

Table 43: Continuation of Bond Angles (°) for [(THF)_xNa][(N₂)Mo(N[Ad]Ar)₃] (18).

N(3)-C(37)-C(310)	112.6(5)
N(3)-C(37)-C(38)	112.3(6)
C(310)-C(37)-C(38)	110.2(6)
N(3)-C(37)-C(39)	106.9(5)
C(310)-C(37)-C(39)	107.5(6)
C(38)-C(37)-C(39)	106.9(5)
C(311)-C(38)-C(37)	110.1(7)
C(313)-C(39)-C(37)	112.1(6)
C(115)-C(110)-C(17)	113.1(6)
C(18)-C(111)-C(112)	109.0(6)
C(18)-C(111)-C(20)	108.0(6)
C(112)-C(111)-C(20)	109.4(6)
C(113)-C(112)-C(111)	109.7(6)
C(114)-C(113)-C(112)	110.4(7)
C(114)-C(113)-C(19)	109.8(6)
C(112)-C(113)-C(19)	108.4(6)
C(113)-C(114)-C(115)	109.2(6)
C(110)-C(115)-C(114)	110.0(7)
C(110)-C(115)-C(20)	108.5(6)
C(114)-C(115)-C(20)	109.3(6)
C(215)-C(210)-C(27)	112.3(5)
C(28)-C(211)-C(212)	109.7(6)
C(28)-C(211)-C(216)	109.2(6)
C(212)-C(211)-C(216)	109.5(7)
C(213)-C(212)-C(211)	109.1(6)
C(212)-C(213)-C(29)	110.3(7)
C(212)-C(213)-C(214)	110.4(6)
C(29)-C(213)-C(214)	109.4(6)
C(213)-C(214)-C(215)	108.6(7)
C(210)-C(215)-C(216)	111.0(7)
C(210)-C(215)-C(214)	109.2(6)
C(216)-C(215)-C(214)	108.5(6)
C(215)-C(216)-C(211)	108.4(6)
C(37)-C(310)-C(315)	110.2(6)
C(38)-C(311)-C(312)	111.9(7)

Table 44: Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for the structure of $[(\text{THF})_x\text{Na}][(\text{N}_2)\text{Mo}(\text{N}[\text{Ad}]\text{Ar})_3]$ (18). $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
Mo	3345(1)	3398(1)	6172(1)	29(1)
Na	3415(2)	3294(2)	2706(3)	104(1)
N(1)	4079(2)	3754(2)	6382(4)	35(2)
N(2)	2984(2)	3779(2)	6236(4)	34(2)
N(3)	2978(2)	2655(2)	6434(4)	38(2)
N(4)	3353(2)	3357(2)	4952(5)	35(2)
N(5)	3362(2)	3330(2)	4186(6)	46(2)
C(11)	4220(3)	4027(3)	7205(5)	43(2)
C(12)	4243(3)	4489(3)	7251(6)	52(2)
C(13)	4384(3)	4758(4)	8058(6)	61(3)
C(14)	4494(3)	4551(5)	8788(7)	86(3)
C(15)	4474(4)	4107(4)	8761(7)	85(3)
C(16)	4328(3)	3839(3)	7958(6)	64(3)
C(17)	4488(2)	3834(2)	5774(5)	36(2)
C(18)	4569(2)	4216(2)	5052(5)	35(2)
C(19)	4990(3)	4027(3)	6257(6)	50(2)
C(20)	4827(3)	3792(3)	3944(6)	54(2)
C(21)	2726(3)	3696(3)	7061(5)	39(2)
C(22)	2245(3)	3287(3)	7189(6)	49(2)
C(23)	1994(3)	3175(4)	7979(7)	73(3)
C(24)	2227(4)	3512(4)	8704(7)	78(3)
C(25)	2697(4)	3928(4)	8613(6)	69(3)
C(26)	2946(3)	4018(3)	7790(6)	57(2)
C(27)	2864(2)	4045(2)	5561(5)	33(2)
C(28)	2685(3)	4387(3)	5924(6)	51(2)
C(29)	2469(2)	3692(2)	4884(5)	39(2)
C(31)	3150(3)	2622(3)	7279(6)	44(2)
C(32)	3431(3)	2384(3)	7469(6)	53(2)
C(33)	3598(4)	2370(4)	8297(6)	65(3)
C(34)	3540(4)	2635(4)	8983(7)	86(3)
C(35)	3275(4)	2886(4)	8845(7)	78(3)
C(36)	3091(3)	2877(3)	8007(6)	57(2)
C(37)	2703(2)	2217(2)	5848(5)	40(2)
C(38)	2388(3)	1736(3)	6385(6)	53(2)
C(39)	2334(2)	2310(3)	5286(5)	39(2)
C(110)	4372(2)	3348(2)	5306(5)	31(2)
C(111)	4978(3)	4296(3)	4389(5)	46(2)
C(112)	5468(3)	4478(3)	4903(6)	54(2)
C(113)	5403(3)	4094(3)	5604(6)	50(2)
C(114)	5263(3)	3602(3)	5162(6)	53(2)
C(115)	4770(3)	3410(3)	4665(5)	48(2)

Table 45: Continuation of Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for the structure of $[(\text{THF})_x\text{Na}][(\text{N}_2)\text{Mo}(\text{N}[\text{Ad}]\text{Ar})_3]$ (**18**). $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(131)	4404(4)	5259(4)	8096(7)	99(4)
C(151)	4626(5)	3925(4)	9571(8)	135(5)
C(210)	3344(2)	4385(2)	5010(5)	31(2)
C(211)	2586(3)	4666(3)	5205(6)	53(2)
C(212)	2194(3)	4300(3)	4564(6)	51(2)
C(213)	2375(3)	3978(3)	4157(5)	45(2)
C(214)	2852(3)	4293(3)	3635(5)	54(2)
C(215)	3255(3)	4667(3)	4292(5)	44(2)
C(216)	3073(3)	4997(3)	4686(6)	57(2)
C(231)	1484(3)	2734(4)	8097(8)	102(4)
C(251)	2956(5)	4295(4)	9390(7)	112(4)
C(310)	3040(3)	2149(3)	5197(5)	46(2)
C(311)	2075(3)	1309(3)	5754(6)	62(3)
C(312)	1724(3)	1408(3)	5198(6)	64(3)
C(313)	2034(3)	1892(3)	4656(6)	59(3)
C(314)	2380(3)	1818(3)	4007(5)	53(2)
C(315)	2727(3)	1704(3)	4566(6)	52(2)
C(316)	2425(3)	1227(3)	5129(7)	66(3)
C(331)	3896(5)	2109(5)	8451(7)	118(5)
C(351)	3222(5)	3207(5)	9545(8)	132(5)
O(2)	3814(4)	4064(3)	2120(6)	125(3)
C(21S)	3633(7)	4209(6)	1406(10)	197(10)
C(22S)	3914(8)	4709(6)	1315(8)	177(8)
C(23S)	4152(5)	4916(5)	2107(10)	134(5)
C(24S)	4165(5)	4508(7)	2601(9)	143(6)
O(1)	2670(3)	2915(4)	2117(7)	144(4)
C(11S)	2444(7)	2486(7)	1669(12)	164(7)
C(12S)	1961(8)	2390(10)	1553(18)	337(19)
C(13S)	1836(6)	2598(9)	2261(14)	215(10)
C(14S)	2304(8)	2979(8)	2537(16)	276(16)
O(3)	3800(4)	2891(4)	2268(7)	123(3)
C(31S)	4125(10)	3070(8)	1574(13)	245(13)
C(32S)	4373(7)	2823(7)	1528(11)	189(8)
C(33S)	4331(7)	2580(6)	2361(10)	135(5)
C(34S)	3889(6)	2550(4)	2762(9)	133(5)

Table 46: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[(\text{THF})_x\text{Na}][(\text{N}_2)\text{Mo}(\text{N}[\text{Ad}]\text{Ar})_3]$ (18).

atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Mo	25(1)	24(1)	39(1)	2(1)	-1(1)	12(1)
Na	130(4)	129(4)	59(3)	-1(3)	7(2)	69(3)
N(1)	21(3)	37(4)	47(4)	3(3)	2(3)	15(3)
N(2)	26(3)	43(4)	32(4)	6(3)	-2(3)	16(3)
N(3)	41(4)	48(4)	41(4)	3(3)	2(3)	34(3)
N(4)	17(3)	32(4)	54(5)	4(4)	7(3)	1(3)
N(5)	34(4)	24(4)	78(6)	0(4)	14(4)	12(3)
C(11)	35(5)	47(6)	41(6)	8(4)	-1(4)	15(4)
C(12)	36(5)	45(6)	55(6)	-7(5)	12(4)	6(4)
C(13)	46(5)	85(7)	37(6)	-14(6)	4(4)	21(5)
C(14)	62(7)	104(10)	44(7)	-14(6)	3(5)	7(6)
C(15)	114(9)	77(8)	68(8)	6(7)	-1(6)	51(7)
C(16)	60(6)	67(6)	50(6)	1(6)	-2(5)	20(5)
C(17)	28(4)	23(4)	56(5)	3(4)	-1(4)	11(3)
C(18)	20(4)	30(4)	49(5)	-3(4)	0(4)	8(3)
C(19)	43(5)	30(4)	70(6)	4(4)	-4(5)	12(4)
C(20)	44(5)	62(6)	64(6)	1(5)	21(4)	32(5)
C(21)	36(5)	32(5)	56(6)	9(4)	3(4)	22(4)
C(22)	34(5)	54(6)	61(6)	13(5)	5(5)	23(5)
C(23)	54(6)	96(8)	75(8)	27(7)	26(6)	43(6)
C(24)	66(7)	112(9)	63(8)	27(7)	29(6)	49(7)
C(25)	82(8)	110(8)	39(6)	0(6)	4(5)	65(7)
C(26)	50(5)	64(6)	53(6)	-18(5)	0(5)	25(5)
C(27)	24(4)	29(4)	41(5)	1(4)	9(4)	9(4)
C(28)	32(5)	50(5)	71(6)	-18(5)	-11(4)	19(4)
C(29)	22(4)	34(4)	53(5)	-4(4)	2(4)	7(4)
C(31)	45(5)	41(5)	47(6)	7(4)	-2(4)	21(4)
C(32)	59(6)	59(6)	48(6)	-15(4)	-15(5)	33(5)
C(33)	94(7)	90(7)	36(6)	7(5)	-12(5)	64(6)
C(34)	83(8)	104(9)	65(8)	14(7)	-6(6)	41(7)
C(35)	85(7)	90(8)	70(8)	12(6)	-5(6)	51(7)
C(36)	68(6)	71(6)	47(6)	19(5)	11(5)	46(5)
C(37)	18(4)	30(4)	75(6)	-17(4)	-9(4)	13(4)
C(38)	33(5)	29(5)	85(7)	20(5)	1(4)	7(4)
C(39)	29(4)	45(5)	43(5)	-9(4)	-3(4)	18(4)
C(110)	27(4)	14(4)	49(5)	3(3)	-5(4)	1(3)
C(111)	37(5)	35(5)	63(6)	4(4)	11(4)	16(4)
C(112)	26(5)	41(5)	88(7)	-11(5)	5(4)	12(4)
C(113)	20(4)	57(6)	73(6)	5(5)	1(4)	18(4)
C(114)	45(5)	47(5)	75(7)	7(5)	7(5)	29(4)
C(115)	45(5)	36(5)	69(6)	-5(4)	-1(5)	25(4)
C(131)	109(9)	65(7)	103(9)	-45(6)	4(7)	30(6)

45

Table 47: Continuation of Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[(\text{THF})_x\text{Na}][(\text{N}_2)\text{Mo}(\text{N}[\text{Ad}]\text{Ar})_3]$ (18).

atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(151)	181(14)	101(10)	94(10)	26(8)	-32(9)	50(10)
C(210)	14(4)	35(4)	40(5)	-1(4)	-1(3)	1(3)
C(211)	48(5)	37(5)	85(7)	4(5)	4(5)	30(5)
C(212)	28(4)	37(5)	86(7)	7(5)	-7(4)	16(4)
C(213)	42(5)	32(4)	61(6)	12(4)	-8(4)	19(4)
C(214)	46(5)	53(5)	56(6)	20(5)	1(5)	21(5)
C(215)	31(5)	33(4)	68(6)	1(4)	8(4)	18(4)
C(216)	55(6)	46(5)	68(6)	16(5)	-3(5)	25(5)
C(231)	39(6)	105(8)	133(10)	65(8)	46(6)	13(6)
C(251)	152(11)	138(11)	51(7)	-28(7)	4(7)	77(9)
C(310)	32(4)	41(5)	71(6)	-4(4)	-3(4)	22(4)
C(311)	43(5)	25(5)	103(8)	8(5)	3(5)	6(4)
C(312)	47(5)	43(5)	99(8)	-17(5)	-3(5)	21(5)
C(313)	30(5)	56(6)	95(7)	-6(5)	1(5)	24(5)
C(314)	46(5)	41(5)	63(6)	-24(4)	-8(4)	16(4)
C(315)	35(5)	41(5)	86(7)	-17(5)	1(5)	23(4)
C(316)	50(5)	40(5)	118(8)	-3(5)	3(5)	30(5)
C(331)	177(13)	143(11)	87(9)	-15(8)	-50(9)	120(11)
C(351)	150(12)	183(14)	96(9)	-70(9)	-42(9)	109(11)
O(2)	162(9)	150(8)	91(7)	7(6)	-4(6)	100(8)
C(21S)	280(23)	112(13)	101(13)	-1(10)	-104(14)	25(14)
C(22S)	275(22)	177(17)	57(10)	-40(11)	-82(12)	97(17)
C(23S)	99(10)	156(14)	109(13)	5(11)	-16(9)	36(10)
C(24S)	73(9)	241(19)	91(11)	-47(13)	-48(8)	61(11)
O(1)	116(7)	135(8)	165(9)	-74(7)	-31(7)	52(7)
C(11S)	150(16)	195(20)	162(17)	1(15)	-35(13)	97(15)
C(12S)	217(30)	371(42)	289(37)	-138(31)	-95(28)	48(29)
C(13S)	194(21)	302(28)	165(19)	-95(18)	30(16)	136(21)
C(14S)	191(19)	250(23)	463(39)	-269(26)	-177(24)	168(19)
O(3)	159(8)	133(8)	88(6)	-2(6)	-8(6)	81(7)
C(31S)	461(41)	258(25)	166(20)	76(18)	66(23)	291(30)
C(32S)	300(25)	183(18)	149(17)	61(14)	46(15)	168(19)
C(33S)	212(18)	132(12)	115(13)	16(10)	-4(11)	127(13)
C(34S)	169(14)	64(8)	121(12)	49(8)	7(11)	25(9)