

CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1998, 10(11), 3568-3575, DOI:[10.1021/cm980332r](https://doi.org/10.1021/cm980332r)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1998 American Chemical Society

41

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-11	1	2	66	-66	8	12	2	2	29	21	-29	3	4	2	312	315	5	-3	6	2	311	-314	5	-4	8	2	244	-249	4
-10	1	2	178	181	3	13	2	2	88	-111	10	4	4	2	230	234	4	-2	6	2	387	380	7	-3	8	2	44	57	-44
-9	1	2	143	-145	3	14	2	2	26	18	-26	5	4	2	194	-191	3	-1	6	2	170	-171	3	-2	8	2	168	177	4
-8	1	2	517	-512	7	15	2	2	40	106	-40	6	4	2	306	-305	5	0	6	2	704	-699	7	-1	8	2	391	395	6
-7	1	2	493	488	6	-17	3	2	23	13	-23	7	4	2	255	258	4	1	6	2	44	3	-44	0	8	2	219	-219	4
-6	1	2	958	930	7	-16	3	2	37	-23	-37	8	4	2	298	302	5	2	6	2	703	696	7	1	8	2	23	18	-23
-5	1	2	821	-800	6	-15	3	2	84	-76	10	9	4	2	359	-343	6	3	6	2	102	99	4	2	8	2	159	165	4
-4	1	2	1086	-1059	7	-14	3	2	111	101	7	10	4	2	29	-50	-29	4	6	2	465	-482	8	3	8	2	384	-357	6
-3	1	2	408	-435	5	-13	3	2	76	-76	9	11	4	2	131	119	6	5	6	2	163	165	4	4	8	2	95	-86	7
-2	1	2	120	109	2	-12	3	2	43	69	-43	12	4	2	33	-4	-33	6	6	2	289	286	5	5	8	2	29	-16	-29
-1	1	2	611	-600	5	-11	3	2	110	106	5	13	4	2	64	-21	-64	7	6	2	240	-240	4	6	8	2	147	144	5
0	1	2	41	-20	5	-10	3	2	69	71	7	14	4	2	45	-85	-41	8	6	2	352	-333	6	7	8	2	78	88	9
1	1	2	1528	1654	9	-9	3	2	161	163	3	15	4	2	67	96	-67	9	6	2	48	46	-48	8	8	2	29	-11	-29
2	1	2	171	-189	3	-8	3	2	371	-381	5	-16	5	2	36	56	-36	10	6	2	245	231	4	9	8	2	169	175	6
3	1	2	1148	-1138	7	-7	3	2	113	119	4	-15	5	2	34	-35	-34	11	6	2	46	-47	-23	10	8	2	36	-84	-36
4	1	2	20	-11	-20	-6	3	2	108	104	3	-14	5	2	214	-216	5	12	6	2	33	-33	-33	11	8	2	37	-76	-37
5	1	2	59	75	6	-5	3	2	317	-313	4	-13	5	2	151	142	5	13	6	2	80	87	14	12	8	2	37	-9	-37
6	1	2	219	-245	3	-4	3	2	198	173	3	-12	5	2	258	250	4	14	6	2	36	19	-36	-13	9	2	51	-4	-51
7	1	2	763	-798	7	-3	3	2	25	-12	-25	-11	5	2	82	-78	7	-14	7	2	37	62	-37	-12	9	2	29	-44	-29
8	1	2	383	406	6	-2	3	2	830	810	6	-10	5	2	108	-106	6	-13	7	2	34	2	-34	-11	9	2	33	31	-33
9	1	2	400	405	6	-1	3	2	506	-508	5	-9	5	2	84	102	6	-12	7	2	173	-180	6	-10	9	2	163	170	6
10	1	2	82	-80	7	0	3	2	220	211	3	-8	5	2	386	391	6	-11	7	2	61	-56	11	-9	9	2	40	25	-40
11	1	2	49	-46	-49	1	3	2	499	526	5	-7	5	2	660	-652	8	-10	7	2	28	71	-28	-8	9	2	246	-248	4
12	1	2	57	19	-57	2	3	2	112	-119	3	-6	5	2	524	-529	7	-9	7	2	188	-183	4	-7	9	2	28	30	-28
13	1	2	34	11	-34	3	3	2	344	-351	6	-5	5	2	888	874	8	-8	7	2	114	118	6	-6	9	2	120	138	6
14	1	2	149	-165	7	4	3	2	179	174	3	-4	5	2	262	267	4	-7	7	2	286	277	5	-5	9	2	186	-180	4
15	1	2	47	-89	-47	5	3	2	198	188	3	-3	5	2	608	-606	7	-6	7	2	23	15	-23	-4	9	2	56	-55	11
-17	2	2	35	-33	-35	6	3	2	96	88	4	-2	5	2	269	-275	5	-5	7	2	121	-112	4	-3	9	2	306	297	5
-16	2	2	26	30	-26	7	3	2	256	-257	4	-1	5	2	1140	1136	8	-4	7	2	361	-369	6	-2	9	2	245	232	4
-15	2	2	71	67	12	8	3	2	181	170	4	0	5	2	181	181	3	-3	7	2	174	175	3	-1	9	2	255	-255	4
-14	2	2	141	-129	6	9	3	2	27	22	-27	1	5	2	1299	-1295	9	-2	7	2	140	-147	4	0	9	2	137	-141	5
-13	2	2	157	-154	5	10	3	2	171	-165	5	2	5	2	64	81	6	-1	7	2	284	-279	5	1	9	2	232	225	4
-12	2	2	92	-93	7	11	3	2	30	34	-30	3	5	2	776	774	7	0	7	2	294	300	5	2	9	2	182	-174	4
-11	2	2	166	168	4	12	3	2	67	66	11	4	5	2	162	-172	3	1	7	2	178	177	3	3	9	2	178	-173	4
-10	2	2	24	27	-24	13	3	2	34	39	-34	5	5	2	394	-392	5	2	7	2	252	239	4	4	9	2	179	182	5
-9	2	2	21	22	-21	14	3	2	37	-23	-37	6	5	2	189	200	3	3	7	2	140	-133	4	5	9	2	184	176	5
-8	2	2	335	336	5	15	3	2	41	-42	-41	7	5	2	484	486	8	4	7	2	167	-171	4	6	9	2	23	-27	-23
-7	2	2	27	37	-27	-16	4	2	70	-56	14	8	5	2	326	-316	6	5	7	2	27	51	-27	7	9	2	112	-104	6
-6	2	2	243	-250	4	-15	4	2	169	165	6	9	5	2	360	-339	6	6	7	2	404	-377	7	8	9	2	123	125	7
-5	2	2	496	-491	6	-14	4	2	30	4	-30	10	5	2	215	210	5	7	7	2	34	48	-34	9	9	2	44	2	-20
-4	2	2	76	87	4	-13	4	2	278	-275	5	11	5	2	101	97	7	8	7	2	58	71	-58	10	9	2	114	-140	9
-3	2	2	114	101	3	-12	4	2	158	149	5	12	5	2	32	-70	-32	9	7	2	177	162	5	11	9	2	36	-17	-36
-2	2	2	359	-359	5	-11	4	2	93	105	7	13	5	2	52	-60	-52	10	7	2	46	39	-21	-11	10	2	38	116	-38
-1	2	2	381	400	5	-10	4	2	166	158	4	14	5	2	66	99	-66	11	7	2	100	-99	10	-10	10	2	103	-117	10
0	2	2	640	672	5	-9	4	2	457	-456	8	-15	6	2	38	-56	-38	12	7	2	41	71	-41	-9	10	2	153	-153	6
1	2	2	162	169	3	-8	4	2	160	158	3	-14	6	2	110	111	8	13	7	2	71	-20	-71	-8	10	2	68	83	12
2	2	2	382	-402	5	-7	4	2	650	666	7	-13	6	2	178	184	6	-14	8	2	54	-52	-54	-7	10	2	131	135	7
3	2	2	20	-41	-20	-6	4	2	625	-630	7	-12	6	2	57	-64	13	-13	8	2	37	-9	-37	-6	10	2	113	-111	7
4	2	2	100	105	3	-5	4	2	324	-322	5	-11	6	2	211	-209	4	-12	8	2	66	-76	14	-5	10	2	150	-146	5
5	2	2	86	-78	4	-4	4	2	378	386	6	-10	6	2	109	101	6	-11	8	2	34	55	-34	-4	10	2	272	269	4
6	2	2	22	-45	-22	-3	4	2	377	365	6	-9	6	2	121	111	5	-10	8	2	29	-27	-29	-3	10	2	160	150	5
7	2	2	365	372	5	-2	4	2	365	-367	6	-8	6	2	310	-326	5	-9	8	2	171	170	5	-2	10	2	309	-307	5
8	2	2	191	191	3	-1	4	2	563	-562	6	-7	6	2	326	-329	5	-8	8	2	52	70	-52	-1	10	2	83	-63	7
9	2	2	96	-100	5	0	4	2	1147	1126	8	-6	6	2	434	445	8	-7	8	2	205	-206	4	0	10	2	240	225	4
10	2	2	90	-89	7	1	4	2	346	-352	6	-5	6	2	496	498	7	-6	8	2	104	94	6	1	10	2	29	-10	-29
11	2	2	48	33	-14	2	4	2	612	-612	6	-4	6	2	233	-225	4	-5	8	2	81	-67	7	2	10	2	325	-303	6

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
3	10	2	84	80	8	-9	1	3	322	-315	5	14	2	3	87	-125	13	6	4	3	176	173	3	1	6	3	150	-145	3
4	10	2	319	291	5	-8	1	3	22	17	-22	15	2	3	87	161	-87	7	4	3	154	-157	4	2	6	3	160	164	3
5	10	2	33	-77	-33	-7	1	3	471	466	6	-17	3	3	38	11	-38	8	4	3	359	-349	6	3	6	3	225	-216	4
6	10	2	205	-198	5	-6	1	3	142	154	3	-16	3	3	60	96	-60	9	4	3	39	7	-39	4	6	3	43	-32	-12
7	10	2	46	53	-46	-5	1	3	1115	-1097	7	-15	3	3	119	-112	7	10	4	3	255	232	4	5	6	3	131	-125	4
8	10	2	58	90	-58	-4	1	3	357	354	5	-14	3	3	366	-346	6	11	4	3	34	25	-34	6	6	3	159	150	5
9	10	2	39	-67	-39	-3	1	3	348	327	5	-13	3	3	312	305	5	12	4	3	64	-70	15	7	6	3	257	240	4
10	10	2	40	-70	-40	-2	1	3	125	-123	2	-12	3	3	352	345	6	13	4	3	37	40	-37	8	6	3	164	-157	5
-10	11	2	76	-104	16	-1	1	3	207	-203	3	-11	3	3	105	-102	6	14	4	3	31	21	-31	9	6	3	81	75	9
-9	11	2	101	136	10	0	1	3	124	-128	3	-10	3	3	31	30	-19	-16	5	3	36	21	-36	10	6	3	73	54	10
-8	11	2	34	16	-34	1	1	3	408	440	5	-9	3	3	258	257	4	-15	5	3	83	128	13	11	6	3	95	-90	10
-7	11	2	64	-91	-64	2	1	3	103	107	3	-8	3	3	86	86	5	-14	5	3	35	-46	-35	12	6	3	38	-35	-38
-6	11	2	61	-56	13	3	1	3	474	-489	6	-7	3	3	806	-788	7	-13	5	3	29	17	-29	13	6	3	43	-35	-43
-5	11	2	136	139	6	4	1	3	34	73	-34	-6	3	3	323	-330	5	-12	5	3	159	-160	5	-15	7	3	37	41	-37
-4	11	2	132	133	7	5	1	3	208	-207	3	-5	3	3	744	741	7	-11	5	3	162	-157	5	-14	7	3	93	121	11
-3	11	2	278	-288	5	6	1	3	119	121	4	-4	3	3	41	38	-41	-10	5	3	86	77	7	-13	7	3	164	-163	6
-2	11	2	45	5	-45	7	1	3	371	-386	6	-3	3	3	411	382	6	-9	5	3	153	-147	4	-12	7	3	93	-108	10
-1	11	2	168	171	5	8	1	3	73	67	7	-2	3	3	304	305	4	-8	5	3	113	113	5	-11	7	3	276	263	5
0	11	2	32	-22	-32	9	1	3	331	329	5	-1	3	3	637	627	6	-7	5	3	220	216	4	-10	7	3	50	61	-50
1	11	2	157	-153	6	10	1	3	85	-61	7	0	3	3	70	63	4	-6	5	3	110	112	4	-9	7	3	176	-171	4
2	11	2	35	-37	-35	11	1	3	94	-87	7	1	3	3	684	-706	6	-5	5	3	59	54	7	-8	7	3	127	-131	5
3	11	2	179	200	6	12	1	3	48	-39	-16	2	3	3	95	-98	4	-4	5	3	663	-648	7	-7	7	3	221	224	4
4	11	2	33	-24	-33	13	1	3	36	56	-36	3	3	3	256	275	4	-3	5	3	157	159	3	-6	7	3	117	118	5
5	11	2	160	-162	7	14	1	3	37	-8	-37	4	3	3	79	72	4	-2	5	3	292	-281	5	-5	7	3	286	-287	4
6	11	2	51	94	-24	15	1	3	82	-102	15	5	3	3	114	100	4	-1	5	3	418	-420	6	-4	7	3	151	151	4
7	11	2	37	52	-37	-17	2	3	60	-17	-60	6	3	3	102	90	5	0	5	3	186	178	3	-3	7	3	130	126	4
8	11	2	62	-26	-17	-16	2	3	35	51	-35	7	3	3	440	439	6	1	5	3	383	378	5	-2	7	3	23	-13	-23
-7	12	2	57	41	-57	-15	2	3	161	159	6	8	3	3	211	-206	4	2	5	3	287	280	4	-1	7	3	144	-146	4
-6	12	2	52	20	-52	-14	2	3	232	-222	4	9	3	3	372	-361	6	3	5	3	332	-332	5	0	7	3	106	-107	5
-5	12	2	37	55	-37	-13	2	3	459	-432	7	10	3	3	121	114	6	4	5	3	253	-240	4	1	7	3	282	283	5
-4	12	2	54	-52	-54	-12	2	3	400	365	7	11	3	3	150	133	5	5	5	3	180	175	3	2	7	3	33	-10	-33
-3	12	2	33	-31	-33	-11	2	3	21	19	-21	12	3	3	32	-20	-32	6	5	3	317	-315	5	3	7	3	210	-215	4
-2	12	2	62	91	-62	-10	2	3	159	-152	4	13	3	3	35	-58	-35	7	5	3	28	-33	-28	4	7	3	32	33	-32
-1	12	2	84	-82	10	-9	2	3	82	-82	5	14	3	3	40	117	-40	8	5	3	66	52	10	5	7	3	235	223	4
0	12	2	48	-7	-48	-8	2	3	309	320	5	-16	4	3	68	-60	16	9	5	3	124	117	6	6	7	3	162	149	5
1	12	2	34	-16	-34	-7	2	3	386	388	6	-15	4	3	34	-66	-34	10	5	3	31	49	-31	7	7	3	246	-228	4
2	12	2	36	33	-36	-6	2	3	694	-698	6	-14	4	3	192	196	6	11	5	3	78	-79	12	8	7	3	33	-40	-33
3	12	2	64	72	16	-5	2	3	168	-171	3	-13	4	3	286	270	5	12	5	3	33	32	-33	9	7	3	182	168	5
4	12	2	75	-83	14	-4	2	3	60	54	5	-12	4	3	30	-38	-30	13	5	3	39	-36	-39	10	7	3	71	-68	13
5	12	2	36	26	-36	-3	2	3	352	-348	5	-11	4	3	226	-223	4	14	5	3	39	-85	-39	11	7	3	82	-89	13
6	12	2	39	34	-39	-2	2	3	313	319	5	-10	4	3	94	100	5	-15	6	3	36	-62	-36	12	7	3	40	38	-40
-4	13	2	36	2	-36	-1	2	3	105	-102	3	-9	4	3	82	-73	5	-14	6	3	34	7	-34	-14	8	3	36	-72	-36
-3	13	2	39	-59	-39	0	2	3	735	736	6	-8	4	3	492	-474	7	-13	6	3	83	64	9	-13	8	3	39	-130	-39
-2	13	2	38	-57	-38	1	2	3	98	105	3	-7	4	3	30	-58	-30	-12	6	3	289	-292	5	-12	8	3	73	69	11
-1	13	2	38	51	-38	2	2	3	888	-932	7	-6	4	3	672	651	7	-11	6	3	96	95	7	-11	8	3	139	137	6
0	13	2	43	43	-43	3	2	3	54	-56	6	-5	4	3	570	558	7	-10	6	3	172	167	4	-10	8	3	153	-146	5
1	13	2	66	-50	-66	4	2	3	66	76	6	-4	4	3	171	-185	3	-9	6	3	28	-45	-28	-9	8	3	85	-68	8
2	13	2	68	43	-68	5	2	3	252	247	4	-3	4	3	65	-66	5	-8	6	3	39	-19	-39	-8	8	3	278	271	5
-17	1	3	34	-49	-34	6	2	3	300	-310	5	-2	4	3	241	241	4	-7	6	3	80	-88	6	-7	8	3	56	38	10
-16	1	3	32	-39	-32	7	2	3	36	0	-36	-1	4	3	437	-434	6	-6	6	3	230	232	4	-6	8	3	319	-315	5
-15	1	3	53	55	-16	8	2	3	579	585	8	0	4	3	592	-602	6	-5	6	3	256	-249	4	-5	8	3	26	-36	-26
-14	1	3	261	244	5	9	2	3	148	-135	5	1	4	3	248	-249	4	-4	6	3	332	-321	5	-4	8	3	254	254	4
-13	1	3	218	-209	4	10	2	3	261	-246	4	2	4	3	501	511	6	-3	6	3	360	366	5	-3	8	3	87	92	6
-12	1	3	169	-159	4	11	2	3	32	65	-32	3	4	3	247	250	4	-2	6	3	53	-40	7	-2	8	3	273	-276	5
-11	1	3	264	256	5	12	2	3	32	33	-32	4	4	3	200	-198	3	-1	6	3	294	292	4	-1	8	3	25	-19	-25
-10	1	3	136	-143	4	13	2	3	36	-35	-36	5	4	3	82	74	5	0	6	3	112	-104	4	0	8	3	259	250	4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
1	8	3	25	-7	-25	-10	11	3	39	17	-39	3	0	4	230	229	4	-5	2	4	285	287	4	-12	4	4	155	-156	5
2	8	3	129	-127	5	-9	11	3	37	46	-37	4	0	4	524	534	7	-4	2	4	20	-26	-20	-11	4	4	207	-202	4
3	8	3	57	-59	11	-8	11	3	66	14	-66	5	0	4	171	-174	3	-3	2	4	307	-298	4	-10	4	4	24	27	-24
4	8	3	177	163	4	-7	11	3	32	13	-32	6	0	4	187	-182	3	-2	2	4	147	145	3	-9	4	4	237	238	4
5	8	3	64	-57	11	-6	11	3	33	93	-33	7	0	4	225	227	4	-1	2	4	96	-88	3	-8	4	4	132	124	4
6	8	3	166	-153	5	-5	11	3	34	41	-34	8	0	4	518	535	8	0	2	4	269	-290	4	-7	4	4	730	-718	8
7	8	3	134	125	6	-4	11	3	147	-155	6	9	0	4	311	-286	5	1	2	4	153	153	3	-6	4	4	510	488	7
8	8	3	136	130	7	-3	11	3	72	-62	11	10	0	4	435	-396	7	2	2	4	313	348	5	-5	4	4	520	504	7
9	8	3	81	-72	10	-2	11	3	32	8	-32	11	0	4	123	108	6	3	2	4	114	112	4	-4	4	4	646	-629	7
10	8	3	52	-143	-52	-1	11	3	55	-57	-55	12	0	4	34	15	-34	4	2	4	74	-56	6	-3	4	4	55	-58	7
11	8	3	39	59	-39	0	11	3	73	70	10	13	0	4	62	35	-62	5	2	4	109	114	4	-2	4	4	45	37	8
-13	9	3	34	12	-34	1	11	3	53	50	-16	14	0	4	42	-73	-42	6	2	4	26	-4	-26	-1	4	4	479	479	6
-12	9	3	98	144	12	2	11	3	32	40	-32	-17	1	4	68	-12	-68	7	2	4	190	-189	4	0	4	4	540	-556	7
-11	9	3	64	-11	-64	3	11	3	33	-2	-33	-16	1	4	32	-26	-32	8	2	4	122	-116	5	1	4	4	130	-146	3
-10	9	3	142	-161	7	4	11	3	43	-28	-43	-15	1	4	33	8	-33	9	2	4	156	156	5	2	4	4	740	781	7
-9	9	3	140	147	6	5	11	3	36	-15	-36	-14	1	4	324	-305	5	10	2	4	107	97	7	3	4	4	390	-402	5
-8	9	3	83	87	9	6	11	3	76	-94	-76	-13	1	4	184	178	5	11	2	4	22	-34	-22	4	4	4	185	-189	3
-7	9	3	143	-145	5	7	11	3	35	21	-35	-12	1	4	434	426	7	12	2	4	51	-20	-51	5	4	4	26	47	-26
-6	9	3	124	-129	6	-7	12	3	36	3	-36	-11	1	4	25	3	-25	13	2	4	37	40	-37	6	4	4	215	215	4
-5	9	3	41	32	-41	-6	12	3	64	24	-64	-10	1	4	374	-351	6	14	2	4	35	-1	-35	7	4	4	27	-57	-27
-4	9	3	287	280	5	-5	12	3	35	-38	-35	-9	1	4	130	-128	4	-17	3	4	65	29	-65	8	4	4	281	-269	5
-3	9	3	175	-177	4	-4	12	3	38	-110	-38	-8	1	4	519	526	7	-16	3	4	64	-27	-64	9	4	4	182	173	5
-2	9	3	39	-29	-39	-3	12	3	36	-8	-36	-7	1	4	253	-260	4	-15	3	4	105	104	8	10	4	4	131	124	6
-1	9	3	238	228	4	-2	12	3	104	121	11	-6	1	4	809	-796	7	-14	3	4	98	-111	8	11	4	4	119	-114	8
0	9	3	94	-92	6	-1	12	3	54	24	-54	-5	1	4	736	738	6	-13	3	4	29	-19	-29	12	4	4	33	5	-33
1	9	3	228	-227	4	0	12	3	34	11	-34	-4	1	4	653	666	6	-12	3	4	53	53	-53	13	4	4	39	-9	-39
2	9	3	106	-92	6	1	12	3	35	-20	-35	-3	1	4	317	-314	5	-11	3	4	90	-86	6	-16	5	4	38	-51	-38
3	9	3	259	241	4	2	12	3	39	21	-39	-2	1	4	416	-410	5	-10	3	4	25	26	-25	-15	5	4	34	-3	-34
4	9	3	118	117	6	3	12	3	37	-7	-37	-1	1	4	798	832	6	-9	3	4	90	-88	5	-14	5	4	120	148	8
5	9	3	278	-251	5	4	12	3	101	-110	10	0	1	4	123	138	3	-8	3	4	279	288	4	-13	5	4	52	-85	-52
6	9	3	141	129	6	5	12	3	39	-4	-39	1	1	4	1002	-1099	7	-7	3	4	207	206	4	-12	5	4	292	-295	5
7	9	3	90	99	10	-3	13	3	126	158	9	2	1	4	39	-40	-10	-6	3	4	502	-479	7	-11	5	4	146	140	5
8	9	3	34	-36	-34	-2	13	3	41	37	-41	3	1	4	1199	1235	8	-5	3	4	429	424	6	-10	5	4	224	217	4
9	9	3	88	-118	12	-1	13	3	76	-114	-76	4	1	4	47	42	9	-4	3	4	347	-336	5	-9	5	4	110	-106	5
10	9	3	37	-13	-37	0	13	3	36	-4	-36	5	1	4	142	-150	4	-3	3	4	231	-237	4	-8	5	4	235	-230	4
-11	10	3	39	-106	-39	1	13	3	38	28	-38	6	1	4	24	55	-24	-2	3	4	311	-297	4	-7	5	4	353	353	6
-10	10	3	43	28	-31	-17	0	4	36	-28	-36	7	1	4	339	349	5	-1	3	4	225	225	4	-6	5	4	567	585	8
-9	10	3	33	2	-33	-16	0	4	63	-27	13	8	1	4	197	-204	4	0	3	4	387	397	6	-5	5	4	911	-914	8
-8	10	3	131	-139	7	-15	0	4	53	84	-53	9	1	4	392	-367	7	1	3	4	462	-484	6	-4	5	4	470	-474	7
-7	10	3	33	-2	-33	-14	0	4	93	-90	7	10	1	4	212	201	5	2	3	4	176	178	3	-3	5	4	616	609	7
-6	10	3	104	96	7	-13	0	4	516	-497	7	11	1	4	126	109	6	3	3	4	256	261	4	-2	5	4	255	253	4
-5	10	3	200	200	5	-12	0	4	201	203	4	12	1	4	27	-10	-27	4	3	4	257	-256	4	-1	5	4	607	-607	7
-4	10	3	107	-107	7	-11	0	4	205	198	4	13	1	4	34	10	-34	5	3	4	46	-54	-46	0	5	4	210	-209	4
-3	10	3	152	-153	5	-10	0	4	206	-197	3	14	1	4	40	79	-40	6	3	4	85	-84	6	1	5	4	962	962	8
-2	10	3	249	234	4	-9	0	4	192	-192	3	-17	2	4	52	23	-22	7	3	4	137	135	5	2	5	4	23	4	-23
-1	10	3	115	-111	6	-8	0	4	394	397	5	-16	2	4	32	33	-32	8	3	4	130	-124	6	3	5	4	731	-735	8
0	10	3	218	-206	5	-7	0	4	486	491	7	-15	2	4	48	-33	-19	9	3	4	32	-50	-32	4	5	4	125	130	4
1	10	3	41	9	-41	-6	0	4	1372	-1341	9	-14	2	4	104	98	7	10	3	4	173	161	5	5	5	4	302	297	5
2	10	3	166	155	5	-5	0	4	832	-835	7	-13	2	4	171	166	5	11	3	4	32	-37	-32	6	5	4	114	-114	5
3	10	3	145	134	6	-4	0	4	1334	1328	8	-12	2	4	30	-39	-30	12	3	4	56	-79	-18	7	5	4	342	-317	6
4	10	3	148	-155	6	-3	0	4	556	558	6	-11	2	4	114	-115	5	13	3	4	37	-16	-37	8	5	4	185	178	5
5	10	3	78	81	11	-2	0	4	1125	-1162	7	-10	2	4	145	-136	4	14	3	4	37	7	-37	9	5	4	313	282	5
6	10	3	45	48	-45	-1	0	4	339	-340	5	-9	2	4	125	133	4	-16	4	4	32	52	-32	10	5	4	146	-157	7
7	10	3	143	-140	7	0	0	4	542	579	6	-8	2	4	100	-103	4	-15	4	4	38	-112	-38	11	5	4	115	-127	9
8	10	3	52	-26	-52	1	0	4	84	75	4	-7	2	4	60	57	6	-14	4	4	87	-87	10	12	5	4	38	60	-38
9	10	3	34	4	-34	2	0	4	1692	-1706	10	-6	2	4	511	513	6	-13	4	4	317	320	5	13	5	4	59	41	-20

44

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-15	6	4	23	59	-23	-13	8	4	36	-12	-36	-4	10	4	233	-214	4	-3	1	5	173	-177	3	-9	3	5	64	-66	7
-14	6	4	114	-120	8	-12	8	4	68	79	13	-3	10	4	148	-143	5	-2	1	5	90	86	4	-8	3	5	130	127	4
-13	6	4	172	-181	6	-11	8	4	78	-63	10	-2	10	4	356	338	6	-1	1	5	41	61	-41	-7	3	5	436	434	7
-12	6	4	52	46	-52	-10	8	4	25	-30	-25	-1	10	4	92	85	8	0	1	5	32	30	-32	-6	3	5	326	312	5
-11	6	4	336	330	5	-9	8	4	86	-77	8	0	10	4	255	-247	4	1	1	5	225	-248	4	-5	3	5	957	-937	8
-10	6	4	51	-53	-51	-8	8	4	87	-85	7	1	10	4	24	-22	-24	2	1	5	102	-91	4	-4	3	5	266	-265	4
-9	6	4	248	-236	4	-7	8	4	234	244	4	2	10	4	231	211	5	3	1	5	443	442	7	-3	3	5	37	6	-37
-8	6	4	158	158	4	-6	8	4	28	-35	-28	3	10	4	32	-23	-32	4	1	5	23	1	-23	-2	3	5	64	-63	6
-7	6	4	195	196	4	-5	8	4	27	-21	-27	4	10	4	237	-259	5	5	1	5	43	-55	-43	-1	3	5	165	157	3
-6	6	4	349	-366	6	-4	8	4	216	198	4	5	10	4	62	59	14	6	1	5	84	-79	6	0	3	5	87	82	4
-5	6	4	447	-444	8	-3	8	4	64	-66	9	6	10	4	135	146	7	7	1	5	140	144	5	1	3	5	501	538	7
-4	6	4	393	395	6	-2	8	4	135	-129	5	7	10	4	37	-37	-37	8	1	5	63	47	10	2	3	5	51	60	8
-3	6	4	338	333	6	-1	8	4	187	-169	4	8	10	4	75	-68	14	9	1	5	297	-273	5	3	3	5	474	-493	7
-2	6	4	409	-398	5	0	8	4	125	126	5	-10	11	4	99	118	11	10	1	5	31	37	-31	4	3	5	76	-76	6
-1	6	4	22	-7	-22	1	8	4	154	157	5	-9	11	4	92	-137	13	11	1	5	109	114	8	5	3	5	25	-47	-25
0	6	4	626	615	8	2	8	4	140	-132	5	-8	11	4	38	-71	-38	12	1	5	38	24	-38	6	3	5	26	-18	-26
1	6	4	55	-49	8	3	8	4	251	235	4	-7	11	4	97	140	10	13	1	5	69	-20	16	7	3	5	190	-177	4
2	6	4	634	-638	8	4	8	4	30	40	-30	-6	11	4	35	2	-35	-17	2	5	77	70	13	8	3	5	32	96	-32
3	6	4	159	-154	4	5	8	4	118	-114	6	-5	11	4	36	-64	-36	-16	2	5	32	-30	-32	9	3	5	366	331	6
4	6	4	428	427	6	6	8	4	49	-66	-49	-4	11	4	118	-138	8	-15	2	5	82	-76	10	10	3	5	125	-112	7
5	6	4	23	15	-23	7	8	4	34	-80	-34	-3	11	4	221	233	5	-14	2	5	168	156	5	11	3	5	139	-150	7
6	6	4	227	-225	4	8	8	4	34	55	-34	-2	11	4	37	72	-37	-13	2	5	520	510	8	12	3	5	53	2	-53
7	6	4	166	160	5	9	8	4	35	-40	-35	-1	11	4	175	-202	6	-12	2	5	346	-339	6	13	3	5	41	23	-41
8	6	4	196	180	5	10	8	4	40	29	-40	0	11	4	50	40	-50	-11	2	5	338	-336	5	-17	4	5	70	-84	17
9	6	4	93	-92	9	11	8	4	62	92	-62	1	11	4	81	80	10	-10	2	5	212	209	4	-16	4	5	38	11	-38
10	6	4	161	-171	6	-13	9	4	31	-27	-31	2	11	4	52	14	-16	-9	2	5	48	-79	-48	-15	4	5	34	37	-34
11	6	4	34	24	-34	-12	9	4	53	46	-53	3	11	4	119	-131	8	-8	2	5	24	-29	-24	-14	4	5	179	-202	6
12	6	4	67	81	-67	-11	9	4	26	-43	-26	4	11	4	63	-24	-63	-7	2	5	224	-229	4	-13	4	5	197	-192	5
-15	7	4	97	-108	12	-10	9	4	94	-93	9	5	11	4	85	172	-85	-6	2	5	783	790	7	-12	4	5	160	155	5
-14	7	4	36	-25	-36	-9	9	4	32	-18	-32	6	11	4	64	-58	-64	-5	2	5	356	352	5	-11	4	5	308	295	5
-13	7	4	34	49	-34	-8	9	4	259	259	4	-7	12	4	39	-41	-39	-4	2	5	560	-562	6	-10	4	5	62	-60	9
-12	7	4	123	129	7	-7	9	4	28	-9	-28	-6	12	4	39	-49	-39	-3	2	5	186	169	3	-9	4	5	120	-128	4
-11	7	4	29	29	-29	-6	9	4	213	-212	4	-5	12	4	38	-8	-38	-2	2	5	34	67	-34	-8	4	5	238	240	4
-10	7	4	107	-98	6	-5	9	4	138	142	6	-4	12	4	38	21	-38	-1	2	5	22	-32	-22	-7	4	5	154	-161	4
-9	7	4	149	137	5	-4	9	4	41	58	-41	-3	12	4	39	77	-39	0	2	5	257	-264	4	-6	4	5	642	-628	8
-8	7	4	55	-47	-55	-3	9	4	224	-221	4	-2	12	4	68	-83	15	1	2	5	202	-211	4	-5	4	5	372	-385	5
-7	7	4	304	-300	5	-2	9	4	172	-161	5	-1	12	4	34	35	-34	2	2	5	921	963	8	-4	4	5	275	278	4
-6	7	4	27	59	-27	-1	9	4	170	181	5	0	12	4	27	43	-27	3	2	5	23	33	-23	-3	4	5	440	434	7
-5	7	4	140	141	4	0	9	4	185	174	5	1	12	4	38	-45	-38	4	2	5	196	-193	3	-2	4	5	23	-45	-23
-4	7	4	272	271	4	1	9	4	188	-179	5	2	12	4	37	-6	-37	5	2	5	110	-108	5	-1	4	5	134	121	3
-3	7	4	90	-78	5	2	9	4	69	56	10	3	12	4	38	-56	-38	6	2	5	72	62	7	0	4	5	299	302	4
-2	7	4	29	-41	-29	3	9	4	160	149	5	4	12	4	78	76	-78	7	2	5	39	14	-39	1	4	5	193	-212	3
-1	7	4	93	99	5	4	9	4	186	-183	5	-17	1	5	49	34	-49	8	2	5	304	-287	5	2	4	5	552	-555	7
0	7	4	183	-180	4	5	9	4	156	-138	5	-16	1	5	31	-11	-31	9	2	5	143	137	6	3	4	5	350	-364	6
1	7	4	111	-110	5	6	9	4	51	25	-51	-15	1	5	31	-61	-31	10	2	5	317	285	6	4	4	5	277	276	5
2	7	4	27	69	-27	7	9	4	99	107	10	-14	1	5	159	-155	5	11	2	5	102	-111	9	5	4	5	54	71	-54
3	7	4	25	52	-25	8	9	4	39	-25	-39	-13	1	5	236	233	4	12	2	5	50	-25	-50	6	4	5	122	-117	6
4	7	4	209	202	4	9	9	4	39	-51	-39	-12	1	5	226	217	4	13	2	5	26	6	-26	7	4	5	105	93	6
5	7	4	84	-86	8	10	9	4	39	86	-39	-11	1	5	286	-281	5	-17	3	5	36	-5	-36	8	4	5	207	193	5
6	7	4	172	165	5	-11	10	4	85	-107	13	-10	1	5	48	44	-48	-16	3	5	36	-34	-36	9	4	5	31	-46	-31
7	7	4	45	15	-45	-10	10	4	35	69	-35	-9	1	5	335	338	6	-15	3	5	32	53	-32	10	4	5	166	-211	7
8	7	4	148	-145	6	-9	10	4	181	190	6	-8	1	5	157	-166	3	-14	3	5	261	254	4	11	4	5	34	-44	-34
9	7	4	34	-70	-34	-8	10	4	96	-102	9	-7	1	5	424	-423	7	-13	3	5	285	-281	5	12	4	5	39	72	-39
10	7	4	33	-33	-33	-7	10	4	146	-163	7	-6	1	5	252	-255	4	-12	3	5	460	-435	7	13	4	5	39	-21	-39
11	7	4	34	115	-34	-6	10	4	55	63	-15	-5	1	5	606	597	6	-11	3	5	306	303	5	-16	5	5	37	7	-37
-14	8	4	84	109	14	-5	10	4	119	114	6	-4	1	5	21	-8	-21	-10	3	5	142	139	4	-15	5	5	87	-111	12

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-14	5	5	52	47	-52	-13	7	5	97	128	10	-7	9	5	188	184	5	-1	12	5	32	-31	-32	5	1	6	262	257	4
-13	5	5	23	48	-23	-12	7	5	142	154	6	-6	9	5	31	44	-31	0	12	5	64	58	-17	6	1	6	28	-54	-28
-12	5	5	88	94	8	-11	7	5	229	-239	5	-5	9	5	67	-73	10	1	12	5	36	23	-36	7	1	6	94	-90	7
-11	5	5	175	178	5	-10	7	5	106	-104	7	-4	9	5	254	-247	4	2	12	5	37	12	-37	8	1	6	92	96	8
-10	5	5	213	-211	4	-9	7	5	201	199	4	-3	9	5	166	163	5	-17	0	6	35	47	-35	9	1	6	256	243	5
-9	5	5	85	-87	7	-8	7	5	85	89	8	-2	9	5	125	124	6	-16	0	6	22	30	-22	10	1	6	121	-142	8
-8	5	5	25	-31	-25	-7	7	5	138	-132	5	-1	9	5	253	-242	4	-15	0	6	33	65	-33	11	1	6	105	-136	10
-7	5	5	315	-322	5	-6	7	5	81	-87	7	0	9	5	47	47	-47	-14	0	6	42	57	-42	12	1	6	39	35	-39
-6	5	5	139	141	4	-5	7	5	299	301	5	1	9	5	234	223	5	-13	0	6	368	354	6	-17	2	6	47	-44	-47
-5	5	5	107	106	5	-4	7	5	75	-64	7	2	9	5	57	35	-57	-12	0	6	206	-211	4	-16	2	6	37	-10	-37
-4	5	5	484	490	8	-3	7	5	251	-253	4	3	9	5	209	-188	5	-11	0	6	415	-421	7	-15	2	6	31	-11	-31
-3	5	5	107	-96	4	-2	7	5	27	56	-27	4	9	5	117	-138	8	-10	0	6	218	215	4	-14	2	6	39	-12	-39
-2	5	5	224	-224	4	-1	7	5	132	131	4	5	9	5	178	183	6	-9	0	6	85	76	6	-13	2	6	135	-144	6
-1	5	5	320	317	5	0	7	5	104	103	5	6	9	5	34	-33	-34	-8	0	6	92	-88	5	-12	2	6	31	45	-31
0	5	5	269	-281	5	1	7	5	255	-251	4	7	9	5	85	-82	12	-7	0	6	587	-574	7	-11	2	6	182	170	4
1	5	5	282	-285	4	2	7	5	82	-79	8	8	9	5	39	80	-39	-6	0	6	862	850	8	-10	2	6	27	4	-27
2	5	5	24	-25	-24	3	7	5	228	222	4	9	9	5	39	55	-39	-5	0	6	878	871	8	-9	2	6	65	-71	7
3	5	5	184	178	4	4	7	5	30	-18	-30	-11	10	5	93	94	11	-4	0	6	665	-662	7	-8	2	6	72	-86	6
4	5	5	314	313	5	5	7	5	142	-140	5	-10	10	5	37	59	-37	-3	0	6	425	-462	6	-7	2	6	45	57	-45
5	5	5	125	-114	5	6	7	5	72	-68	10	-9	10	5	39	-87	-39	-2	0	6	504	486	6	-6	2	6	309	-308	5
6	5	5	173	157	5	7	7	5	150	147	6	-8	10	5	112	123	9	-1	0	6	221	232	4	-5	2	6	233	-231	4
7	5	5	28	3	-28	8	7	5	35	41	-35	-7	10	5	34	-50	-34	0	0	6	429	-447	7	-4	2	6	200	203	3
8	5	5	185	-165	5	9	7	5	126	-135	8	-6	10	5	106	-118	8	1	0	6	124	-125	4	-3	2	6	204	202	3
9	5	5	30	-20	-30	10	7	5	71	43	16	-5	10	5	110	-120	8	2	0	6	1014	1014	8	-2	2	6	65	46	6
10	5	5	48	-21	-48	11	7	5	75	70	-75	-4	10	5	72	44	10	3	0	6	21	-4	-21	-1	2	6	23	-66	-23
11	5	5	39	84	-39	-14	8	5	73	73	15	-3	10	5	237	224	5	4	0	6	602	-593	8	0	2	6	63	67	6
12	5	5	41	19	-41	-13	8	5	93	113	11	-2	10	5	136	-127	6	5	0	6	28	50	-28	1	2	6	206	-209	4
-15	6	5	65	74	-65	-12	8	5	102	-103	8	-1	10	5	36	8	-36	6	0	6	264	255	4	2	2	6	247	-250	4
-14	6	5	36	39	-36	-11	8	5	114	-125	8	0	10	5	174	158	5	7	0	6	29	-28	-29	3	2	6	76	-78	6
-13	6	5	80	-71	10	-10	8	5	115	134	8	1	10	5	80	-98	11	8	0	6	237	-239	5	4	2	6	73	84	8
-12	6	5	178	191	5	-9	8	5	90	88	8	2	10	5	84	-88	10	9	0	6	109	99	7	5	2	6	27	-40	-27
-11	6	5	59	-31	11	-8	8	5	227	-231	4	3	10	5	89	-97	10	10	0	6	244	329	6	6	2	6	29	-3	-29
-10	6	5	288	-288	5	-7	8	5	53	-56	-53	4	10	5	76	101	12	11	0	6	53	-83	-22	7	2	6	108	111	6
-9	6	5	92	89	7	-6	8	5	243	238	4	5	10	5	33	26	-33	12	0	6	38	-54	-38	8	2	6	30	29	-30
-8	6	5	62	64	9	-5	8	5	122	118	5	6	10	5	54	-58	-54	-17	1	6	36	10	-36	9	2	6	105	-105	8
-7	6	5	106	100	5	-4	8	5	214	-204	4	7	10	5	41	100	-41	-16	1	6	35	26	-35	10	2	6	42	-99	-42
-6	6	5	104	-99	5	-3	8	5	111	-103	6	-9	11	5	80	-88	13	-15	1	6	32	-23	-32	11	2	6	35	16	-35
-5	6	5	104	99	5	-2	8	5	101	95	6	-8	11	5	38	-10	-38	-14	1	6	212	217	5	12	2	6	35	26	-35
-4	6	5	348	342	6	-1	8	5	30	42	-30	-7	11	5	37	0	-37	-13	1	6	55	-28	-55	-17	3	6	38	-55	-38
-3	6	5	229	-242	4	0	8	5	139	-131	5	-6	11	5	53	-25	-53	-12	1	6	547	-531	7	-16	3	6	35	28	-35
-2	6	5	103	-105	5	1	8	5	29	17	-29	-5	11	5	56	-1	-56	-11	1	6	108	105	6	-15	3	6	94	-114	10
-1	6	5	25	-30	-25	2	8	5	153	133	5	-4	11	5	134	141	7	-10	1	6	386	365	6	-14	3	6	26	66	-26
0	6	5	21	5	-21	3	8	5	31	8	-31	-3	11	5	77	65	11	-9	1	6	174	167	4	-13	3	6	56	86	-56
1	6	5	285	287	4	4	8	5	173	-148	5	-2	11	5	62	-65	15	-8	1	6	220	-216	4	-12	3	6	132	-138	5
2	6	5	147	-146	4	5	8	5	30	7	-30	-1	11	5	34	-12	-34	-7	1	6	185	182	3	-11	3	6	27	15	-27
3	6	5	156	156	4	6	8	5	125	135	7	0	11	5	62	-69	-62	-6	1	6	727	730	7	-10	3	6	23	6	-23
4	6	5	29	40	-29	7	8	5	34	-51	-34	1	11	5	35	-64	-35	-5	1	6	794	-775	7	-9	3	6	21	-48	-21
5	6	5	30	-41	-30	8	8	5	116	-128	9	2	11	5	31	18	-31	-4	1	6	493	-499	7	-8	3	6	59	-64	8
6	6	5	61	-58	12	9	8	5	57	50	-57	3	11	5	38	31	-38	-3	1	6	554	556	7	-7	3	6	162	-159	4
7	6	5	133	-123	6	10	8	5	49	99	-49	4	11	5	36	56	-36	-2	1	6	310	305	5	-6	3	6	387	398	5
8	6	5	127	111	6	-13	9	5	62	-53	-62	5	11	5	37	10	-37	-1	1	6	403	-430	7	-5	3	6	215	-212	4
9	6	5	33	27	-33	-12	9	5	103	-142	11	-6	12	5	37	-23	-37	0	1	6	161	-170	3	-4	3	6	95	-96	4
10	6	5	49	-54	-22	-11	9	5	36	-50	-36	-5	12	5	38	32	-38	1	1	6	748	792	7	-3	3	6	352	350	5
11	6	5	86	92	14	-10	9	5	180	205	6	-4	12	5	37	39	-37	2	1	6	113	111	4	-2	3	6	147	-136	3
-15	7	5	38	-38	-38	-9	9	5	36	-58	-36	-3	12	5	38	-7	-38	3	1	6	702	-723	8	-1	3	6	77	-82	6
-14	7	5	60	-144	-60	-8	9	5	60	-101	-60	-2	12	5	81	-121	14	4	1	6	26	-22	-26	0	3	6	302	-312	5

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
1	3	6	146	144	4	-1	5	6	386	365	6	2	7	6	87	-81	8	-9	10	6	150	-160	7	3	1	7	327	-337	5
2	3	6	42	61	-12	0	5	6	149	140	4	3	7	6	87	-88	8	-8	10	6	90	104	10	4	1	7	29	-53	-29
3	3	6	203	-213	4	1	5	6	536	-536	8	4	7	6	120	-105	6	-7	10	6	142	160	7	5	1	7	188	175	5
4	3	6	286	298	5	2	5	6	64	-64	8	5	7	6	32	79	-32	-6	10	6	77	-86	12	6	1	7	71	67	10
5	3	6	28	-10	-28	3	5	6	605	597	9	6	7	6	32	4	-32	-5	10	6	37	-102	-37	7	1	7	47	-49	-47
6	3	6	62	-46	11	4	5	6	72	-69	9	7	7	6	51	-57	-19	-4	10	6	140	154	7	8	1	7	34	-69	-34
7	3	6	30	-20	-30	5	5	6	272	-258	5	8	7	6	80	102	12	-3	10	6	95	104	9	9	1	7	131	157	8
8	3	6	46	-8	-46	6	5	6	69	58	10	9	7	6	40	34	-40	-2	10	6	234	-265	5	10	1	7	52	-31	-52
9	3	6	94	78	9	7	5	6	182	170	5	10	7	6	41	-3	-41	-1	10	6	91	-106	9	11	1	7	38	-88	-38
10	3	6	91	-116	11	8	5	6	67	-67	12	-14	8	6	109	-129	11	0	10	6	220	240	6	-17	2	7	162	-182	8
11	3	6	40	16	-40	9	5	6	171	-202	7	-13	8	6	35	27	-35	1	10	6	39	33	-39	-16	2	7	51	26	-51
12	3	6	68	51	-68	10	5	6	70	97	-70	-12	8	6	66	2	-66	2	10	6	95	-104	9	-15	2	7	63	66	-63
-16	4	6	37	-14	-37	11	5	6	78	105	-78	-11	8	6	31	36	-31	3	10	6	36	3	-36	-14	2	7	33	-48	-33
-15	4	6	33	48	-33	-15	6	6	71	-103	17	-10	8	6	113	120	8	4	10	6	107	155	11	-13	2	7	316	-306	5
-14	4	6	96	108	9	-14	6	6	68	100	16	-9	8	6	41	-19	-41	5	10	6	38	-43	-38	-12	2	7	267	260	5
-13	4	6	255	-252	4	-13	6	6	154	175	6	-8	8	6	89	104	8	6	10	6	63	-121	-63	-11	2	7	535	524	7
-12	4	6	29	30	-29	-12	6	6	60	-45	13	-7	8	6	241	-237	4	-9	11	6	61	80	-61	-10	2	7	359	-364	6
-11	4	6	307	308	5	-11	6	6	262	-268	5	-6	8	6	76	-70	9	-8	11	6	105	125	11	-9	2	7	26	20	-26
-10	4	6	171	-161	4	-10	6	6	41	-19	-19	-5	8	6	31	62	-31	-7	11	6	40	-150	-40	-8	2	7	25	25	-25
-9	4	6	148	-149	4	-9	6	6	323	308	5	-4	8	6	159	-150	5	-6	11	6	36	-17	-36	-7	2	7	24	-21	-24
-8	4	6	145	-146	4	-8	6	6	168	-161	5	-3	8	6	88	82	8	-5	11	6	51	63	-23	-6	2	7	480	-473	8
-7	4	6	469	469	8	-7	6	6	123	-112	5	-2	8	6	104	97	6	-4	11	6	50	69	-50	-5	2	7	307	-304	5
-6	4	6	74	-76	7	-6	6	6	343	338	5	-1	8	6	81	63	7	-3	11	6	96	-101	10	-4	2	7	751	724	8
-5	4	6	592	-578	8	-5	6	6	302	291	5	0	8	6	27	-31	-27	-2	11	6	113	-117	8	-3	2	7	126	130	4
-4	4	6	502	503	8	-4	6	6	391	-391	6	1	8	6	181	-172	5	-1	11	6	144	199	8	-2	2	7	265	-263	4
-3	4	6	171	174	3	-3	6	6	342	-340	5	2	8	6	95	84	7	0	11	6	69	4	-69	-1	2	7	75	79	6
-2	4	6	274	-288	4	-2	6	6	382	382	6	3	8	6	118	-112	7	1	11	6	38	-96	-38	0	2	7	46	-51	-46
-1	4	6	74	-69	6	-1	6	6	143	141	4	4	8	6	31	-45	-31	2	11	6	71	15	-71	1	2	7	138	150	4
0	4	6	111	111	4	0	6	6	398	-403	6	5	8	6	39	109	-39	3	11	6	36	62	-36	2	2	7	510	-535	8
1	4	6	358	377	6	1	6	6	26	35	-26	6	8	6	51	28	-51	4	11	6	38	43	-38	3	2	7	27	-28	-27
2	4	6	609	-625	8	2	6	6	445	446	7	7	8	6	35	29	-35	-5	12	6	36	-22	-36	4	2	7	310	299	5
3	4	6	153	156	4	3	6	6	124	105	5	8	8	6	41	-42	-41	-4	12	6	29	-17	-29	5	2	7	29	-19	-29
4	4	6	303	315	5	4	6	6	313	-303	5	9	8	6	40	-29	-40	-3	12	6	38	-50	-38	6	2	7	42	-15	-42
5	4	6	98	-98	7	5	6	6	29	-45	-29	-12	9	6	39	-81	-39	-2	12	6	38	47	-38	7	2	7	19	-16	-19
6	4	6	102	-98	7	6	6	6	149	148	6	-11	9	6	59	44	-59	-1	12	6	40	20	-40	8	2	7	116	95	7
7	4	6	53	-49	-14	7	6	6	88	-69	8	-10	9	6	35	56	-35	0	12	6	71	-72	17	9	2	7	40	-60	-40
8	4	6	194	177	5	8	6	6	83	-119	12	-9	9	6	32	-39	-32	-17	1	7	60	-46	-60	10	2	7	176	-218	7
9	4	6	36	-41	-36	9	6	6	72	99	-72	-8	9	6	172	-196	6	-16	1	7	37	-3	-37	11	2	7	40	78	-40
10	4	6	39	-140	-39	10	6	6	42	116	-42	-7	9	6	57	-68	-16	-15	1	7	33	30	-33	-17	3	7	38	0	-38
11	4	6	43	109	-43	-15	7	6	42	84	-42	-6	9	6	260	262	5	-14	1	7	59	47	-59	-16	3	7	38	77	-38
12	4	6	38	9	-38	-14	7	6	36	18	-36	-5	9	6	78	-71	9	-13	1	7	191	-189	5	-15	3	7	32	-46	-32
-16	5	6	38	39	-38	-13	7	6	120	-125	8	-4	9	6	92	-85	7	-12	1	7	236	-228	4	-14	3	7	106	-117	8
-15	5	6	38	17	-38	-12	7	6	35	-76	-35	-3	9	6	183	175	5	-11	1	7	337	332	5	-13	3	7	126	143	7
-14	5	6	109	-131	8	-11	7	6	26	-21	-26	-2	9	6	78	57	9	-10	1	7	141	142	4	-12	3	7	389	373	6
-13	5	6	48	44	-17	-10	7	6	156	156	5	-1	9	6	150	-141	6	-9	1	7	147	-138	4	-11	3	7	345	-344	6
-12	5	6	212	228	5	-9	7	6	49	-31	-49	0	9	6	156	-150	6	-8	1	7	99	102	5	-10	3	7	365	-358	6
-11	5	6	101	-113	7	-8	7	6	28	-8	-28	1	9	6	127	121	6	-7	1	7	175	180	3	-9	3	7	129	133	4
-10	5	6	306	-298	5	-7	7	6	261	252	4	2	9	6	39	28	-39	-6	1	7	159	155	4	-8	3	7	80	-79	6
-9	5	6	153	144	5	-6	7	6	24	-56	-24	3	9	6	121	-138	7	-5	1	7	415	-411	5	-7	3	7	98	-94	5
-8	5	6	272	266	4	-5	7	6	28	-62	-28	4	9	6	78	109	12	-4	1	7	151	-149	4	-6	3	7	145	-137	4
-7	5	6	192	-192	4	-4	7	6	226	-214	4	5	9	6	111	118	9	-3	1	7	264	273	4	-5	3	7	494	488	8
-6	5	6	443	-432	6	-3	7	6	28	-8	-28	6	9	6	30	-40	-30	-2	1	7	43	-47	-43	-4	3	7	302	295	5
-5	5	6	521	540	8	-2	7	6	84	96	7	7	9	6	42	-75	-42	-1	1	7	23	38	-23	-3	3	7	418	-423	6
-4	5	6	482	486	8	-1	7	6	28	-35	-28	8	9	6	67	-19	-67	0	1	7	45	-49	10	-2	3	7	109	-109	5
-3	5	6	582	-593	8	0	7	6	164	149	5	-11	10	6	64	87	-64	1	1	7	212	235	3	-1	3	7	191	-187	3
-2	5	6	261	-255	4	1	7	6	89	87	7	-10	10	6	42	-35	-42	2	1	7	80	90	7	0	3	7	49	-56	-49

47

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
1	3	7	202	-203	4	1	5	7	168	164	4	7	7	7	80	-83	12	2	10	7	81	63	12	-4	1	8	571	549	8
2	3	7	22	-36	-22	2	5	7	154	-147	5	8	7	7	39	-35	-39	3	10	7	39	17	-39	-3	1	8	621	-614	8
3	3	7	471	468	6	3	5	7	83	-67	8	9	7	7	43	101	-43	4	10	7	39	-58	-39	-2	1	8	240	-251	4
4	3	7	75	69	9	4	5	7	145	-138	5	-13	8	7	84	-97	13	5	10	7	44	-67	-44	-1	1	8	88	90	6
5	3	7	179	-164	5	5	5	7	77	58	10	-12	8	7	91	107	12	-8	11	7	37	-25	-37	0	1	8	95	79	6
6	3	7	25	-37	-25	6	5	7	29	43	-29	-11	8	7	109	135	9	-7	11	7	37	-32	-37	1	1	8	375	-375	7
7	3	7	31	13	-31	7	5	7	34	-28	-34	-10	8	7	34	-97	-34	-6	11	7	35	-16	-35	2	1	8	97	-82	6
8	3	7	55	-27	-55	8	5	7	115	140	9	-9	8	7	145	-165	7	-5	11	7	39	-7	-39	3	1	8	451	438	7
9	3	7	171	-194	7	9	5	7	38	-7	-38	-8	8	7	136	132	6	-4	11	7	49	-59	-49	4	1	8	30	14	-30
10	3	7	69	76	-18	10	5	7	74	-2	-74	-7	8	7	30	62	-30	-3	11	7	39	-21	-39	5	1	8	248	-228	4
11	3	7	42	140	-42	-15	6	7	37	-54	-37	-6	8	7	103	-118	8	-2	11	7	30	82	-30	6	1	8	32	14	-32
-16	4	7	59	20	-59	-14	6	7	36	-24	-36	-5	8	7	100	-98	7	-1	11	7	42	24	-42	7	1	8	31	22	-31
-15	4	7	63	-56	-63	-13	6	7	65	110	-65	-4	8	7	118	120	6	0	11	7	52	27	-52	8	1	8	43	-47	-43
-14	4	7	133	136	7	-12	6	7	80	-76	10	-3	8	7	125	122	6	1	11	7	40	33	-40	9	1	8	124	-136	8
-13	4	7	113	116	7	-11	6	7	33	-9	-33	-2	8	7	101	-95	7	2	11	7	38	-39	-38	10	1	8	73	62	-73
-12	4	7	207	-209	5	-10	6	7	307	312	5	-1	8	7	30	-47	-30	-17	0	8	39	-94	-39	-17	2	8	41	63	-41
-11	4	7	251	-250	4	-9	6	7	97	-99	7	0	8	7	105	90	7	-16	0	8	37	-16	-37	-16	2	8	50	42	-25
-10	4	7	57	67	12	-8	6	7	139	-138	5	1	8	7	35	-14	-35	-15	0	8	53	-65	-53	-15	2	8	33	-12	-33
-9	4	7	256	259	4	-7	6	7	128	-110	6	2	8	7	133	-117	6	-14	0	8	47	7	-47	-14	2	8	34	43	-34
-8	4	7	76	-70	7	-6	6	7	39	60	-39	3	8	7	34	-27	-34	-13	0	8	134	-128	6	-13	2	8	48	29	-48
-7	4	7	29	18	-29	-5	6	7	46	23	-46	4	8	7	149	163	7	-12	0	8	145	146	5	-12	2	8	29	-14	-29
-6	4	7	343	335	5	-4	6	7	218	-208	4	5	8	7	34	19	-34	-11	0	8	631	624	10	-11	2	8	240	-229	4
-5	4	7	94	91	5	-3	6	7	132	137	5	6	8	7	80	-108	14	-10	0	8	177	-176	5	-10	2	8	29	-30	-29
-4	4	7	361	-364	6	-2	6	7	182	172	4	7	8	7	70	5	-70	-9	0	8	217	-212	4	-9	2	8	124	121	6
-3	4	7	320	-313	5	-1	6	7	92	-87	7	8	8	7	54	81	-54	-8	0	8	127	-130	5	-8	2	8	25	-4	-25
-2	4	7	141	135	4	0	6	7	41	33	-18	-12	9	7	55	77	-55	-7	0	8	243	244	4	-7	2	8	26	9	-26
-1	4	7	190	190	4	1	6	7	210	-208	4	-11	9	7	37	14	-37	-6	0	8	272	-265	4	-6	2	8	44	54	-44
0	4	7	143	-140	4	2	6	7	30	68	-30	-10	9	7	149	-184	8	-5	0	8	684	-672	8	-5	2	8	144	148	4
1	4	7	184	188	4	3	6	7	30	-36	-30	-9	9	7	31	-16	-31	-4	0	8	675	694	8	-4	2	8	179	-178	4
2	4	7	360	381	5	4	6	7	48	-68	-48	-8	9	7	123	139	8	-3	0	8	484	506	8	-3	2	8	203	-205	3
3	4	7	130	133	5	5	6	7	58	87	-58	-7	9	7	158	-175	6	-2	0	8	340	-338	6	-2	2	8	25	-5	-25
4	4	7	292	-285	5	6	6	7	33	16	-33	-6	9	7	32	14	-32	-1	0	8	100	-110	5	-1	2	8	26	64	-26
5	4	7	173	-174	5	7	6	7	55	41	-55	-5	9	7	132	144	7	0	0	8	222	208	4	0	2	8	25	31	-25
6	4	7	125	114	6	8	6	7	63	-64	-63	-4	9	7	139	138	6	1	0	8	152	170	4	1	2	8	104	109	5
7	4	7	32	-7	-32	9	6	7	38	-57	-38	-3	9	7	112	-106	7	2	0	8	678	-679	9	2	2	8	148	139	5
8	4	7	52	-70	-20	-14	7	7	128	146	9	-2	9	7	235	-207	5	3	0	8	93	-92	8	3	2	8	30	-21	-30
9	4	7	68	78	15	-13	7	7	56	-67	-20	-1	9	7	206	191	5	4	0	8	530	491	7	4	2	8	119	-102	6
10	4	7	77	128	-77	-12	7	7	153	-165	7	0	9	7	31	-4	-31	5	0	8	30	32	-30	5	2	8	61	-36	12
11	4	7	40	10	-40	-11	7	7	162	187	7	1	9	7	119	-144	8	6	0	8	179	-168	5	6	2	8	31	25	-31
-16	5	7	70	-25	-70	-10	7	7	57	73	-57	2	9	7	33	17	-33	7	0	8	32	-22	-32	7	2	8	33	-37	-33
-15	5	7	38	14	-38	-9	7	7	210	-223	5	3	9	7	37	111	-37	8	0	8	80	112	12	8	2	8	33	-7	-33
-14	5	7	40	-3	-40	-8	7	7	26	-66	-26	4	9	7	58	78	-17	9	0	8	37	-47	-37	9	2	8	41	66	-41
-13	5	7	54	-98	-54	-7	7	7	122	114	6	5	9	7	40	-112	-40	10	0	8	115	-187	12	10	2	8	39	54	-39
-12	5	7	42	10	-42	-6	7	7	81	71	8	6	9	7	37	-20	-37	-17	1	8	39	-42	-39	-16	3	8	37	3	-37
-11	5	7	54	-64	13	-5	7	7	240	-227	4	-10	10	7	67	-89	-18	-16	1	8	58	67	-58	-15	3	8	71	55	13
-10	5	7	178	181	5	-4	7	7	29	-8	-29	-9	10	7	106	133	11	-15	1	8	35	24	-35	-14	3	8	25	-2	-25
-9	5	7	156	161	5	-3	7	7	284	275	5	-8	10	7	31	-22	-31	-14	1	8	33	-41	-33	-13	3	8	138	-146	6
-8	5	7	85	-80	7	-2	7	7	29	-33	-29	-7	10	7	37	-8	-37	-13	1	8	30	-22	-30	-12	3	8	112	115	7
-7	5	7	246	234	4	-1	7	7	138	-140	5	-6	10	7	116	122	8	-12	1	8	393	386	7	-11	3	8	43	-37	-43
-6	5	7	106	-107	5	0	7	7	102	-93	7	-5	10	7	35	8	-35	-11	1	8	112	-109	6	-10	3	8	33	-33	-33
-5	5	7	209	-220	4	1	7	7	115	117	6	-4	10	7	29	-31	-29	-10	1	8	488	-469	7	-9	3	8	101	95	6
-4	5	7	142	-131	4	2	7	7	104	90	7	-3	10	7	154	-176	7	-9	1	8	46	-7	12	-8	3	8	47	33	-13
-3	5	7	49	53	11	3	7	7	198	-188	5	-2	10	7	33	31	-33	-8	1	8	66	27	7	-7	3	8	27	61	-27
-2	5	7	373	375	6	4	7	7	25	5	-25	-1	10	7	95	102	10	-7	1	8	51	-66	-51	-6	3	8	186	-186	4
-1	5	7	94	-90	6	5	7	7	93	109	9	0	10	7	48	-104	-48	-6	1	8	356	-343	6	-5	3	8	26	18	-26
0	5	7	104	95	5	6	7	7	51	5	-51	1	10	7	55	87	-55	-5	1	8	516	497	8	-4	3	8	226	217	4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 10

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-3	3	8	209	-200	4	0	5	8	95	-95	7	-13	8	8	60	-22	-60	-16	1	9	39	68	-39	-12	3	9	240	-244	5
-2	3	8	114	107	5	1	5	8	283	272	5	-12	8	8	100	-123	11	-15	1	9	60	-47	14	-11	3	9	196	195	5
-1	3	8	69	69	8	2	5	8	71	66	10	-11	8	8	30	10	-30	-14	1	9	33	-10	-33	-10	3	9	372	370	6
0	3	8	53	55	10	3	5	8	388	-371	7	-10	8	8	105	-112	9	-13	1	9	58	24	-58	-9	3	9	148	-153	5
1	3	8	27	30	-27	4	5	8	25	-6	-25	-9	8	8	55	71	-55	-12	1	9	203	191	5	-8	3	9	90	-89	7
2	3	8	111	-108	6	5	5	8	239	236	5	-8	8	8	34	3	-34	-11	1	9	253	-258	5	-7	3	9	70	64	9
3	3	8	101	88	8	6	5	8	34	-28	-34	-7	8	8	119	123	8	-10	1	9	220	-215	5	-6	3	9	23	27	-23
4	3	8	113	-113	7	7	5	8	37	-77	-37	-6	8	8	156	150	6	-9	1	9	170	171	5	-5	3	9	167	-165	5
5	3	8	69	-50	11	8	5	8	59	10	-59	-5	8	8	155	-156	6	-8	1	9	34	-5	-34	-4	3	9	224	-222	4
6	3	8	159	138	6	9	5	8	58	114	-58	-4	8	8	30	37	-30	-7	1	9	26	-9	-26	-3	3	9	402	389	7
7	3	8	31	-18	-31	-15	6	8	62	71	-62	-3	8	8	74	-79	10	-6	1	9	52	-38	10	-2	3	9	177	171	4
8	3	8	36	56	-36	-14	6	8	65	-34	16	-2	8	8	132	-126	6	-5	1	9	192	192	4	-1	3	9	30	-39	-30
9	3	8	38	-55	-38	-13	6	8	140	-152	7	-1	8	8	40	40	-40	-4	1	9	190	188	4	0	3	9	29	-11	-29
10	3	8	40	21	-40	-12	6	8	34	108	-34	0	8	8	33	4	-33	-3	1	9	372	-374	6	1	3	9	31	46	-31
-16	4	8	32	-27	-32	-11	6	8	197	201	6	1	8	8	137	156	7	-2	1	9	26	-18	-26	2	3	9	52	34	-15
-15	4	8	52	-11	-52	-10	6	8	26	10	-26	2	8	8	34	-33	-34	-1	1	9	41	44	-41	3	3	9	270	-254	4
-14	4	8	56	-85	-56	-9	6	8	230	-228	5	3	8	8	31	7	-31	0	1	9	29	43	-29	4	3	9	34	-43	-34
-13	4	8	146	160	7	-8	6	8	33	89	-33	4	8	8	36	44	-36	1	1	9	103	-111	7	5	3	9	250	222	5
-12	4	8	80	89	10	-7	6	8	149	139	5	5	8	8	39	-94	-39	2	1	9	103	-105	8	6	3	9	35	33	-35
-11	4	8	318	-319	5	-6	6	8	324	-305	5	6	8	8	39	-16	-39	3	1	9	244	234	4	7	3	9	33	-16	-33
-10	4	8	105	109	7	-5	6	8	182	-168	5	-11	9	8	71	33	-71	4	1	9	56	53	-14	8	3	9	39	6	-39
-9	4	8	157	155	5	-4	6	8	331	316	5	-10	9	8	54	-78	-54	5	1	9	177	-161	5	9	3	9	39	78	-39
-8	4	8	69	60	9	-3	6	8	306	287	5	-9	9	8	92	83	11	6	1	9	48	-15	-48	-15	4	9	40	63	-40
-7	4	8	260	-252	4	-2	6	8	239	-237	4	-8	9	8	91	116	11	7	1	9	34	9	-34	-14	4	9	57	-49	-57
-6	4	8	39	-31	-39	-1	6	8	202	-186	4	-7	9	8	35	40	-35	8	1	9	37	38	-37	-13	4	9	36	-89	-36
-5	4	8	404	402	6	0	6	8	221	222	4	-6	9	8	182	-200	6	9	1	9	39	-71	-39	-12	4	9	163	181	6
-4	4	8	254	-249	4	1	6	8	30	-22	-30	-5	9	8	43	-25	-43	-16	2	9	74	-46	-74	-11	4	9	200	208	5
-3	4	8	281	-273	5	2	6	8	249	-243	4	-4	9	8	106	123	9	-15	2	9	103	-111	11	-10	4	9	47	-49	-47
-2	4	8	376	369	6	3	6	8	44	-39	-44	-3	9	8	126	-129	8	-14	2	9	33	17	-33	-9	4	9	197	-194	5
-1	4	8	26	9	-26	4	6	8	218	217	5	-2	9	8	34	5	-34	-13	2	9	96	101	9	-8	4	9	65	45	10
0	4	8	107	-97	5	5	6	8	36	46	-36	-1	9	8	147	149	7	-12	2	9	135	-138	6	-7	4	9	31	83	-31
1	4	8	217	-211	4	6	6	8	102	-112	9	0	9	8	92	84	10	-11	2	9	416	-410	6	-6	4	9	167	-161	5
2	4	8	287	287	5	7	6	8	39	13	-39	1	9	8	86	-81	10	-10	2	9	372	369	6	-5	4	9	29	-26	-29
3	4	8	96	93	8	8	6	8	41	75	-41	2	9	8	72	-72	15	-9	2	9	166	159	5	-4	4	9	297	298	5
4	4	8	317	-317	5	-14	7	8	37	-35	-37	3	9	8	74	87	16	-8	2	9	172	-171	5	-3	4	9	182	184	5
5	4	8	75	90	12	-13	7	8	134	147	9	4	9	8	35	-38	-35	-7	2	9	37	49	-20	-2	4	9	168	-168	5
6	4	8	68	82	13	-12	7	8	36	43	-36	5	9	8	75	-79	17	-6	2	9	133	125	5	-1	4	9	195	-184	5
7	4	8	61	-2	-61	-11	7	8	35	-17	-35	-9	10	8	93	122	13	-5	2	9	160	158	4	0	4	9	104	101	7
8	4	8	37	-62	-37	-10	7	8	171	-181	6	-8	10	8	40	-91	-40	-4	2	9	470	-462	6	1	4	9	30	2	-30
9	4	8	42	-8	-42	-9	7	8	112	-110	7	-7	10	8	41	-133	-41	-3	2	9	242	-235	4	2	4	9	181	-185	5
10	4	8	44	102	-44	-8	7	8	88	90	8	-6	10	8	95	90	11	-2	2	9	303	304	5	3	4	9	33	6	-33
-15	5	8	36	-17	-36	-7	7	8	134	-128	6	-5	10	8	83	104	14	-1	2	9	42	-37	-42	4	4	9	189	198	6
-14	5	8	78	89	14	-6	7	8	92	77	7	-4	10	8	76	-93	15	0	2	9	85	79	8	5	4	9	31	103	-31
-13	5	8	49	-13	-49	-5	7	8	106	114	7	-3	10	8	38	-72	-38	1	2	9	24	-38	-24	6	4	9	36	-90	-36
-12	5	8	225	-249	5	-4	7	8	32	67	-32	-2	10	8	126	145	9	2	2	9	154	152	5	7	4	9	33	-32	-33
-11	5	8	65	99	-65	-3	7	8	40	37	-21	-1	10	8	41	84	-41	3	2	9	31	51	-31	8	4	9	43	33	-43
-10	5	8	253	251	4	-2	7	8	213	-203	4	0	10	8	111	-168	11	4	2	9	308	-289	5	-15	5	9	78	67	14
-9	5	8	31	-70	-31	-1	7	8	71	42	9	1	10	8	37	-36	-37	5	2	9	57	25	-57	-14	5	9	37	-15	-37
-8	5	8	243	-245	4	0	7	8	112	-98	6	2	10	8	37	72	-37	6	2	9	36	68	-36	-13	5	9	94	110	10
-7	5	8	139	126	5	1	7	8	92	-87	8	3	10	8	43	-3	-43	7	2	9	37	15	-37	-12	5	9	64	-36	13
-6	5	8	350	329	6	2	7	8	33	69	-33	-6	11	8	38	61	-38	8	2	9	38	-34	-38	-11	5	9	28	-36	-28
-5	5	8	317	-298	5	3	7	8	81	87	11	-5	11	8	88	-90	13	9	2	9	41	-2	-41	-10	5	9	51	-90	-51
-4	5	8	362	-354	6	4	7	8	54	69	-54	-4	11	8	39	-30	-39	-16	3	9	148	-151	8	-9	5	9	104	-105	7
-3	5	8	417	420	7	5	7	8	37	-69	-37	-3	11	8	37	49	-37	-15	3	9	38	28	-38	-8	5	9	88	107	9
-2	5	8	227	225	4	6	7	8	39	-53	-39	-2	11	8	41	91	-41	-14	3	9	54	72	-20	-7	5	9	46	-71	-46
-1	5	8	281	-265	5	7	7	8	41	41	-41	-1	11	8	109	-130	11	-13	3	9	34	-76	-34	-6	5	9	21	-1	-21

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-5	5	9	182	176	5	-12	8	9	92	-65	11	-1	0	10	123	133	6	5	2	10	36	34	-36	-8	5	10	145	150	6
-4	5	9	56	-13	-56	-11	8	9	92	-111	12	0	0	10	78	-97	9	6	2	10	38	-32	-38	-7	5	10	29	-31	-29
-3	5	9	37	-11	-37	-10	8	9	41	55	-41	1	0	10	105	-93	7	7	2	10	41	-10	-41	-6	5	10	195	-194	5
-2	5	9	241	-235	4	-9	8	9	153	175	7	2	0	10	253	254	5	8	2	10	53	8	-53	-5	5	10	167	153	5
-1	5	9	29	-15	-29	-8	8	9	29	-58	-29	3	0	10	89	104	10	-15	3	10	40	57	-40	-4	5	10	252	253	5
0	5	9	42	20	-20	-7	8	9	85	-100	11	4	0	10	400	-388	6	-14	3	10	42	-28	-42	-3	5	10	294	-285	5
1	5	9	30	-65	-30	-6	8	9	62	75	-62	5	0	10	43	-23	-30	-13	3	10	136	133	7	-2	5	10	148	-166	6
2	5	9	96	102	8	-5	8	9	34	37	-34	6	0	10	77	108	14	-12	3	10	53	-65	-53	-1	5	10	175	180	6
3	5	9	51	52	-17	-4	8	9	72	-76	12	7	0	10	39	13	-39	-11	3	10	50	-18	-50	0	5	10	34	85	-34
4	5	9	63	2	-63	-3	8	9	69	-84	13	8	0	10	41	-40	-41	-10	3	10	65	57	11	1	5	10	136	-138	7
5	5	9	35	-30	-35	-2	8	9	109	105	9	-16	1	10	107	-126	12	-9	3	10	113	-110	7	2	5	10	26	-52	-26
6	5	9	40	-98	-40	-1	8	9	90	89	10	-15	1	10	59	-53	-20	-8	3	10	31	-15	-31	3	5	10	151	186	7
7	5	9	41	36	-41	0	8	9	106	-108	9	-14	1	10	59	-16	-15	-7	3	10	28	-21	-28	4	5	10	35	33	-35
8	5	9	42	-43	-42	1	8	9	34	-7	-34	-13	1	10	57	7	-57	-6	3	10	90	92	8	5	5	10	44	-170	-44
-14	6	9	40	-24	-40	2	8	9	79	79	13	-12	1	10	152	-155	7	-5	3	10	94	91	7	6	5	10	41	1	-41
-13	6	9	80	-91	13	3	8	9	37	21	-37	-11	1	10	88	91	9	-4	3	10	164	-160	5	-13	6	10	57	53	-57
-12	6	9	60	-5	-60	4	8	9	72	-101	-72	-10	1	10	405	392	7	-3	3	10	87	73	8	-12	6	10	95	-102	12
-11	6	9	68	95	-68	5	8	9	40	-28	-40	-9	1	10	69	-65	11	-2	3	10	30	-42	-30	-11	6	10	164	-174	7
-10	6	9	239	-254	5	-10	9	9	34	99	-34	-8	1	10	198	-186	5	-1	3	10	32	-38	-32	-10	6	10	65	67	15
-9	6	9	58	74	-58	-9	9	9	40	15	-40	-7	1	10	29	14	-29	0	3	10	48	24	-48	-9	6	10	176	189	6
-8	6	9	166	165	5	-8	9	9	153	-154	7	-6	1	10	69	50	9	1	3	10	40	-13	-40	-8	6	10	34	-18	-34
-7	6	9	31	26	-31	-7	9	9	57	84	-57	-5	1	10	175	-159	5	2	3	10	30	43	-30	-7	6	10	117	-134	8
-6	6	9	31	-22	-31	-6	9	9	36	39	-36	-4	1	10	377	-357	6	3	3	10	34	-20	-34	-6	6	10	135	142	7
-5	6	9	119	-125	7	-5	9	9	135	-150	8	-3	1	10	445	424	7	4	3	10	66	-16	-66	-5	6	10	99	100	8
-4	6	9	89	83	8	-4	9	9	35	-14	-35	-2	1	10	253	261	4	5	3	10	62	62	-17	-4	6	10	242	-230	5
-3	6	9	82	-67	9	-3	9	9	56	51	-18	-1	1	10	111	-105	7	6	3	10	53	-73	-53	-3	6	10	194	-183	5
-2	6	9	159	-152	6	-2	9	9	150	169	7	0	1	10	31	-30	-31	7	3	10	59	-6	-22	-2	6	10	132	135	7
-1	6	9	96	101	8	-1	9	9	40	-94	-40	1	1	10	32	63	-32	-15	4	10	37	30	-37	-1	6	10	146	161	7
0	6	9	56	-5	-56	0	9	9	60	-58	-60	2	1	10	32	35	-32	-14	4	10	39	46	-39	0	6	10	58	-108	-58
1	6	9	35	92	-35	1	9	9	91	94	12	3	1	10	248	-246	5	-13	4	10	57	-59	-57	1	6	10	37	-14	-37
2	6	9	32	-13	-32	2	9	9	46	-37	-46	4	1	10	34	-28	-34	-12	4	10	128	-129	7	2	6	10	105	131	10
3	6	9	34	-55	-34	3	9	9	74	-58	17	5	1	10	177	206	7	-11	4	10	250	258	5	3	6	10	59	-9	-59
4	6	9	62	70	-62	-8	10	9	78	-47	14	6	1	10	31	12	-31	-10	4	10	61	-46	-61	4	6	10	110	-143	11
5	6	9	35	-65	-35	-7	10	9	61	74	-20	7	1	10	41	-19	-41	-9	4	10	176	-164	5	5	6	10	40	-50	-40
6	6	9	58	-23	-58	-6	10	9	26	-66	-26	8	1	10	42	4	-42	-8	4	10	30	17	-30	-12	7	10	55	-22	-55
7	6	9	40	-7	-40	-5	10	9	38	8	-38	-16	2	10	102	-89	12	-7	4	10	118	111	6	-11	7	10	73	64	-73
-13	7	9	40	18	-40	-4	10	9	40	53	-40	-15	2	10	39	44	-39	-6	4	10	53	34	-53	-10	7	10	119	115	10
-12	7	9	122	142	10	-3	10	9	38	71	-38	-14	2	10	36	5	-36	-5	4	10	272	-257	5	-9	7	10	92	98	11
-11	7	9	110	-121	9	-2	10	9	40	3	-40	-13	2	10	33	3	-33	-4	4	10	154	148	6	-8	7	10	114	-134	9
-10	7	9	66	-83	-66	-1	10	9	41	-120	-41	-12	2	10	95	101	10	-3	4	10	230	218	4	-7	7	10	56	-16	-56
-9	7	9	183	211	6	0	10	9	37	53	-37	-11	2	10	129	124	7	-2	4	10	254	-254	5	-6	7	10	33	-13	-33
-8	7	9	47	27	-47	-16	0	10	38	-7	-38	-10	2	10	71	73	11	-1	4	10	57	-69	-57	-5	7	10	141	-153	7
-7	7	9	110	-115	7	-15	0	10	35	-32	-35	-9	2	10	192	-187	5	0	4	10	115	123	7	-4	7	10	72	54	12
-6	7	9	32	-80	-32	-14	0	10	49	-61	-49	-8	2	10	31	-35	-31	1	4	10	34	68	-34	-3	7	10	32	26	-32
-5	7	9	108	112	8	-13	0	10	33	6	-33	-7	2	10	30	38	-30	2	4	10	103	-99	8	-2	7	10	160	170	7
-4	7	9	57	73	-57	-12	0	10	29	-20	-29	-6	2	10	41	-17	-41	3	4	10	83	-96	11	-1	7	10	33	-14	-33
-3	7	9	185	-200	5	-11	0	10	460	-455	8	-5	2	10	29	9	-29	4	4	10	150	179	8	0	7	10	62	-41	-62
-2	7	9	32	8	-32	-10	0	10	143	135	6	-4	2	10	106	92	6	5	4	10	34	-33	-34	1	7	10	37	68	-37
-1	7	9	135	136	6	-9	0	10	404	390	6	-3	2	10	160	165	5	6	4	10	48	-81	-48	2	7	10	71	-77	16
0	7	9	52	54	-18	-8	0	10	37	0	-23	-2	2	10	59	-33	-59	7	4	10	43	33	-43	3	7	10	52	-55	-52
1	7	9	57	-49	-16	-7	0	10	99	-95	7	-1	2	10	46	-72	-18	-14	5	10	68	-6	-68	4	7	10	42	-8	-42
2	7	9	44	-73	-44	-6	0	10	46	-42	-46	0	2	10	30	-19	-30	-13	5	10	57	-27	-57	-11	8	10	76	-29	-76
3	7	9	87	107	11	-5	0	10	286	287	5	1	2	10	31	-36	-31	-12	5	10	189	197	6	-10	8	10	47	0	-47
4	7	9	36	13	-36	-4	0	10	490	-472	7	2	2	10	52	-41	-52	-11	5	10	57	-71	-57	-9	8	10	37	-36	-37
5	7	9	70	-107	-70	-3	0	10	492	-477	7	3	2	10	34	43	-34	-10	5	10	253	-273	5	-8	8	10	41	-81	-41
6	7	9	42	18	-42	-2	0	10	453	430	7	4	2	10	70	97	15	-9	5	10	58	69	-15	-7	8	10	37	4	-37

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl NI

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-6	8	10	35	-72	-35	-2	2	11	211	-221	5	-7	5	11	36	-47	-36	-10	0	12	36	-69	-36	-11	3	12	96	87	11
-5	8	10	127	142	8	-1	2	11	42	-38	-42	-6	5	11	49	24	-49	-9	0	12	341	-342	6	-10	3	12	85	-76	11
-4	8	10	57	63	-19	0	2	11	30	33	-30	-5	5	11	113	-109	8	-8	0	12	65	117	-65	-9	3	12	36	39	-36
-3	8	10	35	-18	-35	1	2	11	52	-5	-52	-4	5	11	34	40	-34	-7	0	12	145	129	6	-8	3	12	33	9	-33
-2	8	10	100	97	10	2	2	11	35	-10	-35	-3	5	11	34	6	-34	-6	0	12	59	26	12	-7	3	12	31	-31	-31
-1	8	10	68	-83	-18	3	2	11	36	-60	-36	-2	5	11	92	104	11	-5	0	12	81	-87	10	-6	3	12	33	-18	-33
0	8	10	41	-37	-41	4	2	11	152	190	8	-1	5	11	35	24	-35	-4	0	12	195	185	5	-5	3	12	110	-107	9
1	8	10	54	-56	-54	5	2	11	70	15	-70	0	5	11	28	-61	-28	-3	0	12	287	274	5	-4	3	12	84	99	12
2	8	10	39	-2	-39	6	2	11	75	-90	-75	1	5	11	36	28	-36	-2	0	12	322	-308	5	-3	3	12	34	-15	-34
3	8	10	68	67	-68	-14	3	11	52	-61	-52	2	5	11	36	-41	-36	-1	0	12	178	-176	7	-2	3	12	36	-4	-36
-9	9	10	33	-33	-33	-13	3	11	60	39	-60	3	5	11	61	-50	-22	0	0	12	134	135	8	-1	3	12	37	46	-37
-8	9	10	42	-72	-42	-12	3	11	145	155	7	4	5	11	34	11	-34	1	0	12	36	29	-36	0	3	12	54	-33	-54
-7	9	10	48	42	-48	-11	3	11	65	-109	-65	-12	6	11	52	37	-52	2	0	12	38	-20	-38	1	3	12	36	-10	-36
-6	9	10	88	106	13	-10	3	11	258	-272	5	-11	6	11	104	-104	12	3	0	12	64	-53	-22	2	3	12	55	-33	-55
-5	9	10	36	28	-36	-9	3	11	95	103	8	-10	6	11	103	115	12	4	0	12	165	191	10	3	3	12	40	13	-40
-4	9	10	97	-109	13	-8	3	11	152	165	6	-9	6	11	62	24	14	5	0	12	42	24	-42	4	3	12	43	31	-43
-3	9	10	42	51	-42	-7	3	11	33	-50	-33	-8	6	11	176	-176	6	-14	1	12	36	1	-36	-13	4	12	38	6	-38
-2	9	10	39	13	-39	-6	3	11	36	-6	-36	-7	6	11	47	51	-47	-13	1	12	39	-31	-39	-12	4	12	96	94	12
-1	9	10	114	-119	11	-5	3	11	90	85	9	-6	6	11	35	2	-35	-12	1	12	40	61	-40	-11	4	12	130	-136	10
0	9	10	40	-18	-40	-4	3	11	142	136	6	-5	6	11	37	101	-37	-11	1	12	54	-46	-54	-10	4	12	40	-8	-40
1	9	10	49	62	-49	-3	3	11	236	-224	5	-4	6	11	58	1	-58	-10	1	12	217	-216	6	-9	4	12	181	177	6
-15	1	11	62	79	-62	-2	3	11	152	-155	6	-3	6	11	47	-20	-47	-9	1	12	67	73	15	-8	4	12	97	-89	10
-14	1	11	39	12	-39	-1	3	11	126	122	7	-2	6	11	103	108	9	-8	1	12	246	237	5	-7	4	12	44	-46	-27
-13	1	11	34	14	-34	0	3	11	46	46	-46	-1	6	11	59	-70	-59	-7	1	12	33	11	-33	-6	4	12	36	-27	-36
-12	1	11	103	-112	10	1	3	11	24	-24	-24	0	6	11	35	-40	-35	-6	1	12	33	-31	-33	-5	4	12	149	136	7
-11	1	11	74	72	12	2	3	11	35	-18	-35	1	6	11	40	-16	-40	-5	1	12	28	23	-28	-4	4	12	30	-60	-30
-10	1	11	181	192	6	3	3	11	83	110	13	2	6	11	60	-4	-60	-4	1	12	142	130	6	-3	4	12	152	-153	7
-9	1	11	186	-194	5	4	3	11	33	29	-33	3	6	11	44	83	-44	-3	1	12	176	-183	6	-2	4	12	145	151	8
-8	1	11	73	-64	10	5	3	11	132	-150	10	-11	7	11	38	45	-38	-2	1	12	182	-192	7	-1	4	12	45	57	-45
-7	1	11	73	72	10	6	3	11	41	-16	-41	-10	7	11	123	109	10	-1	1	12	152	154	8	0	4	12	96	-83	11
-6	1	11	31	-22	-31	-14	4	11	47	-17	-47	-9	7	11	43	-144	-43	0	1	12	79	67	13	1	4	12	37	-17	-37
-5	1	11	51	-43	-51	-13	4	11	57	40	-22	-8	7	11	45	-43	-45	1	1	12	38	-11	-38	2	4	12	41	24	-41
-4	1	11	153	-147	5	-12	4	11	83	-122	-83	-7	7	11	108	117	11	2	1	12	38	-7	-38	3	4	12	41	48	-41
-3	1	11	251	264	5	-11	4	11	142	-154	7	-6	7	11	27	51	-27	3	1	12	78	88	-78	-12	5	12	38	-56	-38
-2	1	11	33	82	-33	-10	4	11	50	69	-50	-5	7	11	34	-33	-34	4	1	12	60	33	-60	-11	5	12	39	5	-39
-1	1	11	136	-139	7	-9	4	11	143	157	7	-4	7	11	103	-87	9	-14	2	12	65	-76	-22	-10	5	12	209	219	7
0	1	11	34	-18	-34	-8	4	11	60	-15	-60	-3	7	11	103	100	9	-13	2	12	37	20	-37	-9	5	12	55	-78	-55
1	1	11	33	16	-33	-7	4	11	53	-79	-53	-2	7	11	38	26	-38	-12	2	12	39	-56	-39	-8	5	12	163	-157	7
2	1	11	51	58	-51	-6	4	11	79	90	10	-1	7	11	85	-112	14	-11	2	12	40	-54	-40	-7	5	12	43	32	-43
3	1	11	78	-96	13	-5	4	11	32	12	-32	0	7	11	39	-15	-39	-10	2	12	35	27	-35	-6	5	12	27	72	-27
4	1	11	36	-44	-36	-4	4	11	207	-200	5	1	7	11	39	51	-39	-9	2	12	115	114	8	-5	5	12	55	-35	-55
5	1	11	82	117	17	-3	4	11	137	-129	7	2	7	11	70	49	-70	-8	2	12	66	84	-66	-4	5	12	153	-155	7
6	1	11	26	-7	-26	-2	4	11	106	128	8	-9	8	11	41	-107	-41	-7	2	12	37	-96	-37	-3	5	12	177	168	7
-15	2	11	99	117	12	-1	4	11	116	121	7	-8	8	11	68	33	16	-6	2	12	31	-14	-31	-2	5	12	117	131	9
-14	2	11	38	-45	-38	0	4	11	57	-65	-57	-7	8	11	95	109	13	-5	2	12	45	-28	-45	-1	5	12	126	-138	10
-13	2	11	61	-41	-61	1	4	11	29	-46	-29	-6	8	11	72	-64	-72	-4	2	12	80	-60	10	0	5	12	48	-63	-48
-12	2	11	36	58	-36	2	4	11	75	70	13	-5	8	11	39	-40	-39	-3	2	12	52	-52	-19	1	5	12	39	60	-39
-11	2	11	236	243	5	3	4	11	37	-16	-37	-4	8	11	61	65	-61	-2	2	12	25	31	-25	2	5	12	40	42	-40
-10	2	11	196	-199	5	4	4	11	86	-109	16	-3	8	11	52	40	-52	-1	2	12	78	79	13	-11	6	12	89	86	14
-9	2	11	232	-229	5	5	4	11	43	-40	-43	-2	8	11	41	-73	-41	0	2	12	61	-12	-61	-10	6	12	63	-68	-21
-8	2	11	198	199	5	-13	5	11	69	-73	-69	-1	8	11	98	-77	12	1	2	12	54	-9	-18	-9	6	12	166	-170	8
-7	2	11	46	10	-46	-12	5	11	40	14	-40	0	8	11	40	78	-40	2	2	12	67	10	-67	-8	6	12	40	16	-40
-6	2	11	25	3	-25	-11	5	11	65	77	-65	-14	0	12	37	33	-37	3	2	12	59	-29	-59	-7	6	12	128	127	10
-5	2	11	32	-57	-32	-10	5	11	32	38	-32	-13	0	12	66	6	-66	4	2	12	42	-53	-42	-6	6	12	41	-27	-41
-4	2	11	163	172	6	-9	5	11	39	66	-39	-12	0	12	38	-43	-38	-13	3	12	62	-32	-62	-5	6	12	42	-50	-42
-3	2	11	186	183	5	-8	5	11	82	-99	12	-11	0	12	202	202	6	-12	3	12	35	19	-35	-4	6	12	43	116	-43

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(10) H(22) N P(2) Cl Ni

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-3	6	12	81	92	16	-1	1	13	54	119	-54	-5	3	13	35	-38	-35	-4	5	13	39	-32	-39	-3	1	14	76	65	-76
-2	6	12	107	-110	12	0	1	13	38	17	-38	-4	3	13	70	-63	-70	-3	5	13	39	-41	-39	-2	1	14	105	96	13
-1	6	12	40	-108	-40	1	1	13	79	-12	-79	-3	3	13	103	113	12	-2	5	13	39	-25	-39	-1	1	14	119	-110	12
0	6	12	43	64	-43	2	1	13	41	-13	-41	-2	3	13	116	109	11	-1	5	13	41	-9	-41	-10	2	14	40	-44	-40
1	6	12	58	52	-58	-12	2	13	39	-24	-39	-1	3	13	117	-107	11	-7	6	13	40	-26	-40	-9	2	14	52	-61	-30
-9	7	12	38	-13	-38	-11	2	13	110	-121	13	0	3	13	43	-54	-43	-6	6	13	41	-40	-41	-8	2	14	41	-26	-41
-8	7	12	108	103	11	-10	2	13	50	60	-34	1	3	13	42	15	-42	-5	6	13	39	-26	-39	-7	2	14	41	59	-41
-7	7	12	60	53	-23	-9	2	13	225	214	7	-11	4	13	64	61	-64	-4	6	13	38	-27	-38	-6	2	14	79	40	-79
-6	7	12	39	-52	-39	-8	2	13	126	-122	8	-10	4	13	70	-92	-70	-3	6	13	45	58	-45	-5	2	14	41	-15	-41
-5	7	12	39	85	-39	-7	2	13	63	-47	14	-9	4	13	134	-132	10	-10	0	14	36	23	-36	-4	2	14	55	31	-55
-4	7	12	39	-43	-39	-6	2	13	35	0	-35	-8	4	13	38	10	-38	-9	0	14	239	223	7	-3	2	14	43	2	-43
-3	7	12	71	-68	-18	-5	2	13	42	17	-42	-7	4	13	93	86	13	-8	0	14	109	-100	12	-2	2	14	33	-38	-33
-2	7	12	42	-50	-42	-4	2	13	72	-44	-72	-6	4	13	58	-27	-58	-7	0	14	135	-125	9	-1	2	14	63	-43	-23
-1	7	12	40	0	-40	-3	2	13	34	-106	-34	-5	4	13	57	-5	-57	-6	0	14	46	25	-46	-9	3	14	41	27	-41
-13	1	13	41	38	-41	-2	2	13	128	133	9	-4	4	13	108	104	11	-5	0	14	76	53	-76	-8	3	14	43	-26	-43
-12	1	13	39	30	-39	-1	2	13	41	80	-41	-3	4	13	53	63	-28	-4	0	14	57	-43	-57	-7	3	14	40	44	-40
-11	1	13	40	-8	-40	0	2	13	85	-84	16	-2	4	13	39	-86	-39	-3	0	14	121	-106	11	-6	3	14	42	-11	-42
-10	1	13	143	-127	8	1	2	13	41	-5	-41	-1	4	13	45	-91	-45	-2	0	14	131	134	11	-5	3	14	73	35	-73
-9	1	13	78	107	-78	2	2	13	41	-1	-41	0	4	13	33	30	-33	-1	0	14	131	126	11	-4	3	14	67	-37	-19
-8	1	13	33	99	-33	-12	3	13	43	-67	-43	1	4	13	77	40	-77	-10	1	14	111	121	13	-3	3	14	51	-19	-51
-7	1	13	101	-109	10	-11	3	13	42	53	-42	-10	5	13	63	-5	-63	-9	1	14	40	-53	-40	-2	3	14	52	41	-52
-6	1	13	29	12	-29	-10	3	13	179	180	8	-9	5	13	37	-20	-37	-8	1	14	176	-161	8	-7	4	14	42	57	-42
-5	1	13	35	23	-35	-9	3	13	85	-90	14	-8	5	13	43	69	-43	-7	1	14	72	2	-72	-6	4	14	41	-16	-41
-4	1	13	51	66	-51	-8	3	13	177	-167	7	-7	5	13	40	86	-40	-6	1	14	87	55	14	-5	4	14	41	-39	-41
-3	1	13	40	-91	-40	-7	3	13	34	21	-34	-6	5	13	39	-34	-39	-5	1	14	40	3	-40	-4	4	14	41	-13	-41
-2	1	13	32	-90	-32	-6	3	13	34	17	-34	-5	5	13	42	50	-42	-4	1	14	39	-48	-39						

Tables of Observed and Calculated Structure Factors

(10 x F_O ; 10 x F_C ; 10 x $\sigma(F)^*$)

for [Pd(bpy)(pyrrole)₂]

*Negative values of 10 $\sigma(F)$ denote unobserved reflections.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 1

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
2	0	0	3098	3258	7	0	4	0	355	348	6	0	8	0	1151	-1122	9	6	12	0	350	370	11	-9	1	1	297	289	10
3	0	0	1790	1754	9	1	4	0	1198	-1183	9	1	8	0	85	-98	-24	7	12	0	325	318	12	-8	1	1	367	358	8
4	0	0	2197	2206	11	2	4	0	345	-326	6	2	8	0	969	-961	9	8	12	0	554	554	9	-7	1	1	767	750	8
5	0	0	1172	1168	10	3	4	0	1039	-1047	9	3	8	0	593	-596	7	9	12	0	198	185	19	-6	1	1	88	91	-23
6	0	0	1000	1022	9	4	4	0	618	-589	7	4	8	0	578	-572	7	10	12	0	558	541	10	-5	1	1	210	231	8
7	0	0	1461	1456	12	5	4	0	529	-534	6	5	8	0	550	-525	7	11	12	0	42	-6	-42	-4	1	1	191	-176	9
8	0	0	1076	1061	11	6	4	0	329	-329	8	6	8	0	94	-94	-31	1	13	0	117	-125	29	-3	1	1	225	228	7
9	0	0	1130	1145	10	7	4	0	388	-390	8	7	8	0	544	-555	8	2	13	0	348	346	10	-2	1	1	118	112	10
10	0	0	40	-45	-40	8	4	0	582	-578	7	8	8	0	37	45	-37	3	13	0	271	-260	13	-1	1	1	2270	2243	6
11	0	0	947	944	10	9	4	0	101	-121	-33	9	8	0	134	-101	24	4	13	0	334	343	11	0	1	1	482	661	47
12	0	0	41	-13	-41	10	4	0	554	-556	9	10	8	0	230	-237	15	5	13	0	540	-549	9	1	1	1	2116	2042	6
13	0	0	580	565	10	11	4	0	39	37	-39	11	8	0	250	-261	16	6	13	0	490	493	10	2	1	1	321	-308	6
14	0	0	42	40	-42	12	4	0	443	-457	11	12	8	0	83	-48	-71	7	13	0	322	-326	13	3	1	1	670	678	7
1	1	0	237	186	4	13	4	0	40	-21	-40	13	8	0	226	-249	19	8	13	0	234	254	17	4	1	1	304	304	6
2	1	0	1193	-1119	8	14	4	0	331	-318	14	1	9	0	31	-24	-31	9	13	0	330	-341	13	5	1	1	845	863	7
3	1	0	1564	1560	9	1	5	0	308	296	6	2	9	0	220	230	11	10	13	0	88	93	-71	6	1	1	705	710	7
4	1	0	1131	-1158	9	2	5	0	299	-285	6	3	9	0	250	-258	10	0	14	0	463	461	9	7	1	1	892	905	8
5	1	0	757	757	7	3	5	0	571	574	6	4	9	0	654	654	7	1	14	0	228	-234	14	8	1	1	641	642	7
6	1	0	775	-779	8	4	5	0	394	-386	6	5	9	0	407	-387	8	2	14	0	436	422	9	9	1	1	474	475	8
7	1	0	840	863	8	5	5	0	191	208	11	6	9	0	729	737	8	3	14	0	78	-78	-59	10	1	1	660	659	8
8	1	0	1092	-1087	9	6	5	0	114	-122	18	7	9	0	59	-20	-59	4	14	0	462	458	10	11	1	1	231	242	16
9	1	0	420	431	9	7	5	0	234	242	11	8	9	0	652	640	8	5	14	0	40	60	-40	12	1	1	458	464	11
10	1	0	518	-526	9	8	5	0	448	-452	8	9	9	0	97	-98	-38	6	14	0	160	144	24	13	1	1	217	202	17
11	1	0	63	-72	-63	9	5	0	144	132	22	10	9	0	292	296	13	7	14	0	246	244	16	14	1	1	290	283	15
12	1	0	38	22	-38	10	5	0	78	-79	-66	11	9	0	151	140	26	8	14	0	41	42	-41	-14	2	1	362	359	13
13	1	0	141	-151	27	11	5	0	39	-78	-39	12	9	0	130	133	32	9	14	0	311	295	15	-13	2	1	291	286	13
14	1	0	61	36	-61	12	5	0	176	-175	21	0	10	0	1610	1586	12	1	15	0	39	8	-39	-12	2	1	251	242	13
0	2	0	138	-126	6	13	5	0	121	-136	-36	1	10	0	510	-497	7	2	15	0	37	-29	-37	-11	2	1	498	495	9
1	2	0	2741	2682	7	14	5	0	152	-112	27	2	10	0	947	932	9	3	15	0	266	272	13	-10	2	1	410	411	10
2	2	0	482	461	6	0	6	0	1575	-1593	11	3	10	0	99	106	-28	4	15	0	336	-332	12	-9	2	1	1001	1015	10
3	2	0	1510	1499	10	1	6	0	1029	-1014	8	4	10	0	711	718	8	5	15	0	155	146	25	-8	2	1	466	474	8
4	2	0	350	337	6	2	6	0	1175	-1156	10	5	10	0	101	92	-30	6	15	0	395	-378	12	-7	2	1	1659	1675	12
5	2	0	860	896	8	3	6	0	1113	-1096	9	6	10	0	248	249	13	7	15	0	200	202	20	-6	2	1	414	418	7
6	2	0	814	817	8	4	6	0	1471	-1433	11	7	10	0	322	326	11	8	15	0	318	-310	14	-5	2	1	1790	1825	12
7	2	0	470	469	7	5	6	0	809	-788	8	8	10	0	214	224	15	0	16	0	501	-485	10	-4	2	1	1183	1161	9
8	2	0	877	854	9	6	6	0	1017	-1023	9	9	10	0	430	424	10	1	16	0	39	-22	-39	-3	2	1	1016	1028	8
9	2	0	280	-271	11	7	6	0	640	-646	8	10	10	0	91	-99	-48	2	16	0	382	-390	12	-2	2	1	1563	1523	8
10	2	0	713	708	8	8	6	0	785	-779	8	11	10	0	479	493	11	3	16	0	40	29	-40	-1	2	1	1275	1224	7
11	2	0	106	-133	-33	9	6	0	532	-532	9	12	10	0	117	-76	-35	4	16	0	454	-445	11	0	2	1	1192	1143	7
12	2	0	609	617	9	10	6	0	544	-549	9	1	11	0	450	455	8	5	16	0	73	-79	-73	1	2	1	2348	2285	7
13	2	0	73	-94	-73	11	6	0	595	-604	9	2	11	0	141	-151	19	6	16	0	131	-148	32	2	2	1	366	361	6
14	2	0	274	272	16	12	6	0	297	-281	14	3	11	0	709	699	8	7	16	0	176	-176	23	3	2	1	1916	1844	10
1	3	0	1126	-1090	8	13	6	0	347	-332	13	4	11	0	441	-426	9	1	17	0	41	46	-41	4	2	1	948	949	8
2	3	0	1540	1500	9	1	7	0	139	139	12	5	11	0	447	438	9	2	17	0	41	42	-41	5	2	1	104	121	17
3	3	0	670	631	7	2	7	0	160	-147	11	6	11	0	540	-554	9	3	17	0	127	-105	-32	6	2	1	947	943	9
4	3	0	843	835	8	3	7	0	71	69	-32	7	11	0	449	466	10	4	17	0	117	72	-35	7	2	1	136	120	16
5	3	0	921	-912	8	4	7	0	89	102	-24	8	11	0	38	-3	-38	5	17	0	218	-227	20	8	2	1	798	811	8
6	3	0	529	554	7	5	7	0	304	298	9	9	11	0	339	347	13	0	18	0	238	-237	17	9	2	1	180	177	17
7	3	0	665	-663	7	6	7	0	56	20	-56	10	11	0	41	22	-41	1	18	0	397	-399	12	10	2	1	438	445	9
8	3	0	448	436	8	7	7	0	114	-110	27	11	11	0	115	130	-38	2	18	0	191	-206	20	11	2	1	150	150	24
9	3	0	671	-675	8	8	7	0	88	89	-37	0	12	0	183	173	16	3	18	0	382	-382	13	12	2	1	237	242	16
10	3	0	310	309	11	9	7	0	177	169	18	1	12	0	1141	1151	11	-14	1	1	81	82	-81	13	2	1	250	243	16
11	3	0	214	-199	16	10	7	0	150	-169	23	2	12	0	36	31	-36	-13	1	1	66	18	-66	14	2	1	75	72	-75
12	3	0	172	-164	21	11	7	0	69	63	-69	3	12	0	946	938	9	-12	1	1	213	200	16	-14	3	1	255	-269	16
13	3	0	177	-161	21	12	7	0	40	16	-40	4	12	0	37	19	-37	-11	1	1	36	1	-36	-13	3	1	195	204	20
14	3	0	210	-212	20	13	7	0	42	46	-42	5	12	0	398	387	9	-10	1	1	127	130	24	-12	3	1	247	-231	15

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) PG

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-11	3	1	253	242	13	-13	5	1	395	-400	12	-13	7	1	300	289	14	-10	9	1	421	451	11	-3	11	1	36	10	-36
-10	3	1	259	-258	13	-12	5	1	347	328	12	-12	7	1	343	-349	13	-9	9	1	92	-83	-41	-2	11	1	684	678	8
-9	3	1	281	273	11	-11	5	1	546	-546	9	-11	7	1	327	325	12	-8	9	1	163	172	19	-1	11	1	276	275	11
-8	3	1	353	-357	9	-10	5	1	230	224	15	-10	7	1	608	-611	9	-7	9	1	195	202	17	0	11	1	808	815	11
-7	3	1	52	49	-52	-9	5	1	667	-651	8	-9	7	1	191	185	17	-6	9	1	128	-130	24	1	11	1	252	246	12
-6	3	1	440	-424	7	-8	5	1	50	17	-50	-8	7	1	307	-306	11	-5	9	1	382	370	8	2	11	1	666	653	8
-5	3	1	816	-805	8	-7	5	1	601	-614	7	-7	7	1	124	-133	24	-4	9	1	226	-233	12	3	11	1	220	223	13
-4	3	1	241	225	7	-6	5	1	373	-392	7	-6	7	1	389	-399	8	-3	9	1	800	803	8	4	11	1	346	343	10
-3	3	1	1214	-1191	10	-5	5	1	418	-405	7	-5	7	1	577	-591	7	-2	9	1	474	-494	7	5	11	1	167	167	18
-2	3	1	148	-123	10	-4	5	1	1310	-1295	10	-4	7	1	221	222	10	-1	9	1	1066	1040	9	6	11	1	263	260	13
-1	3	1	568	-563	6	-3	5	1	165	168	10	-3	7	1	1280	-1284	11	0	9	1	679	-674	9	7	11	1	372	378	10
0	3	1	152	153	6	-2	5	1	1528	-1529	11	-2	7	1	49	57	-49	1	9	1	748	757	8	8	11	1	151	159	23
1	3	1	2871	-2797	8	-1	5	1	708	703	7	-1	7	1	1347	-1361	10	2	9	1	613	-612	7	9	11	1	388	369	11
2	3	1	267	271	7	0	5	1	1756	-1756	7	0	7	1	757	749	6	3	9	1	416	433	7	10	11	1	124	112	-33
3	3	1	2133	-2054	10	1	5	1	332	338	6	1	7	1	1396	-1410	13	4	9	1	343	-346	9	11	11	1	292	283	15
4	3	1	720	705	7	2	5	1	1666	-1619	11	2	7	1	432	421	6	5	9	1	102	96	-28	-11	12	1	59	-18	-59
5	3	1	124	109	15	3	5	1	293	280	7	3	7	1	1767	-1739	13	6	9	1	37	-30	-37	-10	12	1	59	104	-59
6	3	1	119	126	17	4	5	1	1000	-967	8	4	7	1	114	125	19	7	9	1	280	281	12	-9	12	1	143	-126	27
7	3	1	349	336	8	5	5	1	367	-358	7	5	7	1	612	-606	7	8	9	1	182	194	18	-8	12	1	170	157	19
8	3	1	209	-209	13	6	5	1	525	-526	7	6	7	1	528	-532	7	9	9	1	272	-266	13	-7	12	1	162	-154	22
9	3	1	220	231	14	7	5	1	768	-774	8	7	7	1	256	-261	11	10	9	1	220	217	17	-6	12	1	162	188	21
10	3	1	365	-364	11	8	5	1	136	117	21	8	7	1	573	-572	8	11	9	1	286	-288	15	-5	12	1	111	114	-30
11	3	1	348	356	12	9	5	1	1257	-1259	12	9	7	1	79	-61	-54	12	9	1	230	240	19	-4	12	1	37	20	-37
12	3	1	138	-131	27	10	5	1	74	38	-74	10	7	1	741	-743	9	-12	10	1	242	-233	17	-3	12	1	195	-205	16
13	3	1	246	238	16	11	5	1	735	-748	9	11	7	1	40	-48	-40	-11	10	1	210	-203	19	-2	12	1	71	-61	-71
14	3	1	197	-180	21	12	5	1	40	-12	-40	12	7	1	620	-621	10	-10	10	1	471	-468	11	-1	12	1	176	-195	16
-14	4	1	193	193	21	13	5	1	557	-540	10	13	7	1	40	28	-40	-9	10	1	362	-374	11	0	12	1	39	-42	-27
-13	4	1	360	353	12	14	5	1	42	-6	-42	-13	8	1	266	-226	15	-8	10	1	622	-633	8	1	12	1	226	227	14
-12	4	1	410	397	11	-14	6	1	171	167	26	-12	8	1	255	-255	16	-7	10	1	305	-324	12	2	12	1	148	-157	20
-11	4	1	297	294	13	-13	6	1	42	-53	-42	-11	8	1	514	-497	10	-6	10	1	876	-853	9	3	12	1	257	255	12
-10	4	1	763	757	9	-12	6	1	40	31	-40	-10	8	1	95	-121	-41	-5	10	1	36	-28	-36	4	12	1	357	-350	10
-9	4	1	92	115	-36	-11	6	1	242	240	15	-9	8	1	529	-527	9	-4	10	1	1041	-1046	10	5	12	1	60	46	-60
-8	4	1	1282	1301	12	-10	6	1	223	-210	15	-8	8	1	37	14	-37	-3	10	1	230	-240	12	6	12	1	104	-128	-37
-7	4	1	32	-40	-32	-9	6	1	661	660	8	-7	8	1	1282	-1285	11	-2	10	1	1165	-1174	10	7	12	1	183	187	18
-6	4	1	1796	1808	14	-8	6	1	533	-537	8	-6	8	1	309	296	10	-1	10	1	401	-413	8	8	12	1	147	-149	25
-5	4	1	491	474	6	-7	6	1	1158	1162	11	-5	8	1	1370	-1360	11	0	10	1	697	-706	6	9	12	1	65	63	-65
-4	4	1	2178	2150	12	-6	6	1	789	-784	8	-4	8	1	98	-111	24	1	10	1	936	-943	9	10	12	1	41	26	-41
-3	4	1	672	676	7	-5	6	1	984	972	9	-3	8	1	1316	-1336	12	2	10	1	34	-24	-34	11	12	1	42	7	-42
-2	4	1	1485	1474	10	-4	6	1	709	-701	7	-2	8	1	445	-443	6	3	10	1	879	-864	9	-10	13	1	125	127	-34
-1	4	1	1542	1507	9	-3	6	1	1035	1021	9	-1	8	1	879	-894	8	4	10	1	181	-174	15	-9	13	1	84	94	-75
0	4	1	461	452	5	-2	6	1	297	-288	6	0	8	1	442	-454	7	5	10	1	869	-855	9	-8	13	1	120	131	-32
1	4	1	2253	2224	9	-1	6	1	65	51	-28	1	8	1	753	-743	8	6	10	1	81	-96	-50	-7	13	1	41	67	-41
2	4	1	1116	1085	9	0	6	1	87	-71	15	2	8	1	1292	-1310	11	7	10	1	404	-401	10	-6	13	1	143	141	24
3	4	1	1829	1750	11	1	6	1	779	-774	8	3	8	1	292	-273	9	8	10	1	37	21	-37	-5	13	1	79	63	-64
4	4	1	90	29	21	2	6	1	296	317	7	4	8	1	1383	-1354	11	9	10	1	358	-362	12	-4	13	1	312	313	11
5	4	1	1782	1740	13	3	6	1	569	-577	6	5	8	1	178	182	15	10	10	1	40	27	-40	-3	13	1	218	223	14
6	4	1	399	-374	7	4	6	1	445	447	6	6	8	1	1173	-1192	11	11	10	1	192	-175	20	-2	13	1	183	177	16
7	4	1	944	963	9	5	6	1	1354	-1323	12	7	8	1	374	386	9	12	10	1	159	-143	26	-1	13	1	305	309	11
8	4	1	110	-105	26	6	6	1	931	929	9	8	8	1	586	-581	8	-11	11	1	234	224	18	0	13	1	155	155	14
9	4	1	1006	1012	9	7	6	1	861	-870	9	9	8	1	37	10	-37	-10	11	1	58	39	-58	1	13	1	303	308	11
10	4	1	39	10	-39	8	6	1	618	617	8	10	8	1	424	-438	11	-9	11	1	246	260	15	2	13	1	341	344	11
11	4	1	491	500	10	9	6	1	651	-656	9	11	8	1	164	-171	23	-8	11	1	59	67	-59	3	13	1	73	90	-73
12	4	1	200	208	19	10	6	1	240	254	16	12	8	1	196	-199	21	-7	11	1	188	181	17	4	13	1	292	298	12
13	4	1	96	84	-48	11	6	1	120	-133	-31	13	8	1	128	-158	-34	-6	11	1	121	130	27	5	13	1	131	111	26
14	4	1	243	237	18	12	6	1	110	-129	-38	-12	9	1	253	255	16	-5	11	1	94	86	-36	6	13	1	229	234	16
-14	5	1	207	209	20	13	6	1	42	33	-42	-11	9	1	162	-166	24	-4	11	1	496	492	8	7	13	1	256	264	15

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
8	13	1	259	263	15	-3	17	1	300	-292	14	-3	1	2	1007	-1001	8	-5	3	2	1784	1772	13	-7	5	2	249	-233	10
9	13	1	270	251	15	-2	17	1	153	173	25	-2	1	2	194	190	7	-4	3	2	675	678	7	-6	5	2	735	737	7
10	13	1	199	179	21	-1	17	1	367	-377	13	-1	1	2	377	376	5	-3	3	2	1517	1521	10	-5	5	2	148	137	13
-9	14	1	241	248	17	0	17	1	49	72	-35	0	1	2	859	812	7	-2	3	2	1610	1559	9	-4	5	2	717	718	7
-8	14	1	395	402	12	1	17	1	327	-312	13	1	1	2	2038	2013	7	-1	3	2	1858	1830	8	-3	5	2	47	27	-47
-7	14	1	248	249	16	2	17	1	41	86	-41	2	1	2	439	-403	6	0	3	2	81	76	12	-2	5	2	742	738	7
-6	14	1	503	500	10	3	17	1	379	-362	12	3	1	2	981	976	9	1	3	2	816	779	8	-1	5	2	470	464	6
-5	14	1	283	277	13	4	17	1	41	-47	-41	4	1	2	244	-242	8	2	3	2	4375	4414	10	0	5	2	861	836	6
-4	14	1	327	321	12	5	17	1	188	-192	23	5	1	2	1281	1293	10	3	3	2	99	88	18	1	5	2	655	655	7
-3	14	1	176	178	17	-3	18	1	186	-213	22	6	1	2	491	-501	6	4	3	2	1982	1949	12	2	5	2	572	553	7
-2	14	1	309	310	11	-2	18	1	43	53	-43	7	1	2	966	996	9	5	3	2	489	481	6	3	5	2	982	985	9
-1	14	1	435	439	10	-1	18	1	70	-73	-70	8	1	2	34	-14	-34	6	3	2	1723	1740	14	4	5	2	176	-171	12
0	14	1	407	422	7	0	18	1	49	-23	-36	9	1	2	923	919	10	7	3	2	326	323	9	5	5	2	594	599	7
1	14	1	368	364	10	1	18	1	92	80	-58	10	1	2	115	119	28	8	3	2	1343	1371	12	6	5	2	165	169	14
2	14	1	379	381	10	2	18	1	128	-128	-34	11	1	2	332	340	12	9	3	2	347	337	10	7	5	2	685	699	8
3	14	1	328	327	12	3	18	1	134	128	33	12	1	2	120	127	-34	10	3	2	1017	1037	10	8	5	2	36	18	-36
4	14	1	37	13	-37	-14	0	2	524	-504	11	13	1	2	126	141	30	11	3	2	320	303	13	9	5	2	579	570	8
5	14	1	367	375	11	-13	0	2	111	110	-36	14	1	2	322	309	14	12	3	2	573	578	10	10	5	2	124	129	30
6	14	1	114	100	-35	-12	0	2	553	-551	9	-14	2	2	136	128	29	13	3	2	487	506	11	11	5	2	240	242	17
7	14	1	357	365	13	-11	0	2	81	86	-64	-13	2	2	476	-473	11	14	3	2	249	231	18	12	5	2	253	245	16
8	14	1	78	58	-78	-10	0	2	1065	-1058	10	-12	2	2	154	148	22	-14	4	2	84	-81	-84	13	5	2	97	102	-52
9	14	1	204	179	20	-9	0	2	34	3	-34	-11	2	2	603	-600	9	-13	4	2	292	287	14	-14	6	2	242	248	18
-8	15	1	44	57	-44	-8	0	2	584	-583	7	-10	2	2	268	272	12	-12	4	2	38	-10	-38	-13	6	2	212	225	19
-7	15	1	42	-46	-42	-7	0	2	284	-290	9	-9	2	2	626	-626	8	-11	4	2	363	377	11	-12	6	2	418	413	12
-6	15	1	40	44	-40	-6	0	2	1024	-993	10	-8	2	2	206	183	12	-10	4	2	122	-107	26	-11	6	2	273	271	14
-5	15	1	39	27	-39	-5	0	2	703	-716	7	-7	2	2	528	-506	7	-9	4	2	510	506	8	-10	6	2	422	406	10
-4	15	1	39	-20	-39	-4	0	2	120	119	13	-6	2	2	1138	-1103	10	-8	4	2	72	-46	-48	-9	6	2	304	303	11
-3	15	1	278	268	13	-3	0	2	2887	-2996	9	-5	2	2	412	-381	14	-7	4	2	257	244	10	-8	6	2	557	552	8
-2	15	1	38	-73	-38	-2	0	2	1183	1200	8	-4	2	2	1078	-1084	9	-6	4	2	402	398	7	-7	6	2	555	549	7
-1	15	1	211	223	17	-1	0	2	2222	-2263	7	-3	2	2	102	-69	14	-5	4	2	143	-125	13	-6	6	2	273	281	9
0	15	1	174	-164	14	0	0	2	2092	2117	14	-2	2	2	1031	-1027	9	-4	4	2	492	502	6	-5	6	2	836	823	8
1	15	1	104	93	-35	1	0	2	2964	-3132	7	-1	2	2	985	966	8	-3	4	2	300	269	6	-4	6	2	628	604	7
2	15	1	148	-156	23	2	0	2	1106	1099	9	0	2	2	2004	-1964	11	-2	4	2	922	901	7	-3	6	2	932	928	8
3	15	1	122	140	29	3	0	2	109	-133	16	1	2	2	589	566	6	-1	4	2	425	-427	6	-2	6	2	540	521	6
4	15	1	113	-116	-34	4	0	2	85	51	20	2	2	2	3717	-3689	9	0	4	2	547	563	9	-1	6	2	663	672	7
5	15	1	115	133	-37	5	0	2	454	-462	6	3	2	2	856	833	8	1	4	2	817	-815	8	0	6	2	177	188	7
6	15	1	113	88	-36	6	0	2	304	-288	8	4	2	2	1082	-1088	10	2	4	2	844	-764	8	1	6	2	1130	1103	10
7	15	1	70	-106	-70	7	0	2	108	89	21	5	2	2	119	-114	15	3	4	2	172	-169	11	2	6	2	120	142	15
8	15	1	42	99	-42	8	0	2	659	-677	8	6	2	2	333	320	8	4	4	2	674	659	7	3	6	2	94	116	22
-7	16	1	389	395	13	9	0	2	358	360	10	7	2	2	141	-130	16	5	4	2	71	67	-37	4	6	2	569	543	7
-6	16	1	42	1	-42	10	0	2	461	-459	9	8	2	2	267	275	11	6	4	2	32	-4	-32	5	6	2	418	420	7
-5	16	1	573	584	10	11	0	2	518	524	10	9	2	2	452	-436	9	7	4	2	33	43	-33	6	6	2	151	150	17
-4	16	1	41	8	-41	12	0	2	502	-513	10	10	2	2	411	415	10	8	4	2	105	-103	-29	7	6	2	128	155	21
-3	16	1	376	380	12	13	0	2	220	212	18	11	2	2	416	-428	11	9	4	2	110	110	-31	8	6	2	172	-179	18
-2	16	1	39	64	-39	14	0	2	254	-246	18	12	2	2	381	366	11	10	4	2	418	-427	10	9	6	2	38	-5	-38
-1	16	1	339	346	12	-14	1	2	41	-2	-41	13	2	2	228	-226	18	11	4	2	273	301	15	10	6	2	122	-104	-31
0	16	1	304	309	16	-13	1	2	145	150	25	14	2	2	220	199	19	12	4	2	139	-117	28	11	6	2	68	-105	-68
1	16	1	194	180	18	-12	1	2	75	78	-75	-14	3	2	160	163	24	13	4	2	178	176	23	12	6	2	101	122	-44
2	16	1	400	402	11	-11	1	2	38	50	-38	-13	3	2	242	253	17	14	4	2	160	-134	26	13	6	2	41	-79	-41
3	16	1	40	22	-40	-10	1	2	464	486	9	-12	3	2	285	295	13	-14	5	2	96	105	-52	-13	7	2	111	-114	-40
4	16	1	345	337	13	-9	1	2	129	-139	20	-11	3	2	447	434	9	-13	5	2	41	27	-41	-12	7	2	170	-180	23
5	16	1	79	-81	-79	-8	1	2	1479	1468	13	-10	3	2	256	250	12	-12	5	2	107	121	-38	-11	7	2	130	-163	28
6	16	1	352	373	14	-7	1	2	587	-602	7	-9	3	2	1027	1033	10	-11	5	2	156	171	21	-10	7	2	249	-262	14
7	16	1	83	-62	-83	-6	1	2	2078	2075	13	-8	3	2	32	6	-32	-10	5	2	329	335	11	-9	7	2	259	-258	12
-5	17	1	132	-131	33	-5	1	2	713	-714	7	-7	3	2	1232	1266	11	-9	5	2	152	124	20	-8	7	2	109	-99	27
-4	17	1	42	5	-42	-4	1	2	2370	2391	11	-6	3	2	600	586	7	-8	5	2	504	512	8	-7	7	2	444	-454	8

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-6	7	2	236	-225	11	-4	9	2	1217	-1239	11	3	11	2	111	115	-28	-5	14	2	282	-285	13	4	17	2	228	211	18
-5	7	2	498	-504	7	-3	9	2	429	-433	7	4	11	2	738	-726	8	-4	14	2	129	133	25	5	17	2	43	-13	-43
-4	7	2	95	-101	22	-2	9	2	989	-1001	10	5	11	2	196	194	16	-3	14	2	261	-263	13	-3	18	2	97	87	-51
-3	7	2	599	-595	7	-1	9	2	600	-618	7	6	11	2	656	-647	8	-2	14	2	302	307	12	-2	18	2	303	285	14
-2	7	2	642	-623	7	0	9	2	277	-303	6	7	11	2	206	197	16	-1	14	2	562	-552	9	-1	18	2	41	-33	-41
-1	7	2	184	-197	10	1	9	2	766	-767	8	8	11	2	548	-540	9	0	14	2	311	319	9	0	18	2	230	218	14
0	7	2	829	-823	5	2	9	2	587	-593	7	9	11	2	85	-107	-62	1	14	2	408	-401	10	1	18	2	42	38	-42
1	7	2	314	-321	7	3	9	2	1004	-1005	9	10	11	2	244	-239	16	2	14	2	151	149	23	2	18	2	178	200	23
2	7	2	1080	-1042	10	4	9	2	406	-395	8	11	11	2	42	-49	-42	3	14	2	386	-393	10	-14	1	3	235	-234	18
3	7	2	594	-575	7	5	9	2	1174	-1165	11	-11	12	2	393	-388	12	4	14	2	163	168	21	-13	1	3	366	-357	12
4	7	2	658	-644	7	6	9	2	212	-208	14	-10	12	2	63	23	-63	5	14	2	111	-101	-36	-12	1	3	306	-304	13
5	7	2	734	-708	8	7	9	2	659	-670	9	-9	12	2	578	-583	10	6	14	2	99	125	-47	-11	1	3	522	-519	9
6	7	2	487	-464	8	8	9	2	184	-188	18	-8	12	2	246	-250	15	7	14	2	118	123	-33	-10	1	3	450	-446	9
7	7	2	36	-54	-36	9	9	2	525	-517	9	-7	12	2	413	-423	10	8	14	2	101	-121	-45	-9	1	3	594	-601	8
8	7	2	396	-389	10	10	9	2	336	-347	13	-6	12	2	493	-494	9	9	14	2	138	171	32	-8	1	3	809	-820	8
9	7	2	228	-242	15	11	9	2	400	-394	12	-5	12	2	40	-61	-40	-8	15	2	513	510	11	-7	1	3	661	-700	8
10	7	2	527	-544	10	12	9	2	311	-309	14	-4	12	2	718	-715	8	-7	15	2	70	43	-70	-6	1	3	697	-737	7
11	7	2	120	-142	-34	-12	10	2	338	-322	14	-3	12	2	72	100	-72	-6	15	2	586	579	10	-5	1	3	1131	-1160	10
12	7	2	299	-308	15	-11	10	2	191	196	21	-2	12	2	956	-960	9	-5	15	2	40	91	-40	-4	1	3	49	4	-49
13	7	2	126	-121	-33	-10	10	2	358	-344	12	-1	12	2	301	314	11	-4	15	2	587	568	9	-3	1	3	760	-778	7
-13	8	2	41	59	-41	-9	10	2	248	259	14	0	12	2	769	-792	11	-3	15	2	74	89	-74	-2	1	3	225	-234	6
-12	8	2	296	310	15	-8	10	2	167	-152	19	1	12	2	237	240	13	-2	15	2	536	512	9	-1	1	3	406	-411	5
-11	8	2	124	131	-31	-7	10	2	301	-310	11	2	12	2	582	-569	8	-1	15	2	437	416	10	0	1	3	1387	-1349	8
-10	8	2	340	344	11	-6	10	2	179	-173	18	3	12	2	397	399	9	0	15	2	503	513	7	1	1	3	436	-428	6
-9	8	2	37	73	-37	-5	10	2	219	-210	14	4	12	2	421	-406	10	1	15	2	484	486	10	2	1	3	685	-682	7
-8	8	2	402	399	9	-4	10	2	147	151	20	5	12	2	38	34	-38	2	15	2	228	228	16	3	1	3	831	-864	7
-7	8	2	60	42	-60	-3	10	2	739	-731	8	6	12	2	39	-15	-39	3	15	2	514	508	10	4	1	3	1003	-1034	9
-6	8	2	845	837	8	-2	10	2	663	659	8	7	12	2	223	-237	15	4	15	2	40	62	-40	5	1	3	562	-575	6
-5	8	2	324	330	9	-1	10	2	406	-430	8	8	12	2	143	141	27	5	15	2	685	676	9	6	1	3	854	-866	8
-4	8	2	117	122	18	0	10	2	837	800	9	9	12	2	132	-162	31	6	15	2	41	28	-41	7	1	3	1000	-997	9
-3	8	2	736	738	8	1	10	2	718	-718	8	10	12	2	213	222	19	7	15	2	551	569	11	8	1	3	586	-588	8
-2	8	2	75	73	-29	2	10	2	356	357	8	-10	13	2	41	25	-41	8	15	2	43	24	-43	9	1	3	732	-727	8
-1	8	2	547	551	7	3	10	2	509	-483	7	-9	13	2	451	442	11	-7	16	2	43	72	-43	10	1	3	284	-296	13
0	8	2	79	-69	-20	4	10	2	81	96	-45	-8	13	2	41	-61	-41	-6	16	2	66	53	-66	11	1	3	552	-559	10
1	8	2	712	695	7	5	10	2	274	-264	12	-7	13	2	648	649	9	-5	16	2	217	201	19	12	1	3	163	-172	24
2	8	2	401	-387	7	6	10	2	130	141	25	-6	13	2	140	124	24	-4	16	2	63	5	-63	13	1	3	338	-359	14
3	8	2	255	266	9	7	10	2	405	411	10	-5	13	2	687	693	9	-3	16	2	332	321	12	14	1	3	144	-183	30
4	8	2	33	23	-33	8	10	2	238	-239	15	-4	13	2	278	-280	12	-2	16	2	71	-55	-71	-14	2	3	86	-50	-64
5	8	2	163	196	17	9	10	2	127	140	29	-3	13	2	429	434	9	-1	16	2	322	315	13	-13	2	3	167	-160	23
6	8	2	184	175	15	10	10	2	240	-252	17	-2	13	2	163	176	19	0	16	2	111	-99	-30	-12	2	3	127	-116	25
7	8	2	85	62	-41	11	10	2	202	192	20	-1	13	2	492	498	9	1	16	2	338	330	12	-11	2	3	37	-16	-37
8	8	2	205	210	15	12	10	2	204	-174	21	0	13	2	268	276	9	2	16	2	110	-106	-37	-10	2	3	429	-422	9
9	8	2	38	-15	-38	-11	11	2	150	-143	27	1	13	2	218	244	15	3	16	2	330	327	13	-9	2	3	62	79	-62
10	8	2	99	42	-40	-10	11	2	92	73	-49	2	13	2	747	758	9	4	16	2	41	-6	-41	-8	2	3	502	-501	7
11	8	2	67	-54	-67	-9	11	2	409	-395	11	3	13	2	230	-223	14	5	16	2	149	149	29	-7	2	3	397	378	7
12	8	2	155	147	26	-8	11	2	105	-120	-36	4	13	2	526	520	9	6	16	2	43	55	-43	-6	2	3	355	-354	7
13	8	2	102	-81	-47	-7	11	2	574	-571	9	5	13	2	297	-304	12	7	16	2	43	-32	-43	-5	2	3	547	530	6
-13	9	2	197	-207	21	-6	11	2	372	376	10	6	13	2	685	682	9	-5	17	2	299	286	15	-4	2	3	335	-348	6
-12	9	2	271	-271	15	-5	11	2	1011	-1003	10	7	13	2	143	-139	26	-4	17	2	63	-2	-63	-3	2	3	413	403	6
-11	9	2	303	-306	13	-4	11	2	576	590	8	8	13	2	463	461	11	-3	17	2	172	161	23	-2	2	3	1409	-1356	9
-10	9	2	471	-468	10	-3	11	2	710	-709	8	9	13	2	68	-56	-68	-2	17	2	134	130	28	-1	2	3	431	433	6
-9	9	2	238	-247	14	-2	11	2	69	78	-69	10	13	2	329	321	14	-1	17	2	200	215	20	0	2	3	111	-89	9
-8	9	2	801	-804	9	-1	11	2	412	-415	9	-9	14	2	71	30	-71	0	17	2	237	246	12	1	2	3	695	661	7
-7	9	2	225	-241	14	0	11	2	331	-337	7	-8	14	2	182	-181	22	1	17	2	41	82	-41	2	2	3	812	769	8
-6	9	2	1037	-1041	10	1	11	2	117	-137	24	-7	14	2	62	-71	-62	2	17	2	238	212	16	3	2	3	568	551	7
-5	9	2	35	-12	-35	2	11	2	632	-634	8	-6	14	2	235	-261	16	3	17	2	42	56	-42	4	2	3	543	531	7

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
5	2	3	72	49	-32	3	4	3	1338	1303	12	3	6	3	1436	-1410	11	5	8	3	358	353	9	10	10	3	41	-56	-41
6	2	3	537	528	7	4	4	3	95	-88	21	4	6	3	585	582	7	6	8	3	594	-592	8	11	10	3	220	-208	18
7	2	3	77	-84	-37	5	4	3	1214	1177	10	5	6	3	1497	-1477	12	7	8	3	249	258	13	-11	11	3	203	-200	20
8	2	3	723	698	8	6	4	3	174	-195	14	6	6	3	930	918	9	8	8	3	688	-682	8	-10	11	3	459	-466	11
9	2	3	170	165	19	7	4	3	923	930	9	7	6	3	558	-568	8	9	8	3	83	82	-53	-9	11	3	346	-368	12
10	2	3	322	331	12	8	4	3	140	-146	21	8	6	3	453	455	9	10	8	3	349	-348	12	-8	11	3	631	-650	9
11	2	3	315	303	13	9	4	3	641	630	8	9	6	3	699	-684	8	11	8	3	218	-245	19	-7	11	3	493	-504	9
12	2	3	183	176	20	10	4	3	212	-208	17	10	6	3	104	99	-36	12	8	3	177	-182	23	-6	11	3	507	-518	9
13	2	3	209	206	20	11	4	3	357	378	13	11	6	3	137	-138	28	-13	9	3	123	-108	-38	-5	11	3	952	-932	9
14	2	3	109	118	-42	12	4	3	237	240	18	12	6	3	126	-105	-33	-12	9	3	281	270	16	-4	11	3	289	-291	12
-14	3	3	141	-152	29	13	4	3	105	89	-44	13	6	3	104	63	-43	-11	9	3	284	-294	15	-3	11	3	1086	-1098	10
-13	3	3	269	248	15	-14	5	3	524	506	11	-13	7	3	640	658	10	-10	9	3	313	310	12	-2	11	3	302	-306	10
-12	3	3	279	-285	13	-13	5	3	40	8	-40	-12	7	3	102	84	-42	-9	9	3	223	-243	16	-1	11	3	904	-907	9
-11	3	3	241	230	14	-12	5	3	845	853	9	-11	7	3	827	845	9	-8	9	3	110	133	-29	0	11	3	349	-346	7
-10	3	3	390	-382	9	-11	5	3	73	-92	-73	-10	7	3	62	-56	-62	-7	9	3	104	89	-30	1	11	3	989	-998	10
-9	3	3	262	254	11	-10	5	3	926	918	9	-9	7	3	747	744	9	-6	9	3	221	-223	13	2	11	3	337	-343	10
-8	3	3	133	119	18	-9	5	3	353	351	10	-8	7	3	373	370	9	-5	9	3	476	475	8	3	11	3	701	-688	8
-7	3	3	284	-259	9	-8	5	3	823	820	9	-7	7	3	829	824	9	-4	9	3	492	-493	7	4	11	3	433	-441	9
-6	3	3	62	70	-43	-7	5	3	503	513	7	-6	7	3	824	843	8	-3	9	3	339	360	8	5	11	3	405	-382	10
-5	3	3	147	-154	12	-6	5	3	834	824	8	-5	7	3	481	464	7	-2	9	3	599	-603	7	6	11	3	441	-428	10
-4	3	3	569	559	6	-5	5	3	1477	1455	11	-4	7	3	1450	1484	12	-1	9	3	794	785	8	7	11	3	352	-341	11
-3	3	3	26	-48	-26	-4	5	3	621	612	7	-3	7	3	489	482	6	0	9	3	489	-496	5	8	11	3	491	-491	10
-2	3	3	730	727	7	-3	5	3	2037	2041	12	-2	7	3	1545	1580	13	1	9	3	588	604	7	9	11	3	215	-219	18
-1	3	3	250	-273	6	-2	5	3	281	277	6	-1	7	3	122	-128	14	2	9	3	550	-539	7	10	11	3	362	-346	12
0	3	3	1617	1566	25	-1	5	3	2135	2137	11	0	7	3	2047	2043	9	3	9	3	33	9	-33	11	11	3	166	-177	25
1	3	3	2486	-2410	10	0	5	3	39	-36	-28	1	7	3	805	-751	8	4	9	3	297	-299	10	-11	12	3	42	-3	-42
2	3	3	730	707	8	1	5	3	1678	1689	11	2	7	3	1657	1632	13	5	9	3	229	216	13	-10	12	3	104	97	-39
3	3	3	773	-752	7	2	5	3	342	-310	7	3	7	3	663	663	7	6	9	3	66	-79	-66	-9	12	3	66	-69	-66
4	3	3	533	519	6	3	5	3	2199	2143	12	4	7	3	1176	1182	11	7	9	3	76	-75	-62	-8	12	3	149	156	25
5	3	3	379	-376	7	4	5	3	513	504	7	5	7	3	606	601	8	8	9	3	173	188	20	-7	12	3	142	-144	25
6	3	3	31	19	-31	5	5	3	1568	1534	12	6	7	3	678	652	8	9	9	3	258	-264	14	-6	12	3	154	156	23
7	3	3	245	240	11	6	5	3	630	631	8	7	7	3	792	794	8	10	9	3	293	281	14	-5	12	3	39	36	-39
8	3	3	157	-167	18	7	5	3	199	205	14	8	7	3	90	76	-40	11	9	3	267	-282	16	-4	12	3	38	-62	-38
9	3	3	315	307	11	8	5	3	811	804	8	9	7	3	496	484	9	12	9	3	214	214	21	-3	12	3	37	5	-37
10	3	3	486	-487	10	9	5	3	308	-305	12	10	7	3	40	8	-40	-12	10	3	42	15	-42	-2	12	3	51	33	-51
11	3	3	525	519	10	10	5	3	723	728	9	11	7	3	781	787	9	-11	10	3	129	137	30	-1	12	3	202	198	15
12	3	3	242	-248	17	11	5	3	40	-1	-40	12	7	3	109	-94	-43	-10	10	3	41	-20	-41	0	12	3	43	-46	-31
13	3	3	230	241	18	12	5	3	547	548	10	13	7	3	450	452	12	-9	10	3	248	233	14	1	12	3	37	29	-37
14	3	3	72	-81	-72	13	5	3	42	51	-42	-13	8	3	82	105	-82	-8	10	3	388	-400	11	2	12	3	130	-129	25
-14	4	3	219	-217	20	-14	6	3	82	96	-82	-12	8	3	129	121	31	-7	10	3	196	201	17	3	12	3	257	248	13
-13	4	3	148	-145	26	-13	6	3	41	-54	-41	-11	8	3	103	-106	-41	-6	10	3	484	-497	9	4	12	3	243	-261	14
-12	4	3	40	-57	-40	-12	6	3	183	-187	21	-10	8	3	223	223	15	-5	10	3	425	410	9	5	12	3	230	228	15
-11	4	3	193	-186	17	-11	6	3	146	141	24	-9	8	3	411	-408	10	-4	10	3	555	-551	8	6	12	3	39	12	-39
-10	4	3	122	147	28	-10	6	3	366	-352	11	-8	8	3	382	367	9	-3	10	3	276	269	10	7	12	3	71	15	-71
-9	4	3	670	-672	8	-9	6	3	398	402	10	-7	8	3	465	-468	8	-2	10	3	130	-132	19	8	12	3	42	-63	-42
-8	4	3	361	367	9	-8	6	3	955	-952	9	-6	8	3	534	541	7	-1	10	3	65	64	-65	9	12	3	42	22	-42
-7	4	3	1054	-1054	10	-7	6	3	503	518	7	-5	8	3	531	-547	7	0	10	3	37	-6	-27	10	12	3	44	-18	-44
-6	4	3	373	359	7	-6	6	3	801	-813	8	-4	8	3	718	707	8	1	10	3	294	-293	10	-10	13	3	264	-266	16
-5	4	3	1223	-1195	11	-5	6	3	609	615	7	-3	8	3	933	-905	9	2	10	3	118	108	22	-9	13	3	334	-338	13
-4	4	3	438	444	6	-4	6	3	1295	-1254	11	-2	8	3	282	306	8	3	10	3	399	-406	9	-8	13	3	385	-409	12
-3	4	3	1032	-1014	9	-3	6	3	178	201	10	-1	8	3	468	-453	7	4	10	3	189	171	15	-7	13	3	566	-577	10
-2	4	3	512	510	6	-2	6	3	635	-626	7	0	8	3	130	109	11	5	10	3	586	-583	8	-6	13	3	437	-432	10
-1	4	3	284	-276	6	-1	6	3	317	321	6	1	8	3	30	-4	-30	6	10	3	375	374	10	-5	13	3	561	-549	9
0	4	3	383	364	6	0	6	3	134	-124	9	2	8	3	528	-529	7	7	10	3	395	-381	10	-4	13	3	514	-508	9
1	4	3	2299	2238	10	1	6	3	1002	-988	9	3	8	3	46	8	-46	8	10	3	39	58	-39	-3	13	3	397	-404	10
2	4	3	843	-832	8	2	6	3	729	736	7	4	8	3	1059	-1064	10	9	10	3	451	-454	11	-2	13	3	605	-621	8

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	13	3	546	-552	8	2	16	3	225	213	18	-8	1	4	398	384	8	-10	3	4	715	-713	8	-10	5	4	57	-50	-57
0	13	3	590	-600	7	3	16	3	109	-125	-40	-7	1	4	1514	-1538	12	-9	3	4	247	-256	12	-9	5	4	378	-380	10
1	13	3	659	-658	8	4	16	3	328	337	14	-6	1	4	1488	1473	11	-8	3	4	898	-926	9	-8	5	4	69	-62	-52
2	13	3	437	-440	10	5	16	3	77	-82	-77	-5	1	4	1727	-1763	13	-7	3	4	42	-37	-42	-7	5	4	556	-563	7
3	13	3	571	-563	9	6	16	3	380	357	13	-4	1	4	785	764	7	-6	3	4	1268	-1307	12	-6	5	4	150	139	14
4	13	3	324	-315	12	-5	17	3	231	223	18	-3	1	4	222	-231	7	-5	3	4	92	73	20	-5	5	4	343	-349	7
5	13	3	362	-368	11	-4	17	3	493	481	11	-2	1	4	552	-540	6	-4	3	4	1700	-1713	12	-4	5	4	1162	-1103	9
6	13	3	231	-227	16	-3	17	3	150	136	27	-1	1	4	1330	-1329	9	-3	3	4	38	-24	-38	-3	5	4	869	-845	8
7	13	3	348	-349	13	-2	17	3	418	401	11	0	1	4	953	-929	6	-2	3	4	1379	-1378	10	-2	5	4	344	-343	6
8	13	3	293	-303	15	-1	17	3	39	19	-39	1	1	4	131	-130	14	-1	3	4	543	-542	6	-1	5	4	395	-404	6
9	13	3	172	-162	24	0	17	3	491	477	7	2	1	4	1289	-1310	11	0	3	4	447	-467	4	0	5	4	310	-320	6
-9	14	3	99	-74	-46	1	17	3	102	111	-42	3	1	4	549	560	7	1	3	4	562	-559	6	1	5	4	705	-675	7
-8	14	3	41	59	-41	2	17	3	481	463	11	4	1	4	1358	-1378	10	2	3	4	360	337	6	2	5	4	663	-660	7
-7	14	3	41	57	-41	3	17	3	164	198	26	5	1	4	756	762	7	3	3	4	2066	-2028	12	3	5	4	236	-218	10
-6	14	3	69	24	-69	4	17	3	418	423	12	6	1	4	1174	-1175	11	4	3	4	323	332	8	4	5	4	1042	-925	9
-5	14	3	39	-39	-39	5	17	3	198	178	21	7	1	4	67	54	-50	5	3	4	1033	-1057	9	5	5	4	366	366	8
-4	14	3	60	70	-60	-2	18	3	162	191	26	8	1	4	597	-621	8	6	3	4	107	110	22	6	5	4	676	-674	7
-3	14	3	172	-203	20	-1	18	3	71	34	-71	9	1	4	155	148	21	7	3	4	897	-920	9	7	5	4	181	185	16
-2	14	3	269	269	13	0	18	3	43	-9	-31	10	1	4	265	-286	14	8	3	4	36	56	-36	8	5	4	400	-395	10
-1	14	3	40	-88	-40	1	18	3	115	107	-38	11	1	4	146	155	26	9	3	4	615	-644	9	9	5	4	124	-119	27
0	14	3	213	214	12	2	18	3	122	-115	-39	12	1	4	41	-32	-41	10	3	4	141	104	24	10	5	4	293	-294	13
1	14	3	229	227	15	-14	0	4	368	-364	13	13	1	4	109	-98	-43	11	3	4	300	-313	14	11	5	4	68	-66	-68
2	14	3	74	93	-74	-13	0	4	218	219	17	14	1	4	78	72	-78	12	3	4	42	-12	-42	12	5	4	76	43	-76
3	14	3	221	226	16	-12	0	4	377	-365	11	-14	2	4	314	326	15	13	3	4	41	-14	-41	13	5	4	129	-107	32
4	14	3	62	20	-62	-11	0	4	395	378	10	-13	2	4	304	-313	14	-14	4	4	136	-116	29	-14	6	4	115	132	-39
5	14	3	274	272	14	-10	0	4	688	-705	8	-12	2	4	245	238	15	-13	4	4	393	390	12	-13	6	4	153	142	25
6	14	3	41	18	-41	-9	0	4	455	442	8	-11	2	4	403	-403	10	-12	4	4	97	-104	-40	-12	6	4	108	80	-39
7	14	3	209	221	19	-8	0	4	982	-990	9	-10	2	4	178	172	16	-11	4	4	231	228	15	-11	6	4	57	53	-57
8	14	3	75	84	-75	-7	0	4	442	-445	7	-9	2	4	602	-601	8	-10	4	4	282	-277	12	-10	6	4	195	189	17
9	14	3	155	158	29	-6	0	4	69	34	-34	-8	2	4	195	194	12	-9	4	4	376	372	10	-9	6	4	136	133	23
-8	15	3	42	55	-42	-5	0	4	1422	-1465	10	-7	2	4	468	-486	7	-8	4	4	107	-82	23	-8	6	4	262	264	11
-7	15	3	41	-11	-41	-4	0	4	449	442	6	-6	2	4	733	-726	7	-7	4	4	186	176	12	-7	6	4	287	289	10
-6	15	3	77	59	-77	-3	0	4	2193	-2243	10	-5	2	4	426	416	6	-6	4	4	105	-105	19	-6	6	4	280	286	9
-5	15	3	40	31	-40	-2	0	4	1078	1089	8	-4	2	4	1223	-1225	10	-5	4	4	80	39	-24	-5	6	4	859	841	8
-4	15	3	117	-115	-35	-1	0	4	1444	-1486	9	-3	2	4	133	143	11	-4	4	4	904	875	8	-4	6	4	391	384	7
-3	15	3	205	184	16	0	0	4	2171	-2159	16	-2	2	4	2497	-2482	10	-3	4	4	521	-510	6	-3	6	4	735	736	7
-2	15	3	216	-217	16	1	0	4	2253	-2268	10	-1	2	4	511	500	5	-2	4	4	973	991	8	-2	6	4	591	597	7
-1	15	3	202	218	17	2	0	4	835	816	8	0	2	4	1239	-1223	14	-1	4	4	121	-115	11	-1	6	4	738	754	7
0	15	3	292	-292	9	3	0	4	1810	-1829	11	1	2	4	839	820	8	0	4	4	606	620	5	0	6	4	506	516	5
1	15	3	151	141	23	4	0	4	617	-618	7	2	2	4	1707	-1688	11	1	4	4	626	-625	7	1	6	4	1004	988	9
2	15	3	123	-99	31	5	0	4	842	-875	8	3	2	4	626	594	6	2	4	4	923	940	9	2	6	4	489	498	7
3	15	3	69	40	-69	6	0	4	863	-867	8	4	2	4	751	-763	7	3	4	4	109	109	18	3	6	4	891	889	8
4	15	3	117	-107	-33	7	0	4	332	-327	8	5	2	4	345	-334	7	4	4	4	1502	1446	11	4	6	4	2042	2006	15
5	15	3	131	129	32	8	0	4	1051	-1045	9	6	2	4	243	-258	10	5	4	4	88	72	-29	5	6	4	414	423	8
6	15	3	43	-7	-43	9	0	4	286	-304	12	7	2	4	563	-573	8	6	4	4	540	530	7	6	6	4	839	827	9
7	15	3	44	-19	-44	10	0	4	1010	-1010	10	8	2	4	36	-15	-36	7	4	4	459	466	8	7	6	4	586	582	8
8	15	3	113	131	-45	11	0	4	92	127	-49	9	2	4	437	-451	9	8	4	4	97	102	-34	8	6	4	327	325	11
-7	16	3	131	130	32	12	0	4	800	-787	9	10	2	4	354	364	11	9	4	4	332	341	11	9	6	4	232	241	15
-6	16	3	188	-203	21	13	0	4	43	57	-43	11	2	4	507	-505	10	10	4	4	39	30	-39	10	6	4	470	464	10
-5	16	3	144	130	27	14	0	4	567	-570	11	12	2	4	211	226	19	11	4	4	412	428	11	11	6	4	325	311	12
-4	16	3	275	-296	15	-14	1	4	406	-397	12	13	2	4	381	-382	13	12	4	4	120	120	-34	12	6	4	388	402	13
-3	16	3	152	147	24	-13	1	4	174	-175	21	14	2	4	79	73	-79	13	4	4	317	300	14	13	6	4	171	168	25
-2	16	3	40	-1	-40	-12	1	4	38	-13	-38	-14	3	4	365	-366	13	-14	5	4	139	-138	31	-13	7	4	341	357	14
-1	16	3	182	185	20	-11	1	4	409	-392	10	-13	3	4	345	-339	13	-13	5	4	115	-133	-35	-12	7	4	207	192	18
0	16	3	109	129	26	-10	1	4	123	-134	24	-12	3	4	484	-481	10	-12	5	4	136	-113	28	-11	7	4	249	266	15
1	16	3	67	12	-67	-9	1	4	881	-901	9	-11	3	4	306	-310	11	-11	5	4	265	-258	14	-10	7	4	293	287	13

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 7

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-9	7	4	344	335	10	-4	9	4	182	181	13	4	11	4	320	-318	11	-3	14	4	592	-595	9	-14	1	5	275	259	16
-8	7	4	481	479	9	-3	9	4	1020	1039	9	5	11	4	672	660	8	-2	14	4	350	356	11	-13	1	5	188	202	20
-7	7	4	238	242	12	-2	9	4	494	500	7	6	11	4	197	-189	18	-1	14	4	606	-619	9	-12	1	5	289	294	13
-6	7	4	706	705	8	-1	9	4	664	687	8	7	11	4	541	547	9	0	14	4	181	172	14	-11	1	5	249	255	13
-5	7	4	519	505	7	0	9	4	607	629	8	8	11	4	151	-144	25	1	14	4	613	-598	9	-10	1	5	278	271	11
-4	7	4	406	409	7	1	9	4	282	281	9	9	11	4	194	180	21	2	14	4	106	104	-35	-9	1	5	306	304	10
-3	7	4	230	227	9	2	9	4	725	731	8	10	11	4	79	-64	-79	3	14	4	373	-376	11	-8	1	5	504	497	7
-2	7	4	268	263	8	3	9	4	374	367	9	11	11	4	105	95	-50	4	14	4	41	-48	-41	-7	1	5	265	267	9
-1	7	4	765	746	7	4	9	4	799	787	8	-11	12	4	361	-357	14	5	14	4	403	-401	12	-6	1	5	588	592	7
0	7	4	54	-33	-38	5	9	4	139	162	24	-10	12	4	83	80	-83	6	14	4	182	-156	22	-5	1	5	284	296	8
1	7	4	113	122	18	6	9	4	968	959	10	-9	12	4	425	-436	11	7	14	4	110	-94	-42	-4	1	5	360	355	6
2	7	4	167	-131	13	7	9	4	39	57	-39	-8	12	4	71	-35	-71	8	14	4	282	-295	17	-3	1	5	283	296	6
3	7	4	32	-28	-32	8	9	4	341	336	12	-7	12	4	412	-412	10	-8	15	4	140	-118	29	-2	1	5	237	-230	7
4	7	4	398	-394	8	9	9	4	123	118	29	-6	12	4	502	-518	9	-7	15	4	521	-506	11	-1	1	5	830	814	7
5	7	4	256	248	12	10	9	4	256	251	16	-5	12	4	83	-70	-46	-6	15	4	154	-186	24	0	1	5	116	-111	11
6	7	4	236	239	13	11	9	4	85	75	-85	-4	12	4	718	-748	9	-5	15	4	656	-646	9	1	1	5	618	621	7
7	7	4	391	397	10	12	9	4	148	120	30	-3	12	4	265	265	12	-4	15	4	290	-306	14	2	1	5	253	-323	8
8	7	4	83	-91	-51	-12	10	4	303	-291	16	-2	12	4	890	-908	9	-3	15	4	554	-544	9	3	1	5	402	402	6
9	7	4	67	86	-67	-11	10	4	123	111	-35	-1	12	4	118	121	26	-2	15	4	226	-226	16	4	1	5	109	79	19
10	7	4	41	56	-41	-10	10	4	447	-433	10	0	12	4	1080	-1087	12	-1	15	4	394	-404	11	5	1	5	46	-19	-46
11	7	4	131	126	32	-9	10	4	117	96	-30	1	12	4	82	-118	-52	0	15	4	400	-410	10	6	1	5	32	-18	-32
12	7	4	42	-21	-42	-8	10	4	347	-355	11	2	12	4	1017	-1007	10	1	15	4	83	-96	-64	7	1	5	200	-189	14
-13	8	4	43	34	-43	-7	10	4	62	-27	-62	3	12	4	206	-214	16	2	15	4	508	-482	10	8	1	5	150	147	20
-12	8	4	201	195	20	-6	10	4	37	4	-37	4	12	4	635	-610	9	3	15	4	40	-69	-40	9	1	5	202	-212	16
-11	8	4	59	-95	-59	-5	10	4	378	-363	9	5	12	4	206	-201	17	4	15	4	580	-588	10	10	1	5	39	0	-39
-10	8	4	236	238	15	-4	10	4	94	87	-32	6	12	4	357	-366	12	5	15	4	128	113	32	11	1	5	157	-147	24
-9	8	4	213	-211	15	-3	10	4	877	-892	9	7	12	4	512	-504	10	6	15	4	478	-474	11	12	1	5	122	110	-36
-8	8	4	238	231	13	-2	10	4	315	322	9	8	12	4	230	-225	18	7	15	4	105	110	-46	13	1	5	340	-344	14
-7	8	4	118	92	24	-1	10	4	876	-865	9	9	12	4	526	-533	11	-7	16	4	172	176	23	-14	2	5	244	-215	17
-6	8	4	386	381	9	0	10	4	92	92	20	10	12	4	81	-44	-81	-6	16	4	82	86	-74	-13	2	5	335	-327	13
-5	8	4	177	184	14	1	10	4	595	-603	8	-10	13	4	315	-308	14	-5	16	4	275	284	15	-12	2	5	351	-350	11
-4	8	4	76	64	-33	2	10	4	102	95	-29	-9	13	4	42	67	-42	-4	16	4	144	174	29	-11	2	5	206	-233	16
-3	8	4	854	842	8	3	10	4	664	-669	8	-8	13	4	516	-516	10	-3	16	4	286	265	15	-10	2	5	573	-580	8
-2	8	4	44	-49	-44	4	10	4	176	-175	17	-7	13	4	131	137	29	-2	16	4	68	-75	-68	-9	2	5	302	-300	10
-1	8	4	519	539	7	5	10	4	415	-413	10	-6	13	4	402	-399	10	-1	16	4	349	341	13	-8	2	5	782	-797	8
0	8	4	35	22	-26	6	10	4	543	-541	9	-5	13	4	198	197	16	0	16	4	100	-76	-33	-7	2	5	509	-518	7
1	8	4	255	273	9	7	10	4	239	-249	15	-4	13	4	540	-552	9	1	16	4	448	444	11	-6	2	5	930	-947	9
2	8	4	193	203	12	8	10	4	452	-458	10	-3	13	4	204	194	15	2	16	4	59	-32	-59	-5	2	5	28	-11	-28
3	8	4	638	624	8	9	10	4	85	64	-60	-2	13	4	527	-530	9	3	16	4	308	328	14	-4	2	5	1711	-1722	12
4	8	4	103	100	-26	10	10	4	334	-333	14	-1	13	4	103	-99	-33	4	16	4	125	104	-33	-3	2	5	105	90	14
5	8	4	516	513	8	11	10	4	43	14	-43	0	13	4	260	-262	10	5	16	4	145	136	30	-2	2	5	892	-914	8
6	8	4	118	109	27	-11	11	4	42	56	-42	1	13	4	414	-409	10	6	16	4	159	166	28	-1	2	5	893	-927	7
7	8	4	216	205	16	-10	11	4	432	408	11	2	13	4	38	-2	-38	-5	17	4	42	48	-42	0	2	5	1587	-1571	7
8	8	4	180	179	19	-9	11	4	74	9	-74	3	13	4	429	-435	10	-4	17	4	327	-330	15	1	2	5	1255	-1250	11
9	8	4	39	39	-39	-8	11	4	558	564	9	4	13	4	281	278	13	-3	17	4	42	-44	-42	2	2	5	802	-806	8
10	8	4	368	361	11	-7	11	4	169	-153	19	5	13	4	564	-573	9	-2	17	4	111	-104	-36	3	2	5	1404	-1440	12
11	8	4	102	77	-46	-6	11	4	607	613	8	6	13	4	235	220	16	-1	17	4	100	-105	-45	4	2	5	93	-92	22
12	8	4	264	260	17	-5	11	4	457	-466	9	7	13	4	552	-549	10	0	17	4	43	-52	-30	5	2	5	1300	-1316	12
-12	9	4	414	427	13	-4	11	4	816	826	9	8	13	4	175	169	24	1	17	4	250	-260	17	6	2	5	154	-160	16
-11	9	4	589	601	10	-3	11	4	259	-255	12	9	13	4	310	-316	15	2	17	4	42	39	-42	7	2	5	1040	-1016	10
-10	9	4	430	433	11	-2	11	4	508	522	8	-9	14	4	41	46	-41	3	17	4	170	-164	24	8	2	5	436	-435	9
-9	9	4	523	531	9	-1	11	4	240	261	12	-8	14	4	125	-125	-33	4	17	4	43	-27	-43	9	2	5	602	-600	9
-8	9	4	204	203	15	0	11	4	210	200	10	-7	14	4	41	38	-41	-2	18	4	262	252	17	10	2	5	236	-239	15
-7	9	4	942	951	9	1	11	4	364	359	10	-6	14	4	162	-137	22	-1	18	4	42	26	-42	11	2	5	139	-134	27
-6	9	4	328	330	10	2	11	4	152	-144	20	-5	14	4	80	-55	-72	0	18	4	308	308	12	12	2	5	235	-214	17
-5	9	4	1178	1167	11	3	11	4	436	449	9	-4	14	4	97	96	-40	1	18	4	195	199	22	13	2	5	229	-231	19

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-14	3	5	154	-138	27	-14	5	5	96	132	-50	-12	7	5	526	-522	11	-7	9	5	68	38	-68	2	11	5	291	299	12
-13	3	5	301	298	14	-13	5	5	616	-604	10	-11	7	5	80	-48	-80	-6	9	5	105	-96	-29	3	11	5	37	6	-37
-12	3	5	208	-198	17	-12	5	5	82	96	-67	-10	7	5	539	-533	9	-5	9	5	446	431	8	4	11	5	108	134	-34
-11	3	5	88	111	-45	-11	5	5	773	-782	9	-9	7	5	188	209	17	-4	9	5	342	-343	9	5	11	5	38	54	-38
-10	3	5	319	-326	11	-10	5	5	36	75	-36	-8	7	5	521	-519	8	-3	9	5	490	499	7	6	11	5	115	-121	-31
-9	3	5	180	185	15	-9	5	5	634	-633	8	-7	7	5	93	-94	-28	-2	9	5	762	-771	8	7	11	5	92	61	-48
-8	3	5	161	-149	16	-8	5	5	33	-17	-33	-6	7	5	33	15	-33	-1	9	5	322	338	9	8	11	5	40	40	-40
-7	3	5	139	-122	15	-7	5	5	199	-190	12	-5	7	5	307	-320	8	0	9	5	560	-568	5	9	11	5	113	85	-37
-6	3	5	275	273	8	-6	5	5	405	-418	7	-4	7	5	374	355	7	1	9	5	601	614	8	10	11	5	91	-106	-68
-5	3	5	29	6	-29	-5	5	5	28	-1	-28	-3	7	5	1080	-1092	9	2	9	5	392	-401	9	-11	12	5	91	-78	-60
-4	3	5	27	58	-27	-4	5	5	729	-730	7	-2	7	5	832	848	9	3	9	5	555	534	8	-10	12	5	41	47	-41
-3	3	5	442	-444	6	-3	5	5	652	648	7	-1	7	5	1025	-1056	9	4	9	5	183	-161	16	-9	12	5	104	-112	-41
-2	3	5	330	340	5	-2	5	5	1390	-1400	12	0	7	5	770	770	6	5	9	5	91	-106	-44	-8	12	5	108	97	-34
-1	3	5	776	-768	7	-1	5	5	885	872	8	1	7	5	1389	-1366	12	6	9	5	128	29	30	-7	12	5	191	-191	18
0	3	5	767	764	8	0	5	5	1638	-1622	14	2	7	5	652	667	8	7	9	5	438	-429	10	-6	12	5	254	245	13
1	3	5	823	-823	8	1	5	5	922	905	8	3	7	5	251	258	11	8	9	5	247	247	15	-5	12	5	37	31	-37
2	3	5	768	763	8	2	5	5	1231	-1212	11	4	7	5	85	80	-35	9	9	5	88	-78	-54	-4	12	5	36	-33	-36
3	3	5	62	19	-50	3	5	5	845	800	8	5	7	5	155	-166	19	10	9	5	340	349	13	-3	12	5	62	80	-62
4	3	5	440	425	7	4	5	5	656	-657	7	6	7	5	37	30	-37	11	9	5	197	-205	22	-2	12	5	36	-18	-36
5	3	5	287	-285	9	5	5	5	522	500	7	7	7	5	216	223	16	-12	10	5	72	92	-72	-1	12	5	172	158	18
6	3	5	50	-34	-50	6	5	5	34	44	-34	8	7	5	223	-234	15	-11	10	5	409	385	12	0	12	5	222	-221	11
7	3	5	112	129	28	7	5	5	315	-311	11	9	7	5	313	308	12	-10	10	5	162	155	23	1	12	5	38	40	-38
8	3	5	367	-382	10	8	5	5	150	157	22	10	7	5	199	-214	19	-9	10	5	577	569	9	2	12	5	160	-163	21
9	3	5	429	420	10	9	5	5	308	-294	12	11	7	5	484	479	11	-8	10	5	37	-30	-37	3	12	5	94	80	-39
10	3	5	203	-205	18	10	5	5	383	387	11	12	7	5	233	-252	18	-7	10	5	773	784	9	4	12	5	171	-169	20
11	3	5	483	496	11	11	5	5	216	-210	18	-13	8	5	233	221	18	-6	10	5	202	198	15	5	12	5	73	26	-73
12	3	5	234	-242	18	12	5	5	262	258	17	-12	8	5	432	443	12	-5	10	5	885	882	9	6	12	5	70	-56	-70
13	3	5	198	183	21	13	5	5	112	-109	-42	-11	8	5	157	187	23	-4	10	5	261	266	11	7	12	5	41	-34	-41
-14	4	5	293	-285	16	-13	6	5	101	33	-44	-10	8	5	587	595	9	-3	10	5	795	801	8	8	12	5	86	-76	-69
-13	4	5	184	-175	22	-12	6	5	85	-98	-64	-9	8	5	146	-138	21	-2	10	5	640	639	8	9	12	5	43	20	-43
-12	4	5	233	-218	16	-11	6	5	63	61	-63	-8	8	5	882	879	9	-1	10	5	787	809	8	10	12	5	77	-68	-77
-11	4	5	580	-564	9	-10	6	5	351	-362	11	-7	8	5	208	204	14	0	10	5	679	674	6	-10	13	5	99	99	-47
-10	4	5	154	-153	19	-9	6	5	474	460	9	-6	8	5	1236	1236	11	1	10	5	692	690	8	-9	13	5	209	216	20
-9	4	5	955	-951	9	-8	6	5	672	-665	8	-5	8	5	119	106	22	2	10	5	919	937	10	-8	13	5	150	134	26
-8	4	5	238	225	11	-7	6	5	640	644	7	-4	8	5	1513	1494	12	3	10	5	371	362	10	-7	13	5	148	162	25
-7	4	5	1027	-1047	9	-6	6	5	408	-426	8	-3	8	5	607	593	7	4	10	5	915	912	10	-6	13	5	104	100	-35
-6	4	5	30	28	-30	-5	6	5	455	459	7	-2	8	5	1522	1513	12	5	10	5	456	441	10	-5	13	5	163	159	19
-5	4	5	1818	-1786	14	-4	6	5	694	-715	7	-1	8	5	899	920	9	6	10	5	967	958	10	-4	13	5	60	-38	-60
-4	4	5	94	-113	19	-3	6	5	381	384	7	0	8	5	757	760	6	7	10	5	172	166	21	-3	13	5	196	206	16
-3	4	5	2010	-1994	12	-2	6	5	377	-382	6	1	8	5	819	852	8	8	10	5	540	529	9	-2	13	5	116	137	29
-2	4	5	594	-589	6	-1	6	5	503	486	6	2	8	5	489	482	7	9	10	5	232	235	17	-1	13	5	148	137	21
-1	4	5	1057	-1033	9	0	6	5	119	122	11	3	8	5	1180	1185	12	10	10	5	380	386	13	0	13	5	154	149	17
0	4	5	486	-511	6	1	6	5	280	-294	9	4	8	5	154	135	18	11	10	5	167	169	27	1	13	5	39	-42	-39
1	4	5	708	-690	7	2	6	5	677	669	7	5	8	5	1469	1485	12	-11	11	5	234	249	18	2	13	5	135	135	25
2	4	5	1697	-1672	13	3	6	5	1498	-1482	12	6	8	5	92	85	-39	-10	11	5	76	34	-76	3	13	5	72	-31	-72
3	4	5	643	606	8	4	6	5	1089	1070	10	7	8	5	1144	1136	10	-9	11	5	282	280	13	4	13	5	40	40	-40
4	4	5	1324	-1335	12	5	6	5	614	-627	8	8	8	5	104	-101	-37	-8	11	5	158	163	21	5	13	5	73	42	-73
5	4	5	96	-83	-28	6	6	5	729	731	8	9	8	5	649	631	9	-7	11	5	161	166	21	6	13	5	42	16	-42
6	4	5	1113	-1118	10	7	6	5	548	-544	8	10	8	5	211	214	18	-6	11	5	196	213	15	7	13	5	42	2	-42
7	4	5	124	113	24	8	6	5	362	357	11	11	8	5	337	332	14	-5	11	5	114	-102	26	8	13	5	42	0	-42
8	4	5	898	-882	9	9	6	5	196	-186	17	12	8	5	274	276	18	-4	11	5	522	514	8	9	13	5	44	24	-44
9	4	5	214	-207	17	10	6	5	176	175	19	-12	9	5	351	365	13	-3	11	5	121	-116	25	-9	14	5	297	-300	15
10	4	5	426	-438	10	11	6	5	42	-31	-42	-11	9	5	223	-232	18	-2	11	5	475	461	8	-8	14	5	227	-206	17
11	4	5	151	-154	25	12	6	5	42	-6	-42	-10	9	5	178	192	21	-1	11	5	200	-210	14	-7	14	5	389	-391	11
12	4	5	235	-233	17	13	6	5	138	112	34	-9	9	5	199	-188	17	0	11	5	393	402	14	-6	14	5	301	-304	13
13	4	5	320	-322	15	-13	7	5	136	134	30	-8	9	5	197	212	16	1	11	5	109	-89	-30	-5	14	5	407	-408	11

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-4	14	5	221	-225	16	-9	0	6	1182	1200	12	-9	2	6	34	-17	-34	-9	4	6	96	-93	-31	-7	6	6	531	-535	7
-3	14	5	654	-648	8	-8	0	6	934	940	9	-8	2	6	750	756	8	-8	4	6	454	-458	8	-6	6	6	635	-645	7
-2	14	5	235	-226	15	-7	0	6	707	694	8	-7	2	6	238	259	10	-7	4	6	156	-164	16	-5	6	6	704	-698	7
-1	14	5	674	-688	9	-6	0	6	1441	1448	12	-6	2	6	492	498	7	-6	4	6	619	-594	7	-4	6	6	1151	-1151	10
0	14	5	365	-373	9	-5	0	6	525	529	6	-5	2	6	1064	1083	9	-5	4	6	782	-793	8	-3	6	6	803	-821	8
1	14	5	518	-521	9	-4	0	6	1970	2004	13	-4	2	6	398	-395	6	-4	4	6	170	-159	11	-2	6	6	1198	-1186	10
2	14	5	516	-522	9	-3	0	6	571	-549	6	-3	2	6	1485	1529	12	-3	4	6	1701	-1679	13	-1	6	6	713	-735	8
3	14	5	406	-390	10	-2	0	6	2075	2147	11	-2	2	6	60	31	-26	-2	4	6	61	53	-31	0	6	6	1093	-1101	10
4	14	5	492	-483	10	-1	0	6	702	713	7	-1	2	6	1350	1374	11	-1	4	6	1299	-1289	10	1	6	6	1092	-1074	10
5	14	5	329	-315	13	0	0	6	2727	2808	11	0	2	6	785	-760	5	0	4	6	166	-158	7	2	6	6	931	-934	9
6	14	5	466	-461	11	1	0	6	281	-265	7	1	2	6	1190	1197	10	1	4	6	1504	-1480	13	3	6	6	638	-628	8
7	14	5	244	-222	18	2	0	6	1484	1525	12	2	2	6	89	-92	-23	2	4	6	405	392	7	4	6	6	534	-549	7
8	14	5	387	-380	13	3	0	6	415	402	6	3	2	6	888	897	9	3	4	6	1181	-1173	10	5	6	6	1026	-1000	10
-8	15	5	97	74	-45	4	0	6	570	585	7	4	2	6	138	150	16	4	4	6	224	-237	11	6	6	6	422	-409	9
-7	15	5	41	-60	-41	5	0	6	188	195	12	5	2	6	564	568	7	5	4	6	564	-562	7	7	6	6	552	-561	8
-6	15	5	155	162	23	6	0	6	150	180	16	6	2	6	34	17	-34	6	4	6	435	-428	8	8	6	6	371	-355	11
-5	15	5	40	17	-40	7	0	6	652	656	8	7	2	6	53	6	-53	7	4	6	138	-133	23	9	6	6	354	-349	11
-4	15	5	109	-97	-33	8	0	6	184	172	17	8	2	6	434	428	9	8	4	6	554	-535	8	10	6	6	230	-228	15
-3	15	5	261	257	16	9	0	6	740	752	9	9	2	6	150	-146	24	9	4	6	39	1	-39	11	6	6	300	-285	14
-2	15	5	320	-335	13	10	0	6	120	-123	-33	10	2	6	609	607	9	10	4	6	154	-160	23	12	6	6	178	-186	24
-1	15	5	136	169	29	11	0	6	721	696	9	11	2	6	63	-99	-63	11	4	6	83	82	-69	-13	7	6	88	79	-55
0	15	5	212	-219	13	12	0	6	345	-359	14	12	2	6	387	397	12	12	4	6	291	-303	15	-12	7	6	204	-216	20
1	15	5	201	203	19	13	0	6	376	376	14	13	2	6	168	-188	26	13	4	6	73	61	-73	-11	7	6	40	14	-40
2	15	5	71	-40	-71	-14	1	6	196	-191	20	-14	3	6	130	89	32	-14	5	6	42	-8	-42	-10	7	6	70	-107	-70
3	15	5	93	51	-49	-13	1	6	41	33	-41	-13	3	6	77	77	-77	-13	5	6	42	25	-42	-9	7	6	181	-186	17
4	15	5	87	-79	-70	-12	1	6	93	89	-40	-12	3	6	86	-115	-55	-12	5	6	87	86	-54	-8	7	6	62	3	-62
5	15	5	43	-10	-43	-11	1	6	292	-298	12	-11	3	6	37	-37	-37	-11	5	6	338	-333	12	-7	7	6	48	43	-48
6	15	5	103	-117	-49	-10	1	6	503	504	9	-10	3	6	84	-82	-44	-10	5	6	35	-14	-35	-6	7	6	104	96	23
7	15	5	43	-40	-43	-9	1	6	613	-618	8	-9	3	6	257	254	12	-9	5	6	230	-229	13	-5	7	6	31	33	-31
-6	16	5	325	-310	13	-8	1	6	705	715	8	-8	3	6	572	-579	7	-8	5	6	34	35	-34	-4	7	6	92	91	-25
-5	16	5	284	-282	15	-7	1	6	1097	-1105	10	-7	3	6	523	523	7	-7	5	6	272	-274	10	-3	7	6	86	70	-26
-4	16	5	432	-433	12	-6	1	6	709	723	7	-6	3	6	929	-948	9	-6	5	6	51	1	-51	-2	7	6	544	508	6
-3	16	5	305	-289	14	-5	1	6	1190	-1191	10	-5	3	6	571	562	7	-5	5	6	477	-475	7	-1	7	6	50	-74	-50
-2	16	5	462	-464	11	-4	1	6	485	493	6	-4	3	6	1046	-1024	9	-4	5	6	748	-698	7	0	7	6	210	228	8
-1	16	5	274	-288	15	-3	1	6	519	-518	6	-3	3	6	117	-110	13	-3	5	6	170	-177	11	1	7	6	32	1	-32
0	16	5	393	-407	8	-2	1	6	993	987	8	-2	3	6	542	-538	6	-2	5	6	160	-175	12	2	7	6	77	-84	-38
1	16	5	357	-347	13	-1	1	6	218	215	7	-1	3	6	492	-501	6	-1	5	6	667	-664	7	3	7	6	49	-18	-49
2	16	5	188	-178	22	0	1	6	867	-859	8	0	3	6	345	-329	5	0	5	6	246	-257	6	4	7	6	110	-92	26
3	16	5	520	-528	11	1	1	6	101	-73	19	1	3	6	605	-615	7	1	5	6	379	-366	7	5	7	6	174	194	18
4	16	5	154	-134	26	2	1	6	959	-949	9	2	3	6	101	-111	20	2	5	6	337	-340	8	6	7	6	38	-5	-38
5	16	5	492	-485	11	3	1	6	647	637	7	3	3	6	730	-767	8	3	5	6	33	37	-33	7	7	6	39	-49	-39
-5	17	5	92	-76	-55	4	1	6	1188	-1193	10	4	3	6	462	442	7	4	5	6	711	-713	8	8	7	6	39	9	-39
-4	17	5	83	73	-83	5	1	6	577	582	7	5	3	6	1053	-1056	9	5	5	6	174	178	15	9	7	6	138	139	25
-3	17	5	229	-244	18	6	1	6	997	-1031	10	6	3	6	34	-4	-34	6	5	6	610	-624	8	10	7	6	41	54	-41
-2	17	5	88	92	-63	7	1	6	498	487	8	7	3	6	859	-890	9	7	5	6	134	-138	24	11	7	6	116	83	-39
-1	17	5	283	-296	15	8	1	6	666	-654	8	8	3	6	203	-199	15	8	5	6	312	-324	12	12	7	6	96	110	-59
0	17	5	247	245	13	9	1	6	39	60	-39	9	3	6	598	-612	9	9	5	6	98	-84	-40	-13	8	6	201	-185	20
1	17	5	241	-247	19	10	1	6	372	-393	11	10	3	6	57	32	-57	10	5	6	186	-187	18	-12	8	6	42	-31	-42
2	17	5	231	222	18	11	1	6	41	11	-41	11	3	6	284	-288	15	11	5	6	131	-156	31	-11	8	6	364	-365	12
3	17	5	90	-113	-73	12	1	6	43	-10	-43	12	3	6	295	-306	15	12	5	6	150	-133	28	-10	8	6	38	-28	-38
4	17	5	66	57	-66	13	1	6	158	-160	26	13	3	6	103	-100	-49	-13	6	6	322	-339	14	-9	8	6	299	-293	11
-14	0	6	41	62	-41	-14	2	6	384	394	12	-14	4	6	311	-317	14	-12	6	6	636	-650	10	-8	8	6	88	-92	-40
-13	0	6	796	790	9	-13	2	6	95	-83	-43	-13	4	6	41	26	-41	-11	6	6	575	-570	9	-7	8	6	227	-239	13
-12	0	6	37	-21	-37	-12	2	6	645	630	9	-12	4	6	586	-577	10	-10	6	6	469	-478	10	-6	8	6	343	-342	10
-11	0	6	733	732	9	-11	2	6	101	-114	-33	-11	4	6	240	-238	14	-9	6	6	655	-646	8	-5	8	6	250	-247	11
-10	0	6	160	133	18	-10	2	6	582	605	8	-10	4	6	467	-460	9	-8	6	6	695	-693	8	-4	8	6	344	-342	9

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-3	8	6	251	-244	10	4	10	6	351	370	11	-4	13	6	287	-293	12	4	16	6	179	-196	23	4	2	7	876	873	8
-2	8	6	903	-913	9	5	10	6	190	184	17	-3	13	6	185	192	18	5	16	6	143	-130	29	5	2	7	476	-459	8
-1	8	6	95	-94	24	6	10	6	40	55	-40	-2	13	6	245	-255	14	-4	17	6	181	-176	23	6	2	7	759	761	8
0	8	6	675	-680	17	7	10	6	208	222	18	-1	13	6	89	115	-47	-3	17	6	118	130	-38	7	2	7	203	-198	16
1	8	6	82	89	-36	8	10	6	62	71	-62	0	13	6	39	-38	-27	-2	17	6	63	-22	-63	8	2	7	235	244	15
2	8	6	254	-272	11	9	10	6	337	337	13	-1	13	6	224	-233	16	-1	17	6	132	-139	-33	9	2	7	39	-22	-39
3	8	6	107	-111	-28	10	10	6	43	-59	-43	2	13	6	86	57	-55	0	17	6	121	117	26	10	2	7	190	197	19
4	8	6	483	-448	8	11	10	6	295	307	16	3	13	6	447	-451	10	1	17	6	137	-121	31	11	2	7	41	20	-41
5	8	6	109	-135	-34	-11	11	6	189	-173	21	4	13	6	207	205	18	2	17	6	106	95	-45	12	2	7	43	59	-43
6	8	6	626	-635	8	-10	11	6	172	137	23	5	13	6	480	-478	10	3	17	6	215	-193	19	13	2	7	63	60	-63
7	8	6	39	-38	-39	-9	11	6	396	-410	11	6	13	6	324	331	14	-14	1	7	225	223	19	-14	3	7	170	-178	24
8	8	6	119	-116	-31	-8	11	6	376	377	11	7	13	6	475	-458	11	-13	1	7	204	222	20	-13	3	7	178	187	21
9	8	6	207	-188	18	-7	11	6	383	-382	10	8	13	6	45	53	-45	-12	1	7	182	179	19	-12	3	7	303	-302	13
10	8	6	90	87	-63	-6	11	6	493	491	9	-9	14	6	304	305	15	-11	1	7	150	156	21	-11	3	7	209	198	17
11	8	6	236	-222	18	-5	11	6	229	-227	14	-8	14	6	41	38	-41	-10	1	7	417	418	10	-10	3	7	75	-67	-63
12	8	6	44	33	-44	-4	11	6	493	501	9	-7	14	6	196	191	19	-9	1	7	389	404	10	-9	3	7	433	426	9
-12	9	6	42	10	-42	-3	11	6	395	-403	9	-6	14	6	190	154	20	-8	1	7	754	757	9	-8	3	7	214	-211	14
-11	9	6	133	142	29	-2	11	6	344	349	10	-5	14	6	169	181	20	-7	1	7	303	294	9	-7	3	7	95	101	-28
-10	9	6	218	-212	16	-1	11	6	36	32	-36	-4	14	6	377	378	11	-6	1	7	542	555	7	-6	3	7	101	-71	22
-9	9	6	236	240	15	0	11	6	37	28	-26	-3	14	6	316	-333	12	-5	1	7	940	938	9	-5	3	7	532	-520	7
-8	9	6	276	-278	12	1	11	6	371	366	11	-2	14	6	694	704	9	-4	1	7	271	294	8	-4	3	7	80	111	-24
-7	9	6	432	429	9	2	11	6	38	-21	-38	-1	14	6	228	-236	15	-3	1	7	1314	1295	10	-3	3	7	239	-260	8
-6	9	6	167	-182	17	3	11	6	501	510	9	0	14	6	587	583	7	-2	1	7	890	884	8	-2	3	7	675	689	7
-5	9	6	360	364	9	4	11	6	37	55	-37	1	14	6	204	-188	18	-1	1	7	1357	1367	10	-1	3	7	348	-364	6
-4	9	6	83	-75	-35	5	11	6	431	437	10	2	14	6	480	490	10	0	1	7	841	851	7	0	3	7	679	684	14
-3	9	6	609	613	8	6	11	6	235	-219	15	3	14	6	40	-30	-40	1	1	7	1086	1077	9	1	3	7	678	-682	7
-2	9	6	374	375	8	7	11	6	451	444	11	4	14	6	314	315	14	2	1	7	614	635	7	2	3	7	1017	993	9
-1	9	6	394	399	8	8	11	6	206	-223	20	5	14	6	90	56	-58	3	1	7	1102	1088	10	3	3	7	422	-435	7
0	9	6	285	293	7	9	11	6	350	333	13	6	14	6	126	114	-37	4	1	7	763	749	8	4	3	7	437	434	8
1	9	6	35	14	-35	10	11	6	43	0	-43	7	14	6	211	215	20	5	1	7	69	106	-50	5	3	7	169	170	16
2	9	6	614	608	8	-10	12	6	573	564	10	8	14	6	45	-40	-45	6	1	7	497	507	8	6	3	7	74	9	-62
3	9	6	80	87	-51	-9	12	6	225	229	19	-8	15	6	65	83	-65	7	1	7	500	513	9	7	3	7	247	252	13
4	9	6	587	584	8	-8	12	6	610	623	10	-7	15	6	232	-213	17	8	1	7	531	534	9	8	3	7	212	-211	17
5	9	6	68	89	-68	-7	12	6	421	425	11	-6	15	6	207	204	19	9	1	7	396	421	11	9	3	7	303	291	12
6	9	6	884	892	10	-6	12	6	446	445	10	-5	15	6	311	-308	13	10	1	7	508	530	10	10	3	7	152	-127	24
7	9	6	130	-128	28	-5	12	6	559	568	9	-4	15	6	92	-78	-48	11	1	7	145	147	27	11	3	7	229	220	18
8	9	6	452	456	10	-4	12	6	248	252	13	-3	15	6	354	-366	12	12	1	7	271	288	17	12	3	7	220	-203	19
9	9	6	42	-13	-42	-3	12	6	984	979	10	-2	15	6	73	-88	-73	13	1	7	43	-34	-43	-14	4	7	251	247	17
10	9	6	288	273	15	-2	12	6	139	138	21	-1	15	6	204	-193	18	-14	2	7	299	294	14	-13	4	7	332	326	13
11	9	6	169	158	25	-1	12	6	1248	1259	12	0	15	6	244	-258	12	-13	2	7	242	245	16	-12	4	7	359	353	12
-12	10	6	42	0	-42	0	12	6	182	185	12	1	15	6	42	55	-42	-12	2	7	190	192	20	-11	4	7	243	246	15
-11	10	6	496	504	11	1	12	6	1229	1223	11	2	15	6	343	-331	13	-11	2	7	474	467	10	-10	4	7	622	616	8
-10	10	6	40	-29	-40	2	12	6	304	309	12	3	15	6	138	133	30	-10	2	7	532	541	9	-9	4	7	266	259	12
-9	10	6	386	386	11	3	12	6	653	627	9	4	15	6	458	-451	11	-9	2	7	755	744	8	-8	4	7	910	925	9
-8	10	6	96	86	-35	4	12	6	249	248	14	5	15	6	97	88	-50	-8	2	7	199	211	13	-7	4	7	119	-110	21
-7	10	6	304	305	12	5	12	6	426	428	10	6	15	6	383	-370	13	-7	2	7	1164	1170	11	-6	4	7	1300	1296	11
-6	10	6	354	351	10	6	12	6	403	422	11	-6	16	6	209	-214	20	-6	2	7	64	36	-42	-5	4	7	183	-175	11
-5	10	6	207	199	14	7	12	6	324	321	14	-5	16	6	42	-43	-42	-5	2	7	1071	1081	9	-4	4	7	1131	1123	10
-4	10	6	771	776	8	8	12	6	578	576	10	-4	16	6	302	-308	14	-4	2	7	117	-88	15	-3	4	7	28	-18	-28
-3	10	6	34	13	-34	9	12	6	43	37	-43	-3	16	6	76	-70	-76	-3	2	7	1575	1557	13	-2	4	7	549	568	6
-2	10	6	867	863	9	-10	13	6	214	-213	19	-2	16	6	402	-407	12	-2	2	7	674	696	6	-1	4	7	363	366	6
-1	10	6	293	-289	10	-9	13	6	273	248	15	-1	16	6	73	11	-73	-1	2	7	1161	1131	10	0	4	7	159	173	9
0	10	6	900	900	17	-8	13	6	374	-372	12	0	16	6	449	-451	9	0	2	7	817	801	8	1	4	7	518	541	7
1	10	6	36	27	-36	-7	13	6	314	304	12	1	16	6	126	148	-34	1	2	7	564	560	7	2	4	7	224	183	11
2	10	6	692	693	9	-6	13	6	440	-423	10	2	16	6	305	-282	14	2	2	7	939	925	9	3	4	7	1330	1344	12
3	10	6	294	299	12	-5	13	6	215	200	15	3	16	6	44	-53	-44	3	2	7	77	-44	-33	4	4	7	442	-437	8

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
5	4	7	899	910	9	9	6	7	105	-86	-35	-10	9	7	259	247	15	0	11	7	749	743	7	-1	14	7	225	219	16
6	4	7	406	-405	9	10	6	7	137	135	28	-9	9	7	126	-122	27	1	11	7	438	439	9	0	14	7	340	348	9
7	4	7	482	480	9	11	6	7	100	-108	-48	-8	9	7	99	105	-35	2	11	7	451	449	9	1	14	7	162	158	23
8	4	7	185	-191	18	12	6	7	89	-14	-81	-7	9	7	103	-86	-30	3	11	7	299	286	12	2	14	7	212	215	19
9	4	7	218	216	16	-13	7	7	91	89	-59	-6	9	7	97	-100	-30	4	11	7	277	274	13	3	14	7	168	172	23
10	4	7	63	78	-63	-12	7	7	505	-513	11	-5	9	7	167	164	17	5	11	7	230	233	16	4	14	7	43	36	-43
11	4	7	42	63	-42	-11	7	7	40	-66	-40	-4	9	7	331	-339	9	6	11	7	317	344	13	5	14	7	204	209	20
12	4	7	72	-14	-72	-10	7	7	528	-532	9	-3	9	7	243	255	11	7	11	7	424	437	12	6	14	7	78	43	-78
-13	5	7	635	-647	10	-9	7	7	37	76	-37	-2	9	7	516	-526	7	8	11	7	195	208	22	7	14	7	119	109	-39
-12	5	7	40	19	-40	-8	7	7	606	-610	8	-1	9	7	480	492	7	9	11	7	399	402	13	-7	15	7	42	-109	-42
-11	5	7	633	-632	9	-7	7	7	363	-355	9	0	9	7	720	-731	6	10	11	7	123	90	-39	-6	15	7	41	5	-41
-10	5	7	266	-271	13	-6	7	7	269	-276	11	1	9	7	440	423	8	-10	12	7	170	139	23	-5	15	7	97	-107	-46
-9	5	7	616	-617	8	-5	7	7	615	-640	7	2	9	7	522	-513	8	-9	12	7	114	-139	-37	-4	15	7	106	-102	-36
-8	5	7	179	-182	16	-4	7	7	52	-56	-52	3	9	7	366	382	10	-8	12	7	88	94	-50	-3	15	7	126	123	29
-7	5	7	485	-486	8	-3	7	7	1594	-1615	12	4	9	7	230	-244	15	-7	12	7	38	25	-38	-2	15	7	322	-337	13
-6	5	7	689	-702	8	-2	7	7	332	333	8	5	9	7	333	-349	12	-6	12	7	90	86	-44	-1	15	7	160	147	23
-5	5	7	580	-555	7	-1	7	7	1643	-1651	15	6	9	7	243	249	15	-5	12	7	37	-30	-37	0	15	7	158	-157	18
-4	5	7	1385	-1379	12	0	7	7	302	304	7	7	9	7	247	-281	16	-4	12	7	101	-115	-32	1	15	7	117	118	-34
-3	5	7	116	139	17	1	7	7	1126	-1138	10	8	9	7	175	188	23	-3	12	7	240	257	12	2	15	7	235	-239	17
-2	5	7	1853	-1839	13	2	7	7	199	195	13	9	9	7	239	-241	17	-2	12	7	37	-38	-37	3	15	7	42	52	-42
-1	5	7	340	345	7	3	7	7	1121	-1129	10	10	9	7	173	179	23	-1	12	7	105	99	-31	4	15	7	66	-80	-66
0	5	7	1389	-1413	25	4	7	7	335	-336	10	11	9	7	208	-207	23	0	12	7	96	-89	-32	5	15	7	65	57	-65
1	5	7	32	26	-32	5	7	7	561	-545	8	-12	10	7	300	-285	15	1	12	7	172	196	22	6	15	7	42	-11	-42
2	5	7	1245	-1252	10	6	7	7	548	-544	9	-11	10	7	40	-10	-40	2	12	7	39	-29	-39	-6	16	7	71	69	-71
3	5	7	68	45	-59	7	7	7	329	-331	12	-10	10	7	489	-492	11	3	12	7	108	94	-33	-5	16	7	299	290	14
4	5	7	963	-951	10	8	7	7	552	-561	9	-9	10	7	90	-101	-50	4	12	7	38	4	-38	-4	16	7	93	70	-46
5	5	7	670	-657	8	9	7	7	40	23	-40	-8	10	7	572	-566	9	5	12	7	171	156	21	-3	16	7	189	206	22
6	5	7	288	-303	12	10	7	7	584	-564	10	-7	10	7	36	-3	-36	6	12	7	42	-18	-42	-2	16	7	64	55	-64
7	5	7	688	-697	9	11	7	7	44	-69	-44	-6	10	7	634	-641	8	7	12	7	43	-31	-43	-1	16	7	216	229	19
8	5	7	139	-133	25	12	7	7	461	-464	12	-5	10	7	36	-45	-36	8	12	7	82	-32	-82	0	16	7	107	128	-30
9	5	7	570	-556	9	-12	8	7	125	-110	-35	-4	10	7	694	-686	8	9	12	7	45	-4	-45	1	16	7	209	183	19
10	5	7	93	-83	-49	-11	8	7	541	-551	10	-3	10	7	166	-171	16	-9	13	7	290	283	14	2	16	7	251	241	17
11	5	7	552	-548	11	-10	8	7	39	22	-39	-2	10	7	413	-414	9	-8	13	7	85	107	-62	3	16	7	43	50	-43
12	5	7	43	-60	-43	-9	8	7	641	-643	9	-1	10	7	455	-464	8	-7	13	7	377	368	12	4	16	7	264	275	17
-13	6	7	41	-37	-41	-8	8	7	80	101	-46	0	10	7	420	-421	6	-6	13	7	154	160	23	-3	17	7	330	-325	13
-12	6	7	63	-52	-63	-7	8	7	963	-954	9	1	10	7	487	-470	9	-5	13	7	358	360	11	-2	17	7	40	24	-40
-11	6	7	154	133	23	-6	8	7	189	176	14	2	10	7	54	62	-54	-4	13	7	72	72	-72	-1	17	7	512	-513	11
-10	6	7	349	-356	11	-5	8	7	1045	-1059	10	3	10	7	474	-468	9	-3	13	7	359	371	11	0	17	7	73	81	-47
-9	6	7	285	289	12	-4	8	7	179	-175	13	4	10	7	156	188	22	-2	13	7	253	257	13	1	17	7	432	-438	12
-8	6	7	497	-481	8	-3	8	7	758	-765	8	5	10	7	99	-61	-39	-1	13	7	331	343	12	2	17	7	44	12	-44
-7	6	7	680	698	8	-2	8	7	358	-357	8	6	10	7	141	156	27	0	13	7	513	517	14	-14	0	8	513	-480	11
-6	6	7	900	-901	9	-1	8	7	371	-370	8	7	10	7	372	-363	12	1	13	7	298	299	13	-13	0	8	304	321	14
-5	6	7	449	472	7	0	8	7	574	-576	7	8	10	7	143	151	29	2	13	7	353	359	11	-12	0	8	608	-627	10
-4	6	7	653	-651	7	1	8	7	383	-393	9	9	10	7	194	-190	22	3	13	7	222	205	16	-11	0	8	38	60	-38
-3	6	7	253	267	9	2	8	7	841	-829	9	10	10	7	94	98	-67	4	13	7	232	230	17	-10	0	8	291	-294	12
-2	6	7	522	-517	6	3	8	7	168	173	18	-11	11	7	222	224	18	5	13	7	297	303	14	-9	0	8	109	96	-29
-1	6	7	364	-359	7	4	8	7	894	-900	9	-10	11	7	87	109	-66	6	13	7	236	222	17	-8	0	8	433	-419	9
0	6	7	69	-66	-25	5	8	7	352	358	11	-9	11	7	283	289	15	7	13	7	346	382	14	-7	0	8	520	-535	8
1	6	7	283	-264	9	6	8	7	856	-860	10	-8	11	7	274	284	14	8	13	7	296	292	16	-6	0	8	196	-177	11
2	6	7	313	322	9	7	8	7	434	424	10	-7	11	7	161	166	21	-8	14	7	310	288	14	-5	0	8	307	-317	8
3	6	7	835	-832	8	8	8	7	399	-410	11	-6	11	7	437	425	9	-7	14	7	167	160	23	-4	0	8	681	688	7
4	6	7	554	557	8	9	8	7	74	73	-74	-5	11	7	283	293	12	-6	14	7	431	424	11	-3	0	8	924	-958	8
5	6	7	720	-700	8	10	8	7	261	-246	16	-4	11	7	518	515	9	-5	14	7	84	71	-53	-2	0	8	832	838	8
6	6	7	479	479	9	11	8	7	43	-5	-43	-3	11	7	158	162	18	-4	14	7	131	129	26	-1	0	8	802	-821	7
7	6	7	537	-542	9	-12	9	7	227	223	18	-2	11	7	753	753	9	-3	14	7	110	96	-33	0	0	8	460	480	16
8	6	7	228	217	16	-11	9	7	100	-90	-42	-1	11	7	199	223	15	-2	14	7	306	308	12	1	0	8	435	-474	7

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
2	0	8	914	910	9	4	2	8	335	-320	9	7	4	8	208	224	17	11	6	8	104	-132	-47	-6	9	8	762	-766	8
3	0	8	197	-200	13	5	2	8	224	224	13	8	4	8	246	-244	15	-13	7	8	129	-121	32	-5	9	8	394	-388	9
4	0	8	344	349	9	6	2	8	226	227	14	9	4	8	184	181	21	-12	7	8	297	-299	15	-4	9	8	860	-866	8
5	0	8	89	-80	-35	7	2	8	91	56	-43	10	4	8	230	-236	17	-11	7	8	105	-93	-39	-3	9	8	419	-429	9
6	0	8	37	-9	-37	8	2	8	623	618	9	11	4	8	111	116	-42	-10	7	8	372	-379	11	-2	9	8	839	-857	9
7	0	8	237	236	14	9	2	8	192	-199	19	12	4	8	213	-218	21	-9	7	8	331	-353	11	-1	9	8	548	-545	7
8	0	8	92	-92	-46	10	2	8	361	355	12	-13	5	8	126	88	31	-8	7	8	226	-231	14	0	9	8	734	-711	10
9	0	8	559	556	9	11	2	8	227	-249	19	-12	5	8	227	226	17	-7	7	8	347	-352	10	1	9	8	662	-676	9
10	0	8	73	-30	-73	12	2	8	246	248	19	-11	5	8	39	40	-39	-6	7	8	310	-293	10	2	9	8	415	-411	9
11	0	8	403	399	13	-14	3	8	397	407	12	-10	5	8	432	431	10	-5	7	8	358	-357	9	3	9	8	804	-799	9
12	0	8	339	-355	14	-13	3	8	295	274	14	-9	5	8	90	88	-38	-4	7	8	316	-313	9	4	9	8	316	-313	11
-14	1	8	138	146	30	-12	3	8	358	379	13	-8	5	8	520	500	8	-3	7	8	640	-643	7	5	9	8	657	-642	9
-13	1	8	164	163	22	-11	3	8	628	620	9	-7	5	8	275	272	10	-2	7	8	31	1	-31	6	9	8	134	-150	29
-12	1	8	297	287	13	-10	3	8	652	672	9	-6	5	8	602	617	8	-1	7	8	682	-684	7	7	9	8	654	-646	9
-11	1	8	90	-134	-47	-9	3	8	1031	1029	10	-5	5	8	49	37	-49	0	7	8	166	-188	13	8	9	8	77	-70	-77
-10	1	8	824	828	9	-8	3	8	178	191	16	-4	5	8	779	790	8	1	7	8	223	-238	13	9	9	8	470	-431	11
-9	1	8	37	-2	-37	-7	3	8	1564	1584	14	-3	5	8	404	412	7	2	7	8	497	-504	8	10	9	8	206	-202	20
-8	1	8	1134	1134	10	-6	3	8	546	551	7	-2	5	8	252	270	9	3	7	8	232	-247	13	-11	10	8	157	178	25
-7	1	8	151	-159	17	-5	3	8	1368	1356	11	-1	5	8	332	346	7	4	7	8	336	-349	11	-10	10	8	224	-204	18
-6	1	8	1196	1209	10	-4	3	8	560	564	7	0	5	8	408	391	9	5	7	8	296	-315	12	-9	10	8	166	184	23
-5	1	8	167	-151	13	-3	3	8	1553	1574	13	1	5	8	753	754	8	6	7	8	345	-338	12	-8	10	8	185	-191	20
-4	1	8	1473	1479	12	-2	3	8	1383	1377	11	2	5	8	416	400	8	7	7	8	132	-123	28	-7	10	8	165	-174	20
-3	1	8	336	-346	7	-1	3	8	852	854	8	3	5	8	667	667	8	8	7	8	257	-272	15	-6	10	8	67	-33	-67
-2	1	8	877	858	8	0	3	8	1178	1180	7	4	5	8	35	59	-35	9	7	8	41	-86	-41	-5	10	8	346	-361	10
-1	1	8	1098	1116	10	1	3	8	817	815	8	5	5	8	647	642	8	10	7	8	177	-188	23	-4	10	8	57	-59	-57
0	1	8	773	764	5	2	3	8	1321	1349	12	6	5	8	198	192	17	11	7	8	150	-157	29	-3	10	8	312	-319	10
1	1	8	1132	1145	10	3	3	8	435	431	8	7	5	8	379	373	11	-12	8	8	266	259	16	-2	10	8	324	310	10
2	1	8	133	115	18	4	3	8	1334	1358	11	8	5	8	172	176	21	-11	8	8	41	-5	-41	-1	10	8	312	-313	10
3	1	8	1146	1184	10	5	3	8	324	314	10	9	5	8	289	295	14	-10	8	8	307	324	13	0	10	8	409	417	7
4	1	8	364	-369	9	6	3	8	1066	1075	10	10	5	8	205	207	19	-9	8	8	38	36	-38	1	10	8	565	-585	8
5	1	8	982	996	9	7	3	8	178	174	18	11	5	8	168	167	25	-8	8	8	118	110	27	2	10	8	255	268	14
6	1	8	482	-471	9	8	3	8	765	758	9	12	5	8	116	108	-42	-7	8	8	146	153	21	3	10	8	322	-338	12
7	1	8	965	965	10	9	3	8	243	242	16	-13	6	8	111	77	-41	-6	8	8	36	-22	-36	4	10	8	38	-65	-38
8	1	8	166	-182	21	10	3	8	459	433	11	-12	6	8	71	54	-71	-5	8	8	80	86	-41	5	10	8	79	-67	-70
9	1	8	551	545	9	11	3	8	283	294	16	-11	6	8	209	198	17	-4	8	8	88	75	-29	6	10	8	147	137	25
10	1	8	109	97	-36	12	3	8	227	199	19	-10	6	8	65	77	-65	-3	8	8	50	27	-50	7	10	8	200	195	21
11	1	8	168	189	25	-13	4	8	144	113	26	-9	6	8	80	86	-48	-2	8	8	513	-512	7	8	10	8	137	-103	30
12	1	8	162	167	27	-12	4	8	240	-235	16	-8	6	8	302	320	11	-1	8	8	374	378	8	9	10	8	124	124	-38
-14	2	8	106	105	-44	-11	4	8	216	218	15	-7	6	8	182	176	16	0	8	8	519	-516	5	10	10	8	109	-104	-46
-13	2	8	442	-442	11	-10	4	8	127	122	26	-6	6	8	99	111	-28	1	8	8	204	217	15	-11	11	8	218	-212	19
-12	2	8	329	336	13	-9	4	8	295	288	11	-5	6	8	263	256	10	2	8	8	405	-405	9	-10	11	8	114	98	-37
-11	2	8	465	-492	10	-8	4	8	53	44	-53	-4	6	8	78	65	-32	3	8	8	37	32	-37	-9	11	8	484	-479	10
-10	2	8	447	472	10	-7	4	8	178	167	15	-3	6	8	385	379	7	4	8	8	144	-151	24	-8	11	8	231	232	15
-9	2	8	59	69	-59	-6	4	8	153	161	16	-2	6	8	57	-46	-57	5	8	8	74	83	-74	-7	11	8	622	-627	9
-8	2	8	34	16	-34	-5	4	8	188	-173	11	-1	6	8	356	359	8	6	8	8	304	-319	13	-6	11	8	171	163	19
-7	2	8	34	-11	-34	-4	4	8	330	344	8	0	6	8	30	-37	-22	7	8	8	40	9	-40	-5	11	8	584	-581	8
-6	2	8	385	-376	7	-3	4	8	422	-424	7	1	6	8	107	119	24	8	8	8	41	-47	-41	-4	11	8	150	141	19
-5	2	8	54	74	-54	-2	4	8	791	807	8	2	6	8	34	8	-34	9	8	8	227	-236	18	-3	11	8	401	-400	9
-4	2	8	705	-709	7	-1	4	8	504	-507	6	3	6	8	50	-20	-50	10	8	8	43	60	-43	-2	11	8	35	5	-35
-3	2	8	861	868	8	0	4	8	703	698	12	4	6	8	290	-289	11	11	8	8	213	-189	21	-1	11	8	143	-143	20
-2	2	8	243	-266	8	1	4	8	464	-474	7	5	6	8	151	-153	22	-12	9	8	302	-291	14	0	11	8	519	-542	6
-1	2	8	1135	1130	10	2	4	8	515	509	7	6	6	8	90	-31	-46	-11	9	8	343	-332	13	1	11	8	171	-182	21
0	2	8	957	-962	12	3	4	8	202	-200	13	7	6	8	255	-268	14	-10	9	8	620	-627	9	2	11	8	514	-504	9
1	2	8	804	805	8	4	4	8	74	67	-57	8	6	8	79	-38	-79	-9	9	8	104	-121	-36	3	11	8	69	65	-69
2	2	8	449	-453	7	5	4	8	69	31	-69	9	6	8	97	-112	-44	-8	9	8	694	-707	9	4	11	8	319	-299	12
3	2	8	748	751	8	6	4	8	38	-33	-38	10	6	8	200	-198	20	-7	9	8	237	-242	14	5	11	8	146	174	25

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
6	11	8	415	-400	11	-6	15	8	552	539	10	-6	2	9	184	-190	13	-2	4	9	630	637	7	4	6	9	417	414	10
7	11	8	164	169	25	-5	15	8	78	35	-78	-5	2	9	761	768	8	-1	4	9	418	424	7	5	6	9	602	-602	8
8	11	8	534	-538	11	-4	15	8	444	423	11	-4	2	9	46	40	-46	0	4	9	246	249	9	6	6	9	489	469	9
9	11	8	126	153	-38	-3	15	8	104	121	-40	-3	2	9	874	865	8	1	4	9	882	867	9	7	6	9	330	-325	12
-10	12	8	88	93	-63	-2	15	8	327	341	13	-2	2	9	88	-61	-23	2	4	9	214	-215	13	8	6	9	211	205	18
-9	12	8	325	-314	14	-1	15	8	332	319	13	-1	2	9	920	908	8	3	4	9	755	764	8	9	6	9	170	-157	23
-8	12	8	102	-91	-43	0	15	8	229	241	13	0	2	9	1025	1020	16	4	4	9	115	-129	28	10	6	9	174	162	24
-7	12	8	121	-112	30	1	15	8	422	426	12	1	2	9	216	222	12	5	4	9	965	967	10	11	6	9	44	-21	-44
-6	12	8	105	-105	-35	2	15	8	90	56	-55	2	2	9	995	1002	9	6	4	9	39	41	-39	-12	7	9	89	91	-54
-5	12	8	37	-7	-37	3	15	8	538	519	11	3	2	9	192	197	14	7	4	9	603	598	9	-11	7	9	726	723	9
-4	12	8	251	-237	12	4	15	8	71	88	-71	4	2	9	816	831	9	8	4	9	77	47	-77	-10	7	9	161	158	22
-3	12	8	129	139	23	5	15	8	459	431	12	5	2	9	63	63	-63	9	4	9	462	461	11	-9	7	9	635	639	9
-2	12	8	348	-359	10	-5	16	8	158	175	25	6	2	9	685	677	8	10	4	9	125	121	-31	-8	7	9	412	406	10
-1	12	8	563	565	8	-4	16	8	138	-132	29	7	2	9	40	-45	-40	11	4	9	289	275	16	-7	7	9	516	513	8
0	12	8	432	-435	8	-3	16	8	190	181	21	8	2	9	531	531	10	-13	5	9	40	26	-40	-6	7	9	651	646	8
1	12	8	505	506	10	-2	16	8	174	-162	22	9	2	9	208	216	18	-12	5	9	580	571	10	-5	7	9	302	303	10
2	12	8	289	-279	13	-1	16	8	224	227	18	10	2	9	281	284	15	-11	5	9	39	45	-39	-4	7	9	1153	1158	11
3	12	8	191	192	20	0	16	8	211	-215	13	11	2	9	179	203	23	-10	5	9	623	610	9	-3	7	9	96	91	-25
4	12	8	40	-25	-40	1	16	8	154	152	27	12	2	9	173	201	27	-9	5	9	421	425	10	-2	7	9	1358	1373	11
5	12	8	77	77	-77	2	16	8	164	-149	25	-13	3	9	107	112	-40	-8	5	9	565	558	8	-1	7	9	298	-297	9
6	12	8	122	156	-34	3	16	8	43	30	-43	-12	3	9	345	-353	12	-7	5	9	400	385	9	0	7	9	1071	1060	22
7	12	8	44	-44	-44	-1	17	8	77	48	-77	-11	3	9	361	362	12	-6	5	9	380	389	9	1	7	9	130	-123	23
8	12	8	306	352	16	-14	1	9	336	-308	15	-10	3	9	138	-121	23	-5	5	9	1152	1128	11	2	7	9	980	973	10
-9	13	8	444	436	11	-13	1	9	472	-463	11	-9	3	9	343	345	10	-4	5	9	31	44	-31	3	7	9	54	-55	-54
-8	13	8	41	-38	-41	-12	1	9	335	-318	13	-8	3	9	76	-49	-46	-3	5	9	1208	1242	11	4	7	9	556	551	8
-7	13	8	658	667	9	-11	1	9	534	-526	10	-7	3	9	35	-24	-35	-2	5	9	89	-91	-24	5	7	9	375	372	11
-6	13	8	64	-54	-64	-10	1	9	92	-102	-42	-6	3	9	66	26	-66	-1	5	9	1427	1464	12	6	7	9	231	232	17
-5	13	8	337	330	11	-9	1	9	863	-874	9	-5	3	9	245	-235	10	0	5	9	141	-142	12	7	7	9	323	305	13
-4	13	8	131	-129	23	-8	1	9	741	-734	9	-4	3	9	177	178	12	1	5	9	1025	1024	9	8	7	9	88	-126	-60
-3	13	8	372	372	11	-7	1	9	1050	-1060	10	-3	3	9	690	-714	7	2	5	9	60	15	-60	9	7	9	439	440	12
-2	13	8	141	152	23	-6	1	9	979	-991	9	-2	3	9	628	641	7	3	5	9	903	907	10	10	7	9	74	-124	-74
-1	13	8	225	238	15	-5	1	9	864	-854	9	-1	3	9	842	-851	8	4	5	9	264	264	13	11	7	9	337	322	15
0	13	8	213	221	15	-4	1	9	911	-913	9	0	3	9	378	397	5	5	5	9	360	364	11	-12	8	9	41	-15	-41
1	13	8	118	133	-34	-3	1	9	355	-375	7	1	3	9	706	-702	8	6	5	9	426	412	10	-11	8	9	364	-366	13
2	13	8	510	511	10	-2	1	9	929	-958	8	2	3	9	267	265	11	7	5	9	214	202	17	-10	8	9	206	200	18
3	13	8	257	-267	15	-1	1	9	1199	-1178	10	3	3	9	365	-368	9	8	5	9	486	495	10	-9	8	9	442	-439	10
4	13	8	422	409	11	0	1	9	1016	-1006	23	4	3	9	122	-106	25	9	5	9	40	-53	-40	-8	8	9	240	233	14
5	13	8	198	-179	20	1	1	9	833	-819	8	5	3	9	37	-6	-37	10	5	9	380	376	12	-7	8	9	610	-592	8
6	13	8	332	307	13	2	1	9	910	-895	8	6	3	9	56	12	-56	11	5	9	103	-81	-46	-6	8	9	395	401	9
7	13	8	147	-145	28	3	1	9	614	-610	8	7	3	9	352	370	12	-13	6	9	88	-60	-51	-5	8	9	610	-605	8
-8	14	8	115	-116	-38	4	1	9	771	-768	9	8	3	9	41	-64	-41	-12	6	9	140	-138	27	-4	8	9	244	236	12
-7	14	8	59	-56	-59	5	1	9	551	-549	8	9	3	9	197	204	19	-11	6	9	167	158	22	-3	8	9	679	-692	8
-6	14	8	41	-9	-41	6	1	9	472	-443	9	10	3	9	162	-158	25	-10	6	9	311	-303	12	-2	8	9	100	-106	-29
-5	14	8	359	-341	12	7	1	9	286	-292	14	11	3	9	114	110	-41	-9	6	9	195	185	16	-1	8	9	376	-373	8
-4	14	8	131	90	26	8	1	9	295	-302	14	12	3	9	128	-140	-37	-8	6	9	508	-497	9	0	8	9	572	-573	6
-3	14	8	380	-370	11	9	1	9	234	-263	18	-13	4	9	74	-48	-74	-7	6	9	707	691	8	1	8	9	37	55	-37
-2	14	8	336	337	12	10	1	9	64	-88	-64	-12	4	9	71	67	-71	-6	6	9	635	-622	8	2	8	9	765	-761	9
-1	14	8	471	-476	10	11	1	9	293	-298	16	-11	4	9	58	52	-58	-5	6	9	623	619	8	3	8	9	38	-81	-38
0	14	8	461	472	12	12	1	9	130	-119	-36	-10	4	9	234	228	14	-4	6	9	526	-523	7	4	8	9	814	-829	9
1	14	8	348	-353	13	-13	2	9	43	1	-43	-9	4	9	37	28	-37	-3	6	9	322	316	9	5	8	9	59	64	-59
2	14	8	178	165	21	-12	2	9	92	85	-47	-8	4	9	503	515	8	-2	6	9	31	15	-31	6	8	9	760	-769	9
3	14	8	287	-292	15	-11	2	9	292	296	14	-7	4	9	330	-317	10	-1	6	9	31	41	-31	7	8	9	40	-80	-40
4	14	8	61	45	-61	-10	2	9	38	-29	-38	-6	4	9	856	854	9	0	6	9	149	147	13	8	8	9	508	-499	10
5	14	8	72	48	-72	-9	2	9	421	420	9	-5	4	9	475	-468	7	1	6	9	333	-332	10	9	8	9	64	-64	-64
6	14	8	75	62	-75	-8	2	9	156	165	19	-4	4	9	844	838	8	2	6	9	485	482	8	10	8	9	249	-276	18
-7	15	8	83	74	-83	-7	2	9	756	769	8	-3	4	9	52	-46	-52	3	6	9	457	-454	9	-11	9	9	102	-107	-44

Cal.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 14

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-10	9	9	232	234	16	4	11	9	173	-169	21	-5	15	9	41	22	-41	1	1	10	219	212	12	7	3	10	445	-443	11
-9	9	9	61	-61	-61	5	11	9	198	-203	20	-4	15	9	69	-66	-69	2	1	10	501	-515	8	8	3	10	174	190	22
-8	9	9	117	122	-30	6	11	9	216	-189	18	-3	15	9	39	16	-39	3	1	10	589	586	8	9	3	10	144	-117	28
-7	9	9	38	-49	-38	7	11	9	43	-62	-43	-2	15	9	126	-119	31	4	1	10	677	-689	9	10	3	10	42	-35	-42
-6	9	9	36	-13	-36	8	11	9	336	-354	15	-1	15	9	188	204	19	5	1	10	697	701	9	11	3	10	44	-15	-44
-5	9	9	85	78	-39	9	11	9	84	31	-84	0	15	9	105	-119	-31	6	1	10	641	-648	9	-13	4	10	253	255	17
-4	9	9	330	-332	10	-9	12	9	40	-34	-40	1	15	9	145	161	27	7	1	10	275	301	14	-12	4	10	41	-49	-41
-3	9	9	321	314	10	-8	12	9	186	181	20	2	15	9	217	-202	19	8	1	10	461	-444	11	-11	4	10	360	352	12
-2	9	9	259	-257	11	-7	12	9	41	64	-41	3	15	9	110	125	-40	9	1	10	141	155	28	-10	4	10	161	136	20
-1	9	9	451	455	8	-6	12	9	74	-75	-74	4	15	9	77	-49	-77	10	1	10	42	-38	-42	-9	4	10	209	204	15
0	9	9	586	-596	6	-5	12	9	59	-43	-59	-4	16	9	42	-65	-42	11	1	10	44	25	-44	-8	4	10	195	177	15
1	9	9	396	398	10	-4	12	9	73	-56	-73	-3	16	9	226	224	18	-13	2	10	377	-389	13	-7	4	10	221	228	14
2	9	9	495	-487	9	-3	12	9	231	246	13	-2	16	9	64	56	-64	-12	2	10	191	197	20	-6	4	10	550	554	8
3	9	9	157	166	23	-2	12	9	36	39	-36	-1	16	9	174	184	24	-11	2	10	404	-421	11	-5	4	10	251	248	11
4	9	9	80	-101	-68	-1	12	9	36	15	-36	0	16	9	125	137	24	-10	2	10	105	110	-34	-4	4	10	761	750	8
5	9	9	40	-56	-40	0	12	9	86	80	-41	1	16	9	150	126	28	-9	2	10	206	-225	15	-3	4	10	69	-66	-43
6	9	9	120	142	-34	1	12	9	41	39	-41	2	16	9	208	211	21	-8	2	10	378	-374	9	-2	4	10	1094	1113	10
7	9	9	182	-189	22	2	12	9	40	-61	-40	-13	0	10	43	-19	-43	-7	2	10	165	-162	17	-1	4	10	89	-70	-27
8	9	9	198	201	20	3	12	9	64	35	-64	-12	0	10	602	-595	10	-6	2	10	450	-451	8	0	4	10	882	897	10
9	9	9	236	-234	19	4	12	9	92	-98	-47	-11	0	10	185	191	20	-5	2	10	247	241	10	1	4	10	100	94	-29
10	9	9	130	138	-36	5	12	9	97	118	-49	-10	0	10	549	-564	9	-4	2	10	523	-538	7	2	4	10	816	813	9
-11	10	9	79	83	-79	6	12	9	90	-106	-59	-9	0	10	255	-240	13	-3	2	10	280	267	9	3	4	10	189	190	17
-10	10	9	261	-237	15	7	12	9	43	-115	-43	-8	0	10	1340	-1365	12	-2	2	10	1300	-1304	10	4	4	10	533	537	9
-9	10	9	197	194	19	8	12	9	44	30	-44	-7	0	10	728	-748	8	-1	2	10	327	330	8	5	4	10	307	306	12
-8	10	9	342	-330	12	-9	13	9	144	-140	30	-6	0	10	326	-337	9	0	2	10	970	-974	8	6	4	10	264	260	14
-7	10	9	162	165	20	-8	13	9	336	-344	14	-5	0	10	1340	-1388	12	1	2	10	73	93	-54	7	4	10	487	487	10
-6	10	9	403	-399	10	-7	13	9	150	-138	27	-4	0	10	105	-127	19	2	2	10	813	-824	8	8	4	10	41	29	-41
-5	10	9	35	30	-35	-6	13	9	448	-432	11	-3	0	10	636	-659	7	3	2	10	54	16	-54	9	4	10	362	370	13
-4	10	9	361	-367	10	-5	13	9	221	-233	17	-2	0	10	276	282	8	4	2	10	713	-723	9	10	4	10	79	-92	-79
-3	10	9	106	99	-27	-4	13	9	344	-344	11	-1	0	10	1350	-1420	11	5	2	10	337	-355	11	11	4	10	230	253	20
-2	10	9	35	21	-35	-3	13	9	117	-132	26	0	0	10	740	-732	6	6	2	10	40	-70	-40	-13	5	10	218	-221	17
-1	10	9	443	-451	8	-2	13	9	269	-266	13	1	0	10	1248	-1253	11	7	2	10	540	-555	10	-12	5	10	223	-223	19
0	10	9	38	15	-27	-1	13	9	235	-219	15	2	0	10	199	-198	15	8	2	10	73	79	-73	-11	5	10	277	-270	14
1	10	9	624	-638	9	0	13	9	119	-103	23	3	0	10	1523	-1524	13	9	2	10	494	-481	11	-10	5	10	86	-80	-48
2	10	9	134	-149	26	1	13	9	316	-307	14	4	0	10	452	-450	9	10	2	10	41	31	-41	-9	5	10	500	-504	9
3	10	9	520	-517	10	2	13	9	249	-227	16	5	0	10	680	-680	8	11	2	10	359	-392	14	-8	5	10	138	-133	20
4	10	9	39	48	-39	3	13	9	251	-248	16	6	0	10	627	-624	9	-13	3	10	368	-367	13	-7	5	10	430	-431	9
5	10	9	479	-479	10	4	13	9	127	-115	-32	7	0	10	415	-414	11	-12	3	10	423	-418	12	-6	5	10	153	-153	18
6	10	9	41	37	-41	5	13	9	187	-170	22	8	0	10	801	-803	9	-11	3	10	89	-99	-54	-5	5	10	661	-649	8
7	10	9	468	-467	11	6	13	9	111	-114	-39	9	0	10	272	-270	15	-10	3	10	651	-650	9	-4	5	10	88	-88	-29
8	10	9	43	-3	-43	7	13	9	112	-67	-42	10	0	10	693	-671	10	-9	3	10	137	-136	22	-3	5	10	397	-401	8
9	10	9	312	-333	16	-7	14	9	75	51	-75	11	0	10	106	-108	-46	-8	3	10	626	-626	8	-2	5	10	232	-235	11
-10	11	9	234	-243	18	-6	14	9	172	187	23	-13	1	10	201	-205	20	-7	3	10	118	126	25	-1	5	10	117	117	21
-9	11	9	378	-383	12	-5	14	9	98	-95	-43	-12	1	10	41	27	-41	-6	3	10	1178	-1167	10	0	5	10	400	-383	6
-8	11	9	302	-300	13	-4	14	9	138	140	26	-11	1	10	385	-386	12	-5	3	10	235	-235	11	1	5	10	62	50	-62
-7	11	9	472	-465	10	-3	14	9	37	40	-37	-10	1	10	202	188	18	-4	3	10	1028	-1021	9	2	5	10	328	-344	11
-6	11	9	228	-224	15	-2	14	9	178	182	21	-9	1	10	485	-485	9	-3	3	10	74	-94	-32	3	5	10	83	71	-51
-5	11	9	477	-480	9	-1	14	9	98	79	-43	-8	1	10	225	204	14	-2	3	10	438	-451	7	4	5	10	142	-145	25
-4	11	9	199	-208	15	0	14	9	200	196	14	-7	1	10	620	-623	8	-1	3	10	297	-307	9	5	5	10	168	165	21
-3	11	9	413	-421	9	1	14	9	221	217	18	-6	1	10	342	349	9	0	3	10	75	55	-27	6	5	10	112	-114	-34
-2	11	9	107	115	25	2	14	9	195	199	20	-5	1	10	705	-715	8	1	3	10	399	-404	9	7	5	10	40	86	-40
-1	11	9	345	-347	10	3	14	9	226	251	19	-4	1	10	536	529	7	2	3	10	68	-58	-68	8	5	10	40	-11	-40
0	11	9	84	-95	-36	4	14	9	132	107	30	-3	1	10	490	-485	7	3	3	10	659	-645	8	9	5	10	42	-16	-42
1	11	9	351	-339	12	5	14	9	168	154	24	-2	1	10	30	-48	-30	4	3	10	332	337	11	10	5	10	42	64	-42
2	11	9	220	-229	17	6	14	9	41	32	-41	-1	1	10	219	-210	10	5	3	10	603	-604	8	11	5	10	82	39	-82
3	11	9	354	-351	12	-6	15	9	42	10	-42	0	1	10	32	-39	-23	6	3	10	242	260	15	-12	6	10	292	289	15

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 15

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-11	6	10	283	295	15	-1	8	10	448	448	8	-8	11	10	514	511	10	0	14	10	86	108	-45	0	2	11	527	-556	7
-10	6	10	220	220	17	0	8	10	128	-143	16	-7	11	10	200	-213	18	1	14	10	398	-413	13	1	2	11	1049	-1046	10
-9	6	10	422	416	10	1	8	10	234	221	14	-6	11	10	385	380	11	2	14	10	43	16	-43	2	2	11	349	-344	10
-8	6	10	406	409	10	2	8	10	40	18	-40	-5	11	10	236	-238	14	3	14	10	244	-240	18	3	2	11	917	-929	10
-7	6	10	302	299	11	3	8	10	489	477	9	-4	11	10	254	258	13	4	14	10	99	-105	-50	4	2	11	226	-225	15
-6	6	10	514	513	8	4	8	10	77	90	-77	-3	11	10	136	129	21	5	14	10	92	-79	-65	5	2	11	705	-698	8
-5	6	10	699	675	8	5	8	10	317	314	13	-2	11	10	348	360	10	-5	15	10	384	-374	12	6	2	11	232	-248	16
-4	6	10	672	668	8	6	8	10	241	226	16	-1	11	10	235	246	13	-4	15	10	41	16	-41	7	2	11	633	-625	9
-3	6	10	869	867	8	7	8	10	76	95	-76	0	11	10	43	24	-31	-3	15	10	182	-200	22	8	2	11	212	-207	19
-2	6	10	648	657	8	8	8	10	197	191	21	1	11	10	341	327	12	-2	15	10	158	-120	24	9	2	11	336	-348	14
-1	6	10	758	768	8	9	8	10	43	27	-43	2	11	10	114	-123	-36	-1	15	10	75	-97	-75	10	2	11	200	-190	21
0	6	10	735	727	6	10	8	10	226	221	19	3	11	10	310	318	13	0	15	10	152	-128	19	11	2	11	152	-165	30
1	6	10	719	712	9	-11	9	10	311	296	14	4	11	10	282	-266	15	1	15	10	110	103	-43	-13	3	11	279	271	15
2	6	10	936	931	10	-10	9	10	151	147	26	5	11	10	368	386	12	2	15	10	200	-185	21	-12	3	11	165	-145	24
3	6	10	669	687	8	-9	9	10	368	363	12	6	11	10	140	-145	29	3	15	10	127	131	-33	-11	3	11	346	344	12
4	6	10	689	680	9	-8	9	10	56	36	-56	7	11	10	306	317	15	-2	16	10	41	-68	-41	-10	3	11	228	-220	16
5	6	10	572	551	9	-7	9	10	448	444	9	8	11	10	175	-186	25	-1	16	10	308	298	14	-9	3	11	185	173	16
6	6	10	534	538	9	-6	9	10	36	-36	-36	-9	12	10	340	-326	13	0	16	10	43	-37	-30	-8	3	11	183	-204	16
7	6	10	344	340	12	-5	9	10	457	461	9	-8	12	10	232	-222	17	-13	1	11	41	-9	-41	-7	3	11	211	201	14
8	6	10	323	313	13	-4	9	10	35	40	-35	-7	12	10	343	-349	12	-12	1	11	278	298	15	-6	3	11	310	333	11
9	6	10	232	225	19	-3	9	10	572	588	8	-6	12	10	508	-482	10	-11	1	11	79	117	-79	-5	3	11	73	49	-45
10	6	10	275	280	17	-2	9	10	35	-27	-35	-5	12	10	210	-206	16	-10	1	11	291	305	13	-4	3	11	511	510	8
-12	7	10	86	91	-64	-1	9	10	295	304	11	-4	12	10	511	-506	9	-9	1	11	236	-241	14	-3	3	11	566	-561	7
-11	7	10	86	112	-66	0	9	10	37	6	-26	-3	12	10	36	4	-36	-8	1	11	75	88	-51	-2	3	11	556	557	7
-10	7	10	39	11	-39	1	9	10	144	147	25	-2	12	10	590	-574	9	-7	1	11	74	-78	-50	-1	3	11	668	-670	7
-9	7	10	179	165	19	2	9	10	199	201	18	-1	12	10	38	63	-38	-6	1	11	171	-168	15	0	3	11	315	314	12
-8	7	10	97	94	-35	3	9	10	40	-85	-40	0	12	10	711	-706	6	-5	1	11	49	74	-49	1	3	11	151	-152	20
-7	7	10	34	15	-34	4	9	10	523	514	9	1	12	10	101	-94	-46	-4	1	11	114	-105	19	2	3	11	185	180	17
-6	7	10	254	247	12	5	9	10	63	-14	-63	2	12	10	778	-783	10	-3	1	11	128	141	16	3	3	11	97	83	-38
-5	7	10	119	-87	22	6	9	10	230	222	18	3	12	10	104	-100	-41	-2	1	11	257	-253	9	4	3	11	39	65	-39
-4	7	10	124	110	23	7	9	10	112	-117	-37	4	12	10	379	-381	13	-1	1	11	31	14	-31	5	3	11	40	-25	-40
-3	7	10	33	23	-33	8	9	10	182	169	24	5	12	10	245	-230	17	0	1	11	253	-252	8	6	3	11	78	38	-78
-2	7	10	208	232	13	9	9	10	64	-35	-64	6	12	10	177	-184	23	1	1	11	63	-52	-63	7	3	11	73	79	-73
-1	7	10	145	-141	18	-11	10	10	41	18	-41	7	12	10	356	-345	14	2	1	11	283	-299	12	8	3	11	87	-96	-62
0	7	10	203	207	15	-10	10	10	296	-313	14	-8	13	10	386	-358	12	3	1	11	78	-62	-66	9	3	11	169	184	24
1	7	10	38	-16	-38	-9	10	10	39	20	-39	-7	13	10	244	240	16	4	1	11	173	-197	20	10	3	11	83	-85	-83
2	7	10	185	178	19	-8	10	10	389	-380	11	-6	13	10	470	-459	11	5	1	11	81	-58	-64	11	3	11	110	129	-43
3	7	10	239	235	15	-7	10	10	199	-187	17	-5	13	10	155	172	23	6	1	11	40	-45	-40	-13	4	11	337	-303	14
4	7	10	66	-64	-66	-6	10	10	96	-103	-37	-4	13	10	301	-318	13	7	1	11	177	-194	22	-12	4	11	280	-293	14
5	7	10	221	238	18	-5	10	10	448	-440	9	-3	13	10	128	129	25	8	1	11	42	-115	-42	-11	4	11	532	-506	10
6	7	10	41	-39	-41	-4	10	10	99	-99	-32	-2	13	10	197	-192	17	9	1	11	205	-230	21	-10	4	11	184	-195	19
7	7	10	87	73	-54	-3	10	10	265	-264	12	-1	13	10	134	-99	25	10	1	11	88	-73	-76	-9	4	11	693	-705	9
8	7	10	41	-10	-41	-2	10	10	117	-125	23	0	13	10	40	25	-28	11	1	11	149	-150	28	-8	4	11	36	-5	-36
9	7	10	81	60	-81	-1	10	10	478	-488	9	1	13	10	261	-252	16	-13	2	11	306	-313	15	-7	4	11	993	-977	10
10	7	10	43	55	-43	0	10	10	38	0	-27	2	13	10	266	272	15	-12	2	11	341	-309	13	-6	4	11	259	-267	12
-12	8	10	215	215	20	1	10	10	663	-663	9	3	13	10	301	-293	15	-11	2	11	197	-199	19	-5	4	11	1236	-1211	11
-11	8	10	66	75	-66	2	10	10	224	220	16	4	13	10	291	301	14	-10	2	11	553	-557	9	-4	4	11	279	-268	10
-10	8	10	319	325	13	3	10	10	537	-548	9	5	13	10	266	-279	16	-9	2	11	56	-56	-56	-3	4	11	1187	-1189	10
-9	8	10	39	6	-39	4	10	10	41	-39	-41	6	13	10	91	57	-66	-8	2	11	388	-380	10	-2	4	11	445	-428	8
-8	8	10	258	259	13	5	10	10	213	-191	19	-7	14	10	89	-74	-77	-7	2	11	488	-485	8	-1	4	11	559	-550	7
-7	8	10	126	121	23	6	10	10	246	-250	17	-6	14	10	68	19	-68	-6	2	11	765	-761	8	0	4	11	916	-915	12
-6	8	10	112	110	26	7	10	10	43	-84	-43	-5	14	10	378	-387	13	-5	2	11	348	-349	9	1	4	11	441	-441	9
-5	8	10	338	345	10	8	10	10	172	-191	26	-4	14	10	57	47	-57	-4	2	11	923	-930	9	2	4	11	911	-899	9
-4	8	10	155	142	18	9	10	10	44	24	-44	-3	14	10	439	-421	11	-3	2	11	410	-404	7	3	4	11	254	-246	14
-3	8	10	482	488	8	-10	11	10	321	328	14	-2	14	10	89	102	-49	-2	2	11	728	-745	8	4	4	11	937	-929	9
-2	8	10	75	65	-44	-9	11	10	81	3	-60	-1	14	10	552	-560	10	-1	2	11	620	-649	7	5	4	11	181	-188	21

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
6	4	11	716	-731	9	-7	7	11	130	-105	22	6	9	11	42	19	-42	-6	13	11	113	-116	-41	-11	1	12	182	-174	20
7	4	11	41	-34	-41	-6	7	11	165	168	18	7	9	11	196	-208	21	-5	13	11	67	42	-67	-10	1	12	333	355	12
8	4	11	564	-565	10	-5	7	11	241	-254	13	8	9	11	175	181	25	-4	13	11	39	-30	-39	-9	1	12	370	-375	11
9	4	11	42	48	-42	-4	7	11	316	306	10	9	9	11	136	-129	-34	-3	13	11	38	-42	-38	-8	1	12	278	283	12
10	4	11	289	-291	15	-3	7	11	402	-414	9	-10	10	11	223	200	18	-2	13	11	38	-36	-38	-7	1	12	284	-284	12
-12	5	11	119	133	-34	-2	7	11	672	671	7	-9	10	11	524	512	10	-1	13	11	39	-69	-39	-6	1	12	130	141	20
-11	5	11	407	-416	12	-1	7	11	576	-591	7	-8	10	11	107	93	-34	0	13	11	47	-70	-34	-5	1	12	600	-604	7
-10	5	11	250	251	14	0	7	11	314	312	8	-7	10	11	651	649	9	1	13	11	135	-163	31	-4	1	12	77	37	-35
-9	5	11	180	-204	19	1	7	11	281	-284	13	-6	10	11	102	92	-35	2	13	11	42	-16	-42	-3	1	12	350	-359	9
-8	5	11	147	-152	21	2	7	11	464	454	9	-5	10	11	462	450	10	3	13	11	190	-199	22	-2	1	12	249	241	11
-7	5	11	106	101	-29	3	7	11	40	-7	-40	-4	10	11	390	368	10	4	13	11	43	-37	-43	-1	1	12	286	-281	10
-6	5	11	86	-84	-35	4	7	11	215	212	17	-3	10	11	556	566	8	5	13	11	151	-150	29	0	1	12	493	-496	12
-5	5	11	484	494	9	5	7	11	40	31	-40	-2	10	11	463	475	9	-6	14	11	244	-240	18	1	1	12	70	55	-70
-4	5	11	319	-334	9	6	7	11	88	70	-52	-1	10	11	276	266	12	-5	14	11	404	-413	12	2	1	12	684	-689	8
-3	5	11	633	641	8	7	7	11	231	223	17	0	10	11	633	632	6	-4	14	11	103	-117	-40	3	1	12	182	163	18
-2	5	11	476	-482	8	8	7	11	204	-191	19	1	10	11	178	162	20	-3	14	11	416	-414	12	4	1	12	770	-768	9
-1	5	11	838	865	9	9	7	11	305	297	15	2	10	11	493	504	10	-2	14	11	215	-234	17	5	1	12	322	341	13
0	5	11	550	-529	9	10	7	11	156	-165	30	3	10	11	67	91	-67	-1	14	11	380	-414	12	6	1	12	602	-608	9
1	5	11	1047	1039	10	-11	8	11	196	216	21	4	10	11	623	609	9	0	14	11	320	-308	13	7	1	12	221	211	17
2	5	11	38	68	-38	-10	8	11	578	568	10	5	10	11	41	26	-41	1	14	11	273	-251	16	8	1	12	376	-386	13
3	5	11	374	366	10	-9	8	11	38	-12	-38	6	10	11	433	436	12	2	14	11	303	-320	15	9	1	12	67	-53	-67
4	5	11	170	172	21	-8	8	11	714	706	9	7	10	11	122	108	-37	3	14	11	155	-154	28	10	1	12	180	-190	23
5	5	11	326	351	12	-7	8	11	61	62	-61	8	10	11	322	310	15	4	14	11	289	-269	15	-12	2	12	397	398	12
6	5	11	141	135	25	-6	8	11	751	748	9	-9	11	11	76	-115	-76	-4	15	11	41	-9	-41	-11	2	12	40	41	-40
7	5	11	106	81	-39	-5	8	11	50	14	-50	-8	11	11	64	75	-64	-3	15	11	63	39	-63	-10	2	12	364	367	12
8	5	11	281	286	16	-4	8	11	916	919	9	-7	11	11	171	-174	23	-2	15	11	126	-95	31	-9	2	12	37	-13	-37
9	5	11	109	-145	-44	-3	8	11	365	378	10	-6	11	11	38	-21	-38	-1	15	11	77	99	-77	-8	2	12	203	202	15
10	5	11	352	366	15	-2	8	11	601	609	8	-5	11	11	184	-179	18	0	15	11	165	-190	19	-7	2	12	177	172	16
-12	6	11	107	-109	-39	-1	8	11	324	341	10	-4	11	11	139	151	24	1	15	11	67	76	-67	-6	2	12	254	261	12
-11	6	11	166	187	24	0	8	11	65	-52	-46	-3	11	11	170	-166	19	2	15	11	102	-92	-49	-5	2	12	541	530	8
-10	6	11	241	-247	16	1	8	11	810	829	9	-2	11	11	115	90	28	-13	0	12	418	422	12	-4	2	12	102	-83	25
-9	6	11	364	381	11	2	8	11	40	-56	-40	-1	11	11	209	-206	15	-12	0	12	40	35	-40	-3	2	12	768	783	8
-8	6	11	397	-391	10	3	8	11	755	755	9	0	11	11	60	69	-33	-11	0	12	695	712	9	-2	2	12	524	-523	7
-7	6	11	391	398	10	4	8	11	40	91	-40	1	11	11	261	-269	15	-10	0	12	91	94	-40	-1	2	12	650	651	8
-6	6	11	378	-375	9	5	8	11	745	720	9	2	11	11	41	13	-41	-9	0	12	513	522	9	0	2	12	469	-465	7
-5	6	11	332	336	10	6	8	11	42	1	-42	3	11	11	154	-155	27	-8	0	12	212	211	14	1	2	12	533	536	9
-4	6	11	392	-404	9	7	8	11	445	411	11	4	11	11	43	-27	-43	-7	0	12	540	549	8	2	2	12	152	-166	22
-3	6	11	440	456	8	8	8	11	43	-13	-43	5	11	11	103	-115	-47	-6	0	12	652	662	8	3	2	12	370	371	11
-2	6	11	257	-264	12	9	8	11	313	310	15	6	11	11	208	-205	21	-5	0	12	154	-133	17	4	2	12	39	28	-39
-1	6	11	34	31	-34	-11	9	11	228	-206	19	7	11	11	68	24	-68	-4	0	12	818	801	8	5	2	12	150	167	25
0	6	11	45	50	-33	-10	9	11	95	87	-48	-8	12	11	85	94	-85	-3	0	12	79	-87	-38	6	2	12	234	264	17
1	6	11	309	-320	12	-9	9	11	163	-174	22	-7	12	11	67	-65	-67	-2	0	12	1155	1178	10	7	2	12	137	-126	29
2	6	11	354	353	11	-8	9	11	38	-50	-38	-6	12	11	41	21	-41	-1	0	12	79	-92	-41	8	2	12	224	235	19
3	6	11	337	-343	12	-7	9	11	130	-137	26	-5	12	11	38	-6	-38	0	0	12	1171	1176	7	9	2	12	118	-113	-39
4	6	11	494	485	10	-6	9	11	177	-188	18	-4	12	11	38	-12	-38	1	0	12	38	-3	-38	10	2	12	277	272	17
5	6	11	352	-343	12	-5	9	11	193	181	16	-3	12	11	38	-1	-38	2	0	12	866	867	9	-12	3	12	215	-213	18
6	6	11	238	235	17	-4	9	11	249	-245	13	-2	12	11	56	-24	-56	3	0	12	151	159	23	-11	3	12	59	67	-59
7	6	11	329	-306	13	-3	9	11	299	306	11	-1	12	11	38	3	-38	4	0	12	494	489	9	-10	3	12	448	-433	11
8	6	11	278	266	15	-2	9	11	548	-557	8	0	12	11	41	-19	-29	5	0	12	248	252	15	-9	3	12	172	189	20
9	6	11	110	-86	-41	-1	9	11	82	44	-40	1	12	11	42	-21	-42	6	0	12	148	146	25	-8	3	12	429	-425	9
10	6	11	81	70	-81	0	9	11	531	-533	8	2	12	11	153	-135	27	7	0	12	440	427	11	-7	3	12	94	107	-36
-12	7	11	319	-327	15	1	9	11	287	269	13	3	12	11	88	86	-64	8	0	12	41	-33	-41	-6	3	12	981	-970	10
-11	7	11	204	207	19	2	9	11	369	-393	12	4	12	11	139	-137	31	9	0	12	401	403	12	-5	3	12	69	63	-69
-10	7	11	250	-253	14	3	9	11	108	116	-38	5	12	11	42	35	-42	10	0	12	165	-175	26	-4	3	12	640	-645	8
-9	7	11	37	38	-37	4	9	11	70	-46	-70	6	12	11	43	-76	-43	-13	1	12	164	-140	23	-3	3	12	296	-299	10
-8	7	11	204	-204	16	5	9	11	61	-38	-61	-7	13	11	146	126	29	-12	1	12	73	50	-73	-2	3	12	666	-667	8

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-1	3	12	423	-457	8	9	5	12	44	-40	-44	0	8	12	475	-481	9	2	11	12	42	-49	-42	6	1	13	306	296	14
0	3	12	367	-368	7	10	5	12	95	-68	-60	1	8	12	39	-66	-39	3	11	12	359	367	13	7	1	13	219	203	18
1	3	12	603	-612	8	-12	6	12	305	-295	15	2	8	12	354	-348	12	4	11	12	158	-163	27	8	1	13	267	257	17
2	3	12	213	-214	15	-11	6	12	359	-364	12	3	8	12	41	-48	-41	5	11	12	330	314	14	9	1	13	119	158	-39
3	3	12	720	-712	9	-10	6	12	358	-347	12	4	8	12	335	-326	13	6	11	12	158	-162	28	10	1	13	207	201	22
4	3	12	59	-76	-59	-9	6	12	340	-345	12	5	8	12	168	-188	24	-8	12	12	369	365	13	-12	2	13	41	60	-41
5	3	12	791	-807	10	-8	6	12	561	-558	9	6	8	12	81	-69	-81	-7	12	12	348	321	13	-11	2	13	209	214	19
6	3	12	40	-60	-40	-7	6	12	313	-303	11	7	8	12	110	-145	-41	-6	12	12	246	249	17	-10	2	13	125	141	30
7	3	12	554	-546	10	-6	6	12	349	-343	10	8	8	12	44	-32	-44	-5	12	12	457	457	11	-9	2	13	449	460	11
8	3	12	131	-146	29	-5	6	12	402	-417	10	-10	9	12	101	117	-45	-4	12	12	104	103	-39	-8	2	13	38	-2	-38
9	3	12	256	-262	17	-4	6	12	612	-595	8	-9	9	12	251	246	15	-3	12	12	602	580	9	-7	2	13	394	389	10
10	3	12	152	-165	30	-3	6	12	492	-499	8	-8	9	12	99	89	-38	-2	12	12	60	25	-60	-6	2	13	175	185	17
-12	4	12	239	-258	18	-2	6	12	625	-631	8	-7	9	12	422	403	10	-1	12	12	607	619	9	-5	2	13	197	189	14
-11	4	12	88	-60	-52	-1	6	12	563	-581	8	-6	9	12	38	24	-38	0	12	12	113	126	24	-4	2	13	68	38	-68
-10	4	12	347	-366	12	0	6	12	297	-299	11	-5	9	12	490	477	9	1	12	12	611	585	10	-3	2	13	305	306	10
-9	4	12	234	-233	15	1	6	12	438	-427	9	-4	9	12	315	296	11	2	12	12	43	40	-43	-2	2	13	271	268	11
-8	4	12	120	-113	27	2	6	12	182	-169	19	-3	9	12	616	626	8	3	12	12	421	410	12	-1	2	13	147	125	20
-7	4	12	257	-252	14	3	6	12	248	-243	15	-2	9	12	229	246	14	4	12	12	43	-32	-43	0	2	13	262	256	10
-6	4	12	131	114	23	4	6	12	317	-342	13	-1	9	12	395	417	10	5	12	12	135	137	33	1	2	13	41	30	-41
-5	4	12	377	-366	9	5	6	12	196	-183	18	0	9	12	247	252	12	-6	13	12	482	-499	11	2	2	13	324	332	12
-4	4	12	51	-12	-51	6	6	12	207	-229	20	1	9	12	209	204	18	-5	13	12	164	168	25	3	2	13	356	-349	11
-3	4	12	648	-656	8	7	6	12	192	-203	20	2	9	12	447	422	10	-4	13	12	274	-272	15	4	2	13	98	108	-42
-2	4	12	34	6	-34	8	6	12	92	-115	-61	3	9	12	67	58	-67	-3	13	12	39	-56	-39	5	2	13	196	-208	19
-1	4	12	840	-847	9	9	6	12	223	-195	20	4	9	12	556	562	10	-2	13	12	168	-171	22	6	2	13	131	121	30
0	4	12	129	114	25	-11	7	12	131	137	31	5	9	12	80	56	-80	-1	13	12	125	-140	30	7	2	13	142	-139	29
1	4	12	329	-333	11	-10	7	12	179	166	21	6	9	12	449	429	12	0	13	12	49	-53	-35	8	2	13	109	77	-42
2	4	12	113	113	-32	-9	7	12	134	155	26	7	9	12	112	92	-43	1	13	12	314	-335	15	9	2	13	114	-158	-43
3	4	12	213	-213	17	-8	7	12	257	248	13	8	9	12	299	310	15	2	13	12	43	10	-43	-12	3	13	184	-169	22
4	4	12	138	-145	28	-7	7	12	87	87	-42	-9	10	12	177	197	21	3	13	12	394	-385	13	-11	3	13	205	204	19
5	4	12	41	-45	-41	-6	7	12	392	397	10	-8	10	12	39	-29	-39	4	13	12	130	130	-36	-10	3	13	206	-205	18
6	4	12	222	-216	18	-5	7	12	172	176	17	-7	10	12	171	192	21	-5	14	12	42	14	-42	-9	3	13	103	116	-37
7	4	12	41	26	-41	-4	7	12	562	577	8	-6	10	12	174	152	18	-4	14	12	370	369	13	-8	3	13	154	-164	20
8	4	12	180	-173	23	-3	7	12	359	374	10	-5	10	12	134	153	26	-3	14	12	88	-104	-58	-7	3	13	211	209	15
9	4	12	167	192	26	-2	7	12	323	341	11	-4	10	12	469	481	10	-2	14	12	374	368	12	-6	3	13	187	179	17
10	4	12	177	-161	25	-1	7	12	137	-138	23	-3	10	12	38	75	-38	-1	14	12	115	-92	-35	-5	3	13	222	-231	13
-12	5	12	44	5	-44	0	7	12	368	365	7	-2	10	12	346	347	11	0	14	12	285	268	19	-4	3	13	489	478	8
-11	5	12	128	-77	31	1	7	12	38	-32	-38	-1	10	12	107	-100	-32	1	14	12	44	-65	-44	-3	3	13	281	-292	11
-10	5	12	85	102	-53	2	7	12	278	289	13	0	10	12	484	486	7	2	14	12	218	201	20	-2	3	13	348	347	10
-9	5	12	199	-197	19	3	7	12	287	288	14	1	10	12	161	-156	24	-12	1	13	236	233	16	-1	3	13	448	-440	8
-8	5	12	67	67	-67	4	7	12	94	104	-48	2	10	12	405	421	12	-11	1	13	184	180	21	0	3	13	297	302	8
-7	5	12	310	-298	11	5	7	12	274	280	15	3	10	12	72	-59	-72	-10	1	13	341	334	13	1	3	13	202	-215	17
-6	5	12	35	13	-35	6	7	12	60	58	-60	4	10	12	293	284	15	-9	1	13	282	290	13	2	3	13	224	212	16
-5	5	12	290	-275	11	7	7	12	101	86	-47	5	10	12	103	95	-47	-8	1	13	479	480	10	3	3	13	323	-326	12
-4	5	12	34	26	-34	8	7	12	120	161	-36	6	10	12	43	6	-43	-7	1	13	448	429	9	4	3	13	63	41	-63
-3	5	12	132	-149	22	9	7	12	148	133	31	7	10	12	83	106	-83	-6	1	13	431	434	9	5	3	13	62	-64	-62
-2	5	12	104	-109	-28	-11	8	12	242	-240	18	-9	11	12	90	-85	-49	-5	1	13	758	760	8	6	3	13	115	-115	-38
-1	5	12	96	-99	-31	-10	8	12	42	-66	-42	-8	11	12	277	271	15	-4	1	13	344	347	9	7	3	13	43	-3	-43
0	5	12	348	-346	8	-9	8	12	336	-347	12	-7	11	12	115	-105	-32	-3	1	13	631	636	8	8	3	13	113	-102	-40
1	5	12	39	43	-39	-8	8	12	40	-44	-40	-6	11	12	414	407	11	-2	1	13	415	431	9	9	3	13	130	118	-35
2	5	12	317	-319	12	-7	8	12	354	-354	11	-5	11	12	85	-90	-52	-1	1	13	826	811	9	-12	4	13	214	200	19
3	5	12	39	42	-39	-6	8	12	143	-153	22	-4	11	12	353	342	11	0	1	13	312	317	8	-11	4	13	40	16	-40
4	5	12	218	-231	17	-5	8	12	36	-23	-36	-3	11	12	56	61	-56	1	1	13	598	592	8	-10	4	13	399	389	11
5	5	12	118	-127	-35	-4	8	12	459	-463	10	-2	11	12	221	243	15	2	1	13	438	440	10	-9	4	13	213	-210	17
6	5	12	285	-291	15	-3	8	12	127	-122	23	-1	11	12	39	20	-39	3	1	13	402	397	11	-8	4	13	449	432	10
7	5	12	86	-61	-64	-2	8	12	408	-404	10	0	11	12	127	127	22	4	1	13	250	255	15	-7	4	13	404	-414	10
8	5	12	68	-43	-68	-1	8	12	270	-285	12	1	11	12	324	314	14	5	1	13	188	202	21	-6	4	13	459	477	9

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 18

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-5	4	13	36	-68	-36	9	6	13	106	-88	-50	6	9	13	129	129	-36	0	14	13	82	103	-58	1	2	14	554	546	9
-4	4	13	275	268	11	-11	7	13	102	-99	-45	7	9	13	104	-54	-49	-12	0	14	179	-187	22	2	2	14	172	-183	22
-3	4	13	51	43	-51	-10	7	13	386	-400	12	-9	10	13	42	-58	-42	-11	0	14	204	187	18	3	2	14	40	43	-40
-2	4	13	264	257	11	-9	7	13	217	-203	18	-8	10	13	365	-359	12	-10	0	14	198	-190	18	4	2	14	39	32	-39
-1	4	13	150	155	19	-8	7	13	437	-437	10	-7	10	13	40	11	-40	-9	0	14	39	53	-39	5	2	14	41	-3	-41
0	4	13	107	96	21	-7	7	13	292	-274	12	-6	10	13	403	-405	11	-8	0	14	74	56	-74	6	2	14	225	220	19
1	4	13	296	297	13	-6	7	13	60	-76	-60	-5	10	13	38	17	-38	-7	0	14	38	-11	-38	7	2	14	42	41	-42
2	4	13	208	229	17	-5	7	13	722	-718	8	-4	10	13	140	-149	25	-6	0	14	36	-18	-36	8	2	14	290	297	17
3	4	13	316	314	12	-4	7	13	141	-151	22	-3	10	13	67	-31	-67	-5	0	14	70	-7	-70	9	2	14	114	-81	-43
4	4	13	223	-219	18	-3	7	13	908	-905	9	-2	10	13	184	-199	20	-4	0	14	482	471	9	-11	3	14	482	482	11
5	4	13	341	340	13	-2	7	13	151	-143	20	-1	10	13	156	-157	22	-3	0	14	502	-524	9	-10	3	14	218	220	18
6	4	13	341	-343	13	-1	7	13	893	-901	9	0	10	13	88	96	-39	-2	0	14	601	611	8	-9	3	14	745	730	9
7	4	13	267	258	17	0	7	13	37	20	-27	1	10	13	202	-182	20	-1	0	14	486	-480	9	-8	3	14	103	82	-37
8	4	13	211	-187	21	1	7	13	575	-565	9	2	10	13	274	259	15	0	0	14	831	841	9	-7	3	14	753	743	8
9	4	13	143	134	30	2	7	13	144	-146	26	3	10	13	178	-188	24	1	0	14	151	-154	25	-6	3	14	193	180	16
-11	5	13	483	-464	11	3	7	13	585	-581	10	4	10	13	246	236	18	2	0	14	549	553	9	-5	3	14	702	698	8
-10	5	13	142	-157	28	4	7	13	179	-172	22	5	10	13	113	-116	-41	3	0	14	92	38	-44	-4	3	14	238	245	12
-9	5	13	534	-534	10	5	7	13	342	-346	14	6	10	13	140	120	32	4	0	14	319	330	14	-3	3	14	539	547	8
-8	5	13	277	-266	13	6	7	13	417	-420	12	-8	11	13	372	364	12	5	0	14	221	219	17	-2	3	14	314	320	10
-7	5	13	146	-149	23	7	7	13	98	-91	-51	-7	11	13	236	226	17	6	0	14	216	202	19	-1	3	14	387	382	10
-6	5	13	341	-321	11	8	7	13	376	-345	14	-6	11	13	402	389	11	7	0	14	348	349	14	0	3	14	594	594	7
-5	5	13	261	-263	12	-10	8	13	42	2	-42	-5	11	13	265	271	15	8	0	14	42	21	-42	1	3	14	230	202	16
-4	5	13	715	-708	8	-9	8	13	529	-506	10	-4	11	13	423	408	11	9	0	14	402	413	14	2	3	14	536	531	9
-3	5	13	94	-93	-31	-8	8	13	74	87	-74	-3	11	13	178	196	20	-11	1	14	41	1	-41	3	3	14	39	20	-39
-2	5	13	1009	-1013	9	-7	8	13	501	-484	9	-2	11	13	479	463	10	-10	1	14	429	428	11	4	3	14	432	412	11
-1	5	13	34	18	-34	-6	8	13	63	56	-63	-1	11	13	257	239	14	-9	1	14	66	-49	-66	5	3	14	60	7	-60
0	5	13	757	-755	20	-5	8	13	352	-361	11	0	11	13	518	531	11	-8	1	14	666	664	9	6	3	14	432	429	12
1	5	13	207	215	17	-4	8	13	113	125	-29	1	11	13	276	266	16	-7	1	14	38	67	-38	7	3	14	63	60	-63
2	5	13	394	-386	10	-3	8	13	132	-131	24	2	11	13	387	382	13	-6	1	14	631	622	8	8	3	14	311	292	15
3	5	13	218	-225	16	-2	8	13	154	-168	20	3	11	13	298	287	16	-5	1	14	35	50	-35	9	3	14	88	87	-88
4	5	13	369	-365	12	-1	8	13	37	3	-37	4	11	13	232	216	18	-4	1	14	454	438	9	-11	4	14	124	128	-33
5	5	13	312	-322	14	0	8	13	311	-310	8	5	11	13	299	285	16	-3	1	14	83	-89	-40	-10	4	14	140	-145	28
6	5	13	230	-242	18	1	8	13	169	181	22	-7	12	13	42	-27	-42	-2	1	14	390	395	9	-9	4	14	74	-27	-74
7	5	13	374	-383	13	2	8	13	362	-368	13	-6	12	13	42	22	-42	-1	1	14	300	289	11	-8	4	14	39	78	-39
8	5	13	43	-71	-43	3	8	13	443	458	11	-5	12	13	78	-42	-78	0	1	14	39	16	-27	-7	4	14	97	-92	-40
9	5	13	369	-367	14	4	8	13	277	-286	16	-4	12	13	40	57	-40	1	1	14	578	556	9	-6	4	14	134	138	25
-11	6	13	192	160	21	5	8	13	253	253	17	-3	12	13	39	-9	-39	2	1	14	245	-236	16	-5	4	14	149	-135	20
-10	6	13	284	-284	14	6	8	13	154	-156	29	-2	12	13	39	-44	-39	3	1	14	385	404	12	-4	4	14	34	10	-34
-9	6	13	306	288	13	7	8	13	263	269	17	-1	12	13	57	58	-57	4	1	14	293	-296	14	-3	4	14	201	-193	14
-8	6	13	361	-360	11	8	8	13	83	-78	-83	0	12	13	97	-69	-35	5	1	14	323	304	13	-2	4	14	36	60	-36
-7	6	13	261	254	14	-10	9	13	153	140	28	1	12	13	103	88	-47	6	1	14	244	-249	18	-1	4	14	368	-391	10
-6	6	13	468	-457	9	-9	9	13	39	-57	-39	2	12	13	103	-85	-48	7	1	14	362	357	14	0	4	14	276	275	9
-5	6	13	503	516	9	-8	9	13	40	-39	-40	3	12	13	125	116	-37	8	1	14	43	-72	-43	1	4	14	40	-40	-40
-4	6	13	88	-95	-38	-7	9	13	82	99	-61	4	12	13	44	-50	-44	9	1	14	209	198	22	2	4	14	40	-47	-40
-3	6	13	401	397	9	-6	9	13	172	-162	20	-5	13	13	354	334	13	-11	2	14	113	-109	-35	3	4	14	40	0	-40
-2	6	13	241	-238	14	-5	9	13	280	266	13	-4	13	13	204	203	19	-10	2	14	185	187	20	4	4	14	215	-220	18
-1	6	13	35	-42	-35	-4	9	13	255	-217	14	-3	13	13	233	193	17	-9	2	14	176	-153	22	5	4	14	72	-43	-72
0	6	13	185	201	13	-3	9	13	267	279	14	-2	13	13	250	238	16	-8	2	14	38	-18	-38	6	4	14	121	-104	-37
1	6	13	39	6	-39	-2	9	13	279	-279	13	-1	13	13	259	263	16	-7	2	14	39	50	-39	7	4	14	45	-28	-45
2	6	13	308	301	12	-1	9	13	367	387	11	0	13	13	284	282	11	-6	2	14	36	-45	-36	8	4	14	190	-184	24
3	6	13	216	-216	17	0	9	13	300	-298	12	1	13	13	210	214	21	-5	2	14	36	-36	-36	-11	5	14	137	120	32
4	6	13	487	470	10	1	9	13	212	215	19	2	13	13	358	341	13	-4	2	14	392	-398	9	-10	5	14	286	283	15
5	6	13	299	-272	15	2	9	13	144	-153	29	3	13	13	124	125	-37	-3	2	14	455	454	9	-9	5	14	40	19	-40
6	6	13	249	248	17	3	9	13	66	65	-66	-3	14	13	40	26	-40	-2	2	14	389	-393	10	-8	5	14	314	316	13
7	6	13	236	-213	18	4	9	13	44	-28	-44	-2	14	13	134	145	31	-1	2	14	590	594	8	-7	5	14	56	38	-56
8	6	13	225	232	20	5	9	13	74	7	-74	-1	14	13	41	5	-41	0	2	14	433	-416	7	-6	5	14	229	227	15

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

PAGE 19

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-5	5	14	124	115	25	-4	8	14	173	-191	19	-4	12	14	76	-98	-76	-8	3	15	38	66	-38	-7	6	15	398	385	11
-4	5	14	322	322	11	-3	8	14	57	1	-57	-3	12	14	265	262	16	-7	3	15	39	26	-39	-6	6	15	333	-323	12
-3	5	14	90	64	-34	-2	8	14	233	-239	15	-2	12	14	107	-101	-37	-6	3	15	116	95	28	-5	6	15	442	447	10
-2	5	14	101	67	-29	-1	8	14	78	73	-66	-1	12	14	285	307	14	-5	3	15	229	-231	15	-4	6	15	134	-114	24
-1	5	14	138	126	21	0	8	14	226	-239	17	0	12	14	122	-136	27	-4	3	15	157	145	18	-3	6	15	88	83	-39
0	5	14	59	57	-31	1	8	14	84	58	-70	1	12	14	324	343	15	-3	3	15	246	-248	13	-2	6	15	58	46	-58
1	5	14	406	408	11	2	8	14	304	-310	14	2	12	14	44	-17	-44	-2	3	15	217	226	14	-1	6	15	37	-19	-37
2	5	14	39	1	-39	3	8	14	43	-72	-43	3	12	14	215	234	21	-1	3	15	221	-212	14	0	6	15	109	93	26
3	5	14	290	300	14	4	8	14	172	-156	23	-3	13	14	207	221	19	0	3	15	404	411	11	1	6	15	154	-171	27
4	5	14	42	18	-42	5	8	14	119	-110	-39	-2	13	14	85	86	-64	1	3	15	204	-196	18	2	6	15	251	232	17
5	5	14	221	197	19	6	8	14	45	-67	-45	-1	13	14	41	78	-41	2	3	15	215	231	18	3	6	15	228	-246	19
6	5	14	43	5	-43	7	8	14	135	-125	-35	0	13	14	186	197	16	3	3	15	290	-298	15	4	6	15	259	259	18
7	5	14	134	143	-35	-9	9	14	279	-274	15	1	13	14	106	95	-52	4	3	15	42	19	-42	5	6	15	268	-268	18
8	5	14	93	51	-66	-8	9	14	502	-507	11	-11	1	15	267	-260	15	5	3	15	76	45	-76	6	6	15	266	266	18
-10	6	14	83	-70	-83	-7	9	14	269	-266	14	-10	1	15	182	-175	21	6	3	15	44	-57	-44	7	6	15	177	-173	28
-9	6	14	76	-45	-76	-6	9	14	558	-553	10	-9	1	15	294	-302	14	7	3	15	154	163	30	-9	7	15	283	294	14
-8	6	14	94	-88	-45	-5	9	14	223	-220	16	-8	1	15	306	-308	13	8	3	15	90	-55	-90	-8	7	15	260	258	15
-7	6	14	181	188	18	-4	9	14	612	-611	9	-7	1	15	284	-282	13	-10	4	15	383	393	13	-7	7	15	200	192	18
-6	6	14	185	-174	18	-3	9	14	333	-338	12	-6	1	15	306	-302	12	-9	4	15	39	2	-39	-6	7	15	344	324	12
-5	6	14	60	90	-60	-2	9	14	613	-627	9	-5	1	15	256	-236	12	-8	4	15	495	494	10	-5	7	15	151	-157	23
-4	6	14	337	-338	11	-1	9	14	404	-405	11	-4	1	15	447	-452	9	-7	4	15	39	-48	-39	-4	7	15	540	537	9
-3	6	14	199	-188	15	0	9	14	394	-376	14	-3	1	15	85	-95	-44	-6	4	15	567	577	9	-3	7	15	83	-103	-51
-2	6	14	185	-208	16	1	9	14	443	-425	11	-2	1	15	317	-321	12	-5	4	15	36	-39	-36	-2	7	15	340	316	11
-1	6	14	174	-176	17	2	9	14	153	-142	28	-1	1	15	37	-36	-37	-4	4	15	307	282	11	-1	7	15	151	-129	21
0	6	14	69	-30	-49	3	9	14	395	-387	12	0	1	15	238	-215	11	-3	4	15	349	341	10	0	7	15	491	485	7
1	6	14	74	-53	-74	4	9	14	143	-137	31	1	1	15	43	-39	-43	-2	4	15	240	255	13	1	7	15	139	-159	29
2	6	14	191	-190	19	5	9	14	403	-404	13	2	1	15	258	-241	15	-1	4	15	258	261	13	2	7	15	276	262	16
3	6	14	72	-63	-72	6	9	14	66	-55	-66	3	1	15	122	-145	-36	0	4	15	481	482	10	3	7	15	44	-103	-44
4	6	14	275	-266	15	-8	10	14	40	8	-40	4	1	15	235	-241	17	1	4	15	471	464	11	4	7	15	178	176	24
5	6	14	181	-175	24	-7	10	14	113	122	-34	5	1	15	71	85	-71	2	4	15	154	158	24	5	7	15	141	124	33
6	6	14	193	-199	22	-6	10	14	40	-34	-40	6	1	15	42	-32	-42	3	4	15	488	473	10	6	7	15	45	-48	-45
7	6	14	217	-220	20	-5	10	14	58	-61	-58	7	1	15	44	-47	-44	4	4	15	101	105	-49	-9	8	15	408	-392	12
8	6	14	97	-95	-57	-4	10	14	141	139	26	8	1	15	45	13	-45	5	4	15	619	594	10	-8	8	15	81	70	-69
-10	7	14	160	-155	25	-3	10	14	163	-175	22	-11	2	15	256	241	17	6	4	15	44	7	-44	-7	8	15	420	-400	11
-9	7	14	302	-310	14	-2	10	14	449	446	10	-10	2	15	39	54	-39	7	4	15	419	416	13	-6	8	15	107	94	-36
-8	7	14	185	-179	20	-1	10	14	118	-111	-32	-9	2	15	355	351	12	-10	5	15	406	400	12	-5	8	15	265	-253	14
-7	7	14	328	-336	12	0	10	14	384	393	10	-8	2	15	97	86	-40	-9	5	15	160	141	24	-4	8	15	57	-4	-57
-6	7	14	129	-112	26	1	10	14	151	-157	28	-7	2	15	549	536	9	-8	5	15	407	419	12	-3	8	15	387	-385	11
-5	7	14	269	-278	14	2	10	14	213	215	20	-6	2	15	197	185	16	-7	5	15	398	377	11	-2	8	15	233	-245	15
-4	7	14	68	-30	-68	3	10	14	132	-130	-34	-5	2	15	406	394	9	-6	5	15	288	313	13	-1	8	15	196	-215	19
-3	7	14	345	-365	11	4	10	14	116	130	-40	-4	2	15	235	222	14	-5	5	15	437	404	9	0	8	15	346	-348	14
-2	7	14	281	-287	12	5	10	14	43	52	-43	-3	2	15	241	249	14	-4	5	15	92	109	-37	1	8	15	61	-84	-61
-1	7	14	367	-379	11	-7	11	14	353	-354	13	-2	2	15	262	266	13	-3	5	15	419	417	9	2	8	15	471	-471	11
0	7	14	235	-242	16	-6	11	14	70	31	-70	-1	2	15	308	317	12	-2	5	15	35	-45	-35	3	8	15	43	24	-43
1	7	14	306	-305	14	-5	11	14	364	-372	12	0	2	15	455	466	7	-1	5	15	553	549	9	4	8	15	437	-443	13
2	7	14	240	-258	17	-4	11	14	40	72	-40	1	2	15	256	244	16	0	5	15	38	-31	-27	5	8	15	45	-46	-45
3	7	14	196	-219	21	-3	11	14	329	-327	13	2	2	15	390	379	12	1	5	15	460	451	11	6	8	15	380	-346	14
4	7	14	189	-170	22	-2	11	14	185	-172	20	3	2	15	94	109	-46	2	5	15	77	-29	-77	-8	9	15	41	-47	-41
5	7	14	164	-152	26	-1	11	14	218	-211	17	4	2	15	282	279	15	3	5	15	326	350	15	-7	9	15	114	90	-35
6	7	14	196	-172	23	0	11	14	237	-232	12	5	2	15	42	76	-42	4	5	15	104	95	-43	-6	9	15	166	-199	22
7	7	14	85	-43	-85	1	11	14	98	-58	-48	6	2	15	244	244	18	5	5	15	73	39	-73	-5	9	15	65	28	-65
-9	8	14	42	-92	-42	2	11	14	312	-311	15	7	2	15	122	120	-38	6	5	15	222	199	21	-4	9	15	379	-381	12
-8	8	14	39	40	-39	3	11	14	43	72	-43	8	2	15	300	288	17	7	5	15	44	-38	-44	-3	9	15	257	252	15
-7	8	14	39	-89	-39	4	11	14	302	-282	16	-11	3	15	152	179	28	-10	6	15	128	-143	-33	-2	9	15	185	-203	20
-6	8	14	37	-1	-37	-6	12	14	41	62	-41	-10	3	15	63	-72	-63	-9	6	15	231	220	17	-1	9	15	323	322	12
-5	8	14	113	-118	-30	-5	12	14	232	206	17	-9	3	15	69	81	-69	-8	6	15	244	-243	16	0	9	15	208	-207	13

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR C(18) H(16) N(4) Pd

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
-8	6	17	219	-230	18	1	9	17	113	92	-44	2	2	18	64	-90	-64	-4	6	18	156	-143	24	-6	3	19	40	23	-40
-7	6	17	185	183	21	-2	10	17	157	155	27	3	2	18	132	135	-39	-3	6	18	76	-65	-76	-5	3	19	42	-37	-42
-6	6	17	225	-215	17	-1	10	17	130	120	32	4	2	18	85	88	-85	-2	6	18	175	-166	22	-4	3	19	156	131	24
-5	6	17	119	152	-31	-8	0	18	193	193	23	-8	3	18	443	-411	12	-1	6	18	73	-99	-73	-3	3	19	109	-123	-42
-4	6	17	234	-226	16	-7	0	18	198	218	21	-7	3	18	146	-140	26	0	6	18	107	-120	-32	-2	3	19	110	105	-39
-3	6	17	83	75	-66	-6	0	18	345	319	13	-6	3	18	450	-447	11	1	6	18	65	-106	-65	-1	3	19	231	-220	18
-2	6	17	40	-5	-40	-5	0	18	42	-86	-42	-5	3	18	187	-187	19	2	6	18	87	-38	-87	0	3	19	74	66	-53
-1	6	17	83	-46	-62	-4	0	18	478	466	11	-4	3	18	359	-357	12	3	6	18	75	-116	-75	1	3	19	142	-156	34
0	6	17	49	58	-36	-3	0	18	41	36	-41	-3	3	18	401	-404	11	-5	7	18	94	98	-47	2	3	19	92	55	-92
1	6	17	231	-228	20	-2	0	18	502	487	10	-2	3	18	289	-287	13	-4	7	18	240	232	17	-5	4	19	67	-54	-67
2	6	17	160	181	28	-1	0	18	40	44	-40	-1	3	18	378	-362	12	-3	7	18	149	151	26	-4	4	19	163	160	23
3	6	17	172	-189	27	0	0	18	399	385	9	0	3	18	229	-218	13	-2	7	18	152	159	25	-3	4	19	120	-143	-35
4	6	17	183	175	25	1	0	18	107	-122	-50	1	3	18	384	-374	13	-1	7	18	146	157	26	-2	4	19	41	39	-41
-7	7	17	40	-3	-40	2	0	18	215	208	22	2	3	18	44	-65	-44	0	7	18	154	152	19	-1	4	19	62	43	-62
-6	7	17	193	170	20	3	0	18	45	-13	-45	3	3	18	423	-415	13	1	7	18	115	113	-43	0	4	19	110	-128	-31
-5	7	17	68	-50	-68	4	0	18	103	121	-52	4	3	18	45	-77	-45	2	7	18	108	108	-48	1	4	19	110	63	-48
-4	7	17	351	334	12	5	0	18	95	75	-63	-7	4	18	102	-99	-41	-4	8	18	190	-163	21	2	4	19	131	-155	-38
-3	7	17	39	-27	-39	-8	1	18	42	65	-42	-6	4	18	76	52	-76	-3	8	18	95	-95	-51	-5	5	19	155	-155	25
-2	7	17	370	364	12	-7	1	18	458	-431	11	-5	4	18	204	-201	19	-2	8	18	81	-105	-81	-4	5	19	381	-357	12
-1	7	17	40	5	-40	-6	1	18	42	24	-42	-4	4	18	96	106	-43	-1	8	18	61	-46	-61	-3	5	19	41	-47	-41
0	7	17	326	316	10	-5	1	18	447	-436	11	-3	4	18	195	-181	20	0	8	18	130	-111	23	-2	5	19	473	-471	11
1	7	17	74	-35	-74	-4	1	18	41	-40	-41	-2	4	18	40	4	-40	-6	1	19	266	256	16	-1	5	19	72	-72	-72
2	7	17	284	286	16	-3	1	18	217	-221	18	-1	4	18	204	-189	19	-5	1	19	280	301	16	0	5	19	395	-392	10
3	7	17	85	67	-85	-2	1	18	171	-153	21	0	4	18	49	3	-35	-4	1	19	324	309	14	1	5	19	45	-40	-45
4	7	17	160	146	28	-1	1	18	139	-136	27	1	4	18	180	-181	25	-3	1	19	315	306	14	-3	6	19	118	122	-34
-6	8	17	349	343	12	0	1	18	238	-241	13	2	4	18	45	23	-45	-2	1	19	248	253	17	-2	6	19	62	-21	-62
-5	8	17	93	95	-46	1	1	18	45	-2	-45	3	4	18	45	-27	-45	-1	1	19	258	256	16	-1	6	19	41	7	-41
-4	8	17	357	369	12	2	1	18	360	-360	15	4	4	18	45	-2	-45	0	1	19	204	202	15	0	6	19	157	154	20
-3	8	17	156	140	23	3	1	18	64	18	-64	-7	5	18	191	-187	20	1	1	19	234	240	21	-4	0	20	328	341	15
-2	8	17	234	243	17	4	1	18	364	-353	14	-6	5	18	41	-60	-41	2	1	19	162	170	32	-3	0	20	66	-79	-66
-1	8	17	189	180	19	5	1	18	46	2	-46	-5	5	18	170	-148	20	3	1	19	231	233	21	-2	0	20	306	304	14
0	8	17	76	110	-45	-8	2	18	147	171	28	-4	5	18	131	-140	29	-6	2	19	76	-87	-76	-1	0	20	60	80	-60
1	8	17	365	349	14	-7	2	18	150	127	27	-3	5	18	158	-159	23	-5	2	19	43	9	-43	0	0	20	274	276	12
2	8	17	78	-4	-78	-6	2	18	109	-80	-37	-2	5	18	124	-141	-33	-4	2	19	83	-106	-83	-4	1	20	112	116	-39
3	8	17	322	307	16	-5	2	18	339	316	13	-1	5	18	81	-88	-81	-3	2	19	41	47	-41	-3	1	20	41	38	-41
-5	9	17	175	158	23	-4	2	18	40	-37	-40	0	5	18	167	-156	18	-2	2	19	119	-109	-34	-2	1	20	102	56	-46
-4	9	17	201	-193	18	-3	2	18	313	328	14	1	5	18	44	-57	-44	-1	2	19	41	-6	-41	-1	1	20	139	126	30
-3	9	17	272	264	15	-2	2	18	83	-85	-59	2	5	18	195	-193	24	0	2	19	42	8	-30	0	1	20	44	25	-31
-2	9	17	253	-246	16	-1	2	18	254	239	15	3	5	18	45	-21	-45	1	2	19	121	-86	-44	-3	2	20	251	249	17
-1	9	17	131	137	31	0	2	18	151	-155	19	-6	6	18	218	-201	18	2	2	19	46	6	-46	-2	2	20	79	-99	-79
0	9	17	50	-74	-37	1	2	18	168	170	29	-5	6	18	172	-146	23	3	2	19	184	-184	26	-1	2	20	216	197	19