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

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	12	7	358	355	-5	1	8	375	362	0	3	9	349	365	4	5	8	69	67	-3	9	8	202	213
3	12	7	228	233	-4	1	8	134	142	1	3	9	309	306	5	5	8	133	114	-2	9	8	592	594
-5	13	7	248	239	-3	1	8	438	433	2	3	9	588	585	-9	5	8	285	258	-1	9	8	460	487
-4	13	7	228	225	-2	1	8	61	48	3	3	9	318	315	-8	5	8	79	70	0	9	8	48	40
-3	13	7	70	63	-1	1	8	538	542	4	3	9	84	80	-7	5	8	333	329	1	9	8	239	234
-2	13	7	253	244	0	1	8	588	590	5	3	9	134	123	-5	5	8	468	485	2	9	8	51	39
-1	13	7	180	179	1	1	8	86	79	7	3	9	82	83	-4	5	8	348	344	3	9	8	104	113
0	13	7	63	69	2	1	8	519	517	-10	4	8	258	261	-3	5	8	66	70	4	9	8	81	89
1	13	7	108	111	3	1	8	397	400	-8	4	8	239	230	-2	5	8	488	482	5	9	8	179	174
2	13	7	81	81	4	1	8	112	120	-7	4	8	241	278	-1	5	8	514	519	-8	9	8	199	192
-3	14	7	97	92	6	1	8	88	102	-6	4	8	146	139	0	5	8	104	101	-7	9	8	36	45
-2	14	7	51	62	7	1	8	105	100	-5	4	8	402	394	1	5	8	228	223	-6	9	8	336	334
-1	14	7	185	185	-10	2	8	228	232	-4	4	8	673	671	3	5	8	285	301	-5	9	8	585	574
0	14	7	148	153	-9	2	8	241	249	-3	4	8	80	84	4	5	8	147	199	-4	9	8	56	52
-10	0	8	236	245	-8	2	8	74	74	-2	4	8	702	697	5	6	8	188	191	-3	9	8	254	255
-9	0	8	417	424	-7	2	8	293	299	-1	4	8	515	515	6	6	8	258	258	-1	9	8	413	410
-8	0	8	115	124	-6	2	8	82	34	0	4	8	74	76	-9	7	8	219	224	0	9	8	202	203
-7	0	8	280	283	-5	2	8	557	563	1	4	8	231	238	-8	7	8	368	367	1	9	8	104	98
-6	0	8	491	486	-4	2	8	641	655	2	4	8	131	131	-7	7	8	96	85	2	9	8	339	344
-4	0	8	383	355	-3	2	8	188	196	3	4	8	333	337	-6	7	8	519	521	3	9	8	230	238
-3	0	8	297	284	-2	2	8	925	925	4	4	8	131	132	-5	7	8	417	420	4	9	8	97	94
-2	0	8	921	913	-1	2	8	880	888	5	4	8	103	105	-4	7	8	118	113	-7	10	8	97	94
-1	0	8	685	680	1	2	8	305	299	6	4	8	272	274	-3	7	8	170	169	-6	10	8	82	87
0	0	8	145	147	2	2	8	138	135	-8	5	8	289	306	-2	7	8	153	160	-5	10	8	288	301
1	0	8	450	444	3	2	8	281	276	-6	5	8	322	330	-1	7	8	311	305	-4	10	8	326	313
2	0	8	148	131	4	2	8	159	161	-7	5	8	88	89	0	7	8	362	361	-3	10	8	157	123
3	0	8	384	367	5	2	8	195	197	-6	5	8	552	554	1	7	8	174	190	-2	10	8	530	535
4	0	8	80	91	6	2	8	248	253	-5	5	8	601	606	2	7	8	448	457	-1	10	8	377	374
5	0	8	201	191	7	2	8	187	187	-4	5	8	108	88	3	7	8	350	354	0	10	8	100	101
6	0	8	274	272	-9	3	8	254	258	-3	5	8	277	268	5	7	8	95	99	1	10	8	158	167
7	0	8	104	105	-8	3	8	313	302	-2	5	8	134	128	6	7	8	105	116	2	10	8	106	108
-10	1	8	78	84	-6	3	8	484	485	-1	5	8	449	457	-9	8	8	272	280	3	10	8	117	128
-9	1	8	242	233	-5	3	8	603	597	0	5	8	303	291	-7	8	8	206	200	4	10	8	53	54
-8	1	8	325	317	-3	3	8	588	589	1	5	8	309	289	-6	8	8	147	135	-6	11	8	302	306
-7	1	8	158	161	-2	3	8	44	32	2	5	8	581	556	-5	8	8	314	321	-5	11	8	304	304
-6	1	8	563	556	-1	3	8	514	509	3	5	8	379	381	-4	8	8	384	370	-4	11	8	47	61

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	11	0	276	270	-9	1	9	320	322	-4	3	9	331	331	2	5	8	59	58	-1	8	9	135	159
-2	11	0	69	73	-8	1	9	87	81	-3	3	9	176	172	3	5	8	81	68	0	8	9	137	115
-1	11	0	328	340	-7	1	9	109	111	-2	3	9	368	368	4	5	8	140	145	1	8	9	170	194
0	11	0	249	247	-6	1	9	81	79	-1	3	9	243	246	5	5	8	124	129	2	8	9	164	175
1	11	0	207	203	-5	1	9	178	169	0	3	9	180	171	-8	6	8	206	215	3	8	9	94	91
2	11	0	285	295	-4	1	9	147	152	1	3	9	61	68	-6	6	8	191	198	4	8	9	55	65
3	11	0	205	210	-3	1	9	210	213	2	3	9	80	78	-7	6	8	168	172	-7	9	9	174	118
-4	12	0	248	246	-2	1	9	481	482	3	3	9	49	48	-6	6	8	340	360	-6	9	9	111	115
-3	12	0	255	256	-1	1	9	404	397	4	3	9	111	112	-5	6	8	383	371	-5	9	9	220	211
-2	12	0	45	46	0	1	9	119	121	5	3	9	141	147	-4	6	8	149	196	-4	9	9	85	87
-1	12	0	354	357	1	1	9	89	88	6	3	9	131	128	-3	6	8	164	164	-3	9	9	148	147
0	12	0	271	276	3	1	9	82	88	-9	4	9	195	192	-2	6	8	45	47	-2	9	9	336	334
1	12	0	91	86	4	1	9	187	197	-8	4	9	272	279	-1	6	8	132	127	-1	9	9	239	244
2	12	0	152	143	5	1	9	190	191	-6	4	9	444	441	0	6	8	52	50	0	9	9	66	65
-3	13	0	132	135	-10	2	9	100	104	-5	4	9	455	460	1	6	8	173	176	2	9	9	62	70
-1	13	0	161	160	-9	2	9	215	222	-4	4	9	138	127	2	6	8	278	272	3	9	9	114	116
0	13	0	188	185	-8	2	9	207	202	-3	4	9	119	126	3	6	8	87	85	-8	10	9	295	299
-10	0	9	113	113	-7	2	9	131	129	-2	4	9	47	48	4	6	8	41	45	-5	10	9	207	203
-9	0	9	236	227	-6	2	9	403	418	-1	4	9	75	83	5	6	8	52	61	-4	10	9	98	97
-8	0	9	205	201	-5	2	9	476	475	0	4	9	139	134	-7	7	8	158	158	-3	10	9	174	178
-7	0	9	54	57	-4	2	9	85	88	1	4	9	221	228	-6	7	8	125	116	-1	10	9	138	150
-6	0	9	360	352	-3	2	9	127	121	2	4	9	224	224	-5	7	8	89	87	0	10	9	77	75
-5	0	9	219	225	-2	2	9	114	114	3	4	9	173	144	-4	7	8	227	227	1	10	9	116	129
-4	0	9	92	99	0	2	9	58	52	4	4	9	100	95	-3	7	8	141	154	2	10	9	139	138
-3	0	9	235	248	1	2	9	220	214	5	4	9	84	87	-2	7	8	360	373	3	10	9	111	119
-2	0	9	83	92	2	2	9	214	215	-8	5	9	219	231	-1	7	8	317	335	-5	11	9	165	174
-1	0	9	178	184	3	2	9	92	78	-7	5	9	59	55	0	7	8	102	92	-4	11	9	129	132
0	0	9	159	159	4	2	9	104	102	-6	5	9	251	265	1	7	8	81	81	-3	11	9	153	151
1	0	9	197	193	5	2	9	81	89	-5	5	9	134	148	2	7	8	72	58	-2	11	9	275	288
2	0	9	257	254	-10	3	9	213	212	-4	5	9	283	277	4	7	8	148	143	-1	11	9	246	247
3	0	9	119	125	-9	3	9	245	241	-3	5	9	229	237	-8	8	8	188	190	0	11	9	98	98
4	0	9	76	63	-8	3	9	74	74	-2	5	9	149	148	-7	8	8	119	113	-3	12	9	80	71
5	0	9	179	170	-7	3	9	266	272	-1	5	9	337	338	-6	8	8	307	298	-2	12	9	140	127
6	0	9	87	80	-6	3	9	181	208	0	5	9	234	241	-5	8	8	237	244	-1	12	9	92	81
-10	1	9	308	312	-5	3	9	220	220	1	5	9	95	89	-3	8	8	138	138	0	12	9	102	107
															-2	8	8	91	82	-9	0	10	100	88

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	10	89	76	3	2	10	234	241	-1	5	10	199	194	1	4	10	144	145	-2	1	11	108	109
-5	0	10	199	194	4	2	10	328	321	0	5	10	381	389	2	4	10	48	48	-1	1	11	216	219
-4	0	10	81	75	5	2	10	204	194	1	5	10	226	229	3	4	10	165	166	0	1	11	69	64
-3	0	10	205	199	-6	3	10	71	67	2	5	10	32	27	-6	4	10	78	80	1	1	11	318	313
-2	0	10	156	159	-5	3	10	87	86	3	5	10	162	169	-5	4	10	111	100	2	1	11	90	90
-1	0	10	36	8	-7	3	10	116	122	4	5	10	46	57	-2	4	10	89	86	3	1	11	317	301
0	0	10	113	123	-6	3	10	157	157	-6	6	10	55	41	-1	4	10	111	102	-6	2	11	255	262
1	0	10	182	176	-5	3	10	119	126	-7	6	10	60	54	0	4	10	180	193	-7	2	11	250	258
2	0	10	87	88	-4	3	10	104	104	-6	6	10	105	107	1	4	10	109	116	-6	2	11	104	93
3	0	10	242	218	-3	3	10	231	230	-5	6	10	64	72	2	4	10	64	68	-5	2	11	208	218
4	0	10	450	428	-2	3	10	108	105	-4	6	10	101	103	-4	10	10	134	135	-4	2	11	84	77
5	0	10	107	102	-1	3	10	290	288	-3	6	10	120	116	-3	10	10	188	194	-3	2	11	287	294
-8	1	10	64	48	0	3	10	387	389	-2	6	10	81	78	-2	10	10	92	91	-2	2	11	128	136
-6	1	10	55	60	1	3	10	217	212	-1	6	10	42	50	0	10	10	101	107	-1	2	11	256	255
-7	1	10	134	141	2	3	10	80	89	0	6	10	81	82	1	10	10	132	140	0	2	11	464	454
-6	1	10	87	85	3	3	10	91	99	1	6	10	230	238	-5	11	10	104	109	1	2	11	194	191
-5	1	10	68	64	4	3	10	116	118	2	6	10	170	178	-2	11	10	58	60	2	2	11	170	186
-4	1	10	150	134	-6	4	10	155	154	3	6	10	172	175	-1	11	10	118	121	3	2	11	209	201
-3	1	10	140	152	-7	4	10	57	62	4	6	10	264	274	-6	0	11	248	243	-7	3	11	198	201
-2	1	10	107	99	-6	4	10	93	90	-8	7	10	101	98	-7	0	11	170	167	-6	3	11	178	172
-1	1	10	188	183	-5	4	10	122	117	-6	7	10	83	80	-6	0	11	91	87	-5	3	11	203	211
0	1	10	330	332	-4	4	10	179	182	-5	7	10	89	80	-5	0	11	234	215	-4	3	11	482	489
1	1	10	182	189	-3	4	10	179	177	-4	7	10	76	72	-4	0	11	78	67	-3	3	11	195	200
2	1	10	81	90	-2	4	10	92	98	-3	7	10	87	89	-3	0	11	220	220	-2	3	11	228	211
3	1	10	141	145	-1	4	10	117	114	-1	7	10	128	133	-2	0	11	150	145	-1	3	11	252	236
4	1	10	138	135	0	4	10	202	207	0	7	10	255	264	-1	0	11	186	180	0	3	11	82	73
5	1	10	224	218	1	4	10	229	237	1	7	10	229	226	0	0	11	423	400	1	3	11	219	214
-8	2	10	142	146	3	4	10	149	148	2	7	10	60	60	1	0	11	159	153	2	3	11	92	87
-6	2	10	63	54	4	4	10	236	240	3	7	10	109	119	2	0	11	242	231	3	3	11	145	136
-4	2	10	225	219	-8	5	10	38	40	-7	8	10	83	81	3	0	11	208	201	-8	4	11	184	186
-3	2	10	188	183	-7	5	10	139	136	-6	8	10	58	64	-6	1	11	70	67	-7	4	11	141	158
-2	2	10	84	84	-6	5	10	185	177	-4	8	10	170	174	-7	1	11	262	288	-6	4	11	78	65
-1	2	10	63	63	-5	5	10	112	121	-3	8	10	191	208	-6	1	11	174	189	-5	4	11	274	239
0	2	10	104	98	-4	5	10	144	154	-2	8	10	124	124	-5	1	11	157	165	-4	4	11	173	103
1	2	10	238	252	-3	5	10	163	171	-1	8	10	49	46	-4	1	11	418	430	-3	4	11	388	370
2	2	10	142	150	-2	5	10	91	91	0	8	10	139	141	-3	1	11	249	263	-2	4	11	180	172

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER PAG 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
-1	4	11	306	305	-2	8	11	218	220	-3	9	11	187	185	2	1	12	117	101	-4	4	12	401	419
0	4	11	494	493	-1	8	11	228	227	-2	9	11	95	105	-7	2	12	216	278	-3	4	12	181	184
1	4	11	249	247	0	8	11	441	448	-1	9	11	184	188	-6	2	12	186	192	-2	4	12	143	134
2	4	11	94	96	1	8	11	237	238	-7	0	12	211	220	-5	2	12	133	171	-1	4	12	216	224
3	4	11	173	156	2	8	11	143	140	-6	0	12	245	253	-4	2	12	406	415	0	4	12	174	110
-7	5	11	134	131	-6	7	11	92	90	-5	0	12	181	187	-3	2	12	162	187	1	4	12	70	74
-6	5	11	110	105	-5	7	11	193	190	-4	0	12	397	400	-2	2	12	142	149	-6	5	12	112	113
-5	5	11	224	231	-4	7	11	284	308	-3	0	12	312	299	-1	2	12	231	211	-5	5	12	203	206
-4	5	11	399	395	-3	7	11	219	199	-2	0	12	89	85	1	2	12	132	130	-4	5	12	85	86
-3	5	11	187	187	-2	7	11	130	121	-1	0	12	253	240	-7	3	12	199	210	-3	5	12	233	238
-2	5	11	183	196	-1	7	11	245	245	1	0	12	139	131	-6	3	12	121	122	-2	5	12	172	183
-1	5	11	335	333	1	7	11	255	258	-7	1	12	203	198	-5	3	12	253	275	-1	5	12	156	148
0	5	11	49	38	-5	8	11	177	186	-6	1	12	142	136	-4	3	12	77	75	0	5	12	285	290
1	5	11	208	220	-4	8	11	59	45	-5	1	12	319	325	-3	3	12	271	227	-5	6	12	125	134
2	5	11	129	135	-3	8	11	200	204	-4	1	12	120	123	-2	3	12	64	67	-4	6	12	319	324
3	5	11	172	167	-2	8	11	181	181	-3	1	12	194	198	-1	3	12	140	133	-3	6	12	187	195
-7	6	11	137	137	-1	8	11	147	142	-2	1	12	171	163	0	3	12	283	282	-2	6	12	199	198
-6	6	11	83	76	0	8	11	318	325	-1	1	12	195	178	1	3	12	188	188	-1	6	12	251	262
-5	6	11	128	132	1	8	11	128	134	0	1	12	339	329	-6	4	12	159	166	-3	7	12	154	160
-4	6	11	87	86	-4	9	11	323	319	1	1	12	118	118	-5	4	12	236	234	-2	7	12	127	126
-3	6	11	254	258																				

RUTHENIUM HYDRIDO CLUSTER $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}PPh)(CO)_8(PMePh_2)$

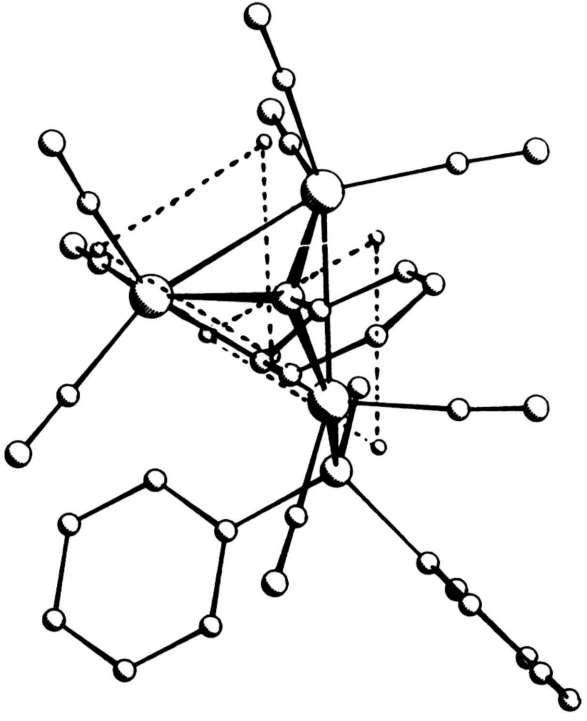

Table 7. Final positional parameters ($\times 10^5$ Ru, $\times 10^4$ for remaining atoms) for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-ebdp})(CO)_7$

Atom	x	y	z
Ru(1)	47615(3)	27714(2)	25678(3)
Ru(2)	31249(3)	30973(2)	23842(3)
Ru(3)	46931(3)	41240(2)	36310(3)
S(1)	4784(1)	4026(1)	2043(1)
P(1)	4469(1)	2225(1)	1123(1)
P(2)	2274(1)	3423(1)	1031(1)
C(1)	6170(5)	[illegible]	2583(4)
C(2)	4523(4)	[illegible]	3213(4)
C(3)	2116(4)	3535(3)	3145(4)
C(4)	2677(4)	[illegible]	2253(4)
C(5)	4399(5)	[illegible]	3631(4)
C(6)	6054(5)	[illegible]	4142(4)
C(7)	4008(5)	3917(4)	4680(4)
O(1)	7013(3)	[illegible]	2616(4)
O(2)	4361(4)	[illegible]	3657(3)
O(3)	1531(4)	[illegible]	3624(4)
O(4)	2401(4)	5403(3)	2149(4)
O(5)	4241(5)	[illegible]	3619(4)
O(6)	6546(4)	4740(3)	4457(4)
O(7)	3512(4)	3760(3)	5243(4)
C(8)	3219(4)	3007(3)	746(4)
C(9)	23[illegible](4)	2444(3)	701(4)
C(23)	3279(2)	4442(2)	-31(2)
C(24)	3473(2)	[illegible]	-845(2)
C(25)	2905(2)	4622(2)	-1651(2)
C(26)	2142(2)	[illegible]	-1643(2)
C(27)	1947(2)	3736(2)	-830(2)
C(22)	2515(2)	[illegible]	-24(2)
C(29)	507(3)	4235(2)	911(3)
C(30)	-509(3)	4345(2)	994(3)
C(31)	-1107(3)	3741(2)	1216(3)
C(32)	-683(3)	3027(2)	1356(3)
C(33)	326(3)	2916(2)	1273(3)
C(28)	924(3)	3521(2)	1051(3)
C(11)	5863(3)	3093(2)	273(2)
C(12)	6242(3)	3457(2)	-467(2)
C(13)	5709(3)	3443(2)	-1319(2)
C(14)	4797(3)	3067(2)	-1432(2)
C(15)	4419(3)	2703(2)	-693(2)
C(10)	4952(3)	2716(2)	160(2)
C(17)	4579(2)	705(2)	1535(3)
C(18)	5003(2)	-12(2)	1563(3)
C(19)	5887(2)	-143(2)	1152(3)
C(20)	6347(2)	443(2)	714(3)
C(21)	5923(2)	1161(2)	686(3)
C(16)	5039(2)	1292(2)	1096(3)

Table 8 - Bond Lengths (Å) for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-ebdp})(CO)_7$

Ru(2)	---	Ru(1)	2.865(1)	Ru(3)	---	Ru(1)	2.879(1)
S(1)	---	Ru(1)	2.357(1)	P(1)	---	Ru(1)	2.332(1)
C(1)	---	Ru(1)	1.898(6)	C(2)	---	Ru(1)	1.898(6)
Ru(3)	---	Ru(2)	2.743(1)	S(1)	---	Ru(2)	2.353(1)
P(2)	---	Ru(2)	2.319(1)	C(3)	---	Ru(2)	1.882(6)
C(4)	---	Ru(2)	1.868(6)	S(1)	---	Ru(3)	2.354(1)
C(5)	---	Ru(3)	1.892(7)	C(6)	---	Ru(3)	1.930(6)
C(7)	---	Ru(3)	1.894(7)	C(8)	---	P(1)	1.798(5)
C(10)	---	P(1)	1.820(4)	C(16)	---	P(1)	1.815(4)
C(9)	---	P(2)	1.813(5)	C(22)	---	P(2)	1.823(3)
C(28)	---	P(2)	1.827(4)	O(1)	---	C(1)	1.139(7)
O(2)	---	C(2)	1.138(8)	O(3)	---	C(3)	1.131(8)
O(4)	---	C(4)	1.138(8)	O(5)	---	C(5)	1.134(8)
O(6)	---	C(6)	1.129(8)	O(7)	---	C(7)	1.137(9)
C(9)	---	C(8)	1.356(8)	C(24)	---	C(23)	1.395(5)
C(22)	---	C(23)	1.395(5)	C(25)	---	C(24)	1.395(4)
C(26)	---	C(25)	1.395(5)	C(27)	---	C(26)	1.395(5)
C(22)	---	C(27)	1.395(4)	C(30)	---	C(29)	1.395(5)
C(28)	---	C(29)	1.395(5)	C(31)	---	C(30)	1.395(5)
C(32)	---	C(31)	1.395(5)	C(33)	---	C(32)	1.395(5)
C(28)	---	C(33)	1.395(5)	C(12)	---	C(11)	1.395(5)
C(10)	---	C(11)	1.395(6)	C(13)	---	C(12)	1.395(5)
C(14)	---	C(13)	1.395(6)	C(15)	---	C(14)	1.395(5)
C(10)	---	C(15)	1.395(5)	C(18)	---	C(17)	1.395(5)
C(16)	---	C(17)	1.395(5)	C(19)	---	C(18)	1.395(5)
C(20)	---	C(19)	1.395(5)	C(21)	---	C(20)	1.395(5)
C(16)	---	C(21)	1.395(5)				

Table 9 - Bond Angles (°) for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-ebdp})(CO)_7$

Ru(3)	- Ru(1)	- Ru(2)	57.1(1)	S(1)	- Ru(1)	- Ru(2)	52.6(1)
S(1)	- Ru(1)	- Ru(3)	52.4(1)	P(1)	- Ru(1)	- Ru(2)	96.7(1)
P(1)	- Ru(1)	- Ru(3)	146.4(1)	P(1)	- Ru(1)	- S(1)	95.8(1)
C(1)	- Ru(1)	- Ru(2)	144.1(2)	C(1)	- Ru(1)	- Ru(3)	97.6(2)
C(1)	- Ru(1)	- S(1)	92.3(2)	C(1)	- Ru(1)	- P(1)	93.8(2)
C(2)	- Ru(1)	- Ru(2)	115.3(2)	C(2)	- Ru(1)	- Ru(3)	114.4(2)
C(2)	- Ru(1)	- S(1)	164.7(2)	C(2)	- Ru(1)	- P(1)	95.0(2)
C(2)	- Ru(1)	- C(1)	97.7(2)	Ru(3)	- Ru(2)	- Ru(1)	61.5(1)
S(1)	- Ru(2)	- Ru(1)	52.6(1)	S(1)	- Ru(2)	- Ru(3)	54.3(1)
P(2)	- Ru(2)	- Ru(1)	102.5(1)	P(2)	- Ru(2)	- Ru(3)	159.4(1)
P(2)	- Ru(2)	- S(1)	106.1(1)	C(3)	- Ru(2)	- Ru(1)	111.3(2)
C(3)	- Ru(2)	- Ru(3)	102.0(2)	C(3)	- Ru(2)	- S(1)	154.8(2)
C(3)	- Ru(2)	- P(2)	96.0(2)	C(4)	- Ru(2)	- Ru(1)	146.7(2)
C(4)	- Ru(2)	- Ru(3)	95.8(2)	C(4)	- Ru(2)	- S(1)	97.2(2)
C(4)	- Ru(2)	- P(2)	93.2(2)	C(4)	- Ru(2)	- C(3)	93.5(3)
Ru(2)	- Ru(3)	- Ru(1)	61.3(1)	S(1)	- Ru(3)	- Ru(1)	52.5(1)
S(1)	- Ru(3)	- Ru(2)	54.5(1)	C(5)	- Ru(3)	- Ru(1)	146.5(2)
C(5)	- Ru(3)	- Ru(2)	92.9(2)	C(5)	- Ru(3)	- S(1)	95.7(2)
C(6)	- Ru(3)	- Ru(1)	101.9(2)	C(6)	- Ru(3)	- Ru(2)	153.9(2)
C(6)	- Ru(3)	- S(1)	105.7(2)	C(6)	- Ru(3)	- C(5)	96.8(3)
C(7)	- Ru(3)	- Ru(1)	108.6(2)	C(7)	- Ru(3)	- Ru(2)	96.1(2)
C(7)	- Ru(3)	- S(1)	149.3(2)	C(7)	- Ru(3)	- C(5)	94.3(3)
C(7)	- Ru(3)	- C(6)	101.8(3)	Ru(2)	- S(1)	- Ru(1)	74.8(1)
Ru(3)	- S(1)	- Ru(1)	75.1(1)	Ru(3)	- S(1)	- Ru(2)	71.2(1)
C(8)	- P(1)	- Ru(1)	114.8(2)	C(10)	- P(1)	- Ru(1)	118.1(1)
C(10)	- P(1)	- C(8)	103.5(2)	C(16)	- P(1)	- Ru(1)	111.5(1)
C(16)	- P(1)	- C(8)	100.1(2)	C(16)	- P(1)	- C(10)	104.6(2)
C(9)	- P(2)	- Ru(2)	117.7(2)	C(22)	- P(2)	- Ru(2)	118.7(1)
C(22)	- P(2)	- C(9)	101.8(2)	C(28)	- P(2)	- Ru(2)	112.5(1)
C(28)	- P(2)	- C(9)	101.5(2)	C(28)	- P(2)	- C(22)	102.2(2)
O(1)	- C(1)	- Ru(1)	176.0(5)	O(2)	- C(2)	- Ru(1)	175.1(5)
O(3)	- C(3)	- Ru(2)	177.8(5)	O(4)	- C(4)	- Ru(2)	178.2(5)
O(5)	- C(5)	- Ru(3)	176.1(6)	O(6)	- C(6)	- Ru(3)	176.2(6)
O(7)	- C(7)	- Ru(3)	177.3(6)	C(9)	- C(8)	- P(1)	130.6(4)
C(8)	- C(9)	- P(2)	128.4(4)	Ru(2)	- H(1')	- Ru(1)	104.3(1)
Ru(3)	- H(2')	- Ru(1)	104.6(1)	C(22)	- C(23)	- C(24)	120.0(3)

Table 9- (cont.)

C(25)	- C(24)	- C(23)	120.0(3)	C(26)	- C(25)	- C(24)	120.0(3)
C(27)	- C(26)	- C(25)	120.0(3)	C(22)	- C(27)	- C(26)	120.0(3)
C(23)	- C(22)	- P(2)	120.5(2)	C(27)	- C(22)	- P(2)	119.5(3)
C(27)	- C(22)	- C(23)	120.0(3)	C(28)	- C(29)	- C(30)	120.0(3)
C(31)	- C(30)	- C(29)	120.0(3)	C(32)	- C(31)	- C(30)	120.0(3)
C(33)	- C(32)	- C(31)	120.0(3)	C(28)	- C(33)	- C(32)	120.0(3)
C(29)	- C(28)	- P(2)	118.2(3)	C(33)	- C(28)	- P(2)	121.6(3)
C(33)	- C(28)	- C(29)	120.0(3)	C(10)	- C(11)	- C(12)	120.0(3)
C(13)	- C(12)	- C(11)	120.0(4)	C(14)	- C(13)	- C(12)	120.0(3)
C(15)	- C(14)	- C(13)	120.0(3)	C(10)	- C(15)	- C(14)	120.0(4)
C(11)	- C(10)	- P(1)	119.2(3)	C(15)	- C(10)	- P(1)	120.8(3)
C(15)	- C(10)	- C(11)	120.0(3)	C(16)	- C(17)	- C(18)	120.0(3)
C(19)	- C(18)	- C(17)	120.0(3)	C(20)	- C(19)	- C(18)	120.0(3)
C(21)	- C(20)	- C(19)	120.0(3)	C(16)	- C(21)	- C(20)	120.0(3)
C(17)	- C(16)	- P(1)	118.2(3)	C(21)	- C(16)	- P(1)	121.8(3)
C(21)	- C(16)	- C(17)	120.0(3)				

Table 10 - Final Atomic Coordinates and thermal parameters for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)$-($\mu$-ebdp)(CO)$_7$

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Ru(1)	4761(5(3)	27714(2)	25678(3)	296(2)	337(2)	343(2)	13(2)	16(2)	8(2)
Ru(2)	31249(3)	38073(2)	23842(3)	322(2)	342(2)	313(2)	23(2)	1(2)	10(2)
Ru(3)	46931(3)	41240(2)	36310(3)	429(3)	382(2)	353(2)	58(2)	58(2)	36(2)
S(1)	4784(1)	4026(1)	2043(1)	37(1)	36(1)	38(1)	0(1)	2(1)	4(1)
P(1)	4489(1)	2225(1)	1128(1)	35(1)	33(1)	38(1)	4(1)	2(1)	1(1)
P(2)	2274(1)	3423(1)	1031(1)	31(1)	36(1)	35(1)	1(1)	2(1)	0(1)
O(1)	6170(5)	2688(3)	2588(4)	50(4)	39(3)	54(4)	3(3)	3(3)	3(3)
O(2)	4523(4)	1974(3)	3218(4)	39(3)	47(3)	46(3)	1(3)	5(3)	3(3)
O(3)	2116(4)	3535(3)	3145(4)	45(3)	53(4)	42(3)	4(3)	6(3)	5(3)
O(4)	2677(4)	4800(3)	2253(4)	42(3)	44(3)	50(3)	6(3)	6(3)	3(3)
O(5)	4398(5)	5166(4)	3631(4)	86(5)	51(4)	45(4)	6(3)	19(3)	3(4)
O(6)	6054(5)	4207(3)	4142(4)	59(4)	44(4)	58(4)	6(3)	8(3)	11(3)
O(7)	4008(5)	3917(4)	4680(4)	58(4)	58(4)	47(4)	13(3)	2(3)	4(3)
O(1)	7015(3)	2650(2)	2616(4)	35(3)	93(4)	97(4)	21(3)	3(2)	3(2)
O(2)	4361(4)	1369(3)	3657(3)	88(4)	66(3)	69(3)	24(3)	13(3)	18(3)
O(3)	1931(4)	3378(3)	3624(4)	78(4)	89(4)	81(4)	9(3)	40(3)	4(3)
O(4)	2401(4)	5403(3)	2149(4)	69(3)	47(3)	100(4)	1(3)	8(3)	17(2)
O(5)	4241(5)	5794(3)	3615(4)	148(5)	41(3)	79(4)	9(2)	39(3)	15(3)
O(6)	6846(4)	4249(3)	4457(4)	57(3)	86(4)	122(5)	22(3)	37(3)	19(3)
O(7)	3582(4)	3768(3)	5293(4)	95(4)	106(4)	64(3)	7(3)	30(3)	5(3)
C(8)	3219(4)	2007(3)	746(4)	34(3)	45(3)	56(4)	9(3)	13(3)	2(2)
C(9)	2388(4)	2444(3)	701(4)	44(3)	31(3)	49(3)	10(2)	4(3)	0(2)
C(23)	3279(2)	4443(2)	31(2)	53(1)					
C(24)	3473(2)	4798(2)	845(2)	62(2)					
C(25)	2905(2)	4622(2)	1651(2)	61(2)					
C(26)	2142(2)	4090(2)	1643(2)	62(2)					
C(27)	1947(2)	3736(2)	830(2)	50(1)					
C(22)	2515(2)	3912(2)	24(2)	36(1)					
C(29)	507(3)	4235(2)	911(3)	52(1)					
C(30)	509(3)	4345(2)	994(3)	70(2)					
C(31)	1107(3)	3741(2)	1216(3)	75(2)					
C(32)	689(3)	3027(2)	1356(3)	82(2)					
C(33)	326(3)	2916(2)	1273(3)	64(2)					
C(28)	924(3)	3521(2)	1051(3)	40(1)					
C(11)	5863(3)	3093(2)	273(2)	63(2)					
C(12)	6242(3)	3457(2)	467(2)	78(2)					

Table 10 (cont.)

	x	y	z	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
C(13)	5709(3)	3443(2)	1319(2)	83(2)					
C(14)	4797(3)	3067(2)	1432(2)	82(2)					
C(15)	4419(3)	2703(2)	693(2)	64(2)					
C(10)	4952(3)	2716(2)	160(2)	45(1)					
C(17)	4579(2)	705(2)	1535(3)	54(1)					
C(18)	5003(2)	12(2)	1563(3)	61(2)					
C(19)	5887(2)	143(2)	1102(3)	66(2)					
C(20)	6347(2)	443(2)	714(3)	68(2)					
C(21)	5923(2)	1161(2)	686(3)	52(1)					
C(16)	5039(2)	1282(2)	1096(3)	39(1)					

Table 11 - Hydrogen parameters for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-}ebdp)(CO)_7$

	x	y	z	U(Å)
H(3')	2566(4)	1053(3)	485(4)	110
H(4')	2360(4)	1950(3)	419(4)	110
H(1')	3405	2793	2633	110
H(2')	5048	3038	3617	110
H(23)	3674(2)	4566(2)	529(2)	134(7)
H(24)	4004(2)	5168(2)	850(2)	134(7)
H(25)	3041(2)	4967(2)	2217(2)	134(7)
H(26)	1747(2)	3967(2)	2204(2)	134(7)
H(27)	1416(2)	3366(2)	825(2)	134(7)
H(29)	923(3)	4655(2)	756(3)	134(7)
H(30)	799(3)	4741(2)	596(3)	134(7)
H(31)	1813(3)	3817(2)	1274(3)	134(7)
H(32)	1105(3)	2606(2)	1511(3)	134(7)
H(33)	616(3)	2420(2)	1370(3)	134(7)
H(11)	6234(3)	3102(2)	366(2)	134(7)
H(12)	6875(3)	3718(2)	368(2)	134(7)
H(13)	5972(3)	3696(2)	1834(2)	134(7)
H(14)	4427(3)	3058(2)	2025(2)	134(7)
H(15)	3785(3)	2441(2)	771(2)	134(7)
H(17)	3964(2)	796(2)	1820(3)	134(7)
H(18)	4683(2)	420(2)	1868(3)	134(7)
H(19)	6182(2)	643(2)	1172(3)	134(7)
H(20)	6962(2)	352(2)	420(3)	134(7)
H(21)	6243(2)	1569(2)	381(3)	134(7)

Table 12 - Structure factor listings for $Ru_3(\mu\text{-}H)_2(\mu_3\text{-}S)(\mu\text{-ebdp})(CO)_7$

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	0	0	3021	2972	3	3	0	742	-772	0	6	0	2685	-2647	11	8	0	991	-1022	11	11	0	359	-360
4	0	0	2895	2895	4	3	0	1095	-1064	1	6	0	2129	-2079	12	8	0	152	144	12	11	0	266	297
6	0	0	1308	1309	5	3	0	689	-680	2	6	0	2185	-2165	13	8	0	142	-177	0	12	0	216	-251
8	0	0	744	-709	6	3	0	612	611	3	6	0	638	640	1	9	0	1739	1734	1	12	0	427	392
10	0	0	195	217	7	3	0	714	-697	4	6	0	1449	-1509	4	9	0	1036	-1009	2	12	0	639	752
12	0	0	583	-545	8	3	0	291	223	5	6	0	216	219	5	9	0	1722	1721	4	12	0	306	323
14	0	0	922	-849	11	3	0	579	-597	6	6	0	940	-1032	6	9	0	637	-654	5	12	0	167	-159
1	1	0	1776	1817	12	3	0	506	447	7	6	0	249	-247	7	9	0	267	261	6	12	0	450	-449
2	1	0	1157	1149	13	3	0	497	492	8	6	0	179	172	8	9	0	641	-718	8	12	0	493	500
3	1	0	159	-159	14	3	0	213	-146	9	6	0	1139	1168	9	9	0	282	334	9	12	0	230	-246
4	1	0	1643	1665	0	4	0	2006	-1933	11	6	0	225	191	10	9	0	723	-792	10	12	0	373	-399
5	1	0	1638	1592	1	4	0	583	558	12	6	0	460	470	12	9	0	127	-114	12	12	0	152	-164
6	1	0	2234	2251	2	4	0	1421	1393	14	6	0	612	630	13	9	0	344	-352	13	12	0	134	-101
7	1	0	431	399	3	4	0	624	602	15	6	0	533	551	14	9	0	245	-256	1	13	0	680	844
8	1	0	2123	2217	4	4	0	591	615	1	7	0	2251	-2244	0	10	0	1089	1097	2	13	0	232	-232
9	1	0	378	-370	6	4	0	406	-414	2	7	0	1292	-1273	1	10	0	912	886	3	13	0	1324	1280
10	1	0	495	504	7	4	0	613	615	3	7	0	1744	-1770	2	10	0	1440	1376	4	13	0	259	258
11	1	0	345	375	8	4	0	774	803	4	7	0	337	-321	3	10	0	161	-205	7	13	0	617	631
12	1	0	1195	1147	10	4	0	597	-595	5	7	0	940	-960	4	10	0	720	657	9	13	0	152	168
13	1	0	691	-706	13	4	0	128	-112	6	7	0	1114	-1160	5	10	0	469	-487	10	13	0	233	234
15	1	0	207	-194	14	4	0	253	278	7	7	0	649	-649	6	10	0	735	737	11	13	0	235	-250
0	2	0	962	-945	15	4	0	270	-255	8	7	0	960	-988	7	10	0	655	667	0	14	0	503	486
1	2	0	2441	2453	1	5	0	1264	-1235	9	7	0	669	-668	8	10	0	249	-223	1	14	0	225	-211
2	2	0	1378	-1394	2	5	0	429	435	10	7	0	426	-404	9	10	0	393	-366	2	14	0	1016	1026
3	2	0	954	-925	3	5	0	540	556	12	7	0	788	-767	11	10	0	425	434	3	14	0	387	405
4	2	0	751	-787	4	5	0	1296	1298	15	7	0	558	482	13	10	0	475	493	4	14	0	317	308
5	2	0	563	558	5	5	0	838	-875	0	8	0	1356	1315	14	10	0	343	-369	5	14	0	1024	1045
6	2	0	314	-286	6	5	0	999	1037	1	8	0	228	179	1	11	0	354	398	5	14	0	124	21
7	2	0	1936	2032	7	5	0	279	267	2	8	0	960	-986	2	11	0	1291	1236	7	14	0	316	306
9	2	0	639	587	8	5	0	680	672	3	8	0	1190	-1147	3	11	0	558	564	8	14	0	1091	1112
11	2	0	1092	1122	9	5	0	541	529	5	8	0	1429	-1414	4	11	0	915	-894	10	14	0	177	-176
12	2	0	144	153	10	5	0	1063	1064	6	8	0	473	524	5	11	0	405	-424	11	14	0	375	368
13	2	0	726	723	11	5	0	141	-139	7	8	0	1556	-1582	6	11	0	696	691	1	15	0	880	-880
15	2	0	165	138	12	5	0	119	-85	8	8	0	374	-280	7	11	0	151	-183	3	15	0	887	-861
1	3	0	893	-856	13	5	0	514	552	9	8	0	1178	-1191	8	11	0	148	-165	4	15	0	1241	1234
2	3	0	697	660	14	5	0	588	578	10	8	0	725	878	9	11	0	113	-144	5	15	0	383	-358

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	15	0	373	361	-9	0	1	1434	1397	13	1	1	746	-782	-6	3	1	1222	-1173	12	4	1	404	403
7	15	0	394	-376	-7	0	1	2402	2349	-15	2	1	219	-217	-5	3	1	264	255	14	4	1	195	-207
8	15	0	434	435	-5	0	1	2842	2825	-14	2	1	720	-696	-4	3	1	882	821	15	4	1	192	-212
10	15	0	675	715	-3	0	1	1502	1442	-13	2	1	484	-451	-3	3	1	1703	-1669	-15	5	1	488	-486
0	16	0	640	-627	-1	0	1	2566	2885	-12	2	1	243	-248	-2	3	1	140	125	-14	5	1	414	413
1	16	0	320	-324	1	0	1	2113	-2121	-11	2	1	384	-346	-1	3	1	518	487	-12	5	1	340	-307
2	16	0	1058	-1093	3	0	1	475	-455	-9	2	1	842	-869	0	3	1	1049	1031	-11	5	1	807	-822
4	16	0	452	-472	5	0	1	2574	-2483	-8	2	1	744	-675	1	3	1	390	385	-10	5	1	192	187
5	16	0	200	197	7	0	1	3422	-3375	-7	2	1	765	-782	2	3	1	712	689	-9	5	1	310	287
8	16	0	493	-498	9	0	1	1052	-991	-6	2	1	918	951	3	3	1	460	429	-8	5	1	423	-428
9	16	0	291	262	11	0	1	1484	-1468	-5	2	1	294	-269	4	3	1	310	-355	-7	5	1	492	441
10	16	0	294	304	13	0	1	892	-1045	-4	2	1	652	613	5	3	1	1725	1740	-6	5	1	1214	-1234
1	17	0	224	-217	15	0	1	381	-358	-3	2	1	295	300	6	3	1	613	579	-5	5	1	156	120
3	17	0	849	-850	-15	1	1	319	-318	-1	2	1	920	934	11	3	1	551	550	-4	5	1	780	785
4	17	0	530	-517	-13	1	1	918	-920	0	2	1	3451	3410	12	3	1	527	544	-3	5	1	2020	1983
5	17	0	274	264	-12	1	1	742	757	1	2	1	1209	1191	-15	4	1	482	435	-2	5	1	2514	-2517
6	17	0	343	-358	-10	1	1	220	205	2	2	1	479	454	-14	4	1	197	-192	-1	5	1	2002	1995
7	17	0	256	-256	-9	1	1	339	-352	3	2	1	1284	1256	-13	4	1	136	86	0	5	1	1102	-1053
8	17	0	425	-437	-8	1	1	857	851	4	2	1	1584	1604	-12	4	1	274	-275	1	5	1	494	508
0	18	0	417	404	-7	1	1	506	456	5	2	1	308	284	-10	4	1	403	-434	2	5	1	427	401
3	18	0	279	-275	-6	1	1	1763	1701	6	2	1	1865	2043	-9	4	1	1040	1059	4	5	1	484	-427
4	18	0	175	165	-5	1	1	2838	2848	7	2	1	516	468	-8	4	1	945	-937	5	5	1	505	537
5	18	0	419	-414	-3	1	1	125	-124	8	2	1	226	-228	-7	4	1	579	-542	6	5	1	955	1012
6	18	0	289	274	-2	1	1	2801	2747	9	2	1	170	149	-5	4	1	550	501	7	5	1	294	305
1	19	0	152	-158	-1	1	1	3516	3773	10	2	1	1023	1038	-4	4	1	724	-704	9	5	1	661	657
2	19	0	337	334	0	1	1	458	442	11	2	1	935	949	-3	4	1	187	187	10	5	1	256	-279
4	19	0	225	-256	1	1	1	2352	2242	12	2	1	253	-275	-2	4	1	1600	1759	11	5	1	377	-416
6	19	0	307	257	3	1	1	2306	2314	14	2	1	437	-455	-1	4	1	3144	-3192	12	5	1	505	500
0	20	0	566	-577	4	1	1	425	-387	15	2	1	223	248	1	4	1	190	234	14	5	1	273	-277
1	20	0	295	323	5	1	1	1803	1751	-13	3	1	328	-323	2	4	1	262	297	15	5	1	264	-265
2	20	0	275	-265	6	1	1	796	-846	-12	3	1	804	-794	3	4	1	205	-224	-14	6	1	232	238
3	20	0	331	-317	7	1	1	290	310	-11	3	1	185	198	4	4	1	698	697	-13	6	1	317	-332
5	20	0	164	-197	8	1	1	684	-703	-10	3	1	164	186	5	4	1	725	-780	-11	6	1	715	-705
-15	0	1	234	-273	10	1	1	171	-178	-9	3	1	890	-898	6	4	1	476	460	-9	6	1	854	-865
-13	0	1	754	720	11	1	1	458	471	-8	3	1	471	-469	7	4	1	824	872	-8	6	1	920	914
-11	0	1	733	667	12	1	1	1033	-1035	-7	3	1	843	-879	9	4	1	911	-919	-7	6	1	1730	-1763

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
-6	6	1	314	-321	4	7	1	1057	1045	-11	9	1	369	501	2	10	1	297	-284	-4	12	1	168	-182
-5	6	1	1243	-1252	5	7	1	1719	-1734	-10	9	1	341	394	3	10	1	206	-211	-3	12	1	659	680
-4	6	1	104	-102	6	7	1	834	844	-9	9	1	170	157	4	10	1	151	98	-2	12	1	246	-255
-3	6	1	1245	-1311	7	7	1	164	-157	-8	9	1	560	555	5	10	1	205	-190	0	12	1	325	-146
-2	6	1	2177	2150	8	7	1	1078	1101	-6	9	1	1057	1055	6	10	1	542	515	1	12	1	1098	1063
-1	6	1	453	-431	10	7	1	1196	1330	-5	9	1	479	460	7	10	1	780	-763	2	12	1	214	-251
0	6	1	776	-747	11	7	1	505	-534	-4	9	1	270	-262	8	10	1	312	-290	3	12	1	234	-231
1	6	1	1394	-1330	12	7	1	491	552	-3	9	1	771	-754	9	10	1	475	-465	4	12	1	303	-317
2	6	1	1501	1451	13	7	1	374	393	-2	9	1	1340	1364	10	10	1	331	359	5	12	1	218	-81
3	6	1	1163	1093	-14	8	1	833	812	-1	9	1	673	-697	11	10	1	515	-538	6	12	1	303	-337
4	6	1	804	759	-13	8	1	370	343	0	9	1	639	643	13	10	1	443	-483	9	12	1	576	-547
5	6	1	991	935	-12	8	1	229	243	1	9	1	749	-745	-12	11	1	369	-351	12	12	1	234	228
7	6	1	1147	1212	-11	8	1	378	365	2	9	1	758	-731	-11	11	1	353	297	-11	13	1	279	-263
8	6	1	923	884	-10	8	1	145	224	3	9	1	542	-537	-10	11	1	181	202	-10	13	1	479	560
9	6	1	586	1024	-9	8	1	531	-515	4	9	1	309	444	-9	11	1	122	-158	-9	13	1	478	460
10	6	1	306	-331	-8	8	1	518	537	5	9	1	674	-662	-8	11	1	277	276	-7	13	1	306	-321
11	6	1	514	653	-7	8	1	699	695	6	9	1	1667	-1649	-5	11	1	667	679	-6	13	1	230	263
13	6	1	763	817	-6	8	1	756	-730	7	9	1	453	-444	-4	11	1	656	643	-5	13	1	224	-213
-15	7	1	209	210	-5	8	1	490	-493	8	9	1	673	-688	-3	11	1	582	-550	-4	13	1	1352	1331
-14	7	1	491	-480	-4	8	1	896	-870	9	9	1	339	-340	-2	11	1	404	391	0	13	1	444	410
-13	7	1	606	643	-3	8	1	1130	-1040	10	9	1	551	-592	-1	11	1	516	476	2	13	1	707	721
-12	7	1	148	-57	-2	8	1	1564	-1539	11	9	1	265	268	0	11	1	542	564	3	13	1	473	511
-11	7	1	128	-129	-1	8	1	397	402	12	9	1	925	-999	1	11	1	776	769	4	13	1	692	-689
-10	7	1	978	-995	0	8	1	2406	-2356	14	9	1	335	-371	2	11	1	222	223	7	13	1	492	489
-9	7	1	189	226	1	8	1	1204	-1176	-11	10	1	399	380	3	11	1	639	-656	8	13	1	829	-828
-8	7	1	746	-756	2	8	1	2194	-2179	-10	10	1	467	480	4	11	1	273	-275	9	13	1	181	191
-7	7	1	244	216	3	8	1	120	-105	-9	10	1	176	172	6	11	1	930	942	10	13	1	767	-798
-6	7	1	521	-525	4	8	1	1834	-1786	-7	10	1	1240	1263	7	11	1	559	-558	12	13	1	207	-197
-5	7	1	1711	-1665	6	8	1	1699	-1757	-6	10	1	1125	1062	11	11	1	262	259	-11	14	1	181	207
-4	7	1	1351	-1385	7	8	1	594	-594	-5	10	1	305	301	12	11	1	271	285	-10	14	1	428	-445
-3	7	1	217	203	8	8	1	958	-1006	-4	10	1	382	389	-13	12	1	207	-196	-9	14	1	425	437
-2	7	1	128	107	9	8	1	686	591	-3	10	1	685	698	-11	12	1	214	-219	-8	14	1	518	550
-1	7	1	2371	-2246	10	8	1	299	-354	-2	10	1	256	-239	-8	12	1	546	543	-7	14	1	157	152
0	7	1	108	-1099	14	8	1	578	572	-1	10	1	501	445	-6	12	1	427	-347	-6	14	1	307	-289
1	7	1	224	-2205	-14	9	1	365	351	0	10	1	1035	1030	-7	12	1	493	-507	-5	14	1	504	495
3	7	1	3[illegible]	-327	-12	9	1	470	491	1	10	1	392	291	-5	12	1	774	793	-4	14	1	528	522

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RUTHENIUM DPPET CLUSTER

H	K	L	10FO	10FC
-3	14	1	423	436
-2	14	1	651	663
0	14	1	729	722
1	14	1	149	237
2	14	1	1331	1309
3	14	1	563	-551
4	14	1	1116	1155
5	14	1	449	-510
6	14	1	541	570
8	14	1	451	466
9	14	1	404	-380
-11	15	1	560	-556
-10	15	1	245	-245
-8	15	1	344	-367
-7	15	1	226	163
-6	15	1	274	-277
-4	15	1	453	-436
-3	15	1	1405	1431
-2	15	1	254	-256
-1	15	1	742	726
1	15	1	479	484
2	15	1	241	-272
3	15	1	1131	1133
4	15	1	585	594
7	15	1	691	701
8	15	1	617	641
9	15	1	284	309
10	15	1	449	443
11	15	1	295	-298
-10	16	1	311	-300
-9	16	1	974	-1022
-7	16	1	302	-316
-6	16	1	463	-495
-5	16	1	1035	-1078
-3	16	1	660	-706
0	16	1	268	-286
1	16	1	230	-232
2	16	1	194	158
3	16	1	507	472
5	16	1	620	656
6	16	1	203	-213
7	16	1	344	290
9	16	1	721	717
10	16	1	171	-165
-7	17	1	326	-327
-5	17	1	337	-416
-4	17	1	800	-825
-3	17	1	568	-594
-1	17	1	614	-630
0	17	1	180	-198
1	17	1	555	-553
2	17	1	392	-412
3	17	1	655	-652
4	17	1	539	528
6	17	1	284	-265
7	17	1	247	-240
8	17	1	333	326
8	18	1	256	-273
-7	18	1	321	358
1	18	1	202	216
-4	18	1	193	-184
-3	18	1	307	-269
-2	18	1	343	-358
-1	18	1	160	-153
1	18	1	832	-851
2	18	1	645	-642
3	18	1	213	-174
4	18	1	260	-275
7	18	1	308	-287
8	18	1	258	-252
-5	19	1	570	595
-1	19	1	405	377
0	19	1	225	-237
1	19	1	142	208
3	19	1	384	-367
4	19	1	223	-226
5	19	1	208	202
-2	20	1	359	-355
1	20	1	248	238
2	20	1	395	-415
3	20	1	183	150
-1	21	1	429	-425
1	21	1	643	-640
-14	0	2	995	983
-12	0	2	480	449
-10	0	2	208	189
-8	0	2	890	848
-6	0	2	744	-759
-4	0	2	739	-683
-2	0	2	405	-435
0	0	2	2401	-2528
2	0	2	1160	-1175
4	0	2	4133	-4064
6	0	2	2442	-2507
10	0	2	1412	-1417
12	0	2	325	350
-14	1	2	271	274
-12	1	2	420	411
-12	1	2	813	798
-10	1	2	564	567
-8	1	2	617	628
-6	1	2	992	953
-7	1	2	1322	1263
-6	1	2	2219	2167
-5	1	2	581	-529
-4	1	2	414	373
-3	1	2	533	508
-2	1	2	1382	1448
-1	1	2	775	-811
0	1	2	306	-335
1	1	2	1014	-997
2	1	2	709	-698
3	1	2	734	-746
4	1	2	285	-287
5	1	2	1611	-1602
6	1	2	934	-953
7	1	2	767	-766
8	1	2	511	-500
9	1	2	480	-474
10	1	2	511	-500
11	1	2	590	-590
12	1	2	1065	-1092
13	1	2	354	344
14	1	2	410	-425
-15	2	2	459	-464
-14	2	2	321	-330
-13	2	2	285	276
-12	2	2	323	-331
-11	2	2	339	333
-9	2	2	205	-197
-8	2	2	459	446
-7	2	2	1700	1637
-6	2	2	1015	1049
-5	2	2	161	172
-4	2	2	440	461
-3	2	2	1046	1044
-2	2	2	2133	2144
-1	2	2	3420	3416
0	2	2	903	915
1	2	2	1198	1169
2	2	2	206	196
3	2	2	1678	1635
4	2	2	432	-422
5	2	2	345	331
6	2	2	572	563
7	2	2	1700	-1675
8	2	2	251	-264
9	2	2	458	467
10	2	2	203	177
11	2	2	1048	-1147
12	2	2	196	-208
13	2	2	560	-568
15	2	2	249	-239
-14	3	2	759	-762
-13	3	2	368	-368
-11	3	2	411	405
-10	3	2	1038	-987
-9	3	2	136	-174
-8	3	2	681	-677
-6	3	2	651	558
-5	3	2	1879	1799
-4	3	2	557	-542
-3	3	2	165	-113
-2	3	2	1147	1151
-1	3	2	4094	4078
0	3	2	1277	1274
1	3	2	788	805
2	3	2	715	-707
4	3	2	2207	2232
5	3	2	1026	1052
6	3	2	299	-288
7	3	2	211	222
8	3	2	325	300
10	3	2	326	361
11	3	2	420	448
14	3	2	516	-574
13	3	2	342	-310
14	3	2	249	242
-15	4	2	265	-249
-14	4	2	220	-191