

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [RE(CO)3(TNEN)(H2O)]2[RE(CO)3(T4EN)2]2

PAGE 12

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	14	325	-287	-4	3	14	607	-858	-8	4	14	943	-830	-8	1	15	456	437	-1	1	15	251	269
1	2	14	451	-462	-3	3	14	302	267	-5	4	14	392	-330	-5	1	15	300	-262	-5	2	15	424	378
-8	3	14	383	484	0	3	14	697	677	-2	4	14	1217	1138	-4	1	15	744	715	-4	2	15	833	-767
-9	3	14	565	495	1	3	14	741	-712	-1	4	14	598	-478	-2	1	15	618	-648	-2	2	15	894	-838

6.

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
1	0	0	70	-34	8	4	0	74	-91	6	9	0	347	-353	0	14	0	110	-83	-7	2	1	419	393
2	0	0	290	324	7	4	0	771	754	0	10	0	381	353	1	16	0	571	535	-5	2	1	92	74
3	0	0	510	-518	6	4	0	170	178	1	10	0	193	-115	2	16	0	138	-127	-4	2	1	150	-185
4	0	0	58	73	1	5	0	377	-398	2	10	0	1135	-1144	3	16	0	221	-226	-3	2	1	444	436
5	0	0	125	-114	2	5	0	918	918	4	10	0	95	108	4	16	0	205	147	-2	2	1	1187	1178
6	0	0	164	-199	3	5	0	188	-197	5	10	0	95	-129	1	17	0	740	242	1	2	1	208	219
7	0	0	403	-381	4	5	0	523	487	8	10	0	92	101	2	17	0	329	-358	0	2	1	2378	-2313
8	0	0	565	-568	5	5	0	238	-256	1	11	0	859	-868	3	17	0	88	-61	1	2	1	185	157
1	1	0	1734	-1758	6	5	0	354	344	2	11	0	523	-470	4	17	0	408	-415	2	2	1	110	122
2	1	0	241	-189	7	5	0	134	184	3	11	0	504	523	1	18	0	332	-307	3	2	1	88	-71
3	1	0	902	-889	8	5	0	102	-76	4	11	0	225	264	2	18	0	157	-119	4	2	1	214	-172
4	1	0	172	173	0	6	0	582	548	6	11	0	248	-294	3	18	0	540	-551	5	2	1	624	-413
5	1	0	557	-558	1	6	0	461	462	7	11	0	74	-75	4	18	0	114	126	7	2	1	959	954
6	1	0	284	-291	3	6	0	512	472	0	12	0	725	-709	2	19	0	104	-114	6	2	1	234	262
7	1	0	273	-253	4	6	0	329	324	1	12	0	719	-689	3	19	0	135	151	-6	3	1	165	142
8	1	0	133	135	5	6	0	528	-483	2	12	0	461	423	4	19	0	683	675	-8	3	1	98	-117
1	2	0	205	-182	6	6	0	247	-269	3	12	0	615	640	0	20	0	275	254	-4	3	1	187	153
2	2	0	1251	-1215	1	7	0	1059	997	4	12	0	184	-210	1	20	0	398	374	-4	3	1	97	-86
3	2	0	214	-257	2	7	0	1080	-1091	5	12	0	496	-484	3	20	0	156	168	-3	3	1	613	778
4	2	0	97	-100	3	7	0	79	70	6	12	0	236	242	-1	1	1	247	-226	-2	3	1	875	848
5	2	0	474	-435	4	7	0	392	-424	7	12	0	203	180	-7	1	1	158	-167	-1	3	1	2023	-2034
6	2	0	461	476	5	7	0	188	111	1	13	0	980	945	-4	1	1	211	205	0	3	1	1168	-1090
7	2	0	423	-415	6	7	0	145	174	2	13	0	347	336	-4	1	1	784	-744	1	3	1	405	-409
1	3	0	1336	-1340	7	7	0	246	277	3	13	0	850	938	-3	1	1	78	73	3	3	1	257	-197
2	3	0	1200	-1194	8	7	0	198	-168	4	13	0	148	-125	-2	1	1	449	469	4	3	1	90	-98
3	3	0	484	474	0	8	0	955	891	5	13	0	573	587	-1	1	1	1917	1950	5	3	1	466	-126
4	3	0	458	476	1	8	0	1406	1363	0	14	0	797	794	0	1	1	145	141	6	3	1	356	338
5	3	0	280	-290	3	8	0	160	-159	1	14	0	936	952	1	1	1	529	-536	7	3	1	218	171
6	3	0	337	-351	4	8	0	127	-186	2	14	0	936	952	2	1	1	274	-240	-7	4	1	194	230
7	3	0	360	343	5	8	0	125	137	3	14	0	410	461	3	1	1	168	-174	-6	4	1	537	-513
8	3	0	1477	-1495	6	8	0	61	-44	5	14	0	381	-416	4	1	1	71	60	-5	4	1	194	-174
1	4	0	1438	-1489	7	8	0	217	-223	6	14	0	333	-350	5	1	1	124	131	-3	4	1	860	864
2	4	0	364	-362	1	9	0	248	229	2	15	0	739	683	6	1	1	382	-340	-2	4	1	185	148
3	4	0	148	-122	2	9	0	944	-576	3	15	0	719	-698	7	1	1	198	-197	-1	4	1	2612	-2708
4	4	0	288	271	4	9	0	456	452	4	15	0	352	-368	8	1	1	281	291	0	4	1	455	-430
5	4	0	80	-73	5	9	0	116	-129	6	15	0	310	300	-4	2	1	581	574	1	4	1	1025	1068

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(PIOPH)3I2.OCLON

4/1/82

PAGE 2

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	4	1	1364	1441	1	8	1	355	-298	0	9	1	1337	1360	-3	12	1	305	-274	-2	15	1	497	460
3	4	1	574	557	-8	7	1	201	-185	1	9	1	294	-572	-2	12	1	290	310	0	15	1	181	180
4	4	1	223	222	-7	7	1	306	-377	2	9	1	395	343	-1	12	1	185	162	1	15	1	77	44
5	4	1	250	118	-6	7	1	172	185	3	9	1	306	-280	0	12	1	128	-114	2	15	1	148	-136
6	4	1	200	-220	-5	7	1	507	-492	4	9	1	81	111	1	12	1	266	-19	4	15	1	237	-291
7	4	1	242	245	-3	7	1	91	-82	5	9	1	803	-514	7	12	1	430	418	5	15	1	180	-141
-8	5	1	370	395	-2	7	1	755	776	6	9	1	286	-240	3	12	1	342	315	-5	16	1	571	539
-9	5	1	305	-284	-1	7	1	1018	981	-7	10	1	244	257	5	12	1	95	-53	-3	16	1	483	-448
-10	5	1	203	-207	0	7	1	228	-205	-8	10	1	237	190	6	12	1	351	-291	-2	16	1	103	-118
-11	5	1	124	118	1	7	1	1452	1502	-5	10	1	313	-289	7	12	1	186	161	-1	16	1	120	102
-12	5	1	502	480	2	7	1	1087	-1068	-4	10	1	213	244	-4	13	1	387	-389	0	16	1	377	377
-13	5	1	685	667	3	7	1	298	-247	-3	10	1	699	715	-4	13	1	147	134	2	16	1	640	-655
-14	5	1	404	378	4	7	1	314	-350	-2	10	1	637	603	-4	13	1	993	357	3	16	1	970	-543
-15	5	1	954	-978	5	7	1	218	-205	-1	10	1	444	-414	-3	13	1	772	704	4	16	1	113	-148
0	5	1	955	-985	6	7	1	978	-325	0	10	1	737	-740	-2	13	1	423	-416	5	16	1	260	287
1	5	1	1212	1157	7	7	1	168	169	1	10	1	450	-441	-1	13	1	427	-450	-5	17	1	127	151
2	5	1	317	-317	-8	8	1	218	-212	2	10	1	266	-239	0	13	1	466	-439	-4	17	1	602	-575
3	5	1	160	-174	-7	8	1	145	122	3	10	1	132	-145	1	13	1	152	136	-3	17	1	279	-312
4	5	1	209	-240	-6	8	1	178	-170	4	10	1	504	-492	2	13	1	405	448	-2	17	1	268	257
5	5	1	267	214	-4	8	1	400	472	5	10	1	214	224	3	13	1	710	-717	1	17	1	197	-209
6	5	1	409	382	-3	8	1	555	565	6	10	1	146	196	4	13	1	445	-413	2	17	1	278	-255
7	5	1	362	-355	-2	8	1	171	-138	-5	11	1	115	-69	5	13	1	191	134	3	17	1	170	137
-8	6	1	132	-109	-1	8	1	515	-504	-4	11	1	670	636	6	13	1	172	183	4	17	1	351	365
-9	6	1	570	-544	0	8	1	662	652	-3	11	1	921	-939	-5	14	1	110	102	-4	18	1	198	-195
-10	6	1	111	-149	1	8	1	295	284	-4	11	1	374	-367	-4	14	1	243	216	3	18	1	183	158
-11	6	1	158	162	2	8	1	711	-703	0	11	1	580	-593	-3	14	1	399	-368	-2	18	1	292	-261
-12	6	1	264	-287	3	8	1	96	-122	-1	11	1	221	205	-2	14	1	325	-347	-1	18	1	313	320
-13	6	1	1938	-1917	4	8	1	529	-542	2	11	1	254	218	-1	14	1	231	227	1	18	1	121	-106
-14	6	1	1118	1088	5	8	1	240	277	3	11	1	252	198	0	14	1	254	253	2	18	1	393	436
0	8	1	660	656	7	8	1	257	242	4	11	1	419	-435	1	14	1	675	669	-4	19	1	223	-196
1	8	1	989	1008	-8	9	1	259	265	5	11	1	652	623	3	14	1	487	-484	-1	19	1	392	437
2	8	1	520	515	-9	9	1	261	229	6	11	1	149	147	4	14	1	533	520	0	19	1	89	-109
3	8	1	151	-173	-10	9	1	286	-293	7	11	1	180	-189	6	14	1	124	-117	1	19	1	115	-104
4	8	1	229	-254	-11	9	1	350	-510	-5	12	1	345	-335	-5	15	1	181	231	3	19	1	90	97
5	8	1	220	187	-12	9	1	311	324	-6	12	1	119	-125	-4	15	1	240	214	4	19	1	168	150
6	8	1	496	-465	-1	9	1	928	931	-4	12	1	304	-301	-3	15	1	204	188	-3	20	1	200	234

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(PI(OPH)3)2.CCLO3

4/1/62

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
-1	20	1	199	189	-8	2	2	266	-181	-2	4	2	2015	-2045	4	6	2	343	-378	-1	9	2	72	-62
0	20	1	138	-94	-7	2	2	226	-196	-1	4	2	1017	963	5	6	2	171	211	-1	9	2	638	-869
2	20	2	112	196	-6	2	2	622	-407	0	4	2	584	-550	-4	7	2	219	-244	2	9	2	530	594
3	20	1	531	520	-5	2	2	101	-112	1	4	2	923	887	-7	7	2	140	188	3	9	2	268	-215
-8	0	2	452	444	-4	2	2	194	-217	2	4	2	386	-415	-6	7	2	351	357	5	9	2	351	373
-8	0	2	181	218	-3	2	2	34	-307	3	4	2	121	-117	-5	7	2	452	438	6	9	2	168	216
-8	0	2	325	306	-2	4	2	513	507	4	4	2	363	399	-4	7	2	742	-778	7	9	2	99	-118
-4	0	2	215	-142	0	2	2	514	533	5	4	2	385	340	-3	7	2	455	-515	-7	10	2	203	168
-3	0	2	1770	1772	1	2	2	548	592	6	4	2	448	440	-2	7	2	278	-285	-4	10	2	527	-496
-2	0	2	1334	-1276	2	2	2	381	-346	7	4	2	546	-571	-1	7	2	600	787	-3	10	2	245	214
-1	0	2	293	255	5	2	2	603	564	8	4	2	288	-235	0	7	2	1210	1160	-2	10	2	292	300
0	0	2	1508	-1625	6	2	2	88	-48	-6	5	2	251	-229	1	7	2	390	-364	-1	10	2	827	787
1	0	2	1188	1184	7	2	2	392	364	-7	5	2	324	-351	2	7	2	208	179	0	10	2	681	-647
2	0	2	1305	-1305	-8	3	2	208	200	-6	5	2	251	713	3	7	2	534	-561	1	10	2	284	254
3	0	2	630	-640	-7	3	2	101	-85	-5	5	2	399	-427	4	7	2	745	723	2	10	2	511	492
4	0	2	185	-209	-6	3	2	278	-293	-4	5	2	407	409	5	7	2	564	-531	3	10	2	372	390
5	0	2	786	-619	-5	3	2	351	351	-3	5	2	997	-1004	6	7	2	640	-622	4	10	2	355	383
6	0	2	303	-325	-4	3	2	342	342	-2	5	2	237	-253	7	7	2	428	449	5	10	2	184	-227
7	0	2	434	447	-3	3	2	1763	1770	-1	5	2	478	446	-7	8	2	419	433	6	10	2	150	-144
8	0	2	203	193	-2	3	2	527	561	0	5	2	208	-218	-6	8	2	336	351	7	10	2	187	154
-8	1	2	178	196	-1	3	2	1625	-1638	1	5	2	515	494	-5	8	2	348	-322	-7	11	2	189	180
-7	1	2	117	-117	0	3	2	731	783	2	5	2	1010	-988	-4	8	2	479	-450	-5	11	2	272	-276
-6	1	2	208	203	1	3	2	331	326	3	5	2	244	248	-2	8	2	860	708	-4	11	2	215	192
-5	1	2	373	-384	2	3	2	476	483	4	5	2	87	84	-1	8	2	434	-409	-3	11	2	680	844
-4	1	2	427	414	3	3	2	378	-353	5	5	2	324	-316	0	8	2	528	-574	-2	11	2	337	-328
-3	1	2	826	775	4	3	2	70	97	6	5	2	485	-505	1	8	2	1108	-1068	-1	11	2	873	-716
-2	1	2	728	698	5	3	2	398	-360	7	5	2	326	-309	2	8	2	254	-273	0	11	2	715	-710
-1	1	2	1980	-1988	6	3	2	843	854	-8	6	2	127	-105	3	8	2	348	371	1	11	2	578	571
0	1	2	1172	-1187	7	3	2	409	387	-7	6	2	205	208	4	8	2	225	283	2	11	2	378	346
1	1	2	188	152	8	3	2	20	-148	-6	6	2	178	211	5	8	2	557	-528	3	11	2	87	-109
2	1	2	2161	-2161	-6	4	2	187	-181	-5	6	2	151	144	6	8	2	45	77	4	11	2	143	-144
3	1	2	42	85	-7	4	2	470	-441	-4	6	2	897	921	7	8	2	240	240	5	11	2	217	211
4	1	2	161	-158	-5	4	2	53	-86	-1	6	2	1179	-1124	-6	9	2	132	-169	-4	12	2	247	208
5	1	2	105	71	-5	4	2	297	253	-4	6	2	1227	1159	-5	9	2	308	342	-3	12	2	418	-358
6	1	2	848	844	-6	4	2	768	741	-3	6	2	1671	-1677	-3	9	2	282	287	-2	12	2	418	-398
8	1	2	172	205	-3	4	2	878	892	2	6	2	1455	-1446	-2	9	2	136	-70	-1	12	2	425	-424

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(P(OPH)3)2·7CLO3

4/1/82

PAGE 4

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
0	12	2	422	409	6	14	2	103	107	0	1	3	73	-87	-4	4	3	84	91	4	6	3	551	-574
2	12	2	150	-150	6	14	2	83	-75	2	1	3	1149	1142	-1	4	3	143	-89	5	6	3	1027	-1055
3	12	2	111	-105	-5	18	2	272	-221	3	1	3	277	-283	0	4	3	448	-504	6	6	3	503	-513
4	12	2	435	432	-3	18	2	247	263	4	1	3	123	-94	1	4	3	748	790	7	6	3	320	326
5	12	2	238	231	0	16	2	155	193	8	1	3	739	748	2	4	3	152	-116	8	6	3	334	354
6	12	2	252	-242	1	16	2	481	-455	-6	4	3	255	-257	3	4	3	354	364	-8	7	3	173	181
7	12	2	133	143	3	16	2	699	482	-6	2	3	132	176	4	4	3	375	-411	-7	7	3	252	256
-8	13	2	302	-268	4	16	2	780	-322	-4	2	3	652	893	6	4	3	192	210	-6	7	3	325	-341
-13	13	2	309	-368	-4	17	2	374	-380	-3	2	3	345	-340	7	4	3	313	-343	-5	7	3	196	191
-13	13	2	594	620	3	17	2	437	-417	-2	2	3	592	-573	-8	4	3	150	-156	-6	7	3	182	-233
0	13	2	89	-107	3	17	2	317	-342	-1	2	3	242	-236	-4	4	3	217	167	-2	7	3	173	153
1	13	2	255	262	4	17	2	224	240	0	2	3	365	-403	-5	5	3	517	517	-1	7	3	237	157
2	13	2	100	98	-4	18	2	295	-284	1	2	3	700	695	-4	4	3	146	-146	0	7	3	384	341
1	13	2	317	283	-3	18	2	224	231	7	2	3	875	-144	-3	5	3	848	-834	1	7	3	375	-375
5	13	2	434	-511	-1	19	2	154	143	3	2	3	673	807	-2	5	3	145	137	2	7	3	758	600
-8	14	2	100	105	0	14	2	214	-242	5	2	3	847	857	-1	5	3	399	390	3	7	3	245	198
-9	14	2	343	385	2	18	2	986	294	6	2	3	498	458	0	5	3	549	-562	4	7	3	435	-493
-4	14	2	214	206	3	18	2	496	514	7	2	3	147	-141	1	5	3	649	594	5	7	3	320	315
-1	14	2	345	349	4	18	2	124	126	8	2	3	149	-164	2	4	3	138	118	6	7	3	136	164
-2	14	2	178	-177	-4	19	2	536	531	-1	3	3	137	-154	3	5	3	361	-352	7	7	3	236	229
-1	14	2	141	141	-4	19	2	142	162	-7	3	3	152	-151	4	5	3	285	336	-6	8	3	381	435
2	14	2	644	-622	-1	19	2	146	130	-5	3	3	108	92	5	5	3	168	173	-5	8	3	106	-126
3	14	2	685	-661	1	19	2	440	395	-4	3	3	303	324	6	5	3	445	-573	-4	8	3	684	-690
4	14	2	231	-198	2	19	2	304	261	-3	4	3	1743	-1721	7	4	3	718	-755	-3	8	3	72	75
5	14	2	232	-262	-3	20	2	150	-147	-2	3	3	267	291	8	4	3	337	316	-2	8	3	431	459
6	14	2	172	167	-2	20	2	224	202	1	3	3	1918	-1930	-7	6	3	257	239	-1	8	3	248	253
-6	15	2	444	434	-1	20	2	424	-526	2	3	3	423	446	-6	6	3	239	197	0	8	3	662	-629
-1	15	2	145	-139	2	20	2	72	-73	3	3	3	431	450	-5	6	3	411	-478	1	8	3	391	352
-4	15	2	216	-227	3	20	2	173	-156	4	3	3	509	527	-4	6	3	620	-581	2	8	3	912	926
-3	15	2	277	-241	-1	1	3	66	67	5	3	3	151	204	-3	6	3	471	-518	3	8	3	124	-158
-2	15	2	307	343	-6	1	3	245	228	6	3	3	317	-330	-2	6	3	703	649	4	8	3	577	542
-1	15	2	350	309	-5	1	3	57	-49	7	3	3	178	-181	-1	6	3	400	-437	5	8	3	194	-167
0	15	2	155	174	-4	1	3	531	525	-6	4	3	127	97	0	6	3	70	-83	7	8	3	249	218
1	15	2	188	-141	-3	1	3	709	749	-5	4	3	144	99	1	6	3	149	-168	-6	9	3	172	-150
2	15	2	722	-733	-2	1	3	1347	-1384	-4	4	3	147	-139	2	6	3	120	-82	-5	9	3	577	-172
3	15	2	350	352	-1	1	3	1148	-1182	-3	4	3	453	441	3	6	3	681	607	-4	9	3	332	365

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
1	3	3	428	456	4	12	3	228	-228	0	18	3	364	-954	2	0	4	830	-796	-5	3	4	161	174
1	1	3	963	-882	5	12	3	257	-246	1	18	3	122	-112	3	0	4	440	-487	-4	3	4	81	58
0	9	3	969	-942	6	12	3	215	253	3	18	3	243	296	4	0	4	196	-162	-3	3	4	157	-165
1	9	3	851	843	-14	13	3	393	398	4	18	3	252	428	5	0	4	795	844	-2	3	4	1427	1440
2	9	3	263	262	-14	13	3	136	124	-4	17	3	144	-113	4	0	4	448	447	-1	3	4	495	480
4	8	3	684	-720	-3	13	3	187	-212	-4	17	3	44	92	7	0	4	262	298	0	3	4	1304	-1337
4	8	3	539	520	-2	13	3	159	-178	-3	17	3	214	-209	8	0	4	148	-150	1	3	4	478	507
1	7	9	277	271	-1	13	3	947	879	-2	17	3	221	224	-4	1	4	314	-314	2	3	4	1192	-1224
1	7	9	296	-293	0	13	3	110	-139	-1	17	3	201	-194	-5	1	4	358	358	3	3	4	216	203
5	10	3	178	189	1	13	3	311	-333	0	17	3	416	-407	-4	1	4	504	-524	4	3	4	191	179
1	4	10	301	362	2	13	3	457	-495	-3	1	4	180	217	-3	1	4	1099	-1093	5	3	4	458	484
1	10	3	854	-819	3	13	3	234	218	-2	1	4	434	428	-2	1	4	269	314	6	3	4	401	-403
0	10	3	379	364	4	13	3	381	358	-1	1	4	104	94	-1	1	4	533	-578	7	3	4	243	-215
1	10	3	407	394	-4	14	3	87	84	0	1	4	132	-181	0	1	4	1622	1545	8	3	4	157	136
2	10	3	928	-587	-12	14	3	188	264	-2	14	3	221	280	2	1	4	124	70	-8	4	4	159	-128
3	10	3	403	-403	-1	14	3	156	122	-1	14	3	121	-127	3	1	4	187	186	-7	4	4	171	184
5	10	3	747	765	0	14	3	198	-192	0	18	3	318	299	4	1	4	695	733	-6	4	4	189	213
1	11	3	237	-259	1	14	3	140	-142	5	1	4	126	139	5	1	4	471	469	-5	4	4	544	-514
1	11	3	515	-464	2	14	3	104	110	6	1	4	146	-146	6	1	4	231	-264	-4	4	4	510	-539
1	11	3	145	-109	3	14	3	368	368	7	1	4	184	140	7	1	4	168	168	-3	4	4	198	200
-2	11	3	193	-108	4	14	3	428	-397	-1	19	3	211	-207	-8	2	4	155	171	-2	4	4	990	989
0	11	3	404	-388	5	14	3	220	241	-5	2	4	163	171	-5	2	4	83	128	-1	4	4	264	-287
0	11	3	235	-221	-6	15	3	115	161	-4	2	4	189	171	-4	2	4	338	-343	0	4	4	274	314
1	11	3	124	113	-5	15	3	245	237	-1	20	3	142	-147	-3	2	4	808	804	1	4	4	619	-598
2	11	3	390	387	-4	15	3	172	-124	0	20	3	239	201	-2	2	4	986	-1011	2	4	4	987	-951
4	11	3	220	203	-2	15	3	87	116	-1	20	3	100	132	-1	2	4	1106	1123	3	4	4	1234	1250
5	11	3	119	-100	0	15	3	148	-114	2	27	3	324	-301	0	2	4	879	804	4	4	4	130	-128
7	12	3	362	-377	1	15	3	284	-304	-7	0	4	286	239	2	4	684	695	5	4	4	1053	-1017	
-1	12	3	269	294	3	15	3	549	-542	-6	0	4	369	-383	2	4	1284	1314	6	4	4	838	-844	
-4	12	3	836	895	4	15	3	92	87	-5	3	4	772	-824	3	2	4	584	559	7	4	4	97	-87
-3	12	3	402	356	5	15	3	209	242	-4	0	4	1050	1104	4	2	4	281	-252	-7	5	4	180	193
-2	12	3	309	-309	-5	16	3	324	-292	-3	0	4	657	-680	5	2	4	451	-480	-6	5	4	337	-343
0	12	3	586	545	-4	16	3	244	-232	-2	0	4	1688	-1677	6	2	4	247	268	-5	5	4	162	157
1	12	3	441	-409	-3	16	3	148	-166	-1	0	4	1874	1859	7	2	4	189	-178	-4	5	4	321	325
2	12	3	133	-136	-2	16	3	83	-59	0	0	4	1784	1741	-7	3	4	350	-349	-3	5	4	844	862
3	12	3	771	-840	-1	16	3	138	-150	1	0	4	685	-804	-6	3	4	134	140	-2	5	4	233	210

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
-1	5	4	243	-229	-7	8	4	225	-247	-5	11	4	340	342	-2	14	4	393	359	0	20	4	323	-346
1	5	4	201	203	-8	8	4	139	-141	-3	11	4	412	-348	0	14	4	221	-209	-8	1	4	174	186
3	5	4	508	-714	-9	8	4	138	72	-2	11	4	334	-301	3	14	4	488	466	-7	1	5	262	-278
4	5	4	1067	-1056	-4	8	4	366	322	-1	11	4	241	312	6	14	4	345	-342	-6	1	4	91	82
6	9	4	103	-115	-5	8	4	553	-529	0	14	4	179	187	-8	14	4	379	-402	-5	1	9	546	471
7	5	4	441	483	-3	8	4	140	-165	1	14	4	671	-666	-4	14	4	276	-301	-4	1	4	329	-337
-7	6	4	121	113	-2	8	4	529	-530	2	11	4	391	-365	-1	15	4	626	-640	-3	1	4	178	-137
-8	6	4	326	312	-1	8	4	451	480	3	11	4	124	140	0	19	4	313	-336	-2	1	4	446	-455
-9	6	4	237	-210	0	8	4	240	229	4	11	4	673	6-3	1	15	4	168	183	-1	1	5	627	-600
-9	6	4	343	-325	1	8	4	507	-527	8	11	4	273	-289	-2	19	4	619	608	0	1	4	58	-54
-13	6	4	6	-6	2	8	4	340	-334	7	11	4	168	-184	-4	18	4	268	-283	1	1	5	118	108
-12	6	4	220	-224	5	8	4	721	738	-6	12	4	106	-88	-3	18	4	366	348	2	1	5	1965	-2002
-12	6	4	508	-504	6	8	4	362	408	-5	12	4	334	-372	-2	16	4	589	-369	3	1	5	498	-467
10	6	4	778	713	-7	9	4	177	174	-4	12	4	153	-139	-1	16	4	144	166	5	1	5	646	618
1	8	4	88	-127	-4	9	4	474	-501	-3	12	4	203	-198	2	16	4	340	-304	7	1	5	108	115
2	8	4	283	-232	-3	9	4	92	121	-2	12	4	318	304	3	16	4	136	-130	-6	2	5	132	-146
3	6	4	468	468	-2	9	4	344	304	-1	12	4	717	715	4	16	4	371	355	-7	2	5	173	-177
4	6	4	961	906	-1	9	4	203	-204	0	12	4	161	-187	-5	17	4	250	-204	-8	2	5	186	157
5	6	4	380	-372	1	9	4	316	302	1	12	4	140	-151	-3	17	4	69	-78	5	2	5	522	-501
6	6	4	118	-136	3	9	4	225	237	2	12	4	456	490	-2	17	4	271	-217	-4	2	5	1132	-1186
7	6	4	443	437	4	9	4	345	344	3	12	4	351	371	0	17	4	167	-137	3	2	5	110	104
-14	7	4	211	166	6	9	4	330	348	5	12	4	265	-302	1	17	4	378	344	-2	2	4	1344	1381
-16	7	4	102	-100	7	9	4	110	-104	6	12	4	256	-247	3	17	4	498	484	0	2	5	482	448
-16	7	4	723	-747	-6	10	4	67	-97	-6	13	4	224	232	-4	16	4	197	209	1	2	4	1534	-1583
-14	7	4	345	319	-5	10	4	104	86	-5	13	4	155	161	-2	18	4	80	115	2	2	5	428	426
-13	7	4	134	150	-4	10	4	711	756	-4	13	4	235	205	-1	18	4	97	-103	3	2	5	1444	1390
-12	7	4	643	-686	-3	10	4	122	-62	-2	13	4	602	552	0	14	4	389	348	5	2	5	280	-306
-1	7	4	1242	-1186	-2	10	4	531	-560	-1	13	4	340	316	1	18	4	495	484	8	2	5	228	-311
0	7	4	303	-289	-1	10	4	304	-254	0	13	4	365	-357	4	18	4	179	-160	7	2	5	100	-98
1	7	4	760	734	0	10	4	656	659	2	13	4	198	-163	-3	18	4	216	237	8	2	5	98	108
2	7	4	443	446	1	10	4	205	-202	3	13	4	233	-225	-2	19	4	146	-118	-7	3	5	142	-145
3	7	4	314	344	2	10	4	183	-181	6	13	4	347	-340	-1	19	4	195	205	-8	3	5	164	-163
4	7	4	696	-747	4	10	4	106	91	-6	14	4	343	326	0	18	4	130	164	-5	3	5	188	-189
5	7	4	176	-171	5	10	4	282	265	-5	14	4	233	-242	1	19	4	484	-473	-4	3	5	245	265
6	7	4	304	298	-7	10	4	235	-264	-4	14	4	266	-331	2	19	4	354	-325	-3	3	5	589	548
7	7	4	342	357	-7	11	4	192	-119	-3	14	4	307	-285	-2	20	4	208	-215	-1	3	5	1268	1292

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CU)3(P(OPH)3)2.O.CLO3

4/1/82

PAGE 7

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
0	3	5	564	527	-3	6	5	543	-584	7	8	5	153	-160	3	11	5	125	-96	0	15	5	301	-314
1	3	5	2389	2421	-2	6	5	762	-774	-8	9	5	109	-91	5	11	5	161	-237	1	15	5	226	-258
2	3	5	456	440	-1	6	5	241	-209	-5	9	5	451	363	4	11	5	324	-330	2	15	5	114	-44
3	3	5	531	387	0	6	5	231	212	-4	9	5	194	-185	-6	12	5	235	242	3	15	5	328	940
4	3	5	537	-537	1	6	5	344	-312	-3	9	5	448	-448	-5	12	5	144	183	4	15	5	194	-200
5	3	5	432	-391	2	6	5	250	261	-2	9	5	577	567	-4	12	5	87	-49	-3	16	5	288	-300
6	3	5	92	-114	3	6	5	928	-977	-1	9	5	569	545	-3	12	5	121	108	-2	16	5	386	-427
-6	3	5	144	-120	4	6	5	514	521	0	9	5	282	337	-2	12	5	443	438	-1	16	5	243	-214
-5	4	5	360	410	5	6	5	498	460	1	9	5	577	-585	-1	12	5	297	344	0	16	5	357	328
-5	4	5	318	-334	6	6	5	478	446	2	8	5	381	-365	0	12	5	788	-804	1	16	5	447	421
-3	4	5	172	225	-7	7	5	147	142	4	8	5	506	518	1	12	5	158	-131	2	16	5	190	216
-2	4	5	798	823	-8	7	5	274	310	5	9	5	190	209	2	12	5	374	-394	3	16	5	128	-75
-1	4	5	631	-648	-9	7	5	514	-525	6	9	4	340	-346	3	12	5	652	652	5	16	5	458	448
0	4	5	1014	1018	-3	7	5	126	-144	-7	10	5	165	168	5	12	5	295	-309	-4	17	5	134	117
1	4	5	748	-762	-2	7	5	831	-837	-5	10	5	257	-254	8	12	5	180	-183	-1	17	5	655	646
2	4	5	137	134	-1	7	5	125	121	-5	10	5	168	-192	-6	13	5	155	-88	0	17	5	576	544
4	4	5	595	539	0	7	5	60	-45	-4	10	5	644	-666	-4	13	5	238	-289	1	17	5	202	-195
5	4	5	501	-464	1	7	5	201	-199	-3	10	5	201	198	-3	13	5	188	225	-4	16	5	149	176
6	4	5	320	-795	2	7	5	562	-387	-2	10	5	144	235	-2	13	5	186	213	-3	16	5	281	-247
7	4	5	100	92	3	7	5	255	-246	-1	10	5	737	785	-1	13	5	611	-796	0	16	5	176	-126
-7	5	5	287	309	4	7	5	395	398	0	10	5	534	-516	0	13	5	337	-365	2	16	5	253	236
-6	5	5	370	-400	5	7	5	99	-124	1	10	5	136	-167	1	13	5	255	224	-1	16	5	235	222
-5	5	5	828	-625	6	7	5	318	341	2	10	5	473	507	2	13	5	607	820	2	16	5	118	-111
-4	5	5	275	282	7	7	5	302	-287	4	10	5	622	533	4	13	5	358	-395	3	16	5	128	-144
-3	5	5	377	397	-7	8	5	109	99	5	10	5	349	-320	5	13	5	150	-157	-2	20	5	214	207
-2	5	5	64	-46	-6	8	5	424	-458	6	10	5	180	-138	-3	14	5	474	471	-1	20	5	177	168
-1	5	5	191	-175	-5	8	5	88	-57	-7	11	5	334	-330	-2	14	5	474	-481	0	20	5	183	-205
0	5	5	292	318	-4	8	5	278	227	-6	11	5	156	-170	-1	14	5	270	-271	1	20	5	190	-228
1	5	5	142	132	-3	8	5	324	-366	-5	11	5	110	114	0	14	5	398	363	2	20	5	116	148
2	5	5	735	774	-2	8	5	241	-228	-4	11	5	299	234	1	14	5	224	209	-8	0	5	261	348
4	5	5	848	-886	0	8	5	209	-221	-3	11	5	239	240	2	14	5	200	-192	-5	0	5	711	-777
5	5	5	482	-458	1	8	5	430	425	-2	11	5	918	890	3	14	5	416	-427	-4	0	5	898	-674
7	5	5	147	132	2	8	5	252	-241	-1	11	5	918	918	5	14	5	201	-174	-3	0	5	528	570
-8	6	5	145	-139	3	8	5	218	-253	0	11	5	154	-159	8	14	5	119	139	-2	0	5	654	647
-5	6	5	593	622	4	8	5	385	-610	1	11	5	402	403	-4	15	5	308	-322	-1	0	5	314	312
-4	6	5	468	512	5	8	5	444	464	2	11	5	249	218	-2	15	5	343	-371	0	0	5	181	-180

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(PIOPH)3I2.OCL03

4/1/82

PAGE 8

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
1	0	6	717	-733	-5	3	6	626	-622	-4	6	6	405	447	6	6	6	211	-195	-3	12	6	377	366
3	0	6	1175	1146	-4	3	6	92	-114	-3	6	6	335	-353	-7	9	6	225	-162	-2	12	6	235	-210
4	0	6	60	126	-3	3	6	711	720	-7	6	6	379	-384	-5	9	6	125	-114	-1	12	6	236	-255
5	0	6	246	-251	-2	3	6	312	329	-1	6	6	177	114	-4	9	6	104	127	0	12	6	764	744
6	0	6	137	-119	-1	3	6	375	-370	0	6	6	430	-446	-2	9	6	276	326	1	12	6	698	880
7	0	6	230	216	0	3	6	354	343	1	6	6	635	618	-1	9	6	209	-247	2	12	6	527	-502
-7	1	6	171	-195	1	3	6	1073	-1085	2	6	6	100	-27	0	9	6	125	-111	4	12	6	359	-385
-8	1	6	301	-255	2	3	6	1342	1401	3	6	6	326	-361	1	9	6	755	793	-8	13	6	210	257
-9	1	6	659	-649	3	3	6	338	334	4	6	6	121	-136	2	9	6	331	294	-4	13	6	936	343
-4	1	6	93	91	4	3	6	768	-749	5	6	6	467	498	4	8	6	154	153	-2	13	6	986	-623
-3	1	6	1124	1164	5	3	6	426	-646	6	6	6	119	-97	5	9	6	286	-312	0	13	6	105	147
-2	1	6	538	555	-8	4	6	120	120	-7	7	6	160	-216	6	9	6	108	-130	1	13	6	991	-980
-1	1	6	680	719	-6	4	6	390	-411	-6	7	6	154	158	-4	10	6	368	-418	2	13	6	108	83
0	1	6	689	-627	-5	4	6	592	577	-5	7	6	463	427	-3	10	6	509	535	-6	14	6	161	-121
1	1	6	894	908	-4	4	6	604	608	-4	7	6	237	-242	-2	10	6	200	223	-4	14	6	123	-126
2	1	6	1276	1273	-7	4	6	288	-315	-2	7	6	148	-155	0	10	6	656	-574	-3	14	6	252	-256
3	1	6	607	567	0	4	6	123	-71	-1	7	6	154	114	1	10	6	594	-576	-2	14	6	698	-714
4	1	6	85	56	1	4	6	752	797	0	7	6	206	-177	2	10	6	538	-557	-1	14	6	268	-311
5	1	6	363	-343	2	4	6	320	331	1	7	6	100	-122	3	10	6	239	277	0	14	6	197	239
7	1	6	220	-231	3	4	6	1168	-1270	2	7	6	973	-865	4	10	6	60	-46	1	14	6	298	271
-8	2	6	192	-176	4	4	6	92	-104	3	7	6	562	-538	5	10	6	452	-551	2	14	6	935	518
-9	2	6	130	116	5	4	6	121	-95	4	7	6	736	740	5	10	6	114	121	3	14	6	404	-409
-4	2	6	338	-313	6	4	6	352	374	5	7	6	102	114	-8	11	6	120	-142	4	14	6	87	60
-3	2	6	414	417	-7	5	6	164	185	6	7	6	134	-134	-5	11	6	159	-605	5	14	6	213	204
-2	2	6	401	376	-6	5	6	463	405	-7	8	6	288	313	-3	11	6	631	650	-5	15	6	204	-248
-1	2	6	953	944	-5	5	6	224	217	-6	8	6	178	160	-2	11	6	169	188	-3	15	6	406	-412
0	2	6	447	-455	-3	5	6	274	248	-4	8	6	612	-646	-1	11	6	413	-401	-2	15	6	139	-147
1	2	6	204	206	-2	5	6	632	-643	-3	8	6	462	-486	0	11	6	378	-349	-1	15	6	561	529
2	2	6	983	-954	-1	5	6	662	-618	-2	8	6	168	181	1	11	6	608	602	0	15	6	558	587
3	2	6	741	-788	0	5	6	229	208	-1	6	6	514	462	2	11	6	492	514	1	15	6	156	-119
4	2	6	126	110	1	5	6	633	-650	0	6	6	177	-169	3	11	6	391	410	2	15	6	348	-408
5	2	6	220	-237	2	5	6	187	-181	1	6	6	594	-610	4	11	6	319	-310	3	15	6	294	-238
-6	2	6	199	-231	3	5	6	392	308	2	6	6	198	174	5	11	6	261	-242	5	15	6	262	271
-7	3	6	106	-100	6	5	6	170	177	3	6	6	208	221	-6	12	6	205	243	-3	16	6	500	-508
-8	3	6	336	339	7	5	6	81	-104	4	6	6	478	435	-5	12	6	234	259	-2	16	6	441	410
-9	3	6	537	535	-8	6	6	263	-274	5	6	6	124	-136	-4	12	6	446	448	-1	16	6	188	208

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(P(OPH)3)2·ClO3

4/1/82

PAGE 8

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
1	16	6	198	-143	0	2	7	583	576	-2	5	7	674	-700	5	7	7	221	-194	3	10	7	127	107
-2	17	6	241	246	1	2	7	1453	1504	-1	5	7	254	-278	6	7	7	118	-111	6	10	7	645	-535
0	17	6	637	603	2	2	7	426	403	0	7	7	300	326	-7	6	7	81	-85	-6	11	7	184	181
2	17	6	112	89	4	2	7	336	-321	1	5	7	221	254	-8	6	7	324	346	-5	11	7	126	139
4	17	6	211	-162	4	2	7	207	217	2	5	7	957	-971	-4	6	7	479	-492	-4	11	7	680	487
4	17	6	146	146	7	2	7	236	-217	3	5	7	711	-632	-3	6	7	219	211	-2	11	7	242	-198
-3	16	6	254	233	-7	3	7	110	135	4	5	7	738	742	-2	6	7	547	564	-1	11	7	119	108
-2	16	6	443	453	-6	3	7	379	386	5	5	7	351	373	-1	6	7	100	-109	0	11	7	173	-184
-1	16	6	302	330	-5	3	7	623	611	6	5	7	277	372	0	6	7	468	450	1	11	7	986	-987
0	16	6	313	-190	-4	3	7	834	808	7	5	7	231	-162	1	6	7	663	-667	2	11	7	132	-205
1	16	6	596	-562	-3	3	7	256	-267	-7	6	7	152	168	2	6	7	495	-463	3	11	7	624	-354
2	16	6	213	-214	-2	3	7	166	-146	-6	6	7	474	401	3	6	7	322	312	4	11	7	343	-377
3	16	6	146	-146	-1	3	7	737	-719	-5	6	7	321	-356	4	6	7	165	-161	5	11	7	323	352
-1	16	6	372	-393	1	3	7	1493	-1529	-4	6	7	464	-452	5	6	7	444	-442	-4	12	7	169	-85
0	16	6	259	-241	2	3	7	838	-760	-3	6	7	111	124	-5	6	7	503	-521	-3	12	7	241	-218
1	16	6	203	181	4	3	7	299	-268	-2	6	7	245	177	-4	6	7	145	112	-2	12	7	391	-360
-1	20	6	116	-133	5	3	7	197	199	0	6	7	229	-194	-3	6	7	368	358	-1	12	7	363	-376
0	20	6	208	208	-6	4	7	138	130	1	6	7	316	-242	-2	6	7	215	-207	1	12	7	120	144
-7	1	7	121	113	-6	4	7	117	-63	2	6	7	462	-419	-1	6	7	620	-785	2	12	7	480	454
-6	1	7	420	-448	-5	4	7	306	279	3	6	7	694	703	0	6	7	283	-287	3	12	7	451	-414
-5	1	7	757	-801	-4	4	7	196	-162	4	6	7	322	246	1	6	7	301	343	4	12	7	379	396
-4	1	7	102	80	-3	4	7	219	-171	5	6	7	88	130	2	6	7	375	251	5	12	7	234	227
-3	1	7	777	592	-2	4	7	300	-324	6	6	7	249	-246	3	6	7	375	251	-6	13	7	151	150
-2	1	7	86	78	-1	4	7	237	251	7	6	7	227	212	4	6	7	375	-422	-6	13	7	85	86
0	1	7	321	-338	0	4	7	650	-674	-7	7	7	137	-161	5	6	7	206	-189	-3	13	7	592	-549
1	1	7	285	-274	1	4	7	567	567	-6	7	7	221	-214	6	6	7	250	247	-2	13	7	311	-291
2	1	7	1708	1688	2	4	7	135	-83	-5	7	7	222	-246	-7	10	7	297	-313	-1	13	7	610	619
4	1	7	288	-279	3	4	7	238	-254	-4	7	7	125	-164	-6	10	7	132	166	0	13	7	453	428
6	1	7	144	156	5	4	7	242	274	-3	7	7	138	-114	-9	10	7	242	-255	1	13	7	140	159
-7	2	7	197	-176	6	4	7	241	236	-2	7	7	554	540	-4	10	7	492	437	2	13	7	163	-177
-6	2	7	940	-557	7	4	7	113	-122	-1	7	7	149	-137	-3	10	7	226	223	3	13	7	139	-139
-5	2	7	446	463	8	4	7	254	-246	0	7	7	749	676	-2	10	7	165	139	4	13	7	326	316
-4	2	7	206	166	-6	5	7	468	510	1	7	7	552	551	-1	10	7	324	-304	-4	14	7	176	-239
-3	2	7	263	295	-5	5	7	668	721	2	7	7	405	390	0	10	7	336	331	-3	14	7	493	-440
-2	2	7	206	162	-4	5	7	338	-316	3	7	7	295	274	1	10	7	566	561	-2	14	7	495	449
-1	2	7	591	-599	-3	5	7	593	-603	4	7	7	208	220	2	10	7	249	-236	-1	14	7	256	223