ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1997, 16(19), 4056-4070, DOI:10.1021/om970494h

Supplementary Material

Tables of fractional atomic coordinates, bondlenghts and angles, and anisotropic thermal parameters for compounds **7** and **10**.

Table 1a. Fractional atomic coordinates and thermal parameters ($Å^2$) for compound **7**

Atom	x	y	z	U_{eq}/U_{iso}
Cr	2167(3)	4488(4)	3641(1)	40(1)
C(1)	-395(24)	6045(25)	3623(8)	52(5)
O(1)	-1928(16)	7073(19)	3635(6)	83(4)
C(2)	3015(21)	5966(20)	4308(7)	37(3)*
O(2)	3534(14)	6989(16)	4716(5)	63(3)
C(3)	3345(24)	6104(25)	2887(8)	51(5)
O(3)	4022(16)	7224(18)	2432(6)	70(4)
S	4695(5)	1773(6)	3738(2)	45(1)
C(4)	2525(19)	1926(24)	4389(7)	57(5)
C(5)	535(21)	1851(23)	4098(8)	53(5)
C(6)	675(20)	2007(21)	3314(7)	45(4)
C(7)	2813(20)	1976(21)	3050(7)	42(4)
C(8)	3831(20)	2172(23)	2253(7)	49(4)
O(4)	5873(14)	2055(13)	2226(4)	43(2)*
Mn	2068(3)	2321(3)	1317(1)	38(1)
C(9)	471(27)	263(22)	1759(8)	52(5)
O(5)	-418(17)	-992(17)	2005(6)	70(4)
C(10)	-72(23)	4131(22)	1697(8)	42(4)
O(6)	-1223(15)	5285(16)	1858(6)	62(3)
C(11)	3890(37)	4329(24)	966(9)	81(7)
O(7)	4897(20)	5581(19)	787(6)	85(4)
C(12)	4437(28)	525(25)	979(8)	54(5)
O(8)	5730(17)	-460(20)	814(6)	86(4)
C(13)	649(24)	2429(26)	452(8)	63(5)
O(9)	-214(17)	2517(19)	-96(6)	84(4)
H(4)	2719(19)	2067(24)	4966(7)	87(29)*
H(5)	-971(21)	1691(23)	4430(8)	87(29)*
H(6)	-707(20)	2133(21)	2972(7)	87(29)*

* isotropic temperature factor;
$\mathbf{U_{eq}} = 1/3\ \Sigma_i\ \Sigma_j\ U_{ij} a^*_i a^{*j} (\mathbf{a_i}.\mathbf{a_j})$

Table 1b. Fractional atomic coordinates and thermal parameters (Å^2) for compound **10**

Atom	x	y	z	U_{eq}/U_{iso}
Cr	4288(2)	-2584(1)	737(1)	38(1)
C(1)	2660(11)	-3357(10)	424(5)	51(2)
O(1)	1724(8)	-3818(8)	224(4)	72(2)
C(2)	5082(11)	-2310(10)	-385(5)	52(2)
O(2)	5615(9)	-2170(8)	-1092(4)	86(2)
C(3)	2638(11)	-584(10)	418(5)	46(2)
O(3)	1632(8)	689(7)	188(4)	74(2)
S	6102(3)	-2157(2)	1619(1)	44(1)
C(4)	7037(10)	-3742(9)	1180(5)	49(2)
C(5)	6243(10)	-4824(9)	1493(5)	47(2)
C(6)	4719(9)	-4332(8)	2003(4)	36(2)
C(7)	4360(9)	-2867(8)	2125(4)	36(2)
C(8)	3026(9)	-1961(8)	2633(4)	34(2)
O(4)	3467(6)	-901(5)	2761(3)	35(1)
Mn(1)	663(2)	-2285(1)	3106(1)	36(1)
C(9)	778(10)	-3716(10)	2586(5)	48(2)
O(5)	745(8)	-4632(7)	2277(4)	67(2)
C(10)	2117(12)	-3781(10)	4043(6)	53(2)
O(6)	3045(9)	-4680(8)	4569(4)	97(2)
C(11)	-1487(11)	-2456(10)	3599(5)	51(2)
O(7)	-2785(8)	-2626(8)	3886(4)	86(2)
C(12)	-500(11)	-726(10)	2142(6)	52(2)
O(8)	-1234(8)	237(7)	1561(4)	73(2)
Mn(2)	2341(2)	743(1)	3401(1)	38(1)
C(13)	1099(11)	2058(9)	2339(5)	46(2)
C(14)	4203(12)	1408(9)	3094(5)	47(2)
O(9)	5384(9)	1851(8)	2919(4)	76(2)
C(15)	1264(12)	2242(10)	3945(5)	54(2)
O(10)	569(9)	3219(7)	4273(4)	82(2)
C(16)	3503(12)	-621(10)	4438(5)	53(2)
O(11)	4130(9)	-1394(8)	5084(4)	80(2)
O(12)	344(8)	2783(7)	1729(4)	70(2)
Cl	40(3)	-302(2)	3825(1)	52(1)
H(4)	8125(10)	-3851(9)	712(5)	46(12)*
H(5)	6739(10)	-5944(9)	1362(5)	46(12)*
H(6)	3890(9)	-5020(8)	2278(4)	46(12)*

* isotropic temperature factor;
$\mathbf{U_{eq}} = 1/3\ \Sigma_i\ \Sigma_j\ U_{ij} a^*_i a^{*j} (\mathbf{a_i}.\mathbf{a_j})$

Table 2a. Bond lengths (Å) and bond angles (°) for compound **7**.

Cr-C(1)	1.85(2)	Cr-C(2)	1.806(13)
Cr-C(3)	1.83(2)	Cr-S	2.369(5)
Cr-C(4)	2.14(2)	Cr-C(5)	2.23(2)
Cr-C(6)	2.183(14)	Cr-C(7)	2.164(14)
C(1)-O(1)	1.15(2)	C(2)-O(2)	1.162(13)
C(3)-O(3)	1.16(2)	S-C(4)	1.735(12)
S-C(7)	1.748(12)	C(4)-C(5)	1.37(2)
C(5)-C(6)	1.42(2)	C(6)-C(7)	1.37(2)
C(7)-C(8)	1.54(2)	C(8)-O(4)	1.254(13)
C(8)-Mn	2.066(12)	Mn-C(9)	1.89(2)
Mn-C(10)	1.91(2)	Mn-C(11)	1.90(2)
Mn-C(12)	1.97(2)	Mn-C(13)	1.84(2)
C(9)-O(5)	1.11(2)	C(10)-O(6)	1.09(2)
C(11)-O(7)	1.12(2)	C(12)-O(8)	1.07(2)
C(13)-O(9)	1.15(2)		
C(1)-Cr-C(2)	86.4(6)	C(1)-Cr-C(3)	89.5(7)
C(2)-Cr-C(3)	90.1(6)	C(1)-Cr-S	162.8(5)
C(2)-Cr-S	103.6(4)	C(3)-Cr-S	104.2(5)
C(1)-Cr-C(4)	121.9(6)	C(2)-Cr-C(4)	92.5(5)
C(3)-Cr-C(4)	148.6(6)	S-Cr-C(4)	44.9(3)
C(1)-Cr-C(5)	94.2(6)	C(2)-Cr-C(5)	116.4(5)
C(3)-Cr-C(5)	153.4(6)	S-Cr-C(5)	68.9(4)
C(4)-Cr-C(5)	36.6(4)	C(1)-Cr-C(6)	94.3(6)
C(2)-Cr-C(6)	153.8(5)	C(3)-Cr-C(6)	116.1(6)
S-Cr-C(6)	70.4(4)	C(4)-Cr-C(6)	64.9(5)
C(5)-Cr-C(6)	37.4(4)	C(1)-Cr-C(7)	125.0(6)
C(2)-Cr-C(7)	148.4(5)	C(3)-Cr-C(7)	93.6(6)
S-Cr-C(7)	45.1(3)	C(4)-Cr-C(7)	68.7(5)
C(5)-Cr-C(7)	62.9(5)	C(6)-Cr-C(7)	36.8(4)
Cr-C(1)-O(1)	176(2)	Cr-C(2)-O(2)	176.9(13)
Cr-C(3)-O(3)	176(2)	Cr-S-C(4)	60.5(6)
Cr-S-C(7)	61.2(5)	C(4)-S-C(7)	88.5(6)
Cr-C(4)-S	74.6(5)	Cr-C(4)-C(5)	75.2(10)
S-C(4)-C(5)	113.2(10)	Cr-C(5)-C(4)	68.2(9)
Cr-C(5)-C(6)	69.6(8)	C(4)-C(5)-C(6)	112.5(12)
Cr-C(6)-C(5)	73.0(8)	Cr-C(6)-C(7)	70.9(8)
C(5)-C(6)-C(7)	110.6(12)	Cr-C(7)-S	73.7(5)
Cr-C(7)-C(6)	72.3(8)	S-C(7)-C(6)	114.3(10)
Cr-C(7)-C(8)	120.2(10)	S-C(7)-C(8)	114.6(9)
C(6)-C(7)-C(8)	131.1(11)	C(7)-C(8)-O(4)	112.9(10)
C(7)-C(8)-Mn	124.2(8)	O(4)-C(8)-Mn	122.6(9)
C(8)-Mn-C(9)	89.8(6)	C(8)-Mn-C(10)	92.1(6)
C(9)-Mn-C(10)	90.7(7)	C(8)-Mn-C(11)	83.6(7)
C(9)-Mn-C(11)	173.3(7)	C(10)-Mn-C(11)	90.7(7)
C(8)-Mn-C(12)	83.7(6)	C(9)-Mn-C(12)	91.2(7)
C(10)-Mn-C(12)	175.4(6)	C(11)-Mn-C(12)	87.0(8)
C(8)-Mn-C(13)	176.6(6)	C(9)-Mn-C(13)	91.9(7)
C(10)-Mn-C(13)	90.8(6)	C(11)-Mn-C(13)	94.6(7)
C(12)-Mn-C(13)	93.4(6)	Mn-C(9)-O(5)	177(2)
Mn-C(10)-O(6)	173(2)	Mn-C(11)-O(7)	176(2)
Mn-C(12)-O(8)	178(2)	Mn-C(13)-O(9)	179(2)

Table 2b. Bond lengths (Å) and bond angles (°) for compound **10**.

Cr-C(1)	1.899(9)	Cr-C(2)	1.819(8)
Cr-C(3)	1.842(8)	Cr-S	2.354(2)
Cr-C(4)	2.154(7)	Cr-C(5)	2.223(8)
Cr-C(6)	2.188(7)	Cr-C(7)	2.168(6)
C(1)-O(1)	1.118(9)	C(2)-O(2)	1.155(8)
C(3)-O(3)	1.163(9)	S-C(4)	1.750(7)
S-C(7)	1.790(7)	C(4)-C(5)	1.365(10)
C(5)-C(6)	1.399(9)	C(6)-C(7)	1.403(8)
C(7)-C(8)	1.450(8)	C(8)-O(4)	1.275(7)
C(8)-Mn(1)	2.058(7)	O(4)-Mn(2)	2.020(4)
Mn(1)-C(9)	1.784(8)	Mn(1)-C(10)	1.884(9)
Mn(1)-C(11)	1.856(8)	Mn(1)-C(12)	1.850(9)
Mn(1)-Cl	2.391(2)	C(9)-O(5)	1.145(8)
C(10)-O(6)	1.116(9)	C(11)-O(7)	1.138(8)
C(12)-O(8)	1.132(9)	Mn(2)-C(13)	1.914(8)
Mn(2)-C(14)	1.800(8)	Mn(2)-C(15)	1.802(8)
Mn(2)-C(16)	1.871(9)	Mn(2)-Cl	2.360(2)
C(13)-O(12)	1.108(8)	C(14)-O(9)	1.152(9)
C(15)-O(10)	1.146(8)	C(16)-O(11)	1.123(9)
C(1)-Cr-C(2)	87.3(3)	C(1)-Cr-C(3)	90.9(3)
C(2)-Cr-C(3)	88.6(4)	C(1)-Cr-S	159.3(2)
C(2)-Cr-S	111.7(3)	C(3)-Cr-S	97.3(2)
C(1)-Cr-C(4)	131.0(3)	C(2)-Cr-C(4)	89.5(3)
C(3)-Cr-C(4)	137.9(3)	S-Cr-C(4)	45.4(2)
C(1)-Cr-C(5)	98.6(3)	C(2)-Cr-C(5)	105.8(3)
C(3)-Cr-C(5)	162.9(3)	S-Cr-C(5)	69.2(2)
C(4)-Cr-C(5)	36.3(3)	C(1)-Cr-C(6)	90.0(3)
C(2)-Cr-C(6)	141.7(3)	C(3)-Cr-C(6)	129.7(3)
S-Cr-C(6)	70.1(2)	C(4)-Cr-C(6)	64.1(3)
C(5)-Cr-C(6)	37.0(2)	C(1)-Cr-C(7)	113.7(3)
C(2)-Cr-C(7)	157.5(3)	C(3)-Cr-C(7)	98.4(3)
S-Cr-C(7)	46.4(2)	C(4)-Cr-C(7)	70.9(3)
C(5)-Cr-C(7)	64.8(3)	C(6)-Cr-C(7)	37.6(2)
Cr-C(1)-O(1)	178.5(7)	Cr-C(2)-O(2)	178.4(8)
Cr-C(3)-O(3)	177.4(7)	Cr-S-C(4)	61.3(2)
Cr-S-C(7)	61.3(2)	C(4)-S-C(7)	90.2(3)
Cr-C(4)-S	73.3(3)	Cr-C(4)-C(5)	74.6(5)
S-C(4)-C(5)	112.7(6)	Cr-C(5)-C(4)	69.1(5)
Cr-C(5)-C(6)	70.1(4)	C(4)-C(5)-C(6)	113.0(7)
Cr-C(6)-C(5)	72.9(4)	Cr-C(6)-C(7)	70.5(4)
C(5)-C(6)-C(7)	114.2(7)	Cr-C(7)-S	72.3(2)
Cr-C(7)-C(6)	72.0(4)	S-C(7)-C(6)	109.2(5)
Cr-C(7)-C(8)	127.2(5)	S-C(7)-C(8)	117.3(5)
C(6)-C(7)-C(8)	133.0(7)	C(7)-C(8)-O(4)	112.3(6)
C(7)-C(8)-Mn(1)	125.5(5)	O(4)-C(8)-Mn(1)	122.2(5)
C(8)-O(4)-Mn(2)	134.7(4)	C(8)-Mn(1)-C(9)	98.4(3)
C(8)-Mn(1)-C(10)	83.9(3)	C(9)-Mn(1)-C(10)	92.7(4)
C(8)-Mn(1)-C(11)	174.5(3)	C(9)-Mn(1)-C(11)	87.0(3)
C(10)-Mn(1)-C(11)	95.2(4)	C(8)-Mn(1)-C(12)	88.4(3)
C(9)-Mn(1)-C(12)	90.1(4)	C(10)-Mn(1)-C(12)	172.1(4)
C(11)-Mn(1)-C(12)	92.3(4)	C(8)-Mn(1)-Cl	89.6(2)
C(9)-Mn(1)-Cl	171.5(2)	C(10)-Mn(1)-Cl	91.0(3)
C(11)-Mn(1)-Cl	85.0(3)	C(12)-Mn(1)-Cl	87.3(3)

Mn(1)-C(9)-O(5)	175.5(7)	Mn(1)-C(10)-O(6)	176.6(9)
Mn(1)-C(11)-O(7)	176.4(8)	Mn(1)-C(12)-O(8)	178.8(8)
O(4)-Mn(2)-C(13)	86.8(3)	O(4)-Mn(2)-C(14)	90.3(3)
C(13)-Mn(2)-C(14)	91.6(3)	O(4)-Mn(2)-C(15)	177.8(3)
C(13)-Mn(2)-C(15)	91.3(3)	C(14)-Mn(2)-C(15)	90.7(4)
O(4)-Mn(2)-C(16)	91.5(3)	C(13)-Mn(2)-C(16)	176.9(3)
C(14)-Mn(2)-C(16)	90.9(4)	C(15)-Mn(2)-C(16)	90.4(4)
O(4)-Mn(2)-Cl	86.9(1)	C(13)-Mn(2)-Cl	90.8(2)
C(14)-Mn(2)-Cl	176.2(3)	C(15)-Mn(2)-Cl	92.2(3)
C(16)-Mn(2)-Cl	86.6(3)	Mn(2)-C(13)-O(12)	177.3(8)
Mn(2)-C(14)-O(9)	178.0(7)	Mn(2)-C(15)-O(10)	178.5(8)
Mn(2)-C(16)-O(11)	176.3(8)	Mn(1)-Cl-Mn(2)	106.4(1)

Table 3a. Anisotropic thermal parameters ($Å^2$) for compound **7**.

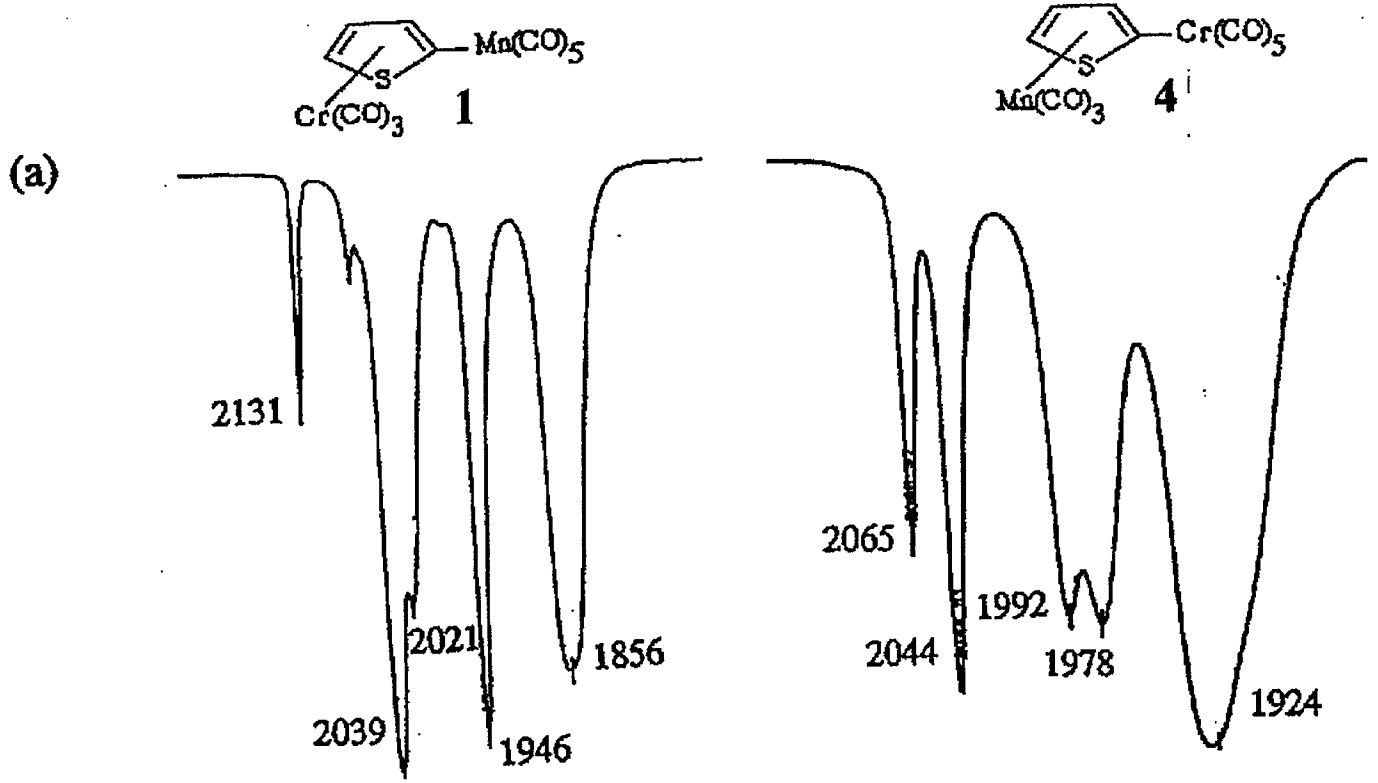
Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cr	11(1)	77(2)	34(1)	-15(1)	6(1)	-5(1)
C(1)	38(10)	74(14)	40(9)	-3(9)	5(8)	11(9)
O(1)	29(6)	132(13)	85(9)	-27(8)	12(6)	20(7)
O(2)	27(6)	109(10)	63(7)	-52(7)	10(5)	-6(6)
C(3)	42(10)	80(14)	32(9)	-6(9)	-11(8)	9(9)
O(3)	41(7)	102(11)	63(8)	-1(7)	8(6)	-6(7)
S	16(2)	85(3)	36(2)	-8(2)	1(2)	-4(2)
C(4)	12(7)	127(16)	38(9)	-36(9)	19(6)	-25(9)
C(5)	18(8)	99(15)	44(9)	-9(9)	12(7)	-26(9)
C(6)	18(7)	83(13)	35(8)	-20(8)	14(6)	-5(8)
C(7)	20(7)	71(12)	38(8)	-15(8)	-7(6)	-1(8)
C(8)	17(7)	103(14)	31(8)	-24(8)	2(6)	-3(8)
Mn	19(1)	60(2)	38(1)	-14(1)	4(1)	-6(1)
C(9)	69(13)	32(11)	50(11)	3(8)	-10(9)	11(9)
O(5)	41(7)	69(10)	98(10)	-3(7)	7(6)	-15(7)
C(10)	36(9)	48(12)	48(10)	-14(8)	-10(8)	-10(8)
O(6)	24(6)	69(9)	96(9)	-37(7)	4(6)	9(6)
C(11)	167(23)	32(12)	42(11)	-4(9)	-22(13)	8(13)
O(7)	85(10)	98(12)	73(9)	-1(8)	17(7)	-42(9)
C(12)	65(12)	63(14)	38(10)	-11(9)	-10(9)	-13(10)
O(8)	39(7)	138(14)	83(9)	-53(9)	26(6)	21(8)
C(13)	34(9)	101(16)	52(11)	-24(11)	11(8)	9(10)
O(9)	52(8)	148(13)	59(8)	-23(8)	-17(6)	-8(8)

Table 3b. Anisotropic thermal parameters (Å^2) for compound **10**.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cr	37(1)	45(1)	34(1)	-18(1)	1(1)	-12(1)
C(1)	47(5)	60(6)	39(5)	-15(4)	1(4)	-11(4)
O(1)	61(4)	91(5)	87(5)	-40(4)	-14(4)	-37(4)
C(2)	49(5)	68(6)	45(5)	-24(5)	0(4)	-19(5)
O(2)	84(5)	129(6)	39(4)	-28(4)	11(3)	-32(5)
C(3)	48(5)	57(5)	39(5)	-21(4)	0(4)	-19(4)
O(3)	68(5)	52(4)	82(5)	-15(4)	-2(4)	-3(3)
S	37(1)	59(1)	47(1)	-25(1)	2(1)	-22(1)
C(4)	31(4)	66(6)	49(5)	-31(4)	-1(4)	-5(4)
C(5)	45(5)	50(5)	49(5)	-27(4)	-2(4)	-9(4)
C(6)	38(4)	33(4)	36(4)	-13(3)	-4(3)	-10(3)
C(7)	44(4)	39(4)	28(4)	-17(3)	4(3)	-12(4)
C(8)	39(4)	38(4)	26(4)	-12(3)	-6(3)	-12(3)
O(4)	38(3)	38(3)	32(3)	-16(2)	0(2)	-14(2)
Mn(1)	37(1)	42(1)	33(1)	-14(1)	3(1)	-18(1)
C(9)	39(5)	57(5)	48(5)	-19(4)	7(4)	-17(4)
O(5)	67(4)	72(4)	92(5)	-45(4)	9(4)	-43(4)
C(10)	67(6)	47(5)	51(6)	-9(4)	-1(5)	-29(5)
O(6)	90(6)	90(6)	81(6)	21(4)	-30(4)	-26(5)
C(11)	49(5)	61(6)	44(5)	-18(4)	-1(4)	-19(5)
O(7)	60(4)	121(6)	82(5)	-15(4)	16(4)	-54(4)
C(12)	53(6)	59(6)	55(6)	-19(5)	-3(5)	-29(5)
O(8)	73(5)	80(5)	59(4)	1(4)	-24(4)	-28(4)
Mn(2)	50(1)	38(1)	33(1)	-17(1)	1(1)	-17(1)
C(13)	53(5)	37(5)	52(5)	-19(4)	-4(4)	-13(4)
C(14)	70(6)	44(5)	32(4)	-12(4)	-8(4)	-23(4)
O(9)	90(5)	95(5)	64(4)	-21(4)	1(4)	-58(4)
C(15)	67(6)	56(6)	42(5)	-16(4)	7(4)	-28(5)
O(10)	134(6)	59(4)	63(4)	-40(4)	32(4)	-35(4)
C(16)	78(7)	56(6)	38(5)	-20(4)	6(5)	-34(5)
O(11)	91(5)	89(5)	51(4)	-14(4)	-17(4)	-20(4)
O(12)	85(5)	58(4)	62(4)	-16(3)	-29(4)	-11(4)
Cl	53(1)	65(1)	53(1)	-37(1)	19(1)	-27(1)

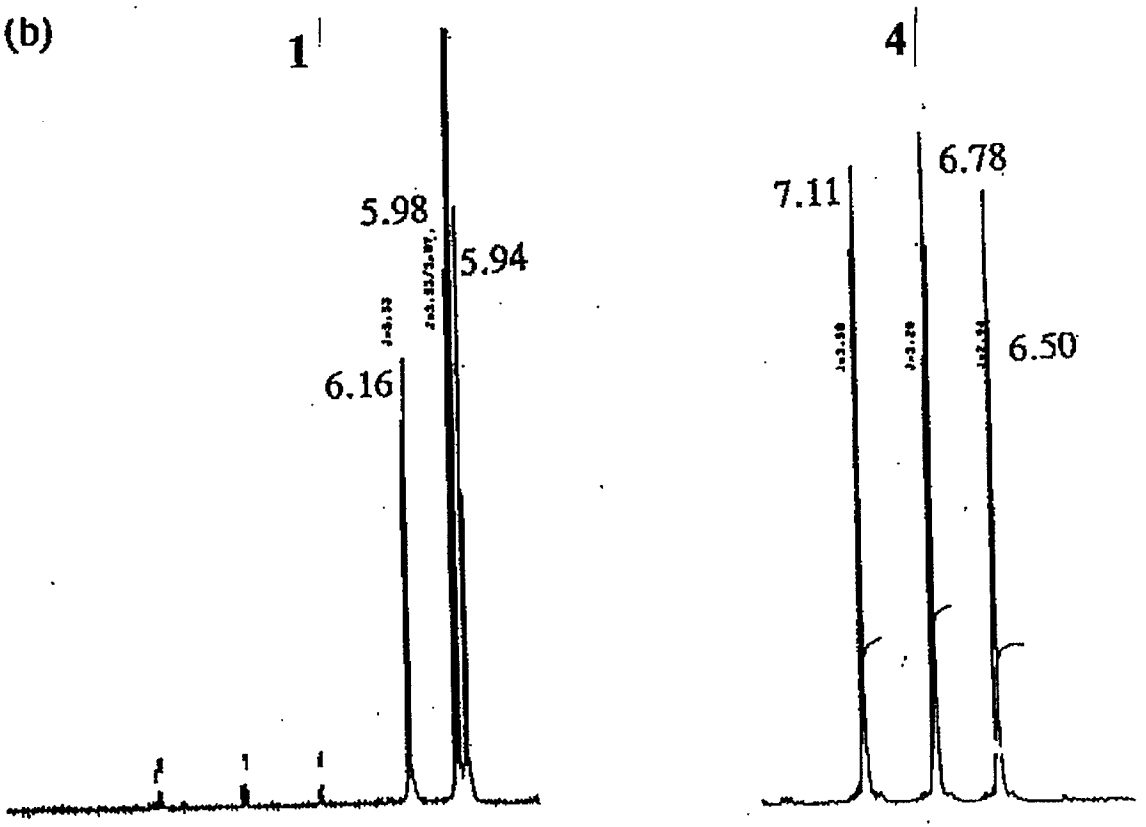
SPECTRAL DATA OF 1 AND 4.

INFRARED SPECTRA



SUPPLEMENTARY MATERIAL

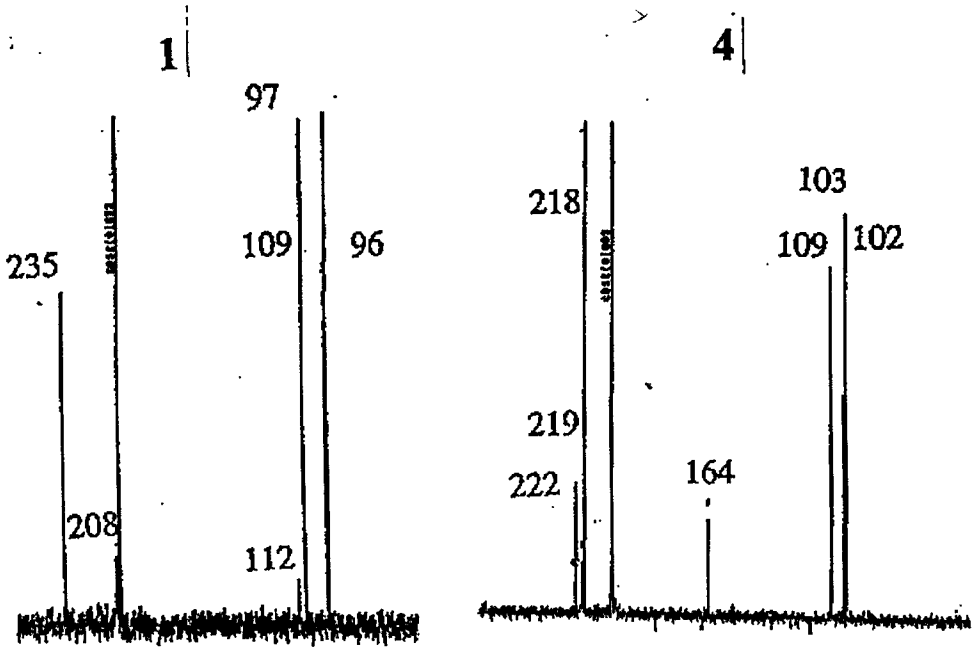
^{1}H NMR SPECTRA



SUPPLEMENTARY MATERIAL

^{13}C NMR DATA

(c)



SUPPLEMENTARY MATERIAL

Fig. 4a

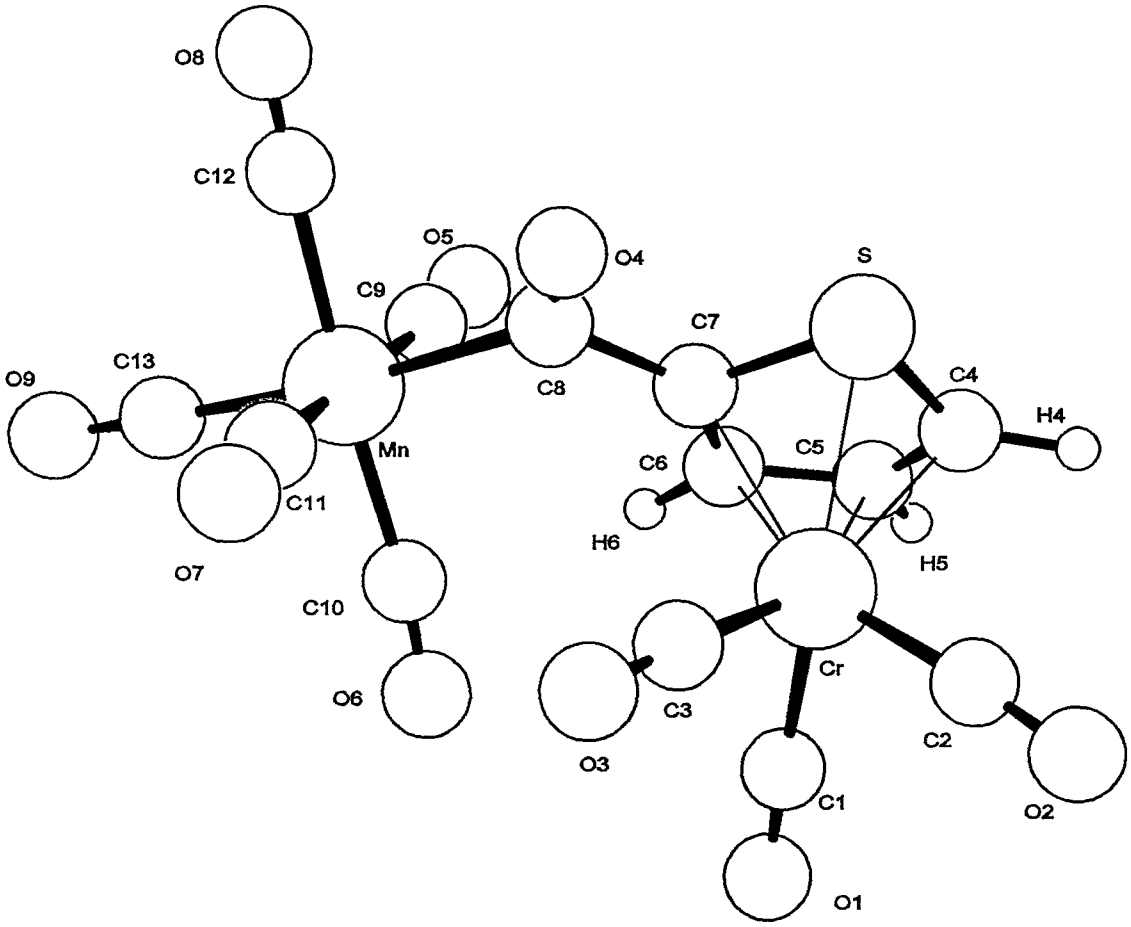


Figure 4a: Compound **7**

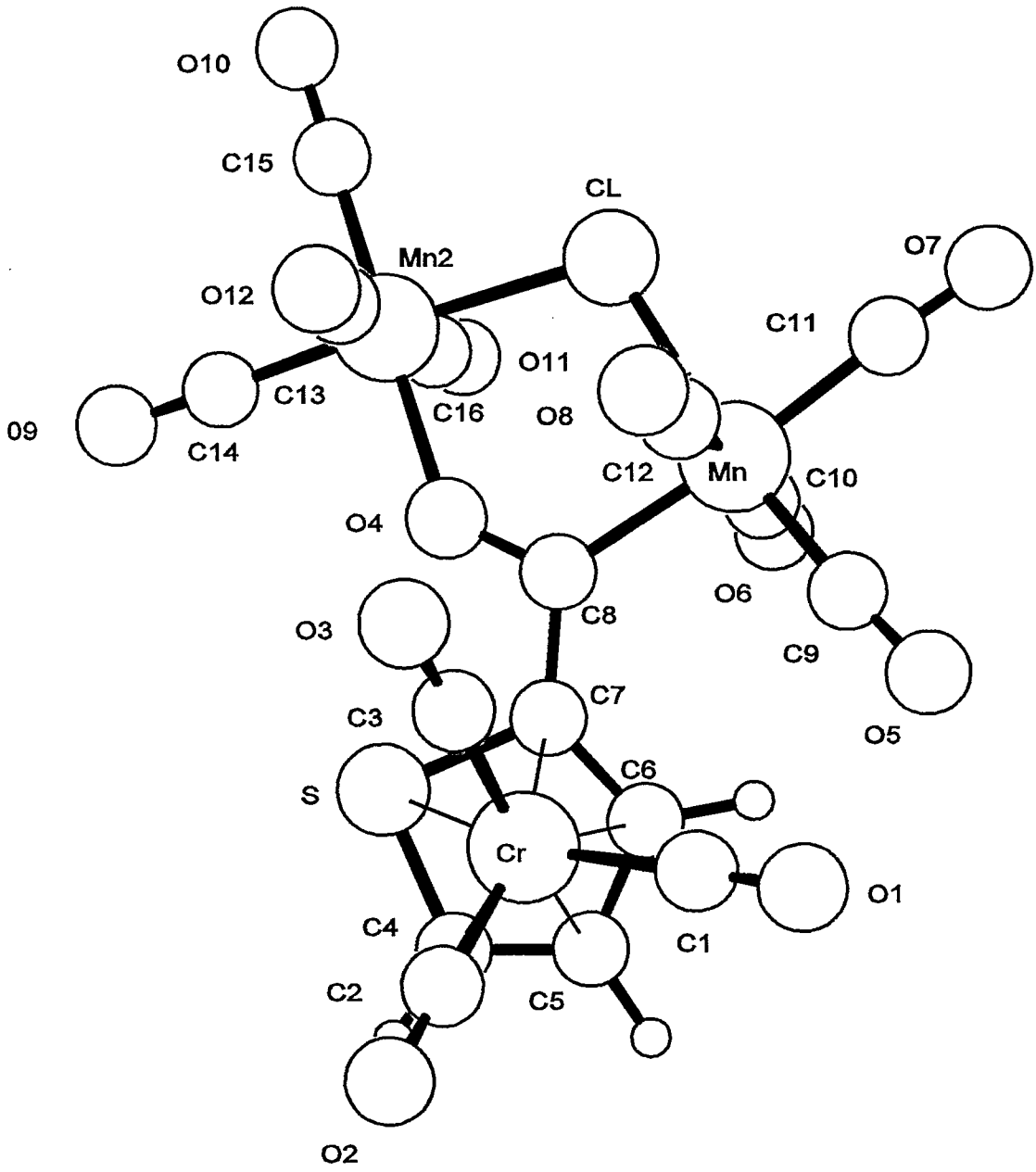

O10
C15
CL
Mn2
O7
O12
C11
O11
C13
C16
O8
09
C14
C12
Mn
C10
O4
O6
C8
O3
C9
C7
C3
O5
C6
S
Cr
O1
C4
C1
C2
C5
O2

Figure 4(b). **10**