

C(18)-Fe(2)-C(15)	70.5(4)	C(16)-Fe(2)-C(24)	165.3(6)
C(19)-Fe(2)-C(16)	69.7(4)	C(17)-Fe(2)-C(24)	154.6(7)
C(18)-Fe(2)-C(16)	68.1(5)	C(22)-Fe(2)-C(24)	68.6(8)
C(15)-Fe(2)-C(16)	41.0(3)	C(23)-Fe(2)-C(24)	41.0(6)
C(19)-Fe(2)-C(17)	72.7(5)	C(20)-Fe(2)-C(24)	39.0(6)
C(18)-Fe(2)-C(17)	43.6(5)	C(21)-Fe(2)-C(24)	70.6(8)
C(15)-Fe(2)-C(17)	70.5(4)	C(2)-C(1)-Cu(2)	147.1(5)
C(16)-Fe(2)-C(17)	39.2(4)	C(2)-C(1)-Cu(1)	133.9(4)
C(19)-Fe(2)-C(22)	162.0(7)	Cu(2)-C(1)-Cu(1)	74.8(2)
C(18)-Fe(2)-C(22)	124.1(7)	C(2)-C(1)-Cu(3)	126.9(4)
C(15)-Fe(2)-C(22)	153.9(7)	Cu(2)-C(1)-Cu(3)	72.9(2)
C(16)-Fe(2)-C(22)	119.5(7)	Cu(1)-C(1)-Cu(3)	69.1(2)
C(17)-Fe(2)-C(22)	104.2(7)	C(1)-C(2)-C(5)	175.1(6)
C(19)-Fe(2)-C(23)	127.9(6)	C(4)-C(3)-Cu(3)	136.2(5)
C(18)-Fe(2)-C(23)	109.1(6)	C(4)-C(3)-Cu(1)	147.7(5)
C(15)-Fe(2)-C(23)	166.4(6)	Cu(3)-C(3)-Cu(1)	74.4(2)
C(16)-Fe(2)-C(23)	152.2(6)	C(4)-C(3)-Cu(2)	120.9(5)
C(17)-Fe(2)-C(23)	119.1(6)	Cu(3)-C(3)-Cu(2)	73.8(2)
C(22)-Fe(2)-C(23)	37.5(6)	Cu(1)-C(3)-Cu(2)	70.8(2)
C(19)-Fe(2)-C(20)	119.1(6)	C(3)-C(4)-C(15)	174.6(7)
C(18)-Fe(2)-C(20)	153.5(7)	C(6)-C(5)-C(9)	106.6(6)
C(15)-Fe(2)-C(20)	108.8(5)	C(6)-C(5)-C(2)	125.7(6)
C(16)-Fe(2)-C(20)	129.6(6)	C(9)-C(5)-C(2)	127.7(6)
C(17)-Fe(2)-C(20)	162.7(7)	C(6)-C(5)-Fe(1)	69.0(3)
C(22)-Fe(2)-C(20)	68.4(7)	C(9)-C(5)-Fe(1)	68.4(3)
C(23)-Fe(2)-C(20)	65.2(7)	C(2)-C(5)-Fe(1)	129.6(4)
C(19)-Fe(2)-C(21)	152.6(7)	C(7)-C(6)-C(5)	107.8(7)
C(18)-Fe(2)-C(21)	163.2(8)	C(7)-C(6)-Fe(1)	69.0(4)
C(15)-Fe(2)-C(21)	116.2(6)	C(5)-C(6)-Fe(1)	69.8(3)
C(16)-Fe(2)-C(21)	106.1(6)	C(8)-C(7)-C(6)	109.3(7)
C(17)-Fe(2)-C(21)	122.0(8)	C(8)-C(7)-Fe(1)	69.9(5)
C(22)-Fe(2)-C(21)	43.7(6)	C(6)-C(7)-Fe(1)	70.3(4)
C(23)-Fe(2)-C(21)	68.2(7)	C(7)-C(8)-C(9)	108.3(7)
C(20)-Fe(2)-C(21)	41.9(6)	C(7)-C(8)-Fe(1)	69.7(5)
C(19)-Fe(2)-C(24)	106.3(7)	C(9)-C(8)-Fe(1)	69.5(4)
C(18)-Fe(2)-C(24)	119.0(8)	C(8)-C(9)-C(5)	108.1(7)
C(15)-Fe(2)-C(24)	126.6(6)	C(8)-C(9)-Fe(1)	69.5(4)

C(5)-C(9)-Fe(1)	70.2(4)	C(20)-C(21)-C(22)	100.0(15)
C(14)-C(10)-C(11)	110.7(10)	C(20)-C(21)-Fe(2)	68.5(7)
C(14)-C(10)-Fe(1)	71.5(6)	C(22)-C(21)-Fe(2)	67.0(9)
C(11)-C(10)-Fe(1)	70.6(6)	C(23)-C(22)-C(21)	108.3(18)
C(10)-C(11)-C(12)	106.3(9)	C(23)-C(22)-Fe(2)	71.5(12)
C(10)-C(11)-Fe(1)	69.1(5)	C(21)-C(22)-Fe(2)	69.3(9)
C(12)-C(11)-Fe(1)	69.4(5)	C(22)-C(23)-C(24)	115.0(19)
C(13)-C(12)-C(11)	105.2(9)	C(22)-C(23)-Fe(2)	71.0(12)
C(13)-C(12)-Fe(1)	70.3(5)	C(24)-C(23)-Fe(2)	71.6(10)
C(11)-C(12)-Fe(1)	69.6(5)	C(20)-C(24)-C(23)	102.1(19)
C(12)-C(13)-C(14)	112.0(10)	C(20)-C(24)-Fe(2)	68.8(9)
C(12)-C(13)-Fe(1)	70.8(5)	C(23)-C(24)-Fe(2)	67.5(10)
C(14)-C(13)-Fe(1)	70.4(5)	P(1)-C(25)-P(2)	110.6(3)
C(10)-C(14)-C(13)	105.6(10)	P(4)-C(26)-P(3)	109.7(3)
C(10)-C(14)-Fe(1)	69.9(5)	C(2A)-C(1A)-C(6A)	117.6(6)
C(13)-C(14)-Fe(1)	69.7(5)	C(2A)-C(1A)-P(1)	119.1(5)
C(16)-C(15)-C(19)	105.2(7)	C(6A)-C(1A)-P(1)	123.2(6)
C(16)-C(15)-C(4)	128.6(7)	C(1A)-C(2A)-C(3A)	121.8(7)
C(19)-C(15)-C(4)	126.1(8)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	119.3(9)
C(16)-C(15)-Fe(2)	69.7(5)	C(5A)-C(4A)-C(3A)	119.5(9)
C(19)-C(15)-Fe(2)	66.5(5)	C(4A)-C(5A)-C(6A)	122.1(9)
C(4)-C(15)-Fe(2)	130.5(5)	C(1A)-C(6A)-C(5A)	119.6(8)
C(17)-C(16)-C(15)	114.5(10)	C(6B)-C(1B)-C(2B)	117.7(6)
C(17)-C(16)-Fe(2)	70.5(6)	C(6B)-C(1B)-P(1)	117.8(5)
C(15)-C(16)-Fe(2)	69.2(5)	C(2B)-C(1B)-P(1)	124.1(6)
C(16)-C(17)-C(18)	103.4(9)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	122.7(8)
C(16)-C(17)-Fe(2)	70.3(6)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	119.5(8)
C(18)-C(17)-Fe(2)	65.9(6)	C(3B)-C(4B)-C(5B)	119.6(8)
C(19)-C(18)-C(17)	109.9(9)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	119.8(9)
C(19)-C(18)-Fe(2)	68.9(6)	C(1B)-C(6B)-C(5B)	120.5(8)
C(17)-C(18)-Fe(2)	70.5(6)	C(2C)-C(1C)-C(6C)	118.0(6)
C(18)-C(19)-C(15)	106.9(10)	C(2C)-C(1C)-P(2)	120.0(5)
C(18)-C(19)-Fe(2)	69.1(7)	C(6C)-C(1C)-P(2)	122.0(5)
C(15)-C(19)-Fe(2)	70.7(5)	C(1C)-C(2C)-C(3C)	121.5(7)
C(24)-C(20)-C(21)	114.6(17)	C(4C)-C(3C)-C(2C)	119.3(8)
C(24)-C(20)-Fe(2)	72.2(9)	C(3C)-C(4C)-C(5C)	120.1(8)
C(21)-C(20)-Fe(2)	69.7(9)	C(4C)-C(5C)-C(6C)	120.3(8)

C(5C)-C(6C)-C(1C)	120.8(7)	C(4H)-C(3H)-C(2H)	120.0
C(2D)-C(1D)-C(6D)	119.0(6)	C(5H)-C(4H)-C(3H)	120.0
C(2D)-C(1D)-P(2)	123.9(5)	C(4H)-C(5H)-C(6H)	120.0
C(6D)-C(1D)-P(2)	117.0(5)	C(5H)-C(6H)-C(1H)	120.0
C(1D)-C(2D)-C(3D)	119.6(8)	C(2I)-C(1I)-C(6I)	117.7(6)
C(4D)-C(3D)-C(2D)	121.5(9)	C(2I)-C(1I)-P(5)	123.3(5)
C(3D)-C(4D)-C(5D)	119.8(8)	C(6I)-C(1I)-P(5)	118.4(4)
C(4D)-C(5D)-C(6D)	121.1(8)	C(1I)-C(2I)-C(3I)	121.2(7)
C(1D)-C(6D)-C(5D)	119.0(8)	C(4I)-C(3I)-C(2I)	120.7(7)
C(6E)-C(1E)-C(2E)	119.3(6)	C(3I)-C(4I)-C(5I)	119.7(7)
C(6E)-C(1E)-P(3)	125.0(5)	C(6I)-C(5I)-C(4I)	119.9(7)
C(2E)-C(1E)-P(3)	115.6(4)	C(5I)-C(6I)-C(1I)	120.8(6)
C(3E)-C(2E)-C(1E)	120.0(6)	C(6J)-C(1J)-C(2J)	119.2(6)
C(4E)-C(3E)-C(2E)	120.6(7)	C(6J)-C(1J)-P(5)	118.9(5)
C(3E)-C(4E)-C(5E)	120.7(7)	C(2J)-C(1J)-P(5)	121.8(5)
C(4E)-C(5E)-C(6E)	119.3(7)	C(3J)-C(2J)-C(1J)	120.5(8)
C(1E)-C(6E)-C(5E)	120.0(6)	C(2J)-C(3J)-C(4J)	119.4(8)
C(2F)-C(1F)-C(6F)	118.9(6)	C(5J)-C(4J)-C(3J)	120.6(8)
C(2F)-C(1F)-P(3)	116.9(4)	C(4J)-C(5J)-C(6J)	120.3(8)
C(6F)-C(1F)-P(3)	124.2(5)	C(1J)-C(6J)-C(5J)	119.9(7)
C(3F)-C(2F)-C(1F)	119.7(6)	P(6)-C(27)-P(5)	110.7(3)
C(4F)-C(3F)-C(2F)	121.0(7)	C(6K)-C(1K)-C(2K)	117.1(6)
C(5F)-C(4F)-C(3F)	119.4(7)	C(6K)-C(1K)-P(6)	119.2(5)
C(4F)-C(5F)-C(6F)	120.5(7)	C(2K)-C(1K)-P(6)	123.7(5)
C(5F)-C(6F)-C(1F)	120.4(6)	C(3K)-C(2K)-C(1K)	121.5(7)
C(2G)-C(1G)-C(6G)	118.3(6)	C(4K)-C(3K)-C(2K)	120.9(8)
C(2G)-C(1G)-P(4)	120.0(4)	C(3K)-C(4K)-C(5K)	119.4(7)
C(6G)-C(1G)-P(4)	121.3(5)	C(4K)-C(5K)-C(6K)	119.8(8)
C(3G)-C(2G)-C(1G)	119.7(6)	C(1K)-C(6K)-C(5K)	121.3(7)
C(4G)-C(3G)-C(2G)	122.4(7)	C(2L)-C(1L)-C(6L)	116.8(6)
C(3G)-C(4G)-C(5G)	118.8(7)	C(2L)-C(1L)-P(6)	121.0(5)
C(4G)-C(5G)-C(6G)	120.3(7)	C(6L)-C(1L)-P(6)	122.2(5)
C(5G)-C(6G)-C(1G)	120.4(7)	C(1L)-C(2L)-C(3L)	121.7(7)
C(2H)-C(1H)-C(6H)	120.0	C(4L)-C(3L)-C(2L)	119.3(8)
C(2H)-C(1H)-P(4)	122.6(3)	C(5L)-C(4L)-C(3L)	119.5(7)
C(6H)-C(1H)-P(4)	116.9(3)	C(4L)-C(5L)-C(6L)	121.7(8)
C(1H)-C(2H)-C(3H)	120.0	C(5L)-C(6L)-C(1L)	120.8(7)

F(2A)-P(7)-F(4)	79.7(9)	F(3)-P(7)-F(1A)	100.3(8)
F(2A)-P(7)-F(1)	35.3(8)	F(5A)-P(7)-F(1A)	87.7(8)
F(4)-P(7)-F(1)	93.0(7)	F(5)-P(7)-F(1A)	129.8(9)
F(2A)-P(7)-F(3A)	88.9(8)	F(2A)-P(7)-F(2)	98.6(9)
F(4)-P(7)-F(3A)	142.1(9)	F(4)-P(7)-F(2)	177.5(7)
F(1)-P(7)-F(3A)	98.3(9)	F(1)-P(7)-F(2)	86.5(6)
F(2A)-P(7)-F(6)	123.2(9)	F(3A)-P(7)-F(2)	35.8(7)
F(4)-P(7)-F(6)	91.0(6)	F(6)-P(7)-F(2)	91.5(7)
F(1)-P(7)-F(6)	90.7(6)	F(3)-P(7)-F(2)	88.1(6)
F(3A)-P(7)-F(6)	124.8(9)	F(5A)-P(7)-F(2)	128.2(8)
F(2A)-P(7)-F(3)	149.7(9)	F(5)-P(7)-F(2)	88.3(6)
F(4)-P(7)-F(3)	92.5(6)	F(1A)-P(7)-F(2)	140.7(9)
F(1)-P(7)-F(3)	173.6(7)	F(2A)-P(7)-F(6A)	97.6(8)
F(3A)-P(7)-F(3)	79.3(9)	F(4)-P(7)-F(6A)	124.4(8)
F(6)-P(7)-F(3)	85.9(6)	F(1)-P(7)-F(6A)	63.3(8)
F(2A)-P(7)-F(5A)	94.3(9)	F(3A)-P(7)-F(6A)	92.8(8)
F(4)-P(7)-F(5A)	50.5(7)	F(6)-P(7)-F(6A)	44.5(7)
F(1)-P(7)-F(5A)	126.8(9)	F(3)-P(7)-F(6A)	110.7(8)
F(3A)-P(7)-F(5A)	95.2(9)	F(5A)-P(7)-F(6A)	165.8(9)
F(6)-P(7)-F(5A)	121.8(8)	F(5)-P(7)-F(6A)	138.4(8)
F(3)-P(7)-F(5A)	59.6(8)	F(1A)-P(7)-F(6A)	84.0(8)
F(2A)-P(7)-F(5)	62.2(8)	F(2)-P(7)-F(6A)	57.4(7)
F(4)-P(7)-F(5)	89.3(7)	F(2A)-P(7)-F(4A)	177.0(10)
F(1)-P(7)-F(5)	94.7(6)	F(4)-P(7)-F(4A)	102.1(8)
F(3A)-P(7)-F(5)	53.8(8)	F(1)-P(7)-F(4A)	146.3(8)
F(6)-P(7)-F(5)	174.5(7)	F(3A)-P(7)-F(4A)	88.2(8)
F(3)-P(7)-F(5)	88.7(6)	F(6)-P(7)-F(4A)	59.5(7)
F(5A)-P(7)-F(5)	54.9(8)	F(3)-P(7)-F(4A)	28.4(7)
F(2A)-P(7)-F(1A)	93.0(8)	F(5A)-P(7)-F(4A)	85.1(8)
F(4)-P(7)-F(1A)	41.4(7)	F(5)-P(7)-F(4A)	115.1(8)
F(1)-P(7)-F(1A)	81.7(8)	F(1A)-P(7)-F(4A)	89.9(8)
F(3A)-P(7)-F(1A)	176.4(10)	F(2)-P(7)-F(4A)	79.6(8)
F(6)-P(7)-F(1A)	51.6(7)	F(6A)-P(7)-F(4A)	83.5(8)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $3 \cdot \text{PF}_6$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cu(1)	41(1)	34(1)	37(1)	-1(1)	9(1)	1(1)
Cu(2)	36(1)	36(1)	41(1)	-2(1)	7(1)	0(1)
Cu(3)	40(1)	34(1)	47(1)	-4(1)	2(1)	1(1)
P(1)	46(1)	35(1)	45(1)	-3(1)	8(1)	5(1)
P(2)	47(1)	36(1)	38(1)	-3(1)	9(1)	-2(1)
P(3)	32(1)	39(1)	46(1)	3(1)	5(1)	-3(1)
P(4)	41(1)	38(1)	51(1)	-1(1)	10(1)	7(1)
P(5)	41(1)	39(1)	40(1)	-7(1)	8(1)	-4(1)
P(6)	42(1)	43(1)	36(1)	0(1)	7(1)	1(1)
Fe(1)	50(1)	56(1)	62(1)	4(1)	31(1)	4(1)
Fe(2)	67(1)	131(1)	101(1)	9(1)	49(1)	-12(1)
C(1)	35(3)	40(3)	46(3)	0(2)	12(2)	1(2)
C(2)	43(3)	47(3)	39(3)	0(2)	15(3)	3(3)
C(3)	40(3)	46(3)	45(3)	-3(3)	15(3)	-6(3)
C(4)	52(4)	51(4)	57(4)	4(3)	23(3)	-4(3)
C(5)	40(3)	52(4)	58(4)	-13(3)	25(3)	-6(3)
C(6)	80(5)	53(4)	105(6)	12(4)	61(5)	14(4)
C(7)	113(7)	55(5)	160(9)	-7(5)	95(7)	-31(5)
C(8)	60(5)	114(7)	104(6)	-29(6)	44(5)	-39(5)
C(9)	49(4)	102(6)	61(4)	-17(4)	19(3)	-10(4)
C(10)	139(10)	85(7)	115(9)	-45(6)	67(8)	-30(7)
C(11)	92(7)	157(11)	77(6)	-40(7)	8(5)	27(7)
C(12)	140(9)	119(8)	83(6)	25(6)	59(7)	47(8)
C(13)	102(7)	107(7)	120(8)	6(6)	80(7)	28(6)
C(14)	141(10)	80(6)	113(8)	8(5)	70(8)	47(6)
C(15)	56(4)	93(6)	81(5)	3(4)	29(4)	-18(4)
C(16)	49(5)	166(9)	118(7)	46(7)	35(5)	-1(5)
C(17)	50(5)	214(14)	131(9)	16(9)	23(5)	-19(7)
C(18)	80(7)	140(10)	175(11)	-10(8)	71(7)	-38(7)
C(19)	101(7)	90(7)	175(10)	3(7)	55(7)	-36(6)
C(20)	199(16)	161(14)	119(10)	-33(10)	65(11)	-56(13)
C(21)	357(28)	95(10)	204(17)	-46(11)	134(18)	1(15)

C(24)	175(17)	336(28)	135(12)	62(15)	40(11)	-16(17)
C(25)	44(3)	50(3)	47(3)	-6(3)	14(3)	5(3)
C(26)	30(3)	46(3)	55(3)	4(3)	9(3)	4(2)
C(1A)	60(4)	37(3)	53(4)	-5(3)	-2(3)	0(3)
C(2A)	67(4)	50(4)	80(5)	10(3)	19(4)	-1(3)
C(3A)	81(6)	75(6)	103(6)	29(5)	25(5)	-6(4)
C(4A)	100(7)	66(6)	120(8)	32(6)	-7(6)	-24(5)
C(5A)	127(8)	48(5)	103(7)	-5(5)	-5(6)	-24(5)
C(6A)	113(6)	45(4)	73(5)	-9(4)	15(4)	0(4)
C(1B)	48(4)	48(4)	53(4)	-8(3)	5(3)	13(3)
C(2B)	66(4)	63(4)	58(4)	-7(3)	8(3)	19(3)
C(3B)	78(6)	94(6)	74(5)	9(4)	10(4)	47(5)
C(4B)	58(5)	123(8)	83(6)	-17(5)	3(4)	41(5)
C(5B)	50(5)	140(9)	111(7)	5(6)	14(5)	-4(5)
C(6B)	56(5)	86(6)	98(6)	14(5)	14(4)	14(4)
C(1C)	53(4)	40(3)	46(3)	2(3)	7(3)	-4(3)
C(2C)	57(4)	54(4)	65(4)	12(3)	6(3)	-1(3)
C(3C)	66(5)	82(6)	104(6)	22(5)	26(4)	-11(4)
C(4C)	79(6)	60(5)	112(7)	23(5)	-4(5)	-23(4)
C(5C)	99(6)	42(4)	94(6)	-7(4)	-3(5)	-16(4)
C(6C)	79(5)	41(4)	69(4)	-3(3)	13(4)	-5(3)
C(1D)	72(4)	40(3)	38(3)	-8(3)	13(3)	-11(3)
C(2D)	88(6)	96(6)	51(4)	-5(4)	28(4)	-17(4)
C(3D)	123(8)	146(9)	62(5)	-10(5)	48(6)	-45(7)
C(4D)	152(10)	122(8)	52(5)	1(5)	33(6)	-31(7)
C(5D)	122(8)	102(7)	43(4)	7(4)	0(5)	5(6)
C(6D)	93(6)	79(5)	47(4)	-7(4)	13(4)	18(4)
C(1E)	34(3)	46(3)	50(3)	1(3)	4(3)	-1(3)
C(2E)	47(4)	61(4)	66(4)	7(3)	10(3)	-13(3)
C(3E)	63(5)	82(5)	94(6)	9(4)	9(4)	-30(4)
C(4E)	65(5)	97(6)	93(6)	4(5)	-5(4)	-41(5)
C(5E)	68(5)	114(7)	62(5)	11(4)	-18(4)	-26(5)
C(6E)	58(4)	76(5)	63(4)	17(4)	-5(3)	-19(4)
C(1F)	37(3)	43(3)	48(3)	1(3)	7(3)	-1(2)
C(2F)	65(4)	53(4)	66(4)	13(3)	24(3)	11(3)
C(3F)	87(6)	89(6)	94(6)	26(5)	53(5)	18(5)
C(4F)	93(6)	92(6)	88(6)	42(5)	42(5)	2(5)

C(5F)	62(4)	64(4)	86(5)	29(4)	18(4)	1(4)
C(6F)	47(4)	53(4)	72(4)	11(3)	14(3)	1(3)
C(1G)	45(3)	33(3)	57(4)	-4(3)	6(3)	2(2)
C(2G)	46(4)	55(4)	74(4)	2(3)	15(3)	-4(3)
C(3G)	65(5)	80(6)	102(6)	19(5)	30(4)	-8(4)
C(4G)	87(6)	59(5)	102(6)	16(4)	23(5)	-18(4)
C(5G)	98(6)	44(4)	102(6)	18(4)	13(5)	7(4)
C(6G)	64(4)	51(4)	84(5)	3(4)	16(4)	12(3)
C(1I)	46(3)	45(3)	42(3)	-2(3)	3(3)	-2(3)
C(2I)	61(4)	46(4)	56(4)	-5(3)	12(3)	-1(3)
C(3I)	86(5)	38(4)	84(5)	-1(3)	13(4)	0(4)
C(4I)	92(6)	57(5)	74(5)	12(4)	12(4)	-20(4)
C(5I)	89(5)	74(5)	64(4)	-1(4)	25(4)	-31(4)
C(6I)	73(4)	58(4)	56(4)	-13(3)	22(3)	-15(3)
C(1J)	54(4)	37(3)	48(3)	-4(3)	16(3)	0(3)
C(2J)	95(5)	62(4)	49(4)	-16(3)	19(4)	-10(4)
C(3J)	135(8)	76(5)	55(5)	-16(4)	32(5)	-15(5)
C(4J)	147(9)	85(6)	68(5)	-12(4)	57(6)	5(6)
C(5J)	91(6)	104(7)	99(7)	12(5)	59(6)	16(5)
C(6J)	74(5)	72(5)	57(4)	8(3)	31(4)	7(4)
C(27)	40(3)	45(3)	47(3)	-8(3)	8(3)	-5(2)
C(1K)	43(3)	56(4)	44(3)	6(3)	8(3)	8(3)
C(2K)	77(5)	57(4)	48(4)	0(3)	19(3)	7(3)
C(3K)	106(7)	91(6)	52(4)	6(4)	34(4)	25(5)
C(4K)	88(6)	109(7)	66(5)	26(5)	45(5)	41(5)
C(5K)	77(6)	127(8)	93(7)	21(6)	33(5)	-29(5)
C(6K)	74(5)	126(7)	49(4)	3(4)	12(4)	-29(5)
C(1L)	44(3)	54(4)	36(3)	-3(3)	5(2)	7(3)
C(2L)	57(4)	92(6)	80(5)	28(4)	22(4)	21(4)
C(3L)	59(5)	124(8)	113(7)	13(6)	34(5)	18(5)
C(4L)	68(5)	107(7)	74(5)	3(5)	10(4)	38(5)
C(5L)	91(6)	88(6)	77(5)	17(4)	22(5)	45(5)
C(6L)	78(5)	55(4)	72(5)	5(3)	25(4)	19(4)
P(7)	153(3)	140(3)	192(4)	66(3)	73(3)	-18(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for $3\cdot\text{PF}_6$.

	x	y	z	U(eq)
H(6)	4062(4)	9731(4)	7520(3)	86
H(7)	5272(5)	10227(5)	7595(4)	117
H(8)	6119(4)	9396(6)	8204(3)	106
H(9)	5451(3)	8344(5)	8518(2)	84
H(10)	4491(7)	7010(7)	7436(4)	128
H(11)	4115(6)	8090(8)	6823(3)	136
H(12)	5213(7)	8863(7)	6800(3)	131
H(13)	6185(5)	8155(6)	7357(4)	119
H(14)	5752(7)	7063(6)	7775(4)	125
H(16)	314(4)	8023(7)	8401(3)	131
H(17)	-649(5)	7190(9)	8503(4)	159
H(18)	-96(5)	5754(8)	8849(4)	149
H(19)	1196(5)	5836(6)	9010(4)	143
H(20)	1725(9)	7797(12)	9822(5)	187
H(21)	728(13)	8840(10)	9438(6)	250
H(22)	-404(10)	7989(14)	9475(6)	242
H(23)	-35(11)	6667(12)	9830(6)	238
H(24)	1271(10)	6436(16)	10022(5)	260
H(25A)	3235(3)	5306(4)	7734(2)	56
H(25B)	3602(3)	6194(4)	7751(2)	56
H(26A)	1005(3)	9783(4)	7675(2)	53
H(26B)	959(3)	9016(4)	7992(2)	53
H(2A)	2566(4)	5596(4)	8986(2)	80
H(3A)	1969(4)	4452(5)	9165(3)	105
H(4A)	2070(5)	3115(6)	8875(4)	126
H(5A)	2745(6)	2936(5)	8420(3)	122
H(6A)	3335(4)	4067(4)	8225(3)	96
H(2B)	4376(4)	4558(4)	9016(2)	78
H(3B)	5548(5)	4250(6)	9252(3)	103
H(4B)	6293(4)	5046(7)	8992(3)	111
H(5B)	5875(4)	6242(7)	8550(3)	124

H(6B)	4685(4)	6554(5)	8322(3)	99
H(2C)	1442(3)	5964(4)	8064(2)	74
H(3C)	628(4)	4886(5)	8037(3)	101
H(4C)	478(4)	3803(5)	7511(3)	110
H(5C)	1123(5)	3789(4)	7014(3)	103
H(6C)	1926(4)	4859(4)	7039(2)	78
H(2D)	3327(4)	6265(5)	7017(2)	92
H(3D)	3186(6)	6517(7)	6249(3)	127
H(4D)	2128(7)	6826(7)	5753(3)	130
H(5D)	1187(5)	6987(6)	6007(3)	114
H(6D)	1288(4)	6751(5)	6771(2)	90
H(2E)	776(3)	7301(4)	7660(2)	71
H(3E)	-240(4)	6615(5)	7260(3)	100
H(4E)	-825(4)	6992(6)	6529(3)	110
H(5E)	-440(4)	8112(6)	6189(3)	108
H(6E)	601(3)	8800(5)	6582(2)	86
H(2F)	2702(3)	8466(4)	7128(2)	73
H(3F)	3064(4)	9197(5)	6591(3)	101
H(4F)	2529(4)	10454(5)	6283(3)	105
H(5F)	1599(4)	10961(5)	6491(3)	86
H(6F)	1193(3)	10211(4)	6998(2)	70
H(2G)	3179(3)	10139(4)	8018(2)	71
H(3G)	3453(4)	11173(5)	7584(3)	97
H(4G)	2731(5)	12304(5)	7313(3)	101
H(5G)	1714(5)	12433(5)	7501(3)	103
H(6G)	1430(4)	11420(4)	7958(2)	81
H(2H)	655(4)	9678(5)	8511(3)	128
H(3H)	225(3)	10279(6)	9056(3)	177
H(4H)	885(5)	11279(6)	9564(3)	153
H(5H)	1976(5)	11678(5)	9527(2)	138
H(6H)	2407(3)	11077(5)	8982(3)	100
H(2I)	3582(3)	11119(4)	9553(2)	67
H(3I)	3857(4)	12401(4)	9288(3)	87
H(4I)	4428(4)	12439(5)	8757(3)	93
H(5I)	4737(4)	11177(5)	8479(2)	91
H(6I)	4460(3)	9888(4)	8739(2)	74
H(2J)	4339(4)	9926(4)	10202(2)	83

H(3J)	4004(6)	10263(5)	10829(3)	106
H(4J)	2858(6)	10068(6)	10803(3)	113
H(5J)	2065(5)	9505(6)	10172(3)	110
H(6J)	2394(4)	9164(4)	9537(2)	79
H(27A)	4696(3)	8760(3)	9270(2)	54
H(27B)	4674(3)	8784(3)	9774(2)	54
H(2K)	4488(4)	8013(4)	10386(2)	73
H(3K)	4048(5)	7693(5)	10959(3)	97
H(4K)	3111(5)	6804(6)	10839(3)	99
H(5K)	2607(4)	6225(6)	10131(3)	117
H(6K)	3042(4)	6560(6)	9540(2)	102
H(2L)	5524(4)	7883(5)	9352(3)	91
H(3L)	6640(4)	7314(6)	9632(3)	116
H(4L)	6818(4)	6088(6)	10067(3)	103
H(5L)	5915(5)	5493(6)	10245(3)	104
H(6L)	4813(4)	6054(4)	9985(2)	81
