

Supporting Information (65 pages)

Ligand Induced Conversion of π to σ C_{60} – Metal Cluster Complexes : Full Characterization of the $\mu_3-\eta^1:\eta^2:\eta^1-C_{60}$ Bonding Mode

Hyunjoon Song, Chang H. Lee, Kwangyeol Lee, Joon T. Park*

Department of Chemistry and School of Molecular Science (BK21),
Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon 305-701, Korea

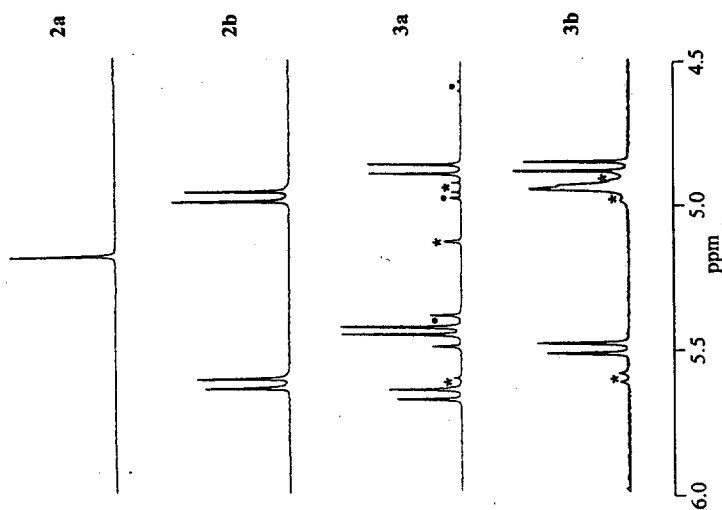


Figure S1. 1H NMR spectra (400 MHz, $CS_2/CDCl_3$ (1:1), 298 K, methylene region) of **2a** – **3b**. Signals from two minor isomers are denoted by * and •, respectively.

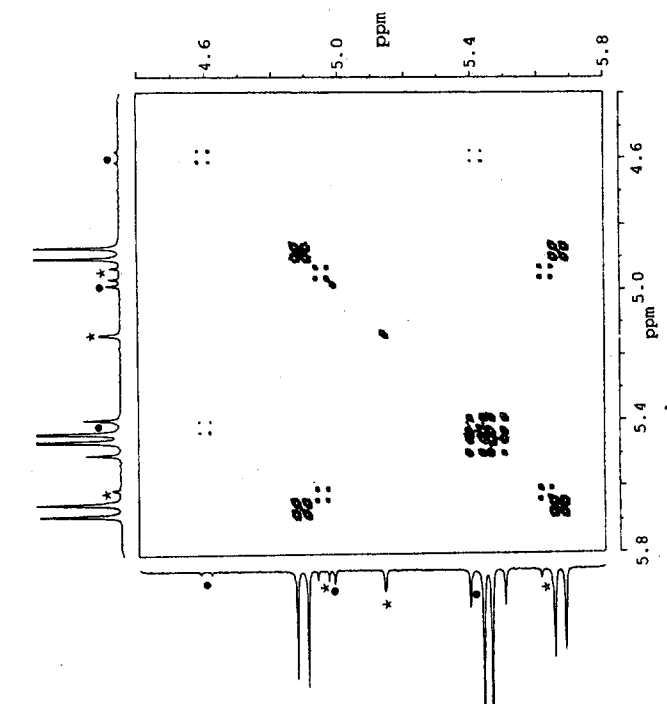


Figure S2. 2D ^1H - ^1H COSY spectrum of 3a. Signals from two minor isomers are denoted by * and •, respectively.

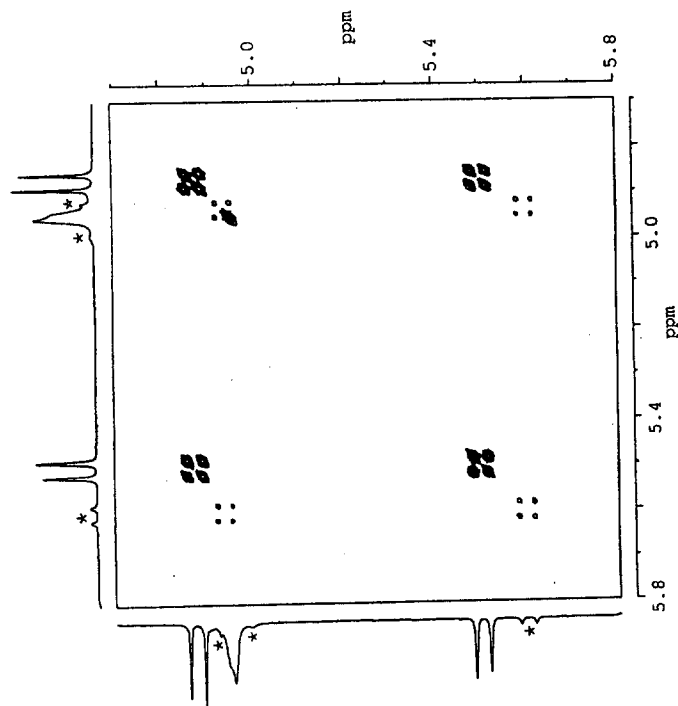


Figure S3. 2D ^1H - ^1H COSY spectrum of 3b. Signals from the minor isomer are denoted by *.

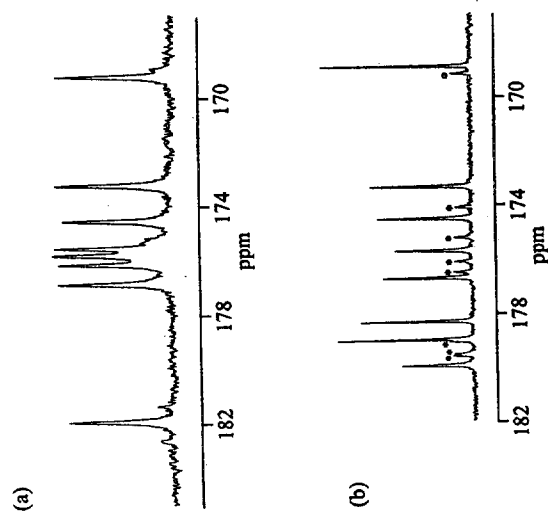


Figure S4. (a) ^{13}C NMR spectra of **3a** (carbonyl region, 100 MHz, $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2/\text{C}_7\text{D}_8$ (1:1), 233 K). (b) ^{13}C NMR spectra of **3b** (carbonyl region, 100 MHz, $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2/\text{C}_7\text{D}_8$ (1:1), 298 K). Signals from the minor isomer are denoted by *

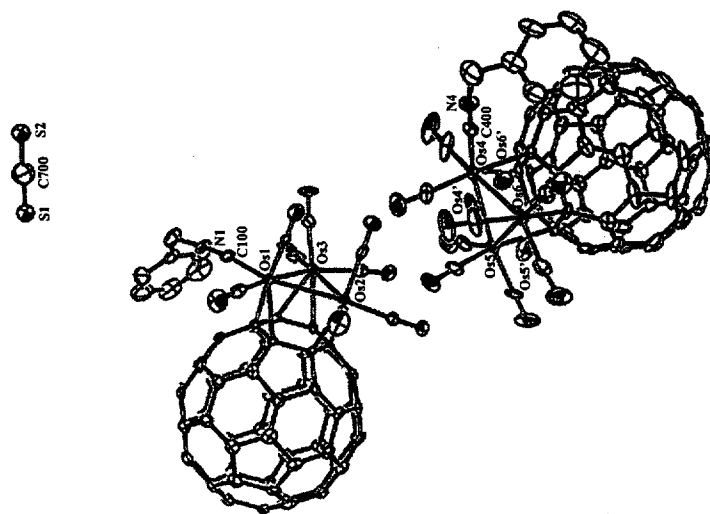


Figure S5. Molecular geometry of **2a** with a selected atomic labeling scheme in an asymmetric unit.

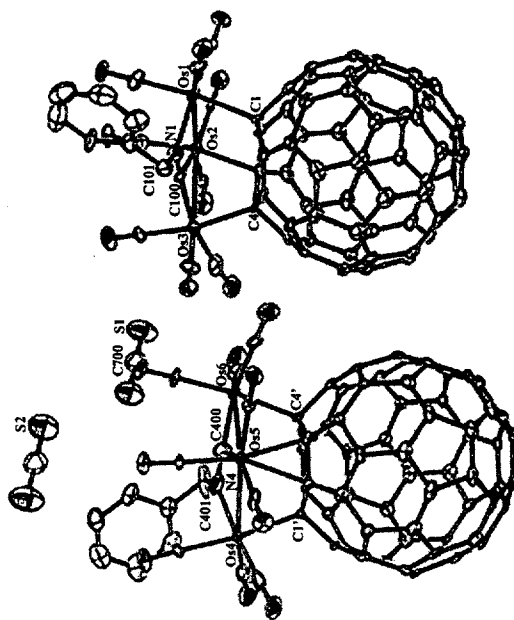


Figure S6. Molecular geometry of 2b with a selected atomic labeling scheme in an asymmetric unit.

S7

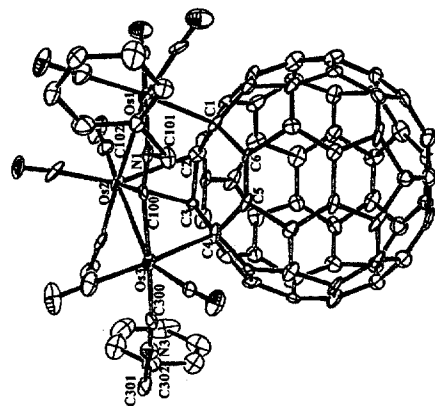


Figure S7. Molecular geometry of 3a with a selected atomic labeling scheme in an asymmetric unit.

S8

Table S1. Crystallographic Data for 2a·0.25CS₂.

Formula	C ₇₆ H ₇ NO ₈ Os ₃ · 0.25CS ₂
Fw	1651.46
system, space group	Monoclinic, P2 ₁ /n
a, Å	23.5677(2)
b, Å	12.6912(2)
c, Å	31.0373(1)
β, deg	95.289(1)
V, Å ³	9243.8(2)
Z	8
D _{calcd} , Mg m ⁻³	2.373
temp. K	298(2)
λ (Mo Kα), Å	0.71073
μ, mm ⁻¹	8.328
θ range for collection	1.32° ≤ θ ≤ 26.51°
no. of rflns measd	50531
no. of unique rflns	19007
no. of rflns (I > 2σ(I))	12503
R _i ^a	0.0693
R _w ^b	0.1649
GOF	1.057

$$^a R_i = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o| \quad ^b R_w = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}$$

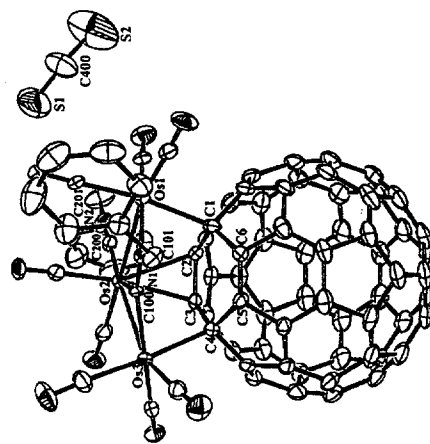


Figure S8. Molecular geometry of 3b with a selected atomic labeling scheme in an asymmetric unit.

Table S2. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2a-0.25CS₂.

	x	y	z	U(eq) ($\text{\AA}^2$)
Os(1)	1596(1)	7200(1)	2425(1)	31(1)
Os(2)	395(1)	7644(1)	2350(1)	34(1)
Os(3)	1114(1)	8550(1)	3061(1)	34(1)
C(100)	2360(6)	7468(12)	2722(5)	39(3)
N(1)	2795(5)	7522(11)	2910(4)	48(4)
C(101)	3318(7)	7516(18)	3170(6)	70(6)
C(102)	3267(5)	7291(10)	3631(3)	49(4)
C(103)	2920(5)	7935(9)	3856(5)	67(5)
C(104)	2871(6)	7756(13)	4293(4)	102(9)
C(105)	3169(7)	6933(16)	4505(3)	103(9)
C(106)	3517(6)	6288(12)	4280(5)	121(11)
C(107)	3366(5)	6468(10)	3843(5)	70(5)
O(1A)	1603(5)	8214(13)	1987(5)	44(4)
O(1B)	1624(5)	8837(11)	1716(4)	79(4)
C(1B)	1879(6)	6214(13)	2052(5)	44(4)
O(2B)	2057(6)	5559(11)	1834(4)	79(4)
C(2A)	475(6)	9006(16)	2114(6)	63(5)
O(2A)	528(5)	9819(11)	1959(5)	82(4)
C(2B)	305(6)	6895(14)	1817(6)	48(4)
C(2C)	-404(6)	7852(11)	2359(4)	31(3)
O(2C)	-879(4)	8005(9)	2346(4)	54(3)
C(3A)	1703(5)	10259(9)	2576(4)	74(4)
C(3B)	426(7)	9269(12)	3144(6)	51(4)
O(3B)	11(5)	9664(10)	3201(5)	77(4)
C(3C)	1493(8)	9051(12)	3587(6)	54(4)
O(3C)	1701(7)	9363(10)	3899(5)	84(4)
C(1)	1516(5)	6216(9)	3008(4)	26(3)
C(2)	1125(5)	5805(9)	2677(4)	21(3)
C(3)	509(5)	6039(10)	2655(4)	28(3)
C(4)	313(5)	6700(9)	2978(4)	26(3)
C(5)	701(5)	7150(10)	3328(4)	24(3)
C(6)	1305(5)	6896(10)	3332(4)	26(3)
C(7)	1588(5)	6606(11)	3748(4)	31(3)
C(8)	1998(5)	5764(11)	3689(4)	31(3)
C(9)	1942(5)	5493(11)	3234(5)	35(3)
C(10)	1984(5)	4478(12)	3110(5)	36(3)
C(11)	1591(6)	4056(10)	2760(4)	33(3)
C(12)	1167(5)	4674(11)	2562(4)	30(3)
C(13)	612(6)	4242(12)	2468(4)	34(3)
C(14)	193(5)	5063(10)	2541(4)	27(3)
C(15)	-303(5)	4844(11)	2711(4)	35(3)
C(16)	-524(5)	5477(11)	3032(5)	37(4)
C(17)	-211(5)	6380(10)	3180(5)	37(4)
C(18)	-138(5)	6647(10)	3624(5)	31(3)
C(19)	426(6)	7067(10)	3732(4)	29(3)
C(20)	716(6)	6845(10)	4120(4)	32(3)

S11

C(21)	1332(6)	6624(10)	4131(4)	32(3)
C(22)	1445(6)	5779(11)	4458(4)	35(3)
C(23)	1838(6)	4980(12)	4386(4)	40(4)
C(24)	2116(5)	4963(12)	3993(4)	32(3)
C(25)	2168(5)	3936(12)	3865(5)	37(3)
C(26)	2098(5)	3663(10)	3435(5)	35(3)
C(27)	1781(6)	2719(11)	3278(5)	40(4)
C(28)	1479(6)	2961(11)	2874(5)	34(3)
C(29)	937(6)	2573(11)	2781(5)	40(4)
C(30)	483(6)	3230(12)	2565(4)	37(3)
C(31)	-45(6)	2939(11)	2753(5)	39(4)
C(32)	-425(5)	3745(11)	2823(4)	34(3)
C(33)	-713(6)	3742(12)	3220(4)	36(3)
C(34)	-767(5)	4841(12)	3345(5)	36(3)
C(35)	-701(6)	5101(11)	3786(5)	39(4)
C(36)	-385(5)	6019(11)	3932(5)	34(3)
C(37)	-76(5)	5789(10)	4329(5)	31(3)
C(38)	469(6)	6185(11)	4427(5)	40(4)
C(39)	922(6)	5542(11)	4639(4)	36(3)
C(40)	796(6)	4507(12)	4741(4)	40(4)
C(41)	1199(6)	3676(12)	4665(4)	40(4)
C(42)	1722(6)	3902(13)	4493(5)	42(4)
C(43)	1919(6)	3241(12)	4176(5)	40(4)
C(44)	1622(6)	2372(11)	4038(5)	44(4)
C(45)	1544(6)	2063(11)	3574(5)	42(4)
C(46)	974(6)	1664(11)	3479(5)	39(3)
C(47)	683(7)	1896(11)	3083(6)	47(4)
C(48)	80(6)	2148(10)	3073(5)	37(3)
C(49)	-205(6)	2170(11)	3447(5)	41(4)
C(50)	-602(5)	2960(11)	3523(5)	39(4)
C(51)	-538(5)	3241(12)	3981(5)	43(4)
C(52)	-589(6)	4278(12)	4109(5)	41(4)
C(53)	-196(6)	4704(12)	4447(5)	40(4)
C(54)	236(6)	4071(12)	4640(4)	38(4)
C(55)	274(6)	3010(12)	4511(5)	38(4)
C(56)	891(6)	2754(11)	4525(5)	38(3)
C(57)	1087(6)	2093(12)	4225(5)	44(4)
C(58)	708(6)	1670(11)	3870(5)	44(4)
C(59)	115(6)	1907(11)	3865(5)	38(4)
C(60)	-85(6)	2576(12)	4187(5)	44(4)
Os(4)	-523(1)	11718(1)	972(1)	33(1)
Os(5)	-1297(1)	10400(1)	1395(1)	36(1)
Os(6)	-1487(1)	10760(1)	470(1)	38(1)
Os(4')	-1747(7)	10292(11)	832(11)	149(13)
Os(5')	-778(9)	11131(14)	1387(5)	106(8)
Os(6')	-1006(6)	11477(11)	477(5)	72(5)
C(400)	-225(7)	12319(11)	451(6)	45(4)
N(4)	-48(6)	12685(12)	154(5)	68(5)
C(401)	100(11)	13090(2)	-242(8)	104(9)
C(402)	-399(7)	13667(12)	-488(5)	82(7)
C(403)	-870(9)	13066(10)	-636(5)	111(9)
C(404)	-1359(7)	13555(17)	-825(5)	125(11)
C(405)	-1377(7)	14646(18)	-866(5)	120(10)
C(406)	-906(9)	15247(10)	-718(5)	108(9)
C(407)	-417(7)	14758(12)	-529(5)	97(8)
C(4A)	-48(7)	10519(15)	979(6)	57(5)
Q(4A)	256(6)	9815(11)	959(5)	88(5)

S12

C(4B)	19(7)	12380(2)	1356(6)	83(7)	C(44)	-2206(7)	17111(11)	1069(7)	58(5)
O(4B)	374(6)	12840(15)	1553(5)	112(7)	C(45)	-1809(7)	16906(10)	1422(6)	49(4)
C(5A)	-925(8)	9165(12)	1227(6)	59(5)	C(46)	-2130(6)	16745(11)	1812(6)	45(4)
O(5A)	-699(6)	8398(9)	1147(5)	83(4)	C(47)	-1967(7)	16011(13)	2122(6)	53(5)
C(3B)	-875(9)	10559(13)	1943(8)	69(6)	C(48)	-2356(7)	15328(13)	2307(5)	46(4)
O(3B)	-644(7)	10657(12)	2282(5)	96(5)	C(49)	-2914(7)	15426(12)	2177(5)	44(4)
C(5C)	-1919(8)	9627(11)	1606(6)	86(5)	C(50)	-3273(7)	14475(13)	2092(6)	57(5)
O(5C)	-2283(7)	9226(9)	1729(5)	86(5)	C(51)	-3682(6)	14684(14)	1732(7)	57(5)
C(6A)	-895(9)	9864(17)	315(7)	84(7)	C(52)	-3825(7)	13907(16)	1437(9)	78(7)
O(6A)	-552(7)	9293(12)	193(5)	110(6)	C(53)	-3887(7)	14113(18)	976(8)	71(6)
C(6B)	-2094(8)	9765(13)	486(6)	57(5)	C(54)	-3798(7)	15091(17)	835(8)	78(7)
O(6B)	-2503(7)	9244(11)	492(5)	93(5)	C(55)	-3622(6)	15993(14)	1134(7)	56(5)
C(6C)	-1664(7)	11153(12)	-114(6)	49(4)	C(56)	-3235(7)	16626(12)	953(6)	53(5)
O(6C)	-1786(6)	11297(11)	-477(4)	73(4)	C(57)	-2787(7)	17058(11)	1221(6)	50(4)
C(1)	-1191(5)	12983(10)	865(4)	29(3)	C(58)	-2739(6)	16837(11)	1675(6)	41(4)
C(2)	-1141(5)	12751(11)	1315(5)	35(3)	C(59)	-3114(7)	16212(13)	1842(6)	55(5)
C(3)	-1555(5)	12071(10)	1523(4)	26(3)	C(60)	-3579(6)	15749(14)	1572(7)	59(5)
C(4)	-2011(6)	11627(10)	1248(5)	37(4)	S(1)	4775	4272	273	50
C(5)	-2074(5)	11849(11)	783(5)	33(3)	C(700)	5000	5000	0	87(9)
C(6)	-1660(6)	12525(10)	596(5)	37(3)					
C(7)	-1886(8)	13321(13)	290(5)	49(4)					
C(8)	-1529(8)	14273(13)	362(5)	56(5)					
C(9)	-1120(6)	14072(11)	730(5)	39(4)					
C(10)	-978(6)	14827(13)	1032(6)	50(4)					
C(11)	-920(6)	14636(12)	1486(6)	48(4)					
C(12)	-1009(6)	13645(12)	1637(5)	38(3)					
C(13)	-1327(6)	13491(12)	1991(5)	39(4)					
C(14)	-1680(6)	12565(10)	1923(4)	32(3)					
C(15)	-2213(8)	12508(12)	2060(5)	52(5)					
C(16)	-2689(7)	12050(13)	1784(7)	57(5)					
C(17)	-2596(7)	11679(11)	1391(6)	49(4)					
C(18)	-2985(6)	11886(12)	1025(7)	57(5)					
C(19)	-2682(7)	12024(12)	656(6)	49(4)					
C(20)	-2844(9)	12788(17)	334(7)	86(8)					
C(21)	-2423(9)	13471(16)	148(6)	64(5)					
C(22)	-2695(9)	14503(17)	93(5)	64(5)					
C(23)	-2361(10)	15377(15)	175(5)	65(6)					
C(24)	-1779(8)	15257(14)	293(6)	59(5)					
C(25)	-1607(9)	16064(13)	603(7)	66(6)					
C(26)	-1225(8)	15892(12)	969(7)	59(5)					
C(27)	-1321(7)	16279(13)	1390(7)	59(5)					
C(28)	-1144(6)	15540(13)	1709(6)	47(4)					
C(29)	-1444(7)	15376(15)	2064(5)	52(4)					
C(30)	-1530(6)	14340(13)	2208(5)	43(4)					
C(31)	-2112(7)	14280(14)	2357(5)	45(4)					
C(32)	-2408(8)	13423(13)	2292(5)	53(4)					
C(33)	-3031(8)	13514(13)	2149(6)	59(5)					
C(34)	-3176(7)	12669(12)	1854(7)	52(5)					
C(35)	-3563(7)	12839(13)	1500(8)	65(6)					
C(36)	-3482(7)	12490(17)	1056(8)	80(7)					
C(37)	-3675(7)	13223(16)	748(9)	71(7)					
C(38)	-3372(8)	13352(18)	403(8)	81(7)					
C(39)	-3272(9)	14402(19)	243(6)	87(8)					
C(40)	-3468(9)	15295(17)	451(6)	74(7)					
C(41)	-3124(9)	16229(15)	526(6)	66(6)					
C(42)	-2573(11)	16285(14)	379(7)	77(7)					
C(43)	-2126(9)	16707(12)	673(7)	70(7)					

^a U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S3. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2a · 0.25CS₂

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Os(1)	20(1)	43(1)	31(1)	11(1)	4(1)	0(1)
Os(2)	21(1)	41(1)	39(1)	16(1)	0(1)	3(1)
Os(3)	28(1)	25(1)	48(1)	6(1)	5(1)	-1(1)
C(1A)	17(7)	71(11)	45(9)	27(9)	15(6)	6(7)
O(1A)	51(7)	101(11)	87(10)	63(9)	14(7)	5(7)
C(1B)	39(8)	64(11)	27(8)	8(8)	3(7)	-14(8)
O(1B)	87(10)	92(10)	64(9)	-15(8)	34(8)	16(8)
C(2A)	16(7)	83(14)	90(14)	44(12)	3(8)	-3(8)
O(2A)	65(8)	68(9)	113(12)	59(9)	3(8)	-1(7)
C(2B)	32(8)	58(11)	55(11)	19(9)	10(8)	5(7)
O(2B)	88(11)	127(14)	63(10)	-20(10)	7(8)	0(10)
C(2C)	29(7)	39(8)	25(7)	7(6)	3(6)	3(6)
O(2C)	35(6)	56(7)	73(8)	14(6)	7(5)	8(5)
C(3A)	47(9)	34(9)	55(11)	7(8)	-3(8)	3(7)
O(3A)	74(9)	50(7)	99(11)	35(7)	20(7)	-28(6)
C(3B)	43(10)	34(9)	76(13)	-2(8)	7(9)	-7(7)
O(3B)	44(7)	56(8)	135(13)	0(8)	23(8)	-3(6)
C(3C)	78(12)	31(9)	53(12)	2(8)	7(9)	-17(9)
O(3C)	129(13)	39(7)	79(10)	-7(7)	-25(9)	6(8)
C(100)	35(8)	45(9)	37(9)	12(7)	7(7)	-9(7)
N(1)	25(6)	89(10)	30(7)	34(7)	-5(5)	-16(6)
C(101)	31(9)	112(17)	64(13)	14(12)	-13(8)	-13(8)
C(102)	27(8)	77(12)	42(10)	14(9)	-4(7)	-23(10)
C(103)	61(12)	69(13)	73(14)	-8(11)	17(10)	-36(18)
C(104)	120(2)	150(2)	48(14)	-40(15)	34(14)	-39(18)
C(105)	79(17)	170(3)	52(14)	17(17)	-6(12)	-27(17)
C(106)	83(18)	140(2)	140(3)	90(2)	-9(17)	6(10)
C(107)	60(12)	72(13)	75(14)	10(11)	-10(10)	6(10)
C(1)	24(6)	19(6)	33(8)	8(6)	-10(5)	0(5)
C(2)	14(6)	22(6)	26(7)	8(5)	-4(5)	-4(5)
C(3)	13(6)	31(7)	38(8)	6(6)	-8(5)	-2(5)
C(4)	19(6)	11(6)	47(8)	13(6)	-6(5)	4(5)
C(5)	26(6)	23(7)	24(7)	3(5)	5(5)	10(5)
C(6)	23(6)	29(7)	26(7)	9(6)	4(5)	-8(5)
C(7)	26(7)	37(8)	30(8)	-14(6)	2(6)	-20(6)
C(8)	16(6)	54(9)	22(7)	16(7)	-5(5)	-4(6)
C(9)	6(5)	35(8)	65(10)	1(7)	9(6)	-1(5)
(10)	20(7)	53(10)	36(8)	10(7)	8(6)	15(6)
C(11)	41(8)	27(7)	34(8)	3(6)	17(6)	8(6)
C(12)	34(7)	43(8)	13(6)	-8(6)	8(5)	12(6)
C(13)	30(7)	46(9)	25(7)	7(7)	-4(6)	2(6)
C(14)	26(7)	18(6)	34(8)	-1(6)	-13(5)	2(5)
C(15)	16(6)	46(9)	39(9)	1(7)	-18(6)	-5(6)
C(16)	18(6)	41(8)	51(10)	19(7)	-15(6)	9(6)
C(17)	26(7)	20(7)	58(10)	26(7)	-4(6)	9(6)
C(18)	24(7)	37(7)	30(8)	-2(6)	1(6)	-1(5)
C(19)	47(8)	25(7)	30(8)	-6(6)	12(6)	4(6)
C(20)	39(8)	23(7)	30(8)	-5(6)	-9(6)	8(6)
C(21)	43(8)	39(8)	19(7)	-6(6)	-13(6)	7(7)
C(22)	36(8)	53(10)	26(8)	10(7)	-18(6)	-4(7)

S15

C(24)	22(6)	51(9)	20(7)	0(6)	-8(5)	-3(6)
C(25)	20(7)	53(10)	35(9)	7(7)	-11(6)	9(6)
C(26)	14(6)	26(7)	64(11)	13(7)	0(6)	5(5)
C(27)	33(8)	32(8)	56(10)	8(7)	13(7)	9(6)
C(28)	37(8)	29(8)	36(8)	-5(6)	6(6)	2(6)
C(29)	49(9)	28(8)	45(9)	-24(7)	16(7)	8(6)
C(30)	42(8)	46(9)	21(7)	-20(7)	1(6)	-5(7)
C(31)	40(8)	35(8)	40(9)	-12(7)	-6(7)	-16(7)
C(32)	19(6)	44(9)	36(8)	1(7)	-17(6)	-9(6)
C(33)	29(7)	48(9)	31(8)	-5(7)	-7(6)	-11(6)
C(34)	12(6)	56(10)	40(9)	6(7)	5(6)	-8(6)
C(35)	29(7)	34(8)	58(10)	2(7)	24(7)	-1(6)
C(36)	21(7)	44(8)	41(9)	3(7)	26(6)	5(6)
C(37)	31(7)	28(7)	39(8)	-2(6)	22(6)	12(6)
C(38)	56(10)	36(8)	30(8)	-11(7)	11(7)	-3(7)
C(39)	51(9)	40(9)	19(7)	4(6)	8(6)	-7(7)
C(40)	48(9)	57(10)	15(7)	6(7)	4(6)	-8(8)
C(41)	56(10)	45(9)	18(7)	15(7)	-3(6)	2(7)
C(42)	35(8)	58(10)	30(8)	23(8)	-13(6)	-13(7)
C(43)	24(7)	42(9)	48(10)	26(8)	-17(6)	4(6)
C(44)	41(8)	33(8)	58(11)	30(8)	6(7)	23(7)
C(45)	39(8)	35(8)	52(10)	10(7)	11(7)	19(7)
C(46)	45(9)	28(8)	42(9)	3(7)	-1(7)	11(6)
C(47)	53(10)	20(7)	67(12)	-19(8)	1(8)	3(7)
C(48)	40(8)	17(7)	51(10)	-7(7)	-9(7)	-16(6)
C(49)	42(9)	34(8)	46(10)	0(7)	-7(7)	-10(6)
C(50)	23(7)	34(8)	58(10)	10(7)	-3(6)	9(6)
C(51)	19(7)	45(9)	65(11)	17(8)	5(7)	0(7)
C(52)	35(8)	45(9)	46(10)	8(8)	23(7)	9(6)
C(53)	53(9)	44(9)	27(8)	1(7)	28(7)	-3(7)
C(54)	51(9)	41(9)	27(8)	13(7)	22(7)	3(7)
C(55)	28(7)	55(10)	32(8)	26(7)	7(6)	-1(7)
C(56)	38(8)	34(8)	42(9)	19(7)	2(7)	1(6)
C(57)	39(8)	33(8)	59(11)	34(8)	-7(7)	2(7)
C(58)	41(9)	29(8)	61(11)	13(7)	1(8)	8(6)
C(59)	26(7)	32(8)	55(10)	10(7)	3(7)	-10(6)
C(60)	37(8)	40(9)	55(10)	19(8)	13(7)	2(7)
Os(4)	25(1)	35(1)	39(1)	-3(1)	1(1)	9(1)
Os(5)	42(1)	23(1)	43(1)	4(1)	3(1)	7(1)
Os(6)	39(1)	32(1)	41(1)	-12(1)	-8(1)	9(1)
Os(4')	53(9)	27(7)	360(4)	-71(14)	-18(15)	6(6)
Os(5')	141(16)	99(13)	65(10)	-13(9)	54(10)	79(13)
Os(6')	56(8)	72(9)	95(11)	-2(8)	41(8)	3(7)
C(4A)	41(9)	75(13)	56(11)	1(10)	0(8)	21(9)
O(4A)	71(9)	71(10)	121(13)	-6(9)	32(8)	11(9)
C(4B)	37(10)	160(2)	48(11)	-35(13)	0(8)	33(12)
O(4B)	50(8)	181(18)	99(12)	-78(12)	-33(8)	17(10)
C(5A)	71(12)	17(8)	92(15)	-2(8)	21(10)	3(8)
O(5A)	96(11)	34(7)	123(13)	1(7)	29(9)	25(7)
C(5B)	67(13)	28(9)	109(18)	8(11)	-7(12)	14(9)
O(5B)	94(12)	81(11)	102(13)	-2(9)	-44(10)	15(9)
C(5C)	76(12)	15(7)	72(13)	5(8)	33(10)	-10(7)
O(5C)	125(12)	41(7)	102(12)	-15(7)	56(10)	-27(8)
C(6A)	84(14)	82(15)	78(14)	-35(12)	-28(11)	57(12)
O(6A)	105(12)	105(12)	116(13)	-42(10)	-15(10)	-74(10)
C(6B)	80(13)	35(9)	51(11)	-5(8)	-22(9)	2(9)
O(6B)	118(13)	69(10)	90(11)	-4(8)	-8(9)	-38(9)

S16

C(47)	48(9)	47(10)	62(12)	-35(9)	-10(8)	4(8)
C(48)	46(9)	61(11)	30(9)	-9(8)	7(7)	5(8)
C(49)	55(10)	49(10)	30(8)	-3(7)	22(7)	25(8)
C(50)	49(10)	44(10)	85(14)	-7(9)	39(10)	-6(8)
C(51)	27(8)	60(12)	88(14)	-24(11)	22(9)	1(8)
C(52)	18(8)	77(14)	140(2)	-28(15)	28(11)	-12(8)
C(53)	28(9)	84(16)	97(17)	-26(14)	-16(9)	7(9)
C(54)	18(8)	67(14)	140(2)	-40(14)	-37(10)	25(8)
C(55)	28(8)	58(11)	80(14)	-30(10)	-16(8)	20(8)
C(56)	56(11)	29(9)	72(13)	6(8)	-10(9)	33(8)
C(57)	53(10)	13(7)	82(13)	-2(8)	-2(9)	21(7)
C(58)	35(8)	25(8)	62(11)	-12(7)	6(7)	6(6)
C(59)	46(10)	51(10)	70(12)	-25(9)	10(9)	21(8)
C(60)	19(7)	60(12)	99(16)	-24(11)	12(9)	19(7)
S(1)	50	50	50	0	5	0
C(700)	77(11)	97(12)	85(12)	21(9)	-6(9)	0(9)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form :

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

C(6C)	52(10)	38(9)	53(11)	-15(8)	-8(8)	6(7)
O(6C)	78(9)	91(10)	47(8)	-8(7)	-9(7)	1(8)
C(400)	50(10)	28(8)	57(11)	3(8)	4(8)	5(7)
N(4)	67(10)	68(11)	76(12)	18(9)	44(9)	1(8)
C(401)	120(2)	92(17)	110(2)	22(16)	56(17)	36(16)
C(402)	130(2)	59(14)	60(14)	-4(11)	23(14)	7(14)
C(403)	130(2)	87(19)	110(2)	36(17)	21(8)	-3(19)
C(404)	180(3)	140(3)	54(16)	4(17)	24(18)	-30(2)
C(405)	180(3)	110(2)	62(17)	34(16)	-20(17)	10(2)
C(406)	170(3)	47(13)	100(2)	4(13)	-19(19)	-1(16)
C(407)	160(2)	58(14)	81(17)	29(12)	36(16)	0(15)
C(1)	26(7)	25(7)	36(8)	2(6)	11(6)	7(5)
C(2)	24(7)	33(8)	46(9)	-12(7)	-3(6)	14(6)
C(3)	29(7)	23(7)	25(7)	12(6)	-4(5)	11(5)
C(4)	32(7)	22(7)	57(10)	-9(7)	14(7)	15(6)
C(5)	12(6)	43(8)	40(8)	-12(7)	-6(5)	3(6)
C(6)	51(9)	22(7)	37(9)	-3(6)	7(7)	22(6)
C(7)	78(12)	50(10)	20(8)	-3(7)	11(8)	33(9)
C(8)	85(13)	49(10)	42(10)	14(8)	43(10)	19(9)
C(9)	33(8)	37(9)	51(10)	0(8)	27(7)	11(6)
C(10)	25(8)	46(10)	83(14)	-3(9)	24(8)	-4(7)
C(11)	17(7)	45(10)	80(13)	-16(9)	-3(7)	1(6)
C(12)	25(7)	42(9)	44(9)	-2(7)	4(6)	-13(6)
C(13)	25(7)	50(9)	38(9)	-9(7)	-16(6)	24(7)
C(14)	42(8)	22(7)	32(8)	11(6)	-1(6)	14(6)
C(15)	93(14)	28(8)	38(10)	11(7)	27(9)	18(8)
C(16)	51(10)	37(9)	89(15)	5(10)	29(10)	-18(8)
C(17)	46(9)	15(7)	89(14)	-4(8)	24(9)	-8(6)
C(18)	29(8)	30(9)	109(16)	-34(10)	0(9)	-7(7)
C(19)	56(10)	30(8)	-37(8)	-9(8)	5(7)	5(5)
C(20)	87(15)	82(15)	73(14)	-56(12)	-68(12)	55(13)
C(21)	71(13)	69(13)	49(12)	-22(10)	-11(10)	10(11)
C(22)	73(13)	75(14)	40(11)	1(10)	-18(9)	38(11)
C(23)	110(17)	57(12)	27(9)	25(9)	5(10)	31(12)
C(24)	79(13)	53(11)	49(11)	23(9)	33(10)	28(10)
C(25)	100(16)	35(10)	70(14)	33(10)	49(12)	11(10)
C(26)	68(12)	19(8)	96(16)	-1(9)	41(11)	-19(8)
C(27)	45(10)	42(10)	92(15)	-12(10)	13(10)	-26(8)
C(28)	20(7)	48(10)	70(12)	-28(9)	-5(7)	-5(7)
C(29)	37(9)	73(13)	42(10)	-14(9)	-19(7)	-2(8)
C(30)	41(8)	55(10)	30(8)	-2(8)	-16(6)	3(7)
C(31)	56(10)	58(11)	21(8)	-3(7)	9(7)	17(8)
C(32)	79(13)	46(10)	38(10)	9(8)	25(9)	3(9)
C(33)	69(12)	39(10)	77(13)	7(9)	46(11)	0(8)
C(34)	42(10)	33(9)	86(14)	0(9)	34(10)	-14(7)
C(35)	37(10)	44(10)	120(18)	-20(11)	40(11)	-19(8)
C(36)	30(9)	72(14)	140(2)	-55(15)	7(11)	-26(9)
C(37)	19(8)	58(12)	130(2)	-45(13)	-30(10)	3(8)
C(38)	49(12)	84(16)	96(17)	-56(14)	-57(11)	30(11)
C(39)	83(15)	100(18)	66(14)	-39(13)	-56(11)	58(13)
C(40)	79(14)	81(15)	54(12)	-25(11)	-35(10)	64(12)
C(41)	77(14)	54(12)	66(13)	20(10)	6(11)	57(11)
C(42)	130(2)	35(10)	60(13)	11(9)	-16(13)	27(12)
C(43)	92(15)	22(9)	102(17)	30(10)	52(14)	35(9)
C(44)	62(11)	11(7)	104(16)	14(9)	27(11)	22(7)
C(45)	44(9)	11(7)	93(14)	-9(8)	11(9)	-7(6)
C(46)	39(8)	23(8)	72(12)	-3(8)	-9(8)	3(6)

S17

S18

Table S4. Interatomic Distances (Å) and Esd's for **2a** · 0.25CS₂

Os(1)-C(1A)	1.874(15)	Os(1)-C(1B)	1.869(17)	C(44)-C(45)	1.49(2)	C(44)-C(57)	1.48(2)
Os(1)-C(1)	2.221(12)	Os(1)-C(100)	1.976(15)	C(46)-C(47)	1.38(2)	C(45)-C(46)	1.44(2)
Os(1)-Os(2)	2.8736(7)	Os(1)-C(2)	2.266(11)	C(47)-C(48)	1.45(2)	C(46)-C(58)	1.42(2)
Os(2)-C(2A)	1.892(18)	Os(1)-Os(3)	2.9219(8)	C(49)-C(50)	1.41(2)	C(48)-C(49)	1.39(2)
Os(2)-C(2C)	1.905(13)	Os(2)-C(2B)	1.90(2)	C(50)-C(51)	1.46(2)	C(49)-C(59)	1.48(2)
Os(2)-C(4)	2.312(12)	Os(2)-C(3)	2.252(13)	C(51)-C(60)	1.46(2)	C(51)-C(52)	1.38(2)
Os(3)-C(3C)	1.896(19)	Os(2)-Os(3)	2.8932(8)	C(53)-C(54)	1.39(2)	C(52)-C(53)	1.44(2)
Os(3)-C(3A)	1.926(16)	Os(3)-C(3B)	1.898(17)	C(55)-C(56)	1.37(2)	C(54)-C(55)	1.41(2)
Os(3)-C(6)	2.291(12)	Os(3)-C(5)	2.222(12)	C(57)-C(58)	1.428(19)	C(55)-C(56)	1.486(19)
C(1B)-O(1B)	1.172(18)	C(1A)-O(1A)	1.158(16)	Os(4)-Os(5)	1.65(2)	C(57)-C(58)	1.46(2)
C(2B)-O(2B)	1.16(2)	C(2A)-O(2A)	1.151(19)	Os(4)-C(1)	1.87(2)	C(59)-C(60)	1.42(2)
C(3A)-O(3A)	1.127(17)	C(2C)-O(2C)	1.132(15)	Os(4)-C(4A)	1.975(17)	Os(4)-Os(6)	1.852(17)
C(3C)-O(3C)	1.12(2)	C(3B)-O(3B)	1.127(17)	Os(4)-C(4)	2.294(12)	Os(4)-C(6)	1.888(17)
N(1)-C(101)	1.408(19)	C(100)-N(1)	1.134(17)	Os(4)-C(5)	2.294(12)	Os(4)-C(4A)	2.253(12)
C(102)-C(103)	1.3900	C(101)-C(102)	1.475(19)	Os(4)-Os(5)	2.9016(9)	Os(4)-Os(5)	2.8794(9)
C(103)-C(104)	1.3900	C(102)-C(107)	1.3900	Os(5)-Os(5)	1.894(15)	Os(5)-Os(5)	1.54(2)
C(105)-C(106)	1.3900	C(104)-C(105)	1.3900	Os(5)-C(5B)	1.926(15)	Os(5)-C(5B)	1.90(2)
C(1)-C(2)	1.415(16)	C(106)-C(107)	1.3900	Os(5)-C(3)	2.250(12)	Os(5)-C(4)	1.96(3)
C(1)-C(9)	1.487(17)	C(1)-C(6)	1.448(17)	Os(5)-Os(6)	2.9022(9)	Os(5)-C(4)	2.307(13)
C(2)-C(12)	1.484(17)	C(2)-C(3)	1.478(15)	Os(6)-Os(6)	1.46(3)	Os(6)-Os(6)	2.307(13)
C(3)-C(14)	1.472(17)	C(3)-C(4)	1.418(18)	Os(6)-C(6A)	1.896(17)	Os(6)-C(6C)	1.432(14)
C(4)-C(17)	1.492(17)	C(4)-C(5)	1.467(18)	Os(6)-C(5)	2.240(12)	Os(6)-C(6B)	1.887(18)
C(5)-C(19)	1.468(17)	C(5)-C(6)	1.458(16)	Os(6)-C(5)	2.240(12)	Os(6)-C(6B)	1.912(19)
C(7)-C(21)	1.380(18)	C(6)-C(7)	1.447(18)	Os(6)-C(6)	1.45(3)	Os(6)-C(6)	2.317(12)
C(8)-C(24)	1.396(18)	C(7)-C(8)	1.464(18)	Os(4)-C(6B)	2.25(2)	Os(4)-C(5)	2.12(2)
C(9)-C(10)	1.352(19)	C(8)-C(9)	1.448(19)	Os(4)-C(4)	2.25(2)	Os(4)-O(6B)	2.39(2)
C(10)-C(11)	1.465(18)	C(10)-C(26)	1.453(19)	Os(4)-Os(6)	2.62(3)	Os(4)-Os(5)	2.93(3)
C(13)-C(30)	1.36(2)	C(13)-C(13)	1.369(18)	Os(5)-C(5B)	1.90(3)	Os(5)-Os(5)	2.230(19)
C(14)-C(15)	1.355(17)	C(11)-C(12)	1.423(18)	Os(5)-C(3)	2.26(2)	Os(5)-C(2)	2.36(2)
C(15)-C(32)	1.472(19)	C(12)-C(13)	1.468(17)	Os(5)-C(4B)	2.47(3)	Os(5)-C(4A)	2.36(2)
C(16)-C(34)	1.423(18)	C(13)-C(14)	1.42(2)	Os(5)-Os(6)	2.86(2)	Os(5)-C(5A)	2.56(2)
C(17)-C(18)	1.409(17)	C(15)-C(16)	1.42(2)	Os(6)-C(6A)	2.13(2)	Os(6)-C(6)	2.094(17)
C(18)-C(19)	1.359(19)	C(16)-C(17)	1.416(19)	Os(6)-C(6A)	2.321(19)	Os(6)-C(400)	2.14(2)
C(19)-C(20)	1.477(18)	C(17)-C(18)	1.42(2)	C(4A)-O(4A)	1.150(18)	Os(6)-C(6C)	2.33(2)
C(20)-C(21)	1.41(2)	C(18)-C(19)	1.443(18)	C(5A)-O(5A)	1.148(17)	C(4B)-O(4B)	1.15(2)
C(22)-C(23)	1.438(18)	C(20)-C(21)	1.432(18)	C(5C)-O(5C)	1.097(17)	C(5B)-O(5B)	1.15(2)
C(23)-C(24)	1.37(2)	C(21)-C(22)	1.484(19)	C(6B)-O(6B)	1.17(2)	C(6A)-O(6A)	1.173(19)
C(24)-C(25)	1.470(19)	C(22)-C(23)	1.433(19)	C(400)-N(4)	1.145(19)	C(6C)-O(6C)	1.153(19)
C(25)-C(43)	1.395(19)	C(23)-C(24)	1.442(2)	C(401)-C(402)	1.53(3)	N(4)-C(401)	1.41(2)
C(27)-C(45)	1.374(19)	C(25)-C(26)	1.37(2)	C(402)-C(407)	1.3900	C(402)-C(403)	1.3900
C(28)-C(29)	1.472(19)	C(26)-C(27)	1.471(19)	C(404)-C(405)	1.3900	C(403)-C(404)	1.3900
C(29)-C(30)	1.39(2)	C(27)-C(28)	1.42(2)	C(406)-C(407)	1.3900	C(405)-C(406)	1.422(19)
C(31)-C(32)	1.39(2)	C(29)-C(30)	1.442(2)	C(1)-C(6)	1.44(2)	C(1)-C(2)	1.459(19)
C(32)-C(33)	1.460(19)	C(30)-C(31)	1.474(19)	C(2)-C(3)	1.491(19)	C(2)-C(12)	1.525(19)
C(33)-C(34)	1.46(2)	C(31)-C(32)	1.42(2)	C(3)-C(4)	1.426(19)	C(3)-C(14)	1.446(18)
C(35)-C(36)	1.434(19)	C(33)-C(34)	1.37(2)	C(4)-C(5)	1.47(2)	C(4)-C(17)	1.488(19)
C(36)-C(37)	1.40(2)	C(34)-C(35)	1.40(2)	C(5)-C(6)	1.458(19)	C(5)-C(19)	1.469(19)
C(37)-C(38)	1.459(19)	C(35)-C(36)	1.45(2)	C(6)-C(7)	1.45(2)	C(7)-C(21)	1.31(2)
C(39)-C(40)	1.39(2)	C(37)-C(38)	1.385(19)	C(7)-C(8)	1.48(2)	C(7)-C(24)	1.39(2)
C(40)-C(41)	1.45(2)	C(38)-C(39)	1.45(2)	C(8)-C(9)	1.45(2)	C(8)-C(10)	1.36(2)
C(41)-C(42)	1.42(2)	C(40)-C(41)	1.44(2)	C(10)-C(11)	1.42(2)	C(9)-C(10)	1.48(2)
C(43)-C(44)	1.36(2)	C(41)-C(42)	1.415(19)	C(11)-C(12)	1.42(2)	C(10)-C(26)	1.46(2)
		C(42)-C(43)	1.41(2)	C(12)-C(13)	1.42(2)	C(11)-C(28)	1.38(2)
				C(13)-C(14)	1.42(2)	C(12)-C(30)	1.38(2)
				C(15)-C(16)	1.42(2)	C(13)-C(34)	1.36(2)
				C(16)-C(17)	1.416(19)	C(14)-C(15)	1.36(2)
				C(17)-C(18)	1.42(2)	C(15)-C(32)	1.47(3)
				C(18)-C(19)	1.443(18)	C(16)-C(34)	1.34(2)
				C(19)-C(20)	1.432(18)	C(17)-C(17)	1.42(2)
				C(20)-C(21)	1.484(19)	C(18)-C(18)	1.42(2)
				C(21)-C(22)	1.433(19)	C(19)-C(19)	1.42(2)
				C(22)-C(23)	1.442(2)	C(20)-C(20)	1.42(2)
				C(23)-C(24)	1.37(2)	C(21)-C(21)	1.42(2)
				C(24)-C(25)	1.470(19)	C(22)-C(22)	1.42(2)
				C(25)-C(43)	1.395(19)	C(23)-C(23)	1.42(2)
				C(27)-C(45)	1.374(19)	C(24)-C(24)	1.42(2)
				C(28)-C(29)	1.472(19)	C(25)-C(25)	1.42(2)
				C(29)-C(30)	1.39(2)	C(26)-C(26)	1.42(2)
				C(31)-C(32)	1.39(2)	C(27)-C(27)	1.42(2)
				C(32)-C(33)	1.460(19)	C(28)-C(28)	1.42(2)
				C(33)-C(34)	1.46(2)	C(29)-C(29)	1.42(2)
				C(35)-C(36)	1.434(19)	C(30)-C(30)	1.42(2)
				C(36)-C(37)	1.40(2)	C(31)-C(31)	1.42(2)
				C(37)-C(38)	1.459(19)	C(32)-C(32)	1.42(2)
				C(39)-C(40)	1.39(2)	C(33)-C(33)	1.42(2)
				C(40)-C(41)	1.45(2)	C(34)-C(34)	1.42(2)
				C(41)-C(42)	1.42(2)	C(35)-C(35)	1.42(2)
						C(36)-C(36)	1.42(2)
						C(37)-C(37)	1.42(2)
						C(38)-C(38)	1.42(2)
						C(39)-C(39)	1.42(2)
						C(40)-C(40)	1.42(2)
						C(41)-C(41)	1.42(2)
						C(42)-C(42)	1.42(2)
						C(43)-C(43)	1.42(2)

Table S5. Interatomic Angles (deg) and Esd's for 2a ·0.25CS₂

C(21)-C(22)	1.46(2)	C(20)-C(21)	1.47(3)	C(1B)-Os(1)-C(1A)	89.0(7)	C(1B)-Os(1)-C(100)	92.4(6)
C(22)-C(39)	1.48(3)	C(22)-C(23)	1.37(3)	C(1A)-Os(1)-C(100)	98.7(6)	C(1B)-Os(1)-C(1)	101.0(6)
C(23)-C(42)	1.40(3)	C(23)-C(24)	1.40(3)	C(1A)-Os(1)-C(1)	170.0(6)	C(100)-Os(1)-C(1)	81.9(5)
C(25)-C(26)	1.43(3)	C(24)-C(25)	1.44(3)	C(1B)-Os(1)-C(2)	84.6(5)	C(1A)-Os(1)-C(2)	145.6(6)
C(26)-C(27)	1.43(2)	C(25)-C(43)	1.50(2)	C(100)-Os(1)-C(2)	115.3(5)	C(1)-Os(1)-C(2)	36.8(4)
C(27)-C(45)	1.41(2)	C(27)-C(28)	1.40(2)	C(1B)-Os(1)-Os(2)	119.1(4)	C(1A)-Os(1)-Os(2)	83.2(4)
C(29)-C(30)	1.41(2)	C(28)-C(29)	1.38(2)	C(100)-Os(1)-Os(2)	148.5(4)	C(1)-Os(1)-Os(2)	91.1(3)
C(30)-C(31)	1.49(2)	C(29)-C(47)	1.50(2)	C(2)-Os(1)-Os(2)	70.8(3)	C(1B)-Os(1)-Os(3)	173.9(4)
C(31)-C(48)	1.45(2)	C(31)-C(32)	1.30(2)	C(1A)-Os(1)-Os(3)	96.8(5)	C(100)-Os(1)-Os(3)	88.8(4)
C(33)-C(50)	1.35(2)	C(32)-C(33)	1.50(3)	C(1)-Os(1)-Os(3)	73.3(3)	C(2)-Os(1)-Os(3)	89.5(3)
C(34)-C(35)	1.38(3)	C(33)-C(34)	1.43(2)	Os(2)-Os(1)-Os(3)	59.890(19)	C(2A)-Os(2)-C(2B)	97.4(8)
C(35)-C(52)	1.50(3)	C(35)-C(36)	1.47(3)	C(1A)-Os(1)-Os(3)	90.7(6)	C(2B)-Os(2)-C(2C)	92.9(6)
C(37)-C(38)	1.35(3)	C(36)-C(37)	1.38(3)	C(2A)-Os(2)-C(2C)	167.5(5)	C(2B)-Os(2)-C(3)	85.0(6)
C(38)-C(39)	1.45(3)	C(37)-C(53)	1.45(3)	C(2A)-Os(2)-C(3)	101.5(5)	C(2A)-Os(2)-C(4)	144.9(7)
C(40)-C(41)	1.44(3)	C(39)-C(40)	1.40(2)	C(2C)-Os(2)-C(3)	117.6(6)	C(2C)-Os(2)-C(4)	84.3(5)
C(41)-C(42)	1.42(3)	C(40)-C(54)	1.50(3)	C(3)-Os(2)-C(4)	36.2(4)	C(2A)-Os(2)-Os(1)	94.5(4)
C(42)-C(43)	1.43(3)	C(41)-C(56)	1.46(2)	C(2B)-Os(2)-Os(1)	90.1(4)	C(2C)-Os(2)-Os(1)	173.6(4)
C(44)-C(45)	1.40(3)	C(43)-C(44)	1.36(3)	C(3)-Os(2)-Os(1)	73.1(3)	C(4)-Os(2)-Os(1)	89.3(3)
C(45)-C(46)	1.50(2)	C(44)-C(57)	1.49(2)	C(2B)-Os(2)-Os(1)	81.9(6)	C(2B)-Os(2)-Os(3)	150.7(4)
C(46)-C(58)	1.46(2)	C(45)-C(47)	1.37(2)	C(2A)-Os(2)-Os(3)	116.3(4)	C(3)-Os(2)-Os(3)	90.0(3)
C(48)-C(49)	1.35(2)	C(46)-C(47)	1.42(2)	C(4)-Os(2)-Os(3)	69.6(3)	Os(1)-Os(2)-Os(3)	60.884(19)
C(49)-C(59)	1.49(2)	C(47)-C(48)	1.48(2)	C(3C)-Os(3)-C(3B)	93.6(8)	C(3C)-Os(3)-C(3A)	90.6(7)
C(51)-C(52)	1.37(3)	C(50)-C(51)	1.43(3)	C(3B)-Os(3)-C(3A)	101.3(6)	C(3C)-Os(3)-C(5)	97.8(6)
C(52)-C(53)	1.45(3)	C(51)-C(60)	1.47(3)	C(3B)-Os(3)-C(5)	85.7(5)	C(3A)-Os(3)-C(5)	168.8(6)
C(54)-C(55)	1.51(2)	C(53)-C(54)	1.34(3)	C(3C)-Os(3)-C(6)	86.0(6)	C(3B)-Os(3)-C(6)	122.1(6)
C(55)-C(60)	1.39(3)	C(55)-C(56)	1.37(2)	C(3A)-Os(3)-C(6)	136.6(5)	C(5)-Os(3)-C(6)	77.7(4)
C(57)-C(58)	1.43(2)	C(56)-C(57)	1.39(2)	C(3C)-Os(3)-Os(2)	170.3(5)	C(3B)-Os(3)-Os(2)	81.3(5)
C(59)-C(60)	1.44(2)	C(58)-C(59)	1.33(2)	C(6)-Os(3)-Os(2)	98.4(5)	C(5)-Os(3)-Os(2)	126.6(6)
S(1)-C(700)	1.3913			C(3B)-Os(3)-Os(1)	139.8(5)	C(3A)-Os(3)-Os(1)	79.4(5)
				C(5)-Os(3)-Os(1)	89.6(3)	C(6)-Os(3)-Os(1)	68.6(3)
				Os(2)-Os(3)-Os(1)	59.226(19)	Os(1)-C(1A)-Os(1)	178.1(11)
				O(1B)-C(1B)-Os(1)	176.7(14)	O(2A)-C(2A)-Os(2)	177.7(19)
				O(2B)-C(2B)-Os(2)	176.1(15)	O(2C)-C(2C)-Os(2)	176.6(12)
				O(3A)-C(3A)-Os(3)	172.9(15)	O(3B)-C(3B)-Os(3)	177.5(14)
				O(3C)-C(3C)-Os(3)	177.8(18)	N(1)-C(100)-Os(1)	173.0(13)
				C(100)-N(1)-C(101)	174.5(15)	N(1)-C(101)-C(102)	114.4(12)
				C(103)-C(102)-C(107)	120.0	C(103)-C(102)-C(101)	118.6(12)
				C(107)-C(102)-C(101)	121.4(12)	C(102)-C(103)-C(104)	120.0
				C(105)-C(104)-C(103)	120.0	C(104)-C(105)-C(106)	120.0
				C(107)-C(106)-C(105)	120.0	C(106)-C(107)-C(102)	120.0
				C(2)-C(1)-C(6)	118.8(11)	C(2)-C(1)-C(9)	118.8(11)
				C(6)-C(1)-C(9)	107.5(11)	C(9)-C(1)-Os(1)	73.3(7)
				C(6)-C(1)-Os(1)	106.9(8)	C(1)-C(2)-C(12)	128.8(9)
				C(1)-C(2)-C(3)	122.0(11)	C(1)-C(2)-Os(1)	118.5(11)
				C(3)-C(2)-C(12)	105.6(10)	C(12)-C(2)-Os(1)	69.9(7)
				C(3)-C(2)-Os(1)	109.7(8)	C(4)-C(3)-C(2)	128.9(8)
				C(4)-C(3)-C(14)	118.6(10)	C(4)-C(3)-Os(2)	117.9(11)
				C(14)-C(3)-C(2)	108.3(10)	C(2)-C(3)-Os(2)	74.3(7)
				C(14)-C(3)-Os(2)	128.5(8)	C(3)-C(4)-C(17)	106.3(8)
				C(3)-C(4)-C(5)	122.2(10)	C(3)-C(4)-Os(2)	118.1(11)
				C(5)-C(4)-C(17)	106.2(12)		69.6(7)

C(5)-C(4)-Os(2)	109.1(8)	C(17)-C(4)-Os(2)	129.2(8)	C(39)-C(40)-C(41)	119.6(13)	C(54)-C(40)-C(41)	106.6(13)
C(6)-C(5)-C(4)	117.5(10)	C(6)-C(5)-C(19)	118.9(11)	C(42)-C(41)-C(56)	119.3(14)	C(42)-C(41)-C(40)	121.2(14)
C(4)-C(5)-C(19)	108.0(10)	C(6)-C(5)-Os(3)	73.7(7)	C(56)-C(41)-C(40)	108.8(13)	C(43)-C(42)-C(41)	119.9(14)
C(4)-C(5)-Os(3)	107.5(8)	C(19)-C(5)-Os(3)	128.2(9)	C(43)-C(42)-C(23)	108.9(12)	C(41)-C(42)-C(23)	118.0(15)
C(7)-C(6)-C(1)	108.0(11)	C(7)-C(6)-C(5)	115.7(11)	C(44)-C(43)-C(42)	120.8(13)	C(44)-C(43)-C(25)	120.4(14)
C(1)-C(6)-C(5)	121.6(11)	C(7)-C(6)-Os(3)	128.3(9)	C(42)-C(43)-C(25)	106.2(13)	C(43)-C(44)-C(57)	120.3(15)
C(1)-C(6)-Os(3)	111.1(8)	C(5)-C(6)-Os(3)	68.6(7)	C(43)-C(44)-C(45)	122.4(13)	C(57)-C(44)-C(45)	106.5(14)
C(21)-C(7)-C(6)	124.1(12)	C(5)-C(6)-C(8)	117.8(12)	C(27)-C(45)-C(46)	119.9(14)	C(27)-C(45)-C(58)	117.3(14)
C(16)-C(7)-C(8)	109.2(11)	C(21)-C(7)-C(8)	118.7(13)	C(46)-C(45)-C(44)	108.6(12)	C(47)-C(46)-C(58)	122.5(14)
C(24)-C(8)-C(7)	122.7(12)	C(9)-C(8)-C(7)	107.1(11)	C(47)-C(46)-C(45)	118.9(14)	C(58)-C(46)-C(45)	107.6(13)
C(10)-C(9)-C(8)	120.2(14)	C(10)-C(9)-C(1)	121.1(13)	C(46)-C(47)-C(29)	120.2(14)	C(46)-C(47)-C(48)	118.0(15)
C(8)-C(9)-C(1)	108.1(11)	C(9)-C(10)-C(26)	119.6(14)	C(29)-C(47)-C(48)	108.6(13)	C(49)-C(48)-C(31)	118.8(14)
C(9)-C(10)-C(11)	120.2(12)	C(9)-C(10)-C(11)	108.7(13)	C(49)-C(48)-C(47)	122.1(14)	C(31)-C(48)-C(47)	108.1(13)
C(12)-C(11)-C(10)	120.6(12)	C(12)-C(11)-C(28)	120.8(13)	C(48)-C(49)-C(50)	122.2(14)	C(48)-C(49)-C(59)	118.8(14)
C(10)-C(11)-C(28)	106.4(12)	C(11)-C(12)-C(13)	119.3(13)	C(50)-C(49)-C(59)	108.0(14)	C(33)-C(50)-C(51)	119.3(14)
C(11)-C(12)-C(2)	120.5(12)	C(13)-C(12)-C(2)	110.0(11)	C(33)-C(50)-C(51)	119.0(13)	C(49)-C(50)-C(51)	109.1(13)
C(30)-C(13)-C(12)	122.5(13)	C(30)-C(13)-C(14)	118.1(12)	C(52)-C(51)-C(60)	120.1(15)	C(52)-C(51)-C(50)	120.5(14)
C(12)-C(13)-C(14)	108.3(12)	C(13)-C(14)-C(13)	122.1(12)	C(60)-C(51)-C(50)	106.8(13)	C(51)-C(52)-C(53)	120.1(14)
C(15)-C(14)-C(3)	120.9(12)	C(13)-C(14)-C(3)	107.6(10)	C(51)-C(52)-C(35)	120.0(14)	C(53)-C(52)-C(35)	107.2(13)
C(14)-C(15)-C(32)	123.0(13)	C(14)-C(15)-C(32)	118.7(13)	C(52)-C(53)-C(37)	119.5(14)	C(54)-C(53)-C(37)	120.1(14)
C(16)-C(15)-C(32)	106.2(12)	C(15)-C(16)-C(17)	118.1(12)	C(53)-C(54)-C(40)	119.6(13)	C(55)-C(54)-C(40)	110.4(13)
C(18)-C(17)-C(16)	110.8(13)	C(17)-C(16)-C(34)	118.0(14)	C(60)-C(55)-C(54)	122.8(14)	C(60)-C(55)-C(56)	118.1(14)
C(16)-C(17)-C(4)	120.8(13)	C(36)-C(18)-C(17)	108.2(12)	C(54)-C(55)-C(56)	106.7(13)	C(57)-C(56)-C(41)	121.1(13)
C(36)-C(18)-C(19)	118.7(13)	C(17)-C(18)-C(19)	109.9(11)	C(57)-C(56)-C(55)	120.3(14)	C(41)-C(56)-C(55)	107.5(13)
C(20)-C(19)-C(18)	120.3(12)	C(20)-C(19)-C(5)	123.2(12)	C(57)-C(56)-C(55)	120.3(14)	C(56)-C(57)-C(44)	118.4(14)
C(18)-C(19)-C(5)	107.4(11)	C(19)-C(20)-C(38)	120.6(13)	C(58)-C(57)-C(44)	106.1(14)	C(59)-C(58)-C(57)	117.5(14)
C(19)-C(20)-C(21)	118.1(11)	C(38)-C(20)-C(21)	109.5(12)	C(46)-C(58)-C(57)	111.1(13)	C(60)-C(59)-C(49)	107.8(13)
C(7)-C(21)-C(20)	119.5(12)	C(7)-C(21)-C(22)	120.8(13)	C(60)-C(59)-C(58)	120.3(14)	C(55)-C(60)-C(51)	117.8(14)
C(20)-C(21)-C(22)	105.4(11)	C(23)-C(22)-C(39)	120.9(13)	C(58)-C(59)-C(49)	118.4(13)	C(55)-C(60)-C(59)	122.2(13)
C(23)-C(22)-C(21)	119.5(12)	C(39)-C(22)-C(21)	108.4(12)	C(55)-C(60)-C(51)	111.1(13)	C(59)-C(60)-C(51)	108.3(14)
C(24)-C(23)-C(42)	120.2(13)	C(22)-C(23)-C(42)	120.5(13)	Os(5)-Os(4)-Os(6)	109.4(7)	Os(5)-Os(4)-C(4B)	89.0(9)
C(24)-C(23)-C(4)	107.1(14)	C(25)-C(24)-C(8)	121.0(13)	Os(6)-Os(4)-C(4B)	159.6(9)	Os(5)-Os(4)-C(4A)	83.4(7)
C(25)-C(24)-C(23)	108.7(13)	C(8)-C(24)-C(23)	119.0(13)	Os(6)-Os(4)-C(4A)	101.3(7)	C(4B)-Os(4)-C(4A)	89.2(8)
C(24)-C(25)-C(26)	121.0(13)	C(24)-C(25)-C(43)	119.6(13)	Os(5)-Os(4)-C(400)	175.7(7)	Os(6)-Os(4)-C(400)	67.8(6)
C(26)-C(25)-C(43)	122.7(13)	C(10)-C(26)-C(27)	107.1(13)	C(4B)-Os(4)-C(400)	94.3(8)	C(4A)-Os(4)-C(400)	93.8(7)
C(25)-C(26)-C(27)	120.8(14)	C(45)-C(27)-C(26)	119.3(14)	Os(5)-Os(4)-C(4)	97.8(6)	Os(6)-Os(4)-C(4)	68.1(5)
C(45)-C(27)-C(28)	108.4(12)	C(29)-C(28)-C(27)	119.4(13)	C(4B)-Os(4)-C(4)	101.6(7)	C(4A)-Os(4)-C(4)	169.2(7)
C(28)-C(27)-C(26)	118.2(13)	C(27)-C(28)-C(11)	109.5(13)	C(400)-Os(4)-C(1)	84.3(5)	Os(5)-Os(4)-C(2)	66.6(6)
C(29)-C(28)-C(11)	120.7(15)	C(28)-C(29)-C(30)	121.0(13)	Os(6)-Os(4)-C(2)	96.3(5)	C(4B)-Os(4)-C(2)	82.7(6)
C(28)-C(29)-C(47)	120.7(15)	C(13)-C(30)-C(29)	118.1(13)	C(1)-Os(4)-C(2)	148.9(6)	C(400)-Os(4)-C(2)	116.6(6)
C(47)-C(29)-C(30)	107.9(12)	C(29)-C(30)-C(31)	106.5(13)	Os(6)-Os(4)-Os(5)	36.4(5)	Os(5)-Os(4)-Os(5)	24.4(6)
C(13)-C(30)-C(31)	122.6(13)	C(32)-C(31)-C(30)	117.3(13)	C(4A)-Os(4)-Os(5)	85.1(4)	C(4B)-Os(4)-Os(5)	113.3(7)
C(32)-C(31)-C(48)	120.4(14)	C(31)-C(32)-C(33)	119.0(13)	Os(5)-Os(4)-Os(6)	91.0(3)	C(2)-Os(4)-Os(5)	152.3(5)
C(48)-C(31)-C(30)	108.9(13)	C(33)-C(32)-C(15)	121.2(12)	C(4B)-Os(4)-Os(6)	84.6(6)	Os(6)-Os(4)-Os(6)	70.3(4)
C(31)-C(32)-C(15)	121.7(13)	C(50)-C(33)-C(32)	120.3(14)	C(400)-Os(4)-Os(6)	171.3(5)	C(4A)-Os(4)-Os(6)	95.9(6)
C(50)-C(33)-C(34)	121.2(13)	C(35)-C(34)-C(16)	121.1(13)	C(2)-Os(4)-Os(6)	92.4(5)	Os(5)-Os(4)-Os(6)	73.6(4)
C(34)-C(33)-C(32)	106.3(12)	C(16)-C(34)-C(33)	108.1(12)	Os(5)-Os(5)-C(5A)	96.0(8)	Os(5)-Os(5)-C(5B)	66.3(8)
C(35)-C(34)-C(33)	120.4(12)	C(34)-C(35)-C(52)	120.0(13)	C(5A)-Os(5)-C(5B)	96.7(8)	Os(5)-Os(5)-C(5C)	160.7(8)
C(34)-C(35)-C(36)	118.7(13)	C(37)-C(36)-C(18)	120.0(12)	C(5A)-Os(5)-C(5C)	93.3(7)	C(5B)-Os(5)-C(5C)	95.9(8)
C(36)-C(35)-C(52)	108.1(14)	C(18)-C(36)-C(35)	118.8(13)	Os(5)-Os(5)-Os(4)	113.1(9)	C(5A)-Os(5)-Os(4)	85.5(7)
C(37)-C(36)-C(35)	108.6(12)	C(37)-C(36)-C(20)	119.0(13)	Os(5)-Os(5)-Os(4)	177.7(6)	C(5C)-Os(5)-Os(4)	84.3(9)
C(38)-C(37)-C(36)	120.8(12)	C(37)-C(38)-C(20)	119.5(14)	Os(5)-Os(5)-C(3)	70.3(4)	C(5A)-Os(5)-C(3)	165.4(6)
C(36)-C(37)-C(53)	108.6(13)	C(20)-C(38)-C(39)	107.7(12)	C(5B)-Os(5)-C(3)	82.5(6)	C(5C)-Os(5)-C(3)	101.2(5)
C(37)-C(38)-C(39)	121.5(14)	C(40)-C(39)-C(38)	118.1(13)	Os(4)-Os(5)-C(3)	95.2(5)	Os(5)-Os(5)-C(4)	99.0(6)
C(40)-C(39)-C(38)	119.7(14)	C(39)-C(40)-C(54)	121.6(14)				

C(5A)-Os(5)-C(4)	148.5(7)	C(5B)-Os(5)-C(4)	114.7(6)	C(5B)-Os(5)-Os(6)	157.8(13)	C(2)-Os(5)-Os(6)	74.0(6)
C(5C)-Os(5)-C(4)	81.2(6)	Os(4)-Os(5)-C(4)	63.1(5)	C(3)-Os(5)-Os(6)	91.2(6)	C(4A)-Os(5)-Os(6)	66.5(7)
C(3)-Os(5)-C(4)	36.4(5)	Os(5)-Os(5)-Os(4)	26.3(6)	C(4B)-Os(5)-Os(6)	86.4(8)	C(5A)-Os(5)-Os(6)	87.0(7)
C(5A)-Os(5)-Os(4)	91.5(5)	C(5B)-Os(5)-Os(4)	92.6(6)	Os(5)-Os(5)-Os(4)	38.0(7)	Os(4)-Os(5)-Os(4)	91.5(8)
C(5C)-Os(5)-Os(4)	169.8(6)	Os(4)-Os(5)-Os(4)	87.0(7)	C(5B)-Os(5)-Os(4)	104.0(13)	C(2)-Os(5)-Os(4)	90.3(6)
C(3)-Os(5)-Os(4)	74.1(3)	C(4)-Os(5)-Os(4)	90.0(3)	C(3)-Os(5)-Os(4)	72.6(7)	C(4A)-Os(5)-Os(4)	97.6(8)
Os(5)-Os(5)-Os(6)	86.5(6)	C(5A)-Os(5)-Os(6)	83.7(6)	C(4B)-Os(5)-Os(4)	139.9(10)	C(5A)-Os(5)-Os(4)	56.5(7)
C(5B)-Os(5)-Os(6)	152.8(6)	C(5C)-Os(5)-Os(6)	111.3(6)	Os(6)-Os(5)-Os(4)	53.8(7)	Os(6)-Os(5)-Os(4)	122.4(9)
Os(4)-Os(5)-Os(6)	27.0(7)	C(3)-Os(5)-Os(6)	90.4(3)	Os(6)-Os(5)-C(6)	79.4(7)	Os(4)-Os(5)-C(6)	99.0(8)
C(4)-Os(5)-Os(6)	69.8(4)	Os(4)-Os(5)-Os(6)	60.24(2)	Os(6)-Os(6)-C(6A)	60.5(8)	Os(4)-Os(6)-C(6A)	105.9(9)
Os(6)-Os(6)-C(6)	128.8(10)	Os(6)-Os(6)-C(6C)	87.3(8)	C(6)-Os(6)-C(6A)	139.6(10)	Os(6)-Os(6)-C(400)	170.6(9)
Os(4)-Os(6)-C(6A)	141.0(9)	Os(6)-Os(6)-C(6A)	77.8(9)	C(6A)-Os(6)-C(400)	58.8(6)	C(6)-Os(6)-C(400)	109.9(8)
Os(6)-Os(6)-C(6B)	108.9(9)	C(6C)-Os(6)-C(6A)	91.0(8)	C(6A)-Os(6)-C(400)	110.2(9)	Os(6)-Os(6)-C(11)	110.0(7)
Os(6)-Os(6)-C(6B)	176.5(8)	Os(4)-Os(6)-C(6B)	48.8(9)	C(6)-Os(6)-C(11)	64.2(6)	C(6)-Os(6)-C(11)	37.7(6)
Os(6)-Os(6)-C(6B)	95.8(7)	C(6A)-Os(6)-C(6B)	100.4(9)	C(6A)-Os(6)-C(11)	161.3(10)	C(400)-Os(6)-C(11)	79.2(7)
Os(6)-Os(6)-C(5)	99.4(6)	C(6A)-Os(6)-C(5)	66.1(6)	Os(6)-Os(6)-C(6C)	54.2(7)	Os(4)-Os(6)-C(6C)	176.1(8)
C(6C)-Os(6)-C(5)	84.4(6)	C(6A)-Os(6)-C(6)	62.6(6)	C(6)-Os(6)-C(6C)	78.7(8)	C(6A)-Os(6)-C(6C)	74.4(8)
C(6B)-Os(6)-C(5)	99.8(6)	Os(6)-Os(6)-C(6)	83.2(6)	Os(6)-Os(6)-Os(4)	124.9(9)	C(1)-Os(6)-C(6C)	114.3(8)
Os(4)-Os(6)-C(6)	140.2(8)	C(6B)-Os(6)-C(6)	119.3(6)	C(6)-Os(6)-Os(4)	76.2(6)	Os(4)-Os(6)-Os(4)	97.4(8)
C(6A)-Os(6)-C(6)	37.3(5)	Os(6)-Os(6)-Os(4)	32.6(7)	C(6)-Os(6)-Os(4)	155.8(11)	C(1)-Os(6)-Os(4)	69.5(8)
C(5)-Os(6)-C(6)	96.9(8)	C(6C)-Os(6)-Os(4)	119.8(5)	Os(4)-Os(6)-Os(5)	32.9(6)	C(6)-Os(6)-Os(5)	89.9(7)
C(6A)-Os(6)-Os(4)	80.1(6)	C(6B)-Os(6)-Os(4)	144.4(5)	C(6A)-Os(6)-Os(5)	94.0(8)	C(400)-Os(6)-Os(5)	91.7(9)
C(5)-Os(6)-Os(4)	89.6(3)	C(6)-Os(6)-Os(4)	69.2(4)	C(6)-Os(6)-Os(5)	69.0(6)	C(6C)-Os(6)-Os(5)	173.4(8)
Os(6)-Os(6)-Os(5)	91.9(7)	Os(4)-Os(6)-Os(5)	37.7(8)	C(1)-Os(6)-Os(5)	64.5(8)	O(4A)-C(4A)-Os(4)	175.4(16)
C(6C)-Os(6)-Os(5)	172.5(5)	C(6A)-Os(6)-Os(5)	96.1(6)	Os(4)-Os(6)-Os(5)	140.6(16)	Os(4)-C(4A)-Os(5)	43.9(6)
C(6B)-Os(6)-Os(5)	85.3(5)	C(6)-Os(6)-Os(5)	73.3(4)	O(4A)-C(4A)-Os(5)	172(2)	O(4B)-C(4B)-Os(5)	145.6(18)
C(6)-Os(6)-Os(5)	89.9(4)	Os(4)-Os(6)-Os(5)	59.49(2)	Os(4)-C(4B)-Os(5)	41.9(6)	O(5A)-C(5A)-Os(5)	176.3(18)
C(6B)-Os(4)-Os(6)	82.3(19)	C(6B)-Os(4)-Os(5)	155.7(16)	O(5A)-C(5A)-Os(5)	144.3(15)	Os(5)-C(5A)-Os(5)	36.6(5)
Os(6)-Os(4)-Os(6)	115.3(9)	C(6B)-Os(4)-C(5)	101.6(14)	Os(5)-C(5B)-Os(5)	177(2)	O(5B)-C(5B)-Os(5)	135(2)
Os(6)-Os(4)-C(5)	75.0(10)	Os(5)-Os(4)-C(5)	99.3(8)	Os(5)-C(5C)-Os(5)	47.6(9)	O(5C)-C(5C)-Os(5)	177.0(14)
Os(6)-Os(4)-C(4)	65.9(8)	C(5)-Os(4)-C(4)	107.1(9)	O(6A)-C(6A)-Os(6)	175.3(18)	O(6A)-C(6A)-Os(6)	141(2)
Os(6)-Os(4)-C(4)	127.2(12)	Os(6)-Os(4)-C(4)	39.0(6)	Os(6)-C(6A)-Os(6)	41.8(5)	O(6B)-C(6B)-Os(4)	131(2)
C(6B)-Os(4)-O(6B)	21.7(10)	Os(6)-Os(4)-O(6B)	103.6(15)	O(6B)-C(6B)-Os(6)	173.0(16)	Os(4)-C(6B)-Os(6)	49.0(13)
Os(5)-Os(4)-O(6B)	138.7(14)	C(5)-Os(4)-O(6B)	103.7(9)	C(6B)-O(6B)-Os(4)	27.2(13)	O(6C)-C(6C)-Os(6)	173.7(15)
C(4)-Os(4)-O(6B)	116.0(9)	C(6B)-Os(4)-Os(6)	107.8(19)	O(6C)-C(6C)-Os(6)	146.3(15)	Os(6)-C(6C)-Os(6)	38.6(5)
Os(6)-Os(4)-O(6)	25.6(5)	C(5)-Os(4)-Os(6)	90.4(7)	N(4)-C(400)-Os(4)	178.5(15)	N(4)-C(400)-Os(6)	127.8(15)
C(5)-Os(4)-O(6)	71.7(8)	Os(4)-Os(4)-Os(6)	92.2(7)	Os(4)-C(400)-Os(6)	53.4(6)	C(400)-N(4)-C(401)	172(2)
O(6B)-Os(4)-Os(6)	129.2(15)	C(6B)-Os(4)-Os(5)	163.2(15)	N(4)-C(401)-C(402)	111.8(16)	C(403)-C(402)-C(407)	120.0
Os(6)-Os(4)-Os(5)	86.8(8)	Os(5)-Os(4)-Os(5)	28.8(5)	C(402)-C(402)-C(401)	117.1(16)	C(407)-C(402)-C(401)	122.6(16)
C(5)-Os(4)-Os(5)	166.1(12)	Os(5)-Os(4)-Os(5)	68.4(7)	C(404)-C(403)-C(404)	120.0	C(405)-C(404)-C(403)	120.0
Os(5)-Os(5)-Os(4)	129.3(9)	C(4)-Os(4)-Os(5)	61.7(6)	C(406)-C(403)-C(406)	120.0	C(407)-C(406)-C(405)	120.0
Os(5)-Os(5)-C(3)	164.2(14)	Os(5)-Os(5)-C(2)	105.0(9)	C(406)-C(407)-C(402)	120.0	C(2)-C(1)-C(6)	118.3(12)
Os(4)-Os(5)-C(2)	70.7(7)	C(5B)-Os(5)-C(2)	111.4(10)	C(2)-C(1)-C(9)	118.6(13)	C(6)-C(1)-C(9)	108.5(13)
Os(5)-Os(5)-C(3)	69.9(8)	Os(4)-Os(5)-C(3)	105.5(7)	C(2)-C(1)-Os(4)	73.4(7)	C(6)-C(1)-Os(4)	106.6(8)
C(5B)-Os(5)-C(3)	82.3(10)	C(2)-Os(5)-C(3)	38.8(5)	C(9)-C(1)-Os(4)	128.3(9)	C(2)-C(1)-Os(6)	109.6(9)
Os(5)-Os(5)-C(4A)	115.6(10)	Os(4)-Os(5)-C(4A)	52.6(7)	C(6)-C(1)-Os(6)	62.6(8)	C(9)-C(1)-Os(6)	126.8(10)
C(5B)-Os(5)-C(4A)	120.9(9)	C(2)-Os(5)-C(4A)	122.8(12)	Os(4)-C(1)-Os(6)	47.7(5)	C(1)-C(2)-C(3)	123.1(12)
C(3)-Os(5)-C(4A)	156.7(9)	Os(5)-Os(5)-C(4B)	176.8(9)	C(1)-C(2)-C(12)	118.8(12)	C(3)-C(2)-C(12)	104.5(11)
Os(4)-Os(5)-C(4B)	49.1(8)	C(5B)-Os(5)-C(4B)	115.8(11)	C(1)-C(2)-Os(5)	106.6(9)	C(3)-C(2)-Os(5)	71.5(9)
C(2)-Os(5)-C(4B)	71.9(8)	C(3)-Os(5)-C(4B)	107.5(9)	C(12)-C(2)-Os(5)	124.6(10)	C(1)-C(2)-Os(4)	70.2(7)
C(4A)-Os(5)-C(4B)	66.1(9)	Os(5)-Os(5)-C(5A)	47.3(6)	C(3)-C(2)-Os(4)	109.8(8)	C(12)-C(2)-Os(4)	129.0(9)
Os(4)-Os(5)-C(5A)	109.9(9)	C(5B)-Os(5)-C(5A)	77.3(10)	Os(5)-C(2)-Os(4)	42.7(6)	C(4)-C(3)-C(14)	118.8(11)
C(2)-Os(5)-C(5A)	146.6(10)	C(3)-Os(5)-C(5A)	117.0(11)	C(4)-C(3)-C(2)	117.2(12)	C(14)-C(3)-C(2)	108.3(11)
C(4A)-Os(5)-C(5A)	70.6(7)	C(4B)-Os(5)-C(5A)	135.1(9)	C(4)-C(3)-Os(5)	73.9(7)	C(14)-C(3)-Os(5)	129.7(8)
Os(5)-Os(5)-Os(6)	91.8(7)	Os(4)-Os(5)-Os(6)	37.6(4)	C(2)-C(3)-Os(5)	105.8(8)	C(4)-C(3)-Os(5)	105.1(9)

C(14)-C(3)-Os(5)	128.6(9)	C(2)-C(3)-Os(5)	69.6(9)	C(35)-C(34)-C(16)	116.6(17)	C(35)-C(34)-C(33)	119.6(16)
Os(5)-C(3)-Os(5)	39.9(6)	C(3)-C(4)-C(5)	121.0(12)	C(16)-C(34)-C(33)	111.3(17)	C(34)-C(35)-C(36)	124.4(16)
C(3)-C(4)-C(17)	118.2(13)	C(5)-C(4)-C(17)	105.9(13)	C(34)-C(35)-C(52)	118.7(18)	C(36)-C(35)-C(52)	104(2)
C(3)-C(4)-Os(4)	114.0(9)	C(5)-C(4)-Os(4)	65.6(11)	C(37)-C(36)-C(18)	123(2)	C(37)-C(36)-C(35)	112.4(19)
C(17)-C(4)-Os(4)	121.1(11)	C(3)-C(4)-Os(5)	69.6(7)	C(18)-C(36)-C(35)	114(2)	C(36)-C(37)-C(36)	117.8(18)
C(5)-C(4)-Os(5)	109.3(8)	C(17)-C(4)-Os(5)	130.5(10)	C(38)-C(37)-C(53)	122(2)	C(36)-C(37)-C(53)	107(2)
Os(4)-C(4)-Os(5)	51.0(7)	C(6)-C(5)-C(4)	119.7(12)	C(37)-C(38)-C(20)	119.8(19)	C(37)-C(38)-C(20)	125(2)
C(6)-C(5)-C(19)	109.0(10)	C(4)-C(5)-C(19)	107.5(12)	C(40)-C(39)-C(38)	103(2)	C(40)-C(39)-C(38)	121(2)
C(6)-C(5)-Os(4)	119.9(11)	C(6)-C(5)-Os(6)	75.4(12)	C(39)-C(39)-C(22)	115(2)	C(38)-C(39)-C(22)	111.7(18)
C(19)-C(5)-Os(4)	107.4(8)	C(19)-C(5)-Os(6)	127.1(9)	C(39)-C(40)-C(54)	122(2)	C(39)-C(40)-C(54)	116(2)
C(4)-C(5)-Os(6)	38.9(9)	C(1)-C(6)-C(7)	108.3(13)	C(41)-C(40)-C(54)	109.8(16)	C(42)-C(41)-C(40)	120.5(18)
Os(4)-C(5)-Os(6)	120.8(13)	C(7)-C(6)-C(5)	116.8(14)	C(42)-C(41)-C(56)	121(2)	C(40)-C(41)-C(56)	106.5(17)
C(1)-C(6)-C(5)	79.7(9)	C(7)-C(6)-Os(6)	123.8(11)	C(41)-C(42)-C(43)	118(2)	C(41)-C(42)-C(43)	117.1(19)
C(1)-C(6)-Os(6)	103.1(9)	C(1)-C(6)-Os(6)	110.4(9)	C(23)-C(42)-C(43)	109(2)	C(44)-C(43)-C(42)	124.2(18)
C(5)-C(6)-Os(6)	128.3(10)	C(5)-C(6)-Os(6)	68.5(7)	C(44)-C(43)-C(25)	121(2)	C(42)-C(43)-C(25)	105.3(19)
Os(6)-C(6)-Os(6)	38.0(4)	C(21)-C(7)-C(6)	127.1(18)	C(43)-C(44)-C(57)	120.0(15)	C(43)-C(44)-C(57)	118.4(19)
C(21)-C(7)-C(8)	121.5(17)	C(6)-C(7)-C(8)	107.4(15)	C(44)-C(45)-C(27)	108.2(16)	C(44)-C(45)-C(27)	122.8(17)
C(24)-C(8)-C(9)	107.7(13)	C(10)-C(9)-C(8)	121.6(14)	C(45)-C(46)-C(46)	107.9(14)	C(47)-C(46)-C(45)	122.1(14)
C(9)-C(8)-C(7)	119.7(15)	C(8)-C(9)-C(11)	107.9(14)	C(46)-C(47)-C(29)	117.5(16)	C(46)-C(47)-C(29)	106.8(14)
C(10)-C(9)-C(11)	123.9(15)	C(9)-C(10)-C(26)	118.9(17)	C(47)-C(48)-C(31)	118.1(15)	C(48)-C(47)-C(31)	117.1(15)
C(11)-C(10)-C(26)	106.7(15)	C(12)-C(11)-C(10)	119.5(15)	C(49)-C(48)-C(47)	109.6(13)	C(48)-C(49)-C(50)	120.2(15)
C(12)-C(11)-C(28)	119.1(16)	C(10)-C(11)-C(28)	109.2(15)	C(48)-C(49)-C(59)	120.7(15)	C(50)-C(49)-C(59)	106.4(15)
C(13)-C(12)-C(2)	108.5(13)	C(30)-C(13)-C(12)	19.3(14)	C(33)-C(50)-C(51)	121.0(18)	C(33)-C(50)-C(51)	119.0(16)
C(30)-C(13)-C(14)	119.1(13)	C(12)-C(13)-C(14)	120.6(15)	C(51)-C(50)-C(49)	108.7(15)	C(52)-C(51)-C(50)	119.7(18)
C(15)-C(14)-C(3)	122.1(13)	C(15)-C(14)-C(3)	120.8(14)	C(52)-C(51)-C(60)	118(2)	C(50)-C(51)-C(60)	108.3(16)
C(14)-C(15)-C(3)	121.0(14)	C(32)-C(15)-C(16)	110.1(16)	C(51)-C(52)-C(35)	122(2)	C(51)-C(52)-C(35)	120(2)
C(17)-C(16)-C(34)	122.3(19)	C(14)-C(15)-C(32)	116.9(16)	C(53)-C(53)-C(37)	107.1(19)	C(54)-C(53)-C(37)	119(2)
C(34)-C(16)-C(15)	106.0(15)	C(17)-C(16)-C(18)	119.2(14)	C(37)-C(53)-C(52)	119(2)	C(37)-C(53)-C(52)	110(2)
C(16)-C(17)-C(4)	121.4(16)	C(18)-C(17)-C(4)	121.0(15)	C(53)-C(54)-C(40)	121.9(19)	C(53)-C(54)-C(40)	123(2)
C(36)-C(18)-C(19)	118.2(19)	C(36)-C(18)-C(17)	121.6(18)	C(40)-C(54)-C(55)	103.0(18)	C(56)-C(55)-C(60)	115.2(19)
C(19)-C(18)-C(17)	109.6(13)	C(18)-C(19)-C(20)	122.1(17)	C(56)-C(55)-C(54)	110.2(18)	C(60)-C(55)-C(54)	110.5(17)
C(18)-C(19)-C(5)	108.4(14)	C(20)-C(19)-C(5)	119.0(17)	C(57)-C(56)-C(41)	118.7(17)	C(55)-C(56)-C(41)	119.9(16)
C(19)-C(20)-C(38)	114(2)	C(19)-C(20)-C(21)	125(2)	C(56)-C(57)-C(44)	119.8(17)	C(58)-C(57)-C(44)	109.1(15)
C(38)-C(20)-C(21)	112(2)	C(7)-C(21)-C(22)	105.7(17)	C(59)-C(58)-C(57)	120.3(16)	C(59)-C(58)-C(57)	120.7(15)
C(7)-C(21)-C(20)	116.4(18)	C(22)-C(21)-C(20)	122.5(18)	C(57)-C(58)-C(46)	106.8(13)	C(58)-C(59)-C(60)	121.0(18)
C(23)-C(22)-C(21)	117.8(18)	C(23)-C(22)-C(39)	119.6(17)	C(58)-C(59)-C(49)	119.6(15)	C(60)-C(59)-C(49)	108.0(16)
C(21)-C(22)-C(39)	106.8(19)	C(22)-C(23)-C(24)	119.6(17)	C(55)-C(60)-C(51)	117.4(17)	C(55)-C(60)-C(51)	122.5(18)
C(8)-C(24)-C(23)	122.1(19)	C(24)-C(23)-C(42)	110(2)	S(1)#1-C(700)-S(1)	108.6(18)	S(1)#1-C(700)-S(1)	180.0
C(23)-C(24)-C(25)	107.9(16)	C(26)-C(25)-C(24)	123.5(15)				
C(26)-C(25)-C(43)	115.9(18)	C(25)-C(26)-C(10)	107.5(19)				
C(25)-C(26)-C(27)	122.9(17)	C(28)-C(27)-C(45)	121.3(16)				
C(27)-C(26)-C(10)	106.6(17)	C(45)-C(27)-C(26)	117.1(18)				
C(28)-C(27)-C(26)	110.7(16)	C(29)-C(28)-C(11)	119.6(16)				
C(29)-C(28)-C(27)	121.8(15)	C(28)-C(29)-C(30)	119.6(16)				
C(27)-C(28)-C(11)	106.7(16)	C(30)-C(29)-C(47)	108.7(15)				
C(28)-C(29)-C(47)	120.1(16)	C(13)-C(30)-C(29)	120.5(15)				
C(13)-C(30)-C(31)	108.0(14)	C(32)-C(31)-C(48)	123.2(16)				
C(29)-C(30)-C(31)	119.5(14)	C(48)-C(31)-C(30)	106.8(14)				
C(32)-C(31)-C(30)	123.5(16)	C(31)-C(32)-C(15)	118.7(15)				
C(15)-C(32)-C(33)	105.0(16)	C(50)-C(33)-C(34)	121(2)				
C(50)-C(33)-C(32)	119.9(16)	C(34)-C(33)-C(32)	107.6(14)				

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -x+y+1, -y+1, -z

Table S7. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2b**·0.5CS₂.

	x	y	z	U(eq) ($\text{\AA}^2$)
Os(1)	-4004(1)	-878(1)	-1507(1)	30(1)
Os(2)	-4618(1)	-1619(1)	-485(1)	29(1)
Os(3)	-3839(1)	-2910(1)	-737(1)	34(1)
C(100)	-3467(16)	-2026(9)	-1055(10)	37(5)
N(1)	-3144(13)	-1681(9)	-1456(9)	40(4)
C(101)	-2364	-1906	-1893	45(5)
C(102)	-1482(11)	-1315(8)	-1879(8)	55(6)
C(103)	-1350(14)	-1111(10)	-2478(7)	76(8)
C(104)	-521(17)	-551(10)	-2462(10)	87(11)
C(105)	175(14)	-194(9)	-1845(13)	96(12)
C(106)	43(13)	-397(10)	-1246(10)	113(15)
C(107)	-786(13)	-938(10)	-1263(7)	69(8)
C(1A)	-2839(18)	-223(11)	-855(11)	47(5)
O(1A)	-2112(12)	178(8)	-474(8)	56(4)
C(1B)	-3639(16)	-612(10)	-2309(13)	44(5)
O(1B)	-3481(13)	-447(9)	-2787(9)	59(4)
C(1C)	-4930(15)	-200(10)	-1444(9)	33(4)
O(1C)	-5468(13)	164(8)	-1374(7)	51(4)
C(2A)	-3431(16)	-1072(11)	204(10)	38(4)
O(2A)	-2697(13)	-701(10)	598(8)	64(5)
C(2B)	-5556(15)	-969(10)	-295(11)	43(5)
O(2B)	-6094(14)	-603(8)	-186(8)	60(5)
C(2C)	-5061(16)	-2182(12)	114(11)	48(6)
O(2C)	-5361(14)	-2454(10)	516(8)	64(5)
C(3A)	-2712(19)	-2577(12)	73(13)	58(7)
O(3A)	-2104(14)	-2382(11)	593(8)	72(5)
C(3B)	-4630(20)	-3626(14)	-374(11)	60(7)
O(3B)	-5176(17)	-4087(12)	-198(11)	87(7)
C(3C)	-3100(18)	-3531(11)	-1235(11)	41(5)
O(3C)	-2676(14)	-3858(9)	-1539(10)	69(5)
C(1)	-5341(14)	-1749(8)	-2174(9)	27(4)
C(2)	-5858(14)	-1894(9)	-1634(9)	28(4)
C(3)	-5839(13)	-2505(9)	-1340(8)	23(3)
C(4)	-5261(14)	-3069(8)	-1566(10)	33(4)
C(5)	-5004(13)	-2992(8)	-2257(8)	23(3)
C(6)	-5015(14)	-2403(9)	-2532(10)	34(4)
C(7)	-5289(15)	-2461(9)	-3260(9)	29(4)
C(8)	-5912(16)	-1939(10)	-3401(9)	35(4)
C(9)	-6049(16)	-1542(9)	-2748(11)	38(5)
C(10)	-6963(18)	-1355(9)	-2720(11)	42(5)
C(11)	-7455(16)	-1426(10)	-2100(11)	40(5)
C(12)	-6923(15)	-1710(10)	-1619(10)	38(4)
C(13)	-7534(15)	-2190(11)	-1328(10)	37(4)
C(14)	-6915(17)	-2723(12)	-1181(9)	41(5)
C(15)	-7371(16)	-3417(12)	-1273(10)	40(5)
C(16)	-6910(15)	-3993(9)	-1598(9)	33(4)
C(17)	-5953(14)	-3819(10)	-1817(10)	33(4)
C(18)	-5862(15)	-4186(8)	-2426(9)	29(4)

S30

Table S6. Crystallographic Data for **2b**·0.5CS₂.

formula	C ₇ H ₇ NO ₉ Os ₃ · 0.5CS ₂
fw	1698.50
system, space group	Triclinic, P1
a, $\text{\AA}$	12.967(2)
b, $\text{\AA}$	19.590(4)
c, $\text{\AA}$	20.488(4)
α deg	100.559(3)
β deg	100.797(3)
γ deg	99.800(3)
V, $\text{\AA}^3$	4912(2)
Z	2
D_{calc} , Mg m ⁻³	2.297
temp, K	233(2)
λ (Mo K α), $\text{\AA}$	0.71073
μ , mm ⁻¹	7.862
θ range for collection	1.32° $\leq \theta \leq$ 25.00°
no. of rflns measd	17228
no. of unique rflns	17228
no. of rflns ($I > 2\sigma(I)$)	14097
R_f^a	0.0819
R_w^b	0.2065
GOF	1.068

$$^a R_f = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|, \quad ^b R_w = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}.$$

S29

C(19)	-5263(14)	-3678(9)	-2750(10)	33(4)	O(4B)	-2726(18)	-9064(10)	-1506(11)	94(8)
C(20)	-5496(16)	-3736(10)	-3427(10)	38(5)	O(4C)	-1910(17)	-8768(13)	-3064(11)	49(6)
C(21)	-5536(16)	-3097(13)	-3717(10)	43(5)	O(4C)	-1835(14)	-9218(10)	-3505(9)	70(5)
C(22)	-6396(17)	-3268(10)	-4297(10)	40(5)	C(5A)	-627(13)	-6441(10)	-2530(10)	32(4)
C(23)	-6994(17)	-2808(10)	-4442(9)	37(5)	O(5A)	201(11)	-6196(9)	-2244(8)	56(4)
C(24)	-6776(16)	-2094(10)	-3994(11)	40(5)	C(5B)	-1680(14)	-7482(10)	-3722(10)	36(5)
C(25)	-7748(16)	-1885(10)	-3925(10)	40(5)	O(5B)	-1479(12)	-7836(8)	-4130(7)	46(4)
C(26)	-7858(19)	-1519(9)	-3315(10)	42(5)	C(5C)	-2217(13)	-6110(8)	-3529(8)	22(3)
C(27)	-8850(18)	-1700(10)	-3080(12)	49(6)	O(5C)	-2273(11)	-5703(8)	-3840(7)	45(3)
C(28)	-8613(17)	-1645(10)	-2346(11)	44(5)	C(6A)	-1628(14)	-5165(10)	-1676(10)	37(5)
C(29)	-9206(17)	-2133(11)	-2078(12)	48(6)	O(6A)	-887(11)	-4788(8)	-1364(8)	54(4)
C(30)	-8655(16)	-2417(11)	-1538(10)	40(5)	C(6B)	-3460(18)	-5208(9)	-2711(10)	39(5)
C(31)	-9170(15)	-3155(11)	-1651(10)	38(5)	O(6B)	-3760(16)	-4861(9)	-3051(9)	70(5)
C(32)	-8541(16)	-3618(12)	-1507(10)	43(5)	C(6C)	-3690(16)	-5526(11)	-1472(10)	41(5)
C(33)	-8761(16)	-4325(10)	-1971(10)	36(4)	O(6C)	-4139(16)	-5361(12)	-1084(11)	89(7)
C(34)	-7771(16)	-4548(10)	-2046(10)	37(5)	C(11)	-3804(12)	-8157(8)	-2821(8)	17(3)
C(35)	-7654(17)	-4919(8)	-2656(9)	36(5)	C(12)	-3743(12)	-7729(8)	-3346(9)	21(3)
C(36)	-6664(17)	-4740(9)	-2866(11)	40(5)	C(13)	-4016(14)	-7049(9)	-3297(11)	34(4)
C(37)	-6896(16)	-4794(9)	-3568(11)	40(5)	C(14)	-4394(13)	-6705(7)	-2274(8)	23(3)
C(38)	-6353(17)	-4306(11)	-3856(11)	42(5)	C(15)	-4735(14)	-7236(8)	-2274(8)	17(3)
C(39)	-6907(19)	-4013(11)	-4401(11)	47(5)	C(16)	-4467(11)	-7878(8)	-2325(7)	26(4)
C(40)	-8020(20)	-4204(11)	-4646(14)	50(6)	C(17)	-5207(13)	-8468(9)	-2215(9)	19(3)
C(41)	-8660(19)	-3704(11)	-4767(9)	44(5)	C(18)	-5137(13)	-9093(8)	-2679(9)	25(4)
C(42)	-8163(17)	-3001(11)	-4674(9)	41(5)	C(19)	-4429(13)	-8915(8)	-3110(9)	27(4)
C(43)	-8608(18)	-2467(12)	-4367(12)	50(6)	C(10)	-4498(14)	-9230(8)	-3767(10)	30(4)
C(44)	-9556(18)	-2612(12)	-4152(11)	48(6)	C(11)	-4459(13)	-8814(9)	-4272(10)	31(4)
C(45)	-9690(17)	-2238(11)	-3508(12)	49(6)	C(12)	-4064(14)	-8094(9)	-4072(10)	31(4)
C(46)	-10301(17)	-2727(12)	-3209(12)	50(6)	C(13)	-4498(14)	-7630(10)	-4465(8)	28(4)
C(47)	-10060(16)	-2707(12)	-2520(14)	53(6)	C(14)	-4509(13)	-6986(9)	-3971(9)	26(4)
C(48)	-10011(15)	-3331(11)	-2213(11)	40(5)	C(15)	-5551(13)	-6651(8)	-4104(9)	25(4)
C(49)	-10280(16)	-3977(12)	-2685(12)	46(5)	C(16)	-5826(14)	-6368(8)	-3540(10)	29(4)
C(50)	-9626(16)	-4502(11)	-2535(11)	41(5)	C(17)	-5438(14)	-6447(8)	-2898(10)	30(4)
C(51)	-9495(17)	-4885(10)	-3186(12)	50(6)	C(18)	-6179(14)	-6653(9)	-2480(10)	32(4)
C(52)	-8558(16)	-5078(9)	-3233(10)	35(4)	C(19)	-5744(14)	-7132(9)	-2107(8)	27(4)
C(53)	-8091(19)	-5019(9)	-3818(11)	49(6)	C(20)	-6439(13)	-7705(10)	-1969(8)	25(4)
C(54)	-8625(18)	-4720(10)	-4332(10)	43(5)	C(21)	-6147(14)	-8376(10)	-2027(9)	29(4)
C(55)	-9616(19)	-4528(12)	-4266(10)	48(5)	C(22)	-7115(15)	-8925(10)	-2318(10)	36(5)
C(56)	-9632(19)	-3893(10)	-4541(10)	44(5)	C(23)	-7079(14)	-9537(9)	-2782(11)	35(4)
C(57)	-10071(16)	-3355(11)	-4246(11)	43(5)	C(24)	-6094(14)	-9632(9)	-2957(11)	36(5)
C(58)	-10543(18)	-3432(11)	-3680(14)	61(8)	C(25)	-6338(15)	-9973(8)	-3669(11)	37(5)
C(59)	-10527(15)	-4036(11)	-3403(10)	40(5)	C(26)	-5613(14)	-9760(9)	-4072(11)	38(5)
C(60)	-10066(15)	-4591(9)	-3720(11)	39(5)	C(27)	-6017(15)	-9671(9)	-4750(11)	38(5)
O(4)	-2068(1)	-8023(1)	-2354(1)	22(1)	C(28)	-5330(16)	-9091(10)	-4889(10)	37(5)
O(5)	-2101(1)	-6829(1)	-3005(1)	20(1)	C(29)	-5719(16)	-8645(11)	-5263(9)	37(5)
O(6)	-2975(1)	-5840(1)	-2140(1)	25(1)	C(30)	-5324(16)	-7887(11)	-5056(9)	39(5)
C(400)	-2380(20)	-6642(13)	-2003(13)	58(6)	C(31)	-6190(14)	-7535(10)	-5180(9)	32(4)
N(4)	-2243(16)	-7110(10)	-1689(13)	77(7)	C(32)	-6203(15)	-6939(10)	-4706(10)	36(5)
C(401)	-2486(18)	-7000(20)	-9231(10)	88(12)	C(33)	-7201(15)	-6824(10)	-4517(10)	36(5)
C(402)	-1519(10)	-7138(8)	-498(7)	49(5)	C(34)	-6973(15)	-6491(8)	-3798(10)	36(5)
C(403)	-1573(12)	-7760(8)	-259(8)	71(8)	C(35)	-7699(14)	-6674(9)	-3414(10)	32(4)
C(404)	-664(15)	-7885(8)	140(8)	81(9)	C(36)	-7281(14)	-6761(9)	-2732(11)	34(4)
C(405)	300(12)	-7389(11)	301(8)	81(9)	C(37)	-7986(13)	-7350(9)	-2605(9)	27(4)
C(406)	355(10)	-6766(9)	62(8)	71(8)	C(38)	-7583(14)	-7812(10)	-2226(10)	32(4)
C(407)	-555(12)	-6641(7)	-338(8)	52(6)	C(39)	-7987(14)	-8577(11)	-2446(9)	34(4)
C(408)	-524(12)	-7778(9)	-1914(10)	30(4)	C(40)	-8835(14)	-8839(10)	-3015(11)	37(5)
O(4A)	316(11)	-7670(9)	-1661(8)	54(4)	C(41)	-8787(14)	-9469(9)	-3493(11)	34(4)
C(4B)	-2446(19)	-8664(12)	-1812(12)	54(6)	C(42)	-7944(14)	-9812(8)	-3374(9)	28(4)

S32

S31

Table S8. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2b -0.5CS₂

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Os(1)	36(1)	21(1)	23(1)	-4(1)	1(1)	-5(1)
Os(2)	30(1)	30(1)	20(1)	-1(1)	0(1)	1(1)
Os(3)	36(1)	30(1)	28(1)	4(1)	-5(1)	6(1)
C(100)	45(11)	23(9)	25(10)	2(8)	-12(9)	-14(8)
N(1)	38(9)	41(9)	38(10)	7(8)	7(8)	4(10)
C(102)	31(11)	55(14)	76(18)	11(13)	10(11)	7(8)
C(103)	90(20)	66(18)	80(20)	18(16)	31(18)	16(16)
C(104)	80(20)	90(20)	130(30)	60(20)	70(20)	38(18)
C(105)	90(30)	60(20)	150(40)	30(20)	70(30)	10(18)
C(106)	58(19)	100(30)	140(40)	-40(30)	20(20)	-2(19)
C(107)	52(14)	67(17)	55(16)	7(13)	-19(12)	-33(13)
C(1A)	57(14)	39(11)	30(12)	-17(9)	16(11)	-7(11)
O(1A)	51(9)	49(9)	43(9)	-12(7)	-13(8)	-13(8)
C(1B)	35(11)	24(10)	77(17)	18(10)	23(11)	0(8)
O(1B)	65(11)	61(10)	55(11)	27(9)	25(9)	-3(8)
C(1C)	39(8)	28(7)	21(7)	-2(6)	-3(6)	-2(7)
O(1C)	76(11)	46(8)	35(9)	-3(7)	9(8)	39(8)
C(2A)	40(8)	49(8)	29(8)	20(7)	15(7)	4(7)
O(2A)	48(9)	85(13)	34(9)	-5(9)	-14(7)	-7(9)
C(2B)	29(10)	29(10)	46(13)	-25(9)	-11(9)	-1(9)
O(2B)	71(11)	49(9)	50(10)	-23(8)	8(9)	22(9)
C(2C)	34(11)	58(14)	36(13)	-19(11)	13(10)	-8(10)
O(2C)	69(11)	92(13)	28(8)	12(9)	23(8)	-2(10)
C(3A)	54(14)	43(12)	55(16)	-3(11)	-35(12)	15(11)
O(3A)	62(11)	100(15)	37(10)	-1(9)	-12(9)	18(10)
C(3B)	73(17)	66(16)	19(11)	-3(11)	-18(11)	-1(14)
O(3B)	80(14)	91(15)	74(14)	37(12)	-11(11)	-16(12)
C(3C)	58(13)	41(11)	37(12)	9(9)	19(10)	33(11)
O(3C)	64(11)	50(10)	76(13)	-27(9)	0(10)	27(9)
C(1)	37(10)	5(7)	30(10)	-9(6)	-3(8)	8(7)
C(2)	31(9)	22(8)	20(9)	-14(7)	0(7)	4(7)
C(3)	23(7)	28(7)	11(7)	-2(6)	-3(5)	2(6)
C(4)	23(9)	10(7)	48(12)	0(8)	-19(8)	-8(7)
C(5)	24(8)	18(8)	16(9)	-12(7)	2(7)	0(7)
C(6)	26(9)	24(9)	40(12)	-12(8)	-2(8)	2(8)
C(7)	38(10)	33(10)	17(9)	12(8)	5(8)	3(8)
C(8)	46(11)	33(10)	23(10)	17(8)	9(8)	-10(9)
C(9)	44(11)	17(8)	43(12)	12(8)	-4(9)	-9(8)
C(10)	62(14)	9(8)	41(12)	-5(8)	-13(10)	10(8)
C(11)	45(8)	24(7)	48(9)	-5(6)	-1(7)	19(7)
C(12)	36(8)	32(7)	33(8)	-11(6)	3(7)	1(6)
C(13)	35(10)	46(11)	23(10)	-6(9)	2(8)	13(9)
C(14)	46(12)	55(13)	12(9)	5(9)	-7(8)	7(10)
C(15)	36(10)	61(14)	27(11)	20(10)	7(9)	9(10)
C(16)	33(10)	27(9)	27(10)	4(8)	-5(8)	-8(8)
C(17)	27(9)	34(10)	31(11)	16(9)	-16(8)	2(8)
C(18)	41(10)	17(8)	24(10)	-5(7)	-9(8)	20(8)
C(19)	30(9)	20(9)	35(11)	-13(8)	0(8)	-2(7)
C(20)	40(11)	28(10)	37(12)	-16(8)	12(9)	9(8)
C(21)	38(11)	70(15)	23(11)	4(10)	12(9)	20(11)
C(22)	57(13)	34(10)	25(11)	2(8)	-5(10)	-5(10)

^a U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

C(43 ^a)	-7487(14)	-10078(8)	-3942(12)	41(5)
C(44 ^a)	-7863(15)	-9990(9)	-4385(11)	38(5)
C(45 ^a)	-7130(16)	-9792(10)	-5006(10)	38(4)
C(46 ^a)	-7569(15)	-9328(11)	-5394(10)	44(5)
C(47 ^a)	-6878(16)	-8761(12)	-5510(9)	42(5)
C(48 ^a)	-7162(15)	-8083(10)	-5470(9)	33(4)
C(49 ^a)	-8125(16)	-7981(11)	-5282(10)	39(5)
C(50 ^a)	-8142(15)	-7332(10)	-4794(11)	42(5)
C(51 ^a)	-8892(15)	-7536(10)	-4383(11)	36(5)
C(52 ^a)	-8668(14)	-7202(10)	-3698(10)	35(5)
C(53 ^a)	-8840(13)	-7631(9)	-3212(10)	30(4)
C(54 ^a)	-9269(12)	-8359(9)	-3425(9)	29(4)
C(55 ^a)	-9475(12)	-8695(10)	-4125(10)	33(4)
C(56 ^a)	-9206(12)	-9375(9)	-4180(9)	27(4)
C(57 ^a)	-8747(14)	-9628(9)	-4698(9)	33(4)
C(58 ^a)	-8555(14)	-9229(11)	-5205(10)	40(5)
C(59 ^a)	-8861(14)	-8568(9)	-5167(9)	31(4)
C(60 ^a)	-9331(14)	-8313(10)	-4598(10)	35(4)
C(700)	-2240(20)	-4583(15)	659(15)	86
S(1)	-2878(11)	-4123(7)	995(6)	131
S(2)	1611(10)	-4935(6)	-342(6)	120

C(23)	58(13)	40(11)	7(8)	8(8)	4(8)	-6(10)	C(3B)	21(9)	43(11)	33(11)	1(9)	8(8)	-17(8)
C(24)	46(12)	35(10)	39(12)	23(9)	8(10)	-9(9)	O(3B)	58(9)	58(9)	34(8)	1(7)	32(7)	17(7)
C(25)	44(11)	36(10)	34(12)	20(9)	-11(9)	4(9)	C(5C)	23(9)	23(8)	16(8)	5(7)	10(7)	5(7)
C(26)	71(15)	18(9)	27(11)	2(8)	-9(10)	11(9)	O(5C)	48(8)	54(9)	35(8)	21(7)	3(7)	11(7)
C(27)	51(13)	23(10)	66(16)	7(10)	-7(12)	17(9)	O(6A)	22(9)	38(10)	33(11)	-18(9)	5(8)	-14(9)
C(28)	47(12)	23(10)	49(14)	-18(9)	-9(10)	22(9)	O(6A)	36(8)	45(9)	62(11)	-4(8)	5(8)	-20(7)
C(29)	40(12)	38(12)	59(15)	-14(10)	2(11)	22(10)	C(6B)	66(14)	18(9)	22(10)	-3(8)	-5(9)	4(9)
C(30)	38(11)	52(12)	27(11)	-6(9)	11(9)	10(10)	O(6B)	100(15)	52(10)	54(11)	6(9)	11(10)	22(10)
C(31)	34(10)	51(12)	31(11)	-3(9)	18(9)	12(9)	C(6C)	43(11)	37(11)	33(12)	-19(9)	16(10)	-1(9)
C(32)	38(11)	65(14)	18(10)	5(10)	7(8)	-5(10)	O(6C)	69(12)	106(16)	70(14)	-36(12)	28(11)	8(12)
C(33)	39(11)	31(10)	38(12)	17(9)	4(9)	-2(8)	C(1)	20(8)	16(7)	11(8)	4(6)	-5(6)	1(6)
C(34)	42(11)	27(9)	38(12)	19(9)	-4(9)	0(8)	C(2)	15(7)	19(8)	27(9)	9(7)	-5(7)	0(6)
C(35)	63(13)	8(7)	26(10)	-4(7)	-8(9)	5(8)	C(3)	22(9)	19(8)	52(13)	3(8)	-4(8)	-5(7)
C(36)	49(12)	16(9)	45(13)	3(8)	-7(10)	3(8)	C(4)	30(9)	9(7)	15(8)	-1(6)	-3(7)	3(6)
C(37)	46(11)	15(8)	54(14)	-7(8)	13(10)	11(8)	C(5)	33(9)	18(8)	13(8)	-4(6)	0(7)	4(7)
C(38)	49(12)	39(11)	34(12)	-10(9)	13(10)	14(10)	C(6)	13(7)	21(8)	9(7)	1(6)	-8(6)	-3(6)
C(39)	60(14)	44(12)	28(12)	-15(9)	9(10)	12(11)	C(7)	28(9)	26(9)	21(9)	7(7)	-2(7)	4(7)
C(40)	79(17)	43(12)	10(10)	-17(8)	-1(10)	0(12)	C(8)	21(8)	15(8)	38(10)	11(7)	-7(7)	5(7)
C(41)	66(14)	44(12)	6(9)	-6(8)	-10(9)	-1(11)	C(9)	24(9)	9(7)	37(11)	-10(7)	-10(8)	6(7)
C(42)	50(12)	49(12)	9(9)	9(8)	-12(8)	-8(10)	C(10)	31(9)	13(8)	42(12)	-3(8)	5(8)	11(7)
C(43)	52(13)	52(13)	45(13)	28(11)	-15(11)	16(11)	C(11)	22(9)	25(9)	39(11)	-7(8)	9(8)	4(7)
C(44)	50(13)	46(12)	35(12)	8(10)	-20(10)	9(10)	C(12)	25(9)	33(10)	33(11)	-6(8)	14(8)	7(8)
C(45)	49(13)	38(11)	52(14)	-3(10)	-16(11)	30(10)	C(13)	29(9)	40(10)	8(8)	0(7)	-4(7)	1(8)
C(46)	37(12)	46(13)	53(15)	-5(11)	-13(10)	14(10)	C(14)	20(8)	22(8)	32(10)	11(7)	-5(7)	0(7)
C(47)	24(10)	42(12)	80(20)	-4(12)	11(11)	2(9)	C(15)	31(9)	6(7)	28(10)	7(7)	-3(8)	1(7)
C(48)	30(10)	45(12)	37(12)	2(9)	8(9)	-9(9)	C(16)	28(9)	11(7)	48(12)	15(7)	-5(8)	-3(7)
C(49)	31(10)	49(13)	46(13)	1(10)	0(9)	-4(9)	C(17)	32(10)	18(8)	38(11)	-17(7)	-6(8)	5(7)
C(50)	40(11)	36(11)	38(12)	7(9)	7(9)	-8(9)	C(18)	35(10)	28(9)	36(11)	-13(8)	2(8)	1(7)
C(51)	48(13)	25(10)	56(15)	4(8)	-9(9)	-26(9)	C(19)	21(8)	48(11)	3(7)	-6(7)	2(6)	8(8)
C(52)	48(12)	18(8)	31(11)	17(10)	-15(11)	17(10)	C(20)	29(9)	36(10)	22(9)	8(8)	6(8)	1(8)
C(53)	69(15)	14(9)	42(13)	-16(8)	-17(11)	9(9)	C(21)	31(10)	38(11)	42(12)	25(9)	11(9)	-1(8)
C(54)	53(13)	29(10)	24(11)	-12(8)	-11(9)	-8(9)	C(22)	29(10)	25(9)	51(13)	21(9)	7(9)	-4(8)
C(55)	57(14)	46(12)	20(11)	-13(9)	-13(10)	2(11)	C(23)	30(10)	18(8)	62(14)	25(9)	1(9)	0(7)
C(56)	69(15)	29(10)	15(10)	-18(8)	-10(10)	5(10)	C(24)	39(11)	6(7)	52(13)	-3(8)	-10(10)	1(7)
C(57)	36(11)	37(11)	39(13)	12(10)	-21(10)	-6(9)	C(25)	23(9)	23(9)	56(14)	-9(9)	-10(9)	17(8)
C(58)	41(12)	31(11)	79(19)	-30(12)	-25(12)	9(10)	C(26)	32(10)	14(8)	61(14)	-22(8)	16(10)	7(7)
C(59)	27(10)	44(12)	27(11)	0(9)	-20(8)	-15(9)	C(27)	41(11)	31(10)	35(11)	-12(8)	13(9)	13(9)
C(60)	33(10)	17(9)	49(13)	-8(8)	-5(9)	-12(8)	C(28)	42(11)	45(11)	12(9)	-15(8)	4(8)	1(9)
O(4)	20(1)	21(1)	21(1)	2(1)	-2(1)	5(1)	C(29)	44(11)	58(13)	8(9)	-3(8)	9(8)	-1(10)
O(5)	19(1)	19(1)	18(1)	0(1)	2(1)	0(1)	C(30)	27(9)	45(11)	18(9)	14(8)	-4(7)	-5(8)
O(6)	26(1)	14(1)	27(1)	-7(1)	1(1)	-1(1)	C(31)	34(10)	35(10)	41(12)	24(9)	0(9)	4(8)
N(4)	41(11)	48(12)	120(20)	-18(13)	-2(12)	-5(10)	C(32)	35(10)	32(10)	47(12)	28(9)	-2(9)	14(8)
C(401)	33(12)	210(40)	61(9)	2(7)	21(15)	-20(16)	C(33)	43(11)	12(8)	47(13)	4(8)	-8(9)	13(8)
C(402)	49(9)	62(9)	31(8)	2(7)	12(7)	6(7)	C(34)	29(9)	18(8)	52(13)	11(8)	7(9)	14(7)
C(403)	79(19)	90(20)	29(13)	-12(13)	19(13)	-5(16)	C(35)	20(9)	27(9)	47(12)	-12(8)	7(8)	17(8)
C(404)	80(20)	130(30)	37(15)	25(17)	16(14)	11(19)	C(36)	23(8)	37(10)	23(9)	-5(8)	5(7)	17(8)
C(405)	66(19)	130(30)	47(17)	3(18)	20(14)	40(20)	C(37)	23(9)	33(10)	38(11)	-4(8)	12(8)	6(8)
C(406)	61(17)	90(20)	43(16)	-2(15)	-3(13)	11(15)	C(38)	27(9)	52(12)	23(10)	11(9)	13(8)	-3(9)
C(407)	57(14)	55(14)	29(12)	-21(10)	15(11)	-4(11)	C(39)	25(9)	43(11)	45(12)	5(9)	22(9)	-2(8)
C(4A)	12(8)	34(10)	46(12)	14(9)	5(8)	7(7)	C(40)	26(9)	18(8)	51(13)	2(8)	3(9)	-3(7)
O(4A)	32(8)	85(12)	34(9)	6(8)	-5(7)	4(8)	C(41)	26(9)	12(7)	31(10)	1(7)	-3(8)	-15(7)
C(4B)	105(14)	44(12)	50(14)	21(11)	-19(11)	-3(11)	C(42)	27(9)	5(7)	87(17)	7(9)	3(10)	-12(7)
O(4B)	103(16)	70(13)	86(15)	47(12)	-21(12)	-32(12)	C(43)	22(9)	16(8)	52(13)	-14(8)	-5(9)	-13(6)
C(4C)	38(12)	75(16)	26(12)	1(11)	-9(9)	20(11)	C(44)	27(9)	33(8)	33(8)	-13(6)	3(7)	7(7)
O(4C)	55(10)	74(12)	55(12)	-28(10)	-4(9)	7(9)	C(45)	30(10)	45(12)	30(11)	-26(9)	-14(9)	-7(9)
C(5A)	13(8)	32(10)	38(11)	-5(8)	-8(8)	0(7)	C(46)	39(11)	65(14)	8(9)	-15(9)	-9(8)	8(10)
O(5A)	30(8)	71(11)	48(10)	0(8)	-8(7)	-7(8)	C(47)						

S36

S35

Table S9. Interatomic Distances (Å) and Esd's for 2b · 0.5CS₂

Os(1)-C(1A)	1.92(2)	Os(1)-C(1B)	1.93(2)
Os(1)-C(1C)	1.94(2)	Os(1)-N(1)	2.084(16)
Os(1)-C(1)	2.244(16)	Os(1)-Os(2)	2.9102(11)
Os(2)-C(2A)	1.89(2)	Os(2)-C(2C)	1.90(2)
Os(2)-C(2B)	1.94(2)	Os(2)-C(100)	2.22(2)
Os(2)-C(3)	2.345(16)	Os(2)-C(2)	2.498(17)
Os(2)-Os(3)	2.8744(11)	Os(3)-C(3A)	1.92(2)
Os(3)-C(3C)	1.936(19)	Os(3)-C(3B)	1.94(3)
Os(3)-C(100)	1.975(18)	Os(3)-C(4)	2.194(17)
C(100)-N(1)	1.24(2)	N(1)-C(101)	1.538(17)
C(101)-C(102)	1.475(12)	C(102)-C(103)	1.3900
C(102)-C(107)	1.3900	C(103)-C(104)	1.3900
C(104)-C(105)	1.3900	C(105)-C(106)	1.3900
C(106)-C(107)	1.3900	C(1A)-O(1A)	1.17(2)
C(1B)-O(1B)	1.13(3)	C(1C)-O(1C)	1.09(2)
C(2A)-O(2A)	1.16(2)	C(2B)-O(2B)	1.10(2)
C(2C)-O(2C)	1.15(3)	C(3A)-O(3A)	1.16(3)
C(3B)-O(3B)	1.20(3)	C(3C)-O(3C)	1.10(2)
C(1)-C(2)	1.44(3)	C(1)-C(9)	1.51(2)
C(1)-C(6)	1.52(2)	C(2)-C(3)	1.44(2)
C(2)-C(12)	1.49(3)	C(3)-C(4)	1.49(2)
C(3)-C(14)	1.50(3)	C(4)-C(17)	1.53(2)
C(4)-C(5)	1.54(3)	C(5)-C(6)	1.37(3)
C(5)-C(19)	1.47(2)	C(6)-C(7)	1.45(3)
C(7)-C(21)	1.36(3)	C(7)-C(8)	1.44(3)
C(8)-C(24)	1.44(3)	C(8)-C(9)	1.48(3)
C(9)-C(10)	1.31(3)	C(10)-C(26)	1.46(3)
C(10)-C(11)	1.54(3)	C(11)-C(12)	1.35(3)
C(11)-C(28)	1.45(3)	C(12)-C(13)	1.41(3)
C(13)-C(30)	1.41(3)	C(13)-C(14)	1.46(3)
C(14)-C(15)	1.35(3)	C(15)-C(32)	1.46(3)
C(15)-C(16)	1.48(3)	C(16)-C(17)	1.41(3)
C(16)-C(34)	1.45(3)	C(17)-C(18)	1.36(3)
C(18)-C(36)	1.41(3)	C(18)-C(19)	1.49(3)
C(19)-C(20)	1.34(3)	C(20)-C(38)	1.45(3)
C(20)-C(21)	1.49(3)	C(21)-C(22)	1.41(3)
C(22)-C(23)	1.32(3)	C(22)-C(39)	1.45(3)
C(23)-C(42)	1.46(3)	C(23)-C(24)	1.48(3)
C(24)-C(25)	1.41(3)	C(25)-C(26)	1.37(3)
C(25)-C(43)	1.47(3)	C(26)-C(27)	1.47(3)
C(27)-C(45)	1.41(3)	C(27)-C(28)	1.46(3)
C(28)-C(29)	1.38(3)	C(29)-C(30)	1.42(3)
C(29)-C(47)	1.46(3)	C(30)-C(31)	1.45(3)
C(31)-C(32)	1.36(3)	C(31)-C(48)	1.37(3)
C(32)-C(33)	1.48(3)	C(33)-C(50)	1.39(3)
C(33)-C(34)	1.45(3)	C(34)-C(35)	1.37(3)
C(35)-C(36)	1.44(3)	C(35)-C(52)	1.45(3)
C(36)-C(37)	1.39(3)	C(37)-C(38)	1.37(3)
C(37)-C(53)	1.50(3)	C(38)-C(39)	1.47(3)
C(39)-C(40)	1.40(3)	C(40)-C(41)	1.41(3)
C(40)-C(54)	1.48(3)	C(41)-C(42)	1.38(3)
C(41)-C(56)	1.44(3)	C(42)-C(43)	1.39(3)

S38

C(48*)	39(10)	43(11)	14(9)	8(8)	1(8)	5(9)
C(49)	35(10)	52(12)	28(11)	16(9)	-3(8)	6(9)
C(50)	33(10)	27(9)	48(13)	0(9)	-26(9)	6(8)
C(51)	32(10)	29(9)	46(13)	4(9)	-1(9)	15(8)
C(52)	27(9)	35(10)	44(12)	-2(9)	0(8)	27(8)
C(53)	16(8)	31(9)	34(11)	-8(8)	-1(7)	4(7)
C(54)	7(7)	35(10)	34(11)	-10(8)	2(7)	0(7)
C(55)	9(7)	42(11)	38(11)	-4(9)	-6(7)	1(7)
C(56)	7(7)	28(9)	40(11)	9(8)	2(7)	-8(7)
C(57)	27(9)	26(9)	26(10)	-9(8)	-11(8)	-12(8)
C(58)	21(9)	51(12)	24(10)	-22(9)	-13(8)	2(9)
C(59)	29(9)	31(9)	18(9)	-8(7)	-16(7)	2(8)
C(60)	22(9)	39(10)	33(11)	-7(9)	-12(8)	9(8)
C(700)	98	79	76	13	13	15
S(1)	199	126	87	22	28	92
S(2)	139	124	115	35	43	55

The anisotropic displacement factor exponent takes the form :

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$$

S37

C(43)-C(44)	1.38(3)	C(44)-C(45)	1.44(3)	C(35)-C(32)	1.43(3)	C(35)-C(36)	1.45(3)
C(45)-C(47)	1.46(3)	C(45)-C(46)	1.44(3)	C(36)-C(37)	1.44(3)	C(37)-C(38)	1.40(3)
C(46)-C(47)	1.38(4)	C(46)-C(58)	1.48(3)	C(37)-C(53)	1.45(2)	C(38)-C(39)	1.46(3)
C(47)-C(48)	1.48(3)	C(48)-C(49)	1.39(3)	C(39)-C(50)	1.39(3)	C(40)-C(41)	1.45(3)
C(49)-C(59)	1.42(3)	C(49)-C(50)	1.48(3)	C(40)-C(54)	1.48(3)	C(41)-C(42)	1.38(3)
C(50)-C(51)	1.46(3)	C(51)-C(52)	1.35(3)	C(41)-C(56)	1.47(3)	C(42)-C(43)	1.45(3)
C(51)-C(60)	1.46(3)	C(52)-C(53)	1.45(3)	C(43)-C(44)	1.37(3)	C(44)-C(45)	1.45(3)
C(53)-C(54)	1.42(3)	C(54)-C(55)	1.42(3)	C(44)-C(57)	1.45(3)	C(45)-C(46)	1.43(3)
C(55)-C(60)	1.37(3)	C(55)-C(56)	1.46(3)	C(46)-C(47)	1.39(3)	C(46)-C(58)	1.44(3)
C(56)-C(57)	1.38(3)	C(57)-C(58)	1.43(4)	C(47)-C(48)	1.43(3)	C(48)-C(49)	1.41(3)
C(58)-C(59)	1.41(3)	C(59)-C(60)	1.44(3)	C(49)-C(59)	1.45(3)	C(49)-C(50)	1.47(3)
Os(4)-C(4B)	1.89(2)	Os(4)-C(4C)	1.93(2)	C(50)-C(51)	1.45(3)	C(51)-C(52)	1.39(3)
Os(4)-C(4A)	1.973(17)	Os(4)-N(4)	2.11(2)	C(51)-C(60)	1.48(3)	C(52)-C(53)	1.44(3)
Os(4)-C(1')	2.225(15)	Os(4)-Os(5)	2.8983(10)	C(53)-C(54)	1.40(2)	C(54)-C(55)	1.42(3)
Os(5)-C(5A)	1.927(17)	Os(5)-C(5C)	1.932(16)	C(55)-C(60)	1.35(3)	C(55)-C(56)	1.42(3)
Os(5)-C(5B)	1.99(2)	Os(5)-C(400)	2.13(3)	C(56)-C(57)	1.37(3)	C(57)-C(58)	1.44(3)
Os(5)-C(5)	2.387(17)	Os(5)-C(2)	2.417(15)	C(58)-C(59)	1.41(3)	C(59)-C(60)	1.46(3)
Os(5)-Os(6)	2.9018(10)	Os(6)-C(6C)	1.86(2)	C(700)-S(1)	1.486(8)	C(700)-S(2)#1	1.489(8)
Os(6)-C(400)	1.91(2)	Os(6)-C(6B)	1.955(19)				
Os(6)-C(6A)	1.958(17)	Os(6)-C(4)	2.228(15)				
C(400)-N(4)	1.230(10)	N(4)-C(401)	1.64(3)				
C(401)-C(402)	1.48(3)	C(402)-C(403)	1.3900				
C(402)-C(407)	1.3900	C(403)-C(404)	1.3900				
C(404)-C(405)	1.3900	C(405)-C(406)	1.3900				
C(406)-C(407)	1.3900	C(4A)-O(4A)	1.08(2)				
C(4B)-O(4B)	1.14(3)	C(4C)-O(4C)	1.17(3)				
C(5A)-O(5A)	1.10(2)	C(5B)-O(5B)	1.09(2)				
C(5C)-O(5C)	1.11(2)	C(6A)-O(6A)	1.11(2)				
C(6B)-O(6B)	1.12(2)	C(6C)-O(6C)	1.10(2)				
C(1')-C(2)	1.49(2)	C(1')-C(9)	1.52(2)				
C(1')-C(6)	1.53(2)	C(2)-C(3)	1.43(2)				
C(2)-C(12)	1.47(2)	C(3)-C(14)	1.45(3)				
C(3)-C(4)	1.53(3)	C(4)-C(5)	1.50(2)				
C(4)-C(17)	1.54(2)	C(5)-C(6)	1.35(2)				
C(5)-C(19)	1.45(2)	C(6)-C(7)	1.45(2)				
C(7)-C(21)	1.37(2)	C(7)-C(8)	1.43(2)				
C(8)-C(24)	1.43(2)	C(8)-C(9)	1.43(3)				
C(9)-C(10)	1.33(3)	C(10)-C(26)	1.44(3)				
C(10)-C(11)	1.46(3)	C(11)-C(12)	1.37(2)				
C(11)-C(28)	1.47(3)	C(12)-C(13)	1.44(3)				
C(13)-C(30)	1.41(2)	C(13)-C(14)	1.47(3)				
C(14)-C(15)	1.38(2)	C(15)-C(32)	1.44(3)				
C(15)-C(16)	1.47(3)	C(16)-C(17)	1.36(3)				
C(16)-C(34)	1.44(2)	C(17)-C(18)	1.46(3)				
C(18)-C(36)	1.39(2)	C(18)-C(19)	1.44(3)				
C(19)-C(20)	1.42(2)	C(20)-C(21)	1.42(3)				
C(20)-C(38)	1.44(2)	C(21)-C(22)	1.45(3)				
C(22)-C(23)	1.40(3)	C(22)-C(39)	1.42(3)				
C(23)-C(24)	1.42(3)	C(23)-C(42)	1.44(3)				
C(24)-C(25)	1.44(3)	C(25)-C(26)	1.42(3)				
C(25)-C(43)	1.46(3)	C(26)-C(27)	1.44(3)				
C(27)-C(45)	1.40(3)	C(27)-C(28)	1.43(3)				
C(28)-C(29)	1.36(3)	C(29)-C(30)	1.44(3)				
C(29)-C(47)	1.46(3)	C(30)-C(31)	1.42(3)				
C(31)-C(32)	1.38(3)	C(31)-C(48)	1.46(3)				
C(32)-C(33)	1.46(3)	C(33)-C(50)	1.39(3)				
C(33)-C(34)	1.45(3)	C(34)-C(35)	1.38(3)				

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -x,-y,-z

Table S10. Intratomic Angles (deg) and Esd's for 2b - 0.5CS₂

C(1A)-Os(1)-C(1B)	96.9(9)	C(1A)-Os(1)-C(1C)	91.7(9)	C(17)-C(4)-Os(3)	117.2(11)	C(5)-C(4)-Os(3)	114.3(11)
C(1B)-Os(1)-C(1C)	91.3(8)	C(1A)-Os(1)-N(1)	89.7(8)	C(6)-C(5)-C(19)	115.8(16)	C(6)-C(5)-C(4)	126.2(15)
C(1B)-Os(1)-N(1)	98.4(7)	C(1C)-Os(1)-N(1)	170.0(7)	C(19)-C(5)-C(4)	112.1(14)	C(5)-C(6)-C(7)	121.8(16)
C(1A)-Os(1)-C(1)	172.0(8)	C(1B)-Os(1)-C(1)	89.6(8)	C(5)-C(6)-C(1)	121.5(7)	C(7)-C(6)-C(1)	109.2(16)
C(1C)-Os(1)-C(1)	92.8(7)	N(1)-Os(1)-C(1)	84.8(6)	C(21)-C(7)-C(8)	117.5(17)	C(21)-C(7)-C(6)	122.6(16)
C(1A)-Os(1)-Os(2)	92.6(7)	C(1B)-Os(1)-Os(2)	166.4(6)	C(8)-C(7)-C(6)	109.0(16)	C(24)-C(8)-C(7)	121.0(18)
C(1C)-Os(1)-Os(2)	98.2(6)	N(1)-Os(1)-Os(2)	71.9(5)	C(24)-C(8)-C(9)	119.2(19)	C(7)-C(8)-C(9)	108.4(15)
C(1)-Os(1)-Os(2)	80.3(5)	C(2A)-Os(2)-C(2C)	91.5(8)	C(10)-C(9)-C(8)	119.3(18)	C(10)-C(9)-C(1)	125(2)
C(2A)-Os(2)-C(2B)	94.1(8)	C(2C)-Os(2)-C(2B)	93.4(10)	C(9)-C(9)-C(1)	108.3(16)	C(9)-C(10)-C(26)	122(2)
C(2A)-Os(2)-C(100)	88.5(8)	C(2C)-Os(2)-C(100)	114.3(8)	C(12)-C(11)-C(28)	119.7(17)	C(26)-C(10)-C(11)	106.8(19)
C(2B)-Os(2)-C(100)	152.2(9)	C(2A)-Os(2)-C(3)	166.3(7)	C(11)-C(12)-C(2)	121(2)	C(12)-C(11)-C(10)	117.1(17)
C(2C)-Os(2)-C(3)	84.6(7)	C(2B)-Os(2)-C(3)	99.2(6)	C(30)-C(13)-C(12)	107.7(18)	C(11)-C(12)-C(13)	118.0(18)
C(100)-Os(2)-C(3)	81.1(6)	C(2A)-Os(2)-C(2)	153.7(7)	C(12)-C(13)-C(14)	123.2(19)	C(13)-C(12)-C(2)	110.2(17)
C(2C)-Os(2)-C(2)	114.5(8)	C(2B)-Os(2)-C(2)	81.0(7)	C(13)-C(14)-C(13)	122.1(19)	C(30)-C(13)-C(14)	117.7(19)
C(100)-Os(2)-C(2)	84.4(6)	C(3)-Os(2)-C(2)	34.3(6)	C(15)-C(14)-C(3)	107.9(17)	C(15)-C(14)-C(13)	122.8(19)
C(2A)-Os(2)-Os(3)	98.1(6)	C(2C)-Os(2)-Os(3)	71.9(7)	C(14)-C(15)-C(32)	120.6(19)	C(13)-C(14)-C(3)	107.2(17)
C(2B)-Os(2)-Os(3)	161.0(6)	C(100)-Os(2)-Os(3)	43.3(5)	C(32)-C(15)-C(16)	116.9(19)	C(14)-C(15)-C(16)	122.5(18)
C(3)-Os(2)-Os(3)	68.1(4)	C(2)-Os(2)-Os(3)	94.0(4)	C(17)-C(16)-C(15)	108.2(18)	C(17)-C(16)-C(34)	118.1(18)
C(2A)-Os(2)-Os(1)	92.9(5)	C(2C)-Os(2)-Os(1)	174.5(6)	C(17)-C(16)-C(17)	119.3(16)	C(34)-C(16)-C(15)	109.4(17)
C(2B)-Os(2)-Os(1)	89.6(7)	C(100)-Os(2)-Os(1)	62.6(5)	C(18)-C(17)-C(4)	119.0(17)	C(18)-C(17)-C(4)	116.0(17)
C(3)-Os(2)-Os(1)	90.4(4)	C(2)-Os(2)-Os(1)	61.4(4)	C(16)-C(17)-C(4)	119.8(18)	C(17)-C(18)-C(36)	124.7(19)
Os(3)-Os(3)-C(100)	104.2(3)	C(3A)-Os(3)-C(3C)	96.4(10)	C(17)-C(18)-C(19)	107.7(15)	C(36)-C(18)-C(19)	116.7(17)
C(3A)-Os(3)-C(3B)	94.0(10)	C(3C)-Os(3)-C(3B)	96.7(10)	C(20)-C(19)-C(5)	123.0(17)	C(20)-C(19)-C(18)	121.4(16)
C(3A)-Os(3)-C(100)	92.3(9)	C(3C)-Os(3)-C(100)	101.7(9)	C(5)-C(19)-C(18)	105.1(15)	C(19)-C(20)-C(38)	119.6(19)
C(3B)-Os(3)-C(100)	159.7(11)	C(3A)-Os(3)-C(4)	166.6(8)	C(19)-C(20)-C(21)	120.7(16)	C(38)-C(20)-C(21)	107.3(18)
C(3C)-Os(3)-C(4)	96.4(8)	C(3B)-Os(3)-C(4)	88.6(8)	C(7)-C(21)-C(22)	122.7(19)	C(7)-C(21)-C(20)	116.2(17)
C(100)-Os(3)-C(4)	81.1(7)	C(3A)-Os(3)-Os(2)	91.5(7)	C(22)-C(21)-C(20)	108.9(19)	C(23)-C(22)-C(21)	121.8(19)
C(3C)-Os(3)-Os(2)	151.5(6)	C(3B)-Os(3)-Os(2)	110.0(8)	C(23)-C(22)-C(39)	119(2)	C(21)-C(22)-C(39)	108.2(19)
C(100)-Os(3)-Os(2)	50.5(7)	C(4)-Os(3)-Os(2)	75.3(4)	C(22)-C(23)-C(42)	123.3(18)	C(22)-C(23)-C(24)	120.3(18)
Os(3)-C(100)-Os(2)	153.4(17)	N(1)-C(100)-Os(2)	117.5(15)	C(42)-C(23)-C(24)	104.5(18)	C(25)-C(24)-C(8)	118.6(19)
C(100)-N(1)-Os(1)	86.2(8)	C(100)-N(1)-C(101)	123.2(16)	C(25)-C(24)-C(23)	110.5(18)	C(8)-C(24)-C(23)	116.8(18)
C(102)-C(101)-N(1)	113.0(9)	C(103)-C(102)-C(107)	120.0	C(26)-C(25)-C(43)	121.2(18)	C(26)-C(25)-C(43)	122(2)
C(103)-C(102)-C(101)	120.3(11)	C(107)-C(102)-C(101)	119.7(11)	C(25)-C(26)-C(10)	105.5(19)	C(25)-C(26)-C(10)	119(2)
C(104)-C(103)-C(102)	120.0	C(103)-C(104)-C(105)	120.0	C(10)-C(26)-C(27)	120.3(19)	C(10)-C(26)-C(27)	107.4(19)
C(106)-C(107)-C(102)	120.0	C(107)-C(106)-C(105)	120.0	C(45)-C(27)-C(26)	120(2)	C(45)-C(27)-C(26)	118(2)
Os(1B)-C(1B)-Os(1)	176.2(19)	O(1A)-C(1A)-Os(1)	177.8(19)	C(29)-C(28)-C(11)	110.6(18)	C(29)-C(28)-C(11)	121(2)
O(2A)-C(2A)-Os(2)	175.0(17)	O(2B)-C(2B)-Os(2)	179(2)	C(11)-C(28)-C(27)	119.3(19)	C(11)-C(28)-C(27)	107(2)
O(2C)-C(2C)-Os(2)	172(2)	O(3A)-C(3A)-Os(3)	174(3)	C(28)-C(29)-C(30)	118.3(19)	C(28)-C(29)-C(47)	121(2)
O(3B)-C(3B)-Os(3)	174.7(19)	O(3C)-C(3C)-Os(3)	176(2)	C(30)-C(29)-C(47)	108(2)	C(13)-C(30)-C(29)	119(2)
C(2)-C(1)-C(9)	114.4(16)	C(2)-C(1)-C(6)	111.8(14)	C(13)-C(30)-C(31)	120.9(19)	C(29)-C(30)-C(31)	108.6(18)
C(9)-C(1)-C(6)	103.3(15)	C(2)-C(1)-Os(1)	95.7(11)	C(32)-C(31)-C(48)	121.5(19)	C(32)-C(31)-C(30)	118.0(18)
C(9)-C(1)-Os(1)	115.8(11)	C(6)-C(1)-Os(1)	116.4(12)	C(48)-C(31)-C(30)	108.8(19)	C(31)-C(32)-C(15)	124(2)
C(3)-C(2)-C(1)	125.4(14)	C(3)-C(2)-C(12)	106.4(16)	C(31)-C(32)-C(33)	118.9(18)	C(15)-C(32)-C(33)	105.4(18)
C(1)-C(2)-Os(2)	119.3(16)	C(3)-C(2)-Os(2)	67.0(9)	C(50)-C(33)-C(34)	118.9(19)	C(50)-C(33)-C(32)	119.1(18)
C(12)-C(2)-Os(2)	114.4(12)	C(12)-C(2)-Os(2)	113.5(12)	C(34)-C(33)-C(36)	111.1(17)	C(35)-C(34)-C(33)	122.0(18)
C(2)-C(3)-C(4)	122.7(15)	C(2)-C(3)-C(14)	108.0(15)	C(34)-C(35)-C(36)	119.2(17)	C(34)-C(35)-C(52)	105.9(17)
C(4)-C(3)-C(14)	118.5(15)	C(2)-C(3)-Os(2)	78.7(10)	C(36)-C(35)-C(52)	110.4(18)	C(37)-C(36)-C(18)	121.6(19)
C(4)-C(3)-Os(2)	107.8(10)	C(14)-C(3)-Os(2)	114.5(12)	C(37)-C(36)-C(35)	108.7(17)	C(18)-C(36)-C(35)	117.2(19)
C(3)-C(4)-C(17)	115.3(15)	C(3)-C(4)-C(5)	108.6(13)	C(36)-C(37)-C(53)	121.3(19)	C(38)-C(37)-C(53)	118(2)
C(17)-C(4)-C(5)	96.4(14)	C(3)-C(4)-Os(3)	105.0(11)	C(37)-C(38)-C(39)	107.4(19)	C(37)-C(38)-C(20)	120(2)
				C(40)-C(39)-C(22)	122(2)	C(20)-C(38)-C(39)	107.0(19)
				C(22)-C(39)-C(38)	117(2)	C(40)-C(39)-C(38)	122(2)
				C(39)-C(40)-C(54)	108.6(19)	C(39)-C(40)-C(41)	123(2)
				C(42)-C(41)-C(56)	117(2)	C(41)-C(40)-C(54)	107(2)
				C(42)-C(41)-C(40)	119(2)	C(42)-C(41)-C(56)	121(2)
				C(40)-C(41)-C(56)	108.2(19)	C(41)-C(42)-C(43)	120(2)

C(41)-C(42)-C(23)	118(2)	C(43)-C(42)-C(23)	109.5(18)	N(4)-C(400)-Os(6)	151(2)	N(4)-C(400)-Os(5)	115(2)
C(44)-C(43)-C(42)	122(2)	C(44)-C(43)-C(25)	117(2)	Os(6)-C(400)-Os(5)	91.8(9)	C(400)-N(4)-C(401)	117(2)
C(42)-C(43)-C(25)	109.8(19)	C(43)-C(44)-C(45)	122(2)	C(400)-N(4)-Os(4)	110(2)	C(401)-N(4)-Os(4)	131.0(18)
C(43)-C(44)-C(57)	118(2)	C(45)-C(44)-C(57)	107(2)	C(402)-C(401)-N(4)	103.8(18)	C(403)-C(402)-C(407)	120.0
C(27)-C(45)-C(46)	119(2)	C(27)-C(45)-C(44)	120(2)	C(403)-C(402)-C(401)	120.3(17)	C(407)-C(402)-C(401)	119.7(17)
C(46)-C(45)-C(44)	109.2(19)	C(47)-C(46)-C(45)	122(2)	C(402)-C(403)-C(404)	120.0	C(403)-C(404)-C(405)	120.0
C(47)-C(46)-C(58)	117(2)	C(45)-C(46)-C(58)	107(2)	C(406)-C(405)-C(406)	120.0	C(407)-C(406)-C(405)	120.0
C(46)-C(47)-C(48)	118(2)	C(46)-C(47)-C(48)	125(2)	C(406)-C(407)-C(402)	120.0	Os(4A)-C(4A)-Os(4)	176.8(17)
C(29)-C(47)-C(48)	106(2)	C(31)-C(48)-C(49)	124(2)	Os(4B)-C(4B)-Os(4)	176(2)	Os(4C)-C(4C)-Os(4)	178.4(19)
C(31)-C(48)-C(47)	109.2(18)	C(49)-C(48)-C(47)	114(2)	Os(5A)-C(5A)-Os(5)	177.0(18)	Os(5B)-C(5B)-Os(5)	177.5(19)
C(34)-C(49)-C(50)	123(2)	C(48)-C(49)-C(50)	115.8(19)	Os(5C)-C(5C)-Os(5)	178.5(16)	Os(6A)-C(6A)-Os(6)	174.3(18)
C(59)-C(49)-C(50)	108.3(19)	C(33)-C(50)-C(51)	119(2)	Os(6B)-C(6B)-Os(6)	178.0(19)	Os(6C)-C(6C)-Os(6)	178(2)
C(33)-C(50)-C(49)	120.5(18)	C(51)-C(50)-C(49)	107.1(18)	C(2)-C(1)-C(9)	113.3(13)	C(2)-C(1)-C(6)	111.2(12)
C(52)-C(51)-C(50)	120.0(19)	C(52)-C(51)-C(60)	121(2)	C(9)-C(1)-C(6)	101.5(13)	C(2)-C(1)-Os(4)	100.6(10)
C(50)-C(51)-C(60)	107(2)	C(51)-C(52)-C(35)	122(2)	C(9)-C(1)-Os(4)	116.3(10)	C(6)-C(1)-Os(4)	114.4(10)
C(51)-C(52)-C(53)	121.6(18)	C(35)-C(52)-C(53)	105.2(18)	C(3)-C(2)-C(12)	107.1(15)	C(3)-C(2)-C(1)	124.1(16)
C(54)-C(53)-C(52)	118(2)	C(54)-C(53)-C(37)	120(2)	C(12)-C(2)-C(1)	119.0(14)	C(3)-C(2)-Os(5)	71.6(9)
C(52)-C(53)-C(37)	108.1(18)	C(55)-C(54)-C(53)	118(2)	C(12)-C(2)-Os(5)	116.4(11)	C(1)-C(2)-Os(5)	110.0(10)
C(55)-C(54)-C(40)	109(2)	C(53)-C(54)-C(40)	122(2)	C(2)-C(3)-C(14)	108.6(16)	C(2)-C(3)-C(4)	121.0(16)
C(60)-C(55)-C(54)	124(2)	C(60)-C(55)-C(56)	119(2)	C(14)-C(3)-C(4)	120.0(15)	C(2)-C(3)-Os(5)	73.9(9)
C(54)-C(55)-C(56)	106(2)	C(57)-C(56)-C(41)	118.4(19)	C(5)-C(3)-Os(5)	116.9(13)	C(4)-C(3)-Os(5)	108.0(11)
C(57)-C(56)-C(55)	121(2)	C(41)-C(56)-C(55)	110(2)	C(5)-C(4)-C(3)	111.7(13)	C(5)-C(4)-C(17)	102.2(14)
C(56)-C(57)-C(58)	119.5(19)	C(56)-C(57)-C(44)	121(2)	C(3)-C(4)-C(17)	111.1(14)	C(5)-C(4)-Os(6)	115.6(10)
C(58)-C(57)-C(44)	109(2)	C(59)-C(58)-C(57)	121(2)	C(3)-C(4)-Os(6)	101.9(10)	C(17)-C(4)-Os(6)	114.6(10)
C(59)-C(58)-C(46)	119(2)	C(57)-C(58)-C(46)	108(2)	C(6)-C(5)-C(19)	120.7(15)	C(6)-C(5)-C(4)	124.3(15)
C(58)-C(59)-C(49)	121(2)	C(58)-C(59)-C(60)	119(2)	C(19)-C(5)-C(4)	108.7(14)	C(5)-C(6)-C(7)	119.2(15)
C(49)-C(59)-C(60)	108.9(18)	C(55)-C(60)-C(51)	121.3(19)	C(5)-C(6)-C(1)	123.5(14)	C(7)-C(6)-C(1)	109.8(13)
C(55)-C(60)-C(51)	118(2)	C(59)-C(60)-C(51)	108.5(19)	C(21)-C(7)-C(8)	122.5(16)	C(21)-C(7)-C(6)	121.2(15)
C(4B)-Os(4)-C(4C)	92.7(11)	C(4B)-Os(4)-C(4A)	95.2(8)	C(8)-C(7)-C(6)	107.0(15)	C(24)-C(8)-C(7)	117.8(16)
C(4C)-Os(4)-C(4A)	93.6(8)	C(4B)-Os(4)-N(4)	95.8(10)	C(24)-C(8)-C(9)	119.4(17)	C(7)-C(8)-C(9)	106.6(14)
C(4C)-Os(4)-N(4)	171.2(10)	C(4A)-Os(4)-N(4)	87.9(8)	C(10)-C(9)-C(8)	121.6(16)	C(10)-C(9)-C(1)	123.8(17)
C(4B)-Os(4)-C(1)	88.9(8)	C(4C)-Os(4)-C(1)	91.9(7)	C(8)-C(9)-C(1)	108.6(14)	C(9)-C(10)-C(26)	120.8(18)
C(4A)-Os(4)-C(1)	173.0(6)	N(4)-Os(4)-C(1)	86.0(7)	C(9)-C(10)-C(11)	120.1(15)	C(12)-C(11)-C(28)	18.6(17)
C(4B)-Os(4)-Os(5)	159.1(8)	C(4C)-Os(4)-Os(5)	103.1(7)	C(12)-C(11)-C(10)	120.2(17)	C(11)-C(12)-C(13)	119.8(17)
C(4A)-Os(4)-Os(5)	97.2(5)	N(4)-Os(4)-Os(5)	68.1(6)	C(10)-C(11)-C(28)	108.9(16)	C(13)-C(12)-C(2)	109.3(14)
C(1)-Os(4)-Os(5)	77.3(4)	C(5A)-Os(5)-C(5C)	96.0(8)	C(11)-C(12)-C(2)	121.5(17)	C(30)-C(13)-C(14)	120.4(16)
C(5A)-Os(5)-C(5B)	92.3(8)	C(5C)-Os(5)-C(5B)	94.1(7)	C(30)-C(13)-C(12)	122.1(17)	C(15)-C(14)-C(3)	123.8(17)
C(5A)-Os(5)-C(400)	83.2(9)	C(5C)-Os(5)-C(400)	119.3(8)	C(12)-C(13)-C(14)	106.0(14)	C(3)-C(14)-C(13)	108.8(14)
C(5B)-Os(5)-C(400)	146.6(8)	C(5A)-Os(5)-C(3)	161.7(7)	C(15)-C(14)-C(13)	118.1(15)	C(14)-C(15)-C(16)	119.1(15)
C(5C)-Os(5)-C(3)	83.1(7)	C(5B)-Os(5)-C(3)	106.0(7)	C(14)-C(15)-C(32)	120.3(16)	C(17)-C(16)-C(34)	119.4(18)
C(400)-Os(5)-C(2)	81.4(9)	C(5A)-Os(5)-C(2)	154.1(7)	C(32)-C(15)-C(16)	108.3(15)	C(34)-C(16)-C(15)	107.9(16)
C(400)-Os(5)-C(2)	109.5(6)	C(5B)-Os(5)-C(2)	82.0(6)	C(17)-C(16)-C(15)	120.0(15)	C(16)-C(17)-C(18)	124.4(17)
C(5A)-Os(5)-Os(4)	89.0(6)	C(5C)-Os(5)-Os(4)	34.5(5)	C(16)-C(17)-C(18)	120.0(16)	C(36)-C(18)-C(19)	120.4(17)
C(5B)-Os(5)-Os(4)	81.6(6)	C(400)-Os(5)-Os(4)	173.5(5)	C(18)-C(17)-C(4)	108.9(15)	C(36)-C(18)-C(17)	107.4(15)
C(3)-Os(5)-Os(4)	93.4(4)	C(2)-Os(5)-Os(4)	65.3(6)	C(36)-C(18)-C(17)	120.1(18)	C(19)-C(18)-C(17)	107.4(15)
C(5A)-Os(5)-Os(6)	94.9(6)	C(2)-Os(5)-Os(6)	65.3(3)	C(20)-C(19)-C(18)	110.1(15)	C(21)-C(19)-C(5)	118.9(15)
C(5B)-Os(5)-Os(6)	170.5(6)	C(400)-Os(5)-Os(6)	79.0(5)	C(18)-C(19)-C(5)	120.3(16)	C(19)-C(20)-C(38)	119.2(16)
C(3)-Os(5)-Os(6)	67.0(5)	C(2)-Os(5)-Os(6)	41.0(6)	C(21)-C(20)-C(38)	109.0(16)	C(7)-C(21)-C(22)	119.1(17)
Os(4)-Os(5)-Os(6)	104.66(3)	C(6C)-Os(6)-C(400)	94.1(4)	C(7)-C(21)-C(20)	120.3(15)	C(23)-C(22)-C(39)	119.9(18)
C(6C)-Os(6)-C(6B)	93.4(9)	C(400)-Os(6)-C(6B)	113.4(10)	C(20)-C(21)-C(22)	108.2(15)	C(39)-C(22)-C(21)	107.3(17)
C(6C)-Os(6)-C(6A)	93.1(8)	C(400)-Os(6)-C(6A)	152.0(10)	C(23)-C(22)-C(21)	119.8(17)	C(22)-C(23)-C(42)	120.3(18)
C(6B)-Os(6)-C(6A)	93.6(9)	C(6C)-Os(6)-C(4)	91.3(7)	C(22)-C(23)-C(42)	120.4(17)	C(8)-C(24)-C(25)	119.3(18)
C(400)-Os(6)-C(4)	80.7(9)	C(6B)-Os(6)-C(4)	91.2(7)	C(23)-C(24)-C(25)	107.4(17)	C(26)-C(25)-C(43)	119.1(19)
C(6A)-Os(6)-C(4)	173.3(7)	C(6C)-Os(6)-Os(5)	157.8(7)	C(26)-C(25)-C(43)	118.5(16)	C(25)-C(26)-C(10)	120.4(19)
C(400)-Os(6)-Os(5)	47.1(8)	C(6B)-Os(6)-Os(5)	104.9(6)	C(4)-Os(6)-Os(5)	120.2(16)	C(10)-C(26)-C(27)	108.4(18)
C(6A)-Os(6)-Os(5)	98.1(6)	C(4)-Os(6)-Os(5)	76.1(4)				

Table S11. Crystallographic Data for 3a.

formula	C ₈₄ H ₁₄ N ₂ O ₈ Os ₃
fw	1749.57
system, space group	Monoclinic, P2 ₁ /c
a, Å	19.9376(8)
b, Å	23.0770(9)
c, Å	12.8318(5)
β, deg	103.462(1)
V, Å ³	5741.7(4)
Z	4
D _{calc} , Mg m ⁻³	2.024
temp, K	193(2)
λ (Mo Kα), Å	0.71073
μ, mm ⁻¹	6.693
θ range for collection	1.37° ≤ θ ≤ 23.34°
no. of rflns measd	23793
no. of unique rflns	8192
no. of rflns (I > 2σ(I))	6267
R _f ^a	0.0779
R _w ^b	0.1995
GOF	1.158

$$^a R_f = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o| \quad ^b R_w = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}$$

C(45)-C(27)-C(28)	119.3(19)	C(45)-C(27)-C(26)	119.5(19)
C(28)-C(27)-C(26)	110.1(17)	C(29)-C(28)-C(27)	122.2(19)
C(29)-C(28)-C(11)	120.8(17)	C(27)-C(28)-C(11)	105.9(18)
C(28)-C(29)-C(30)	121.3(17)	C(28)-C(29)-C(47)	118.2(19)
C(30)-C(29)-C(47)	106.5(18)	C(13)-C(30)-C(31)	120.5(18)
C(13)-C(30)-C(29)	117.3(18)	C(31)-C(30)-C(29)	109.8(17)
C(32)-C(31)-C(30)	118.5(16)	C(32)-C(31)-C(48)	120.4(17)
C(30)-C(31)-C(48)	107.1(17)	C(31)-C(32)-C(15)	122.1(16)
C(31)-C(32)-C(33)	120.8(18)	C(15)-C(32)-C(33)	107.1(18)
C(50)-C(33)-C(34)	118.4(19)	C(50)-C(33)-C(32)	120.0(19)
C(34)-C(33)-C(32)	109.2(16)	C(35)-C(34)-C(16)	122.3(18)
C(35)-C(34)-C(33)	119.7(18)	C(16)-C(34)-C(33)	107.5(18)
C(52)-C(35)-C(36)	107.5(16)	C(34)-C(35)-C(36)	118.0(16)
C(18)-C(36)-C(35)	120.2(18)	C(18)-C(36)-C(37)	119.4(17)
C(38)-C(37)-C(36)	121.2(15)	C(38)-C(37)-C(53)	119.9(17)
C(36)-C(37)-C(53)	107.4(16)	C(37)-C(38)-C(20)	119.4(16)
C(37)-C(38)-C(39)	120.8(17)	C(20)-C(38)-C(39)	106.4(15)
C(40)-C(39)-C(22)	121.9(19)	C(40)-C(39)-C(38)	118.7(18)
C(22)-C(39)-C(38)	109.0(16)	C(39)-C(40)-C(41)	117.7(18)
C(39)-C(40)-C(54)	121.2(17)	C(41)-C(40)-C(54)	106.7(17)
C(42)-C(41)-C(40)	120.9(18)	C(42)-C(41)-C(56)	120.3(18)
C(40)-C(41)-C(56)	107.3(16)	C(41)-C(42)-C(23)	120.6(17)
C(41)-C(42)-C(43)	118.8(17)	C(23)-C(42)-C(43)	107.9(16)
C(44)-C(43)-C(42)	121.6(17)	C(44)-C(43)-C(25)	120.2(19)
C(42)-C(43)-C(25)	106.4(19)	C(43)-C(44)-C(57)	120.9(17)
C(43)-C(44)-C(57)	118.6(19)	C(45)-C(44)-C(57)	108.6(18)
C(27)-C(45)-C(44)	120.1(19)	C(27)-C(45)-C(44)	120.0(19)
C(46)-C(45)-C(44)	107.8(17)	C(47)-C(46)-C(45)	119.0(18)
C(47)-C(46)-C(58)	120(2)	C(45)-C(46)-C(58)	108(2)
C(46)-C(47)-C(29)	120.3(19)	C(46)-C(47)-C(29)	121(2)
C(48)-C(47)-C(29)	108.2(18)	C(49)-C(48)-C(47)	119.8(18)
C(49)-C(48)-C(31)	119.1(18)	C(47)-C(48)-C(31)	108.2(17)
C(48)-C(49)-C(50)	120.6(18)	C(48)-C(49)-C(50)	120.3(18)
C(59)-C(49)-C(50)	108.2(18)	C(33)-C(50)-C(49)	122(2)
C(33)-C(50)-C(49)	119.4(19)	C(51)-C(50)-C(49)	107.0(16)
C(52)-C(51)-C(50)	119.0(18)	C(52)-C(51)-C(60)	119.8(19)
C(50)-C(51)-C(60)	109.3(17)	C(51)-C(52)-C(35)	119.2(19)
C(51)-C(52)-C(53)	118.4(17)	C(35)-C(52)-C(53)	108.7(16)
C(54)-C(53)-C(52)	121.0(17)	C(54)-C(53)-C(37)	120.7(17)
C(52)-C(53)-C(37)	108.0(16)	C(53)-C(54)-C(55)	119.9(18)
C(60)-C(55)-C(54)	121.0(18)	C(55)-C(54)-C(40)	108.5(16)
C(54)-C(55)-C(56)	108.7(17)	C(57)-C(56)-C(41)	120.7(18)
C(56)-C(57)-C(58)	118.9(16)	C(57)-C(56)-C(41)	119.7(17)
C(58)-C(57)-C(44)	121.3(17)	C(56)-C(57)-C(44)	121.8(18)
C(59)-C(58)-C(57)	106.3(17)	C(59)-C(58)-C(46)	121(2)
C(58)-C(59)-C(49)	118.9(18)	C(46)-C(58)-C(57)	109.5(18)
C(49)-C(59)-C(60)	109.4(16)	C(58)-C(59)-C(60)	117.8(18)
C(55)-C(60)-C(51)	119.8(18)	C(55)-C(60)-C(59)	121.5(17)
S(1)-C(700)-S(2)#1	178(3)	C(59)-C(60)-C(51)	106.1(17)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -x,-y-1,-z

Table S12. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3a.

	x	y	z	U(eq) ($\text{\AA}^2$)
Os(1)	-7783(1)	548(1)	-7113(1)	31(1)
Os(2)	-6642(1)	-276(1)	-6679(1)	31(1)
Os(3)	-5641(1)	199(1)	-7778(1)	29(1)
C(100)	-6465(10)	553(8)	-7430(15)	27(5)
N(1)	-6905(9)	945(7)	-7449(12)	27(4)
C(101)	-6817(12)	1502(8)	-7966(17)	34(5)
C(102)	-6962(8)	2001(5)	-7297(10)	34(5)
C(103)	-7386(8)	2454(6)	-7767(8)	43(6)
C(104)	-7502(8)	2921(5)	-7148(12)	62(8)
C(105)	-7193(9)	2936(5)	-6059(11)	45(6)
C(106)	-6768(8)	2484(7)	-5589(8)	48(6)
C(107)	-6653(8)	2017(6)	-6208(10)	52(7)
C(300)	-4976(11)	-440(10)	-7969(16)	33(5)
N(3)	-4603(10)	-827(8)	-7988(16)	42(5)
C(301)	-4161(13)	-1323(10)	-7956(18)	47(6)
C(302)	-4561(8)	-1886(6)	-7969(13)	45(6)
C(303)	-4863(9)	-2150(7)	-8939(11)	57(7)
C(304)	-5233(9)	-2662(7)	-8950(15)	71(9)
C(305)	-5301(10)	-2909(6)	-7990(2)	95(14)
C(306)	-4999(11)	-2645(8)	-7023(15)	99(13)
C(307)	-4629(10)	-2134(8)	-7011(11)	61(8)
C(1A)	-7618(14)	900(12)	-5720(2)	55(7)
O(1A)	-7505(11)	1087(8)	-4865(13)	62(5)
C(1B)	-8408(12)	1156(10)	-7751(18)	37(5)
O(1B)	-8787(10)	1507(8)	-8130(17)	63(5)
C(1C)	-8498(11)	59(9)	-6792(16)	30(5)
O(1C)	-8906(9)	-222(8)	-6603(16)	60(5)
C(2A)	-6356(14)	144(9)	-5324(19)	42(6)
O(2A)	-6160(9)	379(8)	-4572(13)	56(5)
C(2B)	-7212(12)	-851(11)	-6153(18)	41(6)
O(2B)	-7507(11)	-1188(8)	-5824(14)	65(6)
C(2C)	-5855(13)	-804(10)	-6440(16)	38(6)
O(2C)	-5447(10)	-1136(8)	-6248(13)	57(5)
C(3A)	-4977(15)	526(11)	-6620(2)	51(7)
O(3A)	-4564(11)	767(8)	-5954(15)	71(6)
C(3B)	-5408(10)	717(9)	-8799(16)	29(5)
O(3B)	-5314(10)	1023(8)	-9403(13)	55(5)
C(1)	-7908(11)	111(8)	-8700(15)	27(5)
C(2)	-7540(11)	-415(9)	-8358(17)	33(5)
C(3)	-6839(9)	-578(8)	-8434(14)	18(4)
C(4)	-6481(11)	-177(8)	-9084(15)	28(5)
C(5)	-6950(11)	281(8)	-9677(15)	30(5)
C(6)	-7569(10)	404(8)	-9519(13)	21(4)
C(7)	-8142(10)	605(8)	-10422(17)	30(5)
C(8)	-8789(12)	363(9)	-10291(16)	34(5)
C(9)	-8642(11)	26(9)	-9303(16)	31(5)
C(10)	-8999(13)	-485(9)	-9310(17)	38(6)
C(11)	-8614(10)	-1008(9)	-8786(16)	32(5)

S47

C(12)	-7930(10)	-960(8)	-8370(15)	28(5)
C(13)	-7493(11)	-1437(8)	-8553(14)	27(5)
C(14)	-6851(12)	-1209(8)	-8666(17)	34(5)
C(15)	-6503(12)	-1449(9)	-9340(2)	44(6)
C(16)	-6191(10)	-1071(10)	-10046(18)	37(5)
C(17)	-6236(9)	-487(9)	-9946(15)	26(5)
C(18)	-6363(12)	-139(9)	-10894(17)	37(5)
C(19)	-6832(11)	326(9)	-10742(16)	30(5)
C(20)	-7348(11)	526(8)	-11593(15)	28(5)
C(21)	-8013(11)	674(8)	-11445(16)	28(5)
C(22)	-8542(14)	502(10)	-12359(16)	45(6)
C(23)	-9155(11)	261(10)	-12251(17)	37(5)
C(24)	-9282(11)	213(9)	-11184(17)	32(5)
C(25)	-9661(11)	-331(9)	-11152(19)	36(5)
C(26)	-9508(13)	-665(10)	-10240(2)	43(6)
C(27)	-9460(11)	-1289(9)	-10297(19)	38(6)
C(28)	-8927(12)	-1484(10)	-9452(19)	43(6)
C(29)	-8507(13)	-1937(9)	-9580(2)	41(6)
C(30)	-7773(14)	-1931(9)	-9153(18)	43(6)
C(31)	-7431(13)	-2182(9)	-9857(19)	43(6)
C(32)	-6793(12)	-1949(9)	-9977(18)	39(5)
C(33)	-6657(13)	-1879(9)	-11050(2)	43(6)
C(34)	-6262(10)	-1339(10)	-11070(16)	35(5)
C(35)	-6428(13)	-1004(11)	-12017(18)	46(6)
C(36)	-6471(12)	-389(10)	-11945(16)	37(6)
C(37)	-7024(11)	-175(10)	-12812(15)	34(5)
C(38)	-7432(13)	271(10)	-12640(18)	43(6)
C(39)	-8174(11)	247(9)	-13107(17)	32(5)
C(40)	-8473(11)	-233(10)	-13700(17)	38(5)
C(41)	-9097(13)	-460(11)	-13585(18)	46(6)
C(42)	-9441(11)	-218(9)	-12882(17)	35(5)
C(43)	-9753(11)	-594(10)	-12200(17)	37(5)
C(44)	-9720(10)	-1201(10)	-12308(19)	39(6)
C(45)	-9571(12)	-1561(10)	-11322(18)	41(6)
C(46)	-9120(12)	-2026(10)	-11469(19)	41(6)
C(47)	-8608(14)	-2217(9)	-10650(2)	46(6)
C(48)	-7921(12)	-2366(9)	-10813(19)	40(5)
C(49)	-7805(12)	-2296(9)	-11837(18)	38(6)
C(50)	-7153(11)	-2060(9)	-11939(18)	38(6)
C(51)	-7309(11)	-1705(10)	-12936(18)	38(5)
C(52)	-6946(11)	-1183(9)	-12961(17)	35(5)
C(53)	-7293(12)	-666(10)	-13427(18)	39(5)
C(54)	-8016(13)	-694(11)	-13890(15)	44(6)
C(55)	-8396(11)	-1238(9)	-13848(17)	33(5)
C(56)	-9042(11)	-1093(10)	-13690(16)	35(5)
C(57)	-9374(13)	-1448(10)	-13050(2)	48(6)
C(58)	-8993(12)	-1958(10)	-12550(2)	47(7)
C(59)	-8355(14)	-2113(9)	-12664(18)	47(7)

^a U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

S48

Table S13. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3a

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Oa(1)	46(1)	28(1)	23(1)	-1(1)	16(1)	5(1)
C(1A)	64(18)	59(17)	45(16)	-23(14)	19(13)	2(13)
O(1A)	109(16)	47(11)	33(10)	-16(9)	23(10)	3(10)
C(1B)	34(13)	42(14)	43(13)	-20(12)	26(11)	-3(11)
O(1B)	59(13)	44(11)	91(15)	5(11)	26(11)	12(10)
C(1C)	30(5)	30(5)	30(5)	0(1)	7(2)	0(1)
O(1C)	49(11)	59(12)	78(13)	10(10)	28(10)	-4(9)
Oa(2)	49(11)	27(1)	19(1)	3(1)	12(1)	6(1)
C(2A)	89(19)	19(11)	30(13)	5(10)	40(13)	21(11)
O(2A)	72(13)	67(12)	22(9)	-22(9)	0(8)	10(9)
C(2B)	47(15)	45(15)	34(13)	-7(11)	14(11)	15(12)
O(2B)	113(16)	51(11)	42(10)	3(9)	40(11)	-44(11)
C(2C)	58(16)	42(14)	17(11)	-15(10)	17(10)	-15(12)
O(2C)	83(13)	59(11)	38(10)	25(9)	34(9)	56(11)
Oa(3)	37(1)	27(1)	21(1)	-2(1)	7(1)	2(1)
C(3A)	78(19)	45(15)	30(13)	15(12)	12(13)	3(14)
O(3A)	102(16)	53(12)	41(11)	-2(10)	-17(11)	0(11)
C(3B)	27(12)	35(12)	23(11)	-18(10)	1(9)	0(9)
O(3B)	84(14)	50(11)	37(10)	20(9)	25(9)	-9(9)
C(100)	29(11)	29(11)	16(10)	-16(9)	-7(8)	-3(9)
N(1)	41(11)	28(9)	12(8)	-4(7)	3(7)	-9(8)
C(101)	49(14)	18(10)	29(12)	7(9)	-1(10)	0(9)
C(102)	46(14)	30(12)	27(12)	6(9)	11(10)	11(10)
C(103)	53(16)	31(13)	44(14)	4(11)	8(12)	13(11)
C(104)	90(2)	33(14)	58(18)	8(13)	10(16)	26(14)
C(105)	57(16)	38(14)	41(14)	-26(11)	11(12)	8(11)
C(106)	69(18)	45(15)	29(13)	-13(11)	8(12)	-2(13)
C(107)	47(16)	47(15)	61(18)	-10(13)	13(13)	10(12)
C(300)	29(12)	46(14)	20(11)	20(10)	-2(9)	-14(11)
N(3)	45(12)	34(11)	45(12)	10(9)	10(9)	4(10)
C(301)	62(17)	51(15)	27(12)	-22(11)	9(11)	2(12)
C(302)	49(15)	41(14)	50(15)	10(12)	21(12)	17(11)
C(303)	72(19)	41(15)	61(18)	0(14)	20(15)	-9(13)
C(304)	60(2)	42(16)	100(3)	-21(17)	8(17)	-18(14)
C(305)	110(3)	29(16)	180(4)	50(2)	90(3)	28(16)
C(306)	120(3)	100(3)	80(3)	20(2)	50(3)	40(3)
C(307)	100(2)	26(13)	60(18)	6(13)	18(16)	3(14)
C(1)	42(13)	23(10)	22(10)	-11(9)	17(9)	-3(9)
C(2)	42(13)	23(11)	38(12)	1(10)	17(10)	-7(9)
C(3)	18(4)	18(4)	19(4)	0(1)	4(1)	0(1)
C(4)	49(13)	19(10)	15(10)	5(8)	5(9)	-18(9)
C(5)	53(14)	26(11)	14(10)	-11(8)	13(9)	-3(10)
C(6)	31(11)	26(10)	5(8)	-8(8)	5(8)	-1(8)
C(7)	35(13)	15(10)	39(13)	2(9)	10(10)	6(9)
C(8)	59(15)	25(11)	23(11)	9(9)	22(11)	13(10)
C(9)	50(14)	25(11)	23(11)	-1(9)	16(10)	8(10)
C(10)	65(16)	33(13)	21(11)	12(10)	22(11)	5(11)
C(11)	29(12)	39(12)	35(12)	-6(10)	21(10)	-20(10)
C(12)	36(13)	27(11)	23(10)	3(9)	13(9)	9(9)
C(13)	55(14)	13(10)	12(9)	11(8)	9(9)	-1(9)
C(14)	62(15)	8(9)	35(12)	4(9)	15(11)	8(9)

S49

C(15)	39(14)	28(12)	61(16)	-9(11)	3(12)	21(10)
C(16)	22(11)	49(14)	48(14)	16(12)	22(10)	-1(10)
C(17)	11(10)	43(13)	19(10)	-1(9)	-2(8)	0(8)
C(18)	57(15)	28(12)	31(12)	-3(10)	22(11)	-9(10)
C(19)	35(12)	30(11)	28(11)	-1(9)	14(9)	-9(9)
C(20)	48(14)	19(10)	15(10)	-6(8)	6(9)	-19(9)
C(21)	41(13)	14(10)	29(11)	3(9)	12(9)	1(9)
C(22)	85(19)	40(14)	32(12)	18(11)	17(11)	8(13)
C(23)	26(12)	50(14)	32(12)	18(11)	1(9)	5(10)
C(24)	30(12)	31(12)	38(13)	-13(10)	11(10)	17(9)
C(25)	36(13)	28(12)	52(15)	-14(11)	25(11)	-13(10)
C(26)	58(16)	28(12)	51(15)	1(11)	30(13)	-9(11)
C(27)	26(12)	35(13)	55(15)	12(11)	17(11)	-14(9)
C(28)	46(15)	42(14)	50(15)	-27(12)	26(12)	-22(11)
C(29)	52(16)	23(12)	53(15)	10(11)	25(12)	3(10)
C(30)	90(2)	15(11)	35(13)	-1(10)	35(13)	-11(11)
C(31)	64(17)	19(11)	40(14)	7(10)	0(12)	1(11)
C(32)	41(14)	34(13)	40(13)	-2(11)	6(10)	6(10)
C(33)	59(16)	23(11)	58(16)	-17(11)	36(13)	2(11)
C(34)	13(11)	61(15)	30(12)	-9(11)	3(8)	11(10)
C(35)	57(16)	61(17)	25(12)	-16(12)	19(11)	0(12)
C(36)	52(15)	48(14)	20(11)	-13(10)	26(11)	-23(11)
C(37)	35(13)	55(15)	17(10)	-8(10)	18(9)	-30(11)
C(38)	69(17)	44(14)	31(13)	6(11)	40(13)	-3(12)
C(39)	32(5)	32(5)	32(5)	0(1)	7(2)	0(1)
C(40)	39(14)	47(14)	27(12)	10(10)	5(10)	-4(11)
C(41)	51(16)	59(16)	29(12)	-13(12)	10(11)	-3(12)
C(42)	36(13)	31(12)	29(12)	3(10)	-13(9)	10(10)
C(43)	33(13)	49(14)	28(12)	9(11)	7(9)	0(10)
C(44)	11(11)	44(14)	58(15)	-16(12)	-2(10)	-11(9)
C(45)	47(15)	42(14)	37(13)	1(11)	15(11)	-24(11)
C(46)	41(14)	50(15)	38(13)	-12(12)	18(11)	-25(11)
C(47)	72(18)	12(10)	56(16)	-8(11)	16(14)	-18(11)
C(48)	44(15)	32(13)	39(14)	-1(10)	3(11)	4(10)
C(49)	44(14)	29(12)	35(13)	-16(10)	-7(10)	11(10)
C(50)	37(14)	30(12)	46(14)	-19(11)	5(11)	4(10)
C(51)	38(5)	38(5)	37(5)	0(1)	9(2)	0(1)
C(52)	35(5)	35(5)	35(5)	0(1)	9(2)	0(1)
C(53)	39(5)	39(5)	39(5)	0(1)	9(2)	0(1)
C(54)	66(16)	58(15)	100(10)	-2(10)	16(10)	-17(13)
C(55)	33(5)	33(5)	33(5)	0(1)	8(2)	0(1)
C(56)	45(14)	40(13)	20(11)	-3(10)	5(9)	-5(10)
C(57)	49(15)	37(14)	48(15)	-15(12)	-5(12)	-16(12)
C(58)	42(15)	45(14)	55(116)	-43(13)	15(12)	-25(11)
C(59)	80(2)	27(12)	34(13)	-20(11)	21(13)	-21(12)
C(60)	44(6)	44(6)	44(6)	0(1)	10(2)	0(1)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form :
 $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$

S50

Table S14. Interatomic Distances (Å) and Esd's for 3a

Os(1)-C(1A)	1.92(2)	Os(1)-C(1B)	1.93(3)	C(37)-C(53)	1.41(3)	C(38)-C(39)	1.46(3)
Os(1)-C(1C)	1.94(2)	Os(1)-N(1)	2.107(16)	C(39)-C(40)	1.40(3)	C(40)-C(41)	1.39(3)
Os(1)-C(1)	2.234(18)	Os(1)-Os(2)	2.9175(12)	C(40)-C(54)	1.46(3)	C(41)-C(42)	1.37(3)
C(1A)-O(1A)	1.15(3)	C(1B)-O(1B)	1.14(3)	C(41)-C(56)	1.47(3)	C(42)-C(43)	1.47(3)
C(1C)-O(1C)	1.11(2)	Os(2)-C(2C)	1.93(3)	C(43)-C(44)	1.41(3)	C(44)-C(57)	1.42(3)
Os(2)-C(2A)	1.96(2)	Os(2)-C(2B)	1.97(3)	C(44)-C(45)	1.49(3)	C(45)-C(46)	1.44(3)
Os(2)-C(100)	2.21(2)	Os(2)-C(3)	2.302(17)	C(46)-C(47)	1.36(3)	C(46)-C(58)	1.47(3)
Os(2)-C(2)	2.48(2)	Os(2)-Os(3)	2.9125(11)	C(47)-C(48)	1.47(3)	C(48)-C(49)	1.40(3)
C(2A)-O(2A)	1.10(3)	C(2B)-O(2B)	1.12(3)	C(49)-C(59)	1.40(3)	C(49)-C(50)	1.44(3)
C(2C)-O(2C)	1.10(3)	Os(3)-C(3A)	1.90(3)	C(50)-C(51)	1.49(3)	C(51)-C(52)	1.41(3)
Os(3)-C(3B)	1.91(2)	Os(3)-C(100)	1.98(2)	C(51)-C(60)	1.43(3)	C(52)-C(53)	1.44(3)
Os(3)-C(300)	2.04(3)	Os(3)-C(4)	2.251(19)	C(53)-C(54)	1.43(3)	C(54)-C(55)	1.48(3)
C(3A)-O(3A)	1.18(3)	C(3B)-O(3B)	1.10(2)	C(55)-C(56)	1.39(3)	C(55)-C(60)	1.40(3)
C(100)-N(1)	1.26(2)	N(1)-C(101)	1.48(2)	C(56)-C(57)	1.42(3)	C(57)-C(58)	1.47(4)
C(101)-C(102)	1.50(2)	C(102)-C(103)	1.3900	C(58)-C(59)	1.36(3)	C(59)-C(60)	1.50(3)
C(102)-C(107)	1.3900	C(103)-C(104)	1.3900				
C(104)-C(105)	1.3900	C(105)-C(106)	1.3900				
C(106)-C(107)	1.3900	C(300)-N(3)	1.17(3)				
N(3)-C(301)	1.44(3)	C(301)-C(302)	1.52(3)				
C(302)-C(303)	1.3900	C(302)-C(307)	1.3900				
C(303)-C(304)	1.3900	C(304)-C(305)	1.3900				
C(305)-C(306)	1.3900	C(306)-C(307)	1.3900				
C(1)-C(2)	1.43(3)	C(1)-C(9)	1.50(3)				
C(1)-C(6)	1.53(3)	C(2)-C(3)	1.47(3)				
C(2)-C(12)	1.48(3)	C(3)-C(14)	1.49(3)				
C(3)-C(4)	1.53(2)	C(4)-C(17)	1.49(3)				
C(4)-C(5)	1.50(3)	C(5)-C(6)	1.33(3)				
C(5)-C(19)	1.44(3)	C(6)-C(7)	1.50(3)				
C(7)-C(21)	1.40(3)	C(7)-C(8)	1.45(3)				
C(8)-C(24)	1.37(3)	C(8)-C(9)	1.46(3)				
C(9)-C(10)	1.38(3)	C(10)-C(26)	1.44(3)				
C(10)-C(11)	1.50(3)	C(11)-C(12)	1.35(3)				
C(11)-C(28)	1.44(3)	C(12)-C(13)	1.46(3)				
C(13)-C(30)	1.42(3)	C(13)-C(14)	1.42(3)				
C(14)-C(15)	1.35(3)	C(15)-C(32)	1.45(3)				
C(15)-C(16)	1.49(3)	C(16)-C(17)	1.36(3)				
C(16)-C(34)	1.43(3)	C(17)-C(18)	1.43(3)				
C(18)-C(36)	1.44(3)	C(18)-C(19)	1.47(3)				
C(19)-C(20)	1.39(3)	C(20)-C(21)	1.42(3)				
C(20)-C(38)	1.44(3)	C(21)-C(22)	1.44(3)				
C(22)-C(23)	1.38(3)	C(22)-C(39)	1.46(3)				
C(23)-C(42)	1.41(3)	C(23)-C(24)	1.45(3)				
C(24)-C(25)	1.47(3)	C(25)-C(26)	1.37(3)				
C(25)-C(43)	1.45(3)	C(26)-C(27)	1.45(3)				
C(27)-C(28)	1.40(3)	C(27)-C(45)	1.43(3)				
C(28)-C(29)	1.37(3)	C(29)-C(30)	1.44(3)				
C(29)-C(47)	1.49(3)	C(30)-C(31)	1.38(3)				
C(31)-C(32)	1.42(3)	C(31)-C(48)	1.44(3)				
C(32)-C(33)	1.47(3)	C(33)-C(50)	1.39(3)				
C(33)-C(34)	1.48(3)	C(34)-C(35)	1.41(3)				
C(35)-C(36)	1.43(3)	C(35)-C(52)	1.46(3)				
C(36)-C(37)	1.46(3)	C(37)-C(38)	1.36(3)				

Table S15. Interatomic Angles (deg) and Esd's for 3a

C(1A)-Os(1)-C(1B)	92.4(10)	C(1A)-Os(1)-C(1C)	91.4(10)	C(2)-C(3)-C(4)	107.1(16)	C(2)-C(3)-Os(2)	116.8(16)
C(1B)-Os(1)-C(1C)	94.6(9)	C(1A)-Os(1)-N(1)	92.1(9)	C(14)-C(3)-C(4)	118.1(16)	C(2)-C(3)-Os(2)	78.8(11)
C(1B)-Os(1)-N(1)	94.8(8)	C(1C)-Os(1)-N(1)	169.9(8)	C(14)-C(3)-Os(2)	119.0(13)	C(4)-C(3)-Os(2)	110.8(11)
C(1A)-Os(1)-C(1)	176.2(10)	C(1B)-Os(1)-C(1)	91.0(8)	C(17)-C(4)-C(5)	103.6(15)	C(17)-C(4)-C(3)	113.0(15)
C(1A)-Os(1)-C(1)	89.9(8)	N(1)-Os(1)-C(1)	86.0(6)	C(5)-C(4)-C(3)	113.0(17)	C(17)-C(4)-Os(3)	114.9(13)
C(1A)-Os(1)-Os(2)	98.1(8)	C(1B)-Os(1)-Os(2)	162.5(6)	C(6)-C(5)-C(4)	119.4(19)	C(3)-C(4)-Os(3)	100.8(11)
C(1C)-Os(1)-Os(2)	99.1(6)	N(1)-Os(1)-Os(2)	70.9(5)	C(19)-C(5)-C(4)	108.2(17)	C(6)-C(5)-C(4)	124.5(18)
C(1C)-Os(1)-Os(2)	78.2(5)	N(1)-Os(1)-Os(2)	177(2)	C(5)-C(6)-C(1)	125.8(18)	C(7)-C(6)-C(1)	121.1(16)
O(1)-Os(1)-Os(2)	179(2)	O(1)-C(1A)-Os(1)	180(2)	C(21)-C(7)-C(6)	121.0(19)	C(21)-C(7)-C(6)	106.8(16)
O(1)-C(1B)-Os(1)	96.4(9)	O(1C)-C(1C)-Os(1)	180(2)	C(8)-C(7)-C(6)	109.2(17)	C(24)-C(8)-C(7)	119.0(18)
C(2C)-Os(2)-C(2A)	95.8(9)	C(2C)-Os(2)-C(2B)	91.8(9)	C(10)-C(9)-C(8)	123(2)	C(7)-C(8)-C(9)	107.6(19)
C(2A)-Os(2)-C(2B)	85.2(7)	C(2B)-Os(2)-C(100)	113.9(8)	C(8)-C(9)-C(11)	117(2)	C(10)-C(9)-C(11)	123.7(19)
C(2C)-Os(2)-C(3)	85.0(7)	C(2A)-Os(2)-C(3)	154.0(8)	C(9)-C(10)-C(11)	110.7(18)	C(9)-C(10)-C(26)	121.1(19)
C(2B)-Os(2)-C(3)	98.7(8)	C(100)-Os(2)-C(3)	165.4(7)	C(12)-C(11)-C(10)	118(2)	C(26)-C(10)-C(11)	109.2(19)
C(2C)-Os(2)-C(2)	81.5(8)	C(2A)-Os(2)-C(2)	81.0(6)	C(28)-C(11)-C(10)	124(2)	C(12)-C(11)-C(10)	118.4(18)
C(2B)-Os(2)-C(2)	35.6(6)	C(2C)-Os(2)-C(2)	83.6(6)	C(11)-C(12)-C(13)	104(2)	C(11)-C(12)-C(13)	117.6(19)
C(3)-Os(2)-C(2)	98.8(7)	C(2B)-Os(2)-Os(3)	72.3(6)	C(30)-C(13)-C(12)	123.7(19)	C(13)-C(12)-C(2)	108.2(17)
C(100)-Os(2)-Os(3)	42.7(5)	C(2C)-Os(2)-Os(3)	159.4(6)	C(14)-C(13)-C(12)	119.5(18)	C(30)-C(13)-C(12)	121(2)
C(2)-Os(2)-Os(3)	93.8(4)	C(2C)-Os(2)-Os(3)	67.7(4)	C(14)-C(13)-C(14)	108.9(16)	C(15)-C(14)-C(13)	122(2)
C(2A)-Os(2)-Os(1)	84.2(7)	C(2B)-Os(2)-Os(1)	91.0(6)	C(16)-C(17)-C(18)	123.0(19)	C(13)-C(14)-C(3)	108.3(17)
C(100)-Os(2)-Os(1)	63.2(5)	C(3)-Os(2)-Os(1)	93.6(4)	C(18)-C(17)-C(4)	119(2)	C(14)-C(15)-C(16)	119.9(19)
C(2)-Os(2)-Os(1)	63.0(5)	Os(3)-Os(2)-Os(1)	104.73(3)	C(17)-C(18)-C(19)	107(2)	C(17)-C(18)-C(36)	121(2)
O(2A)-C(2A)-Os(2)	176(2)	O(2B)-C(2B)-Os(2)	177(2)	C(19)-C(19)-C(5)	118.5(18)	C(16)-C(17)-C(4)	125.9(18)
O(2C)-C(2C)-Os(2)	173.0(19)	C(3A)-Os(3)-C(3B)	93.1(9)	C(20)-C(19)-C(18)	120.9(19)	C(17)-C(18)-C(36)	122.1(19)
C(3A)-Os(3)-C(100)	97.1(9)	C(3B)-Os(3)-C(100)	104.1(8)	C(21)-C(20)-C(21)	121.0(18)	C(20)-C(19)-C(18)	121.0(18)
C(3A)-Os(3)-C(300)	91.6(10)	C(3B)-Os(3)-C(300)	95.8(8)	C(19)-C(20)-C(38)	108.8(17)	C(21)-C(20)-C(38)	108.2(18)
C(100)-Os(3)-C(300)	157.7(8)	C(3A)-Os(3)-C(4)	79.3(7)	C(7)-C(21)-C(22)	120(2)	C(7)-C(21)-C(22)	118.1(19)
C(3B)-Os(3)-C(4)	89.3(7)	C(100)-Os(3)-C(4)	79.3(7)	C(20)-C(21)-C(22)	110.7(18)	C(23)-C(22)-C(21)	121.9(18)
C(300)-Os(3)-C(4)	91.3(8)	C(3A)-Os(3)-Os(2)	101.6(7)	C(23)-C(22)-C(39)	120(2)	C(21)-C(22)-C(39)	105(2)
C(3B)-Os(3)-Os(2)	150.6(6)	C(4)-Os(3)-Os(2)	49.2(6)	C(22)-C(23)-C(24)	121(2)	C(22)-C(23)-C(24)	119(2)
C(300)-Os(3)-Os(2)	108.9(5)	O(3B)-C(3B)-Os(3)	74.9(5)	C(8)-C(24)-C(23)	121.3(19)	C(8)-C(24)-C(23)	121.3(19)
O(3A)-C(3A)-Os(3)	174(2)	C(100)-Os(3)-Os(2)	175.9(19)	C(23)-C(24)-C(25)	118(2)	C(23)-C(24)-C(25)	107.2(18)
N(1)-C(100)-Os(3)	155.0(17)	N(1)-C(100)-Os(2)	116.7(15)	C(26)-C(25)-C(24)	121(2)	C(26)-C(25)-C(24)	119(2)
Os(3)-C(100)-Os(2)	88.1(8)	C(100)-N(1)-C(101)	118.7(18)	C(43)-C(25)-C(24)	106.7(18)	C(25)-C(26)-C(10)	121.3(19)
C(100)-N(1)-Os(1)	107.1(13)	C(101)-N(1)-Os(1)	131.4(14)	C(25)-C(26)-C(27)	121(2)	C(10)-C(26)-C(27)	107(2)
N(1)-C(101)-C(102)	110.6(15)	C(103)-C(102)-C(107)	120.0	C(28)-C(27)-C(45)	120(2)	C(28)-C(27)-C(26)	109(2)
C(103)-C(102)-C(101)	120.4(11)	C(107)-C(102)-C(101)	119.6(11)	C(45)-C(27)-C(26)	119(2)	C(29)-C(28)-C(27)	122(2)
C(104)-C(103)-C(102)	120.0	C(105)-C(104)-C(103)	120.0	C(29)-C(28)-C(11)	117(2)	C(27)-C(28)-C(11)	111(2)
C(106)-C(107)-C(106)	120.0	C(107)-C(106)-C(105)	120.0	C(28)-C(29)-C(30)	123(2)	C(28)-C(29)-C(47)	119(2)
C(300)-N(3)-C(301)	176(2)	N(3)-C(300)-Os(3)	173.6(17)	C(30)-C(29)-C(47)	105.0(19)	C(31)-C(30)-C(13)	120(2)
C(303)-C(302)-C(301)	120.0	C(303)-C(302)-C(301)	120.0(14)	C(31)-C(30)-C(29)	111(2)	C(13)-C(30)-C(29)	117(2)
C(307)-C(302)-C(301)	119.9(14)	C(302)-C(303)-C(304)	120.0	C(30)-C(31)-C(48)	120(2)	C(30)-C(31)-C(48)	110(2)
C(305)-C(304)-C(303)	120.0	C(304)-C(305)-C(306)	120.0	C(31)-C(32)-C(33)	118(2)	C(31)-C(32)-C(15)	119(2)
C(307)-C(306)-C(305)	120.0	C(306)-C(307)-C(302)	120.0	C(50)-C(33)-C(32)	119(2)	C(15)-C(32)-C(33)	107(2)
C(2)-C(1)-C(9)	114.6(17)	C(2)-C(1)-C(6)	107.9(16)	C(32)-C(33)-C(34)	109.1(19)	C(50)-C(33)-C(34)	121(2)
C(9)-C(1)-C(6)	103.6(16)	C(2)-C(1)-Os(1)	99.4(13)	C(34)-C(33)-C(33)	117(2)	C(16)-C(34)-C(33)	106.6(18)
C(9)-C(1)-Os(1)	114.7(12)	C(6)-C(1)-Os(1)	116.9(12)	C(34)-C(35)-C(36)	120(2)	C(34)-C(35)-C(32)	123(2)
C(1)-C(2)-C(3)	128.5(17)	C(11)-C(2)-C(12)	119.1(19)	C(36)-C(35)-C(32)	107(2)	C(35)-C(36)-C(18)	118(2)
C(3)-C(2)-C(12)	106.7(16)	C(11)-C(2)-Os(2)	111.8(14)	C(38)-C(37)-C(37)	109.5(19)	C(18)-C(36)-C(37)	120(2)
C(12)-C(2)-Os(2)	65.6(10)	C(12)-C(2)-Os(2)	113.1(14)	C(33)-C(37)-C(36)	122(2)	C(38)-C(37)-C(36)	120.5(19)
				C(33)-C(37)-C(36)	106(2)	C(37)-C(38)-C(20)	121(2)
				C(37)-C(38)-C(39)	119(2)	C(20)-C(38)-C(39)	106.6(18)

Table S16. Crystallographic Data for 3b · CS₂.

formula	C ₆₆ H ₁₄ N ₂ O ₈ Os ₃ · CS ₂
fw	1825.70
system, space group	Monoclinic, P2 ₁ /c
a, Å	19.4334(2)
b, Å	10.6922(2)
c, Å	29.0892(2)
β, deg	107.615(1)
V, Å ³	5760.9(1)
Z	4
D _{calcd} , Mg m ⁻³	2.105
temp, K	293(2)
λ (Mo Kα), Å	0.71073
μ, mm ⁻¹	6.745
θ range for collection	1.47° ≤ θ ≤ 26.23°
no. of rflns measd	30521
no. of unique rflns	11490
no. of rflns (I > 2σ(I))	8576
R _f ^a	0.0448
R _w ^b	0.1052
GOF	1.009

$$^a R_f = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o| \quad ^b R_w = [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}$$

C(40)-C(39)-C(38)	121.0(19)	C(40)-C(39)-C(22)	117(2)
C(38)-C(39)-C(22)	109.3(19)	C(41)-C(40)-C(39)	121(2)
C(41)-C(40)-C(34)	111(2)	C(39)-C(40)-C(54)	118(2)
C(42)-C(41)-C(40)	121(2)	C(42)-C(41)-C(56)	121(2)
C(40)-C(41)-C(56)	106(2)	C(41)-C(42)-C(23)	120(2)
C(41)-C(42)-C(43)	120(2)	C(23)-C(42)-C(43)	107.0(19)
C(44)-C(43)-C(25)	121(2)	C(44)-C(43)-C(42)	119(2)
C(25)-C(43)-C(42)	109.0(19)	C(43)-C(44)-C(57)	120(2)
C(43)-C(44)-C(45)	118(2)	C(57)-C(44)-C(45)	108(2)
C(27)-C(45)-C(44)	119(2)	C(27)-C(45)-C(44)	120(2)
C(46)-C(45)-C(44)	108.2(19)	C(47)-C(46)-C(45)	121(2)
C(47)-C(46)-C(58)	120(2)	C(45)-C(46)-C(58)	107(2)
C(46)-C(47)-C(48)	121(2)	C(46)-C(47)-C(29)	119(2)
C(48)-C(47)-C(29)	108(2)	C(49)-C(48)-C(31)	122(2)
C(49)-C(48)-C(47)	118(2)	C(31)-C(48)-C(47)	106(2)
C(48)-C(49)-C(59)	118(2)	C(48)-C(49)-C(50)	119(2)
C(59)-C(49)-C(50)	112(2)	C(33)-C(50)-C(49)	121(2)
C(33)-C(50)-C(51)	121(2)	C(49)-C(50)-C(51)	105.8(18)
C(52)-C(51)-C(60)	120(2)	C(52)-C(51)-C(50)	119(2)
C(60)-C(51)-C(50)	107.5(19)	C(51)-C(52)-C(53)	121(2)
C(51)-C(52)-C(35)	119(2)	C(53)-C(52)-C(35)	107(2)
C(37)-C(53)-C(54)	119(2)	C(37)-C(53)-C(52)	110(2)
C(54)-C(53)-C(52)	119(2)	C(53)-C(54)-C(40)	121(2)
C(33)-C(54)-C(55)	120(2)	C(40)-C(54)-C(55)	105.6(19)
C(36)-C(55)-C(60)	122(2)	C(56)-C(55)-C(54)	107.5(19)
C(60)-C(55)-C(54)	119(2)	C(55)-C(56)-C(57)	121(2)
C(55)-C(56)-C(41)	110.0(19)	C(57)-C(56)-C(41)	118(2)
C(44)-C(57)-C(56)	121(2)	C(44)-C(57)-C(58)	108(2)
C(56)-C(57)-C(58)	117(2)	C(59)-C(58)-C(57)	124(2)
C(59)-C(58)-C(46)	116(2)	C(57)-C(58)-C(46)	108(2)
C(58)-C(59)-C(49)	126(2)	C(58)-C(59)-C(60)	116(2)
C(49)-C(59)-C(60)	105(2)	C(55)-C(60)-C(51)	121(2)
C(55)-C(60)-C(59)	120(2)	C(51)-C(60)-C(59)	109(2)

Table S17. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3b**·CS₂.

	x	y	z	U_{eq}/U_{eq} ($\text{\AA}^2$)
Os(1)	1182(1)	6922(1)	1616(1)	36(1)
Os(2)	1257(1)	9270(1)	2145(1)	31(1)
Os(3)	464(1)	11071(1)	1437(1)	35(1)
C(100)	498(4)	9210(6)	1419(3)	30(2)
N(1)	381(4)	8165(6)	1200(2)	38(2)
C(101)	-142(5)	7995(9)	706(3)	49(2)
C(102)	-643(3)	6878(5)	677(2)	47(2)
C(103)	-673(4)	5931(7)	345(2)	65(3)
C(104)	-1120(5)	4905(6)	323(3)	90(4)
C(105)	-1539(5)	4825(7)	634(4)	108(5)
C(106)	-1509(4)	5772(9)	967(3)	110(5)
C(107)	-1062(4)	6798(7)	989(2)	81(4)
C(200)	2007(5)	8487(8)	2707(3)	42(2)
N(2)	2423(5)	8044(7)	3032(3)	54(2)
C(201)	3001(7)	7541(11)	3435(5)	90(4)
C(202)	3450(4)	8562(6)	3745(2)	51(2)
C(203)	3933(5)	9263(8)	3584(3)	80(4)
C(204)	4363(4)	10158(8)	3883(4)	109(5)
C(205)	4310(5)	10352(8)	4343(4)	113(5)
C(206)	3826(6)	9631(9)	4504(2)	107(5)
C(207)	3396(4)	8756(8)	4205(3)	83(4)
C(1A)	488(5)	6171(7)	1901(3)	44(2)
O(1A)	105(5)	5710(6)	2068(3)	76(2)
C(1B)	1081(5)	5650(8)	1131(3)	80(2)
O(1B)	1032(5)	4872(7)	851(3)	80(2)
C(1C)	1972(6)	6078(8)	2064(4)	50(2)
O(1C)	2463(5)	5593(7)	2331(3)	82(2)
C(2A)	474(5)	8642(8)	2355(3)	46(2)
O(2A)	-5(4)	8306(6)	2467(3)	69(2)
C(2B)	1329(5)	10809(9)	2515(3)	46(2)
O(2B)	1405(4)	11664(6)	2763(3)	66(2)
C(3A)	-407(6)	11204(10)	1630(4)	60(3)
O(3A)	-927(4)	11333(9)	1725(3)	99(3)
C(3B)	839(5)	12709(9)	1729(3)	47(2)
O(3B)	1083(4)	13610(6)	1914(3)	71(2)
C(3C)	5(5)	11615(9)	789(3)	47(2)
O(3C)	-254(4)	11915(8)	396(3)	82(2)
C(1)	1948(4)	8041(7)	1333(3)	38(2)
C(2)	2194(4)	8931(7)	1747(3)	35(2)
C(3)	1980(4)	10230(7)	1721(3)	33(2)
C(4)	1502(4)	10788(7)	1255(3)	34(2)
C(5)	1445(4)	9944(7)	820(3)	36(2)
C(6)	1637(4)	8721(7)	854(3)	36(2)
C(7)	1926(5)	8166(9)	494(4)	53(3)
C(8)	2484(5)	7281(8)	735(4)	53(2)
C(9)	2552(5)	7278(8)	1242(4)	50(2)
C(10)	3243(5)	7185(9)	1583(4)	57(3)
C(11)	3432(5)	7995(10)	2014(4)	56(3)

S57

C(12)	2944(5)	8829(9)	2083(3)	48(2)
C(13)	3190(5)	10083(9)	2259(3)	49(2)
C(14)	2624(5)	10946(8)	2024(3)	44(2)
C(15)	2790(5)	12126(9)	1891(4)	53(3)
C(16)	2388(5)	12654(8)	1423(4)	52(2)
C(17)	1820(5)	11985(8)	1109(3)	43(2)
C(18)	1751(5)	11944(8)	599(3)	49(2)
C(19)	1527(5)	10700(9)	421(3)	42(2)
C(20)	1768(5)	10146(10)	58(3)	53(2)
C(21)	1973(5)	8852(10)	92(3)	54(3)
C(22)	2623(7)	8693(13)	-63(4)	69(3)
C(23)	3139(7)	7874(12)	157(4)	73(3)
C(24)	3088(6)	7118(9)	573(4)	65(3)
C(25)	3805(6)	7008(10)	924(5)	66(3)
C(26)	3881(6)	7034(9)	1414(5)	63(3)
C(27)	4451(6)	7741(11)	1737(4)	68(3)
C(28)	4197(5)	8316(12)	2109(4)	64(3)
C(29)	4426(5)	9518(13)	2289(4)	68(3)
C(30)	3914(5)	10431(11)	2366(3)	61(3)
C(31)	4092(6)	11661(12)	2224(4)	68(3)
C(32)	3545(6)	12490(10)	1986(4)	63(3)
C(33)	3604(6)	13231(9)	1591(5)	67(3)
C(34)	2884(6)	13342(9)	1228(5)	64(3)
C(35)	2806(6)	13325(9)	739(5)	67(3)
C(36)	2226(6)	12617(10)	407(4)	63(3)
C(37)	2499(6)	12046(11)	43(4)	66(3)
C(38)	2278(6)	10863(12)	-137(4)	68(3)
C(39)	2799(6)	9932(13)	-210(4)	74(3)
C(40)	3531(6)	10282(14)	-106(4)	74(4)
C(41)	4086(6)	9394(14)	136(4)	75(4)
C(42)	3912(6)	8218(12)	272(5)	73(3)
C(43)	4301(6)	7696(11)	729(5)	68(3)
C(44)	4878(6)	8372(11)	1048(5)	72(3)
C(45)	4956(6)	8415(12)	1553(5)	72(3)
C(46)	5197(6)	9636(13)	1733(5)	74(3)
C(47)	4947(6)	10196(12)	2096(4)	70(3)
C(48)	4739(6)	11522(13)	2059(4)	72(3)
C(49)	4786(6)	12245(12)	1668(4)	71(3)
C(50)	4216(7)	13127(11)	1424(5)	77(4)
C(51)	4126(8)	13100(11)	903(5)	80(4)
C(52)	3448(7)	13172(10)	563(5)	71(3)
C(53)	3257(6)	12399(11)	141(4)	67(3)
C(54)	3741(7)	11548(13)	63(4)	78(4)
C(55)	4474(6)	11441(13)	421(5)	74(3)
C(56)	4676(6)	10121(13)	463(5)	75(4)
C(57)	5069(6)	9622(12)	906(4)	70(3)
C(58)	5261(5)	10408(13)	1331(4)	70(3)
C(59)	5051(6)	11655(13)	1299(5)	73(3)
C(60)	4654(6)	12208(12)	832(5)	77(4)
C(400)	2716(7)	3423(14)	3416(6)	118(6)
S(1)	2166(4)	4334(6)	3475(3)	210(4)
S(2)	3252(3)	2607(9)	3279(5)	309(7)

^a U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

S58

Table S18. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3b**·CS₂

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Os(1)	47(1)	21(1)	43(1)	1(1)	18(1)	1(1)	63(6)	47(6)	60(6)	-22(5)	35(5)	-21(5)
Os(2)	37(1)	25(1)	34(1)	0(1)	16(1)	0(1)	58(6)	32(5)	79(7)	-6(5)	41(6)	-3(4)
Os(3)	38(1)	25(1)	48(1)	4(1)	21(1)	6(1)	41(5)	31(5)	67(6)	13(4)	29(5)	13(4)
Os(100)	35(4)	14(4)	45(5)	1(3)	19(4)	-1(3)	44(5)	45(6)	65(6)	22(5)	28(5)	15(4)
N(1)	50(4)	28(4)	43(4)	3(3)	25(3)	-2(3)	38(5)	54(6)	37(5)	15(4)	14(4)	10(4)
C(101)	62(6)	50(6)	32(5)	-2(4)	8(4)	-12(5)	42(5)	83(8)	33(5)	2(5)	9(4)	0(5)
C(102)	44(5)	50(6)	40(5)	-7(4)	4(4)	-5(4)	85(8)	85(8)	20(4)	-17(5)	33(6)	-7(5)
C(103)	66(7)	60(7)	66(7)	-23(7)	0(8)	-7(7)	98(9)	90(9)	77(8)	-17(6)	33(6)	-6(7)
C(104)	99(10)	56(8)	94(10)	-23(7)	0(8)	-7(7)	76(8)	73(8)	87(8)	-37(7)	41(7)	-2(7)
C(105)	101(11)	87(11)	122(13)	0(9)	13(10)	-45(9)	67(8)	46(6)	99(9)	-18(6)	40(7)	11(5)
C(106)	95(10)	138(14)	97(11)	-11(10)	31(9)	-67(10)	51(6)	58(7)	99(9)	-2(6)	38(7)	21(5)
C(107)	73(8)	99(10)	71(8)	-19(7)	23(7)	-32(7)	47(6)	47(6)	99(9)	13(6)	30(6)	17(5)
C(200)	43(5)	47(5)	39(5)	7(4)	17(4)	-2(4)	51(6)	51(6)	90(9)	13(6)	31(6)	30(6)
N(2)	59(5)	57(5)	44(5)	14(4)	12(4)	-2(4)	71(8)	71(8)	90(9)	19(6)	10(5)	16(6)
C(201)	93(9)	63(8)	78(8)	27(6)	-26(7)	7(7)	89(9)	89(9)	56(7)	32(6)	10(5)	16(6)
C(202)	43(5)	54(6)	48(6)	18(5)	0(4)	9(4)	112(10)	112(10)	53(6)	16(6)	3(5)	1(6)
C(203)	82(9)	86(9)	81(9)	3(7)	40(7)	-3(7)	33(5)	33(5)	37(5)	-2(5)	9(5)	-13(6)
C(204)	104(11)	89(11)	132(14)	12(10)	32(11)	-38(9)	48(6)	48(6)	59(7)	-27(6)	21(6)	-33(6)
C(205)	135(14)	74(10)	99(12)	-11(9)	-10(11)	-15(9)	63(7)	63(7)	61(7)	-27(6)	34(6)	-32(6)
C(206)	152(15)	116(13)	58(8)	4(8)	37(9)	-8(11)	62(7)	70(7)	101(9)	-20(6)	49(7)	-24(5)
C(207)	120(10)	100(10)	69(8)	16(7)	26(7)	-15(8)	67(7)	40(6)	105(10)	-11(5)	44(7)	-8(5)
C(1A)	63(6)	23(4)	57(6)	7(4)	32(5)	0(4)	67(7)	40(6)	105(10)	-11(5)	44(7)	-8(5)
O(1A)	101(6)	39(4)	113(7)	13(4)	71(6)	3(4)	68(7)	49(6)	81(8)	34(5)	37(6)	12(5)
O(1B)	45(5)	31(5)	55(6)	5(4)	13(4)	-3(4)	63(7)	63(7)	83(9)	31(7)	32(6)	2(6)
O(1C)	118(7)	54(5)	59(5)	-27(4)	30(5)	13(4)	105(10)	105(10)	38(6)	30(6)	22(5)	2(7)
O(1D)	65(6)	30(5)	59(6)	18(4)	26(5)	16(4)	66(7)	66(7)	61(7)	32(6)	34(6)	2(6)
O(1E)	82(6)	60(5)	97(7)	20(4)	16(5)	7(4)	70(8)	118(11)	46(6)	1(6)	36(6)	9(7)
O(2A)	59(6)	37(5)	49(5)	-4(4)	26(5)	-1(4)	60(7)	125(11)	51(7)	3(7)	39(6)	2(7)
O(2B)	79(5)	57(4)	100(6)	-11(4)	69(5)	-19(4)	56(7)	114(11)	73(8)	-11(7)	47(7)	6(7)
O(2C)	57(6)	45(5)	38(5)	8(4)	16(4)	0(4)	63(7)	86(9)	85(9)	-21(7)	47(7)	8(6)
O(3A)	47(6)	60(7)	79(7)	-5(5)	31(6)	5(5)	53(7)	75(8)	90(9)	8(7)	39(6)	22(6)
O(3B)	61(5)	127(8)	128(8)	-19(6)	55(6)	6(5)	43(6)	84(8)	93(9)	8(7)	20(6)	24(6)
O(3C)	57(6)	44(6)	50(6)	4(4)	33(5)	8(5)	38(6)	102(10)	87(9)	11(7)	24(6)	4(6)
O(3D)	99(6)	24(4)	105(6)	-13(4)	54(5)	-17(4)	35(6)	104(10)	95(10)	5(6)	12(5)	-13(6)
O(3E)	42(5)	53(6)	48(6)	4(4)	14(4)	4(4)	46(6)	104(10)	65(7)	-15(7)	16(6)	-30(6)
O(3F)	76(5)	100(7)	62(5)	23(4)	10(4)	12(5)	55(7)	80(8)	81(8)	-17(7)	26(6)	-37(6)
C(1)	36(4)	24(4)	35(4)	-2(4)	12(4)	6(3)	79(9)	79(9)	101(10)	-10(7)	38(8)	-41(7)
C(2)	41(5)	30(4)	35(4)	6(3)	16(4)	1(3)	61(8)	61(8)	108(11)	16(7)	57(9)	-28(7)
C(3)	38(4)	33(4)	41(5)	-1(3)	21(4)	-3(3)	89(9)	89(9)	108(11)	16(7)	57(9)	-28(7)
C(4)	37(4)	28(4)	39(5)	-1(3)	15(4)	1(3)	72(8)	53(7)	102(10)	33(7)	47(8)	-8(6)
C(5)	38(4)	36(5)	34(4)	10(3)	13(4)	3(4)	63(7)	74(8)	75(8)	29(6)	39(6)	-4(6)
C(6)	39(5)	33(5)	38(5)	-2(3)	16(4)	0(4)	58(7)	102(10)	81(9)	18(8)	50(7)	-11(8)
C(7)	48(6)	58(6)	58(6)	-22(5)	25(5)	-13(5)	48(6)	114(11)	85(9)	19(8)	54(7)	3(7)
C(8)	57(6)	35(5)	75(7)	-16(5)	37(6)	1(4)	51(6)	105(10)	87(9)	3(7)	36(6)	6(6)
C(9)	55(6)	28(5)	75(7)	3(4)	30(5)	13(4)	25(5)	105(10)	87(9)	17(7)	26(5)	0(5)
C(10)	58(6)	38(5)	85(8)	25(5)	35(6)	17(5)	48(6)	94(10)	87(9)	1(7)	33(6)	-26(6)
C(11)	44(6)	62(7)	60(6)	24(5)	15(5)	5(5)	59(7)	116(11)	75(8)	15(8)	54(8)	-20(6)
C(12)	40(5)	57(6)	51(6)	19(4)	19(4)	6(4)	79(10)	105(12)	149(15)	-44(11)	5(10)	17(9)
C(13)	42(5)	68(7)	40(5)	4(4)	18(4)	-8(5)	241(8)	134(5)	305(10)	-88(6)	159(8)	-39(5)
C(14)	46(5)	49(6)	43(5)	-12(4)	23(4)	-11(4)	84(4)	280(10)	524(18)	-158(11)	33(7)	-3(5)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form :

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$$

Table S19. Interatomic Distances (Å) and Esd's for 3b CS₂

Os(1)-C(1C)	1.913(9)	Os(1)-C(1B)	1.928(9)	C(37)-C(53)	1.464(15)	C(38)-C(39)	1.481(16)
Os(1)-C(1A)	1.954(9)	Os(1)-N(1)	2.125(7)	C(39)-C(40)	1.412(16)	C(40)-C(41)	1.450(17)
Os(1)-C(1)	2.253(8)	Os(2)-Os(2)	2.922(4)	C(40)-C(54)	1.456(17)	C(41)-C(42)	1.390(17)
Os(2)-C(2A)	1.923(9)	Os(2)-C(2B)	1.947(10)	C(41)-C(43)	1.471(17)	C(42)-C(43)	1.429(17)
Os(2)-C(200)	2.014(9)	Os(2)-C(100)	2.181(8)	C(41)-C(56)	1.419(16)	C(44)-C(45)	1.431(16)
Os(2)-C(3)	2.367(7)	Os(2)-C(2)	2.465(8)	C(43)-C(44)	1.480(16)	C(45)-C(46)	1.431(17)
Os(2)-Os(3)	2.900(4)	Os(3)-C(3C)	1.916(10)	C(44)-C(57)	1.420(16)	C(46)-C(58)	1.469(16)
Os(3)-C(3A)	1.944(10)	Os(3)-C(3B)	1.987(10)	C(46)-C(47)	1.469(17)	C(48)-C(49)	1.403(16)
Os(3)-C(100)	1.992(7)	Os(3)-C(4)	2.256(8)	C(47)-C(48)	1.464(17)	C(49)-C(59)	1.465(16)
C(100)-N(1)	1.273(9)	N(1)-C(101)	1.499(11)	C(49)-C(50)	1.470(17)	C(51)-C(52)	1.391(18)
C(101)-C(102)	1.527(10)	C(102)-C(103)	1.3900	C(50)-C(51)	1.461(17)	C(52)-C(53)	1.433(17)
C(102)-C(107)	1.3900	C(103)-C(104)	1.3900	C(51)-C(60)	1.376(16)	C(53)-C(55)	1.494(17)
C(104)-C(105)	1.3900	C(105)-C(106)	1.3900	C(53)-C(54)	1.405(17)	C(55)-C(56)	1.447(17)
C(106)-C(107)	1.3900	C(200)-N(2)	1.145(11)	C(55)-C(60)	1.389(16)	C(57)-C(58)	1.468(17)
N(2)-C(201)	1.457(13)	C(201)-C(202)	1.513(14)	C(58)-C(59)	1.390(17)	C(59)-C(60)	1.493(7)
C(202)-C(203)	1.3900	C(202)-C(207)	1.3900	C(400)-S(2)	1.471(8)	C(400)-S(1)	
C(203)-C(204)	1.3900	C(204)-C(205)	1.3900				
C(205)-C(206)	1.3900	C(206)-C(207)	1.3900				
C(1A)-O(1A)	1.119(10)	C(1B)-O(1B)	1.146(10)				
C(1C)-O(1C)	1.154(11)	C(2A)-O(2A)	1.134(10)				
C(2B)-O(2B)	1.147(10)	C(3A)-O(3A)	1.133(11)				
C(3B)-O(3B)	1.135(11)	C(3C)-O(3C)	1.146(10)				
C(1)-C(2)	1.495(11)	C(1)-C(9)	1.517(11)				
C(1)-C(6)	1.523(11)	C(2)-C(3)	1.445(11)				
C(2)-C(12)	1.493(12)	C(3)-C(14)	1.503(12)				
C(3)-C(4)	1.516(11)	C(4)-C(5)	1.531(11)				
C(4)-C(17)	1.535(11)	C(5)-C(6)	1.355(11)				
C(5)-C(19)	1.463(11)	C(6)-C(7)	1.456(11)				
C(7)-C(21)	1.406(14)	C(7)-C(8)	1.451(14)				
C(8)-C(24)	1.400(13)	C(8)-C(9)	1.439(14)				
C(9)-C(10)	1.412(14)	C(10)-C(26)	1.473(13)				
C(10)-C(11)	1.476(15)	C(11)-C(12)	1.361(13)				
C(11)-C(28)	1.469(14)	C(12)-C(13)	1.462(13)				
C(13)-C(30)	1.397(13)	C(13)-C(14)	1.439(13)				
C(14)-C(15)	1.387(12)	C(15)-C(16)	1.461(14)				
C(15)-C(32)	1.462(13)	C(16)-C(17)	1.398(13)				
C(16)-C(34)	1.458(13)	C(17)-C(18)	1.448(13)				
C(18)-C(36)	1.412(12)	C(18)-C(19)	1.446(13)				
C(19)-C(20)	1.408(12)	C(20)-C(21)	1.434(14)				
C(20)-C(38)	1.494(13)	C(21)-C(22)	1.475(13)				
C(22)-C(23)	1.338(17)	C(22)-C(39)	1.464(17)				
C(23)-C(42)	1.483(16)	C(23)-C(24)	1.484(17)				
C(24)-C(25)	1.462(16)	C(25)-C(26)	1.390(15)				
C(25)-C(43)	1.457(15)	C(26)-C(27)	1.433(16)				
C(27)-C(45)	1.445(15)	C(27)-C(28)	1.453(15)				
C(28)-C(29)	1.408(16)	C(29)-C(30)	1.458(15)				
C(29)-C(47)	1.487(14)	C(30)-C(31)	1.451(16)				
C(31)-C(32)	1.396(16)	C(31)-C(48)	1.484(14)				
C(32)-C(33)	1.428(15)	C(33)-C(50)	1.421(15)				
C(33)-C(34)	1.479(16)	C(34)-C(35)	1.385(15)				
C(35)-C(36)	1.455(16)	C(35)-C(52)	1.492(15)				
C(36)-C(37)	1.454(15)	C(37)-C(38)	1.386(16)				

C(40)-C(39)-C(22)	119.1(12)	C(40)-C(39)-C(38)	118.6(12)
C(22)-C(39)-C(38)	109.6(9)	C(39)-C(40)-C(41)	118.9(12)
C(39)-C(40)-C(54)	118.7(11)	C(41)-C(40)-C(54)	110.7(11)
C(42)-C(41)-C(40)	121.4(11)	C(42)-C(41)-C(56)	120.2(12)
C(40)-C(41)-C(56)	106.7(12)	C(41)-C(42)-C(43)	120.8(12)
C(41)-C(42)-C(23)	118.5(12)	C(43)-C(42)-C(23)	109.2(11)
C(44)-C(43)-C(42)	120.1(12)	C(44)-C(43)-C(25)	119.1(11)
C(42)-C(43)-C(25)	109.4(10)	C(43)-C(44)-C(45)	120.4(11)
C(43)-C(44)-C(57)	119.5(11)	C(45)-C(44)-C(57)	107.5(11)
C(46)-C(45)-C(44)	109.0(11)	C(46)-C(45)-C(27)	120.2(11)
C(44)-C(45)-C(27)	119.4(12)	C(47)-C(46)-C(45)	120.6(11)
C(47)-C(46)-C(58)	119.1(12)	C(45)-C(46)-C(58)	108.6(11)
C(46)-C(47)-C(48)	120.1(11)	C(46)-C(47)-C(29)	120.0(12)
C(48)-C(47)-C(29)	107.1(10)	C(49)-C(48)-C(47)	120.4(11)
C(49)-C(48)-C(31)	118.5(12)	C(47)-C(48)-C(31)	108.4(10)
C(48)-C(49)-C(50)	121.5(11)	C(48)-C(49)-C(59)	118.7(12)
C(50)-C(49)-C(59)	107.7(11)	C(53)-C(50)-C(49)	118.3(11)
C(33)-C(50)-C(51)	120.2(12)	C(49)-C(50)-C(51)	108.9(12)
C(52)-C(51)-C(60)	119.4(13)	C(52)-C(51)-C(50)	121.5(12)
C(60)-C(51)-C(50)	106.8(12)	C(51)-C(52)-C(53)	121.4(12)
C(51)-C(52)-C(35)	118.2(12)	C(53)-C(52)-C(35)	109.3(10)
C(54)-C(53)-C(52)	120.7(11)	C(54)-C(53)-C(37)	119.7(12)
C(52)-C(53)-C(37)	107.4(10)	C(53)-C(54)-C(40)	122.4(11)
C(53)-C(54)-C(55)	119.4(12)	C(40)-C(54)-C(55)	106.0(12)
C(60)-C(55)-C(56)	120.1(12)	C(60)-C(55)-C(54)	119.2(12)
C(56)-C(55)-C(54)	107.9(12)	C(57)-C(56)-C(55)	120.5(12)
C(57)-C(56)-C(41)	120.0(12)	C(55)-C(56)-C(41)	108.7(11)
C(56)-C(57)-C(58)	119.7(12)	C(56)-C(57)-C(44)	119.5(12)
C(58)-C(57)-C(44)	107.9(10)	C(59)-C(58)-C(57)	120.4(11)
C(59)-C(58)-C(46)	119.8(11)	C(57)-C(58)-C(46)	107.0(11)
C(58)-C(59)-C(49)	121.8(11)	C(58)-C(59)-C(60)	120.6(12)
C(49)-C(59)-C(60)	107.5(12)	C(55)-C(60)-C(51)	119.8(12)
C(55)-C(60)-C(59)	118.6(12)	C(51)-C(60)-C(59)	109.1(12)
S(2)-C(400)-S(1)	170.8(16)		