

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
C(5*)	-0.0474(4)	0.2644(5)	-0.0926(2)	3.3(2)
C(5)	0.0474(4)	0.2644(5)	-0.4074(2)	3.3(2)
C(6*)	-0.0197(3)	0.2212(4)	-0.1245(2)	2.6(2)
C(6)	0.0197(3)	0.2212(4)	-0.3755(2)	2.6(2)
C(7*)	-0.0228(4)	-0.0366(4)	-0.1940(2)	3.0(2)
C(7)	0.0228(4)	-0.0366(4)	-0.3060(2)	3.0(2)
C(8*)	0.0280(4)	-0.0686(5)	-0.1594(3)	3.5(2)
C(8)	-0.0280(4)	-0.0686(5)	-0.3406(3)	3.5(2)
C(9*)	0.0364(4)	-0.1596(6)	-0.1518(3)	4.6(3)
C(9)	-0.0364(4)	-0.1596(6)	-0.3482(3)	4.6(3)
C(10)	0.0039(5)	-0.2199(6)	-0.3220(3)	5.0(3)
C(10*)	-0.0039(5)	-0.2199(6)	-0.1780(3)	5.0(3)
C(11)	0.0527(4)	-0.1891(5)	-0.2884(3)	4.3(3)
C(11*)	-0.0527(4)	-0.1891(5)	-0.2116(3)	4.3(3)
C(12)	0.0635(4)	-0.1001(5)	-0.2790(2)	3.5(2)
C(12*)	-0.0635(4)	-0.1001(5)	-0.2210(2)	3.5(2)
C(13*)	-0.1639(3)	0.0669(4)	-0.1715(2)	3.2(2)
C(13)	0.1639(3)	0.0669(4)	-0.3285(2)	3.2(2)
C(14)	0.1413(3)	0.2934(4)	-0.4476(2)	3.7(2)
C(14*)	-0.1413(3)	0.2934(4)	-0.0524(2)	3.7(2)
C(15*)	0.0495(3)	0.2525(4)	-0.1265(2)	3.3(2)
C(15)	-0.0495(3)	0.2525(4)	-0.3735(2)	3.3(2)
C(16)	-0.0740(4)	-0.0069(5)	-0.3720(3)	5.0(2)
C(16*)	0.0740(4)	-0.0069(5)	-0.1280(3)	5.0(2)

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
C(17)	-0.0059(5)	-0.3167(5)	-0.3305(3)	7.8(3)
C(17*)	0.0059(5)	-0.3167(5)	-0.1695(3)	7.8(3)
C(18)	0.1214(4)	-0.0796(5)	-0.2420(2)	4.1(2)
C(18*)	-0.1214(4)	-0.0796(5)	-0.2580(2)	4.1(2)
C(19*)	-0.0910(4)	-0.0424(5)	-0.0918(3)	5.9(3)
C(19)	0.0910(4)	-0.0424(5)	-0.4082(3)	5.9(3)
C(20*)	-0.1971(4)	-0.1268(5)	-0.1615(3)	6.7(3)
C(20)	0.1971(4)	-0.1268(5)	-0.3385(3)	6.7(3)
C(21*)	-0.2290(4)	0.0007(5)	-0.0926(3)	5.8(3)
C(21)	0.2290(4)	0.0007(5)	-0.4074(3)	5.8(3)
C(22*)	-0.2204(4)	0.2224(6)	-0.2346(3)	6.7(3)
C(22)	0.2204(4)	0.2224(6)	-0.2654(3)	6.7(3)
C(23*)	-0.2792(4)	0.0382(6)	-0.2552(3)	8.9(3)
C(23)	0.2792(4)	0.0382(6)	-0.2448(3)	8.9(3)
C(24*)	-0.3069(4)	0.1447(6)	-0.1784(3)	6.6(3)
C(24)	0.3069(4)	0.1447(6)	-0.3216(3)	6.6(3)
C(25)	0.1057(6)	0.4902(7)	-0.4393(7)	24.6(8)
C(25*)	-0.1057(6)	0.4902(7)	-0.0607(7)	24.6(8)
C(26)	0.2110(8)	0.4063(8)	-0.3702(4)	20.4(6)
C(26*)	-0.2110(8)	0.4063(8)	-0.1298(4)	20.4(6)
C(27)	0.2318(5)	0.4490(6)	-0.4628(3)	9.5(4)
C(27*)	-0.2318(5)	0.4490(6)	-0.0372(3)	9.5(4)
C(28)	0.0217(5)	0.3276(8)	-0.5285(3)	13.2(5)
C(28*)	-0.0217(5)	0.3276(8)	0.0285(3)	13.2(5)

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
C(29)	0.0829(5)	0.1489(6)	-0.5113(3)	8.8(3)
C(29*)	-0.0829(5)	0.1489(6)	0.0113(3)	8.8(3)
C(30)	0.1557(4)	0.3009(6)	-0.5469(3)	7.2(3)
C(30*)	-0.1557(4)	0.3009(6)	0.0469(3)	7.2(3)
C(31*)	0.0442(4)	0.4584(5)	-0.1144(3)	7.1(3)
C(31)	-0.0442(4)	0.4584(5)	-0.3856(3)	7.1(3)
C(32*)	0.1176(4)	0.3827(5)	-0.1798(2)	6.2(3)
C(32)	-0.1176(4)	0.3827(5)	-0.3202(2)	6.2(3)
C(33*)	-0.0315(4)	0.3721(5)	-0.1987(3)	5.7(3)
C(33)	0.0315(4)	0.3721(5)	-0.3013(3)	5.7(3)
C(34*)	0.1425(4)	0.3293(6)	-0.0374(3)	7.7(3)
C(34)	-0.1425(4)	0.3293(6)	-0.4626(3)	7.7(3)
C(35*)	0.1909(4)	0.1948(6)	-0.0947(3)	7.6(3)
C(35)	-0.1909(4)	0.1948(6)	-0.4053(3)	7.6(3)
C(36*)	0.0932(4)	0.1455(6)	-0.0355(2)	6.3(3)
C(36)	-0.0932(4)	0.1455(6)	-0.4645(2)	6.3(3)
H(1*)	-0.1878	0.1710	-0.1134	4.0205
H(1)	0.1878	0.1710	-0.3866	4.0205
H(2*)	-0.0221	0.3069	-0.0735	3.9487
H(2)	0.0221	0.3069	-0.4265	3.9487
H(3)	-0.0708	-0.1797	-0.3718	5.5532
H(3*)	0.0708	-0.1797	-0.1282	5.5532
H(4)	0.0808	-0.2304	-0.2704	5.1762
H(4*)	-0.0808	-0.2304	-0.2296	5.1762

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(5)	0.1405	0.0415	-0.3081	3.8137
H(5*)	-0.1405	0.0415	-0.1919	3.8137
H(6)	0.1812	0.2623	-0.4449	4.4014
H(6*)	-0.1812	0.2623	-0.0551	4.4014
H(7)	-0.0611	0.2152	-0.3513	3.8930
H(7*)	0.0611	0.2152	-0.1487	3.8930
H(8)	-0.0633	0.0522	-0.3634	5.9974
H(8*)	0.0633	0.0522	-0.1366	5.9974
H(9)	-0.0696	-0.0157	-0.4024	5.9974
H(9*)	0.0696	-0.0157	-0.0976	5.9974
H(10)	-0.1178	-0.0185	-0.3700	5.9974
H(10*)	0.1178	-0.0185	-0.1300	5.9974
H(11)	-0.0142	-0.3445	-0.3041	9.3214
H(11*)	0.0142	-0.3445	-0.1959	9.3214
H(12)	-0.0422	-0.3259	-0.3551	9.3214
H(12*)	0.0422	-0.3259	-0.1449	9.3214
H(13)	0.0321	-0.3414	-0.3378	9.3214
H(13*)	-0.0321	-0.3414	-0.1622	9.3214
H(14)	0.1162	-0.1062	-0.2146	4.9108
H(14*)	-0.1162	-0.1062	-0.2854	4.9108
H(15)	0.1599	-0.1017	-0.2499	4.9108
H(15*)	-0.1599	-0.1017	-0.2501	4.9108
H(16)	0.1252	-0.0178	-0.2380	4.9108
H(16*)	-0.1252	-0.0178	-0.2620	4.9108

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(17*)	-0.0785	0.0087	-0.0741	7.1454
H(17)	0.0785	0.0087	-0.4259	7.1454
H(18*)	-0.0942	-0.0905	-0.0724	7.1454
H(18)	0.0942	-0.0905	-0.4276	7.1454
H(19*)	-0.0591	-0.0550	-0.1090	7.1454
H(19)	0.0591	-0.0550	-0.3910	7.1454
H(20*)	-0.1656	-0.1437	-0.1782	8.0795
H(20)	0.1656	-0.1437	-0.3218	8.0795
H(21*)	-0.2012	-0.1716	-0.1404	8.0795
H(21)	0.2012	-0.1716	-0.3596	8.0795
H(22*)	-0.2382	-0.1183	-0.1818	8.0795
H(22)	0.2382	-0.1183	-0.3182	8.0795
H(23*)	-0.2716	0.0111	-0.1105	6.9320
H(23)	0.2716	0.0111	-0.3895	6.9320
H(24*)	-0.2304	-0.0480	-0.0732	6.9320
H(24)	0.2304	-0.0480	-0.4268	6.9320
H(25*)	-0.2145	0.0512	-0.0749	6.9320
H(25)	0.2145	0.0512	-0.4251	6.9320
H(26*)	-0.2582	0.2452	-0.2545	8.1410
H(26)	0.2582	0.2452	-0.2455	8.1410
H(27*)	-0.2053	0.2635	-0.2110	8.1410
H(27)	0.2053	0.2635	-0.2890	8.1410
H(28*)	-0.1872	0.2127	-0.2511	8.1410
H(28)	0.1872	0.2127	-0.2489	8.1410

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(29*)	-0.2481	0.0220	-0.2726	10.7268
H(29)	0.2481	0.0220	-0.2274	10.7268
H(30*)	-0.2927	-0.0129	-0.2417	10.7268
H(30)	0.2927	-0.0129	-0.2583	10.7268
H(31*)	-0.3158	0.0646	-0.2745	10.7268
H(31)	0.3158	0.0646	-0.2255	10.7268
H(32*)	-0.3196	0.0929	-0.1650	7.9832
H(32)	0.3196	0.0929	-0.3350	7.9832
H(33*)	-0.2909	0.1865	-0.1554	7.9832
H(33)	0.2909	0.1865	-0.3446	7.9832
H(34*)	-0.3437	0.1684	-0.1990	7.9832
H(34)	0.3437	0.1684	-0.3010	7.9832
H(35)	0.1225	0.5461	-0.4293	29.5409
H(35*)	-0.1225	0.5461	-0.0707	29.5409
H(36)	0.0864	0.4930	-0.4710	29.5409
H(36*)	-0.0864	0.4930	-0.0290	29.5409
H(37)	0.0732	0.4736	-0.4233	29.5409
H(37*)	-0.0732	0.4736	-0.0767	29.5409
H(38)	0.1805	0.3910	-0.3525	24.5916
H(38*)	-0.1805	0.3910	-0.1475	24.5916
H(39)	0.2455	0.3636	-0.3653	24.5916
H(39*)	-0.2455	0.3636	-0.1347	24.5916
H(40)	0.2294	0.4622	-0.3609	24.5916
H(40*)	-0.2294	0.4622	-0.1391	24.5916

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(41)	0.2678	0.4096	-0.4590	11.4568
H(41*)	-0.2678	0.4096	-0.0410	11.4568
H(42)	0.2114	0.4523	-0.4941	11.4568
H(42*)	-0.2114	0.4523	-0.0059	11.4568
H(43)	0.2472	0.5056	-0.4523	11.4568
H(43*)	-0.2472	0.5056	-0.0477	11.4568
H(44)	0.0292	0.3896	-0.5279	15.8076
H(44*)	-0.0292	0.3896	0.0279	15.8076
H(45)	0.0034	0.3102	-0.5587	15.8076
H(45*)	-0.0034	0.3102	0.0587	15.8076
H(46)	-0.0076	0.3143	-0.5095	15.8076
H(46*)	0.0076	0.3143	0.0095	15.8076
H(47)	0.0552	0.1338	-0.4914	10.6008
H(47*)	-0.0552	0.1338	-0.0086	10.6008
H(48)	0.0619	0.1338	-0.5415	10.6008
H(48*)	-0.0619	0.1338	0.0415	10.6008
H(49)	0.1227	0.1170	-0.5030	10.6008
H(49*)	-0.1227	0.1170	0.0030	10.6008
H(50)	0.1966	0.2724	-0.5375	8.5915
H(50*)	-0.1966	0.2724	0.0375	8.5915
H(51)	0.1363	0.2834	-0.5770	8.5915
H(51*)	-0.1363	0.2834	0.0770	8.5915
H(52)	0.1621	0.3627	-0.5461	8.5915
H(52*)	-0.1621	0.3627	0.0461	8.5915

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(53*)	0.0405	0.5121	-0.1308	8.5666
H(53)	-0.0405	0.5121	-0.3692	8.5666
H(54*)	0.0080	0.4526	-0.1002	8.5666
H(54)	-0.0080	0.4526	-0.3997	8.5666
H(55*)	0.0835	0.4590	-0.0917	8.5666
H(55)	-0.0835	0.4590	-0.4083	8.5666
H(56*)	0.1131	0.4369	-0.1957	7.4371
H(56)	-0.1131	0.4369	-0.3043	7.4371
H(57*)	0.1564	0.3838	-0.1567	7.4371
H(57)	-0.1564	0.3838	-0.3433	7.4371
H(58*)	0.1203	0.3362	-0.2004	7.4371
H(58)	-0.1203	0.3362	-0.2996	7.4371
H(59*)	-0.0328	0.3251	-0.2196	6.8680
H(59)	0.0328	0.3251	-0.2804	6.8680
H(60*)	-0.0683	0.3683	-0.1851	6.8680
H(60)	0.0683	0.3683	-0.3149	6.8680
H(61*)	-0.0326	0.4264	-0.2143	6.8680
H(61)	0.0326	0.4264	-0.2857	6.8680
H(62*)	0.1069	0.3488	-0.0250	9.2652
H(62)	-0.1069	0.3488	-0.4750	9.2652
H(63*)	0.1782	0.3143	-0.0136	9.2652
H(63)	-0.1782	0.3143	-0.4864	9.2652
H(64*)	0.1551	0.3753	-0.0551	9.2652
H(64)	-0.1551	0.3753	-0.4449	9.2652

Table 1. Atomic coordinates and  $B_{iso}/B_{eq}$  (continued)

atom	x	y	z	$B_{eq}$
H(65*)	0.2052	0.2407	-0.1115	9.1512
H(65)	-0.2052	0.2407	-0.3885	9.1512
H(66*)	0.2249	0.1800	-0.0696	9.1512
H(66)	-0.2249	0.1800	-0.4304	9.1512
H(67*)	0.1802	0.1448	-0.1137	9.1512
H(67)	-0.1802	0.1448	-0.3863	9.1512
H(68*)	0.0796	0.0934	-0.0524	7.6586
H(68)	-0.0796	0.0934	-0.4476	7.6586
H(69*)	0.1295	0.1322	-0.0117	7.6586
H(69)	-0.1295	0.1322	-0.4883	7.6586
H(70*)	0.0582	0.1665	-0.0230	7.6586
H(70)	-0.0582	0.1665	-0.4770	7.6586

$$B_{eq} = \frac{8}{3}\pi^2(U_{11}(aa^*)^2 + U_{22}(bb^*)^2 + U_{33}(cc^*)^2 + 2U_{12}aa^*bb^* \cos \gamma + 2U_{13}aa^*cc^* \cos \beta + 2U_{23}bb^*cc^* \cos \alpha)$$

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters

atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>12</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>23</sub>
Se(1)	0.0464(5)	0.0442(5)	0.0393(5)	-0.0079(5)	0.0135(4)	-0.0030(4)
Se(1*)	0.0464(5)	0.0442(5)	0.0393(5)	0.0079(5)	0.0135(4)	0.0030(4)
Ge(1*)	0.0424(5)	0.0317(5)	0.0353(5)	-0.0030(5)	0.0124(4)	0.0004(4)
Ge(1)	0.0424(5)	0.0317(5)	0.0353(5)	0.0030(5)	0.0124(4)	-0.0004(4)
Si(1)	0.060(2)	0.048(2)	0.060(2)	0.014(1)	0.027(1)	0.004(1)
Si(1*)	0.060(2)	0.048(2)	0.060(2)	-0.014(1)	0.027(1)	-0.004(1)
Si(2)	0.047(2)	0.079(2)	0.053(2)	-0.003(2)	0.006(1)	0.009(1)
Si(2*)	0.047(2)	0.079(2)	0.053(2)	0.003(2)	0.006(1)	-0.009(1)
Si(3)	0.110(2)	0.051(2)	0.102(2)	-0.006(2)	0.058(2)	0.007(2)
Si(3*)	0.110(2)	0.051(2)	0.102(2)	0.006(2)	0.058(2)	-0.007(2)
Si(4)	0.067(2)	0.110(3)	0.046(2)	0.005(2)	0.020(1)	0.020(2)
Si(4*)	0.067(2)	0.110(3)	0.046(2)	-0.005(2)	0.020(1)	-0.020(2)
Si(5)	0.070(2)	0.046(2)	0.057(2)	0.016(2)	0.023(1)	0.000(1)
Si(5*)	0.070(2)	0.046(2)	0.057(2)	-0.016(2)	0.023(1)	0.000(1)
Si(6)	0.053(2)	0.063(2)	0.056(2)	0.008(2)	0.005(1)	0.006(1)
Si(6*)	0.053(2)	0.063(2)	0.056(2)	-0.008(2)	0.005(1)	-0.006(1)
C(1)	0.040(5)	0.031(5)	0.023(4)	0.006(4)	0.000(4)	0.004(3)
C(1*)	0.040(5)	0.031(5)	0.023(4)	-0.006(4)	0.000(4)	-0.004(3)
C(2)	0.045(5)	0.034(5)	0.024(4)	0.005(4)	0.009(4)	0.009(4)
C(2*)	0.045(5)	0.034(5)	0.024(4)	-0.005(4)	0.009(4)	-0.009(4)
C(3)	0.042(5)	0.044(5)	0.043(5)	0.016(4)	0.010(4)	0.016(4)
C(3*)	0.042(5)	0.044(5)	0.043(5)	-0.016(4)	0.010(4)	-0.016(4)
C(4)	0.051(6)	0.038(5)	0.040(5)	-0.002(5)	0.015(4)	0.003(4)
C(4*)	0.051(6)	0.038(5)	0.040(5)	0.002(5)	0.015(4)	-0.003(4)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
C(5*)	0.055(6)	0.035(5)	0.036(5)	-0.014(5)	0.012(4)	-0.011(4)
C(5)	0.055(6)	0.035(5)	0.036(5)	0.014(5)	0.012(4)	0.011(4)
C(6*)	0.038(5)	0.033(5)	0.031(4)	-0.002(4)	0.011(4)	-0.001(4)
C(6)	0.038(5)	0.033(5)	0.031(4)	0.002(4)	0.011(4)	0.001(4)
C(7*)	0.043(5)	0.033(5)	0.040(5)	-0.004(4)	0.013(4)	0.004(4)
C(7)	0.043(5)	0.033(5)	0.040(5)	0.004(4)	0.013(4)	-0.004(4)
C(8*)	0.053(6)	0.041(6)	0.042(5)	-0.006(5)	0.015(4)	-0.002(4)
C(8)	0.053(6)	0.041(6)	0.042(5)	0.006(5)	0.015(4)	0.002(4)
C(9*)	0.067(7)	0.047(6)	0.067(6)	0.016(5)	0.023(5)	0.030(5)
C(9)	0.067(7)	0.047(6)	0.067(6)	-0.016(5)	0.023(5)	-0.030(5)
C(10)	0.088(8)	0.031(6)	0.077(7)	0.004(6)	0.031(6)	-0.007(5)
C(10*)	0.088(8)	0.031(6)	0.077(7)	-0.004(6)	0.031(6)	0.007(5)
C(11)	0.068(7)	0.027(5)	0.074(7)	0.006(5)	0.026(6)	0.000(5)
C(11*)	0.068(7)	0.027(5)	0.074(7)	-0.006(5)	0.026(6)	0.000(5)
C(12)	0.046(6)	0.044(5)	0.048(5)	0.003(5)	0.023(4)	0.000(5)
C(12*)	0.046(6)	0.044(5)	0.048(5)	-0.003(5)	0.023(4)	0.000(5)
C(13*)	0.036(5)	0.049(5)	0.041(5)	-0.003(4)	0.020(4)	-0.005(4)
C(13)	0.036(5)	0.049(5)	0.041(5)	0.003(4)	0.020(4)	0.005(4)
C(14)	0.049(6)	0.043(5)	0.053(5)	0.015(4)	0.020(4)	0.017(4)
C(14*)	0.049(6)	0.043(5)	0.053(5)	-0.015(4)	0.020(4)	-0.017(4)
C(15*)	0.052(6)	0.035(5)	0.040(5)	-0.010(4)	0.018(4)	-0.019(4)
C(15)	0.052(6)	0.035(5)	0.040(5)	0.010(4)	0.018(4)	0.019(4)
C(16)	0.058(6)	0.069(7)	0.057(6)	-0.010(5)	0.002(5)	-0.016(5)
C(16*)	0.058(6)	0.069(7)	0.057(6)	0.010(5)	0.002(5)	0.016(5)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
C(17)	0.129(9)	0.032(6)	0.138(9)	-0.011(6)	0.037(7)	-0.014(6)
C(17*)	0.129(9)	0.032(6)	0.138(9)	0.011(6)	0.037(7)	0.014(6)
C(18)	0.063(6)	0.043(5)	0.053(5)	0.016(5)	0.024(5)	0.009(4)
C(18*)	0.063(6)	0.043(5)	0.053(5)	-0.016(5)	0.024(5)	-0.009(4)
C(19*)	0.082(7)	0.081(7)	0.071(6)	0.002(6)	0.036(6)	0.030(5)
C(19)	0.082(7)	0.081(7)	0.071(6)	-0.002(6)	0.036(6)	-0.030(5)
C(20*)	0.094(7)	0.066(7)	0.118(8)	-0.017(6)	0.072(6)	-0.008(6)
C(20)	0.094(7)	0.066(7)	0.118(8)	0.017(6)	0.072(6)	0.008(6)
C(21*)	0.082(7)	0.073(7)	0.074(6)	-0.016(6)	0.040(5)	-0.008(5)
C(21)	0.082(7)	0.073(7)	0.074(6)	0.016(6)	0.040(5)	0.008(5)
C(22*)	0.071(7)	0.098(8)	0.094(7)	0.039(6)	0.036(6)	0.024(6)
C(22)	0.071(7)	0.098(8)	0.094(7)	-0.039(6)	0.036(6)	-0.024(6)
C(23*)	0.073(8)	0.15(1)	0.101(8)	0.023(7)	-0.022(6)	-0.044(7)
C(23)	0.073(8)	0.15(1)	0.101(8)	-0.023(7)	-0.022(6)	0.044(7)
C(24*)	0.056(6)	0.118(8)	0.080(7)	0.012(6)	0.017(5)	-0.011(6)
C(24)	0.056(6)	0.118(8)	0.080(7)	-0.012(6)	0.017(5)	0.011(6)
C(25)	0.16(1)	0.043(8)	0.80(4)	0.023(9)	0.25(2)	0.05(2)
C(25*)	0.16(1)	0.043(8)	0.80(4)	-0.023(9)	0.25(2)	-0.05(2)
C(26)	0.51(3)	0.16(1)	0.099(10)	-0.23(2)	0.05(1)	-0.030(9)
C(26*)	0.51(3)	0.16(1)	0.099(10)	0.23(2)	0.05(1)	0.030(9)
C(27)	0.139(10)	0.103(9)	0.136(9)	-0.047(8)	0.064(8)	-0.003(8)
C(27*)	0.139(10)	0.103(9)	0.136(9)	0.047(8)	0.064(8)	0.003(8)
C(28)	0.090(9)	0.31(2)	0.108(9)	0.07(1)	0.032(7)	0.09(1)
C(28*)	0.090(9)	0.31(2)	0.108(9)	-0.07(1)	0.032(7)	-0.09(1)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>12</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>23</sub>
C(29)	0.134(9)	0.121(10)	0.085(7)	-0.054(8)	0.037(7)	-0.031(7)
C(29*)	0.134(9)	0.121(10)	0.085(7)	0.054(8)	0.037(7)	0.031(7)
C(30)	0.091(8)	0.130(9)	0.053(6)	-0.004(7)	0.018(6)	0.005(6)
C(30*)	0.091(8)	0.130(9)	0.053(6)	0.004(7)	0.018(6)	-0.005(6)
C(31*)	0.124(9)	0.060(7)	0.098(8)	-0.004(6)	0.047(7)	0.007(6)
C(31)	0.124(9)	0.060(7)	0.098(8)	0.004(6)	0.047(7)	-0.007(6)
C(32*)	0.087(7)	0.088(8)	0.068(6)	-0.041(6)	0.033(5)	0.000(5)
C(32)	0.087(7)	0.088(8)	0.068(6)	0.041(6)	0.033(5)	0.000(5)
C(33*)	0.075(7)	0.071(6)	0.073(6)	-0.005(6)	0.017(5)	0.024(6)
C(33)	0.075(7)	0.071(6)	0.073(6)	0.005(6)	0.017(5)	-0.024(6)
C(34*)	0.100(8)	0.101(8)	0.075(7)	-0.016(7)	-0.017(6)	-0.026(6)
C(34)	0.100(8)	0.101(8)	0.075(7)	0.016(7)	-0.017(6)	0.026(6)
C(35*)	0.064(7)	0.119(9)	0.104(8)	0.010(7)	0.013(6)	0.004(7)
C(35)	0.064(7)	0.119(9)	0.104(8)	-0.010(7)	0.013(6)	-0.004(7)
C(36*)	0.094(7)	0.086(7)	0.056(6)	0.005(6)	0.006(5)	0.007(6)
C(36)	0.094(7)	0.086(7)	0.056(6)	-0.005(6)	0.006(5)	-0.007(6)

The general temperature factor expression:

$$\exp(-2\pi^2(a^*U_{11}h^2 + b^*U_{22}k^2 + c^*U_{33}l^2 + 2a^*b^*U_{12}hk + 2a^*c^*U_{13}hl + 2b^*c^*U_{23}kl))$$

Table 3. Bond Lengths(Å)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Se(1)	Ge(1*)	2.433(1)	Se(1)	Ge(1)	2.397(1)
Se(1*)	Ge(1*)	2.397(1)	Se(1*)	Ge(1)	2.433(1)
Ge(1*)	C(1*)	2.013(7)	Ge(1*)	C(7*)	1.994(7)
Ge(1)	C(1)	2.013(7)	Ge(1)	C(7)	1.994(7)
Si(1)	C(13)	1.875(7)	Si(1)	C(19)	1.861(8)
Si(1)	C(20)	1.844(8)	Si(1)	C(21)	1.878(9)
Si(1*)	C(13*)	1.875(7)	Si(1*)	C(19*)	1.861(8)
Si(1*)	C(20*)	1.844(8)	Si(1*)	C(21*)	1.878(9)
Si(2)	C(13)	1.937(7)	Si(2)	C(22)	1.855(9)
Si(2)	C(23)	1.870(9)	Si(2)	C(24)	1.885(9)
Si(2*)	C(13*)	1.937(7)	Si(2*)	C(22*)	1.855(9)
Si(2*)	C(23*)	1.870(9)	Si(2*)	C(24*)	1.885(9)
Si(3)	C(14)	1.910(7)	Si(3)	C(25)	1.84(1)
Si(3)	C(26)	1.81(1)	Si(3)	C(27)	1.88(1)
Si(3*)	C(14*)	1.910(7)	Si(3*)	C(25*)	1.84(1)
Si(3*)	C(26*)	1.81(1)	Si(3*)	C(27*)	1.88(1)
Si(4)	C(14)	1.868(7)	Si(4)	C(28)	1.85(1)
Si(4)	C(29)	1.88(1)	Si(4)	C(30)	1.889(10)
Si(4*)	C(14*)	1.868(7)	Si(4*)	C(28*)	1.85(1)
Si(4*)	C(29*)	1.88(1)	Si(4*)	C(30*)	1.889(10)
Si(5)	C(15)	1.896(7)	Si(5)	C(31)	1.857(9)
Si(5)	C(32)	1.871(9)	Si(5)	C(33)	1.876(8)
Si(5*)	C(15*)	1.896(7)	Si(5*)	C(31*)	1.857(9)
Si(5*)	C(32*)	1.871(9)	Si(5*)	C(33*)	1.876(8)

Table 3. Bond Lengths(Å) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Si(6)	C(15)	1.909(7)	Si(6)	C(34)	1.864(9)
Si(6)	C(35)	1.877(10)	Si(6)	C(36)	1.892(9)
Si(6*)	C(15*)	1.909(7)	Si(6*)	C(34*)	1.864(9)
Si(6*)	C(35*)	1.877(10)	Si(6*)	C(36*)	1.892(9)
C(1)	C(2)	1.43(1)	C(1)	C(6)	1.403(9)
C(1*)	C(2*)	1.43(1)	C(1*)	C(6*)	1.403(9)
C(2)	C(3)	1.37(1)	C(2)	C(13)	1.516(9)
C(2*)	C(3*)	1.37(1)	C(2*)	C(13*)	1.516(9)
C(3)	C(4)	1.372(10)	C(3*)	C(4*)	1.372(10)
C(4)	C(5)	1.40(1)	C(4)	C(14)	1.53(1)
C(4*)	C(5*)	1.40(1)	C(4*)	C(14*)	1.53(1)
C(5*)	C(6*)	1.39(1)	C(5)	C(6)	1.39(1)
C(6*)	C(15*)	1.54(1)	C(6)	C(15)	1.54(1)
C(7*)	C(8*)	1.410(10)	C(7*)	C(12*)	1.425(10)
C(7)	C(8)	1.410(10)	C(7)	C(12)	1.425(10)
C(8*)	C(9*)	1.41(1)	C(8*)	C(16*)	1.52(1)
C(8)	C(9)	1.41(1)	C(8)	C(16)	1.52(1)
C(9*)	C(10*)	1.38(1)	C(9)	C(10)	1.38(1)
C(10)	C(11)	1.36(1)	C(10)	C(17)	1.50(1)
C(10*)	C(11*)	1.36(1)	C(10*)	C(17*)	1.50(1)
C(11)	C(12)	1.40(1)	C(11*)	C(12*)	1.40(1)
C(12)	C(18)	1.495(9)	C(12*)	C(18*)	1.495(9)

Table 4. Bond Lengths(Å)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(3)	H(1)	0.95	C(3*)	H(1*)	0.95
C(5*)	H(2*)	0.95	C(5)	H(2)	0.95
C(9*)	H(3*)	0.95	C(9)	H(3)	0.95
C(11)	H(4)	0.95	C(11*)	H(4*)	0.95
C(13*)	H(5*)	0.95	C(13)	H(5)	0.95
C(14)	H(6)	0.95	C(14*)	H(6*)	0.95
C(15*)	H(7*)	0.95	C(15)	H(7)	0.95
C(16)	H(8)	0.95	C(16)	H(9)	0.95
C(16)	H(10)	0.95	C(16*)	H(8*)	0.95
C(16*)	H(9*)	0.95	C(16*)	H(10*)	0.95
C(17)	H(11)	0.95	C(17)	H(12)	0.95
C(17)	H(13)	0.95	C(17*)	H(11*)	0.95
C(17*)	H(12*)	0.95	C(17*)	H(13*)	0.95
C(18)	H(14)	0.95	C(18)	H(15)	0.95
C(18)	H(16)	0.95	C(18*)	H(14*)	0.95
C(18*)	H(15*)	0.95	C(18*)	H(16*)	0.95
C(19*)	H(17*)	0.95	C(19*)	H(18*)	0.95
C(19*)	H(19*)	0.95	C(19)	H(17)	0.95
C(19)	H(18)	0.95	C(19)	H(19)	0.95
C(20*)	H(20*)	0.95	C(20*)	H(21*)	0.95
C(20*)	H(22*)	0.95	C(20)	H(20)	0.95
C(20)	H(21)	0.95	C(20)	H(22)	0.95
C(21*)	H(23*)	0.95	C(21*)	H(24*)	0.95
C(21*)	H(25*)	0.95	C(21)	H(23)	0.95

Table 4. Bond Lengths(Å) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(21)	H(24)	0.95	C(21)	H(25)	0.95
C(22*)	H(26*)	0.95	C(22*)	H(27*)	0.95
C(22*)	H(28*)	0.95	C(22)	H(26)	0.95
C(22)	H(27)	0.95	C(22)	H(28)	0.95
C(23*)	H(29*)	0.95	C(23*)	H(30*)	0.95
C(23*)	H(31*)	0.95	C(23)	H(29)	0.95
C(23)	H(30)	0.95	C(23)	H(31)	0.95
C(24*)	H(32*)	0.95	C(24*)	H(33*)	0.95
C(24*)	H(34*)	0.95	C(24)	H(32)	0.95
C(24)	H(33)	0.95	C(24)	H(34)	0.95
C(25)	H(35)	0.95	C(25)	H(36)	0.96
C(25)	H(37)	0.95	C(25*)	H(35*)	0.95
C(25*)	H(36*)	0.96	C(25*)	H(37*)	0.95
C(26)	H(38)	0.95	C(26)	H(39)	0.96
C(26)	H(40)	0.95	C(26*)	H(38*)	0.95
C(26*)	H(39*)	0.96	C(26*)	H(40*)	0.95
C(27)	H(41)	0.95	C(27)	H(42)	0.95
C(27)	H(43)	0.95	C(27*)	H(41*)	0.95
C(27*)	H(42*)	0.95	C(27*)	H(43*)	0.95
C(28)	H(44)	0.96	C(28)	H(45)	0.95
C(28)	H(46)	0.95	C(28*)	H(44*)	0.96
C(28*)	H(45*)	0.95	C(28*)	H(46*)	0.95
C(29)	H(47)	0.95	C(29)	H(48)	0.95
C(29)	H(49)	0.95	C(29*)	H(47*)	0.95

Table 4. Bond Lengths( $\text{\AA}$ ) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(29*)	H(48*)	0.95	C(29*)	H(49*)	0.95
C(30)	H(50)	0.95	C(30)	H(51)	0.95
C(30)	H(52)	0.95	C(30*)	H(50*)	0.95
C(30*)	H(51*)	0.95	C(30*)	H(52*)	0.95
C(31*)	H(53*)	0.95	C(31*)	H(54*)	0.95
C(31*)	H(55*)	0.95	C(31)	H(53)	0.95
C(31)	H(54)	0.95	C(31)	H(55)	0.95
C(32*)	H(56*)	0.95	C(32*)	H(57*)	0.95
C(32*)	H(58*)	0.95	C(32)	H(56)	0.95
C(32)	H(57)	0.95	C(32)	H(58)	0.95
C(33*)	H(59*)	0.95	C(33*)	H(60*)	0.95
C(33*)	H(61*)	0.95	C(33)	H(59)	0.95
C(33)	H(60)	0.95	C(33)	H(61)	0.95
C(34*)	H(62*)	0.95	C(34*)	H(63*)	0.95
C(34*)	H(64*)	0.95	C(34)	H(62)	0.95
C(34)	H(63)	0.95	C(34)	H(64)	0.95
C(35*)	H(65*)	0.95	C(35*)	H(66*)	0.95
C(35*)	H(67*)	0.95	C(35)	H(65)	0.95
C(35)	H(66)	0.95	C(35)	H(67)	0.95
C(36*)	H(68*)	0.95	C(36*)	H(69*)	0.95
C(36*)	H(70*)	0.95	C(36)	H(68)	0.95
C(36)	H(69)	0.95	C(36)	H(70)	0.95

Table 5. Bond Angles(°)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Ge(1*)	Se(1)	Ge(1)	83.54(4)	Ge(1*)	Se(1*)	Ge(1)	83.54(4)
Se(1)	Ge(1*)	Se(1*)	88.23(4)	Se(1)	Ge(1*)	C(1*)	118.8(2)
Se(1)	Ge(1*)	C(7*)	107.6(2)	Se(1*)	Ge(1*)	C(1*)	114.3(2)
Se(1*)	Ge(1*)	C(7*)	112.9(2)	C(1*)	Ge(1*)	C(7*)	112.7(3)
Se(1)	Ge(1)	Se(1*)	88.23(4)	Se(1)	Ge(1)	C(1)	114.3(2)
Se(1)	Ge(1)	C(7)	112.9(2)	Se(1*)	Ge(1)	C(1)	118.8(2)
Se(1*)	Ge(1)	C(7)	107.6(2)	C(1)	Ge(1)	C(7)	112.7(3)
C(13)	Si(1)	C(19)	109.6(3)	C(13)	Si(1)	C(20)	110.9(4)
C(13)	Si(1)	C(21)	114.3(3)	C(19)	Si(1)	C(20)	108.3(4)
C(19)	Si(1)	C(21)	104.9(4)	C(20)	Si(1)	C(21)	108.6(4)
C(13*)	Si(1*)	C(19*)	109.6(3)	C(13*)	Si(1*)	C(20*)	110.9(4)
C(13*)	Si(1*)	C(21*)	114.3(3)	C(19*)	Si(1*)	C(20*)	108.3(4)
C(19*)	Si(1*)	C(21*)	104.9(4)	C(20*)	Si(1*)	C(21*)	108.6(4)
C(13)	Si(2)	C(22)	110.4(3)	C(13)	Si(2)	C(23)	110.6(4)
C(13)	Si(2)	C(24)	113.1(3)	C(22)	Si(2)	C(23)	111.3(4)
C(22)	Si(2)	C(24)	105.8(4)	C(23)	Si(2)	C(24)	105.4(4)
C(13*)	Si(2*)	C(22*)	110.4(3)	C(13*)	Si(2*)	C(23*)	110.6(4)
C(13*)	Si(2*)	C(24*)	113.1(3)	C(22*)	Si(2*)	C(23*)	111.3(4)
C(22*)	Si(2*)	C(24*)	105.8(4)	C(23*)	Si(2*)	C(24*)	105.4(4)
C(14)	Si(3)	C(25)	112.5(4)	C(14)	Si(3)	C(26)	108.5(5)
C(14)	Si(3)	C(27)	111.7(4)	C(25)	Si(3)	C(26)	109.9(8)
C(25)	Si(3)	C(27)	105.4(6)	C(26)	Si(3)	C(27)	108.8(6)
C(14*)	Si(3*)	C(25*)	112.5(4)	C(14*)	Si(3*)	C(26*)	108.5(5)
C(14*)	Si(3*)	C(27*)	111.7(4)	C(25*)	Si(3*)	C(26*)	109.9(8)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(25*)	Si(3*)	C(27*)	105.4(6)	C(26*)	Si(3*)	C(27*)	108.8(6)
C(14)	Si(4)	C(28)	115.3(4)	C(14)	Si(4)	C(29)	106.7(3)
C(14)	Si(4)	C(30)	110.1(4)	C(28)	Si(4)	C(29)	107.3(5)
C(28)	Si(4)	C(30)	107.0(4)	C(29)	Si(4)	C(30)	110.3(4)
C(14*)	Si(4*)	C(28*)	115.3(4)	C(14*)	Si(4*)	C(29*)	106.7(3)
C(14*)	Si(4*)	C(30*)	110.1(4)	C(28*)	Si(4*)	C(29*)	107.3(5)
C(28*)	Si(4*)	C(30*)	107.0(4)	C(29*)	Si(4*)	C(30*)	110.3(4)
C(15)	Si(5)	C(31)	115.0(4)	C(15)	Si(5)	C(32)	110.4(4)
C(15)	Si(5)	C(33)	108.5(3)	C(31)	Si(5)	C(32)	106.4(4)
C(31)	Si(5)	C(33)	106.9(4)	C(32)	Si(5)	C(33)	109.5(4)
C(15*)	Si(5*)	C(31*)	115.0(4)	C(15*)	Si(5*)	C(32*)	110.4(4)
C(15*)	Si(5*)	C(33*)	108.5(3)	C(31*)	Si(5*)	C(32*)	106.4(4)
C(31*)	Si(5*)	C(33*)	106.9(4)	C(32*)	Si(5*)	C(33*)	109.5(4)
C(15)	Si(6)	C(34)	115.2(3)	C(15)	Si(6)	C(35)	107.1(4)
C(15)	Si(6)	C(36)	112.3(3)	C(34)	Si(6)	C(35)	106.5(4)
C(34)	Si(6)	C(36)	105.6(4)	C(35)	Si(6)	C(36)	110.0(4)
C(15*)	Si(6*)	C(34*)	115.2(3)	C(15*)	Si(6*)	C(35*)	107.1(4)
C(15*)	Si(6*)	C(36*)	112.3(3)	C(34*)	Si(6*)	C(35*)	106.5(4)
C(34*)	Si(6*)	C(36*)	105.6(4)	C(35*)	Si(6*)	C(36*)	110.0(4)
Ge(1)	C(1)	C(2)	116.9(4)	Ge(1)	C(1)	C(6)	126.2(5)
C(2)	C(1)	C(6)	116.9(6)	Ge(1*)	C(1*)	C(2*)	116.9(4)
Ge(1*)	C(1*)	C(6*)	126.2(5)	C(2*)	C(1*)	C(6*)	116.9(6)
C(1)	C(2)	C(3)	119.7(6)	C(1)	C(2)	C(13)	126.2(6)
C(3)	C(2)	C(13)	114.1(6)	C(1*)	C(2*)	C(3*)	119.7(6)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(1*)	C(2*)	C(13*)	126.2(6)	C(3*)	C(2*)	C(13*)	114.1(6)
C(2)	C(3)	C(4)	124.3(7)	C(2*)	C(3*)	C(4*)	124.3(7)
C(3)	C(4)	C(5)	116.0(7)	C(3)	C(4)	C(14)	121.6(7)
C(5)	C(4)	C(14)	122.4(6)	C(3*)	C(4*)	C(5*)	116.0(7)
C(3*)	C(4*)	C(14*)	121.6(7)	C(5*)	C(4*)	C(14*)	122.4(6)
C(4*)	C(5*)	C(6*)	122.2(6)	C(4)	C(5)	C(6)	122.2(6)
C(1*)	C(6*)	C(5*)	120.8(7)	C(1*)	C(6*)	C(15*)	124.5(6)
C(5*)	C(6*)	C(15*)	114.6(6)	C(1)	C(6)	C(5)	120.8(7)
C(1)	C(6)	C(15)	124.5(6)	C(5)	C(6)	C(15)	114.6(6)
Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	115.8(5)	Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	127.1(5)
C(8*)	C(7*)	C(12*)	116.9(6)	Ge(1)	C(7)	C(8)	115.8(5)
Ge(1)	C(7)	C(12)	127.1(5)	C(8)	C(7)	C(12)	116.9(6)
C(7*)	C(8*)	C(9*)	120.6(6)	C(7*)	C(8*)	C(16*)	121.6(6)
C(9*)	C(8*)	C(16*)	117.8(6)	C(7)	C(8)	C(9)	120.6(6)
C(7)	C(8)	C(16)	121.6(6)	C(9)	C(8)	C(16)	117.8(6)
C(8*)	C(9*)	C(10*)	121.6(7)	C(8)	C(9)	C(10)	121.6(7)
C(9)	C(10)	C(11)	117.9(8)	C(9)	C(10)	C(17)	120.8(8)
C(11)	C(10)	C(17)	121.3(8)	C(9*)	C(10*)	C(11*)	117.9(8)
C(9*)	C(10*)	C(17*)	120.8(8)	C(11*)	C(10*)	C(17*)	121.3(8)
C(10)	C(11)	C(12)	123.5(7)	C(10*)	C(11*)	C(12*)	123.5(7)
C(7)	C(12)	C(11)	119.5(6)	C(7)	C(12)	C(18)	125.2(7)
C(11)	C(12)	C(18)	115.2(6)	C(7*)	C(12*)	C(11*)	119.5(6)
C(7*)	C(12*)	C(18*)	125.2(7)	C(11*)	C(12*)	C(18*)	115.2(6)
Si(1*)	C(13*)	Si(2*)	120.6(4)	Si(1*)	C(13*)	C(2*)	109.9(4)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Si(2*)	C(13*)	C(2*)	110.9(5)	Si(1)	C(13)	Si(2)	120.6(4)
Si(1)	C(13)	C(2)	109.9(4)	Si(2)	C(13)	C(2)	110.9(5)
Si(3)	C(14)	Si(4)	120.6(4)	Si(3)	C(14)	C(4)	112.8(5)
Si(4)	C(14)	C(4)	114.8(5)	Si(3*)	C(14*)	Si(4*)	120.6(4)
Si(3*)	C(14*)	C(4*)	112.8(5)	Si(4*)	C(14*)	C(4*)	114.8(5)
Si(5*)	C(15*)	Si(6*)	117.8(4)	Si(5*)	C(15*)	C(6*)	110.0(5)
Si(6*)	C(15*)	C(6*)	116.9(5)	Si(5)	C(15)	Si(6)	117.8(4)
Si(5)	C(15)	C(6)	110.0(5)	Si(6)	C(15)	C(6)	116.9(5)

Table 6. Bond Angles(°)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(2)	C(3)	H(1)	117.8	C(4)	C(3)	H(1)	117.8
C(2*)	C(3*)	H(1*)	117.8	C(4*)	C(3*)	H(1*)	117.8
C(4*)	C(5*)	H(2*)	118.9	C(6*)	C(5*)	H(2*)	118.9
C(4)	C(5)	H(2)	118.9	C(6)	C(5)	H(2)	118.9
C(8*)	C(9*)	H(3*)	119.2	C(10*)	C(9*)	H(3*)	119.3
C(8)	C(9)	H(3)	119.2	C(10)	C(9)	H(3)	119.3
C(10)	C(11)	H(4)	118.3	C(12)	C(11)	H(4)	118.2
C(10*)	C(11*)	H(4*)	118.3	C(12*)	C(11*)	H(4*)	118.2
Si(1*)	C(13*)	H(5*)	104.7	Si(2*)	C(13*)	H(5*)	104.6
C(2*)	C(13*)	H(5*)	104.7	Si(1)	C(13)	H(5)	104.7
Si(2)	C(13)	H(5)	104.6	C(2)	C(13)	H(5)	104.7
Si(3)	C(14)	H(6)	101.6	Si(4)	C(14)	H(6)	101.6
C(4)	C(14)	H(6)	101.6	Si(3*)	C(14*)	H(6*)	101.6
Si(4*)	C(14*)	H(6*)	101.6	C(4*)	C(14*)	H(6*)	101.6
Si(5*)	C(15*)	H(7*)	103.2	Si(6*)	C(15*)	H(7*)	103.3
C(6*)	C(15*)	H(7*)	103.2	Si(5)	C(15)	H(7)	103.2
Si(6)	C(15)	H(7)	103.3	C(6)	C(15)	H(7)	103.2
C(8)	C(16)	H(8)	109.6	C(8)	C(16)	H(9)	109.6
C(8)	C(16)	H(10)	109.7	H(8)	C(16)	H(9)	109.3
H(8)	C(16)	H(10)	109.4	H(9)	C(16)	H(10)	109.3
C(8*)	C(16*)	H(8*)	109.6	C(8*)	C(16*)	H(9*)	109.6
C(8*)	C(16*)	H(10*)	109.7	H(8*)	C(16*)	H(9*)	109.3
H(8*)	C(16*)	H(10*)	109.4	H(9*)	C(16*)	H(10*)	109.3
C(10)	C(17)	H(11)	109.6	C(10)	C(17)	H(12)	109.5

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(10)	C(17)	H(13)	109.6	H(11)	C(17)	H(12)	109.3
H(11)	C(17)	H(13)	109.4	H(12)	C(17)	H(13)	109.3
C(10*)	C(17*)	H(11*)	109.6	C(10*)	C(17*)	H(12*)	109.5
C(10*)	C(17*)	H(13*)	109.6	H(11*)	C(17*)	H(12*)	109.3
H(11*)	C(17*)	H(13*)	109.4	H(12*)	C(17*)	H(13*)	109.3
C(12)	C(18)	H(14)	109.6	C(12)	C(18)	H(15)	109.6
C(12)	C(18)	H(16)	109.6	H(14)	C(18)	H(15)	109.4
H(14)	C(18)	H(16)	109.4	H(15)	C(18)	H(16)	109.4
C(12*)	C(18*)	H(14*)	109.6	C(12*)	C(18*)	H(15*)	109.6
C(12*)	C(18*)	H(16*)	109.6	H(14*)	C(18*)	H(15*)	109.4
H(14*)	C(18*)	H(16*)	109.4	H(15*)	C(18*)	H(16*)	109.4
Si(1*)	C(19*)	H(17*)	109.5	Si(1*)	C(19*)	H(18*)	109.6
Si(1*)	C(19*)	H(19*)	109.5	H(17*)	C(19*)	H(18*)	109.4
H(17*)	C(19*)	H(19*)	109.3	H(18*)	C(19*)	H(19*)	109.4
Si(1)	C(19)	H(17)	109.5	Si(1)	C(19)	H(18)	109.6
Si(1)	C(19)	H(19)	109.5	H(17)	C(19)	H(18)	109.4
H(17)	C(19)	H(19)	109.3	H(18)	C(19)	H(19)	109.4
Si(1*)	C(20*)	H(20*)	109.6	Si(1*)	C(20*)	H(21*)	109.7
Si(1*)	C(20*)	H(22*)	109.5	H(20*)	C(20*)	H(21*)	109.6
H(20*)	C(20*)	H(22*)	109.2	H(21*)	C(20*)	H(22*)	109.3
Si(1)	C(20)	H(20)	109.6	Si(1)	C(20)	H(21)	109.7
Si(1)	C(20)	H(22)	109.5	H(20)	C(20)	H(21)	109.6
H(20)	C(20)	H(22)	109.2	H(21)	C(20)	H(22)	109.3
Si(1*)	C(21*)	H(23*)	109.5	Si(1*)	C(21*)	H(24*)	109.6

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Si(1*)	C(21*)	H(25*)	109.6	H(23*)	C(21*)	H(24*)	109.4
H(23*)	C(21*)	H(25*)	109.3	H(24*)	C(21*)	H(25*)	109.5
Si(1)	C(21)	H(23)	109.5	Si(1)	C(21)	H(24)	109.6
Si(1)	C(21)	H(25)	109.6	H(23)	C(21)	H(24)	109.4
H(23)	C(21)	H(25)	109.3	H(24)	C(21)	H(25)	109.5
Si(2*)	C(22*)	H(26*)	109.5	Si(2*)	C(22*)	H(27*)	109.6
Si(2*)	C(22*)	H(28*)	109.6	H(26*)	C(22*)	H(27*)	109.3
H(26*)	C(22*)	H(28*)	109.4	H(27*)	C(22*)	H(28*)	109.4
Si(2)	C(22)	H(26)	109.5	Si(2)	C(22)	H(27)	109.6
Si(2)	C(22)	H(28)	109.6	H(26)	C(22)	H(27)	109.3
H(26)	C(22)	H(28)	109.4	H(27)	C(22)	H(28)	109.4
Si(2*)	C(23*)	H(29*)	109.5	Si(2*)	C(23*)	H(30*)	109.6
Si(2*)	C(23*)	H(31*)	109.8	H(29*)	C(23*)	H(30*)	109.1
H(29*)	C(23*)	H(31*)	109.3	H(30*)	C(23*)	H(31*)	109.5
Si(2)	C(23)	H(29)	109.5	Si(2)	C(23)	H(30)	109.6
Si(2)	C(23)	H(31)	109.8	H(29)	C(23)	H(30)	109.1
H(29)	C(23)	H(31)	109.3	H(30)	C(23)	H(31)	109.5
Si(2*)	C(24*)	H(32*)	109.6	Si(2*)	C(24*)	H(33*)	109.7
Si(2*)	C(24*)	H(34*)	109.6	H(32*)	C(24*)	H(33*)	109.3
H(32*)	C(24*)	H(34*)	109.2	H(33*)	C(24*)	H(34*)	109.4
Si(2)	C(24)	H(32)	109.6	Si(2)	C(24)	H(33)	109.7
Si(2)	C(24)	H(34)	109.6	H(32)	C(24)	H(33)	109.3
H(32)	C(24)	H(34)	109.2	H(33)	C(24)	H(34)	109.4
Si(3)	C(25)	H(35)	109.9	Si(3)	C(25)	H(36)	109.4

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Si(3)	C(25)	H(37)	109.8	H(35)	C(25)	H(36)	109.1
H(35)	C(25)	H(37)	109.8	H(36)	C(25)	H(37)	108.9
Si(3*)	C(25*)	H(35*)	109.9	Si(3*)	C(25*)	H(36*)	109.4
Si(3*)	C(25*)	H(37*)	109.8	H(35*)	C(25*)	H(36*)	109.1
H(35*)	C(25*)	H(37*)	109.8	H(36*)	C(25*)	H(37*)	108.9
Si(3)	C(26)	H(38)	110.3	Si(3)	C(26)	H(39)	109.6
Si(3)	C(26)	H(40)	110.0	H(38)	C(26)	H(39)	108.9
H(38)	C(26)	H(40)	109.6	H(39)	C(26)	H(40)	108.5
Si(3*)	C(26*)	H(38*)	110.3	Si(3*)	C(26*)	H(39*)	109.6
Si(3*)	C(26*)	H(40*)	110.0	H(38*)	C(26*)	H(39*)	108.9
H(38*)	C(26*)	H(40*)	109.6	H(39*)	C(26*)	H(40*)	108.5
Si(3)	C(27)	H(41)	109.7	Si(3)	C(27)	H(42)	109.8
Si(3)	C(27)	H(43)	109.7	H(41)	C(27)	H(42)	109.3
H(41)	C(27)	H(43)	109.2	H(42)	C(27)	H(43)	109.3
Si(3*)	C(27*)	H(41*)	109.7	Si(3*)	C(27*)	H(42*)	109.8
Si(3*)	C(27*)	H(43*)	109.7	H(41*)	C(27*)	H(42*)	109.3
H(41*)	C(27*)	H(43*)	109.2	H(42*)	C(27*)	H(43*)	109.3
Si(4)	C(28)	H(44)	109.3	Si(4)	C(28)	H(45)	109.8
Si(4)	C(28)	H(46)	109.9	H(44)	C(28)	H(45)	108.9
H(44)	C(28)	H(46)	109.0	H(45)	C(28)	H(46)	109.9
Si(4*)	C(28*)	H(44*)	109.3	Si(4*)	C(28*)	H(45*)	109.8
Si(4*)	C(28*)	H(46*)	109.9	H(44*)	C(28*)	H(45*)	108.9
H(44*)	C(28*)	H(46*)	109.0	H(45*)	C(28*)	H(46*)	109.9
Si(4)	C(29)	H(47)	109.8	Si(4)	C(29)	H(48)	109.8

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Si(4)	C(29)	H(49)	109.7	H(47)	C(29)	H(48)	109.2
H(47)	C(29)	H(49)	109.2	H(48)	C(29)	H(49)	109.2
Si(4*)	C(29*)	H(47*)	109.8	Si(4*)	C(29*)	H(48*)	109.8
Si(4*)	C(29*)	H(49*)	109.7	H(47*)	C(29*)	H(48*)	109.2
H(47*)	C(29*)	H(49*)	109.2	H(48*)	C(29*)	H(49*)	109.2
Si(4)	C(30)	H(50)	109.6	Si(4)	C(30)	H(51)	109.5
Si(4)	C(30)	H(52)	109.5	H(50)	C(30)	H(51)	109.5
H(50)	C(30)	H(52)	109.4	H(51)	C(30)	H(52)	109.2
Si(4*)	C(30*)	H(50*)	109.6	Si(4*)	C(30*)	H(51*)	109.5
Si(4*)	C(30*)	H(52*)	109.5	H(50*)	C(30*)	H(51*)	109.5
H(50*)	C(30*)	H(52*)	109.4	H(51*)	C(30*)	H(52*)	109.2
Si(5*)	C(31*)	H(53*)	109.7	Si(5*)	C(31*)	H(54*)	109.7
Si(5*)	C(31*)	H(55*)	109.7	H(53*)	C(31*)	H(54*)	109.3
H(53*)	C(31*)	H(55*)	109.2	H(54*)	C(31*)	H(55*)	109.2
Si(5)	C(31)	H(53)	109.7	Si(5)	C(31)	H(54)	109.7
Si(5)	C(31)	H(55)	109.7	H(53)	C(31)	H(54)	109.3
H(53)	C(31)	H(55)	109.2	H(54)	C(31)	H(55)	109.2
Si(5*)	C(32*)	H(56*)	109.7	Si(5*)	C(32*)	H(57*)	109.6
Si(5*)	C(32*)	H(58*)	109.6	H(56*)	C(32*)	H(57*)	109.3
H(56*)	C(32*)	H(58*)	109.4	H(57*)	C(32*)	H(58*)	109.3
Si(5)	C(32)	H(56)	109.7	Si(5)	C(32)	H(57)	109.6
Si(5)	C(32)	H(58)	109.6	H(56)	C(32)	H(57)	109.3
H(56)	C(32)	H(58)	109.4	H(57)	C(32)	H(58)	109.3
Si(5*)	C(33*)	H(59*)	109.5	Si(5*)	C(33*)	H(60*)	109.6

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Si(5*)	C(33*)	H(61*)	109.6	H(59*)	C(33*)	H(60*)	109.4
H(59*)	C(33*)	H(61*)	109.4	H(60*)	C(33*)	H(61*)	109.4
Si(5)	C(33)	H(59)	109.5	Si(5)	C(33)	H(60)	109.6
Si(5)	C(33)	H(61)	109.6	H(59)	C(33)	H(60)	109.4
H(59)	C(33)	H(61)	109.4	H(60)	C(33)	H(61)	109.4
Si(6*)	C(34*)	H(62*)	109.5	Si(6*)	C(34*)	H(63*)	109.7
Si(6*)	C(34*)	H(64*)	109.5	H(62*)	C(34*)	H(63*)	109.5
H(62*)	C(34*)	H(64*)	109.1	H(63*)	C(34*)	H(64*)	109.4
Si(6)	C(34)	H(62)	109.5	Si(6)	C(34)	H(63)	109.7
Si(6)	C(34)	H(64)	109.5	H(62)	C(34)	H(63)	109.5
H(62)	C(34)	H(64)	109.1	H(63)	C(34)	H(64)	109.4
Si(6*)	C(35*)	H(65*)	109.6	Si(6*)	C(35*)	H(66*)	109.8
Si(6*)	C(35*)	H(67*)	109.5	H(65*)	C(35*)	H(66*)	109.5
H(65*)	C(35*)	H(67*)	109.1	H(66*)	C(35*)	H(67*)	109.4
Si(6)	C(35)	H(65)	109.6	Si(6)	C(35)	H(66)	109.8
Si(6)	C(35)	H(67)	109.5	H(65)	C(35)	H(66)	109.5
H(65)	C(35)	H(67)	109.1	H(66)	C(35)	H(67)	109.4
Si(6*)	C(36*)	H(68*)	109.6	Si(6*)	C(36*)	H(69*)	109.9
Si(6*)	C(36*)	H(70*)	109.8	H(68*)	C(36*)	H(69*)	109.1
H(68*)	C(36*)	H(70*)	109.0	H(69*)	C(36*)	H(70*)	109.4
Si(6)	C(36)	H(68)	109.6	Si(6)	C(36)	H(69)	109.9
Si(6)	C(36)	H(70)	109.8	H(68)	C(36)	H(69)	109.1
H(68)	C(36)	H(70)	109.0	H(69)	C(36)	H(70)	109.4

Table 7. Torsion Angles(°)

atom	atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	atom	angle
Se(1)	Ge(1*)	Se(1*)	Ge(1)	29.75(4)	Se(1)	Ge(1*)	C(1*)	C(2*)	173.2(4)
Se(1)	Ge(1*)	C(1*)	C(6*)	-7.2(6)	Se(1)	Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	59.6(7)
Se(1)	Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	-114.8(7)	Se(1)	Ge(1)	Se(1*)	Ge(1*)	-30.25(4)
Se(1)	Ge(1)	C(1)	C(2)	71.1(5)	Se(1)	Ge(1)	C(1)	C(6)	-109.3(5)
Se(1)	Ge(1)	C(7)	C(8)	155.3(6)	Se(1)	Ge(1)	C(7)	C(12)	-19.1(8)
Se(1*)	Ge(1*)	Se(1)	Ge(1)	-30.25(4)	Se(1*)	Ge(1*)	C(1*)	C(2*)	71.1(5)
Se(1*)	Ge(1*)	C(1*)	C(6*)	-109.3(5)	Se(1*)	Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	155.3(6)
Se(1*)	Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	-19.1(8)	Se(1*)	Ge(1)	Se(1)	Ge(1*)	29.75(4)
Se(1*)	Ge(1)	C(1)	C(2)	173.2(4)	Se(1*)	Ge(1)	C(1)	C(6)	-7.2(6)
Se(1*)	Ge(1)	C(7)	C(8)	59.6(7)	Se(1*)	Ge(1)	C(7)	C(12)	-114.8(7)
Ge(1*)	Se(1)	Ge(1)	C(1)	150.7(2)	Ge(1*)	Se(1)	Ge(1)	C(7)	-78.7(3)
Ge(1*)	Se(1*)	Ge(1)	C(1)	-147.2(2)	Ge(1*)	Se(1*)	Ge(1)	C(7)	83.2(2)
Ge(1*)	C(1*)	C(2*)	C(3*)	-176.0(5)	Ge(1*)	C(1*)	C(2*)	C(13*)	5.4(8)
Ge(1*)	C(1*)	C(6*)	C(5*)	177.4(5)	Ge(1*)	C(1*)	C(6*)	C(15*)	1.1(9)
Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	C(9*)	-176.1(7)	Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	C(16*)	5(1)
Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	C(11*)	175.7(7)	Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	C(18*)	-8(1)
Ge(1)	Se(1)	Ge(1*)	C(1*)	-147.2(2)	Ge(1)	Se(1)	Ge(1*)	C(7*)	83.2(2)
Ge(1)	Se(1*)	Ge(1*)	C(1*)	150.7(2)	Ge(1)	Se(1*)	Ge(1*)	C(7*)	-78.7(3)
Ge(1)	C(1)	C(2)	C(3)	-176.0(5)	Ge(1)	C(1)	C(2)	C(13)	5.4(8)
Ge(1)	C(1)	C(6)	C(5)	177.4(5)	Ge(1)	C(1)	C(6)	C(15)	1.1(9)
Ge(1)	C(7)	C(8)	C(9)	-176.1(7)	Ge(1)	C(7)	C(8)	C(16)	5(1)
Ge(1)	C(7)	C(12)	C(11)	175.7(7)	Ge(1)	C(7)	C(12)	C(18)	-8(1)
Si(1)	C(13)	Si(2)	C(22)	165.2(4)	Si(1)	C(13)	Si(2)	C(23)	-71.2(5)
Si(1)	C(13)	Si(2)	C(24)	46.8(5)	Si(1)	C(13)	C(2)	C(1)	110.1(6)

Table 7. Torsion Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	atom	angle
Si(1)	C(13)	C(2)	C(3)	-68.6(7)	Si(1*)	C(13*)	Si(2*)	C(22*)	165.2(4)
Si(1*)	C(13*)	Si(2*)	C(23*)	-71.2(5)	Si(1*)	C(13*)	Si(2*)	C(24*)	46.8(5)
Si(1*)	C(13*)	C(2*)	C(1*)	110.1(6)	Si(1*)	C(13*)	C(2*)	C(3*)	-68.6(7)
Si(2)	C(13)	Si(1)	C(19)	-169.3(4)	Si(2)	C(13)	Si(1)	C(20)	71.3(5)
Si(2)	C(13)	Si(1)	C(21)	-52.0(5)	Si(2)	C(13)	C(2)	C(1)	-114.2(6)
Si(2)	C(13)	C(2)	C(3)	67.1(7)	Si(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(19*)	-169.3(4)
Si(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(20*)	71.3(5)	Si(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(21*)	-52.0(5)
Si(2*)	C(13*)	C(2*)	C(1*)	-114.2(6)	Si(2*)	C(13*)	C(2*)	C(3*)	67.1(7)
Si(3)	C(14)	Si(4)	C(28)	-64.1(7)	Si(3)	C(14)	Si(4)	C(29)	176.8(5)
Si(3)	C(14)	Si(4)	C(30)	57.1(6)	Si(3)	C(14)	C(4)	C(3)	-102.9(7)
Si(3)	C(14)	C(4)	C(5)	79.6(7)	Si(3*)	C(14*)	Si(4*)	C(28*)	-64.1(7)
Si(3*)	C(14*)	Si(4*)	C(29*)	176.8(5)	Si(3*)	C(14*)	Si(4*)	C(30*)	57.1(6)
Si(3*)	C(14*)	C(4*)	C(3*)	-102.9(7)	Si(3*)	C(14*)	C(4*)	C(5*)	79.6(7)
Si(4)	C(14)	Si(3)	C(25)	60.3(9)	Si(4)	C(14)	Si(3)	C(26)	-177.9(7)
Si(4)	C(14)	Si(3)	C(27)	-58.0(6)	Si(4)	C(14)	C(4)	C(3)	113.8(7)
Si(4)	C(14)	C(4)	C(5)	-63.8(8)	Si(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(25*)	60.3(9)
Si(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(26*)	-177.9(7)	Si(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(27*)	-58.0(6)
Si(4*)	C(14*)	C(4*)	C(3*)	113.8(7)	Si(4*)	C(14*)	C(4*)	C(5*)	-63.8(8)
Si(5)	C(15)	Si(6)	C(34)	31.3(6)	Si(5)	C(15)	Si(6)	C(35)	-86.9(5)
Si(5)	C(15)	Si(6)	C(36)	152.3(4)	Si(5)	C(15)	C(6)	C(1)	104.0(7)
Si(5)	C(15)	C(6)	C(5)	-72.5(6)	Si(5*)	C(15*)	Si(6*)	C(34*)	31.3(6)
Si(5*)	C(15*)	Si(6*)	C(35*)	-86.9(5)	Si(5*)	C(15*)	Si(6*)	C(36*)	152.3(4)
Si(5*)	C(15*)	C(6*)	C(1*)	104.0(7)	Si(5*)	C(15*)	C(6*)	C(5*)	-72.5(6)
Si(6)	C(15)	Si(5)	C(31)	-52.4(6)	Si(6)	C(15)	Si(5)	C(32)	68.0(5)

Table 7. Torsion Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	atom	angle
Si(6)	C(15)	Si(5)	C(33)	-172.1(4)	Si(6)	C(15)	C(6)	C(1)	-118.2(6)
Si(6)	C(15)	C(6)	C(5)	65.3(7)	Si(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(31*)	-52.4(6)
Si(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(32*)	68.0(5)	Si(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(33*)	-172.1(4)
Si(6*)	C(15*)	C(6*)	C(1*)	-118.2(6)	Si(6*)	C(15*)	C(6*)	C(5*)	65.3(7)
C(1)	Ge(1)	C(7)	C(8)	-73.4(7)	C(1)	Ge(1)	C(7)	C(12)	112.2(7)
C(1)	C(2)	C(3)	C(4)	-3(1)	C(1)	C(6)	C(5)	C(4)	0(1)
C(1*)	Ge(1*)	C(7*)	C(8*)	-73.4(7)	C(1*)	Ge(1*)	C(7*)	C(12*)	112.2(7)
C(1*)	C(2*)	C(3*)	C(4*)	-3(1)	C(1*)	C(6*)	C(5*)	C(4*)	0(1)
C(2)	C(1)	Ge(1)	C(7)	-59.6(5)	C(2)	C(1)	C(6)	C(5)	-3.1(9)
C(2)	C(1)	C(6)	C(15)	-179.3(6)	C(2)	C(3)	C(4)	C(5)	0(1)
C(2)	C(3)	C(4)	C(14)	-177.5(6)	C(2)	C(13)	Si(1)	C(19)	-38.5(6)
C(2)	C(13)	Si(1)	C(20)	-157.9(5)	C(2)	C(13)	Si(1)	C(21)	78.9(6)
C(2)	C(13)	Si(2)	C(22)	34.8(6)	C(2)	C(13)	Si(2)	C(23)	158.4(5)
C(2)	C(13)	Si(2)	C(24)	-83.5(6)	C(2*)	C(1*)	Ge(1*)	C(7*)	-59.6(5)
C(2*)	C(1*)	C(6*)	C(5*)	-3.1(9)	C(2*)	C(1*)	C(6*)	C(15*)	-179.3(6)
C(2*)	C(3*)	C(4*)	C(5*)	0(1)	C(2*)	C(3*)	C(4*)	C(14*)	-177.5(6)
C(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(19*)	-38.5(6)	C(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(20*)	-157.9(5)
C(2*)	C(13*)	Si(1*)	C(21*)	78.9(6)	C(2*)	C(13*)	Si(2*)	C(22*)	34.8(6)
C(2*)	C(13*)	Si(2*)	C(23*)	158.4(5)	C(2*)	C(13*)	Si(2*)	C(24*)	-83.5(6)
C(3)	C(2)	C(1)	C(6)	4.4(9)	C(3)	C(4)	C(5)	C(6)	1.3(10)
C(3*)	C(2*)	C(1*)	C(6*)	4.4(9)	C(3*)	C(4*)	C(5*)	C(6*)	1.3(10)
C(4)	C(3)	C(2)	C(13)	175.7(6)	C(4)	C(5)	C(6)	C(15)	176.8(6)
C(4)	C(14)	Si(3)	C(25)	-80.7(9)	C(4)	C(14)	Si(3)	C(26)	41.1(8)
C(4)	C(14)	Si(3)	C(27)	161.0(5)	C(4)	C(14)	Si(4)	C(28)	76.2(7)

Table 7. Torsion Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	atom	angle
C(4)	C(14)	Si(4)	C(29)	-43.0(6)	C(4)	C(14)	Si(4)	C(30)	-162.7(5)
C(4*)	C(3*)	C(2*)	C(13*)	175.7(6)	C(4*)	C(5*)	C(6*)	C(15*)	176.8(6)
C(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(25*)	-80.7(9)	C(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(26*)	41.1(8)
C(4*)	C(14*)	Si(3*)	C(27*)	161.0(5)	C(4*)	C(14*)	Si(4*)	C(28*)	76.2(7)
C(4*)	C(14*)	Si(4*)	C(29*)	-43.0(6)	C(4*)	C(14*)	Si(4*)	C(30*)	-162.7(5)
C(6*)	C(1*)	Ge(1*)	C(7*)	120.0(6)	C(6*)	C(1*)	C(2*)	C(13*)	-174.2(6)
C(6*)	C(5*)	C(4*)	C(14*)	179.0(6)	C(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(31*)	85.0(5)
C(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(32*)	-154.6(5)	C(6*)	C(15*)	Si(5*)	C(33*)	-34.7(6)
C(6*)	C(15*)	Si(6*)	C(34*)	-103.1(6)	C(6*)	C(15*)	Si(6*)	C(35*)	138.7(5)
C(6*)	C(15*)	Si(6*)	C(36*)	17.8(6)	C(6)	C(1)	Ge(1)	C(7)	120.0(6)
C(6)	C(1)	C(2)	C(13)	-174.2(6)	C(6)	C(5)	C(4)	C(14)	179.0(6)
C(6)	C(15)	Si(5)	C(31)	85.0(5)	C(6)	C(15)	Si(5)	C(32)	-154.6(5)
C(6)	C(15)	Si(5)	C(33)	-34.7(6)	C(6)	C(15)	Si(6)	C(34)	-103.1(6)
C(6)	C(15)	Si(6)	C(35)	138.7(5)	C(6)	C(15)	Si(6)	C(36)	17.8(6)
C(7*)	C(8*)	C(9*)	C(10*)	0(1)	C(7*)	C(12*)	C(11*)	C(10*)	-1(1)
C(7)	C(8)	C(9)	C(10)	0(1)	C(7)	C(12)	C(11)	C(10)	-1(1)
C(8*)	C(7*)	C(12*)	C(11*)	1(1)	C(8*)	C(7*)	C(12*)	C(18*)	177.3(8)
C(8*)	C(9*)	C(10*)	C(11*)	0(1)	C(8*)	C(9*)	C(10*)	C(17*)	179.9(9)
C(8)	C(7)	C(12)	C(11)	1(1)	C(8)	C(7)	C(12)	C(18)	177.3(8)
C(8)	C(9)	C(10)	C(11)	0(1)	C(8)	C(9)	C(10)	C(17)	179.9(9)
C(9*)	C(8*)	C(7*)	C(12*)	-1(1)	C(9*)	C(10*)	C(11*)	C(12*)	0(1)
C(9)	C(8)	C(7)	C(12)	-1(1)	C(9)	C(10)	C(11)	C(12)	0(1)
C(10)	C(9)	C(8)	C(16)	178.5(9)	C(10)	C(11)	C(12)	C(18)	-177.4(9)
C(10*)	C(9*)	C(8*)	C(16*)	178.5(9)	C(10*)	C(11*)	C(12*)	C(18*)	-177.4(9)

Table 7. Torsion Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	atom	angle
C(12)	C(7)	C(8)	C(16)	-179.1(8)	C(12)	C(11)	C(10)	C(17)	-179.6(9)
C(12*)	C(7*)	C(8*)	C(16*)	-179.1(8)	C(12*)	C(11*)	C(10*)	C(17*)	-179.6(9)

Table 8: Non-bonded Contacts out to 3.60 Å

atom	atom	distance	ADC	atom	atom	distance	ADC
Se(1*)	Se(1*)	3.362(2)	55402	Ge(1)	Ge(1)	3.218(2)	55402
C(11*)	C(11*)	3.53(2)	55402	C(12*)	C(12*)	3.49(2)	55402

The ADC (atom designator code) specifies the position of an atom in a crystal. The 5-digit number shown in the table is a composite of three one-digit numbers and one two-digit number: TA (first digit) + TB (second digit) + TC (third digit) + SN (last two digits). TA, TB and TC are the crystal lattice translation digits along cell edges a, b and c. A translation digit of 5 indicates the origin unit cell. If TA = 4, this indicates a translation of one unit cell length along the a-axis in the negative direction. Each translation digit can range in value from 1 to 9 and thus  $\pm 4$  lattice translations from the origin (TA=5, TB=5, TC=5) can be represented.

The SN, or symmetry operator number, refers to the number of the symmetry operator used to generate the coordinates of the target atom. A list of symmetry operators relevant to this structure are given below.

For a given intermolecular contact, the first atom (origin atom) is located in the origin unit cell and its position can be generated using the identity operator (SN=1). Thus, the ADC for an origin atom is always 55501. The position of the second atom (target atom) can be generated using the ADC and the coordinates of the atom in the parameter table. For example, an ADC of 47502 refers to the target atom moved through symmetry operator two, then translated -1 cell translations along the a axis, +2 cell translations along the b axis, and 0 cell translations along the c axis.

An ADC of 1 indicates an intermolecular contact between two fragments (eg. cation and anion) that reside in the same asymmetric unit.

Symmetry Operators:

(1)	X,	Y,	Z	(2)	-X,	Y,	1/2-Z
(3)	-X,	-Y,	-Z	(4)	X,	-Y,	1/2+Z

Table of Least-Squares Planes

-----

----- Plane number 1 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
C(1)	0.0202	0.0060
C(2)	-0.0214	0.0064
C(3)	0.0063	0.0068
C(4)	0.0116	0.0069
C(5)	-0.0093	0.0066
C(6)	-0.0080	0.0065

Mean deviation from plane is 0.0128 angstroms  
Chi-squared: 29.7

----- Plane number 2 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
C(1*)	-0.0202	0.0060
C(2*)	0.0214	0.0064
C(3*)	-0.0063	0.0068
C(4*)	-0.0116	0.0069
C(5*)	0.0093	0.0066
C(6*)	0.0080	0.0065

Mean deviation from plane is 0.0128 angstroms  
Chi-squared: 29.7

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
2	1	89.21

----- Plane number 3 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
C(7)	0.0062	0.0083
C(8)	-0.0032	0.0086
C(9)	-0.0008	0.0092
C(10)	0.0018	0.0108
C(11)	0.0031	0.0096
C(12)	-0.0058	0.0083

Mean deviation from plane is 0.0035 angstroms  
Chi-squared: 1.3

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
3	1	104.04
3	2	106.47

## Table of Least-Squares Planes (continued)

## ----- Plane number 4 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
C(7*)	-0.0062	0.0083
C(8*)	0.0032	0.0086
C(9*)	0.0008	0.0092
C(10*)	-0.0018	0.0108
C(11*)	-0.0031	0.0096
C(12*)	0.0058	0.0083

Mean deviation from plane is 0.0035 angstroms  
Chi-squared: 1.3

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
4	1	106.47
4	2	104.04
4	3	3.35

## ----- Plane number 5 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
Se(1)	0.0000	
Se(1*)	0.0000	
Ge(1)	0.0000	

Mean deviation from plane is 0.0000 angstroms  
Chi-squared: 0.0

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
5	1	61.78
5	2	146.12
5	3	67.91
5	4	71.23

## ----- Plane number 6 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
Se(1)	0.0000	
Se(1*)	0.0000	
Ge(1*)	0.0000	

Mean deviation from plane is 0.0000 angstroms  
Chi-squared: 0.0

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
6	1	146.12
6	2	61.78
6	3	71.23
6	4	67.91
6	5	136.21

## Table of Least-Squares Planes (continued)

----- Plane number 7 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
Se(1)	0.0000	
Ge(1*)	0.0000	
Ge(1)	0.0000	

Mean deviation from plane is 0.0000 angstroms  
Chi-squared: 0.0

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
7	1	62.38
7	2	147.92
7	3	95.36
7	4	98.51
7	5	29.75
7	6	149.75

----- Plane number 8 -----

Atoms Defining Plane	Distance	esd
Se(1*)	0.0000	
Ge(1*)	0.0000	
Ge(1)	0.0000	

Mean deviation from plane is 0.0000 angstroms  
Chi-squared: 0.0

Dihedral angles between least-squares planes

plane	plane	angle
8	1	147.92
8	2	62.38
8	3	98.51
8	4	95.36
8	5	149.75
8	6	29.75
8	7	137.92

