



JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

J. Am. Chem. Soc., 1997, 119(14), 3411-3412, DOI:[10.1021/ja9640861](https://doi.org/10.1021/ja9640861)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

S-41

Table S-XXV. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 6.

Hf(1)-O(1)	1.999(7)
Hf(1)-O(2)	2.009(7)
Hf(1)-N(4)	2.208(8)
Hf(1)-N(3)	2.219(8)
Hf(1)-N(2)	2.223(9)
Hf(1)-N(1)	2.231(8)
O(1)-C(23)	1.399(13)
O(2)-C(38)	1.420(12)
N(1)-C(1)	1.315(13)
N(1)-C(22)	1.485(13)
N(2)-C(7)	1.353(13)
N(2)-C(8)	1.474(13)
N(3)-C(11)	1.351(13)
N(3)-C(10)	1.470(13)
N(4)-C(17)	1.350(13)
N(4)-C(18)	1.490(13)
C(1)-C(2)	1.42(2)
C(1)-C(7)	1.50(2)
C(2)-C(3)	1.39(2)
C(3)-C(4)	1.37(2)
C(4)-C(5)	1.35(2)
C(5)-C(6)	1.38(2)
C(6)-C(7)	1.391(14)
C(8)-C(9)	1.546(14)
C(9)-C(10)	1.507(14)
C(11)-C(12)	1.390(14)
C(11)-C(17)	1.49(2)
C(12)-C(13)	1.39(2)
C(13)-C(14)	1.37(2)
C(14)-C(15)	1.38(2)
C(15)-C(16)	1.38(2)
C(16)-C(17)	1.386(14)
C(18)-C(19)	1.53(2)
C(19)-C(20)	1.51(2)
C(20)-C(21)	1.52(2)
C(21)-C(22)	1.52(2)
C(23)-C(31)	1.56(2)
C(23)-C(38)	1.57(2)
C(23)-C(24)	1.569(14)
C(24)-C(25)	1.49(2)
C(25)-C(26)	1.38(2)
C(25)-C(30)	1.39(2)
C(26)-C(27)	1.40(2)
C(27)-C(28)	1.29(3)
C(28)-C(29)	1.33(3)
C(29)-C(30)	1.51(3)
C(31)-C(32)	1.51(2)
C(32)-C(33)	1.37(2)
C(32)-C(37)	1.38(2)
C(33)-C(34)	1.40(2)
C(34)-C(35)	1.37(2)
C(35)-C(36)	1.37(2)
C(36)-C(37)	1.37(2)
C(38)-C(39)	1.53(2)
C(38)-C(43)	1.53(2)
C(39)-C(40)	1.35(2)
C(40)-C(41)	1.49(2)
C(41)-C(42)	1.53(2)
C(42)-C(43)	1.51(2)

O(1)-Hf(1)-O(2) 76.6(3)

O(1)-Hf(1)-N(4) 121.9(3)

S-42

O(2)-Hf(1)-N(4)	88.5(3)
O(1)-Hf(1)-N(3)	87.3(3)
O(2)-Hf(1)-N(3)	140.8(3)
N(4)-Hf(1)-N(3)	70.0(3)
O(1)-Hf(1)-N(2)	99.6(3)
O(2)-Hf(1)-N(2)	136.8(3)
N(4)-Hf(1)-N(2)	126.3(3)
N(3)-Hf(1)-N(2)	80.6(3)
O(1)-Hf(1)-N(1)	136.0(3)
O(2)-Hf(1)-N(1)	83.2(3)
N(4)-Hf(1)-N(1)	95.8(3)
N(3)-Hf(1)-N(1)	129.9(3)
N(2)-Hf(1)-N(1)	69.9(3)
C(23)-O(1)-Hf(1)	119.6(6)
C(38)-O(2)-Hf(1)	115.9(6)
C(1)-N(1)-C(22)	118.3(9)
C(1)-N(1)-Hf(1)	121.4(7)
C(22)-N(1)-Hf(1)	120.2(6)
C(7)-N(2)-C(8)	115.2(9)
C(7)-N(2)-Hf(1)	122.3(7)
C(8)-N(2)-Hf(1)	122.5(6)
C(11)-N(3)-C(10)	116.1(8)
C(11)-N(3)-Hf(1)	121.3(7)
C(10)-N(3)-Hf(1)	122.7(6)
C(17)-N(4)-C(18)	118.0(9)
C(17)-N(4)-Hf(1)	122.7(7)
C(18)-N(4)-Hf(1)	118.9(6)
N(1)-C(1)-C(2)	123.4(10)
N(1)-C(1)-C(7)	115.0(9)
C(2)-C(1)-C(7)	121.6(10)
C(3)-C(2)-C(1)	133.8(12)
C(4)-C(3)-C(2)	129.0(12)
C(5)-C(4)-C(3)	126.5(12)
C(4)-C(5)-C(6)	130.8(13)
C(5)-C(6)-C(7)	131.9(12)
N(2)-C(7)-C(6)	122.7(10)
N(2)-C(7)-C(1)	111.3(9)
C(6)-C(7)-C(1)	125.9(10)
N(2)-C(8)-C(9)	112.6(8)
C(10)-C(9)-C(8)	111.5(9)
N(3)-C(10)-C(9)	113.0(8)
N(3)-C(11)-C(12)	122.9(11)
N(3)-C(11)-C(17)	113.7(9)
C(12)-C(11)-C(17)	123.3(11)
C(11)-C(12)-C(13)	132.7(12)
C(14)-C(13)-C(12)	129.5(12)
C(13)-C(14)-C(15)	126.0(11)
C(16)-C(15)-C(14)	129.7(11)
C(15)-C(16)-C(17)	132.3(11)
N(4)-C(17)-C(16)	123.0(10)
N(4)-C(17)-C(11)	111.7(9)
C(16)-C(17)-C(11)	125.1(10)
N(4)-C(18)-C(19)	112.6(9)
C(20)-C(19)-C(18)	115.7(9)
C(19)-C(20)-C(21)	116.5(10)
C(20)-C(21)-C(22)	118.1(9)
N(1)-C(22)-C(21)	113.9(9)
O(1)-C(23)-C(31)	110.7(9)
O(1)-C(23)-C(38)	106.3(9)
C(31)-C(23)-C(38)	112.4(9)
O(1)-C(23)-C(24)	109.2(9)
C(31)-C(23)-C(24)	104.8(9)
C(38)-C(23)-C(24)	113.5(9)
C(25)-C(24)-C(23)	113.6(9)
C(26)-C(25)-C(30)	119(2)
C(26)-C(25)-C(24)	118.6(12)

S-43

C(30)-C(25)-C(24)	122.7(14)
C(25)-C(26)-C(27)	125(2)
C(28)-C(27)-C(26)	115(2)
C(27)-C(28)-C(29)	129(3)
C(28)-C(29)-C(30)	116(2)
C(25)-C(30)-C(29)	117(2)
C(32)-C(31)-C(23)	118.9(10)
C(33)-C(32)-C(37)	116.5(11)
C(33)-C(32)-C(31)	119.2(10)
C(37)-C(32)-C(31)	124.3(11)
C(32)-C(33)-C(34)	122.2(11)
C(35)-C(34)-C(33)	119.2(13)
C(36)-C(35)-C(34)	119.1(12)
C(35)-C(36)-C(37)	120.9(12)
C(36)-C(37)-C(32)	122.2(12)
O(2)-C(38)-C(39)	108.4(8)
O(2)-C(38)-C(43)	111.3(9)
C(39)-C(38)-C(43)	108.8(9)
O(2)-C(38)-C(23)	103.2(8)
C(39)-C(38)-C(23)	108.2(9)
C(43)-C(38)-C(23)	116.6(10)
C(40)-C(39)-C(38)	123.5(11)
C(39)-C(40)-C(41)	124.4(12)
C(40)-C(41)-C(42)	109.3(10)
C(43)-C(42)-C(41)	111.7(11)
C(42)-C(43)-C(38)	109.9(10)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S-44

Table S-XXVI. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf(1)	25(1)	32(1)	22(1)	-1(1)	3(1)	0(1)
O(1)	31(4)	29(4)	27(4)	-1(4)	3(3)	2(4)
O(2)	32(4)	28(4)	40(5)	3(4)	3(4)	-3(4)
N(1)	22(5)	33(5)	36(6)	-6(5)	3(4)	-2(4)
N(2)	29(5)	38(6)	29(5)	4(5)	0(4)	2(5)
N(3)	30(5)	37(6)	22(5)	-5(4)	-1(4)	-16(5)
N(4)	28(5)	37(5)	19(5)	-7(4)	-7(4)	-6(4)
C(1)	26(6)	38(7)	29(7)	8(6)	4(5)	-5(5)
C(2)	42(8)	55(8)	34(7)	3(7)	3(6)	12(7)
C(3)	42(7)	78(10)	43(8)	7(9)	9(6)	12(8)
C(4)	52(9)	79(10)	33(8)	-11(7)	11(6)	20(8)
C(5)	47(9)	69(9)	35(8)	0(7)	11(6)	5(7)
C(6)	34(7)	51(7)	28(7)	-4(6)	11(5)	5(6)
C(7)	38(7)	37(7)	23(6)	-8(5)	6(5)	1(6)
C(8)	37(7)	52(8)	20(6)	-7(6)	-4(5)	-5(6)
C(9)	26(6)	40(7)	34(7)	-1(6)	-4(5)	-10(6)
C(10)	27(6)	33(7)	34(7)	3(5)	2(5)	-2(5)
C(11)	28(7)	34(7)	40(8)	-5(6)	9(6)	1(5)
C(12)	34(7)	45(8)	45(8)	17(6)	-5(6)	-13(6)
C(13)	40(8)	62(9)	54(9)	19(8)	6(7)	-9(7)
C(14)	46(8)	73(9)	28(7)	26(7)	2(6)	5(7)
C(15)	55(8)	62(9)	14(6)	11(6)	2(5)	-3(7)
C(16)	45(7)	44(7)	15(6)	-3(5)	1(5)	-7(6)
C(17)	25(6)	38(7)	28(6)	-10(6)	4(5)	-9(6)
C(18)	48(7)	55(8)	29(6)	0(7)	7(5)	3(7)
C(19)	35(7)	32(7)	40(7)	-1(6)	-13(5)	-12(6)
C(20)	32(7)	51(8)	47(8)	6(7)	-4(6)	5(6)
C(21)	22(6)	50(8)	48(8)	-2(7)	-4(5)	-2(6)
C(22)	27(6)	38(7)	37(7)	-3(6)	5(5)	-1(6)
C(23)	29(6)	56(9)	35(7)	-1(6)	0(5)	8(6)
C(24)	46(8)	33(7)	44(8)	2(6)	7(6)	12(6)
C(25)	32(7)	56(9)	43(8)	-6(7)	1(6)	24(7)
C(26)	45(9)	79(12)	86(12)	-38(10)	-3(9)	11(9)
C(27)	56(11)	107(15)	117(17)	-29(14)	-11(11)	22(11)
C(28)	78(15)	228(32)	59(15)	-57(17)	-16(12)	75(19)
C(29)	89(15)	190(24)	23(9)	23(12)	5(9)	92(16)
C(30)	86(12)	113(14)	43(9)	12(10)	8(9)	57(11)
C(31)	51(8)	50(8)	27(7)	3(6)	14(6)	4(7)
C(32)	30(6)	49(7)	18(5)	10(7)	-1(4)	-3(7)
C(33)	37(7)	55(8)	27(7)	13(6)	4(5)	-3(6)
C(34)	72(10)	66(9)	26(7)	0(7)	21(7)	0(8)
C(35)	61(10)	81(10)	22(7)	15(7)	17(6)	24(8)
C(36)	38(8)	125(14)	30(7)	-26(9)	6(6)	-11(9)
C(37)	44(8)	78(10)	29(7)	-17(7)	1(6)	-27(7)
C(38)	31(6)	28(6)	24(6)	-4(5)	4(5)	-3(5)
C(39)	37(7)	30(7)	42(7)	-8(6)	1(5)	0(6)
C(40)	40(7)	52(8)	45(8)	-2(7)	8(6)	18(7)
C(41)	54(9)	41(8)	57(9)	-13(7)	-8(7)	2(7)
C(42)	52(9)	43(9)	74(11)	-1(7)	-12(8)	-10(7)
C(43)	52(8)	42(8)	54(9)	3(7)	0(7)	6(7)

S-45

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

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	7477(3)	7519(13)	6639(6)	53
H(3A)	7677(4)	6398(15)	5866(6)	65
H(4A)	7369(4)	4978(15)	5165(6)	65
H(5A)	6775(4)	4524(14)	5046(6)	60
H(6A)	6339(3)	5326(12)	5543(5)	45
H(8A)	5906(3)	5583(12)	6077(5)	44
H(8B)	5903(3)	6834(12)	5590(5)	44
H(9A)	5579(3)	8280(12)	6280(5)	41
H(9B)	5339(3)	6980(12)	5996(5)	41
H(10A)	5286(3)	7054(11)	7052(5)	38
H(10B)	5525(3)	5703(11)	6941(5)	38
H(12A)	5388(3)	5523(12)	7832(6)	51
H(13A)	5299(3)	4581(14)	8725(6)	62
H(14A)	5526(3)	5243(14)	9687(6)	59
H(15A)	6003(3)	6688(13)	9948(5)	53
H(16A)	6327(3)	7882(12)	9353(5)	42
H(18A)	6615(3)	9215(13)	8972(5)	52
H(18B)	6800(3)	9574(13)	8365(5)	52
H(19A)	7208(3)	8193(12)	9066(5)	45
H(19B)	6907(3)	6986(12)	9046(5)	45
H(20A)	6972(3)	6574(13)	7979(6)	53
H(20B)	7336(3)	6236(13)	8439(6)	53
H(21A)	7660(3)	7941(12)	7937(6)	49
H(22A)	7097(3)	9732(12)	7578(5)	41
H(22B)	7356(3)	9227(12)	7087(5)	41
H(24A)	5490(3)	12151(12)	7337(6)	49
H(24B)	5575(3)	13268(12)	6829(6)	49
H(26A)	5137(4)	10052(17)	7009(8)	86
H(27A)	4651(5)	8951(22)	6353(11)	114
H(28A)	4474(6)	9941(32)	5430(10)	149
H(29A)	4705(6)	11923(26)	5060(8)	121
H(30A)	5219(5)	13156(19)	5753(7)	97
H(31A)	5833(3)	12189(13)	5925(5)	50
H(31B)	6155(3)	13036(13)	6320(5)	50
H(33A)	5976(3)	9809(13)	5524(5)	47
H(34A)	6385(4)	8544(15)	4976(6)	64
H(35A)	7006(4)	9240(16)	5048(6)	64
H(36A)	7206(4)	11179(18)	5656(6)	77
H(37A)	6800(3)	12421(14)	6185(6)	61
H(39A)	5872(3)	10760(12)	8031(5)	44
H(40A)	6002(3)	12034(13)	8914(6)	55
H(41A)	6578(4)	13266(12)	9071(6)	62
H(41B)	6299(4)	14315(12)	8675(6)	62
H(42A)	6810(4)	14209(14)	8134(7)	70
H(42B)	6833(4)	12545(14)	8192(7)	70
H(43C)	6582(4)	13308(13)	7160(6)	60
H(43A)	6237(4)	13948(13)	7445(6)	60

S-46

Table S-XVIII. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Hf(1)	3892(1)	2878(1)	695(1)	23(1)
O(1)	3130(6)	3518(4)	212(3)	24(2)
O(2)	3628(6)	3878(5)	1257(3)	27(2)
N(1)	3497(8)	2155(6)	1447(4)	26(2)
N(2)	3032(7)	1530(6)	414(4)	24(2)
N(3)	4777(7)	2622(6)	-83(4)	23(2)
N(4)	5603(7)	3261(6)	892(4)	23(2)
C(1)	2982(9)	1347(7)	1392(5)	29(3)
C(2)	2594(9)	908(9)	1858(6)	37(3)
C(3)	2100(10)	51(10)	1897(7)	47(4)
C(4)	1869(9)	-642(8)	1488(7)	39(4)
C(5)	2017(9)	-620(8)	918(7)	39(4)
C(6)	2386(9)	75(7)	616(6)	28(3)
C(7)	2769(9)	969(7)	786(5)	25(3)
C(8)	2853(9)	1200(7)	-192(5)	25(3)
C(9)	3071(10)	1884(8)	-586(5)	31(3)
C(10)	4236(9)	2258(8)	-645(5)	25(3)
C(11)	5845(10)	2815(7)	-73(5)	29(3)
C(12)	6416(10)	2730(7)	-577(6)	33(3)
C(13)	7490(11)	2790(8)	-670(7)	44(4)
C(14)	8307(10)	2993(8)	-271(7)	42(4)
C(15)	8273(10)	3234(8)	303(7)	39(3)
C(16)	7410(10)	3322(8)	618(7)	42(4)
C(17)	6306(9)	3142(7)	493(5)	26(3)
C(18)	5990(10)	3677(8)	1459(6)	37(3)
C(19)	6385(12)	3112(9)	1862(6)	47(4)
C(20)	5674(12)	2263(9)	1939(6)	48(4)
C(21)	4713(12)	2299(10)	2314(6)	50(4)
C(22)	3808(12)	2610(9)	2022(6)	47(4)
C(23)	2699(9)	4211(7)	466(6)	31(3)
C(24)	1554(9)	3849(7)	672(5)	27(3)
C(25)	1106(8)	2906(7)	597(5)	25(3)
C(26)	979(10)	2458(9)	1065(6)	40(3)
C(27)	503(10)	1586(10)	1015(8)	53(5)
C(28)	168(12)	1148(10)	492(11)	71(6)
C(29)	317(10)	1581(10)	6(8)	56(5)
C(30)	788(9)	2445(8)	61(6)	39(3)
C(31)	2685(9)	4849(8)	33(5)	31(3)
C(32)	2054(9)	4472(8)	-504(5)	29(3)
C(33)	1040(9)	4611(8)	-597(6)	33(3)
C(34)	466(11)	4242(9)	-1092(6)	44(4)
C(35)	905(14)	3745(10)	-1511(7)	62(5)
C(36)	1896(12)	3635(8)	-1429(6)	46(4)
C(37)	2461(10)	3980(7)	-924(5)	32(3)
C(38)	3460(9)	4605(7)	1006(5)	25(3)
C(39)	4515(9)	5137(8)	835(6)	30(3)
C(40)	2963(10)	5188(8)	1438(6)	34(3)
C(41)	2798(10)	5071(8)	1974(6)	34(3)
C(42)	2300(10)	5621(9)	2387(6)	39(3)
C(43)	2275(15)	5471(11)	2947(8)	74(5)
C(44)	1796(19)	5980(16)	3365(9)	98(7)
C(45)	1401(17)	6631(14)	3201(10)	89(7)
C(46)	1449(13)	6791(11)	2651(9)	70(6)
C(47)	1879(10)	6299(9)	2241(7)	48(4)
Hf(1B)	6478(1)	19270(1)	2725(1)	27(1)
O(1B)	5464(7)	19795(6)	3207(4)	39(2)

S-47

O(2B)	7426(6)	20101(5)	3325(3)	29(2)
N(1B)	7582(8)	18411(6)	2853(4)	31(2)
N(2B)	5628(8)	17900(6)	2593(4)	31(2)
N(3B)	5440(7)	19351(6)	1991(4)	22(2)
N(4B)	7402(7)	19970(6)	2078(4)	26(2)
C(1B)	7261(10)	17563(8)	2823(6)	36(3)
C(2B)	7888(11)	17013(9)	2979(6)	41(3)
C(3B)	7721(13)	16113(10)	2981(7)	55(4)
C(4B)	6864(15)	15496(10)	2780(8)	67(5)
C(5B)	5936(14)	15611(10)	2574(7)	57(4)
C(6B)	5612(12)	16387(9)	2510(6)	50(4)
C(7B)	6133(11)	17259(9)	2630(6)	39(3)
C(8B)	4501(10)	17638(9)	2424(6)	42(4)
C(9B)	3972(10)	18399(9)	2446(6)	37(3)
C(10B)	4284(9)	18967(8)	1981(6)	35(3)
C(11B)	5777(9)	19828(7)	1576(5)	24(3)
C(12B)	5103(10)	19988(7)	1154(6)	32(3)
C(13B)	5297(11)	20476(8)	708(5)	34(3)
C(14B)	6211(12)	20963(7)	530(6)	37(3)
C(15B)	7215(11)	21083(8)	776(6)	39(3)
C(16B)	7518(10)	20720(7)	1251(5)	30(3)
C(17B)	6929(9)	20174(7)	1632(5)	24(3)
C(18B)	8548(9)	20282(8)	2180(6)	35(3)
C(19B)	9212(9)	19762(8)	1816(6)	34(3)
C(20B)	9088(10)	18824(8)	1915(6)	37(3)
C(21B)	9454(11)	18652(9)	2511(6)	45(4)
C(22B)	8710(10)	18787(8)	3001(6)	38(3)
C(23B)	5821(10)	20354(9)	3699(6)	41(4)
C(24B)	5783(11)	19872(9)	4244(6)	41(4)
C(25B)	5359(12)	18905(10)	4152(6)	48(4)
C(26B)	6048(16)	18344(12)	4072(7)	68(5)
C(27B)	5648(22)	17455(13)	4030(8)	85(7)
C(28B)	4593(27)	17134(15)	4042(11)	117(10)
C(29B)	3928(20)	17699(17)	4124(11)	110(9)
C(30B)	4292(15)	18542(12)	4179(8)	77(6)
C(31B)	5084(12)	21031(10)	3780(6)	52(4)
C(32B)	3918(12)	20607(11)	3874(7)	53(4)
C(33B)	3501(15)	20677(14)	4410(7)	75(6)
C(34B)	2495(16)	20245(15)	4479(8)	87(7)
C(35B)	1866(16)	19684(16)	4035(8)	93(7)
C(36B)	2291(13)	19673(14)	3492(7)	77(6)
C(37B)	3293(13)	20097(12)	3404(7)	66(5)
C(38B)	7010(11)	20799(8)	3588(6)	38(3)
C(39B)	7055(12)	21456(9)	3155(6)	49(4)
C(40B)	7629(12)	21244(10)	4107(7)	50(4)
C(41B)	8522(12)	21103(10)	4266(7)	51(4)
C(42B)	9278(12)	21572(10)	4726(7)	52(4)
C(43B)	9163(16)	22363(12)	5017(7)	79(6)
C(44B)	9929(21)	22805(15)	5427(8)	103(8)
C(45B)	10751(19)	22496(18)	5555(8)	98(8)
C(46B)	10875(18)	21755(17)	5281(9)	111(9)
C(47B)	10144(15)	21282(14)	4877(8)	86(6)
O(11)	9591(20)	3892(17)	2023(12)	86(8)
C(211)	8752(21)	4212(17)	2834(12)	36(6)
C(212)	9192(29)	4501(24)	2395(16)	71(10)
C(213)	9573(42)	3238(35)	2435(25)	124(18)
C(214)	9177(42)	3706(35)	2923(24)	118(17)
O(12)	10810(39)	1543(33)	3222(22)	70(14)
C(221)	11001(76)	1945(65)	3012(43)	96(29)
C(222)	10934(92)	2552(72)	3594(49)	128(37)
C(223)	12040(122)	2560(102)	3543(64)	173(55)
C(224)	11826(74)	1902(64)	3450(40)	93(27)
C(231)	7812(79)	24220(60)	5083(40)	87(25)
C(232)	7217(85)	24000(66)	4810(50)	111(31)
C(233)	8164(95)	24661(77)	4284(53)	135(39)
C(234)	8425(94)	24679(77)	4904(54)	129(38)

S-48

C (235)

7133 (119)

24014 (97)

4232 (69)

180 (56)

S-49

Table S-XXIX. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 7.

Hf(1)-O(1)	2.003(7)
Hf(1)-O(2)	2.041(7)
Hf(1)-N(4)	2.201(9)
Hf(1)-N(3)	2.213(9)
Hf(1)-N(2)	2.222(9)
Hf(1)-N(1)	2.231(9)
O(1)-C(23)	1.419(13)
O(2)-C(38)	1.420(13)
N(1)-C(1)	1.310(14)
N(1)-C(22)	1.47(2)
N(2)-C(7)	1.32(2)
N(2)-C(8)	1.46(2)
N(3)-C(11)	1.35(2)
N(3)-C(10)	1.488(14)
N(4)-C(17)	1.34(2)
N(4)-C(18)	1.46(2)
C(1)-C(2)	1.41(2)
C(1)-C(7)	1.48(2)
C(2)-C(3)	1.40(2)
C(3)-C(4)	1.36(2)
C(4)-C(5)	1.36(2)
C(5)-C(6)	1.39(2)
C(6)-C(7)	1.41(2)
C(8)-C(9)	1.50(2)
C(9)-C(10)	1.51(2)
C(11)-C(12)	1.41(2)
C(11)-C(17)	1.45(2)
C(12)-C(13)	1.40(2)
C(13)-C(14)	1.37(2)
C(14)-C(15)	1.36(2)
C(15)-C(16)	1.37(2)
C(16)-C(17)	1.42(2)
C(18)-C(19)	1.54(2)
C(19)-C(20)	1.50(2)
C(20)-C(21)	1.54(2)
C(21)-C(22)	1.56(2)
C(23)-C(31)	1.53(2)
C(23)-C(24)	1.58(2)
C(23)-C(38)	1.59(2)
C(24)-C(25)	1.48(2)
C(25)-C(26)	1.38(2)
C(25)-C(30)	1.40(2)
C(26)-C(27)	1.39(2)
C(27)-C(28)	1.36(2)
C(28)-C(29)	1.40(3)
C(29)-C(30)	1.37(2)
C(31)-C(32)	1.49(2)
C(32)-C(37)	1.37(2)
C(32)-C(33)	1.40(2)
C(33)-C(34)	1.38(2)
C(34)-C(35)	1.39(2)
C(35)-C(36)	1.35(2)
C(36)-C(37)	1.38(2)
C(38)-C(39)	1.53(2)
C(38)-C(40)	1.54(2)
C(40)-C(41)	1.31(2)
C(41)-C(42)	1.48(2)
C(42)-C(43)	1.37(2)
C(42)-C(47)	1.39(2)
C(43)-C(44)	1.43(3)
C(44)-C(45)	1.35(3)
C(45)-C(46)	1.35(3)

S-50

C(46)-C(47)	1.37(2)
Hf(1B)-O(1B)	1.998(9)
Hf(1B)-O(2B)	2.024(8)
Hf(1B)-N(4B)	2.204(9)
Hf(1B)-N(2B)	2.212(10)
Hf(1B)-N(3B)	2.220(9)
Hf(1B)-N(1B)	2.227(10)
O(1B)-C(23B)	1.39(2)
O(2B)-C(38B)	1.42(2)
N(1B)-C(1B)	1.32(2)
N(1B)-C(22B)	1.48(2)
N(2B)-C(7B)	1.34(2)
N(2B)-C(8B)	1.47(2)
N(3B)-C(11B)	1.33(2)
N(3B)-C(10B)	1.491(14)
N(4B)-C(17B)	1.323(14)
N(4B)-C(18B)	1.47(2)
C(1B)-C(2B)	1.40(2)
C(1B)-C(7B)	1.49(2)
C(2B)-C(3B)	1.41(2)
C(3B)-C(4B)	1.36(2)
C(4B)-C(5B)	1.35(2)
C(5B)-C(6B)	1.42(2)
C(6B)-C(7B)	1.41(2)
C(8B)-C(9B)	1.52(2)
C(9B)-C(10B)	1.51(2)
C(11B)-C(12B)	1.40(2)
C(11B)-C(17B)	1.48(2)
C(12B)-C(13B)	1.38(2)
C(13B)-C(14B)	1.37(2)
C(14B)-C(15B)	1.39(2)
C(15B)-C(16B)	1.41(2)
C(16B)-C(17B)	1.43(2)
C(18B)-C(19B)	1.52(2)
C(19B)-C(20B)	1.52(2)
C(20B)-C(21B)	1.55(2)
C(21B)-C(22B)	1.53(2)
C(23B)-C(24B)	1.57(2)
C(23B)-C(31B)	1.59(2)
C(23B)-C(38B)	1.59(2)
C(24B)-C(25B)	1.51(2)
C(25B)-C(30B)	1.38(2)
C(25B)-C(26B)	1.40(2)
C(26B)-C(27B)	1.39(3)
C(27B)-C(28B)	1.35(3)
C(28B)-C(29B)	1.38(3)
C(29B)-C(30B)	1.32(3)
C(31B)-C(32B)	1.55(2)
C(32B)-C(33B)	1.38(2)
C(32B)-C(37B)	1.43(2)
C(33B)-C(34B)	1.36(3)
C(34B)-C(35B)	1.42(3)
C(35B)-C(36B)	1.40(2)
C(36B)-C(37B)	1.36(2)
C(38B)-C(40B)	1.48(2)
C(38B)-C(39B)	1.54(2)
C(40B)-C(41B)	1.29(2)
C(41B)-C(42B)	1.47(2)
C(42B)-C(47B)	1.36(2)
C(42B)-C(43B)	1.40(2)
C(43B)-C(44B)	1.39(3)
C(44B)-C(45B)	1.31(3)
C(45B)-C(46B)	1.32(3)
C(46B)-C(47B)	1.37(3)
O(11)-C(212)	1.42(4)
O(11)-C(213)	1.50(6)

S-S1

C(211)-C(214)	1.11(5)
C(211)-C(212)	1.27(4)
C(212)-C(214)	1.88(6)
C(213)-C(214)	1.45(7)
O(12)-C(221)	0.85(10)
O(12)-C(224)	1.39(10)
O(12)-C(222)	1.71(12)
C(221)-C(224)	1.50(13)
C(221)-C(222)	1.60(14)
C(221)-C(223)	1.9(2)
C(222)-C(223)	1.4(2)
C(222)-C(224)	1.7(2)
C(223)-C(224)	1.0(2)
C(231)-C(232)	0.98(11)
C(231)-C(234)	1.08(12)
C(232)-C(235)	1.4(2)
C(232)-C(234)	1.7(2)
C(232)-C(233)	2.0(2)
C(233)-C(234)	1.5(2)
C(233)-C(235)	1.5(2)
O(1)-Hf(1)-O(2)	76.7(3)
O(1)-Hf(1)-N(4)	123.2(3)
O(2)-Hf(1)-N(4)	91.1(3)
O(1)-Hf(1)-N(3)	85.4(3)
O(2)-Hf(1)-N(3)	140.9(3)
N(4)-Hf(1)-N(3)	70.0(3)
O(1)-Hf(1)-N(2)	100.1(3)
O(2)-Hf(1)-N(2)	135.6(3)
N(4)-Hf(1)-N(2)	124.1(3)
N(3)-Hf(1)-N(2)	81.3(3)
O(1)-Hf(1)-N(1)	135.5(3)
O(2)-Hf(1)-N(1)	82.2(3)
N(4)-Hf(1)-N(1)	95.7(3)
N(3)-Hf(1)-N(1)	132.0(3)
N(2)-Hf(1)-N(1)	69.4(4)
C(23)-O(1)-Hf(1)	120.5(7)
C(38)-O(2)-Hf(1)	115.3(7)
C(1)-N(1)-C(22)	119.3(10)
C(1)-N(1)-Hf(1)	122.2(8)
C(22)-N(1)-Hf(1)	118.5(8)
C(7)-N(2)-C(8)	117.2(9)
C(7)-N(2)-Hf(1)	121.1(8)
C(8)-N(2)-Hf(1)	121.4(7)
C(11)-N(3)-C(10)	116.5(9)
C(11)-N(3)-Hf(1)	121.2(8)
C(10)-N(3)-Hf(1)	122.2(7)
C(17)-N(4)-C(18)	118.7(10)
C(17)-N(4)-Hf(1)	121.2(7)
C(18)-N(4)-Hf(1)	120.0(8)
N(1)-C(1)-C(2)	123.4(12)
N(1)-C(1)-C(7)	112.7(11)
C(2)-C(1)-C(7)	123.6(11)
C(3)-C(2)-C(1)	132.4(14)
C(4)-C(3)-C(2)	130.4(14)
C(3)-C(4)-C(5)	125.5(12)
C(4)-C(5)-C(6)	130.2(13)
C(5)-C(6)-C(7)	133.0(13)
N(2)-C(7)-C(6)	122.5(11)
N(2)-C(7)-C(1)	114.2(10)
C(6)-C(7)-C(1)	123.1(11)
N(2)-C(8)-C(9)	114.2(9)
C(8)-C(9)-C(10)	113.6(10)
N(3)-C(10)-C(9)	112.0(9)
N(3)-C(11)-C(12)	121.7(11)
N(3)-C(11)-C(17)	112.8(11)

S-52

C(12)-C(11)-C(17)	125.4(11)
C(13)-C(12)-C(11)	132.3(13)
C(14)-C(13)-C(12)	127.7(14)
C(15)-C(14)-C(13)	128.4(13)
C(14)-C(15)-C(16)	128.2(13)
C(15)-C(16)-C(17)	133.9(14)
N(4)-C(17)-C(16)	122.4(12)
N(4)-C(17)-C(11)	114.5(10)
C(16)-C(17)-C(11)	123.1(12)
N(4)-C(18)-C(19)	116.8(11)
C(20)-C(19)-C(18)	117.7(11)
C(19)-C(20)-C(21)	116.3(12)
C(20)-C(21)-C(22)	114.3(11)
N(1)-C(22)-C(21)	113.5(12)
O(1)-C(23)-C(31)	109.2(10)
O(1)-C(23)-C(24)	109.6(9)
C(31)-C(23)-C(24)	111.2(10)
O(1)-C(23)-C(38)	103.8(9)
C(31)-C(23)-C(38)	113.4(9)
C(24)-C(23)-C(38)	109.3(10)
C(25)-C(24)-C(23)	120.0(10)
C(26)-C(25)-C(30)	117.8(12)
C(26)-C(25)-C(24)	120.0(11)
C(30)-C(25)-C(24)	122.2(11)
C(25)-C(26)-C(27)	121.6(14)
C(28)-C(27)-C(26)	120(2)
C(27)-C(28)-C(29)	119(2)
C(30)-C(29)-C(28)	120(2)
C(29)-C(30)-C(25)	121.0(14)
C(32)-C(31)-C(23)	114.5(10)
C(37)-C(32)-C(33)	118.0(12)
C(37)-C(32)-C(31)	120.4(11)
C(33)-C(32)-C(31)	121.6(11)
C(34)-C(33)-C(32)	120.4(13)
C(33)-C(34)-C(35)	120.0(14)
C(36)-C(35)-C(34)	119.6(14)
C(35)-C(36)-C(37)	120.6(14)
C(32)-C(37)-C(36)	121.3(12)
O(2)-C(38)-C(39)	109.9(9)
O(2)-C(38)-C(40)	110.1(10)
C(39)-C(38)-C(40)	108.0(9)
O(2)-C(38)-C(23)	104.9(9)
C(39)-C(38)-C(23)	111.8(10)
C(40)-C(38)-C(23)	112.2(9)
C(41)-C(40)-C(38)	125.1(11)
C(40)-C(41)-C(42)	125.0(12)
C(43)-C(42)-C(47)	118.0(14)
C(43)-C(42)-C(41)	118.4(14)
C(47)-C(42)-C(41)	123.6(13)
C(42)-C(43)-C(44)	121(2)
C(45)-C(44)-C(43)	119(2)
C(44)-C(45)-C(46)	120(2)
C(45)-C(46)-C(47)	122(2)
C(46)-C(47)-C(42)	120(2)
O(1B)-Hf(1B)-O(2B)	76.6(3)
O(1B)-Hf(1B)-N(4B)	121.3(4)
O(2B)-Hf(1B)-N(4B)	87.2(3)
O(1B)-Hf(1B)-N(2B)	100.9(4)
O(2B)-Hf(1B)-N(2B)	139.0(3)
N(4B)-Hf(1B)-N(2B)	125.3(4)
O(1B)-Hf(1B)-N(3B)	85.5(3)
O(2B)-Hf(1B)-N(3B)	137.2(3)
N(4B)-Hf(1B)-N(3B)	69.5(3)
N(2B)-Hf(1B)-N(3B)	82.1(4)
O(1B)-Hf(1B)-N(1B)	135.9(4)
O(2B)-Hf(1B)-N(1B)	83.9(3)

S-53

N(4B)-Hf(1B)-N(1B)	96.4(4)
N(2B)-Hf(1B)-N(1B)	69.6(4)
N(3B)-Hf(1B)-N(1B)	132.4(3)
C(23B)-O(1B)-Hf(1B)	120.2(7)
C(38B)-O(2B)-Hf(1B)	116.2(7)
C(1B)-N(1B)-C(22B)	117.5(10)
C(1B)-N(1B)-Hf(1B)	122.4(8)
C(22B)-N(1B)-Hf(1B)	120.1(8)
C(7B)-N(2B)-C(8B)	116.2(10)
C(7B)-N(2B)-Hf(1B)	121.4(8)
C(8B)-N(2B)-Hf(1B)	122.3(8)
C(11B)-N(3B)-C(10B)	116.2(9)
C(11B)-N(3B)-Hf(1B)	122.4(7)
C(10B)-N(3B)-Hf(1B)	120.9(7)
C(17B)-N(4B)-C(18B)	120.1(10)
C(17B)-N(4B)-Hf(1B)	120.9(8)
C(18B)-N(4B)-Hf(1B)	118.7(7)
N(1B)-C(1B)-C(2B)	124.3(12)
N(1B)-C(1B)-C(7B)	112.4(11)
C(2B)-C(1B)-C(7B)	123.3(12)
C(1B)-C(2B)-C(3B)	134.0(14)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	128(2)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	128(2)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	129(2)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	132.0(14)
N(2B)-C(7B)-C(6B)	121.7(13)
N(2B)-C(7B)-C(1B)	113.7(11)
C(6B)-C(7B)-C(1B)	124.6(13)
N(2B)-C(8B)-C(9B)	112.5(11)
C(10B)-C(9B)-C(8B)	114.4(11)
N(3B)-C(10B)-C(9B)	113.0(10)
N(3B)-C(11B)-C(12B)	123.2(11)
N(3B)-C(11B)-C(17B)	111.2(10)
C(12B)-C(11B)-C(17B)	125.5(12)
C(13B)-C(12B)-C(11B)	131.5(12)
C(14B)-C(13B)-C(12B)	131.6(12)
C(13B)-C(14B)-C(15B)	126.9(12)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	127.8(13)
C(15B)-C(16B)-C(17B)	132.6(12)
N(4B)-C(17B)-C(16B)	120.7(10)
N(4B)-C(17B)-C(11B)	115.2(10)
C(16B)-C(17B)-C(11B)	124.1(10)
N(4B)-C(18B)-C(19B)	114.1(10)
C(20B)-C(19B)-C(18B)	116.3(10)
C(19B)-C(20B)-C(21B)	116.9(11)
C(22B)-C(21B)-C(20B)	115.6(11)
N(1B)-C(22B)-C(21B)	114.0(11)
O(1B)-C(23B)-C(24B)	112.4(11)
O(1B)-C(23B)-C(31B)	107.4(10)
C(24B)-C(23B)-C(31B)	109.4(11)
O(1B)-C(23B)-C(38B)	105.7(10)
C(24B)-C(23B)-C(38B)	109.7(10)
C(31B)-C(23B)-C(38B)	112.2(11)
C(25B)-C(24B)-C(23B)	116.2(11)
C(30B)-C(25B)-C(26B)	117(2)
C(30B)-C(25B)-C(24B)	122(2)
C(26B)-C(25B)-C(24B)	120(2)
C(27B)-C(26B)-C(25B)	120(2)
C(28B)-C(27B)-C(26B)	120(2)
C(27B)-C(28B)-C(29B)	119(2)
C(30B)-C(29B)-C(28B)	121(2)
C(29B)-C(30B)-C(25B)	122(2)
C(32B)-C(31B)-C(23B)	113.0(12)
C(33B)-C(32B)-C(37B)	120(2)
C(33B)-C(32B)-C(31B)	121(2)
C(37B)-C(32B)-C(31B)	119.0(14)

S-54

C(34B)-C(33B)-C(32B)	119(2)
C(33B)-C(34B)-C(35B)	123(2)
C(36B)-C(35B)-C(34B)	116(2)
C(37B)-C(36B)-C(35B)	122(2)
C(36B)-C(37B)-C(32B)	119(2)
O(2B)-C(38B)-C(40B)	112.3(11)
O(2B)-C(38B)-C(39B)	107.9(11)
C(40B)-C(38B)-C(39B)	108.0(11)
O(2B)-C(38B)-C(23B)	103.2(10)
C(40B)-C(38B)-C(23B)	114.4(12)
C(39B)-C(38B)-C(23B)	110.9(11)
C(41B)-C(40B)-C(38B)	124.5(14)
C(40B)-C(41B)-C(42B)	130(2)
C(47B)-C(42B)-C(43B)	116(2)
C(47B)-C(42B)-C(41B)	122(2)
C(43B)-C(42B)-C(41B)	121(2)
C(44B)-C(43B)-C(42B)	119(2)
C(45B)-C(44B)-C(43B)	122(2)
C(44B)-C(45B)-C(46B)	120(2)
C(45B)-C(46B)-C(47B)	121(2)
C(42B)-C(47B)-C(46B)	121(2)
C(212)-O(11)-C(213)	97(3)
C(214)-C(211)-C(212)	104(4)
C(211)-C(212)-O(11)	115(3)
C(211)-C(212)-C(214)	35(2)
O(11)-C(212)-C(214)	84(3)
C(214)-C(213)-O(11)	98(4)
C(211)-C(214)-C(213)	117(5)
C(211)-C(214)-C(212)	41(3)
C(213)-C(214)-C(212)	81(4)
C(221)-O(12)-C(224)	80(9)
C(221)-O(12)-C(222)	68(9)
C(224)-O(12)-C(222)	66(6)
O(12)-C(221)-C(224)	66(8)
O(12)-C(221)-C(222)	83(10)
C(224)-C(221)-C(222)	68(7)
O(12)-C(221)-C(223)	93(10)
C(224)-C(221)-C(223)	33(6)
C(222)-C(221)-C(223)	48(6)
C(223)-C(222)-C(221)	75(9)
C(223)-C(222)-C(224)	36(7)
C(221)-C(222)-C(224)	54(6)
C(223)-C(222)-O(12)	82(9)
C(221)-C(222)-O(12)	30(4)
C(224)-C(222)-O(12)	48(5)
C(224)-C(223)-C(222)	87(10)
C(224)-C(223)-C(221)	54(10)
C(222)-C(223)-C(221)	56(8)
C(223)-C(224)-O(12)	118(10)
C(223)-C(224)-C(221)	93(10)
O(12)-C(224)-C(221)	34(4)
C(223)-C(224)-C(222)	56(10)
O(12)-C(224)-C(222)	66(6)
C(221)-C(224)-C(222)	59(6)
C(232)-C(231)-C(234)	111(10)
C(231)-C(232)-C(235)	132(10)
C(231)-C(232)-C(234)	37(8)
C(235)-C(232)-C(234)	96(10)
C(231)-C(232)-C(233)	83(10)
C(235)-C(232)-C(233)	49(8)
C(234)-C(232)-C(233)	47(5)
C(234)-C(233)-C(235)	100(10)
C(234)-C(233)-C(232)	56(7)
C(235)-C(233)-C(232)	44(7)
C(231)-C(234)-C(233)	109(10)
C(231)-C(234)-C(232)	33(7)

S-55

C(233)-C(234)-C(232)	77(8)
C(232)-C(235)-C(233)	87(10)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S-56

Table S-XXX. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 7.
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf(1)	25(1)	18(1)	28(1)	4(1)	0(1)	11(1)
O(1)	24(4)	14(4)	39(5)	5(4)	0(4)	11(3)
O(2)	32(5)	23(4)	28(5)	2(4)	6(4)	14(4)
N(1)	33(6)	25(6)	24(6)	11(4)	1(5)	9(5)
N(2)	27(6)	15(5)	30(6)	0(4)	1(4)	4(4)
N(3)	20(5)	18(5)	36(6)	6(4)	6(4)	10(4)
N(4)	25(6)	18(5)	28(6)	6(4)	-3(5)	6(4)
C(1)	31(7)	21(7)	38(8)	5(6)	-1(6)	15(6)
C(2)	24(7)	46(8)	43(9)	16(7)	4(6)	8(6)
C(3)	19(7)	59(10)	72(11)	39(9)	12(7)	11(7)
C(4)	22(7)	23(7)	78(12)	26(8)	0(7)	8(6)
C(5)	24(7)	16(7)	78(12)	8(7)	1(7)	6(5)
C(6)	22(7)	25(7)	43(8)	4(6)	4(6)	16(5)
C(7)	16(6)	23(7)	41(8)	7(6)	0(5)	10(5)
C(8)	20(6)	19(6)	41(8)	7(6)	6(5)	11(5)
C(9)	42(8)	33(7)	21(7)	3(6)	-2(6)	14(6)
C(10)	23(7)	28(7)	22(7)	-1(5)	2(5)	7(5)
C(11)	40(8)	22(6)	34(8)	13(6)	5(6)	23(6)
C(12)	33(8)	26(7)	43(8)	10(6)	8(6)	10(6)
C(13)	43(9)	39(8)	58(10)	15(7)	18(8)	21(7)
C(14)	13(7)	30(8)	91(13)	27(8)	13(7)	10(6)
C(15)	29(8)	28(7)	62(11)	18(7)	-4(7)	5(6)
C(16)	21(7)	39(8)	69(11)	16(7)	-1(7)	8(6)
C(17)	23(7)	22(6)	36(8)	17(6)	2(6)	7(5)
C(18)	27(7)	42(8)	43(9)	-2(7)	-17(6)	13(6)
C(19)	55(9)	58(10)	30(8)	7(7)	-16(7)	21(8)
C(20)	70(11)	43(9)	44(9)	17(7)	-17(8)	33(8)
C(21)	56(10)	50(9)	45(9)	24(7)	-9(8)	4(8)
C(22)	76(11)	41(8)	25(8)	9(6)	1(7)	13(8)
C(23)	26(7)	20(6)	46(8)	-1(6)	19(6)	8(5)
C(24)	34(7)	29(7)	23(7)	9(5)	3(5)	10(6)
C(25)	14(6)	22(6)	38(8)	-1(6)	-9(5)	5(5)
C(26)	32(8)	56(9)	42(9)	26(7)	8(6)	18(7)
C(27)	17(7)	46(10)	104(15)	40(10)	5(8)	9(7)
C(28)	27(9)	33(9)	152(21)	11(12)	15(11)	3(7)
C(29)	21(8)	45(10)	95(14)	-21(9)	3(8)	10(7)
C(30)	23(7)	41(8)	54(10)	12(7)	5(6)	7(6)
C(31)	28(7)	27(7)	43(8)	7(6)	4(6)	15(5)
C(32)	30(7)	28(7)	34(8)	4(6)	0(6)	15(6)
C(33)	25(7)	34(7)	46(9)	17(6)	1(6)	14(6)
C(34)	40(8)	42(9)	52(10)	20(8)	-10(7)	3(7)
C(35)	83(13)	53(10)	47(10)	-3(8)	-29(9)	14(9)
C(36)	57(10)	28(8)	52(10)	-9(7)	3(8)	15(7)
C(37)	43(8)	21(7)	34(8)	3(6)	3(6)	12(6)
C(38)	29(7)	18(6)	29(7)	0(5)	-1(5)	13(5)
C(39)	23(7)	26(7)	42(8)	2(6)	-4(6)	10(5)
C(40)	37(8)	23(7)	45(9)	8(6)	-8(6)	11(6)
C(41)	42(8)	23(7)	40(9)	1(6)	-5(6)	15(6)
C(42)	33(8)	49(9)	31(8)	-13(7)	-3(6)	13(7)
C(43)	102(15)	64(12)	59(12)	-10(9)	6(11)	34(11)
C(44)	130(20)	119(19)	50(13)	12(13)	20(12)	39(16)
C(45)	99(17)	91(16)	80(16)	-8(13)	39(13)	33(13)
C(46)	47(10)	59(11)	98(16)	-23(11)	28(10)	12(8)
C(47)	31(8)	43(9)	71(11)	2(8)	8(7)	11(7)
Hf(1B)	26(1)	30(1)	27(1)	5(1)	-2(1)	9(1)
O(1B)	37(5)	44(5)	39(6)	-2(4)	-4(4)	16(4)

S-57

O(2B)	29(5)	28(5)	29(5)	-2(4)	-3(4)	5(4)
N(1B)	41(6)	29(6)	22(6)	-2(5)	-4(5)	11(5)
N(2B)	26(6)	33(6)	32(6)	7(5)	1(5)	2(5)
N(3B)	15(5)	34(6)	20(5)	1(5)	3(4)	12(4)
N(4B)	15(5)	30(6)	35(6)	13(5)	-3(4)	3(4)
C(1B)	37(8)	38(8)	36(8)	8(6)	-1(6)	10(6)
C(2B)	52(9)	47(9)	29(8)	11(6)	-3(7)	20(7)
C(3B)	70(11)	45(10)	61(11)	14(8)	9(9)	35(9)
C(4B)	94(14)	26(9)	86(14)	14(9)	2(11)	21(9)
C(5B)	72(12)	37(9)	58(11)	-6(8)	-5(9)	12(8)
C(6B)	50(9)	44(9)	49(10)	1(7)	-16(7)	3(7)
C(7B)	51(9)	34(8)	28(8)	5(6)	-2(7)	0(7)
C(8B)	35(8)	46(9)	38(9)	14(7)	-4(6)	-7(6)
C(9B)	26(7)	46(8)	39(8)	8(7)	0(6)	6(6)
C(10B)	25(7)	34(7)	41(8)	-6(6)	-7(6)	2(6)
C(11B)	27(7)	21(6)	27(7)	-8(5)	-8(5)	15(5)
C(12B)	26(7)	22(7)	50(9)	-4(6)	-2(6)	17(5)
C(13B)	51(9)	27(7)	34(8)	5(6)	-2(7)	29(7)
C(14B)	69(10)	17(7)	34(8)	7(6)	-6(7)	29(7)
C(15B)	53(9)	19(7)	49(9)	16(6)	11(7)	13(6)
C(16B)	33(7)	20(6)	40(8)	1(6)	-8(6)	15(5)
C(17B)	35(7)	13(6)	23(7)	-2(5)	-3(5)	6(5)
C(18B)	34(8)	30(7)	40(8)	16(6)	-7(6)	-1(6)
C(19B)	18(7)	42(8)	46(9)	16(7)	11(6)	7(6)
C(20B)	29(7)	46(8)	38(8)	10(7)	4(6)	9(6)
C(21B)	35(8)	44(9)	60(10)	19(7)	11(7)	12(7)
C(22B)	32(8)	33(7)	50(9)	16(7)	-6(7)	4(6)
C(23B)	38(8)	49(9)	41(9)	-11(7)	-8(7)	29(7)
C(24B)	36(8)	66(10)	28(8)	11(7)	0(6)	25(7)
C(25B)	56(10)	57(10)	27(8)	8(7)	-7(7)	3(8)
C(26B)	99(14)	78(13)	40(10)	24(9)	10(9)	42(11)
C(27B)	154(23)	62(14)	48(12)	12(10)	4(13)	36(14)
C(28B)	160(28)	59(15)	120(22)	4(14)	-31(20)	0(18)
C(29B)	98(18)	108(20)	124(21)	77(17)	4(15)	-12(16)
C(30B)	72(13)	67(13)	95(15)	39(11)	-7(11)	9(10)
C(31B)	65(11)	61(10)	36(9)	3(7)	-8(8)	31(8)
C(32B)	46(9)	77(11)	48(10)	18(8)	-4(8)	37(8)
C(33B)	67(13)	138(18)	40(10)	8(10)	-2(9)	70(13)
C(34B)	67(14)	162(22)	44(12)	1(12)	7(10)	57(14)
C(35B)	73(14)	164(23)	64(14)	41(14)	19(11)	58(15)
C(36B)	37(10)	160(20)	42(11)	28(11)	1(8)	29(11)
C(37B)	56(11)	124(16)	32(9)	0(9)	-4(8)	50(11)
C(38B)	44(8)	34(8)	38(8)	-4(6)	-13(7)	15(6)
C(39B)	54(9)	43(9)	54(10)	3(7)	-20(8)	19(7)
C(40B)	50(10)	52(10)	52(10)	-4(8)	1(8)	21(8)
C(41B)	46(10)	53(10)	52(10)	-4(8)	2(8)	12(8)
C(42B)	50(10)	45(9)	55(10)	-5(8)	-12(8)	2(7)
C(43B)	89(14)	79(14)	54(12)	-8(10)	-13(10)	-2(11)
C(44B)	136(22)	105(18)	40(12)	-33(12)	-8(13)	-9(16)
C(45B)	95(17)	148(23)	27(11)	-11(12)	-37(11)	-16(16)
C(46B)	110(19)	149(23)	75(16)	-34(16)	-58(14)	55(17)
C(47B)	76(13)	104(16)	79(14)	-9(12)	-48(11)	37(12)

S-58

Table S-XXXI. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 7.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	2684(9)	1259(9)	2207(6)	45
H(3A)	1896(10)	-65(10)	2263(7)	56
H(4A)	1585(9)	-1176(8)	1607(7)	47
H(5A)	1845(9)	-1155(8)	696(7)	46
H(6A)	2380(9)	-78(7)	223(6)	34
H(8A)	2124(9)	887(7)	-254(5)	30
H(8B)	3300(9)	793(7)	-291(5)	30
H(9A)	2729(10)	2347(8)	-445(5)	38
H(9B)	2761(10)	1640(8)	-962(5)	38
H(10A)	4569(9)	1809(8)	-823(5)	30
H(10B)	4319(9)	2709(8)	-894(5)	30
H(12A)	5996(10)	2611(7)	-910(6)	39
H(13A)	7673(11)	2680(8)	-1048(7)	53
H(14A)	8970(10)	2962(8)	-408(7)	51
H(15A)	8916(10)	3355(8)	505(7)	46
H(16A)	7586(10)	3550(8)	997(7)	50
H(18A)	5426(10)	3907(8)	1644(6)	45
H(18B)	6564(10)	4164(8)	1414(6)	45
H(19A)	7050(12)	3000(9)	1723(6)	56
H(19B)	6532(12)	3447(9)	2236(6)	56
H(20A)	6093(12)	1913(9)	2104(6)	58
H(20B)	5419(12)	1970(9)	1564(6)	58
H(21A)	4948(12)	2684(10)	2662(6)	60
H(21B)	4434(12)	1728(10)	2421(6)	60
H(22A)	3196(12)	2529(9)	2261(6)	56
H(22B)	4033(12)	3224(9)	1996(6)	56
H(24A)	1544(9)	4049(7)	1077(5)	33
H(24B)	1074(9)	4118(7)	478(5)	33
H(26A)	1218(10)	2746(9)	1424(6)	48
H(27A)	412(10)	1301(10)	1339(8)	64
H(28A)	-158(12)	565(10)	458(11)	85
H(29A)	98(10)	1285(10)	-353(8)	67
H(30A)	897(9)	2728(8)	-264(6)	47
H(31A)	2401(9)	5325(8)	212(5)	37
H(31B)	3406(9)	5081(8)	-66(5)	37
H(33A)	752(9)	4953(8)	-323(6)	39
H(34A)	-214(11)	4325(9)	-1148(6)	53
H(35A)	518(14)	3492(10)	-1844(7)	74
H(36A)	2201(12)	3324(8)	-1714(6)	55
H(37A)	3131(10)	3876(7)	-869(5)	39
H(39A)	4841(9)	4786(8)	565(6)	45
H(39B)	4972(9)	5333(8)	1169(6)	45
H(39C)	4395(9)	5627(8)	666(6)	45
H(40A)	2764(10)	5660(8)	1310(6)	41
H(41A)	3010(10)	4606(8)	2105(6)	41
H(43A)	2573(15)	5033(11)	3057(8)	89
H(44A)	1759(19)	5864(16)	3742(9)	118
H(45A)	1093(17)	6970(14)	3468(10)	107
H(46A)	1182(13)	7249(11)	2547(9)	85
H(47A)	1889(10)	6419(9)	1864(7)	58
H(2BA)	8563(11)	17304(9)	3110(6)	49
H(3BA)	8269(13)	15916(10)	3141(7)	65
H(4BA)	6922(15)	14927(10)	2784(8)	80
H(5BA)	5437(14)	15106(10)	2458(7)	68
H(6BA)	4927(12)	16304(9)	2360(6)	59
H(8BA)	4146(10)	17238(9)	2677(6)	50
H(8BB)	4427(10)	17337(9)	2038(6)	50

S-59

H(9BA)	3212(10)	18182(9)	2420(6)	44
H(9BB)	4143(10)	18748(9)	2814(6)	44
H(10C)	4077(9)	18628(8)	1613(6)	42
H(10D)	3901(9)	19428(8)	2023(6)	42
H(12B)	4398(10)	19714(7)	1181(6)	38
H(13B)	4700(11)	20476(8)	488(5)	41
H(14B)	6154(12)	21243(7)	211(6)	44
H(15B)	7753(11)	21446(8)	607(6)	46
H(16B)	8242(10)	20864(7)	1333(5)	36
H(18C)	8716(9)	20269(8)	2580(6)	42
H(18D)	8742(9)	20879(8)	2105(6)	42
H(19C)	9038(9)	19777(8)	1417(6)	41
H(19D)	9950(9)	20047(8)	1883(6)	41
H(20C)	9479(10)	18549(8)	1627(6)	45
H(20D)	8348(10)	18542(8)	1853(6)	45
H(21C)	9543(11)	18061(9)	2482(6)	53
H(21D)	10140(11)	19028(9)	2610(6)	53
H(22C)	8916(10)	18532(8)	3325(6)	45
H(22D)	8796(10)	19402(8)	3116(6)	45
H(24C)	6493(11)	19983(9)	4410(6)	49
H(24D)	5351(11)	20122(9)	4522(6)	49
H(26B)	6770(16)	18562(12)	4047(7)	81
H(27B)	6108(22)	17081(13)	3993(8)	103
H(28B)	4323(27)	16541(15)	3995(11)	140
H(29B)	3205(20)	17481(17)	4141(11)	132
H(30B)	3818(15)	18903(12)	4237(8)	92
H(31C)	5350(12)	21456(10)	4106(6)	62
H(31D)	5118(12)	21332(10)	3444(6)	62
H(33B)	3900(15)	21013(14)	4717(7)	90
H(34B)	2203(16)	20320(15)	4837(8)	104
H(35B)	1732(16)	19102(16)	4139(8)	112
H(35C)	1190(16)	19847(16)	4013(8)	112
H(36B)	1875(13)	19365(14)	3180(7)	92
H(37B)	3570(13)	20054(12)	3041(7)	80
H(39D)	6657(12)	21180(9)	2814(6)	74
H(39E)	7776(12)	21671(9)	3064(6)	74
H(39F)	6759(12)	21928(9)	3320(6)	74
H(40B)	7355(12)	21655(10)	4335(7)	61
H(41B)	8719(12)	20633(10)	4060(7)	61
H(43B)	8582(16)	22589(12)	4938(7)	94
H(44B)	9857(21)	23333(15)	5616(8)	123
H(45B)	11243(19)	22798(18)	5836(8)	118
H(46B)	11471(18)	21549(17)	5363(9)	134
H(47B)	10240(15)	20752(14)	4703(8)	103

S-60

Table S-XXXII. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 8. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Hf(1)	5007(1)	-1502(1)	12918(1)	32(1)
O(1)	4723(5)	-1024(2)	13471(6)	36(2)
O(2)	4707(5)	-1370(2)	10799(6)	39(2)
N(1)	3827(6)	-1594(2)	14192(7)	35(2)
N(2)	3798(6)	-1902(2)	11921(8)	38(2)
N(3)	6055(6)	-1933(2)	12525(8)	36(2)
N(4)	6305(6)	-1632(2)	14864(7)	36(2)
N(5)	6500(6)	-1032(2)	12766(8)	40(2)
N(6)	7487(8)	-308(2)	13134(10)	62(3)
C(1)	3062(8)	-1820(2)	13818(10)	38(2)
C(2)	2178(8)	-1842(3)	14412(10)	45(3)
C(3)	1384(9)	-2083(3)	14294(11)	53(3)
C(4)	1208(9)	-2379(3)	13576(13)	59(3)
C(5)	1807(9)	-2502(3)	12733(11)	55(3)
C(6)	2631(8)	-2352(3)	12311(10)	46(3)
C(7)	3137(8)	-2036(2)	12627(10)	39(2)
C(8)	3834(9)	-2067(3)	10586(10)	48(3)
C(9)	4802(8)	-2289(3)	10714(10)	46(3)
C(10)	5813(8)	-2083(2)	11102(10)	43(3)
C(11)	6758(7)	-2080(2)	13586(9)	28(2)
C(12)	7180(8)	-2409(2)	13495(10)	39(2)
C(13)	8047(9)	-2580(3)	14358(11)	49(3)
C(14)	8769(8)	-2475(3)	15563(11)	47(3)
C(15)	8752(8)	-2173(3)	16282(11)	49(3)
C(16)	7965(8)	-1929(3)	16015(10)	44(3)
C(17)	7018(8)	-1880(2)	14913(9)	35(2)
C(18)	6460(9)	-1415(2)	16146(9)	46(3)
C(19)	6213(10)	-1598(3)	17398(11)	62(3)
C(20)	5162(12)	-1789(3)	17101(11)	65(4)
C(21)	4152(10)	-1574(3)	16852(11)	63(4)
C(22)	3834(9)	-1376(3)	15432(10)	50(3)
C(23)	5006(8)	-709(2)	13062(11)	38(2)
C(24)	5007(9)	-443(2)	14229(10)	45(3)
C(25)	5654(10)	-518(2)	15717(11)	49(3)
C(26)	6769(11)	-532(3)	16091(11)	61(3)
C(27)	7350(12)	-602(3)	17496(13)	74(4)
C(28)	6851(16)	-648(3)	18511(14)	91(5)
C(29)	5721(16)	-638(3)	18164(14)	86(5)
C(30)	5134(12)	-578(3)	16755(12)	70(4)
C(31)	4168(8)	-601(2)	11648(10)	44(3)
C(32)	3031(8)	-583(3)	11691(11)	45(3)
C(33)	2522(10)	-278(3)	11714(14)	67(4)
C(34)	1452(11)	-268(3)	11731(16)	84(4)
C(35)	881(11)	-564(3)	11720(15)	80(4)
C(36)	1387(10)	-874(3)	11729(15)	78(4)
C(37)	2453(9)	-880(3)	11712(12)	58(3)
C(38)	6099(8)	-734(2)	12780(10)	35(2)
C(39)	6572(8)	-406(3)	12473(11)	47(3)
C(40)	7799(9)	36(2)	12865(12)	51(3)
C(41)	8778(10)	27(3)	12333(15)	74(4)
C(42)	9197(12)	389(3)	12201(17)	88(5)
C(43)	9436(12)	568(4)	13590(18)	102(5)
C(44)	8419(13)	586(3)	14091(16)	95(5)
C(45)	8032(12)	231(3)	14274(15)	86(4)
C(46)	7558(8)	-1077(2)	12490(11)	44(3)
C(47)	7487(8)	-1330(3)	11336(10)	44(3)

S-61

C(48)	8552(8)	-1405(3)	11060(11)	50(3)
C(49)	9319(9)	-1523(3)	12438(12)	61(3)
C(50)	9456(8)	-1270(3)	13619(11)	58(3)
C(51)	8374(8)	-1180(3)	13851(10)	50(3)
C1(1)	892(5)	-1722(1)	29850(5)	135(2)
C1(2)	1301(7)	-1486(2)	27357(6)	192(3)
C(52)	1557(18)	-1466(6)	28954(18)	159(9)

S-62

Table XXXIII. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 8.

Hf(1)-O(1)	2.028(6)
Hf(1)-O(2)	2.075(6)
Hf(1)-N(4)	2.231(7)
Hf(1)-N(2)	2.254(8)
Hf(1)-N(1)	2.255(7)
Hf(1)-N(3)	2.276(8)
Hf(1)-N(5)	2.716(7)
O(1)-C(23)	1.390(10)
N(1)-C(1)	1.313(11)
N(1)-C(22)	1.489(12)
N(2)-C(7)	1.349(12)
N(2)-C(8)	1.477(11)
N(3)-C(11)	1.318(11)
N(3)-C(10)	1.472(11)
N(4)-C(17)	1.338(11)
N(4)-C(18)	1.492(11)
N(5)-C(38)	1.291(11)
N(5)-C(46)	1.479(12)
N(6)-C(39)	1.247(12)
N(6)-C(40)	1.466(13)
C(1)-C(2)	1.423(13)
C(1)-C(7)	1.473(13)
C(2)-C(3)	1.385(14)
C(3)-C(4)	1.35(2)
C(4)-C(5)	1.37(2)
C(5)-C(6)	1.380(14)
C(6)-C(7)	1.407(13)
C(8)-C(9)	1.507(14)
C(9)-C(10)	1.500(13)
C(11)-C(12)	1.421(12)
C(11)-C(17)	1.483(12)
C(12)-C(13)	1.383(13)
C(13)-C(14)	1.355(14)
C(14)-C(15)	1.394(14)
C(15)-C(16)	1.375(14)
C(16)-C(17)	1.409(13)
C(18)-C(19)	1.534(14)
C(19)-C(20)	1.51(2)
C(20)-C(21)	1.52(2)
C(21)-C(22)	1.554(14)
C(23)-C(38)	1.520(14)
C(23)-C(24)	1.554(13)
C(23)-C(31)	1.568(13)
C(24)-C(25)	1.500(14)
C(25)-C(30)	1.39(2)
C(25)-C(26)	1.39(2)
C(26)-C(27)	1.41(2)
C(27)-C(28)	1.34(2)
C(28)-C(29)	1.41(2)
C(29)-C(30)	1.40(2)
C(31)-C(32)	1.486(14)
C(32)-C(33)	1.378(14)
C(32)-C(37)	1.398(14)
C(33)-C(34)	1.39(2)
C(34)-C(35)	1.38(2)
C(35)-C(36)	1.39(2)
C(36)-C(37)	1.39(2)
C(38)-C(39)	1.499(13)
C(40)-C(41)	1.499(14)
C(40)-C(45)	1.54(2)
C(41)-C(42)	1.55(2)
C(42)-C(43)	1.49(2)

S-63

C(43)-C(44)	1.53(2)
C(44)-C(45)	1.52(2)
C(46)-C(47)	1.496(13)
C(46)-C(51)	1.515(13)
C(47)-C(48)	1.508(13)
C(48)-C(49)	1.517(14)
C(49)-C(50)	1.51(2)
C(50)-C(51)	1.523(14)
C1(1)-C(52)	1.72(2)
C1(2)-C(52)	1.51(2)

O(1)-Hf(1)-O(2)	92.0(2)
O(1)-Hf(1)-N(4)	97.8(3)
O(2)-Hf(1)-N(4)	143.7(3)
O(1)-Hf(1)-N(2)	128.0(3)
O(2)-Hf(1)-N(2)	79.9(3)
N(4)-Hf(1)-N(2)	118.7(3)
O(1)-Hf(1)-N(1)	78.5(2)
O(2)-Hf(1)-N(1)	128.9(3)
N(4)-Hf(1)-N(1)	87.4(3)
N(2)-Hf(1)-N(1)	68.4(3)
O(1)-Hf(1)-N(3)	154.6(3)
O(2)-Hf(1)-N(3)	88.6(3)
N(4)-Hf(1)-N(3)	68.1(3)
N(2)-Hf(1)-N(3)	77.1(3)
N(1)-Hf(1)-N(3)	120.1(3)
O(1)-Hf(1)-N(5)	64.0(2)
O(2)-Hf(1)-N(5)	73.3(2)
N(4)-Hf(1)-N(5)	79.9(3)
N(2)-Hf(1)-N(5)	151.3(3)
N(1)-Hf(1)-N(5)	137.9(2)
N(3)-Hf(1)-N(5)	92.0(3)
C(23)-O(1)-Hf(1)	132.7(6)
C(1)-N(1)-C(22)	117.3(8)
C(1)-N(1)-Hf(1)	122.0(6)
C(22)-N(1)-Hf(1)	120.5(6)
C(7)-N(2)-C(8)	117.5(8)
C(7)-N(2)-Hf(1)	121.1(6)
C(8)-N(2)-Hf(1)	120.6(6)
C(11)-N(3)-C(10)	119.4(8)
C(11)-N(3)-Hf(1)	120.9(6)
C(10)-N(3)-Hf(1)	118.9(6)
C(17)-N(4)-C(18)	117.4(8)
C(17)-N(4)-Hf(1)	123.4(6)
C(18)-N(4)-Hf(1)	119.0(6)
C(38)-N(5)-C(46)	120.5(8)
C(38)-N(5)-Hf(1)	109.3(6)
C(46)-N(5)-Hf(1)	129.6(6)
C(39)-N(6)-C(40)	117.8(10)
N(1)-C(1)-C(2)	123.9(9)
N(1)-C(1)-C(7)	114.1(8)
C(2)-C(1)-C(7)	121.8(9)
C(3)-C(2)-C(1)	132.1(11)
C(4)-C(3)-C(2)	130.9(11)
C(3)-C(4)-C(5)	125.4(11)
C(4)-C(5)-C(6)	130.0(11)
C(5)-C(6)-C(7)	131.8(11)
N(2)-C(7)-C(6)	124.0(9)
N(2)-C(7)-C(1)	111.7(8)
C(6)-C(7)-C(1)	124.2(9)
N(2)-C(8)-C(9)	114.3(8)
C(10)-C(9)-C(8)	110.8(8)
N(3)-C(10)-C(9)	113.8(8)
N(3)-C(11)-C(12)	123.4(8)
N(3)-C(11)-C(17)	113.4(8)
C(12)-C(11)-C(17)	123.1(8)

S-64

C(13)-C(12)-C(11)	132.0(9)
C(14)-C(13)-C(12)	129.5(10)
C(13)-C(14)-C(15)	126.8(10)
C(16)-C(15)-C(14)	128.4(10)
C(15)-C(16)-C(17)	133.4(10)
N(4)-C(17)-C(16)	125.2(9)
N(4)-C(17)-C(11)	111.8(8)
C(16)-C(17)-C(11)	122.7(9)
N(4)-C(18)-C(19)	113.3(8)
C(20)-C(19)-C(18)	117.1(9)
C(19)-C(20)-C(21)	116.0(9)
C(20)-C(21)-C(22)	115.6(9)
N(1)-C(22)-C(21)	112.4(9)
O(1)-C(23)-C(38)	109.1(7)
O(1)-C(23)-C(24)	109.9(8)
C(38)-C(23)-C(24)	111.5(8)
O(1)-C(23)-C(31)	109.0(8)
C(38)-C(23)-C(31)	108.1(8)
C(24)-C(23)-C(31)	109.2(8)
C(25)-C(24)-C(23)	118.2(8)
C(30)-C(25)-C(26)	118.5(11)
C(30)-C(25)-C(24)	119.6(12)
C(26)-C(25)-C(24)	121.8(10)
C(25)-C(26)-C(27)	120.3(12)
C(28)-C(27)-C(26)	121(2)
C(27)-C(28)-C(29)	119.8(14)
C(30)-C(29)-C(28)	119.2(14)
C(25)-C(30)-C(29)	120.8(14)
C(32)-C(31)-C(23)	116.1(8)
C(33)-C(32)-C(37)	118.4(10)
C(33)-C(32)-C(31)	121.7(10)
C(37)-C(32)-C(31)	119.9(9)
C(32)-C(33)-C(34)	120.6(11)
C(35)-C(34)-C(33)	120.6(12)
C(34)-C(35)-C(36)	119.7(12)
C(37)-C(36)-C(35)	119.1(12)
C(36)-C(37)-C(32)	121.7(11)
N(5)-C(38)-C(39)	126.9(9)
N(5)-C(38)-C(23)	117.3(8)
C(39)-C(38)-C(23)	115.7(8)
N(6)-C(39)-C(38)	123.2(10)
N(6)-C(40)-C(41)	109.9(9)
N(6)-C(40)-C(45)	107.4(10)
C(41)-C(40)-C(45)	110.5(10)
C(40)-C(41)-C(42)	110.8(10)
C(43)-C(42)-C(41)	110.6(12)
C(42)-C(43)-C(44)	109.6(12)
C(45)-C(44)-C(43)	109.7(12)
C(44)-C(45)-C(40)	110.2(11)
N(5)-C(46)-C(47)	110.6(8)
N(5)-C(46)-C(51)	109.2(8)
C(47)-C(46)-C(51)	111.8(9)
C(46)-C(47)-C(48)	113.4(8)
C(47)-C(48)-C(49)	107.9(8)
C(50)-C(49)-C(48)	113.0(9)
C(49)-C(50)-C(51)	110.6(9)
C(46)-C(51)-C(50)	112.2(9)
Cl(2)-C(52)-Cl(1)	120.0(14)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S-65

Table S-XXXIV. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 8.
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf(1)	41(1)	24(1)	29(1)	-1(1)	7(1)	-2(1)
O(1)	46(4)	25(4)	37(4)	-1(3)	11(3)	0(3)
O(2)	51(4)	32(4)	30(3)	10(3)	5(3)	8(3)
N(1)	44(5)	29(5)	35(4)	-2(3)	13(4)	-16(4)
N(2)	42(5)	33(5)	38(5)	-8(4)	11(4)	-6(4)
N(3)	43(5)	34(5)	32(4)	-7(4)	11(4)	-4(4)
N(4)	48(5)	33(5)	27(4)	-6(3)	9(4)	-2(4)
N(5)	41(5)	33(5)	47(5)	0(4)	14(4)	-8(4)
N(6)	60(7)	51(6)	70(7)	4(5)	9(5)	-7(5)
C(1)	42(6)	34(6)	34(5)	10(5)	3(5)	-1(5)
C(2)	49(7)	39(6)	48(6)	10(5)	14(5)	-5(5)
C(3)	44(7)	68(8)	46(7)	22(6)	9(5)	6(6)
C(4)	47(7)	54(8)	66(8)	14(7)	-1(6)	-18(6)
C(5)	56(8)	44(7)	51(7)	2(6)	-9(6)	-20(6)
C(6)	56(7)	37(6)	38(6)	-7(5)	-1(5)	-10(6)
C(7)	41(6)	33(6)	36(6)	0(5)	-1(5)	-3(5)
C(8)	60(7)	49(7)	32(6)	-3(5)	8(5)	-10(6)
C(9)	63(7)	39(6)	35(6)	-9(5)	11(5)	-3(6)
C(10)	57(7)	34(6)	35(6)	-1(5)	7(5)	10(5)
C(11)	28(5)	23(5)	30(5)	5(4)	4(4)	-6(4)
C(12)	50(6)	26(5)	42(6)	-5(5)	15(5)	2(5)
C(13)	60(7)	39(6)	48(7)	-2(5)	18(6)	10(6)
C(14)	42(6)	41(7)	54(7)	3(5)	8(5)	13(5)
C(15)	39(6)	51(7)	52(7)	6(6)	4(5)	0(6)
C(16)	52(7)	43(6)	32(6)	-11(5)	0(5)	-8(5)
C(17)	39(6)	28(5)	34(5)	4(4)	5(5)	-7(5)
C(18)	57(7)	38(6)	34(5)	-4(5)	0(5)	4(5)
C(19)	96(10)	47(7)	39(6)	-2(5)	9(6)	21(7)
C(20)	129(12)	35(6)	28(5)	13(5)	17(7)	-10(8)
C(21)	87(9)	66(9)	43(6)	-10(6)	29(6)	-29(8)
C(22)	67(8)	45(6)	47(6)	-6(5)	28(6)	-11(6)
C(23)	47(6)	17(5)	49(6)	4(5)	11(5)	1(5)
C(24)	64(7)	24(5)	46(6)	6(5)	13(5)	-3(5)
C(25)	79(9)	22(6)	48(7)	-7(5)	20(6)	5(6)
C(26)	105(11)	35(7)	41(7)	-9(5)	15(7)	-12(7)
C(27)	111(11)	35(7)	63(9)	3(6)	2(8)	-23(7)
C(28)	169(17)	45(8)	44(8)	-2(6)	6(10)	-27(10)
C(29)	162(16)	50(8)	52(9)	-9(7)	41(10)	-21(10)
C(30)	118(11)	39(7)	61(8)	-12(6)	39(8)	-4(7)
C(31)	53(7)	31(6)	47(6)	0(5)	14(5)	-13(5)
C(32)	53(7)	35(6)	51(6)	2(5)	20(5)	-4(5)
C(33)	57(8)	35(7)	111(11)	-5(7)	27(7)	-1(6)
C(34)	80(10)	46(8)	134(13)	-17(8)	42(9)	9(8)
C(35)	78(10)	57(9)	120(12)	-6(8)	50(9)	12(8)
C(36)	60(9)	66(9)	115(12)	7(8)	37(8)	-13(7)
C(37)	53(8)	40(7)	79(9)	-2(6)	14(6)	2(6)
C(38)	43(6)	19(5)	43(6)	-5(4)	8(5)	-1(5)
C(39)	40(7)	43(7)	57(7)	4(5)	10(6)	-7(5)
C(40)	49(7)	26(6)	79(8)	2(6)	20(6)	-9(5)
C(41)	73(9)	52(8)	105(11)	-9(7)	40(8)	5(7)
C(42)	79(10)	66(10)	125(13)	4(9)	36(9)	-25(8)
C(43)	75(11)	73(11)	145(16)	8(10)	7(10)	-31(9)
C(44)	121(13)	59(9)	106(12)	-25(8)	36(10)	-26(9)
C(45)	99(11)	64(9)	103(11)	-16(8)	41(9)	-11(8)
C(46)	50(7)	28(6)	58(7)	3(5)	24(6)	-3(5)
C(47)	42(6)	52(7)	37(6)	2(5)	11(5)	-3(5)

S-66

C(48)	57(7)	44(7)	49(6)	-8(5)	14(6)	-3(5)
C(49)	55(7)	50(7)	83(8)	5(7)	30(6)	12(7)
C(50)	41(7)	81(9)	51(7)	-9(6)	10(5)	-10(6)
C(51)	49(7)	56(7)	46(6)	-3(5)	13(5)	-6(6)
C1(1)	191(5)	112(4)	123(4)	10(3)	82(4)	26(4)
C1(2)	333(9)	143(5)	129(4)	33(4)	111(6)	29(6)
C(52)	227(24)	165(20)	82(12)	-3(14)	36(14)	6(19)

S-67

Table S-XXXV. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 8.

	x	y	z	U(eq)
H(2B)	2124(8)	-1660(3)	14988(10)	55
H(3A)	887(9)	-2034(3)	14793(11)	64
H(4A)	633(9)	-2510(3)	13660(13)	71
H(5A)	1632(9)	-2720(3)	12393(11)	66
H(6B)	2902(8)	-2485(3)	11707(10)	56
H(8A)	3823(9)	-1894(3)	9883(10)	58
H(8B)	3192(9)	-2204(3)	10243(10)	58
H(9A)	4833(8)	-2460(3)	11434(10)	55
H(9B)	4738(8)	-2403(3)	9821(10)	55
H(10A)	6409(8)	-2227(2)	11049(10)	52
H(10B)	5753(8)	-1904(2)	10411(10)	52
H(12A)	6802(8)	-2532(2)	12709(10)	47
H(13A)	8150(9)	-2798(3)	14068(11)	58
H(14A)	9336(8)	-2621(3)	15951(11)	56
H(15A)	9349(8)	-2130(3)	17039(11)	59
H(16A)	8083(8)	-1761(3)	16706(10)	53
H(18A)	5998(9)	-1218(2)	15904(9)	55
H(18B)	7196(9)	-1336(2)	16433(9)	55
H(19A)	6791(10)	-1756(3)	17785(11)	75
H(19B)	6222(10)	-1432(3)	18128(11)	75
H(20A)	5193(12)	-1939(3)	17895(11)	78
H(20B)	5098(12)	-1930(3)	16273(11)	78
H(21A)	4252(10)	-1414(3)	17624(11)	76
H(21B)	3559(10)	-1720(3)	16887(11)	76
H(22A)	3126(9)	-1279(3)	15301(10)	61
H(22B)	4336(9)	-1191(3)	15480(10)	61
H(24A)	5262(9)	-231(2)	13946(10)	54
H(24B)	4269(9)	-408(2)	14242(10)	54
H(26A)	7132(11)	-494(3)	15409(11)	73
H(27A)	8094(12)	-616(3)	17725(13)	89
H(28A)	7249(16)	-686(3)	19441(14)	109
H(29A)	5369(16)	-671(3)	18860(14)	103
H(30A)	4388(12)	-579(3)	16515(12)	84
H(31A)	4373(8)	-381(2)	11374(10)	52
H(31B)	4212(8)	-760(2)	10914(10)	52
H(33A)	2896(10)	-77(3)	11719(14)	80
H(34A)	1118(11)	-60(3)	11749(16)	101
H(35A)	161(11)	-556(3)	11708(15)	96
H(36A)	1016(10)	-1074(3)	11746(15)	93
H(37A)	2792(9)	-1087(3)	11716(12)	70
H(39A)	6164(8)	-270(3)	11754(11)	57
H(40A)	7209(9)	146(2)	12161(12)	61
H(41A)	8605(10)	-83(3)	11415(15)	88
H(41B)	9335(10)	-104(3)	12980(15)	88
H(42A)	9843(12)	377(3)	11886(17)	106
H(42B)	8661(12)	515(3)	11499(17)	106
H(43A)	9691(12)	795(4)	13491(18)	123
H(43B)	9993(12)	449(4)	14284(18)	123
H(44A)	8569(13)	707(3)	14985(16)	113
H(44B)	7865(13)	708(3)	13402(16)	113
H(45A)	7385(12)	243(3)	14587(15)	103
H(45B)	8576(12)	112(3)	14992(15)	103
H(46A)	7779(8)	-860(2)	12181(11)	52
H(47A)	6994(8)	-1247(3)	10471(10)	53
H(47B)	7193(8)	-1539(3)	11589(10)	53
H(48A)	8830(8)	-1203(3)	10725(11)	60
H(48B)	8468(8)	-1579(3)	10342(11)	60

S-68

H(49A)	9054(9)	-1734(3)	12723(12)	73
H(49B)	10014(9)	-1568(3)	12283(12)	73
H(50A)	9791(8)	-1067(3)	13384(11)	70
H(50B)	9922(8)	-1363(3)	14484(11)	70
H(51A)	8103(8)	-1374(3)	14253(10)	60
H(51B)	8469(8)	-996(3)	14527(10)	60
H(52A)	1439(18)	-1234(6)	29195(18)	191
H(52B)	2319(18)	-1510(6)	29332(18)	191

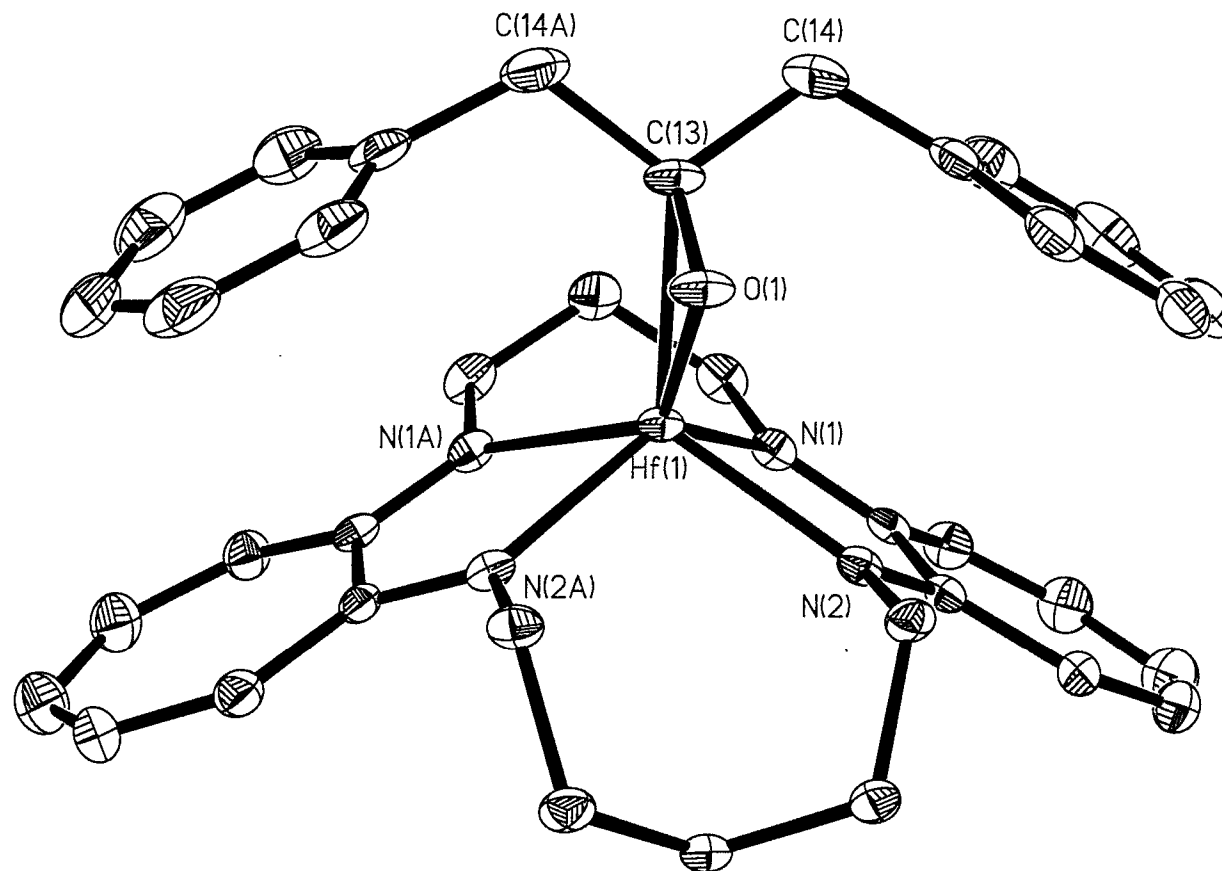


Figure S-I. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **2** showing atom labeling scheme.

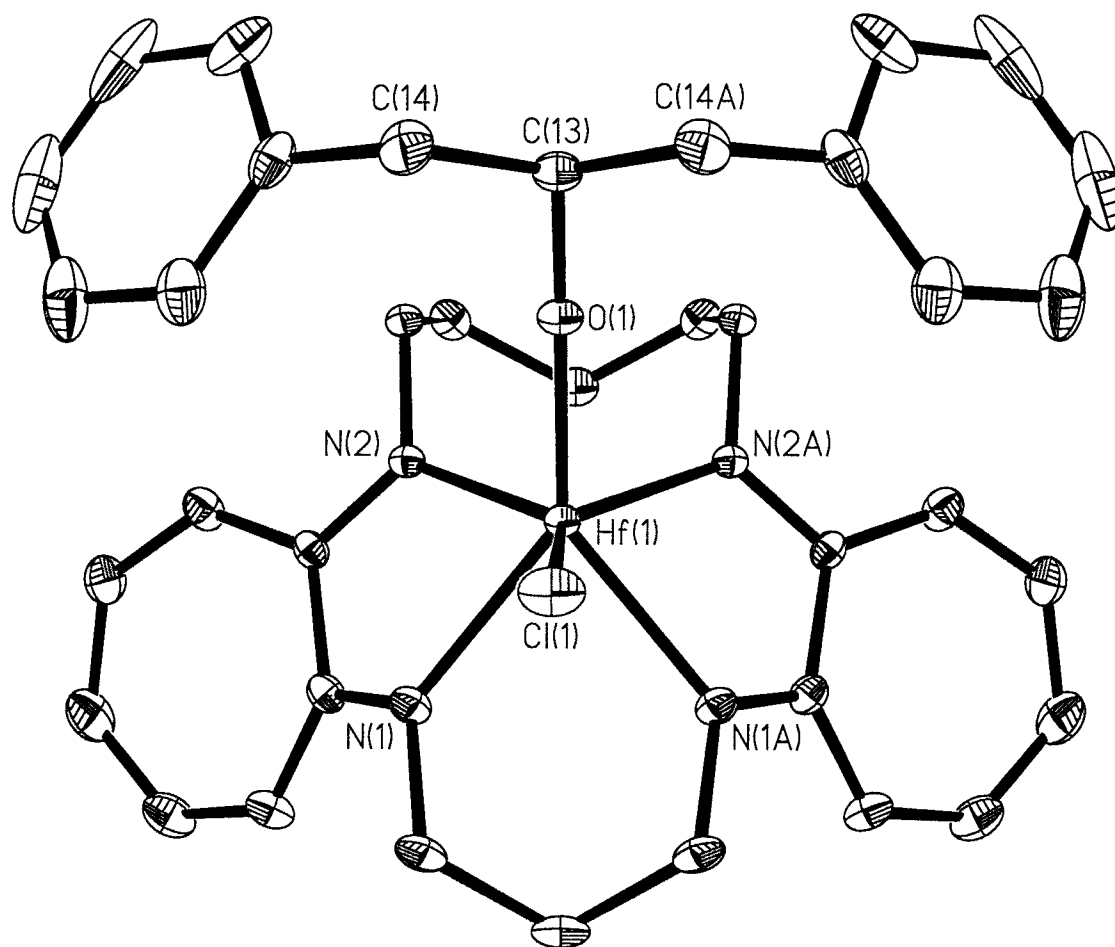


Figure S-II. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **3** showing atom labeling scheme.

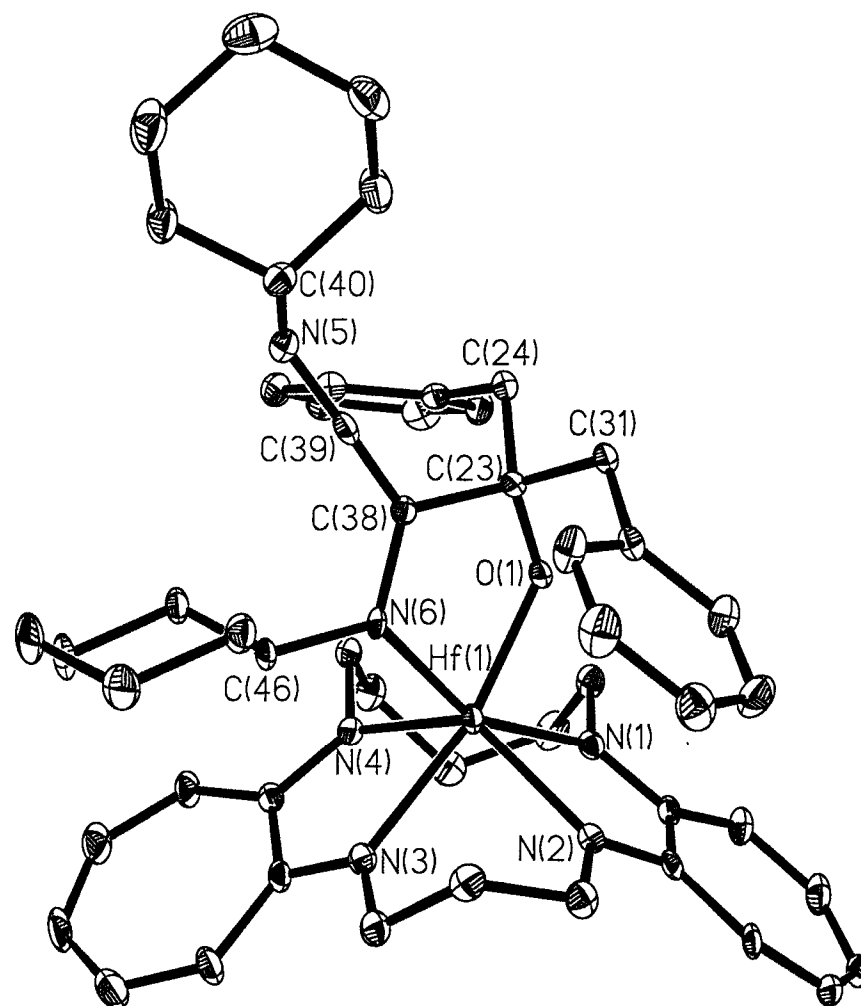


Figure S-III. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **4** showing atom labeling scheme.

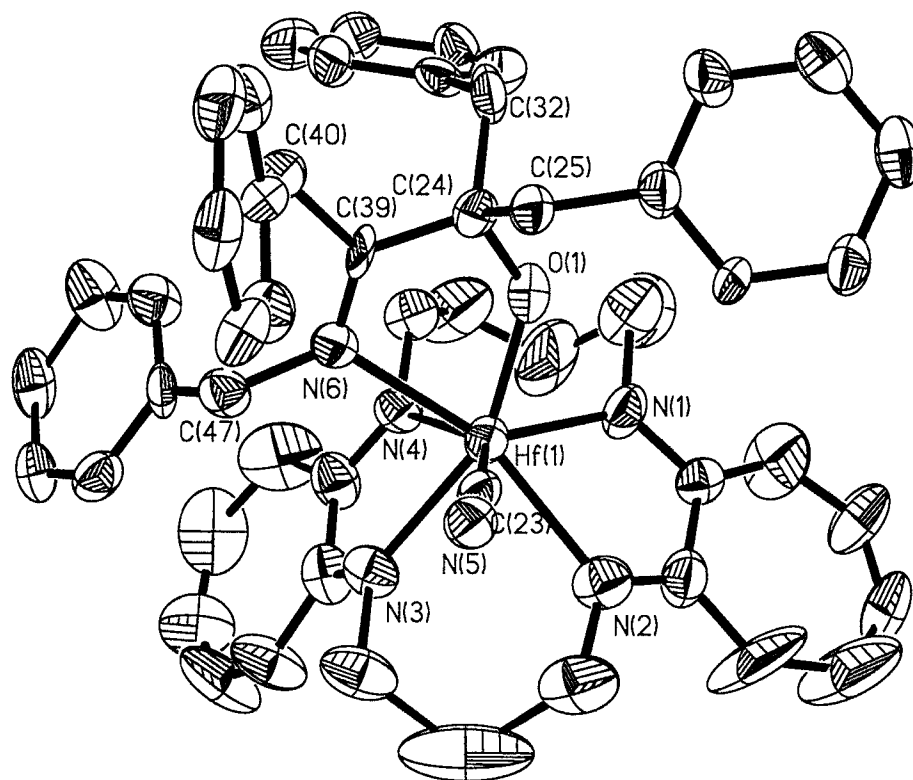


Figure S-IV. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **5** showing atom labeling scheme.

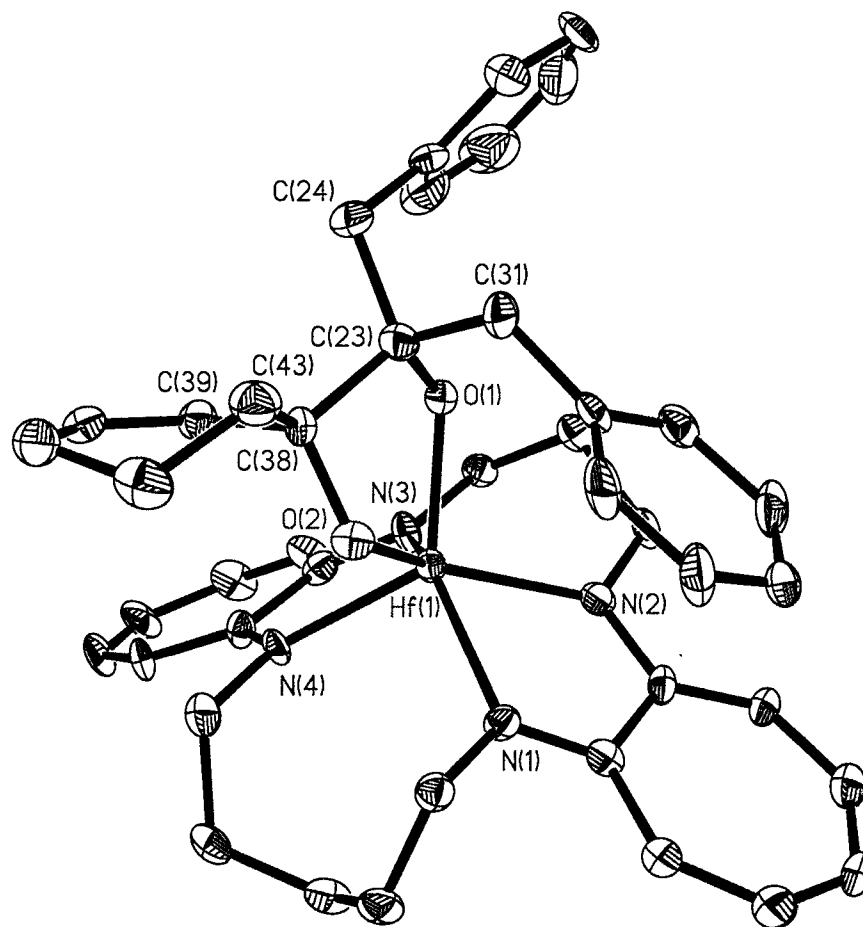


Figure S-V. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **6** showing atom labeling scheme.

S-74

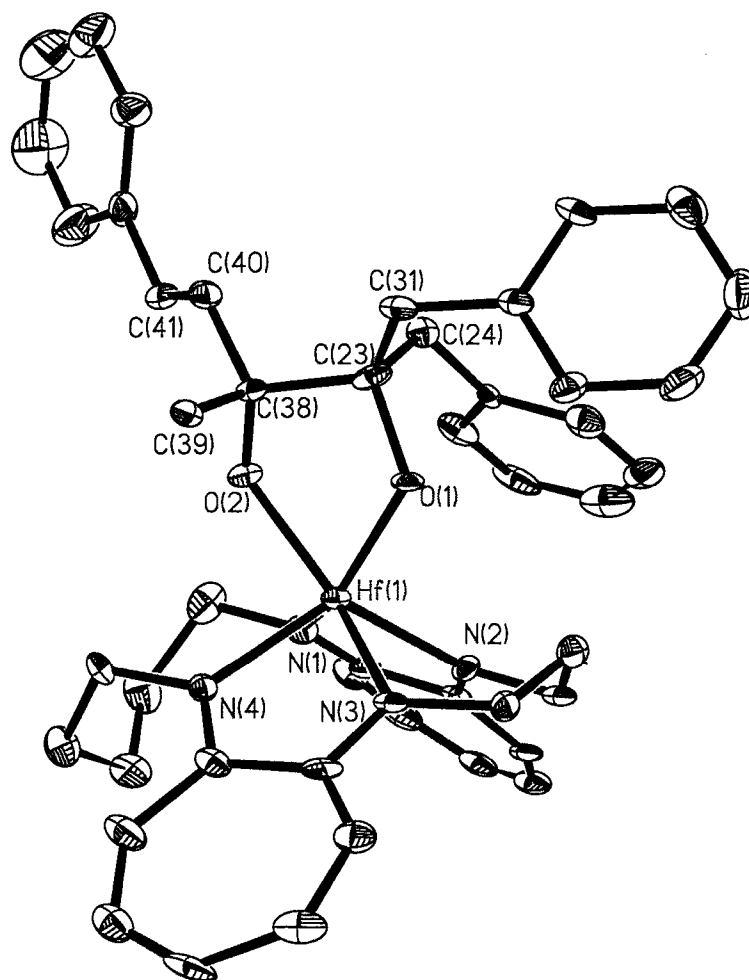


Figure S-VI. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **7** showing atom labeling scheme.

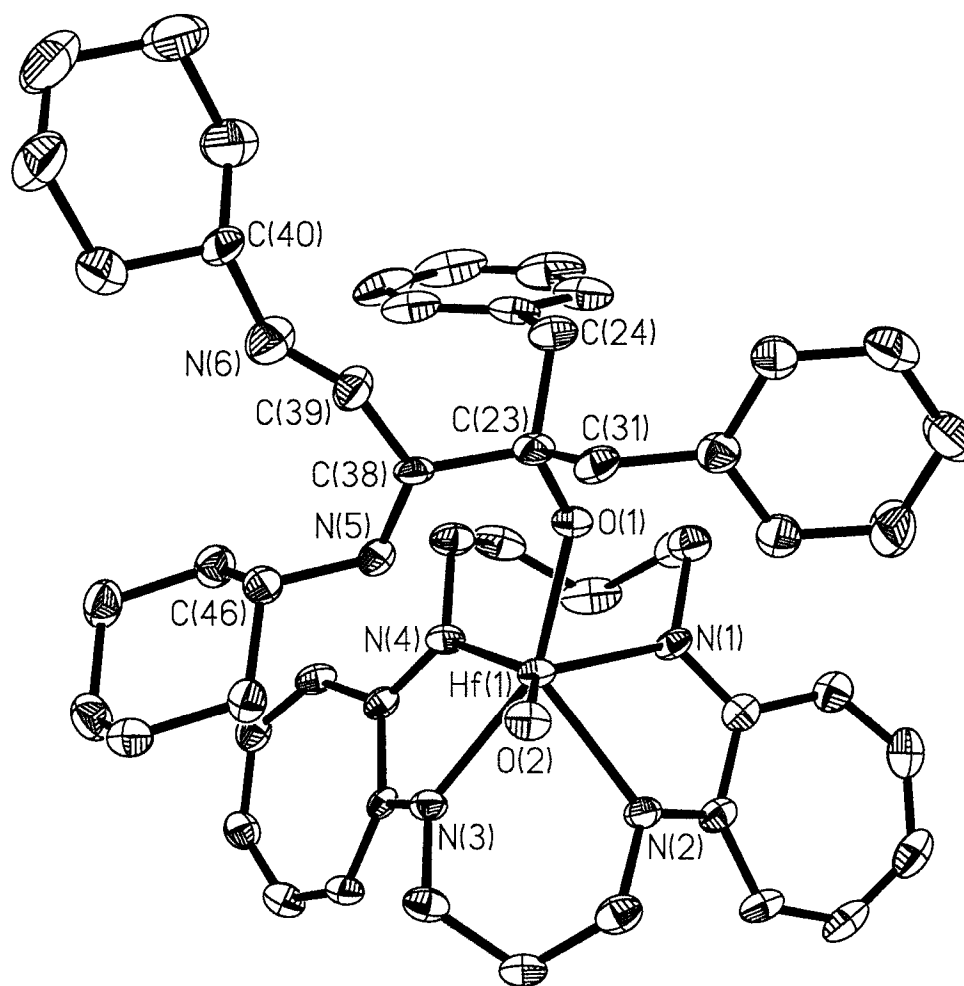


Figure S-VII. ORTEP Diagram (30% ellipsoids) of **8** showing atom labeling scheme.