

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1997, 16(14), 3158-3164, DOI:[10.1021/om9701480](https://doi.org/10.1021/om9701480)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: s876: C15H31KN2OZn

Crystal Data

Empirical Formula	C15 H31 K N2 O Zn		
Formula Weight	359.91		
Crystal System	Orthorhombic		
Space group	Pnma	(No. 62)	
a, b, c [Angstrom]	15.6658 (7)	21.5705 (11)	11.3578 (9)
alpha, beta, gamma [deg]	90	90	90
V [Ang**3]	3838.0 (4)		
Z	8		
D(calc) [g/cm**3]	1.246		
F(000) [Electrons]	1536		
Mu(MoKa) [/cm]	15.0		
Crystal Size [mm]	0.13 x	0.38 x	0.50

Data Collection

Temperature (K)	150	
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073
Theta Min-Max [Deg]	1.9, 27.5	
Scan type	omega-2theta	
Scan, [Deg]	0.57 + 0.35 Tan(Theta)	
Hor. and vert. aperture [mm]	3.00	4.00
Reference Reflection(s)	-2 4 1; 0 2 6; -4 0 2	
Dataset	-16: 20 ; 0: 27 ; -14: 0	
Tot., Uniq. Data	6685,	4526
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	2846	

Refinement

Nref, Npar	4526, 280
R, wR, S	0.0495, 0.1151, 1.02
$w = 1/[s^2(F_o^2) + (0.0556P)^2 + 0.0000P]$ where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$	
Max. and Av. Shift/Error	0.10, 0.00
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang ³]	-0.56, 0.47

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: s876: C₁₅H₃₁KN₂OZn

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
Zn(11)	0.55322 (3)	1/4	0.41635 (4)	0.0299 (2)
*Zn(31)	0.45938 (7)	0.02745 (4)	0.38181 (9)	0.0385 (3)
K(21)	0.50041 (5)	0.12023 (3)	0.58673 (8)	0.0524 (3)
O(21)	0.4946 (2)	0.10758 (11)	0.8253 (2)	0.0611 (11)
N(11)	0.5914 (2)	1/4	0.5803 (3)	0.0300 (12)
N(12)	0.4384 (2)	1/4	0.4828 (3)	0.0287 (12)
*N(31)	0.4272 (9)	-0.0073 (9)	0.542 (2)	0.045 (5)
*N(32)	0.5785 (10)	0.0142 (10)	0.4447 (19)	0.053 (5)
C(11)	0.7419 (3)	1/4	0.5342 (4)	0.0437 (14)
C(12)	0.6910 (2)	0.1925 (2)	0.7098 (3)	0.0597 (12)
C(13)	0.6774 (3)	1/4	0.6329 (4)	0.0383 (14)
C(14)	0.5210 (3)	1/4	0.6545 (4)	0.0297 (12)
C(15)	0.4421 (3)	1/4	0.6052 (3)	0.0290 (12)
C(16)	0.3545 (2)	1/4	0.4256 (4)	0.0320 (12)
C(17)	0.3033 (2)	0.30768 (15)	0.4588 (3)	0.0480 (12)
C(18)	0.3687 (3)	1/4	0.2933 (4)	0.0457 (16)
C(19)	0.6066 (3)	1/4	0.2612 (4)	0.0470 (16)
C(21)	0.5548 (3)	0.0829 (2)	0.9031 (4)	0.0817 (17)
C(22)	0.5526 (4)	0.1251 (4)	1.0021 (5)	0.194 (6)
C(23)	0.4683 (5)	0.1505 (5)	1.0026 (7)	0.254 (7)
C(24)	0.4318 (3)	0.1385 (2)	0.8940 (5)	0.0937 (19)
*C(30)	0.4052 (5)	0.0638 (3)	0.2429 (6)	0.055 (2)
*C(31)	0.2726 (4)	-0.0059 (3)	0.4961 (7)	0.053 (3)
*C(32)	0.3326 (5)	-0.0845 (3)	0.6352 (7)	0.064 (3)
*C(33)	0.3251 (6)	0.0298 (4)	0.6901 (7)	0.058 (3)
*C(34)	0.3457 (13)	-0.0174 (7)	0.5890 (13)	0.038 (4)
*C(35)	0.4955 (6)	-0.0179 (3)	0.6023 (7)	0.042 (3)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang^2] -----
*C(36)	0.5745(5)	-0.0087(3)	0.5514(9)	0.044(3)
*C(37)	0.6639(13)	0.0258(8)	0.3805(14)	0.050(5)
*C(38)	0.6423(5)	0.0521(3)	0.2590(7)	0.060(3)
*C(39)	0.7119(5)	0.0733(4)	0.4511(8)	0.078(3)
*C(310)	0.7073(6)	-0.0368(4)	0.3691(10)	0.074(4)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U

Starred Atom sites have a Population less than 1.0

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal
Parameters
for: s876: C15H31KN2OZn

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
*H(1#)	0.716 (4)	-0.0547 (14)	0.4476 (10)	0.1110
*H(11A)	0.728 (2)	0.2827 (16)	0.478 (3)	0.0650
*H(11B)	0.741 (2)	0.2097 (8)	0.494 (3)	0.0650
*H(11C)	0.7990 (5)	0.258 (3)	0.5665 (7)	0.0650
H(12A)	0.7493 (5)	0.1927 (6)	0.7411 (17)	0.0890
H(12B)	0.6823 (15)	0.1551 (2)	0.6623 (6)	0.0890
H(12C)	0.6501 (10)	0.1929 (6)	0.7751 (12)	0.0890
H(14A)	0.528 (2)	1/4	0.734 (3)	0.015 (9)
H(15A)	0.387 (3)	1/4	0.656 (3)	0.035 (11)
H(17A)	0.2481 (6)	0.3069 (5)	0.4183 (15)	0.0720
H(17B)	0.3349 (7)	0.34486 (15)	0.4352 (17)	0.0720
H(17C)	0.2941 (12)	0.3083 (5)	0.5441 (4)	0.0720
*H(18A)	0.3143 (7)	0.243 (3)	0.2531 (4)	0.0690
*H(18B)	0.409 (3)	0.2171 (18)	0.2725 (7)	0.0690
*H(18C)	0.392 (4)	0.2902 (9)	0.2690 (8)	0.0690
*H(19A)	0.624 (2)	0.2077 (2)	0.2407 (13)	0.0700
*H(19B)	0.6570 (13)	0.2769 (12)	0.2624 (9)	0.0700
*H(19C)	0.5658 (8)	0.2654 (15)	0.2027 (6)	0.0700
H(21A)	0.6123 (3)	0.0819 (2)	0.8669 (4)	0.0980
H(21B)	0.5389 (3)	0.0404 (2)	0.9275 (4)	0.0980
H(22A)	0.5641 (4)	0.1027 (4)	1.0765 (5)	0.2330
H(22B)	0.5957 (4)	0.1582 (4)	0.9926 (5)	0.2330
H(23A)	0.4339 (5)	0.1313 (5)	1.0659 (7)	0.3050
H(23B)	0.4706 (5)	0.1958 (5)	1.0167 (7)	0.3050
H(24A)	0.4145 (3)	0.1777 (2)	0.8554 (5)	0.1120
H(24B)	0.3806 (3)	0.1120 (2)	0.9033 (5)	0.1120
*H(30A)	0.3430 (5)	0.0610 (19)	0.251 (2)	0.0830

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal
Parameters (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
*H(30B)	0.423 (2)	0.0412 (15)	0.1724 (8)	0.0830
*H(30C)	0.422 (2)	0.1074 (7)	0.236 (2)	0.0830
*H(31)	0.6714 (19)	-0.0646 (10)	0.322 (5)	0.1110
*H(31A)	0.2754 (19)	0.0370 (7)	0.468 (3)	0.0800
*H(31B)	0.2170 (4)	-0.013 (2)	0.5331 (13)	0.0800
*H(31C)	0.2799 (18)	-0.0343 (16)	0.430 (2)	0.0800
*H(31D)	0.7627 (18)	-0.0317 (6)	0.330 (5)	0.1110
*H(32A)	0.2749 (14)	-0.0887 (8)	0.667 (5)	0.0960
*H(32B)	0.375 (3)	-0.0932 (10)	0.697 (4)	0.0960
*H(32C)	0.340 (4)	-0.1139 (4)	0.5703 (14)	0.0960
*H(33A)	0.2673 (14)	0.0222 (16)	0.720 (3)	0.0870
*H(33B)	0.329 (3)	0.0722 (4)	0.6595 (14)	0.0870
*H(33C)	0.366 (2)	0.0245 (17)	0.754 (2)	0.0870
*H(35A)	0.4914 (6)	-0.0320 (3)	0.6814 (7)	0.0510
*H(36A)	0.6252 (5)	-0.0188 (3)	0.5932 (9)	0.0530
*H(38A)	0.607 (3)	0.0221 (11)	0.2156 (18)	0.0910
*H(38B)	0.6952 (5)	0.060 (2)	0.2154 (18)	0.0910
*H(38C)	0.611 (3)	0.0909 (13)	0.2682 (7)	0.0910
*H(39A)	0.681 (2)	0.1126 (10)	0.450 (5)	0.1170
*H(39B)	0.7687 (17)	0.080 (2)	0.417 (4)	0.1170
*H(39C)	0.718 (4)	0.0589 (15)	0.5325 (16)	0.1170

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi} ** 2) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda}) ** 2$ for Isotropic Atoms

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: s876: C15H31KN2OZn

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
Zn(11)	0.0249(2)	0.0366(3)	0.0282(3)	0	0.0056(2)	0
Zn(31)	0.0465(6)	0.0316(4)	0.0373(5)	-0.0046(4)	-0.0166(5)	0.0049(4)
K(21)	0.0679(5)	0.0291(3)	0.0602(5)	-0.0043(3)	0.0200(4)	0.0007(3)
O(21)	0.068(2)	0.0594(15)	0.056(2)	0.0029(13)	0.0126(13)	0.0123(13)
N(11)	0.027(2)	0.034(2)	0.029(2)	0	-0.001(2)	0
N(12)	0.026(2)	0.034(2)	0.026(2)	0	0.0033(14)	0
N(31)	0.031(6)	0.037(6)	0.067(11)	-0.013(6)	-0.004(6)	0.009(5)
N(32)	0.062(11)	0.046(7)	0.050(9)	-0.018(6)	-0.024(7)	-0.008(6)
C(11)	0.026(2)	0.047(2)	0.058(3)	0	-0.004(2)	0
C(12)	0.043(2)	0.078(2)	0.058(2)	0.021(2)	-0.012(2)	0.008(2)
C(13)	0.031(2)	0.043(2)	0.041(3)	0	-0.010(2)	0
C(14)	0.040(2)	0.028(2)	0.021(2)	0	-0.002(2)	0
C(15)	0.030(2)	0.028(2)	0.029(2)	0	0.006(2)	0
C(16)	0.024(2)	0.039(2)	0.033(2)	0	0.002(2)	0
C(17)	0.034(2)	0.061(2)	0.049(2)	-0.003(2)	-0.0046(15)	0.016(2)
C(18)	0.035(2)	0.070(3)	0.032(3)	0	-0.003(2)	0
C(19)	0.037(2)	0.062(3)	0.042(3)	0	0.013(2)	0
C(21)	0.085(3)	0.102(3)	0.058(3)	0.023(3)	0.001(2)	0.014(3)
C(22)	0.099(5)	0.396(15)	0.088(5)	-0.101(7)	-0.003(4)	-0.059(7)
C(23)	0.142(7)	0.426(16)	0.194(10)	-0.229(11)	0.020(7)	-0.021(9)
C(24)	0.087(3)	0.086(3)	0.108(4)	0.011(3)	0.050(3)	0.020(3)
C(30)	0.063(4)	0.058(4)	0.045(4)	-0.004(3)	-0.016(4)	0.019(4)
C(31)	0.045(4)	0.056(4)	0.058(5)	-0.001(4)	-0.011(3)	0.009(3)
C(32)	0.078(6)	0.054(5)	0.060(5)	0.007(4)	-0.009(5)	-0.014(4)
C(33)	0.063(6)	0.053(5)	0.057(6)	-0.004(4)	0.009(4)	0.005(4)
C(34)	0.049(7)	0.031(4)	0.035(7)	-0.003(5)	0.008(5)	-0.012(4)
C(35)	0.054(5)	0.039(4)	0.034(4)	-0.003(3)	-0.004(4)	0.000(4)

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
C(36)	0.050(5)	0.034(4)	0.047(5)	-0.009(4)	-0.023(4)	0.012(3)
C(37)	0.040(6)	0.057(8)	0.053(10)	0.005(6)	0.004(6)	-0.004(5)
C(38)	0.059(4)	0.066(4)	0.056(5)	0.008(4)	-0.001(4)	0.002(4)
C(39)	0.082(6)	0.065(5)	0.086(7)	-0.003(5)	-0.041(5)	-0.029(5)
C(310)	0.043(5)	0.066(5)	0.113(10)	0.013(6)	0.000(5)	0.015(4)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi}^2) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda})^2$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 * (\text{Pi}^2) * \text{Sum}_{ij} (h(i) * h(j) * U(i,j) * \text{Astar}(i) * \text{Astar}(j))$, for
Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial Lengths and
h(i) are the Reflection Indices.

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: s876: C15H31KN2OZn

Zn(11)	-N(11)	1.956(3)	C(16)	-C(17)	1.528(4)
Zn(11)	-N(12)	1.951(3)	C(16)	-C(18)	1.519(6)
Zn(11)	-C(19)	1.951(5)	C(21)	-C(22)	1.447(8)
Zn(31)	-N(31)	2.03(2)	C(22)	-C(23)	1.430(11)
Zn(31)	-N(32)	2.018(17)	C(23)	-C(24)	1.384(10)
Zn(31)	-C(30)	1.956(7)	C(31)	-C(34)	1.577(19)
K(21)	-O(21)	2.725(2)	C(32)	-C(34)	1.553(17)
K(21)	-N(31)	3.023(19)	C(33)	-C(34)	1.568(17)
K(21)	-N(32)	3.05(2)	C(35)	-C(36)	1.380(12)
K(21)	-C(14)	2.9210(15)	C(37)	-C(38)	1.530(18)
K(21)	-C(15)	2.9519(16)	C(37)	-C(39)	1.50(2)
K(21)	-C(35)	2.986(7)	C(37)	-C(310)	1.52(2)
K(21)	-C(36)	3.040(7)	C(11)	-H(11A)	0.98(3)
K(21)	-N(31)b	3.06(2)	C(11)	-H(11B)	0.98(2)
K(21)	-C(35)b	3.080(7)	C(11)	-H(11C)	0.982(15)
K(21)	-C(36)b	3.103(8)	C(12)	-H(12A)	0.980(11)
O(21)	-C(21)	1.398(5)	C(12)	-H(12B)	0.980(7)
O(21)	-C(24)	1.422(6)	C(12)	-H(12C)	0.980(15)
N(11)	-C(13)	1.474(6)	C(14)	-H(14A)	0.91(3)
N(11)	-C(14)	1.388(6)	C(15)	-H(15A)	1.04(4)
N(12)	-C(15)	1.391(5)	C(17)	-H(17A)	0.980(12)
N(12)	-C(16)	1.466(5)	C(17)	-H(17B)	0.980(9)
N(31)	-C(34)	1.40(3)	C(17)	-H(17C)	0.980(6)
N(31)	-C(35)	1.291(19)	C(18)	-H(18A)	0.979(15)
N(32)	-C(36)	1.31(2)	C(18)	-H(18B)	0.98(4)
N(32)	-C(37)	1.54(3)	C(18)	-H(18C)	0.98(3)
C(11)	-C(13)	1.509(7)	C(19)	-H(19A)	0.980(10)
C(12)	-C(13)	1.532(5)	C(19)	-H(19B)	0.98(2)
C(14)	-C(15)	1.357(6)	C(19)	-H(19C)	0.980(15)

Table S5 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

C(21)	-H(21A)	0.990(7)	C(32)	-H(32C)	0.979(17)
C(21)	-H(21B)	0.990(6)	C(33)	-H(33A)	0.98(3)
C(22)	-H(22A)	0.990(9)	C(33)	-H(33B)	0.980(13)
C(22)	-H(22B)	0.989(11)	C(33)	-H(33C)	0.97(3)
C(23)	-H(23A)	0.989(12)	C(35)	-H(35A)	0.951(11)
C(23)	-H(23B)	0.991(15)	C(36)	-H(36A)	0.951(12)
C(24)	-H(24A)	0.990(7)	C(38)	-H(38A)	0.98(3)
C(24)	-H(24B)	0.991(6)	C(38)	-H(38B)	0.980(16)
C(30)	-H(30A)	0.981(12)	C(38)	-H(38C)	0.98(3)
C(30)	-H(30B)	0.98(2)	C(39)	-H(39A)	0.98(3)
C(30)	-H(30C)	0.980(18)	C(39)	-H(39B)	0.98(3)
C(31)	-H(31A)	0.980(19)	C(39)	-H(39C)	0.98(2)
C(31)	-H(31B)	0.979(13)	C(310)	-H(1#)	0.98(2)
C(31)	-H(31C)	0.98(3)	C(310)	-H(31)	0.98(4)
C(32)	-H(32A)	0.98(3)	C(310)	-H(31D)	0.98(4)
C(32)	-H(32B)	0.98(5)			

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: s876: C15H31KN2OZn

N(11)	-Zn(11)	-N(12)	85.05(14)	N(32)	-K(21)	-C(36)b	45.9(3)
N(11)	-Zn(11)	-C(19)	136.81(17)	C(14)	-K(21)	-C(15)	26.71(12)
N(12)	-Zn(11)	-C(19)	138.15(17)	C(14)	-K(21)	-C(35)	160.66(18)
N(31)	-Zn(31)	-N(32)	82.0(7)	C(14)	-K(21)	-C(36)	150.37(18)
N(31)	-Zn(31)	-C(30)	139.7(5)	N(31)b	-K(21)	-C(14)	148.0(3)
N(32)	-Zn(31)	-C(30)	138.0(6)	C(14)	-K(21)	-C(35)b	150.25(17)
O(21)	-K(21)	-N(31)	93.6(4)	C(14)	-K(21)	-C(36)b	156.65(18)
O(21)	-K(21)	-N(32)	117.6(4)	C(15)	-K(21)	-C(35)	159.1(2)
O(21)	-K(21)	-C(14)	80.65(10)	C(15)	-K(21)	-C(36)	174.25(18)
O(21)	-K(21)	-C(15)	90.80(9)	N(31)b	-K(21)	-C(15)	154.7(4)
O(21)	-K(21)	-C(35)	80.81(16)	C(15)	-K(21)	-C(35)b	137.36(16)
O(21)	-K(21)	-C(36)	93.0(2)	C(15)	-K(21)	-C(36)b	130.86(17)
O(21)	-K(21)	-N(31)b	114.1(4)	C(35)	-K(21)	-C(36)	26.5(2)
O(21)	-K(21)	-C(35)b	128.47(15)	N(31)b	-K(21)	-C(35)	40.8(4)
O(21)	-K(21)	-C(36)b	114.37(18)	C(35)	-K(21)	-C(35)b	47.7(2)
N(31)	-K(21)	-N(32)	51.8(5)	C(35)	-K(21)	-C(36)b	41.1(2)
N(31)	-K(21)	-C(14)	163.4(3)	N(31)b	-K(21)	-C(36)	21.1(5)
N(31)	-K(21)	-C(15)	139.2(3)	C(35)b	-K(21)	-C(36)	40.9(2)
N(31)	-K(21)	-C(35)	24.8(4)	C(36)	-K(21)	-C(36)b	50.8(2)
N(31)	-K(21)	-C(36)	44.8(3)	N(31)b	-K(21)	-C(35)b	24.3(4)
N(31)	-K(21)	-N(31)b	48.4(4)	N(31)b	-K(21)	-C(36)b	44.0(3)
N(31)	-K(21)	-C(35)b	40.4(4)	C(35)b	-K(21)	-C(36)b	25.8(2)
N(31)	-K(21)	-C(36)b	20.9(5)	K(21)	-O(21)	-C(21)	130.1(2)
N(32)	-K(21)	-C(14)	144.3(4)	K(21)	-O(21)	-C(24)	121.5(3)
N(32)	-K(21)	-C(15)	150.6(4)	C(21)	-O(21)	-C(24)	107.4(3)
N(32)	-K(21)	-C(35)	45.1(4)	Zn(11)	-N(11)	-C(13)	131.7(3)
N(32)	-K(21)	-C(36)	24.8(4)	Zn(11)	-N(11)	-C(14)	109.6(3)
N(31)b	-K(21)	-N(32)	4.3(5)	C(13)	-N(11)	-C(14)	118.7(4)
N(32)	-K(21)	-C(35)b	24.1(4)	Zn(11)	-N(12)	-C(15)	110.4(3)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

Zn(11)	-N(12)	-C(16)	130.9(3)	K(21)a	-C(14)	-C(15)	77.92(10)
C(15)	-N(12)	-C(16)	118.7(3)	K(21)	-C(15)	-N(12)	86.67(10)
Zn(31)	-N(31)	-K(21)	73.8(6)	K(21)	-C(15)	-C(14)	75.37(10)
Zn(31)	-N(31)	-C(34)	128.7(13)	K(21)	-C(15)	-K(21)a	142.98(17)
Zn(31)	-N(31)	-C(35)	109.6(11)	N(12)	-C(15)	-C(14)	116.8(4)
Zn(31)	-N(31)	-K(21)b	76.9(6)	K(21)a	-C(15)	-N(12)	86.67(10)
K(21)	-N(31)	-C(34)	115.0(12)	K(21)a	-C(15)	-C(14)	75.37(10)
K(21)	-N(31)	-C(35)	76.0(9)	N(12)	-C(16)	-C(17)	111.2(2)
K(21)	-N(31)	-K(21)b	131.6(5)	N(12)	-C(16)	-C(18)	107.9(3)
C(34)	-N(31)	-C(35)	121.7(18)	N(12)	-C(16)	-C(17)a	111.2(2)
K(21)b	-N(31)	-C(34)	113.3(12)	C(17)	-C(16)	-C(18)	108.7(2)
K(21)b	-N(31)	-C(35)	78.8(9)	C(17)	-C(16)	-C(17)a	109.1(3)
Zn(31)	-N(32)	-K(21)	73.2(6)	C(17)a	-C(16)	-C(18)	108.7(2)
Zn(31)	-N(32)	-C(36)	109.7(11)	O(21)	-C(21)	-C(22)	103.6(4)
Zn(31)	-N(32)	-C(37)	127.7(14)	C(21)	-C(22)	-C(23)	105.4(6)
K(21)	-N(32)	-C(36)	77.0(10)	C(22)	-C(23)	-C(24)	107.8(7)
K(21)	-N(32)	-C(37)	118.4(12)	O(21)	-C(24)	-C(23)	106.9(5)
C(36)	-N(32)	-C(37)	122.6(14)	N(31)	-C(34)	-C(31)	112.5(13)
N(11)	-C(13)	-C(11)	108.1(4)	N(31)	-C(34)	-C(32)	113.2(14)
N(11)	-C(13)	-C(12)	111.0(2)	N(31)	-C(34)	-C(33)	111.4(14)
N(11)	-C(13)	-C(12)a	111.0(2)	C(31)	-C(34)	-C(32)	106.1(11)
C(11)	-C(13)	-C(12)	109.3(3)	C(31)	-C(34)	-C(33)	103.8(11)
C(11)	-C(13)	-C(12)a	109.3(3)	C(32)	-C(34)	-C(33)	109.3(10)
C(12)	-C(13)	-C(12)a	108.1(3)	K(21)	-C(35)	-N(31)	79.2(9)
K(21)	-C(14)	-N(11)	85.86(11)	K(21)	-C(35)	-C(36)	79.0(4)
K(21)	-C(14)	-C(15)	77.92(10)	K(21)	-C(35)	-K(21)b	132.3(3)
K(21)	-C(14)	-K(21)a	146.80(17)	N(31)	-C(35)	-C(36)	119.7(11)
N(11)	-C(14)	-C(15)	118.2(4)	K(21)b	-C(35)	-N(31)	77.0(10)
K(21)a	-C(14)	-N(11)	85.86(11)	K(21)b	-C(35)	-C(36)	78.0(5)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

K(21)	-C(36)	-N(32)	78.2(10)	H(11C)	-C(11)	-H(11C) a	20(5)
K(21)	-C(36)	-C(35)	74.6(4)	H(11A) a-C(11)	-H(11B) a		109(3)
K(21)	-C(36)	-K(21) b	129.2(3)	H(11A) a-C(11)	-H(11C) a		109(4)
N(32)	-C(36)	-C(35)	119.0(10)	H(11B) a-C(11)	-H(11C) a		110(4)
K(21) b	-C(36)	-N(32)	81.0(10)	C(13)	-C(12)	-H(12A)	109.4(9)
K(21) b	-C(36)	-C(35)	76.2(4)	C(13)	-C(12)	-H(12B)	109.5(5)
N(32)	-C(37)	-C(38)	107.1(14)	C(13)	-C(12)	-H(12C)	109.5(9)
N(32)	-C(37)	-C(39)	107.0(13)	H(12A)	-C(12)	-H(12B)	109.4(16)
N(32)	-C(37)	-C(310)	106.5(14)	H(12A)	-C(12)	-H(12C)	109.6(14)
C(38)	-C(37)	-C(39)	109.8(12)	H(12B)	-C(12)	-H(12C)	109.4(14)
C(38)	-C(37)	-C(310)	110.6(11)	K(21)	-C(14)	-H(14A)	105.96(18)
C(39)	-C(37)	-C(310)	115.3(13)	N(11)	-C(14)	-H(14A)	120(2)
C(13)	-C(11)	-H(11A)	109.7(19)	C(15)	-C(14)	-H(14A)	121(2)
C(13)	-C(11)	-H(11B)	109.6(19)	K(21) a	-C(14)	-H(14A)	105.96(18)
C(13)	-C(11)	-H(11C)	109.4(7)	K(21)	-C(15)	-H(15A)	107.3(3)
C(13)	-C(11)	-H(11A) a	109.7(19)	N(12)	-C(15)	-H(15A)	121(2)
C(13)	-C(11)	-H(11B) a	109.6(19)	C(14)	-C(15)	-H(15A)	122(2)
C(13)	-C(11)	-H(11C) a	109.4(7)	K(21) a	-C(15)	-H(15A)	107.3(3)
H(11A)	-C(11)	-H(11B)	109(3)	C(16)	-C(17)	-H(17A)	109.5(8)
H(11A)	-C(11)	-H(11C)	109(4)	C(16)	-C(17)	-H(17B)	109.5(7)
H(11A)	-C(11)	-H(11A) a	93(3)	C(16)	-C(17)	-H(17C)	109.4(8)
H(11A)	-C(11)	-H(11B) a	19(3)	H(17A)	-C(17)	-H(17B)	109.4(11)
H(11A)	-C(11)	-H(11C) a	125(3)	H(17A)	-C(17)	-H(17C)	109.6(15)
H(11B)	-C(11)	-H(11C)	110(4)	H(17B)	-C(17)	-H(17C)	109.5(14)
H(11A) a-C(11)	-H(11B)		19(3)	C(16)	-C(18)	-H(18A)	109.5(6)
H(11B)	-C(11)	-H(11B) a	125(3)	C(16)	-C(18)	-H(18B)	109.5(8)
H(11B)	-C(11)	-H(11C) a	92(4)	C(16)	-C(18)	-H(18C)	109.4(7)
H(11A) a-C(11)	-H(11C)		125(3)	C(16)	-C(18)	-H(18A) a	109.5(6)
H(11B) a-C(11)	-H(11C)		92(4)	C(16)	-C(18)	-H(18B) a	109.5(8)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

C(16)	-C(18)	-H(18C) a	109.4 (7)	H(19B)	-C(19)	-H(19B) a	73 (2)
H(18A)	-C(18)	-H(18B)	110 (4)	H(19B)	-C(19)	-H(19C) a	137.4 (13)
H(18A)	-C(18)	-H(18C)	109 (4)	H(19A) a-C(19)	-H(19C)		73 (2)
H(18A)	-C(18)	-H(18A) a	18 (5)	H(19B) a-C(19)	-H(19C)		137.4 (13)
H(18A)	-C(18)	-H(18B) a	124 (3)	H(19C)	-C(19)	-H(19C) a	40 (3)
H(18A)	-C(18)	-H(18C) a	93 (5)	H(19A) a-C(19)	-H(19B) a		109 (2)
H(18B)	-C(18)	-H(18C)	109 (4)	H(19A) a-C(19)	-H(19C) a		110 (2)
H(18A) a-C(18)	-H(18B)		124 (3)	H(19B) a-C(19)	-H(19C) a		109.5 (19)
H(18B)	-C(18)	-H(18B) a	93 (3)	O(21)	-C(21)	-H(21A)	111.1 (5)
H(18B)	-C(18)	-H(18C) a	18 (4)	O(21)	-C(21)	-H(21B)	111.1 (5)
H(18A) a-C(18)	-H(18C)		93 (5)	C(22)	-C(21)	-H(21A)	111.0 (5)
H(18B) a-C(18)	-H(18C)		18 (4)	C(22)	-C(21)	-H(21B)	111.0 (5)
H(18C)	-C(18)	-H(18C) a	124 (4)	H(21A)	-C(21)	-H(21B)	109.0 (6)
H(18A) a-C(18)	-H(18B) a		110 (4)	C(21)	-C(22)	-H(22A)	110.6 (8)
H(18A) a-C(18)	-H(18C) a		109 (4)	C(21)	-C(22)	-H(22B)	110.7 (6)
H(18B) a-C(18)	-H(18C) a		109 (4)	C(23)	-C(22)	-H(22A)	110.6 (7)
Zn(11)	-C(19)	-H(19A)	109.5 (10)	C(23)	-C(22)	-H(22B)	110.8 (9)
Zn(11)	-C(19)	-H(19B)	109.4 (8)	H(22A)	-C(22)	-H(22B)	108.7 (8)
Zn(11)	-C(19)	-H(19C)	109.4 (7)	C(22)	-C(23)	-H(23A)	110.2 (10)
Zn(11)	-C(19)	-H(19A) a	109.5 (10)	C(22)	-C(23)	-H(23B)	110.2 (9)
Zn(11)	-C(19)	-H(19B) a	109.4 (8)	C(24)	-C(23)	-H(23A)	110.1 (9)
Zn(11)	-C(19)	-H(19C) a	109.4 (7)	C(24)	-C(23)	-H(23B)	110.1 (9)
H(19A)	-C(19)	-H(19B)	109 (2)	H(23A)	-C(23)	-H(23B)	108.4 (11)
H(19A)	-C(19)	-H(19C)	110 (2)	O(21)	-C(24)	-H(24A)	110.3 (5)
H(19A)	-C(19)	-H(19A) a	137 (2)	O(21)	-C(24)	-H(24B)	110.4 (5)
H(19A)	-C(19)	-H(19B) a	39 (2)	C(23)	-C(24)	-H(24A)	110.4 (7)
H(19A)	-C(19)	-H(19C) a	73 (2)	C(23)	-C(24)	-H(24B)	110.3 (7)
H(19B)	-C(19)	-H(19C)	109.5 (19)	H(24A)	-C(24)	-H(24B)	108.6 (6)
H(19A) a-C(19)	-H(19B)		39 (2)	Zn(31)	-C(30)	-H(30A)	109.3 (17)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s876: C15H31KN2OZn

Zn(31)	-C(30)	-H(30B)	109.7(17)	C(36)	-C(35)	-H(35A)	120.2(11)
Zn(31)	-C(30)	-H(30C)	109.4(16)	K(21)b	-C(35)	-H(35A)	115.5(6)
H(30A)	-C(30)	-H(30B)	109(3)	K(21)	-C(36)	-H(36A)	117.6(7)
H(30A)	-C(30)	-H(30C)	109(3)	N(32)	-C(36)	-H(36A)	120.6(12)
H(30B)	-C(30)	-H(30C)	110(2)	C(35)	-C(36)	-H(36A)	120.5(11)
C(34)	-C(31)	-H(31A)	110(2)	K(21)b	-C(36)	-H(36A)	113.0(6)
C(34)	-C(31)	-H(31B)	109.5(13)	C(37)	-C(38)	-H(38A)	109.4(15)
C(34)	-C(31)	-H(31C)	109.3(18)	C(37)	-C(38)	-H(38B)	109.5(16)
H(31A)	-C(31)	-H(31B)	109(3)	C(37)	-C(38)	-H(38C)	109.4(10)
H(31A)	-C(31)	-H(31C)	110(3)	H(38A)	-C(38)	-H(38B)	110(3)
H(31B)	-C(31)	-H(31C)	110(3)	H(38A)	-C(38)	-H(38C)	110(3)
C(34)	-C(32)	-H(32A)	109.5(16)	H(38B)	-C(38)	-H(38C)	109(3)
C(34)	-C(32)	-H(32B)	109.2(18)	C(37)	-C(39)	-H(39A)	110(3)
C(34)	-C(32)	-H(32C)	109.5(13)	C(37)	-C(39)	-H(39B)	110(3)
H(32A)	-C(32)	-H(32B)	110(4)	C(37)	-C(39)	-H(39C)	110(3)
H(32A)	-C(32)	-H(32C)	109(4)	H(39A)	-C(39)	-H(39B)	108(3)
H(32B)	-C(32)	-H(32C)	109(4)	H(39A)	-C(39)	-H(39C)	110(4)
C(34)	-C(33)	-H(33A)	110(2)	H(39B)	-C(39)	-H(39C)	109(4)
C(34)	-C(33)	-H(33B)	109.5(14)	C(37)	-C(310)	-H(1#)	110(2)
C(34)	-C(33)	-H(33C)	109(2)	C(37)	-C(310)	-H(31)	109.5(19)
H(33A)	-C(33)	-H(33B)	110(3)	C(37)	-C(310)	-H(31D)	109.6(13)
H(33A)	-C(33)	-H(33C)	109(3)	H(1#)	-C(310)	-H(31)	110(4)
H(33B)	-C(33)	-H(33C)	109(3)	H(1#)	-C(310)	-H(31D)	109(5)
K(21)	-C(35)	-H(35A)	112.1(6)	H(31)	-C(310)	-H(31D)	109(4)
N(31)	-C(35)	-H(35A)	120.1(14)				

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: shelxl

Crystal Data

Empirical Formula	C19 H32 K N2 O0.5 Zn		
Formula Weight	400.96		
Crystal System	Orthorhombic		
Space group	P21212	(No. 18)	
a, b, c [Angstrom]	18.712 (2)	10.634 (2)	10.803 (8)
V [Ang**3]	2149.6 (17)		
Z	4		
D(calc) [g/cm**3]	1.239		
F(000) [Electrons]	852		
Mu(MoKa) [/cm]	13.4		
Crystal Size [mm]	0.08 x	0.38 x	0.38

Data Collection

Temperature (K)	150	
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073
Theta Min-Max [Deg]	1.9, 25.0	
Scan type	Omega/2Theta	
Scan, [Deg]	1.00 + 0.35 Tan(Theta)	
Hor. and vert. aperture [mm]	4.00	4.00
Reference Reflection(s)	-2 4 1 ; 0 2 6 ; -4 0 2	
Dataset	-21: 24 ;	0: 13 ; 0: 14
Tot., Uniq. Data	3897,	3421
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	1768	

Refinement

Nref, Npar	3421,	221
R, wR, S	0.0976,	0.2477, 1.14
Weighting Scheme		
Max. and Av. Shift/Error	0.04, 0.00	
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.63, 0.82	

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal
Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: shelxl

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
Zn(1)	0.05718(8)	0.2183(2)	0.7483(2)	0.0278(5)
K(1)	0	1/2	0.8203(5)	0.0403(19)
K(2)	0	0	0.9715(4)	0.0357(19)
O(30)	0	0	1.2286(14)	0.055(7)
N(1)	-0.0422(6)	0.2297(11)	0.7992(10)	0.029(4)
N(2)	0.0793(6)	0.2661(13)	0.9177(12)	0.032(5)
C(1)	-0.0940(8)	0.1701(15)	0.6022(12)	0.028(5)
C(2)	-0.1540(8)	0.3340(14)	0.7311(16)	0.036(6)
C(3)	-0.1548(8)	0.1077(15)	0.7973(11)	0.031(6)
C(4)	-0.1109(7)	0.2130(14)	0.7336(13)	0.020(4)
C(5)	-0.0451(9)	0.2622(14)	0.9240(14)	0.033(6)
C(6)	0.0179(8)	0.2833(13)	0.9829(12)	0.026(5)
C(7)	0.1467(11)	0.2865(19)	0.9809(17)	0.042(7)
C(8)	0.2071(9)	0.277(2)	0.8919(15)	0.062(8)
C(9)	0.1537(11)	0.4165(18)	1.0389(18)	0.058(8)
C(10)	0.1563(11)	0.1837(19)	1.0826(18)	0.072(9)
C(20)	0.1078(9)	0.1917(16)	0.5901(15)	0.038(7)
C(21)	0.1329(10)	0.3091(17)	0.5269(17)	0.034(6)
C(22)	0.0807(10)	0.3748(16)	0.4535(17)	0.049(7)
C(23)	0.1020(12)	0.4822(18)	0.3947(18)	0.063(9)
C(24)	0.1703(11)	0.528(2)	0.4098(18)	0.060(9)
C(25)	0.2158(11)	0.4658(18)	0.4854(17)	0.053(8)
C(26)	0.1974(11)	0.3595(18)	0.5401(16)	0.049(7)
C(31)	0.0488(17)	-0.065(3)	1.293(2)	0.140(16)
C(32)	0.1032(13)	-0.127(2)	1.237(3)	0.104(11)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal
Parameters
for: shelxl

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
H(1A)	-0.061 (4)	0.230 (5)	0.563 (3)	0.0420
H(1B)	-0.1383 (10)	0.165 (8)	0.554 (3)	0.0420
H(1C)	-0.071 (4)	0.087 (4)	0.6047 (14)	0.0420
H(2A)	-0.2009 (19)	0.318 (2)	0.694 (7)	0.0540
H(2B)	-0.129 (2)	0.397 (3)	0.682 (7)	0.0540
H(2C)	-0.160 (4)	0.365 (4)	0.8158 (18)	0.0540
H(3A)	-0.1264 (19)	0.030 (3)	0.800 (7)	0.0460
H(3B)	-0.199 (2)	0.092 (6)	0.750 (5)	0.0460
H(3C)	-0.167 (4)	0.134 (4)	0.882 (3)	0.0460
H(5)	-0.0894 (9)	0.2693 (14)	0.9663 (14)	0.0390
H(6)	0.0190 (8)	0.3092 (13)	1.0670 (12)	0.0320
H(8A)	0.207 (4)	0.193 (4)	0.854 (8)	0.0930
H(8B)	0.2523 (10)	0.291 (12)	0.936 (3)	0.0930
H(8C)	0.202 (4)	0.341 (8)	0.827 (7)	0.0930
H(9A)	0.203 (2)	0.428 (5)	1.069 (10)	0.0870
H(9B)	0.121 (5)	0.424 (4)	1.109 (7)	0.0870
H(9C)	0.142 (6)	0.4808 (18)	0.977 (3)	0.0870
H(10A)	0.197 (5)	0.206 (7)	1.135 (8)	0.1080
H(10B)	0.165 (7)	0.102 (3)	1.0431 (18)	0.1080
H(10C)	0.113 (3)	0.179 (9)	1.133 (8)	0.1080
H(20A)	0.1497 (9)	0.1372 (16)	0.6057 (15)	0.0460
H(20B)	0.0756 (9)	0.1459 (16)	0.5331 (15)	0.0460
H(22)	0.0331 (10)	0.3446 (16)	0.4462 (17)	0.0580
H(23)	0.0694 (12)	0.5257 (18)	0.3427 (18)	0.0750
H(24)	0.1851 (11)	0.603 (2)	0.3681 (18)	0.0720
H(25)	0.2622 (11)	0.4992 (18)	0.4995 (17)	0.0630
H(26)	0.2315 (11)	0.3177 (18)	0.5907 (16)	0.0580

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal
Parameters (continued)
for: shelxl

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
H(31A)	0.0224 (17)	-0.128 (3)	1.343 (2)	0.1670
H(31B)	0.0709 (17)	-0.005 (3)	1.353 (2)	0.1670
H(32A)	0.115 (7)	-0.203 (9)	1.285 (9)	0.1600
H(32B)	0.145 (3)	-0.072 (6)	1.232 (15)	0.1600
H(32C)	0.088 (4)	-0.152 (15)	1.153 (7)	0.1600

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi} ** 2) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda}) ** 2$ for Isotropic Atoms

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: shelxl

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
Zn(1)	0.0253(8)	0.0292(8)	0.0289(8)	-0.0012(13)	0.0024(13)	0.0021(9)
K(1)	0.050(4)	0.023(3)	0.048(3)	0	0	-0.001(3)
K(2)	0.055(4)	0.024(3)	0.028(3)	0	0	0.000(3)
O(30)	0.074(12)	0.069(12)	0.021(11)	0	0	0.016(10)
N(1)	0.036(8)	0.023(7)	0.028(6)	-0.009(6)	-0.008(5)	-0.002(6)
N(2)	0.025(8)	0.024(8)	0.048(9)	-0.011(7)	0.005(6)	-0.003(7)
C(1)	0.026(9)	0.040(11)	0.019(8)	0.001(7)	0.001(7)	0.002(8)
C(2)	0.032(9)	0.038(10)	0.037(12)	-0.008(9)	0.018(10)	0.002(7)
C(3)	0.024(9)	0.064(13)	0.004(7)	-0.002(7)	-0.006(6)	-0.023(9)
C(4)	0.024(7)	0.033(8)	0.002(8)	0.006(8)	-0.001(7)	-0.001(8)
C(5)	0.035(11)	0.019(10)	0.045(10)	-0.015(8)	0.013(8)	-0.020(8)
C(6)	0.052(11)	0.010(8)	0.017(7)	-0.001(7)	0.006(7)	0.012(9)
C(7)	0.051(13)	0.029(11)	0.045(12)	-0.006(11)	-0.006(10)	-0.002(12)
C(8)	0.047(12)	0.105(18)	0.034(10)	-0.012(13)	-0.019(9)	-0.009(13)
C(9)	0.058(14)	0.050(14)	0.066(14)	0.003(11)	-0.025(12)	-0.024(12)
C(10)	0.057(14)	0.068(17)	0.091(17)	0.006(13)	-0.061(13)	0.001(12)
C(20)	0.036(11)	0.033(12)	0.046(11)	-0.016(9)	-0.006(9)	0.003(9)
C(21)	0.035(11)	0.024(11)	0.042(11)	-0.003(9)	0.011(9)	-0.007(9)
C(22)	0.034(11)	0.029(11)	0.083(14)	0.025(10)	-0.009(10)	-0.005(9)
C(23)	0.075(16)	0.031(13)	0.082(16)	0.016(12)	-0.035(14)	0.004(12)
C(24)	0.050(14)	0.080(19)	0.049(13)	0.009(12)	0.017(11)	0.006(13)
C(25)	0.056(13)	0.050(15)	0.052(13)	-0.023(11)	0.019(11)	-0.009(11)
C(26)	0.056(14)	0.042(12)	0.048(12)	0.030(11)	0.000(10)	-0.016(11)
C(31)	0.18(3)	0.16(3)	0.08(2)	0.059(18)	-0.04(2)	0.09(3)
C(32)	0.11(2)	0.11(2)	0.093(19)	-0.01(2)	-0.02(2)	0.062(17)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi}^{**2}) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda})^{**2}$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 * (\text{Pi}^{**2}) * \text{Sum}_{ij} (h(i) * h(j) * U(i,j) * \text{Astar}(i) * \text{Astar}(j))$, for
Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial Lengths and

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: shelxl

Zn(1)	-N(1)	1.943(11)	C(31)	-C(32)	1.36(4)
Zn(1)	-N(2)	1.944(13)	C(1)	-H(1A)	0.98(6)
Zn(1)	-C(20)	1.974(17)	C(1)	-H(1B)	0.98(3)
K(1)	-N(1)	2.990(12)	C(1)	-H(1C)	0.98(5)
K(1)	-N(2)	3.081(13)	C(2)	-H(2A)	0.98(5)
K(1)	-C(5)	2.892(15)	C(2)	-H(2B)	0.97(5)
K(1)	-C(6)	2.917(14)	C(2)	-H(2C)	0.98(3)
K(2)	-O(30)	2.777(16)	C(3)	-H(3A)	0.98(4)
K(2)	-C(5)	2.958(15)	C(3)	-H(3B)	0.99(5)
K(2)	-C(6)	3.034(14)	C(3)	-H(3C)	0.98(4)
O(30)	-C(31)	1.34(3)	C(5)	-H(5)	0.95(2)
N(1)	-C(4)	1.479(17)	C(6)	-H(6)	0.950(18)
N(1)	-C(5)	1.393(19)	C(8)	-H(8A)	0.98(6)
N(2)	-C(6)	1.360(19)	C(8)	-H(8B)	0.98(3)
N(2)	-C(7)	1.45(2)	C(8)	-H(8C)	0.98(8)
C(1)	-C(4)	1.524(19)	C(9)	-H(9A)	0.99(5)
C(2)	-C(4)	1.52(2)	C(9)	-H(9B)	0.98(9)
C(3)	-C(4)	1.55(2)	C(9)	-H(9C)	0.98(4)
C(5)	-C(6)	1.36(2)	C(10)	-H(10A)	0.98(9)
C(7)	-C(8)	1.49(3)	C(10)	-H(10B)	0.98(4)
C(7)	-C(9)	1.52(3)	C(10)	-H(10C)	0.98(7)
C(7)	-C(10)	1.56(3)	C(20)	-H(20A)	0.99(2)
C(20)	-C(21)	1.50(2)	C(20)	-H(20B)	0.99(2)
C(21)	-C(22)	1.44(3)	C(22)	-H(22)	0.95(3)
C(21)	-C(26)	1.33(3)	C(23)	-H(23)	0.95(3)
C(22)	-C(23)	1.37(3)	C(24)	-H(24)	0.96(3)
C(23)	-C(24)	1.38(3)	C(25)	-H(25)	0.95(3)
C(24)	-C(25)	1.35(3)	C(26)	-H(26)	0.95(3)
C(25)	-C(26)	1.32(3)	C(31)	-H(31A)	0.99(4)

Table S5 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
for: shelxl

C(31)	-H(31B)	1.00(4)	C(32)	-H(32B)	0.98(6)
C(32)	-H(32A)	0.99(10)	C(32)	-H(32C)	0.99(9)

Table S6 - Bond Angles
for: shelxl (Degrees)

N(1)	-Zn(1)	-N(2)	85.5(5)	N(2)b	-K(1)	-C(6)b	26.0(4)
N(1)	-Zn(1)	-C(20)	135.5(6)	C(5)b	-K(1)	-C(6)b	27.0(4)
N(2)	-Zn(1)	-C(20)	138.6(6)	O(30)	-K(2)	-C(5)	100.0(3)
N(1)	-K(1)	-N(2)	51.5(3)	O(30)	-K(2)	-C(6)	87.7(3)
N(1)	-K(1)	-C(5)	27.3(4)	O(30)	-K(2)	-C(5)a	100.0(3)
N(1)	-K(1)	-C(6)	46.9(3)	O(30)	-K(2)	-C(6)a	87.7(3)
N(1)	-K(1)	-N(1)b	171.3(4)	C(5)	-K(2)	-C(6)	26.2(4)
N(1)	-K(1)	-N(2)b	132.4(3)	C(5)	-K(2)	-C(5)a	160.0(4)
N(1)	-K(1)	-C(5)b	161.3(4)	C(5)	-K(2)	-C(6)a	155.7(4)
N(1)	-K(1)	-C(6)b	140.8(4)	C(5)a	-K(2)	-C(6)	155.7(4)
N(2)	-K(1)	-C(5)	45.8(4)	C(6)	-K(2)	-C(6)a	175.3(4)
N(2)	-K(1)	-C(6)	26.0(4)	C(5)a	-K(2)	-C(6)a	26.2(4)
N(1)b	-K(1)	-N(2)	132.4(3)	K(2)	-O(30)	-C(31)	121.3(12)
N(2)	-K(1)	-N(2)b	140.1(4)	K(2)	-O(30)	-C(31)a	121.3(12)
N(2)	-K(1)	-C(5)b	115.7(4)	C(31)	-O(30)	-C(31)a	117.4(19)
N(2)	-K(1)	-C(6)b	119.2(4)	Zn(1)	-N(1)	-K(1)	80.1(4)
C(5)	-K(1)	-C(6)	27.0(4)	Zn(1)	-N(1)	-C(4)	133.5(9)
N(1)b	-K(1)	-C(5)	161.3(4)	Zn(1)	-N(1)	-C(5)	109.1(9)
N(2)b	-K(1)	-C(5)	115.7(4)	K(1)	-N(1)	-C(4)	112.4(8)
C(5)	-K(1)	-C(5)b	134.4(5)	K(1)	-N(1)	-C(5)	72.4(8)
C(5)	-K(1)	-C(6)b	115.1(4)	C(4)	-N(1)	-C(5)	117.4(12)
N(1)b	-K(1)	-C(6)	140.8(4)	Zn(1)	-N(2)	-K(1)	77.7(4)
N(2)b	-K(1)	-C(6)	119.2(4)	Zn(1)	-N(2)	-C(6)	110.1(9)
C(5)b	-K(1)	-C(6)	115.1(4)	Zn(1)	-N(2)	-C(7)	131.9(11)
C(6)	-K(1)	-C(6)b	105.9(4)	K(1)	-N(2)	-C(6)	70.2(8)
N(1)b	-K(1)	-N(2)b	51.5(3)	K(1)	-N(2)	-C(7)	117.3(11)
N(1)b	-K(1)	-C(5)b	27.3(4)	C(6)	-N(2)	-C(7)	118.1(13)
N(1)b	-K(1)	-C(6)b	46.9(3)	N(1)	-C(4)	-C(1)	107.6(11)
N(2)b	-K(1)	-C(5)b	45.8(4)	N(1)	-C(4)	-C(2)	111.6(12)

Table S6 - Bond Angles
for: shelxl

(Degrees) (continued)

N(1)	-C(4)	-C(3)	109.6(11)	C(24)	-C(25)	-C(26)	122(2)
C(1)	-C(4)	-C(2)	110.3(12)	C(21)	-C(26)	-C(25)	122.3(19)
C(1)	-C(4)	-C(3)	107.9(12)	O(30)	-C(31)	-C(32)	122(2)
C(2)	-C(4)	-C(3)	109.8(11)	C(4)	-C(1)	-H(1A)	110(3)
K(1)	-C(5)	-K(2)	143.9(6)	C(4)	-C(1)	-H(1B)	110(3)
K(1)	-C(5)	-N(1)	80.2(8)	C(4)	-C(1)	-H(1C)	109.5(15)
K(1)	-C(5)	-C(6)	77.5(9)	H(1A)	-C(1)	-H(1B)	110(5)
K(2)	-C(5)	-N(1)	85.6(8)	H(1A)	-C(1)	-H(1C)	109(5)
K(2)	-C(5)	-C(6)	80.0(9)	H(1B)	-C(1)	-H(1C)	110(6)
N(1)	-C(5)	-C(6)	117.4(14)	C(4)	-C(2)	-H(2A)	109.6(19)
K(1)	-C(6)	-K(2)	138.4(5)	C(4)	-C(2)	-H(2B)	110(3)
K(1)	-C(6)	-N(2)	83.8(8)	C(4)	-C(2)	-H(2C)	109(3)
K(1)	-C(6)	-C(5)	75.4(9)	H(2A)	-C(2)	-H(2B)	109(5)
K(2)	-C(6)	-N(2)	86.5(9)	H(2A)	-C(2)	-H(2C)	110(6)
K(2)	-C(6)	-C(5)	73.8(9)	H(2B)	-C(2)	-H(2C)	109(5)
N(2)	-C(6)	-C(5)	117.9(13)	C(4)	-C(3)	-H(3A)	110(3)
N(2)	-C(7)	-C(8)	110.3(14)	C(4)	-C(3)	-H(3B)	110(4)
N(2)	-C(7)	-C(9)	113.8(16)	C(4)	-C(3)	-H(3C)	109(3)
N(2)	-C(7)	-C(10)	109.1(16)	H(3A)	-C(3)	-H(3B)	109(5)
C(8)	-C(7)	-C(9)	105.2(16)	H(3A)	-C(3)	-H(3C)	110(5)
C(8)	-C(7)	-C(10)	108.7(16)	H(3B)	-C(3)	-H(3C)	110(5)
C(9)	-C(7)	-C(10)	109.7(15)	K(1)	-C(5)	-H(5)	111.8(14)
Zn(1)	-C(20)	-C(21)	115.2(12)	K(2)	-C(5)	-H(5)	103.9(14)
C(20)	-C(21)	-C(22)	116.3(16)	N(1)	-C(5)	-H(5)	121.3(18)
C(20)	-C(21)	-C(26)	124.9(17)	C(6)	-C(5)	-H(5)	121.3(17)
C(22)	-C(21)	-C(26)	118.7(17)	K(1)	-C(6)	-H(6)	110.5(13)
C(21)	-C(22)	-C(23)	117.6(18)	K(2)	-C(6)	-H(6)	109.2(13)
C(22)	-C(23)	-C(24)	120.7(19)	N(2)	-C(6)	-H(6)	121.1(17)
C(23)	-C(24)	-C(25)	118.9(19)	C(5)	-C(6)	-H(6)	121.0(17)

Table S6 - Bond Angles
for: shelxl

(Degrees) (continued)

C(7)	-C(8)	-H(8A)	109(5)	H(20A)	-C(20)	-H(20B)	107(2)
C(7)	-C(8)	-H(8B)	109(2)	C(21)	-C(22)	-H(22)	121(2)
C(7)	-C(8)	-H(8C)	110(5)	C(23)	-C(22)	-H(22)	121(2)
H(8A)	-C(8)	-H(8B)	110(8)	C(22)	-C(23)	-H(23)	120(2)
H(8A)	-C(8)	-H(8C)	109(7)	C(24)	-C(23)	-H(23)	120(2)
H(8B)	-C(8)	-H(8C)	109(8)	C(23)	-C(24)	-H(24)	120(2)
C(7)	-C(9)	-H(9A)	109(4)	C(25)	-C(24)	-H(24)	121(2)
C(7)	-C(9)	-H(9B)	110(3)	C(24)	-C(25)	-H(25)	119(2)
C(7)	-C(9)	-H(9C)	109(3)	C(26)	-C(25)	-H(25)	119(2)
H(9A)	-C(9)	-H(9B)	109(8)	C(21)	-C(26)	-H(26)	119(2)
H(9A)	-C(9)	-H(9C)	110(8)	C(25)	-C(26)	-H(26)	119(2)
H(9B)	-C(9)	-H(9C)	109(7)	O(30)	-C(31)	-H(31A)	107(3)
C(7)	-C(10)	-H(10A)	109(5)	O(30)	-C(31)	-H(31B)	107(3)
C(7)	-C(10)	-H(10B)	109(2)	C(32)	-C(31)	-H(31A)	107(3)
C(7)	-C(10)	-H(10C)	109(5)	C(32)	-C(31)	-H(31B)	107(3)
H(10A)	-C(10)	-H(10B)	110(8)	H(31A)	-C(31)	-H(31B)	107(3)
H(10A)	-C(10)	-H(10C)	110(7)	C(31)	-C(32)	-H(32A)	109(7)
H(10B)	-C(10)	-H(10C)	110(9)	C(31)	-C(32)	-H(32B)	110(6)
Zn(1)	-C(20)	-H(20A)	108.5(15)	C(31)	-C(32)	-H(32C)	109(6)
Zn(1)	-C(20)	-H(20B)	108.5(15)	H(32A)	-C(32)	-H(32B)	110(10)
C(21)	-C(20)	-H(20A)	108.5(18)	H(32A)	-C(32)	-H(32C)	109(11)
C(21)	-C(20)	-H(20B)	108.5(18)	H(32B)	-C(32)	-H(32C)	110(12)