

Table 1. Crystal data and structure refinement for structure8.

|                                   |                                                                                                                                 |
|-----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Identification code               | structure8                                                                                                                      |
| Empirical formula                 | C130 H132 Cu8 N34 O42                                                                                                           |
| Formula weight                    | 3351.02                                                                                                                         |
| Temperature                       | 153(2) K                                                                                                                        |
| Wavelength                        | 0.71073 Å                                                                                                                       |
| Crystal system                    | Triclinic                                                                                                                       |
| Space group                       | P-1                                                                                                                             |
| Unit cell dimensions              | a = 15.4312(19) Å $\alpha$ = 110.336(2)°.<br>b = 15.4407(19) Å $\beta$ = 99.593(2)°.<br>c = 17.314(2) Å $\gamma$ = 103.977(2)°. |
| Volume                            | 3608.7(8) Å <sup>3</sup>                                                                                                        |
| Z                                 | 1                                                                                                                               |
| Calculated density                | 1.542 Mg/m <sup>3</sup>                                                                                                         |
| Absorption coefficient            | 1.248 mm <sup>-1</sup>                                                                                                          |
| F(000)                            | 1718                                                                                                                            |
| Crystal size                      | 0.43 x 0.28 x 0.05 mm <sup>3</sup>                                                                                              |
| Theta range for data collection   | 1.41 to 28.40°.                                                                                                                 |
| Limiting indices                  | -20 ≤ h ≤ 20, -20 ≤ k ≤ 20, -21 ≤ l ≤ 22                                                                                        |
| Reflections collected             | 61092                                                                                                                           |
| Independent reflections           | 16073 [R(int) = 0.0639]                                                                                                         |
| Completeness to theta = 28.40°    | 88.5%                                                                                                                           |
| Absorption correction             | Empirical                                                                                                                       |
| Max. and min. transmission        | 1.000 and 0.770                                                                                                                 |
| Refinement method                 | Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>                                                                                     |
| Data / restraints / parameters    | 16073 / 4 / 1052                                                                                                                |
| Goodness-of-fit on F <sup>2</sup> | 1.031                                                                                                                           |
| Final R indices [I > 2σ(I)]       | R1 = 0.0680, wR2 = 0.1733                                                                                                       |
| R indices (all data)              | R1 = 0.1101, wR2 = 0.1895                                                                                                       |
| Largest diff. peak and hole       | 1.361 and -0.694 e.Å <sup>-3</sup>                                                                                              |

Table 2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for struct8. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

|        | x         | y         | z       | U(eq)   |
|--------|-----------|-----------|---------|---------|
| Cu(1)  | 9604(1)   | 7095(1)   | 1675(1) | 30(1)   |
| Cu(2)  | 9546(1)   | 8921(1)   | 2869(1) | 30(1)   |
| Cu(3)  | 5974(1)   | 3769(1)   | 4018(1) | 29(1)   |
| Cu(4)  | 6048(1)   | 5213(1)   | 5680(1) | 34(1)   |
| N(1)   | 10487(3)  | 6312(3)   | 1542(3) | 33(1)   |
| N(2)   | 8690(3)   | 5763(3)   | 936(3)  | 33(1)   |
| N(3)   | 8573(3)   | 9452(3)   | 3304(3) | 33(1)   |
| N(4)   | 10367(3)  | 10087(3)  | 3941(2) | 31(1)   |
| N(5)   | 9757(3)   | 7610(3)   | 614(3)  | 33(1)   |
| N(6)   | 9746(3)   | 9809(3)   | 2059(3) | 32(1)   |
| N(7)   | 5615(3)   | 2304(3)   | 3472(3) | 35(1)   |
| N(8)   | 5773(3)   | 3566(3)   | 2779(3) | 31(1)   |
| N(9)   | 6236(3)   | 6651(3)   | 6294(3) | 37(1)   |
| N(10)  | 6120(3)   | 5291(3)   | 6870(3) | 37(1)   |
| N(11)  | 7543(3)   | 4100(3)   | 4210(3) | 34(1)   |
| N(14)  | 8891(5)   | 5708(5)   | 2789(4) | 67(2)   |
| N(15)  | 13900(10) | 12886(13) | 6165(8) | 87(6)   |
| N(15A) | 14240(9)  | 12177(14) | 5652(8) | 82(5)   |
| N(16)  | 2996(13)  | -620(30)  | 779(9)  | 520(30) |
| N(17)  | 6859(11)  | 8394(18)  | 236(16) | 264(17) |
| C(1)   | 11402(4)  | 6663(4)   | 1867(3) | 39(1)   |
| C(2)   | 11946(4)  | 6058(5)   | 1806(4) | 48(2)   |
| C(3)   | 11519(4)  | 5061(5)   | 1402(4) | 51(2)   |
| C(4)   | 10580(4)  | 4706(4)   | 1063(3) | 43(1)   |
| C(5)   | 10069(4)  | 5332(3)   | 1133(3) | 32(1)   |
| C(6)   | 9046(4)   | 5022(3)   | 792(3)  | 34(1)   |
| C(7)   | 8484(4)   | 4063(4)   | 361(4)  | 48(1)   |
| C(8)   | 7537(4)   | 3846(4)   | 43(4)   | 55(2)   |
| C(9)   | 7187(4)   | 4605(4)   | 180(3)  | 45(1)   |
| C(10)  | 7773(4)   | 5551(4)   | 635(3)  | 41(1)   |
| C(11)  | 7662(4)   | 9054(4)   | 2950(4) | 45(1)   |

|        |           |           |          |        |
|--------|-----------|-----------|----------|--------|
| C (12) | 7038 (5)  | 9463 (5)  | 3297 (4) | 64 (2) |
| C (13) | 7364 (5)  | 10317 (5) | 4031 (4) | 64 (2) |
| C (14) | 8310 (4)  | 10724 (5) | 4383 (4) | 52 (2) |
| C (15) | 8897 (4)  | 10278 (4) | 4018 (3) | 35 (1) |
| C (16) | 9917 (4)  | 10652 (3) | 4370 (3) | 32 (1) |
| C (17) | 10410 (4) | 11505 (4) | 5089 (3) | 41 (1) |
| C (18) | 11359 (4) | 11783 (4) | 5357 (3) | 47 (1) |
| C (19) | 11803 (4) | 11199 (4) | 4909 (4) | 47 (1) |
| C (20) | 11285 (4) | 10356 (4) | 4212 (3) | 40 (1) |
| C (21) | 9035 (4)  | 7624 (5)  | 97 (4)   | 61 (2) |
| C (22) | 9094 (4)  | 8069 (5)  | -469 (4) | 63 (2) |
| C (23) | 9951 (3)  | 8550 (3)  | -507 (3) | 26 (1) |
| C (24) | 10706 (4) | 8521 (4)  | 20 (4)   | 43 (1) |
| C (25) | 10568 (4) | 8049 (4)  | 553 (4)  | 42 (1) |
| C (26) | 9045 (4)  | 9796 (6)  | 1528 (5) | 90 (3) |
| C (27) | 9112 (4)  | 10323 (6) | 1016 (5) | 92 (3) |
| C (28) | 9944 (3)  | 10902 (3) | 1052 (3) | 28 (1) |
| C (29) | 10672 (4) | 10911 (6) | 1609 (5) | 74 (2) |
| C (30) | 10544 (4) | 10358 (6) | 2089 (5) | 74 (2) |
| C (31) | 5513 (3)  | 1706 (4)  | 3883 (4) | 43 (1) |
| C (32) | 5239 (4)  | 698 (4)   | 3449 (5) | 52 (2) |
| C (33) | 5071 (4)  | 313 (4)   | 2584 (5) | 58 (2) |
| C (34) | 5163 (4)  | 901 (4)   | 2149 (4) | 50 (2) |
| C (35) | 5428 (3)  | 1911 (4)  | 2610 (4) | 41 (1) |
| C (36) | 5536 (3)  | 2626 (4)  | 2217 (3) | 38 (1) |
| C (37) | 5400 (4)  | 2369 (5)  | 1341 (4) | 50 (2) |
| C (38) | 5542 (4)  | 3098 (5)  | 1051 (4) | 55 (2) |
| C (39) | 5813 (4)  | 4068 (4)  | 1628 (4) | 43 (1) |
| C (40) | 5909 (3)  | 4267 (4)  | 2483 (3) | 38 (1) |
| C (41) | 6303 (3)  | 7293 (4)  | 5948 (4) | 42 (1) |
| C (42) | 6611 (4)  | 8290 (4)  | 6444 (5) | 50 (2) |
| C (43) | 6847 (4)  | 8620 (5)  | 7324 (5) | 55 (2) |
| C (44) | 6770 (3)  | 7956 (4)  | 7687 (4) | 49 (2) |
| C (45) | 6466 (3)  | 6968 (4)  | 7163 (4) | 39 (1) |
| C (46) | 6358 (3)  | 6194 (4)  | 7486 (4) | 40 (1) |
| C (47) | 6453 (4)  | 6359 (5)  | 8331 (4) | 48 (2) |
| C (48) | 6258 (4)  | 5573 (6)  | 8556 (4) | 61 (2) |

|         |            |            |           |           |
|---------|------------|------------|-----------|-----------|
| C (49)  | 5985 (4)   | 4644 (6)   | 7933 (4)  | 56 (2)    |
| C (50)  | 5934 (3)   | 4520 (4)   | 7086 (4)  | 44 (1)    |
| C (51)  | 8001 (4)   | 3676 (4)   | 4572 (5)  | 62 (2)    |
| C (52)  | 8955 (4)   | 3993 (4)   | 4883 (5)  | 64 (2)    |
| C (53)  | 9485 (3)   | 4806 (3)   | 4822 (3)  | 29 (1)    |
| C (54)  | 8995 (4)   | 5222 (6)   | 4418 (5)  | 74 (2)    |
| C (55)  | 8046 (4)   | 4851 (5)   | 4126 (5)  | 68 (2)    |
| O (1)   | 8695 (2)   | 7724 (2)   | 1980 (2)  | 35 (1)    |
| O (2)   | 10465 (2)  | 8257 (2)   | 2642 (2)  | 35 (1)    |
| O (3)   | 5944 (2)   | 3851 (2)   | 5151 (2)  | 32 (1)    |
| O (4)   | 5801 (2)   | 5048 (2)   | 4493 (2)  | 34 (1)    |
| O (5)   | 9622 (4)   | 5491 (4)   | 2779 (3)  | 73 (1)    |
| O (6)   | 8115 (4)   | 5087 (4)   | 2340 (3)  | 81 (2)    |
| O (7)   | 8979 (6)   | 6570 (4)   | 3239 (4)  | 143 (3)   |
| O (8)   | 13492 (4)  | 13384 (3)  | 6068 (3)  | 68 (2)    |
| O (9)   | 7038 (13)  | 8730 (20)  | -204 (11) | 296 (17)  |
| O (10)  | 2907 (6)   | -1581 (7)  | 1200 (7)  | 163 (3)   |
| O (11)  | 14608 (15) | 11481 (19) | 5666 (13) | 449 (16)  |
| O (12)  | 14022 (9)  | 12776 (8)  | 6840 (9)  | 230 (5)   |
| O (13)  | 6748 (9)   | 7376 (12)  | 433 (6)   | 232 (6)   |
| O (14)  | 2868 (17)  | -304 (16)  | 1090 (40) | 1000 (60) |
| O (15)  | 6357 (8)   | 8735 (11)  | 958 (6)   | 243 (6)   |
| O (16)  | 3775 (13)  | -1040 (40) | 290 (20)  | 550 (50)  |
| O (16A) | 3550 (20)  | -1382 (11) | 559 (15)  | 195 (15)  |
| O (17)  | 8933 (3)   | 12651 (3)  | 6278 (2)  | 64 (1)    |
| O (18)  | 7117 (3)   | 2975 (3)   | 5999 (3)  | 68 (1)    |
| O (19)  | 12858 (4)  | 13469 (4)  | 7634 (4)  | 99 (2)    |
| O (20)  | 12279 (4)  | 9223 (4)   | 2620 (4)  | 111 (2)   |
| O (21)  | 6625 (8)   | 10598 (16) | 6004 (12) | 357 (14)  |
| O (22)  | 4124 (8)   | -23 (7)    | -318 (6)  | 192 (4)   |
| O (23)  | 5765 (9)   | 2331 (7)   | 8111 (13) | 327 (10)  |
| O (24)  | 5592 (8)   | 5893 (9)   | 806 (9)   | 233 (6)   |
| O (25)  | 15715 (11) | 11830 (11) | 6444 (12) | 139 (6)   |
| O (25A) | 16400 (20) | 10686 (17) | 5642 (15) | 320 (30)  |
| O (26)  | 5503 (13)  | 7328 (19)  | 1116 (11) | 458 (16)  |
| N (13)  | 7842 (3)   | 5910 (3)   | 6169 (3)  | 39 (1)    |
| C (61)  | 8329 (4)   | 6685 (5)   | 6079 (5)  | 71 (2)    |

|        |           |          |          |         |
|--------|-----------|----------|----------|---------|
| C (62) | 8320 (4)  | 5573 (4) | 6625 (4) | 48 (2)  |
| C (60) | 9270 (4)  | 7138 (5) | 6422 (5) | 64 (2)  |
| C (63) | 9278 (4)  | 5994 (4) | 7010 (4) | 51 (2)  |
| C (59) | 9774 (3)  | 6798 (3) | 6912 (3) | 29 (1)  |
| C (58) | 10786 (3) | 7275 (3) | 7316 (3) | 33 (1)  |
| C (57) | 11296 (5) | 8044 (6) | 7185 (6) | 102 (3) |
| C (64) | 11280 (4) | 6980 (5) | 7843 (5) | 73 (2)  |
| C (56) | 12216 (5) | 8515 (7) | 7635 (7) | 126 (4) |
| N (12) | 12680 (3) | 8242 (4) | 8156 (4) | 64 (2)  |
| C (65) | 12212 (5) | 7483 (6) | 8239 (6) | 82 (2)  |

---

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for struct8.

|             |           |
|-------------|-----------|
| Cu(1)-O(1)  | 1.933(3)  |
| Cu(1)-O(2)  | 1.951(3)  |
| Cu(1)-N(2)  | 2.006(4)  |
| Cu(1)-N(1)  | 2.020(4)  |
| Cu(1)-N(5)  | 2.267(4)  |
| Cu(1)-Cu(2) | 2.8913(8) |
| Cu(2)-O(1)  | 1.920(3)  |
| Cu(2)-O(2)  | 1.956(3)  |
| Cu(2)-N(3)  | 2.010(4)  |
| Cu(2)-N(4)  | 2.021(4)  |
| Cu(2)-N(6)  | 2.285(4)  |
| Cu(3)-O(3)  | 1.930(3)  |
| Cu(3)-O(4)  | 1.961(3)  |
| Cu(3)-N(7)  | 2.013(4)  |
| Cu(3)-N(8)  | 2.014(4)  |
| Cu(3)-N(11) | 2.292(4)  |
| Cu(3)-Cu(4) | 2.9276(9) |
| Cu(4)-O(3)  | 1.932(3)  |
| Cu(4)-O(4)  | 1.940(3)  |
| Cu(4)-N(10) | 2.004(4)  |
| Cu(4)-N(9)  | 2.023(4)  |
| N(1)-C(1)   | 1.326(6)  |
| N(1)-C(5)   | 1.356(6)  |
| N(2)-C(10)  | 1.339(6)  |
| N(2)-C(6)   | 1.350(6)  |
| N(3)-C(11)  | 1.328(7)  |
| N(3)-C(15)  | 1.339(6)  |
| N(4)-C(20)  | 1.326(6)  |
| N(4)-C(16)  | 1.346(6)  |
| N(5)-C(25)  | 1.311(6)  |
| N(5)-C(21)  | 1.317(7)  |
| N(6)-C(26)  | 1.289(7)  |
| N(6)-C(30)  | 1.296(7)  |
| N(7)-C(31)  | 1.344(7)  |
| N(7)-C(35)  | 1.350(7)  |

|              |           |
|--------------|-----------|
| N(8)-C(40)   | 1.338(6)  |
| N(8)-C(36)   | 1.353(6)  |
| N(9)-C(41)   | 1.317(7)  |
| N(9)-C(45)   | 1.362(7)  |
| N(10)-C(46)  | 1.344(7)  |
| N(10)-C(50)  | 1.348(7)  |
| N(11)-C(51)  | 1.298(7)  |
| N(11)-C(55)  | 1.299(7)  |
| N(14)-O(5)   | 1.253(7)  |
| N(14)-O(7)   | 1.246(7)  |
| N(14)-O(6)   | 1.254(7)  |
| N(15)-O(8)   | 1.14(2)   |
| N(15)-O(12)  | 1.230(15) |
| N(15)-N(15A) | 1.42(2)   |
| N(15A)-O(11) | 1.34(3)   |
| N(16)-O(14)  | 0.68(6)   |
| N(16)-O(16A) | 1.60(4)   |
| N(16)-O(16)  | 1.71(4)   |
| N(16)-O(10)  | 1.86(4)   |
| N(17)-O(9)   | 1.10(5)   |
| N(17)-O(15)  | 1.58(2)   |
| N(17)-O(13)  | 1.70(3)   |
| C(1)-C(2)    | 1.389(7)  |
| C(2)-C(3)    | 1.378(8)  |
| C(3)-C(4)    | 1.361(8)  |
| C(4)-C(5)    | 1.375(7)  |
| C(5)-C(6)    | 1.483(7)  |
| C(6)-C(7)    | 1.377(7)  |
| C(7)-C(8)    | 1.384(8)  |
| C(8)-C(9)    | 1.371(8)  |
| C(9)-C(10)   | 1.376(7)  |
| C(11)-C(12)  | 1.383(8)  |
| C(12)-C(13)  | 1.382(9)  |
| C(13)-C(14)  | 1.374(9)  |
| C(14)-C(15)  | 1.373(7)  |
| C(15)-C(16)  | 1.476(7)  |
| C(16)-C(17)  | 1.387(7)  |

|                   |           |
|-------------------|-----------|
| C (17) -C (18)    | 1.370 (8) |
| C (18) -C (19)    | 1.368 (8) |
| C (19) -C (20)    | 1.369 (7) |
| C (21) -C (22)    | 1.381 (8) |
| C (22) -C (23)    | 1.376 (7) |
| C (23) -C (24)    | 1.374 (7) |
| C (23) -C (28) #1 | 1.474 (6) |
| C (24) -C (25)    | 1.375 (7) |
| C (26) -C (27)    | 1.396 (8) |
| C (27) -C (28)    | 1.353 (7) |
| C (28) -C (29)    | 1.347 (7) |
| C (28) -C (23) #1 | 1.474 (6) |
| C (29) -C (30)    | 1.386 (8) |
| C (31) -C (32)    | 1.389 (8) |
| C (32) -C (33)    | 1.357 (9) |
| C (33) -C (34)    | 1.364 (9) |
| C (34) -C (35)    | 1.398 (7) |
| C (35) -C (36)    | 1.478 (8) |
| C (36) -C (37)    | 1.391 (8) |
| C (37) -C (38)    | 1.369 (9) |
| C (38) -C (39)    | 1.391 (8) |
| C (39) -C (40)    | 1.377 (7) |
| C (41) -C (42)    | 1.388 (7) |
| C (42) -C (43)    | 1.379 (9) |
| C (43) -C (44)    | 1.369 (9) |
| C (44) -C (45)    | 1.387 (7) |
| C (45) -C (46)    | 1.472 (8) |
| C (46) -C (47)    | 1.371 (8) |
| C (47) -C (48)    | 1.381 (9) |
| C (48) -C (49)    | 1.371 (9) |
| C (49) -C (50)    | 1.397 (8) |
| C (51) -C (52)    | 1.379 (7) |
| C (52) -C (53)    | 1.370 (7) |
| C (53) -C (54)    | 1.359 (7) |
| C (53) -C (53) #2 | 1.491 (9) |
| C (54) -C (55)    | 1.370 (8) |
| O (10) -O (16A)   | 1.66 (3)  |

|                    |            |
|--------------------|------------|
| O (16) -O (16A)    | 0.87 (6)   |
| O (21) -O (25A) #3 | 0.73 (4)   |
| O (25A) -O (21) #4 | 0.73 (4)   |
| N (13) -C (62)     | 1.310 (6)  |
| N (13) -C (61)     | 1.325 (7)  |
| C (61) -C (60)     | 1.373 (8)  |
| C (62) -C (63)     | 1.398 (7)  |
| C (60) -C (59)     | 1.372 (7)  |
| C (63) -C (59)     | 1.374 (7)  |
| C (59) -C (58)     | 1.482 (7)  |
| C (58) -C (64)     | 1.359 (8)  |
| C (58) -C (57)     | 1.369 (8)  |
| C (57) -C (56)     | 1.375 (10) |
| C (64) -C (65)     | 1.379 (8)  |
| C (56) -N (12)     | 1.303 (10) |
| N (12) -C (65)     | 1.289 (9)  |

|                       |             |
|-----------------------|-------------|
| O (1) -Cu (1) -O (2)  | 83.34 (14)  |
| O (1) -Cu (1) -N (2)  | 96.34 (16)  |
| O (2) -Cu (1) -N (2)  | 164.11 (16) |
| O (1) -Cu (1) -N (1)  | 167.49 (16) |
| O (2) -Cu (1) -N (1)  | 96.24 (16)  |
| N (2) -Cu (1) -N (1)  | 80.64 (17)  |
| O (1) -Cu (1) -N (5)  | 93.77 (15)  |
| O (2) -Cu (1) -N (5)  | 98.66 (15)  |
| N (2) -Cu (1) -N (5)  | 97.21 (15)  |
| N (1) -Cu (1) -N (5)  | 98.64 (15)  |
| O (1) -Cu (1) -Cu (2) | 41.19 (10)  |
| O (2) -Cu (1) -Cu (2) | 42.33 (10)  |
| N (2) -Cu (1) -Cu (2) | 136.45 (12) |
| N (1) -Cu (1) -Cu (2) | 138.01 (12) |
| N (5) -Cu (1) -Cu (2) | 95.24 (10)  |
| O (1) -Cu (2) -O (2)  | 83.54 (14)  |
| O (1) -Cu (2) -N (3)  | 96.14 (16)  |
| O (2) -Cu (2) -N (3)  | 166.10 (16) |
| O (1) -Cu (2) -N (4)  | 170.42 (16) |
| O (2) -Cu (2) -N (4)  | 97.70 (16)  |

|                        |             |
|------------------------|-------------|
| N (3) -Cu (2) -N (4)   | 80.37 (17)  |
| O (1) -Cu (2) -N (6)   | 97.89 (15)  |
| O (2) -Cu (2) -N (6)   | 99.95 (15)  |
| N (3) -Cu (2) -N (6)   | 93.86 (15)  |
| N (4) -Cu (2) -N (6)   | 91.27 (15)  |
| O (1) -Cu (2) -Cu (1)  | 41.53 (10)  |
| O (2) -Cu (2) -Cu (1)  | 42.19 (10)  |
| N (3) -Cu (2) -Cu (1)  | 136.93 (12) |
| N (4) -Cu (2) -Cu (1)  | 139.67 (12) |
| N (6) -Cu (2) -Cu (1)  | 98.92 (10)  |
| O (3) -Cu (3) -O (4)   | 80.62 (14)  |
| O (3) -Cu (3) -N (7)   | 95.40 (16)  |
| O (4) -Cu (3) -N (7)   | 157.62 (15) |
| O (3) -Cu (3) -N (8)   | 170.32 (15) |
| O (4) -Cu (3) -N (8)   | 99.69 (15)  |
| N (7) -Cu (3) -N (8)   | 80.60 (17)  |
| O (3) -Cu (3) -N (11)  | 98.02 (14)  |
| O (4) -Cu (3) -N (11)  | 105.15 (15) |
| N (7) -Cu (3) -N (11)  | 97.20 (15)  |
| N (8) -Cu (3) -N (11)  | 91.25 (15)  |
| O (3) -Cu (3) -Cu (4)  | 40.75 (10)  |
| O (4) -Cu (3) -Cu (4)  | 41.09 (10)  |
| N (7) -Cu (3) -Cu (4)  | 135.28 (13) |
| N (8) -Cu (3) -Cu (4)  | 140.74 (12) |
| N (11) -Cu (3) -Cu (4) | 97.56 (10)  |
| O (3) -Cu (4) -O (4)   | 81.10 (14)  |
| O (3) -Cu (4) -N (10)  | 97.12 (16)  |
| O (4) -Cu (4) -N (10)  | 172.31 (16) |
| O (3) -Cu (4) -N (9)   | 176.05 (16) |
| O (4) -Cu (4) -N (9)   | 101.64 (16) |
| N (10) -Cu (4) -N (9)  | 80.53 (18)  |
| O (3) -Cu (4) -Cu (3)  | 40.70 (10)  |
| O (4) -Cu (4) -Cu (3)  | 41.63 (10)  |
| N (10) -Cu (4) -Cu (3) | 137.66 (13) |
| N (9) -Cu (4) -Cu (3)  | 141.29 (13) |
| C (1) -N (1) -C (5)    | 119.0 (4)   |
| C (1) -N (1) -Cu (1)   | 126.1 (4)   |

|                         |            |
|-------------------------|------------|
| C (5) -N (1) -Cu (1)    | 114.6 (3)  |
| C (10) -N (2) -C (6)    | 118.7 (4)  |
| C (10) -N (2) -Cu (1)   | 126.0 (4)  |
| C (6) -N (2) -Cu (1)    | 115.2 (3)  |
| C (11) -N (3) -C (15)   | 118.9 (4)  |
| C (11) -N (3) -Cu (2)   | 125.7 (4)  |
| C (15) -N (3) -Cu (2)   | 115.3 (3)  |
| C (20) -N (4) -C (16)   | 119.3 (4)  |
| C (20) -N (4) -Cu (2)   | 125.9 (3)  |
| C (16) -N (4) -Cu (2)   | 114.7 (3)  |
| C (25) -N (5) -C (21)   | 115.1 (5)  |
| C (25) -N (5) -Cu (1)   | 122.5 (3)  |
| C (21) -N (5) -Cu (1)   | 121.6 (4)  |
| C (26) -N (6) -C (30)   | 114.8 (5)  |
| C (26) -N (6) -Cu (2)   | 120.9 (4)  |
| C (30) -N (6) -Cu (2)   | 124.3 (4)  |
| C (31) -N (7) -C (35)   | 118.9 (5)  |
| C (31) -N (7) -Cu (3)   | 126.0 (4)  |
| C (35) -N (7) -Cu (3)   | 115.0 (4)  |
| C (40) -N (8) -C (36)   | 118.6 (5)  |
| C (40) -N (8) -Cu (3)   | 126.2 (4)  |
| C (36) -N (8) -Cu (3)   | 115.1 (3)  |
| C (41) -N (9) -C (45)   | 119.6 (5)  |
| C (41) -N (9) -Cu (4)   | 126.2 (4)  |
| C (45) -N (9) -Cu (4)   | 113.2 (3)  |
| C (46) -N (10) -C (50)  | 118.9 (5)  |
| C (46) -N (10) -Cu (4)  | 115.7 (4)  |
| C (50) -N (10) -Cu (4)  | 125.4 (4)  |
| C (51) -N (11) -C (55)  | 115.5 (5)  |
| C (51) -N (11) -Cu (3)  | 121.5 (4)  |
| C (55) -N (11) -Cu (3)  | 121.6 (4)  |
| O (5) -N (14) -O (7)    | 116.9 (7)  |
| O (5) -N (14) -O (6)    | 120.8 (6)  |
| O (7) -N (14) -O (6)    | 122.3 (8)  |
| O (8) -N (15) -O (12)   | 119.9 (17) |
| O (8) -N (15) -N (15A)  | 137.3 (12) |
| O (12) -N (15) -N (15A) | 102.0 (17) |

|                    |            |
|--------------------|------------|
| O(11)-N(15A)-N(15) | 142.1 (16) |
| O(14)-N(16)-O(16A) | 147 (6)    |
| O(14)-N(16)-O(16)  | 155 (3)    |
| O(16A)-N(16)-O(16) | 30 (3)     |
| O(14)-N(16)-O(10)  | 98 (5)     |
| O(16A)-N(16)-O(10) | 57 (2)     |
| O(16)-N(16)-O(10)  | 87 (4)     |
| O(9)-N(17)-O(15)   | 128 (3)    |
| O(9)-N(17)-O(13)   | 144 (2)    |
| O(15)-N(17)-O(13)  | 87 (2)     |
| N(1)-C(1)-C(2)     | 122.1 (5)  |
| C(3)-C(2)-C(1)     | 118.8 (5)  |
| C(4)-C(3)-C(2)     | 118.8 (5)  |
| C(3)-C(4)-C(5)     | 120.4 (5)  |
| N(1)-C(5)-C(4)     | 120.9 (5)  |
| N(1)-C(5)-C(6)     | 114.4 (4)  |
| C(4)-C(5)-C(6)     | 124.8 (5)  |
| N(2)-C(6)-C(7)     | 121.3 (5)  |
| N(2)-C(6)-C(5)     | 114.6 (4)  |
| C(7)-C(6)-C(5)     | 124.1 (5)  |
| C(6)-C(7)-C(8)     | 119.9 (5)  |
| C(9)-C(8)-C(7)     | 118.1 (5)  |
| C(8)-C(9)-C(10)    | 119.9 (5)  |
| N(2)-C(10)-C(9)    | 122.0 (5)  |
| N(3)-C(11)-C(12)   | 122.0 (6)  |
| C(13)-C(12)-C(11)  | 119.5 (6)  |
| C(14)-C(13)-C(12)  | 117.6 (6)  |
| C(15)-C(14)-C(13)  | 120.4 (6)  |
| N(3)-C(15)-C(14)   | 121.5 (5)  |
| N(3)-C(15)-C(16)   | 114.8 (4)  |
| C(14)-C(15)-C(16)  | 123.7 (5)  |
| N(4)-C(16)-C(17)   | 120.2 (5)  |
| N(4)-C(16)-C(15)   | 114.7 (4)  |
| C(17)-C(16)-C(15)  | 125.1 (5)  |
| C(18)-C(17)-C(16)  | 120.0 (5)  |
| C(19)-C(18)-C(17)  | 118.8 (5)  |
| C(18)-C(19)-C(20)  | 119.1 (5)  |

|                     |          |
|---------------------|----------|
| N(4)-C(20)-C(19)    | 122.6(5) |
| N(5)-C(21)-C(22)    | 124.4(5) |
| C(23)-C(22)-C(21)   | 119.8(5) |
| C(24)-C(23)-C(22)   | 115.9(5) |
| C(24)-C(23)-C(28)#1 | 121.9(4) |
| C(22)-C(23)-C(28)#1 | 122.1(4) |
| C(23)-C(24)-C(25)   | 119.5(5) |
| N(5)-C(25)-C(24)    | 125.3(5) |
| N(6)-C(26)-C(27)    | 124.1(6) |
| C(28)-C(27)-C(26)   | 121.1(5) |
| C(29)-C(28)-C(27)   | 114.3(5) |
| C(29)-C(28)-C(23)#1 | 122.8(5) |
| C(27)-C(28)-C(23)#1 | 122.9(5) |
| C(28)-C(29)-C(30)   | 120.9(5) |
| N(6)-C(30)-C(29)    | 124.8(6) |
| N(7)-C(31)-C(32)    | 122.0(6) |
| C(33)-C(32)-C(31)   | 118.5(6) |
| C(32)-C(33)-C(34)   | 120.8(5) |
| C(33)-C(34)-C(35)   | 118.8(6) |
| N(7)-C(35)-C(34)    | 120.9(5) |
| N(7)-C(35)-C(36)    | 114.8(5) |
| C(34)-C(35)-C(36)   | 124.3(5) |
| N(8)-C(36)-C(37)    | 122.0(5) |
| N(8)-C(36)-C(35)    | 114.5(5) |
| C(37)-C(36)-C(35)   | 123.6(5) |
| C(38)-C(37)-C(36)   | 118.4(6) |
| C(37)-C(38)-C(39)   | 120.0(6) |
| C(40)-C(39)-C(38)   | 118.4(6) |
| N(8)-C(40)-C(39)    | 122.6(5) |
| N(9)-C(41)-C(42)    | 121.9(6) |
| C(43)-C(42)-C(41)   | 119.1(6) |
| C(44)-C(43)-C(42)   | 119.2(6) |
| C(43)-C(44)-C(45)   | 119.4(6) |
| N(9)-C(45)-C(44)    | 120.8(5) |
| N(9)-C(45)-C(46)    | 115.4(4) |
| C(44)-C(45)-C(46)   | 123.8(5) |
| N(10)-C(46)-C(47)   | 122.1(6) |

|                     |           |
|---------------------|-----------|
| N(10)-C(46)-C(45)   | 113.9(5)  |
| C(47)-C(46)-C(45)   | 124.0(5)  |
| C(46)-C(47)-C(48)   | 119.2(6)  |
| C(49)-C(48)-C(47)   | 119.5(6)  |
| C(48)-C(49)-C(50)   | 118.7(6)  |
| N(10)-C(50)-C(49)   | 121.5(6)  |
| N(11)-C(51)-C(52)   | 124.2(5)  |
| C(53)-C(52)-C(51)   | 120.3(5)  |
| C(54)-C(53)-C(52)   | 114.6(5)  |
| C(54)-C(53)-C(53)#2 | 123.3(6)  |
| C(52)-C(53)-C(53)#2 | 122.1(6)  |
| C(53)-C(54)-C(55)   | 120.8(5)  |
| N(11)-C(55)-C(54)   | 124.4(6)  |
| Cu(2)-O(1)-Cu(1)    | 97.28(16) |
| Cu(1)-O(2)-Cu(2)    | 95.48(15) |
| Cu(3)-O(3)-Cu(4)    | 98.56(15) |
| Cu(4)-O(4)-Cu(3)    | 97.29(14) |
| O(16A)-O(10)-N(16)  | 53.6(10)  |
| O(16A)-O(16)-N(16)  | 68(3)     |
| O(16)-O(16A)-N(16)  | 82(4)     |
| O(16)-O(16A)-O(10)  | 152(5)    |
| N(16)-O(16A)-O(10)  | 70(2)     |
| C(62)-N(13)-C(61)   | 115.4(5)  |
| N(13)-C(61)-C(60)   | 125.0(5)  |
| N(13)-C(62)-C(63)   | 123.7(5)  |
| C(61)-C(60)-C(59)   | 119.9(5)  |
| C(59)-C(63)-C(62)   | 120.3(5)  |
| C(63)-C(59)-C(60)   | 115.7(5)  |
| C(63)-C(59)-C(58)   | 122.1(5)  |
| C(60)-C(59)-C(58)   | 122.1(5)  |
| C(64)-C(58)-C(57)   | 114.9(5)  |
| C(64)-C(58)-C(59)   | 122.5(5)  |
| C(57)-C(58)-C(59)   | 122.6(5)  |
| C(58)-C(57)-C(56)   | 120.2(7)  |
| C(58)-C(64)-C(65)   | 120.0(6)  |
| N(12)-C(56)-C(57)   | 124.3(7)  |
| C(65)-N(12)-C(56)   | 115.2(6)  |

N(12)-C(65)-C(64)

125.0(7)

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1  $-x+2, -y+2, -z$       #2  $-x+2, -y+1, -z+1$

#3  $x-1, y, z$       #4  $x+1, y, z$

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for struct8.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

|         | $U^{11}$ | $U^{22}$ | $U^{33}$ | $U^{23}$  | $U^{13}$  | $U^{12}$  |
|---------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Cu (1)  | 38 (1)   | 27 (1)   | 29 (1)   | 12 (1)    | 9 (1)     | 13 (1)    |
| Cu (2)  | 36 (1)   | 26 (1)   | 29 (1)   | 12 (1)    | 12 (1)    | 11 (1)    |
| Cu (3)  | 22 (1)   | 30 (1)   | 33 (1)   | 13 (1)    | 2 (1)     | 6 (1)     |
| Cu (4)  | 35 (1)   | 31 (1)   | 33 (1)   | 14 (1)    | 4 (1)     | 9 (1)     |
| N (1)   | 42 (3)   | 37 (2)   | 27 (2)   | 19 (2)    | 11 (2)    | 17 (2)    |
| N (2)   | 43 (3)   | 31 (2)   | 28 (2)   | 14 (2)    | 10 (2)    | 13 (2)    |
| N (3)   | 38 (2)   | 32 (2)   | 33 (2)   | 15 (2)    | 12 (2)    | 17 (2)    |
| N (4)   | 39 (2)   | 31 (2)   | 26 (2)   | 13 (2)    | 11 (2)    | 10 (2)    |
| N (5)   | 40 (2)   | 31 (2)   | 29 (2)   | 13 (2)    | 7 (2)     | 16 (2)    |
| N (6)   | 41 (2)   | 25 (2)   | 32 (2)   | 13 (2)    | 9 (2)     | 11 (2)    |
| N (7)   | 23 (2)   | 30 (2)   | 47 (3)   | 13 (2)    | 4 (2)     | 7 (2)     |
| N (8)   | 20 (2)   | 35 (2)   | 31 (2)   | 10 (2)    | 0 (2)     | 6 (2)     |
| N (9)   | 24 (2)   | 35 (2)   | 47 (3)   | 15 (2)    | 8 (2)     | 10 (2)    |
| N (10)  | 27 (2)   | 47 (3)   | 39 (3)   | 19 (2)    | 5 (2)     | 16 (2)    |
| N (11)  | 24 (2)   | 38 (2)   | 33 (2)   | 10 (2)    | 3 (2)     | 5 (2)     |
| N (14)  | 83 (5)   | 67 (4)   | 58 (4)   | 36 (3)    | 19 (4)    | 20 (4)    |
| N (15)  | 66 (9)   | 116 (13) | 33 (6)   | 37 (8)    | -5 (6)    | -47 (8)   |
| N (15A) | 46 (7)   | 156 (14) | 27 (6)   | 17 (7)    | 15 (5)    | 29 (8)    |
| N (16)  | 190 (17) | 790 (60) | 81 (8)   | -123 (18) | 76 (10)   | -300 (30) |
| N (17)  | 98 (11)  | 224 (18) | 220 (20) | -150 (17) | -111 (13) | 99 (12)   |
| C (1)   | 41 (3)   | 42 (3)   | 34 (3)   | 15 (2)    | 9 (2)     | 15 (3)    |
| C (2)   | 38 (3)   | 69 (4)   | 45 (3)   | 25 (3)    | 11 (3)    | 27 (3)    |
| C (3)   | 63 (4)   | 56 (4)   | 48 (4)   | 25 (3)    | 17 (3)    | 39 (3)    |
| C (4)   | 62 (4)   | 40 (3)   | 37 (3)   | 19 (3)    | 18 (3)    | 28 (3)    |
| C (5)   | 47 (3)   | 34 (3)   | 21 (2)   | 14 (2)    | 14 (2)    | 16 (2)    |
| C (6)   | 49 (3)   | 30 (3)   | 27 (3)   | 15 (2)    | 13 (2)    | 14 (2)    |
| C (7)   | 66 (4)   | 32 (3)   | 42 (3)   | 13 (3)    | 13 (3)    | 18 (3)    |
| C (8)   | 59 (4)   | 34 (3)   | 54 (4)   | 12 (3)    | 6 (3)     | 0 (3)     |
| C (9)   | 42 (3)   | 45 (3)   | 38 (3)   | 16 (3)    | 6 (3)     | 4 (3)     |
| C (10)  | 43 (3)   | 45 (3)   | 34 (3)   | 17 (3)    | 8 (3)     | 14 (3)    |
| C (11)  | 43 (3)   | 42 (3)   | 51 (4)   | 18 (3)    | 11 (3)    | 20 (3)    |

|        |        |         |         |         |         |         |
|--------|--------|---------|---------|---------|---------|---------|
| C (12) | 45 (4) | 82 (5)  | 65 (4)  | 26 (4)  | 9 (3)   | 32 (4)  |
| C (13) | 59 (4) | 87 (5)  | 54 (4)  | 20 (4)  | 19 (3)  | 49 (4)  |
| C (14) | 62 (4) | 62 (4)  | 37 (3)  | 16 (3)  | 13 (3)  | 38 (3)  |
| C (15) | 45 (3) | 37 (3)  | 30 (3)  | 19 (2)  | 10 (2)  | 19 (2)  |
| C (16) | 45 (3) | 31 (3)  | 28 (3)  | 18 (2)  | 13 (2)  | 16 (2)  |
| C (17) | 61 (4) | 35 (3)  | 29 (3)  | 12 (2)  | 15 (3)  | 20 (3)  |
| C (18) | 62 (4) | 34 (3)  | 30 (3)  | 7 (2)   | 5 (3)   | 7 (3)   |
| C (19) | 41 (3) | 44 (3)  | 43 (3)  | 10 (3)  | 10 (3)  | 6 (3)   |
| C (20) | 42 (3) | 38 (3)  | 37 (3)  | 13 (2)  | 13 (3)  | 12 (2)  |
| C (21) | 37 (3) | 74 (4)  | 81 (5)  | 59 (4)  | 7 (3)   | 2 (3)   |
| C (22) | 31 (3) | 91 (5)  | 76 (5)  | 66 (4)  | -4 (3)  | 1 (3)   |
| C (23) | 29 (2) | 24 (2)  | 22 (2)  | 5 (2)   | 6 (2)   | 8 (2)   |
| C (24) | 28 (3) | 59 (4)  | 54 (4)  | 38 (3)  | 11 (3)  | 15 (3)  |
| C (25) | 36 (3) | 56 (4)  | 47 (3)  | 32 (3)  | 8 (3)   | 21 (3)  |
| C (26) | 37 (4) | 119 (7) | 103 (6) | 91 (6)  | -25 (4) | -30 (4) |
| C (27) | 35 (4) | 135 (7) | 111 (6) | 105 (6) | -21 (4) | -19 (4) |
| C (28) | 34 (3) | 21 (2)  | 22 (2)  | 3 (2)   | 5 (2)   | 6 (2)   |
| C (29) | 28 (3) | 128 (7) | 113 (6) | 106 (6) | 21 (4)  | 24 (4)  |
| C (30) | 33 (3) | 129 (7) | 108 (6) | 100 (6) | 23 (4)  | 31 (4)  |
| C (31) | 27 (3) | 39 (3)  | 63 (4)  | 25 (3)  | 5 (3)   | 9 (2)   |
| C (32) | 34 (3) | 33 (3)  | 83 (5)  | 25 (3)  | 3 (3)   | 9 (2)   |
| C (33) | 39 (3) | 27 (3)  | 84 (5)  | 6 (3)   | -3 (3)  | 6 (3)   |
| C (34) | 39 (3) | 37 (3)  | 55 (4)  | 2 (3)   | 3 (3)   | 9 (3)   |
| C (35) | 24 (3) | 39 (3)  | 49 (4)  | 9 (3)   | 5 (2)   | 9 (2)   |
| C (36) | 21 (3) | 47 (3)  | 40 (3)  | 15 (3)  | 4 (2)   | 10 (2)  |
| C (37) | 35 (3) | 53 (4)  | 43 (3)  | 5 (3)   | 7 (3)   | 9 (3)   |
| C (38) | 34 (3) | 92 (5)  | 35 (3)  | 23 (3)  | 6 (3)   | 20 (3)  |
| C (39) | 30 (3) | 60 (4)  | 44 (3)  | 25 (3)  | 11 (3)  | 18 (3)  |
| C (40) | 21 (2) | 54 (3)  | 39 (3)  | 22 (3)  | 2 (2)   | 12 (2)  |
| C (41) | 29 (3) | 39 (3)  | 57 (4)  | 18 (3)  | 13 (3)  | 13 (2)  |
| C (42) | 30 (3) | 35 (3)  | 87 (5)  | 24 (3)  | 19 (3)  | 13 (2)  |
| C (43) | 28 (3) | 42 (3)  | 73 (5)  | 2 (3)   | 3 (3)   | 11 (3)  |
| C (44) | 24 (3) | 45 (3)  | 58 (4)  | 3 (3)   | 2 (3)   | 9 (2)   |
| C (45) | 19 (2) | 39 (3)  | 45 (3)  | 5 (3)   | 0 (2)   | 9 (2)   |
| C (46) | 19 (2) | 49 (3)  | 42 (3)  | 9 (3)   | 1 (2)   | 11 (2)  |
| C (47) | 32 (3) | 72 (4)  | 34 (3)  | 12 (3)  | 5 (2)   | 23 (3)  |
| C (48) | 46 (4) | 101 (6) | 47 (4)  | 35 (4)  | 13 (3)  | 40 (4)  |

|         |          |          |            |           |           |          |
|---------|----------|----------|------------|-----------|-----------|----------|
| C (49)  | 47 (4)   | 92 (5)   | 60 (4)     | 53 (4)    | 21 (3)    | 36 (4)   |
| C (50)  | 29 (3)   | 60 (4)   | 54 (4)     | 30 (3)    | 16 (3)    | 20 (3)   |
| C (51)  | 23 (3)   | 48 (4)   | 122 (6)    | 48 (4)    | 14 (3)    | 6 (3)    |
| C (52)  | 27 (3)   | 49 (4)   | 125 (6)    | 51 (4)    | 11 (4)    | 13 (3)   |
| C (53)  | 23 (2)   | 35 (3)   | 24 (2)     | 7 (2)     | 9 (2)     | 5 (2)    |
| C (54)  | 33 (3)   | 108 (6)  | 92 (5)     | 86 (5)    | -10 (3)   | -9 (3)   |
| C (55)  | 26 (3)   | 104 (6)  | 85 (5)     | 75 (5)    | -9 (3)    | 1 (3)    |
| O (1)   | 36 (2)   | 26 (2)   | 40 (2)     | 10 (2)    | 9 (2)     | 9 (2)    |
| O (2)   | 32 (2)   | 33 (2)   | 33 (2)     | 5 (2)     | 8 (2)     | 11 (2)   |
| O (3)   | 29 (2)   | 32 (2)   | 38 (2)     | 19 (2)    | 4 (2)     | 10 (2)   |
| O (4)   | 38 (2)   | 29 (2)   | 37 (2)     | 18 (2)    | 7 (2)     | 9 (2)    |
| O (5)   | 68 (3)   | 72 (3)   | 90 (4)     | 31 (3)    | 40 (3)    | 31 (3)   |
| O (6)   | 74 (4)   | 88 (4)   | 74 (4)     | 36 (3)    | 19 (3)    | 11 (3)   |
| O (7)   | 271 (10) | 56 (4)   | 82 (4)     | 1 (3)     | 11 (5)    | 87 (5)   |
| O (8)   | 83 (4)   | 49 (3)   | 73 (4)     | 30 (3)    | 15 (3)    | 19 (3)   |
| O (9)   | 142 (11) | 400 (30) | 144 (12)   | -88 (14)  | 22 (9)    | 52 (12)  |
| O (10)  | 115 (6)  | 174 (8)  | 212 (10)   | 70 (8)    | 62 (7)    | 66 (6)   |
| O (11)  | 370 (30) | 590 (40) | 320 (20)   | 240 (20)  | 160 (20)  | -80 (20) |
| O (12)  | 256 (14) | 194 (11) | 231 (13)   | 80 (10)   | 80 (11)   | 55 (9)   |
| O (13)  | 249 (13) | 388 (18) | 127 (7)    | 90 (10)   | 67 (8)    | 232 (14) |
| O (14)  | 290 (30) | 240 (20) | 2000 (140) | 380 (40)  | -510 (50) | -37 (17) |
| O (15)  | 221 (12) | 320 (16) | 124 (8)    | 0 (9)     | 32 (8)    | 120 (12) |
| O (16)  | 50 (10)  | 730 (80) | 270 (30)   | -370 (40) | 67 (16)   | -70 (20) |
| O (16A) | 270 (30) | 67 (9)   | 160 (20)   | 75 (13)   | -96 (19)  | -47 (13) |
| O (17)  | 80 (3)   | 94 (3)   | 34 (2)     | 27 (2)    | 19 (2)    | 53 (3)   |
| O (18)  | 56 (3)   | 75 (3)   | 70 (3)     | 38 (3)    | -7 (2)    | 20 (2)   |
| O (19)  | 71 (4)   | 65 (3)   | 161 (6)    | 44 (4)    | 39 (4)    | 19 (3)   |
| O (20)  | 104 (5)  | 75 (4)   | 148 (6)    | 34 (4)    | 70 (4)    | 7 (3)    |
| O (21)  | 108 (7)  | 670 (30) | 550 (30)   | 560 (30)  | 116 (11)  | 88 (12)  |
| O (22)  | 208 (10) | 160 (8)  | 141 (8)    | -17 (6)   | 68 (7)    | 46 (8)   |
| O (23)  | 210 (12) | 99 (7)   | 640 (30)   | 136 (12)  | 75 (15)   | 42 (7)   |
| O (24)  | 209 (11) | 236 (12) | 310 (15)   | 191 (12)  | 93 (10)   | 35 (9)   |
| O (25)  | 127 (12) | 108 (11) | 170 (15)   | 77 (11)   | 1 (11)    | 12 (9)   |
| O (25A) | 480 (50) | 160 (18) | 200 (20)   | -31 (16)  | 290 (30)  | -90 (20) |
| O (26)  | 350 (20) | 700 (40) | 269 (18)   | 350 (20)  | -57 (16)  | -70 (20) |
| N (13)  | 29 (2)   | 49 (3)   | 44 (3)     | 23 (2)    | 8 (2)     | 15 (2)   |
| C (61)  | 28 (3)   | 105 (6)  | 113 (6)    | 87 (5)    | 10 (4)    | 17 (3)   |

|        |        |         |          |         |         |         |
|--------|--------|---------|----------|---------|---------|---------|
| C (62) | 29 (3) | 44 (3)  | 76 (4)   | 38 (3)  | 3 (3)   | 5 (2)   |
| C (60) | 36 (3) | 71 (4)  | 104 (6)  | 68 (4)  | 10 (3)  | 9 (3)   |
| C (63) | 34 (3) | 54 (4)  | 71 (4)   | 44 (3)  | -1 (3)  | 7 (3)   |
| C (59) | 31 (3) | 27 (2)  | 28 (3)   | 8 (2)   | 11 (2)  | 11 (2)  |
| C (58) | 30 (3) | 30 (3)  | 34 (3)   | 8 (2)   | 10 (2)  | 9 (2)   |
| C (57) | 48 (4) | 117 (7) | 140 (8)  | 103 (7) | -18 (5) | -19 (4) |
| C (64) | 31 (3) | 65 (4)  | 121 (6)  | 61 (5)  | -6 (4)  | -4 (3)  |
| C (56) | 44 (4) | 139 (9) | 191 (11) | 124 (9) | -15 (6) | -32 (5) |
| N (12) | 34 (3) | 64 (4)  | 80 (4)   | 29 (3)  | 8 (3)   | -2 (3)  |
| C (65) | 37 (4) | 93 (6)  | 120 (7)  | 61 (5)  | -1 (4)  | 17 (4)  |

---

Table 5. Hydrogen coordinates (  $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for struct8.

|        | x     | y     | z    | U(eq) |
|--------|-------|-------|------|-------|
| H(1)   | 11694 | 7350  | 2150 | 47    |
| H(2)   | 12602 | 6326  | 2039 | 58    |
| H(3)   | 11874 | 4631  | 1360 | 61    |
| H(4)   | 10277 | 4021  | 777  | 51    |
| H(7)   | 8745  | 3552  | 282  | 57    |
| H(8)   | 7142  | 3189  | -262 | 66    |
| H(9)   | 6542  | 4479  | -39  | 53    |
| H(10)  | 7518  | 6069  | 739  | 49    |
| H(11)  | 7432  | 8470  | 2442 | 54    |
| H(12)  | 6389  | 9159  | 3033 | 77    |
| H(13)  | 6950  | 10613 | 4284 | 77    |
| H(14)  | 8558  | 11317 | 4882 | 62    |
| H(17)  | 10089 | 11898 | 5395 | 49    |
| H(18)  | 11703 | 12370 | 5845 | 56    |
| H(19)  | 12460 | 11376 | 5079 | 56    |
| H(20)  | 11596 | 9947  | 3911 | 47    |
| H(21)  | 8434  | 7306  | 114  | 73    |
| H(22)  | 8545  | 8043  | -830 | 75    |
| H(24)  | 11317 | 8826  | 16   | 51    |
| H(25)  | 11104 | 8039  | 907  | 51    |
| H(26)  | 8445  | 9403  | 1481 | 108   |
| H(27)  | 8565  | 10275 | 636  | 111   |
| H(29)  | 11280 | 11301 | 1675 | 89    |
| H(30)  | 11081 | 10383 | 2467 | 89    |
| H(31)  | 5631  | 1981  | 4489 | 52    |
| H(32D) | 5171  | 288   | 3751 | 62    |
| H(33)  | 4887  | -375  | 2278 | 70    |
| H(34)  | 5049  | 629   | 1544 | 61    |
| H(37)  | 5214  | 1704  | 953  | 60    |
| H(38)  | 5454  | 2941  | 456  | 66    |
| H(39)  | 5929  | 4581  | 1437 | 52    |
| H(40)  | 6079  | 4927  | 2878 | 46    |

|        |            |           |           |         |
|--------|------------|-----------|-----------|---------|
| H (41) | 6135       | 7066      | 5341      | 50      |
| H (42) | 6658       | 8740      | 6180      | 60      |
| H (43) | 7062       | 9300      | 7675      | 66      |
| H (44) | 6923       | 8171      | 8293      | 59      |
| H (47) | 6650       | 7007      | 8757      | 58      |
| H (48) | 6312       | 5675      | 9138      | 73      |
| H (49) | 5833       | 4094      | 8075      | 68      |
| H (50) | 5764       | 3880      | 6654      | 52      |
| H (51) | 7657       | 3111      | 4627      | 74      |
| H (52) | 9247       | 3647      | 5140      | 76      |
| H (54) | 9316       | 5778      | 4337      | 89      |
| H (55) | 7734       | 5164      | 3843      | 82      |
| H (1A) | 8300 (30)  | 7430 (40) | 2160 (40) | 60 (20) |
| H (2A) | 10980 (20) | 8560 (40) | 2610 (40) | 80 (20) |
| H (3A) | 6420 (20)  | 3810 (40) | 5440 (30) | 48 (17) |
| H (4A) | 6010 (30)  | 5490 (20) | 4330 (30) | 28 (14) |
| H (61) | 8003       | 6947      | 5751      | 86      |
| H (60) | 9573       | 7685      | 6321      | 76      |
| H (62) | 7999       | 5013      | 6696      | 76      |
| H (63) | 9586       | 5722      | 7340      | 61      |
| H (57) | 11013      | 8252      | 6783      | 122     |
| H (56) | 12535      | 9077      | 7561      | 151     |
| H (65) | 12533      | 7252      | 8602      | 98      |
| H (64) | 10983      | 6432      | 7941      | 98      |

---

