

III Anhang

Kristallstrukturdaten

	x	y	z	U (eq)
C(1)	9298(3)	8131(2)	3659(1)	22(1)
C(2)	5909(3)	6581(2)	3070(1)	25(1)
C(3)	6404(3)	6056(2)	3928(1)	21(1)
C(4)	6323(3)	4554(1)	3943(1)	21(1)
C(5)	8068(3)	3798(2)	3568(1)	24(1)
C(6)	7910(3)	2426(2)	3553(1)	26(1)
C(7)	5995(3)	1804(2)	3909(1)	25(1)
C(8)	4246(3)	2537(2)	4280(1)	25(1)
C(9)	4414(3)	3916(2)	4303(1)	23(1)
S(1)	11316(1)	9275(1)	3768(1)	29(1)
S(2)	9298(1)	6684(1)	4234(1)	27(1)
S(3)	6981(1)	8267(1)	2976(1)	26(1)

Tab. 41. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **2**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
C(1)-S(1)	1.6323(16)	S(1)-C(1)-S(3)	123.19(10)
C(1)-S(3)	1.7280(17)	S(1)-C(1)-S(2)	122.20(10)
C(1)-S(2)	1.7316(16)	S(3)-C(1)-S(2)	114.60(9)
C(2)-C(3)	1.524(2)	C(3)-C(2)-S(3)	109.92(11)
C(2)-S(3)	1.8079(18)	C(4)-C(3)-C(2)	110.80(13)
C(3)-C(4)	1.512(2)	C(4)-C(3)-S(2)	111.63(11)
C(3)-S(2)	1.8270(17)	C(2)-C(3)-S(2)	107.27(11)
C(4)-C(9)	1.389(2)	C(9)-C(4)-C(5)	119.26(14)
C(4)-C(5)	1.390(2)	C(9)-C(4)-C(3)	119.49(15)
C(5)-C(6)	1.383(2)	C(5)-C(4)-C(3)	121.18(15)
C(6)-C(7)	1.381(3)	C(6)-C(5)-C(4)	120.47(17)
C(7)-C(8)	1.376(3)	C(7)-C(6)-C(5)	119.73(17)
C(8)-C(9)	1.391(2)	C(8)-C(7)-C(6)	120.53(16)
		C(7)-C(8)-C(9)	119.86(17)
		C(4)-C(9)-C(8)	120.14(17)
		C(1)-S(2)-C(3)	98.19(8)
		C(1)-S(3)-C(2)	97.27(8)

Tab. 42. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **2**.

	x	y	z	U (eq)
O(1)	3919(2)	4829(5)	1033(1)	42(1)
N(1)	5473(2)	2596(5)	4060(1)	37(1)
N(2)	8258(2)	6273(6)	4060(1)	40(1)
C(1)	5907(3)	3936(6)	3464(1)	35(1)
C(2)	7295(3)	5697(7)	3470(1)	38(1)
C(3)	7817(3)	4999(7)	4651(1)	38(1)
C(4)	6454(3)	3139(8)	4642(1)	39(1)
C(5)	4905(3)	3497(7)	2813(1)	36(1)
C(6)	4118(3)	3272(7)	2252(1)	38(1)
C(7)	3221(3)	3021(7)	1553(1)	37(1)

Tab. 43. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **5**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Bindungslänge		Winkel	
	Å		°
O(1)-C(7)	1.415(3)	C(7)-O(1)-H(1O)	108(2)
O(1)-H(1O)	0.89(4)	C(4)-N(1)-C(1)	115.4(2)
N(1)-C(4)	1.327(3)	C(2)-N(2)-C(3)	116.0(2)
N(1)-C(1)	1.348(3)	N(1)-C(1)-C(2)	121.3(2)
N(2)-C(2)	1.333(3)	N(1)-C(1)-C(5)	119.0(2)
N(2)-C(3)	1.333(3)	C(2)-C(1)-C(5)	119.7(2)
C(1)-C(2)	1.381(4)	N(2)-C(2)-C(1)	122.7(2)
C(1)-C(5)	1.432(3)	N(2)-C(2)-H(2)	118.7
C(2)-H(2)	0.9500	C(1)-C(2)-H(2)	118.7
C(3)-C(4)	1.381(4)	N(2)-C(3)-C(4)	121.3(2)
C(3)-H(3)	0.9500	N(2)-C(3)-H(3)	119.4
C(4)-H(4)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3)	119.4
C(5)-C(6)	1.198(3)	N(1)-C(4)-C(3)	123.2(2)
C(6)-C(7)	1.460(3)	N(1)-C(4)-H(4)	118.4
C(7)-H(7A)	0.9900	C(3)-C(4)-H(4)	118.4
C(7)-H(7B)	0.9900	C(6)-C(5)-C(1)	176.2(3)
		C(5)-C(6)-C(7)	177.5(3)
		O(1)-C(7)-C(6)	112.6(2)
		O(1)-C(7)-H(7A)	109.1
		C(6)-C(7)-H(7A)	109.1
		O(1)-C(7)-H(7B)	109.1
		C(6)-C(7)-H(7B)	109.1
		H(7A)-C(7)-H(7B)	107.8

Tab. 44. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **5**.

	x	y	z	U (eq)
Cl(1)	3775(2)	5089(1)	3362(1)	56(1)
O(1)	10089(4)	851(2)	8330(2)	45(1)
N(1)	6071(4)	1735(2)	1522(2)	36(1)
N(2)	2393(4)	4205(2)	1120(2)	39(1)
C(1)	4430(5)	2047(2)	428(2)	39(1)
C(2)	2596(5)	3268(2)	230(2)	37(1)
C(3)	4023(4)	3899(2)	2190(2)	36(1)
C(4)	5879(4)	2660(2)	2431(2)	32(1)
C(5)	7564(4)	2334(2)	3626(2)	35(1)
C(6)	8982(4)	2069(2)	4625(2)	36(1)
C(7)	10614(4)	1726(2)	5872(2)	38(1)
C(8)	8564(5)	1093(2)	7106(2)	38(1)

Tab. 45. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **7**.
 U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
Cl(1)-C(3)	1.723(2)	C(8)-O(1)-H(1O)	107(2)
O(1)-C(8)	1.410(2)	C(1)-N(1)-C(4)	117.36(16)
O(1)-H(1O)	0.86(3)	C(3)-N(2)-C(2)	116.42(17)
N(1)-C(1)	1.335(2)	N(1)-C(1)-C(2)	121.98(18)
N(1)-C(4)	1.337(2)	N(1)-C(1)-H(1)	119.0
N(2)-C(3)	1.313(3)	C(2)-C(1)-H(1)	119.0
N(2)-C(2)	1.333(3)	N(2)-C(2)-C(1)	121.43(18)
C(1)-C(2)	1.378(3)	N(2)-C(2)-H(2)	119.3
C(1)-H(1)	0.9500	C(1)-C(2)-H(2)	119.3
C(2)-H(2)	0.9500	N(2)-C(3)-C(4)	123.56(19)
C(3)-C(4)	1.400(3)	N(2)-C(3)-Cl(1)	117.23(15)
C(4)-C(5)	1.430(2)	C(4)-C(3)-Cl(1)	119.20(15)
C(5)-C(6)	1.197(3)	N(1)-C(4)-C(3)	119.24(16)
C(6)-C(7)	1.460(3)	N(1)-C(4)-C(5)	118.35(16)
C(7)-C(8)	1.518(3)	C(3)-C(4)-C(5)	122.40(17)
C(7)-H(7A)	0.9900	C(6)-C(5)-C(4)	179.6(2)
C(7)-H(7B)	0.9900	C(5)-C(6)-C(7)	177.9(2)
C(8)-H(8A)	0.9900	C(6)-C(7)-C(8)	111.74(17)
C(8)-H(8B)	0.9900	C(6)-C(7)-H(7A)	109.3
		C(8)-C(7)-H(7A)	109.3
		C(6)-C(7)-H(7B)	109.3
		C(8)-C(7)-H(7B)	109.3
		H(7A)-C(7)-H(7B)	107.9
		O(1)-C(8)-C(7)	111.60(17)
		O(1)-C(8)-H(8A)	109.3
		C(7)-C(8)-H(8A)	109.3
		O(1)-C(8)-H(8B)	109.3

C(7)-C(8)-H(8B)	109.3
H(8A)-C(8)-H(8B)	108.0

Tab. 46. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **7**.

	x	y	z	U (eq)
O(1)	3431(4)	5505(1)	6296(3)	45(1)
N(1)	8364(4)	7948(1)	7865(3)	35(1)
N(2)	3789(4)	8695(1)	6327(3)	36(1)
C(1)	8145(5)	5460(1)	7786(4)	43(1)
C(2)	5523(5)	5781(1)	6925(3)	32(1)
C(3)	5601(5)	6466(1)	6872(4)	34(1)
C(4)	5740(5)	7024(1)	6906(3)	32(1)
C(5)	5934(4)	7698(1)	6992(3)	29(1)
C(6)	8463(5)	8570(1)	7957(4)	37(1)
C(7)	6190(5)	8940(1)	7195(4)	35(1)
C(8)	3671(5)	8070(1)	6212(4)	32(1)

Tab. 47. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **9**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
O(1)-C(2)	1.207(3)	C(6)-N(1)-C(5)	115.70(19)
N(1)-C(6)	1.322(3)	C(7)-N(2)-C(8)	115.96(19)
N(1)-C(5)	1.340(3)	C(2)-C(1)-H(1A)	109.5
N(2)-C(7)	1.322(3)	C(2)-C(1)-H(1B)	109.5
N(2)-C(8)	1.330(3)	H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
C(1)-C(2)	1.489(3)	C(2)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1A)	0.9800	H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1B)	0.9800	H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1C)	0.9800	O(1)-C(2)-C(3)	120.6(2)
C(2)-H(3)	1.456(3)	O(1)-C(2)-C(1)	123.6(2)
C(3)-C(4)	1.188(3)	C(3)-C(2)-C(1)	115.8(2)
C(4)-C(5)	1.435(3)	C(4)-C(3)-C(2)	177.4(2)
C(5)-C(8)	1.391(3)	C(3)-C(4)-C(5)	178.8(2)
C(6)-C(7)	1.392(3)	N(1)-C(5)-C(8)	121.9(2)
C(6)-H(6)	0.9500	N(1)-C(5)-C(4)	117.35(19)
C(7)-H(7)	0.9500	C(8)-C(5)-C(4)	120.8(2)
C(8)-H(8)	0.9500	N(1)-C(6)-C(7)	122.2(2)
		N(1)-C(6)-H(6)	118.9
		C(7)-C(6)-H(6)	118.9
		N(2)-C(7)-C(6)	122.3(2)
		N(2)-C(7)-H(7)	118.8
		C(6)-C(7)-H(7)	118.8
		N(2)-C(8)-C(5)	121.9(2)
		N(2)-C(8)-H(8)	119.0
		C(5)-C(8)-H(8)	119.0

Tab. 48. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **9**.

	x	y	z	U (eq)
S(1)	1734(1)	1608(7)	1767(1)	33(1)
S(2)	3427(1)	1803(6)	2045(1)	31(1)
O(1)	2249(4)	-490(20)	2548(2)	49(2)
O(2)	3780(4)	6816(18)	955(2)	36(2)
N(1)	2184(5)	3490(20)	159(2)	38(2)
N(2)	1366(5)	5330(20)	933(2)	32(2)
C(1)	2435(6)	680(30)	2191(2)	36(2)
C(2)	3214(5)	3310(20)	1514(2)	28(2)
C(3)	2433(5)	3110(20)	1384(2)	24(2)
C(4)	2094(5)	3880(20)	943(2)	28(2)
C(5)	2496(6)	2860(20)	558(2)	33(2)
C(6)	1492(6)	5130(30)	148(3)	37(2)
C(7)	1059(6)	5980(20)	532(3)	38(2)
C(8)	3910(6)	4920(20)	1270(3)	31(2)
C(9)	4733(6)	4310(30)	1439(3)	40(2)
S(3)	5867(1)	6868(7)	3234(1)	34(1)
S(4)	4194(2)	6974(7)	2922(1)	33(1)
O(3)	5430(5)	9020(20)	2431(2)	53(2)
O(4)	3719(4)	2063(17)	4006(2)	37(2)
N(3)	5271(5)	5050(20)	4831(2)	36(2)
N(4)	6162(5)	3340(20)	4079(2)	34(2)
C(10)	5207(6)	7830(30)	2792(2)	33(2)
C(11)	4350(5)	5450(20)	3454(2)	29(2)
C(12)	5120(6)	5530(20)	3605(2)	29(2)
C(13)	5427(5)	4760(20)	4053(2)	27(2)
C(14)	4991(6)	5760(30)	4428(3)	34(2)
C(15)	5983(6)	3480(30)	4852(3)	38(2)
C(16)	6434(6)	2690(30)	4486(3)	38(2)
C(17)	3633(6)	3990(20)	3688(2)	30(2)
C(18)	2823(6)	4900(30)	3505(3)	42(2)

Tab. 49. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **13**.

U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
S(1)-C(3)	1.737(8)	C(3)-S(1)-C(1)	96.4(4)
S(1)-C(1)	1.768(9)	C(2)-S(2)-C(1)	97.1(4)
S(2)-C(2)	1.745(8)	C(6)-N(1)-C(5)	116.7(8)
S(2)-C(1)	1.757(10)	C(4)-N(2)-C(7)	116.2(7)
O(1)-C(1)	1.210(10)	O(1)-C(1)-S(2)	123.6(7)
O(2)-C(8)	1.218(10)	O(1)-C(1)-S(1)	123.7(8)
N(1)-C(6)	1.309(12)	S(2)-C(1)-S(1)	112.6(5)
N(1)-C(5)	1.336(10)	C(3)-C(2)-C(8)	127.9(7)
N(2)-C(4)	1.328(11)	C(3)-C(2)-S(2)	116.2(6)
N(2)-C(7)	1.342(10)	C(8)-C(2)-S(2)	115.7(6)
C(2)-C(3)	1.357(11)	C(2)-C(3)-C(4)	127.8(7)
C(2)-C(8)	1.503(13)	C(2)-C(3)-S(1)	117.6(6)
C(3)-C(4)	1.481(10)	C(4)-C(3)-S(1)	114.5(6)
C(4)-C(5)	1.400(11)	N(2)-C(4)-C(5)	122.1(7)
C(5)-H(5)	0.9500	N(2)-C(4)-C(3)	116.7(7)
C(6)-C(7)	1.405(13)	C(5)-C(4)-C(3)	121.0(8)
C(6)-H(6)	0.9500	N(1)-C(5)-C(4)	121.3(8)
C(7)-H(7)	0.9500	N(1)-C(5)-H(5)	119.4
C(8)-C(9)	1.476(13)	C(4)-C(5)-H(5)	119.4
C(9)-H(9A)	0.9800	N(1)-C(6)-C(7)	122.5(7)
C(9)-H(9B)	0.9800	N(1)-C(6)-H(6)	118.7
C(9)-H(9C)	0.9800	C(7)-C(6)-H(6)	118.7
S(3)-C(12)	1.750(9)	N(2)-C(7)-C(6)	121.0(9)
S(3)-C(10)	1.769(8)	N(2)-C(7)-H(7)	119.5
S(4)-C(11)	1.732(8)	C(6)-C(7)-H(7)	119.5
S(4)-C(10)	1.757(10)	O(2)-C(8)-C(9)	122.0(9)
O(3)-C(10)	1.240(10)	O(2)-C(8)-C(2)	119.6(8)
O(4)-C(17)	1.221(10)	C(9)-C(8)-C(2)	118.3(7)
N(3)-C(15)	1.327(12)	C(8)-C(9)-H(9A)	109.5
N(3)-C(14)	1.334(10)	C(8)-C(9)-H(9B)	109.5
N(4)-C(13)	1.338(12)	H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5

N(4)-C(16)	1.338(10)	C(8)-C(9)-H(9C)	109.5
C(11)-C(12)	1.357(12)	H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
C(11)-C(17)	1.494(12)	H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
C(12)-C(13)	1.480(10)	C(12)-S(3)-C(10)	96.3(4)
C(13)-C(14)	1.400(11)	C(11)-S(4)-C(10)	97.4(4)
C(14)-H(14)	0.9500	C(15)-N(3)-C(14)	116.6(8)
C(15)-C(16)	1.372(13)	C(13)-N(4)-C(16)	115.9(7)
C(15)-H(15)	0.9500	O(3)-C(10)-S(4)	123.5(7)
C(16)-H(16)	0.9500	O(3)-C(10)-S(3)	124.0(8)
C(17)-C(18)	1.496(13)	S(4)-C(10)-S(3)	112.5(4)
C(18)-H(18A)	0.9800	C(12)-C(11)-C(17)	126.6(7)
C(18)-H(18B)	0.9800	C(12)-C(11)-S(4)	116.6(6)
C(18)-H(18C)	0.9800	C(17)-C(11)-S(4)	116.7(6)
		C(11)-C(12)-C(13)	129.0(7)
		C(11)-C(12)-S(3)	117.1(6)
		C(13)-C(12)-S(3)	113.9(7)
		N(4)-C(13)-C(14)	122.3(7)
		N(4)-C(13)-C(12)	116.6(7)
		C(14)-C(13)-C(12)	120.9(8)
		N(3)-C(14)-C(13)	120.4(9)
		N(3)-C(14)-H(14)	119.8
		C(13)-C(14)-H(14)	119.8
		N(3)-C(15)-C(16)	123.1(7)
		N(3)-C(15)-H(15)	118.4
		C(16)-C(15)-H(15)	118.4
		N(4)-C(16)-C(15)	121.3(9)
		N(4)-C(16)-H(16)	119.3
		C(15)-C(16)-H(16)	119.3
		O(4)-C(17)-C(11)	120.6(8)
		O(4)-C(17)-C(18)	122.5(9)
		C(11)-C(17)-C(18)	116.8(7)
		C(17)-C(18)-H(18A)	109.5

C(17)-C(18)-H(18A)	109.5
C(17)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(17)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5

Tab. 50. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **13**.

	x	y	z	U (eq)
O(1)	7204(2)	2095(1)	7741(1)	32(1)
N(1)	3764(3)	4705(1)	1867(1)	35(1)
C(1)	9119(3)	1684(2)	6536(1)	35(1)
C(2)	7704(3)	2036(2)	5257(1)	30(1)
C(3)	6604(3)	2335(1)	4216(1)	30(1)
C(4)	5225(3)	2705(1)	2980(1)	27(1)
C(5)	5090(4)	4270(2)	2962(1)	32(1)
C(6)	2572(3)	3569(2)	724(1)	32(1)
C(7)	2632(3)	1989(2)	634(1)	33(1)
C(8)	3960(3)	1539(2)	1775(1)	32(1)

Tab. 51. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **15**.
 $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors

	Bindungslänge Å		Winkel °
O(1)-C(1)	1.4129(17)	C(1)-O(1)-H(10)	108.2(13)
O(1)-H(10)	0.93(2)	C(6)-N(1)-C(5)	117.54(11)
N(1)-C(6)	1.3336(18)	O(1)-C(1)-C(2)	113.91(11)
N(1)-C(5)	1.3350(17)	O(1)-C(1)-H(1A)	107.4(11)
C(1)-C(2)	1.4684(18)	C(2)-C(1)-H(1A)	109.4(11)
C(1)-H(1A)	1.02(2)	O(1)-C(1)-H(1B)	111.9(12)
C(1)-H(1B)	0.98(2)	C(2)-C(1)-H(1B)	107.9(12)
C(2)-C(3)	1.1928(18)	H(1A)-C(1)-H(1B)	106.1(16)
C(3)-C(4)	1.4340(17)	C(3)-C(2)-C(1)	178.91(14)
C(4)-C(5)	1.3929(17)	C(2)-C(3)-C(4)	178.84(13)
C(4)-C(8)	1.3937(18)	C(5)-C(4)-C(8)	117.84(11)
C(5)-H(5)	0.976(17)	C(5)-C(4)-C(3)	120.08(11)
C(6)-C(7)	1.3778(19)	C(8)-C(4)-C(3)	122.08(11)
C(6)-H(6)	0.960(17)	N(1)-C(5)-C(4)	123.53(12)
C(7)-C(8)	1.3805(18)	N(1)-C(5)-H(5)	116.4(10)
C(7)-H(7)	0.968(18)	C(4)-C(5)-H(5)	120.1(10)
C(8)-H(8)	0.993(18)	N(1)-C(6)-C(7)	123.21(12)
		N(1)-C(6)-H(6)	117.7(10)
		C(7)-C(6)-H(6)	119.1(10)
		C(6)-C(7)-C(8)	119.23(12)
		C(6)-C(7)-H(7)	119.7(11)
		C(8)-C(7)-H(7)	121.0(11)
		C(7)-C(8)-C(4)	118.64(12)
		C(7)-C(8)-H(8)	121.6(10)
		C(4)-C(8)-H(8)	119.7(10)

Tab. 52. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für 15.

	x	y	z	U (eq)
O(1)	2142(10)	12298(7)	8070(7)	73(2)
N(1)	2142(10)	1930(7)	1815(7)	48(2)
N(2)	2673(9)	2606(7)	5238(7)	49(2)
C(1)	5964(15)	12608(11)	9355(12)	88(3)
C(2)	3759(15)	11603(10)	8802(10)	64(2)
C(3)	3358(14)	9855(9)	7629(9)	58(2)
C(4)	3032(12)	8451(9)	6645(9)	49(2)
C(5)	2599(11)	6764(8)	5423(9)	46(2)
C(6)	1847(12)	6389(9)	3693(9)	49(2)
C(7)	1420(12)	4808(9)	2543(9)	52(2)
C(8)	1716(11)	3499(8)	3028(9)	44(2)
C(9)	2443(11)	3848(8)	4733(8)	41(2)
C(10)	2883(11)	5500(8)	5932(9)	46(2)
C(11)	1531(13)	784(9)	2372(9)	55(2)
C(12)	2243(12)	1112(9)	4078(9)	53(2)

Tab. 53. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **19**.

U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	Bindungslänge Å		Winkel °
O(1)-C(2)	1.442(9)	C(2)-O(1)-H(1)	109.5
O(1)-H(1)	0.8400	C(11)-N(1)-C(8)	114.7(6)
N(1)-C(11)	1.311(9)	C(12)-N(2)-C(9)	116.9(6)
N(1)-C(8)	1.363(8)	C(2)-C(1)-H(1A)	109.5
N(2)-C(12)	1.301(8)	C(2)-C(1)-H(1B)	109.5
N(2)-C(9)	1.359(8)	H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
C(1)-C(2)	1.470(12)	C(2)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1A)	0.9800	H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1B)	0.9800	H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
C(1)-H(1C)	0.9800	O(1)-C(2)-C(1)	113.5(7)
C(2)-C(3)	1.476(10)	O(1)-C(2)-C(3)	111.2(7)
C(2)-H(2)	1.0000	C(1)-C(2)-C(3)	109.5(8)
C(3)-C(4)	1.198(10)	O(1)-C(2)-H(2)	107.5
C(4)-C(5)	1.445(10)	C(1)-C(2)-H(2)	107.5
C(5)-C(10)	1.386(9)	C(3)-C(2)-H(2)	107.5
C(5)-C(6)	1.416(10)	C(4)-C(3)-C(2)	178.3(8)
C(6)-C(7)	1.353(10)	C(3)-C(4)-C(5)	178.5(8)
C(6)-H(6)	0.9500	C(10)-C(5)-C(6)	119.6(6)
C(7)-C(8)	1.412(9)	C(10)-C(5)-C(4)	120.2(7)
C(7)-H(7)	0.9500	C(6)-C(5)-C(4)	120.2(6)
C(8)-C(9)	1.402(9)	C(7)-C(6)-C(5)	120.3(7)
C(9)-C(10)	1.413(9)	C(7)-C(6)-H(6)	119.8
C(10)-H(10)	0.9500	C(5)-C(6)-H(6)	119.8
C(11)-C(12)	1.407(10)	C(6)-C(7)-C(8)	121.3(7)
C(11)-H(11)	0.9500	C(6)-C(7)-H(7)	119.4
C(12)-H(12)	0.9500	C(8)-C(7)-H(7)	119.4
		N(1)-C(8)-C(9)	122.2(6)
		N(1)-C(8)-C(7)	118.8(6)
		C(9)-C(8)-C(7)	119.0(6)
		N(2)-C(9)-C(8)	120.6(6)
		N(2)-C(9)-C(10)	119.7(6)

C(8)-C(9)-C(10)	119.6(6)
C(5)-C(10)-C(9)	120.1(6)
C(5)-C(10)-H(10)	119.9
C(9)-C(10)-H(10)	119.9
N(1)-C(11)-C(12)	123.8(7)
N(1)-C(11)-H(11)	118.1
C(12)-C(11)-H(11)	118.1
N(2)-C(12)-C(11)	121.7(7)
N(2)-C(12)-H(12)	119.1
C(11)-C(12)-H(12)	119.1

Tab. 54. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **19**.

	x	y	z	U (eq)
C(1)	4601(6)	3788(3)	9051(3)	64(1)
C(2)	3087(6)	3227(3)	8370(3)	56(1)
C(3)	3433(6)	2132(3)	8304(2)	54(1)
C(4)	1892(6)	1503(3)	7804(3)	64(1)
C(5)	2173(8)	480(3)	7814(3)	74(1)
C(6)	3970(8)	43(3)	8301(3)	76(1)
C(7)	5537(7)	637(3)	8777(3)	65(1)
C(8)	5300(6)	1684(3)	8774(2)	55(1)
C(9)	7081(6)	2288(3)	9300(3)	61(1)
C(10)	6977(6)	3403(3)	9093(3)	67(1)
C(11)	-1478(8)	1394(4)	6840(3)	92(1)
C(12)	7762(9)	-774(4)	9287(4)	94(1)
O(1)	1700(5)	3713(2)	7927(2)	81(1)
O(2)	143(5)	1990(2)	7348(2)	85(1)
O(3)	7377(5)	282(2)	9268(2)	80(1)
Br(1)	3187(1)	3641(1)	10189(1)	80(1)

Tab. 55. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **21**.
 U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge Å		Winkel °
C(1)-C(10)	1.486(5)	C(10)-C(1)-C(2)	111.9(3)
C(1)-C(2)	1.520(5)	C(10)-C(1)-Br(1)	111.9(3)
C(1)-Br(1)	1.967(5)	C(2)-C(1)-Br(1)	106.6(2)
C(2)-O(1)	1.213(4)	O(1)-C(2)-C(3)	125.3(3)
C(2)-C(3)	1.474(5)	O(1)-C(2)-C(1)	117.8(3)
C(3)-C(8)	1.407(5)	C(3)-C(2)-C(1)	116.9(3)
C(3)-C(4)	1.420(5)	C(8)-C(3)-C(4)	118.6(3)
C(4)-C(5)	1.368(6)	C(8)-C(3)-C(2)	119.3(3)
C(4)-O(2)	1.369(5)	C(4)-C(3)-C(2)	122.1(3)
C(5)-C(6)	1.382(6)	C(5)-C(4)-O(2)	124.2(4)
C(6)-C(7)	1.385(6)	C(5)-C(4)-C(3)	120.4(4)
C(7)-O(3)	1.362(5)	O(2)-C(4)-C(3)	115.5(4)
C(7)-C(8)	1.398(5)	C(4)-C(5)-C(6)	120.7(4)
C(8)-C(9)	1.510(5)	C(5)-C(6)-C(7)	120.3(4)
C(9)-C(10)	1.515(5)	O(3)-C(7)-C(6)	124.9(4)
C(11)-O(2)	1.430(5)	O(3)-C(7)-C(8)	115.0(3)
C(12)-O(3)	1.420(5)	C(6)-C(7)-C(8)	120.1(4)
		C(7)-C(8)-C(3)	119.8(3)
		C(7)-C(8)-C(9)	117.4(3)
		C(3)-C(8)-C(9)	122.8(3)
		C(8)-C(9)-C(10)	113.0(3)
		C(1)-C(10)-C(9)	111.8(3)
		C(4)-O(2)-C(11)	118.0(4)
		C(7)-O(3)-C(12)	118.3(4)

Tab. 56. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **21**.

Anhang

	x	y	z	U (eq)
S(1)	-707(1)	4509(1)	2642(1)	40(1)
S(2)	-216(1)	6668(1)	3992(1)	49(1)
O(1)	-842(2)	3121(2)	733(2)	44(1)
O(2)	570(2)	2130(2)	-583(1)	43(1)
O(3)	2287(2)	-229(2)	2399(2)	50(1)
O(4)	1373(2)	5033(2)	4106(1)	40(1)
C(1)	15(3)	2820(2)	1347(2)	35(1)
C(2)	786(3)	1856(2)	1099(2)	33(1)
C(3)	1004(3)	1498(2)	111(2)	38(1)
C(4)	1646(3)	557(2)	-105(2)	43(1)
C(5)	2074(3)	-45(2)	640(2)	43(1)
C(6)	1895(3)	310(2)	1616(2)	40(1)
C(7)	1265(3)	1268(2)	1860(2)	37(1)
C(8)	1147(3)	1655(3)	2950(2)	45(1)
C(9)	136(4)	2502(3)	3080(2)	45(1)
C(10)	343(3)	3369(2)	2465(2)	36(1)
C(11)	275(3)	5432(2)	3669(2)	37(1)
C(12)	2460(3)	5743(3)	4872(2)	44(1)
C(13)	3273(4)	6338(3)	4295(3)	58(1)
C(14)	3249(4)	4971(3)	5420(3)	56(1)
C(15)	928(3)	1857(3)	-1546(2)	48(1)
C(16)	2705(4)	-1306(3)	2143(3)	58(1)
S(4)	5291(1)	2009(1)	3109(1)	42(1)
S(4A)	4876(9)	1609(8)	2931(7)	47(1)
S(5)	6006(1)	-63(1)	1841(1)	52(1)
S(5A)	7524(9)	724(7)	2644(6)	68(1)
O(5)	2287(2)	4845(2)	1468(2)	42(1)
O(6)	4954(2)	3118(2)	-1522(1)	43(1)
O(7)	3771(2)	3678(2)	2617(2)	48(1)
O(8)	6185(3)	438(2)	3835(2)	63(1)
C(17)	4131(3)	3255(2)	1845(2)	36(1)

Anhang

C(18)	3853(3)	3658(2)	880(2)	33(1)
C(19)	2903(3)	4436(2)	699(2)	34(1)
C(20)	2629(3)	4745(2)	-229(2)	36(1)
C(21)	3293(3)	4317(2)	-987(2)	38(1)
C(22)	4242(3)	3575(2)	-817(2)	35(1)
C(23)	4543(3)	3246(2)	111(2)	33(1)
C(24)	5637(3)	2487(3)	278(2)	42(1)
C(25)	6154(3)	2497(3)	1402(3)	39(1)
C(25A)	5120(20)	1540(18)	902(16)	37(5)
C(26)	4959(3)	2265(2)	1843(2)	37(1)
C(27)	5921(4)	719(3)	2934(3)	51(1)
C(28)	6844(5)	-564(3)	3970(4)	74(1)
C(29)	6298(6)	-1003(4)	4755(3)	85(1)
C(30)	8314(6)	-282(5)	4200(6)	140(3)
C(31)	1517(4)	5760(2)	1337(2)	48(1)
C(32)	4667(4)	3444(3)	-2477(2)	49(1)

Tab. 57. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **22**.
 $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	Bindungslänge Å		Winkel °
S(1)-C(11)	1.732(3)	C(11)-S(1)-C(10)	103.16(14)
S(1)-C(10)	1.822(3)	C(3)-O(2)-C(15)	117.5(2)
S(2)-C(11)	1.647(3)	C(6)-O(3)-C(16)	117.1(3)
O(1)-C(1)	1.208(3)	C(11)-O(4)-C(12)	121.8(2)
O(2)-C(3)	1.365(3)	O(1)-C(1)-C(2)	123.9(2)
O(2)-C(15)	1.425(3)	O(1)-C(1)-C(10)	122.2(3)
O(3)-C(6)	1.373(4)	C(2)-C(1)-C(10)	113.9(2)
O(3)-C(16)	1.425(3)	C(7)-C(2)-C(3)	119.5(2)
O(4)-C(11)	1.320(3)	C(7)-C(2)-C(1)	119.0(2)
O(4)-C(12)	1.478(3)	C(3)-C(2)-C(1)	121.4(3)
C(1)-C(2)	1.486(4)	O(2)-C(3)-C(4)	123.6(3)
C(1)-C(10)	1.518(4)	O(2)-C(3)-C(2)	116.8(2)
C(2)-C(7)	1.406(4)	C(4)-C(3)-C(2)	119.6(3)
C(2)-C(3)	1.410(4)	C(3)-C(4)-C(5)	120.7(3)
C(3)-C(4)	1.379(4)	C(6)-C(5)-C(4)	120.3(3)
C(4)-C(5)	1.390(4)	O(3)-C(6)-C(5)	124.3(3)
C(5)-C(6)	1.379(4)	O(3)-C(6)-C(7)	115.4(3)
C(6)-C(7)	1.395(4)	C(5)-C(6)-C(7)	120.3(3)
C(7)-C(8)	1.513(4)	C(6)-C(7)-C(2)	119.6(3)
C(8)-C(9)	1.518(4)	C(6)-C(7)-C(8)	118.5(3)
C(9)-C(10)	1.520(4)	C(2)-C(7)-C(8)	121.9(2)
C(12)-C(14)	1.493(5)	C(7)-C(8)-C(9)	113.9(2)
C(12)-C(13)	1.512(5)	C(8)-C(9)-C(10)	109.2(3)
S(4)-C(27)	1.747(3)	C(1)-C(10)-C(9)	108.3(2)
S(4)-C(26)	1.791(3)	C(1)-C(10)-S(1)	108.3(2)
S(4A)-C(27)	1.569(9)	C(9)-C(10)-S(1)	113.9(2)
S(4A)-C(26)	1.845(9)	O(4)-C(11)-S(2)	127.4(2)
S(5)-C(27)	1.646(4)	O(4)-C(11)-S(1)	113.46(19)
S(5A)-C(27)	1.752(9)	S(2)-C(11)-S(1)	119.15(18)
O(5)-C(19)	1.364(3)	O(4)-C(12)-C(14)	104.9(2)

Anhang

O(5)-C(31)	1.430(3)	O(4)-C(12)-C(13)	106.7(2)
O(6)-C(22)	1.377(3)	C(14)-C(12)-C(13)	113.0(3)
O(6)-C(32)	1.423(3)	C(27)-S(4)-C(26)	102.00(15)
O(7)-C(17)	1.223(3)	C(27)-S(4A)-C(26)	107.0(5)
O(8)-C(27)	1.326(4)	C(19)-O(5)-C(31)	116.3(2)
O(8)-C(28)	1.466(4)	C(22)-O(6)-C(32)	116.5(2)
C(17)-C(18)	1.482(4)	C(27)-O(8)-C(28)	120.8(3)
C(17)-C(26)	1.523(4)	O(7)-C(17)-C(18)	124.5(3)
C(18)-C(23)	1.413(4)	O(7)-C(17)-C(26)	120.0(3)
C(18)-C(19)	1.418(4)	C(18)-C(17)-C(26)	115.4(2)
C(19)-C(20)	1.377(4)	C(23)-C(18)-C(19)	118.9(2)
C(20)-C(21)	1.388(4)	C(23)-C(18)-C(17)	119.1(2)
C(21)-C(22)	1.382(4)	C(19)-C(18)-C(17)	122.0(2)
C(22)-C(23)	1.391(4)	O(5)-C(19)-C(20)	122.7(2)
C(23)-C(24)	1.502(4)	O(5)-C(19)-C(18)	117.4(2)
C(24)-C(25)	1.522(4)	C(20)-C(19)-C(18)	119.9(3)
C(24)-C(25A)	1.70(2)	C(19)-C(20)-C(21)	120.7(3)
C(25)-C(26)	1.501(5)	C(22)-C(21)-C(20)	120.3(3)
C(25A)-C(26)	1.47(2)	O(6)-C(22)-C(21)	124.1(3)
C(28)-C(30)	1.471(7)	O(6)-C(22)-C(23)	115.4(2)
C(28)-C(29)	1.484(6)	C(21)-C(22)-C(23)	120.5(3)
		C(22)-C(23)-C(18)	119.7(2)
		C(22)-C(23)-C(24)	118.5(2)
		C(18)-C(23)-C(24)	121.8(2)
		C(23)-C(24)-C(25)	111.8(2)
		C(23)-C(24)-C(25A)	108.1(8)
		C(26)-C(25)-C(24)	107.9(3)
		C(26)-C(25A)-C(24)	100.4(12)
		C(25A)-C(26)-C(17)	122.8(9)
		C(25)-C(26)-C(17)	107.6(2)
		C(25)-C(26)-S(4)	117.4(2)
		C(17)-C(26)-S(4)	107.33(19)

C(25A)-C(26)-S(4A)	116.7(9)
C(17)-C(26)-S(4A)	112.0(3)
O(8)-C(27)-S(4A)	109.7(4)
O(8)-C(27)-S(5)	126.2(3)
O(8)-C(27)-S(4)	107.0(2)
S(5)-C(27)-S(4)	126.5(2)
O(8)-C(27)-S(5A)	101.1(4)
S(4A)-C(27)-S(5A)	131.0(5)
O(8)-C(28)-C(30)	107.9(4)
O(8)-C(28)-C(29)	107.1(3)
C(30)-C(28)-C(29)	116.1(5)

Tab. 58. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **22**.

	x	y	z	U (eq)
C(1)	-1801(14)	3284(4)	3679(3)	50(1)
C(2)	758(13)	1977(3)	4294(3)	44(1)
C(3)	1876(15)	1113(3)	4428(3)	50(1)
C(4)	1836(14)	907(3)	5189(3)	45(1)
C(5)	3384(12)	1562(3)	5670(3)	42(1)
C(6)	5003(13)	1349(3)	6324(3)	43(1)
C(7)	6366(13)	1945(4)	6770(3)	47(1)
C(8)	6042(13)	2765(3)	6581(3)	49(1)
C(9)	4407(14)	2990(3)	5945(3)	46(1)
C(10)	3039(13)	2386(3)	5471(3)	43(1)
C(11)	1371(13)	2571(3)	4779(3)	43(1)
C(12)	6900(16)	262(4)	7107(3)	56(1)
C(13)	5579(17)	4422(4)	6121(4)	64(1)
O(1)	-3259(12)	3762(3)	3266(2)	64(1)
O(2)	5078(10)	522(2)	6464(2)	51(1)
O(3)	3898(10)	3782(2)	5724(2)	54(1)
S(1)	-31(4)	3555(1)	4520(1)	50(1)
S(2)	-1218(4)	2236(1)	3476(1)	49(1)

Tab. 59. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **23**.

U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
C(1)-O(1)	1.218(7)	O(1)-C(1)-S(1)	124.1(5)
C(1)-S(1)	1.751(6)	O(1)-C(1)-S(2)	122.7(5)
C(1)-S(2)	1.772(6)	S(1)-C(1)-S(2)	113.1(3)
C(2)-C(11)	1.347(8)	C(11)-C(2)-C(3)	121.8(5)
C(2)-C(3)	1.493(8)	C(11)-C(2)-S(2)	118.8(4)
C(2)-S(2)	1.736(5)	C(3)-C(2)-S(2)	119.3(4)
C(3)-C(4)	1.489(8)	C(4)-C(3)-C(2)	110.7(5)
C(4)-C(5)	1.505(7)	C(3)-C(4)-C(5)	113.3(5)
C(5)-C(6)	1.397(7)	C(6)-C(5)-C(10)	120.5(5)
C(5)-C(10)	1.401(8)	C(6)-C(5)-C(4)	120.0(5)
C(6)-C(7)	1.374(8)	C(10)-C(5)-C(4)	119.4(5)
C(6)-O(2)	1.374(7)	C(7)-C(6)-O(2)	125.1(5)
C(7)-C(8)	1.388(8)	C(7)-C(6)-C(5)	120.2(5)
C(8)-C(9)	1.375(8)	O(2)-C(6)-C(5)	114.7(4)
C(9)-O(3)	1.369(7)	C(6)-C(7)-C(8)	119.9(5)
C(9)-C(10)	1.414(7)	C(9)-C(8)-C(7)	120.9(5)
C(10)-C(11)	1.457(7)	O(3)-C(9)-C(8)	124.8(5)
C(11)-S(1)	1.757(5)	O(3)-C(9)-C(10)	115.0(5)
C(12)-O(2)	1.434(6)	C(8)-C(9)-C(10)	120.2(5)
C(13)-O(3)	1.423(7)	C(5)-C(10)-C(9)	118.3(5)
		C(5)-C(10)-C(11)	118.0(5)
		C(9)-C(10)-C(11)	123.7(5)
		C(2)-C(11)-C(10)	121.0(5)
		C(2)-C(11)-S(1)	115.4(4)
		C(10)-C(11)-S(1)	123.6(4)
		C(6)-O(2)-C(12)	117.2(4)
		C(9)-O(3)-C(13)	118.6(5)
		C(1)-S(1)-C(11)	96.9(3)
		C(2)-S(2)-C(1)	95.6(3)

Tab. 60. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für 23.

	x	y	z	U (eq)
C(1)	1099(3)	4962(3)	4558(17)	36(1)
C(2)	1188(3)	5936(2)	4708(17)	33(1)
C(3)	1705(3)	5777(2)	3316(17)	33(1)
C(4)	2181(3)	6120(3)	2219(19)	38(1)
O(1)	926(2)	4538(2)	4882(15)	51(1)
O(2)	2641(2)	5986(2)	836(16)	49(1)
S(1)	661(1)	5494(1)	5849(4)	34(1)
S(2)	1806(1)	5132(1)	2805(4)	33(1)

Tab. 61. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **27**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	\AA		°
C(1)-O(1)	1.197(8)	O(1)-C(1)-S(2)	124.4(6)
C(1)-S(2)	1.766(6)	O(1)-C(1)-S(1)	122.8(5)
C(1)-S(1)	1.783(7)	S(2)-C(1)-S(1)	112.8(4)
C(2)-C(3)	1.334(9)	C(3)-C(2)-S(1)	118.1(5)
C(2)-S(1)	1.714(6)	C(2)-C(3)-C(4)	122.7(6)
C(3)-C(4)	1.458(9)	C(2)-C(3)-S(2)	117.9(5)
C(3)-S(2)	1.737(6)	C(4)-C(3)-S(2)	119.4(5)
C(4)-O(2)	1.204(8)	O(2)-C(4)-C(3)	123.8(6)
		C(2)-S(1)-C(1)	95.7(3)
		C(3)-S(2)-C(1)	95.4(3)

Tab. 62. Bindungslängen [\AA] und -winkel [$^\circ$] für **27**.

	x	y	z	U (eq)
S(1)	5457(1)	5689(2)	5840(1)	45(1)
S(2)	6084(1)	9368(2)	4141(1)	53(1)
O(1)	6979(2)	6173(8)	6394(4)	68(1)
O(2)	3782(1)	8136(4)	5366(2)	35(1)
O(3)	3686(2)	4681(5)	3771(3)	44(1)
C(1)	6316(2)	6909(8)	5626(4)	48(1)
C(2)	5071(2)	9305(7)	3617(4)	42(1)
C(3)	4784(2)	7655(6)	4381(3)	33(1)
C(4)	3927(2)	7398(6)	4065(3)	32(1)
C(5)	3031(2)	6917(6)	5095(3)	35(1)
C(6)	3077(2)	4274(6)	4342(5)	45(1)

Tab. 63. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **28**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
S(1)-C(3)	1.737(3)	C(3)-S(1)-C(1)	96.06(16)
S(1)-C(1)	1.773(4)	C(2)-S(2)-C(1)	96.22(17)
S(2)-C(2)	1.725(4)	C(4)-O(2)-C(5)	103.6(2)
S(2)-C(1)	1.773(4)	C(4)-O(3)-C(6)	107.0(2)
O(1)-C(1)	1.200(5)	O(1)-C(1)-S(1)	124.3(4)
O(2)-C(4)	1.398(3)	O(1)-C(1)-S(2)	123.6(4)
O(2)-C(5)	1.433(4)	S(1)-C(1)-S(2)	112.12(19)
O(3)-C(4)	1.411(4)	C(3)-C(2)-S(2)	118.1(3)
O(3)-C(6)	1.432(4)	C(3)-C(2)-H(2)	117(3)
C(2)-C(3)	1.327(5)	S(2)-C(2)-H(2)	124(3)
C(2)-H(2)	1.01(5)	C(2)-C(3)-C(4)	124.1(3)
C(3)-C(4)	1.487(4)	C(2)-C(3)-S(1)	117.5(3)
C(4)-H(4)	1.0000	C(4)-C(3)-S(1)	118.4(2)
C(5)-C(6)	1.507(4)	O(2)-C(4)-O(3)	105.5(2)
C(5)-H(5A)	0.9900	O(2)-C(4)-C(3)	110.8(2)
C(5)-H(5B)	0.9900	O(3)-C(4)-C(3)	110.3(2)
C(6)-H(6A)	0.9900	O(2)-C(4)-H(4)	110.1
C(6)-H(6B)	0.9900	O(3)-C(4)-H(4)	110.1
		C(3)-C(4)-H(4)	110.1
		O(2)-C(5)-C(6)	102.9(2)
		O(2)-C(5)-H(5A)	111.2
		C(6)-C(5)-H(5A)	111.2
		O(2)-C(5)-H(5B)	111.2
		C(6)-C(5)-H(5B)	111.2
		H(5A)-C(5)-H(5B)	109.1
		O(3)-C(6)-C(5)	104.5(2)
		O(3)-C(6)-H(6A)	110.9
		C(5)-C(6)-H(6A)	110.9
		O(3)-C(6)-H(6B)	110.9

C(5)-C(6)-H(6B)	110.9
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.9

Tab. 64. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **28**.

	x	y	z	U (eq)
S(1)	775(4)	5284(1)	3543(1)	58(1)
S(2)	488(3)	3325(1)	3029(1)	56(1)
O(1)	-1351(11)	3919(3)	4507(2)	80(1)
N(1)	2953(12)	3858(3)	-32(2)	63(1)
N(2)	3484(12)	2829(2)	1463(2)	57(1)
C(1)	-263(14)	4132(3)	3833(3)	61(1)
C(2)	3166(14)	5863(3)	2037(3)	60(1)
C(3)	1932(13)	5036(3)	2525(3)	48(1)
C(4)	1774(12)	4137(3)	2282(3)	46(1)
C(5)	2556(12)	3733(3)	1462(3)	46(1)
C(6)	4250(14)	2474(3)	728(3)	62(1)
C(7)	4055(14)	2974(3)	-6(3)	61(1)
C(8)	2211(14)	4221(3)	713(3)	58(1)

Tab. 65. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für **31**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
S(1)-C(3)	1.734(5)	C(3)-S(1)-C(1)	97.1(2)
S(1)-C(1)	1.766(5)	C(4)-S(2)-C(1)	96.7(2)
S(2)-C(4)	1.751(4)	C(7)-N(1)-C(8)	115.1(4)
S(2)-C(1)	1.757(5)	C(6)-N(2)-C(5)	116.4(4)
O(1)-C(1)	1.209(6)	O(1)-C(1)-S(2)	123.7(4)
N(1)-C(7)	1.335(6)	O(1)-C(1)-S(1)	124.1(4)
N(1)-C(8)	1.336(6)	S(2)-C(1)-S(1)	112.2(3)
N(2)-C(6)	1.319(6)	C(3)-C(2)-H(2A)	109.5
N(2)-C(5)	1.343(5)	C(3)-C(2)-H(2B)	109.5
C(2)-C(3)	1.508(6)	H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
C(2)-H(2A)	0.9600	C(3)-C(2)-H(2C)	109.5
C(2)-H(2B)	0.9600	H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
C(2)-H(2C)	0.9600	H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
C(3)-C(4)	1.345(6)	C(4)-C(3)-C(2)	128.1(4)
C(4)-C(5)	1.470(6)	C(4)-C(3)-S(1)	116.9(3)
C(5)-C(8)	1.377(6)	C(2)-C(3)-S(1)	114.9(3)
C(6)-C(7)	1.366(7)	C(3)-C(4)-C(5)	128.5(4)
C(6)-H(6)	0.9300	C(3)-C(4)-S(2)	117.0(3)
C(7)-H(7)	0.9300	C(5)-C(4)-S(2)	114.5(3)
C(8)-H(8)	0.9300	N(2)-C(5)-C(8)	120.2(4)
		N(2)-C(5)-C(4)	116.5(4)
		C(8)-C(5)-C(4)	123.2(4)
		N(2)-C(6)-C(7)	123.0(4)
		N(2)-C(6)-H(6)	118.5
		C(7)-C(6)-H(6)	118.5
		N(1)-C(7)-C(6)	121.8(4)
		N(1)-C(7)-H(7)	119.1
		C(6)-C(7)-H(7)	119.1
		N(1)-C(8)-C(5)	123.3(4)

N(1)-C(8)-H(8)	118.3
C(5)-C(8)-H(8)	118.3

Tab. 66. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **31**.

	x	y	z	U (eq)
S(1)	1697(1)	6868(1)	800(1)	48(1)
S(2)	1203(1)	4256(1)	1840(1)	49(1)
O(1)	1604(2)	7276(4)	2233(2)	64(1)
O(2)	-36(2)	1988(3)	564(2)	60(1)
O(3)	1050(2)	989(3)	1348(1)	51(1)
N(1)	2137(2)	5717(3)	-694(2)	47(1)
N(2)	980(2)	3655(4)	-1505(2)	48(1)
C(1)	1486(2)	4799(4)	-369(2)	41(1)
C(2)	2198(3)	5570(4)	-1422(2)	50(1)
C(3)	1640(3)	4538(4)	-1821(2)	49(1)
C(4)	906(2)	3817(4)	-779(2)	44(1)
C(5)	1420(2)	4939(4)	432(2)	41(1)
C(6)	1189(2)	3766(4)	913(2)	43(1)
C(7)	1517(3)	6331(5)	1725(2)	51(1)
C(8)	909(2)	2019(4)	734(2)	45(1)
C(9)	-468(3)	965(8)	1053(3)	85(1)
C(10)	194(3)	354(6)	1568(3)	73(1)

Tab. 67. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für **32**.

U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
S(1)-C(5)	1.755(3)	C(5)-S(1)-C(7)	96.28(17)
S(1)-C(7)	1.761(4)	C(6)-S(2)-C(7)	96.17(17)
S(2)-C(6)	1.735(4)	C(9)-O(2)-C(8)	108.5(3)
S(2)-C(7)	1.762(4)	C(8)-O(3)-C(10)	108.3(3)
O(1)-C(7)	1.210(4)	C(2)-N(1)-C(1)	115.8(3)
O(2)-C(8)	1.417(4)	C(3)-N(2)-C(4)	115.8(3)
O(3)-C(8)	1.412(4)	N(1)-C(1)-C(4)	121.0(3)
O(3)-C(10)	1.411(5)	N(1)-C(1)-C(5)	116.2(3)
N(1)-C(2)	1.335(5)	C(4)-C(1)-C(5)	122.9(3)
N(1)-C(1)	1.347(4)	N(1)-C(2)-C(3)	122.7(3)
N(2)-C(3)	1.334(5)	N(2)-C(3)-C(2)	121.8(3)
N(2)-C(4)	1.333(5)	N(2)-C(4)-C(1)	122.9(3)
C(1)-C(5)	1.466(5)	C(6)-C(5)-C(1)	127.8(3)
C(2)-C(3)	1.378(5)	C(6)-C(5)-S(1)	116.4(3)
C(5)-C(6)	1.339(5)	C(1)-C(5)-S(1)	115.8(2)
C(6)-C(8)	1.514(5)	C(5)-C(6)-S(2)	118.1(3)
C(9)-C(10)	1.437(6)	C(8)-C(6)-S(2)	115.3(2)
		O(1)-C(7)-S(1)	124.0(3)
		O(1)-C(7)-S(2)	123.1(3)
		S(1)-C(7)-S(2)	113.0(2)
		O(2)-C(8)-O(3)	107.7(3)
		O(2)-C(8)-C(6)	109.1(3)
		O(3)-C(8)-C(6)	110.3(3)
		O(2)-C(9)-C(10)	108.9(4)
		O(3)-C(10)-C(9)	106.5(3)

Tab. 68. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für 32.

	x	y	z	U (eq)
Se(1)	3413(1)	4931(1)	2350(2)	22(1)
Se(2)	5000	5000	5844(3)	21(1)
S(1)	4054(2)	7028(2)	859(7)	26(1)
S(2)	1906(2)	7806(2)	3133(7)	28(1)
O(1)	3620(7)	8850(5)	1030(20)	35(1)
C(1)	3267(9)	8075(7)	1590(20)	25(1)
C(2)	3028(8)	6241(7)	2290(30)	22(1)
C(3)	2064(9)	6572(7)	3310(20)	23(1)
C(4)	1062(9)	6035(9)	4620(30)	32(1)

Tab. 69. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **33**.
 U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Bindungslänge		Winkel	
	Å		°
Se(1)-C(2)	1.914(10)	C(2)-Se(1)-Se(2)	99.2(3)
Se(1)-Se(2)	2.3586(12)	Se(1)-Se(2)-Se(1)#1	106.49(7)
Se(2)-Se(1)#1	2.3586(12)	C(2)-S(1)-C(1)	96.4(5)
S(1)-C(2)	1.752(10)	C(3)-S(2)-C(1)	97.5(5)
S(1)-C(1)	1.780(11)	O(1)-C(1)-S(2)	125.6(9)
S(2)-C(3)	1.762(11)	O(1)-C(1)-S(1)	123.4(9)
S(2)-C(1)	1.777(11)	S(2)-C(1)-S(1)	110.9(6)
O(1)-C(1)	1.197(13)	C(3)-C(2)-S(1)	119.1(8)
C(2)-C(3)	1.306(15)	C(3)-C(2)-Se(1)	123.8(8)
C(3)-C(4)	1.510(16)	S(1)-C(2)-Se(1)	117.1(5)
C(4)-H(4A)	0.9800	C(2)-C(3)-C(4)	128.4(10)
C(4)-H(4B)	0.9800	C(2)-C(3)-S(2)	116.0(8)
C(4)-H(4C)	0.9800	C(4)-C(3)-S(2)	115.6(8)
		C(3)-C(4)-H(4A)	109.5
		C(3)-C(4)-H(4B)	109.5
		H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
		C(3)-C(4)-H(4C)	109.5
		H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
		H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5

Tab. 70. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **33**.

	x	y	z	U (eq)
C(1)	8162(4)	4074(4)	6323(3)	33(1)
C(2)	8914(3)	6483(4)	5642(3)	29(1)
C(3)	8349(3)	5707(4)	4770(3)	30(1)
C(4)	8143(4)	6153(5)	3661(3)	43(1)
C(5)	5603(4)	9723(4)	2588(3)	33(1)
C(6)	6767(3)	9491(4)	4583(3)	28(1)
C(7)	5772(3)	8578(4)	4418(3)	29(1)
C(8)	5451(4)	7611(4)	5199(3)	41(1)
O(1)	7920(3)	3109(3)	6837(2)	45(1)
O(2)	5276(3)	10021(3)	1673(2)	44(1)
S(1)	8957(1)	5723(1)	6836(1)	35(1)
S(2)	7775(1)	3994(1)	4954(1)	37(1)
S(3)	6964(1)	10450(1)	3530(1)	29(1)
S(4)	4745(1)	8505(1)	3138(1)	39(1)
Se(1)	9666(1)	8351(1)	5643(1)	36(1)
Se(2)	8033(1)	9809(1)	5895(1)	34(1)

Tab. 71. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **34**.
 U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge		Winkel
	Å		°
C(1)-O(1)	1.202(4)	O(1)-C(1)-S(2)	123.4(3)
C(1)-S(2)	1.763(4)	O(1)-C(1)-S(1)	124.7(3)
C(1)-S(1)	1.769(4)	S(2)-C(1)-S(1)	111.8(2)
C(2)-C(3)	1.346(5)	C(3)-C(2)-S(1)	118.1(3)
C(2)-S(1)	1.741(3)	C(3)-C(2)-Se(1)	123.7(3)
C(2)-Se(1)	1.895(3)	S(1)-C(2)-Se(1)	118.23(19)
C(3)-C(4)	1.498(5)	C(2)-C(3)-C(4)	127.9(3)
C(3)-S(2)	1.733(4)	C(2)-C(3)-S(2)	116.0(3)
C(5)-O(2)	1.203(4)	C(4)-C(3)-S(2)	116.1(3)
C(5)-S(3)	1.759(4)	O(2)-C(5)-S(3)	124.6(3)
C(5)-S(4)	1.765(4)	O(2)-C(5)-S(4)	123.2(3)
C(6)-C(7)	1.335(5)	S(3)-C(5)-S(4)	112.14(19)
C(6)-S(3)	1.739(3)	C(7)-C(6)-S(3)	118.9(3)
C(6)-Se(2)	1.897(4)	C(7)-C(6)-Se(2)	124.8(3)
C(7)-C(8)	1.499(5)	S(3)-C(6)-Se(2)	116.30(19)
C(7)-S(4)	1.742(4)	C(6)-C(7)-C(8)	127.7(3)
Se(1)-Se(2)	2.3397(7)	C(6)-C(7)-S(4)	115.4(3)
		C(8)-C(7)-S(4)	117.0(3)
		C(2)-S(1)-C(1)	96.35(17)
		C(3)-S(2)-C(1)	97.68(17)
		C(6)-S(3)-C(5)	96.08(17)
		C(7)-S(4)-C(5)	97.43(17)
		C(2)-Se(1)-Se(2)	99.23(11)
		C(6)-Se(2)-Se(1)	98.40(11)

Tab. 72. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für 34.

Anhang

	x	y	z	U (eq)
S(6A)	3500(60)	1540(50)	4090(40)	45(16)
S(7A)	4070(50)	1850(50)	5900(40)	36(14)
S(4A)	-670(50)	2970(40)	6000(30)	28(13)
S(1A)	-1300(50)	2560(50)	4090(30)	31(14)
Mo(1)	364(4)	3138(3)	5015(3)	51(2)
Mo(1A)	-610(20)	4049(18)	4971(18)	53(8)
S(1)	992(12)	1768(13)	4096(9)	58(4)
S(2)	526(11)	4202(12)	4081(8)	61(4)
S(3)	990(11)	4691(10)	5956(8)	56(3)
S(4)	1411(14)	2273(12)	5982(9)	61(4)
O(1)	-1090(30)	3010(30)	5040(20)	88(12)
O(2)	2030(30)	260(30)	2940(20)	78(4)
O(3)	-810(30)	1480(30)	510(20)	78(4)
O(4)	1300(40)	3810(30)	9470(30)	103(6)
O(5)	2890(40)	1310(30)	7160(30)	103(6)
C(1)	810(40)	2280(40)	3240(30)	52(11)
C(2)	560(50)	3190(40)	3210(30)	65(14)
C(3)	130(50)	3730(40)	2490(30)	61(13)
C(4)	-460(50)	2800(40)	1850(30)	71(14)
C(5)	10(30)	1830(20)	1740(20)	78(4)
C(6)	-20(30)	1130(30)	1080(18)	78(4)
C(7)	360(30)	80(30)	958(17)	78(4)
C(8)	1190(30)	-140(20)	1630(20)	78(4)
C(9)	1340(30)	560(30)	2360(18)	78(4)
C(10)	650(30)	1550(30)	2464(17)	78(4)
C(11)	3150(40)	940(40)	3210(30)	78(4)
C(12)	-840(50)	720(40)	-280(30)	78(4)
C(13)	1580(50)	3250(50)	6870(40)	78(16)
C(14)	1210(50)	4340(40)	6800(30)	63(13)
C(15)	1360(50)	4970(40)	7540(30)	61(13)
C(16)	940(60)	4420(50)	8150(40)	88(18)

Anhang

C(17)	1410(40)	3480(30)	8250(30)	103(6)
C(18)	1570(40)	3170(30)	8960(30)	103(6)
C(19)	2160(40)	2250(40)	9060(20)	103(6)
C(20)	2590(40)	1650(30)	8450(30)	103(6)
C(21)	2440(40)	1970(30)	7740(20)	103(6)
C(22)	1850(40)	2880(40)	7640(20)	103(6)
C(23)	1240(60)	3330(50)	10200(30)	103(6)
C(24)	3980(50)	1810(50)	7020(40)	103(6)
Mo(2)	5549(3)	4263(3)	4942(3)	50(2)
Mo(2A)	4590(20)	2838(19)	4940(19)	62(9)
S(5)	3952(10)	4399(13)	4003(9)	70(4)
S(6)	5829(13)	2727(15)	4048(8)	61(5)
S(7)	6199(12)	3239(11)	5867(10)	54(4)
S(8)	4390(12)	4932(13)	5862(8)	72(4)
O(6)	6630(20)	5150(20)	4960(30)	88(12)
O(7)	7220(30)	2200(30)	2870(20)	81(5)
O(8)	3640(30)	1070(30)	520(20)	81(5)
O(9)	5330(30)	3440(30)	9270(20)	88(5)
O(10)	8160(40)	3290(30)	7120(30)	88(5)
C(25)	4180(50)	3590(40)	3100(30)	67(14)
C(26)	5130(50)	3000(40)	3140(30)	73(15)
C(27)	5310(30)	2250(30)	2430(19)	81(5)
C(28)	6350(30)	1800(30)	2335(19)	81(5)
C(29)	6480(30)	1180(30)	1630(20)	81(5)
C(30)	5570(30)	990(30)	1023(18)	81(5)
C(31)	4530(30)	1430(30)	1120(20)	81(5)
C(32)	4400(30)	2060(30)	1820(20)	81(5)
C(33)	3230(60)	2680(50)	1840(50)	100(20)
C(34)	3520(50)	3780(50)	2380(40)	81(17)
C(35)	7930(50)	1330(40)	3110(40)	81(5)
C(36)	3600(50)	190(40)	-60(40)	81(5)
C(37)	5870(50)	3950(40)	6720(30)	68(14)

Anhang

C(38)	5070(70)	4610(60)	6740(50)	100(20)
C(39)	4650(50)	5170(40)	7470(30)	74(15)
C(40)	4780(70)	4370(60)	8020(50)	110(20)
C(41)	5740(30)	3800(30)	8070(30)	88(5)
C(42)	6040(30)	3360(30)	8740(20)	88(5)
C(43)	7070(30)	2870(30)	8870(20)	88(5)
C(44)	2820(30)	8330(20)	88(5)	88(5)
C(45)	7500(30)	3250(30)	7670(20)	88(5)
C(46)	6470(40)	3740(30)	7540(20)	88(5)
C(47)	5400(50)	2760(50)	9840(40)	88(5)
C(48)	8810(60)	2360(50)	6950(40)	88(5)
Mo(3)	4406(4)	9305(3)	5010(3)	49(2)
Mo(3A)	5350(20)	7920(20)	4960(20)	74(10)
S(9)	5982(11)	9991(14)	5927(9)	73(4)
S(10)	4218(11)	8261(9)	5910(9)	61(4)
S(11)	5542(12)	9528(13)	4105(9)	72(4)
S(12)	3755(13)	7780(13)	4077(8)	69(4)
O(11)	3290(30)	10180(30)	5020(30)	99(15)
O(12)	6540(30)	8600(30)	9460(20)	87(5)
O(13)	2880(40)	8260(30)	7100(30)	87(5)
O(14)	4300(30)	6660(20)	490(20)	80(5)
O(15)	1780(30)	7250(30)	2850(20)	80(5)
C(49)	5800(40)	9650(30)	6830(30)	52(11)
C(50)	4940(50)	8950(40)	6790(30)	75(16)
C(51)	4780(40)	8700(30)	7570(20)	87(5)
C(52)	3750(30)	8250(30)	7630(20)	87(5)
C(53)	3630(30)	7920(30)	8310(20)	87(5)
C(54)	4530(30)	8040(30)	8928(19)	87(5)
C(55)	5550(30)	8480(30)	8860(20)	87(5)
C(56)	5680(30)	8810(30)	8180(30)	87(5)
C(57)	6640(80)	9450(70)	8130(60)	140(30)
C(58)	6450(40)	10220(40)	7560(30)	63(13)

Anhang

C(59)	2140(50)	7300(50)	6840(40)	87(5)
C(60)	6730(50)	7750(50)	9810(40)	87(5)
C(61)	4900(50)	8850(40)	3280(30)	63(13)
C(62)	3930(60)	8130(50)	3150(40)	89(19)
C(63)	3510(30)	7470(30)	2413(18)	80(5)
C(64)	2460(30)	6950(30)	2299(19)	80(5)
C(65)	2030(20)	6320(30)	1590(20)	80(5)
C(66)	2650(30)	6210(30)	986(18)	80(5)
C(67)	3700(30)	6720(30)	1100(20)	80(5)
C(68)	4130(30)	7350(30)	1810(20)	80(5)
C(69)	5180(60)	7950(50)	1900(50)	110(20)
C(70)	5230(50)	8990(40)	2510(30)	75(15)
C(71)	1160(50)	6250(40)	2970(40)	80(5)
C(72)	4140(50)	5520(30)	0(30)	80(5)
Mo(4)	9587(4)	8091(4)	4923(3)	49(2)
Mo(4A)	10561(19)	9041(17)	4967(16)	51(7)
S(13)	8976(12)	7226(11)	5869(8)	64(4)
S(14)	9429(11)	9639(9)	5865(8)	54(3)
S(15)	8967(11)	9134(11)	3972(7)	60(4)
S(16)	8506(11)	6730(14)	4020(8)	74(4)
O(16)	10980(30)	7960(30)	4919(17)	75(11)
O(17)	7910(40)	6290(30)	7060(30)	85(5)
O(18)	10950(30)	8540(30)	9400(20)	85(5)
O(19)	8920(30)	5970(30)	510(20)	79(4)
O(20))	6780(30)	5220(30)	2880(20)	79(4)
C(73)	9200(50)	8210(40)	6760(30)	85(17)
C(74)	9520(40)	9190(40)	6760(30)	85(5)
C(75)	9880(40)	9920(30)	7490(30)	85(5)
C(76)	10580(60)	9350(50)	8040(40)	85(5)
C(77)	10080(30)	8370(30)	8090(20)	85(5)
C(78)	10260(30)	8040(30)	8800(20)	85(5)
C(79)	9650(30)	7180(30)	8910(18)	85(5)

C(80)	8850(30)	6640(30)	8310(20)	85(5)
C(81)	8660(30)	6970(30)	7600(20)	85(5)
C(82)	9280(40)	7830(30)	7490(19)	85(5)
C(83)	11630(50)	7810(40)	9880(30)	85(5)
C(84)	6860(50)	6980(50)	6960(40)	85(5)
C(85)	8550(40)	8150(30)	3100(30)	45(10)
C(86)	8320(40)	7180(40)	3120(30)	58(12)
C(87)	7960(40)	6410(30)	2391(18)	79(4)
C(88)	7330(30)	5480(30)	2330(19)	79(4)
C(89)	7170(30)	4730(20)	1640(20)	79(4)
C(90)	7650(30)	4910(30)	1020(18)	79(4)
C(91)	8280(30)	5840(30)	1082(19)	79(4)
C(92)	8440(30)	6590(20)	1770(20)	79(4)
C(93)	9030(40)	7530(30)	1780(30)	53(11)
C(94)	8640(50)	8500(40)	2300(30)	76(16)
C(95)	5820(50)	5930(40)	3040(40)	79(4)
C(96)	8720(50)	5180(40)	-150(30)	79(4)
Na(1)	2394(10)	6148(11)	4955(9)	28(2)
Na(2)	3553(10)	2277(10)	5030(10)	39(3)
Na(3)	6409(10)	7231(10)	4953(10)	34(3)
Na(4)	8377(11)	4702(10)	6092(9)	29(3)
Na(5)	1550(12)	9137(10)	3866(8)	29(3)
Na(6)	-2119(11)	4102(11)	3832(8)	27(3)
Na(7)	7616(10)	1157(11)	4982(9)	27(2)
Na(8)	2065(11)	9674(9)	6098(8)	24(3)

Tab. 73. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **35**.

$U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	Bindungslänge Å		Winkel °
S(6A)-Mo(2A)	2.27(7)	O(1)-Mo(1)-S(2)	106.5(10)
S(7A)-Mo(2A)	2.47(7)	O(1)-Mo(1)-S(3)	104.7(16)
S(4A)-Mo(1A)	2.50(6)	S(2)-Mo(1)-S(3)	86.1(4)
S(1A)-Mo(1A)	2.28(6)	O(1)-Mo(1)-S(1)	112.5(16)
Mo(1)-O(1)	1.76(3)	S(2)-Mo(1)-S(1)	83.4(5)
Mo(1)-S(2)	2.372(15)	S(3)-Mo(1)-S(1)	142.8(5)
Mo(1)-S(3)	2.377(15)	O(1)-Mo(1)-S(4)	109.0(11)
Mo(1)-S(1)	2.378(18)	S(2)-Mo(1)-S(4)	144.3(5)
Mo(1)-S(4)	2.400(15)	S(3)-Mo(1)-S(4)	82.0(5)
Mo(1)-Na(4)#1	3.670(15)	S(1)-Mo(1)-S(4)	86.1(5)
Mo(1)-Na(6)	3.703(14)	O(1)-Mo(1)-Na(4)#1	45.6(15)
Mo(1A)-S(2)	2.30(3)	S(2)-Mo(1)-Na(4)#1	100.4(4)
Mo(1A)-S(3)	2.40(3)	S(3)-Mo(1)-Na(4)#1	59.1(4)
S(1)-C(1)	1.76(5)	S(1)-Mo(1)-Na(4)#1	158.1(5)
S(1)-Na(2)	3.25(2)	S(4)-Mo(1)-Na(4)#1	102.0(5)
S(1)-Na(5)#2	3.39(2)	O(1)-Mo(1)-Na(6)	49.4(10)
S(2)-C(2)	1.83(6)	S(2)-Mo(1)-Na(6)	57.2(4)
S(2)-Na(6)	3.133(19)	S(3)-Mo(1)-Na(6)	102.2(4)
S(2)-Na(1)	3.320(19)	S(1)-Mo(1)-Na(6)	101.8(4)
S(3)-C(14)	1.63(6)	S(4)-Mo(1)-Na(6)	158.5(5)
S(3)-Na(4)#1	3.19(2)	Na(4)#1-Mo(1)-Na(6)	64.0(3)
S(4)-C(13)	1.80(6)	S(1A)-Mo(1A)-S(2)	83.1(18)
S(4)-Na(2)	3.32(2)	S(1A)-Mo(1A)-S(3)	141.7(19)
O(1)-Na(4)#1	2.74(5)	S(2)-Mo(1A)-S(3)	87.1(9)
O(1)-Na(7)#1	2.81(3)	S(1A)-Mo(1A)-S(4A)	87.3(19)
O(1)-Na(6)	2.89(3)	S(2)-Mo(1A)-S(4A)	137.0(18)
O(2)-C(9)	1.33(4)	S(3)-Mo(1A)-S(4A)	75.0(16)
O(2)-C(11)	1.55(3)	C(1)-S(1)-Mo(1)	104.6(17)
O(2)-Na(5)#2	2.52(4)	C(1)-S(1)-Na(2)	110.2(16)
O(3)-C(6)	1.41(5)	Mo(1)-S(1)-Na(2)	88.7(6)

Anhang

O(3)-C(12)	1.54(3)	C(1)-S(1)-Na(5)#2	114.3(17)
O(4)-C(18)	1.20(5)	Mo(1)-S(1)-Na(5)#2	139.4(6)
O(4)-C(23)	1.54(3)	Na(2)-S(1)-Na(5)#2	88.4(5)
O(5)-C(21)	1.38(6)	C(2)-S(2)-Mo(1)	102.2(18)
O(5)-C(24)	1.54(3)	C(2)-S(2)-Na(6)	92.5(18)
O(5)-Na(8)#2	2.62(5)	Mo(1)-S(2)-Na(6)	83.3(4)
C(1)-C(2)	1.22(6)	C(2)-S(2)-Na(1)	129.3(18)
C(1)-C(10)	1.50(5)	Mo(1)-S(2)-Na(1)	106.0(5)
C(2)-C(3)	1.58(7)	Na(6)-S(2)-Na(1)	131.6(6)
C(3)-C(4)	1.56(7)	C(14)-S(3)-Mo(1)	107.4(19)
C(3)-H(3A)	0.9900	C(14)-S(3)-Na(4)#1	86(2)
C(3)-H(3B)	0.9900	Mo(1)-S(3)-Na(4)#1	81.1(5)
C(4)-C(5)	1.35(6)	C(13)-S(4)-Mo(1)	105(2)
C(4)-H(4A)	0.9900	C(13)-S(4)-Na(2)	114(2)
C(4)-H(4B)	0.9900	Mo(1)-S(4)-Na(2)	86.7(5)
C(5)-C(6)	1.3309	Mo(1)-O(1)-Na(4)#1	107.2(18)
C(5)-C(10)	1.5046	Mo(1)-O(1)-Na(7)#1	129(2)
C(6)-C(7)	1.4078	Na(4)#1-O(1)-Na(7)#1	112.3(13)
C(7)-C(8)	1.4954	Mo(1)-O(1)-Na(6)	103.0(12)
C(7)-H(7)	0.9500	Na(4)#1-O(1)-Na(6)	87.8(12)
C(8)-C(9)	1.4247	Na(7)#1-O(1)-Na(6)	109.2(12)
C(8)-H(8)	0.9500	C(9)-O(2)-C(11)	114(4)
C(9)-C(10)	1.4989	C(9)-O(2)-Na(5)#2	128(3)
C(11)-H(11A)	0.9800	C(11)-O(2)-Na(5)#2	116(3)
C(11)-H(11B)	0.9800	C(6)-O(3)-C(12)	110(4)
C(11)-H(11C)	0.9800	C(18)-O(4)-C(23)	112(5)
C(12)-H(12A)	0.9800	C(21)-O(5)-C(24)	111(4)
C(12)-H(12B)	0.9800	C(21)-O(5)-Na(8)#2	133(3)
C(12)-H(12C)	0.9800	C(24)-O(5)-Na(8)#2	114(4)
C(13)-C(14)	1.48(7)	C(2)-C(1)-C(10)	114(4)
C(13)-C(22)	1.51(7)	C(2)-C(1)-S(1)	123(4)
C(14)-C(15)	1.39(7)	C(10)-C(1)-S(1)	121(3)

C(15)-C(16)	1.55(8)	C(1)-C(2)-C(3)	130(5)
C(15)-H(15A)	0.9900	C(1)-C(2)-S(2)	122(4)
C(15)-H(15B)	0.9900	C(3)-C(2)-S(2)	107(3)
C(16)-C(17)	1.36(7)	C(4)-C(3)-C(2)	105(4)
C(16)-H(16A)	0.9900	C(4)-C(3)-H(3A)	110.8
C(16)-H(16B)	0.9900	C(2)-C(3)-H(3A)	110.8
C(17)-C(18)	1.3900	C(4)-C(3)-H(3B)	110.8
C(17)-C(22)	1.3900	C(2)-C(3)-H(3B)	110.8
C(18)-C(19)	1.3900	H(3A)-C(3)-H(3B)	108.9
C(19)-C(20)	1.3900	C(5)-C(4)-C(3)	120(5)
C(19)-H(19)	0.9500	C(5)-C(4)-H(4A)	107.2
C(20)-C(21)	1.3900	C(3)-C(4)-H(4A)	107.2
C(20)-H(20)	0.9500	C(5)-C(4)-H(4B)	107.2
C(21)-C(22)	1.3900	C(3)-C(4)-H(4B)	107.2
C(23)-H(23A)	0.9800	H(4A)-C(4)-H(4B)	106.9
C(23)-H(23B)	0.9800	C(6)-C(5)-C(4)	129(3)
C(23)-H(23C)	0.9800	C(6)-C(5)-C(10)	117.4
C(24)-H(24A)	0.9800	C(4)-C(5)-C(10)	113(3)
C(24)-H(24B)	0.9800	C(5)-C(6)-C(7)	130.0
C(24)-H(24C)	0.9800	C(5)-C(6)-O(3)	107(3)
Mo(2)-O(6)	1.71(3)	C(7)-C(6)-O(3)	120(3)
Mo(2)-S(7)	2.328(14)	C(6)-C(7)-C(8)	112.4
Mo(2)-S(6)	2.347(19)	C(6)-C(7)-H(7)	123.8
Mo(2)-S(5)	2.355(13)	C(8)-C(7)-H(7)	123.8
Mo(2)-S(8)	2.369(16)	C(9)-C(8)-C(7)	121.0
Mo(2)-Na(2)	3.535(11)	C(9)-C(8)-H(8)	119.5
Mo(2)-Na(4)	3.647(14)	C(7)-C(8)-H(8)	119.5
Mo(2)-Na(6)#3	3.677(15)	O(2)-C(9)-C(8)	117(3)
Mo(2A)-S(5)	2.86(3)	O(2)-C(9)-C(10)	123(3)
S(5)-C(25)	1.80(6)	C(8)-C(9)-C(10)	120.0
S(5)-Na(1)	3.32(2)	C(1)-C(10)-C(9)	119(3)
S(6)-C(26)	1.79(6)	C(1)-C(10)-C(5)	124(3)

S(6)-Na(6)#3	3.15(2)	C(9)-C(10)-C(5)	116.0
S(6)-Na(7)	3.38(2)	O(2)-C(11)-H(11A)	109.5
S(7)-C(37)	1.73(6)	O(2)-C(11)-H(11B)	109.5
S(7)-Na(4)	3.14(2)	H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
S(8)-C(38)	1.76(8)	O(2)-C(11)-H(11C)	109.5
S(8)-Na(1)	3.224(19)	H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
O(6)-Na(3)	2.68(3)	H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
O(6)-Na(4)	2.79(4)	O(3)-C(12)-H(12A)	109.5
O(6)-Na(6)#3	2.85(5)	O(3)-C(12)-H(12B)	109.5
O(7)-C(28)	1.33(5)	H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
O(7)-C(35)	1.48(7)	O(3)-C(12)-H(12C)	109.5
O(7)-Na(6)#3	2.73(4)	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
O(8)-C(36)	1.38(6)	H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
O(8)-C(31)	1.39(5)	C(14)-C(13)-C(22)	123(5)
O(9)-C(42)	1.37(5)	C(14)-C(13)-S(4)	116(4)
O(9)-C(47)	1.45(7)	C(22)-C(13)-S(4)	120(4)
O(10)-C(45)	1.37(5)	C(15)-C(14)-C(13)	108(5)
O(10)-C(48)	1.43(7)	C(15)-C(14)-S(3)	130(4)
O(10)-Na(4)	2.85(4)	C(13)-C(14)-S(3)	120(4)
C(25)-C(26)	1.37(7)	C(14)-C(15)-C(16)	114(5)
C(25)-C(34)	1.47(8)	C(14)-C(15)-H(15A)	108.8
C(26)-C(27)	1.48(6)	C(16)-C(15)-H(15A)	108.8
C(27)-C(28)	1.3900	C(14)-C(15)-H(15B)	108.8
C(27)-C(32)	1.3900	C(16)-C(15)-H(15B)	108.8
C(28)-C(29)	1.3900	H(15A)-C(15)-H(15B)	107.7
C(29)-C(30)	1.3900	C(17)-C(16)-C(15)	115(5)
C(29)-H(29)	0.9500	C(17)-C(16)-H(16A)	108.4
C(30)-C(31)	1.3900	C(15)-C(16)-H(16A)	108.4
C(30)-H(30)	0.9500	C(17)-C(16)-H(16B)	108.4
C(31)-C(32)	1.3900	C(15)-C(16)-H(16B)	108.4
C(32)-C(33)	1.62(8)	H(16A)-C(16)-H(16B)	107.5
C(33)-C(34)	1.55(8)	C(16)-C(17)-C(18)	121(4)

C(33)-H(33A)	0.9900	C(16)-C(17)-C(22)	118(4)
C(33)-H(33B)	0.9900	C(18)-C(17)-C(22)	120.0
C(34)-H(34A)	0.9900	O(4)-C(18)-C(17)	114(4)
C(34)-H(34B)	0.9900	O(4)-C(18)-C(19)	125(4)
C(35)-H(35A)	0.9800	C(17)-C(18)-C(19)	120.0
C(35)-H(35B)	0.9800	C(20)-C(19)-C(18)	120.0
C(35)-H(35C)	0.9800	C(20)-C(19)-H(19)	120.0
C(36)-H(36A)	0.9800	C(18)-C(19)-H(19)	120.0
C(36)-H(36B)	0.9800	C(21)-C(20)-C(19)	120.0
C(36)-H(36C)	0.9800	C(21)-C(20)-H(20)	120.0
C(37)-C(38)	1.28(8)	C(19)-C(20)-H(20)	120.0
C(37)-C(46)	1.59(6)	O(5)-C(21)-C(20)	115(4)
C(38)-C(39)	1.53(9)	O(5)-C(21)-C(22)	125(4)
C(39)-C(40)	1.53(9)	C(20)-C(21)-C(22)	120.0
C(39)-H(39A)	0.9900	C(21)-C(22)-C(17)	120.0
C(39)-H(39B)	0.9900	C(21)-C(22)-C(13)	123(4)
C(40)-C(41)	1.36(8)	C(17)-C(22)-C(13)	116(4)
C(40)-H(40A)	0.9900	O(4)-C(23)-H(23A)	109.5
C(40)-H(40B)	0.9900	O(4)-C(23)-H(23B)	109.5
C(41)-C(42)	1.3900	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(41)-C(46)	1.3900	O(4)-C(23)-H(23C)	109.5
C(42)-C(43)	1.3900	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
C(43)-C(44)	1.3900	H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
C(43)-H(43)	0.9500	O(5)-C(24)-H(24A)	109.5
C(44)-C(45)	1.3900	O(5)-C(24)-H(24B)	109.5
C(44)-H(44)	0.9500	H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(45)-C(46)	1.3900	O(5)-C(24)-H(24C)	109.5
C(47)-H(47A)	0.9800	H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
C(47)-H(47B)	0.9800	H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(47)-H(47C)	0.9800	O(6)-Mo(2)-S(7)	106.1(15)
C(48)-H(48A)	0.9800	O(6)-Mo(2)-S(6)	106.6(16)
C(48)-H(48B)	0.9800	S(7)-Mo(2)-S(6)	84.6(5)

C(48)-H(48C)	0.9800	O(6)-Mo(2)-S(5)	113.9(16)
Mo(3)-O(11)	1.75(3)	S(7)-Mo(2)-S(5)	140.0(5)
Mo(3)-S(10)	2.311(13)	S(6)-Mo(2)-S(5)	82.6(6)
Mo(3)-S(9)	2.336(15)	O(6)-Mo(2)-S(8)	111.4(17)
Mo(3)-S(11)	2.338(15)	S(7)-Mo(2)-S(8)	81.4(5)
Mo(3)-S(12)	2.351(17)	S(6)-Mo(2)-S(8)	141.8(6)
Mo(3)-Na(3)	3.572(12)	S(5)-Mo(2)-S(8)	85.7(5)
Mo(3)-Na(8)	3.661(14)	O(6)-Mo(2)-Na(2)	173.3(14)
Mo(3)-Na(5)	3.670(15)	S(7)-Mo(2)-Na(2)	67.3(4)
Mo(3A)-S(12)	2.25(4)	S(6)-Mo(2)-Na(2)	72.0(5)
Mo(3A)-S(10)	2.33(4)	S(5)-Mo(2)-Na(2)	72.7(4)
Mo(3A)-S(11)	2.81(3)	S(8)-Mo(2)-Na(2)	69.8(5)
S(9)-C(49)	1.80(5)	O(6)-Mo(2)-Na(4)	47.5(15)
S(9)-Na(7)#4	3.314(19)	S(7)-Mo(2)-Na(4)	58.6(4)
S(10)-C(50)	1.73(6)	S(6)-Mo(2)-Na(4)	100.3(5)
S(10)-Na(8)	3.178(19)	S(5)-Mo(2)-Na(4)	161.2(4)
S(11)-C(61)	1.62(6)	S(8)-Mo(2)-Na(4)	102.2(5)
S(11)-Na(7)#4	3.24(2)	Na(2)-Mo(2)-Na(4)	125.9(3)
S(12)-C(62)	1.84(7)	O(6)-Mo(2)-Na(6)#3	48.7(16)
S(12)-Na(5)	3.17(2)	S(7)-Mo(2)-Na(6)#3	101.9(5)
O(11)-Na(2)#4	2.69(3)	S(6)-Mo(2)-Na(6)#3	58.0(4)
O(11)-Na(8)	2.78(4)	S(5)-Mo(2)-Na(6)#3	102.9(4)
O(11)-Na(5)	2.81(6)	S(8)-Mo(2)-Na(6)#3	160.0(5)
O(12)-C(60)	1.34(6)	Na(2)-Mo(2)-Na(6)#3	129.8(4)
O(12)-C(55)	1.45(5)	Na(4)-Mo(2)-Na(6)#3	64.5(3)
O(13)-C(52)	1.29(5)	S(6A)-Mo(2A)-S(7A)	83(2)
O(13)-C(59)	1.47(7)	S(6A)-Mo(2A)-S(5)	92(2)
O(13)-Na(8)	2.84(4)	S(7A)-Mo(2A)-S(5)	146.6(18)
O(14)-C(67)	1.39(5)	C(25)-S(5)-Mo(2)	107.5(19)
O(14)-C(72)	1.54(3)	C(25)-S(5)-Na(1)	149.1(19)
O(15)-C(64)	1.38(5)	Mo(2)-S(5)-Na(1)	103.2(6)
O(15)-C(71)	1.54(3)	C(26)-S(6)-Mo(2)	104(2)

Anhang

O(15)-Na(5)	2.78(4)	C(26)-S(6)-Na(6)#3	86.5(19)
C(49)-C(50)	1.35(7)	Mo(2)-S(6)-Na(6)#3	82.7(6)
C(49)-C(58)	1.46(7)	C(26)-S(6)-Na(7)	147(2)
C(50)-C(51)	1.53(7)	Mo(2)-S(6)-Na(7)	108.2(6)
C(51)-C(52)	1.3900	Na(6)#3-S(6)-Na(7)	90.6(5)
C(51)-C(56)	1.3900	C(37)-S(7)-Mo(2)	105.0(19)
C(52)-C(53)	1.3900	C(37)-S(7)-Na(4)	90.0(19)
C(53)-C(54)	1.3900	Mo(2)-S(7)-Na(4)	82.1(4)
C(53)-H(53)	0.9500	C(38)-S(8)-Mo(2)	105(3)
C(54)-C(55)	1.3900	C(38)-S(8)-Na(1)	149(3)
C(54)-H(54)	0.9500	Mo(2)-S(8)-Na(1)	105.7(5)
C(55)-C(56)	1.3900	Mo(2)-O(6)-Na(3)	125.5(15)
C(56)-C(57)	1.44(9)	Mo(2)-O(6)-Na(4)	105.7(19)
C(57)-C(58)	1.54(10)	Na(3)-O(6)-Na(4)	113.7(14)
C(57)-H(57A)	0.9900	Mo(2)-O(6)-Na(6)#3	104.6(19)
C(57)-H(57B)	0.9900	Na(3)-O(6)-Na(6)#3	112.9(16)
C(58)-H(58A)	0.9900	Na(4)-O(6)-Na(6)#3	87.6(10)
C(58)-H(58B)	0.9900	C(28)-O(7)-C(35)	110(4)
C(59)-H(59A)	0.9800	C(28)-O(7)-Na(6)#3	138(3)
C(59)-H(59B)	0.9800	C(35)-O(7)-Na(6)#3	111(3)
C(59)-H(59C)	0.9800	C(36)-O(8)-C(31)	128(4)
C(60)-H(60A)	0.9800	C(42)-O(9)-C(47)	123(4)
C(60)-H(60B)	0.9800	C(45)-O(10)-C(48)	114(4)
C(60)-H(60C)	0.9800	C(45)-O(10)-Na(4)	135(3)
C(61)-C(62)	1.46(8)	C(48)-O(10)-Na(4)	111(4)
C(61)-C(70)	1.54(8)	C(26)-C(25)-C(34)	123(5)
C(62)-C(63)	1.43(7)	C(26)-C(25)-S(5)	116(4)
C(63)-C(64)	1.3900	C(34)-C(25)-S(5)	119(4)
C(63)-C(68)	1.3900	C(25)-C(26)-C(27)	118(5)
C(64)-C(65)	1.3900	C(25)-C(26)-S(6)	120(5)
C(65)-C(66)	1.3900	C(27)-C(26)-S(6)	117(4)
C(65)-H(65)	0.9500	C(28)-C(27)-C(32)	120.0

C(66)-C(67)	1.3900	C(28)-C(27)-C(26)	123(3)
C(66)-H(66)	0.9500	C(32)-C(27)-C(26)	117(3)
C(67)-C(68)	1.3900	O(7)-C(28)-C(29)	123(3)
C(68)-C(69)	1.44(7)	O(7)-C(28)-C(27)	116(3)
C(69)-C(70)	1.55(9)	C(29)-C(28)-C(27)	120.0
C(69)-H(69A)	0.9900	C(28)-C(29)-C(30)	120.0
C(69)-H(69B)	0.9900	C(28)-C(29)-H(29)	120.0
C(70)-H(70A)	0.9900	C(30)-C(29)-H(29)	120.0
C(70)-H(70B)	0.9900	C(31)-C(30)-C(29)	120.0
C(71)-H(71A)	0.9800	C(31)-C(30)-H(30)	120.0
C(71)-H(71B)	0.9800	C(29)-C(30)-H(30)	120.0
C(71)-H(71C)	0.9800	C(32)-C(31)-C(30)	120.0
C(72)-H(72A)	0.9800	C(32)-C(31)-O(8)	124(3)
C(72)-H(72B)	0.9800	C(30)-C(31)-O(8)	115(3)
C(72)-H(72C)	0.9800	C(31)-C(32)-C(27)	120.0
Mo(4)-O(16)	1.69(3)	C(31)-C(32)-C(33)	116(4)
Mo(4)-S(16)	2.358(17)	C(27)-C(32)-C(33)	123(4)
Mo(4)-S(15)	2.373(13)	C(34)-C(33)-C(32)	107(5)
Mo(4)-S(14)	2.373(14)	C(34)-C(33)-H(33A)	110.3
Mo(4)-S(13)	2.395(14)	C(32)-C(33)-H(33A)	110.3
Mo(4)-Na(5)#3	3.654(14)	C(34)-C(33)-H(33B)	110.3
Mo(4)-Na(8)#3	3.699(13)	C(32)-C(33)-H(33B)	110.3
S(13)-C(73)	1.82(6)	H(33A)-C(33)-H(33B)	108.6
S(13)-Na(3)	3.238(19)	C(25)-C(34)-C(33)	107(5)
S(14)-C(74)	1.79(5)	C(25)-C(34)-H(34A)	110.3
S(14)-Na(8)#3	3.122(19)	C(33)-C(34)-H(34A)	110.3
S(14)-Na(7)#4	3.310(17)	C(25)-C(34)-H(34B)	110.3
S(15)-C(85)	1.80(5)	C(33)-C(34)-H(34B)	110.3
S(15)-Na(5)#3	3.14(2)	H(34A)-C(34)-H(34B)	108.6
S(16)-C(86)	1.78(5)	O(7)-C(35)-H(35A)	109.5
S(16)-Na(3)	3.25(2)	O(7)-C(35)-H(35B)	109.5
S(16)-Na(6)#3	3.38(2)	H(35A)-C(35)-H(35B)	109.5

O(16)-Na(5)#3	2.78(4)	O(7)-C(35)-H(35C)	109.5
O(16)-Na(1)#3	2.87(4)	H(35A)-C(35)-H(35C)	109.5
O(16)-Na(8)#3	2.87(3)	H(35B)-C(35)-H(35C)	109.5
O(17)-C(81)	1.37(5)	O(8)-C(36)-H(36A)	109.5
O(17)-C(84)	1.54(7)	O(8)-C(36)-H(36B)	109.5
O(17)-Na(4)	2.54(4)	H(36A)-C(36)-H(36B)	109.5
O(18)-C(78)	1.30(5)	O(8)-C(36)-H(36C)	109.5
O(18)-C(83)	1.53(3)	H(36A)-C(36)-H(36C)	109.5
O(19)-C(96)	1.39(6)	H(36B)-C(36)-H(36C)	109.5
O(19)-C(91)	1.41(5)	C(38)-C(37)-C(46)	115(6)
O(20)-C(88)	1.35(5)	C(38)-C(37)-S(7)	123(5)
O(20)-C(95)	1.50(7)	C(46)-C(37)-S(7)	122(4)
O(20)-Na(6)#3	2.62(4)	C(37)-C(38)-C(39)	125(7)
C(73)-C(74)	1.30(6)	C(37)-C(38)-S(8)	119(6)
C(73)-C(82)	1.46(6)	C(39)-C(38)-S(8)	117(5)
C(74)-C(75)	1.45(6)	C(38)-C(39)-C(40)	106(5)
C(75)-C(76)	1.49(7)	C(38)-C(39)-H(39A)	110.5
C(75)-H(75A)	0.9900	C(40)-C(39)-H(39A)	110.5
C(75)-H(75B)	0.9900	C(38)-C(39)-H(39B)	110.5
C(76)-C(77)	1.41(6)	C(40)-C(39)-H(39B)	110.5
C(76)-H(76A)	0.9900	H(39A)-C(39)-H(39B)	108.6
C(76)-H(76B)	0.9900	C(41)-C(40)-C(39)	117(6)
C(77)-C(78)	1.3900	C(41)-C(40)-H(40A)	107.9
C(77)-C(82)	1.3900	C(39)-C(40)-H(40A)	107.9
C(78)-C(79)	1.3900	C(41)-C(40)-H(40B)	107.9
C(79)-C(80)	1.3900	C(39)-C(40)-H(40B)	107.9
C(79)-H(79)	0.9500	H(40A)-C(40)-H(40B)	107.2
C(80)-C(81)	1.3900	C(40)-C(41)-C(42)	117(4)
C(80)-H(80)	0.9500	C(40)-C(41)-C(46)	122(4)
C(81)-C(82)	1.3900	C(42)-C(41)-C(46)	120.0
C(83)-H(83A)	0.9800	O(9)-C(42)-C(41)	120(3)
C(83)-H(83B)	0.9800	O(9)-C(42)-C(43)	120(3)

C(83)-H(83C)	0.9800	C(41)-C(42)-C(43)	120.0
C(84)-H(84A)	0.9800	C(44)-C(43)-C(42)	120.0
C(84)-H(84B)	0.9800	C(44)-C(43)-H(43)	120.0
C(84)-H(84C)	0.9800	C(42)-C(43)-H(43)	120.0
C(85)-C(86)	1.28(6)	C(43)-C(44)-C(45)	120.0
C(85)-C(94)	1.59(7)	C(43)-C(44)-H(44)	120.0
C(86)-C(87)	1.48(6)	C(45)-C(44)-H(44)	120.0
C(87)-C(88)	1.3900	O(10)-C(45)-C(46)	114(3)
C(87)-C(92)	1.3900	O(10)-C(45)-C(44)	126(3)
C(88)-C(89)	1.3900	C(46)-C(45)-C(44)	120.0
C(89)-C(90)	1.3900	C(45)-C(46)-C(41)	120.0
C(89)-H(89)	0.9500	C(45)-C(46)-C(37)	124(3)
C(90)-C(91)	1.3900	C(41)-C(46)-C(37)	113(3)
C(90)-H(90)	0.9500	O(9)-C(47)-H(47A)	109.5
C(91)-C(92)	1.3900	O(9)-C(47)-H(47B)	109.5
C(92)-C(93)	1.39(5)	H(47A)-C(47)-H(47B)	109.5
C(93)-C(94)	1.53(7)	O(9)-C(47)-H(47C)	109.5
C(93)-H(93A)	0.9900	H(47A)-C(47)-H(47C)	109.5
C(93)-H(93B)	0.9900	H(47B)-C(47)-H(47C)	109.5
C(94)-H(94A)	0.9900	O(10)-C(48)-H(48A)	109.5
C(94)-H(94B)	0.9900	O(10)-C(48)-H(48B)	109.5
C(95)-H(95A)	0.9800	H(48A)-C(48)-H(48B)	109.5
C(95)-H(95B)	0.9800	O(10)-C(48)-H(48C)	109.5
C(95)-H(95C)	0.9800	H(48A)-C(48)-H(48C)	109.5
C(96)-H(96A)	0.9800	H(48B)-C(48)-H(48C)	109.5
C(96)-H(96B)	0.9800	O(11)-Mo(3)-S(10)	106.4(14)
C(96)-H(96C)	0.9800	O(11)-Mo(3)-S(9)	111.8(19)
Na(1)-O(16)#1	2.87(4)	S(10)-Mo(3)-S(9)	82.2(5)
Na(2)-O(11)#2	2.69(3)	O(11)-Mo(3)-S(11)	112.4(14)
Na(4)-O(1)#3	2.74(5)	S(10)-Mo(3)-S(11)	141.2(5)
Na(4)-S(3)#3	3.19(2)	S(9)-Mo(3)-S(11)	84.7(5)
Na(4)-Mo(1)#3	3.670(15)	O(11)-Mo(3)-S(12)	106.6(18)

Na(4)-Na(6)#3	3.906(17)	S(10)-Mo(3)-S(12)	85.7(5)
Na(5)-O(2)#4	2.52(4)	S(9)-Mo(3)-S(12)	141.6(6)
Na(5)-O(16)#1	2.78(4)	S(11)-Mo(3)-S(12)	82.3(6)
Na(5)-S(15)#1	3.14(2)	O(11)-Mo(3)-Na(3)	172.4(12)
Na(5)-S(1)#4	3.39(2)	S(10)-Mo(3)-Na(3)	69.2(4)
Na(5)-Mo(4)#1	3.654(14)	S(9)-Mo(3)-Na(3)	74.3(5)
Na(5)-Na(8)	3.859(17)	S(11)-Mo(3)-Na(3)	72.1(4)
Na(6)-O(20)#1	2.62(4)	S(12)-Mo(3)-Na(3)	67.4(5)
Na(6)-O(7)#1	2.73(4)	O(11)-Mo(3)-Na(8)	47.1(14)
Na(6)-O(6)#1	2.85(5)	S(10)-Mo(3)-Na(8)	59.3(4)
Na(6)-S(6)#1	3.15(2)	S(9)-Mo(3)-Na(8)	103.8(5)
Na(6)-S(16)#1	3.38(2)	S(11)-Mo(3)-Na(8)	159.4(4)
Na(6)-Mo(2)#1	3.677(15)	S(12)-Mo(3)-Na(8)	100.9(4)
Na(6)-Na(4)#1	3.906(17)	Na(3)-Mo(3)-Na(8)	128.0(3)
Na(7)-O(1)#3	2.81(3)	O(11)-Mo(3)-Na(5)	47.8(18)
Na(7)-S(11)#2	3.24(2)	S(10)-Mo(3)-Na(5)	102.3(4)
Na(7)-S(14)#2	3.310(17)	S(9)-Mo(3)-Na(5)	159.6(5)
Na(7)-S(9)#2	3.314(19)	S(11)-Mo(3)-Na(5)	102.5(5)
Na(8)-O(5)#4	2.62(5)	S(12)-Mo(3)-Na(5)	58.8(5)
Na(8)-O(16)#1	2.87(3)	Na(3)-Mo(3)-Na(5)	126.0(3)
Na(8)-S(14)#1	3.122(19)	Na(8)-Mo(3)-Na(5)	63.5(3)
Na(8)-Mo(4)#1	3.699(13)	S(12)-Mo(3A)-S(10)	87.5(11)
		S(12)-Mo(3A)-S(11)	74.1(10)
		S(10)-Mo(3A)-S(11)	116.8(11)
		C(49)-S(9)-Mo(3)	107.5(16)
		C(49)-S(9)-Na(7)#4	146.9(16)
		Mo(3)-S(9)-Na(7)#4	105.6(6)
		C(50)-S(10)-Mo(3)	106(2)
		C(50)-S(10)-Na(8)	91(2)
		Mo(3)-S(10)-Na(8)	82.0(4)
		C(61)-S(11)-Mo(3)	106(2)
		C(61)-S(11)-Na(7)#4	146(2)

Mo(3)-S(11)-Na(7)#4	107.9(6)
C(62)-S(12)-Mo(3)	105(2)
C(62)-S(12)-Na(5)	83(2)
Mo(3)-S(12)-Na(5)	81.9(5)
Mo(3)-O(11)-Na(2)#4	123.1(15)
Mo(3)-O(11)-Na(8)	105.5(16)
Na(2)#4-O(11)-Na(8)	115.5(17)
Mo(3)-O(11)-Na(5)	105(2)
Na(2)#4-O(11)-Na(5)	114.5(15)
Na(8)-O(11)-Na(5)	87.2(9)
C(60)-O(12)-C(55)	114(4)
C(52)-O(13)-C(59)	120(4)
C(52)-O(13)-Na(8)	135(3)
C(59)-O(13)-Na(8)	105(3)
C(67)-O(14)-C(72)	109(3)
C(64)-O(15)-C(71)	109(4)
C(64)-O(15)-Na(5)	134(2)
C(71)-O(15)-Na(5)	116(3)
C(50)-C(49)-C(58)	124(5)
C(50)-C(49)-S(9)	115(4)
C(58)-C(49)-S(9)	120(3)
C(49)-C(50)-C(51)	114(5)
C(49)-C(50)-S(10)	122(4)
C(51)-C(50)-S(10)	123(4)
C(52)-C(51)-C(56)	120.0
C(52)-C(51)-C(50)	119(4)
C(56)-C(51)-C(50)	120(4)
O(13)-C(52)-C(53)	120(4)
O(13)-C(52)-C(51)	120(4)
C(53)-C(52)-C(51)	120.0
C(52)-C(53)-C(54)	120.0
C(52)-C(53)-H(53)	120.0

C(54)-C(53)-H(53)	120.0
C(55)-C(54)-C(53)	120.0
C(55)-C(54)-H(54)	120.0
C(53)-C(54)-H(54)	120.0
C(54)-C(55)-C(56)	120.0
C(54)-C(55)-O(12)	124(3)
C(56)-C(55)-O(12)	116(3)
C(55)-C(56)-C(51)	120.0
C(55)-C(56)-C(57)	122(5)
C(51)-C(56)-C(57)	117(5)
C(56)-C(57)-C(58)	117(7)
C(56)-C(57)-H(57A)	108.0
C(58)-C(57)-H(57A)	108.0
C(56)-C(57)-H(57B)	108.0
C(58)-C(57)-H(57B)	108.0
H(57A)-C(57)-H(57B)	107.3
C(49)-C(58)-C(57)	108(5)
C(49)-C(58)-H(58A)	110.1
C(57)-C(58)-H(58A)	110.1
C(49)-C(58)-H(58B)	110.1
C(57)-C(58)-H(58B)	110.1
H(58A)-C(58)-H(58B)	108.5
O(13)-C(59)-H(59A)	109.5
O(13)-C(59)-H(59B)	109.5
H(59A)-C(59)-H(59B)	109.5
O(13)-C(59)-H(59C)	109.5
H(59A)-C(59)-H(59C)	109.5
H(59B)-C(59)-H(59C)	109.5
O(12)-C(60)-H(60A)	109.5
O(12)-C(60)-H(60B)	109.5
H(60A)-C(60)-H(60B)	109.5
O(12)-C(60)-H(60C)	109.5

H(60A)-C(60)-H(60C)	109.5
H(60B)-C(60)-H(60C)	109.5
C(62)-C(61)-C(70)	110(5)
C(62)-C(61)-S(11)	128(5)
C(70)-C(61)-S(11)	122(4)
C(63)-C(62)-C(61)	123(6)
C(63)-C(62)-S(12)	124(4)
C(61)-C(62)-S(12)	108(5)
C(64)-C(63)-C(68)	120.0
C(64)-C(63)-C(62)	119(4)
C(68)-C(63)-C(62)	121(4)
O(15)-C(64)-C(65)	121(3)
O(15)-C(64)-C(63)	118(3)
C(65)-C(64)-C(63)	120.0
C(64)-C(65)-C(66)	120.0
C(64)-C(65)-H(65)	120.0
C(66)-C(65)-H(65)	120.0
C(65)-C(66)-C(67)	120.0
C(65)-C(66)-H(66)	120.0
C(67)-C(66)-H(66)	120.0
O(14)-C(67)-C(68)	119(3)
O(14)-C(67)-C(66)	120(3)
C(68)-C(67)-C(66)	120.0
C(67)-C(68)-C(63)	120.0
C(67)-C(68)-C(69)	119(4)
C(63)-C(68)-C(69)	121(4)
C(68)-C(69)-C(70)	112(6)
C(68)-C(69)-H(69A)	109.2
C(70)-C(69)-H(69A)	109.2
C(68)-C(69)-H(69B)	109.2
C(70)-C(69)-H(69B)	109.2
H(69A)-C(69)-H(69B)	107.9

C(61)-C(70)-C(69)	115(5)
C(61)-C(70)-H(70A)	108.6
C(69)-C(70)-H(70A)	108.6
C(61)-C(70)-H(70B)	108.6
C(69)-C(70)-H(70B)	108.6
H(70A)-C(70)-H(70B)	107.5
O(15)-C(71)-H(71A)	109.5
O(15)-C(71)-H(71B)	109.5
H(71A)-C(71)-H(71B)	109.5
O(15)-C(71)-H(71C)	109.5
H(71A)-C(71)-H(71C)	109.5
H(71B)-C(71)-H(71C)	109.5
O(14)-C(72)-H(72A)	109.5
O(14)-C(72)-H(72B)	109.5
H(72A)-C(72)-H(72B)	109.5
O(14)-C(72)-H(72C)	109.5
H(72A)-C(72)-H(72C)	109.5
H(72B)-C(72)-H(72C)	109.5
O(16)-Mo(4)-S(16)	111.9(12)
O(16)-Mo(4)-S(15)	104.8(12)
S(16)-Mo(4)-S(15)	83.1(5)
O(16)-Mo(4)-S(14)	105.5(12)
S(16)-Mo(4)-S(14)	142.6(5)
S(15)-Mo(4)-S(14)	87.2(4)
O(16)-Mo(4)-S(13)	111.7(12)
S(16)-Mo(4)-S(13)	84.5(4)
S(15)-Mo(4)-S(13)	143.5(5)
S(14)-Mo(4)-S(13)	82.1(5)
O(16)-Mo(4)-Na(5)#3	46.6(12)
S(16)-Mo(4)-Na(5)#3	105.7(5)
S(15)-Mo(4)-Na(5)#3	58.2(4)
S(14)-Mo(4)-Na(5)#3	99.5(4)

S(13)-Mo(4)-Na(5)#3	158.1(4)
O(16)-Mo(4)-Na(8)#3	48.5(11)
S(16)-Mo(4)-Na(8)#3	160.4(5)
S(15)-Mo(4)-Na(8)#3	102.2(4)
S(14)-Mo(4)-Na(8)#3	57.0(4)
S(13)-Mo(4)-Na(8)#3	100.9(4)
Na(5)#3-Mo(4)-Na(8)#3	63.3(3)
C(73)-S(13)-Mo(4)	105.3(19)
C(73)-S(13)-Na(3)	111.6(19)
Mo(4)-S(13)-Na(3)	88.7(5)
C(74)-S(14)-Mo(4)	105.6(16)
C(74)-S(14)-Na(8)#3	88.4(17)
Mo(4)-S(14)-Na(8)#3	83.4(5)
C(74)-S(14)-Na(7)#4	132.7(17)
Mo(4)-S(14)-Na(7)#4	105.6(5)
Na(8)#3-S(14)-Na(7)#4	129.7(5)
C(85)-S(15)-Mo(4)	103.5(15)
C(85)-S(15)-Na(5)#3	95.4(16)
Mo(4)-S(15)-Na(5)#3	81.8(4)
C(86)-S(16)-Mo(4)	105.4(17)
C(86)-S(16)-Na(3)	114.0(18)
Mo(4)-S(16)-Na(3)	89.2(6)
C(86)-S(16)-Na(6)#3	113.6(17)
Mo(4)-S(16)-Na(6)#3	138.3(6)
Na(3)-S(16)-Na(6)#3	88.1(5)
Mo(4)-O(16)-Na(5)#3	107.3(17)
Mo(4)-O(16)-Na(1)#3	131.3(18)
Na(5)#3-O(16)-Na(1)#3	110.1(11)
Mo(4)-O(16)-Na(8)#3	105.4(15)
Na(5)#3-O(16)-Na(8)#3	86.0(10)
Na(1)#3-O(16)-Na(8)#3	107.2(11)
C(81)-O(17)-C(84)	102(4)

C(81)-O(17)-Na(4)	127(3)
C(84)-O(17)-Na(4)	126(3)
C(78)-O(18)-C(83)	114(4)
C(96)-O(19)-C(91)	115(4)
C(88)-O(20)-C(95)	114(4)
C(88)-O(20)-Na(6)#3	117(3)
C(95)-O(20)-Na(6)#3	125(3)
C(74)-C(73)-C(82)	120(5)
C(74)-C(73)-S(13)	120(4)
C(82)-C(73)-S(13)	118(4)
C(73)-C(74)-C(75)	120(5)
C(73)-C(74)-S(14)	120(4)
C(75)-C(74)-S(14)	120(3)
C(74)-C(75)-C(76)	109(4)
C(74)-C(75)-H(75A)	109.8
C(76)-C(75)-H(75A)	109.8
C(74)-C(75)-H(75B)	109.8
C(76)-C(75)-H(75B)	109.8
H(75A)-C(75)-H(75B)	108.2
C(77)-C(76)-C(75)	113(5)
C(77)-C(76)-H(76A)	109.0
C(75)-C(76)-H(76A)	109.0
C(77)-C(76)-H(76B)	109.0
C(75)-C(76)-H(76B)	109.0
H(76A)-C(76)-H(76B)	107.8
C(78)-C(77)-C(82)	120.0
C(78)-C(77)-C(76)	118(4)
C(82)-C(77)-C(76)	121(4)
O(18)-C(78)-C(79)	116(3)
O(18)-C(78)-C(77)	123(3)
C(79)-C(78)-C(77)	120.0
C(80)-C(79)-C(78)	120.0

C(80)-C(79)-H(79)	120.0
C(78)-C(79)-H(79)	120.0
C(81)-C(80)-C(79)	120.0
C(81)-C(80)-H(80)	120.0
C(79)-C(80)-H(80)	120.0
O(17)-C(81)-C(80)	111(3)
O(17)-C(81)-C(82)	128(3)
C(80)-C(81)-C(82)	120.0
C(81)-C(82)-C(77)	120.0
C(81)-C(82)-C(73)	125(3)
C(77)-C(82)-C(73)	115(3)
O(18)-C(83)-H(83A)	109.5
O(18)-C(83)-H(83B)	109.5
H(83A)-C(83)-H(83B)	109.5
O(18)-C(83)-H(83C)	109.5
H(83A)-C(83)-H(83C)	109.5
H(83B)-C(83)-H(83C)	109.5
O(17)-C(84)-H(84A)	109.5
O(17)-C(84)-H(84B)	109.5
H(84A)-C(84)-H(84B)	109.5
O(17)-C(84)-H(84C)	109.5
H(84A)-C(84)-H(84C)	109.5
H(84B)-C(84)-H(84C)	109.5
C(86)-C(85)-C(94)	121(4)
C(86)-C(85)-S(15)	122(4)
C(94)-C(85)-S(15)	117(3)
C(85)-C(86)-C(87)	119(4)
C(85)-C(86)-S(16)	121(4)
C(87)-C(86)-S(16)	120(3)
C(88)-C(87)-C(92)	120.0
C(88)-C(87)-C(86)	124(3)

C(92)-C(87)-C(86)	115(3)
O(20)-C(88)-C(87)	126(3)
O(20)-C(88)-C(89)	114(3)
C(87)-C(88)-C(89)	120.0
C(90)-C(89)-C(88)	120.0
C(90)-C(89)-H(89)	120.0
C(88)-C(89)-H(89)	120.0
C(89)-C(90)-C(91)	120.0
C(89)-C(90)-H(90)	120.0
C(91)-C(90)-H(90)	120.0
C(92)-C(91)-C(90)	120.0
C(92)-C(91)-O(19)	118(3)
C(90)-C(91)-O(19)	121(3)
C(93)-C(92)-C(91)	117(3)
C(93)-C(92)-C(87)	123(3)
C(91)-C(92)-C(87)	120.0
C(92)-C(93)-C(94)	113(4)
C(92)-C(93)-H(93A)	108.9
C(94)-C(93)-H(93A)	108.9
C(92)-C(93)-H(93B)	108.9
C(94)-C(93)-H(93B)	108.9
H(93A)-C(93)-H(93B)	107.7
C(93)-C(94)-C(85)	107(4)
C(93)-C(94)-H(94A)	110.3
C(85)-C(94)-H(94A)	110.3
C(93)-C(94)-H(94B)	110.3
C(85)-C(94)-H(94B)	110.3
H(94A)-C(94)-H(94B)	108.6
O(20)-C(95)-H(95A)	109.5
O(20)-C(95)-H(95B)	109.5
H(95A)-C(95)-H(95B)	109.5
O(20)-C(95)-H(95C)	109.5

H(95A)-C(95)-H(95C)	109.5
H(95B)-C(95)-H(95C)	109.5
O(19)-C(96)-H(96A)	109.5
O(19)-C(96)-H(96B)	109.5
H(96A)-C(96)-H(96B)	109.5
O(19)-C(96)-H(96C)	109.5
H(96A)-C(96)-H(96C)	109.5
H(96B)-C(96)-H(96C)	109.5
O(16)#1-Na(1)-S(8)	149.5(8)
O(16)#1-Na(1)-S(5)	146.7(8)
S(8)-Na(1)-S(5)	58.8(4)
O(16)#1-Na(1)-S(2)	100.1(7)
S(8)-Na(1)-S(2)	103.6(5)
S(5)-Na(1)-S(2)	77.4(5)
O(11)#2-Na(2)-S(1)	77.9(10)
O(11)#2-Na(2)-S(4)	78.8(9)
S(1)-Na(2)-S(4)	59.6(4)
O(11)#2-Na(2)-Mo(2)	143.2(8)
S(1)-Na(2)-Mo(2)	130.3(5)
S(4)-Na(2)-Mo(2)	133.2(5)
O(6)-Na(3)-S(13)	79.5(8)
O(6)-Na(3)-S(16)	79.7(10)
S(13)-Na(3)-S(16)	59.1(4)
O(6)-Na(3)-Mo(3)	142.7(7)
S(13)-Na(3)-Mo(3)	130.1(5)
S(16)-Na(3)-Mo(3)	132.2(5)
O(17)-Na(4)-O(1)#3	179.0(13)
O(17)-Na(4)-O(6)	91.3(14)
O(1)#3-Na(4)-O(6)	88.8(13)
O(17)-Na(4)-O(10)	91.5(14)
O(1)#3-Na(4)-O(10)	89.3(11)
O(6)-Na(4)-O(10)	124.2(12)

O(17)-Na(4)-S(7)	101.0(11)
O(1)#3-Na(4)-S(7)	79.9(8)
O(6)-Na(4)-S(7)	66.0(7)
O(10)-Na(4)-S(7)	58.8(9)
O(17)-Na(4)-S(3)#3	112.2(11)
O(1)#3-Na(4)-S(3)#3	67.0(8)
O(6)-Na(4)-S(3)#3	125.1(10)
O(10)-Na(4)-S(3)#3	104.8(10)
S(7)-Na(4)-S(3)#3	143.7(6)
O(17)-Na(4)-Mo(2)	96.4(11)
O(1)#3-Na(4)-Mo(2)	84.1(8)
O(6)-Na(4)-Mo(2)	26.8(6)
O(10)-Na(4)-Mo(2)	97.7(9)
S(7)-Na(4)-Mo(2)	39.2(3)
S(3)#3-Na(4)-Mo(2)	142.7(6)
O(17)-Na(4)-Mo(1)#3	152.0(11)
O(1)#3-Na(4)-Mo(1)#3	27.2(7)
O(6)-Na(4)-Mo(1)#3	105.2(11)
O(10)-Na(4)-Mo(1)#3	97.4(10)
S(7)-Na(4)-Mo(1)#3	106.4(5)
S(3)#3-Na(4)-Mo(1)#3	39.8(3)
Mo(2)-Na(4)-Mo(1)#3	108.6(4)
O(17)-Na(4)-Na(6)#3	132.1(11)
O(1)#3-Na(4)-Na(6)#3	47.6(7)
O(6)-Na(4)-Na(6)#3	46.9(11)
O(10)-Na(4)-Na(6)#3	128.7(10)
S(7)-Na(4)-Na(6)#3	83.8(5)
S(3)#3-Na(4)-Na(6)#3	84.6(5)
Mo(2)-Na(4)-Na(6)#3	58.1(3)
Mo(1)#3-Na(4)-Na(6)#3	58.4(3)
O(2)#4-Na(5)-O(15)	92.4(12)
O(2)#4-Na(5)-O(16)#1	177.8(13)

O(15)-Na(5)-O(16)#1	89.7(11)
O(2)#4-Na(5)-O(11)	90.1(12)
O(15)-Na(5)-O(11)	124.9(12)
O(16)#1-Na(5)-O(11)	89.2(11)
O(2)#4-Na(5)-S(15)#1	112.7(10)
O(15)-Na(5)-S(15)#1	103.5(9)
O(16)#1-Na(5)-S(15)#1	66.1(8)
O(11)-Na(5)-S(15)#1	125.7(10)
O(2)#4-Na(5)-S(12)	100.9(10)
O(15)-Na(5)-S(12)	58.8(9)
O(16)#1-Na(5)-S(12)	80.8(8)
O(11)-Na(5)-S(12)	66.7(8)
S(15)#1-Na(5)-S(12)	143.1(6)
O(2)#4-Na(5)-S(1)#4	58.4(9)
O(15)-Na(5)-S(1)#4	147.2(9)
O(16)#1-Na(5)-S(1)#4	119.4(9)
O(11)-Na(5)-S(1)#4	74.0(7)
S(15)#1-Na(5)-S(1)#4	77.8(5)
S(12)-Na(5)-S(1)#4	135.5(6)
O(2)#4-Na(5)-Mo(4)#1	152.6(10)
O(15)-Na(5)-Mo(4)#1	97.2(8)
O(16)#1-Na(5)-Mo(4)#1	26.1(7)
O(11)-Na(5)-Mo(4)#1	105.0(10)
S(15)#1-Na(5)-Mo(4)#1	40.0(3)
S(12)-Na(5)-Mo(4)#1	106.1(4)
S(1)#4-Na(5)-Mo(4)#1	103.3(5)
O(2)#4-Na(5)-Mo(3)	94.9(9)
O(15)-Na(5)-Mo(3)	97.7(9)
O(16)#1-Na(5)-Mo(3)	85.4(7)
O(11)-Na(5)-Mo(3)	27.4(7)
S(15)#1-Na(5)-Mo(3)	143.9(5)
S(12)-Na(5)-Mo(3)	39.4(3)

S(1)#4-Na(5)-Mo(3)	99.4(4)
Mo(4)#1-Na(5)-Mo(3)	109.0(4)
O(2)#4-Na(5)-Na(8)	130.5(10)
O(15)-Na(5)-Na(8)	128.8(9)
O(16)#1-Na(5)-Na(8)	48.0(7)
O(11)-Na(5)-Na(8)	46.1(9)
S(15)#1-Na(5)-Na(8)	85.9(5)
S(12)-Na(5)-Na(8)	83.5(5)
S(1)#4-Na(5)-Na(8)	84.0(5)
Mo(4)#1-Na(5)-Na(8)	58.9(3)
Mo(3)-Na(5)-Na(8)	58.1(3)
O(20)#1-Na(6)-O(7)#1	93.4(13)
O(20)#1-Na(6)-O(6)#1	87.5(13)
O(7)#1-Na(6)-O(6)#1	123.7(11)
O(20)#1-Na(6)-O(1)	172.4(14)
O(7)#1-Na(6)-O(1)	90.7(13)
O(6)#1-Na(6)-O(1)	84.9(13)
O(20)#1-Na(6)-S(2)	117.7(10)
O(7)#1-Na(6)-S(2)	106.2(10)
O(6)#1-Na(6)-S(2)	122.8(9)
O(1)-Na(6)-S(2)	67.0(7)
O(20)#1-Na(6)-S(6)#1	98.5(10)
O(7)#1-Na(6)-S(6)#1	58.2(9)
O(6)#1-Na(6)-S(6)#1	66.0(7)
O(1)-Na(6)-S(6)#1	78.3(7)
S(2)-Na(6)-S(6)#1	142.1(6)
O(20)#1-Na(6)-S(16)#1	59.4(9)
O(7)#1-Na(6)-S(16)#1	148.1(10)
O(6)#1-Na(6)-S(16)#1	75.1(7)
O(1)-Na(6)-S(16)#1	118.3(9)
S(2)-Na(6)-S(16)#1	76.5(5)
S(6)#1-Na(6)-S(16)#1	136.2(6)

O(20)#1-Na(6)-Mo(2)#1	91.5(10)
O(7)#1-Na(6)-Mo(2)#1	97.0(9)
O(6)#1-Na(6)-Mo(2)#1	26.7(5)
O(1)-Na(6)-Mo(2)#1	81.7(8)
S(2)-Na(6)-Mo(2)#1	140.6(5)
S(6)#1-Na(6)-Mo(2)#1	39.3(4)
S(16)#1-Na(6)-Mo(2)#1	99.8(5)
O(20)#1-Na(6)-Mo(1)	157.0(10)
O(7)#1-Na(6)-Mo(1)	97.4(9)
O(6)#1-Na(6)-Mo(1)	103.1(9)
O(1)-Na(6)-Mo(1)	27.5(7)
S(2)-Na(6)-Mo(1)	39.5(3)
S(6)#1-Na(6)-Mo(1)	104.5(5)
S(16)#1-Na(6)-Mo(1)	103.1(4)
Mo(2)#1-Na(6)-Mo(1)	107.2(3)
O(20)#1-Na(6)-Na(4)#1	128.4(11)
O(7)#1-Na(6)-Na(4)#1	127.2(10)
O(6)#1-Na(6)-Na(4)#1	45.6(9)
O(1)-Na(6)-Na(4)#1	44.6(10)
S(2)-Na(6)-Na(4)#1	83.3(4)
S(6)#1-Na(6)-Na(4)#1	82.3(5)
S(16)#1-Na(6)-Na(4)#1	84.6(4)
Mo(2)#1-Na(6)-Na(4)#1	57.4(3)
Mo(1)-Na(6)-Na(4)#1	57.6(3)
O(1)#3-Na(7)-S(11)#2	148.8(9)
O(1)#3-Na(7)-S(14)#2	103.3(8)
S(11)#2-Na(7)-S(14)#2	104.0(5)
O(1)#3-Na(7)-S(9)#2	144.3(11)
S(11)#2-Na(7)-S(9)#2	57.5(4)
S(14)#2-Na(7)-S(9)#2	78.3(4)
O(1)#3-Na(7)-S(6)	75.4(8)
S(11)#2-Na(7)-S(6)	77.0(5)

S(14)#2-Na(7)-S(6)	178.1(6)
S(9)#2-Na(7)-S(6)	103.6(5)
O(5)#4-Na(8)-O(11)	93.8(15)
O(5)#4-Na(8)-O(13)	90.4(14)
O(11)-Na(8)-O(13)	122.1(12)
O(5)#4-Na(8)-O(16)#1	175.3(13)
O(11)-Na(8)-O(16)#1	87.9(13)
O(13)-Na(8)-O(16)#1	92.4(12)
O(5)#4-Na(8)-S(14)#1	109.9(11)
O(11)-Na(8)-S(14)#1	123.3(10)
O(13)-Na(8)-S(14)#1	108.8(10)
O(16)#1-Na(8)-S(14)#1	65.6(7)
O(5)#4-Na(8)-S(10)	102.7(11)
O(11)-Na(8)-S(10)	66.1(7)
O(13)-Na(8)-S(10)	56.8(10)
O(16)#1-Na(8)-S(10)	82.0(8)
S(14)#1-Na(8)-S(10)	144.7(5)
O(5)#4-Na(8)-Mo(3)	99.2(10)
O(11)-Na(8)-Mo(3)	27.4(6)
O(13)-Na(8)-Mo(3)	95.1(10)
O(16)#1-Na(8)-Mo(3)	84.3(7)
S(14)#1-Na(8)-Mo(3)	141.6(5)
S(10)-Na(8)-Mo(3)	38.7(3)
O(5)#4-Na(8)-Mo(4)#1	149.5(11)
O(11)-Na(8)-Mo(4)#1	104.4(12)
O(13)-Na(8)-Mo(4)#1	99.9(9)
O(16)#1-Na(8)-Mo(4)#1	26.1(7)
S(14)#1-Na(8)-Mo(4)#1	39.6(3)
S(10)-Na(8)-Mo(4)#1	107.0(4)
Mo(3)-Na(8)-Mo(4)#1	108.3(4)
O(5)#4-Na(8)-Na(5)	133.7(11)
O(11)-Na(8)-Na(5)	46.7(12)

O(13)-Na(8)-Na(5)	128.3(10)
O(16)#1-Na(8)-Na(5)	46.0(7)
S(14)#1-Na(8)-Na(5)	83.3(5)
S(10)-Na(8)-Na(5)	84.0(5)
Mo(3)-Na(8)-Na(5)	58.4(3)
Mo(4)#1-Na(8)-Na(5)	57.8(3)

Tab. 74. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **35**.

Anhang

	x	y	z	U (eq)
Mo(1)	202(2)	3103(1)	4291(1)	34(1)
Mo(2)	1055(2)	1853(1)	5748(1)	34(1)
S(1)	3183(5)	2617(3)	5011(2)	37(1)
O(1)	94(11)	4247(8)	4495(6)	42(3)
O(2)	-1244(11)	2773(8)	3899(5)	40(3)
O(3)	19(10)	2081(7)	6178(5)	37(3)
O(4)	790(11)	712(7)	5508(5)	38(3)
O(5)	2466(11)	1545(8)	6501(5)	37(3)
O(6)	4101(14)	1951(9)	7247(6)	68(5)
O(7)	1873(14)	3065(9)	2832(6)	54(4)
O(8)	716(10)	3404(7)	3491(5)	33(3)
O(9)	280(10)	2501(7)	5036(5)	35(3)
O(10)	2168(9)	3156(8)	4633(5)	36(3)
O(11)	2609(10)	1918(8)	5347(5)	39(3)
O(12)	3795(15)	2119(11)	4616(8)	77(5)
O(13)	3947(12)	3240(11)	5448(6)	70(5)
N(1)	1988(12)	3263(11)	6216(6)	36(4)
N(2)	3266(13)	4794(10)	6933(7)	43(4)
N(3)	804(14)	1726(10)	3832(6)	38(2)
N(4)	1497(14)	226(10)	3162(6)	38(2)
C(1)	3221(17)	2152(14)	6836(8)	47(5)
C(2)	2966(18)	3125(14)	6718(8)	43(5)
C(3)	1710(19)	4158(12)	6092(9)	39(5)
C(4)	2308(18)	4877(13)	6428(8)	41(5)
C(5)	3578(19)	3894(13)	7057(10)	51(6)
C(6)	1344(19)	2825(13)	3210(9)	42(5)
C(7)	1228(17)	1845(12)	3392(8)	38(2)
C(8)	678(17)	797(12)	3999(8)	38(2)
C(9)	1074(17)	125(12)	3625(7)	38(2)
C(10)	1597(17)	1081(12)	2995(8)	38(2)
Mo(3)	6050(2)	1856(1)	10747(1)	28(1)

Anhang

Mo(4)	10747(1)	2519(17)	9286(1)	28(1)
S(2)	8187(4)	2602(4)	10010(2)	37(1)
O(14)	5034(13)	2055(8)	11186(5)	46(3)
O(15)	5808(13)	703(8)	10522(5)	46(3)
O(16)	5109(11)	4262(8)	9481(5)	36(3)
O(17)	3721(13)	2810(8)	8904(6)	48(3)
O(18)	7452(11)	1549(7)	11498(5)	36(3)
O(19)	9132(14)	1932(8)	12251(6)	56(4)
O(20)	5750(12)	3406(8)	8504(5)	40(3)
O(21)	6864(14)	3073(9)	7826(6)	52(4)
O(22)	5254(10)	2499(9)	10042(6)	42(3)
O(23)	7187(11)	3141(8)	9624(6)	44(3)
O(24)	7619(11)	1920(8)	10344(5)	37(3)
O(25)	8801(15)	2090(11)	9598(7)	73(5)
O(26)	8956(13)	3257(11)	10455(6)	71(5)
N(5)	6993(13)	3261(8)	11216(6)	28(3)
N(6)	8274(16)	4770(10)	11937(7)	47(5)
N(7)	5795(12)	1653(8)	8851(6)	29(2)
N(8)	6595(14)	193(11)	8200(7)	44(3)
C(11)	8242(18)	2146(12)	11857(8)	38(5)
C(12)	7923(16)	3144(11)	11699(8)	32(4)
C(13)	6679(16)	4141(12)	11062(8)	33(4)
C(14)	7321(17)	4896(11)	11460(8)	35(4)
C(15)	8557(16)	3891(12)	12062(7)	38(5)
C(16)	6326(17)	2827(12)	8194(8)	34(4)
C(17)	6290(15)	1822(12)	8348(7)	32(3)
C(18)	5762(16)	829(12)	8986(9)	40(3)
C(19)	6058(15)	45(9)	8689(7)	33(3)
C(20)	6690(15)	1103(13)	8058(8)	39(3)
N(30)	4020(12)	9010(8)	6240(6)	31(3)
C(31)	3503(18)	8486(13)	5671(8)	68(5)
C(32)	2519(17)	8982(15)	5208(9)	63(6)

Anhang

C(33)	3040(20)	9089(13)	6635(9)	72(3)
C(34)	3520(30)	9470(20)	7255(13)	72(3)
C(34A)	3460(50)	8780(30)	7257(14)	72(3)
C(35)	5080(20)	8563(16)	6584(10)	103(10)
C(36)	5100(30)	7591(14)	6769(15)	119(11)
C(37)	4300(20)	10036(12)	6133(10)	72(3)
C(38)	5220(40)	10600(30)	6010(20)	72(3)
C(38A)	5220(30)	10040(20)	5784(16)	72(3)
N(40)	2781(16)	5884(10)	3911(7)	41(4)
C(41)	3110(20)	4894(13)	3863(10)	53(6)
C(42)	4500(20)	4672(17)	4102(13)	83(8)
C(43)	3060(20)	6222(12)	4585(7)	44(5)
C(44)	2608(18)	5674(11)	5036(9)	49(5)
C(45)	1354(18)	5924(15)	3654(7)	49(5)
C(46)	980(20)	5661(17)	2966(9)	66(6)
C(47)	3370(20)	6518(14)	3593(10)	65(7)
C(48)	2990(20)	7477(15)	3536(10)	80(8)
N(50)	2290(14)	4102(10)	1117(7)	37(4)
C(51)	1995(17)	3715(13)	442(8)	45(5)
C(52)	2450(20)	4306(17)	6(9)	68(7)
C(53)	1580(17)	3555(11)	1473(7)	39(4)
C(54)	1940(30)	2490(12)	1464(11)	82(9)
C(55)	3629(17)	4101(12)	1405(10)	56(6)
C(56)	4110(20)	4316(16)	2045(11)	80(9)
C(57)	1903(17)	5120(12)	1163(8)	42(5)
C(58)	575(17)	5281(16)	900(9)	63(6)
N(60)	961(15)	968(11)	8679(7)	47(3)
C(61)	0(20)	532(14)	8899(9)	110(7)
C(63)	-120(20)	-324(16)	9089(15)	128(13)
C(64)	2136(18)	818(13)	9110(8)	97(6)
C(65)	2470(20)	1062(18)	9746(9)	84(8)
C(66)	751(17)	2004(12)	8700(9)	73(4)

C(67)	-100(30)	2400(20)	8236(12)	143(15)
C(68)	960(20)	674(16)	8067(7)	100(7)
C(69)	1630(30)	830(30)	7663(11)	180(20)
O(101)	4751(6)	6870(4)	5723(3)	14(1)
O(102)	4030(6)	8133(5)	4277(3)	17(1)

Tab. 75. Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotropen Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für **40**.
U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	Bindungslänge Å		Winkel °
Mo(1)-O(1)	1.691(12)	O(1)-Mo(1)-O(2)	104.7(6)
Mo(1)-O(2)	1.691(11)	O(1)-Mo(1)-O(9)	103.7(5)
Mo(1)-O(9)	1.882(11)	O(2)-Mo(1)-O(9)	98.7(5)
Mo(1)-O(8)	2.060(11)	O(1)-Mo(1)-O(8)	92.5(5)
Mo(1)-O(10)	2.145(10)	O(2)-Mo(1)-O(8)	93.5(5)
Mo(1)-N(3)	2.351(15)	O(9)-Mo(1)-O(8)	156.4(5)
Mo(2)-O(4)	1.694(10)	O(1)-Mo(1)-O(10)	91.6(5)
Mo(2)-O(3)	1.698(11)	O(2)-Mo(1)-O(10)	162.5(5)
Mo(2)-O(9)	1.888(10)	O(9)-Mo(1)-O(10)	83.2(4)
Mo(2)-O(5)	2.058(11)	O(8)-Mo(1)-O(10)	79.3(4)
Mo(2)-O(11)	2.150(12)	O(1)-Mo(1)-N(3)	160.8(6)
Mo(2)-N(1)	2.342(15)	O(2)-Mo(1)-N(3)	85.1(5)
S(1)-O(13)	1.400(13)	O(9)-Mo(1)-N(3)	90.7(5)
S(1)-O(12)	1.408(14)	O(8)-Mo(1)-N(3)	70.2(5)
S(1)-O(10)	1.478(11)	O(10)-Mo(1)-N(3)	77.5(5)
S(1)-O(11)	1.510(12)	O(4)-Mo(2)-O(3)	104.0(6)
O(5)-C(1)	1.281(19)	O(4)-Mo(2)-O(9)	103.7(5)
O(6)-C(1)	1.211(19)	O(3)-Mo(2)-O(9)	98.1(5)
O(7)-C(6)	1.20(2)	O(4)-Mo(2)-O(5)	92.8(5)
O(8)-C(6)	1.32(2)	O(3)-Mo(2)-O(5)	94.9(5)
N(1)-C(3)	1.35(2)	O(9)-Mo(2)-O(5)	155.7(5)
N(1)-C(2)	1.37(2)	O(4)-Mo(2)-O(11)	91.5(5)
N(2)-C(4)	1.35(2)	O(3)-Mo(2)-O(11)	163.7(5)
N(2)-C(5)	1.36(2)	O(9)-Mo(2)-O(11)	82.7(5)
N(3)-C(7)	1.20(2)	O(5)-Mo(2)-O(11)	79.1(5)
N(3)-C(8)	1.42(2)	O(4)-Mo(2)-N(1)	163.3(5)
N(4)-C(9)	1.25(2)	O(3)-Mo(2)-N(1)	84.6(5)
N(4)-C(10)	1.31(2)	O(9)-Mo(2)-N(1)	88.9(5)
C(1)-C(2)	1.45(3)	O(5)-Mo(2)-N(1)	71.9(5)
C(2)-C(5)	1.38(2)	O(11)-Mo(2)-N(1)	79.1(5)

Anhang

C(3)-C(4)	1.32(2)	O(13)-S(1)-O(12)	114.0(10)
C(6)-C(7)	1.49(2)	O(13)-S(1)-O(10)	108.0(8)
C(7)-C(10)	1.49(2)	O(12)-S(1)-O(10)	109.8(8)
C(8)-C(9)	1.38(2)	O(13)-S(1)-O(11)	109.6(8)
Mo(3)-O(14)	1.690(13)	O(12)-S(1)-O(11)	108.2(8)
Mo(3)-O(15)	1.701(12)	O(10)-S(1)-O(11)	107.1(7)
Mo(3)-O(22)	1.879(14)	C(1)-O(5)-Mo(2)	124.3(11)
Mo(3)-O(18)	2.050(10)	C(6)-O(8)-Mo(1)	123.3(10)
Mo(3)-O(24)	2.166(12)	Mo(1)-O(9)-Mo(2)	155.4(6)
Mo(3)-N(5)	2.342(11)	S(1)-O(10)-Mo(1)	140.3(7)
Mo(4)-O(16)	1.702(11)	S(1)-O(11)-Mo(2)	137.4(7)
Mo(4)-O(17)	1.707(13)	C(3)-N(1)-C(2)	116.1(16)
Mo(4)-O(22)	1.911(14)	C(3)-N(1)-Mo(2)	131.6(11)
Mo(4)-O(20)	2.041(12)	C(2)-N(1)-Mo(2)	112.2(12)
Mo(4)-O(23)	2.163(12)	C(4)-N(2)-C(5)	113.7(16)
Mo(4)-N(7)	2.412(12)	C(7)-N(3)-C(8)	118.0(17)
S(2)-O(26)	1.440(13)	C(7)-N(3)-Mo(1)	114.6(13)
S(2)-O(25)	1.447(13)	C(8)-N(3)-Mo(1)	127.4(13)
S(2)-O(23)	1.474(12)	C(9)-N(4)-C(10)	117.2(17)
S(2)-O(24)	1.487(12)	O(6)-C(1)-O(5)	123.4(19)
O(18)-C(11)	1.31(2)	O(6)-C(1)-C(2)	119.5(17)
O(19)-C(11)	1.20(2)	O(5)-C(1)-C(2)	117.0(16)
O(20)-C(16)	1.320(19)	N(1)-C(2)-C(5)	118.9(18)
O(21)-C(16)	1.19(2)	N(1)-C(2)-C(1)	114.1(16)
N(5)-C(12)	1.31(2)	C(5)-C(2)-C(1)	127.0(17)
N(5)-C(13)	1.35(2)	C(4)-C(3)-N(1)	123.4(19)
N(6)-C(14)	1.32(2)	C(3)-C(4)-N(2)	123.7(19)
N(6)-C(15)	1.33(2)	N(2)-C(5)-C(2)	124.1(18)
N(7)-C(18)	1.23(2)	O(7)-C(6)-O(8)	123.2(18)
N(7)-C(17)	1.395(19)	O(7)-C(6)-C(7)	125.6(19)
N(8)-C(20)	1.37(2)	O(8)-C(6)-C(7)	111.0(16)
N(8)-C(19)	1.39(2)	N(3)-C(7)-C(10)	124.9(17)

Anhang

C(11)-C(12)	1.51(2)	N(3)-C(7)-C(6)	117.9(18)
C(12)-C(15)	1.386(19)	C(10)-C(7)-C(6)	117.1(17)
C(13)-C(14)	1.43(2)	C(9)-C(8)-N(3)	114.2(17)
C(16)-C(17)	1.50(2)	N(4)-C(9)-C(8)	129.2(17)
C(17)-C(20)	1.32(2)	N(4)-C(10)-C(7)	116.5(17)
C(18)-C(19)	1.36(2)	O(14)-Mo(3)-O(15)	102.9(6)
N(30)-C(35)	1.419(19)	O(14)-Mo(3)-O(22)	98.8(6)
N(30)-C(31)	1.422(18)	O(15)-Mo(3)-O(22)	105.0(5)
N(30)-C(37)	1.54(2)	O(14)-Mo(3)-O(18)	93.5(5)
N(30)-C(33)	1.57(2)	O(15)-Mo(3)-O(18)	91.4(5)
C(31)-C(32)	1.51(2)	O(22)-Mo(3)-O(18)	156.6(5)
C(33)-C(34)	1.42(2)	O(14)-Mo(3)-O(24)	164.2(5)
C(33)-C(34A)	1.43(3)	O(15)-Mo(3)-O(24)	91.4(6)
C(35)-C(36)	1.47(3)	O(22)-Mo(3)-O(24)	83.8(5)
C(37)-C(38)	1.39(3)	O(18)-Mo(3)-O(24)	79.2(5)
C(37)-C(38A)	1.43(2)	O(14)-Mo(3)-N(5)	85.5(5)
N(40)-C(47)	1.43(2)	O(15)-Mo(3)-N(5)	161.7(6)
N(40)-C(41)	1.47(2)	O(22)-Mo(3)-N(5)	89.4(5)
N(40)-C(43)	1.50(2)	O(18)-Mo(3)-N(5)	71.7(5)
N(40)-C(45)	1.56(2)	O(24)-Mo(3)-N(5)	78.9(5)
C(41)-C(42)	1.55(3)	O(16)-Mo(4)-O(17)	102.9(6)
C(43)-C(44)	1.48(2)	O(16)-Mo(4)-O(22)	104.3(5)
C(45)-C(46)	1.50(2)	O(17)-Mo(4)-O(22)	97.8(5)
C(47)-C(48)	1.44(3)	O(16)-Mo(4)-O(20)	91.3(5)
N(50)-C(55)	1.48(2)	O(17)-Mo(4)-O(20)	95.7(6)
N(50)-C(53)	1.50(2)	O(22)-Mo(4)-O(20)	156.5(5)
N(50)-C(51)	1.52(2)	O(16)-Mo(4)-O(23)	91.8(5)
N(50)-C(57)	1.53(2)	O(17)-Mo(4)-O(23)	164.1(5)
C(51)-C(52)	1.50(3)	O(22)-Mo(4)-O(23)	84.1(5)
C(53)-C(54)	1.58(2)	O(20)-Mo(4)-O(23)	77.9(5)
C(55)-C(56)	1.40(3)	O(16)-Mo(4)-N(7)	162.1(5)
C(57)-C(58)	1.48(2)	O(17)-Mo(4)-N(7)	87.0(5)

Anhang

N(60)-C(68)	1.400(19)	O(22)-Mo(4)-N(7)	88.8(5)
N(60)-C(61)	1.44(2)	O(20)-Mo(4)-N(7)	72.8(5)
N(60)-C(64)	1.44(2)	O(23)-Mo(4)-N(7)	77.2(5)
N(60)-C(66)	1.50(2)	O(26)-S(2)-O(25)	115.2(10)
C(61)-C(63)	1.333(18)	O(26)-S(2)-O(23)	107.0(8)
C(64)-C(65)	1.389(18)	O(25)-S(2)-O(23)	108.3(8)
C(66)-C(67)	1.363(19)	O(26)-S(2)-O(24)	109.7(8)
C(68)-C(69)	1.330(19)	O(25)-S(2)-O(24)	108.6(8)
		O(23)-S(2)-O(24)	107.8(7)
		C(11)-O(18)-Mo(3)	126.6(10)
		C(16)-O(20)-Mo(4)	125.2(11)
		Mo(3)-O(22)-Mo(4)	153.4(6)
		S(2)-O(23)-Mo(4)	140.0(8)
		S(2)-O(24)-Mo(3)	137.7(7)
		C(12)-N(5)-C(13)	118.2(13)
		C(12)-N(5)-Mo(3)	113.4(10)
		C(13)-N(5)-Mo(3)	128.3(11)
		C(14)-N(6)-C(15)	116.2(14)
		C(18)-N(7)-C(17)	116.0(15)
		C(18)-N(7)-Mo(4)	133.8(13)
		C(17)-N(7)-Mo(4)	110.2(9)
		C(20)-N(8)-C(19)	115.9(14)
		O(19)-C(11)-O(18)	124.6(16)
		O(19)-C(11)-C(12)	123.7(16)
		O(18)-C(11)-C(12)	111.6(15)
		N(5)-C(12)-C(15)	122.3(16)
		N(5)-C(12)-C(11)	116.5(14)
		C(15)-C(12)-C(11)	121.2(16)
		N(5)-C(13)-C(14)	118.1(15)
		N(6)-C(14)-C(13)	123.0(16)
		N(6)-C(15)-C(12)	122.0(16)
		O(21)-C(16)-O(20)	123.4(17)

O(21)-C(16)-C(17)	121.4(16)
O(20)-C(16)-C(17)	115.2(15)
C(20)-C(17)-N(7)	118.5(16)
C(20)-C(17)-C(16)	126.3(16)
N(7)-C(17)-C(16)	115.1(14)
N(7)-C(18)-C(19)	129.6(18)
C(18)-C(19)-N(8)	115.5(14)
C(17)-C(20)-N(8)	124.2(17)
C(35)-N(30)-C(31)	110.1(13)
C(35)-N(30)-C(37)	111.4(17)
C(31)-N(30)-C(37)	112.4(14)
C(35)-N(30)-C(33)	109.7(17)
C(31)-N(30)-C(33)	109.0(14)
C(37)-N(30)-C(33)	104.0(12)
N(30)-C(31)-C(32)	115.0(14)
C(34)-C(33)-N(30)	114(2)
C(34A)-C(33)-N(30)	114(3)
N(30)-C(35)-C(36)	124(2)
C(38)-C(37)-N(30)	142(3)
C(38A)-C(37)-N(30)	108.0(19)
C(47)-N(40)-C(41)	116.3(17)
C(47)-N(40)-C(43)	107.5(15)
C(41)-N(40)-C(43)	109.8(15)
C(47)-N(40)-C(45)	109.8(16)
C(41)-N(40)-C(45)	106.4(14)
C(43)-N(40)-C(45)	106.6(15)
N(40)-C(41)-C(42)	116.1(18)
C(44)-C(43)-N(40)	119.5(15)
C(46)-C(45)-N(40)	111.0(16)
N(40)-C(47)-C(48)	121(2)
C(55)-N(50)-C(53)	112.2(15)
C(55)-N(50)-C(51)	111.2(16)

C(53)-N(50)-C(51)	109.2(13)
C(55)-N(50)-C(57)	105.7(13)
C(53)-N(50)-C(57)	106.8(14)
C(51)-N(50)-C(57)	111.7(14)
C(52)-C(51)-N(50)	114.8(14)
N(50)-C(53)-C(54)	110.6(15)
C(56)-C(55)-N(50)	122(2)
C(58)-C(57)-N(50)	114.7(15)
C(68)-N(60)-C(61)	113.4(14)
C(68)-N(60)-C(64)	111.7(16)
C(61)-N(60)-C(64)	109.2(16)
C(68)-N(60)-C(66)	108.5(16)
C(61)-N(60)-C(66)	107.2(15)
C(64)-N(60)-C(66)	106.6(12)
C(63)-C(61)-N(60)	132(2)
C(65)-C(64)-N(60)	127(2)
C(67)-C(66)-N(60)	120.5(19)
C(69)-C(68)-N(60)	137(2)

Tab. 76. Bindungslängen [Å] und -winkel [°] für **40**.