

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR REIC013ITMENIF

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
4	6	3	1381	1383	8	6	3	274	-290	7	11	3	187	179	-1	14	3	264	-286	-2	18	3	166	165
5	6	3	852	852	-8	6	3	180	-167	1	11	3	140	119	0	14	3	710	-716	-1	18	3	77	-63
6	6	3	677	-622	-6	6	3	179	184	-7	12	3	388	-353	2	14	3	673	730	0	18	3	180	-195
7	6	3	898	-623	-6	6	3	384	-287	-6	12	3	187	-85	3	14	3	137	110	2	18	3	202	216
8	6	3	462	424	-3	6	3	276	-258	-5	12	3	488	472	4	14	3	817	-599	-6	0	4	248	-189
-9	0	3	614	605	-2	6	3	268	276	-4	12	3	264	271	5	14	3	212	-297	-7	0	4	1261	-1186
-8	7	3	893	-838	-1	6	3	487	487	-3	12	3	588	-588	6	14	3	382	381	-8	0	4	629	-662
-7	7	3	838	-811	0	6	3	188	-133	-2	12	3	388	-377	-8	15	3	430	440	-8	0	4	1769	1770
-6	7	3	1004	989	1	6	3	334	-335	-1	12	3	286	263	-8	15	3	281	284	-4	0	4	871	878
-5	7	3	1015	1031	2	6	3	382	278	0	12	3	621	616	-4	15	3	395	-396	-3	0	4	1921	-1865
-4	7	3	861	-872	3	6	3	139	140	1	12	3	150	-167	-3	15	3	407	-421	-2	0	4	2012	-1919
-3	7	3	1631	-1642	4	6	3	123	-115	2	12	3	545	-538	-2	15	3	337	347	-1	0	4	852	836
0	7	3	824	748	5	6	3	206	-186	4	12	3	488	477	-1	15	3	533	572	3	0	4	130	134
1	7	3	1126	1116	6	6	3	163	159	5	12	3	118	115	0	15	3	199	-153	5	0	4	444	523
2	7	3	75	-78	7	6	3	163	135	6	12	3	283	-284	1	15	3	546	-609	7	0	4	536	-621
3	7	3	1361	-1278	8	6	3	150	-149	7	12	3	161	-176	3	15	3	554	564	6	0	4	441	527
4	7	3	224	-212	-2	10	3	64	-67	-8	13	3	346	361	4	15	3	215	193	-8	1	4	840	907
5	7	3	810	771	-1	10	3	119	139	-7	13	3	109	113	5	15	3	421	-433	-7	1	4	153	173
6	7	3	584	525	0	10	3	78	-93	-6	13	3	452	-460	-5	15	3	352	373	-5	1	4	443	-446
7	7	3	613	-570	1	10	3	71	71	-5	13	3	246	-261	-4	15	3	276	286	-3	1	4	1235	1326
8	7	3	471	-429	2	10	3	71	56	-4	13	3	567	566	-3	15	3	282	-289	-2	1	4	1735	-1635
-9	6	3	365	372	3	10	3	65	61	-3	13	3	371	393	-2	15	3	404	-413	0	1	4	433	470
-8	6	3	212	265	4	10	3	264	-262	-2	13	3	466	-469	-1	15	3	231	237	1	1	4	1677	1795
-7	6	3	612	-619	5	10	3	81	72	-1	13	3	678	-682	0	15	3	440	453	2	1	4	207	-212
-6	6	3	441	-467	-8	12	3	164	-155	0	13	3	151	158	2	15	3	456	-478	4	1	4	382	-412
-5	6	3	586	569	-6	11	3	263	285	1	13	3	689	724	3	15	3	93	-82	5	1	4	1381	1431
-4	6	3	678	661	-5	11	3	103	91	4	13	3	616	-629	4	15	3	429	405	6	1	4	363	393
-3	6	3	181	-161	-4	11	3	369	-390	4	13	3	163	-132	5	15	3	185	176	7	1	4	762	-827
-2	6	3	898	-910	-3	11	3	162	-151	5	13	3	445	444	-4	17	3	249	245	8	1	4	487	-524
-1	6	3	147	157	-2	11	3	236	226	6	13	3	220	162	-3	17	3	234	245	8	2	4	84	78
0	6	3	372	359	-1	11	3	127	126	-7	14	3	433	435	-2	17	3	187	-194	-7	2	4	1911	1915
1	6	3	63	-26	1	11	3	369	-377	-6	14	3	195	211	-1	17	3	284	-321	-6	2	4	463	496
2	6	3	636	-588	2	11	3	62	26	-5	14	3	456	-461	0	17	3	100	96	-5	2	4	1853	-1609
3	6	3	370	-377	3	11	3	496	412	-4	14	3	368	-366	1	17	3	305	333	-4	2	4	767	-798
4	6	3	428	417	5	11	3	263	-256	-3	14	3	427	-42	3	17	3	321	-328	-3	2	4	1440	1457
5	6	3	387	340	6	11	3	102	-84	-2	14	3	561	547	4	17	3	102	-103	-2	2	4	1057	1106

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURAL FACTORS FOR REIC0313TNENIF

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	2	4	1023	-1054	3	4	4	286	-271	-5	7	4	318	-298	-1	9	4	1311	1310	3	11	4	875	-869
0	2	4	1052	-1048	4	4	4	255	-251	-4	7	4	728	-691	0	9	4	422	-395	4	11	4	178	-161
1	2	4	593	526	5	4	4	287	278	-3	7	4	698	578	1	9	4	1311	-1331	5	11	4	643	623
3	2	4	262	-177	6	4	4	348	-343	-2	7	4	728	-681	2	9	4	411	-370	6	11	4	285	252
4	2	4	3227	-1323	7	4	4	138	-105	-1	7	4	948	-843	3	9	4	1084	1064	7	11	4	389	-371
5	2	4	436	-438	8	4	4	161	133	6	7	4	528	528	4	9	4	321	236	8	11	4	342	-310
6	2	4	652	679	9	4	4	131	101	1	7	4	1167	1172	5	9	4	764	-759	-7	12	4	458	460
7	2	4	438	431	-16	5	4	75	84	2	7	4	225	-227	6	9	4	314	-283	-8	12	4	161	158
8	2	4	358	-366	-14	5	4	136	122	3	7	4	764	-750	7	9	4	532	509	-9	12	4	570	-566
-16	3	4	769	-549	-13	5	4	83	-77	4	7	4	188	-200	8	9	4	425	398	-4	12	4	338	-327
-17	3	4	159	-155	-12	5	4	82	28	5	7	4	516	486	-8	10	4	192	-85	-3	12	4	522	526
-18	3	4	817	801	-11	5	4	145	-120	6	7	4	214	186	-6	10	4	758	-757	-2	12	4	590	586
-19	3	4	411	421	0	5	4	68	-18	7	7	4	407	-394	-6	10	4	231	-236	-1	12	4	409	-413
-14	3	4	801	-913	2	5	4	454	452	8	7	4	288	-285	-5	10	4	834	822	9	12	4	556	-545
-13	3	4	537	-517	3	5	4	73	22	-7	8	4	783	709	-4	10	4	535	435	1	12	4	205	211
-12	3	4	835	805	4	5	4	121	-107	-6	8	4	247	242	-3	10	4	870	-855	2	12	4	715	717
-11	3	4	837	825	5	5	4	97	-66	-5	8	4	844	-837	-2	10	4	871	-861	4	12	4	827	-594
0	3	4	761	-858	-16	6	4	161	-82	-4	8	4	637	-605	-1	10	4	597	667	5	12	4	204	-177
1	3	4	1262	-1264	-17	6	4	388	-383	-3	8	4	845	850	0	10	4	1072	1026	8	12	4	399	383
2	3	4	121	-108	-19	6	4	407	413	-2	8	4	1083	1088	1	10	4	224	-202	7	12	4	273	246
3	3	4	1060	1084	-14	6	4	313	308	-1	8	4	899	-896	2	10	4	1133	-1120	-8	13	4	157	-202
4	3	4	397	401	-13	6	4	258	-235	0	8	4	1310	-1300	4	10	4	939	875	-6	13	4	348	351
5	3	4	877	-618	-12	6	4	385	-341	1	8	4	286	304	5	10	4	310	308	-5	13	4	109	102
6	3	4	268	-257	-11	6	4	193	189	2	8	4	1275	1274	6	10	4	604	-605	-4	13	4	343	-352
7	3	4	485	484	0	8	4	538	490	4	8	4	791	-786	7	10	4	379	-354	-3	13	4	276	-282
8	3	4	277	274	1	6	4	541	-515	5	8	4	337	-325	8	10	4	312	304	-2	13	4	265	263
-7	4	4	278	-288	2	6	4	573	-535	6	8	4	681	628	-8	11	4	568	556	-1	12	4	362	414
-6	4	4	251	-256	3	6	4	108	103	7	8	4	349	318	-6	11	4	763	-749	0	13	4	153	-147
-5	4	4	542	545	4	6	4	342	447	8	8	4	356	-339	-5	11	4	291	-304	1	13	4	424	-442
-4	4	4	243	207	5	6	4	158	162	-8	9	4	670	-685	-4	11	4	731	706	3	13	4	437	437
-3	4	4	317	-312	6	6	4	280	-276	-7	9	4	123	-112	-3	11	4	519	626	4	13	4	96	86
-2	4	4	220	-213	7	6	4	236	-188	-6	9	4	795	782	-2	11	4	783	-783	5	13	4	288	-305
-1	4	4	292	244	8	6	4	157	165	-5	9	4	375	364	-1	11	4	858	-862	6	13	4	169	-174
0	4	4	483	500	-6	7	4	454	456	-4	9	4	856	-828	9	11	4	456	431	-7	14	4	162	-163
1	4	4	327	280	-7	7	4	80	80	-3	9	4	773	-764	1	11	4	837	862	-5	14	4	206	210
2	4	4	590	-354	-8	7	4	691	-690	-2	9	4	915	893	2	11	4	162	-170	-3	14	4	145	-134

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR REIC(0)3(1)T(1)F

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
-2	14	4	124	-131	4	1	8	169	-164	7	3	5	637	625	-6	6	5	188	193	-6	8	5	102	-90
-1	14	4	68	78	5	1	8	368	409	8	3	5	336	349	-7	8	5	840	825	-5	8	5	531	532
0	14	4	178	173	6	1	8	217	256	-8	4	5	259	-247	-6	6	5	169	164	-4	8	5	134	129
2	14	4	214	-202	7	1	5	240	-287	-7	4	5	1020	-1018	-5	5	5	1178	-1167	-3	8	5	499	-485
4	14	4	134	133	8	1	5	147	-113	-6	4	5	127	-119	-4	6	5	454	-420	-2	8	5	833	-520
6	14	4	118	-124	-8	2	5	182	185	-5	4	5	1455	1468	-3	6	5	1266	1258	-1	8	5	505	457
8	14	4	182	129	-7	2	5	753	804	-4	4	5	626	612	-2	8	5	1338	1325	0	8	5	808	780
-14	16	4	95	103	-6	2	5	258	246	-3	4	5	1505	-1491	-1	8	5	1084	-1049	1	8	5	236	-250
-3	16	4	143	-150	-5	2	5	822	-972	-2	4	5	1582	-1601	0	8	5	1152	-1142	2	8	5	865	-828
-2	16	4	148	-148	-4	2	5	602	-597	-1	4	5	1001	944	1	6	5	533	522	3	8	5	117	101
-1	16	4	87	83	-3	2	5	762	732	0	4	5	1361	1373	2	8	5	1578	1686	4	8	5	536	506
0	16	4	202	208	-2	2	5	973	990	1	4	5	441	-468	3	8	5	349	-331	5	8	5	171	152
2	16	4	63	-62	-1	2	5	511	-523	2	4	5	1715	-1763	4	6	5	1110	-1055	6	8	5	467	-420
4	16	4	141	-147	0	2	5	1277	-1240	3	4	5	345	345	5	8	5	229	-230	7	8	5	226	-207
6	16	4	153	159	1	2	5	384	405	4	4	5	1185	1196	6	8	5	861	823	8	8	5	231	210
-14	17	4	225	218	2	2	5	1668	1105	5	4	5	239	250	7	8	5	354	360	-6	8	5	206	204
-3	17	4	158	175	3	2	5	177	-183	6	4	5	945	-936	8	8	5	440	-437	-6	8	5	360	-358
-2	17	4	208	-208	4	2	5	850	-893	7	4	5	421	-411	-8	7	5	636	-633	-4	8	5	162	143
-1	17	4	222	-244	5	2	5	273	-293	8	4	5	452	-471	-7	7	5	72	-19	-3	8	5	136	147
0	17	4	110	108	6	2	5	656	680	-6	5	5	861	891	-6	7	5	320	333	-2	8	5	249	-255
1	17	4	271	267	7	2	5	338	334	-7	5	5	89	-94	-5	7	5	175	-159	-1	8	5	363	-344
2	17	4	335	-165	8	2	5	248	-254	-6	5	5	1156	-1168	-4	7	5	779	-739	0	8	5	172	167
-2	18	4	212	219	-8	3	5	784	-793	-5	5	5	167	-176	-3	7	5	829	-814	1	9	5	436	425
-1	18	4	188	-169	-6	3	5	1236	1266	-4	5	5	1331	1312	-2	7	5	936	925	2	9	5	138	-130
0	18	4	268	-299	-5	3	5	408	401	-3	5	5	953	964	-1	7	5	1071	1059	3	9	5	208	-177
0	19	4	130	-141	-4	3	5	1098	-1100	-2	5	5	1416	-1412	0	7	5	952	-837	5	8	5	214	202
-18	1	5	274	318	-3	3	5	983	-980	-1	5	5	1512	-1474	1	7	5	1324	-1304	6	8	5	105	100
-6	1	5	478	-836	-2	3	5	1281	1269	0	5	5	663	669	2	7	5	449	427	7	8	5	143	-115
-1	1	5	220	-224	-1	3	5	1647	1513	1	8	5	1619	1669	3	7	5	1067	1019	8	8	5	160	-163
-14	1	5	126	186	0	3	5	985	-866	2	8	5	431	-492	4	7	5	172	142	0	10	5	120	-116
-3	1	5	334	269	1	3	5	1560	-1581	3	5	5	1839	-1844	5	7	5	778	-722	6	10	5	97	-72
-2	1	5	166	-218	2	3	5	384	378	4	5	5	199	-186	6	7	5	217	-192	-8	11	5	167	167
-1	1	5	560	-569	3	3	5	1302	1376	5	5	5	1047	885	7	7	5	528	456	-6	11	5	209	-198
0	1	5	272	243	4	3	5	88	112	6	5	5	283	267	8	7	5	834	315	-4	11	5	354	334
1	1	5	710	702	5	3	5	893	-847	7	5	5	730	-683	-5	8	5	127	-132	-2	11	5	347	-348
3	1	5	564	-513	6	3	5	340	-342	8	5	5	458	-436	-7	8	5	498	-495	-1	11	5	418	-215

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3(TMNF)

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
0	11	5	242	247	-3	14	5	373	378	-5	0	6	1382	-1367	4	2	5	1026	1084	6	4	6	156	-142
1	11	5	257	248	0	14	5	342	337	-4	0	6	668	-684	6	2	5	801	-828	-7	5	6	93	-65
2	11	5	75	-62	1	14	5	214	-225	-3	0	5	2149	2158	7	2	6	310	-135	-8	5	6	84	70
3	11	5	267	-289	2	14	5	503	-804	-2	0	6	1642	1071	8	2	6	426	437	-4	3	6	65	62
4	11	5	215	211	4	14	5	550	537	-1	0	6	1443	-1342	-8	3	6	143	148	-3	5	6	273	-260
5	11	5	201	-191	5	14	5	137	123	0	0	6	1504	-1476	-6	3	5	805	-816	-2	5	6	163	153
-7	12	5	369	387	-6	15	5	436	-447	1	0	6	492	485	-5	3	6	172	-174	0	5	6	98	81
-6	12	5	95	116	-5	15	5	164	-191	2	0	6	1369	1476	-4	3	6	782	791	3	5	6	77	-79
-5	12	5	489	-465	-4	15	5	492	475	3	0	6	123	-213	-3	3	6	700	673	4	5	6	227	230
-4	12	5	128	-121	-3	15	5	341	357	7	0	6	353	406	-2	3	6	1913	-1615	6	5	6	168	-55
-3	12	5	509	563	-2	15	5	427	-425	8	0	6	528	-610	-1	3	6	650	-672	-7	6	6	359	364
-2	12	5	373	360	-1	15	5	413	-443	-8	1	6	725	-620	0	3	6	759	765	-6	6	6	98	-73
-1	12	5	468	-446	0	15	5	277	270	-7	1	6	86	95	1	3	6	788	770	-5	6	6	402	-401
0	12	5	464	-442	1	15	5	460	504	-6	1	6	1105	1203	2	3	6	640	-548	-3	6	6	443	432
1	12	5	265	264	2	15	5	66	-81	-5	1	6	317	339	3	3	6	801	-824	-2	6	6	316	314
2	12	5	459	441	3	15	5	847	-863	-4	1	6	1365	-1460	4	3	6	272	-295	-1	6	6	223	-222
3	12	5	73	-71	4	15	5	112	-73	-3	1	6	657	-858	5	3	6	739	742	0	6	6	379	-372
4	12	5	383	-372	5	15	5	384	388	1	1	6	1488	-1483	6	3	6	219	214	1	6	6	313	321
5	12	5	347	346	-8	16	5	354	-361	2	1	6	425	436	7	3	6	368	-385	2	6	6	370	341
-15	13	5	472	481	-4	16	5	249	-237	4	1	6	80	84	8	3	6	268	-189	3	6	6	169	-172
-14	13	5	200	202	-3	16	5	358	407	5	1	6	958	-1080	-8	4	6	100	121	4	6	6	375	-378
-13	13	5	547	-529	-2	16	5	323	353	6	1	6	188	-231	-7	4	6	348	334	5	6	6	281	270
-12	13	5	265	-284	-1	16	5	257	-275	7	1	6	671	763	-6	4	6	124	135	7	6	6	184	87
-11	13	5	835	830	0	16	5	384	-367	8	1	6	326	308	-5	4	6	410	-418	8	6	6	179	-154
-10	13	5	526	524	1	16	5	132	143	-6	2	6	179	-206	-4	4	6	231	-243	-8	7	6	518	-514
-9	13	5	361	-373	2	16	5	438	447	-7	2	6	865	-885	-3	4	6	340	536	-6	7	6	641	647
-8	13	5	585	-578	4	16	5	395	-371	-6	2	6	123	-124	-2	4	6	467	456	-5	7	6	128	121
-7	13	5	135	140	-4	17	5	285	-289	-5	2	6	1082	1151	-1	4	6	363	-361	-4	7	6	735	-729
-6	13	5	563	562	-3	17	5	197	-206	0	4	6	608	614	0	4	6	287	-282	-3	7	6	567	-568
-5	13	5	419	-413	-2	17	5	251	255	-3	2	6	1611	-1712	1	4	6	309	238	-2	7	6	644	623
-4	13	5	130	-121	-1	17	5	248	278	-2	2	6	1041	-1050	2	4	6	388	401	-1	7	6	754	756
-3	14	5	96	-107	0	17	5	141	-134	0	2	6	1158	1184	3	4	6	93	107	0	7	6	564	-544
-2	14	5	498	500	1	17	5	253	-257	-1	2	6	994	1051	4	4	6	467	-488	1	7	6	768	-744
-1	14	5	288	284	0	18	5	164	170	1	2	6	842	-810	5	4	6	222	-224	2	7	6	385	378
0	14	5	586	587	-8	0	6	288	281	2	2	6	1126	-1164	6	4	6	239	255	3	7	6	789	750
-2	14	5	428	-439	-7	0	6	1607	875	3	2	6	251	212	7	4	6	173	143	5	7	6	562	-547

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR REIC(13)ITMENIF

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
6	7	6	82	-103	-8	10	6	261	191	3	12	6	108	88	-3	1	7	330	-324	2	3	7	619	-635
7	7	6	358	340	-7	10	6	741	731	4	12	6	488	455	-2	1	7	335	587	3	3	7	985	-123
8	7	6	178	144	-6	10	6	877	-881	5	12	6	370	-362	-1	1	7	282	284	5	3	7	948	950
9	6	6	154	-161	-5	10	6	348	-348	-6	13	6	293	-290	0	1	7	391	-391	7	3	7	501	-496
-7	8	6	743	-723	-3	10	6	989	871	-4	13	6	331	322	1	1	7	454	-442	8	3	7	213	-256
-8	8	6	104	-76	-2	10	6	588	574	-3	13	6	155	166	2	1	7	170	204	-8	4	7	254	271
-9	8	6	831	851	-1	10	6	722	-719	-2	13	6	374	-322	3	1	7	411	481	-7	4	7	945	985
-10	8	6	322	294	0	10	6	877	-846	-1	13	6	308	-321	4	1	7	93	109	-6	4	7	117	-123
-11	8	6	937	-934	1	10	6	483	489	0	13	6	188	164	5	1	7	367	-416	-5	4	7	1148	-1201
-12	8	6	842	-825	2	10	6	1003	996	1	13	6	349	342	7	1	7	157	134	-4	4	7	172	-188
-13	8	6	616	606	3	10	6	89	-104	2	13	6	102	-79	8	1	7	119	131	-3	4	7	1675	1735
0	8	6	1018	983	4	10	6	616	-740	3	13	6	293	-277	-6	2	7	157	-151	-2	4	7	793	664
1	8	6	823	-814	5	10	6	540	539	4	13	6	308	267	-7	2	7	966	-632	-1	4	7	1087	-1084
2	8	6	970	-870	6	10	6	298	293	-8	14	6	68	-127	-6	2	7	149	171	0	4	7	1238	-1305
3	8	6	102	97	-8	11	6	505	-483	-3	14	6	157	156	-5	2	7	968	887	1	4	7	585	677
4	8	6	864	863	-6	11	6	713	705	-2	14	6	126	131	-4	2	7	248	233	2	4	7	1218	1255
5	8	6	604	-561	-8	11	6	177	180	-1	14	6	188	-114	-3	2	7	1013	-1048	3	4	7	305	-299
6	8	6	283	-248	-4	11	6	786	-782	0	14	6	136	-115	-2	2	7	791	-754	4	4	7	995	-1013
7	8	6	377	391	-3	11	6	421	-421	2	14	6	127	118	-1	2	7	718	735	5	4	7	135	137
8	8	6	658	631	-2	11	6	785	767	4	14	6	189	-189	0	2	7	817	783	6	4	7	792	805
-1	9	6	68	-86	-1	11	6	585	584	-3	16	6	112	-124	1	2	7	515	-514	7	4	7	248	234
-2	9	6	872	-885	0	11	6	661	-587	-3	16	6	168	157	2	2	7	982	-980	8	4	7	504	-476
-3	9	6	196	-198	1	11	6	862	-828	-2	16	6	104	109	3	2	7	105	194	-8	5	7	788	-814
-4	9	6	915	898	2	11	6	297	290	-1	16	6	107	-112	4	2	7	659	704	-7	5	7	134	127
-5	9	6	517	511	3	11	6	788	773	5	16	6	188	-160	5	2	7	568	-599	-6	5	7	1151	1197
-6	9	6	884	-670	4	11	6	567	-544	1	16	6	90	96	7	2	7	153	-141	-4	5	7	1203	-1241
-7	9	6	862	-665	5	11	6	144	-142	2	16	6	12	127	6	2	7	267	303	-3	5	7	417	-434
-8	9	6	639	639	-7	12	6	422	-419	-2	17	6	176	181	-8	3	7	954	795	-2	5	7	1355	1366
-9	9	6	1078	1081	-8	12	6	507	510	-1	17	6	220	226	-7	3	7	160	-168	-1	5	7	821	823
0	9	6	320	-320	-14	12	6	250	237	0	17	6	178	-178	-6	3	7	1000	-1057	0	5	7	867	-841
1	9	6	1021	-1017	-13	12	6	596	-606	1	17	6	162	-161	-4	3	7	1231	1307	1	5	7	1317	-1365
2	9	6	128	-128	-12	12	6	337	-492	0	18	6	222	213	-3	3	7	675	690	2	5	7	897	704
3	9	6	741	713	-1	12	6	452	454	-6	1	7	274	-264	-2	3	7	1173	-1135	3	5	7	1108	1117
4	9	6	246	197	0	12	6	551	541	-7	1	7	120	115	-1	3	7	923	-946	4	5	7	118	-112
5	9	6	540	-485	1	12	6	257	-266	-6	1	7	444	437	0	3	7	874	871	5	5	7	985	-978
6	9	6	290	-292	2	12	6	675	-621	-4	1	7	537	-512	1	3	7	1281	1321	6	5	7	142	-124

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3(TMEN)F

PAGE 19

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
7	5	7	776	807	-4	8	7	183	-164	2	11	7	164	171	-4	15	7	485	-485	-7	1	8	311	-285
8	5	7	24	269	-3	8	7	569	568	3	11	7	191	203	-3	15	7	207	-215	-6	1	8	1057	-896
-7	8	7	281	-235	-12	8	7	224	222	5	11	7	166	-158	-2	15	7	464	492	-4	1	8	1348	1305
-7	8	7	863	-905	-11	8	7	355	-379	-7	12	7	328	-312	-1	15	7	322	349	-3	1	8	582	564
-5	6	7	916	937	0	6	7	460	-445	-5	12	7	371	369	0	15	7	346	-340	-2	1	8	1273	-1240
-4	6	7	293	289	1	6	7	392	381	-4	12	7	139	135	1	15	7	413	-445	-1	1	8	929	-883
-3	6	7	1289	-1285	2	6	7	607	597	-3	12	7	451	-442	2	15	7	210	291	0	1	8	1223	1176
-2	6	7	472	-447	4	8	7	578	-530	-2	12	7	284	-286	3	15	7	424	416	1	1	8	1057	1124
-1	6	7	881	872	6	8	7	358	334	-1	12	7	421	423	-5	16	7	325	348	2	1	8	792	-854
0	6	7	1110	1077	7	8	7	95	94	0	12	7	322	298	-4	16	7	105	95	3	1	8	874	-949
1	8	7	735	-743	8	8	7	219	-185	1	12	7	355	-366	-3	16	7	392	-408	4	1	8	159	183
2	8	7	1169	-1142	-8	9	7	108	-114	2	12	7	341	-328	-2	16	7	235	-248	5	1	8	769	859
3	6	7	235	296	-6	9	7	328	314	3	12	7	95	121	-1	16	7	330	334	6	1	8	124	111
4	8	7	1028	888	-5	9	7	88	-78	4	12	7	327	306	0	16	7	344	338	7	1	8	529	-593
6	6	7	657	-632	-4	9	7	382	-350	6	12	7	267	-284	1	16	7	182	-208	8	1	8	208	-197
7	6	7	249	-226	-3	9	7	134	-124	-7	13	7	98	-89	2	16	7	377	-381	-8	2	8	328	372
8	6	7	438	489	-2	9	7	182	186	-6	13	7	423	-417	-2	17	7	272	-278	-7	2	8	702	742
-6	7	7	924	951	-1	9	7	204	220	-4	13	7	131	114	0	17	7	187	180	-6	2	8	142	-150
-7	7	7	75	-98	0	8	7	206	-194	-3	13	7	266	279	-6	0	8	143	-140	-5	2	8	849	-840
-6	7	7	793	-648	1	9	7	245	-248	-2	13	7	564	-485	-7	0	8	458	-447	-4	2	8	277	-257
-4	7	7	723	714	2	9	7	107	84	-1	13	7	355	-356	-6	0	8	180	174	-3	2	8	1248	1233
-3	7	7	349	347	3	8	7	235	249	0	13	7	437	442	-5	0	8	103	1099	-2	2	8	676	621
-2	7	7	744	-720	5	9	7	241	-211	-4	0	8	111	124	-3	0	8	1569	-1550	-1	2	8	1291	-1234
-1	7	7	530	-495	7	9	7	113	106	3	13	7	436	-432	-4	0	8	111	124	1	2	8	918	814
0	7	7	683	664	-2	10	7	90	-75	-3	0	8	1569	-1550	-2	0	8	856	-697	2	2	8	936	961
1	7	7	980	937	-1	10	7	74	-62	-1	0	8	401	381	-2	0	8	1385	1313	3	2	8	284	-390
2	7	7	484	-475	1	10	7	57	84	-5	14	7	488	-479	-1	0	8	1004	-1011	4	2	8	732	-776
3	7	7	883	-868	2	10	7	77	-35	0	0	8	1080	1041	0	0	8	1128	-1189	6	2	8	552	509
5	7	7	725	683	-8	11	7	132	-146	-3	14	7	536	542	1	0	8	1004	-1011	7	2	8	118	140
6	7	7	137	104	-6	11	7	221	-247	-2	14	7	385	349	2	0	8	1128	-1189	8	2	8	360	-402
7	7	7	431	-384	-4	11	7	198	-200	-1	14	7	428	-441	3	0	8	317	344	-8	3	8	428	-466
8	7	7	168	-168	-3	11	7	143	-178	0	14	7	414	-401	4	0	8	823	654	-7	3	8	239	258
-6	8	7	166	143	-2	12	7	286	288	1	14	7	290	307	5	0	8	859	731	-6	3	8	816	657
-7	8	7	483	-484	-1	11	7	62	68	2	14	7	467	483	8	0	8	148	-170	-4	3	8	701	-734
-8	8	7	111	-114	0	11	7	316	-335	3	14	7	116	-139	7	0	8	485	551	-3	3	8	348	-352
-5	8	7	529	-543	1	11	7	153	-142	4	14	7	435	-408	-8	1	8	788	753	-2	3	8	802	812

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR REICG13ITMENIF

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	3	8	563	596	0	8	8	200	192	-7	9	8	223	218	2	11	8	428	-417	-2	1	8	564	-543
0	3	8	904	-917	1	8	8	208	-208	-6	9	8	748	750	3	11	8	523	-535	-1	1	0	178	-190
1	3	8	646	-640	2	8	8	385	-378	-5	9	8	101	-79	4	11	8	174	38	0	1	8	398	389
2	3	8	446	434	3	8	8	95	100	-4	9	8	1033	-1009	5	11	8	528	535	0	1	8	273	298
3	3	8	583	603	4	8	8	231	236	-3	8	8	284	-283	-7	12	8	356	370	1	1	8	178	-182
4	3	8	173	-163	5	8	8	238	-228	-2	9	8	834	824	-5	12	8	409	-433	3	1	8	320	-373
5	3	8	557	-660	6	8	8	124	121	-1	9	8	527	540	-3	12	8	528	531	4	1	8	111	101
6	3	8	86	-89	-6	7	8	352	358	0	9	8	703	-692	-2	12	8	212	223	5	1	8	247	272
7	3	8	337	351	-7	7	8	148	-145	1	9	8	675	-674	-1	12	8	436	-492	7	1	8	154	-179
8	3	8	126	146	-8	7	8	571	-592	2	9	8	440	426	0	12	8	399	-357	-9	2	8	268	214
-8	4	8	161	-170	-4	7	8	885	880	3	9	8	745	750	1	12	8	345	350	-7	2	8	521	515
-7	4	8	264	-292	-3	7	8	249	235	4	9	8	214	-202	2	12	8	470	466	-6	2	9	118	-116
-6	4	8	178	181	-2	7	8	695	-688	5	9	8	651	-656	3	12	8	118	-104	-5	2	9	576	-581
-5	4	8	278	268	-1	7	8	374	-380	-6	10	8	261	-232	4	12	8	440	-498	-3	2	9	1047	966
-4	4	8	235	236	0	7	8	570	-56	-7	10	8	598	-594	-6	13	8	206	245	-2	2	8	159	142
-3	4	8	501	-505	1	7	8	523	527	-8	10	8	142	117	-4	13	8	290	-280	-1	2	8	951	-897
-2	4	8	235	-251	2	7	8	264	-240	-5	10	8	783	815	-2	13	8	300	305	0	2	8	617	-673
-1	4	8	478	476	3	7	8	566	-574	-4	10	8	118	92	-1	13	8	188	183	1	2	8	572	604
0	4	8	395	407	4	7	8	188	192	-3	10	8	955	-948	0	13	8	232	-223	2	2	8	584	639
1	4	8	345	-336	5	7	8	499	490	-2	10	8	381	-363	1	13	8	261	-282	3	2	9	142	-157
2	4	8	252	-249	6	7	8	325	-322	-1	10	8	715	742	2	13	8	121	104	4	2	9	808	-854
3	4	8	113	77	-1	6	8	235	213	0	10	8	607	566	3	13	8	230	218	5	2	9	117	144
4	4	8	349	333	-7	6	8	558	567	1	10	8	580	-558	5	13	8	213	-223	0	2	8	321	354
5	4	8	262	-248	-8	6	8	184	-164	2	10	8	760	-753	-6	14	8	102	39	8	2	8	262	-301
6	4	8	119	-110	-5	6	8	782	-788	3	10	8	304	309	-3	14	8	149	-148	-8	3	8	536	-581
7	4	8	348	327	-4	6	8	110	-100	4	10	8	670	633	0	14	8	125	130	-7	3	9	262	274
8	4	8	84	-77	-3	6	8	914	815	5	10	8	542	-511	2	14	8	92	-86	-6	3	9	704	783
-3	5	8	135	139	-2	6	8	481	444	-8	11	8	425	425	4	14	8	149	118	-5	3	9	156	-143
-1	5	8	227	-249	-1	6	8	755	-758	-7	11	8	136	-127	-2	15	8	82	25	-4	3	9	1104	-1143
0	5	8	63	39	0	6	8	640	-623	-6	11	8	570	-576	-2	15	8	67	-81	-3	3	9	148	-106
-7	6	8	295	-308	1	6	8	445	449	4	11	8	771	740	-1	15	8	153	147	-2	3	9	1128	1117
-5	6	8	373	376	2	6	8	752	741	-3	11	8	716	715	0	17	8	152	152	-1	3	9	615	570
-4	6	8	82	-83	3	6	8	245	-215	-2	11	8	670	685	-8	1	9	27	258	0	3	9	1026	-981
-3	6	8	159	-167	4	6	8	835	-824	-1	11	8	402	-404	-7	1	9	145	-85	1	3	9	751	-760
-2	6	8	96	-92	5	6	8	589	562	0	11	8	620	588	-6	1	9	296	-285	2	3	9	510	494
-1	6	8	488	478	-8	9	8	462	-458	1	11	8	586	615	-4	1	9	415	406	3	3	9	787	826

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3THIENIF

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
4	3	9	283	-326	-3	6	9	890	1029	6	8	9	287	-272	-4	13	9	465	-444	8	0	10	535	-557
5	3	9	335	-667	-2	6	9	303	300	-8	9	9	127	146	-3	13	9	114	-126	-6	1	10	605	-584
7	3	9	488	480	-1	6	9	885	-883	-6	9	9	207	-198	-2	13	9	461	460	-7	1	10	434	441
-6	4	9	386	-381	0	6	9	568	-569	-4	9	9	353	324	-1	13	9	236	243	-6	1	10	908	877
-7	4	9	735	-780	1	6	9	710	722	-2	9	9	335	-332	0	13	9	393	-378	-5	1	10	316	-297
-8	4	9	238	254	2	6	9	774	730	-1	9	9	241	-133	1	13	9	299	-310	-4	1	10	1120	-1105
-8	4	9	871	1081	3	6	9	292	-318	0	9	9	171	152	2	13	9	253	261	-3	1	10	88	-80
-13	4	9	1256	-1318	4	6	9	750	-730	1	9	9	163	167	3	13	9	315	314	-2	1	10	999	953
-12	4	9	283	-278	5	6	9	168	116	3	9	9	188	-168	4	13	9	164	-158	-1	1	10	613	605
-11	4	9	1132	1161	6	6	9	582	568	5	8	9	204	140	-5	14	9	393	399	0	1	10	1026	-1006
0	4	9	763	767	-8	7	9	398	-421	-3	10	9	98	79	-3	14	9	456	-467	1	1	10	731	-764
1	4	9	691	-808	-7	7	9	230	233	0	10	9	88	-41	-2	14	9	171	-156	2	1	10	626	657
2	4	9	684	-881	-6	7	9	853	609	-8	11	9	127	139	-1	14	9	430	445	3	1	10	664	667
3	4	9	324	331	-4	7	9	813	-909	-6	11	9	150	-186	0	14	9	323	306	4	1	10	398	-429
4	4	9	842	830	-3	7	9	244	-146	-4	11	9	242	244	1	14	9	328	-383	5	1	10	621	-650
5	4	9	212	-210	-2	7	9	569	609	-3	11	9	112	98	2	14	9	361	-347	7	1	10	446	466
6	4	9	603	-607	-1	7	9	370	376	-2	11	9	206	-183	-4	15	9	413	335	-8	2	10	428	-405
-8	5	9	567	609	0	7	9	635	-624	-1	11	9	114	-119	-2	15	9	414	-415	-7	2	10	871	-814
-7	5	9	322	-356	1	7	9	491	-495	0	11	9	223	208	-1	15	9	205	-207	-6	2	10	362	352
-6	5	9	893	-961	2	7	9	350	350	1	11	9	198	91	9	15	9	391	394	-5	2	10	812	764
-4	5	9	1336	1369	3	7	9	610	609	2	11	9	157	-156	1	15	9	317	340	-3	2	10	907	-878
-3	5	9	164	109	4	7	9	189	-192	3	11	9	35	-148	2	15	9	235	-245	-2	2	10	244	-224
-2	5	9	912	-945	5	7	9	957	-952	4	11	9	90	121	9	16	9	258	-249	-1	2	10	347	327
-1	5	9	348	-366	6	7	9	102	-36	5	11	9	145	132	-8	0	10	367	513	0	2	10	593	596
0	5	9	1048	1083	-7	8	9	184	-172	-7	12	9	239	247	-7	0	10	840	815	1	2	10	770	-618
1	5	9	742	751	-7	8	9	331	-342	-6	12	9	105	-104	-6	0	10	456	-442	2	2	10	693	-714
2	5	9	578	-572	-6	8	9	144	110	-5	12	9	397	-347	-5	0	10	389	-398	3	2	10	339	431
3	5	9	892	-828	-5	8	9	449	475	-3	12	9	353	351	-3	0	10	1127	1081	4	2	10	624	648
4	5	9	353	353	-4	8	9	612	-626	-2	12	9	218	255	-2	0	10	258	279	5	2	10	137	-175
5	5	9	760	744	-3	8	9	181	-186	-1	12	9	342	-358	-1	0	10	1159	-1084	6	2	10	420	-425
-6	6	9	568	-550	0	8	9	459	467	0	12	9	241	-215	0	0	10	778	-773	-8	3	10	385	361
-7	6	9	322	329	1	8	9	215	246	1	12	9	254	255	1	0	10	340	351	-7	3	10	257	-274
-8	6	9	610	668	2	8	9	278	288	2	12	9	279	255	2	0	10	728	725	-6	3	10	465	-468
-11	6	9	212	-220	3	8	9	362	-355	3	12	9	175	-202	3	0	10	468	-448	-5	3	10	229	208
-12	6	9	891	-870	4	8	9	130	130	4	12	9	246	-238	4	0	10	767	-752	-4	3	10	744	714
-14	8	9	138	-139	4	8	9	442	427	-6	13	9	330	331	5	0	10	195	192	-2	3	10	544	-598

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $\text{Re}(\text{CO})_3(\text{THF})\text{I}$

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	3	10	298	-290	-5	7	10	343	-370	2	9	10	481	-481	1	12	10	305	-328	4	2	11	362	374
0	3	10	786	671	-5	7	10	131	-129	3	9	10	419	-428	2	12	10	307	-298	5	2	11	319	-325
1	3	10	516	522	-4	7	10	611	-614	4	9	10	286	258	3	12	10	185	164	-6	3	11	346	354
2	3	10	429	-456	-3	7	10	86	-100	5	9	10	594	510	4	12	11	354	323	-7	3	11	384	-374
3	3	10	487	-496	-2	7	10	682	620	-8	10	10	294	304	-4	13	10	294	293	-8	3	11	651	-620
4	3	10	251	268	-1	7	10	130	130	-7	10	10	448	482	-2	13	10	220	-221	-5	3	11	245	220
5	3	10	337	367	0	7	10	468	-485	-6	10	10	225	-213	-1	13	10	147	-143	-4	3	11	938	863
6	3	10	245	-268	1	7	10	353	-351	-5	10	10	610	-643	0	13	10	241	232	-2	3	11	876	-838
-1	4	10	184	165	2	7	10	320	320	-4	10	10	107	69	1	13	10	150	158	-1	3	11	171	-147
-17	4	10	166	165	3	7	10	346	358	-3	10	10	730	784	-5	14	10	119	-95	0	3	11	928	877
-16	4	10	158	-164	4	7	10	173	-178	-2	10	10	168	151	-3	14	10	105	105	1	3	11	418	427
-15	4	10	288	-282	5	7	10	361	-365	-1	10	10	734	-751	0	14	10	88	-61	2	3	11	518	-547
-13	4	10	331	334	6	7	10	109	48	0	10	10	405	-380	2	14	10	110	100	3	3	11	468	-505
-12	4	10	186	143	-8	8	10	278	-285	1	10	10	578	582	-8	1	11	137	-145	4	3	11	349	360
-11	4	10	397	-377	-7	8	10	362	-412	2	10	10	451	436	-7	1	11	172	150	5	3	11	448	473
0	4	10	263	-187	-6	8	10	290	233	3	10	10	314	-322	-6	1	11	270	280	-8	4	11	422	452
1	4	10	271	271	-5	8	10	560	611	4	10	10	522	-488	-4	1	11	334	-303	-7	4	11	496	511
2	4	10	327	321	-4	8	10	762	-782	5	10	10	153	150	-3	1	11	94	78	-6	4	11	365	-372
3	4	10	186	-183	-12	8	10	145	-142	-7	11	10	226	224	-2	1	11	329	307	-5	4	11	857	-891
4	4	10	248	-221	-11	8	10	688	717	-6	11	10	461	472	0	1	11	424	-414	-4	4	11	120	137
5	4	10	141	146	0	8	10	329	328	-5	11	10	114	-136	1	1	11	183	-194	-3	4	11	971	948
-12	5	10	90	-48	1	8	10	513	-523	-4	11	10	624	-603	2	1	11	227	223	-2	4	11	223	185
-11	5	10	124	113	2	8	10	475	-469	-2	11	10	577	593	3	1	11	234	233	-1	4	11	1119	-1048
0	5	10	93	37	3	8	10	286	297	-1	11	10	259	261	4	1	11	144	-143	0	4	11	342	-279
17	6	10	211	-201	4	8	10	471	485	0	11	10	585	-577	5	1	11	153	-173	1	4	11	738	743
-15	6	10	278	-296	5	8	10	158	-164	1	11	10	384	-380	-8	2	11	377	-344	2	4	11	524	532
-13	6	10	381	380	6	8	10	384	-377	2	11	10	374	388	-7	2	11	387	-373	3	4	11	495	-544
-11	6	10	322	-338	7	9	10	374	384	3	11	10	414	408	-6	2	11	228	222	4	4	11	553	-570
0	6	10	80	-82	-7	9	10	274	-280	4	11	10	212	-201	-5	2	11	365	574	5	4	11	172	171
1	6	10	309	305	-6	9	10	521	-553	5	11	10	410	-388	-3	2	11	517	-515	6	4	11	474	503
2	6	10	231	238	-5	9	10	211	219	-6	12	10	122	143	-2	2	11	83	76	-6	5	11	366	-398
3	6	10	127	-120	-4	9	10	803	797	-5	12	10	351	398	-1	2	11	764	742	-7	5	11	330	356
4	6	10	221	-216	-2	9	10	612	-623	-3	12	10	427	-436	0	2	11	130	122	-6	5	11	611	653
5	6	10	168	139	-1	9	10	275	-268	-2	12	10	169	-134	1	2	11	535	-526	-5	5	11	344	-329
-8	7	10	458	-265	0	9	10	688	679	-1	12	10	390	412	2	2	11	432	-438	-4	5	11	665	-1061
-7	7	10	180	184	1	9	10	452	471	6	12	10	263	280	3	2	11	367	393	-2	5	11	592	1024

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3(THF)3

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
-1	5	11	348	332	-7	8	11	222	227	1	13	11	227	216	-6	2	12	356	-357	3	4	12	165	179
0	5	11	907	-1559	-6	8	11	123	-123	2	13	11	222	-242	-5	2	12	704	-692	4	4	12	165	155
1	5	11	468	-483	-5	8	11	356	-384	-1	14	11	344	-380	-4	2	12	271	254	0	5	11	93	-72
2	5	11	573	567	-3	8	11	432	461	0	14	11	153	-150	-3	2	12	694	684	-7	5	11	100	-128
3	5	11	511	506	-2	8	11	83	58	0	15	11	353	-351	-1	2	12	779	-764	-5	5	11	187	202
4	5	11	343	-344	-1	8	11	458	-503	-8	0	12	468	-459	0	2	12	244	-237	-3	6	11	270	-269
5	5	11	532	-543	0	8	11	193	-197	-7	0	12	546	-538	1	2	12	532	557	-1	6	11	262	264
-8	6	11	343	-376	1	8	11	284	289	-6	0	12	515	507	2	2	12	421	427	0	6	11	112	90
-7	6	11	402	-427	2	8	11	261	252	-5	0	12	937	920	3	2	12	439	-451	1	8	11	238	-249
-6	6	11	271	290	3	8	11	174	-162	-4	0	12	284	-269	4	2	12	461	-450	2	6	11	118	-95
-5	6	11	666	723	4	8	11	259	-250	-3	0	12	884	-891	5	2	12	170	136	3	5	11	168	166
-4	6	11	185	-153	-7	9	11	92	77	-2	0	12	113	-107	6	2	12	355	349	4	5	11	147	144
-3	6	11	780	-854	-6	9	11	154	152	-1	0	12	882	939	-8	3	12	233	-223	-1	7	11	171	180
-2	6	11	233	-219	-4	8	11	244	-247	0	0	12	276	248	-7	3	12	220	216	-7	7	11	230	-241
-1	6	11	672	907	-2	8	11	220	218	1	0	12	647	-661	-6	3	12	442	417	-6	7	11	264	-263
0	6	11	343	340	0	9	11	239	-219	2	0	12	498	-504	-5	3	12	234	-219	-5	7	11	160	151
1	6	11	994	-889	1	9	11	166	-104	3	0	12	513	548	-4	3	12	530	-504	-4	7	11	408	408
2	6	11	455	-485	2	9	11	116	81	4	0	12	563	555	-3	3	12	207	197	-3	7	11	86	-83
3	6	11	365	369	3	9	11	165	145	5	0	12	217	-236	-2	3	12	554	539	-2	7	11	427	-463
4	6	11	539	512	-6	11	11	141	154	6	0	12	458	-456	0	3	12	502	-489	0	7	11	484	446
5	6	11	428	-422	-5	11	11	101	-105	-8	1	12	419	384	1	3	12	292	-301	1	7	11	167	176
-8	7	11	245	274	-4	11	11	175	-172	-7	1	12	426	-425	2	3	12	352	361	2	7	11	312	-308
-7	7	11	182	-234	-2	11	11	222	226	-6	1	12	672	-666	3	3	12	331	337	3	7	11	197	-215
-6	7	11	408	-444	0	11	11	133	-135	-5	1	12	375	385	4	3	12	249	-253	4	7	11	227	222
-5	7	11	174	178	1	11	11	142	-151	-4	1	12	548	917	5	3	12	244	-249	5	7	11	158	162
-4	7	11	617	674	2	11	11	153	121	-3	1	12	156	-159	-8	4	12	184	-140	-7	6	11	266	267
-3	7	11	106	-117	-5	12	11	282	266	-2	1	12	891	-841	7	4	12	166	-175	-6	8	11	278	-292
-2	7	11	688	-716	-3	12	11	305	-323	-1	1	12	179	-171	-6	4	12	108	117	-5	8	11	427	-470
-1	7	11	262	-222	0	12	11	241	290	0	1	12	841	802	-5	4	12	230	235	-4	8	11	137	141
0	7	11	563	584	0	12	11	173	171	1	1	12	425	436	-4	4	12	165	-135	-3	8	11	536	548
1	7	11	363	378	1	12	11	208	-223	2	1	12	523	-539	-3	4	12	262	-242	-1	8	11	534	-573
2	7	11	342	-319	2	12	11	187	-188	3	1	12	514	-529	-2	4	12	119	72	0	8	11	156	-164
3	7	11	380	-374	-5	13	11	121	134	4	1	12	391	304	-1	4	12	262	256	1	8	11	460	478
4	7	11	217	202	-4	13	11	365	364	5	1	12	444	459	0	4	12	128	111	2	8	11	224	214
5	7	11	338	345	-2	13	11	369	-370	-8	2	12	385	369	1	4	12	188	-188	3	8	11	336	-346
-8	8	11	183	215	0	13	11	344	336	-7	2	12	452	439	2	4	12	159	-163	4	8	11	325	-338

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR RE(CO)3(TMNF)

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
-5	8	12	173	-169	-7	1	13	182	-152	-6	4	13	454	-419	2	8	13	287	295	-5	0	14	600	-581
-7	9	12	315	339	-6	1	13	170	-181	-7	4	13	365	-352	3	6	13	348	-370	-4	0	14	325	324
-5	8	12	376	409	-5	1	13	154	165	-6	4	13	473	445	4	8	13	340	-333	-3	0	14	600	756
-5	8	12	220	-251	-4	1	13	255	247	-5	4	13	581	573	-7	7	13	245	277	-2	0	14	138	-136
-4	9	12	552	-564	-2	1	13	259	-247	-4	4	13	227	-225	-6	7	13	316	337	-1	0	14	719	-740
-3	9	12	90	109	0	1	13	222	213	-3	4	13	735	-712	-5	7	13	205	-210	0	0	14	108	-84
-2	9	12	604	615	1	1	13	74	56	-2	4	13	769	770	-4	7	13	418	-415	1	0	14	517	530
-1	9	12	57	63	2	1	13	245	-244	0	4	13	218	174	-3	7	13	101	115	2	0	14	216	213
0	8	12	632	-630	4	1	13	325	113	1	4	13	564	-612	-2	7	13	540	550	3	0	14	455	-458
1	8	12	205	-214	5	1	13	123	120	2	4	13	223	-222	0	7	13	585	-541	4	0	14	364	-345
2	8	12	369	405	-6	2	13	271	272	3	4	13	450	478	1	7	13	244	-242	-5	1	14	184	-178
3	8	12	320	319	-7	2	13	183	187	4	4	13	380	370	2	7	13	379	363	-7	1	14	385	389
4	8	12	313	-285	-6	2	13	346	-327	5	4	13	230	-249	3	7	13	261	270	-6	1	14	475	468
-6	10	12	281	303	-5	2	13	460	-404	-8	5	13	283	251	4	7	13	183	-177	-5	1	14	359	-357
-5	10	12	432	476	-4	2	13	207	196	-7	5	13	417	-419	-6	8	13	186	186	-4	1	14	636	-609
-4	10	12	145	-148	-3	2	13	473	473	-6	5	13	497	-460	-5	8	13	258	274	-3	1	14	218	228
-3	10	12	524	-546	-1	2	13	433	-433	-5	5	13	298	310	-4	8	13	125	-100	-2	1	14	826	777
-1	10	12	603	636	0	2	13	74	-65	-4	9	13	641	599	-3	8	13	304	-308	-1	1	14	98	-81
0	10	12	174	163	1	2	13	398	427	-3	9	13	136	-158	-1	8	13	356	393	0	1	14	604	-569
1	10	12	471	-492	2	2	13	122	111	-2	9	13	864	-863	0	8	13	131	105	1	1	14	183	-178
2	10	12	278	-261	3	2	13	331	-344	0	9	13	778	731	1	8	13	293	-294	2	1	14	531	511
3	10	12	318	335	4	2	13	241	-231	1	9	13	278	283	2	8	13	192	-181	3	1	14	293	292
4	10	12	166	197	5	2	13	135	165	2	9	13	508	-523	3	8	13	217	206	4	1	14	303	-302
5	11	12	450	452	-6	3	13	289	-185	3	9	13	329	-342	-4	9	13	177	155	-6	2	14	319	-307
6	11	12	480	-486	-7	3	13	392	346	4	9	13	306	320	-2	9	13	187	-188	-7	2	14	274	-269
7	11	12	511	500	-8	3	13	417	410	5	9	13	341	349	0	9	13	136	130	-6	2	14	353	345
8	11	12	227	226	-9	3	13	359	-347	-6	6	13	359	372	2	9	13	160	-147	-5	2	14	469	463
9	11	12	323	-311	-4	3	13	589	-588	-7	6	13	340	342	-2	10	13	105	92	-4	2	14	275	-256
-5	12	12	271	-386	-3	3	13	135	123	-6	6	13	377	-363	-4	11	13	129	158	-3	2	14	581	-558
-4	12	12	178	102	-2	3	13	695	676	-5	6	13	446	-473	-2	11	13	131	-146	-2	2	14	143	141
-3	12	12	343	338	0	3	13	588	-569	-4	6	13	171	183	0	11	13	172	173	-1	2	14	614	604
-1	12	12	365	-382	1	3	13	205	-193	-3	6	13	583	590	0	12	13	86	-6	1	2	14	438	-449
0	12	12	144	-132	2	3	13	517	535	-2	8	13	104	-63	0	13	13	251	-273	2	2	14	261	-192
1	12	12	256	284	3	3	13	145	238	-1	9	13	746	-755	-6	0	14	438	416	3	2	14	338	351
-2	13	12	228	225	4	3	13	291	-306	0	8	13	216	-102	-7	0	14	352	351	4	2	14	270	256
0	13	12	182	-165	5	3	13	268	-312	1	8	13	533	552	-6	0	14	461	-443	-7	3	14	186	-213

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $\text{RE}(\text{CO})_3(\text{TREN})\text{F}$

PAGE 18

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	
-1	8	3	14	288	-271	-4	7	14	277	-267	-6	2	18	269	-251	-1	5	15	97	-78	3	6	16	455	-466					
-1	8	3	14	193	198	-3	7	14	135	124	-5	2	18	183	182	0	5	15	922	-493	-5	1	16	304	304					
-1	4	3	14	371	358	-2	7	14	335	316	-4	2	18	274	-248	2	5	15	483	488	-4	1	16	443	400					
-1	3	3	14	162	-160	0	7	14	378	-334	-3	2	15	306	-308	-5	6	15	383	348	-3	1	16	284	-265					
-1	2	3	14	442	-418	2	7	14	273	279	-2	2	15	170	135	-4	6	15	269	-255	-2	1	16	537	-514					
0	3	3	14	395	372	-5	8	14	300	322	-1	2	15	401	380	-3	6	15	446	-423	-1	1	16	125	116					
1	3	3	14	122	116	-1	8	14	218	-221	0	2	15	77	58	-2	6	15	109	130	0	1	16	503	475					
2	3	3	14	314	-362	-3	8	14	360	-364	1	2	15	273	-262	-1	6	15	471	471	-5	2	16	238	-234					
3	3	3	14	166	-163	-2	8	14	103	84	-6	3	15	244	-241	1	6	15	404	-453	-4	2	16	249	238					
4	3	3	14	155	153	-1	6	14	404	430	-5	3	15	297	304	2	6	15	145	-149	-3	2	16	416	395					
7	4	4	14	162	79	1	8	14	330	-330	-4	3	15	388	349	-5	7	15	271	244	-2	2	16	165	-176					
-1	6	4	14	131	-127	2	8	14	130	-112	-3	3	15	252	-253	-4	7	15	330	299	-1	2	16	433	-419					
-1	5	4	14	161	-173	-5	9	14	252	274	-2	3	15	481	-479	-3	7	15	141	-153	1	2	16	382	390					
-1	4	4	14	100	63	-4	9	14	357	368	0	3	15	476	441	-2	7	15	398	-392	-4	3	16	216	-211					
-1	3	4	14	189	173	-3	9	14	162	-168	2	3	15	351	-357	0	7	15	399	381	-3	3	16	135	134					
-1	1	4	14	189	-198	-2	9	14	689	-493	-5	4	15	466	-463	-5	8	15	149	-171	-2	3	16	304	308					
1	1	4	14	160	114	0	8	14	447	421	-5	4	15	358	-363	-4	8	15	138	138	0	3	16	304	-272					
2	4	4	14	75	66	1	3	14	107	89	-4	4	15	311	286	-3	8	15	235	227	-3	4	16	193	134					
3	4	4	14	118	-110	-5	10	14	278	-307	-3	4	15	488	478	-1	8	15	247	-251	-1	4	16	122	128					
4	4	4	14	98	-79	-4	10	14	201	210	-2	4	15	156	-151	0	8	15	103	-98	-4	6	16	139	131					
6	6	14	148	-148	-3	10	14	371	390	-1	4	15	525	-524	-2	9	15	122	124	-1	6	16	147	145						
-1	5	6	14	173	-148	-1	10	14	411	-489	1	4	15	428	461	0	9	15	131	-96	0	7	16	235	208					
-1	5	6	14	167	156	0	11	14	362	-343	2	4	15	148	119	-5	0	15	329	326	-2	1	17	121	-110					
-1	5	6	14	221	-224	-1	1	15	120	81	-5	5	15	333	308	-4	9	15	315	-298	0	1	17	142	129					
1	5	6	14	159	181	-4	1	15	121	-112	-5	5	15	330	-330	-3	0	16	551	-504	-2	2	17	155	-141					
2	6	14	84	64	-3	1	15	146	136	-4	5	15	475	-441	-2	0	16	263	238	0	2	17	81	63						
3	5	14	146	-148	-2	1	15	198	202	-3	5	15	233	218	-1	0	16	553	528	1	3	17	317	-492						
-1	6	7	14	203	267	0	1	15	201	-188	-2	5	15	519	510	0	0	15	81	-24	0	5	17	351	322					
-5	7	14	210	-218	2	1	15	119	122																					