

[Mn(TCNQ-TCNQ)(MeOH)₂·2MeOH]_∞, (9)

X-ray Data Collection, Structure Determination and Refinement for [Mn(TCNQ-TCNQ)(MeOH)₂·(MeOH)₂]_∞ (9).

A blue crystal of the title compound was mounted on a fiber and transferred to the goniometer. The crystal was cooled to -100°C during data collection by using a stream of cold nitrogen gas. The space group was determined to be either centric P-1 or acentric P1. The subsequent solution and successful refinement of the structure was carried out in the centric space group P-1. A summary of data collection parameters is given in Table I.

The methyl hydrogen atoms were included as a rigid group with rotational freedom at the bonded carbon atom ($B = 1.2 \cdot U_{eq}(C)$). The alcoholic hydrogen atoms were located from a difference Fourier map and refined isotropically. Refinement of nonhydrogen atoms was carried out with anisotropic temperature factors. The final values of the positional parameters are given in Table 2.

Table 1. Crystal data and structure refinement

Compound	[Mn(TCNQ-TCNQ)(MeOH) ₂ ·2MeOH] _∞
Color / Shape	Green / Parallelepiped
Empirical formula	C ₂₈ H ₂₄ MnN ₈ O ₄
Formula weight	591.49
Temperature	293(2) K
Crystal system	Triclinic
Space group	P $\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 7.2966(8) \text{ \AA}$ $\alpha = 76.112(2)^\circ$
(2581 reflections	$b = 7.4289(8) \text{ \AA}$ $\beta = 87.242(2)^\circ$
in full θ range)	$c = 14.060(2) \text{ \AA}$ $\gamma = 71.891(2)^\circ$
Volume	702.91(13) $\text{\AA}^3$
Z	1
Density (calculated)	1.397 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.518 mm ⁻¹
Diffractometer / scan	Siemens SMART / CCD area detector
Radiation / wavelength	MoK α (graphite monochrom.) / 0.71073 $\text{\AA}$
F(000)	305
Crystal size	0.05 x 0.10 x 0.10 mm
θ range for data collection	1.49 to 23.24 $^\circ$
Index ranges	$-8 \leq h \leq 6$, $-8 \leq k \leq 4$, $-15 \leq l \leq 15$
Reflections collected	2870
Independent / observed refls.	1967(R _{int} = 0.0544) / 1935([I > 2 σ (I)])
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Computing	SHELXTL, Ver. 5 ¹
Data / restraints / parameters	1962 / 0 / 198
Goodness-of-fit on F ²	1.321
SHELX-93 weight parameters	0.0000, 2.8845
Final R indices [I > 2 σ (I)]	R1 = 0.0687, wR2 = 0.1546
R indices (all data)	R1 = 0.0720, wR2 = 0.1594
Extinction coefficient	0.006(3)
Largest diff. peak and hole	0.480 and -0.595 e $\text{\AA}^{-3}$

Table 2. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ-TCNQ})(\text{MeOH})_2 \cdot 2\text{MeOH}]_\infty$ (9).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)
Mn	10000	0	10000	17(1)
O(1)	9147(6)	3122(6)	9374(3)	35(1)
O(2)	7350(6)	5807(7)	10312(3)	43(1)
N(1)	8543(7)	-490(7)	8780(3)	33(1)
N(2)	2593(6)	-98(7)	9137(3)	32(1)
N(3)	7783(8)	-4028(8)	3530(4)	45(1)
N(4)	1613(8)	-2254(8)	3798(4)	44(1)
C(1)	5357(7)	-1213(7)	7115(3)	21(1)
C(2)	6969(7)	-1907(7)	6582(4)	22(1)
C(3)	6842(8)	-2700(7)	5805(4)	24(1)
C(4)	5066(8)	-2748(7)	5511(4)	23(1)
C(5)	3412(8)	-1896(8)	5984(4)	27(1)
C(6)	3557(7)	-1128(8)	6763(4)	24(1)
C(7)	5477(7)	-578(7)	8013(3)	20(1)
C(8)	7205(7)	-554(7)	8408(3)	21(1)
C(9)	3903(8)	-294(8)	8633(4)	26(1)
C(10)	4928(8)	-3850(8)	4746(4)	26(1)
C(11)	6515(8)	-3922(8)	4047(4)	27(1)
C(12)	3072(9)	-2958(8)	4187(4)	28(1)
C(13)	8873(9)	4025(9)	8344(4)	41(2)
C(14)	6118(11)	5562(12)	11096(5)	59(2)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table 3. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for [Mn(TCNQ-TCNQ)(MeOH)₂·2MeOH]_∞, (9).

Mn-O(1)	2.172(4)	Mn-N(2)#2	2.189(4)
Mn-N(1)	2.219(4)	O(1)-C(13)	1.437(7)
O(2)-C(14)	1.402(7)	N(1)-C(8)	1.148(6)
N(2)-C(9)	1.156(7)	N(3)-C(11)	1.144(7)
N(4)-C(12)	1.131(7)	C(1)-C(2)	1.391(7)
C(1)-C(6)	1.403(7)	C(1)-C(7)	1.464(7)
C(2)-C(3)	1.379(7)	C(3)-C(4)	1.392(7)
C(4)-C(5)	1.396(7)	C(4)-C(10)	1.524(7)
C(5)-C(6)	1.374(7)	C(7)-C(9)	1.402(7)
C(7)-C(8)	1.409(7)	C(10)-C(11)	1.479(7)
C(10)-C(12)	1.479(8)	C(10)-C(10)#5	1.659(10)
O(1)-Mn-O(1)#1	180.0	O(1)-Mn-N(2)#2	85.2(2)
O(1)#1-Mn-N(2)#2	94.8(2)	N(2)#2-Mn-N(2)#3	180.0
O(1)-Mn-N(1)	91.8(2)	O(1)#1-Mn-N(1)	88.2(2)
N(2)#2-Mn-N(1)	90.6(2)	N(2)#3-Mn-N(1)	89.4(2)
N(1)-Mn-N(1)#1	180.0	C(13)-O(1)-Mn	124.9(4)
C(8)-N(1)-Mn	152.1(4)	C(9)-N(2)-Mn#4	172.2(4)
C(2)-C(1)-C(6)	117.6(4)	C(2)-C(1)-C(7)	122.7(4)
C(6)-C(1)-C(7)	119.8(4)	C(3)-C(2)-C(1)	121.3(5)
C(2)-C(3)-C(4)	120.3(5)	C(3)-C(4)-C(5)	118.9(4)
C(3)-C(4)-C(10)	121.0(5)	C(5)-C(4)-C(10)	119.8(4)
C(6)-C(5)-C(4)	120.2(5)	C(5)-C(6)-C(1)	121.2(5)
C(9)-C(7)-C(8)	114.8(4)	C(9)-C(7)-C(1)	120.2(4)
C(8)-C(7)-C(1)	124.0(4)	N(1)-C(8)-C(7)	175.4(5)
N(2)-C(9)-C(7)	178.2(5)	C(11)-C(10)-C(12)	108.6(4)
C(11)-C(10)-C(4)	112.0(4)	C(12)-C(10)-C(4)	111.4(4)
C(11)-C(10)-C(10)#5	106.0(5)	C(12)-C(10)-C(10)#5	106.8(5)
C(4)-C(10)-C(10)#5	111.8(5)	N(3)-C(11)-C(10)	177.7(6)
N(4)-C(12)-C(10)	176.8(6)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+2, -y, -z+2 #2 x+1, y, z #3 -x+1, -y, -z+2 #4 x-1, y, z
 #5 -x+1, -y-1, -z+1

Table 4. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ-TCNQ})(\text{MeOH})_2 \cdot 2\text{MeOH}]_\infty$, (9).

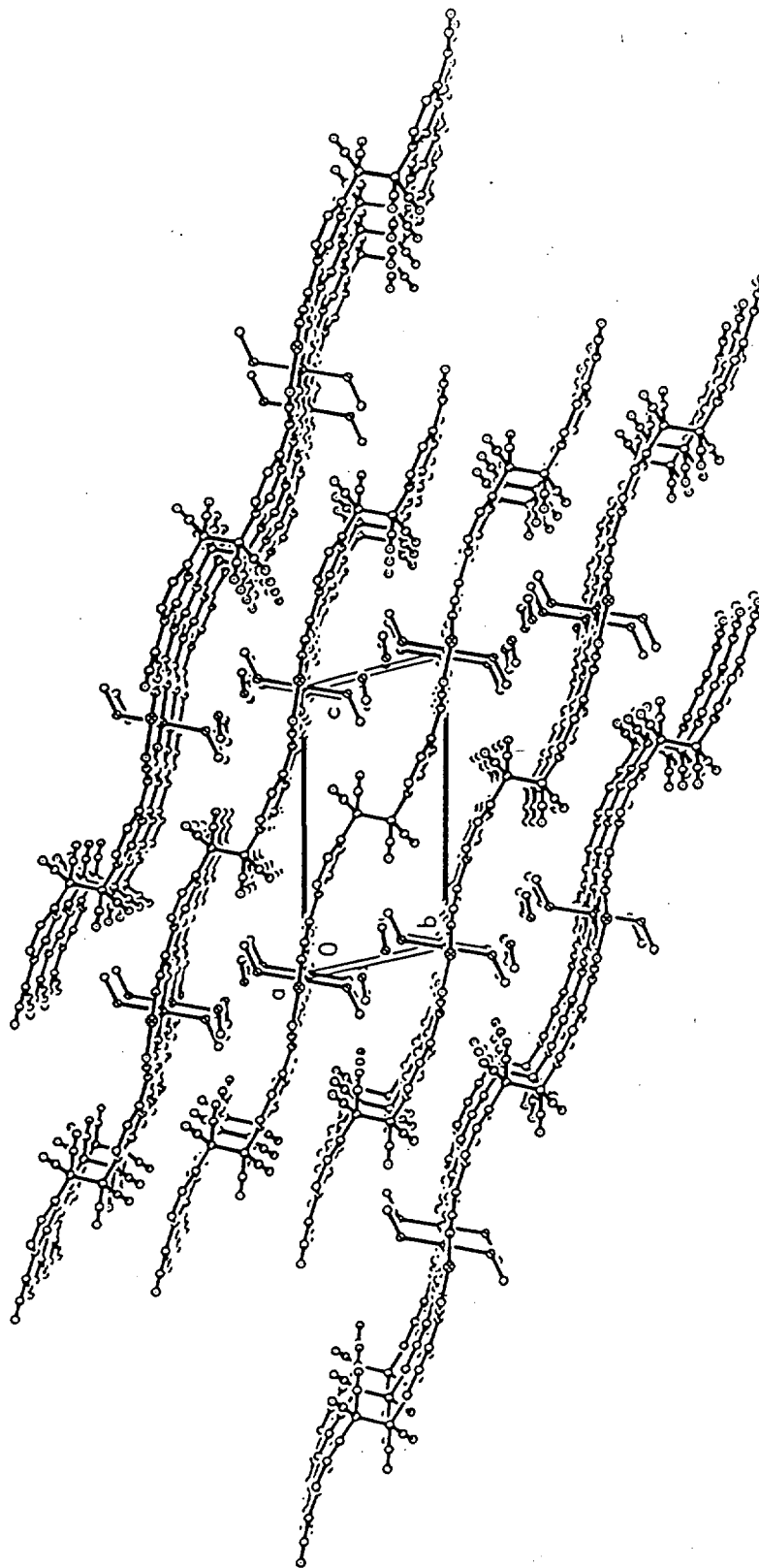
Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	17(1)	26(1)	11(1)	-6(1)	1(1)	-10(1)
O(1)	50(3)	33(2)	22(2)	-8(2)	4(2)	-12(2)
O(2)	51(3)	47(3)	46(3)	-21(2)	18(2)	-30(2)
N(1)	30(3)	54(3)	24(2)	-12(2)	2(2)	-25(2)
N(2)	25(3)	58(3)	21(2)	-16(2)	6(2)	-20(2)
N(3)	57(4)	59(4)	33(3)	-22(3)	20(3)	-33(3)
N(4)	52(4)	45(3)	37(3)	-9(2)	-12(3)	-19(3)
C(1)	28(3)	24(3)	16(2)	-8(2)	-1(2)	-14(2)
C(2)	25(3)	24(3)	20(3)	-10(2)	3(2)	-11(2)
C(3)	28(3)	23(3)	22(3)	-7(2)	5(2)	-12(2)
C(4)	32(3)	24(3)	18(3)	-7(2)	-4(2)	-14(2)
C(5)	25(3)	34(3)	26(3)	-8(2)	-4(2)	-13(2)
C(6)	24(3)	30(3)	23(3)	-11(2)	3(2)	-13(2)
C(7)	17(3)	28(3)	17(3)	-11(2)	5(2)	-8(2)
C(8)	28(3)	26(3)	14(2)	-7(2)	5(2)	-13(2)
C(9)	29(3)	33(3)	21(3)	-10(2)	-5(3)	-13(2)
C(10)	31(3)	34(3)	20(3)	-12(2)	4(2)	-16(2)
C(11)	41(3)	30(3)	19(3)	-11(2)	1(3)	-18(3)
C(12)	39(4)	33(3)	19(3)	-8(2)	-1(3)	-17(3)
C(13)	50(4)	43(4)	22(3)	6(3)	2(3)	-14(3)
C(14)	68(5)	72(5)	56(5)	-29(4)	31(4)	-44(4)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

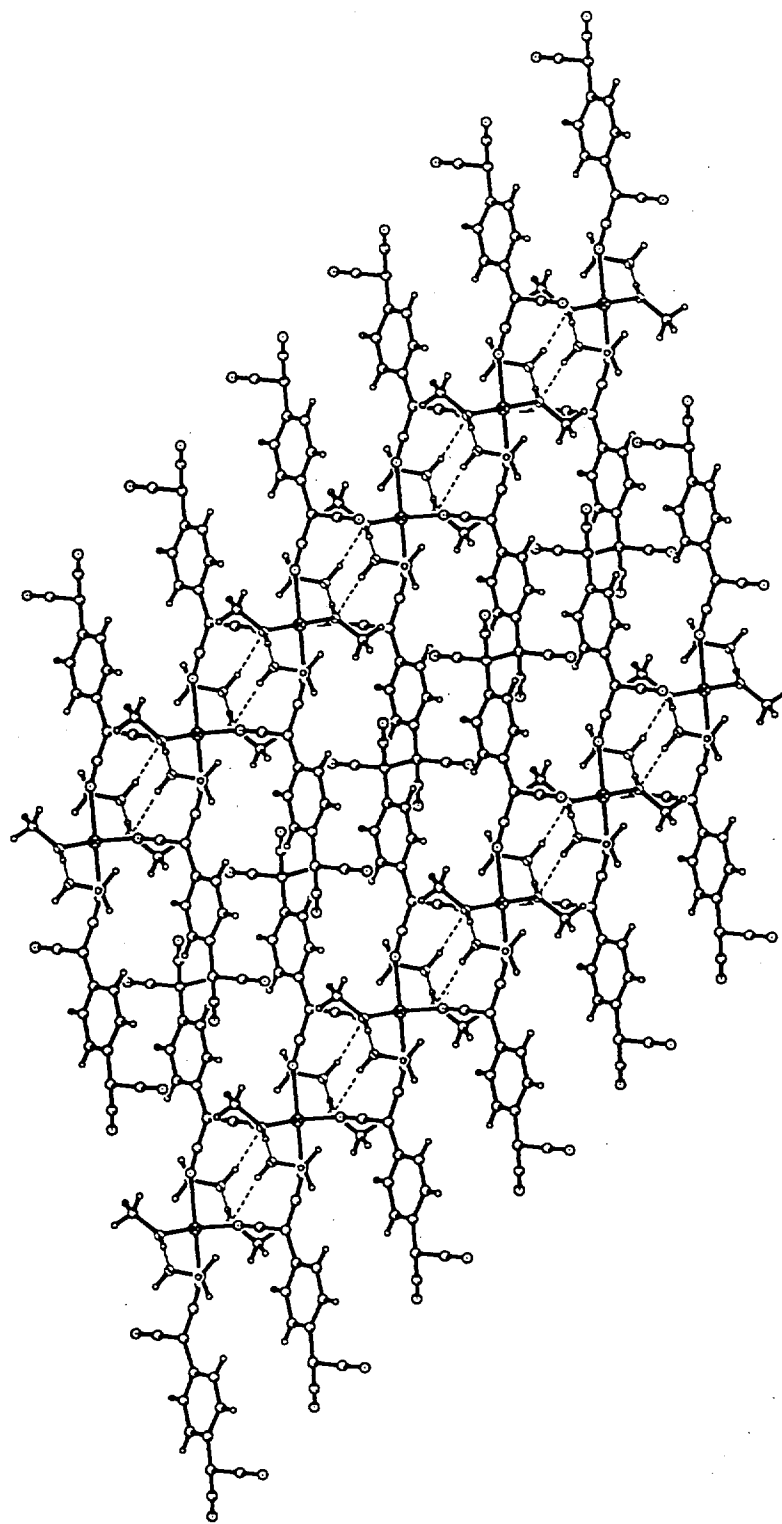
$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12}] .$$

Table 5. Hydrogen Coordinates ($\times 10^6$) and Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ-TCNQ})(\text{MeOH})_2 \cdot 2\text{MeOH}]_\infty$, (9).

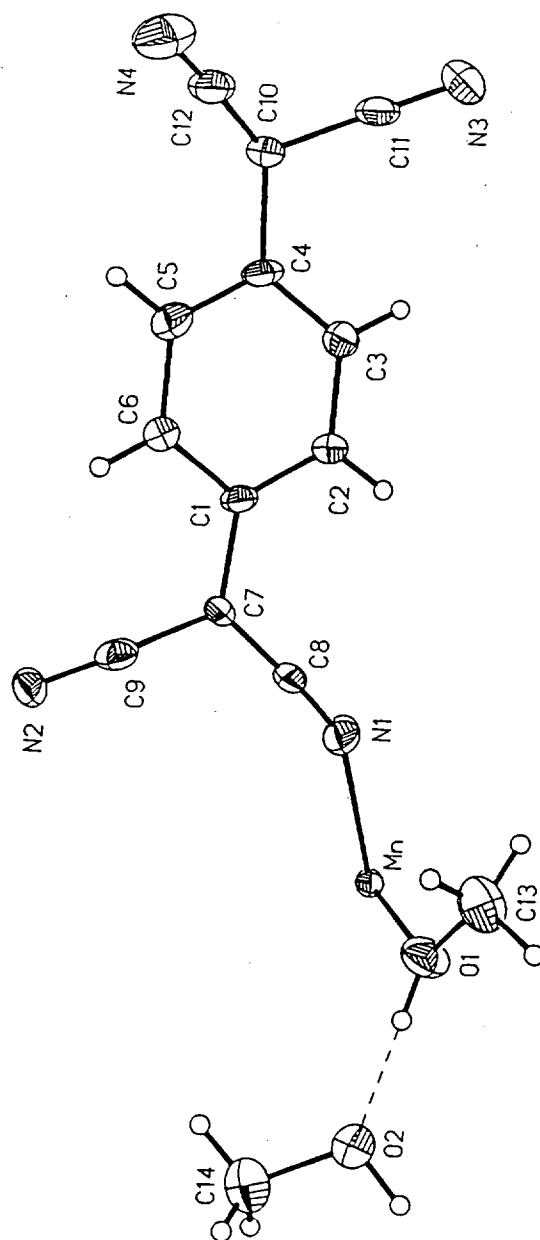
Atom	x	y	z	U(eq)
H(101)	8562(92)	4020(97)	9703(48)	45(19)
H(102)	7843(124)	6778(131)	10344(62)	87(29)
H(2)	8155(7)	-1833(7)	6753(4)	26
H(3)	7948(8)	-3206(7)	5476(4)	28
H(5)	2207(8)	-1849(8)	5770(4)	32
H(6)	2442(7)	-541(8)	7063(4)	29
H(13A)	9174(53)	5230(28)	8213(6)	49
H(13B)	7555(16)	4280(51)	8151(7)	49
H(13C)	9707(40)	3170(25)	7980(4)	49
H(14A)	6835(17)	5196(65)	11704(5)	70
H(14B)	5575(52)	4558(47)	11056(20)	70
H(14C)	5100(38)	6763(22)	11064(19)	70

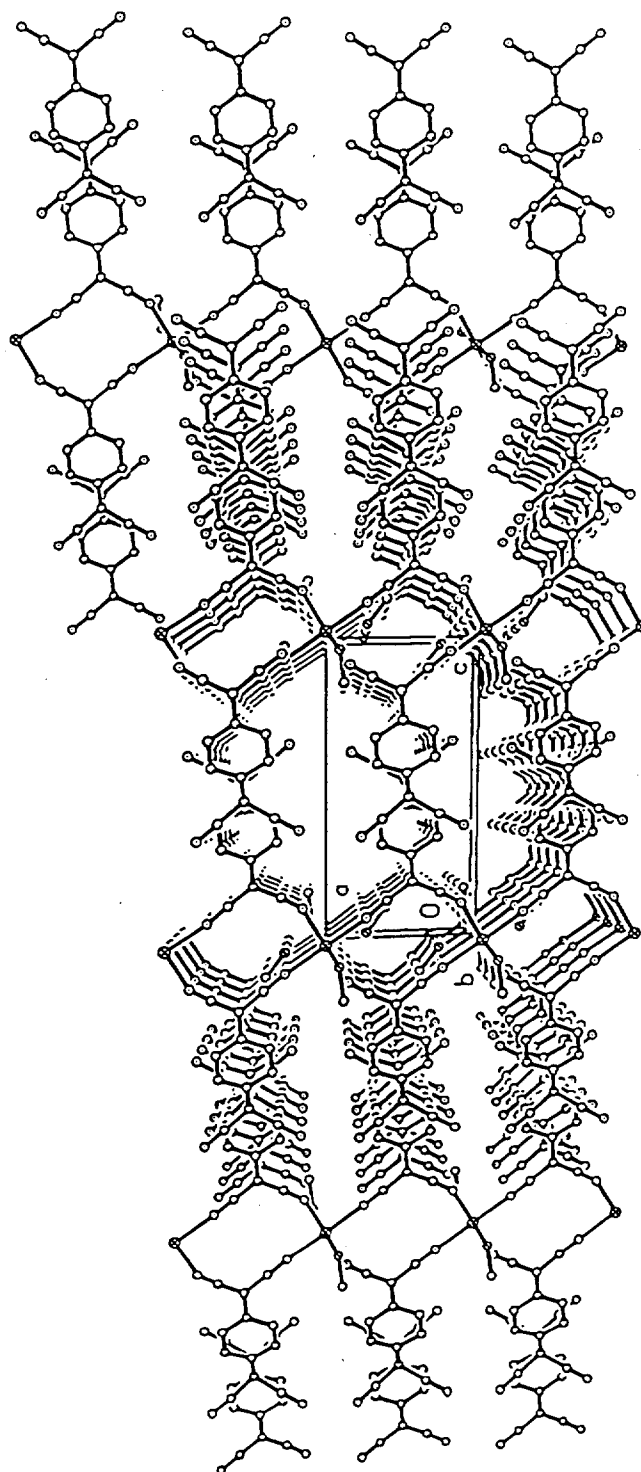


A side view of the stepped layers



A top view of a layer where the dotted lines represent the hydrogen bonds between MeOH molecules





packing diagram

top-view that emphasizes the geometry within the layer
two Mn centers form 12-membered rings which are
bridged by μ_4 -(TCNQ-TCNQ) $_2$ - dimers

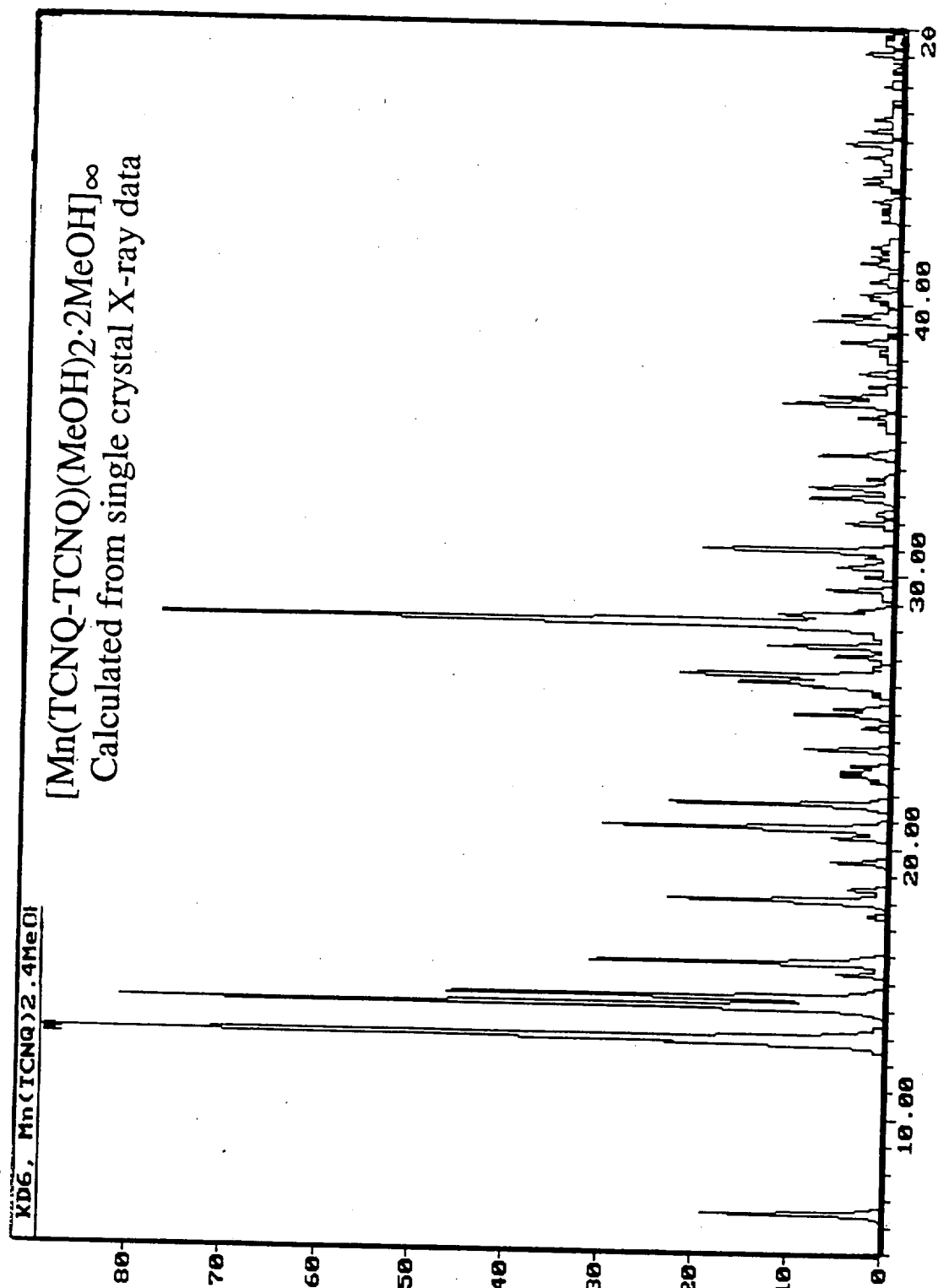


Table of observed and calculated structure factors for $[\text{Mn}(\text{TCNQ-TCNQ})(\text{MeOH})_2 \cdot 2\text{MeOH}]_{\infty}$

Table 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	0	0	289	301	1	2	7	0	44	24	2	5	-1	1	43	10	5	-3	6	1	47	23	2	6	-2	2	114	117	9
2	0	0	164	158	1	3	7	0	110	106	2	6	-1	1	213	205	2	-2	6	1	154	164	2	-7	-1	2	187	200	2
3	0	0	179	187	1	4	7	0	146	140	2	7	-1	1	41	38	2	-1	6	1	58	54	2	-6	-1	2	40	8	16
4	0	0	161	170	3	5	7	0	81	72	2	-7	0	1	233	245	3	0	6	1	94	99	1	-5	-1	2	260	269	2
5	0	0	79	79	1	-5	-7	1	137	124	2	-6	0	1	331	303	4	1	6	1	105	96	13	-4	-1	2	95	89	7
6	0	0	158	156	2	-4	-7	1	70	70	2	-5	0	1	213	217	2	2	6	1	94	111	1	-3	-1	2	168	157	1
7	0	0	73	74	1	-3	-7	1	111	101	2	-4	0	1	99	102	3	3	6	1	21	12	3	-2	-1	2	45	32	1
-7	1	0	151	159	2	-2	-7	1	59	34	2	-3	0	1	248	248	5	4	6	1	109	105	2	-1	-1	2	650	609	20
-6	1	0	50	38	2	-1	-7	1	64	54	19	-2	0	1	482	504	3	5	6	1	83	82	2	0	-1	2	392	386	4
-5	1	0	202	207	5	0	-7	1	109	111	2	-1	0	1	712	733	16	6	6	1	154	155	2	1	-1	2	553	546	4
-4	1	0	64	67	2	1	-7	1	117	126	2	0	0	1	72	192	-41	7	6	1	92	86	2	2	-1	2	71	82	2
-3	1	0	28	10	7	-6	-6	1	165	162	2	1	0	1	525	543	6	-1	7	1	69	75	2	3	-1	2	40	8	5
-2	1	0	51	44	1	-5	-6	1	47	49	2	2	0	1	149	140	2	0	7	1	63	19	14	4	-1	2	100	95	1
-1	1	0	96	107	1	-4	-6	1	133	126	2	3	0	1	53	41	2	1	7	1	102	111	9	5	-1	2	236	227	3
0	1	0	261	267	3	-3	-6	1	70	67	2	4	0	1	118	120	3	2	7	1	121	134	2	6	-1	2	122	125	2
1	1	0	31	29	1	-2	-6	1	45	12	1	5	0	1	127	116	7	3	7	1	83	81	2	7	-1	2	47	50	2
2	1	0	424	419	23	-1	-6	1	86	76	8	6	0	1	78	78	1	4	7	1	56	42	2	-7	0	2	45	37	2
3	1	0	391	386	2	0	-6	1	135	141	2	7	0	1	80	76	2	5	7	1	156	155	2	-6	0	2	130	144	2
4	1	0	184	190	2	1	-6	1	80	79	1	-7	1	1	122	131	2	6	7	1	48	31	2	-5	0	2	56	25	8
5	1	0	61	55	3	2	-6	1	108	104	2	-6	1	1	22	10	3	2	8	1	36	12	3	-4	0	2	240	243	1
6	1	0	153	169	2	3	-6	1	93	94	2	-5	1	1	148	159	1	3	8	1	130	121	2	-3	0	2	323	327	5
7	1	0	127	130	2	-7	-5	1	200	180	3	-4	1	1	35	22	1	-5	-7	2	52	32	2	-2	0	2	380	388	7
-6	2	0	153	140	2	-6	-5	1	60	56	2	-3	1	1	90	88	1	-4	-7	2	141	149	2	-1	0	2	214	212	2
-5	2	0	237	251	4	-5	-5	1	38	28	2	-2	1	1	49	45	1	-3	-7	2	88	90	2	0	0	2	530	505	7
-4	2	0	132	125	1	-4	-5	1	211	209	2	-1	1	1	532	548	14	-2	-7	2	100	103	2	1	0	2	210	215	5
-3	2	0	221	233	9	-3	-5	1	136	145	2	0	1	1	244	272	3	-1	-7	2	57	38	10	2	0	2	157	157	3
-1	2	0	37	26	1	-2	-5	1	65	68	3	1	1	1	236	241	4	0	-7	2	114	126	2	3	0	2	47	51	1
0	2	0	259	287	3	-1	-5	1	68	49	7	2	1	1	264	276	9	-6	-6	2	71	60	2	4	0	2	189	182	1
1	2	0	277	288	22	0	-5	1	144	152	2	3	1	1	121	135	4	-5	-6	2	99	102	2	5	0	2	93	86	7
2	2	0	185	183	9	1	-5	1	125	124	2	4	1	1	364	355	3	-4	-6	2	40	32	2	6	0	2	74	86	1
3	2	0	68	58	1	2	-5	1	55	59	2	5	1	1	161	162	2	-3	-6	2	45	29	2	7	0	2	49	49	2
4	2	0	201	198	2	3	-5	1	88	80	2	6	1	1	161	162	2	-2	-6	2	113	100	2	-7	1	2	57	60	2
5	2	0	153	157	2	4	-5	1	85	74	2	7	1	1	26	23	3	-1	-6	2	67	52	11	-6	1	2	67	75	1
6	2	0	146	144	2	-7	-4	1	57	57	2	-6	2	1	97	95	1	0	-6	2	192	209	2	-5	1	2	21	6	3
7	2	0	93	92	1	-6	-4	1	134	134	2	-5	2	1	50	45	1	1	-6	2	69	71	2	-4	1	2	54	61	1
8	2	0	125	136	2	-5	-4	1	146	158	2	-4	2	1	143	144	5	2	-6	2	94	99	2	-3	1	2	234	245	2
-5	3	0	86	85	2	-4	-4	1	184	188	2	-3	2	1	273	276	8	-7	-5	2	169	167	2	-2	1	2	61	65	1
-4	3	0	75	83	2	-3	-4	1	50	54	1	-2	2	1	183	203	5	-6	-5	2	107	102	2	-1	1	2	359	367	2
-3	3	0	44	49	2	-2	-4	1	120	115	1	-1	2	1	74	85	1	-5	-5	2	60	59	1	0	1	2	29	12	7
-2	3	0	150	173	2	-1	-4	1	133	139	8	0	2	1	115	117	1	-4	-5	2	101	111	2	1	1	2	487	480	4
-1	3	0	383	412	4	0	-4	1	301	323	3	1	2	1	219	230	4	-3	-5	2	53	55	2	2	1	2	366	378	3
0	3	0	393	419	5	1	-4	1	70	60	1	2	2	1	246	247	2	-2	-5	2	58	50	14	3	1	2	427	403	10
1	3	0	81	60	5	2	-4	1	119	124	2	3	2	1	28	10	9	-1	-5	2	51	29	17	4	1	2	78	78	8
2	3	0	142	155	1	3	-4	1	48	39	2	4	2	1	242	244	2	0	-5	2	207	228	2	5	1	2	191	181	6
3	3	0	143	144	1	4	-4	1	45	40	2	5	2	1	200	196	2	1	-5	2	58	60	2	6	1	2	98	102	1
4	3	0	308	296	4	5	-4	1	122	137	2	6	2	1	157	159	2	2	-5	2	74	89	1	7	1	2	50	24	2
5	3	0	31	15	3	-8	-3	1	35	30	2	7	2	1	123	128	2	3	-5	2	47	54	2	-6	2	2	80	88	1
6	3	0	72	80	1	-7	-3	1	172	183	2	8	2	1	148	143	2	4	-5	2	61	61	2	-5	2	2	61	61	10
7	3	0	79	87	1	-6	-3	1	107	113	1	-6	3	1	27	4	3	-7	-4	2	168	162	2	-4	2	2	187	181	2
8	3	0	92	98	2	-5	-3	1	20	8	4	-5	3	1	78	81	2	-6	-4	2	32	10	3	-3	2	2	247	251	3
-5	4	0	70	52	2	-4	-3	1	46	54	2	-4	3	1	117	119	2	-5	-4	2	201	197	2	-2	2	2	165	179	3
-4	4	0	41	20	3	-3	-3	1	185	190	3	-3	3	1	181	197	2	-4	-4	2	66	62	2	-1	2	2	82	97	1
-3	4	0	127	129	2	-2	-3	1	227	248	17	-2	3	1	26	10	3	-3	-4	2	258	258	3	0	2	2	45	47	1
-2	4	0	95	102	1	-1	-3	1	187	202	12	-1	3	1	339	368	4	-2	-4	2	119	116	7	1	2	2	307	19	6
-1	4	0	86	98	1	0	-3	1	384	407	4	0	3	1	274	298	3	-1	-4	2	120	117	2	2	2	2	307	294	10
0	4	0	113	131	1	1	-3	1	217	240	2	1	3	1	275	286	2	0	-4	2	313	330	4	3	2	2	415	403	3
1	4	0	268	270	12	2	-3	1	75	95	1	2	3	1	45	52	2	1	-4	2	122	136	2	5	2	2	199	212	1
2	4	0	33	18	3	3	-3	1	55	37	2	3	3	1	200	201	3	2	-4	2	46	30	2	5	2	2	346	355	4
3	4	0	117	122	1	4	-3	1	61	47	2	4	3	1	41	24	2	3	-4	2	124	122	2	6	2	2	206	206	2
4	4	0	234	241	3	5	-3	1	143	141	2	5	3	1	102	100	1	4	-4										

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD6

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	
7	4	2	68	60	2	-5	-2	3	65	39	25	-2	4	3	155	159	2	2	-3	4	103	101	1	-1	4	4	106	116	1	
-4	5	2	125	118	2	-4	-2	3	134	133	1	-1	4	3	124	139	1	1	-3	-3	4	37	20	2	0	4	4	112	118	18
-3	5	2	89	82	2	-3	-2	3	202	197	2	0	4	3	40	31	1	4	-3	-3	4	72	68	1	1	4	4	290	274	13
-2	5	2	93	94	2	-2	-2	3	195	189	5	1	4	3	394	397	6	5	-3	-3	4	98	86	2	2	4	4	361	359	13
-1	5	2	26	30	3	-1	-2	3	161	162	4	2	4	3	322	325	6	-7	-2	-2	4	82	83	3	3	4	4	58	56	2
0	5	2	28	29	2	0	-2	3	186	181	2	3	4	3	44	38	1	-6	-2	-2	4	76	72	10	4	4	4	124	124	1
1	5	2	38	25	9	1	-2	3	225	229	2	4	4	3	149	155	2	-5	-2	-2	4	55	14	17	5	4	4	60	67	2
2	5	2	179	184	8	2	-2	3	46	8	3	5	4	3	151	152	2	-4	-2	-2	4	265	258	3	6	4	4	46	40	2
3	5	2	183	200	6	3	-2	3	229	237	3	6	4	3	51	40	2	-3	-2	-2	4	96	99	1	7	4	4	89	102	1
4	5	2	168	180	2	4	-2	3	152	156	1	7	4	3	25	14	3	-2	-2	-2	4	167	157	2	-4	5	4	156	149	2
5	5	2	151	154	2	5	-2	3	133	129	4	-4	5	3	69	47	2	-1	-2	-2	4	40	35	5	-3	5	4	68	64	2
6	5	2	102	105	2	6	-2	3	63	55	12	-3	5	3	113	114	2	0	-2	-2	4	220	224	2	-2	5	4	20	9	4
7	5	2	43	41	2	-7	-1	3	31	13	2	-2	5	3	38	34	3	1	-2	-2	4	346	348	4	-1	5	4	21	11	3
-3	6	2	110	112	2	-6	-1	3	295	289	2	-1	5	3	61	55	2	2	-2	-2	4	50	23	8	0	5	4	140	142	15
-2	6	2	96	107	2	-5	-1	3	84	78	2	0	5	3	58	82	1	3	-2	-2	4	193	190	1	1	5	4	44	28	7
-1	6	2	95	91	2	-4	-1	3	85	78	11	1	5	3	377	392	19	4	-2	-2	4	99	100	1	2	5	4	375	375	12
0	6	2	76	71	2	-3	-1	3	327	339	6	2	5	3	136	132	5	5	-2	-2	4	99	100	4	3	5	4	140	145	1
1	6	2	220	253	17	-2	-1	3	455	439	26	3	5	3	129	136	5	6	-2	-2	4	126	120	1	4	5	4	182	177	2
2	6	2	52	33	18	-1	-1	3	77	68	3	4	5	3	305	300	4	-7	-1	-1	4	52	53	2	5	5	4	116	115	2
3	6	2	76	71	1	0	-1	3	112	102	1	5	5	3	168	172	2	-6	-1	-1	4	132	140	3	6	5	4	82	71	2
4	6	2	79	77	2	1	-1	3	58	71	1	6	5	3	29	9	3	-5	-1	-1	4	178	188	1	7	5	4	44	32	2
5	6	2	104	104	2	2	-1	3	238	243	2	7	5	3	154	164	2	-4	-1	-1	4	68	61	1	-3	6	4	110	107	2
6	6	2	45	39	2	3	-1	3	152	150	1	-3	6	3	67	56	2	-3	-1	-1	4	170	171	5	-2	6	4	41	39	2
7	6	2	61	64	2	4	-1	3	132	125	1	-2	6	3	104	105	2	-2	-1	-1	4	311	304	6	-1	6	4	124	131	2
-1	7	2	42	20	2	5	-1	3	194	183	2	-1	6	3	71	62	2	-1	-1	-1	4	105	94	7	0	6	4	95	79	25
0	7	2	113	113	25	6	-1	3	133	123	9	0	6	3	69	63	22	0	-1	-1	4	83	67	1	1	6	4	49	19	14
1	7	2	180	194	22	7	-1	3	31	16	2	1	6	3	81	56	11	1	-1	-1	4	161	160	2	2	6	4	97	95	3
2	7	2	76	66	1	-7	0	3	82	87	1	2	6	3	223	223	9	2	-1	-1	4	216	212	2	3	6	4	39	42	2
3	7	2	103	101	2	-6	0	3	51	48	1	3	6	3	48	22	5	3	-1	-1	4	217	212	1	4	6	4	43	21	2
4	7	2	220	220	3	-5	0	3	51	55	5	4	6	3	85	82	1	4	-1	-1	4	84	74	1	5	6	4	196	186	2
5	7	2	55	49	2	-4	0	3	256	255	1	5	6	3	47	28	2	5	-1	-1	4	142	136	3	6	6	4	79	64	2
6	7	2	36	13	3	-3	0	3	361	355	5	6	6	3	60	63	2	6	-1	-1	4	107	100	5	7	6	4	116	120	2
7	7	2	86	63	24	-2	0	3	242	237	4	7	6	3	110	113	2	-6	0	-1	4	122	121	8	-1	7	4	42	15	2
2	8	2	129	119	2	-1	0	3	270	262	1	-1	7	3	60	66	2	-5	0	-1	4	34	6	4	0	7	4	150	159	2
3	8	2	39	22	3	0	0	3	210	212	4	0	7	3	75	57	23	-4	0	-1	4	359	347	4	1	7	4	138	127	4
4	8	2	90	83	2	1	0	3	407	405	6	1	7	3	139	126	4	-3	0	-1	4	209	219	2	2	7	4	151	144	4
-4	-7	3	117	122	2	2	0	3	489	480	5	2	7	3	180	177	8	-2	0	-1	4	664	629	11	3	7	4	59	19	2
-3	-7	3	84	79	2	3	0	3	246	242	3	3	7	3	69	55	2	-1	0	-1	4	196	180	1	4	7	4	84	77	2
-2	-7	3	64	51	2	4	0	3	66	76	2	4	7	3	86	57	2	0	0	-1	4	464	440	4	5	7	4	54	28	2
-1	-7	3	64	37	2	5	0	3	232	231	3	5	7	3	116	117	2	1	0	-1	4	483	489	6	6	7	4	60	40	2
0	-7	3	107	107	2	6	0	3	162	162	2	6	7	3	63	32	2	2	0	-1	4	448	403	8	1	8	4	54	30	2
-6	-6	3	41	5	3	7	0	3	18	11	5	1	8	3	73	22	24	3	0	-1	4	176	149	2	2	8	4	120	121	2
-5	-6	3	72	80	2	-7	1	3	26	13	2	2	8	3	100	86	10	4	0	-1	4	328	324	3	3	8	4	82	46	2
-4	-6	3	47	15	2	-6	1	3	98	116	1	3	8	3	104	85	2	5	0	-1	4	141	151	1	4	8	4	149	146	2
-3	-6	3	121	109	2	-5	1	3	45	39	1	4	8	3	77	69	2	-5	0	-1	4	30	7	2	-5	-6	5	62	66	2
-2	-6	3	163	152	2	-4	1	3	69	61	3	-4	-7	4	73	69	2	7	0	-1	4	54	33	3	-4	-6	5	72	58	2
-1	-6	3	81	66	8	-3	1	3	31	7	1	-3	-7	4	101	94	2	-5	1	-1	4	103	108	5	-3	-6	5	103	103	2
0	-6	3	125	129	2	-2	1	3	410	402	7	-2	-7	4	78	66	2	-4	1	-1	4	72	75	2	-2	-6	5	190	188	2
1	-6	3	98	106	2	-1	1	3	339	340	11	-1	-7	4	68	41	2	-3	1	-1	4	141	143	1	-1	-6	5	167	159	2
2	-6	3	38	37	2	0	1	3	324	326	5	-5	-6	4	98	88	2	-2	1	-1	4	431	417	6	0	-6	5	41	24	2
-7	-5	3	150	170	2	1	1	3	169	163	9	-4	-6	4	86	79	2	-1	1	-1	4	258	265	4	1	-6	5	88	98	2
-6	-5	3	28	25	2	2	1	3	424	423	9	-3	-6	4	45	21	2	0	1	-1	4	125	126	1	-6	-5	5	229	253	3
-5	-5	3	70	65	1	3	1	3	236	229	8	-2	-6	4	92	83	2	1	1	-1	4	190	181	1	-5	-5	5	34	10	3
-4	-5	3	50	32	2	4	1	3	54	62	1	-1	-6	4	228	243	16	2	1	-1	4	235	241	4	-4	-5	5	85	84	1
-3	-5	3	142	152	2	5	1	3	109	111	1	0	-6	4	67	73	1	3	1	-1	4	78	81	1	-3	-5	5	85	88	2
-2	-5	3	97	97	2	6	1	3	107	117	1	1	-6	4	53	55	2	4	1	-1	4	235	239	2	-2	-5	5	193	197	1
-1	-5	3	40	13	4	7	1	3	59	43	2	2	-6	4	62	65	2	5	1	-1	4	167	172	1	-1	-5	5	47	16	4
0	-5	3	150	158	2	-6	2	3	114	117	1	-6	-5	4	68	55	2	6	1	-1	4	64	65	1	0	-5	5	126	135	2
1	-5	3	154	157	2	-5	2																							

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD6

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	5	54	6	24	3	4	5	78	66	1	5	-2	6	55	6	8	3	5	6	46	35	4	0	0	7	257	244	11
-4	-2	5	167	164	2	4	4	5	50	30	4	-7	-1	6	75	72	2	4	5	6	228	243	11	0	0	7	68	46	1
-3	-2	5	78	77	1	5	4	5	120	110	2	-6	-1	6	168	174	2	5	5	6	53	44	2	2	0	7	254	245	8
-2	-2	5	344	338	8	6	4	5	135	138	2	-5	-1	6	143	145	2	6	5	6	173	176	2	3	0	7	127	124	1
-1	-2	5	194	182	1	7	4	5	84	83	2	-4	-1	6	50	36	7	7	5	6	116	118	2	4	0	7	31	22	3
0	-2	5	101	97	1	-4	5	5	63	49	2	-3	-1	6	386	357	3	-3	6	6	69	56	2	5	0	7	33	13	2
1	-2	5	189	187	2	-3	5	5	65	77	1	-2	-1	6	90	94	1	-2	6	6	41	31	2	6	0	7	161	156	6
2	-2	5	337	350	7	-2	5	5	18	6	5	-1	-1	6	77	54	5	-1	6	6	214	209	3	-6	1	7	31	8	3
3	-2	5	54	35	2	-1	5	5	28	32	2	0	-1	6	96	75	1	0	6	6	31	9	2	-5	1	7	230	225	3
4	-2	5	213	215	3	0	5	5	174	162	3	1	-1	6	20	22	2	1	6	6	48	38	2	-4	1	7	136	135	2
5	-2	5	118	118	2	1	5	5	248	261	4	2	-1	6	326	315	4	2	6	6	74	73	1	-3	1	7	48	17	12
6	-2	5	56	12	14	2	5	5	160	157	5	3	-1	6	309	308	9	3	6	6	248	253	2	-2	1	7	180	175	1
-7	-1	5	58	43	2	3	5	5	196	193	3	4	-1	6	100	97	6	4	6	6	107	100	2	-1	1	7	324	307	2
-6	-1	5	141	141	4	4	5	5	115	113	1	5	-1	6	118	104	5	5	6	6	157	151	2	0	1	7	214	209	2
-5	-1	5	128	137	2	5	5	5	63	44	2	6	-1	6	64	42	6	6	6	6	144	137	2	1	1	7	225	223	1
-4	-1	5	115	115	6	6	5	5	60	47	2	-6	0	6	122	106	2	-1	7	6	200	202	2	2	1	7	202	199	3
-3	-1	5	76	73	3	7	5	5	86	83	2	-5	0	6	118	109	2	0	7	6	61	32	2	3	1	7	169	174	4
-2	-1	5	417	386	9	-3	6	5	93	85	2	-4	0	6	164	169	5	1	7	6	86	85	1	4	1	7	88	90	2
-1	-1	5	37	13	8	-2	6	5	104	98	2	-3	0	6	228	230	4	2	7	6	186	178	2	5	1	7	30	6	3
0	-1	5	120	98	1	-1	6	5	34	5	2	-2	0	6	145	139	3	3	7	6	40	6	2	6	1	7	98	100	2
1	-1	5	122	125	1	0	6	5	76	70	1	-1	0	6	133	133	2	5	7	6	231	243	3	7	1	7	72	47	2
2	-1	5	364	375	4	1	6	5	40	23	2	0	0	6	152	151	6	1	8	6	46	45	2	-6	2	7	61	45	3
3	-1	5	116	106	3	2	6	5	227	228	11	1	0	6	229	240	9	2	8	6	84	69	2	-5	2	7	190	197	2
4	-1	5	195	198	2	3	6	5	50	32	14	2	0	6	175	170	3	-3	-6	7	73	79	2	-4	2	7	121	128	2
5	-1	5	194	191	2	4	6	5	135	134	2	3	0	6	89	80	1	-2	-6	7	37	19	2	-3	2	7	95	102	6
6	-1	5	93	86	4	5	6	5	57	27	3	4	0	6	156	155	1	-1	-6	7	125	124	2	-2	2	7	184	198	7
-6	0	5	245	231	3	6	6	5	207	201	3	5	0	6	131	138	1	-5	-5	7	74	68	2	-1	2	7	346	330	3
-5	0	5	74	64	3	-1	7	5	100	104	2	6	0	6	79	16	13	-4	-5	7	32	15	2	0	2	7	17	13	2
-4	0	5	88	90	1	0	7	5	139	136	2	-6	1	6	104	96	2	-3	-5	7	157	156	2	1	2	7	231	218	2
-3	0	5	478	456	8	1	7	5	120	119	2	-5	1	6	185	191	2	-2	-5	7	84	87	2	2	2	7	172	181	6
-2	0	5	134	117	2	2	7	5	43	29	2	-4	1	6	78	69	1	-1	-5	7	138	132	2	3	2	7	251	236	4
-1	0	5	146	145	2	3	7	5	75	65	10	0	5	6	38	22	7	0	-5	7	56	52	1	4	2	7	25	22	2
0	0	5	262	258	2	4	7	5	126	135	2	-2	1	6	112	116	2	1	-5	7	65	66	1	5	2	7	173	165	3
1	0	5	310	315	2	5	7	5	84	69	2	-1	1	6	348	338	9	-2	-5	7	159	177	2	6	2	7	146	133	2
2	0	5	140	134	1	6	7	5	128	134	2	0	1	6	519	494	10	-6	-4	7	132	141	2	7	2	7	110	101	2
3	0	5	114	114	1	1	8	5	57	45	2	1	1	6	103	86	1	-5	-4	7	75	78	1	-5	3	7	75	62	2
4	0	5	119	114	1	2	8	5	101	104	2	2	1	6	286	278	2	-4	-4	7	108	121	1	-4	3	7	138	135	4
5	0	5	77	72	2	4	8	5	55	29	2	3	1	6	311	316	7	-3	-4	7	117	110	2	-3	3	7	37	9	6
6	0	5	90	58	11	-4	-6	6	137	134	2	4	1	6	25	7	1	-2	-4	7	50	38	2	-2	3	7	33	6	2
7	0	5	77	76	2	-3	-6	6	86	87	2	-1	-4	7	36	21	2	-1	-4	7	63	49	4	-1	3	7	171	175	3
-6	1	5	110	108	2	-2	-6	6	204	207	2	6	1	6	129	131	3	0	-4	7	132	145	2	0	3	7	235	230	2
-5	1	5	86	77	2	-1	-6	6	63	21	2	7	1	6	84	74	2	1	-4	7	68	74	2	1	3	7	194	191	2
-4	1	5	133	138	1	0	-6	6	63	59	2	-6	2	6	132	111	2	2	-4	7	139	146	2	2	3	7	90	85	3
-3	1	5	316	308	9	-6	-5	6	53	29	2	-5	2	6	53	46	2	3	-4	7	109	99	2	3	3	7	53	48	6
-2	1	5	161	175	3	-5	-5	6	33	21	2	-4	2	6	65	45	19	-6	-3	7	175	167	2	4	3	7	109	111	7
-1	1	5	46	28	1	-4	-5	6	78	75	1	-3	2	6	152	160	4	-5	-3	7	201	202	11	5	3	7	37	18	1
0	1	5	43	48	1	-3	-5	6	116	118	2	-2	2	6	25	11	9	-4	-3	7	83	70	4	6	3	7	200	198	2
1	1	5	341	327	5	-2	-5	6	127	137	2	-1	2	6	25	24	1	-3	-3	7	365	367	2	7	3	7	169	172	2
2	1	5	538	512	4	-1	-5	6	84	68	3	0	2	6	379	360	9	-2	-3	7	137	137	2	-5	4	7	133	108	2
3	1	5	167	168	4	0	-5	6	97	99	1	1	2	6	91	99	1	-1	-3	7	59	44	3	-4	4	7	91	76	18
4	1	5	73	78	1	1	-5	6	100	106	2	2	2	6	607	596	11	0	-3	7	71	67	2	-3	4	7	63	56	4
5	1	5	64	68	3	2	-5	6	101	105	2	3	2	6	38	33	1	1	-3	7	51	13	6	-2	4	7	122	125	1
6	1	5	37	6	2	-6	-4	6	69	71	1	4	2	6	40	41	1	2	-3	7	45	19	1	-1	4	7	275	256	3
7	1	5	132	136	2	-5	-4	6	158	164	2	5	2	6	61	50	2	3	-3	7	158	174	3	0	4	7	106	106	1
-4	2	5	43	26	5	-3	-4	6	64	52	2	6	2	6	177	193	2	-4	-3	7	54	53	2	1	4	7	84	90	1
-3	2	5	160	159	3	-2	-4	6	63	51	2	-5	3	6	244	249	3	-7	-2	7	93	87	2	2	4	7	102	108	1
-2	2	5	86	86	1	-1	-4	6	174	168	4	-4	3	6	69	54	4	-6	-2	7	39	43	2	3	4	7	222	219	4
-1	2	5	29	25	8	0	-4	6	85	71	1	-3	3	6	70	71	8	-4	-2	7	74	61	2	4	4	7	101	96	8
0	2	5	33	20	8	1	-4	6	60	50	1	-2	3	6	27	31	9	-3	-2	7	123	123	3	5	4	7	105	102	2
1	2	5	425	407	11	2	-4	6	132	144	2	-1	3	6	86	93	2	-2	-2	7	141	133	2	6	4	7	137	126	

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD6

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	8	7	52	59	2	4	2	8	82	81	1	1	-1	9	215	205	2	0	-4	10	67	61	1	-1	5	10	62	57	2	
3	8	7	82	87	2	5	2	8	126	127	2	2	-1	9	129	139	2	1	-4	10	109	104	1	0	5	10	92	91	2	
-4	-5	8	59	39	2	6	2	8	87	95	4	4	-1	9	42	34	1	-5	-3	10	104	97	2	0	1	5	10	125	121	2
-3	-5	8	152	175	2	7	2	8	68	70	2	5	-1	9	74	38	2	-4	-3	10	88	76	2	2	5	10	134	143	2	
-2	-5	8	119	124	2	-5	3	8	48	53	2	-6	0	9	126	130	2	-3	-3	10	75	58	2	3	5	10	99	93	1	
-1	-5	8	53	15	2	-4	3	8	92	87	2	-5	0	9	67	63	2	-1	-3	10	122	119	2	4	5	10	145	152	2	
0	-5	8	141	161	2	-3	3	8	58	38	11	-4	0	9	134	140	2	0	-3	10	55	35	2	5	5	10	47	39	2	
-1	-5	8	70	80	2	-2	3	8	81	83	1	-3	0	9	96	105	1	1	-3	10	77	77	3	-2	6	10	54	9	2	
-5	-4	8	94	105	1	-1	3	8	349	351	5	-2	0	9	154	153	3	2	-3	10	63	48	1	-1	6	10	109	109	2	
-4	-4	8	45	38	2	0	3	8	50	51	1	-1	0	9	33	9	8	3	-3	10	147	148	1	0	6	10	38	27	2	
-3	-4	8	57	53	1	1	3	8	74	74	1	0	0	9	99	99	1	-5	-2	10	38	38	2	1	6	10	109	112	2	
-2	-4	8	90	70	2	2	3	8	37	30	1	1	0	9	49	49	1	-4	-2	10	108	110	2	2	6	10	65	51	1	
-1	-4	8	156	143	2	3	3	8	405	406	3	2	0	9	67	78	1	-3	-2	10	156	168	2	3	6	10	142	145	2	
0	-4	8	125	124	1	4	3	8	133	126	1	3	0	9	144	146	2	-2	-2	10	188	184	2	4	6	10	175	180	2	
1	-4	8	121	123	5	5	3	8	268	271	9	4	0	9	108	110	6	-1	-2	10	90	87	3	0	7	10	69	63	2	
2	-4	8	94	101	2	6	3	8	133	129	2	5	0	9	182	179	1	0	-2	10	139	136	2	1	7	10	67	69	2	
3	-4	8	117	124	2	7	3	8	67	72	2	6	0	9	79	82	5	1	-2	10	56	54	1	2	7	10	30	30	2	
-6	-3	8	75	43	2	-4	4	8	94	91	9	-6	1	9	78	82	2	2	-2	10	45	23	2	3	7	10	135	141	2	
-5	-3	8	240	231	3	-3	4	8	47	9	14	-5	1	9	71	66	2	3	-2	10	80	78	2	4	7	10	137	146	2	
-4	-3	8	249	251	3	-2	4	8	226	229	18	-4	1	9	150	163	2	4	-2	10	57	38	1	-3	-4	11	88	48	2	
-3	-3	8	72	63	1	-1	4	8	191	183	1	-3	1	9	69	61	1	-5	-1	10	43	47	2	-4	-3	11	117	108	2	
-2	-3	8	101	100	1	0	4	8	112	110	1	-2	1	9	267	272	2	-4	-1	10	128	132	2	-3	-3	11	54	37	2	
-1	-3	8	56	42	1	1	4	8	33	16	2	-1	1	9	428	426	10	-3	-1	10	145	140	2	-2	-3	11	109	94	2	
0	-3	8	81	61	5	2	4	8	119	123	1	0	1	9	287	281	4	-2	-1	10	187	201	2	0	-3	11	101	102	2	
1	-3	8	40	17	7	3	4	8	151	141	2	1	1	9	107	97	1	-1	-1	10	266	279	13	1	-3	11	89	85	2	
2	-3	8	158	153	3	4	4	8	170	163	3	2	1	9	72	62	2	0	-1	10	283	284	14	2	-3	11	83	85	1	
3	-3	8	91	87	1	5	4	8	282	275	3	3	1	9	190	191	6	1	-1	10	79	84	1	-5	-2	11	78	84	2	
-4	-3	8	70	52	2	6	4	8	171	166	2	4	1	9	52	36	11	2	-1	10	74	77	1	-4	-2	11	131	140	2	
-6	-2	8	71	70	2	7	4	8	51	30	2	5	1	9	105	110	8	3	-1	10	73	74	1	-3	-2	11	67	80	1	
-5	-2	8	106	97	2	-3	5	8	59	18	2	6	1	9	146	149	13	4	-1	10	41	43	2	-2	-2	11	182	179	2	
-4	-2	8	67	54	2	-2	5	8	310	308	4	-5	2	9	84	89	2	5	-1	10	94	49	16	-1	-2	11	55	12	2	
-3	-2	8	197	191	15	-1	5	8	59	64	2	-4	2	9	28	24	3	-5	0	10	94	98	2	0	-2	11	126	121	2	
-2	-2	8	138	138	2	0	5	8	269	274	3	-3	2	9	42	27	7	-4	0	10	70	68	2	1	-2	11	32	16	2	
-1	-2	8	212	205	4	1	5	8	176	172	2	-2	2	9	201	202	10	-3	0	10	46	42	2	2	-2	11	55	51	2	
0	-2	8	293	283	3	2	5	8	24	6	3	-1	2	9	187	177	4	-2	0	10	158	162	4	3	-2	11	86	91	2	
1	-2	8	30	27	2	3	5	8	45	46	1	0	2	9	176	173	2	-1	0	10	39	21	2	-5	-1	11	51	34	2	
2	-2	8	78	78	1	4	5	8	236	243	3	1	2	9	175	173	5	0	0	10	126	125	2	-4	-1	11	88	92	2	
3	-2	8	140	141	2	5	5	8	55	6	-2	2	2	9	185	194	2	1	0	10	79	78	1	-3	-1	11	152	156	2	
-4	-2	8	56	25	1	6	5	8	119	117	2	4	2	9	284	277	2	2	0	10	123	128	2	-2	-1	11	169	172	2	
-5	-2	8	72	21	-1	-2	6	8	150	138	2	4	2	9	178	161	9	3	0	10	237	244	3	-1	-1	11	186	191	3	
-6	-1	8	36	35	3	-1	6	8	56	34	2	5	2	9	228	219	10	4	0	10	28	25	2	0	-1	11	78	78	1	
-5	-1	8	164	168	2	0	6	8	81	74	2	6	2	9	129	138	2	5	0	10	105	110	11	1	-1	11	113	113	2	
-4	-1	8	49	53	1	1	6	8	104	109	1	-5	3	9	91	96	2	-5	1	10	112	116	2	2	-1	11	65	64	2	
-3	-1	8	74	74	1	2	6	8	81	86	1	-4	3	9	132	127	2	-4	1	10	198	198	2	3	-1	11	42	28	2	
-2	-1	8	91	92	2	3	6	8	178	187	2	-3	3	9	71	54	12	-3	1	10	109	112	2	4	-1	11	140	142	2	
-1	-1	8	252	241	2	4	6	8	94	97	1	-2	3	9	268	274	9	-2	1	10	243	232	4	-5	0	11	105	103	2	
0	-1	8	119	113	2	-1	7	8	85	75	2	-1	3	9	83	79	6	-1	1	10	119	121	2	-4	0	11	52	41	2	
1	-1	8	184	180	2	0	7	8	43	16	2	0	3	9	213	212	6	0	1	10	80	84	1	-3	0	11	42	25	2	
2	-1	8	238	238	3	1	7	8	34	11	2	1	3	9	151	150	1	1	1	10	103	104	1	-2	0	11	219	222	3	
3	-1	8	168	181	2	2	7	8	92	88	1	2	3	9	40	35	2	2	1	10	29	6	2	-1	0	11	45	36	1	
-4	-1	8	61	74	1	3	7	8	33	7	2	3	3	9	25	8	2	3	1	10	48	24	2	0	0	11	60	61	1	
-5	-1	8	72	60	3	-3	-5	9	42	23	2	4	3	9	380	369	6	4	1	10	237	231	2	1	0	11	212	210	2	
-6	0	8	90	78	2	-2	-5	9	72	59	2	5	3	9	48	26	4	5	1	10	49	56	1	2	0	11	116	119	2	
-5	0	8	252	247	3	-1	-5	9	120	116	2	6	3	9	114	112	2	-6	1	10	58	58	6	3	0	11	113	95	2	
-4	0	8	45	29	2	-5	-4	9	58	38	2	-4	4	9	42	33	3	-5	2	10	76	80	2	4	0	11	364	365	4	
-3	0	8	141	150	1	-5	-4	9	105	67	2	-3	4	9	35	41	2	-3	2	10	43	40	2	5	0	11	58	48	1	
-2	0	8	248	256	5	-2	-4	9	60	40	1	-2	4	9	364	355	18	-2	2	10	454	456	12	-5	1	11	31	30	3	
-1	0	8	31	35	2	-1	-4	9	129	122	2	-1	4	9	37	34	1	-1	0	10	30	27	1	-4	1	11	157	159	2	
0	0	8	138	129	2	0	-4	9	185	185	1	0	4	9	60	61	1	0	2	10	144	147	1	-3	1	11	252	260	3	
1	0	8	24	13	2	1	-4	9	52	28	2	1	4	9	74</															

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD6

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	4	11	145	135	10	-4	0	12	80	79	2	1	4	12	80	77	1	3	1	13	99	101	2	-2	1	14	17	14	5
-2	4	11	88	82	1	-3	0	12	310	316	4	2	4	12	53	48	2	4	1	13	137	138	2	-1	1	14	54	42	15
-1	4	11	91	98	9	-2	0	12	173	168	2	3	4	12	189	182	2	-3	2	13	124	128	2	0	1	14	137	139	2
0	4	11	36	16	9	-1	0	12	123	119	5	4	4	12	163	181	2	-2	2	13	96	95	18	1	1	14	69	70	2
1	4	11	75	70	1	0	0	12	136	134	2	5	4	12	42	12	2	-1	2	13	137	141	3	2	1	14	113	118	2
2	4	11	29	30	3	1	0	12	114	125	2	-2	5	12	57	44	2	0	2	13	46	39	12	3	1	14	102	98	2
3	4	11	111	118	2	2	0	12	66	67	2	-1	5	12	70	77	2	1	2	13	111	114	2	-2	2	14	24	19	3
4	4	11	135	143	2	3	0	12	238	225	3	0	5	12	142	135	2	2	2	13	34	33	3	-1	2	14	82	84	16
5	4	11	106	110	2	4	0	12	65	60	1	1	5	12	76	59	2	3	2	13	102	108	2	0	2	14	171	172	2
-2	5	11	47	22	2	-4	1	12	126	134	2	2	5	12	144	150	2	4	2	13	125	133	2	1	2	14	61	39	2
-1	5	11	97	95	2	-3	1	12	211	216	3	3	5	12	57	47	2	-3	3	13	66	66	2	2	2	14	227	230	3
0	5	11	148	149	2	-2	1	12	93	90	1	4	5	12	55	37	2	-2	3	13	49	43	7	3	2	14	41	39	2
1	5	11	174	185	2	-1	1	12	161	167	3	5	5	12	108	112	2	-1	3	13	51	35	10	-2	3	14	114	109	10
2	5	11	40	49	2	0	1	12	43	37	3	0	6	12	102	101	2	0	3	13	208	221	12	-1	3	14	64	64	17
3	5	11	115	116	2	1	1	12	33	34	2	1	6	12	46	10	2	1	3	13	96	88	2	0	3	14	134	143	13
4	5	11	147	161	2	2	1	12	45	36	2	2	6	12	152	155	2	2	3	13	188	194	2	1	3	14	164	159	2
5	5	11	42	24	2	3	1	12	203	201	2	3	6	12	95	84	2	3	3	13	100	97	2	2	3	14	120	127	2
-1	6	11	52	44	2	4	1	12	159	154	2	4	6	12	129	122	2	4	3	13	53	60	2	3	3	14	89	87	2
0	6	11	106	111	2	5	1	12	110	128	2	-3	-2	13	242	272	3	-2	4	13	80	54	21	-1	4	14	53	42	9
1	6	11	105	108	2	-4	2	12	86	95	2	-2	-2	13	45	29	2	-1	4	13	131	141	1	0	4	14	72	69	5
2	6	11	59	58	2	-3	2	12	84	92	2	0	-2	13	150	137	2	0	4	13	100	110	3	1	4	14	115	122	2
3	6	11	183	185	2	-2	2	12	237	237	4	1	-2	13	39	35	2	1	4	13	52	41	2	2	4	14	126	119	2
4	6	11	127	132	2	-1	2	12	98	104	2	-3	-1	13	191	215	2	2	4	13	194	204	2	3	4	14	100	108	2
2	7	11	120	121	2	0	2	12	103	106	1	-2	-1	13	94	84	2	3	4	13	70	66	2	0	5	14	54	55	2
-3	-3	12	117	113	2	1	2	12	130	134	2	0	-1	13	106	102	2	4	4	13	41	38	2	1	5	14	94	87	2
-2	-3	12	110	105	2	2	2	12	83	78	1	1	-1	13	84	85	2	-1	5	13	66	23	2	2	5	14	58	47	2
0	-3	12	72	51	2	3	2	12	41	52	2	2	-1	13	54	34	2	0	5	13	114	116	2	0	0	15	132	133	2
1	-3	12	74	50	3	4	2	12	91	96	2	-4	0	13	77	80	2	1	5	13	114	109	2	0	1	15	129	130	2
-4	-2	12	82	91	1	5	2	12	54	49	2	-3	0	13	36	6	3	2	5	13	86	85	2	1	1	15	64	60	2
-3	-2	12	104	115	2	-3	3	12	97	97	2	-2	0	13	169	172	2	3	5	13	54	45	2	2	1	15	105	113	2
-2	-2	12	53	57	1	-2	3	12	76	67	5	-1	0	13	64	68	5	4	5	13	41	20	2	-1	2	15	48	26	13
0	-2	12	52	19	2	-1	3	12	49	31	9	0	0	13	59	58	2	1	6	13	102	115	2	0	2	15	39	10	2
1	-2	12	150	159	2	0	3	12	187	190	10	1	0	13	181	178	2	2	6	13	122	125	2	1	2	15	166	169	2
2	-2	12	64	68	2	1	3	12	232	249	10	2	0	13	106	104	2	-2	-1	14	136	148	2	2	2	15	59	50	2
-4	-1	12	98	109	2	2	3	12	57	50	2	3	0	13	76	75	2	0	-1	14	124	125	2	-1	3	15	59	50	14
-3	-1	12	167	187	2	3	3	12	162	157	2	-4	1	13	166	185	2	1	-1	14	71	48	2	0	3	15	148	147	2
-2	-1	12	58	59	2	4	3	12	148	165	2	-3	1	13	82	79	2	-3	0	14	82	86	2	1	3	15	169	170	2
-1	-1	12	137	145	8	5	3	12	62	69	2	-2	1	13	38	12	2	-2	0	14	73	71	2	2	3	15	75	72	2
0	-1	12	117	121	2	-3	4	12	96	81	10	-1	1	13	96	85	2	0	0	14	97	100	2	1	4	15	108	110	2
1	-1	12	52	45	2	-2	4	12	64	41	22	0	1	13	156	152	2	1	0	14	108	102	2						
2	-1	12	102	105	2	-1	4	12	56	44	12	1	1	13	104	106	1	2	0	14	99	92	2						
3	-1	12	36	13	2	0	4	12	37	32	2	2	1	13	112	113	2	-3	1	14	73	75	2						

X-ray Data Collection, Structure Determination, and Refinement for KD5. A purple crystal of

the compound was mounted on a fiber and transferred to the goniometer. The crystal was cooled to -100°C during data collection by using a stream of cold nitrogen gas.

The systematic absences and cell symmetry originally suggested a C-centered orthorhombic space group. The merging R for all 10,394 collected data on an orthorhombic setting was 8%. In the orthorhombic setting, the space group was determined to be either the centric Cmcm or the acentric C2cm or Cmc2_1 from the systematic absences. Solution of the structure could be carried out in Cmc2_1 , however, the structure was disordered across mirror planes and would not refine. The structure was ultimately solved as a 50/50 twin in C2/c . The structure was solved in C2/c and then refined using the twinning law: 100, 010, 00-1. Refinement of a batch scale factor revealed that the twinning was 50/50. A summary of data collection parameters is given in Table 1.

The methyl group C25 was resolved into two disordered orientation with 45% (C(25)) and 55% (C(25')) occupancy. Each position was refined in alternate least-squares cycles.

The geometrically constrained hydrogen atoms were placed in calculated positions and allowed to ride on the bonded atom with $B = 1.2 \cdot U_{\text{eqv}}(\text{C})$. Alcoholic hydrogen atoms were placed in calculated positions ($B = 1.2 \cdot U_{\text{eqv}}(\text{O})$), with torsional freedom. The methyl hydrogen atoms were included as a rigid group with rotational freedom at the bonded carbon atom ($B = 1.2 \cdot U_{\text{eqv}}(\text{C})$). Refinement of nonhydrogen atoms was carried out with anisotropic temperature factors. The final values of the positional parameters are given in Table 2.

Table 1. Crystal data and structure refinement

Compound	[Mn(TCNQ)(TCNQ-TCNQ) _{0.5} (MeOH) ₂] _∞
Color / Shape	red / parallelepiped
Empirical formula	C ₂₆ H ₁₆ MnN ₈ O ₂
Formula weight	527.41
Temperature	173(2) K
Crystal system	Monoclinic
Space group	C2/c
Unit cell dimensions (4552 reflections in full θ range)	$a = 14.4378(5) \text{ \AA}$ $\alpha = 90^\circ$ $b = 27.3067(11) \text{ \AA}$ $\beta = 90.057(1)^\circ$ $c = 13.1238(5) \text{ \AA}$ $\gamma = 90^\circ$
Volume	5174.0(3) $\text{\AA}^3$
Z	8
Density (calculated)	1.354 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.549 mm ⁻¹
Diffractometer / scan	Siemens SMART / CCD area detector
Radiation / wavelength	MoK α (graphite monochrom.) / 0.71073 $\text{\AA}$
F(000)	2152
Crystal size	0.40 x 0.10 x 0.10 mm
θ range for data collection	1.49 to 23.31 $^\circ$
Index ranges	-15 $\leq h \leq 16$, -27 $\leq k \leq 30$, -12 $\leq l \leq 14$
Reflections collected	10394
Independent / observed refls.	3724 ($R_{\text{int}} = 0.0773$) / 3290 ($[I > 2\sigma(I)]$)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix-block least-squares on F^2
Computing	SHELXTL, Ver. 5 ¹
Data / restraints / parameters	3712 / 0 / 348
Goodness-of-fit on F^2	1.216
SHELX-93 weight parameters	0.0200, 17.9838
Final R indices $[I > 2\sigma(I)]$	$R1 = 0.0678$, $wR2 = 0.1210$
R indices (all data)	$R1 = 0.0812$, $wR2 = 0.1291$
Largest diff. peak and hole	0.342 and -0.659 e $\text{\AA}^{-3}$

Table 2. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ})(\text{TCNQ}-\text{TCNQ})_{0.5}(\text{MeOH})_2]_{\infty}$, (10).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) a
Mn(1)	0	589(1)	2500	23(1)
Mn(2)	5000	516(1)	2500	21(1)
O(1)	-599(3)	624(2)	967(4)	38(1)
O(2)	5183(3)	545(2)	867(3)	37(1)
N(1)	1011(4)	1140(2)	1927(4)	32(1)
N(2)	3928(4)	1081(2)	2202(4)	27(1)
N(3)	1292(5)	4121(2)	379(4)	41(2)
N(4)	4354(5)	4053(2)	572(5)	43(2)
N(5)	1010(4)	23(2)	2124(4)	31(2)
N(6)	3920(4)	-32(2)	2444(5)	31(1)
N(7)	942(5)	-2983(2)	1027(5)	47(2)
N(8)	3964(6)	-2986(3)	1207(6)	58(2)
C(1)	2600(5)	2118(2)	1474(4)	21(1)
C(2)	1783(4)	2398(2)	1241(5)	24(2)
C(3)	1846(5)	2882(2)	993(5)	21(2)
C(4)	2727(5)	3131(2)	948(5)	23(2)
C(5)	3510(4)	2844(2)	1205(5)	23(2)
C(6)	3463(5)	2364(2)	1445(5)	23(2)
C(7)	2507(5)	1614(2)	1728(4)	23(1)
C(8)	1659(5)	1366(2)	1828(6)	28(2)
C(9)	3294(5)	1330(2)	1975(5)	23(2)
C(10)	2764(5)	3631(2)	700(4)	29(2)
C(11)	1967(5)	3908(3)	502(5)	31(2)
C(12)	3635(5)	3873(2)	626(5)	30(2)
C(13)	2441(5)	-1036(2)	1816(4)	22(1)
C(14)	1627(5)	-1276(2)	1576(5)	25(2)
C(15)	1627(5)	-1758(2)	1227(5)	27(2)
C(16)	2439(6)	-2003(2)	1107(4)	24(1)
C(17)	3266(5)	-1774(2)	1393(5)	29(2)
C(18)	3274(5)	-1299(2)	1745(5)	31(2)
C(19)	2437(5)	-522(2)	2120(4)	22(1)

C(20)	1641(5)	-236(2)	2127(5)	25(2)
C(21)	3263(5)	-257(2)	2296(5)	28(2)
C(22)	2474(6)	-2511(2)	622(4)	32(2)
C(23)	1617(6)	-2792(3)	877(6)	33(2)
C(24)	3281(7)	-2789(3)	959(6)	38(2)
C(25) ^b	-1262(16)	353(8)	410(16)	90(9)
C(25') ^b	-1480(11)	522(6)	695(10)	67(5)
C(26)	5991(6)	501(3)	281(6)	53(2)

^aU(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor. ^bC(25) and C(25') are disordered with 45% and 55% occupancy, respectively.

Table 3. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for [Mn(TCNQ(TCNQ-TCNQ)_{0.5}(MeOH)₂]_∞, (10).

Mn(1)-N(5)#1	2.183(6)	Mn(1)-N(5)	2.183(6)
Mn(1)-O(1)	2.191(5)	Mn(1)-O(1)#1	2.191(5)
Mn(1)-N(1)	2.226(6)	Mn(1)-N(1)#1	2.226(6)
Mn(2)-O(2)	2.161(5)	Mn(2)-O(2)#2	2.161(5)
Mn(2)-N(6)	2.161(6)	Mn(2)-N(6)#2	2.161(6)
Mn(2)-N(2)#2	2.222(6)	Mn(2)-N(2)	2.222(6)
O(1)-C(25')	1.35(2)	O(1)-C(25)	1.41(2)
O(2)-C(26)	1.402(9)	N(1)-C(8)	1.129(8)
N(2)-C(9)	1.177(8)	N(3)-C(11)	1.147(9)
N(4)-C(12)	1.150(8)	N(5)-C(20)	1.151(8)
N(6)-C(21)	1.146(8)	N(7)-C(23)	1.124(9)
N(8)-C(24)	1.169(11)	C(1)-C(6)	1.416(9)
C(1)-C(7)	1.421(7)	C(1)-C(2)	1.439(9)
C(2)-C(3)	1.364(9)	C(3)-C(4)	1.444(10)
C(4)-C(10)	1.404(8)	C(4)-C(5)	1.418(9)
C(5)-C(6)	1.349(9)	C(7)-C(8)	1.407(10)
C(7)-C(9)	1.414(10)	C(10)-C(11)	1.401(10)
C(10)-C(12)	1.424(10)	C(13)-C(14)	1.382(9)
C(13)-C(18)	1.405(9)	C(13)-C(19)	1.459(7)
C(14)-C(15)	1.393(9)	C(15)-C(16)	1.359(11)
C(16)-C(17)	1.398(11)	C(16)-C(22)	1.528(7)
C(17)-C(18)	1.377(9)	C(19)-C(20)	1.390(10)
C(19)-C(21)	1.414(10)	C(22)-C(24)	1.459(12)
C(22)-C(23)	1.493(11)	C(22)-C(22)#3	1.635(10)
N(5)#1-Mn(1)-N(5)	89.7(3)	N(5)#1-Mn(1)-O(1)	88.6(2)
N(5)-Mn(1)-O(1)	95.0(2)	N(5)#1-Mn(1)-O(1)#1	95.0(2)
N(5)-Mn(1)-O(1)#1	88.6(2)	O(1)-Mn(1)-O(1)#1	175.1(3)
N(5)#1-Mn(1)-N(1)	173.3(2)	N(5)-Mn(1)-N(1)	87.9(2)
O(1)-Mn(1)-N(1)	85.4(2)	O(1)#1-Mn(1)-N(1)	91.3(2)
N(5)#1-Mn(1)-N(1)#1	87.9(2)	N(5)-Mn(1)-N(1)#1	173.3(2)
O(1)-Mn(1)-N(1)#1	91.3(2)	O(1)#1-Mn(1)-N(1)#1	85.4(2)
N(1)-Mn(1)-N(1)#1	95.1(3)	O(2)-Mn(2)-O(2)#2	175.8(2)
O(2)-Mn(2)-N(6)	94.6(2)	O(2)#2-Mn(2)-N(6)	88.3(2)
O(2)-Mn(2)-N(6)#2	88.3(2)	O(2)#2-Mn(2)-N(6)#2	94.6(2)
N(6)-Mn(2)-N(6)#2	92.5(3)	O(2)-Mn(2)-N(2)#2	93.6(2)

O(2)#2-Mn(2)-N(2)#2	83.5(2)	N(6)-Mn(2)-N(2)#2	171.8(2)
N(6)#2-Mn(2)-N(2)#2	88.4(2)	O(2)-Mn(2)-N(2)	83.5(2)
O(2)#2-Mn(2)-N(2)	93.6(2)	N(6)-Mn(2)-N(2)	88.4(2)
N(6)#2-Mn(2)-N(2)	171.8(2)	N(2)#2-Mn(2)-N(2)	91.9(3)
C(25')-O(1)-Mn(1)	127.2(6)	C(25)-O(1)-Mn(1)	136.0(9)
C(26)-O(2)-Mn(2)	130.1(4)	C(8)-N(1)-Mn(1)	162.2(6)
C(9)-N(2)-Mn(2)	170.6(5)	C(20)-N(5)-Mn(1)	164.1(5)
C(21)-N(6)-Mn(2)	166.8(6)	C(6)-C(1)-C(7)	123.3(6)
C(6)-C(1)-C(2)	117.6(5)	C(7)-C(1)-C(2)	119.1(7)
C(3)-C(2)-C(1)	120.7(6)	C(2)-C(3)-C(4)	121.7(6)
C(10)-C(4)-C(5)	124.3(6)	C(10)-C(4)-C(3)	120.1(6)
C(5)-C(4)-C(3)	115.6(5)	C(6)-C(5)-C(4)	123.6(6)
C(5)-C(6)-C(1)	120.8(6)	C(8)-C(7)-C(9)	114.4(5)
C(8)-C(7)-C(1)	124.8(7)	C(9)-C(7)-C(1)	120.6(7)
N(1)-C(8)-C(7)	175.3(7)	N(2)-C(9)-C(7)	177.5(7)
C(11)-C(10)-C(4)	122.3(6)	C(11)-C(10)-C(12)	117.6(6)
C(4)-C(10)-C(12)	120.1(6)	N(3)-C(11)-C(10)	176.6(7)
N(4)-C(12)-C(10)	177.5(7)	C(14)-C(13)-C(18)	118.0(5)
C(14)-C(13)-C(19)	121.1(7)	C(18)-C(13)-C(19)	120.9(7)
C(13)-C(14)-C(15)	121.6(7)	C(16)-C(15)-C(14)	120.1(7)
C(15)-C(16)-C(17)	119.1(5)	C(15)-C(16)-C(22)	121.6(8)
C(17)-C(16)-C(22)	119.2(7)	C(18)-C(17)-C(16)	121.2(7)
C(17)-C(18)-C(13)	119.8(7)	C(20)-C(19)-C(21)	114.2(5)
C(20)-C(19)-C(13)	123.1(7)	C(21)-C(19)-C(13)	122.2(7)
N(5)-C(20)-C(19)	176.4(7)	N(6)-C(21)-C(19)	178.2(7)
C(24)-C(22)-C(23)	109.1(5)	C(24)-C(22)-C(16)	112.0(6)
C(23)-C(22)-C(16)	110.2(6)	C(24)-C(22)-C(22)#3	106.6(8)
C(23)-C(22)-C(22)#3	106.3(8)	C(16)-C(22)-C(22)#3	112.6(5)
N(7)-C(23)-C(22)	175.5(8)	N(8)-C(24)-C(22)	175.4(9)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x,y,-z+1/2 #2 -x+1,y,-z+1/2 #3 -x+1/2,-y-1/2,-z

Table 4. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for
[Mn(TCNQ(TCNQ-TCNQ)_{0.5}(MeOH)₂]_∞, (10).

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn(1)	22(1)	19(1)	28(1)	0	-1(1)	0
Mn(2)	23(1)	16(1)	25(1)	0	-2(1)	0
O(1)	24(3)	55(3)	35(3)	9(2)	-8(2)	-14(2)
O(2)	24(3)	59(3)	26(2)	10(2)	5(2)	14(2)
N(1)	37(4)	20(3)	41(4)	1(3)	1(3)	-4(3)
N(2)	30(3)	29(3)	23(3)	1(2)	1(2)	-4(3)
N(3)	56(5)	36(4)	32(4)	-2(3)	-5(3)	9(3)
N(4)	53(4)	36(4)	42(4)	4(3)	5(3)	-19(3)
N(5)	26(3)	22(3)	44(4)	-8(2)	0(3)	-3(3)
N(6)	39(3)	23(3)	31(3)	0(3)	-8(4)	-2(3)
N(7)	62(5)	41(4)	38(4)	5(3)	0(4)	-15(4)
N(8)	88(6)	41(4)	44(4)	-2(3)	1(4)	19(4)
C(1)	25(4)	26(3)	13(3)	-6(2)	5(3)	1(3)
C(2)	17(4)	29(4)	27(4)	1(3)	0(3)	2(3)
C(3)	22(4)	21(4)	21(3)	1(3)	5(3)	9(3)
C(4)	29(5)	20(3)	21(3)	1(3)	3(3)	0(3)
C(5)	22(4)	25(4)	22(4)	-2(3)	-1(3)	-5(3)
C(6)	28(4)	22(4)	20(4)	6(3)	1(3)	8(3)
C(7)	33(3)	14(3)	21(3)	1(2)	-8(4)	3(3)
C(8)	37(4)	20(4)	27(4)	-1(3)	-1(3)	-4(3)
C(9)	22(4)	19(4)	30(4)	-2(3)	7(3)	-10(3)
C(10)	49(5)	18(3)	19(3)	-2(3)	-3(3)	3(3)
C(11)	42(5)	27(4)	24(4)	4(3)	-5(3)	-3(4)
C(12)	52(5)	18(4)	22(4)	7(3)	-1(3)	0(4)
C(13)	25(3)	21(3)	19(3)	0(2)	-1(4)	-1(3)
C(14)	25(4)	21(4)	28(4)	0(3)	1(3)	-4(3)
C(15)	34(4)	20(4)	27(4)	-6(3)	6(3)	3(3)
C(16)	33(4)	16(3)	23(3)	4(2)	-4(4)	5(3)
C(17)	34(4)	28(4)	24(4)	3(3)	8(3)	11(3)
C(18)	41(4)	24(4)	27(4)	-7(3)	-6(3)	1(3)
C(19)	23(3)	23(3)	20(2)	-1(2)	4(3)	0(3)
C(20)	19(4)	31(4)	25(4)	0(3)	2(3)	-7(3)
C(21)	46(4)	11(3)	25(4)	-4(3)	3(4)	2(3)
C(22)	59(5)	15(3)	22(3)	-3(2)	6(5)	-2(4)

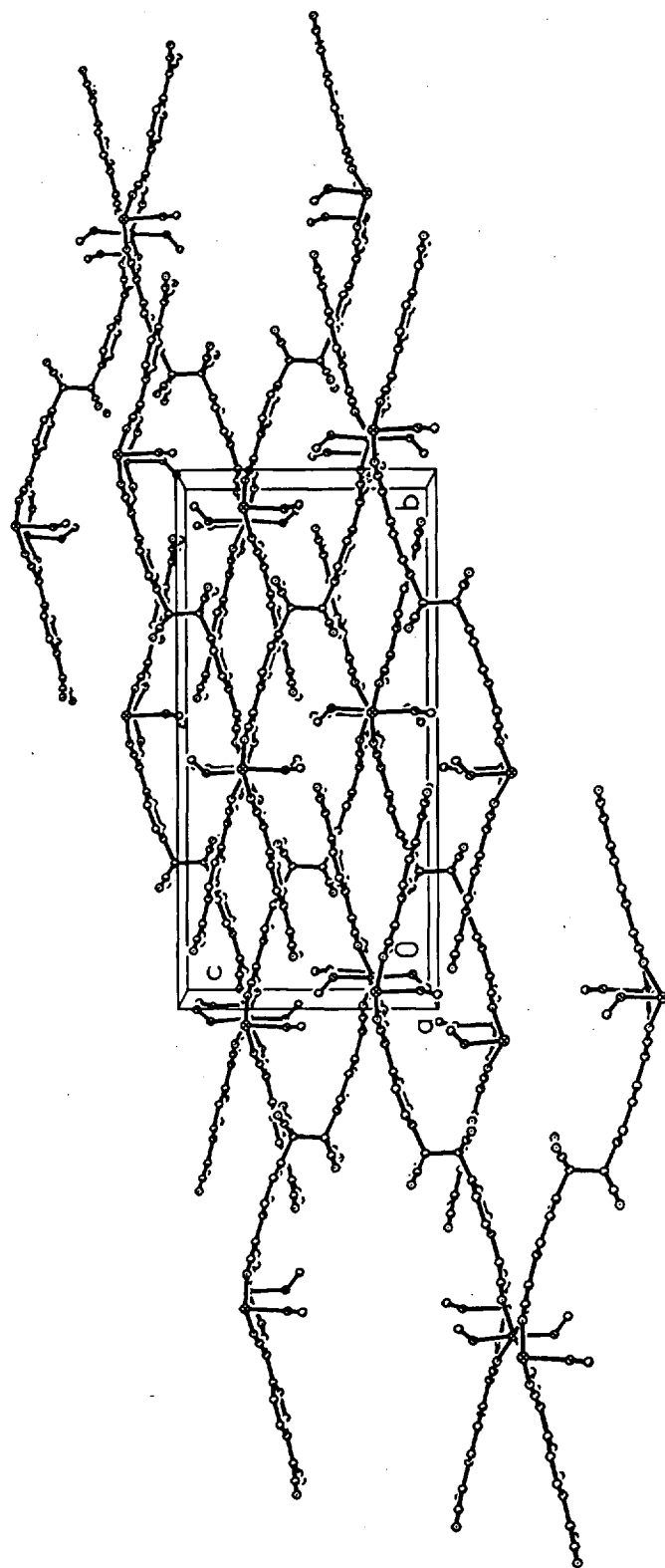
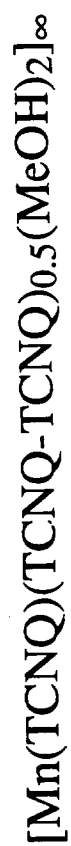
C(23)	49(5)	24(4)	25(4)	-2(3)	-3(4)	-10(4)
C(24)	84(7)	10(4)	20(4)	-3(3)	5(4)	-2(4)
C(25)	124(19)	90(16)	56(13)	28(12)	-69(13)	-85(15)
C(25')	81(12)	104(13)	17(7)	34(8)	-21(7)	-47(10)
C(26)	58(6)	58(6)	45(5)	7(4)	5(4)	6(4)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 u_{11} + \dots + 2hka^* b^* u_{12}].$$

Table 5. Hydrogen Coordinates ($\times 10^6$) and Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ}(\text{TCNQ}-\text{TCNQ})_{0.5}(\text{MeOH})_2)_{\infty}]$, (10).

Atom	x	y	z	U(eq)
H(101)	-24(3)	806(2)	488(4)	45
H(102)	4669(3)	806(2)	401(3)	44
H(2)	1193(4)	2244(2)	1259(5)	29
H(3)	1296(5)	3060(2)	847(5)	26
H(5)	4101(4)	2997(2)	1210(5)	27
H(6)	4015(5)	2189(2)	1595(5)	28
H(14)	1055(5)	-1109(2)	1651(5)	30
H(15)	1057(5)	-1916(2)	1074(5)	33
H(17)	3832(5)	-1950(2)	1343(5)	35
H(18)	3842(5)	-1150(2)	1939(5)	37
H(25A)	-947(17)	151(40)	-100(77)	108
H(25B)	-1689(62)	579(8)	68(92)	108
H(25C)	-1610(73)	142(42)	875(22)	108
H(25D)	-1709(22)	779(16)	237(50)	81
H(25E)	-1870(15)	509(30)	1305(12)	81
H(25F)	-1500(13)	206(14)	344(53)	81
H(26A)	6337(17)	809(6)	304(28)	64
H(26B)	5823(6)	426(16)	-427(9)	64
H(26C)	6375(16)	236(11)	555(22)	64



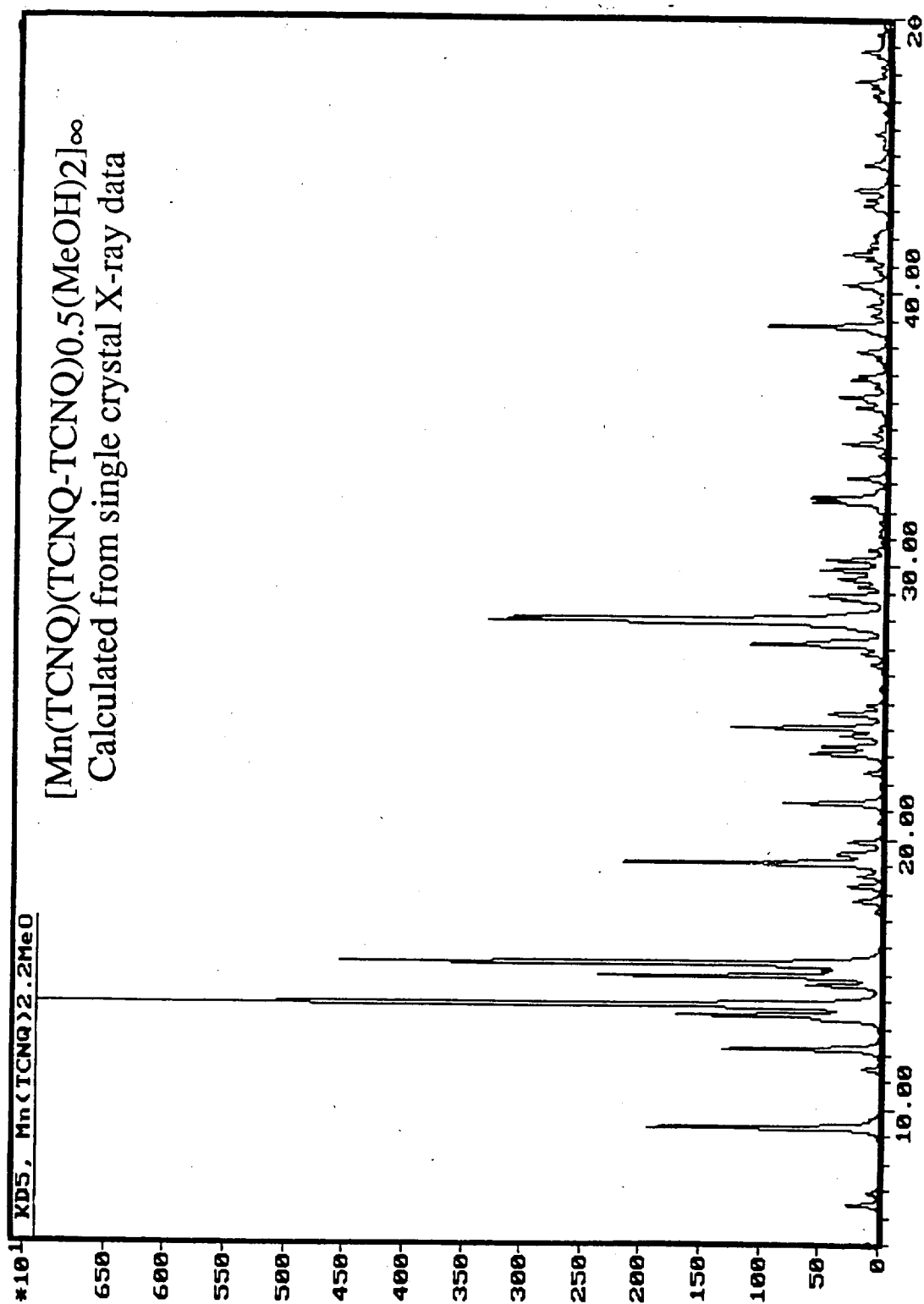


Table 6. Table of observed and calculated structure factors for $[\text{Mn}(\text{TCNQ})(\text{TCNQ}-\text{TCNQ})_{0.5}(\text{MeOH})_2]_{\infty}$

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	2413	2572	-30	1	11	0	459	473	6	0	24	0	70	75	69	-15	5	1	248	97	28	6	10	1	622	655	54
4	0	0	1277	1339	-17	3	11	0	933	922	12	2	24	0	381	374	23	-13	5	1	260	188	22	8	10	1	229	257	31
6	0	0	1297	1514	-12	5	11	0	335	326	8	4	24	0	464	423	28	-11	5	1	247	92	26	10	10	1	161	82	42
8	0	0	1695	1778	16	7	11	0	154	56	39	6	24	0	451	438	37	-9	5	1	363	326	26	12	10	1	243	250	26
10	0	0	330	333	56	9	11	0	93	145	93	8	24	0	278	18	86	-7	5	1	568	550	7	14	10	1	263	289	93
12	0	0	2005	2166	19	11	11	0	365	354	17	1	25	0	320	317	24	-5	5	1	1177	1133	23	-13	11	1	346	441	28
14	0	0	377	362	24	13	11	0	334	316	21	3	25	0	299	205	57	-3	5	1	333	306	5	-11	11	1	214	154	45
16	0	0	530	468	26	0	12	0	2586	2563	50	5	25	0	301	245	32	-1	5	1	1304	1349	6	-9	11	1	56	45	56
1	1	0	82	216	-8	2	12	0	146	51	28	7	25	0	267	189	41	1	5	1	1301	1350	31	-7	11	1	368	351	10
3	1	0	220	237	10	4	12	0	401	357	8	9	25	0	362	85	51	3	5	1	284	306	8	-5	11	1	377	375	7
5	1	0	374	390	16	6	12	0	1061	1075	71	0	26	0	1084	1131	19	5	5	1	1112	1133	24	-3	11	1	199	143	15
7	1	0	614	605	6	8	12	0	376	357	21	2	26	0	136	47	135	7	5	1	537	549	13	-1	11	1	481	481	8
9	1	0	533	499	15	10	12	0	424	384	29	4	26	0	836	845	61	9	5	1	338	326	27	1	11	1	484	481	16
11	1	0	505	530	10	12	12	0	602	651	60	6	26	0	861	909	23	11	5	1	193	92	86	3	11	1	150	143	16
13	1	0	536	550	27	14	12	0	226	146	46	8	26	0	282	40	157	13	5	1	102	188	101	5	11	1	372	374	13
15	1	0	289	69	38	1	13	0	403	397	16	1	27	0	124	131	123	15	5	1	142	97	39	7	11	1	340	350	30
0	2	0	171	482	-39	3	13	0	662	663	10	3	27	0	190	103	75	-14	6	1	735	772	11	9	11	1	110	45	62
2	2	0	4318	4628	125	5	13	0	639	646	16	5	27	0	184	101	94	-12	6	1	596	571	11	11	11	1	193	154	41
4	2	0	608	678	9	7	13	0	73	132	73	7	27	0	233	200	33	-10	6	1	753	727	15	13	11	1	374	442	54
6	2	0	538	530	7	9	13	0	111	54	52	0	28	0	206	172	43	-8	6	1	948	938	15	-14	12	1	367	367	47
8	2	0	999	1050	12	11	13	0	654	789	29	2	28	0	572	665	20	-6	6	1	1018	1010	31	-12	12	1	932	996	13
10	2	0	1231	1279	10	13	13	0	260	81	42	4	28	0	598	602	41	-4	6	1	1583	1598	10	-10	12	1	238	236	16
12	2	0	224	138	25	0	14	0	262	287	13	6	28	0	440	399	30	-2	6	1	2189	2195	11	-8	12	1	368	370	26
14	2	0	528	522	15	2	14	0	496	479	10	1	29	0	282	257	30	0	6	1	1500	1567	25	-6	12	1	1717	1762	16
1	3	0	523	558	10	4	14	0	139	59	20	3	29	0	326	325	28	2	6	1	2143	2194	48	-4	12	1	1275	1277	25
3	3	0	198	216	10	6	14	0	259	229	13	2	30	0	185	197	54	4	6	1	1467	1599	55	-2	12	1	315	311	8
5	3	0	102	82	31	8	14	0	200	148	58	-15	1	1	330	234	41	6	6	1	946	1009	32	0	12	1	2835	2855	43
7	3	0	256	263	10	10	14	0	123	112	123	-13	1	1	599	604	9	8	6	1	883	938	28	2	12	1	313	310	13
9	3	0	508	521	10	12	14	0	236	171	40	-11	1	1	597	564	18	10	6	1	731	727	61	4	12	1	1263	1276	51
11	3	0	267	271	15	14	14	0	202	117	51	-9	1	1	257	248	17	12	6	1	558	572	70	6	12	1	1659	1761	134
13	3	0	322	273	36	1	15	0	468	466	8	-7	1	1	181	174	21	14	6	1	724	773	53	8	12	1	356	371	15
15	3	0	79	12	79	3	15	0	127	113	32	-5	1	1	218	213	36	-15	7	1	222	25	39	10	12	1	252	236	95
0	4	0	460	460	16	5	15	0	264	208	23	-3	1	1	602	575	8	-13	7	1	261	134	19	12	12	1	923	997	51
2	4	0	479	451	6	7	15	0	181	155	43	-1	1	1	332	336	3	-11	7	1	262	263	40	14	12	1	377	367	19
4	4	0	39	25	39	9	15	0	376	364	27	1	1	1	327	336	8	-9	7	1	375	326	22	-13	13	1	157	71	44
6	4	0	330	293	17	11	15	0	102	12	102	3	1	1	546	574	22	-7	7	1	414	371	15	-11	13	1	203	121	30
8	4	0	409	376	19	13	15	0	331	365	34	5	1	1	202	212	14	-5	7	1	1039	995	12	-9	13	1	196	201	37
10	4	0	254	234	21	0	16	0	1537	1520	39	7	1	1	222	174	32	-3	7	1	1987	2015	19	-7	13	1	181	68	42
12	4	0	347	332	38	2	16	0	988	958	22	9	1	1	234	248	30	-1	7	1	1687	1723	21	-5	13	1	296	299	10
14	4	0	259	15	33	4	16	0	674	686	12	11	1	1	569	565	34	1	7	1	1644	1722	35	-3	13	1	1186	1194	18
1	5	0	447	454	7	6	16	0	411	371	10	13	1	1	581	605	44	3	7	1	1907	2017	133	-1	13	1	260	254	9
3	5	0	701	708	11	8	16	0	686	668	31	15	1	1	296	234	34	5	7	1	980	993	60	1	13	1	249	254	9
5	5	0	37	65	36	10	16	0	707	746	17	-14	2	1	336	346	21	7	7	1	400	371	12	3	13	1	1165	1194	26
7	5	0	368	310	28	12	16	0	422	406	17	-12	2	1	452	408	10	9	7	1	355	325	56	5	13	1	266	299	59
9	5	0	258	243	14	1	17	0	254	249	13	-10	2	1	1068	1087	21	11	7	1	346	264	76	7	13	1	82	68	82
11	5	0	200	152	20	3	17	0	234	194	38	-8	2	1	940	899	15	13	7	1	151	134	38	9	13	1	227	201	46
13	5	0	255	191	33	5	17	0	121	13	121	-6	2	1	341	352	12	15	7	1	247	25	73	11	13	1	146	121	145
15	5	0	255	137	39	7	17	0	179	64	32	-4	2	1	649	673	16	-14	8	1	355	378	31	13	13	1	180	71	52
0	6	0	1809	1916	46	9	17	0	163	21	35	-2	2	1	2745	2818	17	-12	8	1	306	264	24	-14	14	1	476	537	19
2	6	0	1470	1571	33	11	17	0	145	116	145	0	2	1	1035	1094	6	-10	8	1	279	247	43	-12	14	1	547	500	16
4	6	0	974	1010	14	13	17	0	244	13	31	2	2	1	2536	2818	111	-8	8	1	692	684	12	-10	14	1	1027	1046	51
6	6	0	569	585	11	0	18	0	1679	1681	27	4	2	1	606	674	37	-6	8	1	356	358	11	-8	14	1	595	595	10
8	6	0	486	510	16	2	18	0	1378	1368	17	6	2	1	334	353	7	-4	8	1	1513	1501	25	-6	14	1	1134	1112	28
10	6	0	76	76	76	4	18	0	615	580	9	8	2	1	818	898	8	-2	8	1	704	687	8	-4	14	1	496	499	20
12	6	0	135	155	41	6	18	0	496	506	17	10	2	1	995	1088	41	0	8	1	451	442	7	-2	14	1	2091	2090	26
14	6	0	513	524	42	8	18	0	1065	1027	50	12	2	1	423	408	32	2	8	1	686	688							

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

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	16	1	583	607	44	-6	24	1	798	801	14	6	2	2	744	814	38	-4	8	2	2986	2921	21	-6	14	2	275	179	20
12	16	1	319	330	22	-4	24	1	738	702	19	8	2	2	931	1004	35	-2	8	2	746	750	4	-4	14	2	147	43	22
-13	17	1	187	172	38	-2	24	1	650	628	57	10	2	2	917	1022	46	0	8	2	932	877	10	-2	14	2	250	201	20
-11	17	1	243	257	24	0	24	1	300	201	33	12	2	2	817	861	62	2	8	2	731	749	9	0	14	2	334	342	15
-9	17	1	363	354	67	2	24	1	623	628	11	14	2	2	315	381	21	4	8	2	2823	2920	235	2	14	2	191	201	22
-7	17	1	406	386	13	4	24	1	711	703	18	-15	3	2	401	286	46	6	8	2	910	1017	40	4	14	2	0	44	1
-5	17	1	243	188	36	6	24	1	820	802	25	-13	3	2	465	449	28	8	8	2	964	978	77	6	14	2	286	179	42
-3	17	1	334	375	22	8	24	1	324	284	26	-11	3	2	523	509	15	10	8	2	497	516	20	8	14	2	186	214	69
-1	17	1	714	738	15	-9	25	1	240	147	53	-9	3	2	459	478	14	12	8	2	451	435	42	10	14	2	187	193	31
1	17	1	731	737	9	-7	25	1	211	196	36	-7	3	2	488	489	18	14	8	2	761	804	57	12	14	2	144	146	59
3	17	1	407	375	35	-5	25	1	467	407	30	-5	3	2	152	75	43	-15	9	2	121	39	61	14	14	2	103	117	102
5	17	1	234	188	16	-3	25	1	318	331	22	-3	3	2	558	561	4	-13	9	2	330	156	27	-13	15	2	173	125	43
7	17	1	381	387	32	-1	25	1	330	347	24	-1	3	2	754	749	5	-11	9	2	256	205	47	-11	15	2	300	287	28
9	17	1	322	354	20	1	25	1	327	348	18	1	3	2	749	749	13	-9	9	2	308	292	19	-9	15	2	121	183	52
11	17	1	249	257	60	3	25	1	358	331	36	3	3	2	532	560	15	-7	9	2	509	465	8	-7	15	2	421	382	21
13	17	1	304	172	37	5	25	1	396	406	26	5	3	2	78	75	34	-5	9	2	953	895	11	-5	15	2	292	274	13
-12	18	1	223	221	31	7	25	1	273	195	64	7	3	2	478	489	22	-3	9	2	531	514	4	-3	15	2	511	525	11
-10	18	1	279	257	23	9	25	1	221	147	161	9	3	2	441	478	21	-1	9	2	434	442	7	-1	15	2	633	640	6
-8	18	1	271	258	37	-8	26	1	225	200	82	11	3	2	478	508	26	1	9	2	426	443	10	1	15	2	627	639	8
-6	18	1	191	136	69	-6	26	1	329	331	24	13	3	2	434	449	15	3	9	2	500	513	33	3	15	2	514	524	15
-4	18	1	466	479	19	-4	26	1	405	337	61	15	3	2	292	286	23	5	9	2	883	896	18	5	15	2	255	274	20
-2	18	1	193	77	23	-2	26	1	205	65	100	-14	4	2	378	350	19	7	9	2	495	465	45	7	15	2	360	383	18
0	18	1	216	187	16	0	26	1	425	435	24	-12	4	2	346	336	19	9	9	2	289	291	18	9	15	2	177	183	36
2	18	1	218	76	16	2	26	1	164	65	36	-10	4	2	356	345	19	11	9	2	178	205	35	11	15	2	306	287	46
4	18	1	486	479	24	4	26	1	420	338	67	-8	4	2	276	206	43	13	9	2	180	156	48	13	15	2	127	125	55
6	18	1	253	135	19	6	26	1	339	332	24	-6	4	2	506	480	10	15	9	2	124	39	75	-12	16	2	419	392	28
8	18	1	278	259	18	8	26	1	327	200	30	-4	4	2	119	94	18	-14	10	2	705	698	12	-10	16	2	686	708	24
10	18	1	285	257	18	-7	27	1	322	349	50	-2	4	2	699	723	4	-12	10	2	665	666	18	-8	16	2	508	485	22
12	18	1	0	220	1	-5	27	1	574	554	39	0	4	2	200	209	11	-10	10	2	365	324	29	-6	16	2	753	754	16
-11	19	1	360	399	23	-3	27	1	359	334	64	2	4	2	669	723	15	-8	10	2	466	461	22	-4	16	2	279	242	17
-9	19	1	468	450	46	-1	27	1	230	308	39	4	4	2	66	94	66	-6	10	2	1730	1793	11	-2	16	2	1059	1068	10
-7	19	1	648	687	36	1	27	1	239	308	33	6	4	2	481	480	30	-4	10	2	1564	1596	21	0	16	2	1201	1235	16
-5	19	1	335	318	27	3	27	1	315	334	21	8	4	2	300	206	26	-2	10	2	646	670	5	2	16	2	1068	1068	22
-3	19	1	544	580	12	5	27	1	524	554	54	10	4	2	332	345	38	0	10	2	827	887	10	4	16	2	203	241	50
-1	19	1	497	521	12	7	27	1	351	349	34	12	4	2	361	336	19	2	10	2	633	670	10	6	16	2	690	754	38
1	19	1	501	521	22	-6	28	1	158	141	110	14	4	2	314	350	20	4	10	2	1460	1596	111	8	16	2	477	485	39
3	19	1	587	579	11	-4	28	1	136	152	135	-15	5	2	195	128	100	6	10	2	1622	1793	110	10	16	2	727	708	14
5	19	1	338	319	19	-2	28	1	416	235	193	-13	5	2	243	172	67	8	10	2	459	461	47	12	16	2	413	393	18
7	19	1	664	687	44	0	28	1	0	24	1	-11	5	2	178	179	22	10	10	2	313	325	31	-13	17	2	290	249	25
9	19	1	481	451	28	2	28	1	299	235	30	-7	5	2	538	508	31	12	10	2	663	666	88	-11	17	2	306	255	73
11	19	1	399	399	57	4	28	1	319	152	108	-7	5	2	262	241	12	14	10	2	668	698	37	-9	17	2	458	451	46
-12	20	1	238	233	29	6	28	1	296	141	104	-5	5	2	877	845	6	-13	11	2	266	64	-23	-7	17	2	223	245	19
-10	20	1	522	520	17	-3	29	1	468	314	163	-3	5	2	652	619	6	-11	11	2	236	143	20	-5	17	2	801	814	31
-8	20	1	665	678	32	-1	29	1	68	232	67	-1	5	2	317	334	4	-9	11	2	79	151	78	-3	17	2	733	732	20
-6	20	1	800	775	11	1	29	1	205	232	47	1	5	2	330	334	8	-7	11	2	313	297	23	-1	17	2	656	639	10
-4	20	1	717	721	15	-2	30	1	284	343	30	3	5	2	616	618	18	-5	11	2	398	386	12	1	17	2	670	639	19
-2	20	1	656	651	10	0	30	1	269	154	42	5	5	2	800	843	28	-3	11	2	310	254	14	3	17	2	753	733	19
0	20	1	770	810	19	-14	0	2	226	235	23	7	5	2	229	240	14	-1	11	2	60	45	34	5	17	2	788	813	17
2	20	1	679	651	8	-12	0	2	1539	1598	23	9	5	2	471	507	15	1	11	2	91	45	20	7	17	2	238	245	23
4	20	1	740	722	9	-10	0	2	1085	1029	18	11	5	2	179	179	42	3	11	2	275	253	10	9	17	2	414	451	31
6	20	1	753	776	20	-8	0	2	1318	1337	19	13	5	2	228	172	29	5	11	2	371	386	57	11	17	2	269	254	43
8	20	1	640	679	13	-6	0	2	1257	1266	18	15	5	2	190	128	58	7	11	2	282	297	43	13	17	2	239	250	29
10	20	1	512	520	56	-4	0	2	926	924	16	-14	6	2	472	403	49	9	11	2	169	151	29	-12	18	2	524	452	76
12	20	1	335	233	108	-2	0	2	826	847	6	-12	6	2	384	420	16	11	11	2	167	143	33	-10	18	2	795	778	15
-11	21	1	270	174	30	0	0	2	2224	2190	19	-10	6	2	546	543	18	13	11	2	161	64	47	-8	18	2	1529	1529	47
-9	21	1	318	218	82	2	0	2	815	846	32	-8	6	2	775	698	11	-14	12	2	249	235	31	-6	18	2	569	569	11
-7	21	1																											

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

				10Fo		10Fc		10s						10Fo		10Fc		10s						10Fo		10Fc		10s						10Fo		10Fc		10s			
-11	21	2	329	226	40	7	1	3	266	271	12	-3	7	3	472	449	10	-3	13	3	154	87	29	-6	20	3	703	721	28	-6	20	3	703	721	28	-6	20	3	703	721	28
-9	21	2	186	201	110	9	1	3	311	331	14	-1	7	3	318	311	5	-1	13	3	392	362	6	-4	20	3	217	163	24	-4	20	3	217	163	24	-4	20	3	217	163	24
-7	21	2	470	422	17	11	1	3	427	459	15	1	7	3	320	311	11	1	13	3	415	362	11	-2	20	3	393	437	16	-2	20	3	393	437	16	-2	20	3	393	437	16
-5	21	2	617	633	32	13	1	3	570	588	35	3	7	3	441	450	14	3	13	3	170	87	29	0	20	3	258	216	29	0	20	3	258	216	29	0	20	3	258	216	29
-3	21	2	346	360	36	15	1	3	150	162	50	5	7	3	716	722	23	5	13	3	529	473	51	2	20	3	458	437	10	2	20	3	458	437	10	2	20	3	458	437	10
-1	21	2	351	345	42	-14	2	3	445	412	21	7	7	3	435	412	22	7	13	3	505	512	44	4	20	3	237	163	75	4	20	3	237	163	75	4	20	3	237	163	75
1	21	2	368	345	14	-12	2	3	456	423	18	9	7	3	359	375	16	9	13	3	422	472	16	6	20	3	723	721	28	6	20	3	723	721	28	6	20	3	723	721	28
3	21	2	399	360	35	-10	2	3	638	649	18	11	7	3	311	262	28	11	13	3	181	181	74	8	20	3	407	392	19	8	20	3	407	392	19	8	20	3	407	392	19
5	21	2	619	634	9	-8	2	3	770	747	9	13	7	3	353	351	19	13	13	3	186	101	32	10	20	3	510	525	16	10	20	3	510	525	16	10	20	3	510	525	16
7	21	2	464	421	16	-6	2	3	802	806	7	15	7	3	259	233	41	15	14	3	739	709	13	-11	21	3	297	168	77	-11	21	3	297	168	77	-11	21	3	297	168	77
9	21	2	296	201	44	-4	2	3	482	479	5	-14	8	3	265	199	65	-14	14	3	625	579	17	-9	21	3	246	272	24	-9	21	3	246	272	24	-9	21	3	246	272	24
11	21	2	245	226	30	-2	2	3	219	198	13	-12	8	3	425	413	30	-12	14	3	664	666	23	-7	21	3	427	383	19	-7	21	3	427	383	19	-7	21	3	427	383	19
-10	22	2	250	168	79	0	2	3	2457	2449	16	-10	8	3	259	245	23	-10	14	3	1439	1447	11	-5	21	3	311	229	23	-5	21	3	311	229	23	-5	21	3	311	229	23
-8	22	2	248	201	26	2	2	3	200	198	17	-8	8	3	264	221	13	-8	14	3	914	914	8	-3	21	3	370	371	18	-3	21	3	370	371	18	-3	21	3	370	371	18
-6	22	2	401	417	20	4	2	3	462	478	12	-6	8	3	394	394	11	-6	14	3	193	183	11	-1	21	3	340	274	81	-1	21	3	340	274	81	-1	21	3	340	274	81
-4	22	2	293	315	24	6	2	3	771	806	37	-4	8	3	820	823	6	-4	14	3	1252	1239	14	1	21	3	319	274	51	1	21	3	319	274	51	1	21	3	319	274	51
-2	22	2	135	92	134	8	2	3	718	747	31	-2	8	3	294	276	10	-2	14	3	219	183	13	3	21	3	365	371	11	3	21	3	365	371	11	3	21	3	365	371	11
0	22	2	260	115	116	10	2	3	617	649	48	0	8	3	470	414	8	0	14	3	906	914	11	5	21	3	258	229	61	5	21	3	258	229	61	5	21	3	258	229	61
2	22	2	229	92	55	12	2	3	463	424	46	2	8	3	269	276	11	2	14	3	1407	1447	64	7	21	3	411	383	22	7	21	3	411	383	22	7	21	3	411	383	22
4	22	2	356	315	13	14	2	3	448	412	47	4	8	3	785	823	23	4	14	3	697	666	42	9	21	3	298	272	54	9	21	3	298	272	54	9	21	3	298	272	54
6	22	2	406	417	16	-15	3	3	237	77	51	6	8	3	379	394	45	6	14	3	549	578	51	11	21	3	216	168	39	11	21	3	216	168	39	11	21	3	216	168	39
8	22	2	277	201	26	-13	3	3	201	239	41	8	8	3	211	221	21	8	14	3	654	708	60	-10	22	3	539	560	17	-10	22	3	539	560	17	-10	22	3	539	560	17
10	22	2	279	168	53	-11	3	3	683	672	10	10	8	3	220	245	32	10	14	3	283	138	99	-8	22	3	529	499	14	-8	22	3	529	499	14	-8	22	3	529	499	14
-9	23	2	273	268	273	-9	3	3	527	521	18	12	8	3	421	413	17	12	14	3	353	284	20	-6	22	3	460	418	14	-6	22	3	460	418	14	-6	22	3	460	418	14
-7	23	2	261	204	67	-7	3	3	435	419	11	14	8	3	214	199	83	14	14	3	336	258	17	-4	22	3	751	746	40	-4	22	3	751	746	40	-4	22	3	751	746	40
-5	23	2	555	555	17	-5	3	3	503	513	6	-13	9	3	307	326	16	-13	15	3	228	209	22	-2	22	3	565	574	20	-2	22	3	565	574	20	-2	22	3	565	574	20
-3	23	2	365	415	60	-3	3	3	1210	1192	7	-11	9	3	138	129	29	-11	15	3	105	77	105	0	22	3	478	441	18	0	22	3	478	441	18	0	22	3	478	441	18
-1	23	2	279	291	21	-1	3	3	1573	1555	10	-9	9	3	159	56	51	-9	15	3	627	637	8	2	22	3	574	574	14	2	22	3	574	574	14	2	22	3	574	574	14
1	23	2	295	292	54	1	3	3	1540	1554	19	-7	9	3	296	276	10	-7	15	3	416	349	16	4	22	3	745	745	9	4	22	3	745	745	9	4	22	3	745	745	9
3	23	2	383	414	30	3	3	3	1158	1193	23	-5	9	3	249	237	12	-5	15	3	388	350	18	6	22	3	446	419	16	6	22	3	446	419	16	6	22	3	446	419	16
5	23	2	554	555	15	5	3	3	498	512	15	-3	9	3	771	764	6	-3	15	3	612	637	10	8	22	3	508	499	13	8	22	3	508	499	13	8	22	3	508	499	13
7	23	2	269	204	21	7	3	3	394	418	14	-1	9	3	864	866	6	-1	15	3	127	77	46	10	22	3	539	560	18	10	22	3	539	560	18	10	22	3	539	560	18
9	23	2	255	268	30	9	3	3	498	520	33	3	9	3	862	865	13	3	15	3	283	209	30	-9	23	3	199	218	48	-9	23	3	199	218	48	-9					

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

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
0	0	4	1272	1210	12	-10	6	4	484	486	20	-8	12	4	219	202	45	10	18	4	938	977	14	2	28	4	173	250	64
2	0	4	2768	2818	56	-8	6	4	826	767	20	-6	12	4	961	916	8	12	18	4	284	305	28	4	28	4	464	467	25
4	0	4	1084	1134	44	-6	6	4	399	413	10	-4	12	4	908	924	17	-11	19	4	381	243	76	-1	29	4	291	206	92
6	0	4	462	481	10	-4	6	4	1092	1093	7	-2	12	4	542	511	13	-9	19	4	304	194	17	-1	29	4	261	206	39
8	0	4	1385	1472	93	-2	6	4	397	397	12	0	12	4	484	472	14	-7	19	4	755	694	27	-15	1	5	223	35	56
10	0	4	1508	1605	84	0	6	4	408	429	10	2	12	4	525	511	9	-5	19	4	758	748	30	-13	1	5	384	371	23
12	0	4	610	661	32	2	6	4	407	396	8	4	12	4	907	923	29	-3	19	4	341	263	18	-11	1	5	328	246	45
14	0	4	582	531	23	4	6	4	1055	1094	25	6	12	4	900	914	12	-1	19	4	289	244	33	-9	1	5	59	44	59
-15	1	4	239	143	37	6	6	4	388	413	15	8	12	4	174	202	40	1	19	4	268	243	20	-7	1	5	411	391	9
-13	1	4	507	495	19	8	6	4	767	767	33	10	12	4	346	361	19	3	19	4	334	263	17	-5	1	5	206	172	13
-11	1	4	293	263	72	10	6	4	419	485	71	12	12	4	454	432	60	5	19	4	697	749	13	-3	1	5	1011	978	6
-9	1	4	261	245	17	12	6	4	362	320	47	14	12	4	243	278	93	7	19	4	692	694	45	-1	1	5	662	642	6
-7	1	4	216	189	25	14	6	4	325	318	64	-13	13	4	333	305	21	9	19	4	115	194	114	3	1	5	660	641	8
-5	1	4	597	594	10	-13	7	4	177	239	57	-11	13	4	301	222	20	11	19	4	265	243	25	1	1	5	986	977	11
-3	1	4	1300	1281	7	-11	7	4	194	239	40	-9	13	4	328	340	20	-10	20	4	355	364	27	5	1	5	196	172	15
-1	1	4	4111	4149	23	-9	7	4	288	256	21	-7	13	4	215	222	23	-8	20	4	437	401	37	7	1	5	388	390	12
1	1	4	4149	4145	33	-7	7	4	216	212	14	-5	13	4	331	325	11	-6	20	4	705	693	26	9	1	5	97	44	38
3	1	4	1297	1282	19	-5	7	4	779	745	9	-3	13	4	269	259	23	-4	20	4	314	184	67	11	1	5	265	246	18
5	1	4	595	592	12	-3	7	4	504	486	7	-1	13	4	537	552	6	-2	20	4	506	511	20	13	1	5	368	371	37
7	1	4	250	188	20	-1	7	4	180	181	12	1	13	4	562	551	16	0	20	4	866	876	34	15	1	5	247	35	54
9	1	4	238	245	32	1	7	4	205	181	15	3	13	4	336	259	28	2	20	4	493	511	28	-14	2	5	276	268	64
11	1	4	304	262	36	3	7	4	483	486	7	5	13	4	334	326	49	4	20	4	303	184	34	-12	2	5	697	671	16
13	1	4	524	495	17	5	7	4	749	746	21	7	13	4	187	222	59	6	20	4	683	693	33	-10	2	5	710	693	13
15	1	4	297	143	49	7	7	4	245	212	29	9	13	4	359	340	21	8	20	4	487	402	19	-8	2	5	563	545	20
-14	2	4	161	110	161	9	7	4	224	257	64	11	13	4	327	222	38	10	20	4	336	364	23	-6	2	5	1375	1343	9
-12	2	4	1165	1137	20	11	7	4	292	239	82	13	13	4	297	305	57	-9	21	4	499	432	30	-4	2	5	586	595	6
-10	2	4	696	691	10	13	7	4	311	239	21	-12	14	4	297	101	76	-7	21	4	330	213	46	0	2	5	1230	1249	7
-8	2	4	1073	1068	10	-14	8	4	705	673	37	-10	14	4	302	232	51	-5	21	4	493	451	30	-2	2	5	479	489	9
-6	2	4	1055	1057	13	-12	8	4	650	626	30	-8	14	4	269	232	19	-3	21	4	276	266	58	2	2	5	1246	1249	8
-4	2	4	577	547	5	-10	8	4	530	524	15	-6	14	4	304	265	15	-1	21	4	303	297	69	4	2	5	587	595	10
-2	2	4	1164	1168	7	-8	8	4	726	723	20	-4	14	4	119	122	42	1	21	4	318	297	27	6	2	5	1338	1342	22
0	2	4	5901	5918	47	-6	8	4	1728	1708	32	-2	14	4	255	233	13	3	21	4	390	266	31	8	2	5	522	545	13
2	2	4	1210	1165	8	-4	8	4	1449	1470	13	0	14	4	474	441	14	5	21	4	472	450	17	10	2	5	682	691	27
4	2	4	570	546	12	-2	8	4	1077	1090	8	2	14	4	290	233	14	7	21	4	179	213	42	12	2	5	660	671	45
6	2	4	1024	1056	49	0	8	4	609	551	11	4	14	4	187	122	30	9	21	4	405	431	23	14	2	5	369	267	69
8	2	4	1011	1068	31	2	8	4	1075	1088	16	6	14	4	186	265	63	-10	22	4	238	216	32	-13	3	5	234	266	55
10	2	4	628	689	25	4	8	4	1434	1468	38	8	14	4	244	231	80	-8	22	4	504	497	13	-11	3	5	342	369	24
12	2	4	1105	1136	64	6	8	4	1676	1709	99	10	14	4	208	232	59	-6	22	4	680	671	11	-9	3	5	236	167	17
14	2	4	158	110	41	8	8	4	669	723	63	12	14	4	154	101	42	-4	22	4	277	202	33	-7	3	5	587	574	14
-15	3	4	261	188	28	10	8	4	505	523	57	-13	15	4	193	139	29	-2	22	4	365	357	31	-5	3	5	419	406	7
-13	3	4	274	251	31	12	8	4	609	625	76	-11	15	4	421	431	34	0	22	4	396	289	42	-3	3	5	951	916	7
-11	3	4	399	355	18	14	8	4	684	672	113	-9	15	4	389	404	35	2	22	4	404	357	22	-1	3	5	544	537	9
-9	3	4	227	72	115	-13	9	4	266	223	65	-7	15	4	417	418	11	4	22	4	302	202	73	1	3	5	532	538	7
-7	3	4	285	222	12	-11	9	4	177	70	34	-5	15	4	489	474	21	6	22	4	651	669	31	3	3	5	947	915	13
-5	3	4	265	266	12	-9	9	4	471	472	13	-3	15	4	350	333	10	8	22	4	481	496	31	5	3	5	417	405	20
-3	3	4	764	765	5	-7	9	4	429	407	13	-1	15	4	221	221	15	10	22	4	241	217	113	7	3	5	578	573	18
-1	3	4	1821	1805	13	-5	9	4	974	973	11	1	15	4	213	221	15	-9	23	4	260	198	43	9	3	5	160	167	32
1	3	4	1795	1805	16	-3	9	4	783	735	7	3	15	4	331	334	49	-7	23	4	633	696	19	11	3	5	378	369	16
3	3	4	753	764	7	-1	9	4	1507	1393	24	5	15	4	483	473	29	-5	23	4	289	310	71	13	3	5	207	267	26
5	3	4	289	266	12	1	9	4	1442	1392	11	7	15	4	411	419	38	-3	23	4	275	268	24	-14	4	5	457	451	28
7	3	4	214	221	20	3	9	4	777	736	11	9	15	4	361	403	46	-1	23	4	435	441	40	-12	4	5	673	660	34
9	3	4	94	72	47	5	9	4	972	973	32	11	15	4	355	431	34	1	23	4	406	441	22	-10	4	5	906	921	10
11	3	4	383	354	23	7	9	4	391	407	15	-12	16	4	395	381	15	3	23	4	214	268	29	-8	4	5	1484	1479	27
13	3	4	305	251	41	9	9	4	433	473	31	-10	16	4	564	544	13	5	23	4	476	310	120	-6	4	5	540	539	9
15	3	4	345	187	36	11	9	4	107	70	107	-8	16	4	851	833	16	7	23	4	675	695	40	-4	4	5	1804	1799	12
-14	4	4	178	183	65	13	9	4	286	223	45	-6	16	4	399	338	31	9	23	4	377	198	38	-2					

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

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	6	5	1098	1144	10	10	12	5	673	689	14	11	19	5	294	274	26	-7	1	6	446	422	16	-5	7	6	467	461	9
8	6	5	794	792	28	12	12	5	362	338	20	-10	20	5	335	274	39	-5	1	6	268	231	18	-3	7	6	239	148	33
10	6	5	787	783	32	-13	13	5	272	171	39	-8	20	5	414	354	39	-3	1	6	210	183	21	-1	7	6	574	559	6
12	6	5	281	232	24	-11	13	5	211	193	40	-6	20	5	664	630	27	-1	1	6	546	514	10	1	7	6	570	558	7
14	6	5	702	772	36	-9	13	5	204	226	36	-4	20	5	306	185	57	1	1	6	564	513	7	3	7	6	195	148	49
-13	7	5	147	110	110	-7	13	5	490	484	10	-2	20	5	600	594	15	3	1	6	172	183	34	5	7	6	463	460	19
-11	7	5	215	200	54	-5	13	5	175	76	53	0	20	5	565	498	31	5	1	6	267	230	20	7	7	6	162	148	137
-9	7	5	300	295	17	-3	13	5	433	415	14	2	20	5	588	595	12	7	1	6	466	422	10	9	7	6	0	36	1
-7	7	5	382	389	17	-1	13	5	286	257	17	4	20	5	215	185	41	9	1	6	344	358	18	11	7	6	200	132	33
-5	7	5	524	526	12	1	13	5	258	257	12	6	20	5	619	631	19	11	1	6	393	388	15	13	7	6	288	336	27
-3	7	5	181	172	23	3	13	5	418	415	51	8	20	5	375	353	24	13	1	6	513	497	18	-12	8	6	785	798	20
-1	7	5	176	80	21	5	13	5	121	76	74	10	20	5	238	273	29	-14	2	6	399	387	62	-10	8	6	442	396	18
1	7	5	141	80	30	7	13	5	439	484	57	-9	21	5	164	115	34	-12	2	6	540	509	43	-8	8	6	506	477	18
3	7	5	129	172	40	9	13	5	249	226	95	-7	21	5	499	480	32	-10	2	6	535	526	14	-6	8	6	1328	1302	13
5	7	5	527	525	19	11	13	5	173	193	108	-5	21	5	629	684	50	-8	2	6	801	792	17	-4	8	6	1125	1096	12
7	7	5	348	388	15	13	13	5	237	171	35	-3	21	5	352	352	29	-6	2	6	1011	964	8	-2	8	6	1367	1323	17
9	7	5	303	294	18	-12	14	5	721	718	24	-1	21	5	165	57	81	-4	2	6	892	886	6	0	8	6	1955	1956	11
11	7	5	184	200	39	-10	14	5	461	475	17	1	21	5	147	57	42	-2	2	6	1669	1663	10	2	8	6	1341	1323	13
-13	8	5	0	110	1	-8	14	5	620	614	11	3	21	5	354	352	24	0	2	6	1345	1328	16	4	8	6	1129	1095	13
-14	8	5	245	293	42	-6	14	5	1153	1125	11	5	21	5	673	685	15	2	2	6	1670	1663	19	6	8	6	1276	1302	40
-12	8	5	194	175	76	-4	14	5	591	574	9	7	21	5	465	480	19	4	2	6	894	886	7	8	8	6	432	477	15
-10	8	5	333	329	17	-2	14	5	1064	1031	9	9	21	5	236	114	32	6	2	6	984	964	22	10	8	6	437	395	15
-8	8	5	202	242	25	0	14	5	1833	1815	14	-8	22	5	758	736	13	8	2	6	797	791	8	12	8	6	767	798	16
-6	8	5	581	577	8	2	14	5	1028	1032	10	-6	22	5	268	231	33	10	2	6	547	525	14	14	8	6	456	457	33
-4	8	5	196	214	14	4	14	5	593	575	15	-4	22	5	977	972	32	12	2	6	504	509	13	-13	9	6	297	341	40
-2	8	5	934	889	12	6	14	5	1109	1124	45	-2	22	5	704	699	58	14	2	6	427	386	36	-11	9	6	302	217	53
0	8	5	1110	1095	8	8	14	5	583	614	36	0	22	5	337	293	51	-13	3	6	146	177	85	-9	9	6	294	300	32
2	8	5	917	890	8	10	14	5	465	474	32	2	22	5	718	699	12	-11	3	6	290	290	59	-7	9	6	423	371	20
4	8	5	214	214	17	12	14	5	688	718	15	4	22	5	932	972	14	-9	3	6	376	389	13	-5	9	6	889	884	8
6	8	5	526	576	11	-11	15	5	270	179	80	6	22	5	264	231	81	-7	3	6	309	251	24	-3	9	6	1050	1026	15
8	8	5	259	242	22	-9	15	5	399	403	24	8	22	5	747	736	15	-5	3	6	518	492	10	-1	9	6	437	463	8
10	8	5	342	329	20	-7	15	5	385	392	13	-7	23	5	677	716	29	-3	3	6	509	505	9	1	9	6	437	462	8
12	8	5	248	175	56	-5	15	5	217	168	50	-5	23	5	669	645	15	-1	3	6	534	515	8	3	9	6	1015	1027	21
14	8	5	339	293	41	-3	15	5	457	431	15	-3	23	5	337	289	21	1	3	6	537	514	11	5	9	6	901	882	18
-13	9	5	221	205	114	-1	15	5	504	510	9	-1	23	5	205	232	60	3	3	6	526	504	23	7	9	6	391	370	25
-11	9	5	100	47	99	1	15	5	500	510	11	1	23	5	235	232	30	5	3	6	514	491	11	9	9	6	318	300	35
-9	9	5	362	387	25	3	15	5	435	431	15	3	23	5	355	289	33	7	3	6	270	250	32	11	9	6	254	217	55
-7	9	5	222	223	33	5	15	5	211	168	31	5	23	5	587	646	17	9	3	6	400	388	21	13	9	6	325	341	40
-5	9	5	543	546	12	7	15	5	346	391	18	7	23	5	651	716	18	11	3	6	313	290	17	-12	10	6	469	489	28
-3	9	5	540	521	13	9	15	5	382	403	18	-8	24	5	295	233	28	13	3	6	212	177	26	-10	10	6	453	428	44
-1	9	5	500	503	8	11	15	5	225	179	32	-6	24	5	1013	1003	27	-14	4	6	416	440	41	-8	10	6	934	892	24
1	9	5	492	503	8	-12	16	5	440	434	22	-4	24	5	219	179	54	-12	4	6	722	689	53	-6	10	6	804	794	11
3	9	5	534	521	27	-10	16	5	522	472	14	-2	24	5	325	342	132	-10	4	6	173	43	65	-4	10	6	1841	1879	25
5	9	5	527	545	47	-8	16	5	584	592	11	0	24	5	835	884	59	-8	4	6	233	202	34	-2	10	6	1307	1281	9
7	9	5	244	223	27	-6	16	5	382	377	23	2	24	5	389	342	100	-6	4	6	691	685	16	0	10	6	493	495	8
9	9	5	364	386	18	-4	16	5	480	463	14	4	24	5	292	178	109	-4	4	6	227	199	13	2	10				

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

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	13	6	276	129	37	3	21	6	538	533	49	-8	4	7	989	960	10	6	10	7	125	142	53	-4	18	7	341	137	124
11	13	6	294	342	23	5	21	6	336	328	21	-6	4	7	834	827	9	8	10	7	273	220	57	-2	18	7	257	231	45
-12	14	6	163	161	75	7	21	6	430	508	21	-4	4	7	1824	1805	20	10	10	7	353	283	49	0	18	7	220	61	29
-10	14	6	296	204	58	9	21	6	209	328	36	-2	4	7	648	626	9	12	10	7	178	126	39	2	18	7	290	231	23
-8	14	6	168	174	28	-8	22	6	507	415	47	0	4	7	2166	2136	14	-11	11	7	292	209	29	4	18	7	230	137	31
-6	14	6	459	447	11	-6	22	6	309	302	24	2	4	7	635	625	12	-9	11	7	262	231	18	6	18	7	345	286	65
-4	14	6	255	290	24	-4	22	6	335	391	21	4	4	7	1816	1804	37	-7	11	7	331	318	31	8	18	7	0	140	1
-2	14	6	502	495	24	-2	22	6	141	169	59	6	4	7	871	827	23	-5	11	7	234	211	29	10	18	7	204	191	203
0	14	6	473	469	17	0	22	6	171	73	55	8	4	7	988	960	14	-3	11	7	332	340	12	-9	19	7	202	207	28
2	14	6	510	496	22	2	22	6	189	169	35	10	4	7	210	208	102	-1	11	7	593	601	15	-7	19	7	266	267	19
4	14	6	292	289	22	4	22	6	432	391	28	12	4	7	727	727	29	1	11	7	628	600	16	-5	19	7	229	251	34
6	14	6	445	447	22	6	22	6	319	302	76	-13	5	7	391	381	23	3	11	7	347	340	45	-3	19	7	253	231	40
8	14	6	213	174	48	8	22	6	389	414	23	-11	5	7	518	496	16	5	11	7	194	211	30	-1	19	7	347	335	17
10	14	6	198	204	32	-7	23	6	499	475	19	-9	5	7	532	512	24	7	11	7	366	317	67	3	19	7	367	335	18
12	14	6	48	160	48	-5	23	6	345	278	21	-7	5	7	625	603	12	9	11	7	197	231	31	3	19	7	231	230	72
-11	15	6	202	52	64	-3	23	6	475	419	48	-5	5	7	409	367	9	11	11	7	159	209	39	5	19	7	279	250	55
-9	15	6	406	416	14	-1	23	6	411	318	83	-3	5	7	599	588	16	-12	12	7	502	458	19	7	19	7	273	267	89
-7	15	6	369	354	15	1	23	6	312	318	21	-1	5	7	1857	1839	13	-10	12	7	436	475	36	9	19	7	328	207	54
-5	15	6	594	583	18	3	23	6	398	420	20	1	5	7	1867	1838	13	-8	12	7	390	393	21	-8	20	7	243	153	23
-3	15	6	774	770	9	5	23	6	219	278	34	3	5	7	601	587	19	-6	12	7	794	818	11	-6	20	7	382	408	35
-1	15	6	528	514	18	7	23	6	475	474	21	5	5	7	416	367	9	-4	12	7	854	853	9	-4	20	7	535	502	24
1	15	6	531	514	11	-6	24	6	414	427	31	7	5	7	593	603	28	-2	12	7	871	865	8	-2	20	7	437	427	25
3	15	6	743	771	28	-4	24	6	405	357	77	9	5	7	507	512	14	0	12	7	949	997	9	0	20	7	424	412	16
5	15	6	654	582	34	-2	24	6	179	119	81	11	5	7	530	497	14	2	12	7	868	864	12	2	20	7	413	427	27
7	15	6	334	354	22	0	24	6	595	502	26	13	5	7	398	381	37	4	12	7	883	852	13	4	20	7	465	503	18
9	15	6	391	415	20	2	24	6	274	119	47	-12	6	7	614	570	26	6	12	7	774	818	13	6	20	7	342	408	23
11	15	6	109	52	108	4	24	6	402	356	52	-10	6	7	747	731	36	8	12	7	404	393	19	8	20	7	213	153	72
-10	16	6	319	348	22	6	24	6	444	428	30	-8	6	7	499	491	21	10	12	7	483	475	18	-7	21	7	299	264	71
-8	16	6	1193	1196	20	-5	25	6	365	245	64	-6	6	7	813	799	15	12	12	7	447	458	20	-5	21	7	261	253	99
-6	16	6	494	485	15	-3	25	6	356	338	64	-4	6	7	749	749	18	-11	13	7	0	60	1	-3	21	7	419	378	21
-4	16	6	1308	1331	12	-1	25	6	486	400	96	-2	6	7	1812	1820	12	-9	13	7	247	192	44	-1	21	7	371	348	31
-2	16	6	692	672	14	1	25	6	389	401	37	0	6	7	595	581	9	-7	13	7	177	181	24	1	21	7	335	347	20
0	16	6	754	739	12	3	25	6	435	338	99	2	6	7	1858	1818	20	-5	13	7	358	330	13	3	21	7	281	378	28
2	16	6	642	671	14	5	25	6	311	244	38	4	6	7	755	749	12	-3	13	7	341	322	19	5	21	7	237	253	33
4	16	6	1323	1333	35	-4	26	6	585	600	17	6	6	7	839	799	10	-1	13	7	104	81	45	7	21	7	298	264	27
6	16	6	481	485	17	-2	26	6	537	528	28	8	6	7	553	490	13	1	13	7	174	81	33	-8	22	7	288	381	43
8	16	6	1155	1194	21	0	26	6	451	405	27	10	6	7	776	731	32	3	13	7	295	322	22	-6	22	7	484	501	18
10	16	6	375	347	19	2	26	6	543	527	26	12	6	7	569	571	27	5	13	7	381	331	37	-4	22	7	623	615	55
-11	17	6	379	241	56	4	26	6	621	600	40	-13	7	7	246	326	45	7	13	7	207	180	41	-2	22	7	521	536	18
-9	17	6	371	380	23	-3	27	6	233	177	43	-11	7	7	106	158	105	9	13	7	239	192	56	0	22	7	812	773	12
-7	17	6	851	867	19	-1	27	6	224	115	187	-9	7	7	261	68	59	11	13	7	190	60	40	2	22	7	566	536	17
-5	17	6	839	851	10	1	27	6	256	115	36	-7	7	7	150	154	23	-10	14	7	591	587	15	4	22	7	596	615	53
-3	17	6	242	245	17	3	27	6	107	177	106	-5	7	7	447	423	10	-8	14	7	580	586	28	6	22	7	472	501	39
-1	17	6	327	284	20	-13	1	7	260	193	95	-3	7	7	598	571	8	-6	14	7	703	738	12	-7	23	7	255	186	47
1	17	6	331	284	17	-11	1	7	338	344	22	-1	7	7	304	307	16	-4	14	7	796	821	14	-5	23	7	291	341	25
3																													

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

	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
7	1	8	578	589	12	0	8	8	2020	1993	15	-10	16	8	415	407	25	-10	2	9	437	387	38	-5	9	9	223	182	52	
9	1	8	317	249	35	2	8	8	199	266	23	-8	16	8	396	387	16	-8	2	9	706	707	14	-3	9	9	359	322	32	
11	1	8	342	193	25	4	8	8	777	767	12	-6	16	8	299	324	36	-6	2	9	131	104	45	-1	9	9	369	365	32	
13	1	8	301	146	164	6	8	8	665	656	19	-4	16	8	507	484	25	-4	2	9	1055	1071	18	-1	9	9	364	365	16	
-12	2	8	209	245	39	8	8	8	621	607	28	-2	16	8	691	692	12	-2	2	9	459	497	13	3	9	9	369	322	30	
-10	2	8	704	694	49	10	8	8	467	431	16	0	16	8	419	440	24	0	2	9	99	68	99	5	9	9	267	183	25	
-8	2	8	578	588	14	12	8	8	733	742	39	2	16	8	647	692	15	2	2	9	478	495	12	7	9	9	289	295	23	
-6	2	8	353	338	14	-11	9	8	434	380	31	4	16	8	513	484	18	4	2	9	1091	1070	22	9	9	9	270	217	37	
-4	2	8	1057	1077	10	-9	9	8	274	283	60	6	16	8	299	323	43	6	2	9	140	104	37	11	9	9	282	91	42	
-2	2	8	1032	1039	12	-7	9	8	154	142	52	8	16	8	412	387	20	8	2	9	755	706	14	-10	10	9	348	338	23	
0	2	8	240	167	32	-5	9	8	570	582	10	10	16	8	450	407	21	10	2	9	385	387	17	-8	10	9	199	177	35	
2	2	8	1050	1037	9	-3	9	8	521	532	13	-9	17	8	319	324	25	12	2	9	328	170	31	-6	10	9	254	248	18	
4	2	8	1100	1077	9	-1	9	8	351	365	11	-7	17	8	494	511	15	-11	3	9	221	214	35	-4	10	9	145	116	57	
6	2	8	366	338	16	1	9	8	392	366	22	-5	17	8	588	563	18	-9	3	9	84	148	84	-2	10	9	320	311	36	
8	2	8	586	588	19	3	9	8	535	531	20	-3	17	8	186	152	35	-7	3	9	469	454	26	0	10	9	219	104	51	
10	2	8	721	695	15	5	9	8	563	583	18	-1	17	8	67	78	67	-5	3	9	450	467	23	2	10	9	274	311	23	
12	2	8	378	245	34	7	9	8	212	142	211	1	17	8	209	78	47	-3	3	9	130	149	130	4	10	9	256	116	40	
-13	3	8	412	388	75	9	9	8	341	283	37	3	17	8	128	151	128	-1	3	9	371	319	34	6	10	9	339	247	62	
-11	3	8	428	350	20	11	9	8	465	380	34	5	17	8	597	563	65	1	3	9	341	319	14	8	10	9	165	176	103	
-7	3	8	271	278	16	-12	10	8	271	266	36	7	17	8	556	511	18	3	3	9	182	149	46	10	10	9	402	338	56	
-5	3	8	392	349	12	-10	10	8	716	730	13	9	17	8	302	324	54	5	3	9	463	466	23	-11	11	9	35	205	35	
-3	3	8	460	439	22	-8	10	8	334	322	18	-8	18	8	332	345	34	7	3	9	459	452	25	-9	11	9	231	221	42	
-1	3	8	1303	1328	36	-6	10	8	853	845	20	-6	18	8	723	776	11	9	3	9	178	148	105	-7	11	9	206	135	40	
1	3	8	1337	1327	17	-4	10	8	647	625	13	-4	18	8	562	549	14	11	3	9	316	213	28	-5	11	9	358	277	32	
3	3	8	464	438	9	-2	10	8	1136	1167	18	-2	18	8	600	540	14	-12	4	9	667	729	15	-3	11	9	267	263	16	
5	3	8	371	349	13	0	10	8	341	330	13	0	18	8	621	625	18	-10	4	9	517	475	31	-1	11	9	148	207	37	
7	3	8	311	278	14	2	10	8	1167	1166	16	2	18	8	538	540	17	-8	4	9	564	571	15	1	11	9	239	207	29	
9	3	8	208	94	54	4	10	8	603	625	26	4	18	8	515	548	30	-6	4	9	843	884	13	3	11	9	258	263	30	
11	3	8	417	350	25	6	10	8	836	844	22	6	18	8	762	776	23	-4	4	9	621	641	10	5	11	9	280	276	72	
13	3	8	448	388	59	8	10	8	275	323	36	8	18	8	354	345	70	-2	4	9	573	576	35	7	11	9	281	135	42	
-12	4	8	271	288	30	10	10	8	733	731	15	-7	19	8	336	337	24	0	4	9	733	728	18	9	11	9	229	221	34	
-10	4	8	220	104	168	12	10	8	356	266	54	-5	19	8	179	128	45	2	4	9	577	575	19	11	11	9	398	205	77	
-8	4	8	183	55	37	-11	11	8	199	157	61	-3	19	8	170	94	80	4	4	9	646	639	22	-10	12	9	583	676	16	
-6	4	8	363	352	28	-9	11	8	261	204	36	-1	19	8	201	240	35	6	4	9	880	883	32	-8	12	9	481	512	11	
-4	4	8	429	409	24	-7	11	8	331	317	21	1	19	8	236	240	25	8	4	9	635	571	13	-6	12	9	555	535	28	
-2	4	8	849	858	10	-5	11	8	423	453	28	3	19	8	233	93	33	10	4	9	515	475	41	-4	12	9	402	405	12	
0	4	8	1961	1943	27	-3	11	8	462	463	15	5	19	8	183	128	183	12	4	9	720	730	36	-2	12	9	584	556	15	
2	4	8	856	856	11	-1	11	8	472	478	10	7	19	8	326	337	26	-11	5	9	230	179	41	0	12	9	527	502	31	
4	4	8	450	409	33	1	11	8	478	477	13	-8	20	8	318	339	45	-9	5	9	119	93	119	2	12	9	573	556	57	
6	4	8	419	351	33	3	11	8	487	463	17	-6	20	8	386	360	31	-7	5	9	321	311	15	4	12	9	449	406	18	
8	4	8	196	55	29	5	11	8	451	452	31	-4	20	8	229	183	32	-5	5	9	165	90	165	6	12	9	555	533	25	
10	4	8	123	104	41	7	11	8	401	318	25	-2	20	8	649	612	31	-3	5	9	327	331	23	8	12	9	492	513	17	
12	4	8	385	288	24	9	11	8	207	204	86	0	20	8	325	277	32	-1	5	9	123	66	53	10	12	9	717	675	31	
-13	5	8	182	206	181	11	11	8	44	157	43	2	20	8	595	612	16	1	5	9	155	66	62	-9	13	9	270	282	29	
-11	5	8	341	335	29	-10	12	8	226	227	56	4	20	8	238	183	37	3	5	9	334	330	17	-7	13	9	620	630	16	
-9	5	8	144	90	75	-8	12	8	642	626	21	6	20	8	352	360	84	5	5	9	223	90	42	-5	13	9	742	741	15	
-7	5	8	289	156	91	-6	12	8	370	359	31	8	20	8	354	339	44	7	5	9	348	310	37	-3	13	9	549	558	11	
-5	5	8	313	344	14	-4	12	8	821	828	15	-7	21	8	154	254	116	9	5	9	248	93	24	-1	13	9	211	171	26	
-3	5	8	155	111	28	-2	12	8	505	478	12	-5	21	8	217	186	34	11	5	9	284	179	67	3	13	9	128	171	59	
-1	5	8	675	659	10	0	12	8	213	197	17	-3	21	8	191	190	44	-12	6	9	540	535	56	1	13	9	527	559	16	
1	5	8	672	659	14	2	12	8	503	477	23	-1	21	8	365	403	20	-10	6	9	609	581	16	5	13	9	749	741	14	
3	5	8	134	111	33	4	12	8	851	828	44	1	21	8	456	403	16	-8	6	9	676	636	18	9	13	9	687	630	15	
5	5	8	356	343	12	6	12	8	379	358	45	3	21	8	252	190	32	-6	6	9	453	452	24	7	13	9	341	282	28	
7	5	8	198	155	75	8	12	8	620	625	34	5	21	8	311	186	63	-4	6	9	515	517	10	-10	14	9	506	500	19	
9	5	8	169	90	103	10	12	8	302	227	39	7	21	8	243	255	97	-2	6	9	548	547	21	-8	14	9	733	737	26	
11	5	8	388	335	30	-11	13	8	251	233	27	-6	22	8	263	39	29	0	6	9	863	883	9	-6	14	9	248	243	19	
13	5	8	208	206	32	-9</																								

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

	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	17	9	267	290	28	-10	4	10	196	120	55	-8	12	10	309	341	19	-2	2	11	390	417	16	-3	11	11	373	353	28	
5	17	9	290	265	47	-8	4	10	413	429	20	-6	12	10	328	323	18	0	2	11	146	72	62	-1	11	11	292	241	53	
7	17	9	125	106	125	-6	4	10	142	165	51	-4	12	10	486	464	13	2	2	11	353	416	17	1	11	11	294	240	52	
-8	18	9	273	108	30	-4	4	10	221	238	53	-2	12	10	501	522	10	4	2	11	839	859	13	3	11	11	383	353	21	
-6	18	9	254	170	47	-2	4	10	199	158	42	0	12	10	350	310	24	6	2	11	448	382	61	5	11	11	345	226	120	
-4	18	9	46	48	45	0	4	10	161	59	69	2	12	10	511	521	17	8	2	11	630	587	25	7	11	11	496	419	24	
-2	18	9	21	74	20	2	4	10	236	157	25	4	12	10	483	464	18	10	2	11	370	225	31	-8	12	11	650	654	27	
0	18	9	323	295	35	4	4	10	269	238	19	6	12	10	349	324	66	-9	3	11	133	82	132	-6	12	11	337	312	45	
2	18	9	164	74	45	6	4	10	137	165	51	8	12	10	422	340	68	-7	3	11	171	75	55	-4	12	11	341	306	18	
4	18	9	111	48	111	8	4	10	470	428	26	-9	13	10	331	320	73	-5	3	11	474	480	19	-2	12	11	618	646	19	
6	18	9	235	170	50	10	4	10	268	120	34	-7	13	10	135	128	134	-1	3	11	202	261	32	0	12	11	580	623	17	
8	18	9	198	108	45	-11	5	10	175	293	53	-5	13	10	479	484	25	-3	3	11	146	73	38	2	12	11	636	647	19	
-7	19	9	309	345	20	-9	5	10	174	68	58	-3	13	10	385	391	21	1	3	11	52	73	52	4	12	11	371	306	23	
-5	19	9	353	304	41	-7	5	10	325	292	20	-1	13	10	93	101	92	3	3	11	269	260	24	6	12	11	364	312	41	
-3	19	9	378	372	18	-5	5	10	276	231	45	1	13	10	196	101	40	5	3	11	475	481	13	8	12	11	696	652	51	
-1	19	9	207	70	29	-3	5	10	335	349	17	3	13	10	348	392	28	7	3	11	273	74	93	-7	13	11	215	215	44	
1	19	9	69	70	68	-1	5	10	617	596	19	5	13	10	448	484	42	9	3	11	371	82	41	-5	13	11	186	185	90	
3	19	9	345	373	23	1	5	10	575	595	26	9	13	10	403	320	23	-10	4	11	560	551	38	-3	13	11	134	84	133	
5	19	9	339	304	31	3	5	10	382	348	14	-8	14	10	571	605	21	-8	4	11	513	564	31	-1	13	11	264	193	31	
7	19	9	370	344	25	5	5	10	121	231	121	-6	14	10	378	396	15	-6	4	11	770	774	14	-1	13	11	132	194	132	
-6	20	9	482	387	48	7	5	10	416	291	79	-4	14	10	351	347	25	-4	4	11	592	603	14	3	13	11	209	84	39	
-4	20	9	336	325	24	9	5	10	185	68	115	-2	14	10	248	194	22	-2	4	11	787	804	13	5	13	11	254	184	86	
0	20	9	282	260	46	11	5	10	314	292	34	0	14	10	377	428	22	0	4	11	492	449	15	7	13	11	242	216	55	
2	20	9	111	71	94	-10	6	10	174	214	49	2	14	10	203	194	55	2	4	11	793	804	26	-6	14	11	402	310	17	
2	20	9	313	259	27	-8	6	10	375	380	67	4	14	10	352	347	28	4	4	11	625	603	22	-4	14	11	884	909	21	
4	20	9	319	325	36	-6	6	10	320	279	24	6	14	10	411	395	21	8	4	11	800	774	33	-2	14	11	532	554	15	
6	20	9	445	387	44	-4	6	10	321	318	19	8	14	10	575	603	81	10	4	11	558	563	25	0	14	11	348	289	25	
-5	21	9	219	176	38	-2	6	10	185	191	29	-7	15	10	676	682	11	-7	5	11	611	551	57	2	14	11	563	553	36	
-3	21	9	140	164	82	0	6	10	576	554	11	-5	15	10	837	881	15	-9	5	11	194	227	99	4	14	11	884	909	27	
-1	21	9	170	173	77	2	6	10	209	191	26	-3	15	10	408	359	31	-7	5	11	291	291	23	6	14	11	378	309	94	
1	21	9	230	172	80	4	6	10	344	318	22	-1	15	10	209	261	28	-5	5	11	221	147	47	-5	15	11	132	41	42	
3	21	9	233	164	36	6	6	10	320	279	31	1	15	10	272	260	29	-3	5	11	79	112	78	-3	15	11	242	167	29	
5	21	9	246	175	34	8	6	10	414	380	20	3	15	10	449	359	30	-1	5	11	348	355	62	-1	15	11	51	200	51	
-4	22	9	379	341	36	10	6	10	335	213	93	5	15	10	866	882	15	1	5	11	355	355	18	1	15	11	298	200	109	
-2	22	9	234	120	171	-11	7	10	445	443	21	7	15	10	692	681	16	3	5	11	128	111	127	3	15	11	252	166	34	
0	22	9	719	754	13	-9	7	10	147	217	50	-8	16	10	226	230	27	5	5	11	277	147	51	5	15	11	217	41	37	
2	22	9	218	120	44	-7	7	10	339	353	21	-4	16	10	750	780	18	7	5	11	303	290	25	-6	16	11	250	287	22	
4	22	9	371	340	65	-5	7	10	235	166	19	-2	16	10	292	284	23	9	5	11	166	228	166	-4	16	11	379	391	31	
-3	23	9	152	30	93	-3	7	10	409	420	16	-2	16	10	349	286	19	-10	6	11	242	333	82	-4	16	11	327	351	29	
-1	23	9	190	30	111	-1	7	10	263	223	68	0	16	10	367	336	25	-8	6	11	610	618	17	0	16	11	469	389	22	
1	23	9	118	30	74	1	7	10	219	224	31	2	16	10	355	287	78	-6	6	11	734	783	43	2	16	11	447	351	67	
3	23	9	200	30	80	3	7	10	428	419	18	4	16	10	333	283	52	-4	6	11	678	704	22	4	16	11	375	390	25	
-10	0	10	417	431	31	5	7	10	144	166	143	6	16	10	760	780	16	-2	6	11	302	330	20	6	16	11	331	287	28	
-8	0	10	774	799	20	7	7	10	418	353	48	8	16	10	225	230	135	0	6	11	1424	1487	40	-5	17	11	339	245	71	
-6	0	10	776	793	19	9	7	10	242	217	30	-7	17	10	327	341	64	2	6	11	328	330	52	-3	17	11	276	249	46	
-4	0	10	660	639	19	11	7	10	533	442	30	-5	17	10	277	296	49	4	6	11	703	703	57	-1	17	11	453	460	22	
-2	0	10	698	701	17	-10	8	10	605	619	22	-3	17	10	345	341	19	6	6	11	766	783	31	1	17	11	422	459	49	
0	0	10	360	411	26	-8	8	10	396	400	44	-1	17	10	385	358	19	8	6	11	620	618	39	3	17	11	215	250	38	
2	0	10	700	701	17	-6	8	10	810	810	11	1	17	10	358	358	34	10	6	11	329	333	27	5	17	11	323	245	26	
4	0	10	608	638	14	-4	8	10	376	363	17	3	17	10	365	341	56	-9	7	11	208	239	37	-4	17	11	264	166	167	
6	0	10	792	793	38	-2	8	10	816	809	23	5	17	10	272	295	33	-5	7	11	303	326	25	-2	18	11	255	231	25	
8	0	10	818	798	60	0	8	10	154	58	32	7	17	10	372	341	56	-3	7	11	575	582	15	0	18	11	388	328	79	
10	0	10	485	431	29	2	8	10	805	809	28	-6	18	10	489	487	79	-1	7	11	904	938	27	2	18	11	205	231	204	
-11	1	10	107	42	106	4	8	10	311	363	23	-4	18	10	472	462	18	1	7	11	888	937	32	4	18	11	251	166	251	
-9	1	10	193	136	104	6	8	10	824	809	23	-2	18	10	406	393	25	3	7	11	574	582	38	-3	19	11	193	159	39	
-7	1	10	296	270	24	8	8	10	409																					

Table 6. Observed and calculated structure factors for KD5

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	12	170	33	45	-8	8	12	327	319	27	3	13	12	264	294	34	-2	4	13	535	568	16	1	11	13	217	64	53
-1	3	12	256	234	50	-6	8	12	480	496	20	5	13	12	244	204	37	0	4	13	729	752	14	3	11	13	297	283	31
1	3	12	285	233	31	-4	8	12	613	638	14	-4	14	12	298	132	34	2	4	13	542	568	15	-2	12	13	373	412	38
3	3	12	120	33	55	-2	8	12	748	748	50	-2	14	12	389	299	26	4	4	13	719	762	22	0	12	13	499	554	28
5	3	12	40	156	40	0	8	12	511	516	15	0	14	12	436	477	61	6	4	13	273	274	42	2	12	13	409	412	30
7	3	12	212	48	36	4	8	12	674	639	21	2	14	12	278	299	107	-5	5	13	136	60	93	-1	13	13	185	39	81
9	3	12	225	219	43	6	8	12	506	495	66	4	14	12	326	131	102	-3	5	13	157	106	156	1	13	13	0	39	1
-8	4	12	185	178	39	8	8	12	345	318	75	-3	15	12	239	151	45	-1	5	13	150	137	150	-4	0	14	362	425	32
-6	4	12	121	151	120	-7	9	12	177	54	72	-1	15	12	164	88	164	1	5	13	202	138	51	-2	0	14	505	508	28
-4	4	12	170	233	41	-5	9	12	391	381	14	3	15	12	265	151	135	5	5	13	137	60	115	0	0	14	484	520	25
-2	4	12	326	366	20	-3	9	12	116	192	85	3	15	12	265	151	135	-6	6	13	466	482	45	2	0	14	460	507	25
0	4	12	115	10	60	-1	9	12	120	128	63	-2	16	12	501	517	88	-4	6	13	327	309	23	4	0	14	344	425	30
2	4	12	368	366	24	1	9	12	91	128	91	0	16	12	380	401	27	-2	6	13	583	610	16	-3	1	14	269	194	29
4	4	12	321	233	22	3	9	12	372	192	168	2	16	12	558	518	37	0	6	13	613	656	16	-1	1	14	135	156	91
6	4	12	66	151	66	5	9	12	336	380	25	-1	17	12	288	23	36	2	6	13	627	610	22	1	1	14	99	156	98
8	4	12	0	177	1	7	9	12	211	54	210	1	17	12	276	23	74	4	6	13	282	310	38	3	1	14	186	194	44
-7	5	12	262	266	39	-6	10	12	470	464	18	-7	1	13	391	461	61	6	6	13	403	482	32	-4	2	14	350	335	24
-5	5	12	172	190	50	-4	10	12	427	460	19	-5	1	13	361	386	28	-5	7	13	181	83	64	-2	2	14	423	442	21
-3	5	12	432	491	54	-2	10	12	655	725	15	-3	1	13	194	240	65	-3	7	13	88	39	88	0	2	14	287	216	26
-1	5	12	877	944	19	2	10	12	725	726	55	-1	1	13	148	129	136	-1	7	13	309	360	24	2	2	14	416	441	21
1	5	12	856	942	19	4	10	12	508	461	68	1	1	13	209	129	30	1	7	13	353	359	42	4	2	14	341	335	24
3	5	12	464	490	17	6	10	12	495	464	19	3	1	13	204	241	39	3	7	13	165	40	67	-3	3	14	157	223	157
5	5	12	260	189	32	-7	11	12	185	190	45	5	1	13	382	386	23	5	7	13	207	83	55	-1	3	14	251	254	28
7	5	12	298	266	29	-5	11	12	309	329	17	7	1	13	365	460	33	-4	8	13	366	462	26	1	3	14	264	254	52
-8	6	12	132	54	132	-3	11	12	158	99	92	-6	2	13	319	378	24	-2	8	13	161	182	160	3	3	14	291	223	54
-6	6	12	483	520	37	-1	11	12	0	94	1	-4	2	13	343	370	22	0	8	13	435	438	20	-4	4	14	45	132	44
-4	6	12	303	247	34	1	11	12	251	94	71	-2	2	13	386	390	19	2	8	13	104	181	104	-2	4	14	291	325	26
-2	6	12	460	456	40	3	11	12	137	99	74	0	2	13	620	682	34	4	8	13	443	462	30	0	4	14	197	125	36
0	6	12	173	152	35	5	11	12	292	328	59	2	2	13	376	390	28	-5	9	13	119	41	119	2	4	14	316	325	23
2	6	12	450	455	17	7	11	12	202	190	40	4	2	13	344	369	20	-3	9	13	288	348	25	4	4	14	163	131	89
4	6	12	138	247	113	-6	12	12	581	647	13	6	2	13	367	379	30	-1	9	13	325	307	43	-3	5	14	195	214	36
6	6	12	554	520	28	-4	12	12	186	173	31	-7	3	13	99	127	98	1	9	13	310	307	37	-1	5	14	268	248	26
8	6	12	181	54	122	-2	12	12	333	313	33	-5	3	13	167	207	49	3	9	13	298	348	35	1	5	14	266	248	25
-7	7	12	187	132	57	0	12	12	425	396	32	-3	3	13	128	90	128	5	9	13	443	41	220	3	5	14	270	214	42
-5	7	12	250	259	48	2	12	12	324	313	76	-1	3	13	229	218	31	-4	10	13	95	196	94	-2	6	14	380	309	57
-3	7	12	97	108	96	4	12	12	205	172	41	1	3	13	171	217	37	-2	10	13	324	275	35	0	6	14	171	123	42
-1	7	12	559	563	61	6	12	12	613	646	18	3	3	13	188	90	36	0	10	13	325	327	40	2	6	14	220	309	52
1	7	12	568	563	15	-5	13	12	251	204	57	5	3	13	218	207	53	2	10	13	240	275	42	-1	7	14	288	257	26
3	7	12	198	108	52	-3	13	12	380	293	35	7	3	13	0	127	1	4	10	13	361	196	47	1	7	14	144	256	91
5	7	12	355	259	88	-1	13	12	315	177	57	-6	4	13	293	274	43	-3	11	13	306	283	23	0	8	14	609	621	24
7	7	12	259	132	99	1	13	12	113	177	113	-4	4	13	737	762	15	-1	11	13	162	64	72						

1E-3

X-ray Data Collection, Structure Determination and Refinement for $[\text{Mn}(\text{TCNQ})_2(\text{MeOH})_2]_\infty$ (11).

A red-purple prism of the title compound was mounted on a fiber and transferred to the goniometer. The crystal was cooled to -100°C during data collection by using a stream of cold nitrogen gas. Successful solution and refinement of the structure was carried out in the monoclinic space group $I2/a$. A summary of data collection parameters is given in Table 1.

Sample ID: MSU7 Date: 9/22/96Sample Information:Specimen:

Color: red Habit: prism
 Dimensions: 0.2 x 0.2 x 0.2 mm³
 Faces: _____

Structure:

Formula: MnC₂₄H₁₂N₈O₂ Name: Mn(TCNO)₂(H₂O)₂
 Crystal System: monoclinic Space Group: I2/a
 Unit Cell Parameters:
 $a =$ 12.5843(7) Å $\alpha =$ 90°
 $b =$ 13.7147(7) Å $\beta =$ 92.887(6)°
 $c =$ 13.3525(7) Å $\gamma =$ 90°
 Volume: 2301.58 F(000): 1012
 Z: 4 μ : 0.61 mm⁻¹

Data Collection:

Instrument: Siemens SMART
 Wavelength: MoK α (0.71073 Å) Temperature: -100 °C
 Distance: 4.970 cm Power: 50KV/40 mA
 Data Collection Time: 13.5 hours Sec./Frame: 30
 Frames Collected: 1321 Scan Width: 0.30 (w)
 Reflections Collected: 7074 Independent Reflections: 2681
 Observed Reflections: 2216 % > 4 σ (F): 82.7
 Resolution: 0.75 Å Max. 2 θ : 55
 $R(\text{sig})$: 3.43 % Redundancy: 2.63
 $R(\text{int})$: 2.63 % wR2: 8.43%
 $R1$: 3.57 %
 Absorption Correction Method: SADABS
 Min./Max. Transmission: _____
 Flack Parameter: NA

GOF = 1.077

Comments:

Table 1. Crystal data and structure refinement for $[\text{Mn}(\text{TCNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$ (11)

Identification code	$[\text{Mn}(\text{TCNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$
Empirical formula	C ₂₄ H ₁₂ Mn N ₈ O ₂
Formula weight	499.36
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	I2/a
Unit cell dimensions	a = 12.5843(7) Å b = 13.7147(7) Å c = 13.3525(7) Å alpha = 90 deg. beta = 92.8870(10) deg. gamma = 90 deg.
Volume	2301.6(2) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.441 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.613 mm ⁻¹
F(000)	1012
Crystal size	0.20 x 0.20 x 0.20 mm
Theta range for data collection	2.13 to 28.32 deg.
Index ranges	-16 ≤ h ≤ 16, -18 ≤ k ≤ 16, -7 ≤ l ≤ 17
Reflections collected	6950
Independent reflections	2681 [R(int) = 0.0263]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	2681 / 0 / 175
Goodness-of-fit on F ²	1.077
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R ₁ = 0.0357, wR ₂ = 0.0794
R indices (all data)	R ₁ = 0.0491, wR ₂ = 0.0843
Largest diff. peak and hole	0.394 and -0.227 e.Å ⁻³

Table 2. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Mn}(\text{TCNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$, (11).

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Mn(1)	0	5000	0	24 (1)	1
C(1)	1133 (1)	4600 (1)	3922 (1)	22 (1)	1
C(2)	1263 (1)	4389 (1)	4964 (1)	22 (1)	1
C(3)	1274 (1)	5112 (1)	5665 (1)	21 (1)	1
C(4)	1146 (1)	6107 (1)	5386 (1)	21 (1)	1
C(5)	1009 (1)	6324 (1)	4340 (1)	23 (1)	1
C(6)	1004 (1)	5599 (1)	3639 (1)	23 (1)	1
C(7)	1167 (1)	3848 (1)	3194 (1)	23 (1)	1
C(8)	930 (1)	4048 (1)	2167 (1)	25 (1)	1
N(1)	707 (1)	4242 (1)	1348 (1)	32 (1)	1
C(9\)	1500 (1)	2883 (1)	3442 (1)	28 (1)	1
N(2)	1792 (2)	2111 (1)	3645 (1)	41 (1)	1
C(10)	1166 (1)	6856 (1)	6121 (1)	23 (1)	1
C(11)	1489 (1)	6662 (1)	7138 (1)	24 (1)	1
N(3)	1774 (1)	6472 (1)	7948 (1)	34 (1)	1
C(12)	898 (1)	7829 (1)	5857 (1)	24 (1)	1
N(4)	638 (1)	8598 (1)	5614 (1)	31 (1)	1
O(1)	-1453 (1)	5171 (1)	750 (1)	44 (1)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.