JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
J. Am. Chem. Soc., 1996, 118(21), 5150-5151, DOI:10.1021/ja9602915

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html

ACS Publications
MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

J-5151-1

Table S-1. Atomic coordinates ($x10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) for **2**

	x	y	z	U(eq)
Li(1)	0	5000	0	75(13)
Li(2)	2500	7500	-2436(8)	79(12)
Li(3)	2500	2500	-1265(7)	58(12)
Li(4)	2500	2500	1243(7)	50(11)
Si(1)	2046(3)	5548(2)	617(1)	66(1)
Si(2)	2726(3)	5656(2)	-358(1)	73(2)
Si(3)	2260(7)	6171(3)	-1824(2)	60(3)
Si(31)	2090(9)	5902(4)	-2071(2)	78(4)
Si(4)	2178(6)	5722(3)	-2796(2)	74(3)
Si(41)	2309(7)	6214(4)	-3051(2)	67(3)
C(11)	1635(8)	4993(5)	253(3)	49(5)
C(12)	1860(9)	5045(6)	-124(3)	53(5)
B(13)	1565(10)	4420(8)	-316(4)	65(6)
B(14)	1155(11)	3870(7)	5(4)	72(7)
B(15)	1200(11)	4304(7)	357(4)	65(6)
B(16)	2338(12)	4355(7)	69(4)	69(6)
C(21)	1614(10)	6624(6)	-2258(4)	60(6)
C(22)	1663(11)	6596(7)	-2635(5)	97(8)
B(23)	890(15)	7088(11)	-2803(4)	106(10)
B(24)	229(11)	7454(8)	-2475(4)	71(6)
B(25)	808(12)	7129(7)	-2126(4)	65(7)
B(26)	373(10)	6631(8)	-2480(5)	79(8)
C(31)	1947(11)	6411(5)	505(3)	103(7)
C(32)	1030(9)	5429(6)	975(3)	96(6)
C(33)	3466(9)	5363(6)	783(3)	102(7)
C(34)	3197(11)	5306(6)	-780(3)	132(8)
C(35)	1885(11)	6373(5)	-460(3)	113(7)
C(36)	4017(9)	5882(6)	-127(3)	106(7)
C(37)	1302(13)	5713(9)	-1649(4)	156(9)
C(38)	3585(11)	5871(7)	-1947(3)	111(7)
C(39)	2569(19)	6754(11)	-1490(5)	86(8)
C(391)	1713(31)	5131(16)	-2269(10)	142(14)
C(40)	3658(11)	5803(7)	-2895(3)	113(7)
C(41)	1414(12)	5610(7)	-3210(3)	115(7)
C(42)	1812(20)	4986(12)	-2535(7)	90(8)
C(421)	2672(22)	6744(12)	-3409(6)	92(9)
N(51)	2347(12)	3336(5)	-1554(4)	83(6)
N(52)	3837(11)	2864(7)	-975(4)	96(6)
C(53)	3162(23)	3707(10)	-1386(7)	197(17)
C(54)	3943(18)	3485(11)	-1139(8)	211(20)
C(55)	2694(16)	3305(7)	-1894(4)	170(11)
C(56)	1300(13)	3646(7)	-1550(5)	200(13)
C(57)	4861(11)	2522(8)	-985(4)	201(12)
C(58)	3620(16)	2994(9)	-625(5)	205(13)
N(61)	1071(9)	2229(6)	971(3)	64(5)
N(62)	2324(10)	1647(5)	1533(3)	66(5)
C(63)	774(15)	1645(8)	1141(6)	192(15)
C(64)	1430(17)	1348(8)	1348(5)	139(11)
C(65)	1257(11)	2099(7)	619(4)	149(10)
C(66)	178(10)	2680(6)	981(3)	98(8)
C(67)	3283(12)	1227(6)	1526(4)	113(8)
C(68)	2030(13)	1705(6)	1888(4)	130(9)

J-5151-2

* Occupancy of disordered atoms: Si(3), Si(4), C(39), and C(42): 52.79%; Si(31), Si(41), C(391), and C(421): 47.21%.

** Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

J-5151-3

Table S-2. Bond lengths (Å) for **2**

Li(1)-Cnt(1)	2.047		Li(1)-C(11)	2.200	(10)
Li(1)-C(12)	2.294	(10)	Li(1)-B(13)	2.554	(14)
Li(1)-B(14)	2.740	(14)	Li(1)-B(15)	2.473	(15)
Li(2)-Cnt(2)	2.071		Li(2)-C(21)	2.229	(16)
Li(2)-C(22)	2.276	(18)	Li(2)-B(23)	2.554	(25)
Li(2)-B(24)	2.742	(13)	Li(2)-B(25)	2.489	(21)
Li(3)-N(51)	2.084	(19)	Li(3)-N(52)	2.106	(20)
Li(4)-N(61)	2.096	(17)	Li(4)-N(62)	2.116	(17)
Si(41)-C(421)	1.826	(26)	C(11)-C(12)	1.485	(15)
C(11)-B(15)	1.585	(18)	C(11)-B(16)	1.733	(18)
C(12)-B(13)	1.545	(20)	C(12)-B(16)	1.721	(18)
B(13)-B(14)	1.764	(21)	B(13)-B(16)	1.763	(20)
B(14)-B(15)	1.637	(22)	B(14)-B(16)	1.766	(20)
B(15)-B(16)	1.772	(20)	C(21)-C(22)	1.463	(23)
C(21)-B(25)	1.523	(19)	C(21)-B(26)	1.725	(19)
C(22)-B(23)	1.532	(25)	C(22)-B(26)	1.668	(19)
B(23)-B(24)	1.681	(23)	B(23)-B(26)	1.693	(25)
B(24)-B(25)	1.666	(21)	B(24)-B(26)	1.727	(23)
B(25)-B(26)	1.799	(23)	Si(1)-C(11)	1.891	(11)
Si(1)-C(31)	1.859	(11)	Si(1)-C(32)	1.863	(11)
Si(1)-C(33)	1.868	(12)	Si(2)-C(12)	1.880	(12)
Si(2)-C(34)	1.879	(13)	Si(2)-C(35)	1.851	(12)
Si(2)-C(36)	1.855	(12)	Si(3)-C(21)	2.077	(15)
Si(3)-C(37)	1.645	(18)	Si(3)-C(38)	1.780	(15)
Si(3)-C(39)	1.816	(23)	Si(31)-C(21)	1.768	(16)
Si(31)-C(37)	1.929	(17)	Si(31)-C(38)	1.865	(16)
Si(31)-C(391)	1.841	(37)	Si(4)-C(22)	2.026	(17)
Si(4)-C(40)	1.832	(15)	Si(4)-C(41)	1.861	(15)
Si(4)-C(42)	1.894	(27)	Si(41)-C(22)	1.957	(19)
Si(41)-C(40)	1.935	(16)	Si(41)-C(41)	1.771	(16)
N(51)-C(53)	1.409	(29)	N(51)-C(55)	1.382	(22)
N(51)-C(56)	1.418	(21)	N(52)-C(54)	1.449	(28)
N(52)-C(57)	1.426	(20)	N(52)-C(58)	1.404	(24)
C(53)-C(54)	1.419	(36)	N(61)-C(63)	1.433	(23)
N(61)-C(65)	1.405	(21)	N(61)-C(66)	1.431	(17)
N(62)-C(64)	1.437	(23)	N(62)-C(67)	1.450	(18)
N(62)-C(68)	1.425	(20)	C(63)-C(64)	1.283	(28)

J-5151-4

Table S-3. Bond angles (°) for **2**

Cnt(1)-Li(1)-Cnt(1A)	180.0	Cnt(2)-LI(2)-Cnt(2A)	175.0
C(11)-Li(1)-C(12)	38.5(4)	C(11)-Li(1)-B(13)	63.2(4)
C(12)-Li(1)-B(13)	36.7(4)	C(11)-Li(1)-B(14)	62.4(4)
C(12)-Li(1)-B(14)	62.6(4)	B(13)-Li(1)-B(14)	38.7(5)
C(11)-Li(1)-B(15)	39.1(4)	C(12)-Li(1)-B(15)	64.5(4)
B(13)-Li(1)-B(15)	63.7(5)	B(14)-Li(1)-B(15)	36.2(5)
C(11)-Li(1)-C(11A)	180.0(1)	C(12)-Li(1)-C(11A)	141.5(4)
B(13)-Li(1)-C(11A)	116.8(4)	B(14)-Li(1)-C(11A)	117.6(4)
B(15)-Li(1)-C(11A)	140.9(4)	C(11)-Li(1)-C(12A)	141.5(4)
C(12)-Li(1)-C(12A)	180.0(1)	B(13)-Li(1)-C(12A)	143.3(4)
B(14)-Li(1)-C(12A)	117.4(4)	B(15)-Li(1)-C(12A)	115.5(4)
C(11A)-Li(1)-C(12A)	38.5(4)	C(11)-Li(1)-B(13A)	116.8(4)
C(12)-Li(1)-B(13A)	143.3(4)	B(13)-Li(1)-B(13A)	180.0(1)
B(14)-Li(1)-B(13A)	141.3(5)	B(15)-Li(1)-B(13A)	116.3(5)
C(11A)-Li(1)-B(13A)	63.2(4)	C(12A)-Li(1)-B(13A)	36.7(4)
C(11)-Li(1)-B(14A)	117.6(4)	C(12)-Li(1)-B(14A)	117.4(4)
B(13)-Li(1)-B(14A)	141.3(5)	B(14)-Li(1)-B(14A)	180.0(1)
B(15)-Li(1)-B(14A)	143.8(5)	C(11A)-Li(1)-B(14A)	62.4(4)
C(12A)-Li(1)-B(14A)	62.6(4)	B(13A)-Li(1)-B(14A)	38.7(5)
C(11)-Li(1)-B(15A)	140.9(4)	C(12)-Li(1)-B(15A)	115.5(4)
B(13)-Li(1)-B(15A)	116.3(5)	B(14)-Li(1)-B(15A)	143.8(5)
B(15)-Li(1)-B(15A)	180.0(1)	C(11A)-Li(1)-B(15A)	39.1(4)
C(12A)-Li(1)-B(15A)	64.5(4)	B(13A)-Li(1)-B(15A)	63.7(5)
B(14A)-Li(1)-B(15A)	36.2(5)	C(21)-Li(2)-C(22)	37.9(6)
C(21)-Li(2)-B(23)	62.0(6)	C(22)-Li(2)-B(23)	36.4(7)
C(21)-Li(2)-B(24)	60.7(5)	C(22)-Li(2)-B(24)	60.6(5)
B(23)-Li(2)-B(24)	36.8(5)	C(21)-Li(2)-B(25)	37.1(5)
C(22)-Li(2)-B(25)	62.7(5)	B(23)-Li(2)-B(25)	62.7(5)
B(24)-Li(2)-B(25)	36.7(5)	C(21)-Li(2)-C(21A)	144.0(17)
C(22)-Li(2)-C(21A)	177.3(8)	B(23)-Li(2)-C(21A)	144.4(8)
B(24)-Li(2)-C(21A)	121.6(6)	B(25)-Li(2)-C(21A)	119.9(11)
C(21)-Li(2)-C(22A)	177.3(8)	C(22)-Li(2)-C(22A)	140.4(17)
B(23)-Li(2)-C(22A)	115.3(12)	B(24)-Li(2)-C(22A)	116.9(7)
B(25)-Li(2)-C(22A)	141.7(6)	C(21A)-Li(2)-C(22A)	37.9(6)
C(21)-Li(2)-B(23A)	144.4(8)	C(22)-Li(2)-B(23A)	115.3(12)
B(23)-Li(2)-B(23A)	112.4(14)	B(24)-Li(2)-B(23A)	137.6(12)
B(25)-Li(2)-B(23A)	174.4(11)	C(21A)-Li(2)-B(23A)	62.0(6)
C(22A)-Li(2)-B(23A)	36.4(7)	C(21)-Li(2)-B(24A)	121.6(6)
C(22)-Li(2)-B(24A)	116.9(7)	B(23)-Li(2)-B(24A)	137.6(12)
B(24)-Li(2)-B(24A)	173.6(14)	B(25)-Li(2)-B(24A)	148.8(11)
C(21A)-Li(2)-B(24A)	60.7(5)	C(22A)-Li(2)-B(24A)	60.6(5)
B(23A)-Li(2)-B(24A)	36.8(5)	C(21)-Li(2)-B(25A)	119.9(11)
C(22)-Li(2)-B(25A)	141.7(6)	B(23)-Li(2)-B(25A)	174.4(11)
B(24)-Li(2)-B(25A)	148.8(11)	B(25)-Li(2)-B(25A)	122.4(14)
C(21A)-Li(2)-B(25A)	37.1(5)	C(22A)-Li(2)-B(25A)	62.7(5)
B(23A)-Li(2)-B(25A)	62.7(5)	B(24A)-Li(2)-B(25A)	36.7(5)
N(51)-Li(3)-N(52)	92.9(6)	N(51)-Li(3)-N(51A)	115.0(14)
N(52)-Li(3)-N(51A)	121.4(6)	N(51)-Li(3)-N(52A)	121.4(6)
N(52)-Li(3)-N(52A)	115.6(15)	N(51A)-Li(3)-N(52A)	92.9(6)
N(61)-Li(4)-N(62)	87.5(5)	N(61)-Li(4)-N(61A)	119.7(14)
N(62)-Li(4)-N(61A)	125.1(5)	N(61)-Li(4)-N(62A)	125.1(5)
N(62)-Li(4)-N(62A)	116.1(13)	N(61A)-Li(4)-N(62A)	87.5(5)
C(11)-Si(1)-C(31)	113.9(5)	C(11)-Si(1)-C(32)	107.4(5)
C(31)-Si(1)-C(32)	105.0(5)	C(11)-Si(1)-C(33)	111.7(5)
C(31)-Si(1)-C(33)	109.9(6)	C(32)-Si(1)-C(33)	108.6(5)
C(12)-Si(2)-C(34)	108.8(6)	C(12)-Si(2)-C(35)	110.4(5)

J-5151-5

C(34)-Si(2)-C(35)	107.1(6)	C(12)-Si(2)-C(36)	114.0(5)
C(34)-Si(2)-C(36)	105.3(6)	C(35)-Si(2)-C(36)	110.9(6)
C(21)-Si(3)-C(37)	109.5(7)	C(21)-Si(3)-C(38)	106.3(7)
C(37)-Si(3)-C(38)	122.4(9)	C(21)-Si(3)-C(39)	110.2(9)
C(37)-Si(3)-C(39)	103.9(10)	C(38)-Si(3)-C(39)	104.0(9)
C(21)-Si(31)-C(37)	111.1(8)	C(21)-Si(31)-C(38)	116.6(8)
C(37)-Si(31)-C(38)	104.6(7)	C(21)-Si(31)-C(391)	119.7(13)
C(37)-Si(31)-C(391)	92.9(13)	C(38)-Si(31)-C(391)	108.4(13)
C(22)-Si(4)-C(40)	106.2(7)	C(22)-Si(4)-C(41)	103.1(7)
C(40)-Si(4)-C(41)	108.3(7)	C(22)-Si(4)-C(42)	119.7(10)
C(40)-Si(4)-C(42)	114.4(9)	C(41)-Si(4)-C(42)	104.0(9)
C(22)-Si(41)-C(40)	105.0(7)	C(22)-Si(41)-C(41)	109.5(7)
C(40)-Si(41)-C(41)	107.6(7)	C(22)-Si(41)-C(421)	118.1(10)
C(40)-Si(41)-C(421)	107.8(10)	C(41)-Si(41)-C(421)	108.3(10)
Li(1)-C(11)-Si(1)	124.2(5)	Li(1)-C(11)-C(12)	74.2(6)
Si(1)-C(11)-C(12)	129.7(8)	Li(1)-C(11)-B(15)	79.8(7)
Si(1)-C(11)-B(15)	116.9(8)	C(12)-C(11)-B(15)	112.1(10)
Li(1)-C(11)-B(16)	105.1(7)	Si(1)-C(11)-B(16)	130.5(8)
C(12)-C(11)-B(16)	64.1(8)	B(15)-C(11)-B(16)	64.4(8)
Li(1)-C(12)-Si(2)	132.1(6)	Li(1)-C(12)-C(11)	67.3(6)
Si(2)-C(12)-C(11)	128.5(8)	Li(1)-C(12)-B(13)	80.8(6)
Si(2)-C(12)-B(13)	118.0(8)	C(11)-C(12)-B(13)	111.7(10)
Li(1)-C(12)-B(16)	101.7(7)	Si(2)-C(12)-B(16)	126.2(8)
C(11)-C(12)-B(16)	64.9(8)	B(13)-C(12)-B(16)	65.1(8)
Li(1)-B(13)-C(12)	62.5(6)	Li(1)-B(13)-B(14)	76.4(7)
C(12)-B(13)-B(14)	105.9(10)	Li(1)-B(13)-B(16)	91.3(7)
C(12)-B(13)-B(16)	62.3(8)	B(14)-B(13)-B(16)	60.1(8)
Li(1)-B(14)-B(13)	64.9(6)	Li(1)-B(14)-B(15)	63.0(7)
B(13)-B(14)-B(15)	102.5(10)	Li(1)-B(14)-B(16)	85.2(7)
B(13)-B(14)-B(16)	59.9(8)	B(15)-B(14)-B(16)	62.6(8)
Li(1)-B(15)-C(11)	61.1(6)	Li(1)-B(15)-B(14)	80.9(8)
C(11)-B(15)-B(14)	107.5(11)	Li(1)-B(15)-B(16)	93.7(8)
C(11)-B(15)-B(16)	61.9(8)	B(14)-B(15)-B(16)	62.2(9)
C(11)-B(16)-C(12)	50.9(6)	C(11)-B(16)-B(13)	91.7(9)
C(12)-B(16)-B(13)	52.6(8)	C(11)-B(16)-B(14)	96.0(9)
C(12)-B(16)-B(14)	98.6(9)	B(13)-B(16)-B(14)	60.0(8)
C(11)-B(16)-B(15)	53.8(7)	C(12)-B(16)-B(15)	93.6(9)
B(13)-B(16)-B(15)	97.3(9)	B(14)-B(16)-B(15)	55.1(8)
Li(2)-C(21)-Si(3)	116.4(8)	Li(2)-C(21)-Si(31)	132.2(7)
Li(2)-C(21)-C(22)	72.8(11)	Si(3)-C(21)-C(22)	140.6(10)
Si(31)-C(21)-C(22)	111.2(10)	Li(2)-C(21)-B(25)	80.8(8)
Si(3)-C(21)-B(25)	106.5(9)	Si(31)-C(21)-B(25)	131.4(11)
C(22)-C(21)-B(25)	112.9(11)	Li(2)-C(21)-B(26)	104.7(9)
Si(3)-C(21)-B(26)	137.0(9)	Si(31)-C(21)-B(26)	119.5(9)
C(22)-C(21)-B(26)	62.5(9)	B(25)-C(21)-B(26)	66.9(9)
Li(2)-C(22)-Si(4)	135.7(7)	Li(2)-C(22)-Si(41)	116.1(9)
Si(4)-C(22)-Si(41)	42.1(4)	Li(2)-C(22)-C(21)	69.3(11)
Si(4)-C(22)-C(21)	110.9(10)	Si(41)-C(22)-C(21)	148.5(11)
Li(2)-C(22)-B(23)	81.7(10)	Si(4)-C(22)-B(23)	131.3(13)
Si(41)-C(22)-B(23)	99.6(12)	C(21)-C(22)-B(23)	111.8(12)
Li(2)-C(22)-B(26)	104.7(10)	Si(4)-C(22)-B(26)	115.9(10)
Si(41)-C(22)-B(26)	133.2(11)	C(21)-C(22)-B(26)	66.5(10)
B(23)-C(22)-B(26)	63.7(10)	Li(2)-B(23)-C(22)	61.9(8)
Li(2)-B(23)-B(24)	77.7(9)	C(22)-B(23)-B(24)	105.8(13)
Li(2)-B(23)-B(26)	93.4(10)	C(22)-B(23)-B(26)	62.1(10)
B(24)-B(23)-B(26)	61.6(10)	Li(2)-B(24)-B(23)	65.5(9)
Li(2)-B(24)-B(25)	63.3(9)	B(23)-B(24)-B(25)	103.3(12)
Li(2)-B(24)-B(26)	86.3(7)	B(23)-B(24)-B(26)	59.5(11)
B(25)-B(24)-B(26)	64.0(10)	Li(2)-B(25)-C(21)	62.1(7)

J-5151-6

Li(2)-B(25)-B(24)	79.9(9)	C(21)-B(25)-B(24)	106.1(11)
Li(2)-B(25)-B(26)	93.0(9)	C(21)-B(25)-B(26)	61.9(8)
B(24)-B(25)-B(26)	59.7(9)	C(21)-B(26)-C(22)	51.0(8)
C(21)-B(26)-B(23)	93.1(10)	C(22)-B(26)-B(23)	54.2(10)
C(21)-B(26)-B(24)	95.2(10)	C(22)-B(26)-B(24)	98.1(10)
B(23)-B(26)-B(24)	58.9(10)	C(21)-B(26)-B(25)	51.2(8)
C(22)-B(26)-B(25)	91.6(10)	B(23)-B(26)-B(25)	97.4(11)
B(24)-B(26)-B(25)	56.3(8)	Li(3)-N(51)-C(53)	98.7(13)
Li(3)-N(51)-C(55)	116.4(11)	C(53)-N(51)-C(55)	104.7(16)
Li(3)-N(51)-C(56)	117.1(11)	C(53)-N(51)-C(56)	111.4(14)
C(55)-N(51)-C(56)	107.6(14)	Li(3)-N(52)-C(54)	99.0(13)
Li(3)-N(52)-C(57)	117.7(11)	C(54)-N(52)-C(57)	111.1(14)
Li(3)-N(52)-C(58)	116.1(12)	C(54)-N(52)-C(58)	105.5(16)
C(57)-N(52)-C(58)	106.6(14)	N(51)-C(53)-C(54)	126.4(19)
N(52)-C(54)-C(53)	122.0(19)	Li(4)-N(61)-C(63)	101.8(11)
Li(4)-N(61)-C(65)	114.0(10)	C(63)-N(61)-C(65)	108.7(14)
Li(4)-N(61)-C(66)	115.3(9)	C(63)-N(61)-C(66)	111.2(11)
C(65)-N(61)-C(66)	105.8(11)	Li(4)-N(62)-C(64)	100.2(10)
Li(4)-N(62)-C(67)	114.8(9)	C(64)-N(62)-C(67)	109.0(11)
Li(4)-N(62)-C(68)	117.7(10)	C(64)-N(62)-C(68)	109.3(13)
C(67)-N(62)-C(68)	105.5(11)	N(61)-C(63)-C(64)	123.0(16)
N(62)-C(64)-C(63)	124.2(15)		

J-5151-7

Table S-4. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x 10^3$) for **2**

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Li(1)	40(19)	52(19)	134(29)	-12(16)	-22(22)	-9(21)
Li(2)	66(21)	77(20)	94(24)	-1(18)	0	0
Li(3)	63(26)	45(19)	66(19)	1(16)	0	0
Li(4)	35(22)	55(20)	61(18)	21(15)	0	0
Si(1)	62(2)	79(3)	57(2)	-5(3)	-12(2)	-1(2)
Si(2)	51(2)	95(3)	72(3)	-10(3)	5(2)	26(2)
Si(3)	57(5)	60(5)	61(6)	5(5)	-5(6)	7(5)
Si(31)	84(7)	86(8)	64(7)	7(7)	4(7)	24(6)
Si(4)	79(5)	73(5)	70(5)	1(6)	-5(5)	-26(5)
Si(41)	88(6)	55(5)	58(5)	2(6)	10(5)	-19(5)
C(11)	47(8)	61(9)	39(9)	14(7)	-3(7)	-2(7)
C(12)	36(8)	66(10)	56(9)	14(7)	-2(7)	-3(8)
B(13)	46(9)	84(12)	65(11)	16(10)	16(9)	-17(12)
B(14)	58(11)	62(11)	96(13)	5(10)	-18(12)	5(11)
B(15)	62(11)	45(11)	87(12)	6(10)	6(10)	14(11)
B(16)	55(10)	63(10)	90(11)	4(11)	-6(10)	13(11)
C(21)	48(10)	50(9)	81(11)	-8(8)	8(9)	13(9)
C(22)	59(11)	102(13)	130(15)	14(9)	2(12)	-74(12)
B(23)	61(14)	205(22)	51(13)	-16(16)	11(12)	-12(15)
B(24)	55(10)	93(11)	65(11)	7(9)	37(12)	-11(13)
B(25)	59(11)	74(11)	63(12)	31(11)	-8(10)	-12(10)
B(26)	33(10)	96(14)	108(15)	14(9)	6(11)	-24(13)
C(31)	120(12)	98(11)	91(11)	0(10)	-11(10)	-8(8)
C(32)	109(12)	111(12)	67(10)	14(10)	-17(9)	-11(9)
C(33)	99(11)	102(12)	105(12)	-22(10)	-27(10)	-8(10)
C(34)	128(14)	143(14)	123(13)	-18(12)	38(11)	31(11)
C(35)	122(12)	90(11)	126(13)	-6(10)	13(11)	26(9)
C(36)	79(10)	137(13)	103(11)	-19(10)	13(9)	44(10)
C(37)	144(14)	225(19)	99(13)	75(15)	-2(11)	44(13)
C(38)	90(10)	143(14)	101(12)	6(11)	-11(10)	3(10)
C(40)	97(11)	134(14)	107(11)	16(11)	27(10)	-42(11)
C(41)	165(14)	112(12)	68(10)	42(12)	8(11)	-31(10)
N(51)	84(11)	64(9)	99(10)	13(9)	1(10)	15(8)
N(52)	84(10)	92(10)	112(12)	6(10)	-31(9)	-2(9)
C(53)	238(34)	94(20)	260(34)	-52(25)	-23(25)	26(20)
C(54)	119(20)	163(30)	352(47)	-50(21)	-69(23)	-40(28)
C(55)	223(23)	154(18)	133(17)	42(17)	32(18)	53(14)
C(56)	107(16)	109(16)	383(32)	42(14)	66(19)	118(18)
C(57)	67(13)	252(24)	283(26)	39(15)	-94(17)	-124(21)
C(58)	266(27)	226(24)	123(18)	-11(20)	-46(20)	-67(18)
N(61)	70(9)	58(8)	63(9)	3(8)	-3(7)	-16(7)
N(62)	70(9)	63(8)	64(8)	14(8)	-1(8)	7(7)
C(63)	121(17)	110(18)	346(36)	-80(15)	-120(20)	95(20)
C(64)	177(22)	90(17)	149(19)	-68(17)	-40(16)	34(13)
C(65)	86(13)	189(19)	171(19)	-58(12)	-13(14)	-92(16)
C(66)	66(11)	94(14)	134(15)	-12(11)	4(11)	-14(11)
C(67)	109(13)	51(10)	180(16)	16(11)	34(12)	37(11)
C(68)	175(17)	89(13)	125(15)	25(13)	-4(15)	16(11)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

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

J-5151-8

Table S-5. H-Atom coordinates ($x10^4$) and isotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) for **2**

	x	y	z	U
H(13)	1969	4180	-608	80
H(14)	1160	3245	-77	80
H(15)	1313	4188	692	80
H(16)	3176	4052	223	80
H(341)	474	4219	-220	80
H(23)	806	7317	-3149	80
H(24)	-545	7851	-2464	80
H(25)	629	7380	-1807	80
H(26)	-572	6385	-2401	80
H(342)	964	7743	-2685	80
H(31A)	1214	6507	423	80
H(31B)	2097	6659	709	80
H(31C)	2479	6515	330	80
H(32A)	1030	4989	1045	80
H(32B)	1233	5694	1167	80
H(32C)	303	5546	896	80
H(33A)	3502	4915	836	80
H(33B)	4004	5463	608	80
H(33C)	3621	5607	988	80
H(34A)	2562	5181	-914	80
H(34B)	3621	5616	-907	80
H(34C)	3649	4938	-734	80
H(35A)	1227	6240	-580	80
H(35B)	1681	6589	-251	80
H(35C)	2306	6658	-604	80
H(36A)	3829	6071	92	80
H(36B)	4459	5506	-89	80
H(36C)	4431	6184	-262	80
H(37A)	1503	5472	-1432	80
H(37B)	587	5930	-1578	80
H(37C)	1020	5357	-1803	80
H(37D)	1297	6006	-1465	80
H(37E)	457	5624	-1696	80
H(37F)	1510	5281	-1546	80
H(38A)	3990	5625	-1756	80
H(38B)	3548	5545	-2135	80
H(38C)	4110	6189	-2022	80
H(38D)	4091	5955	-2144	80
H(38E)	3820	6120	-1758	80
H(38F)	3799	5406	-1883	80
H(39A)	2846	6546	-1281	80
H(39B)	3126	7037	-1575	80
H(39C)	1916	6995	-1427	80
H(39D)	2049	5126	-2467	80
H(39E)	1984	4771	-2110	80
H(39F)	931	5114	-2260	80
H(40A)	4001	5395	-2975	80
H(40B)	3823	6113	-3077	80
H(40C)	4107	5933	-2694	80
H(40D)	4074	5600	-3092	80
H(40E)	4202	6120	-2803	80
H(40F)	3556	5484	-2726	80
H(41A)	1548	5186	-3317	80
H(41B)	580	5611	-3172	80

J-5151-9

H(41C)	1549	5926	-3382	80
H(41D)	684	5793	-3295	80
H(41E)	1703	5380	-3412	80
H(41F)	1204	5292	-3041	80
H(42A)	2120	4626	-2643	80
H(42B)	2158	5043	-2306	80
H(42C)	1033	4946	-2503	80
H(42D)	2011	6953	-3489	80
H(42E)	3193	7068	-3331	80
H(42F)	3004	6511	-3596	80
H(53A)	2722	3985	-1244	80
H(53B)	3527	3972	-1554	80
H(54A)	4598	3446	-1279	80
H(54B)	4107	3794	-963	80
H(55A)	2601	3707	-2011	80
H(55B)	3462	3183	-1900	80
H(55C)	2256	2983	-2007	80
H(56A)	1303	4027	-1689	80
H(56B)	779	3345	-1644	80
H(56C)	1089	3752	-1318	80
H(57A)	5415	2727	-846	80
H(57B)	4742	2094	-904	80
H(57C)	5108	2509	-1221	80
H(58A)	4240	3164	-499	80
H(58B)	3009	3288	-612	80
H(58C)	3405	2591	-527	80
H(63A)	549	1359	960	80
H(63B)	120	1739	1274	80
H(64A)	973	1137	1516	80
H(64B)	1769	1019	1210	80
H(65A)	583	1981	504	80
H(65B)	1563	2474	512	80
H(65C)	1781	1754	604	80
H(66A)	-433	2519	847	80
H(66B)	-52	2737	1216	80
H(66C)	414	3084	887	80
H(67A)	3147	849	1660	80
H(67B)	3439	1110	1291	80
H(67C)	3907	1453	1621	80
H(68A)	1966	1294	1998	80
H(68B)	2583	1954	2005	80
H(68C)	1329	1922	1899	80

* Occupancy of disordered atoms: H(37a), H(37b), H(37c), H(38a), H(38b), H(38c), ...: 52.79%; H(37d), H(37e), H(37f), H(38d), H(38e), H(38f), ...: 47.21%.