ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1996, 15(2), 626-638, DOI:10.1021/om950691l

L638-41

Table S-13. Interatomic distances (Å) for 4

Dy(1)-Dy(2)	3.726	(2)	Dy(1)-Dy(3)	3.725	(2)
Dy(1)-C(11)	2.680	(18)	Dy(1)-C(12)	2.699	(17)
Dy(1)-B(13)	2.730	(28)	Dy(1)-B(14)	2.692	(30)
Dy(1)-B(15)	2.649	(25)	Dy(1)-B(24)	2.692	(23)
Dy(1)-B(25)	2.860	(26)	Dy(1)-B(63)	2.753	(33)
Dy(1)-B(64)	2.710	(22)	Dy(1)-O(10)	2.184	(10)
Dy(2)-Dy(3)	3.742	(2)	Dy(2)-B(23)	2.762	(31)
Dy(2)-B(24)	2.641	(25)	Dy(2)-C(31)	2.723	(22)
Dy(2)-C(32)	2.717	(23)	Dy(2)-B(33)	2.755	(29)
Dy(2)-B(34)	2.750	(27)	Dy(2)-B(35)	2.665	(25)
Dy(2)-B(44)	2.628	(20)	Dy(2)-B(45)	2.852	(21)
Dy(2)-O(10)	2.116	(10)	Dy(3)-B(43)	2.777	(22)
Dy(3)-B(44)	2.691	(20)	Dy(3)-C(51)	2.724	(23)
Dy(3)-C(52)	2.687	(22)	Dy(3)-B(53)	2.760	(24)
Dy(3)-B(54)	2.764	(27)	Dy(3)-B(55)	2.722	(32)
Dy(3)-B(64)	2.667	(24)	Dy(3)-B(65)	2.909	(28)
Dy(3)-O(10)	2.186	(10)	C(11)-C(12)	1.501	(27)
C(11)-B(15)	1.593	(34)	C(11)-B(16)	1.748	(42)
C(11)-Si(1)	1.872	(21)	C(12)-B(13)	1.552	(36)
C(12)-B(16)	1.725	(41)	C(12)-Si(2)	1.928	(20)
B(13)-B(14)	1.666	(38)	B(13)-B(16)	1.867	(37)
B(13)-Li(1)	2.229	(58)	B(14)-B(15)	1.631	(37)
B(14)-B(16)	1.826	(33)	B(14)-Li(1)	2.397	(53)
B(14)-Li(3)	2.396	(51)	B(15)-B(16)	1.811	(35)
B(15)-Li(3)	2.320	(55)	C(21)-C(22)	1.518	(28)
C(21)-B(25)	1.563	(37)	C(21)-B(26)	1.762	(42)
C(21)-Si(3)	1.878	(28)	C(21)-Li(4)	2.201	(44)
C(22)-B(23)	1.562	(41)	C(22)-B(26)	1.782	(34)
C(22)-Si(4)	1.876	(22)	C(22)-Li(4)	2.192	(44)
B(23)-B(24)	1.624	(33)	B(23)-B(26)	1.811	(34)
B(23)-Li(4)	2.406	(52)	B(24)-B(25)	1.735	(38)
B(24)-B(26)	1.748	(39)	B(24)-Li(4)	2.574	(53)
B(25)-B(26)	1.807	(35)	B(25)-Li(4)	2.344	(41)
C(31)-C(32)	1.509	(27)	C(31)-B(35)	1.510	(28)
C(31)-B(36)	1.656	(41)	C(31)-Si(5)	1.888	(21)
C(32)-B(33)	1.523	(33)	C(32)-B(36)	1.697	(34)
C(32)-Si(6)	1.897	(19)	B(33)-B(34)	1.629	(28)
B(33)-B(36)	1.748	(34)	B(33)-Li(2)	2.363	(42)
B(34)-B(35)	1.678	(34)	B(34)-B(36)	1.723	(34)
B(34)-Li(1)	2.435	(44)	B(34)-Li(2)	2.371	(41)
B(35)-B(36)	1.754	(39)	B(35)-Li(1)	2.370	(47)
C(41)-C(42)	1.528	(28)	C(41)-B(45)	1.549	(31)
C(41)-B(46)	1.660	(38)	C(41)-Si(7)	1.903	(21)
C(41)-Li(5)	2.165	(39)	C(42)-B(43)	1.514	(32)
C(42)-B(46)	1.677	(37)	C(42)-Si(8)	1.867	(20)
C(42)-Li(5)	2.179	(39)	B(43)-B(44)	1.741	(33)
B(43)-B(46)	1.805	(33)	B(43)-Li(5)	2.342	(50)
B(44)-B(45)	1.726	(32)	B(44)-B(46)	1.792	(28)
B(44)-Li(5)	2.469	(55)	B(45)-B(46)	1.879	(32)
B(45)-Li(5)	2.289	(49)	C(51)-C(52)	1.490	(27)
C(51)-B(55)	1.594	(33)	C(51)-B(56)	1.661	(35)
C(51)-Si(9)	1.865	(19)	C(52)-B(53)	1.546	(26)
C(52)-B(56)	1.659	(41)	C(52)-Si(10)	1.940	(21)
B(53)-B(54)	1.691	(32)	B(53)-B(56)	1.798	(37)
B(53)-Li(3)	2.268	(43)	B(54)-B(55)	1.685	(29)

L638-42

Table S-13. Interatomic distances (continued)

B(54)-B(56)	1.834	(34)	B(54)-Li(2)	2.367	(41)
B(54)-Li(3)	2.403	(42)	B(55)-B(56)	1.820	(36)
B(55)-Li(2)	2.275	(43)	C(61)-C(62)	1.501	(27)
C(61)-B(65)	1.495	(38)	C(61)-B(66)	1.708	(32)
C(61)-Si(11)	1.896	(21)	C(61)-Li(6)	2.215	(39)
C(62)-B(63)	1.594	(41)	C(62)-B(66)	1.729	(40)
C(62)-Si(12)	1.889	(26)	C(62)-Li(6)	2.169	(38)
B(63)-B(64)	1.638	(43)	B(63)-B(66)	1.829	(39)
B(63)-Li(6)	2.297	(41)	B(64)-B(65)	1.687	(31)
B(64)-B(66)	1.731	(37)	B(64)-Li(6)	2.566	(46)
B(65)-B(66)	1.786	(32)	B(65)-Li(6)	2.391	(47)
C(71)-Si(1)	1.929	(28)	C(72)-Si(1)	1.868	(34)
C(73)-Si(1)	1.842	(29)	C(74)-Si(2)	1.888	(34)
C(75)-Si(2)	1.835	(25)	C(76)-Si(2)	1.882	(29)
C(77)-Si(3)	1.878	(36)	C(78)-Si(3)	1.880	(45)
C(79)-Si(3)	1.908	(27)	C(80)-Si(4)	1.876	(30)
C(81)-Si(4)	1.846	(31)	C(82)-Si(4)	1.838	(46)
C(83)-Si(5)	1.853	(27)	C(84)-Si(5)	1.912	(37)
C(85)-Si(5)	1.845	(37)	C(86)-Si(6)	1.859	(37)
C(87)-Si(6)	1.807	(28)	C(88)-Si(6)	1.900	(34)
C(89)-Si(7)	1.916	(30)	C(90)-Si(7)	1.884	(27)
C(91)-Si(7)	1.843	(39)	C(92)-Si(8)	1.961	(26)
C(93)-Si(8)	1.743	(27)	C(94)-Si(8)	1.888	(41)
C(95)-Si(9)	1.874	(33)	C(96)-Si(9)	1.911	(37)
C(97)-Si(9)	1.907	(34)	C(98)-Si(10)	1.915	(34)
C(99)-Si(10)	1.879	(33)	C(100)-Si(10)	1.877	(47)
C(101)-Si(11)	1.917	(31)	C(102)-Si(11)	1.943	(32)
C(103)-Si(11)	1.899	(30)	C(104)-Si(12)	1.905	(30)
C(105)-Si(12)	1.897	(34)	C(106)-Si(12)	1.920	(33)
O(110)-C(111)	1.498	(42)	O(110)-Li(4)	1.782	(40)
O(110)-Li(5)	1.848	(43)	O(110)-Li(6)	1.793	(36)
Li(1)-O(121)	1.929	(55)	Li(2)-O(126)	1.894	(49)
Li(3)-O(131)	1.951	(53)	Li(4)-Li(5)	2.860	(52)
Li(4)-Li(6)	2.830	(52)	Li(5)-Li(6)	2.924	(49)
O(121)-C(122)	1.384	(29)	O(121)-C(125)	1.384	(40)
C(122)-C(123)	1.481	(56)	C(123)-C(124)	1.481	(61)
C(124)-C(125)	1.481	(52)	O(126)-C(127)	1.441	(35)
O(126)-C(130)	1.478	(36)	C(127)-C(128)	1.549	(47)
C(128)-C(129)	1.553	(48)	C(129)-C(130)	1.435	(50)
O(131)-C(132)	1.384	(26)	O(131)-C(135)	1.384	(40)
C(132)-C(133)	1.481	(52)	C(133)-C(134)	1.481	(69)
C(134)-C(135)	1.481	(50)			

L638.43

Table S-14. Interatomic angles (°) of **4**

Dy(2)-Dy(1)-Dy(3)	60.3(1)	Dy(1)-Dy(2)-Dy(3)	59.8(1)
Dy(1)-Dy(3)-Dy(2)	59.9(1)	Dy(1)-C(11)-C(12)	74.5(9)
Dy(1)-C(11)-B(15)	71.6(10)	C(12)-C(11)-B(15)	108.4(18)
Dy(1)-C(11)-B(16)	102.8(12)	C(12)-C(11)-B(16)	63.6(16)
B(15)-C(11)-B(16)	65.5(16)	Dy(1)-C(11)-Si(1)	133.6(11)
C(12)-C(11)-Si(1)	132.0(14)	B(15)-C(11)-Si(1)	117.0(15)
B(16)-C(11)-Si(1)	122.6(14)	Dy(1)-C(12)-C(11)	73.1(9)
Dy(1)-C(12)-B(13)	74.5(11)	C(11)-C(12)-B(13)	114.8(18)
Dy(1)-C(12)-B(16)	102.7(11)	C(11)-C(12)-B(16)	65.2(16)
B(13)-C(12)-B(16)	69.2(17)	Dy(1)-C(12)-Si(2)	134.7(10)
C(11)-C(12)-Si(2)	129.3(14)	B(13)-C(12)-Si(2)	113.7(14)
B(16)-C(12)-Si(2)	122.1(13)	Dy(1)-B(13)-C(12)	72.3(13)
Dy(1)-B(13)-B(14)	70.9(13)	C(12)-B(13)-B(14)	103.2(19)
Dy(1)-B(13)-B(16)	97.7(14)	C(12)-B(13)-B(16)	59.8(16)
B(14)-B(13)-B(16)	61.9(15)	Dy(1)-B(13)-Li(1)	106.0(14)
C(12)-B(13)-Li(1)	177.5(21)	B(14)-B(13)-Li(1)	74.4(19)
B(16)-B(13)-Li(1)	119.1(23)	Dy(1)-B(14)-B(13)	73.4(15)
Dy(1)-B(14)-B(15)	70.8(14)	B(13)-B(14)-B(15)	107.4(21)
Dy(1)-B(14)-B(16)	100.1(17)	B(13)-B(14)-B(16)	64.4(15)
B(15)-B(14)-B(16)	62.9(15)	Dy(1)-B(14)-Li(1)	102.4(16)
B(13)-B(14)-Li(1)	63.6(17)	B(15)-B(14)-Li(1)	170.4(24)
B(16)-B(14)-Li(1)	113.0(17)	Dy(1)-B(14)-Li(3)	103.4(15)
B(13)-B(14)-Li(3)	174.6(23)	B(15)-B(14)-Li(3)	67.3(17)
B(16)-B(14)-Li(3)	112.5(17)	Li(1)-B(14)-Li(3)	121.7(20)
Dy(1)-B(15)-C(11)	73.7(12)	Dy(1)-B(15)-B(14)	73.7(13)
C(11)-B(15)-B(14)	106.2(18)	Dy(1)-B(15)-B(16)	102.1(14)
C(11)-B(15)-B(16)	61.4(16)	B(14)-B(15)-B(16)	63.8(15)
Dy(1)-B(15)-Li(3)	106.9(13)	C(11)-B(15)-Li(3)	178.0(20)
B(14)-B(15)-Li(3)	72.3(17)	B(16)-B(15)-Li(3)	116.6(21)
C(11)-B(16)-C(12)	51.2(14)	C(11)-B(16)-B(13)	90.7(19)
C(12)-B(16)-B(13)	51.0(14)	C(11)-B(16)-B(14)	92.3(17)
C(12)-B(16)-B(14)	90.5(17)	B(13)-B(16)-B(14)	53.6(13)
C(11)-B(16)-B(15)	53.2(14)	C(12)-B(16)-B(15)	90.4(18)
B(13)-B(16)-B(15)	92.5(16)	B(14)-B(16)-B(15)	53.3(13)
C(22)-C(21)-B(25)	110.6(21)	C(22)-C(21)-B(26)	65.4(15)
B(25)-C(21)-B(26)	65.5(17)	C(22)-C(21)-Si(3)	129.2(18)
B(25)-C(21)-Si(3)	118.8(15)	B(26)-C(21)-Si(3)	126.4(15)
C(22)-C(21)-Li(4)	69.5(15)	B(25)-C(21)-Li(4)	74.9(17)
B(26)-C(21)-Li(4)	100.5(20)	Si(3)-C(21)-Li(4)	133.0(19)
C(21)-C(22)-B(23)	111.9(19)	C(21)-C(22)-B(26)	63.9(15)
B(23)-C(22)-B(26)	65.2(16)	C(21)-C(22)-Si(4)	128.6(19)
B(23)-C(22)-Si(4)	118.3(15)	B(26)-C(22)-Si(4)	129.7(14)
C(21)-C(22)-Li(4)	70.1(15)	B(23)-C(22)-Li(4)	77.7(18)
B(26)-C(22)-Li(4)	100.1(17)	Si(4)-C(22)-Li(4)	130.1(15)
Dy(2)-B(23)-C(22)	159.7(16)	Dy(2)-B(23)-B(24)	68.5(14)
C(22)-B(23)-B(24)	107.5(19)	Dy(2)-B(23)-B(26)	124.7(16)
C(22)-B(23)-B(26)	63.3(16)	B(24)-B(23)-B(26)	60.9(14)
Dy(2)-B(23)-Li(4)	97.1(14)	C(22)-B(23)-Li(4)	62.9(17)
B(24)-B(23)-Li(4)	76.7(16)	B(26)-B(23)-Li(4)	91.9(17)
Dy(1)-B(24)-Dy(2)	88.6(8)	Dy(1)-B(24)-B(23)	147.9(15)
Dy(2)-B(24)-B(23)	76.6(13)	Dy(1)-B(24)-B(25)	77.2(11)
Dy(2)-B(24)-B(25)	154.1(14)	B(23)-B(24)-B(25)	104.3(21)
Dy(1)-B(24)-B(26)	135.9(14)	Dy(2)-B(24)-B(26)	135.4(14)
B(23)-B(24)-B(26)	64.9(15)	B(25)-B(24)-B(26)	62.5(15)

L638-44

Table S-14. Interatomic angles (continued)

Dy(1)-B(24)-Li(4)	88.5(11)	Dy(2)-B(24)-Li(4)	96.2(11)
B(23)-B(24)-Li(4)	65.5(16)	B(25)-B(24)-Li(4)	62.4(14)
B(26)-B(24)-Li(4)	87.9(18)	Dy(1)-B(25)-C(21)	154.3(14)
Dy(1)-B(25)-B(24)	66.6(12)	C(21)-B(25)-B(24)	105.1(17)
Dy(1)-B(25)-B(26)	122.9(17)	C(21)-B(25)-B(26)	62.5(16)
B(24)-B(25)-B(26)	59.1(15)	Dy(1)-B(25)-Li(4)	89.3(13)
C(21)-B(25)-Li(4)	65.0(15)	B(24)-B(25)-Li(4)	76.7(16)
B(26)-B(25)-Li(4)	94.1(15)	C(21)-B(26)-C(22)	50.7(13)
C(21)-B(26)-B(23)	91.1(17)	C(22)-B(26)-B(23)	51.5(14)
C(21)-B(26)-B(24)	96.7(18)	C(22)-B(26)-B(24)	93.4(16)
B(23)-B(26)-B(24)	54.2(14)	C(21)-B(26)-B(25)	51.9(14)
C(22)-B(26)-B(25)	89.8(16)	B(23)-B(26)-B(25)	94.3(16)
B(24)-B(26)-B(25)	58.4(15)	Dy(2)-C(31)-C(32)	73.7(12)
Dy(2)-C(31)-B(35)	71.6(12)	C(32)-C(31)-B(35)	111.7(18)
Dy(2)-C(31)-B(36)	101.2(13)	C(32)-C(31)-B(36)	64.7(15)
B(35)-C(31)-B(36)	67.1(16)	Dy(2)-C(31)-Si(5)	133.5(12)
C(32)-C(31)-Si(5)	128.3(14)	B(35)-C(31)-Si(5)	118.4(14)
B(36)-C(31)-Si(5)	125.0(16)	Dy(2)-C(32)-C(31)	74.1(12)
Dy(2)-C(32)-B(33)	75.2(13)	C(31)-C(32)-B(33)	111.2(16)
Dy(2)-C(32)-B(36)	100.2(12)	C(31)-C(32)-B(36)	61.8(15)
B(33)-C(32)-B(36)	65.5(15)	Dy(2)-C(32)-Si(6)	133.5(11)
C(31)-C(32)-Si(6)	131.2(15)	B(33)-C(32)-Si(6)	114.5(15)
B(36)-C(32)-Si(6)	125.7(17)	Dy(2)-B(33)-C(32)	72.5(14)
Dy(2)-B(33)-B(34)	72.6(14)	C(32)-B(33)-B(34)	106.4(17)
Dy(2)-B(33)-B(36)	97.5(15)	C(32)-B(33)-B(36)	62.1(15)
B(34)-B(33)-B(36)	61.2(13)	Dy(2)-B(33)-Li(2)	101.9(13)
C(32)-B(33)-Li(2)	174.2(21)	B(34)-B(33)-Li(2)	70.1(14)
B(36)-B(33)-Li(2)	118.4(17)	Dy(2)-B(34)-B(33)	73.0(14)
Dy(2)-B(34)-B(35)	69.2(13)	B(33)-B(34)-B(35)	105.0(17)
Dy(2)-B(34)-B(36)	98.3(15)	B(33)-B(34)-B(36)	62.8(13)
B(35)-B(34)-B(36)	62.1(15)	Dy(2)-B(34)-Li(1)	100.9(16)
B(33)-B(34)-Li(1)	171.9(22)	B(35)-B(34)-Li(1)	67.5(15)
B(36)-B(34)-Li(1)	114.0(16)	Dy(2)-B(34)-Li(2)	101.8(12)
B(33)-B(34)-Li(2)	69.6(14)	B(35)-B(34)-Li(2)	170.8(19)
B(36)-B(34)-Li(2)	119.1(17)	Li(1)-B(34)-Li(2)	117.4(16)
Dy(2)-B(35)-C(31)	75.9(12)	Dy(2)-B(35)-B(34)	74.7(12)
C(31)-B(35)-B(34)	105.2(16)	Dy(2)-B(35)-B(36)	100.6(12)
C(31)-B(35)-B(36)	60.4(15)	B(34)-B(35)-B(36)	60.2(15)
Dy(2)-B(35)-Li(1)	105.1(15)	C(31)-B(35)-Li(1)	176.1(24)
B(34)-B(35)-Li(1)	71.6(15)	B(36)-B(35)-Li(1)	115.7(21)
C(31)-B(36)-C(32)	53.5(14)	C(31)-B(36)-B(33)	94.6(19)
C(32)-B(36)-B(33)	52.5(13)	C(31)-B(36)-B(34)	97.2(20)
C(32)-B(36)-B(34)	95.2(17)	B(33)-B(36)-B(34)	56.0(12)
C(31)-B(36)-B(35)	52.5(14)	C(32)-B(36)-B(35)	92.8(19)
B(33)-B(36)-B(35)	97.0(18)	B(34)-B(36)-B(35)	57.7(14)
C(42)-C(41)-B(45)	114.5(17)	C(42)-C(41)-B(46)	63.3(15)
B(45)-C(41)-B(46)	71.6(16)	C(42)-C(41)-Si(7)	126.4(14)
B(45)-C(41)-Si(7)	118.5(15)	B(46)-C(41)-Si(7)	127.9(14)
C(42)-C(41)-Li(5)	69.9(14)	B(45)-C(41)-Li(5)	74.0(15)
B(46)-C(41)-Li(5)	99.7(17)	Si(7)-C(41)-Li(5)	132.4(18)
C(41)-C(42)-B(43)	112.6(18)	C(41)-C(42)-B(46)	62.2(15)
B(43)-C(42)-B(46)	68.7(16)	C(41)-C(42)-Si(8)	130.1(14)
B(43)-C(42)-Si(8)	116.5(15)	B(46)-C(42)-Si(8)	130.5(14)
C(41)-C(42)-Li(5)	68.9(14)	B(43)-C(42)-Li(5)	76.3(16)
B(46)-C(42)-Li(5)	98.6(16)	Si(8)-C(42)-Li(5)	130.9(17)

L638-45

Table S-14. Interatomic angles (continued)

Dy(3)-B(43)-C(42)	160.2(16)	Dy(3)-B(43)-B(44)	68.8(10)
C(42)-B(43)-B(44)	104.6(17)	Dy(3)-B(43)-B(46)	125.0(15)
C(42)-B(43)-B(46)	59.9(14)	B(44)-B(43)-B(46)	60.7(12)
Dy(3)-B(43)-Li(5)	95.6(11)	C(42)-B(43)-Li(5)	64.7(15)
B(44)-B(43)-Li(5)	72.7(16)	B(46)-B(43)-Li(5)	89.4(16)
Dy(2)-B(44)-Dy(3)	89.4(6)	Dy(2)-B(44)-B(43)	149.6(14)
Dy(3)-B(44)-B(43)	74.1(10)	Dy(2)-B(44)-B(45)	78.9(10)
Dy(3)-B(44)-B(45)	154.4(15)	B(43)-B(44)-B(45)	105.1(17)
Dy(2)-B(44)-B(46)	140.1(13)	Dy(3)-B(44)-B(46)	130.5(13)
B(43)-B(44)-B(46)	61.4(12)	B(45)-B(44)-B(46)	64.5(12)
Dy(2)-B(44)-Li(5)	91.9(11)	Dy(3)-B(44)-Li(5)	94.8(11)
B(43)-B(44)-Li(5)	64.9(15)	B(45)-B(44)-Li(5)	63.3(15)
B(46)-B(44)-Li(5)	85.8(15)	Dy(2)-B(45)-C(41)	155.3(15)
Dy(2)-B(45)-B(44)	64.7(9)	C(41)-B(45)-B(44)	102.4(16)
Dy(2)-B(45)-B(46)	122.0(13)	C(41)-B(45)-B(46)	56.9(14)
B(44)-B(45)-B(46)	59.4(12)	Dy(2)-B(45)-Li(5)	90.2(11)
C(41)-B(45)-Li(5)	65.4(15)	B(44)-B(45)-Li(5)	74.4(16)
B(46)-B(45)-Li(5)	89.2(15)	C(41)-B(46)-C(42)	54.5(14)
C(41)-B(46)-B(43)	93.7(18)	C(42)-B(46)-B(43)	51.4(13)
C(41)-B(46)-B(44)	95.5(16)	C(42)-B(46)-B(44)	96.0(15)
B(43)-B(46)-B(44)	57.9(12)	C(41)-B(46)-B(45)	51.5(13)
C(42)-B(46)-B(45)	93.2(17)	B(43)-B(46)-B(45)	96.7(14)
B(44)-B(46)-B(45)	56.0(12)	Dy(3)-C(51)-C(52)	72.6(12)
Dy(3)-C(51)-B(55)	72.9(13)	C(52)-C(51)-B(55)	110.6(15)
Dy(3)-C(51)-B(56)	102.1(13)	C(52)-C(51)-B(56)	63.3(15)
B(55)-C(51)-B(56)	67.9(16)	Dy(3)-C(51)-Si(9)	133.2(11)
C(52)-C(51)-Si(9)	130.0(15)	B(55)-C(51)-Si(9)	117.6(15)
B(56)-C(51)-Si(9)	124.5(17)	Dy(3)-C(52)-C(51)	75.4(12)
Dy(3)-C(52)-B(53)	76.1(12)	C(51)-C(52)-B(53)	114.4(17)
Dy(3)-C(52)-B(56)	103.6(13)	C(51)-C(52)-B(56)	63.4(15)
B(53)-C(52)-B(56)	68.1(15)	Dy(3)-C(52)-Si(10)	134.4(12)
C(51)-C(52)-Si(10)	129.6(14)	B(53)-C(52)-Si(10)	112.4(13)
B(56)-C(52)-Si(10)	121.4(16)	Dy(3)-B(53)-C(52)	70.9(12)
Dy(3)-B(53)-B(54)	72.3(12)	C(52)-B(53)-B(54)	104.3(15)
Dy(3)-B(53)-B(56)	97.1(12)	C(52)-B(53)-B(56)	58.9(15)
B(54)-B(53)-B(56)	63.3(14)	Dy(3)-B(53)-Li(3)	102.8(15)
C(52)-B(53)-Li(3)	173.7(21)	B(54)-B(53)-Li(3)	73.1(15)
B(56)-B(53)-Li(3)	123.1(20)	Dy(3)-B(54)-B(53)	72.0(13)
Dy(3)-B(54)-B(55)	70.8(14)	B(53)-B(54)-B(55)	105.8(16)
Dy(3)-B(54)-B(56)	96.1(14)	B(53)-B(54)-B(56)	61.2(14)
B(55)-B(54)-B(56)	62.1(13)	Dy(3)-B(54)-Li(2)	102.9(13)
B(53)-B(54)-Li(2)	171.6(15)	B(55)-B(54)-Li(2)	65.9(14)
B(56)-B(54)-Li(2)	113.6(16)	Dy(3)-B(54)-Li(3)	99.2(16)
B(53)-B(54)-Li(3)	64.5(14)	B(55)-B(54)-Li(3)	168.4(22)
B(56)-B(54)-Li(3)	114.8(16)	Li(2)-B(54)-Li(3)	123.5(16)
Dy(3)-B(55)-C(51)	73.1(14)	Dy(3)-B(55)-B(54)	73.5(14)
C(51)-B(55)-B(54)	104.7(17)	Dy(3)-B(55)-B(56)	97.8(15)
C(51)-B(55)-B(56)	57.8(14)	B(54)-B(55)-B(56)	63.0(13)
Dy(3)-B(55)-Li(2)	106.8(14)	C(51)-B(55)-Li(2)	176.0(17)
B(54)-B(55)-Li(2)	71.6(14)	B(56)-B(55)-Li(2)	118.5(18)
C(51)-B(56)-C(52)	53.3(14)	C(51)-B(56)-B(53)	95.1(20)
C(52)-B(56)-B(53)	53.0(13)	C(51)-B(56)-B(54)	95.8(18)
C(52)-B(56)-B(54)	94.0(19)	B(53)-B(56)-B(54)	55.5(13)
C(51)-B(56)-B(55)	54.3(14)	C(52)-B(56)-B(55)	93.5(19)
B(53)-B(56)-B(55)	96.3(18)	B(54)-B(56)-B(55)	54.9(12)

L638-46

Table S-14. Interatomic angles (continued)

C(62)-C(61)-B(65)	113.2(18)	C(62)-C(61)-B(66)	64.8(15)
B(65)-C(61)-B(66)	67.4(16)	C(62)-C(61)-Si(11)	124.9(17)
B(65)-C(61)-Si(11)	120.3(15)	B(66)-C(61)-Si(11)	125.4(14)
C(62)-C(61)-Li(6)	68.3(13)	B(65)-C(61)-Li(6)	77.6(17)
B(66)-C(61)-Li(6)	100.3(15)	Si(11)-C(61)-Li(6)	134.2(14)
C(61)-C(62)-B(63)	109.7(21)	C(61)-C(62)-B(66)	63.4(15)
B(63)-C(62)-B(66)	66.7(18)	C(61)-C(62)-Si(12)	132.1(17)
B(63)-C(62)-Si(12)	117.1(16)	B(66)-C(62)-Si(12)	127.8(14)
C(61)-C(62)-Li(6)	71.6(14)	B(63)-C(62)-Li(6)	73.5(16)
B(66)-C(62)-Li(6)	101.4(18)	Si(12)-C(62)-Li(6)	130.4(17)
Dy(1)-B(63)-C(62)	164.1(16)	Dy(1)-B(63)-B(64)	71.1(14)
C(62)-B(63)-B(64)	105.3(19)	Dy(1)-B(63)-B(66)	125.3(20)
C(62)-B(63)-B(66)	60.2(16)	B(64)-B(63)-B(66)	59.6(16)
Dy(1)-B(63)-Li(6)	99.3(14)	C(62)-B(63)-Li(6)	64.8(15)
B(64)-B(63)-Li(6)	79.5(16)	B(66)-B(63)-Li(6)	93.7(16)
Dy(1)-B(64)-Dy(3)	87.7(7)	Dy(1)-B(64)-B(63)	74.0(13)
Dy(3)-B(64)-B(63)	147.0(15)	Dy(1)-B(64)-B(65)	154.6(14)
Dy(3)-B(64)-B(65)	80.4(12)	B(63)-B(64)-B(65)	104.6(21)
Dy(1)-B(64)-B(66)	133.2(13)	Dy(3)-B(64)-B(66)	139.0(13)
B(63)-B(64)-B(66)	65.7(17)	B(65)-B(64)-B(66)	63.0(14)
Dy(1)-B(64)-Li(6)	94.0(10)	Dy(3)-B(64)-Li(6)	93.4(10)
B(63)-B(64)-Li(6)	61.7(15)	B(65)-B(64)-Li(6)	64.6(14)
B(66)-B(64)-Li(6)	87.4(16)	Dy(3)-B(65)-C(61)	156.1(16)
Dy(3)-B(65)-B(64)	64.7(12)	C(61)-B(65)-B(64)	106.1(18)
Dy(3)-B(65)-B(66)	121.5(15)	C(61)-B(65)-B(66)	62.0(15)
B(64)-B(65)-B(66)	59.7(13)	Dy(3)-B(65)-Li(6)	91.3(12)
C(61)-B(65)-Li(6)	64.8(16)	B(64)-B(65)-Li(6)	75.8(15)
B(66)-B(65)-Li(6)	91.8(16)	C(61)-B(66)-C(62)	51.8(13)
C(61)-B(66)-B(63)	91.3(17)	C(62)-B(66)-B(63)	53.1(16)
C(61)-B(66)-B(64)	95.5(15)	C(62)-B(66)-B(64)	95.9(17)
B(63)-B(66)-B(64)	54.7(16)	C(61)-B(66)-B(65)	50.6(14)
C(62)-B(66)-B(65)	90.7(16)	B(63)-B(66)-B(65)	93.4(16)
B(64)-B(66)-B(65)	57.3(13)	Dy(1)-O(10)-Dy(2)	120.1(5)
Dy(1)-O(10)-Dy(3)	117.0(5)	Dy(2)-O(10)-Dy(3)	120.9(4)
C(111)-O(110)-Li(4)	112.8(21)	C(111)-O(110)-Li(5)	117.2(18)
Li(4)-O(110)-Li(5)	104.0(20)	C(111)-O(110)-Li(6)	110.4(19)
Li(4)-O(110)-Li(6)	104.7(17)	Li(5)-O(110)-Li(6)	106.8(19)
O(110)-C(111)-Li(4)	36.9(13)	O(110)-C(111)-Li(6)	38.4(12)
Li(4)-C(111)-Li(6)	62.6(14)	C(11)-Si(1)-C(71)	109.3(13)
C(11)-Si(1)-C(72)	110.2(11)	C(71)-Si(1)-C(72)	113.1(13)
C(11)-Si(1)-C(73)	108.9(12)	C(71)-Si(1)-C(73)	107.0(14)
C(72)-Si(1)-C(73)	108.2(15)	C(12)-Si(2)-C(74)	116.5(12)
C(12)-Si(2)-C(75)	108.8(9)	C(74)-Si(2)-C(75)	108.8(14)
C(12)-Si(2)-C(76)	106.8(12)	C(74)-Si(2)-C(76)	106.8(14)
C(75)-Si(2)-C(76)	108.8(12)	C(21)-Si(3)-C(77)	110.0(14)
C(21)-Si(3)-C(78)	111.0(16)	C(77)-Si(3)-C(78)	112.0(19)
C(21)-Si(3)-C(79)	112.8(13)	C(77)-Si(3)-C(79)	107.5(14)
C(78)-Si(3)-C(79)	103.4(16)	C(22)-Si(4)-C(80)	111.2(13)
C(22)-Si(4)-C(81)	106.9(13)	C(80)-Si(4)-C(81)	105.3(17)
C(22)-Si(4)-C(82)	113.5(13)	C(80)-Si(4)-C(82)	111.5(19)
C(81)-Si(4)-C(82)	108.0(16)	C(31)-Si(5)-C(83)	109.0(10)
C(31)-Si(5)-C(84)	110.3(13)	C(83)-Si(5)-C(84)	106.8(14)
C(31)-Si(5)-C(85)	114.7(11)	C(83)-Si(5)-C(85)	105.7(15)
C(84)-Si(5)-C(85)	109.9(14)	C(32)-Si(6)-C(86)	107.3(12)
C(32)-Si(6)-C(87)	109.4(11)	C(86)-Si(6)-C(87)	108.2(14)
C(32)-Si(6)-C(88)	114.3(12)	C(86)-Si(6)-C(88)	111.4(14)

L638-47

Table S-14. Interatomic angles (continued)

C(87)-Si(6)-C(88)	106.1(14)	C(41)-Si(7)-C(89)	110.0(11)
C(41)-Si(7)-C(90)	112.4(12)	C(89)-Si(7)-C(90)	105.3(14)
C(41)-Si(7)-C(91)	113.1(12)	C(89)-Si(7)-C(91)	109.7(14)
C(90)-Si(7)-C(91)	106.0(14)	C(42)-Si(8)-C(92)	105.5(9)
C(42)-Si(8)-C(93)	114.0(13)	C(92)-Si(8)-C(93)	111.3(13)
C(42)-Si(8)-C(94)	113.9(12)	C(92)-Si(8)-C(94)	104.3(15)
C(93)-Si(8)-C(94)	107.4(15)	C(51)-Si(9)-C(95)	118.1(14)
C(51)-Si(9)-C(96)	110.7(12)	C(95)-Si(9)-C(96)	110.3(16)
C(51)-Si(9)-C(97)	111.9(12)	C(95)-Si(9)-C(97)	96.1(19)
C(96)-Si(9)-C(97)	108.7(17)	C(52)-Si(10)-C(98)	114.8(11)
C(52)-Si(10)-C(99)	108.0(10)	C(98)-Si(10)-C(99)	108.7(17)
C(52)-Si(10)-C(100)	107.6(14)	C(98)-Si(10)-C(100)	108.9(16)
C(99)-Si(10)-C(100)	108.8(16)	C(61)-Si(11)-C(101)	108.3(12)
C(61)-Si(11)-C(102)	110.7(11)	C(101)-Si(11)-C(102)	109.1(13)
C(61)-Si(11)-C(103)	114.0(10)	C(101)-Si(11)-C(103)	105.4(13)
C(102)-Si(11)-C(103)	109.1(15)	C(62)-Si(12)-C(104)	114.4(14)
C(62)-Si(12)-C(105)	109.0(14)	C(104)-Si(12)-C(105)	108.3(13)
C(62)-Si(12)-C(106)	112.4(11)	C(104)-Si(12)-C(106)	106.0(15)
C(105)-Si(12)-C(106)	106.3(18)	B(13)-Li(1)-B(14)	42.0(13)
B(13)-Li(1)-B(34)	133.7(25)	B(14)-Li(1)-B(34)	110.4(18)
B(13)-Li(1)-B(35)	119.3(26)	B(14)-Li(1)-B(35)	130.0(23)
B(34)-Li(1)-B(35)	40.9(10)	B(13)-Li(1)-O(121)	111.3(20)
B(14)-Li(1)-O(121)	113.1(21)	B(34)-Li(1)-O(121)	114.6(25)
B(35)-Li(1)-O(121)	116.5(24)	B(33)-Li(2)-B(34)	40.3(9)
B(33)-Li(2)-B(54)	134.1(21)	B(34)-Li(2)-B(54)	111.3(17)
B(33)-Li(2)-B(55)	120.7(19)	B(34)-Li(2)-B(55)	132.3(22)
B(54)-Li(2)-B(55)	42.5(10)	B(33)-Li(2)-O(126)	112.3(18)
B(34)-Li(2)-O(126)	115.7(18)	B(54)-Li(2)-O(126)	113.3(18)
B(55)-Li(2)-O(126)	111.9(19)	B(14)-Li(3)-B(15)	40.4(12)
B(14)-Li(3)-B(53)	133.1(22)	B(15)-Li(3)-B(53)	124.4(25)
B(14)-Li(3)-B(54)	106.7(18)	B(15)-Li(3)-B(54)	130.8(22)
B(53)-Li(3)-B(54)	42.3(10)	B(14)-Li(3)-O(131)	109.7(19)
B(15)-Li(3)-O(131)	112.0(18)	B(53)-Li(3)-O(131)	115.4(23)
B(54)-Li(3)-O(131)	114.4(24)	C(21)-Li(4)-O(110)	155.0(30)
C(22)-Li(4)-O(110)	141.8(21)	B(23)-Li(4)-O(110)	132.9(22)
B(24)-Li(4)-O(110)	138.5(26)	B(25)-Li(4)-O(110)	150.3(22)
Li(5)-Li(4)-Li(6)	61.8(13)	C(41)-Li(5)-O(110)	152.3(25)
C(42)-Li(5)-O(110)	140.2(23)	B(43)-Li(5)-O(110)	133.0(20)
B(44)-Li(5)-O(110)	140.4(19)	B(45)-Li(5)-O(110)	148.3(20)
Li(4)-Li(5)-Li(6)	58.6(12)	C(61)-Li(6)-O(110)	156.6(20)
C(62)-Li(6)-O(110)	148.7(24)	B(63)-Li(6)-O(110)	134.3(19)
B(64)-Li(6)-O(110)	136.0(22)	B(65)-Li(6)-O(110)	144.9(21)
Li(4)-Li(6)-Li(5)	59.6(12)	Li(1)-O(121)-C(122)	120.8(13)
Li(1)-O(121)-C(125)	130.7(10)	Li(2)-O(126)-C(127)	124.1(20)
Li(2)-O(126)-C(130)	125.5(20)	Li(3)-O(131)-C(132)	117.4(23)
Li(3)-O(131)-C(135)	133.8(20)		

L638-48

Table S-15. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x 10^3$) of **4**

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Dy(1)	34(1)	34(1)	43(1)	-7(1)	3(1)	1(1)
Dy(2)	39(1)	37(1)	31(1)	-16(1)	5(1)	0(1)
Dy(3)	37(1)	33(1)	32(1)	-13(1)	1(1)	0(1)
Si(1)	44(4)	67(5)	75(5)	1(3)	15(4)	-7(4)
Si(2)	59(5)	64(5)	72(5)	-2(4)	-7(4)	19(4)
Si(3)	71(5)	87(6)	113(7)	-39(5)	-27(5)	3(5)
Si(4)	104(6)	70(5)	61(5)	-45(5)	-5(4)	-2(4)
Si(5)	126(7)	90(5)	30(4)	-70(5)	-3(4)	7(3)
Si(6)	67(5)	90(6)	69(5)	-31(4)	31(4)	-26(4)
Si(7)	92(6)	44(4)	75(5)	-14(4)	10(4)	-23(4)
Si(8)	81(5)	40(4)	68(5)	-8(4)	-7(4)	14(3)
Si(9)	65(5)	73(5)	109(6)	-18(4)	-42(5)	3(4)
Si(10)	108(6)	96(6)	35(4)	-61(5)	-6(4)	8(4)
Si(11)	97(6)	66(5)	61(5)	-41(4)	2(4)	13(4)
Si(12)	68(5)	112(7)	118(7)	-56(5)	20(5)	14(5)
C(71)	113(26)	81(22)	134(28)	34(19)	49(22)	34(19)
C(72)	76(19)	96(21)	86(20)	-31(16)	23(15)	24(16)
C(73)	121(26)	101(24)	76(20)	1(19)	-15(18)	-23(17)
C(74)	59(18)	125(26)	144(28)	-40(18)	11(18)	34(21)
C(75)	51(16)	82(19)	78(18)	16(14)	-13(14)	-4(14)
C(76)	129(27)	62(18)	95(22)	24(18)	-28(19)	41(16)
C(77)	98(26)	202(39)	137(30)	-82(27)	-43(22)	-9(27)
C(78)	241(47)	146(33)	152(33)	-145(35)	-40(31)	64(26)
C(79)	41(17)	141(28)	145(29)	-27(18)	-15(17)	5(22)
C(80)	268(50)	158(34)	51(20)	-80(33)	-70(25)	28(20)
C(81)	106(25)	111(25)	119(27)	-15(20)	0(21)	-48(21)
C(82)	303(51)	95(24)	91(23)	-132(31)	20(27)	-25(19)
C(83)	94(23)	148(29)	65(19)	-39(21)	-20(16)	27(18)
C(84)	160(32)	148(29)	63(19)	-89(26)	6(19)	26(19)
C(85)	150(28)	132(25)	49(16)	-102(23)	2(17)	-11(16)
C(86)	84(21)	147(28)	97(22)	-76(20)	62(17)	-23(19)
C(87)	71(20)	125(26)	100(23)	-24(18)	-2(17)	-16(19)
C(88)	106(24)	100(23)	101(23)	-28(19)	34(19)	-49(19)
C(89)	110(23)	86(20)	89(21)	-26(18)	56(18)	-41(17)
C(90)	103(24)	53(18)	162(31)	16(16)	-3(22)	-34(19)
C(91)	160(30)	76(20)	95(22)	-63(21)	-14(20)	-29(17)
C(92)	157(28)	54(16)	70(18)	-35(18)	48(18)	13(14)
C(93)	63(18)	98(22)	107(23)	-1(16)	-3(16)	33(18)
C(94)	254(44)	72(20)	89(23)	-73(25)	-48(25)	20(17)
C(95)	115(27)	54(18)	191(36)	-8(18)	11(24)	14(20)
C(96)	92(24)	197(36)	87(22)	-62(24)	-45(18)	-4(22)
C(97)	59(22)	297(53)	117(29)	28(26)	-15(20)	-95(32)
C(98)	139(31)	137(30)	111(27)	3(24)	16(23)	82(23)
C(99)	127(28)	186(34)	50(18)	-70(25)	37(17)	13(19)
C(100)	202(39)	203(38)	63(20)	-121(33)	6(22)	-62(23)
C(101)	111(23)	101(22)	72(19)	-55(19)	-7(16)	46(16)
C(102)	147(29)	76(20)	97(23)	-49(20)	36(20)	2(17)
C(103)	117(26)	102(23)	93(22)	-24(20)	49(19)	-8(18)
C(104)	84(22)	144(29)	112(25)	-37(20)	66(19)	-6(21)
C(105)	76(23)	237(44)	138(30)	-73(26)	-29(21)	80(29)
C(106)	79(21)	81(20)	188(33)	-55(18)	-1(20)	27(21)
O(110)	54(9)	52(9)	47(9)	-22(8)	-5(7)	3(7)
C(111)	140(29)	114(25)	78(21)	-64(23)	14(19)	5(18)

L638-49

Table S-15. Anisotropic displacement coefficients (continued)

O(121)	107(15)	54(11)	133(16)	-32(11)	37(12)	14(10)
O(126)	171(19)	135(16)	46(10)	-135(15)	1(10)	7(10)
O(131)	72(12)	71(12)	135(16)	-35(10)	8(11)	-29(11)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})]$$

L638-50

Table S-17. Interatomic distances (Å) of **5**

Ho(1)-Ho(2)	3.713	(1)	Ho(1)-Ho(3)	3.712	(1)
Ho(1)-C(11)	2.678	(10)	Ho(1)-C(12)	2.711	(10)
Ho(1)-B(13)	2.678	(15)	Ho(1)-B(14)	2.715	(16)
Ho(1)-B(15)	2.646	(15)	Ho(1)-B(24)	2.649	(15)
Ho(1)-B(25)	2.843	(16)	Ho(1)-B(63)	2.781	(17)
Ho(1)-B(64)	2.696	(13)	Ho(1)-O(10)	2.169	(6)
Ho(2)-Ho(3)	3.718	(1)	Ho(2)-B(23)	2.734	(19)
Ho(2)-B(24)	2.702	(17)	Ho(2)-C(31)	2.727	(13)
Ho(2)-C(32)	2.702	(14)	Ho(2)-B(33)	2.701	(17)
Ho(2)-B(34)	2.723	(18)	Ho(2)-B(35)	2.715	(15)
Ho(2)-B(44)	2.654	(13)	Ho(2)-B(45)	2.870	(14)
Ho(2)-O(10)	2.153	(6)	Ho(3)-B(43)	2.769	(14)
Ho(3)-B(44)	2.708	(14)	Ho(3)-C(51)	2.688	(14)
Ho(3)-C(52)	2.714	(13)	Ho(3)-B(53)	2.724	(15)
Ho(3)-B(54)	2.732	(18)	Ho(3)-B(55)	2.688	(17)
Ho(3)-B(64)	2.658	(15)	Ho(3)-B(65)	2.891	(18)
Ho(3)-O(10)	2.140	(6)	C(11)-C(12)	1.519	(17)
C(11)-B(15)	1.561	(21)	C(11)-B(16)	1.734	(23)
C(11)-Si(1)	1.865	(13)	C(12)-B(13)	1.558	(21)
C(12)-B(16)	1.698	(23)	C(12)-Si(2)	1.897	(12)
B(13)-B(14)	1.583	(22)	B(13)-B(16)	1.772	(20)
B(13)-Li(1)	2.286	(27)	B(14)-B(15)	1.662	(22)
B(14)-B(16)	1.791	(18)	B(14)-Li(1)	2.351	(26)
B(14)-Li(3)	2.387	(28)	B(15)-B(16)	1.782	(20)
B(15)-Li(3)	2.354	(30)	C(21)-C(22)	1.537	(16)
C(21)-B(25)	1.554	(21)	C(21)-B(26)	1.708	(23)
C(21)-Si(3)	1.865	(15)	C(21)-Li(4)	2.194	(27)
C(22)-B(23)	1.569	(25)	C(22)-B(26)	1.715	(19)
C(22)-Si(4)	1.874	(13)	C(22)-Li(4)	2.168	(30)
B(23)-B(24)	1.691	(20)	B(23)-B(26)	1.854	(20)
B(23)-Li(4)	2.331	(33)	B(24)-B(25)	1.629	(24)
B(24)-B(26)	1.762	(24)	B(24)-Li(4)	2.458	(32)
B(25)-B(26)	1.805	(22)	B(25)-Li(4)	2.296	(25)
C(31)-C(32)	1.494	(16)	C(31)-B(35)	1.611	(17)
C(31)-B(36)	1.702	(24)	C(31)-Si(5)	1.868	(12)
C(32)-B(33)	1.560	(19)	C(32)-B(36)	1.702	(21)
C(32)-Si(6)	1.889	(12)	B(33)-B(34)	1.658	(18)
B(33)-B(36)	1.778	(20)	B(33)-Li(2)	2.316	(28)
B(34)-B(35)	1.652	(22)	B(34)-B(36)	1.798	(21)
B(34)-Li(1)	2.365	(21)	B(34)-Li(2)	2.403	(28)
B(35)-B(36)	1.791	(23)	B(35)-Li(1)	2.299	(23)
C(41)-C(42)	1.505	(17)	C(41)-B(45)	1.539	(20)
C(41)-B(46)	1.671	(23)	C(41)-Si(7)	1.894	(12)
C(41)-Li(5)	2.156	(23)	C(42)-B(43)	1.540	(20)
C(42)-B(46)	1.697	(23)	C(42)-Si(8)	1.872	(13)
C(42)-Li(5)	2.137	(23)	B(43)-B(44)	1.662	(21)
B(43)-B(46)	1.755	(20)	B(43)-Li(5)	2.327	(29)
B(44)-B(45)	1.645	(22)	B(44)-B(46)	1.748	(17)
B(44)-Li(5)	2.498	(32)	B(45)-B(46)	1.807	(20)
B(45)-Li(5)	2.293	(30)	C(51)-C(52)	1.500	(16)
C(51)-B(55)	1.567	(19)	C(51)-B(56)	1.719	(21)
C(51)-Si(9)	1.890	(12)	C(52)-B(53)	1.546	(16)
C(52)-B(56)	1.724	(23)	C(52)-Si(10)	1.881	(12)
B(53)-B(54)	1.647	(21)	B(53)-B(56)	1.781	(22)
B(53)-Li(3)	2.332	(24)	B(54)-B(55)	1.659	(17)

L638-51

Table S-17. Interatomic distances (continued)

B(54)-B(56)	1.789	(20)	B(54)-Li(2)	2.416	(28)
B(54)-Li(3)	2.387	(24)	B(55)-B(56)	1.805	(20)
B(55)-Li(2)	2.278	(28)	C(61)-C(62)	1.498	(16)
C(61)-B(65)	1.523	(24)	C(61)-B(66)	1.715	(19)
C(61)-Si(11)	1.880	(12)	C(61)-Li(6)	2.135	(23)
C(62)-B(63)	1.538	(22)	C(62)-B(66)	1.665	(23)
C(62)-Si(12)	1.895	(15)	C(62)-Li(6)	2.140	(24)
B(63)-B(64)	1.642	(23)	B(63)-B(66)	1.775	(21)
B(63)-Li(6)	2.314	(25)	B(64)-B(65)	1.644	(18)
B(64)-B(66)	1.744	(22)	B(64)-Li(6)	2.464	(30)
B(65)-B(66)	1.804	(19)	B(65)-Li(6)	2.277	(29)
C(71)-Si(1)	1.891	(14)	C(72)-Si(1)	1.834	(19)
C(73)-Si(1)	1.846	(14)	C(74)-Si(2)	1.877	(18)
C(75)-Si(2)	1.860	(13)	C(76)-Si(2)	1.839	(15)
C(77)-Si(3)	1.819	(19)	C(78)-Si(3)	1.819	(23)
C(79)-Si(3)	1.855	(15)	C(80)-Si(4)	1.869	(16)
C(81)-Si(4)	1.838	(17)	C(82)-Si(4)	1.858	(24)
C(83)-Si(5)	1.826	(15)	C(84)-Si(5)	1.859	(20)
C(85)-Si(5)	1.862	(21)	C(86)-Si(6)	1.861	(21)
C(87)-Si(6)	1.838	(15)	C(88)-Si(6)	1.890	(19)
C(89)-Si(7)	1.835	(17)	C(90)-Si(7)	1.863	(15)
C(91)-Si(7)	1.849	(20)	C(92)-Si(8)	1.878	(15)
C(93)-Si(8)	1.804	(15)	C(94)-Si(8)	1.855	(20)
C(95)-Si(9)	1.823	(20)	C(96)-Si(9)	1.894	(21)
C(97)-Si(9)	1.855	(17)	C(98)-Si(10)	1.858	(19)
C(99)-Si(10)	1.844	(16)	C(100)-Si(10)	1.860	(24)
C(101)-Si(11)	1.849	(18)	C(102)-Si(11)	1.888	(17)
C(103)-Si(11)	1.863	(17)	C(104)-Si(12)	1.875	(17)
C(105)-Si(12)	1.851	(18)	C(106)-Si(12)	1.853	(20)
Li(1)-O(121)	1.949	(25)	Li(2)-O(126)	1.909	(34)
Li(3)-O(131)	1.963	(28)	Li(4)-Li(5)	2.872	(31)
Li(4)-Li(6)	2.920	(34)	Li(4)-O(110)	1.830	(25)
Li(5)-Li(6)	2.939	(30)	Li(5)-O(110)	1.833	(25)
Li(6)-O(110)	1.863	(22)	O(110)-C(111)	1.499	(24)
O(121)-C(122)	1.306	(17)	O(121)-C(125)	1.306	(28)
C(122)-C(123)	1.398	(30)	C(123)-C(124)	1.398	(35)
C(124)-C(125)	1.398	(26)	O(126)-C(127)	1.395	(21)
O(126)-C(130)	1.427	(24)	C(127)-C(128)	1.479	(29)
C(128)-C(129)	1.530	(28)	C(129)-C(130)	1.434	(30)
O(131)-C(132)	1.307	(14)	O(131)-C(135)	1.306	(21)
C(132)-C(133)	1.398	(30)	C(133)-C(134)	1.398	(35)
C(134)-C(135)	1.398	(24)			

L638-52

Table S-18. Interatomic angles (°) of **5**

Ho(2)-Ho(1)-Ho(3)	60.1(1)	Ho(1)-Ho(2)-Ho(3)	59.9(1)
Ho(1)-Ho(3)-Ho(2)	60.0(1)	Ho(1)-C(11)-C(12)	74.8(6)
Ho(1)-C(11)-B(15)	71.8(6)	C(12)-C(11)-B(15)	109.0(11)
Ho(1)-C(11)-B(16)	101.2(7)	C(12)-C(11)-B(16)	62.6(9)
B(15)-C(11)-B(16)	65.2(9)	Ho(1)-C(11)-Si(1)	133.8(7)
C(12)-C(11)-Si(1)	129.5(9)	B(15)-C(11)-Si(1)	118.8(9)
B(16)-C(11)-Si(1)	124.5(8)	Ho(1)-C(12)-C(11)	72.4(5)
Ho(1)-C(12)-B(13)	72.0(6)	C(11)-C(12)-B(13)	110.2(11)
Ho(1)-C(12)-B(16)	100.9(7)	C(11)-C(12)-B(16)	64.9(9)
B(13)-C(12)-B(16)	65.8(10)	Ho(1)-C(12)-Si(2)	135.8(6)
C(11)-C(12)-Si(2)	131.1(9)	B(13)-C(12)-Si(2)	116.3(9)
B(16)-C(12)-Si(2)	122.5(8)	Ho(1)-B(13)-C(12)	74.4(7)
Ho(1)-B(13)-B(14)	74.2(8)	C(12)-B(13)-B(14)	108.8(11)
Ho(1)-B(13)-B(16)	100.1(8)	C(12)-B(13)-B(16)	61.0(9)
B(14)-B(13)-B(16)	64.3(9)	Ho(1)-B(13)-Li(1)	106.0(7)
C(12)-B(13)-Li(1)	178.9(12)	B(14)-B(13)-Li(1)	72.3(10)
B(16)-B(13)-Li(1)	119.9(12)	Ho(1)-B(14)-B(13)	71.6(8)
Ho(1)-B(14)-B(15)	69.7(8)	B(13)-B(14)-B(15)	104.5(12)
Ho(1)-B(14)-B(16)	98.2(9)	B(13)-B(14)-B(16)	63.0(9)
B(15)-B(14)-B(16)	62.0(8)	Ho(1)-B(14)-Li(1)	102.9(8)
B(13)-B(14)-Li(1)	67.8(9)	B(15)-B(14)-Li(1)	171.1(13)
B(16)-B(14)-Li(1)	115.8(9)	Ho(1)-B(14)-Li(3)	102.4(8)
B(13)-B(14)-Li(3)	172.3(13)	B(15)-B(14)-Li(3)	68.4(10)
B(16)-B(14)-Li(3)	114.1(10)	Li(1)-B(14)-Li(3)	119.0(10)
Ho(1)-B(15)-C(11)	74.1(7)	Ho(1)-B(15)-B(14)	74.2(7)
C(11)-B(15)-B(14)	107.3(11)	Ho(1)-B(15)-B(16)	101.0(8)
C(11)-B(15)-B(16)	62.1(9)	B(14)-B(15)-B(16)	62.6(8)
Ho(1)-B(15)-Li(3)	105.4(7)	C(11)-B(15)-Li(3)	177.8(12)
B(14)-B(15)-Li(3)	70.6(10)	B(16)-B(15)-Li(3)	116.1(12)
C(11)-B(16)-C(12)	52.5(8)	C(11)-B(16)-B(13)	92.1(10)
C(12)-B(16)-B(13)	53.3(9)	C(11)-B(16)-B(14)	94.9(9)
C(12)-B(16)-B(14)	94.0(9)	B(13)-B(16)-B(14)	52.8(8)
C(11)-B(16)-B(15)	52.7(8)	C(12)-B(16)-B(15)	92.2(10)
B(13)-B(16)-B(15)	92.5(9)	B(14)-B(16)-B(15)	55.5(8)
C(22)-C(21)-B(25)	109.6(12)	C(22)-C(21)-B(26)	63.6(8)
B(25)-C(21)-B(26)	67.0(10)	C(22)-C(21)-Si(3)	127.6(10)
B(25)-C(21)-Si(3)	121.4(8)	B(26)-C(21)-Si(3)	125.9(9)
C(22)-C(21)-Li(4)	68.4(9)	B(25)-C(21)-Li(4)	73.3(10)
B(26)-C(21)-Li(4)	98.7(11)	Si(3)-C(21)-Li(4)	135.4(11)
C(21)-C(22)-B(23)	113.1(11)	C(21)-C(22)-B(26)	63.1(9)
B(23)-C(22)-B(26)	68.6(10)	C(21)-C(22)-Si(4)	129.2(11)
B(23)-C(22)-Si(4)	116.9(9)	B(26)-C(22)-Si(4)	129.8(9)
C(21)-C(22)-Li(4)	70.3(9)	B(23)-C(22)-Li(4)	75.3(11)
B(26)-C(22)-Li(4)	99.5(10)	Si(4)-C(22)-Li(4)	130.7(9)
Ho(2)-B(23)-C(22)	161.3(10)	Ho(2)-B(23)-B(24)	70.8(9)
C(22)-B(23)-B(24)	102.7(12)	Ho(2)-B(23)-B(26)	125.1(9)
C(22)-B(23)-B(26)	59.4(9)	B(24)-B(23)-B(26)	59.4(9)
Ho(2)-B(23)-Li(4)	97.3(9)	C(22)-B(23)-Li(4)	64.1(10)
B(24)-B(23)-Li(4)	73.4(10)	B(26)-B(23)-Li(4)	89.9(10)
Ho(1)-B(24)-Ho(2)	87.9(5)	Ho(1)-B(24)-B(23)	146.5(9)
Ho(2)-B(24)-B(23)	72.9(8)	Ho(1)-B(24)-B(25)	79.4(7)
Ho(2)-B(24)-B(25)	155.8(9)	B(23)-B(24)-B(25)	107.3(13)
Ho(1)-B(24)-B(26)	140.4(9)	Ho(2)-B(24)-B(26)	131.7(8)
B(23)-B(24)-B(26)	64.9(9)	B(25)-B(24)-B(26)	64.2(10)

L638-53

Table S-18. Interatomic angles (continued)

Ho(1)-B(24)-Li(4)	90.1(8)	Ho(2)-B(24)-Li(4)	95.1(7)
B(23)-B(24)-Li(4)	65.3(10)	B(25)-B(24)-Li(4)	64.7(10)
B(26)-B(24)-Li(4)	88.1(11)	Ho(1)-B(25)-C(21)	155.0(8)
Ho(1)-B(25)-B(24)	66.3(8)	C(21)-B(25)-B(24)	106.7(10)
Ho(1)-B(25)-B(26)	125.5(10)	C(21)-B(25)-B(26)	60.6(9)
B(24)-B(25)-B(26)	61.5(9)	Ho(1)-B(25)-Li(4)	88.8(9)
C(21)-B(25)-Li(4)	66.3(9)	B(24)-B(25)-Li(4)	75.4(10)
B(26)-B(25)-Li(4)	92.3(9)	C(21)-B(26)-C(22)	53.4(8)
C(21)-B(26)-B(23)	93.2(10)	C(22)-B(26)-B(23)	52.0(9)
C(21)-B(26)-B(24)	94.8(11)	C(22)-B(26)-B(24)	94.2(10)
B(23)-B(26)-B(24)	55.7(8)	C(21)-B(26)-B(25)	52.4(8)
C(22)-B(26)-B(25)	91.7(10)	B(23)-B(26)-B(25)	93.9(9)
B(24)-B(26)-B(25)	54.4(9)	Ho(2)-C(31)-C(32)	73.1(7)
Ho(2)-C(31)-B(35)	72.4(7)	C(32)-C(31)-B(35)	110.3(10)
Ho(2)-C(31)-B(36)	100.3(7)	C(32)-C(31)-B(36)	63.9(9)
B(35)-C(31)-B(36)	65.4(9)	Ho(2)-C(31)-Si(5)	134.7(8)
C(32)-C(31)-Si(5)	129.5(8)	B(35)-C(31)-Si(5)	117.9(8)
B(36)-C(31)-Si(5)	124.5(10)	Ho(2)-C(32)-C(31)	74.9(7)
Ho(2)-C(32)-B(33)	73.2(8)	C(31)-C(32)-B(33)	112.1(9)
Ho(2)-C(32)-B(36)	101.3(7)	C(31)-C(32)-B(36)	64.0(9)
B(33)-C(32)-B(36)	65.9(9)	Ho(2)-C(32)-Si(6)	134.4(6)
C(31)-C(32)-Si(6)	130.5(8)	B(33)-C(32)-Si(6)	114.5(9)
B(36)-C(32)-Si(6)	123.3(10)	Ho(2)-B(33)-C(32)	73.3(8)
Ho(2)-B(33)-B(34)	72.9(9)	C(32)-B(33)-B(34)	106.4(10)
Ho(2)-B(33)-B(36)	99.2(9)	C(32)-B(33)-B(36)	60.9(8)
B(34)-B(33)-B(36)	63.0(8)	Ho(2)-B(33)-Li(2)	104.5(9)
C(32)-B(33)-Li(2)	177.7(13)	B(34)-B(33)-Li(2)	72.3(9)
B(36)-B(33)-Li(2)	119.5(11)	Ho(2)-B(34)-B(33)	71.5(8)
Ho(2)-B(34)-B(35)	72.1(9)	B(33)-B(34)-B(35)	105.7(10)
Ho(2)-B(34)-B(36)	97.9(9)	B(33)-B(34)-B(36)	61.8(8)
B(35)-B(34)-B(36)	62.4(9)	Ho(2)-B(34)-Li(1)	102.9(9)
B(33)-B(34)-Li(1)	172.3(13)	B(35)-B(34)-Li(1)	67.1(8)
B(36)-B(34)-Li(1)	115.0(9)	Ho(2)-B(34)-Li(2)	101.4(9)
B(33)-B(34)-Li(2)	66.6(9)	B(35)-B(34)-Li(2)	171.6(11)
B(36)-B(34)-Li(2)	114.4(11)	Li(1)-B(34)-Li(2)	120.3(9)
Ho(2)-B(35)-C(31)	73.2(7)	Ho(2)-B(35)-B(34)	72.6(8)
C(31)-B(35)-B(34)	105.5(10)	Ho(2)-B(35)-B(36)	98.3(7)
C(31)-B(35)-B(36)	59.8(9)	B(34)-B(35)-B(36)	62.8(9)
Ho(2)-B(35)-Li(1)	105.0(8)	C(31)-B(35)-Li(1)	176.9(11)
B(34)-B(35)-Li(1)	71.4(8)	B(36)-B(35)-Li(1)	118.5(12)
C(31)-B(36)-C(32)	52.1(8)	C(31)-B(36)-B(33)	93.4(11)
C(32)-B(36)-B(33)	53.2(8)	C(31)-B(36)-B(34)	95.8(12)
C(32)-B(36)-B(34)	94.8(10)	B(33)-B(36)-B(34)	55.2(7)
C(31)-B(36)-B(35)	54.9(8)	C(32)-B(36)-B(35)	93.7(12)
B(33)-B(36)-B(35)	95.4(10)	B(34)-B(36)-B(35)	54.8(8)
C(42)-C(41)-B(45)	112.1(10)	C(42)-C(41)-B(46)	64.3(9)
B(45)-C(41)-B(46)	68.4(10)	C(42)-C(41)-Si(7)	126.2(8)
B(45)-C(41)-Si(7)	120.8(9)	B(46)-C(41)-Si(7)	126.9(8)
C(42)-C(41)-Li(5)	68.8(8)	B(45)-C(41)-Li(5)	74.6(9)
B(46)-C(41)-Li(5)	99.8(10)	Si(7)-C(41)-Li(5)	133.2(10)
C(41)-C(42)-B(43)	110.4(11)	C(41)-C(42)-B(46)	62.6(9)
B(43)-C(42)-B(46)	65.5(9)	C(41)-C(42)-Si(8)	131.3(9)
B(43)-C(42)-Si(8)	117.0(9)	B(46)-C(42)-Si(8)	129.5(8)
C(41)-C(42)-Li(5)	70.2(8)	B(43)-C(42)-Li(5)	76.6(9)
B(46)-C(42)-Li(5)	99.7(10)	Si(8)-C(42)-Li(5)	130.7(10)

L638-54

Table S-18. Interatomic angles (continued)

Ho(3)-B(43)-C(42)	159.6(9)	Ho(3)-B(43)-B(44)	70.3(7)
C(42)-B(43)-B(44)	106.3(11)	Ho(3)-B(43)-B(46)	127.2(9)
C(42)-B(43)-B(46)	61.6(9)	B(44)-B(43)-B(46)	61.4(8)
Ho(3)-B(43)-Li(5)	96.8(6)	C(42)-B(43)-Li(5)	63.3(8)
B(44)-B(43)-Li(5)	75.5(10)	B(46)-B(43)-Li(5)	91.2(10)
Ho(2)-B(44)-Ho(3)	87.8(4)	Ho(2)-B(44)-B(43)	148.4(9)
Ho(3)-B(44)-B(43)	74.3(7)	Ho(2)-B(44)-B(45)	80.0(7)
Ho(3)-B(44)-B(45)	153.9(10)	B(43)-B(44)-B(45)	104.8(12)
Ho(2)-B(44)-B(46)	141.0(9)	Ho(3)-B(44)-B(46)	131.2(9)
B(43)-B(44)-B(46)	61.9(8)	B(45)-B(44)-B(46)	64.3(8)
Ho(2)-B(44)-Li(5)	91.9(7)	Ho(3)-B(44)-Li(5)	94.4(7)
B(43)-B(44)-Li(5)	64.4(9)	B(45)-B(44)-Li(5)	63.3(10)
B(46)-B(44)-Li(5)	85.9(10)	Ho(2)-B(45)-C(41)	156.0(10)
Ho(2)-B(45)-B(44)	65.6(6)	C(41)-B(45)-B(44)	105.7(11)
Ho(2)-B(45)-B(46)	124.0(9)	C(41)-B(45)-B(46)	59.3(9)
B(44)-B(45)-B(46)	60.6(8)	Ho(2)-B(45)-Li(5)	91.0(6)
C(41)-B(45)-Li(5)	65.1(9)	B(44)-B(45)-Li(5)	76.8(10)
B(46)-B(45)-Li(5)	91.0(10)	C(41)-B(46)-C(42)	53.1(8)
C(41)-B(46)-B(43)	93.7(11)	C(42)-B(46)-B(43)	53.0(8)
C(41)-B(46)-B(44)	95.9(10)	C(42)-B(46)-B(44)	96.2(10)
B(43)-B(46)-B(44)	56.7(8)	C(41)-B(46)-B(45)	52.3(8)
C(42)-B(46)-B(45)	92.1(11)	B(43)-B(46)-B(45)	94.7(9)
B(44)-B(46)-B(45)	55.1(8)	Ho(3)-C(51)-C(52)	74.8(7)
Ho(3)-C(51)-B(55)	73.1(8)	C(52)-C(51)-B(55)	111.8(9)
Ho(3)-C(51)-B(56)	102.5(7)	C(52)-C(51)-B(56)	64.4(9)
B(55)-C(51)-B(56)	66.5(8)	Ho(3)-C(51)-Si(9)	134.3(7)
C(52)-C(51)-Si(9)	129.0(9)	B(55)-C(51)-Si(9)	116.5(9)
B(56)-C(51)-Si(9)	122.6(10)	Ho(3)-C(52)-C(51)	72.9(7)
Ho(3)-C(52)-B(53)	73.9(7)	C(51)-C(52)-B(53)	110.8(10)
Ho(3)-C(52)-B(56)	101.3(7)	C(51)-C(52)-B(56)	64.0(9)
B(53)-C(52)-B(56)	65.7(9)	Ho(3)-C(52)-Si(10)	136.3(7)
C(51)-C(52)-Si(10)	131.0(8)	B(53)-C(52)-Si(10)	114.9(8)
B(56)-C(52)-Si(10)	121.6(9)	Ho(3)-B(53)-C(52)	73.1(7)
Ho(3)-B(53)-B(54)	72.7(8)	C(52)-B(53)-B(54)	106.8(9)
Ho(3)-B(53)-B(56)	99.4(7)	C(52)-B(53)-B(56)	61.9(9)
B(54)-B(53)-B(56)	62.8(9)	Ho(3)-B(53)-Li(3)	102.1(8)
C(52)-B(53)-Li(3)	175.2(12)	B(54)-B(53)-Li(3)	71.4(9)
B(56)-B(53)-Li(3)	119.7(12)	Ho(3)-B(54)-B(53)	72.2(8)
Ho(3)-B(54)-B(55)	70.7(8)	B(53)-B(54)-B(55)	105.5(10)
Ho(3)-B(54)-B(56)	98.9(9)	B(53)-B(54)-B(56)	62.3(9)
B(55)-B(54)-B(56)	63.0(8)	Ho(3)-B(54)-Li(2)	101.8(9)
B(53)-B(54)-Li(2)	170.2(11)	B(55)-B(54)-Li(2)	64.9(8)
B(56)-B(54)-Li(2)	112.2(10)	Ho(3)-B(54)-Li(3)	100.5(9)
B(53)-B(54)-Li(3)	67.8(8)	B(55)-B(54)-Li(3)	170.6(14)
B(56)-B(54)-Li(3)	116.6(10)	Li(2)-B(54)-Li(3)	121.5(10)
Ho(3)-B(55)-C(51)	73.0(8)	Ho(3)-B(55)-B(54)	73.6(9)
C(51)-B(55)-B(54)	105.0(10)	Ho(3)-B(55)-B(56)	100.1(8)
C(51)-B(55)-B(56)	60.8(8)	B(54)-B(55)-B(56)	62.0(8)
Ho(3)-B(55)-Li(2)	107.0(9)	C(51)-B(55)-Li(2)	178.7(11)
B(54)-B(55)-Li(2)	73.8(9)	B(56)-B(55)-Li(2)	118.0(11)
C(51)-B(56)-C(52)	51.7(8)	C(51)-B(56)-B(53)	91.5(11)
C(52)-B(56)-B(53)	52.3(8)	C(51)-B(56)-B(54)	93.7(10)
C(52)-B(56)-B(54)	93.7(11)	B(53)-B(56)-B(54)	54.9(8)
C(51)-B(56)-B(55)	52.7(8)	C(52)-B(56)-B(55)	92.0(11)
B(53)-B(56)-B(55)	94.4(10)	B(54)-B(56)-B(55)	55.0(7)

L638-55

Table S-18. Interatomic angles (continued)

C(62)-C(61)-B(65)	110.2(11)	C(62)-C(61)-B(66)	62.0(9)
B(65)-C(61)-B(66)	67.4(9)	C(62)-C(61)-Si(11)	127.2(10)
B(65)-C(61)-Si(11)	120.4(9)	B(66)-C(61)-Si(11)	124.8(8)
C(62)-C(61)-Li(6)	69.7(8)	B(65)-C(61)-Li(6)	74.9(10)
B(66)-C(61)-Li(6)	99.4(10)	Si(11)-C(61)-Li(6)	135.8(9)
C(61)-C(62)-B(63)	112.7(12)	C(61)-C(62)-B(66)	65.4(9)
B(63)-C(62)-B(66)	67.2(10)	C(61)-C(62)-Si(12)	129.7(10)
B(63)-C(62)-Si(12)	117.0(8)	B(66)-C(62)-Si(12)	129.6(9)
C(61)-C(62)-Li(6)	69.3(8)	B(63)-C(62)-Li(6)	76.0(10)
B(66)-C(62)-Li(6)	100.8(11)	Si(12)-C(62)-Li(6)	129.5(11)
Ho(1)-B(63)-C(62)	162.2(9)	Ho(1)-B(63)-B(64)	69.7(8)
C(62)-B(63)-B(64)	104.5(10)	Ho(1)-B(63)-B(66)	125.3(10)
C(62)-B(63)-B(66)	59.8(9)	B(64)-B(63)-B(66)	61.3(9)
Ho(1)-B(63)-Li(6)	98.5(8)	C(62)-B(63)-Li(6)	63.8(9)
B(64)-B(63)-Li(6)	74.9(9)	B(66)-B(63)-Li(6)	91.3(9)
Ho(1)-B(64)-Ho(3)	87.8(4)	Ho(1)-B(64)-B(63)	75.4(7)
Ho(3)-B(64)-B(63)	151.2(9)	Ho(1)-B(64)-B(65)	156.4(8)
Ho(3)-B(64)-B(65)	80.7(8)	B(63)-B(64)-B(65)	105.7(12)
Ho(1)-B(64)-B(66)	131.9(8)	Ho(3)-B(64)-B(66)	139.8(8)
B(63)-B(64)-B(66)	63.1(10)	B(65)-B(64)-B(66)	64.3(9)
Ho(1)-B(64)-Li(6)	97.1(7)	Ho(3)-B(64)-Li(6)	94.7(7)
B(63)-B(64)-Li(6)	65.1(9)	B(65)-B(64)-Li(6)	63.7(9)
B(66)-B(64)-Li(6)	87.2(10)	Ho(3)-B(65)-C(61)	157.8(9)
Ho(3)-B(65)-B(64)	65.2(8)	C(61)-B(65)-B(64)	106.5(12)
Ho(3)-B(65)-B(66)	122.4(9)	C(61)-B(65)-B(66)	61.4(9)
B(64)-B(65)-B(66)	60.6(8)	Ho(3)-B(65)-Li(6)	92.9(8)
C(61)-B(65)-Li(6)	64.9(10)	B(64)-B(65)-Li(6)	76.0(10)
B(66)-B(65)-Li(6)	91.7(10)	C(61)-B(66)-C(62)	52.6(8)
C(61)-B(66)-B(63)	92.8(10)	C(62)-B(66)-B(63)	53.0(9)
C(61)-B(66)-B(64)	94.4(9)	C(62)-B(66)-B(64)	95.0(10)
B(63)-B(66)-B(64)	55.6(9)	C(61)-B(66)-B(65)	51.2(8)
C(62)-B(66)-B(65)	91.1(9)	B(63)-B(66)-B(65)	94.0(9)
B(64)-B(66)-B(65)	55.2(8)	Ho(1)-O(10)-Ho(2)	118.5(3)
Ho(1)-O(10)-Ho(3)	119.0(3)	Ho(2)-O(10)-Ho(3)	120.0(3)
C(11)-Si(1)-C(71)	110.4(7)	C(11)-Si(1)-C(72)	112.4(7)
C(71)-Si(1)-C(72)	109.7(7)	C(11)-Si(1)-C(73)	109.4(6)
C(71)-Si(1)-C(73)	107.9(7)	C(72)-Si(1)-C(73)	106.9(8)
C(12)-Si(2)-C(74)	117.1(7)	C(12)-Si(2)-C(75)	110.0(5)
C(74)-Si(2)-C(75)	105.9(8)	C(12)-Si(2)-C(76)	107.2(7)
C(74)-Si(2)-C(76)	108.1(7)	C(75)-Si(2)-C(76)	108.3(7)
C(21)-Si(3)-C(77)	112.6(8)	C(21)-Si(3)-C(78)	111.1(8)
C(77)-Si(3)-C(78)	110.5(11)	C(21)-Si(3)-C(79)	110.4(7)
C(77)-Si(3)-C(79)	106.5(8)	C(78)-Si(3)-C(79)	105.3(8)
C(22)-Si(4)-C(80)	112.1(7)	C(22)-Si(4)-C(81)	107.0(8)
C(80)-Si(4)-C(81)	106.3(8)	C(22)-Si(4)-C(82)	113.6(7)
C(80)-Si(4)-C(82)	111.1(10)	C(81)-Si(4)-C(82)	106.2(8)
C(31)-Si(5)-C(83)	110.4(6)	C(31)-Si(5)-C(84)	111.7(8)
C(83)-Si(5)-C(84)	107.0(8)	C(31)-Si(5)-C(85)	114.0(7)
C(83)-Si(5)-C(85)	104.1(9)	C(84)-Si(5)-C(85)	109.2(8)
C(32)-Si(6)-C(86)	108.2(7)	C(32)-Si(6)-C(87)	109.8(6)
C(86)-Si(6)-C(87)	107.8(8)	C(32)-Si(6)-C(88)	113.6(7)
C(86)-Si(6)-C(88)	110.2(8)	C(87)-Si(6)-C(88)	107.1(7)
C(41)-Si(7)-C(89)	109.7(7)	C(41)-Si(7)-C(90)	112.7(7)
C(89)-Si(7)-C(90)	107.5(8)	C(41)-Si(7)-C(91)	112.1(6)
C(89)-Si(7)-C(91)	107.4(8)	C(90)-Si(7)-C(91)	107.3(8)

L638-56

Table S-18. Interatomic angles (continued)

C(42)-Si(8)-C(92)	107.6(6)	C(42)-Si(8)-C(93)	114.0(8)
C(92)-Si(8)-C(93)	107.4(8)	C(42)-Si(8)-C(94)	113.0(7)
C(92)-Si(8)-C(94)	104.8(9)	C(93)-Si(8)-C(94)	109.5(8)
C(51)-Si(9)-C(95)	114.4(8)	C(51)-Si(9)-C(96)	110.5(7)
C(95)-Si(9)-C(96)	108.5(9)	C(51)-Si(9)-C(97)	110.1(7)
C(95)-Si(9)-C(97)	103.6(9)	C(96)-Si(9)-C(97)	109.5(9)
C(52)-Si(10)-C(98)	116.1(6)	C(52)-Si(10)-C(99)	108.7(6)
C(98)-Si(10)-C(99)	106.7(9)	C(52)-Si(10)-C(100)	110.4(8)
C(98)-Si(10)-C(100)	106.9(9)	C(99)-Si(10)-C(100)	107.7(8)
C(61)-Si(11)-C(101)	110.7(7)	C(61)-Si(11)-C(102)	111.1(7)
C(101)-Si(11)-C(102)	106.0(7)	C(61)-Si(11)-C(103)	112.9(6)
C(101)-Si(11)-C(103)	105.5(7)	C(102)-Si(11)-C(103)	110.3(9)
C(62)-Si(12)-C(104)	110.6(8)	C(62)-Si(12)-C(105)	107.4(8)
C(104)-Si(12)-C(105)	108.3(7)	C(62)-Si(12)-C(106)	114.6(7)
C(104)-Si(12)-C(106)	110.2(9)	C(105)-Si(12)-C(106)	105.5(9)
B(13)-Li(1)-B(14)	39.9(6)	B(13)-Li(1)-B(34)	132.0(12)
B(14)-Li(1)-B(34)	111.2(9)	B(13)-Li(1)-B(35)	119.8(12)
B(14)-Li(1)-B(35)	132.1(11)	B(34)-Li(1)-B(35)	41.5(6)
B(13)-Li(1)-O(121)	111.6(9)	B(14)-Li(1)-O(121)	111.6(10)
B(34)-Li(1)-O(121)	115.7(12)	B(35)-Li(1)-O(121)	116.0(11)
B(33)-Li(2)-B(34)	41.1(6)	B(33)-Li(2)-B(54)	132.1(15)
B(34)-Li(2)-B(54)	108.1(11)	B(33)-Li(2)-B(55)	121.5(14)
B(34)-Li(2)-B(55)	130.5(15)	B(54)-Li(2)-B(55)	41.3(6)
B(33)-Li(2)-O(126)	114.5(13)	B(34)-Li(2)-O(126)	114.3(13)
B(54)-Li(2)-O(126)	112.1(13)	B(55)-Li(2)-O(126)	114.0(13)
B(14)-Li(3)-B(15)	41.0(7)	B(14)-Li(3)-B(53)	133.8(12)
B(15)-Li(3)-B(53)	122.3(13)	B(14)-Li(3)-B(54)	110.0(10)
B(15)-Li(3)-B(54)	131.8(13)	B(53)-Li(3)-B(54)	40.8(6)
B(14)-Li(3)-O(131)	109.7(11)	B(15)-Li(3)-O(131)	109.4(10)
B(53)-Li(3)-O(131)	116.0(12)	B(54)-Li(3)-O(131)	118.0(14)
Li(5)-Li(4)-Li(6)	61.0(8)	C(21)-Li(4)-O(110)	151.1(18)
C(22)-Li(4)-O(110)	139.5(13)	B(23)-Li(4)-O(110)	132.4(13)
B(24)-Li(4)-O(110)	142.0(16)	B(25)-Li(4)-O(110)	150.9(14)
Li(5)-Li(4)-O(110)	38.4(8)	Li(6)-Li(4)-O(110)	38.1(7)
Li(4)-Li(5)-Li(6)	60.3(8)	C(41)-Li(5)-O(110)	153.0(14)
C(42)-Li(5)-O(110)	141.6(14)	B(43)-Li(5)-O(110)	134.6(12)
B(44)-Li(5)-O(110)	140.2(11)	B(45)-Li(5)-O(110)	148.7(12)
Li(4)-Li(5)-O(110)	38.3(7)	Li(6)-Li(5)-O(110)	37.7(7)
Li(4)-Li(6)-Li(5)	58.7(7)	C(61)-Li(6)-O(110)	156.7(14)
C(62)-Li(6)-O(110)	145.8(15)	B(63)-Li(6)-O(110)	132.0(11)
B(64)-Li(6)-O(110)	134.9(14)	B(65)-Li(6)-O(110)	146.0(14)
Li(4)-Li(6)-O(110)	37.3(6)	Li(5)-Li(6)-O(110)	37.0(7)
Li(4)-O(110)-Li(5)	103.3(12)	Li(4)-O(110)-Li(6)	104.5(11)
Li(5)-O(110)-Li(6)	105.3(12)	Li(4)-O(110)-C(111)	118.0(12)
Li(5)-O(110)-C(111)	115.8(10)	Li(6)-O(110)-C(111)	108.6(12)
Li(6)-C(111)-O(110)	40.1(8)	Li(1)-O(121)-C(122)	123.5(14)
Li(1)-O(121)-C(125)	125.1(11)	Li(2)-O(126)-C(127)	126.3(13)
Li(2)-O(126)-C(130)	126.7(13)	Li(3)-O(131)-C(132)	122.5(14)
Li(3)-O(131)-C(135)	125.9(12)		

L638-57

Table S-19. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x 10^3$) of **5**

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ho(1)	29(1)	28(1)	34(1)	-6(1)	0(1)	2(1)
Ho(2)	32(1)	30(1)	26(1)	-12(1)	1(1)	0(1)
Ho(3)	28(1)	28(1)	26(1)	-10(1)	-1(1)	0(1)
Li(1)	25(11)	45(13)	47(13)	3(10)	26(10)	2(11)
Li(2)	58(15)	90(19)	51(15)	-51(15)	9(12)	-13(13)
Li(3)	49(15)	58(16)	57(15)	-4(12)	-11(12)	4(12)
Li(4)	67(17)	42(15)	84(19)	-1(13)	-9(15)	-5(13)
Li(5)	51(14)	27(12)	59(15)	9(11)	-4(12)	12(11)
Li(6)	56(15)	72(17)	32(13)	-21(13)	-18(11)	9(12)
Si(1)	46(2)	56(3)	58(3)	1(2)	14(2)	-5(2)
Si(2)	45(2)	56(3)	63(3)	0(2)	-11(2)	16(2)
Si(3)	55(3)	85(3)	99(4)	-41(3)	-20(3)	2(3)
Si(4)	107(4)	59(3)	48(3)	-45(3)	-6(2)	-5(2)
Si(5)	97(3)	75(3)	25(2)	-52(3)	-6(2)	6(2)
Si(6)	49(3)	73(3)	63(3)	-21(2)	28(2)	-14(2)
Si(7)	68(3)	41(2)	63(3)	-9(2)	7(2)	-18(2)
Si(8)	71(3)	36(2)	62(3)	-7(2)	-8(2)	10(2)
Si(9)	47(3)	67(3)	79(3)	-14(2)	-28(2)	2(2)
Si(10)	88(3)	83(3)	29(2)	-53(3)	-4(2)	1(2)
Si(11)	82(3)	53(3)	46(2)	-33(2)	5(2)	11(2)
Si(12)	49(3)	93(4)	95(4)	-39(3)	3(3)	18(3)
C(11)	50(8)	36(8)	37(8)	-9(7)	2(6)	-3(6)
C(12)	44(8)	28(7)	43(8)	-8(6)	10(6)	3(6)
B(13)	51(10)	32(9)	43(10)	-7(8)	-17(8)	-2(7)
B(14)	28(8)	28(8)	54(10)	7(7)	5(7)	2(7)
B(15)	46(10)	26(8)	46(10)	-2(7)	-1(8)	-2(7)
B(16)	48(10)	33(9)	58(11)	-7(8)	7(8)	4(8)
C(21)	36(8)	44(8)	51(8)	-21(7)	-13(7)	4(7)
C(22)	64(10)	40(8)	41(8)	-27(7)	-14(7)	3(6)
B(23)	58(11)	46(10)	34(9)	-5(9)	-12(8)	8(8)
B(24)	58(10)	43(10)	37(9)	-16(8)	-13(8)	26(8)
B(25)	47(10)	26(8)	47(10)	-14(7)	-14(8)	18(7)
B(26)	40(9)	35(9)	71(12)	-19(8)	-19(8)	4(8)
C(31)	58(9)	45(8)	34(8)	-32(7)	7(7)	-4(6)
C(32)	63(9)	37(8)	30(7)	-30(7)	1(7)	6(6)
B(33)	40(9)	37(9)	37(9)	-21(7)	5(7)	-1(7)
B(34)	63(11)	44(10)	33(9)	-32(9)	-8(8)	3(7)
B(35)	60(10)	35(9)	37(9)	-30(8)	2(8)	1(7)
B(36)	49(10)	62(11)	37(9)	-30(9)	3(8)	8(8)
C(41)	43(8)	41(8)	35(8)	-13(7)	6(6)	-3(6)
C(42)	41(8)	35(8)	47(8)	-12(6)	0(6)	2(6)
B(43)	19(8)	44(9)	45(9)	-5(7)	0(7)	5(8)
B(44)	36(9)	37(9)	51(10)	-17(7)	4(7)	6(8)
B(45)	50(10)	49(10)	33(9)	-22(8)	14(7)	-7(8)
B(46)	52(10)	31(9)	42(9)	-7(8)	4(8)	-9(7)
C(51)	52(9)	43(8)	44(8)	-25(7)	-13(7)	4(7)
C(52)	46(8)	39(8)	35(7)	-24(7)	-1(6)	-5(6)
B(53)	43(9)	41(9)	29(8)	-34(8)	-1(7)	-6(7)
B(54)	41(9)	52(10)	40(9)	-23(8)	-2(7)	2(8)
B(55)	48(9)	27(8)	30(8)	-14(7)	-11(7)	-3(7)
B(56)	41(9)	62(11)	31(9)	-22(8)	-4(7)	3(8)
C(61)	50(8)	42(8)	25(7)	-26(7)	11(6)	4(6)
C(62)	41(8)	56(9)	45(8)	-19(7)	3(7)	-2(7)
B(63)	23(8)	56(10)	53(10)	-18(8)	11(7)	-11(8)

L638-58

Table S-19. Anisotropic displacement coefficients (contined)

B(64)	54(10)	16(7)	34(8)	-10(7)	20(7)	2(6)
B(65)	68(11)	32(9)	25(8)	-16(8)	-8(8)	-1(7)
B(66)	53(10)	38(9)	44(10)	-23(8)	8(8)	4(7)
C(71)	96(14)	65(11)	88(13)	12(10)	25(11)	-3(10)
C(72)	54(10)	92(13)	89(13)	-12(9)	26(9)	2(10)
C(73)	71(12)	121(15)	47(10)	-9(11)	22(9)	-10(10)
C(74)	48(10)	110(15)	98(14)	-7(10)	-10(10)	11(11)
C(75)	53(9)	65(10)	57(10)	-1(8)	-14(8)	6(8)
C(76)	81(12)	60(11)	85(12)	-1(9)	-21(10)	19(9)
C(77)	101(16)	142(19)	136(19)	-47(14)	-51(14)	-19(15)
C(78)	113(17)	133(19)	175(23)	-81(15)	-3(16)	-2(17)
C(79)	49(10)	112(15)	129(16)	-27(10)	-24(10)	-16(13)
C(80)	189(22)	106(15)	57(11)	-86(16)	-13(13)	10(11)
C(81)	148(18)	69(12)	97(14)	-39(12)	27(13)	-42(11)
C(82)	175(22)	110(16)	94(15)	-80(16)	0(14)	-21(13)
C(83)	110(15)	132(17)	71(12)	-46(13)	-51(11)	14(12)
C(84)	155(18)	119(16)	52(11)	-84(15)	13(11)	8(10)
C(85)	148(17)	124(15)	43(10)	-98(14)	6(10)	-16(10)
C(86)	83(13)	113(15)	97(14)	-47(12)	51(11)	-27(12)
C(87)	61(11)	89(13)	102(14)	-18(10)	14(10)	-8(11)
C(88)	122(16)	95(14)	69(12)	-33(12)	34(11)	-33(10)
C(89)	131(16)	64(11)	94(14)	-34(11)	50(12)	-35(10)
C(90)	91(14)	79(13)	97(14)	12(11)	19(11)	-22(11)
C(91)	134(16)	53(10)	73(12)	-44(11)	-1(11)	-18(9)
C(92)	150(17)	62(11)	63(11)	-35(12)	20(11)	9(9)
C(93)	74(12)	80(13)	102(14)	8(10)	-12(11)	34(11)
C(94)	153(18)	59(11)	82(13)	-40(12)	0(12)	19(10)
C(95)	94(15)	82(14)	173(21)	-16(12)	-71(14)	35(14)
C(96)	69(12)	157(20)	120(16)	-46(13)	-51(12)	-5(14)
C(97)	47(11)	142(18)	127(17)	14(11)	-12(11)	-25(14)
C(98)	157(20)	167(21)	70(13)	-68(17)	-11(13)	56(14)
C(99)	108(14)	116(15)	48(10)	-60(12)	36(9)	-18(10)
C(100)	187(22)	185(21)	38(10)	-134(19)	-5(12)	-16(12)
C(101)	129(15)	50(10)	71(12)	-39(10)	-32(11)	24(9)
C(102)	115(15)	65(12)	101(14)	-41(11)	4(12)	12(10)
C(103)	146(18)	120(16)	50(11)	-63(14)	29(11)	1(10)
C(104)	71(12)	126(17)	120(16)	-34(12)	52(11)	19(13)
C(105)	72(13)	133(17)	147(19)	-66(13)	-27(12)	31(14)
C(106)	73(12)	112(15)	156(19)	-68(12)	-7(12)	17(14)
O(10)	21(4)	43(5)	12(4)	-9(4)	0(3)	6(3)
O(110)	43(5)	41(5)	38(5)	-19(4)	-5(4)	-3(4)
C(111)	83(14)	156(20)	73(13)	-27(14)	-12(10)	-49(13)
O(121)	97(9)	55(7)	130(10)	-24(7)	55(8)	20(7)
O(126)	146(11)	102(9)	53(7)	-103(9)	-3(7)	0(6)
C(127)	131(16)	112(15)	49(10)	-86(14)	7(10)	6(10)
C(128)	128(18)	120(19)	139(21)	-80(16)	-41(15)	37(16)
C(129)	140(19)	99(16)	100(16)	-63(14)	-8(14)	-26(13)
C(130)	142(18)	134(18)	87(14)	-112(16)	-29(12)	13(13)
O(131)	64(7)	40(6)	124(9)	-21(6)	-8(7)	-12(6)
C(132)	236(38)	70(19)	667(85)	-53(23)	8(44)	-160(33)
C(133)	255(43)	116(26)	289(46)	22(26)	-47(35)	-94(28)
C(134)	449(68)	124(28)	361(52)	-190(38)	227(50)	-87(31)
C(135)	94(20)	175(31)	500(63)	-37(21)	14(28)	-187(37)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})]$$

L638-59

Table S-20. H-Atom coordinates ($x10^4$) and isotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) of **5**

	x	y	z	U
H(13)	784	5889	1644	80
H(14)	2386	5804	2634	80
H(15)	1207	5676	3567	80
H(16)	258	7126	2670	80
H(23)	2853	2263	811	80
H(24)	1992	3985	1650	80
H(25)	46	4108	1844	80
H(26)	781	3736	575	80
H(33)	5522	3652	1696	80
H(34)	3832	5082	1989	80
H(36)	4652	4785	716	80
H(43)	4369	1555	3470	80
H(44)	4336	2586	2428	80
H(45)	4706	1312	1463	80
H(46)	6021	748	2508	80
H(53)	2862	4815	4164	80
H(54)	3829	5029	2994	80
H(55)	5447	3037	3056	80
H(56)	4980	4270	4238	80
H(63)	189	3821	3186	80
H(64)	1978	3864	3395	80
H(65)	2648	2466	4236	80
H(66)	763	3556	4474	80
H(71A)	-1252	7494	3432	80
H(71B)	-1876	7252	3019	80
H(71C)	-2064	7283	3670	80
H(72A)	-1149	4678	3381	80
H(72B)	-1994	5410	3637	80
H(72C)	-1806	5378	2986	80
H(73A)	5	5184	4220	80
H(73B)	-46	6133	4240	80
H(73C)	-872	5914	4444	80
H(74A)	-2399	6242	1697	80
H(74B)	-1823	5397	2013	80
H(74C)	-2177	6272	2337	80
H(75A)	22	5769	950	80
H(75B)	-405	5086	1080	80
H(75C)	-985	5959	796	80
H(76A)	-640	7480	1622	80
H(76B)	-1620	7610	1440	80
H(76C)	-1401	7643	2079	80
H(77A)	-342	2188	265	80
H(77B)	-1381	2645	373	80
H(77C)	-789	3192	262	80
H(78A)	-230	1220	1410	80
H(78B)	-617	1770	1952	80
H(78C)	-1272	1714	1481	80
H(79A)	-1507	4186	1326	80
H(79B)	-2106	3643	1428	80
H(79C)	-1451	3699	1898	80

L638-60

Table S-20. H-Atom coordinates (continued)

H(80A)	1654	2234	-313	80
H(80B)	1565	1381	-510	80
H(80C)	727	2122	-254	80
H(81A)	3207	1166	414	80
H(81B)	3094	521	860	80
H(81C)	3085	329	214	80
H(82A)	1337	331	1018	80
H(82B)	529	851	631	80
H(82C)	1367	110	375	80
H(83A)	1970	4588	76	80
H(83B)	2505	5169	-90	80
H(83C)	2267	4629	-553	80
H(84A)	4921	3428	-446	80
H(84B)	4184	3886	-894	80
H(84C)	4422	4427	-431	80
H(85A)	2830	2712	-3	80
H(85B)	3084	2843	-628	80
H(85C)	3833	2291	-212	80
H(86A)	6486	3508	716	80
H(86B)	7015	2756	305	80
H(86C)	6111	3471	113	80
H(87A)	6540	2142	1571	80
H(87B)	6149	1447	1415	80
H(87C)	7031	1444	1117	80
H(88A)	5318	1442	292	80
H(88B)	5330	2104	-173	80
H(88C)	6235	1389	19	80
H(89A)	4891	177	772	80
H(89B)	5871	12	974	80
H(89C)	5660	-723	680	80
H(90A)	6453	-1866	1652	80
H(90B)	6671	-1129	1938	80
H(90C)	6112	-1577	2267	80
H(91A)	3817	-711	1377	80
H(91B)	4617	-1584	1263	80
H(91C)	4253	-1331	1879	80
H(92A)	4499	355	4070	80
H(92B)	3706	106	3856	80
H(92C)	4487	-554	4205	80
H(93A)	6335	-492	3519	80
H(93B)	6271	-1364	3703	80
H(93C)	6480	-1216	3073	80
H(94A)	4911	-1655	2696	80
H(94B)	4748	-1833	3329	80
H(94C)	3967	-1173	2980	80
H(95A)	5733	959	3964	80
H(95B)	6594	770	4332	80
H(95C)	5634	1243	4597	80
H(96A)	6148	2755	4956	80
H(96B)	7114	2182	4738	80
H(96C)	6641	3117	4508	80
H(97A)	6558	1710	3128	80
H(97B)	6906	2427	3304	80
H(97C)	7379	1491	3534	80
H(98A)	4228	1966	5138	80

L638-61

Table S-20. H-Atom coordinates (continued)

H(98B)	5088	2164	5270	80
H(98C)	4300	2388	5714	80
H(99A)	2398	4349	4971	80
H(99B)	2465	3395	4966	80
H(99C)	2586	3816	5531	80
H(10A)	4078	4734	5210	80
H(10B)	4196	4185	5760	80
H(10C)	4985	3960	5317	80
H(10D)	2626	1800	5217	80
H(10E)	2735	868	5395	80
H(10F)	3205	1018	4843	80
H(10G)	2334	35	4168	80
H(10H)	1961	-152	4748	80
H(10I)	1299	248	4251	80
H(10J)	631	2317	5304	80
H(10K)	164	1772	4999	80
H(10L)	826	1372	5496	80
H(10M)	-1737	3213	4370	80
H(10N)	-860	3099	4702	80
H(10O)	-1219	3824	4248	80
H(10P)	-653	2447	2817	80
H(10Q)	-1599	2818	3116	80
H(10R)	-1046	3405	3016	80
H(10S)	-74	1022	3629	80
H(10T)	-172	1209	4278	80
H(10U)	-1034	1410	3910	80
H(11A)	2071	244	2167	80
H(11B)	2202	201	2822	80
H(11C)	1257	734	2568	80
H(12A)	1484	7526	1998	80
H(12B)	1209	7477	1375	80
H(12C)	2197	8353	1805	80
H(12D)	1474	8623	1331	80
H(12E)	3051	8017	1082	80
H(12F)	2340	7927	670	80
H(12G)	2945	6621	823	80
H(12H)	3546	6730	1305	80
H(12I)	5279	5443	1709	80
H(12J)	6296	5139	1868	80
H(12K)	4926	6642	2190	80
H(12L)	5931	6509	2067	80
H(12M)	5255	6464	3097	80
H(12N)	6280	6209	2964	80
H(13A)	6503	4882	2988	80
H(13B)	5558	5149	3280	80
H(13C)	1398	7122	4060	80
H(13D)	1271	7391	3427	80
H(13E)	1861	8052	4355	80
H(13F)	1460	8452	3776	80
H(13G)	3068	8032	3951	80
H(13H)	2734	7962	3343	80
H(13I)	3569	6643	3435	80
H(13J)	3377	6704	4082	80

L638-62

Table S-21. Bond lengths (Å) and bond angles (°) of **6**

Mn(1)-Mn(2)	2.665	(2)	Mn(1)-C(11)	2.227	(6)
Mn(1)-C(12)	2.131	(7)	Mn(1)-B(13)	2.137	(8)
Mn(1)-B(14)	2.193	(8)	Mn(1)-B(15)	2.219	(8)
Mn(1)-C(21)	2.220	(6)	Mn(1)-C(22)	2.090	(6)
Mn(1)-B(23)	2.123	(8)	Mn(1)-B(24)	2.225	(7)
Mn(1)-B(25)	2.274	(8)	Mn(2)-B(13)	2.458	(8)
Mn(2)-B(14)	2.340	(8)	Mn(2)-B(23)	2.485	(7)
Mn(2)-B(24)	2.327	(7)	Mn(2)-N(51)	2.246	(5)
Mn(2)-N(52)	2.261	(5)	Si(1)-C(11)	1.881	(7)
Si(1)-C(31)	1.850	(8)	Si(1)-C(32)	1.848	(9)
Si(1)-C(33)	1.849	(10)	Si(2)-C(12)	1.887	(7)
Si(2)-C(34)	1.872	(8)	Si(2)-C(35)	1.867	(8)
Si(2)-C(36)	1.846	(8)	Si(3)-C(21)	1.882	(6)
Si(3)-C(37)	1.856	(8)	Si(3)-C(38)	1.848	(7)
Si(3)-C(39)	1.857	(7)	Si(4)-C(22)	1.873	(7)
Si(4)-C(40)	1.855	(8)	Si(4)-C(41)	1.858	(8)
Si(4)-C(42)	1.850	(8)	C(11)-C(12)	1.484	(9)
C(11)-B(15)	1.555	(12)	C(11)-B(16)	1.735	(10)
C(12)-B(13)	1.576	(10)	C(12)-B(16)	1.749	(11)
B(13)-B(14)	1.689	(12)	B(13)-B(16)	1.764	(11)
B(14)-B(15)	1.651	(11)	B(14)-B(16)	1.737	(12)
B(15)-B(16)	1.804	(12)	C(21)-C(22)	1.495	(9)
C(21)-B(25)	1.553	(10)	C(21)-B(26)	1.738	(10)
C(22)-B(23)	1.582	(9)	C(22)-B(26)	1.726	(9)
B(23)-B(24)	1.699	(11)	B(23)-B(26)	1.751	(11)
B(24)-B(25)	1.641	(11)	B(24)-B(26)	1.760	(11)
B(25)-B(26)	1.802	(11)	N(51)-C(53)	1.482	(8)
N(51)-C(55)	1.470	(9)	N(51)-C(56)	1.475	(8)
N(52)-C(54)	1.486	(8)	N(52)-C(57)	1.480	(9)
N(52)-C(58)	1.475	(9)	C(53)-C(54)	1.501	(10)

Mn(2)-Mn(1)-C(11)	124.4(2)	Mn(2)-Mn(1)-C(12)	103.5(2)
C(11)-Mn(1)-C(12)	39.8(2)	Mn(2)-Mn(1)-B(13)	60.4(2)
C(11)-Mn(1)-B(13)	71.0(3)	C(12)-Mn(1)-B(13)	43.3(3)
Mn(2)-Mn(1)-B(14)	56.6(2)	C(11)-Mn(1)-B(14)	70.7(3)
C(12)-Mn(1)-B(14)	73.2(3)	B(13)-Mn(1)-B(14)	45.9(3)
Mn(2)-Mn(1)-B(15)	98.7(2)	C(11)-Mn(1)-B(15)	40.9(3)
C(12)-Mn(1)-B(15)	70.8(3)	B(13)-Mn(1)-B(15)	75.3(3)
B(14)-Mn(1)-B(15)	43.9(3)	Mn(2)-Mn(1)-C(21)	124.4(2)
C(11)-Mn(1)-C(21)	111.2(2)	C(12)-Mn(1)-C(21)	121.2(2)
B(13)-Mn(1)-C(21)	153.2(3)	B(14)-Mn(1)-C(21)	160.9(3)
B(15)-Mn(1)-C(21)	124.8(3)	Mn(2)-Mn(1)-C(22)	105.3(2)
C(11)-Mn(1)-C(22)	116.7(2)	C(12)-Mn(1)-C(22)	151.0(2)
B(13)-Mn(1)-C(22)	163.6(3)	B(14)-Mn(1)-C(22)	120.9(3)
B(15)-Mn(1)-C(22)	101.0(3)	C(21)-Mn(1)-C(22)	40.5(2)
Mn(2)-Mn(1)-B(23)	61.3(2)	C(11)-Mn(1)-B(23)	147.4(3)
C(12)-Mn(1)-B(23)	164.8(2)	B(13)-Mn(1)-B(23)	121.5(3)
B(14)-Mn(1)-B(23)	96.2(3)	B(15)-Mn(1)-B(23)	109.3(3)
C(21)-Mn(1)-B(23)	71.9(3)	C(22)-Mn(1)-B(23)	44.1(3)
Mn(2)-Mn(1)-B(24)	55.9(2)	C(11)-Mn(1)-B(24)	166.6(3)
C(12)-Mn(1)-B(24)	127.5(3)	B(13)-Mn(1)-B(24)	101.4(3)
B(14)-Mn(1)-B(24)	112.4(3)	B(15)-Mn(1)-B(24)	149.4(3)
C(21)-Mn(1)-B(24)	70.5(2)	C(22)-Mn(1)-B(24)	73.6(3)
B(23)-Mn(1)-B(24)	45.9(3)	Mn(2)-Mn(1)-B(25)	96.6(2)
C(11)-Mn(1)-B(25)	130.1(3)	C(12)-Mn(1)-B(25)	109.9(3)

L638-63

Table S-21. Bond lengths and bond angles (continued)

B(13)-Mn(1)-B(25)	116.8(3)	B(14)-Mn(1)-B(25)	152.0(3)
B(15)-Mn(1)-B(25)	164.1(3)	C(21)-Mn(1)-B(25)	40.4(2)
C(22)-Mn(1)-B(25)	70.4(3)	B(23)-Mn(1)-B(25)	74.3(3)
B(24)-Mn(1)-B(25)	42.8(3)	Mn(1)-Mn(2)-B(13)	49.1(2)
Mn(1)-Mn(2)-B(14)	51.5(2)	B(13)-Mn(2)-B(14)	41.1(3)
Mn(1)-Mn(2)-B(23)	48.5(2)	B(13)-Mn(2)-B(23)	97.5(3)
B(14)-Mn(2)-B(23)	83.4(3)	Mn(1)-Mn(2)-B(24)	52.4(2)
B(13)-Mn(2)-B(24)	89.7(3)	B(14)-Mn(2)-B(24)	103.7(3)
B(23)-Mn(2)-B(24)	41.2(3)	Mn(1)-Mn(2)-N(51)	138.1(2)
B(13)-Mn(2)-N(51)	95.5(2)	B(14)-Mn(2)-N(51)	119.7(2)
B(23)-Mn(2)-N(51)	155.1(2)	B(24)-Mn(2)-N(51)	118.1(2)
Mn(1)-Mn(2)-N(52)	141.3(1)	B(13)-Mn(2)-N(52)	153.7(2)
B(14)-Mn(2)-N(52)	119.3(2)	B(23)-Mn(2)-N(52)	96.5(2)
B(24)-Mn(2)-N(52)	115.2(2)	N(51)-Mn(2)-N(52)	80.5(2)
C(11)-Si(1)-C(31)	112.8(3)	C(11)-Si(1)-C(32)	111.4(4)
C(31)-Si(1)-C(32)	107.7(4)	C(11)-Si(1)-C(33)	109.4(3)
C(31)-Si(1)-C(33)	109.7(4)	C(32)-Si(1)-C(33)	105.6(4)
C(12)-Si(2)-C(34)	116.4(3)	C(12)-Si(2)-C(35)	108.5(3)
C(34)-Si(2)-C(35)	108.7(4)	C(12)-Si(2)-C(36)	107.7(3)
C(34)-Si(2)-C(36)	106.1(4)	C(35)-Si(2)-C(36)	109.2(4)
C(21)-Si(3)-C(37)	108.2(3)	C(21)-Si(3)-C(38)	118.7(4)
C(37)-Si(3)-C(38)	107.0(4)	C(21)-Si(3)-C(39)	107.2(3)
C(37)-Si(3)-C(39)	108.8(4)	C(38)-Si(3)-C(39)	106.7(4)
C(22)-Si(4)-C(40)	108.4(3)	C(22)-Si(4)-C(41)	108.9(3)
C(40)-Si(4)-C(41)	108.6(4)	C(22)-Si(4)-C(42)	113.1(3)
C(40)-Si(4)-C(42)	105.5(4)	C(41)-Si(4)-C(42)	112.2(3)
Mn(1)-C(11)-Si(1)	148.4(3)	Mn(1)-C(11)-C(12)	66.7(3)
Si(1)-C(11)-C(12)	126.3(5)	Mn(1)-C(11)-B(15)	69.3(4)
Si(1)-C(11)-B(15)	118.5(5)	C(12)-C(11)-B(15)	112.2(5)
Mn(1)-C(11)-B(16)	90.4(4)	Si(1)-C(11)-B(16)	121.2(4)
C(12)-C(11)-B(16)	65.3(4)	B(15)-C(11)-B(16)	66.2(5)
Mn(1)-C(12)-Si(2)	134.9(3)	Mn(1)-C(12)-C(11)	73.6(4)
Si(2)-C(12)-C(11)	134.1(5)	Mn(1)-C(12)-B(13)	68.5(4)
Si(2)-C(12)-B(13)	112.4(4)	C(11)-C(12)-B(13)	111.9(6)
Mn(1)-C(12)-B(16)	93.2(4)	Si(2)-C(12)-B(16)	129.0(5)
C(11)-C(12)-B(16)	64.3(4)	B(13)-C(12)-B(16)	63.8(4)
Mn(1)-B(13)-Mn(2)	70.5(2)	Mn(1)-B(13)-C(12)	68.1(4)
Mn(2)-B(13)-C(12)	138.1(5)	Mn(1)-B(13)-B(14)	68.8(4)
Mn(2)-B(13)-B(14)	65.7(4)	C(12)-B(13)-B(14)	104.2(6)
Mn(1)-B(13)-B(16)	92.6(4)	Mn(2)-B(13)-B(16)	125.9(5)
C(12)-B(13)-B(16)	62.9(4)	B(14)-B(13)-B(16)	60.3(5)
Mn(1)-B(14)-Mn(2)	71.9(2)	Mn(1)-B(14)-B(13)	65.3(4)
Mn(2)-B(14)-B(13)	73.2(4)	Mn(1)-B(14)-B(15)	68.9(4)
Mn(2)-B(14)-B(15)	136.6(5)	B(13)-B(14)-B(15)	105.7(6)
Mn(1)-B(14)-B(16)	91.4(4)	Mn(2)-B(14)-B(16)	135.0(5)
B(13)-B(14)-B(16)	62.0(5)	B(15)-B(14)-B(16)	64.3(5)
Mn(1)-B(15)-C(11)	69.8(4)	Mn(1)-B(15)-B(14)	67.2(4)
C(11)-B(15)-B(14)	105.8(6)	Mn(1)-B(15)-B(16)	88.8(4)
C(11)-B(15)-B(16)	61.7(5)	B(14)-B(15)-B(16)	60.2(5)
C(11)-B(16)-C(12)	50.4(4)	C(11)-B(16)-B(13)	92.9(5)
C(12)-B(16)-B(13)	53.3(4)	C(11)-B(16)-B(14)	94.9(5)
C(12)-B(16)-B(14)	95.4(5)	B(13)-B(16)-B(14)	57.7(5)
C(11)-B(16)-B(15)	52.1(4)	C(12)-B(16)-B(15)	90.5(5)
B(13)-B(16)-B(15)	96.5(5)	B(14)-B(16)-B(15)	55.5(5)

L638-64

Table S-21. Bond lengths and bond angles (continued)

Mn(1)-C(21)-Si(3)	147.2(3)	Mn(1)-C(21)-C(22)	65.1(3)
Si(3)-C(21)-C(22)	132.3(4)	Mn(1)-C(21)-B(25)	71.7(4)
Si(3)-C(21)-B(25)	112.9(5)	C(22)-C(21)-B(25)	111.6(5)
Mn(1)-C(21)-B(26)	90.3(4)	Si(3)-C(21)-B(26)	121.7(4)
C(22)-C(21)-B(26)	64.0(4)	B(25)-C(21)-B(26)	66.1(4)
Mn(1)-C(22)-Si(4)	133.9(3)	Mn(1)-C(22)-C(21)	74.5(4)
Si(4)-C(22)-C(21)	128.3(4)	Mn(1)-C(22)-B(23)	69.1(4)
Si(4)-C(22)-B(23)	118.4(5)	C(21)-C(22)-B(23)	111.9(5)
Mn(1)-C(22)-B(26)	95.2(4)	Si(4)-C(22)-B(26)	130.0(4)
C(21)-C(22)-B(26)	64.9(4)	B(23)-C(22)-B(26)	63.7(4)
Mn(1)-B(23)-Mn(2)	70.2(2)	Mn(1)-B(23)-C(22)	66.8(4)
Mn(2)-B(23)-C(22)	136.8(5)	Mn(1)-B(23)-B(24)	70.2(4)
Mn(2)-B(23)-B(24)	64.4(3)	C(22)-B(23)-B(24)	104.0(6)
Mn(1)-B(23)-B(26)	93.3(4)	Mn(2)-B(23)-B(26)	125.7(5)
C(22)-B(23)-B(26)	62.1(4)	B(24)-B(23)-B(26)	61.3(4)
Mn(1)-B(24)-Mn(2)	71.6(2)	Mn(1)-B(24)-B(23)	63.9(3)
Mn(2)-B(24)-B(23)	74.4(4)	Mn(1)-B(24)-B(25)	70.2(4)
Mn(2)-B(24)-B(25)	136.7(5)	B(23)-B(24)-B(25)	105.5(5)
Mn(1)-B(24)-B(26)	89.6(4)	Mn(2)-B(24)-B(26)	135.1(5)
B(23)-B(24)-B(26)	60.8(4)	B(25)-B(24)-B(26)	63.9(5)
Mn(1)-B(25)-C(21)	67.9(4)	Mn(1)-B(25)-B(24)	67.0(4)
C(21)-B(25)-B(24)	106.8(6)	Mn(1)-B(25)-B(26)	87.0(4)
C(21)-B(25)-B(26)	61.9(4)	B(24)-B(25)-B(26)	61.3(5)
C(21)-B(26)-C(22)	51.1(4)	C(21)-B(26)-B(23)	94.0(5)
C(22)-B(26)-B(23)	54.1(4)	C(21)-B(26)-B(24)	94.3(5)
C(22)-B(26)-B(24)	95.8(5)	B(23)-B(26)-B(24)	57.9(4)
C(21)-B(26)-B(25)	52.0(4)	C(22)-B(26)-B(25)	91.2(5)
B(23)-B(26)-B(25)	96.9(5)	B(24)-B(26)-B(25)	54.8(4)
Mn(2)-N(51)-C(53)	106.0(4)	Mn(2)-N(51)-C(55)	112.2(4)
C(53)-N(51)-C(55)	108.5(5)	Mn(2)-N(51)-C(56)	111.7(4)
C(53)-N(51)-C(56)	109.9(5)	C(55)-N(51)-C(56)	108.4(5)
Mn(2)-N(52)-C(54)	105.3(4)	Mn(2)-N(52)-C(57)	113.5(4)
C(54)-N(52)-C(57)	108.9(5)	Mn(2)-N(52)-C(58)	111.6(4)
C(54)-N(52)-C(58)	109.8(5)	C(57)-N(52)-C(58)	107.7(5)
N(51)-C(53)-C(54)	110.8(5)	N(52)-C(54)-C(53)	110.8(6)

L638-65

Table S-22. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x 10^3$) of **6**

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Mn(1)	28(1)	41(1)	19(1)	0(1)	2(1)	1(1)
Mn(2)	34(1)	37(1)	20(1)	-1(1)	3(1)	3(1)
Si(1)	54(1)	90(2)	33(1)	15(1)	-5(1)	15(1)
Si(2)	70(2)	47(1)	36(1)	13(1)	13(1)	6(1)
Si(3)	55(1)	61(2)	38(1)	-1(1)	17(1)	16(1)
Si(4)	56(1)	57(2)	31(1)	-3(1)	5(1)	-15(1)
C(11)	33(4)	64(6)	20(4)	6(4)	4(3)	8(4)
C(12)	37(4)	52(5)	15(3)	3(4)	5(3)	8(3)
B(13)	31(5)	46(6)	32(5)	8(4)	4(4)	10(4)
B(14)	25(4)	44(6)	53(5)	-5(4)	3(4)	13(4)
B(15)	27(5)	71(7)	37(5)	2(5)	-1(4)	3(5)
B(16)	48(5)	61(6)	21(4)	2(5)	4(4)	11(4)
C(21)	34(4)	41(5)	23(4)	-5(4)	5(3)	3(3)
C(22)	25(4)	40(4)	26(4)	4(3)	7(3)	7(3)
B(23)	31(4)	47(5)	22(4)	1(4)	5(3)	-1(4)
B(24)	22(4)	47(6)	36(5)	4(4)	4(4)	1(4)
B(25)	31(5)	45(6)	38(5)	-2(4)	10(4)	-1(4)
B(26)	31(5)	51(6)	27(4)	-7(4)	-1(4)	1(4)
C(31)	110(8)	90(7)	41(5)	2(6)	5(5)	28(5)
C(32)	76(7)	144(10)	68(6)	-2(7)	-28(5)	15(6)
C(33)	96(7)	157(10)	53(6)	59(7)	-15(5)	25(6)
C(34)	162(10)	60(6)	52(6)	-1(6)	13(6)	20(5)
C(35)	84(7)	89(8)	79(7)	35(6)	18(5)	1(6)
C(36)	74(6)	46(5)	64(5)	-6(4)	12(5)	-8(4)
C(37)	87(7)	80(7)	73(6)	-7(6)	18(5)	29(5)
C(38)	120(8)	103(8)	35(5)	4(7)	23(5)	19(5)
C(39)	65(6)	107(8)	82(7)	-15(6)	40(5)	28(6)
C(40)	94(7)	68(6)	82(7)	-21(6)	10(5)	-33(5)
C(41)	94(7)	78(7)	45(5)	23(5)	14(5)	-18(5)
C(42)	78(6)	116(8)	46(5)	-3(6)	-10(4)	-33(5)
N(51)	28(3)	43(3)	24(3)	2(3)	2(2)	-1(3)
N(52)	45(4)	41(4)	26(3)	-6(3)	0(3)	3(3)
C(53)	46(4)	46(5)	21(4)	1(4)	-2(3)	6(4)
C(54)	71(5)	52(5)	36(4)	-4(5)	15(4)	22(4)
C(55)	49(5)	50(5)	32(4)	-1(4)	6(4)	-6(4)
C(56)	39(4)	75(6)	34(4)	1(4)	12(3)	4(4)
C(57)	95(7)	46(5)	54(5)	-18(5)	5(5)	1(4)
C(58)	68(6)	54(5)	41(4)	12(5)	1(4)	6(4)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})]$$

L638-66

Table S-23. H-Atom coordinates ($x10^4$) and isotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) of **6**

	x	y	z	U
H(13)	3356	-1228	5474	80
H(14)	4011	542	6029	80
H(15)	4371	236	7728	80
H(16)	5380	-1276	6627	80
H(23)	1654	1231	6635	80
H(24)	694	-244	5617	80
H(25)	317	-1684	6652	80
H(26)	-610	206	7089	80
H(31A)	2934	-1592	9040	80
H(31B)	3048	-2435	8654	80
H(31C)	3772	-2223	9331	80
H(32A)	4701	-375	8985	80
H(32B)	5506	-1041	9254	80
H(32C)	5708	-562	8536	80
H(33A)	5017	-2756	7772	80
H(33B)	5912	-2097	7753	80
H(33C)	5710	-2577	8471	80
H(34A)	2419	-3206	7545	80
H(34B)	2975	-3908	7125	80
H(34C)	3641	-3342	7646	80
H(35A)	4690	-2619	5697	80
H(35B)	5135	-2957	6439	80
H(35C)	4469	-3523	5917	80
H(36A)	2285	-2388	5494	80
H(36B)	2137	-3297	5727	80
H(36C)	1548	-2604	6137	80
H(37A)	1301	-2436	8279	80
H(37B)	175	-2638	8565	80
H(37C)	331	-2499	7734	80
H(38A)	505	-405	9359	80
H(38B)	209	-1289	9597	80
H(38C)	1367	-1090	9371	80
H(39A)	-1304	-488	8263	80
H(39B)	-1382	-1223	7724	80
H(39C)	-1538	-1363	8554	80
H(40A)	3019	1645	7739	80
H(40B)	1921	2040	7539	80
H(40C)	2465	2210	8298	80
H(41A)	18	787	8855	80
H(41B)	495	1648	9028	80
H(41C)	-49	1478	8269	80
H(42A)	2241	39	9229	80
H(42B)	3225	351	8812	80
H(42C)	2688	914	9381	80
H(53A)	1400	544	4011	80
H(53B)	2378	477	3522	80
H(54A)	3326	1294	4351	80
H(54B)	2344	1763	4044	80
H(55A)	1955	-1019	3749	80
H(55B)	2088	-1340	4546	80
H(55C)	1148	-757	4335	80

L638-67

Table S-23. H-Atom coordinates (continued)

H(56A)	3684	-515	3765	80
H(56B)	4076	102	4362	80
H(56C)	3886	-811	4565	80
H(57A)	2719	2568	5215	80
H(57B)	2631	2102	5952	80
H(57C)	3568	1913	5439	80
H(58A)	1012	2204	4853	80
H(58B)	666	1290	4803	80
H(58C)	839	1702	5563	80

L638-68

Table S-24. Bond lengths (Å) and bond angles (°) for 7

Co-C(12)#1	2.027(8)	Co-C(12)	2.027(9)
Co-B(13)	2.09(2)	Co-B(13)#1	2.09(2)
Co-B(14)	2.15(2)	Si-C(18)#4	1.851(7)
Si-C(18)	1.851(7)	Si-C(19)	1.851(7)
Si-C(12)	1.851(7)	Li-N(21)	2.063(11)
Li-N(21)#2	2.063(11)	Li-N(21)#3	2.063(11)
C(12)-C(12)#1	1.53(2)	C(12)-B(13)	1.61(2)
C(12)-B(16)	1.80(2)	B(13)-B(13)#5	1.05(3)
B(13)-B(14)	1.50(2)	B(13)-B(16)	1.77(2)
B(14)-B(13)#1	1.50(2)	B(14)-B(16)#5	1.53(2)
B(14)-B(16)	1.53(2)	B(16)-B(13)#1	1.77(2)
B(16)-C(12)#1	1.80(2)	N(21)-C(23)#6	1.466(8)
N(21)-C(23)	1.466(8)	N(21)-C(22)	1.466(8)
C(22)-C(22)#2	1.613(9)	C(31)-C(31)#7	1.23(5)
C(31)-C(32)	1.31(3)	C(32)-C(31)#1	1.31(3)
C(12)#1-Co-C(12)	44.4(6)	C(12)#1-Co-B(13)	76.6(4)
C(12)-Co-B(13)	46.0(5)	C(12)#1-Co-B(13)#1	46.0(5)
C(12)-Co-B(13)#1	76.6(4)	B(13)-Co-B(13)#1	75.4(7)
C(12)#1-Co-B(14)	70.8(3)	C(12)-Co-B(14)	70.8(3)
B(13)-Co-B(14)	41.3(4)	B(13)#1-Co-B(14)	41.3(4)
C(18)#4-Si-C(18)	99.8(10)	C(18)#4-Si-C(19)	107.0(5)
C(18)-Si-C(19)	107.0(5)	C(18)#4-Si-C(12)	132.6(6)
C(18)-Si-C(12)	97.2(5)	C(19)-Si-C(12)	109.6(5)
N(21)-Li-N(21)#2	98.3(7)	N(21)-Li-N(21)#3	115.4(4)
N(21)#2-Li-N(21)#3	115.4(4)	C(12)#1-C(12)-B(13)	108.6(6)
C(12)#1-C(12)-B(16)	64.9(5)	B(13)-C(12)-B(16)	62.3(8)
C(12)#1-C(12)-Si	130.2(3)	B(13)-C(12)-Si	120.7(7)
B(16)-C(12)-Si	133.0(8)	C(12)#1-C(12)-Co	67.8(3)
B(13)-C(12)-Co	69.2(6)	B(16)-C(12)-Co	91.4(7)
Si-C(12)-Co	135.1(6)	B(13)#5-B(13)-B(14)	69.5(5)
B(13)#5-B(13)-C(12)	139.8(6)	B(14)-B(13)-C(12)	102.1(9)
B(13)#5-B(13)-B(16)	124.4(7)	B(14)-B(13)-B(16)	55.0(7)
C(12)-B(13)-B(16)	64.2(9)	B(13)#5-B(13)-Co	75.5(4)
B(14)-B(13)-Co	71.3(9)	C(12)-B(13)-Co	64.8(6)
B(16)-B(13)-Co	90.1(9)	B(13)#1-B(14)-B(13)	117(2)
B(13)#1-B(14)-B(16)#5	112.5(7)	B(13)-B(14)-B(16)#5	112.5(7)
B(13)#1-B(14)-B(16)	71.7(6)	B(13)-B(14)-B(16)	71.7(6)
B(16)#5-B(14)-B(16)	170(2)	B(13)#1-B(14)-Co	67.4(9)
B(13)-B(14)-Co	67.4(9)	B(16)#5-B(14)-Co	95.2(12)
B(16)-B(14)-Co	95.2(12)	B(14)-B(16)-B(13)	53.2(8)
B(14)-B(16)-B(13)#1	53.2(8)	B(13)-B(16)-B(13)#1	92.3(14)
B(14)-B(16)-C(12)#1	92.6(14)	B(13)-B(16)-C(12)#1	91.0(13)
B(13)#1-B(16)-C(12)#1	53.5(8)	B(14)-B(16)-C(12)	92.6(14)
B(13)-B(16)-C(12)	53.5(8)	B(13)#1-B(16)-C(12)	91.0(13)
C(12)#1-B(16)-C(12)	50.2(9)	C(23)#6-N(21)-C(23)	110(2)
C(23)#6-N(21)-C(22)	111.2(10)	C(23)-N(21)-C(22)	111.2(10)
C(23)#6-N(21)-Li	112.3(8)	C(23)-N(21)-Li	112.3(8)
C(22)-N(21)-Li	99.9(8)	N(21)-C(22)-C(22)#2	120.9(6)
C(31)#7-C(31)-C(32)	121(2)	C(31)-C(32)-C(31)#1	118(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
#1 x,y,-z #2 -x+1,-y+1,z #3 y,-x+1,-z+1/2
#4 -x,y,z #5 x,-y+1,z #6 -x+1,y,z #7 -x+1,-y,z

E

LC038-69

Table S-25. Anisotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) of 7

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Co	82(2)	54(2)	65(1)	0	0	0
Si	133(3)	80(2)	126(3)	41(2)	0	0
Li	140(19)	140(19)	63(17)	0	0	0
C(12)	77(8)	67(7)	80(6)	-8(6)	4(5)	-2(5)
B(13)	97(10)	69(10)	84(8)	-10(7)	10(9)	2(7)
B(14)	71(11)	144(19)	127(16)	0	0	0
B(16)	108(17)	62(13)	95(14)	0	0	-12(12)
C(18)	167(11)	312(19)	313(19)	61(15)	27(11)	85(13)
C(19)	493(36)	146(13)	106(9)	34(9)	0	0
N(21)	166(11)	158(10)	164(10)	-61(8)	0	0
C(22)	545(51)	1148(206)	80(10)	-123(40)	0	0
C(23)	253(16)	288(19)	391(24)	-185(18)	56(16)	-103(15)
C(31)	315(58)	180(15)	199(20)	0	94(23)	0
C(32)	119(20)	136(21)	432(79)	0	0	0

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})]$$

Table S-26. H-Atom coordinates ($x10^4$) and isotropic displacement coefficients ($Å^2 x10^3$) of 7

	x	y	z	U
H(13)	1486(13)	4471(11)	1362(8)	125
H(14)	2509	5579	0	170
H(16)	2640(21)	3216(18)	0	133
H(18A)	1860(9)	1943(11)	1103(8)	396
H(18B)	1131(9)	1129(11)	601(8)	396
H(18C)	1130(9)	1030(11)	1512(8)	396
H(19A)	604	3633(11)	2168(5)	372
H(19B)	91	2523(11)	2493(5)	372
H(19C)	-695	3488(11)	2211(5)	372
H(22A)	4350	4096(4)	701(8)	886
H(22B)	5650	4096(4)	701(8)	886
H(23A)	3357(12)	3480(13)	1742(10)	466
H(23B)	4008(12)	2655(13)	2287(10)	466
H(23C)	4010(12)	2471(13)	1381(10)	466
H(31)	4112(20)	0	1122(13)	347
H(32)	3155(30)	0	0	343