

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(P(OPH)3)2.OCL03

4/1/82

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
0 10	7	305	-541		-1 20	7	363	-334		1 2	0	74	-60		1 9	0	205	187		-1 0	0	308	-313	
1 10	7	344	-348		0 20	7	133	135		2 2	0	174	537		2 5	0	632	474		0 0	0	82	-43	
2 10	7	235	-244		-0 0	0	93	68		3 2	0	154	-185		3 5	0	188	187		1 0	0	424	-443	
3 10	7	113	127		-7 0	0	289	-313		6 2	0	89	-58		4 5	0	420	443		2 0	0	210	247	
4 10	7	197	184		-7 0	0	955	-512		7 2	0	204	161		5 5	0	117	-142		3 0	0	188	179	
-5 10	7	89	43		-9 0	0	205	-241		-7 3	0	218	-214		7 5	0	169	178		4 0	0	373	-384	
-4 10	7	376	-414		-4 0	0	361	365		-6 3	0	438	450		-4 6	0	457	-503		6 0	0	147	181	
-3 10	7	249	-275		-3 0	0	510	565		-5 3	0	573	538		-3 6	0	148	184		-5 0	0	183	140	
-2 10	7	139	101		-2 0	0	111	120		-4 3	0	245	-307		-2 6	0	83	-45		-3 0	0	181	188	
-1 10	7	139	-145		-1 0	0	1008	-988		-3 3	0	652	-441		-1 6	0	90	77		-2 0	0	75	-40	
0 10	7	149	203		0 0	0	437	431		-2 3	0	539	-508		0 6	0	803	585		0 0	0	468	-477	
1 10	7	492	433		-1 0	0	922	966		0 3	0	944	402		1 6	0	202	-186		1 0	0	374	-366	
2 10	7	247	271		2 0	0	715	717		1 3	0	633	654		2 6	0	844	-802		2 0	0	78	-103	
3 10	7	213	218		3 0	0	109	-161		2 3	0	574	-634		3 6	0	535	535		3 0	0	614	-616	
-4 10	7	214	-208		4 0	0	492	-422		3 3	0	281	-266		4 6	0	352	-314		4 0	0	619	-580	
-3 10	7	304	314		5 0	0	157	166		4 3	0	617	634		5 6	0	289	-275		4 0	0	131	144	
-2 10	7	348	376		6 0	0	257	-424		5 3	0	139	-153		6 6	0	173	184		-6 10	0	142	-164	
-1 10	7	408	487		-4 1	0	135	-151		6 3	0	73	57		7 6	0	184	-183		-4 10	0	106	108	
1 10	7	124	-178		-6 1	0	203	163		7 3	0	242	-221		-7 7	0	118	-87		-3 10	0	287	-280	
2 10	7	236	-244		-5 1	0	492	510		-7 4	0	275	245		-8 7	0	328	-310		-2 10	0	188	92	
3 10	7	113	111		-4 1	0	195	192		-6 4	0	486	482		-4 7	0	266	266		-1 10	0	277	-234	
-4 10	7	48	504		-3 1	0	285	-288		-3 4	0	308	-308		-3 7	0	275	294		0 10	0	239	-270	
-3 10	7	137	183		-2 1	0	56	61		-1 4	0	419	-433		-2 7	0	947	944		1 10	0	332	373	
-2 10	7	333	-327		0 1	0	222	278		0 4	0	582	-610		-1 7	0	317	302		2 10	0	147	137	
1 10	7	610	-600		1 1	0	721	722		1 4	0	542	-257		0 7	0	370	-401		3 10	0	274	-282	
2 10	7	115	-138		2 1	0	790	-759		2 4	0	243	-257		1 7	0	252	-265		4 10	0	345	346	
3 10	7	110	-100		3 1	0	827	-817		3 4	0	1251	1258		2 7	0	441	536		5 10	0	183	737	
4 10	7	248	-127		4 1	0	625	-654		4 4	0	514	444		3 7	0	343	-361		-6 11	0	123	87	
-5 10	7	488	201		5 1	0	189	-174		5 4	0	148	151		4 7	0	270	-254		-5 11	0	488	551	
-4 10	7	473	-172		-6 2	0	215	244		-6 5	0	263	-243		5 7	0	329	303		-4 11	0	130	162	
0 10	7	150	142		-6 2	0	114	-126		-4 5	0	240	-240		7 7	0	274	-264		-3 11	0	166	-403	
1 10	7	110	-63		-7 2	0	168	170		-3 4	0	86	-68		-6 8	0	238	-257		-2 11	0	276	-299	
2 10	7	115	-112		-3 2	0	124	117		-2 4	0	267	273		-4 8	0	278	303		-1 11	0	89	-87	
-3 10	7	122	135		-2 2	0	708	-744		-1 4	0	639	-604		-3 8	0	198	202		0 11	0	611	613	
-2 10	7	173	-147		-1 2	0	118	-164		0 9	0	138	146		-2 9	0	158	-165		1 11	0	337	360	
0 10	7	271	-325		C 2	0	850	-757												2 11	0	210	-242	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(PiOPH)2.OCLO3

4/1/82

PAGE 11

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
3	11	0	122	132	0	15	0	290	-312	-8	2	9	478	514	-6	4	9	277	-306
0	11	0	356	332	4	15	0	309	-320	-5	2	9	229	203	-5	5	9	320	-318
0	11	0	315	312	-4	16	0	136	124	-4	2	9	199	-179	-4	5	9	175	165
-8	12	0	171	176	-3	16	0	261	263	-3	2	9	248	-268	-2	9	9	158	162
0	12	0	239	266	-2	16	0	364	-370	-2	2	9	474	449	-1	5	9	143	94
-4	12	0	250	-206	-1	16	0	81	-104	-1	2	9	1056	865	1	5	9	147	128
-3	12	0	382	-418	0	16	0	282	277	0	2	9	104	-122	2	9	9	590	630
-2	12	0	226	222	2	16	0	161	130	1	2	9	1445	-1423	3	9	9	598	631
0	12	0	431	-424	3	16	0	134	-151	2	2	9	527	-484	4	9	9	283	-324
1	12	0	431	-447	-4	17	0	186	178	3	2	9	317	263	7	9	9	368	370
3	12	0	45	-100	-3	17	0	287	264	4	2	9	145	226	-6	6	9	470	-428
4	12	0	496	484	-1	17	0	177	182	5	2	9	103	-89	-4	6	9	72	-75
-3	13	0	117	-46	0	17	0	426	-387	-7	2	9	103	-73	-3	6	9	945	620
-4	13	0	411	-424	1	17	0	182	-179	-7	3	9	158	145	-2	6	9	131	84
-3	13	0	123	-104	2	17	0	255	-204	-5	3	9	240	-259	-1	6	9	911	464
-2	13	0	317	-209	9	17	0	165	-121	-4	3	9	598	-597	0	6	9	66	81
-1	13	0	245	-260	-2	16	0	275	-280	-1	3	9	231	-235	1	6	9	241	271
0	13	0	273	-317	-1	16	0	396	-394	0	3	9	338	-384	2	6	9	680	663
1	13	0	610	622	0	16	0	201	-193	1	3	9	154	167	3	6	9	483	-492
2	13	0	307	-283	1	16	0	210	222	3	3	9	461	429	4	6	9	132	-183
3	13	0	312	314	7	16	0	161	-133	4	3	9	157	156	5	6	9	336	-137
4	13	0	439	415	-2	16	0	285	-272	5	3	9	217	-199	-5	7	9	253	257
-1	14	0	178	-186	0	19	0	189	190	6	3	9	148	350	-4	7	9	223	257
-4	14	0	770	-261	1	19	0	151	129	7	3	9	150	97	-3	7	9	227	255
-3	14	0	297	-264	-4	1	0	165	170	-7	4	9	132	128	-2	7	9	300	-251
-2	14	0	311	273	-2	1	0	154	-938	-5	4	9	254	-223	-1	7	9	484	532
-1	14	0	461	461	-1	1	0	427	420	-4	4	9	306	-332	0	7	9	384	-393
0	14	0	287	308	0	1	0	1281	1232	-2	4	9	491	-444	1	7	9	381	374
1	14	0	180	-175	1	1	0	61	60	-1	4	9	153	186	2	7	9	405	-406
2	14	0	229	-230	2	1	0	245	-245	0	4	9	269	-247	3	7	9	625	-614
3	14	0	184	230	3	1	0	261	-246	1	4	9	242	-242	4	7	9	342	-335
4	14	0	76	-78	4	1	0	361	367	3	4	9	460	414	5	7	9	158	-172
5	14	0	104	92	5	1	0	276	-293	4	4	9	319	327	-6	8	9	184	-144
-6	15	0	79	-38	6	1	0	293	-284	5	4	9	179	191	-4	8	9	217	156
-5	15	0	687	656	7	1	0	233	-210	7	4	9	291	-264	-2	4	9	462	466
-2	15	0	408	417	-7	2	0	262	268	-7	5	9	304	346	-1	8	9	245	-256
0	8	0	466	-461	0	8	0	466	-461	0	8	0	466	-461	0	8	0	466	-461
1	8	0	265	314	1	8	0	265	314	1	8	0	265	314	1	8	0	265	314
2	8	0	392	-378	2	8	0	392	-378	2	8	0	392	-378	2	8	0	392	-378
3	8	0	361	-374	3	8	0	361	-374	3	8	0	361	-374	3	8	0	361	-374
4	8	0	150	-146	4	8	0	150	-146	4	8	0	150	-146	4	8	0	150	-146
5	8	0	261	230	5	8	0	261	230	5	8	0	261	230	5	8	0	261	230
6	8	0	202	-207	6	8	0	202	-207	6	8	0	202	-207	6	8	0	202	-207
7	8	0	273	-323	7	8	0	273	-323	7	8	0	273	-323	7	8	0	273	-323
8	8	0	149	-186	8	8	0	149	-186	8	8	0	149	-186	8	8	0	149	-186
9	8	0	581	631	9	8	0	581	631	9	8	0	581	631	9	8	0	581	631
10	8	0	218	228	10	8	0	218	228	10	8	0	218	228	10	8	0	218	228
11	8	0	562	-527	11	8	0	562	-527	11	8	0	562	-527	11	8	0	562	-527
12	8	0	429	407	12	8	0	429	407	12	8	0	429	407	12	8	0	429	407
13	8	0	140	131	13	8	0	140	131	13	8	0	140	131	13	8	0	140	131
14	8	0	352	327	14	8	0	352	327	14	8	0	352	327	14	8	0	352	327
15	8	0	135	-135	15	8	0	135	-135	15	8	0	135	-135	15	8	0	135	-135
16	8	0	163	160	16	8	0	163	160	16	8	0	163	160	16	8	0	163	160
17	8	0	344	337	17	8	0	344	337	17	8	0	344	337	17	8	0	344	337
18	8	0	412	-436	18	8	0	412	-436	18	8	0	412	-436	18	8	0	412	-436
19	8	0	278	-502	19	8	0	278	-502	19	8	0	278	-502	19	8	0	278	-502
20	8	0	278	319	20	8	0	278	319	20	8	0	278	319	20	8	0	278	319
21	8	0	136	144	21	8	0	136	144	21	8	0	136	144	21	8	0	136	144
22	8	0	368	-293	22	8	0	368	-293	22	8	0	368	-293	22	8	0	368	-293
23	8	0	509	-536	23	8	0	509	-536	23	8	0	509	-536	23	8	0	509	-536
24	8	0	539	533	24	8	0	539	533	24	8	0	539	533	24	8	0	539	533
25	8	0	110	-109	25	8	0	110	-109	25	8	0	110	-109	25	8	0	110	-109
26	8	0	187	-178	26	8	0	187	-178	26	8	0	187	-178	26	8	0	187	-178
27	8	0	248	-246	27	8	0	248	-246	27	8	0	248	-246	27	8	0	248	-246
28	8	0	115	76	28	8	0	115	76	28	8	0	115	76	28	8	0	115	76
29	8	0	403	-371	29	8	0	403	-371	29	8	0	403	-371	29	8	0	403	-371
30	8	0	281	-285	30	8	0	281	-285	30	8	0	281	-285	30	8	0	281	-285
31	8	0	204	174	31	8	0	204	174	31	8	0	204	174	31	8	0	204	174
32	8	0	400	427	32	8	0	400	427	32	8	0	400	427	32	8	0	400	427
33	8	0	50	482	33	8	0	50	482	33	8	0	50	482	33	8	0	50	482
34	8	0	175	-162	34	8	0	175	-162	34	8	0	175	-162	34	8	0	175	-162

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
-8	12	9	213	194	-1	16	9	209	-260	-7	4	10	198	199	1	5	10	490	516	4	8	10	329	356
-8	12	9	127	-148	0	16	9	243	-228	-5	2	10	268	-262	2	5	10	312	-307	5	8	10	159	-178
-4	12	9	162	-159	3	16	9	366	-342	-2	2	10	193	193	3	5	10	361	-352	6	8	10	394	-398
-3	12	9	476	-487	-3	17	9	379	-434	-1	4	10	65	110	4	5	10	229	-236	-8	9	10	143	156
-2	12	9	193	-175	-2	17	9	273	-271	1	2	10	117	-64	5	5	10	54	90	-9	9	10	321	-291
-1	12	9	372	358	-4	17	9	114	-135	2	2	10	52	7	6	5	10	342	-336	-3	8	10	233	205
0	12	9	284	275	0	17	9	181	152	3	2	10	201	197	-7	8	10	218	-223	-2	8	10	178	-123
1	12	9	148	-169	1	17	9	157	-151	5	2	10	111	-77	-6	8	10	81	95	-1	9	10	321	-327
3	12	9	965	623	3	17	9	188	-186	-7	3	10	185	179	-4	8	10	289	308	0	8	10	331	312
4	12	9	146	100	1	18	9	140	7	-5	3	10	79	-63	-2	8	10	663	736	4	9	10	358	-372
5	12	9	160	128	-7	0	10	231	236	-4	3	10	92	-105	-1	8	10	464	-514	3	9	10	410	440
-9	13	9	185	-180	-8	0	10	129	145	-1	3	10	363	-348	0	8	10	562	548	4	9	10	121	121
-4	13	9	149	-144	-5	0	10	293	259	0	3	10	303	-354	1	8	10	609	768	6	9	10	359	394
-3	13	9	453	489	-4	0	10	324	-355	1	3	10	282	-254	2	8	10	142	138	-6	10	10	146	179
-2	13	9	968	952	-3	0	10	66	-65	2	3	10	268	273	3	8	10	211	-280	-5	10	10	208	263
0	13	9	292	-254	-2	0	10	188	209	3	3	10	629	601	4	8	10	191	-195	-4	10	10	127	126
1	13	9	258	-243	-1	0	10	791	793	4	3	10	221	-164	-7	7	10	248	-249	-3	10	10	407	-374
2	13	9	280	311	0	0	10	303	-243	5	3	10	441	420	-5	7	10	101	109	-2	10	10	288	-276
4	13	9	218	-261	1	0	10	786	-775	-7	4	10	174	-173	-4	7	10	209	199	-1	10	10	388	371
5	13	9	201	-223	2	0	10	291	176	-6	4	10	363	-414	-3	7	10	198	158	1	10	10	451	-443
-9	14	9	124	-168	3	0	10	216	243	-5	4	10	217	-192	-2	7	10	439	-435	2	10	10	243	292
-4	14	9	259	332	5	0	10	92	-127	-4	4	10	110	132	-1	7	10	95	102	3	10	10	303	355
-3	14	9	147	94	6	0	10	263	-215	-3	4	10	483	448	0	7	10	447	444	4	10	10	265	202
-2	14	9	281	-236	7	0	10	182	-164	-2	4	10	43	31	1	7	10	281	251	5	10	10	198	208
-1	14	9	289	-292	-7	1	10	147	187	-1	4	10	243	-240	2	7	10	573	-561	-6	11	10	113	138
0	14	9	264	230	-6	1	10	202	210	1	4	10	221	248	3	7	10	76	82	-5	11	10	209	-257
2	14	9	321	321	-4	1	10	442	-443	2	4	10	379	408	4	7	10	268	276	-4	11	10	37	38
3	14	9	205	-217	-2	1	10	188	-189	3	4	10	609	-790	-4	8	10	206	197	-3	11	10	158	122
-4	14	9	170	140	-1	1	10	161	132	4	4	10	291	-316	-6	8	10	301	-291	-2	11	10	370	376
-2	15	9	110	67	0	1	10	1104	-117	5	4	10	138	-127	-3	8	10	426	-474	-1	11	10	177	-186
-1	15	9	293	310	1	1	10	174	173	6	4	10	186	182	-2	8	10	317	296	0	11	10	902	-471
2	15	9	285	300	2	1	10	200	224	-7	5	10	242	-256	-1	8	10	238	282	1	11	10	203	-233
3	15	9	196	-168	3	1	10	308	334	4	5	10	283	326	0	8	10	213	243	2	11	10	376	413
4	15	9	142	-127	4	1	10	110	-119	-2	5	10	302	-334	1	8	10	564	-595	5	11	10	355	-365
-4	16	9	438	442	6	1	10	262	264	-4	5	10	218	301	2	8	10	299	-285	-5	12	10	203	-214
-2	16	9	120	126	7	1	10	79	92	0	5	10	122	122	3	8	10	146	-153	-6	12	10	109	106

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(PiOPH)3I2.OCLJ3

4/1/82

PAGE 13

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
-2	12	10	193	-214	0	1	11	814	-823	3	4	11	156	143	1	8	11	527	-540
-1	12	10	164	-125	1	1	11	218	-197	-7	5	11	242	-206	2	8	11	412	414
1	12	10	371	352	2	1	11	158	-154	-4	5	11	313	349	3	8	11	246	210
4	12	10	213	-241	3	1	11	94	112	-9	5	11	346	342	4	8	11	347	428
6	12	10	110	132	4	1	11	133	-130	-2	5	11	450	-447	5	8	11	246	281
-3	13	10	305	-323	-7	2	11	83	-116	-1	5	11	474	432	-6	8	11	239	289
-2	13	10	187	174	-8	2	11	146	187	0	5	11	923	854	-4	8	11	133	-143
-1	13	10	124	134	-9	2	11	137	-169	2	5	11	327	-343	-3	8	11	174	219
0	13	10	275	273	-4	2	11	92	125	3	5	11	444	-447	-2	8	11	421	401
2	13	10	114	118	-2	2	11	320	-377	4	5	11	48	-34	0	8	11	532	-540
3	13	10	164	-157	-1	2	11	904	-937	8	5	11	288	239	1	8	11	390	-412
-3	14	10	336	346	0	2	11	111	51	-5	6	11	374	373	2	8	11	374	380
-4	14	10	235	143	1	2	11	274	320	-5	6	11	101	91	3	8	11	144	144
-3	14	10	375	348	2	2	11	222	-204	-9	6	11	253	-204	4	8	11	248	248
0	14	10	180	149	3	2	11	151	-208	-2	6	11	328	306	5	8	11	402	-409
1	14	10	398	370	4	2	11	257	-250	-1	6	11	418	386	-5	10	11	150	-113
2	14	10	174	219	5	2	11	345	324	0	6	11	204	230	-4	10	11	145	82
3	14	10	462	-445	-7	3	11	164	-134	1	6	11	309	-282	-2	10	11	185	-211
4	14	10	185	-210	-6	3	11	142	-119	2	6	11	729	-720	-1	10	11	322	-322
-2	15	10	740	-278	-5	3	11	187	-234	3	6	11	151	182	0	10	11	528	-479
-1	15	10	121	124	-4	3	11	321	349	4	6	11	344	339	1	10	11	503	515
0	15	10	193	234	-3	3	11	117	-103	5	6	11	164	-184	4	10	11	293	-244
2	15	10	104	-122	-2	3	11	109	70	6	6	11	448	-458	-3	11	11	285	-311
3	15	10	282	-238	-1	3	11	188	-178	-8	7	11	190	204	-2	11	11	389	391
0	16	10	275	-236	0	3	11	825	761	-5	7	11	280	-251	1	11	11	329	345
2	16	10	348	-357	1	3	11	139	125	-3	7	11	115	127	2	11	11	80	-85
-3	17	10	211	-210	2	3	11	283	-237	-2	7	11	85	-124	4	11	11	145	115
-1	17	10	192	-190	4	3	11	141	109	-1	7	11	680	-639	-5	12	11	198	191
0	17	10	334	319	5	3	11	177	190	1	7	11	877	-659	-4	12	11	83	-84
1	18	10	204	-176	-7	4	11	250	-240	2	7	11	87	-43	-3	12	11	564	576
7	1	11	125	125	-4	4	11	118	-167	3	7	11	245	278	-1	12	11	389	-435
-6	1	11	131	102	-3	4	11	264	275	4	7	11	367	-402	0	12	11	220	221
-8	1	11	218	-203	-2	4	11	524	510	-4	8	11	115	-121	1	12	11	393	409
-3	1	11	222	244	-1	4	11	275	-257	-3	8	11	417	-466	3	12	11	564	-331
-2	1	11	87	88	0	4	11	438	496	-1	8	11	338	338	4	12	11	184	-261
-1	1	11	82	88	2	4	11	87	-85	0	8	11	138	130	-3	13	11	111	-107

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(P(OPH)3)2.OClO3

4/1/82

PAGE 14

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	1	12	122	-135	4	5	12	339	324	-2	10	12	614	605	0	15	12	180	-203	5	4	13	91	76
5	1	12	275	207	4	5	12	108	-117	-2	10	12	111	-120	1	15	12	248	-265	-5	5	13	158	-119
6	1	12	191	172	6	5	12	234	-192	-1	10	12	348	-345	-1	18	12	219	-205	-3	5	13	87	72
-7	2	12	119	-123	-6	6	12	181	-142	0	10	12	117	99	0	18	12	171	-157	-2	5	13	568	676
10	2	12	193	205	-5	6	12	247	256	1	10	12	475	481	-5	1	13	130	-103	-1	5	13	308	-277
-14	2	12	195	-170	-3	6	12	149	-93	3	10	12	134	122	-4	1	13	323	331	0	5	13	268	-277
12	2	12	120	38	-1	6	12	183	243	4	10	12	118	-131	-3	1	13	134	-141	1	5	13	214	-213
0	2	12	136	-88	0	6	12	346	-348	-5	11	12	99	89	-2	1	13	840	-794	2	5	13	278	-278
1	2	12	613	-371	1	6	12	254	-275	-4	11	12	137	140	-1	1	13	222	-218	3	5	13	598	529
2	2	12	177	147	2	6	12	126	121	-3	11	12	256	-282	0	1	13	333	328	4	5	13	288	248
3	2	12	286	280	3	6	12	337	-352	-2	11	12	423	-401	1	1	13	113	131	5	5	13	471	-437
-1	3	12	787	-783	5	6	12	314	314	0	11	12	439	414	4	1	13	294	-293	-6	6	13	141	-107
0	3	12	100	109	-4	7	12	466	-536	1	11	12	198	171	5	1	13	194	181	-5	6	13	158	101
1	3	12	498	508	-2	7	12	577	587	2	11	12	534	-522	-6	2	13	258	-408	-4	6	13	356	347
1	3	12	196	233	0	7	12	945	-559	3	11	12	514	-492	-4	2	13	178	-118	-3	6	13	284	242
3	3	12	487	-509	1	7	12	210	-225	-4	11	12	166	-192	-3	2	13	828	-798	-2	6	13	111	-191
4	3	12	189	-180	2	7	12	203	208	-4	12	12	208	-179	-1	2	13	608	621	-1	6	13	695	-720
6	3	12	354	362	3	7	12	133	132	-3	12	12	132	-184	0	2	13	608	608	0	6	13	384	-377
-14	4	12	208	-275	4	7	12	330	342	-1	12	12	139	128	2	2	13	177	-171	1	6	13	198	-178
-13	4	12	383	-385	5	7	12	506	-498	0	12	12	377	370	4	2	13	169	191	2	6	13	128	107
-2	4	12	216	179	-5	8	12	213	231	4	12	12	132	-130	5	2	13	411	459	3	6	13	144	-128
0	4	12	5088	1935	-4	8	12	150	-182	-4	12	12	161	158	-3	3	13	270	-325	4	6	13	308	-280
1	4	12	213	184	-2	8	12	288	-301	-4	13	12	317	269	-4	3	13	161	-151	-5	7	13	268	288
2	4	12	270	222	-1	8	12	418	-442	-3	13	12	342	371	-3	3	13	263	284	-4	7	13	419	-468
3	4	12	189	-217	0	8	12	414	-458	-2	13	12	268	252	-2	3	13	430	414	-2	7	13	327	-324
4	4	12	474	468	1	8	12	242	261	0	13	12	225	205	-1	3	13	362	310	-1	7	13	288	-284
5	4	12	245	237	2	8	12	208	207	1	13	12	88	-61	0	3	13	88	-119	0	7	13	48	58
6	4	12	321	-319	3	8	12	130	-124	2	13	12	90	88	2	3	13	273	301	1	7	13	145	158
-14	5	12	128	255	4	8	12	934	-612	-3	13	12	188	-184	3	3	13	161	174	4	7	13	514	514
-13	5	12	113	156	5	8	12	105	88	-3	14	12	345	-344	4	3	13	232	151	5	7	13	58	41
-2	5	12	204	181	-6	9	12	142	-188	-1	14	12	194	230	5	3	13	419	-376	-5	8	13	302	-310
0	5	12	281	280	-5	9	12	215	244	0	14	12	303	-301	-5	4	13	217	231	-3	8	13	369	370
1	5	12	178	-174	-4	9	12	361	-364	-4	14	12	235	-245	-4	4	13	217	165	-2	8	13	207	-182
2	5	12	271	-245	-2	9	12	248	259	2	14	12	331	-320	-1	4	13	461	448	0	8	13	82	82
1	5	12	150	-180	1	9	12	403	421	3	14	12	157	-169	1	4	13	294	300	1	8	13	487	479
2	5	12	288	288	4	9	12	432	423	-2	15	12	185	179	3	6	13	688	-824	2	8	13	84	-102

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MNICO3(P10PH)312.OCL03

4/1/82

PAGE 15

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	8	13	422	393	-1	14	13	191	-214	-1	3	14	63	100	-4	8	14	223	-233	-2	13	14	345	-350
4	8	13	118	-118	0	14	13	301	-246	0	3	14	182	178	-3	8	14	280	-316	-1	14	14	375	-340
-9	8	13	130	81	2	14	13	372	407	1	3	14	106	-72	-1	8	14	239	298	0	14	14	162	-177
-4	8	13	493	813	-2	13	13	144	-170	3	3	14	425	377	0	8	14	368	342	-5	1	15	258	-210
-3	8	13	172	-200	-1	15	13	145	-181	4	3	14	278	274	2	8	14	333	290	-4	1	15	332	-344
-2	8	13	437	-488	0	15	13	116	-104	5	3	14	451	-21	3	8	14	115	120	-2	1	15	481	-439
-1	8	13	181	-188	-5	0	14	191	144	-6	4	14	104	-120	4	8	14	283	268	-1	1	15	285	277
0	8	13	370	406	-3	0	14	1152	-1178	-4	4	14	285	331	-5	8	14	274	-284	0	1	15	280	288
2	8	13	418	-352	-2	0	14	158	-147	-3	4	14	835	582	-2	8	14	117	119	1	1	15	110	-95
3	8	13	291	-276	-1	0	14	388	382	-2	4	14	313	387	-1	8	14	590	578	3	1	15	256	251
4	8	13	105	-120	0	0	14	638	701	-1	4	14	474	-448	0	8	14	250	227	4	1	15	127	146
-4	10	13	408	-422	1	0	14	103	-53	1	4	14	172	-211	1	8	14	255	-235	-5	2	15	244	-285
-3	10	13	293	-275	3	0	14	372	-322	2	4	14	140	125	3	8	14	133	101	-3	4	15	778	787
-1	10	13	192	149	4	0	14	240	242	4	4	14	316	-301	-4	10	14	184	130	-2	4	15	151	82
0	10	13	537	542	8	0	14	728	724	5	4	14	148	-206	-3	10	14	175	-184	4	2	15	120	-81
1	10	13	190	-210	-5	1	14	104	-84	-2	5	14	245	-247	-2	10	14	214	192	6	2	15	678	-589
-4	10	13	148	173	-4	1	14	526	-583	-1	5	14	247	-217	-1	10	14	190	216	-6	3	15	288	325
-3	11	13	190	234	-2	1	14	255	288	0	5	14	66	20	-2	10	14	163	-182	-3	3	15	248	230
-3	11	13	259	221	-1	1	14	301	324	1	4	14	221	-251	2	10	14	281	-266	-1	3	15	252	-278
-1	11	13	411	428	1	1	14	308	-274	2	4	14	216	-176	3	10	14	436	-435	1	3	15	81	-104
0	11	13	342	318	2	4	14	318	303	4	5	14	160	178	-4	11	14	257	-262	2	3	15	250	-243
1	11	13	425	-428	3	1	14	127	-90	9	5	14	168	173	-2	11	14	243	276	-5	4	15	97	-73
3	11	13	192	-148	4	1	14	357	332	-7	8	14	511	-573	-1	11	14	184	168	-3	4	15	271	293
-4	12	13	219	200	4	1	14	393	-300	-4	6	14	184	-166	0	11	14	184	-158	-2	4	15	134	-126
-3	12	13	352	-346	-6	2	14	154	114	-2	8	14	205	-182	2	11	14	188	-131	-1	4	15	357	-344
-1	12	13	169	185	-5	2	14	126	140	-1	6	14	126	-111	3	11	14	358	367	1	4	15	151	-165
0	12	13	298	-262	-3	2	14	258	-278	0	8	14	108	91	-3	12	14	281	328	2	4	15	418	371
2	12	13	189	-211	-1	2	14	332	310	1	6	14	136	121	-2	12	14	303	292	4	4	15	217	-212
3	12	13	281	-270	1	2	14	89	104	2	6	14	277	307	-1	12	14	134	-111	-4	5	15	143	154
-4	13	13	304	-303	2	2	14	101	-112	3	6	14	130	167	0	12	14	438	-515	-5	5	15	177	157
-3	13	13	142	-102	3	2	14	266	-237	4	6	14	227	-180	1	12	14	258	209	-2	5	15	460	-482
-2	13	13	220	237	-8	3	14	205	217	-4	7	14	380	375	2	12	14	346	328	-1	5	15	185	-154
2	13	13	76	98	-5	3	14	214	-247	-3	7	14	142	-139	-2	13	14	89	-94	0	5	15	180	-184
3	13	13	452	450	-4	3	14	362	-343	-2	7	14	368	-361	-1	13	14	240	-208	1	5	15	220	-190
-3	14	13	123	88	-3	3	14	194	-217	1	7	14	148	-143	0	13	14	148	-180	3	5	15	248	-249
-2	14	13	291	275	-2	3	14	814	801	3	7	14	152	-131	1	13	14	147	149	4	5	15	191	-147

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

MN(CO)3(P(OPH)3)2.7ClO3

40102

PAGE 10

N	K	L	10FO	10FC	N	K	L	10FO	10FC	N	K	L	10FO	10FC	N	K	L	10FO	10FC	N	K	L	10FO	10FC
-5	8	15	198	-202	0	13	15	298	-273	-4	9	16	259	-241	0	10	16	202	-211	1	7	17	185	-187
-3	8	15	190	-125	-5	0	16	134	-177	-3	9	16	325	-155	-2	10	16	289	-304	-2	8	17	116	-169
-2	6	15	394	-425	-3	0	16	431	-493	-2	9	16	189	-231	-1	11	16	171	-174	0	8	17	208	-204
-1	6	15	90	-64	-1	0	16	177	-134	-1	9	16	144	-110	0	11	16	127	-115	-2	9	17	163	-154
0	6	15	180	-182	1	0	16	343	-341	0	9	16	155	-163	1	11	16	326	-279	-1	8	17	265	-246
1	6	15	202	-192	2	0	16	288	-303	1	9	16	457	-409	-4	1	17	175	-157	1	9	17	477	-451
3	6	15	106	-85	3	0	16	124	-98	2	9	16	476	-463	-2	1	17	107	-116	-3	0	16	145	-156
4	6	15	955	-617	4	0	16	449	-458	3	9	16	776	-979	0	1	17	209	-191	-2	0	16	120	-130
-4	7	15	94	91	-4	1	16	304	-279	-4	6	16	476	-54	1	1	17	368	-325	0	0	16	417	-329
-1	7	15	457	481	-2	1	16	198	-158	-2	6	16	255	-274	2	1	17	254	-224	1	0	16	244	-176
1	7	15	218	261	2	1	16	143	-175	0	8	16	137	-102	3	1	17	290	-302	2	0	16	437	-418
3	7	15	226	187	3	1	16	426	-529	1	6	16	211	-145	4	2	17	743	-649	6	1	16	77	-31
4	7	15	144	-161	-4	1	16	132	-126	2	6	16	173	-215	-3	2	17	142	-150	1	1	16	410	-395
-4	8	15	110	104	-5	2	16	205	-185	-4	7	16	246	-220	4	3	17	77	-66	1	2	16	68	-57
-2	8	15	260	-285	-4	2	16	123	-140	-2	7	16	188	-156	-3	3	17	122	-117	-2	3	16	316	-123
2	8	15	473	-400	-1	2	16	137	-110	-1	7	16	126	-202	-2	3	17	92	-111	-1	3	16	156	-118
3	8	15	157	-159	4	2	16	117	-131	0	7	16	739	-267	0	3	17	254	-358	-1	3	16	508	-474
-4	8	15	246	-779	-5	3	16	254	-287	1	7	16	277	-426	1	3	17	397	-358	2	3	16	287	-269
1	9	15	82	-75	-4	3	16	165	-163	2	7	16	477	-70	2	3	17	298	-242	0	4	16	331	-293
2	8	15	122	-86	-2	9	16	264	-247	3	7	16	193	-196	3	3	17	384	-538	1	4	16	144	-93
3	8	15	174	168	0	9	16	96	-87	-3	8	16	172	-5	-4	4	17	146	-154	-4	5	16	210	-67
-3	10	15	216	-256	2	9	16	114	-101	-2	8	16	347	-294	1	4	17	97	-89	0	5	16	182	-164
0	10	15	239	-200	3	9	16	407	-399	-1	8	16	240	-262	3	4	17	412	-146	1	5	16	332	-300
1	10	15	224	-202	4	9	16	143	-141	0	8	16	45	-80	1	5	17	625	-393	-2	6	16	83	-91
2	10	15	197	-142	-4	4	16	189	-194	2	8	16	959	-911	-2	6	17	112	-154	-1	6	16	294	-213
3	10	15	141	-115	-3	4	16	279	-227	3	8	16	63	-65	3	7	17	86	-51	0	7	16	182	-140
-2	11	15	120	-132	-2	4	16	362	-311	-1	9	16	132	-126	-1	6	17	250	-248	-1	7	16	364	-170
1	11	15	287	-293	0	4	16	308	-312	0	9	16	171	-159	1	6	17	184	-188	-1	1	19	314	-321
1	11	15	141	-182	1	4	16	145	-148	1	9	16	233	-143	4	6	17	410	-647	0	1	19	130	-121
2	11	15	442	-436	2	4	16	466	-446	2	9	16	326	-269	-3	7	17	154	-127	-1	2	19	136	-132
-1	12	15	392	-386	3	4	16	283	-265	-1	10	16	186	-228	0	7	17	262	-232	0	2	19	467	-451
-1	13	15	216	-225																				

7.

STRUCTURE FACTORS FOR [MN(CO)3(DIPHOS)(-OBFS)](C6H5)2CH3P3

PAGE 1

H	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	6	901	-875	6	7	0	442	438	6	11	0	497	528	3	18	0	189	-177
4	0	787	-885	7	7	0	374	358	7	11	0	377	348	1	18	0	241	325
4	0	986	-1317	8	7	0	281	285	0	11	0	1001	-903	1	20	0	221	200
4	0	887	-697	10	7	0	309	317	3	12	0	166	-116	-13	0	1	307	288
4	0	411	381	11	7	0	319	290	5	17	0	242	-250	-11	0	1	268	348
4	0	157	136	0	8	0	548	-552	6	12	0	198	108	-8	0	1	160	155
4	0	301	328	1	8	0	680	-638	8	12	0	383	353	-7	0	1	1215	-1366
4	0	403	-401	2	8	0	647	-542	9	12	0	172	136	-5	0	1	1392	-1462
4	0	487	-477	3	8	0	180	-177	11	12	0	212	184	-3	0	1	413	401
4	0	198	187	4	8	0	208	-175	1	14	0	468	-473	-1	0	1	958	801
5	0	1949	1833	5	8	0	761	-455	2	13	0	404	-363	1	0	1	2744	2868
5	0	318	321	7	8	0	442	-423	3	13	0	416	-400	3	0	1	1194	1166
5	0	234	-287	13	8	0	306	283	4	13	0	348	-333	5	0	1	2542	2543
5	0	171	-188	1	9	0	1374	1271	5	13	0	448	-444	7	0	1	457	412
5	0	243	-251	2	9	0	1274	-1216	7	13	0	219	-251	9	0	1	188	172
5	0	378	347	3	9	0	529	-514	0	14	0	865	838	11	0	1	207	160
5	0	834	-840	4	9	0	628	-620	2	14	0	429	385	-13	0	1	553	-573
5	0	583	-578	6	9	0	558	-620	3	14	0	183	-172	-10	1	1	121	-85
5	0	140	-161	7	9	0	148	-188	5	14	0	187	-51	-9	1	1	601	677
5	0	240	-185	8	9	0	198	-178	6	14	0	284	-292	-5	1	1	224	245
5	0	147	134	11	9	0	228	-156	8	14	0	241	-211	-7	1	1	600	617
5	0	259	228	13	9	0	182	-185	1	15	0	283	288	-6	1	1	278	226
5	0	617	966	0	10	0	989	881	2	15	0	481	441	-9	1	1	285	-286
5	0	836	-633	1	10	0	858	781	3	15	0	188	183	-4	1	1	815	-781
5	0	1460	1422	2	10	0	713	693	4	15	0	289	263	-3	1	1	883	-780
5	0	283	265	3	10	0	442	424	5	15	0	368	334	-2	1	1	301	-288
5	0	785	818	4	10	0	221	177	6	15	0	338	337	-1	1	1	2482	-2243
5	0	358	365	5	10	0	447	441	9	15	0	249	-235	1	1	1	486	-584
5	0	308	361	6	10	0	261	-248	0	16	0	248	-247	2	1	1	1523	1558
5	0	248	-283	8	10	0	131	140	9	16	0	225	208	3	1	1	1812	-1798
5	0	407	417	9	10	0	289	-266	1	17	0	348	-373	4	1	1	1078	1077
5	0	186	186	12	10	0	293	-327	3	17	0	187	-173	5	1	1	716	687
7	0	1838	-1474	1	11	0	995	-934	4	17	0	210	164	6	1	1	841	883
7	0	125	-80	2	11	0	181	78	7	17	0	181	117	7	1	1	819	803
7	0	148	-160	3	11	0	291	268	1	18	0	298	-328	8	1	1	241	-258
7	0	748	-645	5	11	0	148	117	2	18	0	337	-327	8	1	1	271	230

M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC	M	K	L	10FO	10FC
3	3	1	203	-242	-1	5	1	882	-836	-5	7	1	551	-489	-3	9	1	620	576
6	3	1	563	-543	0	5	1	628	-572	-4	7	1	302	-281	-2	9	1	855	-822
7	3	1	1114	-1138	1	5	1	908	888	-3	7	1	691	-655	-1	9	1	841	767
9	3	1	261	-262	2	5	1	410	199	-4	7	1	648	749	0	9	1	221	227
1	3	1	239	-200	3	5	1	87	-122	-1	7	1	210	148	1	9	1	634	607
2	3	1	112	148	4	5	1	216	-234	1	7	1	345	-349	2	9	1	186	193
3	3	1	176	168	5	5	1	225	-246	2	7	1	253	-262	3	9	1	860	-753
1	4	1	176	-209	6	5	1	594	608	3	7	1	284	-283	4	9	1	542	540
0	4	1	137	136	8	5	1	237	-183	4	7	1	909	-115	6	9	1	926	598
7	4	1	620	-621	10	5	1	369	356	5	7	1	450	463	7	9	1	377	-457
8	4	1	538	555	11	5	1	431	381	6	7	1	1145	-1230	8	9	1	308	-308
5	4	1	1066	818	-14	6	1	182	-86	7	7	1	352	332	9	9	1	487	-434
4	4	1	421	-363	-10	6	1	304	-303	8	7	1	361	345	11	9	1	270	-262
4	4	1	472	-251	-8	6	1	718	717	-10	7	1	208	-179	-10	10	1	302	284
3	4	1	3003	2706	-7	6	1	446	437	-12	8	1	294	-295	-8	10	1	514	463
2	4	1	116	-106	-6	6	1	688	-622	-11	8	1	157	-218	-8	10	1	587	576
1	4	1	345	346	-5	6	1	144	182	-9	8	1	218	-213	-5	10	1	265	-281
0	4	1	352	354	-4	6	1	207	-200	-8	8	1	420	-418	-4	10	1	551	-524
1	4	1	1966	-2197	-3	6	1	888	-356	-6	8	1	196	-183	-3	10	1	441	380
3	4	1	1196	1582	-2	6	1	1067	-897	-5	8	1	751	664	-1	10	1	390	344
5	4	1	742	764	-1	6	1	172	-136	-4	8	1	150	-78	0	10	1	588	-542
-	4	1	110	80	0	6	1	1531	-1442	-3	8	1	574	470	1	10	1	582	598
8	4	1	448	-443	1	6	1	862	-764	-2	8	1	1203	1097	2	10	1	364	-348
6	4	1	210	-194	2	6	1	294	-312	-1	8	1	282	-278	3	10	1	313	372
8	4	1	346	-366	3	6	1	215	231	0	8	1	1762	1654	4	10	1	218	-258
0	4	1	508	-463	4	6	1	302	342	2	8	1	589	418	5	10	1	290	285
2	4	1	471	-405	5	6	1	370	429	3	8	1	617	-63	6	10	1	341	377
3	4	1	274	-260	6	6	1	544	665	4	8	1	1934	-1153	7	10	1	404	387
4	5	1	226	163	7	6	1	187	200	7	8	1	223	-204	8	10	1	322	301
1	5	1	188	-167	8	6	1	480	544	8	8	1	519	-508	12	10	1	227	208
8	5	1	171	211	10	6	1	270	247	-10	8	1	144	-361	-7	11	1	338	-343
4	5	1	827	-76	11	6	1	262	272	-10	8	1	217	194	-8	11	1	219	238
6	5	1	787	-767	-14	7	1	268	-307	-9	8	1	227	-210	-4	11	1	198	185
8	5	1	487	438	-8	7	1	503	-464	-7	9	1	139	123	-3	11	1	284	230
4	5	1	364	366	-6	7	1	145	171	-6	8	1	603	-548	-2	11	1	577	557
3	5	1	836	753	-6	7	1	172	-157	-5	9	1	631	587	-1	11	1	724	-704

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [MN(CO)3(DIPHOS)](H2OBF3)]3.(C6H5)2CH3PO

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	H	K	L	10FO	10FC
0	11	1	115	-66	11	13	1	267	-236	-12	0	2	233	242	-5	2	2	955	-667	-13	4	2	340	426					
1	11	1	221	-232	-9	14	1	191	157	-10	0	2	745	683	-4	2	2	637	-561	-8	4	2	223	214					
2	11	1	107	-170	-7	14	1	459	-367	-8	0	2	508	577	-3	2	2	229	225	-7	4	2	414	-396					
3	11	1	178	-210	-5	13	1	163	-165	-6	0	2	261	261	-2	2	2	624	573	-6	4	2	360	-369					
4	11	1	215	-438	-4	14	1	327	316	-4	0	2	1214	-1153	-1	2	2	1318	-1278	-5	4	2	1016	882					
5	11	1	339	424	-3	14	1	908	-366	-2	0	2	504	-471	0	2	2	1142	1110	-4	4	2	303	-300					
6	11	1	962	848	1	14	1	367	388	2	0	2	1204	-1161	1	2	2	182	-188	-3	4	2	797	746					
7	11	1	333	356	4	14	1	242	276	4	0	2	260	-247	2	2	2	355	-361	-2	4	2	143	-121					
8	11	1	333	356	4	14	1	242	276	4	0	2	1204	-1161	1	2	2	182	-188	-3	4	2	797	746					
9	11	1	161	150	-7	15	1	242	240	6	0	2	260	-247	2	2	2	355	-361	-2	4	2	143	-121					
10	11	1	209	162	-6	15	1	426	-237	8	0	2	1893	1626	3	2	2	544	-604	-1	4	2	1883	1728					
-1	12	1	170	-176	-1	15	1	413	-411	10	0	2	1483	1389	4	2	2	276	-224	0	4	2	1260	1084					
-2	12	1	180	-210	2	15	1	130	107	12	0	4	217	-173	5	2	2	614	-768	1	4	2	1138	-1137					
-3	12	1	214	-272	4	15	1	359	346	14	0	2	376	-364	6	2	2	857	-849	2	4	2	239	273					
-4	12	1	202	-246	6	15	1	327	398	-14	1	2	444	-470	7	2	2	577	577	3	4	2	1057	1286					
-5	12	1	260	265	7	15	1	247	329	-11	1	2	247	-261	8	2	2	208	-216	4	4	2	221	216					
-6	12	1	183	-181	-3	16	1	206	174	-10	1	2	325	-354	9	2	2	223	217	5	4	2	1173	1138					
-7	12	1	604	-523	-1	16	1	980	323	-8	1	2	1017	1075	10	2	2	347	-307	6	4	2	586	584					
-8	12	1	321	-326	0	16	1	241	-230	-7	1	2	378	392	11	2	2	222	200	7	4	2	444	-435					
-9	12	1	202	261	2	16	1	173	-117	-6	1	2	753	750	12	2	2	207	162	8	4	2	228	230					
-10	12	1	371	-439	5	16	1	269	-318	-5	1	2	209	173	-14	3	2	145	127	9	4	2	384	-335					
-11	12	1	354	-379	6	16	1	218	253	-3	1	2	579	476	-10	3	2	738	792	11	4	2	470	-439					
-12	12	1	201	-214	8	16	1	267	237	-2	1	2	1402	1216	-8	3	2	268	266	13	4	2	325	-278					
-13	12	1	148	-107	-4	17	1	233	210	-1	1	2	844	-623	-6	3	2	168	-164	-11	5	2	156	160					
-14	12	1	181	177	-3	17	1	477	-441	0	1	2	1200	-1246	-5	3	2	192	184	-8	5	2	260	305					
-15	12	1	160	83	0	17	1	164	-207	1	1	2	843	1023	-3	3	2	1916	-1731	-7	5	2	169	-263					
-16	12	1	244	-240	2	17	1	329	-328	4	1	2	1574	-1480	-2	3	2	787	695	-4	5	2	827	-562					
-17	12	1	227	202	6	17	1	166	-78	6	1	2	346	346	-1	3	2	792	-725	-3	5	2	784	-763					
-18	12	1	226	202	-4	18	1	223	166	7	1	2	891	-647	0	3	2	430	449	-2	5	2	1008	868					
-19	12	1	248	224	-2	18	1	224	190	10	1	2	294	290	1	3	2	814	850	3	5	2	699	-617					
-20	12	1	611	-554	-1	18	1	314	-465	10	1	2	401	395	4	3	2	853	843	-1	5	2	679	-761					
-21	12	1	1166	1066	0	18	1	341	338	12	1	2	598	592	5	3	2	616	-661	4	5	2	921	-1051					
-22	12	1	917	-908	0	19	1	204	244	-11	2	2	320	-365	6	3	2	177	-150	5	5	2	350	367					
-23	12	1	464	451	2	19	1	226	189	-10	2	2	325	-345	7	3	2	677	-664	6	5	2	411	-407					
-24	12	1	207	-171	3	19	1	165	108	-9	2	2	363	-393	8	3	2	734	-760	7	5	2	947	923					
-25	12	1	390	-371	0	20	1	358	-405	-8	2	2	198	-296	9	3	2	487	-437	8	5	2	393	362					
-26	12	1	238	-180	-14	0	2	166	126	-6	2	2	431	424	12	3	2	280	-275	10	5	2	178	156					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR [Mn(CO)5(PHOS)(40BF3)], (C6H5)2CH3PO

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
11	8	2	442	454	3	7	2	200	-182	8	9	2	442	385	-8	12	2	291	-236	-2	15	2	426	3-4
12	5	2	401	366	7	4	2	225	249	10	8	2	442	-362	-5	12	4	246	-219	-1	15	2	296	-253
13	6	2	261	-232	9	7	2	827	-771	12	8	2	304	-263	-3	12	2	933	-512	3	15	2	247	310
-11	6	2	185	-253	7	7	2	489	-476	-10	10	2	341	357	-2	12	2	462	428	4	15	2	179	-226
-10	6	2	238	-244	10	7	2	407	328	-9	10	2	270	307	-1	12	2	323	323	5	15	2	347	389
-9	6	2	508	-481	11	7	2	463	-435	-7	10	2	212	214	3	12	2	217	181	-2	16	2	300	321
-8	6	2	347	331	-11	8	2	249	243	-6	10	2	520	478	4	12	2	162	160	0	16	2	308	303
-7	6	2	853	632	-8	8	2	390	-373	-3	10	2	457	443	4	12	4	234	-280	1	16	2	306	-288
-6	6	2	473	823	-7	8	2	133	-506	-2	10	2	122	-146	8	12	2	463	-504	6	16	2	213	-227
-5	6	2	1274	-1050	-3	8	2	466	-480	-1	10	2	194	148	7	12	2	279	-288	-2	17	2	332	-338
-4	6	2	547	-459	-2	8	2	518	461	0	10	2	445	-433	8	12	2	277	-285	-1	17	2	292	287
-3	6	2	324	-311	0	8	2	545	510	1	10	2	346	-352	-8	13	2	237	-176	0	17	2	285	172
-2	6	2	197	185	1	8	2	128	84	2	10	2	325	339	-6	13	2	223	-157	5	17	2	223	-277
-1	6	2	357	-346	4	8	2	179	191	3	10	2	259	-267	-4	13	2	172	274	7	17	2	306	-286
0	6	2	931	1027	5	8	2	276	315	5	10	2	712	-924	-3	13	2	332	-266	2	16	2	155	-127
1	6	2	246	282	6	8	2	357	-322	8	10	2	863	826	-1	13	2	363	-377	5	16	2	332	337
2	6	2	143	187	7	8	2	314	-378	8	10	2	475	435	0	13	2	276	280	-5	16	2	180	-201
3	6	2	703	-764	8	8	2	634	-616	10	10	2	441	427	1	13	2	337	-317	-1	16	2	243	-268
4	6	2	376	-372	10	8	2	560	-494	11	10	2	369	372	4	13	2	406	531	3	16	2	163	-121
5	6	2	167	164	-10	8	2	373	-618	-11	11	2	218	-161	5	13	2	186	182	1	16	2	146	-127
6	6	2	235	-275	-9	8	2	277	227	-8	11	2	368	-355	6	13	2	233	288	-13	0	3	428	-477
7	6	2	242	286	-7	8	2	531	611	-6	11	2	147	-80	-9	14	2	180	186	-13	0	3	171	192
8	6	2	300	269	-6	8	2	254	240	-8	11	2	139	-97	-8	14	2	427	381	-11	0	3	205	-223
-11	8	2	313	-361	-5	8	2	260	-231	-2	11	2	181	-172	-6	14	2	222	-215	-5	0	3	686	682
-10	7	2	250	-207	-4	8	2	148	-177	-1	11	2	865	786	-3	14	2	188	144	-3	0	3	687	677
-9	7	2	762	-714	-3	8	2	464	448	0	11	2	805	-778	-2	14	2	288	-325	-1	0	3	2182	2157
-8	7	2	157	153	-2	8	2	288	289	1	11	2	339	542	0	14	2	424	-440	1	0	3	1155	-785
-7	7	2	407	-370	-1	8	2	712	-696	2	11	2	260	-245	7	14	2	389	-436	3	0	3	770	-756
-6	7	2	478	-431	0	8	2	128	115	3	11	2	190	223	4	14	2	317	-402	5	0	3	383	-346
-5	7	2	463	-422	2	8	2	546	488	4	11	2	324	-365	8	14	2	358	364	7	0	3	277	263
-4	7	2	379	-370	3	8	2	504	-571	5	11	2	166	-162	7	14	2	155	172	8	0	3	446	455
-3	7	2	426	385	4	8	2	703	613	7	11	2	424	-411	8	14	2	355	322	11	0	3	335	333
-2	7	2	367	375	5	8	2	210	204	8	11	2	407	415	8	14	2	259	-147	-13	1	3	332	-277
-1	7	2	211	-161	6	8	2	443	444	11	11	2	157	-85	-8	15	2	278	207	-12	1	3	375	-441
0	7	2	382	342	7	8	2	196	613	-8	12	2	445	-447	-7	15	2	338	322	-11	1	3	461	-534
1	7	2	217	-206	8	8	2	527	-576	-7	12	2	280	-238	-6	15	2	254	184	-9	1	3	703	-784