JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
J. Am. Chem. Soc., 1997, 119(7), 1662-1667, DOI:10.1021/ja963475s

Table 1. Atomic coordinates (Å) for **I**.

Atom	x	y	z	U_{eq} (Å^2)
Mo(1)	0.0877 (2)	0.5737 (1)	0.5345 (1)	0.031 (1)
Fe(1)	0.0942 (4)	0.6454 (1)	0.5783 (2)	0.047 (2)
Fe(2)	-0.0383 (4)	0.5819 (1)	0.6046 (1)	0.038 (2)
Fe(3)	-0.1015 (4)	0.6240 (2)	0.5366 (1)	0.044 (2)
S(1)	-0.0922 (8)	0.6503 (3)	0.6001 (3)	0.055 (4)
S(2)	-0.1048 (7)	0.5546 (3)	0.5461 (3)	0.038 (3)
S(3)	0.0713 (7)	0.6427 (3)	0.5105 (3)	0.046 (3)
S(4)	0.1557 (7)	0.5826 (3)	0.6006 (2)	0.042 (3)
Cl(1)	-0.1067 (7)	0.5535 (3)	0.6602 (3)	0.052 (4)
Cl(2)	0.2118 (9)	0.6945 (3)	0.6001 (3)	0.080 (4)
Cl(3)	-0.2509 (8)	0.6427 (3)	0.4984 (3)	0.080 (4)
Cl(4)	0.9721 (7)	0.0473 (3)	0.1146 (2)	0.053 (3)
Cl(5)	0.7522 (9)	0.0698 (3)	0.1644 (3)	0.080 (4)
Cl(6)	0.5273 (8)	0.0958 (3)	0.1206 (3)	0.073 (4)
Cl(7)	0.4810 (7)	0.5967 (3)	0.4741 (3)	0.063 (4)
O(1)	0.2546 (16)	0.5757 (5)	0.5116 (6)	0.034 (5)
O(2)	0.0671 (16)	0.5545 (6)	0.4743 (6)	0.036 (6)
C(1)	0.2587 (24)	0.5736 (8)	0.4710 (8)	0.032 (8)
C(2)	0.1583 (25)	0.5614 (8)	0.4514 (8)	0.023 (8)
C(3)	0.8454 (26)	0.0607 (9)	0.0901 (9)	0.036 (8)
C(4)	0.6468 (28)	0.0825 (9)	0.0920 (10)	0.049 (9)
C(5)	0.7501 (27)	0.0701 (9)	0.1135 (9)	0.038 (9)
C(6)	0.3520 (26)	0.5842 (9)	0.4500 (9)	0.038 (9)
N(1)	0.1266 (21)	0.5047 (7)	0.5410 (7)	0.040 (7)
C(7)	0.2337 (33)	0.4906 (11)	0.5546 (11)	0.068 (11)
Mo(2)	0.4375 (4)	0.1671 (1)	0.2500	0.044 (2)
Fe(4)	0.6145 (6)	0.2238 (2)	0.2500	0.053 (3)
Fe(5)	0.4154 (4)	0.2407 (2)	0.2909 (2)	0.058 (2)
S(5)	0.5435 (8)	0.1907 (3)	0.3056 (3)	0.060 (4)

Atom	x	y	z	U_{eq} (Å^2)
S(6)	0.2794 (11)	0.2120 (4)	0.2500	0.065 (6)
S(7)	0.5203 (13)	0.2844 (4)	0.2500	0.067 (6)
Cl(8)	0.8055 (11)	0.2224 (5)	0.2500	0.084 (6)
Cl(9)	0.3424 (11)	0.2729 (3)	0.1543 (4)	0.122 (6)
Cl(10)	0.2628 (8)	0.0605 (3)	0.1563 (3)	0.065 (4)
Cl(11)	0.1677 (10)	-0.0173 (3)	0.2023 (3)	0.089 (5)
O(3)	0.3563 (18)	0.1248 (6)	0.2887 (6)	0.047 (6)
C(8)	0.3111 (26)	0.0926 (9)	0.2698 (8)	0.040 (9)
C(9)	0.2643 (27)	0.0591 (10)	0.2079 (9)	0.051 (9)
C(10)	0.2173 (25)	0.0252 (9)	0.2692 (7)	0.044 (9)
N(2)	0.5688 (39)	0.1116 (15)	0.2500	0.086 (14)
C(11)	0.5616 (177)	0.0762 (71)	0.2500	0.166 (77)
C(11a)	0.6936 (64)	0.1184 (22)	0.2500	0.048 (22)
N(3)	1.0411 (22)	0.1853 (8)	0.1211 (8)	0.051 (8)
C(12)	0.9234 (31)	0.1637 (11)	0.1113 (11)	0.062 (12)
C(13)	0.8228 (35)	0.1878 (12)	0.1266 (12)	0.098 (13)
C(14)	1.0507 (31)	0.2276 (11)	0.1048 (11)	0.060 (11)
C(15)	1.0457 (35)	0.2335 (12)	0.0608 (13)	0.091 (13)
C(16)	1.1257 (34)	0.1551 (11)	0.1042 (11)	0.071 (11)
C(17)	1.2512 (37)	0.1662 (12)	0.1122 (12)	0.082 (12)
C(18)	1.0528 (35)	0.1868 (13)	0.1672 (13)	0.095 (14)
C(19)	1.0415 (38)	0.1462 (13)	0.1895 (13)	0.103 (14)
N(4)	0.4697 (25)	0.4246 (9)	0.1271 (9)	0.053 (8)
C(20)	0.5393 (56)	0.4565 (20)	0.1481 (20)	0.173 (24)
C(21)	0.4756 (46)	0.4858 (16)	0.1762 (16)	0.124 (18)
C(22)	0.3923 (55)	0.4439 (19)	0.0983 (20)	0.151 (23)
C(23)	0.4264 (39)	0.4699 (15)	0.0667 (14)	0.104 (16)
C(24)	0.5524 (50)	0.4003(18)	0.1025 (17)	0.142 (19)
C(25)	0.4853 (56)	0.3636 (20)	0.0822 (18)	0.181 (23)
C(26)	0.3942 (50)	0.4034 (19)	0.1530 (19)	0.170 (22)
C(27)	0.4923 (50)	0.3818 (17)	0.1852 (17)	0.137 (20)
N(5)	-0.0118 (38)	0.3436 (13)	0.2500	0.074 (13)

Atom	x	y	z	U_{eq} (Å^2)
C(28)	0.0874 (68)	0.3769 (24)	0.2500	0.129 (26)
C(29)	0.1917 (99)	0.3670 (32)	0.2762 (33)	0.136 (40)
C(30)	0.0413 (84)	0.2971 (31)	0.2500	0.183 (37)
C(31)	-0.1939 (83)	0.3460 (26)	0.2013 (25)	0.288 (36)
C(32)	-0.0857 (60)	0.3483 (19)	0.2868 (19)	0.243 (23)
C(33)	0.0953 (97)	0.3045 (36)	0.3047 (35)	0.160 (44)
N(6)	0.5359 (36)	0.2500	0.000	0.056 (12)
C(34)	0.6360 (72)	0.2182 (22)	-0.0100 (25)	0.196 (32)
C(35)	0.7552 (66)	0.2500	0.000	0.111 (24)
C(36)	0.5424 (76)	0.2984 (27)	-0.0222 (30)	0.297 (37)
C(37)	0.5421 (51)	0.2138 (18)	0.0710 (18)	0.157 (21)
C(38)	0.4511 (69)	0.2252 (23)	-0.0221 (24)	0.091 (24)
C(39)	0.5168 (64)	0.2426 (21)	-0.0431 (21)	0.094 (21)
C(40)	0.3243 (102)	0.2500	0.000	0.193 (47)

Table 2. Calculated H atom positions for **I**.

Atom	x	y	z	U_{eq} (Å^2)
H(1)	0.2261	0.4633	0.5675	0.0800
H(2)	0.2688	0.5092	0.5732	0.0800
H(3)	0.2861	0.4866	0.5316	0.0800
H(4)	0.9233	0.1376	0.1234	0.0800
H(5)	0.9184	0.1620	0.0824	0.0800
H(6)	0.7522	0.1735	0.1188	0.0800
H(7)	0.8194	0.2154	0.1140	0.0800
H(8)	0.8243	0.1910	0.1550	0.0800
H(9)	1.1265	0.2383	0.1127	0.0800
H(10)	0.9932	0.2446	0.1159	0.0800
H(11)	1.0552	0.2620	0.0530	0.0800
H(12)	0.9727	0.2236	0.0503	0.0800
H(13)	1.1060	0.2173	0.0471	0.0800
H(14)	1.1151	0.1283	0.1151	0.0800
H(15)	1.171	0.1539	0.0748	0.0800
H(16)	1.3032	0.1475	0.1000	0.0800
H(17)	1.2653	0.1688	0.1405	0.0800
H(18)	1.2673	0.1945	0.1001	0.0800
H(19)	1.1277	0.1985	0.1715	0.0800
H(20)	0.9949	0.2055	0.1758	0.0800
H(21)	1.0528	0.1524	0.2184	0.0800
H(22)	1.1016	0.1274	0.1816	0.0800
H(23)	0.9688	0.1344	0.1858	0.0800
H(24)	0.5686	0.4754	0.1246	0.0800
H(25)	0.6003	0.4458	0.1606	0.0800
H(26)	0.5354	0.5067	0.1838	0.0800
H(27)	0.4513	0.4709	0.1964	0.0800
H(28)	0.4197	0.5005	0.1604	0.0800
H(29)	0.3413	0.4641	0.1149	0.0800
H(30)	0.3414	0.4250	0.0866	0.0800

Atom	x	y	z	U_{eq} (Å^2)
H(31)	0.3661	0.4829	0.0506	0.0800
H(32)	0.4759	0.4550	0.0475	0.0800
H(33)	0.4758	0.4941	0.0758	0.0800
H(34)	0.5832	0.4141	0.0804	0.0800
H(35)	0.6087	0.3859	0.1180	0.0800
H(36)	0.5268	0.3441	0.0655	0.0800
H(37)	0.4178	0.3727	0.0650	0.0800
H(38)	0.4433	0.3446	0.1027	0.0800
H(39)	0.3455	0.4161	0.1671	0.0800
H(40)	0.3648	0.3775	0.1388	0.0800
H(41)	0.4530	0.3622	0.2059	0.0800
H(42)	0.5313	0.4016	0.2015	0.0800
H(43)	0.5506	0.3630	0.1753	0.0800

Table 3. Anisotropic temperature factors for the atoms in **I**.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo(1)	0.023 (2)	0.039 (2)	0.032 (2)	-0.001 (2)	0.000 (1)	-0.004 (1)
Fe(1)	0.055 (4)	0.039 (3)	0.046 (3)	-0.006 (3)	0.000 (3)	-0.010 (3)
Fe(2)	0.033 (3)	0.046 (3)	0.035 (3)	0.002 (2)	0.002 (2)	-0.004 (3)
Fe(3)	0.035 (3)	0.052 (3)	0.046 (3)	0.001 (3)	0.003 (3)	0.003 (3)
S(1)	0.059 (7)	0.050 (6)	0.055 (7)	-0.011 (5)	0.015 (5)	0.011 (5)
S(2)	0.030 (5)	0.038 (6)	0.046 (6)	-0.004 (5)	0.003 (4)	-0.003 (4)
S(3)	0.038 (6)	0.048 (6)	0.051 (6)	0.005 (5)	0.000 (5)	-0.009 (5)
S(4)	0.028 (6)	0.056 (6)	0.042 (6)	0.002 (5)	-0.004 (4)	-0.007 (5)
Cl(1)	0.043 (6)	0.075 (7)	0.039 (6)	0.016 (5)	0.007 (5)	0.000 (5)
Cl(2)	0.104 (9)	0.056 (6)	0.081 (7)	-0.016 (6)	-0.011 (6)	-0.035 (6)
Cl(3)	0.033 (6)	0.114 (8)	0.092 (8)	0.041 (6)	-0.012 (6)	0.016 (6)
Cl(4)	0.040 (6)	0.068 (7)	0.049 (6)	0.012 (5)	-0.006 (5)	0.006 (5)
Cl(5)	0.072 (7)	0.124 (9)	0.044 (6)	0.001 (6)	0.009 (5)	0.018 (7)
Cl(6)	0.050 (7)	0.118 (9)	0.051 (7)	0.008 (6)	0.022 (6)	0.031 (6)
Cl(7)	0.031 (6)	0.101 (7)	0.058 (6)	-0.004 (5)	0.000 (5)	-0.023 (5)
Mo(2)	0.043 (3)	0.033 (3)	0.057 (3)	0	0	-0.007 (2)
Fe(4)	0.039 (5)	0.050 (5)	0.071 (6)	0	0	-0.011 (4)
Fe(5)	0.055 (4)	0.040 (4)	0.080 (4)	-0.014 (3)	0.013 (3)	-0.003 (3)
S(5)	0.061 (7)	0.055 (7)	0.063 (7)	0.002 (5)	-0.004 (6)	-0.014 (5)
S(6)	0.040 (9)	0.045 (9)	0.110 (12)	0	0	0.001 (7)
S(7)	0.079 (11)	0.040 (9)	0.081 (11)	0	0	-0.007 (8)
Cl(8)	0.032 (9)	0.106 (12)	0.113 (12)	0	0	-0.016 (8)
Cl(9)	0.131 (11)	0.076 (8)	0.159 (12)	0.060 (8)	-0.092(10)	-0.036 (8)
Cl(10)	0.060 (7)	0.069 (6)	0.065 (7)	-0.009 (5)	-0.001 (5)	-0.008 (5)
Cl(11)	0.096 (9)	0.068 (7)	0.102 (9)	-0.022 (6)	0.011 (7)	-0.043 (6)