

Electronic supplementary information:

Synthesis and Characterization of *trans*-M₂(TⁱPB)₂(O₂C-CH=CH-2-C₄H₃S)₂ (M = Mo or W) and Comments on the Metal-to-Ligand Charge Transfer Bands in MM Quadruply Bonded Complexes of the Type *trans*-M₂(TⁱPB)₂L₂, where TⁱPB = 2,4,6-triisopropylbenzoate and L = π -Accepting Carboxylate Ligand.

Brian G. Alberding, Malcolm H. Chisholm*, Benjamin J. Lear, Vesal Naseri and Carly R. Reed

Department of Chemistry, The Ohio State University, 100 W. 18th Ave, Columbus, OH 43210

Table 1. Crystal data and structure refinement for Mo₂(TiPB)₂(O₂C-CH=CH-C₄H₃S)₂·2DMSO·2THF.

Identification code	Mo ₂ (TiPB) ₂ (O ₂ C-CH=CH-C ₄ H ₃ S) ₂ ·2DMSO·2THF	
Empirical formula	C ₁₁₆ H ₁₆₈ Mo ₄ O ₂₄ S ₈	
Formula weight	2586.74	
Temperature	180(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system, space group	Triclinic, P-1	
Unit cell dimensions	a = 13.9371(1) Å	alpha = 72.1801(3) deg.
	b = 15.6806(1) Å	beta = 83.7171(3) deg.
	c = 16.2650(1) Å	gamma = 70.2194(3) deg.
Volume	3184.31(4) Å ³	
Z, Calculated density	1, 1.349 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.580 mm ⁻¹	
F(000)	1352	
Crystal size	0.11 x 0.09 x 0.08 mm	
Theta range for data collection	2.57 to 24.71 deg.	
Limiting indices	-16<=h<=16, -18<=k<=18, -19<=l<=19	
Reflections collected / unique	21362 / 10837 [R(int) = 0.0146]	
Completeness to theta = 24.71	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.955 and 0.939	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	10848 / 476 / 773	

Goodness-of-fit on F^2 1.035
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$] $R_1 = 0.0479$, $wR_2 = 0.1203$
R indices (all data) $R_1 = 0.0568$, $wR_2 = 0.1262$
Largest diff. peak and hole 1.384 and $-1.193 \text{ e.}\text{\AA}^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for carly2. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Mo(1)	5387(1)	9630(1)	591(1)	28(1)
Mo(2)	213(1)	4712(1)	5650(1)	34(1)
S(1)	1096(1)	13053(1)	2273(1)	49(1)
O(1)	4643(2)	8610(2)	871(2)	34(1)
O(2)	3819(2)	9385(2)	-379(2)	33(1)
O(3)	4231(2)	10445(2)	1251(2)	33(1)
O(4)	3409(2)	11228(2)	0(2)	33(1)
O(5)	1037(2)	3384(2)	5447(2)	39(1)
O(6)	577(2)	3994(2)	4074(2)	36(1)
O(7)	1533(2)	5065(2)	5450(2)	54(1)
O(8)	1140(3)	5713(2)	4060(2)	58(1)
C(1)	3999(3)	8715(3)	319(2)	33(1)
C(2)	3434(3)	8021(3)	503(2)	38(1)
C(3)	3890(4)	7173(3)	308(3)	49(1)
C(30)	4938(4)	6960(4)	-109(4)	70(2)
C(31)	5745(5)	6268(6)	549(5)	103(2)
C(32)	4986(6)	6624(5)	-901(4)	97(2)
C(4)	3353(4)	6517(3)	511(3)	60(1)
C(5)	2396(4)	6712(4)	873(4)	60(1)
C(50)	1793(5)	6001(4)	1085(5)	82(2)
C(51)	2006(10)	5413(7)	2025(5)	165(5)
C(52)	2054(5)	5365(5)	524(5)	89(2)
C(6)	1965(4)	7568(4)	1051(4)	61(1)
C(7)	2463(3)	8235(3)	879(3)	47(1)
C(70)	1984(4)	9171(4)	1081(4)	68(2)
C(71)	1403(5)	9954(5)	302(5)	96(2)
C(72)	1337(6)	9116(6)	1887(5)	111(3)
C(8)	3484(3)	11091(3)	811(2)	33(1)
C(9)	2701(3)	11688(3)	1257(3)	37(1)
C(10)	1899(3)	12376(3)	859(3)	37(1)
C(11)	1103(3)	13039(3)	1218(2)	36(1)
C(12)	279(3)	13738(3)	787(3)	46(1)
C(13)	-354(4)	14283(3)	1319(3)	53(1)
C(14)	0(3)	13991(3)	2131(3)	52(1)
C(15)	1032(3)	3307(3)	4695(2)	31(1)
C(16)	1566(3)	2355(3)	4559(2)	36(1)
C(17)	2525(3)	2167(3)	4154(3)	43(1)
C(170)	2998(3)	2947(4)	3811(3)	54(1)
C(171)	3784(4)	2788(5)	3090(4)	83(2)
C(172)	3472(4)	3109(5)	4529(4)	71(2)
C(18)	2997(4)	1252(4)	4094(3)	63(2)
C(19)	2562(6)	547(4)	4397(4)	78(2)
C(190)	3130(8)	-443(5)	4316(6)	134(4)
C(191)	3024(7)	-550(5)	3505(5)	115(3)

C(192)	3731(8)	-1056(5)	4987(6)	155(5)
C(20)	1601(5)	772(4)	4765(4)	72(2)
C(21)	1088(4)	1664(3)	4857(3)	51(1)
C(210)	27(5)	1895(4)	5246(4)	74(2)
C(211)	-710(13)	2052(17)	4549(11)	108(7)
C(212)	-93(14)	1104(18)	6018(9)	117(8)
C(213)	27(5)	1895(4)	5246(4)	74(2)
C(214)	-700(20)	1510(30)	5000(30)	180(20)
C(215)	44(18)	1691(15)	6250(15)	118(10)
C(23)	1713(3)	5467(3)	4754(3)	47(1)
C(24)	2674(4)	5750(4)	4568(4)	63(1)
C(25)	2939(4)	6209(3)	3851(4)	62(1)
S(2)	4760(2)	6272(3)	4361(3)	58(1)
C(26)	3858(3)	6496(3)	3654(3)	48(1)
C(27)	3918(7)	7040(7)	2732(6)	31(2)
C(28)	5047(4)	7192(4)	2845(3)	56(1)
C(29)	5452(4)	6816(4)	3629(3)	61(1)
S(2')	4122(8)	7058(9)	2804(6)	58(1)
C(26')	3858(3)	6496(3)	3654(3)	48(1)
C(27')	4530(30)	6440(30)	4350(30)	31(2)
C(28')	5047(4)	7192(4)	2845(3)	56(1)
C(29')	5452(4)	6816(4)	3629(3)	61(1)
S(10)	1733(2)	3098(1)	7493(1)	93(1)
O(10)	846(4)	3920(3)	7195(2)	101(2)
C(101)	2282(7)	3219(5)	8294(5)	115(3)
C(102)	1172(6)	2335(6)	8285(7)	143(4)
S(11)	6833(2)	9453(2)	2430(1)	50(1)
O(11)	6342(2)	8960(2)	2028(2)	45(1)
C(111)	5880(40)	10550(50)	2470(40)	64(3)
C(113)	6826(17)	8830(20)	3573(17)	70(5)
S(11')	6031(2)	9275(2)	2855(2)	50(1)
O(11')	6342(2)	8960(2)	2028(2)	45(1)
C(114)	5820(50)	10500(50)	2540(40)	64(3)
C(112)	7221(19)	8980(20)	3403(19)	70(5)
O(14)	-3640(20)	4680(20)	3088(19)	195(4)
C(141)	-2780(30)	4290(30)	2670(30)	178(5)
C(142)	-2930(30)	3550(30)	2350(20)	190(5)
C(143)	-3780(30)	3320(30)	2960(30)	208(5)
C(144)	-4350(20)	4300(30)	3020(30)	199(6)
O(14')	-3049(10)	3394(11)	3717(8)	195(4)
C(145)	-2602(13)	4041(16)	3197(10)	178(5)
C(146)	-3092(15)	4500(16)	2331(11)	190(5)
C(147)	-4121(14)	4336(16)	2535(13)	208(5)
C(148)	-3972(15)	3622(19)	3384(12)	199(6)
O(13)	8710(30)	12060(30)	1070(20)	210(4)
C(131)	7640(30)	12150(30)	1420(20)	176(4)
C(132)	7740(30)	11500(30)	2250(20)	156(4)
C(133)	8680(30)	10980(20)	2300(20)	151(4)
C(134)	9240(30)	11640(40)	1950(20)	150(4)
O(13')	8900(12)	11772(12)	1415(8)	210(4)
C(135)	8258(14)	11172(15)	1506(8)	176(4)
C(136)	8039(13)	10943(13)	2399(8)	156(4)
C(137)	8445(13)	11295(12)	2799(8)	151(4)
C(138)	9245(13)	11604(15)	2319(9)	150(4)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for carly2.

Mo(1)-O(1)	2.102(3)
Mo(1)-O(3)	2.108(3)
Mo(1)-Mo(1)#1	2.1093(10)

Mo(1)-O(4)#1	2.113(3)
Mo(1)-O(2)#1	2.115(3)
Mo(1)-O(11)	2.563(3)
Mo(2)-O(7)	2.060(3)
Mo(2)-Mo(2)#2	2.0937(9)
Mo(2)-O(6)#2	2.113(3)
Mo(2)-O(5)	2.117(3)
Mo(2)-O(8)#2	2.165(3)
Mo(2)-O(10)	2.544(4)
S(1)-C(14)	1.703(5)
S(1)-C(11)	1.721(4)
O(1)-C(1)	1.273(4)
O(2)-C(1)	1.269(4)
O(2)-Mo(1)#1	2.115(3)
O(3)-C(8)	1.276(4)
O(4)-C(8)	1.281(4)
O(4)-Mo(1)#1	2.113(3)
O(5)-C(15)	1.265(4)
O(6)-C(15)	1.263(4)
O(6)-Mo(2)#2	2.113(3)
O(7)-C(23)	1.162(6)
O(8)-C(23)	1.336(6)
O(8)-Mo(2)#2	2.165(3)
C(1)-C(2)	1.492(5)
C(2)-C(3)	1.383(6)
C(2)-C(7)	1.399(6)
C(3)-C(4)	1.409(6)
C(3)-C(30)	1.516(7)
C(30)-C(32)	1.520(8)
C(30)-C(31)	1.521(9)
C(30)-H(30A)	1.0000
C(31)-H(31A)	0.9800
C(31)-H(31B)	0.9800
C(31)-H(31C)	0.9800
C(32)-H(32A)	0.9800
C(32)-H(32B)	0.9800
C(32)-H(32C)	0.9800
C(4)-C(5)	1.371(7)
C(4)-H(4A)	0.9500
C(5)-C(6)	1.378(7)
C(5)-C(50)	1.552(7)
C(50)-C(52)	1.482(9)
C(50)-C(51)	1.525(10)
C(50)-H(50A)	1.0000
C(51)-H(51A)	0.9800
C(51)-H(51B)	0.9800
C(51)-H(51C)	0.9800
C(52)-H(52A)	0.9800
C(52)-H(52B)	0.9800
C(52)-H(52C)	0.9800
C(6)-C(7)	1.387(6)
C(6)-H(6A)	0.9500
C(7)-C(70)	1.513(7)
C(70)-C(72)	1.505(8)
C(70)-C(71)	1.540(9)
C(70)-H(70A)	1.0000
C(71)-H(71A)	0.9800
C(71)-H(71B)	0.9800
C(71)-H(71C)	0.9800
C(72)-H(72A)	0.9800
C(72)-H(72B)	0.9800
C(72)-H(72C)	0.9800
C(8)-C(9)	1.465(5)

C(9)-C(10)	1.323(5)
C(9)-H(9A)	0.9500
C(10)-C(11)	1.449(5)
C(10)-H(10A)	0.9500
C(11)-C(12)	1.366(6)
C(12)-C(13)	1.425(6)
C(12)-H(12A)	0.9500
C(13)-C(14)	1.348(7)
C(13)-H(13A)	0.9500
C(14)-H(14A)	0.9500
C(15)-C(16)	1.499(5)
C(16)-C(21)	1.396(6)
C(16)-C(17)	1.402(6)
C(17)-C(18)	1.391(6)
C(17)-C(170)	1.514(7)
C(170)-C(172)	1.525(7)
C(170)-C(171)	1.534(7)
C(170)-H(17A)	1.0000
C(171)-H(17E)	0.9800
C(171)-H(17F)	0.9800
C(171)-H(17G)	0.9800
C(172)-H(17B)	0.9800
C(172)-H(17C)	0.9800
C(172)-H(17D)	0.9800
C(18)-C(19)	1.375(9)
C(18)-H(18A)	0.9500
C(19)-C(20)	1.381(9)
C(19)-C(190)	1.525(7)
C(190)-C(192)	1.353(10)
C(190)-C(191)	1.408(10)
C(190)-H(19G)	1.0000
C(191)-H(19A)	0.9800
C(191)-H(19B)	0.9800
C(191)-H(19C)	0.9800
C(192)-H(19D)	0.9800
C(192)-H(19E)	0.9800
C(192)-H(19F)	0.9800
C(20)-C(21)	1.385(7)
C(20)-H(20A)	0.9500
C(21)-C(210)	1.513(8)
C(210)-C(212)	1.512(18)
C(210)-C(211)	1.521(19)
C(210)-H(21A)	1.0000
C(211)-H(21B)	0.9800
C(211)-H(21C)	0.9800
C(211)-H(21D)	0.9800
C(212)-H(21E)	0.9800
C(212)-H(21F)	0.9800
C(212)-H(21G)	0.9800
C(214)-H(21I)	0.9800
C(214)-H(21J)	0.9800
C(214)-H(21K)	0.9800
C(215)-H(21L)	0.9800
C(215)-H(21M)	0.9800
C(215)-H(21N)	0.9800
C(23)-C(24)	1.522(7)
C(24)-C(25)	1.259(7)
C(24)-H(24A)	0.9500
C(25)-C(26)	1.468(7)
C(25)-H(25A)	0.9500
S(2)-C(29)	1.661(6)
S(2)-C(26)	1.674(6)
C(26)-C(27)	1.491(11)

C(27)-C(28)	1.706(9)
C(27)-H(27A)	0.9500
C(28)-C(29)	1.329(7)
C(28)-H(28A)	0.9500
C(29)-H(29A)	0.9500
C(27')-H(27C)	0.9500
S(10)-O(10)	1.447(4)
S(10)-C(101)	1.669(7)
S(10)-C(102)	1.781(8)
C(101)-H(10C)	0.9800
C(101)-H(10D)	0.9800
C(101)-H(10E)	0.9800
C(102)-H(10F)	0.9800
C(102)-H(10G)	0.9800
C(102)-H(10H)	0.9800
S(11)-O(11)	1.501(4)
S(11)-C(111)	1.80(7)
S(11)-C(113)	1.82(2)
C(111)-H(11A)	0.9800
C(111)-H(11B)	0.9800
C(111)-H(11C)	0.9800
C(113)-H(11D)	0.9800
C(113)-H(11E)	0.9800
C(113)-H(11F)	0.9800
S(11')-C(114)	1.75(7)
S(11')-C(112)	1.82(3)
C(114)-H(11G)	0.9800
C(114)-H(11H)	0.9800
C(114)-H(11I)	0.9800
C(112)-H(11J)	0.9800
C(112)-H(11K)	0.9800
C(112)-H(11L)	0.9800
O(14)-C(144)	1.35(2)
O(14)-C(141)	1.36(2)
C(141)-C(142)	1.50(2)
C(141)-H(14B)	0.9900
C(141)-H(14C)	0.9900
C(142)-C(143)	1.51(3)
C(142)-H(14D)	0.9900
C(142)-H(14E)	0.9900
C(143)-C(144)	1.50(2)
C(143)-H(14F)	0.9900
C(143)-H(14G)	0.9900
C(144)-H(14H)	0.9900
C(144)-H(14I)	0.9900
O(14')-C(148)	1.341(16)
O(14')-C(145)	1.385(15)
C(145)-C(146)	1.492(18)
C(145)-H(14J)	0.9900
C(145)-H(14K)	0.9900
C(146)-C(147)	1.52(2)
C(146)-H(14L)	0.9900
C(146)-H(14M)	0.9900
C(147)-C(148)	1.469(18)
C(147)-H(14N)	0.9900
C(147)-H(14O)	0.9900
C(148)-H(14P)	0.9900
C(148)-H(14Q)	0.9900
O(13)-C(131)	1.508(18)
O(13)-C(134)	1.540(18)
C(131)-C(132)	1.407(17)
C(131)-H(13B)	0.9900
C(131)-H(13C)	0.9900

C(132)-C(133)	1.29(2)
C(132)-H(13D)	0.9900
C(132)-H(13E)	0.9900
C(133)-C(134)	1.446(18)
C(133)-H(13F)	0.9900
C(133)-H(13G)	0.9900
C(134)-H(13H)	0.9900
C(134)-H(13I)	0.9900
O(13')-C(135)	1.470(14)
O(13')-C(138)	1.516(12)
C(135)-C(136)	1.410(14)
C(135)-H(13J)	0.9900
C(135)-H(13K)	0.9900
C(136)-C(137)	1.248(17)
C(136)-H(13L)	0.9900
C(136)-H(13M)	0.9900
C(137)-C(138)	1.425(13)
C(137)-H(13N)	0.9900
C(137)-H(13O)	0.9900
C(138)-H(13P)	0.9900
C(138)-H(13Q)	0.9900
O(1)-Mo(1)-O(3)	90.16(10)
O(1)-Mo(1)-Mo(1)#1	92.17(7)
O(3)-Mo(1)-Mo(1)#1	91.36(7)
O(1)-Mo(1)-O(4)#1	89.80(10)
O(3)-Mo(1)-O(4)#1	176.60(9)
Mo(1)#1-Mo(1)-O(4)#1	92.04(7)
O(1)-Mo(1)-O(2)#1	176.65(9)
O(3)-Mo(1)-O(2)#1	89.77(10)
Mo(1)#1-Mo(1)-O(2)#1	91.17(7)
O(4)#1-Mo(1)-O(2)#1	90.08(10)
O(1)-Mo(1)-O(11)	95.11(10)
O(3)-Mo(1)-O(11)	84.88(10)
Mo(1)#1-Mo(1)-O(11)	171.81(7)
O(4)#1-Mo(1)-O(11)	91.74(10)
O(2)#1-Mo(1)-O(11)	81.55(10)
O(7)-Mo(2)-Mo(2)#2	94.06(11)
O(7)-Mo(2)-O(6)#2	89.85(12)
Mo(2)#2-Mo(2)-O(6)#2	92.21(8)
O(7)-Mo(2)-O(5)	89.58(12)
Mo(2)#2-Mo(2)-O(5)	91.05(8)
O(6)#2-Mo(2)-O(5)	176.72(9)
O(7)-Mo(2)-O(8)#2	176.41(13)
Mo(2)#2-Mo(2)-O(8)#2	89.45(10)
O(6)#2-Mo(2)-O(8)#2	90.77(11)
O(5)-Mo(2)-O(8)#2	89.61(11)
O(7)-Mo(2)-O(10)	84.14(17)
Mo(2)#2-Mo(2)-O(10)	175.62(9)
O(6)#2-Mo(2)-O(10)	91.78(12)
O(5)-Mo(2)-O(10)	84.95(12)
O(8)#2-Mo(2)-O(10)	92.30(16)
C(14)-S(1)-C(11)	92.3(2)
C(1)-O(1)-Mo(1)	116.7(2)
C(1)-O(2)-Mo(1)#1	117.1(2)
C(8)-O(3)-Mo(1)	117.9(2)
C(8)-O(4)-Mo(1)#1	116.8(2)
C(15)-O(5)-Mo(2)	117.7(2)
C(15)-O(6)-Mo(2)#2	116.8(2)
C(23)-O(7)-Mo(2)	118.1(3)
C(23)-O(8)-Mo(2)#2	112.9(3)
O(2)-C(1)-O(1)	122.8(3)
O(2)-C(1)-C(2)	118.7(3)

O(1)-C(1)-C(2)	118.5(3)
C(3)-C(2)-C(7)	121.5(4)
C(3)-C(2)-C(1)	119.2(4)
C(7)-C(2)-C(1)	119.3(4)
C(2)-C(3)-C(4)	118.1(4)
C(2)-C(3)-C(30)	120.7(4)
C(4)-C(3)-C(30)	121.2(4)
C(3)-C(30)-C(32)	113.3(5)
C(3)-C(30)-C(31)	110.8(5)
C(32)-C(30)-C(31)	111.6(5)
C(3)-C(30)-H(30A)	106.9
C(32)-C(30)-H(30A)	106.9
C(31)-C(30)-H(30A)	106.9
C(30)-C(31)-H(31A)	109.5
C(30)-C(31)-H(31B)	109.5
H(31A)-C(31)-H(31B)	109.5
C(30)-C(31)-H(31C)	109.5
H(31A)-C(31)-H(31C)	109.5
H(31B)-C(31)-H(31C)	109.5
C(30)-C(32)-H(32A)	109.5
C(30)-C(32)-H(32B)	109.5
H(32A)-C(32)-H(32B)	109.5
C(30)-C(32)-H(32C)	109.5
H(32A)-C(32)-H(32C)	109.5
H(32B)-C(32)-H(32C)	109.5
C(5)-C(4)-C(3)	121.6(5)
C(5)-C(4)-H(4A)	119.2
C(3)-C(4)-H(4A)	119.2
C(4)-C(5)-C(6)	118.6(4)
C(4)-C(5)-C(50)	122.0(5)
C(6)-C(5)-C(50)	119.5(5)
C(52)-C(50)-C(51)	109.6(6)
C(52)-C(50)-C(5)	114.2(5)
C(51)-C(50)-C(5)	107.4(5)
C(52)-C(50)-H(50A)	108.5
C(51)-C(50)-H(50A)	108.5
C(5)-C(50)-H(50A)	108.5
C(50)-C(51)-H(51A)	109.5
C(50)-C(51)-H(51B)	109.5
H(51A)-C(51)-H(51B)	109.5
C(50)-C(51)-H(51C)	109.5
H(51A)-C(51)-H(51C)	109.5
H(51B)-C(51)-H(51C)	109.5
C(50)-C(52)-H(52A)	109.5
C(50)-C(52)-H(52B)	109.5
H(52A)-C(52)-H(52B)	109.5
C(50)-C(52)-H(52C)	109.5
H(52A)-C(52)-H(52C)	109.5
H(52B)-C(52)-H(52C)	109.5
C(5)-C(6)-C(7)	122.5(5)
C(5)-C(6)-H(6A)	118.8
C(7)-C(6)-H(6A)	118.8
C(6)-C(7)-C(2)	117.7(4)
C(6)-C(7)-C(70)	122.1(4)
C(2)-C(7)-C(70)	120.2(4)
C(72)-C(70)-C(7)	114.1(5)
C(72)-C(70)-C(71)	111.6(5)
C(7)-C(70)-C(71)	111.7(5)
C(72)-C(70)-H(70A)	106.3
C(7)-C(70)-H(70A)	106.3
C(71)-C(70)-H(70A)	106.3
C(70)-C(71)-H(71A)	109.5
C(70)-C(71)-H(71B)	109.5

H(71A)-C(71)-H(71B)	109.5
C(70)-C(71)-H(71C)	109.5
H(71A)-C(71)-H(71C)	109.5
H(71B)-C(71)-H(71C)	109.5
C(70)-C(72)-H(72A)	109.5
C(70)-C(72)-H(72B)	109.5
H(72A)-C(72)-H(72B)	109.5
C(70)-C(72)-H(72C)	109.5
H(72A)-C(72)-H(72C)	109.5
H(72B)-C(72)-H(72C)	109.5
O(3)-C(8)-O(4)	121.9(3)
O(3)-C(8)-C(9)	118.2(3)
O(4)-C(8)-C(9)	119.9(3)
C(10)-C(9)-C(8)	122.8(4)
C(10)-C(9)-H(9A)	118.6
C(8)-C(9)-H(9A)	118.6
C(9)-C(10)-C(11)	127.9(4)
C(9)-C(10)-H(10A)	116.1
C(11)-C(10)-H(10A)	116.1
C(12)-C(11)-C(10)	126.3(4)
C(12)-C(11)-S(1)	110.5(3)
C(10)-C(11)-S(1)	123.2(3)
C(11)-C(12)-C(13)	112.7(4)
C(11)-C(12)-H(12A)	123.6
C(13)-C(12)-H(12A)	123.6
C(14)-C(13)-C(12)	112.6(4)
C(14)-C(13)-H(13A)	123.7
C(12)-C(13)-H(13A)	123.7
C(13)-C(14)-S(1)	111.9(3)
C(13)-C(14)-H(14A)	124.1
S(1)-C(14)-H(14A)	124.1
O(6)-C(15)-O(5)	122.2(3)
O(6)-C(15)-C(16)	119.9(3)
O(5)-C(15)-C(16)	117.9(3)
C(21)-C(16)-C(17)	121.4(4)
C(21)-C(16)-C(15)	118.1(4)
C(17)-C(16)-C(15)	120.5(4)
C(18)-C(17)-C(16)	117.1(5)
C(18)-C(17)-C(170)	123.2(4)
C(16)-C(17)-C(170)	119.7(4)
C(17)-C(170)-C(172)	112.0(4)
C(17)-C(170)-C(171)	113.4(4)
C(172)-C(170)-C(171)	110.0(4)
C(17)-C(170)-H(17A)	107.1
C(172)-C(170)-H(17A)	107.1
C(171)-C(170)-H(17A)	107.1
C(170)-C(171)-H(17E)	109.5
C(170)-C(171)-H(17F)	109.5
H(17E)-C(171)-H(17F)	109.5
C(170)-C(171)-H(17G)	109.5
H(17E)-C(171)-H(17G)	109.5
H(17F)-C(171)-H(17G)	109.5
C(170)-C(172)-H(17B)	109.5
C(170)-C(172)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(172)-H(17C)	109.5
C(170)-C(172)-H(17D)	109.5
H(17B)-C(172)-H(17D)	109.5
H(17C)-C(172)-H(17D)	109.5
C(19)-C(18)-C(17)	123.1(5)
C(19)-C(18)-H(18A)	118.4
C(17)-C(18)-H(18A)	118.4
C(18)-C(19)-C(20)	117.8(5)
C(18)-C(19)-C(190)	120.2(7)

C(20)-C(19)-C(190)	122.0(7)
C(192)-C(190)-C(191)	129.3(7)
C(192)-C(190)-C(19)	116.4(6)
C(191)-C(190)-C(19)	114.0(6)
C(192)-C(190)-H(19G)	91.9
C(191)-C(190)-H(19G)	91.9
C(19)-C(190)-H(19G)	91.9
C(190)-C(191)-H(19A)	109.5
C(190)-C(191)-H(19B)	109.5
H(19A)-C(191)-H(19B)	109.5
C(190)-C(191)-H(19C)	109.5
H(19A)-C(191)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(191)-H(19C)	109.5
C(190)-C(192)-H(19D)	109.5
C(190)-C(192)-H(19E)	109.5
H(19D)-C(192)-H(19E)	109.5
C(190)-C(192)-H(19F)	109.5
H(19D)-C(192)-H(19F)	109.5
H(19E)-C(192)-H(19F)	109.5
C(19)-C(20)-C(21)	122.4(5)
C(19)-C(20)-H(20A)	118.8
C(21)-C(20)-H(20A)	118.8
C(20)-C(21)-C(16)	118.1(5)
C(20)-C(21)-C(210)	121.1(5)
C(16)-C(21)-C(210)	120.8(4)
C(212)-C(210)-C(21)	112.6(9)
C(212)-C(210)-C(211)	108.6(9)
C(21)-C(210)-C(211)	107.1(8)
C(212)-C(210)-H(21A)	109.5
C(21)-C(210)-H(21A)	109.5
C(211)-C(210)-H(21A)	109.5
H(21I)-C(214)-H(21J)	109.5
H(21I)-C(214)-H(21K)	109.5
H(21J)-C(214)-H(21K)	109.5
H(21L)-C(215)-H(21M)	109.5
H(21L)-C(215)-H(21N)	109.5
H(21M)-C(215)-H(21N)	109.5
O(7)-C(23)-O(8)	125.4(4)
O(7)-C(23)-C(24)	120.4(4)
O(8)-C(23)-C(24)	114.1(5)
C(25)-C(24)-C(23)	126.5(5)
C(25)-C(24)-H(24A)	116.7
C(23)-C(24)-H(24A)	116.7
C(24)-C(25)-C(26)	127.7(6)
C(24)-C(25)-H(25A)	116.2
C(26)-C(25)-H(25A)	116.2
C(29)-S(2)-C(26)	93.7(3)
C(25)-C(26)-C(27)	112.9(5)
C(25)-C(26)-S(2)	125.7(4)
C(27)-C(26)-S(2)	121.4(4)
C(26)-C(27)-C(28)	94.6(5)
C(26)-C(27)-H(27A)	132.7
C(28)-C(27)-H(27A)	132.7
C(29)-C(28)-C(27)	116.2(5)
C(29)-C(28)-H(28A)	121.9
C(27)-C(28)-H(28A)	121.9
C(28)-C(29)-S(2)	114.1(4)
C(28)-C(29)-H(29A)	123.0
S(2)-C(29)-H(29A)	123.0
O(10)-S(10)-C(101)	109.6(3)
O(10)-S(10)-C(102)	100.9(4)
C(101)-S(10)-C(102)	88.3(5)
S(10)-O(10)-Mo(2)	127.0(2)

S(10)-C(101)-H(10C)	109.5
S(10)-C(101)-H(10D)	109.5
H(10C)-C(101)-H(10D)	109.5
S(10)-C(101)-H(10E)	109.5
H(10C)-C(101)-H(10E)	109.5
H(10D)-C(101)-H(10E)	109.5
S(10)-C(102)-H(10F)	109.5
S(10)-C(102)-H(10G)	109.5
H(10F)-C(102)-H(10G)	109.5
S(10)-C(102)-H(10H)	109.5
H(10F)-C(102)-H(10H)	109.5
H(10G)-C(102)-H(10H)	109.5
O(11)-S(11)-C(111)	107(2)
O(11)-S(11)-C(113)	103.0(8)
C(111)-S(11)-C(113)	97(2)
S(11)-O(11)-Mo(1)	127.50(18)
C(114)-S(11')-C(112)	95(2)
S(11')-C(114)-H(11G)	109.5
S(11')-C(114)-H(11H)	109.5
H(11G)-C(114)-H(11H)	109.5
S(11')-C(114)-H(11I)	109.5
H(11G)-C(114)-H(11I)	109.5
H(11H)-C(114)-H(11I)	109.5
S(11')-C(112)-H(11J)	109.5
S(11')-C(112)-H(11K)	109.5
H(11J)-C(112)-H(11K)	109.5
S(11')-C(112)-H(11L)	109.5
H(11J)-C(112)-H(11L)	109.5
H(11K)-C(112)-H(11L)	109.5
C(144)-O(14)-C(141)	108(2)
O(14)-C(141)-C(142)	109.6(18)
O(14)-C(141)-H(14B)	109.7
C(142)-C(141)-H(14B)	109.7
O(14)-C(141)-H(14C)	109.7
C(142)-C(141)-H(14C)	109.7
H(14B)-C(141)-H(14C)	108.2
C(141)-C(142)-C(143)	99.9(16)
C(141)-C(142)-H(14D)	111.8
C(143)-C(142)-H(14D)	111.8
C(141)-C(142)-H(14E)	111.8
C(143)-C(142)-H(14E)	111.8
H(14D)-C(142)-H(14E)	109.5
C(144)-C(143)-C(142)	98.1(18)
C(144)-C(143)-H(14F)	112.1
C(142)-C(143)-H(14F)	112.1
C(144)-C(143)-H(14G)	112.1
C(142)-C(143)-H(14G)	112.1
H(14F)-C(143)-H(14G)	109.8
O(14)-C(144)-C(143)	106(2)
O(14)-C(144)-H(14H)	110.4
C(143)-C(144)-H(14H)	110.4
O(14)-C(144)-H(14I)	110.4
C(143)-C(144)-H(14I)	110.4
H(14H)-C(144)-H(14I)	108.6
C(148)-O(14')-C(145)	106.4(15)
O(14')-C(145)-C(146)	111.5(12)
O(14')-C(145)-H(14J)	109.3
C(146)-C(145)-H(14J)	109.3
O(14')-C(145)-H(14K)	109.3
C(146)-C(145)-H(14K)	109.3
H(14J)-C(145)-H(14K)	108.0
C(145)-C(146)-C(147)	100.6(11)
C(145)-C(146)-H(14L)	111.7

C(147)-C(146)-H(14L)	111.7
C(145)-C(146)-H(14M)	111.7
C(147)-C(146)-H(14M)	111.7
H(14L)-C(146)-H(14M)	109.4
C(148)-C(147)-C(146)	104.0(12)
C(148)-C(147)-H(14N)	111.0
C(146)-C(147)-H(14N)	111.0
C(148)-C(147)-H(14O)	111.0
C(146)-C(147)-H(14O)	111.0
H(14N)-C(147)-H(14O)	109.0
O(14')-C(148)-C(147)	113.1(14)
O(14')-C(148)-H(14P)	109.0
C(147)-C(148)-H(14P)	109.0
O(14')-C(148)-H(14Q)	109.0
C(147)-C(148)-H(14Q)	109.0
H(14P)-C(148)-H(14Q)	107.8
C(131)-O(13)-C(134)	96.3(18)
C(132)-C(131)-O(13)	106.5(16)
C(132)-C(131)-H(13B)	110.4
O(13)-C(131)-H(13B)	110.4
C(132)-C(131)-H(13C)	110.4
O(13)-C(131)-H(13C)	110.4
H(13B)-C(131)-H(13C)	108.6
C(133)-C(132)-C(131)	104.6(18)
C(133)-C(132)-H(13D)	110.8
C(131)-C(132)-H(13D)	110.8
C(133)-C(132)-H(13E)	110.8
C(131)-C(132)-H(13E)	110.8
H(13D)-C(132)-H(13E)	108.9
C(132)-C(133)-C(134)	104(2)
C(132)-C(133)-H(13F)	110.9
C(134)-C(133)-H(13F)	110.9
C(132)-C(133)-H(13G)	110.9
C(134)-C(133)-H(13G)	110.9
H(13F)-C(133)-H(13G)	108.9
C(133)-C(134)-O(13)	94.2(17)
C(133)-C(134)-H(13H)	112.9
O(13)-C(134)-H(13H)	112.9
C(133)-C(134)-H(13I)	112.9
O(13)-C(134)-H(13I)	112.9
H(13H)-C(134)-H(13I)	110.3
C(135)-O(13')-C(138)	105.9(10)
C(136)-C(135)-O(13')	102.6(10)
C(136)-C(135)-H(13J)	111.2
O(13')-C(135)-H(13J)	111.2
C(136)-C(135)-H(13K)	111.2
O(13')-C(135)-H(13K)	111.2
H(13J)-C(135)-H(13K)	109.2
C(137)-C(136)-C(135)	113.0(10)
C(137)-C(136)-H(13L)	109.0
C(135)-C(136)-H(13L)	109.0
C(137)-C(136)-H(13M)	109.0
C(135)-C(136)-H(13M)	109.0
H(13L)-C(136)-H(13M)	107.8
C(136)-C(137)-C(138)	112.8(12)
C(136)-C(137)-H(13N)	109.0
C(138)-C(137)-H(13N)	109.0
C(136)-C(137)-H(13O)	109.0
C(138)-C(137)-H(13O)	109.0
H(13N)-C(137)-H(13O)	107.8
C(137)-C(138)-O(13')	99.0(10)
C(137)-C(138)-H(13P)	112.0
O(13')-C(138)-H(13P)	112.0

C(137)-C(138)-H(13Q)	112.0
O(13')-C(138)-H(13Q)	112.0
H(13P)-C(138)-H(13Q)	109.6

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
 #1 -x+1,-y+2,-z #2 -x,-y+1,-z+1

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^3$) for carly2.
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo(1)	30(1)	27(1)	22(1)	-3(1)	-5(1)	-7(1)
Mo(2)	42(1)	30(1)	23(1)	-7(1)	-9(1)	-2(1)
S(1)	43(1)	65(1)	38(1)	-23(1)	-3(1)	-8(1)
O(1)	39(1)	33(1)	27(1)	-3(1)	-5(1)	-13(1)
O(2)	37(1)	35(1)	27(1)	-5(1)	-4(1)	-13(1)
O(3)	31(1)	35(1)	27(1)	-6(1)	-5(1)	-7(1)
O(4)	32(1)	32(1)	29(1)	-6(1)	-4(1)	-4(1)
O(5)	48(2)	33(1)	28(1)	-10(1)	-9(1)	1(1)
O(6)	43(2)	34(1)	27(1)	-10(1)	-7(1)	-3(1)
O(7)	45(2)	57(2)	64(2)	-25(2)	-6(2)	-14(2)
O(8)	77(2)	33(2)	52(2)	-12(1)	36(2)	-16(2)
C(1)	36(2)	34(2)	29(2)	-10(2)	1(2)	-11(2)
C(2)	48(2)	41(2)	28(2)	-6(2)	-1(2)	-21(2)
C(3)	61(3)	44(3)	47(3)	-15(2)	10(2)	-25(2)
C(30)	77(4)	53(3)	89(4)	-35(3)	29(3)	-31(3)
C(31)	63(4)	149(7)	111(6)	-77(5)	8(4)	-17(4)
C(32)	112(5)	97(5)	70(4)	-35(4)	30(4)	-16(4)
C(4)	72(3)	41(3)	72(3)	-18(2)	3(3)	-25(2)
C(5)	55(3)	56(3)	73(3)	-14(3)	8(3)	-29(2)
C(50)	83(4)	63(4)	109(5)	-28(4)	20(4)	-40(3)
C(51)	320(15)	206(10)	65(5)	-23(5)	20(6)	-227(11)
C(52)	102(5)	81(4)	108(5)	-29(4)	-12(4)	-54(4)
C(6)	46(3)	64(3)	77(4)	-23(3)	10(2)	-26(2)
C(7)	43(2)	53(3)	46(3)	-8(2)	-2(2)	-21(2)
C(70)	44(3)	63(3)	92(4)	-26(3)	12(3)	-12(2)
C(71)	66(4)	67(4)	133(6)	-19(4)	-2(4)	-3(3)
C(72)	102(5)	106(6)	125(6)	-59(5)	44(5)	-23(5)
C(8)	33(2)	34(2)	33(2)	-9(2)	-1(2)	-11(2)
C(9)	39(2)	41(2)	30(2)	-11(2)	-2(2)	-10(2)
C(10)	38(2)	41(2)	31(2)	-12(2)	0(2)	-12(2)
C(11)	36(2)	41(2)	34(2)	-15(2)	1(2)	-11(2)
C(12)	44(2)	47(2)	41(2)	-17(2)	-5(2)	-1(2)
C(13)	45(3)	53(3)	59(3)	-30(2)	-5(2)	2(2)
C(14)	43(2)	63(3)	58(3)	-39(2)	7(2)	-11(2)
C(15)	32(2)	33(2)	28(2)	-8(2)	-2(2)	-10(2)
C(16)	41(2)	33(2)	30(2)	-11(2)	-8(2)	-3(2)
C(17)	42(2)	48(2)	37(2)	-20(2)	-10(2)	-2(2)
C(170)	40(2)	69(3)	56(3)	-29(3)	4(2)	-13(2)
C(171)	60(3)	131(6)	75(4)	-55(4)	22(3)	-36(4)
C(172)	55(3)	96(4)	78(4)	-48(3)	3(3)	-26(3)
C(18)	57(3)	64(3)	57(3)	-35(3)	-14(2)	16(3)
C(19)	112(5)	39(3)	70(4)	-27(3)	-30(4)	11(3)
C(190)	195(9)	58(4)	125(7)	-59(4)	-56(6)	34(5)
C(191)	169(8)	68(4)	106(6)	-57(4)	7(5)	-12(5)
C(192)	185(9)	69(5)	154(8)	-50(5)	-63(7)	67(6)

C(20)	115(5)	36(3)	66(4)	-15(2)	-17(3)	-21(3)
C(21)	70(3)	40(2)	46(3)	-14(2)	-6(2)	-20(2)
C(210)	82(4)	67(4)	89(4)	-27(3)	19(3)	-47(3)
C(211)	62(9)	152(19)	98(11)	-7(11)	4(7)	-48(10)
C(212)	138(14)	160(20)	65(9)	-11(10)	16(8)	-86(13)
C(213)	82(4)	67(4)	89(4)	-27(3)	19(3)	-47(3)
C(214)	105(17)	200(40)	330(60)	-170(40)	80(30)	-110(20)
C(215)	136(18)	78(13)	125(17)	-24(11)	59(14)	-37(11)
C(23)	41(2)	43(2)	60(3)	-24(2)	-19(2)	-5(2)
C(24)	67(3)	60(3)	58(3)	-15(3)	-14(3)	-13(3)
C(25)	74(3)	46(3)	68(3)	-24(3)	20(3)	-20(3)
S(2)	53(2)	82(2)	42(1)	-1(1)	-6(1)	-39(2)
C(26)	45(2)	50(3)	54(3)	-21(2)	7(2)	-19(2)
C(27)	17(4)	44(3)	37(4)	-16(3)	-2(3)	-13(3)
C(28)	63(3)	57(3)	43(3)	0(2)	6(2)	-30(2)
C(29)	60(3)	87(4)	49(3)	-15(3)	5(2)	-45(3)
S(2')	53(2)	82(2)	42(1)	-1(1)	-6(1)	-39(2)
C(26')	45(2)	50(3)	54(3)	-21(2)	7(2)	-19(2)
C(27')	17(4)	44(3)	37(4)	-16(3)	-2(3)	-13(3)
C(28')	63(3)	57(3)	43(3)	0(2)	6(2)	-30(2)
C(29')	60(3)	87(4)	49(3)	-15(3)	5(2)	-45(3)
S(10)	97(1)	88(1)	59(1)	-21(1)	-19(1)	19(1)
O(10)	107(3)	97(3)	49(2)	-21(2)	-37(2)	40(3)
C(101)	145(7)	89(5)	76(5)	-31(4)	-41(5)	26(5)
C(102)	76(5)	120(7)	201(10)	-9(7)	39(6)	-36(5)
S(11)	48(1)	64(1)	42(1)	-23(1)	0(1)	-17(1)
O(11)	57(2)	43(2)	32(2)	-9(1)	-11(1)	-9(1)
C(111)	73(6)	55(6)	65(6)	-29(5)	-20(5)	-5(4)
C(113)	94(16)	61(9)	48(10)	-16(7)	-32(10)	-5(9)
S(11')	48(1)	64(1)	42(1)	-23(1)	0(1)	-17(1)
O(11')	57(2)	43(2)	32(2)	-9(1)	-11(1)	-9(1)
C(114)	73(6)	55(6)	65(6)	-29(5)	-20(5)	-5(4)
C(112)	94(16)	61(9)	48(10)	-16(7)	-32(10)	-5(9)
O(14)	175(8)	286(10)	151(8)	-44(7)	4(6)	-125(8)
C(141)	175(8)	293(12)	118(10)	-55(9)	23(7)	-150(9)
C(142)	189(10)	265(12)	149(9)	-40(8)	-3(7)	-133(9)
C(143)	184(9)	262(11)	187(12)	-3(9)	-17(8)	-133(9)
C(144)	157(8)	291(13)	158(12)	-18(9)	-2(8)	-124(8)
O(14')	175(8)	286(10)	151(8)	-44(7)	4(6)	-125(8)
C(145)	175(8)	293(12)	118(10)	-55(9)	23(7)	-150(9)
C(146)	189(10)	265(12)	149(9)	-40(8)	-3(7)	-133(9)
C(147)	184(9)	262(11)	187(12)	-3(9)	-17(8)	-133(9)
C(148)	157(8)	291(13)	158(12)	-18(9)	-2(8)	-124(8)
O(13)	237(9)	266(10)	118(7)	29(7)	-27(7)	-135(8)
C(131)	213(9)	253(11)	88(6)	-8(7)	-45(7)	-132(8)
C(132)	202(8)	212(12)	99(6)	8(7)	-44(7)	-155(8)
C(133)	221(9)	173(9)	93(6)	-17(6)	-22(7)	-120(7)
C(134)	182(8)	196(9)	122(10)	-59(9)	-4(7)	-112(7)
O(13')	237(9)	266(10)	118(7)	29(7)	-27(7)	-135(8)
C(135)	213(9)	253(11)	88(6)	-8(7)	-45(7)	-132(8)
C(136)	202(8)	212(12)	99(6)	8(7)	-44(7)	-155(8)
C(137)	221(9)	173(9)	93(6)	-17(6)	-22(7)	-120(7)
C(138)	182(8)	196(9)	122(10)	-59(9)	-4(7)	-112(7)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^3$) for carly2.

	x	y	z	U(eq)
--	---	---	---	-------

H(30A)	5098	7567	-309	83
H(31A)	6424	6220	292	155
H(31B)	5653	5644	720	155
H(31C)	5676	6494	1058	155
H(32A)	4455	7084	-1309	146
H(32B)	4875	6008	-727	146
H(32C)	5657	6564	-1178	146
H(4A)	3661	5926	393	72
H(50A)	1048	6366	1026	98
H(51A)	1690	4914	2164	247
H(51B)	1721	5822	2402	247
H(51C)	2744	5126	2113	247
H(52A)	1587	4994	647	134
H(52B)	2756	4937	638	134
H(52C)	1992	5744	-83	134
H(6A)	1302	7705	1302	73
H(70A)	2562	9365	1190	81
H(71A)	1851	9981	-207	143
H(71B)	1182	10564	428	143
H(71C)	804	9814	188	143
H(72A)	1197	9694	2058	167
H(72B)	1699	8566	2352	167
H(72C)	692	9051	1774	167
H(9A)	2773	11577	1859	44
H(10A)	1837	12445	264	44
H(12A)	143	13849	197	55
H(13A)	-960	14795	1123	64
H(14A)	-323	14275	2571	63
H(17A)	2435	3544	3558	65
H(17E)	3985	3356	2835	125
H(17F)	3484	2657	2643	125
H(17G)	4386	2249	3329	125
H(17B)	3732	3643	4288	106
H(17C)	4034	2539	4791	106
H(17D)	2953	3249	4971	106
H(18A)	3652	1108	3830	76
H(19G)	2539	-667	4561	161
H(19A)	3407	-204	3069	172
H(19B)	2302	-298	3348	172
H(19C)	3290	-1223	3535	172
H(19D)	3976	-1689	4907	233
H(19E)	3337	-1072	5526	233
H(19F)	4314	-850	5014	233
H(20A)	1281	298	4962	86
H(21A)	-134	2487	5420	88
H(21B)	-529	1483	4356	162
H(21C)	-671	2590	4059	162
H(21D)	-1406	2185	4783	162
H(21E)	392	983	6466	175
H(21F)	41	529	5842	175
H(21G)	-790	1286	6246	175
H(21H)	-278	2597	5017	88
H(21I)	-1397	1846	5151	269
H(21J)	-533	834	5306	269
H(21K)	-657	1594	4374	269
H(21L)	-652	1923	6464	177
H(21M)	466	2013	6394	177
H(21N)	330	1007	6520	177
H(24A)	3120	5561	5040	76
H(25A)	2491	6392	3382	74
H(27A)	3483	7233	2252	37
H(28A)	5368	7528	2373	67

H(29A)	6081	6854	3760	73
H(27C)	4480	6263	4962	37
H(28C)	5360	7521	2361	67
H(29C)	6117	6758	3776	73
H(10C)	2690	3641	8052	173
H(10D)	2725	2599	8622	173
H(10E)	1754	3490	8677	173
H(10F)	648	2224	8015	215
H(10G)	861	2630	8743	215
H(10H)	1699	1730	8534	215
H(11A)	5741	10986	1884	97
H(11B)	6121	10841	2826	97
H(11C)	5246	10433	2722	97
H(11D)	7331	8200	3685	105
H(11E)	6147	8780	3743	105
H(11F)	6996	9187	3907	105
H(11G)	5190	10825	2198	97
H(11H)	6393	10637	2190	97
H(11I)	5743	10717	3053	97
H(11J)	7534	8287	3596	105
H(11K)	7084	9224	3904	105
H(11L)	7686	9256	3004	105
H(14B)	-2197	4005	3071	214
H(14C)	-2633	4784	2179	214
H(14D)	-2310	2988	2419	228
H(14E)	-3156	3794	1744	228
H(14F)	-4195	3062	2710	250
H(14G)	-3507	2871	3529	250
H(14H)	-4769	4678	2502	239
H(14I)	-4801	4273	3537	239
H(14J)	-1867	3713	3125	214
H(14K)	-2663	4532	3481	214
H(14L)	-2705	4189	1896	228
H(14M)	-3170	5183	2127	228
H(14N)	-4667	4927	2561	250
H(14O)	-4299	4097	2095	250
H(14P)	-4500	3867	3789	239
H(14Q)	-4064	3044	3327	239
H(13B)	7278	12799	1443	211
H(13C)	7251	11991	1039	211
H(13D)	7570	11840	2696	187
H(13E)	7283	11117	2322	187
H(13F)	8813	10533	1946	181
H(13G)	8876	10614	2901	181
H(13H)	9981	11330	1913	180
H(13I)	9098	12117	2275	180
H(13J)	7627	11522	1163	211
H(13K)	8630	10597	1326	211
H(13L)	7291	11169	2485	187
H(13M)	8279	10246	2645	187
H(13N)	8723	10818	3349	181
H(13O)	7919	11839	2940	181
H(13P)	9919	11110	2453	180
H(13Q)	9263	12193	2415	180
