
A. Crystallographic Data


[Rh(en)₃][MnN(NCS)(CN)₄·H₂O

Table A.1.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for [Rh(en)₃][MnN(NCS)(CN)₄·H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Mn	3293(1)	4753(1)	6001(1)	14(1)
Rh	7825(1)	5236(1)	3811(1)	12(1)
N(10)	4850(3)	4216(2)	6109(2)	20(1)
C(1)	2081(4)	3559(2)	6404(2)	18(1)
N(1)	1418(4)	2845(2)	6623(2)	27(1)
C(2)	3399(4)	5495(2)	6988(2)	16(1)
N(2)	3612(3)	5926(2)	7544(2)	21(1)
C(3)	4006(4)	6084(3)	5552(2)	21(1)
N(3)	4430(5)	6842(3)	5278(2)	37(1)
C(4)	2979(4)	4251(2)	4943(2)	18(1)
N(4)	2955(4)	3988(2)	4322(2)	29(1)
N(5)	906(4)	5491(2)	5948(2)	26(1)
C(5)	-292(4)	5744(3)	6149(2)	24(1)
S	-2043(1)	6055(1)	6435(1)	31(1)
N(11)	9061(3)	3841(2)	3851(2)	17(1)
C(11)	9061(4)	3464(3)	4649(2)	19(1)
C(12)	7478(4)	3614(2)	4966(2)	20(1)
N(12)	7000(3)	4724(2)	4840(1)	18(1)
N(21)	8812(3)	5742(2)	2814(2)	17(1)
C(21)	9998(4)	6558(3)	3000(2)	21(1)
C(22)	10838(4)	6221(3)	3699(2)	20(1)
N(22)	9676(3)	5992(2)	4297(2)	16(1)
N(31)	5969(3)	4539(2)	3276(2)	17(1)
C(31)	4981(4)	5386(3)	2951(2)	19(1)
C(32)	4851(4)	6240(3)	3523(2)	20(1)
N(32)	6435(3)	6550(2)	3778(2)	17(1)
O(1W)	1772(4)	7732(2)	7873(2)	37(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.12: Bond distances [Å] and angles [°] for [Rh(en)₃][MnN(NCS)(CN)₄].H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.540(3)	Mn-C(3)	1.995(4)
Mn-C(1)	2.004(3)	Mn-C(2)	2.007(3)
Mn-C(4)	2.017(3)	Mn-N(5)	2.298(3)
Rh-N(22)	2.080(3)	Rh-N(12)	2.082(2)
Rh-N(21)	2.083(3)	Rh-N(31)	2.088(3)
Rh-N(32)	2.088(3)	Rh-N(11)	2.101(3)
C(1)-N(1)	1.157(4)	C(2)-N(2)	1.152(4)
C(3)-N(3)	1.155(5)	C(4)-N(4)	1.160(4)
N(5)-C(5)	1.154(5)	C(5)-S	1.664(4)
N(11)-C(11)	1.504(4)	C(11)-C(12)	1.509(5)
C(12)-N(12)	1.508(4)	N(21)-C(21)	1.515(4)
C(21)-C(22)	1.513(5)	C(22)-N(22)	1.503(4)
N(31)-C(31)	1.509(4)	C(31)-C(32)	1.507(5)
C(32)-N(32)	1.512(4)		
			
N(10)-Mn-C(3)	99.26(15)	N(10)-Mn-C(1)	94.44(15)
C(3)-Mn-C(1)	166.25(15)	N(10)-Mn-C(2)	93.68(14)
C(3)-Mn-C(2)	85.84(13)	C(1)-Mn-C(2)	94.40(12)
N(10)-Mn-C(4)	95.36(15)	C(3)-Mn-C(4)	86.69(13)
C(1)-Mn-C(4)	90.99(13)	C(2)-Mn-C(4)	169.08(13)
N(10)-Mn-N(5)	174.60(13)	C(3)-Mn-N(5)	84.87(14)
C(1)-Mn-N(5)	81.52(13)	C(2)-Mn-N(5)	83.11(12)
C(4)-Mn-N(5)	88.31(13)	N(22)-Rh-N(12)	92.92(11)
N(22)-Rh-N(21)	83.48(11)	N(12)-Rh-N(21)	175.78(11)
N(22)-Rh-N(31)	176.77(11)	N(12)-Rh-N(31)	89.88(11)
N(21)-Rh-N(31)	93.78(11)	N(22)-Rh-N(32)	94.85(11)
N(12)-Rh-N(32)	94.63(11)	N(21)-Rh-N(32)	87.88(12)
N(31)-Rh-N(32)	83.31(11)	N(22)-Rh-N(11)	89.24(11)
N(12)-Rh-N(11)	82.90(11)	N(21)-Rh-N(11)	94.82(11)
N(31)-Rh-N(11)	92.71(11)	N(32)-Rh-N(11)	175.34(11)
N(1)-C(1)-Mn	177.5(3)	N(2)-C(2)-Mn	173.3(3)
N(3)-C(3)-Mn	178.4(3)	N(4)-C(4)-Mn	173.0(3)
C(5)-N(5)-Mn	158.3(3)	N(5)-C(5)-S	177.6(3)
C(11)-N(11)-Rh	108.0(2)	N(11)-C(11)-C(12)	108.3(3)
N(12)-C(12)-C(11)	108.7(3)	C(12)-N(12)-Rh	109.69(18)
C(21)-N(21)-Rh	108.4(2)	C(22)-C(21)-N(21)	108.3(3)
N(22)-C(22)-C(21)	108.3(3)	C(22)-N(22)-Rh	108.8(2)
C(31)-N(31)-Rh	108.06(19)	C(32)-C(31)-N(31)	108.2(3)
C(31)-C(32)-N(32)	109.2(3)	C(32)-N(32)-Rh	109.1(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.1.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Rh}(\text{en})_3][\text{MnN}(\text{NCS})(\text{CN})_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^2U11 + \dots + 2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	14(1)	14(1)	14(1)	1(1)	1(1)	0(1)
Rh	12(1)	11(1)	13(1)	-1(1)	0(1)	0(1)
N(10)	19(1)	23(2)	18(1)	0(1)	4(1)	1(1)
C(1)	17(2)	18(2)	19(1)	-3(1)	5(1)	3(1)
N(1)	26(2)	21(2)	34(2)	-2(1)	10(1)	-3(1)
C(2)	13(1)	15(2)	20(2)	5(1)	2(1)	1(1)
N(2)	20(2)	21(2)	21(2)	2(1)	2(1)	2(1)
C(3)	26(2)	18(2)	18(2)	-4(1)	5(1)	-2(1)
N(3)	65(3)	21(2)	24(2)	-3(1)	6(2)	-11(2)
C(4)	18(2)	14(1)	21(2)	6(1)	1(1)	0(1)
N(4)	41(2)	26(2)	19(1)	0(1)	0(1)	-2(2)
N(5)	30(2)	27(2)	22(1)	-1(1)	-3(1)	4(1)
C(5)	24(2)	17(2)	31(2)	1(2)	-4(2)	3(1)
S	27(1)	32(1)	34(1)	-2(1)	0(1)	2(1)
N(11)	17(1)	13(1)	21(1)	1(1)	2(1)	1(1)
C(11)	20(2)	14(2)	23(2)	4(1)	1(1)	3(1)
C(12)	23(2)	17(2)	19(2)	2(1)	5(1)	1(1)
N(12)	19(1)	17(1)	18(1)	-1(1)	3(1)	3(1)
N(21)	15(1)	18(1)	17(1)	0(1)	1(1)	-1(1)
C(21)	17(2)	16(2)	29(2)	3(1)	4(1)	-1(1)
C(22)	16(2)	15(2)	29(2)	0(1)	-1(1)	-3(1)
N(22)	16(1)	12(1)	19(1)	0(1)	-5(1)	-1(1)
N(31)	17(1)	13(2)	20(1)	1(1)	0(1)	-2(1)
C(31)	13(1)	23(2)	22(2)	3(1)	-4(1)	-1(1)
C(32)	12(2)	24(2)	25(2)	0(2)	-2(1)	3(1)
N(32)	16(1)	16(1)	19(1)	-1(1)	0(1)	3(1)
O(1W)	26(2)	26(2)	59(2)	18(1)	15(1)	12(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.1.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Rh}(\text{en})_3][\text{MnN}(\text{NCS})(\text{CN})_4]\cdot\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	8624	3366	3551	20
H(11B)	10027	3946	3694	20
H(11C)	9799	3852	4941	23
H(11D)	9339	2737	4666	23
H(12A)	6765	3149	4721	24
H(12B)	7478	3460	5498	24
H(12C)	7373	5126	5209	22
H(12D)	5974	4770	4848	22
H(21A)	9256	5206	2576	20
H(21B)	8091	6011	2512	20
H(21C)	10710	6632	2587	25
H(21D)	9505	7221	3083	25
H(22A)	11443	5608	3596	24
H(22B)	11521	6768	3865	24
H(22C)	9364	6586	4512	19
H(22D)	10095	5589	4653	19
H(31A)	6301	4117	2909	20
H(31B)	5428	4160	3605	20
H(31C)	5437	5651	2494	23
H(31D)	3976	5115	2832	23
H(32A)	4257	6002	3948	24
H(32B)	4334	6832	3305	24
H(32C)	6386	6840	4236	20
H(32D)	6830	7019	3459	20
H(11W)	2350(60)	7300(40)	7940(30)	44
H(12W)	830(60)	7740(40)	7990(30)	44

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄P)₂[MnN(CN)₄]-2H₂O

Table A.2.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (Ph₄P)₂[MnN(CN)₄]-2H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Mn	4857(1)	2550(1)	2521(1)	44(1)
P(1)	1689(1)	8188(1)	1560(1)	41(1)
P(2)	8419(1)	6559(1)	3754(1)	39(1)
N(10)	5435(2)	3522(2)	3163(2)	75(1)
C(1)	6138(2)	1722(2)	2321(2)	49(1)
N(1)	6875(2)	1219(2)	2212(2)	72(1)
C(2)	4771(2)	1466(2)	3270(2)	53(1)
N(2)	4746(2)	868(2)	3730(2)	78(1)
C(3)	3178(2)	2709(2)	2318(2)	55(1)
N(3)	2202(2)	2760(2)	2211(2)	89(1)
C(4)	4681(2)	3152(2)	1450(2)	56(1)
N(4)	4627(2)	3549(2)	859(2)	87(1)
C(111)	2291(2)	8834(2)	883(2)	48(1)
C(112)	2787(2)	8201(2)	354(2)	66(1)
C(113)	3268(3)	8679(3)	-160(2)	79(1)
C(114)	3265(3)	9778(3)	-152(2)	86(1)
C(115)	2795(3)	10422(3)	367(2)	97(1)
C(116)	2303(3)	9951(2)	884(2)	76(1)
C(121)	976(2)	9179(2)	2074(1)	42(1)
C(122)	1600(2)	10073(2)	2632(2)	57(1)
C(123)	998(3)	10847(2)	2987(2)	69(1)
C(124)	-189(3)	10722(3)	2784(2)	71(1)
C(125)	-804(3)	9845(3)	2236(2)	68(1)
C(126)	-234(2)	9066(2)	1878(2)	56(1)
C(131)	604(2)	7150(2)	937(1)	45(1)
C(132)	-57(2)	7245(2)	100(2)	65(1)
C(133)	-1018(3)	6530(3)	-322(2)	86(1)
C(134)	-1312(3)	5731(3)	83(2)	81(1)
C(135)	-660(3)	5625(3)	892(2)	72(1)
C(136)	299(2)	6327(2)	1322(2)	57(1)
C(141)	2801(2)	7547(2)	2320(2)	45(1)
C(142)	3313(2)	6661(2)	2025(2)	68(1)
C(143)	4146(3)	6124(3)	2588(2)	79(1)
C(144)	4484(2)	6480(3)	3432(2)	74(1)
C(145)	4000(3)	7361(3)	3733(2)	79(1)
C(146)	3147(2)	7901(2)	3183(2)	62(1)
C(211)	7468(2)	7281(2)	2964(2)	43(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.2.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{CN})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	x	y	z	U(eq)
C(212)	6871(2)	8143(2)	3202(2)	65(1)
C(213)	6124(3)	8691(3)	2595(2)	77(1)
C(214)	5969(3)	8394(3)	1763(2)	75(1)
C(215)	6546(3)	7553(3)	1513(2)	85(1)
C(216)	7306(3)	6994(2)	2111(2)	69(1)
C(221)	9693(2)	7404(2)	4394(1)	42(1)
C(222)	10353(2)	7120(2)	5176(2)	50(1)
C(223)	11370(2)	7717(2)	5654(2)	57(1)
C(224)	11733(2)	8594(3)	5363(2)	72(1)
C(225)	11085(3)	8886(3)	4594(2)	85(1)
C(226)	10060(2)	8295(2)	4107(2)	65(1)
C(231)	8858(2)	5364(2)	3228(1)	44(1)
C(232)	10037(2)	5221(2)	3343(2)	58(1)
C(233)	10363(3)	4318(3)	2919(2)	74(1)
C(234)	9547(3)	3559(3)	2390(2)	79(1)
C(235)	8367(3)	3677(2)	2269(2)	74(1)
C(236)	8025(2)	4588(2)	2688(2)	59(1)
C(241)	7705(2)	6172(2)	4473(1)	39(1)
C(242)	7456(2)	5093(2)	4513(2)	51(1)
C(243)	6901(2)	4837(2)	5070(2)	63(1)
C(244)	6595(2)	5647(3)	5583(2)	63(1)
C(245)	6842(2)	6720(3)	5553(2)	58(1)
C(246)	7401(2)	6993(2)	5006(2)	51(1)
O(1W)	3572(2)	417(2)	4971(2)	78(1)
O(2W)	6255(3)	4364(3)	-26(2)	135(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.22: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(CN)₄]·2H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.498(2)	Mn-C(1)	1.960(3)
Mn-C(3)	1.964(3)	Mn-C(2)	1.974(3)
Mn-C(4)	1.983(3)	P(1)-C(131)	1.783(2)
P(1)-C(121)	1.792(2)	P(1)-C(111)	1.795(3)
P(1)-C(141)	1.797(2)	P(2)-C(211)	1.792(2)
P(2)-C(231)	1.793(2)	P(2)-C(221)	1.793(2)
P(2)-C(241)	1.803(2)	C(1)-N(1)	1.141(3)
C(2)-N(2)	1.143(3)	C(3)-N(3)	1.139(3)
C(4)-N(4)	1.146(3)	C(111)-C(116)	1.378(4)
C(111)-C(112)	1.390(3)	C(112)-C(113)	1.373(4)
C(113)-C(114)	1.354(4)	C(114)-C(115)	1.366(4)
C(115)-C(116)	1.381(4)	C(121)-C(122)	1.384(3)
C(121)-C(126)	1.394(3)	C(122)-C(123)	1.395(4)
C(123)-C(124)	1.367(4)	C(124)-C(125)	1.360(4)
C(125)-C(126)	1.376(3)	C(131)-C(136)	1.381(3)
C(131)-C(132)	1.392(3)	C(132)-C(133)	1.382(4)
C(133)-C(134)	1.373(5)	C(134)-C(135)	1.354(4)
C(135)-C(136)	1.374(4)	C(141)-C(142)	1.377(3)
C(141)-C(146)	1.378(3)	C(142)-C(143)	1.380(4)
C(143)-C(144)	1.351(4)	C(144)-C(145)	1.356(4)
C(145)-C(146)	1.384(4)	C(211)-C(216)	1.377(3)
C(211)-C(212)	1.380(3)	C(212)-C(213)	1.380(4)
C(213)-C(214)	1.346(4)	C(214)-C(215)	1.353(4)
C(215)-C(216)	1.386(4)	C(221)-C(226)	1.381(3)
C(221)-C(222)	1.388(3)	C(222)-C(223)	1.373(3)
C(223)-C(224)	1.367(4)	C(224)-C(225)	1.372(4)
C(225)-C(226)	1.380(4)	C(231)-C(236)	1.382(3)
C(231)-C(232)	1.392(3)	C(232)-C(233)	1.374(4)
C(233)-C(234)	1.355(4)	C(234)-C(235)	1.387(4)
C(235)-C(236)	1.386(4)	C(241)-C(242)	1.377(3)
C(241)-C(246)	1.396(3)	C(242)-C(243)	1.381(3)
C(243)-C(244)	1.366(4)	C(244)-C(245)	1.365(4)
C(245)-C(246)	1.376(3)		
N(10)-Mn-C(1)	105.46(12)	N(10)-Mn-C(3)	104.09(12)
C(1)-Mn-C(3)	150.40(11)	N(10)-Mn-C(2)	101.15(12)
C(1)-Mn-C(2)	86.06(10)	C(3)-Mn-C(2)	86.71(10)
N(10)-Mn-C(4)	100.37(13)	C(1)-Mn-C(4)	87.38(10)
C(3)-Mn-C(4)	88.94(10)	C(2)-Mn-C(4)	158.46(11)
C(131)-P(1)-C(121)	107.19(11)	C(131)-P(1)-C(111)	109.87(11)
C(121)-P(1)-C(111)	109.41(11)	C(131)-P(1)-C(141)	107.69(11)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.2.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(CN)₄]·2H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(121)-P(1)-C(141)	111.59(11)	C(111)-P(1)-C(141)	111.00(11)
C(211)-P(2)-C(231)	108.73(11)	C(211)-P(2)-C(221)	110.92(11)
C(231)-P(2)-C(221)	109.39(11)	C(211)-P(2)-C(241)	111.22(11)
C(231)-P(2)-C(241)	110.09(11)	C(221)-P(2)-C(241)	106.48(10)
N(1)-C(1)-Mn	178.4(2)	N(2)-C(2)-Mn	177.3(3)
N(3)-C(3)-Mn	177.2(3)	N(4)-C(4)-Mn	176.0(3)
C(116)-C(111)-C(112)	118.5(3)	C(116)-C(111)-P(1)	121.8(2)
C(112)-C(111)-P(1)	119.6(2)	C(113)-C(112)-C(111)	120.6(3)
C(114)-C(113)-C(112)	119.9(3)	C(113)-C(114)-C(115)	120.8(3)
C(114)-C(115)-C(116)	119.9(3)	C(111)-C(116)-C(115)	120.3(3)
C(122)-C(121)-C(126)	119.8(2)	C(122)-C(121)-P(1)	121.11(18)
C(126)-C(121)-P(1)	119.03(19)	C(121)-C(122)-C(123)	118.9(3)
C(124)-C(123)-C(122)	120.3(3)	C(125)-C(124)-C(123)	120.9(3)
C(124)-C(125)-C(126)	120.1(3)	C(125)-C(126)-C(121)	119.9(3)
C(136)-C(131)-C(132)	119.1(2)	C(136)-C(131)-P(1)	119.47(19)
C(132)-C(131)-P(1)	120.8(2)	C(133)-C(132)-C(131)	119.6(3)
C(134)-C(133)-C(132)	120.0(3)	C(135)-C(134)-C(133)	120.6(3)
C(134)-C(135)-C(136)	120.2(3)	C(135)-C(136)-C(131)	120.4(3)
C(142)-C(141)-C(146)	119.0(2)	C(142)-C(141)-P(1)	118.42(19)
C(146)-C(141)-P(1)	122.5(2)	C(141)-C(142)-C(143)	120.4(3)
C(144)-C(143)-C(142)	120.1(3)	C(143)-C(144)-C(145)	120.3(3)
C(144)-C(145)-C(146)	120.7(3)	C(141)-C(146)-C(145)	119.5(3)
C(216)-C(211)-C(212)	118.3(2)	C(216)-C(211)-P(2)	121.5(2)
C(212)-C(211)-P(2)	120.24(19)	C(213)-C(212)-C(211)	120.4(3)
C(214)-C(213)-C(212)	120.5(3)	C(213)-C(214)-C(215)	120.3(3)
C(214)-C(215)-C(216)	120.3(3)	C(211)-C(216)-C(215)	120.2(3)
C(226)-C(221)-C(222)	119.6(2)	C(226)-C(221)-P(2)	121.40(19)
C(222)-C(221)-P(2)	118.94(19)	C(223)-C(222)-C(221)	119.9(2)
C(224)-C(223)-C(222)	120.3(3)	C(223)-C(224)-C(225)	120.3(3)
C(224)-C(225)-C(226)	120.1(3)	C(225)-C(226)-C(221)	119.8(3)
C(236)-C(231)-C(232)	119.4(2)	C(236)-C(231)-P(2)	120.23(19)
C(232)-C(231)-P(2)	120.3(2)	C(233)-C(232)-C(231)	120.0(3)
C(234)-C(233)-C(232)	120.5(3)	C(233)-C(234)-C(235)	120.6(3)
C(236)-C(235)-C(234)	119.4(3)	C(231)-C(236)-C(235)	120.0(3)
C(242)-C(241)-C(246)	119.1(2)	C(242)-C(241)-P(2)	122.00(18)
C(246)-C(241)-P(2)	118.89(19)	C(241)-C(242)-C(243)	120.0(2)
C(244)-C(243)-C(242)	120.5(3)	C(245)-C(244)-C(243)	120.2(3)
C(244)-C(245)-C(246)	120.2(3)	C(245)-C(246)-C(241)	120.0(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.2.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{CN})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^*2U11+ .. +2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	47(1)	49(1)	41(1)	10(1)	19(1)	8(1)
P(1)	43(1)	44(1)	40(1)	8(1)	16(1)	9(1)
P(2)	39(1)	43(1)	39(1)	6(1)	16(1)	4(1)
N(10)	87(2)	67(2)	62(2)	-11(1)	22(1)	-7(1)
C(1)	47(2)	61(2)	47(2)	17(1)	20(1)	8(1)
N(1)	62(2)	88(2)	82(2)	25(2)	38(1)	22(2)
C(2)	46(2)	72(2)	50(2)	22(2)	25(1)	20(1)
N(2)	83(2)	99(2)	78(2)	50(2)	46(2)	33(2)
C(3)	64(2)	69(2)	47(2)	26(1)	30(1)	29(2)
N(3)	70(2)	136(3)	88(2)	56(2)	45(2)	49(2)
C(4)	60(2)	59(2)	59(2)	21(2)	29(1)	14(1)
N(4)	102(2)	99(2)	79(2)	46(2)	44(2)	18(2)
C(111)	53(2)	53(2)	44(1)	13(1)	20(1)	8(1)
C(112)	80(2)	65(2)	67(2)	16(2)	40(2)	16(2)
C(113)	88(2)	98(3)	66(2)	17(2)	45(2)	10(2)
C(114)	101(3)	100(3)	73(2)	28(2)	47(2)	-10(2)
C(115)	154(4)	67(2)	91(3)	26(2)	64(3)	-6(2)
C(116)	114(3)	58(2)	74(2)	19(2)	53(2)	9(2)
C(121)	45(1)	45(2)	39(1)	10(1)	15(1)	10(1)
C(122)	59(2)	57(2)	58(2)	5(2)	22(1)	3(2)
C(123)	95(2)	51(2)	63(2)	-5(2)	34(2)	1(2)
C(124)	94(2)	60(2)	79(2)	14(2)	52(2)	30(2)
C(125)	61(2)	71(2)	81(2)	14(2)	32(2)	25(2)
C(126)	53(2)	56(2)	58(2)	8(1)	19(1)	13(1)
C(131)	47(1)	48(2)	40(1)	5(1)	14(1)	11(1)
C(132)	71(2)	66(2)	50(2)	12(2)	8(2)	9(2)
C(133)	76(2)	95(3)	58(2)	1(2)	-11(2)	6(2)
C(134)	59(2)	83(3)	85(3)	-15(2)	12(2)	-10(2)
C(135)	72(2)	66(2)	82(2)	2(2)	33(2)	-12(2)
C(136)	64(2)	58(2)	47(2)	6(1)	17(1)	-3(2)
C(141)	41(1)	51(2)	45(2)	14(1)	12(1)	8(1)
C(142)	72(2)	68(2)	61(2)	10(2)	16(2)	27(2)
C(143)	73(2)	75(2)	93(3)	29(2)	23(2)	32(2)
C(144)	48(2)	77(2)	88(2)	42(2)	1(2)	5(2)
C(145)	79(2)	86(2)	57(2)	21(2)	-3(2)	2(2)
C(146)	67(2)	63(2)	52(2)	13(2)	10(1)	10(2)
C(211)	42(1)	45(2)	44(1)	13(1)	15(1)	3(1)
C(212)	84(2)	65(2)	56(2)	21(2)	31(2)	25(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.2.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{CN})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^*2U11+ \dots +2hka^*b^*U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(213)	82(2)	74(2)	96(3)	44(2)	44(2)	34(2)
C(214)	59(2)	85(2)	77(2)	43(2)	6(2)	6(2)
C(215)	106(3)	89(3)	46(2)	19(2)	5(2)	4(2)
C(216)	88(2)	72(2)	46(2)	11(2)	20(2)	20(2)
C(221)	44(1)	47(2)	40(1)	8(1)	18(1)	2(1)
C(222)	51(2)	48(2)	49(2)	10(1)	14(1)	-1(1)
C(223)	55(2)	66(2)	46(2)	6(1)	10(1)	0(2)
C(224)	58(2)	84(2)	66(2)	-3(2)	15(2)	-20(2)
C(225)	82(2)	88(2)	80(2)	28(2)	17(2)	-39(2)
C(226)	67(2)	76(2)	53(2)	25(2)	15(2)	-14(2)
C(231)	51(2)	45(2)	43(1)	9(1)	24(1)	8(1)
C(232)	58(2)	71(2)	48(2)	10(1)	19(1)	20(2)
C(233)	81(2)	84(2)	65(2)	15(2)	32(2)	41(2)
C(234)	127(3)	56(2)	77(2)	19(2)	61(2)	36(2)
C(235)	119(3)	48(2)	65(2)	-1(2)	49(2)	-13(2)
C(236)	70(2)	53(2)	63(2)	0(2)	37(2)	-4(2)
C(241)	33(1)	50(2)	35(1)	8(1)	11(1)	3(1)
C(242)	59(2)	50(2)	48(2)	8(1)	23(1)	1(1)
C(243)	76(2)	60(2)	57(2)	13(2)	26(2)	-14(2)
C(244)	57(2)	90(2)	49(2)	13(2)	24(1)	-11(2)
C(245)	62(2)	76(2)	44(2)	5(2)	27(1)	9(2)
C(246)	61(2)	53(2)	44(1)	7(1)	22(1)	7(1)
O(1W)	67(1)	93(2)	89(2)	34(1)	39(1)	18(1)
O(2W)	125(2)	118(2)	222(4)	81(2)	115(2)	48(2)

Table A2.5: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{CN})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(112)	2793	7446	349	79
H(113)	3595	8249	-514	94
H(114)	3588	10097	-504	103
H(115)	2806	11177	372	116
H(116)	1979	10390	1235	91
H(122)	2408	10156	2767	69
H(123)	1407	11450	3365	83
H(124)	-581	11245	3023	85
H(125)	-1612	9772	2104	82
H(126)	-656	8465	1505	67

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.2.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{CN})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (continued).

	x	y	z	U(eq)
H(132)	146	7785	-173	78
H(133)	-1465	6590	-880	103
H(134)	-1966	5259	-201	98
H(135)	-861	5075	1157	87
H(136)	745	6246	1876	69
H(142)	3096	6422	1443	82
H(143)	4475	5516	2385	95
H(144)	5051	6120	3809	88
H(145)	4244	7605	4314	95
H(146)	2811	8497	3394	75
H(212)	6972	8357	3775	78
H(213)	5724	9270	2762	92
H(214)	5464	8769	1359	90
H(215)	6431	7349	938	101
H(216)	7707	6423	1935	82
H(222)	10107	6526	5377	60
H(223)	11813	7524	6177	69
H(224)	12424	8994	5689	86
H(225)	11337	9483	4399	101
H(226)	9618	8496	3587	78
H(232)	10603	5737	3706	70
H(233)	11152	4227	2996	89
H(234)	9779	2953	2105	94
H(235)	7811	3149	1911	88
H(236)	7236	4678	2606	71
H(242)	7662	4538	4166	61
H(243)	6734	4108	5096	76
H(244)	6216	5467	5953	76
H(245)	6633	7269	5904	70
H(246)	7575	7725	4991	61
H(11W)	3890(40)	550(30)	4540(30)	162
H(12W)	4070(40)	190(40)	5300(30)	162
H(21W)	5800(40)	4130(30)	330(30)	162
H(22W)	5900(40)	5010(40)	-340(30)	162

(Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic)**Table A.3.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic). U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.**

	x	y	z	U(eq)
Mn	91(1)	2638(1)	2802(1)	39(1)
P(1)	4878(1)	7659(1)	1379(1)	36(1)
P(2)	3892(1)	2110(1)	5325(1)	35(1)
N(10)	-1492(4)	2196(3)	2940(2)	58(1)
C(1)	698(5)	1197(4)	2981(2)	38(1)
N(1)	1059(4)	392(4)	3112(2)	52(1)
C(2)	-165(5)	2019(4)	2051(2)	41(1)
N(2)	-294(5)	1627(4)	1624(2)	64(1)
C(3)	57(5)	4258(5)	2605(2)	51(1)
N(3)	59(5)	5209(4)	2505(2)	81(2)
C(4)	867(5)	3363(4)	3512(2)	40(1)
N(4)	1290(4)	3771(3)	3927(2)	52(1)
N(11)	2623(4)	3331(3)	2588(1)	37(1)
C(11)	3312(5)	2605(4)	2338(2)	40(1)
C(12)	4774(5)	2908(5)	2255(2)	49(1)
C(13)	5580(6)	4023(5)	2440(2)	66(2)
C(14)	4912(6)	4791(5)	2688(2)	68(2)
C(15)	3439(6)	4410(4)	2753(2)	51(1)
C(16)	5436(6)	2023(5)	1966(3)	90(2)
C(111)	6109(4)	7835(4)	1932(2)	35(1)
C(112)	6940(5)	7036(4)	1980(2)	45(1)
C(113)	7971(5)	7215(4)	2382(2)	50(1)
C(114)	8190(5)	8193(5)	2733(2)	49(1)
C(115)	7395(5)	8996(4)	2691(2)	54(1)
C(116)	6356(5)	8818(4)	2294(2)	52(1)
C(121)	5859(5)	8434(4)	861(2)	38(1)
C(122)	7148(5)	9334(4)	977(2)	47(1)
C(123)	7872(6)	9969(4)	580(2)	59(2)
C(124)	7314(6)	9720(5)	78(2)	65(2)
C(125)	6028(6)	8839(4)	-45(2)	54(1)
C(126)	5310(5)	8206(4)	351(2)	44(1)
C(131)	3445(5)	8305(4)	1550(2)	38(1)
C(132)	2992(5)	9030(4)	1217(2)	51(1)
C(133)	1878(6)	9512(5)	1359(2)	64(2)
C(134)	1243(5)	9314(4)	1822(2)	55(1)
C(135)	1692(6)	8602(5)	2153(2)	68(2)
C(136)	2791(6)	8101(5)	2017(2)	62(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.3.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{3-pic})(\text{CN})_4] \cdot (\text{3-pic})$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	x	y	z	U(eq)
C(141)	4168(5)	6099(4)	1182(2)	37(1)
C(142)	2928(5)	5421(4)	1397(2)	49(1)
C(143)	2456(6)	4195(5)	1286(2)	61(2)
C(144)	3219(6)	3639(5)	966(2)	64(2)
C(145)	4450(6)	4288(5)	747(2)	62(2)
C(146)	4933(5)	5512(4)	856(2)	49(1)
C(211)	2544(5)	685(4)	5312(2)	34(1)
C(212)	1780(5)	347(4)	5758(2)	48(1)
C(213)	763(5)	-757(5)	5753(2)	55(1)
C(214)	491(5)	-1507(4)	5310(2)	48(1)
C(215)	1223(5)	-1192(4)	4867(2)	48(1)
C(216)	2261(5)	-84(4)	4866(2)	44(1)
C(221)	4596(5)	2286(4)	4690(2)	34(1)
C(222)	6037(5)	2326(4)	4605(2)	40(1)
C(223)	6536(5)	2382(4)	4107(2)	49(1)
C(224)	5641(6)	2405(4)	3686(2)	52(1)
C(225)	4214(5)	2368(4)	3763(2)	52(1)
C(226)	3685(5)	2293(4)	4254(2)	48(1)
C(231)	3061(5)	3265(4)	5536(2)	38(1)
C(232)	2584(5)	3942(4)	5179(2)	51(1)
C(233)	1767(6)	4687(5)	5359(3)	73(2)
C(234)	1426(6)	4770(5)	5866(3)	77(2)
C(235)	1921(6)	4134(5)	6228(3)	74(2)
C(236)	2755(6)	3391(4)	6059(2)	58(2)
C(241)	5319(5)	2151(4)	5800(2)	34(1)
C(242)	6345(5)	3230(4)	5938(2)	46(1)
C(243)	7494(5)	3275(5)	6278(2)	53(1)
C(244)	7601(6)	2247(5)	6485(2)	57(2)
C(245)	6588(6)	1179(5)	6364(2)	54(1)
C(246)	5434(5)	1122(4)	6019(2)	42(1)
N(1P)	7797(5)	3696(6)	303(3)	86(2)
C(1P)	8209(6)	4836(7)	193(3)	78(2)
C(2P)	8857(6)	5787(6)	545(3)	79(2)
C(3P)	9104(8)	5519(10)	1047(4)	107(3)
C(4P)	8695(9)	4376(12)	1174(4)	121(3)
C(5P)	8074(8)	3490(8)	801(4)	103(3)
C(6P)	9274(8)	7040(6)	378(3)	144(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.32: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.523(4)	Mn-C(4)	1.989(5)
Mn-C(3)	1.992(5)	Mn-C(2)	1.995(5)
Mn-C(1)	1.996(5)	Mn-N(11)	2.431(4)
P(1)-C(141)	1.785(4)	P(1)-C(111)	1.789(4)
P(1)-C(131)	1.790(4)	P(1)-C(121)	1.793(5)
P(2)-C(221)	1.780(4)	P(2)-C(211)	1.798(4)
P(2)-C(231)	1.801(4)	P(2)-C(241)	1.801(4)
C(1)-N(1)	1.150(5)	C(2)-N(2)	1.148(5)
C(3)-N(3)	1.151(5)	C(4)-N(4)	1.151(5)
N(11)-C(15)	1.318(5)	N(11)-C(11)	1.348(5)
C(11)-C(12)	1.376(6)	C(12)-C(13)	1.362(6)
C(12)-C(16)	1.514(7)	C(13)-C(14)	1.367(7)
C(14)-C(15)	1.380(7)	C(111)-C(116)	1.386(6)
C(111)-C(112)	1.391(5)	C(112)-C(113)	1.376(6)
C(113)-C(114)	1.366(6)	C(114)-C(115)	1.367(6)
C(115)-C(116)	1.373(6)	C(121)-C(126)	1.380(6)
C(121)-C(122)	1.394(6)	C(122)-C(123)	1.382(6)
C(123)-C(124)	1.364(6)	C(124)-C(125)	1.385(7)
C(125)-C(126)	1.379(6)	C(131)-C(136)	1.371(6)
C(131)-C(132)	1.381(5)	C(132)-C(133)	1.383(6)
C(133)-C(134)	1.351(7)	C(134)-C(135)	1.366(6)
C(135)-C(136)	1.380(7)	C(141)-C(142)	1.384(6)
C(141)-C(146)	1.390(6)	C(142)-C(143)	1.379(6)
C(143)-C(144)	1.359(7)	C(144)-C(145)	1.371(7)
C(145)-C(146)	1.376(6)	C(211)-C(216)	1.377(6)
C(211)-C(212)	1.393(6)	C(212)-C(213)	1.382(6)
C(213)-C(214)	1.359(6)	C(214)-C(215)	1.368(6)
C(215)-C(216)	1.396(6)	C(221)-C(222)	1.396(6)
C(221)-C(226)	1.405(5)	C(222)-C(223)	1.374(6)
C(223)-C(224)	1.370(6)	C(224)-C(225)	1.379(6)
C(225)-C(226)	1.366(6)	C(231)-C(236)	1.384(6)
C(231)-C(232)	1.396(6)	C(232)-C(233)	1.385(7)
C(233)-C(234)	1.351(8)	C(234)-C(235)	1.378(7)
C(235)-C(236)	1.386(7)	C(241)-C(242)	1.384(6)
C(241)-C(246)	1.386(5)	C(242)-C(243)	1.378(6)
C(243)-C(244)	1.368(6)	C(244)-C(245)	1.362(6)
C(245)-C(246)	1.385(6)	N(1P)-C(1P)	1.326(7)
N(1P)-C(5P)	1.350(9)	C(1P)-C(2P)	1.372(8)
C(2P)-C(3P)	1.376(9)	C(2P)-C(6P)	1.495(8)
C(3P)-C(4P)	1.343(10)	C(4P)-C(5P)	1.354(10)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.32: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic) (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
N(10)-Mn-C(3)	97.5(2)	N(10)-Mn-C(4)	96.9(2)
N(10)-Mn-C(2)	97.4(2)	C(4)-Mn-C(3)	88.94(18)
C(3)-Mn-C(2)	90.54(19)	C(4)-Mn-C(2)	165.67(19)
C(4)-Mn-C(1)	86.97(18)	N(10)-Mn-C(1)	97.84(19)
C(2)-Mn-C(1)	89.75(18)	C(3)-Mn-C(1)	164.50(19)
C(4)-Mn-N(11)	82.82(16)	N(10)-Mn-N(11)	179.44(18)
C(2)-Mn-N(11)	82.90(16)	C(3)-Mn-N(11)	83.00(17)
C(141)-P(1)-C(111)	109.2(2)	C(1)-Mn-N(11)	81.66(15)
C(111)-P(1)-C(131)	109.4(2)	C(141)-P(1)-C(131)	110.5(2)
C(111)-P(1)-C(121)	108.0(2)	C(141)-P(1)-C(121)	110.3(2)
C(221)-P(2)-C(211)	108.4(2)	C(131)-P(1)-C(121)	109.4(2)
C(211)-P(2)-C(231)	108.3(2)	C(221)-P(2)-C(231)	113.0(2)
C(211)-P(2)-C(241)	109.5(2)	C(221)-P(2)-C(241)	110.3(2)
N(1)-C(1)-Mn	176.2(4)	C(231)-P(2)-C(241)	107.4(2)
N(3)-C(3)-Mn	177.9(5)	N(2)-C(2)-Mn	177.4(4)
C(15)-N(11)-C(11)	115.8(4)	N(4)-C(4)-Mn	178.6(5)
C(11)-N(11)-Mn	122.3(3)	C(15)-N(11)-Mn	121.7(3)
C(13)-C(12)-C(11)	117.4(5)	N(11)-C(11)-C(12)	124.8(4)
C(11)-C(12)-C(16)	120.4(5)	C(13)-C(12)-C(16)	122.2(5)
C(13)-C(14)-C(15)	119.2(5)	C(12)-C(13)-C(14)	119.3(5)
C(116)-C(111)-C(112)	118.4(4)	N(11)-C(15)-C(14)	123.4(5)
C(112)-C(111)-P(1)	120.0(3)	C(116)-C(111)-P(1)	121.3(3)
C(114)-C(113)-C(112)	119.7(5)	C(113)-C(112)-C(111)	120.6(4)
C(114)-C(115)-C(116)	119.8(5)	C(113)-C(114)-C(115)	120.8(5)
C(126)-C(121)-C(122)	119.1(4)	C(115)-C(116)-C(111)	120.7(4)
C(122)-C(121)-P(1)	119.9(4)	C(126)-C(121)-P(1)	120.8(4)
C(124)-C(123)-C(122)	119.9(5)	C(123)-C(122)-C(121)	120.0(5)
C(126)-C(125)-C(124)	118.8(5)	C(123)-C(124)-C(125)	121.2(5)
C(136)-C(131)-C(132)	118.8(4)	C(125)-C(126)-C(121)	121.0(5)
C(132)-C(131)-P(1)	120.8(4)	C(136)-C(131)-P(1)	120.4(3)
C(134)-C(133)-C(132)	121.6(5)	C(131)-C(132)-C(133)	119.4(5)
C(134)-C(135)-C(136)	120.2(5)	C(133)-C(134)-C(135)	119.2(5)
C(142)-C(141)-C(146)	118.4(4)	C(131)-C(136)-C(135)	120.7(5)
C(146)-C(141)-P(1)	120.7(4)	C(142)-C(141)-P(1)	120.6(4)
C(144)-C(143)-C(142)	119.9(5)	C(143)-C(142)-C(141)	120.8(5)
C(144)-C(145)-C(146)	120.1(5)	C(143)-C(144)-C(145)	120.5(5)
C(216)-C(211)-C(212)	119.4(4)	C(145)-C(146)-C(141)	120.3(5)
C(212)-C(211)-P(2)	119.9(4)	C(216)-C(211)-P(2)	120.7(4)
C(214)-C(213)-C(212)	119.9(5)	C(213)-C(212)-C(211)	120.2(5)
C(214)-C(215)-C(216)	119.9(5)	C(213)-C(214)-C(215)	121.0(5)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.32: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic) (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(222)-C(221)-C(226)	118.1(4)	C(211)-C(216)-C(215)	119.7(5)
C(226)-C(221)-P(2)	120.7(3)	C(222)-C(221)-P(2)	121.0(3)
C(224)-C(223)-C(222)	121.1(5)	C(223)-C(222)-C(221)	120.2(4)
C(226)-C(225)-C(224)	120.6(5)	C(223)-C(224)-C(225)	119.4(5)
C(236)-C(231)-C(232)	119.4(4)	C(225)-C(226)-C(221)	120.6(5)
C(232)-C(231)-P(2)	121.4(4)	C(236)-C(231)-P(2)	118.8(3)
C(234)-C(233)-C(232)	121.8(6)	C(233)-C(232)-C(231)	118.3(5)
C(234)-C(235)-C(236)	118.5(6)	C(233)-C(234)-C(235)	120.8(6)
C(242)-C(241)-C(246)	119.4(4)	C(231)-C(236)-C(235)	121.1(5)
C(246)-C(241)-P(2)	121.5(3)	C(242)-C(241)-P(2)	119.1(3)
C(244)-C(243)-C(242)	119.5(5)	C(243)-C(242)-C(241)	120.3(4)
C(244)-C(245)-C(246)	119.8(4)	C(245)-C(244)-C(243)	121.2(5)
C(1P)-N(1P)-C(5P)	115.5(6)	C(245)-C(246)-C(241)	119.8(4)
C(1P)-C(2P)-C(3P)	116.6(7)	N(1P)-C(1P)-C(2P)	125.2(7)
C(3P)-C(2P)-C(6P)	122.8(8)	C(1P)-C(2P)-C(6P)	120.6(8)
C(3P)-C(4P)-C(5P)	119.5(10)	C(4P)-C(3P)-C(2P)	120.1(8)
N(1P)-C(5P)-C(4P)	123.1(8)		

Table A.33: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄P)₂[MnN(3-pic)(CN)₄](3-pic). The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2p²[h²a*2U11+ .. +2hka*b*U12].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	36(1)	42(1)	42(1)	5(1)	3(1)	15(1)
P(1)	41(1)	38(1)	33(1)	3(1)	3(1)	15(1)
P(2)	37(1)	38(1)	33(1)	5(1)	1(1)	14(1)
N(10)	37(2)	69(3)	72(3)	3(2)	11(2)	19(2)
C(1)	34(3)	44(3)	34(3)	3(2)	8(2)	7(2)
N(1)	56(3)	50(3)	52(3)	5(2)	-5(2)	18(2)
C(2)	39(3)	33(3)	50(4)	2(3)	-12(3)	9(2)
N(2)	72(3)	61(3)	54(3)	-3(3)	-16(3)	13(2)
C(3)	51(3)	62(4)	44(3)	-2(3)	-9(3)	26(3)
N(3)	105(4)	59(3)	90(4)	13(3)	-11(3)	41(3)
C(4)	45(3)	41(3)	41(3)	4(3)	5(3)	22(2)
N(4)	69(3)	50(3)	43(3)	7(2)	4(2)	27(2)
N(11)	38(2)	36(2)	37(2)	3(2)	3(2)	8(2)
C(11)	35(3)	41(3)	41(3)	2(2)	-2(2)	6(2)
C(12)	42(3)	55(4)	50(4)	8(3)	1(3)	13(3)
C(13)	36(3)	80(5)	75(5)	9(4)	5(3)	6(3)
C(14)	60(4)	52(4)	71(4)	-2(3)	8(3)	-17(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.3.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{3-pic})(\text{CN})_4](\text{3-pic})$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^2U11+ .. +2hka*b*U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(15)	54(4)	46(3)	49(4)	1(3)	9(3)	5(3)
C(16)	61(4)	88(5)	128(6)	-7(4)	17(4)	35(4)
C(111)	34(3)	37(3)	36(3)	5(2)	1(2)	13(2)
C(112)	45(3)	39(3)	49(3)	1(2)	-5(3)	10(2)
C(113)	40(3)	52(3)	60(4)	15(3)	-6(3)	14(3)
C(114)	38(3)	58(4)	47(4)	12(3)	-8(3)	6(3)
C(115)	60(4)	53(3)	45(4)	-9(3)	-10(3)	15(3)
C(116)	58(4)	49(3)	53(4)	-4(3)	-7(3)	27(3)
C(121)	50(3)	36(3)	30(3)	-2(2)	6(2)	17(2)
C(122)	50(3)	46(3)	39(3)	3(2)	-1(3)	6(3)
C(123)	59(4)	56(4)	53(4)	16(3)	2(3)	-2(3)
C(124)	85(5)	65(4)	48(4)	18(3)	16(3)	18(3)
C(125)	75(4)	55(4)	35(3)	9(3)	2(3)	21(3)
C(126)	52(3)	39(3)	39(3)	-3(2)	-1(3)	14(2)
C(131)	42(3)	44(3)	33(3)	5(2)	8(2)	22(2)
C(132)	61(4)	63(4)	42(3)	12(3)	10(3)	38(3)
C(133)	72(4)	79(4)	56(4)	11(3)	9(3)	44(3)
C(134)	52(3)	62(4)	61(4)	-10(3)	4(3)	36(3)
C(135)	78(4)	93(5)	52(4)	19(3)	23(3)	53(4)
C(136)	78(4)	82(4)	45(4)	16(3)	14(3)	51(3)
C(141)	36(3)	38(3)	38(3)	6(2)	3(2)	14(2)
C(142)	50(3)	46(3)	52(4)	5(3)	6(3)	17(3)
C(143)	53(4)	53(4)	73(4)	19(3)	2(3)	6(3)
C(144)	68(4)	38(3)	83(5)	1(3)	-5(4)	13(3)
C(145)	68(4)	48(4)	73(4)	-9(3)	5(3)	23(3)
C(146)	45(3)	46(3)	53(4)	-3(3)	6(3)	12(3)
C(211)	38(3)	38(3)	30(3)	5(2)	-1(2)	17(2)
C(212)	52(3)	54(3)	36(3)	-2(2)	5(3)	12(3)
C(213)	44(3)	65(4)	53(4)	17(3)	17(3)	11(3)
C(214)	29(3)	48(3)	65(4)	9(3)	-2(3)	3(2)
C(215)	51(3)	46(3)	44(3)	-7(3)	-4(3)	13(3)
C(216)	44(3)	47(3)	44(3)	9(3)	9(3)	14(3)
C(221)	33(3)	36(3)	36(3)	9(2)	4(2)	13(2)
C(222)	35(3)	42(3)	44(3)	10(2)	0(2)	13(2)
C(223)	39(3)	55(3)	59(4)	13(3)	18(3)	20(3)
C(224)	58(4)	61(4)	39(3)	14(3)	9(3)	16(3)
C(225)	47(3)	71(4)	42(4)	16(3)	2(3)	20(3)
C(226)	36(3)	66(4)	45(4)	16(3)	5(3)	18(3)
C(231)	36(3)	32(3)	48(3)	2(2)	3(2)	14(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.3.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{3-pic})(\text{CN})_4](\text{3-pic})$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12}]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(232)	50(3)	40(3)	62(4)	6(3)	-4(3)	13(3)
C(233)	64(4)	42(4)	116(6)	1(4)	-20(4)	26(3)
C(234)	59(4)	47(4)	132(7)	-8(4)	16(4)	25(3)
C(235)	84(5)	64(4)	81(5)	-2(3)	32(4)	31(4)
C(236)	73(4)	63(4)	49(4)	8(3)	13(3)	37(3)
C(241)	37(3)	38(3)	30(3)	2(2)	2(2)	15(2)
C(242)	49(3)	40(3)	50(3)	2(2)	0(3)	18(3)
C(243)	44(3)	61(4)	51(4)	-5(3)	-4(3)	10(3)
C(244)	60(4)	70(4)	41(3)	2(3)	-11(3)	20(3)
C(245)	61(4)	63(4)	48(4)	18(3)	-4(3)	30(3)
C(246)	49(3)	39(3)	38(3)	4(2)	-1(2)	12(2)
N(1P)	70(4)	94(5)	92(5)	0(4)	-8(3)	22(3)
C(1P)	66(4)	93(5)	75(5)	-4(4)	-16(4)	24(4)
C(2P)	44(4)	92(6)	104(6)	-23(5)	-1(4)	31(4)
C(3P)	55(5)	168(9)	93(8)	-50(6)	-20(5)	39(6)
C(4P)	85(7)	209(11)	83(7)	12(8)	0(5)	68(8)
C(5P)	84(6)	114(7)	130(8)	32(6)	19(6)	54(5)
C(6P)	99(6)	79(6)	246(11)	-14(6)	19(6)	16(5)

Table A.3.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{3-pic})(\text{CN})_4](\text{3-pic})$.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	2760	1843	2213	48
H(13)	6575	4260	2399	79
H(14)	5445	5560	2812	81
H(15)	2998	4943	2921	62
H(16A)	4690	1301	1860	135
H(16B)	6143	1839	2192	135
H(16C)	5895	2368	1662	135
H(112)	6799	6376	1739	54
H(113)	8516	6673	2414	60
H(114)	8888	8313	3003	59
H(115)	7557	9661	2931	64
H(116)	5812	9363	2268	62
H(122)	7520	9508	1320	56
H(123)	8737	10563	656	71
H(124)	7807	10151	-186	78
H(125)	5655	8677	-388	65

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.3 .4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(\text{3-pic})(\text{CN})_4]\cdot(\text{3-pic})$ (continued).

	x	y	z	U(eq)
H(126)	4441	7616	273	52
H(132)	3432	9192	901	61
H(133)	1559	9984	1131	77
H(134)	508	9659	1914	66
H(135)	1255	8454	2471	82
H(136)	3092	7620	2246	74
H(142)	2407	5797	1619	58
H(143)	1616	3750	1430	73
H(144)	2904	2811	895	76
H(145)	4959	3901	525	75
H(146)	5776	5948	711	58
H(212)	1954	866	6059	58
H(213)	267	-987	6053	65
H(214)	-204	-2244	5307	58
H(215)	1029	-1716	4566	57
H(216)	2759	134	4565	53
H(222)	6662	2315	4886	48
H(223)	7498	2404	4054	59
H(224)	5993	2445	3351	62
H(225)	3606	2393	3479	63
H(226)	2714	2247	4299	57
H(232)	2810	3894	4828	61
H(233)	1443	5144	5124	87
H(234)	851	5261	5971	93
H(235)	1700	4202	6578	89
H(236)	3114	2971	6300	69
H(242)	6258	3929	5801	55
H(243)	8193	3998	6366	64
H(244)	8380	2279	6713	69
H(245)	6670	491	6512	65
H(246)	4738	395	5935	50
H(1P)	8046	5005	-149	94
H(3P)	9555	6130	1299	129
H(4P)	8837	4194	1516	145
H(5P)	7826	2701	893	124
H(61P)	9706	7589	672	216
H(62P)	8427	7233	249	216
H(63P)	9958	7103	107	216

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄P)₂[MnN(4-pic)(CN)₄]-0.5(4-pic)-H₂O

Table A.4.1: Atomic coordinates (x 10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄P)₂[MnN(4-pic)(CN)₄]-0.5(4-pic)-H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mn	5570(1)	6595(1)	7492(1)	43(1)
P(1)	1683(1)	1176(1)	8986(1)	45(1)
P(2)	19(1)	2000(1)	5714(1)	42(1)
N(10)	4191(3)	6721(3)	7226(1)	63(1)
C(1)	5369(3)	8002(3)	7761(2)	47(1)
N(1)	5244(3)	8823(3)	7904(2)	65(1)
C(2)	5136(4)	5941(3)	8412(2)	55(1)
N(2)	4866(4)	5569(3)	8934(2)	90(1)
C(3)	6301(4)	5155(3)	7298(2)	52(1)
N(3)	6744(4)	4337(3)	7179(2)	76(1)
C(4)	6409(4)	7199(3)	6661(2)	49(1)
N(4)	6848(3)	7568(3)	6167(2)	73(1)
N(11)	7754(3)	6346(2)	7962(1)	47(1)
C(11)	8832(4)	5955(3)	7649(2)	57(1)
C(12)	10065(4)	5637(3)	7935(2)	70(1)
C(13)	10210(4)	5710(3)	8582(3)	67(1)
C(14)	9106(4)	6133(3)	8907(2)	66(1)
C(15)	7908(4)	6438(3)	8588(2)	53(1)
C(16)	11545(5)	5346(4)	8919(3)	132(2)
C(111)	1212(4)	119(3)	8665(2)	44(1)
C(112)	-103(4)	67(3)	8609(2)	53(1)
C(113)	-446(4)	-745(3)	8360(2)	64(1)
C(114)	532(5)	-1526(3)	8169(2)	67(1)
C(115)	1840(5)	-1487(3)	8226(2)	67(1)
C(116)	2195(4)	-668(3)	8470(2)	55(1)
C(121)	2710(3)	1848(3)	8386(2)	47(1)
C(122)	2996(4)	1572(3)	7773(2)	63(1)
C(123)	3769(4)	2110(4)	7330(2)	76(1)
C(124)	4274(4)	2911(4)	7486(2)	76(1)
C(125)	4025(5)	3176(4)	8098(2)	91(2)
C(126)	3251(5)	2652(3)	8549(2)	83(2)
C(131)	2547(3)	652(3)	9744(2)	47(1)
C(132)	2969(4)	1320(3)	10106(2)	72(1)
C(133)	3672(4)	923(4)	10677(2)	76(1)
C(134)	3968(4)	-146(4)	10897(2)	68(1)
C(135)	3549(4)	-818(3)	10552(2)	70(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.4.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(4\text{-pic})(\text{CN})_4 \cdot 0.5(4\text{-pic}) \cdot \text{H}_2\text{O}]$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	x	y	z	U(eq)
C(136)	2844(4)	-412(3)	9978(2)	61(1)
C(141)	222(3)	2102(3)	9142(2)	44(1)
C(142)	-321(4)	2109(3)	9769(2)	56(1)
C(143)	-1489(4)	2781(3)	9868(2)	72(1)
C(144)	-2121(4)	3449(3)	9340(3)	82(1)
C(145)	-1609(4)	3453(3)	8717(3)	73(1)
C(146)	-432(4)	2786(3)	8610(2)	63(1)
C(211)	-560(4)	2061(3)	4894(2)	45(1)
C(212)	-1903(4)	2389(3)	4771(2)	71(1)
C(213)	-2362(4)	2535(4)	4136(2)	85(2)
C(214)	-1500(5)	2353(3)	3621(2)	70(1)
C(215)	-186(4)	2015(3)	3740(2)	56(1)
C(216)	292(4)	1871(3)	4373(2)	49(1)
C(221)	122(4)	3301(3)	5836(2)	46(1)
C(222)	-949(4)	4116(3)	5702(2)	61(1)
C(223)	-896(5)	5107(3)	5823(2)	71(1)
C(224)	219(6)	5283(3)	6072(2)	79(1)
C(225)	1295(5)	4485(4)	6205(3)	100(2)
C(226)	1239(4)	3486(3)	6099(2)	81(1)
C(231)	1614(3)	1169(3)	5855(2)	41(1)
C(232)	2695(4)	1404(3)	5458(2)	54(1)
C(233)	3928(4)	772(4)	5581(2)	67(1)
C(234)	4088(4)	-72(3)	6099(2)	71(1)
C(235)	3041(4)	-290(3)	6495(2)	68(1)
C(236)	1803(4)	327(3)	6376(2)	51(1)
C(241)	-1171(3)	1500(3)	6285(2)	47(1)
C(242)	-1625(4)	1969(3)	6827(2)	56(1)
C(243)	-2518(4)	1544(4)	7266(2)	75(1)
C(244)	-2935(4)	648(4)	7173(2)	78(1)
C(245)	-2477(4)	176(3)	6643(3)	74(1)
C(246)	-1604(4)	599(3)	6193(2)	63(1)
O(1W)	4174(5)	3735(3)	9856(2)	113(1)
N(1P)	5132(8)	6526(7)	4485(7)	158(3)
C(1P)	4499(11)	3798(19)	4871(12)	114(5)
C(2P)	4604(6)	4792(10)	4527(4)	99(2)
C(3P)	5020(10)	5544(10)	4824(7)	89(3)
C(5P)	4699(13)	5750(20)	4220(7)	133(7)
C(6P)	5132(8)	6526(7)	4485(7)	158(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.42: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(4-pic)(CN)]₄·0.5(4-pic)·H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.514(3)	Mn-C(4)	1.980(4)
Mn-C(1)	1.990(4)	Mn-C(3)	1.994(4)
Mn-C(2)	1.997(4)	Mn-N(11)	2.429(3)
P(1)-C(131)	1.787(4)	P(1)-C(111)	1.793(3)
P(1)-C(141)	1.794(4)	P(1)-C(121)	1.805(4)
P(2)-C(241)	1.789(4)	P(2)-C(231)	1.789(3)
P(2)-C(221)	1.793(3)	P(2)-C(211)	1.798(3)
C(1)-N(1)	1.149(4)	C(2)-N(2)	1.141(4)
C(3)-N(3)	1.144(4)	C(4)-N(4)	1.153(4)
N(11)-C(11)	1.318(4)	N(11)-C(15)	1.334(4)
C(11)-C(12)	1.381(5)	C(12)-C(13)	1.368(5)
C(13)-C(14)	1.364(5)	C(13)-C(16)	1.521(5)
C(14)-C(15)	1.379(5)	C(111)-C(112)	1.379(5)
C(111)-C(116)	1.398(5)	C(112)-C(113)	1.372(5)
C(113)-C(114)	1.386(5)	C(114)-C(115)	1.369(5)
C(115)-C(116)	1.379(5)	C(121)-C(122)	1.376(5)
C(121)-C(126)	1.382(5)	C(122)-C(123)	1.369(5)
C(123)-C(124)	1.352(5)	C(124)-C(125)	1.363(5)
C(125)-C(126)	1.370(5)	C(131)-C(136)	1.369(5)
C(131)-C(132)	1.387(5)	C(132)-C(133)	1.372(5)
C(133)-C(134)	1.370(6)	C(134)-C(135)	1.368(5)
C(135)-C(136)	1.381(5)	C(141)-C(142)	1.380(5)
C(141)-C(146)	1.390(5)	C(142)-C(143)	1.376(5)
C(143)-C(144)	1.367(6)	C(144)-C(145)	1.361(6)
C(145)-C(146)	1.382(5)	C(211)-C(216)	1.378(4)
C(211)-C(212)	1.387(5)	C(212)-C(213)	1.376(5)
C(213)-C(214)	1.372(5)	C(214)-C(215)	1.359(5)
C(215)-C(216)	1.380(5)	C(221)-C(226)	1.375(5)
C(221)-C(222)	1.376(5)	C(222)-C(223)	1.379(5)
C(223)-C(224)	1.354(6)	C(224)-C(225)	1.368(6)
C(225)-C(226)	1.378(5)	C(231)-C(236)	1.381(4)
C(231)-C(232)	1.397(5)	C(232)-C(233)	1.380(5)
C(233)-C(234)	1.380(5)	C(234)-C(235)	1.362(5)
C(235)-C(236)	1.376(5)	C(241)-C(242)	1.386(4)
C(241)-C(246)	1.387(5)	C(242)-C(243)	1.380(5)
C(243)-C(244)	1.373(6)	C(244)-C(245)	1.368(6)
C(245)-C(246)	1.378(5)	N(1P)-C(1P)#1	1.36(2)
N(1P)-C(3P)	1.371(13)	N(1P)-C(5P)	1.39(2)
C(1P)-C(3P)#1	1.33(2)	C(1P)-C(6P)#1	1.36(2)
C(1P)-N(1P)#1	1.36(2)	C(1P)-C(2P)	1.39(2)
C(2P)-C(5P)	1.32(2)	C(2P)-C(3P)#1	1.375(16)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.42: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(4-pic)(CN)₄]-0.5(4-pic)-H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(2P)-C(3P)	1.392(16)	C(3P)-C(5P)	1.27(2)
C(3P)-C(1P)#1	1.33(2)	C(3P)-C(2P)#1	1.375(16)
C(3P)-C(3P)#1	1.48(3)		
N(10)-Mn-C(4)	97.42(16)	N(10)-Mn-C(1)	97.99(16)
C(4)-Mn-C(1)	87.62(14)	N(10)-Mn-C(3)	98.24(16)
C(4)-Mn-C(3)	88.75(15)	C(1)-Mn-C(3)	163.69(14)
N(10)-Mn-C(2)	95.56(15)	C(4)-Mn-C(2)	167.02(15)
C(1)-Mn-C(2)	90.79(15)	C(3)-Mn-C(2)	89.19(15)
N(10)-Mn-N(11)	177.53(14)	C(4)-Mn-N(11)	85.02(13)
C(1)-Mn-N(11)	82.50(12)	C(3)-Mn-N(11)	81.35(12)
C(2)-Mn-N(11)	82.00(12)	C(131)-P(1)-C(111)	109.32(17)
C(131)-P(1)-C(141)	109.24(16)	C(111)-P(1)-C(141)	109.19(17)
C(131)-P(1)-C(121)	110.75(16)	C(111)-P(1)-C(121)	109.62(16)
C(141)-P(1)-C(121)	108.69(17)	C(241)-P(2)-C(231)	110.06(16)
C(241)-P(2)-C(221)	109.06(16)	C(231)-P(2)-C(221)	108.63(17)
C(241)-P(2)-C(211)	107.43(17)	C(231)-P(2)-C(211)	112.03(16)
C(221)-P(2)-C(211)	109.59(16)	N(1)-C(1)-Mn	178.6(3)
N(2)-C(2)-Mn	178.9(3)	N(3)-C(3)-Mn	178.5(4)
N(4)-C(4)-Mn	177.3(4)	C(11)-N(11)-C(15)	116.1(3)
C(11)-N(11)-Mn	121.5(2)	C(15)-N(11)-Mn	121.6(2)
N(11)-C(11)-C(12)	123.8(4)	C(13)-C(12)-C(11)	119.8(4)
C(14)-C(13)-C(12)	116.9(4)	C(14)-C(13)-C(16)	121.7(5)
C(12)-C(13)-C(16)	121.3(5)	C(13)-C(14)-C(15)	120.0(4)
N(11)-C(15)-C(14)	123.4(4)	C(112)-C(111)-C(116)	119.4(3)
C(112)-C(111)-P(1)	121.2(3)	C(116)-C(111)-P(1)	119.4(3)
C(113)-C(112)-C(111)	120.5(4)	C(112)-C(113)-C(114)	119.9(4)
C(115)-C(114)-C(113)	120.2(4)	C(114)-C(115)-C(116)	120.3(4)
C(115)-C(116)-C(111)	119.7(4)	C(122)-C(121)-C(126)	118.7(4)
C(122)-C(121)-P(1)	122.1(3)	C(126)-C(121)-P(1)	119.2(3)
C(123)-C(122)-C(121)	120.2(4)	C(124)-C(123)-C(122)	121.0(4)
C(123)-C(124)-C(125)	119.4(4)	C(124)-C(125)-C(126)	120.8(4)
C(125)-C(126)-C(121)	119.9(4)	C(136)-C(131)-C(132)	117.8(4)
C(136)-C(131)-P(1)	121.7(3)	C(132)-C(131)-P(1)	120.5(3)
C(133)-C(132)-C(131)	121.0(4)	C(134)-C(133)-C(132)	120.1(4)
C(135)-C(134)-C(133)	119.9(4)	C(134)-C(135)-C(136)	119.5(4)
C(131)-C(136)-C(135)	121.6(4)	C(142)-C(141)-C(146)	118.9(3)
C(142)-C(141)-P(1)	122.0(3)	C(146)-C(141)-P(1)	119.0(3)
C(143)-C(142)-C(141)	120.8(4)	C(144)-C(143)-C(142)	119.6(4)
C(145)-C(144)-C(143)	120.7(4)	C(144)-C(145)-C(146)	120.3(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.42: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)₂[MnN(4-pic)(CN)₄]-0.5(4-pic)-H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(145)-C(146)-C(141)	119.7(4)	C(216)-C(211)-C(212)	118.7(3)
C(216)-C(211)-P(2)	122.4(3)	C(212)-C(211)-P(2)	118.7(3)
C(213)-C(212)-C(211)	120.1(4)	C(214)-C(213)-C(212)	120.5(4)
C(215)-C(214)-C(213)	119.7(4)	C(214)-C(215)-C(216)	120.6(4)
C(211)-C(216)-C(215)	120.4(3)	C(226)-C(221)-C(222)	119.2(3)
C(226)-C(221)-P(2)	120.6(3)	C(222)-C(221)-P(2)	120.1(3)
C(221)-C(222)-C(223)	120.4(4)	C(224)-C(223)-C(222)	119.9(4)
C(223)-C(224)-C(225)	120.6(4)	C(224)-C(225)-C(226)	119.9(5)
C(221)-C(226)-C(225)	120.1(4)	C(236)-C(231)-C(232)	119.5(3)
C(236)-C(231)-P(2)	120.5(3)	C(232)-C(231)-P(2)	119.9(3)
C(233)-C(232)-C(231)	119.4(4)	C(234)-C(233)-C(232)	120.0(4)
C(235)-C(234)-C(233)	120.7(4)	C(234)-C(235)-C(236)	120.1(4)
C(235)-C(236)-C(231)	120.3(4)	C(242)-C(241)-C(246)	119.7(3)
C(242)-C(241)-P(2)	121.5(3)	C(246)-C(241)-P(2)	118.7(3)
C(243)-C(242)-C(241)	119.8(4)	C(244)-C(243)-C(242)	120.1(4)
C(245)-C(244)-C(243)	120.3(4)	C(244)-C(245)-C(246)	120.5(4)
C(245)-C(246)-C(241)	119.6(4)	C(1P)#1-N(1P)-C(3P)	58.3(10)
C(1P)#1-N(1P)-C(5P)	113.0(13)	C(3P)-N(1P)-C(5P)	54.7(10)
C(3P)#1-C(1P)-C(6P)#1	61.1(10)	C(3P)#1-C(1P)-N(1P)#1	61.1(10)
C(6P)#1-C(1P)-N(1P)#1	0.0(8)	C(3P)#1-C(1P)-C(2P)	60.7(12)
C(6P)#1-C(1P)-C(2P)	121.8(14)	N(1P)#1-C(1P)-C(2P)	121.8(14)
C(5P)-C(2P)-C(3P)#1	120.5(13)	C(5P)-C(2P)-C(1P)	178.0(10)
C(3P)#1-C(2P)-C(1P)	57.7(9)	C(5P)-C(2P)-C(3P)	55.7(10)
C(3P)#1-C(2P)-C(3P)	64.9(11)	C(1P)-C(2P)-C(3P)	122.5(11)
C(5P)-C(3P)-C(1P)#1	123.8(19)	C(5P)-C(3P)-N(1P)	63.3(14)
C(1P)#1-C(3P)-N(1P)	60.6(12)	C(5P)-C(3P)-C(2P)#1	174(2)
C(1P)#1-C(3P)-C(2P)#1	61.5(13)	N(1P)-C(3P)-C(2P)#1	122.1(15)
C(5P)-C(3P)-C(2P)	59.4(15)	C(1P)#1-C(3P)-C(2P)	175.3(15)
N(1P)-C(3P)-C(2P)	122.7(15)	C(2P)#1-C(3P)-C(2P)	115.1(11)
C(5P)-C(3P)-C(3P)#1	116(2)	C(1P)#1-C(3P)-C(3P)#1	120(2)
N(1P)-C(3P)-C(3P)#1	176.6(11)	C(2P)#1-C(3P)-C(3P)#1	58.1(11)
C(2P)-C(3P)-C(3P)#1	57.0(11)	C(3P)-C(5P)-C(2P)	65.0(14)
C(3P)-C(5P)-N(1P)	62.0(11)	C(2P)-C(5P)-N(1P)	126.9(14)

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

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.43: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(4\text{-pic})(\text{CN})_4] \cdot 0.5(4\text{-pic}) \cdot \text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	41(1)	50(1)	37(1)	-1(1)	-8(1)	-7(1)
P(1)	45(1)	44(1)	45(1)	-6(1)	-2(1)	-8(1)
P(2)	44(1)	35(1)	47(1)	-8(1)	-4(1)	-3(1)
N(10)	52(2)	78(2)	56(2)	-2(2)	-19(2)	-13(2)
C(1)	41(2)	57(3)	39(2)	-5(2)	-4(2)	-2(2)
N(1)	64(2)	65(2)	66(2)	-17(2)	-6(2)	-4(2)
C(2)	43(2)	73(3)	50(2)	-4(2)	-11(2)	-17(2)
N(2)	86(3)	131(4)	50(2)	20(2)	-2(2)	-46(3)
C(3)	60(3)	55(3)	43(2)	-2(2)	-14(2)	-18(2)
N(3)	94(3)	54(2)	83(3)	-16(2)	-5(2)	-17(2)
C(4)	55(2)	43(2)	46(2)	-5(2)	-4(2)	-1(2)
N(4)	81(3)	71(3)	55(2)	6(2)	9(2)	-5(2)
N(11)	44(2)	46(2)	48(2)	-6(2)	-4(2)	-3(2)
C(11)	48(3)	60(3)	62(3)	-14(2)	3(2)	-4(2)
C(12)	42(3)	68(3)	101(4)	-30(3)	-1(3)	0(2)
C(13)	51(3)	46(3)	105(4)	-16(3)	-28(3)	-1(2)
C(14)	67(3)	66(3)	70(3)	-18(2)	-25(3)	-13(2)
C(15)	45(2)	56(3)	60(3)	-18(2)	-5(2)	-9(2)
C(16)	81(4)	120(5)	198(6)	-57(5)	-77(4)	24(3)
C(111)	47(2)	43(2)	41(2)	-5(2)	1(2)	-11(2)
C(112)	53(3)	51(2)	58(2)	-10(2)	-4(2)	-15(2)
C(113)	65(3)	64(3)	67(3)	-8(2)	-5(2)	-25(2)
C(114)	102(4)	57(3)	51(3)	-13(2)	1(3)	-33(3)
C(115)	83(3)	55(3)	67(3)	-22(2)	19(3)	-15(2)
C(116)	53(2)	55(3)	55(2)	-12(2)	3(2)	-7(2)
C(121)	45(2)	51(2)	45(2)	-8(2)	-1(2)	-9(2)
C(122)	73(3)	73(3)	49(2)	-7(2)	-1(2)	-30(2)
C(123)	88(3)	94(4)	54(3)	-12(3)	12(3)	-38(3)
C(124)	71(3)	83(4)	74(3)	1(3)	12(3)	-29(3)
C(125)	112(4)	81(4)	99(4)	-28(3)	26(3)	-60(3)
C(126)	114(4)	80(3)	74(3)	-34(3)	32(3)	-57(3)
C(131)	38(2)	52(3)	51(2)	-13(2)	-1(2)	-6(2)
C(132)	79(3)	60(3)	72(3)	-10(2)	-30(3)	2(2)
C(133)	72(3)	88(4)	70(3)	-22(3)	-27(3)	-7(3)
C(134)	47(3)	98(4)	52(3)	-3(3)	-7(2)	-2(3)
C(135)	70(3)	63(3)	67(3)	6(2)	-16(3)	-4(2)
C(136)	63(3)	59(3)	58(3)	-1(2)	-13(2)	-11(2)
C(141)	43(2)	38(2)	52(2)	-8(2)	-5(2)	-7(2)
C(142)	59(3)	49(2)	55(3)	-6(2)	3(2)	-5(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.43: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(4\text{-pic})(\text{CN})_4] \cdot 0.5(4\text{-pic}) \cdot \text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2 [h^2 a^* 2U11 + \dots + 2hka^* b^* U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(143)	66(3)	60(3)	85(3)	-19(3)	13(3)	0(2)
C(144)	56(3)	53(3)	131(5)	-17(3)	11(3)	-1(2)
C(145)	64(3)	48(3)	96(4)	11(3)	-25(3)	1(2)
C(146)	71(3)	55(3)	56(3)	1(2)	-8(2)	-2(2)
C(211)	45(2)	38(2)	51(2)	-11(2)	-12(2)	-1(2)
C(212)	53(3)	96(4)	63(3)	-26(3)	-11(2)	2(2)
C(213)	58(3)	117(4)	78(3)	-34(3)	-23(3)	6(3)
C(214)	83(3)	63(3)	65(3)	-22(2)	-27(3)	-2(3)
C(215)	68(3)	46(2)	53(3)	-15(2)	-7(2)	0(2)
C(216)	51(2)	42(2)	53(2)	-8(2)	-12(2)	-3(2)
C(221)	55(2)	36(2)	46(2)	-8(2)	1(2)	-7(2)
C(222)	62(3)	44(3)	75(3)	-12(2)	4(2)	-4(2)
C(223)	84(3)	36(3)	83(3)	-10(2)	15(3)	4(2)
C(224)	122(4)	47(3)	76(3)	-23(3)	21(3)	-26(3)
C(225)	101(4)	68(4)	144(5)	-42(4)	-27(4)	-19(3)
C(226)	84(3)	46(3)	120(4)	-32(3)	-38(3)	-4(2)
C(231)	45(2)	34(2)	43(2)	-9(2)	-4(2)	-4(2)
C(232)	55(3)	51(2)	52(2)	-1(2)	-9(2)	-4(2)
C(233)	48(3)	76(3)	74(3)	-14(3)	1(2)	-7(2)
C(234)	50(3)	60(3)	100(4)	-21(3)	-25(3)	7(2)
C(235)	63(3)	56(3)	79(3)	4(2)	-21(3)	-6(2)
C(236)	49(2)	48(2)	55(2)	-5(2)	-7(2)	-6(2)
C(241)	45(2)	34(2)	59(2)	-7(2)	-6(2)	-2(2)
C(242)	62(3)	45(2)	57(2)	-9(2)	4(2)	-9(2)
C(243)	71(3)	78(3)	69(3)	-7(3)	16(3)	-11(3)
C(244)	60(3)	70(3)	93(4)	12(3)	14(3)	-14(3)
C(245)	52(3)	54(3)	114(4)	-4(3)	-6(3)	-12(2)
C(246)	58(3)	49(3)	85(3)	-20(2)	5(2)	-11(2)
O(1W)	154(4)	115(3)	85(3)	-4(2)	-12(3)	-71(3)
N(1P)	106(6)	136(7)	210(10)	21(7)	38(6)	-26(5)
C(1P)	53(7)	149(15)	165(16)	-84(15)	19(9)	-30(9)
C(2P)	69(4)	167(8)	69(5)	-36(5)	5(4)	-27(5)
C(3P)	47(6)	103(10)	115(13)	-25(11)	36(7)	-8(8)
C(5P)	70(8)	270(30)	54(9)	-11(12)	17(7)	-31(12)
C(6P)	106(6)	136(7)	210(10)	21(7)	38(6)	-26(5)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.4.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(4\text{-pic})(\text{CN})_4]\cdot 0.5(4\text{-pic})\cdot \text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	8759	5889	7210	69
H(12)	10795	5374	7689	83
H(14)	9161	6216	9344	79
H(15)	7171	6724	8821	63
H(16A)	12197	5076	8611	199
H(16B)	11479	4800	9293	199
H(16C)	11803	5932	9065	199
H(112)	-761	586	8741	63
H(113)	-1335	-771	8319	77
H(114)	299	-2078	8002	81
H(115)	2493	-2015	8100	81
H(116)	3085	-641	8505	65
H(122)	2663	1019	7659	76
H(123)	3949	1922	6915	92
H(124)	4788	3278	7179	91
H(125)	4385	3718	8210	109
H(126)	3089	2838	8965	99
H(132)	2773	2047	9960	86
H(133)	3948	1381	10914	91
H(134)	4452	-414	11281	82
H(135)	3738	-1544	10703	84
H(136)	2563	-873	9745	73
H(142)	109	1654	10128	67
H(143)	-1848	2781	10292	86
H(144)	-2909	3906	9407	98
H(145)	-2054	3905	8361	88
H(146)	-79	2796	8184	76
H(212)	-2495	2511	5117	85
H(213)	-3263	2758	4056	102
H(214)	-1815	2460	3193	84
H(215)	397	1880	3393	67
H(216)	1195	1644	4448	59
H(222)	-1712	3997	5527	73
H(223)	-1624	5654	5735	85
H(224)	253	5953	6153	95
H(225)	2064	4615	6367	120
H(226)	1958	2936	6206	98
H(232)	2584	1981	5114	65
H(233)	4650	916	5315	80
H(234)	4920	-498	6179	85

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.4.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})_2[\text{MnN}(4\text{-pic})(\text{CN})_4] \cdot 0.5(4\text{-pic}) \cdot \text{H}_2\text{O}$ (continued).

	x	y	z	U(eq)
H(235)	3162	-856	6846	82
H(236)	1090	176	6647	62
H(242)	-1330	2568	6894	67
H(243)	-2837	1865	7625	90
H(244)	-3532	361	7471	94
H(245)	-2756	-435	6587	89
H(246)	-1307	283	5829	76
H(11W)	4430(80)	4150(60)	9630(30)	190
H(12W)	4670(70)	3880(60)	10130(30)	190



A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄As)[MnN(en)(CN)₃]

Table A.5.1: Atomic coordinates (x 10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)[MnN(en)(CN)₃]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mn	-34(1)	2767(1)	2690(1)	38(1)
As	5022(1)	596(1)	7474(1)	36(1)
N(10)	-552(4)	3222(2)	3171(4)	54(1)
C(1)	1637(5)	2687(2)	4646(5)	45(2)
N(1)	2591(5)	2624(2)	5768(5)	72(2)
C(2)	650(5)	3286(2)	1954(5)	41(1)
N(2)	1015(4)	3572(2)	1465(5)	54(1)
C(3)	-1507(5)	2679(2)	577(6)	43(1)
N(3)	-2327(5)	2613(2)	-655(5)	66(2)
N(11)	-572(4)	2039(2)	3232(4)	44(1)
C(11)	-536(5)	1520(2)	2533(6)	57(2)
C(12)	624(6)	1506(2)	2656(6)	65(2)
N(12)	726(4)	2034(2)	2031(4)	49(1)
C(111)	5025(5)	1126(2)	6156(5)	37(1)
C(112)	5934(5)	1539(2)	6778(6)	48(1)
C(113)	5958(5)	1920(2)	5856(6)	56(2)
C(114)	5056(6)	1889(3)	4331(7)	61(2)
C(115)	4150(6)	1489(3)	3717(6)	56(2)
C(116)	4114(5)	1095(2)	4625(5)	42(1)
C(121)	6447(5)	100(2)	8398(5)	39(1)
C(122)	7319(5)	189(2)	8152(6)	48(2)
C(123)	8343(5)	-178(3)	8864(6)	62(2)
C(124)	8457(6)	-604(3)	9774(7)	68(2)
C(125)	7576(6)	-692(3)	9980(7)	67(2)
C(126)	6549(6)	-349(2)	9290(6)	56(2)
C(131)	3543(5)	156(2)	6323(5)	39(1)
C(132)	3526(6)	-372(2)	5732(6)	52(2)
C(133)	2444(7)	-670(3)	4821(7)	65(2)
C(134)	1364(7)	-456(3)	4463(9)	88(2)
C(135)	1365(7)	67(3)	5013(9)	100(3)
C(136)	2466(6)	370(3)	5989(8)	77(2)
C(141)	5118(5)	1041(2)	8981(5)	43(1)
C(142)	4244(6)	1456(3)	8554(6)	62(2)
C(143)	4324(7)	1778(3)	9655(9)	77(2)
C(144)	5275(9)	1700(3)	11109(9)	83(3)
C(145)	6186(7)	1306(3)	11539(7)	81(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.5.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})[\text{MnN}(\text{en})(\text{CN})_3]$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	X	y	z	U(eq)
C(146)	6121(5)	959(2)	10485(6)	55(2)

Table A.5.2: Bond distances [\AA] and angles [$^\circ$] for $(\text{Ph}_4\text{As})[\text{MnN}(\text{en})(\text{CN})_3]$.

Bond/ Angle	$\text{\AA}/^\circ$	Bond/ Angle	$\text{\AA}/^\circ$
Mn-N(10)	1.532(4)	Mn-C(2)	1.972(6)
Mn-C(3)	1.983(6)	Mn-C(1)	1.995(6)
Mn-N(11)	2.074(4)	Mn-N(12)	2.327(4)
As-C(131)	1.901(5)	As-C(141)	1.911(5)
As-C(111)	1.920(5)	As-C(121)	1.928(5)
C(1)-N(1)	1.147(6)	C(2)-N(2)	1.142(6)
C(3)-N(3)	1.147(6)	N(11)-C(11)	1.458(6)
C(11)-C(12)	1.482(7)	C(12)-N(12)	1.463(6)
C(111)-C(112)	1.378(6)	C(111)-C(116)	1.385(6)
C(112)-C(113)	1.373(6)	C(113)-C(114)	1.378(7)
C(114)-C(115)	1.353(7)	C(115)-C(116)	1.388(7)
C(121)-C(122)	1.369(7)	C(121)-C(126)	1.394(6)
C(122)-C(123)	1.400(7)	C(123)-C(124)	1.362(7)
C(124)-C(125)	1.350(8)	C(125)-C(126)	1.370(7)
C(131)-C(136)	1.356(7)	C(131)-C(132)	1.393(6)
C(132)-C(133)	1.367(7)	C(133)-C(134)	1.352(8)
C(134)-C(135)	1.367(8)	C(135)-C(136)	1.398(8)
C(141)-C(142)	1.372(7)	C(141)-C(146)	1.401(7)
C(142)-C(143)	1.385(7)	C(143)-C(144)	1.349(9)
C(144)-C(145)	1.371(9)	C(145)-C(146)	1.384(8)
N(10)-Mn-C(3)	98.4(2)	N(10)-Mn-C(2)	98.1(2)
N(10)-Mn-C(1)	97.7(2)	C(2)-Mn-C(3)	87.37(19)
C(3)-Mn-C(1)	163.9(2)	C(2)-Mn-C(1)	90.6(2)
C(2)-Mn-N(11)	162.81(18)	N(10)-Mn-N(11)	99.09(19)
C(1)-Mn-N(11)	88.11(18)	C(3)-Mn-N(11)	89.16(18)
C(2)-Mn-N(12)	85.40(17)	N(10)-Mn-N(12)	176.49(19)
C(1)-Mn-N(12)	81.62(18)	C(3)-Mn-N(12)	82.28(18)
C(131)-As-C(141)	112.4(2)	N(11)-Mn-N(12)	77.46(14)
C(141)-As-C(111)	106.8(2)	C(131)-As-C(111)	108.2(2)
C(141)-As-C(121)	109.5(2)	C(131)-As-C(121)	109.9(2)
N(1)-C(1)-Mn	177.9(5)	C(111)-As-C(121)	109.9(2)
N(3)-C(3)-Mn	176.9(5)	N(2)-C(2)-Mn	176.7(5)
N(11)-C(11)-C(12)	109.7(5)	C(11)-N(11)-Mn	113.5(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.52: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)[MnN(en)(CN)₃] (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(12)-N(12)-Mn	106.7(3)	N(12)-C(12)-C(11)	109.3(5)
C(112)-C(111)-As	118.3(4)	C(112)-C(111)-C(116)	121.4(5)
C(113)-C(112)-C(111)	119.3(5)	C(116)-C(111)-As	120.3(4)
C(115)-C(114)-C(113)	121.6(5)	C(112)-C(113)-C(114)	119.4(5)
C(111)-C(116)-C(115)	118.2(5)	C(114)-C(115)-C(116)	120.1(5)
C(122)-C(121)-As	119.9(4)	C(122)-C(121)-C(126)	121.6(5)
C(121)-C(122)-C(123)	117.7(5)	C(126)-C(121)-As	118.5(4)
C(125)-C(124)-C(123)	121.2(6)	C(124)-C(123)-C(122)	120.3(6)
C(125)-C(126)-C(121)	118.6(5)	C(124)-C(125)-C(126)	120.5(6)
C(136)-C(131)-As	120.1(4)	C(136)-C(131)-C(132)	118.9(5)
C(133)-C(132)-C(131)	120.8(6)	C(132)-C(131)-As	120.9(4)
C(133)-C(134)-C(135)	119.0(7)	C(134)-C(133)-C(132)	120.6(6)
C(131)-C(136)-C(135)	119.2(6)	C(134)-C(135)-C(136)	121.2(7)
C(142)-C(141)-As	119.1(4)	C(142)-C(141)-C(146)	121.7(5)
C(141)-C(142)-C(143)	118.7(6)	C(146)-C(141)-As	119.1(4)
C(143)-C(144)-C(145)	121.3(6)	C(144)-C(143)-C(142)	120.3(7)
C(145)-C(146)-C(141)	117.5(6)	C(144)-C(145)-C(146)	120.4(7)



A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.53: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})[\text{MnN}(\text{en})(\text{CN})_3]$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^*2U11+ \dots +2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	44(1)	41(1)	30(1)	-3(1)	23(1)	-2(1)
As	39(1)	35(1)	35(1)	2(1)	23(1)	1(1)
N(10)	58(4)	52(3)	55(3)	-13(2)	35(3)	-2(3)
C(1)	48(4)	53(4)	29(3)	-8(3)	21(3)	-15(3)
N(1)	65(4)	90(4)	39(3)	-5(3)	18(3)	-24(3)
C(2)	39(4)	42(4)	35(3)	-10(2)	18(3)	0(3)
N(2)	67(4)	47(3)	54(3)	1(2)	38(3)	-3(3)
C(3)	46(4)	42(4)	49(3)	3(3)	33(3)	-1(3)
N(3)	56(4)	84(4)	39(3)	-2(3)	17(3)	2(3)
N(11)	43(3)	54(3)	36(2)	5(2)	24(2)	0(2)
C(11)	65(5)	40(4)	60(4)	-6(3)	35(4)	-12(3)
C(12)	83(5)	48(4)	79(4)	10(3)	57(4)	17(4)
N(12)	57(3)	50(3)	43(2)	-2(2)	32(3)	3(2)
C(111)	36(4)	32(3)	41(3)	-3(2)	22(3)	6(3)
C(112)	48(4)	44(4)	41(3)	-1(3)	21(3)	-4(3)
C(113)	68(5)	41(4)	63(4)	2(3)	42(4)	-14(3)
C(114)	90(5)	47(4)	62(4)	6(3)	54(4)	1(4)
C(115)	74(5)	53(4)	35(3)	6(3)	30(3)	13(4)
C(116)	36(4)	42(4)	38(3)	-7(3)	17(3)	3(3)
C(121)	34(4)	38(3)	37(3)	3(3)	17(3)	8(3)
C(122)	56(4)	41(4)	49(3)	5(3)	32(3)	3(3)
C(123)	44(4)	66(5)	74(4)	-3(4)	35(4)	4(3)
C(124)	47(4)	57(5)	69(4)	7(4)	18(4)	18(4)
C(125)	66(5)	50(5)	67(4)	22(3)	30(4)	13(4)
C(126)	63(5)	44(4)	67(4)	19(3)	42(4)	13(3)
C(131)	32(4)	44(4)	46(3)	4(3)	26(3)	5(3)
C(132)	57(5)	45(4)	64(4)	-2(3)	41(4)	5(3)
C(133)	85(6)	45(4)	72(4)	-14(4)	51(5)	-15(4)
C(134)	78(6)	57(5)	124(6)	-16(5)	58(6)	-29(4)
C(135)	65(6)	68(6)	173(8)	-5(5)	76(6)	-5(4)
C(136)	68(5)	52(4)	130(6)	-36(4)	70(5)	-20(4)
C(141)	50(4)	40(4)	43(3)	-2(3)	30(3)	-4(3)
C(142)	72(5)	55(4)	63(4)	-20(3)	43(4)	-3(4)
C(143)	93(6)	60(5)	114(6)	-29(4)	81(6)	-11(4)
C(144)	132(8)	80(6)	79(5)	-43(5)	86(6)	-46(5)
C(145)	114(7)	83(6)	44(4)	-12(4)	46(5)	-42(5)
C(146)	68(5)	51(4)	47(3)	5(3)	34(4)	-11(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.54 Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})[\text{MnN}(\text{en})(\text{CN})_3]$.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	-71	1993	4233	53
H(11B)	-1348	2089	2949	53
H(11C)	-1246	1510	1486	68
H(11D)	-575	1187	3023	68
H(12A)	1331	1470	3699	78
H(12B)	617	1179	2115	78
H(12C)	279	2007	1028	58
H(12D)	1523	2101	2409	58
H(112)	6526	1561	7811	57
H(113)	6578	2196	6256	67
H(114)	5069	2150	3709	73
H(115)	3551	1477	2685	67
H(116)	3495	819	4215	51
H(122)	7233	483	7534	58
H(123)	8949	-131	8714	74
H(124)	9155	-838	10263	82
H(125)	7667	-989	10596	80
H(126)	5932	-414	9414	67
H(132)	4260	-523	5959	62
H(133)	2452	-1024	4443	78
H(134)	631	-662	3852	106
H(135)	619	224	4732	120
H(136)	2461	714	6405	92
H(142)	3610	1521	7547	74
H(143)	3718	2050	9389	92
H(144)	5314	1917	11836	100
H(145)	6852	1271	12545	97
H(146)	6720	682	10765	66

(Ph₄P)[MnN(bipy)(CN)₃]-0.5(bipy)-2H₂O**Table A.6.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (Ph₄P)[MnN(bipy)(CN)₃]-0.5(bipy)-2H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.**

	X	y	z	U(eq)
Mn	2127(1)	2064(1)	611(1)	33(1)
P	8554(1)	1627(1)	3438(1)	28(1)
N(10)	713(3)	1822(2)	1179(2)	36(1)
C(1)	3291(3)	1383(3)	1569(2)	29(1)
N(1)	3948(3)	970(2)	2121(2)	37(1)
C(2)	2433(3)	3483(3)	856(2)	34(1)
N(2)	2599(3)	4285(3)	1057(2)	51(1)
C(3)	1389(3)	2826(3)	-521(2)	30(1)
N(3)	945(3)	3232(2)	-1178(2)	44(1)
N(11)	2289(3)	647(2)	205(2)	25(1)
C(11)	1412(3)	-176(3)	555(2)	32(1)
C(12)	1485(3)	-1139(3)	289(2)	39(1)
C(13)	2489(3)	-1276(3)	-354(2)	39(1)
C(14)	3418(3)	-448(3)	-703(2)	31(1)
C(15)	3299(3)	507(3)	-419(2)	24(1)
C(16)	4241(3)	1421(3)	-740(2)	27(1)
C(17)	5261(3)	1471(3)	-1443(2)	33(1)
C(18)	6089(3)	2381(3)	-1699(2)	44(1)
C(19)	5894(3)	3204(3)	-1260(2)	41(1)
C(110)	4854(3)	3092(3)	-578(2)	35(1)
N(12)	4040(2)	2238(2)	-319(2)	28(1)
C(111)	7863(3)	2594(3)	2546(2)	27(1)
C(112)	8682(3)	3407(3)	1970(2)	36(1)
C(113)	8150(4)	4095(3)	1259(2)	44(1)
C(114)	6815(4)	4007(3)	1125(2)	47(1)
C(115)	5993(4)	3220(3)	1693(2)	42(1)
C(116)	6519(3)	2508(3)	2401(2)	35(1)
C(121)	7286(3)	1322(3)	4374(2)	29(1)
C(122)	6480(3)	2154(3)	4595(2)	40(1)
C(123)	5605(3)	1934(3)	5383(2)	46(1)
C(124)	5577(3)	919(3)	5942(2)	47(1)
C(125)	6362(3)	76(3)	5725(2)	41(1)
C(126)	7237(3)	279(3)	4944(2)	34(1)
C(131)	10000(3)	2182(3)	3766(2)	28(1)
C(132)	9929(3)	2475(3)	4569(2)	35(1)
C(133)	11039(4)	2916(3)	4809(2)	47(1)
C(134)	12302(3)	2794(3)	3443(2)	41(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.6.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{bipy})(\text{CN})_3] \cdot 0.5(\text{bipy}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	X	y	z	U(eq)
C(135)	12233(4)	3076(3)	4239(3)	44(1)
C(136)	11203(3)	2337(3)	3201(2)	36(1)
C(141)	9023(3)	380(3)	3127(2)	26(1)
C(142)	10215(3)	-161(3)	3337(2)	41(1)
C(143)	10532(4)	-1158(3)	3113(2)	45(1)
C(144)	9631(4)	-1606(3)	2706(2)	47(1)
C(145)	8436(4)	-1082(3)	2494(2)	49(1)
C(146)	8128(4)	-75(3)	2698(2)	40(1)
N(21)	3183(3)	5147(2)	5122(2)	40(1)
C(21)	4426(3)	4928(3)	5373(2)	34(1)
C(22)	4685(4)	4603(3)	6254(3)	51(1)
C(23)	3590(4)	4481(3)	6910(3)	63(1)
C(24)	2310(4)	4693(3)	6661(3)	54(1)
C(25)	2146(4)	5020(3)	5774(3)	47(1)
O(1W)	1002(3)	5490(3)	2219(2)	60(1)
O(2W)	1621(4)	6308(3)	3630(2)	77(1)

Table A.6.2: Bond distances [\AA] and angles [$^\circ$] for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{bipy})(\text{CN})_3] \cdot 0.5(\text{bipy}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Bond/ Angle	$\text{\AA}/^\circ$	Bond/ Angle	$\text{\AA}/^\circ$
Mn-N(10)	1.574(3)	Mn-C(2)	1.959(4)
Mn-C(3)	1.992(4)	Mn-C(1)	1.994(4)
Mn-N(11)	2.032(3)	Mn-N(12)	2.244(3)
P-C(141)	1.789(3)	P-C(111)	1.791(3)
P-C(131)	1.794(3)	P-C(121)	1.794(3)
C(1)-N(1)	1.145(4)	C(2)-N(2)	1.152(4)
C(3)-N(3)	1.152(4)	N(11)-C(11)	1.347(3)
N(11)-C(15)	1.359(3)	C(11)-C(12)	1.374(4)
C(12)-C(13)	1.373(4)	C(13)-C(14)	1.384(4)
C(14)-C(15)	1.378(4)	C(15)-C(16)	1.465(4)
C(16)-N(12)	1.349(4)	C(16)-C(17)	1.401(4)
C(17)-C(18)	1.386(4)	C(18)-C(19)	1.374(4)
C(19)-C(110)	1.385(4)	C(110)-N(12)	1.324(4)
C(111)-C(116)	1.389(4)	C(111)-C(112)	1.402(4)
C(112)-C(113)	1.372(4)	C(113)-C(114)	1.377(4)
C(114)-C(115)	1.379(4)	C(115)-C(116)	1.378(4)
C(121)-C(122)	1.385(4)	C(121)-C(126)	1.393(4)
C(122)-C(123)	1.399(4)	C(123)-C(124)	1.358(4)
C(124)-C(125)	1.383(4)	C(125)-C(126)	1.392(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.62: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)[MnN(bipy)(CN)₃]-0.5(bipy)·2H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(131)-C(132)	1.383(4)	C(131)-C(136)	1.394(4)
C(132)-C(133)	1.378(4)	C(133)-C(135)	1.391(4)
C(134)-C(135)	1.367(4)	C(134)-C(136)	1.379(4)
C(141)-C(142)	1.375(4)	C(141)-C(146)	1.385(4)
C(142)-C(143)	1.402(4)	C(143)-C(144)	1.361(4)
C(144)-C(145)	1.371(4)	C(145)-C(146)	1.400(4)
N(21)-C(21)	1.335(4)	N(21)-C(25)	1.351(4)
C(21)-C(22)	1.381(5)	C(21)-C(21)#1	1.519(6)
C(22)-C(23)	1.394(4)	C(23)-C(24)	1.368(5)
C(24)-C(25)	1.366(5)		
N(10)-Mn-C(2)	97.34(15)	N(10)-Mn-C(3)	95.93(14)
C(2)-Mn-C(3)	89.76(15)	N(10)-Mn-C(1)	97.84(14)
C(2)-Mn-C(1)	88.23(14)	C(3)-Mn-C(1)	166.23(13)
N(10)-Mn-N(11)	96.94(13)	C(2)-Mn-N(11)	165.64(13)
C(3)-Mn-N(11)	90.33(12)	C(1)-Mn-N(11)	88.27(13)
N(10)-Mn-N(12)	171.24(12)	C(2)-Mn-N(12)	90.62(13)
C(3)-Mn-N(12)	80.38(13)	C(1)-Mn-N(12)	86.01(12)
N(11)-Mn-N(12)	75.24(11)	C(141)-P-C(111)	110.96(16)
C(141)-P-C(131)	109.58(16)	C(111)-P-C(131)	110.75(16)
C(141)-P-C(121)	108.32(16)	C(111)-P-C(121)	108.61(16)
C(131)-P-C(121)	108.54(16)	N(1)-C(1)-Mn	178.5(3)
N(2)-C(2)-Mn	175.6(4)	N(3)-C(3)-Mn	177.5(3)
C(11)-N(11)-C(15)	118.6(3)	C(11)-N(11)-Mn	120.9(2)
C(15)-N(11)-Mn	120.5(2)	N(11)-C(11)-C(12)	122.4(3)
C(13)-C(12)-C(11)	119.1(3)	C(12)-C(13)-C(14)	119.1(3)
C(15)-C(14)-C(13)	119.7(3)	N(11)-C(15)-C(14)	121.1(3)
N(11)-C(15)-C(16)	115.2(3)	C(14)-C(15)-C(16)	123.7(3)
N(12)-C(16)-C(17)	121.7(3)	N(12)-C(16)-C(15)	115.0(3)
C(17)-C(16)-C(15)	123.3(3)	C(18)-C(17)-C(16)	118.5(3)
C(19)-C(18)-C(17)	119.6(3)	C(18)-C(19)-C(110)	118.0(3)
N(12)-C(110)-C(19)	124.0(3)	C(110)-N(12)-C(16)	118.1(3)
C(110)-N(12)-Mn	127.8(2)	C(16)-N(12)-Mn	113.4(2)
C(116)-C(111)-C(112)	119.9(3)	C(116)-C(111)-P	119.6(3)
C(112)-C(111)-P	120.5(3)	C(113)-C(112)-C(111)	119.3(3)
C(112)-C(113)-C(114)	120.4(4)	C(113)-C(114)-C(115)	120.9(3)
C(116)-C(115)-C(114)	119.5(3)	C(115)-C(116)-C(111)	120.1(3)
C(122)-C(121)-C(126)	119.9(3)	C(122)-C(121)-P	120.0(3)
C(126)-C(121)-P	119.6(3)	C(121)-C(122)-C(123)	119.6(3)
C(124)-C(123)-C(122)	120.2(4)	C(123)-C(124)-C(125)	120.8(4)
C(124)-C(125)-C(126)	119.8(4)	C(125)-C(126)-C(121)	119.7(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.6.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)[MnN(bipy)(CN)₃]-0.5(bipy)·2H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(132)-C(131)-C(136)	119.5(3)	C(132)-C(131)-P	120.6(3)
C(136)-C(131)-P	119.9(3)	C(133)-C(132)-C(131)	120.2(3)
C(132)-C(133)-C(135)	120.0(3)	C(135)-C(134)-C(136)	120.6(3)
C(134)-C(135)-C(133)	119.9(3)	C(134)-C(136)-C(131)	119.8(3)
C(142)-C(141)-C(146)	119.4(3)	C(142)-C(141)-P	121.9(3)
C(146)-C(141)-P	118.7(3)	C(141)-C(142)-C(143)	120.5(3)
C(144)-C(143)-C(142)	119.5(3)	C(143)-C(144)-C(145)	120.9(3)
C(144)-C(145)-C(146)	119.9(4)	C(141)-C(146)-C(145)	119.8(3)
C(21)-N(21)-C(25)	117.1(3)	N(21)-C(21)-C(22)	123.1(3)
N(21)-C(21)-C(21)#1	116.0(4)	C(22)-C(21)-C(21)#1	120.9(4)
C(21)-C(22)-C(23)	118.3(4)	C(24)-C(23)-C(22)	119.2(4)
C(25)-C(24)-C(23)	118.8(4)	N(21)-C(25)-C(24)	123.6(4)

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

Table A.6.3: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄P)[MnN(bipy)(CN)₃]-0.5(bipy)·2H₂O. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2p²[h²a*2U11+ .. +2hka*b*U12].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	36(1)	34(1)	30(1)	-11(1)	-5(1)	6(1)
P	30(1)	27(1)	28(1)	-6(1)	-4(1)	-2(1)
N(10)	35(2)	40(2)	32(2)	-10(2)	2(1)	2(2)
C(1)	29(2)	32(2)	27(2)	-12(2)	5(2)	-1(2)
N(1)	42(2)	41(2)	26(2)	-7(2)	-3(2)	3(2)
C(2)	37(2)	29(2)	39(2)	-9(2)	-15(2)	3(2)
N(2)	58(2)	42(2)	53(2)	-12(2)	-6(2)	1(2)
C(3)	30(2)	28(2)	33(2)	-11(2)	-3(2)	0(2)
N(3)	44(2)	38(2)	48(2)	-2(2)	-13(2)	-4(2)
N(11)	27(2)	22(2)	26(2)	-3(1)	-5(1)	-2(1)
C(11)	27(2)	31(2)	36(2)	-3(2)	-1(2)	-1(2)
C(12)	38(2)	27(2)	54(3)	-8(2)	-12(2)	-7(2)
C(13)	40(2)	35(2)	49(3)	-18(2)	-13(2)	2(2)
C(14)	30(2)	34(2)	32(2)	-12(2)	-3(2)	2(2)
C(15)	24(2)	28(2)	21(2)	-6(2)	-6(2)	6(2)
C(16)	26(2)	26(2)	28(2)	-5(2)	-7(2)	1(2)
C(17)	35(2)	37(2)	28(2)	-8(2)	2(2)	3(2)
C(18)	35(2)	54(3)	35(2)	-1(2)	6(2)	-1(2)
C(19)	36(2)	29(2)	53(3)	0(2)	-2(2)	-5(2)
C(110)	39(2)	26(2)	42(2)	-7(2)	-9(2)	3(2)
N(12)	28(2)	25(2)	30(2)	-5(1)	-6(1)	-2(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.6.4: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{bipy})(\text{CN})_3] \cdot 0.5(\text{bipy}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^*2U11+ .. +2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(111)	31(2)	24(2)	25(2)	-6(2)	-7(2)	2(2)
C(112)	41(2)	29(2)	38(2)	-4(2)	-10(2)	-2(2)
C(113)	56(3)	31(2)	45(3)	-5(2)	-7(2)	-10(2)
C(114)	69(3)	31(2)	42(3)	-4(2)	-23(2)	10(2)
C(115)	36(2)	44(3)	47(3)	-8(2)	-16(2)	3(2)
C(116)	38(2)	28(2)	37(2)	-4(2)	-6(2)	-2(2)
C(121)	28(2)	33(2)	30(2)	-11(2)	-6(2)	2(2)
C(122)	40(2)	36(2)	39(2)	-2(2)	7(2)	0(2)
C(123)	40(2)	51(3)	47(3)	-16(2)	6(2)	12(2)
C(124)	48(3)	55(3)	32(2)	-5(2)	4(2)	-5(2)
C(125)	46(2)	37(2)	36(2)	-1(2)	-6(2)	-2(2)
C(126)	33(2)	36(2)	30(2)	-7(2)	-3(2)	1(2)
C(131)	26(2)	32(2)	26(2)	-8(2)	-5(2)	-1(2)
C(132)	35(2)	39(2)	32(2)	-11(2)	3(2)	-6(2)
C(133)	49(3)	55(3)	43(3)	-26(2)	-3(2)	-7(2)
C(134)	33(2)	46(3)	46(3)	-14(2)	-6(2)	-2(2)
C(135)	36(2)	50(3)	51(3)	-18(2)	-15(2)	-9(2)
C(136)	36(2)	40(2)	38(2)	-21(2)	-6(2)	-1(2)
C(141)	30(2)	27(2)	21(2)	-4(2)	-6(2)	-1(2)
C(142)	44(2)	36(2)	47(3)	-18(2)	-17(2)	3(2)
C(143)	53(3)	39(3)	47(3)	-17(2)	-11(2)	15(2)
C(144)	75(3)	27(2)	39(3)	-11(2)	-3(2)	10(2)
C(145)	68(3)	43(3)	41(3)	-13(2)	-21(2)	-4(2)
C(146)	44(2)	33(2)	42(3)	-9(2)	-7(2)	2(2)
N(21)	35(2)	41(2)	46(2)	-18(2)	1(2)	-3(2)
C(21)	34(2)	29(2)	43(3)	-15(2)	-1(2)	-1(2)
C(22)	38(2)	75(3)	37(3)	-13(2)	3(2)	6(2)
C(23)	64(3)	78(4)	43(3)	-10(2)	3(2)	8(3)
C(24)	56(3)	55(3)	49(3)	-20(2)	18(2)	-6(2)
C(25)	37(2)	45(3)	65(3)	-26(2)	2(2)	-5(2)
O(1W)	50(2)	77(3)	54(2)	-21(2)	-11(2)	18(2)
O(2W)	100(3)	67(3)	70(3)	-22(2)	-38(2)	37(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.65: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{bipy})(\text{CN})_3]\cdot 0.5(\text{bipy})\cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	733	-89	993	39
H(12)	862	-1692	541	47
H(13)	2544	-1915	-552	47
H(14)	4120	-536	-1126	38
H(17)	5381	905	-1732	40
H(18)	6773	2434	-2164	53
H(19)	6444	3818	-1417	50
H(110)	4720	3651	-283	42
H(112)	9577	3479	2070	44
H(113)	8694	4623	865	53
H(114)	6463	4484	645	57
H(115)	5091	3170	1600	51
H(116)	5975	1969	2782	42
H(122)	6521	2855	4222	48
H(123)	5041	2484	5524	55
H(124)	5024	789	6477	56
H(125)	6304	-623	6100	49
H(126)	7786	-279	4803	40
H(132)	9129	2374	4948	42
H(133)	10991	3107	5351	56
H(134)	13097	2911	3060	49
H(135)	12983	3374	4400	53
H(136)	11264	2133	2664	43
H(142)	10816	137	3631	49
H(143)	11351	-1510	3240	54
H(144)	9830	-2276	2571	57
H(145)	7830	-1396	2214	59
H(146)	7324	288	2546	48
H(22)	5566	4470	6405	61
H(23)	3729	4257	7509	76
H(24)	1565	4617	7087	65
H(25)	1272	5162	5611	56
H(22W)	2150(30)	5840(30)	3990(20)	56(13)
H(12W)	450(50)	5940(40)	1870(30)	160(30)
H(11W)	1390(30)	5080(30)	1850(20)	35(12)
H(21W)	1450(40)	5880(40)	3240(30)	120(20)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄P)[MnN(phen)(CN)₃]

Table A.7.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (Ph₄P)[MnN(phen)(CN)₃]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mn	6402(1)	-2209(1)	7224(1)	31(1)
P	8942(1)	1888(1)	4848(1)	20(1)
N(10)	6456(3)	-2875(3)	8054(4)	28(1)
C(1)	5087(4)	-2379(4)	6317(5)	29(2)
N(1)	4327(4)	-2451(3)	5804(4)	39(2)
C(2)	6744(4)	-3026(4)	6429(5)	29(2)
N(2)	6986(4)	-3535(4)	5992(4)	37(2)
C(3)	7677(4)	-1732(4)	7813(4)	22(1)
N(3)	8356(3)	-1366(3)	8109(4)	26(1)
N(1P)	6052(3)	-1126(3)	7794(4)	23(1)
C(1P)	5929(4)	-1117(4)	8623(4)	24(1)
C(2P)	5739(4)	-353(4)	9024(5)	27(2)
C(3P)	5667(4)	421(4)	8556(5)	29(2)
C(4P)	5792(4)	469(4)	7669(5)	22(1)
C(5P)	5758(4)	1255(4)	7139(5)	29(2)
C(6P)	5891(4)	1256(4)	6289(5)	33(2)
C(7P)	6065(4)	441(4)	5895(5)	24(2)
C(8P)	6184(4)	384(4)	5010(5)	28(2)
C(9P)	6340(4)	-428(5)	4689(5)	30(2)
C(10P)	6391(4)	-1176(4)	5272(5)	25(2)
C(11P)	6112(4)	-343(4)	6406(5)	21(1)
C(12P)	5975(4)	-330(4)	7308(5)	23(1)
N(2P)	6277(3)	-1139(3)	6108(4)	20(1)
C(111)	9828(4)	2004(4)	4416(4)	20(1)
C(112)	9783(4)	1581(4)	3566(4)	23(1)
C(113)	10488(4)	1686(4)	3263(5)	31(2)
C(114)	11238(4)	2196(4)	3820(5)	29(2)
C(115)	11281(4)	2624(4)	4667(5)	34(2)
C(116)	10565(4)	2539(4)	4955(4)	25(2)
C(121)	8559(3)	2965(4)	4996(4)	17(1)
C(122)	8586(4)	3646(4)	4384(5)	33(2)
C(123)	8293(4)	4481(4)	4497(5)	33(2)
C(124)	7948(4)	4625(5)	5201(5)	33(2)
C(125)	7927(4)	3955(5)	5810(5)	39(2)
C(126)	8227(4)	3133(5)	5706(5)	33(2)
C(131)	8040(4)	1263(4)	3960(4)	21(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.7.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{phen})(\text{CN})_3]$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	X	y	z	U(eq)
C(132)	7230(4)	1659(4)	3333(5)	27(2)
C(133)	6579(4)	1150(4)	2597(5)	32(2)
C(134)	6746(4)	285(5)	2470(5)	32(2)
C(135)	7542(4)	-128(4)	3099(5)	28(2)
C(136)	8188(4)	369(4)	3843(5)	27(2)
C(141)	9323(4)	1305(4)	5996(4)	21(1)
C(142)	8676(4)	883(4)	6246(5)	25(2)
C(143)	8946(4)	454(4)	7141(5)	31(2)
C(144)	9851(5)	455(4)	7810(5)	34(2)
C(145)	10493(4)	878(4)	7558(5)	28(2)
C(146)	10230(4)	1293(4)	6667(5)	25(2)

Table A.7.2: Bond distances [\AA] and angles [$^\circ$] for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{phen})(\text{CN})_3]$.

Bond/ Angle	\AA°	Bond/ Angle	\AA°
Mn-N(10)	1.568(5)	Mn-C(2)	1.939(6)
Mn-C(1)	2.012(7)	Mn-C(3)	2.013(6)
Mn-N(1P)	2.032(5)	Mn-N(2P)	2.268(5)
P-C(131)	1.785(6)	P-C(141)	1.790(6)
P-C(121)	1.794(5)	P-C(111)	1.798(5)
C(1)-N(1)	1.154(7)	C(2)-N(2)	1.173(7)
C(3)-N(3)	1.144(7)	N(1P)-C(1P)	1.322(7)
N(1P)-C(12P)	1.387(7)	C(1P)-C(2P)	1.394(8)
C(2P)-C(3P)	1.345(8)	C(3P)-C(4P)	1.411(8)
C(4P)-C(12P)	1.405(8)	C(4P)-C(5P)	1.418(8)
C(5P)-C(6P)	1.361(8)	C(6P)-C(7P)	1.444(8)
C(7P)-C(11P)	1.397(8)	C(7P)-C(8P)	1.405(8)
C(8P)-C(9P)	1.381(8)	C(9P)-C(10P)	1.408(8)
C(10P)-N(2P)	1.325(7)	C(11P)-N(2P)	1.350(7)
C(11P)-C(12P)	1.440(8)	C(111)-C(112)	1.389(7)
C(111)-C(116)	1.392(7)	C(112)-C(113)	1.393(7)
C(113)-C(114)	1.390(8)	C(114)-C(115)	1.390(8)
C(115)-C(116)	1.391(7)	C(121)-C(126)	1.386(7)
C(121)-C(122)	1.388(8)	C(122)-C(123)	1.387(8)
C(123)-C(124)	1.385(8)	C(124)-C(125)	1.369(9)
C(125)-C(126)	1.371(8)	C(131)-C(132)	1.393(8)
C(131)-C(136)	1.402(8)	C(132)-C(133)	1.398(8)
C(133)-C(134)	1.370(8)	C(134)-C(135)	1.391(8)
C(135)-C(136)	1.390(8)	C(141)-C(146)	1.394(8)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.7.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)[MnN(phen)(CN)₃] (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(141)-C(142)	1.397(7)	C(142)-C(143)	1.379(8)
C(143)-C(144)	1.390(9)	C(144)-C(145)	1.394(8)
C(145)-C(146)	1.365(8)		
N(10)-Mn-C(2)	97.2(3)	N(10)-Mn-C(1)	98.4(2)
C(2)-Mn-C(1)	89.8(2)	N(10)-Mn-C(3)	99.9(2)
C(2)-Mn-C(3)	90.0(2)	C(1)-Mn-C(3)	161.5(2)
N(10)-Mn-N(1P)	97.6(2)	C(2)-Mn-N(1P)	165.2(2)
C(1)-Mn-N(1P)	89.1(2)	C(3)-Mn-N(1P)	86.4(2)
N(10)-Mn-N(2P)	174.0(2)	C(2)-Mn-N(2P)	88.8(2)
C(1)-Mn-N(2P)	81.4(2)	C(3)-Mn-N(2P)	80.2(2)
N(1P)-Mn-N(2P)	76.49(19)	C(131)-P-C(141)	107.4(3)
C(131)-P-C(121)	110.9(3)	C(141)-P-C(121)	109.7(3)
C(131)-P-C(111)	108.5(3)	C(141)-P-C(111)	111.8(3)
C(121)-P-C(111)	108.6(3)	N(1)-C(1)-Mn	177.9(6)
N(2)-C(2)-Mn	176.6(6)	N(3)-C(3)-Mn	171.9(5)
C(1P)-N(1P)-C(12P)	117.3(5)	C(1P)-N(1P)-Mn	124.6(4)
C(12P)-N(1P)-Mn	118.0(4)	N(1P)-C(1P)-C(2P)	123.1(6)
C(3P)-C(2P)-C(1P)	119.8(6)	C(2P)-C(3P)-C(4P)	120.6(6)
C(12P)-C(4P)-C(3P)	116.3(6)	C(12P)-C(4P)-C(5P)	118.9(6)
C(3P)-C(4P)-C(5P)	124.8(6)	C(6P)-C(5P)-C(4P)	121.8(6)
C(5P)-C(6P)-C(7P)	120.2(6)	C(11P)-C(7P)-C(8P)	117.1(6)
C(11P)-C(7P)-C(6P)	119.2(6)	C(8P)-C(7P)-C(6P)	123.6(6)
C(9P)-C(8P)-C(7P)	119.3(6)	C(8P)-C(9P)-C(10P)	118.9(6)
N(2P)-C(10P)-C(9P)	122.9(6)	N(2P)-C(11P)-C(7P)	124.0(5)
N(2P)-C(11P)-C(12P)	116.2(5)	C(7P)-C(11P)-C(12P)	119.7(5)
N(1P)-C(12P)-C(4P)	122.9(5)	N(1P)-C(12P)-C(11P)	117.0(5)
C(4P)-C(12P)-C(11P)	120.1(6)	C(10P)-N(2P)-C(11P)	117.8(5)
C(10P)-N(2P)-Mn	130.2(4)	C(11P)-N(2P)-Mn	111.9(4)
C(112)-C(111)-C(116)	120.5(5)	C(112)-C(111)-P	121.5(4)
C(116)-C(111)-P	118.0(4)	C(111)-C(112)-C(113)	119.5(5)
C(114)-C(113)-C(112)	120.0(6)	C(113)-C(114)-C(115)	120.5(5)
C(114)-C(115)-C(116)	119.5(6)	C(115)-C(116)-C(111)	120.0(5)
C(126)-C(121)-C(122)	118.9(5)	C(126)-C(121)-P	121.4(5)
C(122)-C(121)-P	119.7(4)	C(123)-C(122)-C(121)	120.0(6)
C(124)-C(123)-C(122)	119.8(6)	C(125)-C(124)-C(123)	120.3(6)
C(124)-C(125)-C(126)	119.8(6)	C(125)-C(126)-C(121)	121.1(6)
C(132)-C(131)-C(136)	119.7(6)	C(132)-C(131)-P	121.5(5)
C(136)-C(131)-P	118.5(4)	C(131)-C(132)-C(133)	118.9(6)
C(134)-C(133)-C(132)	120.7(6)	C(133)-C(134)-C(135)	121.3(6)
C(136)-C(135)-C(134)	118.4(6)	C(135)-C(136)-C(131)	120.9(6)
C(146)-C(141)-C(142)	119.0(6)	C(146)-C(141)-P	122.5(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.7.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄P)[MnN(phen)(CN)₃] (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(142)-C(141)-P	118.3(5)	C(143)-C(142)-C(141)	119.6(6)
C(142)-C(143)-C(144)	120.9(6)	C(143)-C(144)-C(145)	119.2(6)
C(146)-C(145)-C(144)	120.0(6)	C(145)-C(146)-C(141)	121.2(6)

Table A.7.3: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄P)[MnN(phen)(CN)₃]. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2p²[h²a*2U11+ .. +2hka*b*U12].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	23(1)	23(1)	48(1)	-1(1)	16(1)	2(1)
P	18(1)	23(1)	23(1)	-3(1)	13(1)	-1(1)
N(10)	27(3)	16(3)	44(4)	-2(3)	18(3)	2(2)
C(1)	34(4)	24(4)	39(4)	-1(3)	26(4)	2(3)
N(1)	30(3)	34(4)	57(4)	10(3)	23(3)	-2(3)
C(2)	22(3)	38(4)	32(4)	-6(3)	18(3)	-5(3)
N(2)	35(3)	44(4)	36(4)	2(3)	19(3)	-4(3)
C(3)	26(3)	20(3)	27(4)	0(3)	18(3)	5(3)
N(3)	27(3)	30(3)	25(3)	3(3)	15(3)	-1(2)
N(1P)	15(3)	26(3)	31(3)	-4(3)	14(3)	-1(2)
C(1P)	16(3)	29(4)	25(4)	1(3)	7(3)	-7(3)
C(2P)	23(3)	34(4)	26(4)	-6(3)	12(3)	2(3)
C(3P)	18(3)	32(4)	39(4)	-12(3)	15(3)	1(3)
C(4P)	14(3)	24(4)	26(4)	0(3)	7(3)	-1(3)
C(5P)	23(4)	17(3)	43(4)	-4(3)	10(3)	1(3)
C(6P)	26(4)	22(4)	48(5)	12(4)	14(4)	-3(3)
C(7P)	16(3)	23(4)	34(4)	5(3)	9(3)	2(3)
C(8P)	12(3)	43(4)	30(4)	17(3)	8(3)	-4(3)
C(9P)	16(3)	50(5)	27(4)	13(4)	13(3)	2(3)
C(10P)	16(3)	32(4)	28(4)	-3(3)	10(3)	0(3)
C(11P)	12(3)	24(4)	31(4)	-7(3)	12(3)	-3(3)
C(12P)	16(3)	21(4)	32(4)	-6(3)	9(3)	-4(3)
N(2P)	14(3)	22(3)	27(3)	-1(2)	11(2)	-2(2)
C(111)	18(3)	24(4)	24(4)	1(3)	15(3)	0(2)
C(112)	23(3)	32(4)	16(3)	-4(3)	12(3)	-6(3)
C(113)	31(4)	33(4)	37(4)	-8(3)	22(4)	-2(3)
C(114)	28(3)	31(4)	41(4)	-1(3)	28(3)	-3(3)
C(115)	14(3)	48(5)	40(4)	-2(4)	11(3)	-11(3)
C(116)	22(3)	40(4)	13(3)	-10(3)	8(3)	-3(3)
C(121)	14(3)	16(3)	24(3)	-2(3)	11(3)	-1(2)
C(122)	31(4)	29(4)	47(5)	-3(4)	25(4)	6(3)
C(123)	34(4)	28(4)	32(4)	0(3)	11(4)	4(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.7.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{phen})(\text{CN})_3]$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^2U11+ .. +2hka*b*U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(124)	25(4)	33(4)	35(4)	-6(4)	7(3)	6(3)
C(125)	37(4)	43(5)	47(5)	-9(4)	27(4)	16(3)
C(126)	35(4)	41(4)	31(4)	-2(4)	21(4)	-3(3)
C(131)	17(3)	26(4)	24(4)	0(3)	14(3)	-3(3)
C(132)	23(3)	25(4)	34(4)	-8(3)	13(3)	-1(3)
C(133)	18(3)	39(4)	36(4)	-10(4)	7(3)	2(3)
C(134)	26(4)	55(5)	19(4)	-12(3)	15(3)	-14(3)
C(135)	26(4)	33(4)	31(4)	-5(3)	19(3)	-2(3)
C(136)	16(3)	43(4)	26(4)	-1(3)	13(3)	-3(3)
C(141)	27(3)	13(3)	29(4)	1(3)	17(3)	2(3)
C(142)	31(4)	28(4)	22(4)	-4(3)	17(3)	-6(3)
C(143)	33(4)	21(4)	43(5)	-2(3)	20(4)	-3(3)
C(144)	56(5)	22(4)	29(4)	-2(3)	22(4)	2(3)
C(145)	27(4)	25(4)	27(4)	1(3)	6(3)	4(3)
C(146)	28(4)	26(4)	26(4)	1(3)	15(3)	5(3)



A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.7.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{P})[\text{MnN}(\text{phen})(\text{CN})_3]$.

	x	y	z	U(eq)
H(1P)	5973	-1646	8956	28
H(2P)	5662	-377	9612	33
H(3P)	5534	930	8820	34
H(5P)	5642	1785	7379	35
H(6P)	5870	1783	5961	39
H(8P)	6159	888	4642	34
H(9P)	6411	-480	4099	35
H(10P)	6509	-1719	5060	30
H(112)	9285	1231	3202	27
H(113)	10457	1414	2687	37
H(114)	11714	2253	3624	34
H(115)	11784	2963	5039	41
H(116)	10578	2840	5508	30
H(122)	8800	3542	3899	40
H(123)	8328	4942	4102	39
H(124)	7730	5179	5260	40
H(125)	7710	4059	6293	47
H(126)	8207	2680	6120	40
H(132)	7124	2251	3403	32
H(133)	6027	1402	2189	39
H(134)	6319	-33	1952	38
H(135)	7640	-721	3023	33
H(136)	8725	104	4269	32
H(142)	8067	891	5811	30
H(143)	8517	161	7300	37
H(144)	10026	176	8419	41
H(145)	11101	877	7996	33
H(146)	10663	1574	6505	30

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃]-4H₂O

Table A.8.1: Atomic coordinates (x 10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃]-4H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mn	9765(1)	8189(1)	1703(1)	47(1)
As(1)	5621(1)	4994(1)	3049(1)	39(1)
As(2)	3443(1)	2071(1)	1624(1)	40(1)
N(10)	9979(3)	8244(3)	760(2)	52(1)
O(11)	9413(3)	8353(3)	3073(2)	59(1)
O(12)	9101(4)	9501(3)	4130(2)	95(1)
C(1)	11492(4)	7445(4)	1607(3)	49(1)
N(1)	12471(4)	7005(3)	1572(3)	70(1)
C(2)	9923(4)	6722(4)	1709(3)	52(1)
N(2)	10009(4)	5852(4)	1668(3)	74(1)
C(3)	7972(4)	8776(3)	2143(3)	53(1)
N(3)	6950(4)	9052(3)	2410(3)	69(1)
N(11)	9587(3)	9709(3)	1974(2)	48(1)
C(11)	9677(4)	10392(4)	1403(3)	59(1)
C(12)	9693(4)	11340(4)	1573(4)	74(2)
C(13)	9584(5)	11631(5)	2366(4)	86(2)
C(14)	9464(4)	10972(5)	2974(4)	76(2)
C(15)	9447(4)	10011(4)	2768(3)	57(1)
C(16)	9305(4)	9232(4)	3380(3)	61(1)
C(111)	5456(4)	3707(3)	3293(2)	40(1)
C(112)	6210(4)	2733(4)	2720(3)	56(1)
C(113)	6178(5)	1775(4)	2923(4)	72(2)
C(114)	5381(5)	1796(5)	3693(4)	75(2)
C(115)	4605(5)	2771(5)	4267(3)	70(1)
C(116)	4627(4)	3739(4)	4066(3)	55(1)
C(121)	4112(4)	6308(3)	3633(2)	40(1)
C(122)	3076(4)	6467(4)	3536(3)	50(1)
C(123)	1992(4)	7426(4)	3935(3)	62(1)
C(124)	1924(5)	8218(4)	4441(3)	73(2)
C(125)	2932(5)	8059(4)	4558(3)	71(2)
C(126)	4056(4)	7103(4)	4154(3)	57(1)
C(131)	6868(4)	4864(4)	3399(2)	45(1)
C(132)	7289(4)	4061(4)	3884(3)	56(1)
C(133)	8228(5)	3941(5)	4099(3)	77(2)
C(134)	8735(5)	4592(7)	3839(3)	99(2)
C(135)	8311(6)	5403(7)	3367(4)	111(2)
C(136)	7375(5)	5538(5)	3137(3)	82(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.8.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{pic})(\text{CN})_3]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	X	y	z	U(eq)
C(141)	6144(4)	5015(3)	1855(2)	40(1)
C(142)	7366(4)	4450(4)	1352(3)	52(1)
C(143)	7725(4)	4447(4)	493(3)	57(1)
C(144)	6896(4)	4974(4)	130(3)	55(1)
C(145)	5682(4)	5527(4)	629(3)	58(1)
C(146)	5290(4)	5557(3)	1498(3)	47(1)
C(211)	3430(4)	727(3)	1905(3)	45(1)
C(212)	2890(4)	347(4)	1541(3)	55(1)
C(213)	2890(5)	-642(4)	1718(3)	74(2)
C(214)	3422(5)	-1231(4)	2263(4)	80(2)
C(215)	3981(5)	-860(4)	2621(3)	76(2)
C(216)	4002(4)	111(4)	2429(3)	62(1)
C(221)	2535(3)	3232(3)	2581(2)	42(1)
C(222)	2383(4)	2985(4)	3389(3)	57(1)
C(223)	1772(5)	3842(5)	4057(3)	69(2)
C(224)	1310(4)	4937(4)	3926(3)	60(1)
C(225)	1429(4)	5196(4)	3132(3)	54(1)
C(226)	2055(4)	4336(4)	2451(3)	50(1)
C(231)	5074(4)	1780(3)	1144(2)	40(1)
C(232)	5273(4)	2676(4)	961(3)	53(1)
C(233)	6426(4)	2499(4)	561(3)	62(1)
C(234)	7404(4)	1428(5)	355(3)	65(1)
C(235)	7214(4)	536(4)	546(3)	67(1)
C(236)	6045(4)	707(4)	937(3)	57(1)
C(241)	2775(4)	2539(3)	784(3)	43(1)
C(242)	3527(4)	2132(4)	-57(3)	56(1)
C(243)	3035(5)	2401(4)	-670(3)	70(2)
C(244)	1823(6)	3078(4)	-450(4)	78(2)
C(245)	1063(5)	3507(4)	388(4)	76(2)
C(246)	1536(2)	3232(2)	1010(2)	55(1)
O(1W)	8002(2)	7622(2)	4213(2)	234(3)
O(2W)	5603(2)	8687(2)	3976(2)	160(2)
O(3W)	9042(2)	8538(2)	5596(2)	324(5)
O(4W)	6625(2)	9431(2)	5307(2)	266(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.82: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃].4H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.538(3)	Mn-C(2)	1.931(5)
Mn-C(3)	1.998(5)	Mn-C(1)	1.999(5)
Mn-N(11)	2.044(3)	Mn-O(11)	2.214(3)
As(1)-C(121)	1.902(4)	As(1)-C(111)	1.905(4)
As(1)-C(131)	1.911(4)	As(1)-C(141)	1.913(4)
As(2)-C(241)	1.891(4)	As(2)-C(231)	1.900(4)
As(2)-C(211)	1.903(4)	As(2)-C(221)	1.911(4)
O(11)-C(16)	1.261(5)	O(12)-C(16)	1.242(5)
C(1)-N(1)	1.142(5)	C(2)-N(2)	1.150(5)
C(3)-N(3)	1.154(5)	N(11)-C(11)	1.345(5)
N(11)-C(15)	1.354(5)	C(11)-C(12)	1.362(6)
C(12)-C(13)	1.365(7)	C(13)-C(14)	1.371(7)
C(14)-C(15)	1.397(6)	C(15)-C(16)	1.502(6)
C(111)-C(112)	1.375(5)	C(111)-C(116)	1.385(5)
C(112)-C(113)	1.370(6)	C(113)-C(114)	1.367(7)
C(114)-C(115)	1.378(6)	C(115)-C(116)	1.376(6)
C(121)-C(122)	1.382(5)	C(121)-C(126)	1.395(5)
C(122)-C(123)	1.369(6)	C(123)-C(124)	1.367(6)
C(124)-C(125)	1.361(7)	C(125)-C(126)	1.394(6)
C(131)-C(132)	1.376(6)	C(131)-C(136)	1.377(6)
C(132)-C(133)	1.379(6)	C(133)-C(134)	1.347(7)
C(134)-C(135)	1.369(8)	C(135)-C(136)	1.385(7)
C(141)-C(142)	1.378(5)	C(141)-C(146)	1.379(5)
C(142)-C(143)	1.373(5)	C(143)-C(144)	1.359(6)
C(144)-C(145)	1.368(6)	C(145)-C(146)	1.385(5)
C(211)-C(212)	1.381(6)	C(211)-C(216)	1.386(6)
C(212)-C(213)	1.386(6)	C(213)-C(214)	1.379(7)
C(214)-C(215)	1.387(7)	C(215)-C(216)	1.377(6)
C(221)-C(222)	1.376(5)	C(221)-C(226)	1.385(5)
C(222)-C(223)	1.374(6)	C(223)-C(224)	1.374(6)
C(224)-C(225)	1.363(6)	C(225)-C(226)	1.389(5)
C(231)-C(236)	1.377(5)	C(231)-C(232)	1.388(5)
C(232)-C(233)	1.363(5)	C(233)-C(234)	1.379(6)
C(234)-C(235)	1.378(6)	C(235)-C(236)	1.384(6)
C(241)-C(242)	1.380(5)	C(241)-C(246)	1.383(5)
C(242)-C(243)	1.379(6)	C(243)-C(244)	1.354(7)
C(244)-C(245)	1.380(7)	C(245)-C(246)	1.378(6)
N(10)-Mn-C(3)	97.91(18)	N(10)-Mn-C(2)	97.27(18)
N(10)-Mn-C(1)	98.84(17)	C(2)-Mn-C(3)	85.99(17)
C(3)-Mn-C(1)	162.45(18)	C(2)-Mn-C(1)	86.74(18)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.82: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃].4H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(2)-Mn-N(11)	166.76(17)	N(10)-Mn-N(11)	95.85(17)
C(1)-Mn-N(11)	89.51(15)	C(3)-Mn-N(11)	93.96(15)
C(2)-Mn-O(11)	90.78(15)	N(10)-Mn-O(11)	171.93(16)
C(1)-Mn-O(11)	81.99(14)	C(3)-Mn-O(11)	82.15(15)
C(121)-As(1)-C(111)	109.68(16)	N(11)-Mn-O(11)	76.12(13)
C(111)-As(1)-C(131)	106.99(18)	C(121)-As(1)-C(131)	111.65(17)
C(111)-As(1)-C(141)	110.22(16)	C(121)-As(1)-C(141)	110.43(17)
C(241)-As(2)-C(231)	107.47(17)	C(131)-As(1)-C(141)	107.81(17)
C(231)-As(2)-C(211)	109.59(17)	C(241)-As(2)-C(211)	107.87(17)
C(231)-As(2)-C(221)	109.63(16)	C(241)-As(2)-C(221)	109.70(18)
C(16)-O(11)-Mn	115.1(3)	C(211)-As(2)-C(221)	112.46(17)
N(2)-C(2)-Mn	176.0(4)	N(1)-C(1)-Mn	178.0(4)
C(11)-N(11)-C(15)	118.1(4)	N(3)-C(3)-Mn	175.9(4)
C(15)-N(11)-Mn	117.5(3)	C(11)-N(11)-Mn	124.2(3)
C(11)-C(12)-C(13)	118.8(5)	N(11)-C(11)-C(12)	123.2(5)
C(13)-C(14)-C(15)	118.9(5)	C(12)-C(13)-C(14)	120.0(5)
N(11)-C(15)-C(16)	115.2(4)	N(11)-C(15)-C(14)	120.9(5)
O(12)-C(16)-O(11)	126.3(5)	C(14)-C(15)-C(16)	123.9(5)
O(11)-C(16)-C(15)	115.7(4)	O(12)-C(16)-C(15)	117.9(5)
C(112)-C(111)-As(1)	119.7(3)	C(112)-C(111)-C(116)	120.3(4)
C(113)-C(112)-C(111)	120.2(4)	C(116)-C(111)-As(1)	119.9(3)
C(113)-C(114)-C(115)	120.8(5)	C(114)-C(113)-C(112)	119.6(5)
C(115)-C(116)-C(111)	119.1(4)	C(116)-C(115)-C(114)	119.9(5)
C(122)-C(121)-As(1)	119.4(3)	C(122)-C(121)-C(126)	120.5(4)
C(123)-C(122)-C(121)	119.9(4)	C(126)-C(121)-As(1)	120.1(3)
C(125)-C(124)-C(123)	120.3(5)	C(124)-C(123)-C(122)	120.4(5)
C(125)-C(126)-C(121)	117.9(5)	C(124)-C(125)-C(126)	121.1(5)
C(132)-C(131)-As(1)	119.5(3)	C(132)-C(131)-C(136)	120.5(4)
C(131)-C(132)-C(133)	118.9(5)	C(136)-C(131)-As(1)	120.0(4)
C(133)-C(134)-C(135)	120.5(6)	C(134)-C(133)-C(132)	121.0(5)
C(131)-C(136)-C(135)	119.4(5)	C(134)-C(135)-C(136)	119.7(6)
C(142)-C(141)-As(1)	119.9(3)	C(142)-C(141)-C(146)	120.4(4)
C(143)-C(142)-C(141)	119.3(4)	C(146)-C(141)-As(1)	119.6(3)
C(143)-C(144)-C(145)	119.6(4)	C(144)-C(143)-C(142)	121.1(4)
C(141)-C(146)-C(145)	118.9(4)	C(144)-C(145)-C(146)	120.7(4)
C(212)-C(211)-As(2)	118.4(3)	C(212)-C(211)-C(216)	120.5(4)
C(211)-C(212)-C(213)	119.8(5)	C(216)-C(211)-As(2)	121.0(3)
C(213)-C(214)-C(215)	120.9(5)	C(214)-C(213)-C(212)	119.4(5)
C(215)-C(216)-C(211)	119.8(5)	C(216)-C(215)-C(214)	119.5(5)
C(222)-C(221)-As(2)	121.0(3)	C(222)-C(221)-C(226)	119.9(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.82: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃].4H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(223)-C(222)-C(221)	119.3(4)	C(226)-C(221)-As(2)	119.0(3)
C(225)-C(224)-C(223)	120.7(4)	C(224)-C(223)-C(222)	120.8(4)
C(221)-C(226)-C(225)	120.3(4)	C(224)-C(225)-C(226)	119.1(4)
C(236)-C(231)-As(2)	121.5(3)	C(236)-C(231)-C(232)	120.0(4)
C(233)-C(232)-C(231)	120.3(4)	C(232)-C(231)-As(2)	118.4(3)
C(235)-C(234)-C(233)	119.9(4)	C(232)-C(233)-C(234)	120.1(4)
C(231)-C(236)-C(235)	119.3(4)	C(234)-C(235)-C(236)	120.4(4)
C(242)-C(241)-As(2)	119.3(3)	C(242)-C(241)-C(246)	120.0(4)
C(243)-C(242)-C(241)	119.7(4)	C(246)-C(241)-As(2)	120.6(3)
C(243)-C(244)-C(245)	120.6(5)	C(244)-C(243)-C(242)	120.3(5)
C(245)-C(246)-C(241)	119.5(3)	C(246)-C(245)-C(244)	119.8(5)

Table A.83: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MnN(pic)(CN)₃].4 H₂O. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2p [h²a*2U11+ .. +2hka*b*U12].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	37(1)	49(1)	42(1)	-4(1)	-12(1)	-13(1)
As(1)	37(1)	44(1)	35(1)	6(1)	-12(1)	-20(1)
As(2)	38(1)	40(1)	45(1)	12(1)	-19(1)	-20(1)
N(10)	46(2)	57(2)	45(2)	2(2)	-15(2)	-20(2)
O(11)	53(2)	61(2)	48(2)	-1(2)	-17(2)	-19(2)
O(12)	127(3)	78(3)	49(2)	-12(2)	-34(2)	-27(2)
C(1)	47(3)	50(3)	42(3)	-3(2)	-14(2)	-20(2)
N(1)	47(3)	79(3)	79(3)	6(2)	-28(2)	-24(2)
C(2)	35(3)	60(3)	44(3)	9(2)	-14(2)	-12(3)
N(2)	77(3)	67(3)	72(3)	18(2)	-33(2)	-29(3)
C(3)	54(3)	40(3)	56(3)	0(2)	-21(3)	-16(2)
N(3)	40(2)	69(3)	80(3)	-3(2)	-19(2)	-16(2)
N(11)	35(2)	46(2)	48(2)	-6(2)	-12(2)	-12(2)
C(11)	48(3)	54(3)	62(3)	3(3)	-15(2)	-20(3)
C(12)	64(4)	55(4)	77(4)	2(3)	-10(3)	-23(3)
C(13)	70(4)	58(4)	111(5)	-6(4)	-10(4)	-33(3)
C(14)	64(4)	69(4)	75(4)	-28(3)	-18(3)	-21(3)
C(15)	37(3)	55(3)	55(3)	-9(3)	-11(2)	-9(2)
C(16)	51(3)	60(3)	46(3)	-10(3)	-18(2)	-8(3)
C(111)	40(2)	43(3)	36(2)	6(2)	-15(2)	-20(2)
C(112)	54(3)	45(3)	53(3)	-4(2)	-12(2)	-17(2)
C(113)	78(4)	45(3)	92(4)	-1(3)	-38(3)	-24(3)
C(114)	97(5)	65(4)	94(4)	29(3)	-51(4)	-54(4)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.83: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{pic})(\text{CN})_3] \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p \sqrt{h^2 a^* 2U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12}}$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(115)	78(4)	80(4)	65(3)	25(3)	-26(3)	-52(3)
C(116)	61(3)	54(3)	47(3)	6(2)	-14(2)	-32(3)
C(121)	43(3)	34(2)	37(2)	7(2)	-11(2)	-18(2)
C(122)	40(3)	50(3)	50(3)	1(2)	-10(2)	-18(2)
C(123)	45(3)	66(3)	58(3)	4(3)	-7(2)	-24(3)
C(124)	62(4)	47(3)	74(4)	-2(3)	-5(3)	-14(3)
C(125)	91(4)	46(3)	54(3)	-7(2)	-6(3)	-31(3)
C(126)	65(3)	55(3)	53(3)	6(2)	-17(3)	-35(3)
C(131)	37(2)	66(3)	32(2)	5(2)	-14(2)	-24(2)
C(132)	48(3)	74(3)	45(3)	7(2)	-20(2)	-28(3)
C(133)	63(4)	104(5)	52(3)	7(3)	-31(3)	-26(3)
C(134)	69(4)	197(8)	54(4)	15(4)	-26(3)	-82(5)
C(135)	114(6)	208(8)	83(5)	40(5)	-43(4)	-131(6)
C(136)	102(4)	132(5)	66(3)	42(3)	-44(3)	-91(4)
C(141)	40(2)	44(3)	36(2)	6(2)	-14(2)	-22(2)
C(142)	40(3)	70(3)	42(3)	13(2)	-13(2)	-26(2)
C(143)	49(3)	63(3)	47(3)	1(2)	-2(2)	-29(3)
C(144)	69(4)	69(3)	34(3)	13(2)	-16(3)	-41(3)
C(145)	65(3)	61(3)	55(3)	19(2)	-37(3)	-28(3)
C(146)	41(3)	48(3)	41(3)	3(2)	-11(2)	-17(2)
C(211)	44(3)	45(3)	53(3)	13(2)	-20(2)	-27(2)
C(212)	57(3)	51(3)	70(3)	19(2)	-28(3)	-33(3)
C(213)	82(4)	67(4)	91(4)	18(3)	-31(3)	-52(3)
C(214)	82(4)	53(3)	91(4)	20(3)	-10(3)	-39(3)
C(215)	87(4)	56(3)	90(4)	38(3)	-38(3)	-37(3)
C(216)	64(3)	60(3)	67(3)	25(3)	-33(3)	-31(3)
C(221)	40(3)	52(3)	40(2)	4(2)	-15(2)	-27(2)
C(222)	63(3)	57(3)	50(3)	15(2)	-26(3)	-27(3)
C(223)	75(4)	97(4)	40(3)	13(3)	-23(3)	-45(4)
C(224)	55(3)	73(4)	47(3)	-11(3)	-14(2)	-31(3)
C(225)	60(3)	46(3)	60(3)	3(2)	-24(3)	-27(3)
C(226)	48(3)	51(3)	50(3)	10(2)	-22(2)	-23(2)
C(231)	46(3)	43(3)	41(2)	15(2)	-24(2)	-26(2)
C(232)	49(3)	49(3)	61(3)	14(2)	-21(2)	-26(2)
C(233)	59(3)	74(4)	64(3)	19(3)	-19(3)	-45(3)
C(234)	48(3)	88(4)	59(3)	19(3)	-19(3)	-36(3)
C(235)	42(3)	65(3)	70(3)	10(3)	-13(3)	-15(3)
C(236)	47(3)	51(3)	72(3)	22(2)	-22(3)	-25(3)
C(241)	47(3)	36(2)	52(3)	12(2)	-25(2)	-21(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.8.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{pic})(\text{CN})_3] \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p [h^2a^*2U11+ .. +2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(242)	64(3)	50(3)	53(3)	9(2)	-28(3)	-22(3)
C(243)	92(4)	63(3)	54(3)	4(3)	-35(3)	-34(3)
C(244)	113(5)	68(4)	89(5)	19(3)	-77(4)	-44(4)
C(245)	64(4)	72(4)	103(5)	16(3)	-53(4)	-28(3)
C(246)	50(3)	59(3)	62(3)	12(2)	-31(3)	-25(3)
O(1W)	350(10)	200(6)	144(5)	46(5)	-28(6)	-177(7)
O(2W)	184(5)	224(6)	163(5)	114(4)	-87(4)	-160(5)
O(3W)	265(10)	369(12)	287(10)	145(9)	-37(8)	-174(9)
O(4W)	350(10)	214(7)	167(6)	22(5)	25(6)	-176(7)

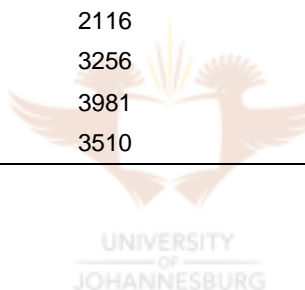
Table A.8.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{pic})(\text{CN})_3] \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	9730	10208	866	71
H(12)	9777	11781	1156	89
H(13)	9592	12276	2495	103
H(14)	9395	11162	3515	91
H(112)	6742	2725	2193	68
H(113)	6697	1113	2538	87
H(114)	5363	1144	3832	90
H(115)	4067	2776	4789	83
H(116)	4093	4404	4445	65
H(122)	3115	5925	3200	60
H(123)	1298	7538	3861	74
H(124)	1185	8869	4706	88
H(125)	2870	8597	4913	85
H(126)	4746	6998	4229	68
H(132)	6946	3606	4063	67
H(133)	8516	3403	4428	92
H(134)	9377	4489	3982	119
H(135)	8652	5861	3201	133
H(136)	7090	6078	2808	98
H(142)	7941	4075	1592	62
H(143)	8550	4078	154	69
H(144)	7152	4959	-453	66
H(145)	5114	5887	381	70
H(146)	4465	5937	1836	56
H(212)	2528	754	1178	67

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.8.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{pic})(\text{CN})_3]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (continued).

	x	y	z	U(eq)
H(213)	2534	-906	1471	89
H(214)	3407	-1886	2393	96
H(215)	4338	-1263	2987	92
H(216)	4398	352	2650	74
H(222)	2690	2247	3482	69
H(223)	1671	3680	4604	83
H(224)	913	5506	4384	72
H(225)	1095	5938	3048	65
H(226)	2153	4501	1905	60
H(232)	4616	3402	1112	63
H(233)	6552	3101	427	74
H(234)	8191	1308	87	78
H(235)	7875	-186	411	80
H(236)	5916	103	1059	68
H(242)	4361	1678	-211	68
H(243)	3538	2116	-1237	83
H(244)	1499	3256	-868	94
H(245)	233	3981	533	91
H(246)	1027	3510	1577	66



A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O

Table A.9.1: Atomic coordinates (x 10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mn	7067(1)	260(1)	8101(1)	27(1)
As(1)	6914(1)	3677(1)	1523(1)	26(1)
As(2)	9971(1)	5736(1)	2992(1)	23(1)
N(10)	6775(4)	128(4)	8980(3)	37(1)
C(1)	7789(4)	-1449(4)	8246(3)	31(1)
N(1)	8226(4)	-2437(4)	8330(3)	41(1)
C(2)	8570(4)	113(4)	8356(3)	33(1)
N(2)	9423(4)	28(4)	8527(3)	45(1)
C(3)	6496(4)	1997(4)	7700(3)	30(1)
N(3)	6189(4)	3002(4)	7442(3)	34(1)
N(11)	5657(3)	429(3)	7451(3)	28(1)
C(11)	4714(4)	332(4)	7769(3)	33(1)
C(12)	4531(5)	289(5)	8582(4)	41(1)
C(13)	3588(6)	208(5)	8895(4)	51(2)
C(14)	2807(5)	188(5)	8392(4)	51(2)
C(15)	2938(5)	240(5)	7607(4)	49(2)
C(16)	3898(5)	329(5)	7256(4)	42(1)
C(17)	4043(5)	423(6)	6424(4)	49(2)
C(18)	4929(4)	575(5)	6117(4)	45(2)
C(19)	5713(4)	567(4)	6650(3)	30(1)
C(110)	6721(4)	695(4)	6314(3)	31(1)
O(11)	7476(3)	482(3)	6847(2)	31(1)
O(12)	6733(4)	986(4)	5546(2)	49(1)
C(111)	6629(4)	5291(4)	1135(3)	29(1)
C(112)	5556(4)	6168(5)	1028(4)	39(1)
C(113)	5375(5)	7317(5)	642(4)	47(2)
C(114)	6242(6)	7570(5)	363(4)	49(2)
C(115)	7309(5)	6680(5)	486(4)	47(2)
C(116)	7511(4)	5537(5)	883(4)	38(1)
C(121)	8031(4)	2775(5)	2464(3)	35(1)
C(122)	7722(6)	2683(10)	3242(5)	110(4)
C(123)	8505(6)	2017(11)	3933(5)	121(5)
C(124)	9624(5)	1424(5)	3819(4)	44(1)
C(125)	9922(4)	1488(5)	3065(4)	38(1)
C(126)	9140(4)	2174(5)	2371(4)	37(1)
C(131)	7373(4)	3115(4)	617(3)	28(1)
C(132)	8059(4)	1934(4)	753(3)	34(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.9.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{quin})(\text{CN})_3]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor (continued).

	X	y	z	U(eq)
C(133)	8316(5)	1553(5)	75(4)	38(1)
C(134)	7933(4)	2321(5)	-715(4)	35(1)
C(135)	7271(4)	3490(5)	-850(4)	40(1)
C(136)	6994(4)	3900(5)	-181(3)	37(1)
C(141)	5581(4)	3543(4)	1820(3)	27(1)
C(142)	5201(4)	2957(4)	1452(3)	34(1)
C(143)	4259(4)	2828(5)	1685(4)	39(1)
C(144)	3704(5)	3260(5)	2296(4)	45(2)
C(145)	4079(5)	3854(6)	2653(4)	49(2)
C(146)	5015(4)	4013(5)	2419(3)	37(1)
C(211)	10132(4)	6837(4)	3395(3)	26(1)
C(212)	9422(5)	7277(5)	3939(3)	38(1)
C(213)	9560(6)	8066(6)	4245(4)	50(2)
C(214)	10419(6)	8367(5)	4006(4)	50(2)
C(215)	11105(6)	7947(5)	3474(4)	46(2)
C(216)	10977(5)	7168(5)	3159(3)	38(1)
C(221)	10050(4)	6158(4)	1829(3)	26(1)
C(222)	9588(4)	7340(5)	1349(3)	36(1)
C(223)	9566(4)	7643(5)	501(3)	40(1)
C(224)	10020(5)	6782(6)	132(3)	43(2)
C(225)	10506(5)	5618(5)	614(4)	40(1)
C(226)	10513(4)	5295(5)	1461(3)	32(1)
C(231)	8573(4)	5724(4)	3230(3)	26(1)
C(232)	7617(4)	6516(4)	2682(3)	34(1)
C(233)	6596(4)	6542(5)	2883(4)	40(1)
C(234)	6541(4)	5785(6)	3621(4)	46(2)
C(235)	7495(5)	5006(7)	4162(4)	60(2)
C(236)	8516(4)	4960(5)	3971(3)	43(1)
C(241)	11133(4)	4213(4)	3568(3)	26(1)
C(242)	11111(4)	3245(4)	3444(3)	32(1)
C(243)	11968(4)	2150(4)	3839(3)	35(1)
C(244)	12818(5)	2029(5)	4342(3)	40(1)
C(245)	12841(5)	2993(5)	4467(4)	45(1)
C(246)	11993(4)	4099(5)	4073(3)	33(1)
O(2W)	5897(4)	3464(4)	4771(3)	64(1)
O(3W)	6180(3)	4607(4)	5866(3)	49(1)
O(1W)	7760(20)	333(18)	4406(14)	380(13)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.92: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mn-N(10)	1.523(5)	Mn-C(2)	1.984(5)
Mn-C(3)	1.999(5)	Mn-C(1)	2.003(5)
Mn-N(11)	2.110(4)	Mn-O(11)	2.168(4)
As(1)-C(131)	1.907(5)	As(1)-C(141)	1.912(5)
As(1)-C(121)	1.916(5)	As(1)-C(111)	1.921(5)
As(2)-C(211)	1.901(5)	As(2)-C(221)	1.911(5)
As(2)-C(231)	1.912(4)	As(2)-C(241)	1.918(5)
C(1)-N(1)	1.157(7)	C(2)-N(2)	1.136(7)
C(3)-N(3)	1.161(6)	N(11)-C(19)	1.331(7)
N(11)-C(11)	1.404(6)	C(11)-C(12)	1.397(8)
C(11)-C(16)	1.423(8)	C(12)-C(13)	1.394(8)
C(13)-C(14)	1.388(9)	C(14)-C(15)	1.337(9)
C(15)-C(16)	1.441(8)	C(16)-C(17)	1.408(9)
C(17)-C(18)	1.356(8)	C(18)-C(19)	1.404(8)
C(19)-C(110)	1.511(7)	C(110)-O(12)	1.254(6)
C(110)-O(11)	1.256(6)	C(111)-C(112)	1.384(7)
C(111)-C(116)	1.384(7)	C(112)-C(113)	1.390(8)
C(113)-C(114)	1.380(8)	C(114)-C(115)	1.382(9)
C(115)-C(116)	1.378(8)	C(121)-C(122)	1.371(10)
C(121)-C(126)	1.386(7)	C(122)-C(123)	1.382(10)
C(123)-C(124)	1.406(9)	C(124)-C(125)	1.331(8)
C(125)-C(126)	1.387(7)	C(131)-C(136)	1.388(7)
C(131)-C(132)	1.394(7)	C(132)-C(133)	1.387(8)
C(133)-C(134)	1.372(8)	C(134)-C(135)	1.375(8)
C(135)-C(136)	1.396(8)	C(141)-C(142)	1.392(7)
C(141)-C(146)	1.405(8)	C(142)-C(143)	1.379(7)
C(143)-C(144)	1.395(9)	C(144)-C(145)	1.385(9)
C(145)-C(146)	1.389(7)	C(211)-C(212)	1.391(8)
C(211)-C(216)	1.392(7)	C(212)-C(213)	1.393(8)
C(213)-C(214)	1.389(9)	C(214)-C(215)	1.351(9)
C(215)-C(216)	1.384(7)	C(221)-C(226)	1.391(7)
C(221)-C(222)	1.398(7)	C(222)-C(223)	1.380(8)
C(223)-C(224)	1.390(9)	C(224)-C(225)	1.380(8)
C(225)-C(226)	1.381(8)	C(231)-C(236)	1.389(7)
C(231)-C(232)	1.391(7)	C(232)-C(233)	1.391(7)
C(233)-C(234)	1.381(8)	C(234)-C(235)	1.380(9)
C(235)-C(236)	1.380(8)	C(241)-C(246)	1.386(7)
C(241)-C(242)	1.391(7)	C(242)-C(243)	1.384(7)
C(243)-C(244)	1.367(8)	C(244)-C(245)	1.386(8)
C(245)-C(246)	1.388(8)		

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.92: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
N(10)-Mn-C(2)	94.9(2)	N(10)-Mn-C(3)	97.3(2)
C(2)-Mn-C(3)	88.8(2)	N(10)-Mn-C(1)	96.2(2)
C(2)-Mn-C(1)	87.8(2)	C(3)-Mn-C(1)	166.3(2)
N(10)-Mn-N(11)	103.9(2)	C(2)-Mn-N(11)	161.2(2)
C(3)-Mn-N(11)	90.17(18)	C(1)-Mn-N(11)	88.78(18)
N(10)-Mn-O(11)	178.88(19)	C(2)-Mn-O(11)	84.87(18)
C(3)-Mn-O(11)	81.58(18)	C(1)-Mn-O(11)	84.88(18)
N(11)-Mn-O(11)	76.37(15)	C(131)-As(1)-C(141)	108.8(2)
C(131)-As(1)-C(121)	110.9(2)	C(141)-As(1)-C(121)	108.4(2)
C(131)-As(1)-C(111)	106.1(2)	C(141)-As(1)-C(111)	110.3(2)
C(121)-As(1)-C(111)	112.3(2)	C(211)-As(2)-C(221)	109.2(2)
C(211)-As(2)-C(231)	109.0(2)	C(221)-As(2)-C(231)	110.8(2)
C(211)-As(2)-C(241)	108.4(2)	C(221)-As(2)-C(241)	111.2(2)
C(231)-As(2)-C(241)	108.19(19)	N(1)-C(1)-Mn	178.7(4)
N(2)-C(2)-Mn	177.8(5)	N(3)-C(3)-Mn	177.4(5)
C(19)-N(11)-C(11)	116.7(4)	C(19)-N(11)-Mn	115.1(3)
C(11)-N(11)-Mn	128.0(3)	C(12)-C(11)-N(11)	121.0(5)
C(12)-C(11)-C(16)	118.5(5)	N(11)-C(11)-C(16)	120.5(5)
C(13)-C(12)-C(11)	121.0(6)	C(14)-C(13)-C(12)	119.9(6)
C(15)-C(14)-C(13)	121.4(6)	C(14)-C(15)-C(16)	120.7(6)
C(17)-C(16)-C(11)	119.4(5)	C(17)-C(16)-C(15)	122.1(6)
C(11)-C(16)-C(15)	118.5(6)	C(18)-C(17)-C(16)	119.2(5)
C(17)-C(18)-C(19)	119.0(6)	N(11)-C(19)-C(18)	125.0(5)
N(11)-C(19)-C(110)	116.0(4)	C(18)-C(19)-C(110)	119.0(5)
O(12)-C(110)-O(11)	126.5(5)	O(12)-C(110)-C(19)	118.0(5)
O(11)-C(110)-C(19)	115.5(4)	C(110)-O(11)-Mn	116.2(3)
C(112)-C(111)-C(116)	121.6(5)	C(112)-C(111)-As(1)	120.6(4)
C(116)-C(111)-As(1)	117.3(4)	C(111)-C(112)-C(113)	118.2(5)
C(114)-C(113)-C(112)	120.7(6)	C(113)-C(114)-C(115)	120.1(5)
C(116)-C(115)-C(114)	120.3(5)	C(115)-C(116)-C(111)	119.1(5)
C(122)-C(121)-C(126)	119.4(5)	C(122)-C(121)-As(1)	119.4(4)
C(126)-C(121)-As(1)	121.1(4)	C(121)-C(122)-C(123)	120.8(7)
C(122)-C(123)-C(124)	118.4(7)	C(125)-C(124)-C(123)	120.9(6)
C(124)-C(125)-C(126)	120.6(5)	C(121)-C(126)-C(125)	119.8(5)
C(136)-C(131)-C(132)	120.7(5)	C(136)-C(131)-As(1)	118.7(4)
C(132)-C(131)-As(1)	120.5(4)	C(133)-C(132)-C(131)	118.5(5)
C(134)-C(133)-C(132)	121.2(5)	C(133)-C(134)-C(135)	120.4(5)
C(134)-C(135)-C(136)	119.9(5)	C(131)-C(136)-C(135)	119.4(5)
C(142)-C(141)-C(146)	121.1(4)	C(142)-C(141)-As(1)	119.4(4)
C(146)-C(141)-As(1)	119.5(4)	C(143)-C(142)-C(141)	119.4(5)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.92: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O (continued).

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(142)-C(143)-C(144)	120.3(5)	C(145)-C(144)-C(143)	120.0(5)
C(144)-C(145)-C(146)	120.8(6)	C(145)-C(146)-C(141)	118.4(5)
C(212)-C(211)-C(216)	121.0(5)	C(212)-C(211)-As(2)	119.4(4)
C(216)-C(211)-As(2)	119.6(4)	C(211)-C(212)-C(213)	119.1(5)
C(214)-C(213)-C(212)	118.5(6)	C(215)-C(214)-C(213)	122.5(6)
C(214)-C(215)-C(216)	119.8(5)	C(215)-C(216)-C(211)	119.1(5)
C(226)-C(221)-C(222)	120.6(5)	C(226)-C(221)-As(2)	120.1(4)
C(222)-C(221)-As(2)	119.3(4)	C(223)-C(222)-C(221)	119.2(5)
C(222)-C(223)-C(224)	120.3(5)	C(225)-C(224)-C(223)	120.0(5)
C(224)-C(225)-C(226)	120.7(6)	C(225)-C(226)-C(221)	119.2(5)
C(236)-C(231)-C(232)	120.6(4)	C(236)-C(231)-As(2)	119.4(4)
C(232)-C(231)-As(2)	119.9(3)	C(231)-C(232)-C(233)	119.3(5)
C(234)-C(233)-C(232)	119.9(5)	C(235)-C(234)-C(233)	120.3(5)
C(236)-C(235)-C(234)	120.7(5)	C(235)-C(236)-C(231)	119.1(5)
C(246)-C(241)-C(242)	121.3(5)	C(246)-C(241)-As(2)	119.9(4)
C(242)-C(241)-As(2)	118.8(4)	C(243)-C(242)-C(241)	118.8(5)
C(244)-C(243)-C(242)	120.3(5)	C(243)-C(244)-C(245)	121.0(5)
C(244)-C(245)-C(246)	119.6(5)	C(241)-C(246)-C(245)	119.0(5)

Table A.93: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MnN(quin)(CN)₃]-3H₂O. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2p²[h²a*2U11+ .. +2hka*b*U12].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mn	30(1)	19(1)	29(1)	-8(1)	7(1)	-8(1)
As(1)	22(1)	25(1)	37(1)	-16(1)	11(1)	-11(1)
As(2)	24(1)	22(1)	28(1)	-9(1)	11(1)	-13(1)
N(10)	45(2)	27(2)	34(3)	-13(2)	10(2)	-10(2)
C(1)	32(2)	28(3)	33(3)	-8(2)	6(2)	-14(2)
N(1)	46(3)	24(2)	52(3)	-14(2)	9(2)	-15(2)
C(2)	34(3)	23(2)	37(3)	-15(2)	5(2)	-4(2)
N(2)	33(2)	41(3)	59(3)	-28(2)	3(2)	-7(2)
C(3)	26(2)	28(3)	33(3)	-9(2)	7(2)	-9(2)
N(3)	36(2)	21(2)	41(3)	-10(2)	11(2)	-10(2)
N(11)	30(2)	19(2)	29(2)	-5(2)	5(2)	-8(2)
C(11)	36(3)	22(2)	37(3)	-4(2)	6(2)	-12(2)
C(12)	42(3)	38(3)	45(3)	-13(3)	20(3)	-20(3)
C(13)	63(4)	42(3)	55(4)	-19(3)	28(3)	-28(3)
C(14)	42(3)	33(3)	77(5)	-15(3)	26(3)	-20(3)
C(15)	40(3)	37(3)	67(4)	-5(3)	8(3)	-23(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.9.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{quin})(\text{CN})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^2U11 + \dots + 2hka^*b^*U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(16)	37(3)	29(3)	51(4)	-5(2)	8(3)	-13(2)
C(17)	42(3)	60(4)	45(4)	-15(3)	1(3)	-25(3)
C(18)	35(3)	53(4)	37(3)	-7(3)	1(2)	-17(3)
C(19)	33(2)	18(2)	30(3)	-2(2)	7(2)	-7(2)
C(110)	40(3)	21(2)	30(3)	-6(2)	6(2)	-12(2)
O(11)	32(2)	28(2)	34(2)	-9(2)	10(2)	-16(2)
O(12)	61(3)	56(3)	31(2)	-7(2)	8(2)	-31(2)
C(111)	26(2)	29(3)	42(3)	-21(2)	17(2)	-15(2)
C(112)	35(3)	31(3)	60(4)	-23(3)	24(3)	-17(2)
C(113)	45(3)	28(3)	68(4)	-23(3)	22(3)	-12(3)
C(114)	71(4)	33(3)	55(4)	-19(3)	19(3)	-32(3)
C(115)	54(3)	50(4)	58(4)	-24(3)	23(3)	-38(3)
C(116)	31(3)	37(3)	54(4)	-19(3)	16(2)	-20(2)
C(121)	29(2)	38(3)	36(3)	-19(2)	5(2)	-8(2)
C(122)	38(4)	176(10)	64(5)	-78(6)	1(4)	24(5)
C(123)	45(4)	200(12)	52(5)	-66(6)	3(4)	20(6)
C(124)	36(3)	50(4)	37(3)	-24(3)	3(2)	-5(3)
C(125)	25(2)	38(3)	50(4)	-18(3)	7(2)	-10(2)
C(126)	27(2)	43(3)	40(3)	-13(2)	16(2)	-16(2)
C(131)	26(2)	29(3)	39(3)	-17(2)	15(2)	-16(2)
C(132)	36(3)	29(3)	41(3)	-13(2)	16(2)	-19(2)
C(133)	44(3)	28(3)	50(3)	-25(3)	18(3)	-17(2)
C(134)	29(2)	46(3)	46(3)	-32(3)	19(2)	-20(2)
C(135)	37(3)	43(3)	37(3)	-16(3)	2(2)	-14(3)
C(136)	36(3)	27(3)	42(3)	-15(2)	1(2)	-6(2)
C(141)	26(2)	26(2)	33(3)	-10(2)	12(2)	-14(2)
C(142)	33(3)	28(3)	41(3)	-11(2)	9(2)	-15(2)
C(143)	35(3)	33(3)	52(4)	-10(3)	9(3)	-22(2)
C(144)	34(3)	47(3)	61(4)	-13(3)	21(3)	-26(3)
C(145)	44(3)	61(4)	49(4)	-22(3)	25(3)	-28(3)
C(146)	35(3)	46(3)	41(3)	-20(3)	20(2)	-25(3)
C(211)	31(2)	23(2)	28(3)	-10(2)	11(2)	-16(2)
C(212)	43(3)	44(3)	38(3)	-19(3)	18(2)	-26(3)
C(213)	66(4)	55(4)	46(4)	-33(3)	22(3)	-32(3)
C(214)	84(5)	38(3)	41(3)	-18(3)	5(3)	-35(3)
C(215)	69(4)	44(3)	46(4)	-15(3)	12(3)	-43(3)
C(216)	46(3)	39(3)	42(3)	-19(2)	19(3)	-29(3)
C(221)	22(2)	26(2)	31(3)	-10(2)	13(2)	-13(2)
C(222)	38(3)	31(3)	41(3)	-10(2)	12(2)	-19(2)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.93: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{quin})(\text{CN})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^2U11 + \dots + 2hka^*b^*U12]$ (continued).

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(223)	36(3)	44(3)	33(3)	4(3)	7(2)	-22(3)
C(224)	41(3)	68(4)	30(3)	-10(3)	11(2)	-36(3)
C(225)	40(3)	55(4)	40(3)	-30(3)	18(2)	-25(3)
C(226)	31(2)	37(3)	37(3)	-18(2)	12(2)	-18(2)
C(231)	29(2)	32(3)	25(2)	-15(2)	14(2)	-19(2)
C(232)	34(3)	31(3)	41(3)	-8(2)	10(2)	-19(2)
C(233)	27(2)	39(3)	56(4)	-16(3)	10(2)	-16(2)
C(234)	30(3)	65(4)	57(4)	-27(3)	21(3)	-31(3)
C(235)	52(4)	85(5)	42(4)	0(3)	16(3)	-44(4)
C(236)	33(3)	59(4)	36(3)	-8(3)	13(2)	-26(3)
C(241)	26(2)	24(2)	32(3)	-8(2)	12(2)	-15(2)
C(242)	32(2)	29(3)	35(3)	-9(2)	9(2)	-15(2)
C(243)	38(3)	25(3)	44(3)	-16(2)	16(2)	-12(2)
C(244)	40(3)	32(3)	34(3)	-8(2)	7(2)	-5(2)
C(245)	39(3)	50(4)	37(3)	-8(3)	1(2)	-17(3)
C(246)	33(3)	36(3)	34(3)	-13(2)	9(2)	-19(2)
O(2W)	71(3)	44(3)	54(3)	-7(2)	15(2)	-11(2)
O(3W)	51(2)	48(2)	51(3)	-11(2)	18(2)	-28(2)
O(1W)	520(40)	330(20)	430(30)	-200(20)	230(30)	-280(30)

UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Table A.94: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{quin})(\text{CN})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(12)	5046	316	8920	49
H(13)	3483	168	9441	61
H(14)	2179	137	8605	61
H(15)	2405	219	7284	59
H(17)	3537	381	6089	59
H(18)	5017	684	5562	53
H(112)	4971	5993	1209	47
H(113)	4663	7921	571	56
H(114)	6109	8340	91	59
H(115)	7893	6854	300	56
H(116)	8231	4938	980	46
H(122)	6977	3073	3306	132
H(123)	8297	1961	4460	145
H(124)	10164	982	4277	52
H(125)	10663	1068	3003	46

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.94: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MnN}(\text{quin})(\text{CN})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (continued).

	x	y	z	U(eq)
H(126)	9358	2230	1846	45
H(132)	8338	1412	1287	41
H(133)	8756	764	157	45
H(134)	8121	2049	-1162	42
H(135)	7010	4006	-1387	48
H(136)	6559	4691	-268	44
H(142)	5579	2655	1053	40
H(143)	3992	2451	1434	47
H(144)	3083	3149	2463	55
H(145)	3700	4150	3053	59
H(146)	5262	4420	2654	45
H(212)	8863	7048	4097	46
H(213)	9086	8385	4600	60
H(214)	10526	8876	4221	60
H(215)	11662	8181	3319	56
H(216)	11448	6870	2795	45
H(222)	9298	7915	1598	43
H(223)	9247	8427	176	48
H(224)	9997	6990	-440	52
H(225)	10832	5045	366	48
H(226)	10825	4509	1782	39
H(232)	7660	7022	2185	41
H(233)	5951	7070	2522	48
H(234)	5859	5800	3755	55
H(235)	7448	4506	4661	72
H(236)	9158	4425	4333	51
H(242)	10531	3331	3103	39
H(243)	11967	1493	3763	42
H(244)	13389	1289	4603	48
H(245)	13421	2898	4813	54
H(246)	12003	4754	4147	39

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

(Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₃]-3H₂O

Table A.10.1: Atomic coordinates (x 10⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₄]-3H₂O. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	X	y	z	U(eq)
Mo	9753(1)	8091(1)	1672(1)	47(1)
As(1)	5606(1)	5079(1)	3077(1)	42(1)
As(2)	3525(1)	2021(1)	1598(1)	43(1)
O(10)	9950(3)	8300(3)	668(2)	58(1)
C(1)	11594(4)	7275(4)	1583(3)	51(1)
N(1)	12550(4)	6809(4)	1579(3)	73(1)
C(2)	9857(4)	6476(4)	1669(3)	54(1)
N(2)	9885(4)	5619(4)	1645(3)	75(1)
C(3)	7822(4)	8723(4)	2214(3)	53(1)
N(3)	6819(4)	8987(4)	2532(3)	72(1)
N(11)	9618(3)	9740(3)	1960(2)	52(1)
C(11)	9726(4)	10431(4)	1399(3)	61(1)
C(12)	9739(5)	11401(5)	1582(4)	82(2)
C(13)	9631(5)	11688(5)	2378(5)	90(2)
C(14)	9482(5)	11009(5)	2976(4)	85(2)
C(15)	9483(4)	10028(5)	2752(3)	64(1)
C(16)	9330(4)	9227(5)	3344(3)	69(2)
O(11)	9439(3)	8349(3)	3009(2)	63(1)
O(12)	9110(4)	9454(4)	4095(2)	107(2)
C(111)	6792(4)	5050(4)	3459(3)	52(1)
C(112)	7154(5)	5870(6)	3277(3)	80(2)
C(113)	8050(6)	5802(8)	3523(4)	109(3)
C(114)	8564(6)	4930(8)	3927(4)	109(3)
C(115)	8193(5)	4149(6)	4113(4)	88(2)
C(116)	7295(4)	4192(4)	3881(3)	61(1)
C(121)	5500(4)	3734(3)	3297(3)	42(1)
C(122)	6311(4)	2760(4)	2709(3)	55(1)
C(123)	6298(5)	1772(4)	2894(3)	67(1)
C(124)	5490(5)	1738(4)	3638(4)	70(2)
C(125)	4680(5)	2704(4)	4205(3)	70(2)
C(126)	4670(4)	3708(4)	4034(3)	59(1)
C(131)	4076(4)	6344(3)	3668(3)	45(1)
C(132)	3084(4)	6444(4)	3543(3)	52(1)
C(133)	1987(4)	7378(4)	3950(3)	68(2)
C(134)	1896(5)	8181(5)	4482(3)	79(2)
C(135)	2871(6)	8068(5)	4622(3)	76(2)
C(136)	3987(4)	7149(4)	4216(3)	57(1)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.10.1: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MoO}(\text{pic})(\text{CN})_4]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	X	y	z	U(eq)
C(141)	6145(4)	5107(3)	1886(2)	42(1)
C(142)	5312(4)	5575(3)	1512(3)	46(1)
C(143)	5729(5)	5515(4)	642(3)	58(1)
C(144)	6937(5)	5015(4)	164(3)	58(1)
C(145)	7742(4)	4569(4)	541(3)	63(1)
C(146)	7354(4)	4618(4)	1413(3)	58(1)
C(211)	2590(4)	3183(4)	2550(3)	47(1)
C(212)	2426(5)	2928(5)	3357(3)	67(1)
C(213)	1793(5)	3799(5)	4023(3)	78(2)
C(214)	1330(4)	4890(5)	3892(3)	64(1)
C(215)	1472(4)	5147(4)	3101(3)	59(1)
C(216)	2104(4)	4301(4)	2418(3)	52(1)
C(221)	2928(4)	2449(4)	719(3)	45(1)
C(222)	1714(4)	3079(4)	905(3)	58(1)
C(223)	1305(5)	3310(5)	260(4)	76(2)
C(224)	2095(6)	2911(4)	-567(4)	73(2)
C(225)	3287(5)	2294(4)	-749(3)	69(2)
C(226)	3730(4)	2058(4)	-107(3)	55(1)
C(231)	5144(3)	1757(3)	1157(3)	41(1)
C(232)	5347(4)	2663(4)	960(3)	54(1)
C(233)	6504(5)	2489(4)	569(3)	65(1)
C(234)	7450(4)	1424(5)	392(3)	63(1)
C(235)	7250(4)	531(4)	597(3)	66(1)
C(236)	6097(4)	682(4)	973(3)	56(1)
C(241)	3467(4)	670(4)	1888(3)	50(1)
C(242)	3973(4)	89(4)	2452(3)	66(1)
C(243)	3892(5)	-875(5)	2657(4)	81(2)
C(244)	3336(5)	-1265(5)	2296(4)	81(2)
C(245)	2867(5)	-699(4)	1731(4)	75(2)
C(246)	2940(4)	271(4)	1522(3)	58(1)
O(1W)	5402(4)	8869(4)	4151(3)	124(2)
O(2W)	3251(6)	900(6)	4918(4)	182(3)
O(3W)	8863(19)	8318(17)	5248(18)	1160(50)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.10.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₄]-3H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
Mo-O(10)	1.681(3)	Mo-C(2)	2.125(6)
Mo-C(1)	2.165(5)	Mo-C(3)	2.177(5)
Mo-O(11)	2.191(3)	Mo-N(11)	2.216(4)
As(1)-C(121)	1.906(4)	As(1)-C(131)	1.915(4)
As(1)-C(111)	1.918(4)	As(1)-C(141)	1.919(4)
As(2)-C(221)	1.904(4)	As(2)-C(231)	1.908(4)
As(2)-C(241)	1.908(4)	As(2)-C(211)	1.914(4)
C(1)-N(1)	1.150(5)	C(2)-N(2)	1.147(6)
C(3)-N(3)	1.149(5)	N(11)-C(11)	1.336(6)
N(11)-C(15)	1.352(6)	C(11)-C(12)	1.369(7)
C(12)-C(13)	1.373(8)	C(13)-C(14)	1.377(8)
C(14)-C(15)	1.394(8)	C(15)-C(16)	1.495(8)
C(16)-O(12)	1.232(6)	C(16)-O(11)	1.263(6)
C(111)-C(116)	1.380(6)	C(111)-C(112)	1.390(7)
C(112)-C(113)	1.381(8)	C(113)-C(114)	1.376(10)
C(114)-C(115)	1.350(9)	C(115)-C(116)	1.382(7)
C(121)-C(126)	1.378(6)	C(121)-C(122)	1.400(6)
C(122)-C(123)	1.370(6)	C(123)-C(124)	1.375(7)
C(124)-C(125)	1.376(7)	C(125)-C(126)	1.376(6)
C(131)-C(132)	1.378(6)	C(131)-C(136)	1.399(6)
C(132)-C(133)	1.384(6)	C(133)-C(134)	1.378(8)
C(134)-C(135)	1.362(8)	C(135)-C(136)	1.388(7)
C(141)-C(146)	1.376(6)	C(141)-C(142)	1.382(5)
C(142)-C(143)	1.390(6)	C(143)-C(144)	1.376(6)
C(144)-C(145)	1.355(6)	C(145)-C(146)	1.394(6)
C(211)-C(212)	1.380(6)	C(211)-C(216)	1.397(6)
C(212)-C(213)	1.386(7)	C(213)-C(214)	1.364(7)
C(214)-C(215)	1.358(6)	C(215)-C(216)	1.384(6)
C(221)-C(222)	1.380(6)	C(221)-C(226)	1.385(6)
C(222)-C(223)	1.370(7)	C(223)-C(224)	1.383(8)
C(224)-C(225)	1.354(7)	C(225)-C(226)	1.393(6)
C(231)-C(232)	1.380(6)	C(231)-C(236)	1.385(6)
C(232)-C(233)	1.377(6)	C(233)-C(234)	1.374(7)
C(234)-C(235)	1.363(7)	C(235)-C(236)	1.379(6)
C(241)-C(246)	1.371(6)	C(241)-C(242)	1.394(6)
C(242)-C(243)	1.384(7)	C(243)-C(244)	1.391(8)
C(244)-C(245)	1.367(7)	C(245)-C(246)	1.387(6)
O(10)-Mo-C(1)	100.36(15)	O(10)-Mo-C(2)	102.56(17)
O(10)-Mo-C(3)	100.47(15)	C(2)-Mo-C(1)	87.24(17)
C(1)-Mo-C(3)	158.93(17)	C(2)-Mo-C(3)	85.21(17)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.10.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₄]-3H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(2)-Mo-O(11)	95.55(16)	O(10)-Mo-O(11)	161.89(15)
C(3)-Mo-O(11)	80.33(14)	C(1)-Mo-O(11)	80.87(14)
C(2)-Mo-N(11)	167.57(16)	O(10)-Mo-N(11)	89.84(15)
C(3)-Mo-N(11)	93.55(15)	C(1)-Mo-N(11)	89.62(15)
C(121)-As(1)-C(131)	109.27(18)	O(11)-Mo-N(11)	72.07(14)
C(131)-As(1)-C(111)	110.8(2)	C(121)-As(1)-C(111)	107.48(19)
C(131)-As(1)-C(141)	111.72(17)	C(121)-As(1)-C(141)	109.53(18)
C(221)-As(2)-C(231)	107.04(18)	C(111)-As(1)-C(141)	107.95(18)
C(231)-As(2)-C(241)	110.18(18)	C(221)-As(2)-C(241)	107.50(19)
C(231)-As(2)-C(211)	110.30(18)	C(221)-As(2)-C(211)	110.63(18)
N(1)-C(1)-Mo	175.6(4)	C(241)-As(2)-C(211)	111.07(19)
N(3)-C(3)-Mo	174.7(4)	N(2)-C(2)-Mo	177.0(4)
C(11)-N(11)-Mo	124.7(3)	C(11)-N(11)-C(15)	118.4(5)
N(11)-C(11)-C(12)	123.1(5)	C(15)-N(11)-Mo	116.8(4)
C(12)-C(13)-C(14)	119.1(6)	C(11)-C(12)-C(13)	119.0(6)
N(11)-C(15)-C(14)	121.0(5)	C(13)-C(14)-C(15)	119.3(6)
C(14)-C(15)-C(16)	124.1(5)	N(11)-C(15)-C(16)	114.8(5)
O(12)-C(16)-C(15)	120.0(6)	O(12)-C(16)-O(11)	125.4(6)
C(16)-O(11)-Mo	121.4(3)	O(11)-C(16)-C(15)	114.6(5)
C(116)-C(111)-As(1)	119.1(4)	C(116)-C(111)-C(112)	121.7(5)
C(113)-C(112)-C(111)	118.2(6)	C(112)-C(111)-As(1)	119.2(4)
C(115)-C(114)-C(113)	121.6(6)	C(114)-C(113)-C(112)	119.7(7)
C(111)-C(116)-C(115)	118.5(6)	C(114)-C(115)-C(116)	120.3(6)
C(126)-C(121)-As(1)	120.7(3)	C(126)-C(121)-C(122)	120.4(4)
C(123)-C(122)-C(121)	119.0(4)	C(122)-C(121)-As(1)	118.8(3)
C(123)-C(124)-C(125)	120.0(5)	C(122)-C(123)-C(124)	120.7(5)
C(125)-C(126)-C(121)	119.3(4)	C(126)-C(125)-C(124)	120.5(5)
C(132)-C(131)-As(1)	119.3(3)	C(132)-C(131)-C(136)	121.2(4)
C(131)-C(132)-C(133)	119.1(5)	C(136)-C(131)-As(1)	119.5(3)
C(135)-C(134)-C(133)	121.0(5)	C(134)-C(133)-C(132)	119.9(5)
C(135)-C(136)-C(131)	118.2(5)	C(134)-C(135)-C(136)	120.5(5)
C(146)-C(141)-As(1)	119.5(3)	C(146)-C(141)-C(142)	121.0(4)
C(141)-C(142)-C(143)	118.2(4)	C(142)-C(141)-As(1)	119.4(3)
C(145)-C(144)-C(143)	120.1(4)	C(144)-C(143)-C(142)	121.0(4)
C(141)-C(146)-C(145)	119.3(4)	C(144)-C(145)-C(146)	120.3(4)
C(212)-C(211)-As(2)	120.8(3)	C(212)-C(211)-C(216)	120.1(4)
C(211)-C(212)-C(213)	118.7(5)	C(216)-C(211)-As(2)	119.1(3)
C(215)-C(214)-C(213)	120.6(5)	C(214)-C(213)-C(212)	121.0(5)
C(215)-C(216)-C(211)	119.5(4)	C(214)-C(215)-C(216)	120.1(5)
C(222)-C(221)-As(2)	120.5(4)	C(222)-C(221)-C(226)	120.8(4)
C(223)-C(222)-C(221)	119.1(5)	C(226)-C(221)-As(2)	118.6(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.10.2: Bond distances [Å] and angles [°] for (Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₄].3H₂O.

Bond/ Angle	Å/°	Bond/ Angle	Å/°
C(225)-C(224)-C(223)	120.3(5)	C(222)-C(223)-C(224)	120.6(5)
C(221)-C(226)-C(225)	118.8(4)	C(224)-C(225)-C(226)	120.4(5)
C(232)-C(231)-As(2)	117.9(3)	C(232)-C(231)-C(236)	120.4(4)
C(233)-C(232)-C(231)	119.5(4)	C(236)-C(231)-As(2)	121.5(3)
C(235)-C(234)-C(233)	120.4(4)	C(234)-C(233)-C(232)	120.1(5)
C(235)-C(236)-C(231)	119.2(4)	C(234)-C(235)-C(236)	120.5(4)
C(246)-C(241)-As(2)	118.9(4)	C(246)-C(241)-C(242)	120.8(4)
C(243)-C(242)-C(241)	118.4(5)	C(242)-C(241)-As(2)	120.3(4)
C(245)-C(244)-C(243)	120.2(5)	C(242)-C(243)-C(244)	120.6(5)
C(241)-C(246)-C(245)	120.2(5)	C(244)-C(245)-C(246)	119.7(5)

Table A.10.3: Anisotropic displacement parameters (Å² x 10³) for (Ph₄As)₂[MoO(pic)(CN)₄].3H₂O.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2a^*2U11+ .. +2hka^*b^*U12]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo	36(1)	49(1)	42(1)	1(1)	-14(1)	-9(1)
As(1)	39(1)	44(1)	38(1)	6(1)	-14(1)	-17(1)
As(2)	41(1)	39(1)	52(1)	15(1)	-22(1)	-19(1)
O(10)	53(2)	68(2)	46(2)	7(2)	-21(2)	-21(2)
C(1)	44(3)	56(3)	47(3)	3(2)	-20(2)	-16(2)
N(1)	50(3)	80(3)	87(3)	12(3)	-32(2)	-25(2)
C(2)	38(3)	55(3)	53(3)	7(2)	-20(2)	-8(2)
N(2)	64(3)	61(3)	84(3)	6(3)	-28(2)	-16(3)
C(3)	49(3)	40(3)	53(3)	-1(2)	-19(2)	-8(2)
N(3)	42(3)	68(3)	81(3)	0(2)	-14(2)	-12(2)
N(11)	33(2)	53(2)	49(2)	-8(2)	-12(2)	-4(2)
C(11)	41(3)	56(3)	67(3)	6(3)	-14(2)	-13(2)
C(12)	66(4)	66(4)	87(5)	1(3)	-8(3)	-25(3)
C(13)	75(4)	73(4)	97(5)	-22(4)	-8(4)	-30(3)
C(14)	69(4)	80(5)	75(4)	-28(4)	-19(3)	-15(3)
C(15)	45(3)	63(4)	59(3)	-10(3)	-14(2)	-8(2)
C(16)	52(3)	72(4)	51(3)	-11(3)	-16(2)	-5(3)
O(11)	55(2)	67(2)	48(2)	2(2)	-21(2)	-14(2)
O(12)	126(4)	94(3)	55(2)	-13(2)	-39(2)	-11(3)
C(111)	47(3)	76(3)	38(2)	6(2)	-17(2)	-32(3)
C(112)	88(4)	123(5)	67(4)	27(3)	-35(3)	-77(4)
C(113)	117(6)	214(9)	64(4)	30(5)	-31(4)	-134(6)
C(114)	73(5)	211(10)	57(4)	4(5)	-24(3)	-77(6)
C(115)	63(4)	125(6)	66(4)	5(4)	-37(3)	-27(4)
C(116)	54(3)	78(4)	45(3)	3(3)	-22(2)	-22(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

**Table A.10.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MoO}(\text{pic})(\text{CN})_4] \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p \sqrt{h^2 a^* 2U11 + .. + 2hka^* b^* U12}$.**

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(121)	43(2)	43(3)	41(2)	9(2)	-20(2)	-18(2)
C(122)	53(3)	45(3)	52(3)	0(2)	-14(2)	-15(2)
C(123)	72(4)	43(3)	75(4)	-4(3)	-25(3)	-18(3)
C(124)	96(4)	48(3)	79(4)	19(3)	-43(3)	-37(3)
C(125)	91(4)	59(4)	64(3)	21(3)	-22(3)	-46(3)
C(126)	61(3)	53(3)	47(3)	-1(2)	-8(2)	-24(3)
C(131)	48(3)	40(3)	40(2)	9(2)	-12(2)	-18(2)
C(132)	45(3)	49(3)	54(3)	1(2)	-12(2)	-19(2)
C(133)	47(3)	64(4)	68(3)	6(3)	-12(3)	-13(3)
C(134)	67(4)	59(4)	66(4)	1(3)	-1(3)	-10(3)
C(135)	90(4)	57(4)	60(3)	-7(3)	-12(3)	-28(3)
C(136)	62(3)	53(3)	50(3)	2(2)	-16(2)	-26(3)
C(141)	44(2)	40(2)	35(2)	8(2)	-13(2)	-16(2)
C(142)	47(3)	44(3)	43(3)	11(2)	-19(2)	-18(2)
C(143)	75(4)	57(3)	53(3)	16(2)	-39(3)	-30(3)
C(144)	79(4)	57(3)	38(3)	11(2)	-17(3)	-37(3)
C(145)	51(3)	63(3)	59(3)	7(3)	-7(3)	-23(3)
C(146)	48(3)	77(4)	43(3)	16(2)	-16(2)	-26(3)
C(211)	44(3)	50(3)	45(3)	12(2)	-18(2)	-21(2)
C(212)	79(4)	63(4)	57(3)	18(3)	-29(3)	-30(3)
C(213)	92(4)	93(5)	44(3)	11(3)	-26(3)	-39(4)
C(214)	61(3)	66(4)	56(3)	-5(3)	-20(3)	-24(3)
C(215)	55(3)	56(3)	64(3)	1(3)	-23(3)	-24(3)
C(216)	58(3)	51(3)	44(3)	13(2)	-20(2)	-24(2)
C(221)	49(3)	40(3)	56(3)	12(2)	-28(2)	-21(2)
C(222)	46(3)	52(3)	75(3)	10(3)	-28(3)	-20(2)
C(223)	64(4)	64(4)	113(5)	16(3)	-61(4)	-20(3)
C(224)	99(5)	57(3)	89(4)	12(3)	-67(4)	-35(3)
C(225)	92(4)	55(3)	57(3)	4(3)	-36(3)	-25(3)
C(226)	53(3)	43(3)	62(3)	9(2)	-27(3)	-15(2)
C(231)	37(2)	40(2)	47(2)	13(2)	-20(2)	-18(2)
C(232)	46(3)	48(3)	67(3)	17(2)	-21(2)	-21(2)
C(233)	66(3)	68(4)	78(4)	26(3)	-28(3)	-44(3)
C(234)	39(3)	82(4)	63(3)	16(3)	-16(2)	-28(3)
C(235)	44(3)	56(3)	83(4)	14(3)	-23(3)	-14(2)
C(236)	50(3)	44(3)	76(3)	22(2)	-27(2)	-23(2)
C(241)	44(3)	40(3)	60(3)	14(2)	-17(2)	-17(2)
C(242)	64(3)	61(3)	76(4)	28(3)	-32(3)	-30(3)
C(243)	94(4)	60(4)	83(4)	36(3)	-36(4)	-34(3)

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

**Table A.10.3: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MoO}(\text{pic})(\text{CN})_4] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p [h^2a^*2U11+ .. +2hka^*b^*U12]$.**

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(244)	79(4)	57(4)	92(4)	24(3)	-13(3)	-37(3)
C(245)	68(4)	58(4)	105(5)	17(3)	-24(3)	-41(3)
C(246)	53(3)	51(3)	77(3)	19(3)	-27(3)	-28(2)
O(1W)	145(4)	137(4)	106(4)	43(3)	-31(3)	-92(4)
O(2W)	193(6)	191(7)	162(6)	55(5)	-46(5)	-107(6)
O(3W)	600(30)	660(40)	1260(70)	660(50)	350(40)	-80(30)

Table A.10.4: Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MoO}(\text{pic})(\text{CN})_4] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	9796	10245	859	73
H(12)	9820	11857	1173	98
H(13)	9658	12333	2512	108
H(14)	9383	11202	3523	102
H(112)	6802	6449	2999	96
H(113)	8305	6342	3415	131
H(114)	9183	4879	4076	131
H(115)	8543	3579	4399	105
H(116)	7036	3656	4006	74
H(122)	6850	2783	2201	66
H(123)	6842	1117	2512	81
H(124)	5491	1063	3758	84
H(125)	4134	2678	4708	84
H(126)	4110	4362	4413	70
H(132)	3150	5892	3191	63
H(133)	1312	7464	3864	82
H(134)	1158	8810	4749	95
H(135)	2788	8611	4993	91
H(136)	4657	7071	4306	68
H(142)	4495	5920	1835	55
H(143)	5183	5817	378	70
H(144)	7201	4984	-418	70
H(145)	8558	4228	216	76
H(146)	7906	4322	1672	69
H(212)	2733	2186	3451	81
H(213)	1683	3637	4569	94
H(214)	913	5462	4347	76
H(215)	1144	5894	3018	70

A. CRYSTALLOGRAPHIC DATA

Table A.10.4: Hydrogen coordinates (x 104) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $(\text{Ph}_4\text{As})_2[\text{MoO}(\text{pic})(\text{CN})_4] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

	x	y	z	U(eq)
H(216)	2204	4475	1876	62
H(222)	1180	3344	1461	69
H(223)	488	3739	380	91
H(224)	1807	3068	-1000	88
H(225)	3813	2026	-1307	83
H(226)	4549	1645	-231	66
H(232)	4707	3385	1090	65
H(233)	6647	3093	424	78
H(234)	8230	1311	130	75
H(235)	7896	-185	483	79
H(236)	5961	71	1101	67
H(242)	4356	345	2684	79
H(243)	4212	-1267	3039	97
H(244)	3283	-1913	2441	97
H(245)	2501	-963	1487	90
H(246)	2629	653	1133	70

