

Supporting Information for
Synthesis of Molybdenum Complexes that Contain "Hybrid" Triamidoamine Ligands,
[(Hexaisopropylterphenyl)NCH₂CH₂)₂NCH₂CH₂NAryl]³⁺, and Studies Relevant to
Catalytic Reduction of Dinitrogen

Walter W. Weare, Richard R. Schrock*, Adam S. Hock, and Peter Müller

For **3c** (04072) and **5d** (04169)

1. Partially labeled ORTEP drawing
2. Crystal data and structure refinement
 3. Atomic coordinates
 4. Bond lengths and angles
 5. Anisotropic thermal parameters
6. Hydrogen atom coordinates and isotropic displacement parameters

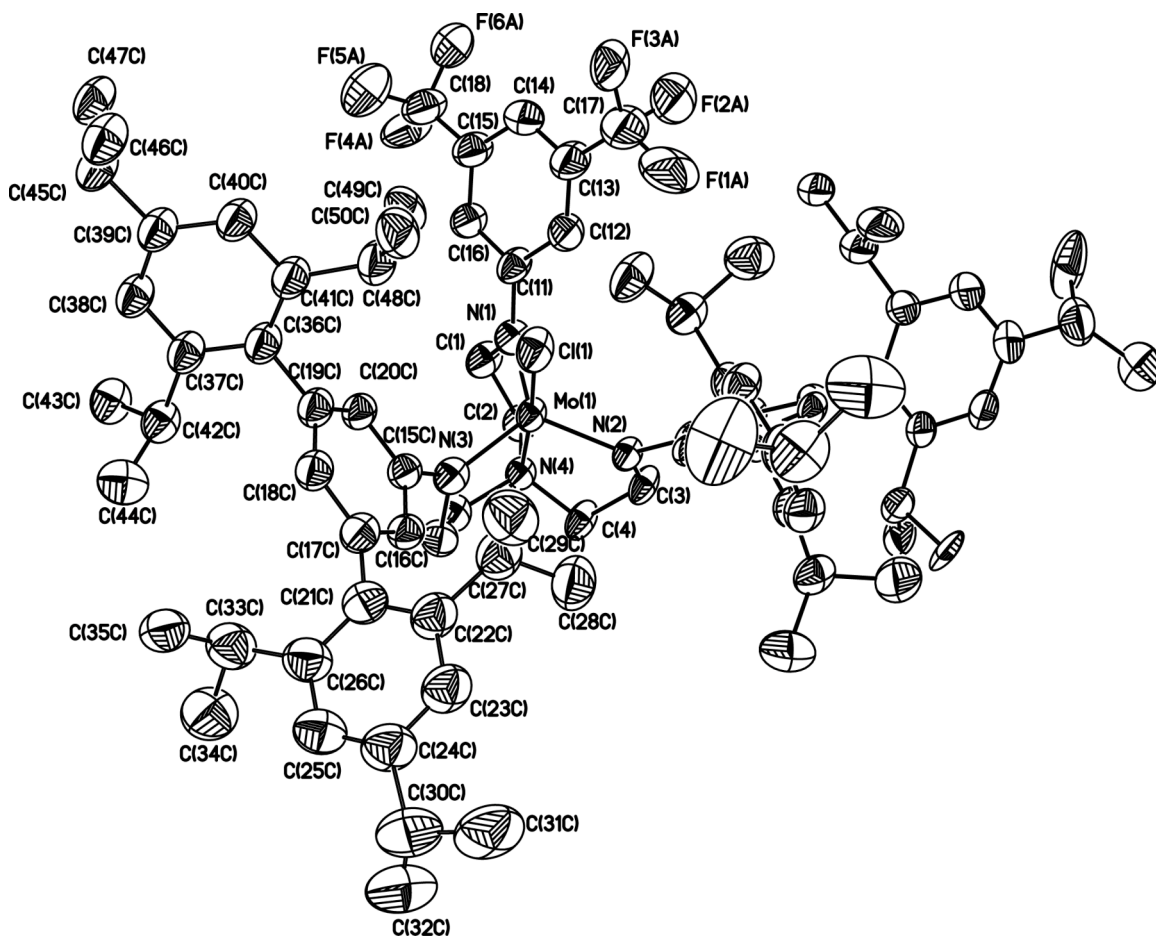


Figure 1. Thermal Ellipsoid Plot (50% probability level) of the structure of **04072**. Hydrogen atoms and co-crystallized solvent molecules have been omitted for clarity. Only one orientation of the disorder portion of the molecule is shown. The full labeling scheme may be seen on <http://reciprocal.lms.mit.edu/recipnet/index.jsp> by searching the code 04072..

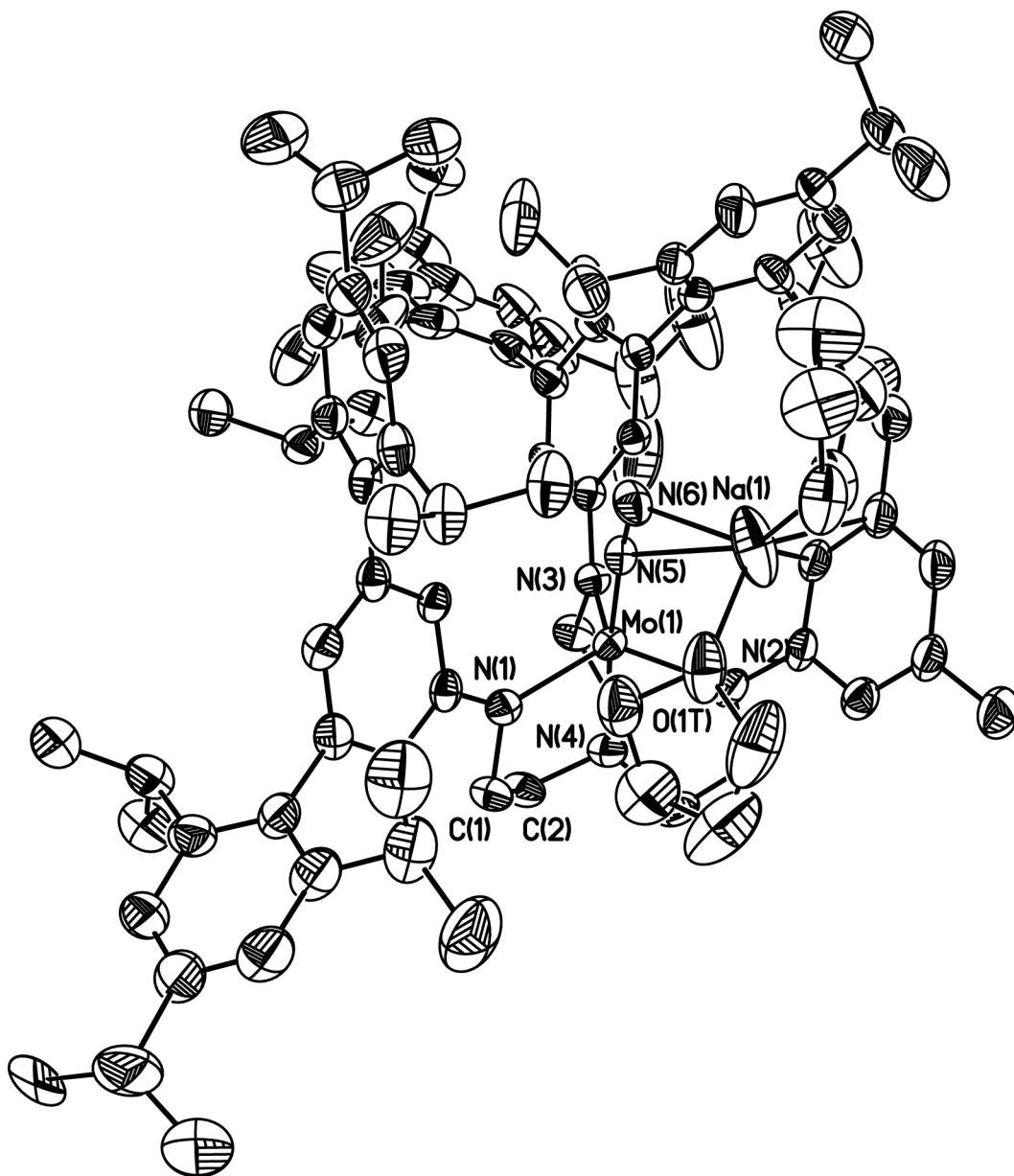


Figure 2. Thermal Ellipsoid Plot (50% probability level) of the structure of **04169**. Hydrogen atoms and co-crystallized solvent molecules have been omitted for clarity. Only one orientation of the disorder portion of the molecule is shown. The full labeling scheme may be seen on <http://reciprocal.lms.mit.edu/recipnet/index.jsp> by searching the code 04169.

Table 1. Crystal data and structure refinement for [(HIPTNCH₂CH₂)₂NCH₂CH₂N{3,5-(CF₃)₂C₆H₃}]MoCl.

Identification code	04072	
Empirical formula	C ₈₆ H ₁₁₃ Cl F ₆ Mo N ₄	
Formula weight	1448.19	
Temperature	193(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	Pbcn	
Unit cell dimensions	a = 33.780(7) Å	a = 90°.
	b = 23.053(5) Å	b = 90°.
	c = 21.560(4) Å	g = 90°.
Volume	16790(6) Å ³	
Z	8	
Density (calculated)	1.146 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.244 mm ⁻¹	
F(000)	6160	
Crystal size	0.28 x 0.15 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.77 to 21.01°.	
Index ranges	0 ≤ h ≤ 34, 0 ≤ k ≤ 23, 0 ≤ l ≤ 21	
Reflections collected	62854	
Independent reflections	8986 [R(int) = 0.1130]	
Completeness to theta = 21.01°	99.5 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9807 and 0.9348	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	8986 / 2559 / 1311	
Goodness-of-fit on F ²	1.121	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0743, wR2 = 0.1900	
R indices (all data)	R1 = 0.1187, wR2 = 0.2208	
Largest diff. peak and hole	0.823 and -0.786 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 04072. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Cl(1)	1921(1)	3078(1)	-161(1)	58(1)
Mo(1)	2141(1)	2424(1)	588(1)	38(1)
N(1)	2545(2)	1997(2)	105(3)	46(2)
C(11)	2708(3)	2118(3)	-468(4)	48(2)
C(12)	2786(3)	2698(4)	-652(4)	58(2)
C(13)	2950(3)	2833(4)	-1204(4)	69(3)
C(17)	3009(3)	3438(4)	-1377(4)	91(3)
F(1)	3286(4)	3556(4)	-1759(7)	115(4)
F(2)	2677(4)	3641(4)	-1712(5)	98(3)
F(3)	3009(5)	3808(5)	-925(6)	94(3)
F(1A)	2904(9)	3829(10)	-980(11)	115(4)
F(2A)	3424(4)	3513(7)	-1339(10)	98(3)
F(3A)	2985(8)	3577(7)	-1952(6)	94(3)
C(14)	3054(3)	2405(4)	-1619(4)	63(2)
C(15)	2972(3)	1838(4)	-1463(4)	58(2)
C(18)	3075(3)	1373(4)	-1895(4)	71(2)
F(4)	3191(5)	1533(4)	-2449(4)	94(3)
F(5)	3363(4)	1044(6)	-1668(5)	95(3)
F(6)	2782(3)	1001(6)	-1987(7)	97(3)
F(4A)	3202(11)	883(8)	-1665(10)	94(3)
F(5A)	2792(7)	1240(13)	-2289(14)	95(3)
F(6A)	3376(8)	1535(11)	-2263(13)	97(3)
C(16)	2806(3)	1701(3)	-904(4)	52(2)
N(2)	2357(2)	2940(2)	1226(3)	39(2)
C(215)	2421(2)	3551(3)	1185(3)	38(2)
C(216)	2790(2)	3784(3)	1293(3)	38(2)
C(217)	2851(2)	4383(3)	1267(3)	36(2)
C(218)	2534(2)	4724(3)	1119(3)	37(2)
C(219)	2159(2)	4513(3)	1010(3)	34(2)
C(220)	2105(2)	3914(3)	1058(3)	36(2)
C(221)	3242(2)	4643(3)	1421(3)	40(2)

C(222)	3483(2)	4851(3)	955(3)	46(2)
C(223)	3827(2)	5135(3)	1111(4)	55(2)
C(224)	3938(3)	5230(4)	1721(4)	60(2)
C(225)	3693(2)	5005(3)	2171(4)	54(2)
C(226)	3348(2)	4717(3)	2038(3)	45(2)
C(227)	3395(3)	4760(3)	273(3)	53(2)
C(228)	3389(8)	5323(4)	-92(5)	71(4)
C(229)	3693(5)	4338(5)	-1(9)	75(4)
C(28B)	3180(110)	5270(80)	-20(120)	60(30)
C(29B)	3570(110)	4360(90)	-200(100)	60(30)
C(230)	4311(3)	5554(4)	1867(5)	78(3)
C(231)	4250(8)	6003(11)	2343(12)	96(8)
C(232)	4637(5)	5181(8)	1925(16)	100(7)
C(31B)	4389(19)	5910(30)	2430(30)	69(14)
C(32B)	4643(11)	5350(40)	1530(40)	108(19)
C(233)	3098(3)	4489(3)	2560(4)	49(2)
C(234)	3270(5)	3923(8)	2822(10)	66(5)
C(235)	3039(6)	4941(7)	3082(8)	72(4)
C(34B)	3320(40)	4130(60)	3050(60)	60(20)
C(35B)	2900(50)	5020(40)	2880(70)	70(20)
C(236)	1839(2)	4930(3)	850(3)	37(2)
C(237)	1657(2)	5248(3)	1312(3)	47(2)
C(238)	1400(2)	5680(3)	1138(4)	52(2)
C(239)	1317(2)	5807(3)	534(4)	54(2)
C(240)	1491(2)	5468(3)	82(4)	51(2)
C(241)	1754(2)	5022(3)	232(3)	43(2)
C(242)	1722(2)	5119(3)	1996(3)	52(2)
C(243)	1343(3)	5065(5)	2347(4)	86(3)
C(244)	1989(3)	5538(5)	2329(4)	86(3)
C(245)	1044(3)	6300(4)	352(5)	78(3)
C(246)	639(4)	6226(7)	565(10)	110(7)
C(247)	1212(5)	6888(5)	505(11)	102(6)
C(46B)	722(12)	6088(18)	-40(20)	125(16)
C(47B)	1258(12)	6799(15)	40(20)	105(14)
C(248)	1939(3)	4668(3)	-283(4)	51(2)
C(249)	1651(4)	4443(18)	-763(9)	64(5)

C(250)	2282(9)	4975(17)	-594(15)	83(6)
C(49B)	1660(30)	4670(80)	-840(40)	64(5)
C(50B)	2330(30)	4960(100)	-440(80)	68(18)
N(3)	1639(2)	2043(3)	716(3)	45(2)
C(315)	1271(4)	2153(12)	417(7)	43(2)
C(316)	957(4)	2443(8)	696(7)	45(2)
C(317)	617(4)	2570(5)	358(6)	50(2)
C(318)	602(5)	2399(8)	-255(6)	49(2)
C(319)	906(4)	2099(9)	-547(6)	49(2)
C(320)	1240(5)	1987(13)	-204(7)	45(2)
C(321)	286(3)	2911(5)	630(5)	60(2)
C(322)	319(3)	3509(5)	679(5)	65(2)
C(323)	16(3)	3821(6)	956(6)	71(2)
C(324)	-315(4)	3550(6)	1188(7)	78(2)
C(325)	-346(4)	2955(6)	1114(7)	75(2)
C(326)	-59(4)	2639(5)	834(6)	67(2)
C(327)	666(4)	3839(6)	411(7)	71(3)
C(328)	532(5)	4279(7)	-77(8)	96(4)
C(329)	904(5)	4125(7)	903(8)	96(4)
C(330)	-649(5)	3885(7)	1511(7)	102(3)
C(331)	-665(5)	4509(7)	1317(8)	117(5)
C(332)	-665(6)	3733(9)	2150(8)	124(5)
C(333)	-112(5)	1990(6)	793(7)	77(2)
C(334)	-134(6)	1738(8)	1446(7)	114(5)
C(335)	-492(6)	1830(10)	437(8)	92(5)
C(336)	866(4)	1941(6)	-1212(6)	51(2)
C(337)	690(5)	1419(6)	-1390(7)	50(2)
C(338)	604(5)	1335(8)	-2006(7)	52(2)
C(339)	678(8)	1744(10)	-2447(7)	55(2)
C(340)	875(7)	2244(9)	-2272(7)	56(2)
C(341)	969(7)	2349(8)	-1651(7)	56(2)
C(342)	610(5)	940(6)	-920(8)	51(3)
C(343)	187(5)	948(8)	-713(13)	64(4)
C(344)	722(6)	333(7)	-1148(14)	64(4)
C(345)	570(7)	1659(11)	-3124(7)	60(2)
C(346)	927(7)	1570(8)	-3518(10)	71(4)

C(347)	317(9)	2163(15)	-3367(13)	65(4)
C(348)	1188(5)	2911(6)	-1500(8)	65(2)
C(349)	1581(4)	2951(7)	-1843(8)	74(3)
C(350)	934(5)	3425(6)	-1634(8)	80(4)
C(15C)	1289(8)	2130(30)	362(16)	44(2)
C(16C)	971(9)	2360(20)	676(15)	46(2)
C(17C)	615(7)	2465(12)	362(12)	52(2)
C(18C)	598(9)	2327(19)	-255(13)	50(2)
C(19C)	919(9)	2107(19)	-582(11)	49(2)
C(20C)	1260(10)	1990(30)	-261(16)	46(2)
C(21C)	290(6)	2731(9)	727(10)	61(2)
C(22C)	337(6)	3292(9)	929(9)	66(2)
C(23C)	68(6)	3525(10)	1346(10)	73(3)
C(24C)	-244(8)	3198(11)	1561(12)	80(3)
C(25C)	-286(8)	2637(11)	1357(13)	75(3)
C(26C)	-31(8)	2406(10)	933(13)	70(2)
C(27C)	678(7)	3670(11)	718(12)	71(3)
C(28C)	940(10)	3876(16)	1243(15)	84(6)
C(29C)	551(12)	4142(16)	292(17)	89(6)
C(30C)	-504(9)	3453(12)	2076(13)	102(4)
C(31C)	-410(12)	4088(12)	2170(18)	114(6)
C(32C)	-508(12)	3092(15)	2609(14)	121(8)
C(33C)	-110(10)	1804(10)	696(13)	77(3)
C(34C)	-216(13)	1391(15)	1226(16)	97(7)
C(35C)	-449(13)	1820(20)	214(16)	73(6)
C(36C)	872(9)	1955(12)	-1244(11)	52(2)
C(37C)	657(10)	1461(13)	-1399(14)	51(2)
C(38C)	567(12)	1367(16)	-2010(14)	52(2)
C(39C)	681(18)	1740(20)	-2466(14)	55(2)
C(40C)	907(16)	2221(19)	-2304(14)	56(2)
C(41C)	1004(14)	2341(16)	-1687(14)	57(2)
C(42C)	537(11)	1030(13)	-897(18)	53(3)
C(43C)	624(15)	416(15)	-1080(30)	59(5)
C(44C)	106(13)	1090(20)	-700(30)	64(6)
C(45C)	552(15)	1650(20)	-3131(14)	59(3)
C(46C)	380(20)	2180(30)	-3420(30)	65(6)

C(47C)	874(16)	1390(19)	-3540(20)	65(6)
C(48C)	1266(10)	2863(13)	-1542(17)	65(3)
C(49C)	1121(10)	3419(14)	-1839(19)	74(3)
C(50C)	1691(9)	2735(14)	-1710(20)	72(5)
C(1)	2650(3)	1426(3)	353(4)	52(2)
C(2)	2673(3)	1483(3)	1042(4)	47(2)
C(3)	2581(3)	2656(3)	1722(3)	46(2)
C(4)	2393(3)	2088(3)	1866(3)	48(2)
C(5)	1597(3)	1666(4)	1277(4)	53(2)
C(6)	1982(2)	1357(3)	1352(4)	47(2)
N(4)	2314(2)	1770(2)	1279(3)	39(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 04072.

Cl(1)-Mo(1)	2.331(2)
Mo(1)-N(3)	1.931(7)
Mo(1)-N(2)	1.959(6)
Mo(1)-N(1)	1.978(7)
Mo(1)-N(4)	2.199(6)
N(1)-C(11)	1.382(10)
N(1)-C(1)	1.465(9)
C(11)-C(16)	1.385(11)
C(11)-C(12)	1.418(11)
C(12)-C(13)	1.349(11)
C(13)-C(14)	1.377(12)
C(13)-C(17)	1.457(12)
C(17)-F(1)	1.278(10)
C(17)-F(3A)	1.283(12)
C(17)-F(1A)	1.292(13)
C(17)-F(3)	1.296(11)
C(17)-F(2)	1.412(10)
C(17)-F(2A)	1.415(12)
C(14)-C(15)	1.379(12)
C(15)-C(16)	1.368(11)
C(15)-C(18)	1.461(11)
C(18)-F(4A)	1.308(13)
C(18)-F(4)	1.309(9)
C(18)-F(5A)	1.314(12)
C(18)-F(6)	1.324(10)
C(18)-F(5)	1.327(10)
C(18)-F(6A)	1.342(12)
N(2)-C(215)	1.427(9)
N(2)-C(3)	1.463(9)
C(215)-C(216)	1.377(9)
C(215)-C(220)	1.384(9)
C(216)-C(217)	1.397(9)
C(217)-C(218)	1.366(9)
C(217)-C(221)	1.489(9)

C(218)-C(219)	1.377(9)
C(219)-C(220)	1.396(9)
C(219)-C(236)	1.487(10)
C(221)-C(222)	1.378(9)
C(221)-C(226)	1.389(9)
C(222)-C(223)	1.374(10)
C(222)-C(227)	1.515(10)
C(223)-C(224)	1.384(11)
C(224)-C(225)	1.376(11)
C(224)-C(230)	1.500(12)
C(225)-C(226)	1.370(10)
C(226)-C(233)	1.502(11)
C(227)-C(29B)	1.50(2)
C(227)-C(228)	1.518(11)
C(227)-C(229)	1.520(11)
C(227)-C(28B)	1.52(2)
C(230)-C(232)	1.400(14)
C(230)-C(32B)	1.419(19)
C(230)-C(231)	1.473(14)
C(230)-C(31B)	1.495(19)
C(233)-C(34B)	1.534(19)
C(233)-C(234)	1.537(11)
C(233)-C(235)	1.546(11)
C(233)-C(35B)	1.547(19)
C(236)-C(241)	1.379(9)
C(236)-C(237)	1.382(9)
C(237)-C(238)	1.373(9)
C(237)-C(242)	1.521(10)
C(238)-C(239)	1.366(10)
C(239)-C(240)	1.380(10)
C(239)-C(245)	1.515(10)
C(240)-C(241)	1.397(9)
C(241)-C(248)	1.515(10)
C(242)-C(243)	1.493(10)
C(242)-C(244)	1.505(11)
C(245)-C(246)	1.453(14)

C(245)-C(46B)	1.467(19)
C(245)-C(247)	1.506(14)
C(245)-C(47B)	1.511(19)
C(248)-C(50B)	1.509(19)
C(248)-C(249)	1.511(12)
C(248)-C(250)	1.514(13)
C(248)-C(49B)	1.516(19)
N(3)-C(15C)	1.418(12)
N(3)-C(315)	1.422(10)
N(3)-C(5)	1.496(9)
C(315)-C(316)	1.391(11)
C(315)-C(320)	1.396(11)
C(316)-C(317)	1.392(11)
C(317)-C(318)	1.380(11)
C(317)-C(321)	1.488(12)
C(318)-C(319)	1.391(12)
C(319)-C(320)	1.373(11)
C(319)-C(336)	1.484(12)
C(321)-C(322)	1.386(13)
C(321)-C(326)	1.394(13)
C(322)-C(323)	1.384(13)
C(322)-C(327)	1.515(14)
C(323)-C(324)	1.374(14)
C(324)-C(325)	1.384(15)
C(324)-C(330)	1.535(17)
C(325)-C(326)	1.356(13)
C(326)-C(333)	1.510(16)
C(327)-C(329)	1.487(14)
C(327)-C(328)	1.529(15)
C(330)-C(332)	1.423(17)
C(330)-C(331)	1.500(16)
C(333)-C(334)	1.524(14)
C(333)-C(335)	1.538(14)
C(336)-C(341)	1.379(11)
C(336)-C(337)	1.396(11)
C(337)-C(338)	1.374(11)

C(337)-C(342)	1.522(11)
C(338)-C(339)	1.361(12)
C(339)-C(340)	1.384(12)
C(339)-C(345)	1.517(11)
C(340)-C(341)	1.397(12)
C(341)-C(348)	1.527(13)
C(342)-C(343)	1.499(14)
C(342)-C(344)	1.530(14)
C(345)-C(346)	1.490(16)
C(345)-C(347)	1.534(15)
C(348)-C(350)	1.492(15)
C(348)-C(349)	1.523(15)
C(15C)-C(16C)	1.380(15)
C(15C)-C(20C)	1.385(15)
C(16C)-C(17C)	1.401(15)
C(17C)-C(18C)	1.369(15)
C(17C)-C(21C)	1.484(15)
C(18C)-C(19C)	1.389(15)
C(19C)-C(20C)	1.373(15)
C(19C)-C(36C)	1.479(15)
C(21C)-C(22C)	1.374(16)
C(21C)-C(26C)	1.391(16)
C(22C)-C(23C)	1.386(16)
C(22C)-C(27C)	1.514(17)
C(23C)-C(24C)	1.376(17)
C(24C)-C(25C)	1.373(18)
C(24C)-C(30C)	1.53(2)
C(25C)-C(26C)	1.365(16)
C(26C)-C(33C)	1.50(2)
C(27C)-C(29C)	1.487(18)
C(27C)-C(28C)	1.514(18)
C(30C)-C(32C)	1.42(2)
C(30C)-C(31C)	1.51(2)
C(33C)-C(34C)	1.529(17)
C(33C)-C(35C)	1.545(17)
C(36C)-C(41C)	1.378(15)

C(36C)-C(37C)	1.391(15)
C(37C)-C(38C)	1.368(15)
C(37C)-C(42C)	1.524(15)
C(38C)-C(39C)	1.367(15)
C(39C)-C(40C)	1.384(15)
C(39C)-C(45C)	1.514(15)
C(40C)-C(41C)	1.398(15)
C(41C)-C(48C)	1.526(17)
C(42C)-C(43C)	1.500(18)
C(42C)-C(44C)	1.522(18)
C(45C)-C(46C)	1.48(2)
C(45C)-C(47C)	1.52(2)
C(48C)-C(50C)	1.510(19)
C(48C)-C(49C)	1.514(18)
C(1)-C(2)	1.493(11)
C(2)-N(4)	1.472(9)
C(3)-C(4)	1.488(10)
C(4)-N(4)	1.487(9)
C(5)-C(6)	1.491(11)
C(6)-N(4)	1.480(9)
N(3)-Mo(1)-N(2)	120.2(3)
N(3)-Mo(1)-N(1)	117.1(3)
N(2)-Mo(1)-N(1)	114.5(3)
N(3)-Mo(1)-N(4)	79.9(2)
N(2)-Mo(1)-N(4)	80.9(2)
N(1)-Mo(1)-N(4)	80.3(2)
N(3)-Mo(1)-Cl(1)	96.47(19)
N(2)-Mo(1)-Cl(1)	102.32(17)
N(1)-Mo(1)-Cl(1)	100.20(18)
N(4)-Mo(1)-Cl(1)	176.10(17)
C(11)-N(1)-C(1)	114.3(6)
C(11)-N(1)-Mo(1)	130.1(5)
C(1)-N(1)-Mo(1)	115.0(5)
N(1)-C(11)-C(16)	124.1(7)
N(1)-C(11)-C(12)	121.0(7)
C(16)-C(11)-C(12)	114.9(8)

C(13)-C(12)-C(11)	122.8(8)
C(12)-C(13)-C(14)	120.8(8)
C(12)-C(13)-C(17)	120.2(8)
C(14)-C(13)-C(17)	119.0(8)
F(1)-C(17)-F(3A)	50.8(10)
F(1)-C(17)-F(1A)	118.6(17)
F(3A)-C(17)-F(1A)	116.6(16)
F(1)-C(17)-F(3)	110.2(11)
F(3A)-C(17)-F(3)	124.2(13)
F(1A)-C(17)-F(3)	16.8(19)
F(1)-C(17)-F(2)	100.4(9)
F(3A)-C(17)-F(2)	51.2(11)
F(1A)-C(17)-F(2)	83.8(15)
F(3)-C(17)-F(2)	99.7(10)
F(1)-C(17)-F(2A)	44.3(8)
F(3A)-C(17)-F(2A)	94.9(12)
F(1A)-C(17)-F(2A)	98.5(15)
F(3)-C(17)-F(2A)	82.8(12)
F(2)-C(17)-F(2A)	140.7(11)
F(1)-C(17)-C(13)	117.8(9)
F(3A)-C(17)-C(13)	118.5(10)
F(1A)-C(17)-C(13)	117.5(15)
F(3)-C(17)-C(13)	116.0(10)
F(2)-C(17)-C(13)	109.9(8)
F(2A)-C(17)-C(13)	103.7(10)
C(13)-C(14)-C(15)	118.1(8)
C(16)-C(15)-C(14)	121.1(8)
C(16)-C(15)-C(18)	119.4(7)
C(14)-C(15)-C(18)	119.6(8)
F(4A)-C(18)-F(4)	119.3(14)
F(4A)-C(18)-F(5A)	106.5(14)
F(4)-C(18)-F(5A)	72.3(14)
F(4A)-C(18)-F(6)	75.1(14)
F(4)-C(18)-F(6)	105.7(8)
F(5A)-C(18)-F(6)	37.7(13)
F(4A)-C(18)-F(5)	28.9(14)

F(4)-C(18)-F(5)	106.1(9)
F(5A)-C(18)-F(5)	129.7(13)
F(6)-C(18)-F(5)	103.4(9)
F(4A)-C(18)-F(6A)	102.4(14)
F(4)-C(18)-F(6A)	32.4(12)
F(5A)-C(18)-F(6A)	103.6(13)
F(6)-C(18)-F(6A)	131.1(13)
F(5)-C(18)-F(6A)	79.7(15)
F(4A)-C(18)-C(15)	118.0(12)
F(4)-C(18)-C(15)	116.5(8)
F(5A)-C(18)-C(15)	114.3(12)
F(6)-C(18)-C(15)	113.3(8)
F(5)-C(18)-C(15)	110.8(8)
F(6A)-C(18)-C(15)	110.6(12)
C(15)-C(16)-C(11)	122.4(8)
C(215)-N(2)-C(3)	114.1(6)
C(215)-N(2)-Mo(1)	127.7(5)
C(3)-N(2)-Mo(1)	115.7(4)
C(216)-C(215)-C(220)	119.6(6)
C(216)-C(215)-N(2)	120.8(6)
C(220)-C(215)-N(2)	119.6(7)
C(215)-C(216)-C(217)	121.0(7)
C(218)-C(217)-C(216)	117.5(7)
C(218)-C(217)-C(221)	121.0(6)
C(216)-C(217)-C(221)	121.5(6)
C(217)-C(218)-C(219)	123.9(6)
C(218)-C(219)-C(220)	117.1(7)
C(218)-C(219)-C(236)	118.8(6)
C(220)-C(219)-C(236)	124.1(7)
C(215)-C(220)-C(219)	120.9(7)
C(222)-C(221)-C(226)	120.3(7)
C(222)-C(221)-C(217)	120.1(7)
C(226)-C(221)-C(217)	119.4(7)
C(223)-C(222)-C(221)	119.0(7)
C(223)-C(222)-C(227)	118.0(7)
C(221)-C(222)-C(227)	122.9(7)

C(222)-C(223)-C(224)	122.5(8)
C(225)-C(224)-C(223)	116.5(8)
C(225)-C(224)-C(230)	123.0(8)
C(223)-C(224)-C(230)	120.5(8)
C(226)-C(225)-C(224)	123.1(8)
C(225)-C(226)-C(221)	118.5(7)
C(225)-C(226)-C(233)	119.5(7)
C(221)-C(226)-C(233)	122.0(7)
C(29B)-C(227)-C(222)	132(10)
C(29B)-C(227)-C(228)	100(10)
C(222)-C(227)-C(228)	112.8(7)
C(29B)-C(227)-C(229)	23(10)
C(222)-C(227)-C(229)	109.7(10)
C(228)-C(227)-C(229)	110.8(8)
C(29B)-C(227)-C(28B)	112(3)
C(222)-C(227)-C(28B)	113(9)
C(228)-C(227)-C(28B)	27(10)
C(229)-C(227)-C(28B)	130(10)
C(232)-C(230)-C(32B)	39(4)
C(232)-C(230)-C(231)	118.6(13)
C(32B)-C(230)-C(231)	135(3)
C(232)-C(230)-C(31B)	97(3)
C(32B)-C(230)-C(31B)	118(2)
C(231)-C(230)-C(31B)	21(3)
C(232)-C(230)-C(224)	112.0(11)
C(32B)-C(230)-C(224)	113(2)
C(231)-C(230)-C(224)	112.3(13)
C(31B)-C(230)-C(224)	126(3)
C(226)-C(233)-C(34B)	115(6)
C(226)-C(233)-C(234)	111.0(8)
C(34B)-C(233)-C(234)	26(6)
C(226)-C(233)-C(235)	112.5(8)
C(34B)-C(233)-C(235)	86(6)
C(234)-C(233)-C(235)	110.6(8)
C(226)-C(233)-C(35B)	107(6)
C(34B)-C(233)-C(35B)	109(2)

C(234)-C(233)-C(35B)	132(6)
C(235)-C(233)-C(35B)	25(7)
C(241)-C(236)-C(237)	121.5(7)
C(241)-C(236)-C(219)	118.4(6)
C(237)-C(236)-C(219)	119.9(6)
C(238)-C(237)-C(236)	118.0(7)
C(238)-C(237)-C(242)	119.9(7)
C(236)-C(237)-C(242)	122.1(7)
C(239)-C(238)-C(237)	123.1(7)
C(238)-C(239)-C(240)	117.7(7)
C(238)-C(239)-C(245)	122.2(8)
C(240)-C(239)-C(245)	120.1(8)
C(239)-C(240)-C(241)	121.6(7)
C(236)-C(241)-C(240)	118.0(7)
C(236)-C(241)-C(248)	122.7(7)
C(240)-C(241)-C(248)	119.3(7)
C(243)-C(242)-C(244)	109.1(7)
C(243)-C(242)-C(237)	112.6(7)
C(244)-C(242)-C(237)	115.1(7)
C(246)-C(245)-C(46B)	56(2)
C(246)-C(245)-C(247)	113.1(11)
C(46B)-C(245)-C(247)	135.1(19)
C(246)-C(245)-C(47B)	133(2)
C(46B)-C(245)-C(47B)	111(2)
C(247)-C(245)-C(47B)	39.7(18)
C(246)-C(245)-C(239)	113.8(10)
C(46B)-C(245)-C(239)	110.6(19)
C(247)-C(245)-C(239)	112.8(10)
C(47B)-C(245)-C(239)	113.1(19)
C(50B)-C(248)-C(249)	124(6)
C(50B)-C(248)-C(250)	14(6)
C(249)-C(248)-C(250)	110.5(9)
C(50B)-C(248)-C(241)	106(9)
C(249)-C(248)-C(241)	114.9(10)
C(250)-C(248)-C(241)	112.9(16)
C(50B)-C(248)-C(49B)	111(3)

C(249)-C(248)-C(49B)	21(5)
C(250)-C(248)-C(49B)	97(6)
C(241)-C(248)-C(49B)	109(5)
C(15C)-N(3)-C(315)	6.0(19)
C(15C)-N(3)-C(5)	116(3)
C(315)-N(3)-C(5)	112.8(12)
C(15C)-N(3)-Mo(1)	126(3)
C(315)-N(3)-Mo(1)	128.5(12)
C(5)-N(3)-Mo(1)	117.6(5)
C(316)-C(315)-C(320)	119.3(10)
C(316)-C(315)-N(3)	123.7(11)
C(320)-C(315)-N(3)	116.8(11)
C(315)-C(316)-C(317)	120.3(10)
C(318)-C(317)-C(316)	118.2(10)
C(318)-C(317)-C(321)	120.1(10)
C(316)-C(317)-C(321)	121.7(10)
C(317)-C(318)-C(319)	123.3(11)
C(320)-C(319)-C(318)	117.2(10)
C(320)-C(319)-C(336)	123.4(10)
C(318)-C(319)-C(336)	119.4(10)
C(319)-C(320)-C(315)	121.8(11)
C(322)-C(321)-C(326)	119.3(10)
C(322)-C(321)-C(317)	119.7(10)
C(326)-C(321)-C(317)	120.9(10)
C(323)-C(322)-C(321)	119.4(10)
C(323)-C(322)-C(327)	118.4(10)
C(321)-C(322)-C(327)	122.1(10)
C(324)-C(323)-C(322)	121.4(12)
C(323)-C(324)-C(325)	118.0(11)
C(323)-C(324)-C(330)	122.4(13)
C(325)-C(324)-C(330)	119.6(12)
C(326)-C(325)-C(324)	122.1(12)
C(325)-C(326)-C(321)	119.6(11)
C(325)-C(326)-C(333)	118.3(11)
C(321)-C(326)-C(333)	121.9(10)
C(329)-C(327)-C(322)	111.7(11)

C(329)-C(327)-C(328)	110.9(12)
C(322)-C(327)-C(328)	111.5(11)
C(332)-C(330)-C(331)	120.3(15)
C(332)-C(330)-C(324)	110.1(13)
C(331)-C(330)-C(324)	112.4(13)
C(326)-C(333)-C(334)	109.3(12)
C(326)-C(333)-C(335)	111.4(12)
C(334)-C(333)-C(335)	109.3(12)
C(341)-C(336)-C(337)	120.4(9)
C(341)-C(336)-C(319)	118.2(10)
C(337)-C(336)-C(319)	121.0(10)
C(338)-C(337)-C(336)	118.5(10)
C(338)-C(337)-C(342)	120.3(10)
C(336)-C(337)-C(342)	121.2(10)
C(339)-C(338)-C(337)	122.7(10)
C(338)-C(339)-C(340)	118.3(10)
C(338)-C(339)-C(345)	122.6(11)
C(340)-C(339)-C(345)	119.1(10)
C(339)-C(340)-C(341)	121.1(11)
C(336)-C(341)-C(340)	118.8(10)
C(336)-C(341)-C(348)	123.6(10)
C(340)-C(341)-C(348)	117.5(10)
C(343)-C(342)-C(337)	111.0(11)
C(343)-C(342)-C(344)	110.0(10)
C(337)-C(342)-C(344)	113.9(11)
C(346)-C(345)-C(339)	111.7(13)
C(346)-C(345)-C(347)	111.2(12)
C(339)-C(345)-C(347)	111.4(14)
C(350)-C(348)-C(349)	111.0(12)
C(350)-C(348)-C(341)	110.7(14)
C(349)-C(348)-C(341)	111.7(13)
C(16C)-C(15C)-C(20C)	120.7(17)
C(16C)-C(15C)-N(3)	116(2)
C(20C)-C(15C)-N(3)	123(2)
C(15C)-C(16C)-C(17C)	120.0(17)
C(18C)-C(17C)-C(16C)	117.8(16)

C(18C)-C(17C)-C(21C)	125.4(17)
C(16C)-C(17C)-C(21C)	116.8(16)
C(17C)-C(18C)-C(19C)	122.9(18)
C(20C)-C(19C)-C(18C)	118.3(16)
C(20C)-C(19C)-C(36C)	121.9(17)
C(18C)-C(19C)-C(36C)	119.5(16)
C(19C)-C(20C)-C(15C)	120.1(17)
C(22C)-C(21C)-C(26C)	119.7(15)
C(22C)-C(21C)-C(17C)	118.2(15)
C(26C)-C(21C)-C(17C)	121.6(15)
C(21C)-C(22C)-C(23C)	119.7(15)
C(21C)-C(22C)-C(27C)	122.1(16)
C(23C)-C(22C)-C(27C)	118.1(16)
C(24C)-C(23C)-C(22C)	120.5(17)
C(25C)-C(24C)-C(23C)	119.1(17)
C(25C)-C(24C)-C(30C)	122.3(18)
C(23C)-C(24C)-C(30C)	118.2(18)
C(26C)-C(25C)-C(24C)	121.2(18)
C(25C)-C(26C)-C(21C)	119.7(17)
C(25C)-C(26C)-C(33C)	118.4(17)
C(21C)-C(26C)-C(33C)	121.9(17)
C(29C)-C(27C)-C(22C)	112.8(18)
C(29C)-C(27C)-C(28C)	114(2)
C(22C)-C(27C)-C(28C)	113.7(18)
C(32C)-C(30C)-C(31C)	117(2)
C(32C)-C(30C)-C(24C)	112(2)
C(31C)-C(30C)-C(24C)	110(2)
C(26C)-C(33C)-C(34C)	111(2)
C(26C)-C(33C)-C(35C)	110(2)
C(34C)-C(33C)-C(35C)	110(2)
C(41C)-C(36C)-C(37C)	122.1(15)
C(41C)-C(36C)-C(19C)	118.7(17)
C(37C)-C(36C)-C(19C)	118.8(17)
C(38C)-C(37C)-C(36C)	118.5(16)
C(38C)-C(37C)-C(42C)	121.3(17)
C(36C)-C(37C)-C(42C)	120.2(17)

C(39C)-C(38C)-C(37C)	121.9(17)
C(38C)-C(39C)-C(40C)	118.7(16)
C(38C)-C(39C)-C(45C)	120.7(18)
C(40C)-C(39C)-C(45C)	120.6(18)
C(39C)-C(40C)-C(41C)	121.7(17)
C(36C)-C(41C)-C(40C)	117.1(16)
C(36C)-C(41C)-C(48C)	123.7(18)
C(40C)-C(41C)-C(48C)	119.1(17)
C(43C)-C(42C)-C(44C)	110.5(19)
C(43C)-C(42C)-C(37C)	112(2)
C(44C)-C(42C)-C(37C)	113(2)
C(46C)-C(45C)-C(39C)	113(3)
C(46C)-C(45C)-C(47C)	111(2)
C(39C)-C(45C)-C(47C)	113(2)
C(50C)-C(48C)-C(49C)	112(2)
C(50C)-C(48C)-C(41C)	110(2)
C(49C)-C(48C)-C(41C)	113(2)
N(1)-C(1)-C(2)	107.2(6)
N(4)-C(2)-C(1)	110.0(7)
N(2)-C(3)-C(4)	109.0(6)
N(4)-C(4)-C(3)	109.4(6)
C(6)-C(5)-N(3)	106.4(7)
N(4)-C(6)-C(5)	110.1(6)
C(2)-N(4)-C(6)	111.9(6)
C(2)-N(4)-C(4)	111.8(6)
C(6)-N(4)-C(4)	111.2(6)
C(2)-N(4)-Mo(1)	107.0(4)
C(6)-N(4)-Mo(1)	108.1(4)
C(4)-N(4)-Mo(1)	106.6(4)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 04072. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Cl(1)	87(2)	33(1)	53(1)	6(1)	-15(1)	-3(1)
Mo(1)	59(1)	21(1)	35(1)	1(1)	-4(1)	-1(1)
N(1)	73(4)	23(3)	42(3)	9(3)	-1(3)	2(3)
C(11)	72(6)	34(4)	37(4)	-1(3)	-6(4)	3(4)
C(12)	88(7)	40(4)	46(5)	5(4)	-2(5)	-12(4)
C(13)	113(8)	49(4)	44(5)	5(3)	-1(5)	-12(5)
C(17)	148(8)	64(5)	61(6)	12(4)	4(6)	-18(7)
F(1)	176(9)	66(5)	105(7)	28(5)	45(7)	-12(6)
F(2)	158(7)	55(5)	82(6)	13(4)	-10(5)	-17(5)
F(3)	176(10)	38(4)	68(4)	6(3)	-17(5)	-33(6)
F(1A)	176(9)	66(5)	105(7)	28(5)	45(7)	-12(6)
F(2A)	158(7)	55(5)	82(6)	13(4)	-10(5)	-17(5)
F(3A)	176(10)	38(4)	68(4)	6(3)	-17(5)	-33(6)
C(14)	79(6)	61(5)	48(5)	5(4)	8(5)	-12(5)
C(15)	80(7)	52(4)	43(4)	2(4)	3(4)	1(4)
C(18)	102(7)	65(5)	45(5)	1(4)	8(5)	1(5)
F(4)	153(8)	78(5)	50(4)	-8(4)	19(5)	7(5)
F(5)	112(6)	84(6)	89(6)	-28(5)	-5(5)	24(4)
F(6)	121(6)	88(6)	82(6)	-38(5)	26(5)	-20(5)
F(4A)	153(8)	78(5)	50(4)	-8(4)	19(5)	7(5)
F(5A)	112(6)	84(6)	89(6)	-28(5)	-5(5)	24(4)
F(6A)	121(6)	88(6)	82(6)	-38(5)	26(5)	-20(5)
C(16)	80(6)	33(4)	43(4)	1(3)	5(4)	-1(4)
N(2)	62(4)	25(3)	29(3)	3(3)	-7(3)	-3(3)
C(215)	62(5)	21(3)	31(4)	-4(3)	-4(4)	3(3)
C(216)	57(5)	19(3)	37(4)	5(3)	-1(4)	8(3)
C(217)	52(4)	23(4)	33(4)	6(3)	4(4)	1(3)
C(218)	58(4)	21(4)	32(4)	-3(3)	1(4)	-1(3)
C(219)	54(4)	25(4)	22(4)	-3(3)	-2(4)	2(3)
C(220)	50(4)	31(4)	28(4)	0(3)	-1(4)	-2(3)
C(221)	56(4)	19(4)	45(4)	-1(3)	-1(4)	4(3)

C(222)	58(5)	34(5)	45(4)	1(3)	6(4)	-2(4)
C(223)	67(6)	42(5)	57(5)	-2(4)	7(4)	-6(4)
C(224)	66(5)	45(5)	69(5)	-9(4)	-1(4)	-15(4)
C(225)	72(6)	42(5)	49(5)	-13(4)	-4(4)	-11(4)
C(226)	57(5)	31(4)	47(4)	-5(4)	3(4)	-5(4)
C(227)	69(6)	48(5)	44(4)	2(4)	8(4)	-6(4)
C(228)	94(13)	66(6)	52(6)	15(5)	9(7)	6(6)
C(229)	113(11)	63(6)	49(8)	-19(6)	3(8)	16(7)
C(28B)	100(60)	60(40)	40(40)	20(40)	10(50)	0(40)
C(29B)	90(60)	50(50)	40(30)	0(40)	10(40)	-20(40)
C(230)	69(6)	70(7)	96(7)	-13(5)	0(5)	-21(4)
C(231)	65(16)	79(12)	146(17)	-42(12)	-53(11)	-7(9)
C(232)	85(9)	73(11)	140(20)	-14(12)	-32(12)	-1(7)
C(31B)	30(30)	90(30)	80(20)	-10(20)	-20(20)	0(20)
C(32B)	49(15)	110(40)	170(40)	-80(30)	-30(30)	0(20)
C(233)	61(6)	45(5)	39(4)	-8(3)	-1(4)	-3(4)
C(234)	80(9)	64(8)	53(9)	11(7)	6(7)	-1(7)
C(235)	90(11)	81(8)	46(7)	-18(7)	8(7)	2(8)
C(34B)	90(50)	70(40)	40(40)	0(30)	-20(30)	-30(40)
C(35B)	110(50)	60(40)	40(40)	-40(30)	10(30)	-10(30)
C(236)	48(5)	20(4)	44(4)	1(3)	-1(4)	-1(3)
C(237)	66(6)	23(4)	52(4)	-1(3)	6(4)	3(4)
C(238)	65(6)	35(5)	57(4)	-6(4)	5(4)	6(4)
C(239)	63(5)	29(4)	68(5)	-2(4)	-6(5)	7(4)
C(240)	73(6)	36(5)	44(5)	-1(4)	-9(4)	2(4)
C(241)	62(5)	23(4)	44(4)	3(3)	-4(4)	-2(3)
C(242)	71(6)	35(5)	50(4)	-4(4)	7(4)	13(4)
C(243)	95(7)	100(8)	61(6)	11(6)	19(6)	-12(6)
C(244)	125(9)	86(8)	46(6)	2(5)	0(6)	-29(6)
C(245)	86(7)	58(5)	90(7)	3(5)	-11(6)	32(5)
C(246)	78(8)	101(12)	152(18)	1(13)	-13(11)	40(7)
C(247)	132(13)	33(6)	140(18)	10(10)	7(14)	32(7)
C(46B)	120(30)	110(30)	150(40)	-10(30)	-60(20)	56(18)
C(47B)	130(30)	70(20)	120(40)	40(20)	20(30)	56(16)
C(248)	76(6)	31(5)	44(4)	2(4)	-4(4)	8(4)
C(249)	99(7)	43(14)	52(6)	-11(7)	-13(5)	10(7)

C(250)	110(11)	59(10)	80(13)	-17(12)	32(9)	-8(9)
C(49B)	99(7)	43(14)	52(6)	-11(7)	-13(5)	10(7)
C(50B)	70(20)	70(40)	60(40)	0(40)	12(13)	10(20)
N(3)	59(3)	33(4)	42(4)	2(3)	-4(3)	4(3)
C(315)	57(3)	31(4)	42(4)	0(4)	2(3)	-4(3)
C(316)	56(4)	44(5)	35(4)	2(4)	3(3)	-2(3)
C(317)	57(3)	48(4)	47(3)	-2(3)	-1(3)	0(3)
C(318)	58(4)	45(5)	45(3)	-1(3)	-4(3)	-3(4)
C(319)	62(4)	39(4)	44(3)	-4(3)	-3(3)	-6(3)
C(320)	58(4)	36(4)	41(4)	-1(4)	3(3)	-4(4)
C(321)	60(3)	60(4)	59(4)	-7(4)	4(3)	5(3)
C(322)	64(4)	61(4)	71(5)	-14(4)	5(4)	7(3)
C(323)	67(5)	70(5)	77(6)	-15(5)	2(4)	13(4)
C(324)	69(4)	85(5)	80(5)	-12(5)	12(4)	16(4)
C(325)	67(4)	81(5)	77(5)	2(5)	13(4)	9(4)
C(326)	65(4)	69(4)	66(5)	4(4)	11(4)	4(4)
C(327)	70(5)	57(6)	87(7)	-11(5)	6(5)	3(4)
C(328)	103(10)	82(9)	104(10)	13(7)	4(8)	2(7)
C(329)	91(8)	87(10)	109(10)	-15(8)	-8(7)	-15(7)
C(330)	90(6)	115(6)	100(6)	-19(6)	27(6)	30(6)
C(331)	108(11)	114(8)	129(11)	-21(8)	37(10)	46(9)
C(332)	114(11)	150(11)	108(7)	-15(8)	41(8)	41(9)
C(333)	82(5)	69(5)	79(5)	11(5)	12(5)	-1(4)
C(334)	144(10)	100(9)	98(8)	37(8)	5(8)	-5(10)
C(335)	93(8)	82(8)	100(10)	1(9)	8(8)	-15(7)
C(336)	68(4)	41(3)	44(3)	-4(3)	-7(3)	-4(3)
C(337)	67(4)	38(3)	46(3)	-4(3)	-8(3)	0(3)
C(338)	70(5)	39(4)	47(3)	-6(3)	-9(4)	0(4)
C(339)	75(4)	44(4)	46(3)	-4(3)	-9(3)	-1(3)
C(340)	81(5)	45(4)	44(3)	-5(3)	-4(4)	-6(4)
C(341)	79(4)	45(3)	44(3)	-2(3)	-7(3)	-9(3)
C(342)	66(6)	36(5)	52(4)	1(4)	-9(5)	5(5)
C(343)	79(8)	41(9)	72(7)	12(7)	11(7)	14(6)
C(344)	71(11)	37(5)	82(9)	-3(6)	-3(8)	11(6)
C(345)	86(5)	45(4)	48(3)	-3(3)	-15(4)	0(4)
C(346)	102(8)	60(10)	50(6)	-16(8)	-10(6)	14(8)

C(347)	88(9)	51(7)	57(7)	2(6)	-16(7)	3(7)
C(348)	91(6)	49(4)	54(5)	-2(4)	-9(4)	-18(4)
C(349)	94(7)	54(5)	74(7)	8(6)	-5(6)	-22(5)
C(350)	108(9)	49(5)	84(10)	-11(7)	-19(8)	-10(7)
C(15C)	57(4)	34(5)	40(4)	0(4)	2(4)	-5(4)
C(16C)	57(4)	42(5)	39(4)	1(4)	2(3)	-3(4)
C(17C)	58(3)	49(5)	47(4)	-2(4)	-1(3)	0(4)
C(18C)	59(4)	45(5)	46(4)	0(4)	-4(3)	-4(4)
C(19C)	62(4)	40(4)	44(3)	-3(3)	-3(3)	-5(4)
C(20C)	59(4)	36(5)	41(4)	-2(4)	1(4)	-4(4)
C(21C)	62(4)	61(5)	59(4)	-5(4)	5(4)	5(4)
C(22C)	65(4)	65(5)	69(5)	-13(4)	4(4)	6(4)
C(23C)	68(5)	73(5)	76(6)	-16(5)	5(5)	11(4)
C(24C)	72(5)	86(6)	82(6)	-9(5)	14(5)	12(5)
C(25C)	68(5)	80(6)	76(6)	1(5)	13(5)	6(5)
C(26C)	69(4)	70(5)	71(5)	0(5)	11(4)	1(4)
C(27C)	71(6)	64(6)	79(7)	-15(6)	5(5)	1(5)
C(28C)	88(11)	73(14)	91(13)	-21(11)	-2(10)	-9(10)
C(29C)	89(11)	81(11)	96(12)	6(8)	6(10)	-3(9)
C(30C)	93(7)	113(7)	99(7)	-16(6)	28(6)	25(7)
C(31C)	109(13)	115(8)	116(12)	-29(8)	33(12)	33(10)
C(32C)	127(18)	141(14)	95(12)	-10(11)	39(13)	15(17)
C(33C)	86(6)	67(6)	77(7)	5(5)	12(6)	-5(5)
C(34C)	127(14)	78(10)	85(12)	17(10)	7(12)	-7(13)
C(35C)	86(12)	69(12)	65(13)	-7(10)	18(10)	-5(10)
C(36C)	69(4)	41(4)	45(3)	-4(3)	-6(3)	-4(3)
C(37C)	68(5)	39(4)	47(3)	-3(3)	-8(4)	-1(4)
C(38C)	70(5)	39(4)	47(3)	-6(4)	-9(4)	0(4)
C(39C)	77(5)	43(4)	46(3)	-4(3)	-9(4)	-1(4)
C(40C)	79(5)	44(4)	45(4)	-4(4)	-5(4)	-4(4)
C(41C)	79(5)	46(4)	45(3)	-2(3)	-7(4)	-9(4)
C(42C)	68(6)	39(5)	52(5)	0(5)	-6(5)	1(5)
C(43C)	72(12)	40(6)	66(11)	-1(8)	-5(11)	5(9)
C(44C)	75(10)	48(14)	70(12)	15(13)	6(10)	12(10)
C(45C)	84(6)	45(5)	48(4)	-4(4)	-13(4)	1(5)
C(46C)	90(12)	49(9)	56(9)	-1(8)	-18(9)	4(9)

C(47C)	97(11)	44(12)	53(8)	-15(10)	-10(9)	2(10)
C(48C)	90(6)	50(5)	54(5)	-2(4)	-7(5)	-17(4)
C(49C)	94(7)	54(5)	74(7)	8(6)	-5(6)	-22(5)
C(50C)	91(7)	50(12)	75(13)	15(12)	-1(11)	-24(6)
C(1)	86(6)	26(4)	45(4)	0(3)	1(4)	5(4)
C(2)	70(5)	22(4)	48(4)	9(3)	-3(4)	8(4)
C(3)	82(6)	21(4)	34(4)	-1(3)	-14(4)	2(4)
C(4)	84(6)	23(4)	38(4)	-2(3)	-13(4)	6(4)
C(5)	67(5)	48(5)	43(5)	13(4)	-3(4)	-10(4)
C(6)	75(5)	26(4)	42(5)	8(3)	-5(4)	-9(4)
N(4)	57(4)	23(3)	36(3)	4(3)	-2(3)	-2(3)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10⁴) and isotropic displacement parameters (Å²x 10³) for 04072.

	x	y	z	U(eq)
H(12)	2721	3003	-375	70
H(14)	3178	2499	-2001	75
H(16)	2756	1305	-811	63
H(216)	3005	3534	1385	45
H(218)	2575	5130	1088	45
H(220)	1849	3754	1002	44
H(223)	3994	5271	789	66
H(225)	3766	5052	2593	65
H(227)	3127	4580	240	64
H(27B)	3150	4524	340	64
H(22A)	3325	5240	-526	106
H(22B)	3649	5508	-68	106
H(22C)	3188	5583	83	106
H(22D)	3634	4279	-442	113
H(22E)	3676	3966	218	113
H(22F)	3960	4497	43	113
H(28A)	3108	5173	-448	97
H(28B)	3363	5609	-31	97
H(28C)	2948	5369	218	97
H(29A)	3625	3985	-14	90
H(29B)	3822	4531	-353	90
H(29C)	3388	4318	-549	90
H(230)	4367	5779	1481	94
H(30B)	4255	5890	1588	94
H(23A)	4026	6248	2226	145
H(23B)	4489	6242	2377	145
H(23C)	4196	5818	2743	145
H(23D)	4642	4913	1572	150
H(23E)	4614	4960	2311	150
H(23F)	4881	5410	1931	150

H(31A)	4141	6084	2578	104
H(31B)	4578	6218	2333	104
H(31C)	4499	5663	2760	104
H(32A)	4552	5139	1160	161
H(32B)	4798	5086	1791	161
H(32C)	4808	5677	1402	161
H(233)	2830	4398	2386	58
H(33B)	2884	4243	2377	58
H(23G)	3099	3781	3158	99
H(23H)	3536	3996	2984	99
H(23I)	3283	3631	2493	99
H(23J)	2871	4776	3407	108
H(23K)	2913	5289	2912	108
H(23L)	3297	5044	3259	108
H(34A)	3130	3999	3367	96
H(34B)	3526	4362	3238	96
H(34C)	3436	3787	2848	96
H(35A)	2731	4882	3218	105
H(35B)	2740	5229	2576	105
H(35C)	3106	5274	3044	105
H(238)	1274	5900	1454	63
H(240)	1430	5539	-341	61
H(242)	1854	4731	2018	62
H(24A)	1169	4788	2136	128
H(24B)	1213	5444	2368	128
H(24C)	1398	4927	2768	128
H(24D)	2020	5417	2762	128
H(24E)	1874	5928	2314	128
H(24F)	2249	5542	2127	128
H(245)	1029	6287	-111	94
H(45B)	921	6453	741	94
H(24G)	479	6557	429	165
H(24H)	635	6204	1019	165
H(24I)	529	5868	391	165
H(24J)	1483	6916	344	153
H(24K)	1215	6941	956	153

H(24L)	1048	7190	315	153
H(46A)	549	6412	-157	187
H(46B)	568	5795	182	187
H(46C)	833	5914	-420	187
H(47A)	1477	6926	310	158
H(47B)	1074	7122	-17	158
H(47C)	1362	6673	-357	158
H(248)	2055	4317	-79	61
H(48B)	1989	4262	-139	61
H(49A)	1449	4206	-559	97
H(49B)	1794	4207	-1068	97
H(49C)	1525	4771	-973	97
H(50A)	2396	4723	-914	124
H(50B)	2485	5065	-284	124
H(50C)	2188	5335	-784	124
H(24M)	1782	4442	-1175	97
H(24N)	1618	5065	-976	97
H(24O)	1410	4490	-719	97
H(25A)	2462	4748	-764	102
H(25B)	2492	4977	-65	102
H(25C)	2273	5360	-578	102
H(316)	975	2556	1119	54
H(318)	372	2491	-488	59
H(320)	1456	1792	-394	54
H(323)	38	4231	987	85
H(325)	-576	2763	1263	90
H(327)	841	3551	198	86
H(32D)	385	4078	-405	145
H(32E)	764	4470	-257	145
H(32F)	361	4570	118	145
H(32G)	994	3834	1203	143
H(32H)	742	4416	1116	143
H(32I)	1135	4315	716	143
H(330)	-897	3714	1333	122
H(33A)	-660	4534	863	176
H(33B)	-435	4715	1487	176

H(33C)	-908	4687	1475	176
H(33D)	-673	3310	2191	186
H(33E)	-904	3900	2337	186
H(33F)	-431	3885	2362	186
H(333)	121	1818	573	92
H(33G)	-165	1316	1421	171
H(33H)	-360	1906	1666	171
H(33I)	111	1830	1670	171
H(33J)	-515	1407	410	138
H(33K)	-480	1995	18	138
H(33L)	-722	1988	656	138
H(338)	490	977	-2130	62
H(340)	948	2519	-2579	68
H(342)	777	1024	-547	62
H(34D)	143	638	-408	96
H(34E)	13	886	-1071	96
H(34F)	126	1324	-522	96
H(34G)	665	49	-822	95
H(34H)	1005	323	-1248	95
H(34I)	568	239	-1520	95
H(345)	406	1299	-3153	71
H(34J)	846	1512	-3950	106
H(34K)	1072	1228	-3372	106
H(34L)	1098	1912	-3490	106
H(34M)	249	2095	-3803	98
H(34N)	466	2526	-3331	98
H(34O)	73	2191	-3122	98
H(348)	1246	2911	-1045	78
H(34P)	1743	2610	-1746	111
H(34Q)	1722	3303	-1713	111
H(34R)	1532	2967	-2290	111
H(35D)	1078	3781	-1527	120
H(35E)	691	3402	-1387	120
H(35F)	866	3431	-2076	120
H(16C)	993	2445	1105	55
H(18C)	355	2384	-469	60

H(20C)	1476	1805	-467	55
H(23M)	99	3913	1485	87
H(25D)	-496	2406	1513	90
H(27C)	849	3410	461	86
H(28D)	1034	3541	1481	126
H(28E)	789	4135	1515	126
H(28F)	1168	4086	1072	126
H(29D)	390	3978	-43	133
H(29E)	786	4331	116	133
H(29F)	395	4427	522	133
H(30C)	-780	3443	1910	122
H(31D)	-421	4290	1771	170
H(31E)	-144	4126	2347	170
H(31F)	-604	4259	2454	170
H(32J)	-580	2696	2489	181
H(32K)	-701	3241	2908	181
H(32L)	-244	3090	2799	181
H(33M)	134	1657	488	92
H(34S)	-266	1003	1058	145
H(34T)	-453	1532	1439	145
H(34U)	5	1373	1521	145
H(35G)	-494	1428	53	110
H(35H)	-376	2078	-127	110
H(35I)	-691	1962	412	110
H(38C)	422	1029	-2120	63
H(40C)	999	2474	-2621	67
H(42C)	702	1116	-524	63
H(43A)	549	153	-746	89
H(43B)	907	375	-1170	89
H(43C)	472	318	-1456	89
H(44A)	46	809	-376	97
H(44B)	-66	1023	-1060	97
H(44C)	60	1485	-543	97
H(45C)	334	1358	-3117	71
H(46D)	306	2092	-3847	98
H(46E)	579	2489	-3414	98

H(46F)	148	2299	-3184	98
H(47D)	773	1341	-3960	97
H(47E)	952	1012	-3370	97
H(47F)	1104	1650	-3543	97
H(48C)	1257	2922	-1083	77
H(49D)	847	3494	-1711	111
H(49E)	1132	3382	-2292	111
H(49F)	1290	3742	-1707	111
H(50D)	1854	3076	-1622	108
H(50E)	1708	2642	-2153	108
H(50F)	1786	2405	-1466	108
H(1A)	2908	1298	184	63
H(1B)	2446	1136	237	63
H(2A)	2699	1093	1232	56
H(2B)	2909	1713	1156	56
H(3A)	2583	2904	2096	55
H(3B)	2858	2595	1588	55
H(4A)	2570	1856	2134	58
H(4B)	2141	2152	2091	58
H(5A)	1539	1904	1648	63
H(5B)	1379	1384	1218	63
H(6A)	1994	1176	1768	57
H(6B)	2004	1046	1038	57

Table 6. Crystal data and structure refinement for
{[(HIPTNCH₂CH₂)₂NCH₂CH₂N(3,5-Me₂C₆H₃)]MoN₂}Na(THF)₂.

Identification code	04169	
Empirical formula	C103.33 H156.33 Mo N6 Na O2.17	
Formula weight	1636.27	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Rhombohedral	
Space group	R-3	
Unit cell dimensions	a = 32.204(5) Å	a = 90°.
	b = 32.204(5) Å	b = 90°.
	c = 51.045(10) Å	g = 120°.
Volume	45845(13) Å ³	
Z	18	
Density (calculated)	1.067 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.180 mm ⁻¹	
F(000)	15996	
Crystal size	0.24 x 0.18 x 0.04 mm ³	
Theta range for data collection	0.83 to 25.02°.	
Index ranges	-38<=h<=19, 0<=k<=38, 0<=l<=60	
Reflections collected	229429	
Independent reflections	17866 [R(int) = 0.1206]	
Completeness to theta = 25.02°	99.3 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9928 and 0.9580	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	17866 / 1707 / 1197	
Goodness-of-fit on F ²	1.043	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0742, wR2 = 0.1953	
R indices (all data)	R1 = 0.1066, wR2 = 0.2130	
Largest diff. peak and hole	1.135 and -0.466 e.Å ⁻³	

Table 7. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 04169. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Mo(1)	1417(1)	7989(1)	1611(1)	27(1)
N(1)	794(2)	7841(1)	1800(1)	31(1)
N(2)	2067(2)	8493(2)	1739(1)	35(1)
N(3)	1417(2)	7432(1)	1429(1)	29(1)
N(4)	1484(2)	7618(2)	1959(1)	36(1)
N(5)	1400(1)	8365(1)	1334(1)	30(1)
N(6)	1411(2)	8632(2)	1175(1)	41(1)
C(1)	756(2)	7658(2)	2071(1)	39(1)
C(2)	1004(2)	7363(2)	2083(1)	41(1)
C(3)	2252(2)	8372(2)	1976(1)	43(1)
C(4)	1849(2)	7996(2)	2133(1)	45(1)
C(5)	1375(2)	7051(2)	1608(1)	37(1)
C(6)	1632(2)	7279(2)	1862(1)	39(1)
C(115)	1410(2)	7329(2)	1159(1)	29(1)
C(116)	1616(2)	7706(2)	978(1)	29(1)
C(117)	1648(2)	7632(2)	713(1)	33(1)
C(118)	1466(2)	7165(2)	621(1)	40(1)
C(119)	1252(2)	6777(2)	795(1)	39(1)
C(120)	1230(2)	6862(2)	1060(1)	35(1)
C(121)	1922(2)	8061(2)	537(1)	36(1)
C(122)	2396(2)	8197(2)	467(1)	42(1)
C(123)	2657(2)	8604(2)	315(1)	46(1)
C(124)	2471(2)	8875(2)	228(1)	55(2)
C(125)	2002(2)	8740(3)	301(1)	67(2)
C(126)	1723(2)	8335(2)	454(1)	52(2)
C(127)	2655(3)	7937(2)	577(2)	70(2)
C(128)	3020(4)	8238(4)	789(2)	103(3)
C(129)	2883(4)	7792(3)	358(2)	121(4)
C(130)	2763(3)	9330(3)	64(1)	71(2)
C(131)	2545(3)	9255(4)	-205(2)	119(4)
C(132)	2866(3)	9772(3)	194(2)	94(3)

C(133)	1205(2)	8192(3)	522(2)	69(2)
C(134)	865(3)	7843(3)	320(2)	96(3)
C(135)	1123(2)	8613(3)	556(1)	71(2)
C(136)	1083(2)	6278(2)	691(1)	48(1)
C(137)	616(3)	6000(2)	604(1)	55(2)
C(138)	473(3)	5547(2)	493(1)	72(2)
C(139)	790(4)	5370(2)	471(2)	80(2)
C(140)	1254(3)	5657(2)	564(2)	87(3)
C(141)	1409(3)	6106(2)	674(2)	70(2)
C(142)	266(3)	6176(2)	615(2)	71(2)
C(143)	-230(3)	5809(3)	722(2)	83(2)
C(144)	240(4)	6370(3)	339(2)	113(4)
C(145)	648(4)	4892(3)	344(2)	117(4)
C(146)	225(4)	4497(3)	432(2)	126(5)
C(147)	780(3)	4933(3)	67(1)	78(2)
C(148)	1920(3)	6385(3)	783(2)	99(3)
C(149)	1982(4)	6150(4)	1033(3)	139(4)
C(150)	2294(4)	6461(4)	575(3)	178(6)
C(215)	432(2)	7947(2)	1737(1)	32(1)
C(216)	139(2)	7998(2)	1926(1)	37(1)
C(217)	-228(2)	8090(2)	1851(1)	40(1)
C(218)	-299(2)	8141(2)	1590(1)	39(1)
C(219)	-12(2)	8102(2)	1399(1)	33(1)
C(220)	350(2)	8011(2)	1473(1)	31(1)
C(221)	-528(2)	8125(2)	2068(1)	45(1)
C(222)	-370(2)	8552(3)	2210(1)	58(2)
C(223)	-636(3)	8560(3)	2421(2)	72(2)
C(224)	-1056(3)	8165(3)	2497(1)	74(2)
C(225)	-1223(2)	7760(3)	2351(1)	62(2)
C(226)	-967(2)	7730(2)	2135(1)	49(1)
C(227)	87(3)	9009(3)	2128(2)	70(2)
C(228)	-17(3)	9277(3)	1915(2)	90(2)
C(229)	368(3)	9349(3)	2347(2)	105(3)
C(230)	-1325(4)	8180(4)	2744(2)	111(3)
C(231)	-976(8)	8427(14)	2953(5)	175(16)
C(232)	-1777(6)	7819(9)	2783(4)	179(16)

C(31B)	-1216(9)	7962(11)	2977(4)	127(8)
C(32B)	-1437(8)	8531(8)	2780(3)	113(8)
C(233)	-1172(2)	7260(2)	1985(1)	51(2)
C(234)	-1174(3)	6861(3)	2154(1)	65(2)
C(235)	-1676(2)	7111(3)	1880(1)	58(2)
C(236)	-71(2)	8176(2)	1114(1)	35(1)
C(237)	-231(2)	7797(2)	931(1)	38(1)
C(238)	-284(2)	7881(2)	668(1)	43(1)
C(239)	-190(2)	8327(2)	575(1)	49(1)
C(240)	-28(2)	8695(2)	759(1)	50(1)
C(241)	38(2)	8636(2)	1021(1)	41(1)
C(242)	-332(2)	7301(2)	1012(1)	40(1)
C(243)	58(2)	7202(2)	914(1)	48(1)
C(244)	-826(2)	6908(2)	918(1)	56(2)
C(245)	-249(3)	8420(3)	285(1)	63(2)
C(246)	208(4)	8736(6)	158(3)	77(5)
C(247)	-567(6)	7972(5)	138(3)	81(5)
C(46B)	-26(6)	8244(7)	102(3)	74(5)
C(47B)	-750(6)	8282(12)	226(4)	134(11)
C(248)	250(2)	9068(2)	1199(1)	49(2)
C(249)	766(2)	9436(2)	1113(2)	64(2)
C(250)	-64(2)	9305(2)	1210(2)	63(2)
C(315)	2401(2)	8926(2)	1613(1)	35(1)
C(316)	2650(2)	9368(2)	1748(1)	40(1)
C(317)	2950(2)	9794(2)	1617(1)	43(1)
C(318)	2998(2)	9783(2)	1346(1)	50(1)
C(319)	2768(2)	9349(2)	1205(1)	46(1)
C(320)	2481(2)	8929(2)	1346(1)	39(1)
C(321)	3235(2)	10262(2)	1763(1)	57(2)
C(322)	2836(2)	9338(2)	916(1)	63(2)
Na(1)	1961(1)	9429(1)	1293(1)	77(1)
O(1T)	1627(2)	9606(2)	1629(1)	68(1)
C(1T)	1846(3)	9950(3)	1834(2)	105(3)
C(2T)	1729(4)	9673(4)	2080(2)	112(3)
C(3T)	1403(3)	9162(3)	2002(2)	83(2)
C(4T)	1228(2)	9199(2)	1746(1)	64(2)

O(2T)	2232(5)	10141(4)	1103(2)	62(3)
C(5T)	2347(7)	10141(6)	835(3)	78(4)
C(6T)	2089(10)	10339(10)	692(3)	109(6)
C(7T)	2005(11)	10631(9)	887(4)	90(6)
C(8T)	2076(14)	10481(10)	1146(4)	61(4)
O(2U)	2045(5)	10008(4)	983(3)	69(3)
C(5U)	2088(16)	10441(10)	1093(4)	79(6)
C(6U)	2168(10)	10771(6)	871(5)	97(7)
C(7U)	1865(8)	10432(6)	663(4)	100(6)
C(8U)	1936(8)	10019(6)	706(3)	97(6)
C(1X)	997(7)	5637(7)	-616(3)	97(5)
C(2X)	1161(14)	6047(8)	-425(6)	201(12)
C(3X)	1104(10)	6444(7)	-541(5)	162(10)
C(4X)	1222(10)	6843(6)	-340(5)	179(11)
C(5X)	1149(9)	7222(6)	-476(4)	187(12)
C(6X)	1357(10)	7628(7)	-276(5)	214(13)
C(7X)	1357(7)	8042(6)	-393(4)	99(6)
C(1Y)	-511(12)	9696(12)	3130(7)	245(15)
C(2Y)	-885(12)	9849(11)	3156(9)	256(16)
C(3Y)	-1386(11)	9467(10)	3218(9)	291(17)
C(4Y)	-1700(11)	9697(11)	3241(8)	320(18)
C(5Y)	-1766(15)	9818(17)	2968(9)	370(20)
C(6Y)	-2219(13)	9821(11)	2929(13)	380(20)
C(7Y)	-2136(4)	10309(5)	2843(2)	410(30)
C(1W)	2717(4)	7869(5)	1393(2)	158(12)
C(2W)	2579(4)	7375(5)	1326(2)	113(8)
C(3W)	2960(4)	7383(5)	1403(2)	149(11)
C(4W)	2814(4)	6910(5)	1476(2)	158(12)
C(5W)	2365(4)	6554(5)	1727(2)	152(16)
O(1G)	22(4)	9892(5)	488(2)	107(9)
C(1G)	-27(4)	10281(5)	397(2)	112(10)
C(2G)	424(4)	10638(5)	299(2)	138(11)
C(3G)	753(4)	10470(5)	330(2)	138(11)
C(4G)	505(4)	10008(5)	447(2)	112(10)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [°] for 04169.

Mo(1)-N(5)	1.882(4)
Mo(1)-N(2)	2.012(4)
Mo(1)-N(3)	2.022(4)
Mo(1)-N(1)	2.053(4)
Mo(1)-N(4)	2.209(4)
N(1)-C(215)	1.404(6)
N(1)-C(1)	1.488(6)
N(2)-C(315)	1.418(7)
N(2)-C(3)	1.481(7)
N(3)-C(115)	1.413(6)
N(3)-C(5)	1.482(6)
N(4)-C(6)	1.477(7)
N(4)-C(2)	1.483(7)
N(4)-C(4)	1.490(7)
N(5)-N(6)	1.171(6)
N(5)-Na(1)	2.976(5)
N(6)-Na(1)	2.353(6)
C(1)-C(2)	1.519(8)
C(3)-C(4)	1.491(8)
C(5)-C(6)	1.517(7)
C(115)-C(116)	1.400(7)
C(115)-C(120)	1.405(7)
C(116)-C(117)	1.386(7)
C(117)-C(118)	1.395(7)
C(117)-C(121)	1.508(7)
C(118)-C(119)	1.400(7)
C(119)-C(120)	1.392(7)
C(119)-C(136)	1.512(7)
C(121)-C(126)	1.391(8)
C(121)-C(122)	1.405(8)
C(122)-C(123)	1.388(8)
C(122)-C(127)	1.554(9)
C(123)-C(124)	1.356(9)
C(124)-C(125)	1.399(9)

C(124)-C(130)	1.534(8)
C(125)-C(126)	1.393(8)
C(126)-C(133)	1.534(9)
C(127)-C(129)	1.533(11)
C(127)-C(128)	1.534(12)
C(130)-C(132)	1.451(11)
C(130)-C(131)	1.508(10)
C(133)-C(134)	1.515(11)
C(133)-C(135)	1.516(11)
C(136)-C(137)	1.385(9)
C(136)-C(141)	1.413(10)
C(137)-C(138)	1.411(8)
C(137)-C(142)	1.494(10)
C(138)-C(139)	1.402(12)
C(139)-C(140)	1.388(13)
C(139)-C(145)	1.516(9)
C(140)-C(141)	1.391(9)
C(141)-C(148)	1.534(12)
C(142)-C(143)	1.535(11)
C(142)-C(144)	1.556(11)
C(145)-C(146)	1.396(11)
C(145)-C(147)	1.464(10)
C(148)-C(150)	1.532(13)
C(148)-C(149)	1.545(15)
C(215)-C(220)	1.408(7)
C(215)-C(216)	1.415(7)
C(216)-C(217)	1.408(8)
C(217)-C(218)	1.374(8)
C(217)-C(221)	1.513(8)
C(218)-C(219)	1.394(7)
C(219)-C(220)	1.385(7)
C(219)-C(236)	1.504(7)
C(221)-C(226)	1.391(9)
C(221)-C(222)	1.405(8)
C(222)-C(223)	1.384(9)
C(222)-C(227)	1.532(10)

C(223)-C(224)	1.370(11)
C(224)-C(225)	1.362(10)
C(224)-C(230)	1.543(10)
C(225)-C(226)	1.408(8)
C(226)-C(233)	1.519(9)
C(227)-C(229)	1.511(10)
C(227)-C(228)	1.526(12)
C(230)-C(232)	1.348(16)
C(230)-C(32B)	1.360(15)
C(230)-C(231)	1.463(17)
C(230)-C(31B)	1.508(16)
C(233)-C(235)	1.539(9)
C(233)-C(234)	1.544(9)
C(236)-C(237)	1.414(7)
C(236)-C(241)	1.421(7)
C(237)-C(238)	1.397(8)
C(237)-C(242)	1.517(8)
C(238)-C(239)	1.394(8)
C(239)-C(240)	1.392(9)
C(239)-C(245)	1.541(8)
C(240)-C(241)	1.385(8)
C(241)-C(248)	1.508(8)
C(242)-C(243)	1.527(8)
C(242)-C(244)	1.530(8)
C(245)-C(46B)	1.458(14)
C(245)-C(246)	1.459(13)
C(245)-C(47B)	1.473(15)
C(245)-C(247)	1.489(13)
C(248)-C(250)	1.542(8)
C(248)-C(249)	1.546(9)
C(315)-C(320)	1.387(7)
C(315)-C(316)	1.414(7)
C(315)-Na(1)	3.100(6)
C(316)-C(317)	1.392(8)
C(317)-C(318)	1.393(8)
C(317)-C(321)	1.513(8)

C(318)-C(319)	1.408(8)
C(318)-Na(1)	2.950(6)
C(319)-C(320)	1.399(8)
C(319)-C(322)	1.496(8)
C(319)-Na(1)	2.769(6)
C(320)-Na(1)	2.855(6)
Na(1)-O(2T)	2.226(10)
Na(1)-O(1T)	2.246(6)
Na(1)-O(2U)	2.356(10)
Na(1)-C(5T)	3.065(15)
Na(1)-C(4T)	3.120(7)
O(1T)-C(1T)	1.427(8)
O(1T)-C(4T)	1.430(7)
C(1T)-C(2T)	1.477(11)
C(2T)-C(3T)	1.500(11)
C(3T)-C(4T)	1.451(9)
O(2T)-C(5T)	1.416(14)
O(2T)-C(8T)	1.430(14)
C(5T)-C(6T)	1.472(15)
C(6T)-C(7T)	1.486(17)
C(7T)-C(8T)	1.466(15)
O(2U)-C(5U)	1.445(14)
O(2U)-C(8U)	1.458(14)
C(5U)-C(6U)	1.485(16)
C(6U)-C(7U)	1.484(17)
C(7U)-C(8U)	1.475(15)
C(1X)-C(2X)	1.511(17)
C(2X)-C(3X)	1.499(17)
C(3X)-C(4X)	1.537(17)
C(4X)-C(5X)	1.523(17)
C(5X)-C(6X)	1.525(18)
C(6X)-C(7X)	1.462(16)
C(1Y)-C(2Y)	1.517(17)
C(2Y)-C(3Y)	1.495(17)
C(3Y)-C(4Y)	1.526(17)
C(4Y)-C(5Y)	1.492(19)

C(5Y)-C(6Y)	1.477(18)
C(6Y)-C(7Y)	1.520(17)
C(1W)-C(2W)	1.4623
C(2W)-C(3W)	1.2767
C(3W)-C(4W)	1.4014
C(4W)-C(5W)	1.8409
O(1G)-C(1G)	1.4200
O(1G)-C(4G)	1.4200
C(1G)-C(2G)	1.4200
C(2G)-C(3G)	1.4199
C(3G)-C(4G)	1.4200
N(5)-Mo(1)-N(2)	94.50(17)
N(5)-Mo(1)-N(3)	103.59(16)
N(2)-Mo(1)-N(3)	113.78(17)
N(5)-Mo(1)-N(1)	99.39(17)
N(2)-Mo(1)-N(1)	122.50(17)
N(3)-Mo(1)-N(1)	116.36(16)
N(5)-Mo(1)-N(4)	174.09(17)
N(2)-Mo(1)-N(4)	80.32(17)
N(3)-Mo(1)-N(4)	81.25(16)
N(1)-Mo(1)-N(4)	81.21(16)
C(215)-N(1)-C(1)	113.1(4)
C(215)-N(1)-Mo(1)	132.1(3)
C(1)-N(1)-Mo(1)	114.0(3)
C(315)-N(2)-C(3)	114.9(4)
C(315)-N(2)-Mo(1)	128.1(3)
C(3)-N(2)-Mo(1)	116.5(3)
C(115)-N(3)-C(5)	114.9(4)
C(115)-N(3)-Mo(1)	130.7(3)
C(5)-N(3)-Mo(1)	114.2(3)
C(6)-N(4)-C(2)	111.4(4)
C(6)-N(4)-C(4)	113.0(4)
C(2)-N(4)-C(4)	112.1(4)
C(6)-N(4)-Mo(1)	106.6(3)
C(2)-N(4)-Mo(1)	106.6(3)
C(4)-N(4)-Mo(1)	106.6(3)

N(6)-N(5)-Mo(1)	174.2(4)
N(6)-N(5)-Na(1)	47.7(3)
Mo(1)-N(5)-Na(1)	126.69(19)
N(5)-N(6)-Na(1)	110.7(4)
N(1)-C(1)-C(2)	108.6(4)
N(4)-C(2)-C(1)	111.4(4)
N(2)-C(3)-C(4)	110.5(4)
N(4)-C(4)-C(3)	110.8(4)
N(3)-C(5)-C(6)	108.9(4)
N(4)-C(6)-C(5)	110.3(4)
C(116)-C(115)-C(120)	117.0(4)
C(116)-C(115)-N(3)	119.5(4)
C(120)-C(115)-N(3)	123.4(4)
C(117)-C(116)-C(115)	122.6(4)
C(116)-C(117)-C(118)	119.0(5)
C(116)-C(117)-C(121)	119.0(4)
C(118)-C(117)-C(121)	121.7(5)
C(117)-C(118)-C(119)	120.2(5)
C(120)-C(119)-C(118)	119.4(5)
C(120)-C(119)-C(136)	121.5(5)
C(118)-C(119)-C(136)	118.9(5)
C(119)-C(120)-C(115)	121.7(5)
C(126)-C(121)-C(122)	119.7(5)
C(126)-C(121)-C(117)	121.2(5)
C(122)-C(121)-C(117)	119.0(5)
C(123)-C(122)-C(121)	119.2(6)
C(123)-C(122)-C(127)	118.3(5)
C(121)-C(122)-C(127)	122.2(5)
C(124)-C(123)-C(122)	122.4(6)
C(123)-C(124)-C(125)	117.9(5)
C(123)-C(124)-C(130)	122.4(6)
C(125)-C(124)-C(130)	119.6(6)
C(126)-C(125)-C(124)	122.0(6)
C(121)-C(126)-C(125)	118.6(6)
C(121)-C(126)-C(133)	121.2(5)
C(125)-C(126)-C(133)	120.1(6)

C(129)-C(127)-C(128)	112.0(8)
C(129)-C(127)-C(122)	111.7(7)
C(128)-C(127)-C(122)	111.3(6)
C(132)-C(130)-C(131)	115.7(8)
C(132)-C(130)-C(124)	114.6(6)
C(131)-C(130)-C(124)	109.3(6)
C(134)-C(133)-C(135)	111.0(6)
C(134)-C(133)-C(126)	110.0(7)
C(135)-C(133)-C(126)	114.1(6)
C(137)-C(136)-C(141)	120.4(6)
C(137)-C(136)-C(119)	119.8(6)
C(141)-C(136)-C(119)	119.8(6)
C(136)-C(137)-C(138)	119.0(7)
C(136)-C(137)-C(142)	121.7(5)
C(138)-C(137)-C(142)	119.3(7)
C(139)-C(138)-C(137)	121.7(8)
C(140)-C(139)-C(138)	117.6(6)
C(140)-C(139)-C(145)	120.0(9)
C(138)-C(139)-C(145)	122.4(9)
C(139)-C(140)-C(141)	122.5(8)
C(140)-C(141)-C(136)	118.8(8)
C(140)-C(141)-C(148)	118.6(7)
C(136)-C(141)-C(148)	122.5(6)
C(137)-C(142)-C(143)	114.3(6)
C(137)-C(142)-C(144)	108.7(8)
C(143)-C(142)-C(144)	112.8(7)
C(146)-C(145)-C(147)	120.2(8)
C(146)-C(145)-C(139)	116.5(7)
C(147)-C(145)-C(139)	113.3(7)
C(150)-C(148)-C(141)	111.6(10)
C(150)-C(148)-C(149)	111.5(10)
C(141)-C(148)-C(149)	112.1(7)
N(1)-C(215)-C(220)	119.6(4)
N(1)-C(215)-C(216)	123.9(5)
C(220)-C(215)-C(216)	116.5(5)
C(217)-C(216)-C(215)	121.3(5)

C(218)-C(217)-C(216)	119.8(5)
C(218)-C(217)-C(221)	123.3(5)
C(216)-C(217)-C(221)	116.8(5)
C(217)-C(218)-C(219)	120.5(5)
C(220)-C(219)-C(218)	119.6(5)
C(220)-C(219)-C(236)	119.1(4)
C(218)-C(219)-C(236)	121.2(5)
C(219)-C(220)-C(215)	122.3(5)
C(226)-C(221)-C(222)	118.2(5)
C(226)-C(221)-C(217)	120.4(5)
C(222)-C(221)-C(217)	121.4(6)
C(223)-C(222)-C(221)	119.8(7)
C(223)-C(222)-C(227)	120.2(6)
C(221)-C(222)-C(227)	120.0(6)
C(224)-C(223)-C(222)	122.4(7)
C(225)-C(224)-C(223)	117.9(6)
C(225)-C(224)-C(230)	121.3(8)
C(223)-C(224)-C(230)	120.8(7)
C(224)-C(225)-C(226)	122.1(7)
C(221)-C(226)-C(225)	119.5(6)
C(221)-C(226)-C(233)	121.7(5)
C(225)-C(226)-C(233)	118.8(6)
C(229)-C(227)-C(228)	109.7(7)
C(229)-C(227)-C(222)	115.6(7)
C(228)-C(227)-C(222)	111.2(6)
C(232)-C(230)-C(32B)	94.5(16)
C(232)-C(230)-C(231)	124.7(16)
C(32B)-C(230)-C(231)	84.4(19)
C(232)-C(230)-C(31B)	83.5(17)
C(32B)-C(230)-C(31B)	120.2(13)
C(231)-C(230)-C(31B)	52.0(16)
C(232)-C(230)-C(224)	118.2(9)
C(32B)-C(230)-C(224)	121.3(11)
C(231)-C(230)-C(224)	108.7(12)
C(31B)-C(230)-C(224)	111.3(10)
C(226)-C(233)-C(235)	110.6(5)

C(226)-C(233)-C(234)	111.5(5)
C(235)-C(233)-C(234)	111.7(6)
C(237)-C(236)-C(241)	118.4(5)
C(237)-C(236)-C(219)	121.4(5)
C(241)-C(236)-C(219)	120.2(5)
C(238)-C(237)-C(236)	119.5(5)
C(238)-C(237)-C(242)	118.7(5)
C(236)-C(237)-C(242)	121.7(5)
C(239)-C(238)-C(237)	122.8(6)
C(240)-C(239)-C(238)	116.4(5)
C(240)-C(239)-C(245)	120.6(6)
C(238)-C(239)-C(245)	123.0(6)
C(241)-C(240)-C(239)	123.5(6)
C(240)-C(241)-C(236)	119.3(5)
C(240)-C(241)-C(248)	119.0(5)
C(236)-C(241)-C(248)	121.6(5)
C(237)-C(242)-C(243)	111.4(5)
C(237)-C(242)-C(244)	112.0(5)
C(243)-C(242)-C(244)	110.5(5)
C(46B)-C(245)-C(246)	57.4(9)
C(46B)-C(245)-C(47B)	115.5(13)
C(246)-C(245)-C(47B)	133.6(11)
C(46B)-C(245)-C(247)	62.1(10)
C(246)-C(245)-C(247)	114.5(10)
C(47B)-C(245)-C(247)	59.1(13)
C(46B)-C(245)-C(239)	113.9(8)
C(246)-C(245)-C(239)	112.6(7)
C(47B)-C(245)-C(239)	111.2(9)
C(247)-C(245)-C(239)	112.8(8)
C(241)-C(248)-C(250)	111.9(5)
C(241)-C(248)-C(249)	110.8(5)
C(250)-C(248)-C(249)	110.6(5)
C(320)-C(315)-C(316)	117.4(5)
C(320)-C(315)-N(2)	120.0(4)
C(316)-C(315)-N(2)	122.6(5)
C(320)-C(315)-Na(1)	66.8(3)

C(316)-C(315)-Na(1)	84.6(3)
N(2)-C(315)-Na(1)	115.6(3)
C(317)-C(316)-C(315)	121.6(5)
C(316)-C(317)-C(318)	118.9(5)
C(316)-C(317)-C(321)	121.3(5)
C(318)-C(317)-C(321)	119.8(5)
C(317)-C(318)-C(319)	121.5(6)
C(317)-C(318)-Na(1)	89.1(4)
C(319)-C(318)-Na(1)	68.7(3)
C(320)-C(319)-C(318)	117.5(5)
C(320)-C(319)-C(322)	121.3(5)
C(318)-C(319)-C(322)	121.2(6)
C(320)-C(319)-Na(1)	79.0(3)
C(318)-C(319)-Na(1)	83.0(4)
C(322)-C(319)-Na(1)	108.6(4)
C(315)-C(320)-C(319)	123.0(5)
C(315)-C(320)-Na(1)	86.7(3)
C(319)-C(320)-Na(1)	72.2(3)
O(2T)-Na(1)-O(1T)	93.5(3)
O(2T)-Na(1)-N(6)	134.9(4)
O(1T)-Na(1)-N(6)	106.07(18)
O(2T)-Na(1)-O(2U)	20.3(3)
O(1T)-Na(1)-O(2U)	101.0(3)
N(6)-Na(1)-O(2U)	114.7(4)
O(2T)-Na(1)-C(319)	97.1(3)
O(1T)-Na(1)-C(319)	137.5(2)
N(6)-Na(1)-C(319)	95.04(18)
O(2U)-Na(1)-C(319)	102.9(3)
O(2T)-Na(1)-C(320)	125.8(3)
O(1T)-Na(1)-C(320)	124.0(2)
N(6)-Na(1)-C(320)	75.16(16)
O(2U)-Na(1)-C(320)	130.1(3)
C(319)-Na(1)-C(320)	28.75(17)
O(2T)-Na(1)-C(318)	81.8(4)
O(1T)-Na(1)-C(318)	115.1(2)
N(6)-Na(1)-C(318)	122.34(19)

O(2U)-Na(1)-C(318)	95.5(3)
C(319)-Na(1)-C(318)	28.27(16)
C(320)-Na(1)-C(318)	48.80(17)
O(2T)-Na(1)-N(5)	156.4(4)
O(1T)-Na(1)-N(5)	98.40(16)
N(6)-Na(1)-N(5)	21.60(13)
O(2U)-Na(1)-N(5)	136.3(4)
C(319)-Na(1)-N(5)	87.86(16)
C(320)-Na(1)-N(5)	62.21(14)
C(318)-Na(1)-N(5)	110.91(17)
O(2T)-Na(1)-C(5T)	25.2(4)
O(1T)-Na(1)-C(5T)	117.3(3)
N(6)-Na(1)-C(5T)	115.1(4)
O(2U)-Na(1)-C(5T)	18.9(4)
C(319)-Na(1)-C(5T)	84.1(3)
C(320)-Na(1)-C(5T)	111.2(3)
C(318)-Na(1)-C(5T)	79.9(4)
N(5)-Na(1)-C(5T)	134.5(4)
O(2T)-Na(1)-C(315)	136.2(4)
O(1T)-Na(1)-C(315)	97.5(2)
N(6)-Na(1)-C(315)	81.77(16)
O(2U)-Na(1)-C(315)	150.1(3)
C(319)-Na(1)-C(315)	48.90(17)
C(320)-Na(1)-C(315)	26.52(14)
C(318)-Na(1)-C(315)	55.21(17)
N(5)-Na(1)-C(315)	62.21(13)
C(5T)-Na(1)-C(315)	132.3(3)
O(2T)-Na(1)-C(4T)	115.3(3)
O(1T)-Na(1)-C(4T)	24.69(16)
N(6)-Na(1)-C(4T)	82.08(18)
O(2U)-Na(1)-C(4T)	117.3(3)
C(319)-Na(1)-C(4T)	137.0(2)
C(320)-Na(1)-C(4T)	112.5(2)
C(318)-Na(1)-C(4T)	126.8(2)
N(5)-Na(1)-C(4T)	73.87(16)
C(5T)-Na(1)-C(4T)	135.9(3)

C(315)-Na(1)-C(4T)	88.50(19)
C(1T)-O(1T)-C(4T)	106.0(6)
C(1T)-O(1T)-Na(1)	130.1(5)
C(4T)-O(1T)-Na(1)	114.3(4)
O(1T)-C(1T)-C(2T)	106.2(6)
C(1T)-C(2T)-C(3T)	105.1(7)
C(4T)-C(3T)-C(2T)	103.8(7)
O(1T)-C(4T)-C(3T)	104.0(6)
O(1T)-C(4T)-Na(1)	41.0(3)
C(3T)-C(4T)-Na(1)	114.0(5)
C(5T)-O(2T)-C(8T)	109.9(11)
C(5T)-O(2T)-Na(1)	112.7(9)
C(8T)-O(2T)-Na(1)	128.0(15)
O(2T)-C(5T)-C(6T)	106.0(12)
O(2T)-C(5T)-Na(1)	42.1(6)
C(6T)-C(5T)-Na(1)	126.7(14)
C(5T)-C(6T)-C(7T)	105.2(13)
C(8T)-C(7T)-C(6T)	106.7(13)
O(2T)-C(8T)-C(7T)	106.7(13)
C(5U)-O(2U)-C(8U)	105.2(11)
C(5U)-O(2U)-Na(1)	114.9(11)
C(8U)-O(2U)-Na(1)	137.2(9)
O(2U)-C(5U)-C(6U)	106.9(13)
C(7U)-C(6U)-C(5U)	101.8(15)
C(8U)-C(7U)-C(6U)	102.5(13)
O(2U)-C(8U)-C(7U)	108.2(11)
C(3X)-C(2X)-C(1X)	110.6(19)
C(2X)-C(3X)-C(4X)	111.4(19)
C(5X)-C(4X)-C(3X)	107.0(17)
C(4X)-C(5X)-C(6X)	101.6(17)
C(7X)-C(6X)-C(5X)	107.8(18)
C(3Y)-C(2Y)-C(1Y)	117(2)
C(2Y)-C(3Y)-C(4Y)	108.7(19)
C(5Y)-C(4Y)-C(3Y)	106(2)
C(6Y)-C(5Y)-C(4Y)	113(3)
C(5Y)-C(6Y)-C(7Y)	112(2)

C(3W)-C(2W)-C(1W)	98.2
C(2W)-C(3W)-C(4W)	105.3
C(3W)-C(4W)-C(5W)	126.5
C(1G)-O(1G)-C(4G)	108.0
O(1G)-C(1G)-C(2G)	108.0
C(3G)-C(2G)-C(1G)	108.0
C(2G)-C(3G)-C(4G)	108.0
O(1G)-C(4G)-C(3G)	108.0

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 04169. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2[h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Mo(1)	28(1)	25(1)	27(1)	-1(1)	-3(1)	13(1)
N(1)	33(2)	29(2)	31(2)	-1(2)	-1(2)	15(2)
N(2)	29(2)	38(2)	36(2)	-8(2)	-10(2)	16(2)
N(3)	35(2)	23(2)	28(2)	1(2)	-1(2)	13(2)
N(4)	41(2)	41(2)	29(2)	1(2)	0(2)	23(2)
N(5)	25(2)	27(2)	36(2)	1(2)	0(2)	12(2)
N(6)	35(2)	40(2)	48(3)	16(2)	4(2)	19(2)
C(1)	45(3)	46(3)	29(3)	2(2)	6(2)	24(3)
C(2)	49(3)	48(3)	30(3)	9(2)	5(2)	27(3)
C(3)	43(3)	48(3)	41(3)	-11(2)	-15(2)	26(3)
C(4)	50(3)	63(4)	30(3)	-3(2)	-13(2)	34(3)
C(5)	48(3)	32(3)	35(3)	6(2)	3(2)	24(3)
C(6)	48(3)	41(3)	35(3)	12(2)	1(2)	26(3)
C(115)	29(3)	26(2)	31(2)	1(2)	0(2)	13(2)
C(116)	30(3)	23(2)	32(2)	-2(2)	-2(2)	11(2)
C(117)	30(3)	28(3)	34(3)	4(2)	2(2)	9(2)
C(118)	45(3)	29(3)	31(3)	-4(2)	8(2)	8(2)
C(119)	41(3)	27(3)	39(3)	-2(2)	8(2)	11(2)
C(120)	39(3)	23(2)	38(3)	4(2)	9(2)	13(2)
C(121)	36(3)	30(3)	30(3)	0(2)	-1(2)	7(2)
C(122)	45(3)	33(3)	38(3)	0(2)	11(2)	12(3)
C(123)	44(3)	37(3)	41(3)	2(2)	12(3)	9(3)
C(124)	45(3)	50(4)	44(3)	18(3)	2(3)	4(3)
C(125)	41(3)	64(4)	75(5)	42(4)	-7(3)	11(3)
C(126)	34(3)	56(4)	45(3)	23(3)	-6(2)	8(3)
C(127)	59(4)	45(4)	114(6)	29(4)	47(4)	32(3)
C(128)	98(7)	123(8)	120(7)	27(5)	-9(5)	80(7)
C(129)	116(8)	83(6)	182(10)	16(6)	79(7)	64(6)
C(130)	53(4)	71(5)	59(4)	39(3)	4(3)	7(4)
C(131)	84(6)	118(8)	78(5)	63(5)	-12(5)	-7(6)
C(132)	89(6)	64(5)	96(6)	45(4)	22(5)	14(5)

C(133)	32(3)	78(5)	82(5)	47(4)	-2(3)	17(3)
C(134)	41(4)	69(5)	151(8)	27(5)	-20(5)	7(4)
C(135)	44(4)	98(5)	66(4)	38(4)	0(3)	31(4)
C(136)	62(4)	27(3)	38(3)	-4(2)	21(3)	9(3)
C(137)	84(4)	29(3)	34(3)	-6(2)	3(3)	16(3)
C(138)	113(6)	32(3)	44(4)	-9(3)	2(4)	17(4)
C(139)	124(6)	34(4)	66(5)	-7(3)	40(4)	28(4)
C(140)	100(5)	28(3)	115(7)	-1(4)	61(5)	18(4)
C(141)	78(4)	25(3)	92(5)	0(3)	48(4)	15(3)
C(142)	82(5)	36(4)	83(5)	-24(3)	-42(4)	19(3)
C(143)	73(5)	65(5)	107(6)	-32(4)	-32(4)	30(4)
C(144)	132(9)	59(5)	118(7)	0(5)	-63(6)	24(5)
C(145)	183(10)	42(4)	95(6)	-26(4)	47(6)	32(5)
C(146)	213(12)	27(4)	90(6)	-7(4)	47(7)	24(5)
C(147)	114(7)	56(4)	60(4)	-21(3)	3(4)	38(5)
C(148)	65(4)	42(4)	184(9)	-13(5)	45(5)	23(4)
C(149)	81(7)	71(7)	249(12)	-2(8)	-25(7)	25(6)
C(150)	109(8)	96(8)	314(16)	2(10)	119(11)	41(7)
C(215)	25(3)	21(2)	43(3)	-5(2)	-2(2)	8(2)
C(216)	39(3)	34(3)	37(3)	-9(2)	0(2)	18(2)
C(217)	34(3)	34(3)	50(3)	-10(2)	1(2)	16(2)
C(218)	35(3)	36(3)	48(3)	-7(2)	-5(2)	20(3)
C(219)	26(3)	25(3)	45(3)	-5(2)	0(2)	10(2)
C(220)	26(3)	25(3)	37(3)	-5(2)	-3(2)	10(2)
C(221)	37(3)	56(3)	48(3)	-17(3)	-6(2)	28(3)
C(222)	53(4)	69(4)	65(4)	-28(3)	-12(3)	41(3)
C(223)	65(4)	94(5)	74(5)	-44(4)	-14(3)	54(4)
C(224)	52(4)	112(6)	70(4)	-41(4)	-6(3)	50(4)
C(225)	51(4)	89(5)	51(4)	-11(3)	4(3)	40(4)
C(226)	51(3)	65(4)	39(3)	-6(3)	0(3)	35(3)
C(227)	56(4)	60(4)	99(5)	-30(4)	-7(4)	34(3)
C(228)	86(6)	67(5)	123(7)	-18(5)	-4(5)	43(5)
C(229)	81(6)	87(6)	128(8)	-49(6)	-23(5)	27(5)
C(230)	100(6)	187(10)	69(5)	-49(6)	1(4)	89(7)
C(231)	107(16)	250(40)	92(15)	-70(20)	7(12)	36(19)
C(232)	68(10)	290(30)	102(15)	-136(18)	33(10)	31(12)

C(31B)	102(17)	210(30)	89(10)	-7(14)	22(12)	94(18)
C(32B)	121(16)	180(20)	79(12)	-21(11)	36(11)	107(17)
C(233)	54(4)	53(4)	45(3)	2(3)	11(3)	26(3)
C(234)	70(5)	67(4)	65(4)	11(3)	13(4)	40(4)
C(235)	56(4)	60(4)	58(4)	2(3)	6(3)	29(3)
C(236)	22(3)	36(3)	46(3)	0(2)	-3(2)	15(2)
C(237)	28(3)	41(3)	43(3)	2(2)	0(2)	17(2)
C(238)	33(3)	52(3)	44(3)	4(3)	-4(2)	22(3)
C(239)	40(3)	60(4)	54(3)	13(3)	0(3)	32(3)
C(240)	41(3)	51(4)	65(4)	15(3)	-3(3)	28(3)
C(241)	27(3)	40(3)	61(3)	5(3)	3(2)	20(2)
C(242)	42(3)	36(3)	35(3)	-2(2)	-1(2)	13(3)
C(243)	56(4)	38(3)	51(4)	-2(3)	2(3)	24(3)
C(244)	47(4)	49(4)	52(4)	-3(3)	0(3)	8(3)
C(245)	65(4)	72(5)	57(4)	15(3)	-8(3)	39(4)
C(246)	69(8)	104(12)	50(7)	23(7)	-5(6)	38(7)
C(247)	97(12)	86(9)	63(8)	4(7)	-16(8)	48(8)
C(46B)	77(12)	82(13)	50(7)	13(8)	-1(7)	31(10)
C(47B)	80(12)	260(30)	67(12)	33(16)	-11(9)	88(16)
C(248)	38(3)	35(3)	76(4)	3(3)	0(3)	20(3)
C(249)	44(4)	47(4)	91(5)	-1(4)	-4(3)	16(3)
C(250)	56(4)	46(4)	97(5)	0(4)	-4(4)	33(3)
C(315)	22(2)	35(3)	45(3)	-10(2)	-5(2)	12(2)
C(316)	32(3)	43(3)	44(3)	-14(2)	-3(2)	18(2)
C(317)	29(3)	39(3)	51(3)	-15(3)	-4(2)	10(2)
C(318)	33(3)	40(3)	56(3)	-8(3)	3(2)	4(2)
C(319)	29(3)	44(3)	50(3)	-12(2)	-1(2)	8(2)
C(320)	26(3)	37(3)	43(3)	-12(2)	-4(2)	9(2)
C(321)	47(4)	42(3)	63(4)	-15(3)	-1(3)	8(3)
C(322)	47(4)	56(4)	52(4)	-13(3)	7(3)	0(3)
Na(1)	52(2)	35(1)	146(3)	21(2)	35(2)	23(1)
O(1T)	43(2)	38(2)	111(4)	-9(2)	1(2)	10(2)
C(1T)	80(6)	52(5)	166(8)	-45(5)	-40(6)	22(4)
C(2T)	119(8)	116(7)	126(7)	-60(6)	-60(6)	78(7)
C(3T)	87(6)	86(5)	92(5)	-12(4)	-9(4)	55(5)
C(4T)	46(4)	47(4)	85(4)	-13(3)	7(3)	13(3)

O(2T)	54(7)	39(5)	92(7)	0(5)	8(5)	23(5)
C(5T)	91(11)	65(8)	93(8)	18(6)	19(7)	51(8)
C(6T)	141(16)	132(14)	105(9)	5(9)	0(11)	106(13)
C(7T)	111(15)	86(13)	100(11)	-1(11)	-7(12)	70(12)
C(8T)	47(10)	37(8)	100(9)	-5(8)	-6(10)	22(8)
O(2U)	58(7)	29(5)	110(7)	7(5)	-1(5)	15(5)
C(5U)	79(13)	37(9)	112(10)	7(8)	-11(12)	23(9)
C(6U)	113(15)	53(8)	120(13)	11(7)	-35(11)	38(10)
C(7U)	117(14)	72(10)	112(11)	6(8)	-24(10)	47(10)
C(8U)	115(14)	66(9)	108(9)	5(8)	10(10)	43(10)
C(1X)	119(15)	115(13)	87(12)	20(10)	24(11)	80(13)
C(2X)	200(30)	93(16)	290(30)	-27(15)	0(20)	63(18)
C(3X)	170(20)	108(13)	220(20)	48(13)	129(18)	77(15)
C(4X)	220(20)	67(11)	210(20)	72(11)	134(19)	33(14)
C(5X)	270(20)	93(11)	210(20)	92(12)	208(19)	96(15)
C(6X)	270(30)	96(13)	290(30)	69(13)	220(20)	99(16)
C(7X)	86(13)	90(10)	80(12)	7(9)	3(10)	12(10)
C(1Y)	420(40)	160(30)	190(30)	0(20)	-90(30)	170(30)
C(2Y)	370(30)	140(20)	240(30)	40(20)	70(30)	110(20)
C(3Y)	410(30)	71(18)	310(30)	70(20)	80(30)	63(18)
C(4Y)	320(30)	79(19)	450(40)	100(20)	140(30)	16(19)
C(5Y)	340(40)	190(30)	530(50)	150(30)	100(40)	100(30)
C(6Y)	370(40)	150(20)	630(60)	220(30)	190(50)	130(30)
C(7Y)	390(50)	150(30)	620(80)	290(40)	170(60)	80(30)
C(1W)	57(15)	160(20)	110(20)	-79(18)	57(14)	-53(13)
C(2W)	78(14)	142(17)	73(16)	56(14)	34(13)	19(15)
C(3W)	41(12)	210(20)	65(15)	34(17)	-33(12)	-32(13)
C(4W)	76(19)	240(30)	150(30)	20(20)	-26(15)	70(20)
C(5W)	190(40)	140(30)	210(40)	60(20)	60(30)	140(30)
O(1G)	126(14)	105(16)	95(14)	-13(13)	-24(16)	62(12)
C(1G)	126(13)	101(14)	109(15)	-11(11)	-13(12)	57(10)
C(2G)	142(14)	125(14)	153(17)	14(13)	7(13)	71(11)
C(3G)	142(14)	125(14)	153(17)	14(13)	7(13)	71(11)
C(4G)	126(13)	101(14)	109(15)	-11(11)	-13(12)	57(10)

Table 10. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for 04169.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	414	7458	2121	47
H(1B)	910	7930	2196	47
H(2A)	1038	7293	2268	49
H(2B)	804	7053	1992	49
H(3A)	2436	8664	2084	51
H(3B)	2472	8256	1923	51
H(4A)	1974	7849	2257	54
H(4B)	1697	8145	2236	54
H(5A)	1521	6875	1526	44
H(5B)	1033	6820	1643	44
H(6A)	1555	7027	1995	47
H(6B)	1983	7452	1833	47
H(116)	1738	8024	1039	35
H(118)	1489	7110	440	48
H(120)	1088	6598	1178	42
H(123)	2977	8694	269	55
H(125)	1868	8929	245	80
H(127)	2406	7635	663	84
H(12A)	2859	8315	927	154
H(12B)	3275	8535	711	154
H(12C)	3160	8055	864	154
H(12D)	2638	7598	228	181
H(12E)	3018	7605	432	181
H(12F)	3138	8081	274	181
H(130)	3082	9354	37	85
H(13A)	2493	8951	-277	179
H(13B)	2762	9519	-320	179
H(13C)	2237	9248	-194	179
H(13D)	3013	9790	365	140
H(13E)	2567	9777	219	140

H(13F)	3087	10046	87	140
H(133)	1128	8018	693	83
H(13G)	925	7575	301	144
H(13H)	916	8007	151	144
H(13I)	533	7721	377	144
H(13J)	786	8495	601	107
H(13K)	1200	8796	392	107
H(13L)	1329	8821	697	107
H(138)	153	5356	432	86
H(140)	1473	5542	552	105
H(142)	402	6456	737	86
H(14A)	-437	5952	724	125
H(14B)	-196	5717	900	125
H(14C)	-373	5525	609	125
H(14D)	15	6491	344	170
H(14E)	131	6111	210	170
H(14F)	559	6631	290	170
H(145)	891	4822	422	141
H(14G)	202	4516	623	189
H(14H)	224	4201	387	189
H(14I)	-50	4496	349	189
H(14J)	1097	5216	41	117
H(14K)	543	4965	-39	117
H(14L)	789	4646	12	117
H(148)	1978	6710	835	119
H(14M)	1748	6120	1165	209
H(14N)	2307	6349	1102	209
H(14O)	1930	5831	989	209
H(15A)	2247	6614	420	267
H(15B)	2256	6150	525	267
H(15C)	2616	6666	646	267
H(216)	190	7969	2106	44
H(218)	-547	8204	1539	46
H(220)	548	7992	1342	37
H(223)	-523	8850	2517	86
H(225)	-1522	7488	2396	74

H(227)	303	8903	2047	84
H(22A)	-201	9054	1774	135
H(22B)	286	9535	1844	135
H(22C)	-202	9414	1989	135
H(22D)	654	9627	2275	158
H(22E)	463	9184	2474	158
H(22F)	167	9457	2434	158
H(230)	-1393	8440	2692	133
H(30B)	-1652	7908	2701	133
H(23A)	-824	8240	3002	263
H(23B)	-1139	8463	3106	263
H(23C)	-730	8744	2891	263
H(23D)	-1898	7866	2950	268
H(23E)	-1780	7513	2786	268
H(23F)	-1982	7815	2640	268
H(31A)	-868	8128	3006	190
H(31B)	-1333	7622	2943	190
H(31C)	-1374	7996	3133	190
H(32A)	-1654	8514	2640	169
H(32B)	-1143	8845	2775	169
H(32C)	-1595	8488	2950	169
H(233)	-960	7314	1831	61
H(23G)	-1309	6564	2053	97
H(23H)	-1369	6810	2311	97
H(23I)	-845	6958	2206	97
H(23J)	-1802	6808	1784	87
H(23K)	-1656	7360	1762	87
H(23L)	-1889	7070	2027	87
H(238)	-389	7623	547	52
H(240)	40	9003	700	60
H(242)	-332	7291	1207	49
H(24A)	-15	6882	971	72
H(24B)	368	7442	987	72
H(24C)	73	7220	722	72
H(24D)	-880	6595	976	85
H(24E)	-839	6913	727	85

H(24F)	-1074	6964	992	85
H(245)	-424	8604	288	75
H(45B)	-65	8777	266	75
H(24G)	396	9020	267	115
H(24H)	149	8835	-14	115
H(24I)	385	8565	134	115
H(24J)	-865	7781	236	122
H(24K)	-404	7786	116	122
H(24L)	-640	8054	-34	122
H(46A)	301	8345	161	111
H(46B)	-15	8376	-72	111
H(46C)	-213	7893	95	111
H(47A)	-867	8420	358	201
H(47B)	-949	7931	230	201
H(47C)	-767	8401	52	201
H(248)	267	8958	1379	59
H(24M)	899	9712	1232	96
H(24N)	761	9544	934	96
H(24O)	966	9286	1119	96
H(25A)	83	9581	1328	95
H(25B)	-384	9072	1275	95
H(25C)	-91	9412	1034	95
H(316)	2611	9374	1932	48
H(318)	3189	10075	1254	60
H(320)	2333	8632	1255	46
H(32D)	3559	10320	1797	85
H(32E)	3077	10243	1930	85
H(32F)	3253	10525	1658	85
H(32G)	3041	9200	880	94
H(32H)	2988	9665	846	94
H(32I)	2524	9141	831	94
H(1T1)	1719	10173	1837	125
H(1T2)	2198	10138	1808	125
H(2T1)	1566	9781	2204	134
H(2T2)	2023	9712	2164	134
H(3T1)	1581	8985	1991	100

H(3T2)	1136	8997	2128	100
H(4T1)	1131	8906	1641	77
H(4T2)	950	9249	1762	77
H(5T1)	2243	9811	776	94
H(5T2)	2697	10342	808	94
H(6T1)	1781	10078	623	131
H(6T2)	2283	10540	544	131
H(7T1)	2233	10976	860	108
H(7T2)	1674	10575	871	108
H(8T1)	2322	10760	1246	73
H(8T2)	1773	10332	1247	73
H(5U1)	2360	10589	1217	95
H(5U2)	1791	10368	1189	95
H(6U1)	2061	11002	915	117
H(6U2)	2510	10949	819	117
H(7U1)	1524	10340	685	120
H(7U2)	1975	10572	487	120
H(8U1)	1642	9718	658	117
H(8U2)	2204	10050	597	117
H(1X1)	1023	5375	-534	146
H(1X2)	1200	5747	-773	146
H(1X3)	663	5521	-665	146
H(2X1)	970	5932	-262	241
H(2X2)	1502	6171	-379	241
H(3X1)	770	6312	-602	194
H(3X2)	1319	6579	-694	194
H(4X1)	1008	6713	-186	215
H(4X2)	1558	6984	-279	215
H(5X1)	805	7106	-509	225
H(5X2)	1327	7324	-644	225
H(6X1)	1159	7528	-115	257
H(6X2)	1688	7710	-229	257
H(7X1)	1508	8315	-272	149
H(7X2)	1026	7963	-428	149
H(7X3)	1537	8126	-558	149
H(1Y1)	-192	9981	3113	368

H(1Y2)	-579	9496	2973	368
H(1Y3)	-520	9513	3285	368
H(2Y1)	-777	10096	3296	308
H(2Y2)	-891	10005	2990	308
H(3Y1)	-1392	9307	3385	349
H(3Y2)	-1510	9223	3077	349
H(4Y1)	-2013	9470	3321	384
H(4Y2)	-1540	9990	3351	384
H(5Y1)	-1495	10138	2923	443
H(5Y2)	-1758	9583	2846	443
H(6Y1)	-2403	9728	3095	456
H(6Y2)	-2414	9579	2795	456
H(7Y1)	-2444	10299	2830	622
H(7Y2)	-1976	10391	2672	622
H(7Y3)	-1933	10551	2973	622
H(1W1)	2457	7930	1346	237
H(1W2)	3008	8091	1296	237
H(1W3)	2779	7919	1582	237
H(2W1)	2292	7139	1424	136
H(2W2)	2524	7313	1136	136
H(3W1)	3104	7602	1553	179
H(3W2)	3199	7489	1259	179
H(4W1)	3110	6910	1528	190
H(4W2)	2702	6719	1312	190
H(5W1)	2332	6235	1738	229
H(5W2)	2055	6522	1679	229
H(5W3)	2468	6715	1897	229
H(1G1)	-131	10413	542	134
H(1G2)	-272	10172	256	134
H(2G1)	397	10700	112	166
H(2G2)	537	10941	397	166
H(3G1)	1024	10692	443	166
H(3G2)	883	10451	157	166
H(4G1)	516	9768	330	134
H(4G2)	656	10009	616	134
