C(18)-C(17)-C(16)	120.1(7)
C(18)-C(19)-C(20)	120.7(7)
C(19)-C(18)-C(17)	119.6(6)
C(19)-C(20)-C(15)	120.6(6)
C(22)-C(21)-C(26)	117.9(6)
C(22)-C(21)-C(3)	121.4(6)
C(26)-C(21)-C(3)	120.7(6)
C(23)-C(22)-C(21)	120.9(7)
C(24)-C(23)-C(22)	120.0(8)
C(23)-C(24)-C(25)	120.5(8)
C(24)-C(25)-C(26)	120.1(8)
C(25)-C(26)-C(21)	120.5(7)
C(28)-C(27)-C(32)	118.4(7)
C(28)-C(27)-C(4)	120.4(6)
C(32)-C(27)-C(4)	121.1(6)
C(27)-C(28)-C(29)	120.2(8)
C(30)-C(29)-C(28)	120.5(9)
C(29)-C(30)-C(31)	121.0(9)
C(30)-C(31)-C(32)	119.2(9)
C(31)-C(32)-C(27)	120.7(8)
C(34)-C(33)-C(38)	118.6(7)
C(34)-C(33)-C(5)	119.1(7)
C(38)-C(33)-C(5)	122.2(6)
C(33)-C(34)-C(35)	121.6(7)
C(36)-C(35)-C(34)	119.3(8)
C(35)-C(36)-C(37)	120.2(8)
C(38)-C(37)-C(36)	120.3(8)
C(37)-C(38)-C(33)	120.1(7)
C(40)-C(39)-C(44)	115.6(8)
C(40)-C(39)-C(6)	121.7(8)
C(44)-C(39)-C(6)	122.6(8)
C(39)-C(40)-C(41)	120.9(10)
C(42)-C(41)-C(40)	121.8(13)
C(41)-C(42)-C(43)	119.3(13)
C(42)-C(43)-C(44)	120.1(13)
C(43)-C(44)-C(39)	122.1(11)
C(50)-C(45)-C(46)	116.6(7)
C(50)-C(45)-C(7)	122.9(7)
C(46)-C(45)-C(7)	120.5(7)
C(47)-C(46)-C(45)	123.0(8)
C(48)-C(47)-C(46)	118.8(9)
C(47)-C(48)-C(49)	120.9(9)
C(48)-C(49)-C(50)	120.2(8)
C(49)-C(50)-C(45)	120.4(8)
C(56)-C(51)-C(52)	118.1(6)

C(56)-C(51)-C(8)	121.4(6)
C(52)-C(51)-C(8)	120.0(6)
C(53)-C(52)-C(51)	119.7(8)
C(54)-C(53)-C(52)	120.6(8)
C(53)-C(54)-C(55)	120.1(8)
C(54)-C(55)-C(56)	120.4(8)
C(55)-C(56)-C(51)	121.0(7)
C(62)-C(57)-C(58)	119.9(6)
C(62)-C(57)-Se(1)	123.7(5)
C(58)-C(57)-Se(1)	116.4(5)
C(59)-C(58)-C(57)	120.3(8)
C(60)-C(59)-C(58)	120.9(8)
C(59)-C(60)-C(61)	119.1(8)
C(60)-C(61)-C(62)	121.0(8)
C(57)-C(62)-C(61)	118.7(7)
C(68)-C(63)-C(64)	118.8(6)
C(68)-C(63)-Se(2)	115.6(5)
C(64)-C(63)-Se(2)	125.3(5)
C(65)-C(64)-C(63)	120.5(7)
C(66)-C(65)-C(64)	120.3(7)
C(65)-C(66)-C(67)	119.7(7)
C(66)-C(67)-C(68)	120.3(7)
C(63)-C(68)-C(67)	120.4(7)
N(1)-C(69)-C(70)	115.9(5)
N(1)-C(71)-C(72)	115.8(5)
C(74)-C(73)-N(1)	116.0(5)
N(1)-C(75)-C(76)	115.3(5)
N(2)-C(77)-C(78)	114.1(11)
C(80A)-C(79)-C(80)	80.2(13)
C(80A)-C(79)-N(2)	145.3(16)
C(80)-C(79)-N(2)	122.6(11)
N(2)-C(81)-C(82)	116.8(8)
C(84)-C(83)-N(2)	118.5(10)
C(84)-C(83A)-N(2)	134(3)
C(83A)-C(84)-C(83)	49.3(13)
N(3)-C(85)-C(86)	173.6(14)
N(4)-C(87)-C(88)	108.2(17)
O(1)-C(91)-C(89)	126(3)
O(1)-C(92)-C(90)	107(2)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for $(Et_4N)_2[Mo_2(SePh)_2(S_2C_2Ph_2)_4]\cdot 2MeCN\cdot Et_2O$.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo(1)	28(1)	30(1)	26(1)	1(1)	4(1)	3(1)
Mo(2)	32(1)	38(1)	29(1)	0(1)	3(1)	3(1)
Se(1)	28(1)	39(1)	31(1)	0(1)	4(1)	0(1)
Se(2)	30(1)	33(1)	31(1)	2(1)	4(1)	2(1)
S(1)	29(1)	37(1)	32(1)	-4(1)	5(1)	4(1)
S(2)	28(1)	41(1)	30(1)	-4(1)	4(1)	4(1)
S(3)	31(1)	34(1)	36(1)	2(1)	5(1)	1(1)
S(4)	34(1)	34(1)	35(1)	-2(1)	5(1)	4(1)
S(5)	32(1)	50(1)	35(1)	9(1)	4(1)	1(1)
S(6)	30(1)	57(1)	45(1)	9(1)	10(1)	3(1)
S(7)	35(1)	40(1)	42(1)	-7(1)	4(1)	3(1)
S(8)	36(1)	45(1)	45(1)	-10(1)	0(1)	6(1)
N(1)	29(3)	46(4)	37(4)	-7(3)	11(3)	2(3)
N(2)	42(4)	88(5)	46(4)	11(4)	12(3)	11(4)
N(3)	420(20)	117(9)	143(12)	12(8)	143(13)	-22(11)
N(4)	160(12)	196(11)	134(10)	49(8)	65(8)	1(9)
O(1)	260(20)	137(13)	870(50)	-130(20)	20(30)	29(14)
C(1)	32(4)	24(4)	26(4)	0(3)	4(3)	-3(3)
C(2)	31(4)	32(4)	25(4)	-2(3)	4(3)	-2(3)
C(3)	39(4)	33(4)	25(4)	2(3)	6(3)	0(3)
C(4)	39(4)	33(4)	25(4)	2(3)	2(3)	5(3)
C(5)	34(4)	45(4)	32(4)	8(3)	8(3)	3(3)
C(6)	38(4)	57(5)	35(5)	6(4)	9(4)	1(4)
C(7)	44(4)	41(5)	31(4)	-7(3)	3(3)	2(4)
C(8)	45(5)	41(4)	36(4)	-3(3)	-3(4)	9(4)
C(9)	24(4)	47(5)	22(4)	-3(3)	9(3)	0(3)
C(10)	37(4)	41(4)	36(5)	2(4)	13(4)	0(3)
C(11)	37(4)	82(6)	25(4)	10(4)	-4(4)	6(4)
C(12)	36(5)	93(7)	33(5)	-16(5)	-5(4)	-7(5)
C(13)	42(5)	61(6)	42(5)	-24(4)	9(4)	-6(4)
C(14)	32(4)	38(5)	44(5)	-8(4)	8(4)	4(3)
C(15)	29(4)	33(4)	34(5)	-3(3)	4(3)	6(3)
C(16)	42(4)	38(4)	37(5)	-6(4)	12(4)	2(3)
C(17)	47(5)	40(5)	63(6)	-9(4)	10(4)	8(4)
C(19)	39(4)	68(6)	33(5)	-21(4)	9(4)	1(4)

C(18)	49(5)	47(5)	58(6)	-24(4)	7(4)	6(4)
C(20)	25(4)	51(5)	36(5)	-2(4)	8(3)	-2(3)
C(21)	33(4)	32(4)	41(5)	9(3)	-5(4)	2(3)
C(22)	46(5)	44(5)	48(5)	-8(4)	1(4)	-3(4)
C(23)	65(6)	49(5)	72(7)	-16(4)	-5(5)	-6(5)
C(24)	72(7)	55(6)	79(7)	-2(5)	-24(6)	-28(5)
C(25)	42(5)	77(6)	81(7)	23(5)	11(5)	-16(5)
C(26)	51(5)	44(5)	53(5)	5(4)	5(4)	-4(4)
C(27)	41(4)	39(5)	31(4)	-5(3)	-9(4)	4(4)
C(28)	53(5)	50(5)	47(5)	-9(4)	1(4)	12(4)
C(29)	79(7)	72(7)	96(8)	-31(6)	15(6)	27(6)
C(30)	102(9)	55(7)	112(10)	-16(6)	-11(7)	29(6)
C(31)	110(8)	28(5)	91(8)	10(5)	-15(6)	0(5)
C(32)	62(5)	43(5)	54(6)	3(4)	-2(4)	1(4)
C(33)	36(4)	45(5)	42(5)	11(4)	9(4)	-3(4)
C(34)	51(5)	58(5)	46(5)	20(4)	-1(4)	0(4)
C(35)	48(5)	49(5)	75(7)	11(5)	1(5)	1(4)
C(36)	62(6)	50(6)	68(7)	18(5)	-26(5)	-4(4)
C(37)	75(6)	57(6)	49(6)	9(5)	-15(5)	-27(5)
C(38)	54(5)	62(5)	35(5)	13(4)	0(4)	-3(4)
C(39)	44(5)	70(6)	60(6)	32(5)	7(4)	-1(4)
C(40)	69(7)	124(10)	164(12)	66(8)	55(7)	3(7)
C(41)	92(9)	120(10)	275(19)	118(11)	64(11)	11(8)
C(42)	61(8)	245(19)	186(15)	153(15)	48(9)	29(11)
C(43)	88(9)	227(16)	83(9)	38(11)	35(7)	-8(11)
C(44)	87(7)	153(10)	64(7)	6(6)	46(6)	-29(7)
C(45)	53(5)	39(5)	38(5)	-9(4)	13(4)	5(4)
C(46)	50(5)	47(5)	60(6)	-21(4)	7(4)	-3(4)
C(47)	65(6)	62(6)	80(7)	-23(5)	10(5)	-10(5)
C(48)	76(7)	83(8)	95(8)	-35(6)	37(6)	-36(6)
C(49)	109(8)	41(6)	75(7)	2(5)	41(6)	-8(6)
C(50)	69(6)	52(6)	46(5)	-7(4)	17(4)	2(5)
C(51)	43(5)	44(5)	47(5)	-4(4)	8(4)	12(4)
C(52)	53(5)	62(5)	58(6)	-9(4)	2(4)	14(4)
C(53)	46(5)	65(6)	101(8)	-2(5)	3(5)	27(5)
C(54)	72(7)	66(7)	115(9)	-38(6)	32(7)	9(5)
C(55)	60(6)	71(6)	85(7)	-36(5)	21(6)	-10(5)
C(56)	46(5)	55(5)	52(5)	-18(4)	9(4)	9(4)
C(57)	33(4)	58(5)	31(4)	-10(4)	5(3)	1(4)
C(58)	33(4)	75(6)	56(5)	8(4)	9(4)	-2(4)
C(59)	39(5)	129(9)	62(6)	14(6)	10(5)	-6(5)
C(60)	33(5)	157(11)	58(6)	5(6)	10(5)	13(6)
C(61)	50(6)	97(7)	63(6)	-3(5)	-3(5)	39(5)
C(62)	45(5)	59(5)	52(5)	3(4)	8(4)	12(4)

C(63)	28(4)	32(4)	44(5)	1(3)	-2(3)	1(3)
C(64)	51(5)	36(5)	50(5)	2(4)	7(4)	-1(4)
C(65)	68(6)	48(6)	71(6)	3(4)	16(5)	-5(4)
C(66)	85(7)	37(5)	90(7)	-5(5)	15(6)	8(5)
C(67)	67(6)	47(6)	131(9)	-11(5)	35(6)	10(5)
C(68)	44(5)	48(5)	73(6)	1(4)	18(4)	1(4)
C(69)	36(4)	69(6)	40(5)	-6(4)	17(4)	-3(4)
C(70)	72(6)	65(6)	49(5)	8(4)	25(4)	-6(4)
C(71)	35(4)	40(5)	62(5)	-3(4)	2(4)	8(3)
C(72)	60(5)	51(5)	81(7)	13(4)	12(5)	8(4)
C(73)	51(5)	51(5)	35(5)	1(4)	10(4)	4(4)
C(74)	50(5)	73(6)	43(5)	-17(4)	1(4)	2(4)
C(75)	24(4)	54(5)	60(5)	1(4)	10(4)	2(3)
C(76)	29(4)	79(6)	60(6)	-9(5)	-5(4)	3(4)
C(77)	53(7)	172(13)	184(14)	-98(10)	8(7)	17(7)
C(78)	370(20)	189(16)	171(15)	-57(12)	-134(15)	200(17)
C(79)	196(12)	84(8)	92(9)	3(7)	93(9)	9(8)
C(80)	104(10)	114(12)	64(10)	-16(8)	-14(9)	34(10)
C(80A)	104(10)	114(12)	64(10)	-16(8)	-14(9)	34(10)
C(81)	49(6)	118(9)	181(12)	-83(8)	28(7)	-15(6)
C(82)	94(8)	120(9)	104(9)	-25(7)	-21(7)	7(7)
C(83)	66(9)	96(10)	67(8)	-7(8)	32(9)	5(9)
C(83A)	66(9)	96(10)	67(8)	-7(8)	32(9)	5(9)
C(84)	313(19)	116(11)	161(13)	45(10)	177(14)	55(13)
C(85)	180(13)	95(10)	64(9)	20(7)	30(8)	-45(8)
C(86)	113(9)	207(13)	57(8)	4(8)	18(7)	-24(8)
C(87)	200(30)	780(90)	1030(110)	270(80)	210(50)	120(40)
C(88)	310(20)	122(10)	187(14)	108(9)	220(16)	117(11)
C(90)	192(17)	236(19)	240(20)	34(15)	117(16)	116(15)
C(89)	290(30)	340(40)	930(100)	50(50)	-130(50)	110(30)
C(91)	220(30)	170(20)	720(70)	-260(30)	80(40)	-80(30)
C(92)	370(50)	330(40)	600(70)	-260(40)	250(40)	-200(40)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Et_4N)_2[Mo_2(SePh)_2(S_2C_2Ph_2)_4]\cdot 2MeCN\cdot Et_2O$.

	x	y	z	U(eq)
H(10A)	-1084	10282	5123	44
H(11A)	218	10404	5872	59
H(12A)	652	11141	6151	67
H(13A)	-180	11753	5671	58
H(14A)	-1467	11628	4915	46
H(16A)	-4536	11798	4089	46
H(17A)	-5161	12378	4547	60
H(19A)	-4067	11680	5817	56
H(18A)	-4916	12321	5413	62
H(20A)	-3409	11102	5366	45
H(22A)	-5444	8724	2437	56
H(23A)	-6981	8216	2318	78
H(24A)	-8284	8218	2854	89
H(25A)	-8119	8747	3490	80
H(26A)	-6591	9262	3616	60
H(28A)	-2047	8890	2750	62
H(29A)	-1305	8152	2753	99
H(30A)	-2016	7587	3185	113
H(31A)	-3438	7736	3644	97
H(32A)	-4218	8466	3636	66
H(34A)	-5960	11755	1190	63
H(35A)	-7422	12154	668	70
H(36A)	-7495	12155	-187	78
H(37A)	-6089	11773	-520	77
H(38A)	-4608	11383	3	62
H(40A)	-3116	12180	964	137
H(41A)	-2078	12657	524	190
H(42A)	-860	12381	63	193
H(43A)	-606	11614	19	156
H(44A)	-1627	11129	436	116
H(46A)	-5728	9298	1005	63
H(47A)	-6901	8688	736	84
H(48A)	-6336	7975	1033	98
H(49A)	-4604	7870	1599	86
H(50A)	-3388	8482	1859	66
H(52A)	-468	9146	2196	71
H(53A)	907	8679	1937	87

H(54A)	493	8324	1171	99
H(55A)	-1260	8450	637	86
H(56A)	-2634	8920	873	61
H(58A)	-107	11234	2660	66
H(59A)	1872	11120	2764	92
H(60A)	2678	10430	3028	99
H(61A)	1483	9847	3200	87
H(62A)	-524	9953	3100	63
H(64A)	-3461	11521	2134	55
H(65A)	-3650	12302	2109	75
H(66A)	-5003	12655	2497	85
H(67A)	-6207	12223	2894	95
H(68A)	-6011	11440	2931	65
H(69A)	-4055	5722	482	56
H(69B)	-3001	5814	929	56
H(70A)	-3523	5051	921	90
H(70B)	-2245	5091	816	90
H(70C)	-3301	4998	368	90
H(71A)	-2877	6506	508	56
H(71B)	-3796	6367	27	56
H(72A)	-2652	6970	-162	96
H(72B)	-2446	6543	-484	96
H(72C)	-1513	6676	-3	96
H(73A)	-2387	5790	-496	54
H(73B)	-2454	5326	-215	54
H(74A)	-4109	5421	-826	85
H(74B)	-4394	5881	-577	85
H(74C)	-4462	5417	-293	85
H(75A)	-851	5964	176	55
H(75B)	-1028	5543	511	55
H(76A)	18	6105	1010	87
H(76B)	-1186	6031	1178	87
H(76C)	-1011	6453	843	87
H(77A)	10284	5359	4049	166
H(77B)	9849	5068	3561	166
H(78A)	10511	4594	4241	402
H(78B)	9166	4510	4044	402
H(78C)	9591	4803	4532	402
H(79A)	7510	5670	4252	138
H(79B)	8355	5296	4527	138
H(79C)	8979	5755	4410	138
H(79D)	8486	5291	4511	138
H(80A)	8741	5951	4892	147
H(80B)	8988	6166	4390	147

H(80C)	9814	5783	4667	147
H(80D)	7909	5781	4885	147
H(80E)	6886	5549	4502	147
H(80F)	7337	6035	4386	147
H(81A)	6864	5237	3535	139
H(81B)	7531	4847	3868	139
H(82A)	7058	4615	3042	167
H(82B)	8429	4635	3209	167
H(82C)	7758	5026	2874	167
H(83A)	9687	5852	3645	88
H(83B)	8936	5630	3162	88
H(83C)	7853	5644	3126	88
H(83D)	7170	5797	3534	88
H(84A)	8559	6359	3201	269
H(84B)	7437	6071	3232	269
H(84C)	8171	6294	3722	269
H(84D)	7626	6287	3147	269
H(84E)	8251	6314	3717	269
H(84F)	8963	6166	3306	269
H(86A)	5728	4824	5621	188
H(86B)	5934	5289	5363	188
H(86C)	6852	5115	5830	188
H(88A)	-689	12552	4088	276
H(88B)	-280	12041	4119	276
H(88C)	-1441	12179	4295	276
H(90A)	-2257	7518	1178	319
H(90B)	-2599	7146	1542	319
H(90C)	-1514	7069	1285	319
H(89A)	1441	7233	3268	828
H(89B)	564	6822	3154	828
H(89C)	122	7298	3308	828
H(91A)	384	7616	2579	448
H(91B)	1016	7183	2435	448
H(92A)	-556	7687	1756	499
H(92B)	-1627	7731	2032	499

Table 1. Crystal data and structure refinement for $(Bu_4N)[Mo(CO)(SePh)(S_2C_2Me_2)_2]$.

Identification code	bsl49
Empirical formula	C31 H53 Mo N O S4 Se
Formula weight	758.88
Temperature	213(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	monoclinic
Space group	P2(1)/c
Unit cell dimensions	a = 9.476(3) Å alpha = 90 deg.
	b = 19.967(4) Å beta = 97.75(3) deg.
	c = 19.285(6) Å gamma = 90 deg.
Volume, Z	3616(2) $Å^3$, 4
Density (calculated)	1.394 Mg/m^3
Absorption coefficient	1.624 mm^{-1}
F(000)	1576
Crystal size	0.12 x 0.16 x 0.2 mm
Theta range for data collection	1.47 to 22.50 deg.
Limiting indices	-12<=h<=12, -26<=k<=17, -24<=l<=25
Reflections collected	15343
Independent reflections	4733 [R(int) = 0.1183]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4724 / 18 / 352
Goodness-of-fit on F^2	1.050
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0535, wR2 = 0.0806
R indices (all data)	R1 = 0.1314, wR2 = 0.0968
Largest diff. peak and hole	0.593 and -0.550 $e.Å^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Bu_4N)[Mo(CO)(SePh)(S_2C_2Me_2)_2]$. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Mo(1)	-2090(1)	5678(1)	-2116(1)	34(1)
Se(1)	-3468(1)	6794(1)	-2105(1)	45(1)
S(1)	92(2)	6259(1)	-1913(1)	46(1)
S(2)	-759(2)	4943(1)	-1322(1)	50(1)
S(4)	-3234(2)	4751(1)	-2665(1)	42(1)
S(3)	-2082(2)	6031(1)	-3293(1)	44(1)
O(1)	-4106(7)	5387(3)	-977(3)	59(2)
N(1)	-1676(7)	6058(3)	2856(3)	44(2)
C(1)	-3353(10)	5497(4)	-1390(5)	49(3)
C(2)	1265(9)	5861(4)	-1303(4)	51(3)
C(3)	913(9)	5280(5)	-1019(4)	49(3)
C(6)	2719(9)	6199(5)	-1110(5)	78(3)
C(7)	1826(9)	4878(4)	-469(4)	75(3)
C(5)	-3241(8)	4817(4)	-3568(4)	40(2)
C(4)	-2687(8)	5363(4)	-3833(4)	36(2)
C(9)	-3859(8)	4228(4)	-3989(4)	53(2)
C(8)	-2622(9)	5455(4)	-4604(4)	66(3)
C(10)	-3381(9)	7074(4)	-1151(4)	39(2)
C(11)	-4366(11)	7756(4)	-302(5)	59(3)
C(12)	-3239(12)	7581(4)	202(5)	62(3)
C(13)	-2210(10)	7139(4)	42(5)	56(3)
C(14)	-4403(9)	7508(4)	-961(5)	51(3)
C(15)	-2276(8)	6888(4)	-632(4)	45(2)
C(16)	-3118(8)	6325(4)	2561(4)	48(2)
C(17)	-3664(9)	6138(4)	1811(4)	52(3)
C(18)	-4987(10)	6528(4)	1543(5)	73(3)
C(19)	-5667(11)	6352(4)	814(5)	85(4)
C(20)	-1364(9)	6350(4)	3594(4)	50(2)
C(21)	-21(9)	6082(4)	4036(4)	57(3)
C(22)	378(10)	6504(5)	4691(5)	74(3)
C(23)	1105(9)	7157(5)	4556(5)	79(3)
C(24)	-550(11)	6265(5)	2425(6)	93(2)
C(25)	-505(10)	7020(5)	2245(5)	94(2)
C(26)	798(10)	7230(5)	1837(5)	96(2)
C(27)	2023(10)	7262(5)	2390(5)	100(2)
C(28)	-1658(9)	5305(4)	2871(4)	56(3)
C(29)	-2702(9)	4975(4)	3299(4)	49(2)

C(30)	-2565(10)	4225(4)	3305(5)	68(3)
C(31)	-3593(9)	3880(4)	3720(4)	64(3)

Table 3 . Bond lengths [Å] and angles [deg] for $(Bu_4N)(Mo(CO)(SePh)(S_2C_2Me_2)_2]$.

Mo(1)-C(1)	1.993(10)
Mo(1)-S(4)	2.327(2)
Mo(1)-S(1)	2.357(2)
Mo(1)-S(2)	2.359(2)
Mo(1)-S(3)	2.379(2)
Mo(1)-Se(1)	2.5848(11)
Se(1)-C(10)	1.915(8)
S(1)-C(2)	1.702(8)
S(2)-C(3)	1.748(9)
S(4)-C(5)	1.746(8)
S(3)-C(4)	1.741(8)
O(1)-C(1)	1.159(9)
N(1)-C(24)	1.496(11)
N(1)-C(28)	1.504(9)
N(1)-C(16)	1.505(8)
N(1)-C(20)	1.530(9)
C(2)-C(3)	1.344(11)
C(2)-C(6)	1.534(11)
C(3)-C(7)	1.507(10)
C(5)-C(4)	1.341(10)
C(5)-C(9)	1.503(9)
C(4)-C(8)	1.506(9)
C(10)-C(14)	1.384(10)
C(10)-C(15)	1.397(9)
C(11)-C(14)	1.361(10)
C(11)-C(12)	1.388(11)
C(12)-C(13)	1.380(11)
C(13)-C(15)	1.387(10)
C(16)-C(17)	1.515(9)
C(17)-C(18)	1.507(10)
C(18)-C(19)	1.507(10)
C(20)-C(21)	1.529(9)
C(21)-C(22)	1.523(10)
C(22)-C(23)	1.514(10)
C(24)-C(25)	1.550(12)
C(25)-C(26)	1.606(12)
C(26)-C(27)	1.468(12)
C(28)-C(29)	1.520(10)
C(29)-C(30)	1.503(10)
C(30)-C(31)	1.508(10)

C(1)-Mo(1)-S(4)	83.6(2)
C(1)-Mo(1)-S(1)	124.7(2)
S(4)-Mo(1)-S(1)	144.25(8)
C(1)-Mo(1)-S(2)	75.6(2)
S(4)-Mo(1)-S(2)	88.64(8)
S(1)-Mo(1)-S(2)	79.54(8)
C(1)-Mo(1)-S(3)	143.4(2)
S(4)-Mo(1)-S(3)	82.09(8)
S(1)-Mo(1)-S(3)	84.09(8)
S(2)-Mo(1)-S(3)	137.21(9)
C(1)-Mo(1)-Se(1)	78.4(2)
S(4)-Mo(1)-Se(1)	119.00(6)
S(1)-Mo(1)-Se(1)	90.39(6)
S(2)-Mo(1)-Se(1)	139.24(6)
S(3)-Mo(1)-Se(1)	79.54(6)
C(10)-Se(1)-Mo(1)	107.6(2)
C(2)-S(1)-Mo(1)	111.2(3)
C(3)-S(2)-Mo(1)	111.0(3)
C(5)-S(4)-Mo(1)	109.5(3)
C(4)-S(3)-Mo(1)	107.5(3)
C(24)-N(1)-C(28)	106.2(6)
C(24)-N(1)-C(16)	111.8(7)
C(28)-N(1)-C(16)	111.6(6)
C(24)-N(1)-C(20)	110.4(7)
C(28)-N(1)-C(20)	111.2(6)
C(16)-N(1)-C(20)	105.6(6)
O(1)-C(1)-Mo(1)	178.8(8)
C(3)-C(2)-C(6)	123.0(8)
C(3)-C(2)-S(1)	120.6(7)
C(6)-C(2)-S(1)	116.4(7)
C(2)-C(3)-C(7)	126.6(8)
C(2)-C(3)-S(2)	117.4(6)
C(7)-C(3)-S(2)	116.0(7)
C(4)-C(5)-C(9)	125.0(8)
C(4)-C(5)-S(4)	119.5(6)
C(9)-C(5)-S(4)	115.4(6)
C(5)-C(4)-C(8)	123.1(7)
C(5)-C(4)-S(3)	120.6(6)
C(8)-C(4)-S(3)	116.2(6)
C(14)-C(10)-C(15)	117.5(8)
C(14)-C(10)-Se(1)	119.7(7)
C(15)-C(10)-Se(1)	122.7(7)
C(14)-C(11)-C(12)	118.8(9)
C(13)-C(12)-C(11)	120.3(9)
C(12)-C(13)-C(15)	119.8(8)

C(11)-C(14)-C(10)	123.0(8)
C(13)-C(15)-C(10)	120.6(8)
N(1)-C(16)-C(17)	116.7(7)
C(18)-C(17)-C(16)	111.2(7)
C(19)-C(18)-C(17)	115.5(8)
C(21)-C(20)-N(1)	115.3(6)
C(22)-C(21)-C(20)	111.4(7)
C(23)-C(22)-C(21)	113.6(8)
N(1)-C(24)-C(25)	115.8(8)
C(24)-C(25)-C(26)	114.2(8)
C(27)-C(26)-C(25)	103.9(9)
N(1)-C(28)-C(29)	115.9(7)
C(30)-C(29)-C(28)	112.0(7)
C(29)-C(30)-C(31)	113.5(7)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for $(Bu_4N)(Mo(CO)(SePh)(S_2C_2Me_2)_2]$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo(1)	32(1)	34(1)	35(1)	0(1)	2(1)	4(1)
Se(1)	45(1)	38(1)	50(1)	2(1)	-2(1)	9(1)
S(1)	31(1)	53(2)	53(2)	-5(1)	-2(1)	3(1)
S(2)	60(2)	54(2)	37(2)	8(1)	9(1)	21(1)
S(4)	46(2)	34(1)	45(2)	3(1)	7(1)	-5(1)
S(3)	52(2)	41(2)	38(2)	6(1)	-1(1)	-6(1)
O(1)	61(5)	54(4)	67(5)	13(3)	26(4)	11(3)
N(1)	40(5)	42(5)	55(5)	-13(4)	21(4)	8(4)
C(1)	52(7)	48(7)	48(7)	5(5)	5(5)	16(5)
C(2)	41(6)	61(7)	50(7)	-22(5)	0(5)	10(5)
C(3)	37(6)	81(8)	25(6)	-7(5)	-7(5)	27(5)
C(6)	42(7)	111(9)	75(8)	-20(6)	-12(6)	9(6)
C(7)	71(7)	109(9)	40(6)	-7(6)	-6(5)	52(6)
C(5)	27(5)	45(6)	47(6)	-7(5)	4(4)	4(4)
C(4)	36(5)	48(6)	24(5)	0(4)	3(4)	6(4)
C(9)	55(6)	44(6)	55(6)	-12(5)	-4(5)	-4(5)
C(8)	82(8)	71(7)	43(7)	6(5)	2(6)	0(5)
C(10)	39(6)	25(5)	51(6)	-3(4)	-3(5)	-4(4)
C(11)	80(8)	47(7)	56(8)	1(6)	28(7)	13(6)
C(12)	95(9)	49(7)	46(7)	-5(5)	26(7)	-19(6)
C(13)	57(7)	61(7)	49(8)	0(5)	2(6)	-5(5)
C(14)	55(7)	33(6)	65(8)	-3(5)	12(6)	9(5)
C(15)	41(6)	55(6)	38(6)	-8(5)	-2(5)	-6(5)
C(16)	36(6)	42(6)	66(7)	-5(5)	14(5)	10(4)
C(17)	64(7)	41(6)	52(7)	-14(5)	10(5)	-11(5)
C(18)	74(8)	76(8)	67(8)	23(6)	7(6)	-7(6)
C(19)	97(9)	72(8)	78(8)	17(6)	-17(7)	-29(6)
C(20)	48(6)	51(6)	53(7)	-17(5)	19(5)	1(5)
C(21)	43(6)	50(6)	76(7)	-15(5)	-2(5)	16(5)
C(22)	61(7)	70(8)	87(8)	-12(6)	-7(6)	2(6)
C(23)	47(7)	79(8)	110(9)	-19(6)	5(6)	-17(6)
C(24)	62(4)	110(5)	113(5)	-16(4)	28(4)	-6(4)
C(25)	63(4)	111(5)	114(5)	-16(4)	28(3)	-6(4)
C(26)	64(4)	112(5)	115(5)	-16(4)	28(3)	-5(4)
C(27)	68(4)	116(5)	120(6)	-15(4)	29(4)	-4(4)
C(28)	56(7)	48(7)	65(7)	-11(5)	14(6)	16(5)
C(29)	48(6)	41(6)	53(6)	-3(5)	-7(5)	12(5)

C(30)	74(7)	64(8)	75(8)	7(6)	43(6)	3(6)
C(31)	72(7)	55(7)	62(7)	-6(5)	5(6)	8(5)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Bu_4N)(Mo(CO)(SePh)(S_2C_2Me_2)_2]$.

	x	y	z	U(eq)
H(4A)	2748(9)	6607(5)	-1371(5)	117
H(4B)	3457(9)	5903(5)	-1219(5)	117
H(4C)	2863(9)	6299(5)	-618(5)	117
H(5A)	1318(9)	4485(4)	-359(4)	112
H(5B)	2053(9)	5145(4)	-54(4)	112
H(5C)	2690(9)	4749(4)	-642(4)	112
H(8A)	-4186(8)	3901(4)	-3682(4)	79
H(8B)	-3142(8)	4032(4)	-4233(4)	79
H(8C)	-4645(8)	4374(4)	-4322(4)	79
H(9A)	-2188(9)	5879(4)	-4679(4)	99
H(9B)	-3569(9)	5445(4)	-4854(4)	99
H(9C)	-2068(9)	5101(4)	-4768(4)	99
H(11A)	-5083(11)	8039(4)	-191(5)	71
H(12A)	-3176(12)	7762(4)	649(5)	74
H(13A)	-1475(10)	7010(4)	385(5)	67
H(14A)	-5148(9)	7635(4)	-1299(5)	61
H(15A)	-1579(8)	6593(4)	-740(4)	54
H(16A)	-3088(8)	6809(4)	2593(4)	57
H(16B)	-3803(8)	6169(4)	2855(4)	57
H(17A)	-2931(9)	6228(4)	1517(4)	63
H(17B)	-3874(9)	5663(4)	1784(4)	63
H(18A)	-5684(10)	6459(4)	1861(5)	87
H(18B)	-4750(10)	7000(4)	1553(5)	87
H(19A)	-6498(11)	6624(4)	690(5)	127
H(19B)	-5937(11)	5888(4)	798(5)	127
H(19C)	-5001(11)	6431(4)	489(5)	127
H(20A)	-1277(9)	6832(4)	3556(4)	59
H(20B)	-2173(9)	6260(4)	3839(4)	59
H(21A)	-181(9)	5623(4)	4170(4)	69
H(21B)	761(9)	6085(4)	3759(4)	69
H(22A)	-479(10)	6602(5)	4897(5)	89
H(22B)	1006(10)	6245(5)	5029(5)	89
H(23A)	1327(9)	7398(5)	4987(5)	119
H(23B)	481(9)	7422(5)	4231(5)	119
H(23C)	1967(9)	7065(5)	4363(5)	119
H(24A)	-688(11)	6014(5)	1990(6)	112
H(24B)	370(11)	6138(5)	2673(6)	112

H(25A)	-443(10)	7275(5)	2676(5)	113
H(25B)	-1391(10)	7141(5)	1960(5)	113
H(26A)	949(10)	6898(5)	1487(5)	115
H(26B)	625(10)	7662(5)	1611(5)	115
H(27A)	2859(10)	7386(5)	2190(5)	149
H(27B)	2166(10)	6831(5)	2610(5)	149
H(27C)	1844(10)	7589(5)	2733(5)	149
H(28A)	-704(9)	5160(4)	3056(4)	67
H(28B)	-1855(9)	5143(4)	2394(4)	67
H(29A)	-2532(9)	5141(4)	3775(4)	58
H(29B)	-3665(9)	5097(4)	3104(4)	58
H(30A)	-1600(10)	4106(4)	3501(5)	82
H(30B)	-2722(10)	4063(4)	2827(5)	82
H(31A)	-3453(9)	3404(4)	3704(4)	95
H(31B)	-4551(9)	3986(4)	3522(4)	95
H(31C)	-3429(9)	4029(4)	4197(4)	95

Table 1. Crystal data and structure refinement for $(Et_4N)[Mo(CO)(SeC_6H_2\text{-}2,4,6\text{-}Pr^i_3)(S_2C_2Me_2)_2]$.

Identification code	bsl61
Empirical formula	C32 H55 Mo N O S4 Se
Formula weight	772.91
Temperature	213(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	orthorhombic, Pbcn
Unit cell dimensions	a = 25.5665(7) Å alpha = 90 deg. b = 16.8041(5) Å beta = 90 deg. c = 17.1866(5) Å gamma = 90 deg.
Volume	7383.7(4) $Å^3$
Z, Calculated density	8, 1.391 Mg/m^3
Absorption coefficient	1.592 mm^{-1}
F(000)	3216
Crystal size	0.15 x 0.20 x 0.28 mm
Theta range for data collection	1.45 to 28.30 deg.
Limiting indices	-23<=h<=33, -22<=k<=22, -22<=l<=22
Reflections collected / unique	46600 / 9118 [R(int) = 0.0608]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	9118 / 0 / 361
Goodness-of-fit on F^2	1.000
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0355, wR2 = 0.0673
R indices (all data)	R1 = 0.0713, wR2 = 0.0765
Largest diff. peak and hole	0.437 and -0.408 $e.Å^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Et_4N)[Mo(CO)(SeC_6H_2\text{-}2,4,6\text{-}Pr^i_3)(S_2C_2Me_2)_2]$. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Mo(1)	6331(1)	3281(1)	1264(1)	22(1)
S(1)	5774(1)	3110(1)	2354(1)	32(1)
S(2)	6631(1)	2036(1)	1725(1)	33(1)
S(3)	6338(1)	4632(1)	1553(1)	29(1)
S(4)	7240(1)	3524(1)	1018(1)	29(1)
Se(1)	6422(1)	2841(1)	-168(1)	27(1)
O(1)	5176(1)	3662(1)	723(1)	46(1)
N(1)	7056(1)	3737(2)	4040(1)	35(1)
C(1)	5591(1)	3504(2)	913(2)	32(1)
C(2)	5858(1)	2172(2)	2760(2)	36(1)
C(3)	6246(1)	1712(2)	2494(2)	35(1)
C(4)	6980(1)	5001(2)	1499(2)	30(1)
C(5)	7367(1)	4515(2)	1261(2)	30(1)
C(6)	5486(1)	1951(2)	3410(2)	58(1)
C(7)	6376(2)	899(2)	2827(2)	55(1)
C(8)	7045(1)	5861(2)	1726(2)	42(1)
C(9)	7933(1)	4757(2)	1188(2)	43(1)
C(10)	5742(1)	2471(2)	-530(1)	25(1)
C(11)	5415(1)	2996(2)	-946(2)	28(1)
C(12)	4934(1)	2715(2)	-1206(2)	33(1)
C(13)	4760(1)	1950(2)	-1067(2)	33(1)
C(14)	5090(1)	1449(2)	-657(2)	34(1)
C(15)	5580(1)	1685(2)	-384(2)	29(1)
C(16)	5584(1)	3840(2)	-1143(2)	36(1)
C(17)	5920(1)	3836(2)	-1870(2)	53(1)
C(18)	5136(1)	4431(2)	-1222(2)	54(1)
C(19)	4234(1)	1644(2)	-1356(2)	42(1)
C(20)	3801(1)	2241(2)	-1267(3)	72(1)
C(21)	4271(1)	1356(3)	-2186(2)	72(1)
C(22)	5912(1)	1078(2)	36(2)	32(1)
C(23)	5654(1)	790(2)	787(2)	45(1)
C(24)	6036(1)	375(2)	-498(2)	50(1)
C(25)	7353(1)	4426(2)	4387(2)	53(1)
C(26)	7296(2)	5205(3)	3951(3)	85(2)
C(27)	7156(1)	3028(2)	4572(2)	46(1)
C(28)	6924(2)	2256(2)	4301(2)	80(1)
C(29)	7230(1)	3560(2)	3215(2)	50(1)

C(30)	7803(2)	3361(3)	3124(2)	96(2)
C(31)	6478(1)	3923(2)	3990(2)	42(1)
C(32)	6219(1)	4173(2)	4742(2)	62(1)

Table 3. Bond lengths [Å]and angles [deg] for $(Et_4N)[Mo(CO)(SeC_6H_2\text{-}2,4,6\text{-}Pr^i_3)(S_2C_2Me_2)_2]$.

Mo(1)-C(1)	2.021(3)
Mo(1)-S(3)	2.3244(7)
Mo(1)-S(2)	2.3638(7)
Mo(1)-S(1)	2.3699(7)
Mo(1)-S(4)	2.3988(7)
Mo(1)-Se(1)	2.5800(3)
S(1)-C(2)	1.736(3)
S(2)-C(3)	1.736(3)
S(3)-C(4)	1.757(3)
S(4)-C(5)	1.746(3)
Se(1)-C(10)	1.949(3)
O(1)-C(1)	1.141(3)
N(1)-C(25)	1.507(4)
N(1)-C(31)	1.514(4)
N(1)-C(29)	1.516(4)
N(1)-C(27)	1.523(4)
C(2)-C(3)	1.340(4)
C(2)-C(6)	1.511(4)
C(3)-C(7)	1.517(4)
C(4)-C(5)	1.348(4)
C(4)-C(8)	1.506(4)
C(5)-C(9)	1.507(4)
C(10)-C(15)	1.408(4)
C(10)-C(11)	1.410(4)
C(11)-C(12)	1.391(4)
C(11)-C(16)	1.520(4)
C(12)-C(13)	1.382(4)
C(13)-C(14)	1.385(4)
C(13)-C(19)	1.522(4)
C(14)-C(15)	1.394(4)
C(15)-C(22)	1.511(4)
C(16)-C(17)	1.515(4)
C(16)-C(18)	1.524(4)
C(19)-C(20)	1.502(5)
C(19)-C(21)	1.509(5)
C(22)-C(23)	1.529(4)
C(22)-C(24)	1.530(4)
C(25)-C(26)	1.516(5)
C(27)-C(28)	1.501(5)
C(29)-C(30)	1.509(5)
C(31)-C(32)	1.511(5)

C(1)-Mo(1)-S(3)	83.64(8)
C(1)-Mo(1)-S(2)	124.64(8)
S(3)-Mo(1)-S(2)	142.20(3)
C(1)-Mo(1)-S(1)	72.34(8)
S(3)-Mo(1)-S(1)	87.39(3)
S(2)-Mo(1)-S(1)	79.80(3)
C(1)-Mo(1)-S(4)	145.38(9)
S(3)-Mo(1)-S(4)	82.17(2)
S(2)-Mo(1)-S(4)	83.99(3)
S(1)-Mo(1)-S(4)	137.93(3)
C(1)-Mo(1)-Se(1)	81.53(8)
S(3)-Mo(1)-Se(1)	118.85(2)
S(2)-Mo(1)-Se(1)	92.12(2)
S(1)-Mo(1)-Se(1)	140.66(2)
S(4)-Mo(1)-Se(1)	78.052(19)
C(2)-S(1)-Mo(1)	110.74(10)
C(3)-S(2)-Mo(1)	110.44(10)
C(4)-S(3)-Mo(1)	109.92(10)
C(5)-S(4)-Mo(1)	107.50(9)
C(10)-Se(1)-Mo(1)	108.39(7)
C(25)-N(1)-C(31)	110.9(2)
C(25)-N(1)-C(29)	111.8(3)
C(31)-N(1)-C(29)	105.9(2)
C(25)-N(1)-C(27)	106.2(2)
C(31)-N(1)-C(27)	111.1(2)
C(29)-N(1)-C(27)	111.0(2)
O(1)-C(1)-Mo(1)	177.2(3)
C(3)-C(2)-C(6)	125.2(3)
C(3)-C(2)-S(1)	118.6(2)
C(6)-C(2)-S(1)	116.3(2)
C(2)-C(3)-C(7)	123.6(3)
C(2)-C(3)-S(2)	119.9(2)
C(7)-C(3)-S(2)	116.5(2)
C(5)-C(4)-C(8)	125.3(3)
C(5)-C(4)-S(3)	119.3(2)
C(8)-C(4)-S(3)	115.4(2)
C(4)-C(5)-C(9)	124.5(3)
C(4)-C(5)-S(4)	120.9(2)
C(9)-C(5)-S(4)	114.6(2)
C(15)-C(10)-C(11)	120.2(2)
C(15)-C(10)-Se(1)	120.3(2)
C(11)-C(10)-Se(1)	119.5(2)
C(12)-C(11)-C(10)	118.3(2)
C(12)-C(11)-C(16)	119.8(2)

C(10)-C(11)-C(16)	121.8(2)
C(13)-C(12)-C(11)	123.1(3)
C(12)-C(13)-C(14)	117.2(3)
C(12)-C(13)-C(19)	122.8(3)
C(14)-C(13)-C(19)	120.0(3)
C(13)-C(14)-C(15)	123.1(3)
C(14)-C(15)-C(10)	118.1(3)
C(14)-C(15)-C(22)	118.3(2)
C(10)-C(15)-C(22)	123.6(2)
C(17)-C(16)-C(11)	110.0(2)
C(17)-C(16)-C(18)	110.8(3)
C(11)-C(16)-C(18)	114.4(3)
C(20)-C(19)-C(21)	110.9(3)
C(20)-C(19)-C(13)	113.1(3)
C(21)-C(19)-C(13)	111.2(3)
C(15)-C(22)-C(23)	111.9(2)
C(15)-C(22)-C(24)	110.6(2)
C(23)-C(22)-C(24)	110.5(3)
N(1)-C(25)-C(26)	114.8(3)
C(28)-C(27)-N(1)	115.1(3)
C(30)-C(29)-N(1)	115.2(3)
C(32)-C(31)-N(1)	115.8(3)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Et_4N)[Mo(CO)(SeC_6H_2\text{-}2,4,6\text{-}Pr^i_3)(S_2C_2Me_2)_2]$.

	x	y	z	U(eq)
H(6A)	5566	1425	3591	87
H(6B)	5133	1967	3220	87
H(6C)	5525	2322	3831	87
H(7A)	6140	780	3246	82
H(7B)	6728	899	3017	82
H(7C)	6340	503	2427	82
H(8A)	7406	6009	1678	63
H(8B)	6934	5933	2255	63
H(8C)	6837	6189	1390	63
H(9A)	7970	5306	1330	65
H(9B)	8046	4685	660	65
H(9C)	8143	4434	1526	65
H(12A)	4720	3058	-1487	40
H(14A)	4980	931	-559	41
H(16A)	5806	4025	-715	43
H(17A)	6202	3464	-1806	80
H(17B)	6060	4358	-1956	80
H(17C)	5710	3682	-2309	80
H(18A)	4930	4427	-755	81
H(18B)	4920	4285	-1657	81
H(18C)	5275	4955	-1305	81
H(19A)	4142	1183	-1035	50
H(20A)	3783	2413	-736	107
H(20B)	3475	2000	-1412	107
H(20C)	3868	2690	-1597	107
H(21A)	4545	968	-2227	108
H(21B)	4347	1798	-2522	108
H(21C)	3944	1120	-2337	108
H(22A)	6244	1334	175	38
H(23A)	5576	1239	1113	68
H(23B)	5887	436	1055	68
H(23C)	5335	514	663	68
H(24A)	6199	565	-965	76
H(24B)	5718	101	-627	76
H(24C)	6269	16	-236	76
H(25A)	7721	4288	4406	64
H(25B)	7235	4503	4918	64
H(26A)	7498	5610	4207	128

H(26B)	6934	5359	3944	128
H(26C)	7418	5141	3427	128
H(27A)	7531	2959	4626	55
H(27B)	7017	3149	5083	55
H(28A)	7006	1844	4668	120
H(28B)	7067	2119	3801	120
H(28C)	6551	2310	4259	120
H(29A)	7026	3118	3019	60
H(29B)	7152	4020	2893	60
H(30A)	7878	3260	2585	143
H(30B)	7884	2897	3426	143
H(30C)	8011	3801	3301	143
H(31A)	6429	4346	3612	51
H(31B)	6298	3456	3794	51
H(32A)	5855	4277	4650	92
H(32B)	6384	4645	4936	92
H(32C)	6253	3754	5119	92

Table1. Crystal Data and Structure Refinement for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$

Identification code	jpd95t
Empirical formula	$C_{12}H_{18}MoS_6$
Formula weight	450.56
Temperature	213(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	a = 7.0301(3) Å α = 83.99°
	b = 8.9791(3) Å β = 81.602(2)°
	c = 14.8274(5) Å γ =72.108(2)°
Volume, Z	879.36(6) $Å^3$, 2
Density (calculated)	1.702 mg/m^3
Absorption coefficient	1.442 mm^{-1}
F(000)	456
Crystal size	0.28 x 0.10 x 0.04 mm
θ range for data collection	1.39 to 28.33°
Limiting indices	-9 < h < 8, -11 < k < 9, -16 < &Il&: &G< 19
Reflections collected	5862
Independent reflections	4083 (R_{int} = 0.0341)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4083 / 0 / 172
Goodness-of-fit on F^2	0.951
Final R indices [I>2σ(I)]	R_1 = 0.0499, wR_2 = 0.0999
R indices (all data)	R_1 = 0.0932, wR_2 = 0.1069
Largest diff. peak and hole	1.222 and -1.062 e·$Å^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U(eq)
Mo(1)	2687(1)	9792(1)	2456(1)	27(1)
S(1)	4372(2)	11544(2)	2791(1)	33(1)
S(2)	8(2)	12150(2)	2392(1)	32(1)
S(3)	5784(2)	8829(2)	1529(1)	34(1)
S(4)	1442(2)	9238(2)	1164(1)	34(1)
S(5)	4465(2)	8201(2)	3615(1)	35(1)
S(6)	65(2)	8844(2)	3245(1)	35(1)
C(1)	2935(8)	13405(6)	2523(3)	31(1)
C(2)	1003(8)	13676(6)	2361(3)	33(1)
C(3)	3864(9)	14706(7)	2556(4)	44(2)
C(4)	-396(9)	15299(7)	2194(4)	52(2)
C(5)	5368(8)	7951(6)	642(3)	31(1)
C(6)	3450(8)	8110(6)	487(3)	31(1)
C(7)	7200(9)	7086(7)	30(4)	47(2)
C(8)	2953(9)	7451(7)	-320(4)	46(2)
C(9)	2691(8)	7790(7)	4461(3)	33(1)
C(10)	759(8)	8093(7)	4299(3)	33(1)
C(11)	3453(9)	7049(8)	5351(4)	49(2)
C(12)	-842(9)	7678(8)	4990(4)	53(2)

Table 3. Selected bond lengths (Å) for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$
Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Mo(1)-S(5)	2.3603(14)
Mo(1)-S(3)	2.3655(14)
Mo(1)-S(2)	2.366(2)
Mo(1)-S(1)	2.3672(14)
Mo(1)-S(6)	2.3697(14)
Mo(1)-S(4)	2.3762(14)
S(1)-C(1)	1.706(6)
S(2)-C(2)	1.714(6)
S(3)-C(5)	1.706(5)
S(4)-C(6)	1.716(5)
S(5)-C(9)	1.729(5)
S(6)-C(10)	1.713(5)
C(1)-C(2)	1.357(7)
C(1)-C(3)	1.511(7)
C(2)-C(4)	1.506(8)
C(5)-C(6)	1.362(7)
C(5)-C(7)	1.509(7)
C(6)-C(8)	1.518(7)
C(9)-C(10)	1.353(7)
C(9)-C(11)	1.508(7)
C(10)-C(12)	1.516(7)

Table 4. Selected bond angles (deg.) for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$
Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S(5)-Mo(1)-S(3)	83.32(5)
S(5)-Mo(1)-S(2)	135.70(5)
S(3)-Mo(1)-S(2)	133.20(5)
S(5)-Mo(1)-S(1)	82.13(5)
S(3)-Mo(1)-S(1)	80.51(5)
S(2)-Mo(1)-S(1)	81.24(5)
S(5)-Mo(1)-S(6)	81.51(5)
S(3)-Mo(1)-S(6)	138.62(6)
S(2)-Mo(1)-S(6)	81.53(5)
S(1)-Mo(1)-S(6)	134.43(5)
S(5)-Mo(1)-S(4)	133.44(6)
S(3)-Mo(1)-S(4)	81.08(5)
S(2)-Mo(1)-S(4)	83.71(5)
S(1)-Mo(1)-S(4)	136.95(5)
S(6)-Mo(1)-S(4)	81.99(5)
C(1)-S(1)-Mo(1)	107.8(2)
C(2)-S(2)-Mo(1)	107.6(2)
C(5)-S(3)-Mo(1)	108.5(2)
C(6)-S(4)-Mo(1)	107.6(2)
C(9)-S(5)-Mo(1)	107.0(2)
C(10)-S(6)-Mo(1)	107.1(2)
C(2)-C(1)-C(3)	122.9(5)
C(2)-C(1)-S(1)	120.2(4)
C(3)-C(1)-S(1)	116.7(4)
C(1)-C(2)-C(4)	122.9(5)
C(1)-C(2)-S(2)	120.4(4)
C(4)-C(2)-S(2)	116.6(4)
C(6)-C(5)-C(7)	123.1(5)
C(6)-C(5)-S(3)	120.1(4)
C(7)-C(5)-S(3)	116.8(4)
C(5)-C(6)-C(8)	123.3(5)
C(5)-C(6)-S(4)	120.2(4)
C(8)-C(6)-S(4)	116.3(4)
C(10)-C(9)-C(11)	123.6(5)
C(10)-C(9)-S(5)	120.4(4)
C(11)-C(9)-S(5)	116.0(4)
C(9)-C(10)-C(12)	123.0(5)
C(9)-C(10)-S(6)	120.1(4)
C(12)-C(10)-S(6)	116.7(4)

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[(ha^*)^2U_{11} + ... + 2hka^*b^*U_{12}]$

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo(1)	31(1)	29(1)	21(1)	-3(1)	-3(1)	-8(1)
S(1)	34(1)	33(1)	34(1)	-5(1)	-7(1)	-11(1)
S(2)	31(1)	33(1)	30(1)	-5(1)	-4(1)	-7(1)
S(3)	31(1)	39(1)	31(1)	-7(1)	-3(1)	-9(1)
S(4)	34(1)	41(1)	28(1)	-8(1)	-6(1)	-9(1)
S(5)	36(1)	42(1)	29(1)	4(1)	-7(1)	-13(1)
S(6)	35(1)	42(1)	29(1)	1(1)	-5(1)	-16(1)
C(1)	41(3)	33(3)	20(3)	-5(2)	5(2)	-17(3)
C(2)	42(3)	32(3)	20(3)	-2(2)	-4(2)	-5(3)
C(3)	46(4)	35(4)	52(4)	-5(3)	-9(3)	-14(3)
C(4)	54(4)	36(4)	66(4)	-5(3)	-15(3)	-10(3)
C(5)	47(4)	29(3)	17(3)	1(2)	2(2)	-15(3)
C(6)	45(4)	26(3)	20(3)	-1(2)	-2(2)	-8(3)
C(7)	52(4)	46(4)	36(3)	-7(3)	4(3)	-6(3)
C(8)	60(4)	52(4)	29(3)	-11(3)	1(3)	-23(4)
C(9)	41(3)	39(4)	21(3)	-3(3)	-2(2)	-16(3)
C(10)	36(3)	41(4)	23(3)	-7(3)	1(2)	-16(3)
C(11)	55(4)	62(5)	25(3)	10(3)	-13(3)	-12(4)
C(12)	57(4)	74(5)	30(3)	2(3)	1(3)	-26(4)

Table 6. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $[Mo^{VI}(S_2C_2Me_2)_3]$

H atom	x	y	z	U(eq)
H(3A)	5250(9)	14257(7)	2680(4)	65
H(3B)	3111(9)	15385(7)	3035(4)	65
H(3C)	3828(9)	15309(7)	1973(4)	65
H(4A)	-1698(9)	15227(7)	2093(4)	78
H(4B)	163(9)	15814(7)	1659(4)	78
H(4C)	-556(9)	15901(7)	2721(4)	78
H(7A)	8406(9)	7118(7)	262(4)	71
H(7B)	7154(9)	7581(7)	-584(4)	71
H(7C)	7216(9)	6004(7)	17(4)	71
H(8A)	1503(9)	7697(7)	-296(4)	68
H(8B)	3554(9)	6322(7)	-296(4)	68
H(8C)	3482(9)	7913(7)	-884(4)	68
H(11A)	4876(9)	6946(8)	5315(4)	73
H(11B)	3254(9)	6020(8)	5465(4)	73
H(11C)	2718(9)	7704(8)	5844(4)	73
H(12A)	-2112(9)	7993(8)	4736(4)	79
H(12B)	-994(9)	8220(8)	5541(4)	79
H(12C)	-444(9)	6555(8)	5137(4)	79

Table 1. Crystal data and structure refinement for $(Et_4N)[Mo(S_2C_2Me_2)_3]\cdot MeCN$.

Identification code	bsl46a
Empirical formula	C22 H41 Mo N2 S6
Formula weight	621.87
Temperature	213(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	monoclinic
Space group	P2(1)/n
Unit cell dimensions	a = 9.6185(14) Å alpha = 90 deg.
	b = 24.159(3) Å beta = 105.347(12) deg.
	c = 13.256(2) Å gamma = 90 deg.
Volume, Z	2970.4(7) $Å^3$, 4
Density (calculated)	1.391 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.877 mm^{-1}
F(000)	1300
Crystal size	0.01 x 0.20 x 0.25 mm
Theta range for data collection	1.69 to 22.50 deg.
Limiting indices	-10<=h<=12, -31<=k<=30, -14<=l<=17
Reflections collected	12646
Independent reflections	3885 [R(int) = 0.0523]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3881 / 8 / 281
Goodness-of-fit on F^2	1.025
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0438, wR2 = 0.1161
R indices (all data)	R1 = 0.0745, wR2 = 0.1319
Largest diff. peak and hole	0.801 and -0.748 $e.Å^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Et_4N)[Mo(S_2C_2Me_2)_3]\cdot MeCN$. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Mo(1)	-4880(1)	3444(1)	5970(1)	40(1)
S(1)	-7260(2)	3637(1)	6079(1)	59(1)
S(2)	-4380(2)	3719(1)	7750(1)	56(1)
S(3)	-6050(2)	2697(1)	4918(2)	66(1)
S(4)	-3172(2)	2736(1)	6624(2)	63(1)
S(5)	-5630(2)	3949(1)	4381(1)	59(1)
S(6)	-2762(2)	3969(1)	6073(2)	65(1)
N(1)	-1748(5)	3070(2)	3145(4)	46(1)
C(3)	-5005(8)	2107(3)	5208(6)	58(2)
C(4)	-3721(8)	2127(3)	5956(6)	55(2)
C(9)	-5580(10)	1597(3)	4579(7)	90(3)
C(10)	-2734(9)	1636(3)	6266(7)	80(2)
C(1)	-7208(7)	3912(3)	7294(5)	54(2)
C(2)	-5935(7)	3953(3)	8026(5)	51(2)
C(7)	-8636(8)	4104(4)	7436(7)	89(3)
C(8)	-5764(9)	4202(3)	9093(6)	82(2)
C(5)	-4286(7)	4412(3)	4297(5)	49(2)
C(6)	-3023(7)	4419(3)	5043(5)	52(2)
C(11)	-4650(8)	4783(3)	3350(6)	75(2)
C(12)	-1812(7)	4819(3)	5047(7)	76(2)
C(13)	-3107(9)	2988(4)	3438(7)	63(3)
C(13A)	-2431(9)	2550(4)	2539(7)	63(3)
C(14)	-3943(9)	2438(4)	2879(8)	105(3)
C(15)	-1018(10)	3583(4)	3661(8)	66(3)
C(15A)	-449(10)	3203(4)	2895(8)	66(3)
C(16)	328(8)	3746(4)	3399(7)	90(3)
C(17)	-1987(10)	3103(5)	1970(7)	68(3)
C(17A)	-2878(10)	3546(5)	2880(7)	68(3)
C(18)	-3072(11)	3618(4)	1552(8)	139(5)
C(19)	-718(10)	2577(4)	3452(8)	65(3)
C(19A)	-1573(10)	2976(4)	4340(8)	65(3)
C(20)	-363(10)	2480(4)	4682(7)	104(3)
C(21)	3362(13)	82(5)	3563(14)	203(6)
C(22)	4824(13)	-130(5)	3800(15)	203(6)
N(2)	5971(14)	-292(6)	4115(17)	517(27)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for $(Et_4N)[Mo(S_2C_2Me_2)_3]\cdot MeCN$.

Mo(1)-S(4)	2.371(2)
Mo(1)-S(6)	2.372(2)
Mo(1)-S(3)	2.375(2)
Mo(1)-S(5)	2.375(2)
Mo(1)-S(2)	2.375(2)
Mo(1)-S(1)	2.378(2)
S(1)-C(1)	1.730(7)
S(2)-C(2)	1.727(7)
S(3)-C(3)	1.728(7)
S(4)-C(4)	1.726(7)
S(5)-C(5)	1.734(6)
S(6)-C(6)	1.711(7)
N(1)-C(15A)	1.413(11)
N(1)-C(13)	1.472(10)
N(1)-C(15)	1.499(10)
N(1)-C(17)	1.515(10)
N(1)-C(19)	1.533(10)
N(1)-C(13A)	1.540(11)
N(1)-C(17A)	1.558(12)
N(1)-C(19A)	1.565(11)
C(3)-C(4)	1.364(9)
C(3)-C(9)	1.510(9)
C(4)-C(10)	1.508(9)
C(1)-C(2)	1.350(9)
C(1)-C(7)	1.509(9)
C(2)-C(8)	1.505(9)
C(5)-C(6)	1.348(9)
C(5)-C(11)	1.506(9)
C(6)-C(12)	1.512(9)
C(13)-C(14)	1.627(12)
C(13A)-C(14)	1.655(11)
C(15)-C(16)	1.480(12)
C(15A)-C(16)	1.570(12)
C(17)-C(18)	1.625(13)
C(17A)-C(18)	1.729(14)
C(19)-C(20)	1.592(13)
C(19A)-C(20)	1.648(12)
C(21)-C(22)	1.4505(11)
C(22)-N(2)	1.1410(11)
S(4)-Mo(1)-S(6)	82.13(7)
S(4)-Mo(1)-S(3)	80.86(7)

S(6)-Mo(1)-S(3)	134.94(8)
S(4)-Mo(1)-S(5)	135.49(7)
S(6)-Mo(1)-S(5)	80.29(6)
S(3)-Mo(1)-S(5)	83.34(7)
S(4)-Mo(1)-S(2)	84.24(7)
S(6)-Mo(1)-S(2)	81.28(7)
S(3)-Mo(1)-S(2	137.36(7)
S(5)-Mo(1)-S(2)	132.23(7)
S(4)-Mo(1)-S(1)	134.78(7)
S(6)-Mo(1)-S(1)	135.85(8)
S(3)-Mo(1)-S(1)	82.56(7)
S(5)-Mo(1)-S(1)	83.22(6)
S(2)-Mo(1)-S(1)	80.21(6)
C(1)-S(1)-Mo(1)	109.9(2)
C(2)-S(2)-Mo(1)	110.0(2)
C(3)-S(3)-Mo(1)	109.8(3)
C(4)-S(4)-Mo(1)	109.8(3)
C(5)-S(5)-Mo(1)	109.4(2)
C(6)-S(6)-Mo(1)	110.5(2)
C(13)-N(1)-C(15)	109.4(6)
C(13)-N(1)-C(17)	112.0(6)
C(15)-N(1)-C(17)	110.5(7)
C(13)-N(1)-C(19)	112.5(6)
C(15)-N(1)-C(19)	109.2(6)
C(17)-N(1)-C(19)	103.0(6)
C(15A)-N(1)-C(13A)	110.2(6)
C(15A)-N(1)-C(17A)	112.7(6)
C(13A)-N(1)-C(17A)	108.0(6)
C(15A)-N(1)-C(19A)	114.0(6)
C(13A)-N(1)-C(19A)	109.1(6)
C(17A)-N(1)-C(19A)	102.5(5)
C(4)-C(3)-C(9)	124.0(7)
C(4)-C(3)-S(3)	119.6(5)
C(9)-C(3)-S(3)	116.4(6)
C(3)-C(4)-C(10)	123.6(7)
C(3)-C(4)-S(4)	119.9(5)
C(10)-C(4)-S(4)	116.5(6)
C(2)-C(1)-C(7)	124.7(7)
C(2)-C(1)-S(1)	119.6(5)
C(7)-C(1)-S(1)	115.6(6)
C(1)-C(2)-C(8)	123.9(6)
C(1)-C(2)-S(2)	119.7(5)
C(8)-C(2)-S(2)	116.4(5)
C(6)-C(5)-C(11)	124.7(6)
C(6)-C(5)-S(5)	120.2(5)

C(11)-C(5)-S(5)	115.1(5)
C(5)-C(6)-C(12)	123.7(6)
C(5)-C(6)-S(6)	119.4(5)
C(12)-C(6)-S(6)	116.9(5)
N(1)-C(13)-C(14)	110.9(7)
N(1)-C(13A)-C(14)	106.0(6)
C(16)-C(15)-N(1)	116.5(8)
N(1)-C(15A)-C(16)	116.2(7)
N(1)-C(17)-C(18)	107.5(8)
N(1)-C(17A)-C(18)	100.7(6)
N(1)-C(19)-C(20)	109.5(7)
N(1)-C(19A)-C(20)	105.2(6)
N(2)-C(22)-C(21)	171(2)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for$(Et_4N)[Mo(S_2C_2Me_2)_3]\cdot MeCN$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo(1)	29(1)	49(1)	40(1)	1(1)	7(1)	-1(1)
S(1)	31(1)	94(2)	50(1)	2(1)	9(1)	1(1)
S(2)	42(1)	77(1)	44(1)	-8(1)	3(1)	5(1)
S(3)	62(1)	63(1)	62(1)	-12(1)	-5(1)	-4(1)
S(4)	48(1)	60(1)	70(1)	-6(1)	-1(1)	12(1)
S(5)	37(1)	82(1)	54(1)	18(1)	6(1)	-6(1)
S(6)	35(1)	89(1)	65(1)	14(1)	2(1)	-16(1)
N(1)	41(3)	56(4)	38(3)	-6(3)	7(3)	-2(3)
C(3)	68(5)	48(4)	60(5)	-2(4)	24(4)	-7(4)
C(4)	61(5)	46(4)	66(5)	7(4)	33(4)	5(4)
C(9)	110(7)	64(5)	97(7)	-18(5)	31(6)	-25(5)
C(10)	76(6)	65(5)	108(7)	11(5)	38(5)	9(4)
C(1)	46(4)	64(5)	56(4)	18(4)	20(4)	12(3)
C(2)	57(5)	53(4)	45(4)	6(3)	17(4)	8(3)
C(7)	62(5)	125(8)	89(6)	25(6)	35(5)	40(5)
C(8)	105(7)	89(6)	54(5)	-4(5)	25(5)	20(5)
C(5)	52(4)	43(4)	57(4)	5(3)	23(4)	1(3)
C(6)	39(4)	53(4)	66(5)	-3(4)	18(4)	-3(3)
C(11)	71(5)	75(5)	85(6)	28(5)	30(5)	7(4)
C(12)	56(5)	72(5)	106(7)	-1(5)	30(5)	-16(4)
C(13)	51(6)	87(8)	53(6)	-2(5)	17(5)	2(5)
C(13A)	51(6)	87(8)	53(6)	-2(5)	17(5)	2(5)
C(14)	69(6)	120(8)	119(8)	10(7)	14(6)	-41(5)
C(15)	57(6)	66(7)	67(7)	-11(5)	3(5)	-3(5)
C(15A)	57(6)	66(7)	67(7)	-11(5)	3(5)	-3(5)
C(16)	66(5)	108(7)	85(6)	3(6)	-1(5)	-30(5)
C(17)	51(6)	107(9)	45(6)	-6(6)	13(5)	-10(5)
C(17A)	51(6)	107(9)	45(6)	-6(6)	13(5)	-10(5)
C(18)	116(9)	128(9)	131(10)	77(8)	-43(7)	-12(7)
C(19)	56(6)	62(7)	74(7)	-7(5)	12(5)	9(5)
C(19A)	56(6)	62(7)	74(7)	-7(5)	12(5)	9(5)
C(20)	93(7)	115(8)	82(6)	33(6)	-14(5)	-3(6)
C(21)	173(10)	77(6)	297(13)	13(8)	-44(11)	-2(6)
C(22)	174(10)	78(6)	297(13)	13(8)	-43(11)	-2(6)
N(2)	671(42)	164(14)	991(69)	283(25)	704(51)	231(20)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $(Et_4N)[Mo(S_2C_2Me_2)_3]\cdot MeCN$.

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	-6496(10)	1679(3)	4101(7)	135
H(3B)	-5693(10)	1305(3)	5042(7)	135
H(3C)	-4915(10)	1482(3)	4192(7)	135
H(4A)	-1896(9)	1744(3)	6804(7)	121
H(4B)	-2446(9)	1505(3)	5669(7)	121
H(4C)	-3232(9)	1346(3)	6524(7)	121
H(7A)	-9384(8)	4031(4)	6810(7)	134
H(7B)	-8593(8)	4495(4)	7578(7)	134
H(7C)	-8841(8)	3910(4)	8012(7)	134
H(8A)	-4769(9)	4188(3)	9480(6)	123
H(8B)	-6334(9)	3997(3)	9459(6)	123
H(8C)	-6082(9)	4580(3)	9021(6)	123
H(11A)	-5607(8)	4701(3)	2934(6)	113
H(11B)	-3975(8)	4721(3)	2943(6)	113
H(11C)	-4601(8)	5162(3)	3571(6)	113
H(12A)	-1020(7)	4750(3)	5648(7)	114
H(12B)	-2147(7)	5191(3)	5073(7)	114
H(12C)	-1500(7)	4769(3)	4422(7)	114
H(13A)	-3721(9)	3309(4)	3230(7)	76
H(13B)	-2903(9)	2950(4)	4192(7)	76
H(13A)	-1785(9)	2236(4)	2728(7)	76
H(13B)	-2632(9)	2610(4)	1791(7)	76
H(14A)	-4823(9)	2389(4)	3082(8)	158
H(14B)	-4160(9)	2479(4)	2134(8)	158
H(14C)	-3337(9)	2120(4)	3091(8)	158
H(14D)	-4439(9)	2117(4)	2533(8)	158
H(14E)	-3713(9)	2385(4)	3623(8)	158
H(14F)	-4551(9)	2757(4)	2691(8)	158
H(15A)	-1695(10)	3888(4)	3480(8)	79
H(15B)	-802(10)	3532(4)	4413(8)	79
H(15A)	-653(10)	3236(4)	2140(8)	79
H(15B)	213(10)	2895(4)	3103(8)	79
H(16A)	694(8)	4079(4)	3770(7)	135
H(16B)	1030(8)	3457(4)	3600(7)	135
H(16C)	133(8)	3810(4)	2660(7)	135
H(16D)	1185(8)	3796(4)	3168(7)	135
H(16E)	-293(8)	4061(4)	3194(7)	135

H(16F)	584(8)	3710(4)	4147(7)	135
H(17A)	-2407(10)	2761(5)	1643(7)	81
H(17B)	-1077(10)	3162(5)	1800(7)	81
H(17A)	-2526(10)	3883(5)	3259(7)	81
H(17B)	-3779(10)	3438(5)	3022(7)	81
H(18A)	-3249(11)	3646(4)	806(8)	209
H(18B)	-3968(11)	3561(4)	1727(8)	209
H(18C)	-2631(11)	3954(4)	1872(8)	209
H(18D)	-3759(11)	3903(4)	1264(8)	209
H(18E)	-2150(11)	3716(4)	1452(8)	209
H(18F)	-3387(11)	3274(4)	1205(8)	209
H(19A)	166(10)	2650(4)	3254(8)	78
H(19B)	-1159(10)	2247(4)	3086(8)	78
H(19A)	-2483(10)	2862(4)	4460(8)	78
H(19B)	-1252(10)	3312(4)	4733(8)	78
H(20A)	273(10)	2168(4)	4864(7)	156
H(20B)	98(10)	2803(4)	5041(7)	156
H(20C)	-1235(10)	2408(4)	4882(7)	156
H(20D)	-213(10)	2400(4)	5412(7)	156
H(20E)	-693(10)	2153(4)	4279(7)	156
H(20F)	527(10)	2601(4)	4556(7)	156
H(21A)	2814(13)	-73(5)	2912(14)	304
H(21B)	3381(13)	478(5)	3505(14)	304
H(21C)	2924(13)	-18(5)	4109(14)	304