

Acta Crystallographica Section C

**Crystal Structure**

**Communications**

ISSN 0108-2701

## **(Dicyclohexylphosphino)borane, $\text{BH}_3\text{PH}(\text{C}_6\text{H}_{11})_2$ , a Precursor to Water-Soluble Phosphine Ligands**

**M. W. Day, B. Mohr and R. H. Grubbs**

This electronic document was scanned from an archival copy of material deposited to accompany a paper published in an IUCr journal. In many cases the only accessible copy was a microfilm of a poor-quality original.

83180

BK1263

Table 6. Observed and calculated structure factors for bk1263

Table with 18 columns: h, k, l, 10Fo, 10Fc, 10s (repeated 3 times). Each row represents a set of Miller indices and their corresponding structure factor values.

Table 1. Observed and calculated structure factors for bk1263

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
5	6	3	93	91	2	0	2	4	137	136	1	-4	10	4	79	83	2	-2	5	5	200	207	2	-1	1	6	37	28	1
-6	6	3	25	12	3	1	2	4	208	205	2	-3	10	4	62	65	2	-1	5	5	111	112	2	0	1	6	94	99	1
-5	7	3	27	14	3	2	2	4	44	40	1	-2	10	4	142	141	2	0	1	5	357	342	3	1	1	6	13	18	2
-4	7	3	29	28	3	3	2	4	33	35	2	-1	10	4	94	92	2	1	5	5	164	157	2	2	1	6	94	83	1
-3	7	3	-6	10	6	4	2	4	78	82	2	0	10	4	-14	1	3	2	5	5	459	461	4	3	1	6	195	197	2
-2	7	3	126	118	2	5	2	4	22	16	3	1	10	4	76	74	2	3	5	5	35	29	4	4	1	6	24	28	2
-1	7	3	51	49	2	6	2	4	71	66	2	2	10	4	17	22	4	4	5	5	167	163	2	5	1	6	83	83	2
0	7	3	128	141	2	-6	3	4	13	4	5	3	10	4	22	22	3	5	5	5	20	9	3	1	1	6	9	10	6
1	7	3	81	82	2	-5	3	4	187	189	2	4	10	4	28	29	3	6	5	5	21	18	4	-6	2	6	100	95	2
2	7	3	228	224	3	-4	3	4	162	162	2	-4	11	4	8	5	7	-6	6	5	15	0	5	-5	5	6	16	16	4
3	7	3	17	5	3	-3	3	4	102	110	2	-3	11	4	89	81	2	-5	6	5	39	34	3	-4	2	6	120	123	2
4	7	3	55	52	2	-2	3	4	351	344	3	-2	11	4	58	54	2	-4	6	5	21	20	3	-3	2	6	18	17	2
5	7	3	34	31	3	-1	3	4	286	278	3	-1	11	4	84	84	2	-3	6	5	107	113	2	-2	2	6	63	64	1
-5	8	3	39	43	3	0	4	4	36	35	1	0	11	4	78	76	2	-2	6	5	33	22	2	-1	1	6	108	105	1
-4	8	3	39	33	2	1	3	4	16	22	2	1	11	4	14	23	4	-1	6	5	221	222	2	0	0	6	167	161	2
-3	8	3	40	43	3	2	3	4	26	35	3	2	11	4	7	4	7	0	6	5	30	31	1	1	1	6	347	337	3
-2	8	3	39	46	2	3	3	4	77	81	2	3	11	4	-15	4	4	1	6	5	284	290	3	2	2	6	132	136	2
-1	8	3	112	116	2	4	3	4	73	70	2	-3	12	4	-16	2	4	2	6	5	35	34	2	3	3	6	30	29	2
0	8	3	-2	2	7	5	3	4	128	125	2	-2	12	4	82	82	2	3	6	5	284	304	4	4	4	6	120	121	2
1	8	3	171	170	2	6	3	4	32	35	3	-1	12	4	62	60	2	4	6	5	67	61	2	5	2	6	38	34	2
2	8	3	40	38	2	-6	4	4	112	110	2	0	12	4	76	78	2	5	6	5	51	51	2	6	6	6	86	82	2
3	8	3	52	48	2	-5	4	4	55	56	2	1	12	4	14	15	4	-5	7	5	29	16	3	-6	3	6	24	21	3
4	8	3	51	58	2	-4	4	4	126	125	2	2	12	4	-10	9	5	-4	7	5	51	49	2	-5	3	6	130	122	2
5	8	3	108	99	2	-3	4	4	-2	2	7	3	12	4	19	18	4	-3	7	5	39	29	2	-4	3	6	14	18	3
-5	9	3	-3	6	10	-2	4	4	72	79	1	-2	13	4	10	11	6	-2	7	5	210	211	2	-3	3	6	110	116	2
-4	9	3	39	33	2	-1	4	4	47	42	1	-1	13	4	79	77	2	-1	7	5	53	55	2	-2	3	6	13	4	2
-3	9	3	46	46	2	0	4	4	-6	3	4	0	13	4	52	55	2	0	7	5	110	106	2	-1	1	6	128	123	2
-2	9	3	98	102	2	1	4	4	106	102	1	1	13	4	65	70	2	1	7	5	65	64	2	0	3	6	400	382	4
-1	9	3	-11	6	4	2	4	4	93	98	1	-5	0	5	108	108	2	2	7	5	253	254	3	1	3	6	167	156	2
0	9	3	121	125	2	3	4	4	54	54	2	-3	0	5	27	24	2	3	7	5	58	58	2	2	3	6	70	71	1
1	9	3	13	13	5	4	4	4	205	204	2	-1	0	5	18	14	2	-1	0	5	96	94	2	3	3	6	130	133	2
2	9	3	75	100	2	5	4	4	9	11	5	1	0	5	527	529	5	4	7	5	14	8	4	4	3	6	53	53	2
3	9	3	68	72	2	6	4	4	91	90	2	3	0	5	182	181	2	-5	8	5	15	18	5	5	3	6	99	101	2
4	9	3	92	86	2	-6	5	4	14	8	5	5	0	5	93	93	2	-4	8	5	58	53	2	6	3	6	18	16	4
5	9	3	24	22	2	-5	5	4	160	155	2	-6	1	5	73	75	2	-3	8	5	114	114	2	-6	4	6	107	105	2
-4	10	3	28	27	3	-4	5	4	32	36	2	-5	1	5	16	9	4	-2	8	5	25	24	2	-5	4	6	27	28	3
-3	10	3	10	9	5	-3	5	4	61	63	3	-4	1	5	18	3	3	-1	8	5	182	190	2	-4	4	6	161	161	2
-2	10	3	41	37	2	-2	5	4	91	80	1	-3	1	5	105	103	2	0	8	5	79	80	2	-3	4	6	51	45	2
-1	10	3	121	126	2	-1	5	4	161	155	2	-2	1	5	158	154	2	1	8	5	220	221	2	-2	4	6	198	199	2
0	10	3	-14	10	2	0	5	4	24	21	2	-1	1	5	191	191	2	2	8	5	53	54	2	-1	4	6	66	64	1
1	10	3	101	108	2	1	5	4	106	99	1	0	1	5	529	533	4	3	8	5	115	105	2	0	4	6	85	81	1
2	10	3	28	28	3	2	5	4	54	46	1	1	1	5	158	158	2	4	8	5	42	40	2	1	4	6	64	59	3
3	10	3	95	93	2	3	5	4	98	102	2	2	1	5	300	288	3	5	8	5	66	64	2	2	4	6	309	313	3
4	10	3	12	7	5	4	5	4	55	42	2	3	1	5	30	32	2	-5	9	5	12	6	3	3	4	6	36	40	2
-4	11	3	28	28	2	5	5	4	160	166	2	4	1	5	147	149	2	-4	9	5	22	23	3	4	4	6	102	101	2
-3	11	3	41	41	2	6	5	4	6	1	8	5	1	5	-9	7	5	-3	9	5	63	64	4	5	4	6	23	19	3
-2	11	3	4	3	8	-6	6	4	96	99	2	6	1	5	33	41	3	-2	9	5	121	122	2	6	6	6	99	96	2
-1	11	3	33	35	2	-5	6	4	-12	3	4	-6	2	5	12	16	5	-1	9	5	22	13	3	-6	5	6	24	18	3
0	11	3	113	115	2	-4	6	4	164	162	2	-5	2	5	41	32	2	0	9	5	246	249	3	-5	5	6	135	136	2
1	11	3	37	36	2	-3	6	4	49	46	2	-4	2	5	66	62	2	1	9	5	94	92	2	-4	5	6	12	12	4
2	11	3	84	88	2	-2	6	4	153	159	2	-3	2	5	284	275	3	2	9	5	116	117	2	-3	5	6	161	162	2
3	11	3	14	12	5	-1	6	4	59	65	1	-2	2	5	21	19	2	3	9	5	62	57	2	-2	5	6	33	22	2
-3	12	3	15	23	5	0	6	4	83	84	1	-1	2	5	222	224	2	4	9	5	105	98	2	-1	1	6	82	77	1
-2	12	3	33	25	5	1	6	4	23	21	2	0	2	5	85	86	1	-4	10	5	25	27	3	0	5	6	76	76	1
-1	12	3	13	5	5	2	6	4	66	68	2	1	2	5	520	510	5	-3	10	5	14	15	4	1	5	6	438	426	4
0	12	3	49	42	3	3	6	4	253	253	3	2	2	5	57	60	1	-2	10	5	18	21	3	2	5	6	19	14	2
1	12	3	93	89	2	4	6	4	134	141	2	3	2	5	174	174	2	-1	10	5	149	148	2	3	5	6	202	202	2
2	12	3	17	21	4	5	6	4	20	11	5	4	1	5	63	64	2	0	10	5	2	6	2	4	4	6	64	65	2
3	12	3	59	61	2	-5	7	4	131	132	2	5	2	5	79	81	2	1	10	5	111	109	2	5	5	6	129	128	2
-2	13	3	26	24	3	-4	7	4	27	29	3	6	2	5	17	14	4	2	10	5	34	40	2	6	6	6	8	4	7
-1	13	3	48	47	2	-3	7	4	177	183	2	-6	3	5	48	47	2	3	10	5	87	82	2	-6	6	6	93	91	2
0	13	3	26	26	5	-2	7	4	1																				

Table 1. Observed and calculated structure factors for bk1263

			10Fo			10Fc			10s						10Fo			10Fc			10s						10Fo			10Fc			10s		
h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	8	6	36	34	2	1	4	7	612	588	5	6	0	8	90	91	2	-1	8	8	161	165	2	2	4	9	68	74	2						
3	8	6	48	46	2	2	4	7	21	1	-6	1	8	22	21	3	0	8	8	153	153	2	3	4	9	25	24	2							
4	8	6	105	110	3	3	4	7	20	29	-5	1	8	67	61	2	1	8	8	40	43	2	4	4	9	-2	19	2							
5	8	6	14	4	5	4	4	7	51	47	-4	1	8	31	23	2	2	8	8	79	80	2	5	4	9	44	44	2							
-4	9	6	42	43	2	5	4	7	11	16	-3	1	8	35	38	2	3	8	8	28	28	3	-5	5	9	11	6	5							
-3	9	6	62	60	2	6	4	7	31	22	-2	1	8	28	27	2	4	8	8	83	91	2	-4	5	9	160	163	2							
-2	9	6	75	75	2	-6	5	7	57	56	-1	1	8	268	250	3	-4	9	8	23	18	3	-3	5	9	57	56	2							
-1	9	6	32	30	2	-5	5	7	29	27	0	1	8	424	414	4	-3	9	8	5	1	7	-2	5	9	322	322	3							
0	9	6	63	67	2	-4	5	7	87	84	1	1	8	137	133	2	-2	9	8	67	64	2	-1	5	9	64	63	1							
1	9	6	106	105	2	-3	5	7	29	33	2	1	8	15	24	2	-1	9	8	84	86	2	0	5	9	314	318	3							
2	9	6	108	100	2	-2	5	7	184	174	3	1	8	174	186	2	0	9	8	37	40	2	1	5	9	127	133	2							
3	9	6	75	78	2	-1	5	7	161	158	4	1	8	7	0	5	1	9	8	5	1	7	2	5	9	118	118	2							
4	9	6	4	11	8	0	5	7	461	460	5	1	8	152	148	2	2	9	8	35	37	2	3	5	9	36	36	2							
-4	10	6	79	79	2	-4	5	7	87	84	6	1	8	18	13	4	3	9	8	77	72	2	4	5	9	36	34	2							
-3	10	6	48	49	2	-3	5	7	51	47	-6	2	8	101	97	2	4	9	8	4	0	9	5	5	9	-9	13	6							
-2	10	6	62	60	2	3	5	7	70	71	-5	2	8	63	66	2	-4	10	8	50	53	2	-5	6	9	108	101	2							
-1	10	6	61	65	2	-4	5	7	47	44	-4	2	8	41	39	2	-3	10	8	14	3	4	-4	6	9	22	25	3							
0	10	6	60	56	2	-3	5	7	14	7	-3	2	8	67	66	2	-2	10	8	58	64	2	-3	6	9	224	231	2							
1	10	6	58	60	2	-5	6	7	77	74	-2	2	8	47	50	2	-1	10	8	-16	1	3	-2	6	9	25	23	2							
2	10	6	62	66	2	-4	6	7	27	32	-1	2	8	177	171	2	0	10	8	-14	10	3	-1	6	9	354	359	3							
3	10	6	7	11	2	-3	6	7	108	108	0	2	8	535	536	5	1	10	8	13	10	4	0	6	9	75	79	2							
4	10	6	67	70	2	-2	6	7	21	9	-1	2	8	451	434	4	2	10	8	62	64	2	1	6	9	153	151	2							
-3	11	6	75	70	2	-1	6	7	345	350	2	2	8	187	185	2	3	10	8	6	11	7	2	6	9	13	18	4							
-2	11	6	-14	1	4	0	6	7	130	127	3	2	8	10	11	4	4	10	8	63	62	2	3	6	9	18	16	3							
-1	11	6	38	36	2	-1	6	7	227	224	4	2	8	172	169	2	-3	11	8	-7	1	7	4	6	9	2	16	9							
0	11	6	53	53	2	2	6	7	160	164	5	2	8	21	17	3	-2	11	8	4	12	8	5	6	9	38	36	3							
1	11	6	33	31	2	3	6	7	168	159	6	2	8	74	71	2	-1	11	8	39	37	2	-5	7	9	12	6	5							
2	11	6	-11	0	5	4	6	7	57	57	-6	3	8	8	10	7	0	11	8	-15	5	3	-4	7	9	118	119	2							
3	11	6	23	28	3	5	6	7	-11	4	-5	3	8	90	91	2	2	11	8	63	64	2	-3	7	9	40	43	2							
-3	12	6	25	28	3	-5	7	7	18	1	-4	3	8	42	46	2	2	11	8	11	16	5	-2	7	9	273	276	3							
-2	12	6	29	30	3	-4	7	7	62	57	-3	3	8	14	12	3	3	11	8	74	72	2	-1	7	9	25	28	2							
-1	12	6	9	10	3	-3	7	7	58	57	-2	3	8	23	22	2	-2	12	8	15	18	2	0	7	9	187	182	2							
0	12	6	9	10	6	-2	7	7	328	327	-1	3	8	42	42	1	-1	12	8	-4	1	8	1	7	9	20	25	3							
1	12	6	8	12	6	-1	7	7	182	184	0	3	8	442	418	4	0	12	8	63	61	2	2	7	9	33	37	4							
2	12	6	-5	16	8	0	7	7	267	276	1	3	8	598	599	5	1	12	8	19	30	4	3	7	9	16	13	4							
-1	13	6	-8	11	7	1	7	7	118	119	2	3	8	89	78	2	2	12	8	53	57	2	4	7	9	-17	3	3							
0	13	6	-13	12	5	2	7	7	338	348	3	3	8	154	152	2	0	13	8	-9	1	6	5	7	9	24	20	3							
-5	0	7	130	135	3	2	7	7	57	56	4	3	8	-11	2	4	-5	0	9	121	127	2	-5	8	9	93	95	2							
-3	0	7	305	300	2	5	7	7	18	14	5	3	8	110	111	2	-3	0	9	205	206	2	-4	8	9	22	16	3							
-1	0	7	122	125	1	-5	8	7	67	68	-6	4	8	40	36	3	-1	0	9	229	232	2	-3	8	9	112	116	4							
1	0	7	-12	5	2	-4	8	7	-8	15	-5	4	8	23	20	3	3	0	9	189	195	2	-2	8	9	14	4	4							
3	0	7	61	55	2	-3	8	7	129	127	-4	4	8	87	83	2	5	0	9	87	82	2	-1	8	9	181	185	2							
5	0	7	36	39	2	-2	8	7	131	132	-3	4	8	85	89	2	-6	1	9	104	107	2	0	8	9	173	174	2							
-6	1	7	21	11	3	-1	8	7	287	287	-2	4	8	51	47	1	-5	1	9	46	49	2	2	8	9	16	23	4							
-5	1	7	63	63	3	0	8	7	14	7	-1	4	8	64	71	1	-4	1	9	138	136	2	3	8	9	49	51	2							
-4	1	7	241	242	3	1	8	7	173	166	0	4	8	101	89	1	-3	1	9	-4	11	6	-4	8	9	32	39	3							
-3	1	7	51	53	3	2	8	7	30	25	-2	1	9	164	163	2	-2	1	9	283	293	3	-4	9	9	127	121	2							
-2	1	7	192	195	2	3	8	7	202	204	2	4	8	303	305	3	-1	1	9	65	64	1	-3	9	9	31	33	3							
-1	1	7	26	19	1	4	8	7	38	35	2	4	8	20	21	3	0	1	9	186	185	2	-2	9	9	101	102	2							
0	1	7	37	41	1	5	8	7	-16	0	4	4	8	101	103	2	0	1	9	82	77	2	-1	9	9	62	60	2							
1	1	7	160	155	2	-4	9	7	93	92	5	4	8	19	31	4	2	1	9	48	50	1	0	9	9	137	135	2							
2	1	7	115	113	2	-3	9	7	51	53	-6	5	8	9	6	6	3	1	9	32	37	2	1	9	9	75	75	2							
3	1	7	-5	10	5	-2	9	7	134	138	-5	5	8	94	91	2	4	1	9	29	27	2	2	9	9	95	98	2							
4	1	7	29	38	2	-1	9	7	32	35	-4	5	8	11	17	4	5	1	9	31	20	3	3	9	9	-12	10	5							
5	1	7	10	8	5	0	9	7	74	76	-3	5	8	18	14	3	6	1	9	100	93	2	4	9	9	15	14	5							
6	1	7	21	14	4	1	9	7	29	23	-2	5	8	163	162	2	-6	2	9	25	20	3	-4	10	9	10	5	6							
-6	2	7	25	29	2	-1	9	7	138	129	-5	5	8	174	166	2	-5	2	9	127	127	2	-3	10	9	156	154	2							
-5	2	7	51	50	2	2	9	7	38	41	-4	5	8	72	70	1	-4	2	9	23	31	3	-2	10	9	43	48	2							
-4	2	7	8	10	5	4	9	7	37	38	3	1	9	182	188	2	-3	2	9	194	198	2	-1	10	9	55	64	2							
-3	2	7	187	194	2	-4	10	7	11	2	2	5	8	132	131	2	-2	2	9	25	28	2	0	10	9	-11	7	5							
-2	2	7	56	63	1	-3	10	7	112	110	3	5	8	139	135	2	-1	2	9	367	362	3	1	10	9	127	124	2							
-1	2	7	243	235	2	-2	10	7	8	7	4	5	8	-13	1	4	0	2	9	1															

Table 1. Observed and calculated structure factors for bk1263

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	1	10	280	292	3	2	9	10	4	13	8	1	6	11	30	34	2	-3	4	12	76	77	2	-2	2	13	24	21	2
2	1	10	16	20	2	3	9	10	107	101	2	2	6	11	29	31	2	-2	4	12	221	218	2	-1	2	13	121	111	2
3	1	10	174	181	2	4	9	10	19	22	4	3	6	11	-19	3	-2	-1	4	12	66	65	2	0	2	13	88	92	2
4	1	10	39	31	2	-3	10	10	37	27	3	4	6	11	21	20	3	-0	4	12	54	65	2	1	2	13	181	188	2
5	1	10	106	100	2	-2	10	10	66	59	2	5	6	11	57	54	2	1	4	12	117	112	2	2	2	13	78	83	2
6	1	10	28	30	3	-1	10	10	48	47	2	-5	7	11	21	8	4	2	4	12	97	95	2	3	2	13	262	269	3
-6	2	10	41	37	3	0	10	10	35	36	2	-4	7	11	136	136	2	3	4	12	121	125	2	4	2	13	10	6	5
-5	2	10	73	19	2	1	10	10	45	46	2	-3	7	11	-6	5	3	4	4	12	44	38	2	5	5	13	106	106	2
-4	2	10	22	74	2	2	10	10	115	110	2	-2	7	11	19	10	6	5	4	12	22	26	2	4	2	13	26	19	3
-3	2	10	98	101	2	3	10	10	25	22	5	-1	7	11	204	203	2	-5	5	12	24	23	3	3	3	13	146	149	2
-2	2	10	123	123	2	-3	11	10	52	53	2	0	7	11	103	105	2	-4	5	12	61	62	2	2	2	13	27	28	2
-1	2	10	95	104	1	-2	11	10	28	25	3	1	7	11	23	24	3	-3	5	12	68	69	2	-2	3	13	69	67	2
0	1	10	380	377	3	-1	11	10	62	67	2	2	7	11	76	80	2	-2	5	12	39	36	2	-1	3	13	81	83	2
1	2	10	20	11	2	0	11	10	32	37	2	3	7	11	18	18	3	-1	0	12	293	296	3	0	3	13	73	74	2
2	2	10	140	145	2	1	11	10	72	66	3	4	7	11	29	27	3	0	5	12	-14	6	3	1	3	13	60	60	2
3	2	10	37	39	2	2	11	10	22	26	3	-4	8	11	9	3	6	1	5	12	112	107	2	2	3	13	196	195	2
4	2	10	152	156	2	-2	12	10	38	40	3	-3	8	11	58	56	2	2	5	12	41	41	2	3	3	13	44	43	2
5	2	10	86	82	2	-1	12	10	7	8	7	-2	8	11	-17	0	3	3	5	12	57	44	2	4	3	13	168	165	2
-6	3	10	36	37	2	0	12	10	72	69	2	-1	8	11	106	103	3	4	5	12	29	31	3	5	3	13	6	13	8
-5	3	10	40	39	2	1	12	10	11	22	6	0	8	11	25	30	3	5	5	12	17	23	4	-5	4	13	117	112	2
-4	3	10	27	27	2	-5	0	11	137	135	2	1	8	11	7	5	6	-5	6	12	9	2	6	-4	4	13	7	10	6
-3	3	10	102	102	2	-3	0	11	161	159	2	2	8	11	47	45	2	-4	6	12	36	36	2	-3	4	13	53	51	2
-2	3	10	181	183	3	-1	0	11	226	239	2	3	8	11	39	43	2	-3	6	12	103	104	2	-2	4	13	91	90	2
-1	3	10	278	278	2	4	0	11	-13	0	2	4	8	11	22	22	4	-2	6	12	76	71	2	-1	4	13	-4	13	6
0	3	10	78	71	1	3	0	11	98	96	2	-4	9	11	120	117	2	-1	6	12	44	46	2	0	4	13	61	57	2
1	3	10	202	206	2	-5	0	11	190	182	2	-3	9	11	14	13	4	0	6	12	203	200	2	1	4	13	104	106	2
2	3	10	48	47	2	-6	1	11	118	117	2	-2	9	11	79	76	2	2	6	12	-11	6	2	2	4	13	60	75	2
3	3	10	176	168	2	-5	1	11	39	37	2	-1	9	11	49	50	2	2	6	12	60	57	2	3	4	13	108	112	2
4	3	10	-9	2	2	-4	1	11	162	161	2	0	9	11	96	100	2	3	6	12	8	8	6	4	4	13	8	12	6
5	3	10	77	73	2	-3	1	11	49	52	2	1	9	11	48	52	2	4	6	12	54	54	2	5	4	13	76	75	2
-6	4	10	28	30	3	-2	1	11	178	186	2	2	9	11	17	20	4	-5	7	12	22	11	4	-5	5	13	44	36	2
-5	4	10	34	27	2	1	1	11	90	88	1	1	9	11	10	11	6	-4	7	12	19	18	4	-4	5	13	70	68	2
-4	4	10	76	73	2	0	1	11	177	169	2	-3	10	11	88	80	2	-3	7	12	-7	6	6	-3	5	13	39	43	2
-3	4	10	123	123	2	1	1	11	20	24	2	-2	10	11	11	12	5	-2	7	12	40	42	2	-2	5	13	79	82	2
-2	4	10	201	195	2	-2	1	11	48	44	2	-1	10	11	57	54	2	-1	7	12	18	15	3	-1	5	13	-4	2	7
-1	4	10	120	123	2	3	1	11	34	35	2	0	10	11	38	37	2	0	7	12	6	14	6	0	5	13	66	67	2
0	4	10	182	191	2	4	1	11	204	205	2	1	10	11	35	39	3	1	7	12	98	94	2	1	5	13	4	7	2
1	4	10	209	193	2	5	1	11	36	33	3	2	10	11	34	32	3	2	7	12	19	19	3	2	5	13	113	116	2
2	4	10	191	189	2	-6	2	11	33	37	3	3	10	11	50	52	2	3	7	12	80	79	2	3	5	13	41	40	2
3	4	10	13	13	2	-5	2	11	129	130	2	-2	11	11	50	48	2	4	7	12	-15	9	4	4	5	13	64	60	2
4	4	10	83	84	2	-4	2	11	91	91	2	-1	11	11	-14	2	4	-4	8	12	34	29	3	5	5	13	-20	3	-3
5	4	10	40	41	2	-3	2	11	196	192	2	0	11	11	11	13	5	-3	8	12	29	26	3	-5	6	13	105	97	2
-6	5	10	51	56	2	-2	2	11	54	55	2	1	11	11	14	13	5	-2	8	12	-12	9	4	-4	6	13	75	74	2
-5	5	10	20	2	3	-1	2	11	120	119	2	2	11	11	25	21	3	-1	8	12	17	23	3	-3	6	13	10	11	5
-4	5	10	47	44	2	0	2	11	172	160	2	-1	12	11	27	29	3	0	8	12	87	84	2	-2	6	13	1	13	3
-3	5	10	25	15	2	1	2	11	163	162	2	0	12	11	22	17	4	-1	8	12	19	14	3	-1	6	13	19	21	3
-2	5	10	258	254	3	2	2	11	23	23	2	1	12	11	-9	8	6	2	8	12	109	102	2	0	6	13	28	34	2
-1	5	10	153	140	2	-6	2	11	116	113	2	-6	0	12	16	8	5	3	8	12	-10	5	5	1	6	13	78	87	2
0	5	10	20	23	2	4	2	11	47	44	2	-4	0	12	197	201	2	4	8	12	51	51	2	2	6	13	-11	18	4
1	5	10	14	11	2	-5	2	11	115	114	2	-2	0	12	150	141	2	-4	9	12	51	43	2	3	6	13	81	79	2
2	5	10	151	148	2	0	3	11	93	85	2	0	0	12	209	214	2	-3	9	12	56	57	2	4	6	13	-15	8	4
3	5	10	18	31	3	-5	3	11	60	61	2	2	0	12	121	117	2	-2	9	12	-7	6	6	-4	7	13	113	104	2
4	5	10	52	48	3	-4	3	11	172	175	2	4	0	12	63	60	2	0	9	12	110	109	2	-3	7	13	50	53	2
5	5	10	35	31	2	-3	3	11	115	116	2	-6	1	12	22	9	4	-1	9	12	-10	8	5	-2	7	13	26	30	3
-6	6	10	45	47	2	-2	3	11	215	216	2	-5	1	12	45	46	2	2	9	12	112	108	2	-1	7	13	19	22	3
-5	6	10	127	122	2	-1	3	11	29	25	2	-4	1	12	-10	3	4	1	9	12	-4	2	8	0	7	13	-15	4	3
-4	6	10	122	122	2	0	3	11	65	63	1	-3	1	12	217	222	2	-3	9	12	93	86	2	1	7	13	41	50	2
-3	6	10	59	57	2	1	3	11	86	83	2	-2	1	12	31	32	2	-3	10	12	16	17	4	2	7	13	103	103	2
-2	6	10	95	95	2	2	3	11	42	44	2	-1	1	12	151	148	2	-2	10	12	70	66	2	3	7	13	-12	13	4
-1	6	10	33	35	2	3	3	11	121	128	2	0																	

Table 1. Observed and calculated structure factors for bk1263

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	0	14	3	16	9	-1	10	14	-14	1	4	-2	9	15	6	5	7	2	9	16	14	1	5	-1	1	18	84	89	2	-1	1	18	84	89	2
-5	1	14	57	57	2	0	10	14	127	121	2	-1	9	15	25	22	3	-1	10	16	19	4	4	0	1	18	29	30	2	0	1	18	29	30	2
-4	1	14	-7	14	6	2	10	14	19	22	4	0	9	15	69	67	2	0	10	16	38	32	3	1	1	18	82	79	2	1	1	18	82	79	2
-3	1	14	169	167	2	2	10	14	60	56	4	1	9	15	16	15	4	1	10	16	24	31	3	2	1	18	71	72	2	2	1	18	71	72	2
-2	1	14	-6	1	5	-1	11	14	109	105	2	2	9	15	114	108	2	2	9	15	33	34	3	3	1	18	29	34	3	3	1	18	29	34	3
-1	1	14	149	152	2	0	11	14	16	7	5	-2	10	15	-16	4	4	-5	0	17	55	50	2	4	1	18	-10	8	6	4	1	18	-10	8	6
0	1	14	159	157	2	1	11	14	74	71	2	-1	10	15	39	40	3	-1	0	17	239	240	3	-4	2	18	111	113	2	-4	2	18	111	113	2
1	1	14	393	398	4	-5	0	15	55	56	2	0	10	15	11	2	5	1	0	17	79	75	2	-3	2	18	93	97	2	-3	2	18	93	97	2
2	1	14	116	117	2	-3	0	15	29	25	2	1	10	15	102	97	2	3	0	17	64	67	2	-2	2	18	173	177	2	-2	2	18	173	177	2
3	1	14	11	5	4	-1	0	15	44	44	2	-4	0	16	124	127	2	-5	1	17	-14	10	4	-1	1	18	113	116	2	-1	1	18	113	116	2
4	1	14	49	45	3	0	0	15	454	464	4	-2	0	16	243	251	3	-4	1	17	-4	4	8	0	2	18	67	69	2	0	2	18	67	69	2
5	1	14	31	33	3	3	0	15	136	138	4	0	0	16	263	266	3	-3	1	17	49	47	2	1	2	18	165	161	2	1	2	18	165	161	2
-5	2	14	2	5	10	-5	0	15	75	78	2	2	0	16	57	59	2	-2	1	17	101	99	2	2	2	18	8	18	6	2	2	18	8	18	6
-4	2	14	109	110	2	-5	1	15	25	31	3	4	0	16	21	22	3	-1	1	17	57	57	2	3	3	18	23	29	3	3	3	18	23	29	3
-3	2	14	26	27	2	-4	1	15	26	24	3	-5	1	16	80	73	3	0	1	17	164	163	2	4	2	18	77	69	2	4	2	18	77	69	2
-2	2	14	208	211	2	-3	1	15	17	17	3	-4	1	16	65	68	2	-4	1	17	100	97	2	-4	3	18	56	52	2	-4	3	18	56	52	2
-1	2	14	40	37	2	-2	1	15	65	65	2	-3	1	16	188	192	2	1	2	17	24	30	3	-3	3	18	82	84	2	-3	3	18	82	84	2
0	2	14	156	161	2	-1	1	15	22	23	2	-2	1	16	80	85	2	3	1	17	-19	2	-3	3	18	19	19	3	-2	3	18	19	19	3	
1	2	14	75	80	2	0	1	15	195	193	2	-1	1	16	222	230	2	-5	2	17	55	55	2	-1	0	18	77	80	2	-1	0	18	77	80	2
2	2	14	75	74	2	1	1	15	256	252	3	0	1	16	40	34	2	-4	2	17	-8	0	7	0	3	18	-12	15	4	0	3	18	-12	15	4
3	2	14	55	53	3	2	1	15	305	311	3	1	1	16	175	172	2	-3	2	17	29	26	3	1	3	18	10	17	5	1	3	18	10	17	5
4	2	14	5	3	7	3	1	15	20	24	3	2	1	16	91	93	2	-4	2	17	50	48	2	2	3	18	36	35	2	2	3	18	36	35	2
5	2	14	18	17	4	4	1	15	63	66	2	3	1	16	-17	11	3	-2	2	17	61	62	2	2	3	18	71	65	2	2	3	18	71	65	2
-5	3	14	87	92	2	5	1	15	19	19	4	4	1	16	-14	2	4	-1	2	17	59	61	2	4	3	18	-20	1	3	4	3	18	-20	1	3
-4	3	14	64	63	2	-5	2	15	44	43	2	-5	2	16	13	22	5	0	2	17	53	54	2	-4	4	18	83	80	2	-4	4	18	83	80	2
-3	3	14	158	155	2	-4	2	15	27	27	3	-4	2	16	115	110	2	1	2	17	112	110	2	-3	4	18	18	20	4	-3	4	18	18	20	4
-2	3	14	-17	9	2	-3	2	15	41	42	2	-3	2	16	35	37	2	2	2	17	-19	14	-3	-2	4	18	21	22	3	-2	4	18	21	22	3
-1	3	14	205	200	2	-2	2	15	33	38	2	-2	2	16	183	189	2	3	2	17	29	33	3	-2	4	18	33	37	2	3	2	17	29	33	2
0	3	14	-9	9	4	-1	2	15	95	93	2	-1	2	16	15	8	3	4	2	17	-15	4	4	0	4	18	51	56	2	0	4	18	51	56	2
1	3	14	49	45	2	0	2	15	202	209	2	0	2	16	213	223	2	-5	3	17	14	0	5	1	4	18	31	28	2	-5	3	17	14	0	5
2	3	14	164	165	2	1	2	15	264	256	3	1	2	16	42	48	2	-4	3	17	76	70	2	2	4	18	77	81	2	-4	3	17	76	70	2
3	3	14	75	80	2	2	2	15	15	4	3	2	2	16	42	45	2	-3	3	17	30	33	3	3	4	18	15	12	4	3	4	18	15	12	4
4	3	14	31	25	3	3	2	15	85	86	2	3	2	16	-9	3	5	-2	3	17	69	69	2	-4	5	18	-4	2	9	-4	5	18	-4	2	9
5	3	14	17	17	4	4	2	15	23	27	3	4	2	16	-9	1	6	-1	3	17	104	111	2	-3	5	18	38	40	2	-3	5	18	38	40	2
-5	4	14	19	16	4	5	2	15	77	75	2	-5	3	16	132	133	2	0	3	17	150	150	2	-2	5	18	10	15	5	-2	5	18	10	15	5
-4	4	14	148	145	2	-5	3	15	24	17	3	-4	3	16	19	20	4	-1	3	17	31	33	2	-2	5	18	25	27	3	-1	3	17	31	33	2
-3	4	14	98	99	2	-4	3	15	37	37	2	-3	3	16	102	97	2	2	3	17	89	83	2	0	5	18	13	24	4	2	3	17	89	83	2
-2	4	14	106	106	2	-3	3	15	29	35	2	-2	3	16	55	56	2	3	3	17	26	33	3	-1	5	18	12	15	4	-1	5	18	12	15	4
-1	4	14	23	24	2	-2	3	15	33	33	2	-1	3	16	267	278	3	-4	3	17	46	48	2	2	5	18	35	36	3	2	5	18	35	36	3
0	4	14	128	134	2	0	3	15	63	56	2	0	3	16	73	64	2	-4	4	17	15	14	4	3	5	18	64	65	2	-4	4	17	15	14	4
1	4	14	34	42	2	1	3	15	258	259	3	1	3	16	43	52	2	-3	4	17	84	84	2	-3	6	18	-16	7	4	-3	6	18	-16	7	4
2	4	14	93	97	2	2	3	15	61	63	2	2	3	16	46	40	2	-2	4	17	37	41	2	-2	6	18	27	36	3	-2	6	18	27	36	3
3	4	14	53	57	2	3	3	15	67	70	2	3	3	16	20	27	3	-1	4	17	157	155	2	-1	6	18	52	52	2	-1	6	18	52	52	2
4	4	14	36	37	3	3	3	15	17	31	4	4	3	16	25	18	3	0	4	17	91	101	2	0	6	18	28	27	3	0	6	18	28	27	3
5	4	14	-7	2	2	4	3	15	117	115	2	-5	4	16	17	13	4	-4	4	17	145	142	2	1	6	18	-19	14	-3	-4	4	17	-19	14	-3
-5	5	14	65	70	2	-5	4	15	59	54	2	-4	4	16	118	118	2	2	4	17	13	13	4	2	6	18	44	44	2	2	6	18	44	44	2
-4	5	14	19	17	4	-4	4	15	35	30	2	-3	4	16	8	12	6	-3	4	17	62	62	2	-3	6	18	16	13	4	-3	6	18	16	13	4
-3	5	14	92	98	2	-3	4	15	79	79	2	-2	4	16	184	177	2	-2	4	17	10	20	6	-3	7	18	76	69	2	-2	7	18	76	69	2
-2	5	14	21	23	3	-2	4	15	26	17	3	-1	4	16	43	30	2	-4	5	17	34	37	3	-2	7	18	20	24	4	-2	7	18	20	24	4
-1	5	14	77	76	2	-1	4	15	165	163	2	0	4	16	79	85	2	-3	5	17	-5	2	7	-1	7	18	16	15	4	-1	7	18	16	15</	

Table 1. Observed and calculated structure factors for bk1263

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
-4	4	19	34	30	3	-1	1	20	50	50	2	0	6	20	63	57	2	1	4	21	96	89	2	1	4	22	10	6	6
-3	4	19	94	92	2	0	1	20	-10	11	5	1	6	20	41	36	2	2	4	21	30	19	3	2	4	22	134	124	2
-2	4	19	31	34	3	1	1	20	99	100	2	2	6	20	97	95	2	-2	5	21	100	94	2	-2	5	22	9	12	6
-1	4	19	-10	11	5	2	1	20	21	23	3	-2	7	20	29	20	3	-1	5	21	16	12	4	-1	5	22	62	63	2
0	4	19	39	32	2	3	1	20	84	84	2	-1	7	20	56	46	2	0	5	21	100	102	2	0	5	22	24	15	3
1	4	19	82	80	2	-4	2	20	46	49	2	0	7	20	-4	8	9	1	5	21	22	19	3	1	5	22	90	84	2
2	4	19	7	9	7	-3	2	20	28	22	3	1	7	20	43	52	3	2	5	21	20	17	4	-1	6	22	-18	4	4
3	4	19	55	51	2	-2	2	20	73	72	2	-1	8	20	26	22	3	-2	6	21	-17	0	4	0	6	22	69	66	2
-3	5	19	-7	6	7	-1	2	20	8	10	6	0	8	20	45	49	3	-1	6	21	91	88	2	-1	0	23	55	53	2
-2	5	19	41	43	2	0	2	20	124	121	2	-3	0	21	140	132	2	0	6	21	-11	9	5	1	0	23	70	67	2
-1	5	19	42	41	2	1	2	20	-13	6	4	-1	0	21	-3	18	9	1	6	21	45	41	2	-2	1	23	41	44	3
0	5	19	106	97	2	2	2	20	88	90	2	1	0	21	59	62	2	-1	7	21	-9	8	6	-1	1	23	32	31	3
1	5	19	-11	7	5	3	2	20	14	18	5	3	0	21	13	24	5	0	7	21	63	66	2	0	1	23	-7	8	7
2	5	19	62	61	2	-4	3	20	8	2	7	-3	1	21	19	5	4	-2	0	22	135	131	2	1	1	23	42	37	3
3	5	19	12	5	6	-3	3	20	-14	12	4	-2	1	21	74	68	2	0	0	22	77	73	2	2	1	23	40	40	3
-3	6	19	84	83	2	-2	3	20	27	26	3	-1	1	21	28	36	3	2	0	22	43	43	2	-2	2	23	-10	8	5
-2	6	19	41	34	2	-1	3	20	81	84	2	0	1	21	22	35	3	-3	1	22	109	103	2	-1	2	23	42	42	2
-1	6	19	123	123	2	0	3	20	16	14	4	1	1	21	22	17	3	-2	1	22	12	5	5	0	2	23	16	15	4
0	6	19	11	20	5	1	3	20	61	63	2	2	1	21	17	18	4	-1	1	22	72	68	2	1	2	23	31	24	3
1	6	19	75	76	2	2	3	20	-10	3	5	3	1	21	-15	11	4	0	1	22	-13	1	4	-2	3	23	45	46	3
2	6	19	-3	9	10	3	3	20	95	90	2	-3	2	21	78	73	2	1	1	22	103	96	2	-1	3	23	-14	5	4
-2	7	19	127	124	2	-3	4	20	12	14	5	-2	2	21	67	68	2	2	1	22	33	31	3	0	3	23	44	45	2
-1	7	19	12	9	5	-2	4	20	-15	0	4	-1	2	21	40	39	2	-3	2	22	36	35	3	1	3	23	19	2	4
0	7	19	93	97	2	-1	4	20	-9	20	5	0	2	21	26	31	3	-2	2	22	62	63	2	-1	4	23	39	36	3
1	7	19	19	14	4	0	4	20	9	18	6	1	2	21	47	45	2	-1	2	22	41	41	2	0	4	23	30	27	3
2	7	19	60	56	2	1	4	20	8	4	6	2	2	21	13	12	5	0	2	22	94	92	2	1	4	23	47	39	2
-2	8	19	23	12	4	2	4	20	91	88	2	3	2	21	-12	8	5	1	2	22	60	51	2	0	5	23	48	48	3
-1	8	19	140	130	2	3	4	20	-16	7	4	-3	3	21	59	56	2	2	2	22	100	96	2	-2	0	24	77	76	2
0	8	19	42	38	3	-3	5	20	28	33	3	-2	3	21	84	84	2	-3	3	22	-14	5	5	0	0	24	119	112	2
1	8	19	60	59	2	-2	5	20	15	21	4	-1	3	21	67	68	2	-2	3	22	68	66	2	-1	1	24	96	90	2
-4	0	20	38	42	3	-1	5	20	-14	12	4	0	3	21	66	62	2	-1	3	22	67	67	2	0	1	24	-11	6	5
-2	0	20	32	33	3	0	5	20	-13	2	4	1	3	21	21	26	3	0	3	22	16	21	4	1	1	24	98	89	2
0	0	20	33	36	2	1	5	20	76	76	2	2	3	21	64	64	2	1	3	22	122	115	2	-1	2	24	-13	0	5
2	0	20	115	112	2	2	5	20	30	26	3	-3	4	21	69	64	2	2	3	22	37	32	3	0	2	24	104	98	2
-4	1	20	7	10	7	-3	6	20	24	20	4	-2	4	21	51	54	2	-2	4	22	21	26	4	-1	3	24	96	90	2
-3	1	20	15	19	4	-2	6	20	-4	14	9	-1	4	21	113	116	2	-1	4	22	-6	15	7	0	3	24	19	20	4
-2	1	20	53	56	2	-1	6	20	12	12	5	0	4	21	3	2	9	0	4	22	72	75	2	0	4	22	19	20	4