JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
J. Am. Chem. Soc., 1996, 118(36), 8623-8638, DOI:10.1021/ja960574x

SQUID Magnetic Measurements on $Mo(NRAr)_3$. The raw molar susceptibility data, plotted in Figure 1 for the 5-300 K temperature range, are given in the following with the temperature value (K) preceding the corresponding value of the susceptibility in parenthesis: 5.0000 (0.23546); 6.0000 (0.20616); 6.9900 (0.18397); 7.9800 (0.16645); 8.9800 (0.15238); 9.9700 (0.14079); 11.990 (0.12252); 13.990 (0.10875); 16.000 (0.097770); 18.050 (0.088672); 20.070 (0.081222); 23.020 (0.072138); 26.120 (0.064781); 29.080 (0.058865); 32.090 (0.053809); 35.090 (0.049607); 38.080 (0.045952); 41.000 (0.042854); 43.980 (0.040090); 46.980 (0.037635); 49.990 (0.035457); 55.000 (0.032397); 60.020 (0.029765); 65.040 (0.027582); 70.040 (0.025688); 75.050 (0.024036); 80.070 (0.022594); 85.080 (0.021317); 90.090 (0.020172); 95.110 (0.019140); 100.13 (0.018210); 110.15 (0.016584); 120.18 (0.015234); 130.19 (0.014103); 140.20 (0.013125); 150.20 (0.012289); 160.24 (0.011551); 170.19 (0.010889); 180.19 (0.010314); 190.19 (0.0097936); 200.20 (0.0093574); 220.17 (0.0085326); 240.16 (0.0076935); 260.16 (0.0071199); 280.16 (0.0065017); 300.25 (0.0055373).

SQUID Magnetic Measurements on (μ-N_2)[Mo(NRAr)$_3$]$_2$. The raw molar susceptibility data, plotted in Figure ? for the 29-300 K temperature range, are given in the following with the temperature value (K) preceding the corresponding value of the susceptibility in parenthesis: 5.0000 (0.033986); 5.9900 (0.032970); 7.0000 (0.032212); 7.9800 (0.031638); 8.9900 (0.031155); 9.9800 (0.030772); 11.990 (0.030115); 14.020 (0.029522); 16.010 (0.028784); 18.010 (0.028049); 20.050 (0.027211); 23.020 (0.025938); 26.110 (0.024613); 29.040 (0.023333); 32.030 (0.022083); 35.010 (0.020910); 38.010 (0.019821); 41.000 (0.018844); 43.990 (0.017889); 46.970 (0.017008); 50.000 (0.016235); 54.940 (0.015027); 59.960 (0.013955); 65.050 (0.013068); 70.060 (0.012316); 75.100 (0.011664); 80.090 (0.011066); 85.100 (0.010509); 90.110 (0.010017); 95.080 (0.0095679); 100.12 (0.0091647); 110.09 (0.0084417); 120.09 (0.0078479); 130.11 (0.0073227); 138.86 (0.0068450); 150.43 (0.0066078); 158.83 (0.0061514); 170.54 (0.0059414); 180.20 (0.0056329); 190.21 (0.0053784); 200.19 (0.0051700); 220.15 (0.0048045); 240.13 (0.0044692); 260.16 (0.0042100); 280.16 (0.0039646); 300.16 (0.0035250).

Table of Kinetic Data: Rate Constants for Conversion of $(\mu\text{-}N_2)[Mo(NRAr)_3]_2$ to 2 $NMo(NRAr)_3$, and Conversion of $(\mu\text{-}^{15}N_2)[Mo(NRAr)_3]_2$ to 2 $^{15}NMo(NRAr)_3$.

T/K	$^{14}N_2$ Data	±	$^{15}N_2$ Data	±
298.15	0.00036207	7.3300e-05	0.00031971	5.8250e-05
300.65	0.00038706	0.00021325	0.00044144	0.00022706
303.15	0.00055092	0.00032593	0.00042612	0.00010159
305.65	0.00061215	5.0090e-05	0.00056155	6.1090e-05
308.15	0.00090267	0.00027106	0.00072055	0.00011154
310.65	0.0011135	0.00026664	0.0010238	0.00019166
313.15	0.0015032	0.00050160	0.0012396	3.3410e-05
315.65	0.0018976	0.00011880	0.0016481	0.00014114
318.15	0.0025653	8.0980e-05	0.0022788	7.0540e-05
320.65	0.0034609	5.2110e-05	0.0031269	0.00011053
323.15	0.0046316	0.00021253	0.0042109	0.00010447
325.65	0.0061831	0.00032243	0.0057794	0.00031123
328.15	0.0081913	0.00031926	0.0077624	0.00027940
330.65	0.011323	0.0026046	0.010091	0.00073111
333.15	0.014357	0.00077353	0.012356	0.0016827
335.65	0.019638	0.0019153	0.017154	0.00058544
338.15	0.024556	0.0028108	0.021314	0.00054539

Table 95118. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 95117. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

$NMo(N[t\text{-}Bu]Ph)_3$

	x	y	z	U(eq)
Mo(1)	9304(1)	4304(1)	696(1)	26(1)
N(1)	8884(1)	3884(1)	1116(1)	41(1)
C(1)	9287(1)	4376(1)	-565(1)	29(1)
N(2)	9194(1)	3961(1)	-95(1)	27(1)
C(2)	9851(1)	4525(1)	-737(1)	34(1)
C(3)	9944(2)	4945(2)	-1168(1)	46(1)
C(4)	9473(2)	5213(2)	-1441(2)	50(1)
C(5)	8909(2)	5065(2)	-1279(2)	49(1)
C(6)	8812(1)	4656(1)	-843(1)	37(1)
C(7)	8930(1)	3373(1)	-254(1)	36(1)
C(8)	9058(2)	3225(2)	-894(2)	64(1)
C(9)	9202(2)	2909(2)	141(2)	71(1)
C(10)	8264(1)	3377(2)	-160(2)	57(1)

Table 95119. Bond lengths [Å] and angles [°] for $NMo(N[t\text{-}Bu]Ph)_3$

Mo(1)-N(1)	1.658(5)	Mo(1)-N(2)	1.979(2)
Mo(1)-N(2)#1	1.979(2)	Mo(1)-N(2)#2	1.979(2)
C(1)-C(2)	1.384(4)	C(1)-C(6)	1.406(4)
C(1)-N(2)	1.444(4)	N(2)-C(7)	1.513(3)
C(2)-C(3)	1.389(4)	C(3)-C(4)	1.381(5)
C(4)-C(5)	1.380(5)	C(5)-C(6)	1.382(5)
C(7)-C(8)	1.523(4)	C(7)-C(9)	1.521(5)
C(7)-C(10)	1.534(4)		

N(1)-Mo(1)-N(2)	102.94(7)	N(1)-Mo(1)-N(2)#1	102.94(7)
N(2)-Mo(1)-N(2)#1	115.13(5)	N(1)-Mo(1)-N(2)#2	102.94(7)
N(2)-Mo(1)-N(2)#2	115.14(5)	N(2)#1-Mo(1)-N(2)#2	115.14(5)
C(2)-C(1)-C(6)	118.4(3)	C(2)-C(1)-N(2)	120.5(2)
C(6)-C(1)-N(2)	121.1(2)	C(1)-N(2)-C(7)	117.3(2)
C(1)-N(2)-Mo(1)	113.5(2)	C(7)-N(2)-Mo(1)	128.2(2)
C(1)-C(2)-C(3)	120.7(3)	C(4)-C(3)-C(2)	120.3(3)
C(5)-C(4)-C(3)	119.7(3)	C(4)-C(5)-C(6)	120.4(3)
C(5)-C(6)-C(1)	120.5(3)	N(2)-C(7)-C(8)	110.5(3)
N(2)-C(7)-C(9)	108.2(2)	C(8)-C(7)-C(9)	109.6(3)
N(2)-C(7)-C(10)	110.7(2)	C(8)-C(7)-C(10)	109.0(3)
C(9)-C(7)-C(10)	108.9(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -z+1,x-1/2,-y+1/2 #2 y+1/2,-z+1/2,-x+1

Table 95120. Anisotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for $NMo(N[t\text{-}Bu]Ph)_3$

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + ... + 2hka^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo(1)	26(1)	26(1)	26(1)	-2(1)	-2(1)	2(1)
N(1)	41(1)	41(1)	41(1)	-1(1)	-1(1)	1(1)
C(1)	35(2)	25(2)	26(1)	-7(1)	-5(1)	3(2)
N(2)	22(1)	25(1)	33(1)	-4(1)	-3(1)	1(1)
C(2)	35(2)	38(2)	30(2)	-5(2)	0(2)	4(1)
C(3)	51(2)	49(2)	37(2)	2(2)	12(2)	2(2)
C(4)	72(3)	47(2)	32(2)	6(2)	1(2)	4(2)
C(5)	57(3)	44(2)	44(2)	0(2)	-16(2)	14(2)
C(6)	33(2)	39(2)	39(2)	-2(2)	-9(1)	4(1)
C(7)	36(2)	29(2)	42(2)	-8(1)	-7(1)	-3(1)
C(8)	85(3)	47(2)	60(2)	-25(2)	14(2)	-18(2)
C(9)	86(3)	26(2)	100(3)	-2(2)	-32(3)	-5(2)
C(10)	44(2)	49(2)	79(3)	-15(2)	-2(2)	-15(2)

Table 95121. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $NMo(N[t\text{-}Bu]Ph)_3$

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	10170(1)	4341(1)	-562(1)	41
H(3A)	10325(2)	5046(2)	-1274(1)	55
H(4A)	9537(2)	5493(2)	-1732(2)	60
H(5A)	8591(2)	5242(2)	-1465(2)	58
H(6A)	8431(1)	4564(1)	-731(1)	44
H(8A)	8887(2)	3518(2)	-1143(2)	97
H(8B)	8894(2)	2848(2)	-986(2)	97
H(8C)	9475(2)	3215(2)	-955(2)	97
H(9C)	9121(2)	3003(2)	544(2)	106
H(9B)	9619(2)	2899(2)	80(2)	106
H(9A)	9037(2)	2532(2)	50(2)	106
H(10A)	8180(1)	3470(2)	243(2)	86
H(10B)	8107(1)	2997(2)	-251(2)	86
H(10C)	8088(1)	3666(2)	-411(2)	86

S .

Positional parameters and B(eq) for $Mo[N(R)Ar]_3$

atom	x	y	z	B(eq)
Mo	0.28448(6)	0.95108(5)	0.32356(6)	2.62(5)
Mo(A)	0.26324(6)	0.44223(5)	0.70485(6)	2.40(5)
N(1)	0.2332(5)	1.0596(4)	0.3658(4)	2.1(4)
N(1A)	0.2018(5)	0.3825(5)	0.8031(5)	2.4(4)
N(2)	0.1952(5)	0.8601(5)	0.3073(5)	2.4(4)
N(2A)	0.3958(5)	0.4857(5)	0.7053(5)	2.3(4)
N(3)	0.4193(5)	0.9456(4)	0.2684(4)	2.0(4)
N(3A)	0.1856(5)	0.4752(4)	0.6139(5)	2.0(4)
C(11)	0.2340(6)	1.1200(5)	0.2999(6)	2.1(5)
C(11A)	0.1885(7)	0.4390(6)	0.8700(6)	2.7(6)
C(12)	0.3069(6)	1.1790(6)	0.2847(6)	2.5(5)
C(12A)	0.2546(7)	0.4420(6)	0.9302(6)	3.2(6)
C(13)	0.3112(7)	1.2321(6)	0.2168(7)	3.0(6)
C(13A)	0.2478(8)	0.5030(8)	0.9914(6)	3.9(7)
C(14)	0.2422(8)	1.2250(6)	0.1612(6)	3.1(6)
C(14A)	0.171(1)	0.5618(7)	0.9927(7)	4.3(7)
C(15)	0.1699(7)	1.1676(6)	0.1714(6)	2.5(5)
C(15A)	0.1036(8)	0.5591(7)	0.9355(7)	3.7(6)
C(16)	0.1645(7)	1.1149(6)	0.2423(6)	2.8(6)
C(16A)	0.1132(7)	0.4991(6)	0.8753(6)	3.1(6)
C(17)	0.1964(8)	1.0872(7)	0.4517(6)	3.8(6)
C(17A)	0.1600(7)	0.2982(6)	0.8141(6)	3.3(6)
C(21)	0.1315(6)	0.8819(5)	0.2444(6)	2.2(5)
C(21A)	0.3923(6)	0.5753(6)	0.7037(6)	2.2(5)
C(22)	0.0405(7)	0.9191(6)	0.2644(6)	3.0(6)
C(22A)	0.4264(7)	0.6216(6)	0.6337(6)	2.6(5)
C(23)	-0.0208(7)	0.9441(6)	0.2066(7)	2.9(6)
C(23A)	0.4170(7)	0.7079(7)	0.6301(7)	3.5(6)
C(24)	0.0099(7)	0.9286(6)	0.1245(7)	3.1(6)
C(24A)	0.3667(8)	0.7482(6)	0.6975(8)	3.7(7)
C(25)	0.1005(7)	0.8915(6)	0.0992(6)	2.8(6)
C(25A)	0.3302(7)	0.7048(6)	0.7676(7)	3.3(6)
C(26)	0.1610(7)	0.8676(6)	0.1618(6)	3.0(6)
C(26A)	0.3447(7)	0.6181(6)	0.7696(6)	2.5(5)
C(27)	0.1884(7)	0.7746(6)	0.3450(6)	2.8(6)
C(27A)	0.4919(7)	0.4409(6)	0.7068(7)	3.0(6)
C(31)	0.4153(6)	0.9306(6)	0.1822(6)	2.4(5)
C(31A)	0.1147(7)	0.5391(6)	0.6401(6)	2.6(5)
C(32)	0.4406(7)	0.8535(6)	0.1486(7)	2.9(6)
C(32A)	0.0221(7)	0.5190(6)	0.6763(6)	2.5(5)
C(33)	0.4355(8)	0.8389(7)	0.0659(8)	3.8(7)
C(33A)	-0.0446(8)	0.5805(7)	0.7080(6)	3.3(6)
C(34)	0.4012(8)	0.9030(8)	0.0164(6)	4.0(7)
C(34A)	-0.0174(7)	0.6631(7)	0.7016(7)	3.7(7)
C(35)	0.3739(7)	0.9808(7)	0.0471(7)	3.2(6)
C(35A)	0.0740(8)	0.6853(6)	0.6666(6)	3.2(6)
C(36)	0.3831(6)	0.9941(6)	0.1302(6)	2.4(5)
C(36A)	0.1402(7)	0.6221(6)	0.6367(6)	2.9(6)
C(37)	0.5161(7)	0.9555(6)	0.3003(6)	2.6(5)

Positional parameters and B(eq) for $Mo[N(R)Ar]_3$

atom	x	y	z	B(eq)
C(37A)	0.1876(6)	0.4454(6)	0.5278(6)	2.3(5)
C(131)	0.3908(8)	1.2960(7)	0.2025(7)	5.1(7)
C(131A)	0.322(1)	0.5063(8)	1.0532(8)	6.2(9)
C(151)	0.0935(8)	1.1595(6)	0.1110(7)	3.8(6)
C(151A)	0.021(1)	0.6251(8)	0.9373(7)	5.5(8)
C(171)	0.099(1)	1.124(2)	0.4510(9)	15(2)
C(171A)	0.1826(8)	0.2525(6)	0.7335(7)	4.4(7)
C(172)	0.265(1)	1.1435(9)	0.4880(7)	7(1)
C(172A)	0.0503(8)	0.3072(7)	0.8342(8)	4.9(7)
C(173)	0.194(1)	1.007(1)	0.5049(8)	11(1)
C(173A)	0.208(1)	0.2483(7)	0.8824(7)	5.6(8)
C(231)	-0.1187(8)	0.9887(7)	0.2294(7)	4.4(7)
C(231A)	0.4566(8)	0.7569(7)	0.5545(7)	4.9(7)
C(251)	0.1319(8)	0.8729(7)	0.0101(7)	4.6(7)
C(251A)	0.2748(9)	0.7499(7)	0.8400(7)	5.1(8)
C(271)	0.0868(8)	0.7626(7)	0.3891(8)	6.0(8)
C(271A)	0.554(1)	0.448(1)	0.631(1)	17(2)
C(272)	0.2089(9)	0.7068(7)	0.2789(8)	5.1(8)
C(272A)	0.4718(9)	0.3498(8)	0.719(1)	9(1)
C(273)	0.2652(8)	0.7649(7)	0.4051(7)	4.7(7)
C(273A)	0.538(1)	0.468(1)	0.778(2)	19(2)
C(331)	0.463(1)	0.7531(8)	0.0292(8)	7(1)
C(331A)	-0.1419(8)	0.5561(7)	0.7519(7)	4.7(7)
C(351)	0.3356(8)	1.0506(7)	-0.0065(6)	4.4(7)
C(351A)	0.1036(9)	0.7769(7)	0.6601(8)	5.3(8)
C(371)	0.4971(9)	0.983(1)	0.3883(8)	8(1)
C(371A)	0.1949(7)	0.5196(7)	0.4674(6)	3.8(6)
C(372)	0.5697(8)	1.0223(9)	0.2495(9)	7(1)
C(372A)	0.0985(7)	0.3940(6)	0.5157(6)	3.4(6)
C(373)	0.577(1)	0.8763(8)	0.298(1)	8(1)
C(373A)	0.2792(7)	0.3902(6)	0.5100(6)	3.6(6)
H(1)	0.3555	1.1825	0.3225	2.9
H(2)	0.3056	0.4003	0.9301	3.7
H(3)	0.2451	1.2610	0.1135	3.6
H(4)	0.1643	0.6035	1.0336	5.3
H(5)	0.1128	1.0765	0.2519	3.4
H(6)	0.0657	0.4983	0.8358	3.6
H(7)	0.0197	0.9282	0.3214	3.5
H(8)	0.4580	0.5928	0.5867	2.9
H(9)	-0.0329	0.9436	0.0833	3.6
H(10)	0.3571	0.8075	0.6955	4.4
H(11)	0.2227	0.8409	0.1473	3.7
H(12)	0.3217	0.5874	0.8182	3.0
H(13)	0.4606	0.8093	0.1841	3.3
H(14)	0.0039	0.4618	0.6786	2.8
H(15)	0.3958	0.8925	-0.0411	4.5
H(16)	-0.0629	0.7064	0.7225	4.4
H(17)	0.3678	1.0482	0.1523	2.8
H(18)	0.2036	0.6364	0.6136	3.4
H(19)	0.4523	1.2671	0.1975	5.9

Positional parameters and B(eq) for $Mo[N(R)Ar]_3$

atom	x	y	z	B(eq)
H(20)	0.3820	1.3264	0.1530	5.9
H(21)	0.3866	1.3324	0.2481	5.9
H(22)	0.2886	0.4996	1.1072	7.1
H(23)	0.3684	0.4620	1.0430	7.1
H(24)	0.3520	0.5585	1.0482	7.1
H(25)	0.0306	1.1718	0.1388	4.6
H(26)	0.1062	1.1983	0.0662	4.6
H(27)	0.0956	1.1042	0.0907	4.6
H(28)	0.0481	0.6788	0.9295	6.4
H(29)	-0.0188	0.6143	0.8942	6.4
H(30)	-0.0168	0.6218	0.9894	6.4
H(31)	0.0802	1.1431	0.5062	18.2
H(32)	0.1065	1.1740	0.4156	18.2
H(33)	0.0585	1.0877	0.4327	18.2
H(34)	0.1570	0.1980	0.7396	4.9
H(35)	0.1543	0.2826	0.6909	4.9
H(36)	0.2517	0.2485	0.7213	4.9
H(37)	0.3286	1.1158	0.4866	7.9
H(38)	0.2711	1.1940	0.4568	7.9
H(39)	0.2428	1.1549	0.5440	7.9
H(40)	0.0378	0.3377	0.8841	5.7
H(41)	0.0234	0.3354	0.7903	5.7
H(42)	0.0247	0.2526	0.8421	5.7
H(43)	0.1710	1.0237	0.5602	12.3
H(44)	0.1490	0.9717	0.4845	12.3
H(45)	0.2564	0.9842	0.5027	12.3
H(46)	0.1810	0.1936	0.8881	6.8
H(47)	0.2759	0.2438	0.8696	6.8
H(48)	0.1937	0.2762	0.9345	6.8
H(49)	-0.1277	0.9939	0.2878	5.1
H(50)	-0.1180	1.0423	0.2036	5.1
H(51)	-0.1690	0.9566	0.2110	5.1
H(52)	0.5246	0.7466	0.5459	5.8
H(53)	0.4254	0.7395	0.5085	5.8
H(54)	0.4429	0.8148	0.5641	5.8
H(55)	0.1420	0.8143	0.0037	5.5
H(56)	0.0838	0.8932	-0.0237	5.5
H(57)	0.1923	0.9003	-0.0061	5.5
H(58)	0.3160	0.7896	0.8602	6.0
H(59)	0.2186	0.7771	0.8214	6.0
H(60)	0.2558	0.7101	0.8824	6.0
H(61)	0.0749	0.8026	0.4317	7.2
H(62)	0.0393	0.7696	0.3506	7.2
H(63)	0.0833	0.7075	0.4129	7.2
H(64)	0.6111	0.4135	0.6375	20.7
H(65)	0.5193	0.4222	0.5888	20.7
H(66)	0.5668	0.5017	0.6192	20.7
H(67)	0.2052	0.6536	0.3066	6.2
H(68)	0.1612	0.7120	0.2412	6.2
H(69)	0.2720	0.7141	0.2525	6.2

Positional parameters and B(eq) for $Mo[N(R)Ar]_3$

atom	x	y	z	B(eq)
H(70)	0.4317	0.3446	0.7713	9.9
H(71)	0.4409	0.3309	0.6762	9.9
H(72)	0.5327	0.3214	0.7248	9.9
H(73)	0.2614	0.7099	0.4295	5.5
H(74)	0.3274	0.7718	0.3763	5.5
H(75)	0.2527	0.8053	0.4469	5.5
H(76)	0.6006	0.4360	0.7759	21.5
H(77)	0.5604	0.5264	0.7606	21.5
H(78)	0.5024	0.4666	0.8227	21.5
H(79)	0.4057	0.7314	0.0095	8.0
H(80)	0.5118	0.7598	-0.0151	8.0
H(81)	0.4848	0.7178	0.0710	8.0
H(82)	-0.1454	0.5741	0.8073	5.3
H(83)	-0.1924	0.5838	0.7241	5.3
H(84)	-0.1476	0.4978	0.7495	5.3
H(85)	0.3776	1.0971	-0.0065	5.3
H(86)	0.3334	1.0319	-0.0612	5.3
H(87)	0.2716	1.0676	0.0162	5.3
H(88)	0.1598	0.7836	0.6896	6.4
H(89)	0.1198	0.7916	0.6033	6.4
H(90)	0.0517	0.8117	0.6830	6.4
H(91)	0.5596	0.9941	0.4077	9.1
H(92)	0.4613	1.0361	0.3875	9.1
H(93)	0.4639	0.9440	0.4200	9.1
H(94)	0.2513	0.5499	0.4742	4.6
H(95)	0.1984	0.4993	0.4118	4.6
H(96)	0.1381	0.5549	0.4769	4.6
H(97)	0.6302	1.0294	0.2720	8.3
H(98)	0.5814	1.0027	0.1944	8.3
H(99)	0.5317	1.0713	0.2521	8.3
H(100)	0.0411	0.4275	0.5268	4.1
H(101)	0.1032	0.3751	0.4601	4.1
H(102)	0.0971	0.3468	0.5526	4.1
H(103)	0.5401	0.8353	0.3335	9.5
H(104)	0.5866	0.8567	0.2447	9.5
H(105)	0.6354	0.8859	0.3215	9.5
H(106)	0.2763	0.3436	0.5477	4.2
H(107)	0.2819	0.3707	0.4548	4.2
H(108)	0.3351	0.4216	0.5168	4.2

U values for $Mo[N(R)Ar]_3$

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Mo	0.0281(5)	0.0243(5)	0.0457(7)	0.0034(4)	0.0023(5)	-0.0028(5)
Mo(A)	0.0315(6)	0.0377(6)	0.0230(6)	-0.0067(4)	-0.0064(4)	0.0045(5)
N(1)	0.039(5)	0.025(4)	0.016(5)	-0.001(4)	-0.005(4)	-0.005(4)
N(1A)	0.034(5)	0.029(5)	0.026(5)	0.003(4)	0.000(4)	-0.002(4)
N(2)	0.036(5)	0.032(5)	0.023(5)	0.006(4)	0.001(4)	0.003(4)
N(2A)	0.030(5)	0.037(5)	0.020(5)	0.001(4)	-0.003(4)	-0.004(4)
N(3)	0.027(5)	0.035(5)	0.016(5)	0.000(4)	-0.005(4)	-0.002(4)
N(3A)	0.028(4)	0.019(4)	0.029(5)	0.005(3)	-0.010(4)	0.001(4)
C(11)	0.033(6)	0.026(6)	0.021(6)	0.005(4)	-0.003(5)	-0.007(5)
C(11A)	0.044(7)	0.031(6)	0.027(7)	-0.011(5)	-0.004(5)	0.008(5)
C(12)	0.034(6)	0.038(6)	0.028(6)	0.000(5)	-0.014(5)	-0.003(5)
C(12A)	0.052(7)	0.045(7)	0.026(7)	-0.008(5)	-0.012(5)	0.003(6)
C(13)	0.037(6)	0.035(6)	0.041(7)	-0.001(5)	-0.003(5)	-0.000(6)
C(13A)	0.067(8)	0.063(8)	0.020(7)	-0.018(7)	-0.021(6)	0.001(6)
C(14)	0.062(8)	0.033(6)	0.022(6)	0.002(6)	-0.007(6)	-0.001(5)
C(14A)	0.08(1)	0.060(8)	0.022(7)	-0.017(7)	-0.002(7)	-0.016(6)
C(15)	0.043(6)	0.027(6)	0.028(6)	0.007(5)	-0.015(5)	-0.003(5)
C(15A)	0.067(8)	0.050(8)	0.021(7)	0.002(6)	0.004(6)	-0.001(6)
C(16)	0.044(7)	0.030(6)	0.034(7)	-0.001(5)	-0.007(5)	-0.012(5)
C(16A)	0.057(7)	0.040(7)	0.020(6)	0.002(6)	-0.003(5)	-0.004(5)
C(17)	0.069(8)	0.056(8)	0.017(6)	0.004(6)	0.005(6)	-0.017(6)
C(17A)	0.054(7)	0.043(7)	0.025(7)	-0.010(6)	0.005(5)	0.004(5)
C(21)	0.024(6)	0.020(5)	0.041(7)	0.007(4)	-0.006(5)	0.002(5)
C(21A)	0.034(6)	0.026(6)	0.026(6)	-0.002(5)	-0.011(5)	0.003(5)
C(22)	0.037(6)	0.033(6)	0.045(8)	-0.005(5)	-0.007(6)	-0.002(5)
C(22A)	0.035(6)	0.035(6)	0.029(7)	-0.000(5)	-0.010(5)	-0.003(5)
C(23)	0.030(6)	0.034(6)	0.049(8)	-0.001(5)	-0.005(6)	-0.000(6)
C(23A)	0.034(6)	0.048(8)	0.054(8)	-0.004(5)	-0.020(6)	0.004(6)
C(24)	0.037(6)	0.032(6)	0.052(8)	-0.004(5)	-0.021(6)	0.009(6)
C(24A)	0.050(7)	0.023(6)	0.07(1)	-0.001(5)	-0.027(7)	-0.006(6)
C(25)	0.035(6)	0.034(6)	0.040(7)	-0.005(5)	-0.015(5)	-0.002(5)
C(25A)	0.046(7)	0.028(6)	0.055(9)	0.003(5)	-0.017(6)	-0.009(6)
C(26)	0.041(6)	0.049(7)	0.026(7)	-0.001(5)	-0.005(5)	-0.010(5)
C(26A)	0.043(6)	0.028(6)	0.025(6)	-0.001(5)	-0.004(5)	-0.005(5)
C(27)	0.031(6)	0.033(6)	0.044(7)	-0.003(5)	-0.008(5)	0.008(5)

for $Mo[N(R)Ar]_3$

U11	U22	U33	U12	U13	U23
0.026(6)	0.037(6)	0.051(8)	-0.002(5)	-0.007(5)	0.002(6)
0.025(5)	0.038(6)	0.028(7)	-0.002(5)	-0.001(5)	-0.005(5)
0.038(6)	0.043(7)	0.018(6)	0.009(5)	-0.003(5)	-0.003(5)
0.043(7)	0.031(6)	0.035(7)	0.011(5)	-0.003(5)	0.002(5)
0.040(6)	0.035(6)	0.018(6)	0.001(5)	-0.005(5)	-0.002(5)
0.059(8)	0.034(7)	0.054(9)	-0.003(6)	-0.007(7)	-0.013(6)
0.049(7)	0.052(7)	0.024(7)	0.010(6)	0.002(5)	-0.019(6)
0.050(7)	0.09(1)	0.016(7)	-0.021(7)	0.007(5)	-0.013(7)
0.040(7)	0.065(8)	0.038(7)	0.020(6)	-0.020(6)	-0.021(6)
0.039(7)	0.046(7)	0.037(8)	-0.004(5)	-0.003(5)	0.002(6)
0.046(7)	0.041(7)	0.034(7)	0.007(6)	-0.007(6)	-0.011(5)
0.032(6)	0.030(6)	0.028(7)	0.000(5)	0.003(5)	-0.001(5)
0.025(6)	0.036(7)	0.051(8)	0.000(5)	-0.008(5)	-0.005(6)
0.037(6)	0.044(7)	0.019(6)	0.009(5)	-0.010(5)	-0.013(5)
0.030(6)	0.036(6)	0.023(6)	0.005(5)	-0.006(5)	-0.008(5)
0.072(9)	0.062(8)	0.06(1)	-0.020(7)	-0.019(7)	0.013(7)
0.09(1)	0.10(1)	0.045(9)	-0.014(8)	-0.021(8)	-0.008(8)
0.060(7)	0.042(7)	0.048(8)	-0.000(6)	-0.025(6)	0.001(6)
0.11(1)	0.064(9)	0.033(8)	0.008(8)	-0.007(7)	-0.003(7)
0.10(1)	0.40(3)	0.05(1)	0.16(2)	-0.01(1)	-0.09(2)
0.077(9)	0.036(7)	0.053(9)	-0.004(6)	-0.000(7)	-0.000(6)
0.13(1)	0.10(1)	0.031(8)	-0.01(1)	-0.014(8)	-0.042(8)
0.061(8)	0.045(7)	0.08(1)	-0.022(6)	0.016(7)	-0.004(7)
0.28(2)	0.10(1)	0.023(9)	-0.06(1)	0.04(1)	-0.017(9)
0.12(1)	0.037(7)	0.06(1)	-0.023(7)	-0.037(8)	0.034(7)
0.049(7)	0.046(7)	0.07(1)	0.009(6)	-0.013(6)	-0.002(6)
0.073(9)	0.056(8)	0.06(1)	-0.016(7)	-0.023(7)	0.019(7)
0.072(8)	0.073(9)	0.029(7)	-0.004(7)	-0.004(6)	-0.003(6)
0.09(1)	0.047(8)	0.06(1)	0.005(7)	0.001(7)	-0.029(7)
0.040(7)	0.08(1)	0.11(1)	0.001(6)	-0.010(7)	0.062(9)
0.10(1)	0.27(2)	0.22(2)	0.14(1)	0.11(1)	0.19(2)
0.08(1)	0.037(7)	0.08(1)	0.006(7)	-0.017(8)	-0.012(7)
0.06(1)	0.052(9)	0.21(2)	0.029(7)	0.05(1)	0.05(1)
0.051(7)	0.062(8)	0.07(1)	0.004(6)	-0.014(7)	0.012(7)
0.21(2)	0.17(2)	0.37(3)	0.13(2)	-0.27(2)	-0.18(2)
0.13(1)	0.07(1)	0.06(1)	0.008(9)	-0.013(9)	-0.028(8)

U values for $Mo[N(R)Ar]_3$

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(331A)	0.050(7)	0.08(1)	0.047(8)	0.014(6)	0.009(6)	-0.041(7)
C(351)	0.063(8)	0.074(9)	0.029(7)	0.002(7)	-0.013(6)	0.007(6)
C(351A)	0.074(9)	0.047(8)	0.08(1)	0.013(7)	-0.017(7)	-0.012(7)
C(371)	0.058(8)	0.18(2)	0.06(1)	0.04(1)	-0.037(7)	-0.04(1)
C(371A)	0.055(7)	0.060(8)	0.028(7)	0.007(6)	0.000(6)	-0.001(6)
C(372)	0.053(8)	0.12(1)	0.09(1)	-0.046(8)	-0.028(8)	0.01(1)
C(372A)	0.047(7)	0.053(7)	0.032(7)	-0.017(6)	-0.014(5)	-0.003(6)
C(373)	0.09(1)	0.06(1)	0.17(2)	0.028(8)	-0.09(1)	-0.04(1)
C(373A)	0.058(7)	0.044(7)	0.038(7)	-0.000(6)	-0.010(6)	-0.009(6)
H(1)	0.0369					
H(2)	0.0470					
H(3)	0.0458					
H(4)	0.0667					
H(5)	0.0435					
H(6)	0.0453					
H(7)	0.0448					
H(8)	0.0373					
H(9)	0.0453					
H(10)	0.0553					
H(11)	0.0466					
H(12)	0.0384					
H(13)	0.0421					
H(14)	0.0356					
H(15)	0.0569					
H(16)	0.0560					
H(17)	0.0357					
H(18)	0.0435					
H(19)	0.0741					
H(20)	0.0741					
H(21)	0.0741					
H(22)	0.0900					
H(23)	0.0900					
H(24)	0.0900					
H(25)	0.0581					
H(26)	0.0581					
H(27)	0.0581					

U values for $Mo[N(R)Ar]_3$

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
H(28)	0.0807					
H(29)	0.0807					
H(30)	0.0807					
H(31)	0.2299					
H(32)	0.2299					
H(33)	0.2299					
H(34)	0.0626					
H(35)	0.0626					
H(36)	0.0626					
H(37)	0.0996					
H(38)	0.0996					
H(39)	0.0996					
H(40)	0.0721					
H(41)	0.0721					
H(42)	0.0721					
H(43)	0.1553					
H(44)	0.1553					
H(45)	0.1553					
H(46)	0.0856					
H(47)	0.0856					
H(48)	0.0856					
H(49)	0.0641					
H(50)	0.0641					
H(51)	0.0641					
H(52)	0.0733					
H(53)	0.0733					
H(54)	0.0733					
H(55)	0.0691					
H(56)	0.0691					
H(57)	0.0691					
H(58)	0.0763					
H(59)	0.0763					
H(60)	0.0763					
H(61)	0.0912					
H(62)	0.0912					
H(63)	0.0912					

U values for $Mo[N(R)Ar]_3$

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
H(64)	0.2624					
H(65)	0.2624					
H(66)	0.2624					
H(67)	0.0781					
H(68)	0.0781					
H(69)	0.0781					
H(70)	0.1259					
H(71)	0.1259					
H(72)	0.1259					
H(73)	0.0691					
H(74)	0.0691					
H(75)	0.0691					
H(76)	0.2729					
H(77)	0.2729					
H(78)	0.2729					
H(79)	0.1017					
H(80)	0.1017					
H(81)	0.1017					
H(82)	0.0670					
H(83)	0.0670					
H(84)	0.0670					
H(85)	0.0673					
H(86)	0.0673					
H(87)	0.0673					
H(88)	0.0807					
H(89)	0.0807					
H(90)	0.0807					
H(91)	0.1156					
H(92)	0.1156					
H(93)	0.1156					
H(94)	0.0583					
H(95)	0.0583					
H(96)	0.0583					
H(97)	0.1054					
H(98)	0.1054					
H(99)	0.1054					

U values for $Mo[N(R)Ar]_3$

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
H(100)	0.0515					
H(101)	0.0515					
H(102)	0.0515					
H(103)	0.1197					
H(104)	0.1197					
H(105)	0.1197					
H(106)	0.0530					
H(107)	0.0530					
H(108)	0.0530					

Inreamolecular distances (Å) involving the nonhydrogen atoms for $Mo[N(R)Ar]_3$.

Mo-N(1)	1.960(7)	C(13A)-C(14A)	1.39(1)
Mo-N(2)	1.964(7)	C(13A)-C(131A)	1.49(1)
Mo-N(3)	1.977(7)	C(14)-C(15)	1.37(1)
Mo(A)-N(1A)	1.970(7)	C(14A)-C(15A)	1.37(1)
Mo(A)-N(2A)	1.968(7)	C(15)-C(16)	1.41(1)
Mo(A)-N(3A)	1.956(7)	C(15)-C(151)	1.51(1)
N(1)-C(11)	1.42(1)	C(15A)-C(16A)	1.37(1)
N(1)-C(17)	1.50(1)	C(15A)-C(151A)	1.53(1)
N(1A)-C(11A)	1.42(1)	C(17)-C(171)	1.44(2)
N(1A)-C(17A)	1.48(1)	C(17)-C(172)	1.49(2)
N(2)-C(21)	1.44(1)	C(17)-C(173)	1.53(2)
N(2)-C(27)	1.49(1)	C(17A)-C(171A)	1.51(1)
N(2A)-C(21A)	1.43(1)	C(17A)-C(172A)	1.51(1)
N(2A)-C(27A)	1.49(1)	C(17A)-C(173A)	1.54(1)
N(3)-C(31)	1.43(1)	C(21)-C(22)	1.38(1)
N(3)-C(37)	1.49(1)	C(21)-C(26)	1.38(1)
N(3A)-C(31A)	1.43(1)	C(21A)-C(22A)	1.39(1)
N(3A)-C(37A)	1.48(1)	C(21A)-C(26A)	1.38(1)
C(11)-C(12)	1.40(1)	C(22A)-C(23A)	1.38(1)
C(22)-C(23)	1.37(1)	C(11A)-C(12A)	1.40(1)
C(11)-C(16)	1.40(1)	C(23)-C(24)	1.38(1)
C(11A)-C(16A)	1.39(1)	C(23A)-C(24A)	1.39(1)
C(23)-C(231)	1.52(1)	C(12A)-C(13A)	1.40(1)
C(12)-C(13)	1.37(1)	C(23A)-C(231A)	1.51(1)
C(13)-C(14)	1.38(1)	C(24A)-C(25A)	1.38(1)

C(24)-C(25)	1.39(1)	C(25)-C(26)	1.41(1)
C(13)-C(131)	1.51(1)	C(37)-C(371)	1.49(1)
C(25)-C(251)	1.50(1)	C(25A)-C(251A)	1.52(1)
C(37)-C(372)	1.50(1)	C(37A)-C(371A)	1.52(1)
C(25A)-C(26A)	1.39(1)	C(27)-C(271)	1.52(1)
C(37)-C(373)	1.49(1)	C(37A)-C(372A)	1.52(1)
C(27)-C(272)	1.54(1)	C(27A)-C(272A)	1.49(1)
C(37A)-C(373A)	1.52(1)	C(27A)-C(273A)	1.45(2)
C(27)-C(273)	1.51(1)	C(31)-C(32)	1.38(1)
C(27A)-C(271A)	1.43(2)	C(31)-C(36)	1.40(1)
C(31A)-C(32A)	1.39(1)	C(33)-C(34)	1.39(1)
C(31A)-C(36A)	1.38(1)	C(33)-C(331)	1.53(1)
C(32)-C(33)	1.37(1)	C(33A)-C(34A)	1.38(1)
C(32A)-C(33A)	1.39(1)	C(33A)-C(331A)	1.51(1)
C(34)-C(35)	1.37(1)	C(35)-C(351)	1.51(1)
C(34A)-C(35A)	1.38(1)	C(35A)-C(36A)	1.40(1)
C(35)-C(36)	1.38(1)	C(35A)-C(351A)	1.53(1)

Intramolecular Bond Angles (°) for $Mo[N(R)Ar]_3$.

N(1)-Mo-N(2)	120.4(3)	C(12)-C(11)-C(16)	117.8(9)
N(1)-Mo-N(3)	118.0(3)	C(1A)-C(11A)-C(12A)	122.1(9)
N(2)-Mo-N(3)	119.3(3)	C(1A)-C(11A)-C(16A)	121.4(9)
N(1A)-Mo(A)-N(2A)	120.3(3)	C(12A)-C(11A)-C(16A)	116(1)
N(1A)-Mo(A)-N(3A)	120.0(3)	C(11)-C(12)-C(13)	122.3(9)
N(2A)-Mo(A)-N(3A)	118.9(3)	C(11A)-C(12A)-C(13A)	123(1)
Mo-N(1)-C(11)	110.2(5)	C(12)-C(13)-C(14)	118.3(9)
Mo-N(1)-C(17)	131.7(6)	C(12)-C(13)-C(131)	121.0(9)
C(11)-N(1)-C(17)	118.1(7)	C(14)-C(13)-C(131)	121(1)
Mo(A)-N(1A)-C(11A)	108.6(6)	C(12A)-C(13A)-C(14A)	118(1)
Mo(A)-N(1A)-C(17A)	132.1(6)	C(12A)-C(13A)-C(131A)	121(1)
C(11A)-N(1A)-C(17A)	118.8(8)	C(14A)-C(13A)-C(131A)	121(1)
Mo-N(2)-C(21)	111.5(5)	C(13)-C(14)-C(15)	122.5(9)
Mo-N(2)-C(27)	130.7(6)	C(13A)-C(14A)-C(15A)	121(1)
C(21)-N(2)-C(27)	117.7(7)	C(14)-C(15)-C(16)	118.8(9)
Mo(A)-N(2A)-C(21A)	110.2(6)	C(14)-C(15)-C(151)	123.0(9)
Mo(A)-N(2A)-C(27A)	130.7(6)	C(16)-C(15)-C(151)	118.3(9)
C(21A)-N(2A)-C(27A)	119.1(7)	C(14A)-C(15A)-C(16A)	120(1)
Mo-N(3)-C(31)	108.9(5)	C(14A)-C(15A)-C(151A)	120(1)
Mo-N(3)-C(37)	132.0(6)	C(16A)-C(15A)-C(151A)	120(1)
C(31)-N(3)-C(37)	119.0(7)	C(11)-C(16)-C(15)	120.3(9)
Mo(A)-N(3A)-C(31A)	110.4(6)	C(11A)-C(16A)-C(15A)	123(1)
Mo(A)-N(3A)-C(37A)	131.8(6)	C(1)-C(17)-C(171)	109.6(9)
C(31A)-N(3A)-C(37A)	117.8(7)	C(1)-C(17)-C(172)	112.6(9)
N(1)-C(11)-C(12)	123.1(8)	C(1)-C(17)-C(173)	105.1(9)
N(1)-C(11)-C(16)	118.8(8)	C(171)-C(17)-C(172)	113(1)
C(171)-C(17)-C(173)	110(1)	C(26)-C(25)-C(251)	120.4(9)
C(172)-C(17)-C(173)	106(1)	C(24A)-C(25A)-C(26A)	118(1)
N(1A)-C(17A)-C(171A)	107.7(8)	C(24A)-C(25A)-C(251A)	121(1)
N(1A)-C(17A)-C(172A)	109.2(8)	C(26A)-C(25A)-C(251A)	121(1)
N(1A)-C(17A)-C(173A)	110.4(8)	C(21)-C(26)-C(25)	121.0(9)
C(171A)-C(17A)-C(172A)	109.8(9)	C(21A)-C(26A)-C(25A)	122.1(9)
C(171A)-C(17A)-C(173A)	108.2(9)	N(2)-C(27)-C(271)	110.0(8)
C(172A)-C(17A)-C(173A)	111.5(9)	N(2)-C(27)-C(272)	111.3(9)
N(2)-C(21)-C(22)	121.2(9)	N(2)-C(27)-C(273)	108.1(8)
N(2)-C(21)-C(26)	120.5(8)	C(271)-C(27)-C(272)	108.8(9)
C(22)-C(21)-C(26)	118.3(9)	C(271)-C(27)-C(273)	110.8(9)
N(2A)-C(21A)-C(22A)	122.1(9)	C(272)-C(27)-C(273)	107.8(9)
N(2A)-C(21A)-C(26A)	119.7(8)	C(2A)-C(27A)-C(271A)	114(1)
C(22A)-C(21A)-C(26A)	117.8(9)	C(2A)-C(27A)-C(272A)	107.0(8)
C(21)-C(22)-C(23)	123(1)	C(2A)-C(27A)-C(273A)	109(1)
C(21A)-C(22A)-C(23A)	122(1)	C(271A)-C(27A)-C(272A)	107(1)
C(22)-C(23)-C(24)	117.3(9)	C(271A)-C(27A)-C(273A)	113(2)
C(22)-C(23)-C(231)	123(1)	C(272A)-C(27A)-C(273A)	108(1)
C(24)-C(23)-C(231)	120(1)	N(3)-C(31)-C(32)	121.4(9)
C(22A)-C(23A)-C(24A)	118(1)	N(3)-C(31)-C(36)	120.2(9)
C(22A)-C(23A)-C(231A)	121(1)	C(32)-C(31)-C(36)	118.4(9)
C(24A)-C(23A)-C(231A)	121(1)	C(3A)-C(31A)-C(32A)	121.3(9)
C(23)-C(24)-C(25)	122.8(9)	C(3A)-C(31A)-C(36A)	120.0(8)
C(23A)-C(24A)-C(25A)	122(1)	C(32A)-C(31A)-C(36A)	118.4(9)
C(24)-C(25)-C(26)	117(1)	C(31)-C(32)-C(33)	121.3(9)
C(24)-C(25)-C(251)	122.3(9)	C(31A)-C(32A)-C(33A)	121.7(9)

C(32)-C(33)-C(34)	119(1)
C(32)-C(33)-C(331)	121(1)
C(34)-C(33)-C(331)	120(1)
C(32A)-C(33A)-C(34A)	118(1)
C(32A)-C(33A)-C(331A)	120(1)
C(34A)-C(33A)-C(331A)	121.3(9)
C(33)-C(34)-C(35)	122(1)
C(33A)-C(34A)-C(35A)	122(1)
C(34)-C(35)-C(36)	117(1)
C(34)-C(35)-C(351)	122(1)
C(36)-C(35)-C(351)	120(1)
C(34A)-C(35A)-C(36A)	119(1)
C(34A)-C(35A)-C(351A)	121(1)
C(36A)-C(35A)-C(351A)	119.9(9)
C(31)-C(36)-C(35)	121.9(9)
C(31A)-C(36A)-C(35A)	121.1(9)
N(3)-C(37)-C(371)	107.1(8)
N(3)-C(37)-C(372)	108.5(8)
N(3)-C(37)-C(373)	112.9(8)
C(371)-C(37)-C(372)	110(1)
C(371)-C(37)-C(373)	109(1)
C(372)-C(37)-C(373)	110(1)
N(3A)-C(37A)-C(371A)	109.8(8)
N(3A)-C(37A)-C(372A)	111.8(8)
N(3A)-C(37A)-C(373A)	108.0(7)
C(371A)-C(37A)-C(372A)	110.7(8)
C(371A)-C(37A)-C(373A)	107.7(8)
C(372A)-C(37A)-C(373A)	108.8(8)