

Supplementary Data for:

Isopolyoxometalates Derived from Arylstibonic Acids with “Reverse Keggin-ion” structures based on [M(RSb)₁₂O₂₈] cores, M = Co(II) or Zn(II).

Brian K. Nicholson^{*, a}, Christopher J. Clark^b, Shane G. Telfer^c and Tania Groutso^d

Full crystal structure details for:

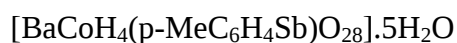
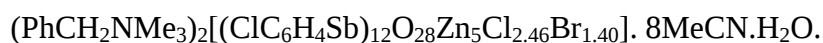
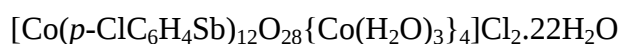
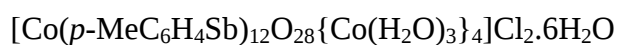


Table 1a. Crystal data and structure refinement for



Identification code	cscs_sq
Empirical formula	C ₈₄ H ₁₂₀ Cl ₂ Co ₅ O ₄₆ Sb ₁₂
Formula weight	3692.35
Temperature	139(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system, space group	Tetragonal, P -4 n 2
Unit cell dimensions	a = 16.5969(7) Å alpha = 90 deg. b = 16.5969(7) Å beta = 90 deg. c = 24.2315(17) Å gamma = 90 deg.
Volume	6674.7(6) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.837 Mg/m ³
Absorption coefficient	24.603 mm ⁻¹
F(000)	3546
Crystal size	0.20 x 0.20 x 0.20 mm
Theta range for data collection	6.65 to 72.12 deg.
Limiting indices	-20<=h<=15, -19<=k<=19, -29<=l<=25
Reflections collected / unique	57610 / 6530 [R(int) = 0.0743]
Completeness to theta = 72.12	99.6 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	1.0 and 0.36
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	6530 / 0 / 332
Goodness-of-fit on F ²	1.046
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0459, wR2 = 0.1231
R indices (all data)	R1 = 0.0540, wR2 = 0.1310
Absolute structure parameter	0.067(12)
Largest diff. peak and hole	1.080 and -0.556 e.Å ⁻³

Table 1b. Bond lengths [Å] and angles [deg] for [Co(*p*-MeC₆H₄Sb)₁₂O₂₈{Co(H₂O)₃}₄]Cl₂·6H₂O

Sb(1)-O(4)	1.963(7)	C(24)-C(25)	1.32(2)
Sb(1)-O(6)	1.975(6)	C(24)-C(27)	1.500(18)
Sb(1)-O(2)#1	2.028(6)	C(25)-C(26)	1.427(17)
Sb(1)-O(3)#2	2.035(7)	C(31)-C(36)	1.310(15)
Sb(1)-C(11)	2.098(10)	C(31)-C(32)	1.363(15)
Sb(1)-O(1)	2.176(6)	C(32)-C(33)	1.412(16)
Sb(1)-Sb(2)#2	3.0862(9)	C(33)-C(34)	1.338(16)
Sb(1)-Sb(3)	3.1906(9)	C(34)-C(35)	1.341(16)
Sb(1)-Sb(2)	3.2122(9)	C(34)-C(37)	1.618(16)
Sb(2)-O(5)	1.943(7)	C(35)-C(36)	1.381(17)
Sb(2)-O(6)	1.953(7)		
Sb(2)-O(3)	2.019(6)	O(4)-Sb(1)-O(6)	96.0(3)
Sb(2)-O(2)#3	2.050(7)	O(4)-Sb(1)-O(2)#1	162.4(2)
Sb(2)-C(21)	2.120(9)	O(6)-Sb(1)-O(2)#1	89.4(3)
Sb(2)-O(1)	2.202(6)	O(4)-Sb(1)-O(3)#2	90.1(3)
Sb(2)-Sb(1)#1	3.0861(9)	O(6)-Sb(1)-O(3)#2	161.6(3)
Sb(2)-Sb(3)	3.2103(9)	O(2)#1-Sb(1)-O(3)#2	80.1(3)
Sb(3)-O(4)	1.963(6)	O(4)-Sb(1)-C(11)	96.4(4)
Sb(3)-O(5)	1.967(7)	O(6)-Sb(1)-C(11)	97.2(4)
Sb(3)-O(7)	1.989(6)	O(2)#1-Sb(1)-C(11)	99.5(4)
Sb(3)-O(7)#3	2.018(6)	O(3)#2-Sb(1)-C(11)	99.4(4)
Sb(3)-C(31)	2.130(10)	O(4)-Sb(1)-O(1)	77.7(2)
Sb(3)-O(1)	2.150(6)	O(6)-Sb(1)-O(1)	78.0(2)
Sb(3)-Sb(3)#3	3.0723(12)	O(2)#1-Sb(1)-O(1)	87.1(2)
Co(1)-O(1)#3	2.050(6)	O(3)#2-Sb(1)-O(1)	86.4(2)
Co(1)-O(1)#1	2.050(6)	C(11)-Sb(1)-O(1)	171.8(3)
Co(1)-O(1)#2	2.050(6)	O(4)-Sb(1)-Sb(2)#2	130.3(2)
Co(1)-O(1)	2.050(6)	O(6)-Sb(1)-Sb(2)#2	130.40(19)
Co(2)-O(2)	2.102(7)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(2)#2	41.10(19)
Co(2)-O(3)#2	2.111(7)	O(3)#2-Sb(1)-Sb(2)#2	40.23(18)
Co(2)-O(9)	2.126(7)	C(11)-Sb(1)-Sb(2)#2	94.6(3)
Co(2)-O(8)	2.127(7)	O(1)-Sb(1)-Sb(2)#2	93.57(16)
Co(2)-O(10)	2.138(8)	O(4)-Sb(1)-Sb(3)	35.64(18)
Co(2)-O(7)#3	2.158(6)	O(6)-Sb(1)-Sb(3)	85.60(19)
O(2)-Sb(1)#2	2.028(6)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(3)	128.91(16)
O(2)-Sb(2)#3	2.050(7)	O(3)#2-Sb(1)-Sb(3)	89.33(18)
O(3)-Sb(1)#1	2.035(7)	C(11)-Sb(1)-Sb(3)	131.6(3)
O(3)-Co(2)#1	2.111(7)	O(1)-Sb(1)-Sb(3)	42.16(16)
O(7)-Sb(3)#3	2.018(6)	Sb(2)#2-Sb(1)-Sb(3)	119.99(2)
O(7)-Co(2)#3	2.158(6)	O(4)-Sb(1)-Sb(2)	86.2(2)
C(11)-C(16)	1.378(15)	O(6)-Sb(1)-Sb(2)	34.90(19)
C(11)-C(12)	1.395(15)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(2)	88.74(16)
C(12)-C(13)	1.352(15)	O(3)#2-Sb(1)-Sb(2)	128.91(19)
C(13)-C(14)	1.371(18)	C(11)-Sb(1)-Sb(2)	131.6(3)
C(14)-C(15)	1.452(18)	O(1)-Sb(1)-Sb(2)	43.10(15)
C(14)-C(17)	1.459(18)	Sb(2)#2-Sb(1)-Sb(2)	120.04(2)
C(15)-C(16)	1.325(15)	Sb(3)-Sb(1)-Sb(2)	60.182(18)
C(21)-C(22)	1.322(16)	O(5)-Sb(2)-O(6)	95.9(3)
C(21)-C(26)	1.407(17)	O(5)-Sb(2)-O(3)	160.5(3)
C(22)-C(23)	1.372(16)	O(6)-Sb(2)-O(3)	90.5(3)
C(23)-C(24)	1.292(18)	O(5)-Sb(2)-O(2)#3	88.9(3)

O(6)-Sb(2)-O(2)#3	162.3(3)	O(7)-Sb(3)-Sb(1)	129.46(18)
O(3)-Sb(2)-O(2)#3	79.9(3)	O(7)#3-Sb(3)-Sb(1)	89.59(18)
O(5)-Sb(2)-C(21)	95.6(4)	C(31)-Sb(3)-Sb(1)	132.0(3)
O(6)-Sb(2)-C(21)	95.9(3)	O(1)-Sb(3)-Sb(1)	42.80(16)
O(3)-Sb(2)-C(21)	102.0(4)	Sb(3)#3-Sb(3)-Sb(1)	119.94(2)
O(2)#3-Sb(2)-C(21)	100.6(3)	O(4)-Sb(3)-Sb(2)	86.3(2)
O(5)-Sb(2)-O(1)	76.9(3)	O(5)-Sb(3)-Sb(2)	34.58(19)
O(6)-Sb(2)-O(1)	77.8(2)	O(7)-Sb(3)-Sb(2)	90.15(17)
O(3)-Sb(2)-O(1)	86.6(2)	O(7)#3-Sb(3)-Sb(2)	129.22(18)
O(2)#3-Sb(2)-O(1)	86.7(2)	C(31)-Sb(3)-Sb(2)	129.0(3)
C(21)-Sb(2)-O(1)	169.5(3)	O(1)-Sb(3)-Sb(2)	43.08(15)
O(5)-Sb(2)-Sb(1)#1	129.3(2)	Sb(3)#3-Sb(3)-Sb(2)	120.66(2)
O(6)-Sb(2)-Sb(1)#1	131.04(19)	Sb(1)-Sb(3)-Sb(2)	60.24(2)
O(3)-Sb(2)-Sb(1)#1	40.63(19)	O(1)#3-Co(1)-O(1)#1	109.78(17)
O(2)#3-Sb(2)-Sb(1)#1	40.55(17)	O(1)#3-Co(1)-O(1)#2	109.78(16)
C(21)-Sb(2)-Sb(1)#1	97.0(3)	O(1)#1-Co(1)-O(1)#2	108.9(3)
O(1)-Sb(2)-Sb(1)#1	93.44(16)	O(1)#3-Co(1)-O(1)	108.9(3)
O(5)-Sb(2)-Sb(3)	35.07(19)	O(1)#1-Co(1)-O(1)	109.78(16)
O(6)-Sb(2)-Sb(3)	85.40(19)	O(1)#2-Co(1)-O(1)	109.78(17)
O(3)-Sb(2)-Sb(3)	127.95(19)	O(2)-Co(2)-O(3)#2	96.3(2)
O(2)#3-Sb(2)-Sb(3)	88.83(15)	O(2)-Co(2)-O(9)	86.4(3)
C(21)-Sb(2)-Sb(3)	130.0(3)	O(3)#2-Co(2)-O(9)	89.0(3)
O(1)-Sb(2)-Sb(3)	41.84(16)	O(2)-Co(2)-O(8)	87.9(3)
Sb(1)#1-Sb(2)-Sb(3)	119.32(2)	O(3)#2-Co(2)-O(8)	174.8(3)
O(5)-Sb(2)-Sb(1)	85.49(19)	O(9)-Co(2)-O(8)	88.3(3)
O(6)-Sb(2)-Sb(1)	35.37(19)	O(2)-Co(2)-O(10)	173.8(3)
O(3)-Sb(2)-Sb(1)	89.18(18)	O(3)#2-Co(2)-O(10)	88.7(3)
O(2)#3-Sb(2)-Sb(1)	128.77(15)	O(9)-Co(2)-O(10)	90.1(3)
C(21)-Sb(2)-Sb(1)	130.6(3)	O(8)-Co(2)-O(10)	86.9(3)
O(1)-Sb(2)-Sb(1)	42.49(15)	O(2)-Co(2)-O(7)#3	96.3(2)
Sb(1)#1-Sb(2)-Sb(1)	120.03(3)	O(3)#2-Co(2)-O(7)#3	95.2(3)
Sb(3)-Sb(2)-Sb(1)	59.575(19)	O(9)-Co(2)-O(7)#3	174.7(3)
O(4)-Sb(3)-O(5)	96.4(3)	O(8)-Co(2)-O(7)#3	87.3(3)
O(4)-Sb(3)-O(7)	162.3(3)	O(10)-Co(2)-O(7)#3	86.8(3)
O(5)-Sb(3)-O(7)	90.3(3)	Co(1)-O(1)-Sb(3)	122.1(3)
O(4)-Sb(3)-O(7)#3	90.2(3)	Co(1)-O(1)-Sb(1)	122.0(3)
O(5)-Sb(3)-O(7)#3	161.3(3)	Sb(3)-O(1)-Sb(1)	95.0(2)
O(7)-Sb(3)-O(7)#3	78.7(3)	Co(1)-O(1)-Sb(2)	121.2(3)
O(4)-Sb(3)-C(31)	97.2(3)	Sb(3)-O(1)-Sb(2)	95.1(2)
O(5)-Sb(3)-C(31)	94.9(3)	Sb(1)-O(1)-Sb(2)	94.4(2)
O(7)-Sb(3)-C(31)	98.5(3)	Sb(1)#2-O(2)-Sb(2)#3	98.4(3)
O(7)#3-Sb(3)-C(31)	101.7(3)	Sb(1)#2-O(2)-Co(2)	129.4(3)
O(4)-Sb(3)-O(1)	78.4(2)	Sb(2)#3-O(2)-Co(2)	128.7(3)
O(5)-Sb(3)-O(1)	77.6(2)	Sb(2)-O(3)-Sb(1)#1	99.1(3)
O(7)-Sb(3)-O(1)	87.2(2)	Sb(2)-O(3)-Co(2)#1	128.7(3)
O(7)#3-Sb(3)-O(1)	86.6(2)	Sb(1)#1-O(3)-Co(2)#1	129.3(3)
C(31)-Sb(3)-O(1)	170.7(3)	Sb(3)-O(4)-Sb(1)	108.7(3)
O(4)-Sb(3)-Sb(3)#3	129.7(2)	Sb(2)-O(5)-Sb(3)	110.3(3)
O(5)-Sb(3)-Sb(3)#3	130.53(19)	Sb(2)-O(6)-Sb(1)	109.7(3)
O(7)-Sb(3)-Sb(3)#3	40.28(17)	Sb(3)-O(7)-Sb(3)#3	100.1(3)
O(7)#3-Sb(3)-Sb(3)#3	39.59(18)	Sb(3)-O(7)-Co(2)#3	128.1(3)
C(31)-Sb(3)-Sb(3)#3	95.6(3)	Sb(3)#3-O(7)-Co(2)#3	128.7(3)
O(1)-Sb(3)-Sb(3)#3	93.50(16)	C(16)-C(11)-C(12)	116.8(10)
O(4)-Sb(3)-Sb(1)	35.64(19)	C(16)-C(11)-Sb(1)	121.7(8)
O(5)-Sb(3)-Sb(1)	85.7(2)	C(12)-C(11)-Sb(1)	121.4(8)

C(13)-C(12)-C(11)	120.9(11)	C(25)-C(24)-C(27)	116.1(14)
C(12)-C(13)-C(14)	123.7(12)	C(24)-C(25)-C(26)	125.5(14)
C(13)-C(14)-C(15)	114.0(11)	C(21)-C(26)-C(25)	114.2(13)
C(13)-C(14)-C(17)	124.9(13)	C(36)-C(31)-C(32)	120.3(12)
C(15)-C(14)-C(17)	120.7(13)	C(36)-C(31)-Sb(3)	122.1(9)
C(16)-C(15)-C(14)	121.7(13)	C(32)-C(31)-Sb(3)	117.4(8)
C(15)-C(16)-C(11)	122.6(12)	C(31)-C(32)-C(33)	119.7(11)
C(22)-C(21)-C(26)	119.8(10)	C(34)-C(33)-C(32)	118.1(11)
C(22)-C(21)-Sb(2)	122.5(9)	C(33)-C(34)-C(35)	121.2(11)
C(26)-C(21)-Sb(2)	117.7(8)	C(33)-C(34)-C(37)	118.2(11)
C(21)-C(22)-C(23)	119.7(13)	C(35)-C(34)-C(37)	120.6(12)
C(24)-C(23)-C(22)	125.6(15)	C(34)-C(35)-C(36)	120.1(13)
C(23)-C(24)-C(25)	115.1(13)	C(31)-C(36)-C(35)	120.5(13)
C(23)-C(24)-C(27)	128.6(15)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -y+1,x,-z+2 #2 y,-x+1,-z+2 #3 -x+1,-y+1,z

Table 2a. Crystal data and structure refinement for



Identification code	rbcocl_sq
Empirical formula	C72 H116 Cl14 Co5 O62 Sb12
Formula weight	4225.60
Temperature	93(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Trigonal, R 32
Unit cell dimensions	a = 23.7522(3) Å alpha = 90 deg. b = 23.7522(3) Å beta = 90 deg. c = 44.6195(15) Å gamma = 120 deg.
Volume	21800.3(8) Å ³
Z, Calculated density	6, 1.931 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.080 mm ⁻¹
F(000)	12174
Crystal size	0.22 x 0.16 x 0.16 mm
Theta range for data collection	1.09 to 27.92 deg
Limiting indices	-31 ≤ h ≤ 30, -31 ≤ k ≤ 31, -58 ≤ l ≤ 58
Reflections collected / unique	224245 / 11547 [R(int) = 0.0616]
Completeness to theta = 27.92	99.3 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	1.000 and 0.886
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	11547 / 38 / 498
Goodness-of-fit on F ²	1.051
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0294, wR2 = 0.0826
R indices (all data)	R1 = 0.0314, wR2 = 0.0839
Absolute structure parameter	-0.01(2)
Largest diff. peak and hole	1.301 and -2.669 e.Å ⁻³

Table 2b. Crystal data and structure refinement for

[Co(p-ClC₆H₄Sb)₁₂O₂₈{Co(H₂O)₃}₄]Cl₂.22H₂O (2).

Sb(1)-O(10)	1.977(3)	Cl(1)-C(14)	1.740(5)
Sb(1)-O(10)#1	2.001(3)	Cl(2)-C(24)	1.735(5)
Sb(1)-O(4)	2.009(3)	Cl(3)-C(34)	1.740(6)
Sb(1)-O(3)	2.025(3)	Cl(4)-C(44)	1.734(7)
Sb(1)-C(21)	2.109(4)	O(2)-Sb(1)#2	2.123(3)
Sb(1)-O(2)	2.123(3)	O(2)-Sb(1)#1	2.123(3)
Sb(1)-Sb(2)	3.1086(4)	O(3)-Co(3)#2	2.134(3)
Sb(1)-Sb(1)#2	3.1865(5)	O(5)-Sb(4)#1	2.017(3)
Sb(1)-Sb(1)#1	3.1865(5)	O(9)-Sb(3)#2	2.025(3)
Sb(2)-O(8)	1.979(3)	O(10)-Sb(1)#2	2.001(3)
Sb(2)-O(6)	1.995(3)	C(11)-C(12)	1.371(7)
Sb(2)-O(3)	2.021(3)	C(11)-C(16)	1.432(7)
Sb(2)-O(4)	2.022(3)	C(12)-C(13)	1.397(7)
Sb(2)-C(11)	2.098(5)	C(13)-C(14)	1.344(8)
Sb(2)-O(1)	2.122(3)	C(14)-C(15)	1.400(9)
Sb(2)-Sb(3)	3.1756(4)	C(15)-C(16)	1.362(8)
Sb(2)-Sb(4)	3.1922(4)	C(21)-C(26)	1.397(8)
Sb(3)-O(7)	1.986(3)	C(21)-C(22)	1.397(7)
Sb(3)-O(8)	1.992(3)	C(22)-C(23)	1.368(8)
Sb(3)-O(5)	2.018(3)	C(23)-C(24)	1.404(10)
Sb(3)-O(9)#1	2.025(3)	C(24)-C(25)	1.340(10)
Sb(3)-C(31)	2.098(5)	C(25)-C(26)	1.396(8)
Sb(3)-O(1)	2.111(3)	C(31)-C(36)	1.392(8)
Sb(3)-Sb(4)#1	3.1211(4)	C(31)-C(32)	1.410(7)
Sb(3)-Sb(4)	3.1871(4)	C(32)-C(33)	1.380(9)
Sb(4)-O(7)	1.976(3)	C(33)-C(34)	1.368(10)
Sb(4)-O(6)	1.984(3)	C(34)-C(35)	1.380(9)
Sb(4)-O(5)#2	2.017(3)	C(35)-C(36)	1.390(9)
Sb(4)-O(9)	2.027(3)	C(41)-C(46)	1.376(10)
Sb(4)-C(41)	2.116(5)	C(41)-C(42)	1.388(8)
Sb(4)-O(1)	2.128(3)	C(42)-C(43)	1.407(10)
Sb(4)-Sb(3)#2	3.1211(4)	C(43)-C(44)	1.378(14)
Co(1)-O(1)	2.150(3)	C(44)-C(45)	1.364(14)
Co(1)-O(1)#2	2.150(3)	C(45)-C(46)	1.428(11)
Co(1)-O(1)#1	2.150(3)	OW6-OW6A	0.94(7)
Co(1)-O(2)	2.154(6)	OW9-OW9A	0.97(2)
Co(2)-OW1	2.118(4)		
Co(2)-OW1#2	2.118(4)	O(10)-Sb(1)-O(10)#1	96.06(19)
Co(2)-OW1#1	2.118(4)	O(10)-Sb(1)-O(4)	162.73(13)
Co(2)-O(9)	2.133(3)	O(10)#1-Sb(1)-O(4)	92.06(13)
Co(2)-O(9)#1	2.133(3)	O(10)-Sb(1)-O(3)	90.01(13)
Co(2)-O(9)#2	2.133(3)	O(10)#1-Sb(1)-O(3)	162.61(13)
Co(3)-OW3	2.098(4)	O(4)-Sb(1)-O(3)	78.11(13)
Co(3)-OW2	2.098(4)	O(10)-Sb(1)-C(21)	95.78(17)
Co(3)-OW4	2.110(4)	O(10)#1-Sb(1)-C(21)	92.82(16)
Co(3)-O(3)#1	2.134(3)	O(4)-Sb(1)-C(21)	99.02(17)
Co(3)-O(4)	2.153(3)	O(3)-Sb(1)-C(21)	102.79(15)
Co(3)-O(5)	2.162(3)	O(10)-Sb(1)-O(2)	78.38(13)

O(10)#1-Sb(1)-O(2)	77.88(13)	O(3)-Sb(2)-Sb(4)	89.87(8)
O(4)-Sb(1)-O(2)	88.50(14)	O(4)-Sb(2)-Sb(4)	128.89(9)
O(3)-Sb(1)-O(2)	87.46(13)	C(11)-Sb(2)-Sb(4)	131.65(14)
C(21)-Sb(1)-O(2)	168.30(18)	O(1)-Sb(2)-Sb(4)	41.38(8)
O(10)-Sb(1)-Sb(2)	129.76(10)	Sb(1)-Sb(2)-Sb(4)	120.377(11)
O(10)#1-Sb(1)-Sb(2)	131.73(10)	Sb(3)-Sb(2)-Sb(4)	60.066(9)
O(4)-Sb(1)-Sb(2)	39.70(9)	O(7)-Sb(3)-O(8)	97.43(14)
O(3)-Sb(1)-Sb(2)	39.75(9)	O(7)-Sb(3)-O(5)	162.17(14)
C(21)-Sb(1)-Sb(2)	96.17(13)	O(8)-Sb(3)-O(5)	90.63(13)
O(2)-Sb(1)-Sb(2)	95.34(13)	O(7)-Sb(3)-O(9)#1	90.58(14)
O(10)-Sb(1)-Sb(1)#2	37.02(9)	O(8)-Sb(3)-O(9)#1	162.37(12)
O(10)#1-Sb(1)-Sb(1)#2	86.51(9)	O(5)-Sb(3)-O(9)#1	77.62(13)
O(4)-Sb(1)-Sb(1)#2	128.96(9)	O(7)-Sb(3)-C(31)	95.20(17)
O(3)-Sb(1)-Sb(1)#2	88.62(9)	O(8)-Sb(3)-C(31)	94.69(17)
C(21)-Sb(1)-Sb(1)#2	132.01(14)	O(5)-Sb(3)-C(31)	99.98(17)
O(2)-Sb(1)-Sb(1)#2	41.36(9)	O(9)#1-Sb(3)-C(31)	100.23(17)
Sb(2)-Sb(1)-Sb(1)#2	119.413(9)	O(7)-Sb(3)-O(1)	77.78(13)
O(10)-Sb(1)-Sb(1)#1	86.89(10)	O(8)-Sb(3)-O(1)	78.28(13)
O(10)#1-Sb(1)-Sb(1)#1	36.52(9)	O(5)-Sb(3)-O(1)	88.40(13)
O(4)-Sb(1)-Sb(1)#1	90.66(9)	O(9)#1-Sb(3)-O(1)	88.17(13)
O(3)-Sb(1)-Sb(1)#1	128.21(9)	C(31)-Sb(3)-O(1)	169.19(17)
C(21)-Sb(1)-Sb(1)#1	128.96(13)	O(7)-Sb(3)-Sb(4)#1	130.22(10)
O(2)-Sb(1)-Sb(1)#1	41.36(9)	O(8)-Sb(3)-Sb(4)#1	129.94(9)
Sb(2)-Sb(1)-Sb(1)#1	120.590(9)	O(5)-Sb(3)-Sb(4)#1	39.31(9)
Sb(1)#2-Sb(1)-Sb(1)#1	60.0	O(9)#1-Sb(3)-Sb(4)#1	39.65(9)
O(8)-Sb(2)-O(6)	96.56(14)	C(31)-Sb(3)-Sb(4)#1	95.11(14)
O(8)-Sb(2)-O(3)	162.28(13)	O(1)-Sb(3)-Sb(4)#1	95.71(9)
O(6)-Sb(2)-O(3)	91.49(13)	O(7)-Sb(3)-Sb(2)	87.10(9)
O(8)-Sb(2)-O(4)	90.32(13)	O(8)-Sb(3)-Sb(2)	36.76(9)
O(6)-Sb(2)-O(4)	162.92(13)	O(5)-Sb(3)-Sb(2)	89.97(9)
O(3)-Sb(2)-O(4)	77.90(13)	O(9)#1-Sb(3)-Sb(2)	128.86(9)
O(8)-Sb(2)-C(11)	97.33(16)	C(31)-Sb(3)-Sb(2)	130.87(14)
O(6)-Sb(2)-C(11)	95.32(16)	O(1)-Sb(3)-Sb(2)	41.52(8)
O(3)-Sb(2)-C(11)	97.60(16)	Sb(4)#1-Sb(3)-Sb(2)	120.160(11)
O(4)-Sb(2)-C(11)	99.29(16)	O(7)-Sb(3)-Sb(4)	36.35(9)
O(8)-Sb(2)-O(1)	78.29(12)	O(8)-Sb(3)-Sb(4)	87.25(10)
O(6)-Sb(2)-O(1)	77.92(13)	O(5)-Sb(3)-Sb(4)	129.06(10)
O(3)-Sb(2)-O(1)	88.06(12)	O(9)#1-Sb(3)-Sb(4)	90.02(10)
O(4)-Sb(2)-O(1)	88.26(12)	C(31)-Sb(3)-Sb(4)	130.92(15)
C(11)-Sb(2)-O(1)	171.35(15)	O(1)-Sb(3)-Sb(4)	41.45(8)
O(8)-Sb(2)-Sb(1)	129.71(10)	Sb(4)#1-Sb(3)-Sb(4)	120.488(14)
O(6)-Sb(2)-Sb(1)	131.32(10)	Sb(2)-Sb(3)-Sb(4)	60.226(9)
O(3)-Sb(2)-Sb(1)	39.84(9)	O(7)-Sb(4)-O(6)	96.49(15)
O(4)-Sb(2)-Sb(1)	39.39(9)	O(7)-Sb(4)-O(5)#2	161.47(14)
C(11)-Sb(2)-Sb(1)	92.99(13)	O(6)-Sb(4)-O(5)#2	91.59(14)
O(1)-Sb(2)-Sb(1)	95.54(8)	O(7)-Sb(4)-O(9)	90.20(14)
O(8)-Sb(2)-Sb(3)	37.03(9)	O(6)-Sb(4)-O(9)	162.31(13)
O(6)-Sb(2)-Sb(3)	86.53(9)	O(5)#2-Sb(4)-O(9)	77.60(14)
O(3)-Sb(2)-Sb(3)	128.51(9)	O(7)-Sb(4)-C(41)	97.04(18)
O(4)-Sb(2)-Sb(3)	89.67(9)	O(6)-Sb(4)-C(41)	96.21(18)
C(11)-Sb(2)-Sb(3)	133.84(13)	O(5)#2-Sb(4)-C(41)	98.63(18)
O(1)-Sb(2)-Sb(3)	41.27(8)	O(9)-Sb(4)-C(41)	99.20(18)
Sb(1)-Sb(2)-Sb(3)	119.788(11)	O(7)-Sb(4)-O(1)	77.60(13)
O(8)-Sb(2)-Sb(4)	87.31(9)	O(6)-Sb(4)-O(1)	78.01(13)
O(6)-Sb(2)-Sb(4)	36.54(9)	O(5)#2-Sb(4)-O(1)	87.86(13)

O(9)-Sb(4)-O(1)	87.53(13)	OW2-Co(3)-O(5)	175.66(15)
C(41)-Sb(4)-O(1)	171.48(17)	OW4-Co(3)-O(5)	88.32(14)
O(7)-Sb(4)-Sb(3)#2	129.78(10)	O(3)#1-Co(3)-O(5)	95.53(12)
O(6)-Sb(4)-Sb(3)#2	130.92(10)	O(4)-Co(3)-O(5)	94.28(12)
O(5)#2-Sb(4)-Sb(3)#2	39.35(9)	Sb(3)-O(1)-Sb(2)	97.21(13)
O(9)-Sb(4)-Sb(3)#2	39.60(9)	Sb(3)-O(1)-Sb(4)	97.50(12)
C(41)-Sb(4)-Sb(3)#2	93.57(15)	Sb(2)-O(1)-Sb(4)	97.38(13)
O(1)-Sb(4)-Sb(3)#2	94.95(9)	Sb(3)-O(1)-Co(1)	119.79(15)
O(7)-Sb(4)-Sb(3)	36.56(10)	Sb(2)-O(1)-Co(1)	119.85(14)
O(6)-Sb(4)-Sb(3)	86.38(10)	Sb(4)-O(1)-Co(1)	119.94(15)
O(5)#2-Sb(4)-Sb(3)	128.12(10)	Sb(1)-O(2)-Sb(1)#2	97.27(17)
O(9)-Sb(4)-Sb(3)	89.36(9)	Sb(1)-O(2)-Sb(1)#1	97.27(17)
C(41)-Sb(4)-Sb(3)	133.15(16)	Sb(1)#2-O(2)-Sb(1)#1	97.27(17)
O(1)-Sb(4)-Sb(3)	41.06(8)	Sb(1)-O(2)-Co(1)	119.93(13)
Sb(3)#2-Sb(4)-Sb(3)	119.511(14)	Sb(1)#2-O(2)-Co(1)	119.93(13)
O(7)-Sb(4)-Sb(2)	86.80(10)	Sb(1)#1-O(2)-Co(1)	119.93(13)
O(6)-Sb(4)-Sb(2)	36.77(9)	Sb(2)-O(3)-Sb(1)	100.41(13)
O(5)#2-Sb(4)-Sb(2)	89.80(9)	Sb(2)-O(3)-Co(3)#2	127.82(15)
O(9)-Sb(4)-Sb(2)	128.01(9)	Sb(1)-O(3)-Co(3)#2	129.38(15)
C(41)-Sb(4)-Sb(2)	132.69(16)	Sb(1)-O(4)-Sb(2)	100.90(14)
O(1)-Sb(4)-Sb(2)	41.24(8)	Sb(1)-O(4)-Co(3)	127.32(16)
Sb(3)#2-Sb(4)-Sb(2)	119.646(11)	Sb(2)-O(4)-Co(3)	129.09(14)
Sb(3)-Sb(4)-Sb(2)	59.708(9)	Sb(4)#1-O(5)-Sb(3)	101.34(13)
O(1)-Co(1)-O(1)#2	109.62(9)	Sb(4)#1-O(5)-Co(3)	127.37(17)
O(1)-Co(1)-O(1)#1	109.62(9)	Sb(3)-O(5)-Co(3)	128.72(16)
O(1)#2-Co(1)-O(1)#1	109.62(9)	Sb(4)-O(6)-Sb(2)	106.69(15)
O(1)-Co(1)-O(2)	109.33(9)	Sb(4)-O(7)-Sb(3)	107.09(14)
O(1)#2-Co(1)-O(2)	109.33(9)	Sb(2)-O(8)-Sb(3)	106.21(15)
O(1)#1-Co(1)-O(2)	109.33(9)	Sb(3)#2-O(9)-Sb(4)	100.75(14)
OW1-Co(2)-OW1#2	88.78(16)	Sb(3)#2-O(9)-Co(2)	128.01(16)
OW1-Co(2)-OW1#1	88.78(16)	Sb(4)-O(9)-Co(2)	128.47(16)
OW1#2-Co(2)-OW1#1	88.78(16)	Sb(1)-O(10)-Sb(1)#2	106.46(15)
OW1-Co(2)-O(9)	86.56(14)	C(12)-C(11)-C(16)	118.8(5)
OW1#2-Co(2)-O(9)	88.64(14)	C(12)-C(11)-Sb(2)	123.5(4)
OW1#1-Co(2)-O(9)	174.73(14)	C(16)-C(11)-Sb(2)	117.5(4)
OW1-Co(2)-O(9)#1	88.64(14)	C(11)-C(12)-C(13)	120.6(5)
OW1#2-Co(2)-O(9)#1	174.72(14)	C(14)-C(13)-C(12)	119.6(5)
OW1#1-Co(2)-O(9)#1	86.56(14)	C(13)-C(14)-C(15)	121.9(5)
O(9)-Co(2)-O(9)#1	95.80(12)	C(13)-C(14)-Cl(1)	118.8(5)
OW1-Co(2)-O(9)#2	174.72(14)	C(15)-C(14)-Cl(1)	119.2(4)
OW1#2-Co(2)-O(9)#2	86.56(14)	C(16)-C(15)-C(14)	119.0(5)
OW1#1-Co(2)-O(9)#2	88.64(14)	C(15)-C(16)-C(11)	120.1(5)
O(9)-Co(2)-O(9)#2	95.80(12)	C(26)-C(21)-C(22)	119.7(5)
O(9)#1-Co(2)-O(9)#2	95.80(12)	C(26)-C(21)-Sb(1)	118.8(4)
OW3-Co(3)-OW2	88.95(15)	C(22)-C(21)-Sb(1)	121.4(4)
OW3-Co(3)-OW4	88.63(16)	C(23)-C(22)-C(21)	120.4(6)
OW2-Co(3)-OW4	88.45(16)	C(22)-C(23)-C(24)	119.1(6)
OW3-Co(3)-O(3)#1	176.18(14)	C(25)-C(24)-C(23)	121.1(5)
OW2-Co(3)-O(3)#1	87.38(13)	C(25)-C(24)-Cl(2)	119.8(5)
OW4-Co(3)-O(3)#1	90.25(14)	C(23)-C(24)-Cl(2)	119.0(5)
OW3-Co(3)-O(4)	85.92(14)	C(24)-C(25)-C(26)	120.8(6)
OW2-Co(3)-O(4)	88.66(14)	C(25)-C(26)-C(21)	118.8(6)
OW4-Co(3)-O(4)	173.87(15)	C(36)-C(31)-C(32)	118.1(5)
O(3)#1-Co(3)-O(4)	95.02(13)	C(36)-C(31)-Sb(3)	121.6(4)
OW3-Co(3)-O(5)	88.08(14)	C(32)-C(31)-Sb(3)	120.3(4)

C(33)-C(32)-C(31)	119.7(6)	C(42)-C(41)-Sb(4)	119.5(5)
C(34)-C(33)-C(32)	120.7(5)	C(41)-C(42)-C(43)	118.8(7)
C(33)-C(34)-C(35)	120.8(6)	C(44)-C(43)-C(42)	119.5(7)
C(33)-C(34)-Cl(3)	120.8(4)	C(45)-C(44)-C(43)	122.1(7)
C(35)-C(34)-Cl(3)	118.2(5)	C(45)-C(44)-Cl(4)	119.7(8)
C(34)-C(35)-C(36)	118.8(6)	C(43)-C(44)-Cl(4)	117.8(7)
C(35)-C(36)-C(31)	121.4(5)	C(44)-C(45)-C(46)	117.8(9)
C(46)-C(41)-C(42)	120.8(6)	C(41)-C(46)-C(45)	120.0(7)
C(46)-C(41)-Sb(4)	119.5(4)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Table 3a. Crystal data for (PhCH₂NMe₃)₂[(ClC₆H₄Sb)₁₂O₂₈Zn₅Cl_{2.46}Br_{1.40}]. 8MeCN.H₂O. (3)

Identification code	p_cl4_sq
Empirical formula	C ₁₀₈ H ₁₀₆ Br _{1.40} Cl _{14.46} N ₁₀ O ₂₉ Sb ₁₂ Sr _{0.14} Zn _{4.86}
Formula weight	4423.47
Temperature	89(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P 2(1)/m
Unit cell dimensions	a = 15.2930(2) Å alpha = 90 deg. b = 25.0465(4) Å beta = 92.5970(10) deg. c = 19.1113(3) Å gamma = 90 deg.
Volume	7312.80(19) Å ³
Z, Calculated density	2, 2.009 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.720 mm ⁻¹
F(000)	4228
Crystal size	0.30 x 0.30 x 0.26 mm
Theta range for data collection	1.07 to 27.98 deg.
Limiting indices	-20 ≤ h ≤ 20, -32 ≤ k ≤ 32, -25 ≤ l ≤ 25
Reflections collected / unique	170500 / 17961 [R(int) = 0.0529]
Completeness to theta = 27.98	99.7 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	1.000 and 0.810
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	17961 / 24 / 931
Goodness-of-fit on F ²	1.050
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R ₁ = 0.0496, wR ₂ = 0.1320
R indices (all data)	R ₁ = 0.0666, wR ₂ = 0.1415
Largest diff. peak and hole	2.001 and -1.609 e.Å ⁻³

Table 3b. Crystal data for (PhCH₂NMe₃)₂[(ClC₆H₄Sb)₁₂O₂₈Zn₅Cl_{2.46}Br_{1.40}]. 8MeCN.H₂O. (3)

Sb(1)-O(3)	1.955(4)	Sb(7)-O(9)	2.013(4)
Sb(1)-O(3)#1	1.955(4)	Sb(7)-O(11)	2.031(4)
Sb(1)-O(2)#1	2.026(4)	Sb(7)-C(71)	2.109(6)
Sb(1)-O(2)	2.026(4)	Sb(7)-O(4)	2.182(4)
Sb(1)-C(11)	2.097(11)	Sb(7)-Sb(7)#1	3.1830(8)
Sb(1)-O(5)	2.174(6)	Zn(1)-O(12)	2.012(4)
Sb(1)-Sb(2)	3.1245(10)	Zn(1)-O(12)#1	2.012(4)
Sb(1)-Sb(3)	3.1844(7)	Zn(1)-O(5)	2.023(6)
Sb(1)-Sb(3)#1	3.1844(7)	Zn(1)-O(4)	2.025(6)
Sb(2)-O(1)#1	1.954(4)	Zn(2)-O(2)	2.011(4)
Sb(2)-O(1)	1.954(4)	Zn(2)-O(8)	2.017(4)
Sb(2)-O(2)	2.020(4)	Zn(2)-O(9)	2.023(4)
Sb(2)-O(2)#1	2.020(4)	Zn(2)-Cl(21)	2.218(19)
Sb(2)-C(21)	2.109(9)	Zn(2)-Br(21)	2.288(9)
Sb(2)-O(4)	2.212(6)	Zn(3)-O(15)	2.005(6)
Sb(2)-Sb(7)#1	3.1973(9)	Zn(3)-O(10)	2.013(4)
Sb(2)-Sb(7)	3.1973(9)	Zn(3)-O(10)#1	2.013(4)
Sb(3)-O(3)	1.943(4)	Zn(3)-Cl(31)	2.22(2)
Sb(3)-O(6)	1.952(3)	Zn(3)-Br(31)	2.284(13)
Sb(3)-O(10)	2.021(4)	Zn(4)-O(11)	2.014(4)
Sb(3)-O(8)	2.025(4)	Zn(4)-O(11)#1	2.014(4)
Sb(3)-C(31)	2.097(6)	Zn(4)-O(14)	2.023(6)
Sb(3)-O(5)	2.200(4)	Zn(4)-Cl(41)	2.212(5)
Sb(3)-Sb(4)	3.1108(7)	Zn(4)-Br(41)	2.257(13)
Sb(3)-Sb(3)#1	3.1906(8)	Cl(1)-C(14)	1.735(12)
Sb(4)-O(13)	1.953(4)	Cl(2)-C(24)	1.756(12)
Sb(4)-O(16)	1.955(4)	Cl(3)-C(34)	1.733(7)
Sb(4)-O(10)	2.009(4)	Cl(4)-C(44)	1.744(7)
Sb(4)-O(8)	2.011(4)	Cl(5)-C(54)	1.746(8)
Sb(4)-C(41)	2.099(6)	Cl(6)-C(64)	1.745(8)
Sb(4)-O(12)	2.175(4)	Cl(7)-C(74)	1.738(7)
Sb(4)-Sb(5)	3.1789(7)	O(4)-Sb(7)#1	2.182(4)
Sb(4)-Sb(6)	3.1816(6)	O(5)-Sb(3)#1	2.200(4)
Sb(5)-O(16)	1.948(4)	O(6)-Sb(3)#1	1.952(3)
Sb(5)-O(17)	1.956(4)	O(7)-Sb(7)#1	1.956(3)
Sb(5)-O(14)	2.004(4)	O(14)-Sb(5)#1	2.004(4)
Sb(5)-O(15)	2.023(4)	O(15)-Sb(5)#1	2.023(4)
Sb(5)-C(51)	2.099(7)	C(11)-C(12)	1.286(18)
Sb(5)-O(12)	2.210(4)	C(11)-C(12)#1	1.286(18)
Sb(5)-Sb(5)#1	3.1118(8)	C(11)-C(12A)#1	1.492(17)
Sb(5)-Sb(6)	3.2038(6)	C(11)-C(12A)	1.492(17)
Sb(6)-O(13)	1.948(4)	C(11)-Sb(1A)	2.55(3)
Sb(6)-O(17)	1.949(4)	C(12)-C(13)	1.41(3)
Sb(6)-O(9)	2.017(4)	C(12A)-C(13A)	1.38(2)
Sb(6)-O(11)	2.026(4)	C(13)-C(14)	1.22(2)
Sb(6)-C(61)	2.105(6)	C(13A)-C(14)	1.57(2)
Sb(6)-O(12)	2.200(4)	C(14)-C(13)#1	1.22(2)
Sb(6)-Sb(7)	3.1217(6)	C(14)-C(13A)#1	1.57(2)
Sb(7)-O(1)	1.946(5)	C(21)-C(22A)#1	1.348(17)
Sb(7)-O(7)	1.956(3)	C(21)-C(22A)	1.348(17)

C(21)-C(22)	1.432(16)	C(4A)-C(4B)	1.41(2)
C(21)-C(22)#1	1.432(16)	N(5)-C(5A)	1.11(3)
C(21)-Sb(2A)	2.55(3)	C(5A)-C(5B)	1.51(3)
C(22)-C(23)	1.40(2)	N(6)-C(6A)	1.156(14)
C(22A)-C(23A)	1.41(2)	C(6A)-C(6B)	1.415(16)
C(23)-C(24)	1.47(2)	Sb(1A)-Sb(2A)	3.11(4)
C(23A)-C(24)	1.25(2)	Sb(1A)-Sb(3A)	3.29(3)
C(24)-C(23A)#1	1.25(2)	Sb(1A)-Sb(3A)#1	3.29(3)
C(24)-C(23)#1	1.47(2)	Sb(2A)-Sb(7A)#1	3.23(3)
C(31)-C(32)	1.393(9)	Sb(2A)-Sb(7A)	3.23(3)
C(31)-C(36)	1.401(9)	Sb(3A)-Sb(4A)	3.10(3)
C(32)-C(33)	1.395(9)	Sb(3A)-Sb(3A)#1	3.30(4)
C(33)-C(34)	1.359(10)	Sb(4A)-Sb(6A)	3.15(3)
C(34)-C(35)	1.391(10)	Sb(4A)-Sb(5A)	3.17(3)
C(35)-C(36)	1.396(9)	Sb(5A)-Sb(5A)#1	3.06(4)
C(41)-C(42)	1.391(9)	Sb(5A)-Sb(6A)	3.20(3)
C(41)-C(46)	1.394(9)	Sb(6A)-Sb(7A)	3.09(2)
C(42)-C(43)	1.375(9)	Sb(7A)-Sb(7A)#1	3.20(3)
C(43)-C(44)	1.365(11)		
C(44)-C(45)	1.366(11)	O(3)-Sb(1)-O(3)#1	97.4(2)
C(45)-C(46)	1.376(10)	O(3)-Sb(1)-O(2)#1	160.95(18)
C(51)-C(52)	1.380(10)	O(3)#1-Sb(1)-O(2)#1	90.26(17)
C(51)-C(56)	1.384(10)	O(3)-Sb(1)-O(2)	90.26(17)
C(52)-C(53)	1.391(10)	O(3)#1-Sb(1)-O(2)	160.95(18)
C(53)-C(54)	1.361(12)	O(2)#1-Sb(1)-O(2)	77.5(2)
C(54)-C(55)	1.391(13)	O(3)-Sb(1)-C(11)	96.5(2)
C(55)-C(56)	1.371(11)	O(3)#1-Sb(1)-C(11)	96.5(2)
C(61)-C(66)	1.376(10)	O(2)#1-Sb(1)-C(11)	99.9(3)
C(61)-C(62)	1.382(11)	O(2)-Sb(1)-C(11)	99.9(3)
C(62)-C(63)	1.388(11)	O(3)-Sb(1)-O(5)	78.58(16)
C(63)-C(64)	1.355(15)	O(3)#1-Sb(1)-O(5)	78.58(16)
C(64)-C(65)	1.377(15)	O(2)#1-Sb(1)-O(5)	85.96(16)
C(65)-C(66)	1.380(11)	O(2)-Sb(1)-O(5)	85.96(16)
C(71)-C(76)	1.372(10)	C(11)-Sb(1)-O(5)	172.5(3)
C(71)-C(72)	1.374(10)	O(3)-Sb(1)-Sb(2)	129.58(13)
C(72)-C(73)	1.381(11)	O(3)#1-Sb(1)-Sb(2)	129.58(13)
C(73)-C(74)	1.397(12)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(2)	39.37(11)
C(74)-C(75)	1.347(12)	O(2)-Sb(1)-Sb(2)	39.37(11)
C(75)-C(76)	1.387(10)	C(11)-Sb(1)-Sb(2)	95.1(3)
N(1)-C(1)	1.472(14)	O(5)-Sb(1)-Sb(2)	92.40(15)
N(1)-C(3)	1.480(13)	O(3)-Sb(1)-Sb(3)	35.09(12)
N(1)-C(2)	1.525(13)	O(3)#1-Sb(1)-Sb(3)	86.25(12)
N(1)-C(4)	1.562(14)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(3)	129.11(12)
C(4)-C(5)	1.510(15)	O(2)-Sb(1)-Sb(3)	90.21(11)
C(5)-C(6)	1.398(14)	C(11)-Sb(1)-Sb(3)	131.0(2)
C(5)-C(10)	1.415(14)	O(5)-Sb(1)-Sb(3)	43.61(10)
C(6)-C(7)	1.469(15)	Sb(2)-Sb(1)-Sb(3)	120.27(3)
C(7)-C(8)	1.361(17)	O(3)-Sb(1)-Sb(3)#1	86.25(12)
C(8)-C(9)	1.462(18)	O(3)#1-Sb(1)-Sb(3)#1	35.09(12)
C(9)-C(10)	1.420(16)	O(2)#1-Sb(1)-Sb(3)#1	90.21(11)
N(2)-C(2A)	1.134(16)	O(2)-Sb(1)-Sb(3)#1	129.11(12)
C(2A)-C(2B)	1.537(19)	C(11)-Sb(1)-Sb(3)#1	131.0(2)
N(3)-C(3A)	1.29(3)	O(5)-Sb(1)-Sb(3)#1	43.61(10)
C(3A)-C(3B)	1.42(3)	Sb(2)-Sb(1)-Sb(3)#1	120.27(3)
N(4)-C(4A)	1.19(2)	Sb(3)-Sb(1)-Sb(3)#1	60.129(18)

O(1)#1-Sb(2)-O(1)	97.0(3)	C(31)-Sb(3)-Sb(4)	93.66(19)
O(1)#1-Sb(2)-O(2)	160.27(17)	O(5)-Sb(3)-Sb(4)	91.94(14)
O(1)-Sb(2)-O(2)	90.04(17)	O(3)-Sb(3)-Sb(1)	35.35(12)
O(1)#1-Sb(2)-O(2)#1	90.04(17)	O(6)-Sb(3)-Sb(1)	86.27(16)
O(1)-Sb(2)-O(2)#1	160.27(17)	O(10)-Sb(3)-Sb(1)	128.16(11)
O(2)-Sb(2)-O(2)#1	77.8(2)	O(8)-Sb(3)-Sb(1)	89.94(11)
O(1)#1-Sb(2)-C(21)	97.5(2)	C(31)-Sb(3)-Sb(1)	134.30(19)
O(1)-Sb(2)-C(21)	97.5(2)	O(5)-Sb(3)-Sb(1)	42.96(15)
O(2)-Sb(2)-C(21)	99.8(2)	Sb(4)-Sb(3)-Sb(1)	119.44(2)
O(2)#1-Sb(2)-C(21)	99.8(2)	O(3)-Sb(3)-Sb(3)#1	86.28(12)
O(1)#1-Sb(2)-O(4)	77.68(16)	O(6)-Sb(3)-Sb(3)#1	35.19(13)
O(1)-Sb(2)-O(4)	77.68(16)	O(10)-Sb(3)-Sb(3)#1	89.80(10)
O(2)-Sb(2)-O(4)	85.94(16)	O(8)-Sb(3)-Sb(3)#1	128.99(11)
O(2)#1-Sb(2)-O(4)	85.94(16)	C(31)-Sb(3)-Sb(3)#1	131.23(18)
C(21)-Sb(2)-O(4)	172.6(3)	O(5)-Sb(3)-Sb(3)#1	43.53(10)
O(1)#1-Sb(2)-Sb(1)	129.46(13)	Sb(4)-Sb(3)-Sb(3)#1	119.675(11)
O(1)-Sb(2)-Sb(1)	129.46(13)	Sb(1)-Sb(3)-Sb(3)#1	59.936(9)
O(2)-Sb(2)-Sb(1)	39.51(12)	O(13)-Sb(4)-O(16)	97.34(18)
O(2)#1-Sb(2)-Sb(1)	39.51(12)	O(13)-Sb(4)-O(10)	161.70(16)
C(21)-Sb(2)-Sb(1)	95.0(3)	O(16)-Sb(4)-O(10)	89.98(17)
O(4)-Sb(2)-Sb(1)	92.40(14)	O(13)-Sb(4)-O(8)	90.58(17)
O(1)#1-Sb(2)-Sb(7)#1	34.85(13)	O(16)-Sb(4)-O(8)	162.50(16)
O(1)-Sb(2)-Sb(7)#1	85.71(13)	O(10)-Sb(4)-O(8)	78.17(16)
O(2)-Sb(2)-Sb(7)#1	128.39(12)	O(13)-Sb(4)-C(41)	96.2(2)
O(2)#1-Sb(2)-Sb(7)#1	89.78(12)	O(16)-Sb(4)-C(41)	95.1(2)
C(21)-Sb(2)-Sb(7)#1	131.8(2)	O(10)-Sb(4)-C(41)	99.8(2)
O(4)-Sb(2)-Sb(7)#1	42.93(10)	O(8)-Sb(4)-C(41)	99.5(2)
Sb(1)-Sb(2)-Sb(7)#1	119.686(19)	O(13)-Sb(4)-O(12)	78.83(15)
O(1)#1-Sb(2)-Sb(7)	85.71(13)	O(16)-Sb(4)-O(12)	79.28(15)
O(1)-Sb(2)-Sb(7)	34.85(13)	O(10)-Sb(4)-O(12)	86.13(15)
O(2)-Sb(2)-Sb(7)	89.78(12)	O(8)-Sb(4)-O(12)	87.03(15)
O(2)#1-Sb(2)-Sb(7)	128.39(12)	C(41)-Sb(4)-O(12)	171.9(2)
C(21)-Sb(2)-Sb(7)	131.8(2)	O(13)-Sb(4)-Sb(3)	130.25(13)
O(4)-Sb(2)-Sb(7)	42.93(10)	O(16)-Sb(4)-Sb(3)	129.57(12)
Sb(1)-Sb(2)-Sb(7)	119.686(19)	O(10)-Sb(4)-Sb(3)	39.60(11)
Sb(7)#1-Sb(2)-Sb(7)	59.70(2)	O(8)-Sb(4)-Sb(3)	39.73(11)
O(3)-Sb(3)-O(6)	97.6(2)	C(41)-Sb(4)-Sb(3)	95.08(19)
O(3)-Sb(3)-O(10)	160.28(17)	O(12)-Sb(4)-Sb(3)	92.99(10)
O(6)-Sb(3)-O(10)	90.2(2)	O(13)-Sb(4)-Sb(5)	86.65(13)
O(3)-Sb(3)-O(8)	89.94(17)	O(16)-Sb(4)-Sb(5)	35.39(12)
O(6)-Sb(3)-O(8)	161.01(19)	O(10)-Sb(4)-Sb(5)	89.75(11)
O(10)-Sb(3)-O(8)	77.58(16)	O(8)-Sb(4)-Sb(5)	130.51(11)
O(3)-Sb(3)-C(31)	99.6(2)	C(41)-Sb(4)-Sb(5)	129.9(2)
O(6)-Sb(3)-C(31)	96.4(2)	O(12)-Sb(4)-Sb(5)	43.98(10)
O(10)-Sb(3)-C(31)	97.5(2)	Sb(3)-Sb(4)-Sb(5)	120.515(16)
O(8)-Sb(3)-C(31)	99.6(2)	O(13)-Sb(4)-Sb(6)	35.30(12)
O(3)-Sb(3)-O(5)	78.18(19)	O(16)-Sb(4)-Sb(6)	86.56(12)
O(6)-Sb(3)-O(5)	78.62(17)	O(10)-Sb(4)-Sb(6)	129.40(11)
O(10)-Sb(3)-O(5)	85.67(19)	O(8)-Sb(4)-Sb(6)	91.06(12)
O(8)-Sb(3)-O(5)	85.94(15)	C(41)-Sb(4)-Sb(6)	130.78(18)
C(31)-Sb(3)-O(5)	174.1(2)	O(12)-Sb(4)-Sb(6)	43.66(10)
O(3)-Sb(3)-Sb(4)	129.24(13)	Sb(3)-Sb(4)-Sb(6)	121.077(17)
O(6)-Sb(3)-Sb(4)	129.45(19)	Sb(5)-Sb(4)-Sb(6)	60.491(15)
O(10)-Sb(3)-Sb(4)	39.33(11)	O(16)-Sb(5)-O(17)	97.17(18)
O(8)-Sb(3)-Sb(4)	39.40(12)	O(16)-Sb(5)-O(14)	161.7(2)

O(17)-Sb(5)-O(14)	90.28(18)	O(13)-Sb(6)-Sb(4)	35.40(12)
O(16)-Sb(5)-O(15)	90.30(18)	O(17)-Sb(6)-Sb(4)	85.99(12)
O(17)-Sb(5)-O(15)	161.0(2)	O(9)-Sb(6)-Sb(4)	89.68(12)
O(14)-Sb(5)-O(15)	77.85(19)	O(11)-Sb(6)-Sb(4)	128.89(12)
O(16)-Sb(5)-C(51)	95.4(2)	C(61)-Sb(6)-Sb(4)	131.62(19)
O(17)-Sb(5)-C(51)	95.8(2)	O(12)-Sb(6)-Sb(4)	43.03(10)
O(14)-Sb(5)-C(51)	100.5(3)	Sb(7)-Sb(6)-Sb(4)	119.26(2)
O(15)-Sb(5)-C(51)	100.9(2)	O(13)-Sb(6)-Sb(5)	86.03(12)
O(16)-Sb(5)-O(12)	78.55(16)	O(17)-Sb(6)-Sb(5)	34.95(12)
O(17)-Sb(5)-O(12)	77.95(16)	O(9)-Sb(6)-Sb(5)	128.83(12)
O(14)-Sb(5)-O(12)	86.7(2)	O(11)-Sb(6)-Sb(5)	90.51(12)
O(15)-Sb(5)-O(12)	86.53(19)	C(61)-Sb(6)-Sb(5)	129.96(18)
C(51)-Sb(5)-O(12)	170.5(2)	O(12)-Sb(6)-Sb(5)	43.54(10)
O(16)-Sb(5)-Sb(5)#1	129.91(12)	Sb(7)-Sb(6)-Sb(5)	120.184(16)
O(17)-Sb(5)-Sb(5)#1	129.21(13)	Sb(4)-Sb(6)-Sb(5)	59.713(14)
O(14)-Sb(5)-Sb(5)#1	39.08(13)	O(1)-Sb(7)-O(7)	97.1(2)
O(15)-Sb(5)-Sb(5)#1	39.71(13)	O(1)-Sb(7)-O(9)	90.54(18)
C(51)-Sb(5)-Sb(5)#1	97.25(18)	O(7)-Sb(7)-O(9)	161.56(19)
O(12)-Sb(5)-Sb(5)#1	92.25(10)	O(1)-Sb(7)-O(11)	161.57(17)
O(16)-Sb(5)-Sb(4)	35.55(12)	O(7)-Sb(7)-O(11)	90.3(2)
O(17)-Sb(5)-Sb(4)	85.94(13)	O(9)-Sb(7)-O(11)	77.83(17)
O(14)-Sb(5)-Sb(4)	129.31(18)	O(1)-Sb(7)-C(71)	97.1(2)
O(15)-Sb(5)-Sb(4)	90.18(15)	O(7)-Sb(7)-C(71)	97.9(2)
C(51)-Sb(5)-Sb(4)	130.14(19)	O(9)-Sb(7)-C(71)	97.7(2)
O(12)-Sb(5)-Sb(4)	43.09(10)	O(11)-Sb(7)-C(71)	98.6(2)
Sb(5)#1-Sb(5)-Sb(4)	119.793(11)	O(1)-Sb(7)-O(4)	78.61(19)
O(16)-Sb(5)-Sb(6)	86.05(12)	O(7)-Sb(7)-O(4)	78.61(17)
O(17)-Sb(5)-Sb(6)	34.79(13)	O(9)-Sb(7)-O(4)	86.54(15)
O(14)-Sb(5)-Sb(6)	90.70(14)	O(11)-Sb(7)-O(4)	86.36(19)
O(15)-Sb(5)-Sb(6)	129.38(17)	C(71)-Sb(7)-O(4)	174.0(2)
C(51)-Sb(5)-Sb(6)	129.70(17)	O(1)-Sb(7)-Sb(6)	129.75(13)
O(12)-Sb(5)-Sb(6)	43.29(10)	O(7)-Sb(7)-Sb(6)	129.82(19)
Sb(5)#1-Sb(5)-Sb(6)	119.850(10)	O(9)-Sb(7)-Sb(6)	39.28(12)
Sb(4)-Sb(5)-Sb(6)	59.796(14)	O(11)-Sb(7)-Sb(6)	39.63(12)
O(13)-Sb(6)-O(17)	97.36(18)	C(71)-Sb(7)-Sb(6)	93.43(17)
O(13)-Sb(6)-O(9)	89.79(17)	O(4)-Sb(7)-Sb(6)	92.50(13)
O(17)-Sb(6)-O(9)	160.77(17)	O(1)-Sb(7)-Sb(7)#1	86.25(12)
O(13)-Sb(6)-O(11)	161.01(18)	O(7)-Sb(7)-Sb(7)#1	35.55(14)
O(17)-Sb(6)-O(11)	90.31(18)	O(9)-Sb(7)-Sb(7)#1	129.20(11)
O(9)-Sb(6)-O(11)	77.89(17)	O(11)-Sb(7)-Sb(7)#1	90.08(12)
O(13)-Sb(6)-C(61)	97.0(2)	C(71)-Sb(7)-Sb(7)#1	132.98(17)
O(17)-Sb(6)-C(61)	95.7(2)	O(4)-Sb(7)-Sb(7)#1	43.16(10)
O(9)-Sb(6)-C(61)	101.2(2)	Sb(6)-Sb(7)-Sb(7)#1	119.962(10)
O(11)-Sb(6)-C(61)	99.5(2)	O(1)-Sb(7)-Sb(2)	35.03(12)
O(13)-Sb(6)-O(12)	78.31(15)	O(7)-Sb(7)-Sb(2)	86.29(17)
O(17)-Sb(6)-O(12)	78.37(16)	O(9)-Sb(7)-Sb(2)	90.51(12)
O(9)-Sb(6)-O(12)	85.70(15)	O(11)-Sb(7)-Sb(2)	129.60(12)
O(11)-Sb(6)-O(12)	86.33(15)	C(71)-Sb(7)-Sb(2)	131.74(17)
C(61)-Sb(6)-O(12)	171.8(2)	O(4)-Sb(7)-Sb(2)	43.69(15)
O(13)-Sb(6)-Sb(7)	128.90(13)	Sb(6)-Sb(7)-Sb(2)	120.268(19)
O(17)-Sb(6)-Sb(7)	129.95(13)	Sb(7)#1-Sb(7)-Sb(2)	60.148(11)
O(9)-Sb(6)-Sb(7)	39.20(11)	O(12)-Zn(1)-O(12)#1	109.4(2)
O(11)-Sb(6)-Sb(7)	39.76(12)	O(12)-Zn(1)-O(5)	109.67(14)
C(61)-Sb(6)-Sb(7)	96.27(17)	O(12)#1-Zn(1)-O(5)	109.67(14)
O(12)-Sb(6)-Sb(7)	91.94(10)	O(12)-Zn(1)-O(4)	109.20(14)

O(12)#1-Zn(1)-O(4)	109.20(14)	Sb(7)-O(9)-Zn(2)	125.4(2)
O(5)-Zn(1)-O(4)	109.6(2)	Sb(6)-O(9)-Zn(2)	126.3(2)
O(2)-Zn(2)-O(8)	104.71(16)	Sb(4)-O(10)-Zn(3)	126.8(2)
O(2)-Zn(2)-O(9)	105.33(17)	Sb(4)-O(10)-Sb(3)	101.06(17)
O(8)-Zn(2)-O(9)	105.12(17)	Zn(3)-O(10)-Sb(3)	126.29(19)
O(2)-Zn(2)-Cl(21)	116.3(5)	Zn(4)-O(11)-Sb(6)	124.6(2)
O(8)-Zn(2)-Cl(21)	112.2(8)	Zn(4)-O(11)-Sb(7)	126.8(2)
O(9)-Zn(2)-Cl(21)	112.3(7)	Sb(6)-O(11)-Sb(7)	100.61(19)
O(2)-Zn(2)-Br(21)	109.5(2)	Zn(1)-O(12)-Sb(4)	122.76(19)
O(8)-Zn(2)-Br(21)	114.3(4)	Zn(1)-O(12)-Sb(6)	123.26(18)
O(9)-Zn(2)-Br(21)	116.8(4)	Sb(4)-O(12)-Sb(6)	93.32(14)
Cl(21)-Zn(2)-Br(21)	6.9(7)	Zn(1)-O(12)-Sb(5)	123.02(18)
O(15)-Zn(3)-O(10)	104.47(15)	Sb(4)-O(12)-Sb(5)	92.93(14)
O(15)-Zn(3)-O(10)#1	104.47(15)	Sb(6)-O(12)-Sb(5)	93.17(14)
O(10)-Zn(3)-O(10)#1	104.2(2)	Sb(6)-O(13)-Sb(4)	109.29(19)
O(15)-Zn(3)-Cl(31)	111(2)	Sb(5)-O(14)-Sb(5)#1	101.8(3)
O(10)-Zn(3)-Cl(31)	115.6(10)	Sb(5)-O(14)-Zn(4)	125.04(16)
O(10)#1-Zn(3)-Cl(31)	115.6(10)	Sb(5)#1-O(14)-Zn(4)	125.04(16)
O(15)-Zn(3)-Br(31)	115.8(11)	Zn(3)-O(15)-Sb(5)#1	126.09(16)
O(10)-Zn(3)-Br(31)	113.4(6)	Zn(3)-O(15)-Sb(5)	126.09(16)
O(10)#1-Zn(3)-Br(31)	113.4(6)	Sb(5)#1-O(15)-Sb(5)	100.6(3)
Cl(31)-Zn(3)-Br(31)	4(3)	Sb(5)-O(16)-Sb(4)	109.07(19)
O(11)-Zn(4)-O(11)#1	104.7(3)	Sb(6)-O(17)-Sb(5)	110.3(2)
O(11)-Zn(4)-O(14)	107.05(16)	C(12)-C(11)-C(12)#1	98.8(19)
O(11)#1-Zn(4)-O(14)	107.05(16)	C(12)-C(11)-C(12A)#1	120.5(12)
O(11)-Zn(4)-Cl(41)	118.82(14)	C(12)#1-C(11)-C(12A)#1	39.3(10)
O(11)#1-Zn(4)-Cl(41)	118.82(14)	C(12)-C(11)-C(12A)	39.3(10)
O(14)-Zn(4)-Cl(41)	99.2(2)	C(12)#1-C(11)-C(12A)	120.5(12)
O(11)-Zn(4)-Br(41)	112.8(2)	C(12A)#1-C(11)-C(12A)	115.1(14)
O(11)#1-Zn(4)-Br(41)	112.8(2)	C(12)-C(11)-Sb(1)	123.5(9)
O(14)-Zn(4)-Br(41)	111.9(3)	C(12)#1-C(11)-Sb(1)	123.5(9)
Cl(41)-Zn(4)-Br(41)	12.7(3)	C(12A)#1-C(11)-Sb(1)	115.9(8)
Sb(7)-O(1)-Sb(2)	110.12(19)	C(12A)-C(11)-Sb(1)	115.9(8)
Zn(2)-O(2)-Sb(2)	126.1(2)	C(12)-C(11)-Sb(1A)	127.0(9)
Zn(2)-O(2)-Sb(1)	126.2(2)	C(12)#1-C(11)-Sb(1A)	127.0(9)
Sb(2)-O(2)-Sb(1)	101.12(18)	C(12A)#1-C(11)-Sb(1A)	112.2(8)
Sb(3)-O(3)-Sb(1)	109.56(19)	C(12A)-C(11)-Sb(1A)	112.2(8)
Zn(1)-O(4)-Sb(7)#1	123.10(17)	Sb(1)-C(11)-Sb(1A)	9.7(6)
Zn(1)-O(4)-Sb(7)	123.10(17)	C(11)-C(12)-C(13)	123.7(17)
Sb(7)#1-O(4)-Sb(7)	93.7(2)	C(13A)-C(12A)-C(11)	118.0(16)
Zn(1)-O(4)-Sb(2)	122.1(3)	C(14)-C(13)-C(12)	119.9(19)
Sb(7)#1-O(4)-Sb(2)	93.38(18)	C(12A)-C(13A)-C(14)	114.4(16)
Sb(7)-O(4)-Sb(2)	93.38(18)	C(13)-C(14)-C(13)#1	106(3)
Zn(1)-O(5)-Sb(1)	123.5(3)	C(13)-C(14)-C(13A)#1	123.4(13)
Zn(1)-O(5)-Sb(3)	122.64(18)	C(13)#1-C(14)-C(13A)#1	38.9(14)
Sb(1)-O(5)-Sb(3)	93.43(19)	C(13)-C(14)-C(13A)	38.9(14)
Zn(1)-O(5)-Sb(3)#1	122.64(18)	C(13)#1-C(14)-C(13A)	123.4(13)
Sb(1)-O(5)-Sb(3)#1	93.43(19)	C(13A)#1-C(14)-C(13A)	112.6(17)
Sb(3)-O(5)-Sb(3)#1	92.9(2)	C(13)-C(14)-Cl(1)	119.4(12)
Sb(3)#1-O(6)-Sb(3)	109.6(3)	C(13)#1-C(14)-Cl(1)	119.4(12)
Sb(7)-O(7)-Sb(7)#1	108.9(3)	C(13A)#1-C(14)-Cl(1)	117.1(9)
Sb(4)-O(8)-Zn(2)	125.4(2)	C(13A)-C(14)-Cl(1)	117.1(9)
Sb(4)-O(8)-Sb(3)	100.86(17)	C(22A)#1-C(21)-C(22A)	98.1(16)
Zn(2)-O(8)-Sb(3)	126.4(2)	C(22A)#1-C(21)-C(22)	121.5(11)
Sb(7)-O(9)-Sb(6)	101.53(19)	C(22A)-C(21)-C(22)	46.4(9)

C(22A)#1-C(21)-C(22)#1	46.4(9)
C(22A)-C(21)-C(22)#1	121.5(11)
C(22)-C(21)-C(22)#1	106.8(14)
C(22A)#1-C(21)-Sb(2)	121.3(8)
C(22A)-C(21)-Sb(2)	121.3(8)
C(22)-C(21)-Sb(2)	117.1(7)
C(22)#1-C(21)-Sb(2)	117.1(7)
C(22A)#1-C(21)-Sb(2A)	115.7(9)
C(22A)-C(21)-Sb(2A)	115.7(9)
C(22)-C(21)-Sb(2A)	121.4(8)
C(22)#1-C(21)-Sb(2A)	121.4(8)
Sb(2)-C(21)-Sb(2A)	10.9(6)
C(23)-C(22)-C(21)	117.2(15)
C(21)-C(22A)-C(23A)	118.9(15)
C(22)-C(23)-C(24)	118.0(15)
C(24)-C(23A)-C(22A)	122.7(17)
C(23A)#1-C(24)-C(23A)	96(2)
C(23A)#1-C(24)-C(23)	121.2(13)
C(23A)-C(24)-C(23)	49.2(12)
C(23A)#1-C(24)-C(23)#1	49.2(12)
C(23A)-C(24)-C(23)#1	121.2(13)
C(23)-C(24)-C(23)#1	104.0(14)
C(23A)#1-C(24)-Cl(2)	119.6(10)
C(23A)-C(24)-Cl(2)	119.6(10)
C(23)-C(24)-Cl(2)	119.0(9)
C(23)#1-C(24)-Cl(2)	119.0(9)
C(32)-C(31)-C(36)	119.8(6)
C(32)-C(31)-Sb(3)	121.0(5)
C(36)-C(31)-Sb(3)	119.2(5)
C(31)-C(32)-C(33)	120.1(6)
C(34)-C(33)-C(32)	119.7(6)
C(33)-C(34)-C(35)	121.6(6)
C(33)-C(34)-Cl(3)	119.4(6)
C(35)-C(34)-Cl(3)	119.0(6)
C(34)-C(35)-C(36)	119.5(7)
C(35)-C(36)-C(31)	119.3(6)
C(42)-C(41)-C(46)	120.0(6)
C(42)-C(41)-Sb(4)	119.7(5)
C(46)-C(41)-Sb(4)	120.3(5)
C(43)-C(42)-C(41)	119.4(6)
C(44)-C(43)-C(42)	119.6(7)
C(43)-C(44)-C(45)	121.9(7)
C(43)-C(44)-Cl(4)	119.3(6)
C(45)-C(44)-Cl(4)	118.8(6)
C(44)-C(45)-C(46)	119.4(7)
C(45)-C(46)-C(41)	119.5(7)
C(52)-C(51)-C(56)	120.2(7)
C(52)-C(51)-Sb(5)	118.5(5)
C(56)-C(51)-Sb(5)	120.9(5)
C(51)-C(52)-C(53)	119.5(7)
C(54)-C(53)-C(52)	118.9(8)
C(53)-C(54)-C(55)	122.7(7)
C(53)-C(54)-Cl(5)	119.5(7)
C(55)-C(54)-Cl(5)	117.8(7)
C(56)-C(55)-C(54)	117.6(8)

C(55)-C(56)-C(51)	121.1(8)
C(66)-C(61)-C(62)	119.1(7)
C(66)-C(61)-Sb(6)	121.3(5)
C(62)-C(61)-Sb(6)	119.3(5)
C(61)-C(62)-C(63)	120.3(8)
C(64)-C(63)-C(62)	119.3(9)
C(63)-C(64)-C(65)	121.5(8)
C(63)-C(64)-Cl(6)	119.4(8)
C(65)-C(64)-Cl(6)	119.1(8)
C(64)-C(65)-C(66)	119.0(9)
C(61)-C(66)-C(65)	120.7(8)
C(76)-C(71)-C(72)	119.7(7)
C(76)-C(71)-Sb(7)	120.5(5)
C(72)-C(71)-Sb(7)	119.8(5)
C(71)-C(72)-C(73)	120.3(8)
C(72)-C(73)-C(74)	119.3(8)
C(75)-C(74)-C(73)	120.1(7)
C(75)-C(74)-Cl(7)	120.7(6)
C(73)-C(74)-Cl(7)	119.0(6)
C(74)-C(75)-C(76)	120.3(7)
C(71)-C(76)-C(75)	120.2(7)
C(1)-N(1)-C(3)	111.1(10)
C(1)-N(1)-C(2)	108.0(9)
C(3)-N(1)-C(2)	106.1(8)
C(1)-N(1)-C(4)	113.7(8)
C(3)-N(1)-C(4)	113.9(9)
C(2)-N(1)-C(4)	103.4(9)
C(5)-C(4)-N(1)	111.1(9)
C(6)-C(5)-C(10)	120.9(11)
C(6)-C(5)-C(4)	116.8(10)
C(10)-C(5)-C(4)	122.2(10)
C(5)-C(6)-C(7)	119.2(11)
C(8)-C(7)-C(6)	117.9(11)
C(7)-C(8)-C(9)	125.1(11)
C(10)-C(9)-C(8)	114.7(12)
C(5)-C(10)-C(9)	122.2(12)
N(2)-C(2A)-C(2B)	175.9(16)
N(3)-C(3A)-C(3B)	171(3)
N(4)-C(4A)-C(4B)	176.9(17)
N(5)-C(5A)-C(5B)	178.7(19)
N(6)-C(6A)-C(6B)	179.5(13)
C(11)-Sb(1A)-Sb(2A)	106.0(10)
C(11)-Sb(1A)-Sb(3A)	123.0(9)
Sb(2A)-Sb(1A)-Sb(3A)	119.7(9)
C(11)-Sb(1A)-Sb(3A)#1	123.0(9)
Sb(2A)-Sb(1A)-Sb(3A)#1	119.7(9)
Sb(3A)-Sb(1A)-Sb(3A)#1	60.1(8)
C(21)-Sb(2A)-Sb(1A)	82.9(9)
C(21)-Sb(2A)-Sb(7A)#1	142.4(6)
Sb(1A)-Sb(2A)-Sb(7A)#1	117.0(8)
C(21)-Sb(2A)-Sb(7A)	142.4(6)
Sb(1A)-Sb(2A)-Sb(7A)	117.0(8)
Sb(7A)#1-Sb(2A)-Sb(7A)	59.3(7)
Sb(4A)-Sb(3A)-Sb(1A)	120.7(9)
Sb(4A)-Sb(3A)-Sb(3A)#1	117.5(6)

Sb(1A)-Sb(3A)-Sb(3A)#1	59.9(4)	Sb(7A)-Sb(6A)-Sb(4A)	119.4(8)
Sb(3A)-Sb(4A)-Sb(6A)	119.7(8)	Sb(7A)-Sb(6A)-Sb(5A)	121.1(7)
Sb(3A)-Sb(4A)-Sb(5A)	123.2(9)	Sb(4A)-Sb(6A)-Sb(5A)	59.9(6)
Sb(6A)-Sb(4A)-Sb(5A)	60.8(6)	Sb(6A)-Sb(7A)-Sb(7A)#1	119.3(4)
Sb(5A)#1-Sb(5A)-Sb(4A)	119.3(5)	Sb(6A)-Sb(7A)-Sb(2A)	123.5(7)
Sb(5A)#1-Sb(5A)-Sb(6A)	119.6(5)	Sb(7A)#1-Sb(7A)-Sb(2A)	60.4(4)
Sb(4A)-Sb(5A)-Sb(6A)	59.3(6)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Table 4a. Crystal data and structure refinement for [BaCoH₄(p-MeC₆H₄Sb)O₂₈].5H₂O (4)

Identification code	btmam_sq
Empirical formula	C ₈₄ H ₉₈ Ba Co O ₃₃ Sb ₁₂
Formula weight	3292.89
Temperature	153(2) K
Wavelength	1.54180 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P 2(1)/n
Unit cell dimensions	a = 16.782(3) Å alpha = 90.00(3) deg. b = 26.290(5) Å beta = 91.69(3) deg. c = 29.175(6) Å gamma = 90.00(3) deg.
Volume	12866(4) Å ³
Z, Calculated density	4, 1.700 Mg/m ³
Absorption coefficient	23.443 mm ⁻¹
F(000)	6244
Crystal size	0.12 x 0.08 x 0.01 mm
Theta range for data collection	6.74 to 72.12 deg.
Limiting indices	-20 ≤ h ≤ 18, -32 ≤ k ≤ 29, -35 ≤ l ≤ 31
Reflections collected / unique	123841 / 23872 [R(int) = 0.1827]
Completeness to theta = 72.12	94.2 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	1.00 and 0.30
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	23872 / 24 / 369
Goodness-of-fit on F ²	1.023
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.1278, wR2 = 0.3147
R indices (all data)	R1 = 0.2601, wR2 = 0.3666
Largest diff. peak and hole	0.992 and -0.838 e.Å ⁻³

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [deg] for [BaCoH₄(p-MeC₆H₄Sb)O₂₈].5H₂O (4)

Ba(1)-O(5)	2.693(14)	Sb(6)-O(16)	2.005(13)
Ba(1)-O(4)	2.739(12)	Sb(6)-O(5)	2.021(14)
Ba(1)-O(2)	2.769(13)	Sb(6)-C(61)	2.074(13)
Ba(1)-OW4	2.876(17)	Sb(6)-O(14)	2.197(11)
Ba(1)-OW1	2.880(16)	Sb(6)-Sb(9)	3.241(2)
Ba(1)-OW2	2.902(15)	Sb(7)-O(18)	1.987(13)
Ba(1)-OW3	2.904(17)	Sb(7)-O(6)	2.008(12)
Ba(1)-OW5	3.17(2)	Sb(7)-O(19)	2.010(12)
Sb(1)-O(1)	1.910(13)	Sb(7)-O(25)	2.047(13)
Sb(1)-O(18)	1.963(13)	Sb(7)-C(71)	2.074(13)
Sb(1)-O(5)	1.975(13)	Sb(7)-O(17)	2.137(11)
Sb(1)-O(16)	2.080(13)	Sb(8)-O(21)	1.955(13)
Sb(1)-C(11)	2.103(12)	Sb(8)-O(20)	1.980(12)
Sb(1)-O(17)	2.184(11)	Sb(8)-O(10)	1.994(13)
Sb(1)-Sb(6)	3.148(2)	Sb(8)-O(9)	2.046(12)
Sb(1)-Sb(2)	3.223(2)	Sb(8)-C(81)	2.064(12)
Sb(1)-Sb(7)	3.234(2)	Sb(8)-O(15)	2.174(13)
Sb(2)-O(2)	1.967(13)	Sb(9)-O(22)	1.941(12)
Sb(2)-O(6)	1.971(12)	Sb(9)-O(23)	1.963(13)
Sb(2)-O(1)	2.008(13)	Sb(9)-O(12)	1.976(12)
Sb(2)-O(8)	2.051(12)	Sb(9)-O(13)	2.039(14)
Sb(2)-C(21)	2.093(13)	Sb(9)-C(91)	2.130(13)
Sb(2)-O(17)	2.194(12)	Sb(9)-O(14)	2.140(11)
Sb(2)-Sb(3)	3.156(3)	Sb(10)-O(19)	1.915(13)
Sb(2)-Sb(7)	3.221(2)	Sb(10)-O(20)	1.977(12)
Sb(3)-O(9)	1.928(12)	Sb(10)-O(27)	1.994(13)
Sb(3)-O(3)	1.953(14)	Sb(10)-O(26)	2.035(14)
Sb(3)-O(2)	2.023(13)	Sb(10)-C(101)	2.129(12)
Sb(3)-O(8)	2.063(12)	Sb(10)-O(24)	2.249(10)
Sb(3)-C(31)	2.106(13)	Sb(10)-Sb(11)	3.196(2)
Sb(3)-O(15)	2.241(13)	Sb(10)-Sb(12)	3.198(2)
Sb(3)-Sb(4)	3.217(2)	Sb(11)-O(27)	1.956(13)
Sb(3)-Sb(8)	3.232(2)	Sb(11)-O(21)	2.001(13)
Sb(4)-O(4)	1.968(12)	Sb(11)-O(22)	2.015(13)
Sb(4)-O(10)	1.982(13)	Sb(11)-O(28)	2.015(13)
Sb(4)-O(3)	1.987(14)	Sb(11)-C(111)	2.101(12)
Sb(4)-C(41)	2.084(12)	Sb(11)-O(24)	2.207(10)
Sb(4)-O(11)	2.106(11)	Sb(11)-Sb(12)	3.189(2)
Sb(4)-O(15)	2.202(13)	Sb(12)-O(28)	1.957(13)
Sb(4)-Sb(5)	3.169(2)	Sb(12)-O(26)	1.975(14)
Sb(4)-Sb(8)	3.228(2)	Sb(12)-O(25)	1.987(13)
Sb(5)-O(4)	1.959(12)	Sb(12)-O(23)	2.040(13)
Sb(5)-O(7)	1.969(12)	Sb(12)-C(121)	2.100(12)
Sb(5)-O(12)	1.990(12)	Sb(12)-O(24)	2.157(10)
Sb(5)-C(51)	2.082(12)	Co(1)-O(24)	1.885(11)
Sb(5)-O(11)	2.091(11)	Co(1)-O(15)	1.932(13)
Sb(5)-O(14)	2.194(11)	Co(1)-O(17)	1.983(12)
Sb(5)-Sb(6)	3.212(2)	Co(1)-O(14)	1.995(12)
Sb(5)-Sb(9)	3.234(2)	C(11)-C(12)	1.3900
Sb(6)-O(7)	1.975(12)	C(11)-C(16)	1.3900
Sb(6)-O(13)	1.991(15)	C(12)-C(13)	1.3900

C(13)-C(14)	1.3900	C(92)-C(93)	1.3900
C(14)-C(15)	1.3900	C(93)-C(94)	1.3900
C(14)-C(17)	1.495(17)	C(94)-C(95)	1.3900
C(15)-C(16)	1.3900	C(94)-C(97)	1.518(18)
C(21)-C(22)	1.3900	C(95)-C(96)	1.3900
C(21)-C(26)	1.3900	C(101)-C(102)	1.3900
C(22)-C(23)	1.3900	C(101)-C(106)	1.3900
C(23)-C(24)	1.3900	C(102)-C(103)	1.3900
C(24)-C(25)	1.3900	C(103)-C(104)	1.3900
C(24)-C(27)	1.518(17)	C(104)-C(105)	1.3900
C(25)-C(26)	1.3900	C(104)-C(107)	1.570(17)
C(31)-C(32)	1.3900	C(105)-C(106)	1.3900
C(31)-C(36)	1.3900	C(111)-C(112)	1.3900
C(32)-C(33)	1.3900	C(111)-C(116)	1.3900
C(33)-C(34)	1.3900	C(112)-C(113)	1.3900
C(34)-C(35)	1.3900	C(113)-C(114)	1.3900
C(34)-C(37)	1.500(17)	C(114)-C(115)	1.3900
C(35)-C(36)	1.3900	C(114)-C(117)	1.532(17)
C(41)-C(42)	1.3900	C(115)-C(116)	1.3900
C(41)-C(46)	1.3900	C(121)-C(122)	1.3900
C(42)-C(43)	1.3900	C(121)-C(126)	1.3900
C(43)-C(44)	1.3900	C(122)-C(123)	1.3900
C(44)-C(45)	1.3900	C(123)-C(124)	1.3900
C(44)-C(47)	1.548(17)	C(124)-C(125)	1.3900
C(45)-C(46)	1.3900	C(124)-C(127)	1.549(17)
C(51)-C(52)	1.3900	C(125)-C(126)	1.3900
C(51)-C(56)	1.3900		
C(52)-C(53)	1.3900	O(5)-Ba(1)-O(4)	82.6(4)
C(53)-C(54)	1.3900	O(5)-Ba(1)-O(2)	76.8(4)
C(54)-C(55)	1.3900	O(4)-Ba(1)-O(2)	79.8(4)
C(54)-C(57)	1.541(17)	O(5)-Ba(1)-OW4	75.1(5)
C(55)-C(56)	1.3900	O(4)-Ba(1)-OW4	152.6(5)
C(61)-C(62)	1.3900	O(2)-Ba(1)-OW4	79.8(5)
C(61)-C(66)	1.3900	O(5)-Ba(1)-OW1	136.0(4)
C(62)-C(63)	1.3900	O(4)-Ba(1)-OW1	134.8(4)
C(63)-C(64)	1.3900	O(2)-Ba(1)-OW1	87.2(4)
C(64)-C(65)	1.3900	OW4-Ba(1)-OW1	61.7(5)
C(64)-C(67)	1.521(18)	O(5)-Ba(1)-OW2	136.0(4)
C(65)-C(66)	1.3900	O(4)-Ba(1)-OW2	82.8(4)
C(71)-C(72)	1.3900	O(2)-Ba(1)-OW2	139.9(4)
C(71)-C(76)	1.3900	OW4-Ba(1)-OW2	124.4(4)
C(72)-C(73)	1.3900	OW1-Ba(1)-OW2	80.1(4)
C(73)-C(74)	1.3900	O(5)-Ba(1)-OW3	82.0(4)
C(74)-C(75)	1.3900	O(4)-Ba(1)-OW3	128.9(4)
C(74)-C(77)	1.538(17)	O(2)-Ba(1)-OW3	141.5(4)
C(75)-C(76)	1.3900	OW4-Ba(1)-OW3	63.9(5)
C(81)-C(82)	1.3900	OW1-Ba(1)-OW3	86.2(5)
C(81)-C(86)	1.3900	OW2-Ba(1)-OW3	75.6(4)
C(82)-C(83)	1.3900	O(5)-Ba(1)-OW5	152.4(5)
C(83)-C(84)	1.3900	O(4)-Ba(1)-OW5	76.3(5)
C(84)-C(85)	1.3900	O(2)-Ba(1)-OW5	82.1(5)
C(84)-C(87)	1.526(17)	OW4-Ba(1)-OW5	118.4(6)
C(85)-C(86)	1.3900	OW1-Ba(1)-OW5	59.1(5)
C(91)-C(92)	1.3900	OW2-Ba(1)-OW5	58.8(5)
C(91)-C(96)	1.3900	OW3-Ba(1)-OW5	125.2(5)

O(1)-Sb(1)-O(18)	99.0(5)	C(21)-Sb(2)-Sb(3)	92.3(5)
O(1)-Sb(1)-O(5)	90.3(6)	O(17)-Sb(2)-Sb(3)	92.7(3)
O(18)-Sb(1)-O(5)	158.5(5)	O(2)-Sb(2)-Sb(7)	128.1(4)
O(1)-Sb(1)-O(16)	163.0(5)	O(6)-Sb(2)-Sb(7)	36.4(3)
O(18)-Sb(1)-O(16)	89.5(5)	O(1)-Sb(2)-Sb(7)	87.1(4)
O(5)-Sb(1)-O(16)	77.1(5)	O(8)-Sb(2)-Sb(7)	87.3(3)
O(1)-Sb(1)-C(11)	93.5(6)	C(21)-Sb(2)-Sb(7)	136.0(6)
O(18)-Sb(1)-C(11)	97.6(8)	O(17)-Sb(2)-Sb(7)	41.3(3)
O(5)-Sb(1)-C(11)	101.2(8)	Sb(3)-Sb(2)-Sb(7)	115.78(6)
O(16)-Sb(1)-C(11)	100.0(6)	O(2)-Sb(2)-Sb(1)	93.5(4)
O(1)-Sb(1)-O(17)	78.2(5)	O(6)-Sb(2)-Sb(1)	84.8(3)
O(18)-Sb(1)-O(17)	76.3(5)	O(1)-Sb(2)-Sb(1)	33.7(4)
O(5)-Sb(1)-O(17)	86.9(5)	O(8)-Sb(2)-Sb(1)	130.9(3)
O(16)-Sb(1)-O(17)	89.7(5)	C(21)-Sb(2)-Sb(1)	133.5(7)
C(11)-Sb(1)-O(17)	168.5(7)	O(17)-Sb(2)-Sb(1)	42.5(3)
O(1)-Sb(1)-Sb(6)	128.5(4)	Sb(3)-Sb(2)-Sb(1)	120.82(6)
O(18)-Sb(1)-Sb(6)	127.2(4)	Sb(7)-Sb(2)-Sb(1)	60.25(5)
O(5)-Sb(1)-Sb(6)	38.5(4)	O(9)-Sb(3)-O(3)	95.7(5)
O(16)-Sb(1)-Sb(6)	38.7(4)	O(9)-Sb(3)-O(2)	160.7(5)
C(11)-Sb(1)-Sb(6)	100.7(6)	O(3)-Sb(3)-O(2)	94.1(5)
O(17)-Sb(1)-Sb(6)	90.7(3)	O(9)-Sb(3)-O(8)	89.8(5)
O(1)-Sb(1)-Sb(2)	35.7(4)	O(3)-Sb(3)-O(8)	163.2(5)
O(18)-Sb(1)-Sb(2)	85.1(4)	O(2)-Sb(3)-O(8)	76.4(5)
O(5)-Sb(1)-Sb(2)	91.4(4)	O(9)-Sb(3)-C(31)	96.8(8)
O(16)-Sb(1)-Sb(2)	132.0(4)	O(3)-Sb(3)-C(31)	98.0(7)
C(11)-Sb(1)-Sb(2)	128.0(5)	O(2)-Sb(3)-C(31)	98.2(8)
O(17)-Sb(1)-Sb(2)	42.7(3)	O(8)-Sb(3)-C(31)	97.1(7)
Sb(6)-Sb(1)-Sb(2)	118.66(7)	O(9)-Sb(3)-O(15)	78.9(5)
O(1)-Sb(1)-Sb(7)	88.4(4)	O(3)-Sb(3)-O(15)	78.5(5)
O(18)-Sb(1)-Sb(7)	35.3(4)	O(2)-Sb(3)-O(15)	86.8(5)
O(5)-Sb(1)-Sb(7)	126.8(4)	O(8)-Sb(3)-O(15)	87.1(5)
O(16)-Sb(1)-Sb(7)	90.2(4)	C(31)-Sb(3)-O(15)	174.1(6)
C(11)-Sb(1)-Sb(7)	132.0(8)	O(9)-Sb(3)-Sb(2)	129.2(4)
O(17)-Sb(1)-Sb(7)	41.0(3)	O(3)-Sb(3)-Sb(2)	130.9(4)
Sb(6)-Sb(1)-Sb(7)	115.18(6)	O(2)-Sb(3)-Sb(2)	37.1(4)
Sb(2)-Sb(1)-Sb(7)	59.84(5)	O(8)-Sb(3)-Sb(2)	39.8(3)
O(2)-Sb(2)-O(6)	161.0(5)	C(31)-Sb(3)-Sb(2)	95.3(5)
O(2)-Sb(2)-O(1)	92.1(5)	O(15)-Sb(3)-Sb(2)	90.6(3)
O(6)-Sb(2)-O(1)	96.7(5)	O(9)-Sb(3)-Sb(4)	84.0(4)
O(2)-Sb(2)-O(8)	77.9(5)	O(3)-Sb(3)-Sb(4)	35.6(4)
O(6)-Sb(2)-O(8)	88.9(5)	O(2)-Sb(3)-Sb(4)	94.5(4)
O(1)-Sb(2)-O(8)	161.9(5)	O(8)-Sb(3)-Sb(4)	130.1(3)
O(2)-Sb(2)-C(21)	95.1(7)	C(31)-Sb(3)-Sb(4)	132.8(6)
O(6)-Sb(2)-C(21)	99.7(7)	O(15)-Sb(3)-Sb(4)	43.1(3)
O(1)-Sb(2)-C(21)	100.4(8)	Sb(2)-Sb(3)-Sb(4)	120.48(7)
O(8)-Sb(2)-C(21)	95.6(7)	O(9)-Sb(3)-Sb(8)	36.8(4)
O(2)-Sb(2)-O(17)	88.4(5)	O(3)-Sb(3)-Sb(8)	88.3(4)
O(6)-Sb(2)-O(17)	77.6(5)	O(2)-Sb(3)-Sb(8)	127.2(4)
O(1)-Sb(2)-O(17)	75.9(5)	O(8)-Sb(3)-Sb(8)	86.6(3)
O(8)-Sb(2)-O(17)	88.6(4)	C(31)-Sb(3)-Sb(8)	133.6(7)
C(21)-Sb(2)-O(17)	175.0(6)	O(15)-Sb(3)-Sb(8)	42.1(3)
O(2)-Sb(2)-Sb(3)	38.4(4)	Sb(2)-Sb(3)-Sb(8)	114.77(6)
O(6)-Sb(2)-Sb(3)	128.6(3)	Sb(4)-Sb(3)-Sb(8)	60.08(5)
O(1)-Sb(2)-Sb(3)	130.0(4)	O(4)-Sb(4)-O(10)	160.3(5)
O(8)-Sb(2)-Sb(3)	40.0(3)	O(4)-Sb(4)-O(3)	93.4(5)

O(10)-Sb(4)-O(3)	97.0(5)	O(4)-Sb(5)-Sb(6)	96.6(3)
O(4)-Sb(4)-C(41)	96.0(8)	O(7)-Sb(5)-Sb(6)	35.5(4)
O(10)-Sb(4)-C(41)	98.7(8)	O(12)-Sb(5)-Sb(6)	83.3(4)
O(3)-Sb(4)-C(41)	99.3(7)	C(51)-Sb(5)-Sb(6)	132.2(7)
O(4)-Sb(4)-O(11)	76.8(5)	O(11)-Sb(5)-Sb(6)	132.4(3)
O(10)-Sb(4)-O(11)	88.9(5)	O(14)-Sb(5)-Sb(6)	43.0(3)
O(3)-Sb(4)-O(11)	163.5(5)	Sb(4)-Sb(5)-Sb(6)	120.71(6)
C(41)-Sb(4)-O(11)	94.9(7)	O(4)-Sb(5)-Sb(9)	129.8(4)
O(4)-Sb(4)-O(15)	87.7(5)	O(7)-Sb(5)-Sb(9)	89.9(4)
O(10)-Sb(4)-O(15)	78.0(5)	O(12)-Sb(5)-Sb(9)	35.2(4)
O(3)-Sb(4)-O(15)	78.8(5)	C(51)-Sb(5)-Sb(9)	133.9(6)
C(41)-Sb(4)-O(15)	175.9(7)	O(11)-Sb(5)-Sb(9)	87.3(3)
O(11)-Sb(4)-O(15)	87.5(5)	O(14)-Sb(5)-Sb(9)	41.1(3)
O(4)-Sb(4)-Sb(5)	36.1(4)	Sb(4)-Sb(5)-Sb(9)	115.30(6)
O(10)-Sb(4)-Sb(5)	128.8(4)	Sb(6)-Sb(5)-Sb(9)	60.37(5)
O(3)-Sb(4)-Sb(5)	128.8(4)	O(7)-Sb(6)-O(13)	98.5(6)
C(41)-Sb(4)-Sb(5)	95.1(5)	O(7)-Sb(6)-O(16)	164.1(5)
O(11)-Sb(4)-Sb(5)	40.8(3)	O(13)-Sb(6)-O(16)	89.4(6)
O(15)-Sb(4)-Sb(5)	88.9(3)	O(7)-Sb(6)-O(5)	91.0(5)
O(4)-Sb(4)-Sb(3)	94.6(4)	O(13)-Sb(6)-O(5)	161.2(6)
O(10)-Sb(4)-Sb(3)	84.6(4)	O(16)-Sb(6)-O(5)	77.8(5)
O(3)-Sb(4)-Sb(3)	34.9(4)	O(7)-Sb(6)-C(61)	93.9(8)
C(41)-Sb(4)-Sb(3)	133.6(6)	O(13)-Sb(6)-C(61)	96.7(7)
O(11)-Sb(4)-Sb(3)	131.5(3)	O(16)-Sb(6)-C(61)	98.9(8)
O(15)-Sb(4)-Sb(3)	44.1(3)	O(5)-Sb(6)-C(61)	98.8(7)
Sb(5)-Sb(4)-Sb(3)	118.60(7)	O(7)-Sb(6)-O(14)	77.9(5)
O(4)-Sb(4)-Sb(8)	128.5(4)	O(13)-Sb(6)-O(14)	77.9(5)
O(10)-Sb(4)-Sb(8)	35.8(4)	O(16)-Sb(6)-O(14)	90.4(5)
O(3)-Sb(4)-Sb(8)	87.9(4)	O(5)-Sb(6)-O(14)	88.4(5)
C(41)-Sb(4)-Sb(8)	134.5(7)	C(61)-Sb(6)-O(14)	169.3(6)
O(11)-Sb(4)-Sb(8)	88.0(3)	O(7)-Sb(6)-Sb(1)	128.2(4)
O(15)-Sb(4)-Sb(8)	42.1(3)	O(13)-Sb(6)-Sb(1)	129.2(4)
Sb(5)-Sb(4)-Sb(8)	114.96(6)	O(16)-Sb(6)-Sb(1)	40.5(4)
Sb(3)-Sb(4)-Sb(8)	60.19(5)	O(5)-Sb(6)-Sb(1)	37.5(4)
O(4)-Sb(5)-O(7)	92.5(5)	C(61)-Sb(6)-Sb(1)	98.4(5)
O(4)-Sb(5)-O(12)	161.0(5)	O(14)-Sb(6)-Sb(1)	92.1(3)
O(7)-Sb(5)-O(12)	98.1(5)	O(7)-Sb(6)-Sb(5)	35.4(4)
O(4)-Sb(5)-C(51)	95.3(7)	O(13)-Sb(6)-Sb(5)	84.5(4)
O(7)-Sb(5)-C(51)	97.9(8)	O(16)-Sb(6)-Sb(5)	133.2(4)
O(12)-Sb(5)-C(51)	98.7(7)	O(5)-Sb(6)-Sb(5)	94.2(4)
O(4)-Sb(5)-O(11)	77.4(5)	C(61)-Sb(6)-Sb(5)	127.9(7)
O(7)-Sb(5)-O(11)	163.9(5)	O(14)-Sb(6)-Sb(5)	42.9(3)
O(12)-Sb(5)-O(11)	88.7(5)	Sb(1)-Sb(6)-Sb(5)	120.72(7)
C(51)-Sb(5)-O(11)	95.4(8)	O(7)-Sb(6)-Sb(9)	89.6(4)
O(4)-Sb(5)-O(14)	90.7(5)	O(13)-Sb(6)-Sb(9)	37.0(4)
O(7)-Sb(5)-O(14)	78.1(5)	O(16)-Sb(6)-Sb(9)	88.5(4)
O(12)-Sb(5)-O(14)	76.2(5)	O(5)-Sb(6)-Sb(9)	127.7(4)
C(51)-Sb(5)-O(14)	172.9(6)	C(61)-Sb(6)-Sb(9)	133.3(6)
O(11)-Sb(5)-O(14)	89.5(4)	O(14)-Sb(6)-Sb(9)	41.0(3)
O(4)-Sb(5)-Sb(4)	36.3(4)	Sb(1)-Sb(6)-Sb(9)	115.34(6)
O(7)-Sb(5)-Sb(4)	128.2(4)	Sb(5)-Sb(6)-Sb(9)	60.15(5)
O(12)-Sb(5)-Sb(4)	129.1(4)	O(18)-Sb(7)-O(6)	92.2(5)
C(51)-Sb(5)-Sb(4)	94.9(6)	O(18)-Sb(7)-O(19)	164.6(5)
O(11)-Sb(5)-Sb(4)	41.2(3)	O(6)-Sb(7)-O(19)	86.4(5)
O(14)-Sb(5)-Sb(4)	92.1(3)	O(18)-Sb(7)-O(25)	81.1(5)

O(6)-Sb(7)-O(25)	162.3(5)	O(22)-Sb(9)-O(13)	165.6(5)
O(19)-Sb(7)-O(25)	95.7(5)	O(23)-Sb(9)-O(13)	85.7(5)
O(18)-Sb(7)-C(71)	93.3(8)	O(12)-Sb(9)-O(13)	88.0(5)
O(6)-Sb(7)-C(71)	99.7(7)	O(22)-Sb(9)-C(91)	98.6(7)
O(19)-Sb(7)-C(71)	102.0(8)	O(23)-Sb(9)-C(91)	96.5(7)
O(25)-Sb(7)-C(71)	97.0(7)	O(12)-Sb(9)-C(91)	97.2(8)
O(18)-Sb(7)-O(17)	76.9(5)	O(13)-Sb(9)-C(91)	95.3(8)
O(6)-Sb(7)-O(17)	78.2(5)	O(22)-Sb(9)-O(14)	87.6(5)
O(19)-Sb(7)-O(17)	87.9(5)	O(23)-Sb(9)-O(14)	88.0(5)
O(25)-Sb(7)-O(17)	84.4(5)	O(12)-Sb(9)-O(14)	77.8(5)
C(71)-Sb(7)-O(17)	169.8(8)	O(13)-Sb(9)-O(14)	78.2(5)
O(18)-Sb(7)-Sb(2)	84.8(4)	C(91)-Sb(9)-O(14)	171.9(8)
O(6)-Sb(7)-Sb(2)	35.6(3)	O(22)-Sb(9)-Sb(5)	84.7(4)
O(19)-Sb(7)-Sb(2)	85.2(4)	O(23)-Sb(9)-Sb(5)	130.3(4)
O(25)-Sb(7)-Sb(2)	127.0(4)	O(12)-Sb(9)-Sb(5)	35.5(4)
C(71)-Sb(7)-Sb(2)	134.8(6)	O(13)-Sb(9)-Sb(5)	83.2(4)
O(17)-Sb(7)-Sb(2)	42.6(3)	C(91)-Sb(9)-Sb(5)	132.7(7)
O(18)-Sb(7)-Sb(1)	34.8(4)	O(14)-Sb(9)-Sb(5)	42.4(3)
O(6)-Sb(7)-Sb(1)	83.9(3)	O(22)-Sb(9)-Sb(6)	129.9(4)
O(19)-Sb(7)-Sb(1)	130.0(4)	O(23)-Sb(9)-Sb(6)	84.5(4)
O(25)-Sb(7)-Sb(1)	81.2(4)	O(12)-Sb(9)-Sb(6)	82.7(3)
C(71)-Sb(7)-Sb(1)	128.0(7)	O(13)-Sb(9)-Sb(6)	35.9(4)
O(17)-Sb(7)-Sb(1)	42.1(3)	C(91)-Sb(9)-Sb(6)	131.3(6)
Sb(2)-Sb(7)-Sb(1)	59.91(5)	O(14)-Sb(9)-Sb(6)	42.3(3)
O(21)-Sb(8)-O(20)	94.6(5)	Sb(5)-Sb(9)-Sb(6)	59.48(5)
O(21)-Sb(8)-O(10)	84.7(5)	O(19)-Sb(10)-O(20)	85.6(5)
O(20)-Sb(8)-O(10)	164.4(5)	O(19)-Sb(10)-O(27)	162.4(5)
O(21)-Sb(8)-O(9)	160.9(5)	O(20)-Sb(10)-O(27)	89.7(5)
O(20)-Sb(8)-O(9)	86.6(5)	O(19)-Sb(10)-O(26)	91.1(5)
O(10)-Sb(8)-O(9)	89.0(5)	O(20)-Sb(10)-O(26)	163.1(5)
O(21)-Sb(8)-C(81)	99.0(7)	O(27)-Sb(10)-O(26)	88.5(5)
O(20)-Sb(8)-C(81)	98.7(8)	O(19)-Sb(10)-C(101)	98.5(6)
O(10)-Sb(8)-C(81)	96.8(8)	O(20)-Sb(10)-C(101)	94.2(9)
O(9)-Sb(8)-C(81)	99.7(7)	O(27)-Sb(10)-C(101)	98.8(6)
O(21)-Sb(8)-O(15)	82.9(5)	O(26)-Sb(10)-C(101)	102.7(9)
O(20)-Sb(8)-O(15)	86.0(5)	O(19)-Sb(10)-O(24)	83.4(5)
O(10)-Sb(8)-O(15)	78.4(5)	O(20)-Sb(10)-O(24)	84.3(4)
O(9)-Sb(8)-O(15)	78.1(5)	O(27)-Sb(10)-O(24)	79.2(5)
C(81)-Sb(8)-O(15)	174.7(8)	O(26)-Sb(10)-O(24)	78.8(5)
O(21)-Sb(8)-Sb(4)	82.4(4)	C(101)-Sb(10)-O(24)	177.5(6)
O(20)-Sb(8)-Sb(4)	128.8(4)	O(19)-Sb(10)-Sb(11)	126.9(4)
O(10)-Sb(8)-Sb(4)	35.6(4)	O(20)-Sb(10)-Sb(11)	85.3(4)
O(9)-Sb(8)-Sb(4)	82.0(3)	O(27)-Sb(10)-Sb(11)	35.6(4)
C(81)-Sb(8)-Sb(4)	132.4(7)	O(26)-Sb(10)-Sb(11)	83.5(4)
O(15)-Sb(8)-Sb(4)	42.8(3)	C(101)-Sb(10)-Sb(11)	134.3(5)
O(21)-Sb(8)-Sb(3)	126.7(4)	O(24)-Sb(10)-Sb(11)	43.6(2)
O(20)-Sb(8)-Sb(3)	83.9(4)	O(19)-Sb(10)-Sb(12)	85.6(4)
O(10)-Sb(8)-Sb(3)	84.1(4)	O(20)-Sb(10)-Sb(12)	126.6(4)
O(9)-Sb(8)-Sb(3)	34.4(3)	O(27)-Sb(10)-Sb(12)	83.5(4)
C(81)-Sb(8)-Sb(3)	134.1(6)	O(26)-Sb(10)-Sb(12)	36.5(4)
O(15)-Sb(8)-Sb(3)	43.8(3)	C(101)-Sb(10)-Sb(12)	139.2(8)
Sb(4)-Sb(8)-Sb(3)	59.73(5)	O(24)-Sb(10)-Sb(12)	42.3(3)
O(22)-Sb(9)-O(23)	96.2(5)	Sb(11)-Sb(10)-Sb(12)	59.83(5)
O(22)-Sb(9)-O(12)	86.7(5)	O(27)-Sb(11)-O(21)	90.8(5)
O(23)-Sb(9)-O(12)	165.4(5)	O(27)-Sb(11)-O(22)	165.0(5)

O(21)-Sb(11)-O(22)	85.4(5)	O(24)-Co(1)-O(17)	107.0(5)
O(27)-Sb(11)-O(28)	91.2(5)	O(15)-Co(1)-O(17)	113.9(5)
O(21)-Sb(11)-O(28)	162.1(5)	O(24)-Co(1)-O(14)	105.8(5)
O(22)-Sb(11)-O(28)	88.0(5)	O(15)-Co(1)-O(14)	109.5(5)
O(27)-Sb(11)-C(111)	97.4(8)	O(17)-Co(1)-O(14)	109.9(5)
O(21)-Sb(11)-C(111)	98.8(7)	Sb(1)-O(1)-Sb(2)	110.7(6)
O(22)-Sb(11)-C(111)	97.6(7)	Sb(2)-O(2)-Sb(3)	104.5(6)
O(28)-Sb(11)-C(111)	98.6(8)	Sb(2)-O(2)-Ba(1)	129.1(6)
O(27)-Sb(11)-O(24)	81.0(5)	Sb(3)-O(2)-Ba(1)	125.3(5)
O(21)-Sb(11)-O(24)	84.4(4)	Sb(3)-O(3)-Sb(4)	109.4(7)
O(22)-Sb(11)-O(24)	84.1(4)	Sb(5)-O(4)-Sb(4)	107.6(6)
O(28)-Sb(11)-O(24)	78.4(5)	Sb(5)-O(4)-Ba(1)	122.6(5)
C(111)-Sb(11)-O(24)	176.6(6)	Sb(4)-O(4)-Ba(1)	128.0(6)
O(27)-Sb(11)-Sb(12)	84.3(4)	Sb(1)-O(5)-Sb(6)	104.0(6)
O(21)-Sb(11)-Sb(12)	126.7(4)	Sb(1)-O(5)-Ba(1)	132.1(6)
O(22)-Sb(11)-Sb(12)	86.2(3)	Sb(6)-O(5)-Ba(1)	123.2(6)
O(28)-Sb(11)-Sb(12)	36.0(4)	Sb(2)-O(6)-Sb(7)	108.1(6)
C(111)-Sb(11)-Sb(12)	134.5(7)	Sb(5)-O(7)-Sb(6)	109.1(6)
O(24)-Sb(11)-Sb(12)	42.4(3)	Sb(2)-O(8)-Sb(3)	100.2(5)
O(27)-Sb(11)-Sb(10)	36.4(4)	Sb(3)-O(9)-Sb(8)	108.8(6)
O(21)-Sb(11)-Sb(10)	86.0(4)	Sb(4)-O(10)-Sb(8)	108.5(6)
O(22)-Sb(11)-Sb(10)	128.6(4)	Sb(5)-O(11)-Sb(4)	98.1(4)
O(28)-Sb(11)-Sb(10)	85.1(4)	Sb(9)-O(12)-Sb(5)	109.3(6)
C(111)-Sb(11)-Sb(10)	133.8(6)	Sb(6)-O(13)-Sb(9)	107.1(7)
O(24)-Sb(11)-Sb(10)	44.7(3)	Co(1)-O(14)-Sb(9)	118.0(5)
Sb(12)-Sb(11)-Sb(10)	60.11(5)	Co(1)-O(14)-Sb(5)	122.7(5)
O(28)-Sb(12)-O(26)	90.7(6)	Sb(9)-O(14)-Sb(5)	96.5(4)
O(28)-Sb(12)-O(25)	162.7(5)	Co(1)-O(14)-Sb(6)	122.5(5)
O(26)-Sb(12)-O(25)	95.2(6)	Sb(9)-O(14)-Sb(6)	96.7(4)
O(28)-Sb(12)-O(23)	87.8(5)	Sb(5)-O(14)-Sb(6)	94.0(4)
O(26)-Sb(12)-O(23)	166.0(5)	Co(1)-O(15)-Sb(8)	118.2(6)
O(25)-Sb(12)-O(23)	82.6(5)	Co(1)-O(15)-Sb(4)	126.8(6)
O(28)-Sb(12)-C(121)	98.1(7)	Sb(8)-O(15)-Sb(4)	95.1(5)
O(26)-Sb(12)-C(121)	96.6(8)	Co(1)-O(15)-Sb(3)	122.0(6)
O(25)-Sb(12)-C(121)	97.4(7)	Sb(8)-O(15)-Sb(3)	94.1(5)
O(23)-Sb(12)-C(121)	97.4(7)	Sb(4)-O(15)-Sb(3)	92.8(5)
O(28)-Sb(12)-O(24)	80.9(5)	Sb(6)-O(16)-Sb(1)	100.8(6)
O(26)-Sb(12)-O(24)	82.4(5)	Co(1)-O(17)-Sb(7)	117.4(6)
O(25)-Sb(12)-O(24)	83.8(5)	Co(1)-O(17)-Sb(1)	124.6(6)
O(23)-Sb(12)-O(24)	83.7(5)	Sb(7)-O(17)-Sb(1)	96.9(5)
C(121)-Sb(12)-O(24)	178.5(6)	Co(1)-O(17)-Sb(2)	120.7(5)
O(28)-Sb(12)-Sb(11)	37.2(4)	Sb(7)-O(17)-Sb(2)	96.1(5)
O(26)-Sb(12)-Sb(11)	84.6(4)	Sb(1)-O(17)-Sb(2)	94.8(4)
O(25)-Sb(12)-Sb(11)	127.2(4)	Sb(1)-O(18)-Sb(7)	109.9(6)
O(23)-Sb(12)-Sb(11)	85.8(4)	Sb(10)-O(19)-Sb(7)	138.3(7)
C(121)-Sb(12)-Sb(11)	135.3(6)	Sb(10)-O(20)-Sb(8)	137.4(7)
O(24)-Sb(12)-Sb(11)	43.7(3)	Sb(8)-O(21)-Sb(11)	136.3(7)
O(28)-Sb(12)-Sb(10)	86.0(4)	Sb(9)-O(22)-Sb(11)	136.4(7)
O(26)-Sb(12)-Sb(10)	37.8(4)	Sb(9)-O(23)-Sb(12)	135.4(7)
O(25)-Sb(12)-Sb(10)	88.7(4)	Co(1)-O(24)-Sb(12)	126.8(5)
O(23)-Sb(12)-Sb(10)	128.2(4)	Co(1)-O(24)-Sb(11)	121.9(5)
C(121)-Sb(12)-Sb(10)	134.3(6)	Sb(12)-O(24)-Sb(11)	93.9(4)
O(24)-Sb(12)-Sb(10)	44.6(3)	Co(1)-O(24)-Sb(10)	120.6(5)
Sb(11)-Sb(12)-Sb(10)	60.06(5)	Sb(12)-O(24)-Sb(10)	93.0(4)
O(24)-Co(1)-O(15)	110.4(5)	Sb(11)-O(24)-Sb(10)	91.7(4)

Sb(12)-O(25)-Sb(7)	131.3(7)	C(62)-C(61)-Sb(6)	125.1(16)
Sb(12)-O(26)-Sb(10)	105.8(6)	C(66)-C(61)-Sb(6)	114.5(16)
Sb(11)-O(27)-Sb(10)	108.0(6)	C(63)-C(62)-C(61)	120.0
Sb(12)-O(28)-Sb(11)	106.8(6)	C(62)-C(63)-C(64)	120.0
C(12)-C(11)-C(16)	120.0	C(65)-C(64)-C(63)	120.0
C(12)-C(11)-Sb(1)	121.7(16)	C(65)-C(64)-C(67)	132(2)
C(16)-C(11)-Sb(1)	118.1(16)	C(63)-C(64)-C(67)	108(2)
C(11)-C(12)-C(13)	120.0	C(64)-C(65)-C(66)	120.0
C(14)-C(13)-C(12)	120.0	C(65)-C(66)-C(61)	120.0
C(15)-C(14)-C(13)	120.0	C(72)-C(71)-C(76)	120.0
C(15)-C(14)-C(17)	120(2)	C(72)-C(71)-Sb(7)	119.3(16)
C(13)-C(14)-C(17)	120(2)	C(76)-C(71)-Sb(7)	120.0(16)
C(14)-C(15)-C(16)	120.0	C(73)-C(72)-C(71)	120.0
C(15)-C(16)-C(11)	120.0	C(72)-C(73)-C(74)	120.0
C(22)-C(21)-C(26)	120.0	C(75)-C(74)-C(73)	120.0
C(22)-C(21)-Sb(2)	122.4(17)	C(75)-C(74)-C(77)	117(2)
C(26)-C(21)-Sb(2)	117.1(17)	C(73)-C(74)-C(77)	122(2)
C(23)-C(22)-C(21)	120.0	C(74)-C(75)-C(76)	120.0
C(24)-C(23)-C(22)	120.0	C(75)-C(76)-C(71)	120.0
C(25)-C(24)-C(23)	120.0	C(82)-C(81)-C(86)	120.0
C(25)-C(24)-C(27)	123(2)	C(82)-C(81)-Sb(8)	121.8(16)
C(23)-C(24)-C(27)	117(2)	C(86)-C(81)-Sb(8)	118.1(16)
C(24)-C(25)-C(26)	120.0	C(83)-C(82)-C(81)	120.0
C(25)-C(26)-C(21)	120.0	C(84)-C(83)-C(82)	120.0
C(32)-C(31)-C(36)	120.0	C(83)-C(84)-C(85)	120.0
C(32)-C(31)-Sb(3)	123.1(17)	C(83)-C(84)-C(87)	124(2)
C(36)-C(31)-Sb(3)	116.7(17)	C(85)-C(84)-C(87)	114(2)
C(33)-C(32)-C(31)	120.0	C(84)-C(85)-C(86)	120.0
C(32)-C(33)-C(34)	120.0	C(85)-C(86)-C(81)	120.0
C(35)-C(34)-C(33)	120.0	C(92)-C(91)-C(96)	120.0
C(35)-C(34)-C(37)	118(2)	C(92)-C(91)-Sb(9)	122.8(17)
C(33)-C(34)-C(37)	122(2)	C(96)-C(91)-Sb(9)	117.0(17)
C(36)-C(35)-C(34)	120.0	C(91)-C(92)-C(93)	120.0
C(35)-C(36)-C(31)	120.0	C(92)-C(93)-C(94)	120.0
C(42)-C(41)-C(46)	120.0	C(95)-C(94)-C(93)	120.0
C(42)-C(41)-Sb(4)	116.9(17)	C(95)-C(94)-C(97)	125(2)
C(46)-C(41)-Sb(4)	123.0(17)	C(93)-C(94)-C(97)	114(2)
C(41)-C(42)-C(43)	120.0	C(94)-C(95)-C(96)	120.0
C(44)-C(43)-C(42)	120.0	C(95)-C(96)-C(91)	120.0
C(45)-C(44)-C(43)	120.0	C(102)-C(101)-C(106)	120.0
C(45)-C(44)-C(47)	119(2)	C(102)-C(101)-Sb(10)	119.0(17)
C(43)-C(44)-C(47)	119(2)	C(106)-C(101)-Sb(10)	120.0(17)
C(46)-C(45)-C(44)	120.0	C(103)-C(102)-C(101)	120.0
C(45)-C(46)-C(41)	120.0	C(102)-C(103)-C(104)	120.0
C(52)-C(51)-C(56)	120.0	C(105)-C(104)-C(103)	120.0
C(52)-C(51)-Sb(5)	120.4(16)	C(105)-C(104)-C(107)	124(2)
C(56)-C(51)-Sb(5)	119.5(16)	C(103)-C(104)-C(107)	115(2)
C(53)-C(52)-C(51)	120.0	C(104)-C(105)-C(106)	120.0
C(54)-C(53)-C(52)	120.0	C(105)-C(106)-C(101)	120.0
C(53)-C(54)-C(55)	120.0	C(112)-C(111)-C(116)	120.0
C(53)-C(54)-C(57)	125(2)	C(112)-C(111)-Sb(11)	122.6(16)
C(55)-C(54)-C(57)	114(2)	C(116)-C(111)-Sb(11)	117.4(17)
C(56)-C(55)-C(54)	120.0	C(111)-C(112)-C(113)	120.0
C(55)-C(56)-C(51)	120.0	C(114)-C(113)-C(112)	120.0
C(62)-C(61)-C(66)	120.0	C(113)-C(114)-C(115)	120.0

C(113)-C(114)-C(117)	114(2)	C(121)-C(122)-C(123)	120.0
C(115)-C(114)-C(117)	124(2)	C(124)-C(123)-C(122)	120.0
C(114)-C(115)-C(116)	120.0	C(125)-C(124)-C(123)	120.0
C(115)-C(116)-C(111)	120.0	C(125)-C(124)-C(127)	123(2)
C(122)-C(121)-C(126)	120.0	C(123)-C(124)-C(127)	117(2)
C(122)-C(121)-Sb(12)	123.6(16)	C(124)-C(125)-C(126)	120.0
C(126)-C(121)-Sb(12)	116.0(16)	C(125)-C(126)-C(121)	120.0
