

## Supplementary Information

### Fusing 10-vertex *closo*-Carborane Anions with N-Heterocyclic Carbenes

Varun Tej, Sarah E. McArthur\*, Isaac Banda, Aaron Gregory, Scott G. McArthur, Steven P. Fisher, Vincent Lavallo\*

Correspondence to: vincent.lavallo@ucr.edu

†Department of Chemistry, University of California Riverside. Riverside, CA 92521 (USA).  
vincent.lavallo@ucr.edu

#### Table of Contents

Compound 7 Synthesis and Spectroscopic Data.....	3
Compound 8 Synthesis and Spectroscopic Data.....	7
Compound 9 Synthesis and Spectroscopic Data.....	9
Compound 10[Li <sup>+</sup> ] Synthesis and Spectroscopic Data.....	12
Compound 10[K <sup>+</sup> ] Synthesis and Spectroscopic Data.....	15
Compound 12 Synthesis and Spectroscopic Data.....	16
X-Ray Structure Data for Compound 10[K <sup>+</sup> ] .....	18
X-Ray Structure Data for Compound 12 .....	66
References.....	117

#### General Considerations

Unless otherwise stated, all manipulations were carried out using standard Schlenk or glovebox techniques (O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O < 1ppm) under a dinitrogen or argon atmosphere. Solvents were dried on sodium-potassium alloy or potassium benzophenone ketyl, and distilled under argon before use. 6-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>N-6-CB<sub>9</sub>H<sub>11</sub> was prepared according to literature methods.<sup>1</sup> Reagents were purchased from commercial vendors and used without further purification. NMR spectra were recorded on Bruker Avance 300 MHz, Bruker Avance Neo 400 MHz, Bruker Avance 600 MHz, Bruker Avance III 700 MHz, Varian Inova 300 MHz, or Varian Inova 400 MHz spectrometers.

NMR chemical shifts are reported in parts per million (ppm).  $^1\text{H}$  NMR and  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts were referenced to residual solvent.  $^{11}\text{B}$  NMR chemical shifts were externally referenced to  $\text{BF}_3\cdot\text{OEt}_2$ . High-resolution mass spectrometry (HRMS) was recorded on Agilent Technologies 6210 (time of flight LC/MS) using ESI technique. Complete crystallographic data for compounds **10**[ $\text{K}^+$ ], and **12** are available free of charge from the Cambridge Crystallographic Data Center under the reference numbers 1848686 and 1848697 respectively. The crystallographic data of these structures can be accessed via the ccdc website: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/Requestastructure/Pages/DataRequest.aspx>.

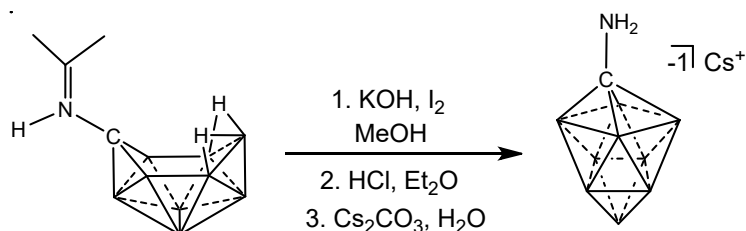
### **Synthesis of 10-vertex Carborane Amine**

The first step of this project is to synthesize the 10-vertex amine. After surveying the literature we found a few synthetic approaches to make this compound. However after attempting these methods we found they had synthetic drawbacks, that we shall describe here. Ultimately this led us to develop a novel synthetic method. The first method attempted was the synthesis from Kennedy and coworkers<sup>2</sup> of the carboxylic acid derivative of the *closo*-2- $\text{CB}_9\text{H}_{10}^-$  anion to be used as a precursor for the 10-vertex amine. The first step of the synthesis is a Brellocks reaction,<sup>3</sup> replacing a boron vertex with a carbon atom bearing the functional group. This leads to a functionalized open cage *arachno*-carborane cluster. *Although not noted in the Kennedy paper, it should be noted that this arachno structure may spontaneously combust when exposed to air, and the reaction should be performed and the product stored under an inert atmosphere.* After obtaining the carboxylic acid functionalized 10-vertex carborane, the acid chloride was formed and reacted with  $\text{NaN}_3$ , undergoing a Curtius rearrangement.<sup>4</sup> The crude reaction should form a mixture of isocyanate and amine functionalized 10-vertex carborane, that fully converts to amine upon hydrolysis. The conversion of the isocyanate to the amine often resulted in a mixture of unidentified products, and after crystallization the yield was usually low. Kennedy and coworkers also published a synthesis of the 10-vertex carboranyl amine cluster that begins with a reaction of decaborane and sodium cyanide, resulting in a mixture of 7- $\text{NH}_3$ -7- $\text{CB}_{10}\text{H}_{12}$  and 6- $\text{NH}_3$ -6- $\text{CB}_9\text{H}_{11}$ .<sup>5</sup> The separation of these two products is achieved with the addition of acetone to the crude reaction mixture, precipitating the zwitterionic iminium, 6- $\text{C}_3\text{H}_7\text{N}$ -6- $\text{CB}_9\text{H}_{11}$ .<sup>1</sup> After isolating this compound, it was treated with  $\text{NaBH}_4$  and borane trimethylamine, which results in a mixture of

both the 12 and 10-vertex *closo*-carboranyl amine clusters. They then claimed these two clusters could be separated through crystallization.<sup>6</sup>

We sought an alternative, more direct route to the 10-vertex carboranyl amine without having to separate the product from a mixture. After isolating 6-C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N-6-CB<sub>9</sub>H<sub>11</sub>,<sup>1</sup> treatment with KOH and I<sub>2</sub> results in the 2-isomer of the 10-vertex *closo*-carboranyl amine (2-NH<sub>2</sub>-2-CB<sub>9</sub>H<sub>9</sub>), which readily isomerizes to the desired 1-isomer of the amine, 1-NH<sub>2</sub>-1-CB<sub>9</sub>H<sub>9</sub> upon reflux or spontaneously during crystallization.

### Synthesis of 10-vertex Carborane Amine 7



In a 500 mL round bottom, 2.00 grams of the zwitterion 6-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>N-6-CB<sub>9</sub>H<sub>11</sub> (11.3 mmol) was added to 260 mL of a 1.5 M solution of KOH in MeOH in an ice bath. To the stirring solution, 4.5 grams (17.7 mmol) of I<sub>2</sub> was added and allowed to stir for 1 hour. The MeOH was removed via reduced pressure and the resulting solid was resuspended in 100 mL of H<sub>2</sub>O, and the excess base was quenched by slowly acidifying with 27 mL of concentrated HCl (checked by litmus). The aqueous solution is then extracted with diethyl ether (3 x 20mL) and the organics were pumped down on a rotary evaporator, resulting in a light brown oil. After adding 10 mL of H<sub>2</sub>O and 3.68 grams of Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (11.3 mmol) to this oil, the solution was allowed to cool down. The desired product **7** then crystallized out of the aqueous solution as off white crystals in about 60% yield. (1.81 g, 6.77 mmol). <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, acetonitrile-d<sub>3</sub>, 25 °C): 3.21 (s, 2H, N-H), 5.5-0.0 (bm, 9H, B-H); <sup>1</sup>H (<sup>11</sup>B-dec) NMR (300 MHz, acetonitrile-d<sub>3</sub>, 25 °C): 3.20 (s, 2H, N-H), 1.50 (s, 5H, B-H), 0.47 (s, 4H, B-H); <sup>11</sup>B (<sup>1</sup>H-dec) NMR (96 MHz, acetonitrile-d<sub>3</sub>, 25 °C): δ = 19.8, -16.6, -25.9; <sup>11</sup>B NMR (96 MHz, acetonitrile-d<sub>63</sub>, 25 °C): δ = 19.2, -17.2, -26.5; <sup>13</sup>C-(<sup>1</sup>H-dec) NMR (124 MHz, acetonitrile-d<sub>6</sub>, 25°C): δ = 85.1 ppm.

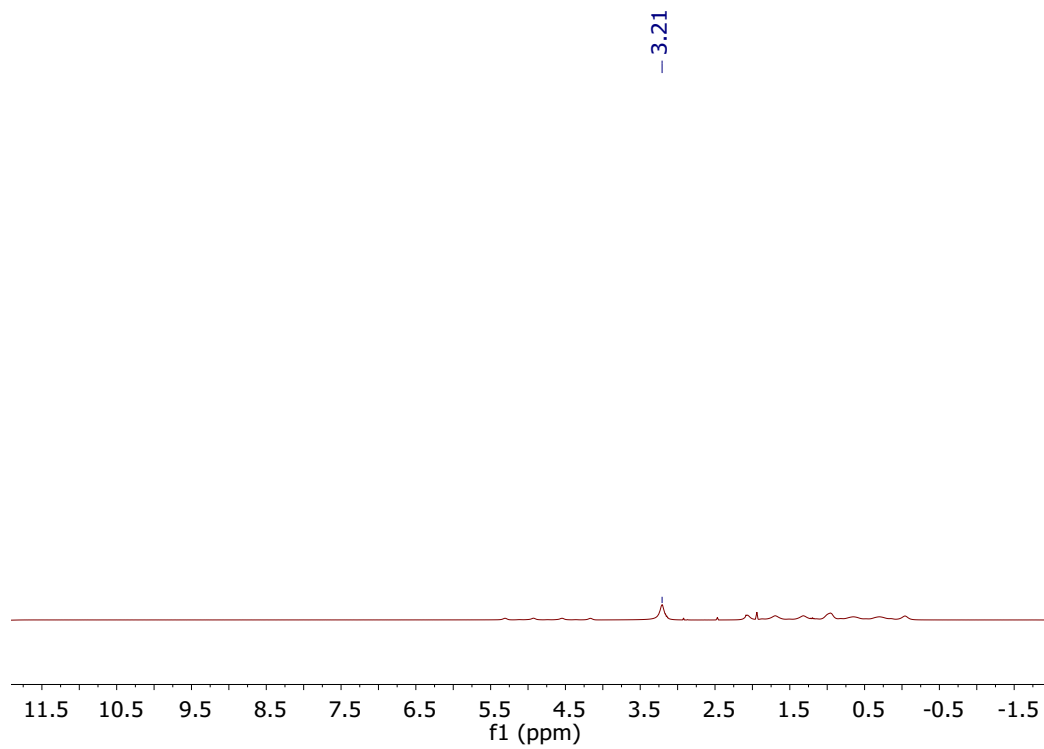


Fig. S6.  $^1\text{H}$ -NMR of  $7[\text{Cs}^+]$  in acetonitrile.

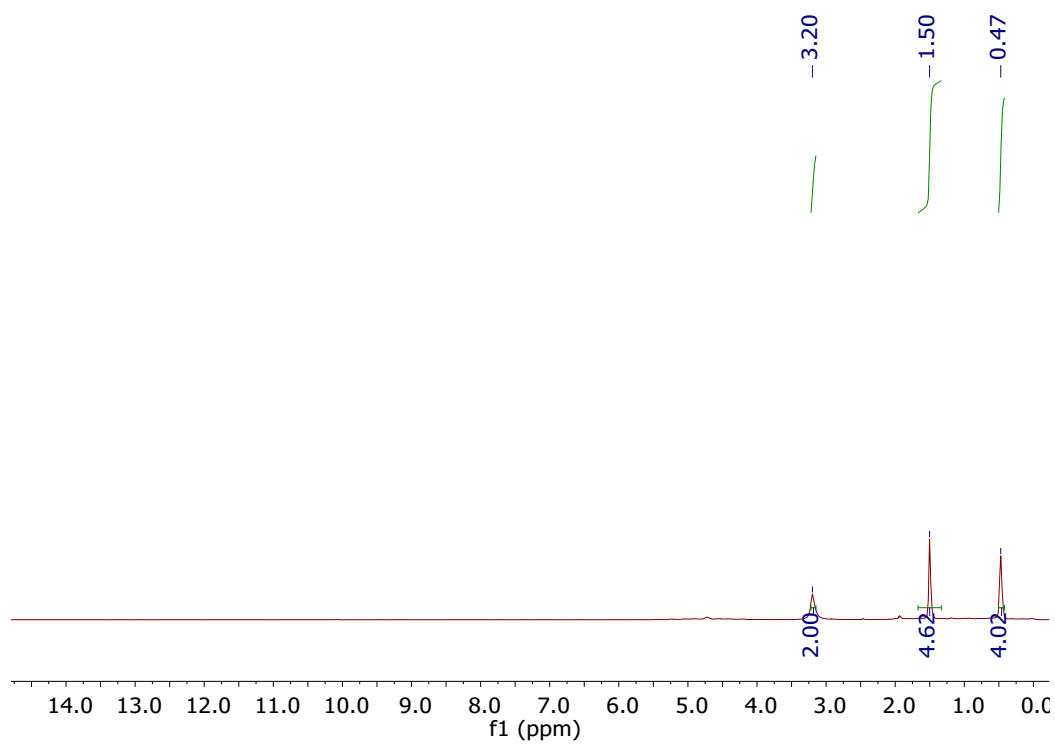


Fig. S7.  $^1\text{H}$ -( $^{11}\text{B}$ -dec) NMR of  $7[\text{Cs}^+]$  in acetonitrile.

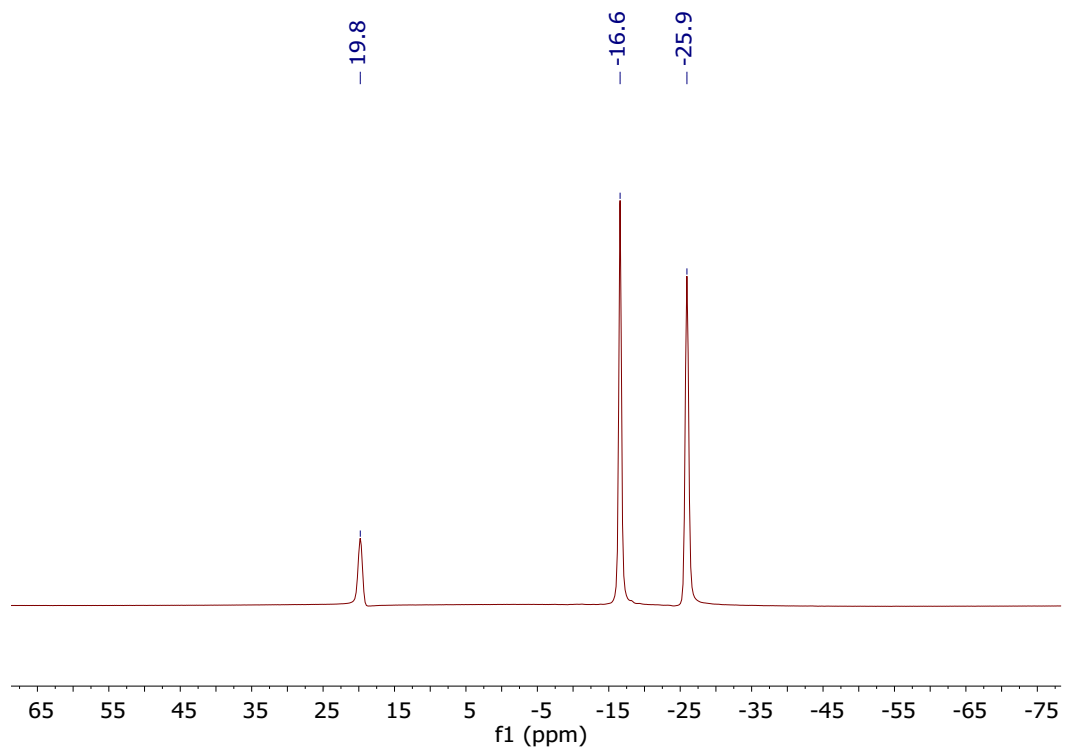


Fig. S8.  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of  $7[\text{Cs}^+]$  in acetonitrile.

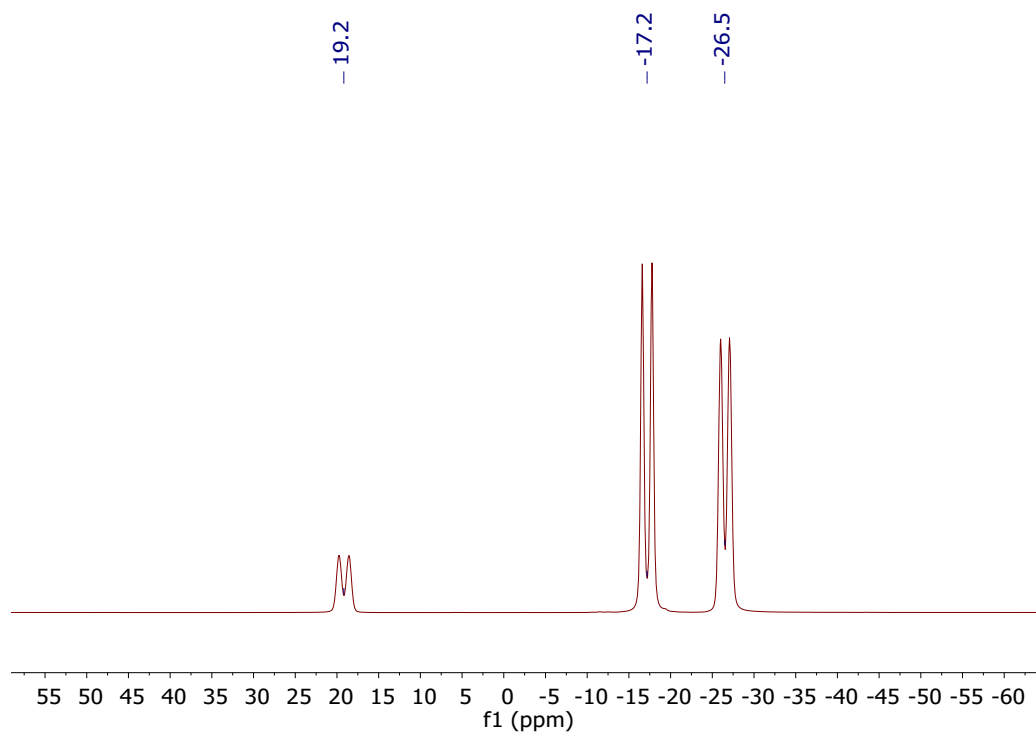


Fig. S9.  $^{11}\text{B}$ -NMR of  $7[\text{Cs}^+]$  in acetonitrile.

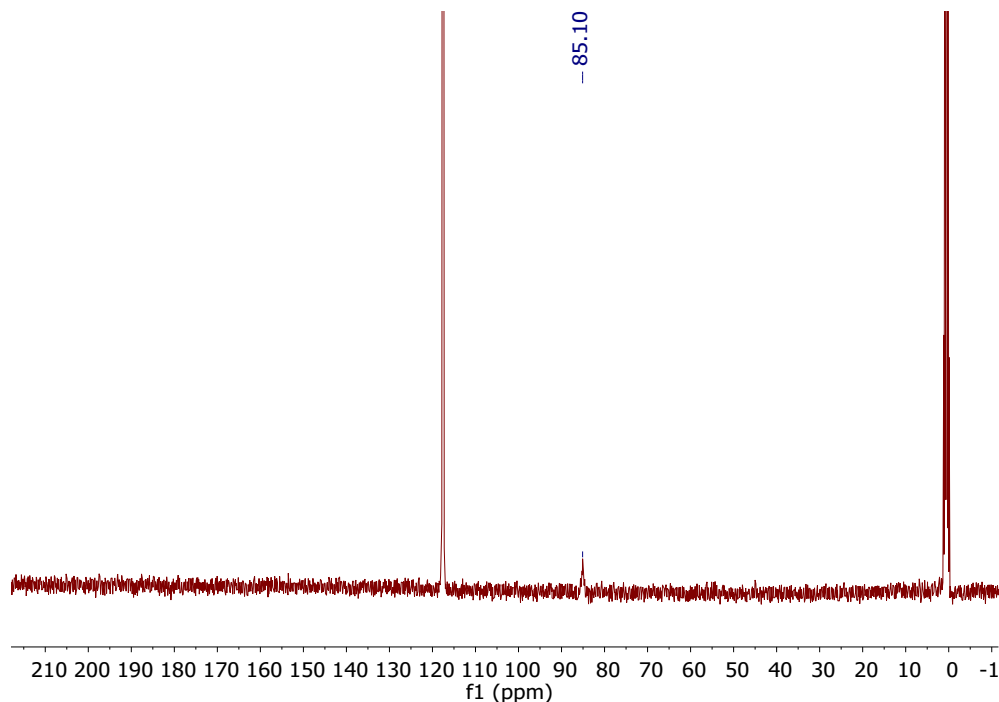
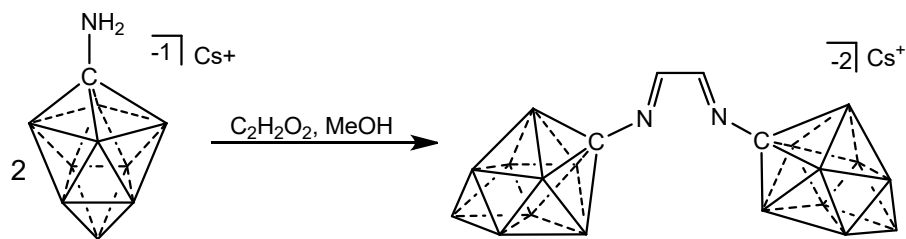


Fig. S10.  $^{13}\text{C}$  NMR of  $7[\text{Cs}^+]$  in acetonitrile.

### Synthesis of 10-Vertex Dianionic Carboranyl Diimine 8



Glyoxal ( $\text{O}_2\text{C}_2\text{H}_2$ ) aqueous solution (40 % w/w, 325 mg, 2.2 mmol) was added to a solution of  $\text{CsNH}_2\text{CB}_9\text{H}_9$  (1.20 g, 4.4 mmol) dissolved in methanol (15 mL) and the reaction mixture stirred for 24 hours. Volatiles were removed under vacuum to afford the crude diimine as a light brown powder. The resulting yield of the  $\text{Cs}^+$  diimine salt **8** was 98% (1.22 g, 2.2 mmol)  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, acetonitrile- $\text{d}_3$ , 25 °C):  $\delta$  = 8.94 (s, 2H), 2.70-0.0 (bm, 18H, B-H);  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (125 MHz, acetonitrile- $\text{d}_3$ , 25 °C):  $\delta$  = 165.2;  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (96 MHz, acetonitrile- $\text{d}_3$ , 25 °C):  $\delta$  = 26.2, -17.4, -25.2 ppm.

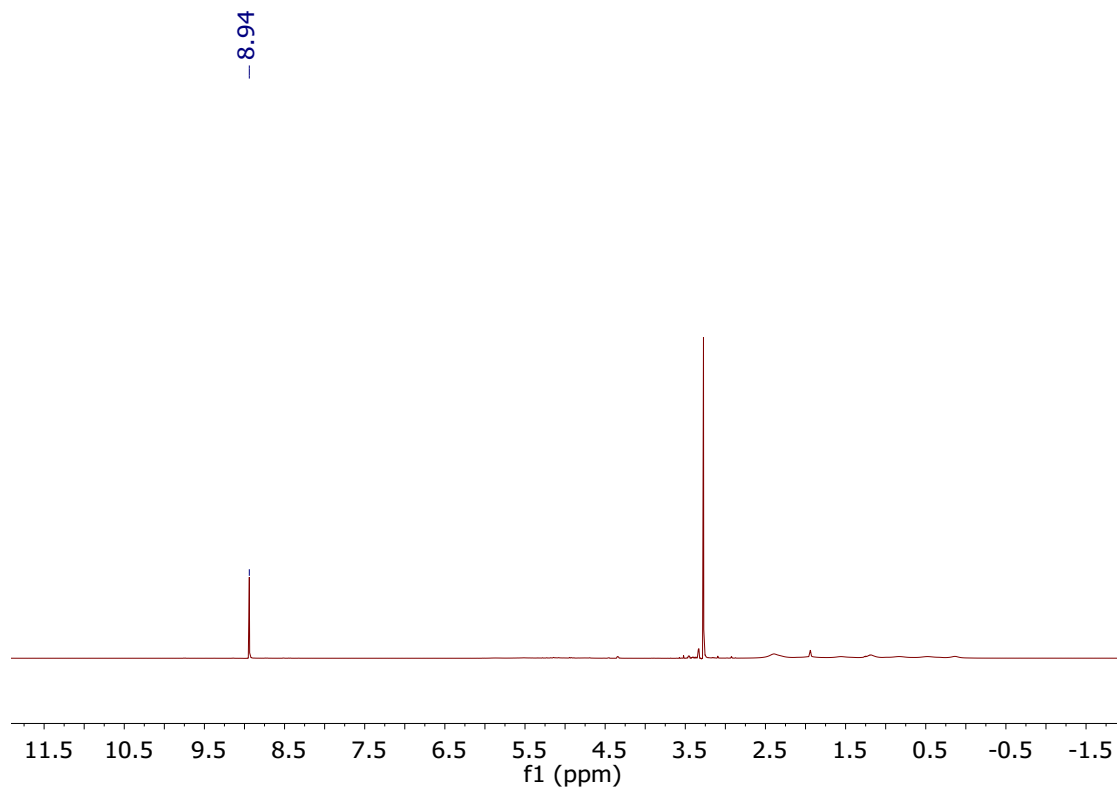


Fig. S11. <sup>1</sup>H-NMR of **8** in acetonitrile-d<sub>3</sub>. The peak at 3.27 ppm due to presence of MeOH.

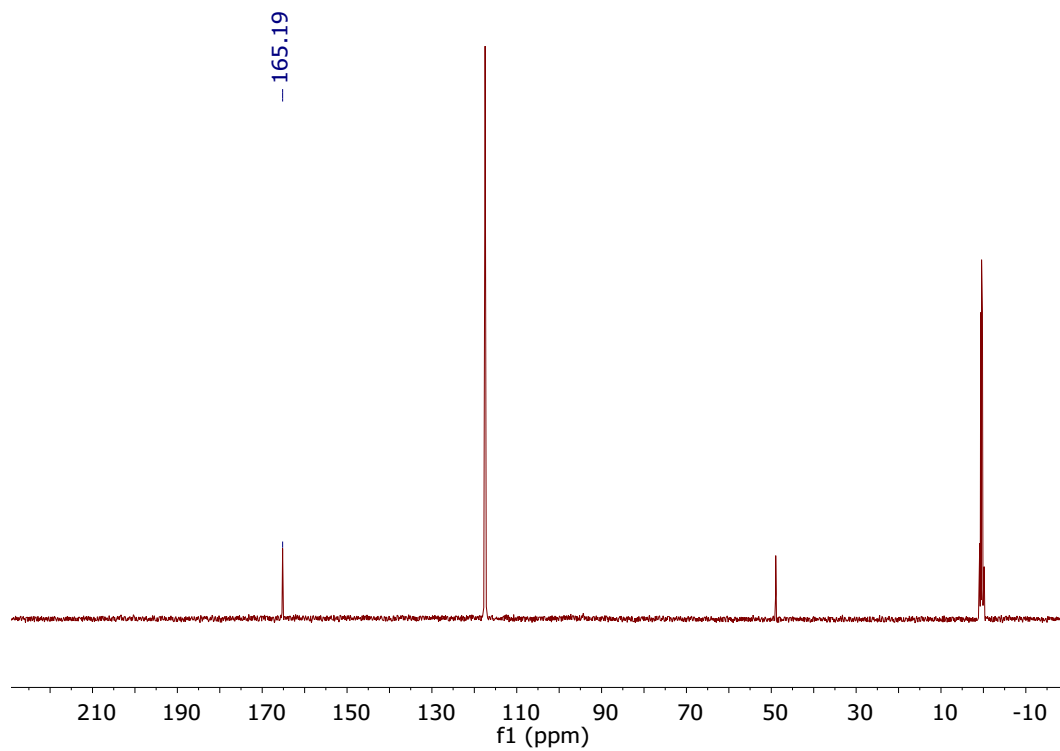


Fig. S12. <sup>13</sup>C-NMR of **8** in acetonitrile-d<sub>3</sub>. The peak at 48.9 ppm due to presence of MeOH.

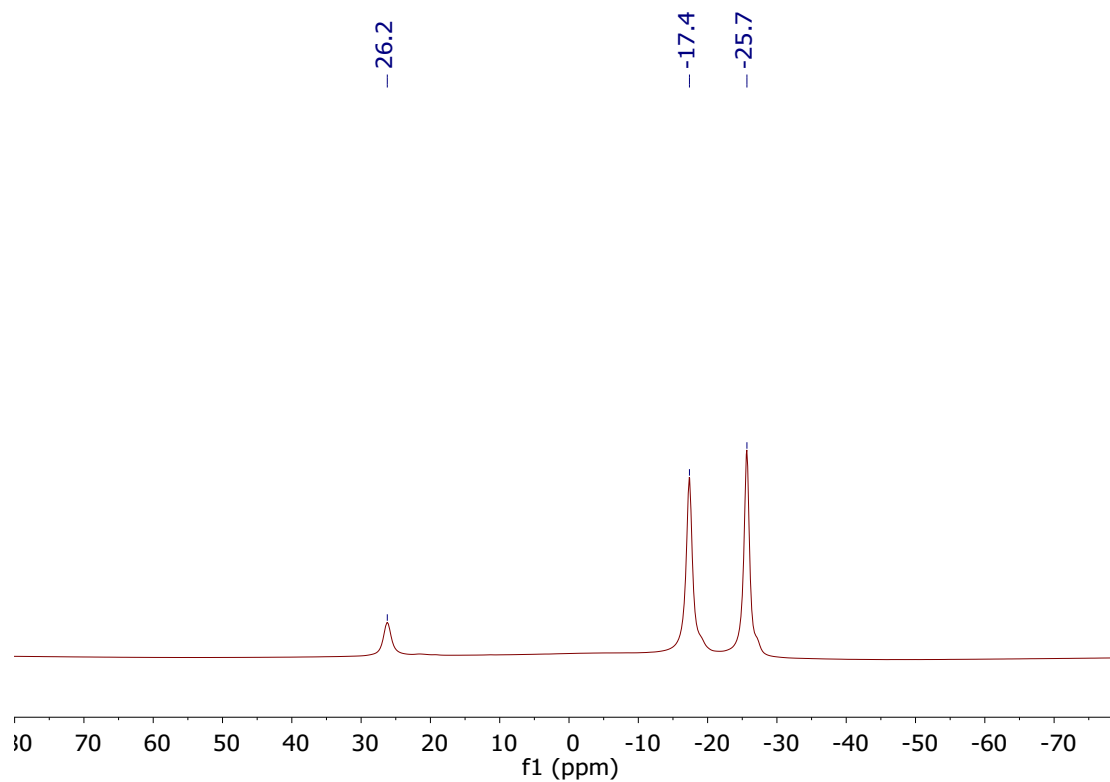
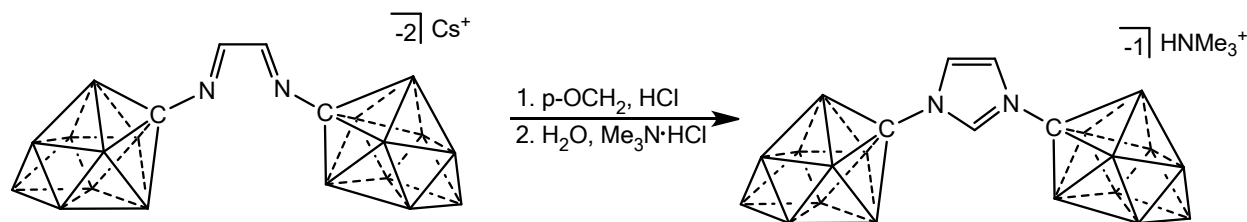


Fig. S13.  $^{11}\text{B}$ -NMR of **8** in acetonitrile- $\text{d}_3$ .



## Synthesis of 10-Vertex Imidazolium Salt **9**



Without further purification, the crude diimine (1.22 g, 2.2 mmol) was dissolved in a solution of ethyl acetate (10 mL). A second solution of 2M HCl/diethyl ether (4 mL) was added to paraformaldehyde (79 mg, 2.6 mmol) and stirred for 30 minutes. The mixture of paraformaldehyde and HCl/diethyl ether was then added to the ethyl acetate solution dropwise, and stirred for three hours. Subsequent removal of all volatiles under high vacuum afforded **9** as a crude mixture. Impurities were removed by washing the product with boiling water, followed by cation exchange to the corresponding  $\text{HNMe}_3^+$  salt through the addition of 1.3 equivalents of trimethylammonium hydrochloride in  $\text{H}_2\text{O}$ . The resulting yield of the  $\text{HNMe}_3^+$  imidazolium salt **9** was 76% (473 mg, 1.70 mmol)  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, acetone- $\text{d}_6$ , 25 °C):  $\delta = 10.26$  (t,  $^4J(\text{H},\text{H}) = 1.72$  Hz, 1H), 8.45 (d,  $^4J(\text{H},\text{H}) = 1.72$  Hz, 2H), 3.25-0.0 (bm, 18H, B-H);  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (125 MHz, acetone- $\text{d}_6$ , 25 °C):  $\delta = 139.27, 125.94, 73.71$ ;  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (96 MHz, acetone- $\text{d}_6$ , 25 °C):  $\delta = 31.0, -15.4, -25.2$  ppm. HRMS (negative mode ESI/APCI)  $[\text{M}]^-$   $m/z$  calc'd for  $\text{N}_2\text{C}_5\text{B}_{18}\text{H}_{21}^- = 304.3498$ ; Found = 304.3491.

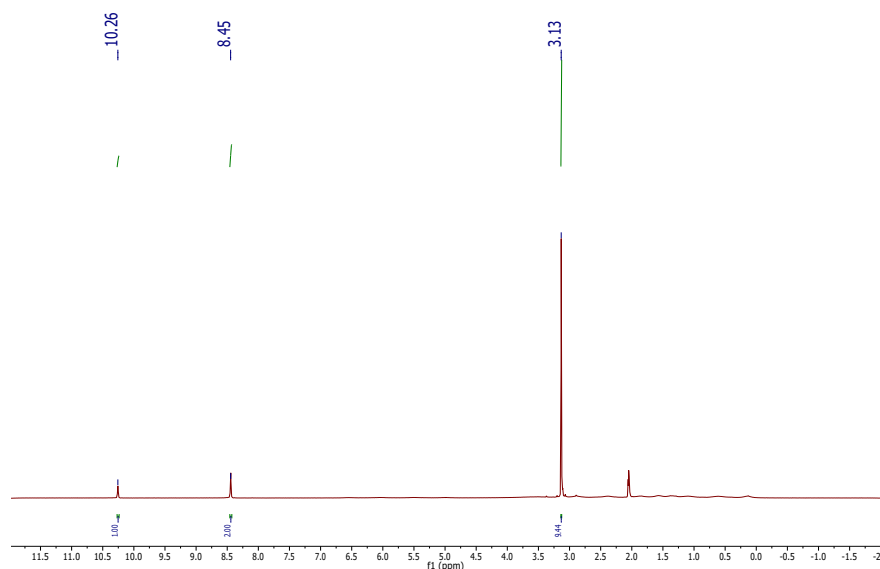


Fig. S14.  $^1\text{H}$ -NMR of **9** in acetone- $\text{d}_6$ . The peak at 3.13 ppm is due to  $\text{Me}_3\text{NH}^+$  counterion.

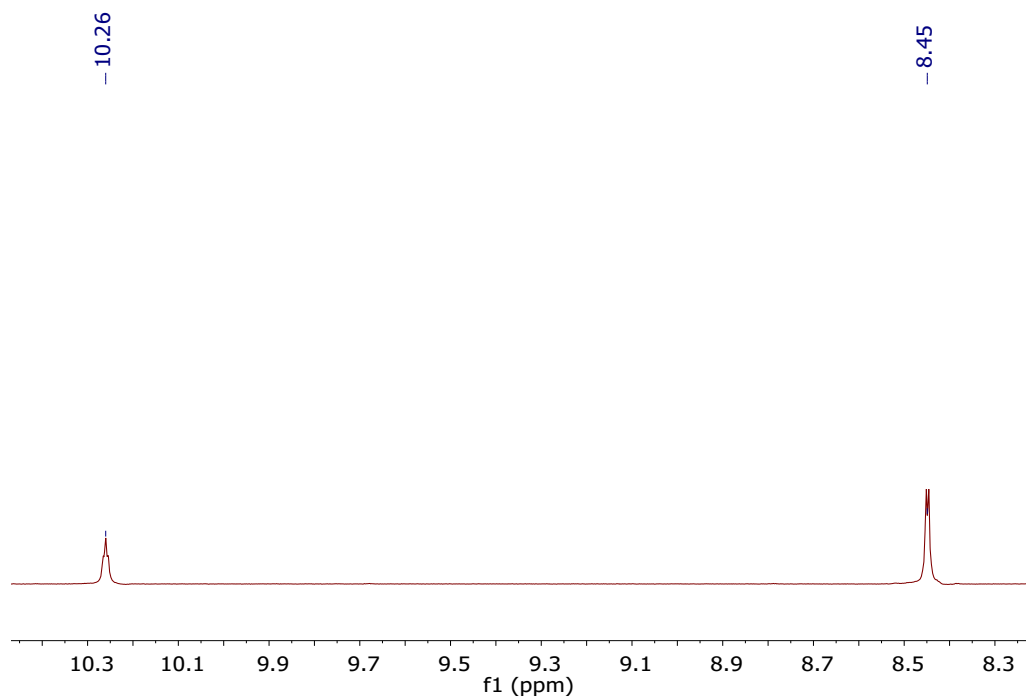


Fig. S15. An expanded view of the aromatic region of the  $^1\text{H-NMR}$  of **9** in acetone- $\text{d}_6$ , showing the small  $^4J(\text{H,H})$  coupling through the imidazolium ring.

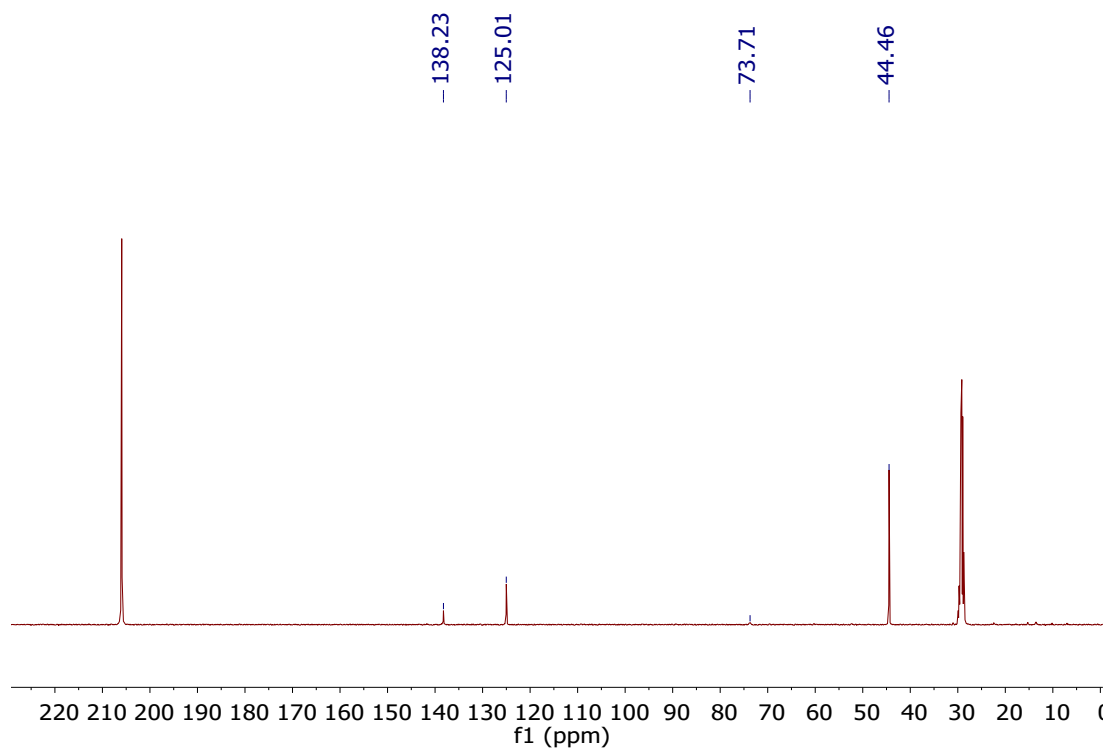


Fig. S16.  $^{13}\text{C-}(^1\text{H-dec})$  NMR of **9** in acetone- $\text{d}_6$ . The peak at 44.46 ppm is due to  $\text{Me}_3\text{NH}^+$  counter cation.

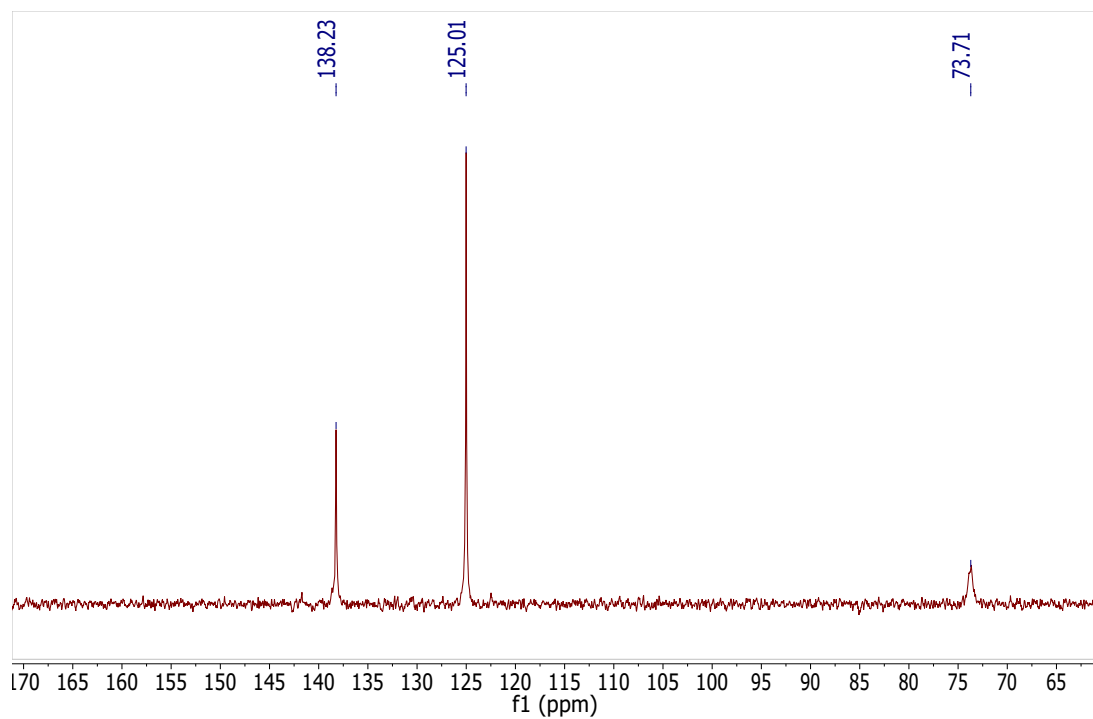


Fig. S17. An expanded view of the  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of **9** in acetone- $\text{d}_6$  showing the resonance of the carborane carbon at 73.71, as well as the carbon resonances of the imidazolium ring.

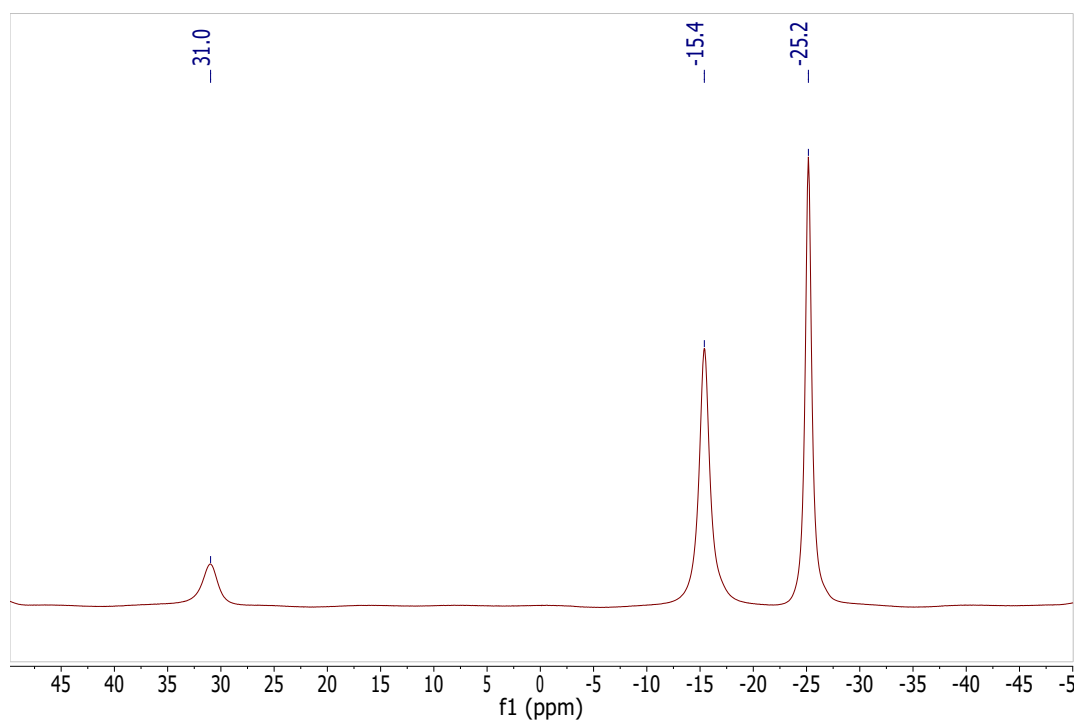
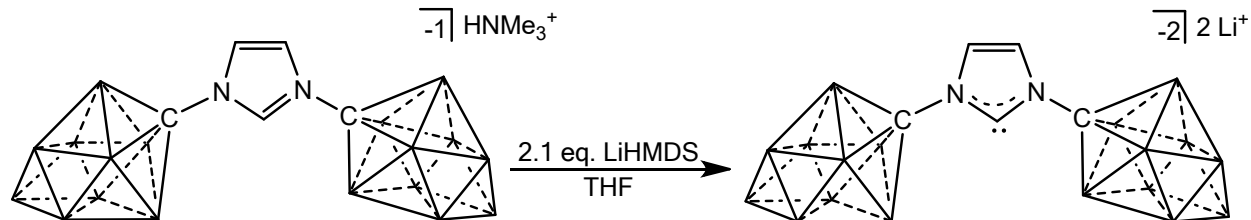


Fig. S18.  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of **9** in acetone- $\text{d}_6$ .

### Synthesis of Normal Li<sup>+</sup> NHC **10**[Li<sup>+</sup>]



A vial equipped with a stir bar was loaded with 310 mg (0.82 mmol) of **9**[HNMe<sub>3</sub><sup>+</sup>] and 5 mL of tetrahydrofuran. In a second vial, 2.1 equivalents (10 mg, 1.72 mmol) of LiHMDS was added and dissolved in tetrahydrofuran (5 mL). The two tetrahydrofuran solutions were combined, the vial capped, and the mixture stirred for 1 hour. The tetrahydrofuran solution was added dropwise to a stirring vial of diethyl ether (20 mL), precipitating a light brown powder. The precipitate was left stirring in diethyl ether for 30 minutes. The solvent was decanted off the precipitate, and the remaining volatiles were removed under vacuum, affording the product **10**[Li<sup>+</sup>] in 92% yield (454 mg, 0.75 mmol) (Note: Li<sup>+</sup> counteranions contain 4 coordinated tetrahydrofuran molecules). <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, tetrahydrofuran-d<sub>8</sub>, 25 °C): δ = 7.75 (s, 2H), 0.01-2.75 (bm, 18H, B-H); <sup>13</sup>C-(<sup>1</sup>H-dec) NMR (125 MHz, tetrahydrofuran-d<sub>8</sub>, 25 °C): δ = 197.72, 121.58, 79.34; <sup>11</sup>B-(<sup>1</sup>H-dec) NMR (96 MHz, tetrahydrofuran-d<sub>8</sub>, 25 °C): δ = 31.4, -21.8, -22.2 ppm.

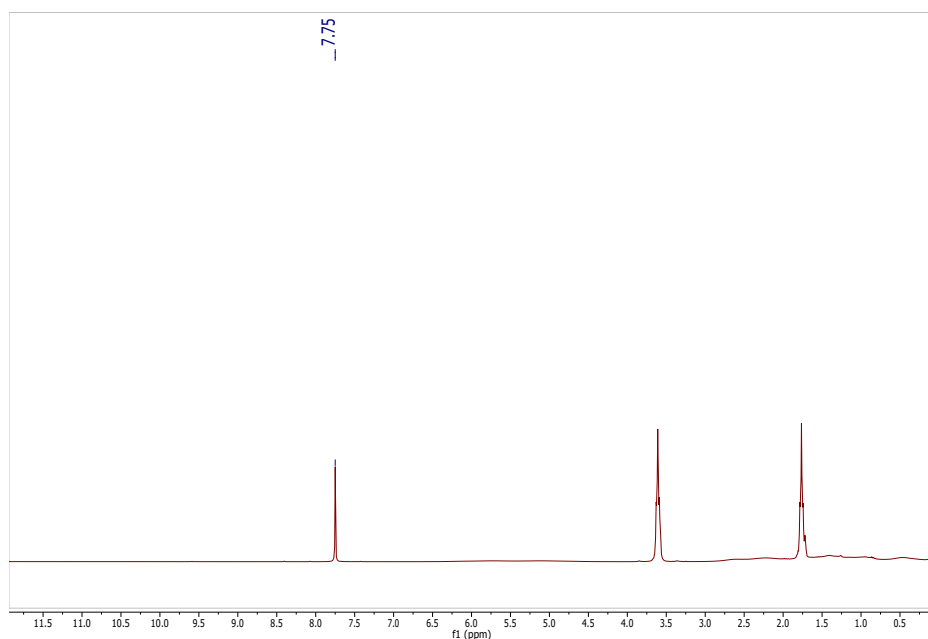


Fig. S19. <sup>1</sup>H-NMR of **10**[Li<sup>+</sup>] in tetrahydrofuran -d<sub>8</sub>.

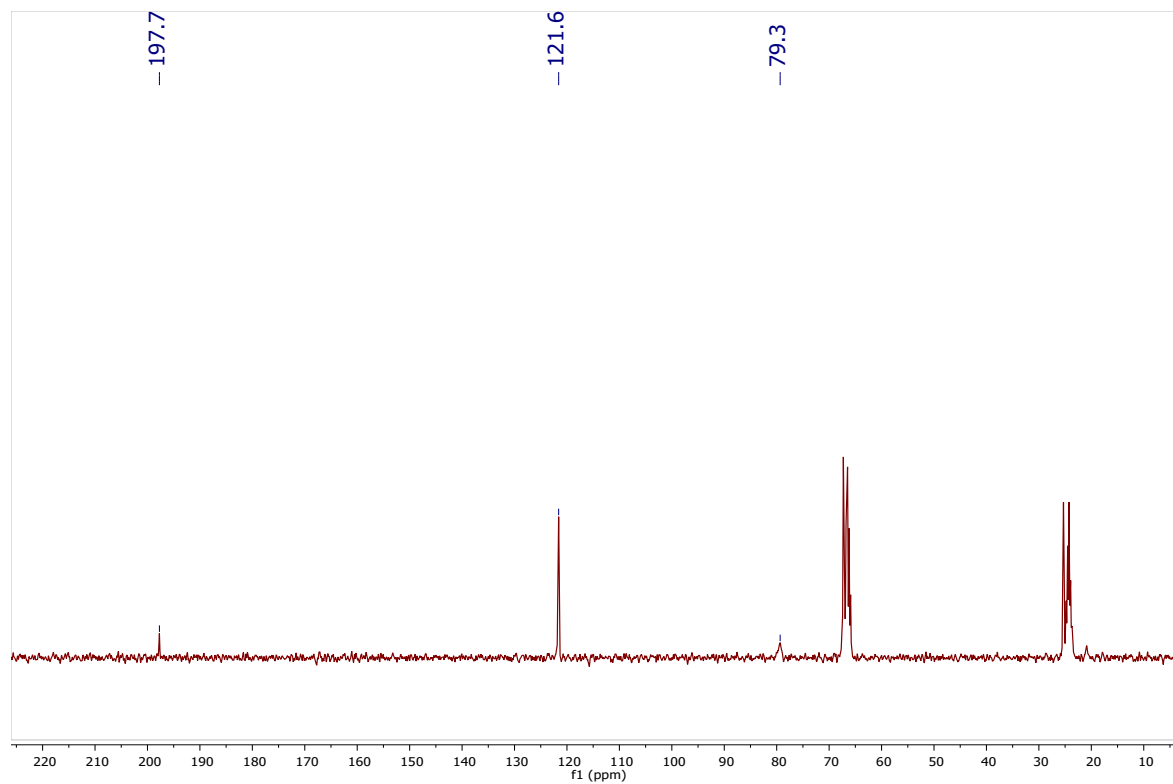


Fig. S20.  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of  $10[\text{Li}^+]$  in tetrahydrofuran - $\text{d}_8$ .

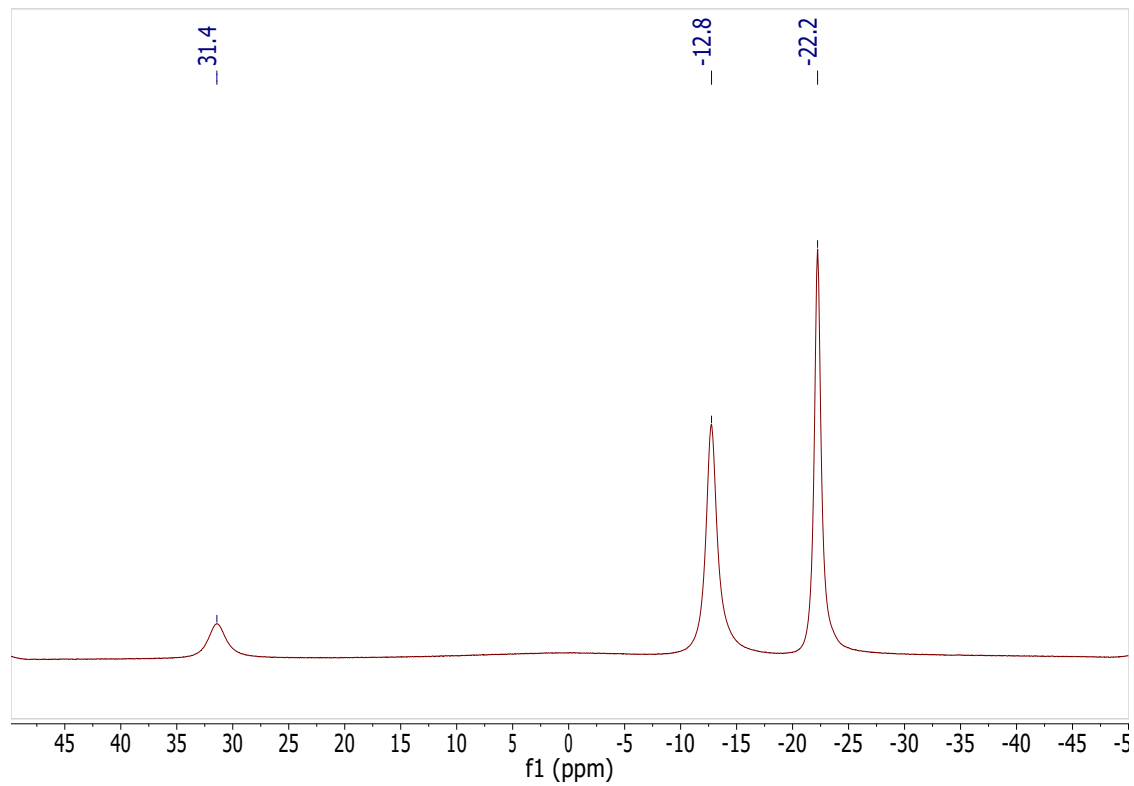
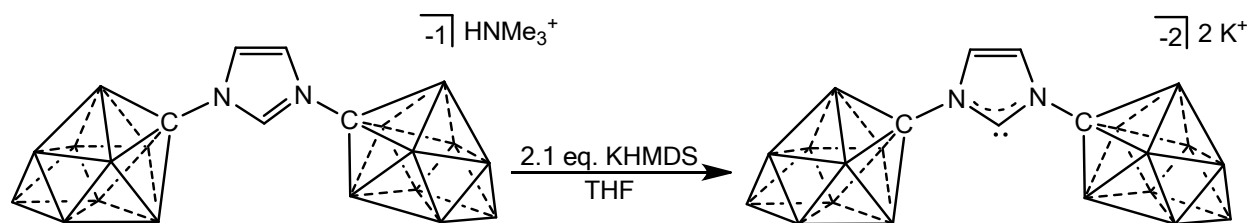


Fig. S21.  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of  $10[\text{Li}^+]$  in tetrahydrofuran - $\text{d}_8$ .

### Synthesis of Normal $K^+$ NHC $10[K^+]$



A vial equipped with a stir bar was loaded with 260 mg (0.69 mmol) of **9** $[HNMe_3^+]$  dissolved in tetrahydrofuran (5 mL). In a second vial, 2.1 equivalents (279 mg, 1.4 mmol) of KHMDS was dissolved in tetrahydrofuran (5 mL) and added to the first vial containing **9**. The vial was capped and the mixture stirred for 1 hour. The tetrahydrofuran reaction solution was added dropwise to a stirring vial of diethyl ether, precipitating a brown powder. The precipitate was left stirring in diethyl ether for 30 minutes. The solvent was decanted from the precipitate, and the remaining volatiles were removed under vacuum, affording the product **10** $[K^+]$  in 89% yield (459 mg, 0.61 mmol). (Note:  $K^+$  counteranions contain 3 coordinated THF molecules). Crystals suitable for a single crystal X-ray diffraction study were grown at  $-30\text{ }^\circ\text{C}$  by layering a tetrahydrofuran solution of **10** $[K^+]$  with diethyl ether.  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz, tetrahydrofuran  $-d_8$ ,  $25\text{ }^\circ\text{C}$ ):  $\delta = 7.72$  (s, 2H), 2.50-0.0 (bm, 22H, B-H);  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (96 MHz, tetrahydrofuran  $-d_8$ ,  $25\text{ }^\circ\text{C}$ ):  $\delta = 30.5$ , -12.7, -22.1 ppm.

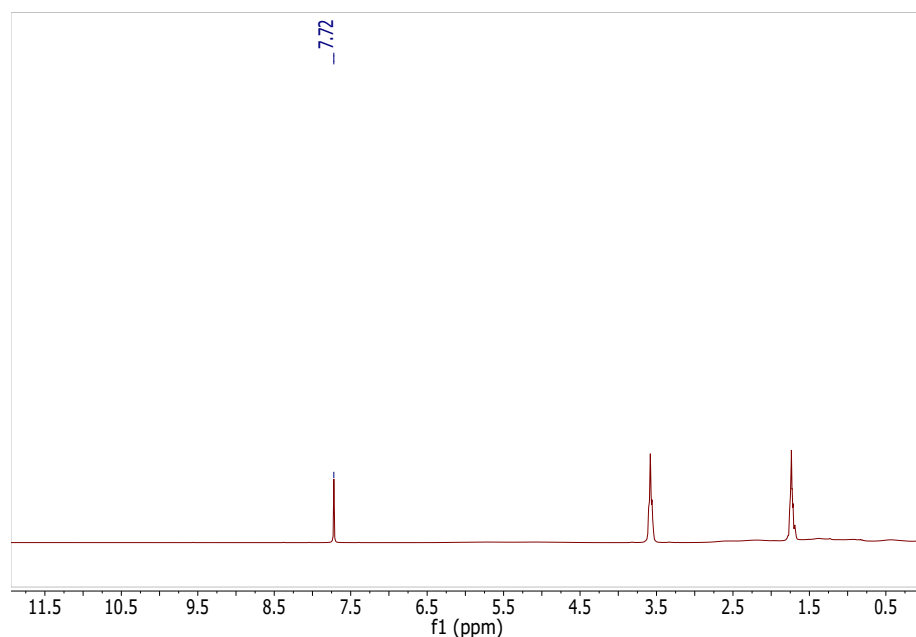


Fig. S22.  $^1\text{H}$ -NMR of **10** $[K^+]$  in tetrahydrofuran  $-d_8$

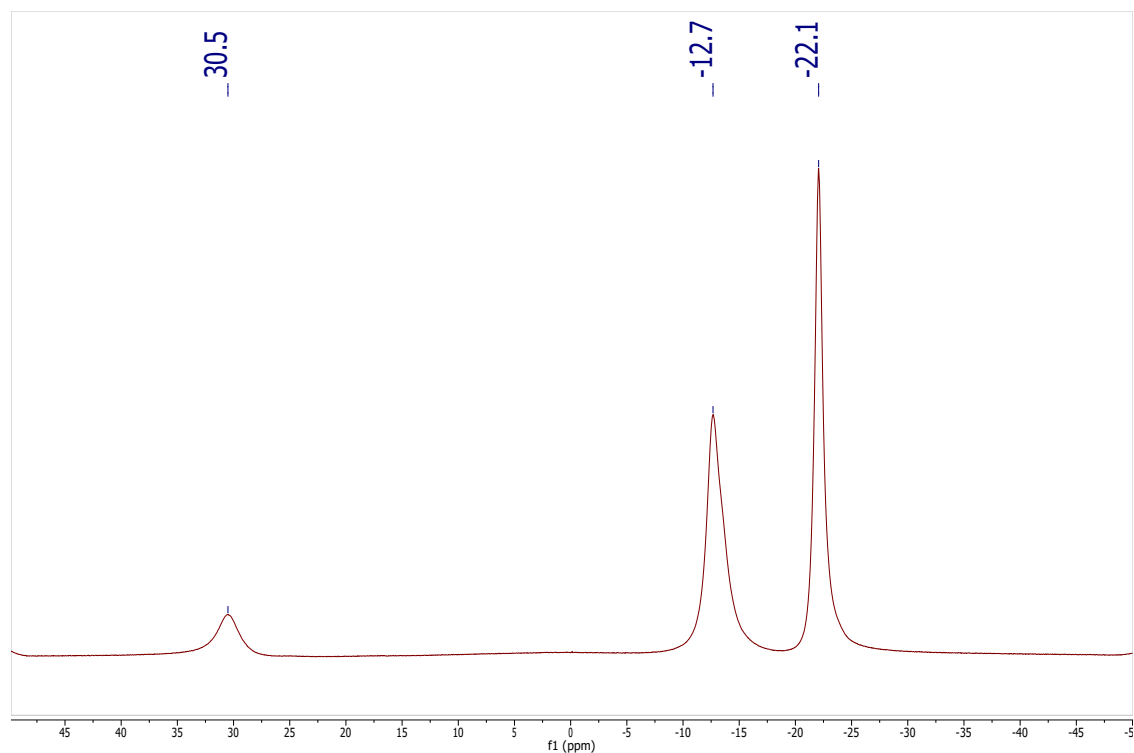
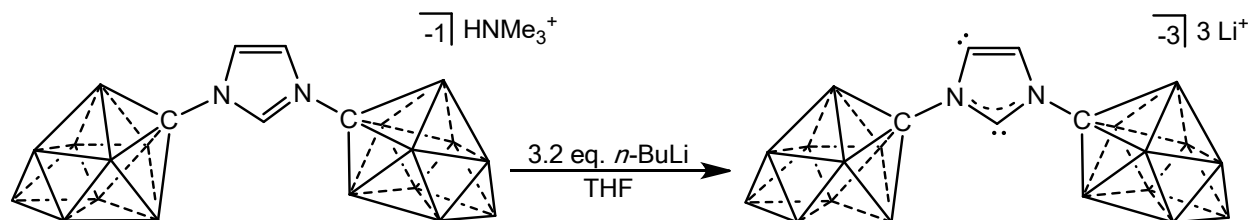


Fig. S23.  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of  $\mathbf{10}[\text{K}^+]$  in tetrahydrofuran- $\text{d}_8$

### Synthesis of Paranormal $\text{Li}^+$ NHC $\mathbf{12}$



A vial equipped with a stir bar was loaded with 190 mg (0.50 mmol) of  $\mathbf{9}[\text{HNMe}_3^+]$ . In a second vial, 3.2 equivalents (102 mg, 0.15 mL, 1.6 mmol) of neat *n*-butyllithium was dissolved in diethyl ether (7 mL) and added to the vial containing  $\mathbf{9}$ . The vial was capped and the mixture stirred. Upon initial addition of the  $\text{Et}_2\text{O}$  mixture to  $\mathbf{9}$ , an oil formed. After vigorous stirring for 3 hours, the oil developed into a white precipitate. The solvent was decanted from the precipitate, and the remaining volatiles were removed under vacuum, affording the product  $\mathbf{12}$  in 97% yield (370 mg, 0.49 mmol) (Note:  $\text{Li}^+$  counteranions contain 10 coordinated THF molecules).  $^1\text{H}$  NMR (700 MHz, tetrahydrofuran- $\text{d}_8$ , 25  $^\circ\text{C}$ ):  $\delta$  = 7.00 (s, 2H), 0.01-2.65 (bm, 18H, B-H);  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (125 MHz, tetrahydrofuran- $\text{d}_8$ , 25  $^\circ\text{C}$ ):  $\delta$  = 197.6, 169.3, 128.8, 90.0, 83.3;  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR (96 MHz, tetrahydrofuran- $\text{d}_8$ , 25  $^\circ\text{C}$ ):  $\delta$  = 31.4, -21.8, -22.2 ppm.

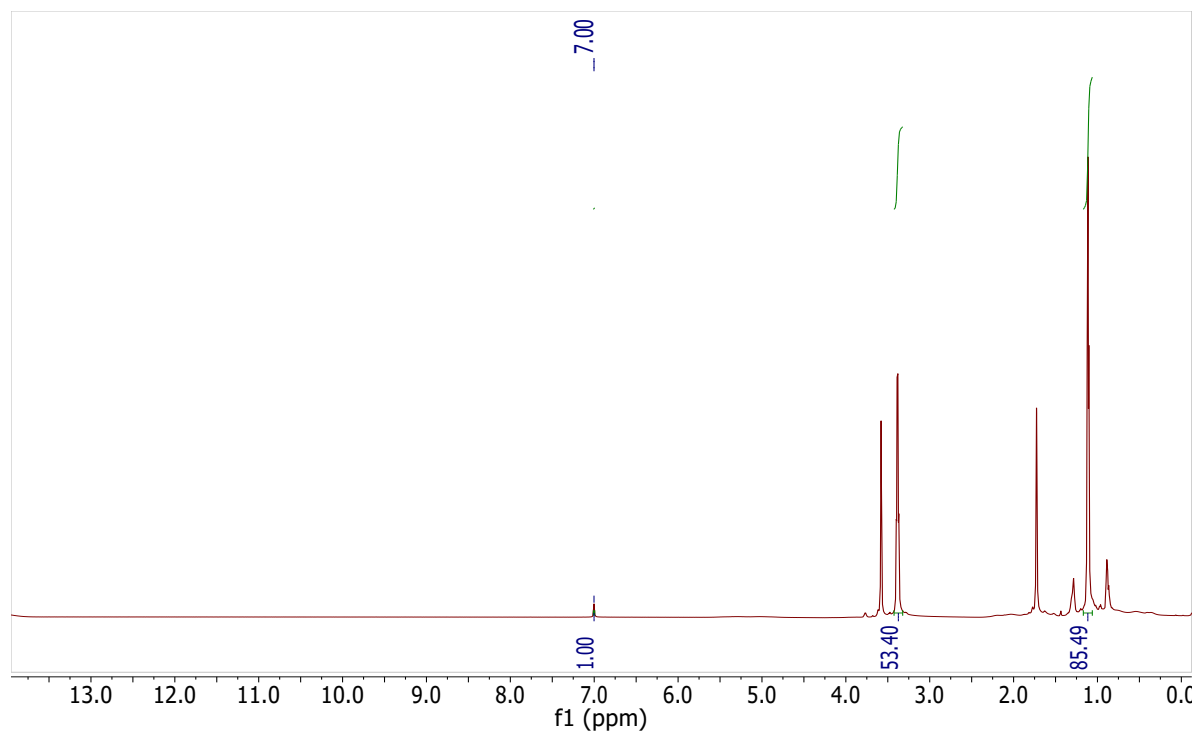


Fig. S24.  $^1\text{H}$ -NMR of **12** in tetrahydrofuran- $d_8$ . Note the presence of diethyl ether at 3.38 and 1.12 ppm, and H-grease at 0.91 and 1.29 ppm.

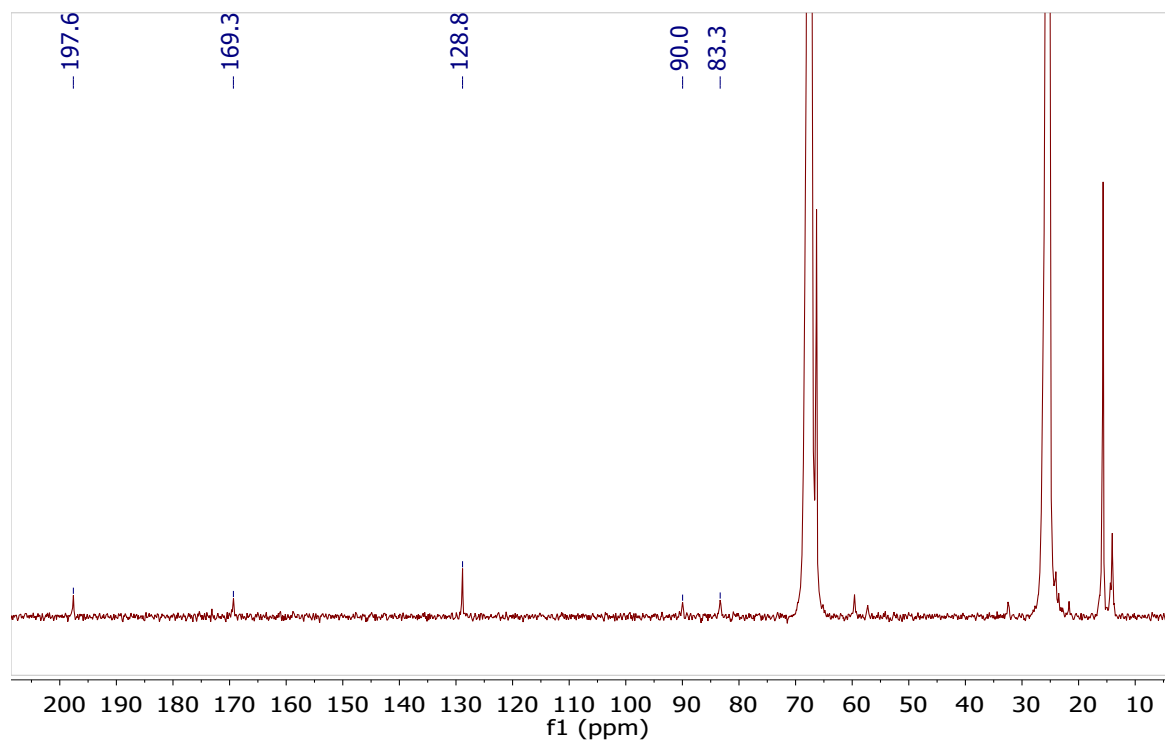


Fig. S25.  $^{13}\text{C}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of **12** in tetrahydrofuran- $d_8$ . Coordinated diethyl ether is seen at 15.7 and 66.3 ppm. Trace n-butyllithium is seen at 14.0, 21.7, and 32.5 ppm.



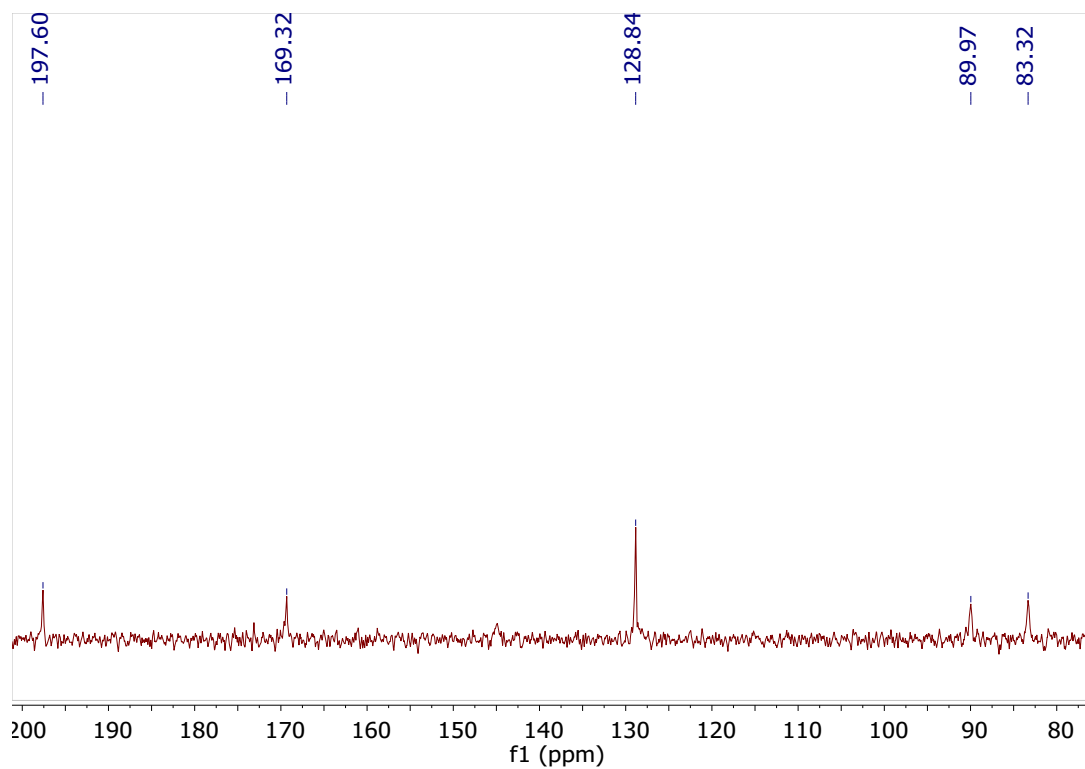


Fig. S26. An expanded view of the <sup>13</sup>C-(<sup>1</sup>H-dec) NMR spectrum of **12** in tetrahydrofuran-d<sub>8</sub>.

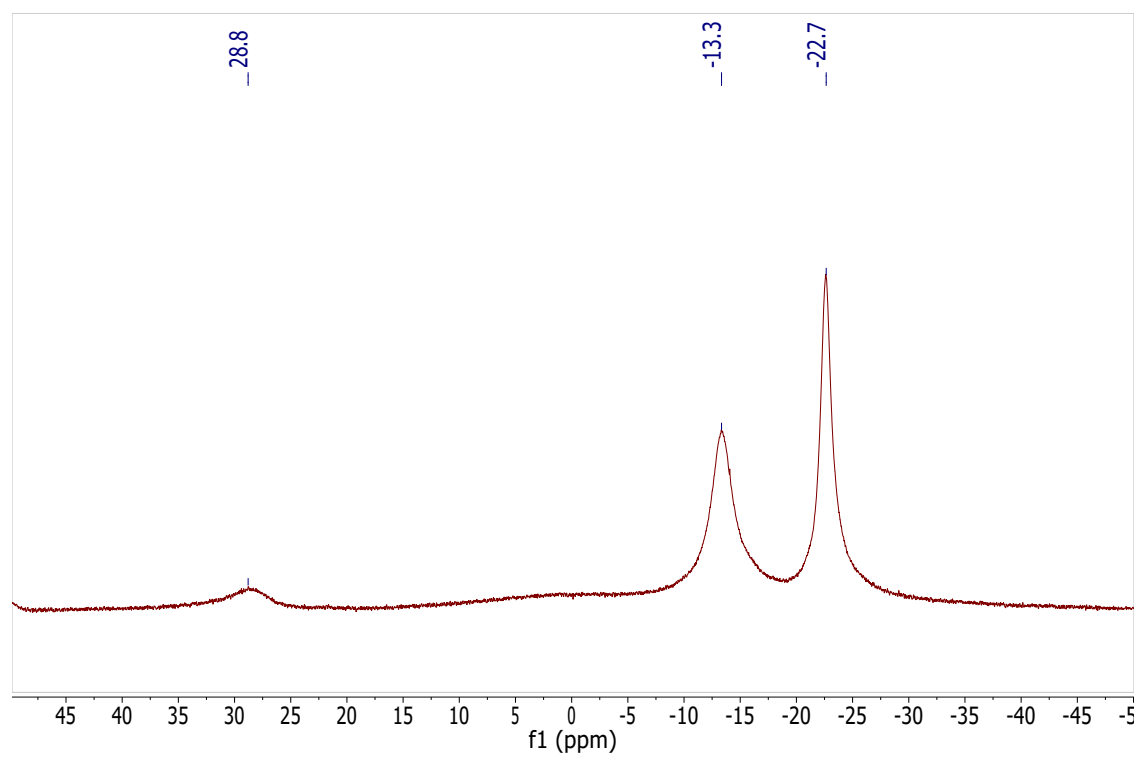


Fig. S27.  $^{11}\text{B}$ -( $^1\text{H}$ -dec) NMR of **12** in tetrahydrofuran- $\text{d}_8$ .

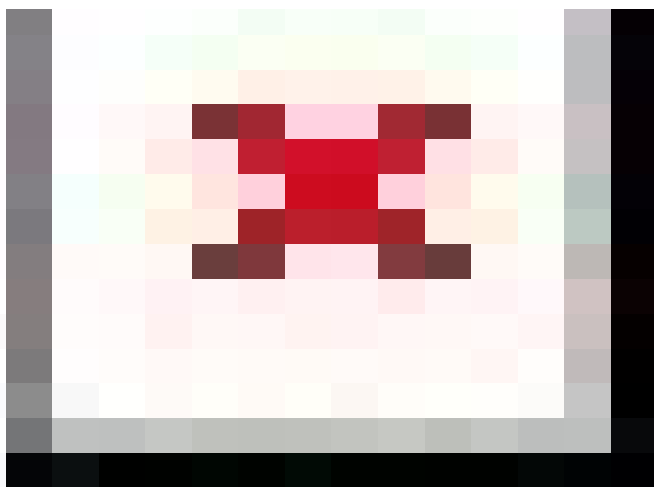


Fig. S28. Solid-state structure of the 10-Vertex NHC dianion **10**[ $\text{K}^+$ ]. Boron = brown, carbon= gray, nitrogen= blue, potassium= purple. For clarity, tetrahydrofuran molecules coordinated to the potassium atoms are omitted. One potassium cation is bound to the deprotonated position of the N-heterocyclic carbene, while the other potassium cation is coordinated to the carborane cluster. The line drawn between the potassium cation and the cluster does not represent a sigma bond. The potassium atom bound to the NHC has three THF molecules coordinated to it, while the potassium coordinated to the carborane cluster is also coordinating to the cluster of another NHC molecule, and possesses two THF molecules.

### X-Ray Structure Determination for **10**[ $\text{K}^+$ ]

A colorless prism fragment (0.589 x 0.559 x 0.478 mm<sup>3</sup>) was used for the single crystal x-ray diffraction study of  $[\text{C}_5\text{H}_{20}\text{B}_{18}\text{N}_2\text{K}_2] \cdot [\text{C}_4\text{H}_8\text{O}]_7$  (sample vL157SL\_70A\_0m). The crystal was coated with paratone oil and mounted on to a cryo-loop glass fiber. X-ray intensity data were collected at 200(2) K on a Bruker APEX2 platform-CCD x-ray diffractometer system (fine focus Mo-radiation,  $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ , 50KV/30mA power). The CCD detector was placed at a distance of 7.0900 cm from the crystal.

A total of 6600 frames were collected for a sphere of reflections (with scan width of  $0.3^\circ$  in  $\omega$ , starting  $\omega/2\theta$  angles at  $-24^\circ/-24^\circ$  with  $\phi$  angles of  $0^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 225^\circ$ , and starting  $\omega/2\theta$  angles at  $-29^\circ/-29^\circ$  with  $\phi$  angles of  $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 270^\circ$  for every 600 frames, 60 sec/frame exposure time). The frames were integrated using the Bruker SAINT software package and using a narrow-frame integration algorithm. Based on an orthorhombic crystal system, the integrated frames yielded a total of 129683 reflections at a maximum  $2\theta$  angle of  $52.044^\circ$  ( $0.81 \text{ \AA}$  resolution), of which 10591 were independent reflections ( $R_{\text{int}} = 0.0275$ ,  $R_{\text{sig}} = 0.0132$ , redundancy = 12.2,

completeness = 99.9%) and 9804 (92.6%) reflections were greater than  $2\sigma(I)$ . The unit cell parameters were,  $\mathbf{a} = 60.9506(58) \text{ \AA}$ ,  $\mathbf{b} = 17.6644(17) \text{ \AA}$ ,  $\mathbf{c} = 9.8809(10) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ,  $V = 10638.3(18) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 8$ , calculated density  $D_c = 1.106 \text{ g/cm}^3$ . Absorption corrections were applied (absorption coefficient  $\mu = 0.219 \text{ mm}^{-1}$ ; max/min transmission = 0.903/0.882) to the raw intensity data using the SADABS program.

The Bruker SHELXTL software package was used for phase determination and structure refinement. The distribution of intensities ( $E^2-1 = 0.721$ ) and systematic absent reflections indicated three possible space groups,  $Cmc2(1)$ ,  $Cmcm$ , and  $Ama2$ . The space group  $Ama2$  (#40) was later determined to be correct. Direct methods of phase determination followed by two Fourier cycles of refinement led to an electron density map from which most of the non-hydrogen atoms were identified in the asymmetric unit of the unit cell. With subsequent isotropic refinement, all of the non-hydrogen atoms were identified. There was one polymeric structure of  $C_5H_{20}B_{18}N_2K_3$  and seven  $C_4H_8O$  solvent molecules present in the asymmetric unit of the unit cell. Five of the seven THF molecules were modeled with disorder (disordered site occupancy ratios were 75%/25%, 70%/30%, 58%/42%, 53%/47% and 50%/50%). The K2 atom and three disordered-THF molecules were located at the mirror plane perpendicular to the a-axis. The K3 atom and two disordered-THF molecule were located at the 2-fold rotation axis parallel to the c-axis. The polymeric chain is propagated along the a-axis. The level B-alerts are probably due to the poor crystal quality and the five highly disordered THF molecules where rigid model restraints were used. The crystal cracks at 100K due to low temperature phase transition and data was collected at 200K.

Atomic coordinates, isotropic and anisotropic displacement parameters of all the non-hydrogen atoms were refined by means of a full matrix least-squares procedure on  $F^2$ . The H-atoms were included in the refinement in calculated positions riding on the atoms to which they were attached. The absolute structure Flack's parameter  $x = 0.038(5)$ . The refinement converged at  $R1 = 0.0590$ ,  $wR2 = 0.1698$ , with intensity,  $I > 2\sigma(I)$ . The largest peak/hole in the final difference map was  $0.589/-0.311 \text{ e/\AA}^3$ .

**Table S1.** Crystal data and structure refinement for  $Ama2$ .

Identification code	vL157SL_70A_0m	
Empirical formula	C33 H76 B18 K2 N2 O7	
Formula weight	885.73	
Temperature	200(2) K	
Wavelength	0.71073 \AA	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	A m a 2	
Unit cell dimensions	$a = 60.951(6) \text{ \AA}$	$\alpha = 90^\circ$ .
	$b = 17.6644(17) \text{ \AA}$	$\beta = 90^\circ$ .
	$c = 9.8809(10) \text{ \AA}$	$\gamma = 90^\circ$ .

Volume	10638.3(18) Å <sup>3</sup>
Z	8
Density (calculated)	1.106 Mg/m <sup>3</sup>
Absorption coefficient	0.219 mm <sup>-1</sup>
F(000)	3776
Crystal size	0.589 x 0.559 x 0.478 mm <sup>3</sup>
Theta range for data collection	2.005 to 26.022°.
Index ranges	-75<=h<=75, -21<=k<=21, -12<=l<=12
Reflections collected	129683
Independent reflections	10591 [R(int) = 0.0275]
Completeness to theta = 25.242°	99.9 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>
Data / restraints / parameters	10591 / 971 / 775
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.100
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0590, wR2 = 0.1698
R indices (all data)	R1 = 0.0630, wR2 = 0.1747
Absolute structure parameter	0.038(5)
Extinction coefficient	n/a
Largest diff. peak and hole	0.589 and -0.311 e.Å <sup>-3</sup>

**Table S2.** Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ )

for Ama2.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
K(1)	1187(1)	501(1)	5984(1)	67(1)
N(1)	1426(1)	-812(2)	2980(3)	53(1)
C(2)	1249(1)	-447(2)	3509(4)	53(1)
N(3)	1116(1)	-385(2)	2405(3)	52(1)
C(4)	1206(1)	-683(3)	1240(5)	66(1)
C(5)	1405(1)	-954(3)	1611(5)	66(1)
C(1A)	1619(1)	-1004(2)	3732(4)	52(1)
B(2A)	1852(1)	-578(2)	3623(5)	56(1)
B(3A)	1805(1)	-1594(3)	3320(6)	64(1)
B(4A)	1640(1)	-1660(3)	4874(6)	67(1)
B(5A)	1684(1)	-656(3)	5176(6)	61(1)
B(6A)	1981(1)	-602(2)	5255(6)	62(1)
B(7A)	2068(1)	-1255(3)	3924(6)	64(1)
B(8A)	1918(1)	-2022(3)	4813(7)	72(1)
B(9A)	1832(1)	-1352(3)	6153(6)	72(1)
B(10A)	2096(1)	-1452(3)	5597(7)	71(1)
C(1B)	903(1)	-54(2)	2444(4)	49(1)
B(2B)	833(1)	729(2)	3160(5)	60(1)
B(3B)	719(1)	-211(2)	3567(4)	54(1)
B(4B)	688(1)	-411(2)	1745(4)	50(1)
B(5B)	804(1)	528(3)	1344(5)	62(1)
B(6B)	615(1)	1155(3)	2201(6)	68(1)
B(7B)	555(1)	627(3)	3769(5)	62(1)
B(8B)	451(1)	-164(3)	2760(4)	55(1)
B(9B)	516(1)	355(3)	1195(5)	58(1)
B(10B)	371(1)	743(3)	2511(5)	62(1)
O(1T)	1034(1)	-608(2)	7685(5)	94(1)
C(1T)	804(1)	-727(4)	7741(6)	97(2)
C(2T)	764(1)	-1537(4)	7605(14)	151(4)
C(3T)	979(1)	-1896(4)	7613(17)	172(5)

C(4T)	1137(1)	-1307(4)	7375(10)	112(2)
O(2T)	935(1)	1598(3)	7080(6)	116(2)
C(5T)	724(1)	1622(5)	7667(10)	122(2)
C(6T)	714(1)	2319(4)	8490(8)	109(2)
C(7T)	933(2)	2630(4)	8422(13)	144(4)
C(8T)	1020(2)	2303(5)	7165(14)	177(5)
O(3T)	1495(1)	956(6)	7851(8)	88(2)
C(9T)	1725(1)	1068(6)	7724(9)	90(3)
C(10T)	1831(2)	606(12)	8789(17)	152(5)
C(11T)	1662(3)	526(14)	9875(14)	152(5)
C(12T)	1447(2)	806(15)	9240(15)	149(6)
O(3U)	1475(3)	545(11)	8106(15)	122(5)
C(9U)	1668(3)	160(11)	8590(20)	134(6)
C(10U)	1765(2)	658(10)	9670(20)	122(6)
C(11U)	1559(3)	1040(8)	10239(11)	101(4)
C(12U)	1417(3)	1149(11)	8996(16)	111(6)
O(4T)	1420(1)	1555(4)	4596(9)	107(3)
C(13T)	1535(2)	2219(7)	5087(13)	140(4)
C(14T)	1761(2)	2173(9)	4463(12)	146(5)
C(15T)	1725(2)	1722(6)	3184(12)	126(3)
C(16T)	1496(2)	1441(6)	3253(10)	126(3)
O(4U)	1471(3)	1578(13)	5240(20)	115(7)
C(13U)	1703(3)	1588(13)	5360(20)	113(7)
C(14U)	1782(4)	1837(19)	3940(30)	124(9)
C(15U)	1603(5)	2433(18)	3630(30)	154(9)
C(16U)	1399(3)	1970(20)	4060(30)	130(9)
K(2)	2500	-305(1)	5428(2)	76(1)
O(5T)	75(2)	-1423(4)	-120(30)	112(6)
C(17T)	251(2)	-1958(9)	80(40)	146(8)
C(18T)	145(3)	-2711(7)	390(20)	125(6)
C(19T)	-95(3)	-2608(10)	80(30)	132(6)
C(20T)	-106(3)	-1863(9)	-670(30)	126(7)
O(5U)	73(2)	-1487(5)	260(30)	111(5)
C(17U)	241(2)	-1892(8)	520(20)	114(5)
C(18U)	218(3)	-2630(10)	-260(30)	162(8)
C(19U)	-19(3)	-2667(7)	-640(30)	127(6)

C(20U)	-116(2)	-1918(9)	-240(30)	122(7)
O(6T)	26(3)	165(11)	-2044(7)	118(6)
C(21T)	232(2)	-127(13)	-2533(14)	134(4)
C(22T)	184(2)	-545(10)	-3820(13)	122(5)
C(23T)	-18(4)	-130(20)	-4350(11)	133(9)
C(24T)	-136(2)	127(14)	-3081(14)	134(4)
K(3)	0	0	679(1)	63(1)
O(7T)	2500	459(6)	3035(11)	94(3)
C(25T)	2310(1)	838(6)	2568(16)	106(4)
C(26T)	2379(1)	1644(5)	2270(20)	125(5)
O(7U)	2500	712(14)	3400(20)	94(3)
C(25U)	2311(1)	1107(17)	2890(20)	124(9)
C(26U)	2377(1)	1370(20)	1490(20)	120(8)
O(8T)	2500	1178(7)	6100(20)	125(6)
C(29T)	2310(1)	1314(17)	6930(20)	184(9)
C(30T)	2379(1)	1864(14)	8000(20)	193(11)
O(8U)	2500	1073(9)	6590(40)	144(8)
C(29U)	2311(1)	1566(10)	6670(30)	169(9)
C(30U)	2378(1)	2191(15)	7610(40)	205(12)
O(9T)	2529(4)	-473(7)	8199(11)	153(6)
C(33T)	2319(4)	-515(14)	8880(30)	166(8)
C(34T)	2329(4)	-1272(14)	9610(20)	210(11)
C(35T)	2568(4)	-1291(16)	10070(20)	220(11)
C(36T)	2690(4)	-838(17)	9040(30)	179(8)

---

**Table S3.** Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for Ama2.

K(1)-O(4U)	2.673(11)	B(5A)-B(6A)	1.810(6)
K(1)-O(2T)	2.700(4)	B(5A)-H(5A)	1.1200
K(1)-O(4T)	2.713(6)	B(6A)-B(10A)	1.692(6)
K(1)-O(3U)	2.733(12)	B(6A)-B(7A)	1.828(7)
K(1)-O(1T)	2.745(4)	B(6A)-B(9A)	1.835(7)
K(1)-O(3T)	2.749(7)	B(6A)-H(6A)	1.1200
K(1)-C(2)	2.987(4)	B(7A)-B(10A)	1.699(8)
N(1)-C(2)	1.363(5)	B(7A)-B(8A)	1.854(7)
N(1)-C(5)	1.382(6)	B(7A)-H(7A)	1.1200
N(1)-C(1A)	1.432(5)	B(8A)-B(10A)	1.672(7)
C(2)-N(3)	1.363(5)	B(8A)-B(9A)	1.851(9)
N(3)-C(4)	1.381(6)	B(8A)-H(8A)	1.1200
N(3)-C(1B)	1.425(5)	B(9A)-B(10A)	1.709(7)
C(4)-C(5)	1.351(6)	B(9A)-H(9A)	1.1200
C(4)-H(4)	0.9500	B(10A)-H(10A)	1.1200
C(5)-H(5)	0.9500	C(1B)-B(3B)	1.602(6)
C(1A)-B(3A)	1.596(5)	C(1B)-B(4B)	1.608(5)
C(1A)-B(5A)	1.603(6)	C(1B)-B(2B)	1.610(5)
C(1A)-B(2A)	1.611(5)	C(1B)-B(5B)	1.612(6)
C(1A)-B(4A)	1.622(6)	B(2B)-B(6B)	1.799(6)
B(2A)-B(6A)	1.794(7)	B(2B)-B(7B)	1.808(7)
B(2A)-B(7A)	1.800(6)	B(2B)-B(5B)	1.839(7)
B(2A)-B(3A)	1.842(6)	B(2B)-B(3B)	1.846(6)
B(2A)-B(5A)	1.848(7)	B(2B)-H(2B)	1.1200
B(2A)-H(2A)	1.1200	B(3B)-B(7B)	1.795(6)
B(3A)-B(8A)	1.793(8)	B(3B)-B(8B)	1.819(6)
B(3A)-B(7A)	1.808(7)	B(3B)-B(4B)	1.844(6)
B(3A)-B(4A)	1.841(8)	B(3B)-H(3B)	1.1200
B(3A)-H(3A)	1.1200	B(4B)-B(9B)	1.795(6)
B(4A)-B(9A)	1.807(7)	B(4B)-B(8B)	1.813(6)
B(4A)-B(8A)	1.813(7)	B(4B)-B(5B)	1.845(6)
B(4A)-B(5A)	1.819(7)	B(4B)-H(4B)	1.1200
B(4A)-H(4A)	1.1200	B(5B)-B(9B)	1.787(6)
B(5A)-B(9A)	1.805(7)	B(5B)-B(6B)	1.809(7)



B(5B)-H(5B)	1.1200	C(7T)-H(7C)	0.9900
B(6B)-B(10B)	1.686(7)	C(7T)-H(7D)	0.9900
B(6B)-B(9B)	1.829(7)	C(8T)-H(8C)	0.9900
B(6B)-B(7B)	1.844(8)	C(8T)-H(8D)	0.9900
B(6B)-H(6B)	1.1200	O(3T)-C(9T)	1.422(9)
B(7B)-B(10B)	1.690(6)	O(3T)-C(12T)	1.427(11)
B(7B)-B(8B)	1.832(6)	C(9T)-C(10T)	1.481(11)
B(7B)-H(7B)	1.1200	C(9T)-H(9C)	0.9900
B(8B)-B(10B)	1.692(7)	C(9T)-H(9D)	0.9900
B(8B)-B(9B)	1.841(7)	C(10T)-C(11T)	1.496(12)
B(8B)-H(8B)	1.1200	C(10T)-H(10C)	0.9900
B(9B)-B(10B)	1.717(6)	C(10T)-H(10D)	0.9900
B(9B)-H(9B)	1.1200	C(11T)-C(12T)	1.533(12)
B(10B)-H(10B)	1.1200	C(11T)-H(11A)	0.9900
O(1T)-C(1T)	1.417(7)	C(11T)-H(11B)	0.9900
O(1T)-C(4T)	1.421(7)	C(12T)-H(12A)	0.9900
C(1T)-C(2T)	1.457(8)	C(12T)-H(12B)	0.9900
C(1T)-H(1A)	0.9900	O(3U)-C(12U)	1.428(12)
C(1T)-H(1B)	0.9900	O(3U)-C(9U)	1.438(12)
C(2T)-C(3T)	1.457(9)	C(9U)-C(10U)	1.510(12)
C(2T)-H(2C)	0.9900	C(9U)-H(9E)	0.9900
C(2T)-H(2D)	0.9900	C(9U)-H(9F)	0.9900
C(3T)-C(4T)	1.440(8)	C(10U)-C(11U)	1.527(12)
C(3T)-H(3C)	0.9900	C(10U)-H(10E)	0.9900
C(3T)-H(3D)	0.9900	C(10U)-H(10F)	0.9900
C(4T)-H(4C)	0.9900	C(11U)-C(12U)	1.517(12)
C(4T)-H(4D)	0.9900	C(11U)-H(11C)	0.9900
O(2T)-C(8T)	1.351(11)	C(11U)-H(11D)	0.9900
O(2T)-C(5T)	1.415(9)	C(12U)-H(12C)	0.9900
C(5T)-C(6T)	1.476(10)	C(12U)-H(12D)	0.9900
C(5T)-H(5C)	0.9900	O(4T)-C(16T)	1.419(10)
C(5T)-H(5D)	0.9900	O(4T)-C(13T)	1.448(9)
C(6T)-C(7T)	1.447(11)	C(13T)-C(14T)	1.511(11)
C(6T)-H(6C)	0.9900	C(13T)-H(13A)	0.9900
C(6T)-H(6D)	0.9900	C(13T)-H(13B)	0.9900
C(7T)-C(8T)	1.467(15)	C(14T)-C(15T)	1.510(11)

C(14T)-H(14A)	0.9900	C(18T)-H(18A)	0.9900
C(14T)-H(14B)	0.9900	C(18T)-H(18B)	0.9900
C(15T)-C(16T)	1.483(10)	C(19T)-C(20T)	1.515(13)
C(15T)-H(15A)	0.9900	C(19T)-H(19A)	0.9900
C(15T)-H(15B)	0.9900	C(19T)-H(19B)	0.9900
C(16T)-H(16A)	0.9900	C(20T)-H(20A)	0.9900
C(16T)-H(16B)	0.9900	C(20T)-H(20B)	0.9900
O(4U)-C(13U)	1.419(12)	O(5U)-C(17U)	1.278(16)
O(4U)-C(16U)	1.428(13)	O(5U)-C(20U)	1.463(16)
C(13U)-C(14U)	1.545(13)	O(5U)-K(3)	2.696(7)
C(13U)-H(13C)	0.9900	C(17U)-C(18U)	1.522(12)
C(13U)-H(13D)	0.9900	C(17U)-H(17C)	0.9900
C(14U)-C(15U)	1.548(14)	C(17U)-H(17D)	0.9900
C(14U)-H(14C)	0.9900	C(18U)-C(19U)	1.497(11)
C(14U)-H(14D)	0.9900	C(18U)-H(18C)	0.9900
C(15U)-C(16U)	1.549(14)	C(18U)-H(18D)	0.9900
C(15U)-H(15C)	0.9900	C(19U)-C(20U)	1.504(12)
C(15U)-H(15D)	0.9900	C(19U)-H(19C)	0.9900
C(16U)-H(16C)	0.9900	C(19U)-H(19D)	0.9900
C(16U)-H(16D)	0.9900	C(20U)-H(20C)	0.9900
K(2)-O(8U)	2.690(10)	C(20U)-H(20D)	0.9900
K(2)-O(7U)	2.692(11)	O(6T)-C(24T)	1.423(11)
K(2)-O(8T)	2.704(10)	O(6T)-C(21T)	1.441(12)
K(2)-O(7T)	2.722(8)	O(6T)-K(3)	2.711(8)
K(2)-O(9T)	2.760(12)	C(21T)-C(22T)	1.500(12)
K(2)-B(10A)#1	3.192(5)	C(21T)-H(21A)	0.9900
K(2)-B(6A)#1	3.212(4)	C(21T)-H(21B)	0.9900
K(2)-C(29T)#1	3.43(2)	C(22T)-C(23T)	1.526(13)
K(2)-B(7A)#1	3.460(5)	C(22T)-H(22A)	0.9900
O(5T)-C(17T)	1.443(13)	C(22T)-H(22B)	0.9900
O(5T)-C(20T)	1.456(13)	C(23T)-C(24T)	1.512(12)
O(5T)-K(3)	2.672(9)	C(23T)-H(23A)	0.9900
C(17T)-C(18T)	1.510(12)	C(23T)-H(23B)	0.9900
C(17T)-H(17A)	0.9900	C(24T)-H(24A)	0.9900
C(17T)-H(17B)	0.9900	C(24T)-H(24B)	0.9900
C(18T)-C(19T)	1.499(12)	K(3)-O(5T)#2	2.672(9)

K(3)-O(5U)#2	2.696(7)	O(9T)-C(36T)	1.439(12)
K(3)-B(10B)#2	3.178(5)	O(9T)-C(33T)	1.445(12)
K(3)-B(9B)#2	3.247(4)	C(33T)-C(34T)	1.520(13)
K(3)-B(8B)#2	3.443(4)	C(33T)-H(33A)	0.9900
O(7T)-C(25T)#1	1.416(7)	C(33T)-H(33B)	0.9900
O(7T)-C(25T)	1.416(7)	C(34T)-C(35T)	1.527(13)
C(25T)-C(26T)	1.514(8)	C(34T)-H(34A)	0.9900
C(25T)-H(25A)	0.9900	C(34T)-H(34B)	0.9900
C(25T)-H(25B)	0.9900	C(35T)-C(36T)	1.499(12)
C(26T)-C(26T)#1	1.478(11)	C(35T)-H(35A)	0.9900
C(26T)-H(26A)	0.9900	C(35T)-H(35B)	0.9900
C(26T)-H(26B)	0.9900	C(36T)-H(36A)	0.9900
O(7U)-C(25U)#1	1.440(9)	C(36T)-H(36B)	0.9900
O(7U)-C(25U)	1.440(9)		
C(25U)-C(26U)	1.517(9)	O(4U)-K(1)-O(2T)	88.1(6)
C(25U)-H(25C)	0.9900	O(2T)-K(1)-O(4T)	90.47(19)
C(25U)-H(25D)	0.9900	O(4U)-K(1)-O(3U)	77.0(7)
C(26U)-C(26U)#1	1.498(13)	O(2T)-K(1)-O(3U)	92.1(3)
C(26U)-H(26C)	0.9900	O(4U)-K(1)-O(1T)	153.6(5)
C(26U)-H(26D)	0.9900	O(2T)-K(1)-O(1T)	94.12(14)
O(8T)-C(29T)#1	1.441(9)	O(4T)-K(1)-O(1T)	167.8(2)
O(8T)-C(29T)	1.441(9)	O(3U)-K(1)-O(1T)	76.6(5)
C(29T)-C(30T)	1.497(9)	O(2T)-K(1)-O(3T)	84.8(2)
C(29T)-H(29A)	0.9900	O(4T)-K(1)-O(3T)	77.4(3)
C(29T)-H(29B)	0.9900	O(1T)-K(1)-O(3T)	91.7(2)
C(30T)-C(30T)#1	1.476(12)	O(4U)-K(1)-C(2)	95.4(6)
C(30T)-H(30A)	0.9900	O(2T)-K(1)-C(2)	143.29(15)
C(30T)-H(30B)	0.9900	O(4T)-K(1)-C(2)	84.60(17)
O(8U)-C(29U)#1	1.446(9)	O(3U)-K(1)-C(2)	124.3(3)
O(8U)-C(29U)	1.446(9)	O(1T)-K(1)-C(2)	98.27(12)
C(29U)-C(30U)	1.504(9)	O(3T)-K(1)-C(2)	128.9(2)
C(29U)-H(29C)	0.9900	C(2)-N(1)-C(5)	112.8(3)
C(29U)-H(29D)	0.9900	C(2)-N(1)-C(1A)	124.4(3)
C(30U)-C(30U)#1	1.487(13)	C(5)-N(1)-C(1A)	122.8(3)
C(30U)-H(30C)	0.9900	N(1)-C(2)-N(3)	101.7(3)
C(30U)-H(30D)	0.9900	N(1)-C(2)-K(1)	132.7(2)

N(3)-C(2)-K(1)	122.4(2)	C(1A)-B(3A)-B(7A)	109.2(3)
C(2)-N(3)-C(4)	113.5(3)	B(8A)-B(3A)-B(7A)	62.0(3)
C(2)-N(3)-C(1B)	123.6(3)	C(1A)-B(3A)-B(4A)	55.7(3)
C(4)-N(3)-C(1B)	122.9(3)	B(8A)-B(3A)-B(4A)	59.8(3)
C(5)-C(4)-N(3)	105.5(4)	B(7A)-B(3A)-B(4A)	103.3(4)
C(5)-C(4)-H(4)	127.2	C(1A)-B(3A)-B(2A)	55.3(2)
N(3)-C(4)-H(4)	127.2	B(8A)-B(3A)-B(2A)	102.6(3)
C(4)-C(5)-N(1)	106.6(4)	B(7A)-B(3A)-B(2A)	59.1(2)
C(4)-C(5)-H(5)	126.7	B(4A)-B(3A)-B(2A)	90.6(3)
N(1)-C(5)-H(5)	126.7	C(1A)-B(3A)-H(3A)	121.3
N(1)-C(1A)-B(3A)	127.4(3)	B(8A)-B(3A)-H(3A)	120.1
N(1)-C(1A)-B(5A)	125.1(3)	B(7A)-B(3A)-H(3A)	120.3
B(3A)-C(1A)-B(5A)	107.5(3)	B(4A)-B(3A)-H(3A)	130.2
N(1)-C(1A)-B(2A)	125.4(3)	B(2A)-B(3A)-H(3A)	131.0
B(3A)-C(1A)-B(2A)	70.1(3)	C(1A)-B(4A)-B(9A)	108.8(3)
B(5A)-C(1A)-B(2A)	70.2(3)	C(1A)-B(4A)-B(8A)	107.6(4)
N(1)-C(1A)-B(4A)	126.4(3)	B(9A)-B(4A)-B(8A)	61.5(3)
B(3A)-C(1A)-B(4A)	69.8(3)	C(1A)-B(4A)-B(5A)	55.2(3)
B(5A)-C(1A)-B(4A)	68.7(3)	B(9A)-B(4A)-B(5A)	59.7(3)
B(2A)-C(1A)-B(4A)	108.1(3)	B(8A)-B(4A)-B(5A)	102.1(3)
C(1A)-B(2A)-B(6A)	108.3(3)	C(1A)-B(4A)-B(3A)	54.4(3)
C(1A)-B(2A)-B(7A)	108.8(3)	B(9A)-B(4A)-B(3A)	102.0(3)
B(6A)-B(2A)-B(7A)	61.1(3)	B(8A)-B(4A)-B(3A)	58.8(3)
C(1A)-B(2A)-B(3A)	54.6(2)	B(5A)-B(4A)-B(3A)	89.6(3)
B(6A)-B(2A)-B(3A)	101.0(3)	C(1A)-B(4A)-H(4A)	122.2
B(7A)-B(2A)-B(3A)	59.5(2)	B(9A)-B(4A)-H(4A)	120.4
C(1A)-B(2A)-B(5A)	54.7(2)	B(8A)-B(4A)-H(4A)	121.2
B(6A)-B(2A)-B(5A)	59.6(3)	B(5A)-B(4A)-H(4A)	130.7
B(7A)-B(2A)-B(5A)	102.5(3)	B(3A)-B(4A)-H(4A)	131.4
B(3A)-B(2A)-B(5A)	88.7(3)	C(1A)-B(5A)-B(9A)	109.8(3)
C(1A)-B(2A)-H(2A)	121.9	C(1A)-B(5A)-B(6A)	107.9(3)
B(6A)-B(2A)-H(2A)	121.1	B(9A)-B(5A)-B(6A)	61.0(3)
B(7A)-B(2A)-H(2A)	120.3	C(1A)-B(5A)-B(4A)	56.1(3)
B(3A)-B(2A)-H(2A)	131.9	B(9A)-B(5A)-B(4A)	59.8(3)
B(5A)-B(2A)-H(2A)	131.1	B(6A)-B(5A)-B(4A)	102.0(3)
C(1A)-B(3A)-B(8A)	109.7(4)	C(1A)-B(5A)-B(2A)	55.1(2)

B(9A)-B(5A)-B(2A)	102.6(3)	B(6A)-B(7A)-H(7A)	131.6
B(6A)-B(5A)-B(2A)	58.7(3)	B(8A)-B(7A)-H(7A)	132.0
B(4A)-B(5A)-B(2A)	91.1(3)	B(10A)-B(8A)-B(3A)	112.1(4)
C(1A)-B(5A)-H(5A)	121.4	B(10A)-B(8A)-B(4A)	112.3(4)
B(9A)-B(5A)-H(5A)	120.2	B(3A)-B(8A)-B(4A)	61.4(3)
B(6A)-B(5A)-H(5A)	121.6	B(10A)-B(8A)-B(9A)	57.8(3)
B(4A)-B(5A)-H(5A)	130.1	B(3A)-B(8A)-B(9A)	102.2(3)
B(2A)-B(5A)-H(5A)	130.7	B(4A)-B(8A)-B(9A)	59.1(3)
B(10A)-B(6A)-B(2A)	112.4(4)	B(10A)-B(8A)-B(7A)	57.3(3)
B(10A)-B(6A)-B(5A)	112.1(3)	B(3A)-B(8A)-B(7A)	59.4(3)
B(2A)-B(6A)-B(5A)	61.7(3)	B(4A)-B(8A)-B(7A)	102.6(3)
B(10A)-B(6A)-B(7A)	57.5(3)	B(9A)-B(8A)-B(7A)	90.6(3)
B(2A)-B(6A)-B(7A)	59.6(3)	B(10A)-B(8A)-H(8A)	118.2
B(5A)-B(6A)-B(7A)	102.9(3)	B(3A)-B(8A)-H(8A)	120.2
B(10A)-B(6A)-B(9A)	57.8(3)	B(4A)-B(8A)-H(8A)	120.0
B(2A)-B(6A)-B(9A)	103.6(3)	B(9A)-B(8A)-H(8A)	130.9
B(5A)-B(6A)-B(9A)	59.3(3)	B(7A)-B(8A)-H(8A)	130.8
B(7A)-B(6A)-B(9A)	92.0(3)	B(10A)-B(9A)-B(5A)	111.6(4)
B(10A)-B(6A)-H(6A)	118.4	B(10A)-B(9A)-B(4A)	110.8(4)
B(2A)-B(6A)-H(6A)	119.6	B(5A)-B(9A)-B(4A)	60.5(3)
B(5A)-B(6A)-H(6A)	120.1	B(10A)-B(9A)-B(6A)	56.9(3)
B(7A)-B(6A)-H(6A)	130.3	B(5A)-B(9A)-B(6A)	59.7(3)
B(9A)-B(6A)-H(6A)	130.0	B(4A)-B(9A)-B(6A)	101.5(4)
B(10A)-B(7A)-B(2A)	111.8(4)	B(10A)-B(9A)-B(8A)	55.9(3)
B(10A)-B(7A)-B(3A)	110.1(4)	B(5A)-B(9A)-B(8A)	101.2(4)
B(2A)-B(7A)-B(3A)	61.4(2)	B(4A)-B(9A)-B(8A)	59.4(3)
B(10A)-B(7A)-B(6A)	57.2(3)	B(6A)-B(9A)-B(8A)	88.6(3)
B(2A)-B(7A)-B(6A)	59.3(3)	B(10A)-B(9A)-H(9A)	119.2
B(3A)-B(7A)-B(6A)	101.0(3)	B(5A)-B(9A)-H(9A)	120.4
B(10A)-B(7A)-B(8A)	55.9(3)	B(4A)-B(9A)-H(9A)	120.7
B(2A)-B(7A)-B(8A)	101.8(3)	B(6A)-B(9A)-H(9A)	131.4
B(3A)-B(7A)-B(8A)	58.6(3)	B(8A)-B(9A)-H(9A)	132.1
B(6A)-B(7A)-B(8A)	88.7(3)	B(8A)-B(10A)-B(6A)	99.9(3)
B(10A)-B(7A)-H(7A)	119.3	B(8A)-B(10A)-B(7A)	66.7(4)
B(2A)-B(7A)-H(7A)	119.9	B(6A)-B(10A)-B(7A)	65.2(3)
B(3A)-B(7A)-H(7A)	121.1	B(8A)-B(10A)-B(9A)	66.4(3)

B(6A)-B(10A)-B(9A)	65.3(3)	B(8B)-B(3B)-B(4B)	59.3(2)
B(7A)-B(10A)-B(9A)	101.2(4)	C(1B)-B(3B)-B(2B)	55.1(2)
B(8A)-B(10A)-H(10A)	129.5	B(7B)-B(3B)-B(2B)	59.5(3)
B(6A)-B(10A)-H(10A)	130.7	B(8B)-B(3B)-B(2B)	101.7(3)
B(7A)-B(10A)-H(10A)	129.3	B(4B)-B(3B)-B(2B)	89.9(3)
B(9A)-B(10A)-H(10A)	129.5	C(1B)-B(3B)-H(3B)	121.7
N(3)-C(1B)-B(3B)	125.9(3)	B(7B)-B(3B)-H(3B)	120.7
N(3)-C(1B)-B(4B)	124.7(3)	B(8B)-B(3B)-H(3B)	121.0
B(3B)-C(1B)-B(4B)	70.1(2)	B(4B)-B(3B)-H(3B)	130.9
N(3)-C(1B)-B(2B)	127.1(3)	B(2B)-B(3B)-H(3B)	131.0
B(3B)-C(1B)-B(2B)	70.2(3)	C(1B)-B(4B)-B(9B)	108.0(3)
B(4B)-C(1B)-B(2B)	108.2(3)	C(1B)-B(4B)-B(8B)	108.5(3)
N(3)-C(1B)-B(5B)	125.6(3)	B(9B)-B(4B)-B(8B)	61.4(3)
B(3B)-C(1B)-B(5B)	108.5(3)	C(1B)-B(4B)-B(3B)	54.8(2)
B(4B)-C(1B)-B(5B)	69.9(3)	B(9B)-B(4B)-B(3B)	102.1(3)
B(2B)-C(1B)-B(5B)	69.6(3)	B(8B)-B(4B)-B(3B)	59.6(2)
C(1B)-B(2B)-B(6B)	108.7(3)	C(1B)-B(4B)-B(5B)	55.1(2)
C(1B)-B(2B)-B(7B)	107.8(3)	B(9B)-B(4B)-B(5B)	58.8(2)
B(6B)-B(2B)-B(7B)	61.5(3)	B(8B)-B(4B)-B(5B)	102.0(3)
C(1B)-B(2B)-B(5B)	55.3(2)	B(3B)-B(4B)-B(5B)	90.0(3)
B(6B)-B(2B)-B(5B)	59.6(3)	C(1B)-B(4B)-H(4B)	122.1
B(7B)-B(2B)-B(5B)	102.4(3)	B(9B)-B(4B)-H(4B)	121.0
C(1B)-B(2B)-B(3B)	54.7(2)	B(8B)-B(4B)-H(4B)	120.6
B(6B)-B(2B)-B(3B)	102.1(3)	B(3B)-B(4B)-H(4B)	130.8
B(7B)-B(2B)-B(3B)	58.9(3)	B(5B)-B(4B)-H(4B)	131.0
B(5B)-B(2B)-B(3B)	90.1(3)	C(1B)-B(5B)-B(9B)	108.2(3)
C(1B)-B(2B)-H(2B)	122.1	C(1B)-B(5B)-B(6B)	108.2(4)
B(6B)-B(2B)-H(2B)	120.5	B(9B)-B(5B)-B(6B)	61.1(3)
B(7B)-B(2B)-H(2B)	121.0	C(1B)-B(5B)-B(2B)	55.1(2)
B(5B)-B(2B)-H(2B)	130.5	B(9B)-B(5B)-B(2B)	102.0(3)
B(3B)-B(2B)-H(2B)	131.2	B(6B)-B(5B)-B(2B)	59.1(3)
C(1B)-B(3B)-B(7B)	108.8(3)	C(1B)-B(5B)-B(4B)	54.9(2)
C(1B)-B(3B)-B(8B)	108.5(3)	B(9B)-B(5B)-B(4B)	59.2(2)
B(7B)-B(3B)-B(8B)	60.9(2)	B(6B)-B(5B)-B(4B)	101.8(3)
C(1B)-B(3B)-B(4B)	55.1(2)	B(2B)-B(5B)-B(4B)	90.1(3)
B(7B)-B(3B)-B(4B)	102.1(3)	C(1B)-B(5B)-H(5B)	122.0

B(9B)-B(5B)-H(5B)	120.9	B(4B)-B(8B)-B(3B)	61.0(2)
B(6B)-B(5B)-H(5B)	121.1	B(10B)-B(8B)-B(7B)	57.1(3)
B(2B)-B(5B)-H(5B)	130.8	B(4B)-B(8B)-B(7B)	101.9(3)
B(4B)-B(5B)-H(5B)	130.9	B(3B)-B(8B)-B(7B)	58.9(2)
B(10B)-B(6B)-B(2B)	112.2(4)	B(10B)-B(8B)-B(9B)	58.0(3)
B(10B)-B(6B)-B(5B)	112.6(3)	B(4B)-B(8B)-B(9B)	58.8(2)
B(2B)-B(6B)-B(5B)	61.3(3)	B(3B)-B(8B)-B(9B)	101.3(3)
B(10B)-B(6B)-B(9B)	58.3(3)	B(7B)-B(8B)-B(9B)	90.1(3)
B(2B)-B(6B)-B(9B)	102.0(3)	B(10B)-B(8B)-H(8B)	118.3
B(5B)-B(6B)-B(9B)	58.8(3)	B(4B)-B(8B)-H(8B)	120.3
B(10B)-B(6B)-B(7B)	57.0(3)	B(3B)-B(8B)-H(8B)	120.8
B(2B)-B(6B)-B(7B)	59.5(3)	B(7B)-B(8B)-H(8B)	131.2
B(5B)-B(6B)-B(7B)	102.1(3)	B(9B)-B(8B)-H(8B)	131.2
B(9B)-B(6B)-B(7B)	90.1(3)	B(10B)-B(9B)-B(5B)	112.2(3)
B(10B)-B(6B)-H(6B)	118.0	B(10B)-B(9B)-B(4B)	111.9(3)
B(2B)-B(6B)-H(6B)	120.2	B(5B)-B(9B)-B(4B)	62.0(2)
B(5B)-B(6B)-H(6B)	120.2	B(10B)-B(9B)-B(6B)	56.7(3)
B(9B)-B(6B)-H(6B)	131.1	B(5B)-B(9B)-B(6B)	60.0(3)
B(7B)-B(6B)-H(6B)	131.3	B(4B)-B(9B)-B(6B)	103.0(3)
B(10B)-B(7B)-B(3B)	112.8(3)	B(10B)-B(9B)-B(8B)	56.7(3)
B(10B)-B(7B)-B(2B)	111.6(4)	B(5B)-B(9B)-B(8B)	103.2(3)
B(3B)-B(7B)-B(2B)	61.7(3)	B(4B)-B(9B)-B(8B)	59.8(2)
B(10B)-B(7B)-B(8B)	57.3(3)	B(6B)-B(9B)-B(8B)	90.0(3)
B(3B)-B(7B)-B(8B)	60.2(2)	B(10B)-B(9B)-H(9B)	119.0
B(2B)-B(7B)-B(8B)	102.8(3)	B(5B)-B(9B)-H(9B)	119.3
B(10B)-B(7B)-B(6B)	56.8(3)	B(4B)-B(9B)-H(9B)	119.6
B(3B)-B(7B)-B(6B)	102.4(3)	B(6B)-B(9B)-H(9B)	131.0
B(2B)-B(7B)-B(6B)	59.0(3)	B(8B)-B(9B)-H(9B)	131.0
B(8B)-B(7B)-B(6B)	89.8(3)	B(6B)-B(10B)-B(7B)	66.2(3)
B(10B)-B(7B)-H(7B)	118.6	B(6B)-B(10B)-B(8B)	100.4(3)
B(3B)-B(7B)-H(7B)	119.4	B(7B)-B(10B)-B(8B)	65.6(3)
B(2B)-B(7B)-H(7B)	120.1	B(6B)-B(10B)-B(9B)	65.0(3)
B(8B)-B(7B)-H(7B)	130.7	B(7B)-B(10B)-B(9B)	99.5(3)
B(6B)-B(7B)-H(7B)	131.6	B(8B)-B(10B)-B(9B)	65.4(3)
B(10B)-B(8B)-B(4B)	112.2(3)	B(6B)-B(10B)-H(10B)	129.7
B(10B)-B(8B)-B(3B)	111.5(3)	B(7B)-B(10B)-H(10B)	129.9

B(8B)-B(10B)-H(10B)	129.9	C(6T)-C(5T)-H(5D)	110.4
B(9B)-B(10B)-H(10B)	130.6	H(5C)-C(5T)-H(5D)	108.6
C(1T)-O(1T)-C(4T)	108.5(5)	C(7T)-C(6T)-C(5T)	104.6(6)
C(1T)-O(1T)-K(1)	117.9(4)	C(7T)-C(6T)-H(6C)	110.8
C(4T)-O(1T)-K(1)	109.7(4)	C(5T)-C(6T)-H(6C)	110.8
O(1T)-C(1T)-C(2T)	108.0(5)	C(7T)-C(6T)-H(6D)	110.8
O(1T)-C(1T)-H(1A)	110.1	C(5T)-C(6T)-H(6D)	110.8
C(2T)-C(1T)-H(1A)	110.1	H(6C)-C(6T)-H(6D)	108.9
O(1T)-C(1T)-H(1B)	110.1	C(6T)-C(7T)-C(8T)	102.9(8)
C(2T)-C(1T)-H(1B)	110.1	C(6T)-C(7T)-H(7C)	111.2
H(1A)-C(1T)-H(1B)	108.4	C(8T)-C(7T)-H(7C)	111.2
C(3T)-C(2T)-C(1T)	106.0(5)	C(6T)-C(7T)-H(7D)	111.2
C(3T)-C(2T)-H(2C)	110.5	C(8T)-C(7T)-H(7D)	111.2
C(1T)-C(2T)-H(2C)	110.5	H(7C)-C(7T)-H(7D)	109.1
C(3T)-C(2T)-H(2D)	110.5	O(2T)-C(8T)-C(7T)	106.1(7)
C(1T)-C(2T)-H(2D)	110.5	O(2T)-C(8T)-H(8C)	110.5
H(2C)-C(2T)-H(2D)	108.7	C(7T)-C(8T)-H(8C)	110.5
C(4T)-C(3T)-C(2T)	106.7(5)	O(2T)-C(8T)-H(8D)	110.5
C(4T)-C(3T)-H(3C)	110.4	C(7T)-C(8T)-H(8D)	110.5
C(2T)-C(3T)-H(3C)	110.4	H(8C)-C(8T)-H(8D)	108.7
C(4T)-C(3T)-H(3D)	110.4	C(9T)-O(3T)-C(12T)	108.1(7)
C(2T)-C(3T)-H(3D)	110.4	C(9T)-O(3T)-K(1)	130.8(6)
H(3C)-C(3T)-H(3D)	108.6	C(12T)-O(3T)-K(1)	116.9(10)
O(1T)-C(4T)-C(3T)	107.2(5)	O(3T)-C(9T)-C(10T)	107.1(7)
O(1T)-C(4T)-H(4C)	110.3	O(3T)-C(9T)-H(9C)	110.3
C(3T)-C(4T)-H(4C)	110.3	C(10T)-C(9T)-H(9C)	110.3
O(1T)-C(4T)-H(4D)	110.3	O(3T)-C(9T)-H(9D)	110.3
C(3T)-C(4T)-H(4D)	110.3	C(10T)-C(9T)-H(9D)	110.3
H(4C)-C(4T)-H(4D)	108.5	H(9C)-C(9T)-H(9D)	108.6
C(8T)-O(2T)-C(5T)	107.1(6)	C(9T)-C(10T)-C(11T)	105.0(7)
C(8T)-O(2T)-K(1)	118.0(5)	C(9T)-C(10T)-H(10C)	110.8
C(5T)-O(2T)-K(1)	134.9(4)	C(11T)-C(10T)-H(10C)	110.8
O(2T)-C(5T)-C(6T)	106.8(6)	C(9T)-C(10T)-H(10D)	110.8
O(2T)-C(5T)-H(5C)	110.4	C(11T)-C(10T)-H(10D)	110.8
C(6T)-C(5T)-H(5C)	110.4	H(10C)-C(10T)-H(10D)	108.8
O(2T)-C(5T)-H(5D)	110.4	C(10T)-C(11T)-C(12T)	105.4(7)



C(10T)-C(11T)-H(11A)	110.7	C(11U)-C(12U)-H(12D)	110.7
C(12T)-C(11T)-H(11A)	110.7	H(12C)-C(12U)-H(12D)	108.8
C(10T)-C(11T)-H(11B)	110.7	C(16T)-O(4T)-C(13T)	105.8(6)
C(12T)-C(11T)-H(11B)	110.7	C(16T)-O(4T)-K(1)	123.0(5)
H(11A)-C(11T)-H(11B)	108.8	C(13T)-O(4T)-K(1)	129.7(7)
O(3T)-C(12T)-C(11T)	106.2(7)	O(4T)-C(13T)-C(14T)	105.0(7)
O(3T)-C(12T)-H(12A)	110.5	O(4T)-C(13T)-H(13A)	110.7
C(11T)-C(12T)-H(12A)	110.5	C(14T)-C(13T)-H(13A)	110.7
O(3T)-C(12T)-H(12B)	110.5	O(4T)-C(13T)-H(13B)	110.7
C(11T)-C(12T)-H(12B)	110.5	C(14T)-C(13T)-H(13B)	110.7
H(12A)-C(12T)-H(12B)	108.7	H(13A)-C(13T)-H(13B)	108.8
C(12U)-O(3U)-C(9U)	110.6(7)	C(15T)-C(14T)-C(13T)	103.6(6)
C(12U)-O(3U)-K(1)	109.6(8)	C(15T)-C(14T)-H(14A)	111.0
C(9U)-O(3U)-K(1)	139.8(8)	C(13T)-C(14T)-H(14A)	111.0
O(3U)-C(9U)-C(10U)	106.3(8)	C(15T)-C(14T)-H(14B)	111.0
O(3U)-C(9U)-H(9E)	110.5	C(13T)-C(14T)-H(14B)	111.0
C(10U)-C(9U)-H(9E)	110.5	H(14A)-C(14T)-H(14B)	109.0
O(3U)-C(9U)-H(9F)	110.5	C(16T)-C(15T)-C(14T)	106.1(6)
C(10U)-C(9U)-H(9F)	110.5	C(16T)-C(15T)-H(15A)	110.5
H(9E)-C(9U)-H(9F)	108.7	C(14T)-C(15T)-H(15A)	110.5
C(9U)-C(10U)-C(11U)	101.4(8)	C(16T)-C(15T)-H(15B)	110.5
C(9U)-C(10U)-H(10E)	111.5	C(14T)-C(15T)-H(15B)	110.5
C(11U)-C(10U)-H(10E)	111.5	H(15A)-C(15T)-H(15B)	108.7
C(9U)-C(10U)-H(10F)	111.5	O(4T)-C(16T)-C(15T)	107.4(7)
C(11U)-C(10U)-H(10F)	111.5	O(4T)-C(16T)-H(16A)	110.2
H(10E)-C(10U)-H(10F)	109.3	C(15T)-C(16T)-H(16A)	110.2
C(12U)-C(11U)-C(10U)	103.3(8)	O(4T)-C(16T)-H(16B)	110.2
C(12U)-C(11U)-H(11C)	111.1	C(15T)-C(16T)-H(16B)	110.2
C(10U)-C(11U)-H(11C)	111.1	H(16A)-C(16T)-H(16B)	108.5
C(12U)-C(11U)-H(11D)	111.1	C(13U)-O(4U)-C(16U)	111.4(8)
C(10U)-C(11U)-H(11D)	111.1	C(13U)-O(4U)-K(1)	129.2(14)
H(11C)-C(11U)-H(11D)	109.1	C(16U)-O(4U)-K(1)	111.7(15)
O(3U)-C(12U)-C(11U)	105.2(8)	O(4U)-C(13U)-C(14U)	104.1(9)
O(3U)-C(12U)-H(12C)	110.7	O(4U)-C(13U)-H(13C)	110.9
C(11U)-C(12U)-H(12C)	110.7	C(14U)-C(13U)-H(13C)	110.9
O(3U)-C(12U)-H(12D)	110.7	O(4U)-C(13U)-H(13D)	110.9

C(14U)-C(13U)-H(13D)	110.9	B(6A)#1-K(2)-C(29T)#1	79.95(17)
H(13C)-C(13U)-H(13D)	109.0	O(8U)-K(2)-B(7A)#1	128.4(2)
C(13U)-C(14U)-C(15U)	98.9(10)	O(7U)-K(2)-B(7A)#1	90.2(5)
C(13U)-C(14U)-H(14C)	112.0	O(8T)-K(2)-B(7A)#1	125.16(19)
C(15U)-C(14U)-H(14C)	112.0	O(7T)-K(2)-B(7A)#1	82.4(2)
C(13U)-C(14U)-H(14D)	112.0	O(9T)-K(2)-B(7A)#1	109.0(5)
C(15U)-C(14U)-H(14D)	112.0	B(10A)#1-K(2)-B(7A)#1	29.24(15)
H(14C)-C(14U)-H(14D)	109.7	B(6A)#1-K(2)-B(7A)#1	31.53(12)
C(14U)-C(15U)-C(16U)	98.7(10)	C(29T)#1-K(2)-B(7A)#1	109.46(16)
C(14U)-C(15U)-H(15C)	112.0	C(17T)-O(5T)-C(20T)	105.3(10)
C(16U)-C(15U)-H(15C)	112.0	C(17T)-O(5T)-K(3)	134.7(11)
C(14U)-C(15U)-H(15D)	112.0	C(20T)-O(5T)-K(3)	118.9(10)
C(16U)-C(15U)-H(15D)	112.0	O(5T)-C(17T)-C(18T)	106.6(9)
H(15C)-C(15U)-H(15D)	109.7	O(5T)-C(17T)-H(17A)	110.4
O(4U)-C(16U)-C(15U)	103.6(9)	C(18T)-C(17T)-H(17A)	110.4
O(4U)-C(16U)-H(16C)	111.0	O(5T)-C(17T)-H(17B)	110.4
C(15U)-C(16U)-H(16C)	111.0	C(18T)-C(17T)-H(17B)	110.4
O(4U)-C(16U)-H(16D)	111.0	H(17A)-C(17T)-H(17B)	108.6
C(15U)-C(16U)-H(16D)	111.0	C(19T)-C(18T)-C(17T)	105.7(7)
H(16C)-C(16U)-H(16D)	109.0	C(19T)-C(18T)-H(18A)	110.6
O(8U)-K(2)-O(7U)	73.4(11)	C(17T)-C(18T)-H(18A)	110.6
O(8T)-K(2)-O(7T)	74.5(5)	C(19T)-C(18T)-H(18B)	110.6
O(8U)-K(2)-B(10A)#1	123.5(3)	C(17T)-C(18T)-H(18B)	110.6
O(7U)-K(2)-B(10A)#1	117.5(4)	H(18A)-C(18T)-H(18B)	108.7
O(8T)-K(2)-B(10A)#1	127.01(16)	C(18T)-C(19T)-C(20T)	104.5(8)
O(7T)-K(2)-B(10A)#1	111.12(19)	C(18T)-C(19T)-H(19A)	110.9
O(9T)-K(2)-B(10A)#1	80.3(5)	C(20T)-C(19T)-H(19A)	110.9
O(8U)-K(2)-B(6A)#1	99.79(9)	C(18T)-C(19T)-H(19B)	110.9
O(7U)-K(2)-B(6A)#1	93.97(15)	C(20T)-C(19T)-H(19B)	110.9
O(8T)-K(2)-B(6A)#1	99.85(8)	H(19A)-C(19T)-H(19B)	108.9
O(7T)-K(2)-B(6A)#1	91.99(11)	O(5T)-C(20T)-C(19T)	104.1(10)
O(9T)-K(2)-B(6A)#1	88.5(6)	O(5T)-C(20T)-H(20A)	110.9
B(10A)#1-K(2)-B(6A)#1	30.64(11)	C(19T)-C(20T)-H(20A)	110.9
O(8T)-K(2)-C(29T)#1	23.7(4)	O(5T)-C(20T)-H(20B)	110.9
O(7T)-K(2)-C(29T)#1	87.9(6)	C(19T)-C(20T)-H(20B)	110.9
B(10A)#1-K(2)-C(29T)#1	1104.2(3)	H(20A)-C(20T)-H(20B)	108.9

C(17U)-O(5U)-C(20U)	114.1(9)	C(21T)-C(22T)-C(23T)	102.3(9)
C(17U)-O(5U)-K(3)	130.2(9)	C(21T)-C(22T)-H(22A)	111.3
C(20U)-O(5U)-K(3)	115.5(7)	C(23T)-C(22T)-H(22A)	111.3
O(5U)-C(17U)-C(18U)	107.5(10)	C(21T)-C(22T)-H(22B)	111.3
O(5U)-C(17U)-H(17C)	110.2	C(23T)-C(22T)-H(22B)	111.3
C(18U)-C(17U)-H(17C)	110.2	H(22A)-C(22T)-H(22B)	109.2
O(5U)-C(17U)-H(17D)	110.2	C(24T)-C(23T)-C(22T)	103.9(8)
C(18U)-C(17U)-H(17D)	110.2	C(24T)-C(23T)-H(23A)	111.0
H(17C)-C(17U)-H(17D)	108.5	C(22T)-C(23T)-H(23A)	111.0
C(19U)-C(18U)-C(17U)	104.8(7)	C(24T)-C(23T)-H(23B)	111.0
C(19U)-C(18U)-H(18C)	110.8	C(22T)-C(23T)-H(23B)	111.0
C(17U)-C(18U)-H(18C)	110.8	H(23A)-C(23T)-H(23B)	109.0
C(19U)-C(18U)-H(18D)	110.8	O(6T)-C(24T)-C(23T)	106.5(8)
C(17U)-C(18U)-H(18D)	110.8	O(6T)-C(24T)-H(24A)	110.4
H(18C)-C(18U)-H(18D)	108.9	C(23T)-C(24T)-H(24A)	110.4
C(18U)-C(19U)-C(20U)	105.8(7)	O(6T)-C(24T)-H(24B)	110.4
C(18U)-C(19U)-H(19C)	110.6	C(23T)-C(24T)-H(24B)	110.4
C(20U)-C(19U)-H(19C)	110.6	H(24A)-C(24T)-H(24B)	108.6
C(18U)-C(19U)-H(19D)	110.6	O(5T)#2-K(3)-O(5T)	145.8(11)
C(20U)-C(19U)-H(19D)	110.6	O(5U)-K(3)-O(5U)#2	162.2(11)
H(19C)-C(19U)-H(19D)	108.7	O(5T)#2-K(3)-B(10B)#2	115.7(3)
O(5U)-C(20U)-C(19U)	103.8(8)	O(5T)-K(3)-B(10B)#2	84.3(5)
O(5U)-C(20U)-H(20C)	111.0	O(5U)-K(3)-B(10B)#2	78.6(5)
C(19U)-C(20U)-H(20C)	111.0	O(5U)#2-K(3)-B(10B)#2	111.9(3)
O(5U)-C(20U)-H(20D)	111.0	O(6T)-K(3)-B(10B)#2	130.7(4)
C(19U)-C(20U)-H(20D)	111.0	O(5T)#2-K(3)-B(9B)#2	93.6(3)
H(20C)-C(20U)-H(20D)	109.0	O(5T)-K(3)-B(9B)#2	91.7(4)
C(24T)-O(6T)-C(21T)	110.2(7)	O(5U)-K(3)-B(9B)#2	89.7(3)
C(24T)-O(6T)-K(3)	132.0(10)	O(5U)#2-K(3)-B(9B)#2	93.0(3)
C(21T)-O(6T)-K(3)	110.2(9)	O(6T)-K(3)-B(9B)#2	103.5(3)
O(6T)-C(21T)-C(22T)	106.7(8)	B(10B)#2-K(3)-B(9B)#2	30.96(12)
O(6T)-C(21T)-H(21A)	110.4	O(5T)#2-K(3)-B(8B)#2	87.7(3)
C(22T)-C(21T)-H(21A)	110.4	O(5T)-K(3)-B(8B)#2	113.0(5)
O(6T)-C(21T)-H(21B)	110.4	O(5U)-K(3)-B(8B)#2	107.8(4)
C(22T)-C(21T)-H(21B)	110.4	O(5U)#2-K(3)-B(8B)#2	83.1(4)
H(21A)-C(21T)-H(21B)	108.6	O(6T)-K(3)-B(8B)#2	129.1(4)

B(10B)#2-K(3)-B(8B)#2	29.26(12)	O(8T)-C(29T)-H(29A)	110.5
B(9B)#2-K(3)-B(8B)#2	31.77(11)	C(30T)-C(29T)-H(29A)	110.5
C(25T)#1-O(7T)-C(25T)	109.9(7)	O(8T)-C(29T)-H(29B)	110.4
C(25T)#1-O(7T)-K(2)	121.2(6)	C(30T)-C(29T)-H(29B)	110.5
C(25T)-O(7T)-K(2)	121.2(6)	H(29A)-C(29T)-H(29B)	108.6
O(7T)-C(25T)-C(26T)	106.3(5)	C(30T)#1-C(30T)-C(29T)	106.4(4)
O(7T)-C(25T)-H(25A)	110.5	C(30T)#1-C(30T)-H(30A)	110.4
C(26T)-C(25T)-H(25A)	110.5	C(29T)-C(30T)-H(30A)	110.4
O(7T)-C(25T)-H(25B)	110.5	C(30T)#1-C(30T)-H(30B)	110.4
C(26T)-C(25T)-H(25B)	110.5	C(29T)-C(30T)-H(30B)	110.4
H(25A)-C(25T)-H(25B)	108.7	H(30A)-C(30T)-H(30B)	108.6
C(26T)#1-C(26T)-C(25T)	106.1(3)	C(29U)#1-O(8U)-C(29U)	105.6(12)
C(26T)#1-C(26T)-H(26A)	110.5	C(29U)#1-O(8U)-K(2)	124.6(7)
C(25T)-C(26T)-H(26A)	110.5	C(29U)-O(8U)-K(2)	124.6(7)
C(26T)#1-C(26T)-H(26B)	110.5	O(8U)-C(29U)-C(30U)	105.1(8)
C(25T)-C(26T)-H(26B)	110.5	O(8U)-C(29U)-H(29C)	110.7
H(26A)-C(26T)-H(26B)	108.7	C(30U)-C(29U)-H(29C)	110.7
C(25U)#1-O(7U)-C(25U)	106.6(12)	O(8U)-C(29U)-H(29D)	110.7
C(25U)#1-O(7U)-K(2)	125.7(5)	C(30U)-C(29U)-H(29D)	110.7
C(25U)-O(7U)-K(2)	125.7(5)	H(29C)-C(29U)-H(29D)	108.8
O(7U)-C(25U)-C(26U)	104.7(8)	C(30U)#1-C(30U)-C(29U)	105.8(4)
O(7U)-C(25U)-H(25C)	110.8	C(30U)#1-C(30U)-H(30C)	110.6
C(26U)-C(25U)-H(25C)	110.8	C(29U)-C(30U)-H(30C)	110.6
O(7U)-C(25U)-H(25D)	110.8	C(30U)#1-C(30U)-H(30D)	110.6
C(26U)-C(25U)-H(25D)	110.8	C(29U)-C(30U)-H(30D)	110.6
H(25C)-C(25U)-H(25D)	108.9	H(30C)-C(30U)-H(30D)	108.7
C(26U)#1-C(26U)-C(25U)	105.5(4)	C(36T)-O(9T)-C(33T)	108.4(7)
C(26U)#1-C(26U)-H(26C)	110.6	C(36T)-O(9T)-K(2)	131.4(14)
C(25U)-C(26U)-H(26C)	110.6	C(33T)-O(9T)-K(2)	114.3(14)
C(26U)#1-C(26U)-H(26D)	110.6	O(9T)-C(33T)-C(34T)	103.3(9)
C(25U)-C(26U)-H(26D)	110.6	O(9T)-C(33T)-H(33A)	111.1
H(26C)-C(26U)-H(26D)	108.8	C(34T)-C(33T)-H(33A)	111.1
C(29T)#1-O(8T)-C(29T)	107.2(11)	O(9T)-C(33T)-H(33B)	111.1
C(29T)#1-O(8T)-K(2)	107.5(13)	C(34T)-C(33T)-H(33B)	111.1
C(29T)-O(8T)-K(2)	107.5(13)	H(33A)-C(33T)-H(33B)	109.1
O(8T)-C(29T)-C(30T)	106.4(7)	C(33T)-C(34T)-C(35T)	101.5(10)

C(33T)-C(34T)-H(34A)	111.5	C(34T)-C(35T)-H(35B)	110.8
C(35T)-C(34T)-H(34A)	111.5	H(35A)-C(35T)-H(35B)	108.8
C(33T)-C(34T)-H(34B)	111.5	O(9T)-C(36T)-C(35T)	106.9(8)
C(35T)-C(34T)-H(34B)	111.5	O(9T)-C(36T)-H(36A)	110.4
H(34A)-C(34T)-H(34B)	109.3	C(35T)-C(36T)-H(36A)	110.4
C(36T)-C(35T)-C(34T)	104.9(8)	O(9T)-C(36T)-H(36B)	110.4
C(36T)-C(35T)-H(35A)	110.8	C(35T)-C(36T)-H(36B)	110.4
C(34T)-C(35T)-H(35A)	110.8	H(36A)-C(36T)-H(36B)	108.6
C(36T)-C(35T)-H(35B)	110.8		

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

**Table S4.** Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for Ama2. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2p^2[ h^2 a^*2U11 + \dots + 2 h k a^* b^* U12 ]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
K(1)	58(1)	68(1)	74(1)	-20(1)	2(1)	2(1)
N(1)	42(1)	48(1)	69(2)	-13(1)	-4(1)	2(1)
C(2)	41(2)	47(2)	71(2)	-14(2)	-8(2)	1(1)
N(3)	43(2)	50(2)	63(2)	-11(1)	-4(1)	-4(1)
C(4)	55(2)	79(3)	65(3)	-13(2)	1(2)	3(2)
C(5)	54(2)	76(2)	67(2)	-15(2)	5(2)	10(2)
C(1A)	38(2)	42(2)	76(2)	-9(2)	-2(2)	0(1)
B(2A)	44(2)	47(2)	78(3)	1(2)	-3(2)	-4(2)
B(3A)	53(2)	51(2)	87(3)	-20(2)	-6(2)	7(2)
B(4A)	53(2)	54(2)	94(3)	9(2)	-8(2)	-8(2)
B(5A)	44(2)	60(2)	79(3)	-9(2)	-2(2)	6(2)
B(6A)	46(2)	48(2)	90(3)	-5(2)	-12(2)	3(2)
B(7A)	43(2)	57(2)	93(3)	-4(2)	2(2)	8(2)
B(8A)	59(3)	47(2)	108(4)	5(2)	-12(3)	1(2)
B(9A)	55(2)	82(3)	81(3)	8(3)	-6(2)	5(2)
B(10A)	50(2)	57(2)	105(4)	10(2)	-11(2)	8(2)
C(1B)	40(2)	50(2)	57(2)	-8(1)	-6(1)	-5(1)
B(2B)	49(2)	50(2)	81(3)	-16(2)	-17(2)	0(2)
B(3B)	56(2)	58(2)	50(2)	-9(2)	-5(2)	1(2)
B(4B)	40(2)	57(2)	54(2)	-11(2)	4(2)	-10(2)
B(5B)	39(2)	66(2)	80(3)	12(2)	-5(2)	-3(2)
B(6B)	49(2)	56(2)	97(3)	0(2)	-14(2)	2(2)
B(7B)	58(2)	64(2)	64(3)	-18(2)	-8(2)	9(2)
B(8B)	45(2)	62(2)	56(2)	-12(2)	5(2)	-6(2)
B(9B)	38(2)	79(3)	58(2)	-5(2)	-6(2)	-3(2)
B(10B)	45(2)	74(3)	69(3)	-17(2)	-5(2)	7(2)
O(1T)	88(2)	89(2)	106(3)	-11(2)	17(2)	-5(2)
C(1T)	90(4)	125(4)	75(3)	-19(3)	12(3)	-4(3)
C(2T)	115(5)	124(6)	214(10)	-37(7)	40(7)	-40(5)
C(3T)	145(7)	95(5)	276(14)	-23(7)	0(9)	-28(4)
C(4T)	95(4)	95(4)	145(6)	-7(4)	19(4)	3(3)

O(2T)	125(4)	89(3)	133(4)	-22(3)	39(3)	30(2)
C(5T)	92(4)	130(5)	143(6)	-41(5)	-5(4)	-4(4)
C(6T)	103(4)	101(4)	122(5)	-11(4)	30(4)	10(3)
C(7T)	123(6)	76(4)	234(10)	-52(5)	22(6)	-2(4)
C(8T)	171(9)	94(5)	267(13)	9(6)	127(9)	11(5)
O(3T)	76(4)	121(6)	68(4)	-18(4)	-5(3)	-16(4)
C(9T)	78(5)	101(6)	91(6)	-32(5)	-4(4)	-15(5)
C(10T)	128(8)	194(11)	134(8)	38(8)	-10(7)	-16(8)
C(11T)	128(8)	194(11)	134(8)	38(8)	-10(7)	-16(8)
C(12T)	130(9)	205(16)	112(10)	44(12)	19(8)	-7(11)
O(3U)	105(9)	164(14)	98(9)	-41(9)	-12(7)	7(9)
C(9U)	106(11)	164(14)	132(13)	-32(10)	4(9)	14(9)
C(10U)	92(9)	132(12)	140(13)	24(10)	-18(9)	-43(8)
C(11U)	139(11)	92(9)	72(7)	4(6)	-15(7)	-43(8)
C(12U)	99(10)	152(15)	82(10)	-6(10)	4(7)	12(9)
O(4T)	96(4)	89(4)	138(7)	-30(5)	37(5)	-23(3)
C(13T)	133(8)	116(7)	170(9)	-13(7)	-7(7)	-28(6)
C(14T)	127(8)	187(12)	124(8)	31(8)	8(6)	-58(8)
C(15T)	109(5)	106(5)	163(6)	14(5)	43(5)	-11(4)
C(16T)	109(5)	106(5)	163(6)	14(5)	43(5)	-11(4)
O(4U)	127(12)	101(14)	117(14)	5(11)	1(11)	-33(11)
C(13U)	118(12)	83(12)	138(15)	1(11)	-15(13)	-37(11)
C(14U)	109(14)	140(20)	119(18)	-42(15)	25(14)	-9(14)
C(15U)	154(18)	148(18)	161(19)	45(15)	12(17)	-23(13)
C(16U)	117(13)	150(20)	124(18)	0(16)	-10(13)	-26(15)
K(2)	47(1)	67(1)	114(1)	4(1)	0	0
O(5T)	120(11)	86(7)	131(12)	-14(7)	-6(8)	6(6)
C(17T)	95(9)	126(10)	220(20)	-67(13)	10(12)	17(7)
C(18T)	118(11)	96(8)	162(16)	-46(9)	-8(11)	41(8)
C(19T)	125(11)	109(11)	162(16)	-22(11)	-14(12)	-2(9)
C(20T)	151(13)	94(9)	131(15)	-44(8)	-36(10)	19(9)
O(5U)	83(6)	77(5)	173(14)	-45(6)	-20(6)	12(4)
C(17U)	77(7)	114(8)	149(12)	-59(8)	-13(7)	19(6)
C(18U)	122(11)	117(11)	240(20)	-89(12)	-13(13)	34(9)
C(19U)	141(12)	80(7)	160(14)	-41(8)	-48(11)	18(7)
C(20U)	112(9)	97(9)	157(16)	-52(9)	-51(10)	18(7)

O(6T)	95(9)	179(18)	79(4)	-11(6)	2(5)	12(10)
C(21T)	109(9)	211(12)	84(7)	1(6)	-7(5)	25(8)
C(22T)	110(9)	179(15)	79(7)	-5(8)	19(7)	1(9)
C(23T)	102(10)	200(20)	95(6)	-11(12)	0(8)	-11(13)
C(24T)	109(9)	211(12)	84(7)	1(6)	-7(5)	25(8)
K(3)	40(1)	72(1)	76(1)	0	0	-4(1)
O(7T)	84(4)	58(5)	140(6)	24(5)	0	0
C(25T)	77(5)	97(7)	145(8)	11(6)	-7(5)	6(4)
C(26T)	128(8)	88(6)	160(12)	38(7)	2(8)	26(5)
O(7U)	84(4)	58(5)	140(6)	24(5)	0	0
C(25U)	98(14)	88(16)	185(19)	36(15)	-5(14)	10(11)
C(26U)	108(15)	97(17)	155(17)	12(14)	-18(14)	21(12)
O(8T)	138(13)	105(9)	130(12)	-27(9)	0	0
C(29T)	167(16)	133(16)	251(19)	-60(15)	35(13)	29(11)
C(30T)	221(19)	106(14)	250(20)	-70(16)	63(16)	49(11)
O(8U)	117(14)	115(12)	199(15)	-67(13)	0	0
C(29U)	143(14)	73(10)	290(20)	-35(12)	-9(15)	17(8)
C(30U)	270(30)	112(16)	230(20)	-47(16)	95(18)	-5(14)
O(9T)	189(17)	169(8)	102(5)	-5(6)	36(13)	30(14)
C(33T)	233(15)	171(19)	94(12)	9(12)	50(13)	-32(15)
C(34T)	320(20)	220(20)	82(12)	62(12)	-54(13)	-90(20)
C(35T)	290(30)	260(20)	113(14)	55(14)	1(17)	-50(20)
C(36T)	272(15)	180(20)	83(10)	24(13)	18(13)	17(17)

---



**Table S5.** Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for Ama2.

	x	y	z	U(eq)
H(4)	1143	-695	363	79
H(5)	1509	-1195	1042	79
H(2A)	1879	-93	2914	67
H(3A)	1795	-1926	2355	77
H(4A)	1499	-2035	5150	80
H(5A)	1578	-229	5696	73
H(6A)	2062	-80	5658	74
H(7A)	2216	-1261	3256	77
H(8A)	1948	-2647	4847	86
H(9A)	1795	-1434	7253	87
H(10A)	2248	-1599	6181	85
H(2B)	955	1091	3712	72
H(3B)	749	-599	4443	65
H(4B)	693	-958	1174	60
H(5B)	902	726	454	74
H(6B)	617	1777	1983	81
H(7B)	511	824	4812	74
H(8B)	322	-598	2984	65
H(9B)	439	335	166	70
H(10B)	202	998	2537	75
H(1A)	731	-449	6999	116
H(1B)	745	-542	8614	116
H(2C)	673	-1723	8368	181
H(2D)	686	-1646	6748	181
H(3C)	1006	-2142	8498	207
H(3D)	988	-2286	6895	207
H(4C)	1268	-1382	7959	134
H(4D)	1185	-1313	6418	134
H(5C)	699	1171	8243	146
H(5D)	610	1633	6954	146
H(6C)	605	2679	8112	131

H(6D)	673	2201	9437	131
H(7C)	1022	2472	9213	173
H(7D)	929	3189	8376	173
H(8C)	974	2611	6376	213
H(8D)	1182	2284	7192	213
H(9C)	1762	1609	7845	108
H(9D)	1775	906	6818	108
H(10C)	1964	864	9142	183
H(10D)	1874	104	8431	183
H(11A)	1701	837	10674	183
H(11B)	1648	-9	10161	183
H(12A)	1331	415	9319	179
H(12B)	1396	1273	9698	179
H(9E)	1774	88	7839	161
H(9F)	1629	-342	8960	161
H(10E)	1868	1033	9291	146
H(10F)	1841	355	10375	146
H(11C)	1486	714	10915	122
H(11D)	1596	1532	10664	122
H(12C)	1259	1123	9239	133
H(12D)	1446	1645	8567	133
H(13A)	1544	2214	6087	168
H(13B)	1459	2687	4798	168
H(14A)	1819	2683	4255	175
H(14B)	1865	1911	5075	175
H(15A)	1745	2046	2377	151
H(15B)	1829	1293	3134	151
H(16A)	1402	1721	2606	151
H(16B)	1490	896	3019	151
H(13C)	1760	1079	5588	136
H(13D)	1751	1952	6060	136
H(14C)	1780	1414	3285	149
H(14D)	1931	2064	3970	149
H(15C)	1599	2568	2656	185
H(15D)	1621	2897	4179	185
H(16C)	1274	2304	4262	156

H(16D)	1356	1607	3341	156
H(17A)	346	-1797	844	175
H(17B)	342	-1996	-744	175
H(18A)	208	-3115	-180	150
H(18B)	166	-2847	1354	150
H(19A)	-182	-2587	929	159
H(19B)	-150	-3028	-484	159
H(20A)	-88	-1941	-1655	151
H(20B)	-248	-1607	-505	151
H(17C)	250	-1995	1504	136
H(17D)	377	-1624	243	136
H(18C)	312	-2626	-1077	194
H(18D)	260	-3067	312	194
H(19C)	-93	-3087	-160	152
H(19D)	-35	-2749	-1630	152
H(20C)	-185	-1664	-1020	146
H(20D)	-227	-1984	485	146
H(21A)	298	-473	-1857	161
H(21B)	336	293	-2706	161
H(22A)	151	-1085	-3642	147
H(22B)	308	-509	-4465	147
H(23A)	25	311	-4913	160
H(23B)	-112	-469	-4894	160
H(24A)	-204	630	-3222	161
H(24B)	-252	-239	-2834	161
H(25A)	2194	829	3268	128
H(25B)	2253	592	1739	128
H(26A)	2322	1808	1379	150
H(26B)	2322	1992	2973	150
H(25C)	2274	1543	3477	148
H(25D)	2182	765	2840	148
H(26C)	2320	1025	787	144
H(26D)	2320	1888	1310	144
H(29A)	2258	836	7351	221
H(29B)	2189	1528	6383	221
H(30A)	2322	2377	7795	232

H(30B)	2322	1707	8898	232
H(29C)	2182	1289	7027	202
H(29D)	2274	1771	5763	202
H(30C)	2321	2684	7292	246
H(30D)	2321	2096	8535	246
H(33A)	2197	-503	8220	199
H(33B)	2301	-93	9528	199
H(34A)	2295	-1697	8988	252
H(34B)	2227	-1287	10386	252
H(35A)	2583	-1062	10981	264
H(35B)	2623	-1818	10104	264
H(36A)	2785	-456	9482	215
H(36B)	2784	-1173	8481	215

---

**Table S6.** Torsion angles [°] for Ama2.

---

C(5)-N(1)-C(2)-N(3)	1.1(4)
C(1A)-N(1)-C(2)-N(3)	178.6(3)
C(5)-N(1)-C(2)-K(1)	-158.1(3)
C(1A)-N(1)-C(2)-K(1)	19.4(5)
N(1)-C(2)-N(3)-C(4)	-0.9(4)
K(1)-C(2)-N(3)-C(4)	161.1(3)
N(1)-C(2)-N(3)-C(1B)	178.2(3)
K(1)-C(2)-N(3)-C(1B)	-19.8(5)
C(2)-N(3)-C(4)-C(5)	0.5(5)
C(1B)-N(3)-C(4)-C(5)	-178.6(4)
N(3)-C(4)-C(5)-N(1)	0.2(5)
C(2)-N(1)-C(5)-C(4)	-0.8(5)
C(1A)-N(1)-C(5)-C(4)	-178.4(3)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(3A)	163.7(4)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(3A)	-19.1(6)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(5A)	-15.8(6)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(5A)	161.5(4)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(2A)	-105.3(5)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(2A)	71.9(5)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(4A)	72.3(5)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(4A)	-110.5(5)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	147.0(3)
B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	-90.7(3)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	27.4(3)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	-31.0(4)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	-148.1(4)
B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	-25.8(4)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	92.3(4)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	33.9(5)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	-122.3(4)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	118.0(3)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	59.7(4)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	119.6(4)
B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	-118.0(3)

B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	-58.3(3)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	-148.2(4)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	31.4(4)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	91.9(4)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	-27.1(3)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	145.6(4)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	-34.8(5)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	25.7(4)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	-93.3(4)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	-121.0(4)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	58.5(3)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	119.0(3)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	119.9(4)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	-60.5(3)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	-119.0(3)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	104.8(4)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	151.5(4)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	46.1(3)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-105.4(4)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-0.7(4)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	46.1(3)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-59.3(3)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-151.5(4)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-46.7(3)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-105.4(3)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	-46.3(3)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	58.5(3)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	105.2(4)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	-0.2(3)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	-146.2(4)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	91.6(4)
B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	-27.6(3)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	31.7(5)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	148.6(4)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	26.5(3)
B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	-92.7(4)

B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	-33.4(4)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	-118.6(4)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	119.2(3)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	59.3(3)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	122.2(4)
B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	-119.2(3)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	-59.9(3)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	150.2(3)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	104.3(3)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	46.0(2)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	-104.7(3)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	45.6(3)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	-0.4(4)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	-58.7(3)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-150.2(3)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-45.9(3)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-104.2(3)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	-45.8(3)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	104.4(3)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	58.5(3)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	0.2(3)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	148.2(4)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	-31.4(4)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	-91.9(3)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	27.8(3)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	-147.0(3)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	33.4(4)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	-27.0(3)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	92.7(3)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	120.3(4)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	-59.2(3)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	-119.7(3)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	-120.0(4)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	60.5(3)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	119.7(3)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	149.5(4)

B(8A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	103.1(4)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	45.2(3)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-149.5(4)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-46.3(4)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-104.2(3)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-103.6(4)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	45.8(3)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-0.5(5)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-58.4(4)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	-45.4(3)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	104.0(3)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	57.7(4)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	-0.2(3)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-149.6(3)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-104.3(3)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-46.0(2)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	105.4(3)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	-44.1(3)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	1.1(4)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	59.4(3)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	149.6(3)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	45.3(3)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	103.6(3)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	46.2(3)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	-103.4(3)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	-58.2(3)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	0.2(3)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	78.1(4)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	-23.8(3)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	22.0(4)
B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	103.9(4)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-25.8(3)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-127.7(3)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-81.9(3)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	101.9(3)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	45.7(3)



B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	127.7(3)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	17.6(4)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	-84.2(3)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	-38.5(4)
B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	43.4(3)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-78.6(5)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	24.6(4)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-20.5(5)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-104.4(4)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	25.9(3)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	129.0(3)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	83.9(3)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	-18.6(4)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	84.5(4)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	39.4(4)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	-44.5(3)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-103.2(4)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-45.1(4)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-129.0(3)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-77.5(4)
B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	23.6(3)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-101.8(4)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-20.8(4)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	24.3(3)
B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	125.3(4)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	80.9(3)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-101.1(4)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-125.3(4)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-44.4(3)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	-19.7(5)
B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	81.4(4)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	-44.0(3)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	37.0(4)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	80.0(4)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	-22.7(3)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	22.0(4)

B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	104.5(4)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-24.6(4)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-127.2(4)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-82.5(3)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	21.0(5)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	-81.6(3)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	-36.9(4)
B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	45.6(3)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	102.7(4)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	44.7(3)
B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	127.2(4)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-153.8(4)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-108.1(4)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-49.2(3)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	153.8(4)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	45.7(3)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	104.6(3)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	106.9(4)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	-46.9(3)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	-1.2(4)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	57.8(4)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	49.3(3)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	-104.5(3)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	-58.9(4)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	0.1(3)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-78.3(5)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	23.4(4)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-104.2(4)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-21.0(5)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	25.9(3)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	127.6(3)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	83.2(3)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	-18.4(4)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	83.4(3)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	-44.2(3)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	39.0(4)

C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-101.8(3)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-127.6(3)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-44.4(3)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	78.8(5)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	-23.5(4)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	21.8(5)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	103.9(4)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-25.1(3)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-127.4(3)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-82.1(3)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	102.3(4)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	45.3(3)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	127.4(3)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	19.2(5)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	-83.1(4)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	-37.8(5)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	44.3(3)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-108.5(4)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-154.0(4)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-50.3(3)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	154.0(4)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	45.5(3)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	103.8(3)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	108.6(4)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	0.1(4)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	-45.4(3)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	58.3(4)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	50.2(3)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-58.3(4)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-103.9(3)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-0.1(3)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	75.8(5)
B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	-24.2(4)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	102.4(5)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	18.6(5)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-26.7(3)

B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-126.7(4)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-83.8(3)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	100.0(4)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	126.7(4)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	42.9(3)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	18.3(4)
B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	-81.7(3)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	44.9(3)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	-38.9(4)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-77.5(5)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	22.7(3)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-103.7(4)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-21.3(4)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	26.2(3)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	126.4(4)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	82.4(3)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	-18.8(4)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	81.5(3)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	-44.9(3)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	37.5(4)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-100.2(4)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-126.4(4)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-44.0(3)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	108.2(4)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	152.9(4)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	49.0(3)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-152.9(4)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-44.7(3)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-103.9(3)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	-107.5(4)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	0.7(4)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	45.4(3)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	-58.5(4)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	-49.1(3)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	59.1(3)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	103.8(3)

B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	-0.1(3)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-108.6(4)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-154.1(4)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-49.8(3)
B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	108.6(4)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	0.0(4)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	-45.5(3)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	58.8(3)
B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	154.1(4)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	45.6(3)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	104.3(3)
B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	49.9(3)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	-58.7(3)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	-104.2(3)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	0.1(3)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	33.5(5)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	-33.5(5)
B(9A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	-57.3(4)
B(7A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	57.5(3)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-24.0(4)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-91.0(4)
B(9A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-114.8(3)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	90.8(4)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	23.9(4)
B(7A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	114.8(3)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	-34.2(5)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	33.1(5)
B(7A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	-58.6(4)
B(9A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	58.1(4)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	24.3(3)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	91.6(4)
B(9A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	116.6(4)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-92.3(4)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-25.0(4)
B(7A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-116.6(4)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	89.7(4)

B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	23.5(3)
B(6A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	113.8(3)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-24.1(3)
B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-90.4(3)
B(8A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-113.8(3)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	31.7(4)
B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	-34.5(4)
B(6A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	55.9(3)
B(8A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	-58.0(3)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-89.1(4)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-23.7(4)
B(6A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-114.1(4)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	25.0(4)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	90.4(4)
B(8A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	114.1(4)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	-30.8(5)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	34.6(4)
B(6A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	-55.8(3)
B(8A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	58.2(3)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(3B)	-45.0(5)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(3B)	134.0(4)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(4B)	-134.5(4)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(4B)	44.5(6)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(2B)	46.2(6)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(2B)	-134.7(4)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(5B)	136.5(4)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(5B)	-44.5(5)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	147.6(4)
B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	-91.8(4)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	-31.7(4)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	27.8(3)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	-147.2(4)
B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	-26.6(3)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	33.4(4)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	92.9(3)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	119.9(4)

B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	-119.5(3)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	-59.5(3)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	-120.6(4)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	60.1(3)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	119.5(3)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	149.0(3)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	-91.9(3)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	27.0(3)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	-32.3(4)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	-146.3(3)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	-27.3(3)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	91.6(3)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	32.4(4)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	-119.1(4)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	118.9(3)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	59.6(3)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	122.0(4)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	-118.9(3)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	-59.3(3)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	104.5(4)
B(7B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	150.1(3)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	45.6(3)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-150.1(3)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-45.6(3)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-104.5(3)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	-104.5(3)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	0.1(4)
B(7B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	45.6(3)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	-58.8(3)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	-45.9(2)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	58.6(3)
B(7B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	104.2(3)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	-0.3(3)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	-147.1(3)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	92.4(3)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	32.2(4)

B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	-27.0(3)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	147.9(4)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	27.4(3)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	-32.8(4)
B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	-92.0(3)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	120.5(4)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	-60.1(3)
B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	-119.4(3)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	-120.1(4)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	119.4(3)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	59.3(3)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	104.6(3)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	149.7(3)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	45.9(2)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	-103.6(3)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	1.0(4)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	46.0(3)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	-57.7(3)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-149.7(3)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-45.1(3)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-103.8(3)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	-45.6(2)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	58.9(3)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	104.0(3)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	0.3(3)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	146.2(3)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	-32.6(4)
B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	27.2(3)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	-92.2(4)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	-149.1(3)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	32.2(4)
B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	91.9(3)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	-27.5(3)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	-121.6(4)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	59.6(3)
B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	119.4(3)



N(3)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	118.9(4)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	-59.8(3)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	-119.4(3)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-149.3(3)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-103.3(3)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-45.2(2)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	103.9(3)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	-45.3(3)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	0.7(4)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	58.7(3)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	149.3(3)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	46.0(3)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	104.0(3)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	45.5(2)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	-103.8(3)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	-57.8(3)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	0.3(3)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	149.6(4)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	104.2(3)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	45.4(3)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-149.6(4)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-45.4(3)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-104.3(3)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	-104.0(4)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	45.6(3)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	0.3(4)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	-58.6(3)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	-45.6(2)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	104.0(3)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	58.6(3)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	-0.3(3)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	78.1(5)
B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	-22.5(3)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	104.4(4)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	21.5(5)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-26.3(3)

B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-126.9(3)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-82.9(3)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	17.7(5)
B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	-82.9(3)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	44.0(3)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	-38.9(4)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	100.6(4)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	126.9(3)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	44.1(3)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-77.6(4)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	23.6(4)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-103.8(4)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-20.9(5)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	26.2(3)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	127.4(3)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	82.9(3)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-101.2(3)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-127.4(3)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-44.5(3)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	-18.6(4)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	82.7(3)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	-44.8(3)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	38.1(4)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	77.5(4)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	-23.6(3)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	20.6(5)
B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	103.1(4)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-25.6(3)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-126.8(3)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-82.6(3)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	101.2(3)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	44.2(3)
B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	126.8(3)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	18.6(4)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	-82.6(3)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	-38.4(4)

B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	44.2(3)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-79.7(4)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	22.4(3)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-22.6(4)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-105.0(4)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	25.3(3)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	127.4(3)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	82.5(3)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	-20.1(4)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	81.9(3)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	37.0(4)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	-45.5(3)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-102.1(4)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-44.9(3)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-127.4(3)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-155.0(3)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-109.2(4)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-51.1(3)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	109.3(3)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	-45.7(3)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	0.1(4)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	58.2(3)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	155.0(3)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	45.8(3)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	103.9(3)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	49.9(3)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	-105.1(3)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	-59.3(3)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	-1.2(3)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	77.3(4)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	-23.6(3)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	103.1(3)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	20.3(4)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-25.8(3)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-126.7(3)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-82.8(3)

C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	18.1(4)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	-82.8(3)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	43.9(3)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	-38.8(4)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	100.9(3)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	126.7(3)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	43.9(3)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-78.3(4)
B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	23.4(3)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-104.2(3)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-21.5(4)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	25.9(3)
B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	127.6(3)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	82.8(3)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-101.7(4)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-127.6(3)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-44.8(3)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	-18.5(4)
B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	83.2(3)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	-44.4(3)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	38.4(3)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-153.9(4)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-107.6(4)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-49.5(3)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	108.8(3)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	-45.1(3)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	1.2(4)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	59.3(3)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	153.9(4)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	46.3(3)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	104.4(3)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	50.7(3)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	-103.2(3)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	-56.9(3)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	1.2(3)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	78.0(5)

B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	-23.1(4)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	21.1(4)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	103.9(4)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-25.8(3)
B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-127.0(3)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-82.8(3)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	101.1(4)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	44.2(3)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	127.0(3)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	19.0(4)
B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	-82.2(3)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	-38.0(4)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	44.8(3)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-78.4(4)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	23.2(3)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-21.8(4)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-104.3(4)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	25.9(3)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	127.5(3)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	82.5(3)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	-19.4(4)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	82.2(3)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	37.2(4)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	-45.3(3)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-101.6(3)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-45.1(3)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-127.5(3)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	108.9(4)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	154.2(4)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	50.1(3)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-154.2(4)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-45.4(3)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-104.1(3)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	-107.8(4)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	1.0(4)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	46.4(3)

B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	-57.7(3)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	-48.9(3)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	59.9(4)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	105.3(3)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	1.2(3)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-154.0(3)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-108.4(3)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-50.1(3)
B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	108.0(4)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	-46.0(3)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	-0.3(4)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	57.9(3)
B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	154.0(3)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	45.7(3)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	103.9(3)
B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	48.9(3)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	-105.1(3)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	-59.5(3)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	-1.2(3)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	23.2(3)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	90.0(4)
B(9B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	113.8(3)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	-34.2(5)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	32.7(5)
B(9B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	56.5(3)
B(7B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	-57.3(3)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-90.6(4)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-23.8(4)
B(7B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-113.8(3)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-90.2(4)
B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-23.0(3)
B(8B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-114.6(3)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	24.4(3)
B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	91.6(3)
B(6B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	114.6(3)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	-32.9(5)

B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	34.3(4)
B(8B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	-57.3(3)
B(6B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	57.2(3)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	-32.4(4)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	33.9(4)
B(7B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	57.8(3)
B(9B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	-56.2(3)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-90.2(3)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-23.9(3)
B(9B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-114.0(3)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	23.9(3)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	90.2(3)
B(7B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	114.0(3)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	24.0(4)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	91.5(3)
B(8B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	115.6(3)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	-34.1(5)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	33.4(4)
B(6B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	-58.1(3)
B(8B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	57.5(3)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-91.6(4)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-24.1(3)
B(6B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-115.6(3)
C(4T)-O(1T)-C(1T)-C(2T)	6.1(9)
K(1)-O(1T)-C(1T)-C(2T)	131.4(7)
O(1T)-C(1T)-C(2T)-C(3T)	5.9(12)
C(1T)-C(2T)-C(3T)-C(4T)	-15.5(15)
C(1T)-O(1T)-C(4T)-C(3T)	-15.9(10)
K(1)-O(1T)-C(4T)-C(3T)	-145.9(8)
C(2T)-C(3T)-C(4T)-O(1T)	19.4(14)
C(8T)-O(2T)-C(5T)-C(6T)	-17.6(11)
K(1)-O(2T)-C(5T)-C(6T)	160.3(5)
O(2T)-C(5T)-C(6T)-C(7T)	-5.0(10)
C(5T)-C(6T)-C(7T)-C(8T)	23.5(10)
C(5T)-O(2T)-C(8T)-C(7T)	33.2(12)
K(1)-O(2T)-C(8T)-C(7T)	-145.1(7)

C(6T)-C(7T)-C(8T)-O(2T)	-35.6(12)
C(12T)-O(3T)-C(9T)-C(10T)	30.0(18)
K(1)-O(3T)-C(9T)-C(10T)	-125.8(12)
O(3T)-C(9T)-C(10T)-C(11T)	-26(2)
C(9T)-C(10T)-C(11T)-C(12T)	12(2)
C(9T)-O(3T)-C(12T)-C(11T)	-22(2)
K(1)-O(3T)-C(12T)-C(11T)	137.9(14)
C(10T)-C(11T)-C(12T)-O(3T)	5(3)
C(12U)-O(3U)-C(9U)-C(10U)	-13(3)
K(1)-O(3U)-C(9U)-C(10U)	165.4(17)
O(3U)-C(9U)-C(10U)-C(11U)	30(2)
C(9U)-C(10U)-C(11U)-C(12U)	-35.9(17)
C(9U)-O(3U)-C(12U)-C(11U)	-11(3)
K(1)-O(3U)-C(12U)-C(11U)	170.6(11)
C(10U)-C(11U)-C(12U)-O(3U)	29(2)
C(16T)-O(4T)-C(13T)-C(14T)	-35.7(13)
K(1)-O(4T)-C(13T)-C(14T)	130.2(9)
O(4T)-C(13T)-C(14T)-C(15T)	26.6(15)
C(13T)-C(14T)-C(15T)-C(16T)	-8.5(15)
C(13T)-O(4T)-C(16T)-C(15T)	30.5(12)
K(1)-O(4T)-C(16T)-C(15T)	-136.7(7)
C(14T)-C(15T)-C(16T)-O(4T)	-13.0(14)
C(16U)-O(4U)-C(13U)-C(14U)	-15(3)
K(1)-O(4U)-C(13U)-C(14U)	132(2)
O(4U)-C(13U)-C(14U)-C(15U)	39(2)
C(13U)-C(14U)-C(15U)-C(16U)	-46(2)
C(13U)-O(4U)-C(16U)-C(15U)	-16(3)
K(1)-O(4U)-C(16U)-C(15U)	-168(2)
C(14U)-C(15U)-C(16U)-O(4U)	39(3)
C(20T)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	-31(3)
K(3)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	136(2)
O(5T)-C(17T)-C(18T)-C(19T)	11(3)
C(17T)-C(18T)-C(19T)-C(20T)	12(3)
C(17T)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	38(3)
K(3)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	-132(2)
C(18T)-C(19T)-C(20T)-O(5T)	-31(3)



C(20U)-O(5U)-C(17U)-C(18U)	21(3)
K(3)-O(5U)-C(17U)-C(18U)	-165(2)
O(5U)-C(17U)-C(18U)-C(19U)	-17(3)
C(17U)-C(18U)-C(19U)-C(20U)	7(3)
C(17U)-O(5U)-C(20U)-C(19U)	-16(3)
K(3)-O(5U)-C(20U)-C(19U)	169.0(19)
C(18U)-C(19U)-C(20U)-O(5U)	4(3)
C(24T)-O(6T)-C(21T)-C(22T)	-15(2)
K(3)-O(6T)-C(21T)-C(22T)	138.9(12)
O(6T)-C(21T)-C(22T)-C(23T)	29(2)
C(21T)-C(22T)-C(23T)-C(24T)	-32(3)
C(21T)-O(6T)-C(24T)-C(23T)	-6(3)
K(3)-O(6T)-C(24T)-C(23T)	-151.9(18)
C(22T)-C(23T)-C(24T)-O(6T)	24(3)
C(25T)#1-O(7T)-C(25T)-C(26T)	-23.0(19)
K(2)-O(7T)-C(25T)-C(26T)	126.6(14)
O(7T)-C(25T)-C(26T)-C(26T)#1	13.5(12)
C(25U)#1-O(7U)-C(25U)-C(26U)	35(3)
K(2)-O(7U)-C(25U)-C(26U)	-160(3)
O(7U)-C(25U)-C(26U)-C(26U)#1	-21.1(19)
C(29T)#1-O(8T)-C(29T)-C(30T)	26(4)
K(2)-O(8T)-C(29T)-C(30T)	141.8(16)
O(8T)-C(29T)-C(30T)-C(30T)#1	-16(2)
C(29U)#1-O(8U)-C(29U)-C(30U)	-35(3)
K(2)-O(8U)-C(29U)-C(30U)	170(3)
O(8U)-C(29U)-C(30U)-C(30U)#1	21(2)
C(36T)-O(9T)-C(33T)-C(34T)	-33.9(18)
K(2)-O(9T)-C(33T)-C(34T)	122.2(14)
O(9T)-C(33T)-C(34T)-C(35T)	38(2)
C(33T)-C(34T)-C(35T)-C(36T)	-29(3)
C(33T)-O(9T)-C(36T)-C(35T)	15(2)
K(2)-O(9T)-C(36T)-C(35T)	-135.5(18)
C(34T)-C(35T)-C(36T)-O(9T)	10(3)

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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



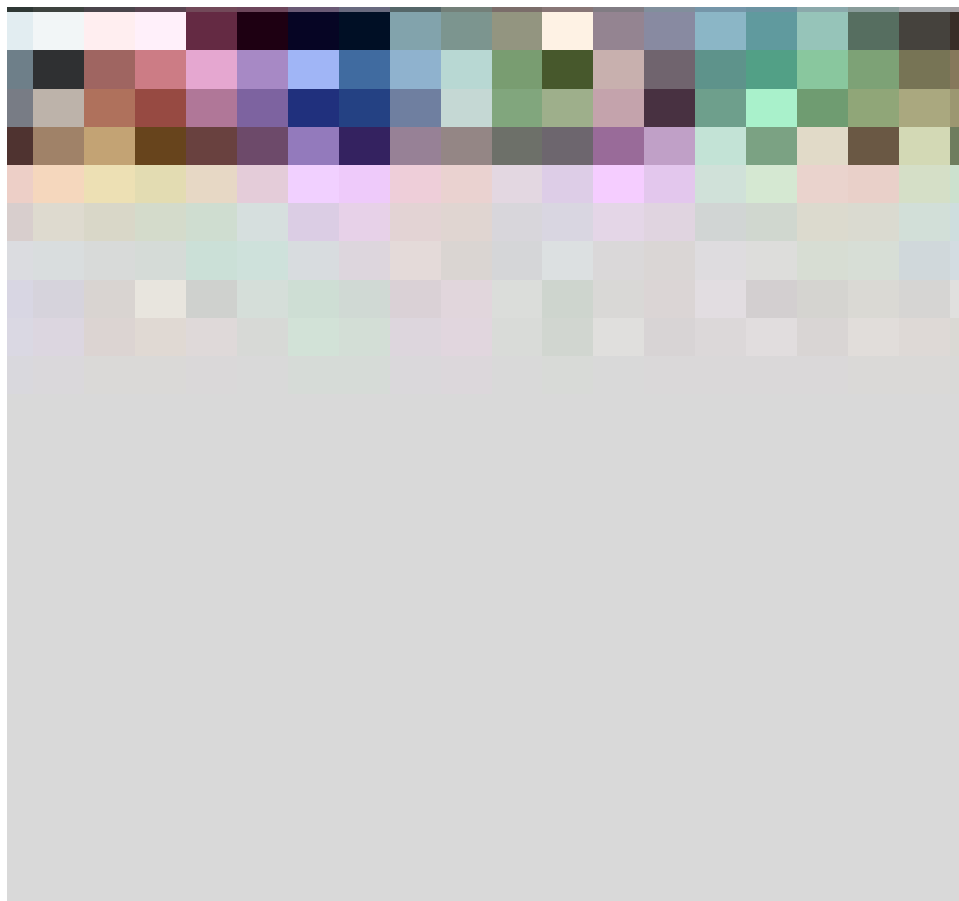


Fig. S29. Solid-state structure of the dimeric 10-Vertex tri-anionic doubly deprotonated NHC **12**[Li<sup>+</sup>]. Boron = brown, carbon= gray, nitrogen= blue, lithium= purple. For clarity, six molecules of coordinated THF have been omitted from the lithium counteranions shown, as well as two additional Li<sup>+</sup> cations. The crystal structure is dimeric with the C-2 center bound to a single lithium cation and the C-5 center bridging two other lithium cations. This dimeric structure is analogous to the X-ray diffraction study of the trianionic doubly deprotonated C-2/C-5 species possessing 12-vertex carborane clusters.

### X-Ray Structure Determination for **12**

A colorless needle fragment (0.531 x 0.211 x 0.066 mm<sup>3</sup>) was used for the single crystal x-ray diffraction study of [Li[C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O]<sub>4</sub>]<sup>+</sup>·[[C<sub>5</sub>H<sub>19</sub>B<sub>18</sub>]Li<sub>2</sub>[C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O]<sub>3</sub>]<sup>-</sup>·[C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O] (sample vL275SL\_0m-5). The crystal was coated with paratone oil and mounted on to a cryo-loop glass fiber. X-ray intensity data were collected at 190(2) K on a Bruker APEX2 platform-CCD x-ray diffractometer system (fine focus Mo-radiation, λ = 0.71073 Å, 50KV/30mA power). The CCD detector was placed at a distance of 5.0600 cm from the crystal.

A total of 3600 frames were collected for a sphere of reflections (with scan width of  $0.3^\circ$  in  $\omega$ , starting  $\omega$  and  $2\theta$  angles of  $-30^\circ$ , and  $\phi$  angles of  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $240^\circ$ , and  $270^\circ$  for every 600 frames, 120 sec/frame exposure time). The Bruker Cell\_Now program was used to obtain the two different orientation matrices of the rotational twin components (Twin law is  $180^\circ$  rotation about the 0 0 1 reciprocal axis). These matrices were imported into the APEX2 program for Bravais lattice determination and initial unit cell refinement. The frames were integrated using the Bruker SAINT software package and using a narrow-frame integration algorithm. Based on a triclinic crystal system, the integrated frames yielded a total of 14348 reflections at a maximum  $2\theta$  angle of  $39.174^\circ$  ( $1.06 \text{ \AA}$  resolution), of which 4819 were independent reflections ( $R_{\text{int}} = 0.0308$ ,  $R_{\text{sig}} = 0.0370$ , redundancy = 3.0, completeness = 48.5%) and 3759 (78.0%) reflections were greater than  $2\sigma(I)$ . The unit cell parameters were,  $\mathbf{a} = 9.5622(10) \text{ \AA}$ ,  $\mathbf{b} = 18.2827(19) \text{ \AA}$ ,  $\mathbf{c} = 18.5319(19) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 114.0568(16)^\circ$ ,  $\beta = 100.8752(17)^\circ$ ,  $\gamma = 102.6755(17)^\circ$ ,  $V = 2742.0(5) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ , calculated density  $D_c = 1.086 \text{ g/cm}^3$ . Absorption corrections were applied (absorption coefficient  $\mu = 0.066 \text{ mm}^{-1}$ ; max/min transmission = 0.996/0.966) to the raw intensity data using the TWINABS program.

The Bruker SHELXTL software package was used for phase determination and structure refinement. The distribution of intensities ( $E^2-1 = 0.854$ ) and no systematic absent reflections indicated two possible space groups, P-1 and P1. The space group P-1 (#2) was later determined to be correct. Direct methods of phase determination followed by two Fourier cycles of refinement led to an electron density map from which most of the non-hydrogen atoms were identified in the asymmetric unit of the unit cell. With subsequent isotropic refinement, all of the non-hydrogen atoms were identified. The combined (major and minor components) HKLF 5 intensity dataset was used in the final structure refinement. There were one disordered cation of  $\text{Li}[\text{C}_4\text{H}_8\text{O}]_4$ , one anion of  $[\text{C}_5\text{H}_{19}\text{B}_{18}]\text{Li}_2[\text{C}_4\text{H}_8\text{O}]_3$ , and one partially occupied (96% occupied) THF solvent molecule present in the asymmetric unit of the unit cell. The dimer-anion was located at the inversion center. Six of the eight THF molecules were modeled with disordered (disordered site occupancy ratios were 70%/30%, 61%/39%, 59%/41%, 59%/41%, 56%/44% and 50%/50%). The rotational twin law was  $180^\circ$  rotation about the 0 0 1 reciprocal axis. The major/minor component twin ratio was 59%/41%. The crystal cracks at 100K due to low temperature phase transition and data was collected at 190K. The A and B-level alerts are due to the poor crystal quality, incomplete data set, and the six highly disordered THF molecules where rigid model restraints were used. Because of the twinning/disorder issues, only about 49% of the triclinic data were collected at long exposure time of 120 second/frame.

Atomic coordinates, isotropic and anisotropic displacement parameters of all the non-hydrogen atoms were refined by means of a full matrix least-squares procedure on  $F^2$ . The H-atoms were included in the refinement in calculated positions riding on the atoms to which they were attached. The refinement converged at  $R1 = 0.0703$ ,  $wR2 = 0.1722$ , with intensity  $I > 2\sigma(I)$ . The largest peak/hole in the final difference map was  $0.228/-0.217 \text{ e/\AA}^3$ .

**Table S7.** Crystal data and structure refinement for vL275SL\_0m-5.

Identification code	vL275SL_0m-5	
Empirical formula	C36.83 H82.67 B18 Li3 N2 O7.96	
Formula weight	896.49	
Temperature	190(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P -1	
Unit cell dimensions	a = 9.5622(10) Å	$\alpha = 114.0568(16)^\circ$ .
	b = 18.2827(19) Å	$\beta = 100.8752(17)^\circ$ .
	c = 18.5319(19) Å	$\gamma = 102.6755(17)^\circ$ .
Volume	2742.0(5) Å <sup>3</sup>	
Z	2	
Density (calculated)	1.086 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.066 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	961	
Crystal size	0.531 x 0.211 x 0.066 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.193 to 19.587°.	
Index ranges	-9<=h<=8, -17<=k<=15, 0<=l<=17	
Reflections collected	14348	
Independent reflections	4819 [R(int) = 0.0308]	
Completeness to theta = 25.242°	48.5 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	4819 / 1104 / 797	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.060	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0703, wR2 = 0.1722	
R indices (all data)	R1 = 0.0949, wR2 = 0.1904	
Extinction coefficient	n/a	
Largest diff. peak and hole	0.228 and -0.217 e.Å <sup>-3</sup>	

**Table S8.** Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ )

for vL275SL\_0m-5.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
N(1)	3525(5)	2517(3)	-717(3)	55(1)
C(2)	4389(6)	2768(3)	71(4)	56(2)
N(3)	5065(5)	3612(3)	355(3)	52(1)
C(4)	4695(6)	3929(3)	-217(4)	55(2)
C(5)	3693(6)	3201(3)	-889(4)	57(2)
C(1A)	2519(6)	1673(3)	-1273(3)	58(2)
B(2A)	877(8)	1270(4)	-1238(5)	78(2)
B(3A)	2434(8)	861(4)	-1129(4)	65(2)
B(4A)	2828(9)	972(4)	-2012(4)	72(2)
B(5A)	1273(9)	1400(4)	-2093(5)	85(2)
B(6A)	-305(10)	547(5)	-2258(6)	99(3)
B(7A)	500(9)	161(4)	-1586(5)	85(2)
B(8A)	1854(9)	-62(4)	-2135(4)	71(2)
B(9A)	1027(10)	314(4)	-2826(5)	91(3)
B(10A)	13(10)	-390(5)	-2615(5)	95(3)
C(1B)	6080(6)	4164(3)	1190(3)	54(1)
B(2B)	5692(9)	4324(5)	2033(5)	76(2)
B(3B)	6265(8)	5140(4)	1719(4)	64(2)
B(4B)	7765(8)	4750(4)	1417(5)	75(2)
B(5B)	7200(8)	3932(5)	1730(4)	75(2)
B(6B)	7383(10)	4544(6)	2812(5)	95(3)
B(7B)	6745(9)	5403(5)	2792(5)	85(2)
B(8B)	8173(9)	5700(5)	2361(5)	87(2)
B(9B)	8852(9)	4843(5)	2379(5)	94(3)
B(10B)	8561(10)	5546(6)	3197(5)	99(3)
Li(1)	4944(10)	2052(7)	629(6)	83(3)
Li(2)	3839(11)	4987(6)	181(7)	71(3)
Li(4)	5099(13)	7832(4)	4302(8)	100(4)
O(1T)	6130(20)	1379(15)	228(12)	90(3)
C(1T)	7320(20)	1333(17)	792(11)	116(7)

C(2T)	8400(20)	1050(20)	327(14)	152(8)
C(3T)	7430(30)	614(18)	-580(12)	130(8)
C(4T)	6430(20)	1163(18)	-555(11)	105(6)
O(1U)	6470(14)	1561(8)	426(8)	90(3)
C(1U)	6860(20)	908(9)	568(8)	108(5)
C(2U)	7450(20)	437(9)	-126(9)	117(5)
C(3U)	6880(20)	685(9)	-790(6)	110(5)
C(4U)	6950(20)	1589(9)	-257(11)	119(5)
O(2T)	4060(40)	1820(20)	1377(17)	118(8)
C(5T)	2570(40)	1860(30)	1119(12)	117(8)
C(6T)	2040(30)	2160(20)	1867(16)	123(6)
C(7T)	3440(30)	2455(16)	2599(11)	135(7)
C(8T)	4320(30)	1880(20)	2196(17)	142(8)
O(2U)	3929(19)	1822(12)	1331(10)	89(4)
C(5U)	2359(18)	1735(16)	1235(9)	93(5)
C(6U)	2320(20)	2233(17)	2115(11)	152(7)
C(7U)	3470(20)	1992(17)	2590(9)	167(7)
C(8U)	4698(18)	2035(16)	2168(11)	138(5)
O(3T)	2005(4)	4727(2)	444(3)	78(1)
C(9T)	736(7)	4053(5)	-250(5)	98(2)
C(10T)	33(8)	3461(4)	52(5)	100(2)
C(11T)	1184(8)	3718(4)	850(5)	101(2)
C(12T)	1955(7)	4661(4)	1179(4)	88(2)
O(4T)	4010(6)	7689(3)	3253(3)	107(2)
C(13T)	4405(9)	7330(5)	2499(5)	113(2)
C(14T)	3179(10)	7185(6)	1819(6)	137(3)
C(15T)	1898(16)	7260(20)	2135(7)	134(6)
C(15U)	2370(30)	7730(18)	2220(9)	134(6)
C(16T)	2572(10)	7759(6)	3040(5)	133(3)
O(5T)	7206(5)	8111(3)	4437(3)	113(2)
C(17T)	8180(10)	8895(6)	4551(10)	133(4)
C(18T)	9668(10)	8789(7)	4513(10)	115(4)
C(19T)	9602(11)	7966(7)	4505(12)	147(5)
C(20T)	8169(11)	7684(7)	4691(9)	130(4)
C(17U)	7823(16)	7956(18)	3761(8)	126(7)
C(18U)	9512(16)	8270(20)	4129(14)	109(7)

C(19U)	9775(14)	8400(20)	5015(13)	135(9)
C(20U)	8404(17)	8650(20)	5207(8)	186(11)
O(6T)	4230(20)	6826(10)	4349(15)	141(7)
C(21T)	5290(20)	6794(9)	4980(13)	172(6)
C(22T)	4590(30)	5976(12)	4989(13)	198(6)
C(23T)	3550(30)	5400(7)	4102(14)	198(6)
C(24T)	3140(30)	6008(11)	3815(13)	172(6)
O(6U)	4430(20)	6794(8)	4339(11)	101(4)
C(21U)	4660(20)	6520(9)	4968(8)	148(5)
C(22U)	4320(20)	5565(9)	4456(12)	164(5)
C(23U)	3020(20)	5324(8)	3710(11)	164(5)
C(24U)	3210(30)	6129(10)	3634(11)	148(5)
O(7T)	4919(14)	8755(7)	5197(5)	108(4)
C(25T)	6046(10)	9341(9)	5973(7)	133(5)
C(26T)	5250(13)	9774(11)	6559(8)	194(9)
C(27T)	3665(13)	9166(11)	6196(7)	156(5)
C(28T)	3452(11)	8730(10)	5271(6)	138(4)
O(7U)	4740(30)	8655(11)	5208(10)	139(7)
C(25U)	4770(30)	9493(13)	5352(11)	170(7)
C(26U)	4300(30)	9870(12)	6124(12)	170(7)
C(27U)	4880(30)	9421(12)	6604(8)	156(5)
C(28U)	4460(20)	8530(10)	5892(11)	138(4)
O(1S)	8262(15)	2701(8)	3708(9)	266(6)
C(1S)	9160(20)	2700(10)	3154(11)	230(7)
C(2S)	10640(19)	3319(8)	3688(10)	241(7)
C(3S)	10349(17)	3900(8)	4319(8)	200(6)
C(4S)	8928(17)	3462(12)	4348(9)	228(7)

---



**Table S9.** Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for vL275SL\_0m-5.

N(1)-C(2)	1.363(7)	B(6A)-H(6A)	1.1200
N(1)-C(5)	1.395(6)	B(7A)-B(10A)	1.662(11)
N(1)-C(1A)	1.431(7)	B(7A)-B(8A)	1.808(11)
C(2)-N(3)	1.359(6)	B(7A)-H(7A)	1.1200
C(2)-Li(1)	2.066(11)	B(8A)-B(10A)	1.661(11)
N(3)-C(4)	1.425(6)	B(8A)-B(9A)	1.821(11)
N(3)-C(1B)	1.444(6)	B(8A)-H(8A)	1.1200
C(4)-C(5)	1.370(7)	B(9A)-B(10A)	1.660(12)
C(4)-Li(2)#1	2.130(11)	B(9A)-H(9A)	1.1200
C(4)-Li(2)	2.171(10)	B(10A)-H(10A)	1.1200
C(5)-H(5)	0.9500	C(1B)-B(5B)	1.572(8)
C(1A)-B(5A)	1.554(9)	C(1B)-B(4B)	1.594(9)
C(1A)-B(4A)	1.579(8)	C(1B)-B(3B)	1.596(8)
C(1A)-B(3A)	1.601(8)	C(1B)-B(2B)	1.600(9)
C(1A)-B(2A)	1.607(9)	B(2B)-B(7B)	1.792(11)
B(2A)-B(6A)	1.760(12)	B(2B)-B(6B)	1.795(11)
B(2A)-B(7A)	1.783(10)	B(2B)-B(3B)	1.827(10)
B(2A)-B(5A)	1.791(12)	B(2B)-B(5B)	1.828(10)
B(2A)-B(3A)	1.821(10)	B(2B)-H(2B)	1.1200
B(2A)-H(2A)	1.1200	B(3B)-B(8B)	1.779(10)
B(3A)-B(7A)	1.806(10)	B(3B)-B(7B)	1.782(10)
B(3A)-B(8A)	1.807(9)	B(3B)-B(4B)	1.818(10)
B(3A)-B(4A)	1.826(10)	B(3B)-H(3B)	1.1200
B(3A)-H(3A)	1.1200	B(4B)-B(8B)	1.788(11)
B(4A)-B(8A)	1.813(9)	B(4B)-B(9B)	1.806(11)
B(4A)-B(9A)	1.822(11)	B(4B)-B(5B)	1.827(11)
B(4A)-B(5A)	1.835(11)	B(4B)-H(4B)	1.1200
B(4A)-H(4A)	1.1200	B(5B)-B(9B)	1.793(11)
B(5A)-B(6A)	1.790(11)	B(5B)-B(6B)	1.803(11)
B(5A)-B(9A)	1.820(10)	B(5B)-H(5B)	1.1200
B(5A)-H(5A)	1.1200	B(6B)-B(10B)	1.692(12)
B(6A)-B(10A)	1.687(11)	B(6B)-B(7B)	1.817(12)
B(6A)-B(7A)	1.798(12)	B(6B)-B(9B)	1.833(13)
B(6A)-B(9A)	1.814(13)	B(6B)-H(6B)	1.1200

B(7B)-B(10B)	1.672(12)	O(1U)-C(4U)	1.442(9)
B(7B)-B(8B)	1.798(12)	C(1U)-C(2U)	1.514(9)
B(7B)-H(7B)	1.1200	C(1U)-H(1C)	0.9900
B(8B)-B(10B)	1.672(12)	C(1U)-H(1D)	0.9900
B(8B)-B(9B)	1.831(12)	C(2U)-C(3U)	1.523(9)
B(8B)-H(8B)	1.1200	C(2U)-H(2E)	0.9900
B(9B)-B(10B)	1.660(12)	C(2U)-H(2F)	0.9900
B(9B)-H(9B)	1.1200	C(3U)-C(4U)	1.521(9)
B(10B)-H(10B)	1.1200	C(3U)-H(3E)	0.9900
Li(1)-O(1T)	1.885(9)	C(3U)-H(3F)	0.9900
Li(1)-O(2U)	1.885(8)	C(4U)-H(4E)	0.9900
Li(1)-O(2T)	1.891(9)	C(4U)-H(4F)	0.9900
Li(1)-O(1U)	1.893(8)	O(2T)-C(5T)	1.435(9)
Li(2)-O(3T)	1.921(10)	O(2T)-C(8T)	1.447(10)
Li(2)-C(4)#1	2.130(11)	C(5T)-C(6T)	1.500(9)
Li(2)-Li(2)#1	2.432(19)	C(5T)-H(5C)	0.9900
Li(4)-O(6T)	1.890(10)	C(5T)-H(5D)	0.9900
Li(4)-O(7T)	1.892(10)	C(6T)-C(7T)	1.523(10)
Li(4)-O(7U)	1.894(11)	C(6T)-H(6C)	0.9900
Li(4)-O(6U)	1.898(10)	C(6T)-H(6D)	0.9900
Li(4)-O(4T)	1.907(14)	C(7T)-C(8T)	1.537(10)
Li(4)-O(5T)	1.907(13)	C(7T)-H(7C)	0.9900
O(1T)-C(1T)	1.429(9)	C(7T)-H(7D)	0.9900
O(1T)-C(4T)	1.440(9)	C(8T)-H(8C)	0.9900
C(1T)-C(2T)	1.514(10)	C(8T)-H(8D)	0.9900
C(1T)-H(1A)	0.9900	O(2U)-C(8U)	1.433(8)
C(1T)-H(1B)	0.9900	O(2U)-C(5U)	1.443(8)
C(2T)-C(3T)	1.520(10)	C(5U)-C(6U)	1.524(9)
C(2T)-H(2C)	0.9900	C(5U)-H(5E)	0.9900
C(2T)-H(2D)	0.9900	C(5U)-H(5F)	0.9900
C(3T)-C(4T)	1.530(10)	C(6U)-C(7U)	1.535(10)
C(3T)-H(3C)	0.9900	C(6U)-H(6E)	0.9900
C(3T)-H(3D)	0.9900	C(6U)-H(6F)	0.9900
C(4T)-H(4C)	0.9900	C(7U)-C(8U)	1.530(10)
C(4T)-H(4D)	0.9900	C(7U)-H(7E)	0.9900
O(1U)-C(1U)	1.432(8)	C(7U)-H(7F)	0.9900

C(8U)-H(8E)	0.9900	O(5T)-C(17U)	1.435(9)
C(8U)-H(8F)	0.9900	O(5T)-C(17T)	1.435(7)
O(3T)-C(12T)	1.423(7)	O(5T)-C(20U)	1.435(10)
O(3T)-C(9T)	1.452(7)	O(5T)-C(20T)	1.459(7)
C(9T)-C(10T)	1.501(9)	C(17T)-C(18T)	1.488(8)
C(9T)-H(9C)	0.9900	C(17T)-H(17A)	0.9900
C(9T)-H(9D)	0.9900	C(17T)-H(17B)	0.9900
C(10T)-C(11T)	1.487(9)	C(18T)-C(19T)	1.487(8)
C(10T)-H(10C)	0.9900	C(18T)-H(18A)	0.9900
C(10T)-H(10D)	0.9900	C(18T)-H(18B)	0.9900
C(11T)-C(12T)	1.518(9)	C(19T)-C(20T)	1.508(9)
C(11T)-H(11A)	0.9900	C(19T)-H(19A)	0.9900
C(11T)-H(11B)	0.9900	C(19T)-H(19B)	0.9900
C(12T)-H(12A)	0.9900	C(20T)-H(20A)	0.9900
C(12T)-H(12B)	0.9900	C(20T)-H(20B)	0.9900
O(4T)-C(16T)	1.407(8)	C(17U)-C(18U)	1.505(9)
O(4T)-C(13T)	1.444(8)	C(17U)-H(17C)	0.9900
C(13T)-C(14T)	1.438(10)	C(17U)-H(17D)	0.9900
C(13T)-H(13A)	0.9900	C(18U)-C(19U)	1.522(10)
C(13T)-H(13B)	0.9900	C(18U)-H(18C)	0.9900
C(14T)-C(15U)	1.444(9)	C(18U)-H(18D)	0.9900
C(14T)-C(15T)	1.463(10)	C(19U)-C(20U)	1.534(10)
C(14T)-H(14A)	0.9900	C(19U)-H(19C)	0.9900
C(14T)-H(14B)	0.9900	C(19U)-H(19D)	0.9900
C(14T)-H(14C)	0.9900	C(20U)-H(20C)	0.9900
C(14T)-H(14D)	0.9900	C(20U)-H(20D)	0.9900
C(15T)-C(16T)	1.465(10)	O(6T)-C(24T)	1.420(9)
C(15T)-H(15A)	0.9900	O(6T)-C(21T)	1.429(9)
C(15T)-H(15B)	0.9900	C(21T)-C(22T)	1.506(9)
C(15U)-C(16T)	1.471(10)	C(21T)-H(21A)	0.9900
C(15U)-H(15C)	0.9900	C(21T)-H(21B)	0.9900
C(15U)-H(15D)	0.9900	C(22T)-C(23T)	1.521(10)
C(16T)-H(16A)	0.9900	C(22T)-H(22A)	0.9900
C(16T)-H(16B)	0.9900	C(22T)-H(22B)	0.9900
C(16T)-H(16C)	0.9900	C(23T)-C(24T)	1.506(9)
C(16T)-H(16D)	0.9900	C(23T)-H(23A)	0.9900

C(23T)-H(23B)	0.9900	C(26U)-H(26D)	0.9900
C(24T)-H(24A)	0.9900	C(27U)-C(28U)	1.522(10)
C(24T)-H(24B)	0.9900	C(27U)-H(27C)	0.9900
O(6U)-C(24U)	1.434(9)	C(27U)-H(27D)	0.9900
O(6U)-C(21U)	1.446(9)	C(28U)-H(28C)	0.9900
C(21U)-C(22U)	1.530(10)	C(28U)-H(28D)	0.9900
C(21U)-H(21C)	0.9900	O(1S)-C(4S)	1.315(16)
C(21U)-H(21D)	0.9900	O(1S)-C(1S)	1.458(17)
C(22U)-C(23U)	1.510(9)	C(1S)-C(2S)	1.454(18)
C(22U)-H(22C)	0.9900	C(1S)-H(1E)	0.9900
C(22U)-H(22D)	0.9900	C(1S)-H(1F)	0.9900
C(23U)-C(24U)	1.511(9)	C(2S)-C(3S)	1.347(15)
C(23U)-H(23C)	0.9900	C(2S)-H(2G)	0.9900
C(23U)-H(23D)	0.9900	C(2S)-H(2H)	0.9900
C(24U)-H(24C)	0.9900	C(3S)-C(4S)	1.441(16)
C(24U)-H(24D)	0.9900	C(3S)-H(3G)	0.9900
O(7T)-C(25T)	1.425(9)	C(3S)-H(3H)	0.9900
O(7T)-C(28T)	1.427(9)	C(4S)-H(4G)	0.9900
C(25T)-C(26T)	1.503(9)	C(4S)-H(4H)	0.9900
C(25T)-H(25A)	0.9900		
C(25T)-H(25B)	0.9900	C(2)-N(1)-C(5)	111.0(4)
C(26T)-C(27T)	1.501(9)	C(2)-N(1)-C(1A)	124.2(4)
C(26T)-H(26A)	0.9900	C(5)-N(1)-C(1A)	124.8(5)
C(26T)-H(26B)	0.9900	N(3)-C(2)-N(1)	102.1(4)
C(27T)-C(28T)	1.516(9)	N(3)-C(2)-Li(1)	126.6(5)
C(27T)-H(27A)	0.9900	N(1)-C(2)-Li(1)	130.0(5)
C(27T)-H(27B)	0.9900	C(2)-N(3)-C(4)	116.1(4)
C(28T)-H(28A)	0.9900	C(2)-N(3)-C(1B)	122.4(5)
C(28T)-H(28B)	0.9900	C(4)-N(3)-C(1B)	121.5(4)
O(7U)-C(25U)	1.436(9)	C(5)-C(4)-N(3)	100.3(4)
O(7U)-C(28U)	1.437(9)	C(5)-C(4)-Li(2)#1	129.4(5)
C(25U)-C(26U)	1.515(10)	N(3)-C(4)-Li(2)#1	123.7(5)
C(25U)-H(25C)	0.9900	C(5)-C(4)-Li(2)	114.1(5)
C(25U)-H(25D)	0.9900	N(3)-C(4)-Li(2)	117.5(4)
C(26U)-C(27U)	1.542(10)	Li(2)#1-C(4)-Li(2)	68.9(4)
C(26U)-H(26C)	0.9900	C(4)-C(5)-N(1)	110.5(5)

C(4)-C(5)-H(5)	124.8	B(2A)-B(3A)-B(4A)	90.1(5)
N(1)-C(5)-H(5)	124.8	C(1A)-B(3A)-H(3A)	122.0
N(1)-C(1A)-B(5A)	125.9(5)	B(7A)-B(3A)-H(3A)	121.4
N(1)-C(1A)-B(4A)	126.5(5)	B(8A)-B(3A)-H(3A)	121.4
B(5A)-C(1A)-B(4A)	71.7(5)	B(2A)-B(3A)-H(3A)	131.0
N(1)-C(1A)-B(3A)	125.5(5)	B(4A)-B(3A)-H(3A)	130.7
B(5A)-C(1A)-B(3A)	108.6(5)	C(1A)-B(4A)-B(8A)	108.7(5)
B(4A)-C(1A)-B(3A)	70.1(4)	C(1A)-B(4A)-B(9A)	107.6(5)
N(1)-C(1A)-B(2A)	125.3(5)	B(8A)-B(4A)-B(9A)	60.1(4)
B(5A)-C(1A)-B(2A)	69.0(5)	C(1A)-B(4A)-B(3A)	55.5(4)
B(4A)-C(1A)-B(2A)	108.1(5)	B(8A)-B(4A)-B(3A)	59.5(4)
B(3A)-C(1A)-B(2A)	69.1(4)	B(9A)-B(4A)-B(3A)	101.3(5)
C(1A)-B(2A)-B(6A)	108.7(6)	C(1A)-B(4A)-B(5A)	53.5(4)
C(1A)-B(2A)-B(7A)	109.1(5)	B(8A)-B(4A)-B(5A)	101.3(5)
B(6A)-B(2A)-B(7A)	61.0(4)	B(9A)-B(4A)-B(5A)	59.7(4)
C(1A)-B(2A)-B(5A)	54.1(4)	B(3A)-B(4A)-B(5A)	88.8(5)
B(6A)-B(2A)-B(5A)	60.5(5)	C(1A)-B(4A)-H(4A)	122.1
B(7A)-B(2A)-B(5A)	103.0(5)	B(8A)-B(4A)-H(4A)	121.0
C(1A)-B(2A)-B(3A)	55.3(3)	B(9A)-B(4A)-H(4A)	121.4
B(6A)-B(2A)-B(3A)	103.1(5)	B(3A)-B(4A)-H(4A)	131.0
B(7A)-B(2A)-B(3A)	60.1(4)	B(5A)-B(4A)-H(4A)	131.7
B(5A)-B(2A)-B(3A)	90.4(5)	C(1A)-B(5A)-B(6A)	109.7(6)
C(1A)-B(2A)-H(2A)	122.1	C(1A)-B(5A)-B(2A)	56.9(4)
B(6A)-B(2A)-H(2A)	120.3	B(6A)-B(5A)-B(2A)	58.9(5)
B(7A)-B(2A)-H(2A)	120.3	C(1A)-B(5A)-B(9A)	108.8(5)
B(5A)-B(2A)-H(2A)	130.6	B(6A)-B(5A)-B(9A)	60.3(5)
B(3A)-B(2A)-H(2A)	130.3	B(2A)-B(5A)-B(9A)	101.4(5)
C(1A)-B(3A)-B(7A)	108.2(5)	C(1A)-B(5A)-B(4A)	54.8(4)
C(1A)-B(3A)-B(8A)	108.0(5)	B(6A)-B(5A)-B(4A)	102.2(5)
B(7A)-B(3A)-B(8A)	60.0(4)	B(2A)-B(5A)-B(4A)	90.7(5)
C(1A)-B(3A)-B(2A)	55.6(4)	B(9A)-B(5A)-B(4A)	59.8(4)
B(7A)-B(3A)-B(2A)	58.9(4)	C(1A)-B(5A)-H(5A)	120.9
B(8A)-B(3A)-B(2A)	101.1(5)	B(6A)-B(5A)-H(5A)	120.9
C(1A)-B(3A)-B(4A)	54.4(4)	B(2A)-B(5A)-H(5A)	130.6
B(7A)-B(3A)-B(4A)	101.8(5)	B(9A)-B(5A)-H(5A)	121.3
B(8A)-B(3A)-B(4A)	59.9(4)	B(4A)-B(5A)-H(5A)	130.7

B(10A)-B(6A)-B(2A)	112.2(6)	B(10A)-B(8A)-B(9A)	56.7(5)
B(10A)-B(6A)-B(5A)	112.3(6)	B(3A)-B(8A)-B(9A)	102.0(5)
B(2A)-B(6A)-B(5A)	60.6(4)	B(7A)-B(8A)-B(9A)	89.4(5)
B(10A)-B(6A)-B(7A)	56.8(5)	B(4A)-B(8A)-B(9A)	60.2(4)
B(2A)-B(6A)-B(7A)	60.1(4)	B(10A)-B(8A)-H(8A)	118.4
B(5A)-B(6A)-B(7A)	102.4(6)	B(3A)-B(8A)-H(8A)	120.1
B(10A)-B(6A)-B(9A)	56.5(5)	B(7A)-B(8A)-H(8A)	131.2
B(2A)-B(6A)-B(9A)	102.9(6)	B(4A)-B(8A)-H(8A)	119.9
B(5A)-B(6A)-B(9A)	60.7(5)	B(9A)-B(8A)-H(8A)	131.4
B(7A)-B(6A)-B(9A)	89.9(5)	B(10A)-B(9A)-B(6A)	57.9(5)
B(10A)-B(6A)-H(6A)	118.8	B(10A)-B(9A)-B(5A)	112.1(6)
B(2A)-B(6A)-H(6A)	119.9	B(6A)-B(9A)-B(5A)	59.0(4)
B(5A)-B(6A)-H(6A)	119.8	B(10A)-B(9A)-B(8A)	56.8(5)
B(7A)-B(6A)-H(6A)	131.1	B(6A)-B(9A)-B(8A)	89.9(5)
B(9A)-B(6A)-H(6A)	130.8	B(5A)-B(9A)-B(8A)	101.5(5)
B(10A)-B(7A)-B(2A)	112.4(6)	B(10A)-B(9A)-B(4A)	112.0(6)
B(10A)-B(7A)-B(6A)	58.2(5)	B(6A)-B(9A)-B(4A)	101.8(5)
B(2A)-B(7A)-B(6A)	58.9(4)	B(5A)-B(9A)-B(4A)	60.5(4)
B(10A)-B(7A)-B(3A)	112.4(6)	B(8A)-B(9A)-B(4A)	59.7(4)
B(2A)-B(7A)-B(3A)	61.0(4)	B(10A)-B(9A)-H(9A)	118.3
B(6A)-B(7A)-B(3A)	102.1(5)	B(6A)-B(9A)-H(9A)	131.1
B(10A)-B(7A)-B(8A)	57.0(5)	B(5A)-B(9A)-H(9A)	120.7
B(2A)-B(7A)-B(8A)	102.6(5)	B(8A)-B(9A)-H(9A)	131.4
B(6A)-B(7A)-B(8A)	90.8(5)	B(4A)-B(9A)-H(9A)	120.3
B(3A)-B(7A)-B(8A)	60.0(4)	B(9A)-B(10A)-B(8A)	66.5(5)
B(10A)-B(7A)-H(7A)	118.1	B(9A)-B(10A)-B(7A)	100.4(5)
B(2A)-B(7A)-H(7A)	120.3	B(8A)-B(10A)-B(7A)	65.9(5)
B(6A)-B(7A)-H(7A)	130.8	B(9A)-B(10A)-B(6A)	65.6(5)
B(3A)-B(7A)-H(7A)	120.1	B(8A)-B(10A)-B(6A)	100.2(5)
B(8A)-B(7A)-H(7A)	130.7	B(7A)-B(10A)-B(6A)	65.0(5)
B(10A)-B(8A)-B(3A)	112.4(5)	B(9A)-B(10A)-H(10A)	129.5
B(10A)-B(8A)-B(7A)	57.1(5)	B(8A)-B(10A)-H(10A)	129.5
B(3A)-B(8A)-B(7A)	59.9(4)	B(7A)-B(10A)-H(10A)	130.1
B(10A)-B(8A)-B(4A)	112.4(5)	B(6A)-B(10A)-H(10A)	130.4
B(3A)-B(8A)-B(4A)	60.6(4)	N(3)-C(1B)-B(5B)	127.3(5)
B(7A)-B(8A)-B(4A)	102.2(5)	N(3)-C(1B)-B(4B)	124.9(5)

B(5B)-C(1B)-B(4B)	70.5(4)	B(4B)-B(3B)-H(3B)	130.5
N(3)-C(1B)-B(3B)	124.6(4)	B(2B)-B(3B)-H(3B)	130.3
B(5B)-C(1B)-B(3B)	108.1(5)	C(1B)-B(4B)-B(8B)	108.3(5)
B(4B)-C(1B)-B(3B)	69.5(4)	C(1B)-B(4B)-B(9B)	107.6(6)
N(3)-C(1B)-B(2B)	126.3(5)	B(8B)-B(4B)-B(9B)	61.3(4)
B(5B)-C(1B)-B(2B)	70.4(4)	C(1B)-B(4B)-B(3B)	55.3(4)
B(4B)-C(1B)-B(2B)	108.8(5)	B(8B)-B(4B)-B(3B)	59.1(4)
B(3B)-C(1B)-B(2B)	69.7(4)	B(9B)-B(4B)-B(3B)	101.7(5)
C(1B)-B(2B)-B(7B)	107.7(6)	C(1B)-B(4B)-B(5B)	54.2(4)
C(1B)-B(2B)-B(6B)	108.2(5)	B(8B)-B(4B)-B(5B)	101.8(5)
B(7B)-B(2B)-B(6B)	60.8(5)	B(9B)-B(4B)-B(5B)	59.1(4)
C(1B)-B(2B)-B(3B)	55.1(4)	B(3B)-B(4B)-B(5B)	89.5(5)
B(7B)-B(2B)-B(3B)	59.0(4)	C(1B)-B(4B)-H(4B)	122.3
B(6B)-B(2B)-B(3B)	102.1(5)	B(8B)-B(4B)-H(4B)	120.8
C(1B)-B(2B)-B(5B)	54.1(4)	B(9B)-B(4B)-H(4B)	121.1
B(7B)-B(2B)-B(5B)	101.1(5)	B(3B)-B(4B)-H(4B)	131.0
B(6B)-B(2B)-B(5B)	59.7(4)	B(5B)-B(4B)-H(4B)	131.4
B(3B)-B(2B)-B(5B)	89.2(5)	C(1B)-B(5B)-B(9B)	109.3(5)
C(1B)-B(2B)-H(2B)	122.3	C(1B)-B(5B)-B(6B)	109.0(5)
B(7B)-B(2B)-H(2B)	121.5	B(9B)-B(5B)-B(6B)	61.3(5)
B(6B)-B(2B)-H(2B)	120.6	C(1B)-B(5B)-B(4B)	55.3(4)
B(3B)-B(2B)-H(2B)	131.0	B(9B)-B(5B)-B(4B)	59.8(4)
B(5B)-B(2B)-H(2B)	131.5	B(6B)-B(5B)-B(4B)	102.7(5)
C(1B)-B(3B)-B(8B)	108.7(5)	C(1B)-B(5B)-B(2B)	55.5(4)
C(1B)-B(3B)-B(7B)	108.4(5)	B(9B)-B(5B)-B(2B)	102.4(5)
B(8B)-B(3B)-B(7B)	60.7(4)	B(6B)-B(5B)-B(2B)	59.2(4)
C(1B)-B(3B)-B(4B)	55.2(4)	B(4B)-B(5B)-B(2B)	90.5(5)
B(8B)-B(3B)-B(4B)	59.6(4)	C(1B)-B(5B)-H(5B)	121.4
B(7B)-B(3B)-B(4B)	102.0(5)	B(9B)-B(5B)-H(5B)	120.4
C(1B)-B(3B)-B(2B)	55.2(4)	B(6B)-B(5B)-H(5B)	120.6
B(8B)-B(3B)-B(2B)	102.6(5)	B(4B)-B(5B)-H(5B)	130.4
B(7B)-B(3B)-B(2B)	59.6(4)	B(2B)-B(5B)-H(5B)	130.8
B(4B)-B(3B)-B(2B)	90.8(5)	B(10B)-B(6B)-B(2B)	111.6(6)
C(1B)-B(3B)-H(3B)	121.9	B(10B)-B(6B)-B(5B)	110.3(6)
B(8B)-B(3B)-H(3B)	120.7	B(2B)-B(6B)-B(5B)	61.1(4)
B(7B)-B(3B)-H(3B)	121.1	B(10B)-B(6B)-B(7B)	56.8(5)

B(2B)-B(6B)-B(7B)	59.5(4)	B(10B)-B(8B)-H(8B)	118.6
B(5B)-B(6B)-B(7B)	101.1(5)	B(3B)-B(8B)-H(8B)	119.8
B(10B)-B(6B)-B(9B)	56.0(5)	B(4B)-B(8B)-H(8B)	119.9
B(2B)-B(6B)-B(9B)	102.1(5)	B(7B)-B(8B)-H(8B)	131.0
B(5B)-B(6B)-B(9B)	59.1(4)	B(9B)-B(8B)-H(8B)	131.5
B(7B)-B(6B)-B(9B)	89.0(6)	B(10B)-B(9B)-B(5B)	112.4(6)
B(10B)-B(6B)-H(6B)	119.4	B(10B)-B(9B)-B(4B)	111.6(6)
B(2B)-B(6B)-H(6B)	119.9	B(5B)-B(9B)-B(4B)	61.0(4)
B(5B)-B(6B)-H(6B)	121.0	B(10B)-B(9B)-B(8B)	57.0(5)
B(7B)-B(6B)-H(6B)	131.6	B(5B)-B(9B)-B(8B)	101.4(5)
B(9B)-B(6B)-H(6B)	131.6	B(4B)-B(9B)-B(8B)	58.9(4)
B(10B)-B(7B)-B(3B)	112.3(6)	B(10B)-B(9B)-B(6B)	57.7(5)
B(10B)-B(7B)-B(2B)	112.7(6)	B(5B)-B(9B)-B(6B)	59.6(5)
B(3B)-B(7B)-B(2B)	61.5(4)	B(4B)-B(9B)-B(6B)	102.4(5)
B(10B)-B(7B)-B(8B)	57.5(5)	B(8B)-B(9B)-B(6B)	90.0(5)
B(3B)-B(7B)-B(8B)	59.6(4)	B(10B)-B(9B)-H(9B)	118.3
B(2B)-B(7B)-B(8B)	103.2(5)	B(5B)-B(9B)-H(9B)	120.2
B(10B)-B(7B)-B(6B)	57.8(5)	B(4B)-B(9B)-H(9B)	120.4
B(3B)-B(7B)-B(6B)	103.0(5)	B(8B)-B(9B)-H(9B)	131.7
B(2B)-B(7B)-B(6B)	59.6(4)	B(6B)-B(9B)-H(9B)	130.7
B(8B)-B(7B)-B(6B)	91.5(5)	B(9B)-B(10B)-B(7B)	100.3(6)
B(10B)-B(7B)-H(7B)	118.2	B(9B)-B(10B)-B(8B)	66.7(5)
B(3B)-B(7B)-H(7B)	120.0	B(7B)-B(10B)-B(8B)	65.1(5)
B(2B)-B(7B)-H(7B)	119.7	B(9B)-B(10B)-B(6B)	66.3(5)
B(8B)-B(7B)-H(7B)	130.4	B(7B)-B(10B)-B(6B)	65.4(5)
B(6B)-B(7B)-H(7B)	130.3	B(8B)-B(10B)-B(6B)	100.7(6)
B(10B)-B(8B)-B(3B)	112.5(6)	B(9B)-B(10B)-H(10B)	129.3
B(10B)-B(8B)-B(4B)	112.0(6)	B(7B)-B(10B)-H(10B)	130.5
B(3B)-B(8B)-B(4B)	61.3(4)	B(8B)-B(10B)-H(10B)	129.6
B(10B)-B(8B)-B(7B)	57.5(5)	B(6B)-B(10B)-H(10B)	129.7
B(3B)-B(8B)-B(7B)	59.7(4)	O(1T)-Li(1)-O(2T)	114.0(13)
B(4B)-B(8B)-B(7B)	102.6(5)	O(2U)-Li(1)-O(1U)	116.7(8)
B(10B)-B(8B)-B(9B)	56.3(5)	O(1T)-Li(1)-C(2)	119.1(8)
B(3B)-B(8B)-B(9B)	102.3(5)	O(2U)-Li(1)-C(2)	122.3(6)
B(4B)-B(8B)-B(9B)	59.9(4)	O(2T)-Li(1)-C(2)	125.8(11)
B(7B)-B(8B)-B(9B)	89.6(6)	O(1U)-Li(1)-C(2)	121.0(6)



O(3T)-Li(2)-C(4)#1	136.1(5)	C(4T)-C(3T)-H(3D)	111.6
O(3T)-Li(2)-C(4)	112.8(5)	H(3C)-C(3T)-H(3D)	109.4
C(4)#1-Li(2)-C(4)	111.1(4)	O(1T)-C(4T)-C(3T)	104.2(7)
O(3T)-Li(2)-Li(2)#1	167.4(7)	O(1T)-C(4T)-H(4C)	110.9
C(4)#1-Li(2)-Li(2)#1	56.4(4)	C(3T)-C(4T)-H(4C)	110.9
C(4)-Li(2)-Li(2)#1	54.8(4)	O(1T)-C(4T)-H(4D)	110.9
O(6T)-Li(4)-O(7T)	108.4(12)	C(3T)-C(4T)-H(4D)	110.9
O(7U)-Li(4)-O(6U)	105.9(12)	H(4C)-C(4T)-H(4D)	108.9
O(6T)-Li(4)-O(4T)	106.5(8)	C(1U)-O(1U)-C(4U)	108.6(5)
O(7T)-Li(4)-O(4T)	111.7(6)	C(1U)-O(1U)-Li(1)	132.9(11)
O(7U)-Li(4)-O(4T)	112.8(9)	C(4U)-O(1U)-Li(1)	113.8(10)
O(6U)-Li(4)-O(4T)	108.6(7)	O(1U)-C(1U)-C(2U)	107.4(5)
O(6T)-Li(4)-O(5T)	114.8(10)	O(1U)-C(1U)-H(1C)	110.2
O(7T)-Li(4)-O(5T)	105.1(6)	C(2U)-C(1U)-H(1C)	110.2
O(7U)-Li(4)-O(5T)	110.4(9)	O(1U)-C(1U)-H(1D)	110.2
O(6U)-Li(4)-O(5T)	108.5(8)	C(2U)-C(1U)-H(1D)	110.2
O(4T)-Li(4)-O(5T)	110.4(7)	H(1C)-C(1U)-H(1D)	108.5
C(1T)-O(1T)-C(4T)	109.7(6)	C(1U)-C(2U)-C(3U)	103.4(6)
C(1T)-O(1T)-Li(1)	120.6(14)	C(1U)-C(2U)-H(2E)	111.1
C(4T)-O(1T)-Li(1)	125.1(14)	C(3U)-C(2U)-H(2E)	111.1
O(1T)-C(1T)-C(2T)	106.8(6)	C(1U)-C(2U)-H(2F)	111.1
O(1T)-C(1T)-H(1A)	110.4	C(3U)-C(2U)-H(2F)	111.1
C(2T)-C(1T)-H(1A)	110.4	H(2E)-C(2U)-H(2F)	109.0
O(1T)-C(1T)-H(1B)	110.4	C(4U)-C(3U)-C(2U)	101.3(6)
C(2T)-C(1T)-H(1B)	110.4	C(4U)-C(3U)-H(3E)	111.5
H(1A)-C(1T)-H(1B)	108.6	C(2U)-C(3U)-H(3E)	111.5
C(1T)-C(2T)-C(3T)	103.2(7)	C(4U)-C(3U)-H(3F)	111.5
C(1T)-C(2T)-H(2C)	111.1	C(2U)-C(3U)-H(3F)	111.5
C(3T)-C(2T)-H(2C)	111.1	H(3E)-C(3U)-H(3F)	109.3
C(1T)-C(2T)-H(2D)	111.1	O(1U)-C(4U)-C(3U)	104.3(6)
C(3T)-C(2T)-H(2D)	111.1	O(1U)-C(4U)-H(4E)	110.9
H(2C)-C(2T)-H(2D)	109.1	C(3U)-C(4U)-H(4E)	110.9
C(2T)-C(3T)-C(4T)	101.0(8)	O(1U)-C(4U)-H(4F)	110.9
C(2T)-C(3T)-H(3C)	111.6	C(3U)-C(4U)-H(4F)	110.9
C(4T)-C(3T)-H(3C)	111.6	H(4E)-C(4U)-H(4F)	108.9
C(2T)-C(3T)-H(3D)	111.6	C(5T)-O(2T)-C(8T)	107.9(8)

C(5T)-O(2T)-Li(1)	102(2)	C(5U)-C(6U)-H(6E)	111.8
C(8T)-O(2T)-Li(1)	146(2)	C(7U)-C(6U)-H(6E)	111.8
O(2T)-C(5T)-C(6T)	108.1(6)	C(5U)-C(6U)-H(6F)	111.8
O(2T)-C(5T)-H(5C)	110.1	C(7U)-C(6U)-H(6F)	111.8
C(6T)-C(5T)-H(5C)	110.1	H(6E)-C(6U)-H(6F)	109.5
O(2T)-C(5T)-H(5D)	110.1	C(8U)-C(7U)-C(6U)	101.5(8)
C(6T)-C(5T)-H(5D)	110.1	C(8U)-C(7U)-H(7E)	111.5
H(5C)-C(5T)-H(5D)	108.4	C(6U)-C(7U)-H(7E)	111.5
C(5T)-C(6T)-C(7T)	104.4(7)	C(8U)-C(7U)-H(7F)	111.5
C(5T)-C(6T)-H(6C)	110.9	C(6U)-C(7U)-H(7F)	111.5
C(7T)-C(6T)-H(6C)	110.9	H(7E)-C(7U)-H(7F)	109.3
C(5T)-C(6T)-H(6D)	110.9	O(2U)-C(8U)-C(7U)	105.7(6)
C(7T)-C(6T)-H(6D)	110.9	O(2U)-C(8U)-H(8E)	110.6
H(6C)-C(6T)-H(6D)	108.9	C(7U)-C(8U)-H(8E)	110.6
C(6T)-C(7T)-C(8T)	101.7(9)	O(2U)-C(8U)-H(8F)	110.6
C(6T)-C(7T)-H(7C)	111.4	C(7U)-C(8U)-H(8F)	110.6
C(8T)-C(7T)-H(7C)	111.4	H(8E)-C(8U)-H(8F)	108.7
C(6T)-C(7T)-H(7D)	111.4	C(12T)-O(3T)-C(9T)	108.9(5)
C(8T)-C(7T)-H(7D)	111.4	C(12T)-O(3T)-Li(2)	123.2(5)
H(7C)-C(7T)-H(7D)	109.3	C(9T)-O(3T)-Li(2)	114.7(5)
O(2T)-C(8T)-C(7T)	103.3(9)	O(3T)-C(9T)-C(10T)	107.0(6)
O(2T)-C(8T)-H(8C)	111.1	O(3T)-C(9T)-H(9C)	110.3
C(7T)-C(8T)-H(8C)	111.1	C(10T)-C(9T)-H(9C)	110.3
O(2T)-C(8T)-H(8D)	111.1	O(3T)-C(9T)-H(9D)	110.3
C(7T)-C(8T)-H(8D)	111.1	C(10T)-C(9T)-H(9D)	110.3
H(8C)-C(8T)-H(8D)	109.1	H(9C)-C(9T)-H(9D)	108.6
C(8U)-O(2U)-C(5U)	109.7(5)	C(11T)-C(10T)-C(9T)	103.7(6)
C(8U)-O(2U)-Li(1)	122.6(13)	C(11T)-C(10T)-H(10C)	111.0
C(5U)-O(2U)-Li(1)	123.7(11)	C(9T)-C(10T)-H(10C)	111.0
O(2U)-C(5U)-C(6U)	104.6(7)	C(11T)-C(10T)-H(10D)	111.0
O(2U)-C(5U)-H(5E)	110.8	C(9T)-C(10T)-H(10D)	111.0
C(6U)-C(5U)-H(5E)	110.8	H(10C)-C(10T)-H(10D)	109.0
O(2U)-C(5U)-H(5F)	110.8	C(10T)-C(11T)-C(12T)	103.9(6)
C(6U)-C(5U)-H(5F)	110.8	C(10T)-C(11T)-H(11A)	111.0
H(5E)-C(5U)-H(5F)	108.9	C(12T)-C(11T)-H(11A)	111.0
C(5U)-C(6U)-C(7U)	99.8(8)	C(10T)-C(11T)-H(11B)	111.0

C(12T)-C(11T)-H(11B)	111.0	C(14T)-C(15U)-H(15C)	110.6
H(11A)-C(11T)-H(11B)	109.0	C(16T)-C(15U)-H(15C)	110.6
O(3T)-C(12T)-C(11T)	103.0(5)	C(14T)-C(15U)-H(15D)	110.6
O(3T)-C(12T)-H(12A)	111.2	C(16T)-C(15U)-H(15D)	110.6
C(11T)-C(12T)-H(12A)	111.2	H(15C)-C(15U)-H(15D)	108.8
O(3T)-C(12T)-H(12B)	111.2	O(4T)-C(16T)-C(15T)	107.7(9)
C(11T)-C(12T)-H(12B)	111.2	O(4T)-C(16T)-C(15U)	104.1(10)
H(12A)-C(12T)-H(12B)	109.1	O(4T)-C(16T)-H(16A)	110.2
C(16T)-O(4T)-C(13T)	108.0(6)	C(15T)-C(16T)-H(16A)	110.2
C(16T)-O(4T)-Li(4)	126.5(6)	O(4T)-C(16T)-H(16B)	110.2
C(13T)-O(4T)-Li(4)	124.6(6)	C(15T)-C(16T)-H(16B)	110.2
C(14T)-C(13T)-O(4T)	107.9(7)	H(16A)-C(16T)-H(16B)	108.5
C(14T)-C(13T)-H(13A)	110.1	O(4T)-C(16T)-H(16C)	110.9
O(4T)-C(13T)-H(13A)	110.1	C(15U)-C(16T)-H(16C)	110.9
C(14T)-C(13T)-H(13B)	110.1	O(4T)-C(16T)-H(16D)	110.9
O(4T)-C(13T)-H(13B)	110.1	C(15U)-C(16T)-H(16D)	110.9
H(13A)-C(13T)-H(13B)	108.4	H(16C)-C(16T)-H(16D)	109.0
C(13T)-C(14T)-C(15U)	103.5(10)	C(17U)-O(5T)-C(20U)	109.0(7)
C(13T)-C(14T)-C(15T)	106.3(10)	C(17T)-O(5T)-C(20T)	107.2(5)
C(13T)-C(14T)-H(14A)	110.5	C(17U)-O(5T)-Li(4)	123.9(8)
C(15T)-C(14T)-H(14A)	110.5	C(17T)-O(5T)-Li(4)	126.0(5)
C(13T)-C(14T)-H(14B)	110.5	C(20U)-O(5T)-Li(4)	126.0(8)
C(15T)-C(14T)-H(14B)	110.5	C(20T)-O(5T)-Li(4)	124.5(5)
H(14A)-C(14T)-H(14B)	108.7	O(5T)-C(17T)-C(18T)	107.4(5)
C(13T)-C(14T)-H(14C)	111.1	O(5T)-C(17T)-H(17A)	110.2
C(15U)-C(14T)-H(14C)	111.1	C(18T)-C(17T)-H(17A)	110.2
C(13T)-C(14T)-H(14D)	111.1	O(5T)-C(17T)-H(17B)	110.2
C(15U)-C(14T)-H(14D)	111.1	C(18T)-C(17T)-H(17B)	110.2
H(14C)-C(14T)-H(14D)	109.0	H(17A)-C(17T)-H(17B)	108.5
C(14T)-C(15T)-C(16T)	104.9(10)	C(19T)-C(18T)-C(17T)	106.5(5)
C(14T)-C(15T)-H(15A)	110.8	C(19T)-C(18T)-H(18A)	110.4
C(16T)-C(15T)-H(15A)	110.8	C(17T)-C(18T)-H(18A)	110.4
C(14T)-C(15T)-H(15B)	110.8	C(19T)-C(18T)-H(18B)	110.4
C(16T)-C(15T)-H(15B)	110.8	C(17T)-C(18T)-H(18B)	110.4
H(15A)-C(15T)-H(15B)	108.8	H(18A)-C(18T)-H(18B)	108.6
C(14T)-C(15U)-C(16T)	105.5(9)	C(18T)-C(19T)-C(20T)	105.7(5)

C(18T)-C(19T)-H(19A)	110.6	C(24T)-O(6T)-Li(4)	138.4(15)
C(20T)-C(19T)-H(19A)	110.6	C(21T)-O(6T)-Li(4)	107.3(12)
C(18T)-C(19T)-H(19B)	110.6	O(6T)-C(21T)-C(22T)	106.4(7)
C(20T)-C(19T)-H(19B)	110.6	O(6T)-C(21T)-H(21A)	110.5
H(19A)-C(19T)-H(19B)	108.7	C(22T)-C(21T)-H(21A)	110.5
O(5T)-C(20T)-C(19T)	104.7(6)	O(6T)-C(21T)-H(21B)	110.5
O(5T)-C(20T)-H(20A)	110.8	C(22T)-C(21T)-H(21B)	110.5
C(19T)-C(20T)-H(20A)	110.8	H(21A)-C(21T)-H(21B)	108.6
O(5T)-C(20T)-H(20B)	110.8	C(21T)-C(22T)-C(23T)	103.6(7)
C(19T)-C(20T)-H(20B)	110.8	C(21T)-C(22T)-H(22A)	111.1
H(20A)-C(20T)-H(20B)	108.9	C(23T)-C(22T)-H(22A)	111.1
O(5T)-C(17U)-C(18U)	107.2(6)	C(21T)-C(22T)-H(22B)	111.1
O(5T)-C(17U)-H(17C)	110.3	C(23T)-C(22T)-H(22B)	111.1
C(18U)-C(17U)-H(17C)	110.3	H(22A)-C(22T)-H(22B)	109.0
O(5T)-C(17U)-H(17D)	110.3	C(24T)-C(23T)-C(22T)	103.7(7)
C(18U)-C(17U)-H(17D)	110.3	C(24T)-C(23T)-H(23A)	111.0
H(17C)-C(17U)-H(17D)	108.5	C(22T)-C(23T)-H(23A)	111.0
C(17U)-C(18U)-C(19U)	104.3(7)	C(24T)-C(23T)-H(23B)	111.0
C(17U)-C(18U)-H(18C)	110.9	C(22T)-C(23T)-H(23B)	111.0
C(19U)-C(18U)-H(18C)	110.9	H(23A)-C(23T)-H(23B)	109.0
C(17U)-C(18U)-H(18D)	110.9	O(6T)-C(24T)-C(23T)	107.9(6)
C(19U)-C(18U)-H(18D)	110.9	O(6T)-C(24T)-H(24A)	110.1
H(18C)-C(18U)-H(18D)	108.9	C(23T)-C(24T)-H(24A)	110.1
C(18U)-C(19U)-C(20U)	101.4(8)	O(6T)-C(24T)-H(24B)	110.1
C(18U)-C(19U)-H(19C)	111.5	C(23T)-C(24T)-H(24B)	110.1
C(20U)-C(19U)-H(19C)	111.5	H(24A)-C(24T)-H(24B)	108.4
C(18U)-C(19U)-H(19D)	111.5	C(24U)-O(6U)-C(21U)	107.4(6)
C(20U)-C(19U)-H(19D)	111.5	C(24U)-O(6U)-Li(4)	116.0(10)
H(19C)-C(19U)-H(19D)	109.3	C(21U)-O(6U)-Li(4)	135.7(10)
O(5T)-C(20U)-C(19U)	103.5(8)	O(6U)-C(21U)-C(22U)	102.9(7)
O(5T)-C(20U)-H(20C)	111.1	O(6U)-C(21U)-H(21C)	111.2
C(19U)-C(20U)-H(20C)	111.1	C(22U)-C(21U)-H(21C)	111.2
O(5T)-C(20U)-H(20D)	111.1	O(6U)-C(21U)-H(21D)	111.2
C(19U)-C(20U)-H(20D)	111.1	C(22U)-C(21U)-H(21D)	111.2
H(20C)-C(20U)-H(20D)	109.0	H(21C)-C(21U)-H(21D)	109.1
C(24T)-O(6T)-C(21T)	110.2(6)	C(23U)-C(22U)-C(21U)	102.8(7)

C(23U)-C(22U)-H(22C)	111.2	C(28T)-C(27T)-H(27B)	111.1
C(21U)-C(22U)-H(22C)	111.2	H(27A)-C(27T)-H(27B)	109.1
C(23U)-C(22U)-H(22D)	111.2	O(7T)-C(28T)-C(27T)	106.0(6)
C(21U)-C(22U)-H(22D)	111.2	O(7T)-C(28T)-H(28A)	110.5
H(22C)-C(22U)-H(22D)	109.1	C(27T)-C(28T)-H(28A)	110.5
C(22U)-C(23U)-C(24U)	104.2(6)	O(7T)-C(28T)-H(28B)	110.5
C(22U)-C(23U)-H(23C)	110.9	C(27T)-C(28T)-H(28B)	110.5
C(24U)-C(23U)-H(23C)	110.9	H(28A)-C(28T)-H(28B)	108.7
C(22U)-C(23U)-H(23D)	110.9	C(25U)-O(7U)-C(28U)	109.5(6)
C(24U)-C(23U)-H(23D)	110.9	C(25U)-O(7U)-Li(4)	127.2(13)
H(23C)-C(23U)-H(23D)	108.9	C(28U)-O(7U)-Li(4)	123.2(13)
O(6U)-C(24U)-C(23U)	107.9(6)	O(7U)-C(25U)-C(26U)	106.4(7)
O(6U)-C(24U)-H(24C)	110.1	O(7U)-C(25U)-H(25C)	110.4
C(23U)-C(24U)-H(24C)	110.1	C(26U)-C(25U)-H(25C)	110.4
O(6U)-C(24U)-H(24D)	110.1	O(7U)-C(25U)-H(25D)	110.4
C(23U)-C(24U)-H(24D)	110.1	C(26U)-C(25U)-H(25D)	110.4
H(24C)-C(24U)-H(24D)	108.4	H(25C)-C(25U)-H(25D)	108.6
C(25T)-O(7T)-C(28T)	110.2(5)	C(25U)-C(26U)-C(27U)	101.2(8)
C(25T)-O(7T)-Li(4)	127.6(9)	C(25U)-C(26U)-H(26C)	111.5
C(28T)-O(7T)-Li(4)	118.5(9)	C(27U)-C(26U)-H(26C)	111.5
O(7T)-C(25T)-C(26T)	107.0(6)	C(25U)-C(26U)-H(26D)	111.5
O(7T)-C(25T)-H(25A)	110.3	C(27U)-C(26U)-H(26D)	111.5
C(26T)-C(25T)-H(25A)	110.3	H(26C)-C(26U)-H(26D)	109.4
O(7T)-C(25T)-H(25B)	110.3	C(28U)-C(27U)-C(26U)	100.3(8)
C(26T)-C(25T)-H(25B)	110.3	C(28U)-C(27U)-H(27C)	111.7
H(25A)-C(25T)-H(25B)	108.6	C(26U)-C(27U)-H(27C)	111.7
C(27T)-C(26T)-C(25T)	104.0(7)	C(28U)-C(27U)-H(27D)	111.7
C(27T)-C(26T)-H(26A)	111.0	C(26U)-C(27U)-H(27D)	111.7
C(25T)-C(26T)-H(26A)	111.0	H(27C)-C(27U)-H(27D)	109.5
C(27T)-C(26T)-H(26B)	111.0	O(7U)-C(28U)-C(27U)	104.9(7)
C(25T)-C(26T)-H(26B)	111.0	O(7U)-C(28U)-H(28C)	110.8
H(26A)-C(26T)-H(26B)	109.0	C(27U)-C(28U)-H(28C)	110.8
C(26T)-C(27T)-C(28T)	103.2(7)	O(7U)-C(28U)-H(28D)	110.8
C(26T)-C(27T)-H(27A)	111.1	C(27U)-C(28U)-H(28D)	110.8
C(28T)-C(27T)-H(27A)	111.1	H(28C)-C(28U)-H(28D)	108.8
C(26T)-C(27T)-H(27B)	111.1	C(4S)-O(1S)-C(1S)	102.6(13)

C(2S)-C(1S)-O(1S)	105.7(14)	C(2S)-C(3S)-C(4S)	105.4(14)
C(2S)-C(1S)-H(1E)	110.6	C(2S)-C(3S)-H(3G)	110.7
O(1S)-C(1S)-H(1E)	110.6	C(4S)-C(3S)-H(3G)	110.7
C(2S)-C(1S)-H(1F)	110.6	C(2S)-C(3S)-H(3H)	110.7
O(1S)-C(1S)-H(1F)	110.6	C(4S)-C(3S)-H(3H)	110.7
H(1E)-C(1S)-H(1F)	108.7	H(3G)-C(3S)-H(3H)	108.8
C(3S)-C(2S)-C(1S)	104.1(15)	O(1S)-C(4S)-C(3S)	112.9(14)
C(3S)-C(2S)-H(2G)	110.9	O(1S)-C(4S)-H(4G)	109.0
C(1S)-C(2S)-H(2G)	110.9	C(3S)-C(4S)-H(4G)	109.0
C(3S)-C(2S)-H(2H)	110.9	O(1S)-C(4S)-H(4H)	109.0
C(1S)-C(2S)-H(2H)	110.9	C(3S)-C(4S)-H(4H)	109.0
H(2G)-C(2S)-H(2H)	109.0	H(4G)-C(4S)-H(4H)	107.8

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

**Table S10.** Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for vL275SL\_0m-5. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2p^2 [ h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(1)	66(3)	42(3)	55(3)	20(3)	18(3)	19(3)
C(2)	62(4)	38(4)	69(5)	24(3)	25(4)	20(3)
N(3)	56(3)	43(3)	59(3)	21(3)	17(3)	23(3)
C(4)	60(4)	48(4)	59(4)	24(4)	17(3)	23(3)
C(5)	72(4)	46(4)	58(4)	27(3)	20(3)	25(3)
C(1A)	70(4)	40(4)	50(4)	12(3)	13(3)	15(3)
B(2A)	70(5)	51(4)	96(6)	19(4)	35(5)	10(4)
B(3A)	88(5)	42(4)	64(5)	26(4)	28(4)	16(4)
B(4A)	93(6)	56(4)	66(5)	22(4)	42(4)	20(4)
B(5A)	93(6)	46(4)	83(6)	19(4)	5(5)	10(4)
B(6A)	86(6)	60(5)	111(7)	23(5)	3(5)	10(4)
B(7A)	104(6)	49(4)	82(6)	22(4)	35(5)	-1(4)
B(8A)	96(6)	42(4)	73(5)	25(4)	31(5)	18(4)
B(9A)	134(7)	52(5)	52(5)	12(4)	10(5)	6(5)
B(10A)	114(7)	49(5)	88(6)	15(4)	20(5)	5(5)
C(1B)	52(4)	50(3)	55(4)	23(3)	11(3)	17(3)
B(2B)	81(5)	80(5)	71(5)	40(4)	23(4)	26(4)
B(3B)	67(5)	53(4)	57(4)	16(4)	16(4)	16(4)
B(4B)	65(5)	72(5)	78(5)	32(4)	17(4)	15(4)
B(5B)	80(5)	71(5)	72(5)	33(4)	14(4)	32(4)
B(6B)	102(7)	114(7)	73(6)	52(5)	20(5)	34(6)
B(7B)	86(6)	86(6)	59(5)	15(4)	15(4)	26(5)
B(8B)	82(5)	82(5)	68(5)	22(4)	10(5)	11(4)
B(9B)	70(5)	118(7)	84(6)	44(6)	9(5)	32(5)
B(10B)	87(6)	114(7)	69(6)	32(5)	9(5)	20(5)
Li(1)	95(8)	83(7)	87(8)	54(7)	28(6)	27(6)
Li(2)	67(6)	58(6)	95(8)	36(6)	32(6)	25(5)
Li(4)	97(9)	84(8)	106(9)	38(7)	34(7)	20(7)
O(1T)	115(6)	87(6)	100(6)	58(5)	33(5)	63(5)
C(1T)	145(14)	93(14)	120(10)	65(11)	13(9)	54(12)

C(2T)	114(14)	145(16)	181(15)	64(14)	11(11)	69(12)
C(3T)	112(15)	164(14)	154(12)	82(13)	56(11)	91(11)
C(4T)	110(14)	119(15)	101(10)	44(12)	44(9)	74(12)
O(1U)	115(6)	87(6)	100(6)	58(5)	33(5)	63(5)
C(1U)	153(11)	83(10)	119(9)	60(7)	46(8)	69(8)
C(2U)	161(12)	105(9)	114(11)	58(8)	47(9)	82(9)
C(3U)	104(11)	142(10)	120(8)	74(7)	51(8)	71(9)
C(4U)	141(11)	107(9)	152(12)	85(8)	68(9)	53(9)
O(2T)	138(12)	121(14)	97(11)	69(11)	36(10)	7(12)
C(5T)	149(15)	122(14)	98(9)	68(11)	52(10)	32(13)
C(6T)	180(13)	125(14)	91(12)	76(11)	52(9)	39(11)
C(7T)	202(16)	151(15)	96(9)	93(11)	51(9)	65(13)
C(8T)	184(15)	161(15)	102(12)	83(12)	48(11)	49(12)
O(2U)	116(8)	101(8)	82(6)	62(7)	34(6)	55(7)
C(5U)	112(7)	114(10)	101(8)	74(8)	75(7)	45(8)
C(6U)	188(13)	159(13)	108(12)	54(11)	80(11)	44(11)
C(7U)	217(14)	201(15)	95(8)	87(11)	67(8)	40(14)
C(8U)	167(11)	170(12)	99(9)	103(9)	33(7)	23(10)
O(3T)	66(3)	79(3)	87(3)	37(3)	29(2)	21(2)
C(9T)	73(5)	104(5)	103(5)	47(4)	19(4)	12(4)
C(10T)	103(5)	76(4)	115(5)	36(4)	38(4)	31(4)
C(11T)	97(5)	95(5)	129(6)	63(5)	40(4)	37(4)
C(12T)	73(4)	100(5)	92(5)	45(4)	31(4)	29(4)
O(4T)	100(4)	131(4)	87(3)	46(3)	32(3)	42(3)
C(13T)	116(6)	134(6)	99(6)	57(5)	45(5)	45(5)
C(14T)	119(7)	176(9)	104(5)	57(6)	29(5)	51(6)
C(15T)	140(9)	126(13)	102(6)	22(7)	6(6)	71(9)
C(15U)	140(9)	126(13)	102(6)	22(7)	6(6)	71(9)
C(16T)	114(6)	159(8)	108(5)	41(6)	26(5)	62(6)
O(5T)	83(3)	106(4)	128(4)	42(3)	32(3)	18(3)
C(17T)	100(8)	134(8)	186(12)	102(8)	32(8)	33(6)
C(18T)	94(7)	120(9)	139(10)	68(8)	26(7)	42(6)
C(19T)	108(8)	94(9)	224(14)	57(9)	60(9)	33(7)
C(20T)	112(8)	108(8)	186(11)	71(8)	58(8)	54(6)
C(17U)	76(10)	147(14)	157(10)	66(13)	58(8)	37(11)
C(18U)	83(9)	106(15)	187(15)	106(13)	44(10)	43(11)



C(19U)	99(10)	129(18)	155(14)	49(15)	39(11)	33(13)
C(20U)	124(13)	186(18)	161(11)	12(16)	27(9)	45(14)
O(6T)	104(11)	129(9)	132(12)	56(8)	5(9)	-29(9)
C(21T)	157(10)	138(8)	165(10)	85(7)	0(8)	-35(7)
C(22T)	199(12)	133(8)	191(12)	88(8)	-20(10)	-30(8)
C(23T)	199(12)	133(8)	191(12)	88(8)	-20(10)	-30(8)
C(24T)	157(10)	138(8)	165(10)	85(7)	0(8)	-35(7)
O(6U)	95(9)	128(7)	85(8)	54(6)	20(7)	44(7)
C(21U)	124(8)	145(7)	153(8)	109(6)	6(7)	-40(7)
C(22U)	158(10)	158(7)	159(10)	115(7)	-21(8)	2(8)
C(23U)	158(10)	158(7)	159(10)	115(7)	-21(8)	2(8)
C(24U)	124(8)	145(7)	153(8)	109(6)	6(7)	-40(7)
O(7T)	97(7)	134(9)	82(6)	30(6)	33(5)	55(7)
C(25T)	101(7)	148(11)	85(8)	0(7)	17(6)	45(8)
C(26T)	99(10)	219(15)	129(10)	-35(10)	22(8)	49(10)
C(27T)	131(9)	183(10)	94(7)	19(7)	52(7)	20(9)
C(28T)	112(6)	185(8)	93(6)	35(6)	51(6)	51(7)
O(7U)	143(14)	142(11)	92(9)	21(9)	57(11)	26(11)
C(25U)	205(16)	152(13)	109(11)	30(10)	48(12)	44(14)
C(26U)	160(16)	171(13)	116(12)	9(11)	40(12)	54(13)
C(27U)	131(9)	183(10)	94(7)	19(7)	52(7)	20(9)
C(28U)	112(6)	185(8)	93(6)	35(6)	51(6)	51(7)
O(1S)	271(12)	223(10)	236(13)	99(9)	65(9)	-13(9)
C(1S)	282(17)	157(11)	206(13)	46(8)	78(10)	68(10)
C(2S)	272(14)	139(11)	242(16)	17(9)	142(11)	29(9)
C(3S)	246(13)	169(10)	153(10)	62(7)	92(9)	9(8)
C(4S)	181(12)	311(17)	136(10)	86(9)	53(9)	12(11)

---

**Table S11.** Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for vL275SL\_0m-5.

	x	y	z	U(eq)
H(5)	3185	3167	-1400	68
H(2A)	397	1638	-758	94
H(3A)	3204	902	-567	78
H(4A)	3907	1093	-2165	86
H(5A)	1111	1872	-2312	101
H(6A)	-1479	552	-2467	118
H(7A)	-21	-148	-1245	102
H(8A)	2435	-548	-2239	85
H(9A)	933	133	-3493	109
H(10A)	-783	-1049	-3049	115
H(2B)	4561	3992	2037	92
H(3B)	5582	5459	1468	77
H(4B)	8295	4757	929	90
H(5B)	7281	3277	1489	90
H(6B)	7343	4241	3228	114
H(7B)	6187	5796	3201	102
H(8B)	8773	6329	2418	105
H(9B)	10000	4776	2449	113
H(10B)	9365	5989	3837	118
H(1A)	6898	918	976	139
H(1B)	7838	1894	1288	139
H(2C)	8793	658	474	182
H(2D)	9260	1548	447	182
H(3C)	6834	19	-761	156
H(3D)	8053	625	-950	156
H(4C)	6949	1679	-580	125
H(4D)	5475	842	-1025	125
H(1C)	5969	515	568	129
H(1D)	7651	1160	1113	129
H(2E)	7038	-184	-338	140

H(2F)	8566	618	64	140
H(3E)	7552	664	-1141	132
H(3F)	5842	315	-1148	132
H(4E)	7990	1990	-54	143
H(4F)	6266	1765	-575	143
H(5C)	1876	1286	691	141
H(5D)	2593	2249	876	141
H(6C)	1231	1697	1835	147
H(6D)	1662	2636	1917	147
H(7C)	3172	2364	3054	162
H(7D)	4020	3061	2818	162
H(8C)	5408	2133	2515	171
H(8D)	3929	1312	2159	171
H(5E)	1735	1131	986	111
H(5F)	1984	1976	876	111
H(6E)	1304	2043	2165	182
H(6F)	2637	2851	2303	182
H(7E)	3870	2402	3190	200
H(7F)	3039	1414	2519	200
H(8E)	5451	2612	2456	166
H(8F)	5222	1626	2175	166
H(9C)	1085	3748	-721	118
H(9D)	-6	4291	-438	118
H(10C)	-927	3532	142	120
H(10D)	-161	2863	-350	120
H(11A)	1913	3407	757	122
H(11B)	702	3611	1242	122
H(12A)	1363	4996	1467	105
H(12B)	2983	4857	1567	105
H(13A)	5343	7725	2539	136
H(13B)	4574	6788	2410	136
H(14A)	2926	6613	1346	164
H(14B)	3453	7612	1626	164
H(14C)	2525	6582	1517	164
H(14D)	3558	7343	1423	164
H(15A)	1213	6687	1984	161

H(15B)	1321	7543	1908	161
H(15C)	1292	7495	1893	161
H(15D)	2799	8305	2283	161
H(16A)	2658	8361	3215	160
H(16B)	1934	7545	3321	160
H(16C)	2529	8301	3452	160
H(16D)	1784	7283	3006	160
H(17A)	8296	9365	5096	160
H(17B)	7751	9027	4108	160
H(18A)	9855	8783	4003	138
H(18B)	10490	9261	5003	138
H(19A)	10491	8038	4933	176
H(19B)	9579	7543	3954	176
H(20A)	7688	7060	4370	156
H(20B)	8376	7856	5291	156
H(17C)	7517	8265	3461	151
H(17D)	7452	7343	3364	151
H(18C)	9971	8805	4125	131
H(18D)	9945	7840	3816	131
H(19C)	10733	8858	5398	162
H(19D)	9780	7871	5046	162
H(20C)	8180	8534	5660	223
H(20D)	8574	9253	5369	223
H(21A)	5498	7285	5528	206
H(21B)	6255	6805	4852	206
H(22A)	4021	6063	5392	238
H(22B)	5374	5737	5132	238
H(23A)	4073	5066	3750	238
H(23B)	2641	5005	4090	238
H(24A)	3144	5827	3234	206
H(24B)	2120	6020	3838	206
H(21C)	3963	6638	5299	177
H(21D)	5713	6802	5347	177
H(22C)	5204	5441	4289	196
H(22D)	4039	5261	4771	196
H(23C)	2041	5136	3801	196

H(23D)	3062	4862	3204	196
H(24C)	3430	6052	3113	177
H(24D)	2266	6274	3623	177
H(25A)	6779	9763	5904	159
H(25B)	6597	9039	6193	159
H(26A)	5720	9869	7127	233
H(26B)	5272	10326	6580	233
H(27A)	2933	9471	6318	187
H(27B)	3549	8752	6415	187
H(28A)	2770	8136	5007	166
H(28B)	3015	9032	5000	166
H(25C)	4065	9468	4870	204
H(25D)	5800	9842	5440	204
H(26C)	3195	9734	5984	205
H(26D)	4796	10494	6443	205
H(27C)	5980	9678	6887	187
H(27D)	4351	9426	7017	187
H(28C)	5092	8220	6041	166
H(28D)	3386	8206	5750	166
H(1E)	9241	2130	2852	276
H(1F)	8700	2863	2743	276
H(2G)	11300	3052	3895	289
H(2H)	11133	3579	3386	289
H(3G)	10276	4383	4214	241
H(3H)	11155	4119	4850	241
H(4G)	9101	3411	4866	274
H(4H)	8250	3803	4363	274

---

**Table S12.** Torsion angles [°] for vL275SL\_0m-5.

---

C(5)-N(1)-C(2)-N(3)	0.0(5)
C(1A)-N(1)-C(2)-N(3)	-176.8(4)
C(5)-N(1)-C(2)-Li(1)	-167.7(4)
C(1A)-N(1)-C(2)-Li(1)	15.5(8)
N(1)-C(2)-N(3)-C(4)	-0.7(6)
Li(1)-C(2)-N(3)-C(4)	167.6(4)
N(1)-C(2)-N(3)-C(1B)	178.4(4)
Li(1)-C(2)-N(3)-C(1B)	-13.4(7)
C(2)-N(3)-C(4)-C(5)	1.0(6)
C(1B)-N(3)-C(4)-C(5)	-178.0(4)
C(2)-N(3)-C(4)-Li(2)#1	-152.8(5)
C(1B)-N(3)-C(4)-Li(2)#1	28.2(7)
C(2)-N(3)-C(4)-Li(2)	125.3(5)
C(1B)-N(3)-C(4)-Li(2)	-53.7(6)
N(3)-C(4)-C(5)-N(1)	-0.9(6)
Li(2)#1-C(4)-C(5)-N(1)	150.7(5)
Li(2)-C(4)-C(5)-N(1)	-127.6(5)
C(2)-N(1)-C(5)-C(4)	0.7(6)
C(1A)-N(1)-C(5)-C(4)	177.5(5)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(5A)	166.1(6)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(5A)	-10.3(9)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(4A)	-100.8(7)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(4A)	82.8(7)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(3A)	-10.5(8)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(3A)	173.1(5)
C(2)-N(1)-C(1A)-B(2A)	77.8(7)
C(5)-N(1)-C(1A)-B(2A)	-98.6(7)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	147.4(5)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	27.6(5)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	-33.8(7)
B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(6A)	-93.2(6)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	-147.7(5)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	92.5(6)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	31.1(7)

B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(7A)	-28.3(5)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	119.8(6)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	-61.4(5)
B(3A)-C(1A)-B(2A)-B(5A)	-120.8(5)
N(1)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	-119.4(6)
B(5A)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	120.8(5)
B(4A)-C(1A)-B(2A)-B(3A)	59.4(5)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	147.0(5)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	-30.0(7)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	-91.7(5)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(7A)	27.8(5)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	-149.4(5)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	33.5(7)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	-28.2(5)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(8A)	91.3(5)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	119.3(6)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	-57.8(5)
B(4A)-C(1A)-B(3A)-B(2A)	-119.5(5)
N(1)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	-121.3(6)
B(5A)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	61.7(5)
B(2A)-C(1A)-B(3A)-B(4A)	119.5(5)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	103.8(6)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	148.9(6)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-C(1A)	44.1(4)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-148.9(6)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-45.0(5)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(7A)	-104.8(5)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-104.3(5)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-0.5(6)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	44.5(5)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(8A)	-60.3(5)
C(1A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	-45.1(4)
B(6A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	58.8(5)
B(7A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	103.8(5)
B(5A)-B(2A)-B(3A)-B(4A)	-1.0(4)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	148.1(5)

B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	-90.4(6)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	28.2(5)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(8A)	-30.7(7)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	-148.3(5)
B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	-26.7(5)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	91.8(5)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(9A)	32.9(6)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	120.0(6)
B(5A)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	-118.5(5)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(3A)	-58.9(5)
N(1)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	-121.5(7)
B(3A)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	118.5(5)
B(2A)-C(1A)-B(4A)-B(5A)	59.7(5)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	104.1(5)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	148.8(6)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-C(1A)	45.9(4)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-148.8(6)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-44.7(4)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(8A)	-102.8(5)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	-103.7(5)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	0.3(6)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	45.0(5)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(9A)	-57.8(5)
C(1A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	-44.9(4)
B(7A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	59.1(5)
B(8A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	103.8(5)
B(2A)-B(3A)-B(4A)-B(5A)	1.0(4)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	-146.4(6)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	91.2(6)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	30.6(7)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(6A)	-27.3(5)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	-119.2(6)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	118.5(5)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(2A)	57.9(5)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	149.3(6)
B(4A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	27.0(5)



B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	-33.7(7)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(9A)	-91.6(6)
N(1)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	122.3(6)
B(3A)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	-60.6(5)
B(2A)-C(1A)-B(5A)-B(4A)	-118.5(5)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-149.7(6)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-104.3(5)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-C(1A)	-44.9(4)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	149.7(6)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	45.4(5)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(6A)	104.8(5)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	105.2(6)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	-44.6(5)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	0.9(6)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(9A)	60.3(5)
C(1A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	45.9(4)
B(6A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	-103.8(5)
B(7A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	-58.4(5)
B(3A)-B(2A)-B(5A)-B(4A)	1.0(4)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	105.0(5)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	150.2(6)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-C(1A)	46.4(4)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-105.7(6)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-0.6(6)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	44.6(5)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(6A)	-59.2(5)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	-47.4(4)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	57.6(5)
B(9A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	102.8(5)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(2A)	-1.0(4)
C(1A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-150.2(6)
B(8A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-45.2(5)
B(3A)-B(4A)-B(5A)-B(9A)	-103.8(5)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	78.4(7)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	-23.6(6)
B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	103.9(7)

B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(10A)	21.0(8)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-25.5(5)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-127.4(6)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(5A)	-82.9(5)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	101.9(6)
B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	127.4(6)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(7A)	44.5(5)
C(1A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	19.6(7)
B(7A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	-82.3(5)
B(5A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	45.1(5)
B(3A)-B(2A)-B(6A)-B(9A)	-37.8(6)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-77.1(8)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-103.8(7)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	23.8(6)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(10A)	-20.5(8)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	26.7(5)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	127.6(6)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(2A)	83.3(5)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	-18.2(7)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	-44.8(5)
B(9A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	82.8(6)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(7A)	38.5(7)
C(1A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-101.0(6)
B(2A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-127.6(6)
B(4A)-B(5A)-B(6A)-B(9A)	-44.3(5)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-77.3(7)
B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	24.0(6)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-21.2(8)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(10A)	-104.0(7)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-101.3(6)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-45.2(5)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(6A)	-128.0(6)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	26.7(5)
B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	128.0(6)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(3A)	82.9(5)
C(1A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	-18.1(7)

B(6A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	83.2(6)
B(5A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	38.0(6)
B(3A)-B(2A)-B(7A)-B(8A)	-44.8(5)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-153.8(7)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-108.7(7)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(10A)	-48.8(5)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	153.8(7)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	45.1(5)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(2A)	105.0(5)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	109.0(6)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	-44.8(5)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	0.3(7)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(3A)	60.2(5)
B(10A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	49.5(5)
B(2A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	-104.2(5)
B(5A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	-59.2(6)
B(9A)-B(6A)-B(7A)-B(8A)	0.7(4)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	77.3(7)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	-23.4(5)
B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	104.0(7)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(10A)	21.2(7)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-26.7(5)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-127.4(5)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(2A)	-82.8(5)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	16.9(6)
B(8A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	-83.8(5)
B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	43.6(5)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(6A)	-39.2(6)
C(1A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	100.7(5)
B(2A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	127.4(5)
B(4A)-B(3A)-B(7A)-B(8A)	44.6(4)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-77.6(6)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	23.4(5)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-20.4(6)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(10A)	-103.9(6)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-101.1(6)

B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-43.9(5)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(7A)	-127.4(5)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	26.3(5)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	127.4(5)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(4A)	83.5(5)
C(1A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	-18.9(6)
B(7A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	82.2(5)
B(2A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	38.3(6)
B(4A)-B(3A)-B(8A)-B(9A)	-45.2(5)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-108.7(6)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-50.4(5)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(10A)	-154.0(6)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	154.0(6)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	45.3(5)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(3A)	103.6(5)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	108.9(6)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	0.3(6)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	58.5(5)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(4A)	-45.1(5)
B(10A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	49.7(5)
B(2A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-59.0(5)
B(6A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-0.7(4)
B(3A)-B(7A)-B(8A)-B(9A)	-104.3(5)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	77.0(7)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	-23.0(6)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	103.9(6)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(10A)	22.0(7)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-26.8(5)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-126.8(5)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(3A)	-81.9(5)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	17.9(7)
B(9A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	-82.1(5)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	44.7(5)
B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(7A)	-37.2(6)
C(1A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	100.0(6)
B(3A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	126.8(5)

B(5A)-B(4A)-B(8A)-B(9A)	45.0(5)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	108.3(6)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	153.4(7)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(10A)	49.1(5)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-153.4(7)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-45.1(5)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(5A)	-104.3(5)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	-49.8(5)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	58.5(5)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	103.6(5)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(8A)	-0.7(4)
B(10A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	-108.7(6)
B(2A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	-0.4(6)
B(5A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	44.6(5)
B(7A)-B(6A)-B(9A)-B(4A)	-59.7(5)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	78.3(8)
B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	-24.2(6)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	19.6(8)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(10A)	103.6(7)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	102.5(7)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	43.8(5)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(6A)	127.8(6)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	19.6(7)
B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	-82.8(6)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	-39.1(6)
B(4A)-B(5A)-B(9A)-B(8A)	45.0(5)
C(1A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-25.4(5)
B(6A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-127.8(6)
B(2A)-B(5A)-B(9A)-B(4A)	-84.1(5)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-109.0(6)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-49.9(5)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(10A)	-154.4(6)
B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	50.7(5)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	-58.3(5)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	0.7(4)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(6A)	-103.8(5)

B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	109.0(7)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	0.0(6)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	59.0(6)
B(4A)-B(8A)-B(9A)-B(5A)	-45.5(5)
B(10A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	154.4(6)
B(3A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	45.4(5)
B(7A)-B(8A)-B(9A)-B(4A)	104.5(5)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-79.0(7)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	22.9(5)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-21.8(7)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(10A)	-103.7(7)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	-19.0(6)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	82.9(5)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	38.2(6)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(6A)	-43.8(5)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	24.8(5)
B(8A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	126.6(6)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(5A)	81.9(5)
C(1A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-101.9(5)
B(3A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-44.7(4)
B(5A)-B(4A)-B(9A)-B(8A)	-126.6(6)
B(6A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-114.1(6)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-89.6(6)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(8A)	-23.7(6)
B(6A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	-56.2(6)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	-31.7(8)
B(8A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	57.9(5)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(7A)	34.1(8)
B(5A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	24.5(6)
B(8A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	114.1(6)
B(4A)-B(9A)-B(10A)-B(6A)	90.4(6)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	90.0(6)
B(7A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	114.2(5)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(9A)	23.9(5)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-24.2(5)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-90.3(5)

B(9A)-B(8A)-B(10A)-B(7A)	-114.2(5)
B(3A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	32.3(7)
B(7A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	56.6(6)
B(4A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	-33.8(7)
B(9A)-B(8A)-B(10A)-B(6A)	-57.6(5)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	32.5(8)
B(6A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	56.7(6)
B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	-34.0(8)
B(8A)-B(7A)-B(10A)-B(9A)	-58.3(5)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	90.8(6)
B(6A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	114.9(6)
B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(8A)	24.2(5)
B(2A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-24.2(6)
B(3A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-90.7(6)
B(8A)-B(7A)-B(10A)-B(6A)	-114.9(6)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-91.1(7)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-25.0(6)
B(7A)-B(6A)-B(10A)-B(9A)	-115.5(6)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	-32.8(8)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	33.3(8)
B(7A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	-57.2(5)
B(9A)-B(6A)-B(10A)-B(8A)	58.3(5)
B(2A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	24.5(6)
B(5A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	90.5(7)
B(9A)-B(6A)-B(10A)-B(7A)	115.5(6)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(5B)	33.4(8)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(5B)	-147.6(6)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(4B)	124.5(6)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(4B)	-56.6(7)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(3B)	-147.7(5)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(3B)	31.3(7)
C(2)-N(3)-C(1B)-B(2B)	-58.6(7)
C(4)-N(3)-C(1B)-B(2B)	120.3(6)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	-146.6(5)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	91.0(5)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	30.7(6)

B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(7B)	-27.9(5)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	149.1(5)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	26.7(5)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	-33.6(7)
B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(6B)	-92.2(6)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	-118.7(6)
B(5B)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	118.9(5)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(3B)	58.7(5)
N(3)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	122.4(6)
B(4B)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	-60.3(5)
B(3B)-C(1B)-B(2B)-B(5B)	-118.9(5)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	-146.6(5)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	32.5(7)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	-27.7(5)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(8B)	92.6(6)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	149.0(5)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	-31.9(7)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	-92.1(5)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(7B)	28.2(5)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	-118.9(6)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	60.1(5)
B(2B)-C(1B)-B(3B)-B(4B)	120.3(5)
N(3)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	120.8(6)
B(5B)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	-60.2(5)
B(4B)-C(1B)-B(3B)-B(2B)	-120.3(5)
B(7B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	148.6(6)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	103.9(5)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-C(1B)	45.1(4)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	-104.1(5)
B(7B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	44.5(5)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	-0.2(6)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(8B)	-59.0(5)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-148.6(6)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-44.8(5)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(7B)	-103.5(5)
C(1B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	-45.2(4)



B(7B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	103.5(5)
B(6B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	58.7(5)
B(5B)-B(2B)-B(3B)-B(4B)	0.0(4)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	146.1(5)
B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	-91.5(6)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	27.5(5)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(8B)	-31.3(7)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	-149.2(5)
B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	-26.8(5)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	92.3(6)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(9B)	33.5(7)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	118.6(6)
B(5B)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	-119.0(5)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(3B)	-58.8(5)
N(3)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	-122.4(6)
B(3B)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	119.0(5)
B(2B)-C(1B)-B(4B)-B(5B)	60.2(5)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	149.3(6)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	104.2(5)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-C(1B)	45.2(4)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-149.3(6)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-45.1(5)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(8B)	-104.1(5)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	-103.4(5)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	45.9(5)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	0.7(6)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(9B)	-58.3(5)
C(1B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	-45.2(4)
B(8B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	104.1(5)
B(7B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	59.0(5)
B(2B)-B(3B)-B(4B)-B(5B)	0.0(4)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	146.7(6)
B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	27.3(6)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	-32.3(7)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(9B)	-92.0(6)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	-148.0(6)

B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	92.6(6)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	33.0(7)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(6B)	-26.7(6)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	119.5(6)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	-59.5(5)
B(2B)-C(1B)-B(5B)-B(4B)	-119.3(5)
N(3)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	-121.3(6)
B(4B)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	119.3(5)
B(3B)-C(1B)-B(5B)-B(2B)	59.7(5)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	104.2(5)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	150.0(6)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-C(1B)	46.0(4)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-150.0(6)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-45.8(5)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(9B)	-104.0(5)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	-104.5(5)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	-0.3(6)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	45.5(5)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(6B)	-58.5(5)
C(1B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	-46.0(4)
B(8B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	58.2(5)
B(9B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	104.0(5)
B(3B)-B(4B)-B(5B)-B(2B)	0.0(4)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-104.0(5)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-150.4(6)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-C(1B)	-45.8(4)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	105.0(6)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	1.1(6)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	-45.3(5)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(9B)	59.2(5)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	150.4(6)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	46.4(5)
B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(6B)	104.5(5)
C(1B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	45.9(4)
B(7B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	-58.1(5)
B(6B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	-104.5(5)

B(3B)-B(2B)-B(5B)-B(4B)	0.0(4)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	77.1(7)
B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	-23.5(6)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	20.2(7)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(10B)	102.0(7)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-24.9(5)
B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-125.5(6)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(5B)	-81.8(5)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	100.6(6)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	43.7(5)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(7B)	125.5(6)
C(1B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	19.1(7)
B(7B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	-81.5(6)
B(3B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	-37.8(6)
B(5B)-B(2B)-B(6B)-B(9B)	44.0(5)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-78.6(7)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	23.5(6)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-21.2(7)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(10B)	-104.1(7)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	25.5(5)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	127.6(6)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(2B)	82.9(5)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	-20.1(7)
B(9B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	82.0(6)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	37.3(6)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(7B)	-45.6(5)
C(1B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-102.1(6)
B(4B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-44.7(5)
B(2B)-B(5B)-B(6B)-B(9B)	-127.6(6)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	77.8(7)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	-23.7(6)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	20.7(7)
B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(10B)	104.6(7)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-26.8(5)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-128.3(6)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(2B)	-83.8(5)

C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	101.5(6)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	44.5(5)
B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(8B)	128.3(5)
C(1B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	17.5(7)
B(8B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	-84.0(6)
B(4B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	-39.5(6)
B(2B)-B(3B)-B(7B)-B(6B)	44.3(5)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-77.3(7)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	24.0(6)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-104.0(7)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(10B)	-21.7(7)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	26.6(5)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	128.0(6)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(3B)	82.2(5)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	-17.4(7)
B(6B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	83.9(6)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	-44.0(5)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(8B)	38.2(6)
C(1B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-101.4(6)
B(3B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-128.0(6)
B(5B)-B(2B)-B(7B)-B(6B)	-45.7(5)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-153.7(7)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-107.1(6)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(10B)	-49.0(5)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	108.4(6)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	-45.3(5)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	1.2(7)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(3B)	59.4(6)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	153.7(7)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	46.5(5)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(2B)	104.7(5)
B(10B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	49.3(5)
B(2B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	-104.4(5)
B(5B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	-57.8(6)
B(9B)-B(6B)-B(7B)-B(8B)	0.3(5)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-77.3(7)

B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	23.8(6)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-103.6(7)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(10B)	-20.1(7)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	26.3(5)
B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	127.4(6)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(4B)	83.5(5)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-101.1(6)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-127.4(6)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(7B)	-43.9(5)
C(1B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	-18.9(7)
B(7B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	82.2(6)
B(4B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	-45.2(5)
B(2B)-B(3B)-B(8B)-B(9B)	38.3(6)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	78.2(7)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	-22.3(6)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	104.4(7)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(10B)	22.3(7)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-26.2(5)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-126.7(6)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(3B)	-82.2(5)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	18.5(7)
B(9B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	-82.0(6)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	44.7(5)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(7B)	-37.5(6)
C(1B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	100.5(6)
B(3B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	126.7(6)
B(5B)-B(4B)-B(8B)-B(9B)	44.6(5)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-153.8(6)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-108.7(6)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(10B)	-49.6(5)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	153.8(6)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	45.1(5)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(3B)	104.2(5)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	108.2(6)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	-45.6(5)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	-0.5(6)

B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(4B)	58.6(6)
B(10B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	49.3(5)
B(3B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	-104.5(5)
B(2B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	-59.4(6)
B(6B)-B(7B)-B(8B)-B(9B)	-0.3(5)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	77.3(7)
B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	-24.3(6)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	103.2(7)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(10B)	19.8(7)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-25.8(5)
B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-127.5(6)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(4B)	-83.3(5)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	18.5(7)
B(6B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	-83.1(6)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	44.4(5)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(8B)	-39.0(6)
C(1B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	101.7(6)
B(4B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	127.5(6)
B(2B)-B(5B)-B(9B)-B(6B)	44.2(5)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-79.2(7)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	22.4(6)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-22.2(7)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(10B)	-104.4(7)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	25.2(5)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	126.8(6)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(5B)	82.2(5)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-101.7(6)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-44.6(5)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(8B)	-126.8(6)
C(1B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	-19.3(7)
B(8B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	82.3(6)
B(3B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	37.7(6)
B(5B)-B(4B)-B(9B)-B(6B)	-44.5(5)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-109.0(6)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-155.0(6)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(10B)	-50.1(5)

B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	109.4(6)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	0.4(7)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	-45.6(5)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(5B)	59.3(6)
B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	155.0(6)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	46.0(5)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(4B)	104.9(5)
B(10B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	50.4(5)
B(3B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	-58.5(6)
B(4B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	-104.5(5)
B(7B)-B(8B)-B(9B)-B(6B)	0.3(5)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	108.0(6)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	153.2(6)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(10B)	49.6(5)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-153.2(6)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-45.2(5)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(5B)	-103.6(5)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	-107.9(6)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	0.1(7)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	45.3(5)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(4B)	-58.3(6)
B(10B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	-49.9(5)
B(2B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	58.2(6)
B(5B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	103.3(5)
B(7B)-B(6B)-B(9B)-B(8B)	-0.3(5)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	-32.3(8)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	34.1(8)
B(8B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	57.0(5)
B(6B)-B(9B)-B(10B)-B(7B)	-57.2(6)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-89.3(6)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-22.9(6)
B(6B)-B(9B)-B(10B)-B(8B)	-114.2(6)
B(5B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	24.9(6)
B(4B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	91.3(6)
B(8B)-B(9B)-B(10B)-B(6B)	114.2(6)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	-33.8(8)

B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	33.3(8)
B(8B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	-58.2(6)
B(6B)-B(7B)-B(10B)-B(9B)	57.8(6)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	24.3(6)
B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	91.5(6)
B(6B)-B(7B)-B(10B)-B(8B)	116.0(6)
B(3B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-91.7(6)
B(2B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-24.5(6)
B(8B)-B(7B)-B(10B)-B(6B)	-116.0(6)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	90.1(6)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	23.2(6)
B(7B)-B(8B)-B(10B)-B(9B)	114.5(6)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-24.4(6)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-91.2(6)
B(9B)-B(8B)-B(10B)-B(7B)	-114.5(6)
B(3B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	31.9(8)
B(4B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	-35.0(7)
B(7B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	56.3(5)
B(9B)-B(8B)-B(10B)-B(6B)	-58.2(6)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-90.3(6)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-24.4(6)
B(7B)-B(6B)-B(10B)-B(9B)	-114.5(6)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	24.3(6)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	90.2(6)
B(9B)-B(6B)-B(10B)-B(7B)	114.5(6)
B(2B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	-31.8(8)
B(5B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	34.1(7)
B(7B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	-56.1(5)
B(9B)-B(6B)-B(10B)-B(8B)	58.5(5)
O(2U)-Li(1)-O(1T)-C(1T)	-57(3)
O(2T)-Li(1)-O(1T)-C(1T)	-53(3)
O(1U)-Li(1)-O(1T)-C(1T)	36(5)
C(2)-Li(1)-O(1T)-C(1T)	138(2)
O(2U)-Li(1)-O(1T)-C(4T)	150.2(19)
O(2T)-Li(1)-O(1T)-C(4T)	154(2)
O(1U)-Li(1)-O(1T)-C(4T)	-118(7)



C(2)-Li(1)-O(1T)-C(4T)	-15(2)
C(4T)-O(1T)-C(1T)-C(2T)	-1(3)
Li(1)-O(1T)-C(1T)-C(2T)	-158.1(19)
O(1T)-C(1T)-C(2T)-C(3T)	-23(2)
C(1T)-C(2T)-C(3T)-C(4T)	36(2)
C(1T)-O(1T)-C(4T)-C(3T)	24(2)
Li(1)-O(1T)-C(4T)-C(3T)	-180(2)
C(2T)-C(3T)-C(4T)-O(1T)	-37(2)
O(1T)-Li(1)-O(1U)-C(1U)	-80(6)
O(2U)-Li(1)-O(1U)-C(1U)	14(2)
O(2T)-Li(1)-O(1U)-C(1U)	16(2)
C(2)-Li(1)-O(1U)-C(1U)	-164.3(14)
O(1T)-Li(1)-O(1U)-C(4U)	72(6)
O(2U)-Li(1)-O(1U)-C(4U)	166.1(12)
O(2T)-Li(1)-O(1U)-C(4U)	168.7(15)
C(2)-Li(1)-O(1U)-C(4U)	-11.9(13)
C(4U)-O(1U)-C(1U)-C(2U)	-7.0(17)
Li(1)-O(1U)-C(1U)-C(2U)	146.4(13)
O(1U)-C(1U)-C(2U)-C(3U)	-17.5(17)
C(1U)-C(2U)-C(3U)-C(4U)	33.6(15)
C(1U)-O(1U)-C(4U)-C(3U)	28.9(16)
Li(1)-O(1U)-C(4U)-C(3U)	-130.1(14)
C(2U)-C(3U)-C(4U)-O(1U)	-38.5(15)
O(1T)-Li(1)-O(2T)-C(5T)	-139(2)
O(2U)-Li(1)-O(2T)-C(5T)	-6(20)
O(1U)-Li(1)-O(2T)-C(5T)	-152.2(19)
C(2)-Li(1)-O(2T)-C(5T)	28(3)
O(1T)-Li(1)-O(2T)-C(8T)	69(4)
O(1U)-Li(1)-O(2T)-C(8T)	56(4)
C(2)-Li(1)-O(2T)-C(8T)	-123(3)
C(8T)-O(2T)-C(5T)-C(6T)	15(3)
Li(1)-O(2T)-C(5T)-C(6T)	-149(3)
O(2T)-C(5T)-C(6T)-C(7T)	10(4)
C(5T)-C(6T)-C(7T)-C(8T)	-29(3)
C(5T)-O(2T)-C(8T)-C(7T)	-33(3)
Li(1)-O(2T)-C(8T)-C(7T)	118(3)

C(6T)-C(7T)-C(8T)-O(2T)	38(2)
O(1T)-Li(1)-O(2U)-C(8U)	71.9(17)
O(2T)-Li(1)-O(2U)-C(8U)	24(21)
O(1U)-Li(1)-O(2U)-C(8U)	58.4(17)
C(2)-Li(1)-O(2U)-C(8U)	-123.6(13)
O(1T)-Li(1)-O(2U)-C(5U)	-133.0(16)
O(2T)-Li(1)-O(2U)-C(5U)	179(100)
O(1U)-Li(1)-O(2U)-C(5U)	-146.5(14)
C(2)-Li(1)-O(2U)-C(5U)	31(2)
C(8U)-O(2U)-C(5U)-C(6U)	22(2)
Li(1)-O(2U)-C(5U)-C(6U)	-136.3(17)
O(2U)-C(5U)-C(6U)-C(7U)	-39.1(19)
C(5U)-C(6U)-C(7U)-C(8U)	41(2)
C(5U)-O(2U)-C(8U)-C(7U)	6(2)
Li(1)-O(2U)-C(8U)-C(7U)	163.7(18)
C(6U)-C(7U)-C(8U)-O(2U)	-30(2)
C(12T)-O(3T)-C(9T)-C(10T)	-10.0(7)
Li(2)-O(3T)-C(9T)-C(10T)	132.7(6)
O(3T)-C(9T)-C(10T)-C(11T)	-13.8(7)
C(9T)-C(10T)-C(11T)-C(12T)	30.8(7)
C(9T)-O(3T)-C(12T)-C(11T)	29.0(6)
Li(2)-O(3T)-C(12T)-C(11T)	-109.8(6)
C(10T)-C(11T)-C(12T)-O(3T)	-37.1(7)
C(16T)-O(4T)-C(13T)-C(14T)	0.2(9)
Li(4)-O(4T)-C(13T)-C(14T)	169.6(6)
O(4T)-C(13T)-C(14T)-C(15U)	19.7(16)
O(4T)-C(13T)-C(14T)-C(15T)	-14.1(19)
C(13T)-C(14T)-C(15T)-C(16T)	22(3)
C(15U)-C(14T)-C(15T)-C(16T)	-67.7(11)
C(13T)-C(14T)-C(15U)-C(16T)	-32(2)
C(15T)-C(14T)-C(15U)-C(16T)	67.5(11)
C(13T)-O(4T)-C(16T)-C(15T)	13.8(19)
Li(4)-O(4T)-C(16T)-C(15T)	-155.3(17)
C(13T)-O(4T)-C(16T)-C(15U)	-19.8(14)
Li(4)-O(4T)-C(16T)-C(15U)	171.1(13)
C(14T)-C(15T)-C(16T)-O(4T)	-22(3)

C(14T)-C(15T)-C(16T)-C(15U)	66.4(11)
C(14T)-C(15U)-C(16T)-O(4T)	32(2)
C(14T)-C(15U)-C(16T)-C(15T)	-68.5(11)
C(17U)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	-54.5(12)
C(20U)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	72.1(13)
C(20T)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	24.4(13)
Li(4)-O(5T)-C(17T)-C(18T)	-172.4(9)
O(5T)-C(17T)-C(18T)-C(19T)	-8.6(17)
C(17T)-C(18T)-C(19T)-C(20T)	-9.7(18)
C(17U)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	37.5(13)
C(17T)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	-30.1(13)
C(20U)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	-75.7(15)
Li(4)-O(5T)-C(20T)-C(19T)	166.4(9)
C(18T)-C(19T)-C(20T)-O(5T)	24.1(16)
C(17T)-O(5T)-C(17U)-C(18U)	59.4(17)
C(20U)-O(5T)-C(17U)-C(18U)	11(3)
C(20T)-O(5T)-C(17U)-C(18U)	-50.6(18)
Li(4)-O(5T)-C(17U)-C(18U)	179.9(14)
O(5T)-C(17U)-C(18U)-C(19U)	14(3)
C(17U)-C(18U)-C(19U)-C(20U)	-31(3)
C(17U)-O(5T)-C(20U)-C(19U)	-31(2)
C(17T)-O(5T)-C(20U)-C(19U)	-84.3(16)
C(20T)-O(5T)-C(20U)-C(19U)	44.5(16)
Li(4)-O(5T)-C(20U)-C(19U)	160.4(12)
C(18U)-C(19U)-C(20U)-O(5T)	38(2)
O(7T)-Li(4)-O(6T)-C(24T)	128(3)
O(7U)-Li(4)-O(6T)-C(24T)	126(3)
O(6U)-Li(4)-O(6T)-C(24T)	-102(12)
O(4T)-Li(4)-O(6T)-C(24T)	8(4)
O(5T)-Li(4)-O(6T)-C(24T)	-115(3)
O(7T)-Li(4)-O(6T)-C(21T)	-78(2)
O(7U)-Li(4)-O(6T)-C(21T)	-80(2)
O(6U)-Li(4)-O(6T)-C(21T)	51(9)
O(4T)-Li(4)-O(6T)-C(21T)	161.3(17)
O(5T)-Li(4)-O(6T)-C(21T)	39(2)
C(24T)-O(6T)-C(21T)-C(22T)	-17(3)

Li(4)-O(6T)-C(21T)-C(22T)	-178(2)
O(6T)-C(21T)-C(22T)-C(23T)	27(3)
C(21T)-C(22T)-C(23T)-C(24T)	-28(3)
C(21T)-O(6T)-C(24T)-C(23T)	-2(3)
Li(4)-O(6T)-C(24T)-C(23T)	152(3)
C(22T)-C(23T)-C(24T)-O(6T)	19(3)
O(6T)-Li(4)-O(6U)-C(24U)	68(10)
O(7T)-Li(4)-O(6U)-C(24U)	120.1(19)
O(7U)-Li(4)-O(6U)-C(24U)	117(2)
O(4T)-Li(4)-O(6U)-C(24U)	-4(2)
O(5T)-Li(4)-O(6U)-C(24U)	-124.1(18)
O(6T)-Li(4)-O(6U)-C(21U)	-99(12)
O(7T)-Li(4)-O(6U)-C(21U)	-47(3)
O(7U)-Li(4)-O(6U)-C(21U)	-50(3)
O(4T)-Li(4)-O(6U)-C(21U)	-171(2)
O(5T)-Li(4)-O(6U)-C(21U)	69(2)
C(24U)-O(6U)-C(21U)-C(22U)	35.4(19)
Li(4)-O(6U)-C(21U)-C(22U)	-157(2)
O(6U)-C(21U)-C(22U)-C(23U)	-38.0(18)
C(21U)-C(22U)-C(23U)-C(24U)	26(2)
C(21U)-O(6U)-C(24U)-C(23U)	-19(2)
Li(4)-O(6U)-C(24U)-C(23U)	170.5(18)
C(22U)-C(23U)-C(24U)-O(6U)	-6(3)
O(6T)-Li(4)-O(7T)-C(25T)	99.8(15)
O(7U)-Li(4)-O(7T)-C(25T)	117(9)
O(6U)-Li(4)-O(7T)-C(25T)	94.4(15)
O(4T)-Li(4)-O(7T)-C(25T)	-143.1(12)
O(5T)-Li(4)-O(7T)-C(25T)	-23.4(15)
O(6T)-Li(4)-O(7T)-C(28T)	-56.3(15)
O(7U)-Li(4)-O(7T)-C(28T)	-40(8)
O(6U)-Li(4)-O(7T)-C(28T)	-61.7(15)
O(4T)-Li(4)-O(7T)-C(28T)	60.7(14)
O(5T)-Li(4)-O(7T)-C(28T)	-179.6(11)
C(28T)-O(7T)-C(25T)-C(26T)	-5(2)
Li(4)-O(7T)-C(25T)-C(26T)	-163.1(13)
O(7T)-C(25T)-C(26T)-C(27T)	23(2)

C(25T)-C(26T)-C(27T)-C(28T)	-30(2)
C(25T)-O(7T)-C(28T)-C(27T)	-14.2(18)
Li(4)-O(7T)-C(28T)-C(27T)	145.8(12)
C(26T)-C(27T)-C(28T)-O(7T)	27.8(19)
O(6T)-Li(4)-O(7U)-C(25U)	-162(2)
O(7T)-Li(4)-O(7U)-C(25U)	35(7)
O(6U)-Li(4)-O(7U)-C(25U)	-167(2)
O(4T)-Li(4)-O(7U)-C(25U)	-48(3)
O(5T)-Li(4)-O(7U)-C(25U)	76(3)
O(6T)-Li(4)-O(7U)-C(28U)	22(2)
O(7T)-Li(4)-O(7U)-C(28U)	-142(10)
O(6U)-Li(4)-O(7U)-C(28U)	17(2)
O(4T)-Li(4)-O(7U)-C(28U)	135.5(18)
O(5T)-Li(4)-O(7U)-C(28U)	-100(2)
C(28U)-O(7U)-C(25U)-C(26U)	-7(3)
Li(4)-O(7U)-C(25U)-C(26U)	176.2(19)
O(7U)-C(25U)-C(26U)-C(27U)	30(2)
C(25U)-C(26U)-C(27U)-C(28U)	-40.4(19)
C(25U)-O(7U)-C(28U)-C(27U)	-20(3)
Li(4)-O(7U)-C(28U)-C(27U)	157.2(18)
C(26U)-C(27U)-C(28U)-O(7U)	37(2)
C(4S)-O(1S)-C(1S)-C(2S)	25(2)
O(1S)-C(1S)-C(2S)-C(3S)	-31(2)
C(1S)-C(2S)-C(3S)-C(4S)	24(2)
C(1S)-O(1S)-C(4S)-C(3S)	-11(2)
C(2S)-C(3S)-C(4S)-O(1S)	-9(2)

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

## References:

1. T. Jelinek, B. Plešek and S. Heřmánek, *J. Organomet. Chem.* 1986, **307**, **2**, C13-C15.
2. A. Franken, C. A. Kilner and J. D. Kennedy, *Chem. Commun.* 2004, **3**, 328-329.
3. B. Brellochs, J. Backovsky, B. Stibr, T. Jelinek, J. Holub, M. Bakardjiev, D. Hnyk, M. Hoffmann, I. Cisarova and B. Wrackmeyer, *Eur. J. Inor. Chem.* 2004, **18**, 3605-3611.
4. B. Ringstrand, A. Ballinski, A. Franken and P. Kaszynski, *Inorg. Chem.* 2005, **44**, **25**, 9561-9566.
5. K. S. B. Base, J. Dolansky and J. Duben, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 1981, **46**, 2345-2353.
6. T. Jelinek, B. Stibr, J. Plešek, M. Thornton-Plett and J. D. Kennedy, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 1997, 4231-4236