

Table 1S. Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
Co (1)	0.1565 (1)	0.13167 (10)	0.1645 (1)	0.77 (4)	1.00
Co (2)	0.6589 (1)	0.23284 (10)	0.1632 (1)	0.83 (4)	1.00
K (1)	-0.0094 (2)	0.1582 (2)	0.3352 (2)	1.47 (8)	1.00
K (2)	0.3234 (2)	0.1605 (2)	-0.0076 (2)	2.00 (9)	1.00
O (1)	-0.0406 (7)	0.2243 (6)	0.2343 (6)	1.7 (3)	1.00
O (2)	-0.1021 (6)	0.1220 (6)	0.2308 (6)	1.7 (2)	1.00
O (3)	-0.1108 (7)	0.0773 (7)	0.3425 (7)	2.7 (3)	1.00
O (4)	0.0003 (8)	0.0960 (7)	0.4462 (7)	3.1 (3)	1.00
O (5)	0.0687 (8)	0.1934 (7)	0.4455 (7)	2.9 (3)	1.00
O (6)	0.0674 (7)	0.2511 (6)	0.3406 (7)	2.4 (3)	1.00
O (7)	0.4170 (7)	0.1357 (6)	0.1032 (6)	1.9 (3)	1.00
O (8)	0.4362 (8)	0.0935 (7)	-0.0068 (8)	3.2 (3)	1.00
O (9)	0.3355 (10)	0.1001 (8)	-0.1183 (9)	4.6 (4)	1.00
O (10)	0.2494 (8)	0.1853 (7)	-0.1206 (8)	3.5 (4)	1.00
O (11)	0.2379 (9)	0.2503 (8)	-0.0217 (9)	4.3 (4)	1.00
O (12)	0.3443 (8)	0.2355 (7)	0.0905 (7)	2.8 (3)	1.00
O (13)	-0.123 (1)	0.1888 (10)	0.374 (1)	1.8 (4)	0.58
O (13')	-0.092 (2)	0.237 (1)	0.363 (2)	2.1 (6)	0.42
O (15)	0.420 (1)	0.220 (1)	-0.050 (1)	2.7 (6)	0.52
O (15')	0.407 (2)	0.247 (1)	-0.015 (2)	2.7 (6)	0.48
N (1)	0.2460 (7)	0.1345 (6)	0.2205 (6)	0.8 (2)	1.00
N (2)	0.1578 (7)	0.0561 (6)	0.1645 (7)	0.9 (2)	1.00
N (3)	0.0672 (7)	0.1302 (7)	0.1080 (7)	1.2 (3)	1.00
N (4)	0.1551 (7)	0.2081 (5)	0.1631 (7)	0.5 (2)	1.00
N (5)	0.0909 (9)	0.1272 (7)	0.2742 (8)	2.0 (3)	1.00
N (6)	0.2249 (8)	0.1281 (7)	0.0567 (7)	1.7 (3)	1.00
N (7)	0.6627 (8)	0.3098 (6)	0.1598 (7)	1.2 (3)	1.00
N (8)	0.7175 (7)	0.2271 (7)	0.1075 (7)	1.2 (3)	1.00
N (9)	0.6580 (8)	0.1565 (7)	0.1674 (8)	1.6 (3)	1.00
N (10)	0.5986 (6)	0.2382 (6)	0.2168 (6)	0.5 (2)	1.00
N (11)	0.5344 (9)	0.2323 (8)	0.0522 (9)	2.6 (4)	1.00
N (12)	0.7830 (8)	0.2288 (7)	0.2736 (7)	1.7 (3)	1.00
C (1)	0.2704 (8)	0.1744 (7)	0.2601 (7)	0.6 (3)	1.00
C (2)	0.3364 (9)	0.1591 (8)	0.2996 (8)	1.0 (3)	1.00
C (3)	0.3493 (9)	0.1083 (8)	0.2823 (8)	1.2 (3)	1.00
C (4)	0.2914 (8)	0.0930 (7)	0.2336 (7)	0.3 (3)	1.00
C (5)	0.2828 (9)	0.0416 (8)	0.2118 (8)	1.1 (3)	1.00
C (6)	0.216 (1)	0.0251 (9)	0.1823 (9)	1.7 (4)	1.00
C (7)	0.1963 (9)	-0.0297 (8)	0.1724 (9)	1.2 (3)	1.00
C (8)	0.1243 (10)	-0.0318 (8)	0.1530 (9)	1.6 (4)	1.00
C (9)	0.1035 (8)	0.0222 (7)	0.1470 (7)	0.4 (3)	1.00
C (10)	0.0360 (9)	0.0390 (8)	0.1194 (8)	1.2 (3)	1.00
C (11)	0.0201 (8)	0.0893 (8)	0.0981 (8)	0.8 (3)	1.00
C (12)	-0.0375 (10)	0.1023 (9)	0.0525 (9)	1.8 (4)	1.00
C (13)	-0.0253 (10)	0.1508 (9)	0.0331 (9)	1.6 (4)	1.00
C (14)	0.0347 (9)	0.1698 (8)	0.0687 (8)	1.1 (3)	1.00
C (15)	0.0629 (9)	0.2205 (8)	0.0714 (8)	1.0 (3)	1.00
C (16)	0.1148 (9)	0.2397 (8)	0.1171 (8)	1.1 (3)	1.00
C (17)	0.1283 (9)	0.2931 (7)	0.1329 (8)	0.9 (3)	1.00
C (18)	0.1786 (9)	0.2961 (8)	0.1893 (8)	1.1 (3)	1.00

Table 1S(cont.) Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
C(19)	0.1918(8)	0.2414(7)	0.2069(7)	0.4(3)	1.00
C(20)	0.2490(8)	0.2256(7)	0.2551(8)	0.7(3)	1.00
C(21)	0.2785(9)	0.2655(8)	0.3027(8)	1.0(3)	1.00
C(22)	0.2334(9)	0.2928(8)	0.3345(9)	1.4(3)	1.00
C(23)	0.2593(10)	0.3304(8)	0.3773(9)	1.5(3)	1.00
C(24)	0.3259(10)	0.3450(9)	0.3864(9)	1.7(4)	1.00
C(25)	0.3728(9)	0.3194(8)	0.3558(9)	1.3(3)	1.00
C(26)	0.3463(9)	0.2819(8)	0.3128(8)	1.1(3)	1.00
C(27)	0.3443(8)	0.0056(7)	0.2246(8)	0.8(3)	1.00
C(28)	0.4017(9)	0.0211(7)	0.2027(8)	0.8(3)	1.00
C(29)	0.4606(9)	-0.0083(8)	0.2134(9)	1.1(3)	1.00
C(30)	0.465(1)	-0.0570(9)	0.2453(10)	2.0(4)	1.00
C(31)	0.402(1)	-0.0749(9)	0.265(1)	2.3(4)	1.00
C(32)	0.343(1)	-0.0407(9)	0.2544(9)	1.7(4)	1.00
C(33)	-0.0184(9)	-0.0009(8)	0.1078(8)	1.2(3)	1.00
C(34)	-0.0201(10)	-0.0401(9)	0.0655(9)	1.7(4)	1.00
C(35)	-0.080(1)	-0.0763(10)	0.052(1)	2.5(4)	1.00
C(36)	-0.129(1)	-0.0694(10)	0.083(1)	2.5(4)	1.00
C(37)	-0.1293(9)	-0.0314(8)	0.1253(8)	1.1(3)	1.00
C(38)	-0.0778(9)	0.0041(8)	0.1354(8)	1.2(3)	1.00
C(39)	0.0286(9)	0.2614(8)	0.0234(8)	1.3(3)	1.00
C(40)	-0.0390(9)	0.2732(8)	0.0124(8)	1.1(3)	1.00
C(41)	-0.0659(10)	0.3109(8)	-0.0314(9)	1.6(4)	1.00
C(42)	-0.023(1)	0.3383(9)	-0.0624(9)	1.9(4)	1.00
C(43)	0.0444(10)	0.3255(8)	-0.0529(9)	1.7(4)	1.00
C(44)	0.0738(10)	0.2860(8)	-0.0103(9)	1.4(3)	1.00
C(45)	0.1126(9)	0.1304(8)	0.2325(8)	1.2(3)	1.00
C(46)	0.1989(9)	0.1284(8)	0.0938(8)	0.9(3)	1.00
C(47)	0.013(1)	0.2588(9)	0.233(1)	2.4(4)	1.00
C(48)	0.029(1)	0.288(1)	0.291(1)	2.9(5)	1.00
C(49)	0.086(1)	0.275(1)	0.403(1)	2.9(5)	1.00
C(50)	0.113(1)	0.233(1)	0.443(1)	2.6(4)	1.00
C(51)	0.090(1)	0.155(1)	0.492(1)	3.5(5)	1.00
C(52)	0.025(1)	0.125(1)	0.499(1)	3.2(5)	1.00
C(53)	-0.067(1)	0.068(1)	0.449(1)	4.3(6)	1.00
C(54)	-0.090(1)	0.041(1)	0.389(1)	3.7(5)	1.00
C(55)	-0.136(1)	0.053(1)	0.287(1)	2.8(4)	1.00
C(56)	-0.1630(10)	0.0950(9)	0.2393(9)	1.7(4)	1.00
C(57)	-0.1188(10)	0.1599(9)	0.1820(9)	1.8(4)	1.00
C(58)	-0.0592(9)	0.1909(8)	0.1820(9)	1.4(3)	1.00
C(59)	0.6143(8)	0.3436(7)	0.1732(7)	0.5(3)	1.00
C(60)	0.6327(10)	0.3964(9)	0.1621(9)	1.8(4)	1.00
C(61)	0.6955(9)	0.3950(8)	0.1458(9)	1.4(3)	1.00
C(62)	0.7112(9)	0.3383(8)	0.1417(8)	1.2(3)	1.00
C(63)	0.7617(9)	0.3196(8)	0.1146(9)	1.3(3)	1.00
C(64)	0.7607(8)	0.2668(7)	0.0945(7)	0.7(3)	1.00
C(65)	0.7898(9)	0.2481(8)	0.0471(8)	1.0(3)	1.00
C(66)	0.7714(8)	0.1990(7)	0.0353(7)	0.5(3)	1.00
C(67)	0.724(1)	0.1850(9)	0.0708(10)	1.9(4)	1.00
C(68)	0.6990(9)	0.1351(8)	0.0770(8)	1.0(3)	1.00

Table 1S(cont.) Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
C(69)	0.6734(8)	0.1191(7)	0.1261(8)	0.6(3)	1.00
C(70)	0.6658(9)	0.0677(8)	0.1479(8)	1.1(3)	1.00
C(71)	0.6466(8)	0.0718(7)	0.2012(8)	0.7(3)	1.00
C(72)	0.6391(9)	0.1296(8)	0.2136(8)	0.9(3)	1.00
C(73)	0.6110(9)	0.1482(8)	0.2591(8)	1.0(3)	1.00
C(74)	0.5869(8)	0.2001(7)	0.2567(7)	0.5(3)	1.00
C(75)	0.5352(9)	0.2197(8)	0.2903(8)	1.2(3)	1.00
C(76)	0.5202(9)	0.2678(8)	0.2693(8)	1.2(3)	1.00
C(77)	0.5575(8)	0.2799(7)	0.2232(8)	0.7(3)	1.00
C(78)	0.5605(10)	0.3285(8)	0.1970(9)	1.6(3)	1.00
C(79)	0.5039(8)	0.3679(8)	0.2005(8)	0.9(3)	1.00
C(80)	0.437(1)	0.3573(9)	0.1656(10)	2.2(4)	1.00
C(81)	0.387(1)	0.3928(9)	0.1645(10)	2.0(4)	1.00
C(82)	0.400(1)	0.4385(9)	0.1975(10)	2.1(4)	1.00
C(83)	0.464(1)	0.4503(9)	0.2336(10)	2.1(4)	1.00
C(84)	0.5138(9)	0.4142(8)	0.2341(9)	1.3(3)	1.00
C(85)	0.8150(9)	0.3531(8)	0.0984(8)	1.1(3)	1.00
C(86)	0.7985(9)	0.3863(8)	0.0508(8)	1.2(3)	1.00
C(87)	0.854(1)	0.417(1)	0.034(1)	3.0(5)	1.00
C(88)	0.919(1)	0.4102(10)	0.066(1)	2.6(4)	1.00
C(89)	0.932(1)	0.377(1)	0.115(1)	3.1(5)	1.00
C(90)	0.8821(10)	0.3470(8)	0.1327(9)	1.4(3)	1.00
C(91)	0.7006(9)	0.0939(8)	0.0300(9)	1.4(3)	1.00
C(92)	0.760(1)	0.063(1)	0.034(1)	2.7(4)	1.00
C(93)	0.762(1)	0.0265(10)	-0.012(1)	2.3(4)	1.00
C(94)	0.705(1)	0.0183(9)	-0.0565(10)	2.0(4)	1.00
C(95)	0.649(1)	0.0499(9)	-0.0626(9)	1.9(4)	1.00
C(96)	0.6464(10)	0.0909(9)	-0.0193(9)	1.9(4)	1.00
C(97)	0.6054(8)	0.1110(7)	0.3092(8)	0.8(3)	1.00
C(98)	0.669(1)	0.096(1)	0.352(1)	2.9(5)	1.00
C(99)	0.659(1)	0.061(1)	0.398(1)	3.2(5)	1.00
C(100)	0.596(1)	0.0423(10)	0.401(1)	2.5(4)	1.00
C(101)	0.538(1)	0.0550(10)	0.359(1)	2.6(4)	1.00
C(102)	0.5439(9)	0.0886(8)	0.3144(9)	1.4(3)	1.00
C(103)	0.7349(9)	0.2323(8)	0.2337(8)	1.0(3)	1.00
C(104)	0.5836(8)	0.2315(7)	0.0956(8)	0.6(3)	1.00
C(105)	0.481(1)	0.111(1)	0.098(1)	2.8(5)	1.00
C(106)	0.468(1)	0.073(1)	0.053(1)	4.8(7)	1.00
C(107)	0.432(2)	0.059(1)	-0.056(2)	5.3(7)	1.00
C(108)	0.405(2)	0.084(2)	-0.114(2)	6.6(8)	1.00
C(109)	0.307(2)	0.131(1)	-0.172(1)	4.7(6)	1.00
C(110)	0.238(1)	0.151(1)	-0.172(1)	4.0(6)	1.00
C(111)	0.193(1)	0.218(1)	-0.124(1)	3.7(5)	1.00
C(112)	0.214(1)	0.262(1)	-0.092(1)	3.7(5)	1.00
C(113)	0.267(1)	0.287(1)	0.017(1)	4.0(6)	1.00
C(114)	0.286(1)	0.266(1)	0.087(1)	3.1(5)	1.00
C(115)	0.362(1)	0.206(1)	0.147(1)	3.0(5)	1.00
C(116)	0.430(1)	0.1774(9)	0.1501(9)	1.8(4)	1.00
C(117)	0.678(1)	0.068(1)	0.576(1)	3.8(6)	1.00
C(118)	0.725(1)	0.024(1)	0.582(1)	4.0(6)	1.00

Table 1S(cont.) Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
C(119)	0.720(1)	-0.017(1)	0.621(1)	3.7(6)	1.00
C(120)	0.775(1)	-0.056(1)	0.632(1)	3.2(5)	1.00
C(121)	0.827(1)	-0.057(1)	0.601(1)	3.7(5)	1.00
C(122)	0.829(1)	-0.015(1)	0.561(1)	4.4(6)	1.00
C(123)	0.783(1)	0.026(1)	0.556(1)	3.3(5)	1.00
H(1)	0.0163	-0.0438	0.0454	2.0036	1.00
H(2)	-0.0837	-0.1034	0.0222	3.0592	1.00
H(3)	-0.1671	-0.0932	0.0749	3.0032	1.00
H(4)	-0.1645	-0.0299	0.1471	1.3183	1.00
H(5)	-0.0799	0.0334	0.1611	1.4681	1.00
H(6)	0.3994	0.0527	0.1799	0.9260	1.00
H(7)	0.4991	0.0039	0.1995	1.3387	1.00
H(8)	0.5057	-0.0772	0.2541	2.4265	1.00
H(9)	0.4012	-0.1084	0.2830	2.7151	1.00
H(10)	0.3035	-0.0503	0.2685	2.0942	1.00
H(11)	0.4275	0.3255	0.1431	2.5823	1.00
H(12)	0.3417	0.3861	0.1407	2.4048	1.00
H(13)	0.3635	0.4630	0.1954	2.4922	1.00
H(14)	0.4720	0.4818	0.2568	2.4680	1.00
H(15)	0.5583	0.4210	0.2589	1.5527	1.00
H(16)	0.7522	0.3900	0.0285	1.4034	1.00
H(17)	0.8438	0.4405	0.0012	3.5445	1.00
H(18)	0.9550	0.4288	0.0554	3.0684	1.00
H(19)	0.9783	0.3739	0.1377	3.7140	1.00
H(20)	0.8930	0.3238	0.1664	1.7354	1.00
H(21)	-0.0679	0.2559	0.0342	1.3121	1.00
H(22)	-0.1137	0.3184	-0.0406	1.8984	1.00
H(23)	-0.0410	0.3658	-0.0899	2.2531	1.00
H(24)	0.0725	0.3432	-0.0752	2.0329	1.00
H(25)	0.1207	0.2761	-0.0041	1.6992	1.00
H(26)	0.6831	-0.0191	0.6403	4.4487	1.00
H(27)	0.7746	-0.0818	0.6625	3.8939	1.00
H(28)	0.8602	-0.0844	0.6068	4.4396	1.00
H(29)	0.8619	-0.0149	0.5375	5.2633	1.00
H(30)	0.7897	0.0571	0.5340	3.9986	1.00
H(32)	0.1858	0.2845	0.3255	1.6789	1.00
H(33)	0.2306	0.3461	0.4004	1.8228	1.00
H(34)	0.3424	0.3730	0.4139	1.9826	1.00
H(35)	0.4203	0.3281	0.3650	1.6019	1.00
H(36)	0.3751	0.2669	0.2894	1.3579	1.00
H(37)	0.7976	0.0660	0.0681	3.2818	1.00
H(38)	0.8031	0.0078	-0.0116	2.7936	1.00
H(39)	0.7045	-0.0099	-0.0842	2.4220	1.00
H(40)	0.6107	0.0447	-0.0961	2.2527	1.00
H(41)	0.6088	0.1147	-0.0248	2.2368	1.00
H(43)	0.7127	0.1077	0.3491	3.4456	1.00
H(44)	0.6978	0.0512	0.4285	3.8974	1.00
H(45)	0.5932	0.0194	0.4333	3.0451	1.00
H(46)	0.4949	0.0406	0.3607	3.0939	1.00
H(47)	0.5034	0.0976	0.2848	1.6656	1.00

Table 1S(cont.) Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
H(48)	0.6778	0.0813	0.6147	4.5998	1.00
H(49)	0.6925	0.0941	0.5519	4.5998	1.00
H(50)	0.6332	0.0560	0.5562	4.5998	1.00
H(51)	-0.0584	0.0426	0.4807	5.1848	1.00
H(52)	-0.0998	0.0926	0.4551	5.1848	1.00
H(53)	-0.1280	0.0192	0.3904	4.3781	1.00
H(54)	-0.0538	0.0208	0.3810	4.3781	1.00
H(55)	0.1216	0.1309	0.4813	4.1686	1.00
H(56)	0.1117	0.1718	0.5295	4.1686	1.00
H(57)	-0.0092	0.1501	0.5045	3.8042	1.00
H(58)	0.0355	0.1027	0.5335	3.8042	1.00
H(59)	0.1199	0.3015	0.4044	3.4493	1.00
H(60)	0.0469	0.2894	0.4130	3.4493	1.00
H(61)	0.1278	0.2478	0.4831	3.1781	1.00
H(62)	0.1521	0.2190	0.4314	3.1781	1.00
H(63)	-0.1329	0.1421	0.1442	2.1844	1.00
H(64)	-0.1548	0.1822	0.1879	2.1844	1.00
H(65)	-0.0682	0.2123	0.1466	1.7068	1.00
H(66)	-0.0219	0.1679	0.1815	1.7068	1.00
H(67)	0.0520	0.2397	0.2280	2.8585	1.00
H(68)	-0.0008	0.2828	0.1999	2.8585	1.00
H(69)	-0.0124	0.2992	0.3003	3.5058	1.00
H(70)	0.0569	0.3173	0.2876	3.5058	1.00
H(71)	-0.0996	0.0344	0.2755	3.3125	1.00
H(72)	-0.1716	0.0297	0.2895	3.3125	1.00
H(73)	-0.1926	0.1187	0.2534	1.9986	1.00
H(74)	-0.1872	0.0792	0.2024	1.9986	1.00
H(76)	0.5104	0.1377	0.0873	3.3159	1.00
H(77)	0.5033	0.0959	0.1355	3.3159	1.00
H(78)	0.4385	0.0473	0.0636	5.7378	1.00
H(79)	0.5104	0.0568	0.0510	5.7378	1.00
H(80)	0.4767	0.0456	-0.0547	6.3657	1.00
H(81)	0.4026	0.0303	-0.0514	6.3657	1.00
H(82)	0.4068	0.0606	-0.1458	7.8913	1.00
H(83)	0.4320	0.1146	-0.1169	7.8913	1.00
H(84)	0.3361	0.1605	-0.1730	5.6850	1.00
H(85)	0.3037	0.1102	-0.2069	5.6850	1.00
H(86)	0.2077	0.1235	-0.1677	4.8096	1.00
H(87)	0.2190	0.1703	-0.2082	4.8096	1.00
H(88)	0.1736	0.2264	-0.1650	4.3847	1.00
H(89)	0.1601	0.1999	-0.1072	4.3847	1.00
H(90)	0.1770	0.2864	-0.0982	4.4840	1.00
H(91)	0.2514	0.2771	-0.1051	4.4840	1.00
H(92)	0.3074	0.2982	0.0061	4.7783	1.00
H(93)	0.2356	0.3154	0.0138	4.7783	1.00
H(94)	0.2498	0.2449	0.0950	3.6760	1.00
H(95)	0.2952	0.2944	0.1143	3.6760	1.00
H(96)	0.3663	0.2291	0.1802	3.5790	1.00
H(97)	0.3268	0.1808	0.1473	3.5790	1.00
H(98)	0.4460	0.1622	0.1893	2.1852	1.00

Table 1S(cont.) Atomic coordinates, Biso and occupancy for CoCNTPPKCR_115K

atom	x	y	z	Biso	occ
H(99)	0.4633	0.2015	0.1425	2.1852	1.00
H(100)	0.8181	0.2680	0.0271	1.1701	1.00
H(101)	0.7870	0.1766	0.0077	0.6012	1.00
H(102)	0.6067	0.4271	0.1654	2.1342	1.00
H(103)	0.7224	0.4242	0.1388	1.6268	1.00
H(104)	0.6729	0.0358	0.1283	1.3740	1.00
H(105)	0.6393	0.0434	0.2263	0.8783	1.00
H(106)	0.3646	0.1798	0.3306	1.1836	1.00
H(107)	0.3886	0.0876	0.2992	1.4748	1.00
H(108)	0.2267	-0.0590	0.1781	1.4435	1.00
H(109)	0.1073	0.3224	0.1097	1.0418	1.00
H(110)	0.1987	0.3267	0.2102	1.2812	1.00
H(111)	0.5174	0.2016	0.3200	1.4732	1.00
H(112)	0.4894	0.2911	0.2823	1.3892	1.00
H(113)	-0.0773	0.0813	0.0381	2.1188	1.00
H(114)	-0.0538	0.1689	-0.0002	1.9750	1.00
H(115)	0.0960	-0.0622	0.1455	1.8676	1.00
H(116)	-0.1668	0.1811	0.3474	2.3284	1.00
H(117)	-0.1244	0.1807	0.4142	2.3284	1.00
H(118)	-0.0735	0.2586	0.3979	2.2948	1.00
H(119)	-0.1159	0.2590	0.3311	2.2948	1.00
H(120)	0.4661	0.2069	-0.0410	3.1920	1.00
H(121)	0.4078	0.2316	-0.0906	3.1920	1.00
H(122)	0.3837	0.2786	-0.0292	3.2692	1.00
H(123)	0.4421	0.2539	0.0205	3.2692	1.00

Table 2S. Bond Distances

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Co (1)	-N (1)	1.94 (1)	K (2)	-O (12)	2.88 (2)
Co (1)	-N (2)	1.92 (1)	K (2)	-O (15)	2.80 (3)
Co (1)	-N (3)	1.94 (2)	K (2)	-O (15')	2.78 (3)
Co (1)	-N (4)	1.94 (1)	K (2)	-N (6)	2.84 (2)
Co (1)	-C (45)	1.94 (2)	O (1)	-C (47)	1.39 (3)
Co (1)	-C (46)	1.98 (2)	O (1)	-C (58)	1.43 (2)
Co (2)	-N (7)	1.96 (2)	O (2)	-C (56)	1.45 (2)
Co (2)	-N (8)	1.92 (2)	O (2)	-C (57)	1.45 (2)
Co (2)	-N (9)	1.94 (2)	O (3)	-C (54)	1.38 (3)
Co (2)	-N (10)	1.91 (1)	O (3)	-C (55)	1.38 (3)
Co (2)	-C (103)	1.93 (2)	O (4)	-C (52)	1.40 (3)
Co (2)	-C (104)	1.88 (2)	O (4)	-C (53)	1.53 (3)
K (1)	-O (1)	2.78 (1)	O (5)	-C (50)	1.36 (3)
K (1)	-O (2)	2.80 (1)	O (5)	-C (51)	1.43 (3)
K (1)	-O (3)	2.92 (2)	O (6)	-C (48)	1.52 (3)
K (1)	-O (4)	2.94 (2)	O (6)	-C (49)	1.50 (3)
K (1)	-O (5)	2.77 (2)	O (7)	-C (105)	1.46 (3)
K (1)	-O (6)	2.80 (2)	O (7)	-C (116)	1.48 (2)
K (1)	-O (13)	2.74 (2)	O (8)	-C (106)	1.45 (3)
K (1)	-O (13')	2.77 (3)	O (8)	-C (107)	1.40 (4)
K (1)	-N (5)	2.81 (2)	O (9)	-C (108)	1.43 (4)
K (2)	-O (7)	2.83 (1)	O (9)	-C (109)	1.45 (4)
K (2)	-O (8)	2.82 (2)	O (10)	-C (110)	1.42 (3)
K (2)	-O (9)	3.00 (2)	O (10)	-C (111)	1.38 (3)
K (2)	-O (10)	2.71 (2)	O (11)	-C (112)	1.57 (3)
K (2)	-O (11)	2.82 (2)	O (11)	-C (113)	1.30 (3)
O (12)	-C (114)	1.38 (3)	C (2)	-C (3)	1.39 (3)
O (12)	-C (115)	1.45 (3)	C (3)	-C (4)	1.45 (2)
O (13)	-O (13')	1.42 (4)	C (4)	-C (5)	1.39 (3)
O (15)	-O (15')	1.12 (4)	C (5)	-C (6)	1.42 (3)
N (1)	-C (1)	1.37 (2)	C (5)	-C (27)	1.51 (2)
N (1)	-C (4)	1.38 (2)	C (6)	-C (7)	1.45 (3)
N (2)	-C (6)	1.38 (2)	C (7)	-C (8)	1.41 (2)
N (2)	-C (9)	1.37 (2)	C (8)	-C (9)	1.43 (3)
N (3)	-C (11)	1.38 (2)	C (9)	-C (10)	1.41 (2)
N (3)	-C (14)	1.40 (2)	C (10)	-C (11)	1.38 (3)
N (4)	-C (16)	1.41 (2)	C (10)	-C (33)	1.47 (3)
N (4)	-C (19)	1.38 (2)	C (11)	-C (12)	1.40 (3)
N (5)	-C (45)	1.13 (2)	C (12)	-C (13)	1.35 (3)
N (6)	-C (46)	1.09 (2)	C (13)	-C (14)	1.37 (3)
N (7)	-C (59)	1.38 (2)	C (14)	-C (15)	1.40 (3)
N (7)	-C (62)	1.35 (2)	C (15)	-C (16)	1.37 (3)
N (8)	-C (64)	1.40 (2)	C (15)	-C (39)	1.54 (3)
N (8)	-C (67)	1.38 (3)	C (16)	-C (17)	1.41 (3)
N (9)	-C (69)	1.42 (2)	C (17)	-C (18)	1.43 (2)
N (9)	-C (72)	1.37 (2)	C (18)	-C (19)	1.45 (2)

Distances are in angstroms. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 2S(cont.) Bond Distances

atom	atom	distance	atom	atom	distance
N(10)	-C(74)	1.38(2)	C(19)	-C(20)	1.44(2)
N(10)	-C(77)	1.37(2)	C(20)	-C(21)	1.50(3)
N(11)	-C(104)	1.22(2)	C(21)	-C(22)	1.45(3)
N(12)	-C(103)	1.16(2)	C(21)	-C(26)	1.39(3)
C(1)	-C(2)	1.46(2)	C(22)	-C(23)	1.37(3)
C(1)	-C(20)	1.37(2)	C(23)	-C(24)	1.35(3)
C(24)	-C(25)	1.45(3)	C(59)	-C(60)	1.43(3)
C(25)	-C(26)	1.38(3)	C(59)	-C(78)	1.37(2)
C(27)	-C(28)	1.41(2)	C(60)	-C(61)	1.39(3)
C(27)	-C(32)	1.36(3)	C(61)	-C(62)	1.48(3)
C(28)	-C(29)	1.37(2)	C(62)	-C(63)	1.38(3)
C(29)	-C(30)	1.42(3)	C(63)	-C(64)	1.42(3)
C(30)	-C(31)	1.49(3)	C(63)	-C(85)	1.48(3)
C(31)	-C(32)	1.45(3)	C(64)	-C(65)	1.42(2)
C(33)	-C(34)	1.37(3)	C(65)	-C(66)	1.31(2)
C(33)	-C(38)	1.47(2)	C(66)	-C(67)	1.42(3)
C(34)	-C(35)	1.49(3)	C(67)	-C(68)	1.38(3)
C(35)	-C(36)	1.35(3)	C(68)	-C(69)	1.39(2)
C(36)	-C(37)	1.36(3)	C(68)	-C(91)	1.50(3)
C(37)	-C(38)	1.35(3)	C(69)	-C(70)	1.42(3)
C(39)	-C(40)	1.35(3)	C(70)	-C(71)	1.35(2)
C(39)	-C(44)	1.45(3)	C(71)	-C(72)	1.51(3)
C(40)	-C(41)	1.39(3)	C(72)	-C(73)	1.37(2)
C(41)	-C(42)	1.42(3)	C(73)	-C(74)	1.40(3)
C(42)	-C(43)	1.35(3)	C(73)	-C(97)	1.50(2)
C(43)	-C(44)	1.42(3)	C(74)	-C(75)	1.51(2)
C(47)	-C(48)	1.47(3)	C(75)	-C(76)	1.32(3)
C(49)	-C(50)	1.42(3)	C(76)	-C(77)	1.45(2)
C(51)	-C(52)	1.55(3)	C(77)	-C(78)	1.38(3)
C(53)	-C(54)	1.49(4)	C(78)	-C(79)	1.53(3)
C(55)	-C(56)	1.52(3)	C(79)	-C(80)	1.41(3)
C(57)	-C(58)	1.43(3)	C(79)	-C(84)	1.39(3)
C(80)	-C(81)	1.35(3)	C(113)	-C(114)	1.63(4)
C(81)	-C(82)	1.37(3)	C(115)	-C(116)	1.53(3)
C(82)	-C(83)	1.38(3)	C(117)	-C(118)	1.44(4)
C(83)	-C(84)	1.36(3)	C(118)	-C(119)	1.37(4)
C(85)	-C(86)	1.35(3)	C(118)	-C(123)	1.43(3)
C(85)	-C(90)	1.39(3)	C(119)	-C(120)	1.45(4)
C(86)	-C(87)	1.47(3)	C(120)	-C(121)	1.40(3)
C(87)	-C(88)	1.34(3)	C(121)	-C(122)	1.40(4)
C(88)	-C(89)	1.36(3)	C(122)	-C(123)	1.38(4)
C(89)	-C(90)	1.39(3)	C(94)	-C(95)	1.36(3)
C(91)	-C(92)	1.41(3)	C(95)	-C(96)	1.44(3)
C(91)	-C(96)	1.36(3)	C(97)	-C(98)	1.45(3)
C(92)	-C(93)	1.40(3)	C(97)	-C(102)	1.39(2)
C(93)	-C(94)	1.35(3)	C(98)	-C(99)	1.40(3)

Distances are in angstroms. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 2S(cont.) Bond Distances

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(99)	-C(100)	1.36(3)			
C(100)	-C(101)	1.36(3)			
C(101)	-C(102)	1.34(3)			
C(105)	-C(106)	1.39(4)			
C(107)	-C(108)	1.46(5)			
C(109)	-C(110)	1.47(4)			
C(111)	-C(112)	1.36(4)			

Distances are in angstroms. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 3S. Bond Angles

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
N(1)	-Co(1)	-N(2)	91.5(7)	N(9)	-Co(2)	-C(104)	90.4(8)
N(1)	-Co(1)	-N(3)	179.0(7)	N(10)	-Co(2)	-C(103)	88.2(7)
N(1)	-Co(1)	-N(4)	88.9(6)	N(10)	-Co(2)	-C(104)	90.8(6)
N(1)	-Co(1)	-C(45)	90.1(7)	C(103)	-Co(2)	-C(104)	178.2(8)
N(1)	-Co(1)	-C(46)	91.4(6)	O(1)	-K(1)	-O(2)	61.8(4)
N(2)	-Co(1)	-N(3)	89.5(7)	O(1)	-K(1)	-O(3)	116.4(4)
N(2)	-Co(1)	-N(4)	179.1(6)	O(1)	-K(1)	-O(4)	169.6(4)
N(2)	-Co(1)	-C(45)	89.5(7)	O(1)	-K(1)	-O(5)	121.2(5)
N(2)	-Co(1)	-C(46)	87.2(7)	O(1)	-K(1)	-O(6)	62.9(4)
N(3)	-Co(1)	-N(4)	90.1(7)	O(1)	-K(1)	-O(13)	92.7(6)
N(3)	-Co(1)	-C(45)	90.2(7)	O(1)	-K(1)	-O(13')	73.9(8)
N(3)	-Co(1)	-C(46)	88.3(7)	O(1)	-K(1)	-N(5)	79.2(5)
N(4)	-Co(1)	-C(45)	91.2(7)	O(2)	-K(1)	-O(3)	58.9(4)
N(4)	-Co(1)	-C(46)	92.1(7)	O(2)	-K(1)	-O(4)	116.4(5)
C(45)	-Co(1)	-C(46)	176.4(8)	O(2)	-K(1)	-O(5)	172.8(4)
N(7)	-Co(2)	-N(8)	90.8(7)	O(2)	-K(1)	-O(6)	124.2(4)
N(7)	-Co(2)	-N(9)	178.3(7)	O(2)	-K(1)	-O(13)	85.6(6)
N(7)	-Co(2)	-N(10)	89.5(6)	O(2)	-K(1)	-O(13')	96.9(8)
N(7)	-Co(2)	-C(103)	90.5(7)	O(2)	-K(1)	-N(5)	84.3(5)
N(7)	-Co(2)	-C(104)	90.9(7)	O(3)	-K(1)	-O(4)	58.7(4)
N(8)	-Co(2)	-N(9)	88.3(7)	O(3)	-K(1)	-O(5)	115.5(5)
N(8)	-Co(2)	-N(10)	178.5(6)	O(3)	-K(1)	-O(6)	166.3(5)
N(8)	-Co(2)	-C(103)	93.3(7)	O(3)	-K(1)	-O(13)	62.6(6)
N(8)	-Co(2)	-C(104)	87.8(7)	O(3)	-K(1)	-O(13')	92.1(8)
N(9)	-Co(2)	-N(10)	91.4(7)	O(3)	-K(1)	-N(5)	114.7(5)
N(9)	-Co(2)	-C(103)	88.1(8)	O(4)	-K(1)	-O(5)	59.4(5)
O(4)	-K(1)	-O(6)	119.4(5)	O(8)	-K(2)	-O(15)	73.2(7)
O(4)	-K(1)	-O(13)	77.0(6)	O(8)	-K(2)	-O(15')	89.2(8)
O(4)	-K(1)	-O(13')	96.7(8)	O(8)	-K(2)	-N(6)	118.3(5)
O(4)	-K(1)	-N(5)	111.0(5)	O(9)	-K(2)	-O(10)	57.6(6)
O(5)	-K(1)	-O(6)	60.1(5)	O(9)	-K(2)	-O(11)	119.0(6)
O(5)	-K(1)	-O(13)	87.7(6)	O(9)	-K(2)	-O(12)	163.3(5)
O(5)	-K(1)	-O(13')	78.5(8)	O(9)	-K(2)	-O(15)	78.2(8)
O(5)	-K(1)	-N(5)	102.5(5)	O(9)	-K(2)	-O(15')	100.9(8)
O(6)	-K(1)	-O(13)	103.7(6)	O(9)	-K(2)	-N(6)	119.0(5)
O(6)	-K(1)	-O(13')	74.4(8)	O(10)	-K(2)	-O(11)	61.5(6)
O(6)	-K(1)	-N(5)	79.0(5)	O(10)	-K(2)	-O(12)	121.4(5)
O(13)	-K(1)	-O(13')	30.0(8)	O(10)	-K(2)	-O(15)	79.9(7)
O(13)	-K(1)	-N(5)	169.3(6)	O(10)	-K(2)	-O(15')	88.0(8)
O(13')	-K(1)	-N(5)	148.5(8)	O(10)	-K(2)	-N(6)	105.0(5)
O(7)	-K(2)	-O(8)	59.9(4)	O(11)	-K(2)	-O(12)	61.8(5)
O(7)	-K(2)	-O(9)	117.5(5)	O(11)	-K(2)	-O(15)	88.6(8)
O(7)	-K(2)	-O(10)	172.0(5)	O(11)	-K(2)	-O(15')	73.3(8)
O(7)	-K(2)	-O(11)	122.5(5)	O(11)	-K(2)	-N(6)	79.3(5)
O(7)	-K(2)	-O(12)	61.1(4)	O(12)	-K(2)	-O(15)	85.2(7)
O(7)	-K(2)	-O(15)	93.1(7)	O(12)	-K(2)	-O(15')	62.7(8)

Angles are in degrees. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 3S(cont.) Bond Angles

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
O(7)	-K(2)	-O(15')	86.8(7)	O(12)	-K(2)	-N(6)	77.7(5)
O(7)	-K(2)	-N(6)	82.8(4)	O(15)	-K(2)	-O(15')	23.3(8)
O(8)	-K(2)	-O(9)	58.4(5)	O(15)	-K(2)	-N(6)	162.4(8)
O(8)	-K(2)	-O(10)	113.9(5)	O(15')	-K(2)	-N(6)	139.1(8)
O(8)	-K(2)	-O(11)	161.8(5)	K(1)	-O(1)	-C(47)	112(1)
O(8)	-K(2)	-O(12)	114.9(5)	K(1)	-O(1)	-C(58)	107(1)
C(47)	-O(1)	-C(58)	114(1)	K(2)	-O(10)	-C(111)	116(2)
K(1)	-O(2)	-C(56)	117(1)	C(110)	-O(10)	-C(111)	110(2)
K(1)	-O(2)	-C(57)	115(1)	K(2)	-O(11)	-C(112)	107(1)
C(56)	-O(2)	-C(57)	111(1)	K(2)	-O(11)	-C(113)	110(2)
K(1)	-O(3)	-C(54)	115(1)	C(112)	-O(11)	-C(113)	121(2)
K(1)	-O(3)	-C(55)	111(1)	K(2)	-O(12)	-C(114)	111(1)
C(54)	-O(3)	-C(55)	113(2)	K(2)	-O(12)	-C(115)	107(1)
K(1)	-O(4)	-C(52)	113(1)	C(114)	-O(12)	-C(115)	112(2)
K(1)	-O(4)	-C(53)	114(1)	K(1)	-O(13)	-O(13')	76(2)
C(52)	-O(4)	-C(53)	110(2)	K(1)	-O(13')	-O(13)	74(2)
K(1)	-O(5)	-C(50)	117(1)	K(2)	-O(15)	-O(15')	77(2)
K(1)	-O(5)	-C(51)	117(1)	K(2)	-O(15')	-O(15)	79(2)
C(50)	-O(5)	-C(51)	117(2)	Co(1)	-N(1)	-C(1)	126(1)
K(1)	-O(6)	-C(48)	108(1)	Co(1)	-N(1)	-C(4)	125(1)
K(1)	-O(6)	-C(49)	113(1)	C(1)	-N(1)	-C(4)	108(1)
C(48)	-O(6)	-C(49)	115(2)	Co(1)	-N(2)	-C(6)	126(1)
K(2)	-O(7)	-C(105)	116(1)	Co(1)	-N(2)	-C(9)	128(1)
K(2)	-O(7)	-C(116)	117(1)	C(6)	-N(2)	-C(9)	106(1)
C(105)	-O(7)	-C(116)	111(1)	Co(1)	-N(3)	-C(11)	128(1)
K(2)	-O(8)	-C(106)	114(1)	Co(1)	-N(3)	-C(14)	129(1)
K(2)	-O(8)	-C(107)	118(2)	C(11)	-N(3)	-C(14)	104(1)
C(106)	-O(8)	-C(107)	116(2)	Co(1)	-N(4)	-C(16)	126(1)
K(2)	-O(9)	-C(108)	111(2)	Co(1)	-N(4)	-C(19)	127(1)
K(2)	-O(9)	-C(109)	109(2)	C(16)	-N(4)	-C(19)	107(1)
C(108)	-O(9)	-C(109)	114(2)	K(1)	-N(5)	-C(45)	148(2)
K(2)	-O(10)	-C(110)	125(2)	K(2)	-N(6)	-C(46)	156(2)
Co(2)	-N(7)	-C(59)	125(1)	C(6)	-C(7)	-C(8)	108(2)
Co(2)	-N(7)	-C(62)	126(1)	C(7)	-C(8)	-C(9)	104(2)
C(59)	-N(7)	-C(62)	109(2)	N(2)	-C(9)	-C(8)	112(1)
Co(2)	-N(8)	-C(64)	126(1)	N(2)	-C(9)	-C(10)	123(2)
Co(2)	-N(8)	-C(67)	128(1)	C(8)	-C(9)	-C(10)	124(2)
C(64)	-N(8)	-C(67)	106(1)	C(9)	-C(10)	-C(11)	124(2)
Co(2)	-N(9)	-C(69)	129(1)	C(9)	-C(10)	-C(33)	118(2)
Co(2)	-N(9)	-C(72)	123(1)	C(11)	-C(10)	-C(33)	118(2)
C(69)	-N(9)	-C(72)	108(2)	N(3)	-C(11)	-C(10)	123(2)
Co(2)	-N(10)	-C(74)	127(1)	N(3)	-C(11)	-C(12)	111(2)
Co(2)	-N(10)	-C(77)	127(1)	C(10)	-C(11)	-C(12)	124(2)
C(74)	-N(10)	-C(77)	106(1)	C(11)	-C(12)	-C(13)	106(2)
N(1)	-C(1)	-C(2)	110(2)	C(12)	-C(13)	-C(14)	109(2)
N(1)	-C(1)	-C(20)	127(2)	N(3)	-C(14)	-C(13)	109(2)

Angles are in degrees. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 3S(cont.) Bond Angles

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(2)	-C(1)	-C(20)	122(2)	N(3)	-C(14)	-C(15)	121(2)
C(1)	-C(2)	-C(3)	106(2)	C(13)	-C(14)	-C(15)	130(2)
C(2)	-C(3)	-C(4)	107(2)	C(14)	-C(15)	-C(16)	126(2)
N(1)	-C(4)	-C(3)	109(1)	C(14)	-C(15)	-C(39)	119(2)
N(1)	-C(4)	-C(5)	128(1)	C(16)	-C(15)	-C(39)	115(2)
C(3)	-C(4)	-C(5)	122(2)	N(4)	-C(16)	-C(15)	124(2)
C(4)	-C(5)	-C(6)	118(2)	N(4)	-C(16)	-C(17)	109(2)
C(4)	-C(5)	-C(27)	118(1)	C(15)	-C(16)	-C(17)	127(2)
C(6)	-C(5)	-C(27)	124(2)	C(16)	-C(17)	-C(18)	109(2)
N(2)	-C(6)	-C(5)	127(2)	C(17)	-C(18)	-C(19)	104(2)
N(2)	-C(6)	-C(7)	109(2)	N(4)	-C(19)	-C(18)	111(1)
C(5)	-C(6)	-C(7)	123(2)	N(4)	-C(19)	-C(20)	125(2)
C(18)	-C(19)	-C(20)	122(2)	C(36)	-C(37)	-C(38)	118(2)
C(1)	-C(20)	-C(19)	120(2)	C(33)	-C(38)	-C(37)	122(2)
C(1)	-C(20)	-C(21)	121(2)	C(15)	-C(39)	-C(40)	123(2)
C(19)	-C(20)	-C(21)	118(2)	C(15)	-C(39)	-C(44)	115(2)
C(20)	-C(21)	-C(22)	119(1)	C(40)	-C(39)	-C(44)	122(2)
C(20)	-C(21)	-C(26)	122(2)	C(39)	-C(40)	-C(41)	119(2)
C(22)	-C(21)	-C(26)	118(2)	C(40)	-C(41)	-C(42)	121(2)
C(21)	-C(22)	-C(23)	120(2)	C(41)	-C(42)	-C(43)	120(2)
C(22)	-C(23)	-C(24)	120(2)	C(42)	-C(43)	-C(44)	121(2)
C(23)	-C(24)	-C(25)	122(2)	C(39)	-C(44)	-C(43)	117(2)
C(24)	-C(25)	-C(26)	118(2)	Co(1)	-C(45)	-N(5)	175(2)
C(21)	-C(26)	-C(25)	122(2)	Co(1)	-C(46)	-N(6)	176(2)
C(5)	-C(27)	-C(28)	117(2)	O(1)	-C(47)	-C(48)	108(2)
C(5)	-C(27)	-C(32)	121(2)	O(6)	-C(48)	-C(47)	109(2)
C(28)	-C(27)	-C(32)	122(2)	O(6)	-C(49)	-C(50)	107(2)
C(27)	-C(28)	-C(29)	122(2)	O(5)	-C(50)	-C(49)	115(2)
C(28)	-C(29)	-C(30)	121(2)	O(5)	-C(51)	-C(52)	107(2)
C(29)	-C(30)	-C(31)	117(2)	O(4)	-C(52)	-C(51)	108(2)
C(30)	-C(31)	-C(32)	119(2)	O(4)	-C(53)	-C(54)	106(2)
C(27)	-C(32)	-C(31)	119(2)	O(3)	-C(54)	-C(53)	112(2)
C(10)	-C(33)	-C(34)	121(2)	O(3)	-C(55)	-C(56)	109(2)
C(10)	-C(33)	-C(38)	120(2)	O(2)	-C(56)	-C(55)	104(2)
C(34)	-C(33)	-C(38)	118(2)	O(2)	-C(57)	-C(58)	109(2)
C(33)	-C(34)	-C(35)	119(2)	O(1)	-C(58)	-C(57)	112(2)
C(34)	-C(35)	-C(36)	118(2)	N(7)	-C(59)	-C(60)	109(1)
C(35)	-C(36)	-C(37)	125(2)	N(7)	-C(59)	-C(78)	125(2)
C(60)	-C(59)	-C(78)	126(2)	N(9)	-C(72)	-C(73)	129(2)
C(59)	-C(60)	-C(61)	108(2)	C(71)	-C(72)	-C(73)	124(2)
C(60)	-C(61)	-C(62)	105(2)	C(72)	-C(73)	-C(74)	120(2)
N(7)	-C(62)	-C(61)	109(2)	C(72)	-C(73)	-C(97)	118(2)
N(7)	-C(62)	-C(63)	127(2)	C(74)	-C(73)	-C(97)	122(2)
C(61)	-C(62)	-C(63)	123(2)	N(10)	-C(74)	-C(73)	125(1)
C(62)	-C(63)	-C(64)	121(2)	N(10)	-C(74)	-C(75)	110(1)
C(62)	-C(63)	-C(85)	124(2)	C(73)	-C(74)	-C(75)	124(2)

Angles are in degrees. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.

Table 3S(cont.) Bond Angles

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(64)	-C(63)	-C(85)	115(2)	C(74)	-C(75)	-C(76)	104(2)
N(8)	-C(64)	-C(63)	125(2)	C(75)	-C(76)	-C(77)	110(2)
N(8)	-C(64)	-C(65)	108(2)	N(10)	-C(77)	-C(76)	110(2)
C(63)	-C(64)	-C(65)	126(2)	N(10)	-C(77)	-C(78)	124(2)
C(64)	-C(65)	-C(66)	109(2)	C(76)	-C(77)	-C(78)	126(2)
C(65)	-C(66)	-C(67)	108(2)	C(59)	-C(78)	-C(77)	123(2)
N(8)	-C(67)	-C(66)	109(2)	C(59)	-C(78)	-C(79)	120(2)
N(8)	-C(67)	-C(68)	124(2)	C(77)	-C(78)	-C(79)	117(2)
C(66)	-C(67)	-C(68)	126(2)	C(78)	-C(79)	-C(80)	118(2)
C(67)	-C(68)	-C(69)	124(2)	C(78)	-C(79)	-C(84)	125(2)
C(67)	-C(68)	-C(91)	120(2)	C(80)	-C(79)	-C(84)	118(2)
C(69)	-C(68)	-C(91)	116(2)	C(79)	-C(80)	-C(81)	119(2)
N(9)	-C(69)	-C(68)	121(2)	C(80)	-C(81)	-C(82)	121(2)
N(9)	-C(69)	-C(70)	109(1)	C(81)	-C(82)	-C(83)	123(2)
C(68)	-C(69)	-C(70)	130(2)	C(82)	-C(83)	-C(84)	116(2)
C(69)	-C(70)	-C(71)	108(2)	C(79)	-C(84)	-C(83)	124(2)
C(70)	-C(71)	-C(72)	108(2)	C(63)	-C(85)	-C(86)	120(2)
N(9)	-C(72)	-C(71)	107(1)	C(63)	-C(85)	-C(90)	117(2)
C(86)	-C(85)	-C(90)	123(2)	O(8)	-C(107)	-C(108)	112(3)
C(85)	-C(86)	-C(87)	118(2)	O(9)	-C(108)	-C(107)	110(3)
C(86)	-C(87)	-C(88)	119(2)	O(9)	-C(109)	-C(110)	112(2)
C(87)	-C(88)	-C(89)	120(2)	O(10)	-C(110)	-C(109)	104(2)
C(88)	-C(89)	-C(90)	124(2)	O(10)	-C(111)	-C(112)	109(2)
C(85)	-C(90)	-C(89)	116(2)	O(11)	-C(112)	-C(111)	111(2)
C(68)	-C(91)	-C(92)	120(2)	O(11)	-C(113)	-C(114)	112(2)
C(68)	-C(91)	-C(96)	118(2)	O(12)	-C(114)	-C(113)	104(2)
C(92)	-C(91)	-C(96)	121(2)	O(12)	-C(115)	-C(116)	109(2)
C(91)	-C(92)	-C(93)	120(2)	O(7)	-C(116)	-C(115)	107(2)
C(92)	-C(93)	-C(94)	119(2)	C(117)	-C(118)	-C(119)	121(3)
C(93)	-C(94)	-C(95)	121(2)	C(117)	-C(118)	-C(123)	119(3)
C(94)	-C(95)	-C(96)	121(2)	C(119)	-C(118)	-C(123)	119(3)
C(91)	-C(96)	-C(95)	117(2)	C(118)	-C(119)	-C(120)	118(2)
C(73)	-C(97)	-C(98)	118(2)	C(119)	-C(120)	-C(121)	123(3)
C(73)	-C(97)	-C(102)	123(2)	C(120)	-C(121)	-C(122)	116(3)
C(98)	-C(97)	-C(102)	119(2)	C(121)	-C(122)	-C(123)	121(3)
C(97)	-C(98)	-C(99)	114(2)	C(118)	-C(123)	-C(122)	121(3)
C(98)	-C(99)	-C(100)	123(2)				
C(99)	-C(100)	-C(101)	122(2)				
C(100)	-C(101)	-C(102)	118(2)				
C(97)	-C(102)	-C(101)	124(2)				
Co(2)	-C(103)	-N(12)	174(2)				
Co(2)	-C(104)	-N(11)	178(2)				
O(7)	-C(105)	-C(106)	110(2)				
O(8)	-C(106)	-C(105)	113(3)				

Angles are in degrees. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.