

5.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)(H2O)]·[RE(CO)3(TMEN)F3]

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	1817	-1723	10	3	0	1114	-1013	4	7	0	876	915	-2	1	1	3205	-3618	0	3	1	579	-782
3	0	0	1676	-1809	9	4	0	3273	-3623	5	7	0	1090	1069	-1	1	1	443	-569	1	3	1	1212	-1304
4	0	0	3057	-3201	1	4	0	1047	1107	6	7	0	1462	-1422	0	1	1	1391	2136	2	3	1	356	-430
5	4	0	2396	2087	2	4	0	871	819	7	7	0	574	587	1	1	1	800	-632	3	3	1	1510	1307
6	0	0	2216	2113	4	4	0	2089	1998	8	7	0	1168	-1079	2	1	1	2495	2372	4	3	1	1961	1765
8	0	0	236	200	5	4	0	2319	-2084	10	7	0	1474	1462	3	1	1	1713	-1585	5	3	1	561	-524
9	0	0	3413	-3234	8	4	0	1045	-1042	11	7	0	805	-873	4	1	1	1149	-1091	6	3	1	404	-486
10	0	0	1877	1794	7	4	0	484	446	0	8	0	1233	1162	5	1	1	1446	1395	7	3	1	2037	-1987
1	1	0	543	-582	8	4	0	350	-380	1	8	0	728	-734	6	1	1	252	-221	9	3	1	1871	1680
2	1	0	4040	-3377	10	4	0	709	-845	3	8	0	330	348	7	1	1	1867	1577	10	3	1	870	780
3	1	0	2529	2208	11	4	0	956	-860	4	8	0	746	-725	8	1	1	2009	-1938	-11	4	1	620	-774
4	1	0	1445	1445	1	5	0	1472	1698	5	8	0	775	775	10	1	1	724	697	-10	4	1	1292	1235
5	1	0	807	746	2	5	0	1577	1562	9	8	0	623	-723	-10	2	1	698	650	-9	4	1	591	710
6	1	0	285	270	3	5	0	746	-770	11	8	0	355	343	-9	2	1	3222	-2881	-8	4	1	719	564
7	1	0	3398	-2859	4	5	0	1407	-1485	1	9	0	1118	-1143	-7	2	1	1412	1249	-6	4	1	1688	-1631
8	1	0	222	-244	5	5	0	1264	-1148	2	9	0	396	-398	-5	2	1	2626	2204	-5	4	1	412	379
9	1	0	191	225	7	5	0	2090	2023	4	9	0	779	830	-4	2	1	2679	-2610	-3	4	1	1352	1182
10	1	0	719	586	8	5	0	1056	848	5	9	0	805	827	-3	2	1	1492	-1456	-2	4	1	865	893
0	2	0	1698	-1371	9	5	0	921	-872	6	9	0	488	-548	-2	2	1	1934	2044	-1	4	1	1982	-2177
1	2	0	1338	-1352	10	5	0	1255	-1176	7	9	0	315	-309	-1	2	1	288	316	1	4	1	696	686
2	2	0	972	972	11	5	0	817	-802	8	9	0	452	-475	1	2	1	1186	-1256	2	4	1	734	709
3	2	0	1197	1132	0	6	0	486	502	9	9	0	312	290	2	2	1	3178	-2519	3	4	1	2105	1862
4	2	0	578	-457	1	6	0	1611	1798	0	10	0	210	178	3	2	1	367	-316	4	4	1	1436	-1374
5	2	0	228	-202	2	6	0	860	-934	1	10	0	1118	-1144	4	2	1	1140	-1033	5	4	1	695	-688
6	2	0	405	-514	3	6	0	2858	-2833	2	10	0	788	768	5	2	1	3276	2811	6	4	1	579	-570
7	2	0	456	-368	4	6	0	475	492	3	10	0	1576	1553	6	2	1	911	822	7	4	1	560	497
8	2	0	1245	1048	5	6	0	254	249	4	10	0	683	-689	7	2	1	2581	-2397	8	4	1	2191	2007
9	2	0	408	353	6	6	0	1694	1632	5	10	0	1263	-1270	9	2	1	1860	-1680	9	4	1	378	-361
1	3	0	470	493	7	6	0	262	306	-10	1	1	382	341	10	2	1	1438	1411	10	4	1	693	-698
2	3	0	1974	-1862	8	6	0	1624	-1761	-9	1	1	586	-601	-10	3	1	1033	-926	11	4	1	515	-476
3	3	0	2094	1863	9	6	0	205	-229	-8	1	1	370	-319	-8	3	1	1121	1089	-11	5	1	645	-609
4	3	0	295	-244	10	6	0	569	-527	-7	1	1	2187	-1916	-7	3	1	2059	1879	-10	5	1	311	275
5	3	0	1840	1679	11	6	0	1022	1031	-6	1	1	2174	1928	-6	3	1	929	-490	-9	5	1	603	566
6	3	0	2202	-2018	1	7	0	1507	-1598	-5	1	1	1805	1535	-5	3	1	1893	-1520	-8	5	1	1628	-1536
7	3	0	439	359	2	7	0	960	1039	-4	1	1	333	-312	-3	3	1	708	-687	-7	5	1	1328	1243
8	3	0	491	421	3	7	0	1350	-1323	-3	1	1	1572	1453	-2	3	1	2108	2170	-6	5	1	1013	-878

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(THF)](H2O)3.[RE(CO)3(THF)]3.

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
-4	5	1	1185	1269	-10	7	1	897	842	10	8	1	511	538	10	0	2	548	-576	7	2	2	434	228	8	2	2	503	-938
-3	5	1	2536	-2522	-8	7	1	1258	-1291	11	8	1	306	337	-10	1	2	732	707	8	2	2	286	-245	9	2	2	266	-245
-2	5	1	641	612	-7	7	1	750	-776	-8	8	1	1343	1443	-9	1	2	2161	-1879	9	2	2	651	761	-10	3	2	157	-86
-1	5	1	190	-185	-6	7	1	250	262	-6	8	1	354	358	-6	1	2	918	-632	-10	3	2	1171	-1060	-8	3	2	1505	1331
0	5	1	863	-950	-5	7	1	1689	1774	-5	8	1	752	-784	-7	1	2	1223	-1074	-7	3	2	1476	1299	-6	3	2	14155	3632
1	5	1	2307	2382	-4	7	1	602	642	-4	8	1	1293	-1381	-6	1	2	1407	1299	-4	3	2	545	-697	-2	1	2	2013	-2197
2	5	1	1284	-1349	-3	7	1	599	-585	-3	8	1	1470	1460	-5	1	2	4155	3632	-4	3	2	270	-221	0	1	2	3744	3521
3	5	1	904	430	-2	7	1	1312	-1399	-1	8	1	878	844	-4	1	2	545	-697	-4	3	2	2608	2443	-3	3	2	1476	-1561
4	5	1	468	536	-1	7	1	772	-809	-1	9	1	1963	-1942	-2	1	2	2013	-2197	-2	3	2	1476	-1561	-1	3	2	2243	2239
5	5	1	1809	-1473	0	7	1	656	750	2	9	1	862	837	0	1	2	3744	3521	-1	3	2	2608	2443	0	3	2	2243	2239
6	5	1	1381	1360	1	7	1	1363	1446	3	9	1	169	146	2	1	2	270	-221	4	3	2	1476	-1561	1	3	2	1369	-1617
7	5	1	1287	-1172	2	7	1	341	337	4	9	1	443	456	3	1	2	243	-216	-3	3	2	2608	2443	2	3	2	1476	-1561
8	5	1	425	461	3	7	1	1459	-1428	5	9	1	726	772	4	1	2	1771	-1784	-2	3	2	1476	-1561	3	3	2	1369	-1617
10	5	1	1899	-1546	4	7	1	1128	-1160	6	9	1	1382	-1506	5	1	2	2099	1940	-1	3	2	2608	2443	4	3	2	1476	-1561
11	5	1	1312	1318	5	7	1	1138	1112	7	10	1	571	-886	6	1	2	656	896	0	3	2	2243	2239	5	3	2	1369	-1617
-10	6	1	597	-628	6	7	1	846	926	-1	10	1	700	-688	7	1	2	1198	1199	1	3	2	636	-514	6	3	2	1288	-1264
-9	6	1	1477	1491	7	7	1	846	1030	0	10	1	137	30	8	1	2	470	-421	4	3	2	1288	-1264	7	3	2	1918	1696
-8	6	1	838	-840	8	7	1	846	-817	1	10	1	179	-210	9	1	2	2488	-2372	5	3	2	1261	-1185	8	3	2	1152	591
-6	6	1	1078	-1091	11	7	1	391	419	2	10	1	215	220	-10	1	2	864	767	6	3	2	1918	1696	9	3	2	1152	591
-4	6	1	1305	1325	-11	6	1	1231	844	3	10	1	378	436	-9	2	2	760	-684	7	3	2	1152	591	10	3	2	1312	1268
-3	6	1	899	902	-10	6	1	1135	-1132	4	10	1	278	-324	-8	2	2	369	-497	8	3	2	1152	591	-11	4	2	1379	-1188
-2	6	1	1215	-1297	-9	6	1	275	-324	-10	0	2	278	-324	-7	2	2	636	-681	6	3	2	1152	591	-10	4	2	1312	1268
-1	6	1	604	686	-8	6	1	636	-744	-9	0	2	1997	2843	-6	2	2	699	629	5	3	2	1918	1696	-9	4	2	1312	1268
0	6	1	2037	-2218	-7	6	1	681	716	-8	0	2	229	-218	-5	2	2	1578	1543	-8	4	2	1312	1268	-7	4	2	1312	1268
1	6	1	792	832	-6	6	1	1817	1878	-7	0	2	4052	-3610	-6	2	2	775	-697	-7	4	2	1312	1268	-6	4	2	1312	1268
2	6	1	1221	1246	-5	6	1	668	-721	-6	0	2	715	-845	-5	2	2	534	490	-6	4	2	1312	1268	-5	4	2	1312	1268
3	6	1	529	-620	-3	6	1	1684	-1638	-4	0	2	2788	2712	-4	2	2	743	683	-5	4	2	1312	1268	-4	4	2	1312	1268
4	6	1	663	698	-2	6	1	500	-545	-3	0	2	1613	1610	-3	2	2	202	258	-4	4	2	1312	1268	-3	4	2	1312	1268
5	6	1	1401	-1388	-1	6	1	2436	2454	-2	0	2	1746	-2113	-2	2	2	1340	1116	-3	4	2	1312	1268	-2	4	2	1312	1268
6	6	1	691	-686	0	6	1	238	248	-1	0	2	2013	2052	0	2	2	564	-576	-2	4	2	1312	1268	-1	4	2	1312	1268
7	6	1	1491	1456	2	6	1	771	-791	0	0	2	2647	-2205	1	2	2	1264	-1284	0	4	2	1312	1268	0	4	2	1312	1268
8	6	1	628	-604	3	6	1	1652	-1654	1	0	2	1278	-1171	2	2	2	1178	-1177	1	4	2	1312	1268	1	4	2	1312	1268
9	6	1	1064	1068	4	6	1	1322	1388	2	0	2	1898	-1895	3	2	2	1342	-1077	2	4	2	1312	1268	2	4	2	1312	1268
10	6	1	494	-492	5	6	1	687	661	3	0	2	3828	-3610	4	2	2	1461	1490	3	4	2	1312	1268	3	4	2	1312	1268
11	6	1	1020	-992	6	6	1	588	583	4	0	2	748	-576	5	2	2	840	773	4	4	2	1312	1268	4	4	2	1312	1268
-11	7	1	663	701	8	6	1	1609	-1639	5	0	2	194	-172	6	2	2	490	496	5	4	2	1312	1268	5	4	2	1312	1268

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)(H2O)]·RE(CO)3(TMEN)F3.

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
6	4	2	1401	1311	-1	6	2	2237	-2411	-8	8	2	424	412	5	10	2	734	766	8	2	3	592	-586
7	4	2	3113	-2811	-1	6	2	1529	1546	-8	8	2	268	-233	-9	1	3	2265	2076	9	2	3	1674	-1469
8	4	2	268	305	2	6	2	385	433	-8	8	2	368	405	-8	1	3	661	-575	-9	3	3	1934	-1870
9	4	2	125	-111	3	6	2	1265	1187	-3	8	2	634	606	-7	1	3	626	-667	-8	3	3	443	-454
10	4	2	362	319	4	6	2	1972	-2073	-2	8	2	615	-869	-6	1	3	1079	-935	-7	3	3	762	785
11	4	2	1944	1820	5	6	2	1159	-1201	-1	8	2	714	671	-5	1	3	2364	-2159	-6	3	3	785	835
-11	5	2	1305	-1358	6	6	2	1061	879	0	8	2	658	-650	-4	1	3	2581	2516	-5	3	3	1924	1830
-10	5	2	473	-450	7	6	2	352	333	2	8	2	876	850	-3	1	3	168	173	-4	3	3	2452	-2576
-9	5	2	1188	1121	8	6	2	1800	1698	3	8	2	1139	-1175	-2	1	3	394	408	-3	3	3	1270	-1233
-8	5	2	1148	1112	9	6	2	748	-701	4	8	2	282	303	-1	1	3	557	689	-2	3	3	1077	-1157
-7	5	2	855	-845	10	6	2	1554	-1536	6	8	2	447	-354	0	1	3	2756	-3051	-1	3	3	1388	1589
-6	5	2	1301	-1267	-11	7	2	223	-188	7	8	2	773	827	1	1	3	1275	1213	0	3	3	3184	3300
-5	5	2	1558	-1590	-9	7	2	380	438	-8	9	2	774	-839	2	1	3	1128	1052	1	3	3	519	478
-4	5	2	484	452	-8	7	2	1822	-1779	-7	9	2	259	249	4	1	3	1397	1392	2	3	3	2853	-2467
-3	5	2	995	1067	-7	7	2	746	775	-6	9	2	361	355	5	1	3	3183	-2968	3	3	3	2372	-2116
-2	5	2	1745	1899	-6	7	2	334	332	-5	9	2	428	472	7	1	3	1248	1176	4	3	3	1487	-1456
-1	5	2	177	160	-5	7	2	396	-385	-4	9	2	205	280	8	1	3	408	-420	5	3	3	2926	2537
0	5	2	1915	-2091	-4	7	2	1465	1618	-3	9	2	1080	-1027	9	1	3	1833	1604	6	3	3	1385	1240
1	5	2	921	-966	-3	7	2	2037	-2125	-2	9	2	763	-752	-10	1	3	882	-820	7	3	3	678	-625
2	5	2	510	547	-1	7	2	852	843	-1	9	2	357	369	-10	2	3	327	293	8	3	3	1200	-1076
3	5	2	1971	1870	0	7	2	910	-928	0	9	2	479	462	-9	2	3	469	476	9	3	3	1526	-1481
4	5	2	1112	1040	1	7	2	2011	2059	1	9	2	924	938	-8	2	3	1159	-979	-10	3	3	918	832
5	5	2	1158	-1071	2	7	2	786	-801	2	9	2	448	-453	-7	2	3	3874	-1366	-10	4	3	1268	-1174
6	5	2	1402	-1347	3	7	2	997	-954	3	9	2	828	-861	-6	2	3	2575	2294	-8	4	3	1409	1292
7	5	2	518	-463	4	7	2	705	787	4	9	2	335	-321	-5	2	3	1694	1449	-7	4	3	588	508
8	5	2	888	862	5	7	2	921	-812	6	9	2	891	920	-3	2	3	1851	1905	-6	4	3	642	618
9	5	2	1668	1839	6	7	2	1617	1574	7	9	2	261	287	-2	2	3	3565	-3926	-5	4	3	1330	-1267
10	5	2	989	-917	7	7	2	217	-170	8	9	2	472	-546	-1	2	3	124	-89	-4	4	3	1316	-1378
-11	6	2	483	-472	8	7	2	1251	-1238	-6	10	2	1400	1418	0	2	3	1172	1264	-3	4	3	1504	1456
-10	6	2	1833	1743	9	7	2	602	612	-5	10	2	1029	-1077	1	2	3	7326	2076	-2	4	3	404	362
-9	6	2	450	435	10	7	2	1161	-1164	-4	10	2	825	-937	2	2	3	3005	2887	-1	4	3	551	609
-8	6	2	760	-632	11	7	2	732	761	-3	10	2	461	-445	3	2	3	2690	-2463	0	4	3	385	-385
-7	6	2	508	-512	-11	8	2	589	577	-1	10	2	1815	1775	4	2	3	1775	-1662	1	4	3	1923	-1840
-6	6	2	1808	-1748	-10	8	2	362	-391	5	10	2	921	-962	5	2	3	420	378	2	4	3	130	144
-5	6	2	1850	1841	-9	8	2	532	504	6	10	2	1021	-1032	6	2	3	582	-571	3	4	3	741	666
-4	6	2	988	1087	-7	8	2	760	-745	7	10	2	1464	1525	7	2	3	3588	3390	4	4	3	1878	1848

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)](TMEN)[H2O].[RE(CO)](TMEN)F.

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	4	3	838	-851	3	6	3	1600	1458	1	8	3	2052	2147	-5	0	4	2759	-2427	-8	2	4	1312	-1140
6	4	3	1860	-1655	4	6	3	378	367	2	8	3	275	-246	-4	0	4	752	672	-7	2	4	224	242
7	4	3	673	-649	5	6	3	438	-364	3	8	3	144	138	-3	0	4	615	-617	-6	2	4	229	203
8	4	3	688	816	6	6	3	758	772	4	8	3	1332	-1454	-2	0	4	884	1188	-5	2	4	768	776
10	4	3	1558	1459	7	6	3	1748	-1662	5	8	3	918	-985	-1	0	4	197	-185	-4	2	4	711	733
11	4	3	420	-414	9	6	3	681	750	6	8	3	1465	1482	0	0	4	3048	-3247	-3	2	4	1088	-1138
-10	5	3	1004	969	11	6	3	802	858	8	8	3	677	785	1	0	4	1003	1139	-2	2	4	285	-307
-8	5	3	988	-893	-11	7	3	778	-783	9	8	3	455	-466	2	0	4	1866	-2691	0	2	4	205	233
-7	5	3	1180	1146	-10	7	3	455	489	10	8	3	1505	-1603	3	0	4	2765	2708	1	2	4	1577	1315
-6	5	3	326	-273	-9	7	3	387	894	-9	9	3	151	200	4	0	4	778	996	2	2	4	490	-488
-5	5	3	873	-931	-8	7	3	772	748	-8	9	3	880	-1174	5	0	4	2432	-2466	3	2	4	217	-148
-4	5	3	1411	1529	-7	7	3	621	-867	-7	9	3	562	470	6	0	4	758	684	4	2	4	721	-765
-3	5	3	1222	-1355	-6	7	3	1080	-1173	-6	9	3	1277	1304	7	0	4	1760	-1808	5	2	4	484	-470
-2	5	3	887	866	-5	7	3	344	-378	-5	9	3	288	-353	9	0	4	2993	3602	6	2	4	1402	1492
-1	5	3	433	439	-4	7	3	638	711	-4	9	3	495	502	10	0	4	1372	-1355	8	2	4	226	-205
0	5	3	1684	-1760	-3	7	3	1484	1428	-3	9	3	1605	-1960	-9	1	4	2223	2001	-10	2	4	646	-588
1	5	3	1372	1331	-2	7	3	428	391	-2	9	3	525	-481	-8	1	4	363	-408	-9	3	4	1005	-905
2	5	3	950	-884	-1	7	3	1236	-1247	-1	9	3	1668	1648	-7	1	4	2131	-2610	-8	3	4	1618	1555
3	5	3	406	334	0	7	3	993	-1070	0	9	3	213	-219	-6	1	4	401	-366	-6	3	4	535	-525
4	5	3	1552	1348	2	7	3	1129	1140	1	9	3	1044	1089	-5	1	4	1773	-1614	-7	3	4	547	-533
5	5	3	1421	-1432	3	7	3	884	833	2	9	3	538	-585	-4	1	4	2051	1893	-6	3	4	1256	1266
6	5	3	1428	1320	5	7	3	1284	-1254	3	9	3	1310	-1427	-3	1	4	1174	1148	-5	3	4	2178	-2162
7	5	3	386	-356	6	7	3	935	-934	4	9	3	613	880	-2	1	4	418	-518	-4	3	4	1830	2076
8	5	3	397	-379	8	7	3	1130	1101	6	9	3	652	874	-1	1	4	154	162	-3	3	4	669	784
9	5	3	1907	1637	9	7	3	648	564	-5	10	3	342	-360	0	1	4	2063	-2230	-2	3	4	1662	-1906
10	5	3	435	431	11	7	3	873	-889	-4	10	3	285	-317	2	1	4	2385	2486	-1	3	4	1853	1755
-11	6	3	877	-849	-10	6	3	1452	1441	-3	10	3	363	357	3	1	4	924	-861	0	3	4	1522	-1476
-7	6	3	1536	1559	-8	6	3	1392	-1391	-1	10	3	362	356	4	1	4	237	275	1	3	4	868	794
-6	6	3	1171	-1167	-7	6	3	233	-196	1	10	3	482	-485	5	1	4	2049	-1691	2	3	4	1849	1883
-5	6	3	274	-251	-6	6	3	847	-186	2	10	3	244	-186	6	1	4	713	-647	3	3	4	1608	-1604
-4	6	3	741	-723	-5	6	3	1545	1631	3	10	3	282	-247	7	1	4	2206	2178	4	3	4	1345	1245
-3	6	3	1757	1822	-4	6	3	1218	1301	-10	0	4	771	-754	8	1	4	231	297	5	3	4	1197	-1146
-2	6	3	324	348	-3	6	3	1281	-1229	-9	0	4	2078	1840	9	1	4	867	620	6	3	4	561	-595
-1	6	3	634	-605	-2	6	3	319	-286	-8	0	4	156	191	10	1	4	1291	-1280	7	3	4	2014	1833
0	6	3	348	-339	-1	6	3	1701	-1642	-7	0	4	3304	3024	-10	2	4	419	480	8	3	4	1163	-1122
1	6	3	1651	-1662	0	6	3	408	418	-6	0	4	2730	-2358	-9	2	4	277	-178	9	3	4	721	690

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)(H2O)]·[RE(CO)3(TMEN)F]·

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
-11	4	4	1788	1848	8	5	4	210	243	3	7	4	1931	1852	4	9	4	781	-843	1	2	5	1086	1068
-10	4	4	607	564	7	5	4	1525	1338	4	7	4	1825	1699	5	9	4	473	-483	2	2	5	702	585
-9	4	4	1173	-1120	8	5	4	1074	-946	6	7	4	822	582	-5	10	4	713	712	3	2	5	1316	1236
-8	4	4	589	536	10	6	4	1183	1152	7	7	4	689	-637	-4	10	4	1116	1120	4	2	5	1789	1707
-7	4	4	2207	-2249	11	5	4	1146	1144	8	7	4	1619	1602	-3	10	4	1807	-1514	5	2	5	3060	-3014
-6	4	4	1454	1429	-10	6	4	982	-895	9	7	4	815	-843	-2	10	4	588	-547	7	2	5	291	265
-5	4	4	1766	1801	-9	6	4	183	206	10	7	4	532	-603	1	10	4	1542	1606	8	2	5	262	240
-4	4	4	1076	-1252	-8	6	4	2138	2175	11	7	4	266	233	2	10	4	817	-844	9	2	5	2512	2488
-3	4	4	716	745	-7	6	4	385	-427	-11	8	4	555	-568	3	10	4	497	-536	10	2	5	1135	-1115
-2	4	4	2541	-2773	-6	6	4	606	-606	-8	8	4	373	426	-8	1	5	1078	-276	-10	3	5	646	629
0	4	4	2483	2442	-4	6	4	1238	-1344	-6	6	4	522	-573	-7	1	5	2233	2205	-9	3	5	865	751
1	4	4	227	202	-3	6	4	1826	1861	-7	6	4	537	504	-6	1	5	1467	-1344	-8	3	5	797	-823
2	4	4	1306	1136	-2	6	4	550	583	-6	8	4	345	-280	-5	1	5	431	455	-7	3	5	2463	-2517
3	4	4	1984	-1748	-1	6	4	159	-186	-5	8	4	325	-296	-4	1	5	774	-845	-6	3	5	458	446
4	4	4	1481	-1338	0	6	4	786	-778	-4	8	4	668	678	-3	1	5	717	-857	-5	3	5	869	970
5	4	4	1951	1774	1	6	4	1817	1732	-3	8	4	635	-586	-2	1	5	947	1136	-4	3	5	1561	1628
6	4	4	424	-428	2	6	4	1354	1351	-2	8	4	677	642	0	1	5	239	219	-3	3	5	801	953
7	4	4	1502	1422	3	6	4	1061	1071	0	8	4	404	-404	1	1	5	1240	-1242	-2	3	5	2092	-2329
8	4	4	472	-421	4	6	4	673	556	1	8	4	787	749	2	1	5	2453	-2506	-1	3	5	1559	-1587
-10	5	4	915	823	5	6	4	547	564	2	8	4	452	-488	3	1	5	2800	2586	0	3	5	495	-473
-9	5	4	809	-751	6	6	4	2244	-2165	3	8	4	272	257	4	1	5	458	-503	1	3	5	2608	2449
-8	5	4	1090	-1066	7	6	4	700	702	4	8	4	434	399	5	1	5	837	836	2	3	5	2646	2540
-7	5	4	241	-268	8	6	4	214	267	5	8	4	831	-842	6	1	5	1013	955	3	3	5	1387	-1170
-6	5	4	1226	1290	9	6	4	1213	1189	6	8	4	468	451	7	1	5	2283	-2340	4	3	5	1651	-1588
-5	5	4	745	757	10	6	4	924	-949	7	8	4	556	-565	8	1	5	415	353	5	3	5	1029	-865
-4	5	4	405	384	-11	7	4	418	-466	8	8	4	535	-547	9	1	5	333	258	6	3	5	179	-173
-3	5	4	1922	-2134	-10	7	4	1215	1252	-7	9	4	529	-572	-10	2	5	338	-232	7	3	5	2334	2205
-2	5	4	751	-716	-9	7	4	426	-451	-6	9	4	623	-650	-9	2	5	2729	2759	8	3	5	303	288
-1	5	4	724	699	-8	7	4	452	473	-5	9	4	391	460	-8	2	5	676	-578	9	3	5	838	-501
0	5	4	1289	1428	-7	7	4	1676	-1720	-4	9	4	626	608	-7	2	5	854	848	10	3	5	1369	-1282
1	5	4	1150	1222	-6	7	4	1258	1302	-3	9	4	352	367	-6	2	5	1346	-1741	-11	4	5	285	261
2	5	4	585	-580	-5	7	4	354	-384	-2	9	4	1144	-1088	-5	2	5	2851	-2870	-9	4	5	403	-406
3	5	4	2597	-2346	-4	7	4	525	470	-3	7	4	221	-177	-4	2	5	2213	2404	-8	4	5	1537	-1475
4	5	4	342	-270	-2	7	4	843	870	-1	7	4	263	302	-3	2	5	536	517	-7	4	5	824	798
5	5	4	907	853	-1	7	4	2173	-2135	0	7	4	747	778	-2	2	5	1366	1570	-6	4	5	1027	1057
6	5	4	1864	1643	0	7	4	684	679	3	9	4	504	526	0	2	5	3763	-3882	-5	4	5	283	253

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

$$[\text{RE}(\text{CO})_3(\text{THF})_2(\text{H}_2\text{O})], [\text{RE}(\text{CO})_3(\text{THF})_2\text{F}],$$

PAGE 6

[illegible]

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)(H2O)], [RE(CO)3(TMEN)F3]

PAGE 7

H	K	L	0FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	4	8	90	2714	-8	8	8	786	-831	-8	8	8	847	844	10	1	7	776	805	6	3	7	884	-835
-4	4	8	1	678	-7	8	8	746	748	-5	8	8	309	314	-9	2	7	2134	-2175	7	3	7	851	-594
-2	4	8	0	-967	-6	8	8	1759	1754	-4	8	8	711	-837	-8	2	7	837	814	8	3	7	866	891
-1	4	8	2	244	-5	8	8	898	-892	-2	8	8	429	360	-7	2	7	1584	1606	9	3	7	1263	1306
0	4	8	2	-2566	-3	8	8	1355	-1340	-1	8	8	617	-868	-6	2	7	310	-234	10	3	7	373	-378
1	4	8	1583	1417	-1	8	8	1965	1923	0	8	8	938	880	-5	2	7	341	371	-11	4	7	204	-224
2	4	8	1772	1679	0	8	8	167	75	3	8	8	447	456	-4	2	7	1717	-1840	-10	4	7	1222	1226
3	4	8	267	-243	1	8	8	204	183	4	8	8	580	-598	-3	2	7	865	-854	-8	4	7	238	-242
4	4	8	577	643	2	8	8	1288	-1274	5	8	8	660	541	-2	2	7	1880	2028	-7	4	7	723	-688
5	4	8	2412	-2201	3	8	8	1400	-1710	7	8	8	349	-319	-1	2	7	519	-614	-6	4	7	880	-1021
6	4	8	231	-207	4	8	8	1454	1481	-5	8	8	573	-554	0	2	7	1850	2188	-5	4	7	837	887
7	4	8	1886	1886	5	8	8	541	554	-3	8	8	641	618	1	2	7	1985	-1882	-4	4	7	514	573
10	4	8	1090	-1110	6	8	8	681	655	-2	8	8	578	544	2	2	7	2398	-2375	-3	4	7	448	453
11	4	8	1072	-1059	8	8	8	1574	-1534	-1	9	8	495	477	3	2	7	1848	1765	-1	4	7	1648	-1646
-11	5	8	894	848	10	8	8	238	280	0	9	8	850	-542	4	2	7	458	-438	0	4	7	476	360
-10	5	8	858	847	11	8	8	610	500	1	9	8	824	-921	5	2	7	1285	1181	1	4	7	716	651
-9	5	8	491	-853	-11	7	8	519	487	3	9	8	353	333	6	2	7	702	635	3	4	7	1061	924
-8	5	8	1111	-1189	-6	7	8	878	-849	4	9	8	812	790	7	2	7	2688	-2679	4	4	7	1304	-1363
-7	5	8	1087	-1128	-5	7	8	1279	1239	-9	1	7	1082	-1036	8	2	7	320	311	5	4	7	833	-745
-6	5	8	847	1010	-7	7	8	860	-831	-8	1	7	528	488	9	2	7	275	-303	6	4	7	421	426
-5	5	8	1260	1267	-6	7	8	827	838	-7	1	7	1288	-1281	10	2	7	1326	1293	7	4	7	302	237
-4	5	8	710	784	-5	7	8	824	-789	-6	1	7	900	940	-10	3	7	235	-222	8	4	7	1128	1110
-3	5	8	869	-775	-4	7	8	987	-1608	-5	1	7	1305	1477	-9	3	7	1307	1374	9	4	7	896	-586
-2	5	8	1967	-1977	-3	7	8	1440	1326	-4	1	7	886	-739	-8	3	7	927	800	10	4	7	837	-864
-1	5	8	474	-472	-2	7	8	420	-398	-3	1	7	241	257	-7	3	7	800	1009	-11	5	7	710	-750
0	5	8	1540	1457	-1	7	8	870	807	-2	1	7	1238	-1483	-6	3	7	1387	-1586	-10	5	7	228	228
1	5	8	1462	1325	0	7	8	364	-363	0	1	7	1465	1561	-5	3	7	1778	-1087	-9	5	7	562	598
2	5	8	676	603	1	7	8	1695	-1580	1	1	7	802	-801	-4	3	7	505	653	-8	5	7	1217	-1306
3	5	8	1850	-1637	2	7	8	1333	1297	2	1	7	788	763	-3	3	7	447	848	-7	5	7	988	991
4	5	8	1910	-1420	3	7	8	888	-824	3	1	7	1335	-1374	-2	3	7	1489	1566	-6	5	7	303	-273
5	5	8	961	873	4	7	8	402	408	4	1	7	1187	-1189	-1	3	7	867	-870	-5	5	7	236	-205
6	5	8	1360	1311	5	7	8	951	978	5	1	7	1739	1745	0	3	7	1844	-1927	-4	5	7	990	1034
7	5	8	249	-269	6	7	8	1615	-1630	6	1	7	848	-527	2	3	7	866	829	-3	5	7	1827	-1714
8	5	8	1158	-1147	7	7	8	638	612	7	1	7	980	959	3	3	7	1965	1845	-2	5	7	646	679
9	5	8	348	-817	-10	8	8	460	469	8	1	7	483	-455	4	3	7	1096	1042	-1	5	7	330	307
-10	6	8	870	-884	-9	8	8	643	-706	9	1	7	1329	-1363	5	3	7	1607	-1531	0	5	7	682	-834

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)(H2O)], [RE(CO)3(TMEN)F],

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
1	5	7	1725	1655	-5	7	7	722	709	-6	0	8	1389	1434	-6	2	8	299	336	-1	4	8	602	-656
2	5	7	1007	-828	-3	7	7	894	-858	-5	0	8	844	925	-5	2	8	584	-561	0	4	8	316	-263
4	5	7	417	387	-2	7	7	702	-692	-4	0	8	874	974	-3	2	8	549	612	1	4	8	546	-439
5	5	7	1674	-1473	0	7	7	1067	1030	-3	0	8	286	308	-1	2	8	305	372	2	4	8	1986	-1879
6	5	7	1155	1084	1	7	7	863	881	-2	0	8	2439	-2622	0	2	8	564	-555	3	4	8	1959	1794
7	5	7	569	-547	2	7	7	518	-453	-1	0	8	258	287	1	2	8	868	-926	4	4	8	644	510
8	5	7	428	-368	3	7	7	933	-909	0	0	8	462	499	4	2	8	1133	1083	7	4	8	1961	-1959
9	5	7	814	862	4	7	7	360	-360	1	0	8	617	879	6	2	8	562	-548	8	4	8	580	805
10	5	7	1071	-1084	5	7	7	582	584	2	0	8	3112	3270	8	2	8	318	-323	8	4	8	446	818
-11	5	7	811	878	6	7	7	654	633	3	0	8	2262	-2453	9	2	8	441	420	11	4	8	895	965
-11	6	7	482	549	7	7	7	380	342	4	0	8	1341	-1356	10	2	8	278	300	-11	5	8	503	-590
-9	6	7	773	791	8	7	7	672	-646	7	0	8	2286	2487	-10	3	8	385	433	-9	5	8	1113	1212
-8	6	7	388	-411	-7	6	7	523	462	8	0	8	605	-605	-9	3	8	1401	-1573	-8	5	8	517	525
-7	6	7	782	-767	-6	6	7	1284	1236	-9	0	8	607	-651	-8	3	8	906	875	-7	5	8	747	-817
-6	6	7	454	408	-5	6	7	1088	-1018	-9	1	8	1805	-1703	-7	3	8	306	-313	-6	5	8	1307	-1345
-5	6	7	565	-555	-4	6	7	508	-513	-7	1	8	425	477	-5	3	8	879	850	-5	5	8	786	-728
-4	6	7	1003	1018	-3	6	7	383	-363	-6	1	8	1110	1319	-4	3	8	1546	-1724	-4	5	8	1355	1386
-3	6	7	311	245	-1	6	7	1862	1845	-5	1	8	1000	1183	-3	3	8	718	722	-3	5	8	1213	1150
-2	6	7	1146	-1087	0	6	7	550	-556	-4	1	8	1317	-1630	-2	3	8	251	-296	-2	5	8	386	450
-1	6	7	179	187	1	6	7	600	-637	-3	1	8	578	-608	-1	3	8	917	-1001	-1	5	8	841	-803
0	6	7	1058	-1020	2	6	7	402	-417	-2	1	8	466	-529	0	3	8	1971	1959	0	5	8	1645	-1569
1	6	7	556	465	3	6	7	855	-801	-1	1	8	560	594	1	3	8	1250	-1517	2	5	8	1284	1257
2	6	7	1401	1353	4	6	7	1751	1817	0	1	8	2218	2512	4	3	8	1231	-1178	3	5	8	1255	1121
3	6	7	1146	-1104	5	6	7	569	572	1	1	8	988	-985	5	3	8	1717	1676	5	5	8	1572	-1504
4	6	7	446	432	6	6	7	483	-492	2	1	8	1452	1515	6	3	8	473	-472	6	5	8	430	-432
5	6	7	876	-666	-6	6	7	264	-219	3	1	8	410	-540	8	3	8	449	443	8	5	8	845	872
6	6	7	284	-306	-8	6	7	307	-300	4	1	8	628	-591	9	3	8	1459	-1479	9	5	8	819	753
7	6	7	1187	1188	-4	6	7	702	-704	5	1	8	2307	2357	10	3	8	579	716	10	5	8	511	-555
8	6	7	616	-576	-3	6	7	1472	1376	6	1	8	387	401	-11	4	8	1407	-1520	-10	6	8	1222	-1463
9	6	7	323	313	-1	6	7	342	-334	7	1	8	661	-653	-9	4	8	378	-384	-8	6	8	1136	-1110
-11	7	7	613	593	1	9	7	1321	-1316	8	1	8	444	-451	-8	6	8	830	690	-7	6	8	275	-237
-10	7	7	203	226	2	9	7	1122	1154	9	1	8	983	-1040	-7	4	8	1524	1596	-6	6	8	570	-585
-9	7	7	514	-483	3	9	7	491	498	-10	2	8	1009	1062	-6	4	8	1377	-1442	-5	6	8	1438	1427
-8	7	7	707	-771	-9	0	8	585	603	-10	2	8	534	-503	-8	4	8	565	-558	-4	6	8	865	862
-7	7	7	175	-178	-8	0	8	580	-529	-9	2	8	521	525	-3	4	8	744	-675	-3	6	8	594	-604
-6	7	7	411	823	-7	0	8	2967	-2124	-7	2	8	132	160	-2	4	8	2783	2695	-2	6	8	208	-228

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO)3(TMEN)](H2O)1.1.[RE(CO)3(TMEN)F].

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
-1	6	8	1624	-1551	0	9	8	440	427	-10	3	9	526	-580	-8	5	9	451	457	-2	7	9	464	-393
0	5	8	710	685	-9	1	9	1439	1372	-9	3	9	1104	-1194	-7	8	9	291	-281	-1	7	9	1244	-1197
1	6	8	1818	1423	-8	1	8	641	-590	-8	3	9	518	611	-6	5	9	774	-755	0	7	8	296	-337
2	6	8	403	-382	-7	1	9	665	-728	-7	3	9	1073	1123	-5	5	8	1117	1029	1	7	9	445	413
3	6	8	262	248	-5	1	9	828	-859	-6	3	8	370	364	-4	5	9	593	-552	2	7	9	655	852
4	6	8	1305	-1333	-4	1	9	1765	2004	-5	3	9	189	126	-3	5	9	829	859	3	7	9	216	197
5	6	8	835	-849	-3	1	9	274	281	-4	3	9	1753	-1844	-2	5	9	810	628	4	7	9	750	-774
6	6	8	1333	1262	-2	1	9	610	-637	-3	3	9	669	-721	-1	5	9	1446	-1425	5	7	9	822	-821
7	6	8	436	432	-1	1	9	373	349	-2	3	9	988	868	0	5	9	1016	997	-7	8	9	378	344
8	6	8	617	584	0	1	8	1382	-1486	-1	3	9	597	573	1	5	8	560	-485	-5	8	9	918	871
9	6	8	588	-721	1	1	9	957	1024	0	3	9	1277	1327	3	5	9	1340	1262	-4	8	9	615	559
-10	7	8	431	-470	2	1	9	1391	1539	1	3	9	1311	-1338	4	5	9	1062	-1060	-3	8	9	1670	-1511
-9	7	8	563	536	3	1	9	850	-836	2	3	9	1578	-1582	5	5	9	467	457	-2	8	9	197	-148
-8	7	8	1085	-1072	4	1	9	478	485	4	3	9	316	282	7	5	9	513	-492	-1	8	9	233	-188
-7	7	8	838	603	5	1	9	1772	-1773	5	3	9	1708	1617	6	5	9	941	986	0	8	9	706	670
-6	7	8	814	782	7	1	9	958	1034	7	3	9	1048	-1075	8	5	9	787	-835	1	8	9	1420	1429
-5	7	8	810	-548	9	1	9	782	823	6	3	9	325	-328	-11	6	9	850	-899	2	8	9	969	-1010
-4	7	8	607	588	10	1	9	895	-926	10	3	9	838	863	-9	6	9	288	231	3	8	9	464	-504
-3	7	8	1391	-7280	-9	2	9	702	-658	-11	4	9	272	-275	-7	6	9	788	760	-9	0	10	1731	-1506
-2	7	8	1134	1105	-7	2	9	1318	-1456	-10	4	9	432	-481	-6	6	9	690	-667	-8	0	10	150	75
0	7	8	720	-682	-6	2	9	1503	1635	-9	4	9	311	315	-5	6	9	383	-408	-7	0	10	839	719
1	7	8	1015	993	-5	2	9	1001	1029	-8	4	9	1135	1214	-4	6	9	358	326	-6	0	10	1460	-1674
2	7	8	813	-887	-4	2	9	555	-612	-5	4	9	1238	-1158	-2	6	9	1265	1175	-5	0	10	1381	-1616
3	7	8	698	-851	-3	2	9	308	280	-4	4	9	382	-330	-1	6	9	432	-361	-4	0	10	1422	1547
4	7	8	1072	1088	-2	2	9	2223	-2294	-3	4	9	973	972	0	6	9	810	-747	-2	0	10	1248	1449
5	7	8	568	-567	-1	2	9	695	768	-1	4	9	401	393	2	6	9	788	-782	-1	0	10	537	-512
6	7	8	847	849	0	2	9	1491	1602	0	4	9	258	-278	3	6	9	1080	1022	0	0	10	2192	-2493
-7	8	8	814	-562	1	2	9	304	-269	1	4	9	1303	-1245	5	6	9	762	-773	1	0	10	974	887
-6	8	8	545	500	2	2	9	1374	1406	2	4	9	714	704	7	8	9	763	-772	2	0	10	482	548
-5	8	8	533	457	3	2	9	2485	-2378	3	4	9	616	567	-10	7	9	555	523	3	0	10	1262	1465
-4	8	8	918	-831	4	2	9	1019	-988	4	4	9	543	512	-9	7	9	551	622	4	0	10	661	682
0	8	8	229	-228	5	2	9	1335	1348	6	4	9	1186	-1177	-7	7	9	765	-744	5	0	10	2108	-2316
2	8	8	766	809	7	2	9	1606	1671	9	4	9	432	411	-8	7	9	814	-753	7	0	10	377	-397
3	8	8	557	-560	8	2	9	836	-817	-10	4	9	763	799	-9	7	9	265	240	8	0	10	482	544
-3	8	8	796	-751	9	2	9	1538	-1622	-10	5	9	642	706	-4	7	9	775	802	9	0	10	1808	1800
-1	9	8	663	629	10	2	9	504	584	-9	8	9	544	-556	-3	7	9	731	682	10	0	10	1056	-1176

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [RE(CO)3(TMEN)(H2O)]·[RE(CO)3(TMEN)F].

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	1	10	737	722	-4	3	10	801	803	-4	5	10	1087	-1056	4	7	10	1043	-1125	-8	3	11	652	-669
-8	1	10	752	-854	-3	3	10	530	530	-3	5	10	279	-279	-4	8	10	482	451	-7	3	11	719	-726
-7	2	10	1261	-1369	-2	3	10	1556	-1548	-2	5	10	1207	1082	-3	8	10	350	-284	-6	3	11	892	974
-6	1	10	577	667	-1	3	10	1182	1188	-1	5	10	763	719	-2	8	10	258	255	-5	3	11	909	901
-4	1	10	1256	1450	0	3	10	685	-697	0	5	10	164	51	0	8	10	877	-624	-4	3	11	318	288
-3	1	10	200	213	2	3	10	1326	1356	1	5	10	858	-822	-8	1	11	305	344	-3	3	11	322	-287
-2	1	10	1326	-1436	3	3	10	1116	-1116	2	5	10	1039	-1019	-7	1	11	924	1002	-2	3	11	1621	-1566
-1	1	10	235	-207	4	3	10	687	-515	3	5	10	576	509	-6	1	11	1146	-1234	0	3	11	651	626
0	1	10	283	-250	5	3	10	581	-517	4	5	10	792	809	-3	1	11	192	-190	1	3	11	736	714
1	1	10	1060	1075	6	3	10	335	-301	5	5	10	741	717	-2	1	11	1686	1732	2	3	11	763	776
2	1	10	1141	1264	7	3	10	1237	1235	6	5	10	526	-531	-1	1	11	495	-551	3	3	11	1524	-1443
3	1	10	1376	-1447	8	3	10	984	-931	7	5	10	1005	-1047	0	1	11	548	-600	4	3	11	769	-793
4	1	10	365	-403	9	3	10	399	453	-9	5	10	376	354	1	1	11	187	-225	6	3	11	377	392
5	1	10	816	-734	-11	4	10	618	541	-8	6	10	1253	1187	2	1	11	956	-991	7	3	11	1049	1096
7	1	10	1254	1366	-8	4	10	1054	-1065	-7	6	10	844	-861	3	1	11	1558	1612	6	3	11	262	-270
9	1	10	371	-325	-7	4	10	410	-427	-6	6	10	771	-710	4	1	11	457	453	-10	4	11	467	-440
10	1	10	436	-443	-6	4	10	1026	955	-5	6	10	377	-373	5	1	11	188	-244	-8	4	11	551	-525
-8	2	10	377	-435	-5	4	10	818	784	-4	6	10	455	-420	7	1	11	1308	-1335	-7	4	11	755	744
-7	2	10	281	282	-4	4	10	1458	-1443	-3	6	10	1612	1455	8	1	11	556	611	-6	4	11	670	636
-6	2	10	406	416	-3	4	10	490	491	-2	6	10	523	-501	9	1	11	460	497	-5	4	11	170	-175
-5	2	10	243	262	0	4	10	1111	-1099	-1	6	10	391	-312	-9	2	11	1459	1557	-3	4	11	1241	-1199
-3	2	10	776	-782	1	4	10	2218	2058	2	6	10	984	-920	-8	2	11	714	-737	-1	4	11	867	839
-1	2	10	603	594	2	4	10	859	-780	3	6	10	1257	1236	-7	2	11	350	-314	0	4	11	178	-23
1	2	10	266	248	3	4	10	270	238	4	6	10	838	825	-6	2	11	513	-682	2	4	11	605	-819
2	2	10	444	-455	4	4	10	570	-537	5	6	10	372	-396	-5	2	11	881	-873	3	4	11	457	-464
3	2	10	428	-416	5	4	10	695	-644	6	6	10	190	-203	-4	2	11	2091	2140	4	4	11	811	849
4	2	10	360	347	6	4	10	1356	1391	-3	6	10	1307	-1326	0	2	11	440	420	6	4	11	627	608
6	2	10	638	676	7	4	10	317	-304	-2	7	10	895	-832	2	2	11	283	-320	7	4	11	441	-492
7	2	10	321	-293	8	4	10	285	-260	0	7	10	1142	1035	1	2	11	2008	-2099	-11	5	11	508	451
10	2	10	430	-216	9	4	10	1348	-1450	-13	7	10	452	-435	2	2	11	1386	1396	-10	5	11	471	-626
-10	3	10	404	-351	-11	5	10	475	536	-12	7	10	513	462	3	2	11	801	816	-9	5	11	259	266
-9	3	10	578	629	-10	5	10	717	-740	-1	7	10	1315	-1263	4	2	11	403	407	-8	5	11	251	225
-8	3	10	177	-186	-9	5	10	406	-381	0	7	10	718	680	5	2	11	332	344	-7	5	11	702	-635
-7	3	10	566	-588	-8	5	10	455	482	1	7	10	483	417	6	2	11	2079	-2102	-6	5	11	690	838
-6	3	10	916	931	-7	5	10	1084	1076	2	7	10	299	-309	7	2	11	902	945	-5	5	11	726	-684
-5	3	10	829	-789	-5	5	10	597	-591	3	7	10	884	840	-10	3	11	309	324	-3	5	11	803	805

60

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RE(CO13ITMEN)H2O]•[RE(CO13ITMEN)F].

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
-2	5	11	996	-870	7	0	12	1661	-1791	-11	4	12	345	317	-7	1	13	240	-225	-4	4	13	250	220
-1	5	11	943	815	-0	1	12	1668	830	-9	4	12	869	841	-6	1	13	597	595	-3	4	13	345	-265
0	5	11	427	-390	-7	1	12	622	639	-6	4	12	435	-357	-5	1	13	514	523	-1	4	13	754	-867
1	5	11	646	-635	-6	1	12	1318	-1386	-7	4	12	685	-619	-4	1	13	1153	-1248	0	4	13	426	437
2	5	11	1001	977	-5	1	12	701	-712	-6	4	12	517	-472	-2	1	13	386	-385	1	4	13	541	548
3	5	11	943	-776	-4	1	12	855	921	-4	4	12	1322	1231	-1	1	13	331	290	-7	5	13	561	461
4	5	11	582	581	-2	1	12	1058	1114	-2	4	12	1021	-950	0	1	13	978	982	-5	8	13	550	-500
5	5	11	343	307	-1	1	12	512	-536	-1	4	12	444	408	1	1	13	676	-694	-4	5	13	723	695
6	5	11	774	-832	0	1	12	984	-1052	0	4	12	1033	-1067	4	1	13	443	-455	-3	5	13	1002	-652
-9	6	11	1030	-972	3	1	12	1175	1254	1	4	12	908	902	5	1	13	1303	1334	-2	5	13	443	437
-8	6	11	547	448	4	1	12	87	319	2	4	12	902	807	-8	2	13	563	-581	-1	5	13	360	368
-5	6	11	577	551	5	1	12	888	-887	3	4	12	614	-725	-8	2	13	743	748	0	5	13	633	-590
-4	6	11	1173	-1121	7	1	12	722	-732	5	4	12	860	-868	-7	2	13	1148	1176	1	5	13	732	684
-2	6	11	275	227	-10	2	12	387	401	-8	5	12	480	-568	-6	2	13	1045	-1046	-8	0	14	320	-367
0	6	11	1050	1011	-7	2	12	332	-375	-8	5	12	627	-551	-4	2	13	853	-849	-7	0	14	676	-866
1	11	668	-702		-5	2	12	385	331	-6	5	12	698	628	-2	2	13	1658	1601	-6	0	14	1525	1546
-6	11	416	-403		-1	2	12	564	-541	-5	5	12	731	675	-1	2	13	271	-262	-5	0	14	498	477
-5	7	11	847	-767	3	2	12	189	175	-3	5	12	637	-551	0	2	13	385	352	-4	0	14	393	-432
-4	7	11	388	-336	4	2	12	480	-563	-2	5	12	778	-769	1	2	13	773	-794	-2	0	14	1708	-1711
-3	7	11	764	696	5	2	12	278	-245	-1	6	12	420	393	2	2	13	867	-1044	-1	0	14	472	504
-2	7	11	738	714	7	2	12	281	248	0	6	12	1116	1048	3	2	13	1448	1440	0	0	14	705	642
0	7	11	624	-600	-10	3	12	186	169	1	6	12	293	269	-10	3	13	173	114	2	0	14	687	691
1	7	11	928	-889	-9	3	12	369	347	2	6	12	467	-454	-8	3	13	772	810	3	0	14	1380	-1423
-9	0	12	1242	-1323	-8	3	12	388	-413	3	5	12	1040	-930	-5	3	13	787	-779	-8	1	14	762	-764
-8	0	12	1068	1154	-7	3	12	789	775	4	5	12	436	-407	-4	3	13	447	-453	-6	1	14	433	457
-7	0	12	1036	1116	-6	3	12	657	-626	-7	6	12	661	576	-4	3	13	839	817	-7	1	14	449	452
-6	0	12	451	-493	-4	3	12	541	579	-6	6	12	842	761	-3	3	13	935	509	-5	1	14	368	359
-5	0	12	501	559	-3	3	12	816	-794	-5	6	12	1063	-962	-2	3	13	332	312	-4	1	14	1201	-1259
-4	0	12	2046	-2124	-2	3	12	974	949	-4	6	12	381	-360	-1	3	13	672	-684	-2	1	14	484	481
-3	0	12	306	-358	-1	3	12	140	-130	-3	6	12	272	-209	0	3	13	944	-986	-1	1	14	291	341
-2	0	12	1489	1585	0	3	12	80	-735	-1	6	12	1294	1161	1	3	13	910	510	0	1	14	800	803
0	0	12	1017	1115	1	3	12	752	751	0	6	12	417	-395	2	3	13	489	538	1	1	14	715	-725
1	0	12	1250	-1286	2	3	12	628	-659	1	6	12	446	-402	3	3	13	735	750	2	1	14	653	-708
2	0	12	1016	-1103	3	3	12	719	738	-10	1	13	161	-143	-8	4	13	308	-302	-8	2	14	335	353
3	0	12	793	871	5	3	12	806	-821	-6	1	13	861	-808	-6	4	13	410	-346	-5	4	14	324	-304
5	0	12	1434	1500	6	3	12	767	777	-8	1	13	436	470	-5	4	13	1018	928	-3	2	14	344	316