ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1996, 15(9), 2205-2212, DOI:10.1021/om950810x

L 2212-1

Table 1: Atomic Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters

$(C_9H_7)_2Ca(thf)_2$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
Ca(1)	¼	0.0451(1)	¼	3.93(5)
O(1)	0.4622(2)	0.2054(2)	0.3430(2)	5.5(1)
C(1)	0.6107(3)	-0.1386(5)	0.3164(3)	5.6(2)
C(2)	0.6322(3)	-0.0439(5)	0.3706(3)	5.8(2)
C(3)	0.6858(3)	0.0425(5)	0.3279(3)	5.5(2)
C(4)	0.7013(3)	-0.0019(4)	0.2452(3)	4.7(2)
C(5)	0.7531(4)	0.0442(6)	0.1762(4)	6.8(3)
C(6)	0.7548(5)	-0.0183(8)	0.1031(5)	8.4(4)
C(7)	0.7064(5)	-0.1279(8)	0.0922(4)	8.1(4)
C(8)	0.6554(4)	-0.1779(5)	0.1567(4)	6.8(3)
C(9)	0.6523(3)	-0.1164(4)	0.2370(3)	4.7(2)
C(10)	0.3977(3)	0.3062(4)	0.3209(3)	6.9(3)
C(11)	0.4230(5)	0.3987(6)	0.3858(4)	10.4(4)
C(12)	0.4637(6)	0.3335(6)	0.4609(4)	11.9(4)
C(13)	0.4919(5)	0.2172(5)	0.4310(3)	9.8(4)
H(1)	0.581(3)	-0.204(4)	0.324(3)	7(1)
H(2)	0.617(3)	-0.034(4)	0.433(3)	6(1)
H(3)	0.712(3)	0.117(4)	0.353(3)	7(1)
H(5)	0.787(4)	0.121(5)	0.180(3)	10(1)
H(6)	0.779(4)	0.009(5)	0.047(4)	10(1)
H(7)	0.707(4)	-0.163(5)	0.041(3)	9(1)
H(8)	0.629(3)	-0.253(4)	0.155(3)	6(1)
H(9)	0.4095	0.3353	0.2648	8.3
H(10)	0.3301	0.2831	0.3231	8.3
H(11)	0.4707	0.4532	0.3653	12.5
H(12)	0.3653	0.4423	0.3998	12.5
H(13)	0.5202	0.3749	0.4855	14.3
H(14)	0.4153	0.3260	0.5027	14.3
H(15)	0.4603	0.1563	0.4631	11.7
H(16)	0.5617	0.2080	0.4382	11.7

The coordinates of the primed atoms are related to those of the unprimed atoms by the expression 1-x, +y, ½-z.

L 2212-2

Table 1: Atomic Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
Ca(1)	0.0106(1)	0.1737(1)	0.25492(9)	4.07(7)
O(2)	0.1430(3)	0.0860(4)	0.3353(3)	5.0(3)
C(1)	0.0882(5)	0.2585(5)	0.1438(4)	4.1(4)
C(2)	0.0046(5)	0.3186(6)	0.1487(4)	4.2(3)
C(3)	0.0235(5)	0.3679(5)	0.2208(4)	4.1(4)
C(4)	0.1227(5)	0.3426(5)	0.2610(4)	3.9(3)
C(5)	0.1839(6)	0.3719(5)	0.3342(5)	4.9(4)
C(6)	0.2818(7)	0.3388(7)	0.3586(5)	6.4(5)
C(7)	0.3199(6)	0.2736(7)	0.3113(6)	5.8(5)
C(8)	0.2646(6)	0.2418(6)	0.2411(5)	5.0(4)
C(9)	0.1626(5)	0.2731(5)	0.2144(4)	4.0(4)
C(10)	0.0997(5)	0.1959(6)	0.0762(5)	5.5(4)
C(11)	0.0362(7)	0.2284(8)	-0.0020(5)	8.4(6)
C(12)	0.0873(9)	0.0862(8)	0.0891(6)	10.3(7)
C(13)	-0.0376(6)	0.4513(6)	0.2436(5)	5.3(4)
C(14)	-0.1484(6)	0.4518(7)	0.2006(5)	7.5(5)
C(15)	0.0082(7)	0.5519(7)	0.2347(7)	10.5(6)
C(16)	-0.1774(5)	0.1040(6)	0.1922(4)	4.5(4)
C(17)	-0.1876(5)	0.1736(6)	0.2484(6)	5.3(4)
C(18)	-0.1410(6)	0.1443(8)	0.3237(5)	5.6(5)
C(19)	-0.1037(5)	0.0468(7)	0.3167(5)	5.1(4)
C(20)	-0.0578(8)	-0.025(1)	0.3726(6)	8.4(6)
C(21)	-0.033(1)	-0.115(1)	0.348(1)	12(1)
C(22)	-0.051(1)	-0.1370(8)	0.269(1)	10.0(7)
C(23)	-0.0955(7)	-0.0710(8)	0.2128(6)	6.7(5)
C(24)	-0.1250(5)	0.0235(6)	0.2349(5)	4.1(4)
C(25)	-0.2278(6)	0.1034(7)	0.1056(5)	6.0(5)
C(26)	-0.2668(8)	0.2007(8)	0.0739(6)	10.2(7)
C(27)	-0.3135(9)	0.0276(9)	0.0861(6)	12.4(7)
C(28)	-0.1412(8)	0.201(1)	0.3958(7)	14(1)
C(29)	-0.0603(8)	0.2647(8)	0.4265(5)	8.9(6)
C(30)	-0.2304(8)	0.2027(9)	0.4231(6)	11.2(8)
C(31)	0.2000(7)	0.0041(6)	0.3152(5)	6.5(5)
C(32)	0.2655(8)	-0.0321(8)	0.3884(6)	9.1(6)
C(33)	0.2778(8)	0.0524(8)	0.4425(5)	9.1(6)
C(34)	0.1817(6)	0.1081(6)	0.4170(5)	5.9(4)

L 2212-3

Table 1 (cont.) $[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
H(1)	-0.0560	0.3245	0.1083	5.0
H(2)	0.1572	0.4151	0.3671	5.8
H(3)	0.3234	0.3604	0.4075	7.6
H(4)	0.3876	0.2504	0.3293	7.0
H(5)	0.2939	0.1987	0.2097	6.0
H(6)	0.1682	0.2042	0.0730	6.6
H(7)	0.0457	0.2973	-0.0087	10.1
H(8)	0.0557	0.1929	-0.0430	10.1
H(9)	-0.0334	0.2159	-0.0041	10.1
H(10)	0.0180	0.0723	0.0873	12.3
H(11)	0.1075	0.0499	0.0488	12.3
H(12)	0.1281	0.0676	0.1391	12.3
H(13)	-0.0352	0.4433	0.2981	6.4
H(14)	-0.1832	0.5011	0.2226	9.0
H(15)	-0.1544	0.4656	0.1463	9.0
H(16)	-0.1773	0.3888	0.2059	9.0
H(17)	0.0778	0.5523	0.2619	12.6
H(18)	0.0026	0.5652	0.1802	12.6
H(19)	-0.0271	0.6015	0.2560	12.6
H(20)	-0.2229	0.2346	0.2362	6.4
H(21)	-0.0440	-0.0097	0.4274	10.1
H(22)	-0.0032	-0.1633	0.3862	13.9
H(23)	-0.0325	-0.2002	0.2534	12.0
H(24)	-0.1066	-0.0880	0.1586	8.0
H(25)	-0.1780	0.0839	0.0784	7.2
H(26)	-0.2137	0.2484	0.0863	12.2
H(27)	-0.2912	0.1966	0.0184	12.2
H(28)	-0.3206	0.2204	0.0970	12.2
H(29)	-0.3671	0.0474	0.1091	14.9
H(30)	-0.3379	0.0228	0.0305	14.9
H(31)	-0.2886	-0.0353	0.1067	14.9
H(32)	-0.1126	0.1482	0.4297	16.4
H(33)	-0.0364	0.2530	0.4815	10.6
H(34)	-0.0070	0.2531	0.4008	10.6
H(35)	-0.0825	0.3314	0.4181	10.6
H(36)	-0.2608	0.2664	0.4142	13.4
H(37)	-0.2765	0.1544	0.3958	13.4
H(38)	-0.2146	0.1887	0.4781	13.4
H(39)	0.1552	-0.0467	0.2906	7.8
H(40)	0.2400	0.0256	0.2804	7.8
H(41)	0.2344	-0.0861	0.4086	10.9
H(42)	0.3292	-0.0524	0.3803	10.9
H(43)	0.2874	0.0307	0.4956	10.9
H(44)	0.3339	0.0920	0.4378	10.9
H(45)	0.1939	0.1771	0.4242	7.1
H(46)	0.1348	0.0876	0.4466	7.1

L 2212-4

Table 1: Atomic Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters

$[(C_9H_7)_2Sr(thf)]_\infty$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
Sr(1)	0.4601(1)	0.3305*	0.6299(1)	2.33(4)
O(1)	0.689(1)	0.394(1)	0.8055(8)	4.1(5)
C(1)	0.165(3)	0.279(3)	0.677(3)	6(2)
C(2)	0.268(3)	0.209(3)	0.768(3)	5(1)
C(3)	0.343(2)	0.315(4)	0.854(2)	5(1)
C(4)	0.281(2)	0.452(3)	0.810(2)	2.9(9)
C(5)	0.302(1)	0.599(2)	0.861(2)	5(1)
C(6)	0.217(2)	0.712(2)	0.799(2)	6(1)
C(7)	0.109(2)	0.685(3)	0.688(2)	7(1)
C(8)	0.087(2)	0.553(2)	0.638(2)	5.0(9)
C(9)	0.176(2)	0.428(3)	0.693(2)	4(1)
C(10)	0.436(2)	0.637(2)	0.544(2)	3(1)
C(11)	0.585(2)	0.621(2)	0.562(2)	4(1)
C(12)	0.618(2)	0.537(3)	0.469(2)	2.6(8)
C(13)	0.481(2)	0.504(2)	0.378(1)	2.9(6)
C(14)	0.449(2)	0.432(2)	0.259(1)	3.9(7)
C(15)	0.302(2)	0.415(2)	0.198(1)	4.9(8)
C(16)	0.188(2)	0.466(2)	0.251(2)	5.2(8)
C(17)	0.218(1)	0.535(2)	0.363(1)	4.1(8)
C(18)	0.370(2)	0.566(2)	0.427(2)	2.5(8)
C(19)	0.837(2)	0.355(4)	0.809(2)	8(1)
C(20)	0.932(2)	0.425(2)	0.923(2)	7(1)
C(21)	0.854(2)	0.549(2)	0.942(2)	7(1)
C(22)	0.693(2)	0.510(2)	0.902(2)	6(1)
H(1)	0.0942	0.2303	0.6114	7.1
H(2)	0.2890	0.1059	0.7728	6.8
H(3)	0.4199	0.2989	0.9270	5.8
H(4)	0.3745	0.6175	0.9365	6.3
H(5)	0.2306	0.8089	0.8323	6.9
H(6)	0.0501	0.7641	0.6465	8.7
H(7)	0.0096	0.5388	0.5643	5.8
H(8)	0.3847	0.6850	0.5990	3.7
H(9)	0.6571	0.6629	0.6294	4.5
H(10)	0.7145	0.5059	0.4650	3.2
H(11)	0.5267	0.3971	0.2227	4.6
H(12)	0.2771	0.3681	0.1176	5.8
H(13)	0.0870	0.4517	0.2075	6.2
H(14)	0.1388	0.5620	0.4004	5.0
H(15)	0.8482	0.2516	0.8121	10.1
H(16)	0.8642	0.3920	0.7353	10.1
H(17)	0.9449	0.3592	0.9934	7.8
H(18)	1.0267	0.4503	0.9101	7.8
H(19)	0.8782	0.5743	1.0291	8.6
H(20)	0.8763	0.6278	0.8937	8.6

L 2212-5

Table 1 (cont.) $[(C_9H_7)_2Sr(thf)]_\infty$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
H(21)	0.6358	0.5942	0.8656	7.7
H(22)	0.6559	0.4751	0.9702	7.7

* Parameter not refined.

The coordinates of the primed atoms are related to those of the unprimed atoms by the expression 1-x, y-½, 1-z.

L 2212-6

Table 1: Atomic Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ba(thf)_2$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
Ba(1)	0.22418(5)	0.22981(4)	0.94205(4)	4.87(3)
O(1)	0.216(1)	0.3201(6)	0.7955(6)	11.2(7)
O(2)	0.4081(6)	0.3039(6)	0.9713(8)	11.1(7)
C(1)	0.0261(7)	0.2777(7)	1.0138(7)	5.7(6)
C(2)	0.0718(9)	0.3492(7)	1.0004(7)	6.1(6)
C(3)	0.1525(9)	0.3579(6)	1.0596(8)	6.0(6)
C(4)	0.1574(8)	0.2912(6)	1.1110(7)	5.7(6)
C(5)	0.2197(9)	0.265(1)	1.1807(8)	7.4(7)
C(6)	0.202(1)	0.197(1)	1.2194(8)	8.1(9)
C(7)	0.126(1)	0.1500(8)	1.1917(9)	7.7(8)
C(8)	0.0615(8)	0.1702(7)	1.1241(8)	6.1(6)
C(9)	0.0769(8)	0.2409(7)	1.0827(7)	5.3(6)
C(10)	-0.0661(8)	0.2479(7)	0.968(1)	7.8(8)
C(11)	-0.068(1)	0.253(1)	0.873(1)	14(1)
C(12)	-0.158(1)	0.288(1)	0.997(1)	15(1)
C(13)	0.219(1)	0.4277(8)	1.0728(9)	8.3(8)
C(14)	0.217(1)	0.4805(9)	0.996(1)	13(1)
C(15)	0.195(1)	0.473(1)	1.152(1)	14(1)
C(16)	0.331(1)	0.1064(7)	0.8381(8)	6.8(7)
C(17)	0.3627(8)	0.0882(6)	0.9200(7)	5.9(6)
C(18)	0.2816(8)	0.0615(6)	0.9676(7)	5.2(6)
C(19)	0.198(1)	0.0614(6)	0.9128(8)	5.6(6)
C(20)	0.101(1)	0.0419(7)	0.9239(9)	7.4(8)
C(21)	0.029(1)	0.0465(9)	0.855(1)	10(1)
C(22)	0.059(1)	0.072(1)	0.776(1)	9(1)
C(23)	0.159(1)	0.0935(8)	0.7618(8)	8.7(9)
C(24)	0.230(1)	0.0891(6)	0.8282(7)	5.6(6)
C(25)	0.397(1)	0.1320(9)	0.764(1)	8.6(9)
C(26)	0.421(1)	0.070(1)	0.704(1)	14(1)
C(27)	0.489(1)	0.171(1)	0.797(1)	12(1)
C(28)	0.2863(9)	0.0311(6)	1.0590(8)	6.3(6)
C(29)	0.284(1)	-0.0543(8)	1.0623(8)	8.9(8)
C(30)	0.374(1)	0.0598(8)	1.1099(8)	8.8(9)
C(31)	0.453(1)	0.366(1)	0.926(2)	19(2)
C(32)	0.549(2)	0.374(2)	0.961(2)	19(2)
C(33)	0.562(2)	0.323(2)	1.031(2)	20(3)
C(34)	0.474(1)	0.277(1)	1.038(1)	14(1)
C(35)	0.135(2)	0.345(2)	0.753(2)	22(2)
C(36)	0.156(2)	0.376(2)	0.672(1)	17(2)
C(37)	0.255(2)	0.371(1)	0.668(1)	16(2)
C(38)	0.292(2)	0.344(2)	0.745(2)	22(2)
H(1)	0.0513	0.3861	0.9579	7.4
H(2)	0.2741	0.2965	1.2006	8.8

L 2212-7

Table 1 (cont.) $[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ba(thf)_2$

atom	*x/a*	*y/b*	*z/c*	B_{iso} (Å^2)
H(3)	0.2443	0.1806	1.2666	9.7
H(4)	0.1164	0.1019	1.2198	9.2
H(5)	0.0083	0.1370	1.1061	7.3
H(6)	-0.0722	0.1947	0.9823	9.4
H(7)	-0.0684	0.3054	0.8560	16.9
H(8)	-0.0115	0.2274	0.8518	16.9
H(9)	-0.1271	0.2281	0.8505	16.9
H(10)	-0.1569	0.3402	0.9782	17.5
H(11)	-0.2149	0.2625	0.9732	17.5
H(12)	-0.1585	0.2863	1.0581	17.5
H(13)	0.2850	0.4092	1.0805	9.9
H(14)	0.2644	0.5204	1.0051	15.1
H(15)	0.2315	0.4519	0.9461	15.1
H(16)	0.1519	0.5028	0.9891	15.1
H(17)	0.2435	0.5130	1.1614	17.2
H(18)	0.1309	0.4961	1.1453	17.2
H(19)	0.1961	0.4400	1.2012	17.2
H(20)	0.4294	0.0929	0.9420	7.1
H(21)	0.0812	0.0249	0.9789	8.9
H(22)	-0.0379	0.0323	0.8636	11.7
H(23)	0.0113	0.0764	0.7293	11.2
H(24)	0.1775	0.1107	0.7065	10.5
H(25)	0.3597	0.1697	0.7322	10.3
H(26)	0.3607	0.0456	0.6837	17.3
H(27)	0.4544	0.0908	0.6567	17.3
H(28)	0.4620	0.0326	0.7327	17.3
H(29)	0.5307	0.1338	0.8259	14.4
H(30)	0.5231	0.1920	0.7498	14.4
H(31)	0.4725	0.2107	0.8358	14.4
H(32)	0.2286	0.0494	1.0864	7.6
H(33)	0.2798	-0.0706	1.1206	10.7
H(34)	0.2272	-0.0725	1.0300	10.7
H(35)	0.3427	-0.0744	1.0387	10.7
H(36)	0.3694	0.0436	1.1681	10.6
H(37)	0.4330	0.0392	1.0867	10.6
H(38)	0.3758	0.1146	1.1073	10.6

L 2212-8

Table 2: Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

$(C_9H_7)_2Ca(thf)_2$

atoms	distance	atoms	distance
Ca(1)–O(1)	2.360(3)	C(3)–C(4)	1.401(6)
Ca(1)–C(1)	2.694(4)	C(4)–C(5)	1.405(6)
Ca(1)–C(2)	2.702(4)	C(4)–C(9)	1.431(6)
Ca(1)–C(3)	2.725(4)	C(5)–C(6)	1.332(8)
Ca(1)–C(4)	2.771(4)	C(6)–C(7)	1.383(9)
Ca(1)–C(9)	2.738(4)	C(7)–C(8)	1.363(8)
O(1)–C(10)	1.444(5)	C(8)–C(9)	1.423(6)
O(1)–C(13)	1.409(5)	C(10)–C(11)	1.464(7)
C(1)–C(2)	1.366(7)	C(11)–C(12)	1.454(7)
C(1)–C(9)	1.403(6)	C(12)–C(13)	1.426(7)
C(2)–C(3)	1.389(6)		

atoms	angle	atoms	angle
O(1)–Ca(1)–O(1)′	82.6(1)	C(5)–C(6)–C(7)	122.0(6)
Ca(1)–O(1)–C(10)	125.6(2)	C(6)–C(7)–C(8)	121.3(6)
Ca(1)–O(1)–C(13)	127.1(3)	C(7)–C(8)–C(9)	119.3(6)
C(10)–O(1)–C(13)	107.2(3)	C(1)–C(9)–C(4)	106.3(4)
C(2)–C(1)–C(9)	109.1(4)	C(1)–C(9)–C(8)	135.9(5)
C(1)–C(2)–C(3)	109.4(4)	C(4)–C(9)–C(8)	117.8(5)
C(2)–C(3)–C(4)	107.7(4)	O(1)–C(10)–C(11)	105.1(4)
C(3)–C(4)–C(5)	132.5(5)	C(10)–C(11)–C(12)	105.7(5)
C(3)–C(4)–C(9)	107.5(4)	C(11)–C(12)–C(13)	106.3(5)
C(5)–C(4)–C(9)	120.0(5)	O(1)–C(13)–C(12)	109.4(5)
C(4)–C(5)–C(6)	119.6(6)		

L 2212-9

Table 2: Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atoms	distance	atoms	distance
Ca(1)–O(2)	2.323(5)	C(8)–C(9)	1.416(9)
Ca(1)–C(1)	2.673(7)	C(10)–C(11)	1.50(1)
Ca(1)–C(2)	2.684(7)	C(10)–C(12)	1.52(1)
Ca(1)–C(3)	2.706(7)	C(13)–C(14)	1.51(1)
Ca(1)–C(4)	2.729(7)	C(13)–C(15)	1.52(1)
Ca(1)–C(9)	2.692(7)	C(16)–C(17)	1.39(1)
Ca(1)–C(16)	2.695(7)	C(16)–C(24)	1.411(9)
Ca(1)–C(17)	2.665(7)	C(16)–C(25)	1.50(1)
Ca(1)–C(18)	2.647(8)	C(17)–C(18)	1.37(1)
Ca(1)–C(19)	2.702(8)	C(18)–C(19)	1.43(1)
Ca(1)–C(24)	2.706(7)	C(18)–C(28)	1.47(1)
O(2)–C(31)	1.441(8)	C(19)–C(20)	1.41(1)
O(2)–C(34)	1.428(8)	C(19)–C(24)	1.422(9)
C(1)–C(2)	1.414(9)	C(20)–C(21)	1.36(2)
C(1)–C(9)	1.407(9)	C(21)–C(22)	1.38(2)
C(1)–C(10)	1.489(9)	C(22)–C(23)	1.36(1)
C(2)–C(3)	1.393(9)	C(23)–C(24)	1.42(1)
C(3)–C(4)	1.403(9)	C(25)–C(26)	1.48(1)
C(3)–C(13)	1.507(9)	C(25)–C(27)	1.53(1)
C(4)–C(5)	1.403(9)	C(28)–C(29)	1.40(1)
C(4)–C(9)	1.431(9)	C(28)–C(30)	1.40(1)
C(5)–C(6)	1.37(1)	C(31)–C(32)	1.45(1)
C(6)–C(7)	1.39(1)	C(32)–C(33)	1.46(1)
C(7)–C(8)	1.34(1)	C(33)–C(34)	1.48(1)

atoms	angle	atoms	angle
Ca(1)–O(2)–C(31)	128.9(5)	C(17)–C(16)–C(25)	128.0(8)
Ca(1)–O(2)–C(34)	122.9(5)	C(24)–C(16)–C(25)	125.3(8)
C(31)–O(2)–C(34)	108.2(6)	C(16)–C(17)–C(18)	112.2(8)
C(2)–C(1)–C(9)	106.6(6)	C(17)–C(18)–C(19)	106.0(8)
C(2)–C(1)–C(10)	127.7(7)	C(17)–C(18)–C(28)	125(1)
C(9)–C(1)–C(10)	125.7(7)	C(19)–C(18)–C(28)	129(1)

L 2212-10

Table 2 (cont.)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atoms	angle	atoms	angle
C(1)–C(2)–C(3)	110.6(6)	C(18)–C(19)–C(20)	133(1)
C(2)–C(3)–C(4)	106.5(6)	C(18)–C(19)–C(24)	107.4(8)
C(2)–C(3)–C(13)	127.0(7)	C(20)–C(19)–C(24)	120(1)
C(4)–C(3)–C(13)	124.9(7)	C(19)–C(20)–C(21)	120(1)
C(3)–C(4)–C(5)	132.5(7)	C(20)–C(21)–C(22)	121(1)
C(3)–C(4)–C(9)	108.9(6)	C(21)–C(22)–C(23)	122(1)
C(5)–C(4)–C(9)	118.6(6)	C(22)–C(23)–C(24)	120(1)
C(4)–C(5)–C(6)	120.7(7)	C(16)–C(24)–C(19)	108.4(8)
C(5)–C(6)–C(7)	119.6(7)	C(16)–C(24)–C(23)	133.6(9)
C(6)–C(7)–C(8)	122.5(7)	C(19)–C(24)–C(23)	117.9(8)
C(7)–C(8)–C(9)	119.6(7)	C(16)–C(25)–C(26)	114.1(8)
C(1)–C(9)–C(4)	107.4(6)	C(16)–C(25)–C(27)	111.6(7)
C(1)–C(9)–C(8)	133.4(8)	C(26)–C(25)–C(27)	109.2(8)
C(4)–C(9)–C(8)	118.8(7)	C(18)–C(28)–C(29)	119.2(8)
C(1)–C(10)–C(11)	114.1(7)	C(18)–C(28)–C(30)	118.4(9)
C(1)–C(10)–C(12)	113.7(7)	C(29)–C(28)–C(30)	121(1)
C(11)–C(10)–C(12)	111.3(8)	O(2)–C(31)–C(32)	107.1(7)
C(3)–C(13)–C(14)	114.6(7)	C(31)–C(32)–C(33)	104.8(8)
C(3)–C(13)–C(15)	112.3(7)	C(32)–C(33)–C(34)	104.2(8)
C(14)–C(13)–C(15)	109.1(7)	O(2)–C(34)–C(33)	106.4(7)
C(17)–C(16)–C(24)	105.8(7)		

Table 2: Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

$[(C_9H_7)_2Sr(thf)]_\infty$

atoms	distance	atoms	distance
Sr(1)–O(1)	2.560(9)	C(3)–C(4)	1.40(4)
Sr(1)–C(1)	2.93(3)	C(4)–C(5)	1.44(3)
Sr(1)–C(2)	2.81(2)	C(4)–C(9)	1.43(3)
Sr(1)–C(3)	2.90(2)	C(5)–C(6)	1.37(2)
Sr(1)–C(4)	3.06(2)	C(6)–C(7)	1.40(3)
Sr(1)–C(9)	3.00(2)	C(7)–C(8)	1.31(3)
Sr(1)–C(10)	2.92(2)	C(8)–C(9)	1.45(3)
Sr(1)–C(10)′	2.91(2)	C(10)–C(11)	1.35(3)
Sr(1)–C(11)	3.04(2)	C(10)–C(18)	1.43(3)
Sr(1)–C(11)′	2.78(2)	C(11)–C(12)	1.36(3)
Sr(1)–C(12)	3.15(2)	C(12)–C(13)	1.44(2)
Sr(1)–C(12)′	2.90(2)	C(13)–C(14)	1.42(2)
Sr(1)–C(13)	3.21(1)	C(13)–C(18)	1.39(2)
Sr(1)–C(13)′	3.02(1)	C(14)–C(15)	1.38(2)
Sr(1)–C(18)	3.05(2)	C(15)–C(16)	1.40(2)
Sr(1)–C(18)′	3.01(2)	C(16)–C(17)	1.34(2)
O(1)–C(19)	1.41(2)	C(17)–C(18)	1.44(2)
O(1)–C(22)	1.48(2)	C(19)–C(20)	1.49(2)
C(1)–C(2)	1.36(4)	C(20)–C(21)	1.38(2)
C(1)–C(9)	1.37(3)	C(21)–C(22)	1.49(2)
C(2)–C(3)	1.40(4)		

atoms	angle	atoms	angle
Sr(1)–O(1)–C(19)	126(1)	C(10)–C(11)–C(12)	111(2)
Sr(1)–O(1)–C(22)	116.5(3)	C(11)–C(12)–C(13)	108(2)
C(19)–O(1)–C(22)	108(1)	C(12)–C(13)–C(14)	133(2)
C(2)–C(1)–C(9)	117.3(5)	C(12)–C(13)–C(18)	105(1)
C(1)–C(2)–C(3)	108(3)	C(14)–C(13)–C(18)	122(2)
C(2)–C(3)–C(4)	107(2)	C(13)–C(14)–C(15)	118(1)
C(3)–C(4)–C(5)	133(2)	C(14)–C(15)–C(16)	121(1)
C(3)–C(4)–C(9)	108(2)	C(15)–C(16)–C(17)	122(1)

L 2212-12

Table 2 (cont.)

$[(C_9H_7)_2Sr(thf)]_\infty$

atoms	angle	atoms	angle
C(5)–C(4)–C(9)	119(2)	C(16)–C(17)–C(18)	120(2)
C(4)–C(5)–C(6)	120(2)	C(10)–C(18)–C(13)	109(2)
C(5)–C(6)–C(7)	120(2)	C(10)–C(18)–C(17)	133(2)
C(6)–C(7)–C(8)	122(2)	C(13)–C(18)–C(17)	117(2)
C(7)–C(8)–C(9)	122(2)	O(1)–C(19)–C(20)	107(2)
C(1)–C(9)–C(4)	106(3)	C(19)–C(20)–C(21)	104(2)
C(1)–C(9)–C(8)	135(3)	C(20)–C(21)–C(22)	106(2)
C(4)–C(9)–C(8)	117(2)	O(1)–C(22)–C(21)	103(1)
C(11)–C(10)–C(18)	107(2)		

L 2212-13

Table 2: Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ba(OC_4H_8)$

atoms	angle	atoms	angle
Ba(1)–O(1)	2.757(9)	C(8)–C(9)	1.40(1)
Ba(1)–O(2)	2.805(9)	C(10)–C(11)	1.47(2)
Ba(1)–C(1)	3.033(9)	C(10)–C(12)	1.49(2)
Ba(1)–C(2)	3.06(1)	C(13)–C(14)	1.50(2)
Ba(1)–C(3)	3.05(1)	C(13)–C(15)	1.51(2)
Ba(1)–C(4)	2.99(1)	C(16)–C(17)	1.36(1)
Ba(1)–C(9)	3.002(9)	C(16)–C(24)	1.40(1)
Ba(1)–C(16)	3.06(1)	C(16)–C(25)	1.53(2)
Ba(1)–C(17)	3.10(1)	C(17)–C(18)	1.41(1)
Ba(1)–C(18)	3.03(1)	C(18)–C(19)	1.39(1)
Ba(1)–C(19)	2.96(1)	C(18)–C(28)	1.51(1)
Ba(1)–C(24)	3.01(1)	C(19)–C(20)	1.36(1)
O(1)–C(35)	1.31(2)	C(19)–C(24)	1.47(1)
O(1)–C(38)	1.37(2)	C(20)–C(21)	1.41(2)
O(2)–C(31)	1.43(2)	C(21)–C(22)	1.39(2)
O(2)–C(34)	1.42(2)	C(22)–C(23)	1.41(2)
C(1)–C(2)	1.40(1)	C(23)–C(24)	1.38(2)
C(1)–C(9)	1.40(1)	C(25)–C(26)	1.47(2)
C(1)–C(10)	1.50(1)	C(25)–C(27)	1.48(2)
C(2)–C(3)	1.40(1)	C(28)–C(29)	1.48(2)
C(3)–C(4)	1.40(1)	C(28)–C(30)	1.48(2)
C(3)–C(13)	1.51(2)	C(31)–C(32)	1.38(3)
C(4)–C(5)	1.42(2)	C(32)–C(33)	1.41(3)
C(4)–C(9)	1.44(1)	C(33)–C(34)	1.43(3)
C(5)–C(6)	1.35(2)	C(35)–C(36)	1.40(2)
C(6)–C(7)	1.36(2)	C(36)–C(37)	1.34(3)
C(7)–C(8)	1.38(2)	C(37)–C(38)	1.36(3)

L 2212-14

Table 2 (cont.)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ba(OC_4H_8)$

atoms	angle	atoms	angle
O(1)–Ba(1)–O(2)	83.4(4)	C(17)–C(16)–C(25)	127(1)
Ba(1)–O(1)–C(35)	127(1)	C(24)–C(16)–C(25)	124(1)
Ba(1)–O(1)–C(38)	129(1)	C(16)–C(17)–C(18)	110(1)
C(35)–O(1)–C(38)	103(1)	C(17)–C(18)–C(19)	107.7(9)
Ba(1)–O(2)–C(31)	131(1)	C(17)–C(18)–C(28)	127(1)
Ba(1)–O(2)–C(34)	119(1)	C(19)–C(18)–C(28)	125(1)
C(31)–O(2)–C(34)	110(1)	C(18)–C(19)–C(20)	133(1)
C(2)–C(1)–C(10)	126(1)	C(18)–C(19)–C(24)	107(1)
C(2)–C(1)–C(9)	108(1)	C(20)–C(19)–C(24)	120(1)
C(9)–C(1)–C(10)	125(1)	C(19)–C(20)–C(21)	121(1)
C(1)–C(2)–C(3)	109(1)	C(20)–C(21)–C(22)	119(1)
C(2)–C(3)–C(13)	128(1)	C(21)–C(22)–C(23)	122(1)
C(2)–C(3)–C(4)	108(1)	C(22)–C(23)–C(24)	120(1)
C(4)–C(3)–C(13)	124(1)	C(16)–C(24)–C(19)	107(1)
C(3)–C(4)–C(5)	135(1)	C(16)–C(24)–C(23)	136(1)
C(3)–C(4)–C(9)	108(1)	C(19)–C(24)–C(23)	118(1)
C(5)–C(4)–C(9)	117(1)	C(16)–C(25)–C(26)	114(1)
C(4)–C(5)–C(6)	121(1)	C(16)–C(25)–C(27)	112(1)
C(5)–C(6)–C(7)	121(1)	C(26)–C(25)–C(27)	110(1)
C(6)–C(7)–C(8)	122(1)	C(18)–C(28)–C(29)	112(1)
C(7)–C(8)–C(9)	118(1)	C(18)–C(28)–C(30)	113(1)
C(1)–C(9)–C(4)	107(1)	C(29)–C(28)–C(30)	110(1)
C(1)–C(9)–C(8)	132(1)	O(2)–C(31)–C(32)	107(2)
C(4)–C(9)–C(8)	121(1)	C(31)–C(32)–C(33)	109(2)
C(1)–C(10)–C(11)	117(1)	C(32)–C(33)–C(34)	109(2)
C(1)–C(10)–C(12)	112(1)	O(2)–C(34)–C(33)	105(2)
C(11)–C(10)–C(12)	107(1)	O(1)–C(35)–C(36)	113(2)
C(14)–C(13)–C(15)	109(1)	C(35)–C(36)–C(37)	104(2)
C(3)–C(13)–C(14)	113(1)	O(1)–C(38)–C(37)	110(2)
C(3)–C(13)–C(15)	113(1)	C(37)–C(38)–C(36)	108(2)
C(17)–C(16)–C(24)	109(1)		

L 2212-15

Table 3: Anisotropic Thermal Parameters (U_{ij} form)

$(C_9H_7)_2Ca(thf)_2$

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ca(1)	0.0440(6)	0.0445(6)	0.0600(7)	0	-0.0039(5)	0
O(1)	0.073(2)	0.061(2)	0.074(2)	0.012(1)	-0.013(1)	-0.015(2)
C(1)	0.055(3)	0.059(3)	0.099(4)	0.008(2)	0.001(3)	0.020(3)
C(2)	0.067(3)	0.090(4)	0.063(3)	0.018(3)	-0.004(2)	0.010(3)
C(3)	0.053(2)	0.071(3)	0.084(3)	0.002(3)	-0.013(2)	-0.007(3)
C(4)	0.040(2)	0.064(2)	0.076(3)	0.007(2)	-0.001(2)	0.010(2)
C(5)	0.063(3)	0.089(4)	0.109(4)	0.011(3)	0.016(3)	0.024(4)
C(6)	0.089(4)	0.136(6)	0.095(5)	0.030(4)	0.021(4)	0.021(5)
C(7)	0.084(4)	0.148(7)	0.077(4)	0.049(4)	0.000(3)	-0.023(5)
C(8)	0.064(3)	0.072(4)	0.121(5)	0.022(3)	-0.014(3)	-0.018(4)
C(9)	0.047(2)	0.058(3)	0.072(3)	0.012(2)	-0.006(2)	0.003(2)
C(10)	0.080(3)	0.076(3)	0.106(4)	0.024(3)	-0.017(3)	-0.019(3)
C(11)	0.163(6)	0.100(4)	0.126(5)	0.053(4)	-0.042(4)	-0.039(4)
C(12)	0.227(8)	0.129(5)	0.094(4)	0.088(6)	-0.032(5)	-0.041(4)
C(13)	0.191(6)	0.105(4)	0.073(4)	0.048(4)	-0.014(4)	-0.017(3)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ca(1)	0.044(1)	0.049(1)	0.062(1)	-0.0018(9)	0.0151(7)	0.002(1)
O(2)	0.063(4)	0.058(4)	0.068(4)	0.005(3)	0.013(3)	0.006(3)
C(1)	0.052(5)	0.058(5)	0.047(5)	-0.001(4)	0.017(4)	-0.006(4)
C(2)	0.036(4)	0.065(5)	0.058(5)	0.006(4)	0.008(4)	0.011(5)
C(3)	0.042(5)	0.049(5)	0.066(5)	-0.000(4)	0.018(4)	-0.004(4)
C(4)	0.043(5)	0.046(5)	0.054(5)	-0.003(4)	0.004(4)	0.002(4)
C(5)	0.058(5)	0.053(5)	0.074(6)	-0.001(4)	0.018(5)	0.006(5)
C(6)	0.074(6)	0.080(7)	0.076(6)	-0.004(6)	-0.006(5)	-0.005(6)
C(7)	0.043(5)	0.075(7)	0.096(7)	0.006(5)	0.001(5)	0.014(6)
C(8)	0.045(5)	0.068(6)	0.078(6)	0.012(5)	0.019(4)	0.014(5)
C(9)	0.047(5)	0.045(5)	0.063(5)	0.002(4)	0.019(4)	0.006(4)
C(10)	0.060(5)	0.087(8)	0.064(6)	-0.000(5)	0.019(4)	0.003(5)
C(11)	0.113(8)	0.14(1)	0.065(6)	0.014(7)	0.019(6)	-0.010(6)
C(12)	0.22(1)	0.073(8)	0.106(8)	0.001(8)	0.054(8)	-0.029(7)
C(13)	0.057(6)	0.060(6)	0.085(6)	0.010(5)	0.018(5)	0.001(5)
C(14)	0.064(6)	0.072(7)	0.152(9)	0.011(5)	0.030(6)	-0.012(6)
C(15)	0.097(8)	0.049(6)	0.27(1)	0.006(6)	0.069(8)	0.000(8)
C(16)	0.048(5)	0.069(6)	0.051(5)	-0.011(5)	0.006(4)	0.014(5)
C(17)	0.043(5)	0.070(6)	0.093(7)	-0.009(5)	0.022(5)	-0.007(6)
C(18)	0.058(5)	0.104(9)	0.058(6)	-0.021(6)	0.028(5)	-0.026(6)
C(19)	0.041(5)	0.084(7)	0.070(7)	-0.017(5)	0.019(5)	0.014(6)
C(20)	0.070(7)	0.15(1)	0.087(8)	-0.041(8)	-0.001(6)	0.05(1)
C(21)	0.086(9)	0.15(1)	0.20(2)	-0.02(1)	0.01(1)	0.11(2)

L 2212-16

Table 3 (cont.)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ca(thf)$

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(22)	0.10(1)	0.053(7)	0.23(2)	0.011(6)	0.05(1)	0.04(1)
C(23)	0.080(7)	0.063(7)	0.121(8)	-0.022(6)	0.042(6)	-0.007(7)
C(24)	0.047(5)	0.053(6)	0.057(6)	-0.014(4)	0.016(4)	0.002(5)
C(25)	0.076(6)	0.071(7)	0.079(6)	-0.011(5)	0.013(5)	0.010(5)
C(26)	0.110(8)	0.12(1)	0.127(9)	-0.017(7)	-0.027(7)	0.039(8)
C(27)	0.18(1)	0.16(1)	0.099(8)	-0.10(1)	-0.043(7)	0.025(8)
C(28)	0.107(9)	0.28(2)	0.16(1)	-0.11(1)	0.089(8)	-0.15(1)
C(29)	0.127(9)	0.113(9)	0.101(8)	-0.009(7)	0.036(7)	-0.040(7)
C(30)	0.13(1)	0.17(1)	0.15(1)	-0.028(8)	0.087(8)	-0.058(9)
C(31)	0.097(7)	0.072(7)	0.079(7)	0.025(6)	0.023(6)	-0.010(5)
C(32)	0.14(1)	0.101(9)	0.092(8)	0.060(8)	0.012(7)	-0.002(7)
C(33)	0.118(9)	0.113(9)	0.090(7)	0.044(7)	-0.020(6)	-0.025(7)
C(34)	0.080(6)	0.070(6)	0.078(6)	0.006(5)	0.024(5)	-0.011(5)

$[(C_9H_7)_2Sr(thf)]_\infty$

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Sr(1)	0.0298(5)	0.0275(5)	0.0313(5)	-0.004(2)	0.0069(4)	0.003(2)
O(1)	0.039(5)	0.065(8)	0.046(6)	-0.002(5)	-0.003(5)	-0.007(5)
C(1)	0.03(1)	0.11(3)	0.08(2)	-0.00(1)	0.01(1)	-0.01(1)
C(2)	0.11(2)	0.03(1)	0.10(2)	-0.01(1)	0.08(2)	-0.01(1)
C(3)	0.029(8)	0.09(2)	0.07(1)	0.01(1)	0.016(7)	0.04(2)
C(4)	0.02(1)	0.07(2)	0.02(1)	-0.01(1)	0.009(7)	-0.01(1)
C(5)	0.020(8)	0.11(2)	0.08(1)	-0.01(1)	0.033(8)	-0.05(1)
C(6)	0.07(1)	0.07(1)	0.10(2)	0.00(1)	0.06(1)	-0.02(1)
C(7)	0.09(2)	0.08(2)	0.12(2)	0.06(1)	0.07(1)	0.05(2)
C(8)	0.029(8)	0.08(2)	0.08(1)	0.03(1)	0.021(8)	0.01(1)
C(9)	0.02(1)	0.05(1)	0.07(2)	-0.01(1)	0.02(1)	0.01(1)
C(10)	0.06(2)	0.03(1)	0.04(1)	-0.01(1)	0.02(1)	-0.01(1)
C(11)	0.06(2)	0.03(1)	0.04(1)	-0.01(1)	-0.01(1)	-0.00(1)
C(12)	0.020(9)	0.04(1)	0.05(1)	0.004(8)	0.014(8)	0.01(1)
C(13)	0.05(1)	0.027(9)	0.027(9)	-0.010(7)	0.006(8)	0.002(7)
C(14)	0.08(1)	0.026(9)	0.05(1)	0.017(8)	0.031(9)	0.009(8)
C(15)	0.06(1)	0.07(1)	0.05(1)	-0.02(1)	-0.009(9)	0.014(9)
C(16)	0.04(1)	0.07(1)	0.07(1)	-0.01(1)	-0.01(1)	0.01(1)
C(17)	0.031(9)	0.06(1)	0.06(1)	-0.009(8)	0.000(8)	0.00(1)
C(18)	0.05(1)	0.03(1)	0.02(1)	0.001(8)	0.014(9)	0.015(8)
C(19)	0.041(9)	0.11(2)	0.16(2)	0.02(1)	-0.01(1)	-0.08(2)
C(20)	0.04(1)	0.09(2)	0.10(1)	0.00(1)	-0.01(1)	-0.04(1)
C(21)	0.05(1)	0.11(2)	0.11(2)	-0.00(1)	-0.00(1)	-0.05(1)
C(22)	0.05(1)	0.11(2)	0.07(1)	0.02(1)	-0.01(1)	-0.03(1)

L2212-17

Table 3 (cont.)

$[1,3\text{-}(C_3H_7)_2C_9H_5]_2Ba(OC_4H_8)_2$

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ba(1)	0.0570(3)	0.0611(4)	0.0670(4)	-0.0032(4)	0.0057(2)	0.0032(4)
O(1)	0.19(1)	0.15(1)	0.093(8)	0.041(9)	0.028(8)	0.050(7)
O(2)	0.069(6)	0.15(1)	0.20(1)	-0.035(6)	0.001(7)	-0.009(8)
C(1)	0.050(6)	0.085(8)	0.081(8)	-0.007(6)	0.013(5)	-0.018(7)
C(2)	0.081(8)	0.075(8)	0.078(8)	0.017(7)	0.006(7)	-0.006(6)
C(3)	0.091(9)	0.061(7)	0.077(8)	-0.013(6)	0.015(7)	-0.010(6)
C(4)	0.083(8)	0.076(9)	0.057(7)	-0.014(6)	0.010(6)	-0.017(6)
C(5)	0.083(8)	0.12(1)	0.073(8)	-0.024(9)	-0.003(6)	-0.012(9)
C(6)	0.11(1)	0.12(1)	0.08(1)	0.01(1)	0.009(8)	0.01(1)
C(7)	0.12(1)	0.09(1)	0.08(1)	0.022(9)	0.025(9)	0.013(8)
C(8)	0.074(8)	0.075(8)	0.084(9)	-0.008(6)	0.024(7)	-0.017(7)
C(9)	0.066(7)	0.071(8)	0.065(7)	0.014(6)	0.015(5)	-0.006(6)
C(10)	0.060(7)	0.12(1)	0.12(1)	0.006(7)	-0.002(7)	0.015(8)
C(11)	0.11(1)	0.29(3)	0.13(1)	-0.03(1)	-0.04(1)	0.01(2)
C(12)	0.054(8)	0.22(2)	0.28(2)	0.02(1)	-0.02(1)	-0.07(2)
C(13)	0.14(1)	0.08(1)	0.10(1)	-0.028(9)	0.020(9)	-0.019(8)
C(14)	0.23(2)	0.09(1)	0.15(1)	-0.07(1)	0.03(1)	-0.00(1)
C(15)	0.25(2)	0.14(1)	0.16(2)	-0.08(1)	0.08(1)	-0.08(1)
C(16)	0.09(1)	0.085(9)	0.080(9)	0.005(7)	0.024(7)	0.012(7)
C(17)	0.084(8)	0.076(8)	0.067(8)	0.013(6)	0.017(6)	0.015(6)
C(18)	0.081(8)	0.059(7)	0.059(7)	0.002(6)	0.011(6)	-0.001(6)
C(19)	0.09(1)	0.045(6)	0.078(8)	-0.015(6)	0.011(7)	-0.005(6)
C(20)	0.09(1)	0.09(1)	0.10(1)	-0.012(8)	0.013(8)	-0.007(8)
C(21)	0.13(1)	0.12(1)	0.13(1)	-0.04(1)	0.02(1)	-0.01(1)
C(22)	0.08(1)	0.15(1)	0.12(1)	-0.02(1)	-0.04(1)	0.02(1)
C(23)	0.14(1)	0.11(1)	0.09(1)	0.00(1)	-0.01(1)	0.002(8)
C(24)	0.10(1)	0.056(7)	0.057(7)	-0.004(6)	-0.009(7)	-0.013(5)
C(25)	0.10(1)	0.13(1)	0.10(1)	-0.02(1)	0.028(9)	0.011(9)
C(26)	0.20(2)	0.25(2)	0.10(1)	-0.05(2)	0.07(1)	-0.03(1)
C(27)	0.13(1)	0.20(2)	0.12(1)	-0.03(1)	0.06(1)	0.03(1)
C(28)	0.093(9)	0.071(8)	0.078(8)	-0.002(7)	0.011(6)	0.008(7)
C(29)	0.15(1)	0.10(1)	0.089(9)	-0.00(1)	0.004(8)	0.033(9)
C(30)	0.13(1)	0.13(1)	0.072(9)	-0.02(1)	-0.005(8)	0.026(8)
C(31)	0.12(2)	0.20(2)	0.41(4)	-0.08(2)	0.02(2)	0.08(2)
C(32)	0.13(2)	0.23(3)	0.36(5)	-0.11(2)	-0.01(2)	0.01(3)
C(33)	0.10(2)	0.39(5)	0.26(3)	-0.06(2)	-0.04(2)	0.02(3)
C(34)	0.10(1)	0.20(2)	0.22(2)	-0.03(1)	-0.05(1)	0.02(2)
C(35)	0.21(3)	0.45(5)	0.17(2)	0.10(3)	0.06(2)	0.17(3)
C(36)	0.13(2)	0.37(4)	0.13(2)	0.01(2)	-0.00(1)	0.10(2)
C(37)	0.29(3)	0.18(2)	0.16(2)	-0.03(2)	0.05(2)	0.10(2)
C(38)	0.19(2)	0.41(4)	0.25(3)	0.06(2)	0.08(2)	0.22(3)

Form of the anisotropic thermal parameter: $\exp[-2\pi^2[a^{*2}U_{11}h^2 + \ldots + 2a^*b^*U_{12}hk + \ldots]$