Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry

Inorg. Chem., 1997, 36(9), 1829-1837, DOI:10.1021/ic970140i

TABLE S16 HYDROGEN ATOMIC PARAMETERS

ATOM	X	Y	Z	U
H3A	0.3998(7)	0.5409(6)	0.5503(5)	0.032(7)
H5A	0.1910(7)	0.4849(6)	0.4503(5)	0.032(7)
H7A	0.1012(6)	0.5889(6)	0.3778(4)	0.032(7)
H8A	0.0351(6)	0.6636(6)	0.2809(4)	0.032(7)
H8B	0.0096(6)	0.7487(6)	0.3196(4)	0.032(7)
H10A	0.0886(7)	0.7472(6)	0.1293(4)	0.032(7)
H10B	0.0422(7)	0.6804(6)	0.1653(4)	0.032(7)
H11A	0.1196(7)	0.5512(6)	0.1688(5)	0.032(7)
H13A	0.1847(7)	0.4071(6)	0.1777(5)	0.032(7)
H15A	0.4528(8)	0.3231(7)	0.1725(5)	0.032(7)
H20A	0.2169(7)	0.9809(6)	-0.0507(5)	0.032(7)
H22A	0.4491(6)	0.9190(6)	0.0498(5)	0.032(7)
H24A	0.4681(6)	0.8220(6)	0.1414(4)	0.032(7)
H25A	0.4715(6)	0.6577(6)	0.2229(4)	0.032(7)
H25B	0.4973(6)	0.7454(6)	0.2345(4)	0.032(7)
H27A	0.4160(6)	0.8468(6)	0.3003(5)	0.032(7)
H27B	0.4010(6)	0.8114(6)	0.3722(5)	0.032(7)
H28A	0.3060(6)	0.9698(6)	0.3227(4)	0.032(7)
H30A	0.1970(7)	1.0987(6)	0.3137(4)	0.032(7)
H32A	-0.0663(7)	1.1011(6)	0.3415(4)	0.032(7)
H37A	-0.4505(8)	1.4206(7)	-0.0462(5)	0.032(7)
H39A	-0.5268(7)	1.2272(7)	0.0632(5)	0.032(7)
H41A	-0.4252(6)	1.1365(6)	0.1333(4)	0.032(7)
H42A	-0.3463(7)	1.0637(6)	0.2262(4)	0.032(7)
H42B	-0.2608(7)	1.0324(6)	0.1827(4)	0.032(7)
H44A	-0.2445(7)	1.0947(6)	0.3726(4)	0.032(7)
H44B	-0.3158(7)	1.0524(6)	0.3393(4)	0.032(7)
H45A	-0.4491(7)	1.1285(6)	0.3488(5)	0.032(7)
H47A	-0.6032(8)	1.1925(8)	0.3501(5)	0.032(7)
H49A	-0.6881(7)	1.4478(7)	0.3483(5)	0.032(7)
H54A	0.0080(7)	1.2042(6)	0.5399(5)	0.032(7)
H56A	-0.0472(6)	1.4288(6)	0.4376(5)	0.032(7)
H58A	-0.1569(6)	1.4532(6)	0.3533(5)	0.032(7)
H59A	-0.3345(7)	1.4616(6)	0.2763(4)	0.032(7)
H59B	-0.2425(7)	1.4878(6)	0.2655(4)	0.032(7)
H61A	-0.1282(7)	1.4054(6)	0.2056(5)	0.032(7)
H61B	-0.1611(7)	1.4029(6)	0.1319(5)	0.032(7)
H62A	-0.0050(7)	1.3012(6)	0.1678(5)	0.032(7)
H64A	0.1264(7)	1.1896(7)	0.1677(5)	0.032(7)
H66A	0.1138(7)	0.9425(7)	0.1587(5)	0.032(7)
H70A	1.1984(9)	0.3461(8)	0.0530(6)	0.032(7)
H71A	1.074(1)	0.4545(8)	0.0698(6)	0.032(7)
H72A	0.932(1)	0.4366(8)	0.0372(6)	0.032(7)
H73A	0.9135(8)	0.3072(8)	-0.0055(6)	0.032(7)
H74A	1.0385(8)	0.1998(7)	-0.0231(6)	0.032(7)
H75A	1.2619(9)	0.2077(8)	0.0171(6)	0.032(7)
H75B	1.2149(9)	0.1794(8)	-0.0450(6)	0.032(7)
H75C	1.2017(9)	0.1407(8)	0.0261(6)	0.032(7)
H77A	0.292(1)	0.231(1)	0.5008(8)	0.032(7)
H78A	0.174(1)	0.174(1)	0.4626(7)	0.032(7)
H79A	0.179(1)	0.029(1)	0.4718(6)	0.032(7)
H80A	0.429(1)	-0.006(1)	0.5475(6)	0.032(7)
H81A	0.313(1)	-0.067(1)	0.5036(7)	0.032(7)
H82A	0.492(1)	0.110(1)	0.5689(9)	0.032(7)
H82B	0.422(1)	0.191(1)	0.5887(9)	0.032(7)
H82C	0.465(1)	0.185(1)	0.5173(9)	0.032(7)
H84A	0.320(2)	0.224(2)	0.866(1)	0.032(7)
H85A	0.369(2)	0.125(2)	0.791(1)	0.032(7)

TABLE S16 HYDROGEN ATOMIC PARAMETERS, CONT.

ATOM	X	Y	Z	U
H86A	0.292(2)	0.139(2)	0.678(2)	0.032(7)
H87A	0.201(2)	0.245(2)	0.658(2)	0.032(7)
H88A	0.154(2)	0.353(2)	0.734(1)	0.032(7)
H89A	0.234(1)	0.3559(9)	0.8964(8)	0.032(7)
H89B	0.140(1)	0.3781(9)	0.8637(8)	0.032(7)
H89C	0.216(1)	0.4213(9)	0.8365(8)	0.032(7)

TABLE S17 BOND LENGTHS(Å)

Mn1 -O1	1.871(6)	N1 -C8	1.49(1)
Mn1 -O2	1.879(6)	N2 -C10	1.48(1)
Mn1 -O5	1.889(7)	N2 -C11	1.31(2)
Mn1 -O6	1.870(7)	N3 -C24	1.32(1)
Mn1 -N1	1.948(9)	N3 -C25	1.47(1)
Mn1 -N4	1.940(9)	N4 -C27	1.49(1)
Mn2 -O2	2.282(6)	N4 -C28	1.29(1)
Mn2 -O3	1.932(8)	C1 -C2	1.42(1)
Mn2 -O4	1.920(7)	C1 -C6	1.38(2)
Mn2 -O5	2.196(6)	C2 -C3	1.38(2)
Mn2 -N2	1.981(9)	C3 -C4	1.38(2)
Mn2 -N3	1.990(9)	C4 -C5	1.38(1)
Cl1 -C2	1.73(1)	C5 -C6	1.41(2)
Cl2 -C4	1.74(1)	C6 -C7	1.45(1)
Cl3 -C14	1.77(1)	C8 -C9	1.55(1)
Cl4 -C16	1.73(1)	C9 -C10	1.54(1)
Cl5 -C19	1.72(1)	C11 -C12	1.45(2)
Cl6 -C21	1.75(1)	C12 -C13	1.40(2)
Cl7 -C31	1.73(1)	C12 -C17	1.39(1)
Cl8 -C33	1.75(1)	C13 -C14	1.38(2)
O1 -C1	1.32(1)	C14 -C15	1.37(2)
O2 -C9	1.44(1)	C15 -C16	1.37(2)
O3 -C17	1.32(1)	C16 -C17	1.42(2)
O4 -C18	1.31(1)	C18 -C19	1.44(1)
O5 -C26	1.45(1)	C18 -C23	1.40(1)
O6 -C34	1.33(1)	C19 -C20	1.39(2)
N1 -C7	1.30(1)	C20 -C21	1.37(1)
C21 -C22	1.37(1)	Cl18-O20	1.43(1)
C22 -C23	1.41(1)	O7 -C35	1.32(1)
C23 -C24	1.45(1)	O8 -C43	1.43(1)
C25 -C26	1.54(1)	O9 -C51	1.33(1)
C26 -C27	1.53(2)	O10 -C52	1.29(1)
C28 -C29	1.44(1)	O11 -C60	1.43(1)
C29 -C30	1.44(2)	O12 -C68	1.31(1)

TABLE S17 BOND LENGTHS(Å), CONT.

C29 -C34	1.38(1)	N5 -C41	1.30(1)
C30 -C31	1.39(1)	N5 -C42	1.48(1)
C31 -C32	1.38(2)	N6 -C44	1.48(1)
C32 -C33	1.40(2)	N6 -C45	1.28(1)
C33 -C34	1.39(1)	N7 -C58	1.29(1)
Cl9 -C36	1.74(1)	N7 -C59	1.49(1)
Cl10-C38	1.72(1)	N8 -C61	1.47(1)
Cl11-C48	1.73(1)	N8 -C62	1.27(1)
Cl12-C50	1.74(1)	C35 -C36	1.43(2)
Cl13-C53	1.75(1)	C35 -C40	1.40(2)
Cl14-C55	1.74(1)	C36 -C37	1.36(2)
Cl15-C65	1.73(1)	C37 -C38	1.41(2)
Cl16-C67	1.74(1)	C38 -C39	1.42(2)
Cl17-O13	1.43(1)	C39 -C40	1.41(1)
Cl17-O14	1.41(1)	C40 -C41	1.46(2)
Cl17-O15	1.44(1)	C42 -C43	1.57(1)
Cl17-O16	1.41(1)	C43 -C44	1.54(1)
Cl18-O17	1.43(1)	C45 -C46	1.45(2)
Cl18-O18	1.43(1)	C46 -C47	1.39(2)
Cl18-O19	1.42(1)	C46 -C51	1.42(2)
C47 -C48	1.37(2)	C69 -C70	1.40(2)
C48 -C49	1.40(2)	C69 -C74	1.40(2)
C49 -C50	1.36(2)	C69 -C75	1.49(2)
C50 -C51	1.40(2)	C70 -C71	1.38(2)
C52 -C53	1.41(1)	C71 -C72	1.39(2)
C52 -C57	1.42(2)	C72 -C73	1.38(2)
C53 -C54	1.37(2)	C73 -C74	1.38(2)
C54 -C55	1.37(2)	C76 -C77	1.41(2)
C55 -C56	1.38(1)	C76 -C80	1.35(3)
C56 -C57	1.44(1)	C76 -C82	1.47(3)
C57 -C58	1.43(1)	C77 -C78	1.39(3)
C59 -C60	1.52(1)	C78 -C79	1.38(3)
C60 -C61	1.54(1)	C79 -C81	1.42(3)
C62 -C63	1.47(2)	C80 -C81	1.42(3)

TABLE S17 BOND LENGTHS(Å), CONT.

C63 -C64	1.40(1)	C83 -C84	1.37(4)
C63 -C68	1.39(2)	C83 -C88	1.32(4)
C64 -C65	1.39(2)	C83 -C89	1.47(3)
C65 -C66	1.36(2)	C84 -C85	1.31(4)
C66 -C67	1.36(2)	C85 -C86	1.61(4)
C67 -C68	1.45(2)	C87 -C88	1.38(5)

TABLE S18 BOND ANGLES(DEG.)

Mn1 -O1 -C1	125.5(6)	Cl5 -C19 -C20	120.7(8)
Mn1 -O2 -Mn2	102.4(3)	Cl6 -C21 -C20	119.1(8)
Mn1 -O2 -C9	116.0(5)	Cl6 -C21 -C22	119.8(8)
Mn1 -O5 -Mn2	105.3(3)	Cl7 -C31 -C30	118.7(9)
Mn1 -O5 -C26	115.9(6)	Cl7 -C31 -C32	120.5(8)
Mn1 -O6 -C34	125.6(6)	Cl8 -C33 -C32	117.5(7)
Mn1 -N1 -C7	127.7(7)	Cl8 -C33 -C34	120.2(9)
Mn1 -N1 -C8	110.9(7)	O1 -Mn1 -O2	170.5(3)
Mn1 -N4 -C27	111.3(7)	O1 -Mn1 -O5	91.5(3)
Mn1 -N4 -C28	128.0(7)	O1 -Mn1 -O6	96.1(3)
Mn2 -O2 -C9	113.1(5)	O1 -Mn1 -N1	89.7(3)
Mn2 -O3 -C17	130.3(6)	O1 -Mn1 -N4	89.2(3)
Mn2 -O4 -C18	132.0(6)	O1 -C1 -C2	118(1)
Mn2 -O5 -C26	114.1(5)	O1 -C1 -C6	124.4(9)
Mn2 -N2 -C10	112.0(7)	O2 -Mn1 -O5	83.9(3)
Mn2 -N2 -C11	129.5(7)	O2 -Mn1 -O6	89.7(3)
Mn2 -N3 -C24	128.2(7)	O2 -Mn1 -N1	82.8(3)
Mn2 -N3 -C25	112.1(7)	O2 -Mn1 -N4	98.3(3)
Cl1 -C2 -C1	118.7(9)	O2 -Mn2 -O3	148.1(3)
Cl1 -C2 -C3	120.1(8)	O2 -Mn2 -O4	84.6(3)
Cl2 -C4 -C3	118.9(8)	O2 -Mn2 -O5	68.4(2)
Cl2 -C4 -C5	119.6(9)	O2 -Mn2 -N2	75.2(3)
Cl3 -C14 -C13	119.5(9)	O2 -Mn2 -N3	111.5(3)
Cl3 -C14 -C15	118(1)	O2 -C9 -C8	110.9(7)
Cl4 -C16 -C15	120.3(9)	O2 -C9 -C10	106.1(7)
Cl4 -C16 -C17	118.4(9)	O3 -Mn2 -O4	123.2(3)
Cl5 -C19 -C18	118.3(8)	O3 -Mn2 -O5	92.0(3)

TABLE S18 BOND ANGLES(DEG.), CONT.

O3 -Mn2 -N2	87.9(3)	N3 -C25 -C26	107.1(8)
O3 -Mn2 -N3	86.7(3)	N4 -C27 -C26	109.4(8)
O3 -C17 -C12	124(1)	N4 -C28 -C29	122(1)
O3 -C17 -C16	118.7(9)	C1 -C2 -C3	121(1)
O4 -Mn2 -O5	141.1(3)	C1 -C6 -C5	121.5(9)
O4 -Mn2 -N2	91.2(3)	C1 -C6 -C7	121(1)
O4 -Mn2 -N3	88.3(3)	C2 -C1 -C6	118(1)
O4 -C18 -C19	118.6(9)	C2 -C3 -C4	120(1)
O4 -C18 -C23	124.7(9)	C3 -C4 -C5	121(1)
O5 -Mn1 -O6	169.5(3)	C4 -C5 -C6	119(1)
O5 -Mn1 -N1	98.4(3)	C5 -C6 -C7	117(1)
O5 -Mn1 -N4	82.2(3)	C7 -N1 -C8	120.5(9)
O5 -Mn2 -N2	107.4(3)	C8 -C9 -C10	113.5(9)
O5 -Mn2 -N3	76.9(3)	C10 -N2 -C11	118.4(9)
O5 -C26 -C25	106.8(8)	C11 -C12 -C13	115.4(9)
O5 -C26 -C27	109.8(8)	C11 -C12 -C17	122(1)
O6 -Mn1 -N1	89.0(3)	C12 -C13 -C14	117(1)
O6 -Mn1 -N4	90.6(3)	C12 -C17 -C16	117(1)
O6 -C34 -C29	123.5(9)	C13 -C12 -C17	122(1)
O6 -C34 -C33	117.8(9)	C13 -C14 -C15	122(1)
N1 -Mn1 -N4	178.8(3)	C14 -C15 -C16	120(1)
N1 -C7 -C6	123(1)	C15 -C16 -C17	121(1)
N1 -C8 -C9	107.3(8)	C18 -C19 -C20	121.0(9)
N2 -Mn2 -N3	173.2(4)	C18 -C23 -C22	121.5(9)
N2 -C10 -C9	107.5(8)	C18 -C23 -C24	121.3(9)
N2 -C11 -C12	123(1)	C19 -C18 -C23	117(1)
N3 -C24 -C23	124.8(9)	C19 -C20 -C21	120(1)

TABLE S18 BOND ANGLES(DEG.), CONT.

C20 -C21 -C22	121(1)	Cl15-C65 -C66	120.9(9)
C21 -C22 -C23	119.5(9)	Cl16-C67 -C66	121(1)
C22 -C23 -C24	117.2(9)	Cl16-C67 -C68	116.7(8)
C24 -N3 -C25	119.4(8)	O7 -C35 -C36	119(1)
C25 -C26 -C27	112.4(9)	O7 -C35 -C40	124(1)
C27 -N4 -C28	120.1(9)	O8 -C43 -C42	110.4(8)
C28 -C29 -C30	116.6(9)	O8 -C43 -C44	106.6(8)
C28 -C29 -C34	123(1)	O9 -C51 -C46	124(1)
C29 -C30 -C31	119(1)	O9 -C51 -C50	120(1)
C29 -C34 -C33	119(1)	O10 -C52 -C53	120(1)
C30 -C29 -C34	120.2(9)	O10 -C52 -C57	124.0(9)
C30 -C31 -C32	121(1)	O11 -C60 -C59	104.3(8)
C31 -C32 -C33	119(1)	O11 -C60 -C61	110.6(9)
C32 -C33 -C34	122(1)	O12 -C68 -C63	125(1)
Cl9 -C36 -C35	117.4(8)	O12 -C68 -C67	119(1)
Cl9 -C36 -C37	119.5(9)	O13 -Cl17-O14	107.3(7)
Cl10-C38 -C37	119.0(9)	O13 -Cl17-O15	109.1(7)
Cl10-C38 -C39	119.3(9)	O13 -Cl17-O16	112.3(6)
Cl11-C48 -C47	121(1)	O14 -Cl17-O15	109.2(7)
Cl11-C48 -C49	120(1)	O14 -Cl17-O16	111.0(7)
Cl12-C50 -C49	119(1)	O15 -Cl17-O16	107.8(7)
Cl12-C50 -C51	118.0(9)	O17 -Cl18-O18	112.9(6)
Cl13-C53 -C52	117.8(8)	O17 -Cl18-O19	109.3(7)
Cl13-C53 -C54	119.4(8)	O17 -Cl18-O20	108.3(6)
Cl14-C55 -C54	120.5(8)	O18 -Cl18-O19	107.4(6)
Cl14-C55 -C56	118.1(9)	O18 -Cl18-O20	109.9(6)
Cl15-C65 -C64	119.8(9)	O19 -Cl18-O20	108.9(7)

TABLE S18 BOND ANGLES(DEG.), CONT.

N5 -C41 -C40	122(1)	C52 -C53 -C54	123(1)
N5 -C42 -C43	107.8(8)	C52 -C57 -C56	121.4(9)
N6 -C44 -C43	106.5(8)	C52 -C57 -C58	121.8(9)
N6 -C45 -C46	126(1)	C53 -C52 -C57	116.1(9)
N7 -C58 -C57	125(1)	C53 -C54 -C55	120(1)
N7 -C59 -C60	109.4(9)	C54 -C55 -C56	121(1)
N8 -C61 -C60	109.9(9)	C55 -C56 -C57	118(1)
N8 -C62 -C63	123(1)	C56 -C57 -C58	117(1)
C35 -C36 -C37	123(1)	C58 -N7 -C59	120.1(9)
C35 -C40 -C39	123(1)	C59 -C60 -C61	112.4(8)
C35 -C40 -C41	121.8(9)	C61 -N8 -C62	119.7(9)
C36 -C35 -C40	116.4(9)	C62 -C63 -C64	118(1)
C36 -C37 -C38	119(1)	C62 -C63 -C68	121.0(9)
C37 -C38 -C39	122(1)	C63 -C64 -C65	121(1)
C38 -C39 -C40	117(1)	C63 -C68 -C67	116.0(9)
C39 -C40 -C41	115(1)	C64 -C63 -C68	121(1)
C41 -N5 -C42	120.9(9)	C64 -C65 -C66	119(1)
C42 -C43 -C44	111.3(8)	C65 -C66 -C67	121(1)
C44 -N6 -C45	120(1)	C66 -C67 -C68	122(1)
C45 -C46 -C47	119(1)	C69 -C70 -C71	120(1)
C45 -C46 -C51	120(1)	C69 -C74 -C73	122(1)
C46 -C47 -C48	121(1)	C70 -C69 -C74	118(1)
C46 -C51 -C50	116(1)	C70 -C69 -C75	122(1)
C47 -C46 -C51	121(1)	C70 -C71 -C72	120(1)
C47 -C48 -C49	119(1)	C71 -C72 -C73	121(1)
C48 -C49 -C50	120(1)	C72 -C73 -C74	118(1)
C49 -C50 -C51	123(1)	C74 -C69 -C75	120(1)

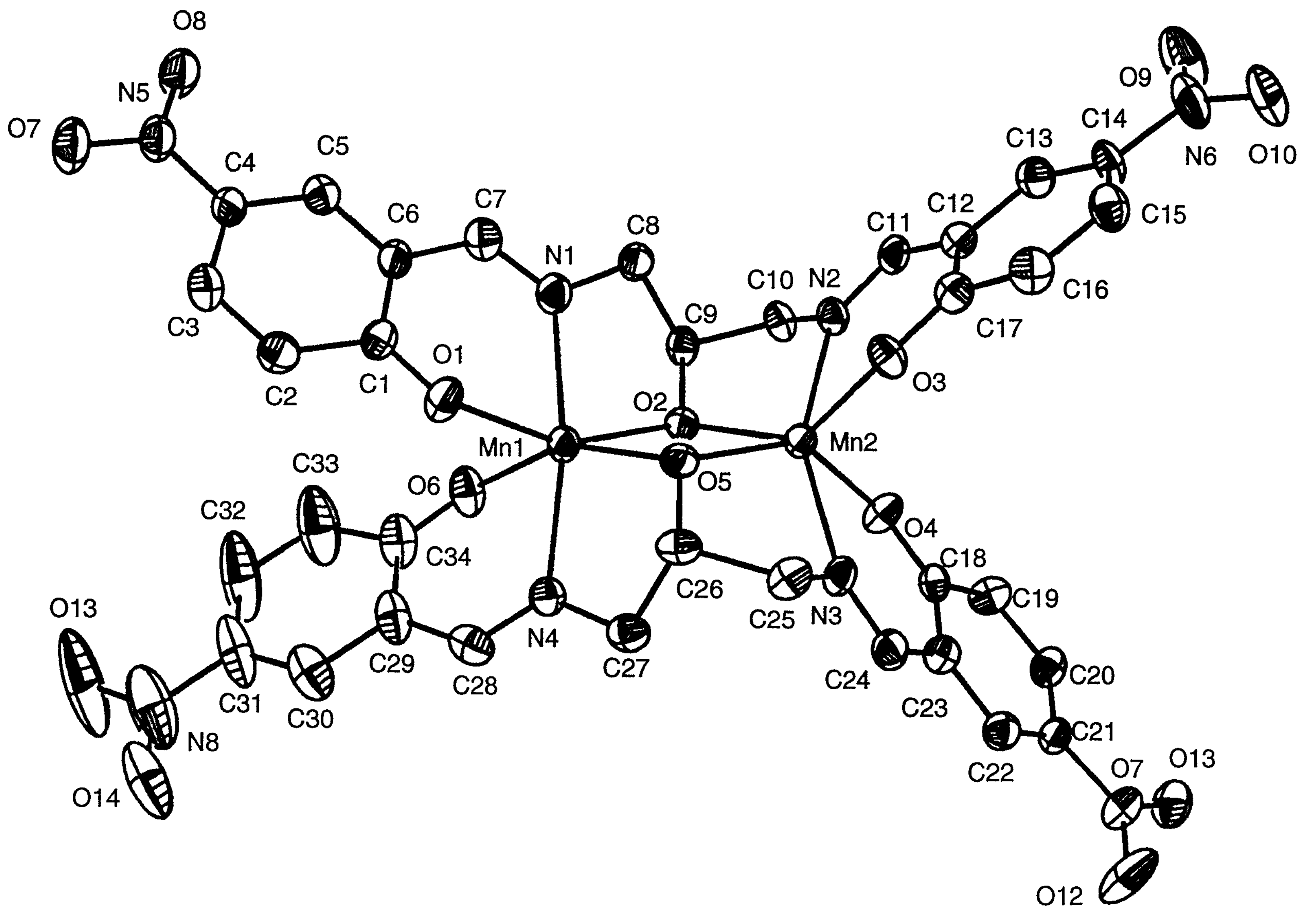
TABLE S18 BOND ANGLES(DEG.), CONT.

C76 -C77 -C78	119(2)	C80 -C76 -C82	122(2)
C76 -C80 -C81	123(2)	C83 -C84 -C85	122(2)
C77 -C76 -C80	120(2)	C83 -C88 -C87	122(3)
C77 -C76 -C82	118(2)	C84 -C83 -C88	114(2)
C77 -C78 -C79	120(2)	C84 -C83 -C89	122(2)
C78 -C79 -C81	122(2)	C84 -C85 -C86	116(3)
C79 -C81 -C80	116(2)	C88 -C83 -C89	123(2)

Table S19 Derivatives of Mn(2-OHsalpn) dimers prepared.

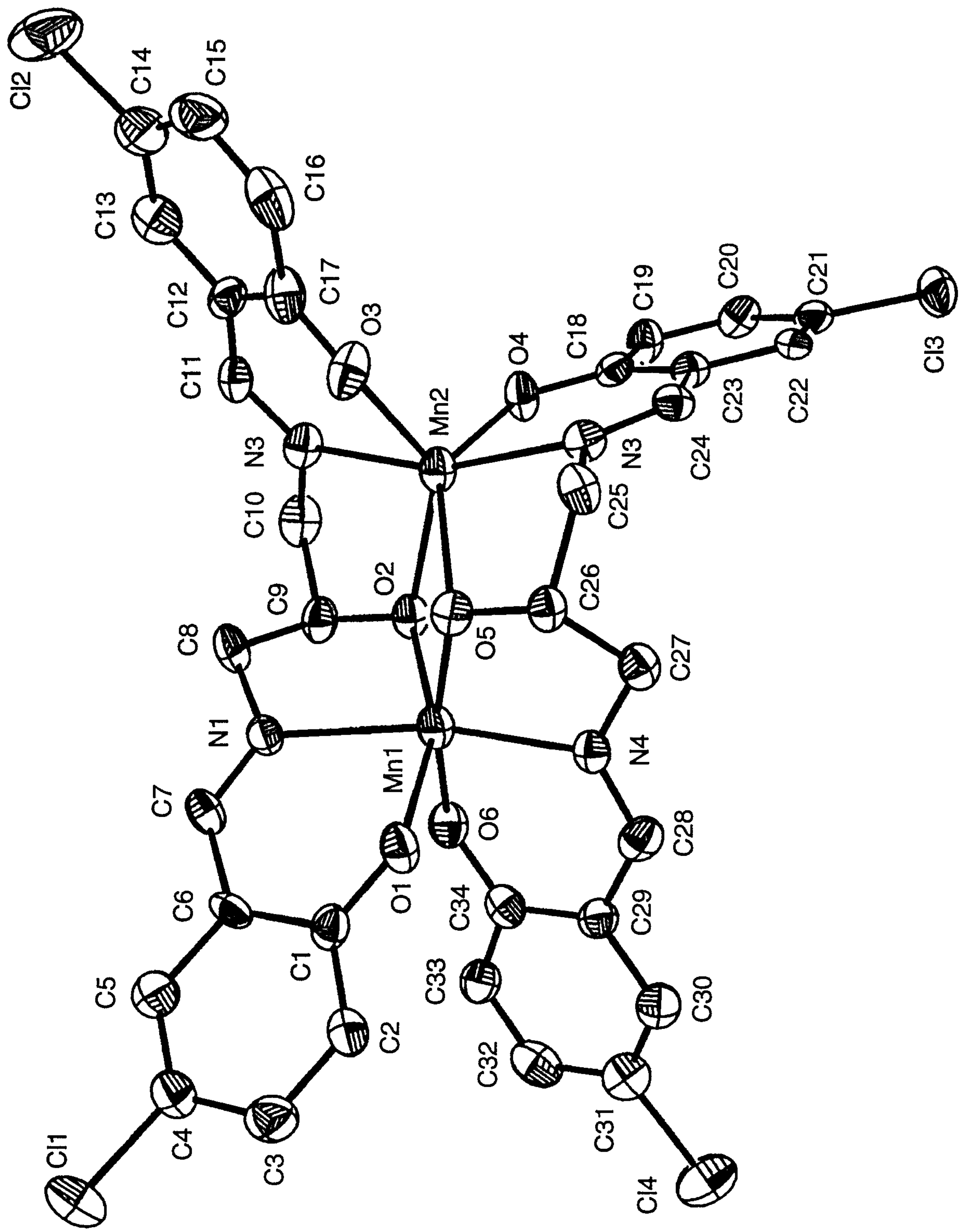
Complex	Elemental Analysis	Crystal Structure	Mass Spect	EPR	UV-Vis	Echem	SQUID
$TMA_2[Mn^{II}(2\text{-}OH(5\text{-}NO_2sal)pn)]_2$	√	√	√	√	√		√
$Na_2[Mn^{II}(2\text{-}OH(5\text{-}NO_2sal)pn)]_2$	√		√	√		√	
$Na_2[Mn^{II}(2\text{-}OHsalpn)]_2$	√		√				
$TEA_2[Mn^{II}(2\text{-}OH(5\text{-}Clsal)pn)]_2$	√		√		√		√
$Na_2[Mn^{II}(2\text{-}OH(3,5\text{-}Clsal)pn)]_2$	√		√	√			
$TEA[Mn^{II/III}(2\text{-}OH(5\text{-}Clsal)pn)_2]$	√	√	√	√	√		√
$TEA[Mn^{II/III}(2\text{-}OH(3,5\text{-}Clsal)pn)_2]$	√			√			
$[Mn^{III}(2\text{-}OH(5\text{-}NO_2sal)pn)]_2$	√	√	√				
$[Mn^{III}(2\text{-}OH(5\text{-}Clsal)pn)]_2$	√		√		√	√	√
$[Mn^{III}(2\text{-}OH(5\text{-}MeOsal)pn)]_2$	√					√	
$[Mn^{III}(2\text{-}OHsalpn)]_2$	√		√			√	√
$[Mn^{III}(2\text{-}OH(3,5\text{-}Clsal)pn)]_2$	√		√		√	√	
$[Mn^{III/IV}(2\text{-}OH(3,5\text{-}Clsal)pn)_2]ClO_4$	√	√	√	√	√	√	√
$[Mn^{III/IV}(2\text{-}OH(5\text{-}Clsal)pn)_2]ClO_4$	√			√	√		

50

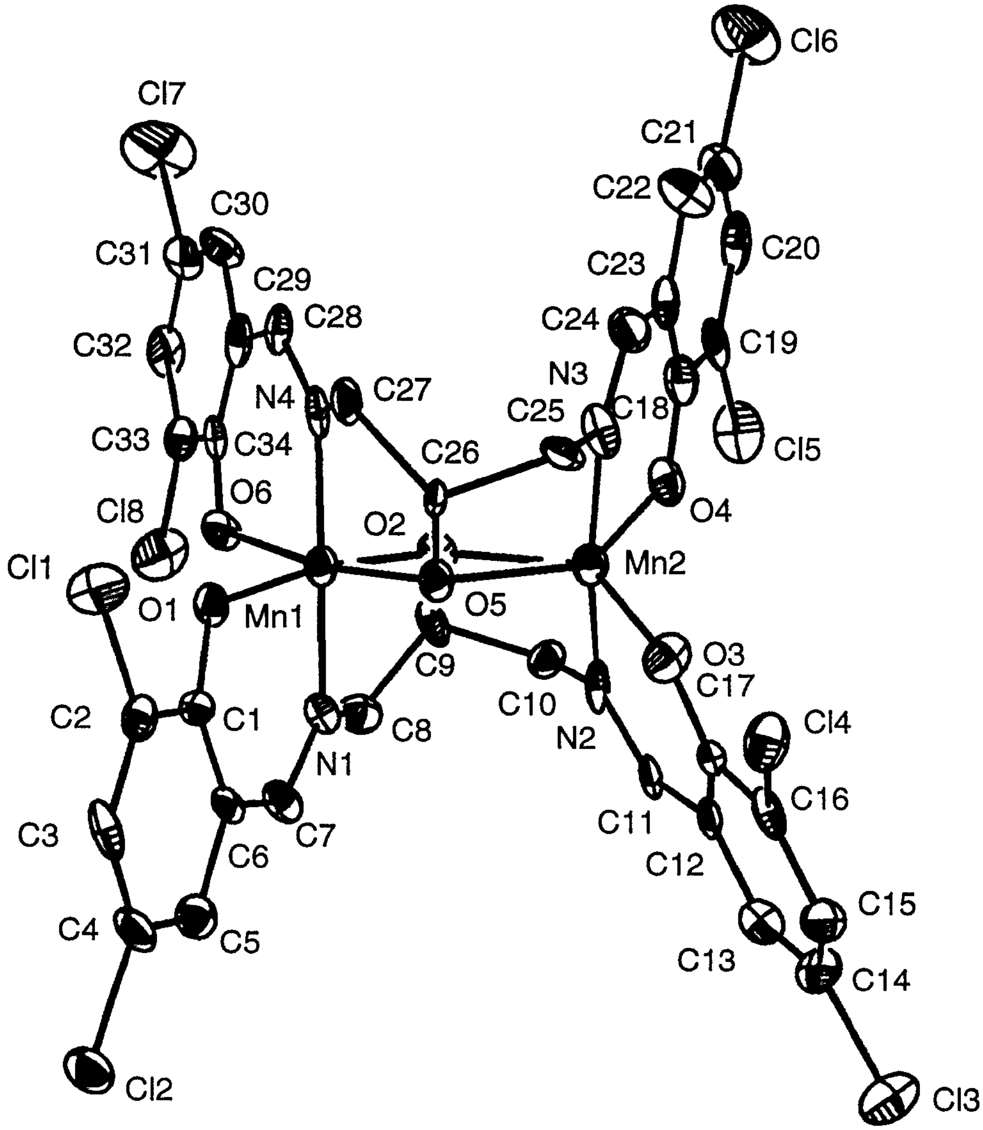


Supplemental Figure S1

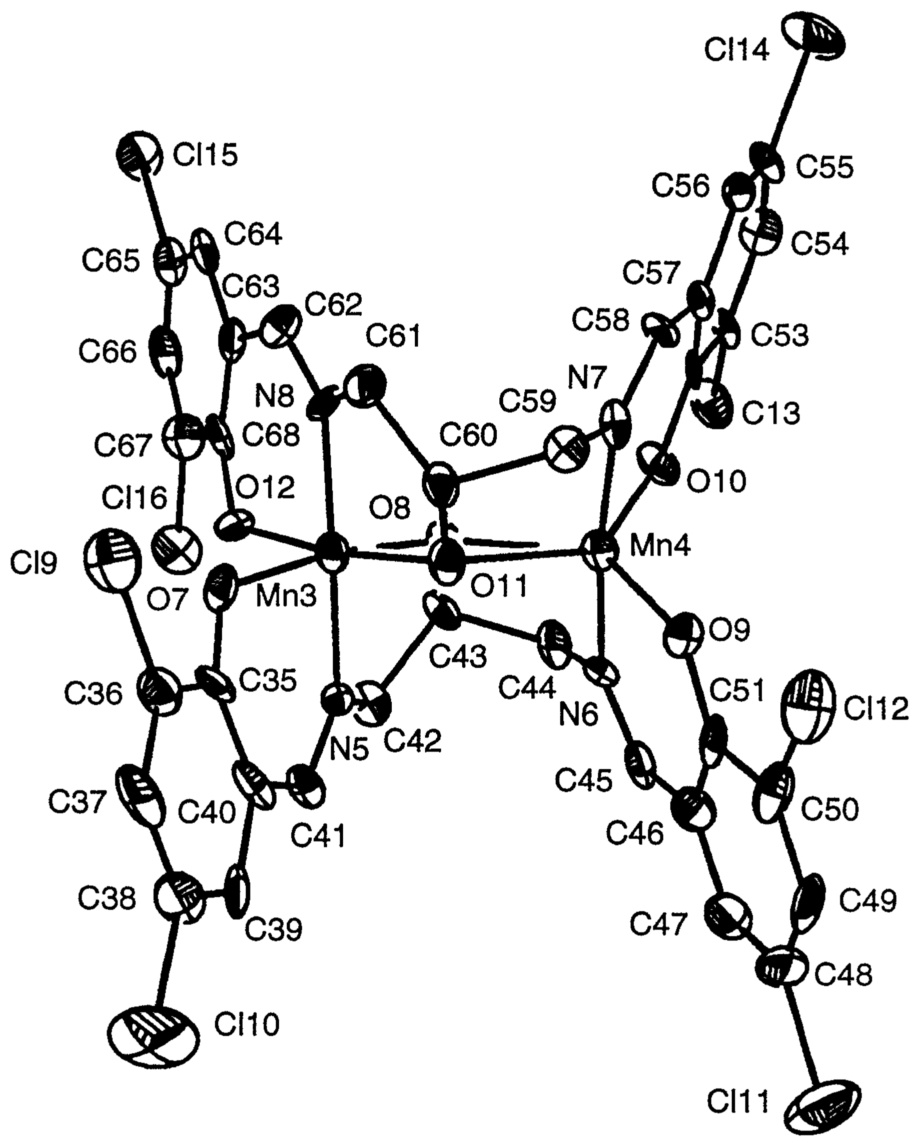
Supplemental Figure S2

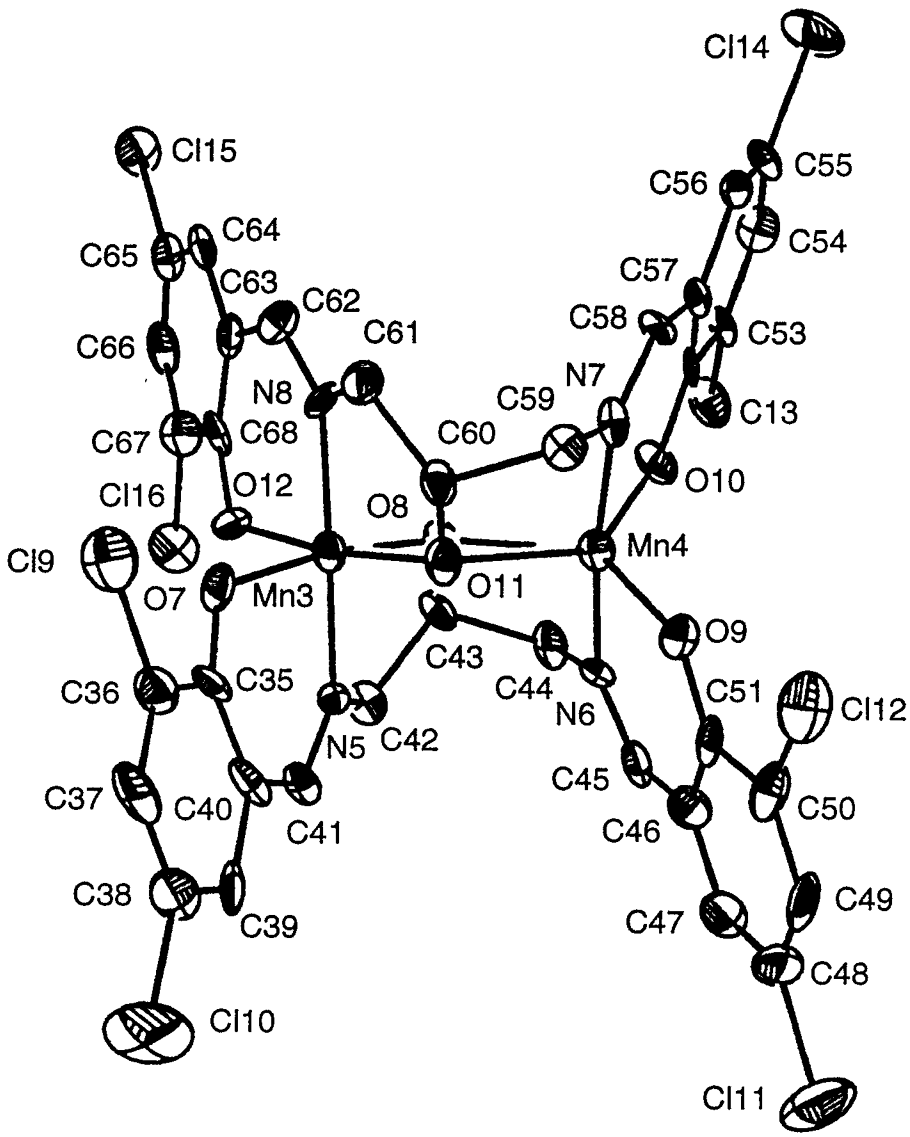


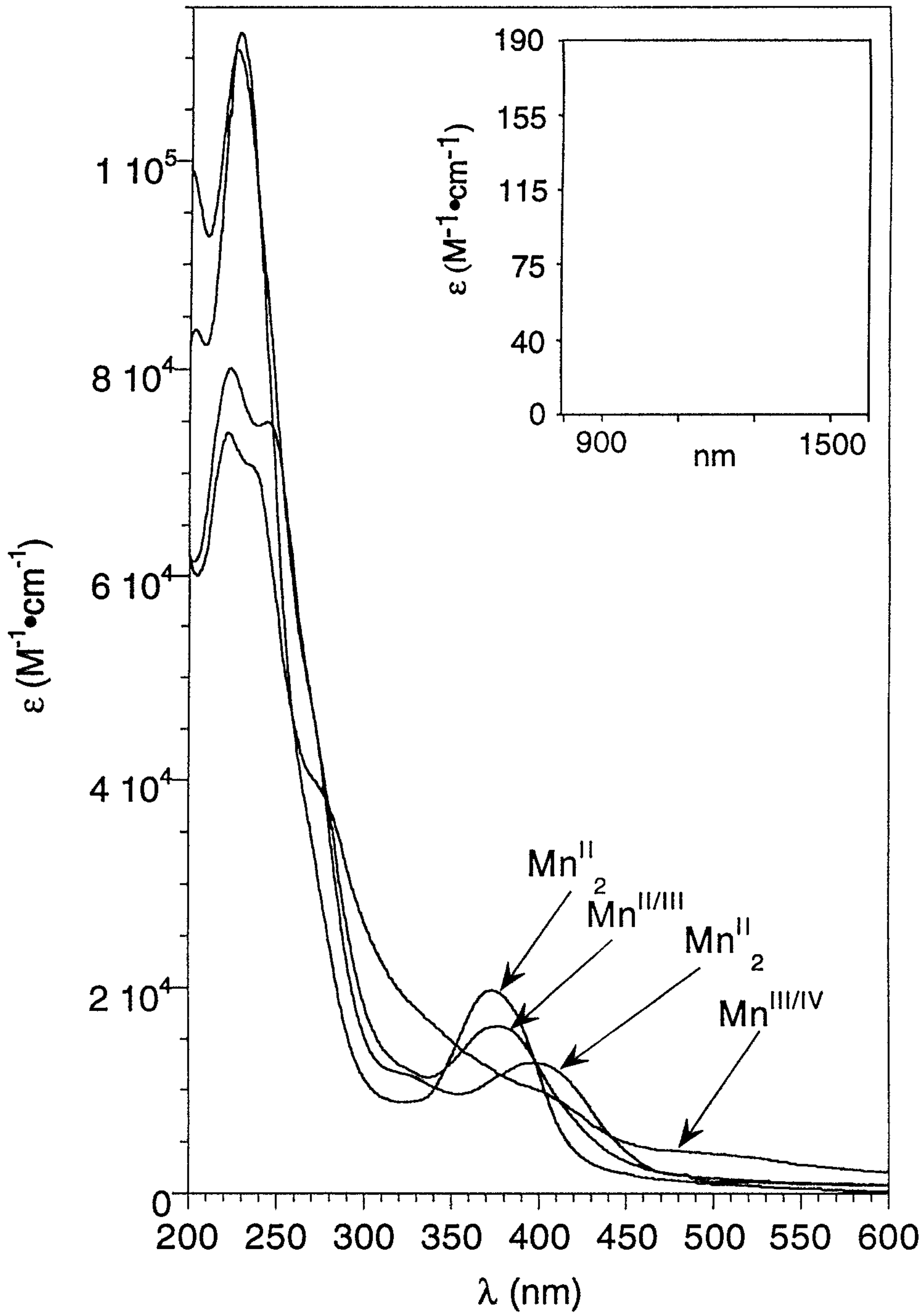
Supplemental Figure S



Supplemental Figure S4




Cl14
Cl15
C55
C56
C64
C54
C65
C63
C57
C62
C58
C53
C66
C61
N7
N8
C59
C13
C60
C67
C68
O10
Cl16
O12
O8
Cl9
Mn4
O7
Mn3
O11
O9
C43
C36
C35
C44
C51
Cl12
N6
C42
N5
C45
C37
C40
C50
C41
C46
C49
C38
C39
C47
C48
Cl10
Cl11


190
155
115
75
40
0
ε (M-1•cm-1)
900
1500
nm
1 10^5
8 10^4
6 10^4
4 10^4
2 10^4
0
ε (M-1•cm-1)
200 250 300 350 400 450 500 550 600
λ (nm)
MnII2
MnII/III
MnII2
MnIII/IV