708 -703
1	17	6	1450 -1474	-1	22	6	362 -332	8	2	7	1121 -1108	-10	5	7	372 -391	-4	7	7	1043 -1070
3	17	6	718 744	1	22	6	360 -368	10	2	7	1113 1163	-9	5	7	758 761	-3	7	7	1488 1402
4	17	6	378 347	-10	1	7	539 -562	-9	3	7	935 918	-7	5	7	827 846	-2	7	7	1507 1424
5	17	6	588 -515	-9	1	7	277 310	-8	3	7	717 -718	-6	5	7	842 -908	-1	7	7	877 885
-6	18	6	321 -328	-8	1	7	731 -745	-7	3	7	598 554	-5	5	7	468 -468	0	7	7	312 -328
-5	18	6	455 453	-7	1	7	454 -430	-6	3	7	880 853	-4	5	7	228 -261	1	7	7	948 -1008
-4	18	6	319 343	-6	1	7	2173 2247	-5	3	7	1405 -1426	-3	5	7	584 655	3	7	7	542 520
-3	18	6	481 463	-5	1	7	257 -252	-4	3	7	1978 1954	-2	5	7	758 692	4	7	7	1199 1152
-2	18	6	722 -820	-2	1	7	2783 -2808	-3	3	7	1288 -1234	-1	4	7	785 778	5	7	7	825 842
-1	18	6	473 -448	-1	1	7	1788 1813	-2	3	7	170 -183	0	5	7	705 -720	6	7	7	1650 -1591
3	18	6	648 659	0	1	7	806 -822	-1	3	7	845 740	1	5	7	382 -347	7	7	7	938 -908

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR BUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 14

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
8	7	7	225	-148	-8	10	7	1521	-1495	8	12	7	1841	1450	8	14	7	510	810
9	7	7	409	104	-5	10	7	710	730	7	12	7	886	-881	7	14	7	545	543
0	8	7	1254	1781	-4	10	7	1951	1495	4	12	7	244	252	-5	14	7	538	525
-1	8	7	411	-102	-3	10	7	1124	-1143	-4	13	7	107	141	-4	14	7	960	-824
-2	8	7	585	-740	-1	10	7	701	879	-7	13	7	1239	-1102	-3	14	7	479	-450
-3	7	8	482	825	0	10	7	2448	-2540	-8	13	7	1851	1588	-1	14	7	871	891
-4	8	7	1301	-1270	1	10	7	2723	2822	-2	13	7	1382	-1357	0	14	7	880	834
-5	7	8	438	496	2	10	7	1008	-1087	-1	13	7	482	417	2	14	7	752	-739
-6	8	7	888	880	3	10	7	1104	1141	0	13	7	204	201	3	14	7	887	-881
-7	8	7	503	-584	5	10	7	1118	-1109	1	13	7	324	303	5	14	7	947	804
-8	8	7	714	888	8	10	7	818	814	2	13	7	880	925	-8	17	7	739	-719
-9	8	7	2080	-2117	8	10	7	372	-133	3	13	7	1408	-1884	-8	17	7	428	462
0	8	7	122	278	9	10	7	1412	1438	5	13	7	281	-103	-2	17	7	857	857
1	8	7	839	857	-8	11	7	430	-820	7	13	7	1210	1181	-1	17	7	294	-303
2	8	7	182	-184	-7	11	7	347	307	8	13	7	881	-889	0	17	7	342	332
3	8	7	777	738	-8	11	7	788	752	-8	14	7	371	-354	2	17	7	810	-552
4	8	7	831	556	-2	11	7	471	-480	-7	14	7	1070	1010	3	17	7	805	768
5	8	7	857	-804	-1	11	7	257	253	-8	14	7	788	-816	4	17	7	307	472
6	7	8	197	-195	0	11	7	391	-373	-5	14	7	1047	1044	-8	18	7	493	806
-7	8	7	981	1014	3	11	7	548	-534	-4	14	7	533	-517	-5	18	7	362	-258
-8	8	7	887	-943	4	11	7	801	817	-3	14	7	253	-221	-3	18	7	1047	-1071
-9	8	7	393	-422	5	11	7	524	-551	-1	14	7	153	117	4	18	7	884	775
-0	8	7	444	788	8	11	7	584	522	0	14	7	587	582	0	18	7	733	730
-1	8	7	1010	-943	8	11	7	244	234	1	14	7	287	341	1	18	7	548	-531
-2	8	7	1298	1257	-8	12	7	477	-495	2	14	7	1183	-1180	3	18	7	1243	-1260
-3	8	7	189	-211	-8	12	7	289	315	5	14	7	715	787	4	18	7	709	857
-4	8	7	817	-838	-8	12	7	791	-758	8	14	7	328	-325	5	18	7	293	-291
-5	8	7	1270	1283	-4	12	7	2513	2382	7	14	7	354	362	-4	18	7	822	-782
-6	8	7	170	-186	-3	12	7	2401	-2274	-1	15	7	479	479	-3	19	7	480	530
-7	8	7	288	275	-2	12	7	1087	1084	-4	15	7	209	211	-2	19	7	1021	1053
-8	7	8	542	-567	-1	12	7	551	-603	-3	15	7	689	-809	-1	19	7	798	-745
-9	8	7	234	250	0	12	7	774	-746	-2	15	7	235	-100	1	19	7	725	-688
0	8	7	281	-279	1	12	7	1278	1322	-1	15	7	140	144	2	19	7	308	-290
-1	10	7	1049	1052	3	12	7	528	-513	1	15	7	562	551	3	19	7	1021	1009
-2	10	7	1405	-1401	4	12	7	1248	1285	4	15	7	432	-447	4	20	7	522	-464
-3	10	7	281	248	8	12	7	2254	-2232	5	15	7	481	-414	-2	20	7	504	-549

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS GO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 14

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	1	8	1400	1722	8	3	8	477	-447	-8	8	8	277	-314	-5	8	8	842	-844	7	10	8	437	433
3	1	8	2314	-2224	7	3	8	1800	1784	-7	8	8	223	183	-4	8	8	430	-444	8	10	8	489	-401
4	1	8	388	391	6	3	8	583	-577	-4	8	8	880	844	-3	8	8	578	-884	-8	11	8	812	817
5	1	8	995	-981	-10	4	8	170	205	-5	8	8	498	441	-2	8	8	247	-194	-8	11	8	467	-449
6	1	8	563	535	-9	4	8	450	-884	-4	8	8	1280	-1286	-1	8	8	610	-384	-7	11	8	1298	1306
7	1	8	592	577	-8	4	8	564	552	-2	8	8	1547	-1546	0	8	8	2542	2404	-6	11	8	1367	-1298
8	1	8	448	-436	-7	4	8	375	-380	-1	8	8	1883	1823	1	8	8	1772	-1844	-5	11	8	588	-518
9	2	8	285	300	-6	4	8	780	772	0	8	8	740	771	2	8	8	684	641	-4	11	8	1086	1080
10	2	8	304	320	-5	4	8	714	885	1	8	8	214	-234	3	8	8	1285	-1247	-3	11	8	876	-827
11	2	8	1344	-1303	-4	4	8	1704	-1816	2	8	8	923	-1046	4	8	8	1079	1014	-2	11	8	1450	1363
12	2	8	870	856	-3	4	8	1200	1179	4	8	8	1042	-1041	5	8	8	910	273	0	11	8	281	-261
13	2	8	1088	-1077	-2	4	8	1130	-1073	5	8	8	1814	1785	6	8	8	1178	-1168	1	11	8	419	-423
14	2	8	1075	1061	0	4	8	1641	2064	8	8	8	247	278	-8	9	8	884	822	2	11	8	1013	-1046
15	2	8	564	541	1	4	8	1378	-1404	7	8	8	387	378	-9	9	8	253	263	3	11	8	1035	1040
16	2	8	811	-863	2	4	8	843	727	8	8	8	422	-444	-1	9	8	314	308	4	11	8	216	233
17	2	8	1123	-1050	3	4	8	476	-851	9	8	8	477	-625	-1	9	8	1248	-1200	5	11	8	228	-193
18	2	8	822	1066	4	4	8	888	-873	-8	7	8	427	438	-4	9	8	273	244	7	11	8	436	-427
19	2	8	1187	-1174	5	4	8	1877	1805	-8	7	8	305	-277	-3	9	8	245	348	8	11	8	344	340
20	2	8	1185	1337	6	4	8	813	-808	-7	7	8	271	-770	-2	9	8	825	878	-8	12	8	943	-841
21	2	8	842	-776	7	4	8	448	444	-8	7	8	541	537	-1	9	8	984	924	-8	12	8	244	-257
22	3	8	315	314	8	4	8	824	-793	-5	7	8	792	-823	0	9	8	1220	-1241	-3	12	8	213	-228
23	3	8	474	-482	-8	8	8	947	-1001	-4	7	8	395	390	3	9	8	243	-225	-4	12	8	1405	1486
24	3	8	341	-319	-4	8	8	1178	1134	-3	7	8	305	323	4	9	8	642	448	-3	12	8	234	-147
25	3	8	738	727	-3	8	8	464	-439	-2	7	8	220	168	5	9	8	665	622	-1	12	8	170	346
26	3	8	420	-402	-2	8	8	1611	-1527	-1	7	8	704	444	6	9	8	433	-454	0	12	8	1717	-1760
27	3	8	187	-195	-1	8	8	172	209	0	7	8	1023	-1040	7	9	8	408	-420	1	12	8	1173	1220
28	3	8	822	-843	0	8	8	212	-188	2	7	8	1331	1288	-8	10	8	987	-988	2	12	8	407	-433
29	3	8	1214	-1242	1	8	8	994	1008	3	7	8	1242	-1252	-5	10	8	840	745	3	12	8	734	738
30	3	8	1285	1307	2	8	8	315	347	4	7	8	1205	1151	-4	10	8	1477	-1434	4	12	8	1381	-1386
31	3	8	624	644	3	8	8	225	-224	5	7	8	481	-504	-3	10	8	1050	1010	5	12	8	270	-268
32	3	8	2828	-2804	4	8	8	481	-478	6	7	8	248	241	0	10	8	725	710	-8	13	8	441	-457
33	3	8	733	730	5	8	8	398	-416	8	7	8	378	-291	1	10	8	640	-680	-8	13	8	313	-350
34	3	8	495	-516	6	8	8	1325	1253	-8	8	8	1014	-965	3	10	8	141	-210	-4	13	8	374	391
35	3	8	822	619	7	8	8	348	-348	-8	8	8	634	677	4	10	8	345	-357	-2	13	8	454	-410
36	3	8	1153	1186	8	8	8	351	-348	-7	8	8	367	-384	5	10	8	1027	1044	0	13	8	802	-878
37	3	8	2040	-1971	-10	8	8	1182	-1203	-6	8	8	1545	1413	6	10	8	885	-893	2	13	8	624	643

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 14

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
3	13	8	721	-730	-3	17	8	305	-279	8	1	9	1224	1921	8	3	9	878	870	-7	8	9	282	-319
4	13	8	484	497	-2	17	8	1185	-1161	6	1	9	481	473	9	3	9	378	-382	-5	8	9	328	384
5	13	8	483	-439	-1	17	8	256	186	7	1	9	1458	-1437	-8	4	9	297	284	-4	8	9	874	-830
-9	14	8	465	-441	1	17	8	632	659	8	1	9	527	528	-8	4	9	575	538	-3	8	9	1890	1843
-5	14	8	1191	-1109	2	17	8	597	541	8	1	9	409	-411	-7	4	9	1520	-1534	-2	8	9	1098	-1041
-4	14	8	1994	1984	3	17	8	883	-885	-10	2	9	884	-1011	-6	4	9	703	691	-1	8	9	285	298
-3	14	8	985	-984	4	17	8	788	-737	-9	2	9	1921	1952	-5	4	9	1885	-1401	0	8	9	867	-818
-2	14	8	1195	1047	-5	18	8	485	-459	-8	2	9	760	-748	-4	4	9	1014	1039	1	8	9	240	-309
-1	14	8	550	-564	-2	18	8	718	462	-6	2	9	745	-715	-3	4	9	1048	1039	2	8	9	552	540
0	14	8	897	-717	1	18	8	188	-152	-5	2	9	743	-740	-2	4	9	658	622	5	8	9	325	300
1	14	8	720	719	3	18	8	270	-283	-4	2	9	1007	1024	-1	4	9	1187	-1160	4	8	9	811	-815
2	14	8	911	933	4	18	8	250	245	-3	2	9	408	378	0	4	9	378	-457	7	8	9	328	284
3	14	8	1751	-1785	-4	18	8	335	331	-1	2	9	488	1001	1	4	9	1141	-1108	-8	7	9	835	-578
4	14	8	792	-740	-2	19	8	434	-358	0	2	9	2040	-2189	2	4	9	1829	1908	-7	7	9	589	-584
5	14	8	889	-784	1	19	8	493	505	1	2	9	1183	1352	3	4	9	712	-714	-6	7	9	278	-240
-7	15	8	977	-1020	2	19	8	497	921	2	2	9	435	-748	4	4	9	1183	1147	-5	7	9	1184	1063
-6	15	8	947	958	3	19	8	645	-861	3	2	9	1136	1271	5	4	9	755	-761	-4	7	9	285	259
-5	15	8	439	-488	-3	20	8	830	-874	4	2	9	1418	-1503	6	4	9	1034	-1003	-3	7	9	521	427
-4	15	8	882	873	-2	20	8	518	817	5	2	9	237	278	8	4	9	471	436	-2	7	9	1276	-1258
-3	15	8	1409	-1374	0	20	8	841	-897	6	2	9	442	-458	9	4	9	643	820	-1	7	9	1878	-1892
-2	15	8	702	714	-1	20	8	821	-587	7	2	9	746	778	-8	4	9	382	-434	0	7	9	1422	1444
-1	15	8	1107	-1060	-1	21	8	228	278	-10	3	9	351	-378	-7	5	9	1084	-1071	2	7	9	1190	1224
0	15	8	748	917	0	21	8	452	-478	-9	3	9	248	270	-6	5	9	358	-340	4	7	9	853	-824
1	15	8	1208	1239	-8	1	9	388	-424	-8	3	9	603	548	-5	5	9	1364	1338	5	7	9	894	-854
2	15	8	1348	-1315	-6	1	9	468	550	-7	3	9	1205	-1231	-4	5	9	884	-888	8	7	9	244	-238
3	15	8	270	-280	-5	1	9	1083	1154	-6	3	9	472	451	-3	5	9	1920	1247	7	7	9	818	815
4	15	8	595	-572	-4	1	9	1475	-1489	-4	3	9	180	-181	-2	5	9	1707	-1684	8	7	9	853	889
5	15	8	785	-798	-3	1	9	730	728	-1	3	9	490	-504	-1	5	9	780	-728	-9	8	9	239	238
-7	16	8	714	842	-2	1	9	1285	-1288	0	3	9	495	807	1	5	9	882	862	-8	8	9	381	358
-6	16	8	804	-813	-3	1	9	184	180	1	3	9	1087	-1038	2	5	9	718	764	-3	8	9	394	-392
-5	16	8	734	711	-2	1	9	1847	1708	2	3	9	788	740	3	5	9	459	478	-2	8	9	878	-595
0	16	8	828	-821	-1	1	9	1347	-1318	3	3	9	834	-882	4	5	9	1878	-1892	-1	8	9	708	894
1	16	8	917	937	0	1	9	818	844	4	3	9	404	378	5	5	9	407	400	0	8	9	848	810
2	16	8	723	-708	2	1	9	2207	-2144	5	3	9	818	-782	6	5	9	482	-518	1	8	9	224	-214
3	16	8	488	-529	3	1	9	2648	2418	6	3	9	1888	1803	7	5	9	823	807	2	8	9	443	-431
-4	17	8	725	733	4	1	9	1970	-1491	7	3	9	1190	-1175	-9	6	9	408	488	3	8	9	213	188

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUC CO ARDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 17

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	8	0	897	-980	3	11	9	800	590	2	14	0	708	-881	2	14	0	899	918
4	8	0	887	878	4	11	9	885	-854	3	14	0	854	888	3	14	0	914	-894
4	8	0	288	312	4	11	9	809	771	3	14	0	310	133	1	20	0	423	-418
4	8	0	523	-415	4	11	9	292	-308	5	14	0	418	-422	-9	0	10	1838	-1880
-7	9	0	1438	-1368	7	11	9	594	411	6	14	0	235	-233	-9	0	10	480	480
-4	9	0	723	688	-4	12	9	873	983	-4	15	0	539	-582	-6	0	10	251	241
-4	9	0	190	200	-4	12	9	1824	-1740	-3	15	0	447	-411	-5	0	10	1404	1515
-3	9	0	471	504	-3	12	9	1952	1812	-2	15	0	481	458	-4	0	10	1288	-1252
-3	9	0	415	421	-2	12	9	1284	-1244	-1	15	0	443	487	-3	0	10	880	-848
-2	9	0	710	-642	-1	12	9	888	698	0	15	0	445	-414	-2	0	10	457	484
0	0	0	219	-242	0	12	9	884	782	2	15	0	349	-380	-1	0	10	1588	-1884
2	0	0	1151	1140	1	12	9	851	-917	4	15	0	211	185	0	0	10	1243	1347
3	0	0	988	-884	2	12	9	452	548	-4	18	0	113	-783	2	0	10	390	381
4	0	0	435	-603	3	12	9	454	-427	-4	18	0	828	810	3	0	10	1837	-1557
4	0	0	481	483	4	12	9	461	-958	-3	18	0	804	808	4	0	10	785	-834
-8	10	0	805	540	5	12	9	1847	1827	-2	18	0	373	-374	5	0	10	852	848
-7	10	0	385	-387	8	12	9	1023	-1054	0	18	0	958	-945	7	0	10	308	282
-8	10	0	1280	1243	7	12	9	887	888	1	18	0	204	-174	-4	1	10	281	-316
-4	10	0	1147	-1112	-7	13	9	1284	1271	2	18	0	482	472	-7	1	10	1081	1054
-1	10	0	330	-374	-8	14	9	758	-710	3	18	0	282	277	-8	1	10	895	-882
0	10	0	2444	2448	-5	13	9	377	-385	4	18	0	122	334	-4	1	10	428	440
1	10	0	1980	-2024	-3	13	9	871	-814	5	18	0	480	-558	-4	1	10	938	-977
2	10	0	1204	1280	-2	13	9	1409	1387	-4	17	0	309	291	-3	1	10	555	588
3	10	0	1198	-1238	-1	13	9	408	-387	-2	17	0	483	-578	-2	1	10	897	703
4	10	0	692	-680	0	13	9	880	848	-1	17	0	804	751	-1	1	10	248	-330
4	10	0	1851	1874	1	13	9	701	-728	0	17	0	818	-787	2	1	10	1482	-1820
8	10	0	587	-575	2	13	9	984	-954	1	17	0	378	374	3	1	10	1184	1107
8	10	0	357	387	3	13	9	409	408	-4	18	0	849	-818	4	1	10	448	-448
-7	11	0	207	490	4	13	9	488	450	-3	18	0	1384	1318	5	1	10	1148	1210
-8	11	0	318	-338	8	13	9	448	407	-2	18	0	748	-724	6	1	10	850	-838
-5	11	0	348	-353	7	13	9	1071	-1081	-1	18	0	189	173	-8	2	10	410	-441
-3	11	0	399	380	-7	14	9	323	-349	0	18	0	901	-914	-8	2	10	848	-841
-1	11	0	578	593	-4	14	9	483	479	2	18	0	521	508	-7	2	10	1318	1320
0	11	0	581	-552	-4	14	9	1029	-1038	-2	19	0	301	-332	-8	2	10	1148	-1151
1	11	0	843	823	-4	14	9	948	912	-1	19	0	182	-340	-4	2	10	1074	1042
2	11	0	1004	-1033	0	14	9	371	-317	0	19	0	482	437	-4	2	10	383	-354

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUM CO ADOPCT NO.2 JAN 84

PAGE 1A

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
3	4	10	887	888	-4	7	10	1395	-1342	-7	10	10	133	377	-4	13	10	388	-383	-4	14	10	424	-411
4	4	10	828	806	-3	7	10	1252	1231	-5	10	10	588	-576	-4	13	10	437	405	-4	17	10	605	-558
4	4	10	1370	-1343	-2	7	10	455	-425	-4	10	10	850	812	-4	13	10	478	-427	-3	17	10	343	-382
6	4	10	595	604	-1	7	10	557	-535	-3	10	10	976	-887	-3	13	10	878	877	-2	17	10	448	-451
7	4	10	629	-584	0	7	10	788	818	-2	10	10	581	527	-1	13	10	147	-193	-1	17	10	783	781
-5	4	10	278	288	1	7	10	248	285	-1	10	10	454	-458	0	13	10	542	580	0	17	10	530	-502
-6	4	10	681	674	2	7	10	438	-987	1	10	10	247	273	1	13	10	718	-310	2	17	10	814	-845
-6	4	10	766	-769	3	7	10	1485	1407	2	10	10	880	-883	2	13	10	628	-568	3	17	10	881	870
-4	4	10	168	178	4	7	10	1395	-1378	3	10	10	714	747	3	13	10	784	788	-3	14	10	775	777
-3	4	10	886	-872	5	7	10	1052	988	5	10	10	404	-480	4	13	10	408	-654	0	18	10	520	-507
-2	4	10	1561	1527	6	7	10	934	-947	6	10	10	281	278	5	13	10	438	711	2	18	10	640	604
-1	4	10	988	420	7	7	10	241	225	7	10	10	304	-328	6	13	10	758	-341	-2	11	11	214	-221
1	4	10	540	-449	-8	7	10	200	218	-8	11	10	587	-882	-8	14	10	1075	1070	-7	11	11	771	-778
2	4	10	802	-808	-12	8	10	898	-884	-7	11	10	1227	-1187	-4	14	10	784	-773	-6	11	11	353	-340
3	4	10	417	406	-12	8	10	727	-753	-6	11	10	530	570	-2	14	10	888	-847	-6	11	11	1480	1438
4	4	10	483	450	-13	8	10	1114	1058	-5	11	10	448	444	0	14	10	784	788	-5	11	11	214	-180
4	4	10	488	-458	-11	8	10	444	432	-4	11	10	384	-488	-3	14	10	287	-324	-5	11	11	431	-433
4	4	10	1370	1344	0	8	10	1788	-1785	-3	11	10	512	427	4	14	10	1040	-1052	0	11	11	607	-793
5	4	10	1858	-1588	1	8	10	384	378	-2	11	10	448	-510	5	14	10	778	738	2	11	11	1440	1544
5	4	10	327	311	3	8	10	738	758	0	11	10	233	-239	-4	14	10	387	-378	3	11	11	872	-915
6	4	10	881	814	4	8	10	1138	1118	1	11	10	231	-281	-3	14	10	281	-281	4	11	11	708	808
-6	4	10	222	-788	5	8	10	1083	-1114	2	11	10	830	848	-2	15	10	1244	1178	5	11	11	1320	-1258
-6	4	10	1180	-1227	7	8	10	380	-347	3	11	10	421	428	-1	15	10	818	-824	6	11	11	504	-583
-3	4	10	384	327	-8	8	10	410	421	4	11	10	980	-938	0	15	10	1248	1278	7	11	11	844	778
-2	4	10	684	685	-8	8	10	147	-881	5	11	10	383	-283	1	15	10	888	-1084	-8	2	11	953	-918
0	4	10	1105	1081	-9	8	10	658	881	7	11	10	978	358	2	15	10	408	-402	-8	2	11	408	424
0	4	10	1203	-1243	-14	8	10	245	-248	-6	12	10	335	354	3	15	10	281	311	-8	2	11	748	-788
1	4	10	418	-441	-13	8	10	595	534	-5	12	10	505	504	4	15	10	792	285	-8	2	11	543	448
2	4	10	1042	1007	-12	8	10	332	-338	-4	12	10	884	-887	5	15	10	785	271	-4	2	11	1128	1107
4	4	10	1785	1771	-11	8	10	1788	-1758	-2	12	10	280	-287	-5	18	10	375	-344	-4	2	11	718	-783
6	4	10	1088	-1073	0	8	10	1808	1842	-1	12	10	338	-341	-4	18	10	858	788	-3	2	11	487	-548
6	4	10	715	-727	1	8	10	1048	-1142	0	12	10	812	808	-3	18	10	738	-703	-2	2	11	378	-387
6	4	10	828	-837	2	8	10	1305	1338	-1	12	10	224	181	-1	18	10	743	-223	-1	2	11	518	-488
7	4	10	375	-360	3	8	10	304	-279	3	12	10	888	-884	0	18	10	638	574	0	2	11	885	878
7	4	10	887	-881	4	8	10	447	-444	4	12	10	887	-889	1	18	10	371	-370	1	2	11	481	428
8	4	10	1021	870	5	8	10	325	-358	5	12	10	517	558	3	18	10	382	348	3	2	11	511	-453

PAGE 10

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

	M	K	L	10F0	10FC	M	K	L	10F0	10FC	M	K	L	10F0	10FC	M	K	L	10F0	10FC	M	K	L	10F0	10FC	M	K	L	10F0	10FC	
4	2	11	857	-823	-7	5	11	533	559	0	7	11	1149	-1154	2	10	11	572	-568	-5	14	11	848	813							
4	2	11	861	882	-6	4	11	827	778	1	7	11	928	935	3	10	11	471	455	-4	14	11	488	-485							
4	2	11	291	257	-5	5	11	1823	-1854	2	7	11	2200	-2230	4	10	11	948	933	-3	14	11	254	-252							
4	2	11	262	241	-4	5	11	803	759	4	7	11	970	941	5	10	11	1004	-947	-1	14	11	275	243							
4	2	11	407	-411	-3	5	11	1777	-1894	5	7	11	230	-242	6	10	11	347	344	3	14	11	958	-954							
4	3	11	490	-526	-2	4	11	1454	1380	6	7	11	1205	1194	-7	11	11	738	-749	-5	15	11	558	503							
4	3	11	592	586	-1	4	11	671	580	7	7	11	540	-529	-8	11	11	381	332	-4	15	11	445	-444							
4	3	11	621	-606	1	5	11	244	-274	-4	8	11	570	520	-4	11	11	584	571	-3	15	11	741	784							
4	3	11	589	552	2	5	11	209	-323	-7	8	11	544	-543	-3	11	11	308	-288	-1	15	11	740	-873							
4	3	11	1131	-1093	3	4	11	1238	-1221	-3	8	11	282	259	-1	11	11	673	-661	0	15	11	292	298							
-3	3	11	1028	954	4	4	11	1611	1546	-2	8	11	407	382	0	11	11	818	878	1	15	11	480	-499							
-2	3	11	887	-439	5	4	11	438	-428	-1	4	11	832	853	1	11	11	814	-794	2	15	11	647	600							
-1	3	11	735	820	6	5	11	1122	1044	0	4	11	1003	-944	2	11	11	1088	1047	3	15	11	218	221							
0	3	11	528	-583	7	5	11	582	-543	2	4	11	243	234	3	11	11	544	-577	4	15	11	382	-393							
1	3	11	473	837	-7	6	11	327	314	4	4	11	163	449	4	11	11	358	339	-3	14	11	981	-922							
2	3	11	281	-285	-6	6	11	822	-823	5	4	11	802	-544	5	11	11	484	-482	-1	14	11	541	-540							
3	3	11	982	918	-5	6	11	805	546	-8	5	11	417	-423	-6	12	11	312	-298	0	14	11	807	884							
4	3	11	1780	-1881	-4	6	11	461	396	-7	5	11	974	985	-4	12	11	527	513	1	16	11	357	402							
4	3	11	1168	1145	-3	6	11	1303	-1273	-5	5	11	763	281	-3	12	11	423	-484	2	16	11	427	-384							
4	3	11	758	-748	-2	6	11	891	880	-4	4	11	887	-907	-2	12	11	604	578	-2	17	11	500	563							
-6	4	11	358	-368	-1	6	11	867	-861	-3	4	11	211	172	1	12	11	484	500	-1	17	11	854	-848							
-5	4	11	1122	-1113	0	6	11	738	750	-1	4	11	288	292	2	12	11	1042	-1057	0	17	11	912	945							
-7	4	11	1224	1239	1	6	11	852	871	0	4	11	288	-318	3	12	11	544	446	1	17	11	817	-722							
-8	4	11	894	-888	2	6	11	1104	-1192	1	4	11	524	528	4	12	11	391	393	-1	18	11	820	-568							
-9	4	11	1234	1163	3	6	11	412	404	2	4	11	793	-816	5	12	11	328	-350	0	18	11	758	748							
-3	4	11	1471	-1425	4	6	11	809	-804	3	4	11	440	458	6	12	11	292	299	-7	0	12	202	232							
-2	4	11	577	564	5	6	11	184	150	4	4	11	480	-412	-8	13	11	223	-239	-4	0	12	938	-904							
-1	4	11	1158	-1147	6	6	11	881	998	-7	10	11	508	543	-5	13	11	379	332	-3	0	12	178	207							
0	4	11	990	1324	-8	7	11	589	-555	-8	10	11	734	-687	-3	13	11	832	798	-4	0	12	684	569							
1	4	11	972	1036	-7	7	11	1005	944	-5	10	11	338	-338	-2	13	11	1146	-1072	-1	0	12	808	828							
2	4	11	1332	-1357	-6	7	11	334	341	-4	10	11	451	462	-1	13	11	341	314	0	0	12	1478	-1453							
3	4	11	518	510	-5	7	11	967	-820	-3	10	11	244	273	0	19	11	958	-758	1	0	12	545	502							
4	4	11	1038	-1040	-4	7	11	745	738	-2	10	11	408	404	1	13	11	447	454	2	0	12	784	-867							
5	4	11	1077	1094	-3	7	11	1647	-1612	-1	10	11	274	285	2	13	11	150	186	3	0	12	1813	1474							
6	4	11	449	-532	-2	7	11	808	499	0	10	11	561	-565	3	13	11	837	847	4	0	12	818	750							
7	4	11	1094	1002	-1	7	11	2098	2034	1	10	11	388	405	4	13	11	638	-677	5	0	12									

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

BUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 20

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
8	0	12	1146	-1081	-3	3	12	920	895	-5	8	12	732	745	4	8	12	598	582	-3	14	12	375	388
7	0	12	295	-310	-2	3	12	477	-555	-3	8	12	743	-788	4	8	12	230	-285	-1	14	12	313	310
-7	1	12	470	-481	-1	3	12	493	-738	-1	8	12	1171	-1117	4	8	12	485	830	0	14	12	620	-649
-8	1	12	238	294	0	3	12	438	-554	0	8	12	1311	1588	-7	10	12	472	-474	2	14	12	430	-445
-8	1	12	865	-537	1	3	12	284	289	1	8	12	382	396	-6	10	12	484	483	3	14	12	383	358
-6	1	12	1283	1225	2	3	12	784	810	3	8	12	223	-222	-1	10	12	290	240	-4	15	12	750	738
-3	1	12	884	-884	4	3	12	284	-274	4	8	12	1041	-1033	1	10	12	287	-248	-3	15	12	488	457
-2	1	12	542	553	5	3	12	211	-206	5	8	12	341	337	2	10	12	412	570	-2	14	12	654	-848
-1	1	12	574	-810	6	3	12	983	-980	-6	7	12	821	-782	3	10	12	616	-604	-1	15	12	416	390
1	1	12	218	-280	7	3	12	827	814	-6	7	12	811	-788	4	10	12	578	538	0	14	12	1071	-990
2	1	12	811	788	-7	4	12	425	-432	-6	7	12	1181	-1125	6	10	12	394	324	1	14	12	644	797
3	1	12	313	295	-8	4	12	831	811	-3	7	12	1301	-1248	-8	11	12	298	243	3	15	12	388	413
4	1	12	432	344	-8	4	12	337	-344	-7	7	12	887	877	-8	11	12	201	-328	-1	14	12	204	287
5	1	12	1167	-1125	-2	4	12	1180	-1187	3	7	12	285	-284	-3	11	12	517	-421	-6	1	13	421	-487
6	1	12	172	189	-1	4	12	888	884	4	7	12	898	795	-1	11	12	883	888	-4	1	13	881	-878
-6	2	12	520	593	2	4	12	743	715	5	7	12	898	-870	0	11	12	323	-330	-2	1	13	584	-685
-7	2	12	853	-867	3	4	12	884	-870	6	7	12	419	580	1	11	12	578	587	-1	1	13	428	447
-8	2	12	851	858	4	4	12	240	-204	-8	8	12	278	238	3	11	12	1148	-1144	0	1	13	881	447
-5	2	12	761	-823	5	4	12	377	382	-5	8	12	810	788	6	11	12	877	877	2	1	13	795	-217
-4	2	12	148	-195	7	4	12	385	384	-2	8	12	430	-487	-6	12	12	408	-388	3	1	13	488	-688
-3	2	12	801	850	-8	5	12	218	245	-1	8	12	178	-247	-5	12	12	304	-277	4	1	13	716	-882
-2	2	12	779	-743	-8	5	12	888	-881	0	8	12	428	503	-3	12	12	115	302	5	1	13	588	501
-1	2	12	1506	1578	-8	5	12	787	784	1	8	12	635	678	-2	12	12	424	441	6	1	13	450	488
0	2	12	477	-485	-8	5	12	782	-784	2	8	12	311	-342	-2	12	12	201	-180	-5	2	13	217	-281
1	2	12	883	-963	-8	5	12	1384	1335	3	8	12	401	375	-1	12	12	111	-320	-4	2	13	315	-511
2	2	12	886	938	-1	5	12	168	-353	4	8	12	1242	-1198	1	12	12	327	-384	-3	2	13	402	424
3	2	12	752	-748	-1	5	12	397	-388	5	8	12	115	528	2	12	12	257	-211	-2	2	13	852	851
4	2	12	202	239	0	5	12	220	-240	-7	8	12	1320	1328	4	12	12	749	788	-1	2	13	378	-382
5	2	12	816	588	2	5	12	1288	1255	-5	9	12	488	-481	-5	13	12	498	-484	0	2	13	440	524
6	2	12	734	-801	3	5	12	254	-253	-4	9	12	888	-881	-4	13	12	884	847	1	2	13	1337	-1380
7	2	12	602	598	4	5	12	518	-513	-3	9	12	925	-921	-3	13	12	884	-884	2	2	13	573	584
-8	3	12	220	-184	5	5	12	388	381	-2	9	12	240	-255	1	13	12	291	291	3	2	13	403	-488
-7	3	12	285	-307	6	5	12	1251	-1252	-1	9	12	1247	1248	2	13	12	314	334	4	2	13	715	768
-6	3	12	870	-717	7	5	12	888	887	0	9	12	1308	-1283	3	13	12	789	-701	5	2	13	436	466
-5	3	12	528	589	-8	6	12	1054	-1045	1	9	12	1471	1471	4	13	12	828	838	6	2	13	458	-488
-4	3	12	628	591	-7	6	12	493	483	2	9	12	1328	-1340	-4	14	12	274	-250	-7	3	13	478	-445

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 21

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-6	1	13	561	563	1	8	13	873	-848	4	10	13	1022	-1018	-6	1	14	250	254	-6	1	14	301	318
-5	1	13	380	-394	2	8	13	898	863	5	10	13	284	278	-5	1	14	243	276	-4	1	14	285	281
-4	1	13	923	984	3	8	13	950	-869	-4	11	13	288	-249	-4	1	14	782	-708	-3	1	14	794	-740
-3	1	13	684	-741	4	8	13	788	707	-2	11	13	313	-302	-3	1	14	367	320	-3	1	14	348	419
-2	1	13	440	450	-7	7	13	1063	-1045	-1	11	13	537	508	-2	1	14	511	-533	2	1	14	758	-784
-1	1	13	108	-779	-8	7	13	203	-255	0	11	13	454	-454	-1	1	14	784	787	4	1	14	375	-344
0	1	13	935	910	-5	7	13	521	566	1	11	13	528	581	0	1	14	244	-252	5	1	14	231	219
1	1	13	392	455	-4	7	13	537	-552	2	11	13	711	-724	2	1	14	301	295	-4	1	14	594	-609
2	1	13	629	-612	-3	7	13	1421	1310	3	11	13	249	245	3	1	14	428	-415	-3	1	14	411	382
3	1	13	881	884	-1	7	13	1044	-1008	-5	12	13	497	-458	4	1	14	193	203	-1	1	14	1302	1217
4	1	13	341	-381	0	7	13	490	449	-4	12	13	583	584	-4	2	14	424	-418	0	1	14	777	-837
5	1	13	435	437	1	7	13	931	-981	-2	12	13	101	-298	-4	2	14	334	395	2	1	14	881	-718
6	1	13	770	-728	2	7	13	1293	1788	0	12	13	235	222	-4	2	14	252	264	3	1	14	488	470
7	1	13	500	-491	3	7	13	404	359	1	12	13	295	-323	-3	2	14	278	-265	4	1	14	439	444
8	1	13	1103	1041	4	7	13	523	-541	2	12	13	689	648	-2	2	14	789	771	5	1	14	288	187
9	1	13	787	-728	5	7	13	472	438	3	12	13	508	-601	-1	2	14	1305	-1311	-5	1	14	833	833
10	1	13	2001	1890	-1	8	13	727	-731	-3	13	13	608	-609	0	2	14	377	342	-4	7	14	1013	-940
11	1	13	880	-1295	0	8	13	541	582	0	13	13	509	492	3	2	14	537	588	-3	7	14	858	868
12	1	13	435	-434	2	8	13	395	294	1	13	13	1060	-1010	5	2	14	833	-888	-7	7	14	302	-298
13	1	13	884	779	4	8	13	873	-882	-3	14	13	422	485	-4	3	14	854	885	1	7	14	627	-608
14	1	13	622	642	5	8	13	388	368	-1	14	13	401	383	-5	3	14	308	-268	2	7	14	490	532
15	1	13	1112	-1053	-5	9	13	371	-405	-1	14	13	423	-433	-3	3	14	572	-628	-5	8	14	602	-577
16	1	13	831	-871	-4	9	13	888	855	-1	15	13	588	577	-2	3	14	483	-478	-4	8	14	388	-388
17	1	13	697	692	-2	9	13	600	574	0	15	13	335	-314	-1	3	14	747	745	-2	8	14	427	495
18	1	13	482	-485	-1	9	13	417	-792	-7	0	14	237	293	2	3	14	242	-261	0	8	14	428	502
19	1	13	1638	1546	0	9	13	381	350	-8	0	14	414	-675	1	3	14	628	-572	1	8	14	801	-833
20	1	13	728	-655	2	9	13	209	-184	-5	0	14	408	497	-4	4	14	413	-414	2	8	14	417	343
21	1	13	508	-689	3	9	13	518	561	-4	0	14	545	517	-5	4	14	318	283	3	8	14	578	-588
22	1	13	728	887	4	9	13	312	-235	-3	0	14	331	-314	-4	4	14	518	-461	4	8	14	819	835
23	1	13	864	878	-8	10	13	468	450	-1	0	14	450	485	-3	4	14	350	334	-4	8	14	300	-295
24	1	13	892	-738	-8	10	13	433	454	0	0	14	1107	-1120	-2	4	14	559	557	-3	8	14	1141	1103
25	1	13	486	535	-4	10	13	398	413	1	0	14	1728	1699	-1	4	14	682	-637	-1	0	14	784	-755
26	1	13	740	-785	-2	10	13	1027	-985	2	0	14	905	-882	0	4	14	234	264	0	0	14	325	358
27	1	13	583	524	0	10	13	785	-282	3	0	14	1364	1484	1	4	14	368	-356	1	0	14	1154	-1180
28	1	13	854	-595	1	10	13	487	482	4	0	14	1081	-1092	3	4	14	365	327	2	0	14	748	787
29	1	13	588	572	3	10	13	340	340	5	0	14	1049	-1105	4	4	14	280	255	3	0	14	514	485

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUS CO ADDUCT NO.2 JAN 84

PAGE 22

M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC
4	0	1A	399	-415	1	1	1A	210	-202	-3	4	1A	901	-800	1	7	1A	914	932	1	0	1A	1359	-1313
4	10	1A	591	-486	2	1	1A	462	-528	-2	4	1A	640	-404	2	7	1A	523	-535	2	0	1A	907	891
3	10	1A	499	527	3	1	1A	693	691	-1	4	1A	1320	-1287	3	7	1A	499	-453	-2	1	1A	416	-434
1	10	1A	309	304	4	1	1A	266	266	0	4	1A	941	701	-4	8	1A	424	-464	-1	1	1A	245	-339
2	10	1A	440	-419	-5	2	1A	242	301	2	4	1A	431	-477	-2	8	1A	284	280	2	1	1A	440	-482
3	10	1A	264	291	-6	2	1A	727	701	-5	4	1A	172	-184	-1	8	1A	324	308	-4	2	1A	280	-284
-1	11	1A	594	591	-3	2	1A	371	-341	-4	5	1A	405	-501	1	8	1A	249	-291	-2	2	1A	570	-568
-2	11	1A	324	333	0	2	1A	799	-814	-3	4	1A	929	-914	-1	8	1A	449	-821	-1	2	1A	697	872
-1	11	1A	408	-799	1	2	1A	1368	1334	-1	4	1A	522	-403	-3	8	1A	267	-245	-2	3	1A	819	844
0	11	1A	295	334	2	2	1A	894	-918	0	5	1A	220	-286	-1	8	1A	526	510	-1	3	1A	404	-415
1	11	1A	742	-741	3	2	1A	888	745	1	4	1A	640	675	2	8	1A	270	277	1	3	1A	353	-340
3	11	1A	1210	1142	4	2	1A	788	-747	2	4	1A	381	-380	-2	10	1A	747	719	0	4	1A	488	-478
-3	12	1A	419	-403	-1	3	1A	410	446	3	4	1A	437	-444	-1	10	1A	368	-309	1	4	1A	319	279
0	12	1A	447	-414	0	3	1A	457	-447	4	4	1A	290	284	0	10	1A	902	844	2	4	1A	217	-217
1	12	1A	736	753	1	3	1A	248	-204	-4	6	1A	720	640	1	10	1A	920	-845	-2	4	1A	365	345
0	13	1A	450	404	2	3	1A	372	362	0	6	1A	137	-148	-4	0	1A	811	-821	0	5	1A	328	-407
-4	1	1A	298	270	3	4	1A	723	-844	1	6	1A	534	511	-3	0	1A	232	275	2	5	1A	321	315
-2	1	1A	897	876	4	3	1A	762	888	2	6	1A	339	-332	-2	0	1A	365	-384	-1	6	1A	478	-435
-1	1	1A	449	-444	-5	4	1A	361	441	3	6	1A	413	431	-1	0	1A	782	282	0	7	1A	297	-380
0	1	1A	247	-237	-6	4	1A	602	601	-3	7	1A	1005	-926	0	0	1A	653	474					

Chapter 2. Positional ($\times 10^5$ for Os, all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Os, all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Os}_3(\mu\text{-H})(\text{H})(\text{CO})_{10}(\text{sp})$ (13)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Os(1)	29266(4)	47667(4)	71867(3)	330(2)	283(2)	351(2)	-92(2)	-98(2)	-29(2)
Os(2)	1920(4)	51222(4)	67604(3)	336(2)	365(3)	431(3)	-133(2)	-101(2)	-50(2)
Os(3)	17296(4)	71477(4)	58191(3)	442(3)	274(2)	360(2)	-86(2)	-113(2)	-26(2)
P	3690(2)	2716(2)	8306(2)	32(1)	31(1)	36(1)	-11(1)	-11(1)	-3(1)
O(11)	1637(9)	5764(8)	8911(6)	79(6)	65(6)	63(5)	-42(5)	-20(4)	9(4)
O(12)	5223(8)	6151(8)	6818(6)	68(5)	66(6)	96(6)	-12(5)	-28(5)	-37(5)
O(13)	4279(8)	3682(8)	5491(5)	66(5)	57(5)	51(5)	-25(4)	0(4)	2(4)
O(21)	-866(9)	2620(8)	7398(7)	75(6)	59(6)	109(7)	-20(5)	-19(5)	-30(5)
O(22)	-1910(9)	6751(9)	5536(7)	71(6)	81(7)	109(7)	-13(6)	-62(6)	-1(5)
O(23)	-1366(9)	5981(11)	8525(8)	71(6)	121(9)	101(7)	-73(7)	29(6)	-28(6)
O(31)	264(9)	8210(8)	7493(6)	89(6)	52(5)	65(5)	-33(5)	-11(5)	11(5)
O(32)	2885(8)	5992(8)	4155(6)	81(6)	60(5)	49(5)	-24(4)	-12(4)	3(4)
O(33)	-170(10)	9108(8)	4518(7)	118(8)	48(5)	103(7)	-13(5)	-79(6)	10(5)
O(34)	3949(9)	8703(9)	5310(6)	91(7)	73(6)	77(6)	-18(5)	-10(5)	-49(6)
C(1)	2912(11)	1197(10)	7216(7)	63(7)	49(7)	48(6)	-21(5)	-20(5)	-15(6)
C(2)	2409(18)	783(26)	6781(20)	94(13)	275(30)	316(31)	-258(27)	-76(18)	28(16)
C(11)	2085(10)	5402(11)	8257(8)	38(6)	49(7)	47(6)	-14(5)	-13(5)	-5(5)
C(12)	4379(12)	5580(10)	6941(8)	59(7)	29(6)	63(7)	-18(5)	1(6)	2(5)
C(13)	3753(10)	4108(11)	6099(8)	39(6)	53(7)	43(6)	-8(6)	-9(5)	-6(5)
C(21)	-468(11)	3565(12)	7177(8)	48(7)	62(8)	67(7)	-7(6)	-27(6)	-26(6)
C(22)	-1130(11)	6151(11)	6001(8)	46(6)	60(8)	67(7)	-25(6)	-24(6)	-8(6)
C(23)	-766(10)	5680(12)	7873(9)	27(6)	71(8)	73(8)	-31(7)	-11(6)	-14(6)
C(31)	818(10)	7753(10)	6901(8)	46(6)	34(6)	53(7)	-15(5)	-17(5)	3(5)
C(32)	2474(11)	6358(11)	4798(8)	53(7)	53(7)	43(6)	-13(6)	-12(5)	-11(5)
C(33)	537(13)	8385(11)	5017(9)	73(8)	37(7)	65(7)	-25(6)	-20(7)	-4(6)
C(34)	3153(13)	8108(10)	5480(8)	75(8)	29(6)	44(6)	-13(5)	0(6)	10(6)
C(41)	2411(5)	1829(5)	9193(4)	33(2)					
C(42)	2770(5)	486(5)	9644(4)	42(2)					
C(43)	1848(5)	-193(5)	10386(4)	50(3)					
C(44)	567(5)	471(5)	10677(4)	52(3)					
C(45)	207(5)	1815(5)	10226(4)	51(3)					
C(46)	1130(5)	2494(5)	9484(4)	45(2)					
C(51)	4611(6)	2917(6)	9085(4)	38(2)					
C(52)	5736(6)	3506(6)	8663(4)	51(3)					
C(53)	6405(6)	3725(6)	9243(4)	68(3)					
C(54)	5949(6)	3355(6)	10245(4)	72(3)					

C(55) - C(56) - C(51) 120.0(6)
 C(66) - C(61) - P 121.9(4)
 C(63) - C(62) - C(61) 120.0(7)
 C(65) - C(64) - C(63) 120.0(5)
 C(61) - C(66) - C(1) 121.8(7)
 C(65) - C(66) - C(61) 120.0(5)

C(62) - C(61) - P 118.1(6)
 C(66) - C(61) - C(62) 120.0(5)
 C(64) - C(63) - C(62) 120.0(5)
 C(66) - C(65) - C(64) 120.0(7)
 C(65) - C(66) - C(1) 118.2(8)

Chapter 2. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Os}_3(\mu\text{-H})(\text{H})(\text{CO})_{10}(\text{sp})$ (13)

	x	y	z	U(11)
H(42)	3763(5)	-29(5)	9419(4)	98(11)
H(43)	2126(5)	-1233(5)	10735(4)	98(11)
H(44)	-147(5)	-55(5)	11251(4)	98(11)
H(45)	-785(5)	2329(5)	10451(4)	98(11)
H(46)	852(5)	3534(5)	9135(4)	98(11)
H(52)	6090(6)	3793(6)	7888(4)	98(11)
H(53)	7276(6)	4182(6)	8917(4)	98(11)
H(54)	6467(6)	3525(6)	10694(4)	98(11)
H(55)	4470(6)	2479(6)	11442(4)	98(11)
H(56)	3284(6)	2090(6)	10413(4)	98(11)
H(62)	4877(5)	-494(5)	6543(4)	98(11)
H(63)	7277(5)	-1056(5)	6662(4)	98(11)
H(64)	8099(5)	1(5)	7497(4)	98(11)
H(65)	6521(5)	1621(5)	8214(4)	98(11)

Chapter 2. For $\text{Os}_3(\mu\text{-H})(\text{H})(\text{CO})_{10}(\text{sp})$ (13)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 1

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	0	0	1225	1224	-3	2	0	2421	2440	-6	4	0	1389	1378	-6	6	0	1147	984
2	0	0	129	-105	-2	2	0	990	946	-5	4	0	744	708	-5	6	0	392	-405
3	0	0	991	1027	-1	2	0	817	710	-4	4	0	1188	1073	-3	6	0	1813	1830
4	0	0	1034	1083	0	2	0	1217	1172	-3	4	0	1340	1388	-2	6	0	1517	1516
5	0	0	548	569	1	2	0	115	87	-2	4	0	645	-624	-1	6	0	609	618
6	0	0	1286	1342	2	2	0	195	-140	-1	4	0	237	244	0	6	0	998	980
7	0	0	1280	1300	3	2	0	3027	3053	0	4	0	2341	2345	1	6	0	434	432
8	0	0	360	-357	4	2	0	2457	2511	1	4	0	2306	2292	2	6	0	929	-925
9	0	0	586	-612	5	2	0	717	-713	2	4	0	162	149	3	6	0	734	721
10	0	0	504	511	6	2	0	380	-293	3	4	0	223	225	4	6	0	2444	2483
-10	1	0	284	-241	7	2	0	808	807	4	4	0	545	559	5	6	0	505	501
-9	1	0	362	365	8	2	0	131	115	5	4	0	385	-372	6	6	0	443	-458
-8	1	0	329	-339	9	2	0	137	144	6	4	0	582	608	7	6	0	200	200
-7	1	0	1773	-1845	10	2	0	575	587	7	4	0	1225	1215	8	6	0	107	-75
-6	1	0	1145	-1174	-6	3	0	579	-593	8	4	0	205	204	9	6	0	183	-201
-5	1	0	573	587	-7	3	0	424	-545	9	4	0	738	-747	-6	7	0	384	-345
-4	1	0	301	-325	-8	3	0	588	-584	-6	5	0	240	247	-5	7	0	241	271
-3	1	0	1183	-1217	-5	3	0	85	98	-7	5	0	1141	-1112	-4	7	0	535	-520
-2	1	0	1272	-1240	-4	3	0	1758	-1740	-6	5	0	1625	-1424	-3	7	0	2167	-2164
-1	1	0	1971	-1875	-3	3	0	2975	-2849	-6	5	0	482	-380	-2	7	0	942	-875
0	1	0	2406	-2751	-2	3	0	229	218	-4	5	0	218	247	-1	7	0	262	271
1	1	0	273	-227	-1	3	0	704	200	-3	5	0	677	-705	1	7	0	895	-882
2	1	0	1307	1392	0	3	0	1084	-1092	-2	5	0	983	-878	2	7	0	373	-379
3	1	0	1251	-1301	1	3	0	2145	-2125	-1	5	0	548	-579	3	7	0	951	-849
4	1	0	1785	-1782	2	3	0	1443	-1425	0	5	0	2292	-2243	4	7	0	1546	-1565
5	1	0	645	-652	3	3	0	2283	-2313	1	5	0	1334	-1331	5	7	0	335	332
6	1	0	318	-324	4	3	0	1548	-1601	2	5	0	1398	1414	6	7	0	930	932
7	1	0	572	-587	5	3	0	783	758	3	5	0	340	-330	7	7	0	471	-462
8	1	0	513	505	6	3	0	372	340	4	5	0	1584	-1604	8	7	0	508	-460
9	1	0	785	-781	7	3	0	1508	-1435	5	5	0	639	-671	-2	8	0	354	379
-9	2	0	388	372	8	3	0	689	-688	6	5	0	534	-533	-4	8	0	548	550
-8	2	0	345	349	9	3	0	262	278	7	5	0	933	-934	-3	8	0	1373	1371
-7	2	0	1351	1340	10	3	0	145	-117	8	5	0	177	175	-1	8	0	843	-886
-6	2	0	353	358	-4	4	0	131	112	9	5	0	654	644	0	8	0	790	784
-5	2	0	784	-730	-6	4	0	538	-523	10	5	0	233	-231	1	8	0	1316	1336
-4	2	0	1354	1348	-7	4	0	528	531	-7	5	0	1126	984	2	8	0	711	713

H	K	L	10FO	10FC
4	8	0	259	263
5	8	0	416	-424
6	8	0	472	-468
7	8	0	799	774
8	8	0	713	710
-3	9	0	505	-513
-2	9	0	177	-181
-1	9	0	146	135
0	9	0	1247	-1265
1	9	0	1305	-1347
2	9	0	228	232
3	9	0	513	518
4	9	0	387	-388
7	9	0	457	-440
-2	10	0	777	782
-1	10	0	284	281
0	10	0	648	647
1	10	0	577	510
2	10	0	712	-730
3	10	0	279	-280
4	10	0	783	787
5	10	0	535	539
-5	1	1	1148	-1141
-4	1	1	458	-443
-3	1	1	389	388
-2	1	1	321	-341
-1	1	1	661	-680
0	1	1	370	-379
1	1	1	825	-831
-7	-9	1	471	449
-6	-9	1	589	592
-5	-9	1	705	695
-3	-9	1	507	-508
-2	-9	1	850	889
-1	-9	1	1485	1480
2	-9	1	450	445

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSPIUM STAYVL CLUSTER JULY 03

PAGE 2

M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC				M K L 10FO 10FC							
3	-4	1	188 -150	1	-4	1	1030-1024	5	-4	1	1110-1078	3	-2	1	959 -988	0	0	1	1881-1811
3	-4	1	1208 -1174	2	-4	1	1340-1347	6	-4	1	578 -548	4	-2	1	931 881	1	0	1	1115 1004
3	-4	1	288 -289	3	-4	1	302 -278	7	-4	1	705 810	5	-2	1	1130 1148	2	0	1	238 181
3	-4	1	485 -487	4	-4	1	1295 1331	8	-4	1	738 770	6	-2	1	378 -389	3	0	1	514 -507
3	-4	1	444 -452	5	-4	1	814 -802	9	-4	1	274 -301	8	-2	1	115 81	4	0	1	275 282
3	-4	1	344 -389	6	-4	1	528 518	-9	-3	1	511 514	9	-2	1	483 -474	5	0	1	235 -25
3	-4	1	1382-1392	-8	-4	1	774 759	-8	-3	1	1578 1573	10	-2	1	408 413	6	0	1	1059-1085
3	-4	1	1380-1347	-7	-4	1	702 703	-7	-3	1	804 874	-10	-1	1	922 925	7	0	1	453 483
0	-4	1	373 371	-4	-4	1	1894 1808	-8	-3	1	800 -804	-9	-1	1	130 -120	8	0	1	1526 1582
1	-4	1	473 457	-4	-4	1	1074 1088	-5	-3	1	543 569	-8	-1	1	483 494	9	0	1	344 333
2	-4	1	918 -918	-3	-4	1	1278-1280	-4	-3	1	1002 1032	-7	-1	1	737 788	10	0	1	158 -195
3	-4	1	820 -824	-2	-4	1	281 314	-3	-3	1	1285 1281	-6	-1	1	884 899	-8	1	1	1423 1437
4	-4	1	287 -288	-1	-4	1	277 2975	-2	-3	1	178 1775	-5	-1	1	1489 1544	-7	1	1	1939 1983
5	-4	1	572 -577	0	-4	1	1253 1228	-1	-3	1	2547 2523	-4	-1	1	2222 2295	-6	1	1	181 -180
6	-4	1	982 974	1	-4	1	582 574	0	-3	1	374 -377	-3	-1	1	888-1018	-5	1	1	178 -178
7	-4	1	228 -244	2	-4	1	728 741	1	-3	1	2083-1882	-2	-1	1	1331-1395	-4	1	1	1142 1182
8	-4	1	414 -410	3	-4	1	228 -238	2	-3	1	1770 1750	-1	-1	1	1684 1670	-3	1	1	727 78
9	-4	1	1088 1087	4	-4	1	738 -700	3	-3	1	1482 1524	0	-1	1	1370 1371	-2	1	1	391 378
10	-4	1	1732 1708	5	-4	1	854 888	4	-3	1	378 -381	1	-1	1	1317 1316	-1	1	1	2548 2508
11	-4	1	672 671	6	-4	1	1184 1198	5	-3	1	311 -301	2	-1	1	1388 1404	0	1	1	1202 1088
12	-4	1	1118 1128	7	-4	1	420 -353	7	-3	1	988-1033	4	-1	1	1118-1191	1	1	1	2878-2856
13	-4	1	832 841	8	-4	1	874 -883	8	-3	1	230 -237	5	-1	1	217 -235	2	1	1	436 -418
14	-4	1	330 -367	9	-4	1	388 -383	9	-3	1	980 990	6	-1	1	1203 1236	3	1	1	1782 1880
1	-7	1	204 216	-10	-4	1	210 -210	-10	-2	1	612 -623	7	-1	1	203 201	4	1	1	135 124
2	-7	1	1727 1762	-8	-4	1	1263-1269	-9	-2	1	478 -453	8	-1	1	802 -852	5	1	1	218 -210
3	-7	1	1063 1004	-7	-4	1	1101-1123	-8	-2	1	1288-1334	9	-1	1	172 -184	6	1	1	197 -146
4	-7	1	471 -488	-6	-4	1	837 -840	-7	-2	1	301 -301	10	-1	1	321 -314	7	1	1	1847-1853
5	-7	1	211 187	-5	-4	1	834 -847	-6	-2	1	538 533	-9	0	1	283 278	8	1	1	1184-1157
6	-7	1	317 -289	-4	-4	1	478 -480	-5	-2	1	1355 1398	-8	0	1	771 -811	10	1	1	358 373
7	-7	1	518 -524	-3	-4	1	188 187	-4	-2	1	2422-2454	-7	0	1	1452-1491	-9	2	1	378 -387
8	-7	1	2058-2034	-2	-4	1	1882-1565	-3	-2	1	898 -700	-6	0	1	762 -800	-8	2	1	1288-1318
9	-7	1	1888-1878	-1	-4	1	3074-1114	-2	-2	1	311 -281	-5	0	1	848-1008	-7	2	1	888 -887
10	-7	1	858 852	0	-4	1	413 -418	-1	-2	1	301 -301	-4	0	1	1028-1088	-6	2	1	804 828
11	-7	1	294 -282	1	-4	1	438 442	0	-2	1	512 -478	-3	0	1	738 742	-5	2	1	158 -172
12	-7	1	678 -881	2	-4	1	585 -588	1	-2	1	770 759	-2	0	1	510 540	-4	2	1	1810-1868
13	-7	1	248 -249	3	-4	1	888 -863	2	-2	1	2430-2587	-1	0	1	3888-3888	-3	2	1	1942-1985

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSPIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 3

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-2	2	1	1128	-1075	-3	4	1	243	311	-1	8	1	411	-423	8	8	1	101	-92	-8	-8	2	238	248
0	2	1	403	391	-2	4	1	1741	1752	0	8	1	431	-431	7	8	1	870	-880	-4	-8	2	444	-434
1	2	1	1371	1360	-1	4	1	1139	-1191	1	8	1	150	1830	8	8	1	598	783	-3	-8	2	608	614
2	2	1	1058	-1060	0	4	1	839	-830	2	8	1	718	751	9	8	1	749	731	-2	-8	2	1260	1260
3	2	1	3273	-3343	1	4	1	414	429	3	8	1	901	-911	-2	8	1	828	-848	-1	-8	2	228	-251
4	2	1	581	585	2	4	1	898	918	4	8	1	258	-248	-1	8	1	258	228	0	-8	2	1211	-1213
5	2	1	1588	1620	3	4	1	348	360	5	8	1	1295	1280	0	8	1	1142	1184	2	-8	2	158	183
6	2	1	248	238	4	4	1	1228	1233	6	8	1	518	588	2	8	1	1084	-1110	3	-8	2	271	-272
7	2	1	420	417	5	4	1	928	952	7	8	1	782	818	3	8	1	921	-923	4	-8	2	273	280
8	2	1	480	494	6	4	1	903	-915	8	8	1	785	740	4	8	1	304	-308	-4	-7	2	198	-228
9	2	1	338	-338	7	4	1	287	-278	9	8	1	227	208	4	8	1	308	-328	-7	-7	2	478	458
10	2	1	104	103	8	4	1	1300	1328	10	8	1	318	-312	7	8	1	212	228	-8	-7	2	287	-288
-18	3	1	388	378	9	4	1	885	883	-18	7	1	247	-288	8	8	1	981	-970	-5	-7	2	888	-884
-17	3	1	715	718	10	4	1	192	202	-17	7	1	247	-288	-1	10	1	244	-234	-4	-7	2	325	-315
-16	3	1	413	-422	-18	5	1	509	513	-16	7	1	1240	1489	0	10	1	809	-831	-3	-7	2	511	-483
-15	3	1	1041	1034	-17	5	1	1400	1378	-15	7	1	827	880	1	10	1	858	857	-2	-7	2	288	-288
-14	3	1	2848	2709	-16	5	1	487	475	-14	7	1	828	-888	2	10	1	1182	1227	-1	-7	2	948	943
-13	3	1	834	843	-15	5	1	358	249	-13	7	1	628	-688	4	10	1	210	-218	0	-7	2	880	881
-12	3	1	1180	-1078	-14	5	1	288	291	-12	7	1	678	-688	5	10	1	432	428	1	-7	2	585	-578
-11	3	1	164	-180	-13	5	1	715	-732	-11	7	1	178	-184	6	10	1	934	930	2	-7	2	782	-788
0	3	1	830	855	-12	5	1	2223	2238	0	7	1	488	888	1	11	1	927	-938	3	-7	2	582	570
1	3	1	518	-511	-11	5	1	1378	1378	1	7	1	488	888	2	11	1	821	-853	4	-7	2	458	488
2	3	1	755	771	0	5	1	1224	-1251	2	7	1	208	-203	3	11	1	488	588	5	-7	2	388	381
3	3	1	1830	1848	1	5	1	1388	-1402	3	7	1	432	-432	4	11	1	248	238	6	-7	2	788	883
4	3	1	1827	-1838	2	5	1	218	-224	4	7	1	151	158	-4	10	2	438	-427	-8	-8	2	514	507
5	3	1	2072	-2058	3	5	1	583	588	-4	7	1	248	-258	-2	10	2	348	348	-7	-8	2	478	-478
6	3	1	448	450	4	5	1	487	-482	5	7	1	248	-258	0	10	2	358	384	-6	-8	2	717	728
7	3	1	488	482	5	5	1	1344	-1371	-4	8	1	971	-1122	-4	10	2	378	398	-5	-8	2	1438	1431
8	3	1	817	-842	6	5	1	823	-808	-3	8	1	184	-187	-1	10	2	888	-888	-4	-8	2	388	-408
9	3	1	428	-427	7	5	1	383	384	-2	8	1	1042	1078	-4	9	2	798	741	-3	-8	2	585	-588
10	3	1	344	-327	8	5	1	1058	-980	-1	8	1	827	815	-3	9	2	171	-184	-1	-8	2	587	-572
-18	4	1	141	-141	-17	6	1	178	134	0	8	1	827	815	-2	9	2	1167	-1188	0	-8	2	182	-158
-17	4	1	827	-883	-16	6	1	828	818	1	8	1	452	-451	-1	9	2	184	-187	1	-8	2	1028	1014
-16	4	1	828	-883	-15	6	1	370	-378	2	8	1	351	-351	0	9	2	141	122	2	-8	2	288	288
-15	4	1	837	-824	-14	6	1	1082	-1152	3	8	1	723	731	2	9	2	937	978	3	-8	2	1528	-1531
-14	4	1	1433	-1438	-13	6	1	228	-231	4	8	1	1182	1187	3	9	2	980	978	4	-8	2	1088	-1108

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

DEMIUM STYRYL CLUSTER

JULY 83

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	-8	2	455	428	-9	-3	2	1111	-1132	9	-2	2	280	-257	5	0	2	1021	1010	4	2	2	2742	-2825
8	-8	2	280	-271	-14	-3	2	818	-827	10	-2	2	1108	-1130	6	0	2	357	-366	5	2	2	1216	-1233
7	-8	2	405	-408	-7	-3	2	538	-547	-9	-1	2	175	-180	7	0	2	1827	-1839	6	2	2	1153	-1178
-9	-8	2	280	-275	-8	-3	2	304	290	-8	-1	2	307	-318	8	0	2	1188	-1218	7	2	2	1178	-1171
-8	-8	2	354	-358	-5	-3	2	268	-251	-7	-1	2	858	847	10	0	2	935	-913	10	2	2	745	-745
-8	-8	2	884	-884	-4	-3	2	272	-278	-8	-1	2	448	-478	-9	1	2	485	-508	-8	3	2	158	-178
-8	-8	2	1174	-1165	-3	-3	2	288	-291	-8	-1	2	1764	-1818	-8	1	2	1045	-1088	-7	3	2	778	788
-4	-8	2	977	1018	-2	-3	2	1261	-1257	-4	-1	2	580	886	-8	1	2	834	843	-6	3	2	851	854
-3	-8	2	1143	1135	-1	-3	2	1003	941	-3	-1	2	1751	1827	-8	1	2	381	377	-5	3	2	1213	-1256
-2	-8	2	1107	-1114	0	-3	2	3375	3328	-2	-1	2	518	530	-4	1	2	434	435	-4	3	2	567	-572
-1	-8	2	727	-727	1	-3	2	885	714	-1	-1	2	857	820	-3	1	2	917	937	-3	3	2	1326	1358
0	-8	2	438	438	2	-3	2	1468	-1472	0	-1	2	288	273	-2	1	2	303	-293	-2	3	2	1841	1807
2	-8	2	548	542	3	-3	2	377	401	-1	-1	2	498	480	-1	1	2	193	-184	-1	3	2	315	-223
3	-8	2	1885	1738	4	-3	2	818	840	2	-1	2	442	452	0	1	2	3085	3088	0	3	2	1848	888
4	-8	2	478	808	5	-3	2	530	512	3	-1	2	3001	3055	1	1	2	2856	2844	1	3	2	488	528
5	-8	2	825	-834	6	-3	2	1481	1451	4	-1	2	2558	2518	2	1	2	702	-878	2	3	2	922	-857
7	-8	2	981	1041	7	-3	2	1274	1238	5	-1	2	148	-137	3	1	2	415	371	3	3	2	1526	1512
8	-8	2	722	653	8	-3	2	131	-175	6	-1	2	218	-213	4	1	2	886	748	4	3	2	3318	3438
-9	-4	2	688	683	9	-3	2	187	-188	7	-1	2	1147	1172	5	1	2	1045	1063	5	3	2	1035	1063
-8	-4	2	836	854	-10	-2	2	189	172	8	-1	2	601	593	7	1	2	1807	1835	6	3	2	471	-458
-7	-4	2	288	258	-9	-2	2	715	729	9	-1	2	448	461	8	1	2	810	622	7	3	2	820	848
-6	-4	2	298	288	-8	-2	2	378	374	10	-1	2	1024	1025	9	1	2	381	-382	8	3	2	446	427
-5	-4	2	152	174	-7	-2	2	1105	-1111	-10	0	2	425	-425	10	1	2	308	320	9	3	2	281	291
-4	-4	2	870	-872	-6	-2	2	1542	1571	-8	0	2	848	880	-9	2	2	541	550	10	3	2	948	984
-3	-4	2	661	-656	-5	-2	2	285	311	-7	0	2	329	348	-8	2	2	805	810	-8	4	2	258	250
-2	-4	2	2258	2251	-4	-2	2	281	-293	-6	0	2	188	204	-7	2	2	864	-872	-7	4	2	125	122
-1	-4	2	378	381	-3	-2	2	429	-838	-5	0	2	884	871	-6	2	2	984	-1013	-6	4	2	174	-156
0	-4	2	2086	2111	-2	-2	2	2430	-2408	-4	0	2	1192	-1233	-5	2	2	431	434	-5	4	2	882	883
1	-4	2	810	-826	-1	-2	2	788	783	-3	0	2	1686	-1771	-4	2	2	686	702	-4	4	2	328	-288
2	-4	2	323	-300	0	-2	2	1784	1787	-2	0	2	430	375	-3	2	2	384	-403	-3	4	2	3108	-2840
3	-4	2	932	-930	1	-2	2	1852	-1888	-1	0	2	1441	1408	-2	2	2	393	-411	-2	4	2	734	-692
4	-4	2	258	250	4	-2	2	2028	-2054	0	0	2	1340	-1294	-1	2	2	288	-315	-1	4	2	730	881
5	-4	2	341	343	5	-2	2	408	-588	1	0	2	1524	-1472	0	2	2	3218	-3112	0	4	2	380	-432
6	-4	2	1081	-1100	6	-2	2	588	-817	2	0	2	1155	-1142	1	2	2	1157	-1072	1	4	2	1330	-1338
7	-4	2	1488	-1528	7	-2	2	840	-855	3	0	2	2382	-2324	2	2	2	1032	984	2	4	2	1483	-1475
8	-4	2	318	-331	8	-2	2	220	198	4	0	2	1288	-1243	3	2	2	248	-185	3	4	2	1472	-2001

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 5

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
4	4	2	2532	-2551	7	8	2	1243	-1323	3	9	2	447	444	-7	-7	3	997	-388	1	-5	3	590	-544
5	4	2	179	-157	8	8	2	781	-817	4	8	2	647	858	-5	-7	3	241	-244	2	-8	3	2043	-2042
6	4	2	1050	1063	9	8	2	502	534	5	9	2	235	232	-4	-7	3	190	-182	3	-5	3	1821	-1836
7	4	2	1354	-1373	-1	7	2	1155	1022	6	9	2	234	-234	-3	-7	3	181	170	4	-5	3	380	347
8	4	2	1372	-1387	-4	7	2	713	-831	7	9	2	567	827	-2	-7	3	1036	-1036	5	-5	3	237	228
9	4	2	310	-300	-3	7	2	334	364	8	9	2	1231	1203	-1	-7	3	1886	-1859	6	-5	3	898	-887
10	4	2	388	-379	-2	7	2	1111	1175	-3	10	2	385	-482	0	-7	3	442	-447	7	-4	3	530	-558
-1	5	2	625	-648	-1	7	2	887	702	-2	10	2	239	-287	1	-7	3	581	580	8	-5	3	271	-278
-7	5	2	357	-330	0	7	2	1132	1175	-1	10	2	430	444	2	-7	3	812	-584	-9	-4	3	310	-320
-6	5	2	515	487	1	7	2	1135	1172	0	10	2	570	-586	3	-7	3	781	-773	-8	-4	3	180	192
-5	5	2	351	346	2	7	2	717	-843	1	10	2	1543	-1565	4	-7	3	285	-273	-7	-4	3	325	328
-4	5	2	543	532	3	7	2	184	142	2	10	2	582	-587	5	-7	3	1021	-1020	-6	-4	3	228	243
-3	5	2	2207	1912	4	7	2	2027	2068	3	10	2	229	256	6	-7	3	841	-824	-5	-4	3	1330	1338
-2	5	2	353	-327	5	7	2	1350	1378	4	10	2	279	-275	-8	-8	3	909	909	-4	-4	3	1532	1544
-1	5	2	1141	-1187	6	7	2	177	166	5	10	2	321	-332	-7	-8	3	173	189	-3	-4	3	438	-409
0	5	2	1182	1208	7	7	2	528	512	7	10	2	658	-680	-6	-8	3	554	-544	-2	-4	3	589	-571
1	5	2	2282	2222	8	7	2	194	183	0	11	2	413	464	-5	-8	3	176	162	-1	-4	3	1723	1719
2	5	2	812	829	9	7	2	151	-128	1	11	2	1127	1130	-4	-8	3	925	918	0	-4	3	2122	2118
3	5	2	823	702	-1	8	2	538	479	3	11	2	504	-489	-3	-8	3	705	707	1	-4	3	1119	1084
4	5	2	828	825	-3	8	2	1264	-1388	4	11	2	600	622	-2	-8	3	1299	1316	2	-4	3	1826	1855
5	5	2	152	144	-2	8	2	1310	-1457	5	11	2	849	845	-1	-8	3	1432	1414	3	-4	3	593	558
7	5	2	1884	1896	-1	8	2	210	-204	-1	9	3	983	-922	0	-8	3	481	-482	4	-4	3	516	-527
8	5	2	1381	1367	1	8	2	737	-788	-4	-9	3	756	-743	1	-8	3	301	-287	5	-4	3	581	572
9	5	2	120	-124	2	8	2	200	-154	-3	-9	3	413	404	2	-8	3	1276	1295	6	-4	3	1228	1280
-1	6	2	185	-154	3	8	2	808	-811	-1	-9	3	494	-509	3	-8	3	1705	1722	7	-4	3	687	688
-6	6	2	1384	-1228	4	8	2	1830	-1860	1	-9	3	852	-874	4	-8	3	343	340	8	-4	3	354	-314
-5	6	2	574	-548	5	8	2	444	-858	2	-9	3	1010	-1046	5	-8	3	350	353	-9	-3	3	432	-438
-4	6	2	308	242	6	8	2	589	618	-8	-8	3	219	227	6	-8	3	471	468	-8	-3	3	586	-588
-3	6	2	420	-477	7	8	2	186	-158	-5	-8	3	638	615	7	-8	3	195	-191	-7	-3	3	1105	-1112
-2	6	2	345	-348	8	8	2	844	-884	-4	-8	3	270	280	8	-8	3	470	-463	-6	-3	3	408	-413
0	6	2	1788	-1878	-4	8	2	135	187	-3	-8	3	1008	-998	-8	-8	3	724	758	-5	-3	3	883	-884
1	6	2	2300	-2373	-1	9	2	1102	1247	-5	-9	3	136	153	-5	-9	3	875	-878	4	-3	3	1012	-1012
3	6	2	187	171	-2	9	2	822	749	-1	-9	3	1809	1808	-4	-9	3	1788	-1778	-3	-3	3	211	223
4	6	2	1420	-1424	-1	9	2	501	-513	0	-9	3	784	738	-3	-9	3	237	-230	-1	-3	3	3129	-3114
5	6	2	1034	-1058	1	9	2	1181	1199	1	-9	3	318	307	-2	-9	3	128	116	0	-3	3	2048	-2039
8	6	2	747	-812	2	9	2	1059	1059	2	-8	3	734	752	-1	-9	3	858	-889	1	-3	3	405	383

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 6

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
2	-3	3	859	-841	2	-1	3	2758	-2784	5	1	3	812	-537	5	3	3	578	584	4	5	3	154	137
3	-3	3	1082	-1085	3	-1	3	3688	-3764	6	1	3	2085	-2085	6	3	3	389	-383	5	4	3	897	1017
4	-3	3	248	-258	4	-1	3	488	-427	7	1	3	1088	-1098	7	3	3	158	-177	6	5	3	897	-700
5	-3	3	1188	-1218	5	-1	3	828	825	8	1	3	730	711	8	3	3	447	467	7	5	3	1537	-1571
6	-3	3	1819	-1884	6	-1	3	885	-742	9	1	3	437	448	9	3	3	545	-551	8	5	3	334	338
7	-3	3	681	619	7	-1	3	621	-613	10	1	3	517	-508	10	3	3	496	-587	9	5	3	607	600
8	-3	3	237	-239	8	-1	3	888	-881	11	1	3	421	-442	11	3	3	277	283	-7	6	3	1080	1043
9	-2	3	253	-253	9	-1	3	318	-240	12	1	3	680	727	12	3	3	381	358	-8	6	3	1193	1182
10	-2	3	1000	988	10	0	3	234	240	13	2	3	1492	1518	13	4	3	740	773	-5	6	3	350	312
11	-2	3	1174	1174	11	0	3	832	828	14	2	3	813	838	14	4	3	137	-122	-4	6	3	688	661
12	-2	3	383	-367	12	0	3	193	-201	15	2	3	122	125	15	4	3	2015	2008	-3	6	3	719	628
13	-2	3	914	937	13	0	3	858	807	16	2	3	984	987	16	4	3	1935	1918	-2	6	3	398	-358
14	-2	3	918	921	14	0	3	2883	2892	17	2	3	859	858	17	4	3	87	-75	-1	6	3	1163	1136
15	-2	3	1884	1875	15	0	3	739	773	18	2	3	287	311	18	4	3	189	-140	0	6	3	2737	2818
16	-2	3	1498	1484	16	0	3	518	-522	19	2	3	3490	3482	19	4	3	1354	1288	1	6	3	368	403
17	-2	3	1800	1884	17	0	3	778	788	20	2	3	2825	2874	20	4	3	818	782	2	6	3	1034	-1059
18	-2	3	2132	-2128	18	0	3	1884	1849	21	2	3	741	-758	21	4	3	1429	1448	3	6	3	381	347
19	-2	3	378	385	19	0	3	1143	1148	22	2	3	880	-834	22	4	3	2180	2170	4	6	3	432	438
20	-2	3	2786	2733	20	0	3	2171	2223	23	2	3	1324	1254	23	4	3	481	454	5	6	3	308	280
21	-2	3	1113	1112	21	0	3	2276	2226	24	2	3	1259	1196	24	4	3	1532	-1533	6	6	3	847	853
22	-2	3	488	467	22	0	3	1211	-1127	25	2	3	733	724	25	4	3	196	171	7	6	3	944	606
23	-2	3	1111	1018	23	0	3	1827	1852	26	2	3	1480	1478	26	4	3	1313	1332	8	6	3	580	-574
24	-2	3	258	-222	24	0	3	1287	1298	27	2	3	221	204	27	4	3	255	282	9	6	3	949	-945
25	-2	3	910	-900	25	0	3	219	213	28	2	3	982	-875	28	4	3	444	-435	10	6	3	421	444
26	-2	3	742	727	26	0	3	492	470	29	2	3	720	709	29	4	3	195	212	-6	7	3	638	-582
27	-1	3	178	-188	27	1	3	917	-949	30	3	3	932	-942	30	4	3	714	-724	-5	7	3	522	468
28	-1	3	988	-1044	28	1	3	867	-821	31	3	3	1843	-1578	31	4	3	503	-525	-3	7	3	1485	-1250
29	-1	3	840	-747	29	1	3	787	-784	32	3	3	333	345	32	4	3	611	-611	-2	7	3	618	-623
30	-1	3	1004	1018	30	1	3	1687	-1738	33	3	3	270	287	33	4	3	1873	-1853	-1	7	3	1073	-1128
31	-1	3	278	-291	31	1	3	648	830	34	3	3	1252	-1276	34	4	3	1058	-983	0	7	3	1464	-1562
32	-1	3	2459	-2518	32	1	3	2163	-2200	35	3	3	1827	-1974	35	4	3	1385	1235	1	7	3	375	382
33	-1	3	1588	-1833	33	0	3	3009	-2888	36	3	3	1093	-1108	36	4	3	528	-493	2	7	3	938	1012
34	-1	3	728	-724	34	1	3	874	-849	37	3	3	1514	-1459	37	4	3	2124	-2088	3	7	3	1063	-1081
35	-1	3	1873	-1517	35	1	3	1250	-1188	38	3	3	877	-874	38	4	3	1408	-1388	4	7	3	1488	-1501
36	-1	3	84	-85	36	1	3	1243	-1220	39	3	3	2514	-2484	39	4	3	537	-557	5	7	3	582	-589
37	-1	3	832	808	37	1	3	878	880	40	3	3	1388	-1298	40	4	3	632	-608	6	7	3	341	332

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 7

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	7	3	583	-770	0	11	3	829	-1054	1	-6	4	447	-431	7	-4	4	477	488	-9	-1	4	750	768
-15	8	3	528	-441	2	11	3	898	1012	2	-6	4	1808	-1800	8	-4	4	319	321	-8	-1	4	1085	1093
-14	8	1	985	831	4	11	3	444	-484	3	-6	4	311	-302	-9	-3	4	404	408	-7	-1	4	232	-229
-13	8	3	1549	1441	-3	-9	4	164	-167	5	-6	4	273	-270	-8	-3	4	922	923	-8	-1	4	254	-232
-12	8	1	495	509	-2	-9	4	489	495	6	-6	4	675	675	-7	-3	4	838	825	-5	-1	4	1418	1437
0	8	3	447	484	0	-9	4	345	374	-8	-6	4	374	368	-6	-3	4	748	759	-4	-1	4	1848	1847
1	8	1	151	-104	1	-9	4	956	984	-7	-5	4	360	-351	-5	-3	4	897	894	-3	-1	4	917	921
2	8	3	190	-209	2	-9	4	349	382	-6	-5	4	351	363	-3	-3	4	832	-810	-2	-1	4	1424	1432
3	8	1	1484	1510	-6	-9	4	794	-796	-5	-5	4	1716	1701	-2	-3	4	1514	1517	-1	-1	4	235	251
4	8	3	898	1029	-5	-4	4	749	-740	-4	-5	4	834	842	-1	-3	4	2082	2088	0	-1	4	580	-550
5	8	1	934	-983	-4	-4	4	281	217	-3	-5	4	339	339	0	-3	4	193	-186	1	-1	4	853	-859
6	8	3	481	-487	-3	-4	4	188	317	-2	-5	4	521	523	1	-3	4	288	-273	2	-1	4	2450	2454
7	8	1	238	227	-2	-4	4	1155	-1175	0	-5	4	280	-279	2	-3	4	191	187	3	-1	4	488	-470
-14	9	3	1194	-1135	-1	-4	4	910	-895	1	-5	4	1445	1445	4	-3	4	876	-904	4	-1	4	1703	-1723
-13	9	1	1140	-1251	0	-8	4	204	-204	2	-5	4	1889	1885	4	-3	4	138	153	5	-1	4	489	-387
-12	9	3	205	228	1	-8	4	773	-771	3	-5	4	242	-232	8	-3	4	1308	1352	7	-1	4	758	-730
-11	9	1	458	483	3	-8	4	488	484	4	-5	4	807	-835	7	-3	4	1087	-1076	8	-1	4	363	331
0	9	3	592	-642	4	-8	4	235	-211	5	-5	4	296	300	4	-3	4	853	-813	9	-1	4	275	-248
1	9	1	845	-910	-7	-7	4	287	275	6	-5	4	283	276	-9	-2	4	406	-815	10	-1	4	706	-675
2	9	3	310	-328	-6	-7	4	412	397	7	-5	4	342	-337	-8	-2	4	1385	-1381	-9	0	4	290	-290
3	9	1	849	-887	-5	-7	4	372	378	-9	-4	4	280	-242	-7	-2	4	390	-398	-6	0	4	714	-732
4	9	3	281	-281	-4	-7	4	340	-310	-8	-4	4	437	-433	-6	-2	4	285	289	-7	0	4	285	318
5	9	1	911	978	-3	-7	4	322	328	-7	-4	4	118	-103	-5	-2	4	818	-847	-6	0	4	108	-110
6	9	3	414	400	-2	-7	4	1782	1770	-6	-4	4	933	-889	-4	-2	4	973	-981	-5	0	4	2111	-2157
7	9	1	730	-739	-1	-7	4	1017	1010	-5	-4	4	2042	-2025	-3	-2	4	476	-488	-4	0	4	1248	-1285
8	9	3	114	-130	0	-7	4	882	-883	-4	-4	4	787	-794	-2	-2	4	1843	-1871	-3	0	4	1302	1307
-1	10	1	393	440	2	-7	4	805	597	-3	-4	4	785	753	-1	-2	4	1223	-1226	-2	0	4	108	113
-2	10	3	414	-449	4	-7	4	539	551	-2	-4	4	984	-950	0	-2	4	1159	1151	-1	0	4	810	-809
0	10	1	1061	1192	5	-7	4	878	888	-1	-4	4	437	-436	1	-2	4	1146	1181	0	0	4	573	-530
1	10	3	741	838	-8	-6	4	748	-757	0	-4	4	498	-478	2	-2	4	1588	-1582	1	0	4	551	-533
2	10	1	223	-205	-7	-6	4	241	278	1	-4	4	1185	-1148	3	-2	4	515	-518	2	0	4	881	-858
3	10	3	250	-270	-6	-6	4	753	-747	2	-4	4	881	-845	4	-2	4	128	134	3	0	4	779	787
5	10	1	272	-258	-4	-6	4	420	-417	3	-4	4	1343	1355	5	-2	4	510	-512	4	0	4	2504	2485
6	10	3	126	111	-3	-6	4	834	-851	4	-4	4	880	745	6	-2	4	853	868	5	0	4	289	254
7	10	1	899	874	-2	-6	4	1227	-1210	5	-4	4	989	-904	7	-2	4	1278	1180	6	0	4	1227	-1208
-1	11	3	272	-307	0	-6	4	1184	1161	6	-4	4	710	-735	8	-2	4	542	-473	7	0	4	342	279

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 93

PAGE 4

M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC	M	N	L	10FO	10FC
8	0	4	390	348	8	2	4	1438	1398	8	4	4	1398	1354	8	8	4	1707	1607	7	8	4	138	138
10	0	4	1048	1001	9	2	4	33	-346	7	4	4	870	872	8	8	4	312	278	8	8	4	822	-828
-9	1	4	107	-93	11	2	4	827	823	8	4	4	342	382	-6	7	4	335	-308	9	8	4	425	-434
-9	1	4	888	728	-4	3	4	1162	1180	10	4	4	728	737	-5	7	4	911	-482	-3	10	4	800	576
-7	1	4	840	888	-7	3	4	322	318	11	4	4	1171	1131	-4	7	4	422	405	-2	10	4	984	881
-8	1	4	495	511	-8	3	4	784	-788	-7	5	4	382	388	-1	7	4	1119	1028	-1	10	4	320	-340
-5	1	4	1420	1488	-5	3	4	408	425	-5	5	4	1169	1177	0	7	4	294	-285	0	10	4	868	-718
-4	1	4	309	318	-4	3	4	1080	1110	-4	5	4	1282	1283	1	7	4	2118	-2188	1	10	4	376	381
-3	1	4	1602	-1648	-3	3	4	510	520	-3	5	4	1131	-1088	2	7	4	548	-581	2	10	4	983	824
-2	1	4	85	-88	-2	3	4	208	221	-2	5	4	1221	-1130	3	7	4	893	858	3	10	4	421	455
-1	1	4	2587	2588	-1	3	4	1188	1154	-1	5	4	1041	958	4	7	4	183	-152	4	10	4	788	829
0	1	4	1388	1358	0	3	4	1885	-1803	0	5	4	917	438	5	7	4	454	-470	5	10	4	886	881
2	1	4	833	-528	1	3	4	1918	-1804	1	5	4	304	-272	6	7	4	452	-451	6	10	4	280	-275
3	1	4	1202	-1213	2	3	4	828	803	2	5	4	413	383	7	7	4	1077	-1053	7	10	4	1100	1097
4	1	4	1410	-1438	3	3	4	987	828	3	5	4	788	-783	8	7	4	1084	-1057	-1	11	4	550	400
5	1	4	788	788	4	3	4	1418	-1345	4	5	4	1630	-1628	10	7	4	358	357	0	11	4	319	388
8	1	4	1388	1287	5	3	4	1028	-984	5	5	4	873	-888	-4	8	4	1132	-1042	1	11	4	887	-1028
7	1	4	1383	-1145	6	3	4	708	-678	6	5	4	927	864	-3	8	4	835	-752	2	11	4	814	-888
8	1	4	1335	-1428	7	3	4	1588	-1614	7	5	4	448	-452	-2	8	4	350	287	4	11	4	218	-220
10	1	4	477	-447	8	3	4	488	-448	8	5	4	1352	-1338	0	8	4	583	588	5	11	4	248	-288
-9	2	4	128	-124	9	3	4	404	418	9	5	4	435	-448	1	8	4	1222	1278	-1	-8	5	278	254
-8	2	4	1301	-1314	10	3	4	181	-157	10	5	4	581	-538	2	8	4	248	-251	-4	-8	5	720	-788
-7	2	4	748	-784	11	3	4	981	-934	-7	5	4	811	-787	3	8	4	984	-1014	-3	-8	5	224	228
-6	2	4	700	-188	-8	4	4	888	-842	-5	6	4	241	-222	4	8	4	1040	1087	-2	-8	5	533	513
-5	2	4	400	-408	-7	4	4	148	158	-4	6	4	347	-330	5	8	4	1381	1383	0	-8	5	283	276
-4	2	4	188	-188	-6	4	4	822	827	-3	6	4	1298	1178	6	8	4	243	283	2	-8	5	948	-855
-3	2	4	541	550	-5	4	4	1188	-1154	-2	6	4	211	175	7	8	4	548	528	3	-8	5	458	-478
-2	2	4	1312	-1308	-4	4	4	1702	-1721	-1	6	4	1788	-1553	8	8	4	934	942	-6	-7	5	288	-271
-1	2	4	3338	-3343	-3	4	4	321	-328	0	6	4	447	-408	-4	8	4	1008	848	-5	-7	5	333	333
0	2	4	803	880	-2	4	4	378	388	1	6	4	1443	1477	-3	8	4	272	-251	-4	-7	5	380	361
1	2	4	882	880	-1	4	4	285	240	2	6	4	802	854	-2	8	4	1078	-1104	-3	-7	5	784	-888
2	2	4	803	-911	0	4	4	432	844	3	6	4	315	311	-1	8	4	301	-330	-2	-7	5	812	-810
3	2	4	332	-277	1	4	4	378	388	4	6	4	845	888	3	8	4	302	322	-1	-7	5	850	831
4	2	4	788	725	2	4	4	1818	-1708	5	6	4	187	131	4	8	4	1382	1416	0	-7	5	758	778
5	2	4	754	-881	3	4	4	858	-742	6	6	4	228	-200	5	8	4	1250	-1383	2	-7	5	703	728
7	2	4	2004	1853	4	4	4	2138	2138	7	6	4	988	970	8	8	4	345	328	3	-7	5	150	162

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 9

M	H	L	10FO	10FC	M	H	L	10FO	10FC	M	H	L	10FO	10FC	M	H	L	10FO	10FC
4	-7	5	582	-588	4	-4	5	174	-178	6	-2	5	2111	-2113	5	0	5	540	485
5	-7	5	385	384	5	-4	5	514	525	7	-2	5	1386	-1084	6	0	5	592	-908
-7	-8	5	222	-205	8	-4	5	851	-883	8	-2	5	277	244	7	0	5	752	-717
-6	-8	5	278	287	7	-4	5	752	-783	-9	-1	5	815	-815	8	0	5	1122	-945
-3	-8	5	724	722	8	-4	5	338	-338	-8	-1	5	155	179	10	0	5	1036	-889
-2	-8	5	387	375	8	-3	5	332	-284	-7	-1	5	980	989	-7	1	5	271	261
-1	-8	5	1344	-1329	-7	-3	5	178	-142	-6	-1	5	114	-103	-6	1	5	625	-618
0	-8	5	1013	-893	-8	-3	5	712	-711	-5	-1	5	434	-433	-5	1	5	939	-965
1	-8	5	750	770	-8	-3	5	209	213	-4	1	5	107	-103	-4	1	5	1865	1699
3	-8	5	502	-510	-6	-3	5	1498	1520	-3	1	5	224	212	-3	1	5	1475	1512
5	-8	5	750	-755	-2	-3	5	1478	-1481	-1	1	5	1699	1700	-2	1	5	372	-381
8	-8	5	1042	-1055	-1	-3	5	805	804	0	-1	5	1748	1747	-1	1	5	84	29
-8	-8	5	458	441	0	-3	5	586	621	1	-1	5	419	-787	0	1	5	951	873
-7	-8	5	428	424	1	-3	5	585	584	2	-1	5	433	-404	1	1	5	679	680
-6	-8	5	778	-772	2	-3	5	1313	1324	3	-1	5	1931	1965	2	1	5	1416	1429
-5	-8	5	575	-573	3	-3	5	1368	1388	4	-1	5	1497	1513	3	1	5	1878	1873
-4	-8	5	227	247	4	-3	5	883	-802	5	-1	5	1154	1143	4	1	5	823	826
-2	-8	5	480	471	5	-3	5	321	-402	6	-1	5	1921	1853	5	1	5	973	-1027
-1	-8	5	1129	1129	6	-3	5	1075	1098	7	-1	5	460	438	6	1	5	716	696
1	-8	5	1232	-1221	7	-3	5	1247	1247	8	-1	5	484	-459	7	1	5	2072	1927
2	-8	5	293	286	8	-3	5	229	202	9	-1	5	588	472	8	1	5	695	610
3	-8	5	1839	1867	9	-3	5	429	403	10	-1	5	1304	1085	9	1	5	763	825
4	-8	5	800	593	-8	-2	5	805	801	-9	0	5	279	267	10	1	5	700	645
5	-8	5	231	224	-7	-2	5	284	298	-8	0	5	279	-319	-9	2	5	511	504
6	-8	5	848	873	-7	-2	5	418	-441	-7	0	5	729	-722	-7	2	5	220	-221
7	-8	5	180	-147	-8	-2	5	88	-81	-6	0	5	863	905	-6	2	5	401	-380
-8	-8	5	234	-209	-8	-2	5	328	-328	-5	0	5	1017	1065	-5	2	5	228	-250
-6	-8	5	1128	1117	-4	-2	5	701	-834	-4	0	5	922	-956	-4	2	5	1324	-1361
-5	-8	5	573	599	-3	-2	5	607	570	-3	0	5	1276	-1301	-3	2	5	842	-859
-4	-8	5	1332	-1338	-2	-2	5	1270	1264	-2	0	5	477	-486	-2	2	5	1343	1357
-3	-8	5	274	-275	-1	-2	5	925	-937	-1	0	5	1025	-1022	-1	2	5	417	-411
-1	-8	5	319	-310	0	-2	5	2281	-2298	0	0	5	1181	-1181	0	2	5	2950	-2903
0	-8	5	140	138	1	-2	5	284	-308	1	0	5	873	-853	1	2	5	1201	-1162
1	-8	5	235	223	2	-2	5	288	-278	2	0	5	947	-942	2	2	5	1058	-1046
2	-8	5	1379	-1387	3	-2	5	808	-808	3	0	5	2545	-2594	3	2	5	1273	-1328
3	-8	5	2511	-2544	5	-	5	882	-887	4	0	5	2092	-2071	4	2	5	1787	-1658

7	2	5	2508	-2305
8	2	5	381	-318
9	2	5	243	220
10	2	5	580	-534
11	2	5	285	-242
-8	3	5	314	-324
-7	3	5	982	1032
-6	3	5	710	727
-4	3	5	370	367
-3	3	5	295	308
-2	3	5	400	-505
-1	3	5	1432	1438
0	3	5	3504	3510
1	3	5	415	414
2	3	5	1345	-1338
3	3	5	1385	1311
4	3	5	1298	1238
5	3	5	1187	1088
6	3	5	1811	1690
7	3	5	1431	1452
8	3	5	356	-329
9	3	5	389	-328
10	3	5	1074	1017
11	3	5	733	888
-7	4	5	970	-1011
-6	4	5	300	-280
-5	4	5	881	930
-4	4	5	145	-140
-3	4	5	982	-953
-2	4	5	904	-812
-1	4	5	1172	-1173
0	4	5	1876	-1782
1	4	5	284	268
2	4	5	1127	1042
3	4	5	1706	1652
4	4	5	2274	-2147

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	4	5	485	-440	7	6	5	1897	-1828	1	9	5	285	318	3	-7	5	484	485	3	-4	5	1077	1084
6	4	5	422	-724	8	6	5	438	-809	2	9	5	362	-377	-8	-5	5	374	362	4	-4	5	428	-435
7	4	5	500	-528	10	4	5	388	-340	3	9	5	1010	1081	-5	-5	5	910	489	5	-4	5	285	278
8	4	5	331	-329	-6	7	5	885	678	4	9	5	1840	1946	-4	-5	5	185	-154	6	-4	5	487	484
10	4	5	1302	-1215	-5	7	5	384	375	8	9	5	188	-226	-3	-5	5	328	-317	8	-4	5	631	638
11	4	5	78	-748	-4	7	5	583	503	7	9	5	280	269	-2	-5	5	1407	1400	-8	-3	5	347	-330
-7	5	5	647	629	-3	7	5	629	754	8	9	5	211	270	-1	-5	5	1541	1508	-5	-3	5	178	-180
-8	5	5	213	-179	-2	7	5	774	-746	-3	10	5	1289	-1157	0	-5	5	151	134	-5	-3	5	1733	-1702
-5	5	5	607	-608	0	7	5	2358	2057	-2	10	5	442	-430	1	-5	5	129	119	-4	-3	5	1185	-1181
-4	5	5	478	552	1	7	5	1455	1441	-1	10	5	425	432	2	-5	5	644	641	-3	-3	5	601	586
-3	5	5	1885	1885	2	7	5	222	-178	0	10	5	288	-261	4	-5	5	474	414	-2	-3	5	218	-204
-2	5	5	442	438	3	7	5	422	428	1	10	5	608	-861	5	-5	5	1440	1448	-1	-3	5	1188	-1187
-1	5	5	343	314	4	7	5	724	737	2	10	5	506	-523	6	-5	5	348	387	0	-3	5	704	-692
0	5	5	481	555	5	7	5	211	207	3	10	5	727	-750	-8	-5	5	245	258	1	-3	5	1083	-1079
1	5	5	585	586	6	7	5	1020	1000	4	10	5	929	-980	-5	-5	5	489	-484	2	-3	5	1849	-1858
2	5	5	640	548	7	7	5	1242	1238	5	10	5	225	245	-4	-5	5	287	-232	3	-3	5	154	-141
3	5	5	2777	2548	8	7	5	265	224	6	10	5	583	547	-3	-5	5	617	-638	4	-3	5	1031	1045
4	5	5	1827	1823	9	7	5	640	-607	7	10	5	704	-725	-2	-5	5	1216	-1194	5	-3	5	683	-694
5	5	5	502	-476	10	7	5	272	246	8	10	5	697	-684	-1	-5	5	1219	-1225	6	-3	5	1453	-1482
6	5	5	115	-148	-4	8	5	181	187	-1	11	5	411	-428	0	-5	5	483	480	7	-3	5	185	-181
7	5	5	1569	1505	-3	8	5	817	-730	0	11	5	708	753	1	-5	5	183	181	8	-3	5	150	-98
8	5	5	387	384	-2	8	5	707	-799	1	11	5	1157	1212	2	-5	5	1432	-1408	-8	-2	5	528	549
9	5	5	693	642	-1	8	5	797	-691	2	11	5	300	350	3	-5	5	1084	-1070	-7	-2	5	522	485
10	5	5	1066	1001	0	8	5	1888	-1812	3	11	5	238	261	4	-5	5	328	-339	-6	-2	5	668	682
-8	6	6	232	-236	1	9	6	815	-846	4	11	5	284	277	5	-5	5	838	-844	-5	-2	5	1211	1183
-4	6	6	1318	-1275	2	9	6	719	727	-2	-8	6	353	349	7	-5	5	364	382	-4	-2	5	629	670
-3	6	6	1938	-1779	3	9	6	818	-823	1	-8	6	1039	1048	-7	-4	5	219	-231	-3	-2	5	949	-949
-2	6	6	585	571	4	9	6	1897	-1737	2	-8	6	1085	1092	-6	-4	5	371	-375	-2	-2	5	913	908
-1	6	6	388	380	5	9	6	827	-718	-5	-7	6	686	-647	-5	-4	5	1219	1232	-1	-2	5	2758	2763
0	6	6	157	-1334	6	9	6	654	-681	-4	-7	6	197	-212	0	-4	5	1018	992	0	-2	5	979	991
1	6	6	1748	-1521	7	9	6	488	-478	-3	-7	6	588	609	-3	-4	5	488	505	1	-2	5	535	530
2	6	6	1248	-1211	8	9	6	380	343	-2	-7	6	459	-465	-2	-4	5	1052	1031	2	-2	5	768	788
3	6	6	1807	-1575	-3	9	6	1273	1111	-1	-7	6	608	-794	-1	-4	5	289	297	3	-2	5	382	-380
4	6	6	828	-838	-2	9	6	1034	908	0	-7	6	470	-470	0	-4	5	173	-174	4	-2	5	187	117
5	6	6	734	677	-1	9	6	421	420	1	-7	6	985	-948	1	-4	5	680	679	5	-2	5	1498	1538
6	6	6	211	-222	0	9	6	704	718	2	-7	6	833	-804	2	-4	5	2225	2206	6	-2	5	1811	1830

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYREYL CLUSTER JULY 83

PAGE 11

H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC				H K L 10FO 10FC												
7	-2	R	243	-244	8	0	6	1158	1087	-7	3	R	984	-988	-6	5	6	458	470	6	7	6	1052	-1071
8	-2	R	512	-504	-8	1	R	478	-483	-6	3	R	480	-485	-5	5	6	425	-435	7	7	6	917	-297
9	-2	R	400	393	-7	1	R	145	-135	-5	3	R	785	-801	-4	5	6	1724	-1734	8	7	6	845	891
-8	-1	R	1101	-1087	-6	1	R	813	832	-4	3	R	655	-647	-3	5	6	1260	-1254	9	7	6	632	581
-7	-1	R	684	-679	-5	1	R	1782	-1842	-2	3	R	358	-348	-1	5	6	804	-758	10	7	6	199	-207
-6	-1	R	434	-411	-4	1	R	2161	-2186	-1	3	R	3330	-3349	1	5	6	168	167	-4	6	6	459	397
-5	-1	R	557	-587	-3	1	R	373	-367	0	3	R	1590	-1607	2	5	6	1428	-1382	-3	6	6	263	232
-4	-1	R	1448	-1472	-2	1	R	378	-371	1	3	R	485	-510	3	5	6	2557	-2372	-1	6	6	1597	1468
-3	-1	R	2548	-2570	-1	1	R	850	-844	2	3	R	848	-834	4	5	6	457	418	0	6	6	1510	1320
0	-1	R	335	-349	0	1	R	403	-422	3	3	R	877	-868	5	5	6	1107	1049	1	6	6	1252	-1183
1	-1	R	838	828	1	1	R	1039	-1046	8	3	R	937	-968	6	5	6	368	-331	2	6	6	403	-386
2	-1	R	1023	-1027	2	1	R	2718	-2727	8	3	R	1090	-983	9	5	6	338	-316	3	6	6	880	829
3	-1	R	1084	-1072	3	1	R	1881	-1839	7	3	R	411	-417	-5	6	6	842	832	4	6	6	552	543
4	-1	R	381	-381	4	1	R	871	848	8	3	R	1534	1439	-4	6	6	1779	1801	5	6	6	356	343
5	-1	R	1504	-1533	5	1	R	428	424	9	3	R	358	-368	-3	6	6	217	211	6	6	6	372	375
6	-1	R	889	-871	6	1	R	1157	-1311	10	3	R	480	-459	-2	6	6	855	-822	7	6	6	160	-168
7	-1	R	947	914	7	1	R	523	-520	11	3	R	279	284	-1	6	6	849	868	8	6	6	1104	-1101
8	-1	R	305	328	8	1	R	204	-207	-7	4	6	786	792	0	6	6	1138	1093	-4	6	6	628	-602
9	-1	R	739	-782	9	1	R	736	-628	-5	4	6	110	116	1	6	6	896	893	-3	6	6	985	-864
10	-1	R	828	-488	10	1	R	393	355	-4	4	6	893	917	2	6	6	1209	1100	-2	6	6	348	-291
-8	0	R	1157	1173	-8	2	R	348	359	-3	4	R	787	782	3	6	6	1127	1052	-1	6	6	478	-428
-7	0	R	280	292	-7	2	R	408	434	-2	4	6	521	518	4	6	6	1123	1038	0	6	6	217	-230
-6	0	R	498	-521	-6	2	R	318	341	-1	4	6	1988	2002	5	6	6	1176	-1187	1	6	6	808	787
-5	0	R	790	811	-5	2	R	1415	1458	0	4	6	318	315	6	6	6	1264	1231	3	6	6	1455	-1497
-4	0	R	1311	1375	-4	2	R	1522	1558	1	4	6	1358	-1351	7	6	6	828	788	4	6	6	312	-326
-3	0	R	1641	1640	-3	2	R	864	-889	2	4	6	244	251	8	6	6	948	-970	5	6	6	682	701
-2	0	R	1578	1558	-1	2	R	1705	1724	3	4	6	2530	2557	9	6	6	280	-222	6	6	6	187	235
-1	0	R	1611	1615	0	2	R	1897	1900	4	4	6	424	378	10	6	6	171	-186	7	6	6	290	228
0	0	R	703	-659	1	2	R	617	637	5	4	6	252	215	-5	7	6	480	-488	8	6	6	532	516
1	0	R	861	-768	2	2	R	1183	1155	6	4	6	357	301	-4	7	6	520	-501	-2	10	6	226	-208
2	0	R	2341	2342	4	2	R	828	-720	7	4	6	768	-740	-4	7	6	842	-893	0	10	6	378	366
3	0	R	1848	1843	5	2	R	213	240	8	4	6	564	-545	-3	7	6	277	245	2	10	6	380	380
4	0	R	158	-133	6	2	R	1588	1585	9	4	6	828	848	-2	7	6	430	588	3	10	6	931	930
5	0	R	312	241	7	2	R	373	375	10	4	6	648	608	-1	7	6	1499	-1484	4	10	6	285	-294
6	0	R	921	329	8	2	R	853	-718	11	4	6	438	-413	4	7	6	1780	-1881	5	10	6	1149	-1189
7	0	R	528	-561	-8	3	R	584	-820	-7	5	6	397	-374	7	10	6	419	402	6	10	6	352	340

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 12

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
8	10	6	205	-216	-6	-4	7	511	-538	2	-2	7	278	296	4	0	7	845	854	9	2	7	692	598
0	11	6	822	-828	-5	-4	7	804	-898	3	-2	7	1111	1112	5	0	7	382	343	10	2	7	1131	1007
1	11	6	374	-401	-4	-4	7	490	-521	4	-2	7	190	-186	6	0	7	1213	1219	-7	3	7	347	379
4	11	6	341	358	-3	-4	7	613	-560	5	-2	7	1085	-1064	7	0	7	812	859	-6	3	7	199	197
5	11	6	717	744	-2	-4	7	481	-481	6	-2	7	247	268	8	0	7	944	-585	-5	3	7	476	466
6	11	6	284	-288	-1	-4	7	480	480	7	-2	7	1232	1244	10	0	7	1037	984	-4	3	7	624	-645
-4	-2	7	458	-479	0	-4	7	320	322	8	-2	7	512	516	-6	1	7	343	334	-3	3	7	922	-990
-3	-2	7	159	161	1	-4	7	1237	-1226	9	-2	7	337	317	-7	1	7	428	-535	-2	3	7	1440	1470
-2	-2	7	527	484	2	-4	7	1024	-1005	-8	-1	7	619	607	-6	1	7	501	530	-1	3	7	1621	1664
-1	-2	7	333	322	3	-4	7	473	476	-7	-1	7	235	235	-5	1	7	1473	1485	0	3	7	733	-717
0	-2	7	574	567	4	-4	7	365	355	-6	-1	7	312	298	-4	1	7	391	380	1	3	7	776	-765
1	-2	7	683	695	5	-4	7	613	633	-5	-1	7	433	422	-1	1	7	211	-205	2	3	7	411	-380
2	-2	7	485	-446	-7	-3	7	145	-131	-4	-1	7	332	-358	0	1	7	1059	-1049	3	3	7	1308	-1271
3	-2	7	738	-707	-6	-3	7	1073	1077	-3	-1	7	440	440	1	1	7	1312	1308	4	3	7	114	-53
-4	-4	7	531	528	-5	-3	7	1406	1374	-2	-1	7	2109	2109	2	1	7	1411	1414	5	3	7	982	1041
-3	-4	7	454	-448	-4	-3	7	280	-280	-1	-1	7	393	392	3	1	7	1307	-1308	6	3	7	480	-472
-2	-4	7	1251	-1242	-3	-3	7	252	-245	0	-1	7	1320	-1310	4	1	7	1617	-1640	7	3	7	2027	-1940
-1	-4	7	229	-235	-2	-3	7	530	541	1	-1	7	409	-371	6	1	7	252	-252	8	3	7	480	-786
0	-4	7	45	40	-1	-3	7	218	-224	2	-1	7	239	228	7	1	7	456	-530	10	3	7	486	-483
1	-4	7	310	-307	0	-3	7	579	583	3	-1	7	403	-420	9	1	7	290	-304	-6	4	7	266	267
2	-4	7	254	241	1	-3	7	1209	1208	4	-1	7	582	559	10	1	7	1533	-1339	-5	4	7	188	-191
3	-4	7	294	300	2	-3	7	248	244	5	-1	7	310	315	-8	2	7	314	-300	-4	4	7	217	-218
4	-4	7	988	-1011	3	-3	7	1388	-1340	6	-1	7	1018	-1042	-6	2	7	578	-601	-2	4	7	1583	-1513
5	-4	7	587	-605	4	-3	7	587	-579	7	-1	7	1514	-1486	-5	2	7	1480	-1502	-1	4	7	574	-580
-6	-4	7	393	407	5	-3	7	731	740	8	-1	7	242	276	-4	2	7	513	530	0	4	7	2033	2040
-5	-4	7	200	183	7	-3	7	447	-443	-8	0	7	685	-660	-3	2	7	1305	1341	1	4	7	887	887
-4	-4	7	144	139	1	-3	7	155	143	-7	0	7	617	634	-2	2	7	925	-905	2	4	7	679	-681
-3	-4	7	1023	997	-1	-2	7	444	-448	-5	0	7	703	-725	-1	2	7	773	-803	3	4	7	353	374
-2	-4	7	1414	1401	-7	-2	7	318	-328	-4	0	7	625	-659	1	2	7	673	-657	4	4	7	788	821
-1	-4	7	275	-273	-6	-2	7	452	-938	-3	0	7	658	-662	2	2	7	161	150	5	4	7	256	242
0	-4	7	840	-824	-5	-2	7	1034	-1052	-2	0	7	1097	-1086	3	2	7	1380	1412	6	4	7	1153	1045
1	-4	7	482	451	-4	-2	7	732	750	-1	0	7	238	237	4	2	7	1620	1559	7	4	7	1650	1484
2	-4	7	552	543	-3	-2	7	369	349	0	0	7	1998	1988	5	2	7	832	-860	8	4	7	455	430
3	-4	7	501	500	-2	-2	7	1431	-1434	1	0	7	308	-270	6	2	7	178	-174	9	4	7	429	-395
4	-4	7	1119	-1116	-1	-2	7	939	-957	2	0	7	1722	-1718	7	2	7	1204	1187	10	4	7	515	502
-7	-4	7	378	382	1	-2	7	585	-585	3	0	7	536	537	8	2	7	714	689	-7	5	7	382	-404

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 43

PAGE 13

	H	K	L	10FO 10FC		H	K	L	10FO 10FC		H	K	L	10FO 10FC		H	K	L	10FO 10FC		H	K	L	10FO 10FC	
115	5	7	178	-164		3	7	7	1140	-1031	5	10	7	636	667	5	-4	8	985	-1001	-1	-1	8	1471	1446
115	5	7	679	688		4	7	7	1324	-1288	7	10	7	304	927	8	-4	8	612	-609	0	-1	8	1242	1242
115	5	7	488	465		5	7	7	304	272	4	10	7	323	331	7	-4	8	444	450	1	-1	8	380	385
115	5	7	172	-178		6	7	7	482	472	1	11	7	399	-388	-7	-3	8	106	-131	2	-1	8	1188	1202
11	0	7	410	-421		7	7	7	1423	-1361	2	11	7	117	-111	-8	-3	8	479	-873	3	-1	8	211	216
11	0	7	1429	-1379		8	7	7	1144	-1105	3	11	7	540	-543	-5	-3	8	179	149	4	-1	8	248	-269
11	0	7	364	-368		9	7	7	274	-241	4	11	7	1212	-1288	-4	-3	8	621	585	5	-1	8	882	875
11	0	7	1429	-1379		10	7	7	467	-432	5	11	7	291	-316	-3	-3	8	247	242	6	-1	8	1685	1672
11	0	7	1429	-1379		11	7	7	516	473	6	11	7	462	443	-2	-3	8	597	588	7	-1	8	656	663
11	0	7	1429	-1379		12	7	7	474	-475	-2	-7	8	186	158	-1	-3	8	627	628	8	-1	8	411	389
11	0	7	1429	-1379		13	7	7	911	-880	0	-7	8	461	-448	0	-3	8	692	-475	-7	0	8	352	-341
11	0	7	1429	-1379		14	7	7	1086	996	1	-7	8	318	325	1	-3	8	245	-242	-8	0	8	98	-100
11	0	7	1429	-1379		15	7	7	1801	1436	-4	-8	8	405	-388	2	-3	8	1402	1396	-9	0	8	118	-108
11	0	7	1429	-1379		16	7	7	282	249	-1	-8	8	770	770	3	-3	8	1532	1532	-10	0	8	384	-321
11	0	7	1429	-1379		17	7	7	248	245	-1	-8	8	190	159	4	-3	8	196	183	-11	0	8	582	584
11	0	7	1429	-1379		18	7	7	488	470	-1	-8	8	325	-322	5	-3	8	541	551	-12	0	8	215	-208
11	0	7	1429	-1379		19	7	7	282	258	1	-8	8	600	-589	6	-3	8	515	541	-13	0	8	2687	-2678
11	0	7	1429	-1379		20	7	7	1441	1414	-7	-2	8	648	-632	-7	-2	8	217	217	0	0	8	1484	-1479
11	0	7	1429	-1379		21	7	7	839	841	3	-8	8	181	180	-8	-2	8	725	719	1	0	8	758	731
11	0	7	1429	-1379		22	7	7	274	-243	4	-8	8	519	522	-9	-2	8	852	-878	2	0	8	584	-556
11	0	7	1429	-1379		23	7	7	1208	-1101	-1	-8	8	400	377	-4	-2	8	1144	-1128	3	0	8	1039	-1043
11	0	7	1429	-1379		24	7	7	1457	-1348	-3	-8	8	828	-838	-3	-2	8	182	159	4	0	8	925	-926
11	0	7	1429	-1379		25	7	7	703	684	-2	-8	8	223	206	-2	-2	8	308	300	5	0	8	1481	-1483
11	0	7	1429	-1379		26	7	7	394	389	-1	-8	8	1480	1439	-1	-2	8	483	-485	6	0	8	1438	-1487
11	0	7	1429	-1379		27	7	7	894	-908	0	-8	8	300	301	0	-2	8	191	-193	7	0	8	411	388
11	0	7	1429	-1379		28	7	7	672	-679	1	-8	8	484	475	1	-2	8	550	-588	8	0	8	590	-702
11	0	7	1429	-1379		29	7	7	844	-848	2	-8	8	1208	1229	2	-2	8	2044	-2021	-7	1	8	492	488
11	0	7	1429	-1379		30	7	7	852	-852	3	-8	8	1098	1088	3	-2	8	991	-984	-8	1	8	483	-503
11	0	7	1429	-1379		31	7	7	413	-403	4	-8	8	354	365	4	-2	8	482	477	-9	1	8	287	-281
11	0	7	1429	-1379		32	7	7	346	331	5	-8	8	275	281	5	-2	8	1231	-1294	-4	1	8	622	636
11	0	7	1429	-1379		33	7	7	631	581	-2	-8	8	895	-903	7	-2	8	783	-772	-3	1	8	508	518
11	0	7	1429	-1379		34	7	7	389	353	-1	-8	8	1321	-1324	8	-2	8	377	-388	-2	1	8	681	710
11	0	7	1429	-1379		35	7	7	483	489	1	-8	8	625	593	-5	-1	8	641	586	-1	1	8	1517	1531
11	0	7	1429	-1379		36	7	7	471	458	-4	-8	8	582	-587	-4	-1	8	901	880	0	1	8	343	392
11	0	7	1429	-1379		37	7	7	545	-544	3	-8	8	608	-607	-3	-1	8	881	-853	1	1	8	971	-957
11	0	7	1429	-1379		38	7	7	1640	1693	4	-8	8	397	-422	-2	-1	8	377	-377	2	1	8	1054	1056

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 14

	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	1			2491	2504	7	3		1483	1478	-4	8		720	-728	3	8		650	-601	1	-6		1058	1062
4	1			878	838	8	3		401	349	-3	8		913	-881	2	8		248	231	2	-8		282	286
8	1			771	784	10	3		395	327	-2	8		451	-458	8	8		1286	-1220	3	-8		473	-483
8	1			538	781	-7	4		507	-519	-1	8		804	-785	7	8		1198	-1220	-4	-5		387	400
10	1			1015	1134	-6	4		312	-288	0	8		618	-610	9	8		417	397	-2	-5		1137	-1108
10	1			812	708	-5	4		338	-345	1	8		525	530	3	8		287	228	-1	-5		858	-848
10	2			818	708	-4	4		722	-744	2	8		444	-440	-1	8		987	840	0	-5		358	-337
10	2			131	-355	-3	4		150	137	2	8		238	-2420	0	8		1602	1588	1	-5		748	-718
10	2			1756	-1106	-2	4		448	444	4	8		982	-917	1	8		215	191	2	-5		140	-145
10	2			910	-817	-1	4		1876	-1875	5	8		431	363	2	8		521	-524	3	-5		280	249
10	2			338	-318	0	4		2224	-2248	6	8		548	-493	4	8		788	741	4	-5		685	-687
10	2			830	-728	1	4		84	-42	7	8		478	-442	5	8		787	771	-5	-4		1173	-1185
10	2			318	-292	2	4		403	-403	8	8		874	-807	5	8		489	477	-5	-4		288	280
10	2			248	-240	3	4		893	-711	10	8		738	-704	8	8		758	744	-4	-4		138	-127
10	2			2174	-2180	5	4		872	-735	-4	7		1214	1183	7	8		448	882	-3	-4		802	586
10	2			2844	-2847	8	4		1802	-1832	-3	7		822	845	8	8		442	-488	-2	-4		1523	1481
10	2			564	548	7	4		185	-876	-2	7		308	-277	9	8		423	-390	-1	-4		888	882
10	2			338	-1035	4	4		882	537	-1	7		345	321	-2	10		488	-435	0	-4		882	-883
10	2			824	-708	10	4		738	-681	0	7		851	870	-1	10		488	-442	1	-4		243	249
10	2			345	-382	-5	5		89	104	0	7		831	829	0	10		882	-754	2	-4		817	823
10	2			931	-845	-4	5		241	268	2	7		1017	1003	1	10		888	281	3	-4		271	251
10	2			488	-391	-3	5		424	432	2	7		1871	1770	2	10		247	243	4	-4		780	772
10	2			208	211	-2	5		460	423	4	7		390	344	3	10		1212	-1178	5	-4		780	772
10	2			288	-307	-1	5		2184	2178	8	7		888	-808	4	10		1192	-1148	8	-4		489	-480
10	2			511	550	0	5		1788	1780	8	7		888	815	8	10		108	-135	-8	-3		118	-128
10	2			1618	1612	1	5		748	-728	7	7		1214	1211	7	10		108	-135	-8	-3		738	-728
10	2			213	210	3	5		1824	1751	8	7		317	283	8	10		282	285	-4	-3		561	-554
10	2			227	-448	4	5		1338	1378	9	7		231	191	0	11		307	301	-3	-3		738	-728
10	2			794	708	5	5		747	751	10	7		377	362	1	11		198	186	-2	-3		1111	-1108
10	2			1317	1318	4	5		1354	1203	-4	7		1081	-1010	3	11		1192	1183	0	-3		454	-464
10	2			826	820	7	5		188	143	-3	7		288	-278	4	11		885	873	1	-3		852	-842
10	2			1248	1254	8	5		134	143	-2	7		500	-470	5	11		874	-598	2	-3		1877	-1888
10	2			1288	1254	8	5		567	523	-1	7		588	-578	6	11		198	-202	3	-3		434	-428
10	2			388	-403	10	5		1044	981	0	8		1822	-1574	-2	-8		944	928	5	-3		183	-388
10	2			130	-144	-8	8		380	383	1	8		783	-743	-1	-8		227	222	-6	-3		288	281
10	2			1474	1640	-8	8		254	239	2	8		638	-609	0	-8		487	467	-6	-2		404	394

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 14

M	N	L	10FD	10FC	M	N	L	10FD	10FC	M	N	L	10FD	10FC	M	N	L	10FD	10FC	M	N	L	10FD	10FC
-5	-2	9	1382	1349	4	0	9	847	847	-4	3	9	342	-362	1	5	9	1000	985	3	9	9	270	-254
-4	-2	9	835	827	5	0	9	1581	1549	-5	3	9	1360	-1347	2	5	9	876	-887	4	9	9	1110	-1070
-2	-2	9	848	814	4	0	9	294	282	-4	3	9	897	-878	3	5	9	439	-453	8	9	9	1111	1097
-1	-2	9	274	272	7	0	9	150	-888	-3	3	9	438	444	5	5	9	743	-760	7	4	9	288	-294
0	-2	9	245	247	8	0	9	514	529	-2	3	9	161	-174	7	5	9	1334	1297	8	4	9	937	-885
1	-2	9	1580	1645	-5	1	9	512	-524	-1	3	9	1084	-1094	8	5	9	459	392	-3	9	9	387	382
2	-2	9	1688	1674	-4	1	9	523	-535	0	3	9	124	-110	9	5	9	981	-404	-2	9	9	288	-245
3	-2	9	295	-285	-3	1	9	784	-790	1	9	9	1088	-1111	-5	6	9	420	409	-1	9	9	1178	-1114
4	-2	9	533	-527	-2	1	9	1512	-1499	2	3	9	1358	-1354	-4	6	9	900	917	0	9	9	142	-130
5	-2	9	811	816	-1	1	9	1116	-1108	3	3	9	366	376	-3	6	9	422	404	1	9	9	741	724
6	-2	9	475	474	0	1	9	774	747	4	3	9	1404	1367	-2	6	9	950	939	2	9	9	150	162
8	-2	9	857	850	1	1	9	267	251	5	3	9	454	-467	-1	6	9	940	927	4	9	9	217	212
-5	-1	9	847	-825	2	1	9	1787	-1773	6	3	9	1120	-1239	0	6	9	900	-520	5	9	9	354	-351
-4	-1	9	1250	-1275	3	1	9	802	-801	7	3	9	231	254	1	6	9	818	-832	6	9	9	485	-446
-3	-1	9	84	-45	4	1	9	213	-233	10	3	9	801	716	2	6	9	1608	1645	7	9	9	958	936
-2	-1	9	828	800	5	1	9	888	-887	-8	4	9	408	418	3	6	9	1141	1192	8	9	9	1077	1050
-1	-1	9	981	-972	6	1	9	307	287	-5	4	9	854	830	4	6	9	893	-703	-1	10	9	840	794
0	-1	9	1253	-1240	7	1	9	874	850	-4	4	9	324	335	5	6	9	412	-404	1	10	9	215	-780
1	-1	9	541	-559	8	1	9	477	-301	-3	4	9	538	-554	7	6	9	802	-899	2	10	9	284	182
2	-1	9	1164	-1154	9	1	9	584	-583	-2	4	9	670	634	8	6	9	952	926	3	10	9	801	898
3	-1	9	819	-874	-7	2	9	294	-282	-1	4	9	2104	2211	-4	7	9	1120	-1132	9	10	9	237	-210
4	-1	9	1004	1001	-6	2	9	914	938	0	4	9	568	544	-1	7	9	323	-311	7	10	9	718	-687
5	-1	9	1108	-1090	-4	2	9	901	896	2	4	9	307	304	1	7	9	433	-440	8	10	9	568	-555
6	-1	9	728	-701	-3	2	9	341	365	3	4	9	173	-177	2	7	9	1440	-1463	1	11	9	351	364
7	-1	9	424	461	-2	2	9	800	788	4	4	9	141	-150	3	7	9	958	-950	2	11	9	534	-527
8	-1	9	251	233	-1	2	9	321	328	5	4	9	1108	1196	4	7	9	1392	1314	3	11	9	984	-989
-7	0	9	384	383	0	2	9	858	-858	6	4	9	832	812	5	7	9	1122	989	4	11	9	750	724
-6	0	9	444	434	1	2	9	1032	1019	7	4	9	859	-899	6	7	9	891	-888	5	11	9	760	748
-5	0	9	874	878	2	2	9	2042	2054	8	4	9	888	-918	9	7	9	200	-150	-2	-5	10	338	742
-4	0	9	134	-152	3	2	9	884	867	9	4	9	214	182	10	7	9	808	870	0	-5	10	358	365
-3	0	9	237	-241	4	2	9	1027	-1015	10	4	9	227	-216	-4	8	9	741	694	2	-5	10	717	-720
-2	0	9	1614	1620	5	2	9	177	175	-5	5	9	381	-312	-3	8	9	991	-954	-3	-4	10	1032	-1001
-1	0	9	1631	1631	6	2	9	325	301	-4	5	9	361	-368	-2	8	9	177	-171	-2	-4	10	730	-703
0	0	9	223	-207	7	2	9	502	540	-2	5	9	1074	-1052	-1	8	9	782	788	-1	-4	10	489	403
1	0	9	92	-90	8	2	9	284	330	-1	5	9	1738	-1728	0	8	9	450	533	0	-4	10	273	270
2	0	9	818	894	10	2	9	737	-778	0	5	9	607	603	2	8	9	310	307	1	-4	10	341	-339

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-4	10	272	284	8	-1	10	878	-878	1	2	10	1317	-1317	9	4	10	395	404	0	0	10	309	289
3	-4	10	181	-181	7	-1	10	619	-640	2	2	10	432	-432	10	4	10	590	533	0	0	10	542	543
4	-4	10	644	-683	6	-1	10	308	-308	3	2	10	1341	1374	-4	5	10	400	-411	2	0	10	1424	1450
5	-4	10	478	451	-8	0	10	488	-472	4	2	10	787	781	-2	5	10	1001	1032	4	0	10	1134	1147
-1	-3	10	226	221	-14	0	10	632	640	5	2	10	450	454	0	5	10	1400	-1453	5	0	10	625	-607
-14	-3	10	285	273	-13	0	10	506	-507	8	2	10	1100	1084	1	5	10	372	-362	7	0	10	1118	1075
-13	-3	10	437	419	-2	0	10	1367	-1366	9	2	10	251	-285	2	5	10	252	-250	6	0	10	478	473
-12	-3	10	203	195	-1	0	10	224	206	9	2	10	553	700	3	5	10	408	-526	9	0	10	440	406
-11	-3	10	983	-888	0	0	10	575	579	-6	3	10	762	783	4	5	10	226	234	-2	0	10	674	654
0	-3	10	287	-288	1	0	10	133	-119	-5	3	10	664	645	6	5	10	1311	-1465	-1	0	10	322	330
1	-3	10	981	989	2	0	10	927	925	-4	3	10	479	-483	7	5	10	1474	-1502	0	0	10	733	-739
2	-3	10	321	322	3	0	10	455	444	-3	3	10	345	-358	10	5	10	725	-623	1	0	10	775	-791
3	-3	10	371	-382	4	0	10	719	-715	-1	3	10	392	-409	-5	6	10	435	-422	2	0	10	339	-354
4	-3	10	187	174	5	0	10	305	-309	1	3	10	952	978	-3	6	10	135	-130	3	0	10	711	-728
5	-3	10	691	-708	6	0	10	1219	1204	2	3	10	438	-405	-2	6	10	270	-270	4	0	10	274	-291
-1	-3	10	739	-715	7	0	10	978	957	3	3	10	1471	-1481	-1	6	10	902	824	5	0	10	413	415
-13	-3	10	534	-558	8	0	10	270	257	4	3	10	109	-777	0	6	10	1404	1457	6	0	10	506	-467
-12	-3	10	185	-184	-1	1	10	213	215	5	3	10	692	681	2	6	10	791	-808	7	0	10	1482	-1402
-11	-3	10	488	491	-13	1	10	678	691	6	3	10	354	-358	3	6	10	880	801	8	0	10	598	-557
0	-3	10	501	-506	-12	1	10	884	857	7	3	10	563	-553	4	6	10	699	611	0	10	10	1325	1271
1	-3	10	1109	-1072	-1	1	10	1035	-1038	9	3	10	707	-699	5	6	10	401	405	1	10	10	537	531
2	-3	10	1158	1143	0	1	10	1534	-1555	10	3	10	847	-870	6	6	10	1005	1123	2	10	10	206	-181
3	-3	10	212	710	1	1	10	339	327	-5	4	10	295	-294	7	6	10	767	703	3	10	10	199	214
4	-3	10	124	-89	2	1	10	415	403	-4	4	10	153	844	8	6	10	301	-206	4	10	10	409	416
5	-3	10	444	444	3	1	10	548	-553	-3	4	10	365	384	10	6	10	900	809	5	10	10	212	225
6	-3	10	133	-124	4	1	10	167	165	-2	4	10	734	-755	-3	7	10	532	-551	6	10	10	753	733
7	-3	10	928	926	5	1	10	578	-589	-1	4	10	229	-233	-7	7	10	214	-211	7	10	10	944	809
-1	-3	10	307	292	6	1	10	1528	-1517	0	4	10	504	495	-1	7	10	402	-395	1	11	10	215	-211
-14	-3	10	608	-748	7	1	10	620	-602	1	4	10	739	236	0	7	10	478	-474	2	11	10	494	497
-13	-3	10	837	827	8	1	10	439	405	2	4	10	981	960	2	7	10	599	564	3	11	10	514	-520
-12	-3	10	457	466	-8	2	10	420	-425	3	4	10	1452	1453	3	7	10	1404	-1400	4	11	10	1024	-1053
0	-1	10	395	391	-14	2	10	637	-786	4	4	10	240	228	4	7	10	1516	-1507	5	11	10	411	-402
1	-1	10	1028	-1015	-5	2	10	288	-271	5	4	10	517	-550	6	7	10	408	-436	-2	-4	11	483	-458
2	-1	10	1254	-1273	-13	2	10	261	-258	6	4	10	618	783	7	7	10	453	-464	-1	-4	11	772	-770
3	-1	10	338	339	-1	2	10	1047	1049	7	4	10	1328	1401	9	7	10	619	-504	0	-4	11	293	-269
4	-1	10	869	888	0	2	10	600	588	8	4	10	432	482	-3	8	10	902	951	1	-4	11	669	-679

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSPIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 17

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-4	11	366	-361	-3	0	11	823	825	-5	3	11	435	459	5	5	11	702	838	8	8	11	735	-743
3	-4	11	472	477	-2	0	11	216	-202	-4	3	11	704	729	6	5	11	1397	1554	7	8	11	347	-316
4	-4	11	222	-222	-1	0	11	883	-901	-3	3	11	459	465	8	5	11	375	-322	9	8	11	170	-100
-3	-3	11	167	-179	0	0	11	458	-488	-2	3	11	868	721	-4	8	11	375	-375	9	8	11	670	-626
-2	-3	11	1059	1042	1	0	11	1027	-1022	-1	3	11	678	861	-2	8	11	455	-449	-1	9	11	827	615
-1	-3	11	1030	980	2	0	11	1277	-1272	0	3	11	308	-314	-1	8	11	1583	-1584	0	9	11	788	770
0	-3	11	256	-256	3	0	11	148	147	1	3	11	66	80	0	8	11	704	-684	1	9	11	578	559
2	-3	11	641	630	4	0	11	484	472	2	3	11	2004	2000	1	8	11	980	947	2	9	11	803	821
4	-3	11	643	629	5	0	11	824	-828	3	3	11	1599	1594	2	8	11	680	-654	3	9	11	470	480
5	-3	11	1214	1223	6	0	11	1380	-1362	4	3	11	129	-140	3	8	11	688	-727	4	9	11	284	-302
-4	-2	11	160	-161	7	0	11	233	-242	5	3	11	312	300	4	8	11	359	-357	5	9	11	168	-208
-3	-2	11	340	-325	8	0	11	225	-234	6	3	11	579	577	5	8	11	1032	-1064	6	9	11	1049	1064
-2	-2	11	1027	-1011	-5	1	11	504	511	7	3	11	151	-152	6	8	11	1000	-1178	7	9	11	628	864
-1	-2	11	490	-456	-3	1	11	529	-508	8	3	11	472	541	7	8	11	195	220	8	9	11	311	-293
0	-2	11	544	525	-2	1	11	538	532	9	3	11	862	1008	8	8	11	523	542	9	10	11	877	-816
1	-2	11	86	89	-1	1	11	1741	1743	-5	4	11	867	-857	9	8	11	523	-518	3	10	11	235	-237
2	-2	11	1287	-1250	0	1	11	488	480	-4	4	11	1093	-1055	-3	7	11	499	508	5	10	11	350	-348
3	-2	11	774	-781	2	1	11	841	839	-2	4	11	88	-79	-2	7	11	688	470	6	10	11	878	-888
4	-2	11	195	-193	4	1	11	559	538	-1	4	11	528	-527	-1	7	11	1031	1018	3	11	11	751	764
5	-2	11	852	-854	5	1	11	1460	1488	0	4	11	345	-324	0	7	11	153	149	4	11	11	367	363
-7	-2	11	217	227	6	1	11	1123	1114	1	4	11	841	-857	1	7	11	490	-473	-2	-3	12	1146	-1107
-6	-1	11	850	830	7	1	11	184	-198	2	4	11	1812	-1810	2	7	11	812	882	-1	-3	12	206	-213
-5	-1	11	531	522	8	1	11	291	-229	3	4	11	1048	-1038	3	7	11	1388	1487	1	-3	12	487	-458
-4	-1	11	112	114	9	1	11	524	554	4	4	11	1011	976	4	7	11	989	323	4	-3	12	1088	-1080
-3	-1	11	450	448	-5	2	11	241	-240	5	4	11	1244	-1377	5	7	11	240	263	-3	-2	12	788	780
-2	-1	11	143	142	-4	2	11	221	-230	6	4	11	579	-584	6	7	11	299	308	-2	-2	12	853	844
0	-1	11	198	-209	-2	2	11	880	-889	7	4	11	200	-251	7	7	11	246	-234	-1	-2	12	328	-300
1	-1	11	831	831	-1	2	11	1457	-1464	8	4	11	507	-502	8	7	11	838	783	0	-2	12	488	-470
2	-1	11	1716	1493	1	2	11	704	690	-4	5	11	667	669	-3	8	11	490	-445	1	-2	12	870	860
3	-1	11	854	846	2	2	11	1180	-1185	-3	5	11	442	-445	-1	8	11	414	-384	2	-2	12	808	800
4	-1	11	498	-484	3	2	11	1152	-1158	-1	5	11	1272	1277	0	8	11	270	-293	3	-2	12	130	130
5	-1	11	543	531	4	2	11	678	-670	0	5	11	788	759	1	8	11	148	-136	4	-2	12	547	589
6	-1	11	580	575	5	2	11	1218	-1211	1	5	11	548	564	2	8	11	1042	-1004	5	-2	12	802	-812
-7	-1	11	383	398	6	2	11	808	-822	2	5	11	816	782	3	8	11	1103	1216	-4	-1	12	285	-282
-6	0	11	824	-848	7	2	11	571	557	3	5	11	218	214	4	8	11	289	303	-3	-1	12	464	-464
-5	0	11	821	-837	8	2	11	844	-877	4	5	11	389	-336	5	8	11	471	480	-2	-1	12	238	-247

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

OSMIUM STYRYL CLUSTER JULY 83

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC		
-1	-1	12	335	338	-4	3	12	444	-444	4	8	12	220	235	-1	-2	13	813	798	5	2	13	760	743	5	2	13	760	743		
-1	0	1	12	182	-181	-3	3	12	521	-528	5	8	12	663	-278	1	-2	13	318	-314	5	2	13	1230	1237	-2	3	13	107	-107	
-1	1	12	1284	-1275	-2	3	12	606	-578	7	8	12	208	-278	1	-2	13	388	-384	5	2	13	270	255	5	2	13	270	255		
-1	1	12	975	-981	0	3	12	688	647	7	8	12	1297	-1324	3	-2	13	388	-138	-3	3	13	381	366	-3	3	13	381	366		
2	1	1	12	472	487	1	3	12	751	-739	8	8	12	275	-302	3	-2	13	388	-384	-1	0	13	984	-1012	5	2	13	984	-1012	
5	-1	12	180	-178	2	3	12	1450	-1450	8	8	12	275	294	-1	-1	13	554	-538	-1	0	13	13	387	-388	-1	0	13	13	387	-388
5	0	1	12	183	184	3	3	12	232	239	-3	7	12	224	-210	0	-1	13	443	475	1	3	13	720	718	2	3	13	720	718	
6	-1	12	320	-305	4	3	12	246	236	-12	7	12	688	-641	1	-1	13	739	718	2	3	13	708	-703	2	3	13	708	-703		
-2	0	12	557	579	6	3	12	948	948	-1	7	12	341	-392	2	-1	13	417	-388	3	3	13	605	-566	3	3	13	605	-566		
-1	0	12	243	274	7	3	12	334	334	0	7	12	928	492	3	-1	13	465	-557	4	3	13	388	-346	4	3	13	388	-346		
0	0	12	553	566	8	3	12	822	-891	1	7	12	120	130	5	-1	13	184	-180	5	3	13	939	-931	5	3	13	939	-931		
1	0	12	1285	1237	-4	4	12	248	241	2	7	12	406	-428	5	-1	13	948	-570	6	3	13	1008	-973	6	3	13	1008	-973		
3	0	12	840	-847	-2	4	12	405	408	4	7	12	187	201	-3	0	13	130	-140	7	3	13	215	220	7	3	13	215	220		
5	0	12	818	921	0	4	12	278	256	8	7	12	405	450	-2	0	13	213	221	8	3	13	182	210	-3	4	13	206	195		
-7	0	12	172	-138	1	4	12	867	883	9	7	12	405	450	0	0	13	228	-219	-3	4	13	206	195	1	4	13	352	346		
-4	1	12	328	328	2	4	12	861	888	9	7	12	388	-383	1	0	13	268	-272	-2	4	13	352	346	-2	4	13	352	346		
-1	1	12	1153	-1144	3	4	12	882	-884	0	8	12	453	-451	2	0	13	1138	1120	-1	4	13	352	346	1	4	13	352	346		
-1	1	12	815	-807	4	4	12	821	-798	1	8	12	267	296	3	0	13	888	801	-1	4	13	350	-344	-1	4	13	350	-344		
2	1	1	12	448	-457	5	4	12	928	927	2	8	12	933	-938	4	0	13	387	-317	2	4	13	724	-724	2	4	13	724	-724	
3	1	12	274	280	6	4	12	227	288	3	8	12	101	-199	5	0	13	942	845	3	4	13	1265	1275	3	4	13	1265	1275		
4	1	12	430	428	7	4	12	289	-315	4	8	12	374	-937	-3	1	13	481	475	4	4	13	411	402	4	4	13	411	402		
5	1	12	582	-588	-4	5	12	337	326	5	8	12	383	-408	-2	1	13	324	330	5	4	13	228	215	5	4	13	228	215		
5	1	12	1121	-1130	-13	5	12	337	335	-8	8	12	287	182	-1	1	13	170	-173	6	4	13	912	912	6	4	13	912	912		
-2	1	12	575	588	-12	5	12	718	-732	-1	9	12	387	-340	1	1	13	408	-403	7	4	13	122	-70	-2	5	13	233	228		
-1	1	12	580	518	-1	6	12	751	-769	0	9	12	208	-208	2	1	13	1178	-1180	-2	5	13	233	228	-2	5	13	233	228		
-1	2	12	1130	1142	0	6	12	134	-134	1	9	12	201	-218	3	1	13	385	-317	-1	5	13	187	-208	-1	5	13	187	-208		
-1	0	12	345	339	1	6	12	404	-418	2	9	12	487	-489	4	1	13	724	-741	1	0	13	181	-207	1	0	13	181	-207		
0	1	12	798	-780	3	6	12	882	942	3	9	12	523	528	5	1	13	222	-204	2	5	13	244	-235	2	5	13	244	-235		
1	2	12	249	276	4	6	12	455	445	4	9	12	908	957	6	1	13	885	-1006	3	5	13	888	-883	3	5	13	888	-883		
2	2	12	633	627	5	6	12	984	-1083	5	9	12	262	-240	7	1	13	885	-676	4	5	13	1192	-1124	4	5	13	1192	-1124		
3	2	12	253	233	6	6	12	380	-408	6	9	12	426	-441	-3	2	13	788	-774	-1	5	13	231	210	-1	5	13	231	210		
4	2	12	728	701	7	6	12	648	727	7	9	12	413	450	-2	2	13	310	-317	5	5	13	301	311	5	5	13	301	311		
5	2	12	607	621	8	6	12	287	301	1	10	12	234	-244	-1	2	13	772	802	6	5	13	832	-813	6	5	13	832	-813		
6	2	12	869	860	-12	6	12	1230	1259	2	10	12	335	-359	0	2	13	405	410	7	5	13	987	-970	7	5	13	987	-970		
-7	2	12	826	-588	-1	6	12	989	981	4	10	12	258	-261	2	2	13	520	560	8	5	13	272	-328	8	5	13	272	-328		
8	2	12	348	328	0	6	12	472	-489	5	10	12	384	387	4	2	13	427	-431	-2	6	13	739	-729	-2	6	13	739	-729		

Chapter 3. Positional ($\times 10^5$ for Ru and P all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Ru and P all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_4(\mu\text{-H})_4(\text{CO})_{10}(\text{dppm})$ (6).

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	91736(3)	46107(3)	20451(2)	275(2)	287(2)	379(2)	-85(1)	-74(1)	-91(1)
Ru(2)	51231(3)	51936(3)	27467(2)	263(2)	276(2)	484(2)	-96(1)	-122(1)	-52(1)
Ru(3)	69462(3)	69542(3)	23720(2)	429(2)	273(2)	457(2)	-88(1)	-117(2)	-120(1)
Ru(4)	73025(3)	48485(3)	36205(2)	293(2)	353(2)	363(2)	-99(1)	-74(1)	-87(1)
P(1)	82810(9)	24562(9)	21788(5)	280(5)	293(5)	393(5)	-107(4)	-67(4)	-70(4)
P(2)	50198(9)	31308(9)	28371(5)	261(5)	312(5)	392(5)	-70(4)	-100(4)	-91(4)
O(11)	8245(4)	5723(4)	350(2)	88(3)	94(3)	41(2)	6(2)	-16(2)	-22(2)
O(12)	11249(3)	4484(4)	1825(2)	32(2)	93(3)	124(3)	-26(2)	-9(2)	-17(2)
O(21)	3402(4)	6629(4)	1519(2)	91(3)	73(2)	109(3)	-13(2)	-69(3)	11(2)
O(22)	2620(3)	5696(3)	4022(2)	40(2)	81(2)	93(2)	-49(2)	12(2)	-8(2)
O(31)	6162(6)	8447(4)	831(2)	168(5)	81(3)	69(3)	16(2)	-65(3)	-44(3)
O(32)	9859(4)	7425(4)	1931(2)	58(2)	98(3)	83(3)	-30(2)	4(2)	-47(2)
O(33)	5769(5)	7094(3)	3164(2)	121(3)	46(2)	84(3)	-31(2)	-17(2)	-12(2)
O(41)	7787(4)	2316(3)	4855(2)	77(2)	63(2)	66(2)	11(2)	-23(2)	-6(2)
O(42)	5357(4)	6518(4)	4635(2)	89(3)	69(2)	88(3)	-47(2)	31(2)	-20(2)
O(43)	9785(4)	5767(4)	3636(2)	63(2)	105(3)	108(3)	-12(2)	-36(2)	-45(2)
C(11)	8218(4)	5313(4)	998(3)	45(2)	50(3)	55(3)	-10(2)	-7(2)	-17(2)
C(12)	10088(4)	4525(4)	1909(2)	31(2)	47(2)	63(3)	-14(2)	-8(2)	-15(2)
C(21)	4050(4)	6060(4)	1972(3)	45(2)	46(2)	69(3)	-8(2)	-27(2)	-8(2)
C(22)	3541(4)	5517(4)	3543(3)	39(2)	41(2)	70(3)	-21(2)	-17(2)	-7(2)
C(31)	6503(6)	7883(4)	1400(3)	92(4)	40(2)	72(3)	-11(2)	-32(3)	-26(3)
C(32)	8783(6)	7204(4)	2094(3)	69(3)	44(2)	54(3)	-12(2)	-9(2)	-21(2)
C(33)	6184(5)	8279(4)	2880(2)	67(3)	40(2)	49(2)	-8(2)	-14(2)	-18(2)
C(41)	7592(4)	3248(4)	4402(2)	11(2)	44(3)	43(2)	-14(2)	-8(2)	-6(2)
C(42)	6083(5)	5895(5)	4250(3)	50(3)	57(3)	53(3)	-19(2)	-2(2)	-20(2)
C(43)	8834(5)	5433(4)	3627(3)	44(3)	57(3)	62(3)	-21(2)	-16(2)	-13(2)
C(1)	6741(3)	2006(3)	2895(2)	29(2)	28(2)	40(2)	-8(2)	-7(2)	-9(1)
C(112)	9292(3)	2512(3)	669(2)	91(4)	69(3)	53(3)	-28(2)	15(3)	-45(3)
C(113)	9439(3)	2217(3)	-15(2)	151(6)	88(4)	57(3)	-34(3)	11(3)	-63(4)
C(114)	8658(3)	1433(3)	-50(2)	108(4)	83(4)	49(3)	-32(3)	-6(3)	-28(3)
C(115)	7729(3)	943(3)	598(2)	70(3)	65(3)	74(3)	-33(3)	-20(3)	-21(3)
C(116)	7581(3)	1238(3)	1283(2)	49(2)	46(2)	64(3)	-21(2)	-8(2)	-16(2)
C(111)	8363(3)	2022(3)	1318(2)	42(2)	40(2)	42(2)	-13(2)	-9(2)	-11(2)
C(127)	10121(3)	21(2)	2397(2)	66(3)	47(3)	113(4)	-38(3)	-51(3)	15(2)
C(123)	11094(3)	-988(2)	2760(2)	107(5)	48(3)	142(6)	-43(3)	-77(4)	23(3)
C(174)	11614(3)	-853(2)	3332(2)	64(3)	48(3)	96(4)	-9(3)	-42(3)	6(2)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(125)	11161(3)	292(2)	3542(2)	48(3)	50(3)	67(3)	-13(2)	-25(2)	4(2)
C(126)	10188(3)	1302(2)	3180(2)	42(2)	49(3)	59(3)	-13(2)	-15(2)	-2(2)
C(121)	9668(3)	1167(2)	2607(2)	33(2)	32(2)	50(2)	-11(2)	-7(2)	-10(2)
C(212)	2408(2)	2964(3)	3733(1)	34(2)	86(4)	70(3)	-11(3)	-7(2)	-12(2)
C(213)	1462(2)	2636(3)	4415(1)	35(3)	90(4)	90(4)	-24(3)	11(3)	-25(3)
C(214)	1956(2)	1846(3)	5073(1)	70(4)	78(4)	70(3)	-19(3)	21(3)	-26(3)
C(215)	3396(2)	1384(3)	5049(1)	72(4)	103(5)	62(3)	8(3)	-5(3)	-20(3)
C(216)	4341(2)	1713(3)	4368(1)	62(3)	73(3)	58(3)	-3(3)	-7(2)	-6(3)
C(211)	3847(2)	2502(3)	3710(1)	33(2)	38(2)	45(2)	-14(2)	-4(2)	-16(2)
C(222)	4780(3)	3597(2)	1323(1)	62(3)	51(3)	48(3)	-8(2)	-25(2)	-9(2)
C(223)	4465(3)	3319(2)	730(1)	83(4)	79(4)	49(3)	-12(3)	-27(3)	-4(3)
C(224)	3871(3)	2289(2)	885(1)	83(4)	80(4)	77(4)	-28(3)	-46(3)	-9(3)
C(225)	3593(3)	1537(2)	1633(1)	71(3)	70(3)	88(4)	-35(3)	-34(3)	-21(3)
C(226)	3908(3)	1815(2)	2226(1)	41(2)	57(3)	61(3)	-21(2)	-18(2)	-13(2)
C(221)	4502(3)	2845(2)	2071(1)	26(2)	40(2)	47(2)	-12(2)	-14(2)	-4(2)

Chapter 3. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_4(\mu\text{-H})_4(\text{CO})_{10}(\text{dppm})$ (6)

	x	y	z	U(11)
H(14)	8179(46)	3779(23)	3031(10)	86(16)
H(23)	5296(22)	6596(22)	2710(20)	46(11)
H(24)	5961(32)	4254(29)	3547(17)	59(12)
H(12)	6496(22)	4460(66)	2150(37)	174(32)
H(1)	6924(3)	1877(3)	3396(2)	44(8)
H(2)	6669(3)	1207(3)	2847(2)	44(8)
H(112)	9898(3)	3119(3)	696(2)	106(6)
H(113)	10159(3)	2596(3)	-517(2)	106(6)
H(114)	8772(3)	1204(3)	-580(2)	106(6)
H(115)	7123(3)	336(3)	571(2)	106(6)
H(116)	6862(3)	859(3)	1785(2)	106(6)
H(122)	9718(3)	-93(2)	1954(2)	106(6)
H(123)	11445(3)	-1875(2)	2597(2)	106(6)
H(124)	12367(3)	-1634(2)	3613(2)	106(6)
H(125)	11564(3)	397(2)	3985(2)	106(6)
H(126)	9837(3)	2188(2)	3342(2)	106(6)
H(212)	2025(2)	3575(3)	3224(1)	106(6)
H(213)	347(2)	2993(3)	4433(1)	106(6)
H(214)	1224(2)	1592(3)	5601(1)	106(6)
H(215)	3779(2)	773(3)	5558(1)	106(6)
H(216)	5456(2)	1355(3)	4349(1)	106(6)
H(222)	5239(3)	4395(2)	1203(1)	106(6)
H(223)	4680(3)	3901(2)	151(1)	106(6)
H(224)	3627(3)	2074(2)	426(1)	106(6)
H(225)	3134(3)	740(2)	1753(1)	106(6)
H(226)	3693(3)	1233(2)	2805(1)	106(6)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER										PAGE 1									
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	0	0	929	-840	-1	2	0	155	121	-5	4	0	384	-377	-6	8	0	468	471	-3	8	0	531	-533	-3	8	0	531	-533
2	0	0	740	-884	0	2	0	441	400	-4	4	0	772	774	-5	8	0	641	-629	-2	8	0	416	431	-2	8	0	416	431
3	0	0	820	-747	1	2	0	325	283	-3	4	0	1270	-1258	-4	8	0	263	280	-1	8	0	832	841	-1	8	0	832	841
4	0	0	865	838	2	2	0	627	614	-2	4	0	445	-443	-3	6	0	217	-210	0	8	0	79	-78	0	8	0	79	-78
5	0	0	388	-387	3	2	0	1178	-1172	-1	4	0	1026	1047	-2	8	0	403	415	1	8	0	782	-790	1	8	0	782	-790
6	0	0	1058	1029	4	2	0	1205	1226	0	4	0	1437	1471	-1	8	0	693	-681	2	8	0	83	-83	2	8	0	83	-83
7	0	0	141	122	5	2	0	82	83	1	4	0	908	-923	0	8	0	831	846	3	8	0	236	228	3	8	0	236	228
8	0	0	137	147	6	2	0	462	-485	2	4	0	431	-429	1	8	0	1024	-1058	4	8	0	254	250	4	8	0	254	250
9	0	0	729	-694	7	2	0	143	139	3	4	0	173	158	2	8	0	484	-520	5	8	0	241	234	5	8	0	241	234
-10	0	0	378	371	8	2	0	330	338	4	4	0	483	521	3	8	0	287	275	6	8	0	421	-415	6	8	0	421	-415
-9	1	0	125	-118	9	2	0	412	-413	5	4	0	450	-435	4	8	0	1346	1352	7	8	0	164	-154	7	8	0	164	-154
-8	1	0	585	589	10	2	0	283	286	6	4	0	859	858	5	8	0	898	-916	8	8	0	59	64	8	8	0	59	64
-7	1	0	188	-149	-9	3	0	582	584	7	4	0	378	-374	6	8	0	376	-384	-4	9	0	235	-240	-4	9	0	235	-240
-6	1	0	109	105	-8	3	0	411	-410	8	4	0	178	-188	7	8	0	84	77	-3	9	0	317	324	-3	9	0	317	324
-5	1	0	888	-930	-7	3	0	144	140	9	4	0	120	-110	8	8	0	85	71	-1	9	0	371	-377	-1	9	0	371	-377
-4	1	0	882	842	-6	3	0	113	-117	10	4	0	288	321	9	8	0	253	-284	0	9	0	70	72	0	9	0	70	72
-3	1	0	807	-770	-5	3	0	288	-248	-8	5	0	331	-322	10	8	0	511	515	1	9	0	1040	1078	1	9	0	1040	1078
-2	1	0	1645	1554	-4	3	0	484	-470	-7	5	0	244	-249	-6	7	0	178	-186	3	9	0	677	-688	3	9	0	677	-688
-1	1	0	1018	-944	-3	3	0	1218	1249	-6	5	0	481	-453	-5	7	0	205	198	5	9	0	247	255	5	9	0	247	255
1	1	0	1298	1185	-2	3	0	608	585	-5	5	0	844	818	-4	7	0	98	-100	6	9	0	188	189	6	9	0	188	189
2	1	0	444	434	-1	3	0	878	-873	-4	5	0	578	-570	-3	7	0	617	627	7	9	0	81	87	7	9	0	81	87
3	1	0	480	490	0	3	0	1582	-1553	-3	5	0	702	706	-2	7	0	274	-276	8	9	0	163	171	8	9	0	163	171
4	1	0	1808	-1579	1	3	0	840	844	-2	5	0	218	219	-1	7	0	292	289	-2	10	0	59	44	-2	10	0	59	44
5	1	0	843	811	2	3	0	57	51	0	5	0	155	-150	0	7	0	89	-86	-1	10	0	84	-70	-1	10	0	84	-70
6	1	0	189	-185	3	3	0	180	188	1	5	0	1577	-1605	1	7	0	424	438	0	10	0	266	249	0	10	0	266	249
7	1	0	172	-155	4	3	0	88	-88	0	5	0	1443	1463	2	7	0	121	118	1	10	0	677	-674	1	10	0	677	-674
8	1	0	734	714	5	3	0	485	-445	2	5	0	447	456	3	7	0	105	107	2	10	0	129	-113	2	10	0	129	-113
9	1	0	488	-480	6	3	0	174	-186	3	5	0	246	-248	4	7	0	717	-718	3	10	0	757	754	3	10	0	757	754
-9	2	0	427	-417	7	3	0	204	189	4	5	0	1469	-1448	5	7	0	153	150	4	10	0	260	255	4	10	0	260	255
-8	2	0	437	416	8	3	0	113	-107	5	5	0	1009	1007	6	7	0	500	494	5	10	0	587	-586	5	10	0	587	-586
-7	2	0	287	-275	9	3	0	321	325	6	5	0	129	-121	7	7	0	62	57	6	10	0	107	-106	6	10	0	107	-106
-6	2	0	523	512	10	3	0	65	-58	7	5	0	226	219	8	7	0	60	-52	7	10	0	150	153	7	10	0	150	153
-5	2	0	272	-248	-9	4	0	729	-723	8	5	0	148	141	9	7	0	262	253	-1	11	0	205	210	-1	11	0	205	210
-4	2	0	484	481	-8	4	0	331	324	9	5	0	44	49	-6	8	0	74	-64	0	11	0	90	-89	0	11	0	90	-89
-3	2	0	1024	-1024	-7	4	0	334	322	10	5	0	630	-632	-5	8	0	101	-80	1	11	0	276	279	1	11	0	276	279
-2	2	0	580	-531	-6	4	0	158	141	-7	6	0	185	-185	-4	8	0	245	238	2	11	0	97	94	2	11	0	97	94

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	11	0	382	-388	-6	-8	1	83	-82	-2	-8	1	630	637	0	-4	1	1072	-1071	0	-2	1	160	-158
4	11	0	383	-385	-5	-8	1	443	-442	-1	-8	1	886	-805	1	-4	1	545	561	1	-2	1	108	-101
5	11	0	550	551	-4	-8	1	378	375	0	-8	1	213	-233	2	-4	1	1823	1830	2	-2	1	379	-348
6	11	0	304	307	-3	-8	1	384	-374	1	-8	1	115	-100	3	-4	1	648	-640	3	-2	1	508	444
-1	-11	1	428	425	-2	-8	1	679	675	2	-8	1	188	187	4	-4	1	334	-327	4	-2	1	941	-939
-1	-11	1	283	301	-1	-8	1	130	-120	3	-8	1	139	136	5	-4	1	127	114	5	-2	1	511	469
-2	-11	1	462	-461	0	-8	1	497	-476	4	-8	1	217	-222	6	-4	1	178	-164	6	-2	1	487	474
-1	-11	1	244	248	1	-8	1	572	-574	5	-8	1	324	-327	8	-4	1	428	400	8	-2	1	317	-245
1	-11	1	288	292	2	-8	1	988	1001	-10	-5	1	359	-368	-10	-3	1	332	-338	8	-2	1	402	386
-7	-10	1	370	-365	3	-8	1	89	-87	-9	-5	1	495	-508	-9	-3	1	200	212	-10	-1	1	729	-741
-8	-10	1	501	-585	4	-8	1	278	-278	-8	-5	1	161	-175	-8	-3	1	312	-308	-9	-1	1	397	-367
-5	-10	1	292	-295	5	-8	1	110	-104	-7	-5	1	715	725	-7	-3	1	634	645	-8	-1	1	873	682
-4	-10	1	378	-377	-9	-7	1	80	80	-6	-5	1	471	-470	-6	-3	1	92	87	-7	-1	1	390	384
-3	-10	1	170	-158	-8	-7	1	153	-162	-5	-5	1	434	452	-4	-3	1	353	-358	-6	-1	1	571	-584
-2	-10	1	1102	1107	-7	-7	1	238	238	-4	-5	1	102	-48	-3	-3	1	817	843	-5	-1	1	239	224
-1	-10	1	368	-377	-6	-7	1	253	-262	-3	-5	1	367	-369	-2	-3	1	713	-744	-4	-1	1	253	237
0	-10	1	150	-145	-5	-7	1	575	578	-2	-5	1	1282	-1288	-1	-3	1	977	984	-3	-1	1	835	-834
1	-10	1	148	-148	-4	-7	1	284	-288	0	-5	1	1117	1164	0	-3	1	287	300	-2	-1	1	940	937
2	-10	1	213	208	-3	-7	1	332	-315	1	-5	1	705	708	1	-3	1	364	-364	-1	-1	1	1294	1212
3	-10	1	223	-218	-2	-7	1	295	-292	1	-5	1	424	-428	2	-3	1	945	-891	0	-1	1	598	632
-8	-9	1	818	-814	-1	-7	1	217	214	2	-5	1	752	-762	3	-3	1	846	844	1	-1	1	1446	-1430
-7	-9	1	485	489	0	-7	1	239	248	3	-5	1	118	106	4	-3	1	1250	1242	2	-1	1	969	-945
-6	-9	1	256	-255	1	-7	1	441	459	4	-5	1	219	-220	5	-3	1	588	-581	3	-1	1	348	-327
-5	-9	1	217	231	2	-7	1	558	-560	5	-5	1	78	59	6	-3	1	297	-288	4	-1	1	1133	1088
-4	-9	1	71	72	3	-7	1	352	-368	6	-5	1	284	288	7	-3	1	187	171	5	-1	1	89	72
-3	-9	1	423	415	4	-7	1	354	349	8	-5	1	288	-278	9	-3	1	167	-160	6	-1	1	46	-69
-2	-9	1	1113	-1113	5	-7	1	132	143	-10	-4	1	365	365	-10	-2	1	605	631	7	-1	1	699	-649
-1	-9	1	345	355	6	-7	1	214	-208	-9	-4	1	218	231	-9	-2	1	100	82	8	-1	1	317	315
0	-9	1	878	692	-10	-6	1	324	333	-8	-4	1	278	285	-8	-2	1	175	-179	9	-1	1	304	-285
1	-9	1	388	398	-9	-6	1	203	199	-7	-4	1	1204	-1240	-7	-2	1	158	-148	10	-1	1	317	304
2	-9	1	800	-786	-8	-6	1	114	104	-6	-4	1	277	295	-6	-2	1	75	78	-10	0	1	546	562
3	-9	1	200	180	-7	-6	1	130	-124	-5	-4	1	178	180	-5	-2	1	291	-287	-9	0	1	332	317
4	-9	1	257	-252	-6	-6	1	582	574	-4	-4	1	458	460	-4	-2	1	783	818	-8	0	1	609	-601
-8	-8	1	73	-60	-5	-6	1	718	-724	-3	-4	1	255	-255	-3	-2	1	318	310	-7	0	1	931	-935
-8	-8	1	432	440	-4	-6	1	447	-452	-2	-4	1	1211	1244	-2	-2	1	45	-43	-6	0	1	770	759
-7	-8	1	411	-400	-3	-6	1	778	782	-1	-4	1	1074	-1078	-1	-2	1	169	147	-5	0	1	268	244

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	0	1	817	-598	-4	2	1	540	571	-5	4	1	271	274	-4	6	1	595	-589	3	8	1	84	75
-3	0	1	801	818	-3	2	1	1008	-893	-4	4	1	581	-567	-3	8	1	108	110	4	8	1	272	-253
-2	0	1	158	168	-2	2	1	278	-271	-3	4	1	924	929	-2	8	1	248	235	5	8	1	888	870
-1	0	1	1465	-1328	-1	2	1	360	-329	-2	4	1	788	-798	0	8	1	284	-310	6	8	1	82	-79
2	0	1	534	505	0	2	1	892	-880	-1	4	1	487	-506	1	8	1	1071	1119	7	8	1	213	-213
3	0	1	1288	-1180	1	2	1	1051	1040	0	4	1	572	575	2	8	1	580	-602	8	8	1	313	-303
4	0	1	783	-747	2	2	1	262	265	2	4	1	891	-883	3	8	1	724	-737	9	8	1	494	480
5	0	1	589	543	3	2	1	1886	-1803	3	4	1	138	-108	4	8	1	82	56	-4	8	1	508	518
7	0	1	784	744	4	2	1	1321	-1302	4	4	1	781	-748	5	8	1	1467	1480	-3	8	1	437	-441
8	0	1	118	-114	5	2	1	1562	1556	5	4	1	555	564	6	8	1	758	-730	-2	8	1	410	427
9	0	1	109	-107	6	2	1	140	131	6	4	1	102	94	7	8	1	200	-198	-1	8	1	381	-392
-10	0	1	480	-466	7	2	1	414	-402	7	4	1	704	709	8	8	1	98	94	0	8	1	338	-351
-10	1	1	388	-402	8	2	1	207	-215	8	4	1	880	-868	10	8	1	407	-422	1	8	1	374	-376
-8	1	1	281	279	9	2	1	351	348	9	4	1	235	237	-5	7	1	117	-118	2	8	1	1111	1124
-7	1	1	688	678	-9	3	1	121	117	10	4	1	324	-324	-4	7	1	253	261	3	8	1	270	-259
-6	1	1	769	-737	-8	3	1	408	394	-8	5	1	591	623	-3	7	1	88	73	4	8	1	71	-62
-5	1	1	710	-678	-6	3	1	238	-244	-7	5	1	100	-98	-2	7	1	94	-89	5	8	1	622	-609
-4	1	1	288	265	-5	3	1	78	-70	-6	5	1	581	-559	-1	7	1	259	-279	6	8	1	320	317
-3	1	1	882	835	-4	3	1	389	-387	-5	5	1	220	-191	0	7	1	214	214	7	8	1	94	-86
-2	1	1	440	-438	-3	3	1	324	-320	-4	5	1	878	883	1	7	1	678	-689	8	8	1	459	464
-1	1	1	759	752	-2	3	1	1093	1089	-3	5	1	454	-442	2	7	1	284	276	9	8	1	299	-298
0	1	1	264	265	-1	3	1	258	-254	-2	5	1	370	363	3	7	1	353	359	-3	10	1	480	488
1	1	1	1528	-1291	0	3	1	188	192	-1	5	1	495	495	4	7	1	278	255	0	10	1	183	-176
2	1	1	808	-810	1	3	1	1848	-1834	0	5	1	148	-138	5	7	1	1188	-1199	1	10	1	472	464
4	1	1	793	758	2	3	1	167	-88	1	5	1	1711	-1772	6	7	1	284	287	2	10	1	1099	-1115
5	1	1	1209	-1193	3	3	1	102	118	2	5	1	1508	1528	7	7	1	377	377	3	10	1	177	169
6	1	1	94	-81	4	3	1	1089	1057	3	5	1	984	1001	8	7	1	480	-486	4	10	1	527	528
7	1	1	80	-86	5	3	1	738	-724	4	5	1	275	285	10	7	1	332	317	5	10	1	503	503
8	1	1	128	111	6	3	1	247	-249	5	5	1	1271	-1290	-5	8	1	53	32	6	10	1	728	-734
9	1	1	77	50	7	3	1	189	-189	6	5	1	803	812	-4	8	1	89	-79	7	10	1	134	134
10	1	1	600	583	8	3	1	289	318	7	5	1	372	-348	-3	8	1	200	192	8	10	1	235	-237
-9	2	1	200	-183	9	3	1	554	-550	8	5	1	552	535	-2	8	1	828	-838	-1	11	1	121	-111
-8	2	1	128	-114	10	3	1	505	492	10	5	1	188	204	-1	8	1	448	454	0	11	1	298	298
-7	2	1	222	-223	-8	4	1	781	-798	-7	6	1	87	84	0	8	1	198	181	1	11	1	426	-421
-6	2	1	178	189	-7	4	1	209	201	-6	6	1	381	398	1	8	1	438	433	2	11	1	445	467
-5	2	1	108	103	-6	4	1	640	622	-5	6	1	448	440	2	8	1	547	-550	4	11	1	303	-311

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	11	1	575	-563	2	-8	2	598	-600	-9	-5	2	192	-178	-10	-3	2	169	178	8	-2	2	499	-485	8	-2	2	499	-485
6	11	1	677	683	3	-8	2	963	954	-8	-5	2	820	-621	-9	-3	2	154	-144	9	-2	2	84	-89	9	-2	2	84	-89
2	12	1	187	-177	5	-8	2	135	-143	-7	-5	2	253	-260	-7	-3	2	279	-244	-10	-1	2	485	482	-10	-1	2	485	482
-4	-11	2	276	272	-9	-7	2	51	-44	-6	-5	2	985	985	-6	-3	2	800	626	-9	-1	2	736	-758	-9	-1	2	736	-758
-3	-11	2	68	76	-8	-7	2	54	54	-5	-5	2	353	-344	-5	-3	2	80	85	-8	-1	2	294	-282	-8	-1	2	294	-282
-1	-11	2	283	-281	-7	-7	2	236	-228	-4	-5	2	870	700	-4	-3	2	477	-462	-6	-1	2	891	884	-6	-1	2	891	884
0	-11	2	121	-118	-6	-7	2	182	178	-2	-5	2	44	-55	-3	-3	2	420	-455	-5	-1	2	603	-601	-5	-1	2	603	-601
-6	-10	2	141	-145	-4	-7	2	120	124	-1	-5	2	1122	-1172	-2	-3	2	705	748	-4	-1	2	765	773	-4	-1	2	765	773
-5	-10	2	433	438	-3	-7	2	226	-247	0	-5	2	1596	1635	-1	-3	2	1132	-1131	-3	-1	2	1458	-1439	-3	-1	2	1458	-1439
-4	-10	2	182	-184	-2	-7	2	328	326	1	-5	2	262	248	0	-3	2	1160	1169	-2	-1	2	157	-153	-2	-1	2	157	-153
-3	-10	2	396	-397	-1	-7	2	487	-495	2	-5	2	393	361	1	-3	2	725	748	-1	-1	2	833	-860	-1	-1	2	833	-860
-2	-10	2	159	-164	0	-7	2	182	-188	3	-5	2	1019	-1034	2	-3	2	425	420	0	-1	2	1403	1350	0	-1	2	1403	1350
-1	-10	2	782	788	1	-7	2	231	231	4	-5	2	216	214	3	-3	2	1461	-1466	1	-1	2	380	-381	1	-1	2	380	-381
0	-10	2	290	-275	2	-7	2	642	637	5	-5	2	498	-494	4	-3	2	931	935	2	-1	2	406	378	2	-1	2	406	378
2	-10	2	396	-388	3	-7	2	894	-888	6	-5	2	706	688	5	-3	2	627	606	3	-1	2	1252	-1255	3	-1	2	1252	-1255
3	-10	2	185	190	4	-7	2	282	-283	7	-5	2	187	-178	6	-3	2	73	74	4	-1	2	144	144	4	-1	2	144	144
-8	-9	2	338	-358	5	-7	2	317	306	8	-5	2	157	157	7	-3	2	643	-640	5	-1	2	90	100	5	-1	2	90	100
-7	-9	2	525	-538	6	-7	2	358	348	-10	-4	2	425	-447	8	-3	2	479	468	6	-1	2	542	509	6	-1	2	542	509
-6	-9	2	238	242	-9	-6	2	208	218	-9	-4	2	283	262	9	-3	2	243	-272	7	-1	2	708	-686	7	-1	2	708	-686
-5	-9	2	68	-64	-8	-6	2	183	180	-8	-4	2	351	354	-10	-2	2	348	-347	8	-1	2	118	95	8	-1	2	118	95
-3	-9	2	260	272	-7	-6	2	288	285	-6	-4	2	1381	-1408	-9	-2	2	407	396	-9	0	2	510	-523	-9	0	2	510	-523
-2	-9	2	288	287	-6	-6	2	121	-102	-8	-2	2	408	414	-8	-2	2	152	144	-9	0	2	721	724	-9	0	2	721	724
-1	-9	2	1103	-1103	-5	-6	2	378	382	-6	-2	2	76	77	-8	-2	2	378	-408	-8	0	2	163	152	-8	0	2	163	152
1	-8	2	420	417	-4	-6	2	588	-604	-5	-2	2	115	105	-5	-2	2	115	105	-7	0	2	356	-353	-7	0	2	356	-353
2	-8	2	248	246	-3	-6	2	88	-90	-4	-2	2	382	-411	-4	-2	2	597	-611	-6	0	2	1614	-1568	-6	0	2	1614	-1568
3	-8	2	590	-605	-2	-6	2	285	294	-3	-2	2	1276	1320	-3	-2	2	1221	1221	-5	0	2	1235	1239	-5	0	2	1235	1239
4	-8	2	101	105	-1	-6	2	811	822	0	-4	2	1554	-1598	-2	-2	2	1187	-1200	-4	0	2	118	-67	-4	0	2	118	-67
-8	-8	2	174	171	0	-6	2	643	-647	-1	-4	2	901	-940	-1	-2	2	184	201	-3	0	2	366	361	-3	0	2	366	361
-7	-8	2	441	438	1	-6	2	48	-28	2	-4	2	173	164	0	-2	2	808	-802	-2	0	2	1378	-1325	-2	0	2	1378	-1325
-6	-8	2	357	-343	2	-6	2	704	-708	1	-2	2	1680	1716	1	-2	2	534	-547	-1	0	2	379	401	-1	0	2	379	401
-5	-8	2	486	-495	3	-6	2	627	628	4	-4	2	711	-682	2	-2	2	1188	-1209	1	0	2	891	886	1	0	2	891	886
-4	-8	2	50	47	4	-6	2	113	108	5	-4	2	72	-55	3	-2	2	1188	1200	2	0	2	783	811	2	0	2	783	811
-3	-8	2	263	267	4	-6	2	215	211	6	-4	2	476	-471	4	-2	2	270	-285	3	0	2	245	243	3	0	2	245	243
-2	-8	2	484	-488	5	-6	2	676	-683	7	-4	2	210	185	5	-2	2	737	-714	4	0	2	1162	-1149	4	0	2	1162	-1149
-1	-8	2	556	565	6	-6	2	439	429	8	-4	2	293	-286	6	-2	2	307	-275	5	0	2	97	-93	5	0	2	97	-93
1	-8	2	751	-748	7	-6	2	812	837	9	-4	2	459	453	7	-2	2	785	782	6	0	2	710	-708	6	0	2	710	-708

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
7	0	2	508	484	4	2	2	1826	-1755	3	4	2	743	706	2	8	2	733	745	8	8	2	319	-319
8	0	2	54	38	5	2	2	810	-807	4	4	2	877	-951	3	8	2	59	55	9	8	2	221	-223
9	0	2	187	187	6	2	2	941	952	5	4	2	686	-621	4	8	2	1472	-1488	-4	8	2	185	193
10	0	2	447	-425	7	2	2	717	709	6	4	2	157	82	5	8	2	423	415	-3	8	2	165	169
-9	1	2	500	-509	8	2	2	652	-627	7	4	2	875	848	6	8	2	956	927	0	8	2	68	-62
-8	1	2	54	-30	9	2	2	604	-610	8	4	2	158	154	7	8	2	121	131	1	8	2	482	-483
-7	1	2	184	180	-8	3	2	95	79	9	4	2	531	-534	8	8	2	348	-337	3	8	2	482	473
-6	1	2	1387	1389	-7	3	2	255	271	11	4	2	126	-111	9	8	2	110	93	4	8	2	85	80
-5	1	2	1344	-1341	-6	3	2	515	508	-8	5	2	242	232	10	6	2	107	-106	5	8	2	113	113
-4	1	2	558	-567	-5	3	2	278	-251	-7	5	2	328	331	-6	7	2	221	221	6	8	2	526	-540
-3	1	2	139	-134	-4	3	2	248	-239	-6	5	2	585	599	-5	7	2	546	-548	8	8	2	190	186
-2	1	2	485	481	-3	3	2	566	-584	-5	5	2	1368	-1403	-4	7	2	194	-203	9	8	2	419	421
-1	1	2	1483	-1414	-2	3	2	629	628	-4	5	2	216	200	-2	7	2	461	466	-3	10	2	315	-329
0	1	2	1327	1280	-1	3	2	211	203	-3	5	2	83	-83	-1	7	2	774	-784	-1	10	2	303	313
1	1	2	184	185	0	3	2	579	-588	-2	5	2	520	527	0	7	2	37	-27	0	10	2	255	-251
2	1	2	981	-933	1	3	2	731	-692	-1	5	2	466	-463	1	7	2	212	207	1	10	2	309	307
3	1	2	813	-834	2	3	2	427	407	0	5	2	1087	1085	2	7	2	762	-728	2	10	2	284	278
4	1	2	1828	1849	3	3	2	1316	-1281	1	5	2	1072	-1060	3	7	2	417	-414	3	10	2	767	-768
5	1	2	371	353	4	3	2	828	785	2	5	2	718	-745	4	7	2	889	908	4	10	2	186	-180
6	1	2	216	-200	5	3	2	732	712	3	5	2	72	67	6	7	2	1085	-1073	5	10	2	533	516
7	1	2	839	-814	6	3	2	711	-695	4	5	2	1432	1416	7	7	2	183	-187	6	10	2	346	352
8	1	2	253	241	7	3	2	986	-964	5	5	2	70	-70	8	7	2	514	508	7	10	2	284	-307
9	1	2	430	431	8	3	2	281	273	6	5	2	534	-520	10	7	2	319	-317	8	10	2	148	-148
-8	2	2	79	-80	9	3	2	178	172	7	5	2	413	-399	-6	8	2	87	86	-2	11	2	46	-46
-7	2	2	158	150	10	3	2	244	-216	8	5	2	85	-85	-5	8	2	281	280	-1	11	2	465	-471
-6	2	2	719	-777	11	3	2	228	224	9	5	2	256	252	-4	8	2	176	-170	0	11	2	159	159
-5	2	2	880	889	-7	4	2	581	-580	10	5	2	247	243	-3	8	2	203	-205	1	11	2	122	115
-4	2	2	571	539	-6	4	2	484	-475	-7	6	2	43	-18	-2	8	2	372	-376	2	11	2	248	-257
-3	2	2	453	-478	-5	4	2	888	880	-6	6	2	575	-578	-1	8	2	172	-174	3	11	2	226	241
-2	2	2	578	580	-4	4	2	202	-110	0	8	2	890	886	0	8	2	442	428	4	11	2	334	316
-1	2	2	765	-776	-3	4	2	434	440	-4	8	2	108	-93	1	8	2	83	77	5	11	2	551	-548
0	2	2	881	-871	-2	4	2	254	-269	-3	6	2	490	-502	2	8	2	185	174	6	11	2	400	-397
1	2	2	471	452	-1	4	2	211	-219	-2	6	2	599	-614	4	8	2	458	-457	7	11	2	456	448
2	2	2	1643	1539	0	4	2	619	-605	-1	6	2	1144	1165	5	8	2	577	-571	1	12	2	251	-262
3	2	2	1643	1539	1	4	2	1618	1687	0	8	2	501	-497	6	8	2	742	736	2	12	2	141	145
					2	4	2	31	-18	1	6	2	67	-28	7	8	2	229	233	4	12	2	209	-279

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1-11	3	70	-85		-4-7	3	748	758		1-5	3	494	484		0-3	3	1140	-1184	
-8-10	3	75	-72		-3-7	3	338	-338		2-5	3	545	574		1-9	3	559	-546	
-5-10	3	247	238		-2-7	3	244	-250		3-5	3	511	528		2-3	3	777	834	
-4-10	3	144	140		-1-7	3	258	258		4-5	3	555	-561		3-3	3	272	-281	
-2-10	3	833	-828		0-7	3	70	-71		5-5	3	524	-531		4-3	3	1172	-1173	
-1-10	3	172	170		1-7	3	844	-833		7-5	3	562	550		5-3	3	400	384	
0-10	3	113	105		2-7	3	515	508		8-5	3	63	-54		6-3	3	588	580	
1-10	3	362	352		3-7	3	802	808		-10-4	3	177	-174		7-3	3	135	127	
2-10	3	156	-181		4-7	3	429	-428		-8-4	3	238	-233		8-3	3	343	-335	
-7-9	3	575	-588		5-7	3	358	-360		-6-4	3	1030	1039		9-3	3	67	85	
-6-9	3	198	-188		6-7	3	277	277		-7-4	3	88	-88		-10-2	3	305	-336	
-4-9	3	333	336		-8-6	3	381	-402		-6-4	3	929	-941		-9-2	3	151	-150	
-3-9	3	253	-249		-8-6	3	228	-228		-5-4	3	768	-785		-8-2	3	72	-72	
-2-9	3	874	881		-7-6	3	513	529		-4-4	3	967	988		-7-2	3	464	475	
-1-9	3	321	-323		-6-6	3	381	358		-3-4	3	514	-534		-6-2	3	378	370	
0-9	3	389	-374		-5-6	3	347	358		-2-4	3	159	161		-5-2	3	312	-324	
1-9	3	342	-336		-4-6	3	288	-312		-1-4	3	1031	1049		-4-2	3	510	-523	
2-9	3	804	808		-3-6	3	324	-341		0-4	3	693	-692		-3-2	3	63	-50	
-8-8	3	578	-588		-2-6	3	144	129		1-4	3	1405	-1433		-2-2	3	408	409	
-7-8	3	512	517		-1-6	3	280	271		2-4	3	464	470		-1-2	3	520	-545	
-6-8	3	411	407		1-6	3	427	418		3-4	3	881	888		0-2	3	887	1612	
-5-8	3	128	-128		2-6	3	64	-28		4-4	3	46	-38		1-2	3	278	264	
-4-8	3	910	-921		3-6	3	749	-743		5-4	3	279	-282		2-2	3	852	-869	
-3-8	3	588	581		4-6	3	394	388		6-4	3	394	-397		3-2	3	835	-834	
-2-8	3	158	-158		5-6	3	445	431		7-4	3	157	151		4-2	3	1220	1257	
-1-8	3	55	45		6-6	3	112	-88		8-4	3	139	136		5-2	3	58	45	
0-8	3	253	258		7-6	3	435	-432		-10-3	3	72	78		6-2	3	742	-734	
1-8	3	582	584		-8-5	3	534	559		-9-3	3	258	260		7-2	3	288	-280	
2-8	3	837	-848		-8-5	3	208	203		-8-3	3	845	-878		8-2	3	798	784	
3-8	3	187	-170		-7-5	3	988	-1007		-7-3	3	235	-245		9-2	3	223	-208	
4-8	3	421	418		-5-5	3	218	238		-6-3	3	503	487		10-2	3	62	59	
5-8	3	288	289		-4-5	3	322	322		-4-3	3	608	628		-10-1	3	374	392	
-6-7	3	338	343		-3-5	3	150	158		-3-3	3	1575	-1580		-9-1	3	410	409	
-7-7	3	242	-257		-2-5	3	425	420		-2-3	3	119	-107		-8-1	3	343	-346	
-8-7	3	238	-238		-1-5	3	848	-853		-1-3	3	549	553		-7-1	3	282	-250	
-5-7	3	110	-118		0-5	3	540	-581		-6-1	3	127	-121		-6-1	3	127	-121	

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-5-1	3	428	418		-4-1	3	141	123	
-4-1	3	415	388		-3-1	3	562	-547	
-2-1	3	287	292		-1-1	3	550	527	
0-1	3	777	816		1-1	3	71	-70	
2-1	3	171	-136		3-1	3	1461	-1468	
4-1	3	80	48		5-1	3	402	408	
6-1	3	802	789		7-1	3	853	-814	
8-1	3	248	245		9-1	3	85	-70	
10-1	3	185	-191		-10-0	3	398	-385	
-9-0	3	516	508		-8-0	3	798	796	
-7-0	3	702	-708		-6-0	3	1143	-1147	
-5-0	3	592	580		-4-0	3	292	286	
-3-0	3	238	243		-2-0	3	414	412	
-1-0	3	1077	-1025		1-0	3	786	764	
3-0	3	250	284		5-0	3	893	899	
7-0	3	898	-887		9-0	3	221	-201	
10-0	3	142	146		11-0	3	127	127	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 7

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-8	1	3	80	-87	8	2	3	739	726	5	4	3	869	-856	6	6	3	492	479	-3	5	3	264	278
-7	1	3	700	-700	9	2	3	401	-376	6	4	3	866	-850	7	6	3	342	324	-2	5	3	123	-122
-6	1	3	712	712	10	2	3	97	96	7	4	3	342	-341	8	6	3	632	596	-1	9	3	640	659
-5	1	3	1142	1133	11	2	3	203	-198	8	4	3	1253	1229	9	6	3	344	-339	0	9	3	215	-222
-4	1	3	928	-925	-9	3	3	95	-87	9	4	3	546	-536	-5	7	3	431	433	1	9	3	74	58
-3	1	3	1100	-1084	-8	3	3	248	-238	10	4	3	151	-164	-4	7	3	501	-506	2	9	3	538	-557
-2	1	3	739	734	-7	3	3	69	-68	11	4	3	162	-178	-3	7	3	464	-456	3	9	3	471	488
-1	1	3	405	415	-5	3	3	777	782	-8	5	3	582	-582	-2	7	3	483	474	4	9	3	297	-291
0	1	3	749	-770	-4	3	3	150	-147	-6	5	3	453	458	-1	7	3	628	659	5	9	3	613	606
1	1	3	1291	1242	-3	3	3	314	-315	-5	5	3	545	538	0	7	3	707	-721	6	9	3	126	-122
2	1	3	517	484	-2	3	3	754	-758	-4	5	3	1244	-1248	1	7	3	161	167	7	9	3	105	-95
3	1	3	854	-854	-1	3	3	1551	1578	-2	5	3	102	-94	2	7	3	195	-170	8	9	3	751	-745
4	1	3	949	-944	0	3	3	133	110	-1	5	3	797	787	3	7	3	69	-69	9	9	3	684	675
5	1	3	1086	1110	1	3	3	379	358	0	5	3	488	-463	4	7	3	798	-785	-3	10	3	490	-491
6	1	3	237	238	2	3	3	337	-332	1	5	3	1019	1027	5	7	3	1235	1232	-2	10	3	86	-86
7	1	3	380	354	3	3	3	108	71	2	5	3	1383	-1404	6	7	3	99	76	-1	10	3	196	-211
8	1	3	797	-801	4	3	3	1722	-1668	3	5	3	177	166	7	7	3	657	-643	0	10	3	606	614
9	1	3	89	67	5	3	3	1585	1148	4	5	3	89	63	8	7	3	215	-206	1	10	3	330	-341
10	1	3	110	-88	6	3	3	749	788	5	5	3	1015	1008	9	7	3	587	560	2	10	3	603	619
-8	2	3	83	79	7	3	3	129	-117	7	5	3	373	358	-6	8	3	102	-92	3	10	3	284	-261
-8	2	3	79	-89	8	3	3	931	-840	8	5	3	950	-920	-5	8	3	214	-216	5	10	3	533	-535
-7	2	3	379	363	9	3	3	529	540	9	5	3	475	458	-4	8	3	420	428	6	10	3	711	714
-6	2	3	125	-115	10	3	3	74	-67	10	5	3	170	164	-3	8	3	185	167	8	10	3	367	372
-5	2	3	998	-800	-8	4	3	534	551	11	5	3	484	471	-2	8	3	235	241	-2	11	3	271	283
-4	2	3	142	134	-7	4	3	264	-298	-8	6	3	357	-367	-1	8	3	679	-685	-1	11	3	94	92
-3	2	3	1083	1080	-6	4	3	418	-410	-5	6	3	705	-703	0	8	3	373	362	0	11	3	663	-666
-2	2	3	231	-225	-5	4	3	791	-800	-4	6	3	1050	1058	1	8	3	129	136	1	11	3	333	332
-1	2	3	1738	-1679	-4	4	3	693	690	-3	6	3	334	353	2	8	3	75	69	2	11	3	159	-170
0	2	3	1213	1240	-3	4	3	88	87	-2	6	3	584	-591	3	8	3	390	-375	3	11	3	98	109
1	2	3	483	454	-2	4	3	644	669	-1	6	3	610	-617	4	8	3	667	668	5	11	3	516	524
2	2	3	555	-589	-1	4	3	1009	-1028	0	6	3	608	643	5	8	3	713	-690	6	11	3	629	-617
3	2	3	591	608	0	4	3	721	-821	1	6	3	654	-647	6	8	3	441	-432	7	11	3	170	-161
4	2	3	1385	1359	1	4	3	1602	-1668	2	6	3	168	204	7	8	3	414	410	1	12	3	144	-136
5	2	3	1973	-1974	2	4	3	1589	1558	3	6	3	196	180	8	8	3	479	478	2	12	3	155	-142
6	2	3	211	-226	3	4	3	458	-448	4	6	3	351	313	9	8	3	784	-775	3	12	3	62	49
7	2	3	428	421	4	4	3	950	913	5	6	3	1443	-1410	-4	9	3	636	-662	4	12	3	231	239

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	12	3	402	-382	-2	-7	4	325	-319	2	-5	4	549	-557	7	-3	4	692	697	8	-1	4	350	346
-4	-10	4	389	392	-1	-7	4	317	-324	3	-5	4	787	777	8	-3	4	63	9	9	-1	4	392	-391
-2	-10	4	104	107	1	-7	4	253	252	4	-5	4	108	106	-8	-2	4	166	-172	10	-1	4	163	-167
-1	-10	4	457	-455	2	-7	4	805	-800	5	-5	4	386	390	-7	-2	4	419	-424	-9	0	4	393	-412
0	-10	4	439	443	3	-7	4	576	575	6	-5	4	1182	-1166	-6	-2	4	862	863	-8	0	4	249	-243
1	-10	4	274	-278	4	-7	4	151	149	7	-5	4	277	272	-5	-2	4	346	343	-7	0	4	54	26
2	-10	4	453	453	5	-7	4	266	-279	8	-5	4	294	307	-4	-2	4	131	118	-6	0	4	1325	1351
-7	-9	4	631	619	6	-7	4	352	-348	-8	-4	4	209	-211	-3	-2	4	936	-998	-5	0	4	776	-764
-8	-9	4	430	-418	-9	-6	4	84	-102	-7	-4	4	644	-675	-2	-2	4	787	841	-4	0	4	212	-223
-5	-9	4	273	-268	-8	-6	4	144	-153	-6	-4	4	1477	1501	-1	-2	4	714	719	-3	0	4	1061	-1063
-4	-9	4	152	-151	-7	-6	4	420	-415	-4	-4	4	407	-398	0	-2	4	1023	-1051	-2	0	4	1374	1383
-3	-9	4	363	368	-6	-6	4	243	232	-3	-4	4	1079	-1090	1	-2	4	169	167	-1	0	4	150	-105
-2	-9	4	88	-89	-5	-6	4	348	370	-2	-4	4	635	645	2	-2	4	1143	1175	0	0	4	698	933
-1	-9	4	758	749	-4	-6	4	488	487	-1	-4	4	398	-390	3	-2	4	1141	-1160	1	0	4	600	-660
0	-9	4	344	-341	-3	-6	4	917	-924	0	-4	4	1169	1168	4	-2	4	177	-176	2	0	4	49	-39
1	-9	4	164	-157	-2	-6	4	123	127	1	-4	4	236	-192	5	-2	4	953	957	3	0	4	475	-473
2	-9	4	275	-275	-1	-6	4	33	-31	2	-4	4	343	334	6	-2	4	560	602	4	0	4	628	626
3	-9	4	371	360	0	-6	4	588	602	3	-4	4	1058	-1075	7	-2	4	819	-914	5	0	4	156	169
4	-9	4	158	156	1	-6	4	659	-685	4	-4	4	728	731	8	-2	4	74	52	6	0	4	813	796
-7	-8	4	568	-569	2	-6	4	810	816	5	-4	4	73	67	8	-2	4	312	313	7	0	4	836	-837
-6	-8	4	350	354	3	-6	4	284	-293	6	-4	4	733	723	-9	-1	4	516	525	8	0	4	564	-575
-5	-8	4	572	568	4	-6	4	471	-489	7	-4	4	302	-288	-8	-1	4	171	174	9	0	4	291	311
-4	-8	4	78	-100	5	-6	4	139	-142	8	-4	4	208	-204	-6	-1	4	705	-718	10	0	4	579	573
-3	-8	4	680	-681	6	-6	4	688	688	-7	-3	4	669	698	-5	-1	4	49	41	-9	1	4	168	174
-2	-8	4	389	394	7	-6	4	345	-330	-6	-3	4	1174	-1210	-4	-1	4	294	299	-8	1	4	68	56
0	-8	4	81	84	-9	-5	4	189	184	-5	-3	4	233	-261	-3	-1	4	1804	1815	-7	1	4	324	318
1	-8	4	398	403	-8	-5	4	325	323	-4	-3	4	732	764	-2	-1	4	178	164	-6	1	4	1440	-1417
2	-8	4	489	487	-7	-5	4	364	348	-3	-3	4	1352	1369	-1	-1	4	139	-145	-5	1	4	805	822
3	-8	4	782	-745	-6	-5	4	1080	-1078	-2	-3	4	1381	-1443	0	-1	4	138	128	-4	1	4	618	629
4	-8	4	80	-89	-5	-5	4	178	179	0	-3	4	314	-320	1	-1	4	1088	1083	-3	1	4	69	73
5	-8	4	123	118	-4	-5	4	365	-382	1	-3	4	231	-239	2	-1	4	1073	-1084	-2	1	4	1366	-1408
-8	-7	4	183	-195	-3	-5	4	888	1014	2	-3	4	636	-644	3	-1	4	1209	1207	-1	1	4	911	940
-7	-7	4	501	498	-2	-5	4	300	-311	3	-3	4	891	930	4	-1	4	460	442	0	1	4	50	33
-5	-7	4	889	-890	-1	-5	4	401	401	4	-3	4	250	-248	5	-1	4	651	-629	1	1	4	795	797
-4	-7	4	139	-152	0	-5	4	1150	-1169	5	-3	4	494	-489	6	-1	4	737	-747	2	1	4	685	-619
-3	-7	4	703	702	1	-5	4	284	293	6	-3	4	263	-271	7	-1	4	903	894	3	1	4	836	807

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	1	4	1355	-1344	-1	3	4	537	528	-4	5	4	170	168	-1	7	4	803	813	6	9	4	423	435
5	1	4	298	271	0	3	4	1235	1248	-3	5	4	568	-584	0	7	4	801	785	7	9	4	134	129
6	1	4	226	218	1	3	4	188	-173	-2	5	4	472	-471	1	7	4	498	-500	8	9	4	125	-119
7	1	4	883	713	2	3	4	72	87	-1	5	4	171	171	2	7	4	53	39	9	9	4	833	-812
8	1	4	93	84	3	3	4	1094	1084	0	5	4	279	276	3	7	4	489	499	-3	10	4	463	475
9	1	4	228	-234	4	3	4	80	79	1	5	4	1172	1185	4	7	4	834	-803	-2	10	4	63	-76
10	1	4	545	-581	5	3	4	1172	-1184	2	5	4	265	-272	5	7	4	99	-93	-1	10	4	332	-321
-9	2	4	198	-201	6	3	4	472	470	3	5	4	827	-825	6	7	4	702	687	0	10	4	247	-228
-8	2	4	108	104	7	3	4	1150	1153	4	5	4	117	-120	7	7	4	91	77	1	10	4	247	-228
-7	2	4	393	-402	8	3	4	624	-649	5	5	4	82	77	8	7	4	467	-444	2	10	4	78	78
-6	2	4	834	832	10	3	4	291	309	6	5	4	470	437	9	7	4	255	-257	3	10	4	553	569
-5	2	4	282	-280	11	3	4	183	194	7	5	4	540	529	10	7	4	404	412	4	10	4	398	-399
-4	2	4	1015	-1004	-8	4	4	130	137	8	5	4	812	-803	-5	8	4	155	-157	5	10	4	128	-125
-3	2	4	276	-258	-7	4	4	244	241	11	5	4	439	446	-4	8	4	180	-193	6	10	4	177	-179
-2	2	4	1900	1848	-6	4	4	284	303	-7	6	4	142	-136	-3	8	4	234	236	7	10	4	249	248
-1	2	4	1832	-1835	-5	4	4	838	-837	-8	6	4	446	445	-2	8	4	655	640	8	10	4	83	82
0	2	4	842	-873	-4	4	4	72	44	-5	6	4	583	-567	-1	8	4	77	-44	-2	11	4	100	88
1	2	4	890	-880	-3	4	4	85	-104	-4	6	4	228	-213	0	8	4	883	-882	-1	11	4	483	480
2	2	4	975	881	-2	4	4	550	571	-3	6	4	633	650	1	8	4	209	199	0	11	4	89	-24
3	2	4	827	-847	-1	4	4	463	481	-2	6	4	1142	1164	2	8	4	449	438	1	11	4	387	-384
4	2	4	575	579	0	4	4	908	-920	-1	6	4	1011	-1047	3	8	4	152	-137	2	11	4	93	87
5	2	4	791	782	1	4	4	1017	-1001	0	6	4	387	-381	4	8	4	118	-124	4	11	4	113	112
6	2	4	710	-695	2	4	4	733	720	1	6	4	169	160	5	8	4	873	868	5	11	4	217	225
7	2	4	722	-728	3	4	4	58	-39	2	6	4	207	-214	6	8	4	659	-615	6	11	4	231	232
8	2	4	311	311	4	4	4	163	151	3	6	4	339	317	7	8	4	359	-337	7	11	4	380	-361
9	2	4	288	258	5	4	4	928	812	4	6	4	1001	1006	8	8	4	302	299	1	12	4	473	490
10	2	4	147	142	6	4	4	388	-384	5	6	4	441	-449	9	8	4	622	625	3	12	4	224	-218
11	2	4	88	-78	7	4	4	882	-844	6	6	4	498	-498	10	8	4	732	-725	4	12	4	83	72
-9	3	4	281	288	8	4	4	254	-251	7	6	4	99	-89	-3	9	4	303	-311	5	12	4	206	203
-8	3	4	193	-208	9	4	4	848	871	8	6	4	284	275	-2	9	4	330	-335	-4	10	5	284	280
-7	3	4	88	87	10	4	4	271	-274	9	6	4	358	334	0	9	4	624	642	-3	10	5	372	360
-6	3	4	343	-348	11	4	4	281	-289	-6	7	4	234	-222	1	9	4	62	65	-2	10	5	119	119
-5	3	4	132	119	-8	5	4	180	-159	-5	7	4	373	369	2	9	4	275	-283	-1	10	5	472	-464
-4	3	4	388	403	-7	5	4	93	-88	-4	7	4	368	380	3	9	4	345	-396	-6	9	5	238	244
-3	3	4	588	571	-6	5	4	330	-325	-3	7	4	132	-150	4	9	4	552	549	-4	9	5	549	-539
-2	3	4	1920	-1922	-5	5	4	1075	1087	-2	7	4	813	-823	5	9	4	482	-471	-2	9	5	206	-198

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	-2	5	558	554	0	-6	5	289	290	3	-4	5	332	-335	2	-2	5	289	-316	4	0	5	403	-412
2	-2	5	344	-342	1	-6	5	40	74	4	-4	5	376	-362	3	-2	5	588	582	5	0	5	151	137
-7	-2	5	280	-287	2	-6	5	602	-611	5	-4	5	135	136	4	-2	5	930	-937	6	0	5	76	-70
-6	-2	5	333	-342	3	-6	5	639	642	6	-4	5	44	-14	6	-2	5	276	270	7	0	5	1347	1366
-5	-2	5	92	-105	4	-6	5	111	-96	7	-4	5	628	621	7	-2	5	509	510	8	0	5	891	-964
-4	-2	5	915	900	5	-6	5	474	-470	8	-4	5	84	-108	8	-2	5	654	-643	9	0	5	220	-225
-3	-2	5	485	-503	6	-6	5	131	-132	-8	-3	5	275	287	-8	-1	5	78	-48	-8	1	5	122	-122
-2	-2	5	142	-147	7	-6	5	667	652	-8	-3	5	379	-380	-8	-1	5	148	147	-7	1	5	129	136
-1	-2	5	125	-110	-8	-5	5	249	-260	-7	-3	5	342	352	-6	-1	5	248	282	-5	1	5	1108	-1117
0	-2	5	79	-78	-7	-5	5	490	504	-6	-3	5	476	483	-5	-1	5	562	-570	-4	1	5	405	410
1	-2	5	176	-175	-6	-5	5	232	246	-5	-3	5	428	-426	-4	-1	5	581	-602	-3	1	5	520	549
2	-2	5	463	459	-5	-5	5	177	-162	-4	-3	5	768	-801	-3	-1	5	58	-43	-2	1	5	463	503
4	-2	5	301	-287	-4	-5	5	347	-377	-3	-3	5	1211	1226	-2	-1	5	1465	1471	-1	1	5	1140	-1166
5	-2	5	171	-166	-3	-5	5	436	-443	-2	-3	5	387	415	-1	-1	5	634	-628	0	1	5	894	-882
-6	-7	5	245	-257	-2	-5	5	771	600	-1	-3	5	731	-747	0	-1	5	1327	-1328	1	1	5	947	-924
-7	-7	5	52	46	-1	-5	5	442	450	0	-3	5	151	-144	1	-1	5	332	-329	2	1	5	1119	1110
-8	-7	5	423	425	0	-5	5	132	-135	1	-3	5	75	70	2	-1	5	1640	1619	3	1	5	281	-277
-5	-7	5	307	316	1	-5	5	940	-977	2	-3	5	55	-54	3	-1	5	1188	-1207	4	1	5	400	395
-4	-7	5	959	-982	2	-5	5	963	973	3	-3	5	290	275	4	-1	5	1039	1043	5	1	5	1020	-1045
-2	-7	5	718	722	3	-5	5	167	-162	4	-3	5	719	730	5	-1	5	232	222	6	1	5	388	370
-1	-7	5	172	-177	4	-5	5	136	141	5	-3	5	233	-211	6	-1	5	180	-164	7	1	5	631	-643
0	-7	5	200	-181	5	-5	5	389	390	6	-3	5	303	-300	7	-1	5	1122	-1111	8	1	5	759	757
1	-7	5	161	150	6	-5	5	212	192	7	-3	5	440	-445	8	-1	5	781	785	9	1	5	108	88
2	-7	5	120	-116	7	-5	5	908	-895	8	-3	5	245	242	9	-1	5	94	100	-9	2	5	124	-118
3	-7	5	378	-374	8	-5	5	138	121	9	-3	5	190	186	10	-1	5	145	48	-8	2	5	258	265
4	-7	5	351	351	-8	-4	5	290	314	-8	-2	5	211	-215	-8	0	5	121	-117	-7	2	5	176	-157
5	-7	5	223	212	-7	-4	5	482	-481	-6	-2	5	74	79	-6	0	5	83	-79	-6	2	5	301	-267
6	-7	5	144	-139	-6	-4	5	128	-136	-7	-2	5	82	-77	-5	0	5	865	866	-5	2	5	948	965
-7	-6	5	81	73	-5	-4	5	724	743	-6	-2	5	436	-416	-4	0	5	336	-329	-4	2	5	50	32
-7	-6	5	189	-187	-4	-4	5	562	584	-5	-2	5	382	379	-3	0	5	48	-44	-3	2	5	1044	-1074
-6	-6	5	402	-387	-3	-4	5	481	-491	-4	-2	5	1108	1119	-2	0	5	984	-1012	-2	2	5	741	-746
-5	-6	5	187	-182	-2	-4	5	900	-907	-3	-2	5	534	-539	-1	0	5	806	625	-1	2	5	1707	1732
-4	-6	5	600	610	-1	-4	5	64	-54	-2	-2	5	1384	-1442	0	0	5	713	733	0	2	5	168	-158
-3	-6	5	580	586	0	-4	5	523	528	-1	-2	5	783	809	1	0	5	1618	1766	1	2	5	249	-245
-2	-6	5	859	-872	1	-4	5	784	810	0	-2	5	774	784	2	0	5	1475	-1480	2	2	5	496	-544
-1	-6	5	208	-211	2	-4	5	130	129	1	-2	5	629	-642	3	0	5	472	466	3	2	5	1207	1202

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDROGENO CLUSTER

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	2	5	878	-988	4	4	5	461	-445	2	6	5	718	-717	5	8	5	308	287	6	11	5	541	542
5	2	5	430	450	5	4	5	166	140	3	6	5	802	593	6	8	5	346	342	7	11	5	108	-107
6	2	5	81	83	6	4	5	170	181	4	6	5	128	124	7	8	5	337	-335	2	12	5	226	226
8	2	5	441	-450	7	4	5	557	577	5	6	5	699	667	8	8	5	480	-460	3	12	5	101	86
9	2	5	260	282	8	4	5	1147	-1201	6	6	5	933	-908	9	8	5	448	447	4	12	5	301	-312
10	2	5	100	100	9	4	5	241	240	7	6	5	103	101	10	8	5	251	248	5	12	5	151	149
11	2	5	450	466	10	4	5	411	426	8	6	5	628	-620	-4	8	5	404	428	-3	-10	6	213	215
-7	3	5	134	-128	11	4	5	328	357	9	6	5	430	413	-3	9	5	169	-168	-2	-10	6	274	279
-8	3	5	448	458	-7	5	5	177	-177	10	6	5	278	271	-2	9	5	152	157	-1	-10	6	224	232
-5	3	5	839	-858	-8	5	5	89	-107	-6	7	5	247	253	-1	8	5	481	-478	0	-10	6	702	-687
-4	3	5	152	-158	-5	5	5	361	-364	-5	7	5	447	-464	0	8	5	255	255	-5	-9	6	80	89
-3	3	5	680	703	-4	5	5	828	835	-4	7	5	328	323	1	8	5	566	583	-4	-8	6	220	227
-2	3	5	1002	1051	-3	5	5	78	81	-3	7	5	283	267	2	8	5	541	535	-3	-8	6	490	-483
0	3	5	360	368	-2	5	5	478	457	-2	7	5	138	-138	3	8	5	1019	-1024	-2	-8	6	103	-97
1	3	5	1158	1168	-1	5	5	978	-1012	-1	7	5	1133	-1162	4	8	5	232	230	-1	-8	6	300	-293
2	3	5	77	-80	0	5	5	101	85	0	7	5	1213	1225	7	8	5	62	46	0	-8	6	775	767
3	3	5	1185	-1122	1	5	5	341	-341	1	7	5	642	621	8	8	5	726	728	1	-8	6	124	-127
4	3	5	708	703	2	5	5	1578	1652	2	7	5	56	-47	9	8	5	438	-431	3	-8	6	243	-238
5	3	5	128	-87	3	5	5	1147	-1163	3	7	5	784	-743	-3	10	5	405	403	-6	-8	6	305	-296
6	3	5	585	-586	4	5	5	104	-100	4	7	5	490	508	-1	10	5	368	377	-5	-8	6	342	-339
7	3	5	282	-288	5	5	5	425	-408	5	7	5	673	-651	0	10	5	586	-607	-4	-8	6	60	-111
8	3	5	828	848	6	5	5	170	182	6	7	5	482	487	1	10	5	170	-160	-3	-8	6	761	758
9	3	5	312	-306	7	5	5	800	-593	7	7	5	301	310	2	10	5	346	-344	-2	-8	6	255	-254
10	3	5	177	-184	8	5	5	1043	1038	8	7	5	251	228	3	10	5	740	731	-1	-8	6	122	-121
11	3	5	248	-254	9	5	5	380	-402	9	7	5	382	-392	5	10	5	70	-60	0	-8	6	471	-464
-8	4	5	207	-208	10	5	5	453	-468	10	7	5	173	-178	6	10	5	684	-676	3	-8	6	418	419
-7	4	5	388	411	11	5	5	577	-588	-5	8	5	268	276	7	10	5	282	280	4	-8	6	188	-193
-5	4	5	400	400	-7	8	5	89	84	-4	8	5	338	-348	8	10	5	348	-348	-7	-7	6	259	-255
-4	4	5	328	-318	-6	8	5	84	-88	-3	8	5	248	-252	9	10	5	280	284	-5	-7	6	540	538
-3	4	5	185	-81	-5	8	5	442	443	-2	8	5	310	-307	-2	11	5	172	-175	-4	-7	6	389	383
-2	4	5	737	-770	-4	8	5	827	-834	-1	8	5	1088	1131	-1	11	5	125	-124	-3	-7	6	901	-884
-1	4	5	1658	1688	-3	8	5	288	-302	0	8	5	288	-285	0	11	5	680	711	-2	-7	6	64	49
0	4	5	889	722	-2	8	5	340	337	1	8	5	787	-806	1	11	5	159	-148	-1	-7	6	432	431
1	4	5	514	-538	-1	8	5	1123	1238	2	8	5	123	-123	3	11	5	400	-407	0	-7	6	224	219
2	4	5	812	-842	0	8	5	1008	-1048	3	8	5	842	859	4	11	5	188	172	1	-7	6	352	-344
3	4	5	1582	1577	1	8	5	138	124	4	8	5	751	-748	5	11	5	116	-104	2	-7	6	426	433

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 12

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	-7	8	303	-289	-4	-4	8	180	185	-4	-2	8	292	-288	-5	0	8	638	655	-7	2	8	661	673
8	-7	8	292	291	-3	-4	8	783	781	-3	-2	8	1284	1333	-4	0	8	332	-316	-6	2	8	298	-297
-8	-8	8	87	-88	-2	-4	8	911	-903	-2	-2	8	305	-358	-3	0	8	795	832	-5	2	8	122	-124
-7	-8	8	181	187	-1	-4	8	85	-58	-1	-2	8	1112	-1133	-2	0	8	1112	-1091	-4	2	8	381	380
-5	-8	8	210	-208	0	-4	8	824	-851	0	-2	8	436	454	-1	0	8	214	-214	-3	2	8	627	64
-4	-8	8	727	-724	1	-4	8	878	903	1	-2	8	1087	1103	0	0	8	305	-339	-2	2	8	1224	-1265
-3	-8	8	1081	1085	2	-4	8	210	218	2	-2	8	841	-839	1	0	8	1746	1705	-1	2	8	162	-159
-2	-8	8	332	324	3	-4	8	281	283	4	-2	8	286	-245	2	0	8	538	546	0	2	8	588	587
-1	-8	8	322	-307	4	-4	8	781	-788	5	-2	8	273	-266	3	0	8	622	-844	1	2	8	613	637
0	-8	8	884	-884	5	-4	8	432	-824	6	-2	8	137	-122	4	0	8	175	-171	2	2	8	383	-331
1	-8	8	805	804	6	-4	8	933	-934	7	-2	8	441	456	5	0	8	277	283	3	2	8	469	-497
2	-8	8	914	-923	7	-4	8	334	325	8	-2	8	150	147	6	0	8	368	-379	4	2	8	854	-839
3	-8	8	102	100	8	-3	8	138	-122	9	-2	8	185	-200	7	0	8	441	444	5	2	8	241	228
4	-8	8	89	85	9	-3	8	347	348	10	-1	8	482	-470	8	0	8	892	708	6	2	8	308	320
5	-8	8	801	-820	10	-3	8	438	-438	11	-1	8	373	370	9	0	8	263	-285	7	2	8	95	-98
6	-8	8	110	116	11	-3	8	483	480	12	-1	8	116	-129	10	0	8	538	-581	8	2	8	107	-114
7	-8	8	212	-222	12	-3	8	180	184	13	-1	8	111	-99	11	1	8	380	396	10	2	8	312	-321
8	-8	8	596	596	13	-3	8	378	-398	14	-1	8	60	61	12	1	8	215	-212	11	2	8	74	45
-5	-5	8	312	-315	14	-3	8	1132	-1132	15	-1	8	1213	-1272	13	1	8	862	861	-8	3	8	422	421
-4	-5	8	838	851	15	-3	8	1034	1074	16	-1	8	202	218	14	1	8	841	-857	-7	3	8	359	-381
-3	-5	8	1078	-1100	16	-3	8	91	-78	17	-1	8	1019	1049	15	1	8	88	78	-6	3	8	188	-208
-2	-5	8	244	-234	17	-3	8	47	48	18	-1	8	90	82	16	1	8	501	-514	-5	3	8	487	500
-1	-5	8	420	418	18	-3	8	945	-971	19	-1	8	2120	-2036	17	1	8	1134	1183	-4	3	8	301	-312
0	-5	8	1250	1281	19	-3	8	88	83	20	-1	8	391	400	18	1	8	216	213	-3	3	8	716	-732
1	-5	8	898	-898	20	-3	8	444	-428	21	-1	8	129	136	19	1	8	922	317	-2	3	8	1212	1223
2	-5	8	58	-70	21	-3	8	865	888	22	-1	8	408	-417	20	1	8	1038	-1087	-1	3	8	387	416
3	-5	8	137	-138	22	-3	8	188	-207	23	-1	8	300	303	21	1	8	648	-632	0	3	8	1285	-1328
4	-5	8	222	218	23	-3	8	95	101	24	-1	8	400	410	22	1	8	527	543	1	3	8	1070	-1097
5	-5	8	322	-332	24	-3	8	215	-238	25	-1	8	487	-493	23	1	8	826	830	2	3	8	723	719
6	-5	8	868	834	25	-3	8	157	-148	26	-1	8	571	-585	24	1	8	808	-802	3	3	8	336	311
7	-5	8	112	-109	26	-3	8	111	-108	27	-1	8	305	313	25	1	8	78	60	4	3	8	446	-440
8	-4	8	293	310	27	-2	8	183	188	28	-1	8	234	237	26	1	8	137	-143	5	3	8	55	69
-8	-4	8	245	-248	28	-2	8	318	-350	29	0	8	402	417	27	1	8	332	-333	6	3	8	218	-226
-7	-4	8	384	410	29	-2	8	343	350	30	0	8	377	-380	28	1	8	101	84	7	3	8	254	-281
-6	-4	8	803	-808	30	-2	8	315	-308	31	0	8	127	-121	29	1	8	938	938	8	3	8	133	-126
-5	-4	8	149	148	31	-2	8	444	-437	32	0	8	241	-258	30	2	8	423	-423	9	3	8	305	309

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 13

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	3	8	242	-244	8	5	8	523	-523	9	7	8	142	134	3	1	8	623	-627	3	-8	7	341	345
11	3	8	50	-24	9	5	8	878	887	10	7	8	171	-171	4	1	8	1043	1067	4	-8	7	249	251
-8	4	8	364	-381	11	5	8	442	-458	-5	8	8	208	-208	5	8	8	207	211	-7	-7	7	160	164
-6	4	8	228	225	-7	6	8	354	360	-4	8	8	180	201	6	8	8	301	-296	-6	-7	7	163	-170
-5	4	8	165	143	-6	8	8	187	-182	-3	8	8	51	32	7	1	8	510	-520	-5	-7	7	102	-109
-4	4	8	60	-33	-5	6	8	138	139	-2	8	8	473	-489	8	16	8	260	255	-4	-7	7	474	472
-3	4	8	555	562	-4	8	8	84	-81	-1	8	8	281	-271	9	10	8	575	-561	-3	-7	7	139	148
-2	4	8	718	-746	-3	8	8	347	-345	0	8	8	1140	1159	-2	11	8	166	-170	-2	-7	7	563	-568
-1	4	8	909	-941	-2	8	8	407	-408	1	8	8	239	-234	-1	11	8	280	-303	0	-7	7	300	300
0	4	8	674	716	-1	6	8	471	489	2	8	8	744	-757	0	11	8	83	-86	1	-7	7	125	121
1	4	8	1245	1288	0	8	8	312	318	3	8	8	70	-33	1	11	8	331	348	2	-7	7	108	-114
2	4	8	579	-602	1	8	8	80	88	4	8	8	754	754	2	11	8	120	111	3	-7	7	60	-61
3	4	8	1020	-1030	2	8	8	836	-847	5	8	8	405	-403	3	11	8	108	100	4	-7	7	238	-228
4	4	8	959	994	3	8	8	787	-805	6	8	8	254	234	4	11	8	957	-959	5	-7	7	188	180
5	4	8	282	-283	4	8	8	327	334	7	8	8	72	-55	5	11	8	54	-48	-7	-6	7	161	-176
6	4	8	353	-337	5	8	8	754	755	8	8	8	408	-411	6	11	8	105	83	-6	-6	7	66	62
7	4	8	302	300	6	8	8	151	119	10	8	8	467	475	7	11	8	453	452	-5	-6	7	187	200
8	4	8	611	621	7	8	8	667	-668	-4	9	8	110	109	8	11	8	377	-373	-4	-6	7	235	-246
9	4	8	888	-901	8	8	8	110	104	-3	9	8	122	125	1	12	8	460	-478	-3	-6	7	616	-622
10	4	8	198	205	9	8	8	324	-337	-2	9	8	80	73	2	12	8	95	-96	-2	-6	7	737	746
11	4	8	119	116	10	8	8	88	-53	-1	9	8	244	235	3	12	8	74	72	-1	-6	7	189	400
-8	5	8	188	-196	11	8	8	343	348	0	9	8	915	-941	4	12	8	261	266	0	-6	7	387	-384
-6	5	8	141	-134	-8	7	8	154	144	2	9	8	718	731	5	12	8	219	-238	1	-6	7	534	-536
-5	5	8	557	-570	-4	7	8	310	-316	3	9	8	570	560	6	12	8	184	201	2	-6	7	535	533
-4	5	8	255	257	-3	7	8	107	-109	4	9	8	1268	-1262	-4	-9	7	231	235	3	-6	7	160	-187
-3	5	8	238	229	-2	7	8	639	657	5	9	8	280	287	-3	-9	7	153	181	4	-6	7	169	165
-2	5	8	346	363	-1	7	8	393	-386	6	9	8	81	-87	-2	-9	7	49	50	5	-6	7	71	74
-1	5	8	550	574	0	7	8	482	-489	7	9	8	52	34	-1	-9	7	547	-552	6	-6	7	148	152
0	5	8	581	-585	1	7	8	373	384	8	9	8	125	-125	1	-9	7	558	551	-8	-5	7	383	-386
1	5	8	1022	-1059	2	7	8	388	384	9	9	8	888	700	2	-9	7	117	122	-7	-5	7	120	-122
2	5	8	520	525	3	7	8	141	156	-3	10	8	264	-264	-4	-8	7	452	-444	-6	-5	7	93	97
3	5	8	1030	1085	4	7	8	369	-384	-2	10	8	244	238	-2	-8	7	293	288	-3	-5	7	649	657
4	5	8	727	-733	5	7	8	280	-285	-1	10	8	98	2	-1	-8	7	288	284	-2	-5	7	600	-606
5	5	8	330	-354	6	7	8	231	-228	0	10	8	400	382	0	-8	7	59	-73	-1	-5	7	611	-630
6	5	8	333	315	7	7	8	929	924	1	10	8	284	-289	1	-8	7	388	-402	0	-5	7	516	512
7	5	8	203	193	8	7	8	103	98	2	10	8	432	-450	2	-8	7	186	-186	1	-5	7	1216	1240

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 14

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-5	7	608	-820	-7	-2	7	438	-457	-8	0	7	484	501	-7	2	7	404	-411	-7	4	7	608	-621
3	-5	7	298	-284	-6	-2	7	241	232	-8	0	7	402	-413	-6	2	7	204	209	-6	4	7	105	100
5	-5	7	55	46	-5	-2	7	57	55	-6	0	7	195	-199	-4	2	7	195	205	-5	4	7	64	52
6	-5	7	293	-285	-4	-2	7	361	-365	-5	0	7	484	-488	-3	2	7	128	123	-4	4	7	217	216
7	-5	7	763	759	-3	-2	7	79	72	-4	0	7	873	886	-2	2	7	372	367	-3	4	7	433	-440
-7	-4	7	66	61	-2	-2	7	1184	1220	-3	0	7	388	-408	-1	2	7	861	-1066	-2	4	7	1244	1277
-8	-4	7	221	-227	-1	-2	7	691	-711	-2	0	7	1148	1212	0	2	7	124	130	-1	4	7	1131	-1183
-5	-4	7	394	-386	0	-2	7	682	-702	-1	0	7	661	-686	1	2	7	54	-54	0	4	7	851	-874
-4	-4	7	123	-133	1	-2	7	483	-480	0	0	7	1118	-1156	2	2	7	861	868	1	4	7	334	344
-2	-4	7	254	278	2	-2	7	890	832	1	0	7	1253	-1283	3	2	7	282	-282	2	4	7	1450	1489
-1	-4	7	216	215	3	-2	7	418	-438	2	0	7	1848	1834	4	2	7	133	-115	3	4	7	998	-1024
0	-4	7	756	-750	4	-2	7	362	355	3	0	7	433	-451	5	2	7	949	-941	4	4	7	56	-45
1	-4	7	1218	-1250	5	-2	7	348	-327	4	0	7	480	-497	6	2	7	522	525	6	4	7	668	683
2	-4	7	684	698	7	-2	7	129	-119	5	0	7	690	-711	7	2	7	194	179	7	4	7	468	-455
3	-4	7	578	605	8	-2	7	265	260	6	0	7	833	844	8	2	7	78	76	8	4	7	565	567
4	-4	7	78	74	9	-2	7	139	-138	7	0	7	980	-985	9	2	7	325	-334	9	4	7	96	-71
5	-4	7	630	-620	-9	-1	7	158	-151	8	0	7	498	499	10	2	7	119	119	10	4	7	132	-147
6	-4	7	514	518	-8	-1	7	469	-459	9	0	7	87	76	11	2	7	473	-486	11	4	7	305	-310
7	-4	7	408	-413	-7	-1	7	548	574	-7	1	7	421	426	-7	3	7	434	440	-7	5	7	570	578
8	-4	7	84	61	-5	-1	7	37	19	-5	1	7	65	71	-4	3	7	278	-278	-6	5	7	125	-120
-8	-3	7	128	138	-4	-1	7	127	133	-5	1	7	450	460	-5	3	7	53	-60	-5	5	7	107	-102
-7	-3	7	84	74	-3	-1	7	535	549	-4	1	7	824	-824	-4	3	7	104	98	-4	5	7	788	-796
-5	-3	7	214	228	-2	-1	7	1488	-1522	-3	1	7	32	-37	-3	3	7	165	-161	-3	5	7	730	763
-4	-3	7	433	420	-1	-1	7	830	823	-2	1	7	106	-121	-2	3	7	1347	-1383	-2	5	7	614	-616
-3	-3	7	358	-364	0	-1	7	1037	1061	-1	1	7	534	554	-1	3	7	845	812	-1	5	7	679	686
-2	-3	7	442	-463	1	-1	7	486	529	0	1	7	450	447	0	3	7	180	201	0	5	7	69	78
-1	-3	7	335	338	2	-1	7	1588	-1610	1	1	7	1156	1194	1	3	7	718	-742	1	5	7	155	-145
0	-3	7	288	277	3	-1	7	724	739	2	1	7	1583	-1581	2	3	7	644	-695	2	5	7	1728	-1768
1	-3	7	681	680	4	-1	7	221	-212	3	1	7	260	261	3	3	7	621	659	3	5	7	1337	1344
2	-3	7	749	-753	5	-1	7	222	-217	4	1	7	602	625	4	3	7	35	13	4	5	7	725	727
3	-3	7	172	-180	6	-1	7	267	-281	5	1	7	1125	1140	5	3	7	502	571	5	5	7	316	298
4	-3	7	226	-229	7	-1	7	669	676	6	1	7	1079	-1078	6	3	7	317	-328	6	5	7	1066	-1081
5	-3	7	853	853	8	-1	7	570	-580	7	1	7	389	410	7	3	7	86	-80	7	5	7	674	658
6	-3	7	147	-132	9	-1	7	86	83	8	1	7	297	-306	8	3	7	359	-373	8	5	7	450	-459
-9	-2	7	385	393	10	-1	7	184	-197	9	1	7	76	-81	9	3	7	289	320	9	5	7	155	145
-8	-2	7	68	66	-9	0	7	128	131	-8	2	7	160	-168	11	3	7	211	206	10	5	7	157	161

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 1*

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
11	5	7	583	604	3	8	7	881	-908	4	11	7	108	106	-3	-6	8	631	-632	-6	-3	8	168	-172
-6	8	7	381	384	4	8	7	143	131	5	11	7	273	-274	-2	-8	8	242	-258	-5	-3	8	468	478
-4	8	7	488	508	5	8	7	72	70	6	11	7	627	-622	-1	-6	8	352	338	-3	-3	8	434	451
-3	8	7	518	-528	6	8	7	161	140	7	11	7	572	583	0	-6	8	808	601	-2	-3	8	688	-705
-2	8	7	86	87	7	8	7	135	128	8	11	7	223	221	1	-6	8	520	-527	-1	-3	8	84	89
-1	8	7	407	-404	8	8	7	83	-78	2	12	7	107	-105	4	-6	8	247	261	0	-3	8	410	-445
0	8	7	888	923	-4	8	7	65	75	3	12	7	170	-180	6	-6	8	137	126	1	-3	8	382	377
1	8	7	447	-463	-3	8	7	360	380	4	12	7	114	90	-7	-5	8	212	-206	2	-3	8	859	683
2	8	7	1240	1281	-2	8	7	280	-307	5	12	7	101	112	-6	-5	8	314	-307	3	-3	8	148	143
3	8	7	810	-825	-1	8	7	433	437	6	12	7	220	225	-5	-5	8	874	687	4	-3	8	1243	-1246
4	8	7	582	-608	0	8	7	95	40	-3	-8	8	169	158	-4	-5	8	453	-457	5	-3	8	380	404
5	8	7	282	-275	1	8	7	582	-583	-2	-8	8	119	114	-3	-5	8	256	256	6	-3	8	473	471
6	8	7	1511	1478	2	8	7	657	-682	-1	-8	8	358	352	-2	-5	8	376	374	7	-3	8	57	38
7	8	7	310	-316	3	8	7	1250	1256	0	-8	8	748	-736	-1	-5	8	99	-105	8	-3	8	201	-196
8	8	7	125	-125	4	8	7	178	162	-5	-8	8	146	-148	0	-5	8	1148	-1155	-8	-2	8	523	538
9	8	7	378	-388	5	8	7	635	-629	-3	-8	8	280	-281	1	-5	8	966	974	-6	-2	8	105	-117
-6	7	7	488	-484	6	8	7	285	-280	-2	-8	8	148	146	2	-5	8	486	486	-4	-2	8	273	287
-5	7	7	224	232	7	8	7	83	68	-1	-8	8	176	-178	3	-5	8	54	59	-3	-2	8	384	-419
-3	7	7	104	101	8	8	7	170	-167	0	-8	8	575	573	4	-5	8	479	-486	-2	-2	8	293	281
-2	7	7	390	-381	8	8	7	167	168	1	-8	8	115	-119	5	-5	8	164	162	-1	-2	8	475	486
-1	7	7	582	-588	-3	10	7	524	-534	2	-8	8	245	-249	6	-5	8	101	-107	0	-2	8	132	130
0	7	7	888	-873	-2	10	7	234	227	3	-8	8	444	-438	-8	-4	8	346	342	1	-2	8	628	-642
2	7	7	288	-282	-1	10	7	115	-106	-5	-7	8	79	-76	-7	-4	8	159	164	2	-2	8	105	88
3	7	7	245	234	0	10	7	285	282	-6	-4	8	143	-147	-6	-4	8	437	439	3	-2	8	120	128
4	7	7	75	70	1	10	7	125	147	-3	-7	8	536	542	-5	-4	8	649	-637	4	-2	8	569	569
5	7	7	111	110	2	10	7	512	532	-2	-7	8	252	-259	-4	-4	8	65	73	5	-2	8	152	-161
6	7	7	995	-974	3	10	7	802	-802	-1	-7	8	132	-142	-3	-4	8	299	-298	6	-2	8	468	-442
8	7	7	288	285	4	10	7	351	-350	0	-7	8	324	-336	-2	-4	8	281	278	7	-2	8	59	50
10	7	7	210	-216	5	10	7	602	619	1	-7	8	273	256	-1	-4	8	387	-410	8	-2	8	61	64
-5	8	7	58	48	6	10	7	864	874	0	-4	8	93	98	0	-4	8	1200	1218	-8	-1	8	423	-440
-3	8	7	79	49	7	10	7	889	-863	3	-7	8	252	251	1	-4	8	748	-763	-7	-1	8	275	-255
-2	8	7	284	283	8	10	7	84	-97	4	-7	8	337	-341	2	-4	8	698	-815	-6	-1	8	353	347
-1	8	7	802	-808	9	11	7	88	-88	5	-7	8	93	-88	4	-4	8	1121	1128	-5	-1	8	290	272
0	8	7	85	46	1	11	7	284	282	-7	-6	8	238	237	5	-4	8	247	-236	-4	-1	8	564	-578
1	8	7	788	787	2	11	7	158	-150	-5	-6	8	244	-250	6	-4	8	209	-195	-3	-1	8	687	694
2	8	7	212	204	3	11	7	488	499	-4	-6	8	484	490	-8	-3	8	474	-472	-2	-1	8	180	180

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	-1	8	772	-782	-1	1	8	300	302	0	3	8	296	325	1	5	8	654	659	4	7	8	182	191
0	-1	8	274	-295	0	1	8	385	-336	1	3	8	500	506	2	5	8	107	-87	5	7	8	527	548
1	-1	8	1369	1380	1	1	8	1300	1334	2	3	8	196	-192	3	5	8	1725	-1757	6	7	8	174	184
2	-1	8	271	277	2	1	8	823	846	3	3	8	386	-447	4	5	8	677	901	7	7	8	864	-888
3	-1	8	886	-875	3	1	8	1027	-1046	4	3	8	150	142	5	5	8	740	759	8	7	8	83	72
4	-1	8	86	88	4	1	8	1066	-1063	5	3	8	661	663	6	5	8	222	211	9	7	8	327	335
5	-1	8	42	-44	5	1	8	1278	1296	6	3	8	506	-514	7	5	8	872	-866	10	7	8	85	86
6	-1	8	287	279	6	1	8	366	375	7	3	8	135	-133	8	5	8	326	336	-5	8	8	270	272
7	-1	8	89	75	7	1	8	408	-399	8	3	8	387	408	9	5	8	428	-438	-4	8	8	144	160
8	-1	8	133	142	8	1	8	143	151	10	3	8	286	-285	10	5	8	164	165	-3	8	8	80	-70
9	-1	8	232	-233	9	1	8	86	81	-6	4	8	582	-581	11	5	8	121	112	-1	8	8	166	161
10	-1	8	13	83	10	1	8	152	-159	-5	4	8	41	-42	-6	8	8	163	-160	0	8	8	524	-518
-8	0	8	483	477	-8	2	8	492	496	-4	4	8	343	346	-5	6	8	82	-92	1	8	8	130	102
-7	0	8	245	246	-7	2	8	254	-250	-3	4	8	158	-150	-4	8	8	288	284	2	8	8	359	363
-6	0	8	203	-185	-6	2	8	112	-118	-2	4	8	57	41	-3	8	8	441	443	3	8	8	119	122
-5	0	8	802	-816	-5	2	8	464	-455	-1	4	8	603	629	-2	8	8	490	-492	4	8	8	474	-476
-4	0	8	541	530	-4	2	8	283	265	0	4	8	634	-642	-1	8	8	80	-88	5	8	8	71	63
-3	0	8	171	-139	-2	2	8	673	693	1	4	8	1105	-1144	0	8	8	341	317	6	8	8	401	-408
-2	0	8	203	-204	-1	2	8	329	-343	2	4	8	146	-125	2	8	8	110	80	7	8	8	580	552
-1	0	8	680	730	0	2	8	181	-175	3	4	8	1722	1667	3	8	8	953	974	8	8	8	71	-55
0	0	8	508	525	2	2	8	690	664	4	4	8	755	-758	4	8	8	547	-538	10	8	8	381	-355
1	0	8	1414	-1440	3	2	8	637	675	5	4	8	121	-120	5	8	8	422	-637	-4	9	8	396	-412
2	0	8	864	-878	4	2	8	744	732	6	4	8	505	-529	6	8	8	137	-103	-3	9	8	133	128
3	0	8	1385	1404	5	2	8	757	-772	7	4	8	424	434	7	8	8	1082	1084	-2	9	8	378	399
4	0	8	466	468	6	2	8	723	-725	8	4	8	313	-307	8	8	8	157	-147	-1	9	8	372	-365
5	0	8	717	-746	7	2	8	748	766	9	4	8	575	-580	9	8	8	180	-194	0	9	8	580	617
6	0	8	69	-65	8	2	8	431	443	10	4	8	328	-340	10	8	8	61	-83	2	9	8	321	-331
8	0	8	188	-177	9	2	8	68	-56	11	4	8	184	184	-6	7	8	77	59	3	9	8	761	-763
9	0	8	244	243	-8	3	8	522	-522	-7	5	8	68	28	-5	7	8	136	-147	4	9	8	1152	1156
10	0	8	156	159	-7	3	8	248	238	-6	5	8	567	566	-4	7	8	53	-23	5	9	8	81	-76
-8	1	8	518	-527	-6	3	8	342	353	-5	5	8	380	363	-3	7	8	75	-86	6	9	8	162	167
-6	1	8	61	57	-5	3	8	163	-157	-4	5	8	481	-506	-2	7	8	88	88	7	9	8	460	-458
-5	1	8	852	844	-4	3	8	221	-204	-3	5	8	489	-511	-1	7	8	251	262	8	9	8	252	240
-4	1	8	408	-410	-3	3	8	378	387	-2	5	8	613	613	0	7	8	133	123	9	9	8	188	-176
-3	1	8	455	-484	-2	3	8	254	-257	-1	5	8	427	-417	1	7	8	432	-445	-3	10	8	97	47
-2	1	8	526	-525	-1	3	8	358	-393	0	5	8	616	598	3	7	8	152	-156	-2	10	8	674	-677

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	10	8	378	371	4	-7	9	440	434	4	-4	8	243	-247	9	-2	9	522	519	8	0	9	252	242
1	10	8	365	366	-8	-8	9	193	204	5	-4	9	841	830	-8	-1	9	835	856	10	0	9	61	-57
2	10	8	65	26	-4	-6	9	100	-88	8	-4	9	257	-260	-7	-1	9	483	-487	-8	1	9	254	255
3	10	8	723	735	-3	-8	9	287	271	7	-4	9	97	84	-6	-1	9	411	-417	-7	1	9	401	-403
4	10	8	1034	-1035	-2	-6	9	287	-288	8	-4	9	287	-281	-5	-1	9	125	126	-6	1	9	372	-386
5	10	8	182	-163	0	-8	9	152	148	-8	-3	9	136	137	-4	-1	9	510	501	-5	1	9	98	-94
6	10	8	471	471	1	-6	9	539	541	-7	-3	9	195	-191	-3	-1	9	547	-518	-4	1	9	1160	1202
7	10	8	842	838	2	-8	9	338	-328	-6	-3	9	355	-360	-2	-1	9	737	757	-3	1	9	437	-464
8	10	8	567	-563	3	-6	9	77	-37	-5	-3	9	393	-400	-1	-1	9	89	-87	-2	1	9	176	-182
9	10	8	171	170	4	-6	9	322	-321	-4	-3	9	516	527	0	-1	9	236	-238	-1	1	9	191	-184
-1	11	8	128	-122	5	-8	9	334	330	-3	-3	9	281	272	1	-1	9	546	-590	0	1	9	668	691
0	11	8	198	-194	-7	-5	9	73	76	-1	-3	9	524	-538	2	-1	9	934	977	1	1	9	1083	-1118
1	11	8	245	-259	-6	-5	9	461	-471	0	-3	9	365	375	3	-1	9	268	-306	2	1	9	1451	1440
2	11	8	346	345	-5	-5	9	212	-225	1	-3	9	929	-949	4	-1	9	323	334	3	1	9	68	-60
3	11	8	405	-416	-4	-5	9	588	608	2	-3	9	72	86	5	-1	9	806	-569	4	1	9	557	-561
4	11	8	520	514	-3	-5	9	282	-297	3	-3	9	679	700	6	-1	9	130	124	5	1	9	1530	-1542
5	11	8	229	232	-2	-5	9	321	334	4	-3	9	139	141	7	-1	9	185	188	6	1	9	1492	1478
6	11	8	188	-189	-1	-5	9	88	85	5	-3	9	1173	-1165	8	-1	9	487	507	7	1	9	296	308
7	11	8	768	-757	0	-5	9	88	-84	6	-3	9	182	180	9	-1	9	488	-484	8	1	9	274	-278
8	11	8	678	678	1	-5	9	834	-835	7	-3	9	311	305	-8	0	9	585	-600	10	1	9	46	58
9	11	8	312	308	2	-5	9	677	690	8	-3	9	162	174	-7	0	9	578	579	-8	2	9	112	-169
1	12	8	139	-130	3	-5	9	184	187	-6	-2	9	338	-336	-6	0	9	504	522	-7	2	9	353	361
2	12	8	134	129	4	-5	9	222	219	-7	-2	9	335	326	-5	0	9	87	-75	-6	2	9	68	-71
3	12	8	244	-255	5	-5	9	545	-555	-6	-2	9	158	148	-4	0	9	1087	-1085	-5	2	9	111	110
-3	-8	9	237	-237	6	-5	9	188	182	-5	-2	9	37	-40	-3	0	9	873	820	-4	2	9	770	-783
0	-8	9	108	-105	7	-5	9	388	-388	-4	-2	9	324	-329	-2	0	9	271	-278	-3	2	9	487	481
1	-8	9	384	367	-7	-4	9	55	-34	-3	-2	9	78	54	-1	0	9	167	182	-2	2	9	112	107
2	-8	9	240	240	-6	-4	9	808	813	-2	-2	9	374	-358	0	0	9	101	104	-1	2	9	275	286
3	-8	9	348	-342	-5	-4	9	518	532	-1	-2	9	522	505	1	0	9	1110	1150	0	2	9	1161	-1167
-3	-7	9	108	-110	-4	-4	9	775	-749	0	-2	9	89	84	2	0	9	1286	-1307	1	2	9	475	500
-4	-7	9	97	-103	-2	-4	9	44	40	1	-2	9	207	210	3	0	9	328	-328	2	2	9	521	-551
-2	-7	9	183	178	-1	-4	9	188	185	2	-2	9	288	-254	4	0	9	145	153	4	2	9	478	483
0	-7	9	78	-67	0	-4	9	85	-112	4	-2	9	317	-318	5	0	9	1252	1241	5	2	9	1056	1076
1	-7	9	219	-213	1	-4	9	1337	1343	5	-2	9	1081	1110	6	0	9	788	-786	6	2	9	1048	-1046
2	-7	9	89	-84	2	-4	9	802	-896	7	-2	9	538	-530	7	0	9	378	398	7	2	9	648	-655
3	-7	9	131	135	3	-4	9	558	-561	8	-2	9	227	-233	8	0	9	418	-414	8	2	9	272	276

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
9	2	9	581	574	-5	5	9	410	411	-1	7	9	124	-120	-2	10	9	200	-197	3	-7	10	455	-457
10	2	9	315	-308	-4	5	9	754	747	0	7	9	862	863	-1	10	9	455	-467	4	-7	10	224	223
-7	3	9	802	-815	-3	5	9	1076	-1075	1	7	9	462	-465	1	10	9	294	290	-6	-6	10	100	-93
-6	3	9	258	271	-2	5	9	202	131	2	7	9	266	272	2	10	9	255	-269	-5	-6	10	283	275
-5	3	9	278	264	-1	5	9	82	82	4	7	9	114	-107	3	10	9	607	619	-4	-6	10	125	-127
-4	3	9	348	356	0	5	9	275	258	5	7	9	230	-191	4	10	9	180	179	-3	-6	10	237	237
-3	3	9	400	-419	1	5	9	383	-382	6	7	9	909	907	5	10	9	460	-461	-2	-6	10	242	-237
-2	3	9	307	303	2	5	9	1462	1501	7	7	9	215	215	6	10	9	472	-457	0	-6	10	160	-155
-1	3	9	187	-186	3	5	9	537	-541	8	7	9	684	-681	7	10	9	486	477	1	-6	10	99	104
0	3	9	488	480	4	5	9	975	-995	10	7	9	626	643	8	10	9	411	407	2	-6	10	132	141
1	3	9	233	235	5	5	9	320	-317	-4	8	9	70	58	9	10	9	119	-116	4	-6	10	119	-131
2	3	9	135	154	6	5	9	1208	1232	-3	8	9	281	304	-1	11	9	306	307	5	-6	10	219	-268
3	3	9	63	-80	7	5	9	184	-183	-2	8	9	78	-70	0	11	9	158	146	-6	-5	10	402	401
5	3	9	824	-818	8	5	9	130	142	-1	8	9	214	230	1	11	9	718	-733	-5	-5	10	652	-645
6	3	9	630	633	9	5	9	402	-420	0	8	9	349	-365	2	11	9	291	273	-1	-5	10	86	90
7	3	9	588	588	-6	6	9	291	-298	2	8	9	191	-181	4	11	9	224	-238	0	-5	10	362	363
9	3	9	530	-534	-5	6	9	143	-140	3	8	9	62	33	5	11	9	246	248	1	-5	10	443	-428
10	3	9	247	241	-4	6	9	438	-435	4	8	9	236	236	6	11	9	540	541	2	-5	10	352	-362
-7	4	9	742	783	-3	6	9	887	881	5	8	9	83	54	7	11	9	504	-502	3	-5	10	74	81
-5	4	9	430	-435	-2	6	9	63	28	6	8	9	121	-133	8	11	9	495	-503	4	-5	10	353	350
-4	4	9	440	-438	-1	6	9	98	-79	7	8	9	267	-258	1	12	9	170	189	5	-5	10	84	-98
-3	4	9	854	889	0	6	9	788	-783	8	8	9	291	284	2	12	9	78	83	-7	-4	10	258	-247
-2	4	9	305	-312	1	6	9	701	722	9	8	9	213	219	3	12	9	228	-226	-6	-4	10	433	-440
-1	4	9	328	313	2	6	9	777	-793	10	8	9	324	-323	5	12	9	42	34	-5	-4	10	656	653
0	4	9	40	33	3	6	9	485	505	-4	9	9	66	-59	6	12	9	322	-318	-4	-4	10	256	279
1	4	9	270	-252	4	6	9	784	784	-3	9	9	588	-618	-3	-8	10	133	151	-3	-4	10	378	-386
2	4	9	1422	-1439	5	6	9	471	491	-2	9	9	272	285	-2	-8	10	415	-400	-2	-4	10	464	-455
3	4	9	425	458	6	6	9	1650	-1655	1	9	9	275	272	-1	-8	10	274	268	-1	-4	10	472	476
4	4	9	85	88	7	6	9	214	198	2	9	9	182	189	0	-8	10	188	-190	0	-4	10	516	-512
5	4	9	367	367	8	6	9	588	603	3	9	9	534	-555	1	-8	10	87	-85	1	-4	10	401	424
6	4	9	585	-587	9	6	9	175	181	4	9	9	232	-197	-5	-7	10	108	-105	2	-4	10	442	444
7	4	9	333	-340	10	6	9	387	-388	5	9	9	413	424	-4	-7	10	129	-127	4	-4	10	760	-763
8	4	9	302	-301	-5	7	9	47	-52	6	9	9	257	259	-3	-7	10	150	-137	6	-4	10	426	420
9	4	9	328	338	-4	7	9	208	207	7	9	9	132	-122	-2	-7	10	426	427	7	-4	10	160	171
10	4	9	133	-151	-3	7	9	376	-372	8	9	9	279	-294	-1	-7	10	204	-204	-6	-3	10	177	177
11	4	9	135	-128	-2	7	9	58	-55	9	9	9	173	-168	0	-7	10	58	58	-5	-3	10	695	-686

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 19

OBSERVED AND CALCULATED 10FO 10FC					OBSERVED AND CALCULATED 10FO 10FC					OBSERVED AND CALCULATED 10FO 10FC					OBSERVED AND CALCULATED 10FO 10FC									
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC					
-4	-3	10	209	-206	-1	-1	10	160	170	2	1	10	535	-535	3	3	10	80	-83	7	5	10	767	758
-3	-3	10	378	393	0	-1	10	237	-223	3	1	10	783	799	5	3	10	414	409	8	5	10	61	90
-2	-3	10	888	894	1	-1	10	420	-440	4	1	10	508	518	6	3	10	984	-995	9	5	10	222	226
-1	-3	10	825	-840	2	-1	10	86	-59	5	1	10	675	-655	7	3	10	410	415	10	5	10	627	-641
0	-3	10	124	-127	3	-1	10	342	342	6	1	10	957	-1011	8	3	10	480	495	-6	6	10	178	195
1	-3	10	129	145	4	-1	10	108	101	7	1	10	393	370	9	3	10	112	-95	-5	6	10	118	115
2	-3	10	314	-322	5	-1	10	426	408	8	1	10	215	220	10	3	10	687	-718	-4	6	10	494	-515
3	-3	10	210	-201	6	-1	10	573	-571	9	1	10	150	158	-7	4	10	241	-244	-3	6	10	552	-553
4	-3	10	1003	1008	7	-1	10	171	-182	10	1	10	316	-313	-6	4	10	534	522	-2	6	10	646	667
5	-3	10	55	-78	8	-1	10	110	114	-7	2	10	71	66	-5	4	10	336	352	-1	6	10	531	558
6	-3	10	739	-734	9	-1	10	480	478	-5	2	10	413	420	-4	4	10	288	-289	0	6	10	557	-577
7	-3	10	155	-158	-7	0	10	339	-329	-4	2	10	143	-137	-3	4	10	584	-578	1	6	10	521	-537
8	-3	10	444	426	-6	0	10	173	184	-3	2	10	746	-768	-2	4	10	467	486	2	6	10	623	637
-7	-2	10	112	-107	-5	0	10	1018	1023	-2	2	10	172	-173	0	4	10	682	692	3	6	10	652	-672
-6	-2	10	109	-110	-4	0	10	187	-196	-1	2	10	925	942	1	4	10	368	-349	4	6	10	256	260
-5	-2	10	355	358	-3	0	10	611	-617	0	2	10	192	-194	3	4	10	591	-605	5	6	10	734	722
-4	-2	10	43	60	-2	0	10	120	128	1	2	10	871	-859	4	4	10	564	583	6	6	10	441	414
-3	-2	10	182	-185	-1	0	10	44	58	2	2	10	287	288	5	4	10	218	-225	7	6	10	1086	-1080
-2	-2	10	581	-590	1	0	10	524	524	3	2	10	43	-24	6	4	10	851	867	8	6	10	63	-22
-1	-2	10	162	154	2	0	10	448	463	4	2	10	387	-385	7	4	10	381	-390	9	6	10	277	294
0	-2	10	260	273	3	0	10	905	-922	5	2	10	120	134	8	4	10	184	-177	10	6	10	541	562
1	-2	10	143	-138	4	0	10	335	-351	6	2	10	1000	991	9	4	10	374	-367	-5	7	10	111	-106
2	-2	10	114	-114	5	0	10	140	131	7	2	10	708	-700	10	4	10	841	859	-4	7	10	176	175
3	-2	10	280	298	6	0	10	527	525	8	2	10	786	-797	-8	5	10	584	-574	-3	7	10	303	296
4	-2	10	589	-592	7	0	10	159	-172	9	2	10	80	78	-5	5	10	168	-162	-2	7	10	401	-416
5	-2	10	189	-177	8	0	10	120	-110	10	2	10	427	443	-4	5	10	578	578	-1	7	10	407	-423
6	-2	10	735	741	9	0	10	520	-539	-7	3	10	188	156	-3	5	10	792	804	0	7	10	195	179
7	-2	10	159	158	10	0	10	327	325	-6	3	10	228	-238	-2	5	10	1050	-1063	1	7	10	802	816
8	-2	10	380	-387	-7	1	10	56	61	-5	3	10	188	-193	-1	5	10	264	-274	2	7	10	540	-562
9	-2	10	285	-286	-5	1	10	812	-818	-4	3	10	92	99	0	5	10	285	385	3	7	10	126	-132
-7	-1	10	388	397	-4	1	10	157	162	-3	3	10	228	231	1	5	10	148	150	4	7	10	314	303
-6	-1	10	124	-110	-3	1	10	1032	1057	-2	3	10	123	113	2	5	10	325	-311	5	7	10	268	-274
-5	-1	10	567	-571	-2	1	10	107	-105	-1	3	10	411	-418	3	5	10	868	892	6	7	10	565	-565
-4	-1	10	118	114	-1	1	10	870	-877	0	3	10	693	-692	4	5	10	587	-577	7	7	10	1023	1025
-3	-1	10	180	183	0	1	10	227	239	1	3	10	631	660	5	5	10	375	-376	8	7	10	357	-370
-2	-1	10	188	180	1	1	10	184	-181	2	3	10	125	-107	6	5	10	590	-625	10	7	10	371	-383

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 20

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	8	10	178	-179	8	10	10	418	422	3	-5	11	139	143	1	-2	11	315	323	8	0	11	222	205
-3	8	10	181	-183	-1	11	10	151	148	4	-5	11	345	-345	2	-2	11	230	-224	7	0	11	178	177
-2	8	10	284	288	0	11	10	344	365	5	-5	11	473	468	3	-2	11	438	-432	8	0	11	854	863
-1	8	10	52	44	1	11	10	237	219	-6	-4	11	342	-335	4	-2	11	418	405	9	0	11	408	-403
0	8	10	165	167	2	11	10	679	-694	-5	-4	11	505	-488	5	-2	11	842	-859	-7	1	11	219	217
1	8	10	502	-514	3	11	10	373	378	-4	-4	11	818	813	6	-2	11	83	-84	-5	1	11	176	193
2	8	10	102	83	5	11	10	72	-75	-3	-4	11	228	239	7	-2	11	409	422	-4	1	11	1255	-1260
3	8	10	102	-104	6	11	10	47	48	-2	-4	11	183	-180	8	-2	11	348	352	-3	1	11	344	347
5	8	10	388	-409	7	11	10	696	712	-1	-4	11	621	-618	-7	-1	11	314	312	-2	1	11	766	765
6	8	10	705	700	2	12	10	452	489	0	-4	11	480	488	-6	-1	11	221	211	-1	1	11	974	986
7	8	10	719	-743	4	12	10	152	-142	1	-4	11	499	-499	-5	-1	11	65	92	0	1	11	1228	-1232
8	8	10	117	-108	6	12	10	183	180	2	-4	11	482	488	-4	-1	11	506	-521	1	1	11	520	532
9	8	10	238	245	-3	-7	11	378	-378	3	-4	11	110	89	-3	-1	11	87	86	2	1	11	481	-510
10	8	10	483	483	-2	-7	11	131	-148	4	-4	11	249	248	-2	-1	11	224	-219	3	1	11	210	217
-3	8	10	96	75	-1	-7	11	527	518	5	-4	11	783	-781	-1	-1	11	530	533	4	1	11	97	96
-2	8	10	843	-868	1	-7	11	110	-115	6	-4	11	242	238	0	-1	11	421	-437	5	1	11	821	816
-1	8	10	228	223	2	-7	11	131	136	-6	-3	11	182	183	1	-1	11	213	-191	6	1	11	862	-862
0	8	10	316	-317	3	-7	11	158	150	-5	-3	11	458	442	2	-1	11	578	-580	7	1	11	209	-203
1	8	10	575	572	-5	-6	11	282	-283	-4	-3	11	700	-698	3	-1	11	466	465	8	1	11	248	-243
2	8	10	78	-77	-4	-6	11	105	105	-3	-3	11	418	-413	4	-1	11	608	-621	9	1	11	473	474
3	8	10	383	374	-3	-6	11	71	-78	-2	-3	11	273	287	5	-1	11	383	359	10	1	11	65	69
4	8	10	886	-892	-2	-6	11	317	298	-1	-3	11	886	874	6	-1	11	211	218	-7	2	11	138	-134
5	8	10	181	144	-1	-6	11	389	-356	0	-3	11	788	-778	7	-1	11	385	-358	-6	2	11	157	168
6	8	10	363	-354	2	-6	11	86	92	2	-3	11	43	34	8	-1	11	579	-586	-5	2	11	137	-138
7	8	10	437	433	3	-6	11	252	-244	3	-3	11	88	-100	9	-1	11	482	509	-4	2	11	800	802
8	8	10	104	-98	4	-6	11	464	481	4	-3	11	193	-197	-7	0	11	356	-358	-3	2	11	224	-225
-2	10	10	821	831	5	-8	11	292	-293	5	-3	11	844	883	-6	0	11	286	-284	-2	2	11	661	-673
-1	10	10	481	-488	-8	-9	11	240	238	6	-3	11	180	-205	-4	0	11	1088	1088	-1	2	11	475	-471
0	10	10	184	-179	-5	-5	11	425	434	7	-3	11	303	-309	-3	0	11	373	-355	0	2	11	1402	1429
1	10	10	412	-402	-4	-5	11	944	-932	8	-3	11	323	-322	-1	0	11	682	-622	1	2	11	205	-216
2	10	10	930	935	-3	-5	11	115	109	-5	-2	11	306	-302	0	0	11	582	604	2	2	11	176	-173
3	10	10	380	-378	-2	-5	11	280	-255	-4	-2	11	373	365	1	0	11	76	-53	3	2	11	89	70
4	10	10	506	507	-1	-5	11	142	137	-3	-2	11	239	219	2	0	11	1128	1131	4	2	11	352	352
5	10	10	113	-104	0	-5	11	63	-73	-2	-2	11	179	-174	3	0	11	116	-352	5	2	11	842	-842
6	10	10	205	-202	1	-5	11	474	455	-1	-2	11	724	-721	4	0	11	358	-124	6	2	11	701	693
7	10	10	758	-748	2	-5	11	353	-348	0	-2	11	987	978	5	0	11	845	-841	7	2	11	483	486

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 21

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
8	2	11	83	-88	10	4	11	80	-28	-1	7	11	146	-138	9	8	11	274	271	1	-5	12	237	234
9	2	11	938	-939	-5	5	11	286	-301	0	7	11	841	-844	-2	10	11	77	21	3	-5	12	209	-218
10	2	11	187	187	-4	5	11	850	-867	1	7	11	507	487	-1	10	11	546	559	4	-5	12	108	116
-7	3	11	178	182	-3	5	11	925	832	2	7	11	458	448	1	10	11	407	-405	5	-5	12	181	-192
-6	3	11	134	-146	-2	5	11	415	426	3	7	11	510	-527	2	10	11	53	-42	-6	-4	12	328	313
-5	3	11	157	154	-1	5	11	53	44	4	7	11	383	-423	3	10	11	74	-70	-5	-4	12	951	-533
-4	3	11	285	-280	0	5	11	838	-865	5	7	11	468	464	4	10	11	265	279	-4	-4	12	253	-252
-3	3	11	138	-147	1	5	11	277	285	6	7	11	286	-249	5	10	11	239	255	-3	-4	12	271	278
-2	3	11	148	156	2	5	11	344	-362	7	7	11	288	-288	7	10	11	131	-115	-2	-4	12	544	543
-1	3	11	519	526	3	5	11	608	616	8	7	11	574	578	8	10	11	356	-362	-1	-4	12	187	-206
0	3	11	887	-903	4	5	11	923	114	9	7	11	301	311	0	11	11	236	-236	0	-4	12	149	-151
1	3	11	395	-397	5	5	11	528	-525	10	7	11	499	-512	1	11	11	740	764	1	-4	12	270	-284
2	3	11	230	227	6	5	11	84	70	-4	8	11	75	65	3	11	11	221	-226	3	-4	12	119	111
3	3	11	381	328	8	5	11	161	-174	-3	8	11	131	-130	5	11	11	55	-49	4	-4	12	271	277
4	3	11	453	-461	9	5	11	443	488	-2	8	11	268	-288	6	11	11	77	-70	6	-4	12	247	-247
5	3	11	597	593	10	5	11	161	156	0	8	11	637	650	7	11	11	240	238	-6	-3	12	353	-348
6	3	11	103	-86	-5	6	11	158	-160	2	8	11	571	-566	2	12	11	276	-277	-5	-3	12	280	274
7	3	11	647	-656	-4	6	11	643	652	4	8	11	80	71	3	12	11	468	471	-4	-3	12	352	343
8	3	11	68	45	-3	6	11	841	-858	5	8	11	224	-220	4	12	11	86	76	-3	-3	12	262	-254
9	3	11	654	670	-2	6	11	283	-265	6	8	11	81	-63	5	12	11	251	-261	-2	-3	12	706	-698
10	3	11	157	-154	-1	6	11	85	88	7	8	11	475	479	-2	-7	12	581	-583	-1	-3	12	582	582
-5	4	11	237	227	0	6	11	1057	1088	8	8	11	346	-353	0	-7	12	388	375	0	-3	12	390	383
-4	4	11	471	473	1	6	11	436	-450	9	8	11	428	-438	1	-7	12	107	107	2	-3	12	387	-385
-3	4	11	357	-348	2	6	11	287	-300	10	8	11	295	284	-4	-6	12	184	-180	3	-3	12	163	160
-2	4	11	240	-243	3	6	11	230	-232	-3	9	11	437	450	-3	-6	12	226	-228	4	-3	12	256	-256
-1	4	11	358	-365	4	6	11	122	108	-2	9	11	87	85	-2	-6	12	284	282	6	-3	12	454	453
0	4	11	722	710	5	6	11	127	-122	-1	9	11	172	-153	-1	-6	12	182	184	-6	-2	12	180	176
1	4	11	361	376	6	6	11	680	711	0	9	11	200	-192	0	-6	12	280	-280	-4	-2	12	284	-288
2	4	11	245	244	7	6	11	144	-148	1	9	11	89	-62	1	-6	12	98	-100	-3	-2	12	121	126
3	4	11	485	-502	8	6	11	514	-521	2	9	11	482	509	2	-6	12	256	254	-2	-2	12	722	711
4	4	11	263	264	9	6	11	306	-313	3	9	11	146	150	4	-6	12	247	-255	-1	-2	12	560	-572
5	4	11	72	-76	10	6	11	195	197	4	9	11	313	-305	-5	-5	12	343	344	0	-2	12	685	-681
6	4	11	98	-93	-5	7	11	262	264	5	9	11	305	-305	-4	-5	12	207	204	1	-2	12	425	409
7	4	11	382	369	-4	7	11	428	-433	6	9	11	185	188	-2	-5	12	280	-250	2	-2	12	601	608
8	4	11	425	429	-3	7	11	302	300	7	9	11	181	-150	-1	-5	12	88	-78	3	-2	12	355	-357
9	4	11	523	-536	-2	7	11	275	278	8	9	11	254	248	0	-5	12	60	58	4	-2	12	217	-215

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 22

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	-2	12	393	390	2	1	12	153	145	10	3	12	848	878	1	8	12	1101	1101	8	8	12	80	-42
6	-2	12	400	-380	3	1	12	389	-385	-6	4	12	247	-252	2	8	12	589	-588	-2	9	12	408	407
6	-2	12	203	203	4	1	12	428	413	-4	4	12	298	259	3	8	12	91	88	0	9	12	278	288
-8	-1	12	84	82	5	1	12	375	384	-3	4	12	410	400	4	8	12	538	-510	1	9	12	673	-664
-5	-1	12	205	211	6	1	12	504	518	-2	4	12	53	-61	5	8	12	308	324	2	9	12	188	176
-4	-1	12	101	84	7	1	12	327	-323	-1	4	12	101	-111	7	8	12	682	688	3	9	12	356	359
-13	-1	12	188	-173	8	1	12	338	-356	0	4	12	850	-849	8	8	12	390	-406	4	9	12	604	614
-2	-1	12	234	-251	-6	2	12	183	176	1	4	12	754	756	8	8	12	78	77	5	9	12	634	-640
0	-1	12	934	933	-5	2	12	123	-115	2	4	12	317	328	10	8	12	515	-527	6	9	12	80	82
1	-1	12	303	-308	-4	2	12	135	-111	3	4	12	84	-75	-4	7	12	174	175	8	8	12	185	-181
2	-1	12	526	-546	-3	2	12	511	523	4	4	12	674	-646	-3	7	12	361	-357	-1	10	12	257	244
3	-1	12	121	-114	-2	2	12	71	67	5	4	12	573	550	-2	7	12	257	263	0	10	12	88	82
4	-1	12	539	550	-1	2	12	883	-813	6	4	12	584	-604	-1	7	12	314	325	1	10	12	450	437
5	-1	12	633	-656	0	2	12	288	-302	7	4	12	82	69	0	7	12	128	-114	2	10	12	288	-295
6	-1	12	488	488	1	2	12	1020	1050	8	4	12	85	100	1	7	12	1131	-1141	4	10	12	368	-363
7	-1	12	288	251	2	2	12	84	84	8	4	12	484	502	2	7	12	488	510	5	10	12	603	614
8	-1	12	603	-612	3	2	12	305	-319	10	4	12	725	-743	3	7	12	483	476	6	10	12	135	130
-8	0	12	157	-161	4	2	12	118	-113	-4	5	12	138	-140	4	7	12	181	-184	7	10	12	303	304
-5	0	12	447	-447	5	2	12	47	52	-3	5	12	586	-586	5	7	12	354	-370	8	10	12	360	-369
-13	0	12	778	773	6	2	12	458	-482	-2	5	12	625	640	6	7	12	550	552	0	11	12	311	-322
-2	0	12	87	105	7	2	12	468	458	-1	5	12	164	168	7	7	12	622	-605	1	11	12	461	-457
0	0	12	712	-715	8	2	12	483	491	0	5	12	363	374	8	7	12	100	88	2	11	12	643	653
1	0	12	56	46	10	2	12	554	-582	1	5	12	585	-626	9	7	12	103	108	3	11	12	98	-86
2	0	12	187	187	-4	3	12	88	108	2	5	12	108	-88	10	7	12	338	353	4	11	12	162	155
3	0	12	671	679	-3	3	12	180	-188	3	5	12	341	-325	-3	8	12	287	296	5	11	12	335	-343
4	0	12	490	-508	-1	3	12	424	-443	4	5	12	1150	1133	-2	8	12	53	-45	6	11	12	71	53
5	0	12	277	278	-1	3	12	437	438	5	5	12	307	-268	-1	8	12	232	-222	7	11	12	240	-221
6	0	12	275	-278	0	3	12	605	611	6	5	12	141	138	0	8	12	210	-213	4	12	12	236	241
7	0	12	83	85	1	3	12	1014	-1020	7	5	12	587	-615	1	8	12	685	670	-2	-8	13	485	-454
8	0	12	788	728	2	3	12	381	-358	8	5	12	187	191	2	8	12	58	-26	-1	-8	13	431	418
-8	1	12	49	-38	3	3	12	438	446	9	5	12	384	-388	3	8	12	333	-342	0	-6	13	237	235
-5	1	12	373	388	4	3	12	178	178	10	5	12	702	726	4	8	12	182	-188	1	-6	13	250	-256
-13	1	12	888	-877	5	3	12	688	-676	-3	6	12	543	558	5	8	12	768	755	2	-6	13	363	-370
-1	1	12	1030	1045	6	3	12	612	608	-2	6	12	553	-554	6	8	12	482	-451	3	-6	13	445	438
0	1	12	582	587	8	3	12	350	-354	-1	6	12	422	-428	7	8	12	274	273	-4	-5	13	341	334
1	1	12	930	-944	8	3	12	128	-132	0	6	12	177	172	8	8	12	248	234	-3	-5	13	73	74

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

OBSERVED AND CALCULATED				OBSERVED AND CALCULATED				OBSERVED AND CALCULATED				OBSERVED AND CALCULATED				OBSERVED AND CALCULATED			
H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC
-2	-5	13	379 353	0	-2	13	506 -309	8	0	13	505 -502	-1	3	13	821 -631	5	5	13	831 632
-1	-5	13	453 -434	1	-2	13	517 -513	9	0	13	119 127	0	3	13	764 766	7	5	13	377 -378
0	-5	13	146 -144	2	-2	13	78 75	-8	1	13	280 286	1	3	13	535 551	8	5	13	87 82
1	-5	13	72 -77	3	-2	13	644 845	-9	1	13	203 -187	2	3	13	787 -769	9	5	13	176 -174
2	-5	13	664 667	4	-2	13	17 -68	-4	1	13	507 -508	3	3	13	739 -731	10	5	13	315 -327
3	-5	13	439 -437	5	-2	13	61 -65	-3	1	13	362 -363	4	3	13	775 763	-4	6	13	288 -306
4	-5	13	79 89	6	-2	13	73 -69	-2	1	13	425 -439	5	3	13	46 -43	-3	6	13	382 381
5	-5	13	133 -132	7	-2	13	93 -88	-1	1	13	553 -561	6	3	13	266 -264	-2	6	13	182 187
-5	-4	13	330 328	8	-2	13	234 -217	0	1	13	1122 1143	7	3	13	108 113	-1	6	13	102 -96
-4	-4	13	501 -488	-8	-1	13	192 193	1	1	13	80 -78	8	3	13	77 -82	0	6	13	583 -589
-3	-4	13	124 -128	-9	-1	13	60 -78	2	1	13	472 477	9	3	13	206 -200	1	6	13	425 445
-2	-4	13	589 587	-10	-1	13	70 78	3	1	13	848 -873	10	3	13	88 -84	2	6	13	532 548
0	-4	13	227 -243	-3	-1	13	156 144	4	1	13	62 72	-4	4	13	44 -49	3	6	13	389 -384
1	-4	13	146 146	-2	-1	13	368 404	5	1	13	125 131	-3	4	13	224 226	4	6	13	358 -359
2	-4	13	588 -581	-1	-1	13	725 -721	6	1	13	508 509	-2	4	13	73 75	5	6	13	322 -325
3	-4	13	217 224	1	-1	13	702 688	7	1	13	185 -147	-1	4	13	454 459	7	6	13	541 543
4	-4	13	56 -59	2	-1	13	262 253	8	1	13	135 132	0	4	13	343 -341	8	6	13	221 220
5	-4	13	388 381	3	-1	13	640 -637	9	1	13	274 -242	1	4	13	718 -718	10	6	13	183 198
-5	-3	13	264 -283	4	-1	13	189 183	-6	2	13	354 -348	2	4	13	283 286	-4	7	13	89 73
-4	-3	13	358 -350	5	-1	13	340 344	-9	2	13	443 438	3	4	13	762 792	-2	7	13	206 -206
-3	-3	13	260 264	6	-1	13	127 -124	-4	2	13	322 -335	4	4	13	366 -381	-1	7	13	53 -44
-2	-3	13	230 217	7	-1	13	200 -169	-2	2	13	225 214	5	4	13	482 -510	0	7	13	656 656
-1	-3	13	805 -781	8	-1	13	528 536	-1	2	13	630 636	6	4	13	398 -400	1	7	13	201 -196
0	-3	13	595 595	-6	0	13	161 -157	0	2	13	1225 -1225	7	4	13	237 -169	2	7	13	668 -688
1	-3	13	247 257	-4	0	13	424 -412	1	2	13	128 -121	8	4	13	170 -170	3	7	13	44 24
2	-3	13	252 255	-3	0	13	218 218	2	2	13	387 384	9	4	13	275 287	4	7	13	611 613
3	-3	13	255 -246	-2	0	13	81 90	3	2	13	928 927	-10	4	13	270 290	5	7	13	102 -101
4	-3	13	151 153	-1	0	13	627 623	4	2	13	317 -304	-5	5	13	77 -74	6	7	13	66 -59
5	-3	13	387 -362	0	0	13	328 -316	5	2	13	441 -449	-4	5	13	184 191	7	7	13	252 -244
6	-3	13	286 301	1	0	13	537 -543	7	2	13	131 137	-3	5	13	381 -387	10	7	13	200 208
7	-3	13	119 107	2	0	13	878 -881	8	2	13	238 247	-2	5	13	137 -144	-3	8	13	153 -156
-6	-2	13	328 -325	3	0	13	1074 1072	-6	3	13	378 377	-1	5	13	63 54	-2	8	13	142 135
-5	-2	13	277 271	4	0	13	107 -119	-5	3	13	168 -172	0	5	13	450 455	-1	8	13	165 167
-3	-2	13	303 -306	5	0	13	84 -81	-4	3	13	143 144	1	5	13	331 335	0	8	13	485 -487
-2	-2	13	127 -112	6	0	13	232 -245	-3	3	13	111 109	3	5	13	749 -757	2	8	13	768 786
-1	-2	13	835 821	7	0	13	218 217	-2	3	13	150 -148	4	5	13	122 133	3	8	13	93 93

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDE CLUSTER

PAGE 24

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	8	13	741	-758	2	-5	14	118	148	3	-1	14	424	428	-1	2	14	220	218	10	4	14	380	415
5	8	13	146	-121	3	-5	14	554	552	4	-1	14	804	-818	0	2	14	174	178	-4	5	14	84	-88
6	8	13	404	408	-3	-4	14	205	-185	5	-1	14	223	237	1	2	14	550	-555	-3	5	14	137	127
7	8	13	248	-261	-2	-4	14	300	-288	6	-1	14	112	-101	2	2	14	162	-163	-2	5	14	468	-451
8	8	13	135	152	-1	-4	14	125	137	8	-1	14	162	-164	3	2	14	153	158	-1	5	14	284	275
9	8	13	148	151	0	-4	14	285	281	-5	0	14	118	-117	4	2	14	636	628	0	5	14	358	-361
-2	8	13	77	88	1	-4	14	388	407	-4	0	14	235	-222	5	2	14	65	27	1	5	14	531	519
0	8	13	157	156	3	-4	14	829	-828	-3	0	14	188	-180	6	2	14	270	-255	2	5	14	247	251
1	8	13	203	182	4	-4	14	128	123	-2	0	14	148	150	7	2	14	584	-580	3	5	14	308	299
2	8	13	482	-487	5	-4	14	288	278	-1	0	14	255	-255	8	2	14	380	358	4	5	14	1306	-1311
3	8	13	159	-183	-2	-3	14	384	385	0	0	14	823	817	9	2	14	52	56	5	5	14	578	585
4	8	13	531	525	-1	-3	14	244	-254	1	0	14	133	-138	-5	3	14	400	405	6	5	14	513	507
5	8	13	380	402	0	-3	14	517	-489	2	0	14	448	-438	-3	3	14	104	-106	7	5	14	307	317
6	8	13	718	-717	1	-3	14	70	54	3	0	14	688	-685	-2	3	14	317	311	8	5	14	640	-650
7	8	13	182	173	2	-3	14	318	318	4	0	14	778	780	0	3	14	837	-840	9	5	14	435	439
8	8	13	183	-185	3	-3	14	143	144	6	0	14	221	-215	1	3	14	805	810	10	5	14	336	-344
-1	10	13	227	-223	5	-3	14	243	-250	7	0	14	330	-330	2	3	14	452	448	-4	6	14	187	189
1	10	13	126	134	-6	-3	14	188	-172	8	0	14	417	418	3	3	14	304	-308	-3	6	14	183	-170
2	10	13	308	318	-5	-2	14	217	-209	-5	1	14	110	103	4	3	14	705	-697	-2	6	14	388	380
3	10	13	141	134	-4	-2	14	114	104	-3	1	14	251	256	5	3	14	485	512	-1	8	14	150	-144
4	10	13	238	-231	-2	-2	14	157	152	-2	1	14	381	-356	7	3	14	188	188	0	8	14	62	45
5	10	13	601	-577	-2	-2	14	350	-337	-1	1	14	75	-66	8	3	14	108	-111	1	8	14	688	-680
6	10	13	488	486	-1	-2	14	110	-133	0	1	14	375	-377	9	3	14	122	128	2	8	14	216	215
7	10	13	128	141	0	-2	14	438	433	1	1	14	350	353	-5	4	14	481	-488	3	8	14	187	-180
8	10	13	80	84	2	-2	14	430	-435	2	1	14	223	231	-3	4	14	123	118	4	8	14	858	883
1	11	13	415	-414	4	-2	14	377	368	3	1	14	348	341	-2	4	14	188	204	5	8	14	387	-354
2	11	13	317	-311	5	-2	14	278	-278	4	1	14	782	-757	-1	4	14	305	-286	6	8	14	330	-338
3	11	13	330	321	6	-2	14	254	254	5	1	14	384	-378	0	4	14	844	880	7	8	14	455	-447
4	11	13	126	135	7	-2	14	188	-204	6	1	14	118	113	1	4	14	608	-600	8	8	14	738	757
5	11	13	184	188	-5	-1	14	275	288	7	1	14	587	588	2	4	14	818	-821	9	8	14	198	-208
6	11	13	308	-307	-3	-1	14	151	-154	8	1	14	500	-488	4	4	14	1103	1115	-3	7	14	82	85
7	11	13	205	-182	-2	-1	14	167	165	9	1	14	223	227	5	4	14	800	-804	-1	7	14	64	-68
-2	-5	14	101	100	-1	-1	14	448	434	-5	2	14	288	-275	6	4	14	110	-104	0	7	14	115	-118
-1	-5	14	352	347	0	-1	14	728	-725	-4	2	14	202	205	7	4	14	138	-148	1	7	14	613	610
0	-5	14	181	-178	1	-1	14	104	-114	-3	2	14	138	-131	8	4	14	140	154	2	7	14	281	-284
1	-5	14	510	-488	2	-1	14	334	332	-2	2	14	162	-151	9	4	14	383	-388	3	7	14	378	-406

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	7	14	474	-468	3	11	14	101	89	2	-1	15	481	-489	0	2	15	427	423	-4	5	15	292	288
5	7	14	442	448	4	11	14	199	-199	3	-1	15	488	470	1	2	15	198	-198	-3	5	15	319	316
6	7	14	108	85	5	11	14	441	438	4	-1	15	143	154	2	2	15	118	-133	-2	5	15	324	-329
7	7	14	382	384	6	11	14	102	82	5	-1	15	244	-250	3	2	15	323	-314	-1	5	15	290	-287
8	7	14	404	-421	8	11	14	184	161	6	-1	15	130	-133	5	2	15	381	382	1	5	15	122	-118
9	7	14	54	-52	-1	-5	15	214	212	7	-1	15	193	209	6	2	15	424	406	2	5	15	84	-53
-2	8	14	152	-158	0	-5	15	73	85	-5	0	15	234	224	7	2	15	337	-350	3	5	15	688	682
-1	8	14	126	128	1	-5	15	777	-755	-4	0	15	152	158	8	2	15	371	-382	5	5	15	1010	-1003
0	8	14	253	267	2	-5	15	250	-238	-3	0	15	498	-484	9	2	15	131	137	6	5	15	84	77
1	8	14	743	-747	-3	-4	15	381	-384	-2	0	15	324	333	-4	3	15	283	278	7	5	15	531	536
3	8	14	307	317	-1	-4	15	88	79	-1	0	15	145	-157	-3	3	15	60	56	8	5	15	127	111
4	8	14	218	232	0	-4	15	785	767	0	0	15	54	-56	-2	3	15	241	-239	9	5	15	380	-383
5	8	14	838	-840	2	-4	15	216	-224	1	0	15	322	332	-1	3	15	190	183	-3	6	15	304	-299
6	8	14	73	-58	3	-4	15	435	-434	2	0	15	717	710	0	3	15	46	-60	-2	6	15	341	337
7	8	14	120	125	4	-4	15	110	105	3	0	15	822	-823	1	3	15	355	-373	-1	6	15	183	179
8	8	14	62	61	-3	-3	15	370	361	4	0	15	275	-276	2	3	15	426	429	0	6	15	144	-150
9	8	14	164	-158	-1	-3	15	339	-338	5	0	15	357	337	3	3	15	402	408	1	6	15	426	-458
-1	9	14	262	253	0	-3	15	237	-240	6	0	15	388	389	4	3	15	299	-304	3	6	15	262	-277
0	9	14	347	-343	2	-3	15	303	-286	7	0	15	266	-266	5	3	15	260	-271	5	6	15	727	712
1	9	14	471	490	3	-3	15	245	232	-4	1	15	188	-185	7	3	15	85	81	6	6	15	150	144
2	9	14	68	61	4	-3	15	164	164	-3	1	15	482	486	8	3	15	295	315	7	6	15	680	-681
3	9	14	364	-352	5	-3	15	172	170	-2	1	15	183	-172	9	3	15	78	-78	8	6	15	272	-273
4	9	14	587	-588	-4	-2	15	134	-128	-1	1	15	75	71	-4	4	15	386	-383	9	6	15	419	431
5	9	14	859	861	-2	-2	15	133	122	0	1	15	248	-248	-3	4	15	47	-34	-3	7	15	60	-72
6	9	14	129	136	-1	-2	15	375	-365	1	1	15	344	350	-2	4	15	248	257	-2	7	15	245	-256
7	9	14	313	-320	0	-2	15	84	93	2	1	15	528	-524	-1	4	15	60	-67	-1	7	15	68	63
8	9	14	189	-198	1	-2	15	111	112	3	1	15	632	654	0	4	15	188	-214	0	7	15	176	-178
9	10	14	116	112	3	-2	15	389	-404	4	1	15	286	280	1	4	15	575	584	1	7	15	188	182
0	10	14	203	-202	5	-2	15	74	33	5	1	15	419	-432	2	4	15	175	-181	2	7	15	201	188
1	10	14	138	136	6	-2	15	262	259	6	1	15	517	-525	3	4	15	724	-728	4	7	15	238	-238
2	10	14	123	135	-4	-1	15	116	107	7	1	15	433	428	4	4	15	180	203	5	7	15	272	-275
3	10	14	608	607	-3	-1	15	222	213	8	1	15	357	347	5	4	15	653	670	7	7	15	406	395
4	10	14	712	-709	-2	-1	15	297	-303	-5	2	15	201	-203	6	4	15	228	-238	8	7	15	273	268
5	10	14	276	-280	0	-1	15	485	480	-3	2	15	280	-258	7	4	15	221	-221	9	7	15	488	-483
6	10	14	182	178	0	-1	15	159	153	-2	2	15	98	102	8	4	15	232	-248	-2	8	15	268	264
7	10	14	489	-501	1	-1	15	477	-458	-1	2	15	182	-188	9	4	15	188	184	-1	8	15	227	-229

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 26

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	8	15	128	132	3	-2	18	184	-178	-1	2	18	71	-68	-1	5	18	480	-488	2	8	18	98	-106
1	8	15	200	218	4	-2	18	223	-212	0	2	18	103	108	1	5	18	108	-108	3	8	18	85	50
2	8	15	487	-504	5	-2	18	74	-78	1	2	18	277	276	2	5	18	188	183	4	8	18	132	-125
4	8	15	300	282	6	-2	18	182	-182	2	2	18	281	-280	3	5	18	487	-455	5	8	18	250	248
5	8	15	270	282	-4	-1	18	211	-201	3	2	18	250	240	4	5	18	988	878	7	8	18	81	87
6	8	15	418	-407	-2	-1	18	278	271	4	2	18	407	-411	5	5	18	271	-260	8	8	18	184	-190
8	8	15	138	-138	-1	-1	18	318	-302	5	2	18	100	-112	6	5	18	488	-485	0	9	18	223	223
8	8	15	281	288	0	-1	18	368	354	6	2	18	131	133	7	5	18	215	-218	2	9	18	68	-61
-1	8	15	54	30	1	-1	18	75	80	7	2	18	713	714	8	5	18	943	948	3	9	18	108	111
0	8	15	288	270	2	-1	18	204	-210	8	2	18	431	-440	9	5	18	148	-154	4	9	18	418	420
1	8	15	405	-408	3	-1	18	378	-380	-3	3	18	252	245	-3	6	18	88	-110	5	9	18	324	-325
2	8	15	441	440	4	-1	18	588	578	-1	3	18	308	-327	-2	6	18	572	-551	6	9	18	280	-255
3	8	15	245	254	7	-1	18	245	-245	0	3	18	113	111	-1	6	18	508	521	7	9	18	188	188
4	8	15	184	-201	-4	0	18	350	338	1	3	18	363	-353	0	6	18	188	187	2	10	18	84	-85
5	8	15	612	-625	-3	0	18	88	105	2	3	18	81	88	1	6	18	161	160	3	10	18	134	128
6	8	15	612	621	-2	0	18	524	-511	3	3	18	134	-135	2	6	18	532	-534	4	10	18	381	-404
7	8	15	72	75	-1	0	18	441	438	4	3	18	282	278	3	6	18	414	415	5	10	18	433	430
1	10	15	104	88	0	0	18	110	-107	5	3	18	182	-157	4	6	18	543	-538	6	10	18	304	306
2	10	15	187	-160	2	0	18	141	141	6	3	18	83	-98	5	6	18	188	180	0	-3	17	426	412
4	10	15	145	132	3	0	18	738	721	7	3	18	410	-425	6	6	18	481	467	1	-3	17	227	-233
5	10	15	727	721	4	0	18	517	-532	8	3	18	247	256	7	6	18	422	433	2	-3	17	148	148
6	10	15	607	-623	5	0	18	158	-158	9	3	18	138	143	8	6	18	825	-836	-1	-2	17	75	63
7	10	15	285	-288	7	0	18	513	517	-3	4	18	246	-245	8	6	18	98	85	0	-2	17	253	-264
3	11	15	275	-278	-4	1	18	238	-228	-2	4	18	255	-272	-2	7	18	217	218	2	-2	17	84	89
4	11	15	107	111	-3	1	18	212	-204	-1	4	18	510	500	-1	7	18	304	-308	3	-2	17	108	101
5	11	15	282	-283	-2	1	18	530	533	0	4	18	284	-288	0	7	18	88	87	5	-2	17	138	141
-1	-4	18	53	-79	-1	1	18	171	-163	1	4	18	237	235	1	7	18	587	-580	-1	-1	17	128	117
1	-4	18	140	-142	1	1	18	128	-127	2	4	18	212	233	2	7	18	91	503	0	-1	17	80	48
2	-4	18	84	-88	2	1	18	123	120	3	4	18	171	188	3	7	18	74	882	1	-1	17	65	70
-1	-3	18	188	182	3	1	18	527	-532	4	4	18	712	-733	4	7	18	588	586	3	-1	17	328	-324
1	-3	18	147	-152	4	1	18	578	573	5	4	18	308	318	5	7	18	247	-248	5	-1	17	110	112
3	-3	18	278	-270	5	1	18	378	381	6	4	18	177	172	7	7	18	354	-346	6	-1	17	108	111
4	-3	18	120	123	6	1	18	53	-58	7	4	18	241	243	8	7	18	873	875	-3	0	17	614	583
0	-2	18	288	-278	7	1	18	885	-884	8	4	18	285	-285	-1	8	18	251	303	-2	0	17	71	-86
1	-2	18	150	132	8	1	18	481	501	-3	5	18	181	153	0	8	18	104	-105	-1	0	17	280	-282
2	-2	18	138	127	-2	2	18	321	-322	-2	5	18	580	582	1	8	18	224	217	1	0	17	141	131

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 27

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	17	249	-247	1	4	17	89	-86	3	8	17	376	-374	-2	2	18	488	473	7	5	18	188	182
3	0	17	251	259	2	4	17	181	183	4	8	17	80	82	-1	2	18	80	80	8	5	18	315	-310
4	0	17	378	388	3	4	17	133	138	5	8	17	84	82	0	2	18	382	-376	-1	8	18	458	-444
5	0	17	382	-377	4	4	17	88	83	6	8	17	63	51	1	2	18	528	-517	0	8	18	342	-348
6	0	17	252	-242	5	4	17	281	-281	7	8	17	82	-50	2	2	18	781	748	2	8	18	621	625
-3	1	17	842	-824	6	4	17	81	88	1	8	17	176	188	3	2	18	82	-70	3	8	18	342	-337
-0	1	17	342	347	8	4	17	284	300	2	8	17	107	-84	4	2	18	56	-44	4	8	18	66	70
0	1	17	182	181	-2	5	17	402	413	5	8	17	248	250	6	2	18	173	187	5	8	18	76	-77
1	1	17	276	-288	-1	5	17	431	414	6	8	17	358	-353	7	2	18	602	-588	6	8	18	80	-57
2	1	17	133	130	0	5	17	308	-290	3	10	17	137	-127	-2	3	18	316	-308	7	8	18	287	-282
4	1	17	448	-438	1	5	17	70	-82	4	10	17	173	174	-1	3	18	125	130	0	7	18	214	213
5	1	17	215	217	2	5	17	88	105	5	10	17	453	-448	0	3	18	80	72	1	7	18	114	-102
6	1	17	583	554	4	5	17	184	-157	0	-2	18	107	-100	1	3	18	424	417	2	7	18	708	-705
7	1	17	223	-221	5	5	17	577	578	1	-2	18	474	-447	2	3	18	384	-356	3	7	18	214	212
-3	2	17	333	315	7	5	17	192	-197	2	-2	18	114	112	3	3	18	97	-98	4	7	18	214	224
-2	2	17	44	-58	8	5	17	332	-353	3	-2	18	98	82	4	3	18	118	126	5	7	18	74	78
-1	2	17	408	-387	-2	8	17	255	-282	1	-1	18	280	265	5	3	18	110	114	6	7	18	318	-320
0	2	17	178	-174	-1	8	17	438	-436	2	-1	18	86	-78	6	3	18	255	-242	7	7	18	243	248
1	2	17	480	488	0	8	17	383	357	3	-1	18	56	-25	7	3	18	317	314	1	8	18	73	-57
3	2	17	95	-104	1	8	17	420	422	4	-1	18	272	-257	-2	4	18	400	395	2	8	18	361	366
6	2	17	485	-472	2	8	17	156	-156	5	-1	18	102	105	-1	4	18	289	-288	3	8	18	105	-86
7	2	17	125	123	3	8	17	283	-253	-2	0	18	605	578	0	4	18	62	-67	4	8	18	296	-307
8	2	17	573	573	4	8	17	281	273	-1	0	18	68	-74	1	4	18	138	-135	5	8	18	88	-84
-3	3	17	112	-111	5	8	17	441	-425	0	0	18	93	-85	2	4	18	147	154	6	8	18	327	328
-2	3	17	228	240	7	8	17	482	478	1	0	18	241	-233	4	4	18	136	133	7	8	18	138	-142
-1	3	17	129	130	4	8	17	403	402	3	0	18	325	-308	5	4	18	188	-191	2	9	18	123	-128
1	3	17	282	-274	-1	7	17	243	244	4	0	18	434	428	6	4	18	122	121	4	9	18	62	61
2	3	17	87	-88	0	7	17	181	-180	5	0	18	84	-103	7	4	18	134	-128	5	9	18	157	155
5	3	17	94	55	1	7	17	430	-433	6	0	18	100	88	-2	5	18	578	-560	0	0	19	121	118
6	3	17	70	75	3	7	17	450	448	-2	1	18	687	-663	-1	5	18	348	348	1	0	19	48	-28
7	3	17	78	72	4	7	17	187	-188	-1	1	18	59	-59	0	5	18	180	176	2	0	19	167	-158
8	3	17	438	-443	6	7	17	51	56	0	1	18	392	380	2	5	18	403	-403	3	0	19	63	-72
-3	4	17	280	254	7	7	17	188	-192	1	1	18	427	418	3	5	18	341	334	-1	1	19	408	-383
-2	4	17	281	-280	8	7	17	283	-271	2	1	18	474	-460	4	5	18	241	-237	0	1	19	331	-314
-1	4	17	83	-84	0	8	17	210	189	3	1	18	309	303	5	5	18	122	133	1	1	19	419	413
0	4	17	186	175	2	8	17	183	181	4	1	18	317	-312	6	5	18	108	111	2	1	19	293	273

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER

PAGE 28

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
3	1	19	149	-151	3	3	19	322	-316	3	5	19	318	-312	6	7	19	71	74	5	3	20	465	-444
5	1	19	172	-175	4	3	19	317	-312	4	5	19	52	47	2	8	19	161	-155	1	4	20	265	247
-1	2	19	307	287	5	3	19	186	192	5	5	19	243	-237	3	8	19	487	481	2	4	20	120	-116
0	2	19	374	355	6	3	19	139	142	6	5	19	289	279	4	8	19	84	-82	3	4	20	353	-334
1	2	19	529	-513	-1	4	19	187	180	7	5	19	111	-101	5	8	19	358	-360	5	4	20	430	419
2	2	19	361	-353	1	4	19	112	-111	0	6	19	278	-276	2	1	20	335	324	1	5	20	164	-159
3	2	19	388	380	2	4	19	359	-348	1	6	19	377	-386	1	2	20	438	418	2	5	20	249	258
4	2	19	187	174	3	4	19	212	215	3	6	19	502	485	2	2	20	578	-564	3	5	20	154	143
5	2	19	149	-154	4	4	19	123	117	4	6	19	129	-132	3	2	20	215	-208	5	5	20	332	-340
6	2	19	111	115	6	4	19	367	-375	6	6	19	192	-194	4	2	20	81	89	2	6	20	564	-570
-1	3	19	188	-183	7	4	19	318	314	1	7	19	443	424	1	3	20	360	-346	3	6	20	111	106
0	3	19	187	-180	0	5	19	142	134	3	7	19	818	-815	2	3	20	378	361	4	6	20	126	130
1	3	19	313	315	1	5	19	125	121	4	7	19	134	131	3	3	20	392	374	5	6	20	346	344
2	3	19	395	343	2	5	19	278	261	5	7	19	287	285	4	3	20	238	-248	4	7	20	288	-288

Chapter 3. Positional ($\times 10^5$ for Ru and P, all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Ru and P, all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_3(\mu\text{-C}_3\text{H}_5)(\mu_3\text{-PPhCH}_2\text{PPh}_2)(\text{CO})_8$ (31)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	87934(3)	37245(3)	17422(3)	236(2)	333(2)	268(2)	-45(1)	5(1)	-112(1)
Ru(2)	84878(3)	14902(3)	27263(3)	267(2)	302(2)	295(2)	15(1)	-49(1)	-64(1)
Ru(3)	74909(3)	26848(3)	6230(3)	281(2)	296(2)	246(2)	-49(1)	-37(1)	-78(1)
P(1)	70600(9)	48660(9)	28935(9)	278(5)	313(5)	275(5)	-61(4)	9(4)	-115(4)
P(2)	64838(8)	27662(8)	24519(8)	250(5)	284(5)	272(5)	-14(4)	-33(4)	-96(4)
O(11)	11107(3)	2337(3)	379(3)	36(2)	81(3)	55(2)	-16(2)	13(2)	-6(2)
O(12)	9900(3)	5650(3)	1780(3)	68(2)	72(2)	93(3)	-8(2)	-11(2)	-52(2)
O(13)	9940(3)	2570(3)	3957(3)	44(2)	64(2)	42(2)	-3(2)	-18(2)	-17(2)
O(14)	7542(3)	5228(3)	-355(3)	64(2)	39(2)	42(2)	10(2)	-15(2)	-17(2)
O(21)	11164(3)	-32(3)	2241(4)	36(2)	70(3)	91(3)	-27(2)	-8(2)	2(2)
O(22)	8225(4)	579(4)	5214(3)	105(3)	95(3)	40(2)	22(2)	-7(2)	-38(3)
O(31)	9388(3)	2039(3)	-1401(3)	67(2)	62(2)	51(2)	-21(2)	22(2)	-19(2)
O(32)	5354(3)	3939(3)	-757(3)	57(2)	80(3)	62(2)	5(2)	-35(2)	-8(2)
C(11)	10232(4)	2839(4)	875(4)	31(2)	51(3)	39(2)	-2(2)	-3(2)	-11(2)
C(12)	9472(4)	4930(4)	1764(4)	36(2)	49(3)	44(3)	-5(2)	-1(2)	-17(2)
C(13)	9364(4)	2648(4)	3234(4)	30(2)	40(2)	30(2)	-3(2)	-1(2)	-6(2)
C(14)	7789(4)	4403(4)	316(4)	35(2)	37(2)	30(2)	-10(2)	4(2)	-11(2)
C(21)	10171(4)	521(4)	2412(4)	41(3)	40(2)	45(3)	-8(2)	-14(2)	-10(2)
C(22)	8331(4)	911(4)	4273(4)	47(3)	51(3)	43(3)	6(2)	-5(2)	-18(2)
C(31)	8711(4)	2276(4)	-635(4)	44(2)	39(2)	32(2)	-8(2)	-4(2)	-13(2)
C(32)	6159(4)	3465(4)	-240(4)	44(3)	44(2)	29(2)	-5(2)	-5(2)	-14(2)
C(1)	7104(4)	1022(4)	541(4)	48(3)	39(2)	45(3)	-15(2)	-1(2)	-17(2)
C(2)	8053(4)	407(4)	1212(4)	41(3)	29(2)	58(3)	-15(2)	1(2)	-11(2)
C(3)	7946(4)	-1(4)	2388(4)	47(3)	34(2)	55(3)	-6(2)	-6(2)	-13(2)
C(4)	5833(3)	4230(3)	2979(3)	27(2)	37(2)	30(2)	-5(2)	2(2)	-12(2)
C(112)	7147(3)	3880(2)	5169(2)	49(1)					
C(113)	7462(3)	3770(2)	6266(2)	63(1)					
C(114)	8012(3)	4542(2)	6542(2)	75(2)					
C(115)	8248(3)	5424(2)	5720(2)	71(2)					
C(116)	7934(3)	5533(2)	4623(2)	55(1)					
C(111)	7364(3)	4761(2)	4347(2)	35(1)					
C(122)	5330(3)	7099(2)	3170(2)	52(1)					
C(123)	4720(3)	8317(2)	2862(2)	59(1)					
C(124)	5131(3)	8919(2)	1880(2)	57(1)					
C(125)	6151(3)	8301(2)	1205(2)	58(1)					
C(126)	6760(3)	7091(2)	1512(2)	44(1)					

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(121)	6350(3)	6479(2)	2495(2)	32(1)					
C(212)	4275(2)	2541(2)	2092(2)	47(1)					
C(213)	3231(2)	2222(2)	2418(2)	58(1)					
C(214)	3077(2)	1615(2)	3492(2)	60(1)					
C(215)	3967(2)	1327(2)	4240(2)	59(1)					
C(216)	5012(2)	1646(2)	3913(2)	44(1)					
C(211)	5166(2)	2253(2)	2839(2)	32(1)					

Chapter 3. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_3(\mu\text{-C}_3\text{H}_5)(\mu_3\text{-PPhCH}_2\text{PPh}_2)(\text{CO})_8$ (31)

	x	y	z	U(11)
H(11)	7237(40)	874(40)	-244(12)	56(14)
H(12)	6264(12)	1094(36)	794(34)	39(11)
H(21)	8861(15)	100(32)	826(29)	34(11)
H(31)	8560(23)	-711(16)	2712(29)	29(10)
H(32)	7139(19)	63(43)	2754(38)	62(15)
H(41)	5492(3)	4146(3)	3759(3)	35(8)
H(42)	5201(3)	4769(3)	2517(3)	35(8)
H(112)	6722(3)	3282(2)	4956(2)	114(6)
H(113)	7279(3)	3087(2)	6903(2)	114(6)
H(114)	8255(3)	4456(2)	7301(2)	114(6)
H(115)	8674(3)	6021(2)	5933(2)	114(6)
H(116)	9117(3)	6216(2)	3986(2)	114(6)
H(122)	5013(3)	6632(2)	3931(2)	114(6)
H(123)	3931(3)	8796(2)	3385(2)	114(6)
H(124)	4658(3)	9864(2)	1642(2)	114(6)
H(125)	6466(3)	9767(2)	444(2)	114(6)
H(126)	7550(3)	6603(2)	989(2)	114(6)
H(212)	4394(2)	3011(2)	1261(2)	114(6)
H(213)	2541(2)	2445(2)	1840(2)	114(6)
H(214)	2268(2)	1368(2)	3745(2)	114(6)
H(215)	3848(2)	857(2)	5071(2)	114(6)
H(216)	5702(2)	1423(2)	4492(2)	114(6)

Chapter 3. For $\text{Ru}_3(\mu\text{-C}_3\text{H}_5)(\mu_3\text{-PPhCH}_2\text{PPh}_2)(\text{CO})_8$ (31)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 1

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	0	0	781	775	-8	2	0	84	-84	4	3	0	587	-588	-4	5	0	838	-840	-7	7	0	270	-282
2	0	0	1138	-1128	-8	2	0	881	-885	5	3	0	838	-873	-3	5	0	275	273	-5	7	0	449	469
3	0	0	984	-987	-7	2	0	621	-601	6	3	0	1334	-1323	-2	5	0	1444	1471	-4	7	0	278	272
4	0	0	122	-128	-6	2	0	86	-86	7	3	0	91	-87	-1	5	0	355	368	-3	7	0	268	-268
5	0	0	520	-507	-5	2	0	564	561	8	3	0	627	627	0	5	0	124	-121	-2	7	0	278	-224
6	0	0	134	128	-4	2	0	477	465	9	3	0	328	331	1	5	0	428	413	-1	7	0	313	330
7	0	0	679	674	-3	2	0	53	-48	10	3	0	377	374	2	5	0	483	-463	0	7	0	443	470
8	0	0	949	952	-2	2	0	687	-664	11	3	0	580	568	3	5	0	1583	-1617	1	7	0	548	-566
9	0	0	63	66	-1	2	0	634	623	12	3	0	216	-211	4	5	0	392	-397	2	7	0	393	-404
10	0	0	380	-381	0	2	0	895	-905	-10	4	0	64	-64	5	5	0	711	727	4	7	0	108	107
11	0	0	200	-144	1	2	0	81	74	-8	4	0	35	30	6	5	0	798	795	5	7	0	339	340
-11	1	0	290	298	2	2	0	282	289	-8	4	0	67	72	7	5	0	44	-77	6	7	0	359	367
-10	1	0	171	-185	3	2	0	828	-819	-7	4	0	148	-143	8	5	0	217	-204	7	7	0	487	493
-9	1	0	1018	-1004	4	2	0	515	-509	-6	4	0	724	-718	9	5	0	193	189	8	7	0	235	225
-8	1	0	381	-389	5	2	0	145	-152	-5	4	0	82	74	11	5	0	374	-381	9	7	0	553	-550
-7	1	0	475	472	6	2	0	488	508	-4	4	0	1018	1039	12	5	0	129	-125	10	7	0	717	-703
-6	1	0	1020	1014	7	2	0	930	935	-3	4	0	1291	1313	-8	6	0	83	72	12	7	0	382	383
-5	1	0	349	382	8	2	0	127	-136	-2	4	0	273	-268	-7	6	0	280	285	-6	8	0	134	-138
-4	1	0	186	-188	9	2	0	77	-75	-1	4	0	331	-363	-6	6	0	552	561	-5	8	0	227	-225
-3	1	0	385	-386	10	2	0	200	214	0	4	0	164	162	-5	6	0	84	-80	-3	8	0	81	-84
-2	1	0	945	-927	11	2	0	407	-410	1	4	0	164	136	-4	6	0	498	-503	-2	8	0	521	-505
-1	1	0	1818	-1834	12	2	0	605	-606	2	4	0	740	-787	-3	6	0	833	-832	-1	8	0	253	-275
0	1	0	720	-720	-10	3	0	110	-93	3	4	0	552	562	-2	6	0	297	-307	0	8	0	808	822
1	1	0	1781	1821	-9	3	0	752	748	4	4	0	1692	1729	-1	6	0	314	341	1	8	0	846	872
2	1	0	1685	1683	-8	3	0	204	197	5	4	0	318	354	1	6	0	128	-118	2	8	0	90	-106
3	1	0	743	-742	-7	3	0	451	-446	6	4	0	284	-282	2	6	0	403	428	3	8	0	480	-483
4	1	0	862	-840	-6	3	0	158	171	7	4	0	918	-950	3	6	0	318	308	4	8	0	615	-602
5	1	0	231	228	-5	3	0	573	557	8	4	0	456	-431	4	6	0	779	-771	5	8	0	687	-709
6	1	0	48	19	-4	3	0	181	183	10	4	0	128	-125	5	6	0	333	-335	6	8	0	273	-290
7	1	0	583	-586	-3	3	0	438	-441	11	4	0	248	-241	6	6	0	118	103	7	8	0	239	248
8	1	0	493	480	-2	3	0	457	-456	12	4	0	537	538	7	6	0	121	123	8	8	0	599	601
9	1	0	123	-119	-1	3	0	144	-158	-9	5	0	301	292	8	6	0	461	-464	9	8	0	618	609
10	1	0	353	-361	0	3	0	353	-319	-8	5	0	300	300	9	6	0	484	-473	10	8	0	216	-219
11	1	0	180	153	1	3	0	488	452	-7	5	0	217	214	10	6	0	407	393	11	8	0	688	-684
-11	2	0	376	384	2	3	0	688	702	-8	5	0	480	-473	11	6	0	440	438	12	8	0	213	-215
-10	2	0	785	785	3	3	0	1058	1082	-5	5	0	902	-905	12	6	0	187	-186	-5	9	0	315	318

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	9	0	138	-147	9	11	0	151	144	0	-10	1	473	-473	-12	-7	1	390	417	8	-8	1	47	37
-1	9	0	685	-688	0	12	0	83	-93	1	-10	1	165	-168	-11	-7	1	757	744	8	-8	1	178	188
0	9	0	789	-788	2	12	0	233	-223	3	-10	1	207	-207	-10	-7	1	72	-71	-12	-5	1	155	-170
1	9	0	471	480	3	12	0	129	-118	4	-10	1	203	191	-9	-7	1	887	-888	-11	-5	1	260	-253
2	9	0	882	892	4	12	0	357	354	-11	-9	1	248	-230	-8	-7	1	420	-411	-10	-5	1	134	-142
3	9	0	94	84	5	12	0	467	459	-10	-8	1	254	242	-7	-7	1	71	83	-9	-5	1	305	307
8	9	0	418	-398	6	12	0	180	184	-9	-9	1	273	269	-5	-7	1	149	147	-8	-5	1	297	-299
7	9	0	463	-463	7	12	0	339	-330	-7	-9	1	68	82	-4	-7	1	1010	1036	-7	-5	1	375	-394
8	9	0	190	-199	8	12	0	431	-437	-6	-9	1	126	119	-3	-7	1	524	582	-6	-5	1	76	-95
9	9	0	422	424	-7	-12	1	628	-654	-5	-9	1	845	-864	-2	-7	1	458	-475	-5	-5	1	817	820
10	9	0	529	534	-6	-12	1	551	-555	-4	-9	1	387	-371	-1	-7	1	898	-915	-4	-5	1	527	548
11	9	0	47	52	-5	-12	1	191	182	-3	-9	1	185	-158	0	-7	1	258	-268	-3	-5	1	280	-274
-4	10	0	300	303	-4	-12	1	215	221	-2	-9	1	395	419	1	-7	1	442	439	-2	-5	1	33	-40
-3	10	0	178	192	-3	-12	1	131	133	-1	-9	1	989	998	2	-7	1	310	-321	0	-5	1	230	-235
-2	10	0	253	247	-1	-12	1	155	183	0	-9	1	494	496	3	-7	1	149	-142	1	-5	1	1044	-1062
-1	10	0	280	286	0	-12	1	202	-197	1	-8	1	374	-359	4	-7	1	339	349	2	-5	1	782	794
0	10	0	402	-414	-8	-11	1	858	837	2	-8	1	222	-217	5	-7	1	132	131	3	-5	1	1300	1353
1	10	0	761	-785	-7	-11	1	377	382	3	-8	1	332	-328	7	-7	1	64	-55	4	-5	1	130	123
3	10	0	428	457	-6	-11	1	428	-423	4	-8	1	382	-397	-12	-6	1	226	-229	5	-5	1	287	-287
8	10	0	260	-278	-5	-11	1	344	-376	-11	-8	1	403	-411	-11	-6	1	130	124	6	-5	1	287	-283
8	10	0	178	184	-4	-11	1	90	-89	-10	-8	1	705	-887	-10	-6	1	772	788	7	-5	1	435	-437
7	10	0	201	208	-3	-11	1	381	373	-9	-8	1	84	-78	-9	-6	1	445	450	8	-5	1	214	-219
8	10	0	250	-225	-2	-11	1	76	-65	-8	-8	1	329	324	-8	-6	1	447	-481	9	-5	1	91	-79
9	10	0	321	-320	-1	-11	1	194	-205	-7	-8	1	38	14	-7	-6	1	119	-138	-12	-4	1	248	238
10	10	0	88	106	0	-11	1	235	233	-6	-8	1	331	339	-5	-6	1	222	240	-11	-4	1	172	190
-2	11	0	98	-97	1	-11	1	153	162	-5	-8	1	349	870	-5	-6	1	34	44	-9	-4	1	535	534
-1	11	0	50	82	2	-11	1	341	-333	-4	-8	1	489	-488	-4	-6	1	284	-279	-8	-4	1	590	588
0	11	0	344	349	-9	-10	1	178	-178	-3	-8	1	1002	-1038	-3	-6	1	258	272	-7	-4	1	967	-964
1	11	0	41	-11	-8	-10	1	200	-218	-2	-8	1	177	-887	-2	-6	1	640	652	-6	-4	1	1420	-1430
2	11	0	310	-312	-7	-10	1	83	80	0	-6	1	800	827	-1	-6	1	137	-138	-5	-4	1	347	-374
3	11	0	168	170	-6	-10	1	303	293	1	-6	1	489	500	0	-6	1	574	-583	-4	-4	1	429	455
4	11	0	375	379	-5	-10	1	141	-138	2	-6	1	118	121	1	-6	1	578	602	-3	-4	1	1231	1234
8	11	0	73	-55	-4	-10	1	129	-114	3	-6	1	65	64	2	-6	1	740	743	-2	-4	1	562	570
8	11	0	430	-439	-3	-10	1	164	140	4	-6	1	115	-114	3	-6	1	439	-439	-1	-4	1	778	787
7	11	0	259	-263	-2	-10	1	534	539	5	-6	1	360	-361	4	-6	1	954	-965	0	-4	1	348	370
8	11	0	326	323	-1	-10	1	174	-154	8	-6	1	188	-180	8	-6	1	129	-124	1	-4	1	310	-350

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-ORTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-4	1	1366	-1404	-7	-2	1	85	107	7	-1	1	1240	1260	-2	1	1	43	-54	12	2	1	454	-441
3	-4	1	220	-209	-6	-2	1	1388	1382	8	-1	1	451	459	-1	1	1	1373	-1360	-10	3	1	420	-433
4	-4	1	1004	1029	-5	-2	1	538	546	9	-1	1	299	-298	0	1	1	2071	-2016	-9	1	1	242	253
5	-4	1	887	880	-4	-2	1	375	345	10	-1	1	492	-480	1	1	1	354	-368	-8	3	1	798	814
6	-4	1	82	83	-3	-2	1	326	-329	11	-1	1	292	-281	2	1	1	488	503	-7	3	1	170	-177
7	-4	1	127	129	-2	-2	1	113	117	-10	0	1	303	-307	3	1	1	266	-253	-6	3	1	169	-169
8	-4	1	50	-54	-1	-2	1	257	-257	-9	0	1	253	-251	4	1	1	457	453	-5	3	1	380	394
9	-4	1	271	-271	0	-2	1	703	-716	-8	0	1	374	387	5	1	1	46	-40	-4	3	1	322	320
10	-4	1	441	-430	1	-2	1	73	-39	-7	0	1	155	159	7	1	1	764	-773	-3	3	1	826	-844
-12	-3	1	498	-489	2	-2	1	801	893	-6	0	1	173	-159	8	1	1	860	-866	-2	3	1	42	-55
-11	-3	1	88	-79	3	-2	1	208	184	-5	0	1	444	438	9	1	1	178	177	-1	3	1	143	-128
-10	-3	1	70	72	4	-2	1	254	-265	-4	0	1	300	302	10	1	1	209	221	0	3	1	742	727
-9	-3	1	201	-187	5	-2	1	499	502	-3	0	1	222	-209	11	1	1	172	-193	1	3	1	1037	-1045
-8	-3	1	748	735	6	-2	1	788	748	-2	0	1	1152	-1132	12	1	1	257	-238	2	3	1	338	-330
-7	-3	1	1238	1254	7	-2	1	113	104	-1	0	1	1449	-1468	-11	2	1	210	-212	3	3	1	1345	1337
-6	-3	1	186	-207	8	-2	1	477	-480	0	0	1	1081	1052	-10	2	1	493	509	4	3	1	982	982
-5	-3	1	1050	-1081	9	-2	1	583	-570	1	0	1	2117	2036	-9	2	1	1072	1014	5	3	1	185	-174
-4	-3	1	1100	-1103	11	-2	1	202	221	2	0	1	532	511	-8	2	1	263	-262	6	3	1	103	80
-3	-3	1	170	-171	-12	-1	1	247	251	3	0	1	443	437	-7	2	1	843	-840	7	3	1	387	-384
-2	-3	1	128	119	-11	-1	1	141	144	4	0	1	81	61	-6	2	1	245	-243	8	3	1	610	-603
-1	-3	1	87	54	-10	-1	1	77	81	5	0	1	1113	-1125	-5	2	1	747	-800	9	3	1	308	-303
0	-3	1	636	844	-9	-1	1	233	243	6	0	1	1309	-1314	-4	2	1	845	-849	10	3	1	236	230
1	-3	1	853	855	-7	-1	1	430	-441	7	0	1	218	-207	-3	2	1	561	564	11	3	1	802	803
2	-3	1	882	-854	-6	-1	1	228	-233	8	0	1	900	889	-2	2	1	1884	1855	12	3	1	550	548
3	-3	1	1421	-1449	-5	-1	1	367	382	9	0	1	870	845	-1	2	1	476	475	-10	4	1	58	55
4	-3	1	530	-525	-4	-1	1	286	270	10	0	1	161	-137	0	2	1	1208	-1203	-9	4	1	158	-160
5	-3	1	260	265	-3	-1	1	184	-186	11	0	1	169	-170	1	2	1	738	-731	-8	4	1	228	238
6	-3	1	282	284	-2	-1	1	928	-914	12	0	1	84	-88	2	2	1	537	537	-7	4	1	252	258
7	-3	1	195	-208	-1	-1	1	1438	1502	-11	1	1	651	852	3	2	1	250	-254	-6	4	1	510	-523
8	-3	1	240	238	0	-1	1	1447	1452	-10	1	1	528	540	4	2	1	333	307	-5	4	1	988	-993
9	-3	1	155	141	1	-1	1	414	-411	-9	1	1	511	-512	5	2	1	158	157	-4	4	1	205	-201
-12	-2	1	137	139	2	-1	1	551	-557	-8	1	1	717	-714	7	2	1	71	83	-3	4	1	649	670
-11	-2	1	314	-319	3	-1	1	220	-222	-7	1	1	288	-298	8	2	1	275	270	-2	4	1	868	870
-10	-2	1	183	-188	4	-1	1	1168	-1187	-6	1	1	387	-383	9	2	1	221	-217	-1	4	1	148	-139
-9	-2	1	186	-188	5	-1	1	872	-859	-5	1	1	1906	1906	10	2	1	495	495	0	4	1	626	635
-8	-2	1	618	-617	6	-1	1	638	634	-3	1	1	1601	1588	11	2	1	197	188	1	4	1	960	-958

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	4	1	2404	-2435	-3	6	1	243	-308	-3	8	1	201	214	4	10	1	37	-56	-4	-11	2	81	-52
3	4	1	1730	-1758	-2	8	1	571	-570	-2	8	1	331	-347	5	10	1	112	-96	-3	-11	2	56	-82
4	4	1	751	761	-1	8	1	203	-214	-1	8	1	838	-831	6	10	1	377	343	-2	-11	2	151	-158
5	4	1	1108	1127	0	8	1	207	-201	0	8	1	133	-142	7	10	1	471	476	-1	-11	2	182	-185
6	4	1	292	298	1	8	1	82	89	1	8	1	619	645	8	10	1	93	89	0	-11	2	276	282
7	4	1	86	101	2	6	1	629	646	2	8	1	393	399	9	10	1	368	-370	1	-11	2	440	470
8	4	1	119	-122	3	6	1	891	1004	3	8	1	414	-408	10	10	1	123	-125	2	-11	2	112	-115
9	4	1	441	-446	4	6	1	402	-400	4	8	1	369	359	11	10	1	251	253	-10	-10	2	87	78
10	4	1	875	-865	5	6	1	254	-283	5	8	1	272	-267	-2	11	1	240	-244	-9	-10	2	306	-300
11	4	1	411	-392	6	6	1	202	-172	6	8	1	887	-888	0	11	1	354	359	-8	-10	2	514	-512
12	4	1	467	464	7	6	1	200	209	7	8	1	475	-459	1	11	1	115	96	-7	-10	2	131	143
-9	5	1	77	-74	8	6	1	81	-74	8	8	1	43	38	2	11	1	150	-147	-6	-10	2	389	398
-7	5	1	719	725	9	6	1	517	-527	9	8	1	705	698	3	11	1	108	114	-5	-10	2	48	-50
-8	5	1	352	374	10	6	1	102	-93	10	8	1	392	384	4	11	1	247	258	-4	-10	2	96	-97
-5	5	1	400	-408	11	6	1	376	359	12	8	1	193	-180	5	11	1	111	-117	-3	-10	2	98	99
-4	5	1	785	-774	-7	7	1	484	-473	-5	9	1	92	-87	6	11	1	178	-185	-2	-10	2	185	204
-3	5	1	705	-725	-6	7	1	601	-605	-4	9	1	170	170	10	11	1	126	-133	-1	-10	2	157	145
-1	5	1	980	972	-5	7	1	303	301	-3	9	1	398	412	1	12	1	246	278	0	-10	2	233	-229
0	5	1	187	190	-4	7	1	852	839	-2	9	1	489	487	2	12	1	123	-131	1	-10	2	87	-90
1	5	1	1041	1039	-3	7	1	91	92	0	9	1	850	-857	3	12	1	551	-553	2	-10	2	116	124
2	5	1	807	805	-2	7	1	277	-279	1	9	1	780	-774	4	12	1	413	422	3	-10	2	185	-197
3	5	1	1743	-1759	0	7	1	330	322	2	9	1	184	175	6	12	1	335	327	-9	-9	2	317	312
4	5	1	2098	-2142	1	7	1	125	-118	3	9	1	276	295	7	12	1	87	91	-8	-9	2	101	-98
5	5	1	175	-170	2	7	1	317	-336	5	9	1	542	545	8	12	1	118	114	-7	-9	2	307	-314
6	5	1	848	856	3	7	1	344	332	6	9	1	369	367	4	13	1	649	-650	-6	-9	2	367	340
7	5	1	259	267	4	7	1	73	80	7	9	1	422	-412	5	13	1	336	-328	-5	-9	2	218	247
8	5	1	133	129	5	7	1	300	-298	8	9	1	604	-500	-6	-12	2	440	-432	-4	-9	2	473	-476
9	5	1	384	384	6	7	1	120	116	9	9	1	242	-223	-5	-12	2	296	-298	-3	-9	2	417	-448
10	5	1	263	260	7	7	1	888	873	10	9	1	352	339	-4	-12	2	153	-160	-2	-9	2	329	-335
11	5	1	441	-429	8	7	1	541	542	11	9	1	323	303	-3	-12	2	117	-113	-1	-9	2	255	250
12	5	1	370	-372	9	7	1	193	180	-4	10	1	285	-301	-2	-12	2	147	148	0	-9	2	447	451
-8	6	1	514	-519	10	7	1	401	-400	-2	10	1	415	418	-1	-12	2	473	480	1	-9	2	255	239
-7	6	1	282	-293	11	7	1	381	-373	-1	10	1	615	607	-8	-11	2	251	260	2	-9	2	252	267
-6	6	1	535	580	-5	8	1	55	-60	0	10	1	424	411	-7	-11	2	739	738	4	-9	2	518	-523
-5	6	1	946	947	-6	8	1	391	-379	1	10	1	176	-168	-6	-11	2	244	235	5	-9	2	488	-488
-4	6	1	104	-91	-4	8	1	142	137	2	10	1	497	-514	-5	-11	2	118	-118	-11	-8	2	350	322

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-ORTHENTHUM ALLYL CLUSTER

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-10	-A	2	344	-332	-10	-A	2	178	188	-12	-A	2	127	142	4	-3	2	522	-542	-5	-1	2	207	192					
-9	-A	2	453	-459	-9	-B	2	498	476	-11	-A	2	175	168	5	-3	2	202	-193	-4	-1	2	142	150					
-8	-A	2	287	-259	-8	-B	2	329	334	-10	-A	2	294	-309	6	-3	2	184	-194	-3	-1	2	450	-427					
-5	-A	2	888	874	-7	-B	2	231	244	-9	-A	2	57	57	7	-3	2	240	-269	-2	-1	2	473	-484					
-4	-A	2	932	926	-8	-B	2	341	358	-8	-A	2	1095	1047	8	-3	2	58	56	-1	-1	2	286	253					
-3	-A	2	180	-164	-5	-B	2	361	-376	-7	-A	2	432	446	9	-3	2	95	85	0	-1	2	98	-74					
-2	-A	2	577	-571	-4	-B	2	712	-720	-6	-A	2	109	-129	10	-3	2	275	276	1	-1	2	118	-111					
-1	-A	2	559	-574	-3	-B	2	195	-184	-5	-A	2	381	-391	-12	-2	2	411	390	2	-1	2	545	-533					
0	-A	2	186	-195	-2	-B	2	517	523	-4	-A	2	148	-143	-11	-2	2	355	362	3	-1	2	923	907					
1	-A	2	118	111	-1	-B	2	359	392	-3	-A	2	286	291	-10	-2	2	154	148	4	-1	2	273	-257					
2	-A	2	141	175	0	-B	2	481	-494	-2	-A	2	1527	1552	-9	-2	2	201	-206	5	-1	2	1090	-1116					
3	-A	2	687	645	1	-B	2	470	-487	-1	-A	2	1304	1333	-8	-2	2	1026	-1024	6	-1	2	785	-781					
4	-A	2	494	509	2	-B	2	645	647	0	-A	2	927	-983	-7	-2	2	1049	-1073	7	-1	2	507	512					
5	-B	2	323	-322	3	-B	2	471	470	2	-A	2	1324	-1335	-6	-2	2	332	345	8	-1	2	482	445					
6	-A	2	438	-425	4	-B	2	438	-428	3	-A	2	177	187	-5	-2	2	876	905	9	-1	2	278	268					
-11	-7	2	416	408	5	-B	2	173	173	5	-A	2	359	336	-4	-2	2	462	444	11	-1	2	89	95					
-10	-7	2	639	658	7	-B	2	285	-295	6	-A	2	590	586	-3	-2	2	457	-442	-11	0	2	165	108					
-9	-7	2	109	114	8	-B	2	316	-308	7	-A	2	434	432	-2	-2	2	195	-188	-10	0	2	186	-188					
-8	-7	2	362	-372	-12	-5	2	74	-71	8	-A	2	98	-81	-1	-2	2	711	-713	-9	0	2	284	-268					
-7	-7	2	331	-348	-11	-5	2	400	-397	9	-A	2	510	-499	0	-2	2	1205	-1202	-8	0	2	243	234					
-6	-7	2	411	-411	-10	-5	2	160	-161	10	-A	2	52	-55	1	-2	2	1077	-1048	-7	0	2	221	215					
-5	-7	2	622	-635	-9	-5	2	98	98	-11	-3	2	345	-343	2	-2	2	811	805	-6	0	2	814	-792					
-4	-7	2	543	571	-7	-5	2	452	-455	-10	-3	2	700	-688	3	-2	2	1010	1006	-5	0	2	485	454					
-3	-7	2	1217	1237	-6	-5	2	98	-92	-8	-3	2	514	-510	4	-2	2	524	-514	-4	0	2	1194	1143					
-2	-7	2	785	748	-5	-5	2	337	352	-8	-3	2	1176	1190	5	-2	2	96	50	-3	0	2	865	848					
-1	-7	2	564	-568	-4	-5	2	117	-113	-7	-3	2	1393	1404	6	-2	2	724	718	-2	0	2	1048	-1030					
0	-7	2	570	-567	-2	-5	2	338	337	-6	-3	2	197	-176	7	-2	2	172	168	-1	0	2	1254	-1248					
1	-7	2	202	144	0	-5	2	119	-134	-5	-3	2	237	-255	8	-2	2	323	-321	0	0	2	1187	-1136					
2	-7	2	186	-186	1	-5	2	1177	-1203	-4	-3	2	44	74	9	-2	2	58	-51	1	0	2	727	690					
3	-7	2	450	-447	2	-5	2	814	-816	-3	-3	2	1045	-1035	10	-2	2	273	-264	2	0	2	755	-744					
4	-7	2	482	476	3	-5	2	362	372	-2	-3	2	662	-687	-12	-1	2	128	-137	3	0	2	187	-153					
5	-7	2	519	505	4	-5	2	623	625	-1	-3	2	220	221	-10	-1	2	242	238	4	0	2	1421	1423					
6	-7	2	108	-113	5	-5	2	123	112	0	-3	2	1688	1708	-9	-1	2	522	517	5	0	2	472	478					
7	-7	2	247	-238	6	-5	2	338	348	1	-3	2	980	987	-8	-1	2	248	293	6	0	2	1048	-1075					
-12	-B	2	303	-308	8	-5	2	468	-470	2	-3	2	640	647	-7	-1	2	301	-303	7	0	2	1051	-1079					
-11	-B	2	376	-385	9	-5	2	617	-598	3	-3	2	631	-630	-6	-1	2	642	-628	8	0	2	144	-152					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
9	0	2	200	204	-3	2	2	1588	-1555	10	1	2	609	-579	3	5	2	522	531	0	7	2	304	314
10	0	2	293	283	-2	2	2	658	-621	11	3	2	139	140	4	5	2	845	-885	1	7	2	180	-195
11	0	2	271	254	-1	2	2	633	821	12	3	2	690	832	5	5	2	910	-924	2	7	2	131	-116
12	0	2	319	377	0	2	2	1171	1122	-9	4	2	118	-100	6	5	2	274	-270	3	7	2	283	274
-11	1	2	75	50	1	2	2	743	-729	-8	4	2	98	88	7	5	2	171	-177	4	7	2	732	728
-10	1	2	606	514	2	2	2	621	630	-7	4	2	140	132	8	5	2	192	171	5	7	2	526	-533
-9	1	2	160	146	3	2	2	38	-29	-6	4	2	259	-253	9	5	2	625	847	6	7	2	449	-452
-8	1	2	435	-437	4	2	2	810	-798	-5	4	2	284	-268	10	5	2	685	872	7	7	2	37	31
-7	1	2	78	-57	5	2	2	465	-465	-4	4	2	250	252	11	5	2	100	95	8	7	2	302	311
-6	1	2	29	-42	6	2	2	695	702	-3	4	2	100	-83	12	5	2	476	-454	9	7	2	142	130
-5	1	2	124	-1258	7	2	2	253	230	-2	4	2	484	-456	-8	6	2	308	-311	10	7	2	125	122
-4	1	2	562	-529	8	2	2	142	-127	-1	4	2	248	255	-7	6	2	905	-895	11	7	2	59	-67
-3	1	2	2094	2022	9	2	2	361	-374	0	4	2	175	-128	-6	6	2	417	-404	12	7	2	82	-66
-2	1	2	2710	2697	10	2	2	93	76	1	4	2	1346	1327	-5	6	2	417	805	-6	8	2	133	135
-1	1	2	53	-39	11	2	2	291	316	2	4	2	365	-164	-4	6	2	588	597	-5	8	2	407	-412
0	1	2	629	-592	12	2	2	145	135	3	4	2	1691	-1730	-3	6	2	141	138	-4	8	2	88	-72
1	1	2	647	-623	-10	3	2	377	-400	4	4	2	1315	-1311	-2	6	2	834	643	-1	8	2	461	453
2	1	2	953	-948	-9	3	2	538	-548	5	4	2	238	278	-1	6	2	513	-517	-2	8	2	92	89
3	1	2	515	-515	-8	3	2	71	67	6	4	2	207	196	0	6	2	1138	-1149	-1	8	2	306	-315
4	1	2	384	-402	-7	3	2	275	272	7	4	2	515	530	1	6	2	927	-945	0	8	2	413	-410
5	1	2	1389	1427	-6	3	2	159	159	8	4	2	867	852	2	6	2	351	358	2	8	2	398	373
6	1	2	997	1011	-5	3	2	464	468	9	4	2	412	417	3	6	2	1404	1422	4	8	2	387	407
7	1	2	107	-109	-4	3	2	391	382	10	4	2	742	-732	4	6	2	548	559	5	8	2	1000	1003
8	1	2	652	-662	-3	3	2	272	-287	11	4	2	838	-847	5	6	2	162	-157	6	8	2	252	-256
9	1	2	542	-521	-2	3	2	656	-667	12	4	2	170	-161	6	6	2	45	40	7	8	2	768	-760
10	1	2	106	83	-1	3	2	736	-703	-9	5	2	236	-237	8	6	2	198	-185	8	8	2	338	-339
11	1	2	42	-21	0	3	2	439	441	-8	5	2	516	-524	9	6	2	282	-294	9	8	2	88	81
12	1	2	97	-83	1	3	2	544	-520	-7	5	2	182	200	10	6	2	128	-134	10	8	2	254	264
-11	2	2	555	-544	2	3	2	54	39	-6	5	2	844	837	11	6	2	191	196	11	8	2	271	251
-10	2	2	377	-369	3	3	2	131	-139	-5	5	2	120	116	12	6	2	146	144	12	8	2	342	338
-9	2	2	441	440	4	3	2	1230	1250	-3	5	2	173	189	-7	7	2	98	88	-5	9	2	232	-227
-8	2	2	482	485	5	3	2	108	-107	-2	5	2	344	-411	-6	7	2	715	-729	-4	9	2	354	-370
-7	2	2	214	-218	6	3	2	67	73	-1	5	2	642	-653	-5	7	2	412	-441	-3	9	2	177	171
-6	2	2	294	273	7	3	2	858	844	0	5	2	589	-598	-4	7	2	186	214	-2	9	2	606	631
-5	2	2	88	-72	8	3	2	284	-257	1	5	2	438	857	-3	7	2	341	319	-1	9	2	578	572
-4	2	2	1157	-1169	9	3	2	892	-717	2	5	2	1989	2014	-1	7	2	205	210	1	8	2	597	-582

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 7

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
2	9	2	444	-444	4	12	2	293	-288	-6	-9	3	85	-85	-2	-7	3	626	635	-1	-5	3	733	742
3	9	2	115	-112	5	12	2	233	237	-5	-9	3	608	593	-1	-7	3	259	250	0	-5	3	194	212
4	9	2	502	-494	6	12	2	140	137	-4	-9	3	128	-116	0	-7	3	264	240	1	-5	3	169	-171
5	9	2	400	388	7	12	2	110	-112	-3	-9	3	219	-232	1	-7	3	85	88	2	-5	3	630	-632
6	9	2	1077	1068	8	12	2	304	284	-2	-9	3	156	-151	2	-7	3	172	-166	3	-5	3	230	-241
7	9	2	420	414	3	13	2	516	512	-1	-9	3	100	-103	3	-7	3	814	-818	4	-5	3	118	126
8	9	2	387	-387	4	13	2	89	-77	0	-9	3	128	-124	4	-7	3	188	-180	5	-5	3	165	-167
9	9	2	501	-501	5	13	2	373	-375	2	-9	3	223	214	5	-7	3	541	547	6	-5	3	302	282
10	9	2	185	-193	-4	-12	3	87	-70	3	-9	3	523	511	6	-7	3	200	144	7	-5	3	580	590
-4	10	2	341	-355	-3	-12	3	460	-444	4	-9	3	122	138	7	-7	3	241	-245	8	-5	3	208	21
-3	10	2	622	-613	-8	-11	3	407	-398	5	-9	3	359	-362	-11	-6	3	379	-393	9	-5	3	318	-315
-2	10	2	88	-92	-7	-11	3	264	248	-11	-8	3	93	98	-10	-6	3	287	-292	-11	-4	3	145	127
-1	10	2	372	371	-6	-11	3	258	285	-10	-8	3	158	157	-8	-6	3	123	-108	-10	-4	3	89	-87
0	10	2	507	509	-5	-11	3	183	176	-9	-8	3	38	-23	-7	-6	3	362	349	-9	-4	3	302	-294
1	10	2	284	288	-4	-11	3	385	368	-7	-8	3	182	-175	-6	-6	3	1081	1087	-8	-4	3	244	259
2	10	2	73	54	-2	-11	3	416	-421	-6	-8	3	458	-486	-5	-6	3	377	368	-7	-4	3	714	693
4	10	2	184	-190	-1	-11	3	475	-496	-5	-8	3	163	-148	-4	-6	3	859	-869	-6	-4	3	82	-82
5	10	2	644	-625	0	-11	3	119	-111	-4	-8	3	835	842	-3	-6	3	817	-822	-5	-4	3	403	-419
6	10	2	65	-60	1	-11	3	413	404	-3	-8	3	720	707	-2	-6	3	171	-378	-4	-4	3	715	715
7	10	2	645	637	-9	-10	3	157	164	-2	-8	3	98	105	-1	-6	3	74	-77	-3	-4	3	455	-439
8	10	2	448	435	-8	-10	3	478	-465	-1	-8	3	60	50	0	-6	3	700	-145	-2	-4	3	1014	-1046
9	10	2	77	63	-7	-10	3	263	-281	0	-8	3	212	-221	1	-6	3	71	-68	-1	-4	3	323	-323
10	10	2	179	-177	-6	-10	3	64	84	1	-8	3	482	-465	2	-8	3	289	315	0	-4	3	1128	1142
-2	11	2	504	-513	-5	-10	3	192	171	2	-8	3	498	-492	3	-6	3	410	402	1	-4	3	1231	1269
-1	11	2	365	-366	-4	-10	3	224	-206	3	-8	3	183	172	4	-6	3	447	-453	2	-4	3	210	213
1	11	2	200	207	-3	-10	3	242	275	4	-8	3	846	844	5	-6	3	203	-207	3	-4	3	445	-454
4	11	2	377	373	-2	-10	3	188	187	5	-8	3	331	311	6	-6	3	365	367	4	-4	3	883	-882
5	11	2	87	-85	-1	-10	3	88	-88	6	-8	3	232	-213	8	-6	3	471	-458	5	-4	3	543	-552
8	11	2	517	-516	0	-10	3	276	-275	-10	-7	3	87	87	-10	-5	3	155	-148	6	-4	3	536	-545
9	11	2	62	-45	1	-10	3	103	-101	-9	-7	3	270	257	-9	-5	3	102	-110	7	-4	3	181	188
9	11	2	81	-73	2	-10	3	175	144	-8	-7	3	303	302	-7	-5	3	378	-373	8	-4	3	708	692
10	11	2	179	-176	3	-10	3	124	108	-7	-7	3	310	323	-6	-5	3	280	-278	9	-4	3	441	442
0	12	2	225	-221	-10	-9	3	109	-108	-6	-7	3	150	-158	-5	-5	3	488	808	-12	-3	3	217	196
1	12	2	198	189	-9	-9	3	306	298	-5	-7	3	1224	-1238	-4	-5	3	368	343	-11	-3	3	356	350
2	12	2	263	260	-8	-9	3	261	238	-4	-7	3	703	-722	-3	-5	3	723	-728	-10	-3	3	93	-82
3	12	2	249	-237	-7	-9	3	368	-351	-3	-7	3	109	111	-2	-5	3	59	-48	-9	-3	3	511	-511

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

TRI-ETHYLBENTHENE ALLYL CLUSTER

PAGE 4

H	K	L	10F0	10FC	H	K	L	10F0	10FC	H	K	L	10F0	10FC	H	K	L	10F0	10FC	H	K	L	10F0	10FC	H	K	L	10F0	10FC
-8	-1	3	978	-979	9	-2	3	70	-70	1	0	3	1150	-1100	-8	2	3	83	-38	5	3	3	448	454	5	3	3	448	454
-7	-3	3	452	-458	10	-2	3	273	284	2	0	3	1039	-1019	-7	2	3	251	247	6	3	3	775	-781	6	3	3	775	-781
-6	-3	3	788	801	11	-2	3	58	41	3	0	3	884	-872	-6	2	3	782	771	7	3	3	282	303	7	3	3	282	303
-5	-3	3	703	697	-11	-1	3	427	-425	4	0	3	1024	1015	-5	2	3	1323	1342	8	3	3	764	784	8	3	3	764	784
-3	-3	3	843	858	-10	-1	3	199	-197	5	0	3	1222	1251	-4	2	3	142	-320	9	3	3	252	-254	9	3	3	252	-254
-2	-3	3	414	-422	-9	-1	3	455	458	6	0	3	200	198	-3	2	3	1318	-1350	10	3	3	513	-493	10	3	3	513	-493
-1	-3	3	1660	-1694	-8	-1	3	898	874	7	0	3	545	-540	-2	2	3	1554	-1516	11	3	3	108	-118	11	3	3	108	-118
0	-3	3	1360	-1363	-7	-1	3	254	253	8	0	3	362	-348	-1	2	3	378	360	-8	4	3	94	97	-8	4	3	94	97
1	-3	3	210	227	-6	-1	3	151	-168	9	0	3	472	-462	0	2	3	322	-297	-7	4	3	309	308	-7	4	3	309	308
2	-3	3	1570	1587	-5	-1	3	128	-109	10	0	3	171	-188	1	2	3	274	281	-6	4	3	92	-77	-6	4	3	92	-77
3	-3	3	586	594	-4	-1	3	74	80	12	0	3	456	442	2	2	3	723	702	-5	4	3	710	-712	-5	4	3	710	-712
4	-3	3	108	-93	-3	-1	3	410	-414	-11	1	3	118	-115	3	2	3	1762	1741	-4	4	3	82	-82	-4	4	3	82	-82
5	-3	3	203	209	-2	-1	3	110	-115	-10	1	3	87	84	4	2	3	425	-463	-3	4	3	380	358	-3	4	3	380	358
6	-3	3	466	-456	-1	-1	3	771	755	-9	1	3	149	152	5	2	3	1228	-1242	-1	4	3	410	-412	-1	4	3	410	-412
7	-3	3	944	-936	0	-1	3	100	100	-8	1	3	80	-83	6	2	3	472	-481	0	4	3	55	44	0	4	3	55	44
8	-3	3	146	-139	1	-1	3	427	419	-7	1	3	258	227	7	2	3	379	383	1	4	3	735	744	1	4	3	735	744
9	-3	3	188	174	2	-1	3	140	119	-6	1	3	548	553	8	2	3	143	-154	2	4	3	348	356	2	4	3	348	356
10	-3	3	217	226	3	-1	3	833	822	-5	1	3	863	-860	9	2	3	207	191	3	4	3	171	-183	3	4	3	171	-183
-11	-2	3	130	136	4	-1	3	1213	1221	-4	1	3	1628	-1623	10	2	3	56	59	4	4	3	86	82	4	4	3	86	82
-10	-2	3	680	678	5	-1	3	363	-352	-3	1	3	180	-167	11	2	3	210	200	5	4	3	173	-194	5	4	3	173	-194
-9	-2	3	495	504	6	-1	3	911	-921	-2	1	3	1458	1439	12	2	3	109	89	6	4	3	583	-564	6	4	3	583	-564
-8	-2	3	223	-234	8	-1	3	212	206	-1	1	3	324	324	-10	3	3	46	-80	7	4	3	753	-757	7	4	3	753	-757
-7	-2	3	860	-869	10	-1	3	218	207	0	1	3	295	278	-9	3	3	137	-130	8	4	3	718	724	8	4	3	718	724
-6	-2	3	1034	-1037	11	-1	3	547	535	1	1	3	1038	1007	-8	3	3	288	-273	9	4	3	1033	1042	9	4	3	1033	1042
-3	-2	3	287	269	-11	0	3	146	138	2	1	3	407	-421	-7	3	3	366	-381	10	4	3	406	415	10	4	3	406	415
-2	-2	3	445	470	-10	0	3	237	-243	3	1	3	757	-765	-6	3	3	451	-448	11	4	3	391	-413	11	4	3	391	-413
-1	-2	3	355	-330	-9	0	3	325	-325	4	1	3	1892	-1710	-5	3	3	562	560	12	4	3	457	-437	12	4	3	457	-437
0	-2	3	798	-801	-8	0	3	86	93	5	1	3	71	46	-4	3	3	1253	1261	-9	5	3	86	92	-9	5	3	86	92
1	-2	3	1647	-1661	-7	0	3	465	444	6	1	3	1138	1152	-3	3	3	408	421	-8	5	3	314	-319	-8	5	3	314	-319
2	-2	3	172	-176	-6	0	3	311	-326	7	1	3	817	613	-2	3	3	304	-293	-7	5	3	428	-435	-7	5	3	428	-435
3	-2	3	863	870	-5	0	3	857	-837	8	1	3	79	74	-1	3	3	188	-152	-6	5	3	378	374	-6	5	3	378	374
4	-2	3	101	107	-4	0	3	588	560	10	1	3	375	-374	0	3	3	401	-384	-5	5	3	292	304	-5	5	3	292	304
5	-2	3	445	-466	-3	0	3	1090	1090	11	1	3	358	-330	1	3	3	253	236	-4	5	3	281	-278	-4	5	3	281	-278
6	-2	3	454	466	-2	0	3	130	-132	12	1	3	268	-273	2	3	3	858	823	-3	5	3	348	352	-3	5	3	348	352
7	-2	3	278	271	-1	0	3	353	-338	-10	2	3	371	-377	3	3	3	345	347	-2	5	3	810	814	-2	5	3	810	814
8	-2	3	453	-461	0	0	3	100	31	-9	2	3	407	-408	4	3	3	954	974	-1	5	3	1088	-1090	-1	5	3	1088	-1090

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	5	3	1337	-1349	-3	7	3	226	-221	-1	9	3	237	224	8	11	3	110	104	3	-9	4	240	244
1	5	3	957	-948	-2	7	3	369	-367	0	9	3	78	85	10	11	3	200	-191	4	-9	4	399	400
2	5	3	889	899	-1	7	3	354	371	1	9	3	236	249	0	12	3	109	-110	-10	-8	4	88	-89
3	5	3	961	981	0	7	3	811	810	2	9	3	68	41	2	12	3	77	44	-9	-8	4	66	61
4	5	3	412	423	1	7	3	750	737	3	9	3	280	-284	4	12	3	321	-332	-7	-8	4	155	151
5	5	3	208	208	2	7	3	220	-216	4	9	3	754	-745	5	12	3	134	133	-6	-8	4	226	-236
6	5	3	838	-873	3	7	3	487	-498	5	9	3	568	-567	6	12	3	173	158	-5	-8	4	589	-597
7	5	3	971	-969	4	7	3	157	145	6	9	3	384	379	7	12	3	318	-314	-4	-8	4	142	-141
8	5	3	94	-101	5	7	3	128	134	7	9	3	847	827	8	12	3	144	-139	-3	-8	4	467	453
9	5	3	752	731	6	7	3	596	-618	8	9	3	198	178	4	13	3	275	278	-1	-8	4	485	485
10	5	3	446	461	7	7	3	232	-217	9	9	3	64	-59	-7	-11	4	217	-216	0	-8	4	484	505
11	5	3	95	102	8	7	3	212	208	10	9	3	147	-144	-8	-11	4	171	-167	1	-8	4	95	-100
12	5	3	349	347	9	7	3	44	-55	11	9	3	378	-379	-5	-11	4	157	-144	2	-8	4	787	-801
-7	8	3	174	-166	10	7	3	185	-148	-4	10	3	424	424	-4	-11	4	325	308	3	-8	4	808	-807
-6	8	3	482	-509	11	7	3	252	243	-3	10	3	455	-467	-3	-11	4	827	819	5	-8	4	537	531
-5	8	3	180	-165	12	7	3	210	194	-2	10	3	547	-550	-1	-11	4	441	-427	-10	-7	4	233	-238
-4	8	3	363	354	-8	8	3	328	337	-1	10	3	171	-173	0	-11	4	342	-339	-9	-7	4	204	-184
-3	8	3	152	-140	-4	8	3	159	-175	1	10	3	117	111	-8	-10	4	144	144	-8	-7	4	107	110
-2	8	3	747	742	-3	8	3	224	198	2	10	3	401	402	-7	-10	4	179	-177	-7	-7	4	801	801
-1	8	3	1242	1243	-2	8	3	222	-217	3	10	3	497	512	-5	-10	4	151	-137	-6	-7	4	488	488
0	8	3	310	313	-1	8	3	132	-125	4	10	3	257	255	-4	-10	4	484	-480	-5	-7	4	138	-130
1	8	3	1622	-1630	0	8	3	38	-35	5	10	3	745	-754	-3	-10	4	39	-36	-4	-7	4	768	-773
2	8	3	1099	-1104	1	8	3	103	98	6	10	3	710	-701	-2	-10	4	878	868	-3	-7	4	575	-574
3	8	3	332	334	4	8	3	217	-214	7	10	3	58	57	-1	-10	4	118	125	-2	-7	4	378	-355
4	8	3	789	789	5	8	3	796	782	8	10	3	331	330	0	-10	4	179	-181	0	-7	4	394	397
5	8	3	180	182	6	8	3	848	840	9	10	3	257	249	1	-10	4	125	-118	1	-7	4	901	895
6	8	3	444	443	7	8	3	319	-309	10	10	3	211	200	-1	-9	4	297	300	2	-7	4	362	365
7	8	3	592	598	8	8	3	267	-253	11	10	3	148	147	-7	-9	4	47	-40	3	-7	4	478	-473
8	8	3	302	-291	9	8	3	122	-113	-1	11	3	325	-322	-6	-8	4	143	-157	4	-7	4	868	-854
9	8	3	427	-430	10	8	3	236	-227	0	11	3	219	-195	-5	-8	4	90	81	5	-7	4	50	-37
10	8	3	159	-175	11	8	3	252	-247	1	11	3	135	-142	-4	-8	4	234	236	6	-7	4	286	258
11	8	3	87	84	12	8	3	272	276	2	11	3	173	-172	-3	-8	4	408	-393	7	-7	4	53	-46
12	8	3	205	192	-5	9	3	172	154	4	11	3	581	576	-2	-8	4	189	-100	-10	-6	4	102	-94
-7	7	3	592	587	-4	9	3	517	-502	5	11	3	350	341	-1	-8	4	235	214	-9	-6	4	458	-436
-6	7	3	279	-283	-3	9	3	289	-304	6	11	3	424	-409	1	-9	4	407	-399	-8	-6	4	855	-866
-5	7	3	238	-246	-2	9	3	206	228	7	11	3	408	-421	2	-9	4	235	-231	-7	-6	4	448	-451

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-PUTHEMIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-8	-8	4	622	838	-2	-4	4	630	-858	-8	-2	4	131	-131	10	-1	4	248	-242	1	1	4	1434	1401
-8	-8	4	1270	1287	-1	-4	4	1120	-1329	-5	-2	4	285	-288	11	-1	4	178	189	2	1	4	1553	1547
-3	-8	4	550	-554	0	-4	4	54	82	-4	-2	4	950	-952	-11	0	4	481	479	3	1	4	348	-324
-2	-8	4	208	-197	1	-4	4	254	276	-3	-2	4	871	-898	-10	0	4	68	79	4	1	4	1449	-1478
-1	-8	4	385	-375	2	-4	4	163	163	-2	-2	4	783	778	-9	0	4	218	-209	5	1	4	900	-980
0	-8	4	839	-823	3	-4	4	217	212	-1	-2	4	1732	1744	-8	0	4	338	-338	6	1	4	285	286
1	-8	4	144	136	4	-4	4	272	276	0	-2	4	853	850	-7	0	4	176	164	7	1	4	360	358
2	-8	4	558	556	5	-4	4	63	-60	1	-2	4	288	-302	-6	0	4	201	201	8	1	4	238	243
3	-8	4	485	482	6	-4	4	905	-908	2	-2	4	542	-545	-5	0	4	511	-445	9	1	4	908	898
5	-8	4	466	-467	7	-4	4	688	-702	3	-2	4	240	-251	-4	0	4	251	-253	10	1	4	319	335
7	-8	4	300	292	8	-4	4	167	164	4	-2	4	203	198	-3	0	4	635	636	11	1	4	203	-212
8	-8	4	139	-140	9	-4	4	487	473	5	-2	4	702	-883	-2	0	4	100	-87	12	1	4	440	-488
-11	-5	4	213	201	-11	-3	4	333	328	8	-2	4	295	289	-1	0	4	680	-670	-10	2	4	71	67
-10	-5	4	290	294	-10	-3	4	489	462	7	-2	4	750	742	0	0	4	801	782	-8	2	4	515	-516
-8	-5	4	389	385	-9	-3	4	186	-188	9	-2	4	481	-483	1	0	4	401	414	-7	2	4	463	-443
-7	-5	4	544	-543	-8	-3	4	138	-128	10	-2	4	224	237	2	0	4	1152	-1134	-6	2	4	115	118
-6	-5	4	907	-914	-7	-3	4	403	-406	-11	-1	4	315	-319	3	0	4	1151	-1187	-5	2	4	1481	1440
-5	-5	4	70	83	-6	-3	4	209	-217	-10	-1	4	787	-786	4	0	4	641	-642	-4	2	4	1269	1278
-4	-5	4	729	745	-5	-3	4	85	-86	-9	-1	4	302	-322	5	0	4	530	542	-3	2	4	150	134
-3	-5	4	147	-137	-3	-3	4	1263	1299	-8	-1	4	398	409	6	0	4	523	546	-2	2	4	807	-590
-2	-5	4	300	-304	-2	-3	4	1228	1244	-7	-1	4	649	649	7	0	4	151	150	-1	2	4	212	-217
-1	-5	4	284	317	-1	-3	4	355	-340	-6	-1	4	143	148	8	0	4	430	452	0	2	4	606	-577
0	-5	4	452	438	0	-3	4	1025	-1050	-5	-1	4	49	-39	9	0	4	102	-111	1	2	4	144	-153
1	-5	4	137	-136	1	-3	4	928	-934	-4	-1	4	318	312	10	0	4	622	-625	2	2	4	585	587
3	-5	4	102	96	3	-3	4	298	287	-3	-1	4	857	-870	11	0	4	548	-541	3	2	4	1811	1806
4	-5	4	59	66	4	-3	4	156	155	-2	-1	4	1528	-1503	-10	1	4	128	115	4	2	4	1180	1144
5	-5	4	348	-348	5	-3	4	1021	1021	-1	-1	4	710	883	-9	1	4	105	-99	5	2	4	855	-861
6	-5	4	278	-258	6	-3	4	702	702	0	-1	4	897	878	-8	1	4	91	-92	6	2	4	1070	-1073
7	-5	4	288	287	7	-3	4	481	-487	1	-1	4	805	772	-7	1	4	273	264	7	2	4	83	83
8	-5	4	565	555	8	-3	4	850	-851	2	-1	4	136	132	-6	1	4	679	662	8	2	4	74	-78
-8	-4	4	146	146	10	-3	4	229	230	3	-1	4	116	132	-5	1	4	574	558	9	2	4	288	-280
-7	-4	4	133	139	-11	-2	4	622	-627	4	-1	4	606	602	-4	1	4	780	-785	10	2	4	425	436
-6	-4	4	203	202	-10	-2	4	110	119	5	-1	4	261	263	-3	1	4	1181	-1135	11	2	4	471	451
-5	-4	4	571	-574	-9	-2	4	783	775	6	-1	4	230	-227	-2	1	4	379	347	12	2	4	68	78
-4	-4	4	459	450	-8	-2	4	438	438	7	-1	4	162	-152	-1	1	4	426	-408	-9	3	4	282	288
-3	-4	4	239	264	-7	-2	4	80	78	8	-1	4	193	-188	0	1	4	127	-107	-8	3	4	347	350

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-7	3	4	423	-419	10	4	4	518	504	8	6	4	765	778	10	8	4	83	75	0	11	4	104	98
-8	3	4	884	-878	11	4	4	122	143	9	6	4	256	-273	11	8	4	454	-446	1	11	4	83	-89
-5	3	4	771	-747	-8	4	4	129	-135	10	6	4	420	-398	12	4	4	380	-354	2	11	4	515	-503
-4	3	4	240	281	-7	4	4	84	-72	11	6	4	52	38	-5	9	4	228	229	3	11	4	532	-518
-3	3	4	837	809	-6	5	4	51	73	12	6	4	160	-150	-4	9	4	154	-136	4	11	4	115	101
-2	3	4	64	76	-5	5	4	212	213	-7	7	4	316	335	-3	9	4	388	-381	5	11	4	708	696
-1	3	4	312	291	-4	5	4	345	-346	-6	7	4	307	300	-2	9	4	158	159	6	11	4	188	171
0	3	4	346	337	-3	5	4	134	-128	-5	7	4	192	214	-1	9	4	226	221	7	11	4	303	-293
1	3	4	356	-346	-2	5	4	838	831	-4	7	4	302	287	0	9	4	100	-88	8	11	4	47	12
2	3	4	343	-333	-1	5	4	700	696	-3	7	4	453	-447	1	9	4	85	-113	9	11	4	154	148
3	3	4	208	-188	0	5	4	887	-988	-2	7	4	930	-928	2	9	4	545	559	10	11	4	350	-334
4	3	4	213	185	1	5	4	889	-888	-1	7	4	675	-658	3	9	4	437	421	1	12	4	238	235
5	3	4	660	616	2	5	4	278	-268	0	7	4	326	317	4	9	4	254	-253	2	12	4	61	62
6	3	4	458	-495	3	5	4	114	-123	1	7	4	918	922	5	9	4	554	-544	3	12	4	158	-170
7	3	4	598	-579	4	5	4	67	62	2	7	4	372	371	6	9	4	350	-374	4	12	4	303	-303
8	3	4	547	544	5	5	4	503	497	4	7	4	174	-173	7	9	4	177	162	5	12	4	110	-94
10	3	4	278	-301	6	5	4	1287	1279	5	7	4	100	-105	8	9	4	160	177	6	12	4	211	211
11	3	4	155	-146	7	5	4	268	264	6	7	4	763	-758	9	9	4	317	313	7	12	4	68	-68
-9	4	4	67	68	8	5	4	1057	-1068	7	7	4	803	-825	10	9	4	543	543	8	12	4	373	-372
-8	4	4	318	323	9	5	4	50	-589	8	7	4	385	378	-3	10	4	284	289	-5	-11	5	482	-489
-7	4	4	408	410	10	5	4	80	-47	9	7	4	313	323	-2	10	4	397	-382	-4	-11	5	245	-264
-6	4	4	228	235	11	5	4	48	33	10	7	4	301	-303	-1	10	4	40	-59	-3	-11	5	354	459
-5	4	4	621	-641	12	5	4	322	310	11	7	4	173	-172	0	10	4	212	-199	-2	-11	5	469	467
-4	4	4	818	-810	-8	6	4	303	303	12	7	4	183	157	1	10	4	465	-475	-7	-10	5	225	206
-3	4	4	200	198	-7	6	4	234	235	-6	8	4	122	114	2	10	4	318	-321	-6	-10	5	238	249
-2	4	4	138	140	-6	6	4	91	-82	-3	8	4	405	407	3	10	4	598	594	-4	-10	5	464	-462
-1	4	4	854	-857	-4	6	4	134	-128	-2	8	4	399	396	4	10	4	820	795	-3	-10	5	778	-747
0	4	4	222	216	-3	6	4	554	-554	-1	8	4	780	-785	5	10	4	117	126	-2	-10	5	171	159
1	4	4	417	425	-2	6	4	422	-427	0	8	4	311	-314	6	10	4	598	-591	-1	-10	5	457	448
2	4	4	51	46	-1	6	4	1321	1334	1	8	4	103	115	7	10	4	384	-379	1	-10	5	80	76
3	4	4	115	114	0	6	4	1219	1208	2	8	4	54	53	8	10	4	166	-176	2	-10	5	182	189
4	4	4	327	347	2	6	4	435	-455	3	8	4	173	-178	9	10	4	277	-275	-8	-9	5	110	-102
5	4	4	375	-392	3	6	4	432	-438	4	8	4	221	-224	10	10	4	146	149	-7	-9	5	52	-68
6	4	4	891	-884	4	6	4	403	-386	5	8	4	403	428	11	10	4	355	510	-5	-9	5	187	189
7	4	4	843	-843	5	6	4	804	-821	6	8	4	114	-118	-2	11	4	250	267	-4	-9	5	437	458
8	4	4	551	552	6	6	4	1102	1114	7	8	4	158	148	-1	11	4	105	114	-3	-9	5	175	-162

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 12

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	-8	5	522	-534	-7	-8	5	1114	-1104	-3	-4	5	775	771	-7	-2	5	188	172	10	-1	5	388	-387
0	-8	5	335	337	-8	-8	5	461	-481	-2	-4	5	313	328	-6	-2	5	529	558	11	-1	5	197	-188
1	-8	5	132	-127	-9	-8	5	330	328	-1	-4	5	472	-481	-5	-2	5	475	487	-10	0	5	498	487
2	-8	5	257	-272	-4	-8	5	527	512	0	-4	5	385	-358	-4	-2	5	433	-442	-9	0	5	95	95
3	-8	5	42	-28	-3	-8	5	143	153	1	-4	5	64	-88	-3	-2	5	1471	-1502	-8	0	5	47	38
-8	-8	5	191	181	-2	-8	5	520	532	2	-4	5	205	-202	-2	-2	5	519	-516	-7	0	5	195	-186
-7	-8	5	85	63	-1	-8	5	231	225	3	-4	5	183	-188	-1	-2	5	623	644	-6	0	5	370	-368
-6	-8	5	149	-124	0	-8	5	1088	-1077	4	-4	5	401	409	0	-2	5	1001	994	-5	0	5	281	-287
-4	-8	5	202	-199	1	-8	5	730	-717	5	-4	5	742	748	1	-2	5	644	628	-4	0	5	162	-161
-3	-8	5	137	128	2	-8	5	353	345	6	-4	5	220	228	2	-2	5	847	834	-3	0	5	1093	1068
-2	-8	5	96	-81	3	-8	5	465	471	7	-4	5	615	-607	3	-2	5	63	-57	-2	0	5	751	744
-1	-8	5	161	-157	4	-8	5	274	278	8	-4	5	481	-477	4	-2	5	802	-808	-1	0	5	485	-458
0	-8	5	554	534	5	-8	5	137	-136	9	-4	5	118	115	5	-2	5	912	-890	0	0	5	269	-245
1	-8	5	510	512	7	-8	5	108	101	-10	-3	5	415	422	6	-2	5	278	-283	1	0	5	1127	1081
3	-8	5	430	-433	-9	-5	5	743	736	-8	-3	5	128	-140	7	-2	5	457	461	2	0	5	231	224
4	-8	5	528	-515	-8	-5	5	696	699	-7	-3	5	274	265	8	-2	5	476	483	3	0	5	939	-919
-10	-7	5	81	84	-7	-5	5	51	48	-6	-1	5	112	-111	8	-2	5	247	-249	4	0	5	478	-470
-9	-7	5	367	-359	-6	-5	5	880	-700	-5	-3	5	347	-351	10	-2	5	93	-98	5	0	5	185	131
-8	-7	5	341	-358	-5	-5	5	808	-816	-4	-3	5	613	-638	-10	-1	5	251	-237	6	0	5	159	161
-7	-7	5	184	189	-4	-5	5	201	192	-2	-3	5	1143	1153	-9	-1	5	456	-475	7	0	5	179	-172
-6	-7	5	547	540	-3	-5	5	247	293	-1	-3	5	931	947	-8	-1	5	368	-373	8	0	5	443	497
-5	-7	5	444	459	-2	-5	5	324	-330	0	-3	5	178	167	-7	-1	5	188	-179	9	0	5	761	760
-4	-7	5	117	144	-1	-5	5	385	386	1	-3	5	191	-122	-6	-1	5	200	205	11	0	5	568	-567
-3	-7	5	136	116	0	-5	5	780	808	2	-3	5	843	-870	-5	-1	5	238	235	-10	1	5	325	319
-2	-7	5	399	-401	1	-5	5	166	-175	3	-1	5	884	-892	-4	-1	5	1024	1064	-8	1	5	328	-333
-1	-7	5	833	-827	2	-5	5	542	-545	4	-3	5	605	-616	-3	-1	5	353	346	-6	1	5	255	243
0	-7	5	407	-406	3	-5	5	281	304	5	-3	5	373	356	-2	-1	5	1143	-1147	-5	1	5	251	250
1	-7	5	681	679	4	-5	5	349	341	6	-3	5	1036	1037	-1	-1	5	1215	-1227	-4	1	5	122	-121
2	-7	5	852	841	5	-5	5	253	-247	7	-3	5	684	688	0	-1	5	637	604	-3	1	5	288	-278
3	-7	5	204	192	7	-5	5	74	-67	8	-3	5	323	-315	2	-1	5	93	-89	-2	1	5	235	229
4	-7	5	128	-130	8	-5	5	322	305	9	-3	5	331	-344	3	-1	5	866	836	-1	1	5	354	-374
5	-7	5	442	-439	-10	-4	5	331	-341	10	-3	5	60	-58	4	-1	5	502	506	0	1	5	1464	-1422
6	-7	5	124	-120	-9	-4	5	172	-178	-11	-2	5	580	-601	5	-1	5	41	-40	1	1	5	738	-688
-10	-6	5	368	361	-8	-4	5	232	262	-10	-2	5	511	-528	6	-1	5	578	-568	2	1	5	1307	1288
-9	-6	5	236	244	-7	-4	5	549	558	-9	-2	5	73	80	7	-1	5	59	59	3	1	5	838	816
-8	-6	5	441	-439	-5	-4	5	253	-256	-8	-2	5	407	413	8	-1	5	324	313	4	1	5	185	180

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 13

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	1	5	773	-778	-1	3	5	376	389	-4	5	5	138	-128	-3	7	5	546	548	1	9	5	403	-422
6	1	5	379	-373	0	3	5	1376	1349	-3	5	5	340	-378	-2	7	5	327	-311	2	9	5	225	239
7	1	5	250	-247	1	3	5	30	14	-2	5	5	123	127	-1	7	5	1100	-1112	3	9	5	540	546
8	1	5	529	-543	2	3	5	1031	-1038	-1	5	5	1109	1100	0	7	5	447	-428	5	9	5	75	-78
9	1	5	142	176	3	3	5	759	-778	0	5	5	379	-352	1	7	5	113	107	6	9	5	71	73
10	1	5	874	960	4	3	5	421	-432	1	5	5	403	-411	3	7	5	386	381	8	9	5	400	-399
11	1	5	379	371	5	3	5	211	229	3	5	5	340	-387	4	7	5	493	503	9	9	5	257	-253
-10	2	5	105	-104	7	3	5	340	-343	4	5	5	764	-764	5	7	5	222	220	10	9	5	481	488
-9	2	5	471	576	8	3	5	145	144	5	5	5	165	-147	6	7	5	155	-158	11	9	5	883	852
-7	2	5	736	-737	9	3	5	374	387	6	5	5	895	886	7	7	5	831	-834	-3	10	5	185	189
-6	2	5	521	-504	10	3	5	228	-250	7	5	5	1134	1140	8	7	5	106	-295	-2	10	5	110	-113
-5	2	5	58	34	11	3	5	273	-262	8	5	5	101	-117	9	7	5	378	369	-1	10	5	127	146
-4	2	5	785	754	-9	4	5	483	-406	9	5	5	472	-463	10	7	5	260	244	0	10	5	254	224
-3	2	5	380	389	-8	4	5	193	-168	10	5	5	161	-166	11	7	5	119	-118	1	10	5	307	-288
-2	2	5	583	521	-7	4	5	428	424	11	5	5	328	-340	12	7	5	119	125	2	10	5	790	-804
-1	2	5	413	410	-6	4	5	843	555	12	5	5	435	-439	-5	8	5	311	-300	3	10	5	298	-296
0	2	5	454	-464	-5	4	5	190	197	-8	6	5	127	143	-4	8	5	220	-243	4	10	5	442	459
1	2	5	1245	-1284	-4	4	5	482	-470	-5	6	5	355	352	-3	8	5	272	299	5	10	5	545	547
2	2	5	1086	-1065	-3	4	5	263	-276	-3	6	5	609	-616	-2	8	5	902	880	6	10	5	100	90
3	2	5	225	252	-2	4	5	291	295	-2	6	5	1005	-977	-1	8	5	173	171	8	10	5	87	89
4	2	5	1279	1297	-1	4	5	218	-219	-1	6	5	241	-241	0	8	5	334	-339	9	10	5	553	-554
5	2	5	528	510	0	4	5	200	-208	0	6	5	875	864	1	8	5	60	-67	10	10	5	740	-736
6	2	5	163	-153	1	4	5	878	863	1	6	5	344	342	2	8	5	60	-55	0	11	5	362	363
7	2	5	147	-146	2	4	5	142	147	2	6	5	94	104	3	8	5	573	-582	1	11	5	70	586
8	2	5	133	-127	3	4	5	317	-308	3	6	5	149	148	5	8	5	152	154	2	11	5	78	-84
9	2	5	851	-835	4	4	5	399	-413	4	6	5	193	-203	6	8	5	141	142	3	11	5	678	-681
10	2	5	359	-374	5	4	5	883	883	5	6	5	929	-934	7	8	5	105	103	4	11	5	481	-479
11	2	5	423	416	6	4	5	181	162	6	6	5	1017	-1006	8	8	5	249	-271	5	11	5	74	77
12	2	5	331	339	7	4	5	251	-235	8	6	5	1063	1072	9	8	5	212	215	6	11	5	384	393
-9	3	5	134	135	8	4	5	540	-535	9	6	5	205	221	10	8	5	325	328	7	11	5	218	225
-8	3	5	728	801	9	4	5	101	100	10	6	5	135	-131	11	8	5	140	-117	8	11	5	173	189
-7	3	5	829	627	11	4	5	99	87	11	6	5	53	36	12	8	5	254	-260	9	11	5	379	399
-6	3	5	417	-423	12	4	5	300	289	12	6	5	164	-168	-4	9	5	82	-96	1	12	5	332	323
-5	3	5	1003	-987	-8	5	5	315	-320	-6	7	5	88	-87	-3	9	5	292	-279	2	12	5	498	510
-4	3	5	731	-708	-7	5	5	251	-246	-5	7	5	68	57	-1	9	5	393	431	4	12	5	181	-178
-3	3	5	153	146	-5	5	5	95	87	-4	7	5	618	645	0	9	5	110	93	5	12	5	197	-201

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 14

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
8	12	5	79	-84	0	-7	6	885	-883	4	-8	6	178	184	5	-3	6	555	-541	3	-1	6	174	-159
8	12	5	118	-112	1	-7	6	345	-344	5	-5	6	145	149	6	-3	6	121	122	4	-1	6	849	865
-8	-10	6	405	384	2	-7	6	327	313	6	-5	6	242	-238	7	-3	6	618	600	5	-1	6	477	474
-5	-10	6	404	387	3	-7	6	112	117	7	-5	6	70	-65	8	-3	6	369	394	6	-1	6	436	-461
-3	-10	6	428	-433	4	-7	6	410	411	8	-5	6	242	228	-10	-2	6	286	-248	7	-1	6	308	-284
-2	-10	6	492	-486	5	-7	6	272	278	-10	-4	6	118	-112	-9	-2	6	107	-109	9	-1	6	224	236
-1	-10	6	79	70	-10	-6	6	112	99	-9	-4	6	717	-720	-7	-2	6	279	-275	-10	-1	6	284	-284
0	-10	6	86	-75	-9	-6	6	584	588	-8	-4	6	379	-385	-6	-2	6	288	298	-10	0	6	324	334
-7	-9	6	454	-427	-8	-6	6	234	258	-7	-4	6	352	388	-5	-2	6	1140	1182	-9	0	6	122	116
-8	-9	6	249	-243	-7	-6	6	199	-215	-5	-4	6	108	113	-4	-2	6	793	797	-8	0	6	160	168
-5	-9	6	255	252	-6	-6	6	477	-467	-4	-4	6	74	90	-3	-2	6	403	-390	-7	0	6	285	242
-4	-9	6	455	444	-5	-6	6	463	-465	-3	-4	6	185	183	-2	-2	6	1001	-1012	-6	0	6	420	-427
-3	-9	6	352	354	-4	-6	6	95	-80	-2	-4	6	192	193	-1	-2	6	494	-505	-5	0	6	864	-865
-2	-9	6	80	-71	-3	-6	6	95	-98	-1	-4	6	318	-315	0	-2	6	187	174	-4	0	6	608	-588
-1	-9	6	188	-185	-2	-6	6	464	453	0	-4	6	258	-255	1	-2	6	701	-196	-3	0	6	227	223
0	-9	6	78	73	-1	-6	6	1286	1282	1	-4	6	171	178	2	-2	6	877	876	-2	0	6	600	594
1	-9	6	103	-103	0	-6	6	157	153	2	-4	6	51	-34	3	-2	6	1511	1520	-1	0	6	489	571
2	-9	6	72	-76	1	-6	6	875	-873	3	-4	6	586	-575	4	-2	6	174	187	0	0	6	535	-520
-8	-8	6	297	296	2	-6	6	353	-339	4	-4	6	214	-208	5	-2	6	821	-841	1	0	6	52	28
-7	-8	6	169	178	3	-6	6	255	261	5	-4	6	335	328	6	-2	6	642	-640	2	0	6	375	374
-6	-8	6	204	-214	4	-6	6	178	-189	6	-4	6	581	588	7	-2	6	139	-138	3	0	6	407	-415
-5	-8	6	296	-269	5	-6	6	193	154	8	-4	6	330	-319	8	-2	6	288	289	4	0	6	138	-165
-4	-8	6	72	71	6	-6	6	379	378	-10	-3	6	350	349	9	-2	6	105	90	5	0	6	116	127
-3	-8	6	163	163	7	-6	6	385	388	-9	-3	6	202	191	-10	-2	6	153	161	7	0	6	365	-358
-2	-8	6	104	88	-10	-5	6	551	-559	-8	-3	6	371	-381	-10	-1	6	239	238	8	0	6	450	-470
-1	-8	6	457	-463	-8	-5	6	708	711	-7	-3	6	60	-66	-8	-1	6	44	-45	9	0	6	407	415
1	-8	6	342	340	-7	-5	6	671	673	-6	-3	6	508	524	-7	-1	6	454	-538	-10	0	6	530	530
2	-8	6	143	137	-6	-5	6	85	85	-5	-3	6	127	-125	-6	-1	6	598	-597	11	0	6	186	-186
3	-8	6	55	57	-4	-5	6	437	-440	-4	-3	6	638	-657	-5	-1	6	405	-424	-8	1	6	145	140
-8	-7	6	388	-370	-3	-5	6	194	-209	-3	-3	6	587	-582	-4	-1	6	867	863	-8	1	6	305	-303
-7	-7	6	159	-164	-2	-5	6	475	-484	-1	-3	6	264	264	-3	-1	6	1499	1410	-8	1	6	358	350
-6	-7	6	255	263	-1	-5	6	141	136	0	-3	6	120	-119	-2	-1	6	493	471	-5	1	6	62	55
-4	-7	6	89	70	0	-5	6	892	901	1	-3	6	370	376	-1	-1	6	877	-866	-4	1	6	337	-323
-3	-7	6	389	407	1	-5	6	654	643	2	-3	6	418	429	0	-1	6	281	-243	-3	1	6	213	-222
-2	-7	6	557	558	2	-5	6	640	-652	3	-3	6	607	-636	1	-1	6	247	-245	-2	1	6	443	450
-1	-7	6	402	-400	3	-5	6	170	-188	4	-3	6	919	-921	2	-1	6	955	-958	-1	1	6	71	-54

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 15

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	1	6	1130	-1131	-3	3	6	273	-257	-4	5	6	80	-85	-3	7	6	874	879	5	9	6	151	-138
1	1	6	954	-976	-2	3	6	601	-595	-3	5	6	117	112	-2	7	6	482	483	6	9	6	167	179
2	1	6	78	-63	-1	3	6	1050	-1023	-1	5	6	407	392	-1	7	6	285	-277	7	9	6	251	232
3	1	6	208	248	0	3	6	1025	-985	1	5	6	136	-151	0	7	6	380	-381	9	9	6	588	-598
4	1	6	344	341	1	3	6	1545	1550	2	5	6	344	345	1	7	6	90	-84	10	9	6	207	-204
5	1	6	473	477	2	3	6	143	163	3	5	6	376	375	2	7	6	731	-732	11	9	6	475	475
6	1	6	456	445	3	3	6	913	-896	4	5	6	389	-376	3	7	6	407	-405	-2	10	6	61	62
7	1	6	211	-228	4	3	6	472	-442	5	5	6	662	-643	4	7	6	542	549	-1	10	6	90	-95
8	1	6	601	-592	5	3	6	496	-511	6	5	6	36	-73	5	7	6	874	887	0	10	6	477	487
9	1	6	918	-913	6	3	6	457	-457	7	5	6	839	862	6	7	6	368	380	1	10	6	173	184
11	1	6	653	636	8	3	6	495	522	8	5	6	515	508	7	7	6	59	-61	2	10	6	385	-382
-9	2	6	258	265	9	3	6	421	423	9	5	6	247	-226	8	7	6	513	-528	3	10	6	428	-418
-8	2	6	575	582	10	3	6	48	-22	10	5	6	180	182	12	7	6	214	203	4	10	6	73	-58
-7	2	6	164	-160	11	3	6	247	-247	11	5	6	95	78	-5	8	6	274	-297	5	10	6	85	82
-6	2	6	337	-331	12	3	6	222	199	12	5	6	541	-543	-4	8	6	584	-577	6	10	6	213	229
-5	2	6	78	-70	-8	4	6	748	-748	-7	6	6	131	-118	-3	8	6	303	-283	7	10	6	284	274
-3	2	6	476	-460	-7	4	6	286	-287	-6	6	6	165	-175	-2	8	6	368	385	8	10	6	485	501
-2	2	6	77	84	-6	4	6	139	115	-5	6	6	287	293	-1	8	6	840	842	10	10	6	605	-599
-1	2	6	1393	1343	-5	4	6	431	432	-4	6	6	502	515	0	8	6	115	-117	-1	11	6	381	-384
0	2	6	983	967	-4	4	6	319	309	-3	6	6	65	-58	1	8	6	58	62	1	11	6	580	584
1	2	6	698	-672	-3	4	6	38	45	-2	6	6	505	-516	2	8	6	287	278	2	11	6	541	532
2	2	6	1284	-1314	-2	4	6	150	138	-1	6	6	493	-482	3	8	6	482	-466	3	11	6	207	-211
3	2	6	199	-210	-1	4	6	338	-344	1	6	6	201	-198	4	8	6	759	-767	4	11	6	170	-159
4	2	6	168	-175	0	4	6	963	-950	2	6	6	113	-120	5	8	6	93	80	5	11	6	285	-280
5	2	6	252	246	1	4	6	228	-226	3	6	6	974	981	6	8	6	337	349	6	11	6	328	-324
6	2	6	676	695	2	4	6	947	962	4	6	6	860	865	7	8	6	89	93	8	11	6	204	211
7	2	6	740	752	4	4	6	407	-411	5	6	6	170	-179	8	8	6	161	-146	9	11	6	481	480
8	2	6	316	332	5	4	6	239	230	6	6	6	784	-812	9	8	6	77	-87	2	12	6	485	456
9	2	6	268	-303	6	4	6	417	429	7	6	6	652	-608	10	8	6	198	196	3	12	6	403	402
10	2	6	744	-741	7	4	6	388	-388	8	6	6	404	430	-3	9	6	235	-240	5	12	6	132	142
11	2	6	182	-172	8	4	6	365	-337	10	6	6	149	127	-2	9	6	221	-227	6	12	6	80	81
-9	3	6	418	-428	10	4	6	72	81	11	6	6	268	279	0	9	6	240	236	7	12	6	177	-159
-8	3	6	181	186	11	4	6	341	-349	12	6	6	364	368	1	9	6	181	-177	-6	-9	7	703	-689
-7	3	6	852	869	12	4	6	268	-230	-6	7	6	316	-318	2	9	6	147	-147	-5	-9	7	215	-202
-6	3	6	413	414	-7	5	6	491	-505	-5	7	6	472	-473	3	9	6	407	397	-4	-8	7	288	289
-4	3	6	348	-335	-8	5	6	85	-83	-4	7	6	144	153	4	9	6	239	241	-3	-9	7	259	253

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	-8	7	143	178	4	-8	7	337	-334	-5	-3	7	124	125	-3	-1	7	382	371	-3	1	7	509	-443
-1	-9	7	115	100	5	-8	7	483	-487	-4	-3	7	285	-298	-2	-1	7	827	831	-2	1	7	431	435
0	-8	7	162	172	-9	-5	7	685	-688	-3	-3	7	235	-219	-1	-1	7	557	555	-1	1	7	489	450
1	-9	7	149	-152	-8	-5	7	76	54	-2	-3	7	58	-80	0	-1	7	91	92	0	1	7	83	-89
-7	-8	7	483	486	-7	-5	7	178	178	-1	-3	7	46	42	1	-1	7	32	15	1	1	7	842	-820
-6	-8	7	130	154	-5	-5	7	600	608	0	-3	7	571	-571	2	-1	7	1088	-1072	2	1	7	56	61
-5	-8	7	358	-359	-4	-5	7	520	515	1	-3	7	308	-311	3	-1	7	1276	-1248	3	1	7	300	259
-4	-8	7	273	-274	-3	-5	7	255	-249	2	-3	7	823	798	4	-1	7	265	224	5	1	7	138	150
-3	-8	7	129	144	-2	-5	7	735	-723	3	-3	7	784	822	5	-1	7	637	640	6	1	7	855	872
-2	-8	7	108	107	-1	-5	7	681	-702	4	-3	7	440	-451	6	-1	7	57	-48	7	1	7	443	462
-1	-8	7	240	-228	2	-5	7	546	550	5	-3	7	350	-371	7	-1	7	244	-258	8	1	7	470	-487
0	-8	7	263	-265	3	-5	7	338	334	6	-3	7	325	-309	8	-1	7	87	80	9	1	7	454	-462
1	-8	7	245	235	4	-5	7	85	-101	7	-3	7	165	-152	10	-1	7	348	-341	10	1	7	85	87
3	-8	7	108	-115	5	-5	7	135	147	8	-2	7	394	389	-8	0	7	283	-254	-8	2	7	344	347
-8	-7	7	127	-140	6	-5	7	259	-253	-8	-2	7	83	-78	-4	0	7	110	-127	-7	2	7	128	124
-7	-7	7	98	-101	8	-5	7	445	-454	-6	-2	7	514	-510	-7	0	7	591	590	-6	2	7	226	-214
-6	-7	7	37	43	7	-5	7	242	-228	-5	-2	7	391	402	-8	0	7	794	782	-5	2	7	90	87
-4	-7	7	147	-131	-9	-4	7	196	-199	-4	-2	7	600	606	-5	0	7	478	-464	-4	2	7	118	122
-2	-7	7	462	433	-8	-4	7	628	-661	-3	-2	7	473	457	-4	0	7	875	-862	-3	2	7	874	-869
-1	-7	7	387	387	-7	-4	7	230	-219	-2	-2	7	48	-192	-3	0	7	340	-360	-2	2	7	914	-883
0	-7	7	329	-333	-5	-4	7	523	-519	-1	-2	7	110	-119	-2	0	7	71	-78	0	2	7	1209	1203
1	-7	7	539	-536	-4	-4	7	258	236	0	-2	7	354	-328	-1	0	7	75	79	1	2	7	727	685
2	-7	7	62	-56	-3	-4	7	644	643	1	-2	7	929	-917	0	0	7	144	138	2	2	7	443	-454
4	-7	7	287	-287	-2	-4	7	323	334	2	-2	7	814	-816	1	0	7	308	304	3	2	7	154	-160
8	-7	7	382	375	-1	-4	7	482	-485	3	-2	7	1208	1217	2	0	7	588	588	4	2	7	158	-120
-9	-6	7	226	228	0	-4	7	587	-552	4	-2	7	1139	1124	3	0	7	243	-260	5	2	7	856	-871
-8	-6	7	375	370	1	-4	7	131	151	6	-2	7	269	-263	4	0	7	482	-461	6	2	7	522	-548
-7	-6	7	116	131	2	-4	7	131	117	7	-2	7	282	-284	5	0	7	379	391	7	2	7	758	776
-6	-6	7	241	270	3	-4	7	185	-211	8	-2	7	290	-284	6	0	7	248	225	8	2	7	788	784
-4	-6	7	494	-482	4	-4	7	108	103	9	-2	7	314	-310	8	0	7	348	-343	9	2	7	381	384
-3	-6	7	544	-552	5	-4	7	117	115	-9	-1	7	86	95	9	0	7	206	-201	10	2	7	347	-330
-2	-6	7	257	-242	7	-4	7	73	74	-8	-1	7	462	479	10	0	7	344	377	11	2	7	342	-343
-1	-6	7	522	533	8	-4	7	71	61	-7	-1	7	279	290	-8	1	7	276	-279	-8	3	7	319	-326
0	-6	7	980	986	-9	-3	7	475	493	-6	-1	7	768	-780	-7	1	7	540	-541	-7	3	7	172	190
2	-6	7	178	-186	-7	-3	7	248	-244	-5	-1	7	787	-779	-6	1	7	516	513	-6	3	7	323	330
3	-6	7	101	-102	-8	-3	7	352	341	-4	-1	7	406	-417	-5	1	7	719	706	-5	3	7	323	311

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 17

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	3	7	447	424	-3	5	7	278	-275	4	7	7	562	-567	-1	10	7	90	-91	4	-7	8	454	-440
-3	3	7	191	200	-2	5	7	457	448	5	7	7	778	748	0	10	7	214	221	-8	-6	8	222	224
-2	3	7	547	-547	-1	5	7	608	596	6	7	7	448	484	1	10	7	335	333	-7	-6	8	85	-89
-1	3	7	883	-974	0	5	7	215	146	7	7	7	142	162	2	10	7	192	-143	-6	-6	8	185	167
0	3	7	939	-909	1	5	7	248	-243	8	7	7	99	100	3	10	7	59	51	-5	-6	8	573	575
1	3	7	714	723	2	5	7	623	620	10	7	7	323	-328	4	10	7	217	-198	-3	-6	8	655	-632
2	3	7	981	984	3	5	7	114	103	11	7	7	399	-398	5	10	7	399	-394	-2	-6	8	480	-439
3	3	7	53	53	4	5	7	100	-113	-4	8	7	249	-242	7	10	7	47	57	-1	-6	8	148	-147
4	3	7	280	245	5	5	7	148	-148	-3	8	7	431	-446	8	10	7	340	319	0	-6	8	287	249
5	3	7	144	134	6	5	7	134	105	-2	8	7	397	-376	9	10	7	428	427	1	-6	8	251	261
6	3	7	838	-842	10	5	7	311	301	-1	8	7	130	116	0	11	7	444	-474	2	-6	8	346	351
7	3	7	999	-987	11	5	7	470	489	0	8	7	170	167	2	11	7	583	559	3	-6	8	329	320
8	3	7	574	572	-8	6	7	269	-273	1	8	7	204	205	3	11	7	70	67	4	-6	8	688	-696
9	3	7	449	444	-4	6	7	392	348	2	8	7	672	684	4	11	7	302	281	-8	-6	8	336	-339
10	3	7	156	-182	-3	6	7	148	153	3	8	7	402	389	5	11	7	212	-207	-7	-6	8	51	-55
11	3	7	448	-454	-2	6	7	370	-365	4	8	7	619	-612	6	11	7	624	-628	-6	-6	8	298	-292
-7	4	7	230	-238	0	6	7	220	224	5	8	7	643	-640	7	11	7	324	-317	-5	-6	8	90	-94
-6	4	7	245	-235	1	6	7	334	-345	6	8	7	222	203	8	12	7	120	109	-4	-6	8	873	871
-5	4	7	249	246	2	6	7	774	-779	7	8	7	212	191	-2	-9	8	110	-109	-3	-6	8	826	818
-4	4	7	752	732	3	6	7	184	202	8	8	7	111	84	-6	-8	8	447	491	-2	-6	8	352	-339
-3	4	7	649	618	4	6	7	1078	1080	10	8	7	271	267	-4	-8	8	219	-215	-1	-6	8	559	-552
0	4	7	612	-614	5	6	7	354	367	11	8	7	120	138	-3	-8	8	36	-39	0	-6	8	178	-184
1	4	7	962	-970	6	6	7	209	-225	-3	9	7	84	85	-1	-8	8	152	-150	1	-6	8	92	-102
2	4	7	59	48	7	6	7	63	-85	-1	9	7	194	-210	0	-8	8	233	-227	2	-6	8	154	-148
3	4	7	429	431	8	6	7	448	-460	0	9	7	143	-129	1	-8	8	123	114	3	-6	8	121	128
4	4	7	136	142	9	6	7	505	-509	1	9	7	137	-143	2	-8	8	185	195	4	-6	8	834	838
5	4	7	127	129	10	6	7	254	-220	2	9	7	147	-148	-7	-7	8	198	-177	5	-6	8	380	359
6	4	7	608	617	11	6	7	143	146	3	9	7	218	228	-6	-7	8	104	105	6	-6	8	380	-393
7	4	7	345	-347	-5	7	7	489	-487	4	9	7	311	331	-5	-7	8	72	74	-8	-4	8	124	-123
8	4	7	154	-142	-4	7	7	451	-467	5	9	7	120	-131	-4	-7	8	278	-279	-7	-4	8	141	-149
9	4	7	205	213	-2	7	7	420	416	6	9	7	147	-158	-3	-7	8	247	-246	-5	-4	8	562	-593
10	4	7	81	88	-1	7	7	150	137	7	9	7	250	270	-2	-7	8	84	83	-4	-4	8	585	-578
-7	5	7	144	-144	0	7	7	141	149	8	9	7	122	114	-1	-7	8	300	312	-3	-4	8	421	428
-6	5	7	88	-76	1	7	7	483	471	9	9	7	294	-287	0	-7	8	132	131	-2	-4	8	817	810
-5	5	7	167	159	2	7	7	235	-225	10	9	7	296	-303	2	-7	8	140	-138	-1	-4	8	198	200
-4	5	7	255	-270	3	7	7	1230	-1232	-2	10	7	113	-122	3	-7	8	74	-78	0	-4	8	505	-490

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	-4	8	143	-149	7	-2	8	307	304	8	0	8	74	63	9	2	8	441	456	10	4	8	155	135
2	-4	8	186	173	8	-2	8	102	99	10	0	8	181	205	10	2	8	205	188	11	4	8	133	133
3	-4	8	238	-236	9	-2	8	527	-528	-8	1	8	189	-202	-8	3	8	74	-74	-6	5	8	85	84
4	-4	8	223	-220	-9	-1	8	212	-199	-7	1	8	641	-825	-5	3	8	309	-310	-5	5	8	327	346
5	-4	8	287	283	-8	-1	8	274	273	-6	1	8	453	-455	-4	3	8	344	336	-4	5	8	116	123
6	-4	8	289	302	-7	-1	8	770	787	-5	1	8	515	511	-3	3	8	924	886	-3	5	8	711	-709
7	-4	8	159	-171	-6	-1	8	193	212	-4	1	8	446	449	-2	3	8	175	168	-2	5	8	381	-353
-8	-3	8	154	141	-5	-1	8	408	-391	-3	1	8	42	52	-1	3	8	399	-379	-1	5	8	390	382
-9	-3	8	136	149	-4	-1	8	255	-270	-2	1	8	92	71	0	3	8	766	-763	0	5	8	474	470
-10	-3	8	310	316	-3	-1	8	450	-447	-1	1	8	446	449	1	3	8	342	-349	2	5	8	124	-123
-11	-3	8	252	-235	-2	-1	8	473	-461	0	1	8	58	64	2	3	8	225	221	3	5	8	425	418
-12	-3	8	482	-488	-1	-1	8	261	212	1	1	8	430	-432	3	3	8	109	128	4	5	8	610	-590
-13	-3	8	156	-156	0	-1	8	1040	1057	3	1	8	558	582	4	3	8	468	474	5	5	8	139	-144
-14	-3	8	284	291	1	-1	8	1004	1052	4	1	8	150	-142	5	3	8	998	1005	6	5	8	255	224
0	-3	8	246	240	2	-1	8	171	168	5	1	8	588	-592	6	3	8	247	236	7	5	8	284	-284
1	-3	8	517	-516	3	-1	8	1082	-1100	6	1	8	150	155	7	3	8	800	-825	8	5	8	348	-348
2	-3	8	233	-212	4	-1	8	547	-512	7	1	8	481	511	8	3	8	469	-482	9	5	8	130	-103
3	-3	8	746	745	5	-1	8	91	12	8	1	8	84	68	10	3	8	251	252	11	5	8	258	275
4	-3	8	132	122	6	-1	8	137	126	10	1	8	144	-135	11	3	8	134	142	-4	6	8	142	142
5	-3	8	73	-61	7	-1	8	435	440	-8	2	8	243	247	-7	4	8	146	-149	-3	6	8	216	234
6	-3	8	113	-111	8	-1	8	345	330	-7	2	8	193	199	-6	4	8	101	84	-2	6	8	357	-372
7	-3	8	547	-541	-8	0	8	610	-827	-6	2	8	317	-317	-5	4	8	273	-265	-1	6	8	197	-130
-8	-2	8	54	47	-5	0	8	275	-280	-5	2	8	93	-86	-4	4	8	724	-714	0	6	8	437	437
-9	-2	8	206	206	-4	0	8	998	1022	-4	2	8	377	371	-3	4	8	90	-96	1	6	8	203	190
-10	-2	8	75	-78	-3	0	8	643	641	-3	2	8	331	-345	-2	4	8	1043	1039	2	6	8	407	-379
-11	-2	8	334	-360	-2	0	8	218	-218	-2	2	8	642	-634	-1	4	8	834	600	3	6	8	817	-838
-12	-2	8	117	-124	-1	0	8	68	41	-1	2	8	363	-351	0	4	8	189	193	4	6	8	452	458
-13	-2	8	194	147	0	0	8	270	-268	0	2	8	140	142	1	4	8	421	-411	5	6	8	607	593
-14	-2	8	405	414	1	0	8	571	-513	1	2	8	506	518	2	4	8	531	-523	6	6	8	140	-142
0	-2	8	227	207	0	0	8	488	485	2	2	8	156	170	3	4	8	288	-285	7	6	8	82	87
1	-2	8	168	-184	1	0	8	783	782	3	2	8	193	194	4	4	8	488	-489	8	6	8	358	384
2	-2	8	871	-864	2	0	8	432	444	4	2	8	664	661	5	4	8	201	192	9	6	8	371	-436
3	-2	8	571	-565	3	0	8	481	-480	5	2	8	328	-345	6	4	8	795	794	10	6	8	558	-551
4	-2	8	534	526	4	0	8	106	101	6	2	8	1200	-1198	7	4	8	282	284	11	6	8	378	-380
5	-2	8	412	418	5	0	8	302	307	7	2	8	318	-379	8	4	8	249	-231	-5	7	8	184	-184
6	-2	8	188	171	6	0	8	105	-95	8	2	8	302	307	9	4	8	134	-138	-4	7	8	278	-288

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	7	8	136	-128	-1	10	8	90	-87	-8	-5	9	322	-318	7	-3	9	370	374	-2	0	9	595	-586
-2	7	8	184	-183	0	10	8	90	97	-5	-5	9	634	-660	-8	-2	9	285	291	-1	0	9	171	-174
-1	7	8	150	-141	1	10	8	336	329	-4	-5	9	78	83	-5	-2	9	270	-279	0	0	9	1184	-1166
0	7	8	141	139	2	10	8	139	-135	-3	-5	9	185	920	-5	-2	9	140	-119	1	0	9	850	-845
1	7	8	658	643	3	10	8	220	-200	-2	-5	9	304	292	-4	-2	9	313	277	2	0	9	239	209
2	7	8	727	687	4	10	8	227	219	1	-5	9	248	-247	-3	-2	9	203	-209	3	0	9	585	617
3	7	8	281	-284	5	10	8	228	218	2	-5	9	576	-568	-2	-2	9	441	-423	4	0	9	108	-136
4	7	8	974	-957	6	10	8	411	-417	3	-5	9	284	-280	-1	-2	9	390	354	5	0	9	102	84
5	7	8	414	-401	7	10	8	324	-339	4	-5	9	151	139	0	-2	9	672	672	6	0	9	256	255
6	7	8	243	240	8	10	8	132	143	5	-5	9	678	700	1	-2	9	186	214	7	0	9	251	-254
7	7	8	378	350	9	10	8	228	228	-7	-4	9	304	325	2	-2	9	265	-263	8	0	9	657	-649
8	7	8	450	561	2	11	8	108	110	-5	-4	9	208	221	3	-2	9	499	-488	-7	1	9	77	-75
9	7	8	190	227	3	11	8	63	46	-4	-4	9	243	-227	4	-2	9	165	-176	-8	1	9	582	-598
-2	8	8	114	-115	4	11	8	141	-148	-4	-4	9	784	-757	5	-2	9	74	-79	-5	1	9	189	-162
-1	8	8	459	-453	5	11	8	418	430	-3	-4	9	332	-558	7	-2	9	413	413	-4	1	9	84	-92
0	8	8	430	-446	6	11	8	492	482	-2	-4	9	381	376	8	-2	9	637	634	-3	1	9	40	70
1	8	8	380	384	7	11	8	370	-373	-1	-4	9	320	349	-8	-1	9	245	-255	-2	1	9	275	282
2	8	8	737	757	-2	-8	9	80	79	0	-4	9	167	147	-7	-1	9	377	381	-1	1	9	756	778
3	8	8	280	289	-5	-7	9	130	125	1	-4	9	75	59	-6	-1	9	581	584	0	1	9	436	415
4	8	8	444	-470	-4	-7	9	121	-118	2	-4	9	180	181	-5	-1	9	190	-188	1	1	9	353	-375
5	8	8	263	-272	-3	-7	9	191	-183	3	-4	9	340	-348	-3	-1	9	170	169	2	1	9	471	-453
6	8	8	82	-83	-2	-7	9	124	119	4	-4	9	545	-533	-2	-1	9	447	-447	3	1	9	262	261
7	8	8	231	-244	-1	-7	9	68	42	5	-4	9	41	-44	-1	-1	9	987	-959	4	1	9	409	384
8	8	8	64	99	1	-7	9	98	97	6	-4	9	400	405	1	-1	9	915	911	5	1	9	199	-174
9	8	8	348	306	2	-7	9	154	163	-8	-3	9	158	-170	2	-1	9	583	559	6	1	9	262	-262
-2	9	8	144	148	-6	-6	9	253	-247	-7	-3	9	125	-124	4	-1	9	251	-260	7	1	9	287	265
-1	9	8	228	232	-5	-6	9	279	269	-6	-3	9	320	307	5	-1	9	210	-212	8	1	9	154	155
0	9	8	175	-182	-4	-6	9	536	530	-4	-3	9	482	474	6	-1	9	482	-486	9	1	9	254	-262
1	9	8	541	-527	-2	-6	9	313	-319	-3	-1	9	414	-432	7	-1	9	475	-478	-7	2	9	284	283
2	9	8	365	-373	-1	-6	9	94	-86	8	-1	9	115	83	8	-1	9	291	285	-5	2	9	209	-191
3	9	8	97	93	0	-6	9	187	-191	-1	-3	9	66	60	9	-1	9	815	833	-4	2	9	258	265
4	9	8	235	222	1	-6	9	180	-187	2	-3	9	66	60	-7	0	9	623	-641	-3	2	9	114	-109
5	9	8	249	-235	2	-6	9	79	69	3	-3	9	181	180	-8	0	9	185	-177	-2	2	9	441	-450
6	9	8	74	60	3	-6	9	465	478	4	-3	9	444	465	-5	0	9	879	863	0	2	9	103	97
7	9	8	152	-149	4	-6	9	502	516	5	-3	9	214	-218	-6	0	9	234	240	3	2	9	231	-246
8	9	8	198	-213	-7	-5	9	78	-69	6	-3	9	147	156	-3	0	9	348	385	4	2	9	487	498

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 20

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	2	9	613	626	-3	5	9	117	-116	6	7	9	111	-114	-1	-6	10	192	189	5	-3	10	50	-54
5	2	9	263	-302	-2	5	9	783	-799	7	7	9	507	-508	0	-6	10	177	159	6	-3	10	165	-168
7	2	9	625	-624	-1	5	9	237	-228	8	7	9	328	-288	1	-6	10	358	-354	-8	-2	10	282	-279
8	2	9	121	-119	1	5	9	81	77	9	7	9	426	425	2	-6	10	477	-463	-5	-2	10	317	-351
-5	3	9	64	103	2	5	9	64	52	10	7	9	615	622	-5	-5	10	334	-322	-4	-2	10	65	40
-16	3	9	502	-501	3	5	9	374	382	-2	8	9	389	408	-4	-5	10	530	-525	-3	-2	10	294	299
-14	3	9	494	-497	4	5	9	384	389	-1	8	9	238	229	-3	-5	10	56	44	-2	-2	10	336	-357
-14	3	9	403	399	5	5	9	310	-332	0	8	9	627	-626	-2	-5	10	227	211	-1	-2	10	234	-236
-2	3	9	504	501	6	5	9	466	-482	1	8	9	564	-563	0	-5	10	506	505	0	-2	10	360	343
0	3	9	185	178	7	5	9	247	265	2	8	9	72	-72	1	-5	10	440	424	1	-2	10	225	216
1	3	9	78	-64	9	5	9	272	-258	3	8	9	453	427	2	-5	10	331	-357	2	-2	10	123	-136
2	3	9	564	-549	10	5	9	165	-181	4	8	9	421	411	3	-5	10	698	-684	3	-2	10	60	62
3	3	9	760	-791	-5	6	9	195	-196	5	8	9	90	104	4	-5	10	431	-429	4	-2	10	267	-262
4	3	9	378	-347	-4	6	9	275	263	6	8	9	85	81	5	-4	10	596	603	5	-2	10	266	-283
5	3	9	619	619	-3	6	9	397	391	7	8	9	103	86	-5	-4	10	411	413	6	-2	10	436	-424
6	3	9	880	870	-1	6	9	235	-223	8	8	9	447	-467	4	-4	10	223	-222	7	-2	10	186	-195
7	3	9	116	119	0	6	9	122	126	9	8	9	408	-428	-3	-4	10	539	-516	-6	-1	10	66	68
8	3	9	365	-361	1	6	9	123	131	-1	9	9	359	360	-2	-4	10	139	-138	-5	-1	10	70	60
9	3	9	234	-226	3	6	9	305	-314	0	9	9	517	528	-1	-4	10	111	-132	-4	-1	10	40	39
10	3	9	209	-215	4	6	9	156	-168	1	9	9	136	-145	0	-4	10	102	-97	-3	-1	10	320	325
-6	4	9	293	286	5	6	9	178	206	2	9	9	536	-520	1	-4	10	377	401	-2	-1	10	101	108
-6	4	9	303	288	6	6	9	142	-122	3	9	9	392	-368	2	-4	10	559	554	-1	-1	10	760	-710
-14	4	9	511	-511	7	6	9	110	-134	4	9	9	114	117	3	-4	10	238	224	0	-1	10	624	-626
-3	4	9	898	-880	8	6	9	715	701	5	9	9	144	137	4	-4	10	406	-414	1	-1	10	135	121
-1	4	9	412	403	9	6	9	351	353	7	9	9	206	210	5	-4	10	443	-429	2	-1	10	274	301
0	4	9	327	335	10	6	9	274	-279	8	9	9	263	266	-6	-3	10	123	-110	3	-1	10	127	118
1	4	9	436	417	-4	7	9	284	-278	9	9	9	223	-224	-5	-3	10	495	510	4	-1	10	272	246
2	4	9	285	284	-3	7	9	142	139	1	10	9	242	264	4	-3	10	813	606	5	-1	10	331	325
3	4	9	217	-214	-2	7	9	73	78	2	10	9	167	172	-3	-3	10	45	-54	6	-1	10	724	-756
4	4	9	909	-904	-1	7	9	522	-532	3	10	9	248	-275	-2	-3	10	264	-257	8	-1	10	407	-393
5	4	9	798	-812	0	7	9	201	-197	4	10	9	82	-78	-1	-3	10	90	90	-6	0	10	315	-317
6	4	9	296	302	1	7	9	404	416	5	10	9	308	309	0	-3	10	103	-102	-5	0	10	231	-208
7	4	9	547	561	2	7	9	504	503	7	10	9	393	-378	1	-3	10	181	-189	-3	0	10	119	103
8	4	9	134	100	3	7	9	174	184	-4	-6	10	280	274	2	-3	10	60	59	-2	0	10	902	815
-5	5	9	434	425	4	7	9	228	-245	3	-3	10	160	177	3	-3	10	101	76	-1	0	10	589	588
-14	5	9	663	665	5	7	9	294	-320	-2	-6	10	180	-175	4	-3	10	295	312	0	0	10	384	-388

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRI-RUTHENIUM ALLYL CLUSTER

PAGE 21

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	0	10	757	-776	-2	3	10	371	350	8	5	10	245	234	6	9	10	239	-212	-4	-1	11	240	-227
2	0	10	145	-127	-1	3	10	44	-34	9	5	10	219	-231	7	9	10	84	46	-3	-1	11	49	61
3	0	10	120	-154	0	3	10	143	-155	-3	6	10	319	298	4	10	10	82	-73	-2	-1	11	538	531
4	0	10	195	213	1	3	10	735	732	-2	6	10	226	231	5	10	10	90	78	0	-1	11	502	-446
5	0	10	564	571	2	3	10	218	184	0	6	10	183	190	-2	-5	11	133	-129	1	-1	11	240	-232
6	0	10	457	458	3	3	10	512	-440	1	8	10	137	129	-1	-5	11	365	-365	3	-1	11	312	-331
7	0	10	460	-476	4	3	10	833	-868	2	8	10	318	-329	0	-5	11	100	90	4	-1	11	180	189
-4	1	10	214	-205	5	3	10	118	-118	3	8	10	309	-306	1	-5	11	517	537	5	-1	11	524	512
-3	1	10	618	-598	6	3	10	314	319	4	8	10	133	-135	-4	-4	11	224	226	6	-1	11	573	606
-2	1	10	298	-276	7	3	10	424	448	5	8	10	142	138	-3	-4	11	150	140	-5	0	11	129	-125
-1	1	10	433	415	8	3	10	162	155	7	8	10	397	-397	-1	-4	11	366	-340	-4	0	11	354	-363
0	1	10	597	577	9	3	10	273	271	8	8	10	433	462	0	-4	11	762	-758	-3	0	11	480	-478
1	1	10	67	70	-5	4	10	509	515	-2	7	10	459	475	1	-4	11	170	-180	-2	0	11	124	142
2	1	10	177	-170	-4	4	10	237	226	-1	7	10	130	-150	2	-4	11	447	449	-1	0	11	705	688
3	1	10	215	-234	-3	4	10	449	-445	0	7	10	381	-363	3	-4	11	519	516	0	0	11	308	296
4	1	10	175	-188	-2	4	10	460	-465	2	7	10	303	309	-5	-3	11	123	-138	1	0	11	122	-119
5	1	10	151	-153	0	4	10	224	-218	3	7	10	160	129	-4	-3	11	320	311	3	0	11	286	-299
6	1	10	161	186	2	4	10	809	806	4	7	10	94	98	-3	-3	11	277	300	4	0	11	507	-496
7	1	10	406	408	3	4	10	817	830	5	7	10	203	233	-2	-3	11	81	73	5	0	11	260	-257
8	1	10	294	-306	4	4	10	78	-83	6	7	10	131	128	-1	-3	11	421	415	6	0	11	285	294
-4	2	10	97	-86	5	4	10	793	-800	7	7	10	130	-121	1	-3	11	710	-707	7	0	11	686	692
-3	2	10	254	281	6	4	10	280	-271	8	7	10	558	-573	2	-3	11	288	-308	-5	1	11	435	455
-2	2	10	365	372	7	4	10	168	169	9	7	10	215	-217	3	-3	11	204	190	-4	1	11	249	235
-1	2	10	522	-528	8	4	10	126	143	-1	8	10	683	667	4	-3	11	147	137	-3	1	11	393	-387
0	2	10	400	-376	-4	5	10	567	594	0	8	10	188	180	5	-3	11	72	79	-2	1	11	755	-766
1	2	10	269	272	-3	5	10	544	528	1	8	10	435	-448	-5	-2	11	387	-397	-1	1	11	242	-246
2	2	10	89	107	-2	5	10	78	-58	2	8	10	316	-312	-4	-2	11	201	-197	0	1	11	308	327
3	2	10	313	-349	-1	5	10	342	-335	3	8	10	151	-140	-3	-2	11	196	180	1	1	11	126	124
4	2	10	192	-143	0	5	10	314	-320	5	8	10	131	109	-1	-2	11	245	-228	3	1	11	354	367
5	2	10	202	202	1	5	10	569	-596	6	8	10	412	404	0	-2	11	249	235	5	1	11	333	-359
6	2	10	127	120	2	5	10	332	-324	7	8	10	599	620	1	-2	11	333	353	8	1	11	417	-421
7	2	10	185	-173	3	5	10	284	281	0	9	10	478	465	2	-2	11	265	-256	7	1	11	157	-148
8	2	10	110	-124	4	5	10	708	694	1	9	10	359	371	4	-2	11	293	289	-4	2	11	270	273
-4	3	10	62	-64	5	5	10	225	231	3	9	10	223	-237	5	-2	11	87	94	-3	2	11	540	560
-3	3	10	171	-190	6	5	10	423	-398	4	9	10	109	-103	6	-2	11	279	-298	-2	2	11	155	152
-2	3	10	518	-517	7	5	10	123	-140	5	9	10	218	-209	-5	-1	11	134	-138	-1	2	11	591	-579

Chapter 3. Positional ($\times 10^5$ for Ru and As, all others $\times 10^4$) and thermal ($\times 10^4$ for Ru and As, all others $\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_3(\mu\text{-H})(\mu\text{-N}_2\text{C}_6\text{H}_4)(\mu_3\text{-AsPhCH}_2\text{AsPh}_2)(\text{CO})_8$ (38)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	68416(6)	27308(5)	62011(4)	317(3)	338(3)	275(4)	-32(3)	-106(3)	-90(2)
Ru(2)	76887(6)	41897(5)	69170(5)	422(3)	300(3)	338(4)	-26(3)	-108(3)	-134(2)
Ru(3)	02348(6)	20253(5)	64096(4)	299(3)	458(3)	279(4)	-99(3)	-44(3)	-154(2)
As(1)	58957(7)	17571(6)	78290(5)	276(3)	288(3)	285(5)	-49(3)	-74(3)	-81(3)
As(2)	85277(7)	22621(6)	79113(5)	300(4)	323(3)	266(5)	-64(3)	-67(3)	-99(3)
N(1)	8745(5)	1452(5)	6292(4)	30(3)	44(3)	24(4)	-10(3)	-8(3)	-11(2)
N(2)	8929(5)	327(5)	6389(4)	32(3)	39(3)	31(4)	-14(3)	-4(3)	-7(2)
O(11)	4240(6)	4873(5)	6157(5)	60(4)	68(4)	73(5)	2(4)	-30(4)	10(3)
O(12)	8485(6)	3915(5)	4352(4)	61(4)	71(4)	37(4)	2(3)	-9(3)	-31(3)
O(13)	6056(8)	1149(7)	5397(5)	117(6)	105(5)	70(5)	-25(4)	-31(5)	-63(5)
O(21)	4873(6)	5237(5)	8219(5)	60(4)	48(3)	115(7)	-35(4)	17(4)	-11(3)
O(22)	9112(8)	5424(6)	7540(5)	103(6)	85(5)	91(6)	-23(4)	-32(5)	-53(4)
O(23)	6910(8)	6245(6)	5347(5)	138(7)	60(4)	77(6)	26(4)	-56(5)	-46(4)
O(31)	12523(7)	2438(7)	6817(5)	74(5)	147(7)	72(5)	-20(5)	-23(4)	-66(5)
O(32)	11793(7)	2085(7)	4364(5)	84(5)	119(6)	38(4)	-29(4)	11(4)	-52(4)
C(11)	5185(8)	4064(7)	6188(6)	48(5)	48(4)	32(5)	4(4)	-16(4)	-9(4)
C(12)	7867(8)	3490(7)	5035(6)	42(4)	49(4)	39(6)	-6(4)	-19(4)	-14(3)
C(13)	6358(8)	1708(7)	5699(6)	49(5)	61(5)	32(5)	-7(4)	-8(4)	-21(4)
C(21)	5896(9)	4789(6)	7747(6)	57(5)	27(3)	59(6)	-2(4)	-13(5)	-14(3)
C(22)	8597(9)	4959(7)	7302(6)	59(5)	42(4)	46(6)	-8(4)	-8(5)	-22(4)
C(23)	7244(9)	5469(7)	5904(7)	74(6)	40(4)	64(7)	3(5)	-28(5)	-26(4)
C(31)	11645(9)	2327(8)	6660(6)	46(5)	77(6)	37(6)	-15(5)	-3(4)	-32(4)
C(32)	11221(8)	2074(7)	5126(6)	43(4)	65(5)	39(6)	-16(5)	-5(4)	-24(4)
C(1)	7364(6)	1163(6)	8411(5)	32(4)	33(3)	24(5)	-4(3)	-7(3)	-8(3)
C(42)	10520(5)	-1647(4)	6709(4)	47(2)					
C(43)	11762(5)	-2378(4)	6903(4)	58(2)					
C(44)	12658(5)	-1848(4)	6969(4)	60(2)					
C(45)	12313(5)	-588(4)	6841(4)	51(2)					
C(46)	11071(5)	143(4)	6646(4)	39(2)					
C(41)	10175(5)	-387(4)	6580(4)	38(2)					
C(52)	8023(4)	3089(4)	9588(4)	42(2)					
C(53)	8298(4)	3041(4)	10391(4)	51(2)					
C(54)	9485(4)	2192(4)	10600(4)	58(2)					
C(55)	10397(4)	1391(4)	10005(4)	64(3)					
C(56)	10122(4)	1439(4)	9201(4)	48(2)					
C(51)	8935(4)	2288(4)	8993(4)	33(2)					

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(62)	4063(4)	211(3)	8667(3)	39(2)					
C(63)	3677(4)	-825(3)	8809(3)	42(2)					
C(64)	4563(4)	-1758(3)	8325(3)	44(2)					
C(65)	5835(4)	-1654(3)	7699(3)	52(2)					
C(66)	6221(4)	-618(3)	7557(3)	45(2)					
C(61)	5335(4)	314(3)	8041(3)	32(2)					
C(72)	4268(5)	2652(4)	9558(4)	57(2)					
C(73)	3063(5)	3284(4)	10149(4)	70(3)					
C(74)	1895(5)	3951(4)	9844(4)	58(2)					
C(75)	1933(5)	3986(4)	8949(4)	56(2)					
C(76)	3138(5)	3354(4)	8359(4)	44(2)					
C(71)	4306(5)	2687(4)	8663(4)	32(2)					

Chapter 3. Hydrogen atom positional ($\times 10^4$) and thermal ($\times 10^3$) parameters for $\text{Ru}_3(\mu\text{-H})(\mu\text{-N}_2\text{C}_6\text{H}_4)(\mu_3\text{-AsPhCH}_2\text{AsPh}_2)(\text{CO})_8$ (38)

	x	y	z	U(11)
H(11)	6959(6)	1129(6)	9072(5)	65(22)
H(12)	7931(6)	357(6)	8291(5)	65(22)
H(42)	9826(5)	-2057(4)	6658(4)	65(3)
H(43)	12029(5)	-3353(4)	7003(4)	65(3)
H(44)	13619(5)	-2413(4)	7120(4)	65(3)
H(45)	13007(5)	-177(4)	6892(4)	65(3)
H(52)	7104(4)	3746(4)	9426(4)	65(3)
H(53)	7593(4)	3661(4)	10852(4)	65(3)
H(54)	9699(4)	2155(4)	11221(4)	65(3)
H(55)	11316(4)	733(4)	10166(4)	65(3)
H(56)	10827(4)	818(4)	8741(4)	65(3)
H(62)	3376(4)	933(3)	5042(3)	65(3)
H(63)	2692(4)	-905(3)	9294(3)	65(3)
H(64)	4264(4)	-2560(3)	8435(3)	65(3)
H(65)	6521(4)	-2376(3)	7324(3)	65(3)
H(66)	7206(4)	-538(3)	7072(3)	65(3)
H(72)	5172(5)	2135(4)	9793(4)	65(3)
H(73)	3033(5)	3257(4)	10841(4)	65(3)
H(74)	961(5)	4440(4)	10302(4)	65(3)
H(75)	1028(5)	4503(4)	8714(4)	65(3)
H(76)	3167(5)	3382(4)	7666(4)	65(3)
H(1)	9405(31)	3597(20)	6046(22)	65(3)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										RUTHENIUM A70 CLUSTER										SEPT 83										PAGE 01									
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC										
1	0	0	507	488	-2	2	0	667	654	-5	4	0	339	-323	-6	6	0	76	-72	1	8	0	521	528															
2	0	0	555	-548	-1	2	0	741	-694	-4	4	0	1203	-1210	-5	6	0	353	353	2	8	0	641	-630															
3	0	0	130	129	0	2	0	1921	1985	-3	4	0	150	152	-4	6	0	302	276	3	8	0	504	-485															
4	0	0	53	40	1	2	0	628	-577	-1	4	0	688	689	-2	6	0	689	688	4	8	0	59	4															
5	0	0	693	685	2	2	0	805	-783	0	4	0	987	940	-1	6	0	126	-121	5	8	0	196	-165															
6	0	0	169	176	3	2	0	121	108	1	4	0	143	-142	0	6	0	397	-377	6	8	0	565	557															
7	0	0	695	698	4	2	0	282	267	2	4	0	770	750	1	6	0	596	-565	7	8	0	337	317															
8	0	0	62	44	5	2	0	522	-529	3	4	0	291	-147	2	6	0	1691	1672	8	8	0	312	-306															
9	0	0	224	221	6	2	0	1404	-1399	4	4	0	603	544	3	6	0	675	647	9	8	0	183	-176															
10	0	0	100	90	7	2	0	1241	-1224	5	4	0	642	-614	4	6	0	1016	-987	10	8	0	303	314															
-9	1	0	126	135	8	2	0	635	651	6	4	0	801	762	5	6	0	241	207	-6	9	0	195	209															
-8	1	0	162	156	9	2	0	258	-234	7	4	0	1490	1452	6	6	0	630	-635	-5	9	0	162	148															
-7	1	0	411	589	10	2	0	250	-264	8	4	0	104	-116	7	6	0	226	-221	-4	9	0	225	-217															
-6	1	0	539	553	-9	3	0	171	-177	9	4	0	131	128	8	6	0	164	-142	-3	9	0	520	-505															
-5	1	0	820	823	-8	3	0	98	-43	-9	4	0	117	-102	9	8	0	204	-202	-2	9	0	205	-181															
-4	1	0	129	-135	-7	3	0	374	-372	-8	5	0	464	471	-8	7	0	205	-204	-1	9	0	881	881															
-3	1	0	708	698	-6	3	0	1696	-1698	-7	5	0	179	-139	-6	7	0	352	-327	0	9	0	248	-223															
-2	1	0	1475	1510	-5	3	0	448	504	-6	5	0	42	33	-5	7	0	338	-315	1	9	0	460	443															
-1	1	0	1498	-1540	-4	3	0	341	370	-5	5	0	942	917	-4	7	0	603	618	2	9	0	210	215															
1	1	0	2036	2128	-3	3	0	1370	-1342	-4	5	0	97	-101	-3	7	0	188	-182	3	9	0	119	-99															
2	1	0	1184	1134	-2	3	0	1370	-1342	-3	5	0	196	172	-2	7	0	315	-295	4	9	0	558	526															
3	1	0	786	724	-1	3	0	224	-211	-2	5	0	32	46	-1	7	0	270	-251	5	9	0	243	-280															
4	1	0	1149	-1128	0	3	0	1478	-1471	-1	5	0	339	312	0	7	0	57	52	7	9	0	523	534															
5	1	0	451	-441	1	3	0	904	-886	0	5	0	1452	1431	1	7	0	988	-870	6	9	0	687	688															
6	1	0	560	-553	2	3	0	1334	-1301	1	5	0	1597	1608	2	7	0	1113	-1097	9	9	0	74	74															
7	1	0	152	153	3	3	0	548	-506	2	5	0	708	648	3	7	0	562	567	10	9	0	24	-248															
8	1	0	480	-488	4	3	0	555	-534	3	5	0	1197	-1177	4	7	0	279	-298	-5	10	0	115	107															
9	1	0	182	170	5	3	0	404	388	4	5	0	887	874	5	7	0	398	-392	-4	10	0	421	406															
10	2	0	154	161	6	3	0	1161	1139	5	5	0	620	595	6	7	0	721	-719	-3	10	0	270	252															
-9	2	0	291	279	7	3	0	1044	-1014	6	5	0	470	-455	7	7	0	276	-264	-2	10	0	518	-519															
-8	2	0	64	71	8	3	0	586	-586	7	5	0	755	757	8	7	0	118	115	-1	10	0	88	104															
-7	2	0	467	-462	9	3	0	700	702	8	5	0	254	255	9	7	0	695	-692	0	10	0	252	244															
-6	2	0	378	-355	10	3	0	201	214	9	5	0	220	198	10	7	0	772	-750	1	10	0	362	243															
-5	2	0	297	293	-8	4	0	140	-148	10	5	0	83	80	-2	8	0	216	-240	2	10	0	447	855															
-4	2	0	538	534	-7	4	0	243	-242	-8	6	0	73	-65	-1	8	0	935	-512	3	10	0	274	-281															
-3	2	0	1404	-1466	-6	4	0	415	428	-7	6	0	488	476	0	8	0	359	-356	4	10	0	80	-120															

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										RUTHENIUM A70 CLUSTER										SEPT 83										PAGE 2									
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC					
5	10	0	393	376	-4-13	1	85	112		-10	-9	1	269	-293	-3	-7	1	676	-660	-4	-5	1	1709	-1685	-4	-5	1	1709	-1685	-4	-5	1	524	465					
6	10	0	157	150	-3-13	1	376	397		-9	-9	1	479	479	-2	-7	1	554	-553	-3	-5	1	524	465	-3	-5	1	524	465	-3	-5	1	837	810					
7	10	0	221	-209	-1-13	1	82	84		-8	-9	1	278	-279	-1	-7	1	1213	1216	-2	-5	1	837	810	-2	-5	1	837	810	-2	-5	1	582	-549					
9	10	0	482	445	-8-12	1	232	235		-7	-9	1	383	-404	0	-7	1	80	23	-1	-5	1	582	-549	-1	-5	1	582	-549	-1	-5	1	1056	-1033					
10	10	0	71	-75	-6-12	1	570	609		-6	-9	1	222	-191	1	-7	1	230	-228	0	-5	1	1056	-1033	0	-5	1	1056	-1033	0	-5	1	981	-964					
-3	11	0	424	417	-5-12	1	352	358		-4	-9	1	68	15	2	-7	1	338	330	1	-5	1	981	-964	1	-5	1	981	-964	1	-5	1	78	-59					
-2	11	0	183	173	-4-12	1	367	-384		-3	-9	1	183	-203	3	-7	1	144	134	2	-5	1	78	-59	2	-5	1	78	-59	2	-5	1	137	54					
-1	11	0	240	-252	-3-12	1	105	-107		-2	-9	1	350	350	4	-7	1	178	159	3	-5	1	137	54	3	-5	1	137	54	3	-5	1	417	417					
1	11	0	686	-674	-2-12	1	148	148		0	-9	1	536	543	5	-7	1	469	-468	4	-5	1	417	417	4	-5	1	417	417	4	-5	1	222	-258					
2	11	0	138	117	-1-12	1	242	242		1	-9	1	164	159	6	-7	1	97	-82	5	-5	1	222	-258	5	-5	1	222	-258	5	-5	1	486	481					
3	11	0	630	623	0-12	1	117	-116		2	-9	1	720	-714	7	-7	1	227	-240	7	-5	1	486	481	7	-5	1	486	481	7	-5	1	182	-174					
4	11	0	116	-112	1-12	1	148	148		3	-9	1	499	501	8	-7	1	169	160	8	-5	1	182	-174	8	-5	1	182	-174	8	-5	1	243	-250					
5	11	0	383	-399	-9-11	1	257	-249		4	-9	1	454	471	-10	-8	1	278	290	9	-5	1	243	-250	9	-5	1	243	-250	9	-5	1	486	-490					
6	11	0	373	-418	-8-11	1	280	286		5	-9	1	88	95	-9	-8	1	54	-59	-10	-4	1	486	-490	-10	-4	1	486	-490	-10	-4	1	93	-76					
7	11	0	127	122	-6-11	1	327	-334		6	-9	1	121	123	-8	-8	1	119	111	-8	-6	1	93	-76	-8	-6	1	93	-76	-8	-6	1	383	371					
8	11	0	450	-443	-5-11	1	346	351		-10	-8	1	400	-525	-7	-6	1	228	-198	-7	-6	1	383	371	-7	-6	1	383	371	-7	-6	1	157	157					
9	11	0	134	-133	-4-11	1	343	351		-8	-8	1	373	376	-6	-6	1	64	-50	-6	-6	1	157	157	-6	-6	1	157	157	-6	-6	1	1003	-970					
-2	12	0	170	162	-3-11	1	228	-221		-7	-8	1	615	590	-5	-6	1	410	-414	-5	-6	1	1003	-970	-5	-6	1	1003	-970	-5	-6	1	382	380					
-1	12	0	342	-343	-2-11	1	565	-552		-6	-8	1	234	208	-4	-6	1	415	420	-4	-6	1	382	380	-4	-6	1	382	380	-4	-6	1	129	-101					
0	12	0	145	133	-1-11	1	189	-198		-4	-8	1	357	381	-3	-6	1	1468	1469	-4	-6	1	129	-101	-3	-6	1	1468	1469	-3	-6	1	1075	-1058					
1	12	0	184	-181	0-11	1	148	-173		-3	-8	1	173	-151	-2	-6	1	1444	-1538	-2	-6	1	1075	-1058	-2	-6	1	1075	-1058	-2	-6	1	768	750					
2	12	0	673	-648	1-11	1	190	-198		-2	-8	1	818	755	-1	-6	1	1030	-1018	-1	-6	1	768	750	-1	-6	1	768	750	-1	-6	1	84	57					
3	12	0	337	-350	2-11	1	265	258		-1	-8	1	160	163	0	-6	1	98	-97	0	-6	1	84	57	0	-6	1	84	57	0	-6	1	939	919					
4	12	0	145	146	3-11	1	310	-317		0	-8	1	270	-265	1	-6	1	914	-902	1	-6	1	939	919	1	-6	1	939	919	1	-6	1	316	300					
5	12	0	311	303	-9-10	1	244	-249		1	-8	1	1352	1363	2	-6	1	321	-323	2	-6	1	316	300	2	-6	1	316	300	2	-6	1	285	-258					
6	12	0	374	-379	-8-10	1	589	-617		2	-8	1	244	243	3	-6	1	356	-366	3	-6	1	285	-258	3	-6	1	285	-258	3	-6	1	343	-348					
7	12	0	174	-168	-7-10	1	156	136		3	-8	1	48	-27	4	-6	1	179	185	4	-6	1	343	-348	4	-6	1	343	-348	4	-6	1	1628	1657					
8	12	0	132	-139	-6-10	1	319	-281		4	-8	1	127	-115	5	-6	1	247	-255	5	-6	1	1628	1657	5	-6	1	1628	1657	5	-6	1	168	-143					
9	12	0	277	-276	-5-10	1	308	-277		5	-8	1	292	293	6	-6	1	53	-68	6	-6	1	168	-143	6	-6	1	168	-143	6	-6	1	658	667					
1	13	0	173	178	-4-10	1	316	-336		6	-8	1	275	283	7	-6	1	254	-248	7	-6	1	658	667	7	-6	1	658	667	7	-6	1	79	-72					
3	13	0	136	-140	-3-10	1	198	185		-10	-7	1	282	285	8	-6	1	493	-527	8	-6	1	79	-72	8	-6	1	79	-72	8	-6	1	74	76					
4	13	0	451	-486	-1-10	1	389	-401		-9	-7	1	49	-59	-10	-5	1	128	140	-10	-5	1	74	76	-10	-5	1	74	76	-10	-5	1	261	-256					
5	13	0	168	174	0-10	1	324	-325		-7	-7	1	291	255	-8	-5	1	338	-320	-8	-5	1	261	-256	-8	-5	1	261	-256	-8	-5	1	440	-434					
6	13	0	291	308	1-10	1	608	-612		-6	-7	1	708	705	-7	-5	1	760	-738	-7	-5	1	440	-434	-7	-5	1	440	-434	-7	-5	1	1497	1490					
7	13	1	261	279	3-10	1	427	425		-5	-7	1	748	754	-6	-5	1	324	-299	-6	-5	1	1497	1490	-6	-5	1	1497	1490	-6	-5	1	535	514					
8	13	1	315	-315	4-10	1	293	-284		-4	-7	1	693	677	-5	-5	1	89	-62	-5	-5	1	535	514	-5	-5	1	535	514	-5	-5	1							

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT A3

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-5	-3	1	234	206	-4	-1	1	342	-342	-7	1	1	844	633	-9	3	1	531	530	10	4	1	330	-330
-4	-1	1	837	844	-3	-1	1	832	788	-6	1	1	448	-504	-8	3	1	72	68	-8	5	1	306	-324
-3	-1	1	238	-211	-2	-1	1	360	318	-5	1	1	246	-270	-7	3	1	107	-104	-7	5	1	272	-270
-2	-3	1	618	-589	-1	-1	1	1781	-1772	-3	1	1	618	597	-6	3	1	119	-119	-6	5	1	106	101
-1	-3	1	427	-405	0	-1	1	2210	-2413	-2	1	1	1692	-1715	-5	3	1	935	958	-5	5	1	418	-429
0	-3	1	1032	984	1	-1	1	348	313	-1	1	1	341	-351	-4	3	1	858	862	-4	5	1	827	-947
1	-3	1	1248	1247	2	-1	1	470	-456	0	1	1	2430	3025	-3	3	1	705	-672	-3	5	1	387	-374
2	-3	1	1488	1483	3	-1	1	1275	-1305	2	1	1	999	868	-2	3	1	885	882	-2	5	1	1022	-1030
3	-3	1	1168	1160	4	-1	1	834	823	3	1	1	89	61	-1	3	1	297	-283	-1	5	1	269	249
4	-3	1	1544	-1580	6	-1	1	260	-293	4	1	1	144	126	0	3	1	542	-547	0	5	1	136	123
6	-3	1	901	920	7	-1	1	526	-534	5	1	1	1051	1046	1	3	1	107	76	1	5	1	876	-865
8	-3	1	219	245	8	-1	1	564	-596	6	1	1	684	678	2	3	1	1442	-1442	2	5	1	215	-258
9	-3	1	74	-74	9	-1	1	228	-231	7	1	1	565	548	3	3	1	386	-346	3	5	1	108	-53
-10	-2	1	142	132	10	-1	1	109	110	8	1	1	171	175	4	3	1	580	547	4	5	1	805	884
-9	-2	1	676	672	-10	0	1	137	139	9	1	1	691	701	5	3	1	141	129	5	5	1	681	-688
-8	-2	1	364	-370	-9	0	1	502	-508	10	1	1	127	131	6	3	1	1412	-1378	6	5	1	328	308
-7	-2	1	457	-430	-8	0	1	89	-89	-9	2	1	133	118	7	3	1	1244	-1215	7	5	1	739	714
-6	-2	1	1127	1112	-7	0	1	529	-534	-8	2	1	274	-286	8	3	1	379	355	8	5	1	479	459
-5	-2	1	834	808	-6	0	1	743	-746	-7	2	1	344	360	9	3	1	537	-551	10	5	1	248	-311
-4	-2	1	887	886	-5	0	1	326	-339	-6	2	1	954	980	10	3	1	74	-70	-8	6	1	136	148
-3	-2	1	469	-447	-4	0	1	942	-914	-5	2	1	673	688	-9	4	1	111	-107	-7	6	1	198	-207
-2	-2	1	188	218	-3	0	1	708	-703	-4	2	1	120	-124	-7	4	1	239	221	-6	6	1	241	208
0	-2	1	270	254	-2	0	1	193	186	-3	2	1	591	594	-6	4	1	459	-463	-5	6	1	109	115
1	-2	1	801	-842	-1	0	1	1252	1254	-2	2	1	1144	1149	-5	4	1	1339	-1336	-4	6	1	557	-519
2	-2	1	1647	-1658	0	0	1	1166	-1181	-1	2	1	434	-431	-4	4	1	349	360	-3	6	1	277	254
3	-2	1	1202	1202	1	0	1	2510	-2247	0	2	1	235	260	-3	4	1	122	-95	-2	6	1	79	-94
4	-2	1	788	765	2	0	1	807	897	1	2	1	1309	1315	-2	4	1	125	125	-1	6	1	605	-639
5	-2	1	1229	-1276	3	0	1	706	-714	2	2	1	732	712	-1	4	1	160	-117	0	6	1	751	720
6	-2	1	198	-218	4	0	1	215	186	3	2	1	1155	1114	0	4	1	1527	-1529	1	6	1	1212	1201
7	-2	1	593	-601	5	0	1	705	688	4	2	1	780	-739	1	4	1	1070	-1070	2	6	1	653	627
10	-2	1	66	-44	6	0	1	146	162	5	2	1	950	-910	3	4	1	1207	-1153	3	6	1	885	-822
-10	-1	1	331	-321	7	0	1	516	530	6	2	1	136	126	4	4	1	1376	-1374	4	6	1	1109	1098
-9	-1	1	519	492	10	0	1	271	-289	7	2	1	874	861	5	4	1	285	-259	5	6	1	283	282
-8	-1	1	671	-672	-10	1	1	106	-101	8	2	1	182	190	6	4	1	713	694	6	6	1	68	77
-7	-1	1	801	-866	-9	1	1	356	-330	9	2	1	514	-510	7	4	1	1153	-1116	7	6	1	925	910
-6	-1	1	592	-553	-8	1	1	74	-63	10	2	1	441	460	8	4	1	675	-659	8	6	1	407	404

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT A3

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	6	1	527	522	-4	9	1	445	-449	7	11	1	85	87	0-11	2	213	207	-5	-8	2	839	-464	
-7	7	1	117	114	-3	9	1	103	85	8	11	1	43	93	1-11	2	349	344	-4	-8	2	280	-281	
-5	7	1	917	922	-2	8	1	314	311	9	11	1	538	546	2-11	2	97	-98	-3	-8	2	101	-87	
-4	7	1	241	234	-1	9	1	253	-230	10	11	1	91	91	-9-10	2	233	-244	-2	-8	2	285	-268	
-3	7	1	196	-184	0	9	1	211	-189	-1	12	1	153	144	-8-10	2	468	483	-1	-8	2	444	-442	
-2	7	1	738	722	1	9	1	120	-115	0	12	1	252	257	-6-10	2	286	-312	0	-8	2	719	708	
-1	7	1	272	258	2	9	1	937	-929	1	12	1	584	-547	-5-10	2	523	538	1	-8	2	232	-248	
0	7	1	277	-278	4	9	1	817	-585	2	12	1	320	307	-4-10	2	283	284	2	-8	2	1002	-995	
1	7	1	179	-161	5	9	1	762	-791	3	12	1	603	589	-3-10	2	224	218	3	-8	2	188	176	
2	7	1	1388	1399	6	9	1	472	439	4	12	1	181	203	-2-10	2	287	-307	4	-8	2	118	123	
3	7	1	830	842	8	9	1	421	-424	5	12	1	119	-123	-1-10	2	134	-136	5	-8	2	244	237	
4	7	1	617	-638	9	9	1	485	-483	6	12	1	211	-210	0-10	2	155	-147	6	-8	2	131	129	
5	7	1	443	440	-4	10	1	181	-193	7	12	1	145	155	1-10	2	230	230	-10	-7	2	887	-863	
6	7	1	578	-534	-3	10	1	602	-607	8	12	1	185	-204	2-10	2	417	416	-9	-7	2	195	-204	
7	7	1	434	425	-2	10	1	385	-400	9	12	1	154	154	3-10	2	523	-547	-8	-7	2	129	-147	
8	7	1	339	328	-1	10	1	214	208	0	13	1	330	343	4-10	2	91	100	-7	-7	2	290	287	
9	7	1	255	-252	0	10	1	172	119	2	13	1	408	-401	-10	-9	2	586	571	-6	-7	2	838	834
-7	8	1	186	183	1	10	1	415	401	3	13	1	205	-202	-9	-9	2	120	-140	-5	-7	2	325	-306
-6	8	1	354	-177	2	10	1	431	-423	4	13	1	274	284	-8	-9	2	404	-407	-4	-7	2	503	-487
-4	8	1	820	820	3	10	1	411	-413	5	13	1	186	-183	-6	-9	2	440	-508	-3	-7	2	579	-559
-3	8	1	93	106	4	10	1	541	538	7	13	1	179	-198	-5	-9	2	137	-170	-2	-7	2	1073	1068
-2	8	1	93	110	5	10	1	384	-377	-4	-13	2	307	329	-4	-9	2	282	-275	-1	-7	2	102	-88
-1	8	1	105	108	6	10	1	185	-183	-3	-13	2	328	-341	-3	-9	2	156	-168	0	-7	2	14	-85
0	8	1	381	384	7	10	1	209	174	-7	-12	2	122	128	-2	-9	2	114	88	1	-7	2	1180	1184
1	8	1	707	-702	8	10	1	568	556	-6	-12	2	194	212	0	-9	2	180	-372	2	-7	2	121	105
2	8	1	621	-588	10	10	1	227	-229	-5	-12	2	623	-636	1	-9	2	1086	-1047	3	-7	2	75	-13
3	8	1	126	125	-3	11	1	84	94	-3	-12	2	270	275	2	-9	2	131	132	4	-7	2	221	-222
4	8	1	258	-227	-2	11	1	175	-187	-1	-12	2	150	161	3	-9	2	287	287	5	-7	2	198	172
5	8	1	379	372	-1	11	1	98	-116	1	-12	2	277	274	4	-9	2	199	-403	6	-7	2	329	327
6	8	1	275	-280	0	11	1	103	-129	-8	-11	2	108	113	5	-9	2	72	-63	7	-7	2	354	364
7	8	1	1223	-1202	1	11	1	364	342	-7	-11	2	231	-235	6	-9	2	154	-145	8	-7	2	283	270
8	8	1	211	-220	2	11	1	1017	997	-6	-11	2	715	724	-10	-8	2	228	-247	-8	-6	2	285	287
9	8	1	87	-101	3	11	1	233	-235	-5	-11	2	399	387	-9	-8	2	427	424	-7	-6	2	231	-215
10	8	1	96	-104	4	11	1	134	-128	-4	-11	2	167	-162	-8	-8	2	192	-186	-6	-6	2	513	507
-6	9	1	185	181	5	11	1	388	399	-2	-11	2	161	164	-7	-8	2	242	-235	-5	-6	2	1093	1091
-5	9	1	578	-571	6	11	1	61	26	-1	-11	2	307	303	-6	-8	2	748	-760	-4	-6	2	1313	1302

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										RUTHENIUM A70 CLUSTER										SEPT A3										PAGE 5																			
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC															
-3	-6	2	331	-296	-3	-4	2	308	280	-8	-2	2	635	-533	-10	0	2	70	82	7	1	2	90	-96	-3	-6	2	331	-296	-3	-4	2	308	280	-8	-2	2	635	-533	-10	0	2	70	82	7	1	2	90	-96
-2	-6	2	719	-682	-2	-4	2	119	109	-7	-2	2	486	477	-9	0	2	428	416	8	1	2	60	-61	-2	-6	2	719	-682	-2	-4	2	119	109	-7	-2	2	486	477	-9	0	2	428	416	8	1	2	60	-61
-1	-6	2	1232	1237	-1	-4	2	287	266	-6	-2	2	221	200	-8	0	2	412	422	9	1	2	329	-324	-1	-6	2	1232	1237	-1	-4	2	287	266	-6	-2	2	221	200	-8	0	2	412	422	9	1	2	329	-324
0	-6	2	207	-199	0	-4	2	1002	-976	-5	-2	2	104	69	-7	0	2	317	-316	10	1	2	528	-543	0	-6	2	207	-199	0	-4	2	1002	-976	-5	-2	2	104	69	-7	0	2	317	-316	10	1	2	528	-543
1	-6	2	768	761	1	-4	2	1798	-1630	-4	-2	2	56	-51	-6	0	2	749	742	-10	2	2	86	-85	1	-6	2	768	761	1	-4	2	1798	-1630	-4	-2	2	56	-51	-6	0	2	749	742	-10	2	2	86	-85
2	-6	2	589	570	2	-4	2	1120	-1113	-3	-2	2	518	-584	-5	0	2	157	-174	-9	2	2	665	-675	2	-6	2	589	570	2	-4	2	1120	-1113	-3	-2	2	518	-584	-5	0	2	157	-174	-9	2	2	665	-675
3	-6	2	181	183	3	-4	2	67	62	-2	-2	2	607	-583	-4	0	2	227	-257	-7	2	2	556	575	3	-6	2	181	183	3	-4	2	67	62	-2	-2	2	607	-583	-4	0	2	227	-257	-7	2	2	556	575
4	-6	2	349	342	4	-4	2	430	434	-1	-2	2	169	367	-3	0	2	1260	1251	-6	2	2	729	-746	4	-6	2	349	342	4	-4	2	430	434	-1	-2	2	169	367	-3	0	2	1260	1251	-6	2	2	729	-746
5	-6	2	265	-250	5	-4	2	541	-527	0	-2	2	422	-394	-2	0	2	1028	996	-5	2	2	354	-356	5	-6	2	265	-250	5	-4	2	541	-527	0	-2	2	422	-394	-2	0	2	1028	996	-5	2	2	354	-356
6	-6	2	201	-219	6	-4	2	647	-640	1	-2	2	482	480	-1	0	2	622	-606	-4	2	2	77	47	6	-6	2	201	-219	6	-4	2	647	-640	1	-2	2	482	480	-1	0	2	622	-606	-4	2	2	77	47
7	-6	2	227	-238	7	-4	2	351	356	2	-2	2	1905	1942	0	0	2	1650	-1701	-3	2	2	144	133	7	-6	2	227	-238	7	-4	2	351	356	2	-2	2	1905	1942	0	0	2	1650	-1701	-3	2	2	144	133
8	-6	2	438	442	8	-4	2	479	-483	3	-2	2	962	979	1	0	2	1223	1197	-2	2	2	1209	-1227	8	-6	2	438	442	8	-4	2	479	-483	3	-2	2	962	979	1	0	2	1223	1197	-2	2	2	1209	-1227
9	-6	2	446	440	9	-4	2	258	-266	4	-2	2	1282	-1283	2	0	2	1202	-1187	-1	2	2	590	-594	9	-6	2	446	440	9	-4	2	258	-266	4	-2	2	1282	-1283	2	0	2	1202	-1187	-1	2	2	590	-594
-10	-6	2	360	373	-10	-3	2	516	-520	5	-2	2	372	369	3	0	2	361	-366	0	2	2	118	133	-10	-6	2	360	373	-10	-3	2	516	-520	5	-2	2	372	369	3	0	2	361	-366	0	2	2	118	133
-9	-6	2	191	176	-9	-3	2	110	-116	6	-2	2	723	719	4	0	2	401	404	1	2	2	222	-230	-9	-6	2	191	176	-9	-3	2	110	-116	6	-2	2	723	719	4	0	2	401	404	1	2	2	222	-230
-8	-6	2	228	221	-8	-3	2	244	216	7	-2	2	310	331	5	0	2	777	-791	2	2	2	302	293	-8	-6	2	228	221	-8	-3	2	244	216	7	-2	2	310	331	5	0	2	777	-791	2	2	2	302	293
-7	-6	2	698	-673	-7	-3	2	135	-125	8	-2	2	645	662	6	0	2	157	139	3	2	2	843	-813	-7	-6	2	698	-673	-7	-3	2	135	-125	8	-2	2	645	662	6	0	2	157	139	3	2	2	843	-813
-6	-6	2	1171	1160	-6	-3	2	1317	-1297	9	-2	2	80	84	7	0	2	286	-305	4	2	2	319	-317	-6	-6	2	1171	1160	-6	-3	2	1317	-1297	9	-2	2	80	84	7	0	2	286	-305	4	2	2	319	-317
-5	-6	2	1647	1603	-5	-3	2	314	-306	-9	-1	2	527	546	8	0	2	1072	-1105	5	2	2	788	782	-5	-6	2	1647	1603	-5	-3	2	314	-306	-9	-1	2	527	546	8	0	2	1072	-1105	5	2	2	788	782
-4	-6	2	811	-770	-4	-3	2	1164	-1124	-8	-1	2	256	-252	9	0	2	423	-418	6	2	2	842	837	-4	-6	2	811	-770	-4	-3	2	1164	-1124	-8	-1	2	256	-252	9	0	2	423	-418	6	2	2	842	837
-3	-6	2	154	-177	-3	-3	2	1120	1084	-7	-1	2	59	-71	10	0	2	128	125	9	2	2	536	526	-3	-6	2	154	-177	-3	-3	2	1120	1084	-7	-1	2	59	-71	10	0	2	128	125	9	2	2	536	526
-2	-6	2	330	-317	-2	-3	2	369	338	-6	-1	2	714	714	-8	1	2	428	432	-8	3	2	904	-912	-2	-6	2	330	-317	-2	-3	2	369	338	-6	-1	2	714	714	-8	1	2	428	432	-8	3	2	904	-912
-1	-6	2	115	-124	-1	-3	2	1355	-1317	-5	-1	2	287	293	-7	1	2	305	-318	-7	3	2	223	247	-1	-6	2	115	-124	-1	-3	2	1355	-1317	-5	-1	2	287	293	-7	1	2	305	-318	-7	3	2	223	247
0	-6	2	297	311	0	-3	2	843	786	-4	-1	2	1704	1701	-6	1	2	530	-553	-6	3	2	546	541	0	-6	2	297	311	0	-3	2	843	786	-4	-1	2	1704	1701	-6	1	2	530	-553	-6	3	2	546	541
1	-6	2	193	-199	1	-3	2	288	273	-3	-1	2	312	289	-5	1	2	491	488	-5	3	2	549	565	1	-6	2	193	-199	1	-3	2	288	273	-3	-1	2	312	289	-5	1	2	491	488	-5	3	2	549	565
2	-6	2	547	-535	2	-3	2	594	-577	-2	-1	2	54	27	-4	1	2	886	-902	-4	3	2	101	-39	2	-6	2	547	-535	2	-3	2	594	-577	-2	-1	2	54	27	-4	1	2	886	-902	-4	3	2	101	-39
3	-6	2	382	-373	3	-3	2	1778	-1766	-1	-1	2	407	371	-3	1	2	1564	-1581	-3	3	2	129	-107	3	-6	2	382	-373	3	-3	2	1778	-1766	-1	-1	2	407	371	-3	1	2	1564	-1581	-3	3	2	129	-107
4	-6	2	219	203	4	-3	2	170	-148	0	-1	2	784	768	-2	1	2	112	81	-2	3	2	293	307	4	-6	2	219	203	4	-3	2	170	-148	0	-1	2	784	768	-2	1	2	112	81	-2	3	2	293	307
5	-6	2	547	-560	5	-3	2	1341	1363	1	-1	2	639	621	-1	1	2	1603	1625	-1	3	2	384	-376	5	-6	2	547	-560	5	-3	2	1341	1363	1	-1	2	639	621	-1	1	2	1603	1625	-1	3	2	384	-376
6	-6	2	613	-613	6	-3	2	268	-248	2	-1	2	89	-82	0	1	2	1193	-1209	0	3	2	1555	1585	6	-6	2	613	-613	6	-3	2	268	-248	2	-1	2	89	-82	0	1	2	1193	-1209	0	3	2	1555	1585
7	-6	2	222	220	7	-3	2	274	257	3	-1	2	2013	2066	1	1	2	1828	-1847	1	3	2	360	349	7	-6	2	222	220	7	-3	2	274	257	3	-1	2	2013	2066	1	1	2	1828	-1847	1	3	2	360	349
-8	-6	2	282	280	8	-3	2	301	307	4	-1	2	327	377	2	1	2	693	-672	2	3	2	268	-246	-8	-6	2	282	280	8	-3	2	301	307	4	-1	2	327	377	2	1	2	693	-672	2	3	2	268	-246
-9	-6	2	202	-213	9	-3	2	202	-211	5	-1	2	800	-793	3	1	2	949	-949	3	3	2	2517	2582	-9	-6	2	202	-213	9	-3	2	202	-211	5	-1	2	800	-793	3</									

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM AZO CLUSTER SEPT 83

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
7	3	2	1064	1062	5	5	2	163	147	8	7	2	229	-206	2	10	2	554	-553	5	13	2	42	-67
8	3	2	403	400	6	5	2	498	481	9	7	2	231	224	3	10	2	308	284	5	14	2	224	235
9	3	2	153	-176	7	5	2	808	-792	10	7	2	544	538	4	10	2	688	-684	-5	-12	3	482	-510
10	3	2	513	515	8	5	2	386	-377	-7	8	2	205	-203	5	10	2	447	-451	-5	-12	3	154	-154
-9	4	2	522	541	8	5	2	671	-646	-6	8	2	155	-135	6	10	2	621	652	-4	-12	3	310	344
-8	4	2	113	101	10	5	2	558	-540	-5	8	2	885	871	7	10	2	81	-100	-3	-12	3	324	-340
-7	4	2	133	-143	-7	6	2	105	-107	-3	8	2	88	-25	8	10	2	365	-374	-1	-12	3	85	-86
-6	4	2	237	-241	-6	6	2	282	241	-2	8	2	701	711	9	10	2	628	-615	0	-12	3	121	-127
-5	4	2	545	547	-5	6	2	284	-287	0	8	2	89	85	10	10	2	210	-200	-7	-11	3	290	295
-4	4	2	1187	1215	-4	6	2	251	-254	1	8	2	240	-242	-3	11	2	285	-274	-6	-11	3	115	113
-3	4	2	464	466	-3	6	2	468	-480	2	8	2	984	975	-2	11	2	429	-409	-5	-11	3	767	-821
-2	4	2	1163	1161	-2	6	2	1472	-1497	3	8	2	909	868	-1	11	2	190	-186	-4	-11	3	167	-174
-1	4	2	468	-438	-1	6	2	844	815	4	8	2	682	716	1	11	2	341	318	-3	-11	3	150	-148
0	4	2	331	-313	0	6	2	384	370	5	8	2	444	492	2	11	2	816	-809	-1	-11	3	200	184
1	4	2	1056	1071	1	6	2	1028	-1050	6	8	2	830	-839	3	11	2	496	-500	0	-11	3	206	-212
2	4	2	216	-196	2	6	2	1263	-1282	7	8	2	570	576	4	11	2	212	205	3	-11	3	145	162
3	4	2	275	256	3	6	2	712	-683	8	8	2	642	836	5	11	2	372	-348	-4	-10	3	209	-200
4	4	2	1234	1217	4	6	2	63	18	9	8	2	102	-85	6	11	2	143	-136	-7	-10	3	416	-414
5	4	2	629	624	5	6	2	607	-624	10	8	2	245	275	7	11	2	74	72	-6	-10	3	567	594
6	4	2	777	-774	6	6	2	360	371	-8	9	2	403	-415	8	11	2	275	276	-5	-10	3	257	236
7	4	2	622	-611	7	6	2	368	-370	-4	9	2	626	609	10	11	2	223	-224	-2	-10	3	393	-419
8	4	2	392	386	9	6	2	454	450	-1	9	2	388	361	-1	12	2	183	-185	-1	-10	3	164	147
9	4	2	237	-210	10	6	2	603	-598	-2	9	2	404	391	0	12	2	521	-527	0	-10	3	433	-443
10	4	2	227	227	-6	7	2	145	-137	0	9	2	385	380	1	12	2	137	120	1	-10	3	335	345
-9	5	2	100	106	-4	7	2	161	177	1	9	2	238	-204	2	12	2	670	663	2	-10	3	97	-93
-8	5	2	288	306	-3	7	2	412	-441	2	9	2	236	233	3	12	2	263	-251	4	-10	3	472	471
-7	5	2	339	348	-2	7	2	528	525	5	9	2	224	223	6	12	2	88	88	-9	-9	3	237	-261
-6	5	2	467	-510	-1	7	2	608	-649	7	9	2	1234	1222	7	12	2	143	167	-8	-9	3	479	484
-5	5	2	201	-191	-1	7	2	1103	-1094	7	9	2	864	-851	8	12	2	102	102	-6	-9	3	128	138
-4	5	2	835	827	0	7	2	223	210	9	9	2	76	-47	9	12	2	242	250	-5	-9	3	435	406
-3	5	2	800	801	1	7	2	699	673	10	8	2	102	93	0	13	2	182	193	-4	-9	3	171	144
0	5	2	1509	-1543	2	7	2	522	510	-5	10	2	302	-310	1	13	2	394	-401	-3	-9	3	758	730
1	5	2	404	-393	3	7	2	264	-272	-2	10	2	278	272	2	13	2	197	216	-2	-9	3	142	133
2	5	2	137	130	4	7	2	141	-132	-1	10	2	108	97	3	13	2	303	309	-1	-9	3	318	-321
3	5	2	848	-844	5	7	2	372	378	0	10	2	77	71	4	13	2	371	384	0	-9	3	307	-319
4	5	2	719	-698	7	7	2	833	833	1	10	2	391	-370	5	13	2	185	198	1	-9	3	407	417

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM AZO CLUSTER

SEPT 83

PAGE 7

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-9	3	684	708	-8	-6	3	542	-578	-8	-4	3	320	302	9	-3	3	66	-28	5	-1	3	191	198
3	-9	3	439	-447	-6	-6	3	548	548	-7	-4	3	509	495	10	-3	3	226	-227	5	-1	3	171	171
4	-9	3	215	209	-5	-6	3	456	-461	-6	-4	3	379	395	-10	-2	3	248	-245	7	-1	3	416	425
5	-9	3	99	96	-4	-6	3	988	-974	-5	-4	3	346	-339	-8	-2	3	303	314	8	-1	3	1044	1054
6	-9	3	151	-156	-3	-6	3	699	-680	-4	-4	3	849	828	-6	-2	3	742	-735	10	-1	3	103	-104
-10	-8	3	586	616	-2	-6	3	623	634	-3	-4	3	1317	1302	-5	-2	3	222	-171	-10	0	3	97	-98
-9	-8	3	97	99	0	-6	3	118	-110	-2	-4	3	71	68	-4	-2	3	1271	-1262	-9	0	3	123	115
-8	-8	3	86	71	1	-6	3	668	672	-1	-4	3	685	666	-3	-2	3	637	-599	-8	0	3	503	-504
-6	-8	3	200	-207	2	-6	3	205	-200	0	-4	3	358	-344	-2	-2	3	579	560	-6	0	3	221	-205
-5	-8	3	411	408	3	-6	3	390	378	2	-4	3	1024	1033	-1	-2	3	1932	-1903	-5	0	3	267	-243
-3	-8	3	140	-146	4	-6	3	378	-393	3	-4	3	559	548	0	-2	3	502	-468	-4	0	3	223	219
-2	-8	3	227	241	5	-6	3	356	-354	4	-4	3	141	-128	1	-2	3	986	980	-3	0	3	185	-143
-1	-8	3	527	506	6	-6	3	267	255	6	-4	3	336	350	2	-2	3	962	-943	-2	0	3	897	-887
0	-8	3	450	-460	7	-6	3	600	607	7	-4	3	482	-447	3	-2	3	1784	-1834	-1	0	3	1186	1142
1	-8	3	1101	-1090	8	-6	3	714	226	8	-4	3	354	-366	4	-2	3	605	-580	0	0	3	1440	1424
2	-8	3	344	351	-10	-5	3	420	-425	9	-4	3	339	345	5	-2	3	379	385	1	0	3	2090	2118
3	-8	3	59	68	-9	-5	3	135	-142	10	-4	3	112	-110	6	-2	3	416	-422	2	0	3	106	-90
4	-8	3	286	-285	-8	-5	3	148	205	-10	-3	3	693	711	7	-2	3	285	285	3	0	3	2189	2199
5	-8	3	384	-402	-7	-5	3	578	-561	-9	-3	3	561	568	8	-2	3	315	-321	4	0	3	229	225
7	-8	3	123	-117	-6	-5	3	91	94	-8	-3	3	235	234	9	-2	3	249	-232	5	0	3	558	545
-9	-7	3	306	316	-5	-5	3	759	746	-7	-3	3	200	-200	10	-2	3	208	204	6	0	3	734	745
-7	-7	3	204	195	-4	-5	3	1168	1167	-6	-3	3	247	250	-10	-1	3	151	-148	7	0	3	647	-676
-6	-7	3	520	-503	-3	-5	3	433	-432	-5	-3	3	234	224	-9	-1	3	618	-608	8	0	3	602	604
-5	-7	3	954	-926	-2	-5	3	324	-302	-4	-3	3	461	-444	-8	-1	3	637	-621	9	0	3	680	714
-2	-7	3	354	-332	-1	-5	3	751	739	-3	-3	3	618	610	-7	-1	3	58	69	10	0	3	258	260
-1	-7	3	516	-507	0	-5	3	72	72	-2	-3	3	334	-323	-6	-1	3	226	-229	-10	1	3	232	243
0	-7	3	655	670	1	-5	3	1261	1266	-1	-3	3	84	82	-5	-1	3	86	-54	-9	1	3	535	545
1	-7	3	600	-603	2	-5	3	434	452	0	-3	3	662	628	-4	-1	3	293	-290	-8	1	3	198	187
2	-7	3	962	-964	4	-5	3	881	872	1	-3	3	1782	-1819	-3	-1	3	1787	-1786	-7	1	3	127	-128
3	-7	3	212	-220	5	-5	3	168	159	2	-3	3	1123	-1126	-2	-1	3	439	797	-6	1	3	881	888
4	-7	3	450	-455	6	-5	3	128	-125	3	-3	3	143	-150	-1	-1	3	1300	1257	-5	1	3	498	-497
5	-7	3	269	274	7	-5	3	109	-114	4	-3	3	288	304	0	-1	3	888	-801	-4	1	3	163	-160
6	-7	3	146	141	8	-5	3	748	753	5	-3	3	814	-813	1	-1	3	304	299	-3	1	3	1800	1838
7	-7	3	189	-198	9	-5	3	194	211	6	-3	3	422	-438	2	-1	3	107	78	-2	1	3	1794	1796
8	-7	3	298	-295	-10	-4	3	416	408	7	-3	3	140	158	3	-1	3	515	468	-1	1	3	827	801
-10	-6	3	539	-530	-9	-4	3	204	-211	8	-3	3	649	-649	4	-1	3	650	-636	0	1	3	105	-100

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM AZO CLUSTER SEPT 83

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	1	3	839	805	0	3	3	158	-159	0	5	3	544	552	2	7	3	452	-432	7	9	3	603	604
3	1	3	789	749	1	3	3	569	-565	1	5	3	1291	1287	3	7	3	1062	-1039	8	9	3	351	336
4	1	3	1176	1125	2	3	3	1189	1223	2	5	3	40	-82	4	7	3	560	-535	9	9	3	218	232
5	1	3	1055	-1061	3	3	3	2295	-2352	3	5	3	691	660	5	7	3	448	-427	10	9	3	381	381
6	1	3	523	545	4	3	3	1819	-1848	4	5	3	931	927	6	7	3	270	265	-4	10	3	292	282
7	1	3	132	132	5	3	3	338	332	5	5	3	789	752	7	7	3	952	-946	-3	10	3	88	88
8	1	3	717	-721	6	3	3	110	107	6	5	3	167	161	8	7	3	200	208	-2	10	3	444	422
9	1	3	177	-204	7	3	3	209	-204	7	5	3	242	-239	10	7	3	803	-788	-1	10	3	90	-96
10	1	3	205	208	8	3	3	187	-175	8	5	3	219	194	-6	8	3	284	257	1	10	3	220	205
-8	2	3	408	408	9	3	3	302	321	10	5	3	978	958	-5	8	3	285	-274	2	10	3	477	481
-8	2	3	900	889	10	3	3	107	-97	-8	5	3	220	224	-4	8	3	606	-581	3	10	3	67	68
-7	2	3	155	-152	-9	4	3	143	-143	-7	6	3	195	210	-3	8	3	257	287	4	10	3	163	-182
-6	2	3	147	-139	-8	4	3	823	-824	-6	6	3	170	184	-2	8	3	606	-585	5	10	3	1089	1047
-5	2	3	565	566	-7	4	3	82	-103	-5	6	3	150	-133	-1	8	3	444	-415	6	10	3	188	211
-4	2	3	638	-630	-5	4	3	216	208	-3	6	3	118	-130	0	8	3	76	-60	7	10	3	304	-296
-3	2	3	282	-314	-4	4	3	201	-171	-2	6	3	1348	1361	2	8	3	381	380	10	10	3	423	441
-2	2	3	446	-442	-3	4	3	574	-568	-1	6	3	1716	1701	3	8	3	370	-370	-3	11	3	150	-148
-1	2	3	784	791	-2	4	3	735	-754	0	6	3	1107	-1127	4	8	3	849	-837	-2	11	3	222	213
1	2	3	167	186	-1	4	3	468	-463	1	6	3	440	414	5	8	3	818	-798	-1	11	3	816	504
2	2	3	863	-667	0	4	3	1099	1112	2	6	3	130	-95	6	8	3	312	296	0	11	3	76	77
3	2	3	1435	-1452	1	4	3	821	-814	3	6	3	462	465	7	8	3	561	559	1	11	3	286	-307
4	2	3	248	252	2	4	3	848	-800	4	6	3	48	30	8	8	3	462	-461	2	11	3	244	-258
5	2	3	489	-468	3	4	3	2322	2370	5	6	3	266	235	9	8	3	278	286	3	11	3	654	639
6	2	3	1073	-1069	4	4	3	385	-381	6	6	3	82	68	10	8	3	223	230	4	11	3	341	-332
8	2	3	118	-110	5	4	3	102	-96	7	6	3	351	-358	-5	9	3	478	484	5	11	3	277	-296
9	2	3	267	-276	6	4	3	288	-270	8	6	3	328	314	-4	9	3	422	-415	6	11	3	323	301
10	2	3	601	-616	7	4	3	894	860	9	6	3	887	-874	-3	9	3	131	-124	7	11	3	175	-168
-9	3	3	659	-671	8	4	3	554	555	10	6	3	283	-315	-2	9	3	88	104	9	11	3	432	-445
-8	3	3	215	224	9	4	3	395	394	-7	7	3	111	111	-1	9	3	235	-215	10	11	3	255	-257
-7	3	3	376	386	10	4	3	472	459	-5	7	3	308	-253	0	9	3	53	71	-2	12	3	248	-251
-6	3	3	412	-415	-7	5	3	252	-222	-4	7	3	208	205	1	9	3	381	-361	-1	12	3	242	-239
-5	3	3	307	-287	-6	5	3	362	-344	-3	7	3	211	-209	2	9	3	222	221	0	12	3	147	151
-4	3	3	608	-596	-4	5	3	597	576	-2	7	3	1074	-1062	3	9	3	284	261	1	12	3	437	420
-3	3	3	459	-456	-3	5	3	811	792	-1	7	3	817	819	4	9	3	1016	982	2	12	3	649	-639
-2	3	3	913	-907	-2	5	3	719	736	0	7	3	462	462	5	9	3	76	55	3	12	3	343	-353
-1	3	3	457	-454	-1	5	3	908	-823	1	7	3	45	23	6	9	3	838	-809	5	12	3	461	-465

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER

SEPT 83

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
6	12	3	63	-85	-7	-8	4	429	-435	3	-7	4	249	238	4	-8	4	328	-325	2	-3	4	1713	1732
7	12	3	189	-182	-8	-9	4	289	304	4	-7	4	419	406	5	-5	4	877	-876	3	-3	4	733	706
9	12	3	101	-100	-8	-9	4	150	-125	5	-7	4	399	387	6	-5	4	213	202	4	-3	4	449	440
0	13	3	509	-500	-4	-9	4	82	84	6	-7	4	571	-562	7	-5	4	491	493	5	-3	4	235	232
2	13	3	249	255	-3	-9	4	126	-140	7	-7	4	100	-114	8	-5	4	77	51	6	-3	4	360	365
3	13	3	267	-274	-2	-9	4	953	-984	-10	-8	4	158	184	9	-5	4	262	-273	7	-3	4	126	-128
5	13	3	369	-377	0	-9	4	436	431	-9	-8	4	127	117	-10	-4	4	643	-662	9	-3	4	376	385
7	13	3	142	142	1	-9	4	280	270	-8	-8	4	219	221	-9	-4	4	184	-180	10	-3	4	139	-150
4	14	3	286	287	2	-9	4	101	-97	-7	-8	4	888	875	-8	-4	4	101	-103	-10	-2	4	368	361
5	14	3	287	292	4	-9	4	301	329	-6	-8	4	466	-460	-7	-4	4	684	-702	-9	-2	4	372	362
6	14	3	148	-145	5	-9	4	281	-222	-5	-6	4	542	-534	-6	-4	4	129	-97	-8	-2	4	533	550
-5	-12	4	487	510	-9	-8	4	283	-281	-4	-8	4	336	329	-5	-4	4	118	118	-7	-2	4	161	157
-3	-12	4	116	132	-8	-8	4	85	84	-3	-8	4	157	152	-4	-4	4	594	590	-6	-2	4	178	186
-2	-12	4	274	279	-7	-8	4	339	-364	-1	-8	4	443	-422	-3	-4	4	735	-721	-5	-2	4	149	144
0	-12	4	145	138	-6	-8	4	447	435	0	-8	4	490	493	-2	-4	4	597	-587	-4	-2	4	347	333
-7	-11	4	170	187	-5	-8	4	194	212	1	-8	4	621	-609	-1	-4	4	620	-625	-3	-2	4	1071	1053
-6	-11	4	431	-442	-4	-8	4	97	-92	2	-8	4	382	-388	0	-4	4	258	-241	-2	-2	4	555	-548
-4	-11	4	187	197	-3	-8	4	830	816	3	-8	4	201	-189	1	-4	4	1622	1649	-1	-2	4	1265	1248
-3	-11	4	283	303	-2	-8	4	384	392	4	-8	4	654	-661	2	-4	4	204	-212	0	-2	4	1727	1703
-1	-11	4	241	-253	-1	-8	4	372	-378	5	-8	4	437	409	3	-4	4	594	-592	1	-2	4	1044	-1020
0	-11	4	162	-171	0	-8	4	398	-400	6	-8	4	260	235	4	-4	4	728	740	2	-2	4	808	-794
1	-11	4	90	97	1	-8	4	674	658	7	-8	4	448	-451	7	-4	4	80	-57	3	-2	4	326	332
2	-11	4	173	-169	2	-8	4	771	780	8	-8	4	365	-385	8	-4	4	742	742	4	-2	4	834	794
3	-11	4	307	-327	4	-8	4	413	428	-10	-5	4	204	-191	9	-4	4	268	264	5	-2	4	80	48
-5	-10	4	208	-225	5	-8	4	127	-113	-9	-5	4	198	209	10	-4	4	108	88	6	-2	4	78	-88
-7	-10	4	373	386	7	-8	4	281	287	-8	-5	4	608	-602	-10	-3	4	212	202	7	-2	4	322	-338
-8	-10	4	161	186	-10	-7	4	402	399	-6	-5	4	414	429	-9	-3	4	436	-434	8	-2	4	695	-712
-9	-10	4	617	-633	-9	-7	4	120	128	-5	-5	4	248	-237	-8	-3	4	147	138	9	-2	4	142	151
-4	-10	4	197	-208	-8	-7	4	359	362	-4	-6	4	984	-975	-7	-3	4	100	-115	10	-2	4	291	-308
-5	-10	4	595	-587	-6	-7	4	191	-205	-3	-6	4	876	-870	-6	-3	4	233	223	-10	-1	4	101	-91
-1	-10	4	377	378	-5	-7	4	992	994	-2	-6	4	87	-88	-4	-3	4	958	944	-8	-1	4	141	-149
0	-10	4	324	-316	-4	-7	4	293	284	-1	-6	4	662	-657	-3	-3	4	591	583	-8	-1	4	334	337
1	-10	4	303	-304	-2	-7	4	357	357	0	-6	4	73	-73	-2	-3	4	234	231	-7	-1	4	444	441
2	-10	4	94	-77	-1	-7	4	811	813	1	-6	4	203	-199	-1	-3	4	999	1003	-6	-1	4	278	282
4	-10	4	366	-365	1	-7	4	758	-743	2	-6	4	843	-838	0	-3	4	1138	-1114	-5	-1	4	147	-120
-8	-9	4	293	-317	2	-7	4	419	411	3	-6	4	380	394	1	-3	4	286	-264	-4	-1	4	1307	-1286

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT 83

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	9	4	168	147	-2	12	4	152	146	-2-10	5	688	712	-3	-7	5	679	697	1	-5	5	400	-385	
-2	9	4	412	-408	-1	12	4	527	536	-1-10	5	371	-328	-1	-7	5	422	-440	2	-5	5	651	631	
0	9	4	186	-172	0	12	4	289	297	1-10	5	301	300	0	-7	5	381	-388	3	-5	5	217	-222	
1	9	4	379	-380	1	12	4	117	-116	2-10	5	122	-129	1	-7	5	466	460	4	-5	5	1021	-994	
2	9	4	378	377	2	12	4	122	-126	3-10	5	238	-243	2	-7	5	474	388	5	-5	5	542	564	
4	9	4	883	-881	3	12	4	556	549	-7	-9	5	285	271	3	-7	5	122	119	6	-5	5	311	301
5	9	4	1326	-1355	4	12	4	92	-93	-5	-9	5	209	-230	4	-7	5	374	358	7	-5	5	325	-335
7	9	4	130	131	5	12	4	259	263	-3	-9	5	738	-748	5	-7	5	461	-501	8	-5	5	312	-328
8	9	4	393	-393	6	12	4	269	251	-2	-9	5	113	90	6	-7	5	58	37	9	-5	5	216	-212
9	9	4	217	213	8	12	4	336	340	-1	-9	5	545	557	7	-7	5	391	404	-10	-4	5	121	103
10	9	4	335	-340	9	12	4	113	-103	0	-9	5	373	-324	-9	-6	5	102	107	-9	-4	5	327	349
-4	10	4	262	-275	10	12	4	238	-253	1	-9	5	271	-241	-8	-6	5	463	459	-8	-4	5	396	-384
-3	10	4	106	88	0	13	4	218	220	2	-9	5	314	-321	-7	-6	5	358	-385	-7	-4	5	225	223
-2	10	4	335	-330	1	13	4	471	482	4	-9	5	413	-402	-6	-6	5	567	-562	-6	-4	5	430	421
-1	10	4	395	-407	2	13	4	174	-160	5	-9	5	88	-82	-5	-6	5	959	961	-5	-4	5	77	48
0	10	4	67	65	3	13	4	74	-75	-9	-8	5	139	-147	-4	-6	5	137	139	-4	-4	5	381	-375
1	10	4	138	-138	4	13	4	152	-149	-8	-8	5	133	-134	-3	-6	5	391	414	-3	-4	5	726	-722
2	10	4	510	-506	5	13	4	299	-300	-7	-8	5	117	-112	-2	-6	5	381	393	-1	-4	5	436	-427
3	10	4	112	-109	6	13	4	275	274	-6	-8	5	104	-124	-1	-6	5	485	472	0	-4	5	643	638
4	10	4	508	509	7	13	4	220	-231	-5	-8	5	576	-613	0	-6	5	594	574	1	-4	5	1029	-1027
5	10	4	181	-200	8	13	4	165	-165	-4	-8	5	132	136	1	-6	5	355	-347	2	-4	5	1401	-1385
6	10	4	785	-790	3	14	4	65	-84	-3	-8	5	241	-245	2	-6	5	443	438	3	-4	5	557	544
7	10	4	271	247	4	14	4	111	123	-2	-8	5	1088	-1101	3	-6	5	257	-252	4	-4	5	564	-557
9	10	4	267	256	5	14	4	598	-597	-1	-8	5	188	-201	4	-6	5	758	759	5	-4	5	906	-882
10	10	4	266	260	6	14	4	291	-295	0	-8	5	183	160	5	-6	5	538	629	6	-4	5	92	-66
-3	11	4	71	-50	-3	-12	5	261	277	1	-8	5	98	91	6	-6	5	419	-436	7	-4	5	92	104
-2	11	4	535	536	-2	-12	5	221	-222	2	-8	5	286	-249	-10	-6	5	233	232	8	-4	5	263	-249
-1	11	4	194	-188	-5	-11	5	376	403	3	-8	5	285	-303	-9	-6	5	98	-81	-9	-3	5	411	-425
0	11	4	219	-229	-3	-11	5	373	321	4	-8	5	159	-175	-8	-5	5	384	402	-8	-3	5	205	-210
1	11	4	199	178	0	-11	5	411	429	5	-8	5	254	-253	-7	-5	5	1043	1035	-7	-3	5	401	-489
2	11	4	280	247	1	-11	5	185	-184	6	-8	5	262	274	-6	-5	5	224	-227	-6	-3	5	204	-193
5	11	4	675	692	2	-11	5	59	-65	-9	-7	5	275	-274	-4	-5	5	108	108	-5	-3	5	610	-619
6	11	4	208	189	-7	-10	5	185	144	-8	-7	5	371	-380	-3	-5	5	777	267	-4	-3	5	116	99
8	11	4	91	86	-6	-10	5	197	-224	-7	-7	5	599	-605	-2	-5	5	683	687	-3	-3	5	520	-517
9	11	4	140	-157	-4	-10	5	111	105	-6	-7	5	360	371	-1	-5	5	232	240	-2	-3	5	584	-572
10	11	4	524	541	-3	-10	5	207	211	-4	-7	5	726	-736	0	-5	5	311	295	-1	-3	5	1569	-1547

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER

SEPT 83

PAGE 12

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	-3	5	805	-790	-2	-1	5	949	-947	-3	1	5	1301	-1307	-4	3	5	431	416	-2	5	5	464	449
1	-3	5	1673	1707	-1	-1	5	1699	1690	-2	1	5	122	-124	-3	3	5	89	-91	-1	5	5	304	325
2	-3	5	794	-755	0	-1	5	1383	1405	-1	1	5	861	-851	-2	3	5	99	-76	0	5	5	724	-713
3	-3	5	453	-450	1	-1	5	54	45	0	1	5	691	-671	-1	3	5	1283	1279	2	5	5	1095	1114
4	-3	5	170	-168	2	-1	5	87	74	1	1	5	201	-149	0	3	5	358	-355	3	5	5	821	-845
5	-3	5	557	-540	3	-1	5	335	-305	2	1	5	415	-413	1	3	5	511	-529	4	5	5	569	-568
7	-3	5	200	-186	4	-1	5	1108	1076	3	1	5	733	-702	2	3	5	210	-213	5	5	5	337	-342
8	-3	5	327	336	5	-1	5	817	835	4	1	5	290	-250	3	3	5	2509	2632	6	5	5	221	-237
9	-3	5	90	86	6	-1	5	555	543	5	1	5	254	-246	4	3	5	694	698	7	5	5	682	680
10	-3	5	316	324	7	-1	5	246	-237	6	1	5	2078	-2065	5	3	5	249	-236	8	5	5	136	-140
-8	-2	5	313	-318	8	-1	5	414	-426	7	1	5	132	-127	6	3	5	1184	1235	9	5	5	554	-539
-8	-2	5	125	-129	9	-1	5	478	456	8	1	5	523	529	7	3	5	166	167	10	5	5	602	-543
-7	-2	5	707	-702	-10	-1	5	261	-257	9	1	5	378	-356	8	3	5	125	128	-7	6	5	100	89
-5	-2	5	338	-336	-10	0	5	194	191	10	1	5	110	-105	9	3	5	252	234	-6	6	5	385	-396
-5	-2	5	129	-173	-8	0	5	197	190	-9	2	5	249	-260	10	3	5	79	-74	-5	6	5	437	438
-4	-2	5	250	231	-7	0	5	734	744	-8	2	5	259	-277	-8	4	5	479	467	-4	6	5	357	359
-3	-2	5	381	-379	-6	0	5	855	844	-6	2	5	883	-679	-7	4	5	146	-151	-3	6	5	345	-345
-2	-2	5	494	471	-4	0	5	1030	-1026	-5	2	5	571	-589	-6	4	5	368	351	-2	6	5	1052	-1042
-1	-2	5	1003	976	-3	0	5	1127	1097	-4	2	5	749	755	-3	4	5	875	901	-1	6	5	350	-340
0	-2	5	1607	-1602	-2	0	5	603	621	-3	2	5	270	-300	-2	4	5	306	301	0	6	5	388	352
1	-2	5	140	-147	-1	0	5	224	-209	-2	2	5	185	-185	-1	4	5	624	626	1	6	5	1215	-1219
2	-2	5	1294	1265	0	0	5	994	959	-1	2	5	1288	-1291	0	4	5	905	956	3	6	5	199	-172
4	-2	5	774	758	1	0	5	1222	-1154	0	2	5	828	-855	1	4	5	1137	1157	4	6	5	603	-591
5	-2	5	62	62	2	0	5	1138	1109	2	2	5	645	637	2	4	5	788	-784	5	6	5	204	-201
7	-2	5	213	188	3	0	5	826	-818	3	2	5	500	-481	3	4	5	728	-759	6	6	5	1342	-1352
8	-2	5	454	443	4	0	5	739	-697	4	2	5	1174	-1182	4	4	5	1831	1989	7	6	5	792	-744
9	-2	5	174	140	5	0	5	771	-723	5	2	5	392	399	5	4	5	782	775	8	6	5	132	117
10	-2	5	111	-84	6	0	5	188	185	7	2	5	850	-832	6	4	5	781	779	9	6	5	593	608
-10	-1	5	161	169	7	0	5	858	856	8	2	5	248	284	7	4	5	315	304	10	6	5	376	-362
-9	-1	5	124	144	8	0	5	1011	-1006	9	2	5	239	240	8	4	5	525	-508	-8	7	5	215	-197
-8	-1	5	470	472	9	0	5	487	-488	10	2	5	345	358	-8	5	5	349	372	-5	7	5	469	-467
-7	-1	5	193	148	-9	1	5	147	158	-9	3	5	133	123	-7	5	5	168	180	-3	7	5	189	179
-6	-1	5	138	-144	-7	1	5	231	-223	-8	3	5	455	-454	-6	5	5	530	522	-2	7	5	69	62
-5	-1	5	322	-307	-6	1	5	96	101	-7	3	5	300	-314	-5	5	5	637	621	-1	7	5	1084	-1099
-4	-1	5	440	456	-5	1	5	1180	1127	-6	3	5	333	322	-4	5	5	406	-402	0	7	5	115	-124
-3	-1	5	1051	1024	-4	1	5	321	-128	-5	3	5	669	-676	-3	5	5	166	-177	1	7	5	278	-287

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER

SEPT 83

PAGE 13

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	7	5	358	-403	-2	10	5	324	-326	0	13	5	273	268	8	-8	5	501	513	4	-8	5	305	308
3	7	5	758	757	-1	10	5	413	398	1	13	5	85	-73	-4	-8	5	189	148	5	-8	5	889	-880
4	7	5	466	-491	0	10	5	144	-185	2	13	5	152	-160	-3	-8	5	595	-621	7	-8	5	282	252
5	7	5	281	-256	1	10	5	258	-260	3	13	5	149	147	-2	-8	5	398	404	8	-8	5	162	-144
6	7	5	511	499	2	10	5	511	513	5	13	5	541	564	-1	-8	5	491	493	-8	-5	5	402	413
7	7	5	54	-50	3	10	5	200	190	6	13	5	117	115	2	-8	5	364	-378	-7	-5	5	567	-565
8	7	5	420	-410	4	10	5	270	-260	8	13	5	538	542	4	-8	5	223	-215	-6	-5	5	722	-739
10	7	5	692	685	5	10	5	680	-691	3	14	5	185	191	5	-8	5	164	182	-5	-5	5	233	227
-13	8	5	258	-257	8	10	5	220	-207	4	14	5	255	-245	6	-8	5	157	-188	-4	-5	5	176	-188
-12	8	5	638	644	9	10	5	220	227	6	14	5	507	528	-7	-7	5	310	316	-3	-5	5	562	558
-11	8	5	257	256	10	10	5	565	-577	-4	-11	5	172	-175	-6	-7	5	49	47	-2	-5	5	144	144
1	8	5	596	585	-3	11	5	321	333	-3	-11	5	133	-149	-5	-7	5	429	-443	-1	-5	5	138	141
2	8	5	785	-407	-2	11	5	388	-383	-2	-11	5	287	-297	-4	-7	5	328	324	0	-5	5	267	261
3	8	5	717	712	-1	11	5	579	-570	0	-11	5	305	-316	-2	-7	5	799	-778	1	-5	5	278	272
4	8	5	1203	1204	0	11	5	104	99	1	-11	5	270	-212	-1	-7	5	108	-110	2	-5	5	132	130
5	8	5	325	331	1	11	5	225	-221	-6	-10	5	265	-278	0	-7	5	173	-162	3	-5	5	445	-427
6	8	5	202	174	2	11	5	337	-336	-5	-10	5	85	90	1	-7	5	136	144	4	-5	5	1148	1132
7	8	5	390	402	3	11	5	276	-273	-3	-10	5	322	338	2	-7	5	126	-112	5	-5	5	673	688
8	8	5	415	427	4	11	5	188	191	-2	-10	5	321	-348	3	-7	5	405	-412	6	-5	5	292	-275
9	8	5	357	-369	5	11	5	223	-205	-1	-10	5	214	-223	4	-7	5	626	-633	7	-5	5	198	201
-15	9	5	91	-75	6	11	5	574	-583	0	-10	5	470	495	5	-7	5	358	-362	9	-5	5	164	168
-14	9	5	425	423	7	11	5	133	-130	1	-10	5	268	-268	6	-7	5	334	338	-9	-4	5	225	-225
-12	9	5	195	191	8	11	5	427	-423	3	-10	5	428	452	7	-7	5	428	-442	-1	-4	5	332	338
-11	9	5	517	508	9	11	5	240	287	-7	-9	5	258	279	-9	-6	5	166	-167	-7	-4	5	748	815
0	9	5	107	-94	10	11	5	261	278	-4	-9	5	150	-152	-4	-6	5	525	-547	-5	-4	5	248	239
1	9	5	1033	1023	-2	12	5	399	402	-3	-9	5	419	433	-7	-6	5	675	-693	-4	-4	5	167	-153
2	9	5	200	190	-1	12	5	262	-238	-2	-9	5	825	837	-6	-6	5	197	402	-2	-4	5	1108	1102
3	9	5	458	-472	0	12	5	397	-394	-1	-9	5	338	-351	-5	-6	5	254	-258	-1	-4	5	801	802
4	9	5	239	234	1	12	5	297	-282	0	-9	5	112	104	-4	-6	5	646	-624	0	-4	5	273	259
5	9	5	781	761	2	12	5	90	83	1	-9	5	258	261	-3	-6	5	269	264	1	-4	5	243	-242
6	9	5	765	758	4	12	5	94	-97	3	-9	5	111	122	-2	-6	5	431	-432	2	-4	5	1211	1211
7	9	5	239	-239	5	12	5	347	337	4	-9	5	80	45	-1	-6	5	327	-321	3	-4	5	93	-79
8	9	5	228	224	7	12	5	302	319	8	-9	5	304	327	0	-8	5	881	-874	4	-4	5	584	-558
9	9	5	90	101	8	12	5	147	-149	-8	-8	5	201	205	1	-6	5	278	-258	5	-4	5	925	922
10	9	5	360	-360	9	12	5	411	-414	-7	-8	5	259	287	2	-6	5	179	192	6	-4	5	294	297
-14	10	5	124	127	10	12	5	335	350	-6	-8	5	88	98	3	-8	5	478	481	7	-4	5	342	359

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM AZO CLUSTER

SEPT 83

PAGE 14

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
9	-4	6	313	-312	8	-2	6	184	-177	8	0	6	98	-116	9	2	6	185	-190	7	4	6	710	-715
-9	-3	6	385	394	8	-2	6	160	-164	8	0	6	707	711	10	2	6	105	-110	8	4	6	446	501
-8	-3	6	252	-252	10	-2	6	408	455	10	0	6	144	-129	-8	3	6	161	-165	8	4	6	570	574
-7	-3	6	575	581	-8	-1	6	192	-190	-7	1	6	554	551	-7	3	6	201	200	-7	5	6	86	-84
-6	-3	6	386	377	-7	-1	6	905	-891	-6	1	6	638	636	-6	3	6	451	-454	-6	5	6	140	147
-5	-3	6	651	646	-6	-1	6	414	-418	-5	1	6	854	-851	-5	3	6	184	-177	-5	5	6	535	-551
-4	-3	6	500	459	-4	-1	6	816	-473	-3	1	6	787	780	-4	3	6	73	-65	-4	5	6	404	-410
-3	-3	6	316	-332	-3	-1	6	721	-719	-2	1	6	417	416	-3	3	6	348	-398	-3	5	6	742	773
-2	-3	6	593	-581	-2	-1	6	209	204	-1	1	6	1321	1288	-2	3	6	325	324	-1	5	6	44	101
-1	-3	6	574	580	-1	-1	6	881	854	0	1	6	1954	1961	-1	3	6	1123	-1131	0	5	6	749	719
0	-3	6	1407	1502	0	-1	6	1442	-1442	1	1	6	153	-137	0	3	6	1398	-1392	1	5	6	950	855
1	-3	6	642	-536	1	-1	6	263	-265	2	1	6	777	761	1	3	6	110	84	2	5	6	279	-267
2	-3	6	482	-657	2	-1	6	161	167	3	1	6	150	166	2	3	6	438	425	3	5	6	447	-462
3	-3	6	537	534	4	-1	6	1192	1146	4	1	6	522	-464	3	3	6	371	-372	4	5	6	974	982
4	-3	6	778	-786	5	-1	6	578	-531	5	1	6	371	-375	4	3	6	1141	-1174	5	5	6	251	243
5	-3	6	322	-308	6	-1	6	880	-857	6	1	6	901	870	5	3	6	73	65	6	5	6	1560	1591
6	-3	6	174	-182	7	-1	6	74	87	7	1	6	1385	1334	6	3	6	848	-845	7	5	6	687	659
7	-3	6	134	-119	8	-1	6	550	533	8	1	6	486	-443	7	3	6	1033	-1025	8	5	6	509	-529
8	-3	6	143	151	9	-1	6	88	-98	9	1	6	135	-135	8	3	6	158	172	9	5	6	378	371
10	-3	6	177	-172	10	-1	6	222	-224	10	1	6	143	-144	9	3	6	196	-185	10	5	6	291	283
-9	-2	6	151	156	-9	0	6	363	365	-8	2	6	315	312	10	3	6	368	340	-7	6	6	151	-151
-8	-2	6	250	-249	-7	0	6	79	-79	-8	2	6	121	121	-8	4	6	256	-258	-6	6	6	457	448
-7	-2	6	125	-121	-6	0	6	841	-848	-6	2	6	26	263	-7	4	6	275	-285	-5	6	6	576	571
-6	-2	6	290	281	-5	0	6	579	-558	-5	2	6	980	960	-6	4	6	330	-314	-4	6	6	293	-282
-5	-2	6	417	-398	-4	0	6	595	586	-4	2	6	192	189	-5	4	6	514	-506	-2	6	6	485	508
-4	-2	6	45	38	-3	0	6	534	537	-3	2	6	121	-121	-4	4	6	293	287	-1	6	6	880	888
-3	-2	6	279	266	-2	0	6	568	-522	-2	2	6	144	153	-3	4	6	748	-749	0	6	6	505	488
-2	-2	6	123	-107	-1	0	6	1377	1364	-1	2	6	921	-900	-2	4	6	518	-538	1	6	6	432	444
-1	-2	6	1752	-1792	0	0	6	777	729	0	2	6	853	847	-1	4	6	724	713	2	6	6	801	819
0	-2	6	870	-881	1	0	6	283	-268	1	2	6	1149	1121	0	4	6	396	-392	3	6	6	341	-350
1	-2	6	669	659	2	0	6	417	411	2	2	6	744	-735	1	4	6	1320	-1330	4	6	6	363	370
2	-2	6	429	-435	3	0	6	742	-745	3	2	6	882	-807	2	4	6	499	-519	5	6	6	858	-874
3	-2	6	260	-271	4	0	6	1198	1143	4	2	6	54	55	3	4	6	973	972	7	6	6	1240	1232
4	-2	6	584	-562	5	0	6	1223	1207	5	2	6	245	-248	4	4	6	215	217	8	6	6	128	125
5	-2	6	924	-890	6	0	6	1025	991	6	2	6	1507	-1565	5	4	6	226	-222	8	6	6	239	-227
7	-2	6	373	-380	7	0	6	201	-190	8	2	6	414	399	6	4	6	672	645	10	6	6	375	-389

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT 83

PAGE 15

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	7	8	427	-414	-3	9	8	358	-352	-1	12	8	258	-285	-3	-8	7	327	314	-4	-5	7	95	-71
-5	7	8	460	485	-1	9	8	140	-171	0	12	8	108	103	-2	-8	7	646	852	-3	-5	7	218	-197
-4	7	8	464	467	0	9	8	335	326	1	12	8	101	-94	-1	-8	7	150	-151	-2	-5	7	825	-836
-3	7	8	78	52	2	8	6	1246	-1273	3	12	6	129	-108	0	-8	7	244	234	-1	-5	7	163	-171
-2	7	8	456	-436	3	9	8	238	223	4	12	8	110	89	3	-8	7	417	409	0	-5	7	574	-561
-1	7	8	214	-210	4	9	8	384	349	5	12	8	210	-224	5	-8	7	132	147	1	-5	7	826	-812
0	7	8	216	217	5	9	8	200	190	6	12	8	286	-290	-7	-7	7	121	126	2	-5	7	439	-435
1	7	8	86	-88	6	9	8	159	160	7	12	8	397	-387	-5	-7	7	521	838	3	-5	7	529	529
2	7	8	691	693	7	9	8	233	225	8	12	8	733	-745	-4	-7	7	276	277	4	-5	7	135	137
3	7	8	565	-567	8	9	8	304	297	9	12	8	299	291	-3	-7	7	515	-538	5	-5	7	737	-720
4	7	8	552	-552	9	9	8	166	-143	0	13	8	231	-230	-2	-7	7	562	572	6	-5	7	172	-178
5	7	8	559	577	10	9	8	262	271	1	13	8	401	-413	-1	-7	7	389	379	7	-5	7	161	-146
6	7	8	1277	-1284	-3	10	8	172	-159	2	13	8	124	-114	0	-7	7	448	454	8	-5	7	201	-215
7	7	8	839	-832	-2	10	8	271	243	3	13	8	79	-73	1	-7	7	515	509	9	-4	7	188	181
8	7	8	74	-39	-1	10	8	151	149	6	13	8	317	-322	2	-7	7	315	-314	-7	-4	7	524	-536
9	7	8	385	392	0	10	8	266	-276	7	13	8	327	327	4	-7	7	226	228	-6	-4	7	524	-527
10	7	8	350	-359	1	10	8	959	952	8	13	8	348	-343	5	-7	7	382	380	-5	-4	7	263	-247
-6	8	8	145	-149	2	10	8	473	474	9	13	8	458	-511	6	-7	7	274	-278	-4	-4	7	545	-540
-5	8	8	463	-445	3	10	8	475	-493	3	14	8	179	-190	-7	-6	7	457	478	-3	-4	7	839	835
-4	8	8	152	-145	4	10	8	76	-77	5	14	8	495	484	-6	-6	7	223	229	-2	-4	7	328	-338
-3	8	8	72	39	5	10	8	206	140	6	14	8	105	-100	-5	-6	7	279	-277	-1	-4	7	977	-971
-2	8	8	151	148	6	10	8	684	687	7	14	8	55	-46	-4	-6	7	645	646	0	-4	7	388	-378
-1	8	8	637	-613	7	10	8	192	189	-3	-10	7	329	-340	-2	-6	7	346	-370	1	-4	7	446	428
0	8	8	300	-290	8	10	8	490	494	-7	-10	7	281	-292	-1	-8	7	52	52	2	-4	7	423	-416
1	8	8	927	-915	10	10	8	84	77	-1	-10	7	245	250	0	-8	7	415	-413	3	-4	7	707	-695
2	8	8	257	-227	-2	11	8	206	-190	1	-8	7	432	-453	1	-6	7	452	456	4	-4	7	987	983
3	8	8	612	612	-1	11	8	574	569	-8	-9	7	127	-122	2	-6	7	292	296	5	-4	7	378	383
4	8	8	800	-800	1	11	8	126	-98	-4	-9	7	103	111	3	-6	7	131	-122	6	-4	7	181	-164
5	8	8	482	-435	2	11	8	599	579	-3	-9	7	295	308	4	-8	7	622	-622	7	-4	7	180	196
6	8	8	81	-102	3	11	8	181	172	-2	-9	7	559	-569	5	-8	7	211	-228	8	-4	7	383	-344
7	8	8	413	-420	4	11	8	135	118	-1	-9	7	372	-366	6	-6	7	271	272	9	-4	7	181	181
8	8	8	487	-485	5	11	8	402	-416	7	-9	7	284	285	7	-6	7	465	-469	-8	-3	7	116	112
9	8	8	299	-294	8	11	8	89	-85	1	-9	7	382	-404	8	-8	7	428	-447	-7	-3	7	341	337
10	8	8	618	436	8	11	8	168	200	3	-9	7	169	211	-7	-8	7	441	-450	-6	-3	7	211	-232
-5	9	8	262	-249	9	11	8	388	392	-5	-8	7	133	-133	-6	-5	7	400	413	-4	-1	7	358	359
-4	9	8	296	-276	10	11	8	561	-563	-4	-8	7	472	-454	-5	-5	7	160	-152	-4	-3	7	694	-693

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A70 CLUSTER

SEPT 83

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	-3	7	269	-286	3	-1	7	656	631	5	1	7	1342	1316	10	3	7	424	414	-3	6	7	144	140	-3	6	7	144	140
-2	-3	7	1194	1192	4	-1	7	698	-706	6	1	7	567	538	-7	4	7	120	119	-1	6	7	99	-91	-1	6	7	99	-91
-1	-1	7	782	855	5	-1	7	950	-971	7	1	7	525	-496	-5	4	7	466	454	0	6	7	273	-224	0	6	7	273	-224
-1	-3	7	422	-402	6	-1	7	128	134	8	1	7	133	-112	-4	4	7	105	96	1	6	7	100	104	1	6	7	100	104
2	-1	7	1011	1005	7	-1	7	330	-317	9	1	7	125	335	-3	4	7	147	-156	2	6	7	221	-214	2	6	7	221	-214
5	-3	7	851	824	8	-1	7	442	-491	-8	2	7	81	-80	-2	4	7	1006	1010	3	6	7	102	-94	3	6	7	102	-94
6	-3	7	183	153	9	-1	7	427	-415	-7	2	7	246	241	-1	4	7	1028	-1029	4	6	7	116	-102	4	6	7	116	-102
7	-3	7	770	776	10	-1	7	362	369	-6	2	7	307	318	0	4	7	1164	-1140	5	6	7	449	-450	5	6	7	449	-450
8	-3	7	197	194	-7	0	7	745	-815	-4	2	7	627	-614	1	4	7	62	-64	6	6	7	1636	1667	6	6	7	1636	1667
9	-3	7	262	-272	-5	0	7	77	79	-3	2	7	274	269	2	4	7	587	552	7	6	7	294	277	7	6	7	294	277
-7	-2	7	662	681	-4	0	7	160	-148	-1	2	7	1037	1043	3	4	7	80	-84	8	6	7	335	-330	8	6	7	335	-330
-4	-2	7	563	567	-3	0	7	746	-717	0	2	7	1229	1227	4	4	7	485	-509	9	6	7	298	302	9	6	7	298	302
-4	-2	7	415	907	-2	0	7	710	-672	1	2	7	841	-873	5	4	7	163	-171	10	6	7	160	157	10	6	7	160	157
-3	-2	7	133	-141	-1	0	7	675	-622	2	2	7	562	589	6	4	7	778	-787	-5	7	7	422	421	-5	7	7	422	421
-2	-2	7	657	-638	0	0	7	1375	-1354	3	2	7	575	602	7	4	7	812	-815	-4	7	7	417	-402	-4	7	7	417	-402
-1	-2	7	1041	1040	1	0	7	271	-276	4	2	7	128	-105	8	4	7	834	-860	-1	7	7	549	547	-1	7	7	549	547
0	-2	7	1497	1479	2	0	7	1235	-1233	5	2	7	982	979	10	4	7	128	113	0	7	7	406	416	0	7	7	406	416
1	-2	7	396	163	4	0	7	1140	1094	7	2	7	1112	1101	-6	5	7	452	-452	1	7	7	426	434	1	7	7	426	434
2	-2	7	359	330	5	0	7	600	-597	9	2	7	215	185	-5	5	7	331	-312	2	7	7	294	261	2	7	7	294	261
3	-2	7	479	453	6	0	7	984	-956	10	2	7	258	-258	-4	5	7	351	343	3	7	7	213	208	3	7	7	213	208
4	-2	7	397	-377	7	0	7	469	-448	-7	3	7	253	228	-3	5	7	688	-680	4	7	7	1028	1048	4	7	7	1028	1048
5	-2	7	459	426	8	0	7	145	134	-6	3	7	125	115	-2	5	7	563	-564	5	7	7	547	-545	5	7	7	547	-545
7	-2	7	245	-273	9	0	7	295	-289	-5	3	7	817	810	-1	5	7	247	240	6	7	7	218	-197	6	7	7	218	-197
8	-2	7	364	350	10	0	7	170	-170	-4	3	7	112	104	0	5	7	534	-535	7	7	7	1164	1151	7	7	7	1164	1151
9	-2	7	214	220	-8	1	7	317	311	-3	3	7	409	422	1	5	7	900	-822	8	7	7	278	285	8	7	7	278	285
10	-2	7	183	-190	-7	1	7	107	-118	-2	3	7	120	124	2	5	7	1194	-1226	9	7	7	238	223	9	7	7	238	223
-8	-1	7	333	-343	-6	1	7	772	-770	-1	3	7	603	-607	3	5	7	74	-74	-4	8	7	345	344	-4	8	7	345	344
-7	-1	7	252	257	-5	1	7	597	-595	0	3	7	1589	1584	4	5	7	123	249	-3	8	7	327	324	-3	8	7	327	324
-6	-1	7	492	544	-4	1	7	162	-167	1	3	7	945	936	5	5	7	75	59	-1	8	7	212	-193	-1	8	7	212	-193
-5	-1	7	213	-204	-3	1	7	174	184	2	3	7	84	84	6	5	7	75	59	1	8	7	398	377	1	8	7	398	377
-4	-1	7	340	353	-2	1	7	486	-471	3	3	7	249	243	7	5	7	1264	-1242	2	8	7	1160	1171	2	8	7	1160	1171
-3	-1	7	449	540	0	1	7	1132	-1087	4	3	7	207	-169	8	5	7	186	177	3	8	7	699	687	3	8	7	699	687
-2	-1	7	97	106	1	1	7	667	-619	5	3	7	864	-861	10	5	7	409	-430	4	8	7	620	604	4	8	7	620	604
-1	-1	7	1366	-1356	2	1	7	202	193	7	3	7	401	381	-6	6	7	256	247	5	8	7	611	-610	5	8	7	611	-610
0	-1	7	405	-401	3	1	7	1212	-1169	8	3	7	71	-70	-5	6	7	908	-887	6	8	7	217	-213	6	8	7	217	-213
1	-1	7	549	524	4	1	7	171	176	9	3	7	57	61	-4	6	7	446	-411	7	8	7	91	-102	7	8	7	91	-102

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT A3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
9	8	7	245	222	9	11	7	198	-202	3	-8	8	238	-248	7	-5	8	275	-288	4	-2	8	188	195
-4	9	7	117	98	10	11	7	153	187	4	-8	8	153	-175	8	-8	8	244	244	5	-2	8	822	823
-3	9	7	170	180	-1	12	7	416	413	-6	-7	8	98	-111	-7	-4	8	159	-187	-1	-1	8	99	106
-2	9	7	193	175	0	12	7	102	107	-5	-7	8	411	-450	-8	-4	8	232	208	-3	-1	8	489	-501
0	9	7	232	-247	1	12	7	208	207	-4	-7	8	545	-558	-4	-4	8	581	587	-2	-1	8	176	-180
1	9	7	1164	-1185	2	12	7	433	422	-2	-7	8	417	421	-3	-4	8	153	168	-1	-1	8	305	302
2	9	7	199	197	3	12	7	98	98	-1	-7	8	210	-212	-7	-4	8	693	-642	0	-1	8	1194	1180
3	9	7	485	493	4	12	7	328	335	0	-7	8	257	248	-1	-4	8	433	437	1	-1	8	934	886
4	9	7	482	-452	5	12	7	73	-70	1	-7	8	630	-626	0	-4	8	353	-380	2	-1	8	761	727
5	9	7	253	-266	6	12	7	69	-72	2	-7	8	285	-302	1	-4	8	796	-788	3	-1	8	118	128
6	9	7	445	-447	8	12	7	638	655	3	-7	8	443	439	2	-4	8	306	-291	4	-1	8	888	-869
7	9	7	271	-249	9	12	7	504	521	-8	-4	8	118	-123	3	-4	8	478	488	5	-1	8	1148	1114
8	9	7	489	-509	10	12	7	298	-300	-5	-8	8	251	264	4	-4	8	137	-132	6	-1	8	302	303
9	9	7	517	-541	2	13	7	362	373	-3	-6	8	494	-494	5	-4	8	684	-684	-3	0	8	364	340
10	9	7	138	-154	8	13	7	150	159	-2	-6	8	394	386	6	-4	8	283	-285	-2	0	8	859	857
-3	10	7	154	-158	7	13	7	281	-282	-1	-6	8	73	62	7	-4	8	538	-519	-1	0	8	292	-288
-2	10	7	137	-135	4	13	7	478	-493	0	-6	8	720	707	8	-4	8	148	-152	0	0	8	81	97
-1	10	7	219	-219	9	13	7	375	376	1	-6	8	951	961	-7	-3	8	431	-429	1	0	8	231	221
0	10	7	463	437	4	14	7	92	94	2	-6	8	557	-583	-6	-3	8	237	-239	2	0	8	385	376
1	10	7	304	-305	5	14	7	231	-216	3	-6	8	272	-252	-8	-3	8	543	-545	3	0	8	1924	1934
2	10	7	1146	-1158	6	14	7	283	-248	4	-6	8	175	189	-4	-3	8	562	-580	4	0	8	1204	-1200
3	10	7	265	-270	7	14	7	178	142	5	-6	8	452	448	-3	-3	8	1023	988	5	0	8	884	-837
4	10	7	59	53	-3	-9	8	301	-304	6	-6	8	137	-155	-2	-3	8	401	-395	6	0	8	117	101
5	10	7	198	-211	-2	-9	8	121	-123	7	-6	8	234	245	-1	-3	8	1185	-1183	7	0	8	157	-141
6	10	7	112	-121	-1	-9	8	364	369	-7	-5	8	432	429	0	-3	8	483	-479	-3	1	8	280	301
7	10	7	163	-165	0	-9	8	341	-358	-6	-5	8	382	377	1	-3	8	287	-288	-1	1	8	332	-320
8	10	7	183	147	1	-9	8	151	-169	-4	-5	8	584	607	2	-3	8	488	-474	0	1	8	705	-676
9	10	7	204	200	2	-9	8	210	216	-3	-5	8	153	-153	3	-1	8	405	-795	1	1	8	174	-139
-2	11	7	300	-288	-5	-9	8	236	-261	-2	-5	8	313	315	4	-3	8	457	-456	2	1	8	1620	-1588
0	11	7	621	611	-4	-8	8	240	261	-1	-5	8	255	255	-3	-2	8	890	-892	4	1	8	802	805
1	11	7	88	80	-3	-8	8	248	245	0	-5	8	539	-518	-2	-2	8	759	738	5	1	8	782	-752
2	11	7	319	-309	-2	-8	8	475	-489	1	-5	8	827	823	-1	-2	8	405	480	6	1	8	888	-823
3	11	7	82	-75	-1	-8	8	375	-382	2	-5	8	738	708	0	-2	8	312	-342	-7	2	8	154	-145
4	11	7	355	340	0	-8	8	124	-125	4	-5	8	588	-573	1	-2	8	542	-542	-3	2	8	138	-142
5	11	7	427	426	1	-8	8	413	-419	5	-5	8	189	-179	2	-2	8	75	-83	-2	2	8	218	-234
6	11	7	338	340	2	-8	8	69	38	6	-5	8	191	188	3	-2	8	381	-358					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM AZO CLUSTER SEPT 83

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	2	A	185	181	2	5	A	438	438	9	12	A	425	-445	-7	0	9	168	165	0	3	9	1295	-1278	0	3	9	1295	-1278
0	2	A	1308	-1318	3	5	A	656	658	4	13	A	382	390	-3	0	9	500	-500	1	3	9	83	-73	1	3	9	83	-73
1	2	A	71	-41	4	5	A	540	538	5	13	A	154	-149	-2	0	9	116	-102	2	3	9	398	-384	2	3	9	398	-384
2	2	A	132	154	5	5	A	918	-927	7	13	A	141	-141	-1	0	9	137	-118	3	3	9	1271	-1261	3	3	9	1271	-1261
3	2	A	1673	-1685	7	5	A	147	148	-4	-8	A	277	297	0	0	9	555	519	4	3	9	241	-239	4	3	9	241	-239
4	2	A	440	-439	-1	8	A	248	232	-3	-8	A	116	-115	1	0	9	670	593	5	3	9	632	-615	5	3	9	632	-615
5	2	A	231	235	0	8	A	402	-422	2	-8	A	70	66	2	0	9	707	716	7	3	9	120	121	7	3	9	120	121
6	2	A	212	207	1	8	A	208	-185	4	-7	A	285	-292	3	0	9	294	-321	-6	4	9	271	-257	-6	4	9	271	-257
7	2	A	301	-277	2	8	A	1054	-1037	5	-7	A	226	222	4	0	9	983	-987	-2	4	9	1009	-1018	-2	4	9	1009	-1018
-7	3	A	107	-103	3	8	A	488	-501	-6	-6	A	269	-297	5	0	9	1298	1296	-1	4	9	611	575	-1	4	9	611	575
-3	3	A	493	-488	4	8	A	218	-202	-6	-5	A	167	-182	6	0	9	126	107	1	4	9	574	-555	1	4	9	574	-555
-2	3	A	993	-972	5	8	A	884	890	7	-5	A	293	293	-7	1	9	215	250	2	4	9	264	-248	2	4	9	264	-248
-1	3	A	1088	1065	5	8	A	442	-445	-7	-4	A	195	204	-3	1	9	213	-206	3	4	9	778	-772	3	4	9	778	-772
0	3	A	799	784	7	8	A	1167	-1189	0	-4	A	441	-437	-2	1	9	590	532	4	4	9	313	-296	4	4	9	313	-296
1	3	A	1062	-1050	-8	7	A	580	-592	1	-4	A	977	987	-1	1	9	483	464	5	4	9	89	57	5	4	9	89	57
2	3	A	355	350	0	7	A	458	-450	A	-4	A	641	659	0	1	9	725	691	6	4	9	513	-544	6	4	9	513	-544
3	3	A	162	149	1	7	A	293	-279	-1	-3	A	717	708	1	1	9	393	-390	7	4	9	119	114	7	4	9	119	114
4	3	A	403	378	2	7	A	120	-122	0	-3	A	61	49	2	1	9	794	805	-1	5	9	735	-737	-1	5	9	735	-737
5	3	A	75	-52	3	7	A	251	-274	1	-3	A	190	-178	3	1	9	2008	2010	0	5	9	832	820	0	5	9	832	820
6	3	A	386	395	4	7	A	1051	-1052	2	-3	A	203	212	4	1	9	248	-263	1	5	9	319	302	1	5	9	319	302
7	3	A	711	702	5	7	A	654	-691	3	-3	A	439	456	5	1	9	254	-231	2	5	9	724	738	2	5	9	724	738
-2	4	A	210	-208	6	7	A	115	1168	8	-3	A	417	416	6	1	9	274	252	3	5	9	305	311	3	5	9	305	311
-1	4	A	800	-811	7	7	A	85	-88	-1	-2	A	752	-343	7	1	9	57	40	4	5	9	588	-587	4	5	9	588	-587
0	4	A	1367	1399	-4	A	306	-310	0	-2	A	450	-449	-7	2	9	144	-134	5	5	9	349	342	5	5	9	349	342	
1	4	A	781	787	2	A	193	-182	1	-2	A	636	-626	-2	2	9	267	270	6	5	9	739	726	6	5	9	739	726	
2	4	A	771	748	3	A	121	100	2	-2	A	232	-263	-1	2	9	84	-83	7	5	9	647	648	7	5	9	647	648	
3	4	A	847	920	4	A	1020	1008	3	-2	A	428	-424	0	2	9	359	344	-5	6	9	456	456	-5	6	9	456	456	
4	4	A	111	87	5	5	A	420	-430	4	-2	A	345	-302	1	2	9	743	722	0	6	9	247	219	0	6	9	247	219
5	4	A	568	557	-3	9	A	464	447	-7	-1	A	536	-560	2	2	9	1404	-1388	1	6	9	193	191	1	6	9	193	191
6	4	A	205	181	-2	10	A	928	922	-1	-1	A	213	-214	3	2	9	170	201	2	6	9	235	227	2	6	9	235	227
7	4	A	713	713	10	10	A	311	-318	0	-1	A	224	203	4	2	9	779	774	3	6	9	1295	1311	3	6	9	1295	1311
-5	5	A	213	201	-1	11	A	195	-183	1	-1	A	584	-605	5	2	9	229	-234	4	6	9	876	905	4	6	9	876	905
-2	5	A	1302	1277	9	11	A	224	-215	2	-1	A	495	-493	7	2	9	589	-542	5	6	9	105	-84	5	6	9	105	-84
-1	5	A	342	-334	1	12	A	188	191	3	-1	A	633	-627	-6	3	9	140	135	6	6	9	658	-658	6	6	9	658	-658
0	5	A	588	-575	2	12	A	281	-260	4	-1	A	537	290	-2	3	9	518	538	7	6	9	482	466	7	6	9	482	466
1	5	A	81	80	8	12	A	130	136	10	-1	A	124	-111	-1	3	9	229	214	-4	7	9	445	429	-4	7	9	445	429

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

RUTHENIUM A20 CLUSTER SEPT 83

PAGE 19

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	7	8	569	579	-6	-1	10	458	471	0	3	10	244	234	-2	9	10	244	244	0	1	11	1081	1082
2	7	9	546	-552	-1	-1	10	525	539	1	3	10	652	652	-1	10	10	111	-105	1	1	11	104	119
3	7	9	549	-552	0	-1	10	196	-211	2	3	10	689	-692	10	10	10	278	-305	2	1	11	771	-755
4	7	9	184	187	1	-1	10	400	-408	3	3	10	889	897	0	11	10	313	-307	3	1	11	873	-858
5	7	9	898	893	2	-1	10	163	164	4	3	10	588	585	1	11	10	184	-195	4	1	11	192	208
6	7	9	245	-229	3	-1	10	285	247	5	3	10	487	492	2	12	10	142	141	5	1	11	380	-360
-3	8	9	152	-144	5	-1	10	508	-520	6	3	10	824	824	4	12	10	421	437	10	1	11	246	-236
4	8	9	344	-325	10	-1	10	191	-195	7	3	10	713	-721	6	12	10	309	-315	-5	2	11	259	259
4	8	9	1044	-1043	-6	0	10	119	121	-1	4	10	568	565	7	12	10	163	165	0	2	11	366	-371
-3	8	9	162	-154	-1	0	10	354	-340	0	4	10	590	-565	4	12	10	288	300	1	2	11	217	233
10	10	9	672	698	0	0	10	415	413	1	4	10	194	194	-2	-7	11	305	-324	2	2	11	375	368
0	11	9	192	196	1	0	10	302	-313	2	4	10	595	-584	-1	-7	11	135	138	3	2	11	844	-819
2	12	9	174	-164	2	0	10	983	-967	3	4	10	412	-422	1	-7	11	86	-102	4	2	11	907	-912
7	12	9	315	-307	3	0	10	987	-1007	4	4	10	292	301	2	-7	11	158	-169	5	2	11	449	-440
8	12	9	337	-330	4	0	10	555	525	5	4	10	724	-730	3	-7	11	305	289	-5	3	11	203	192
9	12	9	249	-251	5	0	10	489	-504	6	4	10	69	51	-4	-6	11	172	175	0	3	11	264	-255
4	13	9	235	-229	10	0	10	214	-219	7	4	10	427	412	-3	-6	11	340	359	1	3	11	797	-783
5	13	9	628	-641	-6	1	10	348	-362	-5	5	10	151	143	4	-8	11	500	538	2	3	11	214	213
1	-4	10	335	367	-1	1	10	1078	-1082	0	5	10	76	60	5	-6	11	142	-158	3	3	11	654	642
2	-4	10	153	164	0	1	10	813	-599	1	5	10	68	-76	-5	-4	11	195	181	4	3	11	205	-201
-4	-7	10	297	313	1	1	10	350	334	2	5	10	151	-149	7	-4	11	266	-267	5	3	11	264	268
-3	-7	10	168	172	2	1	10	511	491	3	5	10	1365	-1386	-6	-3	11	450	-473	6	3	11	537	-518
3	-7	10	149	144	3	1	10	844	-818	4	5	10	311	-289	4	-3	11	345	-384	-5	4	11	545	-550
4	-7	10	647	678	4	1	10	837	-793	5	5	10	72	21	9	-2	11	168	-174	1	4	11	178	142
-5	-6	10	189	213	5	1	10	482	475	6	5	10	745	-737	-6	-1	11	435	-464	3	4	11	1117	1116
5	-6	10	199	194	6	1	10	354	-345	1	6	10	557	-564	1	-1	11	831	826	4	4	11	212	187
6	-6	10	144	-146	7	2	10	180	-173	2	6	10	973	974	2	-1	11	359	337	5	4	11	630	821
7	-6	10	125	-131	-1	2	10	127	-92	3	6	10	193	190	3	-1	11	92	-81	6	4	11	1166	1145
-8	-4	10	123	-123	0	2	10	56	-66	4	6	10	798	-799	9	-1	11	345	348	-4	5	11	111	-111
-6	-3	10	173	169	1	2	10	636	-640	5	6	10	275	-265	-6	0	11	297	310	1	5	11	411	418
-8	-2	10	141	-142	2	7	10	772	755	6	6	10	152	145	0	0	11	144	-133	2	5	11	473	-468
-1	-2	10	471	464	3	2	10	1313	1350	2	7	10	129	-140	1	0	11	396	-382	3	5	11	307	316
1	-2	10	460	474	4	2	10	135	-119	3	7	10	1205	1214	2	0	11	549	520	4	5	11	837	826
2	-2	10	483	469	5	2	10	80	68	4	7	10	785	780	3	0	11	558	541	5	5	11	438	-449
3	-2	10	360	332	6	2	10	113	133	5	7	10	280	291	4	0	11	115	97	6	5	11	501	520
9	-2	10	486	478	-1	3	10	115	-101	-3	8	10	152	167	10	0	11	357	-370	-4	6	11	110	100

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM A70 CLUSTER SEPT 83

PAGE 20

RESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS				RESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS				RESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS				RESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS			
H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC	H	K	L	10FO 10FC
3	5	11	1298-1300	3	1	12	579 564	-3	-3	13	84 98	-2	-3	14	141 -135
5	6	11	86 -79	10	1	12	328 -307	6	-3	13	48 -57	-1	-3	14	188 -168
-3	7	11	67 -76	3	2	12	500 -488	7	-3	13	305 319	4	-3	14	476 -476
-2	9	11	242 -241	4	2	12	204 199	-4	-2	13	114 -106	5	-3	14	443 -450
-2	9	11	602 605	10	2	12	288 -267	7	-2	13	95 85	5	-3	14	194 190
-1	9	11	304 -304	-4	3	12	485 -501	8	-1	13	72 -82	-2	-2	14	312 -312
10	9	11	552 570	3	3	12	327 336	-4	0	13	355 359	6	-2	14	122 -135
-1	10	11	489 488	4	3	12	524 -529	-4	1	13	144 -141	7	-2	14	103 117
0	10	11	81 83	3	4	12	441 -469	9	1	13	352 -345	-2	-1	14	143 152
10	10	11	532 -553	-4	4	12	72 83	10	2	13	237 -233	7	-1	14	480 493
1	11	11	215 210	3	4	12	500 -479	10	3	13	141 -164	5	-1	14	135 -157
2	11	11	67 79	4	4	12	177 -183	-3	4	13	314 337	-3	0	14	85 -80
8	11	11	324 -317	-4	5	12	93 86	10	4	13	72 -84	5	0	14	384 370
9	11	11	283 305	-2	8	12	157 -150	-3	5	13	108 -102	-3	1	14	378 379
3	12	11	160 167	10	8	12	491 -503	10	5	13	74 87	9	1	14	198 213
5	12	11	640 -627	-1	9	12	367 -358	-2	8	13	139 146	9	2	14	549 -536
7	12	11	245 248	10	9	12	273 283	10	6	13	112 121	-3	3	14	504 -527
8	12	11	295 -288	0	10	12	40 -45	-2	7	13	225 -244	10	3	14	268 -256
-2	-6	12	345 -344	1	10	12	71 -57	10	8	13	154 162	-2	4	14	296 -317
-1	-5	12	183 205	8	10	12	278 -265	0	9	13	191 -169	10	4	14	123 -128
1	-5	12	303 -326	10	10	12	463 470	9	9	13	97 -92	-2	5	14	93 -100
2	-5	12	196 -193	2	11	12	155 -154	10	9	13	464 -489	-1	6	14	513 -512
3	-6	12	239 261	3	11	12	55 -56	1	10	13	466 -457	10	6	14	338 352
4	-6	12	401 -404	8	11	12	671 582	8	10	13	523 -542	-1	7	14	106 99
-3	-5	12	273 249	4	12	12	389 -375	9	10	13	115 110	10	7	14	233 -258
-2	-5	12	442 -472	6	12	12	368 374	3	11	13	152 142	0	8	14	179 161
4	-5	12	110 104	7	12	12	266 -250	4	11	13	167 -174	9	8	14	254 256
5	-5	12	191 -172	-2	-5	13	259 -287	5	11	13	138 -142	10	8	14	117 -126
-4	-4	12	352 -343	-1	-5	13	150 147	6	11	13	194 191	1	9	14	510 511
-4	-3	12	199 210	1	-6	13	150 -151	7	11	13	224 228	2	9	14	98 95
7	-3	12	143 -135	2	-6	13	158 -167	8	11	13	244 -243	9	9	14	117 137
8	-2	12	297 -325	4	-6	13	326 -341	-1	-4	14	85 87	2	10	14	389 383
-5	-1	12	241 262	-3	-4	13	211 213	0	-4	14	160 178	3	10	14	98 89
-5	0	12	296 -320	-2	-4	13	514 -561	1	-4	14	270 287	4	10	14	626 623
-5	1	12	214 -221	4	-4	13	358 -353	3	-4	14	88 -98	5	10	14	516 -524
2	1	12	297 276	6	-4	13	210 218	4	-4	14	202 -211	7	10	14	237 253

