ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1997, 16(4), 500-502, DOI:10.1021/om9603777

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	eucual
Empirical formula	$C_{37}H_{36}CuEuNO_2$
Formula weight	742.17
Temperature	193(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	monoclinic
Space group	P21/n
Unit cell dimensions	a = 14.105(4) Å α = 90° b = 15.056(4) Å β = 102.54(2)° c = 15.315(6) Å γ = 90°
Volume	3175(2) Å^3
Z	4
Density (calculated)	1.553 Mg/m^3
Absorption coefficient	2.660 mm^{-1}
F(000)	1492
Crystal size	0.4 x 0.5 x 0.5 mm
θ range for data collection	1.92 to 25.05°
Index ranges	$-16 \le h \le 15$, $0 \le k \le 17$, $0 \le \ell \le 18$
Reflections collected	5532
Independent reflections	3799 (R_{int} = 0.048)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3799 / 0 / 523
Goodness-of-fit on F^2	1.063
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0368, wR2 = 0.0801
R indices (all data)	R1 = 0.0368, wR2 = 0.0801
Largest diff. peak and hole	0.516 and -0.539 eÅ^{-3}

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Eu(1)	205(1)	1465(1)	543(1)	30(1)
Cu(1)	1102(1)	-414(1)	1042(1)	32(1)
O(1)	824(3)	2602(3)	-511(3)	46(1)
O(2)	-377(3)	1503(3)	2048(3)	45(1)
N(1)	442(4)	3090(3)	1327(3)	40(1)
C(1)	323(6)	2628(5)	-1431(5)	53(2)
C(2)	975(9)	3031(8)	-1950(6)	74(3)
C(3)	1756(10)	3516(9)	-1262(9)	90(4)
C(4)	1705(7)	3044(8)	-416(7)	85(3)
C(5)	-19(8)	919(6)	2798(5)	60(2)
C(6)	-270(8)	1340(7)	3597(6)	78(3)
C(7)	-770(7)	2209(6)	3271(5)	66(2)
C(8)	-1122(6)	2029(6)	2282(5)	58(2)
C(9)	74(6)	3844(5)	923(5)	50(2)
C(10)	247(6)	4669(5)	1303(6)	56(2)
C(11)	828(6)	4742(5)	2131(5)	53(2)
C(12)	1219(5)	4011(5)	2561(5)	52(2)
C(13)	1002(5)	3196(5)	2146(5)	47(2)
C(14)	-301(5)	-317(4)	933(4)	34(1)
C(15)	-1155(5)	-268(4)	956(4)	34(1)
C(16)	-2135(5)	-192(4)	1100(4)	36(1)
C(17)	-2382(6)	-584(5)	1834(5)	53(2)
C(18)	-3312(6)	-489(6)	1997(6)	65(2)
C(19)	-3994(7)	-11(6)	1413(6)	62(2)
C(20)	-3762(5)	358(5)	669(5)	51(2)
C(21)	-2839(5)	277(5)	520(5)	42(2)
C(22)	1936(4)	615(4)	1359(4)	34(1)
C(23)	2489(4)	1244(4)	1393(4)	33(1)
C(24)	3205(4)	1916(4)	1358(4)	33(1)
C(25)	3311(5)	2666(4)	1888(5)	41(2)
C(26)	3953(6)	3330(5)	1808(5)	53(2)
C(27)	4535(6)	3248(5)	1198(6)	60(2)
C(28)	4478(6)	2497(6)	677(5)	56(2)
C(29)	3816(5)	1832(5)	747(4)	44(2)
C(30)	1583(4)	-1551(4)	734(4)	35(1)
C(31)	1890(4)	-2269(4)	554(4)	33(1)
C(32)	2299(4)	-3112(4)	392(4)	32(1)
C(33)	2707(5)	-3278(6)	-340(5)	48(2)
C(34)	3075(6)	-4113(6)	-467(6)	59(2)
C(35)	3049(6)	-4784(5)	116(6)	60(2)
C(36)	2670(6)	-4636(5)	842(6)	58(2)
C(37)	2296(5)	-3822(4)	976(5)	45(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

Eu(1)-O(2)	2.609(4)	Eu(1)-O(1)	2.628(4)
Eu(1)-N(1)	2.714(5)	Eu(1)-C(22)	2.800(6)
Eu(1)-C(30)#1	2.838(6)	Eu(1)-C(14)#1	2.872(6)
Eu(1)-C(14)	2.872(6)	Eu(1)-Cu(1)	3.1254(10)
Eu(1)-Cu(1)#1	3.1385(11)	Eu(1)-C(23)	3.219(6)
Cu(1)-C(30)	1.937(6)	Cu(1)-C(22)	1.941(6)
Cu(1)-C(14)	1.954(6)	Cu(1)-Eu(1)#1	3.1386(11)
O(1)-C(4)	1.389(10)	O(1)-C(1)	1.433(8)
O(2)-C(8)	1.423(9)	O(2)-C(5)	1.448(8)
N(1)-C(13)	1.338(8)	N(1)-C(9)	1.342(9)
C(1)-C(2)	1.472(12)	C(2)-C(3)	1.53(2)
C(3)-C(4)	1.49(2)	C(5)-C(6)	1.487(11)
C(6)-C(7)	1.519(12)	C(7)-C(8)	1.512(11)
C(9)-C(10)	1.371(10)	C(10)-C(11)	1.357(11)
C(11)-C(12)	1.339(11)	C(12)-C(13)	1.385(10)
C(14)-C(15)	1.215(8)	C(14)-Eu(1)#1	2.872(6)
C(15)-C(16)	1.451(9)	C(16)-C(21)	1.374(9)
C(16)-C(17)	1.380(9)	C(17)-C(18)	1.395(11)
C(18)-C(19)	1.367(12)	C(19)-C(20)	1.370(11)
C(20)-C(21)	1.375(10)	C(22)-C(23)	1.221(8)
C(23)-C(24)	1.438(8)	C(24)-C(25)	1.380(9)
C(24)-C(29)	1.409(9)	C(25)-C(26)	1.372(10)
C(26)-C(27)	1.376(12)	C(27)-C(28)	1.377(11)
C(28)-C(29)	1.389(10)	C(30)-C(31)	1.218(8)
C(30)-Eu(1)#1	2.838(6)	C(31)-C(32)	1.438(8)
C(32)-C(33)	1.390(9)	C(32)-C(37)	1.395(9)
C(33)-C(34)	1.390(11)	C(34)-C(35)	1.354(12)
C(35)-C(36)	1.353(11)	C(36)-C(37)	1.367(10)

O(2)-Eu(1)-O(1)	137.58(14)	O(2)-Eu(1)-N(1)	67.78(14)
O(1)-Eu(1)-N(1)	70.07(14)	O(2)-Eu(1)-C(22)	91.5(2)
O(1)-Eu(1)-C(22)	101.4(2)	N(1)-Eu(1)-C(22)	101.7(2)
O(2)-Eu(1)-C(30)#1	101.8(2)	O(1)-Eu(1)-C(30)#1	84.9(2)
N(1)-Eu(1)-C(30)#1	105.7(2)	C(22)-Eu(1)-C(30)#1	152.4(2)
O(2)-Eu(1)-C(14)#1	141.8(2)	O(1)-Eu(1)-C(14)#1	80.2(2)
N(1)-Eu(1)-C(14)#1	150.3(2)	C(22)-Eu(1)-C(14)#1	83.7(2)
C(30)#1-Eu(1)-C(14)#1	70.8(2)	O(2)-Eu(1)-C(14)	72.3(2)
O(1)-Eu(1)-C(14)	150.1(2)	N(1)-Eu(1)-C(14)	139.7(2)
C(22)-Eu(1)-C(14)	73.2(2)	C(30)#1-Eu(1)-C(14)	87.9(2)
C(14)#1-Eu(1)-C(14)	70.0(2)	O(2)-Eu(1)-Cu(1)	89.53(10)
O(1)-Eu(1)-Cu(1)	124.67(11)	N(1)-Eu(1)-Cu(1)	134.68(11)
C(22)-Eu(1)-Cu(1)	37.75(13)	C(30)#1-Eu(1)-Cu(1)	117.49(12)
C(14)#1-Eu(1)-Cu(1)	64.02(12)	C(14)-Eu(1)-Cu(1)	37.73(13)
O(2)-Eu(1)-Cu(1)#1	116.72(10)	O(1)-Eu(1)-Cu(1)#1	94.07(9)
N(1)-Eu(1)-Cu(1)#1	142.41(11)	C(22)-Eu(1)-Cu(1)#1	115.03(12)
C(30)#1-Eu(1)-Cu(1)#1	37.41(12)	C(14)#1-Eu(1)-Cu(1)#1	37.61(13)
C(14)-Eu(1)-Cu(1)#1	63.85(12)	Cu(1)-Eu(1)-Cu(1)#1	82.60(3)
O(2)-Eu(1)-C(23)	97.1(2)	O(1)-Eu(1)-C(23)	83.0(2)
N(1)-Eu(1)-C(23)	84.1(2)	C(22)-Eu(1)-C(23)	22.0(2)
C(30)#1-Eu(1)-C(23)	160.8(2)	C(14)#1-Eu(1)-C(23)	92.4(2)
C(14)-Eu(1)-C(23)	95.2(2)	Cu(1)-Eu(1)-C(23)	59.41(10)
Cu(1)#1-Eu(1)-C(23)	128.94(10)	C(30)-Cu(1)-C(22)	122.7(2)
C(30)-Cu(1)-C(14)	116.5(2)	C(22)-Cu(1)-C(14)	120.6(2)
C(30)-Cu(1)-Eu(1)	152.3(2)	C(22)-Cu(1)-Eu(1)	62.0(2)
C(14)-Cu(1)-Eu(1)	64.1(2)	C(30)-Cu(1)-Eu(1)#1	62.9(2)
C(22)-Cu(1)-Eu(1)#1	144.9(2)	C(14)-Cu(1)-Eu(1)#1	63.8(2)
Eu(1)-Cu(1)-Eu(1)#1	97.40(3)	C(4)-O(1)-C(1)	109.2(6)
C(4)-O(1)-Eu(1)	131.0(4)	C(1)-O(1)-Eu(1)	117.6(4)
C(8)-O(2)-C(5)	106.7(5)	C(8)-O(2)-Eu(1)	128.7(4)

C(5)-O(2)-Eu(1)	124.4(4)	C(13)-N(1)-C(9)	114.9(6)
C(13)-N(1)-Eu(1)	120.9(4)	C(9)-N(1)-Eu(1)	124.1(4)
O(1)-C(1)-C(2)	108.1(7)	C(1)-C(2)-C(3)	105.4(8)
C(4)-C(3)-C(2)	101.9(8)	O(1)-C(4)-C(3)	110.4(8)
O(2)-C(5)-C(6)	106.9(7)	C(5)-C(6)-C(7)	105.8(7)
C(8)-C(7)-C(6)	101.7(7)	O(2)-C(8)-C(7)	104.6(6)
N(1)-C(9)-C(10)	123.8(7)	C(11)-C(10)-C(9)	119.0(7)
C(12)-C(11)-C(10)	119.6(7)	C(11)-C(12)-C(13)	118.4(7)
N(1)-C(13)-C(12)	124.2(7)	C(15)-C(14)-Cu(1)	173.6(5)
C(15)-C(14)-Eu(1)#1	106.0(4)	Cu(1)-C(14)-Eu(1)#1	78.6(2)
C(15)-C(14)-Eu(1)	104.0(4)	Cu(1)-C(14)-Eu(1)	78.2(2)
Eu(1)#1-C(14)-Eu(1)	110.0(2)	C(14)-C(15)-C(16)	173.1(6)
C(21)-C(16)-C(17)	118.1(6)	C(21)-C(16)-C(15)	121.4(6)
C(17)-C(16)-C(15)	120.5(6)	C(16)-C(17)-C(18)	121.0(8)
C(19)-C(18)-C(17)	119.5(8)	C(18)-C(19)-C(20)	119.7(8)
C(19)-C(20)-C(21)	120.5(8)	C(16)-C(21)-C(20)	121.0(7)
C(23)-C(22)-Cu(1)	167.5(5)	C(23)-C(22)-Eu(1)	98.7(4)
Cu(1)-C(22)-Eu(1)	80.3(2)	C(22)-C(23)-C(24)	172.3(6)
C(22)-C(23)-Eu(1)	59.3(4)	C(24)-C(23)-Eu(1)	124.2(4)
C(25)-C(24)-C(29)	117.4(6)	C(25)-C(24)-C(23)	122.7(6)
C(29)-C(24)-C(23)	119.9(6)	C(26)-C(25)-C(24)	122.2(7)
C(25)-C(26)-C(27)	119.9(8)	C(26)-C(27)-C(28)	119.9(7)
C(27)-C(28)-C(29)	120.2(8)	C(28)-C(29)-C(24)	120.3(7)
C(31)-C(30)-Cu(1)	179.1(5)	C(31)-C(30)-Eu(1)#1	101.0(4)
Cu(1)-C(30)-Eu(1)#1	79.7(2)	C(30)-C(31)-C(32)	176.3(6)
C(33)-C(32)-C(37)	116.0(6)	C(33)-C(32)-C(31)	123.4(6)
C(37)-C(32)-C(31)	120.6(6)	C(34)-C(33)-C(32)	120.5(8)
C(35)-C(34)-C(33)	121.2(8)	C(36)-C(35)-C(34)	119.4(7)
C(35)-C(36)-C(37)	120.4(8)	C(36)-C(37)-C(32)	122.4(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x,-y,-z

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Eu(1)	32(1)	29(1)	29(1)	-1(1)	6(1)	1(1)
Cu(1)	27(1)	32(1)	36(1)	1(1)	7(1)	0(1)
O(1)	51(3)	47(3)	37(2)	2(2)	5(2)	-14(2)
O(2)	57(3)	46(2)	34(2)	0(2)	14(2)	7(2)
N(1)	48(3)	30(3)	41(3)	-3(2)	10(3)	-1(2)
C(1)	57(5)	59(5)	41(4)	10(3)	3(4)	-21(4)
C(2)	100(8)	81(7)	43(5)	3(5)	16(5)	-24(6)
C(3)	60(7)	89(8)	132(10)	-11(7)	45(7)	-16(7)
C(4)	61(6)	124(9)	55(5)	33(6)	-20(5)	-37(6)
C(5)	85(7)	60(5)	32(4)	2(3)	6(4)	4(5)
C(6)	84(7)	104(7)	47(4)	-11(5)	15(5)	34(6)
C(7)	72(6)	83(6)	48(4)	-8(4)	22(4)	17(5)
C(8)	47(5)	74(6)	53(5)	12(4)	8(4)	8(4)
C(9)	52(5)	51(4)	43(4)	-4(3)	3(3)	-10(3)
C(10)	59(5)	39(4)	70(5)	2(4)	15(4)	4(4)
C(11)	54(5)	42(4)	69(5)	-10(4)	24(4)	-11(4)
C(12)	36(4)	69(5)	52(4)	-11(4)	12(4)	-15(4)
C(13)	36(4)	52(4)	50(4)	0(3)	4(3)	7(3)
C(14)	36(4)	31(3)	36(3)	-2(2)	15(3)	-5(3)
C(15)	30(4)	41(3)	30(3)	-3(2)	6(3)	-4(3)
C(16)	34(4)	42(3)	37(3)	-11(3)	20(3)	-5(3)
C(17)	47(5)	64(5)	55(4)	14(4)	23(4)	0(4)
C(18)	60(6)	79(6)	66(5)	9(5)	38(5)	-9(5)
C(19)	40(5)	74(5)	85(6)	-16(5)	36(5)	-10(4)
C(20)	29(4)	62(5)	65(5)	-2(4)	16(4)	2(4)
C(21)	34(4)	49(4)	47(4)	0(3)	17(3)	2(3)
C(22)	28(3)	40(3)	33(3)	-2(3)	9(3)	8(3)
C(23)	27(3)	38(3)	31(3)	-1(2)	3(2)	1(3)
C(24)	22(3)	41(3)	34(3)	6(3)	4(2)	4(3)
C(25)	35(4)	42(4)	41(4)	2(3)	-1(3)	1(3)
C(26)	49(5)	45(4)	56(4)	1(3)	-7(4)	-8(3)
C(27)	60(5)	54(4)	61(5)	15(4)	2(4)	-22(4)
C(28)	38(4)	80(5)	50(4)	12(4)	14(3)	-6(4)
C(29)	43(4)	51(4)	39(4)	-2(3)	10(3)	-6(3)
C(30)	21(3)	36(3)	47(3)	4(3)	8(2)	0(3)
C(31)	21(3)	42(4)	38(3)	8(3)	12(3)	1(3)
C(32)	17(3)	38(3)	40(3)	-1(3)	3(2)	1(2)
C(33)	34(4)	61(5)	51(4)	2(4)	14(3)	9(3)
C(34)	40(5)	84(6)	56(5)	-23(5)	18(4)	12(4)
C(35)	50(5)	47(4)	83(6)	-13(4)	13(4)	7(4)
C(36)	48(5)	41(4)	87(6)	13(4)	21(4)	5(3)
C(37)	43(4)	38(4)	57(4)	6(3)	16(4)	7(3)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	-316(81)	2892(76)	-1471(75)	128(44)
H(1B)	-15(60)	1979(61)	-1693(55)	86(27)
H(2A)	665(71)	3301(61)	-2469(72)	98(33)
H(2B)	1355(108)	2592(102)	-2012(97)	176(71)
H(3A)	1375(68)	3952(59)	-1186(59)	78(32)
H(3B)	2273(92)	3507(81)	-1237(87)	122(51)
H(4A)	2394(129)	2480(117)	-656(118)	245(78)
H(4B)	1988(52)	3176(46)	107(49)	49(20)
H(5A)	551(46)	1139(42)	2967(41)	30(19)
H(5B)	-561(70)	321(66)	2750(62)	112(34)
H(6A)	376(78)	1477(64)	4025(73)	114(37)
H(6B)	-1050(59)	1134(50)	3328(51)	66(23)
H(7A)	-413(106)	2974(103)	3256(101)	205(61)
H(7B)	-1378(66)	2252(56)	3594(59)	89(28)
H(8A)	-1747(55)	1769(44)	2112(45)	48(20)
H(8B)	-1174(42)	2557(42)	1980(39)	30(16)
H(9)	-383(50)	3775(43)	368(46)	49(19)
H(10)	75(58)	5234(57)	999(55)	79(26)
H(11)	1016(58)	5352(57)	2323(54)	82(26)
H(12)	1623(64)	3927(58)	3134(59)	86(29)
H(13)	1278(41)	2705(37)	2474(37)	26(15)
H(17)	-2005(53)	-921(48)	2246(49)	55(22)
H(18)	-3393(70)	-800(63)	2508(66)	103(33)
H(19)	-4576(57)	-2(48)	1469(46)	56(23)
H(20)	-4179(52)	693(45)	314(44)	49(21)
H(21)	-2721(46)	541(44)	69(42)	41(19)
H(25)	2941(67)	2651(60)	2285(62)	94(33)
H(26)	4023(52)	3773(49)	2175(48)	56(23)
H(27)	4903(54)	3731(48)	1117(48)	59(22)
H(28)	4945(59)	2427(54)	331(52)	72(25)
H(29)	3862(44)	1348(39)	399(41)	36(17)
H(33)	2792(51)	-2833(45)	-585(47)	44(23)
H(34)	3268(52)	-4171(46)	-910(48)	47(22)
H(35)	3277(46)	-5380(44)	21(41)	44(18)
H(36)	2575(55)	-5110(53)	1256(51)	73(25)
H(37)	2006(49)	-3691(42)	1376(45)	41(20)

Table 1. Crystal data and structure refinement for 2.

Identification code	ybcual
Empirical formula	$C_{32}H_{31}CuO_2Yb$
Formula weight	684.15
Temperature	153(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	triclinic
Space group	P-1
Unit cell dimensions	a = 10.127(3) Å α = 102.61(2)°
	b = 11.732(3) Å β = 109.54(2)°
	c = 12.918(4) Å γ = 99.26(2)°
Volume	1365.1(7) Å^3
Z	2
Density (calculated)	1.664 Mg/m^3
Absorption coefficient	4.210 mm^{-1}
F(000)	676
Crystal size	0.6 x 0.5 x 0.6 mm
θ range for data collection	2.14 to 25.06°
Index ranges	$-12 \le h \le 11$, $-13 \le k \le 13$, $0 \le \ell \le 15$
Reflections collected	5132
Independent reflections	3276 (R_{int} = 0.0280)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3276 / 0 / 449
Goodness-of-fit on F^2	1.089
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0363, wR2 = 0.0563
R indices (all data)	R1 = 0.0363, wR2 = 0.0563
Largest diff. peak and hole	0.682 and -0.686 eÅ^{-3}

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 2. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Yb(1)	1321(1)	1175(1)	9504(1)	19(1)
Cu(1)	1689(1)	-803(1)	10583(1)	22(1)
O(1)	2351(4)	728(3)	8082(3)	25(1)
O(2)	2250(5)	3342(4)	10155(4)	31(1)
C(1)	3890(8)	1165(7)	8337(6)	38(2)
C(2)	4031(10)	914(9)	7202(7)	53(2)
C(3)	2877(15)	-173(11)	6490(11)	85(4)
C(4)	1758(10)	-273(7)	7021(6)	39(2)
C(5)	1387(9)	4099(7)	10506(9)	54(3)
C(6)	2397(11)	5255(8)	11269(10)	71(3)
C(7)	3560(9)	5393(6)	10758(8)	46(2)
C(8)	3355(8)	4138(6)	9989(7)	35(2)
C(9)	111(7)	-1186(5)	9068(6)	24(1)
C(10)	-887(7)	-1561(5)	8125(5)	22(1)
C(11)	-2052(6)	-2100(5)	7014(5)	23(1)
C(12)	-2931(7)	-1435(6)	6478(6)	30(2)
C(13)	-4044(8)	-1986(7)	5425(6)	39(2)
C(14)	-4290(8)	-3201(7)	4883(6)	38(2)
C(15)	-3426(7)	-3865(6)	5408(6)	32(2)
C(16)	-2306(7)	-3325(6)	6459(5)	27(1)
C(17)	3344(6)	491(5)	10928(5)	20(1)
C(18)	4328(7)	1389(5)	11214(5)	22(1)
C(19)	5574(6)	2407(5)	11609(5)	20(1)
C(20)	5649(7)	3509(6)	12340(5)	27(2)
C(21)	6827(7)	4467(6)	12700(5)	29(2)
C(22)	7978(7)	4369(6)	12368(5)	28(2)
C(23)	7928(7)	3288(6)	11666(6)	32(2)
C(24)	6751(7)	2314(6)	11291(6)	26(2)
C(25)	1229(6)	-1577(5)	11637(5)	24(1)
C(26)	923(6)	-1974(5)	12344(5)	23(1)
C(27)	714(7)	-2422(5)	13253(5)	23(1)
C(28)	-442(7)	-2304(6)	13580(6)	29(2)
C(29)	-580(8)	-2683(6)	14486(5)	31(2)
C(30)	421(8)	-3211(6)	15071(6)	37(2)
C(31)	1570(9)	-3354(6)	14753(6)	41(2)
C(32)	1730(8)	-2959(6)	13863(6)	32(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 2.

Yb(1)-O(1)	2.403(4)	Yb(1)-O(2)	2.413(4)
Yb(1)-C(17)	2.623(6)	Yb(1)-C(25)#1	2.685(6)
Yb(1)-C(9)	2.694(6)	Yb(1)-C(9)#1	2.699(6)
Yb(1)-Cu(1)	2.9684(10)	Yb(1)-Cu(1)#1	2.9693(12)
Yb(1)-C(18)	3.038(6)	Yb(1)-C(26)#1	3.126(6)
Yb(1)-C(10)#1	3.183(6)	Yb(1)-Yb(1)#1	4.2261(12)
Cu(1)-C(17)	1.922(6)	Cu(1)-C(25)	1.930(7)
Cu(1)-C(9)	1.969(7)	Cu(1)-Yb(1)#1	2.9693(12)
O(1)-C(1)	1.458(8)	O(1)-C(4)	1.462(8)
O(2)-C(8)	1.443(8)	O(2)-C(5)	1.448(8)
C(1)-C(2)	1.491(10)	C(1)-H(1A)	1.01(8)
C(1)-H(1B)	1.03(7)	C(2)-C(3)	1.459(13)
C(2)-H(2A)	0.95(9)	C(2)-H(2B)	1.06(9)
C(3)-C(4)	1.509(12)	C(3)-H(3A)	0.82(13)
C(3)-H(3B)	0.99(10)	C(4)-H(4A)	0.88(7)
C(4)-H(4B)	0.95(7)	C(5)-C(6)	1.467(12)
C(5)-H(5A)	0.79(7)	C(5)-H(5B)	1.28(11)
C(6)-C(7)	1.534(12)	C(6)-H(6A)	1.4(3)
C(6)-H(6B)	1.06(10)	C(7)-C(8)	1.524(10)
C(7)-H(7A)	0.97(9)	C(7)-H(7B)	0.95(8)
C(8)-H(8A)	1.08(8)	C(8)-H(8B)	0.96(6)
C(9)-C(10)	1.224(8)	C(9)-Yb(1)#1	2.699(6)
C(10)-C(11)	1.443(8)	C(10)-Yb(1)#1	3.183(6)
C(11)-C(12)	1.388(9)	C(11)-C(16)	1.398(8)
C(12)-C(13)	1.376(10)	C(12)-H(12)	0.92(6)
C(13)-C(14)	1.385(10)	C(13)-H(13)	0.84(7)
C(14)-C(15)	1.373(10)	C(14)-H(14)	0.93(6)
C(15)-C(16)	1.376(9)	C(15)-H(15)	1.01(7)
C(16)-H(16)	0.93(5)	C(17)-C(18)	1.220(8)
C(18)-C(19)	1.448(9)	C(19)-C(24)	1.396(8)
C(19)-C(20)	1.399(8)	C(20)-C(21)	1.368(9)
C(20)-H(20)	0.92(6)	C(21)-C(22)	1.383(9)
C(21)-H(21)	0.91(6)	C(22)-C(23)	1.371(9)
C(22)-H(22)	0.94(6)	C(23)-C(24)	1.377(9)
C(23)-H(23)	0.94(7)	C(24)-H(24)	0.88(6)
C(25)-C(26)	1.215(8)	C(25)-Yb(1)#1	2.685(6)
C(26)-C(27)	1.450(9)	C(26)-Yb(1)#1	3.126(6)
C(27)-C(28)	1.388(9)	C(27)-C(32)	1.399(9)
C(28)-C(29)	1.379(9)	C(28)-H(28)	0.91(6)
C(29)-C(30)	1.370(10)	C(29)-H(29)	0.93(6)
C(30)-C(31)	1.379(11)	C(30)-H(30)	0.87(6)
C(31)-C(32)	1.377(10)	C(31)-H(31)	0.94(7)
C(32)-H(32)	0.99(7)		

O(1)-Yb(1)-O(2)	98.37(14)	O(1)-Yb(1)-C(17)	90.1(2)
O(2)-Yb(1)-C(17)	101.9(2)	O(1)-Yb(1)-C(25)#1	104.2(2)
O(2)-Yb(1)-C(25)#1	86.2(2)	C(17)-Yb(1)-C(25)#1	162.5(2)
O(1)-Yb(1)-C(9)	91.4(2)	O(2)-Yb(1)-C(9)	170.2(2)
C(17)-Yb(1)-C(9)	77.0(2)	C(25)#1-Yb(1)-C(9)	92.3(2)
O(1)-Yb(1)-C(9)#1	168.1(2)	O(2)-Yb(1)-C(9)#1	93.4(2)
C(17)-Yb(1)-C(9)#1	88.6(2)	C(25)#1-Yb(1)-C(9)#1	75.3(2)
C(9)-Yb(1)-C(9)#1	76.8(2)	O(1)-Yb(1)-Cu(1)	102.60(10)
O(2)-Yb(1)-Cu(1)	135.05(11)	C(17)-Yb(1)-Cu(1)	39.62(14)
C(25)#1-Yb(1)-Cu(1)	125.31(14)	C(9)-Yb(1)-Cu(1)	40.33(14)
C(9)#1-Yb(1)-Cu(1)	69.30(13)	O(1)-Yb(1)-Cu(1)#1	133.94(10)
O(2)-Yb(1)-Cu(1)#1	103.94(10)	C(17)-Yb(1)-Cu(1)#1	123.01(13)
C(25)#1-Yb(1)-Cu(1)#1	39.51(14)	C(9)-Yb(1)-Cu(1)#1	69.36(13)
C(9)#1-Yb(1)-Cu(1)#1	40.30(14)	Cu(1)-Yb(1)-Cu(1)#1	89.25(3)
O(1)-Yb(1)-C(18)	84.81(14)	O(2)-Yb(1)-C(18)	80.1(2)

C(17)-Yb(1)-C(18)	23.4(2)	C(25)#1-Yb(1)-C(18)	164.6(2)
C(9)-Yb(1)-C(18)	100.0(2)	C(9)#1-Yb(1)-C(18)	98.4(2)
Cu(1)-Yb(1)-C(18)	62.95(12)	Cu(1)#1-Yb(1)-C(18)	138.18(11)
O(1)-Yb(1)-C(26)#1	84.6(2)	O(2)-Yb(1)-C(26)#1	78.0(2)
C(17)-Yb(1)-C(26)#1	174.6(2)	C(25)#1-Yb(1)-C(26)#1	22.5(2)
C(9)-Yb(1)-C(26)#1	104.0(2)	C(9)#1-Yb(1)-C(26)#1	96.8(2)
Cu(1)-Yb(1)-C(26)#1	142.81(11)	Cu(1)#1-Yb(1)-C(26)#1	61.97(12)
C(18)-Yb(1)-C(26)#1	154.0(2)	O(1)-Yb(1)-C(10)#1	161.1(2)
O(2)-Yb(1)-C(10)#1	84.0(2)	C(17)-Yb(1)-C(10)#1	71.2(2)
C(25)#1-Yb(1)-C(10)#1	94.6(2)	C(9)-Yb(1)-C(10)#1	86.4(2)
C(9)#1-Yb(1)-C(10)#1	22.1(2)	Cu(1)-Yb(1)-C(10)#1	64.31(10)
Cu(1)#1-Yb(1)-C(10)#1	62.28(11)	C(18)-Yb(1)-C(10)#1	77.1(2)
C(26)#1-Yb(1)-C(10)#1	114.1(2)	O(1)-Yb(1)-Yb(1)#1	129.85(10)
O(2)-Yb(1)-Yb(1)#1	131.78(10)	C(17)-Yb(1)-Yb(1)#1	80.89(14)
C(25)#1-Yb(1)-Yb(1)#1	82.18(14)	C(9)-Yb(1)-Yb(1)#1	38.45(12)
C(9)#1-Yb(1)-Yb(1)#1	38.36(13)	Cu(1)-Yb(1)-Yb(1)#1	44.63(2)
Cu(1)#1-Yb(1)-Yb(1)#1	44.62(2)	C(18)-Yb(1)-Yb(1)#1	101.78(12)
C(26)#1-Yb(1)-Yb(1)#1	103.26(12)	C(10)#1-Yb(1)-Yb(1)#1	50.86(11)
C(17)-Cu(1)-C(25)	127.3(2)	C(17)-Cu(1)-C(9)	116.6(2)
C(25)-Cu(1)-C(9)	115.1(3)	C(17)-Cu(1)-Yb(1)	60.5(2)
C(25)-Cu(1)-Yb(1)	145.5(2)	C(9)-Cu(1)-Yb(1)	62.3(2)
C(17)-Cu(1)-Yb(1)#1	139.8(2)	C(25)-Cu(1)-Yb(1)#1	62.3(2)
C(9)-Cu(1)-Yb(1)#1	62.5(2)	Yb(1)-Cu(1)-Yb(1)#1	90.75(3)
C(1)-O(1)-C(4)	107.1(5)	C(1)-O(1)-Yb(1)	122.5(4)
C(4)-O(1)-Yb(1)	127.4(4)	C(8)-O(2)-C(5)	105.4(5)
C(8)-O(2)-Yb(1)	132.4(4)	C(5)-O(2)-Yb(1)	119.6(4)
O(1)-C(1)-C(2)	105.6(6)	O(1)-C(1)-H(1A)	107(4)
C(2)-C(1)-H(1A)	117(4)	O(1)-C(1)-H(1B)	108(4)
C(2)-C(1)-H(1B)	115(4)	H(1A)-C(1)-H(1B)	104(6)
C(3)-C(2)-C(1)	104.2(7)	C(3)-C(2)-H(2A)	123(6)
C(1)-C(2)-H(2A)	113(6)	C(3)-C(2)-H(2B)	105(5)
C(1)-C(2)-H(2B)	108(5)	H(2A)-C(2)-H(2B)	103(7)
C(2)-C(3)-C(4)	107.9(7)	C(2)-C(3)-H(3A)	112(10)
C(4)-C(3)-H(3A)	118(10)	C(2)-C(3)-H(3B)	120(6)
C(4)-C(3)-H(3B)	112(6)	H(3A)-C(3)-H(3B)	86(9)
O(1)-C(4)-C(3)	105.5(6)	O(1)-C(4)-H(4A)	107(4)
C(3)-C(4)-H(4A)	112(4)	O(1)-C(4)-H(4B)	104(4)
C(3)-C(4)-H(4B)	117(4)	H(4A)-C(4)-H(4B)	111(6)
O(2)-C(5)-C(6)	106.7(7)	O(2)-C(5)-H(5A)	108(5)
C(6)-C(5)-H(5A)	123(5)	O(2)-C(5)-H(5B)	112(5)
C(6)-C(5)-H(5B)	65(5)	H(5A)-C(5)-H(5B)	135(7)
C(5)-C(6)-C(7)	102.5(7)	C(5)-C(6)-H(6A)	97(10)
C(7)-C(6)-H(6A)	133(10)	C(5)-C(6)-H(6B)	120(5)
C(7)-C(6)-H(6B)	105(5)	H(6A)-C(6)-H(6B)	101(10)
C(8)-C(7)-C(6)	105.5(6)	C(8)-C(7)-H(7A)	106(5)
C(6)-C(7)-H(7A)	116(5)	C(8)-C(7)-H(7B)	108(5)
C(6)-C(7)-H(7B)	107(5)	H(7A)-C(7)-H(7B)	114(7)
O(2)-C(8)-C(7)	106.0(6)	O(2)-C(8)-H(8A)	107(4)
C(7)-C(8)-H(8A)	109(4)	O(2)-C(8)-H(8B)	106(4)
C(7)-C(8)-H(8B)	117(4)	H(8A)-C(8)-H(8B)	111(5)
C(10)-C(9)-Cu(1)	172.5(5)	C(10)-C(9)-Yb(1)	110.0(4)
Cu(1)-C(9)-Yb(1)	77.4(2)	C(10)-C(9)-Yb(1)#1	101.8(4)
Cu(1)-C(9)-Yb(1)#1	77.2(2)	Yb(1)-C(9)-Yb(1)#1	103.2(2)
C(9)-C(10)-C(11)	175.4(6)	C(9)-C(10)-Yb(1)#1	56.1(4)
C(11)-C(10)-Yb(1)#1	123.9(4)	C(12)-C(11)-C(16)	118.9(6)
C(12)-C(11)-C(10)	121.9(5)	C(16)-C(11)-C(10)	119.3(6)
C(13)-C(12)-C(11)	120.1(6)	C(13)-C(12)-H(12)	120(4)
C(11)-C(12)-H(12)	120(4)	C(12)-C(13)-C(14)	120.6(7)
C(12)-C(13)-H(13)	123(5)	C(14)-C(13)-H(13)	116(5)
C(15)-C(14)-C(13)	119.6(7)	C(15)-C(14)-H(14)	118(4)
C(13)-C(14)-H(14)	122(4)	C(14)-C(15)-C(16)	120.4(6)
C(14)-C(15)-H(15)	121(4)	C(16)-C(15)-H(15)	118(4)
C(15)-C(16)-C(11)	120.4(6)	C(15)-C(16)-H(16)	126(3)

C(17)-C(16)-H(16)	114(5)	C(18)-C(17)-Cu(1)	175.6(5)
C(18)-C(17)-Yb(1)	97.8(4)	Cu(1)-C(17)-Yb(1)	79.9(2)
C(17)-C(18)-C(19)	175.3(6)	C(17)-C(18)-Yb(1)	58.8(4)
C(19)-C(18)-Yb(1)	125.9(4)	C(24)-C(19)-C(20)	117.8(6)
C(24)-C(19)-C(18)	121.2(5)	C(20)-C(19)-C(18)	121.0(5)
C(21)-C(20)-C(19)	120.4(6)	C(21)-C(20)-H(20)	122(4)
C(19)-C(20)-H(20)	117(4)	C(20)-C(21)-C(22)	121.2(6)
C(20)-C(21)-H(21)	118(4)	C(22)-C(21)-H(21)	121(4)
C(23)-C(22)-C(21)	118.9(6)	C(23)-C(22)-H(22)	120(4)
C(21)-C(22)-H(22)	121(4)	C(22)-C(23)-C(24)	120.8(7)
C(22)-C(23)-H(23)	122(4)	C(24)-C(23)-H(23)	117(4)
C(23)-C(24)-C(19)	120.8(6)	C(23)-C(24)-H(24)	120(4)
C(19)-C(24)-H(24)	119(4)	C(26)-C(25)-Cu(1)	174.6(5)
C(26)-C(25)-Yb(1)#1	99.6(4)	Cu(1)-C(25)-Yb(1)#1	78.2(2)
C(25)-C(26)-C(27)	174.2(6)	C(25)-C(26)-Yb(1)#1	57.9(4)
C(27)-C(26)-Yb(1)#1	127.6(4)	C(28)-C(27)-C(32)	117.7(6)
C(28)-C(27)-C(26)	122.4(6)	C(32)-C(27)-C(26)	119.8(6)
C(29)-C(28)-C(27)	121.5(6)	C(29)-C(28)-H(28)	119(4)
C(27)-C(28)-H(28)	119(4)	C(30)-C(29)-C(28)	120.1(7)
C(30)-C(29)-H(29)	120(4)	C(28)-C(29)-H(29)	120(4)
C(29)-C(30)-C(31)	119.6(7)	C(29)-C(30)-H(30)	119(4)
C(31)-C(30)-H(30)	122(4)	C(32)-C(31)-C(30)	120.7(7)
C(32)-C(31)-H(31)	119(4)	C(30)-C(31)-H(31)	121(4)
C(31)-C(32)-C(27)	120.4(7)	C(31)-C(32)-H(32)	123(4)
C(27)-C(32)-H(32)	117(4)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x,-y,-z+2

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 2.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Yb(1)	19(1)	19(1)	19(1)	6(1)	8(1)	5(1)
Cu(1)	22(1)	22(1)	21(1)	6(1)	8(1)	5(1)
O(1)	29(3)	27(2)	20(2)	7(2)	10(2)	8(2)
O(2)	31(3)	23(2)	41(3)	7(2)	17(2)	8(2)
C(1)	31(4)	49(5)	33(4)	8(4)	14(4)	9(4)
C(2)	41(5)	93(7)	38(5)	25(5)	24(4)	24(5)
C(3)	104(9)	78(7)	62(7)	-25(6)	68(7)	-22(7)
C(4)	57(6)	27(4)	30(4)	3(3)	19(4)	5(4)
C(5)	45(5)	26(4)	99(7)	1(4)	51(5)	6(4)
C(6)	65(6)	31(4)	118(9)	-2(5)	52(7)	5(4)
C(7)	42(5)	22(4)	70(6)	14(4)	17(5)	3(4)
C(8)	34(4)	35(4)	44(5)	22(3)	19(4)	9(4)
C(9)	25(4)	26(3)	28(4)	9(3)	19(3)	8(3)
C(10)	25(4)	20(3)	27(4)	7(3)	13(3)	9(3)
C(11)	21(3)	25(3)	19(3)	3(3)	8(3)	1(3)
C(12)	34(4)	26(4)	24(4)	4(3)	8(3)	4(3)
C(13)	32(4)	48(5)	30(4)	8(4)	5(4)	12(4)
C(14)	27(4)	50(5)	19(4)	-5(3)	1(3)	2(4)
C(15)	28(4)	32(4)	30(4)	-1(3)	12(3)	5(3)
C(16)	24(4)	32(3)	20(3)	5(3)	6(3)	4(3)
C(17)	16(3)	26(3)	17(3)	8(3)	2(3)	8(3)
C(18)	28(4)	29(4)	15(3)	7(3)	10(3)	20(3)
C(19)	21(3)	20(3)	18(3)	7(3)	6(3)	7(3)
C(20)	24(4)	32(4)	24(4)	6(3)	9(3)	9(3)
C(21)	41(4)	25(3)	17(3)	4(3)	8(3)	10(3)
C(22)	28(4)	25(3)	22(3)	5(3)	3(3)	-2(3)
C(23)	24(4)	33(4)	39(4)	9(3)	12(3)	11(3)
C(24)	29(4)	20(3)	27(4)	4(3)	10(3)	8(3)
C(25)	21(3)	24(3)	24(3)	5(3)	5(3)	5(3)
C(26)	17(3)	24(3)	24(3)	7(3)	2(3)	6(3)
C(27)	28(4)	15(3)	21(3)	4(2)	6(3)	1(3)
C(28)	30(4)	33(4)	25(4)	14(3)	6(3)	9(3)
C(29)	35(4)	33(4)	25(4)	7(3)	15(3)	7(3)
C(30)	55(5)	33(4)	23(4)	15(3)	14(4)	7(4)
C(31)	46(5)	44(4)	31(4)	20(3)	3(4)	21(4)
C(32)	38(4)	37(4)	24(4)	13(3)	12(3)	16(3)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 2.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	4189(79)	2035(70)	8811(63)	57(23)
H(1B)	4452(73)	739(59)	8885(59)	43(20)
H(2A)	5008(104)	995(79)	7272(75)	83(30)
H(2B)	3729(98)	1598(83)	6828(78)	90(31)
H(3A)	3192(142)	-767(116)	6343(124)	135(57)
H(3B)	2424(105)	-325(91)	5651(90)	92(33)
H(4A)	1653(69)	-939(62)	7221(54)	33(19)
H(4B)	850(82)	-156(64)	6605(62)	48(23)
H(5A)	845(76)	3709(61)	10686(58)	31(21)
H(5B)	1351(114)	4974(101)	10059(94)	105(39)
H(6A)	2405(300)	5069(267)	12263(253)	473(171)
H(6B)	2045(99)	6061(91)	11305(81)	94(32)
H(7A)	3479(95)	5924(83)	10277(76)	82(30)
H(7B)	4467(88)	5606(67)	11377(67)	55(25)
H(8A)	2938(81)	4134(66)	9103(68)	64(24)
H(8B)	4173(69)	3800(54)	10154(52)	28(18)
H(12)	-2740(68)	-615(60)	6814(54)	34(18)
H(13)	-4579(81)	-1610(67)	5057(64)	50(24)
H(14)	-5013(69)	-3583(56)	4161(57)	34(18)
H(15)	-3534(67)	-4738(60)	5008(54)	38(18)
H(16)	-1681(56)	-3709(45)	6874(44)	8(14)
H(20)	4871(65)	3559(51)	12551(49)	22(16)
H(21)	6838(64)	5172(57)	13175(52)	29(17)
H(22)	8792(68)	5025(56)	12617(51)	29(17)
H(23)	8730(72)	3157(56)	11483(54)	36(19)
H(24)	6713(67)	1635(59)	10809(54)	33(18)
H(28)	-1138(65)	-1987(52)	13176(51)	24(17)
H(29)	-1367(62)	-2592(48)	14684(47)	18(15)
H(30)	273(66)	-3499(56)	15604(55)	30(18)
H(31)	2286(79)	-3680(63)	15165(60)	49(22)
H(32)	2590(80)	-2975(65)	13659(62)	55(23)