

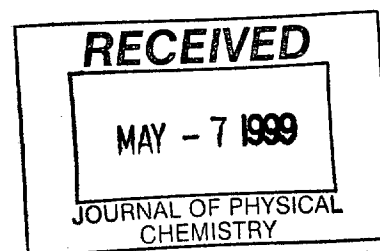
REVISED**SUPPLEMENTARY MATERIAL**

**Sandwich and Mixed Sandwich Complexes of the Cesium Ion with Crown Ethers in
Nitromethane**

Jineun Kim, Mojtaba Shamsipur, Song Z. Huang, Rui H. Huang and James L. Dye
Department of Chemistry and Center for Fundamental Materials Research,
Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824-1322, USA

Supporting Information

Table of Contents



Data for I, $\text{Rb}^+(\text{18C6})(\text{12C4})\text{I} \cdot \text{H}_2\text{O}$	Page
Figure S01. Structure of the molecule (H's and H_2O not shown)	S2
Table S01. Positional and thermal parameters of non-hydrogen atoms	S3
Table S02. Positional and thermal parameters involving hydrogens	S4
Table S03. Bond distances	S5
Table S04. Bond angles	S6
Table S05. General temperature factor expressions-U's	S7
 Data for II, $\text{Cs}^+(\text{18C6})(\text{12C4})\text{SCN}^- \cdot 2(\text{CH}_3\text{OH})$	
Table S11. Positional and thermal parameters of non-hydrogen atoms	S8
Table S12. Positional and thermal parameters for hydrogen atoms	S9
Table S13. Bond distances	S10
Table S14. Bond angles	S11
Table S15. General temperature factor expressions-U's	S12

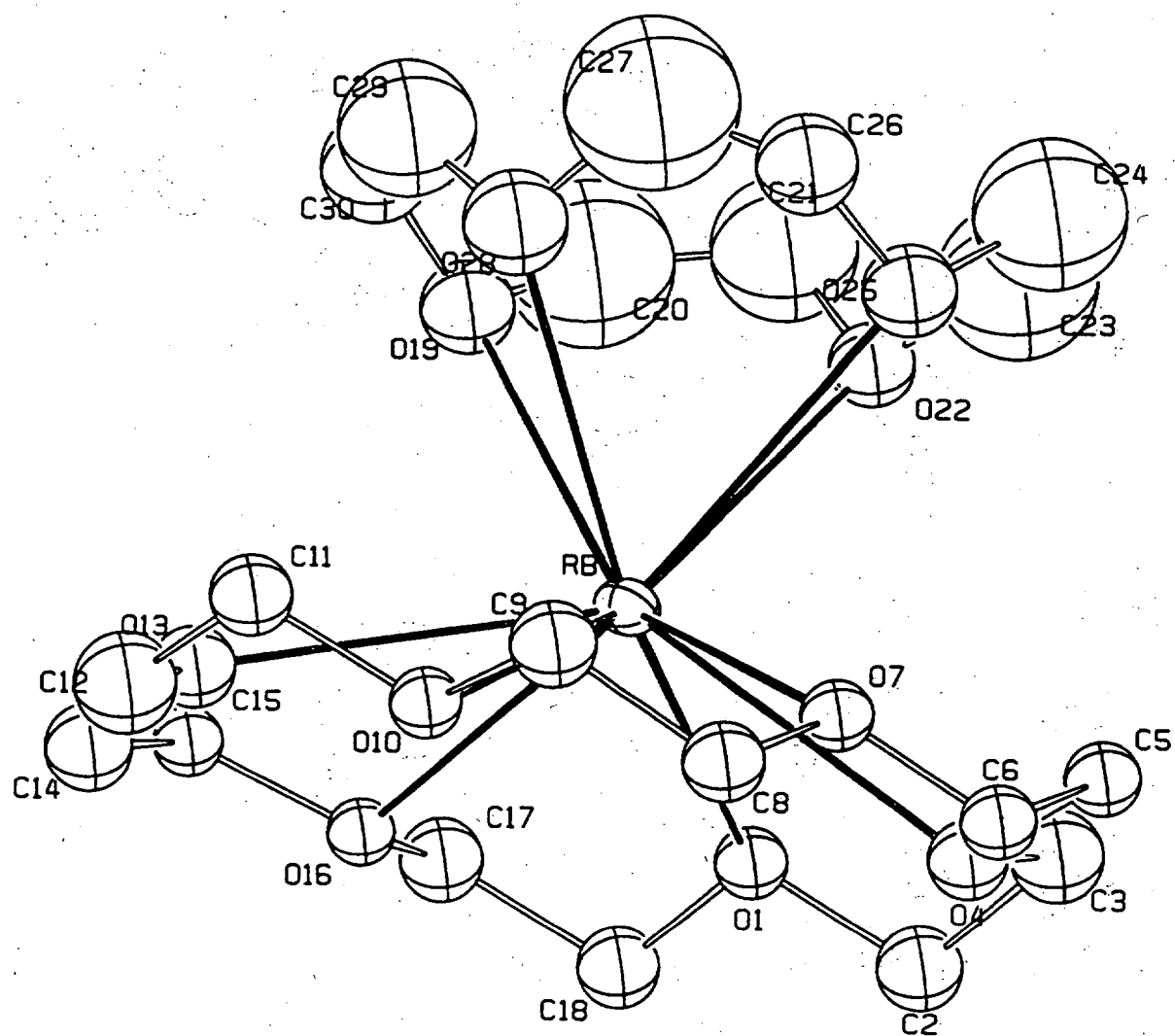


Table S01. Atomic coordinates [x 10000] and equivalent isotropic displacement parameters [x 1000] for $\text{Rb}^+(18\text{C}6)(12\text{C}4)\text{I}^-$

	x	y	z	U(eq)
I	7749(1)	5459(1)	738(1)	30(1)
Rb	2784(2)	8127(1)	689(1)	21(1)
O(01)	1158(16)	356(6)	6472(12)	50(3)
O(1)	2175(13)	6686(5)	873(9)	31(3)
O(4)	194(12)	7440(5)	-516(9)	30(2)
O(7)	897(13)	8646(5)	-1260(10)	28(2)
O(10)	3681(11)	8820(4)	-958(8)	24(2)
O(13)	5690(12)	8183(5)	600(10)	31(3)
O(16)	4825(12)	6965(5)	1101(9)	25(2)
O(19)	4333(14)	8407(6)	2793(11)	38(3)
O(22)	1539(14)	8086(5)	2376(10)	37(3)
O(25)	864(14)	9209(5)	1069(10)	33(3)
O(28)	3648(18)	9482(7)	1516(13)	58(4)
C(2)	846(16)	6432(7)	357(12)	18(3)
C(3)	-196(18)	7001(7)	138(13)	24(3)
C(5)	-736(19)	7953(8)	-952(14)	31(4)
C(6)	-389(18)	8289(7)	-1687(14)	25(3)
C(8)	1334(20)	8932(8)	-1936(15)	33(4)
C(9)	2707(20)	9308(8)	-1435(14)	33(4)
C(11)	4939(20)	9144(8)	-417(15)	29(4)
C(12)	5983(20)	8581(8)	-84(16)	39(4)
C(14)	6612(20)	7658(8)	894(14)	38(4)
C(15)	6110(24)	7214(10)	1600(17)	45(5)
C(17)	4472(20)	6454(8)	1625(14)	32(4)
C(18)	3082(21)	6172(7)	1032(15)	33(4)
C(20)	3929(41)	8065(15)	3303(31)	90(8)
C(21)	2402(31)	8068(12)	3359(25)	70(6)
C(23)	194(43)	8428(21)	2282(36)	125(11)
C(24)	236(47)	9112(19)	1835(33)	108(10)
C(26)	1348(29)	9836(12)	1192(22)	65(6)
C(27)	2646(50)	9888(27)	1632(46)	171(18)
C(29)	4776(35)	9461(12)	2406(25)	77(7)
C(30)	5003(30)	8995(11)	2943(20)	65(6)

**U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S02. Hydrogen coordinates (x10000) and isotropic displacement parameters (x1000) for $\text{Rb}^+(18\text{C}6)(12\text{C}4)\text{I}^-$

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	609	6093	756	21
H(2B)	840	6226	-257	21
H(3A)	-1101	6830	-177	29
H(3B)	-167	7231	740	29
H(5A)	-1628	7761	-1235	38
H(5B)	-766	8269	-447	38
H(6A)	-1094	8605	-2015	30
H(6B)	-308	7971	-2175	30
H(8A)	664	9247	-2318	40
H(8B)	1459	8594	-2383	40
H(9A)	2985	9543	-1930	40
H(9B)	2607	9631	-959	40
H(11A)	4854	9382	150	35
H(11B)	5201	9458	-836	35
H(12A)	5977	8313	-650	47
H(12B)	6876	8771	202	47
H(14A)	7510	7828	1235	45
H(14B)	6637	7402	326	45
H(15A)	6730	6845	1842	54
H(15B)	6085	7476	2163	54
H(17A)	4448	6623	2254	38
H(17B)	5141	6101	1755	38
H(18A)	3101	5993	408	39
H(18B)	2832	5816	1398	39
H(20A)	4521	8145	3971	108
H(20B)	4098	7609	3144	108
H(21A)	2240	7669	3688	84
H(21B)	2261	8456	3719	84
H(23A)	83	8471	2925	150
H(23B)	-553	8168	1859	150
H(24A)	-689	9266	1564	129
H(24B)	689	9411	2375	129
H(26A)	891	10084	1571	78
H(26B)	1125	10046	548	78
H(27A)	2769	9880	2334	205
H(27B)	2878	10337	1489	205
H(29A)	5575	9533	2218	92
H(29B)	4697	9846	2795	92

Table S03. Bond lengths for Rb+(18C6)(12C4)I-

Rb-O(28)	2.980(13)
Rb-O(19)	2.974(12)
Rb-O(1)	2.984(11)
Rb-O(4)	3.032(10)
Rb-O(7)	3.031(9)
Rb-O(16)	3.084(11)
Rb-O(13)	3.09(2)
Rb-O(10)	3.13(2)
Rb-O(25)	3.12(2)
Rb-O(22)	3.10(2)
O(1)-C(18)	1.37(2)
O(1)-C(2)	1.44(2)
O(4)-C(5)	1.41(2)
O(4)-C(3)	1.44(3)
O(7)-C(8)	1.33(3)
O(7)-C(6)	1.47(2)
O(10)-C(9)	1.42(2)
O(10)-C(11)	1.45(2)
O(13)-C(12)	1.37(3)
O(13)-C(14)	1.40(2)
O(16)-C(17)	1.39(3)
O(16)-C(15)	1.39(2)
O(19)-C(20)	1.18(6)
O(19)-C(30)	1.35(3)
O(22)-C(23)	1.53(5)
O(22)-C(21)	1.40(3)
O(25)-C(26)	1.34(3)
O(25)-C(24)	1.46(7)
O(28)-C(29)	1.43(2)
O(28)-C(27)	1.38(7)
C(2)-C(3)	1.54(2)
C(5)-C(6)	1.39(3)
C(8)-C(9)	1.58(2)
C(11)-C(12)	1.53(2)
C(14)-C(15)	1.56(4)
C(17)-C(18)	1.53(2)
C(20)-C(21)	1.63(7)
C(23)-C(24)	1.52(6)
C(26)-C(27)	1.30(5)
C(29)-C(30)	1.18(4)

Table S04. Bond angles for $\text{Rb}^+(18\text{C}6)(12\text{C}4)\text{I}^-$

C(18)-O(1)-C(2)	108.9(11)
C(5)-O(4)-C(3)	116(2)
C(8)-O(7)-C(6)	113.2(12)
C(9)-O(10)-C(11)	109.7(11)
C(12)-O(13)-C(14)	111(2)
C(17)-O(16)-C(15)	111.7(12)
C(20)-O(19)-C(30)	133(3)
C(23)-O(22)-C(21)	112(3)
C(26)-O(25)-C(24)	106(3)
C(29)-O(28)-C(27)	111(3)
O(1)-C(2)-C(3)	110.3(11)
O(4)-C(3)-C(2)	105(2)
C(6)-C(5)-O(4)	112(2)
C(5)-C(6)-O(7)	110.5(12)
O(7)-C(8)-C(9)	110.8(14)
O(10)-C(9)-C(8)	107.4(13)
O(10)-C(11)-C(12)	105.7(12)
O(13)-C(12)-C(11)	110(2)
O(13)-C(14)-C(15)	106(2)
O(16)-C(15)-C(14)	110.2(14)
O(16)-C(17)-C(18)	110.1(12)
O(1)-C(18)-C(17)	107.4(13)
O(19)-C(20)-C(21)	126(3)
O(22)-C(21)-C(20)	106(4)
O(22)-C(23)-C(24)	107(4)
O(25)-C(24)-C(23)	121(5)
O(25)-C(26)-C(27)	115(3)
C(26)-C(27)-O(28)	128(4)
C(30)-C(29)-O(28)	122(2)
C(29)-C(30)-O(19)	127(2)

Table S05. Anisotropic displacement parameters ($\times 1000$)
for $\text{Rb}^+(18\text{C}6)(12\text{C}4)\text{I}^-$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I	33(1)	31(1)	27(1)	1(1)	10(2)	-6(1)
Rb	20(2)	20(1)	21(2)	-1(1)	5(2)	-3(1)

Table S11. Atomic coordinates [x10000] and equivalent isotropic displacement parameters [x1000] for Cs⁺(18C6)(12C4)SCN⁻.

	x	y	z	U(eq)
Cs(1)	7884(1)	1925(1)	4856(1)	29(1)
O(1)	9578(3)	1515(2)	3343(2)	38(1)
C(2)	10611(6)	1893(3)	3214(5)	50(2)
C(3)	10965(5)	2255(4)	4085(5)	54(2)
O(4)	10146(3)	2792(2)	4233(3)	43(1)
C(5)	10422(6)	3207(4)	5032(5)	58(2)
C(6)	9599(7)	3790(4)	5046(4)	61(2)
O(7)	8483(4)	3520(2)	5210(3)	48(1)
C(8)	7602(9)	4045(4)	5090(5)	65(2)
C(9)	6491(8)	3733(4)	5361(5)	68(2)
O(10)	6124(4)	3211(2)	4708(3)	51(1)
C(11)	5068(7)	2874(5)	4912(6)	67(2)
C(12)	4648(5)	2473(5)	4111(6)	70(2)
O(13)	5434(4)	1912(2)	3952(3)	50(1)
C(14)	5199(5)	1548(4)	3098(5)	56(2)
C(15)	6076(5)	996(3)	3003(4)	48(1)
O(16)	7165(3)	1318(2)	2859(3)	37(1)
C(17)	8031(6)	820(3)	2715(4)	46(1)
C(18)	9149(6)	1188(3)	2536(4)	47(1)
O(19)	6356(4)	1531(3)	6471(3)	49(1)
C(20)	5564(7)	947(5)	6182(8)	90(3)
C(21)	6119(8)	274(5)	5995(6)	79(3)
O(22)	6830(5)	372(3)	5270(3)	57(1)
C(23)	7799(10)	-156(4)	5241(5)	78(3)
C(24)	8745(9)	-30(4)	5898(6)	74(2)
O(25)	9201(4)	617(2)	5703(3)	55(1)
C(26)	9976(7)	871(5)	6428(7)	77(2)
C(27)	9441(8)	1182(4)	7196(6)	71(2)
O(28)	8743(4)	1759(2)	6904(3)	45(1)
C(29)	7814(9)	1908(4)	7496(5)	69(2)
C(30)	6809(7)	1446(5)	7375(5)	69(2)
S(101)	2373(3)	664(2)	1623(2)	12(1)
C(102)	3537(9)	275(4)	1548(8)	85(3)
N(103)	4493(8)	-19(5)	1385(6)	73(2)
O(31)	2616(6)	956(3)	8573(6)	107(3)
C(32)	3665(9)	763(6)	8251(9)	107(4)
O(33)	2938(11)	2190(9)	6615(10)	185(5)
C(34)	2672(9)	1437(9)	6433(11)	143(7)

** U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S12. Hydrogen coordinates (x10000) and isotropic displacement parameters (x1000) for $\text{Cs}^+(18\text{C}6)(12\text{C}4)\text{SCN}^-$.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	10487(6)	2233(3)	2731(5)	60
H(2B)	11213(6)	1575(3)	3043(5)	60
H(3A)	10984(5)	1925(4)	4585(5)	65
H(3B)	11727(5)	2455(4)	4045(5)	65
H(5A)	11201(6)	3385(4)	5016(5)	70
H(5B)	10366(6)	2925(4)	5575(5)	70
H(6A)	9835(7)	4119(4)	5520(4)	73
H(6B)	9581(7)	4033(4)	4467(4)	73
H(8A)	7537(9)	4194(4)	4460(5)	78
H(8B)	7794(9)	4449(4)	5465(5)	78
H(9A)	6593(8)	3522(4)	5959(5)	82
H(9B)	5909(8)	4094(4)	5389(5)	82
H(11A)	4501(7)	3220(5)	5065(6)	80
H(11B)	5195(7)	2564(5)	5428(6)	80
H(12A)	3890(5)	2285(5)	4212(6)	84
H(12B)	4587(5)	2776(5)	3583(6)	84
H(14A)	5225(5)	1875(4)	2596(5)	67
H(14B)	4437(5)	1342(4)	3089(5)	67
H(15A)	6132(5)	712(3)	3549(4)	57
H(15B)	5858(5)	696(3)	2493(4)	57
H(17A)	7803(6)	528(3)	2199(4)	55
H(17B)	8136(6)	523(3)	3246(4)	55
H(18A)	9706(6)	852(3)	2333(4)	56
H(18B)	9019(6)	1534(3)	2061(4)	56
H(20A)	5024(7)	874(5)	6654(8)	108
H(20B)	5124(7)	1091(5)	5638(8)	108
H(21A)	6569(8)	117(5)	6528(6)	94
H(21B)	5540(8)	-77(5)	5840(6)	94
H(23A)	7489(10)	-618(4)	5347(5)	94
H(23B)	8096(10)	-154(4)	4637(5)	94
H(24A)	8471(9)	-34(4)	6510(6)	89
H(24B)	9327(9)	-390(4)	5855(6)	89
H(26A)	10451(7)	485(5)	6647(7)	92
H(26B)	10483(7)	1215(5)	6175(7)	92
H(27A)	8971(8)	837(4)	7485(6)	85
H(27B)	10031(8)	1339(4)	7638(6)	85
H(29A)	7563(9)	2386(4)	7394(5)	82
H(29B)	8109(9)	1874(4)	8122(5)	82
H(30A)	7035(7)	964(5)	7481(5)	82
H(30B)	6233(7)	1569(5)	7803(5)	82
H(31)	2278(6)	608(3)	8746(6)	160
H(32A)	3553(9)	584(6)	7644(9)	161
H(32B)	4007(9)	408(6)	8637(9)	161
H(32C)	4164(9)	1162(6)	8247(9)	161
H(33)	2455(11)	2355(9)	6942(10)	278
H(34A)	3262(9)	1238(9)	6080(11)	215
H(34B)	1942(9)	1399(9)	6103(11)	215
H(34C)	2642(9)	1191(9)	6999(11)	215

Table S13. Bond lengths for Cs+(18C6) (12C4) SCN-.

Cs(1)-O(13)	3.087(4)
Cs(1)-O(19)	3.129(4)
Cs(1)-O(1)	3.144(4)
Cs(1)-O(28)	3.146(4)
Cs(1)-O(25)	3.160(4)
Cs(1)-O(7)	3.171(4)
Cs(1)-O(10)	3.204(4)
Cs(1)-O(16)	3.234(4)
Cs(1)-O(4)	3.279(4)
Cs(1)-O(22)	3.284(5)
Cs(1)-C(11)	3.750(7)
Cs(1)-C(15)	3.805(6)
O(1)-C(18)	1.413(7)
O(1)-C(2)	1.422(7)
C(2)-C(3)	1.498(11)
C(3)-O(4)	1.425(8)
O(4)-C(5)	1.444(8)
C(5)-C(6)	1.470(12)
C(6)-O(7)	1.429(8)
O(7)-C(8)	1.440(9)
C(8)-C(9)	1.496(14)
C(9)-O(10)	1.436(9)
O(10)-C(11)	1.432(10)
C(11)-C(12)	1.472(13)
C(12)-O(13)	1.436(8)
O(13)-C(14)	1.451(9)
C(14)-C(15)	1.481(10)
C(15)-O(16)	1.433(7)
O(16)-C(17)	1.411(7)
C(17)-C(18)	1.512(9)
O(19)-C(30)	1.418(8)
O(19)-C(20)	1.497(11)
C(20)-C(21)	1.472(14)
C(21)-O(22)	1.394(9)
O(22)-C(23)	1.516(10)
C(23)-C(24)	1.450(13)
C(24)-O(25)	1.383(9)
O(25)-C(26)	1.448(10)
C(26)-C(27)	1.445(13)
C(27)-O(28)	1.425(8)
O(28)-C(29)	1.450(9)
C(29)-C(30)	1.469(12)
S(101)-C(102)	1.554(11)
C(102)-N(103)	1.279(13)
O(31)-C(32)	1.381(10)
O(33)-C(34)	1.50(2)

Table S14. Bond angles for Cs+(18C6) (12C4) SCN-

C(18)-O(1)-C(2)	112.3(5)
O(1)-C(2)-C(3)	108.7(5)
O(4)-C(3)-C(2)	107.9(5)
C(3)-O(4)-C(5)	113.5(5)
O(4)-C(5)-C(6)	108.1(5)
O(7)-C(6)-C(5)	109.0(5)
C(6)-O(7)-C(8)	111.9(6)
O(7)-C(8)-C(9)	107.8(6)
O(10)-C(9)-C(8)	109.4(5)
C(11)-O(10)-C(9)	113.8(6)
O(10)-C(11)-C(12)	108.8(6)
O(13)-C(12)-C(11)	109.4(6)
C(12)-O(13)-C(14)	113.9(5)
O(13)-C(14)-C(15)	108.9(5)
O(16)-C(15)-C(14)	108.9(5)
C(17)-O(16)-C(15)	111.9(4)
O(16)-C(17)-C(18)	109.8(5)
O(1)-C(18)-C(17)	109.4(4)
C(30)-O(19)-C(20)	112.2(6)
C(21)-C(20)-O(19)	116.0(6)
O(22)-C(21)-C(20)	107.9(7)
C(21)-O(22)-C(23)	113.7(6)
C(24)-C(23)-O(22)	114.3(6)
O(25)-C(24)-C(23)	107.2(6)
C(24)-O(25)-C(26)	112.3(6)
C(27)-C(26)-O(25)	116.1(7)
O(28)-C(27)-C(26)	110.1(6)
C(27)-O(28)-C(29)	113.6(6)
O(28)-C(29)-C(30)	114.9(6)
O(19)-C(30)-C(29)	107.6(7)
N(103)-C(102)-S(101)	172.9(10)

Table S15. Anisotropic displacement parameters U_{ij} [$\times 1000$]
for Cs+(18C6) (12C4) SCN-

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cs(1)	30(1)	31(1)	26(1)	4(1)	3(1)	2(1)
O(1)	37(2)	47(2)	29(2)	4(2)	8(1)	5(2)
C(2)	38(3)	57(4)	56(4)	8(3)	22(3)	8(2)
C(3)	26(2)	72(4)	64(4)	14(3)	1(2)	0(3)
O(4)	40(2)	53(2)	36(2)	1(2)	-6(2)	-8(2)
C(5)	56(4)	79(5)	38(3)	-2(3)	-7(3)	-29(3)
C(6)	99(6)	50(4)	34(3)	-6(2)	2(3)	-31(4)
O(7)	73(3)	36(2)	35(2)	-1(2)	-2(2)	-2(2)
C(8)	114(7)	37(3)	43(3)	-14(3)	-3(4)	18(4)
C(9)	96(6)	65(4)	43(3)	-16(3)	4(4)	40(4)
O(10)	59(3)	55(2)	39(2)	-2(2)	10(2)	27(2)
C(11)	54(4)	85(5)	64(5)	6(4)	20(3)	34(4)
C(12)	30(3)	93(6)	89(6)	13(5)	8(3)	21(3)
O(13)	29(2)	69(3)	49(3)	6(2)	-5(2)	6(2)
C(14)	37(3)	75(5)	54(4)	12(3)	-13(3)	-15(3)
C(15)	52(3)	44(3)	45(3)	2(2)	-9(3)	-19(3)
O(16)	45(2)	29(2)	35(2)	2(1)	-3(2)	-6(1)
C(17)	72(4)	30(3)	35(3)	-6(2)	-2(3)	4(2)
C(18)	63(4)	52(3)	27(2)	0(2)	10(2)	18(3)
O(19)	44(2)	67(3)	38(2)	11(2)	10(2)	9(2)
C(20)	45(4)	93(6)	136(9)	51(6)	43(5)	-2(4)
C(21)	91(6)	83(6)	62(5)	2(4)	9(4)	-48(5)
O(22)	91(3)	50(3)	32(2)	5(2)	0(2)	-19(2)
C(23)	156(9)	31(3)	46(4)	-2(3)	1(4)	18(4)
C(24)	109(7)	47(4)	69(5)	14(3)	23(5)	27(4)
O(25)	77(3)	43(2)	47(2)	11(2)	22(2)	24(2)
C(26)	59(4)	82(6)	87(6)	14(5)	-8(4)	28(4)
C(27)	78(5)	60(4)	69(5)	5(4)	-33(4)	16(4)
O(28)	54(2)	39(2)	42(2)	6(2)	-8(2)	-1(2)
C(29)	112(7)	56(4)	39(3)	-20(3)	19(4)	-11(4)
C(30)	80(5)	89(6)	38(3)	0(3)	17(3)	12(4)
S(101)	21(2)	14(2)	2(1)	2(1)	-4(1)	19(1)
C(102)	92(6)	44(4)	115(7)	-10(4)	-54(6)	-2(4)
N(103)	79(6)	68(5)	73(5)	-10(4)	7(4)	-24(4)
O(201)	92(4)	43(3)	194(8)	-49(4)	89(5)	-25(3)
C(202)	88(6)	92(7)	147(11)	-49(7)	62(7)	-5(6)
O(301)	145(10)	207(14)	201(14)	-35(12)	-18(9)	1(10)
C(302)	62(6)	201(15)	165(13)	-122(12)	-15(7)	1(7)

