ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1998, 17(15), 3141-3142, DOI:10.1021/om980284k

S1

Table 1. Crystal data and structure refinement for 5.

Identification code	p
Empirical formula	$C_{31}H_{41}O_3OsP$
Formula weight	682.81
Temperature	296(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P21/c
Unit cell dimensions	*a* = 9.3619(8) Å alpha = 90°
	b = 21.464(2) Å beta = 107.652(2)°
	c = 14.6989(13) Å gamma = 90°
Volume, Z	2814.6(4) $Å^3$, 4
Density (calculated)	1.611 Mg/m^3
Absorption coefficient	4.617 mm^{-1}
F(000)	1368
Crystal size	0.2 x 0.2 x 0.2 mm
Θ range for data collection	1.74 to 23.29°
Limiting indices	$-10 \le h \le 2$, $-21 \le k \le 21$, $-12 \le l \le 16$
Reflections collected	6110
Independent reflections	3188 (R_{int} = 0.0416)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3188 / 0 / 328
Goodness-of-fit on F^2	1.122
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0448, wR2 = 0.0946
R indices (all data)	R1 = 0.0563, wR2 = 0.1011
Largest diff. peak and hole	0.548 and -1.631 $eÅ^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 5. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Os(1)	1197(1)	3942(1)	7326(1)	32(1)
C(1)	3360(10)	4345(5)	7375(7)	32(3)
C(2)	2385(10)	4808(5)	7482(7)	28(2)
C(3)	1491(10)	5309(5)	6818(7)	32(3)
C(4)	-49(10)	5258(5)	6984(7)	36(3)
C(5)	-323(10)	4667(5)	7324(6)	31(3)
C(6)	-1733(10)	4616(6)	7497(7)	37(3)
C(7)	-2757(11)	5115(6)	7328(7)	45(3)
C(8)	-2435(11)	5657(7)	6961(8)	53(4)
C(9)	-1075(11)	5740(6)	6792(8)	46(3)
C(10)	2274(10)	5926(5)	7052(7)	32(3)
C(11)	3235(12)	6134(6)	6560(8)	47(3)
C(12)	3988(15)	6680(8)	6798(11)	77(5)
C(13)	3811(14)	7058(7)	7524(11)	70(4)
C(14)	2874(13)	6846(7)	8031(9)	59(4)
C(15)	2115(12)	6293(6)	7789(8)	44(3)
C(16)	5136(13)	4054(6)	5480(8)	59(4)
C(17)	4755(11)	3933(6)	6390(8)	38(3)
O(1)	1299(8)	5184(4)	5815(5)	45(2)
O(2)	5320(9)	3540(4)	6951(6)	61(2)
O(3)	3742(7)	4346(4)	6497(5)	39(2)
P(1)	1921(3)	3789(1)	8977(2)	34(1)
C(20)	3024(10)	4444(5)	9736(7)	38(3)
C(21)	1986(12)	4997(6)	9750(8)	47(3)
C(22)	4077(12)	4309(6)	10738(7)	51(3)
C(23)	329(12)	3683(6)	9479(7)	41(3)
C(24)	732(14)	3565(7)	10553(8)	61(4)
C(25)	-824(13)	3178(7)	8959(9)	65(4)
C(26)	3239(13)	3123(6)	9460(8)	49(3)
C(27)	4683(13)	3201(7)	9193(9)	64(4)
C(28)	2596(10)	2471(4)	9178(6)	68(4)
C(30)	-427(10)	3736(4)	5851(6)	49(3)
C(31)	1019(14)	3564(7)	5852(9)	62(4)
C(32)	1542(15)	3079(7)	6534(10)	62(4)
C(33)	404(14)	2945(6)	6937(9)	55(3)
C(34)	-780(13)	3338(6)	6540(8)	46(3)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 5.

Os(1)-C(5)	2.108(11)	Os(1)-C(2)	2.142(10)
Os(1)-C(1)	2.183(9)	Os(1)-C(32)	2.263(13)
Os(1)-C(34)	2.268(11)	Os(1)-C(31)	2.271(11)
Os(1)-C(33)	2.281(13)	Os(1)-C(30)	2.282(8)
Os(1)-P(1)	2.338(3)	C(1)-C(2)	1.389(14)
C(1)-O(3)	1.439(11)	C(1)-H(1)	1.04(13)
C(2)-C(3)	1.522(14)	C(2)-H(2)	1.03(12)
C(3)-O(1)	1.456(11)	C(3)-C(10)	1.502(14)
C(3)-C(4)	1.537(12)	C(4)-C(9)	1.38(2)
C(4)-C(5)	1.41(2)	C(5)-C(6)	1.422(13)
C(6)-C(7)	1.41(2)	C(6)-H(6)	0.93
C(7)-C(8)	1.35(2)	C(7)-H(7)	0.93
C(8)-C(9)	1.38(2)	C(8)-H(8)	0.93
C(9)-H(9)	0.93	C(10)-C(15)	1.38(2)
C(10)-C(11)	1.388(14)	C(11)-C(12)	1.36(2)
C(11)-H(11)	0.93	C(12)-C(13)	1.39(2)
C(12)-H(12)	0.93	C(13)-C(14)	1.39(2)
C(13)-H(13)	0.93	C(14)-C(15)	1.37(2)
C(14)-H(14)	0.93	C(15)-H(15)	0.93
C(16)-C(17)	1.51(2)	C(16)-H(16A)	0.96
C(16)-H(16B)	0.96	C(16)-H(16C)	0.96
C(17)-O(2)	1.187(13)	C(17)-O(3)	1.342(13)
O(1)-H(3)	1.228(8)	O(3)-H(3)	1.988(7)
P(1)-C(23)	1.866(9)	P(1)-C(26)	1.881(12)
P(1)-C(20)	1.894(11)	C(20)-C(22)	1.531(14)
C(20)-C(21)	1.54(2)	C(20)-H(20)	0.98
C(21)-H(21A)	0.96	C(21)-H(21B)	0.96
C(21)-H(21C)	0.96	C(22)-H(22A)	0.96
C(22)-H(22B)	0.96	C(22)-H(22C)	0.96
C(23)-C(24)	1.53(2)	C(23)-C(25)	1.56(2)
C(23)-H(23)	0.98	C(24)-H(24A)	0.96
C(24)-H(24B)	0.96	C(24)-H(24C)	0.96
C(25)-H(25A)	0.96	C(25)-H(25B)	0.96
C(25)-H(25C)	0.96	C(26)-C(27)	1.527(14)
C(26)-C(28)	1.53(2)	C(26)-H(26)	0.98
C(27)-H(27A)	0.96	C(27)-H(27B)	0.96
C(27)-H(27C)	0.96	C(28)-H(28A)	0.96
C(28)-H(28B)	0.96	C(28)-H(28C)	0.96
C(30)-C(31)	1.40(2)	C(30)-C(34)	1.437(14)
C(30)-H(30)	0.93	C(31)-C(32)	1.42(2)
C(31)-H(31)	0.93	C(32)-C(33)	1.40(2)
C(32)-H(32)	0.93	C(33)-C(34)	1.37(2)
C(33)-H(33)	0.93	C(34)-H(34)	0.93
C(5)-Os(1)-C(2)	71.8(4)	C(5)-Os(1)-C(1)	109.0(4)
C(2)-Os(1)-C(1)	37.5(4)	C(5)-Os(1)-C(32)	143.7(4)
C(2)-Os(1)-C(32)	127.9(4)	C(1)-Os(1)-C(32)	93.8(4)
C(5)-Os(1)-C(34)	88.6(4)	C(2)-Os(1)-C(34)	150.2(4)
C(1)-Os(1)-C(34)	148.1(4)	C(32)-Os(1)-C(34)	59.5(5)
C(5)-Os(1)-C(31)	114.1(5)	C(2)-Os(1)-C(31)	107.3(4)
C(1)-Os(1)-C(31)	88.4(4)	C(32)-Os(1)-C(31)	36.6(5)
C(34)-Os(1)-C(31)	59.8(4)	C(5)-Os(1)-C(33)	121.6(4)
C(2)-Os(1)-C(33)	163.7(4)	C(1)-Os(1)-C(33)	127.5(4)
C(32)-Os(1)-C(33)	35.8(4)	C(34)-Os(1)-C(33)	35.2(4)
C(31)-Os(1)-C(33)	60.1(5)	C(5)-Os(1)-C(30)	83.5(3)
C(2)-Os(1)-C(30)	116.4(3)	C(1)-Os(1)-C(30)	116.9(3)
C(32)-Os(1)-C(30)	60.7(4)	C(34)-Os(1)-C(30)	36.8(4)
C(31)-Os(1)-C(30)	35.9(4)	C(33)-Os(1)-C(30)	60.5(4)
C(5)-Os(1)-P(1)	95.0(3)	C(2)-Os(1)-P(1)	91.9(3)

C(1)-Os(1)-P(1)	92.7(3)	C(32)-Os(1)-P(1)	112.2(4)
C(34)-Os(1)-P(1)	112.5(3)	C(31)-Os(1)-P(1)	148.7(4)
C(33)-Os(1)-P(1)	95.6(3)	C(30)-Os(1)-P(1)	149.2(2)
C(2)-C(1)-O(3)	116.8(9)	C(2)-C(1)-Os(1)	69.7(5)
O(3)-C(1)-Os(1)	116.8(6)	C(2)-C(1)-H(1)	123(7)
O(3)-C(1)-H(1)	111(7)	Os(1)-C(1)-H(1)	114(7)
C(1)-C(2)-C(3)	133.3(8)	C(1)-C(2)-Os(1)	72.9(6)
C(3)-C(2)-Os(1)	112.2(6)	C(1)-C(2)-H(2)	118(7)
C(3)-C(2)-H(2)	105(7)	Os(1)-C(2)-H(2)	110(7)
O(1)-C(3)-C(10)	107.2(8)	O(1)-C(3)-C(2)	113.2(8)
C(10)-C(3)-C(2)	109.9(8)	O(1)-C(3)-C(4)	108.3(7)
C(10)-C(3)-C(4)	116.3(8)	C(2)-C(3)-C(4)	102.0(8)
C(9)-C(4)-C(5)	123.7(9)	C(9)-C(4)-C(3)	122.8(10)
C(5)-C(4)-C(3)	113.5(9)	C(4)-C(5)-C(6)	114.2(9)
C(4)-C(5)-Os(1)	117.9(6)	C(6)-C(5)-Os(1)	127.2(8)
C(7)-C(6)-C(5)	121.9(10)	C(7)-C(6)-H(6)	119.1(7)
C(5)-C(6)-H(6)	119.1(6)	C(8)-C(7)-C(6)	120.1(10)
C(8)-C(7)-H(7)	119.9(6)	C(6)-C(7)-H(7)	119.9(7)
C(7)-C(8)-C(9)	120.8(11)	C(7)-C(8)-H(8)	119.6(6)
C(9)-C(8)-H(8)	119.6(7)	C(8)-C(9)-C(4)	119.2(11)
C(8)-C(9)-H(9)	120.4(7)	C(4)-C(9)-H(9)	120.4(7)
C(15)-C(10)-C(11)	117.8(11)	C(15)-C(10)-C(3)	121.3(9)
C(11)-C(10)-C(3)	120.8(10)	C(12)-C(11)-C(10)	120.7(12)
C(12)-C(11)-H(11)	119.7(8)	C(10)-C(11)-H(11)	119.7(7)
C(11)-C(12)-C(13)	122.0(13)	C(11)-C(12)-H(12)	119.0(8)
C(13)-C(12)-H(12)	119.0(9)	C(12)-C(13)-C(14)	117.5(14)
C(12)-C(13)-H(13)	121.2(9)	C(14)-C(13)-H(13)	121.2(9)
C(15)-C(14)-C(13)	120.4(12)	C(15)-C(14)-H(14)	119.8(7)
C(13)-C(14)-H(14)	119.8(9)	C(14)-C(15)-C(10)	121.6(11)
C(14)-C(15)-H(15)	119.2(7)	C(10)-C(15)-H(15)	119.2(7)
C(17)-C(16)-H(16A)	109.5(7)	C(17)-C(16)-H(16B)	109.5(7)
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5	C(17)-C(16)-H(16C)	109.5(6)
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5	H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
O(2)-C(17)-O(3)	124.7(10)	O(2)-C(17)-C(16)	124.3(10)
O(3)-C(17)-C(16)	110.9(11)	C(3)-O(1)-H(3)	116.4(7)
C(17)-O(3)-C(1)	118.7(9)	C(17)-O(3)-H(3)	134.5(7)
C(1)-O(3)-H(3)	99.1(5)	C(23)-P(1)-C(26)	105.6(5)
C(23)-P(1)-C(20)	102.5(5)	C(26)-P(1)-C(20)	99.4(5)
C(23)-P(1)-Os(1)	114.4(3)	C(26)-P(1)-Os(1)	116.7(4)
C(20)-P(1)-Os(1)	116.2(3)	C(22)-C(20)-C(21)	111.0(9)
C(22)-C(20)-P(1)	120.3(9)	C(21)-C(20)-P(1)	110.3(7)
C(22)-C(20)-H(20)	104.6(6)	C(21)-C(20)-H(20)	104.6(6)
P(1)-C(20)-H(20)	104.6(3)	C(20)-C(21)-H(21A)	109.5(6)
C(20)-C(21)-H(21B)	109.5(6)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(20)-C(21)-H(21C)	109.5(6)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5	C(20)-C(22)-H(22A)	109.5(6)
C(20)-C(22)-H(22B)	109.5(5)	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
C(20)-C(22)-H(22C)	109.5(7)	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5	C(24)-C(23)-C(25)	108.0(9)
C(24)-C(23)-P(1)	116.8(8)	C(25)-C(23)-P(1)	114.2(7)
C(24)-C(23)-H(23)	105.6(7)	C(25)-C(23)-H(23)	105.6(7)
P(1)-C(23)-H(23)	105.6(4)	C(23)-C(24)-H(24A)	109.5(7)
C(23)-C(24)-H(24B)	109.5(7)	H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(23)-C(24)-H(24C)	109.5(6)	H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5	C(23)-C(25)-H(25A)	109.5(6)
C(23)-C(25)-H(25B)	109.5(6)	H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5
C(23)-C(25)-H(25C)	109.5(7)	H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5	C(27)-C(26)-C(28)	109.7(9)
C(27)-C(26)-P(1)	110.5(8)	C(28)-C(26)-P(1)	115.7(8)
C(27)-C(26)-H(26)	106.8(6)	C(28)-C(26)-H(26)	106.8(5)
P(1)-C(26)-H(26)	106.8(4)	C(26)-C(27)-H(27A)	109.5(7)
C(26)-C(27)-H(27B)	109.5(6)	H(27A)-C(27)-H(27B)	109.5
C(26)-C(27)-H(27C)	109.5(6)	H(27A)-C(27)-H(27C)	109.5

H(27B)-C(27)-H(27C)	109.5	C(26)-C(28)-H(28A)	109.5(5)
C(26)-C(28)-H(28B)	109.5(6)	H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(26)-C(28)-H(28C)	109.5(5)	H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5	C(31)-C(30)-C(34)	105.7(11)
C(31)-C(30)-Os(1)	71.6(6)	C(34)-C(30)-Os(1)	71.0(6)
C(31)-C(30)-H(30)	127.2(8)	C(34)-C(30)-H(30)	127.2(6)
Os(1)-C(30)-H(30)	122.0(2)	C(30)-C(31)-C(32)	108.6(11)
C(30)-C(31)-Os(1)	72.5(5)	C(32)-C(31)-Os(1)	71.4(7)
C(30)-C(31)-H(31)	125.7(8)	C(32)-C(31)-H(31)	125.7(7)
Os(1)-C(31)-H(31)	122.1(3)	C(33)-C(32)-C(31)	107.8(11)
C(33)-C(32)-Os(1)	72.8(7)	C(31)-C(32)-Os(1)	72.0(7)
C(33)-C(32)-H(32)	126.1(8)	C(31)-C(32)-H(32)	126.1(7)
Os(1)-C(32)-H(32)	120.9(3)	C(34)-C(33)-C(32)	108.3(11)
C(34)-C(33)-Os(1)	71.9(8)	C(32)-C(33)-Os(1)	71.4(8)
C(34)-C(33)-H(33)	125.9(7)	C(32)-C(33)-H(33)	125.9(8)
Os(1)-C(33)-H(33)	122.5(3)	C(33)-C(34)-C(30)	109.6(10)
C(33)-C(34)-Os(1)	72.9(7)	C(30)-C(34)-Os(1)	72.1(6)
C(33)-C(34)-H(34)	125.2(7)	C(30)-C(34)-H(34)	125.2(6)
Os(1)-C(34)-H(34)	121.4(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 5. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + ... + 2hka^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Os(1)	32(1)	32(1)	32(1)	-1(1)	9(1)	-4(1)
C(1)	32(5)	38(9)	24(6)	-7(5)	7(4)	-7(5)
C(2)	29(5)	27(8)	23(5)	-3(4)	0(4)	-4(4)
C(3)	33(5)	38(8)	23(6)	-10(5)	7(4)	0(5)
C(4)	29(5)	38(9)	42(6)	0(5)	9(5)	0(5)
C(5)	32(5)	34(8)	23(6)	-1(5)	3(4)	-11(5)
C(6)	34(5)	38(9)	34(6)	-14(5)	1(5)	-11(5)
C(7)	33(6)	68(11)	33(7)	-5(6)	8(5)	1(6)
C(8)	31(6)	77(12)	46(8)	-5(7)	3(5)	20(6)
C(9)	41(6)	39(9)	50(8)	4(6)	5(5)	15(5)
C(10)	30(5)	22(8)	37(6)	5(5)	-1(4)	3(4)
C(11)	47(6)	39(10)	60(8)	-7(6)	23(6)	-15(6)
C(12)	66(9)	75(14)	97(12)	14(10)	36(8)	-9(8)
C(13)	49(7)	44(12)	109(12)	-2(9)	11(8)	-10(7)
C(14)	51(7)	48(11)	66(9)	-18(7)	-1(6)	19(7)
C(15)	50(6)	40(10)	40(7)	-5(6)	11(5)	-2(6)
C(16)	61(7)	75(12)	48(8)	-8(7)	28(6)	4(7)
C(17)	37(5)	27(9)	49(7)	-15(6)	14(5)	-3(5)
O(1)	48(4)	54(6)	32(4)	-5(4)	12(3)	-4(4)
O(2)	67(5)	50(7)	74(6)	23(5)	35(5)	26(5)
O(3)	43(4)	41(6)	37(4)	4(4)	19(3)	5(4)
P(1)	36(1)	36(2)	33(2)	4(1)	14(1)	4(1)
C(20)	35(5)	48(9)	28(6)	-7(5)	7(5)	1(5)
C(21)	52(6)	37(9)	56(7)	-1(6)	23(6)	2(6)
C(22)	43(6)	73(11)	33(7)	5(6)	5(5)	5(6)
C(23)	50(6)	40(9)	38(7)	8(5)	21(5)	-1(5)
C(24)	74(8)	65(11)	56(8)	10(7)	37(7)	-2(7)
C(25)	48(7)	82(12)	71(9)	9(8)	26(6)	-14(7)
C(26)	63(7)	47(10)	43(7)	16(6)	25(6)	14(6)
C(27)	55(7)	77(12)	64(9)	6(8)	27(7)	23(7)
C(28)	100(10)	32(11)	73(10)	6(7)	29(8)	9(8)
C(30)	64(8)	44(10)	27(7)	-14(5)	-5(6)	-25(6)
C(31)	72(9)	68(12)	58(9)	-49(8)	36(7)	-37(8)
C(32)	63(8)	37(11)	81(10)	-9(8)	14(7)	10(7)
C(33)	71(8)	41(11)	48(8)	-3(6)	12(7)	-10(7)
C(34)	49(7)	32(9)	50(7)	-7(6)	5(6)	-9(5)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1)	4243(139)	4181(64)	7936(91)	80
H(2)	2547(132)	4984(62)	8156(89)	80
H(6)	-1986(10)	4242(6)	7727(7)	80
H(7)	-3655(11)	5072(6)	7469(7)	80
H(8)	-3137(11)	5977(7)	6822(8)	80
H(9)	-853(11)	6117(6)	6551(8)	80
H(11)	3365(12)	5897(6)	6061(8)	80
H(12)	4640(15)	6805(8)	6466(11)	80
H(13)	4302(14)	7439(7)	7665(11)	80
H(14)	2759(13)	7080(7)	8537(9)	80
H(15)	1478(12)	6162(6)	8130(8)	80
H(16A)	4540(13)	4393(6)	5141(8)	80
H(16B)	4933(13)	3687(6)	5089(8)	80
H(16C)	6179(13)	4159(6)	5631(8)	80
H(20)	3683(10)	4596(5)	9379(7)	80
H(21A)	1337(12)	5072(6)	9115(8)	80
H(21B)	2580(12)	5362(6)	9980(8)	80
H(21C)	1393(12)	4903(6)	10163(8)	80
H(22A)	4712(12)	3963(6)	10712(7)	80
H(22B)	3497(12)	4211(6)	11157(7)	80
H(22C)	4683(12)	4670(6)	10974(7)	80
H(23)	-220(12)	4078(6)	9366(7)	80
H(24A)	1444(14)	3872(7)	10889(8)	80
H(24B)	1161(14)	3157(7)	10697(8)	80
H(24C)	-156(14)	3593(7)	10748(8)	80
H(25A)	-1093(13)	3243(7)	8282(9)	80
H(25B)	-1704(13)	3208(7)	9163(9)	80
H(25C)	-386(13)	2772(7)	9112(9)	80
H(26)	3516(13)	3147(6)	10158(8)	80
H(27A)	5083(13)	3611(7)	9371(9)	80
H(27B)	4472(13)	3147(7)	8517(9)	80
H(27C)	5401(13)	2895(7)	9523(9)	80
H(28A)	1689(10)	2424(4)	9347(6)	80
H(28B)	3313(10)	2164(4)	9509(6)	80
H(28C)	2384(10)	2416(4)	8502(6)	80
H(30)	-1032(10)	4044(4)	5481(6)	80
H(31)	1548(14)	3738(7)	5472(9)	80
H(32)	2474(15)	2886(7)	6683(10)	80
H(33)	441(14)	2642(6)	7395(9)	80
H(34)	-1673(13)	3346(6)	6694(8)	80
H(3)	1852	4699	5634	80