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

Table 1 - Final Atomic Coordinates for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

	x	y	z
Ru(1)	-79703(5)	-25000	-13786(4)
Ru(2)	-82605(6)	-24394(7)	-40577(4)
Ru(3)	-106967(5)	-25156(6)	-31694(5)
Ru(1')	-822(2)	-251(3)	-233(2)
Ru(2')	-854(3)	-246(4)	-498(2)
Ru(3')	-1100(3)	-261(3)	-415(3)
Ru(1")	-766(2)	-255(3)	-50(2)
Ru(2")	-809(3)	-246(4)	-318(3)
Ru(3")	-1042(3)	-259(4)	-223(3)
P(1)	-7202(2)	-3973(1)	-523(1)
P(2)	-8998(2)	-1386(1)	-2810(1)
O(1)	-11583(10)	-4486(6)	-4062(8)
O(2)	-12553(10)	-1580(7)	-5408(9)
O(3)	-12525(9)	-2149(6)	-1378(9)
O(4)	-8598(9)	-4468(5)	-4959(6)
O(5)	-5329(11)	-1966(10)	-4178(10)
O(6)	-9598(15)	-1441(7)	-6465(7)
O(7)	-5170(7)	-1563(6)	-572(6)
O(8)	-9098(8)	-1631(6)	654(6)
C(1)	-11218(10)	-3751(7)	-3704(9)
C(2)	-11893(11)	-1914(8)	-4581(10)
C(3)	-11884(9)	-2275(8)	-2067(10)
C(4)	-8470(10)	-3698(7)	-4673(7)
C(5)	-6422(14)	-2140(9)	-4131(10)
C(6)	-9061(15)	-1845(8)	-5549(8)
C(7)	-6204(9)	-1908(6)	-853(6)
C(8)	-8619(8)	-1961(6)	-79(6)
C(9)	-9952(4)	278(3)	-2092(4)
C(10)	-9888(4)	1232(3)	-1839(4)
C(11)	-8813(4)	1768(3)	-2077(4)
C(12)	-7802(4)	1349(3)	-2567(4)
C(13)	-7866(4)	395(3)	-2819(4)
C(14)	-8942(4)	-141(3)	-2582(4)
C(15)	-6434(6)	-4849(3)	1801(4)
C(16)	-5968(6)	-4864(3)	3087(4)
C(17)	-5618(6)	-4032(3)	3740(4)

Footnotes to Table 1 (ie Atoms x y z)

Site occupancy factors: All non-primed atoms = 0.96

Ru(N') atoms = 0.02

Ru(N") atoms = 0.02

TABLE 1. (cont.)

	x	y	z
C(18)	-5734(6)	-3186(3)	3106(4)
C(19)	-6200(6)	-3171(3)	1819(4)
C(20)	-6550(6)	-4002(3)	1167(4)
C(21)	-6050(4)	-5023(4)	-2126(4)
C(22)	-4959(4)	-5359(4)	-2583(4)
C(23)	-3593(4)	-5132(4)	-1988(4)
C(24)	-3317(4)	-4570(4)	-934(4)
C(25)	-4407(4)	-4234(4)	-477(4)
C(26)	-5773(4)	-4461(4)	-1073(4)
C(27)	-8504(9)	-4890(7)	-844(8)

Table 2 - Bond Lengths (Å) for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

Ru(2)	---	Ru(1)	2.934(1)
P(1)	---	Ru(1)	2.366(2)
C(7)	---	Ru(1)	1.908(8)
Ru(3)	---	Ru(2)	2.841(1)
C(4)	---	Ru(2)	1.923(10)
C(6)	---	Ru(2)	1.863(9)
C(1)	---	Ru(3)	1.899(10)
C(3)	---	Ru(3)	1.937(12)
C(26)	---	P(1)	1.823(6)
C(14)	---	P(2)	1.802(5)
C(2)	---	O(2)	1.101(14)
C(4)	---	O(4)	1.147(13)
C(6)	---	O(6)	1.181(13)
C(8)	---	O(8)	1.147(12)

Ru(3)	---	Ru(1)	2.942(1)
P(2)	---	Ru(1)	2.310(2)
C(8)	---	Ru(1)	1.894(8)
P(2)	---	Ru(2)	2.296(2)
C(5)	---	Ru(2)	1.901(14)
P(2)	---	Ru(3)	2.303(2)
C(2)	---	Ru(3)	1.926(10)
C(20)	---	P(1)	1.836(5)
C(27)	---	P(1)	1.818(9)
C(1)	---	O(1)	1.154(13)
C(3)	---	O(3)	1.129(16)
C(5)	---	O(5)	1.129(19)
C(7)	---	O(7)	1.114(11)

Footnotes to Bond length Table

Ru(1')-Ru(2') = 2.90(4) Å

Ru(1')-Ru(3') = 3.00(3)

Ru(2')-Ru(3') = 2.84(4)

Ru(1")-Ru(2") = 2.92(4)

Ru(1")-Ru(3") = 2.94(3)

Ru(2")-Ru(3") = 2.79(5)

Table 3 - Bond Angles (°) for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

Ru(3)	- Ru(1)	- Ru(2)	57.8(1)	P(1)	- Ru(1)	- Ru(2)	112.2(1)
P(1)	- Ru(1)	- Ru(3)	114.7(1)	P(2)	- Ru(1)	- Ru(2)	50.2(1)
P(2)	- Ru(1)	- Ru(3)	50.3(1)	P(2)	- Ru(1)	- P(1)	160.0(1)
C(7)	- Ru(1)	- Ru(2)	98.6(2)	C(7)	- Ru(1)	- Ru(3)	146.6(2)
C(7)	- Ru(1)	- P(1)	95.3(3)	C(7)	- Ru(1)	- P(2)	96.9(2)
C(8)	- Ru(1)	- Ru(2)	143.4(2)	C(8)	- Ru(1)	- Ru(3)	95.2(2)
C(8)	- Ru(1)	- P(1)	101.1(2)	C(8)	- Ru(1)	- P(2)	94.1(2)
C(8)	- Ru(1)	- C(7)	92.7(3)	Ru(3)	- Ru(2)	- Ru(1)	61.2(1)
P(2)	- Ru(2)	- Ru(1)	50.7(1)	P(2)	- Ru(2)	- Ru(3)	52.0(1)
C(4)	- Ru(2)	- Ru(1)	108.1(3)	C(4)	- Ru(2)	- Ru(3)	93.6(3)
C(4)	- Ru(2)	- P(2)	144.2(3)	C(5)	- Ru(2)	- Ru(1)	101.5(3)
C(5)	- Ru(2)	- Ru(3)	159.7(3)	C(5)	- Ru(2)	- P(2)	109.5(4)
C(5)	- Ru(2)	- C(4)	102.5(5)	C(6)	- Ru(2)	- Ru(1)	146.7(4)
C(6)	- Ru(2)	- Ru(3)	96.8(5)	C(6)	- Ru(2)	- P(2)	96.4(4)
C(6)	- Ru(2)	- C(4)	97.2(4)	C(6)	- Ru(2)	- C(5)	93.4(6)
Ru(2)	- Ru(3)	- Ru(1)	60.9(1)	P(2)	- Ru(3)	- Ru(1)	50.5(1)
P(2)	- Ru(3)	- Ru(2)	51.7(1)	C(1)	- Ru(3)	- Ru(1)	110.7(3)
C(1)	- Ru(3)	- Ru(2)	96.7(3)	C(1)	- Ru(3)	- P(2)	147.3(3)
C(2)	- Ru(3)	- Ru(1)	146.1(3)	C(2)	- Ru(3)	- Ru(2)	96.0(4)
C(2)	- Ru(3)	- P(2)	96.0(3)	C(2)	- Ru(3)	- C(1)	95.5(4)
C(3)	- Ru(3)	- Ru(1)	99.9(3)	C(3)	- Ru(3)	- Ru(2)	157.4(3)
C(3)	- Ru(3)	- P(2)	107.6(3)	C(3)	- Ru(3)	- C(1)	107.8(5)
C(3)	- Ru(3)	- C(2)	95.1(5)	C(20)	- P(1)	- Ru(1)	115.5(2)
C(26)	- P(1)	- Ru(1)	114.0(2)	C(26)	- P(1)	- C(20)	103.4(2)
C(27)	- P(1)	- Ru(1)	115.0(3)	C(27)	- P(1)	- C(20)	103.8(3)
C(27)	- P(1)	- C(26)	103.5(4)	Ru(2)	- P(2)	- Ru(1)	79.1(1)
Ru(3)	- P(2)	- Ru(1)	79.2(1)	Ru(3)	- P(2)	- Ru(2)	76.3(1)
C(14)	- P(2)	- Ru(1)	126.5(2)	C(14)	- P(2)	- Ru(2)	137.3(2)
C(14)	- P(2)	- Ru(3)	135.8(2)	O(1)	- C(1)	- Ru(3)	177.2(8)
O(2)	- C(2)	- Ru(3)	177.9(12)	O(3)	- C(3)	- Ru(3)	176.7(9)
O(4)	- C(4)	- Ru(2)	175.3(8)	O(5)	- C(5)	- Ru(2)	179.7(7)
O(6)	- C(6)	- Ru(2)	176.9(12)	O(7)	- C(7)	- Ru(1)	178.5(7)
O(8)	- C(8)	- Ru(1)	175.4(7)	C(9)	- C(14)	- P(2)	118.8(4)
C(13)	- C(14)	- P(2)	121.1(4)	C(15)	- C(20)	- P(1)	120.3(3)
C(19)	- C(20)	- P(1)	119.7(3)	C(21)	- C(26)	- P(1)	119.9(3)
C(25)	- C(26)	- P(1)	120.0(4)				

Table 4 - Final atomic coordinates and thermal parameters for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)\text{-}(CO)_8(PMePh_2)$

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	-79703(5)	-25000	-13786(4)	374(3)	327(3)	406(3)	-16(2)	119(2)	24(3)
Ru(2)	-82605(6)	-24394(7)	-40577(4)	662(4)	461(4)	423(3)	-85(3)	210(2)	-86(3)
Ru(3)	-106967(5)	-25156(6)	-31694(5)	412(3)	382(3)	598(4)	24(3)	53(2)	-10(3)
Ru(1')	-822(2)	-251(3)	-233(2)	3(1)					
Ru(2')	-854(3)	-246(4)	-498(2)	5(1)					
Ru(3')	-1100(3)	-261(3)	-415(3)	5(1)					
Ru(1")	-766(2)	-255(3)	-50(2)	3(1)					
Ru(2")	-809(3)	-246(4)	-318(3)	5(1)					
Ru(3")	-1042(3)	-259(4)	-223(3)	5(1)					
P(1)	-7202(2)	-3973(1)	-523(1)	41(1)	35(1)	47(1)	-2(1)	9(1)	2(1)
P(2)	-8998(2)	-1386(1)	-2810(1)	44(1)	37(1)	44(1)	2(1)	12(1)	3(1)
O(1)	-11583(10)	-4486(6)	-4062(8)	118(6)	55(5)	120(6)	-16(4)	39(5)	-25(5)
O(2)	-12553(10)	-1580(7)	-5408(9)	99(6)	100(7)	118(6)	32(6)	-36(5)	11(5)
O(3)	-12525(9)	-2149(6)	-1378(9)	103(6)	84(7)	162(7)	-9(5)	83(6)	8(5)
O(4)	-8598(9)	-4468(5)	-4959(6)	119(6)	57(5)	77(4)	-27(4)	20(4)	0(4)
O(5)	-5329(11)	-1966(10)	-4178(10)	114(7)	208(13)	165(9)	-103(9)	90(7)	-80(8)
O(6)	-9598(15)	-1441(7)	-6465(7)	274(15)	82(6)	62(4)	10(4)	0(6)	-55(8)
O(7)	-5170(7)	-1563(6)	-572(6)	64(5)	87(6)	96(5)	-9(4)	24(4)	-23(4)
O(8)	-9098(8)	-1631(6)	654(6)	87(5)	81(5)	78(4)	-18(4)	41(3)	11(4)
C(1)	-11218(10)	-3751(7)	-3704(9)	68(6)	44(6)	78(6)	-8(4)	12(4)	-10(5)
C(2)	-11893(11)	-1914(8)	-4581(10)	60(6)	53(6)	91(6)	11(5)	-13(5)	-12(5)
C(3)	-11884(9)	-2275(8)	-2067(10)	54(5)	65(9)	106(7)	6(5)	26(5)	6(5)
C(4)	-8470(10)	-3698(7)	-4673(7)	74(6)	63(7)	52(4)	-13(4)	20(4)	-2(5)
C(5)	-6422(14)	-2140(9)	-4131(10)	114(9)	99(10)	87(7)	-43(6)	62(6)	-40(8)
C(6)	-9061(15)	-1845(8)	-5549(8)	124(9)	73(7)	46(4)	9(5)	7(5)	-25(7)
C(7)	-6204(9)	-1908(6)	-853(6)	44(5)	46(5)	51(4)	-8(3)	15(3)	-5(4)
C(8)	-8619(8)	-1961(6)	-79(6)	53(5)	41(4)	44(3)	-4(3)	14(3)	-2(4)
C(9)	-9952(4)	278(3)	-2092(4)	60(2)					
C(10)	-9888(4)	1232(3)	-1839(4)	69(2)					
C(11)	-8813(4)	1768(3)	-2077(4)	78(3)					
C(12)	-7802(4)	1349(3)	-2567(4)	72(2)					
C(13)	-7866(4)	395(3)	-2819(4)	55(2)					
C(14)	-8942(4)	-141(3)	-2582(4)	38(1)					
C(15)	-6434(6)	-4849(3)	1801(4)	60(2)					
C(16)	-5968(6)	-4864(3)	3087(4)	77(3)					
C(17)	-5618(6)	-4032(3)	3740(4)	71(2)					

Table 4 (cont.)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(18)	-5734(6)	-3186(3)	3106(4)	70(2)					
C(19)	-6200(6)	-3171(3)	1819(4)	60(2)					
C(20)	-6550(6)	-4002(3)	1167(4)	47(2)					
C(21)	-6050(4)	-5023(4)	-2126(4)	69(2)					
C(22)	-4959(4)	-5359(4)	-2583(4)	86(3)					
C(23)	-3593(4)	-5132(4)	-1988(4)	81(3)					
C(24)	-3317(4)	-4570(4)	-934(4)	77(3)					
C(25)	-4407(4)	-4234(4)	-477(4)	64(2)					
C(26)	-5773(4)	-4461(4)	-1073(4)	45(2)					
C(27)	-8504(9)	-4890(7)	-844(8)	64(2)					

Table 5 - Hydrogen parameters for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

	x	y	z	U(11)
H(1)	-10785(4)	-136(3)	-1908(4)	154(13)
H(2)	-10671(4)	1557(3)	-1460(4)	154(13)
H(3)	-8763(4)	2506(3)	-1882(4)	154(13)
H(4)	-6970(4)	1764(3)	-2751(4)	154(13)
H(5)	-7084(4)	71(3)	-3199(4)	154(13)
H(6)	-6705(6)	-5492(3)	1295(4)	154(13)
H(7)	-5878(6)	-5519(3)	3578(4)	154(13)
H(8)	-5257(6)	-4044(3)	4736(4)	154(13)
H(9)	-5463(6)	-2542(3)	3611(4)	154(13)
H(10)	-6289(6)	-2516(3)	1328(4)	154(13)
H(11)	-7108(4)	-5198(4)	-2528(4)	154(13)
H(12)	-5173(4)	-5794(4)	-3399(4)	154(13)
H(13)	-2749(4)	-5392(4)	-2342(4)	154(13)
H(14)	-2259(4)	-4395(4)	-473(4)	154(13)
H(15)	-4193(4)	-3799(4)	338(4)	154(13)
H(16)	-9202(9)	-4740(7)	-404(8)	39(10)
H(17)	-8943(9)	-4960(7)	-1718(8)	39(10)
H(18)	-8048(28)	-5469(38)	-525(28)	39(8)

Table 6 - Structure factor listings for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

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	0	0	1267	1237	7	3	0	438	427	5	7	0	455	430	1	12	0	333	317	-3	1	1	1067	938
2	0	0	493	526	8	3	0	78	78	6	7	0	190	181	2	12	0	214	197	-2	1	1	524	491
3	0	0	1271	1301	9	3	0	63	58	7	7	0	342	338	3	12	0	270	277	-1	1	1	1224	1235
4	0	0	452	464	0	4	0	2238	2169	8	7	0	127	129	5	12	0	196	213	0	1	1	1547	1578
5	0	0	327	343	1	4	0	787	790	9	7	0	106	115	1	13	0	424	427	1	1	1	773	822
6	0	0	54	48	2	4	0	621	604	0	8	0	1361	1386	2	13	0	89	89	2	1	1	482	475
7	0	0	480	494	3	4	0	855	855	1	8	0	806	805	3	13	0	480	471	3	1	1	988	820
8	0	0	435	450	4	4	0	235	220	2	8	0	388	377	4	13	0	517	514	4	1	1	403	417
9	0	0	131	132	5	4	0	744	722	3	8	0	475	477	5	13	0	188	188	5	1	1	275	284
10	0	0	191	195	6	4	0	215	204	4	8	0	135	128	0	14	0	825	820	6	1	1	330	348
1	1	0	1378	1283	7	4	0	815	808	5	8	0	412	385	1	14	0	262	258	7	1	1	383	385
2	1	0	714	685	8	4	0	542	538	6	8	0	204	208	2	14	0	204	215	8	1	1	239	248
3	1	0	360	364	9	4	0	178	179	7	8	0	419	406	3	14	0	224	224	9	1	1	78	98
4	1	0	1303	1353	1	5	0	713	702	8	9	0	376	368	1	15	0	202	214	-9	2	1	228	235
5	1	0	855	879	2	5	0	132	138	1	9	0	489	515	2	-4	1	642	587	-8	2	1	242	238
6	1	0	120	122	3	5	0	1107	1110	2	9	0	389	408	-9	0	1	272	276	-7	2	1	421	408
7	1	0	282	280	4	5	0	1400	1347	3	9	0	458	478	-8	0	1	184	191	-5	2	1	843	833
8	1	0	221	218	5	5	0	590	578	4	9	0	889	858	-7	0	1	185	184	-4	2	1	1474	1328
9	1	0	93	102	6	5	0	343	338	5	9	0	381	381	-6	0	1	148	153	-3	2	1	1236	1093
10	1	0	85	85	7	5	0	321	324	6	9	0	160	163	-5	0	1	444	494	-1	2	1	713	720
0	2	0	1819	1733	8	5	0	104	100	7	9	0	179	189	-4	0	1	1470	1529	0	2	1	716	756
1	2	0	1445	1383	9	5	0	64	60	8	9	0	80	70	-3	0	1	1527	1521	1	2	1	387	387
2	2	0	685	655	0	6	0	1077	1150	0	10	0	1022	1017	-1	0	1	1432	1365	2	2	1	403	415
3	2	0	1148	1104	1	6	0	714	738	1	10	0	734	745	0	0	1	189	203	3	2	1	828	855
4	2	0	467	443	2	6	0	729	702	2	10	0	124	136	1	0	1	170	169	4	2	1	720	770
6	2	0	63	57	3	6	0	852	855	3	10	0	824	820	3	0	1	398	408	5	2	1	373	383
7	2	0	868	888	4	6	0	278	262	4	10	0	114	107	4	0	1	849	884	6	2	1	87	92
8	2	0	562	578	5	6	0	440	427	5	10	0	288	248	5	0	1	271	272	7	2	1	181	180
9	2	0	200	194	6	6	0	171	164	7	10	0	429	415	8	0	1	70	78	8	2	1	100	108
10	2	0	128	130	7	6	0	373	382	1	11	0	411	417	9	0	1	88	79	9	2	1	193	201
1	3	0	754	745	8	6	0	584	578	2	11	0	287	270	-10	1	1	151	159	-10	3	1	177	184
2	3	0	558	537	9	6	0	200	205	3	11	0	488	458	-9	1	1	308	310	-8	3	1	288	272
3	3	0	1320	1237	1	7	0	788	800	4	11	0	712	711	-8	1	1	869	898	-6	3	1	818	782
4	3	0	1810	1583	2	7	0	287	269	5	11	0	244	241	-7	1	1	659	673	-5	3	1	437	382
5	3	0	882	882	3	7	0	1175	1150	6	11	0	219	209	-6	1	1	175	173	-4	3	1	585	492
6	3	0	454	447	4	7	0	948	1009	0	12	0	795	750	-5	1	1	558	567	-3	3	1	257	253

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	1	694	674	2	5	1	386	384	4	7	1	327	328	-7	10	1	271	244	2	12	1	123	128
0	3	1	1764	1796	3	5	1	510	528	5	7	1	219	220	-6	10	1	192	191	3	12	1	495	484
1	3	1	988	1023	4	5	1	258	244	6	7	1	226	228	-5	10	1	425	419	4	12	1	395	397
2	3	1	394	400	5	5	1	40	43	7	7	1	300	312	-4	10	1	808	801	5	12	1	163	159
3	3	1	710	739	6	5	1	291	300	8	7	1	138	146	-3	10	1	395	397	-5	13	1	246	277
4	3	1	112	102	7	5	1	317	325	-7	8	1	234	231	-2	10	1	193	172	-4	13	1	770	253
5	3	1	148	141	8	5	1	222	239	-6	8	1	218	184	-1	10	1	806	806	-3	13	1	250	258
6	3	1	243	257	-9	6	1	250	238	-5	8	1	440	417	0	10	1	365	364	-2	13	1	194	194
7	3	1	484	441	-7	6	1	253	242	-4	8	1	1025	889	1	10	1	78	73	-1	13	1	454	487
8	3	1	132	137	-6	6	1	463	425	-3	8	1	557	538	2	10	1	208	208	0	13	1	368	382
-9	4	1	331	316	-5	6	1	543	518	-2	8	1	516	484	3	10	1	453	454	1	13	1	141	142
-7	4	1	433	393	-4	6	1	1392	1293	-1	8	1	684	677	4	10	1	434	443	2	13	1	175	175
-6	4	1	305	280	-3	6	1	1016	984	0	8	1	241	280	5	10	1	44	79	3	13	1	179	124
-4	4	1	1333	1278	-2	6	1	261	260	1	8	1	293	288	6	10	1	140	191	4	13	1	110	102
-3	4	1	786	756	-1	6	1	706	714	2	8	1	136	131	7	10	1	68	70	-9	14	1	438	429
-1	4	1	526	560	0	6	1	218	227	3	8	1	477	486	-7	11	1	331	321	-2	14	1	174	167
0	4	1	285	301	1	6	1	114	118	4	8	1	431	422	-6	11	1	189	178	-1	14	1	251	248
1	4	1	357	330	2	6	1	610	594	5	8	1	145	148	-5	11	1	468	492	0	14	1	135	130
2	4	1	184	176	3	6	1	502	538	6	8	1	94	91	-4	1	1	182	173	1	14	1	83	84
3	4	1	728	761	4	6	1	414	433	7	8	1	50	50	-3	11	1	258	254	2	14	1	196	195
4	4	1	878	909	5	6	1	222	230	-8	9	1	588	538	-2	11	1	228	238	3	14	1	321	331
5	4	1	158	165	6	6	1	75	77	-7	9	1	381	357	-1	11	1	323	333	-1	15	1	288	316
6	4	1	132	130	7	6	1	218	220	-6	9	1	159	146	0	11	1	693	704	0	15	1	340	383
7	4	1	131	135	8	6	1	141	142	-5	9	1	347	341	1	11	1	388	388	-10	0	2	111	128
8	4	1	130	129	-9	7	1	274	254	-4	9	1	150	140	2	11	1	85	92	-8	0	2	180	178
9	4	1	220	223	-8	7	1	470	418	-3	9	1	387	359	3	11	1	210	224	-6	0	2	285	276
-8	5	1	332	306	-7	7	1	482	481	-2	9	1	147	145	4	11	1	108	120	-7	0	2	914	943
-6	5	1	774	679	-5	7	1	609	571	-1	9	1	644	659	5	11	1	61	71	-5	0	2	125	115
-5	5	1	251	216	-4	7	1	383	361	0	9	1	865	914	6	11	1	182	187	-4	0	2	688	700
-4	5	1	788	726	-3	7	1	522	495	1	9	1	708	700	-6	12	1	39	57	-3	0	2	845	828
-3	5	1	324	304	-2	7	1	322	310	2	9	1	135	130	-5	12	1	288	287	-2	0	2	1188	1164
-2	5	1	421	402	-1	7	1	793	801	3	9	1	472	487	-4	12	1	580	547	-1	0	2	887	720
-1	5	1	339	345	0	7	1	1266	1321	4	9	1	252	266	-3	12	1	327	352	0	0	2	433	402
0	5	1	755	733	1	7	1	538	562	5	9	1	277	275	-2	12	1	300	288	1	0	2	208	211
1	5	1	1454	1482	2	7	1	194	203	6	9	1	287	273	-1	12	1	301	298	2	0	2	139	151
2	5	1	919	937	3	7	1	302	315	7	9	1	244	244	1	12	1	127	123	3	0	2	140	116

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	2	182	187	2	2	2	147	144	0	4	2	1091	1087	-1	6	2	654	662	3	8	2	50	51
6	0	2	859	849	3	2	2	55	51	1	4	2	283	294	0	6	2	274	283	4	8	2	350	370
8	0	2	644	634	4	2	2	400	401	2	4	2	204	215	2	6	2	127	123	5	8	2	496	504
7	0	2	382	380	5	2	2	624	634	3	4	2	137	146	4	6	2	144	149	6	8	2	444	452
8	0	2	68	70	6	2	2	745	765	4	4	2	139	126	5	6	2	435	461	7	8	2	277	239
9	0	2	318	329	7	2	2	176	165	5	4	2	526	527	6	6	2	400	408	8	8	2	119	191
-9	1	2	252	270	8	2	2	189	187	6	4	2	807	814	7	6	2	196	199	-8	9	2	75	79
-8	1	2	207	222	9	2	2	183	161	7	4	2	111	114	8	6	2	124	112	-7	9	2	74	66
-7	1	2	173	109	-10	3	2	111	108	8	4	2	192	202	-9	7	2	156	155	-6	9	2	295	267
-6	1	2	345	307	-9	3	2	303	291	9	4	2	132	131	-8	7	2	174	157	-5	9	2	437	445
-4	1	2	1070	1023	-8	3	2	139	128	-9	5	2	282	245	-7	7	2	178	126	-4	9	2	309	303
-3	1	2	477	496	-7	3	2	152	131	-8	5	2	137	140	-6	7	2	234	221	-3	9	2	145	151
-2	1	2	502	504	-6	3	2	218	208	-7	5	2	86	92	-5	7	2	455	447	-2	9	2	219	204
-1	1	2	207	214	-5	3	2	526	497	-6	5	2	274	257	-4	7	2	604	613	-1	9	2	275	267
0	1	2	428	454	-4	3	2	557	547	-5	5	2	455	458	-3	7	2	151	147	0	9	2	319	392
1	1	2	1459	1501	-3	3	2	661	644	-4	5	2	546	548	-2	7	2	367	360	1	9	2	350	364
2	1	2	1282	1310	-2	3	2	145	147	-3	5	2	910	929	-1	7	2	304	294	2	9	2	478	474
3	1	2	382	404	-1	3	2	154	143	-2	5	2	205	200	0	7	2	315	297	3	9	2	214	223
4	1	2	449	444	0	3	2	637	645	-1	5	2	288	282	1	7	2	542	543	4	9	2	284	303
5	1	2	322	315	1	3	2	344	372	0	5	2	266	265	2	7	2	424	429	5	9	2	200	198
6	1	2	74	74	2	3	2	976	994	1	5	2	617	629	3	7	2	204	187	6	9	2	139	139
7	1	2	198	206	3	3	2	665	685	2	5	2	846	936	4	7	2	124	130	7	9	2	218	240
8	1	2	42	58	4	3	2	82	91	3	5	2	397	415	5	7	2	116	123	-7	10	2	119	117
9	1	2	263	257	5	3	2	315	337	4	5	2	111	116	7	7	2	67	68	-6	10	2	127	130
-10	2	2	50	48	7	3	2	183	186	5	5	2	185	184	8	7	2	68	68	-5	10	2	128	111
-9	2	2	312	302	8	3	2	213	232	6	5	2	138	133	-8	8	2	355	362	-4	10	2	193	184
-8	2	2	770	705	9	3	2	368	374	7	5	2	67	68	-7	8	2	286	284	-3	10	2	213	202
-7	2	2	316	270	-9	4	2	455	409	8	5	2	98	97	-6	8	2	49	53	-2	10	2	227	245
-6	2	2	230	210	-8	4	2	580	527	-9	6	2	323	291	-5	8	2	323	316	-1	10	2	406	405
-5	2	2	527	474	-7	4	2	359	340	-8	6	2	508	487	-4	8	2	247	289	0	10	2	308	285
-4	2	2	571	528	-6	4	2	176	147	-7	6	2	439	408	-3	8	2	257	246	1	10	2	203	208
-3	2	2	251	254	-5	4	2	354	337	-6	6	2	175	156	-2	8	2	450	441	2	10	2	140	153
-2	2	2	445	444	-4	4	2	380	384	-5	6	2	445	420	-1	8	2	423	648	4	10	2	118	110
-1	2	2	447	658	-3	4	2	658	643	-4	6	2	575	559	0	8	2	554	550	5	10	2	440	438
0	2	2	124	100	-2	4	2	580	598	-3	6	2	82	79	1	8	2	138	133	6	10	2	442	455
1	2	2	488	498	-1	4	2	113	123	-2	6	2	454	448	2	8	2	139	141	-7	11	2	121	123

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
-5	11	2	213	201	-8	0	3	336	380	9	1	3	276	283	7	3	3	54	72	5	5	3	508	502
-5	11	2	315	300	-7	0	3	408	448	-10	2	3	107	103	8	3	3	270	267	7	5	3	54	45
-4	11	2	310	313	-6	0	3	964	860	-8	2	3	148	128	-10	4	3	171	161	8	5	3	313	370
-3	11	2	243	239	-5	0	3	703	723	-6	2	3	516	521	-9	4	3	90	70	-7	6	3	196	175
-1	11	2	193	188	-4	0	3	482	461	-5	2	3	342	403	-8	4	3	47	41	-6	6	3	530	510
0	11	2	134	128	-3	0	3	893	906	-4	2	3	217	234	-7	4	3	338	318	-5	6	3	370	343
1	11	2	267	261	-1	0	3	434	451	-3	2	3	575	594	-6	4	3	808	880	-4	6	3	88	92
2	11	2	347	364	0	0	3	68	70	-2	2	3	718	726	-5	4	3	107	104	-3	6	3	518	516
3	11	2	365	364	1	0	3	1082	1046	-1	2	3	690	682	-4	4	3	315	304	-2	6	3	439	475
4	11	2	149	147	2	0	3	1068	1056	0	2	3	260	268	-3	4	3	113	125	-1	6	3	685	714
5	11	2	186	188	3	0	3	181	152	1	2	3	1374	1410	-2	4	3	352	350	0	6	3	216	218
-8	12	2	142	138	4	0	3	693	711	2	2	3	1349	1398	-1	4	3	576	570	1	6	3	913	894
-5	12	2	227	258	5	0	3	728	711	3	2	3	385	391	0	4	3	203	205	2	6	3	1153	1167
-3	12	2	140	138	6	0	3	145	155	4	2	3	901	933	1	4	3	1127	1150	3	6	3	391	317
-2	12	2	245	230	7	0	3	305	309	5	2	3	627	617	2	4	3	1316	1367	4	6	3	938	933
-1	12	2	293	301	8	0	3	54	48	6	2	3	219	225	3	4	3	470	480	5	6	3	407	410
0	12	2	119	119	9	0	3	282	288	7	2	3	217	221	4	4	3	557	584	6	6	3	96	88
1	12	2	176	170	-10	1	3	154	184	8	2	3	105	100	5	4	3	505	513	7	6	3	192	135
2	12	2	196	202	-9	1	3	188	178	9	2	3	335	320	6	4	3	112	123	8	6	3	87	88
3	12	2	71	71	-8	1	3	221	140	-10	3	3	273	243	7	4	3	144	146	-9	7	3	142	175
4	12	2	210	216	-7	1	3	220	206	-8	3	3	393	357	8	4	3	212	217	-8	7	3	157	154
5	12	2	255	265	-6	1	3	153	158	-6	3	3	134	131	-8	5	3	350	327	-7	7	3	83	87
-5	13	2	232	243	-5	1	3	427	443	-7	3	3	259	216	-6	5	3	145	175	-6	7	3	191	174
-4	13	2	359	344	-4	1	3	87	91	-6	3	3	261	261	-7	5	3	124	115	-5	7	3	87	85
-2	13	2	60	50	-3	1	3	1156	1205	-5	3	3	173	181	-6	5	3	72	79	-4	7	3	241	267
0	13	2	95	94	-2	1	3	1344	1379	-4	3	3	599	532	-5	5	3	56	52	-3	7	3	705	707
1	13	2	262	257	-1	1	3	696	706	-3	3	3	464	447	-4	5	3	301	394	-2	7	3	1134	1157
2	13	2	403	395	0	1	3	1325	1372	-2	3	3	987	1003	-3	5	3	939	978	-1	7	3	309	305
3	13	2	278	282	1	1	3	468	444	-1	3	3	256	247	-2	5	3	1207	1230	0	7	3	487	481
4	13	2	175	183	2	1	3	317	322	0	3	3	424	446	-1	5	3	387	423	1	7	3	706	712
-3	14	2	87	85	3	1	3	519	505	1	3	3	719	738	0	5	3	988	1032	2	7	3	93	88
-2	14	2	292	277	4	1	3	231	238	2	3	3	130	127	1	5	3	944	989	3	7	3	228	224
-1	14	2	246	241	5	1	3	741	799	3	3	3	451	470	2	5	3	164	161	4	7	3	177	169
1	14	2	142	142	6	1	3	493	479	4	3	3	149	139	3	5	3	282	284	5	7	3	463	452
-10	0	3	89	80	7	1	3	174	176	5	3	3	885	879	4	5	3	86	77	6	7	3	439	441
-9	0	3	111	119	8	1	3	308	318	6	3	3	858	851	5	5	3	872	868	7	7	3	157	144

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
-8	8	3	85	85	-2	10	3	148	127	0	13	3	282	277	2	1	4	885	842	3	3	4	120	115
-7	8	3	354	346	-1	10	3	67	65	1	13	3	283	245	3	1	4	351	336	4	3	4	535	534
-6	8	3	543	543	0	10	3	83	79	2	13	3	82	63	4	1	4	701	702	5	3	4	522	515
-5	8	3	450	444	1	10	3	518	517	3	13	3	114	120	5	1	4	544	533	6	3	4	113	104
-4	8	3	147	142	2	10	3	707	700	-3	14	3	188	178	6	1	4	94	90	7	3	4	84	77
-3	8	3	532	551	3	10	3	178	190	-2	14	3	85	73	7	1	4	128	128	8	3	4	134	137
-2	8	3	218	220	4	10	3	471	479	-1	14	3	248	240	8	1	4	107	107	-10	4	4	445	428
-1	8	3	327	305	5	10	3	287	293	1	14	3	397	368	-10	2	4	472	421	-9	4	4	295	254
0	8	3	294	304	6	10	3	107	103	2	14	3	349	360	-9	2	4	209	206	-8	4	4	275	270
1	8	3	874	887	-7	11	3	134	127	-10	0	4	182	200	-8	2	4	214	271	-7	4	4	417	419
2	8	3	868	889	-5	11	3	60	71	-9	0	4	198	208	-7	2	4	579	511	-6	4	4	37	47
3	8	3	241	254	-4	11	3	85	85	-8	0	4	337	325	-6	2	4	87	77	-5	4	4	233	238
4	8	3	484	498	-3	11	3	445	444	-7	0	4	620	615	-5	2	4	449	462	-3	4	4	981	1012
5	8	3	470	470	-2	11	3	521	526	-5	0	4	902	929	-4	2	4	182	185	-2	4	4	1317	1334
6	8	3	79	79	-1	11	3	322	323	-4	0	4	189	178	-3	2	4	1024	1029	-1	4	4	922	930
7	8	3	212	211	0	11	3	162	161	-3	0	4	1014	1003	-2	2	4	1378	1423	0	4	4	907	939
-8	9	3	71	74	1	11	3	384	389	-2	0	4	1223	1245	-1	2	4	522	520	1	4	4	953	955
-7	9	3	131	133	2	11	3	175	173	-1	0	4	388	355	0	2	4	1090	1119	2	4	4	109	101
-6	9	3	114	111	3	11	3	290	289	0	0	4	823	817	1	2	4	1083	1098	3	4	4	308	324
-5	9	3	254	238	5	11	3	444	442	1	0	4	589	488	2	2	4	369	342	4	4	4	185	197
-4	9	3	172	158	-6	12	3	303	298	2	0	4	179	186	3	2	4	394	402	5	4	4	524	527
-3	9	3	458	471	-5	12	3	198	195	3	0	4	91	49	4	2	4	288	244	6	4	4	258	240
-2	9	3	795	781	-4	12	3	181	193	4	0	4	728	716	5	2	4	558	584	7	4	4	95	98
-1	9	3	387	383	-3	12	3	318	288	6	0	4	532	505	6	2	4	348	340	8	4	4	228	228
0	9	3	380	384	-2	12	3	104	87	8	0	4	304	287	7	2	4	84	87	-8	5	4	207	205
1	9	3	488	484	-1	12	3	277	285	-9	1	4	180	160	8	2	4	237	236	-6	5	4	88	77
3	9	3	384	373	0	12	3	82	82	-8	1	4	202	200	-9	3	4	198	190	-7	5	4	404	408
4	9	3	128	136	1	12	3	522	517	-7	1	4	823	857	-7	3	4	616	628	-6	5	4	820	834
5	9	3	553	555	2	12	3	593	600	-6	1	4	1114	1193	-6	3	4	785	795	-5	5	4	260	254
6	9	3	517	517	3	12	3	147	150	-5	1	4	561	578	-4	3	4	500	520	-4	5	4	874	888
7	9	3	71	78	4	12	3	228	228	-4	1	4	874	909	-3	3	4	740	783	-3	5	4	879	888
-7	10	3	358	351	-5	13	3	84	81	-3	1	4	1157	1201	-2	3	4	162	172	-2	5	4	260	250
-6	10	3	430	430	-4	13	3	74	64	-2	1	4	467	472	-1	3	4	561	578	-1	5	4	545	544
-5	10	3	270	241	-3	13	3	319	317	-1	1	4	815	808	0	3	4	380	342	0	5	4	143	140
-4	10	3	209	209	-2	13	3	489	485	0	1	4	187	204	1	3	4	1115	1125	1	5	4	783	794
-3	10	3	307	291	-1	13	3	148	147	1	1	4	1003	1074	2	3	4	1207	1243	2	5	4	659	677

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENTUM 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
3	5	4	377	391	5	7	4	497	490	-1	10	4	289	276	-2	14	4	484	442	4	1	5	250	230
4	5	4	542	577	6	7	4	108	122	0	10	4	483	449	-1	14	4	84	85	5	1	5	245	225
5	5	4	396	389	7	7	4	121	118	1	10	4	602	606	0	14	4	334	331	7	1	5	195	194
6	5	4	90	94	-8	8	4	254	244	2	10	4	60	64	-10	0	5	107	95	8	1	5	109	109
7	5	4	108	123	-7	8	4	352	353	3	10	4	250	248	-9	0	5	288	288	-10	2	5	137	131
8	5	4	162	141	-6	8	4	127	137	4	10	4	149	152	-8	0	5	99	97	-9	2	5	231	238
-9	6	4	220	219	-5	8	4	359	361	5	10	4	370	360	-7	0	5	810	822	-8	2	5	103	100
-8	6	4	161	148	-4	8	4	174	167	-6	11	4	431	440	-6	0	5	1044	1072	-7	2	5	443	465
-7	6	4	490	491	-3	8	4	711	709	-5	11	4	205	197	-5	0	5	327	309	-6	2	5	746	800
-6	6	4	187	198	-2	8	4	884	884	-4	11	4	347	334	-4	0	5	654	651	-5	2	5	132	133
-5	6	4	484	464	-1	8	4	197	202	-3	11	4	390	372	-3	0	5	789	749	-4	2	5	827	851
-4	6	4	84	93	0	8	4	582	581	-2	11	4	130	133	-2	0	5	187	146	-3	2	5	1006	1093
-3	6	4	827	888	1	8	4	645	654	-1	11	4	337	339	-1	0	5	441	452	-2	2	5	325	316
-2	6	4	1054	1083	2	8	4	88	95	0	11	4	38	49	0	0	5	212	207	-1	2	5	190	194
-1	6	4	225	224	3	8	4	235	243	1	11	4	482	489	1	0	5	84	83	0	2	5	82	88
0	6	4	844	854	4	8	4	384	374	2	11	4	552	558	2	0	5	294	271	1	2	5	571	584
1	6	4	693	706	5	8	4	469	482	4	11	4	317	314	3	0	5	158	157	2	2	5	471	491
2	6	4	194	197	-7	9	4	433	434	5	11	4	284	287	4	0	5	456	453	3	2	5	93	103
3	6	4	191	176	-6	9	4	637	651	-5	12	4	214	204	5	0	5	380	378	4	2	5	249	244
4	6	4	139	143	-5	9	4	307	307	-4	12	4	127	120	6	0	5	161	170	5	2	5	264	262
5	6	4	362	348	-4	9	4	460	470	-3	12	4	520	516	7	0	5	133	125	6	2	5	215	201
6	6	4	359	365	-3	9	4	768	766	-2	12	4	630	607	8	0	5	221	231	7	2	5	199	218
-9	7	4	110	107	-2	9	4	238	246	-1	12	4	117	117	-10	1	5	367	362	-10	3	5	368	375
-8	7	4	94	91	-1	9	4	264	256	0	12	4	408	408	-9	1	5	183	195	-9	3	5	113	104
-7	7	4	363	371	0	9	4	227	228	1	12	4	472	498	-8	1	5	403	429	-8	3	5	382	381
-6	7	4	814	801	1	9	4	822	804	2	12	4	57	68	-7	1	5	695	735	-7	3	5	415	418
-5	7	4	321	302	2	9	4	675	687	3	12	4	137	130	-6	1	5	312	333	-6	3	5	220	212
-4	7	4	897	896	3	9	4	99	100	4	12	4	153	155	-5	1	5	259	267	-5	3	5	180	180
-3	7	4	874	886	4	9	4	401	488	-4	13	4	304	324	-4	1	5	240	250	-4	3	5	152	158
-2	7	4	127	137	5	9	4	310	311	-3	13	4	375	359	-3	1	5	461	442	-3	3	5	696	707
-1	7	4	388	402	-7	10	4	248	248	-2	13	4	121	109	-2	1	5	741	754	-2	3	5	922	928
0	7	4	313	323	-6	10	4	60	74	-1	13	4	275	271	-1	1	5	368	368	-1	3	5	268	248
1	7	4	743	762	-5	10	4	320	313	0	13	4	113	102	0	1	5	384	390	0	3	5	806	823
2	7	4	723	725	-4	10	4	213	209	1	13	4	399	402	1	1	5	689	676	1	3	5	756	771
3	7	4	193	198	-3	10	4	402	404	2	13	4	379	369	2	1	5	141	129	2	3	5	413	405
4	7	4	364	378	-2	10	4	682	688	3	13	4	130	128	3	1	5	105	114	3	3	5	358	368

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	3	5	267	270	8	5	5	92	97	-7	8	5	363	357	2	10	5	118	107	-1	0	6	419	410
5	3	5	47	43	7	5	5	201	199	-8	8	5	595	592	3	10	5	142	158	0	0	6	108	110
6	3	5	151	147	-9	8	5	144	139	-5	8	5	242	238	4	10	5	194	206	1	0	6	89	80
7	3	5	145	150	-8	8	5	187	201	-4	8	5	444	428	5	10	5	173	170	2	0	6	157	154
-9	4	5	190	192	-7	8	5	384	377	-3	8	5	551	541	-6	11	5	110	111	3	0	6	475	451
-8	4	5	84	94	-6	8	5	571	571	-2	8	5	304	291	-5	11	5	139	139	4	0	6	439	432
-7	4	5	351	351	-5	8	5	90	93	-1	8	5	263	278	-4	11	5	159	152	5	0	6	343	326
-6	4	5	580	593	-4	8	5	617	628	0	8	5	234	220	-3	11	5	253	245	7	0	6	188	181
-5	4	5	174	176	-3	8	5	675	654	1	8	5	274	270	-2	11	5	399	398	-10	1	6	103	121
-4	4	5	673	675	-2	8	5	233	232	2	8	5	94	94	0	11	5	438	427	-9	1	6	93	92
-3	4	5	824	832	-1	8	5	149	150	3	8	5	204	219	1	11	5	273	274	-8	1	6	119	120
-2	4	5	317	308	0	8	5	317	320	4	8	5	340	333	3	11	5	91	95	-7	1	6	277	278
-1	4	5	265	275	1	8	5	389	397	5	8	5	273	287	4	11	5	166	167	-6	1	6	315	314
0	4	5	113	111	2	8	5	274	281	6	8	5	127	128	-5	12	5	117	114	-5	1	6	244	224
1	4	5	585	575	3	8	5	240	255	-9	9	5	262	277	-4	12	5	328	319	-4	1	6	273	250
2	4	5	339	329	4	8	5	344	358	-7	9	5	394	397	-3	12	5	139	129	-3	1	6	382	390
3	4	5	254	267	5	8	5	205	200	-6	9	5	175	191	-2	12	5	45	72	-2	1	6	444	435
4	4	5	213	201	6	8	5	108	98	-5	9	5	231	223	-1	12	5	121	124	-1	1	6	773	789
5	4	5	121	113	7	8	5	173	187	-4	9	5	187	198	0	12	5	88	85	0	1	6	528	511
6	4	5	210	219	-9	7	5	191	196	-3	9	5	285	288	1	12	5	294	310	1	1	6	168	182
7	4	5	158	163	-8	7	5	342	344	-2	9	5	392	380	2	12	5	208	205	2	1	6	349	344
-9	5	5	144	141	-7	7	5	480	481	-1	9	5	212	227	3	12	5	65	79	3	1	6	418	427
-8	5	5	195	204	-6	7	5	63	58	0	9	5	400	405	-3	13	5	344	340	4	1	6	228	219
-7	5	5	473	484	-5	7	5	228	235	1	9	5	224	208	-2	13	5	228	246	5	1	6	68	85
-6	5	5	128	119	-4	7	5	130	119	2	9	5	64	82	-1	13	5	88	90	6	1	6	158	159
-5	5	5	203	203	-3	7	5	620	639	4	9	5	247	248	0	13	5	219	214	7	1	6	315	323
-4	5	5	78	79	-2	7	5	519	521	5	9	5	210	218	1	13	5	319	307	-9	2	6	221	234
-3	5	5	618	629	-1	7	5	180	173	-7	10	5	252	258	-10	0	6	145	201	-7	2	6	251	244
-2	5	5	558	557	0	7	5	334	332	-6	10	5	414	414	-9	0	6	88	70	-6	2	6	234	222
-1	5	5	158	168	1	7	5	448	450	-5	10	5	207	194	-8	0	6	375	390	-5	2	6	248	238
0	5	5	603	627	2	7	5	370	372	-4	10	5	273	267	-7	0	6	295	290	-4	2	6	445	447
1	5	5	590	598	3	7	5	151	154	-3	10	5	498	477	-6	0	6	211	145	-3	2	.	243	239
2	5	5	451	469	4	7	5	41	31	-2	10	5	339	337	-5	0	6	82	92	-2	2	6	172	164
3	5	5	204	200	5	7	5	284	290	-1	10	5	103	114	-4	0	6	345	332	-1	2	6	329	310
4	5	5	341	348	6	7	5	109	108	0	10	5	218	234	-3	0	6	240	249	0	2	6	221	217
5	5	5	137	145	-8	8	5	88	58	1	10	5	364	366	-2	0	6	444	431	1	2	6	145	200

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
2	2	6	358	332	5	4	6	123	129	-5	7	6	90	98	3	9	6	244	245	-1	13	8	103	110
3	2	6	521	516	6	4	6	357	372	-4	7	6	242	246	4	9	6	105	114	0	13	8	100	91
4	2	6	341	338	-9	5	6	51	39	-3	7	6	44	46	-5	10	6	159	162	2	13	8	173	164
5	2	6	111	109	-7	5	6	148	150	-2	7	6	316	324	-4	10	6	98	88	3	13	8	143	153
6	2	6	380	357	-6	5	6	84	92	-1	7	6	470	441	-3	10	6	145	141	-4	14	8	205	204
7	2	6	222	215	-5	5	6	224	233	0	7	6	232	227	-2	10	6	148	140	-3	14	8	141	134
-8	3	6	88	80	-4	5	6	300	302	1	7	6	142	146	-1	10	6	107	113	-2	14	8	42	42
-6	3	6	81	79	-3	5	6	279	285	2	7	6	224	229	-1	10	6	350	384	-1	14	8	81	73
-7	3	6	138	134	-2	5	6	181	185	3	7	6	344	341	0	10	6	143	135	0	14	8	119	105
-6	3	6	147	138	-1	5	6	228	231	4	7	6	194	208	1	10	6	152	142	1	14	8	123	124
-5	3	6	109	109	0	5	6	308	285	5	7	6	127	141	2	10	6	80	71	2	14	8	138	122
-4	3	6	322	323	1	5	6	224	228	6	7	6	105	111	3	10	6	313	323	-3	15	8	71	71
-3	3	6	340	353	2	5	6	372	373	-8	8	6	246	303	4	10	6	196	200	-1	15	8	70	74
-2	3	6	138	139	3	5	6	243	244	-7	8	6	286	289	-5	11	6	168	165	0	15	8	118	117
-1	3	6	503	493	4	5	6	72	82	-6	8	6	161	164	-4	11	6	194	175	-9	0	7	144	137
0	3	6	471	444	5	5	6	171	166	-5	8	6	146	179	-3	11	6	174	179	-8	0	7	344	343
1	3	6	158	162	6	5	6	127	122	-4	8	6	119	122	-2	11	6	19[illegible]	194	-7	0	7	180	180
2	3	6	595	588	-9	6	6	115	104	-3	8	6	118	125	-1	11	6	2[illegible]	247	-6	0	7	452	442
3	3	6	314	310	-8	6	6	149	144	-2	8	6	345	358	0	11	6	259	251	-5	0	7	388	385
4	3	6	101	104	-7	6	6	254	258	-1	8	6	205	198	1	11	6	72	67	-4	0	7	174	171
5	3	6	83	79	-6	6	6	159	155	0	8	6	107	105	2	11	6	232	230	-3	0	7	148	151
6	3	6	147	141	-5	6	6	194	217	1	8	6	92	97	3	11	6	193	192	-2	0	7	95	52
7	3	6	290	302	-4	6	6	414	421	2	8	6	104	103	-4	12	6	138	141	-1	0	7	818	789
-8	4	6	180	187	-3	6	6	138	130	3	8	6	374	348	-3	12	6	193	196	0	0	7	515	489
-7	4	6	217	212	-2	6	6	157	154	4	8	6	279	282	-2	12	6	155	157	1	0	7	144	157
-6	4	6	234	259	-1	6	6	230	236	5	8	6	74	84	-1	12	6	121	136	2	0	7	762	746
-5	4	6	234	242	0	6	6	168	169	-7	9	6	181	156	0	12	6	135	131	3	0	7	771	758
-4	4	6	180	186	1	6	6	282	294	-6	9	6	206	199	1	12	6	61	60	4	0	7	58	58
-3	4	6	356	352	2	6	6	275	264	-5	9	6	128	130	2	12	6	148	151	5	0	7	172	185
-2	4	6	102	111	3	6	6	285	263	-4	9	6	144	130	3	12	6	277	286	6	0	7	182	187
-1	4	6	220	213	4	6	6	425	438	-3	9	6	285	283	4	12	6	177	176	7	0	7	295	292
0	4	6	248	270	5	6	6	97	99	-2	9	6	310	314	-8	13	6	83	80	8	0	7	78	80
1	4	6	79	75	6	6	6	323	334	-1	9	6	388	386	-5	13	6	194	142	-11	1	7	76	86
2	4	6	332	328	-8	7	6	88	88	0	9	6	431	428	-4	13	6	155	160	-9	1	7	224	232
3	4	6	687	682	-7	7	6	225	238	1	9	6	122	128	-3	13	6	57	52	-8	1	7	187	180
4	4	6	348	341	-6	7	6	187	170	2	9	6	284	284	-2	13	6	217	215	-7	1	7	114	111

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
-8	1	7	116	121	-9	3	7	134	133	-7	5	7	181	185	-6	7	7	88	59	0	9	7	196	196
-7	1	7	865	859	-7	3	7	108	113	-6	5	7	41	76	-5	7	7	448	455	1	9	7	257	261
-4	1	7	454	439	-6	3	7	133	137	-5	5	7	477	465	-4	7	7	510	500	2	9	7	79	81
-3	1	7	218	227	-5	3	7	446	446	-4	5	7	440	454	-3	7	7	228	218	3	9	7	304	309
-2	1	7	825	833	-4	3	7	654	632	-3	5	7	98	113	-2	7	7	555	546	4	9	7	195	196
-1	1	7	630	596	-3	3	7	48	32	-2	5	7	588	571	-1	7	7	422	405	5	9	7	115	117
0	1	7	193	195	-2	3	7	787	813	-1	5	7	525	520	0	7	7	143	132	6	9	7	254	267
1	1	7	404	418	-1	3	7	783	743	0	5	7	140	139	1	7	7	300	294	-9	10	7	154	156
2	1	7	66	64	0	3	7	212	211	1	5	7	189	208	2	7	7	54	47	-7	10	7	48	42
3	1	7	433	401	1	3	7	322	297	2	5	7	267	288	3	7	7	460	457	-6	10	7	126	125
4	1	7	420	414	2	3	7	178	172	3	5	7	554	542	4	7	7	275	281	-5	10	7	308	306
5	1	7	182	161	3	3	7	567	581	4	5	7	348	367	5	7	7	116	124	-4	10	7	110	112
6	1	7	373	374	4	3	7	328	331	5	5	7	213	211	6	7	7	421	424	-3	10	7	161	157
7	1	7	208	210	5	3	7	153	153	6	5	7	432	440	-8	8	7	115	102	-1	10	7	452	437
-11	2	7	52	56	6	3	7	390	347	7	5	7	242	241	-6	8	7	243	237	0	10	7	390	396
-10	2	7	106	109	7	3	7	297	270	-10	6	7	88	82	-7	8	7	108	106	1	10	7	145	142
-9	2	7	168	170	-10	4	7	90	93	-9	6	7	182	164	-6	8	7	223	224	2	10	7	434	439
-8	2	7	218	216	-9	4	7	190	192	-8	6	7	197	195	-5	8	7	203	207	3	10	7	244	247
-7	2	7	146	153	-8	4	7	205	199	-7	6	7	72	68	-3	8	7	237	230	5	10	7	40	51
-6	2	7	422	430	-7	4	7	46	52	-6	6	7	386	408	-2	8	7	258	258	-5	11	7	203	221
-5	2	7	470	444	-6	4	7	318	308	-5	6	7	490	422	-1	8	7	484	508	-4	11	7	295	290
-4	2	7	48	48	-5	4	7	328	323	-4	6	7	108	107	0	8	7	408	396	-3	11	7	126	125
-3	2	7	272	270	-4	4	7	198	207	-3	6	7	216	216	1	8	7	168	161	-2	11	7	398	394
-2	2	7	152	152	-3	4	7	228	227	-2	6	7	216	228	2	8	7	528	527	-1	11	7	320	312
-1	2	7	780	805	-2	4	7	48	37	-1	6	7	484	488	3	8	7	342	344	1	11	7	225	213
0	2	7	750	756	-1	4	7	759	780	0	6	7	440	490	4	8	7	93	88	2	11	7	178	143
1	2	7	241	226	0	4	7	572	584	1	6	7	70	74	5	8	7	124	123	3	11	7	312	327
2	2	7	759	758	1	4	7	381	388	2	6	7	600	598	6	8	7	103	95	4	11	7	160	170
3	2	7	451	442	2	4	7	663	686	3	6	7	395	358	-9	9	7	188	194	-8	12	7	202	185
4	2	7	148	138	3	4	7	445	458	4	6	7	74	81	-8	9	7	89	98	-5	12	7	228	218
5	2	7	187	177	4	4	7	111	110	5	6	7	208	201	-6	9	7	74	79	-4	12	7	167	158
6	2	7	102	98	5	4	7	167	168	6	6	7	57	53	-5	9	7	264	255	-3	12	7	62	57
7	2	7	228	233	7	4	7	189	188	7	6	7	242	254	-4	9	7	247	254	-2	12	7	86	85
8	2	7	109	111	-10	5	7	78	80	-9	7	7	188	189	-3	9	7	50	62	-1	12	7	310	317
-11	3	7	61	58	-9	5	7	145	154	-8	7	7	143	145	-2	9	7	323	308	0	12	7	209	211
-10	3	7	78	83	-8	5	7	31	38	-7	7	7	120	127	-1	9	7	423	414	1	12	7	128	121