

Supporting Information for "Barium Azacryptand Sodide, the First Alkalide with an Alkaline Earth Cation, also Contains a Novel Dimer, (Na₂)²⁻

Mikhail Y. Redko, Rui H. Huang, James E. Jackson, James F. Harrison and James L. Dye

Table of Contents

Table1.	Crystal data and structure refinement for BaH ₅ Aza222na	2
Table2.	Atomic coordinates, equivalent isotropic displacement and occupancies for BaH ₅ Aza222na	4
Table3.	Bond lengths and angles for BaH ₅ Aza222na	7
Table4.	Anisotropic displacement parameters for BaH ₅ Aza222na	16
Table5.	Hydrogen coordinates, isotropic displacement parameters and occupancies for BaH ₅ Aza222na	19

Table 1. Crystal data and structure refinement for
BaH₅Aza222na

Identification code	BaH ₅ Aza222Na
Empirical formula	C40 H72 Ba2 N20 Na2
Formula weight	1153.84
Temperature	173 (2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	monoclinic
Space group	Cc
Unit cell dimensions	a = 17.746 (4) Å b = 10.375 (2) Å c = 34.116 (7) Å alpha = 90 deg. beta = 91.29 (3) deg. gamma = 90 deg.
Volume	6280 (2) Å ³
Z	4

Density (calculated)	1.220 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.301 mm ⁻¹
F(000)	2344
Theta range for data collection	2.27 to 28.22 deg.
Index ranges	-22<=h<=22, -13<=k<=12, -45<=l<=24
Reflections collected / unique	19272 / 9206 [R(int) = 0.0692]
Completeness to theta = 28.22	93.1%
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	9206 / 2 / 512
Goodness-of-fit on F ²	1.098
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0723, wR2 = 0.1725
R indices (all data)	R1 = 0.1136, wR2 = 0.1945
Absolute structure parameter	0.24(5)
Largest diff. peak and hole	2.522 and -1.513 e/Å ³

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$), equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$), and occupancies for BaH₅Aza222na

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Ba (1)	3934 (1)	199 (1)	3354 (1)	35 (1)	1
Ba (2)	1564 (1)	4758 (1)	947 (1)	35 (1)	1
Na (1)	778 (8)	1904 (17)	4105 (5)	98 (5)	1
Na (2)	4720 (7)	3038 (14)	184 (4)	71 (3)	1
N (1)	3832 (9)	-1752 (15)	2722 (4)	31 (4)	1
C (2)	3311 (18)	-2750 (20)	2750 (7)	83 (10)	1
C (3)	3373 (18)	-3280 (20)	3174 (9)	80 (9)	1
N (4)	3266 (7)	-2304 (13)	3447 (4)	35 (3)	1
C (5)	3163 (11)	-2830 (20)	3847 (6)	33 (4)	1
C (6)	3021 (14)	-1810 (20)	4174 (5)	50 (6)	1
N (7)	3714 (15)	-840 (20)	4172 (7)	90 (9)	1
C (8)	3446 (15)	265 (19)	4468 (7)	41 (6)	1
C (9)	4078 (16)	1240 (20)	4431 (6)	60 (7)	1
N (10)	3980 (13)	2030 (20)	4092 (5)	53 (6)	1
C (11)	3349 (19)	2880 (20)	4045 (7)	72 (10)	1
C (12)	3098 (10)	3386 (19)	3625 (6)	42 (5)	1
N (13)	2919 (10)	2374 (19)	3428 (6)	54 (6)	1
C (14)	2770 (30)	2890 (30)	2996 (9)	113 (13)	1
C (15)	2604 (14)	1868 (18)	2707 (7)	58 (6)	1
N (16)	3047 (11)	740 (20)	2737 (6)	49 (5)	1

C (17)	3058 (17)	-100 (30)	2380 (8)	63 (9)	1
C (18)	3669 (14)	-980 (30)	2348 (8)	56 (7)	1
C (19)	5338 (16)	-1320 (30)	2632 (9)	64 (8)	1
C (20)	4646 (18)	-2300 (30)	2627 (8)	85 (11)	1
N (21)	5348 (13)	-720 (20)	3051 (8)	72 (7)	1
C (22)	5956 (16)	340 (30)	2985 (9)	65 (9)	1
C (23)	6054 (13)	910 (30)	3407 (11)	84 (11)	1
N (24)	5301 (11)	1630 (20)	3541 (6)	50 (5)	1
C (25)	5419 (14)	2230 (30)	3877 (6)	99 (12)	1
C (26)	4751 (13)	2850 (20)	4035 (6)	72 (9)	1
N (27)	1473 (9)	2869 (19)	273 (5)	38 (4)	1
C (28)	1438 (13)	3490 (30)	-114 (8)	62 (8)	1
C (29)	1962 (17)	4740 (30)	-125 (8)	65 (9)	1
N (30)	1892 (7)	5701 (15)	142 (4)	23 (3)	1
C (31)	2459 (13)	6720 (30)	141 (9)	86 (11)	1
C (32)	2263 (16)	-2210 (30)	393 (6)	71 (8)	1
N (33)	2408 (7)	7240 (13)	820 (4)	29 (3)	1
C (34)	2135 (11)	-1760 (20)	1121 (6)	37 (5)	1
C (35)	2158 (9)	7640 (20)	1529 (6)	36 (5)	1
N (36)	1519 (9)	6638 (16)	1630 (5)	30 (4)	1
C (37)	1800 (16)	5870 (20)	1953 (6)	52 (7)	1
C (38)	2534 (18)	5040 (30)	1888 (10)	66 (9)	1
N (39)	2390 (14)	4205 (18)	1579 (5)	64 (7)	1
C (40)	3100 (20)	3400 (30)	1545 (8)	126 (16)	1
C (41)	2870 (30)	2240 (30)	1276 (8)	170 (20)	1
N (42)	2699 (12)	2682 (19)	897 (5)	70 (7)	1
C (43)	2371 (14)	1590 (30)	577 (7)	66 (7)	1
C (44)	2158 (11)	2020 (20)	224 (7)	49 (6)	1

C(45)	882(17)	2000(30)	279(10)	95(10)	1
C(46)	112(12)	2860(20)	337(7)	58(6)	1
N(47)	161(11)	3360(20)	789(6)	50(6)	1
C(48)	-518(13)	3920(20)	884(6)	50(6)	1
C(49)	-460(13)	4660(30)	1258(8)	57(8)	1
N(50)	101(10)	5631(18)	1283(4)	29(3)	1
C(51)	215(15)	6380(20)	1639(6)	52(7)	1
C(52)	833(9)	7280(20)	1643(6)	35(5)	1
N(101)	4467(16)	2470(30)	2655(6)	73(8)	1
C(102)	4403(16)	3740(30)	2496(11)	101(12)	1
N(103)	1168(9)	9230(20)	2922(6)	84(6)	1
C(104)	1881(16)	9440(30)	3180(9)	89(11)	1
N(105)	1011(18)	2620(30)	1669(9)	113(12)	1
C(106)	1160(30)	1100(30)	1765(10)	150(19)	1
N(107)	3691(15)	5610(30)	1091(10)	105(10)	1
C(108)	4880(60)	5870(60)	1250(20)	440(60)	1

U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

N4, C5, C12, N16, C18, C19, N24, N33, C34, C43, C45, C46, C52 were refined isotropically.

Table 3. Bond lengths [\AA] and angles [deg] for
BaH₅Aza222na

Ba (1) -N (16)	2.66 (2)
Ba (1) -N (4)	2.874 (14)
Ba (1) -N (21)	2.90 (2)
Ba (1) -N (24)	2.90 (2)
Ba (1) -N (13)	2.902 (18)
Ba (1) -N (1)	2.961 (17)
Ba (1) -N (7)	3.02 (2)
Ba (1) -N (10)	3.154 (18)
Ba (2) -N (39)	2.643 (19)
Ba (2) -N (47)	2.921 (19)
Ba (2) -N (42)	2.957 (18)
Ba (2) -N (30)	2.986 (13)
Ba (2) -N (50)	3.001 (17)
Ba (2) -N (36)	3.041 (16)
Ba (2) -N (33)	3.015 (13)
Ba (2) -N (27)	3.024 (18)
Na (1) -Na (2) #1	4.168 (10)
Na (2) -Na (1) #2	4.168 (10)
N (1) -C (2)	1.39 (3)
N (1) -C (18)	1.53 (3)
N (1) -C (20)	1.59 (3)
C (2) -C (3)	1.55 (4)
C (3) -N (4)	1.39 (3)
N (4) -C (5)	1.48 (2)

C(5) -C(6)	1.56 (3)
C(6) -N(7)	1.59 (3)
N(7) -C(8)	1.61 (3)
C(8) -C(9)	1.52 (3)
C(9) -N(10)	1.42 (3)
N(10) -C(11)	1.43 (4)
N(10) -C(26)	1.63 (3)
C(11) -C(12)	1.58 (3)
C(12) -N(13)	1.28 (3)
N(13) -C(14)	1.59 (4)
C(14) -C(15)	1.47 (4)
C(15) -N(16)	1.41 (3)
N(16) -C(17)	1.50 (3)
C(17) -C(18)	1.42 (4)
C(19) -C(20)	1.59 (4)
C(19) -N(21)	1.56 (4)
N(21) -C(22)	1.56 (3)
C(22) -C(23)	1.56 (4)
C(23) -N(24)	1.60 (3)
N(24) -C(25)	1.32 (3)
C(25) -C(26)	1.46 (4)
N(27) -C(45)	1.38 (3)
N(27) -C(28)	1.47 (3)
N(27) -C(44)	1.51 (3)
C(28) -C(29)	1.60 (4)
C(29) -N(30)	1.36 (3)
N(30) -C(31)	1.46 (3)
C(31) -C(32) #3	1.45 (4)
C(32) -C(31) #4	1.45 (4)

C (32) -N (33) #4	1.58 (2)
N (33) -C (34) #3	1.54 (2)
N (33) -C (32) #3	1.58 (2)
C (34) -C (35) #4	1.52 (3)
C (34) -N (33) #4	1.54 (2)
C (35) -C (34) #3	1.52 (3)
C (35) -N (36)	1.58 (2)
N (36) -C (52)	1.39 (3)
N (36) -C (37)	1.44 (3)
C (37) -C (38)	1.58 (3)
C (38) -N (39)	1.39 (4)
N (39) -C (40)	1.52 (3)
C (40) -C (41)	1.57 (5)
C (41) -N (42)	1.40 (3)
N (42) -C (43)	1.67 (3)
C (43) -C (44)	1.33 (3)
C (45) -C (46)	1.65 (4)
C (46) -N (47)	1.63 (3)
N (47) -C (48)	1.38 (3)
C (48) -C (49)	1.49 (3)
C (49) -N (50)	1.42 (3)
N (50) -C (51)	1.45 (3)
C (51) -C (52)	1.44 (3)
N (101) -C (102)	1.43 (4)
N (103) -C (104)	1.54 (3)
N (105) -C (106)	1.63 (4)
N (16) -Ba (1) -N (4)	92.3 (5)

N (16) -Ba (1) -N (21)	106.8 (7)
N (4) -Ba (1) -N (21)	96.1 (6)
N (16) -Ba (1) -N (24)	122.9 (6)
N (4) -Ba (1) -N (24)	141.4 (5)
N (21) -Ba (1) -N (24)	61.2 (7)
N (16) -Ba (1) -N (13)	63.1 (6)
N (4) -Ba (1) -N (13)	115.8 (4)
N (21) -Ba (1) -N (13)	146.1 (6)
N (24) -Ba (1) -N (13)	95.8 (6)
N (16) -Ba (1) -N (1)	62.7 (6)
N (4) -Ba (1) -N (1)	56.2 (4)
N (21) -Ba (1) -N (1)	63.6 (6)
N (24) -Ba (1) -N (1)	123.1 (5)
N (13) -Ba (1) -N (1)	124.5 (5)
N (16) -Ba (1) -N (7)	136.0 (7)
N (4) -Ba (1) -N (7)	61.0 (5)
N (21) -Ba (1) -N (7)	110.1 (7)
N (24) -Ba (1) -N (7)	95.9 (6)
N (13) -Ba (1) -N (7)	96.0 (6)
N (1) -Ba (1) -N (7)	114.9 (5)
N (16) -Ba (1) -N (10)	120.6 (6)
N (4) -Ba (1) -N (10)	117.4 (4)
N (21) -Ba (1) -N (10)	118.4 (7)
N (24) -Ba (1) -N (10)	60.7 (6)
N (13) -Ba (1) -N (10)	57.8 (6)
N (1) -Ba (1) -N (10)	173.5 (4)
N (7) -Ba (1) -N (10)	58.7 (5)
N (39) -Ba (2) -N (47)	119.8 (7)
N (39) -Ba (2) -N (42)	61.5 (5)

N (47) -Ba (2) -N (42)	101.9 (6)
N (39) -Ba (2) -N (30)	134.9 (6)
N (47) -Ba (2) -N (30)	100.1 (5)
N (42) -Ba (2) -N (30)	92.2 (5)
N (39) -Ba (2) -N (50)	102.9 (5)
N (47) -Ba (2) -N (50)	58.6 (5)
N (42) -Ba (2) -N (50)	146.9 (6)
N (30) -Ba (2) -N (50)	116.2 (4)
N (39) -Ba (2) -N (36)	62.5 (5)
N (47) -Ba (2) -N (36)	115.0 (5)
N (42) -Ba (2) -N (36)	122.8 (5)
N (30) -Ba (2) -N (36)	120.3 (4)
N (50) -Ba (2) -N (36)	58.4 (5)
N (39) -Ba (2) -N (33)	92.0 (6)
N (47) -Ba (2) -N (33)	145.3 (5)
N (42) -Ba (2) -N (33)	105.8 (5)
N (30) -Ba (2) -N (33)	58.7 (4)
N (50) -Ba (2) -N (33)	103.5 (4)
N (36) -Ba (2) -N (33)	65.4 (4)
N (39) -Ba (2) -N (27)	119.9 (5)
N (47) -Ba (2) -N (27)	60.5 (5)
N (42) -Ba (2) -N (27)	60.5 (5)
N (30) -Ba (2) -N (27)	61.4 (5)
N (50) -Ba (2) -N (27)	117.0 (5)
N (36) -Ba (2) -N (27)	175.4 (4)
N (33) -Ba (2) -N (27)	117.6 (4)
C (2) -N (1) -C (18)	109.5 (19)
C (2) -N (1) -C (20)	111 (2)

C (18) -N (1) -C (20)	99.9 (16)
C (2) -N (1) -Ba (1)	119.3 (13)
C (18) -N (1) -Ba (1)	104.9 (13)
C (20) -N (1) -Ba (1)	110.6 (14)
N (1) -C (2) -C (3)	107 (2)
N (4) -C (3) -C (2)	111.3 (19)
C (3) -N (4) -C (5)	111.7 (16)
C (3) -N (4) -Ba (1)	121.4 (13)
C (5) -N (4) -Ba (1)	119.5 (11)
N (4) -C (5) -C (6)	115.6 (16)
C (5) -C (6) -N (7)	106.8 (16)
C (6) -N (7) -C (8)	102.1 (18)
C (6) -N (7) -Ba (1)	110.2 (13)
C (8) -N (7) -Ba (1)	111.8 (13)
C (9) -C (8) -N (7)	101.2 (18)
N (10) -C (9) -C (8)	112 (2)
C (11) -N (10) -C (9)	121.6 (19)
C (11) -N (10) -C (26)	108.9 (19)
C (9) -N (10) -C (26)	108 (2)
C (11) -N (10) -Ba (1)	106.0 (14)
C (9) -N (10) -Ba (1)	107.6 (13)
C (26) -N (10) -Ba (1)	103.1 (9)
N (10) -C (11) -C (12)	120.6 (19)
N (13) -C (12) -C (11)	105.4 (18)
C (12) -N (13) -C (14)	104.2 (19)
C (12) -N (13) -Ba (1)	122.3 (15)
C (14) -N (13) -Ba (1)	106.1 (15)
C (15) -C (14) -N (13)	114 (2)
N (16) -C (15) -C (14)	117 (2)

C (15) -N (16) -C (17)	116 (2)
C (15) -N (16) -Ba (1)	123.3 (16)
C (17) -N (16) -Ba (1)	120.2 (15)
C (18) -C (17) -N (16)	117 (2)
C (17) -C (18) -N (1)	114 (2)
C (20) -C (19) -N (21)	105 (2)
C (19) -C (20) -N (1)	118 (2)
C (22) -N (21) -C (19)	98 (2)
C (22) -N (21) -Ba (1)	115.4 (18)
C (19) -N (21) -Ba (1)	117.8 (17)
C (23) -C (22) -N (21)	101 (2)
C (22) -C (23) -N (24)	111 (2)
C (25) -N (24) -C (23)	110 (2)
C (25) -N (24) -Ba (1)	123.4 (15)
C (23) -N (24) -Ba (1)	113.6 (16)
N (24) -C (25) -C (26)	115 (2)
C (25) -C (26) -N (10)	120.2 (18)
C (45) -N (27) -C (28)	106 (2)
C (45) -N (27) -C (44)	104 (2)
C (28) -N (27) -C (44)	99.9 (16)
C (45) -N (27) -Ba (2)	116.0 (16)
C (28) -N (27) -Ba (2)	113.7 (14)
C (44) -N (27) -Ba (2)	115.5 (13)
N (27) -C (28) -C (29)	111 (2)
N (30) -C (29) -C (28)	121 (2)
C (29) -N (30) -C (31)	117.4 (18)
C (29) -N (30) -Ba (2)	113.4 (15)
C (31) -N (30) -Ba (2)	112.8 (14)

C (32) #3-C (31) -N (30)	112.1 (17)
C (31) #4-C (32) -N (33) #4	104 (2)
C (34) #3-N (33) -C (32) #3	109.0 (16)
C (34) #3-N (33) -Ba (2)	108.3 (9)
C (32) #3-N (33) -Ba (2)	111.6 (11)
C (35) #4-C (34) -N (33) #4	109.4 (16)
C (34) #3-C (35) -N (36)	117.5 (16)
C (52) -N (36) -C (37)	121.9 (17)
C (52) -N (36) -C (35)	109.0 (16)
C (37) -N (36) -C (35)	107.0 (18)
C (52) -N (36) -Ba (2)	111.7 (13)
C (37) -N (36) -Ba (2)	102.6 (12)
C (35) -N (36) -Ba (2)	102.9 (9)
N (36) -C (37) -C (38)	117.7 (19)
N (39) -C (38) -C (37)	108 (2)
C (38) -N (39) -C (40)	105 (2)
C (38) -N (39) -Ba (2)	125.0 (15)
C (40) -N (39) -Ba (2)	120.2 (14)
C (41) -C (40) -N (39)	105 (3)
N (42) -C (41) -C (40)	110 (3)
C (41) -N (42) -C (43)	116 (2)
C (41) -N (42) -Ba (2)	108.5 (15)
C (43) -N (42) -Ba (2)	107.8 (13)
C (44) -C (43) -N (42)	117 (2)
C (43) -C (44) -N (27)	108.0 (19)
N (27) -C (45) -C (46)	106 (3)
N (47) -C (46) -C (45)	105 (2)
C (48) -N (47) -C (46)	109.2 (18)
C (48) -N (47) -Ba (2)	119.3 (15)

C (46) -N (47) -Ba (2)	111.1 (12)
N (47) -C (48) -C (49)	112.0 (19)
N (50) -C (49) -C (48)	117 (2)
C (49) -N (50) -C (51)	121.1 (17)
C (49) -N (50) -Ba (2)	112.1 (12)
C (51) -N (50) -Ba (2)	112.1 (13)
N (50) -C (51) -C (52)	116.6 (16)
N (36) -C (52) -C (51)	111.2 (19)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 $x-1/2, -y+1/2, z+1/2$ #2 $x+1/2, -y+1/2, z-1/2$
#3 $x, y+1, z$ #4 $x, y-1, z$

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for
BaH₅Aza222na

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ba (1)	51 (1)	26 (1)	28 (1)	7 (1)	8 (1)	-2 (1)
Ba (2)	47 (1)	32 (1)	28 (1)	-9 (1)	9 (1)	-3 (1)
Na (1)	96 (10)	96 (11)	102 (10)	28 (9)	14 (9)	11 (9)
Na (2)	74 (8)	80 (9)	61 (7)	-2 (7)	19 (6)	-2 (7)
N (1)	47 (9)	27 (7)	20 (6)	13 (5)	27 (6)	14 (6)
C (2)	190 (30)	24 (10)	36 (13)	-7 (9)	-36 (15)	-10 (13)
C (3)	129 (19)	18 (8)	93 (17)	16 (8)	-3 (13)	-1 (9)
C (6)	104 (19)	33 (9)	14 (8)	1 (7)	6 (10)	-3 (11)
N (7)	160 (20)	41 (11)	65 (14)	-18 (10)	54 (14)	-33 (12)
C (8)	59 (12)	47 (11)	19 (9)	18 (7)	21 (8)	15 (8)
C (9)	120 (20)	41 (10)	16 (8)	-10 (7)	-7 (10)	-21 (11)
N (10)	107 (15)	39 (9)	15 (7)	-7 (6)	21 (8)	-12 (10)
C (11)	160 (30)	33 (12)	22 (11)	-20 (9)	26 (14)	-33 (15)
N (13)	56 (10)	46 (10)	60 (12)	5 (8)	40 (9)	13 (7)
C (14)	230 (40)	41 (13)	60 (20)	12 (13)	0 (20)	27 (18)
C (15)	81 (13)	27 (7)	64 (13)	14 (8)	-30 (10)	13 (8)
C (17)	100 (20)	61 (15)	25 (12)	-5 (10)	-30 (13)	7 (14)
C (20)	170 (30)	40 (11)	42 (11)	-3 (8)	38 (13)	33 (13)
N (21)	66 (14)	49 (12)	101 (17)	11 (12)	34 (12)	-6 (10)
C (22)	59 (16)	62 (16)	72 (17)	42 (13)	-13 (13)	-12 (12)
C (23)	35 (12)	61 (16)	160 (30)	13 (17)	52 (15)	-5 (10)

C(25)	104 (17)	150 (20)	47 (12)	-34 (13)	37 (12)	-96 (17)
C(26)	89 (15)	75 (14)	52 (11)	-54 (10)	39 (11)	-71 (13)
N(27)	37 (8)	48 (9)	31 (8)	-2 (6)	17 (6)	-17 (7)
C(28)	46 (12)	75 (16)	65 (16)	-29 (13)	8 (11)	23 (10)
C(29)	67 (15)	100 (20)	30 (12)	-29 (10)	13 (10)	-11 (12)
N(30)	17 (5)	45 (8)	8 (6)	9 (5)	5 (4)	4 (5)
C(31)	50 (14)	110 (20)	110 (20)	9 (18)	54 (15)	-32 (14)
C(32)	110 (18)	65 (13)	37 (11)	32 (9)	-17 (11)	-44 (12)
C(35)	31 (8)	39 (10)	39 (10)	-13 (8)	14 (8)	-5 (7)
N(36)	38 (8)	36 (7)	18 (7)	-6 (5)	26 (6)	-10 (6)
C(37)	116 (18)	37 (9)	5 (6)	-3 (5)	-3 (7)	19 (9)
C(38)	86 (17)	59 (14)	53 (16)	17 (11)	16 (13)	52 (13)
N(39)	141 (17)	34 (7)	17 (6)	10 (5)	7 (7)	47 (8)
C(40)	170 (30)	170 (40)	37 (12)	-53 (17)	-21 (15)	100 (30)
C(41)	310 (50)	150 (30)	39 (15)	-30 (17)	-50 (20)	190 (40)
N(42)	137 (16)	43 (10)	27 (8)	-21 (7)	-50 (9)	49 (10)
C(44)	44 (10)	54 (14)	49 (14)	-12 (11)	19 (10)	16 (9)
N(47)	50 (9)	53 (9)	47 (9)	-13 (6)	29 (7)	-27 (6)
C(48)	64 (15)	44 (11)	40 (10)	9 (9)	-19 (10)	-1 (10)
C(49)	32 (12)	80 (18)	60 (15)	-24 (12)	25 (11)	15 (11)
N(50)	41 (9)	33 (8)	12 (6)	5 (5)	6 (6)	4 (7)
C(51)	78 (14)	50 (10)	28 (8)	-2 (6)	38 (8)	19 (9)
N(101)	130 (20)	64 (15)	29 (9)	-15 (10)	17 (12)	22 (14)
C(102)	94 (17)	58 (16)	150 (30)	-16 (16)	67 (19)	-1 (12)
N(103)	49 (9)	101 (14)	100 (15)	13 (12)	-15 (9)	-36 (8)
C(104)	90 (20)	80 (18)	89 (19)	-14 (15)	-62 (16)	44 (16)
N(105)	140 (30)	70 (18)	130 (30)	34 (17)	-20 (20)	33 (18)
C(106)	300 (50)	34 (13)	110 (30)	17 (14)	-100 (30)	21 (19)

N(107)	118(18)	58(14)	140(20)	30(15)	73(17)	-3(13)
C(108)	1000(200)	110(40)	220(60)	0(40)	90(100)	-100(80)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

Table 5. Hydrogen coordinates ($\text{\AA} \times 10^4$), isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$), and occupancies for BaH₅Aza222na

	x	y	z	U(eq)	Occ.
H(2A)	3424	-3429	2563	99	1
H(2B)	2805	-2439	2694	99	1
H(3A)	2997	-3945	3209	96	1
H(3B)	3866	-3663	3217	96	1
H(5A)	3609	-3322	3920	40	1
H(5B)	2740	-3422	3838	40	1
H(6A)	2989	-2227	4427	60	1
H(6B)	2554	-1352	4120	60	1
H(8A)	2963	626	4386	49	1
H(8B)	3413	-57	4734	49	1
H(9A)	4095	1786	4662	72	1
H(9B)	4555	792	4417	72	1
H(11A)	3450	3629	4208	86	1
H(11B)	2917	2445	4155	86	1
H(12A)	2671	3964	3643	51	1
H(12B)	3509	3841	3503	51	1
H(14A)	2341	3481	2999	136	1
H(14B)	3202	3373	2913	136	1
H(15A)	2079	1622	2729	69	1
H(15B)	2665	2227	2448	69	1

H (17A)	2593	-595	2370	76	1
H (17B)	3055	453	2151	76	1
H (18A)	4118	-504	2281	67	1
H (18B)	3558	-1577	2135	67	1
H (19A)	5266	-660	2433	77	1
H (19B)	5806	-1771	2584	77	1
H (20A)	4761	-2981	2814	102	1
H (20B)	4616	-2697	2369	102	1
H (22A)	6423	-27	2894	78	1
H (22B)	5779	989	2800	78	1
H (23A)	6469	1524	3411	101	1
H (23B)	6178	226	3590	101	1
H (25A)	5805	2878	3841	119	1
H (25B)	5612	1614	4068	119	1
H (26A)	4628	3576	3865	86	1
H (26B)	4895	3206	4289	86	1
H (28A)	922	3730	-177	74	1
H (28B)	1600	2878	-311	74	1
H (29A)	2480	4440	-107	78	1
H (29B)	1893	5121	-382	78	1
H (31A)	2941	6372	227	104	1
H (31B)	2512	7040	-125	104	1
H (32A)	1739	-1971	354	85	1
H (32B)	2579	-1470	345	85	1
H (34A)	2457	-1006	1116	44	1
H (34B)	1625	-1495	1053	44	1
H (35A)	2140	8336	1719	43	1
H (35B)	2641	7216	1566	43	1
H (37A)	1402	5287	2029	63	1

H (37B)	1898	6443	2173	63	1
H (38A)	2953	5605	1827	79	1
H (38B)	2665	4563	2124	79	1
H (40A)	3501	3899	1428	151	1
H (40B)	3276	3101	1801	151	1
H (41A)	3275	1615	1268	201	1
H (41B)	2429	1811	1381	201	1
H (43A)	2759	942	543	79	1
H (43B)	1943	1161	692	79	1
H (44A)	2036	1306	52	58	1
H (44B)	2563	2514	110	58	1
H (45A)	951	1397	494	115	1
H (45B)	851	1520	35	115	1
H (46A)	99	3587	157	69	1
H (46B)	-334	2341	291	69	1
H (48A)	-898	3258	909	60	1
H (48B)	-679	4498	674	60	1
H (49A)	-944	5065	1302	68	1
H (49B)	-369	4055	1470	68	1
H (51A)	288	5792	1856	62	1
H (51B)	-244	6863	1686	62	1
H (52A)	784	7851	1420	42	1
H (52B)	819	7796	1879	42	1
