

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1996, 15(6), 1582-1588, DOI:[10.1021/om950670r](https://doi.org/10.1021/om950670r)

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 S1. Hydrogen Atom Coordinates for [(OC)₄Os(SnMe₂)]₂, **1**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)	Occ
H(11)	0.292(1)	0.7460(9)	-0.012(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(12)	0.208(1)	0.7192(9)	0.116(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(13)	0.138(1)	0.6881(9)	-0.031(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(21)	0.217(1)	0.347(1)	0.133(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(22)	0.156(1)	0.449(1)	0.211(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(23)	0.086(1)	0.418(1)	0.064(1)	0.13(2)	0.8921(7)
H(111)	0.8009(7)	0.4569(5)	0.2405(6)	0.13(2)	0.1079(7)
H(112)	0.7718(7)	0.5611(5)	0.3310(6)	0.13(2)	0.1079(7)
H(113)	0.8806(7)	0.5705(5)	0.2175(6)	0.13(2)	0.1079(7)
H(121)	0.5250(7)	0.7957(5)	0.0412(6)	0.13(2)	0.1079(7)
H(122)	0.5860(7)	0.7913(5)	0.1960(6)	0.13(2)	0.1079(7)
H(123)	0.6948(7)	0.8007(5)	0.0825(6)	0.13(2)	0.1079(7)

Table S2. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}$) for **1**

Atom	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Os(1)	0.0682(3)	0.0468(3)	0.0430(3)	-0.0039(2)	-0.0015(2)	0.0014(2)
Sn(1)	0.0515(4)	0.0537(5)	0.0509(4)	-0.0002(4)	0.0090(3)	0.0002(4)
O(11)	0.124(7)	0.052(4)	0.113(8)	0.014(4)	-0.003(6)	-0.017(5)
O(12)	0.20(1)	0.117(8)	0.076(6)	-0.009(6)	0.056(6)	0.048(8)
O(13)	0.134(8)	0.059(2)	0.083(6)	0.016(4)	0.013(6)	0.001(5)
O(14)	0.110(5)	0.083(6)	0.150(9)	0.001(6)	-0.059(6)	-0.000(6)
Os(10)	0.0515(4)	0.0537(5)	0.0509(4)	-0.0002(4)	0.0090(3)	0.0002(4)
Sn(10)	0.0682(3)	0.0468(3)	0.0430(3)	-0.0039(2)	-0.0015(2)	0.0014(2)

Table S3. Hydrogen Atom Coordinates for $[(OC)_3Os(SnMe_2)]_3$, **2**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
H(11)	0.7740(8)	0.7265(8)	0.0524(7)	0.12(2)
H(12)	0.8819(8)	0.8511(8)	0.1197(7)	0.12(2)
H(13)	0.7254(8)	0.8116(8)	0.1197(7)	0.12(2)

Table S4. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}$) for **2**

Atom	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Os(1)	0.0320(2)	0.0318(2)	0.0557(3)	0.0000	0.0000	0.0158(2)
Sn(1)	0.0394(4)	0.0313(4)	0.0604(5)	0.0000	0.0000	0.0176(3)
O(11)	0.080(6)	0.099(7)	0.151(9)	0.0000	0.0000	0.064(6)
O(12)	0.085(4)	0.093(4)	0.058(4)	-0.001(4)	-0.007(4)	0.051(4)
C(1)	0.075(5)	0.057(5)	0.087(6)	0.026(5)	0.015(5)	0.033(5)
C(11)	0.061(7)	0.056(7)	0.10(1)	0.0000	0.0000	0.034(6)
C(12)	0.051(4)	0.053(5)	0.066(6)	-0.004(4)	-0.003(4)	0.031(4)

Table S5. Hydrogen Atom Coordinates for Os₄(SnMe₂)₄(CO)₁₄, **3**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
H(11)	1.375(1)	0.4627(6)	0.4377(8)	0.19(4)
H(12)	1.466(1)	0.4455(6)	0.3444(8)	0.19(4)
H(13)	1.474(1)	0.3918(6)	0.4567(8)	0.19(4)
H(21)	1.255(1)	0.2426(6)	0.1459(9)	0.12(2)
H(22)	1.385(1)	0.2952(6)	0.1451(9)	0.12(2)
H(23)	1.392(1)	0.2415(6)	0.2574(9)	0.12(2)
H(31)	1.315(1)	0.5824(6)	0.1584(8)	0.12(3)
H(32)	1.392(1)	0.5636(6)	0.0544(8)	0.12(3)
H(33)	1.413(1)	0.5112(6)	0.1702(8)	0.12(3)
H(41)	1.161(1)	0.3581(5)	-0.124(1)	0.15(3)
H(42)	1.286(1)	0.4101(5)	-0.139(1)	0.15(3)
H(43)	1.308(1)	0.3577(5)	-0.023(1)	0.15(3)

Table S6. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}$) for **3**

Atom	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Os(1)	0.0418(2)	0.0430(2)	0.0368(2)	0.0090(2)	0.0135(2)	0.0052(2)
Os(2)	0.0338(2)	0.0302(2)	0.0303(2)	0.0015(1)	0.0109(1)	0.0014(1)
Sn(1)	0.0379(3)	0.0498(3)	0.0361(3)	0.0021(3)	0.0127(3)	0.0089(3)
Sn(2)	0.0352(3)	0.0429(3)	0.0426(3)	0.0119(3)	0.0155(3)	0.0064(3)
O(11)	0.095(6)	0.077(5)	0.072(5)	-0.025(4)	0.026(4)	-0.010(4)
O(12)	0.051(4)	0.144(7)	0.132(7)	0.080(6)	0.048(5)	0.026(5)
O(13)	0.146(8)	0.058(4)	0.062(5)	-0.011(4)	-0.003(5)	-0.008(5)
O(14)	0.073(5)	0.104(6)	0.074(5)	0.045(4)	0.012(4)	0.033(4)
O(21)	0.100(6)	0.055(4)	0.072(5)	-0.025(4)	0.027(4)	-0.025(4)
O(22)	0.039(4)	0.070(4)	0.073(4)	0.023(3)	0.031(3)	0.016(3)
O(23)	0.085(5)	0.067(4)	0.055(4)	-0.025(3)	0.023(4)	-0.018(4)
C(1)	0.049(6)	0.103(8)	0.059(7)	0.008(6)	0.002(5)	-0.010(6)
C(2)	0.106(9)	0.099(8)	0.067(7)	0.012(6)	0.044(7)	0.062(7)
C(3)	0.051(6)	0.100(8)	0.061(7)	0.030(6)	0.002(5)	-0.013(6)
C(4)	0.112(9)	0.067(7)	0.094(8)	0.025(6)	0.076(8)	0.043(7)

Table S7. Hydrogen Atom Coordinates for Os₄(μ₃-O)₂(SnMe₂)₄(CO)₁₄, **4**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)	Occ
H(11)	0.143(1)	0.016(1)	0.240(1)	0.21(3)	1.0000
H(12)	0.045(1)	0.091(1)	0.204(1)	0.21(3)	1.0000
H(13)	0.083(1)	0.042(1)	0.122(1)	0.21(3)	1.0000
H(21)	0.173(1)	0.386(1)	0.110(1)	0.21(3)	1.0000
H(22)	0.065(1)	0.351(1)	0.111(1)	0.21(3)	1.0000
H(23)	0.103(1)	0.302(1)	0.030(1)	0.21(3)	1.0000
H(31)	0.5461(9)	0.225(1)	0.739(1)	0.20(3)	1.0000
H(32)	0.5200(9)	0.309(1)	0.808(1)	0.20(3)	1.0000
H(33)	0.5865(9)	0.343(1)	0.745(1)	0.20(3)	1.0000
H(41)	0.298(1)	0.532(1)	0.582(1)	0.20(3)	1.0000
H(42)	0.353(1)	0.516(1)	0.702(1)	0.20(3)	1.0000
H(43)	0.420(1)	0.549(1)	0.640(1)	0.20(3)	1.0000
H(51)	0.728(5)	0.440(2)	0.036(5)	0.068(6)	0.26(1)
H(53)	0.723(5)	0.116(2)	0.057(5)	0.068(6)	0.26(1)
H(54)	0.814(6)	0.101(3)	-0.051(5)	0.068(6)	0.26(1)
H(55)	0.863(4)	0.256(4)	-0.116(4)	0.068(6)	0.26(1)
H(56)	0.819(6)	0.425(3)	-0.072(5)	0.068(6)	0.26(1)
H(571)	0.645(4)	0.218(5)	0.146(4)	0.111(6)	0.26(1)
H(572)	0.700(5)	0.328(5)	0.188(4)	0.111(6)	0.26(1)
H(573)	0.593(4)	0.325(5)	0.090(5)	0.111(6)	0.26(1)
H(61)	0.784(6)	0.463(2)	-0.031(6)	0.068(6)	0.24(1)
H(62)	0.706(5)	0.376(3)	0.069(5)	0.068(6)	0.24(1)
H(64)	0.745(5)	0.090(2)	-0.048(5)	0.068(6)	0.24(1)
H(65)	0.823(5)	0.176(4)	-0.148(4)	0.068(6)	0.24(1)
H(66)	0.842(4)	0.363(4)	-0.140(4)	0.068(6)	0.24(1)
H(671)	0.667(5)	0.093(4)	0.071(5)	0.111(6)	0.24(1)
H(672)	0.709(5)	0.183(5)	0.156(4)	0.111(6)	0.24(1)
H(673)	0.599(4)	0.195(5)	0.065(5)	0.111(6)	0.24(1)

Table S8. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}^2$) for **4**

Atom	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Os(1)	0.0423(3)	0.0526(3)	0.0506(4)	-0.0030(3)	0.0242(3)	0.0013(2)
Os(2)	0.0314(3)	0.0465(3)	0.0416(3)	-0.0003(3)	0.0154(2)	-0.0003(2)
Sn(1)	0.0400(5)	0.0518(5)	0.0437(6)	-0.0015(4)	0.0181(4)	-0.0030(4)
Sn(2)	0.0321(4)	0.0534(5)	0.0410(6)	-0.0018(4)	0.0137(4)	-0.0037(4)
O(1)	0.032(4)	0.055(5)	0.041(5)	-0.006(4)	0.013(4)	0.001(4)
O(11)	0.118(9)	0.050(6)	0.09(1)	0.018(6)	0.044(8)	0.006(6)
O(12)	0.048(6)	0.111(9)	0.11(1)	-0.030(8)	0.022(7)	0.002(6)
O(13)	0.125(9)	0.048(6)	0.10(1)	0.009(6)	0.055(8)	-0.010(6)
O(14)	0.110(9)	0.087(8)	0.076(9)	-0.027(7)	0.056(8)	0.001(7)
O(21)	0.097(8)	0.054(6)	0.088(9)	0.029(6)	0.045(7)	0.006(6)
O(22)	0.036(6)	0.095(8)	0.103(9)	0.002(7)	0.024(6)	-0.000(5)
O(23)	0.090(7)	0.038(5)	0.083(8)	0.007(6)	0.043(6)	-0.002(5)
C(11)	0.08(1)	0.043(8)	0.06(1)	0.001(8)	0.039(9)	0.004(8)
C(12)	0.06(1)	0.08(1)	0.09(1)	0.00(1)	0.03(1)	0.009(8)
C(13)	0.036(7)	0.08(1)	0.07(1)	0.00(1)	0.019(8)	-0.008(8)
C(14)	0.053(8)	0.07(1)	0.07(1)	0.004(9)	0.030(8)	0.017(7)
C(21)	0.055(8)	0.050(8)	0.07(1)	0.023(8)	0.027(8)	-0.001(7)
C(22)	0.034(7)	0.063(9)	0.056(9)	-0.002(7)	0.020(7)	-0.003(6)
C(23)	0.036(7)	0.054(8)	0.06(1)	0.005(7)	0.019(7)	0.009(6)
C(1)	0.0862	0.0721	0.0597	-0.0165	0.0383	-0.0231
C(2)	0.0765	0.1035	0.0545	0.0210	0.0246	0.0141
C(3)	0.0365	0.0883	0.0700	0.0009	0.0124	-0.0011
C(4)	0.0662	0.0497	0.0887	-0.0129	0.0440	-0.0039