JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
J. Am. Chem. Soc., 1996, 118(50), 12665-12672, DOI:10.1021/ja9617799

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html

ACS Publications
MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

Table 6. Atomic Coordinates and Isotropic Displacement Coefficients for Non-Hydrogen Atoms in [(salen)VOVO(salen)][I_3] (**III**) with Estimated Standard Deviations in Parentheses

atom	*x*	*y*	*z*	*B*(eq)[a]
The Cation				
V(1)	0.1023(1)	0.0579(1)	0.1557(1)	2.18(4)
V(2)	0.3589(1)	0.0898(1)	0.3843(2)	2.29(4)
V(3)	0.4014(1)	0.4369(1)	0.3532(2)	2.63(5)
V(4)	0.1435(1)	0.4149(1)	0.1240(2)	2.69(5)
O(1)	0.1393(6)	0.0213(4)	0.0373(6)	3.2(2)
O(2)	0.0394(5)	0.1383(4)	0.0984(6)	2.8(2)
O(3)	0.2043(5)	0.0801(4)	0.2616(6)	2.7(2)
O(4)	0.3890(5)	0.0615(4)	0.2658(6)	2.9(2)
O(5)	0.3251(5)	0.1850(4)	0.4024(6)	2.7(2)
O(6)	0.4671(6)	0.0898(4)	0.4748(6)	3.7(2)
O(7)	0.3795(6)	0.5325(4)	0.4319(8)	4.3(2)
O(8)	0.4688(6)	0.4745(4)	0.2934(6)	2.8(2)
O(9)	0.2942(6)	0.4136(4)	0.2593(7)	3.6(2)
O(10)	0.1034(6)	0.4468(4)	0.2365(6)	3.0(2)
O(11)	0.1661(6)	0.3177(4)	0.0992(7)	3.6(2)
O(12)	0.0389(6)	0.4215(4)	0.0293(7)	3.8(2)
N(1)	0.0863(7)	-0.0448(5)	0.1473(7)	2.7(2)
N(2)	-0.0006(7)	0.0712(5)	0.2190(8)	3.1(2)
N(3)	0.3455(6)	-0.0182(5)	0.3641(7)	2.4(2)
N(4)	0.2841(7)	0.0895(5)	0.4783(7)	2.7(2)
N(5)	0.4116(7)	0.4020(5)	0.4804(8)	3.1(2)
N(6)	0.4914(7)	0.3447(5)	0.3444(7)	2.9(2)
N(7)	0.1700(7)	0.5217(5)	0.1515(7)	2.8(2)
N(8)	0.2331(7)	0.4100(5)	0.0413(7)	2.8(2)
C(1)	0.1985(8)	-0.0368(6)	0.0252(8)	2.8(3)
C(2)	0.255(1)-	0.0390(7)	-0.032(1)	4.0(3)
C(3)	0.320(1)-	0.0984(8)	-0.042(1)	4.8(4)
C(4)	0.327(1)-	0.1564(8)	-0.001(1)	4.9(4)
C(5)	0.266(1)-	0.1553(7)	0.051(1)	4.2(3)
C(6)	0.2017(9)	-0.0972(6)	0.0647(9)	3.1(3)
C(7)	0.136(1)-	0.1002(7)	0.114(1)	3.3(3)

Table 6. (Continued)

atom	*x*	*y*	*z*	*B*(eq)
C(8)	0.014(1)	-0.0577(8)	0.183(1)	4.3(4)
C(9)	-0.002(1)	0.0100(8)	0.261(1)	4.4(4)
C(10)	-0.0546(8)	0.1282(8)	0.234(1)	3.6(3)
C(11)	-0.0615(8)	0.1913(7)	0.196(1)	3.1(3)
C(12)	-0.122(1)	0.2503(9)	0.223(1)	4.9(4)
C(13)	-0.133(1)	0.3112(8)	0.187(1)	5.0(4)
C(14)	-0.087(1)	0.3110(7)	0.122(1)	4.8(4)
C(15)	-0.0289(9)	0.2541(7)	0.093(1)	3.6(3)
C(16)	-0.0144(8)	0.1931(7)	0.131(1)	3.1(3)
C(17)	0.4538(8)	0.0085(6)	0.249(1)	2.9(3)
C(18)	0.517(1)	0.0171(7)	0.206(1)	3.7(3)
C(19)	0.583(1)-	0.0386(9)	0.185(1)	4.7(4)
C(20)	0.584(1)-	0.1029(8)	0.206(1)	4.3(4)
C(21)	0.523(1)-	0.1128(6)	0.249(1)	3.5(3)
C(22)	0.4568(8)	-0.0565(6)	0.273(1)	2.8(3)
C(23)	0.3925(8)	-0.0674(6)	0.3200(9)	2.5(3)
C(24)	0.2873(8)	-0.0380(6)	0.4111(9)	2.7(3)
C(25)	0.2958(9)	0.0214(6)	0.510(1)	3.3(3)
C(26)	0.222(1)	0.1391(7)	0.5011(9)	3.1(3)
C(27)	0.1983(9)	0.2060(6)	0.4675(9)	2.9(3)
C(28)	0.122(1)	0.2509(7)	0.486(1)	3.8(3)
C(29)	0.093(1)	0.3133(7)	0.452(1)	4.2(4)
C(30)	0.140(1)	0.3311(7)	0.398(1)	4.1(3)
C(31)	0.217(1)	0.2879(6)	0.378(1)	3.2(3)
C(32)	0.2471(8)	0.2254(6)	0.4146(9)	2.5(3)
C(33)	0.314(1)	0.5472(6)	0.475(1)	3.1(3)
C(34)	0.257(1)	0.6102(8)	0.474(1)	4.8(4)
C(35)	0.189(1)	0.6269(9)	0.520(1)	5.9(5)
C(36)	0.177(1)	0.579(1)	0.568(1)	6.3(5)
C(37)	0.235(1)	0.518(1)	0.575(1)	5.7(5)
C(38)	0.302(1)	0.4978(7)	0.526(1)	3.6(3)
C(39)	0.362(1)	0.4328(8)	0.537(1)	4.3(4)
C(40)	0.476(1)	0.3384(7)	0.502(1)	3.7(3)
C(41)	0.483(1)	0.2945(7)	0.400(1)	4.1(3)

Table 6. (Continued)

atom	x	y	z	B(eq)
C(42)	0.5467(9)	0.3274(6)	0.292(1)	3.3(3)
C(43)	0.5558(8)	0.3707(6)	0.229(1)	2.9(3)
C(44)	0.609(1)	0.3377(8)	0.161(1)	4.5(4)
C(45)	0.616(1)	0.376(1)	0.097(1)	5.1(4)
C(46)	0.577(1)	0.444(1)	0.101(1)	5.7(5)
C(47)	0.528(1)	0.4773(8)	0.166(1)	4.0(3)
C(48)	0.5134(8)	0.4397(6)	0.2297(9)	2.7(3)
C(49)	0.0392(9)	0.5022(6)	0.246(1)	2.9(3)
C(50)	-0.029(1)	0.5000(7)	0.284(1)	4.2(4)
C(51)	-0.094(1)	0.5581(8)	0.296(1)	4.9(4)
C(52)	-0.089(1)	0.6192(8)	0.273(1)	4.8(4)
C(53)	-0.021(1)	0.6253(7)	0.235(1)	4.2(4)
C(54)	0.0457(8)	0.5657(7)	0.221(1)	3.2(3)
C(55)	0.118(1)	0.5742(6)	0.185(1)	3.1(3)
C(56)	0.2428(9)	0.5342(6)	0.116(1)	3.4(3)
C(57)	0.233(1)	0.4777(7)	0.015(1)	4.0(4)
C(58)	0.293(1)	0.3571(6)	0.025(1)	3.2(3)
C(59)	0.3017(9)	0.2893(6)	0.049(1)	3.1(3)
C(60)	0.373(1)	0.2375(7)	0.030(1)	3.7(3)
C(61)	0.384(1)	0.1740(7)	0.054(1)	4.1(3)
C(62)	0.318(1)	0.1564(7)	0.089(1)	4.1(4)
C(63)	0.248(1)	0.2044(7)	0.106(1)	4.1(4)
C(64)	0.2365(9)	0.2713(6)	0.085(1)	3.0(3)
The Anion				
I(1)	0.74615(8)	0.25110(5)	0.7246(1)	5.40(3)
I(2)	0.56976(7)	0.29642(5)	0.77044(7)	4.09(2)
I(3)	0.37810(8)	0.32886(6)	0.7846(1)	6.01(3)
I(4)	1.12979(8)	0.16444(7)	0.7426(1)	6.06(3)
I(5)	0.93797(7)	0.15249(6)	0.56050(8)	4.89(3)
I(6)	0.74390(8)	0.14322(7)	0.3765(1)	6.56(3)

[a] $B(\mathrm{eq}) = 8\pi^2/3\{U_{11}(aa^*)^2 + U_{22}(bb^*)^2 + U_{33}(cc^*)^2 + 2U_{12}aa^*bb^*\cos\gamma + 2U_{13}aa^*cc^*\cos\beta + 2U_{23}bb^*cc^*\cos\alpha\}$

Table 7. Atomic Coordinates and Isotropic Displacement Coefficients for Non-Hydrogen Atoms in [(salen)VOVO(salen)][ClO_4] (**IV**) with Estimated Standard Deviations in Parentheses

atom	*x*	*y*	*z*	*B*(eq)[a]
The Cation				
V(1)	0.86695(6)	0.42219(5)	0.84247(6)	3.76(2)
V(2)	0.69726(6)	0.39632(5)	0.53083(7)	4.05(2)
O(1)	1.0031(2)	0.5142(2)	0.8448(3)	4.69(7)
O(2)	0.9523(2)	0.3151(2)	0.8133(3)	4.32(6)
O(3)	0.7864(2)	0.4005(2)	0.7123(3)	4.39(6)
O(4)	0.8280(2)	0.4860(2)	0.5403(3)	4.52(7)
O(5)	0.7282(3)	0.2670(2)	0.4593(3)	4.64(7)
O(6)	0.6242(3)	0.4020(2)	0.4131(3)	5.34(7)
N(1)	0.8215(3)	0.5489(3)	0.9789(3)	4.21(8)
N(2)	0.7633(3)	0.3551(3)	0.9393(3)	4.22(8)
N(3)	0.6432(3)	0.5254(3)	0.6606(3)	4.20(8)
N(4)	0.5649(3)	0.3307(3)	0.6057(3)	4.30(8)
C(1)	1.0029(4)	0.6066(3)	0.8430(4)	4.3(1)
C(2)	1.0856(4)	0.6456(3)	0.7803(4)	4.8(1)
C(3)	1.0889(4)	0.7408(4)	0.7779(4)	5.3(1)
C(4)	1.0148(5)	0.8043(4)	0.8404(5)	5.8(1)
C(5)	0.9340(4)	0.7694(3)	0.9043(4)	5.1(1)
C(6)	0.9262(4)	0.6709(3)	0.9056(4)	4.1(1)
C(7)	0.8479(4)	0.6408(3)	0.9832(4)	4.4(1)
C(8)	0.7533(4)	0.5308(4)	1.0753(4)	5.1(1)
C(9)	0.6863(4)	0.4209(4)	1.0140(5)	5.5(1)
C(10)	0.7568(4)	0.2626(3)	0.9323(4)	4.7(1)
C(11)	0.8273(4)	0.1907(3)	0.8665(4)	4.4(1)
C(12)	0.8052(5)	0.0903(4)	0.8627(5)	5.7(1)
C(13)	0.8711(5)	0.0198(4)	0.8084(5)	6.3(1)
C(14)	0.9648(5)	0.0487(4)	0.7546(5)	6.3(1)
C(15)	0.9911(4)	0.1467(3)	0.7547(4)	5.1(1)
C(16)	0.9227(4)	0.2203(3)	0.8112(4)	4.3(1)
C(17)	0.8366(4)	0.5784(3)	0.5325(4)	4.1(1)
C(18)	0.9229(4)	0.6099(3)	0.4698(4)	4.8(1)
C(19)	0.9303(5)	0.7049(3)	0.4614(4)	5.5(1)
C(20)	0.8558(5)	0.7704(3)	0.5180(5)	5.9(1)

Table 7. (Continued)

atom	x	y	z	B(eq)
C(21)	0.7729(4)	0.7410(3)	0.5835(5)	5.4(1)
C(22)	0.7604(4)	0.6445(3)	0.5906(4)	4.3(1)
C(23)	0.6744(4)	0.6157(4)	0.6626(4)	4.6(1)
C(24)	0.5568(4)	0.5059(3)	0.7403(4)	4.9(1)
C(25)	0.4846(4)	0.4004(4)	0.6614(5)	5.3(1)
C(26)	0.5576(4)	0.2440(4)	0.6171(4)	4.7(1)
C(27)	0.6324(4)	0.1711(3)	0.5686(4)	4.3(1)
C(28)	0.6179(4)	0.0818(4)	0.5945(4)	5.3(1)
C(29)	0.6831(5)	0.0076(3)	0.5432(5)	5.4(1)
C(30)	0.7633(5)	0.0213(4)	0.4654(5)	5.8(1)
C(31)	0.7789(4)	0.1080(4)	0.4382(5)	5.5(1)
C(32)	0.7149(4)	0.1842(3)	0.4899(4)	4.2(1)
The Anion				
Cl(1)	0.3935(1)	0.2014(1)	0.9145(1)	6.87(4)
O(7)	0.369(1)	0.2431(9)	0.829(1)	14.3(3)
O(7')	0.424(1)	0.310(1)	0.929(2)	11.0(5)
O(8)	0.429(1)	0.268(1)	1.034(1)	15.8(4)
O(8')	0.375(2)	0.235(2)	1.042(2)	13.0(6)
O(9')	0.299(2)	0.160(2)	0.834(2)	25.2(8)
O(9)	0.2986(7)	0.1332(8)	0.917(1)	10.8(3)
O(10)	0.4827(4)	0.1486(4)	0.8720(5)	10.4(1)
Disordered Acetonitrile Solvent Molecule				
C(33)	0.5085(5)	0.1210(5)	0.2227(6)	7.2(2)
C(34)	0.5988(5)	0.1085(6)	0.1455(7)	9.1(2)
N(5)	0.4382(5)	0.1313(5)	0.2870(6)	10.0(2)

[a] $B(\text{eq}) = 8\pi^2/3\{U_{11}(aa^*)^2 + U_{22}(bb^*)^2 + U_{33}(cc^*)^2 + 2U_{12}aa^*bb^*\cos\gamma + 2U_{13}aa^*cc^*\cos\beta + 2U_{23}bb^*cc^*\cos\alpha\}$

Table 8. Anisotropic Displacement Parameters for [(salen)VOVO(salen)][I_3] (III)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
I(1)	0.0796(7)	0.0412(6)	0.1024(9)	-0.0060(5)	0.0535(7)	0.0158(5)
I(2)	0.0669(6)	0.0479(5)	0.0469(6)	-0.0047(4)	0.0230(5)	0.0198(4)
I(3)	0.0706(8)	0.0882(9)	0.0866(8)	0.0026(6)	0.0468(7)	0.0261(6)
I(4)	0.0527(7)	0.1069(9)	0.0835(8)	-0.0075(6)	0.0274(6)	0.0404(7)
I(5)	0.0594(6)	0.0716(7)	0.0698(7)	-0.0053(5)	0.0344(5)	0.0247(5)
I(6)	0.0678(8)	0.1066(10)	0.0737(8)	-0.0143(7)	0.0219(6)	0.0256(7)
V(1)	0.026(1)	0.032(1)	0.026(1)	0.0003(8)	0.0120(9)	0.0065(9)
V(2)	0.026(1)	0.030(1)	0.032(1)	-0.0018(8)	0.0104(9)	0.0115(9)
V(3)	0.043(1)	0.029(1)	0.041(1)	0.0070(9)	0.029(1)	0.0135(9)
V(4)	0.037(1)	0.030(1)	0.045(1)	0.0022(9)	0.024(1)	0.0142(10)
O(1)	0.051(5)	0.043(5)	0.035(5)	0.018(4)	0.028(4)	0.017(4)
O(2)	0.036(5)	0.035(5)	0.033(5)	0.004(4)	0.013(4)	0.009(4)
O(3)	0.029(4)	0.038(5)	0.039(5)	0.005(4)	0.015(4)	0.013(4)
O(4)	0.036(5)	0.041(5)	0.045(5)	0.006(4)	0.021(4)	0.022(4)
O(5)	0.038(5)	0.025(4)	0.052(5)	0.003(4)	0.026(4)	0.015(4)
O(6)	0.037(5)	0.047(5)	0.048(5)	-0.003(4)	0.007(4)	0.018(4)
O(7)	0.065(6)	0.037(5)	0.095(7)	0.001(4)	0.064(6)	0.013(5)
O(8)	0.047(5)	0.030(4)	0.045(5)	0.007(4)	0.034(4)	0.012(4)
O(9)	0.036(5)	0.056(6)	0.053(6)	0.010(4)	0.024(4)	0.022(4)
O(10)	0.041(5)	0.035(5)	0.053(5)	0.011(4)	0.029(4)	0.020(4)
O(11)	0.052(6)	0.035(5)	0.068(6)	-0.001(4)	0.038(5)	0.016(4)
O(12)	0.048(5)	0.042(5)	0.057(6)	-0.003(4)	0.020(5)	0.019(4)
N(1)	0.043(6)	0.034(6)	0.024(5)	-0.003(5)	0.010(5)	0.007(4)
N(2)	0.036(6)	0.047(7)	0.038(6)	-0.001(5)	0.016(5)	0.013(5)

Table 8. (Continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
N(3)	0.030(6)	0.031(6)	0.035(6)	0.005(4)	0.015(5)	0.015(5)
N(4)	0.045(6)	0.031(6)	0.033(6)	0.005(5)	0.022(5)	0.012(5)
N(5)	0.043(6)	0.043(6)	0.032(6)	-0.008(5)	0.012(5)	0.009(5)
N(6)	0.042(6)	0.033(6)	0.032(6)	0.003(5)	0.009(5)	0.015(5)
N(7)	0.049(6)	0.028(6)	0.042(6)	-0.004(5)	0.025(5)	0.015(5)
N(8)	0.050(7)	0.027(6)	0.036(6)	0.004(5)	0.023(5)	0.010(4)
C(1)	0.034(7)	0.045(8)	0.013(6)	0.002(6)	0.008(5)	-0.009(5)
C(2)	0.040(8)	0.056(9)	0.047(9)	-0.001(7)	0.021(7)	-0.006(7)
C(3)	0.037(8)	0.07(1)	0.046(9)	-0.001(7)	0.014(7)	-0.023(8)
C(4)	0.051(10)	0.053(10)	0.06(1)	0.007(7)	0.019(8)	-0.005(8)
C(5)	0.047(9)	0.050(9)	0.044(8)	-0.002(7)	0.010(7)	-0.001(7)
C(6)	0.035(7)	0.037(8)	0.026(7)	-0.001(6)	-0.003(6)	0.002(6)
C(7)	0.038(8)	0.051(9)	0.023(7)	-0.011(6)	-0.006(6)	0.013(6)
C(8)	0.043(8)	0.08(1)	0.052(9)	-0.015(7)	0.012(7)	0.032(8)
C(9)	0.042(8)	0.08(1)	0.062(10)	-0.004(7)	0.036(7)	0.020(8)
C(10)	0.015(6)	0.08(1)	0.024(7)	0.002(7)	0.005(5)	-0.001(7)
C(11)	0.020(6)	0.053(8)	0.038(7)	0.005(6)	0.018(6)	-0.004(6)
C(12)	0.046(9)	0.07(1)	0.051(9)	-0.014(8)	0.014(7)	-0.007(8)
C(13)	0.042(9)	0.048(10)	0.08(1)	-0.006(7)	0.025(8)	-0.013(8)
C(14)	0.052(10)	0.034(8)	0.07(1)	-0.007(7)	0.009(8)	0.005(7)
C(15)	0.033(7)	0.038(8)	0.055(9)	0.006(6)	0.014(6)	0.008(7)
C(16)	0.020(6)	0.041(8)	0.036(7)	-0.004(6)	0.001(6)	-0.005(6)
C(17)	0.024(7)	0.043(8)	0.040(7)	0.002(6)	0.014(6)	0.010(6)
C(18)	0.045(8)	0.051(8)	0.052(9)	0.003(6)	0.027(7)	0.013(7)

Table 8. (Continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(19)	0.044(9)	0.08(1)	0.06(1)	-0.003(8)	0.039(8)	0.009(9)
C(20)	0.044(9)	0.06(1)	0.052(9)	-0.007(7)	0.025(7)	-0.012(7)
C(21)	0.039(8)	0.027(7)	0.044(8)	0.004(6)	0.008(6)	-0.005(6)
C(22)	0.032(7)	0.032(7)	0.035(7)	0.003(5)	0.010(6)	0.006(5)
C(23)	0.022(6)	0.032(7)	0.033(7)	-0.003(5)	0.004(5)	0.006(5)
C(24)	0.036(7)	0.030(7)	0.035(7)	-0.002(5)	0.012(6)	0.009(5)
C(25)	0.051(8)	0.045(8)	0.045(8)	-0.002(6)	0.028(7)	0.022(6)
C(26)	0.053(8)	0.050(8)	0.026(7)	-0.009(7)	0.024(6)	0.009(6)
C(27)	0.051(8)	0.030(7)	0.031(7)	-0.003(6)	0.022(6)	0.000(5)
C(28)	0.052(9)	0.042(8)	0.053(9)	0.007(7)	0.034(7)	0.004(7)
C(29)	0.049(9)	0.041(8)	0.07(1)	0.009(7)	0.039(8)	0.008(7)
C(30)	0.049(9)	0.031(8)	0.055(9)	0.004(6)	0.007(7)	0.010(6)
C(31)	0.050(8)	0.031(7)	0.032(7)	-0.007(6)	0.010(6)	0.004(6)
C(32)	0.032(7)	0.030(7)	0.032(7)	-0.011(5)	0.011(6)	0.004(5)
C(33)	0.050(8)	0.035(8)	0.039(8)	-0.011(6)	0.027(7)	-0.004(6)
C(34)	0.06(1)	0.049(9)	0.07(1)	-0.010(8)	0.032(9)	0.002(8)
C(35)	0.06(1)	0.07(1)	0.08(1)	0.003(8)	0.047(10)	-0.031(9)
C(36)	0.06(1)	0.11(2)	0.08(1)	-0.01(1)	0.059(10)	-0.02(1)
C(37)	0.07(1)	0.10(1)	0.07(1)	-0.014(10)	0.056(10)	0.002(9)
C(38)	0.049(8)	0.058(9)	0.030(7)	-0.015(7)	0.021(6)	-0.004(6)
C(39)	0.07(1)	0.07(1)	0.024(7)	-0.032(8)	0.014(7)	0.008(7)
C(40)	0.040(8)	0.053(9)	0.047(8)	-0.006(6)	0.007(6)	0.029(7)
C(41)	0.045(8)	0.036(8)	0.07(1)	0.006(6)	0.018(7)	0.023(7)
C(42)	0.036(8)	0.036(7)	0.035(7)	0.002(6)	0.012(6)	-0.008(6)

Table 8. (Continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(43)	0.027(7)	0.038(7)	0.043(8)	-0.002(5)	0.012(6)	0.008(6)
C(44)	0.040(8)	0.07(1)	0.043(9)	0.009(7)	0.017(7)	-0.002(7)
C(45)	0.06(1)	0.11(1)	0.042(9)	0.020(9)	0.039(8)	0.025(9)
C(46)	0.053(10)	0.12(2)	0.07(1)	0.018(9)	0.043(9)	0.06(1)
C(47)	0.042(8)	0.08(1)	0.052(9)	0.013(7)	0.032(7)	0.031(7)
C(48)	0.035(7)	0.048(8)	0.028(7)	-0.002(6)	0.018(6)	0.012(6)
C(49)	0.035(7)	0.044(8)	0.033(7)	0.003(6)	0.017(6)	0.011(6)
C(50)	0.061(10)	0.043(8)	0.069(10)	-0.004(7)	0.040(8)	0.008(7)
C(51)	0.07(1)	0.06(1)	0.08(1)	0.007(8)	0.060(9)	0.021(9)
C(52)	0.033(8)	0.07(1)	0.08(1)	0.012(7)	0.033(8)	0.011(9)
C(53)	0.056(9)	0.031(8)	0.07(1)	0.005(6)	0.031(8)	0.003(7)
C(54)	0.026(7)	0.051(8)	0.046(8)	-0.005(6)	0.019(6)	0.005(6)
C(55)	0.043(8)	0.027(7)	0.047(8)	-0.001(6)	0.013(7)	0.015(6)
C(56)	0.035(7)	0.035(7)	0.068(9)	-0.001(6)	0.024(7)	0.022(7)
C(57)	0.070(10)	0.047(8)	0.068(10)	0.005(7)	0.050(8)	0.027(7)
C(58)	0.062(9)	0.035(7)	0.035(7)	-0.006(6)	0.034(7)	0.001(6)
C(59)	0.046(8)	0.033(7)	0.045(8)	-0.003(6)	0.024(6)	0.009(6)
C(60)	0.048(8)	0.048(9)	0.049(8)	0.008(7)	0.031(7)	0.008(7)
C(61)	0.062(10)	0.036(8)	0.053(9)	0.021(7)	0.029(8)	0.011(7)
C(62)	0.08(1)	0.030(8)	0.046(9)	0.002(7)	0.025(8)	0.011(6)
C(63)	0.062(10)	0.045(9)	0.055(9)	0.004(7)	0.027(8)	0.019(7)
C(64)	0.041(8)	0.027(7)	0.042(8)	0.000(6)	0.010(6)	0.012(6)

The general temperature factor expression:

$$\exp(-2\pi^2(a^{*2}U_{11}h^2 + b^{*2}U_{22}k^2 + c^{*2}U_{33}l^2 + 2a^*b^*U_{12}hk + 2a^*c^*U_{13}hl + 2b^*c^*U_{23}kl))$$

Table 9. Anisotropic Displacement Parameters for [(salen)VOVO(salen)][ClO_4] (IV)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
V(1)	0.0462(4)	0.0504(4)	0.0535(4)	0.0119(3)	0.0085(3)	0.0273(3)
V(2)	0.0558(4)	0.0505(4)	0.0529(4)	0.0144(3)	0.0101(3)	0.0246(3)
Cl(1)	0.0822(9)	0.0898(9)	0.0940(9)	0.0315(7)	0.0314(7)	0.0343(8)
O(1)	0.050(2)	0.055(2)	0.080(2)	0.015(1)	0.016(1)	0.031(1)
O(2)	0.054(2)	0.052(2)	0.065(2)	0.013(1)	0.011(1)	0.029(1)
O(3)	0.055(2)	0.062(2)	0.056(2)	0.014(1)	0.004(1)	0.030(1)
O(4)	0.060(2)	0.055(2)	0.070(2)	0.022(1)	0.019(1)	0.034(1)
O(5)	0.073(2)	0.051(2)	0.062(2)	0.017(1)	0.020(1)	0.030(1)
O(6)	0.079(2)	0.068(2)	0.062(2)	0.022(2)	0.002(2)	0.030(1)
O(7)	0.28(1)	0.220(8)	0.167(7)	0.178(7)	0.139(7)	0.153(5)
O(7')	0.110(10)	0.12(1)	0.19(1)	0.030(8)	0.01(1)	0.071(10)
O(8)	0.25(1)	0.145(9)	0.103(7)	-0.068(8)	0.062(8)	-0.022(7)
O(8')	0.22(2)	0.24(2)	0.096(9)	0.12(1)	0.086(10)	0.089(10)
O(9')	0.18(1)	0.35(3)	0.19(1)	0.14(2)	-0.16(1)	-0.16(2)
O(9)	0.073(5)	0.142(7)	0.187(9)	-0.002(5)	0.043(5)	0.064(7)
O(10)	0.104(3)	0.162(4)	0.149(4)	0.076(3)	0.045(3)	0.061(3)
N(1)	0.051(2)	0.059(2)	0.056(2)	0.016(2)	0.011(2)	0.028(2)
N(2)	0.049(2)	0.062(2)	0.060(2)	0.017(2)	0.011(2)	0.032(2)
N(3)	0.054(2)	0.056(2)	0.054(2)	0.014(2)	0.006(2)	0.026(2)
N(4)	0.046(2)	0.057(2)	0.060(2)	0.011(2)	0.006(2)	0.024(2)
N(5)	0.107(4)	0.144(5)	0.156(5)	0.027(4)	0.044(4)	0.082(4)
C(1)	0.055(3)	0.056(2)	0.051(2)	0.003(2)	-0.005(2)	0.025(2)
C(2)	0.062(3)	0.061(3)	0.059(3)	0.002(2)	0.002(2)	0.028(2)
C(3)	0.070(3)	0.075(3)	0.065(3)	0.002(2)	0.004(2)	0.041(2)

Table 9. (Continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(4)	0.091(4)	0.058(3)	0.078(3)	0.002(3)	-0.005(3)	0.040(2)
C(5)	0.071(3)	0.051(2)	0.072(3)	0.015(2)	-0.003(2)	0.026(2)
C(6)	0.053(2)	0.047(2)	0.055(2)	0.011(2)	-0.002(2)	0.020(2)
C(7)	0.054(2)	0.060(3)	0.056(2)	0.015(2)	0.008(2)	0.023(2)
C(8)	0.064(3)	0.073(3)	0.071(3)	0.030(2)	0.030(2)	0.034(2)
C(9)	0.059(3)	0.085(3)	0.089(3)	0.029(2)	0.031(2)	0.053(3)
C(10)	0.055(3)	0.066(3)	0.065(3)	0.005(2)	0.001(2)	0.038(2)
C(11)	0.062(3)	0.050(2)	0.057(2)	0.005(2)	-0.001(2)	0.026(2)
C(12)	0.081(3)	0.061(3)	0.079(3)	0.005(3)	0.004(3)	0.037(2)
C(13)	0.103(4)	0.051(3)	0.084(3)	0.014(3)	-0.002(3)	0.027(2)
C(14)	0.104(4)	0.059(3)	0.079(3)	0.031(3)	0.005(3)	0.025(2)
C(15)	0.077(3)	0.056(3)	0.062(3)	0.020(2)	0.011(2)	0.024(2)
C(16)	0.062(3)	0.051(2)	0.049(2)	0.006(2)	-0.005(2)	0.020(2)
C(17)	0.062(3)	0.046(2)	0.049(2)	0.009(2)	-0.002(2)	0.021(2)
C(18)	0.067(3)	0.058(3)	0.062(3)	0.015(2)	0.012(2)	0.027(2)
C(19)	0.090(3)	0.055(3)	0.067(3)	0.008(2)	0.013(3)	0.029(2)
C(20)	0.106(4)	0.052(2)	0.078(3)	0.020(3)	0.013(3)	0.035(2)
C(21)	0.089(3)	0.046(2)	0.073(3)	0.023(2)	0.008(3)	0.024(2)
C(22)	0.060(3)	0.051(2)	0.052(2)	0.018(2)	0.000(2)	0.018(2)
C(23)	0.060(3)	0.063(3)	0.056(2)	0.022(2)	0.004(2)	0.022(2)
C(24)	0.061(3)	0.065(3)	0.067(3)	0.026(2)	0.016(2)	0.026(2)
C(25)	0.049(3)	0.079(3)	0.079(3)	0.019(2)	0.014(2)	0.036(2)
C(26)	0.053(3)	0.064(3)	0.056(2)	-0.003(2)	0.004(2)	0.024(2)
C(27)	0.058(3)	0.050(2)	0.054(2)	0.001(2)	0.001(2)	0.022(2)

Table 9. (Continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(28)	0.072(3)	0.063(3)	0.065(3)	-0.007(2)	0.003(2)	0.034(2)
C(29)	0.089(4)	0.050(2)	0.074(3)	0.009(2)	0.007(3)	0.034(2)
C(30)	0.088(4)	0.058(3)	0.087(3)	0.021(2)	0.015(3)	0.038(2)
C(31)	0.085(3)	0.062(3)	0.072(3)	0.023(2)	0.024(2)	0.035(2)
C(32)	0.062(3)	0.050(2)	0.048(2)	0.006(2)	0.005(2)	0.021(2)
C(33)	0.074(4)	0.103(4)	0.099(4)	0.003(3)	0.012(3)	0.051(3)
C(34)	0.077(4)	0.161(6)	0.104(4)	0.004(4)	0.015(3)	0.058(4)

The general temperature factor expression:

$$\exp(-2\pi^2(a^{*2}U_{11}h^2 + b^{*2}U_{22}k^2 + c^{*2}U_{33}l^2 + 2a^*b^*U_{12}hk + 2a^*c^*U_{13}hl + 2b^*c^*U_{23}kl))$$