

Appendix

F_o and F_c tables

**Observed (F,) and calculated (F,) structure
factors for Cu-OC₈H₁₇**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for $Cu-OC_8H_{17}$

h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c														
0	0	1	188	153	0	0	2	109	106	0	0	3	138	131	0	0	4	59	56	0	0	5	31	27	1	-8	-9	21	20	1	-8	-8	23	23	1	-8	-7	32	32	1	-8	-6	18	18	1	-8	-5	8	-10				
0	0	6	3	-4	0	0	7	5	-6	0	0	8	16	-14	0	0	9	36	-38	0	0	10	18	-19	1	-8	-4	28	-28	1	-8	-3	47	-48	1	-8	-2	42	-42	1	-8	-1	30	-33	1	-8	0	20	-22				
0	0	11	42	-44	0	0	12	14	-15	0	0	13	10	-10	0	1	-15	7	-6	0	1	-14	15	-16	1	-8	1	33	-35	1	-8	2	42	-41	1	-8	3	12	-15	1	-8	4	14	-12	1	-8	5	17	-17				
0	1	-2	8	9	0	1	-11	14	13	0	1	-10	50	50	0	1	-9	35	35	0	1	-8	48	46	1	-8	6	10	-9	1	-8	8	12	13	1	-8	9	18	17	1	-8	10	20	19	1	-8	11	16	16				
0	1	-7	31	31	0	1	-6	30	30	0	1	-5	22	21	0	1	-4	6	7	0	1	-3	23	-24	1	-8	12	7	5	1	-7	-13	11	-10	1	-7	-12	13	-15	1	-7	-11	21	-19	1	-7	-10	25	-25				
0	1	-2	42	-42	0	1	-1	21	19	0	1	0	74	-77	0	1	1	100	-96	0	1	2	81	-74	1	-7	-9	29	-29	1	-7	-8	24	-24	1	-7	-7	24	-26	1	-7	-6	75	-71	1	-7	-5	19	-19				
0	1	3	6	-7	0	1	4	48	-54	0	1	5	4	-5	0	1	6	23	-24	0	1	7	6	-6	1	-7	-3	7	-7	1	-7	-2	11	9	1	-7	-1	26	25	1	-7	0	23	24	1	-7	1	21	24				
0	1	8	7	-7	0	1	9	7	8	0	1	10	8	-10	0	1	11	34	33	0	1	12	29	29	1	-7	2	52	52	1	-7	3	50	52	1	-7	4	3	7	1	-7	5	22	22	1	-7	6	27	37				
0	1	13	15	16	0	1	14	21	22	0	1	15	9	9	0	2	-14	11	-11	0	2	-13	13	-12	1	-7	7	24	25	1	-7	8	9	10	1	-7	9	10	1	-7	10	6	-4	1	-7	11	8	-7	1	-7	12	8	-8
0	2	-2	25	-22	0	2	-1	6	6	0	2	-10	67	-67	0	2	-9	28	-27	0	2	-8	55	-55	1	-7	13	4	5	1	-6	-10	6	7	1	-6	-9	5	5	1	-6	-8	8	9	1	-6	-7	16	-17				
0	2	-7	50	-47	0	2	-6	24	-25	0	2	-5	36	-34	0	2	-3	8	8	0	2	-2	27	-28	1	-6	-6	38	33	1	-6	-5	30	34	1	-6	-4	24	27	1	-6	-3	23	23	1	-6	-2	18	17				
0	2	-1	28	-22	0	2	0	11	-9	0	2	1	96	97	0	2	2	98	97	0	2	3	58	54	1	-6	-1	6	-8	1	-6	0	13	-15	1	-6	1	5	-6	1	-6	2	7	-11	1	-6	4	23	21				
0	2	4	18	-16	0	2	5	32	32	0	2	6	16	18	0	2	7	15	13	0	2	9	3	4	1	-6	5	76	68	1	-6	6	32	27	1	-6	7	10	10	1	-6	8	10	10	1	-6	9	8	8				
0	2	15	9	-11	0	2	11	10	-10	0	2	12	24	-23	0	2	13	14	-13	0	2	14	9	-9	1	-5	-14	7	7	1	-5	-13	10	11	1	-5	-12	5	5	1	-5	-11	4	4	1	-5	-10	4	4				
0	2	15	14	-13	0	2	15	14	-18	0	3	-14	20	-18	0	3	-13	12	-13	0	3	-12	17	-18	1	-5	-9	8	8	1	-5	-8	14	12	1	-5	-7	15	13	1	-5	-6	27	-27	1	-5	-5	27	-27				
0	3	-11	10	-9	0	3	-10	33	35	0	3	-8	25	28	0	3	-7	40	38	0	3	-6	17	18	1	-5	-4	48	-44	1	-5	-3	25	-27	1	-5	-2	23	-27	1	-5	-1	24	-27	1	-5	1	7	-7				
0	3	-5	15	27	0	3	-4	63	61	0	3	-3	14	16	0	3	-2	3	5	0	3	-1	59	58	1	-5	2	4	-4	1	-5	3	4	5	1	-5	4	42	43	1	-5	5	5	6	1	-5	6	22	16				
0	3	0	21	22	0	3	1	9	-7	0	3	2	85	-78	0	3	3	37	-40	0	3	4	21	-25	1	-5	7	21	22	1	-5	8	32	33	1	-5	9	21	24	1	-5	10	18	18	1	-5	11	15	16				
0	3	5	16	-21	0	3	6	34	-33	0	3	7	17	-20	0	3	8	6	-6	0	3	9	3	-2	1	-5	12	9	-9	1	-5	13	5	6	1	-5	14	4	-4	1	-5	15	10	-11	1	-5	16	14	-15				
0	3	10	5	5	0	3	13	4	5	0	3	15	5	5	0	4	-14	33	31	0	4	-13	9	8	1	-4	-11	4	5	1	-4	-10	6	8	1	-4	-9	8	9	1	-4	-8	21	19	1	-4	-7	11	13				
0	4	-11	4	5	0	4	-9	4	3	0	4	-8	10	-10	0	4	-7	12	-16	0	4	-6	6	-8	1	-4	-6	11	-9	1	-4	-5	19	-12	1	-4	-4	26	30	1	-4	-3	42	47	1	-4	-2	25	22				
0	4	-5	15	13	0	4	-4	35	-36	0	4	-3	63	-58	0	4	-2	43	34	0	4	-1	15	13	1	-4	-1	15	13	1	-4	0	16	10	1	-4	1	36	33	1	-4	2	17	15	1	-4	3	9	10				
0	4	0	29	27	0	4	1	7	10	0	4	2	5	3	0	4	3	14	15	0	4	4	11	7	1	-4	4	4	3	1	-4	5	29	-34	1	-4	6	10	-10	1	-4	7	4	-5	1	-4	8	28	-30				
0	4	5	23	22	0	4	6	21	18	0	4	7	8	8	0	4	8	10	13	0	4	10	12	13	1	-4	9	32	-31	1	-4	10	25	-26	1	-4	11	23	-22	1	-4	13	19	-18	1	-4	14	10	8				
0	5	-4	12	-11	0	5	-3	22	-20	0	5	-11	21	-22	0	5	-10	5	-5	0	5	-9	10	-11	1	-3	-13	9	8	1	-3	-12	24	24	1	-3	-11	25	26	1	-3	-10	4	-3	1	-3	-9	4	5				
0	5	-8	4	-4	0	5	-7	7	5	0	5	-6	13	13	0	5	-5	4	-4	0	5	-4	9	-9	1	-3	-8	15	14	1	-3	-7	3	-2	1	-3	-6	7	-6	1	-3	-5	14	-13	1	-3	-4	20	-16				
0	5	-3	63	65	0	5	-2	110	101	0	5	-1	61	57	0	5	0	64	64	0	5	1	50	52	1	-3	-3	43	-43	1	-3	-2	17	-21	1	-3	-1	68	-69	1	-3	0	45	-50	1	-3	1	54	-56				
0	5	2	44	42	0	5	3	19	18	0	5	4	9	8	0	5	5	9	-10	0	5	6	13	-14	1	-3	2	38	32	1	-3	3	34	29	1	-3	4	50	47	1	-3	5	12	10	1	-3	6	7	7				
0	5	7	4	-6	0	5	8	3	-1	0	5	9	16	-17	0	5	10	18	-18	0	5	11	11	-12	1	-3	7	5	6	1	-3	8	12	11	1	-3	9	20	23	1	-3	10	18	19	1	-3	11	18	16				
0	5	13	8	-6	0	5	14	13	-12	0	5	15	7	-6	0	6	-12	4	-7	0	6	-11	21	22	1	-3	12	9	9	1	-3	13	21	19	1	-3	14	6	4	1	-3	15	12	11	1	-3	16	6	-5				
0	6	-10	9	8	0	6	-9	19	19	0	6	-8	18	19	0	6	-7	13	12	0	6	-6	3	4	1	-2	-13	5	-5	1	-2	-12	15	-15	1	-2	-11	31	-30	1	-2	-10	15	-14	1	-2	-9	16	14				
0	6	-5	11	-10	0	6	-3	15	-15	0	6	-2	85	-82	0	6	-1	28	20	0	6	0	26	-27	1	-2	-8	3	-3	1	-2	-7	4	2	1	-2	-6	4	-4	1	-2	-5	7	-5	1	-2	-4	13	17				
0	6	1	32	-29	0	6	2	15	-16	0	6	3	30	-32	0	6	4	15	-16	0	6	5	5	-4	1	-2	-3	11	13	1	-2	-2	36	38	1	-2	-1	44	41	1	-2	0	165	162	1	-2	1	83	87				
0	6	6	3	4	0	6	7	3	-3	0	6	8	8	-9	0	6	9	3	-1	0	6	11	6	5	1	-2	2	227	-221	1	-2	3	248	246	1	-2	4	59	56	1	-2	5	52	52	1	-2	6	38	34				
0	7	-2	15	-13	0	7	-11	9	-7	0	7	-10	14	-13	0	7	-9	20	-19	0	7	-8	15	-17	1	-2	7	8	9	1	-2	8	4	2	1	-2	9	7	-8	1	-2	10	13	-14	1	-2	11	12	-11				
0	7	-7	14	-14	0	7	-6	11	-11	0	7	-5	7	-8	0	7	-3	15	-16	0	7	-2	5	-5	1	-2	12	32	-32	1	-2	13	8	-5	1	-2	14	15	-15	1	-2	15	5	-4	1	-2	16	3	3				
0	7	-1	2	1	0	7	2	25	24	0	7	3	45	44	0	7	4	65	62	0	7	5	47	45	1	-1	-12	6	5	1																							

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Cu-OC₈H₁₇ :

h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c							
1	7	8	25	24	1	7	9	13	15	1	7	10	13	12	1	7	11	4	-4	1	8	-12	12	12	2	0	-11	21	21	2	0	-10	6	7	2	0	-9	17	16	2	0	-8	30	28	2	0	-7	20	19		
1	8	-10	6	-7	1	8	-9	5	-5	1	8	-8	7	-7	1	8	-7	7	5	1	8	-6	9	9	2	0	-6	23	20	2	0	-5	11	-13	2	0	-4	13	5	2	0	-3	27	-27	2	0	-2	27	-27		
1	8	-5	8	9	1	8	-4	6	6	1	8	-3	9	11	1	8	-2	21	-17	1	8	-1	78	-63	2	0	-1	51	-55	2	0	0	5	4	2	0	1	50	-61	2	0	2	80	-74	2	0	3	92	-86		
1	8	0	19	-11	1	8	1	15	-13	1	8	2	8	-8	1	8	3	8	-7	1	8	4	2	-3	2	0	4	46	-44	2	0	5	4	-7	2	0	6	26	27	2	0	7	6	-7	2	0	9	17	17		
1	8	5	3	-4	1	8	6	14	-13	1	8	7	15	-14	1	8	8	16	-15	1	8	9	20	-20	2	0	10	5	4	2	0	11	11	11	2	0	12	20	21	2	0	13	6	4	2	0	14	25	26		
1	8	10	17	-13	1	8	11	14	13	1	8	12	7	4	1	8	13	11	10	1	8	14	9	7	2	0	15	6	-2	2	1	-13	8	-7	2	1	-12	10	-9	2	1	-11	20	-22	2	1	-10	35	-34		
1	9	-6	5	4	1	9	-4	9	-9	1	9	-3	26	-24	1	9	-2	33	-34	1	9	-1	2	-4	2	1	-9	25	-25	2	1	-8	55	-54	2	1	-7	70	-67	2	1	-6	10	9	2	1	-5	7	8		
1	9	0	22	21	1	9	1	25	-23	1	9	2	35	-38	1	9	3	18	-19	1	9	4	14	-14	2	1	-4	17	14	2	1	-3	10	11	2	1	-2	48	48	2	1	-1	23	21	2	1	0	54	56		
1	9	5	14	-15	1	9	6	3	-3	1	9	7	10	11	1	9	8	11	11	1	9	9	12	14	2	1	1	17	21	2	1	2	82	79	2	1	3	22	25	2	1	4	51	-44	2	1	5	91	-82		
1	9	10	33	29	1	9	11	12	12	1	9	12	8	7	1	9	13	10	-7	1	9	14	9	-7	2	1	6	45	-48	2	1	7	18	-17	2	1	8	14	-16	2	1	9	21	-20	2	1	10	20	-21		
1	10	-7	15	-14	1	10	-6	18	-16	1	10	-5	14	-12	1	10	-4	7	-7	1	10	-3	18	17	2	1	11	19	-20	2	1	12	24	-23	2	1	13	16	-16	2	1	14	24	-23	2	1	15	5	-6		
1	10	-1	34	33	1	10	0	3	-1	1	10	1	20	22	1	10	2	38	36	1	10	3	32	31	2	1	16	4	-5	2	2	-13	8	8	2	2	-12	12	14	2	2	-11	14	14	2	2	-10	29	30		
1	10	4	15	16	1	10	5	12	12	1	10	6	15	16	1	10	7	16	16	1	10	8	13	13	2	2	-9	33	33	2	2	-8	37	38	2	2	-7	85	83	2	2	-6	15	16	2	2	-5	45	45		
1	10	9	8	8	1	10	10	11	-11	1	10	11	19	-18	1	10	12	16	-14	1	10	13	10	10	2	2	-4	13	12	2	2	-3	26	-26	2	2	0	43	-43	2	2	1	99	-96	2	2	2	75	-72		
1	11	-8	10	8	1	11	-7	9	8	1	11	-6	21	20	1	11	-5	25	23	1	11	-4	22	21	2	2	3	-5	2	2	4	528	-556	2	2	5	138	-194	2	2	6	96	-93	2	2	7	77	-69			
1	11	-3	16	16	1	11	-2	9	10	1	11	1	11	-10	1	11	1	8	-8	1	11	2	15	-14	2	2	8	40	-41	2	2	9	21	-20	2	2	12	12	12	2	2	13	12	12	2	2	13	21	22		
1	11	3	21	-22	1	11	4	23	-23	1	11	5	25	-26	1	11	6	24	-24	1	11	7	21	-19	2	2	14	12	13	2	2	15	19	18	2	2	16	7	7	2	2	17	5	4	2	2	18	5	-4		
1	11	8	6	-6	1	11	9	6	7	1	11	12	6	5	1	11	13	16	-16	1	11	14	15	-14	2	2	11	6	5	2	2	10	26	25	2	2	11	8	7	2	2	12	12	12	2	2	13	13	-16		
1	12	-6	24	-24	1	12	-5	37	-42	1	12	-4	37	-36	1	12	-3	28	-28	1	12	-2	21	-21	2	2	-3	-6	76	-73	2	2	-5	41	-41	2	2	-4	40	-42	2	2	-3	12	-15	2	2	-2	9	-7	
1	12	-1	16	-15	1	12	3	11	11	1	12	4	16	14	1	12	5	16	14	1	12	6	16	14	2	2	-1	4	-3	2	2	3	0	17	17	2	2	3	1	17	17	2	2	4	10	11					
1	12	7	11	10	1	12	8	17	17	1	12	9	21	16	1	12	10	9	6	1	12	11	5	13	2	2	3	4	204	201	2	2	3	5	177	169	2	2	4	78	76	2	2	5	35	32	2	2	6	28	29
1	13	-4	29	27	1	13	-3	26	29	1	13	-2	27	28	1	13	-1	28	27	1	13	0	21	19	2	2	3	6	4	2	2	10	7	5	2	2	11	7	5	2	2	12	16	-13							
1	13	1	14	13	1	13	2	6	6	1	13	3	4	-3	1	13	4	10	-8	1	13	5	16	-11	2	2	11	11	-11	2	2	12	14	-14	2	2	13	9	9	2	2	14	9	9	2	2	15	24	23		
1	13	8	13	-11	1	13	9	21	-19	1	13	10	33	-30	1	13	11	27	-24	1	13	12	36	-32	2	2	4	-8	65	62	2	2	4	-7	17	-16	2	2	4	-6	105	101	2	2	4	-5	58	61			
1	14	0	25	-23	1	14	1	20	-18	1	14	2	15	-12	1	14	3	12	-10	1	14	4	6	-5	2	2	4	-3	76	70	2	2	4	-2	41	38	2	2	4	-1	39	41	2	2	4	0	18	19			
1	14	7	7	5	1	14	8	10	7	1	14	9	5	2	1	14	10	5	-5	1	14	11	5	-7	2	2	4	2	-26	2	2	4	3	15	-16	2	2	4	5	89	-85	2	2	4	6	82	-78				
2	-13	-1	32	-31	2	-13	0	8	-9	2	-13	1	6	9	2	-13	2	8	-7	2	-13	3	16	-17	2	2	-1	28	-27	2	2	-3	5	-5	2	2	-4	9	11	-12	2	2	-2	4	11	-3					
2	-12	-6	5	-5	2	-12	-5	14	-13	2	-12	-4	23	-23	2	-12	-3	24	-23	2	-12	-2	49	-51	2	2	-2	5	4	2	2	-1	24	23	2	2	-1	15	13	2	2	-1	10	10	2	2	-1	12	12		
2	-12	-1	17	-15	2	-12	0	9	7	2	-12	1	11	-10	2	-12	2	11	-10	2	-12	3	11	12	2	2	-1	25	22	2	2	-2	5	-6	63	-62	2	2	-3	32	-35	2	2	-4	63	-62					
2	-12	6	11	11	2	-12	7	13	12	2	-11	-9	5	-4	2	-11	-8	11	12	2	-11	-7	21	19	2	2	-2	46	-42	2	2	-1	25	-21	2	2	-1	34	-28	2	2	0	26	-26							
2	-11	-4	34	34	2	-11	-3	48	47	2	-11	-2	56	57	2	-11	-1	40	42	2	-11	0	4	3	2	2	5	3	35	-32	2	2	5	4	44	-40	2	2	5	5	15	-12	2	2	5	6	54	51			
2	-11	1	5	-5	2	-11	2	16	20	2	-11	3	17	15	2	-11	4	6	5	2	-11	5	7	-7	2	2	5	8	5	4	2	2	5	10	12	10	2	2	5	11	9	2	2	5	12	3	4				
2	-11	8	12	-13	2	-11	9	14	-15	2	-11	10	17	7	2	-11	11	9	9	2	-11	12	10	9	2	2	6	-12	10	9	2	2	6	-10	45	-47	2	2	6	-9	20	-20	2	2	6	-8	13	-11			
2	-10	-7	12	12	2	-10	-6	14	15	2	-10	-5	8	9	2	-10	-4	14	16	2	-10	-3	9	8	2	2	6	-7	5	-6	2	2	6	-6	6	4	2	2	6	-5	10	12	2	2	6	-4	15	15			
2	-10	-2	4	-3	2	-10	-1	25	-24	2	-10	0	29	-30	2	-10	1	14	-13	2	-10	2	20	-18	2	2	6	-2	22	28	2	2	6	-1	8	-4	2	2	6	0	16	21	2	2	6	1	34	32			
2	-10	3	22	-25	2	-10	4	22	-22	2	-10	5	24	-21	2	-10	6	5	-6	2	-10	7	15	-17	2	2	6	3	12	-12	2	2	6	4	43	-38	2	2	6	5	20	-16	2	2	6	6	19	-14			
2	-10	9	7	1	2	-10	10	15	15	2	-10	11	7	-6	2	-10	12	8	-6	2	-10	13	9	-9	2	2	6	8	13	-15	2	2	6	9	10	-11	2	2	6	10	11	2	2	6	11	6	-6				
2	-9</																																																		

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for $Cu-OC_8H_{17}$

h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
3-8	8	16	-16		3-8	9	17	-16		3-8	10	24	-27		3-8	11	20	-18		3-8	12	21	-20		3-9	5	29	26		3-9	6	9	8		3-9	7	8	-9		3-9	8	4	-2		3-9	9	4	-2																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
3-7	11	10	8		3-7	10	19	19		3-7	9	11	12		3-7	8	10	10		3-7	7	7	6		3-9	10	14	-12		3-9	11	15	-14		3-9	12	10	-10		3-9	13	6	-4		3-10	8	29	-27		3-10	9	16	-14		3-10	10	10	-10		3-10	11	19	-18		3-10	12	10	8		3-10	13	6	5		3-10	14	11	7		3-10	15	14	11		3-10	16	14	11		3-10	17	11	12		3-10	18	14	11		3-10	19	14	11		3-10	20	14	11		3-10	21	14	11		3-10	22	14	11		3-10	23	14	11		3-10	24	14	11		3-10	25	14	11		3-10	26	14	11		3-10	27	14	11		3-10	28	14	11		3-10	29	14	11		3-10	30	14	11		3-10	31	14	11		3-10	32	14	11		3-10	33	14	11		3-10	34	14	11		3-10	35	14	11		3-10	36	14	11		3-10	37	14	11		3-10	38	14	11		3-10	39	14	11		3-10	40	14	11		3-10	41	14	11		3-10	42	14	11		3-10	43	14	11		3-10	44	14	11		3-10	45	14	11		3-10	46	14	11		3-10	47	14	11		3-10	48	14	11		3-10	49	14	11		3-10	50	14	11		3-10	51	14	11		3-10	52	14	11		3-10	53	14	11		3-10	54	14	11		3-10	55	14	11		3-10	56	14	11		3-10	57	14	11		3-10	58	14	11		3-10	59	14	11		3-10	60	14	11		3-10	61	14	11		3-10	62	14	11		3-10	63	14	11		3-10	64	14	11		3-10	65	14	11		3-10	66	14	11		3-10	67	14	11		3-10	68	14	11		3-10	69	14	11		3-10	70	14	11		3-10	71	14	11		3-10	72	14	11		3-10	73	14	11		3-10	74	14	11		3-10	75	14	11		3-10	76	14	11		3-10	77	14	11		3-10	78	14	11		3-10	79	14	11		3-10	80	14	11		3-10	81	14	11		3-10	82	14	11		3-10	83	14	11		3-10	84	14	11		3-10	85	14	11		3-10	86	14	11		3-10	87	14	11		3-10	88	14	11		3-10	89	14	11		3-10	90	14	11		3-10	91	14	11		3-10	92	14	11		3-10	93	14	11		3-10	94	14	11		3-10	95	14	11		3-10	96	14	11		3-10	97	14	11		3-10	98	14	11		3-10	99	14	11		3-10	100	14	11		3-10	101	14	11		3-10	102	14	11		3-10	103	14	11		3-10	104	14	11		3-10	105	14	11		3-10	106	14	11		3-10	107	14	11		3-10	108	14	11		3-10	109	14	11		3-10	110	14	11		3-10	111	14	11		3-10	112	14	11		3-10	113	14	11		3-10	114	14	11		3-10	115	14	11		3-10	116	14	11		3-10	117	14	11		3-10	118	14	11		3-10	119	14	11		3-10	120	14	11		3-10	121	14	11		3-10	122	14	11		3-10	123	14	11		3-10	124	14	11		3-10	125	14	11		3-10	126	14	11		3-10	127	14	11		3-10	128	14	11		3-10	129	14	11		3-10	130	14	11		3-10	131	14	11		3-10	132	14	11		3-10	133	14	11		3-10	134	14	11		3-10	135	14	11		3-10	136	14	11		3-10	137	14	11		3-10	138	14	11		3-10	139	14	11		3-10	140	14	11		3-10	141	14	11		3-10	142	14	11		3-10	143	14	11		3-10	144	14	11		3-10	145	14	11		3-10	146	14	11		3-10	147	14	11		3-10	148	14	11		3-10	149	14	11		3-10	150	14	11		3-10	151	14	11		3-10	152	14	11		3-10	153	14	11		3-10	154	14	11		3-10	155	14	11		3-10	156	14	11		3-10	157	14	11		3-10	158	14	11		3-10	159	14	11		3-10	160	14	11		3-10	161	14	11		3-10	162	14	11		3-10	163	14	11		3-10	164	14	11		3-10	165	14	11		3-10	166	14	11		3-10	167	14	11		3-10	168	14	11		3-10	169	14	11		3-10	170	14	11		3-10	171	14	11		3-10	172	14	11		3-10	173	14	11		3-10	174	14	11		3-10	175	14	11		3-10	176	14	11		3-10	177	14	11		3-10	178	14	11		3-10	179	14	11		3-10	180	14	11		3-10	181	14	11		3-10	182	14	11		3-10	183	14	11		3-10	184	14	11		3-10	185	14	11		3-10	186	14	11		3-10	187	14	11		3-10	188	14	11		3-10	189	14	11		3-10	190	14	11		3-10	191	14	11		3-10	192	14	11		3-10	193	14	11		3-10	194	14	11		3-10	195	14	11		3-10	196	14	11		3-10	197	14	11		3-10	198	14	11		3-10	199	14	11		3-10	200	14	11		3-10	201	14	11		3-10	202	14	11		3-10	203	14	11		3-10	204	14	11		3-10	205	14	11		3-10	206	14	11		3-10	207	14	11		3-10	208	14	11		3-10	209	14	11		3-10	210	14	11		3-10	211	14	11		3-10	212	14	11		3-10	213	14	11		3-10	214	14	11		3-10	215	14	11		3-10	216	14	11		3-10	217	14	11		3-10	218	14	11		3-10	219	14	11		3-10	220	14	11		3-10	221	14	11		3-10	222	14	11		3-10	223	14	11		3-10	224	14	11		3-10	225	14	11		3-10	226	14	11		3-10	227	14	11		3-10	228	14	11		3-10	229	14	11		3-10	230	14	11		3-10	231	14	11		3-10	232	14	11		3-10	233	14	11		3-10	234	14	11		3-10	235	14	11		3-10	236	14	11		3-10	237	14	11		3-10	238	14	11		3-10	239	14	11		3-10	240	14	11		3-10	241	14	11		3-10	242	14	11		3-10	243	14	11		3-10	244	14	11		3-10	245	14	11		3-10	246	14	11		3-10	247	14	11		3-10	248	14	11		3-10	249	14	11		3-10	250	14	11		3-10	251	14	11		3-10	252	14	11		3-10	253	14	11		3-10	254	14	11		3-10	255	14	11		3-10	256	14	11		3-10	257	14	11		3-10	258	14	11		3-10	259	14	11		3-10	260	14	11		3-10	261	14	11		3-10	262	14	11		3-10	263	14	11		3-10	264	14	11		3-10	265	14	11		3-10	266	14	11		3-10	267	14	11		3-10	268	14	11		3-10	269	14	11		3-10	270	14	11		3-10	271	14	11		3-10	272	14	11		3-10	273	14	11		3-10	274	14	11		3-10	275	14	11		3-10	276	14	11		3-10	277	14	11		3-10	278	14	11		3-10	279	14	11		3-10	280	14	11		3-10	281	14	11		3-10	282	14	11		3-10	283	14	11		3-10	284	14	11		3-10	285	14	11		3-10	286	14	11		3-10	287	14	11		3-10	288	14	11		3-10	289	14	11		3-10	290	14	11		3-10	291	14	11		3-10	292	14	11		3-10	293	14	11		3-10	294	14	11		3-10	295	14	11		3-10	296	14	11		3-10	297	14	11		3-10	298	14	11		3-10	299	14	11		3-10	300	14	11		3-10	301	14	11		3-10	302	14	11		3-10	303	14	11		3-10	304	14	11		3-10	305	14	11		3-10	306	14	11		3-10	307	14	11		3-10	308	14	11		3-10	309	14	11		3-10	310	14	11		3-10	311	14	11		3-10	312	14	11		3-10	313	14	11		3-10	314	14	11		3-10	315	14	11		3-10	316	14	11		3-10	317	14	11		3-10	318	14	11		3-10	319	14	11		3-10	320	14	11		3-10	321	14	11		3-10	322	14	11		3-10	323	14	11		3-10	324	14	11		3-10	325	14	11		3-10	326	14	11		3-10	327	14	11		3-10	328	14	11		3-10	329	14	11		3-10	330	14	11		3-10	331</

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for $Cu-OC_8H_{17}$

h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c	h	k	l	F_o	F_c								
4 4 6	44	39			4 4 7	4	3			4 4 8	127	130			4 4 9	57	63			4 4 10	24	25			5 2 -4	15	-15			5 2 -3	46	-42			5 2 -2	26	-25			5 2 -1	20	-22			6 2 0	14	-15
4 4 11	12	15			4 4 12	8	11			4 4 13	7	9			4 4 15	5	-3			4 5 -12	10	-9			5 2 1	4	-5			5 2 3	4	2			5 2 4	5	-4			5 2 5	15	16			5 2 6	27	27
4 5 -8	16	14			4 5 -7	10	12			4 5 -6	7	-5			4 5 -4	25	-21			4 5 -3	8	9			5 2 7	15	14			5 2 8	12	13			5 2 9	33	37			5 2 10	13	-16			5 2 11	13	16
4 5 -2	70	63			4 5 -1	31	32			4 5 0	15	15			4 5 1	3	2			4 5 2	8	-7			5 2 12	9	12			5 2 13	12	13			5 2 14	6	10			5 3 -11	10	-10			5 3 -6	7	10
4 5 3	9	-7			4 5 4	17	-17			4 5 5	27	-24			4 5 6	37	-35			4 5 7	4	2			5 3 -5	24	23			5 3 -4	21	21			5 3 -3	36	35			5 3 -2	57	55			5 3 -1	20	-19
4 5 8	87	-97			4 5 9	75	-93			4 5 10	37	-48			4 5 11	20	-26			4 5 12	12	-13			5 3 0	53	-41			5 3 1	18	-19			5 3 2	19	-16			5 3 3	11	-10			5 3 4	11	-9
4 5 13	4	-4			4 6 -11	16	15			4 6 -10	4	3			4 6 -8	9	9			4 6 -7	3	3			5 3 5	10	-10			5 3 6	19	-18			5 3 7	27	-27			5 3 8	27	-29			5 3 9	36	-41
4 6 -5	15	-15			4 6 -4	76	-72			4 6 -3	14	12			4 6 -2	74	-69			4 6 -1	69	-66			5 3 11	12	-16			5 4 -11	6	5			5 4 -10	7	6			5 4 -9	6	8			5 4 -6	3	2
4 6 0	53	-46			4 6 1	46	-43			4 6 2	23	-24			4 6 3	15	-13			4 6 4	10	-10			5 4 -5	6	-6			5 4 -4	8	-8			5 4 -3	8	6			5 4 -2	25	-24			5 4 -1	134	-121
4 6 5	6	5			4 6 6	28	29			4 6 7	22	22			4 6 8	9	9			4 6 9	44	51			5 4 0	55	-53			5 4 1	29	-32			5 4 2	30	-28			5 4 3	26	-25			5 4 4	29	-23
4 6 10	37	45			4 6 11	16	18			4 6 12	7	9			4 7 -11	17	-18			4 7 -10	19	-19			5 4 5	15	-13			5 4 6	5	-4			5 4 7	5	5			5 4 8	11	13			5 4 9	19	25
4 7 -8	6	-6			4 7 -7	16	-19			4 7 -6	7	-7			4 7 -4	14	14			4 7 -3	23	-22			5 4 10	20	27			5 4 11	10	-13			5 4 12	10	-15			5 5 -10	12	-10			5 5 -9	9	-8
4 7 -2	43	44			4 7 -1	39	39			4 7 0	33	35			4 7 1	43	41			4 7 2	40	34			5 5 -7	6	-6			5 5 -6	8	-10			5 5 -5	9	-11			5 5 -3	8	8			5 5 -2	30	26
4 7 3	22	19			4 7 4	11	11			4 7 5	10	8			4 7 6	12	14			4 7 7	7	7			5 5 -1	82	75			5 5 0	44	41			5 5 1	55	51			5 5 2	44	42			5 5 3	34	35
4 7 8	22	24			4 7 9	9	11			4 7 10	16	-22			4 7 11	12	-15			4 8 -10	23	22			5 5 4	24	23			5 5 5	22	19			5 5 6	22	20			5 5 7	9	11			5 5 8	4	-4
4 8 -9	18	17			4 8 -8	9	-11			4 8 -7	8	7			4 8 -6	28	33			4 8 -5	15	16			5 5 9	5	-4			5 5 10	16	-21			5 6 -10	12	11			5 6 -9	13	15			5 6 -8	5	6
4 8 -4	8	7			4 8 -1	22	-21			4 8 0	22	-19			4 8 1	25	-22			4 8 2	25	-22			5 6 -7	11	12			5 6 -6	28	27			5 6 -5	13	15			5 6 -4	6	7			5 6 -3	3	2
4 8 2	25	-26			4 8 3	13	-15			4 8 4	14	-13			4 8 5	17	-15			4 8 8	15	17			5 6 -2	4	-3			5 6 -1	16	-15			5 6 0	30	-28			5 6 1	23	-21			5 6 2	24	-25
4 8 9	6	5			4 8 10	8	10			4 8 11	12	15			4 8 12	6	8			4 8 14	5	4			5 6 3	17	-15			5 6 4	7	-7			5 6 6	6	-8			5 6 7	20	-23			5 6 8	19	-23
4 9 -9	22	-22			4 9 -8	11	-10			4 9 -7	4	4			4 9 -6	34	-41			4 9 -5	55	-65			5 6 9	15	-19			5 6 10	10	-12			5 6 13	8	9			5 6 14	15	13			5 6 15	9	7
4 9 -4	26	-26			4 9 -3	26	-26			4 9 -2	13	-12			4 9 -1	6	-7			4 9 1	6	7			5 7 -10	7	-5			5 7 -9	12	-13			5 7 -8	8	-11			5 7 -7	4	2			5 7 -6	12	-13
4 9 2	11	13			4 9 3	8	10			4 9 6	9	12			4 9 7	12	13			4 9 8	11	9			5 7 -5	20	-18			5 7 -3	13	-15			5 7 -2	32	-30			5 7 -1	12	-12			5 7 0	9	-8
4 10 -8	11	11			4 10 -7	19	-21			4 10 -6	29	-38			4 10 -4	11	-15			4 10 -3	5	5			5 7 1	4	5			5 7 2	9	9			5 7 3	16	17			5 7 4	12	11			5 7 5	12	14
4 10 -2	4	-5			4 10 3	6	-7			4 10 5	7	11			4 10 6	36	-42			4 10 7	9	-9			5 7 6	13	14			5 7 7	21	26			5 7 8	8	11			5 7 9	6	-7			5 7 10	5	-6
4 10 8	21	-25			4 10 9	20	-24			4 10 10	7	-9			4 10 12	6	-5			4 11 -7	5	6			5 7 11	4	3			5 7 14	11	-9			5 7 15	9	-7			5 8 -8	7	9			5 8 -6	6	4
4 11 -6	31	28			4 11 -5	15	23			4 11 -3	7	-7			4 11 -2	5	-5			4 11 -1	12	-11			5 8 -5	30	40			5 8 -4	37	40			5 8 -3	18	17			5 8 -2	30	31			5 8 -1	11	-8
4 11 0	12	-13			4 11 1	2	4	-4		4 11 2	4	8	10		4 11 3	4	-5			4 11 4	4	-5			5 8 0	11	11			5 8 1	9	10			5 8 2	4	4			5 8 4	9	-12			5 8 5	8	-9
4 11 6	17	21			4 11 8	6	8			4 11 9	11	13			4 11 10	4	6			4 11 12	5	3			5 8 6	11	-13			5 8 7	14	-15			5 8 8	6	6			5 8 9	18	-24			5 8 10	8	15
4 12 -6	8	6			4 12 -5	16	-15			4 12 -4	15	19			4 12 -3	9	9			4 12 -2	15	17			5 8 12	9	-15			5 8 13	11	-12			5 8 14	6	-5			5 9 -7	6	-5			5 9 -6	5	5
4 12 -1	16	20			4 12 0	16	20			4 12 1	13	15			4 12 2	10	11			4 12 3	8	11			5 9 -4	17	-21			5 9 -3	13	-16			5 9 -2	13	-15			5 9 -1	25	-24			5 9 0	19	-20
4 12 7	4	-6			4 12 9	4	-4			4 12 10	8	-5			4 12 11	5	-4			4 13 -4	9	-6			5 9 1	19	-21			5 9 2	17	-18			5 9 3	9	-11			5 9 7	5	6			5 9 8	8	-11
4 13 -2	6	-3			4 13 -1	9	-10			4 13 0	13	-16			4 13 1	14	-18			4 13 2	14	-16			5 9 9	18	24			5 9 11	12	-19			5 9 13	8	7			5 10 -7	14	-10			5 10 -4	6	9
4 13 3	13	-14			4 13 4	12	-13			4 13 5	7	8			4 14 -1	7	5			4 14 0	8	7			5 10 -3	29	43			5 10 -1	36	45			5 10 0	27	32			5 10 1	23	26			5 10 2	19	25
4 14 1	14	11			4 14 2	15	12			4 14 3	18	13			4 14 4	22	16			4 14 5	29	24			5 10 3	13	16			5 10 4	8	8			5 10 7	5	-6			5 10 10	8	-11			5 10 12	6	5
4 14 6	14	11			4 15 2	13	-10			4 15 3	15	-11			4 15 4	12	-9			5 -11 -3	6	4			5 10 13	8	-5			5 11 -6	9	6			5 11 -5	9	-8			5 11 -4	3	-6			5 11 -2	6	-7
5 -11 0	11	-11			5 -11 1	20	-21			5 -11 2	28	-26			5 -11 3	31	-29			5 -11 4	8	-6			5 11 -1	8	-13			5 11 2	5	-7			5 11 3	6	-8			5 11 4	6	-9			5 11 5	6	-9
5 -11 5	15	-12			5 -10 -4	12	-10			5 -10 -3	8	-9			5 -10 -2	11	-12			5 -10 -1	10	-12			5 11 8	6	-6			5 12 -5	14	13			5 12 -4	38	31			5 12 -3	17	21			5 12 -2	17	21
5 -10 1	5	3			5 -10 4	12	-12			5 -10 5	44	-41			5 -10 6	32	-31			5 -10 7	7	-6			5 12 2	5	9		</																		

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure

factors for $\text{Cu-OC}_7\text{H}_{15}\text{-C}_7\text{H}_{15}$

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Cu-OC₇H₁₅-C₇H₁₅

h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c										
1	0	0	118	-111	-5	3	0	38	36	-4	6	0	23	22	3	9	0	16	15	-2	-8	1	15	14	-5	-9	2	14	-14	-3	-5	2	50	46	-4	-2	2	31	-32	7	1	2	11	-11	5	4	2	17	18
3	0	0	72	72	-3	3	0	40	-39	-2	6	0	35	36	5	9	0	16	-15	0	-8	1	17	-18	-3	-9	2	19	-18	-1	-5	2	24	-26	-1	-2	2	21	-20	7	2	2	11	-12	7	4	2	19	-21
4	0	0	49	-48	-2	3	0	173	172	0	6	0	10	-8	-2	10	0	13	-15	5	-8	1	11	-9	-1	-9	2	21	22	0	-5	2	34	33	0	-2	2	126	-130	-6	2	2	14	15	-3	5	2	15	13
5	0	0	35	35	-1	3	0	42	-41	1	6	0	18	21	-1	10	0	21	17	6	-8	1	14	12	0	-9	2	28	-30	1	-5	2	26	-29	1	-2	2	93	100	-4	2	2	57	-57	-2	5	2	32	-32
6	0	0	13	-15	0	3	0	95	89	2	6	0	64	-65	0	10	0	17	-18	-5	-7	1	14	12	1	-9	2	22	22	2	-5	2	12	10	2	-2	2	30	28	-3	2	2	39	-36	-1	5	2	27	28
-7	1	0	12	9	1	3	0	18	-19	3	6	0	58	53	1	10	0	22	-21	-4	-7	1	20	-21	2	-9	2	13	-13	3	-5	2	9	10	3	-2	2	56	58	-2	2	2	14	-17	0	5	2	15	-15
-5	1	0	16	-17	4	3	0	44	-38	4	6	0	26	-24	2	10	0	38	36	-3	-7	1	20	-15	-8	-8	2	12	11	4	-5	2	15	14	4	-2	2	14	-14	-1	2	2	115	118	2	5	2	8	9
-4	1	0	65	62	5	3	0	40	39	6	6	0	18	16	3	10	0	30	-28	-2	-7	1	53	-48	-5	-8	2	13	12	5	-5	2	21	20	-6	-1	2	13	13	0	2	2	84	-90	3	5	2	29	-28
-3	1	0	109	-101	6	3	0	15	-15	8	6	0	14	12	4	10	0	13	11	-1	-7	1	16	18	-3	-8	2	67	61	6	-5	2	22	-23	-5	-1	2	28	-28	1	2	2	21	18	4	5	2	23	-23
-2	1	0	12	11	8	3	0	15	8	-6	7	0	25	25	-2	11	0	18	17	3	-7	1	11	-12	-2	-8	2	14	-14	-9	-4	2	11	13	-4	-1	2	37	36	2	2	2	13	-13	8	5	2	12	-10
-1	1	0	24	18	-5	4	0	37	-36	-4	7	0	10	-2	-1	11	0	28	-27	6	-7	1	18	-22	0	-8	2	8	12	-7	-4	2	24	30	-3	-1	2	27	-25	3	2	2	32	-28	-6	6	2	11	-10
0	1	0	117	-111	-4	4	0	125	113	-3	7	0	13	13	0	11	0	21	24	7	-7	1	11	11	1	-8	2	19	-20	-4	-4	2	51	44	-1	-1	2	39	-31	4	2	8	9	-5	6	2	13	12	
1	1	0	131	104	3	4	0	15	-13	-2	7	0	24	-23	2	11	0	15	-14	-6	-6	1	24	22	2	-8	2	12	11	-3	-4	2	68	-60	0	-1	2	85	84	5	2	2	11	-10	-4	6	2	21	-17
2	1	0	158	-120	-2	4	0	24	-28	-1	7	0	20	18	3	11	0	12	11	-5	-6	1	20	18	-7	-7	2	13	12	-2	-4	2	49	43	2	-1	2	82	-87	8	2	2	20	-20	-1	6	2	17	-18
3	1	0	29	25	-1	4	0	76	73	0	7	0	20	-20	9	11	0	13	-11	-3	-6	1	61	-61	-6	-7	2	22	-23	-1	-4	2	24	-23	3	-1	2	9	9	-4	3	2	21	21	0	6	2	13	15
5	1	0	13	-14	0	4	0	61	-58	1	7	0	15	16	-1	12	0	16	16	-2	-6	1	41	37	-5	-7	2	18	14	0	-4	2	22	-23	5	-1	2	13	-14	-3	3	2	29	-28	2	6	2	12	11
6	1	0	27	25	1	4	0	17	18	2	7	0	33	26	0	12	0	19	-18	-1	-6	1	19	-22	-3	-7	2	19	18	1	-4	2	24	26	-7	0	2	18	-17	-2	3	2	30	-33	3	6	2	25	-27
7	1	0	21	-21	3	4	0	13	-12	3	7	0	48	-43	1	12	0	14	14	0	-6	1	8	8	-2	-7	2	61	60	2	-4	2	23	23	-5	0	2	15	17	-1	3	2	17	-17	4	6	2	53	-43
10	1	0	11	1	4	4	0	54	50	4	7	0	67	62	-3	13	0	12	8	2	-6	1	17	-17	-1	-7	2	46	-44	3	-4	2	41	-42	-4	0	2	15	-14	0	3	2	45	48	5	6	2	27	24
-6	2	0	20	20	5	4	0	55	47	5	7	0	31	-27	7	14	0	11	-11	3	-6	1	32	31	0	-7	2	24	26	5	-4	2	19	-21	-2	0	2	154	143	2	3	2	31	24	6	6	2	14	-14
-5	2	0	17	-17	-6	5	0	11	-12	-5	8	0	11	10	0	-12	1	5	7	4	-6	1	31	-29	3	-7	2	14	13	-7	-3	2	19	-19	-1	0	2	19	-19	4	3	2	21	-22	-4	7	2	15	15
-4	2	0	26	-24	-5	5	0	25	24	-1	8	0	16	-15	-3	-11	1	16	-14	5	-6	1	22	25	-3	-7	2	15	-17	-3	-9	3	25	23	-1	-4	3	29	26	3	-1	3	49	-50	-3	3	3	11	9
-3	2	0	94	94	-4	5	0	85	84	0	8	0	34	37	1	-11	1	12	9	6	-6	1	16	21	2	7	2	42	41	0	-9	3	12	13	0	-4	3	19	-20	4	-1	3	19	20	-2	3	3	15	17
-2	2	0	542	-509	-3	5	0	19	18	1	8	0	44	-43	2	-11	1	14	-15	7	-6	1	11	-12	3	7	2	19	20	1	-9	3	18	-17	3	-4	3	28	-27	-7	0	3	15	13	-1	3	3	47	-33
-1	2	0	56	54	-2	5	0	28	-19	2	8	0	40	39	-5	-10	1	11	-9	-7	-5	1	15	-14	5	7	2	9	-9	2	-9	3	17	17	4	-4	3	20	17	-6	0	3	17	-19	0	3	3	18	-16
0	2	0	5	-3	-1	5	0	13	-12	3	8	0	19	20	0	-10	1	12	-11	-5	-5	1	12	10	-5	-5	2	19	19	-5	-8	3	11	9	-9	-3	3	13	-13	-4	0	3	11	9	1	3	3	42	40
1	2	0	132	-114	0	5	0	27	25	4	8	0	42	-41	1	-10	1	12	-9	-1	-10	1	12	-9	7	7	2	13	-12	-4	-8	3	12	14	-6	-3	3	18	-19	-3	0	3	44	-43	2	3	3	35	-30
2	2	0	78	64	1	5	0	10	-13	5	8	0	28	28	-5	-9	1	21	19	-3	-5	1	20	-19	-3	8	2	10	7	2	-8	3	11	-12	-5	-3	3	33	33	-1	0	3	231	-233	3	3	3	14	14
3	2	0	53	-47	2	5	0	34	30	-6	9	0	10	3	-2	-9	1	18	20	-2	-5	1	21	-21	1	8	2	15	16	-6	-7	3	31	29	-4	-3	3	16	-16	0	0	3	38	-35	5	3	3	14	-14
4	2	0	24	21	3	5	0	39	-40	-4	9	0	12	11	0	-9	1	31	31	-1	-5	1	9	8	2	8	2	11	8	-5	-1	3	33	-32	-2	-3	3	19	21	1	0	3	37	37	6	3	3	18	-18
6	2	0	18	-18	6	5	0	35	-35	0	9	0	32	-33	1	-9	1	14	-11	0	-5	1	7	-10	3	8	2	29	-27	-2	-7	3	29	-30	-1	-3	3	39	-43	2	0	3	114	-122	7	3	3	12	-14
7	2	0	24	24	7	5	0	22	22	1	9	0	53	53	-5	-8	1	16	-14	1	-5	1	17	15	4	8	2	11	10	-1	-7	3	33	37	1	-3	3	45	-44	3	0	3	32	38	8	3	3	15	15
-6	3	0	16	-19	-6	6	0	18	-17	2	9	0	49	-48	-4	-8	1	17	-13	2	-5	1	11	-11	6	8	2	17	-16	0	-7	3	33	-33	-2	-3	3	43	-44	4	0	3	20	-22	-7	4	3	12	-13
3	-5	1	30	-27	-5	-2	1	26	-27	7	0	1	17	-17	3	3	1	19	-19	3	6	1	47	-45	0	9	2	15	-14	1	-7	3	10	12	3	-3	3	58	-60	-6	1	3	11	11	-6	4	3	14	16
4	-5	1	45	49	-4	-2	1	8	8	-7	1	1	14	-12	4	3	1	33	34	4	6	1	190	173	1	9	2	14	-14	-6	-6	3	15	-18	4	-3	3	46	-46	-4	1	3	27	29	-5	4	3	15	-18
5	-5	1	33	-34	-2	-2	1	63	-67	-6	1	1	10	11	5	3	1	42	-42	5	6	1	11	-11	2	9	2	11	-9	-3	-6	3	27	30	5	-3	3	24	27	-3	1	3	21	20	-4	4	3	24	-20
6	-5	1	19	19	-1	-2	1	86	81	-5	1	1	10	-10	6	3	1	51	50																														

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for $\text{Cu-OC}_7\text{H}_{15}\text{-C}_7\text{H}_{15}$

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
-1-10	2	28	-23	-6-5 2 10 -11	4-3 2 51 55	2 1 2 18 -18	1 4 2 31 a	1 11 3 16 18	-7-5 4 31 -35	2-2 4 20 -18	2 2 4 n-a	-3 7 4 14 -14																											
0-10	2	14	16	-5-5 2 14 16	6- 2 1 30 -27	1 1 2 10 12	2 4 2 22-21	3 11 3 11-10	-6-5 4 15 15	4-14 12-11	3 2 4 9 6	-2 1 4 26 26																											
4- 9	1	12	-10	4- 5 2 61-59	-5-2 2 45 42	4 1 2 22 -23	4 4 2 15-11	2 12 3 11-10	-5-5 4 21 -18	-7-1 4 11 11	-6 3 4 13 14	0 1 4 9 -9																											
5 14	3	13	-9	-3-5 4 13 29	-3-1 4 10 9	-5 3 4 16 -15	2 7 4 27 -24	1-4 7 a-m	-7 2 7 11 -6	5 6 7 18 19	-1 10 7 11 8	1-6 8 12 -11																											
1- 1	2	4	1- 1	-2-5 4 18-18	-2-1 4 45 47	-4 3 4 19 17	3 7 4 8- 24	3-4 7 12 10	-5 2 7 11 10	6 6 7 10 9	0 10 7 11-18	4- 5 11 11 12																											
-5-11	4	14	-14	-1-5 4 14 14	0-1 4 a	-3 3 4 15 1	4 7 4 12-14	-3-3 7 11 10	-4 2 7 a-n	4 1 1 12- 7	2 10 7 11 4	-3-5 8 18 -17																											
-1-11	4	17	18	2-5 4 22 11	1-1 4 a-m	-2 3 4 24 -25	0 8 4 11 -9	-2-3 7 13 -13	0 2 7 2-15	-4 7 7 18 17	3 10 7 11 -12	-2-5 8 15 15																											
-3 10 4	11	10	4-5 4 11-11	3-1 4 41 45	-1 3 4 45 46	2 8 4 11 13	0-3 7 10 18	1 2 7 53 56	-3 7 7 21-10	4 1 0 1 19 20	-3-4 8 15 15																												
-1-10	4	11	13	5- 5 4 16 -16	4-1 4 a-u	1 3 4 8 5	4 8 4 a 38	1-3 7 12 -12	4 2 7 40 a	-1 7 7 19 18	5 10 7 28 26	-2-4 8 13 -18																											
0-10	4	12	12	- 1 4 4 21 18	-7 0 4 11 -8	2 3 4 39 1	5 8 4 10-11	5-3 7 11-10	-5 3 7 14-11	0 7 7 32 -31	6 10 7 15 15	-1-4 8 15 17																											
-6- 9	4	12	-9	- 6 4 4 29-11	-3 0 4 12 14	4 3 4 12 10	-2 9 4 10 1	-5-2 7 15 15	-1 3 7 10 -11	1 1 1 26 -26	9 10 7 11-11	2 4 1 17 -19																											
-3- 9	4	40	-43	-5-4 4 23 23	-2 0 4 18-22	8 3 4 15-15	- 1 9 4 10 -8	-1-2 7 39 39	0 3 7 45 0	2 7 7 41-15	-3 11 7 13 14	-5-3 8 11 11																											
-1- 9	4	11	-14	-4-4 4 13 -10	-1 0 4 9	-6 4 4 11 -8	0 9 4 11 10	0-2 7 31 -32	1 3 7 56 -61	3 7 7 13 10	0 11 7 8 6	-1-3 8 22 -25																											
4 9	4	10	-6	4- 1 5 20 -23	1- 3 5 11-11	- 1 2 5 49 52	-1 6 5 26 -26	4-2 7 12 -11	2 1 1 39 39	5 1 1 19-11	1 11 7 19-19	-5-2 8 14-15																											
6 9	4	15	-15	-4-7 5 23 22	5- 1 5 14 13	-2 2 5 30 -31	1 6 5 14-14	5- 2 1 12 11	3 3 7 15-15	6 7 7 24 26	2 11 7 19 19	4- 2 1 11 19																											
2 10	4	24	-26	-1-7 5 33 -33	6-3 5 16 -15	-1 2 5 2 15	2 6 5 16 -16	4-1 1 10 6	4 3 1 11 -11	1 1 1 17 -11	1 11 1 10 -10	-1-2 8 12 -15																											
3 10	4	14	13	-2-7 5 18 15	-6-2 5 10 -8	2 2 5 28 11	4 6 5 11 -11	-2-1 7 11-11	5 3 7 a-m	-4 8 7 12 -10	5 11 7 18 22	0-2 8 27 24																											
6 10	4	12	12	1-7 5 14 15	4- 2 5 16 15	1 2 5 20 -21	6 6 5 18 16	-1-1 7 11-10	-2 4 7 23 24	-3 8 7 11 11	3 12 7 15 16	1- 2 1 10 11																											
2 11	4	14	14	-9-6 5 11 2	-3-2 5 22 -23	1 2 5 10 9	7 6 5 16-19	0-1 7 8 -1	- 1 4 1 30 -31	-2 8 7 23 -23	6 12 7 12 -12	2-2 1 11 -9																											
3 11	4	13	-13	-6-6 5 24 26	0-6 5 11-11	-5 3 5 34 35	-2 7 5 15-15	-1 7 7 15 15	0 4 7 11 -12	-1 8 7 40 41	7 12 7 18 15	5- 2 1 16-15																											
4 11	4	14	15	4 6 5 17 -15	2- 2 5 29-50	-2 3 5 24 22	-1 7 5 18 18	4-1 7 11 11	1 4 1 24 26	0 8 7 14 15	3 13 7 22 -25	4- 1 1 11-11																											
8 11	4	11	-18	-3-6 5 23 23	3-2 5 11 13	- 1 1 5 50 -44	0 7 5 14 11	5-1 7 10 -9	2 4 7 52 -49	1 8 7 18 -18	4 13 7 13 1	-3-1 8 31 33																											
0 12	4	10	11	-2-6 5 24 -23	4- 1 5 15 14	2 3 5 15-15	4 7 5 11 13	6- 1 1 14 14	1 4 1 8 1	2 8 7 13 15	4 14 7 11 16	-2-1 8 15-16																											
4 12	4	11	-12	-1-6 5 17 -16	-5-1 5 17 -16	3 3 5 9 11	5 1 5 11-18	-6 0 7 11 3	-3 5 7 26 -25	5 14 7 12 -9	1- 1 1 21 -11																												
5 13	4	11	-12	1- 6 5 10 -5	4- 1 5 14 16	4 3 5 10 6	8 7 5 11 -13	-3 0 7 30 -27	-2 5 7 36 -36	4 8 7 15 15	1 15 7 16 18	2-1 8 8 12																											
6 13	4	17	15	4- 5 5 17 -19	-1-15 10 1 36	5 1 5 12 10	-3 8 5 10 8	-2 0 7 46 45	-1 5 7 46 48	6 8 7 19-19	-4 10 8 11 12	1- 1 1 19-18																											
0-12	5	11	-11	-5-5 5 19 22	0-1 5 50 -50	-5 4 5 36 -36	2 8 5 13 12	- 1 0 1 10 -8	0 5 7 17 -18	7 8 7 10 19	-2 10 8 12 14	-3 0 8 11-18																											
1-12	5	18	18	-3-5 5 10-10	1- 1 5 20 22	4 1 5 16 19	1 6 5 11-10	2 0 1 26 27	1 5 1 14 -11	1 8 1 11-11	4- 9 6 15-15	0 0 8 17 16																											
-4-11	5	16	-14	-2-5 5 21 21	2-1 5 15 14	-1 4 5 11 13	5 8 5 33 34	3 0 7 32 -33	2 5 7 a 26	-3 9 7 12 -12	-5-8 8 14 11	2 0 8 15 -17																											
-2 11	5	16	-19	-1-5 5 22 -22	1- 1 5 26 -30	0 4 5 12-11	6 8 5 15-15	6 0 7 12-11	1 5 1 80 82	-2 9 7 25 26	-2-8 8 12 11	3 0 8 39 40																											
-1-11	5	12	-12	1-5 5 11 -10	4-1 5 11 11	1 4 5 11 36	-3 9 5 17 -16	-4 1 7 12 11	4 5 7 13 11	-1 9 7 16 -14	-1-8 8 15 -15	4 0 8 17 -17																											
1-11	5	11	-13	1-5 5 12 10	5-1 5 13 -14	2 4 5 8 5	0 9 5 8 -10	-3 1 7 23 a	-2 6 7 17 17	0 9 7 20 11	0-8 8 9 8	7 0 8 12 -13																											
-2-10	5	11	36	4- 5 5 13 -12	-6 0 5 15 -12	3 4 5 16 15	1 9 5 11 11	0 1 7 7 7	-1 6 7 28 -28	1 9 7 11 -11	-6-7 8 18 18	-6 1 8 11 14																											
-1-10	5	27	-29	-5-4 5 19 -17	-5 0 5 17 18	4 4 5 12 11	3 9 5 23 22	2 1 7 29 -31	0 6 7 42 40	3 9 7 a 26	0-7 8 12-14	-5 1 8 17 -18																											
0-10	5	10	-1	-4-4 5 16 15	- 2 0 5 9 -9	5 4 5 14-16	5 9 5 10 -9	3 1 7 33 33	1 6 7 49-52	4 9 7 28 -28	4- 6 8 11-11	-4 1 8 21 10																											
-6- 9	5	17	17	- 1 4 5 15 15	-1 0 5 34 -31	6 4 5 10 10	6 9 5 19 10	-1 1 8 38 44	7 4 8 18 16	7 7 8 21 22	4 11 8 14 -14	- 2 4 9 18 16																											
4- 9	5	16	10	1-4 5 9 8	0 0 5 39 37	-4 5 5 11-10	1 9 5 12-14	0 1 8 17 -19	-4 5 8 1 - 1	8 7 8 18-19	5 11 1 12-10	- 1 4 9 25 -24																											
-3- 9	5	22	24	2 4 5 14 12	1 0 5 40 -44	-3 5 5 22 23	2 10 5 16 15	1 1 8 18 17	- 2 5 17 18	-3 8 8 14-14	6 11 8 17 20	0 4 9 25 27																											
-2- 9	5	12	-13	4 4 5 11 10	4 0 5 11-16	-2 5 5 10 -11	3 10 5 31 -30	3 1 8 50-29	-1 5 8 45 44	-2 8 8 21 22	7 11 8 11 9	2-4 9 11 12																											
-1- 9	5	11	28	4- 1 5 11 12	-3 1 5 80 -80	-1 5 5 10 -9	4 10 5 16 12	4 1 8 18 22	0 5 8 49 44	-1 8 8 73 -70	-2 12 8 11 4	4-4 9 13 -11																											
0-9	5	19	-19	-5-3 5 15 16	0 5 5 20 21	6 10 5 10-11	5 1 8 30 -32	1 5 8 8-34	0 8 8 38 36	2 12 8 10 11	4- 1 9 18 16																												
-4- 8	5	45	-43	-4-3 5 24 -22	0 1 5 11-a	1 5 5 21 -19	2 11 5 11 -13	-5 2 8 18 17	3 5 8 40 36	2 8 8 28 -29	3 12 8 18 -19	-3-3 9 15 -13																											
-3- 8	5	21	23	-3-3 5 25 24	1 1 5 50 46	2 5 5 31 -28	3 11 5 19 20	-4 2 8 10-12	4 5 8 51 -43	1 8 8 18 32	4 12 8 24 25	-1-3 9 20 10																											
-2- 8	5	11	15	-2-3 5 11 -12	2 1 5 20 -20	3 5 5 14 -14	4 11 5 23 -23	-3 2 8 9 6	5 5 8 35 11	4 8 8 31 -32	5 12 8 23 -22	0-3 9 a-n																											
-1- 8	5	17	-17	-1-3 5 11 12	3 1 5 1 P	4 5 5 8 -8	5 11 5 12 12	-2 2 8 12-12	6 5 8 17 -16	5 8 8 18 18	1 13 8 11 -9	-1-3 9 11 10																											
0-8	5	19	19	1- 1 5 50 -50	1 1 5 10 -9	7 5 5 18 21	9 11 5 11 -9	0 2 8 23 23	9 5 8 13 -11	7 8 8 13 -13	3 13 8 21 22	4- 2 9 21 -20																											
1-8	5	11	-12	2-3 5 35 31	4 2 5 13 13	-3 6 5 14 -12	1 12 5 14 15	1 2 8 48 -51	-5 6 8 12 -5	8 8 8 14 15	4 13 8 30 -31	-3-2 9 11 11																											
1 13	5	16	-11	-3-3 6 18-11	-3 1 6 37 40	9 5 6 11 4	4 10 6 18-27	2 2 8 38 37	-4 6 8 14 13	-4 9 8 15 9	1 14 8 15 11	-2-2 9 18-29																											
2 13	5	17	16	-2-3 6 42 45	-2 1 6 9 -9	-2 6 6 14 -15	5 10 6 23 25	5 2 1 56 51	-3 6 8 19-15	-2 9 8 15 -18	2 14 8 16 -17	-1-2 9 10 12																											
7 13	5	15	14	-1-3 6 11-11	0 1 6 8 10	-1 6 6 25 25	8 10 6 18 22	6 2 8 22 -23	- 2 6 1 14 14	-1 9 8 55 54	3 14 8 23 24	1-2 9 12 -10																											
-1 15	5	10	7	0-3 6 19 18	1 1 6 12 -18	0 6 6 28 -29	9 10 6 10 -9	-3 3 8 11-11	-1 6 8 22 24	0 9 8 11-11	1 14 8 15 -16	2-2 9 23 24																											
5 15	5	11	-11	1-1 6 87 86	2 1 6 28 30	1 6 6 17 16	-5 11 6 13 -8	-2 3 8 18 17	0 6 8 8-24	1 9 8 14 13	5 15 8 15 -17	1- 2 9 14-12																											
4 1 6 5	11	4	2-1 6 17 -12	3 1 6 21-11	2 6 6 18-26	0 11 6 10 -9	-1 3 8 10 -1	1 6 8 16 15 1	3 9 8 23 -23	2 15 8 23 27	5- 2 9 10 1																												
-3 10	6	11	-7	1-1 6 25 26	4 1 6 12 13	3 6 6 13 -1	1 11 6 13 14	0 3 8 16-15	2 6 8 61-56	4 9 1 32 30	1 16 8 12 -10	7-2 9 13 10																											
4- 9	6	11	14	4-1 6 10 -13	-3 2 6 21 -20	7 6 6 11 12	2 11 6 11-12	1 3 8 52 52	3 6 8 16 14	5 9 8 27 -27	2 16 8 11-11	-1-1 9 26 -28																											
-3- 9	6	13	-8	-5-2 6 17 -17	-1 2 6 12 -16	8 6 6 13 -14	4 11 6 22 22	2 3 8 27 -29	4 6 8 a 11	6 9 8 a a	3 16 8 12 11	-2-1 9 44 11																											
-1- 9	6	11	-5	4- 2 6 12 10	0 2 6 27 26	-4 7 6 15-12	5 11 6 19 -19	3 3 8 40 38	5 6 8 1- 3 2	-3 10 8 19 10	4 16 8 12 -12	-1-1 9 25 -28																											
-4- 8	6	27	-28	-3-2 6 14 15	3 2 6 50 31	-1 7 6 36 -32	6 11 6 10 -6	4 1 6 10-24	6 6 8 27 29	-2 10 8 14-11	1 17 8 12 6	0-1 9 12 14																											
-6-7	6	15	-11	-2-2 6 18-10	4 2 6 18-10	0 7 6 22 22	1 12 6 12-14	6 3 8 17 17	7 6 8 14 -14	0 10 8 19 21	-6-8 9 11 8	1- 1 9 15 13																											
4- 1	6	14	-11	-1-2 6 9 8	-2 3 6 11-11	1 7 6 33 31	2 12 6 17 16	7 3 8 20 -19	-3 7 8 21 21	1 10 8 17 -20	-5-7 9 14 11	2- 1 9 17 -17																											
2-7	6	11	10	0-2 6 9-60	- 1 1 6 15 32	2 1 6 11-10	3 12 6 16-15	-3 4 8 11 10	-2 7 8 21-11	2 10 8 16 18	0-7 9 13 11	1- 1 9 11 10																											
4- 7	6	11	11	1-2 6 18 21	0 3 6 41 -37	4 7 6 9 -1	6 12 6 24 -26	-2 4 8 19-19	-1 7 8 21 21	4 10 8 10 -8	2- 1 9 13 8	4-1 9 19 -19																											
-6-6	6	31	11	2-2 6 a 11	1 3 6 22 a	5 7 6 a a	2 13 6 18 -18	-1 4 8 33 33	0 7 8 11 13	5 10 8 11 22	1-6 9 12 11	7-1 9 14 -15																											
-1-6	6	15	-15	1- 2 6 21 -21	2 3 6 8 -1	6 7 6 22-21	3 13 6 21 19	0 4 8 31 -32	1 7 8 75 -73	6 10 8 5- 2 4	2-6 9 15-14	- 6 0 9 15 14																											
0-6	6	12	14	4-2 6 17 17	4 3 6 9 4	1 0 1 6 5 3	4 11 6 12 11	1 4 8 22 -23	2 1 1 57 50	-3 11 8 24 -23	4- 5 9 11 -9	-5 0 9 16 -17																											
1- 6	6	16	11	-5-1 6 18 20	1 1 6 11 -6	-3 8 6 10 -10	0 1 4 6 5 4	2 4 8 15 10	3 7 8 1-15	0 11 8 12 -9	-2-5 9 17 -19	-4 0 9 19 21																											
4- 6	6	14	-15	-4-1 6 27 -28	-2 4 6 16-15	-2 8 6 16 19	4 14 6 12 12																																

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for $\text{Cu-OC}_7\text{H}_{15}\text{-C}_7\text{H}_{15}$

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$					
0	-4	6	12	16	-2	0	6	28	26	1	5	6	30	25	3	9	6	22	-22	0	-6	7	14	-13	-1	1	9	19	-20	4	4	9	50	-48	-2	8	9	13	-12	5	12	9	89	89	3	-1	10	16	-14
1	-4	6	21	-23	0	0	6	14	-14	2	5	6	29	-33	4	9	6	20	19	-3	-5	7	14	14	0	1	9	30	30	5	4	9	26	26	0	8	9	36	-38	1	13	9	15	16	4	-1	10	18	19
2	-4	6	34	28	1	0	6	30	30	3	5	6	25	-20	6	9	6	16	-12	-1	-5	7	10	-8	1	1	9	20	-23	9	4	9	12	-10	4	8	9	17	17	2	13	9	16	-17	5	-1	10	14	-14
3	-4	6	24	-21	2	0	6	27	-26	7	5	6	12	-15	2	10	6	10	-11	0	-5	7	17	15	2	1	9	18	21	-4	5	9	14	13	5	8	9	24	-23	4	13	9	30	31	-5	0	10	13	15
4	-4	6	15	-14	5	0	6	13	-12	8	5	6	13	15	3	10	6	24	25	3	-5	7	12	10	4	1	9	19	-19	-3	5	9	10	-7	6	8	9	14	15	5	13	9	35	-37	-4	0	10	21	-24
-3	-4	7	19	-21	4	1	7	31	-30	2	6	7	13	-10	5	9	7	20	19	-3	-6	8	13	14	5	1	9	37	36	-1	5	9	13	13	8	8	9	11	-14	6	13	9	16	19	-3	0	10	19	16
-2	-4	7	14	16	5	1	7	12	12	3	6	7	22	23	-3	10	7	17	-17	0	-6	8	13	9	6	1	9	24	-26	0	5	9	50	-49	9	8	9	29	34	2	14	9	14	15	0	0	10	15	15
-4	2	9	20	19	1	5	9	84	88	-2	9	9	13	13	3	14	9	51	-51	1	0	10	19	-21	-4	8	10	12	-14	-2	-4	11	13	-14	-1	2	11	21	-22	0	7	11	26	27	6	12	11	25	-28
-2	2	9	20	22	2	5	9	20	-19	-1	9	9	10	-9	6	14	9	17	-14	2	0	10	17	18	0	8	10	41	39	0	-4	11	14	11	0	2	11	12	12	1	7	11	19	-18	5	13	11	13	6
1	2	9	28	30	3	5	9	14	-18	0	9	9	17	19	2	15	9	21	-21	4	0	10	18	-18	1	8	10	24	-25	1	-4	11	17	-17	2	2	11	18	-19	2	7	11	10	10	4	14	11	20	22
2	2	9	47	-49	4	5	9	18	14	1	9	9	11	-10	3	15	9	33	34	5	0	10	18	18	1	16	11	10	-4	4	1	12	21	-19	5	10	12	11	-9	0	1	13	16	-15	3	1	14	13	-12
3	2	9	44	45	5	5	9	16	-15	4	9	9	12	-13	1	16	9	16	16	-4	1	10	22	22	2	16	11	6	-8	-5	2	12	18	-16	6	10	12	20	22	4	1	13	14	14	4	1	14	23	-22
4	2	9	15	-8	6	5	9	11	15	5	9	9	29	29	1	17	9	16	-17	-3	1	10	27	-26	0	-6	12	12	-11	-4	2	12	15	15	0	11	12	5	4	5	1	13	16	-13	5	1	14	19	20
5	2	9	30	-29	-3	6	9	18	18	6	9	9	19	-20	2	-6	10	13	10	-2	1	10	9	10	0	-5	12	15	16	-3	2	12	10	-9	5	11	12	22	20	-4	2	13	16	-16	6	1	14	14	-15
6	2	9	25	24	-2	6	9	24	-26	7	9	9	21	20	3	-6	10	12	-11	0	1	10	16	-18	2	-5	12	11	9	-1	2	12	13	14	6	11	12	11	16	0	2	13	12	11	2	2	14	12	-12
7	2	9	14	-15	-1	6	9	13	11	-6	10	9	10	-2	-2	-5	10	12	9	1	1	10	23	22	-2	-4	12	11	9	0	2	12	11	-10	2	12	12	11	-9	5	2	13	15	14	3	2	14	35	36
-6	3	9	16	14	0	6	9	23	18	-2	10	9	14	13	-1	-5	10	14	-13	2	1	10	31	-33	1	-4	12	14	12	3	2	12	14	-12	4	12	12	20	-21	2	3	13	31	-32	4	2	14	13	-12
-5	3	9	11	-8	1	6	9	14	-15	2	10	9	17	-16	2	-5	10	13	-9	3	1	10	21	21	2	-4	12	13	-13	-3	3	12	16	16	7	12	12	13	-18	3	3	13	21	20	5	2	14	13	-11
-3	3	9	13	13	2	6	9	52	53	3	10	9	20	18	-1	-4	10	13	11	7	1	10	12	-9	-2	-3	12	17	-21	1	3	12	37	-37	3	13	12	18	-18	-2	4	13	14	-16	6	2	14	13	12
-2	3	9	28	-28	3	6	9	27	-24	4	10	9	12	-9	0	-4	10	24	-22	-3	2	10	16	14	-1	-3	12	17	16	2	3	12	30	30	5	14	12	18	15	3	4	13	40	-38	-1	3	14	13	11
-1	3	9	15	15	6	6	9	13	-13	5	10	9	12	-11	1	-4	10	20	20	-2	2	10	15	-15	0	-3	12	13	-13	6	3	12	11	-7	1	-6	13	11	-11	4	4	13	18	17	1	3	14	18	16
0	3	9	18	-16	7	6	9	16	19	6	10	9	25	26	6	-4	10	10	5	-1	2	10	19	19	3	-3	12	12	-6	-3	4	12	14	-15	-1	-5	13	11	11	0	5	13	40	39	2	3	14	35	35
1	3	9	13	-11	8	6	9	14	-12	7	10	9	70	-75	-3	-3	10	15	15	0	2	10	13	-13	-1	-2	12	21	-23	1	4	12	25	27	2	-5	13	14	-13	1	5	13	22	-24	3	3	14	33	-32
2	3	9	45	44	-2	7	9	27	26	8	10	9	16	16	-2	-3	10	14	-17	2	2	10	36	34	0	-2	12	12	-7	-1	-4	12	12	-7	-1	-4	13	15	16	4	5	13	17	-17	4	3	14	28	27
3	3	9	73	-76	-1	7	9	36	-34	-2	11	9	12	-12	0	-3	10	19	20	3	2	10	27	-28	1	-2	12	16	-15	-1	5	12	32	33	0	-4	13	13	-11	0	6	13	25	-24	5	3	14	15	-13
4	3	9	40	41	0	7	9	8	-9	2	11	9	11	16	1	-3	10	17	-22	5	2	10	11	-13	5	-2	12	11	6	0	5	12	30	-29	3	-4	13	12	-9	1	6	13	51	48	1	4	14	34	-35
-8	4	9	11	1	1	7	9	19	21	3	11	9	31	-29	-3	-2	10	15	-17	6	2	10	18	-18	-4	-1	12	15	16	2	5	12	13	15	24	16	-19	2	6	13	24	-23	3	4	14	20	19		
-5	3	10	14	10	4	8	10	10	-9	2	-4	11	13	14	3	2	11	11	11	4	7	11	21	-22	-3	-1	12	13	-14	4	5	12	11	10	0	-3	13	22	23	-2	7	13	28	-29	4	4	14	22	-22
-2	3	10	15	13	5	8	10	19	19	-3	-3	11	17	-20	4	2	11	40	-39	5	7	11	14	17	-2	-1	12	15	14	-1	6	12	29	-32	1	-3	13	12	-13	-1	7	13	16	19	5	4	14	15	16
-1	3	10	20	-21	6	8	10	14	-15	-2	-3	11	25	27	5	2	11	18	18	6	7	11	14	-15	0	-1	12	20	-16	0	6	12	12	-13	0	-2	13	15	-15	2	7	13	17	21	-1	5	14	14	-16
0	3	10	32	34	9	8	10	21	-24	-1	-3	11	14	-16	-4	3	11	14	15	-4	8	11	18	14	1	-1	12	17	17	1	6	12	10	-8	1	-2	13	16	15	-2	8	13	30	28	0	5	14	31	-29
1	3	10	14	-14	-1	9	10	17	-13	1	-3	11	13	13	0	3	11	24	-23	-3	8	11	13	-14	3	-1	12	10	-1	4	6	12	14	-14	2	-2	13	13	-13	-1	8	13	35	-33	1	5	14	37	37
2	3	10	13	-10	0	9	10	10	-9	3	-3	11	11	5	1	3	11	14	13	-2	8	11	16	17	5	-1	12	12	-12	5	6	12	14	14	-3	-1	13	20	22	0	8	13	15	15	2	5	14	23	-23
5	3	10	17	20	1	9	10	13	-14	-2	-2	11	16	-19	2	3	11	18	-18	1	8	11	33	31	6	-1	12	13	9	-3	7	12	17	-16	-2	-1	13	20	-23	-1	9	13	16	16	-1	6	14	13	15
-5	4	10	12	-9	2	9	10	16	-19	-1	-2	11	23	26	3	3	11	13	-15	2	8	11	21	-22	-3	0	12	22	24	-2	7	12	22	22	-1	-1	13	12	11	0	9	13	15	-15	0	6	14	16	16
-4	4	10	13	11	5	9	10	12	-16	0	-2	11	21	-20	5	3	11	23																															

**Observed (F_o) and calculated (F_c) structure
factors for the N-form of Cu-C₈H₁₇**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for the N-form of $Cu-C_8H_{17}$

h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $
1	0	0	58	52	-3	4	0	17	16	-4	9	0	8	9	0	0	2	53	54	-2	5	2	10	9
2	0	0	30	28	-1	4	0	37	36	-3	9	0	10	10	-1	5	2	81	78	-1	5	2	9	9
3	0	0	20	18	0	4	0	9	7	0	10	1	15	17	0	10	1	8	8	0	5	2	20	20
4	0	0	20	18	1	4	0	55	55	2	5	1	23	22	3	0	2	15	15	1	5	2	25	25
5	0	0	24	24	2	4	0	15	17	3	5	1	10	11	-2	1	2	20	29	2	5	2	19	28
6	1	0	22	21	3	4	0	15	14	4	5	1	11	12	-2	1	2	18	18	3	5	2	19	28
7	1	0	28	27	4	4	0	11	13	5	5	1	11	13	0	1	2	20	21	4	5	2	19	28
8	1	0	27	25	6	4	0	13	12	5	5	1	13	13	0	1	2	20	21	4	5	2	19	28
9	1	0	24	23	-4	5	0	15	15	3	4	1	17	18	2	1	2	37	33	-5	6	2	12	12
10	1	0	24	23	-3	5	0	15	15	3	4	1	17	18	2	1	2	37	33	-5	6	2	12	12
11	1	0	50	47	-3	5	0	8	7	-3	10	0	12	12	0	1	2	37	33	-5	6	2	12	12
12	1	0	65	78	-1	5	0	22	22	-1	10	0	14	15	2	1	2	11	11	-1	6	2	20	20
13	1	0	27	28	0	5	0	10	10	0	4	1	10	12	4	1	2	25	25	0	6	2	20	20
14	1	0	19	18	1	5	0	63	64	1	10	0	10	10	2	1	2	29	29	2	6	2	20	20
15	1	0	16	16	3	5	0	13	14	2	10	0	15	13	4	1	2	29	29	2	6	2	20	20
16	1	0	22	23	-5	6	0	14	14	-5	11	0	13	12	0	1	2	42	42	-4	6	2	13	12
17	1	0	12	12	-6	6	0	17	17	-6	11	0	15	15	2	1	2	39	36	-2	7	2	28	28
18	1	0	19	18	-1	6	0	19	18	0	11	0	11	11	0	1	2	13	13	-1	6	2	30	30
19	1	0	24	23	0	6	0	13	14	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
20	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
21	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
22	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
23	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
24	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
25	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
26	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
27	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
28	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
29	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
30	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
31	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
32	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
33	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
34	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
35	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
36	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
37	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
38	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
39	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
40	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
41	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
42	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
43	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
44	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
45	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
46	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
47	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
48	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
49	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
50	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
51	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
52	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
53	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
54	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
55	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
56	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
57	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
58	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
59	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
60	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
61	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
62	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
63	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
64	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
65	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
66	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
67	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
68	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
69	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
70	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
71	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0	6	2	30	30
72	1	0	14	14	2	6	0	14	15	2	11	0	14	12	5	1	2	13	13	0				

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for N-form of $\text{Cu-C}_8\text{H}_{17}$

h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC															
-2	4	4	7	-5	-1	8	4	14	14	2	-9	5	8	-8	-1	-4	5	24	25	-3	1	5	23	22	1	13	8	12	11	-4	-5	7	12	11	0	0	7	23	24	-3	-4	7	21	21	-4	-10	7	14	17					
-1	4	4	41	42	0	8	4	25	25	-4	-8	5	9	8	0	-4	5	14	15	-2	1	5	48	45	-2	13	7	11	13	-3	-5	7	20	20	1	0	7	28	25	-2	-4	7	13	13	-1	-10	7	9	7					
0	4	4	37	37	1	8	4	8	9	-2	-8	5	12	12	-1	-4	5	24	23	-1	1	5	11	-10	-3	-12	7	22	23	-2	-5	7	20	20	2	0	7	11	11	-1	-4	7	19	19	0	10	7	12	10					
1	4	4	13	14	-4	-9	4	9	8	-1	-8	5	8	8	2	-4	5	21	-21	0	1	5	25	25	-1	-12	7	10	8	-1	-5	7	17	18	3	0	7	10	9	0	4	7	29	29	1	10	7	22	20					
3	3	4	29	29	3	7	4	10	11	2	-10	5	30	31	5	-5	5	12	10	-1	0	5	7	7	2	-11	7	11	-10	0	-5	7	14	13	4	0	7	12	13	1	4	7	57	55	-1	-11	7	11	10					
5	3	4	10	10	-5	8	4	10	9	-4	-9	5	27	28	-4	-4	5	23	22	1	0	5	18	18	-3	-10	7	20	-20	1	-5	7	18	18	-4	1	7	8	7	2	4	7	11	12	1	11	7	12	11					
-4	4	4	14	12	-2	8	4	11	8	-2	-9	5	8	10	-3	-4	5	63	60	4	0	5	12	10	-1	-12	7	9	7	-5	-8	8	12	13	-2	-1	8	14	15	1	3	8	11	-9	-1	-11	8	10	10					
-3	4	4	7	8	-2	8	4	15	13	-1	-9	5	11	12	-2	-4	5	40	38	-4	1	5	9	9	-2	-13	7	9	7	-3	-8	8	18	19	0	-1	8	52	-50	2	3	8	12	13	0	-18	9	5	5					
2	4	4	7	5	-2	9	4	14	13	0	-8	5	4	7	-3	-3	5	21	22	1	1	5	30	30	-3	-14	8	10	9	-2	-8	8	33	33	-1	-1	8	18	19	3	3	8	10	11	-2	-15	9	14	14					
3	4	4	18	19	0	9	4	10	11	1	-8	5	17	-17	-2	-3	5	28	26	2	1	5	10	10	2	-14	8	13	12	-1	-8	8	68	65	2	-1	8	15	18	4	3	8	9	8	-3	-14	9	13	13					
4	4	4	14	13	1	9	4	18	18	-4	-7	5	17	-18	-1	-3	5	28	27	4	1	5	18	19	-3	-13	8	15	14	0	-8	8	13	13	-3	-1	8	13	14	-4	4	8	27	28	-2	-13	9	12	-7					
-3	5	4	11	9	-2	-10	4	9	9	-3	-7	5	15	16	0	-3	5	28	26	5	1	5	21	21	-1	-12	8	11	9	1	-8	8	18	18	-4	0	8	11	11	-3	4	8	21	21	-3	-11	9	10	12					
-1	5	4	28	29	2	-10	4	12	11	-2	-7	5	21	22	-1	-8	5	47	47	1	-3	5	47	47	-1	-11	8	14	15	2	-8	8	19	19	-2	-11	8	32	33	2	-8	8	16	17	-2	-10	9	13	12					
0	5	4	29	29	4	-10	4	11	7	-1	-7	5	18	18	2	-3	5	16	-16	-3	2	5	16	16	-1	-11	8	10	10	-5	-5	8	14	15	-2	0	8	20	19	-1	4	8	15	16	-3	-11	9	9	10					
1	5	4	24	23	-1	-11	4	21	21	0	-7	5	10	13	3	-3	5	15	17	-1	2	5	11	12	-2	-10	8	32	32	-3	-5	8	17	17	1	0	8	72	69	2	4	8	13	12	-3	-10	9	12	13					
3	5	4	20	20	2	-11	4	10	10	2	-7	5	43	44	4	-3	5	10	10	0	2	5	11	10	0	-10	8	12	13	-2	-5	8	17	17	2	0	8	18	18	-4	5	8	22	22	-1	-10	9	27	27					
4	5	4	26	27	-1	-12	4	10	9	3	-7	5	18	18	-5	-2	5	15	18	1	2	5	28	28	0	-10	8	12	13	-2	-5	8	17	17	3	0	8	13	14	-3	5	8	16	17	-1	-10	9	12	11					
5	5	4	16	17	0	-12	4	12	-13	4	-7	5	12	10	-4	-2	5	24	23	2	2	5	29	28	1	-10	8	9	7	-1	-5	8	19	19	3	0	8	14	17	-2	5	8	14	14	1	-10	9	9	10					
3	2	5	14	14	2	6	5	14	15	-2	-8	6	21	-22	-1	-4	6	31	30	-1	1	6	31	30	-1	1	8	15	16	3	-10	8	15	16	0	-5	8	7	8	4	0	8	14	17	-2	5	8	14	14	1	-10	9	9	10
4	2	5	13	11	3	6	5	12	12	-2	-9	6	12	12	0	-4	6	14	15	0	1	6	36	37	-5	-9	8	10	9	1	-5	8	12	11	5	0	8	15	13	-1	5	8	17	18	-3	-10	9	10	12					
-4	3	5	15	15	-5	-7	5	15	15	-3	-9	6	20	-21	1	-4	6	14	15	1	1	8	26	26	-4	-9	8	13	14	2	-5	8	25	25	-5	1	8	18	18	0	5	8	17	18	-1	-9	9	11	11					
-3	3	5	17	18	-1	-7	5	15	16	-2	-9	6	13	13	3	-4	6	26	26	2	1	6	14	15	-2	-9	8	9	9	3	-5	8	11	10	-3	1	8	25	25	-3	1	8	25	25	1	5	8	49	49	0	-9	9	11	10
-2	3	5	12	13	0	-7	5	51	52	-1	-9	6	11	13	-6	-3	6	13	13	5	1	8	11	6	-1	-9	8	9	9	-4	-4	8	11	8	-2	-1	8	18	18	2	5	8	21	21	-1	-9	9	11	10					
-1	3	5	22	22	1	-7	5	9	8	2	-9	6	12	11	-4	-3	6	14	13	-4	2	8	14	15	0	-9	8	11	12	-3	-4	8	17	17	-1	1	8	25	25	-5	6	8	13	13	-1	-8	9	13	14					
0	3	5	31	31	3	-7	5	13	11	-3	-9	6	33	34	-3	-3	6	37	36	-3	2	8	15	15	-1	-9	8	15	15	-1	-9	8	28	29	0	-1	8	58	54	-6	8	8	24	26	0	-8	9	14	14					
1	3	5	19	20	-5	-8	5	13	11	-3	-8	6	43	45	-2	-3	6	144	138	-2	2	8	11	10	2	-9	8	11	12	-1	-4	8	9	8	1	1	8	16	17	-1	6	8	8	8	-1	-8	9	9	9					
2	3	5	18	17	-4	-8	5	9	9	-2	-8	6	18	18	-1	-3	6	14	15	0	-1	8	14	-37	-3	-9	8	15	16	0	-4	8	8	7	3	1	8	9	10	0	6	8	21	21	-5	-7	9	14	12					
3	3	5	21	21	-2	-8	5	12	12	-1	-8	6	20	21	0	-3	6	29	28	0	2	8	15	16	-4	-8	8	15	14	1	-4	8	8	8	4	1	8	15	17	2	6	8	10	-10	-4	-7	9	14	15					
4	3	5	19	19	-1	-8	5	16	14	2	-8	6	23	24	1	-3	6	20	21	1	2	8	28	27	-3	-8	8	11	11	2	-4	8	14	15	-6	2	8	11	10	-4	7	8	9	-9	-3	-7	9	8	9					
-4	4	5	13	13	0	-8	5	17	17	-6	-7	6	10	9	3	-3	6	15	14	2	2	6	23	22	-1	-8	8	13	11	3	-4	8	12	14	-5	2	8	12	11	-1	7	8	14	-15	-2	-7	9	10	10					
-3	4	5	15	15	3	-8	5	14	13	-3	-7	6	49	50	-5	-3	6	13	11	4	2	6	15	14	0	-8	8	12	13	-3	-3	8	19	19	-3	2	8	15	15	-3	2	8	12	14	-1	-7	9	35	36					
-1	4	5	70	67	-1	-9	5	17	17	-2	-7	6	9	9	-4	-2	6	11	13	5	2	8	21	21	1	-8	8	9	8	-2	-3	8	19	19	-2	2	8	22	23	3	7	8	13	12	-5	-7	9	10	3					
0	4	5	33	33	0	-9	5	27	27	-1	-7	6	28	28	-3	-2	6	13	13	-4	3	8	18	19	-3	-8	8	12	10	-6	-2	8	11	12	0	2	8	14	15	-3	8	8	12	11	-4	-8	9	12	10					
1	4	5	13	13	1	-9	5	14	13	0	-7	6	11	12	-2	-2	6	27	28	-2	2	8	21	21	-4	-7	8	13	12	-2	-2	8	31	31	0	2	8	52	52	-1	8	8	15	13	-3	-6	9	11	10					
2	4	5	13	14	-1	-10	5	15	15	1	-7	6	23	23	-1	-2	6	13	-9	-2	3	8	14	15	-3	-7	8	19	19	-1	-2	8	14	13	-1	-2	8	29	30	-1	9	8	14	13	-2	-6	9	26	26					
3	4	5	21	22	0	-10	5	24	-26	2	-7	6	36	36	0	-2	6	13	13	-1	3	8	58	57	-2	-7	8	23	-23	0	-2	8	17	-15	2	2	8	8	8	9	8	16	15	-1	-6	9	23	24						
4	4	5	21	22	2	-10	5	10	10	-5	-8	6	14	14	1	-																																						

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for N-form of $Cu-C_8H_{17}$

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$										
1	0	8	17	16	-1	-8	7	17	17	4	-1	7	11	10	1	3	7	16	16	-5	9	7	13	-11	0	5	10	11	12	2	-7	11	14	14	-2	0	11	21	22	3	6	11	10	8	-1	-4	12	20	20					
2	0	8	16	16	0	-8	7	18	17	-4	0	7	11	10	2	3	7	8	9	1	9	7	16	15	-2	6	10	9	8	-5	-6	11	15	16	-1	0	11	10	11	-3	7	11	14	11	0	-4	12	19	16					
-4	11	6	12	11	1	-8	7	15	15	-3	0	7	12	12	3	3	7	16	15	2	9	7	21	19	-1	6	10	11	10	-2	-8	11	15	14	0	0	11	16	15	0	7	11	10	12	1	-4	12	14	14					
-2	11	6	10	9	2	-6	7	28	28	-2	0	7	14	14	-4	4	7	23	24	3	9	7	11	9	0	6	10	10	13	-1	-6	11	17	17	2	0	11	26	27	2	7	11	14	13	2	-4	12	20	20					
1	6	10	18	18	-5	-5	11	10	10	3	0	11	13	16	-1	8	11	13	13	-5	-3	12	14	12	-1	7	12	15	16	-3	-3	13	8	-8	2	3	13	11	11	1	-4	14	9	10	-3	7	14	10	7					
0	7	10	13	13	-2	-5	11	12	11	-6	1	11	10	9	0	8	11	10	9	0	-3	12	18	20	0	7	12	10	11	-2	-3	13	26	27	-3	4	13	10	8	3	-4	14	10	10	-2	8	14	9	3					
2	7	10	16	17	-1	-5	11	24	25	-3	1	11	57	57	2	8	11	10	9	-3	-3	12	11	12	2	7	12	12	9	-1	-3	13	18	18	-2	4	13	15	15	4	-4	14	16	17	0	8	14	11	11					
3	7	10	15	14	-4	-4	11	9	12	-2	1	11	19	18	-2	10	11	11	10	-2	-3	12	15	14	-4	6	12	10	11	1	-3	13	11	12	0	4	13	9	8	-2	-3	14	50	50	-2	-3	15	9	6	-2	-3	15	9	6
-3	8	10	11	14	-3	-4	11	9	7	-1	1	11	14	13	-1	-14	12	12	13	-1	-3	12	18	18	-1	8	12	10	10	3	-3	13	15	13	1	4	13	10	10	-1	-3	14	41	41	-3	-2	15	11	8	-3	-2	15	11	8
-2	8	10	11	12	-2	-4	11	9	10	0	1	11	22	22	0	-12	12	11	10	0	-3	12	15	15	0	8	12	13	13	4	-3	13	10	8	3	4	13	14	15	0	-3	14	9	10	-2	-8	15	15	-17					
0	9	10	8	7	-1	-4	11	16	15	1	1	11	9	9	-3	-11	12	11	11	1	-3	12	16	13	-3	9	12	11	7	-3	-2	13	13	12	-2	5	13	8	7	3	-3	14	19	19	-1	-8	15	11	10					
-2	10	10	13	13	1	-4	11	24	24	2	1	11	31	32	0	-11	12	10	12	-4	-2	12	17	19	0	-12	13	10	10	-2	-2	13	42	43	0	5	13	11	12	-5	-2	14	13	15	0	-8	15	10	11					
-1	10	10	12	12	3	-4	11	13	12	-4	2	11	21	22	-3	-10	12	12	11	-2	-2	12	16	17	-3	-11	13	9	7	-1	-2	13	13	13	1	5	13	10	7	-3	-2	14	16	18	-3	-7	15	14	15					
0	10	10	4	7	-4	-3	11	19	19	-3	2	11	26	27	-2	-10	12	10	7	-1	-2	12	13	14	-4	-10	13	10	8	0	-2	13	10	10	-3	6	13	11	8	-2	-2	14	34	35	-2	-7	15	12	10					
-1	11	10	12	12	3	-3	11	14	14	-2	2	11	16	17	-1	-10	12	9	6	0	-2	12	8	8	3	-10	13	9	9	1	-2	13	16	16	-1	6	13	12	11	-1	-2	14	12	14	-1	-7	15	19	19					
-1	-13	11	16	17	-1	-3	11	16	16	-1	2	11	10	10	0	-10	12	14	13	1	-2	12	18	18	-4	-9	13	14	13	3	-2	13	19	20	-2	7	13	12	9	0	-2	14	4	7	0	-7	15	12	12					
0	-13	11	14	14	0	-3	11	15	15	0	2	11	15	15	-2	-9	12	12	13	-3	-1	12	39	-39	0	-9	13	12	12	-5	-1	13	15	14	-1	7	13	17	15	1	-2	14	10	9	1	-7	15	10	9					
-3	-11	11	9	9	1	-3	11	26	26	1	2	11	20	19	-1	-9	12	11	10	-2	-1	12	18	19	-3	-6	13	9	5	-3	-1	13	31	31	0	7	13	13	13	-5	-1	14	10	10	2	-7	15	8	8					
0	-10	11	20	19	3	-3	11	11	12	2	2	11	8	8	-4	-8	12	13	15	-1	-1	12	14	15	0	-8	13	14	13	-2	-1	13	19	20	1	7	13	15	13	-4	-1	14	11	10	-3	-8	15	13	13					
-2	-9	11	12	14	-5	-2	11	11	10	3	2	11	10	-11	-1	-8	12	8	8	0	-1	12	16	15	-3	-7	13	9	10	-1	-1	13	17	18	0	8	13	12	10	-2	-2	14	30	30	-1	-8	15	15	14					
-1	-9	11	18	18	-2	-2	11	23	22	-4	3	11	10	8	0	-8	12	11	11	1	-1	12	13	13	-4	-6	13	9	6	0	-1	13	11	11	0	9	13	16	15	-1	-1	14	14	15	0	-6	15	10	8					
0	-9	11	15	15	-1	-2	11	20	21	-3	3	11	37	-37	1	-8	12	14	14	2	-1	12	19	18	-3	-6	13	12	11	1	-1	13	15	15	-3	-11	14	9	11	1	1	14	8	5	-5	-5	12	7	7					
1	-9	11	10	2	0	-2	11	13	13	0	3	11	9	10	-1	-6	12	13	12	3	-1	12	29	31	1	-6	13	10	9	2	-1	13	22	22	2	-11	14	11	10	2	1	14	13	11	-2	-5	15	9	8					
-4	-8	11	10	11	1	-2	11	27	26	3	2	11	15	14	2	-8	12	20	20	-6	0	12	22	11	2	-6	13	11	11	5	-0	13	13	10	-4	-10	14	10	9	-3	-2	14	14	14	-1	-5	15	21	21					
-3	-8	11	9	8	2	-2	11	32	33	-2	4	11	31	33	3	-6	12	19	21	-3	0	12	50	50	-5	-4	15	11	11	-3	4	15	13	13	-3	-4	16	9	11	0	-10	17	9	12	-2	3	17	12	12					
-2	-8	11	9	10	3	-2	11	27	28	0	4	11	12	12	-3	-5	12	11	10	-2	0	12	49	50	-2	-4	15	31	31	0	4	15	14	14	-2	-4	16	14	13	1	-10	17	9	5	-1	3	17	10	9					
-1	-8	11	12	13	5	-2	11	11	7	3	4	11	12	12	-2	-5	12	11	12	-2	-5	12	11	12	-1	0	12	11	10	1	4	15	16	14	-1	4	15	16	14	-1	-4	16	18	17	-2	-9	17	11	10	0	-10	18	11	-11
0	-8	11	10	9	-4	-1	11	10	10	-1	5	11	8	5	-1	-5	12	25	24	0	0	12	16	15	0	-4	15	10	11	2	4	15	15	14	0	-4	16	9	8	-1	-7	17	22	21	0	-9	18	16	16					
2	-8	11	9	8	-3	-1	11	24	25	0	5	11	14	13	1	-5	12	10	9	1	0	12	11	11	3	-4	15	15	17	-3	5	15	15	14	3	-3	16	9	5	0	-7	17	9	7	0	-8	18	10	11					
-4	-7	11	11	11	-2	-1	11	11	11	1	5	11	18	18	2	-5	12	14	14	2	0	12	31	31	-3	-3	15	13	14	0	5	15	5	7	-2	-2	16	17	16	-1	-6	17	18	17	-4	-7	18	11	10					
-3	-7	11	9	8	-1	-1	11	22	22	-3	6	11	18	18	-5	-4	12	11	13	-4	1	12	14	15	-2	-3	15	24	23	-3	6	15	15	12	-2	-1	16	15	16	-1	-5	17	20	19	-1	-7	18	12	12					
-2	-7	11	10	10	1	-1	11	18	18	-2	6	11	19	19	-4	-4	12	14	14	-3	1	12	33	34	-1	-3	15	26	-27	1	6	15	16	16	0	-1	16	16	17	0	-5	17	16	16	0	-7	18	11	9					
1	1	12	12	12	-5	-5	13	10	10	-4	0	13	13	15	-3	-9	14	12	-12	-1	2	14	21	22	3	-3	15	11	9	0	7	15	11	10	-5	0	16	10	12	1	-5	17	10	12	-1	-5	18	12	14					
-3	2	12	30	29	-3	-5	13	16	-17	-3	0	13	17	18	-2	-6	14	10	10	1	2	14	11	11	-5	-2	15	11	10	-3	-9	16	9	3	-1	0	16	19	20	0	-3	17	14	14	-3	-4	18	8	1					
-2	2	12	14	15	-2	-5	13	13	13	-2	0	13	44	-45	0	-6	14	14	13	-3	3	14	10	8	-2	-2	15	24	22	-2	-9	16	13	11	2	0	16	11	10	-2	-2	17	15	14	0	-4	18	10	12					
-3																																																						

**Observed (F_o) and calculated (F_c) structure
factors for the P-form of $\text{Cu-C}_8\text{H}_{17}$**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for the P-form of $Cu-C_8H_{17}$

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$															
1	0	0	73	66	-3	2	0	27	-27	-3	4	0	31	27	0	6	0	17	17	5	8	0	10	12	6	2	1	11	11	-9	5	1	14	13	-4	7	1	33	34	-2	12	1	7	8	0	-7	2	11	10					
2	0	0	36	32	-2	2	0	97	-99	-2	4	0	6	5	1	6	0	23	22	6	8	0	10	12	7	2	1	10	10	-6	5	1	13	13	-3	7	1	18	18	0	-11	2	7	8	1	-7	2	14	14					
3	0	0	27	30	-1	2	0	84	83	-1	4	0	31	30	2	8	0	20	20	-6	9	0	17	15	9	2	1	11	12	-7	5	1	12	14	-2	7	1	8	8	-2	10	2	10	10	2	-7	2	13	15					
4	0	0	32	34	0	2	0	6	7	0	4	0	27	-25	3	6	0	15	18	-5	9	0	8	7	-11	3	1	7	5	-6	5	1	5	5	-1	7	1	8	9	-1	10	2	8	9	3	-7	2	21	21					
5	0	0	43	42	1	2	0	25	27	1	4	0	7	8	4	6	0	12	12	-4	9	0	8	7	-8	3	1	13	13	-5	5	1	15	14	0	7	1	14	15	0	-10	2	14	14	4	-7	2	21	20					
6	0	0	25	25	2	2	0	19	22	2	4	0	14	14	5	6	0	18	17	-2	9	0	8	8	-7	3	1	11	12	-4	5	1	10	16	1	7	1	20	19	4	-10	2	8	5	5	-7	2	13	10					
7	0	0	28	27	3	2	0	31	28	3	4	0	10	11	8	6	0	7	8	0	9	0	22	-22	-6	3	1	10	10	-3	5	1	37	37	2	7	1	48	48	5	-10	2	13	15	6	-7	2	9	9					
9	0	0	16	16	4	2	0	43	44	4	4	0	17	18	7	6	0	11	10	1	9	0	15	14	-5	3	1	25	-23	-2	5	1	24	23	3	7	1	12	10	6	-10	2	18	18	8	-7	2	7	7					
11	0	0	10	10	5	2	0	26	25	8	4	0	10	10	-10	7	0	10	11	3	9	0	8	8	-4	3	1	11	-9	-1	5	1	9	8	5	7	1	10	9	7	-10	2	16	16	10	-7	2	10	8					
-11	0	0	9	7	6	2	0	12	12	9	4	0	8	8	-9	7	0	15	16	4	9	0	7	7	-3	3	1	18	18	0	5	1	10	9	6	7	1	9	11	-5	-9	2	8	9	-5	-8	2	19	18					
-8	1	0	27	27	7	2	0	12	13	-11	5	0	8	8	-8	7	0	9	10	5	9	0	8	8	-2	3	1	12	15	1	5	1	16	14	7	7	1	11	12	-2	-9	2	7	8	-3	-6	2	12	12					
-7	1	0	33	32	8	2	0	12	12	-9	5	0	12	12	-7	7	0	9	10	-8	10	0	8	-10	-1	3	1	13	13	2	5	1	23	22	-6	8	1	24	25	-1	-9	2	34	35	-2	-6	2	14	15					
-6	1	0	26	25	9	2	0	9	10	-8	5	0	13	12	-6	7	0	8	7	-2	10	0	6	4	-2	10	0	6	4	0	3	1	8	8	3	5	1	20	20	-5	8	1	25	24	0	-9	2	12	12	-1	-6	2	10	9
-5	1	0	20	20	10	2	0	8	7	-7	5	0	19	18	-5	7	0	14	13	0	10	0	6	5	3	3	1	28	25	4	5	1	7	-7	-4	8	1	20	21	-1	-9	2	10	10	0	-6	2	11	10					
-4	1	0	18	16	-12	3	0	9	7	-6	5	0	11	11	-4	7	0	8	6	-3	11	0	12	12	4	3	1	7	8	5	5	1	14	-14	-3	8	1	8	9	4	-9	2	9	8	1	-6	2	5	5					
-3	1	0	28	23	-8	3	0	11	11	-5	5	0	19	20	-3	7	0	38	36	-2	11	0	12	11	5	3	1	15	16	6	5	1	11	12	-2	8	1	8	9	5	-9	2	16	17	2	-6	2	20	19					
-2	1	0	66	-63	-7	3	0	12	11	-4	5	0	11	17	-2	7	0	17	17	-1	11	0	6	5	7	3	1	14	15	7	5	1	9	10	-1	8	1	7	8	8	-9	2	8	5	3	-6	2	14	13					
-1	1	0	9	10	-6	3	0	13	13	-3	5	0	24	24	-1	7	0	8	8	0	11	0	3	5	6	3	1	9	11	8	5	1	8	8	0	8	1	8	9	-6	-8	2	7	7	4	-6	2	21	20					
0	1	0	47	45	-4	3	0	42	42	-2	5	0	32	34	0	7	0	23	23	-2	13	0	7	6	9	3	1	10	10	-9	8	1	9	10	1	8	1	19	19	-5	-6	2	7	7	5	-6	2	7	7					
1	1	0	34	33	-3	3	0	12	13	-1	5	0	32	-26	1	7	0	8	8	0	-11	1	3	4	-10	4	1	7	8	-6	6	1	13	13	2	8	1	14	15	-4	-8	2	14	15	6	-6	2	10	8					
2	1	0	23	22	-2	3	0	31	28	0	5	0	29	-26	2	7	0	38	38	3	-11	1	8	8	-8	4	1	15	12	-7	6	1	11	10	3	8	1	11	11	-1	-8	2	18	17	7	-6	2	7	7					
3	1	0	9	7	-1	3	0	14	11	1	5	0	13	12	5	7	0	9	8	-8	11	1	7	3	-7	4	1	22	21	-6	6	1	8	9	4	8	1	9	7	0	-8	2	17	17	8	-6	2	14	13					
4	1	0	57	54	0	3	0	18	18	2	5	0	20	19	6	7	0	9	8	0	-10	1	17	17	-6	4	1	10	10	-5	6	1	17	17	5	8	1	8	7	1	-8	2	16	14	9	8	-2	9	8					
6	1	0	8	9	2	3	0	43	-36	3	5	0	17	15	-8	8	0	8	6	1	-10	1	8	8	-5	4	1	18	18	-4	6	1	13	12	6	8	1	14	14	2	-8	2	11	9	-9	-5	2	9	9					
7	1	0	16	15	3	3	0	44	42	7	5	0	8	8	-7	8	0	8	-1	5	-10	1	8	8	-4	4	1	9	11	-3	6	1	6	-5	-7	9	1	10	-11	5	-8	2	9	9	-8	-5	2	10	11					
9	1	0	10	10	4	3	0	11	13	-9	6	0	9	10	-6	8	0	17	18	6	-10	1	8	7	-7	-5	2	8	9	-7	-3	2	12	13	-9	-1	2	11	11	-10	1	2	12	13	-8	3	2	13	12					
10	1	0	11	11	5	3	0	20	18	-8	6	0	12	10	-4	8	0	8	-7	7	-10	1	14	14	-6	-5	2	15	16	-6	-3	2	12	13	-6	-1	2	9	8	-8	1	2	26	26	-7	3	2	17	16					
11	1	0	8	8	7	3	0	9	9	-7	6	0	7	8	-3	8	0	16	15	8	-10	1	8	-9	-4	-5	2	13	14	-5	-3	2	9	10	-7	-1	2	31	32	-8	1	2	16	17	-6	3	2	26	25					
-11	2	0	8	8	8	3	0	13	14	-6	6	0	7	8	-2	8	0	7	6	-5	-9	1	11	9	-3	-5	2	7	8	-4	-3	2	30	28	-6	-1	2	17	-17	-5	1	2	29	26	-5	3	2	8	-6					
-10	2	0	9	8	9	3	0	10	10	-5	6	0	14	13	-1	8	0	11	9	-4	-9	1	6	6	-2	-5	2	23	21	-3	-3	2	82	75	-4	-1	2	36	35	-4	-1	2	33	35	-4	-2	11	13						
-9	2	0	21	-22	10	3	0	8	8	-4	8	0	23	23	0	8	0	13	12	-3	-9	1	10	11	0	-5	2	8	8	-2	-3	2	34	32	-3	-1	2	36	34	-2	1	2	8	11	-3	3	2	19	17					
-6	2	0	17	17	-11	4	0	12	11	-3	6	0	28	26	1	8	0	42	40	-2	-9	1	12	13	1	-5	2	6	7	-1	-3	2	4	6	-2	-1	2	23	19	-1	1	2	39	40	-2	3	2	21	23					
-5	2	0	8	9	-8	4	0	13	13	-2	6	0	90	84	2	8	0	24	24	-1	-9	1	22	24	-2	-5	2	15	15	0	-3	2	16	15	-1	-1	2	26	25	0	1	2	40	43	-1	3	2	30	32					
-4	2	0	20	18	-7	4	0	16	16	-1	6	0	19	17	3	8	0	11	12	0	-9	1	10	10	3	-5	2	15	17	1	-3	2	27	23	0	-1	2	50	48	1	1	2	20	19	1	3	2	32	27					
-1	-9	1	9	8	1	-6	1	11	9	8	-4	1	13	13	3	-2	1	12	-9	0	0	1	82	84	5	-5	2	12	-13	2	-3	2	39	35	1	-1	2	25	23	2	1	2	11	9	3	3	2	23	23					
2	-9	1	8	7	2	-6	1	28	28	9	-4	1	12	12	4	-2	1	15	15	1	0	1	35	36	6	-5	2	16	-15	3	-3	2	78	78	2	-1	2	74	68	3	1	2	52	46	4	3	2	8	8					
3	-9	1	7	8	3	-6	1	20	21	10	-4	1	7	6	5	-2	1	9	9	2	0	1	51	47	7	-5	2	10	10	4	-3	2	14	14	3	-1</																		

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for the P-form of Cu-CuH_{17}

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$											
5	2	1	19	18	8	4	1	14	14	-5	7	1	10	10	-1	1	1	6	5	-1	7	2	15	15	-4	6	2	7	7	-7	10	2	8	7	0	-6	3	14	14	-4	5	3	17	17	-2	-3	3	8	10						
-3	6	2	10	9	-5	10	2	1	5	1	-6	3	13	13	-3	-5	3	10	10	-1	-3	3	19	20	5	-6	4	11	11	1	-5	4	12	12	1	-3	4	49	49	0	-1	4	34	31	0	1	4	12	15						
-2	6	2	J	10	-2	10	2	8	7	-2	10	2	14	14	-2	-5	3	14	14	0	-3	3	24	24	6	-6	4	8	9	2	-5	4	22	22	2	-3	4	35	34	1	-1	4	20	20	1	1	4	8	6						
-1	6	2	8	10	-1	10	2	1	8	3	-6	3	40	41	-1	-5	3	17	-15	1	-	3	3	2	1	1	6	6	3	-5	4	9	9	3	-3	4	8	7	2	-1	4	24	24	2	1	4	7	6							
0	6	2	11	10	-5	11	2	6	6	4	-6	3	14	14	1	-5	3	8	10	2	-3	3	20	23	9	-6	4	8	7	4	-5	4	-4	4	-3	4	19	17	3	-1	4	18	16	4	1	4	23	22							
1	6	2	23	11	-2	12	2	6	4	5	-6	3	10	9	2	-5	3	14	15	3	-3	3	16	-16	-3	-7	4	9	9	5	-5	4	14	16	5	-3	4	18	15	4	-1	4	20	18	5	1	4	8	6						
2	6	2	11	12	4	13	3	9	7	6	-6	3	10	7	3	-5	3	11	17	4	-3	3	11	17	4	-3	3	11	18	-2	-7	4	9	9	7	-5	4	9	10	6	-3	4	18	19	5	-1	4	40	1	6	1	4	11	10	
3	6	2	40	-39	0	-11	3	9	8	9	-6	3	1	5	4	-1	3	6	5	5	-3	3	8	9	-1	-7	4	13	12	10	-5	4	9	8	7	-3	4	6	7	6	-1	4	16	16	1	1	4	10	1	2					
5	8	2	1	8	1	-11	3	12	-12	-6	-7	3	6	8	5	-5	3	22	21	1	-3	3	15	14	10	1	4	7	7	4	4	4	10	8	-2	6	4	11	12	7	-10	5	7	6	5	-6	5	15	17						
1	1	2	9	9	6	-11	3	8	1	-5	-7	3	5	6	1	-5	3	10	9	1	-3	3	19	20	-1	0	2	8	8	-1	0	2	8	8	-6	4	4	12	13	-1	-9	5	12	12	1	d	5	13	13						
-10	7	2	8	7	7	-11	3	9	8	-2	-7	3	15	16	8	-5	3	8	7	8	-3	3	21	27	-9	2	4	7	7	-9	2	4	7	7	-7	4	4	17	17	0	0	4	9	8	0	-9	5	7	6	9	d	5	7	6	
-7	7	2	8	9	-2	-10	3	10	10	-1	-7	3	11	11	-6	-4	3	9	12	9	-3	3	17	17	-8	2	4	7	7	-6	4	4	11	12	1	6	4	7	7	1	-9	5	6	6	4	-	5	13	10						
d	1	2	8	9	-1	-10	3	18	19	0	-7	3	7	8	-7	-4	3	10	11	-10	-2	3	12	12	-7	2	4	17	15	-5	4	4	12	11	2	1	4	17	16	2	-9	5	10	10	-6	-5	5	11	11						
-5	7	2	7	8	0	-10	3	27	11	1	-7	3	10	-10	-6	-4	3	13	13	-9	-2	3	9	8	-6	2	4	26	26	4	4	4	18	18	3	1	4	18	15	3	4	5	10	9	-7	-5	5	1	9						
-3	7	2	10	10	2	-10	3	1	4	2	-7	3	9	-11	-5	4	3	10	10	-8	-2	3	11	11	-5	2	4	12	12	-3	4	4	13	14	4	8	4	9	9	4	-9	5	12	10	-6	-5	5	11	10						
-2	7	2	12	12	3	-10	3	7	3	3	-7	3	21	23	-4	-4	3	21	23	-4	-4	3	21	23	-6	-2	3	29	29	-4	2	4	17	18	-2	4	4	6	-4	5	1	4	7	6	6	-9	5	7	4	-5	-5	8	7		
-1	7	2	11	10	4	10	3	6	6	4	-7	3	14	16	-3	-4	3	14	16	-3	-4	3	14	16	-3	2	4	15	15	-3	2	4	15	15	0	4	4	15	15	-9	1	4	7	1	-4	-8	5	16	16	4	-	15	8	9	
-4	-2	3	51	48	-6	0	3	8	8	-6	2	3	5	7	-6	4	3	13	14	0	1	3	15	14	-2	2	4	31	30	1	4	4	20	19	1	4	4	20	19	-6	7	4	12	-14	-2	6	5	7	7	-3	-5	5	11	18	
-3	-2	3	29	28	-5	0	3	23	21	-7	2	3	18	17	-7	4	3	14	14	1	6	3	11	21	-1	2	4	11	19	2	4	4	15	15	-5	7	4	10	-10	-1	-8	5	10	10	-2	-5	5	15	21						
-2	-2	3	21	23	-3	0	3	20	20	-6	2	3	19	18	-6	4	3	11	11	2	8	3	42	4	0	2	4	19	17	3	4	4	18	19	-4	7	4	10	11	0	-8	5	7	8	-1	-5	5	15	14						
-1	-2	3	U	U	-2	0	3	18	-11	-5	2	3	10	-10	-5	4	3	13	14	3	6	3	20	20	2	2	4	12	11	4	4	4	15	11	-1	7	4	6	8	3	-8	5	13	13	1	-5	5	10	10						
0	-2	3	70	63	-1	0	3	100	-94	-4	2	3	5	4	-4	4	3	15	15	4	6	3	10	10	3	2	4	10	10	6	4	4	12	13	0	7	4	8	9	4	-8	5	1	7	2	-5	5	16	16						
1	-2	3	29	29	0	0	3	92	93	-2	2	3	28	28	-3	4	3	32	30	5	1	3	8	1	4	2	4	13	14	-6	5	4	11	9	2	1	4	12	12	5	-8	5	10	10	3	-5	5	19	19						
2	-2	3	56	52	2	0	3	24	20	-1	2	3	9	10	-2	4	3	1	37	6	6	3	12	12	5	2	4	11	12	-6	5	4	8	8	4	1	4	1	1	-6	-5	4	8	1	1	-6	-5	29	29						
3	-2	3	18	17	3	0	3	26	21	0	2	3	21	21	-1	4	3	116	112	7	6	3	10	10	7	6	3	12	10	7	2	4	6	7	-5	5	4	8	9	-9	8	4	7	6	-5	-7	5	14	13	5	-5	5	11	9	
4	-2	3	21	20	4	0	3	33	32	1	2	3	17	-15	0	4	3	11	19	-5	7	3	23	21	-10	3	4	9	8	-4	5	4	13	13	-6	8	4	8	8	-3	-7	5	9	8	7	-5	5	9	9						
5	-2	3	24	24	5	0	3	34	33	2	2	3	6	7	1	4	3	15	15	-4	7	3	6	8	-9	3	4	1	5	-3	5	4	U	U	-4	8	4	7	8	-1	-7	5	13	13	4	-	4	6	8	7					
6	-2	3	20	20	6	0	3	17	16	3	2	3	11	11	2	4	3	21	21	-3	7	3	9	9	-3	7	3	18	17	-2	5	4	24	24	-3	8	4	8	7	-1	-7	5	7	8	4	-7	-4	5	10	10					
1	-2	3	14	14	1	0	3	11	11	4	2	3	11	10	3	4	3	18	19	-2	1	3	6	7	-7	3	4	15	15	-1	5	4	7	1	-2	8	4	6	5	2	-7	5	6	4	-7	-4	5	10	10						
1	-2	3	22	21	8	0	3	9	1	5	2	3	14	14	4	4	3	13	14	-1	1	3	10	10	-6	3	4	14	14	0	5	4	9	10	-6	9	4	7	1	3	-1	5	10	10	-5	-4	5	24	24						
10	-2	3	12	11	9	0	3	10	10	9	2	3	9	9	5	4	3	13	13	1	7	3	28	27	-4	3	4	16	16	1	5	4	19	19	1	5	4	19	19	-5	9	4	9	8	4	-7	5	9	9	4	-	4	5	18	16
-11	-13	7	8	8	-11	1	3	8	8	-10	3	3	11	10	6	4	3	18	17	2	1	3	11	17	-3	3	4	23	20	2	5	4	20	19	-5	10	4	7	4	5	-1	5	5	5	-3	-4	5	21	21						
-7	-1	3	31	31	-10	1	3	10	9	-9	3	3	7	8	8	4	3	8	9	4	1	3	8	8	-2	3	4	1	3	3	5	4	44	44	-1	10	4	8	8	-7	-6	5	7	10	-2	-4	5	15	16						
d	-13	28	28	28	-1	3	7	8	8	-8	3	3	14	16	-9	5	3	14	15	-7	8	3	15	-16	-7	8	3	15	-16	-1	3	4	26	25	4	5	4	10	10	-5	11	4	7	6	-5	-8	5	10	11	-1	-4	5	15	17	
-5	-1	3	21	18	-1	1	3	10	9	-7	3	3	16	17	-8	5	3	18	18	1	8	3	9	8	1	3	4	15	16	6	5	4	8	9	1	-1	3	5	1	4	-8	9	1	-1	3	5	1	0	-4	5	13	28			
4	-1	3	22	21	-8	1	3	11	11	d	3	3	24	24	-7	5	3	12	12	3	8	3	6	4	2	3	4	15	16	1	5	4	10	9	-1	1	2	5	7	8	-3	-8	5	15	15	1	-								

**Observed (F_o) and calculated (F_c) structure
factors for Pd-C₁₀H₂₁**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₁₀H₂₁

h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC	h	k	l	FO	FC											
1	0	0	86	78	4	2	0	24	26	8	4	0	8	10	-4	7	0	24	25	-4	10	0	14	12	8	2	1	27	28	5	4	1	16	18	-9	7	1	15	15	-2	9	1	14	14	4	-10	2	23	72	
2	0	0	57	49	5	2	0	45	43	-10	5	0	11	11	-3	7	0	20	21	-3	10	0	14	13	7	2	1	14	16	6	4	1	14	14	d	7	1	14	14	0	9	1	4	4	5	-10	2	19	19	
3	0	0	43	39	8	2	0	18	18	-8	5	0	9	7	-2	7	0	15	16	-2	10	0	11	11	9	2	1	15	12	-10	5	1	10	11	-7	7	1	a	a	1	9	1	15	16	6	-10	2	a	13	
4	0	0	51	45	-10	3	0	19	20	-7	5	0	20	20	-1	7	0	25	25	0	10	0	10	8	-10	3	1	17	15	-9	5	1	12	13	-6	7	1	19	22	2	9	1	9	10	8	-10	2	15	17	
5	0	0	52	47	-8	3	0	45	41	-6	5	0	21	22	0	7	0	22	20	1	10	0	15	14	-8	3	1	30	28	-6	5	1	14	14	-5	7	1	26	25	-7	10	1	11	12	-2	-9	2	11	10	
8	0	0	44	41	-7	3	0	15	14	-5	5	0	16	16	1	7	0	18	20	-3	11	0	9	11	-7	3	1	24	a	-7	5	1	27	a	-4	7	1	18	19	-6	10	1	17	18	-1	-9	2	16	16	
-8	0	0	34	33	-6	3	0	25	25	-3	5	0	50	51	2	7	0	8	8	-2	11	0	13	13	-6	3	1	15	16	-6	5	1	33	31	-3	7	1	22	22	-5	10	1	12	12	0	-9	2	11	11	
-7	1	0	49	44	-5	3	0	40	37	-2	5	0	20	20	5	7	0	15	16	-1	11	0	11	10	-5	3	1	18	18	-5	5	1	41	39	-2	7	1	21	22	-4	10	1	9	10	1	-9	2	23	23	
-6	1	0	37	34	-3	3	0	18	17	-1	5	0	28	29	-9	8	0	14	14	1	11	0	16	15	-4	3	1	12	13	-3	5	1	30	30	-1	7	1	39	37	-3	10	1	14	14	2	4	2	22	23	
-5	1	0	38	33	-4	3	0	42	40	0	5	0	22	22	-8	8	0	14	13	2	11	0	11	9	-3	3	1	73	65	-2	5	1	27	28	0	7	1	28	28	-2	10	1	19	20	4	4	2	18	20	
-4	1	0	44	40	-2	3	0	12	-12	1	5	0	16	16	-7	8	0	18	20	4	1	2	0	9	8	-2	3	1	13	13	-1	5	1	33	32	1	7	1	a	a	-1	10	1	15	13	5	4	2	21	22
-3	1	0	44	38	-1	3	0	117	-108	2	5	0	13	14	-6	8	0	21	22	-2	12	0	12	11	-1	3	1	11	11	0	5	1	27	28	2	7	1	11	12	3	10	1	10	9	6	-9	2	18	17	
-2	1	0	18	-14	0	3	0	112	108	5	5	0	27	28	-5	8	0	23	21	-1	12	0	13	12	0	3	1	31	31	1	5	1	11	18	3	7	1	13	13	-1	11	1	15	15	-1	-9	2	16	11	
-1	1	0	20	-18	1	3	0	13	18	6	5	0	12	11	-3	8	0	24	24	0	12	0	10	11	1	3	1	22	22	2	5	1	9	9	4	7	1	14	12	-2	11	1	13	12	0	-8	2	14	14	
0	1	0	92	92	2	3	0	37	38	8	5	0	11	8	-2	8	0	16	17	2	-12	1	10	10	2	3	1	13	15	3	5	1	17	17	5	1	1	12	12	1	11	1	1	10	-3	-8	2	8	8	
1	1	0	44	42	3	3	0	30	31	-10	6	0	15	14	-1	8	0	26	26	6	1	2	12	14	4	3	1	9	10	4	5	1	16	15	-9	8	1	11	11	-2	12	1	15	15	-2	-8	2	10	9	
2	1	0	75	71	4	3	0	32	30	-8	6	0	15	15	0	8	0	20	21	-2	-11	1	18	11	5	3	1	34	32	5	5	1	15	15	-7	8	1	23	24	-1	-12	1	16	14	-1	d	2	11	16	
4	1	0	40	39	5	3	0	58	58	-7	6	0	20	20	1	8	0	19	20	-1	-11	1	14	15	6	3	1	18	18	6	5	1	11	10	-6	8	1	17	11	-1	-12	2	11	9	0	-8	2	14	16	
5	1	0	22	22	6	3	0	21	22	-6	6	0	30	29	5	8	0	14	13	0	-11	1	13	12	7	3	1	12	13	1	5	1	10	8	-5	6	1	7	2	2	1	0	-2	10	9	1	-8	2	16	14
8	1	0	15	15	8	3	0	16	16	-5	6	0	32	32	-9	9	0	11	9	1	-11	1	9	10	-10	4	1	27	26	8	5	1	10	9	-4	8	1	13	12	1	-12	2	9	8	2	-8	2	a	1	12
10	1	0	15	15	-7	4	0	17	17	-4	4	0	17	17	-3	11	1	11	11	3	-11	1	11	6	4	4	1	9	9	-9	8	1	14	13	-3	8	1	18	19	-4	12	2	13	12	4	-0	2	13	12	
-9	2	0	15	15	-6	4	0	25	24	-2	6	0	31	31	-7	9	0	16	17	5	-11	1	9	12	-8	4	1	13	12	-8	6	1	18	17	-2	8	1	11	19	5	12	2	12	12	5	-8	2	16	14	
-8	2	0	15	14	-5	4	0	26	24	-1	6	0	22	23	-6	9	0	18	18	6	-11	1	16	11	6	-8	2	19	18	-3	-5	2	29	29	-2	-3	2	38	39	-1	-1	2	53	56	-1	-1	2	8	8	
-7	2	0	15	14	-4	4	0	23	23	0	6	0	24	25	-5	9	0	21	20	-3	-10	1	9	1	-6	-7	2	a	22	-2	-5	2	22	24	-1	-3	2	33	33	0	-1	2	a	a	0	1	2	36	a	
-6	2	0	20	19	-3	4	0	45	41	1	6	0	20	20	-4	9	0	14	13	-2	-10	1	11	11	-5	-7	2	17	18	-1	-5	2	42	43	0	-3	2	82	80	1	-1	2	39	37	1	1	2	30	28	
-5	2	0	34	30	-2	4	0	21	22	2	6	0	12	13	-3	9	0	16	17	-1	-10	1	15	14	4	-1	2	10	10	1	-5	2	30	28	1	-3	2	82	50	2	-12	1	35	2	1	2	19	19		
-4	2	0	25	25	-1	4	0	31	31	3	6	0	15	15	-2	9	0	14	15	0	-10	1	19	18	-3	-7	2	12	12	2	-5	2	S	a	2	-3	2	33	S	3	-12	24	23	3	1	2	63	60		
-3	2	0	17	17	0	4	0	58	55	4	6	0	8	8	-1	9	0	22	21	1	-10	1	15	14	-2	-7	2	0	6	3	-5	2	22	23	3	-3	2	88	51	4	-1	2	87	77	4	1	2	80	72	
-2	2	0	27	26	1	4	0	18	19	5	6	0	20	19	0	9	0	20	21	2	-10	1	13	13	-1	-7	2	34	34	4	-5	2	23	23	4	-32	58	54	6	-1	2	16	16	5	1	2	10	35		
-1	2	0	17	15	2	4	0	22	22	-9	7	0	17	18	1	9	0	21	21	3	-10	1	17	15	0	-7	2	10	11	5	-5	2	a	33	1	-32	14	-12	7	-1	2	27	26	6	1	2	22	20		
1	2	0	50	50	3	4	0	18	16	-8	7	0	17	18	5	9	0	11	9	4	-10	1	22	20	1	-1	2	15	13	8	-5	2	25	26	7	-3	2	49	47	9	-1	2	20	18	1	1	2	16	14	
1	2	0	38	40	4	4	0	32	30	-7	7	0	18	17	-7	10	0	13	15	5	-10	1	12	14	2	-1	2	20	22	1	-5	2	16	18	6	-32	11	12	4	0	2	31	30	8	1	2	15	14		
2	2	0	38	39	5	4	0	45	45	-6	7	0	26	26	-6	10	0	15	16	6	-10	1	19	19	3	-1	2	16	18	6	-5	2	17	-17	9	-3	2	22	21	-8	0	2	13	12	9	1	2	16	15	
3	2	0	27	26	6	4	0	20	19	-5	7	0	34	34	-5	10	0	16	17	7	-10	1	13	13	4	-7	2	21	20	9	-5	2	12	13	4	-2	2	18	21	-7	0	2	15	14	-8	2	2	17	17	
8	10	1	12	12	-6	6	1	18	17	-5	-4	1	18	18	-2	-2	1	78	75	-3	0	1	37	34	5	-7	2	20	19	10	-5	2	14	15	-6	-2	2	a	36	-6	0	2	28	21	-7	2	2	22	a	
-1	-9	1	18	14	-2	-6	1	13	12	-4	-4	1	26	27	-1	-2	1	31	33	-2	0	1	50	-45	6	-7	2	16	14	4	4	2	18	16	-7	-2	2	30	29	-5	0	2	18	11	-6	2	2	19	19	
0	-9	1	19	19	-1	-6	1	23	22	-3	-4	1	27	27	0	-2	1	60	59	-1	0	1	69</																											

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₁₀H₂₁

h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c										
2	2	1	32	32	1	4	1	19	21	3	6	1	15	15	-6	9	1	21	22	0	10	2	10	12	2	4	2	24	21	4	6	2	20	19	-	1	9	2	2	2	11	12	4	-9	3	11	12	-3	-6	3	24	24		
3	2	1	37	36	2	4	1	10	11	4	6	1	14	14	-	5	9	1	17	11	1	-102	10	10	3	4	2	12	13	7	6	2	11	13	0	9	2	1	15	5	-9	3	12	12	-2	-6	3	34	36					
4	2	1	50	48	3	4	1	17	16	5	6	1	14	15	-4	9	1	12	12	2	-102	13	13	4	4	2	21	21	-9	7	2	10	10	1	9	2	11	10	6	-9	3	23	25	-1	-6	3	9	10						
5	2	1	39	38	4	4	1	16	15	6	6	1	9	9	-3	9	1	17	16	3	102	16	16	5	4	2	11	11	-6	7	2	18	18	2	9	2	13	11	1	4	3	14	15	0	-6	3	8	-2	3					
6	4	2	14	14	-	1	1	20	21	3	9	2	13	13	-6	-6	3	13	14	1	-6	3	15	15	1	-2	4	23	21	-1	0	14	11	11	-6	3	4	21	22	-2	5	4	14	15	-4	8	4	15	16					
-10	5	2	14	13	-6	7	2	21	21	-7	10	2	10	8	-5	-6	3	13	13	2	-6	3	22	11	8	-2	4	18	19	-9	1	4	14	13	-5	3	4	21	21	-1	5	4	54	53	-3	8	4	21	22					
-9	5	2	14	12	-5	7	2	19	17	-3	10	2	11	11	-3	-6	3	11	11	3	-6	3	21	11	9	-2	4	13	15	-6	1	4	21	19	-4	3	4	23	24	0	5	4	21	23	-1	8	4	12	12					
-8	5	2	21	20	-4	7	2	19	19	-1	10	2	10	10	-2	-6	3	13	15	4	-6	3	21	11	8	-1	4	17	17	-7	1	4	31	29	-	3	3	4	21	42	1	5	4	19	19	-7	9	4	10	11				
-7	5	2	1	1	-3	7	2	18	18	0	10	2	10	11	-1	-6	3	12	22	6	-6	3	21	11	7	-1	4	15	16	-6	1	4	19	18	-2	3	4	59	57	2	5	4	22	11	-2	9	4	15	15					
-6	5	2	31	31	-2	7	2	21	21	-3	11	2	13	12	0	-6	3	26	27	0	-6	3	11	-11	-5	-1	4	21	21	-5	1	4	21	26	-	1	4	21	51	51	3	5	4	19	18	1	9	4	10	10				
-5	5	2	22	22	-1	7	2	14	15	-2	11	2	13	13	1	-6	3	16	16	-6	-5	3	14	15	-4	-1	4	27	-4	-1	4	19	19	0	3	4	24	24	4	5	4	11	22	-6	10	4	15	15						
-4	5	2	32	32	0	7	2	29	29	1	-13	3	9	7	3	-6	3	20	19	-5	-5	3	16	16	-3	-1	4	21	-	3	1	4	4	1	3	4	19	18	5	5	4	12	10	-5	10	4	12	13						
-	3	5	2	11	1	7	2	14	15	3	-13	3	11	10	4	-6	3	20	19	-3	-5	3	21	11	2	-1	4	27	-2	1	4	34	21	-2	1	4	34	21	2	1	4	34	21	-7	6	4	13	12	-4	10	4	13	14	
-2	5	2	42	39	2	7	2	17	17	-1	-12	3	11	1	5	-6	3	21	24	-2	-5	3	21	28	-1	-1	4	21	21	-1	1	4	48	17	3	3	4	31	21	2	1	4	48	17	-2	10	4	12	11					
-1	5	3	4	48	-1	3	3	50	53	-1	-1	3	69	70	-1	1	3	14	17	1	3	3	11	11	0	-1	4	21	21	0	1	4	21	11	0	1	4	21	11	4	3	4	24	24	-5	6	4	11	21	-1	10	4	10	7
0	5	3	20	20	0	-3	3	42	43	0	-1	3	21	21	0	1	3	21	29	2	3	3	26	24	1	-1	4	12	12	1	1	4	12	12	1	1	4	12	12	1	1	4	12	12	-4	6	4	21	21	0	-12	5	15	15
1	-5	3	10	11	1	-3	3	51	48	1	-1	3	32	30	1	1	3	14	16	3	3	3	19	20	2	-1	4	13	13	6	3	4	13	13	6	3	4	24	25	-	3	6	4	22	22	5	12	5	14	14				
2	-5	3	31	31	2	-3	3	26	26	2	-1	3	34	31	2	1	3	22	21	2	1	3	24	24	4	3	3	24	24	3	-1	4	56	51	3	1	4	22	24	7	3	4	22	24	-2	6	4	17	47	-2	-11	5	12	11
3	-5	3	44	42	3	-3	3	45	42	3	-1	3	55	52	3	1	3	26	25	5	3	3	16	15	4	-1	4	25	25	4	1	4	14	15	-9	4	4	16	17	-1	6	4	23	23	-1	-11	5	14	14					
4	-5	3	28	26	4	-3	3	40	35	4	-1	3	59	53	4	1	3	28	27	6	3	3	15	13	5	-1	4	27	25	5	1	4	23	22	-6	4	4	20	21	0	8	4	15	15	4	-11	5	13	15					
5	-5	3	75	70	5	-3	3	34	33	5	-1	3	40	38	5	1	3	19	19	7	3	3	10	9	6	-1	4	14	14	-9	2	4	17	15	-	1	4	4	2	9	1	6	4	18	17	-7	-11	5	16	17				
6	-5	3	39	39	6	-3	3	40	38	6	-1	3	20	20	6	1	3	17	18	-	1	0	4	11	15	7	-1	4	21	21	-6	2	4	21	21	-6	4	4	21	20	2	6	4	21	21	-3	-10	5	12	11				
1	-5	3	13	15	1	-3	3	15	14	7	-1	3	19	19	7	1	3	15	17	-	9	4	13	11	8	-1	4	13	13	-7	2	4	29	28	-5	4	4	23	22	3	8	4	19	20	-1	-10	5	25	25					
8	-5	3	18	17	8	-3	3	18	18	8	-1	3	18	18	8	-1	3	12	10	-9	2	3	26	25	-6	4	3	26	25	-6	2	4	28	28	-4	4	4	23	22	4	6	4	12	11	0	-10	5	22	23					
-9	-4	3	18	18	9	-3	3	15	17	9	-1	3	18	19	9	-2	3	22	11	-7	4	3	21	21	-9	0	4	12	12	-5	2	4	29	29	-3	4	4	31	31	-9	7	4	12	14	1	-10	5	15	16					
-8	-4	3	24	24	-10	-2	3	13	12	-9	0	3	21	20	-7	2	3	27	21	-7	2	3	27	21	-6	4	3	24	21	-6	4	3	24	21	-4	2	4	22	22	-2	4	4	24	21	-7	7	4	13	13	2	-10	5	12	11
-7	-4	3	20	18	-7	-2	3	14	15	-8	0	3	20	21	-6	2	3	29	21	-5	4	3	11	10	-7	0	4	21	21	-3	2	4	41	40	-1	4	4	41	40	-6	7	4	12	10	3	-10	5	18	17					
-6	-4	3	20	20	-6	-2	3	18	19	-7	0	3	15	15	-4	2	3	30	28	-4	4	3	31	32	-7	0	4	10	10	-6	4	4	10	10	-2	2	4	41	41	0	4	4	11	18	-5	7	4	15	14	-4	-9	5	13	12
-5	-4	3	19	11	-4	-2	3	14	15	-6	0	3	16	16	-3	2	3	27	26	-3	4	3	26	27	-3	0	4	42	41	-1	2	4	42	39	1	4	4	42	39	1	4	4	42	39	-4	7	4	19	18	-3	-9	5	18	18
-4	-4	3	28	28	-3	-2	3	34	34	-4	0	3	55	52	-2	2	3	42	42	-2	2	3	54	51	-2	0	4	18	19	0	2	4	33	-29	2	4	4	33	-29	2	4	4	33	-29	-3	7	4	12	12	-2	-9	5	10	9
-3	-4	3	14	15	-2	-2	3	39	41	-3	0	3	19	19	-1	2	3	41	31	-1	2	3	39	38	-1	0	4	34	31	1	2	4	11	-7	3	4	4	27	27	-2	7	4	14	14	-2	-9	5	17	16					
-2	-4	3	41	41	-1	-2	3	4	4	-2	0	3	4	4	0	2	3	9	9	0	4	3	37	37	0	0	4	12	13	2	2	4	24	24	4	4	4	22	21	-1	7	4	18	18	2	-9	5	19	18					
-1	-4	3	67	75	0	-2	3	18	18	-1	0	3	31	34	-1	0	3	20	20	2	2	3	27	21	1	0	4	16	15	3	2	4	31	31	5	4	4	12	11	5	4	4	12	11	7	4	13	14	3	4	5	15	16	
0	-4	3	73	75	1	-2	3	18	18	0	0	3	31	34	3	2	3	22	11	2	4	3	20	21	2	0	4	10	11	4	2	4	11	20	6	4	4	16	18	1	7	4	11	12	5	-9	5	18	19					
1	-4	3	45	45	2	-2	3	35	41	1	0	3	23	22	4	2	3	22	23	3	4	3	22	22	3	0	4	4	43	5	2	4	17	16	-6	5	4	16	11	2	7	4	15	14	-4	-8	5	15	15					
2	-4	3	39	39	3	-2	3	17	20	2	0	3	9	10	5	2	3	16	15	4	4	3	24	24	4	0	4	13	14	7	2	4	21	21	-																			

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₁₀H₂₁

h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c										
1	7	3	15	15	2	-10	4	10	10	5	-7	4	32	33	-2	-4	4	42	45	-1	-2	4	38	40	6	3	5	11	12	0	6	5	11	11	-3	-10	6	24	26	8	-7	6	17	18	-4	-4	6	24	24					
2	7	3	17	16	3	-10	4	12	14	6	-7	4	37	38	-1	-4	4	18	19	0	-2	4	24	24	7	3	5	15	14	3	6	5	17	17	-1	-10	6	12	11	-7	-6	6	9	8	-3	-4	6	17	19					
3	7	3	18	17	5	-10	4	9	10	9	-7	4	9	7	0	-4	4	29	29	1	-2	4	19	20	-9	4	5	9	10	4	6	5	20	19	2	-10	6	20	18	-6	-6	6	15	14	-2	-4	6	22	23					
4	7	3	9	12	8	-10	4	12	11	-7	-6	4	10	11	1	-4	4	30	31	2	-2	4	52	50	-6	4	5	18	17	-8	7	5	15	14	4	-10	6	18	19	-4	-6	6	15	-15	-1	-4	6	13	15					
-8	8	3	17	19	-4	-9	4	11	12	-5	-6	4	14	14	2	-4	4	21	20	3	-2	4	89	77	-7	4	5	14	13	-5	7	5	18	-16	5	-10	6	25	26	-3	-6	6	16	15	0	-4	6	15	14					
-5	8	3	15	14	-2	-9	4	26	26	-4	-6	4	11	11	3	-4	4	84	75	4	-2	4	51	46	-6	4	5	14	15	-4	7	5	30	31	-3	-9	6	47	50	-2	-6	6	18	20	-2	-4	6	42	39					
5	-2	4	31	29	5	0	4	24	24	-6	3	4	17	19	-4	5	4	23	22	4	7	4	30	30	-5	4	5	12	11	-3	7	5	14	14	-2	-9	6	22	25	-1	-6	6	15	15	3	-4	6	25	24					
6	-2	4	15	15	7	0	4	13	12	-7	3	4	24	22	-3	5	4	25	25	-8	8	4	15	18	-4	4	5	34	33	-2	7	5	15	14	-1	-9	6	19	19	0	-6	6	11	12	4	-4	6	27	27					
-3	4	5	22	23	1	7	5	8	9	1	-9	8	14	13	1	-6	6	28	25	2	-6	6	13	13	2	-6	7	37	36	-7	-3	7	12	10	-4	-1	7	27	28	-1	1	7	19	20	-4	4	7	13	13					
-2	4	5	17	19	3	7	5	10	-11	2	-9	8	23	21	2	-6	6	62	58	6	-4	6	25	24	3	-6	7	28	27	-6	-3	7	18	19	-3	-1	7	31	32	0	1	7	18	18	-3	4	7	18	17					
-1	4	5	12	11	4	7	5	14	14	5	-9	8	24	22	3	-6	6	20	19	7	-4	6	12	11	4	-6	7	19	18	-5	-3	7	17	18	-2	-1	7	109	109	1	1	7	37	36	0	4	7	13	13					
0	4	5	20	20	-7	8	5	15	14	7	-9	8	18	17	4	-6	6	18	19	8	-4	6	17	20	5	-6	7	14	15	-4	-3	7	24	25	-1	-1	7	25	24	2	4	7	18	18	2	4	7	19	-21					
1	4	5	18	20	-6	8	5	12	14	-3	-8	8	18	15	6	-6	6	18	19	8	-3	6	16	14	6	-6	7	18	18	-3	-3	7	22	24	0	-1	7	32	32	3	1	7	41	42	3	4	7	21	21					
2	4	5	29	29	-5	8	5	11	-10	-2	-8	8	15	15	7	-6	6	17	20	-6	-3	6	9	11	7	-6	7	17	18	-2	-3	7	28	28	1	-1	7	33	31	6	1	7	18	18	-9	5	7	10	10					
3	4	5	18	17	-4	8	5	20	21	-1	-8	8	27	26	8	-6	6	17	18	-5	-3	6	9	9	8	-6	7	17	17	-1	-3	7	18	16	2	-1	7	35	35	-10	2	7	15	14	-6	5	7	13	12					
4	4	5	26	24	-3	8	5	15	16	0	-8	8	21	23	-7	-5	6	10	6	-4	-3	6	22	25	-4	-5	7	18	19	0	-3	7	20	20	3	-1	7	20	20	3	-1	7	17	16	-7	5	7	15	15					
-9	5	5	18	19	-1	8	5	9	10	1	-8	8	20	18	-6	-5	6	17	18	-3	-3	6	17	18	-6	-5	7	12	-12	-1	-10	8	10	10	-3	-6	8	17	17	0	-3	8	21	21	6	-1	8	13	13					
-6	5	5	18	18	1	8	5	15	14	2	-8	8	25	25	-5	-5	6	17	19	-2	-3	6	26	29	-5	-5	7	18	18	0	-10	8	13	12	-1	-6	8	14	14	-1	-3	8	27	26	-8	0	8	9	8					
-5	5	5	10	11	2	8	5	13	12	3	-8	8	17	18	-4	-5	6	17	18	-1	-3	6	13	13	-1	-3	6	13	13	-1	-10	8	10	10	1	-10	8	10	10	-3	-6	8	17	17	0	-3	8	21	21	6	-1	8	13	13
-4	5	5	30	30	-7	9	5	9	11	4	-8	8	22	22	-3	-5	6	15	16	0	-3	6	17	16	-3	-5	7	13	13	4	-10	8	15	17	2	-6	8	14	14	3	-3	8	14	14	-5	0	8	10	9					
-2	5	5	13	-12	-6	9	5	15	16	5	-8	8	29	29	-2	-5	6	24	26	1	-3	6	10	10	0	-5	7	16	18	5	-10	8	13	13	3	-6	8	19	16	4	-3	8	48	46	-4	0	8	41	43					
-1	5	5	35	35	-2	9	5	10	10	6	-8	8	11	14	-1	-5	6	17	17	2	-3	6	39	36	1	5	7	17	18	0	-9	8	13	12	4	-8	8	14	14	5	-3	8	26	25	-3	0	8	18	18					
0	5	5	12	13	-4	10	5	16	15	7	-8	8	19	21	0	-5	6	19	21	3	-3	6	16	15	3	-3	6	16	15	3	-5	7	17	18	1	-9	8	29	30	7	-3	8	16	19	-2	0	8	14	15					
1	5	5	20	20	-3	10	5	11	7	8	-8	8	15	16	1	-5	6	19	18	4	-3	6	24	23	-8	6	7	12	12	2	-9	8	12	12	2	-9	8	12	12	-5	-5	8	14	15	-6	-2	8	13	13	-1	0	8	22	22
2	5	5	28	28	-3	12	6	9	10	-3	-7	8	24	24	2	-5	6	58	54	5	-3	6	12	12	-7	6	7	19	17	5	-9	8	13	13	-4	-5	8	13	14	-7	-2	8	11	11	0	0	8	22	22					
3	5	5	28	29	3	12	6	12	10	-2	-7	8	15	15	3	-5	6	38	36	8	-3	6	13	12	-4	6	7	11	10	6	-9	8	15	15	-3	-5	8	21	22	-6	-2	8	11	12	1	0	8	34	33					
4	5	5	48	49	4	12	6	11	11	-1	-7	8	16	16	4	-5	6	31	30	7	-3	6	10	9	-3	6	7	15	15	-6	-8	8	12	10	-2	-5	8	7	-5	-2	8	19	20	2	0	8	18	17						
-6	6	5	14	13	5	12	6	22	23	0	-7	8	21	20	6	-5	6	23	22	8	-3	6	22	22	-2	6	7	13	12	-5	-8	8	10	10	-1	-5	8	25	23	-4	-2	8	21	22	3	0	8	35	-34					
-9	-2	6	11	11	-4	0	6	31	32	-1	2	6	28	30	3	4	6	51	51	3	-12	7	8	6	-1	6	7	9	9	-3	-6	8	11	12	0	-5	8	16	17	-3	-2	8	36	37	5	0	8	14	14					
-8	-2	6	16	16	-3	0	6	52	53	0	2	6	19	20	4	4	6	18	17	4	-12	7	15	12	-1	6	7	12	12	0	6	7	12	12	-2	-6	8	8	1	-5	8	25	24	-2	-2	8	19	20	6	0	8	19	17	
-6	-2	6	13	13	-2	0	6	41	41	1	2	6	33	32	-9	5	6	17	18	1	-11	7	10	11	2	6	7	11	10	-1	-8	8	10	9	2	-5	8	16	15	-1	-2	8	32	31	-7	1	8	12	12					
-5	-2	6	12	14	-1	0	6	30	30	2	2	6	26	24	-5	5	6	14	15	2	-11	7	12	12	3	6	7	14	13	0	-8	8	9	8	3	-5	8	22	22	0	-2	8	32	33	-6	-1	8	20	20					
-4	-2	6	27	29	0	0	6	24	24	3	2	6	30	30	-4	5	6	29	30	3	-11	7	26	25	-5	7	7	20	20	1	-8	8	28	28	7	-5	8	13	15	-1	-8	8	33	33	-5	1	8	15	16					
-3	-2	6	23	26	1	0	6	30	29	4	2	6	13	14	-2	5	6	17	17	4	-11	7	17	18	-4	7	7	17	18	-4	7	7	20	22	2	-8	8	22	20	-6	-4	8	10	11	2	-2	8	32	32	-3	1	8	17	17
-2	-2	6	36	37	2	0	6	35	33	6	2	6	22	22	-1	5	6	10	10	5	-11	7	10	10	-3	7	7	12	11	-3	7	7	12	11	3	-6	8	22	21	-5	-4	8	17	17	3	-2	8	23	23					
-1	-2	6	8	8	3	0	6	33	33	-9	3	6	10	10	0	5	6	12	11	-4	-10	7	9	8	-2	7	7	9	8	5	-8	8	16	17	-4	-4	8	21	21	4	-2	8	30	29	-1	1	8	15	15					
0	-2																																																					

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₁₀H₂₁

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$										
4	-11	14	14	14	-4	-4	7	20	22	0	-2	7	14	15	2	0	7	33	33	-3	3	7	31	31	2	5	8	10	12	2	-7	9	14	13	-9	-3	9	11	9	-5	0	9	41	42	-1	3	9	17	17					
5	-7	7	14	14	-3	-4	1	14	15	1	-2	7	27	25	3	0	7	23	23	-2	3	7	19	18	3	5	8	10	9	4	-7	9	12	13	-6	-3	9	17	17	-4	0	9	29	31	0	3	9	10	10					
6	-7	7	11	18	-2	-4	7	29	29	2	-2	7	31	29	4	0	7	35	35	-1	3	7	15	17	-7	6	8	13	14	5	-7	9	25	27	-5	-3	9	11	10	-3	0	9	14	15	1	3	9	9	11					
7	-7	7	17	15	0	-4	7	19	18	3	-2	7	27	27	5	0	7	21	21	0	3	7	16	18	-6	6	8	10	10	6	-7	9	14	13	-2	-3	9	18	17	-2	0	9	17	16	2	3	9	16	16					
8	-6	7	17	15	1	-4	1	22	21	5	-2	7	16	16	6	0	7	16	16	1	3	7	15	15	-5	6	8	12	12	-5	-6	9	11	12	-1	-3	9	27	26	-1	0	9	18	17	-7	4	9	9	-6					
9	-6	7	10	12	2	-4	7	21	25	6	-2	7	13	15	7	0	7	14	14	2	3	7	23	23	-4	6	8	14	14	-4	-6	9	13	12	0	-3	9	31	31	0	0	9	15	15	-6	4	9	18	19					
10	-6	7	14	15	3	-4	1	18	11	-10	-1	7	12	15	-9	1	7	13	11	3	3	7	27	26	-3	6	8	10	9	-3	-6	9	17	18	1	-3	9	28	28	1	0	9	21	21	-5	4	9	16	15					
11	-6	7	12	13	4	-4	7	11	17	-9	-1	7	12	10	-7	1	7	13	13	4	3	7	18	19	1	6	8	9	11	-1	-6	9	13	13	2	-3	9	25	23	2	0	9	27	27	-4	4	9	12	13					
12	-6	7	11	17	5	-4	7	15	15	-6	-1	7	16	14	-5	1	7	29	29	-5	1	7	29	29	5	3	7	14	13	-1	4	9	27	29	0	-7	10	14	13	-5	-3	10	24	25	0	0	10	28	29	1	-11	11	9	9
13	-6	7	10	10	6	-4	7	27	29	-7	-1	7	14	15	-4	1	7	12	14	-9	4	7	11	12	0	4	9	23	24	1	-7	10	19	18	-3	-3	10	11	11	1	0	10	26	26	2	-10	11	9	7					
14	0	d	1	11	7	-4	7	14	11	-6	-1	7	14	13	-3	1	7	19	19	-6	4	7	20	-21	2	4	9	11	13	2	-7	10	12	12	-2	-3	10	11	10	-7	1	10	14	13	-4	-9	11	9	10					
15	1	6	7	15	15	11	-4	1	19	21	-5	-1	7	23	23	-2	1	7	15	16	-5	4	7	32	32	-6	5	9	12	11	4	-7	10	29	30	-1	-3	10	14	15	-6	1	10	17	18	0	-9	11	10	10				
16	-5	5	9	11	5	-11	9	7	7	0	-3	10	26	26	-3	1	10	10	11	-4	-8	11	14	14	-4	-7	10	14	15	4	-4	10	25	27	-2	0	10	8	8	-2	5	10	11	8	0	-4	11	20	19					
17	4	5	9	14	5	d	10	15	16	1	-3	10	20	19	-2	1	10	11	10	0	-8	11	6	8	-1	-7	10	12	9	5	-4	10	16	16	-1	0	10	12	11	0	-11	11	10	9	1	-4	11	56	55					
18	-1	5	9	11	10	d	10	14	13	2	-3	10	27	-26	-1	1	10	9	11	1	-8	11	18	17	2	-4	11	10	11	-3	0	11	9	9	-4	-9	12	9	7	1	-4	12	16	16	0	-8	13	26	26					
19	0	5	9	12	14	-3	-6	10	14	4	-3	10	11	10	1	1	10	15	15	-5	-7	11	11	8	3	-4	11	12	11	-2	0	11	18	19	-2	-9	12	9	0	2	-4	12	19	18	-1	-7	13	12	10					
20	1	5	9	12	9	-2	-6	10	16	17	5	-3	10	18	18	-7	2	10	9	8	-4	-7	11	26	26	4	-4	11	9	10	-1	0	11	12	10	0	-9	12	12	10	3	-4	12	15	15	0	-7	13	32	31				
21	d	1	9	10	10	-1	-6	10	12	12	-7	-2	10	14	12	-6	2	10	20	20	-3	-7	11	12	12	-7	-3	11	23	23	1	0	11	17	16	2	-9	12	21	22	-5	-3	12	11	9	1	-7	13	9	7				
22	-5	6	9	11	10	0	d	10	14	14	-6	-2	10	9	10	-5	2	10	14	14	-1	-7	11	15	12	-6	-3	11	27	-29	-7	1	11	14	13	-3	-6	12	11	9	-1	-3	12	19	20	0	-8	13	16	16				
23	-4	1	9	13	13	1	-6	10	22	22	-3	-2	10	16	15	-3	2	10	12	12	0	-7	11	14	13	-5	-3	11	23	24	-6	1	11	13	14	-2	-6	12	13	12	0	-3	12	20	20	1	-6	13	10	12				
24	-3	6	9	14	14	2	-4	10	10	10	-2	-2	10	13	12	-2	2	10	16	16	1	-7	11	21	19	-3	-3	11	9	10	-5	1	11	12	12	0	-8	12	15	15	3	-3	12	9	10	2	-6	13	15	15				
25	-1	6	9	13	13	3	-6	10	36	36	-1	-2	10	17	18	-1	2	10	15	15	-7	-6	11	9	9	-2	-3	11	14	13	-2	1	11	23	26	2	-6	12	13	13	-7	-2	12	14	14	-3	-5	13	8	9				
26	0	12	10	14	14	4	d	10	18	19	0	-2	10	20	19	0	2	10	15	16	-3	-6	11	11	9	-1	-3	11	12	11	-1	1	11	21	22	3	-6	12	15	16	-3	-1	12	12	13	-1	-5	13	9	-9				
27	0	11	10	12	12	5	d	10	12	10	1	-2	10	80	59	1	2	10	12	14	-2	-6	11	17	16	0	-3	11	13	13	0	1	11	11	12	-5	-7	12	13	15	-2	-1	12	14	13	0	-5	13	19	18				
28	1	-11	10	9	10	-5	-5	10	13	12	2	-2	10	30	31	3	2	10	9	11	-1	-6	11	20	21	1	-3	11	24	24	-7	2	11	10	8	-4	-7	12	12	12	-1	-1	12	15	14	2	-5	13	14	13				
29	2	-11	10	10	11	-4	-5	10	21	22	3	-2	10	20	20	-6	3	10	13	11	0	-6	11	18	17	2	-3	11	20	20	-5	2	11	13	13	-1	-7	12	15	16	0	-1	12	12	11	0	-4	13	17	16				
30	-4	-10	10	8	6	-2	-5	10	20	19	5	-2	10	18	18	-5	3	10	16	15	1	-6	11	18	19	3	-3	11	21	20	-4	2	11	12	12	0	-7	12	17	15	1	-1	12	10	10	-3	-3	13	15	16				
31	-2	-10	10	8	6	-1	-5	10	21	21	-6	-1	10	21	21	-2	3	10	10	8	2	-6	11	24	24	4	-3	11	12	13	-2	2	11	10	11	3	-7	12	16	18	2	-1	12	12	11	0	-3	13	12	11				
32	0	-10	10	11	11	0	-5	10	21	21	-5	-1	10	12	10	-1	3	10	12	12	3	-6	11	23	24	-7	-2	11	20	19	-1	2	11	15	13	-4	-6	12	8	8	-6	0	12	14	12	-3	-2	13	18	20				
33	2	-10	10	12	11	1	-5	10	21	21	-4	-1	10	15	15	0	3	10	16	16	4	-6	11	20	20	-2	-2	11	14	13	0	2	11	12	13	-1	-6	12	16	15	-2	0	12	14	14	-2	-2	13	16	18				
34	3	-10	9	8	2	-5	10	13	11	-3	-1	10	12	10	2	3	10	12	8	-7	-5	11	14	13	0	-2	11	17	-18	-6	3	11	9	9	0	-6	12	16	15	-1	0	12	16	16	-1	-2	13	13	12					
35	4	-10	13	14	3	-5	10	23	22	-2	-1	10	14	14	-6	4	10	11	10	-4	-5	11	15	15	1	-2	11	24	25	-5	3	11	11	11	-2	-5	12	11	10	0	0	12	10	10	0	-2	13	11	11					
36	-5	4	10	9	8	4	-5	10	22	23	-1	-1	10	9	10	-5	4	10	14	13	-3	-5	11	11	9	3	-2	11	14	16	-4	3	11	14	14	-1	-5	12	9	10	-6	1	12	9	10	1	-2	13	10	9				
37	-2	-4	10	9	8	5	-5	10	16	16	0	-1	10	13	13	-4	4	10	14	13	-1	-5	11	20	20	4	-2	11	13	14	-2	3	11	15	14	0	-5	12	39	38	-1	1	12	13	12	-5	-1	13	10	10				
38	1	4	10	11	10	-4	-4	10	31	32	1	-1	10	21	21	-3	4	10	10	8	0	-5	11	13	12	-2	-1	11	12	11	-1	3	11	11	10	1	-5	12	24	25	0	1	12	12	12	-2	-1	13	11	10				
39	4</																																																					

**Observed (F,) and calculated (F,) structure
factors for Pd-C₈H₁₇**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₈H₁₇

h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c										
1	0	0	85	86	-10	2	0	12	12	3	3	0	49	47	-7	5	0	26	25	5	6	0	22	22	12	-5	1	8	7	2	-3	1	36	36	-10	-1	1	11	11	1	0	1	48	46	-11	2	1	12	13					
2	0	0	55	51	-9	2	0	17	-18	4	3	0	20	20	-6	5	0	17	16	6	8	0	15	14	-9	-4	1	9	10	3	-3	1	9	10	-9	-1	1	17	17	2	0	1	65	62	-10	2	1	19	19					
3	0	0	41	40	-7	2	0	11	11	5	3	0	24	24	-5	5	0	28	27	7	6	0	14	14	-6	-4	1	19	19	4	-3	1	42	42	-6	-1	1	14	13	3	0	1	15	16	-9	2	1	7	6					
4	0	0	48	45	-6	2	0	25	25	6	3	0	13	12	-4	5	0	28	28	8	6	0	10	10	-7	-4	1	9	8	5	-3	1	14	13	-7	-1	1	26	26	4	0	1	46	45	-8	2	1	14	14					
5	0	0	52	49	-5	2	0	20	21	7	3	0	15	14	-3	5	0	36	35	-12	7	0	4	3	-6	-4	1	12	11	6	-3	1	27	26	-6	-1	1	21	21	6	0	1	69	67	-7	2	1	22	21					
6	0	0	33	32	-4	2	0	31	30	8	3	0	18	18	-2	5	0	42	43	-10	7	0	12	13	-5	-4	1	13	13	7	-3	1	16	15	-5	-1	1	21	21	6	0	1	25	24	-6	2	1	22	23					
7	0	0	34	33	-3	2	0	18	-16	9	3	0	12	12	-1	5	0	36	-21	-9	7	0	15	16	-4	-4	1	22	21	8	-3	1	11	12	-4	-1	1	27	27	7	0	1	27	27	-5	2	1	27	27					
8	0	0	10	10	-2	2	0	82	-79	10	3	0	10	9	0	5	0	14	-10	-8	7	0	12	13	-3	-4	1	23	23	9	-3	1	23	24	-3	-1	1	49	48	8	0	1	7	6	-4	2	1	44	45					
9	0	0	21	22	-1	2	0	96	93	-12	4	0	10	10	1	5	0	27	26	-7	7	0	14	13	-2	-4	1	28	24	10	-3	1	5	5	-2	-1	1	27	28	9	0	1	18	17	-3	2	1	30	30					
10	0	0	10	10	0	2	0	21	20	-11	4	0	14	15	2	5	0	28	29	-6	7	0	10	10	-1	-4	1	14	14	11	-3	1	9	10	-1	-1	1	103	102	10	0	1	10	10	-2	2	1	45	44					
11	0	0	12	12	1	2	0	37	34	-10	4	0	7	8	3	5	0	26	26	-5	7	0	19	19	0	-4	1	19	18	12	-3	1	7	6	0	-1	1	56	55	11	0	1	7	8	-1	2	1	55	55					
-11	0	0	9	9	2	2	0	31	31	-9	4	0	9	9	4	5	0	10	10	-4	7	0	14	14	-1	-4	1	29	28	-10	-2	1	13	13	-1	-1	1	64	62	-11	1	1	10	9	0	2	1	32	32					
-10	1	0	7	6	3	2	0	48	47	-8	4	0	18	18	5	5	0	14	14	-3	7	0	44	45	2	-4	1	17	16	-9	-2	1	15	15	-2	-1	1	30	28	-10	1	1	7	7	1	2	1	26	27					
-8	1	0	29	31	4	2	0	56	53	-7	4	0	22	21	6	5	0	13	13	-2	7	0	21	21	3	-4	1	40	39	-6	-2	1	20	20	3	-1	1	43	42	-9	1	1	8	-6	2	2	1	11	12					
-7	1	0	35	35	5	2	0	35	32	-6	4	0	7	8	7	5	0	14	13	-1	7	0	16	16	4	-4	1	26	26	-7	-2	1	17	16	4	-1	1	43	41	-8	1	1	10	10	3	2	1	9	10					
-6	1	0	30	30	6	2	0	17	16	-5	4	0	16	17	8	5	0	8	7	0	7	0	29	29	5	-1	1	39	38	-6	-2	1	23	22	5	-1	1	19	18	4	2	1	40	40										
-5	1	0	31	30	7	2	0	20	19	-4	4	0	12	12	9	5	0	5	7	1	7	0	17	17	7	-4	1	14	14	-5	-2	1	19	20	6	-1	1	11	10	-6	1	1	29	28	5	2	1	26	25					
-4	1	0	29	30	8	2	0	16	16	-3	4	0	41	42	-12	6	0	4	5	2	7	0	43	43	8	-4	1	17	17	-4	-2	1	25	21	7	-1	1	5	-4	-1	1	24	25	6	2	1	15	15						
-3	1	0	40	38	9	2	0	13	14	-2	4	0	19	19	-11	6	0	7	7	4	7	0	9	10	9	-4	1	15	15	9	-4	1	15	15	10	-4	1	7	7	-2	-2	1	41	40	9	-1	1	12	13	8	2	1	11	12
-2	1	0	54	49	10	2	0	9	9	-1	4	0	43	42	-10	6	0	7	7	5	7	0	15	15	10	-4	1	7	7	-2	-2	1	41	40	9	-1	1	12	13	-3	1	1	33	31	8	2	1	11	12					
-1	1	0	25	26	-12	3	0	8	8	0	4	0	15	-12	-9	6	0	14	13	6	7	0	13	13	11	-4	1	10	10	-1	-2	1	27	27	10	-1	1	11	11	-2	1	1	145	152	9	2	1	14	14					
0	1	0	60	57	-11	3	0	11	10	1	4	0	22	23	-8	6	0	14	14	7	7	0	10	10	-12	-4	1	9	9	0	-2	1	34	33	11	-1	1	7	6	-1	1	1	62	59	10	2	1	8	7					
1	1	0	48	46	-9	3	0	8	8	2	4	0	27	28	-7	6	0	13	13	-10	8	0	6	5	-12	3	1	8	8	1	4	1	30	29	-7	6	1	15	15	-11	8	1	8	6	-7	10	1	7	7					
2	1	0	37	37	-6	3	0	16	15	3	4	0	18	19	-6	6	0	15	15	-9	8	0	5	5	-11	3	1	9	9	2	4	1	24	25	-6	6	1	15	14	-10	8	1	8	7	-6	10	1	6	6					
3	1	0	24	24	-7	3	0	17	17	4	4	0	23	22	-5	6	0	20	19	-8	6	0	9	9	-9	3	1	4	5	3	4	1	26	26	-5	6	1	23	22	-9	8	1	6	6	-5	10	1	7	7					
4	1	0	76	70	-6	3	0	22	21	5	4	0	8	8	-4	6	0	29	30	-6	8	0	22	20	-6	3	1	16	17	4	4	1	20	20	-4	6	1	20	21	-6	8	1	7	7	-4	10	1	7	8					
5	1	0	13	12	-5	3	0	11	10	6	4	0	10	9	-3	6	0	39	37	-4	8	0	5	-3	-7	3	1	18	18	5	4	1	7	6	-3	6	1	4	-1	-6	8	1	30	29	-3	10	1	10	10					
6	1	0	16	16	-4	3	0	56	52	8	4	0	14	13	-2	6	0	91	89	-3	8	0	19	19	-6	3	1	19	19	6	4	1	27	27	-2	6	1	8	8	-5	6	1	31	31	-2	10	1	10	9					
7	1	0	20	20	-3	3	0	23	22	9	4	0	8	9	-1	6	0	26	24	-2	8	0	11	11	-5	3	1	18	-14	7	4	1	5	4	-1	6	1	23	22	-4	8	1	22	22	-1	10	1	9	9					
8	1	0	14	14	-2	3	0	43	44	-12	5	0	6	7	0	6	0	30	29	-1	8	0	16	15	-4	3	1	4	5	8	4	1	8	9	0	6	1	31	31	-4	8	1	13	12	-1	10	1	9	9					
9	1	0	15	16	-1	3	0	28	26	-11	5	0	10	10	1	6	0	31	31	0	8	0	19	17	-3	3	1	30	31	9	4	1	6	6	1	6	1	28	28	-2	8	1	13	14	1	10	1	9	7					
10	1	0	14	15	0	3	0	29	29	-10	5	0	8	8	2	6	0	31	30	1	8	0	50	47	-2	3	1	27	26	-12	5	1	6	7	2	6	1	28	28	-1	8	1	11	11	2	10	1	8	8					
11	1	0	11	11	1	3	0	12	12	-9	5	0	14	15	3	6	0	17	17	2	8	0	26	25	-1	3	1	26	26	-11	5	1	9	9	3	6	1	11	11	0	8	1	12	12	3	10	1	5	5					
-11	2	0	10	10	2	3	0	26	-24	-8	5	0	16	17	4	6	0	19	19	3	8	0	17	17	0	3	1	20	20	-10	5	1	7	7	5	6	1	22	21	1	8	1	22	22	-9	11	1	7	5					
4	8	0	10	9	-6	11	0	8	8	-3	-11	1	6	5	2	-9	1	13	12	6	-7	1	11	11	1	3	1	17	11	-9	5	1	17	16	6	6	1	13	11	2	6	1	14	15	-6	11	1	5	4					
5	8	0	15	15	-5	11	0	7	6	-2	-11	1	5	4	3	-9	1	12	12	8	-7	1	13	13	2	3	1	12	9	-6	5	1	17	16	7	6	1	11	11	3	8	1	16	16	-7	11	1	7	6					
6	8	0	13	13	-3	11	0	15	16	-1	-11	1	6	6	4	-9	1	8	9	9	-7	1	9	8	3	3	1	40	36	-7	5	1																						

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₈H₁₇

h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	
8-5	1	15	15	-2-3	1	44	44	9-2	1	10	-9	-3	0	1	40	38	8	1	1	17	16	5-11	2	6	6	-1-8	2	23	23	-2-8	2	23	24	-9-4	2	9	9	3-3	2	88	84				
9-5	1	12	12	-1-3	1	23	22	10-2	1	5	6	-2	0	1	6	7	9	1	1	16	16	6-11	2	6	5	0-8	2	25	24	-1-8	2	21	22	-6-4	2	17	16	4-3	2	24	22				
10-5	1	7	6	0-3	1	25	26	11-2	1	6	6	-1	0	1	16	-15	10	1	1	13	14	-4-10	2	9	10	1-8	2	22	21	0-8	2	21	21	-7-4	2	11	10	5-3	2	9	10				
11-5	1	6	6	-1-3	1	57	57	-11-1	1	5	4	0	0	1	94	96	-12	2	1	6	6	-3-10	2	9	10	2-8	2	16	15	1-8	2	7	14	-6-4	2	20	20	6-3	2	21	20				
-2-10	2	13	14	3-8	2	8	7	2-8	2	29	30	-5-4	2	16	15	7-3	2	18	19	11-7	3	5	4	6-5	3	6	5	0-3	3	37	38	-10-1	3	10	9	1-3	3	14	14						
-1-10	2	10	11	4-8	2	3	3	3-6	2	21	22	-4-4	2	27	27	8-3	2	12	11	-8-6	3	9	9	7-5	3	14	13	1-3	3	41	38	-9-1	3	8	7	2-3	3	36	34						
0-10	2	16	17	5-8	2	12	13	4-6	2	29	29	-3-4	2	36	36	9-3	2	7	7	-7-6	3	12	12	8-5	3	11	10	2-3	3	29	31	-8-1	3	6	6	3-3	3	35	34						
1-10	2	9	10	6-8	2	16	15	5-6	2	15	16	-2-4	2	15	17	10-3	2	5	-4	-5-6	3	11	10	9-5	3	10	10	3-3	3	6	-5	-7-1	3	35	35	4-3	3	46	44						
2-10	2	8	7	7-8	2	7	7	6-6	2	16	15	-1-4	2	15	16	11-3	2	6	6	-4-6	3	6	6	-9-4	3	10	10	4-3	3	27	27	-6-1	3	33	33	5-3	3	40	38						
3-10	2	9	8	8-8	2	10	10	7-6	2	12	11	0-4	2	21	21	-10-2	2	11	11	-3-6	3	20	19	-8-4	3	16	17	5-3	3	18	18	-5-1	3	26	26	6-3	3	22	21						
4-10	2	7	8	9-8	2	12	12	8-6	2	16	15	-1-4	2	34	35	-9-2	2	13	13	-2-6	3	18	18	-7-4	3	18	16	6-3	3	22	21	-4-1	3	36	34	7-3	3	14	15						
5-10	2	16	16	10-8	2	8	8	9-6	2	10	11	2-4	2	31	30	-8-2	2	20	19	-1-6	3	23	23	-6-4	3	19	20	7-3	3	24	24	-3-1	3	31	31	8-3	3	12	12						
6-10	2	20	20	11-8	2	4	4	10-6	2	6	6	3-4	2	34	35	-7-2	2	11	11	0-6	3	19	19	-5-4	3	15	13	8-3	3	27	28	-2-1	3	28	29	9-3	3	13	13						
7-10	2	18	18	-7-7	2	13	13	11-6	2	6	6	4-4	2	28	29	-6-2	2	35	34	2-6	3	29	28	-4-4	3	32	31	9-3	3	18	19	-1-1	3	63	-61	10-3	3	8	9						
-5-2	2	30	29	7-1	2	11	11	-5-1	2	38	37	7-2	2	11	10	-3-4	2	44	43	3-6	3	15	15	-3-4	3	49	46	11-3	3	5	4	0-1	3	9	8	-11	1	3	10	10					
-4-2	2	68	67	8-1	2	19	20	-4-1	2	16	17	8-2	2	9	8	-2-4	2	37	37	4-6	3	24	25	-2-4	3	39	37	-10-2	3	16	15	1-1	3	57	53	-10	1	3	13	13					
-3-2	2	41	40	9-1	2	11	10	-3-1	2	49	46	9-2	2	14	15	-1-4	2	37	36	5-6	3	11	11	-1-4	3	23	23	-9-2	3	14	13	2-1	3	45	45	-9	1	3	5	5					
-2-2	2	22	22	10-1	2	12	12	-2-1	2	27	24	10-2	2	7	7	0-4	2	34	35	6-6	3	10	12	0-4	3	20	20	-6-2	3	23	24	3-1	3	25	23	-8	1	3	14	14					
-1-2	2	71	69	11-1	2	7	6	-1-1	2	52	52	-12	3	2	6	6	1-4	2	22	22	7-6	3	5	6	1-4	3	27	28	-7-2	3	13	14	4-1	3	23	23	-7	1	3	17	16				
0-2	2	46	45	-11-0	2	9	9	0-1	2	56	55	-11	3	2	9	9	4-4	2	30	28	8-6	3	13	12	2-4	3	43	42	-6-2	3	37	35	-5-1	3	40	39	-6	1	3	19	20				
1-2	2	80	56	-10-0	2	5	5	1-1	2	28	28	-10	3	2	5	6	3-4	2	29	29	9-6	3	11	11	3-4	3	29	28	-5-2	3	37	36	6-1	3	11	10	-5	1	3	24	24				
2-2	2	11	-7	-9	0	2	7	6	2-1	2	24	25	-9	3	2	11	10	4-4	2	18	18	10-6	3	6	5	4-4	3	7	-6	-4-2	3	59	57	7-1	3	11	11	-4	1	3	16	17			
3-2	2	18	18	-8-0	2	11	-10	3-1	2	58	55	-8-3	2	18	17	5-4	2	32	32	11-6	3	6	6	5-4	3	22	22	-3-2	3	43	42	-1-3	3	14	14	-3	1	3	12	97					
4-2	2	34	34	-7-0	2	21	21	4-1	2	74	70	-7-3	2	24	23	6-4	2	24	24	-9-5	3	11	10	6-4	3	18	18	-2-2	3	34	36	9-1	3	9	9	-2	1	3	16	16					
5-2	2	34	33	-6-0	2	6	8	5-1	2	32	30	-6-3	2	36	35	7-4	2	11	10	-8-5	3	13	13	7-4	3	14	14	-1-2	3	60	59	10-1	3	11	11	-1	1	3	42	42					
6-2	2	26	27	-5-0	2	28	27	7-1	2	19	19	-4-3	2	25	24	8-4	2	12	13	-7-5	3	19	18	8-4	3	7	6	0-2	3	88	84	11-1	3	9	10	0	1	3	25	24					
7-2	2	39	39	-4-0	2	25	25	8-1	2	13	14	-3-3	2	33	33	9-4	2	6	6	-6-5	3	14	13	10-4	3	8	-9	1-2	3	280	312	-11	0	3	10	9	1	1	3	26	26				
8-2	2	32	31	-3-0	2	24	24	8-1	2	13	12	-2-3	2	35	36	-11	5	2	7	7	-5-5	3	12	12	11-4	3	7	7	2-2	3	48	43	-10	0	3	12	12	2	1	3	8	6			
10-2	2	12	11	-2-0	2	16	18	9-1	2	12	12	-1-3	2	43	43	-10	5	2	7	7	-4-5	3	22	22	-10-3	3	18	14	3-2	3	28	28	-9	0	3	13	14	3	1	3	19	-16			
11-2	2	4	5	-1-0	2	7	-4	1-0	2	10	10	0-3	2	16	18	-9	5	2	17	18	-3-5	3	17	18	-9-3	3	17	17	4-2	3	30	29	-8	0	3	22	-22	4	1	3	43	40			
-11-1	2	6	6	0-0	2	58	56	-12	2	2	5	6	1-3	2	39	39	-8	5	2	14	14	-2-5	3	36	35	-8-3	3	18	17	5-2	3	31	32	-7	0	3	6	5	5	1	3	17	16		
-10-1	2	10	10	1-0	2	36	35	-11	2	2	12	12	2-3	2	14	15	-7	5	2	21	20	-1-5	3	6	-3	-7-3	3	17	16	6-2	3	24	25	-6	0	3	16	18	6	1	3	18	18		
-9-1	2	16	17	2-0	2	34	34	-10	2	2	13	13	3-3	2	32	31	-6	5	2	18	18	0-5	3	14	13	-8-3	3	20	19	7-2	3	18	18	-5	0	3	34	32	7	1	3	11	10		
-8-1	2	17	17	3-0	2	37	36	-9	2	2	9	8	4-3	2	15	14	-5	5	2	19	18	1-5	3	55	19	-5-3	3	18	17	8-2	3	23	23	-4	0	3	20	20	8	1	3	12	11		
-7-1	2	36	37	4-0	2	23	21	-8	2	2	22	21	5-3	2	16	17	-4	5	2	30	31	2-5	3	23	23	-4-3	3	13	13	9-2	3	6	6	-3	0	3	32	32	9	1	3	13	13		
-6-1	2	9	-6	5-0	2	7	-5	-7	2	2	21	21	6-3	2	8	9	-3	5	2	34	33	-3-5	3	25	27	-3-3	3	73	70	10-2	3	14	14	-2	0	3	8	-8	1	3	8	8			
-5-1	2	11	13	6-0	2	18	18	-6	2	2	15	15	7-3	2	8	6	-2	5	2	45	42	-3-2	3	4	3	2-3	3	25	24	-5	5	3	15	16	-7	7	3	8	7	2	3	8	7		
-4-1	2	52	50	7-0	2	20	21	-4	2	2	42	40	8-3	2	7	7	-1	5	2	16	21	-11	2	3	14	14	3-3	3	30	30	-4	5	3	25	25	-6	7	3	11	10	-3	9	3	7	6
-3-1	2	50	49	8-0	2	11	11	-3	2	2	23	22	9-3	2	7	7	0	5	2	35	33	-10	2	3	20	21	4-3	3	19	18	-3	5	3	14	15	-5	7	3	27	26	-2	9	3	19	21
-2-1	2	35	34	9-0	2	17	16	-2	2	2	45	43	-12	4	2	8	6	1	5	2	30	29	-8	2	3	8	5-3	3	13	12	-2	5	3	59	59	-4	7	3	9	9	-1	9	3	17	16
-1-1	2	41	40	10-0	2	12	11	-2	2	2	18	20	-11	4	2	5	6	1	5	2	31	31	-6	2	3	13	13	6-3	3	14	1														

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₈H₁₇

h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $
-2	7	4	5	5	-3	1	5	5	5	7	-4	5	6	5	6	-7	5	9	6	0	4	5	17	17
-1	7	4	12	12	-7	10	4	6	5	9	-7	5	6	7	9	-7	5	6	7	9	-7	5	6	7
0	7	4	15	14	-5	10	4	6	7	9	-5	5	4	5	4	-6	5	6	6	7	9	-5	25	24
2	7	4	9	8	-4	10	4	7	7	9	-5	6	6	6	7	-6	5	6	6	7	9	-5	10	10
4	7	4	9	8	-4	10	4	7	7	9	-5	6	6	6	7	-6	5	6	6	7	9	-5	10	10
5	7	4	9	8	-4	10	4	7	7	9	-5	6	6	6	7	-6	5	6	6	7	9	-5	10	10
-11	8	4	4	4	-2	10	4	9	6	4	1	5	5	5	-4	5	12	13	3	-3	5	9	9	9
-10	8	4	5	5	-1	10	4	9	6	4	1	5	5	5	-4	5	12	13	3	-3	5	9	9	9
-9	8	4	9	8	0	10	4	9	6	4	1	5	5	5	-4	5	12	13	3	-3	5	9	9	9
-8	8	4	11	10	-6	10	4	9	6	4	1	5	5	5	-4	5	12	13	3	-3	5	9	9	9
-6	8	4	11	10	-6	10	4	9	6	4	1	5	5	5	-4	5	12	13	3	-3	5	9	9	9
-5	8	4	9	9	-7	11	4	5	5	-10	5	9	9	9	1	-4	6	48	47	7	-8	5	11	11
4	-8	6	9	9	4	-8	6	8	8	4	-8	6	8	8	7	-1	6	10	10	0	-7	8	10	10
5	-8	6	10	10	6	-8	6	13	13	2	-4	6	105	104	6	-2	6	8	8	7	-1	6	10	10
8	-8	6	7	5	7	-8	6	7	5	7	-8	6	7	5	7	-8	6	7	5	7	-8	6	7	5
7	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5
9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5
10	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5	9	-8	6	5	5
-7	7	6	10	10	-7	5	6	15	14	7	-4	6	9	9	-1	2	6	28	24	9	-2	6	12	13
-6	7	6	14	13	-6	5	6	15	14	7	-4	6	9	9	-1	2	6	28	24	9	-2	6	12	13
-5	7	6	11	10	-5	7	6	14	14	9	-4	6	10	10	0	-2	6	28	24	9	-2	6	12	13
-4	7	6	11	10	-5	7	6	14	14	9	-4	6	10	10	0	-2	6	28	24	9	-2	6	12	13
-3	7	6	14	14	-3	5	6	10	10	-3	6	7	7	7	3	-2	6	22	22	5	0	6	23	23
-2	7	6	13	13	-2	7	6	13	13	4	-2	6	13	13	4	-2	6	27	26	5	0	6	23	23
-1	7	6	18	18	-1	5	6	18	18	4	-2	6	13	13	4	-2	6	27	26	5	0	6	23	23
0	7	6	3	3	0	7	6	3	3	0	7	6	3	3	0	7	6	3	3	0	7	6	3	3
1	7	6	9	9	1	5	6	15	15	1	5	6	15	15	1	5	6	15	15	1	5	6	15	15
2	7	6	9	11	2	5	6	18	19	4	-3	6	16	16	4	-3	6	16	16	4	-3	6	16	16
3	7	6	13	14	3	5	6	18	19	4	-3	6	16	16	4	-3	6	16	16	4	-3	6	16	16
4	7	6	13	13	4	5	6	5	5	3	-3	6	21	20	10	-2	6	7	7	2	0	6	7	7
5	7	6	11	11	5	5	6	14	14	9	-4	6	12	13	0	-2	6	28	24	9	-2	6	12	13
6	7	6	14	13	6	5	6	13	14	9	-4	6	12	13	0	-2	6	28	24	9	-2	6	12	13
7	7	6	5	5	8	5	6	13	14	9	-4	6	12	13	0	-2	6	28	24	9	-2	6	12	13
8	7	6	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
9	7	6	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-8	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-7	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-6	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-5	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-4	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-3	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-2	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
-1	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
0	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
1	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
2	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
3	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
4	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
5	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
6	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
7	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
8	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
9	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
10	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
11	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
12	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
13	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
14	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
15	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
16	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
17	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
18	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
19	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
20	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
21	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
22	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
23	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
24	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
25	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
26	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
27	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
28	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3	-3	6	24	23
29	6	14	15	14	10	5	6	14	15	3	-3	6	24	23	5	0	6	15	15	3				

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Pd-C₈H₁₇

h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c	h	k	l	10F _o	10F _c										
2	-4	9	22	21	8	-2	9	5	8	5	0	9	9	8	-5	3	9	7	7	0	5	9	15	16	-8	5	10	8	9	-5	-8	11	5	5	3	-5	11	4	4	2	-2	11	8	8	-4	1	11	8	8	-4	1	11	8	8
3	-4	9	8	8	7	-2	9	5	5	7	0	9	5	6	-4	3	9	11	12	1	5	9	12	12	-1	1	11	8	9	0	6	11	2	4	2	-5	12	5	5	-3	-1	12	6	5	-4	-7	13	5	4					
4	-4	9	10	11	-10	-1	9	5	8	8	0	9	8	7	-3	3	9	19	19	3	5	9	8	8	0	1	11	8	9	1	-11	12	4	2	-7	-4	12	8	9	-2	-1	12	7	7	-3	-7	13	5	5					
5	-4	9	11	10	-9	-1	9	9	8	-9	1	9	5	5	-1	3	9	8	9	-8	6	9	8	8	1	1	11	6	4	-1	-10	12	4	3	-5	-4	12	9	7	-1	-1	12	7	8	-2	-7	13	4	4					
6	-4	9	10	10	-8	-1	9	9	10	-8	1	9	6	6	0	3	9	8	8	-7	6	9	8	8	3	1	11	8	7	0	-10	12	5	5	-4	-4	12	7	6	1	-1	12	8	8	0	-7	13	6	5					
7	-4	9	8	8	-7	-1	9	11	11	-7	1	9	16	16	1	3	9	5	6	-5	8	9	9	9	4	1	11	9	9	1	-10	12	4	4	-1	-4	12	8	8	2	-1	12	5	5	1	-7	13	8	7					
8	-3	9	8	7	-6	-1	9	12	11	-6	1	9	14	15	3	3	9	7	-6	-4	6	9	8	7	5	1	11	8	9	0	-9	12	8	8	0	-4	12	9	8	3	-1	12	8	5	2	-7	13	5	5					
9	-3	9	10	10	-5	-1	9	16	14	-5	1	9	14	13	4	3	9	12	10	-3	8	9	7	7	-8	2	11	7	7	1	-9	12	6	4	2	-4	12	7	8	4	-1	12	4	4	3	-7	13	4	3					
10	-3	9	11	10	-4	-1	9	18	17	-4	1	9	9	9	5	3	9	5	5	-2	8	9	5	3	-7	2	11	8	7	4	-9	12	5	4	-7	-3	12	5	5	5	-1	12	5	4	4	-7	13	5	3					
11	-3	9	8	7	-2	-1	9	18	19	-3	1	9	14	13	8	3	9	4	5	0	8	9	7	7	-3	2	11	13	15	-4	-8	12	4	5	-8	-3	12	8	6	-5	0	12	5	5	-2	-8	13	5	4					
12	-3	9	10	10	-1	-1	9	13	14	-2	1	9	13	13	-10	4	9	8	6	1	8	9	8	6	-2	2	11	7	9	-3	-8	12	7	7	-5	-3	12	7	6	-2	0	12	5	8	1	-8	13	4	4					
13	-3	9	13	13	0	-1	9	15	15	-1	1	9	7	6	-9	4	9	5	4	2	8	9	6	5	-1	2	11	7	8	-2	-8	12	5	5	-4	-3	12	7	7	1	0	12	7	7	3	-8	13	6	5					
14	-3	9	11	13	1	-1	9	12	13	0	1	9	19	19	-8	4	9	8	7	3	6	9	4	3	0	2	11	4	4	-1	-8	12	5	5	-3	-3	12	8	8	2	0	12	5	4	-4	-4	13	7	7					
15	-7	9	5	5	4	-8	10	6	8	-1	-5	10	12	12	4	-3	10	8	7	-9	0	10	5	5	1	2	11	5	5	0	-8	12	5	4	-1	-3	12	8	8	3	0	12	7	6	-3	-4	13	8	7					
16	-7	9	5	5	8	-8	10	4	3	0	-5	10	16	17	6	-3	10	7	7	-8	0	10	7	7	2	2	11	5	5	1	-8	12	6	5	0	-3	12	8	6	4	0	12	7	7	-2	-4	13	5	4					
17	-6	9	8	8	-6	-7	10	8	8	1	-5	10	17	17	7	-3	10	4	4	-7	0	10	9	9	3	2	11	8	7	3	-8	12	8	8	1	-3	12	5	6	5	0	12	7	7	2	-4	13	5	5					
18	-4	9	7	7	-5	-7	10	8	7	2	-5	10	9	9	-9	-2	10	7	7	-6	0	10	13	12	4	2	11	7	7	4	-8	12	10	11	2	-3	12	5	5	-3	1	12	5	7	-7	-3	13	5	5					
19	-3	7	9	6	7	-4	-7	10	10	3	-5	10	10	9	-8	-2	10	11	11	-5	0	10	13	12	-8	3	11	5	6	-5	-7	12	5	4	4	-3	12	5	4	-2	1	12	8	9	-5	-3	13	5	5					
20	-2	7	9	4	4	-3	-7	10	10	4	-5	10	9	8	-7	-2	10	5	6	-4	0	10	9	10	-7	3	11	6	7	4	-7	12	8	8	5	-3	12	4	3	0	1	12	3	5	-3	-3	13	8	6					
21	-8	3	11	7	7	-3	-7	12	8	5	6	-3	12	4	4	2	1	12	4	3	-1	-3	13	5	5	0	5	11	5	5	-4	-5	12	5	4	2	-2	12	11	12	-1	-9	13	4	2	0	-1	13	7	7				
22	-2	3	11	7	8	-1	-7	12	8	7	-7	-2	12	5	5	-7	2	12	2	5	1	-3	13	5	6	1	5	11	5	4	-3	-5	12	6	5	3	-2	12	4	4	-3	-8	13	7	7	1	-1	13	6	5				
23	-1	3	11	5	5	4	-7	12	4	8	-8	-2	12	7	7	0	2	12	2	4	2	-3	13	5	4	2	5	11	4	4	-2	-5	12	6	7	-7	-1	12	4	5	-2	-8	13	7	6	3	-1	13	5	4				
24	3	3	11	4	3	-4	-8	12	5	5	-5	-2	12	8	8	2	2	12	5	5	4	-3	13	4	3	-7	8	11	4	4	-1	-5	12	8	8	-6	-1	12	9	9	-1	-8	13	5	4	4	-1	13	4	4				
25	4	3	11	5	5	-3	-8	12	5	5	-4	-2	12	7	8	-8	3	12	4	4	-8	-2	13	4	5	-8	0	11	4	3	0	-5	12	10	10	-5	-1	12	7	8	0	-8	13	2	3	0	0	13	5	3				
26	-8	4	11	4	4	-2	-8	12	8	5	-3	-2	12	4	5	-3	3	12	5	7	-5	-2	13	7	6	-5	6	11	5	5	1	-5	12	5	4	-4	-1	12	7	7	4	-8	13	7	7	-7	1	13	4	3				
27	-4	4	11	7	8	0	-8	12	7	7	-2	-2	12	7	7	0	3	12	2	4	2	-2	13	5	6	2	1	13	5	5	1	-8	14	4	3	0	-4	14	4	3	3	-3	14	4	2	-3	-5	15	5	3				
28	0	4	11	4	4	3	-8	12	7	7	-1	-2	12	6	7	1	3	12	9	8	5	-2	13	4	3	3	1	13	4	3	-3	-7	14	4	4	1	-4	14	5	4	0	-2	14	4	3	2	-4	15	5	4				
29	-3	5	11	5	7	-7	-5	12	6	6	0	-2	12	8	8	2	3	12	6	6	-2	-1	13	6	6	2	2	13	4	3	0	-8	14	4	4	0	-3	14	5	3	1	-1	14	5	4	0	-3	15	4	2				
30	-2	5	11	6	5	-5	-5	12	7	8	1	-2	12	11	10	0	5	12	4	4	-1	-1	13	8	8	1	3	13	4	3	-4	-4	14	5	4	2	-3	14	4	3	1	-8	15	4	3									

**Observed (F_o) and calculated (F_c) structure
factors for Ni-C₈H₁₇**

Observed (F_o) and calculated (F_c) structure factors for Ni-C₈H₁₇

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$	h	k	l	$10F_o$	$10F_c$						
1	0	0	73	69	8	2	0	7	9	-5	5	0	11	11	-3	8	0	8	8	-5	-6	1	17	18	8	-6	2	9	8	-2	-3	2	29	21	0	-1	2	46	48	7	1	2	1	1	2	4	2	12	12	
2	0	0	32	30	9	2	0	6	6	-4	5	0	12	12	-1	8	0	5	6	-4	-6	1	20	20	4	-5	2	7	7	0	-3	2	12	12	1	-1	2	19	20	9	1	2	8	6	3	4	2	15	14	
3	0	0	23	22	-11	3	0	8	5	-3	5	0	17	18	0	8	0	8	9	-2	-6	1	13	13	-6	-5	2	10	11	1	-3	2	19	20	2	-1	2	65	6	-1	1	2	7	7	4	4	2	1	7	
4	0	0	24	24	-6	3	0	8	7	-2	5	0	21	22	1	8	0	21	21	-1	-6	1	11	10	-4	-5	2	10	10	2	-3	2	37	36	4	-1	2	11	20	-6	2	2	12	12	5	4	2	18	19	
5	0	0	38	38	-7	3	0	8	7	-1	5	0	20	-20	2	8	0	14	15	2	-6	1	17	17	-3	-5	2	6	6	3	-3	2	69	72	5	-1	2	11	12	-7	2	2	12	12	6	4	2	17	17	
6	0	0	18	18	-6	3	0	8	8	0	5	0	27	-25	5	8	0	8	7	3	-6	1	11	11	-2	-5	2	15	16	4	-3	2	10	10	8	-1	2	14	14	-5	2	2	15	-14	4	5	2	10	11	
7	0	0	25	27	-4	3	0	34	33	2	5	0	15	18	-6	9	0	9	8	-6	-1	18	14	-1	-5	2	6	-6	6	-3	2	10	9	-6	0	2	15	-14	-4	2	2	34	31	-7	5	2	9	9		
9	0	0	11	12	-3	3	0	10	11	3	5	0	8	8	0	9	0	14	-18	5	-6	1	8	7	2	-5	2	10	10	1	-3	2	7	1	-7	0	2	8	8	-3	2	2	13	12	-6	5	2	1	7	
-9	1	0	7	-8	-2	3	0	25	25	-9	6	0	9	7	3	9	0	8	5	6	-1	8	8	3	-5	2	9	1	10	-3	2	9	-10	-5	0	2	13	12	-2	2	2	29	27	-5	5	2	7	7		
-8	1	0	27	27	-1	3	0	11	11	-6	6	0	6	5	-8	10	0	6	-8	6	-1	9	9	6	-5	2	12	-14	-10	-2	2	7	7	-4	0	2	7	7	0	2	2	11	18	-4	5	2	18	18		
-7	1	0	29	29	0	3	0	17	17	-5	8	0	8	8	0	-10	1	9	10	0	-1	6	6	6	-5	2	15	-15	-9	-2	2	6	8	-3	0	2	9	9	3	2	2	19	19	-3	5	2	20	21		
-6	1	0	24	23	1	3	0	7	-6	-4	6	0	16	16	6	-10	1	7	9	-3	-5	1	7	7	7	-5	2	6	4	-6	-2	2	9	9	-2	0	2	11	-10	4	2	2	9	9	-2	5	2	52	50	
-5	1	0	14	15	2	3	0	49	-44	-3	6	0	17	15	7	-10	1	10	12	-2	-5	1	14	14	9	-5	2	1	6	-6	-2	2	23	22	-1	0	2	33	-29	6	2	2	14	15	-1	5	2	12	11	
-4	1	0	12	12	3	3	0	34	32	-2	6	0	61	62	6	-10	1	6	-5	6	-1	6	-5	4	-4	2	7	8	5	-2	2	29	11	0	0	2	40	7	9	2	2	7	9	0	5	2	19	18		
-3	1	0	23	21	4	3	0	8	10	-1	8	0	13	12	-2	-9	1	8	8	0	-5	1	18	15	-6	-4	2	8	1	-4	-2	2	55	53	1	0	2	15	18	-6	3	2	10	9	1	5	2	12	12	
-2	1	0	71	-66	5	3	0	16	16	0	6	0	7	8	-1	-9	1	22	22	1	-5	1	6	-5	-5	-4	2	7	8	-3	-2	2	23	24	2	0	2	17	17	-7	3	2	11	10	2	5	2	16	16	
0	1	0	46	42	8	3	0	9	9	1	8	0	15	14	0	-9	1	8	7	2	-5	1	19	19	-4	-4	2	17	16	-1	-2	2	52	4	3	0	2	17	11	4	3	2	11	17	3	5	2	12	12	
1	1	0	27	27	-11	4	0	6	6	2	6	0	11	11	5	-9	1	9	-10	3	-5	1	11	11	3	-5	1	11	11	0	-2	2	27	28	4	0	2	14	14	-5	3	2	13	-13	5	6	2	11	11	
2	1	0	18	18	-6	4	0	9	9	3	8	0	15	15	-3	-8	1	8	-8	4	-5	1	8	8	-2	-4	2	6	5	1	-2	2	1	37	5	0	2	19	-18	-3	3	2	15	13	-7	6	2	7	6	
4	1	0	49	46	-7	4	0	10	9	5	6	0	10	11	-2	-8	1	26	-25	6	-5	1	6	-5	0	-4	2	9	8	2	-2	2	33	30	6	0	2	6	7	-2	3	2	14	15	-5	6	2	16	15	
7	1	0	14	13	-6	4	0	10	-10	7	8	0	8	7	-1	-8	1	12	10	7	-5	1	10	11	1	-4	2	11	18	3	-2	2	4	5	1	0	2	14	14	-1	3	2	14	25	-2	6	2	7	7	
-9	2	0	22	-23	-3	4	0	22	21	-10	7	0	8	8	0	-8	1	11	10	8	-5	1	7	8	2	-4	2	16	16	1	-2	2	17	11	9	0	2	9	8	0	3	2	10	-9	-1	6	2	5	5	
-6	2	0	11	12	-1	4	0	21	21	-9	7	0	11	11	3	-8	1	8	7	9	-5	1	8	8	0	6	2	8	8	4	-8	3	8	8	-1	-4	3	11	10	2	-2	3	31	31	7	0	3	11	10	
-4	2	0	15	15	0	4	0	25	-23	-6	7	0	8	7	6	-8	1	9	9	6	-4	1	9	10	-6	-4	1	9	10	1	6	2	14	14	0	-4	3	9	9	3	-2	3	12	13	9	0	3	1	7	
-3	2	0	26	-26	2	4	0	8	7	-7	7	0	6	5	4	-7	1	14	13	-4	-7	1	14	13	2	6	2	10	11	-1	-7	3	8	8	1	-4	3	10	11	4	-3	2	17	16	-7	1	3	6	7	
-2	2	0	92	-67	3	4	0	7	8	-5	7	0	8	8	-2	-7	1	14	13	-3	-4	1	9	9	3	6	2	31	-31	1	-7	3	8	-8	2	-4	3	28	28	5	-2	3	17	18	-6	1	3	8	8	
-1	2	0	77	74	4	4	0	13	13	-4	7	0	6	5	-1	-7	1	12	11	-2	-4	1	12	11	-2	-4	1	12	12	-1	1	2	6	5	-1	1	2	6	5	2	-7	3	7	-7	3	-4	3	11	10	
1	2	0	22	22	7	4	0	7	-7	0	-7	1	20	19	0	-7	1	12	12	1	-4	1	13	13	-6	7	2	6	6	3	-7	3	13	13	4	-4	3	12	-11	4	-4	3	10	10	-7	2	3	10	10	
2	2	0	15	15	8	4	0	7	8	-2	7	0	11	12	1	-7	1	13	14	3	-4	1	24	23	-4	7	2	12	-12	4	-1	3	10	8	5	-4	3	11	12	1	-2	3	18	18	-1	1	3	21	21	
3	2	0	15	16	-11	5	0	6	4	-1	7	0	6	6	2	-7	1	14	14	4	-4	1	18	18	-3	7	2	6	5	5	-1	3	7	6	1	-4	3	7	6	4	-1	3	7	5	0	1	3	11	11	
4	2	0	48	46	-9	5	0	9	8	0	7	0	15	15	3	-7	1	31	30	5	-4	1	29	29	-2	1	2	8	1	11	-1	3	8	5	10	-4	3	12	-12	-7	-1	3	34	33	1	1	3	14	15	
5	2	0	19	18	-8	5	0	8	7	2	7	0	29	28	4	-7	1	10	10	6	-4	1	10	8	-8	-1	7	2	6	5	-3	-6	3	12	10	4	-3	3	8	9	-6	-1	3	21	27	2	1	3	6	-4
6	2	0	12	12	-7	5	0	13	12	6	7	0	8	5	5	-7	1	10	10	8	-4	1	9	8	0	1	2	9	9	-2	-6	3	1	1	-6	-3	13	13	-5	-1	3	22	21	3	1	3	35	-32		
7	2	0	7	7	-6	5	0	7	7	-6	8	0	10	10	7	-7	1	8	5	9	-4	1	10	8	9	1	7	2	18	-1	-6	3	1	7	-4	-3	3	5	6	-4	-1	3	17	17	4	1	3	29	29	
-8	-3	1	6	8	-3	-1	1	30	29	-2	1	1	141	134	-2	3	1	5	6	-2	6	1	7	-6	-2	6	1	7	-6	2	7	2	33	33	1	-6	3	6	-4	-3	-3	15	14	5	1	3	10	10		
-7	-3	1	7	6	-2	-1	1	6	7	-1	1	1	51	49	-1	3	1	11	11	-1	6	1	10	10	3	1	2	7	8	2	-6	3	12	12	-1	-3	3	15	15	-2	-1	3	16	15	6	1	3	11	11	
-6	-3	1	7	6	-1	-1	1	69	62	0	1	1	20	20	3	3	1	22	21	0	6	1	16	17	4	7	2	7	7	4	-6	3	10	11	0	-3	3	20	20	-1	-1	3	79	75	9	1	3	7	6	
-5	-3	1	16	16	0	-1	1	36	38	1	1	1	20	20	4	3	1	8	7	1	6	1																												

