

Table 1. Crystal data and structure refinement for AEM1.

Empirical formula	2[(C ₃₇ H ₈ Cr ₁ F ₁₅ N ₄ O) (CH ₂ Cl ₂)]	
Formula weight	1892.77	
Crystallization Solvent	CH ₂ Cl ₂ /(C ₆ H ₅) ₃ PO	
Crystal Habit	Block	
Crystal size	0.33 x 0.24 x 0.14 mm ³	
Crystal color	Purple	
Data Collection		
Preliminary Photos	Rotation	
Type of diffractometer	CCD area detector	
Wavelength	0.71073 Å MoKα	
Data Collection Temperature	98(2) K	
θ range for 5520 reflections used in lattice determination	2.22 to 28.29°	
Unit cell dimensions	a = 14.3325(14) Å	α = 108.241(2)°
	b = 15.7474(15) Å	β = 109.212(2)°
	c = 17.2641(16) Å	γ = 92.414(2)°
Volume	3448.5(6) Å ³	
Z	2	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Density (calculated)	1.819 Mg/m ³	
F(000)	1860	
θ range for data collection	1.52 to 28.55°	
Completeness to θ = 28.55°	88.8 %	
Index ranges	-18 ≤ h ≤ 18, -20 ≤ k ≤ 20, -22 ≤ l ≤ 22	
Data collection scan type	φ and ω scans	
Reflections collected	33515	
Independent reflections	15596 [R _{int} = 0.0530]	
Absorption coefficient	0.610 mm ⁻¹	
Absorption correction	None	
Crystal decay	2.6%	

Table 1 (cont.)

Structure solution and Refinement

Structure solution program	SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)
Primary solution method	Direct methods
Secondary solution method	Difference Fourier map
Hydrogen placement	Difference Fourier map
Structure refinement program	SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)
Refinement method	Full matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	15596 / 70 / 1231
Treatment of hydrogen atoms	Unrestrained
Goodness-of-fit on F^2	1.746
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0454$, $wR_2 = 0.0853$
R indices (all data)	$R_1 = 0.0611$, $wR_2 = 0.0877$
Type of weighting scheme used	Sigma
Weighting scheme used	$w = 1/\sigma^2(F_o^3)$
Max shift/error	0.001
Average shift/error	0.000
Largest diff. peak and hole	1.110 and -0.769 $e.\text{\AA}^{-3}$

Special Refinement Details

The crystal lattice contains solvent molecules. There are two of these solvent molecules (CH_2Cl_2) in the asymmetric unit, four per unit cell. Each of these is disordered in its site therefore a satisfactory description of the solvent region required restraints on the solvent model. Solvent molecules A and B share one site and solvents C, D and E share the other. Solvent A was refined unrestrained with anisotropic atomic displacement parameters and solvent B was assigned one overall isotropic atomic displacement parameter and the bond distances and angles were restrained. Solvents C, D and E were refined with anisotropic atomic displacement parameters. Restraints were placed on the bond distances and angles and the displacement parameters were restrained to tend toward isotropic behavior.

Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor (wR) and goodness of fit (S) are based on F^2 , conventional R-factors (R) are based on F , with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F , and R-factors based on ALL data will be even larger.

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for AEM1. $U(\text{eq})$ is defined as the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Cr(1A)	2574(1)	3708(1)	3353(1)	19(1)
O(1A)	1492(1)	3495(1)	3347(1)	24(1)
N(1A)	3023(2)	2543(1)	3111(1)	19(1)
N(2A)	2383(2)	3706(1)	2185(1)	19(1)
N(3A)	2964(2)	5000(1)	3723(1)	20(1)
N(4A)	3528(2)	3989(1)	4530(1)	19(1)
C(1A)	3368(2)	2101(2)	3711(2)	19(1)
C(2A)	3131(2)	1149(2)	3246(2)	22(1)
C(3A)	2654(2)	1011(2)	2384(2)	21(1)
C(4A)	2600(2)	1871(2)	2286(2)	18(1)
C(5A)	2233(2)	2061(2)	1509(2)	19(1)
C(6A)	2180(2)	2926(2)	1464(2)	19(1)
C(7A)	1921(2)	3173(2)	704(2)	25(1)
C(8A)	1941(2)	4073(2)	947(2)	24(1)
C(9A)	2227(2)	4426(2)	1877(2)	21(1)
C(10A)	2357(2)	5336(2)	2403(2)	21(1)
C(11A)	2719(2)	5617(2)	3310(2)	20(1)
C(12A)	3005(2)	6499(2)	3968(2)	21(1)
C(13A)	3439(2)	6402(2)	4762(2)	22(1)
C(14A)	3428(2)	5467(2)	4613(2)	20(1)
C(15A)	3784(2)	4886(2)	5065(2)	19(1)
C(16A)	4409(2)	4931(2)	5907(2)	21(1)
C(17A)	4531(2)	4068(2)	5877(2)	21(1)
C(18A)	3980(2)	3471(2)	5004(2)	19(1)
C(19A)	3871(2)	2536(2)	4612(2)	20(1)
C(20A)	4329(2)	1999(2)	5170(2)	20(1)
C(21A)	4048(2)	1967(2)	5858(2)	23(1)
C(22A)	4480(2)	1498(2)	6393(2)	24(1)
C(23A)	5236(2)	1027(2)	6256(2)	24(1)
C(24A)	5552(2)	1050(2)	5591(2)	23(1)
C(25A)	5099(2)	1513(2)	5056(2)	21(1)
C(26A)	1912(2)	1267(2)	671(2)	19(1)
C(27A)	2583(2)	737(2)	426(2)	22(1)
C(28A)	2299(2)	-52(2)	-279(2)	29(1)
C(29A)	1306(2)	-314(2)	-806(2)	31(1)
C(30A)	615(2)	214(2)	-623(2)	26(1)
C(31A)	917(2)	986(2)	108(2)	23(1)
C(32A)	2182(2)	6034(2)	1980(2)	21(1)
C(33A)	1229(2)	6146(2)	1501(2)	25(1)
C(34A)	1081(2)	6794(2)	1118(2)	26(1)
C(35A)	1890(2)	7366(2)	1191(2)	23(1)
C(36A)	2843(2)	7273(2)	1667(2)	21(1)
C(37A)	2967(2)	6623(2)	2043(2)	21(1)
F(1A)	3317(1)	2417(1)	6023(1)	33(1)
F(2A)	4167(1)	1478(1)	7042(1)	34(1)
F(3A)	5658(1)	553(1)	6764(1)	33(1)
F(4A)	6295(1)	594(1)	5461(1)	30(1)

F(5A)	5434(1)	1513(1)	4416(1)	26(1)
F(6A)	3569(1)	998(1)	895(1)	31(1)
F(7A)	2978(1)	-558(1)	-470(1)	42(1)
F(8A)	1012(1)	-1089(1)	-1495(1)	47(1)
F(9A)	-351(1)	-32(1)	-1151(1)	35(1)
F(10A)	212(1)	1466(1)	290(1)	30(1)
F(11A)	419(1)	5611(1)	1417(1)	36(1)
F(12A)	149(1)	6887(1)	673(1)	37(1)
F(13A)	1753(1)	7993(1)	818(1)	32(1)
F(14A)	3647(1)	7804(1)	1736(1)	31(1)
F(15A)	3917(1)	6561(1)	2494(1)	26(1)
Cr(1B)	8291(1)	3203(1)	3905(1)	19(1)
O(1B)	9124(1)	3000(1)	3497(1)	24(1)
N(1B)	7033(2)	2913(1)	2921(1)	21(1)
N(2B)	7984(2)	2136(1)	4169(1)	20(1)
N(3B)	8931(2)	3776(1)	5155(1)	20(1)
N(4B)	8104(2)	4443(1)	4068(1)	20(1)
C(1B)	6638(2)	3445(2)	2417(2)	20(1)
C(2B)	5933(2)	2862(2)	1598(2)	24(1)
C(3B)	5894(2)	2005(2)	1600(2)	24(1)
C(4B)	6566(2)	2018(2)	2420(2)	21(1)
C(5B)	6736(2)	1294(2)	2715(2)	20(1)
C(6B)	7380(2)	1341(2)	3541(2)	22(1)
C(7B)	7526(2)	630(2)	3890(2)	26(1)
C(8B)	8206(2)	978(2)	4711(2)	28(1)
C(9B)	8501(2)	1916(2)	4903(2)	25(1)
C(10B)	9165(2)	2535(2)	5688(2)	23(1)
C(11B)	9353(2)	3458(2)	5822(2)	21(1)
C(12B)	9869(2)	4217(2)	6590(2)	23(1)
C(13B)	9751(2)	4983(2)	6384(2)	23(1)
C(14B)	9155(2)	4711(2)	5482(2)	20(1)
C(15B)	8685(2)	5100(2)	4860(2)	20(1)
C(16B)	8564(2)	5956(2)	4799(2)	20(1)
C(17B)	7897(2)	5829(2)	3978(2)	21(1)
C(18B)	7605(2)	4873(2)	3518(2)	19(1)
C(19B)	6895(2)	4387(2)	2697(2)	20(1)
C(20B)	6399(2)	4891(2)	2110(2)	21(1)
C(21B)	6950(2)	5423(2)	1852(2)	25(1)
C(22B)	6526(2)	5886(2)	1307(2)	31(1)
C(23B)	5502(2)	5839(2)	995(2)	31(1)
C(24B)	4929(2)	5328(2)	1233(2)	29(1)
C(25B)	5364(2)	4865(2)	1781(2)	24(1)
C(26B)	6119(2)	393(2)	2121(2)	20(1)
C(27B)	6509(2)	-310(2)	1676(2)	24(1)
C(28B)	5909(2)	-1113(2)	1088(2)	27(1)
C(29B)	4903(2)	-1236(2)	946(2)	24(1)
C(30B)	4493(2)	-567(2)	1397(2)	21(1)
C(31B)	5113(2)	230(2)	1983(2)	20(1)
C(32B)	9692(2)	2209(2)	6415(2)	23(1)
C(33B)	9206(2)	1891(2)	6867(2)	27(1)
C(34B)	9694(2)	1598(2)	7538(2)	30(1)
C(35B)	10716(2)	1628(2)	7793(2)	30(1)
C(36B)	11225(2)	1911(2)	7347(2)	27(1)

C(37B)	10718(2)	2195(2)	6676(2)	25(1)
F(1B)	7949(1)	5484(1)	2132(1)	34(1)
F(2B)	7092(1)	6358(1)	1058(1)	46(1)
F(3B)	5074(1)	6288(1)	462(1)	47(1)
F(4B)	3922(1)	5266(1)	911(1)	41(1)
F(5B)	4760(1)	4386(1)	1995(1)	31(1)
F(6B)	7486(1)	-201(1)	1805(1)	33(1)
F(7B)	6297(1)	-1772(1)	643(1)	39(1)
F(8B)	4313(1)	-2012(1)	368(1)	34(1)
F(9B)	3521(1)	-688(1)	1261(1)	28(1)
F(10B)	4719(1)	871(1)	2435(1)	26(1)
F(11B)	8208(1)	1869(1)	6653(1)	38(1)
F(12B)	9192(1)	1276(1)	7947(1)	43(1)
F(13B)	11199(1)	1370(1)	8469(1)	43(1)
F(14B)	12214(1)	1903(1)	7564(1)	42(1)
F(15B)	11233(1)	2462(1)	6249(1)	35(1)
C(38B)	8703(18)	3785(13)	1812(18)	59(2)
Cl(1B)	7943(7)	2702(6)	1216(6)	59(2)
Cl(2B)	9711(9)	3839(8)	1402(9)	59(2)
C(38A)	8342(3)	3177(3)	1244(3)	54(1)
Cl(1A)	7528(1)	3655(1)	545(1)	47(1)
Cl(2A)	9589(1)	3421(1)	1339(1)	64(1)
C(38C)	783(9)	1061(11)	3326(6)	47(4)
Cl(1C)	-432(5)	584(6)	3178(6)	48(2)
Cl(2C)	1492(2)	1525(3)	4461(1)	60(1)
C(38D)	907(8)	1255(13)	3622(12)	48(4)
Cl(1D)	-362(5)	807(6)	3354(6)	56(2)
Cl(2D)	1693(2)	754(3)	4335(2)	66(1)
C(38E)	-59(12)	1230(11)	3921(12)	56(5)
Cl(1E)	224(4)	383(3)	4419(4)	85(2)
Cl(2E)	795(7)	1423(8)	3428(7)	81(3)

Table 4. Bond lengths [Å] and angles [°] for AEM1.

Cr(1A)-O(1A)	1.5700(17)	C(24A)-F(4A)	1.350(3)
Cr(1A)-N(3A)	1.927(2)	C(24A)-C(25A)	1.368(3)
Cr(1A)-N(1A)	1.936(2)	C(25A)-F(5A)	1.342(3)
Cr(1A)-N(4A)	1.936(2)	C(26A)-C(27A)	1.384(3)
Cr(1A)-N(2A)	1.9425(19)	C(26A)-C(31A)	1.393(3)
N(1A)-C(4A)	1.396(3)	C(27A)-F(6A)	1.346(3)
N(1A)-C(1A)	1.396(3)	C(27A)-C(28A)	1.369(3)
N(2A)-C(6A)	1.385(3)	C(28A)-F(7A)	1.343(3)
N(2A)-C(9A)	1.394(3)	C(28A)-C(29A)	1.373(4)
N(3A)-C(11A)	1.370(3)	C(29A)-F(8A)	1.342(3)
N(3A)-C(14A)	1.386(3)	C(29A)-C(30A)	1.373(4)
N(4A)-C(18A)	1.367(3)	C(30A)-F(9A)	1.341(3)
N(4A)-C(15A)	1.378(3)	C(30A)-C(31A)	1.376(3)
C(1A)-C(19A)	1.400(3)	C(31A)-F(10A)	1.348(3)
C(1A)-C(2A)	1.425(3)	C(32A)-C(37A)	1.380(3)
C(2A)-C(3A)	1.358(3)	C(32A)-C(33A)	1.395(3)
C(2A)-H(2A)	0.92(2)	C(33A)-F(11A)	1.345(3)
C(3A)-C(4A)	1.417(3)	C(33A)-C(34A)	1.369(4)
C(3A)-H(3A)	0.96(2)	C(34A)-F(12A)	1.344(3)
C(4A)-C(5A)	1.402(3)	C(34A)-C(35A)	1.384(4)
C(5A)-C(6A)	1.393(3)	C(35A)-F(13A)	1.327(3)
C(5A)-C(26A)	1.499(3)	C(35A)-C(36A)	1.384(3)
C(6A)-C(7A)	1.421(3)	C(36A)-F(14A)	1.345(3)
C(7A)-C(8A)	1.342(4)	C(36A)-C(37A)	1.363(3)
C(7A)-H(7A)	0.80(2)	C(37A)-F(15A)	1.353(3)
C(8A)-C(9A)	1.430(3)		
C(8A)-H(8A)	0.87(2)	Cr(1B)-O(1B)	1.5713(17)
C(9A)-C(10A)	1.402(3)	Cr(1B)-N(4B)	1.927(2)
C(10A)-C(11A)	1.388(3)	Cr(1B)-N(3B)	1.929(2)
C(10A)-C(32A)	1.487(3)	Cr(1B)-N(1B)	1.943(2)
C(11A)-C(12A)	1.431(3)	Cr(1B)-N(2B)	1.943(2)
C(12A)-C(13A)	1.366(4)	N(1B)-C(1B)	1.398(3)
C(12A)-H(12A)	0.98(2)	N(1B)-C(4B)	1.399(3)
C(13A)-C(14A)	1.412(3)	N(2B)-C(6B)	1.390(3)
C(13A)-H(13A)	0.89(3)	N(2B)-C(9B)	1.397(3)
C(14A)-C(15A)	1.389(3)	N(3B)-C(11B)	1.368(3)
C(15A)-C(16A)	1.412(3)	N(3B)-C(14B)	1.382(3)
C(16A)-C(17A)	1.365(4)	N(4B)-C(18B)	1.367(3)
C(16A)-H(16A)	0.87(3)	N(4B)-C(15B)	1.387(3)
C(17A)-C(18A)	1.431(3)	C(1B)-C(19B)	1.399(3)
C(17A)-H(17A)	0.93(2)	C(1B)-C(2B)	1.425(3)
C(18A)-C(19A)	1.391(3)	C(2B)-C(3B)	1.350(4)
C(19A)-C(20A)	1.489(3)	C(2B)-H(2B)	0.87(2)
C(20A)-C(21A)	1.388(3)	C(3B)-C(4B)	1.418(4)
C(20A)-C(25A)	1.401(3)	C(3B)-H(3B)	0.88(2)
C(21A)-F(1A)	1.345(3)	C(4B)-C(5B)	1.387(3)
C(21A)-C(22A)	1.368(3)	C(5B)-C(6B)	1.398(3)
C(22A)-F(2A)	1.346(3)	C(5B)-C(26B)	1.494(3)
C(22A)-C(23A)	1.380(3)	C(6B)-C(7B)	1.421(4)
C(23A)-F(3A)	1.338(3)	C(7B)-C(8B)	1.349(4)
C(23A)-C(24A)	1.376(4)	C(7B)-H(7B)	0.89(2)

C(8B)-C(9B)	1.420(4)	C(38B)-Cl(1B)	1.778(10)
C(8B)-H(8B)	0.89(3)	C(38B)-Cl(2B)	1.816(10)
C(9B)-C(10B)	1.393(3)		
C(10B)-C(11B)	1.398(3)	C(38A)-Cl(2A)	1.754(4)
C(10B)-C(32B)	1.490(3)	C(38A)-Cl(1A)	1.760(4)
C(11B)-C(12B)	1.422(3)		
C(12B)-C(13B)	1.362(4)	C(38C)-Cl(2C)	1.770(9)
C(12B)-H(12B)	0.95(2)	C(38C)-Cl(1C)	1.771(9)
C(13B)-C(14B)	1.419(3)		
C(13B)-H(13B)	1.05(3)	C(38D)-Cl(1D)	1.776(9)
C(14B)-C(15B)	1.397(3)	C(38D)-Cl(2D)	1.783(9)
C(15B)-C(16B)	1.398(3)		
C(16B)-C(17B)	1.370(3)	C(38E)-Cl(2E)	1.771(9)
C(16B)-H(16B)	0.93(2)	C(38E)-Cl(1E)	1.794(9)
C(17B)-C(18B)	1.432(3)		
C(17B)-H(17B)	0.97(3)	O(1A)-Cr(1A)-N(3A)	109.55(9)
C(18B)-C(19B)	1.392(3)	O(1A)-Cr(1A)-N(1A)	104.31(9)
C(19B)-C(20B)	1.497(3)	N(3A)-Cr(1A)-N(1A)	145.53(9)
C(20B)-C(21B)	1.391(3)	O(1A)-Cr(1A)-N(4A)	108.94(8)
C(20B)-C(25B)	1.397(3)	N(3A)-Cr(1A)-N(4A)	77.75(8)
C(21B)-F(1B)	1.341(3)	N(1A)-Cr(1A)-N(4A)	85.50(8)
C(21B)-C(22B)	1.370(4)	O(1A)-Cr(1A)-N(2A)	105.20(9)
C(22B)-F(2B)	1.332(3)	N(3A)-Cr(1A)-N(2A)	85.59(8)
C(22B)-C(23B)	1.377(4)	N(1A)-Cr(1A)-N(2A)	91.77(8)
C(23B)-F(3B)	1.340(3)	N(4A)-Cr(1A)-N(2A)	145.35(9)
C(23B)-C(24B)	1.366(4)	C(4A)-N(1A)-C(1A)	106.75(19)
C(24B)-F(4B)	1.352(3)	C(4A)-N(1A)-Cr(1A)	120.98(15)
C(24B)-C(25B)	1.377(4)	C(1A)-N(1A)-Cr(1A)	125.58(15)
C(25B)-F(5B)	1.335(3)	C(6A)-N(2A)-C(9A)	107.10(19)
C(26B)-C(31B)	1.380(3)	C(6A)-N(2A)-Cr(1A)	123.89(16)
C(26B)-C(27B)	1.390(3)	C(9A)-N(2A)-Cr(1A)	127.89(15)
C(27B)-F(6B)	1.338(3)	C(11A)-N(3A)-C(14A)	108.44(19)
C(27B)-C(28B)	1.379(4)	C(11A)-N(3A)-Cr(1A)	132.91(16)
C(28B)-F(7B)	1.345(3)	C(14A)-N(3A)-Cr(1A)	117.37(16)
C(28B)-C(29B)	1.375(4)	C(18A)-N(4A)-C(15A)	108.80(19)
C(29B)-F(8B)	1.341(3)	C(18A)-N(4A)-Cr(1A)	133.60(16)
C(29B)-C(30B)	1.378(3)	C(15A)-N(4A)-Cr(1A)	117.39(16)
C(30B)-F(9B)	1.329(3)	N(1A)-C(1A)-C(19A)	124.8(2)
C(30B)-C(31B)	1.380(3)	N(1A)-C(1A)-C(2A)	108.2(2)
C(31B)-F(10B)	1.339(3)	C(19A)-C(1A)-C(2A)	127.0(2)
C(32B)-C(33B)	1.385(3)	C(3A)-C(2A)-C(1A)	108.3(2)
C(32B)-C(37B)	1.392(3)	C(3A)-C(2A)-H(2A)	125.9(14)
C(33B)-F(11B)	1.351(3)	C(1A)-C(2A)-H(2A)	125.7(14)
C(33B)-C(34B)	1.368(4)	C(2A)-C(3A)-C(4A)	107.9(2)
C(34B)-F(12B)	1.342(3)	C(2A)-C(3A)-H(3A)	127.0(14)
C(34B)-C(35B)	1.379(4)	C(4A)-C(3A)-H(3A)	125.0(14)
C(35B)-F(13B)	1.339(3)	N(1A)-C(4A)-C(5A)	123.1(2)
C(35B)-C(36B)	1.372(4)	N(1A)-C(4A)-C(3A)	108.8(2)
C(36B)-F(14B)	1.344(3)	C(5A)-C(4A)-C(3A)	128.0(2)
C(36B)-C(37B)	1.366(4)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	124.9(2)
C(37B)-F(15B)	1.339(3)	C(6A)-C(5A)-C(26A)	118.4(2)
		C(4A)-C(5A)-C(26A)	116.7(2)
		N(2A)-C(6A)-C(5A)	124.0(2)
		N(2A)-C(6A)-C(7A)	108.4(2)

C(5A)-C(6A)-C(7A)	127.7(2)	C(25A)-C(24A)-C(23A)	120.1(2)
C(8A)-C(7A)-C(6A)	108.5(2)	F(5A)-C(25A)-C(24A)	117.8(2)
C(8A)-C(7A)-H(7A)	128.0(18)	F(5A)-C(25A)-C(20A)	119.7(2)
C(6A)-C(7A)-H(7A)	123.3(18)	C(24A)-C(25A)-C(20A)	122.5(2)
C(7A)-C(8A)-C(9A)	108.0(2)	C(27A)-C(26A)-C(31A)	115.4(2)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	126.8(14)	C(27A)-C(26A)-C(5A)	121.9(2)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	125.2(14)	C(31A)-C(26A)-C(5A)	122.6(2)
N(2A)-C(9A)-C(10A)	125.0(2)	F(6A)-C(27A)-C(28A)	117.3(2)
N(2A)-C(9A)-C(8A)	108.0(2)	F(6A)-C(27A)-C(26A)	119.3(2)
C(10A)-C(9A)-C(8A)	127.0(2)	C(28A)-C(27A)-C(26A)	123.4(2)
C(11A)-C(10A)-C(9A)	122.3(2)	F(7A)-C(28A)-C(27A)	121.0(3)
C(11A)-C(10A)-C(32A)	118.7(2)	F(7A)-C(28A)-C(29A)	119.9(2)
C(9A)-C(10A)-C(32A)	118.8(2)	C(27A)-C(28A)-C(29A)	119.2(2)
N(3A)-C(11A)-C(10A)	120.3(2)	F(8A)-C(29A)-C(30A)	120.1(3)
N(3A)-C(11A)-C(12A)	107.5(2)	F(8A)-C(29A)-C(28A)	120.0(2)
C(10A)-C(11A)-C(12A)	131.8(2)	C(30A)-C(29A)-C(28A)	119.9(2)
C(13A)-C(12A)-C(11A)	108.1(2)	F(9A)-C(30A)-C(29A)	119.8(2)
C(13A)-C(12A)-H(12A)	125.3(14)	F(9A)-C(30A)-C(31A)	120.5(2)
C(11A)-C(12A)-H(12A)	126.6(14)	C(29A)-C(30A)-C(31A)	119.6(2)
C(12A)-C(13A)-C(14A)	107.5(2)	F(10A)-C(31A)-C(30A)	118.1(2)
C(12A)-C(13A)-H(13A)	127.8(18)	F(10A)-C(31A)-C(26A)	119.5(2)
C(14A)-C(13A)-H(13A)	124.7(18)	C(30A)-C(31A)-C(26A)	122.4(2)
N(3A)-C(14A)-C(15A)	111.5(2)	C(37A)-C(32A)-C(33A)	115.5(2)
N(3A)-C(14A)-C(13A)	108.4(2)	C(37A)-C(32A)-C(10A)	121.3(2)
C(15A)-C(14A)-C(13A)	140.0(2)	C(33A)-C(32A)-C(10A)	123.1(2)
N(4A)-C(15A)-C(14A)	112.4(2)	F(11A)-C(33A)-C(34A)	118.0(2)
N(4A)-C(15A)-C(16A)	108.2(2)	F(11A)-C(33A)-C(32A)	119.6(2)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	139.2(2)	C(34A)-C(33A)-C(32A)	122.4(2)
C(17A)-C(16A)-C(15A)	107.7(2)	F(12A)-C(34A)-C(33A)	120.4(2)
C(17A)-C(16A)-H(16A)	125.9(19)	F(12A)-C(34A)-C(35A)	119.3(2)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	126.3(19)	C(33A)-C(34A)-C(35A)	120.2(2)
C(16A)-C(17A)-C(18A)	107.8(2)	F(13A)-C(35A)-C(34A)	120.6(2)
C(16A)-C(17A)-H(17A)	129.5(14)	F(13A)-C(35A)-C(36A)	120.8(2)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	122.1(14)	C(34A)-C(35A)-C(36A)	118.5(2)
N(4A)-C(18A)-C(19A)	120.7(2)	F(14A)-C(36A)-C(37A)	120.0(2)
N(4A)-C(18A)-C(17A)	107.5(2)	F(14A)-C(36A)-C(35A)	120.1(2)
C(19A)-C(18A)-C(17A)	131.7(2)	C(37A)-C(36A)-C(35A)	119.9(2)
C(18A)-C(19A)-C(1A)	121.7(2)	F(15A)-C(37A)-C(36A)	117.1(2)
C(18A)-C(19A)-C(20A)	118.4(2)	F(15A)-C(37A)-C(32A)	119.5(2)
C(1A)-C(19A)-C(20A)	119.9(2)	C(36A)-C(37A)-C(32A)	123.4(2)
C(21A)-C(20A)-C(25A)	115.2(2)		
C(21A)-C(20A)-C(19A)	122.5(2)	O(1B)-Cr(1B)-N(4B)	108.49(9)
C(25A)-C(20A)-C(19A)	122.3(2)	O(1B)-Cr(1B)-N(3B)	108.60(9)
F(1A)-C(21A)-C(22A)	117.1(2)	N(4B)-Cr(1B)-N(3B)	78.11(8)
F(1A)-C(21A)-C(20A)	119.7(2)	O(1B)-Cr(1B)-N(1B)	105.85(9)
C(22A)-C(21A)-C(20A)	123.2(2)	N(4B)-Cr(1B)-N(1B)	84.64(8)
F(2A)-C(22A)-C(21A)	120.8(2)	N(3B)-Cr(1B)-N(1B)	144.84(8)
F(2A)-C(22A)-C(23A)	119.5(2)	O(1B)-Cr(1B)-N(2B)	105.86(9)
C(21A)-C(22A)-C(23A)	119.6(2)	N(4B)-Cr(1B)-N(2B)	145.03(8)
F(3A)-C(23A)-C(24A)	120.2(2)	N(3B)-Cr(1B)-N(2B)	85.00(8)
F(3A)-C(23A)-C(22A)	120.5(2)	N(1B)-Cr(1B)-N(2B)	92.30(9)
C(24A)-C(23A)-C(22A)	119.3(2)	C(1B)-N(1B)-C(4B)	106.9(2)
F(4A)-C(24A)-C(25A)	120.6(2)	C(1B)-N(1B)-Cr(1B)	127.61(16)
F(4A)-C(24A)-C(23A)	119.2(2)	C(4B)-N(1B)-Cr(1B)	122.02(17)

C(6B)-N(2B)-C(9B)	106.4(2)	C(17B)-C(16B)-C(15B)	107.5(2)
C(6B)-N(2B)-Cr(1B)	123.41(16)	C(17B)-C(16B)-H(16B)	126.7(15)
C(9B)-N(2B)-Cr(1B)	127.92(16)	C(15B)-C(16B)-H(16B)	125.6(15)
C(11B)-N(3B)-C(14B)	108.5(2)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	107.8(2)
C(11B)-N(3B)-Cr(1B)	133.61(17)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	131.0(15)
C(14B)-N(3B)-Cr(1B)	117.26(17)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.8(15)
C(18B)-N(4B)-C(15B)	108.0(2)	N(4B)-C(18B)-C(19B)	121.0(2)
C(18B)-N(4B)-Cr(1B)	133.58(16)	N(4B)-C(18B)-C(17B)	107.7(2)
C(15B)-N(4B)-Cr(1B)	117.66(16)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	131.0(2)
N(1B)-C(1B)-C(19B)	124.5(2)	C(18B)-C(19B)-C(1B)	121.4(2)
N(1B)-C(1B)-C(2B)	108.0(2)	C(18B)-C(19B)-C(20B)	118.7(2)
C(19B)-C(1B)-C(2B)	127.5(2)	C(1B)-C(19B)-C(20B)	119.9(2)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	108.4(2)	C(21B)-C(20B)-C(25B)	115.1(2)
C(3B)-C(2B)-H(2B)	126.6(16)	C(21B)-C(20B)-C(19B)	121.6(2)
C(1B)-C(2B)-H(2B)	125.0(16)	C(25B)-C(20B)-C(19B)	123.3(2)
C(2B)-C(3B)-C(4B)	108.3(2)	F(1B)-C(21B)-C(22B)	117.2(2)
C(2B)-C(3B)-H(3B)	129.4(16)	F(1B)-C(21B)-C(20B)	119.3(2)
C(4B)-C(3B)-H(3B)	122.2(16)	C(22B)-C(21B)-C(20B)	123.5(3)
C(5B)-C(4B)-N(1B)	123.9(2)	F(2B)-C(22B)-C(21B)	120.6(3)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	127.8(2)	F(2B)-C(22B)-C(23B)	119.9(2)
N(1B)-C(4B)-C(3B)	108.3(2)	C(21B)-C(22B)-C(23B)	119.4(2)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	126.0(2)	F(3B)-C(23B)-C(24B)	120.5(3)
C(4B)-C(5B)-C(26B)	117.0(2)	F(3B)-C(23B)-C(22B)	120.2(3)
C(6B)-C(5B)-C(26B)	116.8(2)	C(24B)-C(23B)-C(22B)	119.2(2)
N(2B)-C(6B)-C(5B)	123.3(2)	F(4B)-C(24B)-C(23B)	119.2(2)
N(2B)-C(6B)-C(7B)	108.9(2)	F(4B)-C(24B)-C(25B)	120.0(3)
C(5B)-C(6B)-C(7B)	127.8(2)	C(23B)-C(24B)-C(25B)	120.8(3)
C(8B)-C(7B)-C(6B)	107.8(2)	F(5B)-C(25B)-C(24B)	117.7(2)
C(8B)-C(7B)-H(7B)	126.0(16)	F(5B)-C(25B)-C(20B)	120.4(2)
C(6B)-C(7B)-H(7B)	126.2(16)	C(24B)-C(25B)-C(20B)	121.9(2)
C(7B)-C(8B)-C(9B)	108.4(2)	C(31B)-C(26B)-C(27B)	116.8(2)
C(7B)-C(8B)-H(8B)	126.7(17)	C(31B)-C(26B)-C(5B)	120.5(2)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	124.8(17)	C(27B)-C(26B)-C(5B)	122.7(2)
C(10B)-C(9B)-N(2B)	124.5(2)	F(6B)-C(27B)-C(28B)	119.0(2)
C(10B)-C(9B)-C(8B)	127.1(2)	F(6B)-C(27B)-C(26B)	119.5(2)
N(2B)-C(9B)-C(8B)	108.4(2)	C(28B)-C(27B)-C(26B)	121.5(2)
C(9B)-C(10B)-C(11B)	122.2(2)	F(7B)-C(28B)-C(29B)	119.8(2)
C(9B)-C(10B)-C(32B)	119.2(2)	F(7B)-C(28B)-C(27B)	120.4(2)
C(11B)-C(10B)-C(32B)	118.6(2)	C(29B)-C(28B)-C(27B)	119.8(2)
N(3B)-C(11B)-C(10B)	120.4(2)	F(8B)-C(29B)-C(28B)	120.0(2)
N(3B)-C(11B)-C(12B)	107.8(2)	F(8B)-C(29B)-C(30B)	119.5(2)
C(10B)-C(11B)-C(12B)	131.6(2)	C(28B)-C(29B)-C(30B)	120.5(2)
C(13B)-C(12B)-C(11B)	108.3(2)	F(9B)-C(30B)-C(29B)	120.4(2)
C(13B)-C(12B)-H(12B)	131.7(15)	F(9B)-C(30B)-C(31B)	121.1(2)
C(11B)-C(12B)-H(12B)	120.0(14)	C(29B)-C(30B)-C(31B)	118.5(2)
C(12B)-C(13B)-C(14B)	107.4(2)	F(10B)-C(31B)-C(30B)	118.4(2)
C(12B)-C(13B)-H(13B)	129.9(16)	F(10B)-C(31B)-C(26B)	118.7(2)
C(14B)-C(13B)-H(13B)	122.5(16)	C(30B)-C(31B)-C(26B)	122.9(2)
N(3B)-C(14B)-C(15B)	112.4(2)	C(33B)-C(32B)-C(37B)	115.5(2)
N(3B)-C(14B)-C(13B)	108.1(2)	C(33B)-C(32B)-C(10B)	123.1(2)
C(15B)-C(14B)-C(13B)	139.3(2)	C(37B)-C(32B)-C(10B)	121.4(2)
N(4B)-C(15B)-C(14B)	111.3(2)	F(11B)-C(33B)-C(34B)	117.3(2)
N(4B)-C(15B)-C(16B)	108.9(2)	F(11B)-C(33B)-C(32B)	119.8(2)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	139.5(2)	C(34B)-C(33B)-C(32B)	122.9(3)

F(12B)-C(34B)-C(33B)	121.1(3)		
F(12B)-C(34B)-C(35B)	119.5(2)		
C(33B)-C(34B)-C(35B)	119.4(2)	Cl(1B)-C(38B)-Cl(2B)	108.0(8)
F(13B)-C(35B)-C(36B)	120.8(3)		
F(13B)-C(35B)-C(34B)	119.5(2)	Cl(2A)-C(38A)-Cl(1A)	112.0(2)
C(36B)-C(35B)-C(34B)	119.7(2)		
F(14B)-C(36B)-C(37B)	120.3(2)	Cl(2C)-C(38C)-Cl(1C)	108.7(7)
F(14B)-C(36B)-C(35B)	120.1(2)		
C(37B)-C(36B)-C(35B)	119.6(3)	Cl(1D)-C(38D)-Cl(2D)	108.8(6)
F(15B)-C(37B)-C(36B)	118.2(2)		
F(15B)-C(37B)-C(32B)	119.0(2)	Cl(2E)-C(38E)-Cl(1E)	113.1(7)
C(36B)-C(37B)-C(32B)	122.8(2)		

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for AEM1. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cr(1A)	165(2)	212(2)	188(2)	83(2)	57(2)	32(2)
O(1A)	201(10)	287(10)	263(10)	111(8)	98(8)	43(7)
N(1A)	163(11)	216(11)	174(10)	67(9)	44(8)	34(8)
N(2A)	164(11)	210(11)	172(10)	71(9)	41(8)	18(8)
N(3A)	167(11)	211(11)	196(11)	73(9)	43(9)	20(8)
N(4A)	176(11)	199(11)	163(10)	45(9)	52(8)	25(8)
C(1A)	141(13)	239(13)	203(13)	105(11)	67(10)	63(10)
C(2A)	231(15)	233(14)	241(14)	117(12)	105(11)	80(11)
C(3A)	190(14)	224(14)	202(13)	69(11)	66(11)	56(11)
C(4A)	145(13)	218(13)	194(12)	62(11)	77(10)	43(10)
C(5A)	140(13)	240(13)	198(12)	82(11)	67(10)	28(10)
C(6A)	136(13)	219(13)	195(12)	56(11)	38(10)	26(10)
C(7A)	251(15)	256(15)	165(13)	33(12)	34(11)	3(11)
C(8A)	215(15)	302(15)	214(13)	149(12)	41(11)	41(11)
C(9A)	128(13)	270(14)	233(13)	124(11)	51(10)	22(10)
C(10A)	145(13)	235(14)	237(13)	106(11)	48(10)	26(10)
C(11A)	153(13)	235(13)	237(13)	125(11)	56(10)	23(10)
C(12A)	176(14)	189(13)	246(14)	75(11)	66(11)	16(10)
C(13A)	189(14)	229(14)	228(14)	59(12)	88(11)	11(11)
C(14A)	153(13)	241(13)	180(12)	44(11)	67(10)	13(10)
C(15A)	180(13)	224(13)	192(13)	66(11)	90(10)	26(10)
C(16A)	174(14)	267(15)	180(13)	50(12)	63(11)	41(11)
C(17A)	167(14)	300(15)	181(13)	104(12)	56(10)	53(11)
C(18A)	165(13)	245(13)	190(12)	95(11)	80(10)	53(10)
C(19A)	161(13)	249(14)	211(13)	97(11)	82(10)	66(10)
C(20A)	183(14)	181(13)	190(12)	55(10)	19(10)	27(10)
C(21A)	198(14)	262(14)	231(13)	86(11)	77(11)	71(11)
C(22A)	293(16)	241(14)	189(13)	80(11)	82(11)	31(11)
C(23A)	287(16)	172(13)	197(13)	81(11)	-8(11)	30(11)
C(24A)	171(14)	211(13)	243(14)	40(11)	19(11)	37(10)
C(25A)	196(14)	222(13)	182(12)	57(11)	53(10)	6(10)
C(26A)	219(14)	212(13)	145(12)	76(10)	50(10)	7(10)
C(27A)	189(14)	277(14)	193(13)	108(11)	33(11)	34(11)
C(28A)	349(17)	301(15)	250(14)	102(12)	147(13)	109(12)
C(29A)	419(19)	264(15)	182(13)	14(12)	98(13)	-5(13)
C(30A)	250(16)	301(15)	176(13)	124(12)	-2(11)	-50(12)
C(31A)	215(14)	266(14)	242(14)	132(12)	84(11)	46(11)
C(32A)	213(14)	215(13)	195(13)	70(11)	63(10)	41(10)
C(33A)	199(14)	272(14)	272(14)	113(12)	63(11)	3(11)
C(34A)	209(15)	338(15)	222(13)	131(12)	21(11)	89(12)
C(35A)	282(15)	249(14)	202(13)	133(11)	87(11)	83(11)
C(36A)	215(14)	213(13)	209(13)	70(11)	82(11)	7(10)
C(37A)	196(14)	216(13)	171(12)	54(11)	34(10)	54(10)
F(1A)	367(10)	425(9)	352(9)	216(8)	221(7)	217(8)
F(2A)	435(11)	400(9)	289(8)	206(7)	188(7)	119(8)
F(3A)	436(11)	296(9)	289(9)	168(7)	81(7)	145(7)
F(4A)	239(9)	311(8)	340(9)	113(7)	81(7)	126(7)

F(5A)	248(9)	316(8)	241(8)	116(7)	118(6)	79(6)
F(6A)	224(9)	401(9)	303(8)	117(7)	89(7)	89(7)
F(7A)	505(12)	435(10)	336(9)	85(8)	214(8)	233(8)
F(8A)	618(13)	355(10)	258(9)	-44(8)	95(8)	0(8)
F(9A)	301(10)	406(9)	250(8)	109(7)	-3(7)	-90(7)
F(10A)	206(9)	339(9)	325(9)	117(7)	67(7)	53(7)
F(11A)	180(9)	446(10)	454(10)	254(8)	35(7)	-14(7)
F(12A)	209(9)	511(10)	405(10)	282(8)	23(7)	90(7)
F(13A)	343(10)	341(9)	333(9)	216(7)	114(7)	103(7)
F(14A)	268(9)	312(9)	366(9)	179(7)	91(7)	-19(7)
F(15A)	163(8)	320(8)	294(8)	162(7)	28(6)	27(6)
Cr(1B)	154(2)	224(2)	179(2)	78(2)	42(2)	16(2)
O(1B)	201(10)	274(10)	253(9)	-94(8)	89(8)	44(7)
N(1B)	193(12)	222(11)	191(11)	66(9)	53(9)	1(9)
N(2B)	179(11)	219(11)	170(10)	71(9)	39(8)	-4(8)
N(3B)	159(11)	227(11)	190(11)	65(9)	40(9)	-5(8)
N(4B)	174(11)	217(11)	175(10)	48(9)	44(8)	9(8)
C(1B)	179(14)	255(14)	177(12)	83(11)	73(10)	32(10)
C(2B)	220(15)	297(15)	175(13)	90(12)	41(11)	58(11)
C(3B)	217(15)	242(15)	192(13)	28(12)	53(11)	-18(11)
C(4B)	169(13)	257(14)	189(13)	47(11)	73(10)	2(10)
C(5B)	166(13)	218(13)	207(13)	43(11)	73(10)	4(10)
C(6B)	173(14)	239(14)	233(13)	83(11)	70(11)	20(10)
C(7B)	264(16)	225(15)	273(15)	75(12)	74(12)	-10(12)
C(8B)	289(16)	287(15)	280(15)	167(13)	44(12)	35(12)
C(9B)	188(14)	304(15)	244(14)	117(12)	51(11)	7(11)
C(10B)	194(14)	287(14)	211(13)	118(11)	59(11)	30(11)
C(11B)	149(13)	281(14)	195(13)	100(11)	49(10)	32(10)
C(12B)	149(13)	329(15)	202(13)	102(12)	47(11)	31(11)
C(13B)	130(13)	305(15)	224(13)	85(12)	40(10)	9(11)
C(14B)	166(13)	221(13)	202(13)	55(11)	85(10)	8(10)
C(15B)	141(13)	258(14)	178(12)	38(11)	60(10)	-3(10)
C(16B)	184(14)	197(13)	206(13)	49(11)	88(11)	19(10)
C(17B)	197(14)	236(14)	233(13)	91(12)	110(11)	50(11)
C(18B)	153(13)	249(13)	205(13)	103(11)	84(10)	60(10)
C(19B)	157(13)	257(14)	188(13)	68(11)	76(10)	52(10)
C(20B)	203(14)	215(13)	161(12)	34(11)	36(10)	47(10)
C(21B)	215(15)	293(15)	213(13)	69(12)	45(11)	28(11)
C(22B)	413(19)	264(15)	228(14)	97(12)	95(13)	-7(12)
C(23B)	400(18)	272(15)	219(14)	118(12)	23(12)	110(13)
C(24B)	243(16)	344(16)	220(14)	47(12)	26(11)	128(12)
C(25B)	231(15)	293(14)	191(13)	53(11)	87(11)	36(11)
C(26B)	218(14)	220(13)	168(12)	81(11)	57(10)	26(10)
C(27B)	202(14)	283(14)	259(14)	117(12)	106(11)	66(11)
C(28B)	375(17)	221(14)	255(14)	81(12)	165(12)	118(12)
C(29B)	336(17)	171(13)	168(13)	34(11)	67(11)	-14(11)
C(30B)	179(14)	251(14)	226(13)	130(11)	57(11)	17(10)
C(31B)	223(14)	195(13)	186(12)	70(11)	85(10)	51(10)
C(32B)	228(14)	231(14)	194(13)	82(11)	43(11)	15(11)
C(33B)	213(15)	312(15)	301(15)	125(12)	103(12)	63(11)
C(34B)	416(18)	315(15)	326(15)	202(13)	251(13)	172(13)
C(35B)	399(18)	325(16)	241(14)	160(13)	111(13)	182(13)
C(36B)	212(15)	288(15)	310(15)	112(12)	76(12)	82(11)

C(37B)	234(15)	268(14)	239(14)	90(12)	82(11)	8(11)
F(1B)	228(9)	491(10)	323(9)	188(8)	80(7)	-15(7)
F(2B)	522(12)	481(11)	402(10)	266(9)	97(9)	-51(9)
F(3B)	598(13)	419(10)	352(10)	227(8)	31(8)	190(9)
F(4B)	261(10)	560(11)	317(9)	117(8)	18(7)	176(8)
F(5B)	186(8)	466(10)	274(8)	129(7)	77(6)	37(7)
F(6B)	227(9)	378(9)	438(10)	136(8)	174(7)	102(7)
F(7B)	462(11)	300(9)	439(10)	51(8)	260(8)	133(8)
F(8B)	406(10)	231(8)	276(8)	18(7)	80(7)	-49(7)
F(9B)	186(8)	273(8)	335(9)	110(7)	45(6)	-26(6)
F(10B)	219(8)	245(8)	285(8)	39(7)	109(6)	30(6)
F(11B)	245(9)	529(11)	505(10)	316(9)	173(8)	123(8)
F(12B)	533(12)	540(11)	527(11)	391(9)	376(9)	276(9)
F(13B)	510(12)	601(11)	377(10)	356(9)	192(8)	328(9)
F(14B)	243(10)	564(11)	496(11)	302(9)	71(8)	139(8)
F(15B)	254(9)	476(10)	444(10)	285(8)	155(7)	44(7)
C(38A)	370(20)	690(30)	640(30)	320(20)	220(20)	80(20)
Cl(1A)	380(6)	562(6)	370(5)	19(4)	156(4)	113(4)
Cl(2A)	313(6)	957(10)	415(6)	-58(7)	122(4)	114(6)
C(38C)	490(60)	400(60)	430(60)	90(50)	110(40)	-40(40)
Cl(1C)	315(19)	510(30)	450(20)	60(20)	68(15)	-152(18)
Cl(2C)	328(14)	950(30)	330(13)	41(13)	63(10)	-140(13)
C(38D)	470(60)	630(70)	540(70)	330(50)	310(50)	110(50)
Cl(1D)	420(30)	640(40)	730(50)	250(30)	300(30)	220(20)
Cl(2D)	418(14)	980(30)	580(15)	502(16)	1(10)	-183(14)
C(38E)	570(80)	550(80)	520(70)	130(60)	210(60)	40(60)
Cl(1E)	830(40)	620(30)	1240(40)	450(30)	400(30)	350(30)
Cl(2E)	870(50)	990(60)	690(50)	270(40)	460(40)	170(40)

Table 6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for AEM1.

	x	y	z	U_{iso}
H(2A)	3247(17)	706(16)	3491(14)	15(6)
H(3A)	2389(17)	441(16)	1917(15)	15(6)
H(7A)	1817(19)	2818(17)	223(16)	21(7)
H(8A)	1809(17)	4394(15)	604(14)	10(6)
H(12A)	2892(18)	7074(16)	3876(15)	18(6)
H(13A)	3670(20)	6832(18)	5284(17)	29(8)
H(16A)	4690(20)	5423(19)	6359(18)	40(9)
H(17A)	4954(18)	3867(15)	6298(15)	13(6)
H(2B)	5600(19)	3037(16)	1169(16)	19(7)
H(3B)	5532(19)	1504(17)	1191(15)	17(7)
H(7B)	7221(18)	55(17)	3616(15)	17(7)
H(8B)	8421(19)	686(17)	5085(16)	23(7)
H(12B)	10204(18)	4130(15)	7131(15)	18(6)
H(13B)	10070(20)	5657(19)	6765(18)	42(8)
H(16B)	8848(18)	6508(17)	5254(16)	21(7)
H(17B)	7577(19)	6258(17)	3723(16)	25(7)