Table 19. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for **5**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2 a^{*2}U^{11} + ... + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cr(1A)	30(1)	23(1)	16(1)	-4(1)	-6(1)	1(1)
Cr(1B)	30(1)	22(1)	17(1)	-3(1)	-5(1)	-3(1)
Cl(1A)	38(1)	45(1)	22(1)	-6(1)	-4(1)	12(1)
Cl(1B)	40(1)	43(1)	24(1)	-6(1)	-7(1)	-16(1)
N(1A)	21(2)	23(2)	25(2)	-6(2)	-5(2)	0(2)
N(2A)	12(2)	25(2)	26(2)	-3(2)	-10(2)	3(2)
N(21A)	30(2)	24(2)	29(2)	-7(2)	-4(2)	-3(2)
N(22A)	26(2)	26(2)	19(2)	-2(2)	-5(2)	0(2)
N(1B)	28(2)	28(2)	22(2)	-3(2)	-5(2)	-4(2)
N(2B)	27(2)	28(2)	27(2)	-9(2)	-2(2)	0(2)
N(21B)	33(2)	23(2)	21(2)	-5(2)	-5(2)	-4(2)
N(22B)	32(2)	23(2)	23(2)	-3(2)	-4(2)	-6(2)
C(1A)	41(4)	54(4)	30(3)	9(3)	-4(3)	-2(3)
C(2A)	29(3)	29(3)	23(2)	-5(2)	-3(2)	-4(2)
C(3A)	29(3)	29(3)	25(2)	-3(2)	0(2)	-3(2)
C(4A)	33(3)	25(3)	23(2)	-8(2)	-1(2)	1(2)
C(5A)	22(3)	42(3)	42(3)	1(2)	0(2)	2(2)
C(6A)	41(3)	38(3)	32(3)	0(2)	-17(2)	-9(3)
C(7A)	53(4)	54(4)	42(3)	-3(3)	-19(3)	-16(3)
C(8A)	28(3)	66(4)	36(3)	15(3)	-6(2)	-6(3)
C(9A)	42(4)	45(4)	31(3)	5(2)	-4(3)	13(3)
C(10A)	43(3)	36(3)	23(3)	-2(2)	-5(2)	4(3)
C(11A)	19(3)	35(3)	19(2)	0(2)	-6(2)	1(2)
C(12A)	36(3)	35(3)	30(3)	-5(2)	-10(2)	-3(2)
C(13A)	45(4)	39(3)	38(3)	4(2)	-21(3)	-3(3)
C(14A)	40(4)	33(3)	48(3)	12(3)	-10(3)	2(3)
C(15A)	43(4)	27(3)	52(3)	-4(2)	-11(3)	4(3)
C(16A)	44(3)	28(3)	33(3)	-5(2)	-7(2)	-1(2)
C(17A)	30(3)	26(3)	29(3)	-2(2)	-9(2)	4(2)
C(21A)	57(4)	40(3)	38(3)	-21(3)	-11(3)	-5(3)
C(22A)	36(3)	33(3)	26(3)	-12(2)	-12(2)	6(2)

C(23A)	43(3)	39(3)	21(2)	-11(2)	-7(2)	-2(3)
C(24A)	30(3)	31(3)	23(2)	-7(2)	-3(2)	0(2)
C(25A)	61(4)	41(3)	24(3)	-3(2)	4(3)	-8(3)
C(26A)	34(3)	24(3)	35(3)	-10(2)	-10(2)	3(2)
C(27A)	45(4)	21(3)	42(3)	-2(2)	-11(3)	0(2)
C(28A)	41(4)	30(3)	51(3)	-5(3)	-2(3)	-15(3)
C(29A)	34(3)	40(3)	54(4)	-12(3)	-13(3)	-8(3)
C(30A)	39(3)	28(3)	36(3)	-6(2)	-15(2)	0(2)
C(31A)	20(3)	27(3)	31(3)	-11(2)	-4(2)	-6(2)
C(32A)	35(3)	34(3)	33(3)	-6(2)	-3(2)	-9(2)
C(33A)	51(4)	31(3)	37(3)	-6(2)	-5(3)	-7(3)
C(34A)	59(4)	42(4)	42(3)	-13(3)	-10(3)	-15(3)
C(35A)	51(4)	52(4)	65(4)	-10(3)	-28(3)	-15(3)
C(36A)	53(4)	37(3)	51(4)	-5(3)	-23(3)	-5(3)
C(37A)	19(3)	31(3)	24(2)	-6(2)	-3(2)	-2(2)
C(1B)	68(4)	48(4)	27(3)	-3(2)	-20(3)	-12(3)
C(2B)	40(3)	39(3)	22(2)	-4(2)	-11(2)	-14(3)
C(3N)	35(3)	38(3)	35(3)	-20(2)	7(2)	-14(3)
C(3B)	49(4)	47(3)	18(2)	-11(2)	-3(2)	-14(3)
C(5B)	62(4)	48(4)	44(3)	-26(3)	7(3)	-5(3)
C(6B)	40(4)	40(3)	47(3)	-15(3)	-5(3)	-4(3)
C(7B)	51(4)	30(3)	52(4)	-4(3)	-24(3)	5(3)
C(7B)	25(3)	59(4)	75(4)	-35(4)	-5(3)	1(3)
C(8B)	50(4)	30(3)	35(3)	-2(2)	-9(3)	-1(3)
C(8B)	42(4)	47(4)	70(4)	-26(3)	-24(3)	13(3)
C(9B)	31(3)	28(3)	29(3)	-4(2)	-16(2)	1(2)
C(12B)	17(3)	36(3)	63(4)	-16(3)	1(2)	-5(2)
C(13B)	49(4)	34(3)	84(5)	-19(3)	-9(4)	3(3)
C(14B)	42(4)	37(3)	71(4)	-17(3)	-19(3)	12(3)
C(15B)	55(4)	22(3)	53(4)	-5(2)	-4(3)	-2(3)
C(16B)	35(3)	25(3)	46(3)	-11(2)	-1(2)	-3(2)
C(17B)	35(3)	26(3)	34(3)	-15(2)	-3(2)	-2(2)
C(21B)	28(3)	47(3)	39(3)	-5(2)	-7(2)	-11(3)
C(22B)	32(3)	29(3)	25(2)	-6(2)	-6(2)	-1(2)
C(23B)	31(3)	39(3)	32(3)	-2(2)	-14(2)	-5(2)
C(24B)	33(3)	35(3)	26(3)	0(2)	-13(2)	-6(2)

C(25B)	60(5)	73(5)	32(3)	20(3)	-20(3)	-21(4)
C(26B)	50(4)	31(3)	29(3)	-9(2)	-2(2)	-8(3)
C(27B)	53(4)	32(3)	49(3)	-12(3)	2(3)	-15(3)
C(28B)	53(4)	30(3)	41(3)	2(2)	4(3)	-13(3)
C(29B)	45(4)	38(3)	29(3)	-2(2)	4(2)	-8(3)
C(30B)	38(3)	27(3)	32(3)	-6(2)	-2(2)	-6(2)
C(31B)	29(3)	25(3)	26(2)	-3(2)	-3(2)	-4(2)
C(32B)	44(3)	28(3)	27(3)	-2(2)	-1(2)	-8(2)
C(33B)	55(4)	30(3)	33(3)	5(2)	-16(3)	-15(3)
C(34B)	34(3)	44(3)	39(3)	4(3)	-9(3)	-12(3)
C(35B)	38(4)	43(3)	43(3)	-6(3)	7(3)	-5(3)
C(36B)	38(3)	33(3)	31(3)	-7(2)	-4(2)	-8(3)
C(37B)	34(3)	30(3)	17(2)	4(2)	-7(2)	-7(2)

Table 20. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for **5**.

	x	y	z	U(eq)
H(1AA)	7847(7)	-1052(4)	4251(3)	69
H(1AB)	6291(7)	-1322(4)	4181(3)	69
H(1AC)	6372(7)	-583(4)	4497(3)	69
H(3AA)	4597(6)	-253(3)	3453(2)	35
H(5AA)	3342(6)	1309(3)	2047(3)	58
H(5AB)	3068(6)	1062(3)	2916(3)	58
H(5AC)	2939(6)	437(3)	2468(3)	58
H(6AA)	9518(6)	537(3)	3656(3)	45
H(7AA)	11565(7)	31(4)	4314(3)	60
H(8AA)	12649(6)	-1238(4)	4392(3)	58
H(9AA)	11695(6)	-2023(4)	3786(3)	53
H(10A)	9617(6)	-1535(3)	3136(3)	43
H(12A)	5486(6)	1179(3)	674(3)	41
H(13A)	4458(6)	2334(3)	-111(3)	51
H(14A)	3917(6)	3490(3)	255(3)	54
H(15A)	4414(6)	3506(3)	1418(3)	50
H(16A)	5433(6)	2361(3)	2217(3)	42
H(21A)	6338(7)	-1160(3)	684(3)	64
H(21B)	7626(7)	-1035(3)	43(3)	64
H(21C)	6100(7)	-498(3)	-64(3)	64
H(23A)	8251(6)	406(3)	-386(3)	40
H(25A)	9651(7)	2087(3)	-231(3)	65
H(25B)	8589(7)	1886(3)	-746(3)	65
H(25C)	10155(7)	1394(3)	-619(3)	65
H(26A)	8046(6)	-1551(3)	2242(3)	37
H(27A)	6690(6)	-2492(3)	3040(3)	44
H(28A)	4150(6)	-2335(3)	3063(3)	49
H(29A)	2962(6)	-1260(3)	2257(3)	50
H(30A)	4328(6)	-310(3)	1458(3)	41
H(32A)	7500(6)	2679(3)	491(3)	41

H(33A)	8474(7)	3788(3)	612(3)	48
H(34A)	10593(7)	3653(4)	1200(3)	55
H(35A)	11672(7)	2398(4)	1737(4)	65
H(36A)	10737(7)	1283(4)	1616(3)	56
H(1BA)	5642(7)	2801(3)	5137(3)	71
H(1BB)	4315(7)	2984(3)	5698(3)	71
H(1BC)	5738(7)	3454(3)	5560(3)	71
H(3BA)	3520(6)	4474(3)	5405(3)	44
H(5BA)	1303(7)	6091(4)	4446(3)	74
H(5BB)	2442(7)	5927(4)	5053(3)	74
H(5BC)	1091(7)	5406(4)	5184(3)	74
H(6BA)	6912(6)	3698(4)	3170(3)	50
H(7BA)	5356(7)	1191(3)	4192(3)	54
H(7BB)	8166(6)	2596(4)	2834(4)	60
H(8BA)	4041(7)	2271(3)	4491(3)	47
H(8BB)	7385(7)	1336(4)	3347(4)	61
H(12B)	-116(6)	5312(3)	3657(3)	46
H(13B)	-1591(8)	6272(4)	2852(4)	66
H(14B)	-519(7)	7349(4)	2067(4)	60
H(15B)	1939(7)	7494(3)	2078(3)	53
H(16B)	3388(6)	6549(3)	2859(3)	42
H(21D)	-244(6)	3774(3)	3052(3)	57
H(21E)	-316(6)	4015(3)	2188(3)	57
H(21F)	-832(6)	4654(3)	2637(3)	57
H(23B)	977(6)	5285(3)	1586(3)	41
H(25D)	4204(8)	6068(4)	759(3)	89
H(25E)	2494(8)	6349(4)	848(3)	89
H(25F)	3031(8)	5607(4)	529(3)	89
H(26B)	2373(6)	2683(3)	2820(3)	43
H(27B)	1459(7)	1571(3)	3602(3)	52
H(28B)	456(7)	1587(3)	4775(3)	52
H(29B)	444(6)	2730(3)	5164(3)	47
H(30B)	1340(6)	3864(3)	4370(3)	39
H(32B)	5128(6)	6599(3)	1871(3)	40
H(33B)	7291(7)	7102(3)	1287(3)	48
H(34B)	8967(6)	6358(3)	695(3)	49

© 2001 American Chemical Society, Organometallics, MacAdams om010857k Supporting Info Page 46

H(35B)	8579(6)	5071(4)	761(3)	52
H(36B)	6443(6)	4537(3)	1377(3)	41

Table 21. Crystal data and structure refinement for **6**.

Identification code	len06	
Empirical formula	C34 H33 Cr N4	
Formula weight	549.64	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/c	
Unit cell dimensions	a = 10.0898(3) Å	α= 90°.
	b = 9.2347(3) Å	β= 97.814(2)°.
	c = 30.2026(5) Å	γ = 90°.
Volume	2788.03(13) Å^3	
Z	4	
Density (calculated)	1.309 g/cm^3	
Absorption coefficient	0.440 mm^{-1}	
F(000)	1156	
Crystal size	0.40 x 0.25 x 0.15 mm^3	
Theta range for data collection	2.04 to 23.99°.	
Index ranges	$-11 \le h \le 11$, $-9 \le k \le 10$, $-34 \le l \le 33$	
Reflections collected	9298	
Independent reflections	4280 [R(int) = 0.0777]	
Completeness to theta = 23.99°	97.5 %	
Absorption correction	None	
Max. and min. transmission	0.9369 and 0.8435	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	4280 / 0 / 352	
Goodness-of-fit on F^2	1.770	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0955, wR2 = 0.2578	
R indices (all data)	R1 = 0.1297, wR2 = 0.2875	
Largest diff. peak and hole	0.633 and -0.857 e.Å^{-3}	

© 2001 American Chemical Society, Organometallics, MacAdams om010857k Supporting Info Page 48

Table 22. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for **6**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Cr(1)	3101(1)	8968(1)	1233(1)	23(1)
N(1)	3722(5)	10999(6)	1274(2)	21(1)
N(2)	2859(6)	9025(6)	1872(2)	24(1)
N(3)	3039(5)	7194(6)	849(2)	23(1)
N(4)	1113(5)	9364(6)	954(2)	22(1)
C(1)	3548(6)	11970(8)	1585(2)	26(2)
C(2)	3012(7)	11611(7)	1972(2)	27(2)
C(3)	2750(7)	10225(7)	2120(2)	25(2)
C(4)	3921(8)	13540(8)	1534(3)	36(2)
C(5)	2323(8)	10088(8)	2579(2)	39(2)
C(6)	5830(7)	11665(8)	997(2)	32(2)
C(7)	6554(7)	11914(8)	647(2)	32(2)
C(8)	5907(7)	11896(7)	212(2)	31(2)
C(9)	4565(8)	11605(8)	127(2)	36(2)
C(10)	3862(7)	11324(7)	482(2)	30(2)
C(11)	4483(7)	11377(7)	918(2)	24(2)
C(12)	1589(7)	6816(8)	1957(2)	34(2)
C(13)	1427(8)	5518(8)	2170(3)	39(2)
C(14)	2389(8)	5038(8)	2509(2)	37(2)
C(15)	3547(8)	5820(8)	2612(3)	34(2)
C(16)	3722(7)	7109(8)	2396(2)	32(2)
C(17)	2731(6)	7655(7)	2077(2)	24(2)
C(21)	2058(7)	6580(7)	568(2)	29(2)
C(22)	786(7)	7214(7)	492(2)	28(2)
C(23)	359(7)	8525(8)	660(2)	26(2)
C(24)	2300(8)	5214(8)	310(3)	38(2)
C(25)	-1053(7)	8988(8)	487(3)	38(2)
C(26)	4918(7)	7931(8)	1256(2)	32(2)
C(27)	6292(7)	7935(8)	1396(3)	38(2)
C(28)	7107(7)	6886(8)	1245(3)	36(2)
C(29)	6586(8)	5868(8)	944(2)	33(2)

C(30)	5230(8)	5833(8)	787(2)	33(2)
C(31)	4400(7)	6879(6)	950(2)	22(2)
C(32)	-155(7)	10583(8)	1482(2)	32(2)
C(33)	-728(7)	11848(8)	1631(2)	32(2)
C(34)	-631(7)	13141(8)	1417(3)	36(2)
C(35)	46(7)	13215(8)	1052(3)	35(2)
C(36)	589(7)	11962(8)	891(2)	29(2)
C(37)	503(6)	10654(8)	1105(2)	24(2)

Table 23. Bond lengths [Å] and angles [°] for **6**.

Cr(1)-N(1)	1.976(5)
Cr(1)-N(2)	1.979(5)
Cr(1)-N(3)	2.005(5)
Cr(1)-C(26)	2.062(7)
Cr(1)-N(4)	2.099(5)
N(1)-C(1)	1.326(8)
N(1)-C(11)	1.448(8)
N(2)-C(3)	1.349(8)
N(2)-C(17)	1.422(8)
N(3)-C(21)	1.339(8)
N(3)-C(31)	1.396(8)
N(4)-C(23)	1.336(9)
N(4)-C(37)	1.443(8)
C(1)-C(2)	1.393(10)
C(1)-C(4)	1.511(10)
C(2)-C(3)	1.394(9)
C(3)-C(5)	1.512(9)
C(6)-C(11)	1.373(10)
C(6)-C(7)	1.383(10)
C(7)-C(8)	1.385(10)
C(8)-C(9)	1.370(10)
C(9)-C(10)	1.388(10)
C(10)-C(11)	1.380(10)
C(12)-C(13)	1.381(11)
C(12)-C(17)	1.396(10)
C(13)-C(14)	1.384(11)
C(14)-C(15)	1.373(11)
C(15)-C(16)	1.381(10)
C(16)-C(17)	1.384(10)
C(21)-C(22)	1.401(10)
C(21)-C(24)	1.519(9)
C(22)-C(23)	1.403(10)
C(23)-C(25)	1.511(10)
C(26)-C(31)	1.392(10)

C(26)-C(27)	1.393(10)
C(27)-C(28)	1.387(11)
C(28)-C(29)	1.363(10)
C(29)-C(30)	1.386(11)
C(30)-C(31)	1.410(10)
C(32)-C(37)	1.395(10)
C(32)-C(33)	1.405(10)
C(33)-C(34)	1.366(11)
C(34)-C(35)	1.376(11)
C(35)-C(36)	1.396(10)
C(36)-C(37)	1.378(10)

N(1)-Cr(1)-N(2)	89.7(2)
N(1)-Cr(1)-N(3)	142.8(2)
N(2)-Cr(1)-N(3)	126.0(2)
N(1)-Cr(1)-C(26)	99.6(3)
N(2)-Cr(1)-C(26)	102.0(3)
N(3)-Cr(1)-C(26)	66.2(3)
N(1)-Cr(1)-N(4)	97.9(2)
N(2)-Cr(1)-N(4)	98.5(2)
N(3)-Cr(1)-N(4)	87.5(2)
C(26)-Cr(1)-N(4)	153.0(3)
C(1)-N(1)-C(11)	119.8(6)
C(1)-N(1)-Cr(1)	127.9(5)
C(11)-N(1)-Cr(1)	112.2(4)
C(3)-N(2)-C(17)	118.0(5)
C(3)-N(2)-Cr(1)	126.3(5)
C(17)-N(2)-Cr(1)	115.6(4)
C(21)-N(3)-C(31)	132.1(6)
C(21)-N(3)-Cr(1)	132.5(5)
C(31)-N(3)-Cr(1)	95.2(4)
C(23)-N(4)-C(37)	117.3(5)
C(23)-N(4)-Cr(1)	126.4(5)
C(37)-N(4)-Cr(1)	116.3(4)
N(1)-C(1)-C(2)	122.4(6)
N(1)-C(1)-C(4)	121.2(6)

C(2)-C(1)-C(4)	116.4(6)
C(1)-C(2)-C(3)	126.9(6)
N(2)-C(3)-C(2)	123.0(6)
N(2)-C(3)-C(5)	119.6(6)
C(2)-C(3)-C(5)	117.4(6)
C(11)-C(6)-C(7)	120.8(7)
C(8)-C(7)-C(6)	119.5(7)
C(7)-C(8)-C(9)	120.5(7)
C(8)-C(9)-C(10)	119.2(7)
C(11)-C(10)-C(9)	121.1(7)
C(10)-C(11)-C(6)	118.9(6)
C(10)-C(11)-N(1)	118.9(6)
C(6)-C(11)-N(1)	122.0(6)
C(13)-C(12)-C(17)	120.4(7)
C(14)-C(13)-C(12)	120.5(7)
C(13)-C(14)-C(15)	119.2(7)
C(16)-C(15)-C(14)	120.4(7)
C(15)-C(16)-C(17)	121.0(7)
C(16)-C(17)-C(12)	118.2(7)
C(16)-C(17)-N(2)	121.8(6)
C(12)-C(17)-N(2)	120.0(6)
N(3)-C(21)-C(22)	120.6(6)
N(3)-C(21)-C(24)	121.3(7)
C(22)-C(21)-C(24)	118.1(6)
C(21)-C(22)-C(23)	128.4(6)
N(4)-C(23)-C(22)	124.5(6)
N(4)-C(23)-C(25)	119.5(6)
C(22)-C(23)-C(25)	116.1(6)
C(31)-C(26)-C(27)	118.2(6)
C(31)-C(26)-Cr(1)	92.9(5)
C(27)-C(26)-Cr(1)	148.5(6)
C(28)-C(27)-C(26)	120.5(7)
C(29)-C(28)-C(27)	120.6(7)
C(28)-C(29)-C(30)	121.2(7)
C(29)-C(30)-C(31)	118.1(6)
C(26)-C(31)-N(3)	105.6(6)

C(26)-C(31)-C(30)	121.4(6)
N(3)-C(31)-C(30)	132.8(6)
C(37)-C(32)-C(33)	119.0(7)
C(34)-C(33)-C(32)	121.1(7)
C(33)-C(34)-C(35)	119.8(7)
C(34)-C(35)-C(36)	119.9(7)
C(37)-C(36)-C(35)	120.7(7)
C(36)-C(37)-C(32)	119.4(6)
C(36)-C(37)-N(4)	121.3(6)
C(32)-C(37)-N(4)	119.2(6)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 24. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for **6**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2 a^{*2} U^{11} + ... + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cr(1)	20(1)	23(1)	24(1)	-6(1)	4(1)	1(1)
N(1)	12(3)	30(3)	22(3)	-4(2)	4(2)	-3(2)
N(2)	24(3)	24(3)	25(3)	-2(2)	8(2)	0(2)
N(3)	18(3)	22(3)	29(3)	-1(2)	7(2)	0(2)
N(4)	21(3)	20(3)	23(3)	-1(2)	2(2)	5(2)
C(1)	13(3)	32(4)	33(4)	-2(3)	0(3)	-1(3)
C(2)	34(4)	23(3)	26(4)	-14(3)	8(3)	-3(3)
C(3)	20(3)	29(4)	28(4)	-6(3)	6(3)	-5(3)
C(4)	43(5)	32(4)	37(4)	-1(3)	16(4)	-3(4)
C(5)	56(5)	37(4)	29(4)	-4(3)	20(4)	1(4)
C(6)	23(4)	41(4)	31(4)	-7(3)	-1(3)	-5(3)
C(7)	20(4)	32(4)	44(4)	-12(3)	3(3)	-9(3)
C(8)	33(4)	28(4)	34(4)	-5(3)	13(3)	-12(3)
C(9)	45(5)	35(4)	28(4)	-2(3)	4(3)	-3(4)
C(10)	21(4)	34(4)	35(4)	-4(3)	8(3)	-2(3)
C(11)	23(4)	22(3)	29(4)	2(3)	9(3)	4(3)
C(12)	27(4)	38(4)	35(4)	5(4)	-1(3)	0(3)
C(13)	40(5)	38(4)	43(5)	-7(4)	14(4)	-12(4)
C(14)	57(5)	27(4)	31(4)	-4(3)	17(4)	-3(4)
C(15)	35(4)	32(4)	37(4)	-5(3)	7(3)	1(3)
C(16)	32(4)	31(4)	34(4)	2(3)	6(3)	-8(3)
C(17)	19(3)	30(4)	24(3)	-9(3)	9(3)	-1(3)
C(21)	31(4)	25(4)	32(4)	0(3)	5(3)	-16(3)
C(22)	17(3)	31(4)	33(4)	-3(3)	-1(3)	-8(3)
C(23)	19(4)	34(4)	27(4)	-3(3)	7(3)	-6(3)
C(24)	40(5)	27(4)	45(5)	-19(3)	-1(4)	-1(3)
C(25)	23(4)	42(4)	46(5)	-8(4)	0(3)	-5(3)
C(26)	31(4)	31(4)	34(4)	-4(3)	9(3)	3(3)
C(27)	28(4)	35(4)	50(5)	-19(4)	-6(3)	2(3)
C(28)	24(4)	40(4)	43(4)	-4(4)	-1(3)	1(3)
C(29)	39(4)	26(4)	34(4)	0(3)	7(3)	8(3)

C(30)	42(5)	27(4)	31(4)	-7(3)	8(3)	-2(3)
C(31)	30(4)	15(3)	22(3)	4(3)	6(3)	-1(3)
C(32)	22(4)	36(4)	37(4)	0(3)	4(3)	-2(3)
C(33)	18(4)	47(5)	31(4)	-6(3)	7(3)	10(3)
C(34)	24(4)	37(4)	45(5)	-3(4)	2(3)	14(3)
C(35)	25(4)	25(4)	54(5)	1(3)	2(3)	2(3)
C(36)	22(4)	30(4)	39(4)	0(3)	10(3)	-1(3)
C(37)	11(3)	33(4)	30(4)	-3(3)	4(3)	2(3)

© 2001 American Chemical Society, Organometallics, MacAdams om010857k Supporting Info Page 56

Table 25. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for **6**.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	2802	12395	2154	33
H(4A)	4287	13668	1252	54
H(4B)	4595	13823	1783	54
H(4C)	3124	14147	1532	54
H(5A)	2179	9065	2644	59
H(5B)	1489	10626	2587	59
H(5C)	3023	10484	2803	59
H(6A)	6270	11694	1296	38
H(7A)	7488	12097	705	38
H(8A)	6397	12086	-28	37
H(9A)	4122	11595	-171	43
H(10A)	2937	11093	424	36
H(12A)	918	7140	1727	41
H(13A)	649	4951	2084	47
H(14A)	2250	4176	2668	45
H(15A)	4232	5472	2834	41
H(16A)	4536	7629	2466	39
H(22A)	127	6689	302	33
H(24A)	3226	4894	394	57
H(24B)	2142	5417	-11	57
H(24C)	1688	4452	382	57
H(25A)	-1246	9914	623	56
H(25B)	-1683	8252	564	56
H(25C)	-1145	9098	161	56
H(27A)	6674	8662	1596	46
H(28A)	8037	6876	1353	44
H(29A)	7162	5171	839	39
H(30A)	4871	5124	576	39
H(32A)	-214	9692	1635	38
H(33A)	-1191	11804	1884	38

© 2001 American Chemical Society, Organometallics, MacAdams om010857k Supporting Info Page 57

H(34A)	-1029	13985	1521	43
H(35A)	143	14119	909	42
H(36A)	1023	12012	631	35