SOME ASPECTS OF THE CHEMISTRY OF METAL CLUSTERS

30-10-87

by

Omar bin Shawkataly

B.Sc. (Hons)

A Thesis presented for the
Degree of Doctor of Philosophy

The Department of Physical and Inorganic Chemistry
The University of Adelaide

January 1987

Awarded 9/10/87

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	10	544	-553	7	3	10	217	-223	8	5	10	[illegible]	370	4	7	10	431	-442	8	9	10	400	413
12	1	10	468	-498	8	3	10	240	275	7	5	10	[illegible]	-411	5	7	10	636	653	9	9	10	181	-181
-8	2	10	221	222	9	3	10	482	471	8	5	10	[illegible]	-555	6	7	10	578	561	10	9	10	208	167
-7	2	10	891	892	10	3	10	150	-157	10	5	10	225	-256	7	7	10	943	912	-8	10	10	284	295
-6	2	10	403	398	-13	4	10	144	-134	11	5	10	278	265	10	7	10	148	129	-7	10	10	626	630
-4	2	10	481	502	-12	4	10	304	292	-12	6	10	331	-287	-12	8	10	219	-195	-5	10	10	124	-97
-3	2	10	1178	1213	-10	4	10	207	-247	-11	6	10	322	302	-9	8	10	295	-293	-3	10	10	335	333
-2	2	10	480	493	-9	4	10	326	-298	-10	6	10	210	-236	-8	8	10	327	310	-1	10	10	386	403
-1	2	10	589	605	-8	4	10	623	-645	-9	6	10	445	457	-7	8	10	677	-685	0	10	10	480	-482
0	2	10	384	365	-7	4	10	177	-210	-8	6	10	396	-393	-6	8	10	436	-444	1	10	10	534	-523
2	2	10	237	233	-4	4	10	1056	-1085	-6	6	10	121	-100	-5	8	10	845	-840	3	10	10	338	365
3	2	10	702	745	-3	4	10	171	-155	-5	6	10	1196	1206	-4	8	10	442	458	4	10	10	464	-492
6	2	10	212	203	-2	4	10	336	-335	-3	6	10	315	306	-3	8	10	906	-922	5	10	10	432	-419
7	2	10	632	-643	1	4	10	352	-371	0	6	10	639	639	-1	8	10	1194	-1120	6	10	10	225	-149
8	2	10	304	323	2	4	10	653	-668	1	6	10	568	581	0	8	10	373	-352	7	10	10	361	-347
10	2	10	169	175	3	4	10	417	394	2	6	10	238	234	2	8	10	774	775	9	10	10	185	183
11	2	10	753	-783	6	4	10	157	139	3	6	10	458	-432	3	8	10	286	-291	-10	11	10	205	-240
12	2	10	198	185	7	4	10	416	458	4	6	10	657	658	4	8	10	242	-258	-8	11	10	391	391
-13	3	10	206	-169	8	4	10	742	-738	5	6	10	401	-345	5	8	10	461	426	-7	11	10	181	190
-11	3	10	151	109	10	4	10	303	312	6	6	10	381	393	7	8	10	493	482	-6	11	10	210	-157
-10	3	10	749	-774	12	4	10	385	-357	8	6	10	365	427	8	8	10	322	316	-5	11	10	528	501
-9	3	10	171	-202	-11	5	10	265	262	9	6	10	934	-939	9	8	10	488	494	-4	11	10	430	-439
-8	3	10	160	-159	-10	5	10	513	512	10	6	10	411	391	10	8	10	337	-329	-2	11	10	384	365
-6	3	10	160	-143	-9	5	10	509	-516	-12	7	10	259	-257	-10	9	10	145	-187	-1	11	10	704	706
-5	3	10	325	358	-8	5	10	551	538	-11	7	10	489	-486	-9	9	10	608	648	0	11	10	464	-469
-4	3	10	267	-245	-7	5	10	165	177	-10	7	10	323	344	-7	9	10	205	-197	1	11	10	193	184
-3	3	10	368	-406	-6	5	10	248	245	-9	7	10	341	-316	-6	9	10	294	-286	4	11	10	352	304
-2	3	10	1230	1271	-4	5	10	929	960	-8	7	10	606	-622	-4	9	10	745	-724	5	11	10	388	239
-1	3	10	946	926	-3	5	10	860	-871	-7	7	10	267	-186	-3	9	10	290	280	6	11	10	271	-244
0	3	10	170	-135	-2	5	10	396	-408	-5	7	10	309	-307	-1	9	10	943	-973	-10	12	10	197	187
1	3	10	397	380	0	5	10	603	613	-3	7	10	708	701	0	9	10	481	-474	-9	12	10	422	-435
2	3	10	531	526	1	5	10	368	-360	-2	7	10	959	-978	1	9	10	408	-390	-6	12	10	437	428
3	3	10	182	180	2	5	10	132	154	-1	7	10	912	920	3	9	10	480	-488	-5	12	10	549	-567
4	3	10	446	460	3	5	10	449	-433	1	7	10	1277	1297	4	9	10	221	195	-3	12	10	160	-145
5	3	10	958	944	4	5	10	419	-404	2	7	10	152	-156	5	9	10	976	-973	0	12	10	259	268
6	3	10	503	-538	5	5	10	339	355	3	7	10	1449	1435	6	9	10	372	-361	1	12	10	394	-401

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM DPPET 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
2	12	10	705	-721	2	16	10	676	696	-8	2	11	828	844	-7	4	11	279	289	-7	6	11	213	226
3	12	10	438	445	-9	17	10	236	237	-7	2	11	228	245	-6	4	11	386	377	-6	6	11	532	549
6	12	10	223	-187	1	17	10	179	185	-6	2	11	387	-422	-5	4	11	888	-930	-5	6	11	417	452
7	12	10	332	335	-13	0	11	281	-288	-5	2	11	198	202	-4	4	11	401	421	-4	6	11	741	-759
8	12	10	258	-247	-7	0	11	1018	-1082	-4	2	11	933	972	-3	4	11	408	411	-3	6	11	322	339
-8	13	10	199	-204	-5	0	11	187	158	0	2	11	205	-204	-2	4	11	839	857	-2	6	11	435	-443
-7	13	10	488	478	-3	0	11	1145	-1198	2	2	11	305	335	-1	4	11	131	126	-1	6	11	959	928
-3	13	10	658	-641	-1	0	11	950	-1009	4	2	11	928	-916	0	4	11	408	405	0	6	11	212	-227
-1	13	10	249	-243	1	0	11	698	-694	6	2	11	542	-543	1	4	11	398	-410	1	6	11	632	604
1	13	10	804	-816	3	0	11	1230	-1225	7	2	11	204	-182	2	4	11	491	502	2	6	11	1161	-1187
2	13	10	268	259	5	0	11	281	-275	8	2	11	242	-234	3	4	11	818	813	3	6	11	816	803
3	13	10	682	-683	7	0	11	198	194	9	2	11	240	-264	5	4	11	193	112	5	6	11	276	221
6	13	10	195	194	11	0	11	579	575	10	2	11	658	-686	8	4	11	553	574	6	6	11	266	-232
7	13	10	627	-608	-13	1	11	340	360	11	2	11	175	-215	10	4	11	287	-302	10	6	11	307	277
-8	14	10	179	-190	-10	1	11	489	462	-9	3	11	757	763	-11	5	11	307	272	-10	7	11	360	338
-5	14	10	663	671	-9	1	11	420	441	-8	3	11	416	403	-10	5	11	837	-848	-9	7	11	622	-617
-4	14	10	431	-429	-8	1	11	150	-124	-7	3	11	437	455	-8	5	11	175	-220	-8	7	11	259	246
-3	14	10	403	434	-6	1	11	225	-228	-6	3	11	333	341	-6	5	11	494	-518	-7	7	11	152	-126
-2	14	10	254	-268	-3	1	11	672	707	-5	3	11	591	600	-5	5	11	148	173	-6	7	11	531	557
-1	14	10	134	130	-2	1	11	1046	-1062	-3	3	11	1146	1211	-4	5	11	559	-574	-5	7	11	302	-314
1	14	10	709	712	-1	1	11	369	-422	-2	3	11	581	566	-3	5	11	555	-550	-4	7	11	1098	1072
2	14	10	640	-642	0	1	11	540	-561	-1	3	11	131	148	-2	5	11	618	622	-3	7	11	643	-665
3	14	10	350	-343	1	1	11	515	-533	1	3	11	304	297	0	5	11	120	81	-2	7	11	519	500
4	14	10	197	-212	2	1	11	526	-532	2	3	11	358	-352	1	5	11	248	-252	-1	7	11	397	354
6	14	10	337	-349	4	1	11	841	-843	3	3	11	492	478	2	5	11	479	484	0	7	11	976	924
7	14	10	179	-231	5	1	11	1209	-1208	4	3	11	400	391	3	5	11	665	-641	1	7	11	260	-234
-7	15	10	280	-266	6	1	11	271	221	5	3	11	312	-276	4	5	11	1116	1109	2	7	11	624	621
-6	15	10	525	515	7	1	11	158	-144	6	3	11	676	-671	7	5	11	978	-1090	5	7	11	813	793
-4	15	10	585	579	9	1	11	250	-257	7	3	11	538	537	8	5	11	625	633	6	7	11	244	224
0	15	10	399	399	8	1	11	748	-748	8	3	11	378	384	9	5	11	177	-202	8	7	11	582	-599
1	15	10	185	209	10	1	11	213	229	9	3	11	201	-216	10	5	11	225	254	9	7	11	480	480
2	15	10	244	187	11	1	11	351	-337	11	3	11	178	-164	11	5	11	256	-265	10	7	11	321	-323
3	15	10	320	271	-13	2	11	311	290	-12	4	11	144	-154	-12	6	11	410	422	-11	8	11	150	128
4	15	10	252	-253	-11	2	11	412	407	-11	4	11	485	-506	-11	6	11	187	-180	-10	8	11	528	-551
-5	16	10	213	214	-10	2	11	483	432	-8	4	11	455	-443	-9	6	11	207	205	-9	8	11	436	-460
-2	16	10	307	314	-9	2	11	474	485	-8	4	11	244	235	-8	6	11	218	-227	-7	8	11	327	-332

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	8	11	348	-374	-9	11	11	274	281	-6	14	11	460	440	2	1	12	756	-707	1	3	12	239	-275
-5	8	11	573	570	-8	11	11	588	551	-5	14	11	392	-388	3	1	12	214	-209	2	3	12	388	-416
-4	8	11	269	-301	-7	11	11	268	-262	1	14	11	374	-302	4	1	12	773	-764	4	3	12	986	-1004
-1	8	11	254	-254	-6	11	11	459	464	2	14	11	748	-686	5	1	12	522	561	5	3	12	484	-513
0	8	11	671	653	-5	11	11	192	-197	-4	15	11	268	282	6	1	12	211	293	6	3	12	289	-320
1	8	11	416	422	-3	11	11	318	357	-3	15	11	158	-202	9	1	12	487	489	7	3	12	182	154
2	8	11	337	332	-2	11	11	159	174	-1	15	11	192	180	10	1	12	156	192	8	3	12	865	-861
4	8	11	873	864	-1	11	11	420	-414	0	15	11	352	341	-11	2	12	299	310	9	3	12	293	-319
5	8	11	284	254	0	11	11	399	-412	1	15	11	384	-389	-9	2	12	419	431	10	3	12	478	-468
6	8	11	628	618	1	11	11	327	324	3	15	11	494	-499	-8	2	12	140	-103	-12	4	12	212	-225
8	8	11	403	407	2	11	11	545	-526	-3	16	11	298	295	-7	2	12	437	-433	-11	4	12	535	530
9	8	11	263	-263	4	11	11	439	-419	0	16	11	169	173	-5	2	12	391	381	-9	4	12	438	424
10	8	11	548	537	5	11	11	180	-154	1	16	11	747	750	-4	2	12	423	-416	-8	4	12	519	549
-11	9	11	304	-321	6	11	11	520	-528	2	16	11	182	-147	-3	2	12	505	-489	-7	4	12	403	395
-9	9	11	140	-137	7	11	11	242	226	-10	0	12	215	-251	-2	2	12	575	-584	-6	4	12	147	-133
-8	9	11	765	-756	-7	12	11	344	346	-8	0	12	875	-921	-1	2	12	813	-786	-5	4	12	468	486
-7	9	11	353	-343	-5	12	11	366	-364	-4	0	12	981	-1007	0	2	12	585	-546	-4	4	12	703	742
-6	9	11	440	-457	-4	12	11	420	427	-2	0	12	488	-478	1	2	12	211	215	-3	4	12	349	322
-5	9	11	333	-319	-2	12	11	583	607	0	0	12	454	421	2	2	12	578	-532	-2	4	12	609	639
-4	9	11	214	-229	0	12	11	473	481	2	0	12	693	-658	3	2	12	1260	-1142	-1	4	12	188	-187
-2	9	11	944	-920	1	12	11	694	-636	4	0	12	1334	1292	4	2	12	588	-563	0	4	12	391	388
-1	9	11	333	-325	2	12	11	792	724	6	0	12	698	720	5	2	12	386	-399	2	4	12	1344	1321
2	9	11	304	-290	5	12	11	299	-308	8	0	12	813	818	7	2	12	348	-356	3	4	12	685	-641
3	9	11	264	300	6	12	11	268	285	10	0	12	849	872	8	2	12	327	-327	5	4	12	575	-618
7	9	11	455	482	7	12	11	284	-292	-12	1	12	173	-191	9	2	12	441	-450	6	4	12	801	594
9	9	11	158	152	-7	13	11	323	312	-10	1	12	233	221	-12	3	12	300	308	7	4	12	357	-380
-6	10	11	706	-696	-6	13	11	508	-508	-9	1	12	584	-603	-10	3	12	896	904	8	4	12	426	445
-4	10	11	298	-297	-5	13	11	371	378	-8	1	12	559	-586	-9	3	12	492	486	9	4	12	490	-485
-3	10	11	212	-237	-4	13	11	736	-727	-7	1	12	232	-222	-4	3	12	251	250	10	4	12	258	-229
-2	10	11	558	-553	-3	13	11	180	161	-6	1	12	259	-272	-7	3	12	164	-189	-11	5	12	315	-324
-1	10	11	568	-584	-1	13	11	467	468	-5	1	12	389	-434	-6	3	12	478	522	-10	5	12	289	-287
0	10	11	913	-893	0	13	11	772	-782	-4	1	12	301	-291	-4	3	12	644	650	-9	5	12	452	463
3	10	11	556	-516	1	13	11	239	226	-3	1	12	935	-990	-3	3	12	178	-167	-8	5	12	179	187
4	10	11	549	-589	2	13	11	205	-220	-2	1	12	1027	-984	-2	3	12	149	-170	-7	5	12	195	194
8	10	11	307	244	4	13	11	182	97	0	1	12	724	-669	-1	3	12	343	-374	-6	5	12	390	-376
-10	11	11	364	337	5	13	11	169	169	1	1	12	519	-511	0	3	12	302	281	-5	5	12	542	568

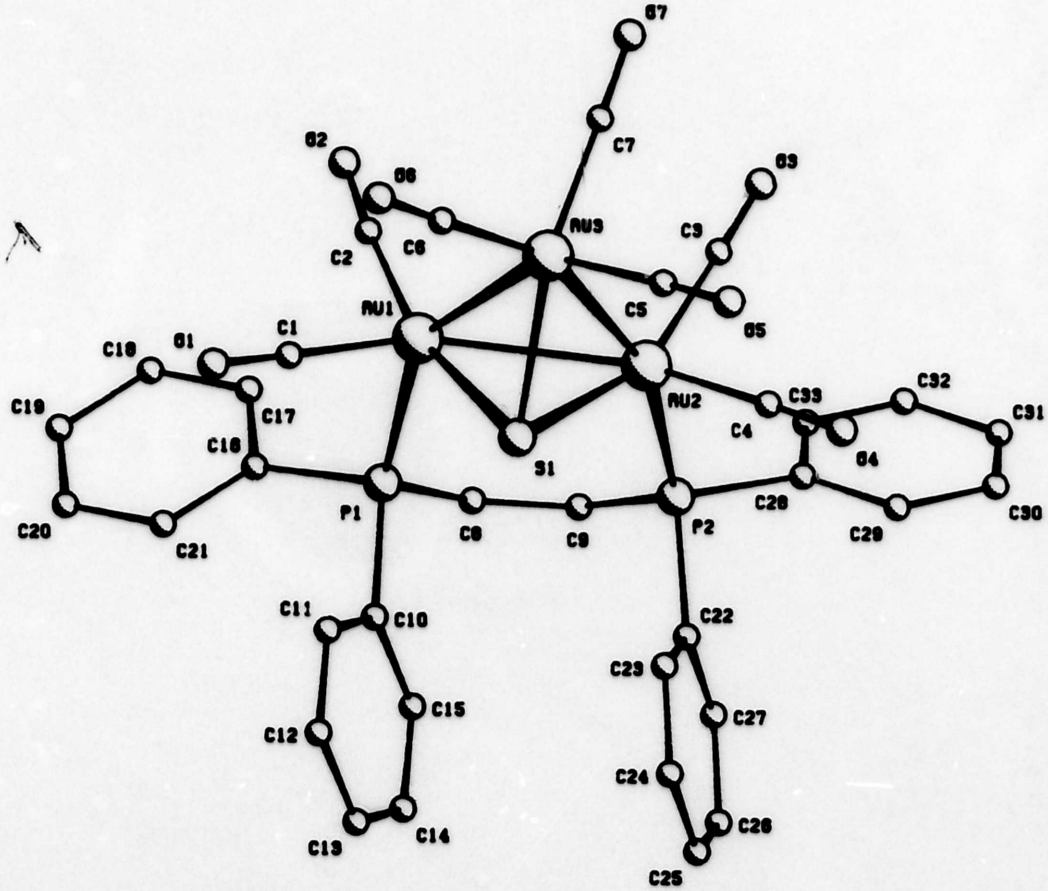
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	5	12	406	-431	1	7	12	307	-297	6	9	12	538	535	4	12	12	352	-340	5	1	13	667	676
-3	5	12	1252	1260	2	7	12	873	850	8	9	12	161	151	5	12	12	199	-185	7	1	13	204	190
-2	5	12	252	-247	3	7	12	541	-541	-9	10	12	411	-412	-5	13	12	253	232	8	1	13	525	544
-1	5	12	546	552	4	7	12	617	616	-8	10	12	193	-193	-5	13	12	269	-281	9	1	13	405	428
0	5	12	431	-429	5	7	12	258	-227	-7	10	12	860	-833	-3	13	12	335	326	-11	2	13	262	-248
1	5	12	1202	1186	7	7	12	679	-714	-6	10	12	200	-177	-2	13	12	264	243	-9	2	13	423	-417
2	5	12	460	-471	8	7	12	355	340	-4	10	12	454	-451	-1	13	12	311	-289	-8	2	13	475	-465
3	5	12	643	562	9	7	12	336	-368	-3	10	12	350	-362	1	13	12	552	540	-7	2	13	513	-518
6	5	12	386	-387	-9	8	12	238	228	-2	10	12	400	-369	3	13	12	324	319	-5	2	13	749	-787
7	5	12	311	321	-8	8	12	156	-175	-1	10	12	154	-144	4	13	12	181	-178	-4	2	13	684	-694
8	5	12	401	397	-7	8	12	328	309	1	10	12	671	663	-5	14	12	450	-440	-3	2	13	375	-428
9	5	12	285	-307	-6	8	12	413	408	2	10	12	336	-327	-3	14	12	242	-229	-2	2	13	185	-204
-11	6	12	443	-464	-5	8	12	415	412	4	10	12	144	97	-2	14	12	162	164	-1	2	13	500	-533
-10	6	12	314	323	-4	8	12	175	-181	5	10	12	595	603	1	14	12	608	-605	2	2	13	991	-1010
-9	6	12	619	-627	-3	8	12	444	446	7	10	12	493	488	2	14	12	488	484	3	2	13	210	199
-8	6	12	272	292	-1	8	12	566	555	-8	11	12	305	-292	0	15	12	721	-717	4	2	13	187	208
-7	6	12	172	-155	0	8	12	387	392	-7	11	12	341	-369	-9	0	13	177	-202	5	2	13	450	437
-6	6	12	531	544	1	8	12	592	594	-5	11	12	725	-714	-7	0	13	287	281	6	2	13	290	-234
-5	6	12	913	-917	2	8	12	391	-409	-4	11	12	250	237	-5	0	13	224	-222	7	2	13	447	449
-4	6	12	651	639	3	8	12	625	601	-3	11	12	709	-695	-3	0	13	631	644	9	2	13	493	500
-3	6	12	225	-227	4	8	12	464	470	-2	11	12	464	-461	-1	0	13	465	511	-11	3	13	428	412
-2	6	12	555	560	5	8	12	354	356	-1	11	12	1194	-1115	3	0	13	1280	1270	-9	3	13	189	-189
-1	6	12	162	-152	8	8	12	198	-190	0	11	12	503	515	7	0	13	198	181	-8	3	13	531	-530
1	6	12	617	-623	9	8	12	216	222	1	11	12	736	-708	9	0	13	390	390	-5	3	13	381	-370
3	6	12	720	691	-9	9	12	474	-470	2	11	12	154	-144	-10	1	13	488	-487	-3	3	13	1096	-1095
4	6	12	410	-377	-8	9	12	378	-362	3	11	12	422	-396	-9	1	13	492	-516	-2	3	13	267	-273
6	6	12	414	-392	-6	9	12	145	-121	4	11	12	162	-168	-6	1	13	361	-330	-1	3	13	611	-635
7	6	12	227	195	-5	9	12	218	202	5	11	12	427	-375	-5	1	13	232	-210	1	3	13	1558	-1513
8	6	12	310	-306	-4	9	12	137	136	6	11	12	259	291	-4	1	13	441	-430	3	3	13	1094	-1099
9	6	12	528	546	-3	9	12	208	-189	-7	12	12	431	445	-3	1	13	297	-322	5	3	13	490	-511
-11	7	12	452	416	-1	9	12	876	870	-6	12	12	602	-585	-2	1	13	396	393	6	3	13	285	324
-10	7	12	424	-420	0	9	12	457	405	-5	12	12	596	571	-1	1	13	714	698	7	3	13	686	-689
-7	7	12	433	418	2	9	12	366	364	-3	12	12	222	229	0	1	13	212	-207	-11	4	13	361	377
-5	7	12	249	222	3	9	12	309	295	-2	12	12	337	-297	2	1	13	706	688	-9	4	13	521	521
-3	7	12	143	-151	4	9	12	358	340	0	12	12	606	-583	3	1	13	378	360	-8	4	13	191	-197
-2	7	12	690	693	5	9	12	467	445	3	12	12	426	-414	4	1	13	663	663	-6	4	13	361	-347

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	13	729	707	0	6	13	179	156	-5	9	13	298	324	-4	13	13	353	362	4	2	14	731	718
-4	4	13	802	-814	1	6	13	489	-488	-3	9	13	242	222	-3	13	13	264	-267	6	2	14	458	465
-3	4	13	294	260	2	6	13	858	905	-2	9	13	646	611	-2	13	13	295	-293	7	2	14	284	249
-2	4	13	514	-498	3	6	13	371	-392	-1	9	13	815	811	-1	13	13	505	-507	8	2	14	277	262
0	4	13	841	-769	5	6	13	552	-543	0	9	13	354	-327	0	13	13	856	523	-10	3	14	531	-528
1	4	13	645	665	6	6	13	394	407	1	9	13	272	292	1	13	13	422	-433	-9	3	14	342	-352
2	4	13	553	-548	8	6	13	437	473	2	9	13	153	163	3	13	13	435	-437	-8	3	14	282	-284
3	4	13	882	-838	-10	7	13	342	-360	3	9	13	377	393	-2	14	13	185	-156	-7	3	14	270	245
4	4	13	461	-422	-9	7	13	206	215	4	9	13	265	260	-1	14	13	241	243	-6	3	14	855	-858
5	4	13	268	-248	-7	7	13	191	185	5	9	13	372	360	0	14	13	201	-203	-4	3	14	879	-902
6	4	13	249	-215	-6	7	13	292	-305	6	9	13	237	-244	-8	0	14	253	269	-3	3	14	345	-267
7	4	13	583	-602	-4	7	13	231	-218	-6	10	13	649	641	-6	0	14	193	-215	-2	3	14	231	-233
8	4	13	220	-207	-3	7	13	794	775	-5	10	13	301	-334	-4	0	14	446	430	-1	3	14	415	438
9	4	13	771	-769	-1	7	13	227	-233	-4	10	13	200	197	0	0	14	285	-297	0	3	14	887	-723
-10	5	13	826	807	0	7	13	428	-450	-2	10	13	785	743	2	0	14	458	487	3	3	14	207	83
-9	5	13	209	221	1	7	13	558	541	0	10	13	778	780	4	0	14	447	-429	4	3	14	400	388
-8	5	13	490	488	2	7	13	200	-222	3	10	13	297	280	-9	1	14	178	204	5	3	14	258	235
-7	5	13	374	-390	3	7	13	217	208	4	10	13	574	580	-8	1	14	474	513	6	3	14	302	301
-6	5	13	666	674	4	7	13	191	-220	5	10	13	235	235	-7	1	14	212	-208	8	3	14	853	889
-4	5	13	743	785	5	7	13	323	-356	6	10	13	193	216	-4	1	14	177	190	-9	4	14	389	-404
-3	5	13	144	111	6	7	13	400	-407	-6	11	13	509	-498	-3	1	14	548	559	-7	4	14	327	-323
-2	5	13	315	-298	7	7	13	174	136	-4	11	13	354	-365	-2	1	14	566	589	-6	4	14	360	333
0	5	13	416	412	-8	8	13	148	153	-3	11	13	285	-289	1	1	14	895	849	-5	4	14	572	-575
1	5	13	263	250	-7	8	13	392	386	-2	11	13	344	-321	2	1	14	294	267	-4	4	14	566	-550
2	5	13	446	-421	-5	8	13	148	-134	-1	11	13	633	617	3	1	14	482	425	-2	4	14	469	-470
3	5	13	366	385	-4	8	13	260	286	2	11	13	250	272	5	1	14	209	-206	-1	4	14	246	-274
4	5	13	708	-658	-3	8	13	376	349	4	11	13	391	424	7	1	14	265	246	0	4	14	205	-210
7	5	13	446	425	0	8	13	213	198	5	11	13	396	405	-10	2	14	197	-240	2	4	14	1230	-1186
8	5	13	808	-803	1	8	13	326	-320	-4	12	13	490	-488	-9	2	14	208	-186	4	4	14	271	-147
9	5	13	197	299	3	8	13	274	277	-3	12	13	584	-557	-5	2	14	521	-530	6	4	14	809	-569
-8	6	13	320	324	5	8	13	147	-154	-2	12	13	318	-326	-4	2	14	196	222	7	4	14	315	295
-5	6	13	167	164	6	8	13	305	-276	0	12	13	514	-521	-2	2	14	407	415	8	4	14	436	-431
-4	6	13	651	689	7	8	13	181	-158	1	12	13	319	312	0	2	14	798	799	-9	5	14	180	-182
-3	6	13	311	-289	-8	9	13	356	390	2	12	13	504	-506	1	2	14	497	-469	-8	5	14	192	-188
-2	6	13	485	461	-7	9	13	308	328	4	12	13	314	-328	2	2	14	737	753	-6	5	14	224	268
-1	6	13	177	-192	-6	9	13	404	411	-5	13	13	261	-246	3	2	14	702	692	-5	5	14	280	-290

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM DPPET 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	5	14	266	282	0	8	14	412	-406	-9	1	15	421	424	-3	4	15	327	-320	4	5	15	168	190
-3	5	14	607	-627	2	8	14	185	172	-8	1	15	234	-271	0	4	15	229	298	-3	9	15	143	118
-2	5	14	157	-149	3	8	14	247	-227	-6	1	15	179	160	1	4	15	595	-573	-2	9	15	446	-444
-1	5	14	137	-171	4	8	14	411	-415	-5	1	15	210	-166	2	4	15	431	396	-1	9	15	308	-318
0	5	14	512	465	5	8	14	232	-253	-4	1	15	309	290	3	4	15	357	348	2	9	15	211	-212
1	5	14	762	-791	-6	9	14	268	249	-2	1	15	240	-226	4	4	15	437	424	3	9	15	225	-223
3	5	14	774	-760	-4	9	14	154	154	-1	1	15	683	-688	5	4	15	534	525	-4	10	15	442	416
5	5	14	289	-310	-3	9	14	197	197	0	1	15	565	570	-7	5	15	149	148	-2	10	15	198	-180
7	5	14	760	-784	-2	9	14	374	396	3	1	15	375	-328	-6	5	15	392	-396	0	10	15	475	-463
-9	6	14	297	297	-1	9	14	456	-465	5	1	15	262	-287	-4	5	15	478	-459	-6	0	16	507	510
-8	6	14	175	-185	5	9	14	474	-483	-8	2	15	320	346	-3	5	15	261	-278	-2	0	16	665	627
-6	6	14	138	132	-4	10	14	400	388	-7	2	15	380	387	-2	5	15	248	-205	0	0	16	522	539
-5	6	14	625	639	-3	10	14	577	552	-6	2	15	411	-403	0	5	15	671	-640	4	0	16	366	383
-4	6	14	353	-377	-1	10	14	255	225	-5	2	15	726	734	1	5	15	459	-450	-7	1	16	251	245
-3	6	14	211	-183	0	10	14	296	272	-4	2	15	240	258	2	5	15	267	-288	-6	1	16	381	-377
0	6	14	304	-330	2	10	14	312	278	-3	2	15	509	495	6	5	15	260	-250	-5	1	16	257	278
1	6	14	574	561	3	10	14	269	269	-2	2	15	184	189	-7	6	15	187	135	-2	1	16	453	-467
2	6	14	236	-225	-5	11	14	197	185	-1	2	15	492	467	-6	6	15	244	240	-1	1	16	510	531
3	6	14	346	-347	-3	11	14	176	187	0	2	15	218	-213	-5	6	15	161	-165	0	1	16	258	252
4	6	14	210	-160	-2	11	14	564	552	1	2	15	316	270	-4	6	15	308	-327	1	1	16	181	-178
5	6	14	256	205	-1	11	14	607	589	2	2	15	534	490	-1	6	15	153	-147	5	1	16	146	146
-8	7	14	158	166	1	11	14	476	452	4	2	15	151	-216	1	6	15	138	-103	-7	2	16	391	-368
-4	7	14	270	255	3	11	14	532	525	5	2	15	154	-168	2	6	15	594	-582	-5	2	16	215	190
-3	7	14	220	223	-2	12	14	481	459	6	2	15	191	217	-7	7	15	262	265	-4	2	16	187	-177
-2	7	14	359	-350	-1	12	14	258	-271	-8	3	15	312	322	-2	7	15	245	-242	-3	2	16	249	-253
-1	7	14	310	-299	0	12	14	533	519	-7	3	15	426	-433	-1	7	15	255	250	0	2	16	378	-392
0	7	14	276	188	2	12	14	299	293	-3	3	15	452	432	0	7	15	233	278	1	2	16	299	276
3	7	14	199	-143	-9	0	15	255	-241	-2	3	15	493	477	1	7	15	132	-91	2	2	16	370	-380
4	7	14	386	-357	-7	0	15	492	-504	0	3	15	162	-150	3	7	15	203	-205	3	2	16	155	-181
6	7	14	164	243	-5	0	15	140	152	1	3	15	825	878	5	7	15	227	217	4	2	16	287	-304
-8	8	14	215	219	-3	0	15	255	-220	2	3	15	386	385	-6	8	15	187	207	5	2	16	392	330
-7	8	14	195	-197	-1	0	15	265	-194	3	3	15	610	610	-5	8	15	251	259	-6	3	16	359	360
-6	8	14	413	-441	1	0	15	448	443	5	3	15	418	390	-3	8	15	311	-316	-4	3	16	502	501
-5	8	14	416	379	3	0	15	148	-126	-7	4	15	239	-254	-2	8	15	150	174	-3	3	16	227	236
-4	8	14	329	352	5	0	15	342	340	-6	4	15	212	-198	1	8	15	207	180	-1	3	16	429	-392
-2	8	14	289	-266	7	0	15	148	192	-5	4	15	726	-752	3	8	15	403	-404	0	3	16	694	688

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM OPPET 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	3	16	159	180	-6	5	16	205	-188	-2	6	16	268	-286	0	0	16	235	205	0	2	17	370	343
2	3	16	190	133	-4	5	16	346	-313	-1	6	16	220	-168	-3	0	17	636	625	1	2	17	303	-255
3	3	16	227	-221	-2	5	16	197	200	0	6	16	316	-305	-4	1	17	156	128	-4	3	17	185	-154
-6	4	16	302	-309	-1	5	16	209	-230	1	6	16	391	-377	-2	1	17	382	373	-2	3	17	369	-391
-5	4	16	179	213	0	5	16	333	-345	3	6	16	220	219	-1	1	17	612	619	-1	3	17	378	379
-4	4	16	285	282	1	5	16	280	266	-3	7	16	317	-322	0	1	17	283	-277	1	3	17	158	-110
-3	4	16	210	200	2	5	16	181	172	-2	7	16	202	180	1	1	17	185	164	-3	4	17	251	-224
-1	4	16	338	341	3	5	16	267	245	0	7	16	258	-277	-4	2	17	160	-191	-1	4	17	238	222
1	4	16	480	469	-5	6	16	429	-435	1	7	16	477	-470	-2	2	17	564	565	1	4	17	388	315
2	4	16	457	468	-4	6	16	236	-235	-3	8	16	320	294	-1	2	17	239	-218					

RUTHENIUM DPPET CLUSTER $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-}ebdp)(CO)_7$