

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3(TNEN).ASR#

SEPT. 1981

PAGE 7

[illegible]

10.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR (PEICO)3(TMEN)(H2O)1.864

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	3	2528	-2135	7	8	0	1844	-1885	5	1	0	798	838	-8	0	1	238	-230	8	2	1	524	542
4	0	0	1359	1265	8	8	0	1027	1023	7	1	0	771	-784	-8	0	1	338	318	13	2	1	838	-819
8	0	0	735	-710	11	8	0	944	-885	9	1	0	959	974	-4	0	1	271	-223	12	2	1	730	779
10	0	0	763	735	0	6	0	1967	2297	11	11	0	261	-275	-2	0	1	3169	2727	14	2	1	481	-516
12	0	0	665	-673	2	6	0	1387	-1380	0	12	0	1011	1010	7	0	1	2816	2724	16	2	1	228	301
14	0	0	563	636	4	6	0	571	560	2	12	0	788	-856	4	0	1	991	-852	-13	3	1	269	-329
16	0	3	383	-361	8	6	0	280	-226	4	12	0	672	594	6	0	1	308	277	-11	3	1	703	701
3	1	0	1612	-1437	10	6	0	721	696	10	12	0	367	348	8	0	1	788	800	-9	3	1	1312	-1274
5	1	0	2228	2110	12	6	0	623	-644	12	12	0	367	-356	10	0	1	628	-569	-7	3	1	1620	1539
7	1	0	1557	-1514	14	6	0	563	571	3	13	0	610	-581	12	0	1	734	779	-8	3	1	1667	-1535
9	1	0	988	989	8	7	0	783	-790	5	13	0	663	683	14	0	1	612	-501	-3	3	1	1651	1597
11	1	0	448	-455	0	7	0	1667	1641	7	13	0	633	-577	16	0	1	361	318	-1	3	1	306	329
13	1	0	235	185	7	7	0	1217	-1260	9	13	0	392	393	-17	1	1	260	206	1	3	1	461	-473
0	2	0	2339	2827	9	7	0	830	503	0	14	0	788	819	-13	1	1	318	-305	3	3	1	1975	1850
2	2	0	2576	-2437	11	7	0	463	-483	2	14	0	580	-599	-11	1	1	552	578	5	3	1	1928	-1783
4	2	0	1256	1240	0	8	0	1737	-1851	6	14	0	239	308	-9	1	1	1304	-1246	7	3	1	1580	1520
6	2	0	808	-802	2	8	0	1130	-1246	12	14	0	265	-268	-7	1	1	1817	1698	9	3	1	659	-640
10	2	0	718	720	4	8	0	861	822	3	15	0	376	-372	-5	1	1	1486	-1369	11	3	1	467	478
12	2	0	702	-752	6	8	0	258	-253	5	15	0	467	581	-3	1	1	333	306	15	3	1	289	-209
14	2	0	637	633	10	8	0	525	522	7	15	0	378	-441	1	1	1	1746	-1721	-16	4	1	367	431
16	2	0	435	-344	12	8	0	567	-561	8	15	0	247	322	3	1	1	2126	2031	-14	4	1	621	-652
3	3	0	353	-290	14	8	0	448	488	0	16	0	432	423	6	1	1	2208	2110	-12	4	1	648	626
7	3	0	1620	-1465	8	9	0	861	-863	2	16	0	355	-392	7	1	1	1669	1619	-10	4	1	661	-596
9	3	0	1225	1178	5	9	0	1090	1076	8	16	0	274	-79	9	1	1	677	-631	-6	4	1	737	728
11	3	0	463	-526	7	9	0	702	-525	3	17	0	254	-241	11	1	1	503	489	-4	4	1	1586	-1502
13	3	0	276	282	9	9	0	470	737	5	17	0	284	312	-16	2	1	461	471	-2	4	1	2007	2089
0	4	0	1148	1143	11	9	0	295	-338	7	17	0	387	-332	-14	2	1	688	-708	0	4	1	1730	-1899
2	4	0	1197	-1081	0	10	0	1146	1168	9	17	0	262	210	-12	2	1	713	699	2	4	1	1146	1088
4	4	0	1659	1621	2	10	0	869	-867	0	18	0	322	319	-10	2	1	645	-642	4	4	1	437	-418
6	4	0	424	-389	4	10	0	812	815	2	18	0	317	-257	-6	2	1	533	489	8	4	1	421	414
10	4	0	799	778	6	10	0	408	-408	4	18	0	219	201	4	2	1	1248	-1208	8	4	1	578	603
12	4	0	749	-745	10	10	0	353	380	2	20	0	238	-227	-2	2	1	2047	1891	10	4	1	780	-788
14	4	0	570	514	12	10	0	496	-488	-16	0	1	582	467	0	2	1	2592	-2549	12	4	1	783	787
16	4	0	283	-373	14	10	0	314	384	-14	0	1	754	-742	2	2	1	1438	1493	14	4	1	484	-503
3	5	0	883	-835	1	11	0	288	267	-12	0	1	737	757	4	2	1	1264	-1203	-13	5	1	378	-313
5	5	0	1493	1394	3	11	0	518	-550	-10	0	1	600	-577	6	2	1	197	186	-11	5	1	553	560

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	
-19	5	1	1430	-1371	-12	8	1	538	-572	-11	11	1	353	-363	-4	14	1	612	-442	-4	0	2	1130	1026	
-17	5	1	1738	1673	-10	8	1	382	-428	-9	11	1	580	-593	-2	14	1	568	710	0	0	2	1381	1118	
-15	5	1	1565	-1575	-8	8	1	532	509	-7	11	1	720	700	0	14	1	711	-700	2	0	2	1667	-1544	
-13	5	1	893	-93	-6	8	1	932	-915	-5	11	1	710	-672	2	14	1	693	503	4	0	2	801	890	
-1	5	1	744	-715	-2	8	1	1363	1524	-3	11	1	409	434	4	14	1	189	-234	6	0	2	297	320	
3	5	1	932	-840	0	8	1	1341	-1513	1	11	1	410	-419	10	14	1	311	-274	8	0	2	751	-777	
5	5	1	1517	-1497	2	8	1	980	972	3	11	1	777	-823	-3	15	1	384	-373	10	0	2	909	912	
7	5	1	1090	1035	4	8	1	592	-642	5	11	1	944	-955	-7	15	1	430	439	12	0	2	668	-595	
9	5	1	733	-714	6	8	1	412	387	7	11	1	805	798	-5	15	1	368	-384	14	0	2	427	458	
11	5	1	380	408	10	8	1	509	-522	9	11	1	439	-418	3	15	1	357	393	-13	1	2	429	427	
11	14	8	1	360	389	12	8	1	574	565	11	11	1	265	229	5	15	1	434	-457	-11	1	2	1011	-940
11	14	8	1	597	-584	14	8	1	411	-405	-11	12	1	386	-323	7	15	1	404	406	-9	1	2	1455	1381
12	8	1	658	659	-11	9	1	502	501	-12	12	1	371	342	9	15	1	288	-254	-7	1	2	1549	-1408	
12	8	1	384	-387	-9	9	1	770	-724	-10	12	1	247	-233	-10	16	1	250	-141	-5	1	2	689	785	
12	8	1	609	560	-7	9	1	1067	1016	-6	12	1	326	278	-4	16	1	416	-349	-3	1	2	1155	-1120	
14	8	1	1201	-1183	-5	9	1	822	-812	-4	12	1	504	-522	-2	16	1	332	454	1	1	2	500	426	
12	8	1	1778	1908	-3	9	1	506	506	-2	12	1	1035	1032	0	16	1	514	-448	3	1	2	1784	-1737	
0	8	1	1548	-1716	1	9	1	484	-473	0	12	1	858	-1009	2	16	1	348	331	5	1	2	1873	1771	
2	8	1	877	-878	3	9	1	686	934	2	12	1	608	630	10	16	1	269	-216	7	1	2	1406	-1321	
4	8	1	565	-541	5	9	1	1233	-1182	4	12	1	404	-359	-9	17	1	300	-292	9	1	2	1672	706	
8	8	1	578	591	7	9	1	1003	976	8	12	1	270	287	-7	17	1	320	322	11	1	2	255	-288	
10	8	1	595	-610	9	9	1	540	-523	10	12	1	382	-371	-5	17	1	333	-319	-15	1	2	294	268	
12	8	1	627	863	11	9	1	249	276	-12	12	1	337	347	8	17	1	251	259	-18	2	2	287	308	
14	8	1	405	-484	-11	14	1	432	-405	-11	13	1	299	278	6	17	1	292	-338	-16	2	2	483	-548	
-13	7	1	295	-279	-12	10	1	405	416	-9	13	1	514	-507	7	17	1	341	278	-14	2	2	643	699	
-11	7	1	489	520	-10	10	1	438	-433	-7	13	1	432	548	-2	18	1	492	351	-12	2	2	717	-712	
-9	7	1	1231	-1194	-8	10	1	408	353	-5	13	1	523	-560	0	18	1	368	-323	-10	2	2	337	335	
-7	7	1	1508	1449	-6	10	1	585	-556	-3	13	1	314	265	2	18	1	256	257	-8	2	2	768	-771	
-5	7	1	1106	-1097	-2	10	1	1193	1286	1	13	1	303	-340	3	18	1	289	198	-4	2	2	1825	1868	
-3	7	1	576	619	0	10	1	1138	-1276	3	13	1	480	538	-4	20	1	255	-158	-2	2	2	2473	-2577	
3	7	1	1148	1188	2	10	1	909	937	5	13	1	708	-700	0	20	1	274	-232	0	2	2	1454	1417	
5	7	1	1027	-1017	4	10	1	467	-478	7	13	1	517	524	2	20	1	288	326	2	2	2	1217	-1161	
7	7	1	1083	1034	6	10	1	293	256	8	13	1	401	369	-1	20	0	550	-571	4	2	2	881	-836	
9	7	1	642	-658	10	10	1	497	-488	-11	13	1	238	172	-14	0	2	678	710	10	2	2	751	792	
11	7	1	399	368	-12	10	1	459	467	-12	14	1	318	267	-12	0	2	760	-782	12	2	2	658	-700	
14	8	1	453	-508	-14	10	1	278	-319	-6	14	1	243	197	-6	0	2	1327	-1302	14	2	2	388	434	

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
-13	3	2	418	398	7	5	2	917	-876	2	8	2	1011	-1087	9	11	2	378	378	-2	16	2	555	-523
-11	3	2	861	-880	9	5	2	478	-473	4	7	2	422	388	-14	12	2	343	342	0	15	2	467	444
-9	3	2	1284	1225	-16	6	2	469	-432	8	8	2	804	-523	-12	12	2	334	-252	2	16	2	313	-323
-7	3	2	1794	-1652	-14	6	2	566	565	10	8	2	588	573	-6	12	2	603	632	-9	17	2	306	287
-5	3	2	1370	1241	-12	6	2	494	-502	12	8	2	480	-482	-2	12	2	772	-860	-7	17	2	289	-376
-3	3	2	1201	-1180	-10	6	2	294	251	-11	9	2	881	-841	0	12	2	788	807	3	17	2	361	-331
1	3	2	1248	1144	-8	6	2	425	431	-9	9	2	1011	-989	2	12	2	455	-469	5	17	2	332	316
3	3	2	2205	-2096	-6	6	2	1051	-1061	-7	9	2	901	-893	4	12	2	242	228	-4	18	2	374	303
5	3	2	1851	1658	-4	6	2	1587	1620	-5	9	2	786	752	6	12	2	250	-340	-2	18	2	411	-370
7	3	2	917	-859	-2	6	2	1738	-1819	-3	9	2	274	-282	10	12	2	363	379	0	14	2	330	319
9	3	2	537	547	0	6	2	1272	1314	1	9	2	639	682	12	12	2	326	-322	-18	0	3	322	-360
15	3	2	295	262	2	6	2	1280	-1211	3	9	2	1114	-1125	-11	13	2	366	-369	-15	0	3	519	550
-16	4	2	473	-439	4	6	2	688	676	8	9	2	1114	1111	-9	13	2	532	537	-14	0	3	867	-583
-14	4	2	555	555	8	6	2	498	-525	7	9	2	687	-713	-7	13	2	627	-537	-12	0	3	554	535
-12	4	2	633	-618	10	6	2	635	661	9	9	2	409	434	-5	13	2	393	347	-10	0	3	262	-221
-6	4	2	958	-867	12	6	2	639	-552	-18	10	2	313	-325	1	13	2	355	317	-8	0	3	673	-566
-4	4	2	1865	1807	14	6	2	318	374	-14	10	2	407	386	3	13	2	557	-507	-6	0	3	1011	968
-2	4	2	3066	-3456	-13	7	2	288	277	-12	10	2	382	-404	5	13	2	537	572	-4	0	3	2181	-1680
0	4	2	1715	1771	-11	7	2	284	-278	-10	10	2	243	219	7	13	2	455	-494	0	0	3	1422	-1315
2	4	2	720	-683	-9	7	2	1114	1070	-8	10	2	366	-352	9	13	2	303	302	2	0	3	765	751
4	4	2	430	409	-7	7	2	1387	-1291	-4	10	2	798	831	-12	14	2	324	-245	4	0	3	387	-367
6	4	2	249	195	-5	7	2	688	670	-2	10	2	1201	-1360	-6	14	2	357	-354	6	0	3	463	-520
8	4	2	642	-630	-3	7	2	409	-444	0	10	2	945	1022	-4	14	2	420	442	8	0	3	638	635
10	4	2	705	718	-1	7	2	380	-363	2	10	2	504	-552	-2	14	2	587	-604	10	0	3	822	-784
12	4	2	615	-630	1	7	2	700	708	4	10	2	425	-450	0	14	2	551	556	-12	0	3	501	549
-14	4	2	380	410	3	7	2	885	-905	10	10	2	461	478	2	14	2	618	-657	-13	1	3	883	-610
-16	4	2	280	316	5	7	2	1162	1122	-12	10	2	447	-400	10	14	2	346	283	-11	4	3	1114	1144
-18	4	2	883	-926	7	7	2	859	-841	-11	11	2	466	-487	-9	15	2	561	407	-9	1	3	1422	-1347
-19	5	2	1312	1736	9	7	2	476	511	-9	11	2	634	860	-7	15	2	374	-408	-7	1	3	1367	1288
-15	5	2	1501	-1487	-16	8	2	345	-381	-7	11	2	788	-786	-5	15	2	208	374	-5	1	3	1158	-1098
-11	5	2	1312	1281	-14	8	2	447	471	-5	11	2	412	437	1	15	2	244	248	-1	1	3	505	428
-7	5	2	645	-617	-12	8	2	495	-511	-3	11	2	280	-246	3	15	2	372	-419	1	1	3	1241	-1164
-3	5	2	233	-227	-6	8	2	514	-599	1	11	2	540	632	5	15	2	446	454	3	1	3	1557	1434
1	5	2	532	504	-4	8	2	1188	1209	3	11	2	944	-986	7	15	2	348	-351	5	1	3	1608	-1362
5	5	2	1586	-1577	-2	8	2	1217	-1291	5	11	2	405	858	-8	16	2	304	-249	7	1	3	863	787
9	5	2	1075	1058	0	8	2	1027	1078	7	11	2	582	-582	-4	16	2	425	436	9	1	3	571	-592

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [RE(CO)3(THF)4]H2O11.8PF6

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
-18	2	3	342	-383	4	4	3	255	-253	-5	7	3	380	-993	-8	10	3	272	-233	-4	14	3	541	-548
-16	2	3	488	529	6	4	3	454	-473	-1	7	3	528	584	-6	10	3	488	548	-2	14	3	541	528
-14	2	3	579	-582	8	4	3	553	572	3	7	3	1189	-1204	-4	10	3	924	-928	0	14	3	487	-488
-12	2	3	461	497	10	4	3	584	-558	3	7	3	1320	-1296	-2	10	3	828	877	5	14	3	359	285
-8	2	3	298	-278	12	4	3	360	442	5	7	3	1116	-1011	0	10	3	411	-838	-11	15	3	311	279
-6	2	3	1233	1101	-13	5	3	352	-425	7	7	3	287	580	2	10	3	394	340	-5	15	3	362	-364
-4	2	3	1888	-1809	-11	5	3	301	822	9	7	3	388	-382	6	10	3	363	-309	-7	15	3	369	367
-2	2	3	1715	1982	-9	5	3	1177	-1112	-16	8	3	311	372	9	10	3	406	423	-7	15	3	363	-267
0	2	3	1280	-1218	-7	6	3	1043	1015	-14	8	3	403	-418	10	10	3	486	-449	-1	15	3	417	-366
2	2	3	801	873	-5	8	3	412	-436	-12	8	3	399	360	-13	11	3	240	-323	3	15	3	356	668
4	2	3	316	-329	-3	8	3	227	201	-8	8	3	314	-284	-11	11	3	626	554	5	15	3	378	-380
6	2	3	579	-580	-1	8	3	871	725	-6	8	3	630	838	-9	13	3	782	-773	7	15	3	312	748
8	2	3	634	655	1	8	3	1351	-1310	-4	8	3	1248	-1608	-7	13	3	843	578	-6	15	3	348	305
10	2	3	727	-789	3	8	3	1508	1444	-2	8	3	1217	1340	-5	13	3	488	-408	-4	18	3	478	-450
12	2	3	407	618	5	8	3	1304	-1244	0	8	3	901	-942	1	13	3	578	-600	-2	18	3	570	687
-13	3	3	511	-688	7	8	3	670	661	2	8	3	466	474	3	13	3	726	703	0	18	3	278	-171
-11	3	3	1084	1080	9	8	3	441	-466	6	8	3	378	-389	5	13	3	659	-641	-6	17	3	278	-340
-9	3	3	1393	-1345	-16	8	3	382	448	8	8	3	699	621	7	13	3	469	486	1	17	3	270	-282
-7	3	3	885	851	-14	8	3	401	-471	10	8	3	917	-820	9	13	3	275	-282	3	17	3	374	317
-5	3	3	629	-567	-12	8	3	544	510	12	8	3	385	380	-14	12	3	408	-368	5	17	3	298	-282
-1	3	3	271	276	-8	8	3	307	-351	-16	9	3	282	143	-6	12	3	462	486	-6	18	3	270	-80
1	3	3	1414	-1371	-6	8	3	1043	1057	-13	9	3	277	-341	-4	12	3	542	-568	-4	18	3	340	-248
3	3	3	1503	1503	-4	8	3	1604	-1625	-11	9	3	737	722	-2	12	3	664	691	-2	18	3	282	303
5	3	3	1312	-1250	-2	8	3	1508	1703	-9	9	3	809	-796	0	12	3	451	-444	-18	0	4	295	390
7	3	3	853	830	0	8	3	1327	-1328	-7	9	3	917	908	2	12	3	472	422	-16	0	4	454	-458
9	3	3	526	-483	2	8	3	861	-844	-5	9	3	814	-846	8	12	3	413	387	-14	0	4	508	825
-12	4	3	313	-341	4	8	3	224	-228	-3	9	3	292	240	10	12	3	366	-360	-12	0	4	282	-228
-16	4	3	515	495	6	8	3	326	-350	-1	9	3	382	437	-11	13	3	506	418	-1	0	4	688	648
-14	4	3	853	-872	8	8	3	648	618	1	9	3	722	-781	-9	13	3	562	-498	-9	0	4	1470	-1379
-12	4	3	421	450	10	8	3	671	-688	-7	9	3	1013	1022	-7	13	3	522	627	-4	0	4	2110	2033
-8	4	3	461	-446	12	8	3	374	432	5	0	3	783	-786	-6	13	3	366	-351	-2	0	4	1504	-1410
-6	4	3	823	753	-17	9	3	284	41	7	9	3	647	645	1	13	3	487	-468	0	0	4	822	807
-4	4	3	2197	-2129	-13	9	3	380	-394	8	9	3	384	-317	3	13	3	548	586	2	0	4	887	-840
-2	4	3	1485	1704	-11	9	3	652	658	-18	10	3	385	833	5	13	3	483	-532	6	0	4	801	835
0	4	3	1845	-1988	-9	9	3	1035	-981	-14	10	3	386	-362	7	13	3	328	369	8	0	4	696	-704
2	4	3	1003	930	-7	9	3	972	328	-12	10	3	280	264	-5	14	3	367	381	10	0	4	588	837

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CREGG13ITMEN11H2011.8FA

PAGE 5

	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-12	0	4	353	-435	-18	4	4	348	367	8	6	4	603	-577	-8	10	4	438	468	-2	14	4	538	-538
-13	1	4	693	899	-16	4	4	420	-456	10	6	4	801	508	-6	10	4	718	-729	-11	15	4	325	-304
-11	1	4	1098	-1088	-14	4	4	537	506	12	6	4	396	-344	-6	10	4	846	862	-9	15	4	286	302
-9	1	4	1327	1273	-12	4	4	340	-302	-15	7	4	292	-217	-2	10	4	738	-798	-7	15	4	310	-277
-7	1	4	1138	-1128	-8	4	4	514	546	-13	7	4	503	477	0	10	4	586	634	1	15	4	387	385
-5	1	4	893	893	-6	4	4	1098	-1130	-13	7	4	729	-696	2	10	4	315	-369	3	15	4	356	-382
1	1	4	1525	1431	-4	4	4	1019	1046	-9	7	4	822	768	6	10	4	251	304	4	15	4	268	294
3	1	4	1217	-1175	-2	4	4	1106	-1186	-7	7	4	869	-534	8	10	4	440	-405	-5	16	4	269	-272
5	1	4	545	767	0	4	4	1106	1057	-5	7	4	463	507	10	10	4	395	368	-6	16	4	334	384
7	1	4	638	-654	2	4	4	662	-667	-1	7	4	798	-848	-13	11	4	409	355	0	16	4	282	250
9	1	4	283	297	6	4	4	539	567	1	7	4	1233	1237	-11	11	4	601	-576	1	17	4	284	259
-18	2	4	305	361	8	4	4	673	-680	3	7	4	1226	-1133	-9	11	4	563	574	3	17	4	347	-288
-16	2	4	411	-644	10	4	4	569	556	5	7	4	687	686	11	4	504	-508	-16	0	4	337	-349	
-14	2	4	498	506	12	4	4	442	-402	7	7	4	488	-506	11	4	300	-331	-16	0	5	468	451	
-12	2	4	305	-259	-13	5	4	563	513	-16	3	4	349	-352	11	4	432	468	-14	0	5	412	-390	
-8	2	4	778	760	-11	5	4	683	-849	-14	4	4	319	362	1	4	622	-630	-10	0	5	438	400	
-6	2	4	1169	-1133	-9	5	4	1035	958	-8	4	4	326	292	1	4	624	516	-8	0	5	901	-901	
-4	2	4	1825	1746	-7	5	4	790	-782	-6	4	4	845	-886	4	4	360	-353	-6	0	5	1691	1655	
-2	2	4	1051	-1016	-6	5	4	588	588	-4	4	4	1185	1307	-10	4	308	248	-2	0	5	1217	1128	
0	2	4	1241	1161	-3	5	4	318	345	-2	4	4	985	-1113	-8	4	436	367	0	0	5	901	-862	
2	2	4	650	-535	-1	5	4	646	-685	0	4	4	655	866	-6	12	4	593	-614	2	0	5	337	318
4	2	4	574	584	1	5	4	1343	1367	2	4	4	378	-360	-4	12	4	721	771	4	0	5	294	312
6	2	4	707	-717	3	5	4	1422	-1293	6	4	4	367	403	-2	12	4	644	-660	6	0	5	468	-455
8	2	4	549	586	5	5	4	940	921	8	4	4	544	-488	0	12	4	481	552	10	0	5	476	-466
-12	2	4	412	-440	7	5	4	588	-636	-10	4	4	631	422	2	12	4	269	-239	12	0	5	365	358
-11	3	4	682	578	-18	5	4	289	332	-13	8	4	510	466	6	12	4	293	268	-16	1	5	331	323
-9	3	4	1075	-1001	-16	6	4	339	-393	-11	8	4	657	-648	8	12	4	344	-326	-13	1	5	721	-689
-7	3	4	1268	1180	-14	6	4	379	472	-9	3	4	763	737	-13	13	4	360	276	-11	1	5	917	892
-5	3	4	869	-791	-12	5	4	281	-266	-7	4	4	819	-498	-11	13	4	413	-367	-9	1	5	800	-808
-3	3	4	462	438	-8	6	4	406	407	-6	3	4	377	421	-9	13	4	458	473	-7	1	5	626	605
-1	3	4	686	-671	-6	6	4	846	-862	-1	3	4	283	-344	-7	13	4	341	-373	-5	1	5	274	-255
1	3	4	1114	1091	-4	6	4	1359	1540	1	3	4	816	826	-1	13	4	287	-306	-3	1	5	176	-247
3	3	4	1304	-1229	-2	6	4	1011	-1125	3	3	4	717	-709	1	13	4	485	509	-1	1	5	1169	-1146
5	3	4	1138	1055	0	6	4	740	928	5	3	4	895	850	3	13	4	492	-521	1	1	5	1025	
7	3	4	569	-676	2	6	4	378	-393	7	3	4	398	-420	5	13	4	390	378					
9	3	4	808	309	6	6	4	619	588	-14	10	4	309	304	-6	14	4	536	-456					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [RE(CO)3(TMEN)](H2O)1.8PF6

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
5	1	5	656	-667	2	4	5	228	174	3	7	5	789	770	1	11	5	585	-634	-10	0	6	255	-278
7	1	5	430	450	4	4	5	345	342	5	7	5	531	-615	3	11	5	525	500	-9	0	6	932	882
-15	2	5	292	-355	6	4	5	616	-577	7	7	5	359	368	5	11	5	388	-349	-6	0	6	1035	-1018
-16	2	5	327	419	8	4	5	511	572	-16	3	5	356	313	7	11	5	301	235	-2	0	6	901	-856
-14	2	5	418	-419	10	4	5	466	-446	-8	3	5	489	-503	-8	12	5	373	-377	0	0	6	480	492
-10	2	5	284	285	-18	5	5	363	329	-8	3	5	726	731	-6	12	5	607	625	4	0	6	391	-377
-8	2	5	885	-849	-13	5	5	623	-639	-4	4	5	785	-859	-4	12	5	578	-635	6	0	6	489	498
-6	2	5	1533	1444	-11	5	5	743	725	-2	8	5	587	726	-2	12	5	517	544	8	0	6	485	-613
-4	2	5	1217	-1317	-9	5	5	861	-826	0	8	5	588	-623	0	12	5	288	-288	10	0	6	260	372
-2	2	5	1209	1172	-7	5	5	754	757	4	8	5	265	237	6	12	5	272	-253	-15	1	6	410	-368
0	2	5	768	-714	-3	5	5	202	-238	6	8	5	440	-428	8	12	5	410	274	-13	1	6	542	626
2	2	5	271	319	-1	5	5	872	871	8	8	5	463	440	-13	13	5	299	-290	-11	1	6	779	-759
4	2	5	129	347	1	5	5	1089	-1014	-13	9	5	433	-443	-11	13	5	336	373	-9	1	6	614	618
6	2	5	523	-621	3	5	5	932	815	-11	9	5	657	810	-9	13	5	336	-354	-7	1	6	376	-354
8	2	5	655	485	5	5	5	685	-651	-9	9	5	678	-575	-7	13	5	359	258	-5	1	6	266	-260
10	2	5	450	-488	7	5	5	427	426	-7	9	5	346	419	-3	13	5	251	-188	-3	1	6	553	578
-15	3	5	363	333	-14	6	5	115	-290	-1	9	5	584	826	-1	13	5	403	403	-1	1	6	972	-958
-13	3	5	409	354	-10	6	5	243	180	1	9	5	515	-674	1	13	5	478	-461	1	1	6	1075	990
-11	3	5	614	-604	-8	6	5	468	-641	3	9	5	71	712	3	13	5	357	324	3	1	6	732	-633
-9	3	5	893	878	-6	6	5	958	1011	5	9	5	473	-473	5	13	5	310	-304	5	1	6	628	622
-7	3	5	409	-469	-4	6	5	814	-869	7	9	5	268	330	-8	14	5	284	-238	-20	2	6	326	-241
-5	3	5	932	906	-2	6	5	822	875	-10	10	5	275	198	-6	14	5	354	337	-18	2	6	339	304
-3	3	5	327	-345	0	6	5	498	-849	-8	10	5	387	-429	-4	14	5	378	-443	-16	2	6	337	-363
-1	3	5	948	621	2	6	5	269	233	-6	10	5	701	738	-2	14	5	374	337	-10	2	6	341	-327
1	3	5	1106	-1070	4	6	5	409	366	-4	10	5	726	-753	-11	15	5	371	255	-8	2	6	594	709
3	3	5	1075	882	6	6	5	905	-466	-2	10	5	627	708	-9	15	5	277	-278	-6	2	6	1185	-1158
5	3	5	690	-649	8	6	5	817	541	0	10	5	470	-512	-1	15	5	251	239	-4	2	6	885	894
7	3	5	490	484	-10	6	5	379	-404	4	10	5	250	193	1	15	5	304	-320	-2	2	6	909	-868
-18	4	5	287	-337	-15	7	5	292	302	6	10	5	393	-354	3	15	5	331	318	0	2	6	475	461
-16	4	5	348	338	-13	7	5	593	-573	8	10	5	412	352	-8	15	5	347	241	4	2	6	423	-412
-14	4	5	370	-371	-11	7	5	750	718	-13	11	5	378	-329	-4	15	5	308	-285	6	2	6	503	488
-8	4	5	672	-658	-9	7	5	579	-598	-11	11	5	483	457	-4	15	5	287	-230	8	2	6	469	-444
-6	4	5	1114	1097	-7	7	5	477	466	-9	11	5	607	-528	-2	15	5	309	200	-10	2	6	309	355
-4	4	5	1106	-1251	-5	7	5	293	-275	-7	11	5	331	385	-18	0	6	476	324	-15	3	6	374	-387
-2	4	5	932	913	-3	7	5	607	612	-3	11	5	332	-343	-16	0	6	341	-358	-13	3	6	539	624
0	4	5	711	-715	1	7	5	980	-932	-1	11	5	477	501	-14	0	6	275	298	-11	3	6	683	-671

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [RE(CD)3BITMEN](H2O)1.8FA

PAGE 7

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-9	3	6	762	743	8	6	6	566	462	8	10	8	385	304	-18	1	7	360	342	1	4	7	355	335
-7	3	6	461	-440	8	6	8	383	-403	-13	11	6	356	309	-13	1	7	574	-538	8	4	7	352	-414
-3	3	6	592	803	10	8	8	307	336	-11	11	6	308	-348	-11	1	7	627	612	8	4	7	327	354
-1	3	6	856	-921	-15	7	3	367	-340	-9	11	6	401	374	-9	1	7	643	-628	-15	5	7	371	364
1	3	6	1027	829	-13	7	3	876	847	-3	11	6	364	318	-7	1	7	235	209	-13	5	7	522	-520
3	3	6	677	-869	-11	7	8	622	-593	-1	11	6	534	-680	-3	1	7	856	-846	-11	5	7	510	493
5	3	6	923	586	-9	7	8	617	522	1	11	6	552	495	-1	1	7	814	787	-9	5	7	389	-422
-11	4	6	288	247	-7	7	8	273	-270	3	11	6	342	-393	1	1	7	808	-731	-7	5	7	464	-474
-11	4	6	398	-320	-3	7	8	223	256	-8	12	6	367	358	3	1	7	645	653	-1	5	7	573	569
-10	4	6	334	-301	-1	7	8	537	-550	-8	12	6	506	-504	5	1	7	407	-393	1	5	7	622	-568
-8	4	6	748	687	1	7	8	694	663	-4	12	6	378	467	-18	2	7	293	-277	3	5	7	486	479
-5	4	6	1043	-1046	3	7	8	693	-639	-2	12	6	319	-340	-10	2	7	356	351	5	5	7	625	-342
-4	4	6	866	804	8	7	8	468	454	-15	13	6	276	-177	-8	2	7	701	702	-10	6	7	478	420
-2	4	6	757	-775	-16	6	8	292	-265	-11	13	6	293	-308	-4	2	7	757	-774	-8	6	7	646	-667
0	4	6	375	381	-10	8	8	342	-313	-1	13	6	375	-342	-4	2	7	541	536	-6	6	7	636	729
4	4	6	425	-402	-8	8	8	505	554	1	13	6	335	372	-2	2	7	541	536	-4	6	7	563	-631
8	4	6	447	465	-6	8	6	657	-733	3	13	6	326	-321	4	2	7	427	398	-2	4	7	617	610
8	4	6	439	-441	-4	8	6	558	607	-3	14	6	291	243	5	2	7	495	-495	4	6	7	305	321
10	4	6	351	346	-2	3	6	585	-620	-6	14	6	382	-334	8	2	7	331	378	6	6	7	361	-344
11	5	6	442	-419	0	6	6	327	334	-4	14	6	386	336	10	2	7	316	-288	8	4	7	326	324
11	5	6	807	755	4	8	6	314	-301	8	14	6	282	197	-15	3	7	368	406	-15	7	7	322	309
11	5	6	716	-588	6	8	6	457	377	-4	15	6	334	258	-13	3	7	607	-617	-13	7	7	336	-431
11	5	6	537	549	8	8	6	378	-363	-11	17	6	300	-174	-11	3	7	564	561	-11	7	7	468	491
13	5	6	446	-476	-13	8	6	439	368	-9	17	6	287	182	-9	3	7	441	-437	-9	7	7	416	-392
13	5	6	311	321	-11	9	6	476	-493	3	17	6	287	-160	-7	3	7	247	256	-3	7	7	406	-413
15	5	6	755	-723	-9	9	6	802	678	-6	18	6	338	-135	-5	3	7	200	186	-1	7	7	584	536
15	5	6	760	756	-7	4	6	287	-313	-10	0	7	356	364	-3	3	7	470	-504	1	7	7	562	-530
3	5	6	702	-647	-3	3	6	373	362	-8	0	7	629	-632	-1	3	7	755	740	3	7	7	470	435
5	5	6	504	618	-1	9	8	525	-578	-6	0	7	669	664	1	3	7	644	-619	-10	8	7	363	363
11	6	6	322	289	-1	9	8	694	650	-4	0	7	729	-716	4	3	7	574	564	-8	8	7	540	-570
11	6	6	329	-346	3	0	6	443	-477	-2	0	7	564	432	5	3	7	376	-340	-6	6	7	561	612
14	6	6	693	689	5	0	6	383	341	7	0	7	273	-268	-10	4	7	475	461	-4	6	7	676	-564
14	6	6	726	-786	-8	10	6	466	492	4	0	7	436	447	-8	4	7	716	-713	-2	8	7	401	377
14	6	6	650	761	-6	10	6	541	-646	3	0	7	429	-466	-6	4	7	646	701	0	6	7	256	-138
15	6	6	584	-609	-4	10	6	653	617	8	0	7	436	387	-4	4	7	617	-641	2	8	7	269	-161
0	6	6	438	430	-2	10	6	432	-466	10	0	7	337	-283	-2	4	7	538	549	4	8	7	289	261

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $\text{Cr}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

P A G E 8

[illegible]