Table 4. Bond lengths [A] and angles [deg] for 1.

Pb(1)-C(7)	2.858(5)
Pb(2)-C(25')	2.756(11)
Pb(2)-C(21')	2.766(7)
Pb(2)-C(24)	2.789(10)
Pb(2)-C(22')	2.792(9)
Pb(2)-C(25)	2.798(9)
Pb(2)-C(23')	2.820(9)
Pb(2)-C(23)	2.823(7)
Pb(2)-C(16)	2.837(5)
Pb(2)-C(21)	2.837(7)
Pb(2)-C(20)	2.845(5)
Pb(2)-C(22)	2.853(10)
Pb(2)-C(17)	2.869(5)
Cs(1)-O(3)	3.012(14)
Cs(1)-O(5)	3.015(13)
Cs(1)-O(6)	3.057(13)
Cs(1)-O(2)	3.143(12)
Cs(1)-O(4)	3.168(13)
Cs(1)-O(1)	3.188(13)
Cs(1)-C(1)	3.298(5)
Cs(1)-C(5)	3.404(5)
Cs(1)-C(2)	3.497(5)
Cs(1)-C(4)	3.658(5)
Cs(1)-C(3)	3.712(5)
Cs(1)-C(31)	3.75(2)
C(26)-O(6)	1.41(2)
C(26)-C(27)	1.52(3)
C(27)-O(1)	1.42(2)
O(1)-C(28)	1.43(2)
C(28)-C(29)	1.49(3)
C(29)-O(2)	1.43(2)
O(2)-C(30)	1.43(2)
C(30)-C(31)	1.48(3)
O(3)-C(31)	1.40(2)
O(3)-C(32)	1.41(2)
C(32)-C(33)	1.47(3)
C(33)-O(4)	1.40(2)
O(4)-C(34)	1.43(2)
C(34)-C(35)	1.51(3)
O(5)-C(35)	1.44(2)
O(5)-C(36)	1.45(2)
C(36)-C(37)	1.59(2)
O(6)-C(37)	1.477(13)
C(1)-C(5)	1.42
C(1)-C(2)	1.42
C(2)-C(3)	1.42
C(3)-C(4)	1.42
C(4)-C(5)	1.42
C(16)-C(17)	1.42
C(16)-C(20)	1.42
C(17)-C(18)	1.42
C(18)-C(19)	1.42
C(19)-C(20)	1.42
C(6)-C(7)	1.42
C(6)-C(10)	1.42
C(7)-C(8)	1.42

C(8)-C(9)	1.42
C(9)-C(10)	1.42
C(21)-C(22)	1.42
C(21)-C(25)	1.42
C(22)-C(23)	1.42
C(23)-C(24)	1.42
C(24)-C(25)	1.42
C(21')-C(22')	1.26
C(21')-C(25')	1.35
C(22')-C(23')	1.39
C(23')-C(24')	1.45
C(24')-C(25')	1.47
C(11)-C(12)	1.40
C(11)-C(15)	1.42
C(12)-C(13)	1.43
C(13)-C(14)	1.36
C(14)-C(15)	1.38
C(15')-C(14')	1.26
C(15')-C(11')	1.45
C(14')-C(13')	1.41
C(13')-C(12')	1.43
C(12')-C(11')	1.36

C(25')-Pb(2)-C(21')	28.21(9)
C(25')-Pb(2)-C(22')	48.09(12)
C(21')-Pb(2)-C(22')	26.13(7)
C(24)-Pb(2)-C(25)	29.45(10)
C(25')-Pb(2)-C(23')	47.64(11)
C(21')-Pb(2)-C(23')	43.36(11)
C(22')-Pb(2)-C(23')	28.71(9)
C(24)-Pb(2)-C(23)	29.31(7)
C(25)-Pb(2)-C(23)	48.25(12)
C(25')-Pb(2)-C(16)	101.4(3)
C(21')-Pb(2)-C(16)	82.2(3)
C(24)-Pb(2)-C(16)	117.2(3)
C(22')-Pb(2)-C(16)	87.7(3)
C(25)-Pb(2)-C(16)	88.1(3)
C(23')-Pb(2)-C(16)	116.4(3)
C(23)-Pb(2)-C(16)	128.8(2)
C(24)-Pb(2)-C(21)	48.20(12)
C(25)-Pb(2)-C(21)	29.18(7)
C(23)-Pb(2)-C(21)	47.89(12)
C(16)-Pb(2)-C(21)	80.9(3)
C(25')-Pb(2)-C(20)	126.1(3)
C(21')-Pb(2)-C(20)	101.0(3)
C(24)-Pb(2)-C(20)	140.1(3)
C(22')-Pb(2)-C(20)	95.0(3)
C(25)-Pb(2)-C(20)	111.3(3)
C(23')-Pb(2)-C(20)	119.0(3)
C(23)-Pb(2)-C(20)	135.6(3)
C(16)-Pb(2)-C(20)	29.0
C(21)-Pb(2)-C(20)	94.0(3)
C(24)-Pb(2)-C(22)	48.05(11)
C(25)-Pb(2)-C(22)	47.97(11)
C(23)-Pb(2)-C(22)	28.97(8)
C(16)-Pb(2)-C(22)	104.2(3)
C(21)-Pb(2)-C(22)	28.90(9)
C(20)-Pb(2)-C(22)	106.6(3)
C(25')-Pb(2)-C(17)	103.0(3)
C(21')-Pb(2)-C(17)	95.6(3)

C(24)-Pb(2)-C(17)	117.8(3)
C(22')-Pb(2)-C(17)	110.3(3)
C(25)-Pb(2)-C(17)	94.5(3)
C(23')-Pb(2)-C(17)	137.7(3)
C(23)-Pb(2)-C(17)	142.7(2)
C(16)-Pb(2)-C(17)	28.80(5)
C(21)-Pb(2)-C(17)	100.1(3)
C(20)-Pb(2)-C(17)	47.43(8)
C(22)-Pb(2)-C(17)	127.9(3)
O(3)-Cs(1)-O(5)	111.6(4)
O(3)-Cs(1)-O(6)	155.2(4)
O(5)-Cs(1)-O(6)	56.8(4)
O(3)-Cs(1)-O(2)	56.3(4)
O(5)-Cs(1)-O(2)	121.4(3)
O(6)-Cs(1)-O(2)	108.4(3)
O(3)-Cs(1)-O(4)	56.3(4)
O(5)-Cs(1)-O(4)	55.3(4)
O(6)-Cs(1)-O(4)	108.5(3)
O(2)-Cs(1)-O(4)	89.0(3)
O(3)-Cs(1)-O(1)	106.9(4)
O(5)-Cs(1)-O(1)	88.1(3)
O(6)-Cs(1)-O(1)	54.6(3)
O(2)-Cs(1)-O(1)	53.9(3)
O(4)-Cs(1)-O(1)	103.7(3)
O(3)-Cs(1)-C(1)	108.1(3)
O(5)-Cs(1)-C(1)	99.8(3)
O(6)-Cs(1)-C(1)	96.0(3)
O(2)-Cs(1)-C(1)	138.7(3)
O(4)-Cs(1)-C(1)	114.7(2)
O(1)-Cs(1)-C(1)	138.0(3)
O(3)-Cs(1)-C(5)	119.4(3)
O(5)-Cs(1)-C(5)	75.5(3)
O(6)-Cs(1)-C(5)	80.9(2)
O(2)-Cs(1)-C(5)	163.1(3)
O(4)-Cs(1)-C(5)	101.6(2)
O(1)-Cs(1)-C(5)	133.8(3)
C(1)-Cs(1)-C(5)	24.4
O(3)-Cs(1)-C(2)	84.8(3)
O(5)-Cs(1)-C(2)	104.5(3)
O(6)-Cs(1)-C(2)	118.4(2)
O(2)-Cs(1)-C(2)	127.2(3)
O(4)-Cs(1)-C(2)	97.6(2)
O(1)-Cs(1)-C(2)	158.6(3)
C(1)-Cs(1)-C(2)	23.9
C(5)-Cs(1)-C(2)	38.87(6)
O(3)-Cs(1)-C(4)	101.4(3)
O(5)-Cs(1)-C(4)	67.3(3)
O(6)-Cs(1)-C(4)	93.8(2)
O(2)-Cs(1)-C(4)	157.4(3)
O(4)-Cs(1)-C(4)	79.6(2)
O(1)-Cs(1)-C(4)	147.9(3)
C(1)-Cs(1)-C(4)	38.15(5)
C(5)-Cs(1)-C(4)	22.8
C(2)-Cs(1)-C(4)	37.38(5)
O(3)-Cs(1)-C(3)	82.2(3)
O(5)-Cs(1)-C(3)	84.6(3)
O(6)-Cs(1)-C(3)	115.5(2)
O(2)-Cs(1)-C(3)	136.1(3)
O(4)-Cs(1)-C(3)	77.6(2)
O(1)-Cs(1)-C(3)	170.0(3)

C(1)-Cs(1)-C(3)	37.71(6)
C(5)-Cs(1)-C(3)	37.37(5)
C(2)-Cs(1)-C(3)	22.5
C(4)-Cs(1)-C(3)	22.2
O(3)-Cs(1)-C(31)	20.4(4)
O(5)-Cs(1)-C(31)	126.5(4)
O(6)-Cs(1)-C(31)	146.6(4)
O(2)-Cs(1)-C(31)	38.7(4)
O(4)-Cs(1)-C(31)	72.9(4)
O(1)-Cs(1)-C(31)	92.2(4)
C(1)-Cs(1)-C(31)	114.1(3)
C(5)-Cs(1)-C(31)	132.3(3)
C(2)-Cs(1)-C(31)	93.8(3)
C(4)-Cs(1)-C(31)	118.7(3)
C(3)-Cs(1)-C(31)	97.6(3)
O(6)-C(26)-C(27)	110(2)
O(1)-C(27)-C(26)	109(2)
O(1)-C(27)-Cs(1)	50.6(9)
C(26)-C(27)-Cs(1)	81.6(12)
C(27)-O(1)-C(28)	111(2)
C(27)-O(1)-Cs(1)	109.3(11)
C(28)-O(1)-Cs(1)	111.2(10)
O(1)-C(28)-C(29)	109(2)
O(2)-C(29)-C(28)	108(2)
C(30)-O(2)-C(29)	114.5(14)
C(30)-O(2)-Cs(1)	116.9(10)
C(29)-O(2)-Cs(1)	118.7(10)
O(2)-C(30)-C(31)	109(2)
C(31)-O(3)-C(32)	114(2)
C(31)-O(3)-Cs(1)	111.1(12)
C(32)-O(3)-Cs(1)	119.3(12)
O(3)-C(31)-C(30)	117(2)
O(3)-C(31)-Cs(1)	48.5(10)
C(30)-C(31)-Cs(1)	88.5(12)
O(3)-C(32)-C(33)	109(2)
O(3)-C(32)-Cs(1)	42.3(9)
C(33)-C(32)-Cs(1)	74.1(13)
O(4)-C(33)-C(32)	113(2)
O(4)-C(33)-Cs(1)	54.3(11)
C(32)-C(33)-Cs(1)	83.9(13)
C(33)-O(4)-C(34)	114(2)
C(33)-O(4)-Cs(1)	104.6(13)
C(34)-O(4)-Cs(1)	105.0(10)
O(4)-C(34)-C(35)	111(2)
O(4)-C(34)-Cs(1)	53.7(9)
C(35)-C(34)-Cs(1)	85.5(11)
C(35)-O(5)-C(36)	113(2)
C(35)-O(5)-Cs(1)	122.6(11)
C(36)-O(5)-Cs(1)	119.5(11)
O(5)-C(35)-C(34)	107(2)
O(5)-C(36)-C(37)	108(2)
C(26)-O(6)-C(37)	118.5(12)
C(26)-O(6)-Cs(1)	120.8(11)
C(37)-O(6)-Cs(1)	108.9(6)
O(6)-C(37)-C(36)	105.0(10)
O(6)-C(37)-Cs(1)	49.5(5)
C(36)-C(37)-Cs(1)	82.9(8)
C(5)-C(1)-C(2)	108.0
C(5)-C(1)-Cs(1)	81.98(10)
C(2)-C(1)-Cs(1)	85.93(11)

C(1)-C(2)-C(3)	108.0
C(1)-C(2)-Cs(1)	70.17(10)
C(3)-C(2)-Cs(1)	87.30(9)
C(4)-C(3)-C(2)	108.0
C(4)-C(3)-Cs(1)	76.76(9)
C(2)-C(3)-Cs(1)	70.22(9)
C(3)-C(4)-C(5)	108.0
C(3)-C(4)-Cs(1)	81.03(10)
C(5)-C(4)-Cs(1)	68.47(10)
C(1)-C(5)-C(4)	108.0
C(1)-C(5)-Cs(1)	73.61(10)
C(4)-C(5)-Cs(1)	88.68(10)
C(17)-C(16)-C(20)	108.0
C(17)-C(16)-Pb(2)	76.85(12)
C(20)-C(16)-Pb(2)	75.84(12)
C(16)-C(17)-C(18)	108.0
C(16)-C(17)-Pb(2)	74.34(12)
C(18)-C(17)-Pb(2)	76.80(12)
C(19)-C(18)-C(17)	108.1
C(20)-C(19)-C(18)	108.0
C(19)-C(20)-C(16)	108.0
C(19)-C(20)-Pb(2)	77.10(11)
C(16)-C(20)-Pb(2)	75.20(12)
C(7)-C(6)-C(10)	107.9
C(6)-C(7)-C(8)	108.0
C(6)-C(7)-Pb(1)	76.47(12)
C(8)-C(7)-Pb(1)	76.71(12)
C(9)-C(8)-C(7)	108.0
C(8)-C(9)-C(10)	107.9
C(9)-C(10)-C(6)	108.1
C(22)-C(21)-C(25)	108.0
C(22)-C(21)-Pb(2)	76.2(3)
C(25)-C(21)-Pb(2)	73.9(4)
C(23)-C(22)-C(21)	108.0
C(23)-C(22)-Pb(2)	74.4(2)
C(21)-C(22)-Pb(2)	74.9(2)
C(22)-C(23)-C(24)	108.0
C(22)-C(23)-Pb(2)	76.7(3)
C(24)-C(23)-Pb(2)	74.0(4)
C(25)-C(24)-C(23)	108.0
C(25)-C(24)-Pb(2)	75.6(2)
C(23)-C(24)-Pb(2)	76.7(4)
C(24)-C(25)-C(21)	108.0
C(24)-C(25)-Pb(2)	74.9(2)
C(21)-C(25)-Pb(2)	77.0(4)
C(22')-C(21')-C(25')	120.5
C(22')-C(21')-Pb(2)	78.1(4)
C(25')-C(21')-Pb(2)	75.5(3)
C(21')-C(22')-C(23')	102.3
C(21')-C(22')-Pb(2)	75.8(4)
C(23')-C(22')-Pb(2)	76.8(2)
C(22')-C(23')-C(24')	112.3
C(22')-C(23')-Pb(2)	74.5(2)
C(24')-C(23')-Pb(2)	77.3(3)
C(23')-C(24')-C(25')	100.8
C(21')-C(25')-C(24')	103.4
C(21')-C(25')-Pb(2)	76.3(3)
C(24')-C(25')-Pb(2)	79.3(2)
C(12)-C(11)-C(15)	104.4
C(11)-C(12)-C(13)	109.6

C(14)-C(13)-C(12)	106.6
C(13)-C(14)-C(15)	109.6
C(14)-C(15)-C(11)	109.7
C(14')-C(15')-C(11')	108.2
C(15')-C(14')-C(13')	108.5
C(14')-C(13')-C(12')	110.2
C(11')-C(12')-C(13')	101.9
C(12')-C(11')-C(15')	111.0

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

© 1999 American Chemical Society, Organometallics, Beswick om980777p Supporting Info Page 47

Table 1. Crystal data and structure refinement for **6**.

Identification code	dw9803
Empirical formula	C49 H73 Li O10 Pb2
Formula weight	1243.39
Temperature	180(2) K
Wavelength	0.71069 A
Crystal system	monoclinic
Space group	P2(1)/n
Unit cell dimensions	a = 13.208(9) A alpha = 90 deg. b = 16.110(7) A beta = 97.47(4) deg. c = 23.747(9) A gamma = 90 deg.
Volume	5010(5) A^3
Z	4
Density (calculated)	1.648 Mg/m^3
Absorption coefficient	6.765 mm^-1
F(000)	2456
Crystal size	0.30 x 0.25 x 0.20 mm
Theta range for data collection	2.51 to 25.00 deg.
Index ranges	-14<=h<=15, 0<=k<=19, -28<=l<=28
Reflections collected	12273
Independent reflections	8803 [R(int) = 0.1380]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	8782 / 0 / 182
Goodness-of-fit on F^2	1.008
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0723, wR2 = 0.1588
R indices (all data)	R1 = 0.1918, wR2 = 0.2367
Largest diff. peak and hole	1.342 and -1.269 e.A^-3

© 1999 American Chemical Society, Organometallics, Beswick om980777p Supporting Info Page 48

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Pb(2)	-3778(1)	3470(1)	3707(1)	28(1)
Pb(1)	560(1)	2946(1)	4169(1)	30(1)
Li(1)	3289(29)	-1770(24)	3699(18)	47(10)
O(1)	2522(12)	-3082(10)	3806(7)	52(4)
C(26)	3070(17)	-3657(14)	4141(10)	46(6)
C(27)	3594(17)	-3160(14)	4618(10)	44(6)
O(2)	4272(11)	-2522(9)	4440(6)	40(4)
C(28)	5180(18)	-2826(15)	4335(11)	53(7)
C(29)	5657(17)	-2140(14)	4009(10)	47(6)
O(3)	5025(13)	-1953(11)	3490(8)	65(5)
C(30)	5159(18)	-2512(17)	3051(11)	58(7)
C(31)	4243(18)	-2400(17)	2617(11)	58(7)
O(4)	3270(12)	-2507(10)	2844(7)	54(4)
C(32)	2972(23)	-3352(18)	2877(14)	80(9)
C(33)	2167(19)	-3416(16)	3241(11)	58(7)
O(5)	2378(11)	-1398(10)	4463(7)	49(4)
C(34)	2646(19)	-631(17)	4724(11)	63(8)
C(35)	3771(16)	-516(15)	4736(9)	45(6)
O(6)	4069(11)	-598(10)	4189(7)	48(4)
C(36)	3963(18)	116(14)	3869(9)	48(6)
C(37)	4017(20)	-100(16)	3266(11)	64(8)
O(7)	3227(13)	-711(11)	3035(7)	63(5)
C(38)	2242(17)	-382(15)	2857(11)	56(7)
C(39)	1507(17)	-1060(14)	2815(10)	46(6)
O(8)	1527(12)	-1505(10)	3351(7)	51(4)
C(40)	967(20)	-1092(17)	3707(11)	63(8)
C(41)	1314(17)	-1500(15)	4266(10)	49(6)
C(21)	-3953(5)	5032(4)	4258(4)	42(6)
C(22)	-3701(5)	5282(4)	3722(4)	39(5)
C(23)	-4494(5)	5115(4)	3298(4)	40(6)
C(24)	-5326(5)	4725(4)	3586(4)	35(5)
C(25)	-4964(5)	4689(4)	4166(4)	34(5)
C(16)	-5025(5)	2221(4)	3095(4)	43(6)
C(17)	-4166(5)	1791(4)	3337(4)	33(5)
C(18)	-4179(5)	1788(4)	3913(4)	46(6)
C(19)	-5043(5)	2223(4)	4045(4)	43(6)
C(20)	-5594(5)	2481(4)	3535(4)	50(6)
C(1)	1816(5)	1644(5)	3927(4)	46(6)
C(2)	2103(6)	1710(5)	4513(4)	41(6)
C(3)	1266(5)	1386(5)	4757(4)	58(7)
C(4)	457(5)	1138(4)	4324(4)	53(7)
C(5)	797(5)	1252(4)	3816(4)	43(6)
C(6)	1925(5)	4046(5)	3741(4)	39(5)
C(7)	2390(6)	3893(5)	4251(4)	51(6)
C(8)	1837(5)	4273(5)	4620(4)	60(7)
C(9)	1044(5)	4679(4)	4336(4)	54(7)
C(10)	1113(5)	4547(4)	3779(4)	65(8)
C(11)	-1594(4)	3455(3)	4408(2)	59(7)
C(12)	-1443(4)	3898(3)	3913(2)	67(8)
C(13)	-1451(4)	3321(3)	3475(2)	57(7)

C(14)	-1588(4)	2501(3)	3653(2)	49(6)
C(15)	-1685(4)	2587(3)	4192(2)	39(5)
C(50)	-3480(26)	5228(22)	1860(15)	114(4)
C(51)	-2950(25)	4700(22)	2167(15)	114(4)
C(52)	-1967(25)	4502(22)	1937(14)	114(4)
C(53)	-2253(26)	4703(22)	1327(14)	114(4)
C(54)	-3183(25)	5140(22)	1353(15)	114(4)
C(55)	-4013(25)	1300(21)	1803(14)	114(4)
C(56)	-3149(26)	1900(22)	1984(15)	114(4)
C(57)	-3130(26)	2375(22)	1493(15)	114(4)
C(58)	-3597(25)	2087(22)	1037(15)	114(4)
C(59)	-4435(26)	1525(21)	1228(15)	114(4)
O(50)	-3480(26)	5228(22)	1860(15)	114(4)
O(51)	-2950(25)	4700(22)	2167(15)	114(4)
O(52)	-1967(25)	4502(22)	1937(14)	114(4)
O(53)	-2253(26)	4703(22)	1327(14)	114(4)
O(54)	-3183(25)	5140(22)	1353(15)	114(4)
O(55)	-4013(25)	1300(21)	1803(14)	114(4)
O(56)	-3149(26)	1900(22)	1984(15)	114(4)
O(57)	-3130(26)	2375(22)	1493(15)	114(4)
O(58)	-3597(25)	2087(22)	1037(15)	114(4)
O(59)	-4435(26)	1525(21)	1228(15)	114(4)

Table 3. Selected bond lengths [A] and angles [deg] for 1.

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Bond lengths [A] and angles [deg] for 1.

Pb(2)-C(19)	2.797(7)
Pb(2)-C(18)	2.817(6)
Pb(2)-C(25)	2.819(7)
Pb(2)-C(21)	2.860(6)
Pb(2)-C(24)	2.864(7)
Pb(2)-C(20)	2.865(7)
Pb(1)-C(1)	2.780(7)
Pb(1)-C(6)	2.810(7)
Pb(1)-C(7)	2.842(7)
Pb(1)-C(8)	2.845(7)
Pb(1)-C(10)	2.866(7)
Li(1)-O(7)	2.32(4)
Li(1)-O(4)	2.35(4)
Li(1)-O(6)	2.38(4)
Li(1)-O(2)	2.38(4)
Li(1)-O(5)	2.38(4)
Li(1)-O(1)	2.37(4)
Li(1)-O(8)	2.41(4)
Li(1)-O(3)	2.43(4)
O(1)-C(26)	1.37(3)
O(1)-C(33)	1.46(3)
C(26)-C(27)	1.48(3)
C(27)-O(2)	1.46(2)
O(2)-C(28)	1.35(2)
C(28)-C(29)	1.53(3)
C(29)-O(3)	1.43(3)
O(3)-C(30)	1.41(3)
C(30)-C(31)	1.49(3)
C(31)-O(4)	1.47(3)
O(4)-C(32)	1.42(3)
C(32)-C(33)	1.46(4)
O(5)-C(34)	1.41(3)
O(5)-C(41)	1.43(3)
C(34)-C(35)	1.49(3)
C(35)-O(6)	1.41(2)
O(6)-C(36)	1.38(3)
C(36)-C(37)	1.48(3)
C(37)-O(7)	1.49(3)
O(7)-C(38)	1.42(3)
C(38)-C(39)	1.46(3)
C(39)-O(8)	1.46(3)
O(8)-C(40)	1.37(3)
C(40)-C(41)	1.50(3)
C(21)-C(22)	1.417(2)
C(21)-C(25)	1.436(2)
C(22)-C(23)	1.381(2)
C(23)-C(24)	1.507(2)
C(24)-C(25)	1.398(2)
C(16)-C(17)	1.389(2)
C(16)-C(20)	1.428(2)
C(17)-C(18)	1.371(2)
C(18)-C(19)	1.408(2)
C(19)-C(20)	1.392(2)
C(1)-C(2)	1.398(2)
C(1)-C(5)	1.479(2)
C(2)-C(3)	1.412(2)

C(3)-C(4)	1.440(2)
C(4)-C(5)	1.353(2)
C(6)-C(7)	1.308(2)
C(6)-C(10)	1.353(2)
C(7)-C(8)	1.357(2)
C(8)-C(9)	1.341(2)
C(9)-C(10)	1.354(2)
C(11)-C(12)	1.410(2)
C(11)-C(15)	1.490(2)
C(12)-C(13)	1.394(2)
C(13)-C(14)	1.405(2)
C(14)-C(15)	1.3104(14)
C(50)-C(51)	1.27(4)
C(50)-C(54)	1.32(4)
C(51)-C(52)	1.51(4)
C(52)-C(53)	1.49(4)
C(53)-C(54)	1.42(4)
C(55)-C(59)	1.45(4)
C(55)-C(56)	1.51(4)
C(56)-C(57)	1.40(4)
C(57)-C(58)	1.26(4)
C(58)-C(59)	1.54(4)
O(50)-O(51)	1.27(4)
O(50)-O(54)	1.32(4)
O(51)-O(52)	1.51(4)
O(52)-O(53)	1.49(4)
O(53)-O(54)	1.42(4)
O(55)-O(59)	1.45(4)
O(55)-O(56)	1.51(4)
O(56)-O(57)	1.40(4)
O(57)-O(58)	1.26(4)
O(58)-O(59)	1.54(4)

C(19)-Pb(2)-C(18)	29.05(6)
C(19)-Pb(2)-C(25)	90.3(2)
C(18)-Pb(2)-C(25)	118.4(2)
C(19)-Pb(2)-C(21)	114.4(2)
C(18)-Pb(2)-C(21)	137.6(2)
C(25)-Pb(2)-C(21)	29.29(6)
C(19)-Pb(2)-C(24)	95.2(2)
C(18)-Pb(2)-C(24)	123.2(2)
C(25)-Pb(2)-C(24)	28.46(5)
C(21)-Pb(2)-C(24)	47.57(9)
C(19)-Pb(2)-C(20)	28.43(5)
C(18)-Pb(2)-C(20)	46.87(9)
C(25)-Pb(2)-C(20)	86.8(2)
C(21)-Pb(2)-C(20)	116.0(2)
C(24)-Pb(2)-C(20)	78.72(14)
C(1)-Pb(1)-C(6)	88.5(2)
C(1)-Pb(1)-C(7)	83.9(2)
C(6)-Pb(1)-C(7)	26.76(5)
C(1)-Pb(1)-C(8)	107.7(2)
C(6)-Pb(1)-C(8)	44.41(9)
C(7)-Pb(1)-C(8)	27.61(5)
C(1)-Pb(1)-C(10)	115.4(2)
C(6)-Pb(1)-C(10)	27.56(6)
C(7)-Pb(1)-C(10)	44.72(9)
C(8)-Pb(1)-C(10)	44.14(9)
O(7)-Li(1)-O(4)	77.8(14)
O(7)-Li(1)-O(6)	74.0(13)

O(4)-Li(1)-O(6)	141(2)
O(7)-Li(1)-O(2)	148(2)
O(4)-Li(1)-O(2)	109(2)
O(6)-Li(1)-O(2)	83.2(14)
O(7)-Li(1)-O(5)	111(2)
O(4)-Li(1)-O(5)	147(2)
O(6)-Li(1)-O(5)	70.0(12)
O(2)-Li(1)-O(5)	81.1(14)
O(7)-Li(1)-O(1)	139(2)
O(4)-Li(1)-O(1)	71.6(13)
O(6)-Li(1)-O(1)	145(2)
O(2)-Li(1)-O(1)	70.6(12)
O(5)-Li(1)-O(1)	83.0(14)
O(7)-Li(1)-O(8)	71.8(13)
O(4)-Li(1)-O(8)	83.7(14)
O(6)-Li(1)-O(8)	112(2)
O(2)-Li(1)-O(8)	139(2)
O(5)-Li(1)-O(8)	69.8(12)
O(1)-Li(1)-O(8)	77.7(13)
O(7)-Li(1)-O(3)	84.3(14)
O(4)-Li(1)-O(3)	70.5(12)
O(6)-Li(1)-O(3)	80.5(13)
O(2)-Li(1)-O(3)	69.5(12)
O(5)-Li(1)-O(3)	141(2)
O(1)-Li(1)-O(3)	110(2)
O(8)-Li(1)-O(3)	148(2)
C(26)-O(1)-C(33)	112(2)
C(26)-O(1)-Li(1)	118(2)
C(33)-O(1)-Li(1)	109(2)
O(1)-C(26)-C(27)	104(2)
O(2)-C(27)-C(26)	114(2)
C(28)-O(2)-C(27)	113(2)
C(28)-O(2)-Li(1)	118(2)
C(27)-O(2)-Li(1)	106(2)
O(2)-C(28)-C(29)	105(2)
O(3)-C(29)-C(28)	111(2)
C(30)-O(3)-C(29)	113(2)
C(30)-O(3)-Li(1)	116(2)
C(29)-O(3)-Li(1)	108(2)
O(3)-C(30)-C(31)	105(2)
O(4)-C(31)-C(30)	114(2)
C(32)-O(4)-C(31)	113(2)
C(32)-O(4)-Li(1)	114(2)
C(31)-O(4)-Li(1)	110(2)
O(4)-C(32)-C(33)	109(2)
C(32)-C(33)-O(1)	110(2)
C(34)-O(5)-C(41)	115(2)
C(34)-O(5)-Li(1)	116(2)
C(41)-O(5)-Li(1)	107(2)
O(5)-C(34)-C(35)	108(2)
O(6)-C(35)-C(34)	112(2)
C(36)-O(6)-C(35)	114(2)
C(36)-O(6)-Li(1)	113(2)
C(35)-O(6)-Li(1)	112(2)
O(6)-C(36)-C(37)	109(2)
C(36)-C(37)-O(7)	113(2)
C(38)-O(7)-C(37)	116(2)
C(38)-O(7)-Li(1)	115(2)
C(37)-O(7)-Li(1)	106(2)
O(7)-C(38)-C(39)	109(2)

C(38)-C(39)-O(8)	112(2)
C(40)-O(8)-C(39)	111(2)
C(40)-O(8)-Li(1)	117(2)
C(39)-O(8)-Li(1)	107(2)
O(8)-C(40)-C(41)	102(2)
O(5)-C(41)-C(40)	114(2)
C(22)-C(21)-C(25)	107.1
C(22)-C(21)-Pb(2)	78.23(12)
C(25)-C(21)-Pb(2)	73.78(11)
C(23)-C(22)-C(21)	110.9
C(22)-C(23)-C(24)	106.2
C(25)-C(24)-C(23)	106.8
C(25)-C(24)-Pb(2)	73.97(12)
C(23)-C(24)-Pb(2)	77.61(12)
C(24)-C(25)-C(21)	109.1
C(24)-C(25)-Pb(2)	77.57(12)
C(21)-C(25)-Pb(2)	76.94(11)
C(17)-C(16)-C(20)	108.9
C(18)-C(17)-C(16)	107.4
C(17)-C(18)-C(19)	109.6
C(17)-C(18)-Pb(2)	78.24(12)
C(19)-C(18)-Pb(2)	74.71(11)
C(20)-C(19)-C(18)	107.6
C(20)-C(19)-Pb(2)	78.50(12)
C(18)-C(19)-Pb(2)	76.24(12)
C(19)-C(20)-C(16)	106.5
C(19)-C(20)-Pb(2)	73.07(12)
C(16)-C(20)-Pb(2)	75.88(12)
C(2)-C(1)-C(5)	109.4
C(2)-C(1)-Pb(1)	80.15(14)
C(5)-C(1)-Pb(1)	78.76(12)
C(1)-C(2)-C(3)	104.7
C(2)-C(3)-C(4)	111.0
C(5)-C(4)-C(3)	107.3
C(4)-C(5)-C(1)	107.4
C(7)-C(6)-C(10)	109.4
C(7)-C(6)-Pb(1)	78.00(13)
C(10)-C(6)-Pb(1)	78.53(12)
C(6)-C(7)-C(8)	106.6
C(6)-C(7)-Pb(1)	75.25(13)
C(8)-C(7)-Pb(1)	76.30(13)
C(9)-C(8)-C(7)	110.2
C(9)-C(8)-Pb(1)	77.90(12)
C(7)-C(8)-Pb(1)	76.09(13)
C(8)-C(9)-C(10)	105.5
C(6)-C(10)-C(9)	108.2
C(6)-C(10)-Pb(1)	73.91(12)
C(9)-C(10)-Pb(1)	76.92(13)
C(12)-C(11)-C(15)	101.7
C(13)-C(12)-C(11)	107.2
C(12)-C(13)-C(14)	113.1
C(15)-C(14)-C(13)	103.1
C(14)-C(15)-C(11)	114.9
C(51)-C(50)-C(54)	104(4)
C(50)-C(51)-C(52)	112(3)
C(53)-C(52)-C(51)	101(3)
C(54)-C(53)-C(52)	100(3)
C(50)-C(54)-C(53)	117(3)
C(59)-C(55)-C(56)	107(3)
C(57)-C(56)-C(55)	102(3)

C(58)-C(57)-C(56)	117(4)
C(57)-C(58)-C(59)	105(3)
C(55)-C(59)-C(58)	103(3)
O(51)-O(50)-O(54)	104(4)
O(50)-O(51)-O(52)	112(3)
O(53)-O(52)-O(51)	101(3)
O(54)-O(53)-O(52)	100(3)
O(50)-O(54)-O(53)	117(3)
O(59)-O(55)-O(56)	107(3)
O(57)-O(56)-O(55)	102(3)
O(58)-O(57)-O(56)	117(4)
O(57)-O(58)-O(59)	105(3)
O(55)-O(59)-O(58)	103(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 5. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(2)	26(1)	21(1)	38(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
Pb(1)	23(1)	24(1)	43(1)	-2(1)	7(1)	-1(1)

© 1999 American Chemical Society, Organometallics, Beswick om980777p Supporting Info Page 57

Table 6. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(26A)	3570(17)	-3942(14)	3932(10)	55
H(26B)	2614(17)	-4077(14)	4280(10)	55
H(27A)	3072(17)	-2890(14)	4821(10)	53
H(27B)	3997(17)	-3538(14)	4890(10)	53
H(28A)	5085(18)	-3338(15)	4103(11)	63
H(28B)	5620(18)	-2955(15)	4694(11)	63
H(29A)	5748(17)	-1634(14)	4247(10)	57
H(29B)	6338(17)	-2320(14)	3926(10)	57
H(30A)	5198(18)	-3090(17)	3195(11)	69
H(30B)	5793(18)	-2385(17)	2887(11)	69
H(31A)	4263(18)	-1837(17)	2452(11)	70
H(31B)	4277(18)	-2805(17)	2307(11)	70
H(32A)	3565(23)	-3693(18)	3035(14)	97
H(32B)	2720(23)	-3563(18)	2493(14)	97
H(33A)	1969(19)	-4005(16)	3274(11)	69
H(33B)	1559(19)	-3103(16)	3069(11)	69
H(34A)	2464(19)	-625(17)	5115(11)	76
H(34B)	2274(19)	-175(17)	4507(11)	76
H(35A)	3967(16)	41(15)	4888(9)	54
H(35B)	4136(16)	-934(15)	4993(9)	54
H(36A)	4514(18)	512(14)	4005(9)	57
H(36B)	3299(18)	382(14)	3906(9)	57
H(37A)	4701(20)	-330(16)	3232(11)	77
H(37B)	3933(20)	413(16)	3034(11)	77
H(38A)	2229(17)	-107(15)	2483(11)	68
H(38B)	2065(17)	35(15)	3134(11)	68
H(39A)	1662(17)	-1452(14)	2516(10)	56
H(39B)	813(17)	-835(14)	2701(10)	56
H(40A)	225(20)	-1171(17)	3593(11)	76
H(40B)	1125(20)	-491(17)	3718(11)	76
H(41A)	915(17)	-1269(15)	4555(10)	59
H(41B)	1161(17)	-2101(15)	4232(10)	59
H(21)	-3532(5)	5081(4)	4613(4)	50
H(22)	-3072(5)	5532(4)	3662(4)	47
H(23)	-4510(5)	5225(5)	2904(4)	48
H(24)	-5973(6)	4540(5)	3409(4)	42
H(25)	-5329(6)	4472(5)	4452(4)	40
H(16)	-5204(6)	2325(5)	2701(4)	51
H(17)	-3662(5)	1544(4)	3139(4)	40
H(18)	-3681(5)	1532(4)	4183(4)	56
H(19)	-5218(5)	2323(5)	4415(4)	51
H(20)	-6225(6)	2773(5)	3490(4)	60
H(1)	2214(6)	1823(5)	3644(4)	55
H(2)	2723(6)	1925(5)	4706(4)	49
H(3)	1240(6)	1338(5)	5153(4)	69
H(4)	-195(5)	933(4)	4384(4)	63
H(5)	446(5)	1107(4)	3455(4)	51
H(6)	2125(6)	3839(5)	3398(4)	47
H(7)	2995(6)	3577(5)	4344(4)	61
H(8)	1991(6)	4254(5)	5022(4)	72
H(9)	539(5)	4993(4)	4492(4)	65

H(10)	669(5)	4767(4)	3468(4)	78
H(11)	-1629(4)	3658(4)	4780(2)	71
H(12)	-1353(4)	4481(3)	3884(3)	80
H(13)	-1372(4)	3467(4)	3096(2)	69
H(14)	-1606(4)	2006(3)	3435(3)	59
H(15)	-1804(4)	2129(3)	4427(3)	46
H(50A)	-3343(26)	5797(22)	2006(15)	136
H(50B)	-4218(26)	5109(22)	1846(15)	136
H(51A)	-3351(25)	4184(22)	2185(15)	136
H(51B)	-2793(25)	4921(22)	2557(15)	136
H(52A)	-1398(25)	4855(22)	2113(14)	136
H(52B)	-1779(25)	3910(22)	1993(14)	136
H(53A)	-1734(26)	5058(22)	1180(14)	136
H(53B)	-2361(26)	4196(22)	1091(14)	136
H(54A)	-3114(25)	5700(22)	1191(15)	136
H(54B)	-3732(25)	4849(22)	1105(15)	136
H(55A)	-3754(25)	723(21)	1813(14)	136
H(55B)	-4542(25)	1343(21)	2061(14)	136
H(56A)	-3295(26)	2247(22)	2308(15)	136
H(56B)	-2495(26)	1603(22)	2089(15)	136
H(57A)	-3422(26)	2927(22)	1559(15)	136
H(57B)	-2408(26)	2461(22)	1437(15)	136
H(58A)	-3129(25)	1762(22)	829(15)	136
H(58B)	-3901(25)	2539(22)	788(15)	136
H(59A)	-5087(26)	1830(21)	1223(15)	136
H(59B)	-4550(26)	1028(21)	983(15)	136