

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	mlb22
Empirical formula	$C_{85}H_{80}BCl_3CsO_{10}$
Formula weight	1511.56
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	P1
Unit cell dimensions	$a = 13.7451(13)$ Å $\alpha = 91.158(6)^\circ$ $b = 16.314(2)$ Å $\beta = 93.151(6)^\circ$ $c = 17.1382(14)$ Å $\gamma = 100.337(7)^\circ$
Volume, Z	$3773.2(6)$ Å ³ , 2
Density (calculated)	1.330 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.656 mm ⁻¹
F(000)	1562
Crystal size	$0.7 \times 0.5 \times 0.4$ mm
θ range for data collection	1.79 to 22.50°
Limiting indices	$-14 \leq h \leq 0$, $-17 \leq k \leq 17$, $-18 \leq l \leq 18$
Reflections collected	10290
Independent reflections	10290 ($R_{int} = 0.0000$)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix-block least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	10285 / 3 / 1796
Goodness-of-fit on F^2	0.962
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0582$, $wR2 = 0.1535$
R indices (all data)	$R1 = 0.0785$, $wR2 = 0.1814$
Absolute structure parameter	$-0.01(3)$
Largest diff. peak and hole	0.988 and -0.958 eÅ ⁻³

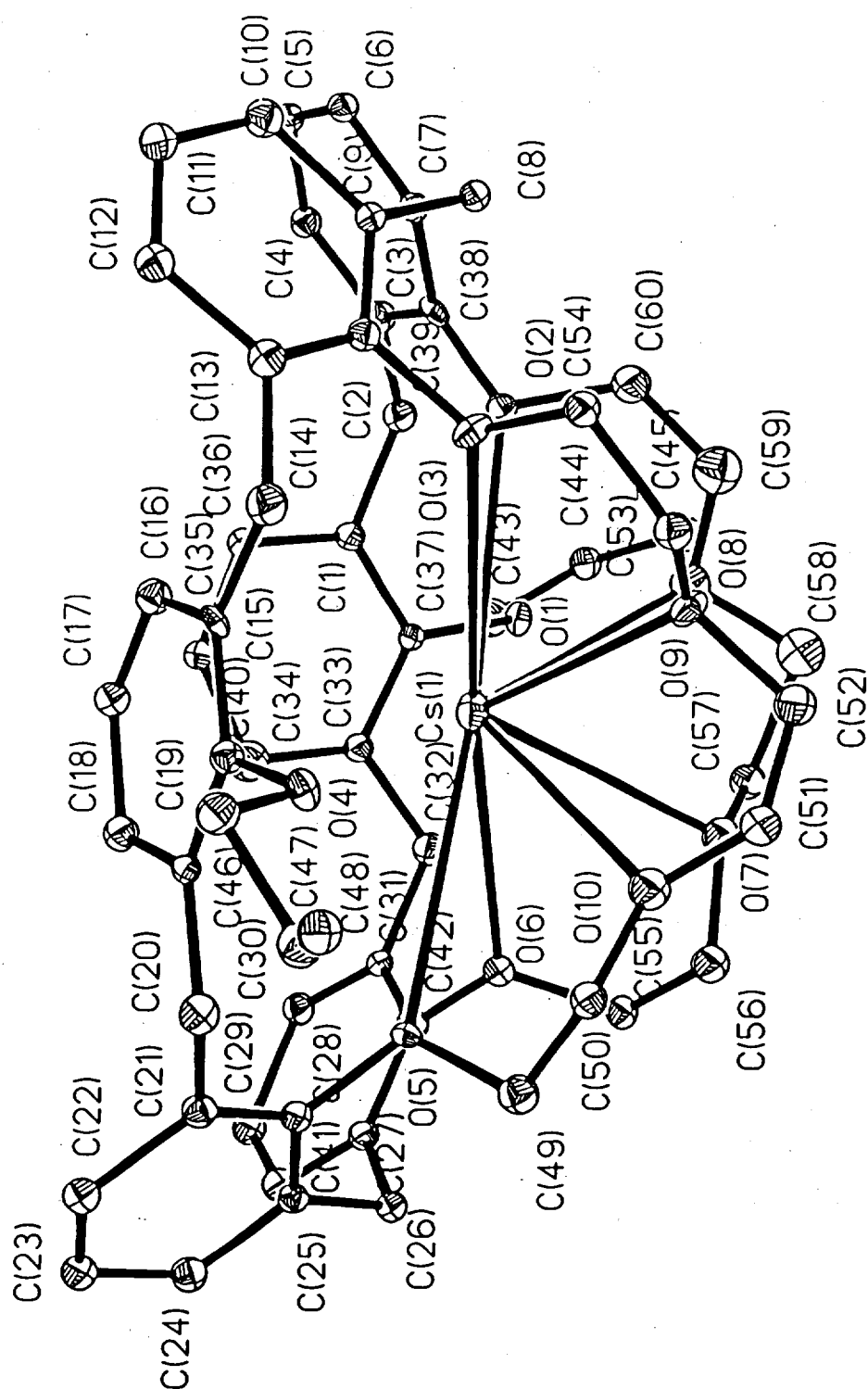


Table 2. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Cs(1)	4464(1)	1843(1)	9242(1)	64
O(1)	7674(6)	3344(6)	8915(5)	43
O(2)	4997(10)	4011(7)	9014(7)	52
O(3)	2551(9)	3062(8)	9285(8)	54
O(4)	914(9)	362(8)	8989(7)	48
O(5)	3754(10)	-407(7)	9309(7)	48
O(6)	6126(10)	530(8)	9423(8)	53
C(57)	6875(11)	2244(9)	10724(8)	64
O(8)	5978(10)	3292(9)	10266(9)	79
O(9)	3311(11)	2385(9)	10631(8)	68
O(10)	3475(12)	669(10)	10638(9)	75
C(1)	6452(14)	3432(11)	7874(11)	46
C(2)	6613(15)	4359(13)	8051(13)	59
C(3)	5730(15)	4769(12)	7961(12)	59
C(4)	5652(14)	5348(11)	7365(11)	51
C(5)	4832(13)	5750(12)	7320(11)	46
C(6)	4116(13)	5584(10)	7831(9)	44
C(7)	4120(13)	4979(11)	8395(10)	40
C(8)	3249(13)	4779(11)	8936(10)	43
C(9)	2350(13)	4241(10)	8501(10)	37
C(10)	1754(16)	4551(13)	7890(12)	63
C(11)	1005(15)	4072(12)	7478(12)	56
C(12)	741(15)	3250(12)	7648(12)	58
C(13)	1253(15)	2924(12)	8294(12)	57
C(14)	972(16)	1974(13)	8472(13)	63
C(15)	1628(11)	1429(9)	8154(10)	37
C(16)	2294(16)	1688(13)	7586(12)	55
C(17)	2916(14)	1196(12)	7315(12)	54
C(18)	2793(14)	335(11)	7544(11)	54
C(25)	4490(13)	-1449(11)	8652(10)	43
C(19)	2123(11)	58(9)	8133(8)	33
C(20)	2032(14)	-803(12)	8379(12)	63
C(21)	2859(14)	-1250(11)	8301(10)	51
C(22)	2746(15)	-1897(12)	7725(11)	58
C(23)	3528(15)	-2273(12)	7606(12)	58
C(24)	4381(16)	-2065(13)	8105(11)	58
C(26)	5455(12)	-1242(11)	9107(9)	44
C(27)	6285(14)	-691(12)	8703(11)	47
C(28)	6751(16)	-1063(14)	8128(13)	64
C(29)	7429(16)	-623(12)	7698(12)	63
C(30)	7695(13)	331(9)	7852(10)	55
C(31)	7295(12)	682(9)	8430(9)	37
C(32)	7539(16)	1572(12)	8592(12)	60
C(33)	6876(14)	2065(11)	8091(10)	47
C(34)	6095(20)	1674(16)	7524(16)	96
C(35)	5585(13)	2231(11)	7169(11)	42
C(36)	5725(14)	3064(11)	7304(11)	47
C(37)	6994(12)	2931(10)	8307(9)	36
C(38)	4944(12)	4579(10)	8481(10)	42
C(39)	2013(12)	3398(10)	8650(10)	44
C(40)	1534(14)	621(11)	8391(11)	47
C(41)	3741(13)	-1037(11)	8731(11)	45

C(42)	6549(15)	159(12)	8850(12)	54
C(43)	8658(18)	3596(14)	8555(15)	92
C(44)	9247(14)	4267(12)	9071(10)	66
C(45)	8877(17)	4490(13)	9802(11)	88
C(46)	-73(13)	-58(11)	8745(12)	64
C(49)	3507(16)	-681(13)	10064(13)	69
C(47)	-334(15)	-754(12)	9365(11)	67
C(48)	-1230(12)	-834(10)	9636(10)	60
C(50)	2934(13)	-162(10)	10464(10)	54
C(51)	3155(15)	1104(12)	11271(12)	66
C(52)	3575(15)	1969(13)	11304(13)	73
C(54)	2141(11)	3152(9)	9983(9)	53
C(55)	6634(14)	498(11)	10202(11)	52
O(7)	5937(10)	1682(9)	10692(9)	69
C(56)	6046(17)	839(14)	10786(14)	71
C(58)	6458(17)	3072(14)	11003(13)	111
C(59)	5659(17)	3990(15)	10372(14)	118
C(59)	2385(12)	2574(8)	10585(9)	58
C(60)	5447(12)	4435(11)	9749(10)	77
Cs(2)	9785(1)	5450(1)	4376(1)	65
O(11)	6463(6)	4014(5)	4810(4)	26
O(12)	8063(9)	6731(7)	4167(7)	44
O(13)	10458(9)	7693(7)	4343(8)	50
O(14)	13289(9)	6928(8)	4624(8)	52
O(15)	11681(9)	4234(7)	4351(7)	44
O(16)	9202(9)	3288(7)	4602(7)	44
O(17)	8289(14)	4034(8)	3298(9)	116
O(18)	8204(11)	5632(8)	2975(8)	70
O(19)	10737(11)	6628(8)	3029(8)	64
O(20)	10870(11)	4832(8)	3002(9)	68
C(61)	7329(11)	5193(10)	5447(9)	35
C(62)	6667(15)	5698(11)	5044(14)	64
C(63)	6977(15)	6687(11)	5208(14)	68
C(64)	6527(13)	7108(10)	5802(11)	61
C(65)	6792(16)	7819(12)	5935(13)	64
C(66)	7503(13)	8325(12)	5507(11)	50
C(67)	7958(13)	7992(11)	4915(11)	43
C(68)	8731(13)	8486(11)	4445(11)	58
C(69)	9685(13)	8736(10)	4969(12)	49
C(70)	9796(15)	9381(10)	5562(11)	49
C(71)	10661(17)	9575(10)	6012(13)	61
C(72)	11415(14)	9140(9)	5956(11)	53
C(73)	11392(12)	8535(9)	5393(10)	43
C(74)	12273(10)	8100(8)	5227(13)	51
C(75)	12069(14)	7167(11)	5522(12)	56
C(75)	13002(13)	4405(9)	5365(11)	43
C(76)	11414(13)	6891(10)	6024(10)	46
C(77)	11380(13)	6127(11)	6322(12)	51
C(78)	11921(14)	5588(11)	6011(11)	44
C(79)	12621(12)	5842(12)	5467(12)	52
C(80)	13279(13)	5294(9)	5144(12)	48
C(81)	11896(15)	3058(11)	5148(13)	52
C(82)	13459(13)	4075(11)	5924(13)	52
C(83)	13206(15)	3239(14)	6108(14)	70
C(84)	12403(13)	2748(10)	5716(11)	47
C(85)	10148(14)	1729(10)	5830(11)	51
C(86)	10971(14)	2504(12)	4758(11)	51
C(87)	10127(14)	2323(9)	5260(11)	42
C(89)	9356(16)	1537(13)	6309(14)	66
C(90)	8570(14)	1938(10)	6225(12)	51
C(91)	8525(11)	2522(9)	5684(10)	39
C(92)	7610(12)	2901(11)	5565(14)	56
C(93)	7790(13)	3842(12)	5711(11)	49

C(94)	8508(15)	4244(13)	6250(12)	56
C(95)	8643(14)	5087(14)	6440(14)	60
C(96)	8050(11)	5536(9)	6003(9)	38
C(97)	7185(12)	4335(11)	5366(10)	43
C(98)	7646(11)	7130(10)	4761(10)	32
C(99)	10533(13)	8344(9)	4875(11)	39
C(100)	12659(11)	6666(10)	5199(10)	35
C(101)	12141(12)	3869(9)	4917(9)	37
C(102)	9304(12)	2690(9)	5194(9)	36
C(103)	5556(9)	3609(9)	5024(10)	44
C(104)	5025(13)	2989(15)	4418(14)	91
C(105)	5304(21)	2612(15)	3950(14)	109
C(106)	14204(9)	7447(10)	4873(11)	49
C(107)	14591(15)	7968(15)	4225(16)	94
C(108)	15357(26)	8253(19)	4016(20)	147
C(109)	11930(14)	4040(11)	3529(11)	69
C(110)	11911(16)	4945(11)	3136(12)	89
C(111)	10552(17)	5283(15)	2375(15)	87
C(112)	11097(21)	6220(12)	2391(10)	89
C(113)	11340(20)	7359(14)	3215(14)	88
C(114)	10786(16)	7994(12)	3561(12)	64
C(115)	9213(10)	3011(8)	3782(7)	55
C(116)	8225(10)	3159(9)	3410(8)	61
C(117)	7491(10)	4201(8)	2838(7)	52
C(118)	7511(15)	4983(12)	2583(12)	96
C(119)	8118(16)	6433(12)	2817(11)	57
C(120)	7592(17)	6801(13)	3411(11)	66
C(121)	5171(16)	-132(13)	5617(13)	84
C(122)	8969(15)	7533(12)	7914(12)	76
Cl(1)	6315(6)	491(6)	5809(5)	145
Cl(2)	4833(6)	-682(6)	6506(6)	114
Cl(3)	4310(11)	338(9)	5325(10)	228
Cl(4)	9903(9)	7000(9)	8333(10)	214
Cl(5)	9362(6)	7982(5)	7116(5)	109
Cl(6)	7846(5)	6859(4)	7781(4)	96
C(178)	4413(16)	5988(13)	11864(12)	60
C(177)	5325(14)	6538(12)	10620(11)	47
C(176)	4563(16)	6244(14)	12668(12)	67
C(153)	4490(15)	7568(12)	11485(12)	56
C(156)	2581(15)	5700(12)	10749(11)	54
C(161)	3325(15)	6389(12)	10645(12)	49
C(168)	5251(14)	6609(11)	9810(12)	56
C(160)	3037(12)	6916(10)	10080(9)	45
C(162)	6234(15)	6369(10)	10996(13)	66
C(167)	6128(16)	6574(13)	9405(14)	62
C(175)	5371(16)	8159(13)	11560(12)	61
C(157)	1650(15)	5586(12)	10284(12)	62
C(163)	7059(15)	6368(11)	10561(12)	57
C(170)	4700(12)	4992(10)	13172(9)	62
B(2)	4361(18)	6652(14)	11139(15)	53
C(154)	4577(15)	4639(13)	12432(11)	74
C(172)	4397(13)	5164(11)	11784(11)	50
C(169)	4691(13)	5793(9)	13300(10)	58
C(159)	2174(20)	6815(16)	9629(15)	91
C(177)	5415(16)	8983(13)	11911(12)	71
C(164)	6975(16)	6509(14)	9745(14)	75
C(153)	3746(16)	7862(13)	11789(13)	69
C(151)	3890(14)	8705(13)	12127(12)	79
C(158)	1444(14)	6075(11)	9781(9)	62
C(150)	4809(13)	9180(13)	12146(12)	80
C(149)	1650(15)	1592(12)	2892(11)	53
C(128)	1078(15)	383(13)	3609(11)	65
C(137)	-1092(15)	749(12)	3005(12)	50

C(143)	-214(12)	1298(10)	1708(9)	35
C(142)	-337(14)	1037(12)	947(10)	52
C(147)	-277(14)	-302(11)	2120(11)	47
C(144)	923(14)	908(11)	2978(11)	44
C(136)	-1997(15)	792(10)	2662(12)	63
C(131)	2504(13)	1788(11)	3307(11)	54
C(133)	-1931(16)	746(13)	4242(14)	62
C(123)	-358(11)	-1933(11)	1427(10)	61
C(141)	-458(14)	1665(10)	387(12)	70
C(132)	-1144(12)	714(10)	3807(10)	43
C(140)	-437(13)	2492(10)	566(10)	68
C(125)	-1169(16)	-851(13)	2101(12)	59
C(138)	-218(18)	2171(14)	1884(14)	76
C(139)	-270(14)	2729(13)	1340(10)	71
C(134)	-2823(15)	854(13)	3824(13)	68
B(1)	-156(16)	700(13)	2443(13)	45
C(135)	-2828(21)	853(15)	3022(16)	91
C(147)	552(12)	-1356(11)	1485(11)	64
C(146)	576(15)	-595(12)	1819(12)	63
C(130)	2661(15)	1214(12)	3943(10)	70
C(129)	2000(14)	554(12)	4053(11)	58
C(124)	-1293(17)	-1615(14)	1776(13)	83

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

Cs(1)-O(9)	3.128(13)	Cs(1)-O(7)	3.16(2)
Cs(1)-O(8)	3.26(2)	Cs(1)-O(10)	3.29(2)
Cs(1)-O(6)	3.407(13)	Cs(1)-O(2)	3.515(11)
Cs(1)-O(3)	3.573(13)	Cs(1)-O(5)	3.631(11)
Cs(1)-C(52)	3.81(2)	Cs(1)-C(34)	3.83(3)
Cs(1)-C(17)	3.85(2)	Cs(1)-C(33)	3.92(2)
O(1)-C(37)	1.43(2)	O(1)-C(43)	1.51(3)
O(2)-C(38)	1.32(2)	O(2)-C(60)	1.47(2)
O(3)-C(54)	1.37(2)	O(3)-C(39)	1.45(2)
O(4)-C(40)	1.39(2)	O(4)-C(46)	1.44(2)
O(5)-C(41)	1.41(2)	O(5)-C(49)	1.42(3)
O(6)-C(42)	1.35(2)	O(6)-C(55)	1.48(2)
C(57)-O(7)	1.44(2)	C(57)-C(58)	1.63(3)
O(8)-C(59)	1.30(3)	O(8)-C(58)	1.47(3)
O(9)-C(59)	1.36(2)	O(9)-C(52)	1.41(3)
O(10)-C(51)	1.42(2)	O(10)-C(50)	1.44(2)
C(1)-C(37)	1.40(2)	C(1)-C(36)	1.40(3)
C(1)-C(2)	1.51(3)	C(2)-C(3)	1.49(3)
C(3)-C(4)	1.42(3)	C(3)-C(38)	1.43(3)
C(4)-C(5)	1.40(3)	C(5)-C(6)	1.35(3)
C(6)-C(7)	1.40(3)	C(7)-C(38)	1.41(2)
C(7)-C(8)	1.55(2)	C(8)-C(9)	1.53(2)
C(9)-C(39)	1.40(2)	C(9)-C(10)	1.45(3)
C(10)-C(11)	1.33(3)	C(11)-C(12)	1.37(3)
C(12)-C(13)	1.44(3)	C(13)-C(39)	1.30(3)
C(13)-C(14)	1.57(3)	C(14)-C(15)	1.49(3)
C(15)-C(40)	1.37(2)	C(15)-C(16)	1.39(3)
C(16)-C(17)	1.37(3)	C(17)-C(18)	1.45(3)
C(18)-C(19)	1.43(2)	C(25)-C(41)	1.34(2)
C(25)-C(24)	1.34(3)	C(25)-C(26)	1.48(2)
C(19)-C(40)	1.41(2)	C(19)-C(20)	1.46(2)
C(20)-C(21)	1.47(3)	C(21)-C(41)	1.37(3)
C(21)-C(22)	1.41(3)	C(22)-C(23)	1.35(3)
C(23)-C(24)	1.40(3)	C(26)-C(27)	1.53(3)
C(27)-C(42)	1.38(3)	C(27)-C(28)	1.39(3)
C(28)-C(29)	1.34(3)	C(29)-C(30)	1.55(2)
C(30)-C(31)	1.33(2)	C(31)-C(42)	1.45(3)
C(31)-C(32)	1.45(3)	C(32)-C(33)	1.55(3)
C(33)-C(37)	1.43(2)	C(33)-C(34)	1.45(3)
C(34)-C(35)	1.37(3)	C(35)-C(36)	1.35(3)
C(43)-C(44)	1.48(3)	C(44)-C(45)	1.44(3)
C(46)-C(47)	1.58(3)	C(49)-C(50)	1.44(3)
C(47)-C(48)	1.33(3)	C(51)-C(52)	1.42(3)
C(54)-C(59)	1.48(2)	C(55)-C(56)	1.48(3)
O(7)-C(56)	1.42(3)	C(59)-C(60)	1.35(3)
Cs(2)-O(20)	3.10(2)	Cs(2)-O(18)	3.203(12)
Cs(2)-O(19)	3.215(13)	Cs(2)-O(17)	3.268(14)
Cs(2)-O(12)	3.436(12)	Cs(2)-O(16)	3.509(12)
Cs(2)-O(15)	3.549(12)	Cs(2)-O(13)	3.613(12)
Cs(2)-C(111)	3.66(3)	Cs(2)-C(96)	3.78(2)
Cs(2)-C(61)	3.891(14)	Cs(2)-C(110)	3.90(2)
O(11)-C(97)	1.36(2)	O(11)-C(103)	1.38(2)
O(12)-C(98)	1.40(2)	O(12)-C(120)	1.43(2)
O(13)-C(99)	1.37(2)	O(13)-C(114)	1.50(2)
O(14)-C(100)	1.37(2)	O(14)-C(106)	1.42(2)
O(15)-C(101)	1.34(2)	O(15)-C(109)	1.51(2)
O(16)-C(102)	1.44(2)	O(16)-C(115)	1.47(2)
O(17)-C(117)	1.39(2)	O(17)-C(116)	1.43(2)
O(18)-C(119)	1.36(2)	O(18)-C(118)	1.42(2)

O(19)-C(113)	1.35(3)	O(19)-C(112)	1.43(2)
O(20)-C(111)	1.41(3)	O(20)-C(110)	1.41(3)
C(61)-C(96)	1.37(2)	C(61)-C(97)	1.38(2)
C(61)-C(62)	1.49(3)	C(62)-C(63)	1.61(3)
C(63)-C(98)	1.35(3)	C(63)-C(64)	1.44(3)
C(64)-C(65)	1.17(2)	C(65)-C(66)	1.41(3)
C(66)-C(67)	1.37(3)	C(67)-C(98)	1.41(3)
C(67)-C(68)	1.50(3)	C(68)-C(69)	1.54(2)
C(69)-C(70)	1.43(3)	C(69)-C(99)	1.44(2)
C(70)-C(71)	1.36(3)	C(71)-C(72)	1.36(3)
C(72)-C(73)	1.36(3)	C(73)-C(99)	1.42(2)
C(73)-C(74)	1.55(2)	C(74)-C(75)	1.59(2)
C(75)-C(76)	1.31(3)	C(75)-C(100)	1.38(3)
C(75)-C(82)	1.30(3)	C(75)-C(101)	1.50(3)
C(75)-C(80)	1.49(2)	C(76)-C(77)	1.35(3)
C(77)-C(78)	1.37(3)	C(78)-C(79)	1.39(3)
C(79)-C(100)	1.42(3)	C(79)-C(80)	1.50(3)
C(81)-C(84)	1.33(3)	C(81)-C(101)	1.38(2)
C(81)-C(86)	1.53(3)	C(82)-C(83)	1.39(3)
C(83)-C(84)	1.38(3)	C(85)-C(87)	1.39(3)
C(85)-C(89)	1.39(3)	C(86)-C(87)	1.47(3)
C(87)-C(102)	1.37(2)	C(89)-C(90)	1.36(3)
C(90)-C(91)	1.35(3)	C(91)-C(102)	1.39(2)
C(91)-C(92)	1.50(2)	C(92)-C(93)	1.52(3)
C(93)-C(94)	1.38(3)	C(93)-C(97)	1.38(3)
C(94)-C(95)	1.39(3)	C(95)-C(96)	1.39(3)
C(103)-C(104)	1.50(3)	C(104)-C(105)	1.13(3)
C(106)-C(107)	1.48(3)	C(107)-C(108)	1.15(4)
C(109)-C(110)	1.64(3)	C(111)-C(112)	1.58(3)
C(113)-C(114)	1.52(3)	C(115)-C(116)	1.53(2)
C(117)-C(118)	1.35(2)	C(119)-C(120)	1.46(3)
C(121)-Cl(3)	1.59(2)	C(121)-Cl(1)	1.72(2)
C(121)-Cl(2)	1.82(2)	C(122)-Cl(5)	1.64(2)
C(122)-Cl(6)	1.73(2)	C(122)-Cl(4)	1.80(2)
C(178)-C(172)	1.34(3)	C(178)-C(176)	1.43(3)
C(178)-B(2)	1.67(3)	C(177)-C(168)	1.39(3)
C(177)-C(162)	1.45(3)	C(177)-B(2)	1.67(3)
C(176)-C(169)	1.34(3)	C(153)-C(175)	1.40(3)
C(153)-C(153)	1.33(3)	C(153)-B(2)	1.57(3)
C(156)-C(161)	1.40(3)	C(156)-C(157)	1.45(3)
C(161)-C(160)	1.40(3)	C(161)-B(2)	1.60(3)
C(168)-C(167)	1.43(3)	C(160)-C(159)	1.36(3)
C(162)-C(163)	1.39(3)	C(167)-C(164)	1.30(3)
C(175)-C(177)	1.45(3)	C(157)-C(158)	1.24(2)
C(163)-C(164)	1.42(3)	C(170)-C(169)	1.32(2)
C(170)-C(154)	1.37(2)	C(154)-C(172)	1.45(3)
C(159)-C(158)	1.46(3)	C(177)-C(150)	1.04(2)
C(153)-C(151)	1.46(3)	C(151)-C(150)	1.36(3)
C(149)-C(131)	1.32(3)	C(149)-C(144)	1.38(3)
C(128)-C(144)	1.42(3)	C(128)-C(129)	1.42(3)
C(137)-C(136)	1.36(3)	C(137)-C(132)	1.38(3)
C(137)-B(1)	1.66(3)	C(143)-C(142)	1.36(3)
C(143)-C(138)	1.45(3)	C(143)-B(1)	1.62(3)
C(142)-C(141)	1.44(3)	C(147)-C(125)	1.38(3)
C(147)-C(146)	1.46(3)	C(147)-B(1)	1.69(3)
C(144)-B(1)	1.68(3)	C(136)-C(135)	1.35(3)
C(131)-C(130)	1.48(3)	C(133)-C(132)	1.36(3)
C(133)-C(134)	1.43(3)	C(123)-C(147)	1.42(2)
C(123)-C(124)	1.61(3)	C(141)-C(140)	1.37(2)
C(140)-C(139)	1.37(2)	C(125)-C(124)	1.33(3)
C(138)-C(139)	1.32(3)	C(134)-C(135)	1.37(3)
C(147)-C(146)	1.35(3)	C(130)-C(129)	1.30(3)

O(9)-Cs(1)-O(7)	78.3(4)	O(9)-Cs(1)-O(8)	72.7(4)
O(7)-Cs(1)-O(8)	50.3(4)	O(9)-Cs(1)-O(10)	52.6(4)
O(7)-Cs(1)-O(10)	65.3(4)	O(8)-Cs(1)-O(10)	101.1(4)
O(9)-Cs(1)-O(6)	123.8(3)	O(7)-Cs(1)-O(6)	52.2(3)
O(8)-Cs(1)-O(6)	90.7(3)	O(10)-Cs(1)-O(6)	80.6(4)
O(9)-Cs(1)-O(2)	81.5(3)	O(7)-Cs(1)-O(2)	99.8(3)
O(8)-Cs(1)-O(2)	49.6(3)	O(10)-Cs(1)-O(2)	133.1(4)
O(6)-Cs(1)-O(2)	126.9(3)	O(9)-Cs(1)-O(3)	49.0(3)
O(7)-Cs(1)-O(3)	123.6(3)	O(8)-Cs(1)-O(3)	90.5(3)
O(10)-Cs(1)-O(3)	91.1(3)	O(6)-Cs(1)-O(3)	171.6(3)
O(2)-Cs(1)-O(3)	59.2(3)	O(9)-Cs(1)-O(5)	100.2(3)
O(7)-Cs(1)-O(5)	85.7(3)	O(8)-Cs(1)-O(5)	135.9(3)
O(10)-Cs(1)-O(5)	49.8(3)	O(6)-Cs(1)-O(5)	56.5(3)
O(2)-Cs(1)-O(5)	174.5(3)	O(3)-Cs(1)-O(5)	118.0(3)
O(9)-Cs(1)-C(52)	20.6(4)	O(7)-Cs(1)-C(52)	60.7(4)
O(8)-Cs(1)-C(52)	70.7(4)	O(10)-Cs(1)-C(52)	38.0(4)
O(6)-Cs(1)-C(52)	103.2(4)	O(2)-Cs(1)-C(52)	95.2(4)
O(3)-Cs(1)-C(52)	69.5(4)	O(5)-Cs(1)-C(52)	87.8(4)
O(9)-Cs(1)-C(34)	167.9(5)	O(7)-Cs(1)-C(34)	101.8(5)
O(8)-Cs(1)-C(34)	97.9(5)	O(10)-Cs(1)-C(34)	138.6(5)
O(6)-Cs(1)-C(34)	62.7(5)	O(2)-Cs(1)-C(34)	86.6(5)
O(3)-Cs(1)-C(34)	125.3(5)	O(5)-Cs(1)-C(34)	91.9(5)
C(52)-Cs(1)-C(34)	162.5(5)	O(9)-Cs(1)-C(17)	116.0(4)
O(7)-Cs(1)-C(17)	157.6(4)	O(8)-Cs(1)-C(17)	147.8(4)
O(10)-Cs(1)-C(17)	108.5(4)	O(6)-Cs(1)-C(17)	106.3(4)
O(2)-Cs(1)-C(17)	99.3(4)	O(3)-Cs(1)-C(17)	76.6(4)
O(5)-Cs(1)-C(17)	75.2(4)	C(52)-Cs(1)-C(17)	128.6(5)
C(34)-Cs(1)-C(17)	67.9(5)	O(9)-Cs(1)-C(33)	150.3(4)
O(7)-Cs(1)-C(33)	83.2(4)	O(8)-Cs(1)-C(33)	77.6(4)
O(10)-Cs(1)-C(33)	136.6(4)	O(6)-Cs(1)-C(33)	56.2(4)
O(2)-Cs(1)-C(33)	79.0(3)	O(3)-Cs(1)-C(33)	132.1(3)
O(5)-Cs(1)-C(33)	101.4(3)	C(52)-Cs(1)-C(33)	142.1(5)
C(34)-Cs(1)-C(33)	21.6(4)	C(17)-Cs(1)-C(33)	89.2(4)
C(37)-O(1)-C(43)	106.7(13)	C(38)-O(2)-C(60)	108.7(12)
C(38)-O(2)-Cs(1)	140.9(10)	C(60)-O(2)-Cs(1)	110.4(9)
C(54)-O(3)-C(39)	111.4(13)	C(54)-O(3)-Cs(1)	117.6(9)
C(39)-O(3)-Cs(1)	130.4(10)	C(40)-O(4)-C(46)	115.9(14)
C(41)-O(5)-C(49)	116.2(14)	C(41)-O(5)-Cs(1)	131.0(10)
C(49)-O(5)-Cs(1)	112.7(11)	C(42)-O(6)-C(55)	113(2)
C(42)-O(6)-Cs(1)	128.5(12)	C(55)-O(6)-Cs(1)	117.0(10)
O(7)-C(57)-C(58)	96.4(13)	C(59)-O(8)-C(58)	109(2)
C(59)-O(8)-Cs(1)	115.5(14)	C(58)-O(8)-Cs(1)	119.0(12)
C(59)-O(9)-C(52)	117(2)	C(59)-O(9)-Cs(1)	126.5(10)
C(52)-O(9)-Cs(1)	108.3(12)	C(51)-O(10)-C(50)	116(2)
C(51)-O(10)-Cs(1)	115.4(12)	C(50)-O(10)-Cs(1)	120.9(11)
C(37)-C(1)-C(36)	120(2)	C(37)-C(1)-C(2)	120(2)
C(36)-C(1)-C(2)	120(2)	C(3)-C(2)-C(1)	117(2)
C(4)-C(3)-C(38)	119(2)	C(4)-C(3)-C(2)	121(2)
C(38)-C(3)-C(2)	120(2)	C(3)-C(4)-C(5)	119(2)
C(6)-C(5)-C(4)	121(2)	C(5)-C(6)-C(7)	122(2)
C(38)-C(7)-C(6)	119(2)	C(38)-C(7)-C(8)	121(2)
C(6)-C(7)-C(8)	120(2)	C(9)-C(8)-C(7)	110.7(14)
C(39)-C(9)-C(10)	113(2)	C(39)-C(9)-C(8)	124(2)
C(10)-C(9)-C(8)	123(2)	C(11)-C(10)-C(9)	124(2)
C(10)-C(11)-C(12)	120(2)	C(11)-C(12)-C(13)	119(2)
C(39)-C(13)-C(12)	119(2)	C(39)-C(13)-C(14)	122(2)
C(12)-C(13)-C(14)	119(2)	C(15)-C(14)-C(13)	116(2)
C(40)-C(15)-C(16)	118(2)	C(40)-C(15)-C(14)	119(2)
C(16)-C(15)-C(14)	123(2)	C(17)-C(16)-C(15)	123(2)
C(16)-C(17)-C(18)	119(2)	C(16)-C(17)-Cs(1)	85.0(12)
C(18)-C(17)-Cs(1)	89.0(11)	C(19)-C(18)-C(17)	119(2)
C(41)-C(25)-C(24)	118(2)	C(41)-C(25)-C(26)	124(2)
C(24)-C(25)-C(26)	118(2)	C(40)-C(19)-C(18)	117.0(14)

C(40)-C(19)-C(20)	124(2)	C(18)-C(19)-C(20)	119(2)
C(19)-C(20)-C(21)	120(2)	C(41)-C(21)-C(22)	119(2)
C(41)-C(21)-C(20)	123(2)	C(22)-C(21)-C(20)	118(2)
C(23)-C(22)-C(21)	118(2)	C(22)-C(23)-C(24)	119(2)
C(25)-C(24)-C(23)	123(2)	C(25)-C(26)-C(27)	116(2)
C(42)-C(27)-C(28)	119(2)	C(42)-C(27)-C(26)	123(2)
C(28)-C(27)-C(26)	118(2)	C(29)-C(28)-C(27)	122(2)
C(28)-C(29)-C(30)	118(2)	C(31)-C(30)-C(29)	120(2)
C(30)-C(31)-C(42)	118(2)	C(30)-C(31)-C(32)	121(2)
C(42)-C(31)-C(32)	121(2)	C(31)-C(32)-C(33)	113(2)
C(37)-C(33)-C(34)	121(2)	C(37)-C(33)-C(32)	114(2)
C(34)-C(33)-C(32)	124(2)	C(37)-C(33)-Cs(1)	84.6(10)
C(34)-C(33)-Cs(1)	75.9(14)	C(32)-C(33)-Cs(1)	102.9(11)
C(35)-C(34)-C(33)	114(2)	C(35)-C(34)-Cs(1)	85.5(14)
C(33)-C(34)-Cs(1)	82.5(14)	C(36)-C(35)-C(34)	127(2)
C(35)-C(36)-C(1)	119(2)	C(1)-C(37)-C(33)	119(2)
C(1)-C(37)-O(1)	116(2)	C(33)-C(37)-O(1)	125(2)
O(2)-C(38)-C(7)	122(2)	O(2)-C(38)-C(3)	119(2)
C(7)-C(38)-C(3)	119(2)	C(13)-C(39)-C(9)	126(2)
C(13)-C(39)-O(3)	119(2)	C(9)-C(39)-O(3)	115(2)
C(15)-C(40)-O(4)	119(2)	C(15)-C(40)-C(19)	124(2)
O(4)-C(40)-C(19)	117(2)	C(25)-C(41)-C(21)	122(2)
C(25)-C(41)-O(5)	123(2)	C(21)-C(41)-O(5)	114(2)
O(6)-C(42)-C(27)	120(2)	O(6)-C(42)-C(31)	117(2)
C(27)-C(42)-C(31)	123(2)	O(1)-C(43)-C(44)	107(2)
C(45)-C(44)-C(43)	120(2)	O(4)-C(46)-C(47)	104.6(14)
O(5)-C(49)-C(50)	114(2)	C(48)-C(47)-C(46)	116(2)
O(10)-C(50)-C(49)	113(2)	O(10)-C(51)-C(52)	113(2)
O(9)-C(52)-C(51)	113(2)	O(9)-C(52)-Cs(1)	51.2(10)
C(51)-C(52)-Cs(1)	91.5(14)	O(3)-C(54)-C(59)	114.3(14)
C(56)-C(55)-O(6)	108(2)	C(56)-O(7)-C(57)	112.3(14)
C(56)-O(7)-Cs(1)	110.9(12)	C(57)-O(7)-Cs(1)	116.1(9)
O(7)-C(56)-C(55)	116(2)	O(8)-C(58)-C(57)	101(2)
O(8)-C(59)-C(60)	120(2)	O(9)-C(59)-C(54)	118.8(14)
C(59)-C(60)-O(2)	121(2)	O(20)-Cs(2)-O(18)	81.2(4)
O(20)-Cs(2)-O(19)	56.0(3)	O(18)-Cs(2)-O(19)	67.5(4)
O(20)-Cs(2)-O(17)	69.2(5)	O(18)-Cs(2)-O(17)	49.3(3)
O(19)-Cs(2)-O(17)	99.8(4)	O(20)-Cs(2)-O(12)	124.1(3)
O(18)-Cs(2)-O(12)	48.4(3)	O(19)-Cs(2)-O(12)	80.1(3)
O(17)-Cs(2)-O(12)	88.7(3)	O(20)-Cs(2)-O(16)	79.7(3)
O(18)-Cs(2)-O(16)	99.2(3)	O(19)-Cs(2)-O(16)	134.6(3)
O(17)-Cs(2)-O(16)	50.5(3)	O(12)-Cs(2)-O(16)	124.5(3)
O(20)-Cs(2)-O(15)	48.9(3)	O(18)-Cs(2)-O(15)	126.9(3)
O(19)-Cs(2)-O(15)	92.5(3)	O(17)-Cs(2)-O(15)	90.8(3)
O(12)-Cs(2)-O(15)	172.3(3)	O(16)-Cs(2)-O(15)	60.1(3)
O(20)-Cs(2)-O(13)	103.9(3)	O(18)-Cs(2)-O(13)	85.6(3)
O(19)-Cs(2)-O(13)	49.9(3)	O(17)-Cs(2)-O(13)	134.7(3)
O(12)-Cs(2)-O(13)	57.2(3)	O(16)-Cs(2)-O(13)	174.4(3)
O(15)-Cs(2)-O(13)	119.0(3)	O(20)-Cs(2)-C(111)	22.1(5)
O(18)-Cs(2)-C(111)	62.4(5)	O(19)-Cs(2)-C(111)	40.4(4)
O(17)-Cs(2)-C(111)	67.0(5)	O(12)-Cs(2)-C(111)	102.1(5)
O(16)-Cs(2)-C(111)	94.5(4)	O(15)-Cs(2)-C(111)	70.7(5)
O(13)-Cs(2)-C(111)	90.2(4)	O(20)-Cs(2)-C(96)	162.8(3)
O(18)-Cs(2)-C(96)	96.1(4)	O(19)-Cs(2)-C(96)	138.4(3)
O(17)-Cs(2)-C(96)	96.1(4)	O(12)-Cs(2)-C(96)	62.1(3)
O(16)-Cs(2)-C(96)	84.0(3)	O(15)-Cs(2)-C(96)	125.6(3)
O(13)-Cs(2)-C(96)	92.8(3)	C(111)-Cs(2)-C(96)	158.0(5)
O(20)-Cs(2)-C(61)	146.0(3)	O(18)-Cs(2)-C(61)	78.1(4)
O(19)-Cs(2)-C(61)	135.0(4)	O(17)-Cs(2)-C(61)	76.8(4)
O(12)-Cs(2)-C(61)	55.2(3)	O(16)-Cs(2)-C(61)	77.4(3)
O(15)-Cs(2)-C(61)	132.0(3)	O(13)-Cs(2)-C(61)	101.1(3)
C(111)-Cs(2)-C(61)	138.0(5)	C(96)-Cs(2)-C(61)	20.5(3)
O(20)-Cs(2)-C(110)	19.3(4)	O(18)-Cs(2)-C(110)	98.6(4)

O(19)-Cs(2)-C(110)	56.6(4)	O(17)-Cs(2)-C(110)	87.1(5)
O(12)-Cs(2)-C(110)	134.9(4)	O(16)-Cs(2)-C(110)	85.1(3)
O(15)-Cs(2)-C(110)	37.4(4)	O(13)-Cs(2)-C(110)	96.9(3)
C(111)-Cs(2)-C(110)	36.4(5)	C(96)-Cs(2)-C(110)	163.0(4)
C(61)-Cs(2)-C(110)	161.3(4)	C(97)-O(11)-C(103)	120.3(11)
C(98)-O(12)-C(120)	113(2)	C(98)-O(12)-Cs(2)	127.5(9)
C(120)-O(12)-Cs(2)	119.2(12)	C(99)-O(13)-C(114)	111.2(13)
C(99)-O(13)-Cs(2)	136.2(10)	C(114)-O(13)-Cs(2)	112.6(10)
C(100)-O(14)-C(106)	116.2(14)	C(101)-O(15)-C(109)	115.5(13)
C(101)-O(15)-Cs(2)	132.3(9)	C(109)-O(15)-Cs(2)	111.9(10)
C(102)-O(16)-C(115)	117.5(12)	C(102)-O(16)-Cs(2)	138.6(9)
C(115)-O(16)-Cs(2)	99.2(8)	C(117)-O(17)-C(116)	111.9(13)
C(117)-O(17)-Cs(2)	123.4(9)	C(116)-O(17)-Cs(2)	122.7(9)
C(119)-O(18)-C(118)	118(2)	C(119)-O(18)-Cs(2)	114.7(10)
C(118)-O(18)-Cs(2)	127.2(11)	C(113)-O(19)-C(112)	110(2)
C(113)-O(19)-Cs(2)	120.5(12)	C(112)-O(19)-Cs(2)	116.3(11)
C(111)-O(20)-C(110)	114(2)	C(111)-O(20)-Cs(2)	102.0(13)
C(110)-O(20)-Cs(2)	114.2(11)	C(96)-C(61)-C(97)	115(2)
C(96)-C(61)-C(62)	122(2)	C(97)-C(61)-C(62)	123(2)
C(96)-C(61)-Cs(2)	75.4(8)	C(97)-C(61)-Cs(2)	92.0(9)
C(62)-C(61)-Cs(2)	108.3(11)	C(61)-C(62)-C(63)	115(2)
C(98)-C(63)-C(64)	120(2)	C(98)-C(63)-C(62)	119(2)
C(64)-C(63)-C(62)	121(2)	C(65)-C(64)-C(63)	120(2)
C(64)-C(65)-C(66)	124(2)	C(67)-C(66)-C(65)	121(2)
C(66)-C(67)-C(98)	116(2)	C(66)-C(67)-C(68)	124(2)
C(98)-C(67)-C(68)	120(2)	C(67)-C(68)-C(69)	108(2)
C(70)-C(69)-C(99)	116(2)	C(70)-C(69)-C(68)	122(2)
C(99)-C(69)-C(68)	121(2)	C(71)-C(70)-C(69)	120(2)
C(70)-C(71)-C(72)	123(2)	C(73)-C(72)-C(71)	122(2)
C(72)-C(73)-C(99)	118(2)	C(72)-C(73)-C(74)	124(2)
C(99)-C(73)-C(74)	118(2)	C(73)-C(74)-C(75)	110.2(14)
C(76)-C(75)-C(100)	122(2)	C(76)-C(75)-C(74)	124(2)
C(100)-C(75)-C(74)	114(2)	C(82)-C(75)-C(101)	118(2)
C(82)-C(75)-C(80)	124(2)	C(101)-C(75)-C(80)	118(2)
C(75)-C(76)-C(77)	120(2)	C(76)-C(77)-C(78)	120(2)
C(76)-C(77)-Cs(2)	81.9(11)	C(78)-C(77)-Cs(2)	80.1(12)
C(77)-C(78)-C(79)	122(2)	C(78)-C(79)-C(100)	116(2)
C(78)-C(79)-C(80)	124(2)	C(100)-C(79)-C(80)	120(2)
C(75)-C(80)-C(79)	113(2)	C(84)-C(81)-C(101)	123(2)
C(84)-C(81)-C(86)	119(2)	C(101)-C(81)-C(86)	119(2)
C(75)-C(82)-C(83)	123(2)	C(84)-C(83)-C(82)	119(2)
C(81)-C(84)-C(83)	121(2)	C(87)-C(85)-C(89)	120(2)
C(87)-C(86)-C(81)	115(2)	C(102)-C(87)-C(85)	117(2)
C(102)-C(87)-C(86)	124(2)	C(85)-C(87)-C(86)	119(2)
C(90)-C(89)-C(85)	120(2)	C(89)-C(90)-C(91)	122(2)
C(90)-C(91)-C(102)	118(2)	C(90)-C(91)-C(92)	120(2)
C(102)-C(91)-C(92)	122(2)	C(93)-C(92)-C(91)	114(2)
C(94)-C(93)-C(97)	116(2)	C(94)-C(93)-C(92)	122(2)
C(97)-C(93)-C(92)	122(2)	C(95)-C(94)-C(93)	124(2)
C(94)-C(95)-C(96)	116(2)	C(61)-C(96)-C(95)	125(2)
C(61)-C(96)-Cs(2)	84.1(9)	C(95)-C(96)-Cs(2)	86.9(11)
O(11)-C(97)-C(93)	121(2)	O(11)-C(97)-C(61)	113(2)
C(93)-C(97)-C(61)	125(2)	C(63)-C(98)-O(12)	120(2)
C(63)-C(98)-C(67)	120(2)	O(12)-C(98)-C(67)	119.9(14)
O(13)-C(99)-C(69)	119(2)	O(13)-C(99)-C(73)	119(2)
C(69)-C(99)-C(73)	122(2)	O(14)-C(100)-C(75)	123(2)
O(14)-C(100)-C(79)	118(2)	C(75)-C(100)-C(79)	119(2)
O(15)-C(101)-C(81)	127(2)	O(15)-C(101)-C(75)	116.7(13)
C(81)-C(101)-C(75)	116(2)	C(87)-C(102)-C(91)	123(2)
C(87)-C(102)-O(16)	121(2)	C(91)-C(102)-O(16)	115.6(14)
O(11)-C(103)-C(104)	113.6(14)	C(105)-C(104)-C(103)	132(2)
O(14)-C(106)-C(107)	110(2)	C(108)-C(107)-C(106)	137(3)
O(15)-C(109)-C(110)	99.9(13)	O(20)-C(110)-C(109)	96.1(14)

O(20)-C(110)-Cs(2)	46.5(9)	C(109)-C(110)-Cs(2)	94.4(11)
O(20)-C(111)-C(112)	113(2)	O(20)-C(111)-Cs(2)	55.9(11)
C(112)-C(111)-Cs(2)	92.7(12)	O(19)-C(112)-C(111)	107(2)
O(19)-C(113)-C(114)	112(2)	O(13)-C(114)-C(113)	108(2)
O(16)-C(115)-C(116)	104.2(11)	O(17)-C(116)-C(115)	108.6(13)
C(118)-C(117)-O(17)	119(2)	C(117)-C(118)-O(18)	117(2)
O(18)-C(119)-C(120)	112(2)	O(12)-C(120)-C(119)	110(2)
Cl(3)-C(121)-Cl(1)	116(2)	Cl(3)-C(121)-Cl(2)	110(2)
Cl(1)-C(121)-Cl(2)	107.6(13)	Cl(5)-C(122)-Cl(6)	114.1(13)
Cl(5)-C(122)-Cl(4)	109.2(13)	Cl(6)-C(122)-Cl(4)	110.5(12)
C(172)-C(178)-C(176)	110(2)	C(172)-C(178)-B(2)	126(2)
C(176)-C(178)-B(2)	123(2)	C(168)-C(177)-C(162)	120(2)
C(168)-C(177)-B(2)	119(2)	C(162)-C(177)-B(2)	121(2)
C(169)-C(176)-C(178)	130(2)	C(175)-C(153)-C(153)	111(2)
C(175)-C(153)-B(2)	127(2)	C(153)-C(153)-B(2)	122(2)
C(161)-C(156)-C(157)	121(2)	C(156)-C(161)-C(160)	112(2)
C(156)-C(161)-B(2)	128(2)	C(160)-C(161)-B(2)	120(2)
C(177)-C(168)-C(167)	117(2)	C(159)-C(160)-C(161)	128(2)
C(163)-C(162)-C(177)	120(2)	C(164)-C(167)-C(168)	124(2)
C(153)-C(175)-C(177)	122(2)	C(158)-C(157)-C(156)	124(2)
C(162)-C(163)-C(164)	119(2)	C(169)-C(170)-C(154)	122(2)
C(153)-B(2)-C(161)	111(2)	C(153)-B(2)-C(178)	110(2)
C(161)-B(2)-C(178)	109(2)	C(153)-B(2)-C(177)	111(2)
C(161)-B(2)-C(177)	112(2)	C(178)-B(2)-C(177)	103(2)
C(170)-C(154)-C(172)	118(2)	C(178)-C(172)-C(154)	124(2)
C(170)-C(169)-C(176)	117(2)	C(160)-C(159)-C(158)	116(2)
C(150)-C(177)-C(175)	123(3)	C(167)-C(164)-C(163)	120(2)
C(153)-C(153)-C(151)	121(2)	C(150)-C(151)-C(153)	119(2)
C(157)-C(158)-C(159)	119(2)	C(177)-C(150)-C(151)	123(3)
C(131)-C(149)-C(144)	127(2)	C(144)-C(128)-C(129)	118(2)
C(136)-C(137)-C(132)	110(2)	C(136)-C(137)-B(1)	119(2)
C(132)-C(137)-B(1)	131(2)	C(142)-C(143)-C(138)	118(2)
C(142)-C(143)-B(1)	125(2)	C(138)-C(143)-B(1)	117(2)
C(143)-C(142)-C(141)	116(2)	C(125)-C(147)-C(146)	118(2)
C(125)-C(147)-B(1)	122(2)	C(146)-C(147)-B(1)	119(2)
C(149)-C(144)-C(128)	117(2)	C(149)-C(144)-B(1)	125(2)
C(128)-C(144)-B(1)	119(2)	C(137)-C(136)-C(135)	127(2)
C(149)-C(131)-C(130)	115(2)	C(132)-C(133)-C(134)	116(2)
C(147)-C(123)-C(124)	116(2)	C(140)-C(141)-C(142)	125(2)
C(133)-C(132)-C(137)	129(2)	C(141)-C(140)-C(139)	116(2)
C(124)-C(125)-C(147)	123(2)	C(139)-C(138)-C(143)	123(2)
C(138)-C(139)-C(140)	121(2)	C(133)-C(134)-C(135)	118(2)
C(143)-B(1)-C(137)	110(2)	C(143)-B(1)-C(144)	114(2)
C(137)-B(1)-C(144)	110(2)	C(143)-B(1)-C(147)	110(2)
C(137)-B(1)-C(147)	107(2)	C(144)-B(1)-C(147)	106(2)
C(136)-C(135)-C(134)	120(3)	C(146)-C(147)-C(123)	119(2)
C(147)-C(146)-C(147)	125(2)	C(129)-C(130)-C(131)	121(2)
C(130)-C(129)-C(128)	122(2)	C(125)-C(124)-C(123)	119(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cs(1)	66	83	46	-2	2	18
O(1)	20	60	42	1	-2	-12
O(2)	85	29	40	10	14	2
O(3)	51	59	55	27	7	14
O(4)	48	52	39	-7	16	-7
O(5)	74	25	42	-1	1	0
O(6)	57	50	51	-1	1	11
C(57)	64	64	64	2	4	12
O(8)	79	79	79	2	5	14
O(9)	86	87	47	26	21	47
O(10)	75	75	75	2	4	14
C(1)	46	46	46	1	3	8
C(2)	59	59	59	2	4	11
C(3)	59	59	59	2	4	11
C(4)	51	51	51	2	3	9
C(5)	46	46	46	1	3	8
C(6)	44	44	44	1	3	8
C(7)	40	40	40	1	2	7
C(8)	43	43	43	1	3	8
C(9)	37	37	37	1	2	7
C(10)	63	63	63	2	4	11
C(11)	56	56	56	2	3	10
C(12)	58	58	58	2	3	11
C(13)	57	57	57	2	3	10
C(14)	63	63	63	2	4	11
C(15)	40	26	41	-14	5	-6
C(16)	55	55	55	2	3	10
C(17)	54	54	54	2	3	10
C(18)	54	54	54	2	3	10
C(25)	43	43	43	1	3	8
C(19)	33	33	33	1	2	6
C(20)	63	63	63	2	4	11
C(21)	51	51	51	2	3	9
C(22)	58	58	58	2	3	10
C(23)	58	58	58	2	3	10
C(24)	58	58	58	2	3	10
C(26)	44	44	44	1	3	8
C(27)	47	47	47	1	3	9
C(28)	64	64	64	2	4	12
C(29)	63	63	63	2	4	11
C(30)	55	55	55	2	3	10
C(31)	37	37	37	1	2	7
C(32)	60	60	60	2	4	11
C(33)	47	47	47	1	3	8
C(34)	96	96	96	3	6	17
C(35)	42	42	42	1	3	8
C(36)	47	47	47	1	3	9
C(37)	36	36	36	1	2	7
C(38)	29	39	54	-23	-4	0
C(39)	44	44	44	1	3	8
C(40)	47	47	47	1	3	8
C(41)	45	45	45	1	3	8

C(42)	54	54	54	2	3	10
C(43)	92	92	92	3	6	17
C(44)	66	66	66	2	4	12
C(45)	88	88	88	3	5	16
C(46)	64	64	64	2	4	11
C(49)	69	69	69	2	4	12
C(47)	67	67	67	2	4	12
C(48)	60	60	60	2	4	11
C(50)	54	54	54	2	3	10
C(51)	66	66	66	2	4	12
C(52)	73	73	73	2	4	13
C(54)	53	53	53	2	3	10
C(55)	52	52	52	2	3	9
O(7)	69	69	69	2	4	13
C(56)	71	71	71	2	4	13
C(58)	111	111	111	3	7	20
C(59)	118	118	118	4	7	21
C(59)	58	58	58	2	3	11
C(60)	78	78	78	2	5	14
Cs(2)	68	82	46	-3	4	19
O(12)	44	42	46	-5	-15	15
O(13)	39	46	66	0	4	14
O(14)	43	45	65	16	0	-2
O(15)	52	37	47	-5	19	10
O(16)	44	35	55	1	-7	12
O(17)	204	46	93	-16	-109	51
O(18)	88	56	66	-29	-40	31
O(19)	75	60	55	-11	40	1
O(20)	68	68	68	2	4	12
C(61)	19	50	35	1	11	-1
C(62)	55	28	103	27	-18	-6
C(63)	53	44	106	2	-14	13
C(64)	42	77	65	29	11	12
C(65)	64	64	64	2	4	12
C(66)	42	59	51	-11	-3	16
C(67)	38	41	58	13	-3	25
C(68)	45	45	76	12	-28	-9
C(69)	39	21	82	22	-3	-5
C(70)	57	20	68	-6	-9	1
C(71)	90	18	76	-2	-1	16
C(72)	57	24	72	13	-14	-1
C(73)	40	25	64	8	8	8
C(74)	23	13	115	14	-14	1
C(75)	48	43	73	23	-24	2
C(75)	44	23	65	2	28	6
C(76)	42	44	52	-11	3	7
C(77)	43	52	56	-5	13	4
C(78)	44	40	47	-2	14	2
C(79)	36	58	62	7	-15	15
C(80)	49	14	82	-9	27	-3
C(81)	53	41	67	0	26	12
C(82)	38	48	71	5	11	9
C(83)	44	71	94	35	3	-1
C(84)	42	34	68	31	-1	9
C(85)	56	28	68	12	16	4
C(86)	50	46	55	8	10	2
C(87)	53	16	53	-8	2	-3
C(89)	69	47	84	26	14	8
C(90)	52	29	68	5	16	-10
C(91)	28	29	57	-8	1	-1
C(92)	23	36	110	3	6	7
C(93)	34	60	53	-20	4	13
C(94)	47	67	55	-15	-3	16

C(95)	32	76	73	-4	0	18
C(96)	31	40	44	-9	1	9
C(97)	27	54	49	-1	16	6
C(98)	29	40	33	12	4	17
C(99)	47	13	53	9	-2	-2
C(100)	29	33	40	2	-2	-4
C(101)	46	23	45	0	28	2
C(102)	53	22	34	12	5	9
C(103)	10	56	60	0	7	-13
C(104)	25	99	130	7	0	-37
C(105)	109	109	109	3	7	20
C(106)	10	55	78	6	4	-4
C(107)	44	91	134	-16	43	-29
C(108)	147	147	147	5	9	27
C(109)	69	69	69	2	4	12
C(110)	89	89	89	3	5	16
C(111)	87	87	87	3	5	16
C(112)	198	60	24	6	40	54
C(113)	88	88	88	3	5	16
C(114)	86	50	61	15	22	20
C(115)	55	55	55	2	3	10
C(116)	61	61	61	2	4	11
C(117)	52	52	52	2	3	9
C(118)	96	96	96	3	6	17
C(119)	74	53	42	-8	-10	12
C(120)	75	75	48	2	-20	21
C(121)	84	84	84	3	5	15
C(122)	76	76	76	2	5	14
Cl(1)	115	182	110	-46	54	-55
Cl(2)	103	113	132	33	45	23
Cl(3)	192	214	266	108	-104	28
Cl(4)	126	211	305	139	-54	35
Cl(5)	99	110	122	28	20	23
Cl(6)	94	99	91	1	12	1
C(178)	60	60	60	2	4	11
C(177)	47	47	47	1	3	9
C(176)	67	67	67	2	4	12
C(153)	56	56	56	2	3	10
C(156)	54	54	54	2	3	10
C(161)	49	49	49	2	3	9
C(168)	56	56	56	2	3	10
C(160)	45	45	45	1	3	8
C(162)	66	66	66	2	4	12
C(167)	62	62	62	2	4	11
C(175)	61	61	61	2	4	11
C(157)	62	62	62	2	4	11
C(163)	57	57	57	2	3	10
C(170)	62	62	62	2	4	11
B(2)	53	53	53	2	3	10
C(154)	74	74	74	2	4	13
C(172)	50	50	50	2	3	9
C(169)	58	58	58	2	3	10
C(159)	91	91	91	3	5	17
C(177)	71	71	71	2	4	13
C(164)	75	75	75	2	4	14
C(153)	69	69	69	2	4	12
C(151)	79	79	79	2	5	14
C(158)	62	62	62	2	4	11
C(150)	80	80	80	2	5	15
C(149)	53	53	53	2	3	10
C(128)	65	65	65	2	4	12
C(137)	50	50	50	2	3	9
C(143)	35	35	35	1	2	6

C(142)	52	52	52	2	3	9
C(147)	47	47	47	1	3	9
C(144)	44	44	44	1	3	8
C(136)	63	63	63	2	4	11
C(131)	54	54	54	2	3	10
C(133)	62	62	62	2	4	11
C(123)	61	61	61	2	4	11
C(141)	70	70	70	2	4	13
C(132)	43	43	43	1	3	8
C(140)	68	68	68	2	4	12
C(125)	59	59	59	2	4	11
C(138)	76	76	76	2	5	14
C(139)	71	71	71	2	4	13
C(134)	68	68	68	2	4	12
B(1)	45	45	45	1	3	8
C(135)	91	91	91	3	5	16
C(147)	64	64	64	2	4	12
C(146)	63	63	63	2	4	11
C(130)	70	70	70	2	4	13
C(129)	58	58	58	2	3	11
C(124)	83	83	83	3	5	15

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	6887(15)	4459(13)	8586(13)	71
H(2B)	7108(15)	4631(13)	7714(13)	71
H(4A)	6139(14)	5459(11)	7007(11)	62
H(5A)	4781(13)	6135(12)	6933(11)	55
H(6A)	3601(13)	5885(10)	7807(9)	53
H(8A)	3453(13)	4487(11)	9387(10)	51
H(8B)	3071(13)	5295(11)	9122(10)	51
H(10A)	1901(16)	5114(13)	7780(12)	75
H(11A)	664(15)	4296(12)	7076(12)	67
H(12A)	238(15)	2905(12)	7350(12)	70
H(14A)	976(16)	1918(13)	9035(13)	76
H(14B)	300(16)	1771(13)	8262(13)	76
H(16A)	2316(16)	2215(13)	7384(12)	66
H(17A)	3226(14)	1343(12)	6823(12)	65
H(18A)	3144(14)	-31(11)	7312(11)	64
H(20A)	1459(14)	-1125(12)	8089(12)	76
H(20B)	1882(14)	-809(12)	8926(12)	76
H(22A)	2148(15)	-2061(12)	7435(11)	69
H(23A)	3499(15)	-2663(12)	7198(12)	69
H(24A)	4891(16)	-2364(13)	8056(11)	69
H(26A)	5673(12)	-1758(11)	9238(9)	53
H(26B)	5354(12)	-964(11)	9594(9)	53
H(28A)	6585(16)	-1637(14)	8040(13)	77
H(29A)	7733(16)	-883(12)	7316(12)	75
H(30A)	8134(13)	658(9)	7540(10)	66
H(32A)	8227(16)	1768(12)	8488(12)	72
H(32B)	7462(16)	1683(12)	9141(12)	72
H(34A)	6116(20)	1133(16)	7273(16)	115
H(35A)	5089(13)	2009(11)	6793(11)	51
H(36A)	5345(14)	3388(11)	7024(11)	57
H(43A)	8562(18)	3798(14)	8032(15)	111
H(43B)	8997(18)	3125(14)	8521(15)	111
H(44A)	9856(14)	4546(12)	8923(10)	80
H(45A)	8267(17)	4212(13)	9951(11)	106
H(45B)	9248(17)	4911(13)	10124(11)	106
H(46A)	-90(13)	-305(11)	8223(12)	76
H(46B)	-536(13)	326(11)	8747(12)	76
H(47A)	4113(16)	-694(13)	10378(13)	83
H(47B)	3133(16)	-1245(13)	10018(13)	83
H(47C)	114(15)	-1087(12)	9531(11)	80
H(48A)	-1663(12)	-492(10)	9459(10)	71
H(48B)	-1426(12)	-1234(10)	10003(10)	71
H(50A)	2341(13)	-129(10)	10141(10)	65
H(50B)	2728(13)	-419(10)	10948(10)	65
H(51A)	3333(15)	857(12)	11757(12)	79
H(51B)	2438(15)	1042(12)	11223(12)	79
H(52A)	3991(15)	2247(13)	11749(13)	87
H(54A)	1426(11)	3068(9)	9893(9)	64
H(54B)	2363(11)	3720(9)	10182(9)	64
H(55A)	6684(14)	-73(11)	10318(11)	62
H(55B)	7297(14)	826(11)	10213(11)	62
H(56A)	5604(10)	1829(9)	11153(9)	83
H(56B)	5392(17)	495(14)	10767(14)	85

H(56C)	6355(17)	791(14)	11301(14)	85
H(58A)	5986(17)	2945(14)	11403(13)	134
H(58B)	6992(17)	3513(14)	11196(13)	134
H(59A)	5578(17)	4180(15)	10875(14)	142
H(59B)	1914(12)	2343(8)	10926(9)	70
H(60A)	5587(12)	5014(11)	9784(10)	93
H(62A)	5999(15)	5519(11)	5206(14)	77
H(62B)	6657(15)	5586(11)	4485(14)	77
H(64A)	6023(13)	6811(10)	6080(11)	73
H(65A)	6521(16)	8065(12)	6345(13)	77
H(66A)	7666(13)	8894(12)	5628(11)	60
H(68A)	8505(13)	8980(11)	4255(11)	70
H(68B)	8854(13)	8153(11)	3997(11)	70
H(70A)	9280(15)	9668(10)	5640(11)	59
H(71A)	10739(17)	10021(10)	6370(13)	73
H(72A)	11960(14)	9260(9)	6312(11)	63
H(74A)	12874(10)	8407(8)	5493(13)	61
H(74B)	12367(10)	8095(8)	4670(13)	61
H(76A)	10969(13)	7222(10)	6175(10)	56
H(77A)	10990(13)	5969(11)	6739(12)	61
H(78A)	11819(14)	5038(11)	6167(11)	52
H(80A)	13247(13)	5321(9)	4578(12)	58
H(80B)	13958(13)	5505(9)	5332(12)	58
H(82A)	13976(13)	4410(11)	6215(13)	62
H(83A)	13577(15)	3015(14)	6492(14)	85
H(84A)	12214(13)	2195(10)	5849(11)	57
H(85A)	10689(14)	1462(10)	5892(11)	61
H(86A)	10763(14)	2774(12)	4295(11)	61
H(86B)	11146(14)	1980(12)	4590(11)	61
H(89A)	9364(16)	1135(13)	6685(14)	80
H(90A)	8049(14)	1806(10)	6552(12)	61
H(92A)	7338(12)	2776(11)	5033(14)	67
H(92B)	7120(12)	2643(11)	5913(14)	67
H(94A)	8926(15)	3930(13)	6501(12)	67
H(95A)	9099(14)	5337(14)	6834(14)	72
H(96A)	8008(11)	6092(9)	6211(9)	46
H(10B)	5145(9)	4019(9)	5127(10)	53
H(10C)	5649(9)	3323(9)	5505(10)	53
H(10D)	4338(13)	2898(15)	4431(14)	109
H(10I)	5981(21)	2662(15)	3893(14)	131
H(10K)	4857(21)	2250(15)	3619(14)	131
H(10E)	14680(9)	7105(10)	5042(11)	59
H(10F)	14106(9)	7801(10)	5313(11)	59
H(10J)	14081(15)	8101(15)	3900(16)	113
H(10G)	15929(26)	8166(19)	4292(20)	177
H(10H)	15403(26)	8572(19)	3571(20)	177
H(10N)	11436(14)	3603(11)	3275(11)	83
H(10O)	12578(14)	3885(11)	3516(11)	83
H(11B)	12169(16)	5409(11)	3497(12)	106
H(11C)	12255(16)	5008(11)	2656(12)	106
H(11D)	10103(17)	5024(15)	1939(15)	104
H(11E)	11808(21)	6253(12)	2463(10)	107
H(11F)	10953(21)	6479(12)	1904(10)	107
H(11G)	12016(20)	7463(14)	3142(14)	106
H(11H)	11215(16)	8535(12)	3620(12)	77
H(11I)	10216(16)	8047(12)	3218(12)	77
H(11J)	9262(10)	2426(8)	3744(7)	66
H(11K)	9765(10)	3335(8)	3530(7)	66
H(11L)	8083(10)	2856(9)	2912(8)	73
H(11M)	7695(10)	2960(9)	3749(8)	73
H(11N)	6950(10)	3782(8)	2707(7)	63
H(11O)	7089(15)	5091(12)	2170(12)	116
H(11P)	7766(16)	6442(12)	2312(11)	69

H(11Q)	8774(16)	6766(12)	2788(11)	69
H(12B)	7596(17)	7383(13)	3305(11)	79
H(12C)	6909(17)	6515(13)	3398(11)	79
H(12D)	5239(16)	-548(13)	5212(13)	101
H(12E)	8886(15)	7973(12)	8289(12)	91
H(17B)	4573(16)	6808(14)	12770(12)	80
H(15A)	2684(15)	5311(12)	11120(11)	65
H(16B)	4662(14)	6675(11)	9546(12)	67
H(16D)	3493(12)	7397(10)	10000(9)	54
H(16E)	6267(15)	6261(10)	11526(13)	80
H(16F)	6086(16)	6599(13)	8863(14)	75
H(17C)	5947(16)	8018(13)	11379(12)	73
H(15B)	1178(15)	5116(12)	10367(12)	74
H(16G)	7653(15)	6277(11)	10799(12)	69
H(17D)	4792(12)	4660(10)	13595(9)	74
H(15C)	4608(15)	4080(13)	12348(11)	88
H(17E)	4263(13)	4916(11)	11287(11)	60
H(16H)	4769(13)	6032(9)	13802(10)	69
H(17F)	6015(16)	9355(13)	11926(12)	85
H(16I)	7533(16)	6555(14)	9454(14)	90
H(15F)	3124(16)	7524(13)	11786(13)	82
H(15G)	3363(14)	8912(13)	12326(12)	94
H(15H)	831(14)	5972(11)	9504(9)	74
H(15D)	4903(13)	9709(13)	12382(12)	96
H(14C)	1530(15)	1954(12)	2501(11)	63
H(12F)	589(15)	-61(13)	3728(11)	78
H(14D)	-343(14)	486(12)	795(10)	62
H(13A)	-2047(15)	778(10)	2119(12)	75
H(13B)	2974(13)	2254(11)	3207(11)	64
H(13C)	-1891(16)	699(13)	4783(14)	74
H(12G)	-410(11)	-2463(11)	1201(10)	73
H(14E)	-558(14)	1496(10)	-138(12)	84
H(13D)	-559(12)	661(10)	4085(10)	51
H(14F)	-531(13)	2870(10)	183(10)	82
H(12H)	-1705(16)	-681(13)	2324(12)	71
H(13E)	-183(18)	2347(14)	2406(14)	91
H(13F)	-192(14)	3290(13)	1486(10)	85
H(13G)	-3380(15)	922(13)	4084(13)	82
H(13I)	-3405(21)	895(15)	2728(16)	109
H(14G)	1123(12)	-1501(11)	1297(11)	76
H(14H)	1181(15)	-231(12)	1859(12)	75
H(13J)	3238(15)	1326(12)	4267(10)	83
H(12I)	2135(14)	184(12)	4433(11)	70
H(12K)	-1912(17)	-1960(14)	1752(13)	99