Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry

Inorg. Chem., 1997, 36(19), 4216-4217, DOI:10.1021/ic970198x

Table 1. Spectroscopic and analytical data for all new compounds.

1. $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Cl_2]$

^{1}H NMR [CD_3CN, 300.005 MHz, $CD_2\underline{H}CN$ as internal standard (δ = 1.94 ppm)]:
δ/ppm 1.0-2.7 (m, 18 H, B-$\underline{H}$)
3.03 (br s, 4 H, C-$\underline{H}$)

^{13}C NMR [CD_3CN, 75.436 MHz, $\underline{C}D_3CN$ as internal standard (δ = 1.39 ppm, septet)]:
δ/ppm 52.2 (d, $^1J_{C\text{-}H}$ = 171 Hz, 4 $\underline{C}$-H)

^{11}B NMR [CD_3CN, 96.25 MHz, $\underline{B}F_3{\cdot}Et_2O$ in CD_3CN as external standard (δ = 0 ppm)]:
δ/ppm 4.9 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 103 Hz, 2 B)
-2.9 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 103 Hz, 4 B)
-3.8 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 132 Hz, 4 B)
-12.5 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 151 Hz, 6 B)
-24.3 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 137 Hz, 2 B)

IR data (cm^{-1}), KBr pellet:
2981 (m), 2943 (m), 2885 (m), 2836 (m), 2519 (s, br), 1476 (m), 1457 (m), 1368 (m), 1244 (m), 1192 (m), 1118 (s), 1077 (s), 1041 (s), 1028 (s), 889 (w), 868 (s), 482 (vs).

Analysis Calculated for $C_{36}H_{86}B_{18}Cl_2Li_2O_8Th$: C, 37.3; H, 7.5. Found: C, 37.2; H, 7.4.

2. $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Br_2]$

^{1}H NMR [CD_3CN, 300.005 MHz, $CD_2\underline{H}CN$ as internal standard (δ = 1.94 ppm)]:
δ/ppm 1.0-2.9 (m, 18 H, B-$\underline{H}$)
3.21 (br s, 4 H, C-$\underline{H}$)

^{13}C NMR [CD_3CN, 75.436 MHz, $\underline{C}D_3CN$ as internal standard (δ = 1.39 ppm, septet)]:
δ/ppm 51.9 (d, $^1J_{C\text{-}H}$ = 176 Hz, 4 $\underline{C}$-H)

^{11}B NMR [CD_3CN, 96.25 MHz, $\underline{B}F_3{\cdot}Et_2O$ in CD_3CN as external standard (δ = 0 ppm)]:
δ/ppm 5.2 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 103 Hz, 2 B)
-2.5 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 107 Hz, 4 B)
-3.7 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 137 Hz, 4 B)
-12.6 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 151 Hz, 6 B)
-23.5 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 142 Hz, 2 B)

IR data (cm^{-1}), KBr pellet:
2980 (s), 2880 (s), 2568 (s), 2540 (s, br), 2423 (m), 1490 (w), 1459 (m), 1457 (m), 1448 (w), 1178 (m), 1044 (s), 965 (m), 915 (m), 891 (s), 675 (w), 668 (w), 627 (w), 494 (s).

Analysis Calculated for $C_{36}H_{86}B_{18}Br_2Li_2O_8Th$: C, 34.7; H, 7.0. Found: C, 34.7; H, 7.1.

3. $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2I_2]$

^1H NMR [CD_3CN, 300.005 MHz, $CD_2\underline{H}CN$ as internal standard (δ = 1.94 ppm)]:
δ/ppm 0.9-2.9 (m, 18 H, B-$\underline{H}$)
3.17 (br s, 4 H, C-$\underline{H}$)

$^{13}C\{^1H\}$ NMR [CD_3CN, 75.436 MHz, $\underline{C}D_3CN$ as internal standard (δ = 1.39 ppm, septet)]:
δ/ppm 52.1 (m, 4 $\underline{C}$-H)

$^{11}B\{^1H\}$ NMR [CH_3CN, 96.25 MHz, $\underline{B}F_3{\cdot}Et_2O$ in CD_3CN as external standard (δ = 0 ppm)]:
δ/ppm 5.4 (s, 2 B)
-2.2 (s, 4 B)
-3.5 (s, 4 B)
-12.2 (s, 6 B)
-23.1 (s, 2 B)

IR data (cm^{-1}), KBr pellet:
2980 (s), 2880 (s), 2568 (s), 2540 (s, br), 2423 (m), 1490 (w), 1457 (w), 1448 (w), 1178 (m), 1045 (s), 1010 (w), 965 (m), 915 (m), 891 (s), 676 (w), 627 (w), 494 (s).

Analysis Calculated for $C_{36}H_{86}B_{18}I_2Li_2O_8Th$: C, 32.2; H, 6.5. Found: C, 32.7; H, 6.4.

4. $[Li(THF)_4][Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})Br_3(THF)]$

^1H NMR [CD_3CN, 300.005 MHz, $CD_2\underline{H}CN$ as internal standard (δ = 1.94 ppm)]:
δ/ppm 0.4-3.0 (m, 9 H, B-$\underline{H}$)
3.25 (br s, 2 H, C-$\underline{H}$)

^{13}C NMR [CD_3CN, 75.436 MHz, $\underline{C}D_3CN$ as internal standard (δ = 1.39 ppm, septet)]:
δ/ppm 53.0 (d, $^1J_{C\text{-}H}$ = 162 Hz, 2 $\underline{C}$-H)

^{11}B NMR [CD_3CN, 96.25 MHz, $\underline{B}F_3{\cdot}Et_2O$ in CD_3CN as external standard (δ = 0 ppm)]:
δ/ppm 8.4 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 107 Hz, 1 B)
-3.0 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 107 Hz, 4 B)
-12.1 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 132 Hz, 3 B)
-22.2 (d, $^1J_{B\text{-}H}$ = 137 Hz, 1 B)

IR data (cm^{-1}), KBr pellet:
2981 (s), 2882 (s), 2536 (s, br), 1457 (m), 1448 (m), 1344 (w), 1294 (w), 1248 (w), 1177 (m), 1090 (w), 1043 (s), 1000 (m), 966 (m), 916 (m), 888 (s), 844 (m), 673 (m), 668 (m), 628 (w), 566 (w), 498 (vs).

Analysis Calculated for $C_{22}H_{51}B_9Br_3LiO_5Th$: C, 27.2; H, 5.3. Found: C, 27.1; H, 5.4.

Table 2.1. Crystal data and structure refinement for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Br_2]$.

Empirical formula	$C_{36}H_{86}B_{18}Br_2Li_2O_8Th$	
Formula weight	1247.37	
Temperature	183 K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	monoclinic	
Space group	*Cc* (No. 9)	
Unit cell dimensions	a = 26.303(2) Å	α = 90°
	b = 11.143(2) Å	β = 103.263(7)°
	c = 20.054(2) Å	γ = 90°
Volume	5720.9(13) $Å^3$	
Z	4	
Density (calculated)	1.448 Mg/m^3	
Absorption coefficient	4.045 mm^{-1}	
absorption correction	semi-empirical	
min./max. transmission	0.794/0.960	
F(000)	2488	
Crystal size	0.21 x 0.29 x 0.33 mm	
θ range for data collection	2.75 to 25.00°	
Index ranges	$-1 \le h \le 31$, $-1 \le k \le 13$, $-23 \le l \le 23$	
Reflections collected	5952	
Independent reflections	5341 (R_{int} = 0.0648)	
Refinement method	full-matrix least-squares on F^2	
Data/restraints/parameters	5341/0/603	
Goodness-of-fit on F^2	1.028	
Final R indices*	$R1 = 0.0398$, $R2_w = 0.0766$ [$4589 F_o > 4\sigma(F_o)$]	
R indices (all data)	$R1 = 0.0590$, $R2_w = 0.0831$	
Absolute structure parameter	0.38(2)	
Largest diff. peak and hole	0.752 and -0.820 $eÅ^{-3}$	

* $R1 = \Sigma\{|F_o| - |F_c|\}/\Sigma|F_o|$; $R2_w = \{\Sigma[w(F_o^2 - F_c^2)^2]/\Sigma[w(F_o^2)^2]\}^{1/2}$. The parameter w = $1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0337 \times P)^2 + 1.7851 \times P]$.

Table 2.2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5-C_2B_9H_{11})_2Br_2]$. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Th	10000	7371(1)	7500	29(1)
Br(1)	10101(1)	7884(1)	6132(1)	56(1)
Br(2)	9941(1)	4894(1)	7111(1)	57(1)
O(1)	11554(4)	7746(9)	2356(6)	65(3)
O(2)	11606(4)	9243(9)	1097(5)	62(3)
O(3)	11448(5)	6311(9)	1040(7)	80(4)
O(4)	10558(4)	7940(15)	1141(6)	97(5)
O(5)	8516(4)	7204(9)	3032(5)	59(3)
O(6)	8548(4)	8843(9)	4404(6)	67(3)
O(7)	8647(5)	6111(9)	4446(5)	80(4)
O(8)	9571(4)	7521(7)	4130(6)	55(3)
C(1)	8926(5)	6973(13)	7026(6)	32(3)
C(2)	9034(5)	8294(11)	6793(6)	37(3)
B(3)	9275(6)	9126(12)	7459(7)	35(3)
B(4)	9281(5)	8247(11)	8197(6)	29(3)
B(5)	9083(5)	6867(11)	7879(7)	33(3)
B(6)	8621(6)	9303(16)	7016(7)	51(4)
B(7)	8763(5)	9278(12)	7911(6)	32(3)
B(8)	8632(5)	7796(10)	8170(7)	33(3)
B(9)	8402(6)	6933(15)	7414(9)	51(4)
B(10)	8392(6)	7891(18)	6704(8)	49(5)
B(11)	8219(6)	8479(13)	7434(8)	45(4)
C(12)	10967(5)	6370(11)	8119(7)	43(3)
C(13)	11102(4)	7343(11)	7641(7)	41(3)
B(14)	10911(6)	8701(14)	7836(8)	36(3)
B(15)	10674(5)	8504(12)	8560(7)	34(3)
B(16)	10697(6)	6940(12)	8718(7)	40(3)
B(17)	11577(6)	8301(14)	8023(9)	42(4)
B(18)	11318(5)	8997(14)	8648(8)	44(4)
B(19)	11184(6)	7896(14)	9227(8)	50(4)
B(20)	11368(7)	6488(13)	8929(9)	58(5)
B(21)	11619(7)	6733(16)	8212(9)	57(5)
B(22)	11747(6)	7781(15)	8882(8)	57(4)
Li(1)	11328(13)	7799(29)	1421(20)	81(10)
Li(2)	8815(10)	7515(23)	3971(16)	58(7)
C(21)	11979(7)	8395(16)	2748(8)	80(5)

C(22)	12124(7)	7832(18)	3424(9)	87(6)
C(23)	11711(9)	7005(23)	3453(12)	120(9)
C(24)	11406(11)	6927(30)	2800(13)	219(21)
C(25)	12079(6)	9386(18)	847(9)	75(6)
C(26)	12012(8)	10496(16)	425(9)	76(6)
C(27)	11480(11)	10926(19)	419(13)	145(12)
C(28)	11319(9)	10320(18)	948(11)	116(8)
C(29)	11927(7)	5915(15)	875(9)	75(5)
C(30)	11891(12)	4604(18)	861(16)	155(11)
C(31)	11457(17)	4265(27)	1054(20)	255(26)
C(32)	11136(17)	5304(24)	997(27)	406(43)
C(33)	10214(6)	8316(13)	1544(8)	63(4)
C(34)	9679(7)	8234(26)	1097(12)	103(8)
C(35)	9740(8)	7735(21)	475(11)	119(8)
C(36)	10223(9)	7741(36)	466(14)	251(27)
C(37)	8800(7)	7111(17)	2514(8)	75(5)
C(38)	8383(9)	6908(20)	1869(9)	95(7)
C(39)	7891(8)	7106(26)	2045(12)	139(10)
C(40)	7984(7)	7321(26)	2727(10)	143(12)
C(41)	8015(8)	9142(22)	4235(14)	130(12)
C(42)	7927(8)	10051(23)	4690(13)	129(9)
C(43)	8436(6)	10522(15)	5010(9)	71(5)
C(44)	8825(5)	9785(12)	4787(7)	54(4)
C(45)	8713(11)	6115(18)	5169(8)	142(12)
C(46)	8580(10)	5027(16)	5391(9)	113(8)
C(47)	8376(10)	4303(17)	4763(10)	114(8)
C(48)	8415(11)	5032(17)	4220(9)	124(10)
C(49)	9890(6)	8552(11)	4054(8)	61(4)
C(50)	10308(9)	8030(18)	3753(13)	105(8)
C(51)	10391(7)	6795(15)	4056(12)	104(7)
C(52)	9893(6)	6432(12)	4232(8)	68(4)

Table 2.3. Bond lengths (Å) for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Br_2]$.

Th-B(3)	2.718(12)	Th-B(16)	2.739(13)
Th-B(15)	2.742(13)	Th-B(5)	2.748(12)
Th-B(14)	2.766(14)	Th-B(4)	2.774(11)
Th-C(12)	2.794(13)	Th-C(1)	2.802(12)
Th-C(2)	2.805(12)	Th-C(13)	2.848(11)
Th-Br(2)	2.8630(13)	Th-Br(1)	2.8744(13)
O(1)-C(24)	1.39(2)	O(1)-C(21)	1.41(2)
O(1)-Li(1)	1.83(4)	O(2)-C(28)	1.41(2)
O(2)-C(25)	1.45(2)	O(2)-Li(1)	1.94(3)
O(3)-C(32)	1.38(2)	O(3)-C(29)	1.44(2)
O(3)-Li(1)	1.88(4)	O(4)-C(33)	1.41(2)
O(4)-C(36)	1.45(2)	O(4)-Li(1)	1.98(4)
O(5)-C(40)	1.40(2)	O(5)-C(37)	1.41(2)
O(5)-Li(2)	1.90(3)	O(6)-C(44)	1.40(2)
O(6)-C(41)	1.41(2)	O(6)-Li(2)	1.93(3)
O(7)-C(48)	1.38(2)	O(7)-C(45)	1.42(2)
O(7)-Li(2)	1.93(3)	O(8)-C(49)	1.45(2)
O(8)-C(52)	1.47(2)	O(8)-Li(2)	1.94(3)
C(1)-C(2)	1.59(2)	C(1)-B(5)	1.67(2)
C(1)-B(9)	1.73(2)	C(1)-B(10)	1.74(2)
C(2)-B(3)	1.63(2)	C(2)-B(6)	1.69(2)
C(2)-B(10)	1.72(2)	B(3)-B(6)	1.76(2)
B(3)-B(4)	1.77(2)	B(3)-B(7)	1.80(2)
B(4)-B(5)	1.70(2)	B(4)-B(8)	1.77(2)
B(4)-B(7)	1.77(2)	B(5)-B(8)	1.77(2)
B(5)-B(9)	1.82(2)	B(6)-B(7)	1.75(2)
B(6)-B(10)	1.75(2)	B(6)-B(11)	1.75(2)
B(7)-B(11)	1.77(2)	B(7)-B(8)	1.79(2)
B(8)-B(9)	1.78(2)	B(8)-B(11)	1.79(2)
B(9)-B(10)	1.77(2)	B(9)-B(11)	1.79(2)
B(10)-B(11)	1.76(2)	C(12)-C(13)	1.54(2)
C(12)-B(16)	1.66(2)	C(12)-B(21)	1.73(2)
C(12)-B(20)	1.73(2)	C(13)-B(14)	1.67(2)
C(13)-B(17)	1.69(2)	C(13)-B(21)	1.70(2)
B(14)-B(15)	1.72(2)	B(14)-B(18)	1.76(2)
B(14)-B(17)	1.76(2)	B(15)-B(18)	1.75(2)
B(15)-B(16)	1.77(2)	B(15)-B(19)	1.80(2)
B(16)-B(20)	1.79(2)	B(16)-B(19)	1.79(2)
B(17)-B(18)	1.74(2)	B(17)-B(22)	1.77(2)
B(17)-B(21)	1.79(3)	B(18)-B(22)	1.76(2)
B(18)-B(19)	1.78(2)	B(19)-B(22)	1.78(2)

B(19)-B(20)	1.79(2)	B(20)-B(21)	1.74(3)
B(20)-B(22)	1.77(2)	B(21)-B(22)	1.75(2)
C(21)-C(22)	1.46(2)	C(22)-C(23)	1.44(3)
C(23)-C(24)	1.37(3)	C(25)-C(26)	1.49(2)
C(26)-C(27)	1.48(3)	C(27)-C(28)	1.40(3)
C(29)-C(30)	1.46(2)	C(30)-C(31)	1.34(3)
C(31)-C(32)	1.42(5)	C(33)-C(34)	1.49(2)
C(34)-C(35)	1.41(3)	C(35)-C(36)	1.27(3)
C(37)-C(38)	1.51(2)	C(38)-C(39)	1.43(3)
C(39)-C(40)	1.35(3)	C(41)-C(42)	1.42(3)
C(42)-C(43)	1.44(2)	C(43)-C(44)	1.46(2)
C(45)-C(46)	1.36(2)	C(46)-C(47)	1.49(2)
C(47)-C(48)	1.38(2)	C(49)-C(50)	1.49(2)
C(50)-C(51)	1.50(3)	C(51)-C(52)	1.49(2)

Table 2.4. Bond angles (°) for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Br_2]$.

B(3)-Th-B(16)	118.3(4)	B(3)-Th-B(15)	90.9(4)
B(16)-Th-B(15)	37.7(4)	B(3)-Th-B(5)	60.1(4)
B(16)-Th-B(5)	99.6(4)	B(15)-Th-B(5)	109.4(4)
B(3)-Th-B(14)	100.6(5)	B(16)-Th-B(14)	60.8(5)
B(15)-Th-B(14)	36.4(4)	B(5)-Th-B(14)	144.0(4)
B(3)-Th-B(4)	37.6(4)	B(16)-Th-B(4)	90.4(4)
B(15)-Th-B(4)	80.9(4)	B(5)-Th-B(4)	35.9(4)
B(14)-Th-B(4)	110.0(4)	B(3)-Th-C(12)	149.4(4)
B(16)-Th-C(12)	34.8(4)	B(15)-Th-C(12)	58.6(4)
B(5)-Th-C(12)	124.2(4)	B(14)-Th-C(12)	57.1(5)
B(4)-Th-C(12)	125.0(4)	B(3)-Th-C(1)	57.2(4)
B(16)-Th-C(1)	133.7(4)	B(15)-Th-C(1)	139.3(4)
B(5)-Th-C(1)	35.0(4)	B(14)-Th-C(1)	156.5(4)
B(4)-Th-C(1)	58.4(4)	C(12)-Th-C(1)	146.3(4)
B(3)-Th-C(2)	34.3(4)	B(16)-Th-C(2)	149.1(4)
B(15)-Th-C(2)	124.9(4)	B(5)-Th-C(2)	57.6(4)
B(14)-Th-C(2)	124.1(4)	B(4)-Th-C(2)	58.8(4)
C(12)-Th-C(2)	176.0(4)	C(1)-Th-C(2)	32.9(4)
B(3)-Th-C(13)	134.6(4)	B(16)-Th-C(13)	56.7(4)
B(15)-Th-C(13)	57.7(4)	B(5)-Th-C(13)	155.3(4)
B(14)-Th-C(13)	34.5(4)	B(4)-Th-C(13)	138.6(4)
C(12)-Th-C(13)	31.7(4)	C(1)-Th-C(13)	163.0(3)
C(2)-Th-C(13)	146.9(4)	B(3)-Th-Br(2)	133.7(3)
B(16)-Th-Br(2)	93.3(3)	B(15)-Th-Br(2)	129.8(3)
B(5)-Th-Br(2)	83.2(3)	B(14)-Th-Br(2)	124.9(3)
B(4)-Th-Br(2)	118.4(3)	C(12)-Th-Br(2)	73.9(3)
C(1)-Th-Br(2)	76.5(3)	C(2)-Th-Br(2)	103.2(3)
C(13)-Th-Br(2)	90.4(2)	B(3)-Th-Br(1)	92.6(3)
B(16)-Th-Br(1)	134.2(3)	B(15)-Th-Br(1)	117.6(3)
B(5)-Th-Br(1)	125.7(3)	B(14)-Th-Br(1)	82.0(3)
B(4)-Th-Br(1)	129.3(3)	C(12)-Th-Br(1)	103.3(3)
C(1)-Th-Br(1)	90.8(2)	C(2)-Th-Br(1)	73.5(3)
C(13)-Th-Br(1)	77.4(3)	Br(2)-Th-Br(1)	86.70(5)
C(24)-O(1)-C(21)	106.4(13)	C(24)-O(1)-Li(1)	127(2)
C(21)-O(1)-Li(1)	125.6(13)	C(28)-O(2)-C(25)	107.0(14)
C(28)-O(2)-Li(1)	123(2)	C(25)-O(2)-Li(1)	129(2)
C(32)-O(3)-C(29)	106(2)	C(32)-O(3)-Li(1)	126(2)
C(29)-O(3)-Li(1)	126.7(14)	C(33)-O(4)-C(36)	104.4(14)
C(33)-O(4)-Li(1)	128(2)	C(36)-O(4)-Li(1)	128(2)
C(40)-O(5)-C(37)	109.2(13)	C(40)-O(5)-Li(2)	124.1(13)
C(37)-O(5)-Li(2)	125.0(12)	C(44)-O(6)-C(41)	108.6(12)

C(44)-O(6)-Li(2)	128.7(11)	C(41)-O(6)-Li(2)	121.3(13)
C(48)-O(7)-C(45)	106.3(12)	C(48)-O(7)-Li(2)	132.6(13)
C(45)-O(7)-Li(2)	120.8(12)	C(49)-O(8)-C(52)	109.9(11)
C(49)-O(8)-Li(2)	125.5(11)	C(52)-O(8)-Li(2)	123.9(11)
C(2)-C(1)-B(5)	110.3(10)	C(2)-C(1)-B(9)	111.7(11)
B(5)-C(1)-B(9)	64.7(8)	C(2)-C(1)-B(10)	62.0(9)
B(5)-C(1)-B(10)	114.3(10)	B(9)-C(1)-B(10)	61.5(9)
C(2)-C(1)-Th	73.6(6)	B(5)-C(1)-Th	70.7(6)
B(9)-C(1)-Th	134.1(8)	B(10)-C(1)-Th	134.3(9)
C(1)-C(2)-B(3)	110.4(9)	C(1)-C(2)-B(6)	111.6(10)
B(3)-C(2)-B(6)	63.8(8)	C(1)-C(2)-B(10)	63.3(9)
B(3)-C(2)-B(10)	115.0(10)	B(6)-C(2)-B(10)	61.7(9)
C(1)-C(2)-Th	73.4(5)	B(3)-C(2)-Th	69.9(6)
B(6)-C(2)-Th	132.2(8)	B(10)-C(2)-Th	135.4(9)
C(2)-B(3)-B(6)	59.9(8)	C(2)-B(3)-B(4)	107.3(9)
B(6)-B(3)-B(4)	107.7(9)	C(2)-B(3)-B(7)	105.7(10)
B(6)-B(3)-B(7)	58.9(7)	B(4)-B(3)-B(7)	59.6(7)
C(2)-B(3)-Th	75.8(6)	B(6)-B(3)-Th	134.0(9)
B(4)-B(3)-Th	72.9(5)	B(7)-B(3)-Th	130.9(7)
B(5)-B(4)-B(3)	104.1(9)	B(5)-B(4)-B(8)	61.4(7)
B(3)-B(4)-B(8)	108.0(9)	B(5)-B(4)-B(7)	108.6(9)
B(3)-B(4)-B(7)	60.9(7)	B(8)-B(4)-B(7)	60.6(7)
B(5)-B(4)-Th	71.2(6)	B(3)-B(4)-Th	69.5(5)
B(8)-B(4)-Th	130.5(7)	B(7)-B(4)-Th	128.8(7)
C(1)-B(5)-B(4)	107.6(9)	C(1)-B(5)-B(8)	105.6(9)
B(4)-B(5)-B(8)	61.2(7)	C(1)-B(5)-B(9)	59.3(8)
B(4)-B(5)-B(9)	109.6(9)	B(8)-B(5)-B(9)	59.3(8)
C(1)-B(5)-Th	74.3(6)	B(4)-B(5)-Th	72.9(6)
B(8)-B(5)-Th	131.9(7)	B(9)-B(5)-Th	132.3(8)
C(2)-B(6)-B(7)	105.1(10)	C(2)-B(6)-B(10)	59.8(9)
B(7)-B(6)-B(10)	109.1(11)	C(2)-B(6)-B(3)	56.3(8)
B(7)-B(6)-B(3)	61.7(8)	B(10)-B(6)-B(3)	107.3(11)
C(2)-B(6)-B(11)	105.8(12)	B(7)-B(6)-B(11)	60.7(8)
B(10)-B(6)-B(11)	60.2(9)	B(3)-B(6)-B(11)	109.1(10)
B(6)-B(7)-B(11)	59.8(8)	B(6)-B(7)-B(4)	108.0(9)
B(11)-B(7)-B(4)	108.4(9)	B(6)-B(7)-B(8)	107.6(10)
B(11)-B(7)-B(8)	60.4(8)	B(4)-B(7)-B(8)	59.6(7)
B(6)-B(7)-B(3)	59.4(8)	B(11)-B(7)-B(3)	106.7(9)
B(4)-B(7)-B(3)	59.5(7)	B(8)-B(7)-B(3)	106.0(8)
B(4)-B(8)-B(5)	57.4(7)	B(4)-B(8)-B(9)	108.4(9)
B(5)-B(8)-B(9)	61.7(7)	B(4)-B(8)-B(11)	107.6(9)
B(5)-B(8)-B(11)	107.6(9)	B(9)-B(8)-B(11)	60.3(8)
B(4)-B(8)-B(7)	59.8(7)	B(5)-B(8)-B(7)	104.8(8)
B(9)-B(8)-B(7)	107.6(10)	B(11)-B(8)-B(7)	59.3(7)
C(1)-B(9)-B(10)	59.4(8)	C(1)-B(9)-B(8)	102.7(10)
B(10)-B(9)-B(8)	107.4(11)	C(1)-B(9)-B(11)	103.4(10)

B(10)-B(9)-B(11)	59.0(9)	B(8)-B(9)-B(11)	60.2(8)
C(1)-B(9)-B(5)	56.0(7)	B(10)-B(9)-B(5)	105.5(10)
B(8)-B(9)-B(5)	59.0(8)	B(11)-B(9)-B(5)	105.4(10)
C(2)-B(10)-C(1)	54.8(7)	C(2)-B(10)-B(6)	58.5(9)
C(1)-B(10)-B(6)	102.3(10)	C(2)-B(10)-B(11)	104.6(11)
C(1)-B(10)-B(11)	104.6(11)	B(6)-B(10)-B(11)	60.0(9)
C(2)-B(10)-B(9)	103.9(10)	C(1)-B(10)-B(9)	59.0(8)
B(6)-B(10)-B(9)	108.2(11)	B(11)-B(10)-B(9)	61.0(9)
B(10)-B(11)-B(6)	59.8(9)	B(10)-B(11)-B(7)	107.9(10)
B(6)-B(11)-B(7)	59.5(8)	B(10)-B(11)-B(8)	107.7(10)
B(6)-B(11)-B(8)	107.4(10)	B(7)-B(11)-B(8)	60.3(7)
B(10)-B(11)-B(9)	60.0(9)	B(6)-B(11)-B(9)	107.4(10)
B(7)-B(11)-B(9)	107.9(9)	B(8)-B(11)-B(9)	59.6(8)
C(13)-C(12)-B(16)	112.3(10)	C(13)-C(12)-B(21)	62.5(9)
B(16)-C(12)-B(21)	114.4(11)	C(13)-C(12)-B(20)	110.7(11)
B(16)-C(12)-B(20)	63.9(9)	B(21)-C(12)-B(20)	60.4(10)
C(13)-C(12)-Th	76.1(6)	B(16)-C(12)-Th	70.8(6)
B(21)-C(12)-Th	137.2(9)	B(20)-C(12)-Th	133.2(8)
C(12)-C(13)-B(14)	111.6(10)	C(12)-C(13)-B(17)	114.5(11)
B(14)-C(13)-B(17)	63.4(8)	C(12)-C(13)-B(21)	64.2(10)
B(14)-C(13)-B(21)	116.2(11)	B(17)-C(13)-B(21)	63.5(9)
C(12)-C(13)-Th	72.2(6)	B(14)-C(13)-Th	70.1(6)
B(17)-C(13)-Th	132.0(8)	B(21)-C(13)-Th	135.1(9)
C(13)-B(14)-B(15)	105.6(11)	C(13)-B(14)-B(18)	103.5(11)
B(15)-B(14)-B(18)	60.3(8)	C(13)-B(14)-B(17)	58.8(8)
B(15)-B(14)-B(17)	108.8(11)	B(18)-B(14)-B(17)	59.2(8)
C(13)-B(14)-Th	75.4(6)	B(15)-B(14)-Th	71.0(6)
B(18)-B(14)-Th	129.3(9)	B(17)-B(14)-Th	132.8(9)
B(14)-B(15)-B(18	61.0(8)	B(14)-B(15)-B(16)	105.8(10)
B(18)-B(15)-B(16)	107.3(10)	B(14)-B(15)-B(19)	108.9(10)
B(18)-B(15)-B(19)	60.2(8)	B(16)-B(15)-B(19)	60.4(8)
B(14)-B(15)-Th	72.6(6)	B(18)-B(15)-Th	131.4(8)
B(16)-B(15)-Th	71.1(6)	B(19)-B(15)-Th	130.0(8)
C(12)-B(16)-B(15)	104.5(10)	C(12)-B(16)-B(20)	60.0(9)
B(15)-B(16)-B(20)	108.1(10)	C(12)-B(16)-B(19)	105.7(11)
B(15)-B(16)-B(19)	60.5(8)	B(20)-B(16)-B(19)	59.7(8)
C(12)-B(16)-Th	74.4(6)	B(15)-B(16)-Th	71.3(6)
B(20)-B(16)-Th	133.0(9)	B(19)-B(16)-Th	130.4(8)
C(13)-B(17)-B(18)	103.7(11)	C(13)-B(17)-B(14)	57.8(8)
B(18)-B(17)-B(14)	60.4(8)	C(13)-B(17)-B(22)	103.3(12)
B(18)-B(17)-B(22)	60.0(9)	B(14)-B(17)-B(22)	107.9(11)
C(13)-B(17)-B(21)	58.7(8)	B(18)-B(17)-B(21)	107.4(12)
B(14)-B(17)-B(21)	107.6(11)	B(22)-B(17)-B(21)	59.0(9)
B(17)-B(18)-B(15)	108.5(10)	B(17)-B(18)-B(14)	60.4(8)
B(15)-B(18)-B(14)	58.6(8)	B(17)-B(18)-B(22)	60.9(9)
B(15)-B(18)-B(22)	109.5(11)	B(14)-B(18)-B(22)	108.6(10)

B(17)-B(18)-B(19)	109.4(11)	B(15)-B(18)-B(19)	61.2(8)
B(14)-B(18)-B(19)	107.7(10)	B(22)-B(18)-B(19)	60.4(9)
B(18)-B(19)-B(22)	59.2(9)	B(18)-B(19)-B(20)	106.2(11)
B(22)-B(19)-B(20)	59.5(9)	B(18)-B(19)-B(16)	105.1(10)
B(22)-B(19)-B(16)	106.6(11)	B(20)-B(19)-B(16)	60.0(8)
B(18)-B(19)-B(15)	58.7(8)	B(22)-B(19)-B(15)	106.5(11)
B(20)-B(19)-B(15)	107.2(10)	B(16)-B(19)-B(15)	59.1(7)
C(12)-B(20)-B(21)	59.9(9)	C(12)-B(20)-B(22)	103.9(11)
B(21)-B(20)-B(22)	60.0(10)	C(12)-B(20)-B(19)	103.1(10)
B(21)-B(20)-B(19)	108.8(11)	B(22)-B(20)-B(19)	60.1(8)
C(12)-B(20)-B(16)	56.1(8)	B(21)-B(20)-B(16)	107.5(11)
B(22)-B(20)-B(16)	107.2(10)	B(19)-B(20)-B(16)	60.2(8)
C(13)-B(21)-C(12)	53.4(8)	C(13)-B(21)-B(20)	102.9(12)
C(12)-B(21)-B(20)	59.8(9)	C(13)-B(21)-B(22)	103.4(11)
C(12)-B(21)-B(22)	104.5(11)	B(20)-B(21)-B(22)	60.9(10)
C(13)-B(21)-B(17)	57.8(8)	C(12)-B(21)-B(17)	101.2(11)
B(20)-B(21)-B(17)	108.2(11)	B(22)-B(21)-B(17)	60.1(10)
B(21)-B(22)-B(18)	108.1(11)	B(21)-B(22)-B(20)	59.1(10)
B(18)-B(22)-B(20)	107.8(11)	B(21)-B(22)-B(19)	108.3(12)
B(18)-B(22)-B(19)	60.4(8)	B(20)-B(22)-B(19)	60.4(10)
B(21)-B(22)-B(17)	60.8(10)	B(18)-B(22)-B(17)	59.1(9)
B(20)-B(22)-B(17)	107.4(10)	B(19)-B(22)-B(17)	107.9(10)
O(1)-Li(1)-O(3)	110(2)	O(1)-Li(1)-O(2)	108(2)
O(3)-Li(1)-O(2)	119(2)	O(1)-Li(1)-O(4)	111(2)
O(3)-Li(1)-O(4)	102(2)	O(2)-Li(1)-O(4)	106(2)
O(5)-Li(2)-O(6)	119(2)	O(5)-Li(2)-O(7)	104.6(12)
O(6)-Li(2)-O(7)	104.5(13)	O(5)-Li(2)-O(8)	109.8(13)
O(6)-Li(2)-O(8)	112.9(13)	O(7)-Li(2)-O(8)	105(2)
O(1)-C(21)-C(22)	107.6(14)	C(23)-C(22)-C(21)	106(2)
C(24)-C(23)-C(22)	107(2)	C(23)-C(24)-O(1)	112(2)
O(2)-C(25)-C(26)	107(2)	C(27)-C(26)-C(25)	105(2)
C(28)-C(27)-C(26)	107(2)	O(2)-C(28)-C(27)	109(2)
O(3)-C(29)-C(30)	105(2)	C(31)-C(30)-C(29)	109(2)
C(30)-C(31)-C(32)	106(3)	O(3)-C(32)-C(31)	109(3)
O(4)-C(33)-C(34)	106.2(13)	C(35)-C(34)-C(33)	106(2)
C(36)-C(35)-C(34)	109(2)	C(35)-C(36)-O(4)	112(2)
O(5)-C(37)-C(38)	104(2)	C(39)-C(38)-C(37)	107(2)
C(40)-C(39)-C(38)	108(2)	C(39)-C(40)-O(5)	111(2)
O(6)-C(41)-C(42)	108(2)	C(41)-C(42)-C(43)	106(2)
C(42)-C(43)-C(44)	107.6(14)	O(6)-C(44)-C(43)	106.1(11)
C(46)-C(45)-O(7)	110.5(14)	C(45)-C(46)-C(47)	106(2)
C(48)-C(47)-C(46)	106(2)	C(47)-C(48)-O(7)	111(2)
O(8)-C(49)-C(50)	103.4(12)	C(51)-C(50)-C(49)	104(2)
C(52)-C(51)-C(50)	107.0(13)	O(8)-C(52)-C(51)	104.7(11)

Table 2.5. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5\text{-}C_2B_9H_{11})_2Br_2]$.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Th	27(1)	31(1)	30(1)	-3(1)	9(1)	0(1)
Br(1)	46(1)	92(1)	35(1)	-3(1)	17(1)	-9(1)
Br(2)	46(1)	39(1)	87(1)	-25(1)	18(1)	-2(1)
O(1)	59(7)	70(7)	61(7)	4(6)	2(6)	-25(6)
O(2)	57(6)	70(7)	65(7)	11(6)	25(5)	-2(5)
O(3)	77(8)	53(7)	129(11)	-24(7)	61(8)	-22(6)
O(4)	31(6)	196(14)	61(7)	-34(9)	2(5)	-9(8)
O(5)	49(6)	89(7)	37(5)	-16(6)	7(5)	-2(5)
O(6)	59(7)	52(6)	102(9)	-15(6)	41(7)	-9(5)
O(7)	142(11)	58(6)	53(6)	-14(5)	46(7)	-48(7)
O(8)	37(6)	48(6)	71(8)	5(5)	-3(5)	0(5)
C(1)	23(6)	43(8)	29(7)	-4(6)	2(5)	9(6)
C(2)	38(8)	44(8)	26(7)	8(6)	1(6)	12(6)
B(3)	38(8)	27(7)	45(9)	9(7)	17(7)	5(6)
B(4)	25(7)	32(7)	30(7)	-5(5)	6(5)	4(5)
B(5)	35(7)	32(7)	36(8)	16(6)	16(6)	6(6)
B(6)	51(10)	69(11)	34(8)	13(8)	15(7)	14(9)
B(7)	35(7)	35(7)	31(7)	-1(6)	18(6)	11(6)
B(8)	39(7)	25(6)	45(7)	0(6)	29(6)	9(6)
B(9)	30(8)	63(10)	69(11)	-9(8)	28(8)	0(7)
B(10)	17(7)	88(14)	37(9)	-7(9)	-1(6)	14(8)
B(11)	24(7)	60(9)	54(9)	-5(8)	15(7)	-1(7)
C(12)	36(8)	29(7)	59(9)	-9(6)	3(7)	7(6)
C(13)	19(5)	51(8)	54(8)	-5(7)	13(6)	3(6)
B(14)	35(8)	34(9)	39(9)	7(7)	8(7)	7(7)
B(15)	19(6)	43(7)	42(8)	-2(6)	9(6)	9(6)
B(16)	47(9)	40(7)	30(7)	3(6)	2(6)	15(7)
B(17)	25(8)	46(10)	55(11)	-14(8)	6(8)	2(7)
B(18)	28(7)	49(9)	47(9)	-13(7)	-5(7)	-4(7)
B(19)	33(8)	65(11)	44(8)	4(7)	-6(7)	14(7)
B(20)	69(12)	22(7)	70(12)	-2(7)	-12(9)	8(7)
B(21)	54(11)	65(11)	50(10)	-22(9)	8(9)	4(9)
B(22)	36(8)	66(10)	59(10)	-25(8)	-9(7)	16(8)
Li(1)	72(21)	84(21)	95(26)	7(20)	36(21)	-19(17)
Li(2)	45(14)	63(17)	73(17)	-15(14)	30(13)	-17(13)
C(21)	82(13)	99(13)	63(10)	-4(10)	28(10)	-16(11)
C(22)	58(10)	137(16)	65(10)	-29(11)	13(9)	-9(10)

C(23)	89(16)	140(20)	114(19)	62(16)	-12(14)	-41(14)
C(24)	166(26)	320(39)	117(20)	129(25)	-77(19)	-196(28)
C(25)	38(9)	97(15)	83(13)	-28(11)	0(9)	-26(9)
C(26)	96(15)	62(11)	58(10)	7(8)	-10(10)	-29(10)
C(27)	220(31)	95(17)	142(22)	56(15)	84(22)	110(19)
C(28)	152(21)	101(15)	109(17)	42(13)	60(15)	70(15)
C(29)	65(11)	75(11)	78(12)	37(9)	2(10)	6(9)
C(30)	209(31)	44(13)	239(33)	25(16)	103(27)	27(16)
C(31)	429(62)	133(27)	310(48)	-102(29)	305(49)	-127(35)
C(32)	468(64)	115(21)	834(103)	-263(42)	559(75)	-208(33)
C(33)	61(10)	60(9)	78(10)	-2(8)	39(9)	6(8)
C(34)	45(12)	158(23)	112(17)	-10(16)	27(11)	25(14)
C(35)	67(13)	163(21)	105(16)	-31(15)	-22(11)	51(14)
C(36)	53(14)	590(82)	111(20)	-145(32)	19(14)	-7(27)
C(37)	61(10)	112(14)	52(9)	3(10)	13(9)	3(10)
C(38)	130(20)	102(15)	47(11)	-39(11)	6(12)	-46(15)
C(39)	67(14)	240(31)	87(16)	-8(18)	-29(12)	-38(17)
C(40)	39(9)	293(36)	90(14)	-58(19)	1(9)	15(16)
C(41)	55(13)	141(20)	211(27)	-126(20)	64(16)	-42(13)
C(42)	63(13)	120(20)	205(27)	-32(19)	33(15)	8(14)
C(43)	76(12)	61(10)	82(12)	-22(9)	31(10)	-5(9)
C(44)	59(9)	43(8)	57(9)	-10(7)	4(7)	-13(7)
C(45)	284(33)	109(16)	43(10)	-11(10)	56(15)	-114(19)
C(46)	189(23)	82(13)	57(11)	-12(10)	6(13)	-50(14)
C(47)	184(24)	67(12)	95(15)	-4(11)	39(16)	-57(14)
C(48)	236(30)	80(15)	77(13)	-51(12)	84(17)	-93(18)
C(49)	52(10)	37(7)	96(12)	19(8)	24(8)	4(6)
C(50)	109(20)	56(11)	178(23)	9(14)	89(17)	15(12)
C(51)	65(13)	47(10)	203(24)	7(12)	36(14)	17(9)
C(52)	68(11)	47(8)	84(11)	8(8)	10(9)	14(8)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

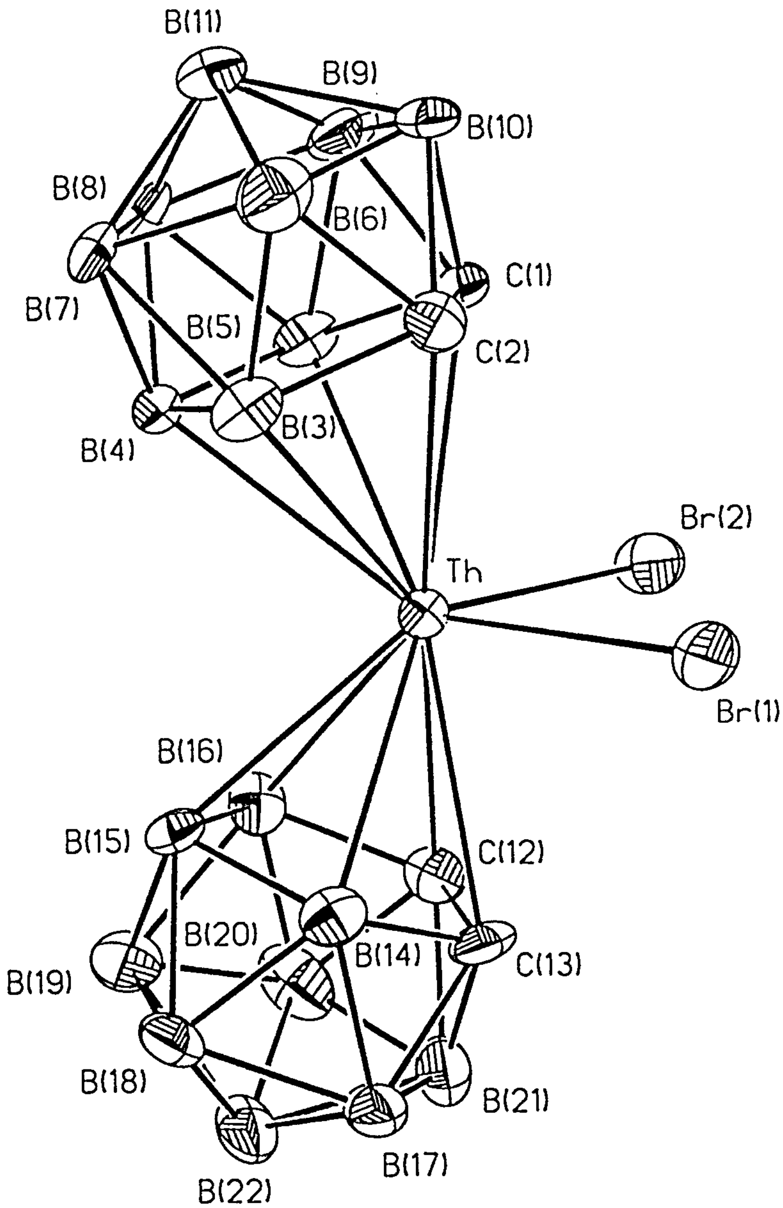
$$-2\pi^2 [(ha^*)^2U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12}]$$

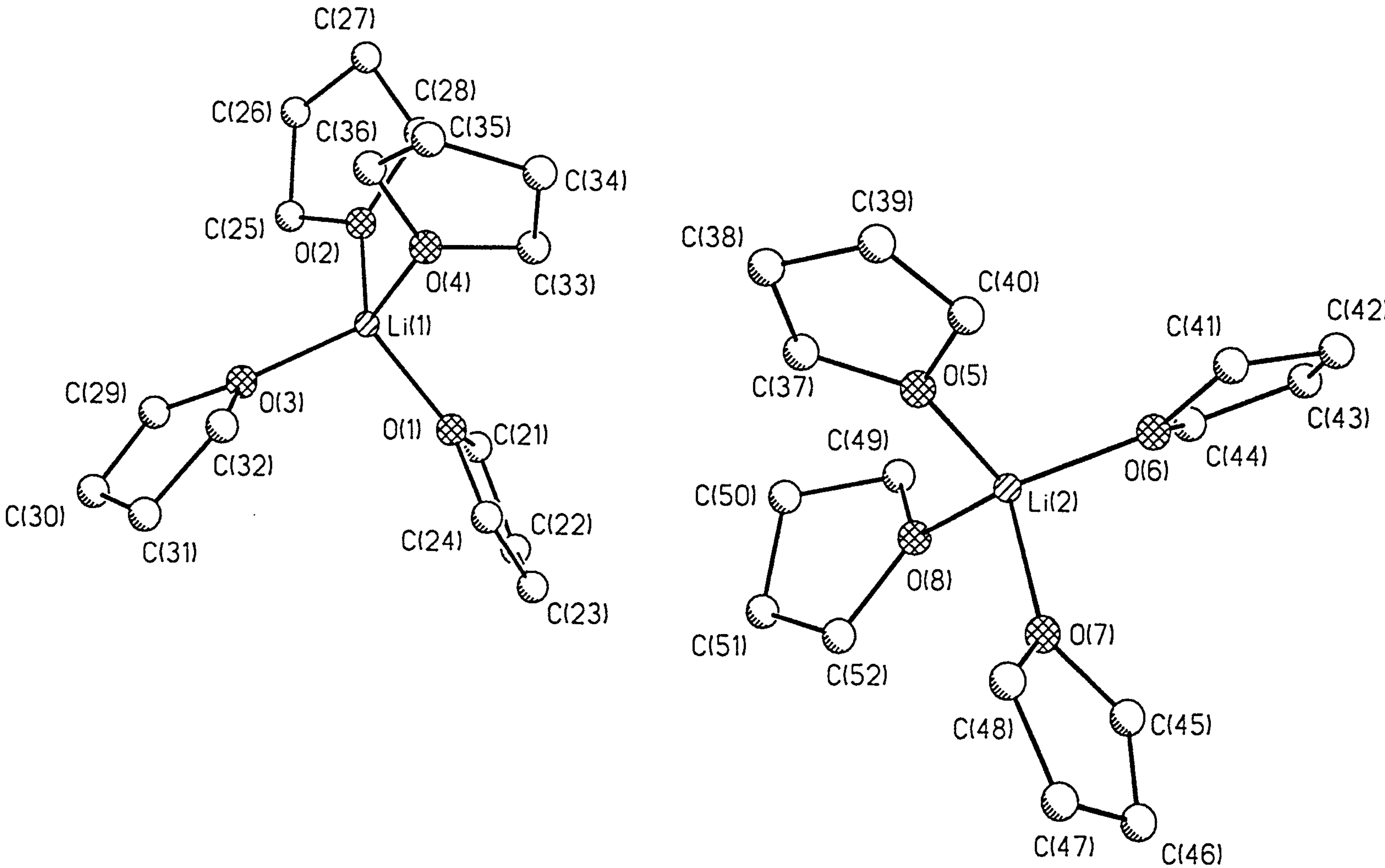
Table 2.6. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for $[Li(THF)_4]_2[Th(\eta^5-C_2B_9H_{11})_2Br_2]$.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	8961(5)	6187(13)	6708(6)	39
H(2)	9142(5)	8453(11)	6302(6)	45
H(3)	9548(6)	9871(12)	7447(7)	42
H(4)	9538(5)	8398(11)	8706(6)	35
H(5)	9223(5)	6039(11)	8161(7)	40
H(6)	8482(6)	10127(16)	6729(7)	61
H(7)	8715(5)	10078(12)	8213(6)	38
H(8)	8493(5)	7608(10)	8637(7)	40
H(9)	8125(6)	6187(15)	7388(9)	61
H(10)	8105(6)	7767(18)	6215(8)	58
H(11)	7816(6)	8753(13)	7427(8)	54
H(12)	10862(5)	5462(11)	7920(7)	51
H(13)	11105(4)	7115(11)	7108(7)	49
H(14)	10785(6)	9429(14)	7464(8)	43
H(15)	10394(5)	9126(12)	8708(7)	41
H(16)	10426(6)	6451(12)	8964(7)	48
H(17)	11857(6)	8751(14)	7774(9)	51
H(18)	11437(5)	9912(14)	8823(8)	52
H(19)	11208(6)	8071(14)	9773(8)	60
H(20)	11510(7)	5738(13)	9279(9)	70
H(21)	11924(7)	6149(16)	8093(9)	69
H(22)	12142(6)	7898(15)	9206(8)	68
H(21A)	11881(7)	9225(16)	2791(8)	96
H(21B)	12271(7)	8374(16)	2529(8)	96
H(22A)	12454(7)	7412(18)	3481(9)	104
H(22B)	12157(7)	8432(18)	3783(9)	104
H(23A)	11853(9)	6225(23)	3610(12)	144
H(23B)	11506(9)	7296(23)	3766(12)	144
H(24A)	11044(11)	7069(30)	2811(13)	263
H(24B)	11431(11)	6121(30)	2627(13)	263
H(25A)	12130(6)	8699(18)	572(9)	90
H(25B)	12381(6)	9458(18)	1227(9)	90
H(26A)	12270(8)	11093(16)	626(9)	92
H(26B)	12047(8)	10324(16)	-36(9)	92
H(27A)	11482(11)	11786(19)	494(13)	174
H(27B)	11245(11)	10751(19)	-19(13)	174
H(28A)	11378(9)	10823(18)	1354(11)	139

H(28B)	10949(9)	10142(18)	810(11)	139
H(29A)	12228(7)	6179(15)	1221(9)	90
H(29B)	11956(7)	6224(15)	433(9)	90
H(30A)	11880(12)	4314(18)	402(16)	186
H(30B)	12196(12)	4262(18)	1169(16)	186
H(31A)	11542(17)	3974(27)	1523(20)	306
H(31B)	11279(17)	3631(27)	759(20)	306
H(32A)	10882(17)	5297(24)	562(27)	487
H(32B)	10950(17)	5313(24)	1362(27)	487
H(33A)	10291(6)	9135(13)	1700(8)	75
H(33B)	10245(6)	7801(13)	1942(8)	75
H(34A)	9459(7)	7725(26)	1305(12)	124
H(34B)	9520(7)	9024(26)	1022(12)	124
H(35A)	9609(8)	6919(21)	431(11)	142
H(35B)	9544(8)	8200(21)	93(11)	142
H(36A)	10286(9)	8366(36)	159(14)	301
H(36B)	10313(9)	6978(36)	290(14)	301
H(37A)	9043(7)	6443(17)	2602(8)	90
H(37B)	8993(7)	7843(17)	2483(8)	90
H(38A)	8427(9)	7462(20)	1513(9)	114
H(38B)	8402(9)	6095(20)	1703(9)	114
H(39A)	7714(8)	7787(26)	1793(12)	167
H(39B)	7670(8)	6405(26)	1930(12)	167
H(40A)	7786(7)	6760(26)	2937(10)	171
H(40B)	7870(7)	8126(26)	2804(10)	171
H(41A)	7805(8)	8441(22)	4275(14)	156
H(41B)	7916(8)	9429(22)	3766(14)	156
H(42A)	7759(8)	9719(23)	5032(13)	155
H(42B)	7706(8)	10678(23)	4442(13)	155
H(43A)	8490(6)	10492(15)	5504(9)	85
H(43B)	8464(6)	11350(15)	4874(9)	85
H(44A)	9008(5)	10252(12)	4508(7)	65
H(44B)	9077(5)	9474(12)	5180(7)	65
H(45A)	9074(11)	6293(18)	5385(8)	171
H(45B)	8496(11)	6735(18)	5299(8)	171
H(46A)	8315(10)	5121(16)	5652(9)	136
H(46B)	8883(10)	4642(16)	5679(9)	136
H(47A)	8582(10)	3581(17)	4766(10)	137
H(47B)	8016(10)	4076(17)	4733(10)	137
H(48A)	8068(11)	5178(17)	3936(9)	148
H(48B)	8619(11)	4628(17)	3941(9)	148
H(49A)	10036(6)	8923(11)	4494(8)	73
H(49B)	9688(6)	9145(11)	3750(8)	73
H(50A)	10198(9)	7994(18)	3258(13)	126
H(50B)	10626(9)	8502(18)	3878(13)	126
H(51A)	10479(7)	6238(15)	3728(12)	125

H(51B)	10673(7)	6799(15)	4463(12)	125
H(52A)	9724(6)	5791(12)	3935(8)	81
H(52B)	9955(6)	6162(12)	4704(8)	81


B(11)
B(9)
B(10)
B(8)
B(6)
C(1)
B(7)
B(5)
C(2)
B(4)
B(3)
Br(2)
Th
Br(1)
B(16)
B(15)
C(12)
B(20)
B(14)
C(13)
B(19)
B(18)
B(21)
B(22)
B(17)


C(27)
C(26)
C(28)
C(36)
C(35)
C(34)
C(25)
O(2)
O(4)
C(33)
Li(1)
C(29)
O(3)
O(1)
C(21)
C(32)
C(30)
C(31)
C(24)
C(22)
C(23)
C(39)
C(38)
C(40)
C(41)
C(42)
C(37)
O(5)
C(43)
C(49)
C(44)
O(6)
C(50)
Li(2)
O(8)
O(7)
C(51)
C(52)
C(48)
C(45)
C(47)
C(46)

b-axis