

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

Compound 1

	x	y	z	U(eq)
Zn(1)	7909(1)	7909(1)	0	52(1)
N(1)	8194(3)	7263(3)	-1301(2)	55(1)
C(1)	7665(4)	7276(4)	-2052(4)	68(1)
O(1)	6785(3)	6785(3)	0	91(2)
N(2)	9186(3)	7338(3)	219(2)	47(1)
C(2)	7885(6)	6744(5)	-2788(4)	81(2)
C(3)	8697(6)	6179(5)	-2752(3)	90(2)
C(4)	9235(4)	6131(4)	-2003(3)	70(1)
C(5)	8970(3)	6701(3)	-1277(3)	49(1)
C(6)	9528(3)	6743(3)	-442(3)	43(1)
C(7)	10356(3)	6264(3)	-195(3)	51(1)
C(8)	10577(3)	6585(3)	678(3)	48(1)
C(9)	11296(3)	6389(4)	1295(4)	62(1)
C(10)	11302(4)	6874(5)	2093(4)	72(2)
C(11)	10583(4)	7538(4)	2303(3)	67(1)
C(12)	9856(4)	7751(4)	1725(3)	60(1)
C(13)	9839(3)	7266(3)	904(3)	47(1)
C(14)	7003(14)	5798(9)	132(13)	115(5)
C(15)	6210(20)	5541(16)	-1210(20)	83(9)
C(16)	6320(70)	4860(110)	-120(80)	480(120)
C(17)	5790(50)	5410(30)	190(60)	170(30)
C(18)	6100(120)	5380(140)	-700(120)	730(80)

Compound 2

	x	y	z	U(eq)
N(1)	1663(6)	9080(4)	6185(4)	42(2)
B(1)	2041(9)	8998(6)	7418(7)	46(2)
C(1)	2108(8)	9700(5)	5643(6)	54(2)
N(2)	1182(6)	8134(4)	7408(4)	41(2)
C(2)	1727(9)	9690(6)	4618(6)	61(3)
C(3)	872(9)	9030(6)	4137(6)	64(3)
C(4)	398(8)	8387(5)	4686(6)	54(2)
C(5)	805(8)	8425(5)	5726(6)	46(2)
C(6)	463(8)	7847(5)	6473(5)	43(2)
C(7)	-281(8)	7102(5)	6541(6)	57(2)
C(8)	-28(8)	6909(5)	7589(6)	49(2)
C(9)	-455(8)	6249(5)	8151(7)	68(3)
C(10)	38(10)	6252(6)	9183(7)	71(3)
C(11)	943(9)	6906(6)	9664(6)	63(2)

C(12)	1371(8)	7558(5)	9145(6)	56(2)
C(13)	890(7)	7556(5)	8104(6)	46(2)
C(14)	3795(8)	8867(5)	7834(5)	42(2)
C(15)	4727(8)	8473(5)	7288(6)	56(2)
C(16)	6195(9)	8294(6)	7697(6)	79(3)
C(17)	6796(9)	8501(5)	8681(7)	69(3)
C(18)	5934(9)	8905(5)	9236(6)	67(3)
C(19)	4465(8)	9092(5)	8814(6)	60(2)
C(20)	1328(8)	9788(5)	7883(5)	40(2)
C(21)	1978(9)	10573(5)	8011(6)	60(2)
C(22)	1378(10)	11264(6)	8396(6)	74(3)
C(23)	55(11)	11153(6)	8708(6)	74(3)
C(24)	-650(10)	10382(6)	8607(6)	78(3)
C(25)	-22(9)	9708(5)	8193(5)	59(2)

Compound 3

	x	y	z	U(eq)
N(4)	4499(2)	2113(3)	1442(3)	51(1)
N(3)	3817(2)	1395(3)	2674(3)	55(1)
C(19)	4310(2)	1183(4)	1185(4)	51(1)
C(26)	4822(2)	2439(4)	658(4)	53(1)
C(18)	3931(2)	745(4)	1921(4)	50(1)
C(20)	4504(2)	907(4)	262(4)	61(2)
C(14)	3487(2)	1110(5)	3438(4)	72(2)
C(21)	4842(2)	1706(4)	-90(4)	57(2)
C(17)	3702(2)	-195(4)	1937(5)	70(2)
C(23)	5412(3)	2797(6)	-1077(4)	83(2)
C(22)	5142(2)	1912(5)	-975(4)	79(2)
C(15)	3259(2)	179(5)	3495(5)	78(2)
C(25)	5103(2)	3343(4)	538(4)	68(2)
C(16)	3364(3)	-477(5)	2729(6)	85(2)
C(24)	5400(2)	3521(5)	-330(5)	80(2)
Be(2)	4195(4)	2500	2500	54(3)
N(2)	7254(2)	6019(3)	1207(3)	44(1)
N(1)	6852(2)	4772(3)	2389(3)	51(1)
C(13)	7429(2)	6819(3)	648(3)	45(1)
C(8)	6979(2)	7530(4)	589(4)	52(1)
C(6)	6696(2)	6228(4)	1486(4)	47(1)
C(12)	7950(2)	6989(4)	179(4)	57(1)
C(7)	6515(2)	7118(4)	1123(4)	58(1)
C(5)	6457(2)	5441(4)	2115(4)	51(1)
C(1)	6695(2)	3989(4)	2954(4)	67(2)
C(4)	5891(2)	5336(4)	2407(4)	67(2)
Be(1)	7500	5000	1773(7)	48(2)
C(2)	6134(3)	3858(5)	3251(4)	81(2)
C(10)	7587(3)	8542(4)	-429(5)	87(2)
C(9)	7076(3)	8405(4)	44(4)	76(2)

C(11)	8018(3)	7835(4)	-351(4)	77(2)
C(3)	5732(3)	4538(5)	2965(5)	81(2)

Compound 4

	x	y	z	U(eq)
N(1)	739(3)	6545(3)	3157(2)	46(1)
N(3)	-3365(4)	4267(3)	3601(2)	62(1)
N(2)	-960(3)	5143(2)	3514(2)	46(1)
C(24)	-1872(5)	4283(3)	3703(2)	50(1)
C(17)	1516(4)	5707(4)	3490(2)	55(1)
C(20)	-984(6)	3412(3)	4026(2)	64(1)
C(18)	496(4)	4831(3)	3703(2)	52(1)
C(7)	-2016(4)	7200(3)	3462(2)	45(1)
C(1)	-1361(4)	5966(3)	2180(2)	47(1)
C(2)	-290(5)	5413(3)	1753(2)	66(1)
C(16)	3064(5)	5800(5)	3588(2)	77(1)
C(12)	-2363(5)	7130(3)	4226(2)	60(1)
C(8)	-2545(4)	8164(3)	3094(2)	59(1)
C(14)	2943(5)	7613(5)	3028(2)	77(1)
C(22)	-3238(7)	2414(4)	4166(3)	95(2)
C(13)	1421(5)	7486(4)	2928(2)	61(1)
C(10)	-3696(6)	8860(4)	4219(3)	88(2)
B(1)	-1042(5)	6246(3)	3057(2)	42(1)
C(19)	517(6)	3788(4)	4012(2)	69(1)
C(11)	-3209(5)	7934(4)	4595(3)	76(1)
C(3)	-550(7)	5056(4)	1023(3)	81(2)
C(23)	-4018(6)	3324(4)	3838(2)	78(1)
C(6)	-2726(5)	6144(3)	1826(2)	72(1)
C(15)	3743(5)	6767(5)	3347(3)	88(2)
C(5)	-2968(7)	5823(4)	1087(3)	94(2)
C(21)	-1745(7)	2459(4)	4265(3)	85(2)
C(9)	-3368(5)	8981(3)	3471(3)	77(1)
C(4)	-1886(8)	5275(4)	690(3)	97(2)

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [°]

Compound 1

Zn(1)-N(2)	1.968(3)
Zn(1)-N(2)#1	1.968(3)
Zn(1)-N(1)	2.189(4)
Zn(1)-N(1)#1	2.189(4)
Zn(1)-O(1)	2.204(6)
N(1)-C(5)	1.330(6)
N(1)-C(1)	1.347(6)
C(1)-C(2)	1.365(8)
O(1)-C(14)	1.417(13)
O(1)-C(14)#1	1.417(13)
N(2)-C(6)	1.376(5)
N(2)-C(13)	1.376(5)
C(2)-C(3)	1.374(10)
C(3)-C(4)	1.353(8)
C(4)-C(5)	1.396(6)
C(5)-C(6)	1.477(6)
C(6)-C(7)	1.377(6)
C(7)-C(8)	1.420(7)
C(8)-C(9)	1.388(7)
C(8)-C(13)	1.435(6)
C(9)-C(10)	1.377(8)
C(10)-C(11)	1.394(9)
C(11)-C(12)	1.365(7)
C(12)-C(13)	1.406(6)
C(14)-C(16)	1.65(7)
C(14)-C(17)	1.77(6)
C(14)-C(18)	1.86(10)
C(15)-C(18)	0.81(16)
C(15)-C(16)	1.90(17)
C(15)-C(17)#1	1.92(10)
C(16)-C(17)	1.16(12)
C(16)-C(18)	1.2(2)
C(16)-C(17)#1	1.81(19)
C(17)-C(17)#1	0.94(12)
C(17)-C(18)#1	1.4(3)
C(17)-C(18)	1.4(2)
C(17)-C(16)#1	1.81(19)
C(17)-C(15)#1	1.92(10)
C(18)-C(17)#1	1.4(3)
N(2)-Zn(1)-N(2)#1	138.8(2)
N(2)-Zn(1)-N(1)	79.75(14)
N(2)#1-Zn(1)-N(1)	106.96(13)
N(2)-Zn(1)-N(1)#1	106.96(13)
N(2)#1-Zn(1)-N(1)#1	79.75(14)
N(1)-Zn(1)-N(1)#1	161.4(2)
N(2)-Zn(1)-O(1)	110.60(11)
N(2)#1-Zn(1)-O(1)	110.60(11)
N(1)-Zn(1)-O(1)	80.69(11)
N(1)#1-Zn(1)-O(1)	80.69(11)
C(5)-N(1)-C(1)	118.2(4)
C(5)-N(1)-Zn(1)	111.2(3)
C(1)-N(1)-Zn(1)	130.2(3)
N(1)-C(1)-C(2)	123.4(5)

C(14)-O(1)-C(14)#1	115.6(16)
C(14)-O(1)-Zn(1)	122.2(8)
C(14)#1-O(1)-Zn(1)	122.2(8)
C(6)-N(2)-C(13)	105.7(3)
C(6)-N(2)-Zn(1)	115.6(3)
C(13)-N(2)-Zn(1)	138.3(3)
C(1)-C(2)-C(3)	117.4(5)
C(4)-C(3)-C(2)	120.8(5)
C(3)-C(4)-C(5)	118.6(5)
N(1)-C(5)-C(4)	121.5(5)
N(1)-C(5)-C(6)	115.1(4)
C(4)-C(5)-C(6)	123.4(4)
N(2)-C(6)-C(7)	112.5(4)
N(2)-C(6)-C(5)	117.2(3)
C(7)-C(6)-C(5)	130.3(4)
C(6)-C(7)-C(8)	106.2(4)
C(9)-C(8)-C(7)	135.4(4)
C(9)-C(8)-C(13)	118.9(4)
C(7)-C(8)-C(13)	105.7(4)
C(10)-C(9)-C(8)	119.5(5)
C(9)-C(10)-C(11)	121.1(5)
C(12)-C(11)-C(10)	121.8(5)
C(11)-C(12)-C(13)	118.0(5)
N(2)-C(13)-C(12)	129.4(4)
N(2)-C(13)-C(8)	109.9(4)
C(12)-C(13)-C(8)	120.7(4)
O(1)-C(14)-C(16)	127(6)
O(1)-C(14)-C(17)	95.7(18)
O(1)-C(14)-C(18)	94(6)
C(18)-C(16)-C(14)	80(10)
C(14)-C(16)-C(17)#1	82(7)
C(17)-C(16)-C(15)	88(10)
C(14)-C(16)-C(15)	81(6)
C(17)#1-C(17)-C(16)	118(10)
C(18)#1-C(17)-C(18)	133(10)
C(17)#1-C(17)-C(14)	109(5)
C(18)#1-C(17)-C(14)	102(6)
C(18)-C(17)-C(16)#1	100(10)
C(14)-C(17)-C(16)#1	117(3)
C(17)#1-C(17)-C(15)#1	94(10)
C(14)-C(17)-C(15)#1	92(3)
C(15)-C(18)-C(17)#1	123(10)
C(16)-C(18)-C(17)#1	91(10)
C(15)-C(18)-C(14)	115(7)
C(17)#1-C(18)-C(14)	88(10)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 y,x,-z

Compound 2

N(1)-C(1)	1.329(8)
N(1)-C(5)	1.358(8)
N(1)-B(1)	1.633(9)
B(1)-N(2)	1.561(9)
B(1)-C(20)	1.587(10)
B(1)-C(14)	1.602(10)
C(1)-C(2)	1.353(8)
N(2)-C(6)	1.369(7)

N(2)-C(13)	1.370(8)
C(2)-C(3)	1.372(10)
C(3)-C(4)	1.374(9)
C(4)-C(5)	1.375(9)
C(5)-C(6)	1.437(9)
C(6)-C(7)	1.363(9)
C(7)-C(8)	1.417(9)
C(8)-C(9)	1.385(9)
C(8)-C(13)	1.401(9)
C(9)-C(10)	1.372(10)
C(10)-C(11)	1.387(10)
C(11)-C(12)	1.342(9)
C(12)-C(13)	1.381(9)
C(14)-C(19)	1.381(9)
C(14)-C(15)	1.389(9)
C(15)-C(16)	1.374(9)
C(16)-C(17)	1.365(9)
C(17)-C(18)	1.358(9)
C(18)-C(19)	1.380(9)
C(20)-C(21)	1.358(9)
C(20)-C(25)	1.398(8)
C(21)-C(22)	1.364(9)
C(22)-C(23)	1.381(10)
C(23)-C(24)	1.359(10)
C(24)-C(25)	1.374(9)

C(1)-N(1)-C(5)	120.9(7)
C(1)-N(1)-B(1)	126.6(7)
C(5)-N(1)-B(1)	112.5(6)
N(2)-B(1)-C(20)	115.1(6)
N(2)-B(1)-C(14)	111.2(6)
C(20)-B(1)-C(14)	115.4(7)
N(2)-B(1)-N(1)	93.5(6)
C(20)-B(1)-N(1)	109.1(6)
C(14)-B(1)-N(1)	110.3(6)
N(1)-C(1)-C(2)	120.9(8)
C(6)-N(2)-C(13)	106.9(6)
C(6)-N(2)-B(1)	115.7(6)
C(13)-N(2)-B(1)	137.3(7)
C(1)-C(2)-C(3)	119.3(8)
C(2)-C(3)-C(4)	120.6(8)
C(3)-C(4)-C(5)	118.1(8)
N(1)-C(5)-C(4)	120.2(7)
N(1)-C(5)-C(6)	110.1(7)
C(4)-C(5)-C(6)	129.6(8)
C(7)-C(6)-N(2)	111.5(7)
C(7)-C(6)-C(5)	140.5(8)
N(2)-C(6)-C(5)	107.9(7)
C(6)-C(7)-C(8)	105.8(7)
C(9)-C(8)-C(13)	118.4(8)
C(9)-C(8)-C(7)	134.4(9)
C(13)-C(8)-C(7)	107.2(7)
C(10)-C(9)-C(8)	118.9(8)
C(9)-C(10)-C(11)	120.9(8)
C(12)-C(11)-C(10)	121.8(8)
C(11)-C(12)-C(13)	117.7(8)
N(2)-C(13)-C(12)	129.1(8)
N(2)-C(13)-C(8)	108.6(7)

C(12)-C(13)-C(8)	122.3(8)
C(19)-C(14)-C(15)	115.0(7)
C(19)-C(14)-B(1)	120.9(7)
C(15)-C(14)-B(1)	123.9(7)
C(16)-C(15)-C(14)	122.7(8)
C(17)-C(16)-C(15)	120.2(8)
C(18)-C(17)-C(16)	119.1(8)
C(17)-C(18)-C(19)	120.3(8)
C(18)-C(19)-C(14)	122.6(7)
C(21)-C(20)-C(25)	115.9(8)
C(21)-C(20)-B(1)	122.9(7)
C(25)-C(20)-B(1)	121.2(7)
C(20)-C(21)-C(22)	124.0(8)
C(21)-C(22)-C(23)	118.1(9)
C(24)-C(23)-C(22)	120.8(9)
C(23)-C(24)-C(25)	119.0(8)
C(24)-C(25)-C(20)	122.1(8)

Compound 3

N(4)-C(26)	1.364(6)
N(4)-C(19)	1.373(5)
N(4)-Be(2)	1.665(5)
N(3)-C(14)	1.336(6)
N(3)-C(18)	1.359(6)
N(3)-Be(2)	1.747(6)
C(19)-C(20)	1.364(6)
C(19)-C(18)	1.449(7)
C(26)-C(25)	1.391(7)
C(26)-C(21)	1.405(6)
C(18)-C(17)	1.375(7)
C(20)-C(21)	1.416(7)
C(14)-C(15)	1.365(7)
C(21)-C(22)	1.402(7)
C(17)-C(16)	1.373(7)
C(23)-C(22)	1.355(8)
C(23)-C(24)	1.395(8)
C(15)-C(16)	1.373(8)
C(25)-C(24)	1.372(7)
Be(2)-N(4)#1	1.665(5)
Be(2)-N(3)#1	1.747(6)
N(2)-C(13)	1.373(5)
N(2)-C(6)	1.387(5)
N(2)-Be(1)	1.668(5)
N(1)-C(5)	1.343(6)
N(1)-C(1)	1.347(6)
N(1)-Be(1)	1.753(6)
C(13)-C(12)	1.389(6)
C(13)-C(8)	1.427(6)
C(8)-C(9)	1.402(7)
C(8)-C(7)	1.414(6)
C(6)-C(7)	1.359(6)
C(6)-C(5)	1.464(6)
C(12)-C(11)	1.349(6)
C(5)-C(4)	1.389(6)
C(1)-C(2)	1.383(7)
C(4)-C(3)	1.359(7)
Be(1)-N(2)#2	1.668(5)

Be(1)-N(1)#2	1.753(6)
C(2)-C(3)	1.368(7)
C(10)-C(9)	1.366(7)
C(10)-C(11)	1.391(7)
C(26)-N(4)-C(19)	106.3(4)
C(26)-N(4)-Be(2)	142.0(4)
C(19)-N(4)-Be(2)	111.0(4)
C(14)-N(3)-C(18)	119.6(5)
C(14)-N(3)-Be(2)	129.8(4)
C(18)-N(3)-Be(2)	110.5(4)
C(20)-C(19)-N(4)	111.5(5)
C(20)-C(19)-C(18)	134.9(5)
N(4)-C(19)-C(18)	113.5(4)
N(4)-C(26)-C(25)	129.1(5)
N(4)-C(26)-C(21)	109.7(5)
C(25)-C(26)-C(21)	121.1(5)
N(3)-C(18)-C(17)	120.3(5)
N(3)-C(18)-C(19)	111.1(4)
C(17)-C(18)-C(19)	128.6(5)
C(19)-C(20)-C(21)	106.2(5)
N(3)-C(14)-C(15)	122.1(6)
C(22)-C(21)-C(26)	118.4(6)
C(22)-C(21)-C(20)	135.2(5)
C(26)-C(21)-C(20)	106.2(5)
C(18)-C(17)-C(16)	119.4(6)
C(22)-C(23)-C(24)	122.3(6)
C(23)-C(22)-C(21)	119.5(6)
C(14)-C(15)-C(16)	118.7(6)
C(24)-C(25)-C(26)	119.3(6)
C(15)-C(16)-C(17)	119.9(6)
C(25)-C(24)-C(23)	119.4(6)
N(4)#1-Be(2)-N(4)	129.3(6)
N(4)#1-Be(2)-N(3)	111.75(19)
N(4)-Be(2)-N(3)	93.7(2)
N(4)#1-Be(2)-N(3)#1	93.7(2)
N(4)-Be(2)-N(3)#1	111.75(19)
N(3)-Be(2)-N(3)#1	119.0(6)
C(13)-N(2)-C(6)	105.6(4)
C(13)-N(2)-Be(1)	141.9(3)
C(6)-N(2)-Be(1)	111.8(4)
C(5)-N(1)-C(1)	119.3(4)
C(5)-N(1)-Be(1)	110.6(4)
C(1)-N(1)-Be(1)	129.5(4)
N(2)-C(13)-C(12)	129.6(4)
N(2)-C(13)-C(8)	109.6(4)
C(12)-C(13)-C(8)	120.8(5)
C(9)-C(8)-C(7)	135.7(5)
C(9)-C(8)-C(13)	118.2(5)
C(7)-C(8)-C(13)	106.1(4)
C(7)-C(6)-N(2)	112.2(4)
C(7)-C(6)-C(5)	136.3(5)
N(2)-C(6)-C(5)	111.6(4)
C(11)-C(12)-C(13)	118.7(5)
C(6)-C(7)-C(8)	106.6(4)
N(1)-C(5)-C(4)	120.9(5)
N(1)-C(5)-C(6)	112.2(4)
C(4)-C(5)-C(6)	126.9(5)

N(1)-C(1)-C(2)	121.3(6)
C(3)-C(4)-C(5)	119.7(6)
N(2)#2-Be(1)-N(2)	126.1(6)
N(2)#2-Be(1)-N(1)#2	93.29(19)
N(2)-Be(1)-N(1)#2	111.56(17)
N(2)#2-Be(1)-N(1)	111.56(17)
N(2)-Be(1)-N(1)	93.29(19)
N(1)#2-Be(1)-N(1)	124.1(6)
C(3)-C(2)-C(1)	119.2(6)
C(9)-C(10)-C(11)	120.6(6)
C(10)-C(9)-C(8)	119.6(5)
C(12)-C(11)-C(10)	122.0(5)
C(4)-C(3)-C(2)	119.6(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 $x, -y+1/2, -z+1/2$ #2 $-x+3/2, -y+1, z$

Compound 4.

N(1)-C(13)	1.343(5)
N(1)-C(17)	1.354(5)
N(1)-B(1)	1.637(5)
N(3)-C(23)	1.337(5)
N(3)-C(24)	1.344(5)
N(2)-C(24)	1.353(5)
N(2)-C(18)	1.392(5)
N(2)-B(1)	1.550(5)
C(24)-C(20)	1.428(5)
C(17)-C(16)	1.396(6)
C(17)-C(18)	1.438(6)
C(20)-C(21)	1.394(6)
C(20)-C(19)	1.412(7)
C(18)-C(19)	1.363(5)
C(7)-C(12)	1.391(5)
C(7)-C(8)	1.407(5)
C(7)-B(1)	1.604(5)
C(1)-C(2)	1.387(5)
C(1)-C(6)	1.385(5)
C(1)-B(1)	1.616(5)
C(2)-C(3)	1.381(6)
C(16)-C(15)	1.375(7)
C(12)-C(11)	1.386(5)
C(8)-C(9)	1.394(5)
C(14)-C(15)	1.361(7)
C(14)-C(13)	1.377(5)
C(22)-C(21)	1.344(7)
C(22)-C(23)	1.416(7)
C(10)-C(11)	1.364(6)
C(10)-C(9)	1.364(6)
C(3)-C(4)	1.355(7)
C(6)-C(5)	1.382(6)
C(5)-C(4)	1.362(7)
C(13)-N(1)-C(17)	121.4(3)
C(13)-N(1)-B(1)	126.2(3)
C(17)-N(1)-B(1)	112.4(3)
C(23)-N(3)-C(24)	113.6(4)
C(24)-N(2)-C(18)	107.3(3)

C(24)-N(2)-B(1)	138.4(3)
C(18)-N(2)-B(1)	113.4(3)
N(3)-C(24)-N(2)	124.9(4)
N(3)-C(24)-C(20)	126.3(4)
N(2)-C(24)-C(20)	108.7(4)
N(1)-C(17)-C(16)	120.1(4)
N(1)-C(17)-C(18)	109.3(3)
C(16)-C(17)-C(18)	130.6(4)
C(21)-C(20)-C(19)	136.7(5)
C(21)-C(20)-C(24)	116.7(5)
C(19)-C(20)-C(24)	106.6(4)
C(19)-C(18)-N(2)	110.8(4)
C(19)-C(18)-C(17)	139.8(4)
N(2)-C(18)-C(17)	109.4(3)
C(12)-C(7)-C(8)	115.3(3)
C(12)-C(7)-B(1)	120.9(3)
C(8)-C(7)-B(1)	123.8(3)
C(2)-C(1)-C(6)	115.5(4)
C(2)-C(1)-B(1)	120.2(3)
C(6)-C(1)-B(1)	124.0(4)
C(3)-C(2)-C(1)	122.9(4)
C(15)-C(16)-C(17)	117.6(5)
C(11)-C(12)-C(7)	122.5(4)
C(9)-C(8)-C(7)	121.9(4)
C(15)-C(14)-C(13)	119.2(5)
C(21)-C(22)-C(23)	120.6(5)
N(1)-C(13)-C(14)	120.0(5)
C(11)-C(10)-C(9)	119.5(5)
N(2)-B(1)-C(7)	113.4(3)
N(2)-B(1)-C(1)	109.6(3)
C(7)-B(1)-C(1)	118.9(3)
N(2)-B(1)-N(1)	94.8(3)
C(7)-B(1)-N(1)	108.7(3)
C(1)-B(1)-N(1)	108.6(3)
C(18)-C(19)-C(20)	106.6(4)
C(10)-C(11)-C(12)	120.5(4)
C(4)-C(3)-C(2)	119.7(5)
N(3)-C(23)-C(22)	124.3(5)
C(5)-C(6)-C(1)	121.6(5)
C(14)-C(15)-C(16)	121.6(4)
C(4)-C(5)-C(6)	120.8(5)
C(22)-C(21)-C(20)	118.4(5)
C(10)-C(9)-C(8)	120.3(4)
C(3)-C(4)-C(5)	119.4(5)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for SI3. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

Compound 1

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Zn(1)	56(1)	56(1)	42(1)	-2(1)	2(1)	21(1)
N(1)	60(2)	58(2)	45(2)	-5(2)	-4(2)	14(2)
C(1)	78(3)	70(3)	57(3)	-5(2)	-15(2)	14(3)
O(1)	86(2)	86(2)	101(4)	-6(3)	6(3)	-6(3)
N(2)	46(2)	53(2)	41(2)	-2(1)	2(1)	12(2)
C(2)	104(4)	88(4)	51(3)	-8(3)	-19(3)	16(4)
C(3)	134(6)	88(4)	47(3)	-30(3)	3(3)	7(4)
C(4)	87(4)	70(3)	54(3)	-19(3)	9(3)	12(3)
C(5)	56(2)	47(2)	44(2)	-6(2)	8(2)	6(2)
C(6)	41(2)	44(2)	44(2)	0(2)	6(2)	4(2)
C(7)	44(2)	48(2)	60(3)	1(2)	9(2)	5(2)
C(8)	42(2)	52(2)	51(2)	10(2)	7(2)	0(2)
C(9)	44(2)	75(3)	67(3)	19(3)	2(2)	5(2)
C(10)	58(3)	93(4)	66(3)	21(3)	-12(3)	-2(3)
C(11)	75(3)	79(3)	47(3)	6(2)	-8(2)	-13(3)
C(12)	67(3)	71(3)	42(2)	-1(2)	2(2)	-3(2)
C(13)	51(2)	51(2)	40(2)	7(2)	4(2)	2(2)
C(14)	132(13)	58(7)	153(15)	25(8)	2(13)	-18(8)
C(15)	69(15)	55(12)	120(20)	-29(15)	-62(15)	7(11)
C(16)	230(80)	700(200)	460(140)	-500(160)	260(100)	-340(120)
C(17)	260(90)	57(19)	200(80)	30(30)	30(60)	-50(40)
C(18)	520(80)	870(110)	800(200)	740(140)	-550(120)	-621

Compound 2.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
N(1)	40(4)	42(4)	44(4)	-1(4)	10(3)	-2(3)
B(1)	44(6)	46(6)	47(6)	4(5)	8(5)	5(5)
C(1)	52(5)	54(6)	59(6)	1(5)	20(5)	-6(5)
N(2)	51(4)	41(4)	31(4)	1(3)	9(3)	-1(3)
C(2)	57(6)	90(8)	39(6)	12(5)	16(4)	21(6)
C(3)	61(6)	86(7)	42(6)	6(6)	6(5)	18(6)
C(4)	57(6)	53(6)	49(6)	-10(5)	1(4)	9(5)
C(5)	36(5)	58(6)	42(6)	-3(5)	6(4)	6(4)
C(6)	38(5)	57(6)	32(5)	-1(4)	-2(4)	8(4)
C(7)	44(5)	55(6)	68(7)	-11(5)	5(4)	-19(5)
C(8)	38(5)	53(6)	57(6)	4(5)	9(4)	-1(4)
C(9)	51(6)	60(7)	100(8)	5(6)	28(6)	-14(5)
C(10)	73(7)	73(8)	75(7)	25(6)	36(6)	5(6)
C(11)	68(6)	63(7)	59(6)	13(6)	14(5)	11(5)
C(12)	74(6)	48(6)	50(6)	4(5)	22(5)	0(5)
C(13)	29(5)	61(6)	51(6)	4(5)	14(4)	3(4)
C(14)	37(5)	48(5)	43(5)	-3(4)	10(4)	-4(4)
C(15)	40(5)	81(6)	46(5)	-9(5)	7(4)	-13(5)
C(16)	47(6)	127(9)	65(7)	-12(6)	14(5)	-1(6)
C(17)	37(5)	86(7)	82(7)	12(6)	10(5)	-5(5)
C(18)	57(6)	88(7)	44(6)	-11(5)	-14(5)	-2(6)
C(19)	47(6)	74(7)	56(6)	-3(5)	3(4)	10(5)
C(20)	40(5)	46(5)	27(4)	-1(4)	-8(4)	2(4)
C(21)	49(6)	48(5)	78(7)	-15(5)	-1(5)	-7(5)

C(22)	76(7)	71(7)	69(7)	-16(6)	1(5)	-2(6)
C(23)	105(9)	67(7)	47(6)	-15(6)	11(6)	28(7)
C(24)	83(7)	72(7)	92(7)	3(7)	52(6)	16(6)
C(25)	64(6)	53(6)	68(6)	4(5)	29(5)	0(5)

Compound 3

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
N(4)	56(3)	50(3)	48(3)	-17(2)	-3(2)	4(2)
N(3)	59(3)	59(3)	46(3)	-20(2)	-3(2)	2(2)
C(19)	48(3)	51(3)	54(4)	-22(3)	-18(3)	11(3)
C(26)	49(3)	61(4)	47(3)	-9(3)	2(3)	4(3)
C(18)	43(3)	49(3)	58(3)	-11(3)	-12(3)	5(3)
C(20)	55(3)	65(4)	62(4)	-32(3)	-10(3)	16(3)
C(14)	76(4)	82(5)	57(4)	-10(3)	3(3)	-2(4)
C(21)	46(3)	83(4)	43(3)	-23(3)	-5(3)	23(3)
C(17)	69(4)	59(4)	81(4)	-18(3)	-4(4)	-9(3)
C(23)	69(4)	125(6)	54(4)	-6(4)	10(3)	1(4)
C(22)	65(4)	110(5)	62(4)	-24(4)	-6(3)	2(4)
C(15)	75(4)	77(4)	81(5)	7(4)	-1(3)	-16(4)
C(25)	71(4)	78(4)	57(4)	-7(3)	4(3)	6(4)
C(16)	83(4)	60(4)	112(6)	0(4)	-14(4)	-18(4)
C(24)	75(4)	92(5)	72(5)	2(4)	-1(4)	-13(4)
Be(2)	61(6)	51(6)	51(6)	-12(5)	0	0
N(2)	36(2)	42(2)	55(3)	-6(2)	2(2)	6(2)
N(1)	50(3)	50(3)	52(3)	-1(2)	6(2)	-4(2)
C(13)	52(3)	36(3)	47(3)	-4(3)	-1(3)	-3(3)
C(8)	54(3)	50(3)	51(3)	-2(3)	-11(3)	14(3)
C(6)	37(3)	53(3)	50(3)	-8(3)	-2(3)	8(3)
C(12)	54(3)	47(3)	72(4)	7(3)	14(3)	6(3)
C(7)	40(3)	69(4)	66(4)	-7(3)	-1(3)	17(3)
C(5)	44(3)	62(4)	47(3)	-10(3)	3(3)	-7(3)
C(1)	72(4)	64(4)	66(4)	7(3)	0(3)	-12(3)
C(4)	48(3)	86(5)	68(4)	-10(3)	14(3)	2(3)
Be(1)	48(5)	43(5)	52(6)	0	0	-5(5)
C(2)	84(5)	90(5)	67(4)	0(4)	24(4)	-35(4)
C(10)	102(5)	68(4)	92(5)	26(4)	19(4)	10(4)
C(9)	90(5)	64(4)	73(4)	13(4)	-7(4)	29(4)
C(11)	75(4)	55(4)	100(5)	27(4)	30(4)	7(3)
C(3)	58(4)	113(6)	71(4)	-9(4)	15(4)	-28(4)

Compound 4

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
N(1)	38(2)	59(2)	42(2)	-1(2)	-2(1)	1(2)
N(3)	69(3)	52(2)	63(2)	2(2)	10(2)	-13(2)
N(2)	44(2)	46(2)	48(2)	7(2)	0(2)	6(2)
C(24)	68(3)	42(2)	39(2)	-2(2)	5(2)	6(2)
C(17)	48(2)	78(3)	39(2)	-4(2)	-1(2)	8(2)
C(20)	102(4)	47(2)	42(2)	4(2)	13(2)	14(3)
C(18)	58(3)	58(3)	41(2)	1(2)	-2(2)	23(2)
C(7)	32(2)	45(2)	58(2)	2(2)	-2(2)	-2(2)
C(1)	54(2)	39(2)	46(2)	8(2)	-5(2)	-6(2)
C(2)	71(3)	64(3)	62(3)	-11(2)	-3(2)	6(2)

C(16)	50(3)	118(4)	62(3)	-1(3)	-9(2)	19(3)
C(12)	61(3)	59(2)	59(3)	-2(2)	1(2)	0(2)
C(8)	50(2)	50(2)	77(3)	12(2)	6(2)	-3(2)
C(14)	49(3)	114(4)	67(3)	-5(3)	2(2)	-27(3)
C(22)	144(6)	56(3)	85(4)	8(3)	23(4)	-20(4)
C(13)	54(3)	73(3)	56(3)	-1(2)	6(2)	-14(2)
C(10)	85(4)	73(3)	105(4)	-18(3)	22(3)	9(3)
B(1)	35(2)	44(2)	48(2)	3(2)	-7(2)	-5(2)
C(19)	82(4)	70(3)	53(3)	11(2)	-1(2)	29(3)
C(11)	84(3)	78(3)	65(3)	-17(3)	7(3)	8(3)
C(3)	110(4)	77(3)	57(3)	-14(2)	7(3)	-17(3)
C(23)	90(4)	65(3)	78(3)	-3(3)	18(3)	-26(3)
C(6)	66(3)	78(3)	71(3)	-3(2)	-21(3)	-1(3)
C(15)	38(3)	146(5)	80(3)	-8(4)	2(2)	-9(3)
C(5)	97(4)	98(4)	86(4)	4(3)	-48(3)	-12(4)
C(21)	140(5)	47(3)	68(3)	13(2)	19(3)	14(3)
C(9)	68(3)	48(3)	114(4)	9(3)	8(3)	15(2)
C(4)	146(6)	86(4)	58(3)	-7(3)	-32(4)	-33(4)

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

Compound 1

	x	y	z	U(eq)
H(1)	7121	7668	-2069	82
H(2)	7500	6764	-3293	97
H(3)	8880	5825	-3249	108
H(4)	9769	5728	-1971	84
H(7)	10700	5820	-532	61
H(9)	11769	5934	1169	75
H(10)	11794	6757	2499	87
H(11)	10599	7844	2853	81
H(12)	9385	8202	1869	72

Compound 2.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	2688	10145	5972	65
H(2)	2041	10127	4244	73
H(3)	612	9018	3433	77
H(4)	-183	7938	4364	65
H(7)	-839	6785	6010	68
H(9)	-1067	5811	7833	82
H(10)	-237	5810	9566	85
H(11)	1262	6892	10365	76
H(12)	1971	7996	9475	67
H(15)	4341	8324	6616	67
H(16)	6781	8030	7304	95
H(17)	7783	8368	8967	83
H(18)	6335	9056	9905	80
H(19)	3904	9381	9205	72
H(21)	2887	10644	7824	72
H(22)	1847	11795	8447	89
H(23)	-360	11611	8991	89
H(24)	-1544	10311	8815	93
H(25)	-511	9183	8117	71

Compound 3

	x	y	z	U(eq)
H(20)	4429	313	-69	73
H(14)	3410	1561	3949	86
H(17)	3774	-636	1416	84
H(23)	5612	2925	-1664	99
H(22)	5155	1445	-1488	95
H(15)	3037	-8	4041	93
H(25)	5089	3821	1041	82
H(16)	3207	-1111	2746	102
H(24)	5591	4120	-419	96
H(12)	8245	6530	228	69

H(7)	6156	7400	1210	70
H(1)	6969	3528	3148	80
H(4)	5621	5809	2221	81
H(2)	6032	3314	3641	97
H(10)	7648	9113	-806	105
H(9)	6793	8889	4	91
H(11)	8364	7948	-673	92
H(3)	5352	4455	3152	97

Compound 4.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	645	5276	1967	79
H(16)	3616	5227	3810	92
H(12)	-2015	6519	4500	72
H(8)	-2340	8259	2583	70
H(14)	3418	8268	2879	92
H(22)	-3765	1780	4313	114
H(13)	866	8053	2702	73
H(10)	-4248	9404	4470	105
H(19)	1356	3400	4180	82
H(11)	-3446	7841	5102	91
H(3)	189	4668	762	98
H(23)	-5052	3262	3784	93
H(6)	-3497	6488	2092	86
H(15)	4775	6846	3402	105
H(5)	-3881	5984	858	112
H(21)	-1232	1867	4487	102
H(9)	-3695	9612	3213	92
H(4)	-2063	5053	195	116