

2.

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)XIFLY

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
0	2	0	1440	1397	-1	9	0	117	122	-7	13	0	281	286	2	16	0	274	276	7	2	1	1801	1879
2	2	0	1295	1186	1	9	0	1721	1695	-5	13	0	534	538	4	16	0	508	532	9	2	1	1869	1817
1	3	0	1742	1718	3	9	0	166	153	-3	13	0	1927	1921	8	16	0	282	274	11	2	1	998	989
3	3	0	2862	2872	5	9	0	1934	1956	-1	13	0	560	577	10	16	0	905	842	13	2	1	917	884
-2	4	0	408	398	7	9	0	447	455	1	13	0	261	276	-7	17	0	424	457	15	2	1	175	152
2	4	0	4630	4643	9	9	0	271	296	3	13	0	368	827	-3	17	0	156	126	17	2	1	493	482
4	4	0	2001	2010	-8	10	0	288	276	5	13	0	294	310	-1	17	0	930	946	2	3	1	2558	2525
-3	5	0	501	482	-8	10	0	1440	1450	7	13	0	1052	1077	1	17	0	948	967	2	3	1	1868	1819
-1	5	0	2207	2097	-4	10	0	639	821	9	13	0	411	387	3	17	0	199	178	4	3	1	799	803
1	5	0	1361	1347	-2	10	0	139	93	-13	13	0	569	807	5	17	0	287	394	6	3	1	1824	1821
3	5	0	3008	3019	0	10	0	1772	1744	-12	14	0	484	481	7	17	0	353	352	8	3	1	828	834
5	5	0	406	404	2	10	0	1451	1456	-8	14	0	516	526	-4	18	0	339	510	10	3	1	1552	1511
-4	6	0	582	567	4	10	0	605	605	-6	14	0	562	541	-2	18	0	369	350	12	3	1	885	934
-2	6	0	3421	3339	6	10	0	274	285	-4	14	0	848	853	0	18	0	624	635	14	3	1	773	779
0	6	0	1657	1635	8	10	0	541	535	-2	14	0	865	879	4	18	0	253	249	16	3	1	669	700
2	6	0	1230	1245	10	10	0	781	784	0	14	0	169	170	1	0	1	2494	2494	18	3	1	213	188
4	6	0	255	253	-9	11	0	1274	1322	2	14	0	768	792	3	0	1	2531	2483	1	4	1	1854	1814
6	6	0	683	674	-5	11	0	446	439	4	14	0	1115	1139	7	0	1	1591	1566	3	4	1	2284	2273
-5	7	0	1130	1127	-3	11	0	948	935	8	14	0	260	271	9	0	1	568	673	5	4	1	1830	1829
-3	7	0	1637	1648	-1	11	0	503	489	10	14	0	282	294	11	0	1	1057	1034	7	4	1	1321	1278
-1	7	0	3071	3014	1	11	0	2046	2032	12	14	0	224	213	13	0	1	1192	1180	9	4	1	1087	1075
1	7	0	292	274	3	11	0	639	653	-9	15	0	379	357	15	0	1	744	733	11	4	1	206	180
3	7	0	688	680	7	11	0	1277	1328	-7	15	0	991	1013	17	0	1	659	639	13	4	1	828	831
5	7	0	2259	2241	9	11	0	390	412	-5	15	0	263	266	0	1	1	2471	2469	15	4	1	636	621
7	7	0	197	179	11	11	0	718	730	-3	15	0	446	445	2	1	1	2267	2274	17	4	1	641	622
-6	8	0	1733	1721	-10	12	0	1086	1080	1	15	0	490	456	4	1	1	2312	2230	0	5	1	386	362
-4	8	0	1042	1027	-8	12	0	742	754	3	15	0	1112	1146	6	1	1	1823	1785	2	5	1	2000	2042
-2	8	0	1576	1583	-4	12	0	1102	1074	5	15	0	547	567	8	1	1	1212	1195	4	5	1	1630	1651
0	8	0	566	561	-2	12	0	1146	1109	7	15	0	159	113	10	1	1	1267	1212	6	5	1	1986	1967
2	8	0	494	497	3	12	0	860	850	9	15	0	507	540	12	1	1	198	176	8	5	1	1228	1207
4	8	0	2076	2050	2	12	0	748	747	11	15	0	432	449	14	1	1	380	862	10	5	1	957	968
6	8	0	1634	1656	4	12	0	360	367	-10	16	0	140	140	16	1	1	579	591	12	5	1	807	802
8	8	0	283	301	6	12	0	872	910	-8	16	0	845	869	18	1	1	460	484	14	5	1	250	261
-7	9	0	1208	1226	8	12	0	1223	1252	-6	16	0	773	764	1	2	1	728	796	16	5	1	647	635
-5	9	0	2135	2119	-11	13	0	185	142	-2	16	0	474	471	3	2	1	2308	2226	18	5	1	373	356
-3	9	0	124	113	-9	13	0	487	494	0	16	0	886	908	5	2	1	1130	1091	1	6	1	1190	1210

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)X(F)Y

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
3	6	1	1418	1459	5	10	1	1195	1201	4	15	1	688	704	6	2	2	357	364	10	6	2	339	322
5	6	1	1466	1435	7	10	1	677	670	6	15	1	754	774	8	2	2	378	386	12	6	2	1927	1816
7	6	1	676	643	9	10	1	598	598	8	15	1	479	493	10	2	2	2165	2111	14	6	2	471	475
9	6	1	1264	1274	11	10	1	770	789	10	15	1	470	461	12	2	2	178	187	16	6	2	305	311
11	6	1	984	976	13	10	1	525	532	1	16	1	222	256	14	2	2	379	345	1	7	2	2266	2303
13	6	1	893	908	15	10	1	627	620	3	16	1	523	555	16	2	2	392	374	3	7	2	1926	1960
15	6	1	545	549	0	11	1	1011	1018	5	16	1	336	319	1	3	2	1887	1857	5	7	2	458	449
0	7	1	1608	1594	2	11	1	1049	1095	7	16	1	596	632	3	3	2	960	934	7	7	2	270	286
2	7	1	2261	2278	4	11	1	1461	1508	9	16	1	454	472	5	3	2	920	926	9	7	2	718	729
4	7	1	1177	1169	6	11	1	661	684	0	17	1	604	629	7	3	2	562	550	11	7	2	968	999
6	7	1	778	772	8	11	1	661	707	2	17	1	557	599	9	3	2	1887	1879	13	7	2	1045	1045
8	7	1	875	881	10	11	1	366	388	4	17	1	353	332	11	3	2	1987	1063	0	8	2	1006	1012
10	7	1	662	656	12	11	1	438	456	6	17	1	392	425	13	3	2	226	201	2	8	2	2014	2039
12	7	1	1057	1076	14	11	1	548	547	1	18	1	366	375	15	3	2	603	619	4	8	2	351	324
14	7	1	621	598	1	12	1	948	899	3	18	1	573	615	17	3	2	674	676	6	8	2	433	441
16	7	1	581	617	3	12	1	838	860	5	18	1	407	411	0	4	2	2321	2292	8	8	2	1595	1611
1	8	1	1645	1641	5	12	1	897	901	2	0	2	2338	2282	2	4	2	253	233	10	8	2	498	470
3	8	1	1214	1192	7	12	1	889	913	4	0	2	2409	2323	4	4	2	1158	1177	12	8	2	721	705
5	8	1	1490	1501	9	12	1	561	587	6	0	2	638	828	6	4	2	2343	2339	1	9	2	651	633
7	8	1	979	983	11	12	1	738	751	8	0	2	1050	1013	10	4	2	914	897	3	9	2	253	252
9	8	1	1208	1216	13	12	1	206	186	10	0	2	461	439	12	4	2	300	287	5	9	2	374	347
11	8	1	582	577	0	13	1	1139	1163	12	0	2	625	801	14	4	2	158	152	7	9	2	1569	1394
13	8	1	245	258	2	13	1	377	395	14	0	2	1527	1496	16	4	2	1082	1083	9	9	2	1480	1614
15	8	1	568	562	4	13	1	713	724	16	0	2	227	229	1	5	2	456	455	11	9	2	143	116
17	8	1	368	321	6	13	1	321	346	1	1	2	990	983	3	5	2	215	214	13	9	2	217	218
0	9	1	696	697	8	13	1	604	636	3	1	2	2320	2296	5	5	2	2374	2378	15	9	2	575	582
2	9	1	732	719	10	13	1	744	748	5	1	2	1364	1316	7	5	2	1665	1662	0	10	2	425	450
4	9	1	957	970	12	13	1	492	490	7	1	2	464	431	9	5	2	266	256	2	10	2	157	225
6	9	1	1095	1091	1	14	1	912	894	9	1	2	1381	1332	11	5	2	622	615	4	10	2	1257	1266
8	9	1	1421	1443	3	14	1	792	810	11	1	2	666	649	13	5	2	768	760	6	10	2	163	157
10	9	1	745	744	5	14	1	468	485	13	1	2	1041	1030	15	5	2	509	508	8	10	2	1148	1177
12	9	1	773	763	7	14	1	699	725	15	1	2	594	586	0	6	2	829	838	10	10	2	277	284
14	9	1	450	462	9	14	1	196	179	17	1	2	183	124	2	6	2	1992	2045	12	10	2	191	152
16	9	1	317	308	11	14	1	493	503	0	2	2	2310	2311	4	6	2	716	737	14	10	2	634	849
1	10	1	1292	1296	0	15	1	736	750	2	2	2	1742	1731	6	6	2	1558	1523	1	11	2	248	251
3	10	1	619	638	2	15	1	472	463	4	2	2	1806	1775	8	6	2	228	215	3	11	2	1328	1371

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)X(F)Y

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
5	11	2	1613	1657	13	0	3	944	918	13	4	3	922	906	15	8	3	619	617	3	14	3	867	902
7	14	2	158	187	15	0	3	589	586	15	4	3	532	536	0	9	3	762	763	5	14	3	464	450
11	11	2	556	555	17	0	3	719	690	17	4	3	481	471	2	9	3	663	676	7	14	3	647	653
13	11	2	304	329	0	1	3	2889	2937	0	5	3	644	644	4	9	3	1069	1063	0	15	3	539	560
0	12	2	588	608	2	1	3	1650	1663	2	5	3	2055	2098	6	9	3	1056	1043	2	12	3	527	559
2	12	2	259	244	4	1	3	1605	1533	4	5	3	1362	1407	8	9	3	1105	1113	4	15	3	787	787
4	12	2	1418	1493	6	1	3	2180	2166	6	5	3	1631	1616	10	9	3	728	723	6	15	3	504	586
6	12	2	504	521	8	1	3	1228	1213	8	5	3	1371	1361	12	9	3	839	826	8	15	3	354	361
8	12	2	164	164	10	1	3	1063	1036	10	5	3	1030	1022	14	9	3	413	395	1	16	3	216	228
10	12	2	908	895	12	1	3	229	184	12	5	3	745	736	1	10	3	1428	1439	3	16	3	571	562
12	12	2	559	552	14	1	3	649	612	14	5	3	281	263	3	10	3	370	575	5	16	3	281	282
1	13	2	1201	1220	16	1	3	651	623	16	5	3	503	491	5	10	3	993	1008	7	16	3	482	501
3	13	2	413	402	1	2	3	503	502	1	6	3	1141	1181	7	10	3	991	594	0	17	3	659	656
5	13	2	389	401	3	2	3	1300	1276	3	6	3	1081	1108	9	10	3	426	420	2	17	3	482	467
7	13	2	323	316	5	2	3	1349	1316	5	6	3	1104	1079	11	10	3	892	906	4	17	3	282	264
9	13	2	562	562	7	2	3	2039	1996	7	6	3	568	554	13	10	3	517	536	2	0	4	1086	1103
11	13	2	923	964	9	2	3	1296	1271	9	6	3	1435	1426	0	11	3	1068	1113	4	0	4	640	638
0	14	2	1428	1497	11	2	3	738	703	11	6	3	829	816	2	11	3	1135	1171	6	0	4	1107	1071
2	14	2	527	549	13	2	3	962	958	13	6	3	689	672	4	11	3	1132	1157	8	0	4	557	548
4	14	2	701	709	15	2	3	165	138	15	6	3	578	569	6	11	3	678	686	10	0	4	1584	1541
6	14	2	362	376	17	2	3	513	515	0	7	3	1390	1433	8	11	3	727	730	12	0	4	797	769
10	14	2	617	621	0	3	3	1687	1695	2	7	3	1636	1678	10	11	3	400	397	14	0	4	262	241
1	15	2	647	660	2	3	3	2253	2310	4	7	3	1375	1370	12	11	3	511	535	16	0	4	624	600
5	15	2	588	586	4	3	3	814	836	6	7	3	833	834	1	12	3	932	944	1	1	4	2121	2163
7	15	2	991	1017	6	3	3	1610	1598	8	7	3	935	941	3	12	3	637	648	3	1	4	693	697
0	16	2	209	222	8	3	3	773	765	10	7	3	666	678	5	12	3	669	670	5	1	4	1977	1561
2	16	2	351	354	10	3	3	1147	1108	12	7	3	848	819	7	12	3	1046	1054	7	1	4	2388	2335
4	16	2	760	779	12	3	3	1031	997	14	7	3	600	568	9	12	3	591	585	9	1	4	134	130
1	17	2	422	453	14	3	3	899	869	16	7	3	700	688	11	12	3	616	618	11	1	4	527	502
3	17	2	747	781	16	3	3	539	543	1	8	3	1150	1152	0	13	3	840	906	13	1	4	467	479
1	0	3	2799	2831	1	4	3	1646	1659	3	8	3	840	848	2	13	3	347	395	15	1	4	467	427
3	0	3	1729	1711	3	4	3	2504	2560	5	8	3	1717	1710	4	13	3	612	613	17	1	4	851	828
5	0	3	682	658	5	4	3	1249	1274	7	8	3	823	838	6	13	3	466	499	0	2	4	1024	1060
7	0	3	1428	1432	7	4	3	793	785	9	8	3	656	664	8	13	3	729	734	2	2	4	453	435
9	0	3	806	788	9	4	3	1095	1089	11	8	3	589	581	10	13	3	562	566	4	2	4	353	364
11	0	3	1161	1128	11	4	3	240	234	13	8	3	225	177	1	14	3	731	736	6	2	4	2565	2549

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)X(F)Y

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
8	2	4	1555	1524	14	6	4	440	440	9	11	4	377	365	0	1	5	1812	1850	4	5	5	1178	1190
10	2	4	337	306	16	6	4	694	673	11	11	4	658	645	2	1	5	1744	1743	4	5	5	1172	1163
12	2	4	837	819	1	7	4	530	525	13	11	4	160	163	4	1	5	2021	2019	6	5	5	867	832
14	2	4	833	804	3	7	4	507	497	0	12	4	746	776	6	1	5	1409	1354	10	5	5	864	836
18	2	4	462	440	5	7	4	1647	1711	2	12	4	623	657	8	1	5	777	749	12	5	5	747	735
1	3	4	1231	1247	7	7	4	172	140	4	12	4	361	378	10	1	5	1369	1616	14	5	5	188	126
3	3	4	2276	2324	9	7	4	1168	1165	6	12	4	601	837	12	1	5	204	207	16	5	5	567	602
5	3	4	434	423	11	7	4	179	142	8	12	4	1083	1087	14	1	5	824	773	1	6	5	1203	1239
7	3	4	1429	1423	13	7	4	325	315	1	13	4	238	229	16	1	5	430	405	3	6	5	921	925
9	3	4	327	306	15	7	4	922	916	3	13	4	740	751	1	2	5	166	374	5	6	5	1280	1260
11	3	4	825	787	0	8	4	514	522	5	13	4	250	260	3	2	5	1562	1584	7	6	5	854	662
13	3	4	1368	1324	2	8	4	425	419	7	13	4	813	921	5	2	5	311	903	9	6	5	796	782
15	3	4	364	362	4	8	4	1620	1632	9	13	4	388	398	7	2	5	1161	1158	11	6	5	860	830
17	3	4	192	166	6	8	4	1414	1434	0	14	4	240	260	9	2	5	1492	1458	13	6	5	873	875
0	4	4	636	650	8	8	4	241	241	2	14	4	711	737	11	2	5	987	957	15	6	5	460	401
2	4	4	3145	3228	10	8	4	205	241	4	14	4	958	1027	13	2	5	657	624	17	6	5	1166	1201
4	4	4	1494	1538	12	8	4	648	664	8	14	4	259	235	17	2	5	310	326	2	7	5	1953	1892
6	4	4	522	507	14	8	4	463	454	10	14	4	315	294	0	3	5	2014	2050	4	7	5	868	864
8	4	4	769	718	1	9	4	1257	1271	1	15	4	178	169	2	3	5	1400	1424	6	7	5	659	663
10	4	4	744	738	3	9	4	107	184	3	15	4	952	984	4	3	5	597	591	8	7	5	710	686
12	4	4	810	897	5	9	4	1623	1629	5	15	4	493	506	6	3	5	1180	1163	10	7	5	302	266
14	4	4	792	766	7	9	4	501	485	7	15	4	165	153	8	3	5	663	656	12	7	5	1085	1033
1	5	4	863	888	9	9	4	289	298	0	16	4	779	803	10	3	5	1468	1429	14	7	5	467	475
3	5	4	2333	2356	11	9	4	1153	1167	2	16	4	208	216	12	3	5	683	674	16	7	5	1483	1531
5	5	4	456	452	13	9	4	438	458	4	16	4	450	457	14	3	5	501	500	3	8	5	855	856
7	5	4	783	760	0	10	4	1487	1534	6	16	4	207	169	16	3	5	650	652	5	8	5	899	898
9	5	4	1805	1777	2	10	4	1229	1250	1	17	4	437	481	1	4	5	1236	1256	7	8	5	811	808
11	5	4	328	307	4	10	4	502	514	1	0	5	1850	1861	3	4	5	1565	1593	9	8	5	1012	1004
13	5	4	526	530	6	10	4	185	194	3	0	5	2019	1994	5	4	5	1432	1437	11	8	5	514	501
15	5	4	245	242	8	10	4	494	502	5	0	5	805	890	7	4	5	1065	1043	13	8	5	354	355
0	6	4	1038	1041	10	10	4	679	688	7	0	5	1254	1213	9	4	5	324	907	15	8	5	655	656
2	6	4	1136	1147	12	10	4	934	933	9	0	5	486	466	11	4	5	288	274	0	9	5	658	650
4	6	4	156	116	1	11	4	1579	1020	11	0	5	635	602	13	4	5	516	506	2	9	5	834	842
6	6	4	1453	1425	3	11	4	547	578	13	0	5	1133	1073	15	4	5	602	582	4	9	5	589	595
10	6	4	1313	1242	5	11	4	173	213	15	0	5	745	714	0	5	5	874	888	6	9	5	636	631
12	6	4	171	167	7	11	4	1052	1077	17	0	5	403	428	2	5	5	1282	1323	8	9	5	1336	1335



OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR  $\text{Ni}(\text{CO})_4(\text{F})_2$ 

PAGE 5

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
10	9	5	640	645	4	15	5	407	438	5	3	6	811	806	11	7	6	748	738	10	12	6	698	680
12	9	5	473	506	6	15	5	686	709	7	3	6	546	527	13	7	6	756	744	12	12	6	434	414
14	9	5	478	419	8	15	5	459	468	8	3	6	1388	1343	15	7	6	249	215	13	13	6	888	922
3	10	5	551	565	1	16	5	214	239	11	1	6	778	746	0	8	6	615	630	14	13	6	323	311
5	10	5	329	922	3	16	5	399	409	12	3	6	362	339	2	8	6	1441	1494	5	13	6	290	285
7	10	5	598	707	5	16	5	277	293	15	3	6	518	517	4	8	6	519	594	7	13	6	398	368
9	10	5	647	639	0	17	5	414	423	0	4	6	1677	1706	6	8	6	317	507	9	13	6	429	431
11	10	5	481	500	2	17	5	564	581	2	4	6	673	702	8	8	6	1227	1221	11	13	6	726	728
13	0	5	412	419	4	0	6	1599	1622	4	4	6	992	985	10	8	6	374	354	12	14	6	1067	1116
0	11	5	603	619	4	0	6	1739	1721	6	4	6	1781	1744	12	8	6	491	595	2	14	6	442	465
2	11	5	729	763	8	0	6	633	605	12	4	6	198	203	1	8	6	617	619	4	14	6	236	259
4	11	5	1325	1362	10	0	6	675	639	14	4	6	320	287	3	9	6	156	129	6	14	6	548	562
6	11	5	617	626	12	0	6	529	496	16	4	6	261	246	7	9	6	927	526	8	14	6	300	321
8	11	5	539	562	14	0	6	583	505	1	5	6	784	809	9	9	6	1317	1094	10	14	6	480	479
10	11	5	292	305	16	0	6	1163	1115	3	5	6	284	283	11	9	6	1051	1069	1	15	6	484	491
12	11	5	244	256	1	1	6	244	213	5	5	6	526	533	13	9	6	285	292	3	15	6	297	287
1	12	5	678	678	3	1	6	755	767	7	5	6	1762	1754	0	10	6	217	237	5	15	6	441	429
3	12	5	803	818	5	1	6	2165	2204	9	5	6	1137	1131	2	10	6	308	525	7	15	6	788	774
5	12	5	684	901	7	1	6	1069	1041	11	5	6	502	475	4	10	6	383	376	0	16	6	190	222
7	12	5	607	596	9	1	6	598	567	13	5	6	540	512	6	10	6	1017	1028	2	16	6	309	312
9	12	5	427	442	11	1	6	1066	1022	15	5	6	621	592	8	10	6	146	139	6	16	6	562	591
11	12	5	698	689	1	1	6	517	500	0	6	6	395	376	1	1				1	17	6	297	326
13	0	5	1041	1078	13	1	6	778	739	2	6	6	564	604	10	10	6	842	849	1	0	7	1642	1680
0	13	5	327	334	15	1	6	413	396	4	6	6	1544	1584	12	10	6	259	253	3	0	7	815	808
2	13	5	653	655	17	1	6	175	213	2	6	6	402	413	14	10	6	248	255	5	0	7	299	293
4	13	5	185	183	0	2	6	1610	1664	3	6	6	1073	1073	1	11	6	620	640	7	0	7	1025	997
6	13	5	364	346	2	2	6	1090	1122	5	6	6	414	410	3	11	6	385	395	9	0	7	558	527
8	13	5	667	687	4	2	6	1247	1232	10	6	6	419	419	1	11	6	350	362	11	0	7	884	853
10	13	5	885	911	6	2	6	622	624	12	6	6	1151	1123	5	11	6	1183	1186	13	0	7	511	495
1	14	5	516	541	8	2	6	946	924	14	6	6	325	352	7	11	6	256	271	15	0	7	322	296
3	14	5	367	332	10	2	6	1598	1555	16	6	6	274	251	11	11	6	485	477	17	0	7	561	573
5	14	5	586	619	12	2	6	303	267	1	7	6	1697	1737	0	12	6	244	262	0	1	7	1603	1674
7	14	5	222	210	14	2	6	368	275	3	7	6	1358	1379	2	12	6	530	567	2	1	7	638	646
9	14	5	722	746	16	2	6	334	330	5	7	6	528	536	4	12	6	176	210	4	1	7	604	599
2	15	5	285	283	1	3	6	1223	1261	6	12	6	269	278	8	12	6	1075	1101	6	1	7	1500	1468
					3	3	6	613	622	8	7	6	639	643	8	12	6	435	441	8	1	7	844	811
																		345	304					

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)X(F)Y

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
10	1	7	707	656	16	5	7	315	312	9	10	7	221	221	4	0	8	463	447	12	4	8	645	616
12	1	7	162	137	1	6	7	370	375	11	10	7	769	767	6	0	8	878	834	14	4	8	488	474
14	1	7	414	376	3	6	7	533	539	13	10	7	434	425	8	0	8	430	404	1	5	6	462	674
16	1	7	523	520	5	6	7	587	611	0	11	7	317	347	10	0	8	984	935	3	5	6	1310	1316
1	2	7	180	170	7	6	7	392	406	2	11	7	875	886	12	0	8	462	437	5	5	6	492	472
3	2	7	776	784	9	6	7	1198	1166	4	11	7	584	555	14	0	8	331	347	7	5	6	662	633
5	2	7	847	846	11	6	7	556	541	6	11	7	502	489	1	1	8	1067	1123	9	5	6	1177	1131
7	2	7	1527	1492	13	6	7	372	354	8	11	7	645	621	3	1	8	629	649	11	5	6	219	201
9	2	7	731	702	15	6	7	455	455	10	11	7	295	278	5	1	8	378	354	13	5	6	341	346
11	2	7	383	334	0	7	7	936	973	12	11	7	411	436	7	1	8	1428	1400	0	6	8	806	824
13	2	7	775	749	2	7	7	702	725	1	12	7	672	696	9	1	8	188	124	2	6	8	608	613
0	3	7	590	602	4	7	7	921	938	3	12	7	295	310	11	1	8	369	350	4	6	8	190	222
2	3	7	1315	1376	6	7	7	696	689	5	12	7	365	377	13	1	8	410	386	6	6	8	555	550
4	3	7	544	541	8	7	7	616	605	7	12	7	874	884	15	1	8	325	313	8	6	8	953	934
6	3	7	1038	1038	10	7	7	526	527	9	12	7	478	454	0	2	8	660	691	10	6	8	834	802
8	3	7	455	457	12	7	7	475	439	11	12	7	378	372	2	2	8	538	553	12	6	8	292	291
10	3	7	569	541	14	7	7	423	428	0	13	7	469	493	4	2	8	470	497	14	6	8	359	334
12	3	7	860	799	1	8	7	516	525	2	13	7	260	254	6	2	8	1508	1486	1	7	8	477	491
14	3	7	777	728	3	8	7	648	680	4	13	7	488	441	8	2	8	612	778	3	7	8	440	462
16	3	7	297	331	5	8	7	1321	1328	6	13	7	366	382	10	2	8	452	442	5	7	8	1116	1112
1	4	7	1123	1147	7	8	7	548	527	8	13	7	607	608	12	2	8	634	612	7	7	8	688	670
3	4	7	1683	1720	9	8	7	527	522	10	13	7	322	323	14	2	8	930	499	11	7	8	227	203
5	4	7	603	609	11	8	7	440	422	1	14	7	425	433	1	3	8	743	766	13	7	8	337	342
7	4	7	431	410	15	8	7	539	523	3	14	7	739	758	3	3	8	127	1242	0	8	8	406	414
9	4	7	798	770	0	9	7	512	521	5	14	7	352	356	5	3	8	326	325	2	8	8	529	536
11	4	7	181	147	2	9	7	435	432	7	14	7	435	433	7	3	8	858	825	4	8	8	1059	1074
13	4	7	839	783	4	9	7	823	852	0	15	7	329	297	9	3	8	404	310	6	8	8	919	923
15	4	7	415	357	6	9	7	837	840	2	15	7	469	489	11	3	8	555	552	8	8	8	268	287
0	5	7	249	251	8	9	7	577	569	4	15	7	626	648	13	3	8	916	881	10	8	8	215	185
2	5	7	1389	1451	10	9	7	541	535	6	15	7	357	340	15	3	8	238	228	12	8	8	465	490
4	5	7	867	876	12	9	7	713	707	8	15	7	266	248	0	4	8	488	498	1	9	8	813	632
6	5	7	635	634	14	9	7	268	255	1	16	7	187	178	2	4	8	1739	1783	3	9	8	240	231
8	5	7	1038	1014	1	10	7	1097	1141	3	16	7	445	461	4	4	8	915	933	5	9	8	1023	1003
10	5	7	884	857	3	10	7	363	349	5	16	7	162	161	8	4	8	471	473	7	9	8	346	326
12	5	7	446	433	5	10	7	626	621	0	17	7	536	563	8	4	8	536	506	9	9	8	338	373
14	5	7	259	209	7	10	7	253	271	2	0	8	625	648	10	4	8	543	530	11	9	8	798	765

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)X(F)Y

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
0	10	8	888	927	14	1	9	555	541	9	6	9	360	353	8	11	9	287	333	6	2	10	506	519
2	10	8	783	808	16	1	8	222	216	11	6	9	599	581	10	11	9	219	194	8	2	10	546	534
4	10	8	399	336	1	2	9	261	252	13	6	9	611	601	1	12	9	416	351	10	2	10	875	648
8	10	8	447	470	3	2	9	1137	1177	15	6	9	253	230	3	12	9	321	541	14	2	10	216	298
10	10	8	523	483	5	2	9	489	472	0	7	9	685	688	5	12	9	544	632	16	2	10	246	233
12	10	8	649	628	7	2	9	543	502	2	7	9	1298	1326	7	12	9	231	272	1	3	10	344	586
1	11	8	1051	1071	9	2	9	1056	1053	4	7	9	413	402	9	12	9	230	259	3	3	10	488	511
3	11	8	390	414	11	2	9	702	664	6	7	9	341	343	11	12	9	446	467	5	3	10	344	324
5	11	8	394	289	13	2	9	325	324	8	7	9	436	408	0	13	9	700	726	7	3	10	353	366
7	11	8	764	745	0	3	9	1386	1448	12	7	9	717	686	2	13	9	193	221	9	3	10	753	747
9	11	8	287	282	2	3	9	541	577	14	7	9	289	308	4	13	9	438	469	11	3	10	464	438
11	11	8	385	406	4	3	9	215	234	1	8	9	976	984	10	13	9	507	502	13	3	10	353	328
0	12	8	429	452	6	3	9	655	651	3	8	9	715	711	1	14	9	648	645	15	3	10	336	349
1	12	8	397	389	8	3	9	374	385	5	8	9	457	449	3	14	9	287	255	2	4	10	558	594
4	12	8	394	397	10	3	9	962	926	7	8	9	592	589	5	14	9	228	200	4	4	10	555	556
6	12	8	587	568	12	3	9	355	351	9	8	9	713	687	7	14	9	388	424	6	4	10	943	813
8	12	8	716	734	14	3	9	272	223	11	8	9	286	330	0	15	9	507	531	10	4	10	397	361
3	13	8	527	520	16	3	9	471	473	13	8	9	215	231	4	15	9	213	180	12	4	10	298	261
5	13	8	260	251	1	4	9	680	708	0	9	9	258	250	6	15	9	537	524	1	5	10	274	266
7	13	8	608	590	3	4	9	623	635	2	9	9	574	569	3	16	9	287	246	3	5	10	404	435
0	14	8	322	356	5	4	9	1080	1086	4	9	9	302	295	2	0	10	763	826	5	5	10	925	945
2	14	8	467	467	7	4	9	743	730	6	9	9	271	261	4	0	10	884	939	7	5	10	643	666
4	14	8	863	888	9	4	9	536	548	8	9	9	937	892	6	0	10	400	382	9	5	10	445	402
3	15	8	650	639	13	4	9	240	222	10	9	9	405	389	8	0	10	358	340	11	5	10	331	329
3	0	9	1429	1440	15	4	9	408	406	12	9	9	263	241	10	0	10	381	394	13	5	10	421	381
5	0	9	465	479	0	5	9	447	482	1	10	9	386	412	12	0	10	401	391	15	5	10	215	229
7	0	9	724	694	2	5	9	576	596	3	10	9	357	390	14	0	10	648	625	0	6	10	405	389
9	0	9	271	246	4	5	9	641	664	5	10	9	617	582	16	0	10	209	159	2	6	10	793	827
11	0	9	275	246	6	5	9	1232	1212	7	10	9	463	459	1	1	10	469	443	6	6	10	628	612
13	0	9	743	715	8	5	9	431	437	9	10	9	475	459	5	1	10	610	622	8	6	10	388	358
15	0	9	531	504	10	5	9	275	269	11	10	9	245	216	7	1	10	510	509	10	6	10	416	365
2	1	9	1131	1187	12	5	9	521	484	13	10	9	287	260	9	1	10	345	510	12	6	10	684	655
4	1	9	1340	1348	1	6	9	766	793	0	11	9	266	236	11	1	10	340	328	14	6	10	231	186
6	1	9	584	555	3	6	9	594	599	2	11	9	309	348	13	1	10	441	437	1	7	10	922	938
8	1	9	337	342	5	6	9	844	856	4	11	9	916	914	2	2	10	507	536	3	7	10	701	718
12	1	9	192	156	7	6	9	460	456	6	11	9	387	363	4	2	10	609	645	5	7	10	395	406



## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR REICOXIFY

PAGE 8

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	7	10	426	410	5	11	10	727	671	7	0	11	567	524	5	4	11	232	235	1	8	11	185	136
11	7	10	420	421	7	11	10	278	236	9	0	11	397	353	9	4	11	506	450	3	8	11	340	341
13	7	10	411	417	11	11	10	384	335	11	0	11	614	569	13	4	11	542	491	5	8	11	861	855
0	8	10	332	346	0	12	10	403	396	2	1	11	341	333	0	5	11	161	165	7	8	11	290	294
2	8	10	781	719	4	12	10	638	603	4	1	11	214	238	2	5	11	787	814	9	8	11	227	192
4	8	10	466	432	6	12	10	355	317	6	1	11	928	673	4	5	11	448	436	11	8	11	288	287
6	8	10	429	393	8	12	10	322	293	8	1	11	529	479	6	5	11	238	228	0	9	11	337	348
8	8	10	719	684	10	12	10	375	410	10	1	11	375	352	8	5	11	594	693	2	9	11	299	285
10	8	10	222	198	1	13	10	603	548	1	2	11	165	131	10	5	11	548	527	4	9	11	528	522
12	8	10	332	310	7	13	10	370	330	3	2	11	329	340	12	5	11	244	238	6	9	11	471	472
1	9	10	432	406	9	13	10	281	264	5	2	11	530	528	1	6	11	162	216	10	9	11	322	321
5	9	10	442	418	0	14	10	647	624	7	2	11	924	903	3	6	11	289	310	12	9	11	388	458
7	9	10	610	570	2	14	10	334	329	9	2	11	251	261	5	6	11	299	235	1	10	11	762	727
9	9	10	632	606	4	14	10	292	224	11	2	11	204	142	7	6	11	256	230	3	10	11	223	205
12	9	10	298	252	6	14	10	379	342	13	2	11	464	470	9	6	11	763	748	5	10	11	261	319
13	9	10	225	187	8	14	10	222	226	0	3	11	259	280	11	6	11	284	267	11	10	11	495	493
0	10	10	426	401	1	15	10	351	285	2	3	11	785	601	0	7	11	493	521	0	11	11	578	588
2	10	10	322	290	3	15	10	320	291	4	3	11	325	344	2	7	11	302	279	2	11	11	501	530
4	10	10	582	583	5	15	10	293	273	6	3	11	560	582	4	7	11	567	561	4	11	11	238	209
8	10	10	466	480	2	16	10	285	235	12	3	11	481	505	6	7	11	437	447	6	11	11	289	288
12	10	10	296	272	1	0	11	678	911	14	3	11	443	449	8	7	11	461	379	8	11	11	377	410
1	11	10	444	419	3	0	11	261	277	1	4	11	604	630	10	7	11	287	301	1	12	11	410	418
3	11	10	608	569	5	0	11	174	163	3	4	11	991	1007	14	7	11	274	271					

3.

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RH(PPH3)CL]4

OCT. 1981.

PAGE 1

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
2	0	0	2112	2018	13	4	0	2090	2111	8	10	0	1369	-1330	10	1	1	463	-446	2	5	1	1686	-1662
4	0	0	2386	2379	15	4	0	1514	1484	8	10	0	864	730	12	1	1	645	-637	3	5	1	984	985
6	0	0	4903	-4799	16	4	0	610	-708	10	10	0	1767	1762	14	1	1	510	-474	6	5	1	1803	1598
8	0	0	3384	-3342	0	8	0	4332	4310	11	10	0	777	736	1	2	1	3144	-3152	7	5	1	657	-715
10	0	0	2168	2144	1	8	0	1237	-1212	12	10	0	874	867	2	2	1	833	-801	8	5	1	1675	1655
12	0	0	674	673	2	8	0	2868	2840	1	12	0	1020	-943	3	2	1	886	-862	9	5	1	1668	-1654
16	0	0	1943	-1509	3	8	0	1818	-1729	2	12	0	1153	1066	4	2	1	315	303	11	5	1	872	-926
0	2	0	3863	-3526	4	8	0	1697	1672	3	12	0	640	-643	5	2	1	1591	1487	12	5	1	1326	-1264
1	2	0	648	-674	5	8	0	726	-716	4	12	0	1189	1223	6	2	1	1807	1680	14	5	1	1081	-1087
2	2	0	826	-770	6	8	0	582	-561	5	12	0	882	-878	7	2	1	2060	2046	15	5	1	608	625
3	2	0	2288	2303	7	8	0	1108	1136	6	12	0	755	-733	8	2	1	2449	2360	1	6	1	2536	2547
4	2	0	2888	2864	8	8	0	2878	-2549	10	12	0	2848	-1895	9	2	1	826	-814	2	6	1	2555	-2527
5	2	0	2997	2542	9	8	0	938	973	12	12	0	800	-820	11	2	1	943	-843	3	6	1	485	468
6	2	0	5910	4886	10	8	0	770	-794	3	14	0	1185	1148	12	2	1	576	-567	4	6	1	1845	-1853
7	2	0	2689	2803	11	8	0	824	-881	5	14	0	787	750	14	2	1	1110	-1107	6	6	1	1154	1100
8	2	0	595	677	12	8	0	737	-733	6	14	0	1028	1009	15	2	1	688	686	7	6	1	1360	-1340
9	2	0	1463	1482	13	8	0	856	-807	9	14	0	426	-376	3	3	1	569	565	8	6	1	1811	1775
10	2	0	732	-744	14	8	0	791	868	10	14	0	715	755	4	3	1	1688	-1672	9	6	1	882	-857
11	2	0	1228	-1239	15	8	0	846	-845	1	16	0	735	-744	5	3	1	982	-958	10	6	1	534	537
13	2	0	1119	-1187	0	8	0	4515	-4517	3	16	0	1555	-1624	6	3	1	1855	-1798	11	6	1	714	-699
14	2	0	341	-404	1	8	0	2177	2115	5	16	0	1086	-1067	8	3	1	2242	-2204	12	6	1	822	-774
19	2	0	1358	-1464	2	8	0	3203	3137	1	0	1	4450	4452	12	3	1	1503	1551	14	6	1	1117	-1150
16	2	0	1104	1172	3	8	0	704	883	3	0	1	578	532	14	3	1	1278	1250	1	7	1	2823	-2825
0	4	0	4113	4015	4	8	0	2038	1947	5	0	1	2863	-2876	1	4	1	945	-873	2	7	1	1186	1248
1	4	0	3281	3229	5	8	0	3898	3711	7	0	1	3488	-3478	2	4	1	1718	1740	4	7	1	1990	1932
2	4	0	3718	-3498	6	8	0	1433	1536	8	0	1	533	553	3	4	1	407	-414	5	7	1	1372	1379
3	4	0	773	-780	8	8	0	995	-1004	11	0	1	866	812	4	4	1	1029	982	6	7	1	836	809
4	4	0	1628	-1654	10	8	0	816	-858	15	0	1	1018	-855	5	4	1	1313	-1210	7	7	1	2166	2109
5	4	0	1124	-1093	12	8	0	480	-466	1	1	1	3752	-3764	6	4	1	1857	-1789	9	7	1	801	808
6	4	0	385	352	13	8	0	447	426	2	1	1	1885	1925	8	4	1	2558	-2562	13	7	1	405	-375
7	4	0	3642	-3722	0	10	0	540	489	3	1	1	1313	-1389	9	4	1	910	1007	1	8	1	2179	-2198
8	4	0	416	458	6	10	0	387	-408	4	1	1	2480	2851	11	4	1	1235	1144	2	8	1	2077	2100
9	4	0	2354	-2333	2	10	0	598	-620	5	1	1	2168	2162	12	4	1	1467	1461	3	8	1	473	482
10	4	0	2212	2149	3	10	0	2852	-2822	6	1	1	1557	1545	14	4	1	1538	1577	4	8	1	2807	2813
11	4	0	1518	1540	4	10	0	905	-924	7	1	1	2629	2603	15	4	1	406	-404	5	8	1	752	732
12	4	0	688	689	5	10	0	1817	-1781	8	1	1	689	711	1	5	1	1799	1844	7	8	1	1319	1335

## OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

[RH(PPH3)Cl]34

OCT. 1981.

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
4	8	1	937	-907	7	10	1	537	582	8	2	2	3487	-3532	2	5	2	2693	2615	11	8	2	528	582
13	8	1	575	-578	8	13	1	371	-398	1	2	2	2473	-2533	4	5	2	540	567	13	8	2	641	781
14	8	1	828	-851	9	13	1	820	773	3	2	2	717	-588	5	5	2	782	783	10	8	2	1253	1314
1	8	1	1195	1249	11	13	1	718	781	4	2	2	1315	1232	6	5	2	761	-778	1	9	2	1724	-1716
2	8	1	2356	-3388	2	14	1	780	722	5	2	2	1359	-1308	7	5	2	1958	1800	2	9	2	1158	1138
4	8	1	2432	-2424	4	14	1	1009	1039	6	2	2	1336	1352	8	5	2	1446	-1468	3	9	2	1633	-1653
5	8	1	1173	-1223	5	14	1	587	-616	7	2	2	834	832	9	5	2	1266	1208	4	9	2	745	-757
8	8	1	887	-803	1	15	1	741	712	8	2	2	1271	1314	10	5	2	1386	-1472	5	9	2	1746	-1764
7	8	1	545	-551	2	15	1	848	-855	10	2	2	1588	-1636	11	5	2	1086	-1036	6	9	2	1200	-1255
10	8	1	1021	1084	4	15	1	854	-845	16	2	2	1311	1255	12	5	2	534	-558	7	9	2	309	-332
11	8	1	713	781	6	15	1	587	-596	0	3	2	3355	3229	13	5	2	1174	-1211	9	9	2	568	-558
2	10	1	1378	-1319	7	15	1	549	-518	2	3	2	3244	3221	15	5	2	818	-866	10	9	2	755	769
3	10	1	867	-1006	2	16	1	787	-800	3	3	2	986	-998	0	6	2	1466	-1373	12	9	2	844	833
4	10	1	1888	-1833	4	16	1	794	-785	4	3	2	1448	-1485	1	6	2	2105	-2125	0	10	2	626	752
5	10	1	1128	-1174	1	17	1	308	359	5	3	2	2188	-2134	3	6	2	1311	-1231	1	10	2	882	877
7	10	1	881	-859	2	17	1	751	707	6	3	2	843	-884	5	6	2	863	-889	2	10	2	295	281
8	10	1	1048	1081	3	17	1	389	383	7	3	2	2217	-2212	7	6	2	1117	1038	4	10	2	515	-500
10	10	1	511	515	0	0	2	708	785	8	3	2	808	-885	8	6	2	512	543	5	10	2	828	782
11	10	1	827	837	2	0	2	2073	-2163	10	3	2	843	810	9	6	2	1173	1172	6	10	2	1331	-1350
13	10	1	646	637	4	0	2	554	842	11	3	2	1039	1010	10	6	2	747	806	7	10	2	563	557
1	11	1	943	909	6	0	2	884	731	12	3	2	588	586	11	6	2	267	-365	9	10	2	307	-389
3	11	1	581	722	8	0	2	1501	1468	13	3	2	1625	1633	13	6	2	705	-739	10	10	2	519	534
4	11	1	823	831	10	0	2	1618	1589	15	3	2	778	801	15	6	2	401	-383	13	10	2	611	-663
7	11	1	854	-730	16	0	2	1138	1116	0	4	2	413	328	16	6	2	680	-615	0	11	2	377	287
8	11	1	776	-863	2	1	2	4242	-4167	1	4	2	1051	1023	0	7	2	2855	-2707	2	11	2	325	317
13	11	1	741	-775	0	1	2	2511	-2227	2	4	2	893	884	1	7	2	1249	1285	3	11	2	520	550
2	12	1	592	-478	3	1	2	1835	1157	3	4	2	508	412	2	7	2	1318	-1871	4	11	2	663	680
3	12	1	869	885	4	1	2	3848	3550	4	4	2	1718	-1722	3	7	2	1852	1818	5	11	2	572	576
5	12	1	862	883	5	1	2	3948	864	5	4	2	1257	1216	5	7	2	1376	1321	8	11	2	640	-653
6	12	1	747	-730	6	1	2	3432	3380	6	4	2	1048	-950	6	7	2	1675	1645	10	11	2	1274	-1269
7	12	1	357	-287	7	1	2	457	478	7	4	2	885	-949	8	7	2	1420	1413	12	11	2	575	-560
9	12	1	823	-815	8	1	2	1878	1727	8	4	2	380	-396	9	7	2	750	-724	0	12	2	1136	-1130
13	12	1	1051	-1071	10	1	2	427	-387	9	4	2	981	-804	2	8	2	1375	1468	2	12	2	578	-629
2	13	1	714	705	11	1	2	855	-811	12	4	2	415	432	4	8	2	864	-865	3	12	2	536	566
4	13	1	728	808	12	1	2	715	-724	13	4	2	741	-683	6	8	2	464	-474	4	12	2	605	643
5	13	1	572	-544	16	1	2	538	541	1	5	2	1353	-1385	7	8	2	798	-782	6	12	2	813	829