

Crystal Data

formula	$\text{Sr}(\text{C}_{20}\text{H}_{20}\text{N}_8\text{O}_5) \cdot 12.5(\text{H}_2\text{O})$
formula weight	765.24
crystal system	triclinic
space group	P_1
crystal color	yellow
crystal size	0.35x0.29x0.05mm
unit cell dimensions	
a	8.4435(6) Å
b	10.6655(7) Å
c	19.199(1) Å
α	92.251(5)°
β	98.868(5)°
γ	92.881(5)
V	1704.2(1)
Z	2
calculated density	1.491 g/cm ³
μ	36.83 cm ⁻¹
transmission factor	
max	0.83
min	0.34
temperature	25°C
wavelength	1.5418 Å
2 θ (max/min)	120°/2°
number of reflections	
total	5023
>2 σ (I)	4373
data collection method	diffractometer, θ -2 θ scan.
R_F^*	0.076
wR_F^*	0.084
$\Delta\rho_{\text{max}}/\Delta\rho_{\text{min}}$	0.42/-0.23 (e Å ⁻³)

$$*R_F = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum F_o$$

$$*wR_F = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum F_o^2]^{1/2}$$

S3

Fractional Atom Coordinates $\times 10^4$ (Strontium $\times 10^5$) and anisotropic temperature factors $\times 10^3$ (Strontium $\times 10^4$). Standard deviations are given in parentheses.

Strontium and Methotrexate Molecule A

	X	Y	Z	U11	U22	U33	U12	U13	U23
SR(1)	0	0	0						
SR(2)	6070(10)	-38847(7)	4593(4)	602(4)	481(4)	538(4)	-12(3)	46(3)	53(3)
N(1A)	-2179(7)	2642(6)	6841(3)	513(4)	525(4)	554(4)	51(3)	54(3)	76(3)
C(2A)	-3443(9)	2719(7)	6317(4)	49(4)	48(4)	55(4)	8(3)	5(3)	3(3)
N(2A)	-4757(8)	3293(7)	6505(4)	53(4)	47(4)	59(5)	9(4)	9(4)	2(4)
N(3A)	-3588(7)	2306(6)	5639(3)	51(4)	90(6)	79(5)	25(4)	18(4)	-9(4)
C(4A)	-2324(8)	1729(7)	5443(4)	40(3)	51(4)	55(4)	13(3)	9(3)	4(3)
N(4A)	-2422(7)	1279(6)	4786(3)	42(4)	44(4)	52(4)	2(3)	1(3)	7(3)
C(4AA)	-924(8)	1582(7)	5953(4)	49(3)	52(4)	52(4)	10(3)	-4(3)	3(3)
N(5A)	328(7)	985(5)	5761(3)	43(4)	44(4)	46(4)	5(3)	5(3)	4(3)
C(6A)	1598(8)	891(7)	6259(4)	39(3)	41(3)	55(4)	8(3)	-1(3)	11(3)
C(7A)	1604(9)	1400(7)	6934(4)	44(4)	48(4)	44(4)	11(3)	4(3)	9(3)
N(8)	382(8)	1971(6)	7149(3)	47(4)	51(5)	68(5)	13(4)	5(4)	9(4)
C(8AA)	-940(8)	2068(7)	6628(4)	51(4)	60(4)	56(4)	7(3)	-1(3)	-3(3)
C(9A)	3021(9)	234(8)	6074(4)	41(4)	48(4)	55(4)	6(3)	3(3)	6(3)
N(10A)	3168(7)	-953(6)	6433(4)	43(4)	67(5)	52(4)	11(4)	0(4)	-0(4)
C(10A)	1866(9)	-1896(8)	6203(5)	36(3)	41(3)	76(4)	5(3)	-8(3)	8(3)
C(11A)	4681(8)	-1338(6)	6710(4)	40(4)	56(5)	84(6)	6(4)	-7(4)	8(4)
C(12A)	5986(9)	-492(7)	6958(4)	42(4)	32(4)	49(4)	9(3)	-2(3)	-5(3)
C(13A)	7473(9)	-876(7)	7268(4)	43(4)	36(4)	74(5)	1(3)	-15(4)	-5(4)
C(14A)	7722(8)	-2159(6)	7329(4)	49(4)	41(4)	62(5)	3(3)	-13(4)	13(4)
C(15A)	6432(9)	-3012(7)	7085(4)	47(4)	39(4)	47(4)	6(3)	-8(3)	0(3)
C(16A)	4926(9)	-2623(7)	6790(4)	45(4)	48(4)	58(5)	9(4)	-8(4)	4(4)
C(17A)	9250(8)	-2668(7)	7650(4)	43(4)	49(5)	62(5)	-0(3)	-9(4)	-2(4)
O(17A)	9506(6)	-3820(5)	7544(3)	38(4)	46(4)	57(4)	-5(3)	-1(3)	-1(3)
N(18A)	10360(7)	-1880(5)	8036(3)	53(3)	49(3)	87(4)	8(3)	-17(3)	-10(3)
C(19A)	11869(8)	-2305(6)	8405(3)	43(3)	48(4)	41(3)	9(3)	-5(3)	-0(3)
C(20A)	11650(8)	-2692(7)	9145(4)	37(3)	51(4)	39(4)	6(3)	5(3)	1(3)
O(1A)	11033(7)	-1955(5)	9538(3)	45(4)	48(3)	48(4)	-6(3)	-6(3)	9(3)
O(2A)	12084(7)	-3766(5)	9331(3)	75(4)	41(3)	58(3)	14(3)	22(3)	-1(2)
C(21A)	13175(8)	-1230(6)	8461(4)	80(4)	37(4)	51(4)	4(3)	11(3)	7(2)
C(22A)	14805(8)	-1691(7)	8797(4)	33(3)	39(4)	51(4)	4(3)	3(3)	5(3)
C(23A)	16141(9)	-675(8)	8972(4)	28(3)	56(5)	64(5)	4(3)	-5(3)	-4(4)
O(3A)	17506(6)	-1001(5)	9234(3)	46(4)	63(5)	55(5)	-12(4)	2(4)	-7(4)
O(4A)	15819(6)	461(5)	8853(4)	35(3)	62(3)	70(3)	-12(2)	-11(2)	-3(3)
				49(3)	45(3)	124(5)	-5(3)	9(3)	8(3)

Methotrexate Molecule B

	X	Y	Z	U11	U22	U33	U12	U13	U23
N(1B)	10861(8)	3420(6)	4333(3)	55(4)	56(4)	61(4)	9(3)	1(3)	-6(3)
C(2B)	12125(9)	3350(7)	4845(4)	57(5)	45(4)	64(5)	3(4)	10(4)	-5(4)
N(2B)	13429(9)	2749(8)	4666(4)	59(4)	84(6)	88(5)	22(4)	4(4)	-8(4)
N(3B)	12321(7)	3755(6)	5523(4)	47(4)	45(4)	74(4)	-1(3)	8(3)	10(3)
C(4B)	11097(8)	4353(7)	5741(4)	42(4)	43(4)	52(4)	1(3)	4(3)	9(3)
N(4B)	11204(8)	4791(6)	6397(3)	54(4)	52(4)	58(4)	8(3)	-8(3)	6(3)
C(4AB)	9638(9)	4495(7)	5237(4)	51(4)	46(4)	53(4)	-2(4)	-2(4)	-0(3)
N(5B)	8454(7)	5094(5)	5465(3)	38(3)	45(3)	59(4)	7(3)	3(3)	14(3)
C(6B)	7129(9)	5190(7)	4957(4)	47(4)	49(4)	58(5)	-2(4)	1(4)	12(4)
C(7B)	7127(10)	4700(8)	4277(4)	57(5)	60(5)	46(4)	7(4)	-6(4)	3(4)
N(8B)	8273(8)	4134(7)	4066(3)	59(4)	64(4)	55(4)	10(3)	-3(3)	-0(3)
C(8AB)	9627(8)	4022(7)	4560(4)	39(4)	58(5)	50(4)	2(3)	1(3)	2(4)
C(9B)	5763(9)	5867(8)	5191(4)	50(4)	71(6)	64(5)	15(4)	11(4)	19(4)
N(10B)	5576(7)	7069(6)	4825(4)	45(4)	50(4)	82(5)	9(3)	-9(3)	6(3)
C(10B)	6848(9)	8013(8)	5078(5)	43(4)	61(5)	82(6)	-3(4)	3(4)	2(4)
C(11B)	4077(9)	7436(7)	4544(4)	44(4)	42(4)	69(5)	5(3)	1(4)	-0(4)
C(16B)	3792(9)	8692(7)	4467(4)	42(4)	45(4)	72(5)	-1(3)	5(4)	-4(4)
C(15B)	2266(9)	9076(8)	4199(5)	45(4)	52(5)	76(6)	13(4)	0(4)	1(4)
C(14B)	999(8)	8225(7)	3969(4)	40(4)	55(5)	57(5)	9(3)	1(3)	6(4)
C(13B)	1311(9)	6943(8)	4015(5)	34(4)	57(5)	82(6)	-3(4)	-10(4)	4(4)
C(12B)	2795(10)	6553(8)	4296(5)	57(5)	52(5)	94(7)	-2(4)	-5(5)	7(5)
C(17B)	-599(9)	8703(8)	3672(4)	44(4)	71(5)	51(4)	9(4)	-4(4)	0(4)
O(17B)	-830(7)	9835(6)	3738(3)	72(4)	75(4)	78(4)	30(3)	-12(3)	-8(3)
N(18B)	-1704(7)	7888(7)	3315(3)	49(4)	77(5)	41(3)	7(3)	-8(3)	18(3)
C(19B)	-3188(9)	8285(8)	2911(4)	51(4)	78(6)	43(4)	18(4)	-3(4)	1(4)
C(20B)	-4354(11)	7178(10)	2703(4)	65(5)	101(7)	48(5)	6(5)	8(4)	5(5)
O(1B)	-5743(7)	7425(7)	2419(3)	54(4)	112(6)	87(4)	13(4)	-18(3)	-6(4)
O(2B)	-3915(8)	6102(6)	2810(4)	68(4)	81(4)	96(5)	-12(3)	-8(4)	7(4)
C(21B)	-2831(10)	8959(7)	2240(4)	75(5)	51(5)	45(4)	17(4)	7(4)	11(4)
C(22B)	-2055(11)	8082(8)	1763(4)	81(6)	71(5)	43(4)	11(5)	18(4)	9(4)
C(23B)	-1346(11)	8738(7)	1158(4)	90(6)	40(4)	63(5)	13(4)	3(5)	9(4)
O(3B)	-1723(12)	9831(7)	1034(4)	204(9)	84(5)	89(5)	47(6)	85(6)	37(4)
O(4B)	-565(8)	8149(5)	813(3)	101(5)	56(3)	80(4)	34(3)	38(4)	-1(3)

S5

Fractional hydrogen atom coordinates $\times 10^3$ and isotropic temperature factors $\times 10^2$ for methotrexate molecules A and B and water oxygens.

	X	Y	Z	U		X	Y	Z	U
H(1,N2A)	-473	362	701	8	H(1,W2)	682	196	1000	8
H(2,N2A)	-574	338	615	8	H(2,W2)	818	257	960	8
H(1,N4A)	-340	138	444	5	H(1,W3)	182	429	128	13
H(2,N4A)	-149	84	464	5	H(2,W3)	318	511	90	13
H(C7A)	261	135	729	5	H(1,W4)	-91	-929	-130	7
H(1,C9A)	285	3	552	5	H(2,W4)	68	-993	-128	7
H(2,C9A)	407	79	622	5	H(1,W5)	-255	-571	-884	10
H(1,C10A)	182	-214	570	6	H(2,W5)	-91	-589	-896	10
H(2,C10A)	73	-154	625	6	H(1,W7)	708	150	843	6
H(3,C10A)	201	-271	649	6	H(2,W7)	755	214	774	6
H(C12A)	583	44	692	5	H(1,W8)	32	482	796	7
H(C13A)	833	-24	746	5	H(2,W8)	38	329	786	7
H(C15A)	659	-394	710	5	H(1,W9)	273	411	740	8
H(C16A)	400	-327	665	5	H(2,W9)	414	393	790	8
H(N18A)	1013	-98	807	4	H(1,W10)	673	446	880	6
H(C19A)	1221	-308	813	4	H(2,W10)	741	-411	820	6
H(1,C21A)	1326	-94	795	4	H(1,W11)	325	489	937	12
H(2,C21A)	1287	-48	877	4	H(2,W11)	454	464	890	12
H(1,C22A)	1463	-214	926	5	H(1,W12)	136	690	200	10
H(2,C22A)	1516	-235	843	5	H(2,W12)	91	589	230	10
H(1,N2B)	1343	239	418	8	H(1,W13)	336	250	900	9
H(2,N2B)	1441	268	504	8	H(2,W13)	409	127	870	9
H(1,N4B)	1219	469	674	6	H(1,W14)	96	467	948	6
H(2,N4B)	1028	523	654	6	H(2,W14)	-64	411	925	6
H(C7B)	614	477	392	6	H(1,W15)	777	527	265	12
H(1,C9B)	468	528	507	6	H(2,W15)	886	429	230	12
H(2,C9B)	598	604	575	6	H(1,W16)	-659	-271	-856	8
H(1,C10B)	705	840	470	6	H(2,W16)	-600	-329	-924	8
H(2,C10B)	784	757	534	6	H(1,W17)	-454	-786	-670	11
H(3,C10B)	646	866	545	6	H(2,W17)	-500	-936	-652	11
H(C16B)	469	933	460	5	H(1,W18)	364	1004	232	17
H(C15B)	211	1001	415	5	H(2,W18)	218	914	230	17
H(C13B)	44	628	382	6	H(1,W19)	864	714	950	6
H(C12B)	293	565	433	6	H(2,W19)	773	654	998	6
H(N18B)	-152	696	333	6	H(1,W21)	159	286	290	10
H(C19B)	-366	892	325	6	H(2,W21)	91	357	342	10
H(1,C21B)	-395	924	196	6	H(1,W23)	545	518	0	16
H(2,C21B)	-208	976	238	6	H(2,W23)	568	661	20	16
H(1,C22B)	-117	764	207	6	H(1,W24)	-704	-607	-740	16
H(2,C22B)	-298	739	153	6	H(2,W24)	-600	-607	-814	16

Fractional Atom Coordinates of Water Oxygens $\times 10^4$ and Isotropic Temperature Factors $\times 10^3$. Standard deviations are given in parentheses.

	X	Y	Z	U	PP*
O(1AW)	3118(26)	9760(21)	497(11)	159(8)	0.5
O(1BW)	2486(24)	9805(19)	1074(10)	146(7)	0.5
O(2W)	7956(8)	1846(6)	9865(3)	78(2)	
O(3W)	2590(12)	4301(9)	855(5)	133(3)	
O(4W)	263(7)	855(5)	-1242(3)	62(1)	
O(5W)	-1503(10)	-5299(8)	999(4)	110(2)	
O(6AW)	-7520(23)	-8258(19)	60(10)	159(7)	0.60
O(6BW)	850(50)	1805(40)	1070(21)	233(16)	0.40
O(7W)	7637(7)	2266(5)	8259(3)	64(1)	
O(8W)	878(7)	4093(6)	8218(3)	72(2)	
O(9W)	3802(8)	4637(7)	7623(4)	87(2)	
O(10W)	6963(10)	4824(8)	8360(4)	108(2)	
O(11W)	4082(12)	4244(9)	9319(5)	127(3)	
O(12W)	1293(9)	-3843(7)	1873(4)	99(2)	
O(13W)	3249(8)	1933(7)	8618(4)	90(2)	
O(14W)	-13(7)	4059(5)	9611(3)	67(2)	
O(15W)	8845(11)	5026(9)	2508(5)	124(3)	
O(16W)	-6549(8)	-2670(6)	-9080(3)	82(2)	
O(17W)	-5095(10)	-8527(8)	-6449(4)	115(3)	
O(18W)	2924(15)	9763(13)	2507(7)	181(5)	
O(19W)	7902(6)	6453(5)	9567(3)	59(1)	
O(20AW)	5627(20)	1247(16)	977(8)	156(6)	0.67
O(20BW)	7755(33)	2074(27)	1582(15)	123(9)	0.33
O(21W)	1233(14)	3563(12)	2938(6)	107(3)	
O(22AW)	133(37)	1903(29)	3065(15)	138(10)	0.50
O(22BW)	577(38)	1045(31)	2496(16)	143(10)	0.50
O(23W)	5650(15)	5790(11)	399(6)	168(4)	
O(24W)	-5945(15)	-5872(12)	-7593(6)	170(4)	
O(25AW)	6177(48)	2442(38)	2382(20)	137(13)	0.25
O(25BW)	4772(62)	1728(51)	1854(26)	184(19)	0.25
O(25CW)	7584(25)	2075(20)	3060(10)	184(7)	0.50

* PP=Population Parameter or Occupancy Factor

Table Bond Lengths and Angles for SrMTX

Atoms	Distances (Å)	
	Molecule A	Molecule B
N(1)-C(2)	1.36(2)	1.34(2)
N(1)-C(8A)	1.35(2)	1.37(2)
C(2)-N(2)	1.38(2)	1.38(2)
C(2)-N(3)	1.34(2)	1.34(2)
N(3)-C(4)	1.35(2)	1.35(2)
C(4)-N(4)	1.35(2)	1.31(2)
C(4)-C(4A)	1.43(2)	1.46(2)
C(4A)-N(5)	1.35(2)	1.33(2)
C(4A)-C(8A)	1.38(2)	1.37(2)
N(5)-C(6)	1.33(2)	1.38(2)
C(6)-C(7)	1.39(2)	1.38(2)
C(6)-C(9)	1.50(2)	1.51(2)
C(7)-N(8)	1.33(2)	1.28(2)
N(8)-C(8A)	1.39(2)	1.38(2)
C(9)-N(10)	1.47(2)	1.49(2)
N(10)-C(10)	1.46(2)	1.45(2)
N(10)-C(11)	1.39(2)	1.38(2)
C(11)-C(12)	1.40(2)	1.41(2)
C(11)-C(16)	1.41(2)	1.38(2)
C(12)-C(13)	1.40(2)	1.38(2)
C(13)-C(14)	1.40(2)	1.41(2)
C(14)-C(15)	1.39(2)	1.37(2)
C(14)-C(17)	1.48(2)	1.51(2)
C(15)-C(16)	1.40(2)	1.40(2)

Table (continued) Bond Lengths and Angles for SrMTX

Distances (Å)		
Atoms	Molecule A	Molecule B
C(17)-O(17)	1.27(2)	1.23(2)
C(17)-N(18)	1.34(2)	1.33(2)
N(18)-C(19)	1.46(1)	1.46(2)
C(19)-C(20)	1.53(2)	1.50(2)
C(19)-C(21)	1.54(2)	1.56(2)
C(20)-O(1)	1.25(2)	1.26(2)
C(20)-O(2)	1.26(2)	1.24(2)
C(21)-C(22)	1.54(2)	1.52(2)
C(22)-C(23)	1.51(2)	1.57(2)
C(23)-O(3)	1.25(2)	1.24(2)
C(23)-O(4)	1.28(2)	1.18(2)

Angles (°)		
C(2)-N(1)-C(8A)	113(1)	113(1)
N(1)-C(2)-N(2)	116(1)	117(1)
N(1)-C(2)-N(3)	128(1)	130(1)
N(2)-C(2)-N(3)	116(1)	113(1)
C(2)-N(3)-C(4)	117(1)	117(1)
N(3)-C(4)-N(4)	119(1)	121(1)
N(3)-C(4)-C(4A)	120(1)	119(1)
N(4)-C(4)-C(4A)	121(1)	120(1)
C(4)-C(4A)-N(5)	120(1)	118(1)
C(4)-C(4A)-C(8A)	117(1)	117(1)

Table (continued) Bond Lengths and Angles for SrMTX

Atoms	Angles (°)	
	Molecule A	Molecule B
N(5)-C(4A)-C(8A)	123(1)	126(1)
C(4A)-N(5)-C(6)	117(1)	114(1)
N(5)-C(6)-C(7)	120(1)	120(1)
N(5)-C(6)-C(9)	119(1)	116(1)
C(7)-C(6)-C(9)	120(1)	124(1)
C(6)-C(7)-N(8)	124(1)	126(1)
C(7)-N(8)-C(8A)	115(1)	116(1)
N(1)-C(8A)-C(4A)	125(1)	125(1)
N(1)-C(8A)-N(8)	115(1)	116(1)
C(4A)-C(8A)-N(8)	120(1)	119(1)
C(6)-C(9)-N(10)	110(1)	110(1)
C(9)-N(10)-C(10)	115(1)	113(1)
C(9)-N(10)-C(11)	120(1)	121(1)
C(10)-N(10)-C(11)	119(1)	120(1)
N(10)-C(11)-C(12)	123(1)	122(1)
N(10)-C(11)-C(16)	120(1)	121(1)
C(12)-C(11)-C(16)	117(1)	117(1)
C(11)-C(12)-C(13)	123(1)	121(1)
C(12)-C(13)-C(14)	120(1)	122(1)
C(13)-C(14)-C(15)	118(1)	117(1)
C(13)-C(14)-C(17)	124(1)	124(1)
C(15)-C(14)-C(17)-	118(1)	119(1)
C(14)-C(15)-C(16)	122(1)	122(1)
C(11)-C(16)-C(15)	120(1)	121(1)

Table (continued) Bond Lengths and Angles for SrMTX

Atoms	Angles (°)	
	Molecule A	Molecule B
C(14)-C(17)-O(17)	120(1)	120(1)
C(14)-C(17)-N(18)	118(1)	118(1)
O(17)-C(17)-N(18)	121(1)	122(1)
C(17)-N(18)-C(19)	122(1)	122(1)
N(18)-C(19)-C(20)	110(1)	110(1)
N(18)-C(19)-C(21)	109(1)	110(1)
C(20)-C(19)-C(21)	110(1)	110(1)
C(19)-C(20)-O(1)	119(1)	116(2)
C(19)-C(20)-O(2)	118(1)	119(1)
O(1)-C(20)-O(2)	123(1)	124(2)
C(19)-C(21)-C(22)	110(1)	111(1)
C(21)-C(22)-C(23)	115(1)	114(1)
C(22)-C(23)-O(3)	118(1)	118(1)
C(22)-C(23)-O(4)	118(1)	118(1)
O(3)-C(23)-O(4)	124(1)	124(2)