

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
W(1)	46(1)	55(1)	56(1)	-6(1)	-6(1)	-15(1)
O(1)	122(5)	50(3)	127(6)	-2(3)	-27(4)	-35(3)
O(2)	116(5)	127(6)	68(4)	-22(4)	17(4)	-55(4)
O(3)	60(3)	89(4)	64(3)	5(3)	-15(3)	-14(3)
O(4)	65(4)	101(4)	103(4)	-39(3)	18(3)	-44(4)
O(5)	63(3)	69(3)	81(3)	-17(2)	-4(3)	-39(3)
O(6)	59(3)	103(5)	94(4)	-24(3)	16(3)	-5(4)
O(7)	52(3)	42(2)	56(2)	-3(2)	-7(2)	-8(2)
O(8)	140(6)	61(3)	69(4)	-41(4)	-16(4)	0(3)
O(9)	69(3)	61(3)	79(3)	-28(3)	-15(3)	-4(3)
O(10)	68(3)	55(3)	94(4)	7(2)	-6(3)	-3(3)
C(1)	64(5)	87(6)	69(5)	-4(4)	-9(4)	-27(4)
C(2)	55(4)	84(6)	85(6)	-5(4)	-3(4)	-28(5)
C(3)	54(4)	67(4)	48(3)	-11(3)	-2(3)	-19(3)
C(4)	77(6)	75(6)	124(9)	-11(5)	-59(6)	-2(6)
C(5)	42(4)	115(8)	117(8)	-7(4)	-6(4)	-51(7)
C(6)	64(5)	78(5)	84(5)	-37(4)	-14(4)	-4(4)
C(7)	57(5)	78(5)	109(7)	-17(4)	-15(4)	-48(5)
C(8)	77(6)	155(10)	56(4)	-63(6)	-8(4)	-32(6)
C(9)	43(3)	51(3)	50(3)	-9(3)	-4(3)	-13(3)
C(10)	48(3)	44(3)	47(3)	-11(2)	-9(3)	-7(2)
C(11)	49(3)	48(3)	46(3)	-4(3)	-4(3)	-7(3)
C(12)	50(3)	43(3)	53(3)	-7(3)	-9(3)	-11(3)
C(13)	73(4)	47(3)	48(3)	-13(3)	-5(3)	-13(3)
C(14)	49(3)	49(3)	42(3)	-10(3)	-4(2)	-6(3)
C(15)	54(4)	50(3)	56(4)	-13(3)	-12(3)	-8(3)
C(16)	48(4)	48(3)	68(4)	-10(3)	-10(3)	-11(3)
C(17)	45(3)	49(3)	64(4)	-9(3)	-5(3)	-19(3)
C(18)	81(6)	70(5)	94(6)	-16(4)	-21(5)	-42(5)
C(19)	52(4)	67(4)	59(4)	-15(3)	0(3)	-27(3)
C(20)	55(5)	85(6)	113(7)	9(4)	-29(5)	-31(5)
C(21)	60(4)	42(3)	49(3)	-9(3)	-2(3)	-6(3)
C(22)	72(5)	73(5)	98(6)	-33(4)	2(4)	-28(5)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
H(4A)	-1	4198	7960	80
H(5A)	-751	3140	9826	80
H(6A)	1184	649	10075	80
H(7A)	2855	621	8651	80
H(8A)	2228	2716	7145	80
H(11A)	5998	856	8402	80
H(11B)	8295	1064	8427	80
H(13A)	6010	2012	5758	80
H(13B)	8369	1754	5436	80
H(14A)	8894	3177	6474	80
H(15A)	5759	4112	5417	80
H(18A)	5487	-2155	6384	80
H(18B)	4729	-1110	5737	80
H(18C)	6390	-1779	5224	80
H(20A)	11468	-2414	8064	80
H(20B)	11863	-1785	6873	80
H(20C)	12282	-1161	7725	80
H(22A)	10725	6189	6456	80
H(22B)	9979	6648	5366	80
H(22C)	9089	7113	6419	80