

ANNEX

Dades cristal·logràfiques del clúster (NEt₄)[Fe₅MoC(CO)₁₇{AuPMe₃}]

Fórmula empírica	C ₂₈ H ₃₁ AuFe ₅ MoNO ₁₆ P
Pes molecular	1240,66
Temperatura	293(2) K
Longitud d'ona	0,71069 Å
Sistema cristal·lí, grup espacial	Monoclínic, P2 ₁
Dimensions de la cel·la unitària	a = 9,563(11) Å α = 90° b = 34,989(4) Å β = 92,63° c = 12,294(9) Å γ = 90°
Volum	4109(6) Å ³
Z, densitat (calculada)	4, 2,005 Mg/m ³
Coefficient d'absorció	5,669 mm ⁻¹
F(000)	2400
Dimensions del cristall	0,1 x 0,1 x 0,2 mm
Interval de θ	2,03 a 29,98°
Índex d'interval	-13 ≤ h ≤ 13 0 ≤ k ≤ 42 0 ≤ l ≤ 17
Reflexions recollides / úniques	12193 / 11651 [R(int) = 0,0511]
Mètode de refinament	Matriu completa dels mínims quadrats
Dades / restringits / paràmetres	11651 / 10 / 247
GOF	0,902
Índex R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0388, wR2 = 0,0948
Índex R (totes les dades)	R1 = 0,1137, wR2 = 0,1201

Dades cristal·logràfiques del clúster [Fe₅MoAu₂C(CO)₁₇(dppm)]

Fórmula empírica	C ₄₃ H ₂₂ Au ₂ Fe ₅ MoNO ₁₇ P ₂
Pes molecular	1641,67
Temperatura	293(2) K
Longitud d'ona	0,71069 Å
Sistema cristal·lí, grup espacial	Monoclínic, P2 ₁
Dimensions de la cel·la unitària	a = 10,8220(10) Å α = 90° b = 25,7800(10) Å β = 104,11° c = 17,8930(10) Å γ = 90°
Volum	4841(6) Å ³
Z, densitat (calculada)	4, 2,252 Mg/m ³
Coefficient d'absorció	7,876 mm ⁻¹
F(000)	3104
Dimensions del cristall	0,1 x 0,1 x 0,2 mm
Interval de θ	1,94 a 25,01°
Índex d'interval	-7 ≤ h ≤ 7 0 ≤ k ≤ 30 0 ≤ l ≤ 20
Reflexions recollides / úniques	15460 / 5281 [R(int) = 0,0654]
Mètode de refinament	Matriu completa dels mínims quadrats
Dades / restringits / paràmetres	5281 / 72 / 631
GOF	0,869
Índex R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0268, wR2 = 0,0442
Índex R (totes les dades)	R1 = 0,0803, wR2 = 0,0496

Dades cristal·logràfiques de l'aresta [PPh₄][Au(C≡CC₅H₄N)₂]

Fórmula empírica	C ₃₈ H ₂₈ AuN ₂ P
Pes molecular	740,56
Temperatura	293(2) K
Longitud d'ona	0,71069 Å
Sistema cristal·lí, grup espacial	Triclínic, P-1
Dimensions de la cel·la unitària	a = 10,8070(10) Å α = 106,260(10)° b = 12,7260(10) Å β = 107,717(10)° c = 13,8840(10) Å γ = 109,210(10)°
Volum	1556,6(2) Å ³
Z, densitat (calculada)	2, 1,580 Mg/m ³
Coefficient d'absorció	4,806 mm ⁻¹
F(000)	728
Dimensions del cristall	0,1 x 0,1 x 0,2 mm
Interval de θ	1,70 a 28,82°
Índex d'interval	0 ≤ h ≤ 14 -17 ≤ k ≤ 16 -18 ≤ l ≤ 17
Reflexions recollides / úniques	11197 / 6435 [R(int) = 0,0234]
Mètode de refinament	Matriu completa dels mínims quadrats
Dades / restringits / paràmetres	6435 / 0 / 467
GOF	1,131
Índex R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0401, wR2 = 0,1040
Índex R (totes les dades)	R1 = 0,0549, wR2 = 0,1209

Dades cristal·logràfiques de la cantonada**[Pt((4-fenil)(4-piridil)acetilè)₂(dppp)]**

Fórmula empírica	C ₅₇ H ₅₂ N ₂ OP ₂ Pt
Pes molecular	1038,04
Temperatura	293(2) K
Longitud d'ona	0,71073 Å
Sistema cristal·lí, grup espacial	Monoclínic, C _m
Dimensions de la cel·la unitària	a = 11,3140(12) Å α = 90° b = 25,359(3) Å β = 121,99(4)° c = 9,7065(11) Å γ = 90°
Volum	2362,0(5) Å ³
Z, densitat (calculada)	2, 1,460 Mg/m ³
Coefficient d'absorció	3,080 mm ⁻¹
F(000)	1048
Dimensions del cristall	0,01 x 0,07 x 0,48 mm
Interval de θ	2,27 a 28,30°
Índex d'interval	-15 ≤ h ≤ 13 -23 ≤ k ≤ 33 -12 ≤ l ≤ 12
Reflexions recollides / úniques	7502 / 4354 [R(int) = 0,0441]
Mètode de refinament	Matriu completa dels mínims quadrats
Dades / restringits / paràmetres	4354 / 2 / 299
GOF	0,964
Índex R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0415, wR2 = 0,0684
Índex R (totes les dades)	R1 = 0,0529, wR2 = 0,0733

Dades cristal·logràfiques del compost
 $[(\mu\text{-C}\equiv\text{Cpy})\{\text{Re}(\text{2,2'}\text{-bpy})(\text{CO})_3\}_2](\text{OTf})$

Fórmula empírica	$\text{C}_{33}\text{H}_{20}\text{N}_5\text{Re}_2\cdot\text{SO}_3\text{CF}_3\cdot\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}\cdot 1/2\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$
Pes molecular	1207,17
Temperatura	200(2) K
Longitud d'ona	0,71073 Å
Sistema cristal·lí, grup espacial	Triclínic, P-1
Dimensions de la cel·la unitària	$a = 10,3373(8) \text{ \AA}$ $\alpha = 114,060(13)^\circ$ $b = 14,2816(17) \text{ \AA}$ $\beta = 92,889(11)^\circ$ $c = 16,949(3) \text{ \AA}$ $\gamma = 99,020(10)^\circ$
Volum	2238,4(5) Å ³
Z, densitat (calculada)	2, 1,791 Mg/m ³
Coefficient d'absorció	5,522 mm ⁻¹
F(000)	1164
Dimensions del cristall	0,489 x 0,319 x 0,292 mm
Interval de θ	2,01 a 27,50°
Índex d'interval	$-13 \leq h \leq 13$ $-18 \leq k \leq 18$ $-22 \leq l \leq 21$
Reflexions recollides / úniques	39495 / 9901 [R(int) = 0,15333]
Mètode de refinament	Matriu completa dels mínims quadrats
Dades / restringits / paràmetres	9901 / 0 / 549
GOF	1,074
Índex R final [$I > 2\sigma(I)$]	R1 = 0,0534, wR2 = 0,1325
Índex R (totes les dades)	R1 = 0,0807, wR2 = 0,1598