Synthese und Struktur neuer übergangsmetallsubstituierter Polyoxomonoorganozinnverbindungen

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften

der

Universität Osnabrück

Fachbereich Biologie/Chemie

vorgelegt von Dipl.-Chem. Maher Izaaryene

> Osnabrück 2005

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von Januar 2002 bis Juli 2005 im Fachbereich Biologie/Chemie der Universität Osnabrück unter der Leitung von Prof. Dr. Hans Reuter durchgeführt.

Referent:	Prof. Dr. H. Reuter
Korreferent:	Prof. Dr. M. Haase
Tag der Abgabe:	05.11.2005
Tag der mündlichen Prüfung:	01.12. 2005

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen verwendet habe. Diejenigen Stellen der Arbeit, die anderen Werken oder dem Sinn nach entnommen wurden, sind in jedem einzelnen Fall unter Abgabe der Quelle kenntlich gemacht.

Ein frührer Promotionsversuch an einer deutschen Hochschule hat nicht stattgefunden.

Für meine Eltern,

für Hakima & Anas.

Dank

Herrn Prof. Dr. H. Reuter danke ich für die interessante Themenstellung, seine stete Diskussionsbereitschaft und die vorbehaltlose Unterstützung dieser Arbeit.

Ebenso gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. M. Haase für die Übernahme des Korreferats.

Meinen Laborkollegen Henning Eickmeier und Otmane Zerzouf danke ich für zahlreiche Diskussionen und Anregungen, sowie Frau Claudia Ratermann für ihre Unterstützung bei den komplizierten Bürokratiefragen.

Den Kollegen der gesamten Arbeitsgruppe Anorganische Chemie I danke ich für die gute Zusammenarbeit bei der Betreuung von Praktika.

Mein Dank gilt auch an Herrn appl. Prof. Dr. J. Schnack und Frau Guss vom Fachbereich Physik.

Dem Land Niedersachsen und der Lichtenberg Stiftung danke ich für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

1	Eir	nleitung	7
	1.1	Monorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen	7
	1.2	Polyoxometallate	9
	1.3	Strukturelle Ähnlichkeiten	12
	1.4	Problemstellung	17
2	Ma	onoorganozinn-Polyoxometal-Verbindungen	
	2.1	Oxovanadiumhaltige Organozinnverbindungen	21
	2.1.	.1 Synthese des Oxometallderivate des [(RSn) ₁₂ O ₁₄ (OH) ₆] ²⁺ -Grundkörpers	
	2.1.	.2 $[({}^{4}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2 H_{2}O \cdot 5 DMSO (1)$	
	2.1. 2.1.	$4 \qquad [(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dms_{0})_{3}] \cdot 3 DMSO(3)$	
	2.1.	$ [({}^{i}PrSn)_{9}(OV)_{2}O_{15}(OH)_{9}] \cdot 4.5 H_{2}O(4) $	
	2.1.	$.6 \qquad [({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}][({}^{i}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}] \cdot 4 \text{ DMSO } (5) \dots$	
	2.2	Molybdänhaltige Monoorganozinnverbindungen	53
	2.2.	.1 $[({}^{i}PrSn)_{8}(MoO_{4})_{4}(SnO_{6})(OH)_{8}] \cdot H_{2}O \cdot 6 DMF(6)$	
	2.2.	.2 $[(\Pr{Sn})_6(MoO_4)_4O_2(OH)_6] \cdot 4 DMSO(7)$	61
3	We	eitere Monoorganozinn-Komplexverbindungen und Vanadiumverbindunger	n 66
	3.1	$Na[({}^{i}PrSn)_{12}O_{6}(OH)_{22}](CH_{3}COO)_{3} \cdot H_{2}O \cdot 5 DMSO (8)$	66
	3.2	$Na_{3}VO_{3} \cdot 7 H_{2}O(9)$	73
4	Zu	sammenfassung	
5	Au	sblick	
6	Ex	perimenteller Teil	
	6.1	Messmethoden	81
	6.2	Synthese der Edukte	82
7	Lit	eratur	
8	An	hang	
	8.1	$[({}^{i}PrSn)_{11}(V^{IV}O)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2H_{2}O \cdot 5 DMSO$ (1)	87
	8.2	$[({}^{i}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmf)] \cdot 4 DMF (2) \dots$	
	8.3	$[(nBuSn)_9(V^VO)_3O_{14}(OH)_6Cl_2(dmso)_2] \cdot 3 DMSO(3)$	
	8.4	$[(iPrSn)_9(OV)_2O_{15}(OH)_9] \cdot 4.5 H_2O (4)$	
	8.5	$[(iPrSn)_{12}O_{14}(OH)_6][(iPrSn)_3(OV)_4O_{10}(OH)_3] \cdot 4 \text{ DMSO } (5).$	
	8.6	$[(iPrSn)_8(MoO_4)_4(SnO_6) (OH)_8] \cdot H_2O \cdot 6 DMF(6) \dots$	144
	8.7	$[(iPrSn)_6(MoO_4)_4O_2(OH)_6] \cdot 4 DMSO (7)$	151
	8.8	$Na[({}^{i}PrSn)_{12}O_{6}(OH)_{22}](CH_{3}COO)_{3} \cdot H_{2}O \cdot 5 DMSO (8)$	156
	8.9	$Na_3VO_3 \cdot 7 H_2O (9)$	
9	Ve	röffentlichungen	

1 Einleitung

Neben den natürlich vorkommenden Oxiden und Sulfiden des Elementes Zinns sind auch die Halogenide schon lange bekannt. So gelang *Libavius* bereits um 1600 aus amalgamiertem Zinn und Quecksilber(II)Chlorid die Herstellung von Zinn(IV)-Chlorid, SnCl₄, das daraufhin auch "Spiritus fumans Libavii", rauchender Geist des Libavius, genannt wurde [1]. Auch bei einer der ersten metallorganischen Verbindungen handelt es sich um eine Zinnverbindung, das 1849 von *Frankland* [2] synthetisierte Diethylzinndiiodid, (C₂H₅)₂SnI₂. Diese Verbindung ist auch das erste Beispiel für die Verbindungsklasse der Organozinn(IV)-Halogenide R_ySnX_{4-y} (R = organischer Rest, X = Halogen, y = 1-3) überhaupt. Verbindungen dieser Art zeigen interessante Eigenschaften. So besitzen sie neben sehr stabilen Zinn-Kohlenstoff-Bindungen auch hydrolyseempfindliche Zinn-Halogen-Bindungen.

1.1 Monorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen

Bei der vollständigen bzw. teilweisen Hydrolyse dieser Bindungen kommt es zur Bildung von Organozinnhydroxiden bzw. Organozinnhydroxidhalogeniden, die unter geeigneten Reaktionsbedingungen zu größeren Einheiten kondensieren können. Ausgehend von den Triorganozinnhalogeniden R₃SnX erhält man so durch Hydrolyse der Zinn-Halogen-Bindung zunächst die Triorganozinnhydroxide R₃SnOH, die in einem nachfolgenden Reaktionsschritt unter Abspaltung von H₂O zu Hexaorganodistannoxanen (R₃Sn)₂O kondensieren können (Schema 1).



Schema 1: Hydrolysestufen von Triorganozinnhalogeniden



Schema 2 : Hydrolyse der Monoorganozinntrihalogenide

Im Falle der Monoorganozinntrihalogenide RSnCl₃ verläuft die Hydrolyse formal über die Hydrolysestufen der "Dihalogenidhydroxide", RSn(OH)X₂, "Halogeniddihydroxide" RSn(OH)₂X bis hin zu den "Stannonsäuren" RSnO(OH), die sämtlich - mit Ausnahme der Dichloridhydroxidhydrate RSn(OH)₂Cl · H₂O (R = ⁱPr, ⁱBu) [3] - bisher strukturell nicht charakterisiert werden konnten (Schema 2).



Unter bestimmten Reaktionsbedingungen sind jedoch auch Monoorganozinnverbindungen mit vollständig oder partiell hydrolysierten Zinn-Halogen-Bindungen als kristalline Verbindungen synthetisierbar. Diese weisen dann aber eine andere Zusammensetzung als die formalen Hydrolysestufen auf. So beschrieben *Reuter* und *Puff* 1989 die Synthese der Verbindungen (ⁱPrSn)₉O₈(OH)₆Cl₅ · 6 DMSO [4] und $[(^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]Cl_{2} \cdot L$ (L = 2DMF oder 3H₂O) [5] durch Hydrolyse-, Aggregations- und Kondensationsreaktionen von ⁱPrSn(OH)₂Cl in organischen Lösungsmitteln (DMF oder DMSO) (siehe Schema 3). Verbindungen mit prinzipiell identisch aufgebauten Kationen werden in der Folgezeit auch mit Butylgruppen als organischem Rest bekannt [6, 7, 8].

1.2 Polyoxometallate

In der Literatur werden viele Begriffe benutzt, um die Polyoxometallate zu definieren. Manchmal werden sie als Isopolyanionen, Heteropolyanionen, Heteropolysalze, Isopolysäuren, Heteropolysäuren, Polyoxoanionen, Polyanionen, Polyverbindungen und nicht zuletzt als Metall-Sauerstoff-Cluster bezeichnet, aber im Allgemeinen versteht man unter Polyoxometallaten nur die Polyanionenverbindungen von Vanadium, Niob, Tantal, Molybdän und Wolfram [9-11].

Die ersten Versuche, den strukturellen Aufbau von Polyoxometallaten zu verstehen, basierten auf der von A. Werner entwickelten Koordinationstheorie. Auf deren Grundlage entstand Anfang des letzten Jahrhunderts die so genannte Miolati-Rosenheim-Theorie. Die $[W_2O_7]^{2^2}$ -Einheiten sind dabei aus zwei über Ecken verknüpften WO₄-Tetraedern aufgebaut [12] [13].

L. Pauling merkte 1929, dass die Ionenradien von Mo^{6+} und W^{6+} auch eine oktaedrische Koordination von sechs O^{2-} -Ionen ermöglichen würden. Er entwickelte daraufhin einen entsprechenden Strukturvorschlag, indem er die Strukturen der Heteropolysäuren des Molybdäns und des Wolframs, die aus 12 Metallzentren und einem Heteroelement X wie Silicium oder Phosphor bestehen, als aus einem zentralen XO₄-Tetraeder und 12 MoO₆- bzw. WO₆-Oktaedern aufgebaut beschrieb. Er nahm dabei eine generelle Eckenverknüpfung aller Koordinationspolyeder an [14].

1933 gelang J.K. Keggin anhand von Pulveraufnahmen die Strukturaufklärung der Verbindung $H_3PW_{12}O_{40} \cdot 5 H_2O$ (siehe Abb. 1). Dabei wurde L. Paulings Annahme, dass das Anion aus WO₆-Oktaedern aufgebaut ist, bestätigt. Es zeigte sich aber, dass die Metall-Sauerstoff-Polyeder sowohl über Ecken als auch über Kanten verknüpft sind [15]. Das Keggin-Anion besteht aus einem zentralen Phosphat-Tetraeder, das von zwölf sowohl über Ecken als auch über Kanten umgeben ist.



Abbildung 1: Struktur des Keggin-Anions als Polyedermodell (links) und als Kalottenmodell (rechts).

Nachdem Evans 1948 die Struktur des $[TeMo_6O_{24}]^{6}$ -Anions aufklärte [16], entwickelte sich die Röntgenstrukturanalyse zu einer immer wichtigeren Methode in der Polyanionenchemie.

Diese grundlegenden Strukturprinzipien und die Weiterentwicklung der Röntgenkristallographie führten im Lauf der Jahre zur Strukturaufklärung weiterer Polyoxometallat-Cluster. Die verbesserte Detektionstechnik und die Entwicklungen im Bereich der Datenverarbeitung ermöglichen immer kürzere Mess- und Rechenzeiten und es gelingt daher zunehmend auch die Röntgenstrukturanalyse großer, komplex aufgebauter Polyoxometallate zu beschreiben.

Heute klassifiziert man die Polyoxometallate bzw. Polyoxoanionen in zwei Gruppen: Isopolyanionen und Heteropolyanionen. Beispiele sind das Heteropolyanion $[TeMo_6O_{24}]^{6^-}$ und das Isopolyanion $[V_{10}O_{28}]^{6^-}$. Beide sind in Abb. 2 dargestellt. Die Klasse der Heteropolyanionen, bei denen ein oder mehrere Heteroatome in der Struktur vorliegen, wird durch drei Strukturtypen repräsentiert. Der von Abb. 1 bekannte Keggin Strukturtyp und seine verschiedenen Isomeren, der Dawson Strukturtyp [17] (siehe Abb. 3) und der Anderson Strukturtyp. Zurzeit sind über 70 Elemente aus allen Gruppen des Periodensystems mit Ausnahme der Edelgase als Heteroatome in Polyoxometallaten bekannt.



Abbildung 2: Das Isopolyanion: $[V_{10}O_{28}]^{6-}$ rechts und links das Heteropolyanion [Te Mo₆ O₂₄].



Abbildung 3: Der Dawsson Strukturtyp als Polyederdarstellung links und als Kalottenmodel rechts.

Die erste Verbindung der Polyoxometallate mit einem organischen Rest wurde in 1977 von Klemperer [18] synthetisiert. In den letzten Jahren hat sich die Chemie der Polyoxometallate mit organischen Resten sehr rasch entwickelt. Es gibt zwei unterschiedliche Typen von organometallischen Strukturen; entweder ist die RM-Gruppe ein Teil des Polyoxoanions oder sie ist terminal an ein Sauerstoffatom des Grundgerüstes gebunden. Beispiele für beide Fälle zeigen die Abb. 4 und 5.



Abbildung 4: Das [CpTiW₅O₁₈]³⁻ Polyoxoanion mit seinem organischen Rest als Teil des Grundgerüstes [18].



Abbildung 5: Das [CpRhMo₅O₁₉]⁻ Polyoxoanion mit dem terminalen organischen Rest [19]

1.3 Strukturelle Ähnlichkeiten

• Das [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Kation

Das im $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ gefundene Metall-Sauerstoff-Gerüst ist in Abb. 6 als Kugel-Stab-Modell dargestellt. Im Idealfall weist es die Symmetrie D_{3d} auf: es enthält eine dreizählige Achse, die durch die Atome O(9) und O(19) verläuft, drei parallel zu dieser Achse verlaufende Spiegelebenen [definiert z. B. durch Sn(1), Sn(2), O(9), O(10), O(19), O(20), Sn(7) und Sn(8)] sowie drei zweizählige Achsen, die durch die Mittelpunkte zweier sich gegenüberliegender Zinn-Sauerstoff-Vierringe [z. B. Sn(1)-O(1)-Sn(3)-O(2) und Sn(7)-O(11)-Sn(9)-O(12)] verlaufen und die den Winkel zwischen je zwei zweizähligen Achsen halbieren. Aus der Kombination dieser Symmetrieelemente ergibt sich ein Inversionszentrum in der Mitte des Käfigmoleküls. Häufig reduziert sich die Symmetrie allerdings auf C_{2h}, (eine zweizählige Achse und eine senkrecht dazu liegende Spiegelebene, beide zusammen erzeugen ein Inversionszentrum) wie in [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆]Cl₂ · 2DMF oder C_i (ein Inversionszentrum), wie in der Verbindung [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆]Cl₂ · 3H₂O.



Abbildung 6: Perspektivische Darstellung des Zinn-Sauerstoff-Gerüstes des $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ -Ions mit der Bezeichnung der Atome.

Das Käfigion enthält als primäre Baueinheiten sechs quadratisch-pyramidal aufgebaute {RSnO₄}-Gruppen, die über gemeinsame Kanten zu einem zentralen Ring verbunden sind sowie sechs oktaedrische {RSnO₅}-Gruppen, von denen je drei über gemeinsame Kanten zu trimeren Einheiten verknüpft sind (siehe Abb. 7). Diese trimeren Einheiten sind an beiden Seiten an den zentralen Ring ankondensiert. Die Verknüpfung der Oktaeder mit dem zentralen Ring erfolgt sowohl über gemeinsame Ecken als auch über gemeinsame Kanten.



Abbildung 7: Polyederdarstellung des zentralen Rings aus quadratisch-pyramidalen {RSnO₄}-Einheiten und in der Mitte der trimeren oktaedrischen {RSnO₅}-Einheiten.

Von den zwanzig Sauerstoffatomen des $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ -Ions verbrücken zwölf als μ_3 -O-Atome jeweils zwei quadratisch-pyramidal koordinierte Zinnatome sowie ein Zinnatom, das oktaedrisch koordiniert ist. Zwei weitere μ_3 -Sauerstoffatome befinden sich im Käfiginneren und verknüpfen je drei oktaedrisch koordinierte Zinnatome. Die restlichen sechs Sauerstoffatome sind Bestandteil von μ_2 -Hydroxylgruppen und verbinden jeweils zwei oktaedrisch koordinierte Zinnatome.

• Das [(OV)₁₂O₁₂F₂(OH)₆]⁶⁻ -Anion

Das im $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ -Ion auftretende Verknüpfungsmuster von Metall- und Sauerstoffatomen ist nicht ausschließlich auf zinnorganische Verbindungen beschränkt. *Müller et al.* publizierten 1993 die Struktur des $[(OV)_{12}O_{12}F_2(OH)_6]^{6-}$ -Anions [19] das prinzipiell den gleichen Aufbau wie das $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Käfigkation zeigt (siehe Abb.9). An Stelle der Zinnatome treten hier die Vanadiumatome als Zentralatome in den quadratischpyramidalen {OVO₄}- und oktaedrischen {OVO₄F}-Einheiten auf.



Abbildung 8: Polyederdarstellung des $[(OV)_6O_{12}F_2(OH)_6]^{6-}$ -Ions; die oktaedrischen Baueinheiten sind dunkelgrau, die quadratisch-pyramidalen Baueinheiten sind als hellgraue Polyeder dargestellt, rechts dargestellt ist das Kalottenmodel [20].

• Das [Na⊂(iPrSn₁₂)O4(OH)₂₄]⁵⁺-Kation

Der Aufbau des $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ -Ion ähnelt stark dem Aufbau von Polyoxometallaten des Vanadiums, Molybdäns oder Wolframs. Insbesondere trimere kantenverknüpfte Baueinheiten, wie die oben beschriebenen, finden sich in allen Varianten des Keggin-Strukturtyps, die von zahlreichen Heteropolysäuren des Molybdäns und Wolframs eingenommen werden [15]. Interessanterweise wird die Ausbildung einer γ -Keggin-Struktur auch im Kation der in Abb. 10 dargestellten, von *Reuter* [21] beschriebenen Verbindung [Na \subset (${}^{i}PrSn_{12}$)O₄(OH)₂₄][Ag₇I₁₁]Cl · H₂O₁₀ · DMSO, beobachtet.



Abbildung 9: Kugel-Stab und Polyederdarstellung des γ -Keggin-Ions [Na $(iPrSn_{12})O_4(OH)_{24}$]⁵⁺ [21].

Die Beispiele sowohl des $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ -Kations und des $[(OV)_{6}O_{12}F_{2}(OH)_{6}]^{6-}$ -Anions als auch des $[Na \subset ({}^{i}PrSn_{12})O_{4}(OH)_{24}]^{5+}$ -Kations und der Heteropolysäuren zeigen, dass es möglich ist, durch den so genannten Selbstorganisationprozess¹, eine bestimmte Struktur für ein Molekül oder Ion auszubilden, auch wenn die konstituierenden Bausteine eine deutlich unterschiedliche Zusammensetzung aufweisen.

¹ Selbstorganisationprozess ist eine Bezeichnung für die Erscheinung, dass aus den niedermolekularen Komponenten eines Systems spontan definierte höhermolekulare Verbindungen entstehen.

1.4 Problemstellung

Das Auftreten so ähnlicher Strukturen und Strukturtypen in Polyoxometallaten auf der einen Seite und metallorganischen Monoorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen auf der anderen Seite ließ vermuten, dass es möglich sein sollte, in Monoorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen wie dem $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Kation, einzelne Zinnpositionen durch andere übergangsmetallhaltige Baugruppen zu ersetzen. In der vorliegenden Arbeit wird versucht eine oder mehrere der Monoorganozinn-Baueinheiten im Grundgerüst des Zinn-Sauerstoff-Käfigs durch baugleiche oder andersartige Polyoxo-Übergangsmetall-Baueinheiten zu ersetzen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeit liegt hierbei im Bereich der Übergangsmetalle Vanadium und Molybdän.

2 Monoorganozinn-Polyoxometal-Verbindungen

• Ergebnisse und Übersicht

Insgesamt wurden fünf Oxovanadium- und zwei Molybdänhaltige-Organozinnverbindungen sowie eine Natriumhaltige Organozinnverbindung neu hergestellt.

In der Abbildungsübersicht sind die Zinn-Atome hellgrau und die Heterometall-Atome dunkelgrau dargestellt, links ist jeweils das Polyeder- und rechts das Kugelstabmodel abgebildet.



 $[(^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2 H_{2}O \cdot 5 DMSO (1)$



 $[(^{i}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmf)] \cdot 4 DMF (2)$



 $[(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}] \cdot 3 DMSO (3)$



 $[({}^{i}PrSn)_{9}(OV)_{2}O_{15}(OH)_{9}] \cdot 4.5 \text{ H}_{2}O (4)$



 $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}][({}^{i}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}] \cdot 4 DMSO (5)$



 $[(^{i}PrSn)_{8}(MoO_{4})_{4}(SnO_{6})(OH)_{8}] \cdot H_{2}O \cdot 6 DMF$ (6)



 $[(^{i}PrSn)_{6}(MoO_{4})_{4}O_{2}(OH)_{6}] \cdot 4 DMSO (7)$



 $Na[({}^{i}PrSn)_{12}O_{6}(OH)_{22}](CH_{3}COO)_{3} \cdot H_{2}O \cdot 5 DMSO (8)$

2.1 Oxovanadiumhaltige Organozinnverbindungen

Die erste Verbindung dieser Art wurde durch Reuter und Kastner synthetisiert und beschrieben [22]. Es handelt sich um die Verbindung $[(^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}]Cl \cdot 2DMF \cdot$ Die Struktur der hier gefundenen Käfigverbindung leitet H₂O. sich vom [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Kation ab und weist eine ikosaedrische Anordnung der Metallatome auf. Der Einbau der quadratisch-pyramidal koordinierten Vanadiumatome mit einem doppelt gebundenen apikalen Sauerstoffatom und vier einfach gebundenen basalen Sauerstoffatomen erfolgt anstelle von quadratisch-pyramidal koordinierten Zinnatomen (siehe Abb. 11).



Abbildung 10: Kugel-Stab- und Polyedermodell des [(ⁱPrSn)₁₁(VO)O₁₈(OH)₆]-Moleküls: aufgrund der Übersichtlichkeit werden die Positionen der organischen Gruppen durch die Sn-C-Bindung angedeutet.

Andere Oxovanadiumhaltige Organozinnverbindungen sind in der Literatur zwar bekannt, allerdings fand man bisher nur koordinative Bindungen des doppelt gebundenen Sauerstoffatoms der Vanadylgruppe an das Zinnatom [23]. Organozinnverbindungen, in denen das Vanadium in quadratisch-pyramidaler {OVO₄}- oder oktaedrischer {OVO₅}- Umgebung vorkommt, sind bisher nicht beschrieben worden.

2.1.1 Synthese des Oxometallderivate des [(RSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Grundkörpers

Allgemeines

Die Synthesen der einzelnen Verbindungen erfolgten im Allgemeinen durch Reaktion von RSn(OH)₂Cl [1, 2, 3] mit Vanadin(IV)-oxidacetylacetonat in DMF oder DMSO. Details zu den Synthesen sind bei den einzelnen Verbindungen beschrieben.

Die Substitution von {RSnO₄}- durch {OVO₄}-Gruppen im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Käfig führt beim Ersatz einer [RSn]-Gruppe durch eine $[VO]^{2+}$ -Gruppe mit vierwertigem Vanadium das die Ladung des Käfigs um 1 verringert.

Zum anderen kann durch die im Vergleich zur Sn-O-Bindungen kürzeren V-O-Bindungen in Verbindungen mit quadratisch-pyramidalen {OVO₄}-Gruppierungen eine Verzerrung des Grundgerüstes erfolgen.

Beschreibung und Nomenklatur des ikosaedrischen Grundgerüstes

Die Oxometallderivate des $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Grundkörpers weisen - wie der Grundkörper selber - alle eine ikosaedrische Anordnung der Metallatome auf (siehe Abb. 12). Um zu verdeutlichen, an welchen Positionen des ikosaedrischen Grundgerüstes die Substitution von Zinn durch Vanadium (als Beispiel für ein Metallatom) stattfindet, soll hier die Ikosaedernomenklatur benutzt werden, die auch in anderen ikosaedrisch aufgebauten Verbindungen angewendet wird.



Abbildung 11: Numerierung der Ikosaederpositionen am Beispiel eines $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ions. Die Beschriftung innerhalb der Atome entspricht der Ikosaedernumerierung, neben den Atomen die Numerierung im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion.

Die Nummerierung der Atome wurde dabei so gewählt, dass die Positionen der Atome 1 und 2 der Ikosaedernomenklatur den Positionen der Atome V(1) und Sn(2) in den Derivaten des $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ions entsprechen (siehe Abb. 13.).



Abbildung 12: Beispiel eines Oxovanadiumderivate des $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ Grundkörpers mit einen Vanadiumatom.

In einem idealen Ikosaeder sind alle Positionen äquivalent und somit ununterscheidbar. Diese hohe Symmetrie wird bereits im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion durch die vorhandenen Sauerstoffatome erniedrigt, der Ikosaeder selbst wird verzerrt. Der Einbau von Vanadiumatomen an einigen Stellen des verzerrten Ikosaeders führt zu einer weiteren Erniedrigung der Symmetrie.

2.1.2 $[(^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2 H_{2}O \cdot 5 DMSO (1)$

Synthese

In einer 100 ml Kristallisierschale wurde 0.5 g i PrSn(OH)₂Cl (2 mmol) mit 0,25 g (1.35 mmol) Natriumorthovanadat \cdot 10H₂O und 5 ml 1M Natriumacetat in 50 ml DMSO 5 min unter Rühren erhitzt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die gelbe klare Lösung wurde in der Kristallisierschale bei Raumtemperatur eingeengt. Nach 4 Wochen kristallisierte 1 in Form grüner Blöcke. Diese Kristalle sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb ein paar Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome, sowie die Sauerstoffatome des Käfigkations konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 1 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 1.

Die Elementarzelle von 1 enthält zwei Formeleinheiten. Da alle Atome auf allgemeinen Lagen liegen, deren Zähligkeit in der Raumgruppe P1 zwei ist, besteht die asymmetrische Einheit aus einem $[({}^{i}PrSn)_{11}(V^{IV}O)O_{14}(OH)_6]^+$ -Ion, 1a, einem Acetat-Ion, fünf DMSO-Molekülen und zwei Molekülen Wasser.

Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das in Abb. 13 dargestellte Käfigion **1a**. Es besteht wie, das $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion aus zwei trimeren, kantenverknüpften {ⁱPrSnO₅}-Oktaedern, die über einen Ring von fünf quadratisch-pyramidalen {RSnO₄}-Gruppen und einer quadratisch-pyramidalen {OVO₄}-Gruppe miteinander verbunden sind.

	-
Temperatur	293(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Summenformel	$C_{45}H_{120}O_{30}S_5Sn_{11}V$
Molare Masse	2658.24
Kristallsystem	Triklin
Raumgruppe	P-1 (no 2)
Elementarzelle	a = 14.452(7) Å
	b = 14.901(2) Å
	c = 20.898(3) Å
	$\alpha = 91.80(1)^{\circ}$
	$\beta = 92.81(2)^{\circ}$
	$\gamma = 97.29(2)^{\circ}$
Volumen	4456(2) $Å^3$
Z	2
Dichte	1.981 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	3.305 mm^{-1}
F(000)	2566
Kristalldimensionen	0.5 x 0.4 x 0.3 mm
Kristallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Gelb-Grün
Gemessener θ-Bereich	1.77 - 22.00°
Indexgrenzen	$-1 \le h \le 13, -15 \le k \le 15, -22 \le l \le 22$
Gemessene Reflexe/ Unabhängige Reflexe	11958 / 10375 [R(int) = 0.0343]
Completeness to theta = 22.00°	94.8 %
Absorptionskorrektur	Empirical
max./min. Transmission	1.0000 und 0.8749
Verfeinungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten / Restraints / Parameter	10375 / 67 / 674
Goodness-of-fit on F ²	1.036
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	$R_1 = 0.0582, wR_2 = 0.1433$
R-Werte [alle Daten]	$R_1 = 0.0818, wR_2 = 0.1632$
Extinctionkoeffizient	0.00021(4)
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	1.048 und -1.709 eÅ ⁻³
^a $R1 = \Sigma(F_o - F_c) / \Sigma F_o $ ^b $wR2 = [\Sigma w(F_o) / \Sigma F_o]$	$(F_{o}^{2} - F_{c}^{2})^{2}) / \Sigma w (F_{o}^{2})^{2}]^{1/2}$

Tabelle 1: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 1.



Abbildung 13: (a) Thermische Schwingungsellipsoide von 1a. Die Zinnatome sind hellgrau, das Vanadiumatom dunkelgrau und die Sauerstoffatome sind weiß dargestellt. Die Positionen der organischen Gruppen sind durch die Sn-C-Bindung angedeutet, (b) Dieselbe Struktur als Polyedermodell, Polyeder um Zinn sind grau, um Vanadium dunkel grau dargestellt.

Die Metallatome sind verzerrt ikosaedrisch angeordnet, die V-Sn-Abstände liegen im Bereich von 3.093 - 3.757 Å, Sn-Sn Abstände bei 3.191 - 3.842 Å. Im Vergleich zum $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion ist eine der quadratisch-pyramidalen {RSnO_4}-Gruppen durch eine ebenfalls quadratisch-pyramidale {OVO_4}-Gruppe ersetzt. Der Einbau des Vanadiumatoms erfolgt an der Position, die der des Zinnatoms Sn(1) im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion, d.h. der Position 1 im Ikosaeder, entspricht. Da eine [ⁱPrSn]³⁺-Gruppe durch eine $[OV]^{2+}$ -Gruppe ersetzt wird, sinkt die Ladung des Kations von +2 auf +1, es wird ein Acetat-Anion in der Kristallstruktur beobachtet (Siehe Abb. 16). Die Berechnung der Bindungsvalenzsummen um die Vanadiumatome ergibt eine Ladung von +3.956 für V(1) in guter Übereinstimmung mit der Oxidationszahl von +4 für Vanadium.

Tabelle 2: Atom- und Winkel- Abstände für die {OVO₄}-Gruppe und die {ⁱPrSnO₄}-Gruppe:

V(1) - O(1) V(1) - O(2) V(1) - O(4) V(1) - O(5)	173.1(9) 191.8(8) 196.6(9) 204.3(9)	$\begin{array}{lll} O(1) & -V(1)-O(2)\\ O(1) & -V(1)-O(4)\\ O(1) & -V(1)-O(5)\\ O(2) & -V(1)-O(4)\\ O(2) & -V(1)-O(5)\\ O(4) & -V(1)-O(5) \end{array}$	94.5(4) 92.9(4) 153.3(4) 140.3(4) 78.7(4) 77.5(4)
Sn(5) - O(4) Sn(5) - O(5) Sn(5) - O(8) Sn(5) - O(17)	208.6(9) 199.5(8) 207.2(9) 206.6(9)	$\begin{array}{lll} O(4) & -Sn(5)-O(5)\\ O(4) & -Sn(5)-O(8)\\ O(4) & -Sn(5)-O(17)\\ O(5) & -Sn(5)-O(8)\\ O(5) & -Sn(5)-O(17)\\ O(8) & -Sn(5)-O(17) \end{array}$	75.8(3) 139.3(4) 78.9(4) 96.4(4) 132.7(3) 78.1(4)



Abbildung 14: Die quadratisch-pyramidale Koordinationpolyeder um Vanadium und Zinnatom: links V(1), rechts Sn(7)

Abb. 14 zeigt die Ähnlichkeit zwischen der quadratisch-pyramidalen { OVO_4 }-Gruppe und einer quadratisch-pyramidalen { $RSnO_4$ }-Gruppe am Beispiel des Zinnatoms Sn(7). Insgesamt zeigt die { OVO_4 }-Gruppe kürzere Metall-Sauerstoff_{basal}-Bindungslängen als die {ⁱPrSnO₄}-Gruppen (d_{V-O} = 1.918-2.043 Å, gemittelt 1.980 Å; d_{Sn-O} = 1.992-2.135 Å, gemittelt 2.049 Å), der V-O_{apikal} Abstand beträgt 1.731(9) Å

Die hier beobachtete Bindungslängenverkürzung durch die Substitution eines Zinnatoms durch ein Vanadiumatom bleibt strukturchemisch ohne weiteren Einfluss auf den Rest des Moleküls. Weder kommt es zu Veränderungen in den Koordinationssphären anderer Zinnatome, noch werden extreme Unterschiede in den V-O-Bindungslängen um das Vanadiumatom selbst beobachtet.



Abbildung 15: Der Käfigion von 1 mit dem Acetat-Ion und Wasser Moleküle, die Zinnatome sind grau, das Vanadiumatom dunkelgrau die Sauerstoffatome weiss dunkelgraue Kugeln und Wasserstoffbrückenbindung zu den Acetat-Ion sind gestrichelt.

Die Ispropyl-Gruppe zeigt eine fehlordnung an drei Zinn Atomen Sn (2), Sn(6) und Sn(9), die Kohlenstoffatome können zwei Positionen auf zwei Ebenen einnehmen mit der Besetzungsfaktoren 65% / 35 % für Sn(2), 75% / 25% für Sn(6) und 70% / 30% für Sn(9).

Die Kristallstruktur wird stabilisiert durch ein System von Wasserstoffbrückenbindungen. Da die Lokalisierung von Wasserstoffatomen in dieser Verbindung und auch in den weiteren hier beschriebenen Strukturen äußerst schwierig und die Verfeinerung ihrer tatsächlichen Positionen nicht zuverlässig ist, werden im Text nur die Donor-Akzeptor-Abstände, nicht aber die Wasserstoff-Akzeptor-Abstände bzw. die Donor-Wasserstoff-Akzeptor-Winkel diskutiert.

Das erste und das zweite DMSO-Molekül sind im Gegensatz zum anderen DMSO Molekül nicht fehlgeordnet. Es bildet eine Wasserstoffbrückenbindung zu μ_2 -OH-Gruppe des Sauerstoffatoms O(20) bzw. O(16), der O(20)…O(1A) Abstand beträgt 2.720 Å und der O(16)...O(2A) Abstand beträgt 2.793 Å. Das dritte DMSO-Molekül ist fehlgeordnet, da das Sauerstoffatom als Wasserstoffbrückenakzeptor für zwei unterschiedliche μ_2 -OH-Gruppen dienen kann. Das Sauerstoffatom kann zwei verschiedene Positionen auf beiden Seiten der S-C-C-Ebene einnehmen, die Besetzungsfaktoren für diese Positionen liegen bei 40% / 60%.

Das vierte und fünfte DMSO-Molekül sind genauso wie das dritte DMSO-Molekül fehlgeordnet, die Besetzungsfaktoren für die Positionen der Sauerstoffatome liegen bei 64% / 36% für das vierte DMSO-Molekül, 51% / 49% für das fünfte DMSO-Molekül.



Abbildung 16: Das Kiristallstrukturmolekül von 1 mit der fehlgeordneten Lösungsmitelmoleküle als Kugelstab dargestellt.

Die Abb. 17 zeigt die Elementarzelle von $[({}^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}(ac)]$.Kation



Abbildung 17: (a) Polyederdarstellung der Elementarzelle in 1, die Polyeder um Zinn sind hellgrau, die um Vanadium dunkelgrau dargestellt.

2.1.3 [(ⁱBuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmf)] · 4 DMF (2)

Synthese

In einem 100 ml Einhalskolben wurden 1 g ¹BuSn(OH)₂Cl mit 0,5 g Vanadin(IV)Oxidacetylacetonat in 25 ml DMF unter Rühren bei Raumtemperatur gemischt. Die grüne klare Lösung wurde in den Einhalskolben bei Raumtemperatur eingeengt. Nach zwei Wochen kristallisierte das Produkt in Form gelber Blöcke. Diese Kristalle sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb weniger Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome, die Chloratome sowie die Sauerstoffatome des Käfigkations konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 3 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 2.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von 2 besteht aus einem neutralen $[({}^{i}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmf)]$ -Käfigmolekül, **2a**, und 4 DMF-Molekülen die durch Wasserstoffbrückenbindung an den Käfig gebunden sind. Da alle Atome auf allgemeinen Lagen liegen, besitzt das Molekül C₁-Symmetrie. Eine mögliche Spiegelebene durch V(1)-Sn(2)-Sn(7)-Sn(8) ist zwar angedeutet, wird aber aufgrund der unterschiedlichen Koordinationspolyeder um Sn(9) und Sn(11) nicht gefunden

Summenformel	$C_{51}H_{59}Cl_2O_{28}N_5Sn_9V_3$		
Molare Masse	2243.95		
Temperatur	293(2) K		
Wellenlänge	0.71073 Å		
Kristallsystem	Triklin		
Raumgruppe	P-1 (no. 2)		
Elementarzelle	a = 14.248(5) Å		
	b = 14.366(8) Å		
	c = 25.006(9) Å		
	$\alpha = 105.62(4)$		
	$\beta = 90.87(3) \text{ Å}$		
	$\gamma = 110.08(3)$		
Volumen	4597(3) Å ³		
Ζ	4		
Dichte	1.621 g/cm^3		
AbsorptionsKoeffizient	2.797 mm ⁻¹		
F(000)	5000		
Kristalldimensionen	$0.3 \times 0.2 \times 0.3 \text{ mm}^3$		
Kristallbeschreibung	Nadeln		
Kristallfarbe	Gelb		
Gemessener θ-Bereich	1.76 - 18°.		
Indexgrenzen	$-1 \le h \le 12, -11 \le k \le 11, -21 \le l \le 21$		
Gemessene Reflexe/ Unabhängige Reflexe	12874/7307 [R(int) = 0.0813]		
Completeness	97.2 %		
Verfeinerungsmethode	full-matrix least-squares on F ²		
Daten / Restraints / Parameter	6500 / 0 / 514		
Goodness-of-fit on F ²	1.053		
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	R1 = 0.1074, $wR2 = 0.2937$		
R-Werte [alle Daten]	$R1^{a} = 0.1371, wR2^{b} = 0.3251$		
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	2.853 und -1.244 eÅ ⁻³		
^a R1 = $\Sigma(F_o - F_c) / \Sigma F_o $ ^b wR2 = $[\Sigma w (F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma w (F_o^2)^2]^{1/2}$			

Tabelle 3: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 2.

Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das Käfigmolekül (siehe Abb. 18). Ähnlich wie das $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion enthält es zwei trimere kantenverknüpfte {ⁱBuSnO₅}-Oktaeder, die hier allerdings über einen Ring von drei quadratisch-pyramidalen {OVO₄}-Gruppen [V(1), V(3), V(5)], einer trigonal-bipyramidalen {RSnO₃Cl}-Gruppe [Sn(11)], einer oktaedrischen {ⁱBuSnO₄Cl}-Gruppe [(Sn(9)] und nur noch einer quadratisch-pyramidalen {Pyramidalen {RSnO₄}-Gruppe [Sn(7)] miteinander verbunden sind (siehe Abb. 19).



Abbildung 18: Thermische Schwingungsellipsoide von 2 ohne das an Sn(9) koordinierte DMF-Molekül mit Atombezeichnung. Die Zinnatome sind grau, die Vanadiumatome dunkelgrau und die Sauerstoffatome sind weiss dargestellt. Die Positionen der organischen Gruppen sind durch die Sn-C-Bindung angedeutet. Rechts Dieselbe Struktur als Polyedermodell. Polyeder um Zinn sind grau, um Vanadium schwarz dargestellt.

Trotz der veränderten Koordinationssphären einiger Zinnatome findet sich immer noch die verzerrt ikosaedrische Anordnung der Metallatome. Im Vergleich zum [(RSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Ion wurden drei quadratisch-pyramidalen {RSnO₄}-Gruppen durch drei ebenfalls quadratisch-pyramidale {OVO₄}-Gruppen ersetzt. Der Einbau der Vanadiumatome erfolgte an den Positionen, die denen der Zinnatome Sn(1), Sn(3) und Sn(5) (Positionen 1, 3 und 6 im Ikosaeder) im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion entsprechen. Die V...V Abstände betragen 2.992Å $[d_{V(1)-V(3)}]$ und 2.957 Å $[d_{V(1)-V(5)}]$. Die V...Sn Abstände liegen im Bereich von 3.208 bis 3.685 Å, die Sn...Sn Abstände zwischen 3.235 und 3.298 Å.

Die Veränderungen in den Koordinationssphären von Sn(9) und Sn(11), die hier nicht mehr quadratisch-pyramidal, sonder trigonal-bipyramidal bzw. oktaedrisch koordiniert sind, führt noch zu weiteren Veränderungen des Metall-Sauerstoff-Gerüstes. Zwei der bisher dreifach verknüpfenden Sauerstoffatome [O(7), O(8)] sind nur noch an zwei Zinnatome koordiniert.

An Sn(9) und Sn(11) ist nun zusätzlich jeweils ein Chloratom koordiniert, $[d_{Sn(9)-Cl(2)} = 2.569(5) \text{ Å}, d_{Sn(11)-Cl(1)} = 2.537(5) \text{ Å}]$. Vergleichbare Bindungslängen werden auch in anderen

Verbindungen mit oktaedrisch koordinierten Monoorganozinn-Baueinheiten wie $[({}^{i}PrSn)_{9}O_{8}(OH)_{6}Cl_{5}] \cdot 6 DMSO [24], d_{Sn-Cl} = 2.504 - 2.554 Å, beobachtet.$

Im Fall des Atoms Sn(9) resultiert die oktaedrische Koordinationssphäre durch zusätzliche Anlagerung eines DMF-Moleküls über das doppelt gebundene Sauerstoffatom.

Sn (7) hat die quadratisch-pyramidale Koordination behalten und V(1) hat Sn(1) ersetzt und dieselbe quadratisch-pyramidale Koordination des Zinns übernommen. Die beobachteten Werte für die basalen Metall-Sauerstoff-Bindungen um die Vanadiumatome liegen im Bereich von 1.590 - 2.05 Å, um die einzelnen Vanadiumatome findet man im Mittel sehr ähnliche Bindungslängen von $\overline{d}_{V(1)-O} = 1.816$ Å, $\overline{d}_{V(3)-O} = 1.842$ Å, $\overline{d}_{V(5)-O} = 1.846$ Å. Um das quadratisch-pyramidal koordinierte Zinnatom Sn(7) findet man basale Zinn-Sauerstoff-Bindungslängen von $d_{Sn-O} = 2.038 - 2.068$ Å, $\overline{d}_{Sn-O} = 2.053$ Å.

 Tabelle 4:
 Vanadium-Sauerstoff Bindungsabstände in [Å].

V(1)-O(1)	1.81(2)	V(3)-O(7)	1.74(2)	
V(1)-O(4)	1.83(2)	V(3)-O(2)	1.91(2)	
V(1)-O(2)	1.92(2)	V(3)-O(18)	1.96(2)	
V(1)-O(5)	1.93(2)	V(3)-O(1)	2.05(2)	
V(1)-O(19)	1.59(2)	V(3)-O(22)	1.55(2)	
V(5)-O(23)	1.56(2)			
V(5)-O(8)	1.69(2)			
V(5)-O(17)	1.96(2)			
V(5)-O(5)	1.98(2)			
V(5)-O(4)	2.04(2)			



Abbildung 19: Perspektivische Darstellung der Koordinationsphere um Sn(7) und V(1) mit der Bezeichnung der Atome.

Die hier beobachtete Verzerrung des Metall-Sauerstoff-Gerüstes ist auf kürzere basale V-O-Bindungslängen in den quadratisch-pyramidalen { OVO_4 }-Baueinheiten im Vergleich zu den Sn-O-Bindungslängen in den { iBuSnO_4 }-Einheiten zurückzuführen. Die um die Vanadiumatome auftretenden Bindungslängen zeigen somit bereits eine deutlich größere Variationsbreite als die in **1a** gefundenen. Die V-O_{apikal} Abstände betragen 1.59, 1.55 and 1.56 Å für V(1), V(3) und V(5). Die Berechnung der V-O-Valenzsummen für diese Vanadiumatome ergibt +5.127, +5.075 und +5.091 in guter Übereinstimmung mit V^V.

In der Kristallstruktur finden sich sowohl intra- als auch intermolekulare Wasserstoffbrückenbindungen (siehe Abb.21). Die intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen werden von den μ_2 -OH-Gruppen der Sauerstoffatome ausgebildet und binden an die Chloratome Cl(2) und Cl(1) mit O…Cl-Abständen von 3.117 Å.



Abbildung 20: Die Anordnung der DMF-Moleküle mit Wasserstoffbrückebindungen und die Chloratome in 2 mit Bezeichnung der Atome.

Das erste der fünf in der Kristallstruktur enthaltenen Lösungsmittelmoleküle fungiert als Akzeptor für eine Wasserstoffbrückenbindung, die von der μ_2 -OH-Gruppe des Sauerstoffatoms O(3) ausgeht. Das zweite DMF-Molekül erhält eine Wasserstoffbrückenbindung von der μ_2 -OH-Gruppe des Sauerstoffatoms. Der O...O Abstand beträgt 2.769 Å.

Die Elementarzelle der Kristallstruktur von $[({}^{i}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmf)]$ -Käfigion wird in Abb. 21 dargestellt.



Abbildung 21: Die Polyederdarstellung der Elementarzelle von 2a als Parallelprojektion auf die ab-Ebene.

2.1.4 [(ⁿBuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmso)₂] · 3 DMSO (3)

Synthese

In einen 250ml Erlenmeyerkolben wurden 1 g (4.34 mmol) ⁿBuSn(OH)₂Cl (Mr = 230.2 g/mol) 0.18 g (0.5 mmol) Vanadylacetylacetonat (99%) 25 ml DMSO auf einer Heizplatte mit Magnetrührer 10 Minuten lang auf 50°C erwärmt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die klare Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur bis die Hälfte eingeengt. Nach zirka 6 Wochen kristallisierte die "Vandiumzinnverbindung" in Form schwach gelber Kristalle. Diese sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb wenigen Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

Struktur

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome, die Chloratome sowie die Sauerstoffatome des Käfigkations konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 6 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 3.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von **3** besteht aus einem neutralen $[({}^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}]$ -Käfigmolekül **3a** und drei DMSO-Molekülen, die durch intramolekulare Wasserstoffverbindungen an das Käfigmolekül gebunden sind. Diese Verbindung unterscheidet sich in ihrer Zusammensetzung von **2** durch den organischen Rest. Statt eines Isobutyl- ist ein n-Butyl-Rest an die Zinnatome gebunden, und statt DMF wird DMSO als Lösungsmittel in der Kristallstruktur eingebaut.

Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das in Abb. 22 dargestellte Käfigmolekül **3a**. Es unterscheidet sich kaum von **2a**, vor Allem bei der koordinativen V-O Bindungslängen ist kein Unterschied zusehen. Alle Atome liegen auf eine allgemeine Position und wie bei 2a besitzt das Molekül C₁-Symmetrie. Aufgrund der unterschiedlichen Koordinationpolyeder um Sn(9) und Sn(11) ist die potentielle Spiegelebene durch V(1)-Sn(2)-Sn(7)-Sn(8) nicht deutlich ausgeprägt. Die Sn(9)-O_{dmso}-Bindung ist deutlich stärker als Sn(9)-O_{dmf}-Bindung in 2a.
Summenformel	$C_{46}H_{117}Cl_2O_{28}S_5Sn_9V_3$
Molare Masse	2136.01
Temperatur	293(2) K
Wellenlänge	0.71069 Å
Kristallsystem	Monoklin
Raumgruppe	P2(1)/n (no. 14)
Elementarzelle	a = 17.961(5) Å
	b = 19.222(4) Å
	c = 26.748(6) Å
	$\beta = 106.776(2)^{\circ}$
Volumen	8842(4) Å ³
Z	4
Dichte	1.931 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	3.036 mm ⁻¹
F(000)	5000
Kristalldimensionen	$0.5 \times 0.5 \times 0.6 \text{ mm}^3$
Kristallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Gelb
Gemessener θ-Bereich	1.91 - 22°.
Indexgrenzen	$-18 \le h \le 1, -1 \le k \le 20, -27 \le l \le 28$
Absorptionskorrektur	empirical from psi-Scans
max./min. Transmission	0.9928/0.4906
Gemessene Reflexe	12874
Unabhängige Reflexe	10733 [R(int) = 0.0365]
Verfeinerungsmethode	full-matrix least-squares on F ²
Daten / Restraints / Parameter	10733 / 99 / 585
Goodness-of-fit / F2	1.027
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	R1 = 0.0622, wR2 = 0.1632
R-Werte [alle Daten]	$R1^{a} = 0.0734, wR2^{b} = 0.1712$
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	1.209 und -1.452 eÅ ⁻³
^a R1 = $\Sigma(F_o - F_c) / \Sigma F_o $ ^b wR2 = $[\Sigma w (F_o^2 - F_c^2)^2]$	$\frac{1}{2} \sum w (F_o^2)^2]^{\frac{1}{2}}$

Tabelle 5: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 3.



Abbildung 22: (a) Thermische Schwingungsellipsoide von 3a ohne DMSO-Molekül. Die Zinnatome sind hellgrau, die Vanadiumatome dunkelgrau und die Sauerstoffatome sind weiss dargestellt. Die Positionen der organischen Gruppen sind durch die Sn-C-Bindung angedeutet. (b) Dieselbe Struktur als Polyedermodell.

Die Art, Anordnung und Verknüpfung der Koordinationspolyeder um Zinn- und Vanadiumatome entspricht ansonsten den in **2a** gefundenen. Der Einbau der Vanadiumatome erfolgte an den Positionen, die denen der Zinnatome Sn(1), Sn(3) und Sn(5) im $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion (Positionen 1, 3 und 6 im Ikosaeder) entsprechen. Außer Sn(7), das quadratisch pyramidal koordiniert ist, wie in die Abb. 23 zu sehen ist, sind alle Zinnatome oktaedrisch koordiniert. Die V…V Abstände betragen 2.990 Å $[d_{V(1)-V(3)}]$ und 2.978 Å $[d_{V(1)-V(5)}]$.



Abbildung 23: Perspektivische Darstellung der thermische Schwingungsellipsoide um Sn(7) und V(1) und Bezeichnung der Atome.

Die beobachteten Werte für die basalen Metall-Sauerstoff-Bindungen in den quadratisch-pyramidalen Koordinationspolyeder der Vanadiumatome liegen im Bereich von 1.597 - 2.040 Å. Um die einzelnen Vanadiumatome findet man im Mittel sehr ähnliche Bindungslängen von $\overline{d}_{V(1)-O} = 1.817$ Å, $\overline{d}_{V(3)-O} = 1.842$ Å, $\overline{d}_{V(5)-O} = 1.841$ Å. Um das quadratisch-pyramidal koordinierte Zinnatom Sn(7) beobachtet man Werte von $d_{Sn-O} = 2.037 - 2.089$ Å, $\overline{d}_{Sn-O} = 2.065$ Å. Die basalen V-O-Bindungslängen unterscheiden sich somit nur unwesentlich von den in **2a** gefundenen. Die V-O_{apikal} Abstände betragen 1.59, 1.58 und 1.59 Å für V(1), V(3) und V(5). Die V…Sn Abstände liegen im Bereich von 3.193 bis 3.684 Å, die Sn…Sn Abstände zwischen 3.249 und 3.290 Å.



Abbildung 24: Perspektivische Darstellung des Koordinationspolyeder am Sn(9).

Der große Unterschied in dem Sn...Sn Abstände kommt von den unterschiedlichen Koordinationsphären an den Zinnatomen, besonders an Sn(9) und Sn(11). Die deutlich kürzere Bindungslänge der Sn(9)-O_{dmso}-Bindung in **3a** führt noch zu weiteren Unterschieden in der oktaedrischen Koordinationssphäre von Sn(9). Die Sn-Cl Abstände sind genauso lang wie bei **2a** und betragen: Sn(9)-Cl(1) 2.517; Sn(11)-Cl(2) 2.587.

Die Unterschiede der trigonal-bipyramidalen Umgebungen der Zinnatome Sn(11) in **3a** und **2a** sind weit weniger deutlich als die Unterschiede der Koordinationssphären der Sn(9)-Atome. Details zu Bindungslängen und -winkeln um Sn(9) und Sn(11) sind in Abb. 25 und Tab. 6 wiedergegeben.

Winkel	Sn(9)	Sn(11)
C-Sn-Cl	91.0(4)	96.0(5)
C-Sn-O ₁	163.9(4)	160.8(5)
C-Sn-O ₂	104.7(4)	97.6(5)
C-Sn-O ₃	99.6(4)	103.3(5)
C-Sn-O _{dmso}	80.5(6)	83.1(8)
Cl-Sn-O ₁	84.8(2)	88.3(3)
Cl-Sn-O ₂	159.4(2)	163.9(3)
Cl-Sn-O ₃	93.4(2)	89.6(3)
Cl-Sn-O _{dmso}	90.0(4)	90.0(4)
O ₁ -Sn-O ₂	76.4(3)	76.1(3)
O ₁ -Sn-O ₃	96.2(3)	95.4(3)
O ₁ -Sn-O _{dmso}	83.9(6)	78.2(6)
O ₂ -Sn-O ₃	96.8(3)	95.7(3)
O ₂ -Sn-O _{dmso}	79.9(5)	83.0(4)
O ₃ -Sn-O _{dmso}	176.5(5)	173.6(6)

Tabelle 6: Bindungswinkel um Sn(9) und Sn(11); O1 ist as Sauerstoffatom *trans* zum organischen Rest[O(12)/O(15)], O2 *trans* zum Chloratom [O(11)/O(14)], O3 das dritte Sauerstoffatom [O(17)/O(18)].

Die Kristallstruktur wird stabilisiert durch ein System von Wasserstoffbrückenbindungen. Da die Lokalisierung von Wasserstoffatomen in dieser Verbindung wie in den vorherigen beschriebenen Strukturen schwierig und die Verfeinerung ihrer tatsächlichen Positionen nicht zuverlässig ist, werden im Text nur die Donor-Akzeptor-Abstände, nicht aber die Wasserstoff-Akzeptor-Abstände bzw. die Donor-Wasserstoff-Akzeptor-Winkel diskutiert.

Die intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen (siehe Abb. 26 und Tab. 7) in **3a** ähneln stark denen in **2a**. Ausgehend von den μ_2 -Gruppen der Sauerstoffatome O(13) und O(16) binden sie die Chloratome Cl(2) und Cl(1) mit O…Cl-Abständen von 3.117 und 3.172 Å. Die vier übrigen μ_2 -OH-Gruppen bilden Wasserstoffbrückenbindungen zu drei zusätzlichen DMSO-Molekülen aus. Das erste DMSO-Molekül fungiert als Akzeptor von der μ_2 -OH-Gruppe O(3)...O(300)/O(305) die O…O-Abstände liegen zwischen 2.623 und 2.711 Å. Dieses DMSO-Molekül ist fehlgeordnet und hat eine Besetzung von 50%/50% bezüglich der O-C-O Ebene. Das zweite DMSO-Molekül ist im Gegensatz zu Erstem nicht fehlgeordnet und dient als Akzeptor für eine Wasserstoffbrückenbindung, die von der μ_2 -OH-Gruppe an O(6) ausgeht. Der Abstand O(6)...O(200) beträgt 2.740 Å. Das dritte DMSO-Molekül ist wiederum fehlgeordnet mit einer 50%/50% Besetzung bzgl. der O-C-O-Ebene.



Abbildung 25: Wasserstoffbrückenbindungen in 3.

Im Gegensatz zu den anderen Gruppen fungiert die μ_2 -OH-Gruppe an O(10) nicht als Donor oder Akzeptor von Wasserstoffbrückenbindungen.

 Tabelle 7:
 Wasserstoffbrückenbindungen in 3 [Å und °].

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
O(3)-H(3)O(305)	0.85	1.88	2.71(3)	167.3
O(6)-H(6)O(200)	0.85	1.79	2.74(3)	175.4
O(16)-H(16)Cl(1)	0.85	2.70	3.11(3)	121.7
O(13)-H(13)Cl(2)	0.85	2.35	3.17(3)	179.7
O(20)-H(20)O(500)	0.85	1.80	2.56(4)	174.9

Abb. 26 zeigt eine Polyederdarstellung der Elementarzelle von 3.



Abbildung 26: Polyederdarstellung der Elementarzelle von 3 als Parallelprojektion auf die ac-Ebene.

2.1.5 [(ⁱPrSn)₉(OV)₂O₁₅(OH)₉] · 4.5 H₂O (4)

Synthese

In einen 250 ml Erlenmeyerkolben wurden 0.5 g (2 mmol) ⁱPrSn(OH)₂Cl · 3/4(H₂O), 0.25 g (1 mmol) Vanadylacetylacetonat (99%), 5 ml DMF und 20 ml Wasser auf eine Heizplatte mit Magnetrührer 10 Minuten lang auf 50°C erwärmt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die klare Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur bis die Hälfte eingeengt. Nach zirka 6 Wochen kristallisierte die "Vandiumzinnverbindung" in Form schwach gelber Kristalle aus. Diese sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb weniger Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome sowie die Sauerstoffatome des Käfigkations konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 8 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 4.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von 4 besteht aus einem Sechstel des neutralen [(ⁱPrSn)₉(VO)₂O₁₅(OH)₉] Käfigmoleküls 4a und 1 1/2 Wasser-Molekülen, die durch Wasserstoffbrückenbindung an das Käfigmolekül gebunden sind.

Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das in Abb. 27 wiedergegebene Käfigmolekül 4a. Ähnlich wie das $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Ion enthält es zwei Gruppen trimerer kantenverknüpfter {iPrSnO5}-Oktaeder. Im Unterschied zur Grundstruktur fehlen hier allerdings alle quadratisch-pyramidalen {RSnO4}-Gruppen. Die Zinnatome sind alle oktaedrisch koordiniert, die Vanadiumatome sind nicht wie in den vorherigen Strukturen (1, 2 und 3) quadratisch-pyramidal, sondern tetraedrisch koordiniert.

Summenformel	$C_{27}H_{81}O_{35}Sn_9V_2$
Molare Masse	2136.01
Kristallsystem	Hexagonal
Raumgruppe	P-3
Elementarzelle	a = 14.702(3) Å
	c = 18.245(4) Å
Volumen	3415.4(12) Å ³
Ζ	2
Dichte	2.077 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	3.566 mm^{-1}
F(000)	2038
Kristalldimensionen	0.7 mm x 0.5 mm x 0.6 mm
Kritallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Gelb
Gemessener θ-Bereich	1.95 - 23.99°.
Indexgrenzen	0≤h<=15, -16≤k≤0, -20≤l≤0
Gemessene Reflexe	3741
Unabhängige Reflexe	1849 [R(int) = 0.0437]
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten / Restraints / Parameter	1849 / 15 / 128
Goodness-of-fit / F^2	1.071
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	R1 = 0.0484, WR2 = 0.1271
R-Werte [alle Daten]	R1 = 0.0557, WR2 = 0.1319
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	$0.848 \text{ und } -0.588 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$
^a $\mathbf{P}_{1} = \mathbf{\Sigma}(\mathbf{F} + \mathbf{F})/\mathbf{\Sigma} \mathbf{F} = \mathbf{b} \mathbf{w} \mathbf{P}_{2} = [\mathbf{\Sigma}\mathbf{w}(\mathbf{F}_{2} - \mathbf{F}_{2})]$	$\frac{2}{5}$ / $\sum \frac{1}{2}$

Tabelle 8: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 4.

^a R1 = $\Sigma(|F_o| - |F_c|) / \Sigma |F_o|$ ^b wR2 = $[\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma w(F_o^2)^2]^{1/2}$



Abbildung 27: Kugel-Stab-Modell von 4a der asymmetrischen Einheit. Die Zinnatome sind grau, die Vanadiumatome dunkelgrau und die Sauerstoffatome sind weiß dargestellt, rechts dieselbe Struktur als Polyedermodell.

Die Vanadium-Tetraeder sind über Ecken verknüpft, die {iPrSnO5}-Oktaeder sowohl über Ecken als auch über Kanten. Das Polyeder der elf Metallatome (siehe Abb. 28) ist eine dreifach überkappte trigonale Pyramide, die aus sechs Zinnatomen besteht, mit drei zusätzlichen Zinnatomen über den quadratischen Flächen und zwei Vanadiumatomen über deren Dreiecksflächen.



Abbildung 28: Das Polyeder der Metallatome in 4a; die Vanadiumatome sind dunkelgrau, die Zinnatome grau dargestellt.

Die Sn…Sn-Abstände liegen im Bereich von 3.4 Å, die Sn…V-Abstände bei 3.6 - 4.91 Å, der Abstand zwischen V(1) und V(1)² beträgt 7.2 Å.

Die V-O-Bindungslängen zeigen mit 1.663 - 1.731 Å einen normalen Vanadium-Sauerstoff-Abstand und eine Spannbreite, die gegenüber den in 2 und 3 beobachteten Werten deutlich kleiner ist. Die Mittelwerte der Metall-Sauerstoff-Bindungen um die einzelnen Zinnatome unterscheiden sich nicht wesentlich von den Zinn-Sauerstoff-Abständen in 1, 2a oder 3. Die Tabelle 9 zeigt die Zinn bzw. Vanadium –Sauerstoff Abstände und ausgewählte Winkel an Sn(1) und V(1).

Sn(1)-O(1)	217	O(1)-Sn(1)-O(2)	75.1(3)
Sn(1)-O(2)	212	O(1)-Sn(1)-O(3)	74.0(3)
Sn(1)-O(3)	212	O(1)-Sn(1)-O(4)	89.2(2)
Sn(1)-O(4)	209	O(1) -Sn(1)-O(5)'	86.6(2)
Sn(1)-O(5)'	213	O(2)-Sn(1)-O(3)	94.4(3)
		O(2)-Sn(1)-O(4)	163.8(3)
		O(3)-Sn(1)-O(4)	84.8(3)
V(1)-O(6)	167	O(6)-V(1)-O(4)	111.4(2)
V(1)-O(4)'	173	O(4) -V(1)-O(4)'	107.5(2)
V(1)-O(4)	173		

 Tabelle 9:
 M-O-Abstände [pm] und Winkeln [°] an Zinn und Vanadium.



Abbildung 29: Die Koordinationssphäre um das Vanadium- und Zinn-Atom mit der Bezeichnung der Atome und einige Atomabständen.

Die Koordinationssphären an V(1) und Sn(1) sind in Abb. 29 dargestellt. Die 216.7 pm und 212.2 pm langen Bindungen zu O(1) und O(2) führen zu einer Verzerrung des Zinn-Oktaeders im Metall-Sauerstoff-Gerüst. Der Sn(1) Oktaeder ist eckenverknüpft über O(4) mit dem Vanadium-Tetraeder und kantenverknüpft über O(1) und O(3) mit dem nächsten Sn(2)-Oktaeder.

Wie in Abb. 30 zu sehen ist, enthält die Kristallstruktur von 4 neun Wasser-Moleküle. Sie fungieren sowohl als Akzeptor als auch als Donor von Wasserstoffbrückenbindungen. Da die Lokalisierung von Wasserstoffatomen äußerst schwierig und die Verfeinerung ihrer tatsächlichen Positionen nicht zuverlässig ist, werden die Donor-Akzeptor-Abstände nicht richtig gerechnet, aber trotzdem festgestellt und der Kristallstruktur eingefügt. Das Wassermolekül ist durch Wasserstoffbrückenbindung an der μ_2 -OH Gruppe gebunden.



Abbildung 30: Die Wassermoleküle des Wasserstoffbrückensytems in 4

Abb. 31 zeigt eine Elementarzelle von 4.



Abbildung 31: Polyederdarstellung der Elementarzelle von 4 mit den Wasser-Molekülen in Parallelprojektion auf die ac-Ebene.

2.1.6 [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆][(ⁱPrSn)₃(OV)₄O₁₀(OH)₃] · 4 DMSO (5)

Synthese

In einem 250 ml Erlenmeyerkolben wurden 0.5 g (2 mmol) ⁱPrSn(OH)₂Cl 0.4 g (2 mmol) Vanadylacetylacetonat (99%), 40 ml DMSO, 0.25 μ l Hydrazin und 10 ml Wasser auf einer Heizplatte mit Magnetrührer 10 Minuten lang auf 50°C erwärmt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die klare gelbe Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur eingeengt. Nach zirka 7 Wochen kristallisierte die "Vandiumzinnverbindung" in Form schwach gelblicher Kristalle. Diese sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb weniger Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

Struktur

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome sowie die Sauerstoffatome des Käfigkations konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 10 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 4.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von 5 besteht aus einem neutralen $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}][({}^{i}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}]$ -Molekül 5a und vier DMSO-Molekülen.

Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das in Abb. 32 wiedergegebene neutrale Molekül **5a**. Es besteht aus einem $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Kation und einem bisher unbekannten $[({}^{i}PrSn)_3(OV)_4O_{10}(OH)_3]^{2-}$ -Anion. Das verzerrte Ikosaeder des Kations hat seine Grundstruktur behalten, es enthält sechs kantenverknüpfter {RSnO₅}-Oktaeder und sechs quadratisch-pyramidale {RSnO₄}-Gruppen. Eine Ausnahme ist das {RSnO₄}-Polyeder, das mit dem Anion verknüpft ist. Das neue Vanadiumhaltige Anion enthält vier {VO}₄-Tetraeder, die durch Ecken verknüpft sind und drei kantenverknüpfte {RSnO₅}-Oktaeder. Kation und Anion sind über ein gemeinsames Sauerstoffatom miteinander verknüpft, das gesamte Molekül ist neutral.

 Tabelle 10: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 5.

Summenformel	$C_{53} H_{138} O_{41} S_4 Sn_{15} V_4$
Molare Masse	3543.98
Kristallsystem	Hexagonal
Raumgruppe	P-6(5)
Elementarzelle	a = 13.7632(3) Å
	c = 95.061(4) Å
Volumen	15594.6(8) Å ³
Z	6
Dichte	2.264 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	4.025 mm^{-1}
F(000)	10140
Kristalldimensionen	0.1 mm x 0.1 mm x 0.08 mm
Kristallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Gelb
Gemessener θ-Bereich	2.27 - 28.33°.
Indexgrenzen	-15≤h≤17, -18≤k≤12, -125≤l≤126
Gemessene Reflexe	106913
Unabhängige Reflexe	24715 [R(int) = 0.0489]
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten / Restraints / Parameter	24727 / 25 / 817
Goodness-of-fit / F^2	1.118
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	R1 = 0.0454, wR2 = 0.0859
R-Werte [alle Daten]	R1 = 0.0496, $wR2 = 0.0873$
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	1.430 und -1.474 eÅ ⁻³
$^{a} R1 = \Sigma(F_{o} - F_{c}) / \Sigma F_{o} $ $^{b} wR2 = [\Sigma w(F_{o}^{2} - F_{c}^{2}) / \Sigma F_{o}]$	$\frac{(2)^{2}}{(2)^{2}} \frac{(2)^{2}}{(2)^{2}} \frac{1}{2}$



Abbildung 32: Rechts die Polyederdarstellung des [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆][(ⁱPrSn)₃(OV)₄O₁₀(OH)₃]-Molekül, links das Kugestabmodel, die Zinnatome sind hellgrau, die Vanadiumatome dunkelgrau, die Sauerstoffatome grau, die Kohlenstoffatome weissgrau und die Wasserstoffatome weiß dargestellt.

Die Koordination an den Zinnatomen ist beim Kation außer bei Sn(1) gleich geblieben. Die Sn-Sn Atomabstände haben ein Mittelwert von 3.254 Å und die Sn-O Abstand beträgt ein Mittelwert von 2.058 Å. Sn (1) hat durch die Verknüpfung mit dem $[({}^{i}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}]$ -Anion seine quadratisch-pyramidale Koordination durch eine trigonal-bipyramidale Koordination ersetzt. Mit einer Bindungslänge von 2.342 Å ist die Sn(1)-O(34) Bindung deutlich länger als eine normale Zinn-Sauerstoff Bindung (siehe Abb. 33).



Abbildung 33: Kugel-Stab-Modell des neuen [(ⁱPrSn)₃(OV)₄O₁₀(OH)₃]-Anions.

Dieses Anion enthält im Gegensatz zu den Verbindungen **1** - **4** keine quadratischpyramidalen Baueinheiten. Es werden nur oktaedrische {RSnO₅}- und tetraedrische {VO₄}-Gruppen beobachtet. Die V-O Abstände liegen im Bereich von 1.685 Å und 1.825 Å, die Sn-O Bindungslängen im Bereich 2.085 Å und 2.220 Å, Sn-Sn Atomabstände liegen zwischen 3.311 Å und 3.317 Å und die V-V Abstände liegen zwischen 3.350 und 4.680. Einen Überblick über ausgewählte Metall-O-Abstände und Winkel für V(1) und Sn(1) sind in Tabelle 11 zusammengefasst.



Abbildung 34: Thermische Schwingungsellipsoide von Sn(1) und V(1) mit Sn-O- und V-O-Abstände (in pm) und Bezeichnung der Atome.

Tabelle 11: Ausgewählte	Bindungsabstände	[pm]	und	-winkel	[°]	für	Sn(1)	und	V(1)	mit	den
Standardabwe	ichungen der letzten	Stellen	in Kla	ammern.							

V(1)-O(7)	171.4(7)	O(7)-V(1)-O(8)	110.8(3)
V(1)-O(8)	170.5(7)	O(7)-V(1)-O(30)	114.7(3)
V(1)-O(30)	185.1(7)	O(7)-V(1)-O(34)	108.3(3)
V(1)-O(34)	165.3(7)	O(8)-V(1)-O(30)	107.4(3)
		O(34)-V(1)-O(8)	110.1(4)
		O(34)-V(1)-O(30)	105.4(3)
Sn(1)-O(12)	202.8(7)	O(12)-Sn(1)-O(24)	129.1(3)
Sn(1)-O(24)	219.7(7)	O(12)-Sn(1)-O(25)	74.3(3)
Sn(1)-O(25)	220.8(7)	O(12)-Sn(1)-O(28)	97.7(3)
Sn(1)-O(28)	201.0(7)	O(12)-Sn(1)-O(34)	79.4(3)
Sn(1)-O(34)	234.2(7)	O(12)-Sn(1)-C(4)	122.4(4)
Sn(1)-C(4)	215.7(11)	O(24)-Sn(1)-O(34)	141.6(3)
		O(25)-Sn(1)-O(34)	145.6(3)
		O(28)-Sn(1)-O(34)	76.7(3)
		O(34)-Sn(2)-C(4)	82.6(3)



Abbildung 35: Wasserstoffbrücken in 5 mit Beschriftung der beteiligten Atome in dem Käfig.

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
C(14)-H(14)O(8)	0.98	2.85	3.64	138.5
C(9)-H(9)O(30)	0.96	2.87	3.59	132.9
C(8)-H(8)O(33)	0.98	2.52	3.43	154.6

Tabelle 12: Wasserstoffbrückenbindungen in 5 [Å und °].

Abb. 36 zeigt eine Polyederdarstellung der Moleküle entlang der außergewöhnlich (95 Å) langen c-Achse in der Elementarzelle. Beim Kalottenmodel sieht man deutlich die Schrauben-Achse.



Abbildung 36: Elementarzelle von 5 als Parallelprojektion auf die ac-Ebene, die Polyeder um die Zinnatome sind hellgrau und die um die Vanadiumatome dunkelgrau dargestellt.

2.2 Molybdänhaltige Monoorganozinnverbindungen

Allgemeines

Organozinnverbindungen mit Molybdän als Übergangsmetall wurden bisher selten beschrieben. Von den bisher drei bekannten Verbindungen weisen Me₂SnMoO₄ [25] und (Me₃Sn)₂MoO₄ [26] polymere Strukturen auf, in denen oktaedrisch aufgebaute Organozinn-Sauerstoff-Einheiten über {MoO₄}-Tetraeder zu zwei- bzw. dreidimensionalen Strukturen verknüpft sind. *Krebs et al.* beschreiben 1991 mit dem in Abb. 37 dargestellten Organozinnmolybdat [(ⁿBu)₄N]₂[(Ph₂Sn)₂(OH)₂(MoO₄)₂] · CH₂Cl₂ [27] erstmals eine Verbindung, in der nicht die Ausbildung eines polymeren Netzwerkes sondern von isolierten oligomeren Organozinn-Molybdat-Anionen, untereinander verknüpft über Wasserstoffbrückenbindungen beobachtet wurde.



Abbildung 37: Polyederdarstellung und Kalottenmodell des [(Ph₂Sn)₂(OH)₂(MoO₄)₂]₂-Anions [27].

In dem in dieser Verbindung enthaltenen $[(Ph_2Sn)_2(OH)_2(MoO_4)_2]^{2-}$ -Anion finden sich zwei {Ph_2SnO_4}-Oktaeder, die über je 2 μ_2 -{MoO_4}-Tetraeder und 2 μ_2 -OH-Gruppen miteinander verknüpft sind. Ein organozinnfreies Polyoxometallat mit entsprechendem Aufbau ist nicht bekannt.

Pope et al. synthetisierten sowohl verschiedene Wolframatostannate(II) mit Kegginbzw. Dawson-Strukturen [28] als auch eine Anzahl von Tris(organotin)-Keggin-Wolframatosilicaten mit den Anionen [(PhSn)₃(β-SiW₉O₃₇)]⁷⁻ oder [(PhSnOH)₃(α-SiW₉O₃₄)₂]¹⁵⁻ [29]. Reuter und Kastner gelang die Synthese einer Verbindung der Zusammensetzung $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}][({}^{i}PrSn)_{4}(MoO_{4})_{4}O(OH)_{3}]_{2} \cdot 6 DMSO mit dem bis daher unbekannten <math>[({}^{i}PrSn)_{4}(MoO_{4})_{4}O(OH)_{3}]^{-}$ Anion [30].



Abbildung 38: Links die Polyederdarstellung, rechts das Kugelstab-Modell des [(ⁱPrSn)₄(MoO₄)₄O(OH)₃]⁻ Anion [30].

Dieses Anion enthält wie die Vanadium-Monoorganozinnverbindung **5** keine quadratisch-pyramidalen Baueinheiten. Es werden nur oktaedrische $\{RSnO_5\}$ - und tetraedrische $\{MoO_4\}$ -Gruppen beobachtet. Die Synthese erfolgte durch Reaktion von Ammoniummolybdat mit Isopropylzinndihydroxidchlorid in DMSO.

2.2.1 [(ⁱPrSn)₈ (MoO₄)₄ (SnO₆) (OH)₈] · H₂O · 6 DMF(6)

Synthese

In einem 250 ml Erlenmeyerkolben wurden 1 g (4 mmol) ⁱPrSn(OH)₂Cl.3/4(H₂O) [1] und 0.5 g (1 mmol) Molybdenylacetylacetonat (99%) in 40 ml DMF auf eine Heizplatte mit Magnetrührer 30 Minuten lang auf 80°C erwärmt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die klare Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur eingeengt. Nach 7 Wochen kristallisierte die "Molybdänzinnverbindung" in Form farbloser durchsichtiger Kristalle aus. Diese sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb wenigen Stunden durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome sowie die Sauerstoffatome der Käfigionen konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 13 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 5.

Die asymmetrische Einheit von 6 besteht aus einem halben neutralen $[(iPrSn)_8(MoO_4)_4(SnO_6)(OH)_8]$ -Käfig-Molekül in dessen Mitte ein Inversionszentrum liegt, einem halben Wassermolekül und drei DMF-Molekülen. Diese sind über Wasserstoffbrücken mit dem Käfig verbunden.

Das in Abb. 39 dargestellte Käfig-Molekül **6a** besteht aus kantenverknüpften {RSnO₅}-Oktaedern, die über vier isolierte μ_3 -{MoO₄}-Tetraeder verknüpft sind. Die Molybdän-Atome liegen alle auf einer allgemeinen Lage. Das zentrale Zinnatom befindet sich in einem {RSn(μ_3 -O)₆} Oktaeder, der über Ecken als auch über Kanten verknüpft ist. Ein solcher Strukturtyp mit einem zentralen Metallatom in einem Käfig-Molekül ist nach meinen Kenntnissen bisher nicht bekannt. Für das zentrale Zinnatom wird eine Sn-Valenz von 3.904 berechnet. Das ist in guter Übereinstimmung mit Sn^{IV} als Oxidationszahl.
 Tabelle 13: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 6.

Summenformel	C42H12 50O37N6SnoM04
Temperatur	293(2) K
Wellenlänge	0.71073 Å
Molare Masse	2645.05
Kristallsystem	Monoklin
Baumaruppa	C2/c
Flowenterrelle	$C_{2/C}$
Elementarzene	a = 25.540(9)A
	b = 21.936(7)A
	c = 15.616(6)A
	$\gamma = 101.26(4)^{\circ}$
Volumen	8580(5)Å ³
Z	4
Dichte	2.048 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	3.207mm ⁻¹
F(000)	4882
Kristalldimensionen	0.3 x 0.2 x 0.1 mm
Kristallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Farblos
Gemessener θ-Bereich	1.93 - 22.00°
Indexgrenzen	-26<=h<=1, -1<=k<=23, -16<=l<=16
Gemessene Reflexe	11958
Unabhängige Reflexe	10375 [R(int) = 0.0343]
Absorptionkorrektur	Empirical
max./min. Transmission	0.1373 und 0.1004
Verfeinungsmethode	Full-matrix least-squares on F^2
Daten / Restraints / Parameter	5195 / 31 / 320
Goodness-of-fit / F2	1.031
R-Werte $[I > 2\sigma(I)]$	R1 = 0.0619, WR2 = 0.1542
R-Werte [alle Daten]	RI = 0.0915, WR2 = 0.1746
IVIAX. UND IVIIN. der letzte Verfeinerung	$1.152 \text{ und } -0.901 \text{ eA}^{-1}$
$K1 = 2(F_0 - F_c)/2 F_0 \qquad WK2 = [2W(F_0 - F_c)]$	$J/\Delta W(\Gamma_o)$]



Abbildung 39: (a) Thermische Schwingungsellipsoide von 6a mit der Bezeichnung der Atome der asymmetrischen Einheit. Die Zinnatome sind hellgrau, die Molybdänatome dunkelgrau und die Sauerstoffatome sind weiß dargestellt. Die Positionen der organischen Gruppen sind durch die Sn-C-Bindung angedeutet. (b) Dieselbe Struktur als Polyedermodell, die Polyeder um Zinn sind hellgrau, um Molybdän dunkelgrau dargestellt.

Die Metall-Atome sind nicht mehr ikosaedrisch angeordnet. Wie in Abb. 40 zu sehen ist, sind zwei Oktaeder untereinander über Kanten verknüpft und weiter über Ecken mit den nächsten zwei verbunden.



Abbildung 40: (a) Polyeder der Zinnatome in 6 mit Kanten- und Eckenverknüpfung. (b) Darstellung der eckenverknüpften Molybdän-Tetraeder.

Die Sn...Sn Bindungslängen liegen bei 3.29 Å, die Mo...Mo Atomabstände bei 6.3 Å. Die Zinn-Sauerstoff-Abstände liegen zwischen 2.0 Å und 2.16 Å und sind damit in dem normalen Bereich. Die Mo-O Bindungslängen variieren zwischen 1.7 Å und 1.8 Å. Dieses entspricht einer normalen Molybdän-Sauerstoff-Bindung. Das zentrale Zinnatom Sn(1) hat M-M Abstand von 3.8 Å zu Sn und 4.3 Å zu Mo. Mit einem Mittelwert von 2.008 sind die Sn(1)-O Bindungen kürzer als bei den anderen Zinnatomen. Die Winkel um Sn(1) und die Sn(1)-O Abstände bei diesem zentralen Atom sind in Tabelle 14 zusammengefasst.



Abbildung 41: Polyederdarstellung des Zinn-Sauerstoff-Oktaeders am zentralen Zinnatom Sn(1).

Tabelle 14: Bindungsabstände	[pm]	und	-winkel	[°]	mit	den	Standardabweichungen	der	letzten	Stellen	in
Klammern.											

Sn(1)-O(1)	2.161(9)	O(1)-Sn(1)-O(2)	74.3(4)
Sn(1)-O(2)	2.039(9)	O(1)-Sn(1)-O(3)	92.9(4)
Sn(1)-O(3)	2.009(9)	O(2)-Sn(1)-O(3)	93.6(4)
		O(1)'-Sn(1)-O(2)	123.2(4)
		O(2)-Sn(1)-O(3)'	143.7(4)
		O(1)'-Sn(1)-O(1)	156.7(5)
		O(2) - Sn(1)-O(2)	93.1(5)
		O(3) -Sn(1)- $O(3)$	101.6(6)

Bindungslängen, Winkel, Valenz und Oktaedrische Koordination des zentralen Atoms in diesem Käfig-Molekül lassen keinen Zweifel daran, dass es sich bei diesen Atom um ein Zinnatom handelt.



Abbildung 42: Die Koordinationsphäre um Sn (1) und die Bezeichnung der Atome.

Die Isopropyl-Reste sind bei Sn(5) fehlgeordnet. Bei den nach außen gerichteten Sauerstoffatomen handelt es sich um μ_2 -OH-Gruppen, von denen Wasserstoffbrückenbindungen zu Lösungsmittelmolekülen ausgehen. Aber da die Lokalisierung von Wasserstoffatomen in dieser Verbindung äußerst schwierig und die Verfeinerung ihrer tatsächlichen Positionen nicht zuverlässig ist, werden die Lagen der Wasserstoffatome nur positioniert.



Abbildung 43: Darstellung der Wasser- und DMF-Moleküle in 6.

Die Kristallstruktur ist über Wasserstoffbrücken stabilisiert. Die Einkristalle verwittern langsamer als die Monoorganozinn-Vanadium-Verbindungen.



Abb. 44 zeigt eine Polyederdarstellung der Käfig Moleküle in der Elementarzelle.

Abbildung 44: Polyederdarstellung der Elementarzelle von 6 als Parallelprojektion auf die ac-Ebene.

2.2.2 [(ⁱPrSn)₆(MoO₄)₄O₂(OH)₆] · 4 DMSO (7)

Synthese

In einen 250 ml Erlenmeyerkolben wurden 1 g (4 mmol) ⁱPrSn(OH)₂Cl und 0.4 g (1 mmol) Molybdenylacetylacetonate (99%) in 50 ml DMSO auf eine Heizplatte mit Magnetrührer 1 Minute lang auf 50°C erwärmt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die klare Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur eingeengt. Nach 9 Wochen kristallisierte die "Molybdänzinnverbindung" in Form farbloser durchsichtiger Kristalle. Diese sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb wenigen Stunden durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Metallatome sowie die Sauerstoffatome der Käfigionen konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 15 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 5.

Die asymmetrische Einheit von 7 besteht aus einem halben $[({}^{1}PrSn)_{6}(MoO_{4})_{4}O_{2}(OH)_{6}]$ -Molekül und zwei DMSO-Molekülen, die durch Wasserstoffbrücken an den Käfig gebunden sind.

Das in Abb. 45 dargestellte Molekül besteht nur aus Gruppen kantenverknüpfter ${}^{i}PrSnO_{4}(OH)$ -Oktaeder die über vier isolierte μ_{3} -{MoO₄}-Tetraeder miteinander verknüpft sind. Es gibt keine quadratisch-pyramidale Koordination an den Zinnatomen. Hier auch finden wir keine ikosaedrische Anordnung der Metall-Atome. Der von den Metallatomen gebildete Polyeder kann als ein verzerrtes tetragonales Antiprisma beschrieben werden, bei dem zwei Zinnatome über der Basisfläche sitzen.



Abbildung 45: Darstellung der Zehn-Metall Polyeder in 7.

 Tabelle 15: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an (7).

Summenformel	C26 H72 MO4 O28 S4 Sn6
Molare Masse	2056 98
Temperatur	293(2) K
Wellenlänge	0.71073 A
Weinenange Kristelleustere	Manahlin
Kristallsystem	
Raumgruppe	P2(1)/n
Elementarzelle	A = 10.467(2) Å
	B = 21.373(3) Å
	C = 14.567(2) Å
	$B = 108.97(1)^{\circ}$
Volumen	3081.9(8) Å ³
Z	2
Dichte	2.217 g/cm^3
Absorptionskoeffizient	3.377 mm^{-1}
F(000)	1968
Kristalldimensionen	0.5 x 0.3 x 0.2 mm
Kristallbeschreibung	Nadeln
Kristallfarbe	Farblos
Gemessener θ-Bereich	2.11 - 22.00°
Indexgrenzen	$-11 \le h \le 1, -1 \le k \le 22, -14 \le l \le 15$
Gemessene Reflexe	4788
Unabhängige Reflexe	3758 [R(int) = 0.0298]
Absorptionskorrektur	Psi-scans
max./min. transmission	0.2428 und 0.1888
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²
Daten / Restraints / Parameter	3758 / 24 / 249
Goodness-of-fit / F2	1.022
R-Werte $[I>2\sigma(I)]$	R1 = 0.0515, $wR2 = 0.1295$
R-Werte [alle Daten]	R1 = 0.0558, $wR2 = 0.1335$
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	1.976 und -1.104 eÅ ⁻³

^a R1 = $\Sigma(|F_o| - |F_c|) / \Sigma|F_o|$ ^b wR2 = $[\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma w(F_o^2)^2]^{\frac{1}{2}}$



Abbildung 46: (a) Thermische Schwingungsellipsoide von 7a mit dem Nummerierungsschema der asymmetrischen Einheit. Die Zinnatome sind hellgrau, die Molybdänatome dunkelgrau und die Sauerstoffatome weiß dargestellt. Die Positionen der organischen Gruppen sind durch die Sn-C-Bindung angedeutet. (b) Dieselbe Struktur als Polyedermodell, Polyeder um Zinn sind hellgrau, um Molybdän dunkelgrau dargestellt.

Die Molybdänatome liegen alle auf einer allgemeinen Lage, sie sind alle tetraedrisch koordiniert und über Ecken verknüpft. Die Valenz zum O beträgt 5.188 bei Mo (1) und 5.987 bei Mo(2), in guter Übereinstimung mit Mo^{VI}. Die Metall-Metall-Abstände betragen um 4.5 Å. Die Koordinationsphäre um die Molybdän- und Zinnatome ist in Abb. 48 dargstellt.



Abbildung 47: Die Zinn- und Molybdän-Sauerstoffabstände in 7 mit der Bezeichnung der Atome.

Die wichtigen Winkel um Sn(1) und Mo(1) sind in Tabelle 16 zusammengefasst.

Tabelle 16: Die O-Mo-O und O-Sn-O Winkel in 7.

O(5)-Mo(1)-O(7)	105.7(4)	O(1)-Sn(1)-O(2)	90.6(3)
O(5)-Mo(1)-O(9)	109.3(4)	O(1)-Sn(1)-O(4)	75.7(3)
O(5)-Mo(1)-O(11)	110.0(5)	O(1)-Sn(1)-O(5)	91.0(3)
O(7)-Mo(1)-O(9)	115.2(4)	O(1)-Sn(1)-O(6)	162.4(3)
O(7)-Mo(1)-O(11)	107.8(5)	O(2)-Sn(1)-O(4)	75.5(3)
O(9)-Mo(1)-O(11)	108.7(4)	O(2)-Sn(1)-O(5)	162.0(3)
		O(2)-Sn(1)-O(6)	90.3(3)
		O(4)-Sn(1)-O(5)	87.5(3)
		O(4)-Sn(1)-O(6)	87.6(3)
		O(5)-Sn(1)-O(6)	82.8(4)

Die organischen Reste in 7 sind Isopropyl-Gruppen. Sie sind hier nicht fehlgeordnet. Die Kristallstruktur ist durch Wasserstoffbrücken über die Lösungsmittel-Moleküle stabilisiert. Die beide DMSO-Moleküle, die sich als Lösungsmittel in der asymmetrischen Einheit befinden, sind beide fehlgeordnet mit der Besetzungsfaktor 60%/40% für das erste und mit 50%/50% für das zweite DMSO-Molekül. Die Abb. 49 zeigt die Kristallstruktur mit den Lösungsmittel-Molekülen und die Wasserstoffbrückenbindungen. Die wichtigsten Daten der Wasserstoffbrückenbindungen sind in Tabelle 17 zusammengefasst.



Abbildung 48: Wasserstoffbrückenbindungen in 7 mit der Darstellung der Lösungsmittel-Moleküle.

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
O(6)-H(6)O(1)	1.02	1.56	2.58	173.7
O(2)-H(2)O(2B)	1.00	1.71	2.64	150.1
O(5)-H(5)O(9)	1.02	1.71	2.71	158.7

Tabelle 17: Wasserstoffbrückenbindungen in 7 [Å und °].

Die Abb. 49 zeigt die Polyederdarstellung der Elementarzelle in 7



Abbildung 49: Polyederdarstellung der Elementarzelle des (ⁱPrSn)₆(MoO₄)₄O₂(OH)₆-Moleküls, die Zinn-Polyeder sind grau, die Vanadiumpolyeder dunkelgrau dargestellt.

3 Weitere Monoorganozinn-Komplexverbindungen und Vanadiumverbindungen

3.1 Na[(ⁱPrSn)₁₂O₆(OH)₂₂](CH₃COO)₃ · H₂O · 5 DMSO (8)

Synthese

In einem 100 ml Kristallisierschale wurden 0.5 g ${}^{i}PrSn(OH)_{2}Cl$ mit 0,25 g Natriumorthovanadat · 10 H₂O und 5 ml 1M Natriumacetat in 50 ml DMSO 5 min unter Rühren erhitzt und weitere 24 h bei Raumtemperatur gerührt. Die gelbe klare Lösung wurde in der Kristallisierschale bei Raumtemperatur eingeengt. Nach 4 Wochen kristallisierte **8** in Form farbloser Prismen. Die Kristallisation erfolgte durch langsames Verdunsten von DMSO.

Diese Kristalle sind in Mutterlauge stabil, verwittern allerdings außerhalb dieser Mutterlauge innerhalb weniger Minuten durch Lösungsmittelabgabe.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Nichtwasserstoffatome der asymmetrischen Einheiten konnten anisotrop verfeinert werden. Für die Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 18 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 8.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von **8** besteht aus einem Natrium-Ion, einem $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{6}(OH)_{22}]^{2+}$ -Kation, drei $[CH_{3}COO]^{-}$ Anionen, einem Wasser-Molekül und fünf DMSO-Molekülen. Die charakteristische Baueinheit der Kristallstruktur ist das in Abb. 50 wiedergegebene Käfigmolekül. Das Natrium-Ion ist wie bei der Keggin-Struktur in den Käfig eingeschlossen. Das *Keggin*-Anion besteht aus einem zentralen Phosphat-Tetraeder der von zwölf sowohl über Ecken als auch über Kanten verknüpften Wolfram-Sauerstoff-Oktaedern umgeben ist. Hier besteht das $[Na \subset ({}^{i}PrSn_{12})O_{6}(OH)_{22}]$ -Kation aus einem Natrium-Tetraeder der von zwölf Zinn-Sauerstoff-Oktaedern umgeben ist. Er setzt sich aus vier trimeren Baueinheiten zusammen, in denen jedes Oktaeder über zwei gemeinsame Kanten mit den beiden anderen Oktaedern verbunden ist.
 Tabelle 18: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 8.

Summenformel	$C_{52} H_{147} Na O_{40} S_5 Sn_{12}$		
Molare Masse	3020.27		
Temperatur	293(2) K		
Wellenlänge	0.71073A		
Kristallsystem	Monoklin		
Raumgruppe	P2(1)/c no 14		
Elementarzelle	a = 22.225(1)Å		
	$b = 16.658(8) \text{\AA}$		
	$c = 27.539 (1) \text{\AA}$		
	$\beta = 91.99(2)^{\circ}$		
Volumen	10189.0(8) Å ³		
Z	4		
Dichte	1.969g/cm^3		
Absorptionskoeffizient	3.066 mm ⁻¹		
F(000)	1968		
Kristalldimensionen	0.3 x 0.3 x 0.2 mm		
Kristallbeschreibung	Nadeln		
Kristallfarbe	Farblos		
Gemessener θ-Bereich	1.92 - 24.00		
Indexgrenzen	$-25 \le h \le 25, 0 \le k \le 19, 0 \le l \le 31$		
Gemessene Reflexe	222091		
Unabhängige Reflexe	15982 [R(int) = 0.0487]		
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares on F ²		
Daten / Restraints / Parameter	15982 / 78 / 684		
Goodness-of-fit / F2	1.066		
R-Werte $[I > 2\sigma(I)]$	R1 = 0.0619, wR2 = 0.1636		
R-Werte [alle Daten]	R1 = 0.0811, $wR2 = 0.1803$		
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	1.533 und -1.665 eÅ ⁻³		
^a R1 = $\Sigma(F_o - F_c) / \Sigma F_o $ ^b wR2 = $[\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma w(F_o^2)^2]^{\frac{1}{2}}$			



Abbildung 50: (a) Thermische Schwingungsellipsoide mit Bezeichnung der Atome in 8 (b) Polyederdarstellung der Atome, die Polyeder um Zinn sind hellgrau, der Polyeder um Natrium ist dunkelgrau.

Alle zwölf Zinnatome sind oktaedrisch koordiniert. Der Hohlraum im Inneren des Zinn-Sauerstoff-Käfigs wird begrenzt durch die μ_3 -O-Atome, die in ihre Mitte ein Natrium-Ion tetraedrisch einschließen. Das ist isostrukturell mit der γ -Keggin-Strukturtyp, bei dem ein trimeres Bauelement über gemeinsame Ecken jeweils mit den drei anderen verbunden ist, die ihrerseits untereinander kantenverknüpft sind. Bei dem α -Keggin-Strukturtyp ist eine trimere Baueinheit über zwei gemeinsame Ecken mit allen drei anderen Trimeren verknüpft, beim ϵ -Keggin-Strukturtyp ist eine trimere Baueinheit jeweils über eine gemeinsame Kante mit allen anderen verbunden.

Die Na-O-Abstände betragen im Mittel 236,3 pm die O-Na-O-Winkel sind in Tabelle 19 zusammengefasst. Die Zinn-Sauerstoff Abstände in dem Käfig-Kation liegen zwischen 201,5 pm und 217,7 pm.



Abbildung 51: Die Koordination um das Natriumatom mit den Abständen in pm und der Bezeichnung der Atome.

In dieser Arbeit ist das Natrium-Ion mit den vier μ_3 -O Atomen das zweite Beispiel für ein Metall-Atom, das in einem Sn-O-Käfig eingeschlossen ist. Bei der Molybdän-Moonorganozinn-Verbindung **6** ist ein Sn-Atom in einem Sn₁₂-Käfig-Molekül eingeschlossen.

Tabelle 19: Die O-Na-O-Winkel in [°].

O(4)-Na(1)-O(1)	111.1(3)
O(4)-Na(1)-O(3)	110.6(3)
O(1)-Na(1)-O(3)	108.6(3)
O(4)-Na(1)-O(2)	109.6(3)
O(1)-Na(1)-O(2)	108.7(3)
O(3)-Na(1)-O(2)	108.3(3)

Die Natrium-Sauerstoff Bindungen liegen in dem normalen Bereich einer Na-O Bindung.

Die Acetat-Anionen sind auch wie das Wasser-Molekül und die fünf DMSO-Moleküle über Wasserstoffbrücken an das Kation gebunden. Die Abb. 52 zeigt das Käfig-Molekül mit den Isopropylresten, dem Acetat-Anion und dem Wasser-Molekül in der Verbindung. Die DMSO-Moleküle werden in Abb. 53 dargestellt.



Abbildung 52: Das Wasserstoffbrückensystem in 8 mit Wasser-Molekülen und Acetat-Ionen. Die Zinnatome sind hellgrau, das Natriumatom dunkelgrau, die Isopropyl-Gruppen als Bindungen an die Zinnatome angedeutet.

Das Wasser-Molekül in der Struktur fungiert sowohl als Donor als auch als Akzeptor von Wasserstoffbrücken. Es ist durch eine H-Brücke als Donor mit dem Acetat-Ion verbrückt und als Akzeptor an das Kation gebunden. Die Acetat-Ionen sind als Akzeptor von H-Brücken an den Zinn-Käfig gebunden. In Tabelle 20 werden die wichtigen Daten der Wasserstoffbrücken zusammengefasst.

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
O(8)-H(8)O(7)	0.85	1.66	2.51	179.6
O(25)-H(25)O(900)	0.85	1.90	2.75	178.7
O(28)-H(28)O(161)	0.85	1.81	2.67	179.7
O(26)-H(26)O(160)	0.85	1.91	2.77	179.4
O(20)-H(20)O(160)	0.85	1.93	2.79	179.6
O(900)-H(901)O(161)	0.85	1.98	2.77	153.0
O(17)-H(17)O(170)	0.85	1.93	2.79	179.7

Tabelle 20: Wasserstoffbrückenbindungen in 7 [Å und °].



Abbildung 53: Darstellung der DMSO-Lösungsmittel-Moleküle in 8. Die Zinnatome sind hellgrau, das Natriumatom dunkelgrau, die Isopropyl-Gruppen sind mit ihren Bindungen an die Zinnatome nur angedeutet.

Drei der fünf Lösungsmittelmoleküle in der Kristallstruktur von **8** sind fehlgeordnet. Im ersten Fall belegt das Schwefelatom S(200) zwei mögliche Positionen auf beiden Seiten der O-C-C-Ebene mit Besetzungsfaktoren von 50%/50%. Im zweiten Fall belegt das Schwefelatom S(300) die Besetzungsfaktoren für die beiden Positionen mit 46%/54%. Die Besetzungsfaktoren für die beiden Positionen des dritten Moleküls sind 60%/40%. Fünf μ_2 -OH-Gruppen des Käfig-Moleküls bilden Wasserstoffbrücken zu den fünf DMSO-Molekülen aus. Das erste und zweite DMSO-Molekül fungieren als Akzeptor von der μ_2 -OH-Gruppe O(24)...O(500); O(14)...O(600), die O·· O-Abstände liegen zwischen 2.652 und 2.802 Å. Die wichtigsten Daten der H-Brücken sind in Tabelle 21 zusammengefasst.

Tabelle 21: Wasserstoffbrückenbindunger	bei den DMSO-Molekülen in 8 [Å	und °].
---	--------------------------------	---------

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
O(24)-H(24)O(500)	0.85	1.95	2.80	178.4
O(14)-H(14)O(600)	0.85	1.79	2.65	179.9
O(21)-H(21)O(200)	0.85	1.95	2.80	177.2
O(16)-H(16)O(300)	0.85	1.98	2.83	170.5
O(15)-H(15)O(400)	0.85	1.94	2.76	158.3

Die Anordnung der Moleküle des $[Na \subset ({}^{i}PrSn_{12})O_{6}(OH)_{22}]$ -Anions in der Elementarzelle wird in der Abb. 54 dargestellt.



Abbildung 54: Polyederdarstellung der Käfig-Moleküle in der Elementarzelle in 8.
3.2 Na₃VO₃ · 7 H₂O (9)

Synthese

Trinatriumoxovanadate-7Hydrat wurde erhalten durch Lösen von V_2O_5 in 10 ml einer 7N Natronlauge. Die Lösung wurde anschließend bei Raumtemperatur eingeengt. Nach zirka 2 Wochen kristallisierte **9** in Form farbloser Kristalle.

<u>Struktur</u>

Die Strukturlösung erfolgte mit den direkten Methoden des Programms SHELXS-97, die Verfeinerung nach dem Least-Squares-Verfahren gegen F² des Programms SHELXL-97. Alle Vanadiumatome, das Natriumatom sowie die Sauerstoffatome konnten anisotrop, die übrigen Atome isotrop verfeinert werden. Für alle Wasserstoffatome wurde ein gemeinsamer isotroper Temperaturfaktor verfeinert.

Weitere Details zur Strukturverfeinerung sind in Tab. 22 wiedergegeben, die Atomkoordinaten finden sich in Anhang 9.

Die asymmetrische Einheit der Kristallstruktur von **9** enthält ein Vandiumatom mit einer tetraedrischen Koordination und drei flächenveknüpfte oktaedrisch koordinierte Natriumatome (siehe Abb. 55). Das Vanadium-Tetraeder ist nur durch ein Sauerstoffatom mit einem Natrium-Oktaeder verknüpft, die drei anderen Sauerstoffatome sind ungebunden. Die V-O-Abstände liegen zwischen 1.69 Å und 1.75 Å, die Na-O Abstände um 2.4 Å. Die Na-Na-Abstände liegen zwischen 3.15 Å und 3.25 Å. Die Wasser-Moleküle bilden ein Wasserstoffbrückensystem (siehe Abb. 57).



Abbildung 55: Kugel-Stab- und Polyedermodell des Natriummetavanadat · 7Hydrat mit der Bezeichnung der Atome.

 Tabelle 22: Experimentelle Daten zur Strukturverfeinerung an 9.

Summenformel	H_{14} Na ₃ O ₁₁ V
Molare Masse	310.02
Kristallsystem	Orthorhombisch
Temperatur	298(2) K
Raumgruppe	Pca2(1) (No. 29)
Elementarzelle	a = 12.6663(12)Å
	b = 6.6299(9)Å
	c = 12.9715(19) Å
Volumen	$1089.3(2) \text{ Å}^3$
Z	4
Dichte	1.890 Mg/m^3
Absorptionskoeffizient	1.070 mm^{-1}
F(000)	632
Kristalldimensionen	$0.3 \times 0.6 \times 0.4 \text{ mm}^3$
Gemessener θ-Bereich	3.07° - 24.99°.
Indexgrenzen	$-15 \le h \le 15, -7 \le k \le 7, -15 \le l \le 15$
Gemessene Reflexe	1992
Unabhängige Reflexe	1899 [R(int) = 0.0138]
Daten / Restraints / Parameter	1899 / 22 / 181
Goodness-of-fit / F ²	1.019
R-Werte $[I > 2\sigma(I)]$	R1 = 0.0279, $wR2 = 0.0747$
R-Werte [alle Daten]	R1 = 0.0291, $wR2 = 0.0759$
Max. und Min. der letzte Verfeinerung	0.324 und -0.385 eÅ ⁻³
$a R_1 = \Sigma(F_c - F_c) / \Sigma F_c $ $b WR_2 = [\Sigma W(F_c^2 - F_c^2)^2]$	$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}$





Abbildung 56: Die Atomabstände innerhalb der Koordinationsphäre an dem Vanadium- und Natriumatom in 9 mit der Bezeichnung der Atome.

Die Bindungswinkel der Vanadium-Tetraeder und Natrium-Oktaeder sind in Tabelle 23 zusammengefasst.

A 4	\mathbf{W}^{2}
Atome	winkei
O(1)-V(1)-O(11)	106.0 (1)
O(1)-V(1)-O(12)	110.0 (1)
O(1)-V(1)-O(13)	110.0 (1)
O(11)-V(1)-O(12)	111.0(1)
O(11)-V(1)-O(13)	109.0(1)
O(13)-V(1)-O(12)	109.0 (1)
O(1)-Na(1)-O(2)	98.3 (1)
O(1)-Na(1)-O(3)	89.2 (1)
O(1)-Na(1)-O(4)	177.0 (1)
O(1)-Na(1)-O(5)	98.0(1)
O(1)-Na(1)-O(6)	95.0(1)
O(2)-Na(1)-O(3)	113.0(1)
O(2)-Na(1)-O(4)	84.5 (1)
O(2)-Na(1)-O(5)	158.0(1)
O(2)-Na(1)-O(6)	84.0 (1)
O(3)-Na(1)-O(4)	88.0(1)
O(3)-Na(1)-O(5)	79.0 (1)
O(3)-Na(1)-O(6)	160.0 (1)
O(4)-Na(1)-O(5)	79.5 (1)
O(4)-Na(1)-O(6)	86.0(1)
O(6)' -Na(1)-O(5)	80.0 (1)

Tabelle 23: Bindungs-Winkel der V-O-Tetraeder und Na-O-Oktaeder in [°].

Das Wassermolekül dient als Donor in zwei Wasserstoffbrückenbindungen. Die vier Sauerstoffatome am Vanadium dienen als Akzeptor von zwei, drei oder vier Wasserstoffbrücken. In der Tabelle 24 sind die Daten ausgewählter Wasserstoffbrückenbindungen zusammengefasst. In der Abb. 57 ist das Wasserstoffbrückensystem in der Kristallstruktur dargestellt.

 $\label{eq:constraint} \textbf{Tabelle 24:} Wasserstoff brückenbindungen in \textbf{9} \ Abstände in [Å] und Winkel in [°].$

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)
O(8)-H(82)O(1)	0.80	2.11	2.88	163.6
O(5)-H(51)O(13)	0.80	1.97	2.74	163.3
O(7)-H(71)O(11)	0.79	2.05	2.84	172.9
O(2)-H(21)O(12)	0.79	2.03	2.82	176.4



Abbildung 57: Wasserstoffbrückensystem in 9. Die Vanadiumatome sind dunkelgrau, die Natriumatome hellgrau, die Sauerstoffatome weiß und die Wasserstoffatome als kleine weiße Kugeln dargestellt. Die Wasserstoffbrückenbindungen sind als gestrichelte Linien dargestellt.

Abb. 58 zeigt die Elementarzelle und das zweidimensionale Netzwerk aus Kationen und Anionen.



Abbildung 58: Elementarzelle von Na₃VO₄·7-Hydrat.



Abbildung 59: Dreidimensionales Netzwerk der Koordinationspolyeder in der Struktur von 9. Die Polyeder um Vanadium sind dunkelgrau, um Natrium hellgrau, die Wasserstoffatome als weiße Kugeln dargestellt.

4 Zusammenfassung

Es konnten insgesamt neun neue Verbindungen synthetisiert und strukturell charakterisiert werden. Sieben übergangsmetallhaltige Monoorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen, eine γ -Keggin-Struktur-Typ analoge Verbindung und eine Verbindung des Natriummetavanadats. Von den sieben übergangsmetallhaltigen Verbindungen entfallen fünf auf oxovanadiumhaltige Derivate des [(RSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Käfigkations (Verb. **1**-**5**), außerdem konnte eine Verbindung mit einem Natrium-Ion isoliert werden (Verb. **8**) und zwei Molybdänhaltige Monoorganozinn-Sauerstoff-Verbindungen (Verb. **6** und **7**).

Es handelt sich um die Verbindungen:

- 1. $[({}^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2 H_{2}O \cdot 5 DMSO(1)$
- 2. $[({}^{i}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmf)] \cdot 4 DMF$ (2)
- 3. $[(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}] \cdot 3 DMSO (3)$
- 4. $[(iPrSn)_9(OV)_2O_{15}(OH)_9] \cdot 4.5 H_2O$ (4)
- 5. $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}][({}^{i}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}] \cdot 4 DMSO(5)$
- 6. $[(iPrSn)_8(MoO_4)_4(SnO_6)(OH)_8] \cdot H_2O \cdot 6 DMF(6)$
- 7. $[({}^{i}PrSn)_{6}(MoO_{4})_{4}O_{2}(OH)_{6}] \cdot 4 DMSO (7)$
- 8. $Na[({}^{i}PrSn)_{12}O_{6}(OH)_{22}](CH_{3}COO)_{3} \cdot H_{2}O \cdot 5 DMSO$ (8)
- 9. Na₃VO₃ · 7 H₂O (9)

Die Verbindungen **1-3** weisen wie der Grundkörper, der des $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ -Käfigs, eine verzerrt ikosaedrische Anordnung der Metallatome auf. Die quadratischpyramidalen Oxovanadiumgruppen besetzen Positionen, die in der Grundstruktur von quadratisch-pyramidal koordinierten Organozinngruppen belegt sind. Diese Verbindungen zeigen, dass es prinzipiell möglich ist, in einem Selbstorganisationsprozess eine Baueinheit gegen eine andere mit analoger Koordinationssphäre auszutauschen, ohne dass eine grundsätzliche geometrische Änderung des sich bildenden Körpers auftritt, trotz verschiedener organischer Reste an den Bausteinen.

Während in der Verbindung 1 zusätzlich zur geometrischen Anordnung der Metallatome auch deren Verbrückung mit Sauerstoffatomen sowie die Koordinationspolyeder mit den in der Grundstruktur gefundenen Verhältnissen im Prinzip übereinstimmt, weisen die

Verbindungen 2 und 3 einige Unterschiede in den Verknüpfungsmustern und Koordinationspolyedern auf. So sind zwei der ursprünglich quadratisch-pyramidalen $\{RSnO_4\}$ -Gruppen durch eine trigonal-bipyramidale $\{RSnO_3Cl\}$ -Gruppe ersetzt.

Der Einbau von quadratisch-pyramidalen {OVO₄}-Baueinheiten anstelle von {RSnO4}-Einheiten führt aufgrund der kürzeren basalen Metall-Sauerstoff-Bindungslängen zu einer Verzerrung des Metall-Sauerstoff-Gerüstes und einer deutlichen Vergrößerung der Bandbreite in den beobachteten basalen Bindungslängen. Diese Verzerrung wird teilweise durch Aufweitung und Änderung der Koordination an einzelnen Zinnatomen kompensiert.

Die Verbindung 4 mit zwei Vanadiumatomen im Käfig zeigt einen grundsätzlich anderen Aufbau als die Käfigmoleküle der Verbindungen 1-3. Drei trimere Baueinheiten aus kantenverknüpfter $\{RSnO_5\}$ -Oktaedern sind über zwei $\{VO_4\}$ -Tetraeder miteinander verbunden. Die Zinn- und die Vanadiumatome bilden ein überkapptes trigonales Prima.

Das in Verbindung **5** gefundene $[({}^{1}PrSn)_{3}(OV)_{4}O_{10}(OH)_{3}]$ -Anion mit sieben Metallatomen hat ebenfalls einen anderen Aufbau als der Grundkörper. Auch hier sind drei trimere Baueinheiten aus kantenverknüpften {RSnO₅}-Oktaedern über vier {VO₄}-Tetraeder miteinander verbunden.

Die Verbindung 6 besteht aus kantenverknüpfter { $RSnO_5$ }-Oktaedern die über vier { MoO_4 }-Tetraeder miteinander verbunden sind. Das zentrale Zinnatom ist ein { $RSn(\mu_3.O)_6$ }-Oktaeder, der über Ecken als auch über Kanten mit den nächsten Metallatomen verknüpft ist.

Die Verbindung 7 mit vier Molybdänatomen und sechs Zinnatome liegt ein verzerrtes quadratisches Antiprisma zugrunde. Sie besteht nur aus Gruppen kantenverknüpfter ${}^{i}PrSnO_{4}(OH)$ -Oktaeder, die über vier isolierte μ_{3} -{MoO₄}-Tetraeder miteinander verknüpft sind. Es gibt keine quadratische pyramidale Koordination bei den Zinnatomen in dieser Verbindung.

Die Verbindung **8** ist das zweite Beispiel eines γ -Keggin-Strukturtyps bei Monoorganozinnsauerstoff-Verbindungen.

Die Verbindung 9 ist das erste Natriummetavanadat mit sieben Wassermolekülen.

5 Ausblick

Die in dieser Arbeit beschriebenen Verbindungen lassen einen interessanten Einblick in die Selbstorganisationsprozesse bei der Bildung von Monoorganozinn-Polyoxometall-Verbindungen zu. Weitergehende Untersuchungen auf diesem Gebiet sollten klären, ob es möglich ist, noch weiteren Organozinnbaueinheiten des [(RSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺-Grundkörpers durch übergangsmetallhaltige Tektonäquivalente zu ersetzen.

Ebenso von Interesse sind NMR-spektroskopische Untersuchungen zur Klärung der in Lösung vorliegenden Verhältnisse.

Für magnetische Untersuchungen an den Vanadiumhaltigen Verbindungen wäre es notwendig, Vanadium in eine andere Oxidationsstufe zu überführen.

6 Experimenteller Teil

6.1 Messmethoden

Die röntgenographischen Untersuchungen wurden im Allgemeinen auf einem Siemens-P4-Einkristalldiffraktometer, im Fall der Verbindung **5** und **8** auf einem Nonius Kappa CCD-Diffraktometer, bei einer Temperatur von 293 K (100 K) mit MoK_{α}-Strahlung ($\lambda = 0.71073$ Å) durchgeführt.

Die unter einem Polarisationsmikroskop ausgewählten Einkristalle wurden in ein Markröhrchen eingebracht, das dann abgeschmolzen und auf dem Goniometerkopf fixiert wurde.

Die Suche nach zu vermessenden Reflexen erfolgte nach Zentrierung des Kristalls mit Hilfe der automatischen Suchroutine des Programms XSCANS [31]. In einigen Fällen wurde zusätzlich eine Rotationsphotografie ausgewertet.

Die Bestimmung der Orientierungsmatrix, die die Informationen über die Abmessungen der Elementarzelle sowie über ihre Lage zum internen Koordinatensystem des Diffraktometers enthält, erfolgte ebenfalls mit Hilfe des Programms XSCANS durch Indizierung der gefundenen Reflexe. Über die Analyse der reduzierten Zelle wurde die Zuordnung zu einem bestimmten Bravais-Gitter automatisch durchgeführt. Die Raumgruppenbestimmung geschah durch Auswertung der Intensitäten symmetrieäquivalenter Reflexe und die Bestimmung der Auslöschungsbedingungen über das Programm SHELXTL / XPREP [32].

Die Lösung der Strukturen erfolgte mit den Direkten Methoden des Programms SHELXS-97 [33], die Verfeinerung über die Methode der kleinsten Fehlerquadrate des Programms SHELXL-97 [34]. Eine anisotrope Verfeinerung aller Atome in der asymmetrischen Einheit erwies sich als nicht sinnvoll. Nur die gut aufgelösten Schweratome sowie die Sauerstoffatome der Käfigmoleküle wurden auf diese Weise berechnet.

Weitere Berechnungen wurden mit Hilfe des Programms VaList [36] (Bindungsvalenzsummen) durchgeführt.

Weitere Details und ggf. Abweichungen von der hier angegebenen allgemeinen Vorgehensweise sind in den Publikationen angegeben.

6.2 Synthese der Edukte

Die zur Herstellung der Organozinn-Sauerstoff-Käfige benötigten Edukte (ⁱPrSnCl₃. ⁱPrSn(OH)₂Cl ³/₄ H₂O ⁱBuSnCl₃ ⁿBuSnCl₃ und PhSnCl₃) sind nicht käuflich erhältlich und wurden zunächst nach [5] bzw. [6] synthetisiert.

Isopropyltriphenylzinn

ⁱPrBr + Mg → [ⁱPrMgBr] [ⁱPrMgBr] + Ph₃SnCl → ⁱPrSnPh₃

In einem 2 l-Dreihalskolben mit aufgesetztem Rückflusskühler und 1 l-Tropftrichter wurden 21.9 g Mg-Späne (0.9 mol) mit 50 ml trockenem Diethylether versetzt. Das Reaktionsgemisch wurde aus dem Tropftrichter mit 10 ml einer Lösung von 123.0 g 2-Brompropan (1.0 mol) in 100 ml Diethylether versetzt. Nach dem Anspringen der Reaktion wurde die restliche Lösung unter Rühren zugetropft.

Zu dem so erhaltenen Grignard-Reagens wurde unter Rühren eine Lösung von 192.7 g Triphenylzinnchlorid (0.5 mol) in 0.4 l Diethylether und 0.4 l THF so zugetropft, dass die Lösung beständig siedete. Nach beendeter Zugabe wurde noch 4 h unter Rückfluss erhitzt, die abgekühlte Reaktionslösung wurde anschließend mit einem Eis-Wasser-Gemisch hydrolysiert. Nach Zugabe von konz. HCl bis zur Phasentrennung wurde die organische Phase abgetrennt, die wässrige mehrfach mit 100 ml Diethylether ausgeethert. Die vereinten organischen Phasen wurden über Na₂SO₄ getrocknet und am Rotationsverdampfer weitgehend eingeengt. Das erhaltene Öl wurde mit 200 ml heißem 96% igem Ethanol versetzt, aus dem das Reaktionsprodukt Isopropyltriphenylzinn beim Abkühlen auskristallisierte.

Ausbeute: 164.1 g (83.5%)

Isopropylzinntrichlorid

ⁱPrSnPh₃ + 3 HCl
$$\rightarrow$$
 ⁱPrSnCl₃ + 3 C₆H₆

Durch eine Lösung von 157.2 g $(0.4 \text{ mol})^{i}$ PrSnPh₃ in 1 l Toluol wurde in einem 2 l-Dreihalskolben mit Rückflusskühler und Gaseinleitungsfritte fünf Tage lang HCl-Gas so langsam hindurchgeleitet, dass nur eine leichte Temperaturerhöhung eintrat. Die erhaltene, jetzt leicht rote Lösung wurde am Rotationsverdampfer eingeengt und im Ölpumpenvakuum destilliert (Sdp. 45°C / 0.01Torr).

Ausbeute: 97.9 g (91.2%)

<u>Isopropylzinndihydroxidchloridhydrat</u>

ⁱPrSnCl₃ + 2 NaOH_(aq) + H₂O \rightarrow ⁱPrSn(OH)₂Cl · ³/₄ H₂O + 2 NaCl_(aq)

Zu einer Lösung von 9.6 g NaOH (240 mmol) in 120 ml destilliertem Wasser wurden unter Rühren und Kühlung im Eisbad 32.1 g ⁱPrSnCl₃ zugetropft. Das Produkt fiel hierbei als weißes Pulver aus. Nach einer Stunde Rühren wurde filtriert, das Produkt mit Wasser gewaschen und an der Luft getrocknet.

Ausbeute: 25.0 g (85%)

Phenylzinntrichlorid

Ph₄Sn + 3 SnCl₄ → 3 PhSnCl₃

60 g Ph₄Sn (0.14 mol) und 110 g SnCl₄ (0.42 mol) wurden unter Rühren für 4 h auf 150°C erhitzt. Das so erhaltene braune Rohprodukt wurde im Ölpumpenvakuum destilliert.

Ausbeute: 145 g (88%)

Tetraisobutylzinn

4 [ⁱBuMgCl] + SnCl₄ \rightarrow ⁱBu₄Sn + 4 MgCl₂

Zu einer Lösung von 43.0 g (165 mmol) Zinn^{IV}-Chlorid in ein Liter n-Hexan wird eine abdekantierte Grignard Lösung, aus 24.3 g (1 mol) Magnesiumspänen und 92.6 g (1mol) Isobutylchlorid in 400 ml abs. Tetrahydrofuran hergestellt und so zugetropft, dass das Reaktionsgemisch beständig siedet. Anschließend wird weitere vier Stunden unter Rückfluss zum Sieden erhitzt.

Danach wird das Reaktionsgemisch bis zur Trockne einrotiert, in Diethylether aufgenommen und mit einem Eis/Wasser-Gemisch hydrolysiert. Hierbei wird so lange halbkonzentrierte Salzsäure zugesetzt, bis sich zwei klare Phasen absetzen. Die organische Phase wird abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet und einrotiert. Der Rückstand wird fraktioniert destilliert (Sdp. 84-87°C / 0.01 Torr).

Ausbeute 42.51 g (74.2%)

Isobutylzinntrichlorid

 $^{i}Bu_{4}Sn + SnCl_{4} \rightarrow ^{i}BuSnCl + ^{i}BuSnCl_{3}$

Unter Kühlung in einem Eisbad werden zu 23.0 g (88.3 mmol) Zinn^{IV}-Chlorid 30.7 g (88.4 mmol) Tetraisobutylzinn hinzu gegeben und 24 h gerührt. Anschließend wird fraktioniert destilliert (Sdp. $54-55^{\circ}C/0.2$ Torr).

Ausbeute 15.5 g (62.4%)

n-Butylzinntrichlorid

 $n\text{-}Bu_4Sn + SnCl_4 \rightarrow n\text{-}BuSnCl + n\text{-}BuSnCl_3$

Unter Kühlung in einem Eisbad werden zu 23.0 g (88.3 mmol) Zinn^{IV}-Chlorid 30.7 g (88.4 mmol) Tetraisobutylzinn hinzu gegeben und 24 h gerührt. Anschließend wird fraktioniert destilliert.

Ausbeute 20 g (80.4%)

7 Literatur

- [1] A. Libavius " Praxis alchymiae" Frankfurt 1604.
- [2] E. Frankland, Liebiegs Ann. Chem. **71** (1849) 171.
- [3] H. Puff, H. Reuter, J. Organomet. Chem., 364, 1989, 57-65.
- [4] H. Puff, H. Reuter, J. Organomet. Chem., 368, 1989, 173-183.
- [5] H. Puff, H. Reuter, J. Organomet. Chem., 373, 1989, 173-184.
- [6] D. Dakternieks, H. Zhu, J. Organomet. Chem., 476, 1994, 33-40.
- [7] F. Banse, F. Ribot, P. Tolédano, J. Maquet, C. Sanchez, *Inorg. Chem.*, 34, 1995, 6371-6379.
- [8] C. Eychenne-Baron, F. Ribot, C. Sanchez, J. Organomet. Chem., 567, 1998, 137-142.
- [9] M. T. Pope, Heteropoly and Isopoly Oxometalates, *Springer*, New York, 1983.
- [10] M. T. Pope, A. Müller, Angew. Chem. 1991, 103, 56; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1991, 30, 34.
- [11] Polyoxometalates: From Platonic Solids to Anti-Retroviral Activity (Hrsg : M. T. Pope, A. Müller), Kluwer Academic Publishers, *Dordrecht*, 1994.
- [12] A. Miolati, J. Prakt. Chem., 1908, 77, 439.
- [13] A. Rosenheim, Z. anorg. Chem., 1916, 96, 139.
- [14 L. Pauling, J. Am Chem. Soc., 1929, **51**, 2868-2880.
- [15] J.K. Keggin, *Nature*, 1933, **131**, 908-909.
- [16] H. T. Evans jr., J. Am. Chem. Soc., 70 (1948), 1291.
- [17] B. Dawsson, Acta Cryst., 6 (1953), 113-126.
- [18] V.W. Day, M.F. Fredrich, W.G. Klemperer, W. Shum, J. Am. Chem. Soc., (1977), 99, 952.
- [19] A. Proust; P. Gouzerh; F. Robert, Angew. Chem. Int. Ed., (1993), 32, 115.
- [20] A. Müller, R. Rohlfing, E. Krickemeyer, Angew. Chem., 105, 1993, 916-918.
- [21] H. Reuter, Angew. Chem., 103, 1991, 1487-1489.
- [22] H. Reuter, G. Kastner, J. Organomet. Chem., 598 (2000) 381-386.

- [23] A. Müller, H. Reuter, S. Dillinger, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 34, 1995, 2328 2361.
- [24] H. Puff, H. Reuter, J. Organomet. Chem., 364, 1989, 57-65.
- [25] Y. Sasaki, H. Imoto, O. Nagano, Bull. Chem. Soc. Jpn., 57, 1984, 1417-1418.
- [26] U. Behrens, A. K. Brimah, K. Yünlü, R. D. Fischer, Angew. Chem., 105, 1993, 117-119.
- [27] B. Krebs, B. Lettmann, H. Pohlmann, H. Fröhlich, Z. Kristallogr., 196, 1991, 231-241.
- [28] G. S. Chorghade, M. T. Pope, J. Am. Chem. Soc., 109, 1987, 5134-5138.
- [29] F. Xin, M. T. Pope, Inorg. Chem., 35, 1996, 1207-1213.
- [30] G. Kastner, H. Reuter, Main Group Met. Chem., 22, 1999, 605-609.
- [31] P. G. Harrison, K. Molloy, R. C. Phillips, P. J. Smith, A. J. Crowe, J. Organomet. Chem., 160, 1978, 421.
- [32] Siemens, XSCANS, X-ray Single Crystal Analysis Software, Vers. 2.2, 1996, Siemens Analytical X-ray Instruments Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- [33] G. M. Sheldrick, SHELXS-97, Programm zur Lösung von Kristallstrukturen, 1997, Universität Göttingen.
- [34] G. M. Sheldrick, SHELXL-97, Programm zur Verfeinerung von Kristallstrukturen, 1997, Universität Göttingen.
- [35] A. L. Spek, PLATON, 1999, Universität Utrecht, Niederlande.
- [36] N. E. Brese, M. O'Keefe, VaList, Program for the calculation of Valence-Bond-Parameters, 1999.

8 Anhang

8.1 $[({}^{i}PrSn)_{11}(V^{IV}O)O_{14}(OH)_{6}(ac)] \cdot 2H_{2}O \cdot 5 DMSO (1)$



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 1.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions	$\begin{array}{l} C_{45} H_{120} O_{30} S_5 Sn_{11} V \\ 2658.24 \\ 293(2) K \\ 0.71073 A \\ Triclinic, P-1 \\ a = 14.452(7) \mathring{A} \alpha = 91.803(7)^\circ \\ b = 14.901(2) \mathring{A} \beta = 92.81(2)^\circ \\ c = 20.898(3) \mathring{A} v = 97.29(2)^\circ \end{array}$
Volume	4456(2) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.981 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.305 mm ⁻¹
F(000)	2566
Crystal size	0.5 x 0.4 x 0.3 mm
Theta range for data collection	1.77 to 22.00°
Limiting indices	-1 ≤ h ≤ 13, -15 ≤ k ≤ 15, -22 ≤ l ≤ 22
Reflections collected / unique	11958 / 10375 [R(int) = 0.0343]
Completeness to theta =	22.00 94.8 %
Absorption correction	Empirical
Max. and min. transmission	1.0000 and 0.8749
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	10375 / 90 / 675
Goodness-of-fit on F^2	1.034
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0581, wR2 = 0.1431
R indices (all data)	R1 = 0.0816, wR2 = 0.1630
Extinction coefficient	0.00021(4)
Largest diff. peak and hole	1.052 and -1.713 e.A ⁻³

	~			
	X	У	Z	U(eq)
V(1)	8677(2)	6450(2)	2338(1)	48(1)
Sn(2)	9433(1)	8429(1)	1891(1)	52(1)
Sn(4)	7705(1)	9559(1)	1470(1)	56(1)
Sn(3)	7433(1)	7038(1)	917(1)	55(1)
Sn(5)	9164(1)	7685(1)	3600(1)	53(1)
Sn(7)	6160(1)	9391(1)	2890(1)	56(1)
Sn(6)	8806(1)	9983(1) 7217(1)	2907(1)	58(1) E4(1)
Sn(0)	7589(1)	8884(1)	4012(1)	57(1)
Sn(10)	7268(1)	6272(1)	3754(1)	54(1)
Sn(11)	5864(1)	8060(1)	1617(1)	52(1)
Sn(12)	6225(1)	5858(1)	2308(1)	51(1)
O(1)	7637(6)	5755(6)	2158(4)	52(2)
O(2)	8522(6)	7223(6)	1634(4)	47(2)
O(3)	8948(6)	9135(6)	1090(5)	60(3) 52(2)
O(4) O(5)	9447(6)	7630(6)	2676(4)	52(2)
O(6)	10003(7)	9614(6)	2464(5)	67(3)
O(7)	7059(6)	8299(6)	1133(4)	53(2)
O(8)	8901(6)	9020(6)	3628(4)	57(2)
O(9)	8291(6)	8957(6)	2251(4)	49(2)
O(10)	8293(7)	10672(6)	2113(5)	70(3)
O(11) O(12)	7454(6) 6241(7)	9809(6)	3290(4)	53(2) 50(2)
O(12)	5970(7)	6581(7)	2003(4) 2007(5)	59(5) 66(3)
O(14)	6450(6)	9400(6)	1951(4)	56(2)
O(15)	5462(7)	8150(6)	2547(4)	57(2)
O(16)	4968(7)	6192(6)	2700(5)	63(3)
O(17)	7927(7)	7598(6)	4063(4)	58(3)
O(18)	6287(6)	6817(6)	1606(4)	51(2)
O(19) O(20)	6647(6)	6885(6) 5164(6)	3000(4)	48(2)
O(20)	9483(6)	5847(6)	2184(5)	60(3)
O(100)	8333(7)	7700(7)	304(4)	67(3)
C(201)	10737(12)	8248(18)	1481(12)	75(6)
C(211)	11470(30)	8130(20)	2008(14)	94(8)
C(221)	10590(20)	7510(20)	956(13)	115(10)
C(202)	10690(20)	8080(30)	1490(20)	75(6)
C(212)	11400(50)	7830(40)	1990(30)	94(8)
C(222) C(30)	7522(10)	5604(10)	1030(20) 667(7)	64(4)
C(31)	6935(14)	5284(14)	65(8)	108(7)
C(32)	8520(11)	5478(13)	558(9)	96(6)
C(40)	7366(12)	10378(10)	683(6)	80(5)
C(41)	7370(20)	9900(20)	47(12)	228(17)
C(42)	6607(19)	10920(20)	804(14)	208(15)
C(50) C(51)	10380(11)	7584(10) 6750(15)	4205(8)	144(0)
C(52)	11079(16)	8414(15)	4010(12)	147(9)
C(601)	9426(17)	11124(12)	3512(10)	90(6)
C(611)	8751(18)	11580(20)	3900(12)	98(8)
C(621)	10155(17)	11737(18)	3182(13)	115(9)
C(602)	9320(50)	11230(20)	3430(30)	90(6)
C(612)	8510(50) 10030(50)	10080(60)	3680(40)	98(8)
C(70)	5316(13)	10449(11)	3059(7)	82(5)
C(71)	5619(15)	11232(13)	2657(10)	117(7)
C(72)	5290(17)	10701(16)	3761(9)	136(9)
C(80)	4139(13)	7469(13)	3735(8)	92(6)
C(81)	3518(16)	7920(16)	3264(10)	130(8)
C(82) C(901)	4230(20)	8017(19)	4347(12)	184(13) 71(4)
C(911)	8360(20)	9040(20)	4900(0) 5406(16)	142(12)
C(921)	6719(18)	9490(20)	5260(16)	134(11)
C(902)	7640(40)	9460(40)	4973(12)	71(4)
C(932)	7460(60)	8720(40)	5440(40)	142(12)
C(942)	6990(50)	10180(40)	4980(40)	134(11)
C(100) C(101)	1002(13) 8088(16)	5519(11) 6135(14)	4581(8) 5147(10)	07(0) 122(8)
C(102)	8280(15)	4819(14)	4381(11)	123(8)
C(110)	4588(11)	8195(9)	1068(7)	68(4)
C(111)	3945(15)	7313(13)	1019(11)	120(7)
C(112)	4119(13)	8946(12)	1376(9)	96(6)
C(120)	5543(10)	4692(9)	1753(7)	66(4)
C(121) C(122)	4842(12)	4981(12) 2065(12)	1∠56(8) 2178(0)	85(5) 00(6)
O(122)	6218(8)	7098(7)	230(5)	76(3)
O(700)	6918(12)	7541(12)	-665(7)	124(5)
C(701)	5283(16)	7576(18)	-635(10)	136(10)
C(702)	6193(18)	7408(14)	-359(9)	94(6)
S(1A)	7862(4)	3109(3)	2570(3)	107(2)
O(1A)	7179(7)	3525(8)	2976(6)	117(5)

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.

Table 2 continued

C(11A)	8999(6)	3741(14)	2766(8)	132(8)
C(12A)	7673(12)	3463(16)	1763(4)	162(11)
S(2A)	2234(5)	5626(5)	2420(4)	147(3)
O(2A)	3169(7)	5279(10)	2465(8)	147(7)
C(21Á)	1760(13)	5412(18)	1612(6)	178(12)
C(22A)	1430(10)	4853(17)	2834(10)	197(14)
O(3A)	1772(15)	420(20)	2865(14)	166(12)
S(3A)	2705(8)	755(10)	2621(7)	152(4)
C(31A)	2590(30)	760(30)	1763(8)	175(17)
C(32A)	2960(30)	1946(15)	2810(20)	250(20)
O(3B)	1830(20)	248(19)	2640(20)	166(12)
S(3B)	2094(13)	1165(15)	2371(11)	152(4)
C(31B)	3110(30)	1090(40)	1910(30)	175(17)
C(32B)	2620(50)	1900(40)	3020(20)	250(20)
O(4A)	4038(13)	2939(15)	4582(9)	135(9)
S(4A)	4575(7)	3308(6)	4036(4)	117(3)
C(41A)	4450(19)	4488(11)	3988(18)	150(12)
C(42A)	5801(9)	3390(20)	4269(17)	182(18)
O(4B)	4270(20)	3200(20)	4707(19)	135(9)
S(4B)	4873(12)	3950(11)	4400(7)	117(3)
C(41B)	4130(20)	4470(40)	3850(20)	150(12)
C(42B)	5570(40)	3430(40)	3840(20)	182(18)
O(5A)	9148(16)	12150(19)	1521(12)	104(8)
S(5A)	9652(9)	12094(8)	921(6)	117(3)
C(51A)	10410(20)	11223(16)	1001(18)	111(10)
C(52A)	10530(20)	13076(14)	921(18)	126(11)
O(5B)	9398(18)	12114(19)	1685(14)	104(8)
S(5B)	10254(10)	12217(8)	1310(6)	117(3)
C(51B)	10180(30)	11233(16)	768(15)	111(10)
C(52B)	10110(30)	13068(18)	723(14)	126(11)
O(6A)	7410(20)	6590(20)	-1787(14)	261(13)

\/(1)-O(21)	1 598(9)
	1.000(0)
V(1)-O(1)	1.731(9)
V(1)-O(2)	1.918(8)
V(1)-O(4)	1.966(9)
	2 042(0)
v(1)-O(3)	2.043(9)
V(1)-Sn(5)	3.165(2)
V(1)-Sn(2)	3.196(3)
Sp(2)- $Q(5)$	2 058(8)
	2.030(0)
Sn(2)-O(9)	2.078(9)
Sn(2)-O(2)	2.126(9)
Sn(2)-Q(3)	2 141(9)
	2.141(3)
SI(2)-O(8)	2.152(9)
Sn(2)-C(202)	2.153(11)
Sn(2)-C(201)	2,153(10)
Sp(2) $Sp(4)$	2 2847(18)
	3.2047(10)
Sn(4)-O(7)	2.074(9)
Sn(4)-O(9)	2.082(8)
Sn(4) - O(14)	2 108(9)
Sp(4) C(40)	2.160(0)
SI(4)-C(40)	2.151(9)
Sn(4)-O(3)	2.157(9)
Sn(4)-O(10)	2,161(10)
Sn(4)- $Sn(11)$	3 2836(10)
	3.2030(13)
Sn(3)-O(100)	2.056(10)
Sn(3)-O(7)	2.062(9)
Sn(3)-O(2)	2 105(8)
	2.00(0)
	2.203(14)
Sn(3)-O(701)	2.227(10)
Sn(3)-O(18)	2.247(9)
Sn(3)- $Sn(11)$	3 2637(17)
	4.005(0)
Sn(5)-O(5)	1.995(8)
Sn(5)-O(17)	2.066(9)
Sn(5)-O(8)	2 072(9)
Sn(5) O(4)	2.086(0)
	2.000(3)
Sn(5)-C(50)	2.138(16)
Sn(5)-Sn(9)	3.2006(18)
Sn(5)-Sn(10)	3 2733(19)
Sn(2) O(11)	2.025(0)
31(7)-0(11)	2.023(9)
Sn(7)-O(14)	2.028(9)
Sn(7)-O(15)	2.079(9)
Sn(Z) - O(12)	2 117(0)
	2.117(3)
SI(7)-C(70)	2.144(17)
Sn(7)-Sn(9)	3.2191(17)
Sn(7)-Sn(11)	3.2471(14)
Sn(6)-Q(9)	2,061(8)
	2.001(0)
Sn(6)-O(8)	2.125(9)
Sn(6)-O(6)	2.127(10)
Sn(6)-O(10)	2.129(10)
Sn(6) O(11)	2 126(0)
	2.130(9)
Sn(6)-C(601)	2.159(10)
Sn(6)-C(602)	2.156(11)
Sn(8)-O(19)	2 061(8)
Sn(8) O(15)	2,002(0)
	2.092(9)
Sn(8)-O(12)	2.122(9)
Sn(8)-O(13)	2.123(10)
Sn(8)-O(16)	2 128(9)
Sn(8) C(80)	2.128(0)
	2.140(19)
Sn(9)-O(12)	2.029(10)
Sn(9)-O(17)	2.042(9)
Sn(9)-O(8)	2 084(9)
$S_{n}(0) O(11)$	2.004(0)
	2.034(3)
Sn(9)-C(901)	2.158(10)
Sn(9)-C(902)	2.155(11)
Sn(10)-O(19)	2.069(8)
Sn(10)-O(4)	2 109(9)
$S_{n}(10) = O(4)$	2.109(9)
SI(10)-O(20)	2.124(9)
Sn(10)-O(13)	2.140(10)
Sn(10)-O(17)	2.148(10)
Sp(10)-C(100)	2 182(17)
	2.02(0)
SI(11)-O(18)	2.022(9)
Sn(11)-O(7)	2.042(9)
Sn(11)-Q(15)	2.062(9)
Sp(11) Q(14)	2140(0)
$O_{1}(11) = O_{1}(14)$ $O_{2}(14) = O_{1}(14)$	2.173(3) 0.450(45)
Sn(11)-C(110)	2.158(15)
Sn(12)-O(18)	2.077(8)
Sn(12)-Q(19)	2.084(8)
$S_{n}(12) - O(1)$	2 104(9)
	2.104(3)
Sn(12)-U(16)	2.138(10)
Sn(12)-C(120)	2.159(14)
Sn(12)-O(20)	2,183(9)
C(201) - C(211)	1 523(17)
	1.525(17)
C(201)-C(221)	1.513(18)
C(202)-C(212)	1.521(19)
C(202)-C(222)	1 515(19)
	1.010(10)
	1 = OE(1E)
C(30)-C(32)	1.505(15)

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

Table 3 continued
C(40)-C(42)
C(40)-C(41)
C(50)-C(52) C(50)-C(51)
C(601)-C(611)
C(601)-C(621)
C(602)-C(622) C(602)-C(612)
C(70)-C(71)
C(70)-C(72) C(80)-C(82)
C(80)-C(81)
C(901)-C(921) C(901)-C(911)
C(902)-C(942)
C(902)-C(932)
C(100)-C(101)
C(110)-C(111)
C(110)-C(112) C(120)-C(121)
C(120)-C(122)
O(701)-C(702) O(700)-C(702)
C(701)-C(702)
S(1A)-O(1A) S(1A)-C(11A)
S(1A)-C(12A)
S(2A)-O(2A)
S(2A)-C(22A) S(2A)-C(21A)
O(3A)-S(3A)
S(3A)-C(32A) S(3A)-C(31A)
O(3B)-S(3B)
S(3B)-C(31B) S(3B)-C(32B)
O(4A)-S(4A)
S(4A)-C(42A)
O(4B)-S(4B)
S(4B)-C(41B)
O(5A)-S(5A)
S(5A)-C(51A)
O(5B)-S(5B)
S(5B)-C(52B)
O(21)-V(1)-O(1)
O(21)-V(1)-O(2)
O(1)-V(1)-O(2) O(21)-V(1)-O(4)
O(1)-V(1)-O(4)
O(2)-V(1)-O(4) O(21)-V(1)-O(5)
O(1)-V(1)-O(5)
O(2)-V(1)-O(5)
O(21)-V(1)-Sn(5)
O(1)-V(1)-Sn(5)
O(2)-V(1)-Sh(5) O(4)-V(1)-Sh(5)
O(5)-V(1)-Sn(5)
O(21)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2)
O(2)-V(1)-Sn(2)
O(4)-V(1)-Sn(2) O(5)-V(1)-Sn(2)
Sn(5)-V(1)-Sn(2)
O(5)-Sn(2)-O(9) O(5)-Sn(2)-O(2)
O(9)-Sn(2)-O(2)
O(5)-Sn(2)-O(3)
O(2)-Sn(2)-O(3)
O(5)-Sn(2)-O(6)
O(9)-Sn(2)-O(6) O(2)-Sn(2)-O(6)
O(3)-Sn(2)-O(6)
U(5)-Sn(2)-C(202)
O(9)-Sn(2)-C(202)
O(9)-Sn(2)-C(202) O(2)-Sn(2)-C(202)
O(9)-Sn(2)-C(202) O(2)-Sn(2)-C(202) O(3)-Sn(2)-C(202) O(6)-Sn(2)-C(202)

1.471(16)
1.487(16)
1.513(16)
1.511(16)
1.521(17)
1.516(19)
1.493(15)
1.487(17)
1.529(16)
1.511(18)
1.507(19)
1.512(19)
1.528(16)
1.509(15)
1.521(15)
1.528(15)
1.33(2)
1.25(2)
1.511(8)
1.809(9)
1.505(9)
1.802(10)
1.794(10)
1.794(12)
1.793(12)
1.504(12)
1.803(12)
1.492(11)
1.803(11)
1.505(12)
1.802(12)
1.802(12)
1.804(11)
1.812(11)
1.815(11)
1.814(11)
105.5(5) 108 3(4)
94.5(4)
107.1(4)
92.9(4) 140.3(4)
101.1(4)
153.3(4)
77.5(4)
112.4(4)
125.7(3) 108.2(3)
40.0(3)
37.9(2)
104.9(4)
40.1(3)
112.7(3)
73.27(6)
88.3(3)
73.8(3) 87.8(3)
161.6(3)
78.0(3)
93.3(3) 91.5(4)
74.3(4)
157.3(4)
90.4(4) 97.7(13)
171.6(13)
99.5(14) 97.3(13)
99.6(15)
102.1(8)

O(9)-Sn(2)-C(201) O(2)-Sn(2)-C(201) O(3)-Sn(2)-C(201) O(6)-Sn(2)-C(201) C(202)-Sn(2)-C(201) O(5)-Sn(2)-V(1) O(9)-Sn(2)-V(1) O(2)-Sn(2)-V(1) O(3)-Sn(2)-V(1) O(6)-Sn(2)-V(1) C(202)-Sn(2)-V(1) C(201)-Sn(2)-V(1) O(5)-Sn(2)-Sn(4) O(9)-Sn(2)-Sn(4) O(2)-Sn(2)-Sn(4) O(3)-Sn(2)-Sn(4) O(6)-Sn(2)-Sn(4) C(202)-Sn(2)-Sn(4) C(201)-Sn(2)-Sn(4)V(1)-Sn(2)-Sn(4) O(7)-Sn(4)-O(9) O(7)-Sn(4)-O(14) O(9)-Sn(4)-O(14) O(7)-Sn(4)-C(40) O(9)-Sn(4)-C(40) O(14)-Sn(4)-C(40) O(7)-Sn(4)-O(3) O(9)-Sn(4)-O(3) O(14)-Sn(4)-O(3) C(40)-Sn(4)-O(3) O(7)-Sn(4)-O(10) O(9)-Sn(4)-O(10) O(14)-Sn(4)-O(10) C(40)-Sn(4)-O(10) O(3)-Sn(4)-O(10) O(7)-Sn(4)-Sn(11) O(9)-Sn(4)-Sn(11) O(14)-Sn(4)-Sn(11) C(40)-Sn(4)-Sn(11) O(3)-Sn(4)-Sn(11) O(10)-Sn(4)-Sn(11) O(7)-Sn(4)-Sn(2) O(9)-Sn(4)-Sn(2) O(14)-Sn(4)-Sn(2) C(40)-Sn(4)-Sn(2) O(3)-Sn(4)-Sn(2) O(10)-Sn(4)-Sn(2) Sn(11)-Sn(4)-Sn(2) O(100)-Sn(3)-O(7) O(100)-Sn(3)-O(2) O(7)-Sn(3)-O(2) O(100)-Sn(3)-C(30) O(7)-Sn(3)-C(30) O(2)-Sn(3)-C(30) O(100)-Sn(3)-O(701) O(7)-Sn(3)-O(701) O(2)-Sn(3)-O(701) C(30)-Sn(3)-O(701) O(100)-Sn(3)-O(18) O(7)-Sn(3)-O(18) O(2)-Sn(3)-O(18) C(30)-Sn(3)-O(18) O(701)-Sn(3)-O(18) O(100)-Sn(3)-Sn(11) O(7)-Sn(3)-Sn(11) O(2)-Sn(3)-Sn(11) C(30)-Sn(3)-Sn(11) O(701)-Sn(3)-Sn(11) O(18)-Sn(3)-Sn(11) O(5)-Sn(5)-O(17) O(5)-Sn(5)-O(8) O(17)-Sn(5)-O(8) O(5)-Sn(5)-O(4) O(17)-Sn(5)-O(4) O(8)-Sn(5)-O(4) O(5)-Sn(5)-C(50) O(17)-Sn(5)-C(50) O(8)-Sn(5)-C(50) O(4)-Sn(5)-C(50) O(5)-Sn(5)-V(1) O(17)-Sn(5)-V(1) O(8)-Sn(5)-V(1) O(4)-Sn(5)-V(1) C(50)-Sn(5)-V(1) O(5)-Sn(5)-Sn(9)

O(17)-Sn(5)-Sn(9)

Table 3 continued

165.0(8) 105.3(8) 93.8(8) 94.4(8) 6.6(18) 38.6(2) 91.4(2) 35.6(2) 128.5(3) 129.2(3) 96.9(13) 103.5(7) 124.2(2) 37.9(2) 87.5(2) 40.3(2) 86.7(3) 137.6(13) 133.6(7) 111.38(6) 89.7(3) 76.6(3) 86.3(3) 100.5(5) 167.9(5) 102.2(5) 85.1(4) 77.6(3) 155.7(3) 96.7(5) 161.4(4) 74.9(4) 91.8(4) 96.1(5) 101.3(4) 36.7(2) 85.7(2) 40.0(2) 106.3(5) 119.6(3) 129.5(3) 83.7(3) 37.8(2) 120.8(2) 136.4(5) 40.0(2) 90.1(3) 102.39(5) 85.6(4) 88.3(4) 91.4(3) 102.2(5) 168.3(5) 97.6(4) 91.5(4) 77.7(4) 169.1(3) 93.2(4) 159.2(3) 73.8(3) 94.9(3) 97.7(4) 81.5(4) 121.6(3) 37.1(2) 100.2(2) 132.8(4) 70.6(3) 37.6(2) 132.7(3) 96.4(4) 78.1(4) 75.8(3) 78.9(4) 139.3(4) 111.3(5) 115.0(5) 108.5(5) 111.5(5) 38.9(2) 104.5(3) 120.6(3) 37.3(2) 121.8(4) 117.8(3) 38.6(3)

O(8)-Sn(5)-Sn(9) O(4)-Sn(5)-Sn(9) C(50)-Sn(5)-Sn(9) V(1)-Sn(5)-Sn(9) O(5)-Sn(5)-Sn(10) O(17)-Sn(5)-Sn(10) O(8)-Sn(5)-Sn(10) O(4)-Sn(5)-Sn(10) C(50)-Sn(5)-Sn(10) V(1)-Sn(5)-Sn(10) Sn(9)-Sn(5)-Sn(10) O(11)-Sn(7)-O(14) O(11)-Sn(7)-O(15) O(14)-Sn(7)-O(15) O(11)-Sn(7)-O(12) O(14)-Sn(7)-O(12) O(15)-Sn(7)-O(12) O(11)-Sn(7)-C(70) O(14)-Sn(7)-C(70) O(15)-Sn(7)-C(70) O(12)-Sn(7)-C(70) O(11)-Sn(7)-Sn(9) O(14)-Sn(7)-Sn(9) O(15)-Sn(7)-Sn(9) O(12)-Sn(7)-Sn(9) C(70)-Sn(7)-Sn(9) O(11)-Sn(7)-Sn(11) O(14)-Sn(7)-Sn(11) O(15)-Sn(7)-Sn(11) O(12)-Sn(7)-Sn(11) C(70)-Sn(7)-Sn(11) Sn(9)-Sn(7)-Sn(11) O(9)-Sn(6)-O(8) O(9)-Sn(6)-O(6) O(8)-Sn(6)-O(6) O(9)-Sn(6)-O(10) O(8)-Sn(6)-O(10) O(6)-Sn(6)-O(10) O(9)-Sn(6)-O(11) O(8)-Sn(6)-O(11) O(6)-Sn(6)-O(11) O(10)-Sn(6)-O(11) O(9)-Sn(6)-C(601) O(8)-Sn(6)-C(601) O(6)-Sn(6)-C(601) O(10)-Sn(6)-C(601) O(11)-Sn(6)-C(601) O(9)-Sn(6)-C(602) O(8)-Sn(6)-C(602) O(6)-Sn(6)-C(602) O(10)-Sn(6)-C(602) O(11)-Sn(6)-C(602) C(601)-Sn(6)-C(602) O(19)-Sn(8)-O(15) O(19)-Sn(8)-O(12) O(15)-Sn(8)-O(12) O(19)-Sn(8)-O(13) O(15)-Sn(8)-O(13) O(12)-Sn(8)-O(13) O(19)-Sn(8)-O(16) O(15)-Sn(8)-O(16) O(12)-Sn(8)-O(16) O(13)-Sn(8)-O(16) O(19)-Sn(8)-C(80) O(15)-Sn(8)-C(80) O(12)-Sn(8)-C(80) O(13)-Sn(8)-C(80) O(16)-Sn(8)-C(80) O(12)-Sn(9)-O(17) O(12)-Sn(9)-O(8) O(17)-Sn(9)-O(8) O(12)-Sn(9)-O(11) O(17)-Sn(9)-O(11) O(8)-Sn(9)-O(11) O(12)-Sn(9)-C(901) O(17)-Sn(9)-C(901) O(8)-Sn(9)-C(901) O(11)-Sn(9)-C(901) O(12)-Sn(9)-C(902) O(17)-Sn(9)-C(902) O(8)-Sn(9)-C(902) O(11)-Sn(9)-C(902) C(901)-Sn(9)-C(902) O(12)-Sn(9)-Sn(5)

O(17)-Sn(9)-Sn(5)

O(8)-Sn(9)-Sn(5)

Table 3 continued

39.8(3) 108 8(3) 122.0(4) 115.72(6) 106.7(2) 39.9(3) 112.0(3) 39.0(2) 119 5(4) 69.48(5) 73.62(4) 99.6(4) 134.5(4) 78.2(4) 77.2(4) 139.3(3) 76 4(4) 107.6(5) 107.3(5) 116.5(5) 112.3(5) 39.4(2) 123.6(3) 104.5(3) 38.1(3) 119.6(4) 121.0(2) 40.3(3) 38.2(2) 106.6(2) 122.7(4) 117.02(4) 90.1(3) 75.2(4) 92.3(4) 76.0(3) 161.3(4) 96.1(4) 86.4(3) 75.4(3) 157.9(3) 91.1(4) 173.9(7) 94.7(7) 100.8(7) 100.1(7) 98.4(7) 168.2(17) 101.6(17) 103.6(19) 92.6(17) 96.8(19) 8(2) 86.9(3) 90.0(3) 76.1(4) 75.7(3) 159.3(4) 92.5(4) 75.1(4) 88.5(4) 159.2(4) 97.6(4) 167.7(6) 102.8(5) 99.6(6) 96.1(5) 97.4(6) 97.2(4) 137.0(4) 78.3(4) 77.6(4) 136.2(3) 77.1(4) 110.6(8) 107.2(8) 111.5(8) 115.4(8) 110.0(17) 108.2(16) 112.0(17) 114.5(17) 1(2) 120.6(2) 39.1(3) 39.5(3)

O(11)-Sn(9)-Sn(5) C(901)-Sn(9)-Sn(5) C(902)-Sn(9)-Sn(5) O(12)-Sn(9)-Sn(7) O(17)-Sn(9)-Sn(7) O(8)-Sn(9)-Sn(7) O(11)-Sn(9)-Sn(7) C(901)-Sn(9)-Sn(7) C(902)-Sn(9)-Sn(7) Sn(5)-Sn(9)-Sn(7) O(19)-Sn(10)-O(4) O(19)-Sn(10)-O(20) O(4)-Sn(10)-O(20) O(19)-Sn(10)-O(13) O(4)-Sn(10)-O(13) O(20)-Sn(10)-O(13) O(19)-Sn(10)-O(17) O(4)-Sn(10)-O(17) O(20)-Sn(10)-O(17) O(13)-Sn(10)-O(17) O(19)-Sn(10)-C(100) O(4)-Sn(10)-C(100) O(20)-Sn(10)-C(100) O(13)-Sn(10)-C(100) O(17)-Sn(10)-C(100) O(19)-Sn(10)-Sn(5) O(4)-Sn(10)-Sn(5) O(20)-Sn(10)-Sn(5) O(13)-Sn(10)-Sn(5) O(17)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(18)-Sn(11)-O(7) O(18)-Sn(11)-O(15) O(7)-Sn(11)-O(15) O(18)-Sn(11)-O(14) O(7)-Sn(11)-O(14) O(15)-Sn(11)-O(14) O(18)-Sn(11)-C(110) O(7)-Sn(11)-C(110) O(15)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(18)-Sn(11)-Sn(7) O(7)-Sn(11)-Sn(7) O(15)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) C(110)-Sn(11)-Sn(7) O(18)-Sn(11)-Sn(3) O(7)-Sn(11)-Sn(3) O(15)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) C(110)-Sn(11)-Sn(3) Sn(7)-Sn(11)-Sn(3) O(18)-Sn(11)-Sn(4) O(7)-Sn(11)-Sn(4) O(15)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) C(110)-Sn(11)-Sn(4) Sn(7)-Sn(11)-Sn(4) Sn(3)-Sn(11)-Sn(4) O(18)-Sn(12)-O(19) O(18)-Sn(12)-O(1) O(19)-Sn(12)-O(1) O(19)-Sn(12)-O(16) O(19)-Sn(12)-O(16) O(1)-Sn(12)-O(16) O(18)-Sn(12)-C(120) O(19)-Sn(12)-C(120) O(1)-Sn(12)-C(120) O(16)-Sn(12)-C(120) O(18)-Sn(12)-O(20) O(19)-Sn(12)-O(20) O(1)-Sn(12)-O(20) O(16)-Sn(12)-O(20) C(120)-Sn(12)-O(20) V(1)-O(1)-Sn(12) V(1)-O(2)-Sn(3) V(1)-O(2)-Sn(2) Sn(3)-O(2)-Sn(2) Sn(2)-O(3)-Sn(4) V(1)-O(4)-Sn(5) V(1)-O(4)-Sn(10) Sn(5)-O(4)-Sn(10) Sn(5)-O(5)-V(1) Sn(5)-O(5)-Sn(2) V(1)-O(5)-Sn(2) Sn(6)-O(6)-Sn(2)

Table 3 continued

106 8(2) 118 8(7) 119.7(16) 40.1(3) 120.4(3) 105.9(3) 37.8(2) 123.9(7) 122.9(16) 116.83(4) 88.4(3) 76.4(3) 95.9(3) 75.2(4) 159.6(4) 92.0(4) 87.0(3) 76.5(3) 162.1(3) 90.3(4) 169.5(6) 101.2(5) 98.3(5) 96.2(5) 99.1(5) 88.3(2) 38.5(2) 132.7(3) 127.2(3) 38.1(2) 101.9(5) 79.3(3) 100.2(3) 138.2(4) 136.1(4) 76.4(3) 75.9(3) 116.7(4) 115.4(5) 102.3(5) 106.7(4)121.6(2) 106.4(2) 38.5(3) 37.6(2) 112.4(4) 42.8(2) 37.5(2) 134.0(3) 110.4(2) 117.8(4) 127.64(4) 108.0(3) 37.4(2) 108.3(3) 39.1(2) 119.1(4) 71.10(4) 72.26(4) 89.5(3) 87.2(3) 89.3(3) 96.1(4) 74.4(3) 163.3(3) 99.9(4) 166.3(5) 101.1(5) 94.5(5) 159.9(3) 74.8(3) 80.3(3) 91.6(4) 97.9(4) 134.4(5) 126.0(4) 104.3(4) 127.7(4) 99.7(4) 102.7(4) 128.5(5) 102.6(4) 103.2(4) 139.0(5) 102.4(4)102.3(4)

Sn(11)-O(7)-Sn(3)
Sn(11)-O(7)-Sn(4)
Sn(3)-O(7)-Sn(4)
Sn(5)-O(8)-Sn(9)
Sn(5)-O(8)-Sn(6)
Sn(9)-O(8)-Sn(6)
Sn(6) - O(9) - Sn(2)
Sn(6) O(0) Sn(2)
SI(0) - O(9) - SI(4)
Sn(2) - O(9) - Sn(4)
Sn(6)-O(10)-Sn(4)
Sn(7)-O(11)-Sn(9)
Sn(7)-O(11)-Sn(6)
Sn(9)-O(11)-Sn(6)
Sn(9)-O(12)-Sn(7)
Sn(9)-O(12)-Sn(8)
Sn(7)-O(12)-Sn(8)
Sn(8)-O(13)-Sn(10)
Sn(7)-O(14)-Sn(4)
Sn(7)-O(14)-Sn(11)
Sn(4)-O(14)-Sn(11)
Sn(11)-O(15)-Sn(7)
Sn(11)-O(15)-Sn(8)
Sn(7)-O(15)-Sn(8)
Sn(8)-O(16)-Sn(12)
Sn(9)-O(17)-Sn(5)
Sn(9)-O(17)-Sn(10)
Sn(5)-O(17)-Sn(10)
Sn(11)-O(18)-Sn(12)
Sn(11) - O(18) - Sn(3)
$S_{n}(12) - O(18) - S_{n}(3)$
Sn(12) - O(10) - Sn(3) Sn(8) O(10) - Sn(10)
Sn(8) - O(19) - Sn(10) Sn(8) - O(10) - Sn(12)
Sn(8)-O(19)-Sn(12)
Sn(10)-O(19)-Sn(12)
Sn(10)-O(20)-Sn(12)
C(211)-C(201)-C(221)
C(211)-C(201)-Sn(2)
C(221)-C(201)-Sn(2)
C(212)-C(202)-C(222)
C(212)-C(202)-Sn(2)
C(222)-C(202)-Sn(2)
C(32)-C(30)-C(31)
C(32)-C(30)-Sn(3)
C(31)-C(30)-Sn(3)
C(42)-C(40)-C(41)
C(42)-C(40)-Sn(4)
C(41)-C(40)-Sn(4)
C(52)-C(50)-C(51)
C(52)-C(50)-Sn(5)
C(51)-C(50)-Sn(5)
C(611)-C(601)-C(621)
C(611)- $C(601)$ - $Sn(6)$
C(621)-C(601)-Sn(6)
C(622) - C(602) - C(612)
C(622) - C(602) - C(012)
C(612) - C(602) - SII(0)
C(012)- $C(002)$ - $SII(0)$
C(71)- $C(70)$ - $C(72)$
0(71)-0(70)-3((7)
$C(70)$ $C(70)$ $C_{m}(7)$
C(72)-C(70)-Sn(7)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-C(932)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-Sn(9) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(932)-C(902)-Sn(9)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(932)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(932)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101) C(102)-C(100)-Sn(10)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(912)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(110)-C(112)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(932)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(111)-C(110)-C(112) C(111)-C(110)-Sn(11)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(111)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-Sn(9) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-C(122)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(932)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(111)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-C(122) C(121)-C(120)-Sn(12)
$\begin{array}{c} C(72)-C(70)-Sn(7)\\ C(82)-C(80)-Sn(8)\\ C(81)-C(80)-Sn(8)\\ C(921)-C(901)-C(911)\\ C(921)-C(901)-Sn(9)\\ C(911)-C(901)-Sn(9)\\ C(911)-C(901)-Sn(9)\\ C(912)-C(902)-C(932)\\ C(942)-C(902)-Sn(9)\\ C(932)-C(902)-Sn(9)\\ C(102)-C(100)-Sn(10)\\ C(102)-C(100)-Sn(10)\\ C(101)-C(110)-Sn(11)\\ C(111)-C(110)-Sn(11)\\ C(111)-C(110)-Sn(11)\\ C(112)-C(120)-Sn(12)\\ C(121)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ \end{array}$
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(91)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(902)-Sn(9) C(922)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(111)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-C(122) C(121)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(91)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-O(701)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-Sn(9) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(902)-C(932) C(942)-C(902)-Sn(9) C(922)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-C(101) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(31) O(700)-C(702)-O(701)
$\begin{array}{c} C(72)-C(70)-Sn(7)\\ C(82)-C(80)-Sn(8)\\ C(81)-C(80)-Sn(8)\\ C(81)-C(80)-Sn(8)\\ C(921)-C(901)-C(911)\\ C(921)-C(901)-Sn(9)\\ C(942)-C(902)-Sn(9)\\ C(942)-C(902)-Sn(9)\\ C(942)-C(902)-Sn(9)\\ C(102)-C(100)-Sn(10)\\ C(102)-C(100)-Sn(10)\\ C(101)-C(110)-Sn(11)\\ C(111)-C(110)-Sn(11)\\ C(111)-C(110)-Sn(11)\\ C(112)-C(120)-Sn(12)\\ C(121)-C(120)-Sn(12)\\ C(121)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(122)-C(120)-Sn(12)\\ C(102)-C(702)-C(701)\\ O(700)-C(702)-C(701)\\ O(701)-C(702)-C(701)\\ \end{array}$
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(91)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(91)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701) O(1A)-S(1A)-C(11A) O(1A)-S(1A)-C(12A)
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-C(81) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(911)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(110)-Sn(11) C(112)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(7
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(110)-Sn(11) C(101)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-Sn(12) C(121)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-
C(72)-C(70)-Sn(7) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(91)-C(901)-C(911) C(921)-C(901)-Sn(9) C(921)-C(901)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(942)-C(902)-Sn(9) C(102)-C(100)-Sn(10) C(102)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(111)-C(110)-Sn(11) C(121)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(122)-C(120)-Sn(12) C(702)-O(701)-Sn(3) O(700)-C(702)-C(701) O(701)-C(702)-C(701

Table 3 continued

105.4(4)
105.8(4)
137.9(5)
132 7(5)
104.1(4)
107.2(4)
107.1(4)
104.3(4)
101.9(4)
132 7(4)
103.4(4)
101.8(4)
133.3(5)
102.5(4)
102.0(4)
102 0(4)
100.9(4)
103.3(4)
135.3(5)
104.8(4)
102.9(4) 102.4(4)
135 6(5)
101.9(4)
129.9(4)
99.6(3)
124.3(4)
106.6(4)
107.2(4)
105.6(4)
115.8(16)
110(2)
110.4(17)
115.4(19)
113(4)
111(3)
108.3(14)
111.9(11)
118.8(15)
114.0(15)
113.0(15)
109.0(18)
108.7(13)
109.9(13)
115 2(16)
112.7(15)
117(2)
105(4)
109(5)
113.7(17)
109.6(13)
107 6(19)
113.7(16)
110.6(14)
115.1(16)
114.6(19)
111.4(18)
108(4)
110(4)
113.2(17)
110.0(13)
112.9(13)
111.3(15)
111.1(12) 100.1(11)
111.5(14)
110.2(10)
112.1(11)
129.8(13)
121.1(19)
122(2)
117(2)
100.7(5)
99,5(5)
107.3(6)
107 7/6
107.7(0)

Table 3 continued	
O(3A)-S(3A)-C(32A)	108.2(8)
O(3A)-S(3A)-C(31A)	108.3(8)
C(32A)-S(3A)-C(31A)	100.4(6)
O(3B)-S(3B)-C(31B)	107.2(8)
O(3B)-S(3B)-C(32B)	107.4(8)
C(31B)-S(3B)-C(32B)	99.6(6)
O(4A)-S(4A)-C(42A)	107.9(7)
O(4A)-S(4A)-C(41A)	108.2(7)
C(42A)-S(4A)-C(41A)	99.9(6)
O(4B)-S(4B)-C(41B)	107.3(8)
O(4B)-S(4B)-C(42B)	107.3(8)
C(41B)-S(4B)-C(42B)	99.7(6)
O(5A)-S(5A)-C(51A)	108.2(8)
O(5A)-S(5A)-C(52A)	107.7(8)
C(51A)-S(5A)-C(52A)	99.3(6)
O(5B)-S(5B)-C(52B)	107.3(8)
O(5B)-S(5B)-C(51B)	107.4(7)
C(52B)-Š(5B)-Č(51B)	98.8(6)

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
V(1)	45(2)	48(1)	51(1)	-2(1)	-1(1)	11(1)
Sn(2)	44(1)	54(1)	59(1)	2(1)	6(1)	9(1)
Sn(4)	57(1)	53(1)	61(1)	10(1)	7(1)	14(1)
Sn(3)	55(1)	63(1)	49(1)	-7(1)	1(1)	14(1)
Sn(5)	43(1)	62(1)	52(1)	-3(1)	-7(1)	8(1)
Sn(7)	51(1)	54(1)	64(1)	-6(1)	6(1)	17(1)
Sn(6)	54(1)	48(1)	70(1)	-7(1)	4(1)	3(1)
Sn(8)	44(1) 56(1)	61(1) 62(4)	59(1)	-2(1)	8(1)	8(1)
Sn(9) Sn(10)	50(1) 52(1)	50(1)	52(1) 51(1)	-13(1) 5(1)	2(1)	9(1) 7(1)
Sn(10) Sn(11)	32(1) 44(1)	59(1)	55(1)	-1(1)	-1(1)	14(1)
Sn(12)	45(1)	49(1)	56(1)	-4(1)	-2(1)	4(1)
O(1)	51(6)	46(5)	59(6)	-4(4)	2(5)	5(4)
O(2)	41(6)	52(5)	49(5)	1(4)	-6(4)	13(4)
O(3)	48(6)	64(6)	71(6)	17(5)	17(5)	16(5)
O(4)	52(6)	53(5)	50(5)	2(4)	0(4)	4(4)
O(5)	35(6)	66(6)	46(5)	-2(4)	-7(4)	1(4)
O(6)	57(7)	53(6)	89(7)	-8(5)	7(6)	-5(5)
O(7)	57(7)	54(6)	51(5)	2(4)	11(5)	11(5)
O(8)	47(6)	62(6)	61(6)	-5(5)	-2(5)	1(5)
O(9)	43(6)	46(5)	58(5)	0(4)	0(4)	11(4)
O(10)	74(8)	54(6)	83(7)	-3(5)	2(6)	14(5)
O(11)	04(0) 62(7)	54(6) 50(6)	50(5) 55(6)	-2(4)	3(4)	1(5)
O(12)	56(7)	$\frac{59(0)}{74(7)}$	55(6) 69(6)	-0(4) 8(5)	4(5)	7(5)
O(14)	50(6)	61(6)	60(6)	5(5)	4(5)	15(5)
O(15)	56(7)	60(6)	56(5)	-6(4)	7(5)	10(5)
O(16)	56(7)	52(6)	78(7)	-14(5)	7(5)	3(5)
O(17)	54(7)	77(7)	47(5)	3(5)	-1(4)	25(5)
O(18)	50(6)	52(5)	49(5)	6(4)	4(4)	5(4)
O(19)	38(6)	52(5)	55(5)	-4(4)	0(4)	11(4)
O(20)	49(6)	59(6)	69(6)	12(5)	4(5)	-7(5)
O(21)	44(6)	62(6)	78(7)	0(5)	9(5)	18(5)
O(100)	75(8)	72(7)	58(6)	0(5)	10(5)	21(6)
O(701)	80(8)	84(8)	65(7) 68(0)	-11(6)	-20(6)	27(6)
O(700)	122(14)	107(10)	00(16)	14(9)	-3(9) 42(15)	4Z(1Z) 92(10)
C(702)	120(20)	97(14)	61(12)	-28(10)	-42(13)	32(14)
S(1A)	109(4)	61(3)	158(5)	4(3)	21(4)	29(3)
O(1A)	124(12)	80(9)	157(13)	0(8)	32(10)	40(8)
S(2A)	103(5)	131(6)	200(8)	-36(5)	1(5)	6(4)
O(2A)	60(10)	135(13)	250(20)	-11(13)	14(11)	33(9)
O(3A)	93(14)	200(20)	190(30)	-90(20)	57(16)	-35(14)
S(3A)	89(9)	176(11)	183(11)	13(8)	13(8)	-10(7)
O(3B)	93(14)	200(20)	190(30)	-90(20)	57(16)	-35(14)
S(3B)	89(9)	176(11)	183(11)	13(8)	13(8)	-10(7)
U(4A)	125(18)	200(20)	67(12)	4(14)	14(12)	-34(15)
S(4A)	100(8)	108(0) 200(20)	(4(5) 67(12)	-0(4) 4(14)	∠0(5) 14(12)	-∠5(5) 34(15)
O(4D) S(4B)	120(10)	200(20)	01(12) 74(5)	4(14) 6(4)	14(1Z) 20(5)	-34(13)
O(5A)	123(17)	94(10)	106(15)	-0(4) 32(10)	20(3) 54(15)	- <u>2</u> 3(3) 25(11)
S(5A)	131(11)	101(6)	123(9)	17(6)	30(6)	20(7)
O(5B)	123(17)	94(10)	106(15)	32(10)	54(15)	25(11)
S(5B)	131(11)	101(6)	123(9)	17(6)	30(6)	20(7)
· /	· /	<u> </u>	X - 7	x = /	x - /	

Table 4.Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 1. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12$].

	Х	У	Z	U(eq)
H(201)	10951	8814	1275	192(11)
H(211)	11507	8621	2320	192(11)
H(211)	12068	8125	1826	192(11)
H(211)	11303	7567	2211	192(11)
H(221)	10122	7655	644	192(11)
H(221)	10380	6944	1137	192(11)
H(221)	11163	7476	753	192(11)
H(202)	10499	7529	1228	192(11)
H(212)	11100	7387	2265	192(11)
H(212)	11656	8359	2247	192(11)
H(212)	11894	7582	1785	192(11)
H(222)	10584	8867	711	192(11)
H(222)	11586	8583	821	192(11)
H(222)	11268	9349	1259	192(11)
H(30)	7305	5234	1022	192(11)
H(31)	6294	5357	126	192(11)
H(31)	6985	4657	-26	192(11)
H(31)	7154	5635	-288	192(11)
H(32)	8903	5674	938	192(11)
H(32)	8734	5829	205	192(11)
H(32)	8559	4850	464	192(11)
H(40)	7915	10836	682	192(11)
H(41)	7905	9576	38	192(11)
1(41)	/407	10337	-283	192(11)
⊐(41)	6811	9485	-24	192(11)
1(42)	6671	11155	1239	192(11)
⊐(42)	6016	10551	/31	192(11)
1(42)	6640	11417	519	192(11)
1(50)	10209	/548	4652	192(11)
H(51)	10374	6220	4062	192(11)
H(51)	11367	6718	4275	192(11)
H(51)	10968	6783	3569	192(11)
H(52)	10813	8946	4259	192(11)
H(52)	11237	8453	3690	192(11)
H(52)	11633	8372	4395	192(11)
H(601)	9795	10846	3839	192(11)
H(611)	8307	11128	4072	192(11)
H(611)	8427	11961	3629	192(11)
H(611)	9088	11941	4245	192(11)
T(021)	10534	11375	2944	192(11)
H(621)	10542	12112	3498	192(11)
T(021)	9651	12112	2090	192(11)
H(602)	9647	11646	3133	192(11)
⊓(012) ⊔(612)	0100	12211	3323	192(11)
П(012) Ц(612)	0730	12211	3917	192(11)
П(012) Ц(622)	0104	11249	3951	192(11)
⊓(022) ⊣(622)	0727	10562	4216	192(11)
H(022)	10322	11510	4210	102(11)
H(022)	4676	10213	2000	192(11)
(70)	5602	110213	2303	102(11)
	6244	11/88	2213	192(11)
H(712)	5205	11683	27.52	192(11)
H(721)	5077	10172	3990	192(11)
-(, , <u>,</u> , , , , , , , , , , , , , , , ,	4871	11146	3815	192(11)
H(723)	5905	10947	3925	192(11)
H(80)	3823	6866	3816	192(11)
H(811)	3443	7578	2864	192(11)
H(812)	3802	8525	3196	192(11)
H(813)	2917	7940	3437	192(11)
H(821)	4617	7748	4654	192(11)
H(822)	3624	8036	4510	192(11)
H(823)	4511	8622	4273	192(11)
H(901)	7925	10081	4947	192(11)
H(911)	8945	9071	5204	192(11)
H(911)	8132	8413	5470	192(11)
H(911)	8447	9362	5812	192(11)
H(921)	6331	9787	4971	192(11)
H(921)	6804	9824	5664	192(11)
H(921)	6425	8887	5324	192(11)
H(902)	8277	9767	5071	192(11)
H(932)	7929	8321	5416	192(11)
H(932)	6855	8385	5342	192(11)
H(932)	7478	8981	5870	192(11)
H(942)	7185	10631	4677	192(11)
H(942)	7018	10463	5401	192(11)
H(942)	6367	9909	4866	192(11)
H(100)	7086	5185	4724	192(11)
H(101)	7664	6554	5257	192(11)
H(101)	8667	6463	5031	192(11)
H(101)	8201	5774	5508	192(11)
	7971	AAAA	4032	192(11)
¬(IUZ)	1011		1002	· · · · · ·
H(102)	8397	4450	4737	192(11)

Table 5. Hydrogen coordinates ($x \ 10^4$) and isotropic displacement parameters ($A^2 x \ 10^3$) f	for 1.
--	--------

H(110)	1716	8368	635	102(11)
	4740	0000	000	132(11)
H(111)	4253	6855	815	192(11)
H(111)	3386	7389	770	192(11)
H(111)	3786	7131	1441	192(11)
H(112)	4541	9500	1397	192(11)
	4041	0700	1001	102(11)
H(112)	3956	8786	1801	192(11)
H(113)	3565	9027	1124	192(11)
H(120)	6023	4428	1521	192(11)
H(121)	5153	5430	001	102(11)
	1055	5450	1 1 7 0	102(11)
H(121)	4355	5231	1470	192(11)
H(121)	4576	4465	992	192(11)
H(122)	5545	3794	2482	192(11)
H(122)	1822	3//5	1016	102(11)
11(122)	4022	4004	1910	102(11)
Π(122)	4599	4201	2403	192(11)
H(701)	4817	7446	-327	192(11)
H(701)	5122	7194	-1013	192(11)
H(701)	5313	8199	-746	192(11)
	0000	0133	-140	102(11)
	9206	3014	3193	192(11)
H(11A)	8959	4377	2739	192(11)
H(11A)	9436	3567	2469	192(11)
H(124)	7081	3171	1586	192(11)
	9460	2200	1500	102(11)
П(12А)	8162	3300	1505	192(11)
H(12A)	7673	4108	1767	192(11)
H(21A)	2107	5809	1332	192(11)
H(21A)	1117	5517	1589	192(11)
H(21A)	1900	4704	1402	102(11)
	1000	4794	1403	192(11)
H(22A)	1614	4879	3282	192(11)
H(22A)	1436	4248	2662	192(11)
H(22A)	812	5020	2777	192(11)
$\square(21\Lambda)$	2499	152	1500	102(11)
	2400	103	1390	192(11)
H(31B)	3147	1075	1603	192(11)
H(31C)	2065	1070	1638	192(11)
H(32A)	2990	2046	3269	192(11)
L(22B)	2469	2252	2625	102(11)
1(32D)	2400	2232	2023	192(11)
H(32C)	3541	2176	2644	192(11)
H(31D)	2964	613	1585	192(11)
H(31E)	3617	960	2186	192(11)
	3273	1653	1708	102(11)
	0450	1000	0040	102(11)
H(32D)	2153	2032	3310	192(11)
H(32E)	2909	2459	2857	192(11)
H(32F)	3090	1615	3251	192(11)
HÌ41A)	3810	4553	3878	192(11)
$\square(111)$	4020	1751	2664	102(11)
	4030	4751	3004	192(11)
H(41A)	4636	4791	4394	192(11)
H(42A)	5978	2795	4309	192(11)
H(42A)	5920	3720	4674	192(11)
$H(12\Delta)$	6150	3703	3950	102(11)
H(42R)	0109	4770	4070	102(11)
H(41B)	3696	4776	4079	192(11)
H(41B)	3782	4008	3563	192(11)
H(41B)	4498	4893	3598	192(11)
H(42B)	5976	3069	4069	192(11)
	5015	2002	2600	102(11)
	5945	3092	3622	192(11)
H(42B)	5172	3051	3534	192(11)
H(51A)	10033	10644	1014	192(11)
H(51A)	10791	11336	1390	192(11)
$H(51\Lambda)$	10705	11226	641	102(11)
	10130	10015	001	102(11)
П(32А)	10232	10010	301	192(11)
H(52A)	10903	13032	555	192(11)
H(52A)	10926	13102	1306	192(11)
H(51B)	10222	10702	1011	102(11)
	10602	11200	407	102(11)
	10093	11308	40/	192(11)
H(51B)	9603	11169	518	192(11)
H(52B)	10105	13646	940	192(11)
H(52B)	9528	12907	479	192(11)
H(52B)	10616	13103	111	102(11)
1(520)	10010	13103		192(11)

Table 5 continued

8.2 [(ⁱBuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmf)] · 4 DMF (2)



Table 1. Crystal data and structure refinement for 2.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions	$\begin{array}{l} C_{51} \ H1_{14} \ CI_2 \ N_5 \ O_{28} \ Sn_9 \ V_3 \\ 2537.40 \\ 293(2) \ K \\ 0.71073 \ \AA \\ Triclinic, \ P-1 \\ a = 14.248(5) \ \AA \ \alpha = 105.62(4)^\circ \\ b = 14.366(8) \ \AA \ \beta = 90.87(3)^\circ \\ c = 25.006(9) \ \AA \ \gamma = 110.08(3)^\circ \end{array}$
Volume	4597(3) A ³
Z, Calculated density	2, 1.833 Mg/m ³
Absorption coefficient	2.811 mm⁻ ¹
F(000)	2464
Crystal size	0.4 mm x 0.3 mm x 0.5 mm
Theta range for data collection	1.76 to 18.04 °
Limiting indices	-1≤h≤12, -11≤k≤11, -21≤l≤21
Reflections collected / unique	7307 / 6200 [R(int) = 0.0813]
Completeness to theta	= 18.04 97.2 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	6200 / 6 / 597
Goodness-of-fit on	F^2 1.071
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0867, wR2 = 0.2185
R indices (all data)	R1 = 0.1163, $wR2 = 0.2449$
Extinction coefficient	0.00025(13)
Largest diff. peak and hole	1.592 and -1.149 e.A ⁻³

	x	V	7	U(ea)
	X	y	L	0(04)
Sn(1)	7900(2)	8181(2)	1718(1)	73(1)
Sn(2)	7434(2)	6006(2)	3516(1)	69(1)
Sn(3) Sn(4)	5136(2)	6090(2) 4628(2)	3525(1)	70(1) 74(1)
Sn(5)	5623(2)	8267(2)	1761(1)	73(1)
Sn(6)	7344(2)	9688(2)	2826(1)	69(1)
Sn(7)	8690(2)	8024(2)	3104(1)	65(1)
Sn(8)	7215(2)	8597(2)	4020(1)	83(1)
Sn(9)	8286(2)	5962(2) 5769(5)	2068(1)	75(1) 75(2)
V(2)	5066(4)	8088(4)	3174(2)	67(2)
V(3)	4404(4)	6286(4)	2159(2)	69(2)
O(1)	6304(15)	6060(15)	3037(8)	74(6)
O(2)	7955(14)	7646(15)	3763(8)	75(6)
0(3)	8453(13) 8453(13)	0437(14) 7527(14)	2921(8)	74(0) 58(5)
O(5)	4457(13)	6498(14)	2911(8)	64(5)
O(6)	6213(16)	5928(18)	4041(7)	90(7)
O(7)	4625(15)	4532(14)	3029(9)	76(6)
O(8)	4959(15)	5274(16)	1998(8)	80(6)
O(9)	8480(20)	4458(13) 9710(20)	2972(9)	120(9)
O(11)	6790(13)	8229(13)	2235(7)	58(5)
O(12)	6819(16)	8516(16)	1255(8)	82(6)
O(13)	7956(14)	9040(15)	3326(7)	71(6)
O(14)	6727(14)	5359(15)	1947(7)	72(6)
O(15) O(16)	6978(15)	9652(15) 6622(16)	2259(9) 1311(8)	75(6)
O(17)	4222(17)	8406(15)	3472(9)	88(7)
O(18)	3254(15)	5800(20)	1910(8)	103(8)
O(19)	5531(17)	4874(18)	915(9)	99(8)
O(20)	5848(15)	7756(15)	3702(7)	71(6)
O(21)	6089(15)	9242(15)	3264(8)	75(6)
O(23)	4709(14)	7761(14)	2387(7)	66(6)
O(90)	10023(17)	6699(18)	2295(10)	97(7)
CI(1)	8388(8)	4314(8)	2209(4)	112(3)
CI(2)	6941(9) 8020(20)	7991(9)	4902(4)	125(4)
C(1)	9950(40)	9080(50)	1270(20)	170(20)
C(12)	10590(60)	9180(60)	800(30)	280(40)
C(13)	10560(50)	9020(50)	1660(30)	220(30)
C(2)	8400(30)	5630(30)	3986(15)	94(11)
C(20)	9420(30)	6420(40) 7130(50)	4260(20)	138(16)
C(22)	10110(40)	5900(50)	4490(20)	200(20)
C(3)	4000(30)	6130(30)	4075(17)	125(14)
C(30)	3820(60)	5490(70)	4480(40)	250(40)
C(31)	2/30(70)	5510(70)	4670(40)	320(50)
C(32) C(4)	5210(30)	3050(30)	4380(30) 1915(17)	123(14)
C(40)	4390(90)	2680(80)	1420(50)	410(70)
C(41)	4630(90)	1850(110)	1010(30)	610(120)
C(42)	3480(40)	1960(100)	1630(50)	570(120)
C(5) C(50)	4560(50) 3910(80)	8580(50)	1320(20)	180(20)
C(51)	3030(70)	8090(60)	780(40)	300(40)
C(52)	4240(100)	7530(90)	370(30)	510(90)
C(6)	8170(40)	11310(40)	3304(19)	142(16)
C(60)	7570(90) 8570(90)	12010(90)	3560(50)	360(50)
C(62)	7650(120)	12520(30)	2970(70)	620(120)
C(7)	10230(30)	8810(30)	3335(16)	105(12)
C(70)	10590(80)	9920(90)	3670(50)	320(50)
C(71)	10370(50)	10030(60)	4270(30)	250(30)
C(72)	7670(30)	10200(30)	3460(50) 4556(16)	300(00) 120(14)
C(80)	6890(40)	10260(30)	4950(20)	139(16)
C(81)	6120(60)	10520(60)	4680(30)	270(40)
C(82)	7370(50)	11290(50)	5370(30)	230(30)
C(9) C(90)	8650(30)	5650(30) 4780(60)	1200(16)	115(13) 210(30)
C(91)	8770(70)	4130(70)	640(40)	310(40)
C(92)	10300(60)	5780(70)	930(40)	310(40)
N(1)	11450(20)	6790(20)	2759(11)	91(9)
C(15)	10430(30)	6390(30) 7530(30)	2610(16)	105(12)
C(10) C(17)	12100(30) 11960(30)	6450(30)	2020(10) 3133(17)	170(14) 124(14)
N(2)	1370(50)	3290(50)	2260(30)	220(20)
C(25)	2260(50)	3740(50)	2460(30)	180(20)
C(26)	810(50)	3690(50)	1920(30)	210(30)
C(27)	740(100)	2630(100)	2590(60)	490(90)

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

1	n - 1
L	UZ.
•	~

O(250)	2700(30)	3480(30)	2771(17)	191(15)
N(3)	2950(30)	3850(30)	312(17)	146(14)
C(35)	3540(30)	3360(30)	-78(17)	121(14)
C(36)	3370(40)	4990(40)	340(20)	190(20)
C(37)	2320(60)	3430(60)	570(30)	270(40)
O(350)	3250(30)	2370(30)	-154(16)	160(12)
N(4)	4520(40)	1410(50)	3430(20)	187(18)
C(45)	4580(60)	560(70)	2920(30)	240(30)
C(46)	4820(80)	2490(90)	3550(40)	380(60)
C(47)	4180(60)	1090(60)	3900(30)	290(40)
O(450)	5200(40)	940(40)	2690(20)	227(19)
N(5)	7750(60)	990(50)	980(30)	240(30)
C(55)	7990(60)	980(50)	1470(40)	220(30)
C(56)	8270(60)	750(70)	630(40)	290(40)
C(57)	6710(90)	780(90)	740(50)	430(70)
O(550)	8740(30)	1010(30)	1622(15)	163(13)

Table 2 continued

Sn(1)-O(11)	2.066(17)
Sn(1)-O(4)	2 086(17)
Sn(1)-C(1)	2 11(3)
$S_{n}(1) - O(16)$	2 12(2)
Sn(1) - O(10)	2.12(2)
$S_{1}(1) = O(10)$	2.14(3)
SI(1)-O(12)	2.17(2)
Sn(1)-Sn(5)	3.292(3)
Sn(2)-O(1)	2.03(2)
Sn(2)-O(3)	2.08(2)
Sn(2)-C(2)	2.10(3)
Sn(2)-O(2)	2.12(2)
Sn(2)-O(9)	2.141(17)
Sn(2)-O(6)	2 19(2)
Sn(2) - Sn(7)	3 282(4)
Sn(2) Sn(4)	3.202(4)
Sn(2) - On(4)	3.299(4)
SII(3)-O(1)	2.063(19)
Sn(3)-O(6)	2.10(2)
Sn(3)-O(7)	2.106(18)
Sn(3)-O(5)	2.115(19)
Sn(3)-C(3)	2.15(4)
Sn(3)-O(20)	2.17(2)
Sn(3)-Sn(4)	3.278(3)
Sn(4)-O(1)	2.083(18)
Sn(4)-O(14)	2.08(2)
Sn(4)-O(8)	2 (19(2)
Sn(4)-O(9)	2 12(2)
Sn(A) - C(A)	2.12(2)
Sn(4) - O(7)	2.17(7)
Sn(4) - O(7)	2.17(2)
SII(5)-O(11)	2.052(16)
Sn(5)-O(21)	2.09(2)
Sn(5)-C(5)	2.10(6)
Sn(5)-O(12)	2.13(2)
Sn(5)-O(15)	2.144(19)
Sn(5)-O(23)	2.168(19)
Sn(5)-V(3)	3.208(6)
Sn(5)-Sn(6)	3.272(4)
Sn(6)-O(13)	2.08(2)
Sn(6)-O(11)	2.088(16)
Sn(6)-O(22)	2.112(19)
Sn(6)-O(10)	2.12(3)
Sn(6)-O(15)	2.14(2)
Sn(6)-C(6)	2.20(5)
Sn(7)-Q(13)	2.040(18)
Sn(7)-Q(3)	2.048(18)
Sn(7)-Q(2)	2.062(18)
Sn(7)-O(4)	2 063(17)
Sn(7)-C(7)	2.08(4)
Sn(7)-Sn(9)	3 235(4)
Sn(7)-Sn(8)	3 265(3)
Sn(8)- $O(20)$	1 02(2)
Sn(0) O(20)	1.02(2)
Sn(0) - O(2) Sn(0) - O(12)	2 17(2)
Sn(0) - O(13) Sn(0) - O(0)	2.17(2)
SII(0)-O(0) Sp(0) CI(2)	2.19(4)
SI(0) - O(2)	2.570(11)
SII(9)-O(3)	2.02(2)
SII(9) - O(14)	2.071(19)
Sh(9)-O(4)	2.098(18)
Sn(9)-C(9)	2.20(4)
Sn(9)-O(90)	2.32(2)
Sn(9)-Cl(1)	2.537(10)
V(1)-O(19)	1.56(2)
V(1)-O(16)	1.69(2)
V(1)-O(14)	1.941(18)
V(1)-O(21)	1.964(19)
V(1)-O(8)	2.03(2)
V(1)-V(3)	2.992(7)
V(2)-O(17)	1.56(2)
V(2)-O(22)	1.75(2)
V(2)-O(23)	1.911(18)
V(2)-O(20)	1.969(19)
V(2)-O(5)	2.053(19)
V(2)-V(3)	2.957(8)
V(3)-O(18)	1.58(2)
V(3)-O(5)	1.818(19)
V(3)-O(8)	1.84(2)
V(3)-O(23)	1.927(19)
V(3)-O(21)	1.93(2)
O(90)-C(15)	1.22(4)
C(1)-C(11)	1.46(6)
C(11)-Č(13)	1.35(7)
C(11)-C(12)	1.50(8)
C(2)-C(20)	1.51(5)
C(20)-C(21)	1.51(6)
C(20)-C(22)	1.60(6)
C(3)-C(30)	1 52(8)
- \ - \ - \ \	- \-/

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 2.

C(30)-C(32) C(30)-C(31) C(4)-C(40) C(40)-C(41) C(40)-C(42) C(5)-C(50) C(5)-C(50) C(50)-C(51) C(50)-C(52) C(6)-C(60) C(60)-C(61) C(60)-C(62) C(7)-C(70) C(70)-C(72) C(70)-C(71) C(8)-C(80) C(80)-C(81) C(80)-C(82) C(9)-C(90) C(90)-C(91) C(90)-C(92) N(1)-C(15) N(1)-C(13) N(1)-C(16) N(1)-C(17) N(2)-C(25) N(2)-C(27) N(2)-C(26) C(25)-O(250) N(3)-C(37) N(3)-C(35) N(3)-C(33) N(3)-C(36) C(35)-O(350) N(4)-C(46) N(4)-C(47) N(4)-C(45) C(45)-O(450) N(5)-C(56) N(5)-C(55) N(5)-C(57) N(5)-C(57) C(55)-O(550) O(11)-Sn(1)-O(4) O(11)-Sn(1)-C(1) O(4)-Sn(1)-C(1) O(11)-Sn(1)-O(16) O(4)-Sn(1)-O(16) C(1)-Sn(1)-O(16) O(11)-Sn(1)-O(10) O(11)-Sn(1)-O(10) O(4)-Sn(1)-O(10) C(1)-Sn(1)-O(10) O(16)-Sn(1)-O(10) O(11)-Sn(1)-O(12) O(4)-Sn(1)-O(12) C(1)-Sn(1)-O(12) C(1)-Sn(1)-O(12) O(16)-Sn(1)-O(12) O(10)-Sn(1)-O(12) O(11)-Sn(1)-Sn(5) O(4)-Sn(1)-Sn(5) C(1)-Sn(1)-Sn(5) O(16)-Sn(1)-Sn(5) O(10)-Sn(1)-Sn(5) O(12)-Sn(1)-Sn(5) O(1)-Sn(2)-O(3) O(1)-Sn(2)-O(2) O(3)-Sn(2)-C(2) O(1)-Sn(2)-O(2) O(3)-Sn(2)-O(2) O(3)-Sn(2)-O(2) C(2)-Sn(2)-O(2) O(1)-Sn(2)-O(9) O(3)-Sn(2)-O(9) C(2)-Sn(2)-O(9) C(2)-Sn(2)-O(9) O(2)-Sn(2)-O(9) O(1)-Sn(2)-O(6) O(3)-Sn(2)-O(6) C(2)-Sn(2)-O(6) O(2)-Sn(2)-O(6) O(9)-Sn(2)-O(6) O(1)-Sn(2)-Sn(7) O(3)-Sn(2)-Sn(7) C(2)-Sn(2)-Sn(7) O(2)-Sn(2)-Sn(7) O(9)-Sn(2)-Sn(7) O(6)-Sn(2)-Sn(7) O(1)-Sn(2)-Sn(4) O(3)-Sn(2)-Sn(4) C(2)-Sn(2)-Sn(4) O(2)-Sn(2)-Sn(4) O(9)-Sn(2)-Sn(4)

Table 3 continued

1.10(9)	•	
1.53(12)	
1.50(2))	
1.03(10 1.46(10)	
1.85(12)	
1.67(12	Ś	
1.49(11)	
1.16(13)	
1.53(5) 1.39(7)		
1.40(7) 1 72(7)		
1.26(9)		
1.38(4)		
1.42(4) 1.45(4)		
1.23(7) 1.50(13)	
1.51(7)	<i>'</i>	
1.21(8)		
1.49(5) 1.52(6)		
1.30(4) 1.40(10)	
1.42(8)	,	
1.13(8)		
1.20(9)		
1.50(11 1.11(8))	
87.7(7) 167.8(1	1)
104.3(1 87 1(7)	1)
83.7(7)	、	
96.2(11 75.9(8))	
94.3(8) 100.7(1	2)
162.9(9 75.4(7))	
159.1(7)	
83.2(8)	'	
36.8(5)		
121.3(5 132.5(1) 0)
77.7(5) 89.1(7)		
39.5(5)		
168.0(1	1)
85.9(8)	')
74.2(7) 105.5(1	1)
76.0(7) 91.3(8)		
93.6(11)	
75.0(7)	, ,	
100.6(1	1)
91.5(8) 96.3(8)		
80.5(6) 37.0(5)		
110.7(1	0)
124.4(6)	
124.9(6 37.2(5))	
84.3(6) 132.7(1	0)
120.7(6 39.1(5))	
20.1(0)		

O(6)-Sn(2)-Sn(4) Sn(7)-Sn(2)-Sn(4) O(1)-Sn(3)-O(6) O(1)-Sn(3)-O(7) O(6)-Sn(3)-O(7) O(1)-Sn(3)-O(5) O(6)-Sn(3)-O(5) O(7)-Sn(3)-O(5) O(1)-Sn(3)-C(3) O(6)-Sn(3)-C(3) O(7)-Sn(3)-C(3) O(5)-Sn(3)-C(3) O(1)-Sn(3)-O(20) O(6)-Sn(3)-O(20) O(7)-Sn(3)-O(20) O(5)-Sn(3)-O(20) C(3)-Sn(3)-O(20) O(1)-Sn(3)-Sn(4) O(6)-Sn(3)-Sn(4) O(7)-Sn(3)-Sn(4) O(5)-Sn(3)-Sn(4) C(3)-Sn(3)-Sn(4) O(20)-Sn(3)-Sn(4) O(1)-Sn(4)-O(14) O(1)-Sn(4)-O(8) O(14)-Sn(4)-O(8) O(1)-Sn(4)-O(9) O(14)-Sn(4)-O(9) O(8)-Sn(4)-O(9) O(1)-Sn(4)-C(4) O(14)-Sn(4)-C(4) O(8)-Sn(4)-C(4) O(9)-Sn(4)-C(4) O(1)-Sn(4)-O(7) O(14)-Sn(4)-O(7) O(8)-Sn(4)-O(7) O(9)-Sn(4)-O(7) C(4)-Sn(4)-O(7) O(1)-Sn(4)-Sn(3) O(14)-Sn(4)-Sn(3) O(8)-Sn(4)-Sn(3)O(9)-Sn(4)-Sn(3) C(4)-Sn(4)-Sn(3) O(7)-Sn(4)-Sn(3) O(1)-Sn(4)-Sn(2) O(14)-Sn(4)-Sn(2) O(8)-Sn(4)-Sn(2) O(9)-Sn(4)-Sn(2) C(4)-Sn(4)-Sn(2) O(7)-Sn(4)-Sn(2)Sn(3)-Sn(4)-Sn(2) O(11)-Sn(5)-O(21) O(11)-Sn(5)-C(5) O(21)-Sn(5)-C(5) O(11)-Sn(5)-O(12) O(21)-Sn(5)-O(12) C(5)-Sn(5)-O(12) O(11)-Sn(5)-O(15) O(21)-Sn(5)-O(15) C(5)-Sn(5)-O(15) O(12)-Sn(5)-O(15) O(11)-Sn(5)-O(23) O(21)-Sn(5)-O(23) C(5)-Sn(5)-O(23) O(12)-Sn(5)-O(23) O(15)-Sn(5)-O(23) O(11)-Sn(5)-V(3) O(21)-Sn(5)-V(3) C(5)-Sn(5)-V(3) O(12)-Sn(5)-V(3) O(15)-Sn(5)-V(3) O(23)-Sn(5)-V(3) O(11)-Sn(5)-Sn(6) O(21)-Sn(5)-Sn(6) C(5)-Sn(5)-Sn(6) O(12)-Sn(5)-Sn(6) O(15)-Sn(5)-Sn(6) O(23)-Sn(5)-Sn(6) V(3)-Sn(5)-Sn(6) O(11)-Sn(5)-Sn(1) O(21)-Sn(5)-Sn(1) C(5)-Sn(5)-Sn(1) O(12)-Sn(5)-Sn(1) O(15)-Sn(5)-Sn(1) O(23)-Sn(5)-Sn(1)

V(3)-Sn(5)-Sn(1)

Table 3 continued

88.1(5) 100.99(9) 75.8(8) 77.7(8) 94.4(8) 88.9(7) 162.3(8) 90.8(8) 176.2(13) 100.5(13) 103.4(13) 94.8(12) 83.7(7) 95.6(8) 156.1(7) 73.7(7) 96.1(13) 38.1(5) 90.1(5) 40.6(5) 82.9(5) 143.6(12) 117.6(5) 84.2(7) 88.5(8) 73.2(7) 75.3(7) 97.9(7) 162.4(7) 169.4(13) 100.7(12) 101.8(12) 94.7(12) 76.4(7) 155.0(7) 90.7(8) 92.1(8) 101.2(12) 38.1(5) 118.0(5) 82.8(5) 88.4(5) 140.4(12) 39.2(5) 36.1(6) 87.2(4) 123.5(5) 39.5(5) 134.2(11) 86.2(5) 60.59(8) 83.9(7) 170(2) 106(2) 76.6(7) 98.4(8) 101.1(17) 77.5(7) 158.0(8) 93(2) 88.6(8) 85.4(7) 71.2(7) 98.1(17) 160.2(7) 95.5(7) 81.5(5) 35.5(5) 106.5(19) 131.0(6) 128.4(6) 35.8(5) 38.2(4) 119.3(5) 132.9(18) 86.2(Ô) 40.1(5) 84.6(5) 102.53(12) 37.1(5) 84.9(5) 141.5(16) 40.4(5) 87.3(5) 120.2(5) 103.09(12) Sn(6)-Sn(5)-Sn(1) O(13)-Sn(6)-O(11) O(13)-Sn(6)-O(22) O(11)-Sn(6)-O(22) O(13)-Sn(6)-O(10) O(13)-Sn(6)-O(10) O(11)-Sn(6)-O(10) O(22)-Sn(6)-O(10) O(13)-Sn(6)-O(15) O(11)-Sn(6)-O(15) O(22)-Sn(6)-O(15) O(10)-Sn(6)-O(15) O(13)-Sn(6)-C(6) O(11)-Sn(6)-C(6) O(22)-Sn(6)-C(6) O(12)-Sn(6)-C(6) O(15)-Sn(6)-C(6) O(13)-Sn(6)-Sn(5) O(11)-Sn(6)-Sn(5) O(22)-Sn(6)-Sn(5) O(10)-Sn(6)-Sn(5) O(15)-Sn(6)-Sn(5) C(6)-Sn(6)-Sn(5) C(6)-Sn(6)-Sn(5) O(13)-Sn(7)-O(3) O(13)-Sn(7)-O(2) O(3)-Sn(7)-O(2) O(13)-Sn(7)-O(4) O(3)-Sn(7)-O(4) O(2)-Sn(7)-O(4) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(2)-Sn(7)-C(7) O(2)-Sn(7)-C(7) O(4)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(3)-Sn(7)-Sn(9) O(2)-Sn(7)-Sn(9) O(4)-Sn(7)-Sn(9) C(7)-Sn(7)-Sn(9) O(1)-Sn(7)-Sn(8) O(3)-Sn(7)-Sn(8) O(2)-Sn(7)-Sn(8) O(4)-Sn(7)-Sn(8) C(7)-Sn(7)-Sn(8) C(7)-Sn(7)-Sn(8) Sn(9)-Sn(7)-Sn(8) O(13)-Sn(7)-Sn(2) O(13)-Sn(7)-Sn(2) O(2)-Sn(7)-Sn(2) O(2)-Sn(7)-Sn(2) O(4)-Sn(7)-Sn(2) C(7)-Sn(7)-Sn(2) Sn(9)-Sn(7)-Sn(2) Sn(8)-Sn(7)-Sn(2) Sn(8)-Sn(7)-Sn(2) O(20)-Sn(8)-O(2) O(20)-Sn(8)-O(13) O(2)-Sn(8)-O(13) O(20)-Sn(8)-C(8) O(2)-Sn(8)-C(8) O(13)-Sn(8)-C(8) O(20)-Sn(8)-Cl(2) O(2)-Sn(8)-Cl(2) O(13)-Sn(8)-Cl(2) C(8)-Sn(8)-Cl(2) O(20)-Sn(8)-Sn(7) O(2)-Sn(8)-Sn(7) O(13)-Sn(8)-Sn(7) C(8)-Sn(8)-Sn(7) Cl(2)-Sn(8)-Sn(7) O(3)-Sn(9)-O(14) O(3)-Sn(9)-O(4) O(14)-Sn(9)-O(4) O(3)-Sn(9)-C(9) O(14)-Sn(9)-C(9) O(4)-Sn(9)-C(9) O(3)-Sn(9)-O(90) O(3)-Sn(9)-O(90) O(14)-Sn(9)-O(90) O(14)-Sn(9)-O(90) O(4)-Sn(9)-O(90) C(9)-Sn(9)-O(90) O(3)-Sn(9)-Cl(1) O(14)-Sn(9)-Cl(1) O(14)-Sn(9)-Cl(1) O(4)-Sn(9)-Cl(1) C(9)-Sn(9)-Cl(1) O(90)-Sn(9)-Cl(1) O(3)-Sn(9)-Sn(7) O(14)-Sn(9)-Sn(7) O(4)-Sn(9)-Sn(7) C(9)-Sn(9)-Sn(7) O(90)-Sn(9)-Sn(7) Cl(1)-Sn(9)-Sn(7)

Table 3 continued

87 9(7)
83.0(7)
89.9(7)
92.1(8)
75.7(9) 165.0(0)
165.0(9)
76.9(7)
84.8(8)
95.8(8)
96.3(13)
166.5(13)
103.3(14)
91.3(15)
101.3(13)
37 4(5)
80.9(6)
89.9(7)
40.2(5)
141.4(12)
137.3(8)
76.1(8)
104 4(7)
76 8(7)
137.9(7)
109.8(13)
110.3(13)
111.9(11)
107.4(11)
133.1(5)
37.9(6)
110.4(5)
39.4(3) 109.9(11)
40 7(6)
106.1(6)
35.4(6)
130.5(5)
116.7(11)
130.09(10)
106.3(6)
37.6(5)
36.9(5)
121 7(10)
71.94(9)
69.24(8)
103.3(8)
104.5(7)
74.8(7)
74.8(7) 123.6(12)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 92.2(7)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12) 100.4(11)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12) 100.4(11) 81.2(8)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 105.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 94.4(2)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 105.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 94.0(2)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 159.7(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 159.7(5) 95.3(11)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 101.5(12) 101.5(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 159.7(5) 95.3(11) 87.5(6)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 105.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 95.3(11) 87.5(6) 37.8(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 105.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 159.7(5) 95.3(11) 87.5(6) 37.8(5) 100.8(5) 100.8(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(6) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 92.6(6) 159.7(5) 95.3(11) 87.5(6) 37.8(5) 100.8(5) 38.6(5) 38.6(5) 38.6(5) 38.6(5)
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 159.7(5) 95.3(11) 87.5(6) 37.8(5) 100.8(5) 38.6(5) 135.2(11))
74.8(7) 123.6(12) 133.1(12) 93.7(12) 91.1(6) 88.7(6) 159.3(6) 88.7(11) 107.8(5) 37.0(6) 37.0(6) 37.8(5) 118.1(11) 124.6(3) 93.3(7) 76.0(7) 96.9(7) 165.1(12) 100.4(11) 81.2(8) 174.5(7) 81.4(8) 84.0(12) 85.6(6) 159.7(5) 95.3(11) 87.5(6) 37.8(5) 100.8(5) 38.6(5) 135.2(11) 74.5(6) 121.9(2)

O(19)-V(1)-O(16)
O(19)-V(1)-O(14)
O(16)-V(1)-O(14)
O(16)-V(1)-O(21)
O(14)-V(1)-O(21)
O(19)-V(1)-O(8) O(16)-V(1)-O(8)
O(14)-V(1)-O(8)
O(21)-V(1)-O(8)
O(19)-V(1)-V(3) O(16)-V(1)-V(3)
O(14)-V(1)-V(3)
O(21)-V(1)-V(3)
O(0)-V(1)-V(3) O(17)-V(2)-O(22)
O(17)-V(2)-O(23)
O(22)-V(2)-O(23) O(17)-V(2)-O(20)
O(22)-V(2)-O(20)
O(23)-V(2)-O(20)
O(17)-V(2)-O(3) O(22)-V(2)-O(5)
O(23)-V(2)-O(5)
O(20)-V(2)-O(5) O(17)-V(2)-V(3)
O(22)-V(2)-V(3)
O(23)-V(2)-V(3)
O(20)-V(2)-V(3) O(5)-V(2)-V(3)
O(18)-V(3)-O(5)
O(18)-V(3)-O(8)
O(18)-V(3)-O(23)
O(5)-V(3)-O(23)
O(8)-V(3)-O(23) O(18)-V(3)-O(21)
O(5)-V(3)-O(21)
O(8)-V(3)-O(21)
O(23)-V(3)-O(21) O(18)-V(3)-V(2)
O(5)-V(3)-V(2)
O(8)-V(3)-V(2) O(23)-V(3)-V(2)
O(21)-V(3)-V(2)
O(18)-V(3)-V(1)
O(8)-V(3)-V(1)
O(23)-V(3)-V(1)
O(21)-V(3)-V(1)
O(18)-V(3)-Sn(5)
O(5)-V(3)-Sn(5)
O(8)-V(3)-Sn(5) O(23)-V(3)-Sn(5)
O(21)-V(3)-Sn(5)
V(2)-V(3)-Sn(5)
Sn(2)-O(1)-Sn(4)
Sn(2)-O(1)-Sn(3)
Sn(4)-O(1)-Sn(3) Sn(8)-O(2)-Sn(7)
Sn(8)-O(2)-Sn(2)
Sn(7)-O(2)-Sn(2) Sn(7)-O(3)-Sn(9)
Sn(7)-O(3)-Sn(2)
Sn(9)-O(3)-Sn(2)
Sn(7)-O(4)-Sn(1) Sn(7)-O(4)-Sn(9)
Sn(1)-O(4)-Sn(9)
V(3)-O(5)-V(2) V(3)-O(5)-Sn(3)
V(2)-O(5)-Sn(3)
Sn(3)-O(6)-Sn(2)
Sn(3)-O(7)-Sn(4) V(3)-O(8)-V(1)
V(3)-O(8)-Sn(4)
V(1)-O(8)-Sn(4)
Sn(4)-O(9)-Sn(2) Sn(6)-O(10)-Sn(1)
Sn(5)-O(11)-Sn(1)
Sn(5)-O(11)-Sn(6) Sn(1)-O(11)-Sn(6)
Sn(5)-O(12)-Sn(1)
Sn(7)-O(13)-Sn(6)
Sn(7)-O(13)-Sn(8)

Table 3 continued

	1	0	4.	5	(1	1)
	1	0	8. ว	8	(1	0)
	9 1	4 0	.∠ 8.	2) () 1	0)
1	9	5	.5	(9)		'
	1	3	7.	9	(8 1)	`
	1 1	0 5	2. 3.	4	((!	י 9))
	7	7	.5	(8	ŝ)	<i>'</i>	
	7	5	.7	(8	3)	,	
	1 1	1 2	5. 6	3	(9 7)	
	1	20	5.	20	(, 6)	
	3	9	.4	(6	6)	<i>'</i>	
	3	7	.1	(6	3)	~	`
	1 1	0 0	5. 7	92	(1	0 0)
1	9	8	.5	2	9)	0	'
	1	0	9.	Ò	(1	0)
	8	7	.6	(9)	、	
	1 1	4 0	0. 3	1	()	g)	
	1	5	0.	2	(8)	
	7	6	.1	(8	S)	ĺ	
	7	9 1	.4	.(8	3)	、	
	י 1	י 2	о. 6.	3	(9 7)	
	3	9	.8	(6	5)	'	
	1	0	6.	7	(6)	
	3 1	7 ∩	.3 7	(! 5	5	1	^	•
	י 1	0	7. 9.	5	(י 1	1)
1	9	7	.6	(È)	Ì	'
	1	0	4.	7	(1	1)
	8 1	1 1	.5 ⊿	(8	3) n	١	
	1	0	- . 5.	7	(1	1)
	1	4	5.	1	(9)	<i>'</i>
	8	1	.1	(9	9)		
	0 1	0 1	י. ק	0	5 ()) R	١	
	4	3	.2	(6	3)	'	
				•				
	1	2	3.	8	(6)	
	1 3	29	3. .4	8	(, 6))	
;	1 3 1 1	2 9 0 2	3. .4 9. 0.	8 (! 5 2	()	, 6) 7 8)	
:	1 3 1 1	2 9 0 2 2	3. .4 9. 0. 4.	8 (! 5 2 2	(15)	, 6) 78 6))))	
	1 3 1 1 4	2 9 0 2 1	3. 9. 9. 4.	8(522)		, 6) 786)))))	
	1 3 1 1 4 1 4	2 9 0 2 1 1 0	3. 9. 0. 4. 0. 2	8(522)		, 6) 786) 6)		
	1 3 1 1 4 1 4	290221101	3. 9. 0. 4. 0. 2. 9.	8(522(3)		,6)786)6)2		
	1 3 1 1 4 1 1 1	290221101	3. 9. 0. 4. 0. 2. 9.	8(522(3(02		,6)786)6)21)))))))
	13111414111	29022110111	3. 9. 0. 4. 9. 2. 5. 2.	8(522(3)0282		,6)786)6)2167)
	13111414111	290221101111	3.49.04.80.29.25.32	8(522)3(0282)		,6)786)6)2167)))
	13111414111143	2902211011119	3.4 9.04.8 0.2 9.25.3.2 .0	8(522(3)0282(0)		,6)786)6)2167))))
	1 3 1 1 1 4 1 1 1 1 1 4 3 7	29022110111193	3.4 9.0 4.8 0.2 9.2 5.3 .2 .0 3.2 .0 .3	8(522(3(0282(((6		,6)786)6)2167))1)))))) 7))
	1311141411143771	29022110111119320	3.49.04.80.29.25.3.20.32	8(522(3)0282)0(697		,6)786)6)2167))11)))))) 78)))
	1 3 1 1 4 1 1 1 1 3 7 7 1 1	290221101111193200	3.49.04.80.292.53.20.3.26.7.	8(522(3)0282)06976		,6)786)6)2167))1198))))) 78))))))))
:	13114141114377111	29022110111 10132000	3.49.04.80.29.25.3.20.3.26.7.3	8(522(3(0282((69768		,6)786)6)2167))11989)))))) (78)))	
	13111414111437711111	2902211011119320000	3.490.480.29253203267370			,6)786)6)2167))119891)))))) ()) ()) ()) ()) ()))))))))
	131114141111437711111111111111111111111	290221101111932000030	3.4904.80292532032673703	8(522)(3(0282)(069768625		,6)786)6)2167))11989198))))))78)))))))))))))
	131114141114377111111111111111111111111	2902211011119320000300	3.490.480.29253.20326737034	8(5222)3(0282)(0(697686253		,6)786)6)2167))119891989))))))78))))))	
	131141411114377111111111111111111111111	290221101111193200003000	3.49. 9.0.4.80.29. 5.3.20.326. 7.3.7.00.3.4.5.	8((522)(3)(0282)(((6976862534		,6)786)6)2167))1198919898)))))) 78)))))))))	
	1311141411143771111111111	290221101111932000030003	3.49.00.4.80.29.25.3.20.326.7.3.7.00.3.4.5.6.7	8((5222))3((0282)(()(69768625341		,6)786)6)2167))11989198981)))))) 78)))))))))))))
	1311141411143771111111111111	29022110111193200003000320	3.49.0.4.80.29.2.53.20.326.7.3.7.0.3.4.5.6.7.2	8((522)(3)(0282)(0)(6976862534111)		,6)786)6)2167))1198919898187)))))))))))))))))))))))))))))))))))))))	
	131114141114377111111111111111111111111	2902211011111932000030003202	3.49. 0.4.80.29.25.3.20.326.7.3.7.0.3.4.5.6.7.2.6.	8((5222))3((0282)((069768625341111)		,6)786)6)2167))11989198981879)))))))0))) 78))))))))))))))	
	131114141114377111111111111	2902211011119320000300032029	3.49. 9.04.80.29. 9.25.3.20.326.7. 3.4.5.6.7. 2.6.4. 4.80.29. 3.20.326.7. 3.4.5.6.7. 2.6.4. 4.80.29. 3.20.326.7. 3.4.5.6.7. 4.80.29.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.326.7. 3.40.20.20.326.7. 3.40.20.20.326.7. 3.40.20.20.20.20.20.20.20.20.20.20.20.20.20	8(5222)3(0282)(0(69768625341111))		,6)786)6)2167))11989198981879))))))0)) 78))))))))	
	1311141411143771111111111111	2902211011111932000030003202930	3.49.0.4.80.29.25.3.20.326.7.3.7.0.34.5.6.7.2.6.47.2	8(5222)3(0282)0008200000000000000000000000000000		,6)786)6)2167))11989198981879)98)))))))))))))))))))))))))))))))))))))))	
	1311141411143771111111111119111	29022110111119320000300032029300	3.49.0.4.80.29.2.5.3.20.326.7.3.70.34.5.6.7.2.1	8(5222)3(0282)(0(69768625341111))(564		,6)786)6)2167))11989198981879)988))))) 0)) 78)) 0))) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)) 0)	
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	13111414111437711111111111191111	290221101111193200003000320293000	3.49.0.4.80.29.2.5.3.20.326.7.3.7.0.3.4.5.6.7.2.6.47.2.1.0.	8(5222)3(0282)(0(69768625341111))5642		,6)786)6)2167))11989198981879)9888))))))0)) 78)))0)))))))))))))))))))))	
	1311141411114377111111111111911111	29022110111119320000300032029300000	3.49.04.80.29.25.3.20.326.7.3.7.0.34.5.6.7.2.6.47.2.1.0.1.2	8((522()3)(0282)()((69768625341111))(56421)		,6)786)6)2167))11989198981879)98881,) $)))) 0)) 78))0))))0)))0)))0))0))0))0))0))0))0)0))0)0$	
	131114141114377111111111111111111111111	290221101111193200003000320293000030	3.49.04.80.29.25.3.20.326.7.37.0.34.56.7.26.47.21.0.1.8.2	8((522)((3)(0282)((((69768625341111((5642124		,6)786)6)2167))11989198981879)9888118) $)))$ $)$ $)0))$ $78)))0)))))))))))))))))))))))))))))))))$)))))
	1311141411114377111111111111911111111111	2902211011111932000030003202930000300	3.49.04.80.29.2.53.20.3267.370.345.67.2.6.47.2.1.01.8.2.1.	8((5222))3((0282)(()(69768625341111))(56421244		,6)786)6)2167))11989198981879)98881188) $)))$ $)$ $)0))$ $78)))0)))))))))))))))))))))))))))))))))$	
	13111414111437711111111111911111111	29022110111119320000300032029300003000	3.4904.80.29253.20326737034.56726.47.2101.821.2	8((5222)(3)(0282)(0)(69768625341111)(564212443		,6)786)6)2167))11989198981879)988811881		
	13111414111437711111111111911111111	2902211011111932000030003202930000300000	3.4 9.0 4.8 0.2 9.2 5.3 .2 0.3 .2 6 7.3 7.0 3.4 5.6 7.2 6.4 7.2 1.0 1.2 6.4 7.2 1.0 0.3 2.1 0.3 2.6 7.3 7.0 3.4 5.6 7.2 6.4 7.2 1.0 0.3 2.6 7.3 7.0 3.4 7.2 1.0 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2 1.2	8((5222)(3)(0282)(()(69768625341111)()56421244324		6)786)6)2167))11989198981879)98881188187		
	1311141411143771111111111111911111111111	29022110111119320000300032029300003000000	3.49.04.80.29.25.3.20.326.7.3.7.0.3.4.5.6.7.2.6.47.2.1.0.1.8.2.1.2.6.4.6	8((5222)(3)(0282)(()(69768625341111)(564212443240		,6)786)6)2167))11989198981879)988811881878) $))))) 0)) 78)))0)))))))))))))))))))))))$	
	131114141111437711111111111111111111111	2902211011111932000030003202930000300000000	3.49.04.80.29.25.3.20.3267.37.0.34.5667.26.47.21.00.1.82.1.264.60.	8((5222))3((0282)(((69768625341111)))5642124432400		,6)786)6)2167))11989198981879)9888118818788) $))))$ $)$ $(0))$ (0)	
	131114141111437711111111111111111111111	2902211011111932000030003202930000300000002	3.49.0.4.80.29.25.3.20.3267.370.34567.26.47.21.0.1.8221.264.60.9	8(5222(3)(0282()(069768625341111)(56421244324003		,6)786)6)2167))11989198981879)98881188187889		

Table 3 continued	
Sn(6)-O(13)-Sn(8)	
V(1)-O(14)-Sn(9)	
V(1)-O(14)-Sn(4) Sn(9)-O(14)-Sn(4)	
Sn(6)-O(15)-Sn(5)	
V(1)-O(16)-Sn(1)	
Sn(8)-O(20)-V(2)	
V(2)-O(20)-Sn(3)	
V(3)-O(21)-V(1)	
V(3)-O(21)-Sn(5)	
V(1)-O(21)-Sn(5) V(2)-O(22)-Sn(6)	
V(2)-O(23)-V(3)	
V(2)-O(23)-Sn(5)	
V(3)-O(23)-Sn(5)	
C(15)-O(90)-Sn(9) C(11)-C(1)-Sn(1)	
C(13)-C(11)-C(1)	
C(13)-C(11)-C(12)	
C(1)-C(11)-C(12) C(20)-C(2)-Sp(2)	
C(2)-C(20)-C(21)	
C(2)-C(20)-C(22)	
C(21)-C(20)-C(22) C(20)-C(2)-Sp(2)	
C(32)-C(3)-C(3)	
C(32)-C(30)-C(31)	
C(3)-C(30)-C(31)	
C(40)-C(4)-Sn(4) C(41)-C(40)-C(4)	
C(41)-C(40)-C(42)	
C(4)-C(40)-C(42)	
C(50)-C(5)-SN(5) C(5)-C(50)-C(51)	
C(5)-C(50)-C(52)	
C(51)-C(50)-C(52)	
C(60)-C(6)-Sn(6) C(6)-C(60)-C(61)	
C(6)-C(60)-C(62)	
C(61)-C(60)-C(62)	
C(70)-C(7)-Sn(7)	
C(72)-C(70)-C(7) C(72)-C(70)-C(71)	
C(7)-C(70)-C(71)	
C(80)-C(8)-Sn(8)	
C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-C(8)	
C(82)-C(80)-C(8)	
C(90)-C(9)-Sn(9)	
C(91)-C(90)-C(9) C(91)-C(90)-C(92)	
C(9)-C(90)-C(92)	
C(15)-N(1)-C(16)	
C(15)-N(1)-C(17) C(16) N(1) C(17)	
O(90)-C(15)-N(1)	
C(25)-N(2)-C(27)	
C(25)-N(2)-C(26)	
O(27)-N(2)-O(26) O(250)-O(25)-N(2)	
C(37)-N(3)-C(35)	
C(37)-N(3)-C(36)	
U(35)-IN(3)-U(36) O(350)-C(35)-N(3)	
C(46)-N(4)-C(47)	
C(46)-N(4)-C(45)	
C(47)-N(4)-C(45) O(450)-C(45)-N(4)	
C(56)-N(5)-C(55)	
C(56)-N(5)-C(57)	
C(55)-N(5)-C(57)	
0(000)-0(00)-0(0)	

121.1(8)
122.2(11)
105.9(9)
129.7(8)
99.7(8)
133.8(11)
124.0(11)
127.1(9)
103.6(8)
100.4(9)
128 8(11)
133 7(11)
100.8(9)
129 3(10)
103.0(8)
119(3)
120(3)
120(5)
103(6)
116(5)
121(3)
108(4)
111(4)
103(4)
119(4)
125(9)
106(8)
101(6)
120(4)
104(6)
98(7)
102(9)
127(9)
136(10)
100(10)
109(9)
109(9) 87(7)
109(9) 87(7) 119(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 111(9) 111(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 126(10) 126(10) 126(10) 126(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 1126(10) 1126(10) 1126(10) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 109(3) 107(5) 109(3) 107(5) 102(7) 102(7) 102(7) 107(5) 102(7) 102(7) 107(5) 102(7) 102(7) 102(7) 102(7) 102(7) 102(7) 107(5) 102(7) 102
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 124(3) 122(4) 112(8) 122(4) 112(8)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 126(10) 111(9) 126(10) 111(9) 126(10) 111(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(8) 124(7) 115(8)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 107(5) 109(7) 86(5) 121(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 124(7) 115(8)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 122(4) 115(3) 122(7) 115(3) 122(7) 122(7) 122(7) 122(7) 122(7) 122(7) 122(7) 122(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 123(7) 122
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 114(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 126(8) 127(6) 128(6) 127(6) 128(6)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 124(3) 112(3) 122(4) 114(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(6) 128(6) 128(6) 106(4) 112(4)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 126(10) 111(9) 126(10) 111(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(6) 128(6) 106(4) 112(6) 112(6) 112(6) 112(7) 1
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(6) 128(6) 106(4) 112(4) 112(4) 110(7) 123(7)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 124(3) 124(3) 115(3) 124(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(6) 126(6) 126(6) 106(4) 112(4) 110(7) 133(7) 116(6)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 126(8) 127(6) 128(7) 128
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 124(3) 124(3) 124(3) 124(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 112(6) 128(6) 106(4) 112(4) 112(4) 116(6) 107(8) 116(6) 107(8) 116(6)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 126(10) 111(9) 126(10) 111(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 116(6) 106(4) 112(4) 116(6) 107(8) 116(9) 116(9) 116(9) 116(9)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 109(3) 101(7) 121(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 124(8) 124(6) 106(4) 112(4) 112(6) 107(8) 116(6) 107(8) 116(9) 112(9)
109(9) 87(7) 119(5) 90(8) 92(7) 106(10) 118(5) 123(10) 126(10) 111(9) 112(3) 105(5) 111(5) 107(5) 107(5) 107(5) 107(5) 109(3) 101(7) 109(7) 86(5) 121(3) 124(3) 115(3) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(4) 115(8) 122(6) 128(6) 106(4) 112(4) 112(4) 112(4) 112(6) 107(8) 116(9) 116(9) 114(9) 125(9) 124(9)

Sn(1)
Sn(2)
Sn(3)
Sn(4)
Sn(5)
Sn(6)
Sn(7)
Sn(8)
Sn(9)
V(1)
V(2)
V(3)
O(1)
O(2)
O(3)
O(4)
O(5)
O(6)
O(7)
O(8)
O(9)
O(10)
O(11)
O(12)
O(13)
O(14)
O(15)
O(16)
O(17)
O(18)
O(19)
O(20)
U(21)
U(22)
O(23)
CI(2)

Table 4.Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for 2. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12$].

	×			
	X	У	Z	U(eq)
H(17D)	4477	8910	3746	133
H(18A)	2967	5295	2020	155
H(19A)	6000	4780	751	148
$H(1\Delta)$	8963	7649	954	114
	8615	2/045	914	114
	0015	0765	1419	114
	9879	9755	1410	205
H(12A)	11242	9709	950	424
H(12B)	10277	9377	529	424
H(12C)	10668	8535	631	424
H(13A)	10235	8998	1996	334
H(13B)	11175	9611	1749	334
H(13C)	10710	8398	1527	334
H(2A)	8040	5390	4278	112
H(2B)	8523	5038	3742	112
H(20A)	9764	6814	4013	166
H(20,1)	8840	7/9/	4706	222
	0000	7404	4700	322
	9900	7624	4980	322
H(21C)	8933	6722	5035	322
H(22A)	10273	5443	4179	301
H(22B)	9744	5502	4726	301
H(22C)	10713	6424	4701	301
H(3A)	4154	6843	4291	150
H(3B)	3363	5911	3844	150
H(30A)	4330	5881	4811	298
H(31A)	2506	5089	4915	476
H(31B)	2000	5250	1212	476
	2241	5200	4040	710
	2190	0212	4000	4/0
H(32A)	3808	4316	4017	253
H(32B)	3653	4333	4656	253
H(4A)	5796	2927	1767	148
H(4B)	4975	2616	2157	148
H(40)	4276	3214	1283	488
H(41A)	4471	1247	1139	910
H(41B)	5331	2093	962	910
H(41C)	4236	1662	653	910
1(400)	4250	1602	1000	860
П(42A)	2905	1546	1320	800
H(42B)	3221	2381	1915	860
H(42C)	3698	1522	1793	860
H(5A)	4676	9271	1357	218
H(50)	3668	7463	1228	345
H(51A)	2573	8204	1049	446
H(51B)	2701	7445	498	446
H(51C)	3240	8644	617	446
H(52A)	4919	7544	397	764
H(52B)	4193	7955	135	764
H(52D)	3780	6933	100	764
1(020)	9970	11500	199	171
	0010	11560	3353	171
H(60A)	6911	11709	3682	430
H(61A)	8562	12579	4341	591
H(61B)	8536	13498	4125	591
H(61C)	9171	12835	3849	591
H(62A)	7107	12048	2686	937
H(62B)	8281	12530	2825	937
H(62C)	7625	13179	3084	937
H(7A)	10683	8470	3233	126
H(70)	11273	9941	3754	385
$H(71\Delta)$	10972	10472	4517	379
L(71R)	10121	0365	4330	370
H(710)	10131	10240	4330	270
1(710)	9000	10340	4339	579
H(72A)	10885	10439	3079	437
H(72B)	11095	11274	3687	437
H(8A)	8311	10384	4777	144
H(8B)	7775	10661	4323	144
H(80)	6618	9780	5105	167
H(81A)	6212	11245	4806	403
	5485	10118	4764	403
H(81C)	6148	10322	4283	403
	7910	11707	5214	220
	7810	11/9/	5214	330
H(82B)	7754	11177	5649	338
H(82C)	6873	11549	5544	338
H(9A)	8036	5362	942	138
H(9B)	9076	6286	1134	138
H(90)	9375	4522	1401	256
H(91A)	8243	4219	466	366
H(91B)	8950	3556	477	366
H(92A)	10131	5855	578	466
H(92B)	10888	5501	018	466
	10000	5031	310	-00
	10442	0420	1219	400
H(15)	10029	5875	2755	126
H(16A)	12309	7177	2187	177
H(16B)	12683	7972	2784	177
H(16C)	11751	7941	2429	177
H(17A)	11499	6148	3367	186
1 1(1 1 1 1 1 1)				
H(17B)	12512	7037	3362	186

Table 5.	Hydrogen coordinates	(x 10 ⁴)	and isotropic displacement	parameters	$(A^2 \times 10^3)$	for 2.
----------	----------------------	-----------------------	----------------------------	------------	---------------------	--------

H(17C)	12217	5948	2917	186
H(25)	2617	4323	2356	221
H(26A)	1093	3697	1575	312
H(26B)	878	4387	2125	312
H(26C)	115	3257	1846	312
H(27A)	222	2891	2729	733
H(27B)	1153	2650	2906	733
H(27C)	431	1928	2360	733
H(35A)	3470	3489	-436	145
H(35B)	4247	3681	70	145
H(36A)	3019	5102	49	284
H(36B)	4072	5199	305	284
H(36C)	3270	5393	699	284
H(37A)	2156	2725	536	329
H(37B)	1988	3800	806	329
H(350)	2634	2119	-185	240
H(45)	4185	-145	2824	291
H(46A)	4316	2707	3741	574
H(46B)	4882	2672	3207	574
H(46C)	5449	2815	3783	574
H(47A)	4688	923	4074	437
H(47B)	3574	488	3791	437
H(47C)	4051	1640	4169	437
H(55)	7503	952	1717	270
H(56A)	8228	1042	335	441
H(56B)	8043	11	490	441
H(56C)	8955	1017	803	441
H(57A)	6320	958	1035	641
H(57B)	6391	65	533	641
H(57C)	6735	1201	491	641

8.3 [(nBuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmso)₂] · 3 DMSO (3)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 3.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Monoclinic, Unit cell dimensions	C ₄₆ H ₁₁₇ Cl ₂ O ₂₈ S ₅ Sn ₉ V ₃ 2570.63 293(2) K 0.71073 A P2(1)/n $a = 17.961(5) \text{ Å } \alpha = 90 \text{ °}$ $b = 19.222(4) \text{ Å } \beta = 106.775(19) \text{ °}$ c = 26.748(6) Å y = 90 °
Volume	8842(4) A ³
Z, Calculated density	4, 1.931 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.036 mm ⁻¹
F(000)	5000
Crystal size	0.4 mm x 0.3 mm x 0.5 mm
Theta range for data collection	1.91 to 22.00 deg.
Limiting indices	-18≤h≤1, -1≤k≤20, -27≤l≤28
Reflections collected / unique	12847 / 10733 [R(int) = 0.0365]
Completeness to theta	= 22.00 99.0 %
Absorption correction	Empirical
Max. And min. Transmission	0.9928 and 0.4906
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	10733 / 99 / 585
Goodness-of-fit on F^2	1.027
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0622, wR2 = 0.1632
R indices (all data)	R1 = 0.0734, wR2 = 0.1712
Extinction coefficient	0.00003(3)
Largest diff. Peak and hole	1.209 and -1.452 e.A ⁻³

	Х	У	Z	U(eq)
V(1) Sp(2)	3551(1)	1998(1) 693(1)	313(1) 808(1)	60(1) 58(1)
V(3)	4924(1)	1301(1)	1048(1)	60(1)
Sn(4)	4147(1)	592(1)	1986(1)	51(1)
V(5)	2295(1)	2514(1)	741(1)	56(1)
Sn(6) Sn(7)	2431(1) 4177(1)	1388(1) 2341(1)	1791(1) 2583(1)	52(1) 52(1)
Sn(8)	4820(1)	3681(1)	2089(1)	66(1)
Sn(9)	2690(1)	3288(1)	1980(1)	56(1)
Sn(10)	3577(1)	3723(1)	905(1)	63(1)
Sn(12)	5269(1)	2945(1)	1099(1)	70(1)
O(1)	4566(5)	2186(4)	603(3)	63(2)
O(2)	3894(5)	1096(4)	607(3)	63(2)
O(3)	3529(5)	-63(4) 2832(4)	1337(3)	61(2) 61(2)
O(5)	2603(5)	1687(4)	456(3)	62(2)
O(6)	2025(5)	638(4)	1173(4)	66(2)
O(7)	4899(5)	710(4)	1519(3)	59(2)
O(8) O(9)	1929(4) 3361(4)	2092(4) 1244(4)	1181(3) 1496(3)	55(2) 49(2)
O(10)	3204(5)	703(4)	2323(3)	59(2)
O(11)	3029(4)	2243(4)	2167(3)	52(2)
O(12)	3864(5)	3355(4)	2327(3)	61(2) 76(2)
O(13) O(14)	4665(4)	1479(4)	2365(3)	55(2)
O(15)	5200(5)	2737(4)	2476(3)	64(2)
O(16)	5741(6)	3663(5)	1721(4)	86(3)
O(17) O(18)	2750(5)	3264(4) 2011(4)	1222(3)	58(2) 60(2)
O(18) O(19)	3407(7)	1934(5)	-303(4)	86(3)
O(20)	4581(6)	3739(5)	628(4)	77(3)
O(21)	4375(5)	3103(4)	1415(3)	55(2)
0(22)	5521(6) 1551(5)	997(6) 2811(5)	773(4) 316(4)	81(3) 75(3)
Cl(1)	6941(2)	2645(3)	2408(2)	121(2)
CI(2)	2723(3)	4632(2)	2024(2)	84(1)
C(20)	2398(11)	33(9)	148(6)	102(5)
C(21)	2550(20)	-280(15)	-330(8) -732(10)	239(6)
C(23)	2740(30)	60(20)	-1219(12)	384(11)
C(40)	4704(9)	-221(7)	2495(6)	77(4)
C(41) C(42)	5084(15) 5500(20)	-766(11) -1314(14)	2225(9) 2626(11)	161(3) 239(6)
C(43)	5790(30)	-1906(17)	2353(16)	384(11)
C(60)	1529(9)	1319(8)	2165(5)	79(4)
C(61)	1810(13)	1527(15)	2731(8)	161(3)
C(62) C(63)	1480(20)	1730(30)	2993(9) 3565(11)	239(6) 384(11)
C(70)	4259(9)	2226(7)	3391(5)	75(4)
C(71)	4359(16)	1484(11)	3568(9)	161(3)
C(72) C(73)	4442(18)	1404(17) 1240(30)	4148(9) 4253(15)	239(6) 384(11)
C(80)	5384(11)	4351(8)	2713(7)	103(5)
C(81)	5329(15)	5107(10)	2640(9)	161(3)
C(82)	5730(20)	5512(12)	3145(10)	239(6)
C(83) C(90)	5820(30) 1449(8)	3287(8)	3022(16) 1834(5)	364(11) 75(4)
C(91)	1041(12)	3636(14)	1333(9)	161(3)
C(92)	186(12)	3560(20)	1159(11)	239(6)
C(93) C(100)	-159(19) 2902(11)	3900(30)	611(13) 442(7)	384(11)
C(101)	2476(15)	4387(12)	-105(8)	161(3)
C(102)	2040(20)	5042(14)	-379(10)	239(6)
C(103)	1530(20)	4840(20)	-924(12)	384(11)
C(110) C(111)	5400(10) 7249(12)	910(9) 859(12)	2440(7) 2629(11)	99(5) 161(3)
C(112)	7563(16)	117(15)	2704(13)	239(6)
C(113)	7170(30)	-341(16)	2247(17)	384(11)
C(120) C(121)	6218(11) 6870(14)	3002(11) 2508(13)	///(8) 979(10)	122(7) 161(3)
C(122)	7580(12)	2699(19)	786(13)	239(6)
C(123)	7370(30)	2620(30)	199(13)	384(11)
O(200)	510(8)	449(6) 065(4)	603(5) 245(2)	129(5)
S(200) C(201)	-09(0) 310(16)	900(4) 1286(12)	∠4⊃(<i>3)</i> -276(7)	100(2) 204(13)
C(202)	-85(17)	1788(8)	578(9)	207(14)
O(300)	5868(11)	1177(11)	8952(8)	88(4)
S(300)	5176(7) 4710(20)	1385(6) 730(15)	9119(5) 0388(16)	122(3)
C(302)	5370(20)	2024(15)	9638(12)	140(12)
O(305)	6128(11)	1188(11)	9156(8)	88(4)

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

Table 2 continued					
S(305)	5667(7)	1290(6)	9536(5)	122(3)	
C(306)	4988(19)	621(14)	9560(18)	148(12)	
C(307)	4990(18)	2027(13)	9367(15)	115(9)	
O(400)	2628(11)	3244(9)	2809(7)	61(3)	
S(400)	2598(4)	3875(4)	3166(3)	66(1)	
C(401)	2494(19)	3559(16)	3793(7)	109(8)	
C(402)	3591(13)	4233(17)	3437(11)	110(8)	
O(405)	2818(11)	3366(9)	2875(7)	61(3)	
S(405)	2889(4)	4040(4)	3216(3)	66(1)	
C(406)	3915(12)	4327(17)	3416(11)	109(8)	
C(407)	2869(19)	3777(16)	3880(7)	110(8)	
O(600)	6074(10)	1851(12)	3276(7)	78(4)	
S(600)	6809(6)	2164(6)	3641(4)	106(2)	
C(601)	7707(11)	1880(30)	3558(16)	201(13)	
C(602)	6970(20)	1940(30)	4317(6)	201(13)	
O(605)	6208(12)	1954(11)	3194(8)	78(4)	
S(605)	6678(6)	2544(6)	3517(4)	106(2)	
C(606)	6570(30)	2650(30)	4152(10)	201(13)	
C(607)	7709(9)	2450(30)	3678(18)	201(13)	
O(500)	4260(20)	3646(16)	9547(14)	165(9)	
S(500)	4716(11)	4157(11)	9306(8)	195(5)	
C(501)	4280(30)	5014(14)	9200(20)	210(20)	
C(502)	4670(50)	3950(30)	8639(15)	360(40)	
O(505)	4680(20)	3792(18)	9695(10)	165(9)	
S(505)	4167(11)	4018(11)	9165(8)	195(5)	
C(506)	4490(30)	4770(20)	8889(17)	210(20)	
C(507)	4100(50)	3400(20)	8646(14)	360(40)	

V(1)-O(19)	1 598(10)
V(1) O(1)	1 800(0)
V(1) = O(1)	1.000(3)
V(1)-O(4)	1.013(9)
V(1)-O(2)	1.930(9)
V(1)-O(5)	1.943(9)
V(1)-V(5)	2.978(3)
V(1) - V(3)	2 990(3)
V(1) V(3)	2 102(2)
V(1)-SII(2)	3.193(2)
Sn(2)-O(9)	2.074(7)
Sn(2)-O(3)	2.102(8)
Sn(2)-O(6)	2.110(9)
Sn(2) - O(2)	2 120(8)
Sn(2) O(5)	2 1 2 3 (0)
SI(2)-O(3)	2.155(9)
Sn(2)-C(20)	2.156(17)
Sn(2)-Sn(6)	3.2874(13)
Sn(2)-Sn(4)	3.2887(15)
V(3)-O(22)	1.577(9)
$\sqrt{(3)} - 0(7)$	1 708(9)
V(2) O(1)	1.025(0)
V(3)-O(2)	1.925(9)
V(3)-O(18)	1.931(9)
V(3)-O(1)	2.069(9)
Sn(4)-O(9)	2.052(7)
Sn(4)-Q(14)	2 064(8)
Sn(4) - O(7)	2 098(8)
Sin(4) = O(1)	2.090(0)
Sn(4)-C(40)	2.124(14)
Sn(4)-O(10)	2.146(8)
Sn(4)-O(3)	2.170(8)
V(5)-O(23)	1.590(9)
V(5)-O(8)	1 710(8)
V(5) = O(5)	1.710(0)
V(5)-O(5)	1.912(9)
V(5)-O(17)	1.948(8)
V(5)-O(4)	2.048(9)
Sn(6)-O(11)	2.059(8)
Sn(6)-O(9)	2 061(7)
$S_{n}(6) O(8)$	2.001(7)
SI(0)-O(0)	2.112(0)
Sn(6)-O(10)	2.132(8)
Sn(6)-C(60)	2.140(14)
Sn(6)-O(6)	2.156(9)
Sn(7)-Q(14)	2 037(8)
Sn(7) = O(11)	2 051(7)
$S_{n}(7) = O(17)$	2.031(7)
SI(7)-O(15)	2.063(6)
Sn(7)-O(12)	2.089(8)
Sn(7)-C(70)	2.134(14)
Sn(7)-Sn(11)	3.2497(14)
Sn(7)-Sn(9)	3 2498(14)
Sn(7) $Sn(8)$	3 2561(13)
SII(7) - SII(6)	3.2301(13)
Sn(8)-O(21)	2.070(8)
Sn(8)-O(12)	2.093(8)
Sn(8)-O(15)	2.102(9)
Sn(8)-C(80)	2.121(17)
Sn(8) - O(13)	2 149(10)
Sn(0) O(16)	2.154(10)
S(0) = O(10)	2.154(10)
Sn(8)-Sn(12)	3.2999(15)
Sn(9)-O(12)	2.047(9)
Sn(9)-O(17)	2.061(8)
Sn(9)-O(11)	2.115(7)
$S_{n}(0) = C(00)$	2150(14)
$S_{n}(0) O(400)$	2.100(17)
Sil(9)-O(400)	2.233(17)
Sn(9)-O(405)	2.341(17)
Sn(9)-Cl(2)	2.587(4)
Sn(10)-O(21)	2.051(8)
Sn(10)-O(4)	2.105(8)
Sn(10)-Q(17)	2.106(8)
Sn(10)-C(100)	2 119(17)
$S_{n}(10) O(100)$	2.130(10)
SI(10)-O(20)	2.139(10)
Sn(10)-O(13)	2.171(9)
Sn(10)-Sn(12)	3.2906(16)
Sn(11)-O(15)	2.035(9)
Sn(11)-O(18)	2.062(8)
Sn(11)-C(110)	2 158(16)
$S_{P}(11) O(14)$	2.150(10)
	2.102(0)
Sn(11)-O(605)	2.216(19)
Sn(11)-O(600)	2.43(2)
Sn(11)-Cl(1)	2.517(4)
Sn(12)-Q(21)	2.042(8)
Sn(12) - O(18)	2 111(8)
$C_{n}(12) = C(10)$	2.1.1(0)
SII(12)-G(120)	2.123(19)
Sn(12)-O(1)	2.125(9)
Sn(12)-O(20)	2.133(10)
Sn(12)-O(16)	2.140(10)
C(20) - C(21)	1 487(18)
C(21)- $C(22)$	1 49(2)
$O(21)^{-}O(22)$	1.73(2)
O(22) - O(23)	1.50(2)
C(40)-C(41)	1.540(18)
C(41)-C(42)	1.54(2)

Table 3.	Bond lengths [Å] and angles [deg] for 3.

Table 3 continued
C(42)- $C(43)$
C(60)-C(61)
C(61)-C(62)
C(62)-C(63) C(70)-C(71)
C(71)-C(72)
C(72)-C(73)
C(80)-C(81)
C(82)-C(83)
C(90)-C(91)
C(91)-C(92)
C(100)-C(101)
C(101)-C(102)
C(102)-C(103)
C(111)-C(112)
C(112)-C(113)
C(120)-C(121) C(121)-C(122)
C(122)-C(123)
O(200)-S(200)
S(200)-C(202) S(200)-C(201)
O(300)-S(300)
S(300)-C(301)
S(300)-C(302)
S(305)-S(305)
S(305)-C(307)
O(400)-S(400)
S(400)-C(401) S(400)-C(402)
O(405)-S(405)
S(405)-C(406)
O(600)-S(600)
S(600)-C(601)
S(600)-C(602)
S(605)-S(605)
S(605)-C(607)
O(500)-S(500)
S(500)-C(502) S(500)-C(501)
O(505)-S(505)
S(505)-C(506)
O(19)-V(1)-O(1)
O(19)-V(1)-O(4)
O(1)-V(1)-O(4)
O(1)-V(1)-O(2)
O(4)-V(1)-O(2)
O(19)-V(1)-O(5)
O(4)-V(1)-O(5)
O(2)-V(1)-O(5)
O(19)-V(1)-V(5)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(19)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(19)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3) O(2)-V(1)-V(3) O(2)-V(1)-V(3)
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(19)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ V(5)-V(1)-V(3)\\ V(5)-V(1)-V(3)\\ \end{array}$
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3) O(2)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-Sn(2)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3) O(2)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2) O(4)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2)
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(4)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2) O(4)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2) O(5)-V(1)-Sn(2)
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(5)-V(1)-Sn(2)\\ O(5)-V(1)$
O(1)-V(1)-V(5) O(4)-V(1)-V(5) O(2)-V(1)-V(5) O(5)-V(1)-V(5) O(1)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-V(3) O(2)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(5)-V(1)-V(3) O(1)-V(1)-Sn(2) O(1)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2) O(2)-V(1)-Sn(2) O(5)-V(1)-Sn(2) V(5)-V(1)-Sn(2) V(3)-V(1)-Sn(2) O(3)-Sn(2)-O(3)
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(5)-V(1)-Sn(2)\\ V(5)-V(1)-Sn(2)\\ V(5)-V(1)-Sn(2)\\ V(3)-V(1)-Sn(2)\\ V(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(3)\\ O(9)-Sn(2)-O(6)\\ \end{array}$
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(6)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3$
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(3)\\ O(3)-Sn(2)-O(3)\\ O(3)-Sn(2)-O(2)\\ O(3)-Sn(2)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)\\ O(3)-S$
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(3)\\ O(3)-Sn(2)-O(6)\\ O(3)-Sn(2)-O(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(2)\\ O(6)-Sn(2)-O(2)\\ O(6)-Sn(2$
$\begin{array}{c} O(1)-V(1)-V(5)\\ O(4)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(2)-V(1)-V(5)\\ O(5)-V(1)-V(5)\\ O(1)-V(1)-V(3)\\ O(4)-V(1)-V(3)\\ O(2)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-V(3)\\ O(5)-V(1)-Sn(2)\\ O(1)-V(1)-Sn(2)\\ O(4)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(2)-V(1)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(3)\\ O(3)-Sn(2)-O(6)\\ O(3)-Sn(2)-O(2)\\ O(3)-Sn(2)\\ O(3)-Sn(2)-O(2$

1.52(2)	
1.505(18)	
1 51(2)	
1.51(2)	
1.52(2)	
1.496(19)	
1.52(2)	
1.49(2)	
1 466(18)	
1.400(10)	
1.54(2)	
1.51(2)	
1,488(18)	
1 /8(2)	
1.40(2)	
1.56(2)	
1.465(18)	
1 55(2)	
1.53(2)	
1.53(2)	
1.464(18)	
1.526(19)	
1 51(2)	
1.31(2)	
1.484(19)	
1.55(2)	
1 51(2)	
1.01(2)	
1.551(11)	
1.820(13)	
1.825(13)	
1.491(13)	
1 779/15	
1.770(15)	
1.811(14)	
1.498(13)	
1 787/15	
1.707(13)	
1.836(14)	
1.555(12)	
1 842(14)	
1.042(14)	
1.854(14)	
1.568(12)	
1 849(14)	
1 957(14)	
1.037(14)	
1.521(12)	
1.777(13)	
1 798(13)	
1.750(10)	
1.524(13)	
4 776(4E)	
1.770(15)	
1.785(15)	
1.785(15)	
1.785(15) 1.536(16)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107 6(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 80.8(4) 4.402(1)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.07.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.07.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 90.5(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.509(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.791(16) 1.804(16) 1.805(16) 80.8(4) 1.43.6(4) 1.43.6(4) 80.5(4) 80.7(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 120.4(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 123.6(3)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 120.4(4) 123.6(3)	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ $	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(3) 109.3(3)	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ \end{array}$	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.07.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 123.6(3) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.07.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 120.4(4) 1	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 80.5(4) 80.5(4) 80.5(4) 80.5(4) 120.4(4) 123.6(3) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.8(3)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 123.6(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 120.4(4) 1	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.701(16) 107.6(5) 97.2(4) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 123.6(3) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.2(2)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 120.4(4) 123.6(3) 120.1(4) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 109.5(3) 109.	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.5(4) 120.4(4) 123.6(3) 120.1(4) 42.5(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 118.00(9)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 123.6(3) 142.6(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 118.00(9) 113.3(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 104.4(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 120.4(4)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 97.2(4) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.4(4) 80.5(4) 80.7(4) 123.6(3) 120.4(4) 123.6(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 113.3(4) 114.6(5) 115.5(5) 115.	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.807(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.7(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(3) 109.6(3) 113.3(4) 114.6(3) 114.4(3) 114.4(3)	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.507(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 123.6(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.1(3)\\ 109.6(3)\\ 113.0(9)\\ 113.3(4)\\ 114.6(3)\\ 114.4(3)\\ 1$	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 123.6(3) 123.2(3) 39.0(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 114.6(3) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 40.6(3)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(4) 120.4(3) 109.6(3) 113.3(4) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 72.72(7)	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 108.4(4)\\ 106.8(5)\\ 108.4(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 120.$	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 123.6(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.1(3)\\ 109.6(3)\\ 113.3(4)\\ 114.6(3)\\ 114.4(3)\\ 40.1(2)\\ 40.6(3)\\ 72.76(7)\\ 72.55(7)\\ \end{array}$	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.507(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 123.6(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 42.8(3)\\ 123.2(3)\\ 39.1(3)\\ 109.6(3)\\ 113.3(4)\\ 114.6(3)\\ 114.4(3)\\ 114$	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 123.6(3) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 123.2(3) 39.0(3) 123.2(3) 39.1(3) 114.0(9) 113.3(4) 114.6(3) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 72.76(7) 72.55(7) 76.3(3) 76.2(2)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 120.4(4) 120.4(4) 123.6(3) 120.1(4) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.5(3) 109.6(3) 113.3(4) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 72.55(7) 76.3(3) 76.2(3) 76.	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(4)\\ 120.$	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.7(4) 123.6(3) 120.1(4) 123.6(3) 123.2(3) 39.0(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 72.76(7) 72.55(7) 76.3(3) 88.4(3) 84.6(3)	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.801(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 144.4(4) 80.5(4) 80.5(4) 142.6(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.8(3) 123.2(3) 39.0(3) 123.2(3) 39.1(3) 109.6(3) 114.4(3) 114.6(3) 114.4(3	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.3(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 42.5(3)\\ 109.6(3)\\ 72.76(7)\\ 72.55(7)\\ 76.2(3)\\ 88.4(3)\\ 84.6(3)\\ 96.6(3)\\ 159.4(2)\\ $	
1.776(15) 1.785(15) 1.536(16) 1.507(17) 1.809(16) 1.515(15) 1.791(16) 1.791(16) 107.6(5) 108.4(5) 97.2(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 106.8(5) 80.8(4) 143.6(4) 102.4(4) 123.6(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.5(3) 109.3(3) 39.0(3) 120.1(4) 42.5(3) 109.6(3) 113.3(4) 114.4(3) 40.1(2) 40.6(3) 72.55(7) 76.3(3) 76.2(3) 84.6(3) 96.6(3) 158.4(3) 84.6(3) 95.2(2) 157.2	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.515(15)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 107.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 108.4(3)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.5(4)\\ 80.7(4)\\ 120.4(3)\\ 120.4(4)\\ 120.4(4)\\ 120.4(3)\\ 120.4(4)\\ 120.4$	
$\begin{array}{c} 1.776(15)\\ 1.785(15)\\ 1.536(16)\\ 1.807(17)\\ 1.809(16)\\ 1.515(15)\\ 1.791(16)\\ 1.791(16)\\ 1.07.6(5)\\ 108.4(5)\\ 97.2(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 80.8(4)\\ 143.6(4)\\ 106.8(5)\\ 144.4(4)\\ 80.7(4)\\ 123.6(3)\\ 144.4(4)\\ 80.7(4)\\ 123.6(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.6(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.1(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 120.2(4)\\ 123.2(3)\\ 39.0(3)\\ 123.2(3)\\ 12$	

O(2)-Sn(2)-O(5) O(9)-Sn(2)-C(20) O(3)-Sn(2)-C(20) O(6)-Sn(2)-C(20) O(2)-Sn(2)-C(20) O(5)-Sn(2)-C(20) O(9)-Sn(2)-V(1) O(3)-Sn(2)-V(1) O(6)-Sn(2)-V(1) O(2)-Sn(2)-V(1) O(5)-Sn(2)-V(1) C(20)-Sn(2)-V(1) O(9)-Sn(2)-Sn(6) O(3)-Sn(2)-Sn(6) O(6)-Sn(2)-Sn(6) O(2)-Sn(2)-Sn(6) O(5)-Sn(2)-Sn(6) C(20)-Sn(2)-Sn(6) V(1)-Sn(2)-Sn(6) O(9)-Sn(2)-Sn(4) O(3)-Sn(2)-Sn(4) O(6)-Sn(2)-Sn(4) O(2)-Sn(2)-Sn(4) O(5)-Sn(2)-Sn(4) C(20)-Sn(2)-Sn(4) V(1)-Sn(2)-Sn(4) Sn(6)-Sn(2)-Sn(4) O(22)-V(3)-O(7) O(22)-V(3)-O(2) O(7)-V(3)-O(2) O(22)-V(3)-O(18) O(7)-V(3)-O(18) O(2)-V(3)-O(18) O(22)-V(3)-O(1) O(7)-V(3)-O(1) O(2)-V(3)-O(1) O(18)-V(3)-O(1) O(22)-V(3)-V(1) O(7)-V(3)-V(1) O(2)-V(3)-V(1) O(18)-V(3)-V(1) O(1)-V(3)-V(1) O(9)-Sn(4)-O(14) O(9)-Sn(4)-O(7) O(14)-Sn(4)-O(7) O(9)-Sn(4)-C(40) O(14)-Sn(4)-C(40) O(7)-Sn(4)-C(40) O(9)-Sn(4)-O(10) O(14)-Sn(4)-O(10) O(7)-Sn(4)-O(10) C(40)-Sn(4)-O(10) O(9)-Sn(4)-O(3) O(14)-Sn(4)-O(3) O(7)-Sn(4)-O(3) C(40)-Sn(4)-O(3) O(10)-Sn(4)-O(3) O(9)-Sn(4)-Sn(2) O(14)-Sn(4)-Sn(2) O(7)-Sn(4)-Sn(2) C(40)-Sn(4)-Sn(2) O(10)-Sn(4)-Sn(2) O(3)-Sn(4)-Sn(2) O(23)-V(5)-O(8) O(23)-V(5)-O(5) O(8)-V(5)-O(5) O(23)-V(5)-O(17) O(8)-V(5)-O(17) O(5)-V(5)-O(17) O(23)-V(5)-O(4) O(8)-V(5)-O(4) O(5)-V(5)-O(4) O(17)-V(5)-O(4) O(23)-V(5)-V(1) O(8)-V(5)-V(1) O(5)-V(5)-V(1) O(17)-V(5)-V(1) O(4)-V(5)-V(1) O(11)-Sn(6)-O(9) O(11)-Sn(6)-O(8) O(9)-Sn(6)-O(8) O(11)-Sn(6)-O(10) O(9)-Sn(6)-O(10) O(8)-Sn(6)-O(10) O(11)-Sn(6)-C(60) O(9)-Sn(6)-C(60)

Table 3 continued

72.3(3) 172.8(5) 99.4(5) 98.1(5) 101.7(5) 99.8(5) 82.9(2) 130.0(2) 129.8(2) 35.9(2) 36.4(2) 104.2(5) 37.2(2) 87.1(2) 40.1(2) 119.0(2) 83.7(2) 137.8(5) 102.77(5) 36.9(2) 40.4(2) 86.7(2) 83.7(2) 119.6(2) 139.6(5) 102.89(5) 61.14(3) 105.4(5) 107.5(5) 95.2(4) 108.0(5) 94.9(4) 138.8(4) 100.2(4) 154.4(4) 74.5(4) 79.4(4) 113.7(4) 126.2(3) 39.2(3) 106.0(3) 36.2(2) 86.5(3) 89.8(3) 85.8(3) 165.6(5) 103.3(5) 101.3(4) 74.1(3) 90.5(3) 163.7(3) 95.0(4) 75.3(3) 157.8(3) 81.7(3) 97.1(4) 96.4(3) 37.4(2) 120.3(2) 78.0(2) 136.0(4) 90.3(2) 38.9(2) 104.5(5) 107.1(5) 95.3(4) 108.3(4) 93.9(4) 139.8(4) 101.7(4) 153.7(4) 75.6(4) 79.0(3) 114.7(4) 126.2(3) 39.8(3) 106.3(3) 36.8(2) 85.9(3) 85.0(3) 90.1(3) 91.1(3) 74.2(3) 164.2(3) 100.4(4) 167.7(5)

Table 3 continued
$O(8)_{Sp}(6)_{C}(60)$
O(10)-Sn(6)-C(60)
O(11)-Sn(6)-O(6)
O(9)-Sn(6)-O(6)
O(8)-Sn(6)-O(6)
C(10)-SI(6)-C(6) C(60)-Sn(6)-O(6)
O(11)-Sn(6)-Sn(2)
O(9)-Sn(6)-Sn(2)
O(8)-Sn(6)-Sn(2)
C(10)-Sn(6)-Sn(2) C(60)-Sn(6)-Sn(2)
O(6)-Sn(6)-Sn(2)
O(14)-Sn(7)-O(11)
O(14)-Sn(7)-O(15)
O(11)-Sn(7)-O(15) O(14)-Sn(7)-O(12)
O(11)-Sn(7)-O(12)
O(15)-Sn(7)-O(12)
O(14)-Sn(7)-C(70)
O(11)-Sn(7)-C(70) O(15)-Sn(7)-C(70)
O(12)-Sn(7)-C(70)
O(14)-Sn(7)-Sn(11)
O(11)-Sn(7)-Sn(11)
O(15)-Sn(7)-Sn(11) O(12)-Sn(7)-Sn(11)
C(70)-Sn(7)-Sn(11)
O(14)-Sn(7)-Sn(9)
O(11)-Sn(7)-Sn(9)
O(15)-Sn(7)-Sn(9) O(12) Sn(7) Sn(9)
C(72)-Sn(7)-Sn(9) C(70)-Sn(7)-Sn(9)
Sn(11)-Sn(7)-Sn(9)
O(14)-Sn(7)-Sn(8)
O(11)-Sn(7)-Sn(8)
O(15)-Sn(7)-Sn(8) O(12)-Sn(7)-Sn(8)
C(70)-Sn(7)-Sn(8)
Sn(11)-Sn(7)-Sn(8)
Sn(9)-Sn(7)-Sn(8)
O(21)-Sn(8)- $O(12)O(21)$ -Sn(8)- $O(15)$
O(12)-Sn(8)-O(15)
O(21)-Sn(8)-C(80)
O(12)-Sn(8)-C(80)
O(15)-Sn(8)- $O(80)$
O(12)-Sn(8)-O(13)
O(15)-Sn(8)-O(13)
C(80)-Sn(8)-O(13)
O(21)-Sn(8)-O(16) O(12)-Sn(8)-O(16)
O(12) O(10) O(15)-Sn(8)-O(16)
C(80)-Sn(8)-O(16)
O(13)-Sn(8)-O(16)
O(21)-Sn(8)-Sn(7) O(12) Sn(8) Sn(7)
O(12)-Sn(8)-Sn(7)
C(80)-Sn(8)-Sn(7)
O(13)-Sn(8)-Sn(7)
O(16)-Sn(8)-Sn(7) O(21)-Sn(8)-Sn(12)
O(12)-Sn(8)-Sn(12)
O(15)-Sn(8)-Sn(12)
C(80)-Sn(8)-Sn(12)
O(13)-Sn(8)-Sn(12)
Sn(7)-Sn(8)-Sn(12)
O(12)-Sn(9)-O(17)
O(12)-Sn(9)-O(11)
O(17)-Sn(9)-O(11)
O(12)-SII(9)-O(90) O(17)-SII(9)-O(90)
O(11)-Sn(9)-C(90)
O(12)-Sn(9)-O(400)
O(17)-Sn(9)-O(400)
C(90)-Sn(9)-O(400)
O(12)-Sn(9)-O(405)
O(17)-Sn(9)-O(405)
O(11)-Sn(9)-O(405)
O(400)-Sn(9)-O(405)
O(12)-Sn(9)-Cl(2)
O(17)-Sn(9)-Cl(2)

O(11)-Sn(9)-Cl(2) C(90)-Sn(9)-Cl(2)O(400)-Sn(9)-Cl(2) O(405)-Sn(9)-Cl(2) O(12)-Sn(9)-Sn(7) O(17)-Sn(9)-Sn(7) O(11)-Sn(9)-Sn(7) C(90)-Sn(9)-Sn(7) O(400)-Sn(9)-Sn(7) O(405)-Sn(9)-Sn(7) Cl(2)-Sn(9)-Sn(7) O(21)-Sn(10)-O(4) O(21)-Sn(10)-O(17) O(4)-Sn(10)-O(17) O(21)-Sn(10)-C(100) O(4)-Sn(10)-C(100) O(17)-Sn(10)-C(100) O(21)-Sn(10)-O(20) O(4)-Sn(10)-O(20) O(17)-Sn(10)-O(20) C(100)-Sn(10)-O(20) O(21)-Sn(10)-O(13) O(4)-Sn(10)-O(13) O(17)-Sn(10)-O(13) C(100)-Sn(10)-O(13) O(20)-Sn(10)-O(13) O(21)-Sn(10)-Sn(12) O(4)-Sn(10)-Sn(12) O(17)-Sn(10)-Sn(12) C(100)-Sn(10)-Sn(12) O(20)-Sn(10)-Sn(12) O(13)-Sn(10)-Sn(12) O(15)-Sn(11)-O(18) O(15)-Sn(11)-C(110) O(18)-Sn(11)-C(110) O(15)-Sn(11)-O(14) O(18)-Sn(11)-O(14) C(110)-Sn(11)-O(14) O(15)-Sn(11)-O(605) O(18)-Sn(11)-O(605) C(110)-Sn(11)-O(605) O(14)-Sn(11)-O(605) O(15)-Sn(11)-O(600) O(18)-Sn(11)-O(600) C(110)-Sn(11)-O(600) O(14)-Sn(11)-O(600) O(14)-SI(11)-O(600) O(605)-Sn(11)-O(600) O(15)-Sn(11)-Cl(1) O(18)-Sn(11)-Cl(1) C(110)-Sn(11)-Cl(1) O(14)-Sn(11)-Cl(1) O(605)-Sn(11)-Cl(1) O(600)-Sn(11)-Cl(1) O(15)-Sn(11)-Sn(7) O(18)-Sn(11)-Sn(7) C(110)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(605)-Sn(11)-Sn(7) O(600)-Sn(11)-Sn(7) Cl(1)-Śn(11)-Śn(7) O(21)-Sn(12)-O(18) O(21)-Sn(12)-C(120) O(18)-Sn(12)-C(120) O(21)-Sn(12)-O(1) O(18)-Sn(12)-O(1) C(120)-Sn(12)-O(1) O(21)-Sn(12)-O(20) O(18)-Sn(12)-O(20) C(120)-Sn(12)-O(20) O(1)-Sn(12)-O(20) O(21)-Sn(12)-O(16) O(18)-Sn(12)-O(16) C(120)-Sn(12)-O(16) O(1)-Sn(12)-O(16) O(20)-Sn(12)-O(16) O(21)-Sn(12)-Sn(10) O(18)-Sn(12)-Sn(10) C(120)-Sn(12)-Sn(10) O(1)-Sn(12)-Sn(10) O(20)-Sn(12)-Sn(10) O(16)-Sn(12)-Sn(10) O(21)-Sn(12)-Sn(8) O(18)-Sn(12)-Sn(8) C(120)-Sn(12)-Sn(8) O(1)-Sn(12)-Sn(8) O(20)-Sn(12)-Sn(8)

Table 3 continued

159.4(2) 910(4)90.0(4) 83.9(4) 38.7(2) 102.0(2) 38.0(2) 138.6(4) 76.0(5)72.8(5) 122.16(11) 88.3(3) 85.8(3) 74.3(3) 168.9(6) 102.0(5) 100.8(6) 75.1(3) 89.7(4) 155.5(3) 100.7(6) 76.2(3) 163.2(3) 97.8(3) 94.0(6) 92.5(4) 36.4(2) 82.4(2) 118.2(2) 140.2(5) 39.5(3) 88.6(3) 95.4(3) 160.8(5) 103.3(5) 76.1(3) 95.7(3) 97.6(5) 78.3(7) 168.9(6) 83.9(8) 91.7(5) 78.2(6) 173.6(6) 83.1(8) 83.0(4) 8.9(7) 88.3(3) 89.6(3) 96.0(́5) 163.9(3) 81.1(5) 90.0(4) 38.4(2) 100.4(2) 131.4(5) 37.9(2) 80.5(6) 74.7(5) 126.12(15) 85.1(3) 168.4(6) 104.7(6) 88.0(3) 74.2(3) 100.6(6) 75.4(3) 154.8(3) 96.8(6) 89.1(3) 76.3(3) 99.1(4) 95.6(7) 163.5(3) 91.7(4) 36.6(2) 117.5(2) 136.5(6) 81.9(2) 39.7(2) 88.3(3) 36.9(2) 87.6(2) 135.6(6) 123.8(2) 86.2(3)

Table 3 continued
O(16)-Sn(12)-Sn(8)
Sn(10)-Sn(12)-Sn(8)
V(1)-O(1)-V(3)
V(1)-O(1)-Sn(12) V(3)-O(1)-Sn(12)
V(3)-O(2)-V(1)
V(3)-O(2)-Sn(2)
V(1)-O(2)-Sn(2) Sn(2)-O(3)-Sn(4)
V(1)-O(4)-V(5)
V(1)-O(4)-Sn(10)
V(5)-O(4)-Sil(10) V(5)-O(5)-V(1)
V(5)-O(5)-Sn(2)
V(1)-O(5)-Sn(2) Sn(2)-O(6)-Sn(6)
V(3)-O(7)-Sn(4)
V(5)-O(8)-Sn(6)
Sn(4)-O(9)-Sn(6) Sn(4)-O(9)-Sn(2)
Sn(6)-O(9)-Sn(2)
Sn(6)-O(10)-Sn(4)
Sn(7)-O(11)-Sn(6) Sn(7)-O(11)-Sn(9)
Sn(6)-O(11)-Sn(9)
Sn(9)-O(12)-Sn(7)
Sn(9)-O(12)-Sn(8) Sn(7)-O(12)-Sn(8)
Sn(8)-O(13)-Sn(10)
Sn(7)-O(14)-Sn(4)
Sn(7)-O(14)-Sn(11) Sn(4)-O(14)-Sn(11)
Sn(11)-O(15)-Sn(7)
Sn(11)-O(15)-Sn(8)
Sn(7)-O(15)-Sn(8) Sn(12)-O(16)-Sn(8)
V(5)-O(17)-Sn(9)
V(5)-O(17)-Sn(10)
V(3)-O(18)-Sn(10)
V(3)-O(18)-Sn(12)
Sn(11)-O(18)-Sn(12)
Sn(12)-O(20)-Sn(10) Sn(12)-O(21)-Sn(10)
Sn(12)-O(21)-Sn(8)
Sn(10)-O(21)-Sn(8)
C(20)-C(21)-C(22)
C(21)-C(22)-C(23)
C(41)-C(40)-Sn(4) C(42)-C(41)-C(40)
C(43)-C(42)-C(41)
C(61)-C(60)-Sn(6)
C(60)-C(61)-C(62) C(61)-C(62)-C(63)
C(71)-C(70)-Sn(7)
C(70)-C(71)-C(72)
C(73)-C(72)-C(71) C(81)-C(80)-Sn(8)
C(80)-C(81)-C(82)
C(83)-C(82)-C(81)
C(91)-C(90)-Sh(9) C(92)-C(91)-C(90)
C(91)-C(92)-C(93)
C(101)-C(100)-Sn(10)
C(100)-C(101)-C(102) C(103)-C(102)-C(101)
C(111)-C(110)-Sn(11)
C(110)-C(111)-C(112) C(113)-C(112)-C(111)
C(113)-C(112)-C(111) C(121)-C(120)-Sn(12)
C(120)-C(121)-C(122)
C(123)-C(122)-C(121) O(200)-S(200)-C(202)
O(200)-S(200)-C(201)
C(202)-S(200)-C(201)
U(300)- $S(300)$ - $C(301)O(300)$ - $S(300)$ - $C(302)$
C(301)-S(300)-C(302)
O(305)-S(305)-C(306)
U(305)-S(305)-C(307) C(306)-S(305)-C(307)
S(400)-O(400)-Sn(9)
O(400)-S(400)-C(401)
C(400)-S(400)-C(402) C(401)-S(400)-C(402)

39.9(3)
60.25(3)
138.7(5)
100.1(4)
101.7(4) 129.6(4)
104.0(4)
100.6(3) 100.7(4)
138.5(5)
101.2(4) 101.2(4)
129.8(4)
103.0(4)
132.1(4)
132.3(4)
108.8(3)
105.3(3)
102.9(3) 129.7(4)
102.5(3)
124.7(4) 103.6(4)
135.1(4)
102.3(4)
130.0(3)
101.4(3)
124.5(4)
135.4(4)
102.2(4) 100 5(4)
122.4(4)
104.6(4) 129 1(4)
123.3(4)
105.4(4)
120.0(4)
107.0(3)
106.8(4)
111.8(13)
115.5(17)
113.0(11)
109.5(15)
111.9(11)
112.7(16)
112.7(11)
112.8(16)
112.8(18)
112.7(16)
110.4(18)
116.0(17)
110.7(18)
112.1(16)
109.0(17)
114.6(15)
111.7(16)
117.4(15)
109.8(16)
110.9(8) 110.9(8)
98.1(7)
117.6(11)
100.1(8)
116.5(11)
98.8(8)
126.6(11)
109.5(9)
96.1(8)

Table 3 continued		
S(405)-O(405)-Sn(9)	128 0(11)	
O(405)- $S(405)$ - $C(406)$	108 8(9)	
O(405)- $S(405)$ - $C(407)$	108.1(9)	
C(406)- $S(405)$ - $C(407)$	95.6(8)	
S(600)-O(600)-Sn(11)	123.3(12)	
O(600)-S(600)-C(601)	116.7(11)	
O(600)-S(600)-C(602)	114.2(10)	
C(601)-S(600)-C(602)	99.5(8)	
S(605)-O(605)-Sn(11)	127.3(14)	
O(605)-S(605)-C(606)	115.8(12)	
O(605)-S(605)-C(607)	115.5(12)	
C(606)-S(605)-C(607)	99.9(9)	
O(500)-S(500)-C(502)	113.4(13)	
O(500)-S(500)-C(501)	113.0(12)	
C(502)-S(500)-C(501)	98.7(10)	
O(505)-S(505)-C(506)	115.8(13)	
O(505)-S(505)-C(507)	114.9(13)	
C(506)-S(505)-C(507)	99.8(10)	

121

		1100	1100	1100	1110		
	U11	022	033	023	U13	012	
\//(1)	71(1)	65(1)	47(1)	2(1)	22(1)	6(1)	
V(1) Sp(2)	64(1)	53(1)	47(1) 57(1)	$\frac{2(1)}{7(1)}$	23(1)	3(1)	
$\frac{31(2)}{\sqrt{2}}$	69(1)	67(1)	62(1)	-7(1)	21(1)	-3(1)	
V(3) Sp(4)	53(1)	47(1)	56(1)	4(1) 5(1)	31(1) 22(1)	9(1) 7(1)	
$\mathcal{S}(4)$	53(1)	47(1) 50(1)	50(1)	J(1) 4(1)	22(1)	F(1)	
V(3) Sp(6)	33(1) 46(1)	59(1)	54(1) 64(1)	4(1) 2(1)	22(1)	3(1)	
Sn(0) Sn(7)	40(1) 54(1)	50(1)	40(1)	0(1)	22(1)	-1(1)	
Sn(7)	54(1) 72(1)	55(1)	49(1) 70(1)	0(1)	21(1)	17(1)	
Sn(0)	62(1)	50(1)	FO(1)	-3(1)	21(1)	-17(1)	
Sn(9) Sn(10)	70(1)	50(1)	62(1)	Z(1) 11(1)	20(1)	0(1)	
Sn(10) Sn(11)	13(1)	32(1) 80(1)	67(1)	4(1)	20(1)	-1(1)	
Sn(11) Sn(12)	43(1)	75(1)	80(1)	4(1)	37(1)	-1(1)	
O(1)	00(T) 70(G)	70(1)	00(1) 52(5)	9(1)	37(1) 35(4)	-11(1)	
O(1)	70(0)	70(3) 62(5)	55(5) 64(5)	7(4)	20(4)	0(4)	
O(2)	70(6)	03(3) 46(5)	71(6)	2(4)	30(4)	9(4) 2(4)	
0(3)	70(0)	40(3)	71(0)	-2(4)	20(3)	3(4)	
0(4)	70(0) 50(5)	60(3) 65(5)	47(3) 57(5)	0(4)	10(4)	2(4)	
0(5)	59(5) 64(5)	65(5) E7(E)	57(5) 76(6)	-4(4)	9(4) 20(5)	-3(4)	
O(0)	64(3) 52(5)	57(5) 60(5)	70(0) 50(5)	-1(4)	20(3)	-0(4)	
O(7)	33(3) 49(E)	09(J) 52(5)	09(0) 61(5)	-1(4)	22(4)	0(4) 5(4)	
0(0)	40(3)	55(5) 45(4)	61(5) E4(E)	0(4)	12(4)	2(2)	
O(9)	49(4) 60(5)	43(4) 51(5)	54(5) 72(6)	-0(4)	13(4)	2(3)	
O(10)	29(4)	51(5)	7 3(0) 60(5)	O(4)	3Z(4) 21(4)	5(2)	
O(11)	30(4) 65(5)	51(4)	69(5) 60(5)	2(4)	21(4)	J(J)	
O(12)	107(9)	52(5)	09(5) 75(6)	2(4)	24(4)	-1(4)	
O(13)	107(0)	50(5) 64(5)	73(0)	-1(4)	33(0)	-9(3)	
O(14) O(15)	40(4) 60(5)	64(5) 64(5)	52(5) 66(5)	-0(4)	0(4)	2(4)	
O(15)	71(6)	04(3)	101(9)	-9(4)	17(4)	-10(4)	
O(10)	71(0)	09(7)	101(6)	-1(0)	30(0)	-31(3)	
O(17)	02(5) 47(5)	33(3) 72(5)	57(5) 65(5)	6(4) 5(4)	19(4)	0(4) 6(4)	
0(10)	47(3)	72(3)	00(0)	3(4) 9(5)	20(4)	-0(4)	
0(19)	112(0)	69(7) 66(6)	03(0)	0(D) 10(F)	30(0)	15(6)	
0(20)	00(7) 50(5)	00(0)	60(7) 60(5)	10(5)	37(6)	-8(5)	
O(21)	38(3) 70(6)	50(5) 102(7)	03(5)	Z(4) Z(6)	20(4)	-0(4)	
O(22)	12(0) 67(6)	102(7)	04(<i>1</i>)	/(O) 4E(E)	40(0)	10(0)	
O(23)	67(6) 59(2)	79(0)	00(0)	15(5)	-1(5)	10(5)	
	58(∠)	144(4)	152(4)	21(4)	15(3)	-20(3)	
U(Z)	110(3)	03(Z)	09(0)	U(Z)	41(∠)	19(2)	

Table 4.Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 3. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12$].

	Х	у	Z	U(eq)
H(201)	2580	-440	229	209(13)
H(202)	1838	35	82	209(13)
H(211)	3114	457	-227	209(13)
H(212)	2240	641	-488	209(13)
H(221)	2032	-483	-837	209(13)
H(222)	2920	-646	-588	209(13)
H(231)	2717	-292	-1477	209(13)
⊓(232) H(233)	2358	203	-1111	209(13)
H(401)	5100	-21	2786	209(13)
H(402)	4324	-450	2633	209(13)
H(411)	4689	-989	1945	209(13)
H(412)	5452	-541	2075	209(13)
H(421)	5942	-1101	2881	209(13)
H(422)	5152	-1495	2809	209(13)
H(431)	6345	-1943	2488	209(13)
H(432)	5651	-1815	1985	209(13)
H(601)	1101	-2334	1085	209(13)
H(602)	1335	845	2139	209(13)
H(611)	2034	1989	2756	209(13)
H(612)	2217	1208	2914	209(13)
H(621)	940	1062	2967	209(13)
H(622)	763	1846	2815	209(13)
H(631)	1061	1711	3724	209(13)
H(632)	1682	2192	3590	209(13)
H(633)	1880	1412	3741	209(13)
H(70A)	4697	2496	3597	209(13)
H(711)	0192 1818	2411 1205	340A	209(13)
H(712)	3914	1235	3370	209(13)
H(721)	4811	1036	4290	209(13)
H(722)	4649	1832	4326	209(13)
H(731)	3757	1276	4621	209(13)
H(732)	3536	777	4137	209(13)
H(733)	3303	1564	4069	209(13)
H(801)	5186	4241	3005	209(13)
H(802)	5932	4231	2818	209(13)
H(812)	4763	5240	2321	209(13)
H(821)	5422	5475	3388	209(13)
H(822)	6238	5311	3309	209(13)
H(831)	6040	6522	3341	209(13)
H(832)	5323	6462	2843	209(13)
H(833)	6163	6309	2805	209(13)
H(901)	1268	2810	1825	209(13)
H(902)	1319	3523	2119	209(13)
H(912)	1245	3452	1062	209(13)
H(921)	-33	3789	1409	209(13)
H(922)	48	3075	1144	209(13)
H(931)	-714	3843	503	209(13)
H(932)	59	3679	364	209(13)
H(933)	-35	4388	630	209(13)
H(101)	2525	4672	617	209(13)
H(102)	3245	4912	447	209(13)
H(102)	2838	4014	-290	209(13)
H(101)	1714	5229	-176	209(13)
H(102)	2407	5397	-406	209(13)
H(101)	1236	5237	-1089	209(13)
H(102)	1181	4474	-896	209(13)
H(103)	1856	4683	-1130	209(13)
H(111)	6206	642	2689	209(13)
H(112)	6238	667	2115	209(13)
H(111) H(112)	7433	1104	2959	209(13)
H(111)	8118	124	2380	209(13)
H(112)	7484	-76	3020	209(13)
H(111)	7313	-816	2332	209(13)
H(112)	7325	-203	1948	209(13)
H(113)	6614	-294	2171	209(13)
H(121)	6017	2933	403	209(13)
H(122)	6427	3471	832	209(13)
H(121)	6697	2041	865	209(13)
П(122) Ц(121)	7023	2513 2175	1358	209(13)
H(122)	1131 8014	3173 2306	003 951	209(13) 209(13)
H(121)	7786	2798	77	209(13)
H(122)	6903	2875	40	209(13)
H(123)	7291	2137	108	209(13)
H(201)	372	904	-492	250`
H(202)	804	1506	-126	250
H(203)	-48	1618	-484	250

Table 5. Hydrogen coordinates ($x \ 10^4$) and isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$) for	or 3.
--	-------

H(201)	-277	1714	873	250
H(202)	-420	2110	341	250
H(203)	431	1976	693	250
H(301)	4557	353	9144	250
H(302)	4254	922	9457	250
H(303)	5058	562	9707	250
H(301)	5647	2409	9552	250
H(302)	5669	1815	9958	250
H(303)	4882	2187	9680	250
H(306)	5255	184	9638	250
H(307)	4598	591	9228	250
H(308)	4744	728	9826	250
H(306)	5273	2443	9344	250
H(307)	4728	2082	9631	250
H(308)	4614	1940	9036	250
H(40A)	1993	3346	3736	250
H(40B)	2540	3944	4029	250
H(40C)	2894	3225	3940	250
H(40D)	3762	4433	3160	250
H(40E)	3940	3867	3601	250
H(40F)	3586	4586	3690	250
H(406)	4055	4486	3115	250
H(407)	4243	3945	3573	250
H(408)	3979	4701	3663	250
H(406)	2361	3606	3864	250
H(407)	2988	4172	4109	250
H(408)	3247	3418	4009	250
H(601)	7664	1856	3192	250
H(602)	7832	1427	3712	250
H(603)	8110	2202	3726	250
H(601)	6545	2116	4433	250
H(602)	7446	2150	4522	250
H(603)	7000	1447	4357	250
H(606)	6056	2817	4124	250
H(607)	6944	2988	4342	250
H(608)	6656	2217	4333	250
H(606)	7847	2262	3385	250
H(607)	7887	2148	3973	250
H(608)	7949	2901	3763	250
H(501)	4141	5156	9505	250
H(502)	3829	5003	8905	250
H(503)	4652	5339	9137	250
H(501)	4976	3541	8633	250
H(502)	4876	4332	8489	250
H(503)	4142	3867	8442	250
H(506)	4615	5133	9145	250
H(507)	4085	4922	8590	250
H(508)	4944	4651	8786	250
H(506)	3888	2972	8/28	250
H(507)	4605	3322	8607	250
H(208)	3/02	3585	8320	250

8.4 [(iPrSn)₉(OV)₂O₁₅(OH)₉] · 4.5 H₂O (4)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 4.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions	C ₂₇ H ₈₁ O ₃₅ Sn ₉ V ₂ 2136.01 293(2) K 0.71073 Å Hexagonal, P-3 $a = 14.702(3)$ Å $\alpha = 90$ ° $b = 14.702(3)$ Å $\beta = 90$ ° c = 18.245(4) Å $y = 120$ °
Volume	3415.4(12) A^3
Z, Calculated density	2, 2.077 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.566 mm ⁻¹
F(000)	2038
Crystal size	0.7 mm x 0.6 mm x 0.5 mm
Theta range for data collection	1.95 to 23.99 deg.
Limiting indices	0 \leq h \leq 15, -16 \leq k \leq 0, -20 \leq l \leq 0
Reflections collected / unique	3741 / 1849 [R(int) = 0.0437]
Completeness to theta	= 23.99 99.8 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	1849 / 15 / 128
Goodness-of-fit on F ² ,	1.071
Final R indices [l>2sigma(l)]	R1 = 0.0484, wR2 = 0.1271
R indices (all data)	R1 = 0.0557, wR2 = 0.1319
Largest diff. peak and hole	0.848 and -0.588 e.A ⁻³

	Х	у	Z	U(eq)
Sn(1)	1096(1)	6325(1)	3431(1)	60(1)
Sn(2)	1016(1)	4281(1)	2500	59(1)
V(1)	3333	6667	4471(1)	62(1)
O(1)	1771(6)	5955(6)	2500	53(2)
O(2)	402(7)	6597(8)	2500	69(2)
O(3)	235(5)	4664(5)	3324(3)	68(2)
O(4)	2067(5)	6057(5)	4125(3)	67(2)
O(5)	2105(5)	4471(5)	3331(3)	63(2)
O(6)	3333	6667	5382(6)	86(4)
C(10)	87(18)	6490(20)	4208(11)	84(5)
C(11)	670(40)	6740(40)	4906(19)	126(9)
C(12)	-130(30)	7340(30)	4010(20)	107(7)
C(20)	325(17)	6530(20)	4368(14)	84(5)
C(21)	980(40)	7490(30)	4810(20)	126(9)
C(22)	-834(19)	5890(30)	4370(30)	107(7)
C(30)	210(30)	6700(20)	4190(17)	84(5)
C(31)	-260(40)	5890(30)	4770(20)	126(9)
C(32)	460(30)	7780(20)	4370(20)	107(7)
C(40)	-2(17)	2615(11)	2500	76(5)
C(41)	50(30)	2140(30)	3232(13)	174(12)
C(50)	440(40)	2627(14)	2500	76(5)
C(51)	-470(40)	2100(60)	3050(40)	174(12)
O(100)	8137(7)	3534(8)	1441(6)	133(4)
O(200)	7005(9)	1866(7)	2500	83(3)

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

Sn(1)-O(4) 2.088(6) Sn(1)-O(2) 2.124(6) Sn(1)-O(2) 2.154(11) Sn(1)-O(20) 2.154(11) Sn(1)-O(20) 2.154(11) Sn(1)-O(20) 2.154(11) Sn(1)-O(20) 2.154(11) Sn(1)-O(1) 2.170(5) Sn(2)-O(3)#2 2.118(6) Sn(2)-O(3)#2 2.138(10) Sn(2)-O(3)#2 2.138(10) Sn(2)-O(3)#2 2.138(10) Sn(2)-O(3)#2 2.138(10) Sn(2)-O(3)#2 2.138(10) Sn(2)-O(4) 2.138(10) Sn(2)-O(4) 2.138(10) Sn(2)-O(4) 1.737(16) V(1)-O(4) 1.737(16) V(1)-O(4)#1 1.747(12) C(2)-	2.089(6) 2.120(5) 2.124(6)
Sn(1)-O2) 2.120(6) Sn(1)-O2) 2.134(6) Sn(1)-O2) 2.154(11) Sn(1)-C20) 2.154(11) Sn(1)-C30) 2.154(11) Sn(1)-C30) 2.154(11) Sn(1)-C30) 2.154(11) Sn(2)-O5) 2.178(6) Sn(2)-O5) 2.131(6) Sn(2)-O5) 2.131(6) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 2.138(15) Sn(2)-O6) 1.633(11) V(1)-O6 1.633(11) V(1)-O4 1.731(6) C40)-C411#2 1.531(19) C40)-C411#2 1.531(19) C4	2.120(5) 2.124(6)
Sn(1)-Obj#1 2.124(b) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(1)-Obj#1 2.154(11) Sn(2)-Obj#2 2.119(6) Sn(2)-Obj#2 2.131(6) Sn(2)-Obj#2 2.131(6) Sn(2)-Obj#2 2.131(6) Sn(2)-Obj#2 2.138(15) Sn(2)-Obj#2 2.138(15) Sn(2)-Obj#2 2.138(15) Sn(2)-Obj#2 2.138(15) Sn(2)-Obj#1 1.731(6) V(1)-Odj#1 1.731(6) C(2)-Cz1 1.479(12)	2.124(6)
Sh(1)-C20 2.134(1) Sh(1)-C20 2.154(11) Sh(1)-C20 2.154(11) Sh(1)-C20 2.154(11) Sh(1)-C20 2.170(5) Sh(2)-OG) 2.119(6) Sh(2)-OG) 2.119(6) Sh(2)-OG) 2.131(6) Sh(2)-OG) 2.131(6) Sh(2)-OG) 2.131(6) Sh(2)-OG) 2.131(6) Sh(2)-OG) 2.138(15) Sh(2)-OG) 2.138(15) Sh(2)-OG) 2.138(15) Sh(2)-OG) 2.138(16) Sh(2)-OG) 2.138(15) C10)-C(11) 1.479(12) C10)-C(12) 1.479(12) C20)-C22) 1.479(12) C20)-C22) 1.479(12) C30)-C31) 1.479(12) C30)-C41) 1.531(19) C40)-C41)	0.404(0)
Sh(1)-CL0) 2.154(11) Sh(1)-CL0) 2.154(11) Sh(1)-CL0) 2.154(11) Sh(1)-CL0) 2.154(11) Sh(2)-CB) 2.119(6) Sh(2)-CB) 2.119(6) Sh(2)-CB) 2.131(6) Sh(2)-CB) 2.131(6) Sh(2)-CB) 2.130(6) Sh(2)-CA) 2.130(6) Sh(2)-CA) 2.130(6) Sh(2)-CA) 2.130(6) Sh(2)-CA) 2.130(6) Sh(2)-CA) 1.479(12) CD)-Sh(1)+2 2.170(6) CD)-Sh(1)+2 1.479(12) CD)-Sh(1)+2 1.479(12) CD)-Sh(1)+2 <td>2.131(6)</td>	2.131(6)
Sin(1)-C(10) 2.154(11) Sin(1)-C(30) 2.154(11) Sin(1)-C(30) 2.170(5) Sin(2)-C(3) 2.118(6) Sin(2)-C(3) 2.118(6) Sin(2)-C(3) 2.118(6) Sin(2)-C(3) 2.131(6) Sin(2)-C(3) 2.138(15) Sin(2)-C(50) 2.138(15) Sin(2)-C(50) 2.138(15) Sin(2)-C(40) 2.138(15) Sin(2)-C(10) 1.731(6) V(1)-O(4) 1.531(16) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.531(19) C(20)-C(21) 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2	2.134(11)
3n(1)-O(3) 2.13m(1) Sn(2)-O(5) 2.119(6) Sn(2)-O(5)#2 2.119(6) Sn(2)-O(5)#2 2.131(6) Sn(2)-O(3) 2.131(6) Sn(2)-O(3) 2.131(6) Sn(2)-O(3) 2.138(15) Sn(2)-O(4) 2.138(15) Sn(2)-O(4) 2.138(15) Sn(2)-O(4) 2.138(15) Sn(2)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.131(6) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(3) 1.479(12) C(30)-C(3) 1.479(12) C(30)-C(4)#2 1.531(19) C(40)-C(4)#2 1.531(19) C(40)-C(4)#2 1.531(19)	2.154(11)
SIN(2)-O(3) 2.1706) SIN(2)-O(3) 2.119(6) SIN(2)-O(3) 2.131(6) SIN(2)-O(3) 2.131(6) SIN(2)-O(3) 2.136(8) SIN(2)-O(1) 2.136(8) SIN(2)-O(1) 2.136(8) SIN(2)-O(1) 2.136(13) SIN(2)-O(4) 2.138(15) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#2 2.170(5) O(2)-SIN(1)#2 2.120(5) O(2)-SIN(1)#2 2.131(6) O(1)-SIN(1)#2 2.131(6) O(1)-SIN(1)#2 2.131(6) O(1)-SIN(1)#2 2.131(6) O(2)-SIN(1)#2 2.131(6) O(2)-SIN(1)#2 2.131(6) O(2)-SIN(1)#2 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2	2.134(11)
Sin Ci Oling 2.119(6) Sin (2) Oling 2.119(6) Sin (2) Oling 2.131(6) Sin (2) Oling 2.131(6) Sin (2) Oling 2.138(15) Sin (2) Oling 2.138(15) Sin (2) Oling 2.138(15) Sin (2) Oling 1.731(6) V(1)-Oling 1.731(6) V(1)-Oling 1.731(6) V(1)-Oling 2.130(1) V(1)-Oling 1.731(6) V(1)-Oling 1.479(12) OlingSin(1)#2 2.100(5) OlingSin(1)#3 2.131(6) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(51)#2 1.531(19) C(30)-C(51)#2 1.531(19) C(30)-C(51)#2 1.53(18)	2.110(5)
Sn(2)-O(3)#2 2.131(6) Sn(2)-O(3) 2.131(8) Sn(2)-C(40) 2.138(15) Sn(2)-C(40) 2.138(15) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#2 2.170(5) O(1)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.131(6) O(1)-Sn(1)#2 2.131(6) O(1)-Sn(1)#2 2.131(6) C(2)-Sn(1)#2 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.478(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.99(13) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.99(13) O(4)-Sn(1)-O(3) 84.8(3) O(2)-Sn(1)-O(3) 9.4(3)	2.119(6)
Sn(2)-Ci(3) 2.131(6) Sn(2)-Ci(5) 2.138(15) Sn(2)-Ci(4) 2.138(15) Sn(2)-Ci(4) 1.683(11) V(1)-Ci(6) 1.683(11) V(1)-Ci(4) 1.731(6) V(1)-Ci(4) 1.731(6) V(1)-Ci(4) 1.731(6) V(1)-Ci(4) 1.731(6) V(1)-Ci(4) 1.731(6) Ci(5)-Sn(1)#2 2.120(5) Ci(5)-Sn(1)#3 2.131(6) Ci(1)-Ci(1) 1.479(12) Ci(2)-Ci(2) 1.479(12) Ci(2)-Ci(2) 1.479(12) Ci(2)-Ci(2) 1.478(12) Ci(3)-Ci(3) 1.478(12) Ci(3)-Ci(3) 1.478(12) Ci(4)-Ci(4) 1.531(19) Ci(4)-Ci(4) 1.531(19) Ci(5)-Ci(5) 1.531(19) Ci(5)-Ci(5) 1.531(19) Ci(5)-Ci(5) 1.531(19) Ci(4)-Ci(4) 1.531(19) Ci(5)-Ci(5) 1.531(19) Ci(4)-Ci(1) 1.68.8(3) Ci(4)-Sin(1)-Ci(2) 9.8(3) Ci(2	2 131(6)
sn2p.c.2011 2.138(8) Sn2p.c150) 2.138(15) V(1)-0(4) 1.633(11) V(1)-0(4) 1.731(6) V(1)-0(4) 1.479(12) C(2)-Sn(1)#2 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.478(12) C(30)-C(32) 1.478(12) C(30)-C(31) 1.478(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(5)#2 1.531(19) C(40)-S(1)-O(2) 1.63.8(3) O(4)-Sn(1)-O(2) 0.63.8(3) O(2)-Sn(1)-O(3) 9.4.4(3) O(2)-Sn(1)-O(2.131(6)
Sn(2)C(50) 2.138(15) Sn(2)C(40) 2.138(15) V(1)-O(6) 1.683(11) V(1)-O(4) 1.731(6) V(1)-O(4)#1 1.731(6) V(1)-O(4)#3 1.731(6) O(1)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.120(5) O(2)-Sn(1)#3 2.131(6) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.99(13) O(4)-Sn(1)-O(2) 68.8(3) O(4)-Sn(1)-O(2) 105.8(10) O(2)-Sn(1)-O(2) 105.8(10) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 88.8(3) O(4)-Sn(1)-O(5)#1 88.8(3) O(4)-Sn(1)-O(5)#1 105.8(1) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.8(1) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.8(1) </td <td>2.136(8)</td>	2.136(8)
Sn(2)-C(40) 2.138(15) V(1)-O(6) 1.663(11) V(1)-O(4) 1.731(6) V(1)-O(4) 1.731(6) V(1)-O(4) 1.731(6) O(1)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#2 2.120(5) O(2)-Sn(1)#2 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.99(13) O(4)-Sn(1)-O(2) 153.8(3) C(51)-C(51)#2 1.99(13) O(4)-Sn(1)-O(2) 153.8(3) O(2)-Sn(1)-O(3) 84.8(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(3)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 100.5(8) O(3)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) O(3)-Sn(1)-C(10) 102.5(11) <td>2.138(15)</td>	2.138(15)
V(1)-C(4)#1 1.731(6) V(1)-C(4)#1 1.731(6) V(1)-C(4)#3 1.731(6) O(1)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#3 2.131(6) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(35)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-S(41) 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-S(41) 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-S(51)#2 1.531(19) C(3)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-S(41) 1.534(3) C(2)-S(1)-C(2) 9.68(2) C(3)-S(1)-C(3) 9.24(3) C(4)-S(1)-C(5)#1 8.68(2) C(2)-	2.138(15)
V(1)-Q(4) 1.731(6) V(1)-Q(4) 1.731(6) V(1)-Q(4) 1.731(6) Q(1)-Sn(1)#2 2.170(6) Q(2)-Sn(1)#2 2.120(5) Q(2)-Sn(1)#3 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(2)-Sn(1)-O(2) 163.8(3) O(4)-Sn(1)-O(2) 163.8(3) O(4)-Sn(1)-O(2) 163.8(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 88.3(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 88.3(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 168.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 168.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 168.9(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(1) O(3)-Sn(1)-O(1) 101.4(17)	1.663(11)
V(1)-O(4) 1.731(6) V(1)-D(4)#3 1.731(6) V(1)-D(4)#3 1.731(6) V(1)-D(4)#3 2.120(5) V(1)-D(1)#2 2.120(5) V(1)-D(1)#3 2.131(6) V(1)-D(1)#3 2.131(6) V(1)-D(1)#3 2.131(6) V(1)-D(1) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-Sn(1)-C(2) 1.638(3) O(4)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(10) O(3)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(10) O(3)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) O(3)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) <tr< td=""><td>1.731(6)</td></tr<>	1.731(6)
V(1)-Q(14)#3 1.731(6) Q(2)-Sn(1)#2 2.170(5) Q(2)-Sn(1)#2 2.120(5) Q(1)-Sn(1)#3 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.478(12) C(30)-C(32) 1.478(12) C(30)-C(32) 1.478(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.99(13) C(51)-C(51)#2 1.99(13) C(51)-C(51)#2 1.99(13) C(3)-C(51)#2 1.99(13) C(3)-C(51)#2 1.99(13) C(3)-C(51)#2 1.99(13) C(3)-C(51)#2 1.93(13) C(3)-C(51)#2 1.93(13) C(3)-S(1)-C(3) 84.8(3) O(4)-Sn(1)-C(3) 90.2(10) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(4)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.5(10) O(3)-Sn(1)-C(20) 90.2(10) O(3)-Sn(1)-C(10) 10.5.7(10) O(4)-Sn(1)-C(20) 98.8(7) <tr< td=""><td>1.731(6)</td></tr<>	1.731(6)
O(1)-Sn(1)#2 2.170(5) O(2)-Sn(1)#3 2.131(6) O(5)-Sn(1)#3 2.131(6) C(10)-C(12) 1.479(12) C(10)-C(12) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(4)-S(-C(1)-O(2) 163.8(3) O(4)-Sn(1)-O(2) 163.8(3) O(4)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 86.3(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(1) O(3)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(1) O(3)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(1) O(3)-Sn(1)-O(5)#1 105.9(1) O(3)-Sn(1)-O(1) 10.4/7) O(2)-Sn(1)-C(20) 98.8(7) O(4)-Sn(1)-C(10) 10.2/2(1) O(3)-Sn(1)-	1.731(6)
D(2)-Sh(1)#2 2.120(9) C(10)-C(12) 1.479(12) C(10)-C(11) 1.479(12) C(20)-C(21) 1.479(12) C(20)-C(22) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.479(12) C(30)-C(32) 1.479(12) C(30)-C(31) 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(40)-C(41)#2 1.531(19) C(50)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.531(19) C(51)-C(51)#2 1.99(13) O(4)-Sn(1)-O(2) 163.8(3) O(4)-Sn(1)-O(3) 84.8(3) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 86.8(2) O(2)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(4)-Sn(1)-O(5)#1 158.9(2) O(4)-Sn(1)-C(20) 98.8(7) O(4)-Sn(1)-C(20) 105.9(10) O(3)-Sn(1)-C(10) 101.4(7) O(2)-Sn(1)-C(20) 98.8(7) O(4)-Sn(1)-C(20) 98.3(8) O(2)-Sn(1)-C(10) 102.3(8) O(2)-Sn(1)-C(10) 102.5(11) O(2)-Sn(1)-C(10) 102.5(8) O(2)-Sn(1)-C(1	2.170(5)
$\begin{aligned} & \begin{array}{lllllllllllllllllllllllllllllllllll$	2.1203) 2.131(6)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1 479(12)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1 479(12)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.479(12)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.479(12)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.478(12)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.479(12)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.531(19)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1.99(13)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	103.0(3)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	04.4(3)
$\begin{array}{ccccccc} 0.00000000000000000000000000000$	3
O(3) - Sn(1) - O(5)#1 $158.9(2)$ $O(4) - Sn(1) - C(20)$ $90.2(10)$ $O(2) - Sn(1) - C(20)$ $105.9(10)$ $O(3) - Sn(1) - C(20)$ $100.5(8)$ $O(5)#1 - Sn(1) - C(20)$ $98.8(7)$ $O(4) - Sn(1) - C(10)$ $94.7(7)$ $O(2) - Sn(1) - C(10)$ $94.7(7)$ $O(3) - Sn(1) - C(10)$ $94.7(7)$ $O(3) - Sn(1) - C(10)$ $91.3(8)$ $C(20) - Sn(1) - C(10)$ $102.3(8)$ $C(20) - Sn(1) - C(10)$ $102.5(11)$ $O(4) - Sn(1) - C(30)$ $102.5(11)$ $O(2) - Sn(1) - C(30)$ $105.5(8)$ $O(5)#1 - Sn(1) - C(30)$ $95.2(8)$ $C(20) - Sn(1) - C(30)$ $95.2(8)$ $C(20) - Sn(1) - C(30)$ $7.2(13)$ $O(4) - Sn(1) - O(1)$ $89.2(2)$ $O(2) - Sn(1) - O(1)$ $75.1(3)$ $O(3) - Sn(1) - O(1)$ $74.0(3)$ $O(3) - Sn(1) - O(1)$ $174.5(8)$ $C(10) - Sn(1) - O(1)$ $166.4(7)$ $C(30) - Sn(1) - O(1)$ $166.4(7)$ $O(5) - Sn(2) - O(5)#2$ $91.3(3)$	88.3(3)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	158.9(2)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	90.2(10)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	105.9(10)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	100.5(8)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	98.8(7)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	101.4(<i>r</i>)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	94.7(7) 98.3(8)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	102 3(8)
$\begin{array}{cccc} O(4)-Sn(1)-C(30) & 102.5(11) \\ O(2)-Sn(1)-C(30) & 93.3(11) \\ O(3)-Sn(1)-C(30) & 105.5(8) \\ O(5)\#1-Sn(1)-C(30) & 95.2(8) \\ C(20)-Sn(1)-C(30) & 7.2(13) \\ O(4)-Sn(1)-O(1) & 89.2(2) \\ O(2)-Sn(1)-O(1) & 75.1(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 166.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ $	11.7(11)
$\begin{array}{cccc} O(2)-Sn(1)-C(30) & 93.3(11) \\ O(3)-Sn(1)-C(30) & 105.5(8) \\ O(5)\#1-Sn(1)-C(30) & 95.2(8) \\ C(20)-Sn(1)-C(30) & 7.2(13) \\ O(4)-Sn(1)-O(1) & 89.2(2) \\ O(2)-Sn(1)-O(1) & 75.1(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O(5)=Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O$	102.5(11)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	93.3(11)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	105.5(8)
$\begin{array}{cccc} C(20)-Sn(1)-C(30) & 13.1(15) \\ C(10)-Sn(1)-C(30) & 7.2(13) \\ O(4)-Sn(1)-O(1) & 89.2(2) \\ O(2)-Sn(1)-O(1) & 75.1(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & 86.6(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 160.2(2) \\ \end{array}$	95.2(8)
$\begin{array}{ccccccc} C(10)-Sn(1)-C(30) & 7.2(13) \\ O(4)-Sn(1)-O(1) & 89.2(2) \\ O(2)-Sn(1)-O(1) & 75.1(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & 86.6(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.6(2) $	13.1(15)
$\begin{array}{cccc} O(4)-SI(1)-O(1) & & & S5.2(2) \\ O(2)-Sn(1)-O(1) & & & 75.1(3) \\ O(3)-Sn(1)-O(1) & & & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & & & 86.6(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & & & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & & & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & & & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & & & 91.3(3) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & & & 91.6(2) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & & & & 91.6(2) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & & & & & 91.6(2) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	1.2(13) 80.2(2)
$\begin{array}{cccc} O(3)-Sn(1)-O(1) & 74.0(3) \\ O(5)\#1-Sn(1)-O(1) & 86.6(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O(5)-Sn(2)-O(3)\#2 & 160.2(2) \\ \end{array}$	00-2(2) 75 1(3)
$\begin{array}{cccc} C(5) & C(1) & C(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & B6.6(2) \\ C(20)-Sn(1)-O(1) & 174.5(8) \\ C(10)-Sn(1)-O(1) & 166.4(7) \\ C(30)-Sn(1)-O(1) & 168.2(11) \\ O(5)-Sn(2)-O(5)\#2 & 91.3(3) \\ O(5)-Sn(2)-O(3)\#2 & 160.2(2) \\ \end{array}$	74.0(3)
C(20)-Sn(1)-O(1) 174.5(8) C(10)-Sn(1)-O(1) 166.4(7) C(30)-Sn(1)-O(1) 168.2(11) O(5)-Sn(2)-O(5)#2 91.3(3) O(5)-Sn(2)-O(3)#2 160.2(2)	86.6(2)
C(10)-Sn(1)-O(1) 166.4(7) C(30)-Sn(1)-O(1) 168.2(11) O(5)-Sn(2)-O(5)#2 91.3(3) O(5)-Sn(2)-O(3)#2 160.2(2)	174.5(8)
C(30)-Sn(1)-O(1) 168.2(11) O(5)-Sn(2)-O(5)#2 91.3(3) O(5)-Sp(2)-O(3)#2 160.2(2)	166.4(7)
O(5)-Sn(2)-O(5)#2 91.3(3) O(5)-Sp(2)-O(3)#2 160.2(2)	168.2(11)
(16) - Sp(2) - O(3) # 2 160 2(2)	91.3(3)
	160.2(2)
0(5)#2-5h(2)-0(3)#2 86.1(2) 0(5) Se(2),0(2) 86.1(2)	2 80.1(2) 96.1(2)
O(5)/51(2)/O(3) 00.1(2) O(5)/2.5p(2).O(3) 160.2(2)	00.1(2) 160.2(2)
O(3)#2-G(2)-O(3) 100.2(2) O(3)#2-G(2)-O(3) 89.7(4)	89 7(4)
Q(5)-Sn(2)-Q(1) 85.7(2)	85.7(2)
Q(5)#2-Sn(2)-Q(1) 85.7(2)	85.7(2)
O(3)#2-Sn(2)-O(1) 74.5(2)	74.5(2)
O(3)-Sn(2)-O(1) 74.5(2)	74.5(2)
O(5)-Sn(2)-C(50) 89.6(10)	89.6(10)
O(5)#2-Sn(2)-C(50) 89.6(10)	89.6(10)
U(3)#Z-5h(Z)-V(5U) 110.0(9)	110.0(9)
U(3)-511(2)-U(3U) 11U.U(9) D(4)-5(2)-C(50) 112-U(4))	110.0(9) 172 2/14
O(1)-O(12)-O(00) 173-2(14) O(5)-Sp(2)-O(40) 104 e(5)	1/ 3.2(14) 101 &/5)
0(5)#2,50(2)-C(40) 101.6(5)	101.0(3)
O(3)#2-Sn(2)-C(40) 98.2(5)	98.2(5)
Q(3)-Sn(2)-Ć(4Q) 98.2(5)	98.2(5)
O(1)-Sn(2)-C(40) 169.4(7)	169.4(7)
C(50)-Sn(2)-C(40) 17.3(13)	17.3(13)
O(6)-V(1)-O(4)#1 111.3(2)	
O(6)-V(1)-O(4) 111.34(19)	111.3(2)

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 4.

Table 3 continued		
O(4)#1-V(1)-O(4)	107.5(2)	
O(6)-V(1)-O(4)#3	111.34(19)	
O(4)#1-V(1)-O(4)#3	107.5(2)	
O(4)-V(1)-O(4)#3	107.5(2)	
Sn(2)-Ò(1)-Sn(1)#2	104.5(2)	
Sn(2)-O(1)-Sn(1)	104.5(2)	
Sn(1)#2-O(1)-Sn(1)	103.1(3)	
Sn(1)-O(2)-Śn(1)#2	106.6(4)	
Sn(1)-O(3)-Sn(2)	106.2(3)	
V(1)-O(4)-Sn(1)	141.5(4)	
Sn(2)-O(5)-Sn(1)#3	139.2(3)	
C(12)-C(10)-C(11)	110(3)	
C(12)-C(10)-Sn(1)	113(2)	
C(11)-C(10)-Sn(1)	104(2)	
C(21)-C(20)-C(22)	127(3)	
C(21)-C(20)-Sn(1)	115(2)	
C(22)-C(20)-Sn(1)	116(2)	
C(32)-C(30)-C(31)	118(3)	
C(32)-C(30)-Sn(1)	124(2)	
C(31)-C(30)-Sn(1)	111(2)	
C(41)#2-C(40)-C(41)	121(3)	
C(41)#2-C(40)-Sn(2)	111.1(15)	
C(41)-C(40)-Sn(2)	111.1(15)	
C(51)#2-C(50)-C(51)	81(6)	
C(51)#2-C(50)-Sn(2)	109(3)	
C(51)-C(50)-Sn(2)	109(3)	
C(50)-C(51)-C(51)#2	49(3)	

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

Table 4. Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 4. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12$].

	U11	U22	U33	U23	U13	U12	
Sn(2)	57(1)	60(1)	53(1)	0	0	24(1)	
V(1)	77(1)	77(1)	31(1)	0	0	39(1)	
O(1)	62(5)	53(4)	42(4)	0	0	27(4)	
O(2)	64(5)	81(6)	62(5)	0	0	36(5)	
O(3)	57(4)	68(4)	68(4)	2(3)	10(3)	22(3)	
O(4)	70(4)	82(4)	44(3)	5(3)	4(3)	35(3)	
O(5)	63(4)	75(4)	51(3)	7(3)	1(3)	35(3)	
O(6)	107(6)	107(6)	44(6)	0	0	53(3)	
O(100)	95(6)	126(8)	155(9)	20(6)	-35(6)	38(6)	
O(200)	114(8)	61(6)	60(5)	0	0	33(6)	

Table 5. Hydrogen coordinates ($x \ 10^4$) and isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$)	for 4
--	-------

	Х	у	Z	U(eq)
H(10)	-574	5827	4254	230(40)
H(11A)	810	6187	5028	230(40)
H(11B)	265	6814	5288	230(40)
H(11C)	1327	7389	4856	230(40)
H(12A)	-498	7178	3550	230(40)
H(12B)	516	7993	3971	230(40)
H(12C)	-562	7399	4384	230(40)
H(20)	434	6059	4688	230(40)
H(21A)	1707	7777	4665	230(40)
H(21B)	907	7308	5316	230(40)
H(21C)	767	7993	4718	230(40)
H(22A)	-1059	5339	4018	230(40)
H(22B)	-1126	6329	4252	230(40)
H(22C)	-1069	5595	4851	230(40)
H(30)	-415	6491	3889	230(40)
H(31A)	-437	5221	4567	230(40)
H(31B)	-891	5866	4947	230(40)
H(31C)	226	6064	5162	230(40)
H(32A)	673	8204	3933	230(40)
H(32B)	1012	8081	4724	230(40)
H(32C)	-158	7766	4567	230(40)
H(40)	-707	2530	2500	230(40)
H(41A)	16	2546	3628	230(40)
H(41B)	701	2129	3261	230(40)
H(41C)	-526	1429	3267	230(40)
H(50)	962	2395	2500	230(40)

8.5 [(iPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆][(iPrSn)₃(OV)₄O₁₀(OH)₃] · 4 DMSO (5)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 5.

Empirical formula	C ₅₃ H ₁₃₈ O ₄₁ S ₄ Sn ₁₅ V ₄
Formula weight	3543.98
Temperature	373(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Hexagonal, P-6(5)
Unit cell dimensions	a = 13.7632(3) Å α = 90 °
	b = 13.7632(3) Å β = 90 °
	c = 95.061(4) Å γ = 120 °
Volume	15594.6(8) A ³
Z, Calculated density	6, 2.264 Mg/m ³
Absorption coefficient	4.025 mm ^{-↑}
F(000)	10140
Crystal size	0.10 x 0.10 x 0.08 mm
Theta range for data collection	1.71 to 28.33 °
Limiting indices	-15≤h≤17, -18≤k≤12, -125≤l≤126
Reflections collected / unique	106934 / 24727 [R(int) = 0.0489]
Completeness to theta	= 28.33 97.8 %
Max. And min. Transmission	0.7390 and 0.6890
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	24727 / 25 / 817
Goodness-of-fit on F ²	1.118
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0454, wR2 = 0.0859
R indices (all data)	R1 = 0.0496, wR2 = 0.0873
Absolute structure parameter	0.03(2)
Largest diff. Peak and hole	1.430 and -1.474 e.Å ⁻³

Set 1 7 6 500 Set 2 711211 100111 42711 2011 Set 2 711211 100111 42711 2011 Set 0 52411 -104511 12211 2011 Set 0 572411 -104511 12211 1711 Set 0 647711 -15411 48611 1411 Set 0 647711 -15411 48611 2011 Set 0 647711 -15811 2011 2011 Set 0 64811 -77611 13611 2011 2011 Set 0 64811 -77611 13611 2011 2011 Set 0 537261 445215 -69411 2211 2011 Set 0 537261 534160 -77711 2221 2211 2211 O(2) 854151 403250 -39311 2211 2211 O(1) 737760 53460 -22711 2211 2211 O(1)		X	V	7	Ll(eq)
Sh(1) 7448(1) 1620(1) 781(1) 18(1) Sirial 7121(1) 201(1) 201(1) 201(1) Sirial 872(1) 201(1) 201(1) 201(1) Sirial 687(1) -1548(1) 482(1) 18(1) Sirial 687(1) -1547(1) 18(1) 22(1) Sirial 6861(1) -2724(1) 18(1) 17(1) Sirial 6861(1) -2724(1) 18(1) 27(1) Sirial 795(1) -796(1) -70(1) 27(1) Sirial 195(1) 274(1) 18(1) 27(1) Sirial 195(1) 274(1) 27(1) 27(1) Sirial 195(1) 274(1) 27(1) 27(1) O(1) 1977(5) 256(2) -397(1) 27(1) O(2) 856(6) -272(1) 27(1) 27(1) O(3) 656(6) 356(6) -272(1) 27(1) O(4) 567(6) 356(6) -367(1)		Λ	j	L	0(04)
Sh20 712(1) (001(1) 22(1) 20(1) Sh20 SF24(1) -1045(1) 132(1) 17(1) Sh(0) SF24(1) -1045(1) 132(1) 17(1) Sh(0) SF24(1) -1045(1) 132(1) 23(1) Sh(0) SF24(1) -175(1) 32(1) 23(1) Sh(0) SF24(1) -175(1) 32(1) 23(1) Sh(1) -175(1) 130(1) 17(1) 24(1) Sh(1) 1372(5) -75(1) 24(1) 32(1) Sh(1) 1372(5) 445(1) -77(1) 32(1) Sh(1) 1372(5) 534(6) -563(1) 27(1) 24(1) Sh(1) 1372(5) 534(6) -563(1) 27(1) 24(1) O(1) 537(6) 534(6) -563(1) 27(1) 24(1) O(1) 537(6) 534(6) -453(1) 27(1) 24(1) O(1) 10372(5) 54(5) -15(1) 27(1) 27(1) <td>Sn(1)</td> <td>7448(1)</td> <td>1620(1)</td> <td>79(1)</td> <td>18(1)</td>	Sn(1)	7448(1)	1620(1)	79(1)	18(1)
Ship Section Control Control <thcontrol< th=""> <thcontrol< th=""> <thcont< td=""><td>Sn(2)</td><td>7112(1)</td><td>1001(1)</td><td>427(1)</td><td>20(1)</td></thcont<></thcontrol<></thcontrol<>	Sn(2)	7112(1)	1001(1)	427(1)	20(1)
Sele 2724(1) 1048(1) 432(1) 117(1) Sele 342(1) 1252(1) 328(1) 23(1) Sele 342(1) 1252(1) 328(1) 23(1) Sele 342(1) 1257(1) 13(1) 12(1) Sele 336(1) 766(1) 130(1) 17(1) Sele 336(1) 140(1) 70(1) 21(1) Sele 336(1) 140(1) 70(1) 21(1) Sele 346(6) 71(1) 22(1) 22(1) Sele 3416(1) 22(1) 22(1) 22(1) Sele 3416(1) 42(2) 64(1) 22(1) Sele 3416(1) 42(2) 64(1) 22(1) Sele 3416(2) 3416(2) 341(1) 21(1) Sele 3416(2) 341(2) 32(1) 22(1) O(5) 658(6) 340(1) 26(1) 21(1) O(6) 658(6) 340(1) 21(1) 21(1) <t< td=""><td>Sn(3) Sn(4)</td><td>9862(1)</td><td>2549(1) 617(1)</td><td>234(1)</td><td>23(1)</td></t<>	Sn(3) Sn(4)	9862(1)	2549(1) 617(1)	234(1)	23(1)
Selio 687(7) 1687(7) 1687(7) 1687(7) 1617(7) Selio 9482(7) -1725(1) -324(7) 22(1) Selio 9482(7) -1725(1) -30(7) 22(1) Selio 9482(7) -1725(1) -20(1) 22(1) Selio 9482(7) 948(7) 20(1) 22(1) Selio 9482(7) 4420(7) -70(7) 22(1) O(2) 1022(8) 4420(8) -77(7) 22(1) O(3) 777(8) 5341(8) -77(7) 22(1) O(4) 9849(8) 1988(8) -77(7) 22(1) O(5) 5744(8) 2368(8) -327(7) 22(1) O(6) 255(6) 3368(6) -327(7) 22(1) O(7) 6568(8) 3368(6) -327(7) 22(1) O(11) 1982(8) 1738(8) -867(7) 27(1) O(11) 1982(8) 1738(8) -867(7) 27(1) O(11) 1982(8) 272	Sn(4) Sn(5)	5724(1)	-1048(1)	132(1)	17(1)
Shrip 9103(1) -1725(1) 329(1) 22(1) Shrip 642(1) -1757(1) 180(1) 101(1) Shrip 672(1) -2724(1) 180(1) 27(1) Shrip 672(1) -2724(1) 180(1) 27(1) Shrip 988(1) -271(1) 22(1) Shrip 988(1) -372(1) 22(1) Col 9747(6) 554(6) -372(1) 22(1) Col 8774(6) 2588(6) -577(1) 21(1) Col 8774(6) 2588(6) -577(1) 21(1) Col 848(6) -322(1) 22(2) 22(2) Col 848(6) -327(1) 21(1) 21(1) Col 848(6) -327(1) 21(2) 22(2) Col 9774(6) 238(6) -327(1) 21(2) Col 9772(6) 403(6) -327(1) 21(1) Col 9772(6) 238(1) 20(1) Col 9772(6)	Sn(6)	6617(1)	-1584(1)	488(1)	18(1)
Sn(B) 9462(1) -1157(1) -13(1) 21(1) Sn(B) 0601(1) -2724(1) 1801(1) 28(1) Sn(12) 955(1) 4120(1) -70(1) 28(1) Sn(12) 955(1) 4120(1) -70(1) 28(1) O(1) 10372(5) 4122(5) -504(1) 22(1) O(2) 8612(9) -502(5) -504(1) 22(1) O(2) 8612(9) -502(5) -503(1) 20(1) O(5) 577(4) 2088(8) -577(1) 21(1) O(6) 8241(5) 4032(5) -563(1) 21(2) O(10) 1062(8) 4345(8) -867(1) 21(2) O(11) 10379(6) 4033(6) -867(1) 21(2) O(12) 653(5) -107(1) 21(2) 21(1) O(12) 653(5) -107(1) 21(2) 21(1) O(14) 1075(5) -178(5) 107(1) 21(1) O(15) 6533(5) -162(1) 21	Sn(7)	9103(1)	-1725(1)	329(1)	23(1)
She0p 6861(1) 2724(1) 180(1) 191(1) She0p 7680(1) 7680(1) 760(1) 24(1) She1p1 1017(2) 81412 22(1) 24(1) She1p1 1017(2) 550(2) -394(1) 22(1) O(2) 812(2) 550(2) -397(1) 23(1) O(3) 7477(2) 534(16) -577(1) 21(1) O(3) 8774(6) 2886(6) -577(1) 21(1) O(6) 824(16) 4326(6) -347(1) 21(1) O(7) 6006(6) 3384(6) -577(1) 21(2) O(7) 6006(6) 3384(6) -423(1) 21(1) O(1) 10182(6) 13416(6) -423(1) 21(1) O(1) 10182(6) 1784(6) 384(1) 21(1) O(1) 10182(6) 1784(6) 384(1) 21(1) O(1) 10182(6) 1784(6) 380(1) 21(1) O(1) 10182(6) 1784(6) 380(Sn(8)	9462(1)	-1157(1)	-13(1)	22(1)
Shif(1) 1082(1) 281(1) 201(1) 21(1) 0(1) 0072(5) 442(6) 504(1) 21(1) 0(1) 0072(5) 442(6) 504(1) 22(1) 0(2) 8474(6) 5502(5) -397(1) 22(1) 0(3) 7477(6) 5344(6) -727(1) 22(1) 0(6) 8249(6) 4322(5) -533(1) 20(1) 0(6) 8241(6) 4332(6) -533(1) 22(1) 0(7) 606(5) 3346(5) -327(1) 22(1) 0(8) 6216(6) 3346(5) -647(1) 772(2) 0(11) 1339(6) -627(1) 24(1) 26(1) 0(12) 6755(5) 92(5) -16(1) 17(1) 0(13) 9772(5) -772(6) 346(1) 21(1) 0(14) 1015(5) -788(5) 260(1) 21(1) 0(15) 843(5) -162(5) 26(1) 21(1) 0(14) 1015(2) 28(1) 21(1)	Sn(9)	6681(1) 7206(1)	-2724(1)	186(1)	18(1)
Shi(2) 9915(1) 1410(1) -70(1) 21(1) O(1) 10372(6) 4152(6) -694(1) 22(1) O(2) 8612(6) 652(2) -397(1) 25(1) O(3) 747(6) 1288(6) -767(1) 22(1) O(3) 877(6) 1288(6) -767(1) 21(1) O(7) 8606(5) 300(6) -348(1) 19(1) O(7) 8606(5) 300(6) -348(1) 19(1) O(7) 8606(5) 300(5) -348(1) 21(1) O(7) 8606(5) 300(5) -467(1) 27(2) O(11) 9737(6) 403(6) -467(1) 27(1) O(13) 9727(5) 42(5) 11(1) 161(1) O(14) 10163(5) 1278(6) 304(1) 18(1) O(14) 10163(5) 127(5) 304(1) 18(1) O(14) 10163(5) 127(5) 304(1) 18(1) O(14) 10163(5) 277(5) 337(1) <td>Sn(10) Sn(11)</td> <td>10826(1)</td> <td>-790(1) 898(1)</td> <td>291(1)</td> <td>26(1)</td>	Sn(10) Sn(11)	10826(1)	-790(1) 898(1)	291(1)	26(1)
O(1) 10372(b) 4132(b) 494(1) 22(1) O(2) 862(b) 5622(c) 397(1) 25(1) O(3) 747(b) 534(b) 472(1) 32(1) O(6) 874(c) 1288(b) 477(1) 21(1) O(6) 824(c) 3288(c) 438(1) 19(1) O(7) 6506(c) 338(c) -434(1) 22(1) O(7) 6506(c) 338(c) -45(1) 27(2) O(10) 827(5) 338(c) -45(1) 27(2) O(11) 9377(6) 440(c) 45(1) 25(1) O(12) 675(5) 32(5) 440(1) 25(1) O(14) 106(5(5) 172(6) 346(1) 25(1) O(14) 106(5(5) 172(6) 346(1) 25(1) O(14) 106(5(5) 172(6) 346(1) 21(1) O(17) 862(5) 336(5) 407(1) 18(1) O(21) 862(5) 336(5) 407(1) 18(Sn(12)	9915(1)	1410(1)	-70(1)	21(1)
O(2) 8812(6) 5502(5) -397(1) 2511 O(3) 747(6) 5344(6) -718(1) 2511 O(4) 8946(6) 1966(6) -718(1) 2511 O(7) 6506(6) 3020(6) -348(1) 1911 O(7) 6506(6) 1300(6) -4621(1) 2612 O(10) 8256(6) 1300(6) -4621(1) 2612 O(11) 1052(6) 426(5) -5(1) 711 O(12) 9756(5) 326(5) -5(1) 711 O(14) 10163(5) 1738(6) 364(1) 25(1) O(14) 10163(5) -1328(5) 26(1) 111 O(15) 5313(5) -55(5) 364(1) 111 O(16) 10623(6) 432(5) 20(1) 711 O(16) 10623(6) 432(5) 20(1) 211 O(16) 1063(5) 436(5) 20(1) 211 O(17) 766(5) 432(1) 211 211	O(1)	10372(5)	4152(5)	-594(1)	22(1)
D(3) 44/(8) 544(18) 42/(1) 32(2) D(6) 854(6) 1888(6) 7(10) 21(1) D(6) 824(15) 4362(2) -638(1) 21(1) D(7) 6606(5) 3346(5) -327(1) 22(1) D(8) 824(5) 3446(5) -327(1) 22(1) D(9) 6606(6) 1390(6) 482(1) 21(2) D(11) 10882(6) 3416(6) -823(1) 31(2) D(11) 9778(6) 435(6) -460(1) 27(1) D(13) 9777(5) 272(6) 440(1) 27(1) D(14) 1063(5) 1738(5) 508(1) 21(1) D(15) 5313(5) -551(5) 528(1) 21(1) D(16) 6333(5) -1329(5) 41(1) 18(1) D(20) 7608(5) 217(5) 137(1) 19(1) D(16) 6333(5) -1329(5) 41(1) 21(1) D(21) 876(5) 137(1) 19(1)	O(2)	8612(6)	5502(5)	-397(1)	25(1)
Org 2774(b) 2884(b) 4971(b) 241(b) OC6 8241(b) 4032(b) -9371(b) 21(b) OC7 6806(b) 3944(b) -327(b) 22(c) OC9 6215(b) 3944(b) -327(b) 22(c) O(10) 10952(b) 3415(b) -423(b) 31(2) O(12) 9752(b) 42(c) -15(1) 27(1) O(14) 10163(s) 1758(b) 26(c) 21(1) 21(c) O(14) 10163(s) 1758(b) 26(c) 11(1) 21(c) O(16) 6333(b) 1523(b) 26(c) 11(1) 21(c) O(16) 7396(b) 152(c) 11(1) 18(1) O(20) 7896(b) 228(c) 230(1) 18(1) O(21) 7495(b) 228(c) 230(1) 18(1) O(22) 2894(b) 227(c) 440(c) 22(c) O(23) 8158(b) 1991(b) 233(1) 18(1) O(24)	O(3)	7477(6)	5341(6)	-672(1)	32(2)
Ce_0 $E2416_0$ $E3226_0$ $E381_0$ 2601_1 $C(P)$ $E906_0$ $3484(5)$ $-327(1)$ $22(1)$ $C(9)$ $E506_0$ $3484(5)$ $-327(1)$ $22(1)$ $C(10)$ $19922(6)$ $3415(6)$ $-4224(1)$ 2162_0 $O(12)$ $19736(6)$ $426(6)$ $-421(1)$ $27(1)$ $O(13)$ $9772(6)$ $472(6)$ $440(1)$ $25(1)$ $O(14)$ $10763(5)$ $758(6)$ $326(6)$ $-107(1)$ $1912(2)$ $O(14)$ $1063(5)$ $758(6)$ $426(6)$ $-107(1)$ $18(1)$ $O(16)$ $5343(6)$ $-1228(6)$ $407(1)$ $18(1)$ $O(20)$ $7508(6)$ $-2237(5)$ $137(1)$ $18(1)$ $O(21)$ $872(6)$ $-1735(5)$ $465(1)$ $20(1)$ $O(22)$ $828(6)$ $-2277(5)$ $37(1)$ $18(1)$ $O(23)$ $8196(6)$ $-132(1)$ $24(1)$ $22(1)$ $O(23)$ 82	O(4) O(5)	5774(5)	2968(5)	-597(1)	20(1)
O/T) 6006(b) 3260(b) -344(1) 19(1) O(B) 9255(b) 3846(b) -327(1) 22(1) O(B) 6508(b) 1390(b) -882(1) 34(2) O(10) 10982(b) 3415(b) -482(1) 34(2) O(11) 1373(b) 433(b) -457(1) 27(2) O(14) 10163(b) 1758(b) 396(1) 25(1) O(15) 5913(b) -55(5) 25(1) 17(1) O(16) 6333(b) -1928(b) 20(1) 17(1) O(17) 10622(b) 382(b) 107(1) 19(1) O(13) 745(b) -228(b) 30(1) 18(1) O(21) 762(b) -238(b) 30(1) 19(1) O(22) 828(b) -178(b) 237(1) 19(1) O(24) 828(b) 2147(b) 237(1) 19(1) O(25) 684(b) 133(1) 27(1) 19(1) O(26) 1683(b) 160(b) 133(1)	O(6)	8241(5)	4032(5)	-593(1)	20(1)
O(e) 9215(6) 3446(6) -427(1) 22(1) O(10) 10942(6) 3415(6) -452(1) 312 O(11) 10942(6) 3415(6) -457(1) 2712 O(13) 6772(6) 972(6) 440(1) 2712 O(14) 10163(5) 756(5) 526(1) 27(1) O(15) 5913(6) -1525(5) 25(1) 17(1) O(16) 6333(6) -162(5) 14(1) 16(1) O(17) 10522(6) 326(5) 340(1) 18(1) O(20) 7306(5) -162(5) 14(1) 16(1) O(21) 7305(5) -162(5) 340(1) 18(1) O(22) 8245(5) 247(5) 337(1) 19(1) O(23) 8245(5) -1725(5) -165(1) 20(1) O(24) 8226(5) 247(5) 237(1) 19(1) O(25) 6316(5) 1908(5) 247(1) 20(1) O(26) 5866(5) -1725(5) 458(1)	O(7)	6906(5)	3080(5)	-348(1)	19(1)
D(1) E334(b) 1340(b) -882(1) 21(2) O(12) 5675(b) 3415(b) -823(1) 31(2) O(12) 5775(b) 422(b) -15(1) 27(1) O(13) 9775(b) 422(b) -16(1) 25(1) O(14) 10163(5) 1758(b) 366(1) 21(1) O(15) 5913(b) -551(5) 562(1) 21(1) O(16) 6333(b) -1923(b) 26(1) 17(1) O(16) 6333(b) -1923(b) 26(1) 17(1) O(17) 10622(b) 382(b) 11(1) 18(1) O(20) 798(b) -33(5) 37(1) 19(1) O(21) 8672(b) 40(5) -237(1) 19(1) O(22) 828(b) 119(b) 238(1) 16(1) O(24) 828(b) 1412(5) 237(1) 19(1) O(26) 566(2) 1437(6) 463(1) 27(1) O(26) 1663(2) 196(1) 27(1)	O(8)	9215(5)	3846(5)	-327(1)	22(1)
0(1) 0776(6) 40310 387(1) 5772 0(12) 6756(5) 502(5) +16(1) 27(1) 0(13) 9772(5) 2773(6) 440(1) 26(1) 0(14) 10163(5) 1556(5) 336(1) 21(1) 0(15) 5913(5) -1529(5) 25(1) 17(1) 0(16) 6333(5) -1529(5) 25(1) 17(1) 0(17) 10622(6) 382(6) -107(1) 26(2) 0(18) 2736(5) -226(6) 380(1) 18(1) 0(21) 8776(5) -246(6) 280(1) 18(1) 0(22) 8756(5) -277(5) 284(1) 22(1) 0(23) 8158(5) -1785(5) 180(1) 21(1) 0(24) 8286(5) -1785(5) 284(1) 22(1) 0(25) 630(5) 1981(6) 132(1) 24(1) 0(26) 1068(5) 1981(6) 132(1) 24(1) 0(26) 10686(5) 1981(6) 424(1	O(9)	6508(6)	1390(6)	-682(1)	26(2)
C121 C758(5) 92(6) -16(1) 27(1) C143 9778(5) 272(6) 440(1) 25(1) C144 10163(6) 1758(5) 396(1) 25(1) C145 5933(5) -551(5) 526(1) 27(1) C161 6333(5) -1929(5) 25(1) 17(1) C171 10622(6) 382(6) -107(1) 18(1) C181 8739(5) -162(5) 11(1) 18(1) C192 8728(5) -228(6) 380(1) 18(1) C221 8728(5) -1787(5) 137(1) 20(1) C223 8728(5) 2147(5) 237(1) 19(1) C261 6366(5) -1991(5) 232(1) 24(1) C262 6320(5) 1303(5) 132(1) 24(1) C263 6366(5) -1991(5) 284(1) 27(1) C264 6366(5) 1303(5) 432(1) 21(1) C27 10683(5) 1503(5) 438(1)	O(10) O(11)	9379(6)	4033(6)	-857(1)	27(2)
Orisi 9772(5) -272(6) 440(1) 25(1) O(14) 1053(5) 155(5) 396(1) 25(1) O(15) 5913(5) -551(5) 526(1) 21(1) O(17) 10622(5) 342(5) -107(1) 24(2) O(18) 9736(5) -162(5) 347(1) 16(1) O(20) 7088(5) -2277(5) 137(1) 19(1) O(21) 8728(5) -2147(5) 284(1) 22(1) O(22) 8286(5) -1756(5) -166(1) 20(1) O(24) 8288(5) 2147(5) 284(1) 22(1) O(25) G310(5) 412(5) 237(1) 19(1) O(26) 5866(5) -1981(5) 289(1) 20(1) O(26) 5866(5) -1981(5) 232(1) 21(2) O(26) 7494(5) 6396(6) 439(1) 20(1) O(27) 1083(5) 1080(5) 439(1) 21(1) O(26) 749(6) 460(6) 4	O(12)	6755(5)	92(5)	-15(1)	17(1)
C)(14) 10163(5) 1758(5) 396(1) 25(1) C)(15) 533(5) -1529(5) 25(1) 17(1) C)(16) 6338(5) -1529(5) 25(1) 17(1) C)(17) 10622(6) 322(5) -107(1) 16(1) C)(18) 2738(5) -266(6) 320(1) 16(1) C)(21) 7826(5) -227(5) 137(1) 19(1) C)(22) 2838(5) -1785(5) 156(1) 20(1) C)(24) 6238(5) 137(1) 19(1) 10(1) C)(26) 6366(5) -1981(5) 238(1) 24(1) C)(26) 6366(5) -1981(5) 238(1) 24(1) C)(26) 6366(5) 1080(5) 438(1) 21(1) C)(26) 6366(5) 1080(5) 438(1) 21(1) C)(26) 6366(5) 1080(5) 439(1) 21(2) C)(26) 636(5) 1636(5) 439(1) 21(1) C)(27) 10683(5) 1386(6)	O(13)	9772(5)	-272(6)	440(1)	25(1)
Q(16) 5313(6) -551(5) 526(1) 21(1) Q(16) G333(5) -1329(5) 26(1) 17(1) Q(17) 10522(6) 382(6) -107(1) 29(2) Q(18) 6738(6) -226(6) 30(1) 22(1) Q(21) 8672(6) 640(5) -230(1) 22(1) Q(22) 8138(6) -7277(5) 137(1) 19(1) Q(23) 8138(6) -7277(5) 237(1) 19(1) Q(24) 8286(6) 2147(5) 284(1) 22(1) Q(25) 6310(6) 412(5) 237(1) 19(1) Q(26) 5866(5) 190(5) 289(1) 16(1) Q(27) 10633(5) 1400(5) 432(1) 20(1) Q(28) 9068(5) 5386(6) -673(1) 312(1) Q(28) 9068(5) 5386(6) -673(1) 312(2) Q(23) 7484(6) 5386(6) 673(1) 22(1) Q(24) 9885(6) 538(6)	O(14)	10163(5)	1758(5)	396(1)	25(1)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	O(15)	5913(5)	-551(5)	526(1)	21(1)
Qi(is) 4736(b) 462(b) 11(1) 16(1) Qi(is) 7485(b) -2226(b) 380(1) 18(1) Qi(2) 7808(b) -39(b) 407(1) 18(1) Qi(2) 875(b) -60(b) -230(1) 22(1) Qi(2) 8758(b) -1785(b) 137(1) 19(1) Qi(2) 8758(b) -1785(b) 284(1) 22(1) Qi(2) 6310(b) 412(b) 284(1) 22(1) Qi(2) 5866(b) -1991(b) 289(1) 16(1) Qi(2) 10683(5) 1300(b) 432(1) 20(1) Qi(2) 10279(6) -567(b) 186(1) 25(2) Qi(3) 7449(5) 1530(b) -433(1) 26(1) Qi(3) 7649(6) -516(1) 26(1) 26(1) Qi(3) 7649(6) 2586(6) -571(1) 26(1) Qi(3) 7649(6) 2586(6) 471(1) 26(1) Qi(3) 7649(6) 2586(6)	O(10)	10622(6)	-1929(5) 382(6)	25(1) -107(1)	29(2)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	O(17)	8739(5)	-162(5)	11(1)	16(1)
Q(20) 7808(5) -39(5) 407(1) 18(1) Q(21) 8276(5) -40(5) -23(1) 22(1) Q(22) 8286(5) -1785(5) -165(1) 20(1) Q(24) 8288(5) 2147(5) 284(1) 22(1) Q(25) 6310(5) 412(5) 237(1) 19(1) Q(26) 5866(5) -1991(5) 289(1) 16(1) Q(27) 10683(5) 1008(5) 132(1) 24(1) Q(28) 9068(5) 2100(5) 439(1) 20(1) Q(29) 10279(6) 567(6) 185(1) 27(2) Q(30) 7849(5) 1630(5) -439(1) 20(1) Q(31) 4831(6) 1589(6) -673(1) 31(2) Q(33) 7215(6) 70(6) 624(1) 28(1) Q(34) 7682(6) 2568(8) 84(1) 26(1) Q(35) 6963(6) 366(6) -647(1) 31(2) Q(36) 7887(6) 4855(5) 647(O(19)	7485(5)	-2286(5)	380(1)	18(1)
Q[21] 8672(5) 640(5) -230(1) 22(1) Q[22] 8286(5) -1785(5) -166(1) 20(1) Q[24] 8288(5) -1475(5) 244(1) 22(1) Q[25] 6310(5) 412(5) 237(1) 19(1) Q[26] 5866(5) -1991(5) 238(1) 24(1) Q[26] 5866(5) 1908(5) 433(1) 20(1) Q[28] 9088(5) 1503(5) 439(1) 20(1) Q[29] 10279(6) -567(6) 452(1) 22(2) Q[30] 7849(5) 1503(5) -67(1) 21(2) Q[31] 4831(6) 1589(6) -673(1) 21(2) Q[33] 7215(6) -70(6) -624(1) 26(1) Q[34] 7682(6) 2366(8) 848(1) 25(1) Q[35] 6963(6) 3366(6) 589(1) 24(1) Q[34] 7651(6) 2367(6) 541(1) 24(1) Q[35] 6963(8) 3366(8) <td< td=""><td>O(20)</td><td>7808(5)</td><td>-39(5)</td><td>407(1)</td><td>18(1)</td></td<>	O(20)	7808(5)	-39(5)	407(1)	18(1)
OL22) 6289(5) -227(7) 157(1) 19(1) OL23) 8158(5) -1785(5) -165(1) 22(1) OL24) 8289(5) 2147(5) 284(1) 22(1) OL25) 6310(5) 412(5) 237(1) 19(1) OL26) 5869(5) -1991(5) 289(1) 24(1) OL27) 10683(5) 2100(5) 42(1) 22(1) OL28) 9068(5) 2100(5) 42(1) 22(2) OL30) 7448(6) 1630(5) -439(1) 22(2) OL31) 4831(6) 5986(6) -673(1) 31(2) OL33) 7215(6) -70(6) -624(1) 22(2) OL34) 7682(6) 2151(5) -159(1) 22(1) OL35) 6853(6) 2598(8) 84(1) 22(1) OL36) 787(6) 1625(5) 59(1) 24(1) OL37) 8407(8) 1628(6) 54(1) 34(2) OL31) 518(10) 247(1) 34(2)	O(21)	8672(5)	640(5)	-230(1)	22(1)
O[2d] $B28(6)$ $-247(6)$ $-284(1)$ $22(1)$ $O[25)$ $B310(6)$ $412(6)$ $237(1)$ $9(1)$ $O[26)$ $5966(6)$ $-1991(5)$ $237(1)$ $16(1)$ $O(27)$ $10663(5)$ $1904(5)$ $237(1)$ $24(1)$ $O(28)$ $9060(6)$ $2100(5)$ $42(1)$ $21(1)$ $O(28)$ $10279(6)$ $-567(6)$ $185(1)$ $27(2)$ $O(30)$ $7048(6)$ $1589(6)$ $-622(1)$ $32(2)$ $O(31)$ $4311(6)$ $1589(6)$ $-622(1)$ $32(2)$ $O(33)$ $7215(6)$ $-70(6)$ $-624(1)$ $28(2)$ $O(33)$ $7215(6)$ $-70(6)$ $-624(1)$ $28(1)$ $O(34)$ $7692(6)$ $215(5)$ $589(1)$ $24(1)$ $O(35)$ $6863(6)$ $3366(6)$ $-448(1)$ $28(1)$ $O(34)$ $782(6)$ $215(5)$ $589(1)$ $24(1)$ $O(35)$ $6863(6)$ $1625(5)$ $589(1)$ $24(1)$ $O(37)$ $8407(5)$ $1625(5)$ $589(1)$ $24(1)$ $O(34)$ $7453(9)$ $2067(9)$ $-14(1)$ $32(2)$ $O(11)$ $6615(8)$ $2398(8)$ $84(1)$ $28(2)$ $O(12)$ $7643(9)$ $1903(9)$ $518(1)$ $72(4)$ $O(12)$ $783(8)$ $190(1)$ $42(2)$ $O(12)$ $7843(9)$ $1903(9)$ $518(1)$ $33(3)$ $O(12)$ $7843(9)$ $1903(9)$ $518(1)$ $72(4)$ $O(12)$ $7843(9)$ $170(10)$ $492(1)$ $38(3)$	0(22)	8286(5)	-2277(5) -1785(5)	-165(1)	19(1) 20(1)
$\begin{array}{cccc} \dot{O}(25) & 6310(5) & 412(5) & 237(1) & 19(1) \\ 0(27) & 16833(5) & 1991(5) & 289(1) & 16(1) \\ 0(27) & 9686(5) & 2100(5) & 42(1) & 20(1) \\ 0(29) & 9088(5) & 2100(5) & 42(1) & 21(2) \\ 0(30) & 74949(5) & 1599(6) & -439(1) & 27(2) \\ 0(31) & 74831(6) & 1599(6) & -439(1) & 22(2) \\ 0(32) & 72849(5) & 1599(6) & -6773(1) & 31(2) \\ 0(33) & 7215(6) & 70(6) & -622(1) & 32(2) \\ 0(33) & 7215(6) & 70(6) & -622(1) & 32(2) \\ 0(34) & 7892(6) & 2151(5) & -158(1) & 25(1) \\ 0(35) & 6963(6) & 3966(6) & -673(1) & 25(1) \\ 0(36) & 7887(6) & -395(5) & 647(1) & 25(1) \\ 0(36) & 7887(6) & -395(5) & 647(1) & 25(1) \\ 0(36) & 7887(6) & -395(5) & 647(1) & 22(1) \\ 0(37) & 8407(5) & 1625(5) & 598(1) & 24(1) \\ 0(11) & 6615(8) & 2598(8) & 84(1) & 22(2) \\ 0(11) & 5618(9) & 2087(9) & -14(1) & 32(2) \\ 0(22) & 7453(9) & 3856(9) & 52(1) & 34(2) \\ 0(21) & 5154(9) & 1440(10) & 462(1) & 34(2) \\ 0(22) & 7084(10) & 1470(10) & 499(1) & 42(3) \\ 0(33) & 11009(9) & 4356(9) & 253(1) & 72(4) \\ 0(23) & 11253(17) & 4662(17) & 397(2) & 92(6) \\ 0(44) & 10228(11) & 1188(11) & 727(1) & 46(3) \\ 0(44) & 10228(11) & 1188(11) & 727(1) & 46(3) \\ 0(44) & 10228(1) & 1736(8) & 91(1) & 28(2) \\ 0(44) & 10228(1) & 1736(8) & 91(1) & 28(2) \\ 0(44) & 10228(1) & -1735(8) & 91(1) & 28(2) \\ 0(5) & 3967(8) & -1735(8) & 91(1) & 28(2) \\ 0(5) & 3967(8) & -1735(8) & 91(1) & 28(2) \\ 0(6) & 5482(8) & -3033(8) & 604(1) & 33(2) \\ 0(6) & 5482(8) & -3033(8) & 604(1) & 33(2) \\ 0(6) & 5482(8) & -3033(8) & 604(1) & 33(2) \\ 0(6) & 5482(8) & -3033(8) & 604(1) & 33(2) \\ 0(7) & 9672(10) & -2673(10) & 425(1) & 34(2) \\ 0(61) & 5432(9) & -2098(9) & -353(1) & 48(3) \\ 0(61) & 10238(1) & -3634(1) & -32(1) & 48(3) \\ 0(61) & 10238(1) & -3634(1) & -33(1) & 48(3) \\ 0(61) & 10238(1) & -3634(1) & -32(1) & 48(3) \\ 0(61) & 10238(1) & -3634(1) & -33(1) & 34(2) \\ 0(61) & 5437(9) & -5130(9) & -271(1) & 34(2) \\ 0(61) & 5437(9) & -5130(9) & -271(1) & 34(2) \\ 0(61) & 5437(9) & -5130(9) & -271(1) & 34(2) \\ 0(61) & 5457(9) & -5448(9) & -305(1) & 22(2) \\ 0(10) & 6253(8) & -1345(6) & -305(1) & 22(2) \\ 0(10) & 6253($	O(24)	8288(5)	2147(5)	284(1)	22(1)
Cl2b S566(5) -1991(5) 289(1) 16(1) O(27) 10683(5) 2100(5) 42(1) 20(1) O(28) 9068(5) 2100(5) 42(1) 20(1) O(29) 10279(6) -567(6) 185(1) 27(2) O(30) 7849(5) 1630(5) -439(1) 32(2) O(33) 7215(6) -70(6) -624(1) 28(2) O(34) 7692(6) 2151(5) -159(1) 25(1) O(35) 6963(6) 258(8) 64(1) 25(1) O(36) 7887(6) -896(5) 647(1) 25(1) O(37) 6407(5) 1625(5) 639(1) 24(1) O(11) 6518(8) 2598(8) 64(1) 32(2) O(12) 7639(9) 3856(9) 52(1) 34(2) C(11) 6518(9) 258(1) 34(2) C(11) 514(9) 140(10) 462(1) 39(3) C(21) 534(9) 140(1) 462(3) 20(3)	O(25)	6310(5)	412(5)	237(1)	19(1)
Q(27)10883(5)1808(5)132(1)24(1) $Q(28)$ 9088(5)2100(5)42(1)20(1) $Q(30)$ 7849(5)1630(5)-439(1)22(2) $Q(31)$ 4831(6)1589(6)-822(1)32(2) $Q(33)$ 7215(6)-70(6)-673(1)31(2) $Q(34)$ 7682(6)2151(5)-159(1)25(1) $Q(35)$ 6983(6)3366(6)-848(1)25(1) $Q(36)$ 7887(6)485(5)647(1)25(1) $Q(36)$ 7687(6)1625(5)589(1)24(1) $Q(37)$ 8407(5)1625(5)589(1)24(1) $Q(11)$ 5618(9)2087(9)-14(1)32(2) $Q(11)$ 5618(9)2087(9)518(1)34(2) $C(12)$ 743(9)3866(9)52(1)34(2) $C(12)$ 763(9)1440(10)462(1)39(3) $C(22)$ 6338(9)1903(9)518(1)34(2) $C(21)$ 514(9)1440(10)462(1)39(3) $C(22)$ 7084(10)3170(10)499(1)42(3) $C(31)$ 1009(9)4356(9)253(1)50(3) $C(31)$ 10058(9)257(1)39(2)98(6) $C(44)$ 10289(11)118(11)727(1)46(3) $C(44)$ 10289(10)-173(8)91(1)28(2) $C(41)$ 10276(18)277(1)397(2)99(6) $C(41)$ 10289(10)-173(1)46(3)27(1) $C(51)$ 3940(9)-303(8)	O(26)	5866(5)	-1991(5)	289(1)	16(1)
O(29)9068(5)2100(5)42(1)20(1) $O(30)$ 7849(6)1650(6)439(1)20(1) $O(31)$ 4831(6)1559(6)-822(1)32(2) $O(32)$ 9885(6)5986(6)-673(1)31(2) $O(33)$ 7215(6)-70(6)-624(1)28(2) $O(34)$ 7692(6)2151(5)-158(1)25(1) $O(35)$ 6963(6)3366(6)-844(1)25(1) $O(36)$ 7887(6)-895(5)647(1)26(2) $O(37)$ 8407(6)1625(5)599(1)24(1) $O(37)$ 8407(6)1625(5)599(1)24(1) $O(37)$ 8407(6)1625(6)52(1)34(2) $O(11)$ 6615(8)2598(8)84(1)28(2) $C(11)$ 518(9)1082(9)518(1)34(2) $C(12)$ 6338(9)1903(9)518(1)34(2) $C(21)$ 5154(9)1440(10)462(1)39(3) $C(22)$ 7084(10)3170(10)499(1)42(3) $C(3)$ 11009(9)436(6)253(1)50(3) $C(31)$ 10258(13)1185(11)727(1)46(3) $C(4)$ 10289(11)1188(11)727(1)46(3) $C(4)$ 10289(11)1188(11)727(1)36(2) $C(4)$ 10276(18)267(17)397(2)94(4) $C(5)$ 3967(8)-1735(8)91(1)28(2) $C(4)$ 10276(18)277(1)36(2)74(5) $C(4)$ 10276(8)-377(9) <td>O(27)</td> <td>10683(5)</td> <td>1808(5)</td> <td>132(1)</td> <td>24(1)</td>	O(27)	10683(5)	1808(5)	132(1)	24(1)
O(30) $T243(6)$ $T630(6)$ $O(3)$ $Z1(6)$ $O(31)$ $4331(6)$ $1539(6)$ $-322(1)$ $32(2)$ $O(31)$ $4331(6)$ $1539(6)$ $-362(1)$ $31(2)$ $O(33)$ $7215(6)$ $-70(6)$ $-673(1)$ $31(2)$ $O(34)$ $7592(6)$ $2151(5)$ $-159(1)$ $26(1)$ $O(33)$ $6663(6)$ $3366(6)$ $-848(1)$ $25(1)$ $O(35)$ $6663(6)$ $3366(6)$ $-848(1)$ $25(1)$ $O(36)$ $7887(6)$ $-895(5)$ $647(1)$ $22(1)$ $O(37)$ $8407(5)$ $1625(5)$ $599(1)$ $24(1)$ $O(37)$ $8407(6)$ $2598(8)$ $84(1)$ $34(2)$ $O(11)$ $5618(9)$ $2087(9)$ $-14(1)$ $34(2)$ $O(11)$ $5154(9)$ $1400(10)$ $482(1)$ $39(3)$ $O(22)$ $7084(10)$ $3170(10)$ $499(1)$ $42(3)$ $O(23)$ $11009(9)$ $435(1)$ $72(4)$ $O(31)$ $10058(9)$ $4924(9)$ $158(1)$ $72(4)$ $O(22)$ $7084(10)$ $3170(10)$ $499(1)$ $42(3)$ $O(22)$ $7084(10)$ $477(1)$ $397(2)$ $92(6)$ $O(31)$ $1003(9)$ $2270(30)$ $725(3)$ $198(14)$ $O(44)$ $10289(1)$ $-1738(8)$ $91(1)$ $28(2)$ $O(41)$ $10276(18)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $36(2)$ $O(77)$ $976(1)$ $-376(9)$ $533(1)$ $39(3)$ $O(77)$ $972(10)$ $-2873(10)$ 424	O(28)	9068(5)	2100(5)	42(1) 185(1)	20(1)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	O(30)	7849(5)	1630(5)	-439(1)	20(1)
O(32)9866(6)5986(6)-673(1)31(2) $O(33)$ 7215(6)-70(6)-624(1)28(2) $O(34)$ 7692(6)2151(5)-159(1)25(1) $O(35)$ 6963(6)3366(6)-848(1)25(1) $O(36)$ 7887(6)-9895(5)647(1)25(1) $O(37)$ 8407(5)1625(5)589(1)24(1) $O(11)$ 6615(8)2598(8)84(1)28(2) $C(11)$ 5618(9)2087(9)-14(1)32(2) $C(12)$ 6338(9)1903(9)518(1)34(2) $C(2)$ 6338(9)1903(9)518(1)39(3) $C(22)$ 7084(10)3170(10)499(1)42(3) $C(23)$ 11054(9)436(9)253(1)50(3) $C(31)$ 1008(9)436(9)253(1)50(3) $C(31)$ 1008(9)436(9)253(1)50(3) $C(41)$ 10289(11)1188(11)727(1)46(3) $C(41)$ 10289(11)1188(11)727(1)46(3) $C(41)$ 10289(11)1188(11)727(1)46(3) $C(42)$ 11010(30)2270(30)725(3)189(14) $C(5)$ 3967(8)-1735(8)91(1)28(2) $C(6)$ 5462(8)-3033(8)60(1)33(2) $C(6)$ 5462(8)-3033(8)60(1)33(2) $C(6)$ 5462(8)-3033(8)60(1)33(2) $C(7)$ 9194(14)-2837(14)589(2)74(5) $C(7)$ 9194(14)-2837	O(31)	4831(6)	1589(6)	-822(1)	32(2)
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	O(32)	9885(6)	5986(6)	-673(1)	31(2)
O(34) $P(93/2)$ $P(51)$ $P(51)$ $P(51)$ $P(51)$ $O(36)$ 7887(6)-895(5)647(1)25(1) $O(37)$ 8407(5)1625(5)589(1)24(1) $C(1)$ 6615(8)2598(8)84(1)28(2) $C(11)$ 5618(9)2087(9)-14(1)32(2) $C(12)$ 7453(9)3856(9)52(1)34(2) $C(2)$ 6338(9)1903(9)518(1)34(2) $C(2)$ 6338(9)1903(9)253(1)50(3) $C(22)$ 7084(10)3170(10)499(1)42(3) $C(3)$ 11009(9)4356(9)253(1)50(3) $C(3)$ 110584(9)4924(9)158(1)72(4) $C(3)$ 11253(17)4662(17)397(2)92(6) $C(4)$ 10289(11)1188(11)727(1)46(3) $C(4)$ 10289(11)118(11)727(1)46(3) $C(4)$ 10289(11)118(11)727(1)46(3) $C(4)$ 10289(11)118(11)727(1)46(3) $C(4)$ 1028(1)-1735(8)91(1)28(2) $C(5)$ 3967(8)-1715(10)231(1)42(3) $C(5)$ 3967(8)-377(9)523(1)29(2) $C(5)$ 3426(10)-175(8)91(1)33(2) $C(5)$ 3426(10)-175(10)231(1)42(3) $C(5)$ 3426(10)-377(9)523(1)29(2) $C(5)$ 3426(10)-377(9)523(1)29(2) $C(6)$ 5462(8) <td>O(33)</td> <td>7215(6)</td> <td>-70(6)</td> <td>-624(1)</td> <td>28(2)</td>	O(33)	7215(6)	-70(6)	-624(1)	28(2)
O(36) $O(36)$ $O(37)$ <	O(34) O(35)	7692(6) 6963(6)	2151(5) 3366(6)	-159(1) -848(1)	25(1) 25(1)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	O(36)	7887(6)	-895(5)	647(1)	25(1)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	O(37)	8407(5)	1625(5)	589(1)	24(1)
C(11) $5618(9)$ $2087(9)$ $-14(1)$ $32(2)$ C(12) $7453(9)$ $3856(9)$ $52(1)$ $34(2)$ C(2) $6338(9)$ $1903(9)$ $518(1)$ $34(2)$ C(21) $5154(9)$ $1440(10)$ $462(1)$ $39(3)$ C(22) $7084(10)$ $3770(10)$ $499(1)$ $42(3)$ C(3) $1009(9)$ $4356(9)$ $253(1)$ $50(3)$ C(31) $10584(9)$ $4924(9)$ $158(1)$ $72(4)$ C(32) $11253(17)$ $4662(17)$ $397(2)$ $92(6)$ C(4) $10289(11)$ $1188(11)$ $727(1)$ $46(3)$ C(41) $10276(18)$ $267(17)$ $800(2)$ $99(6)$ C(42) $11010(30)$ $2270(30)$ $725(3)$ $189(14)$ C(51) $3440(9)$ $-2895(9)$ $27(1)$ $25(2)$ C(52) $3426(10)$ $-175(10)$ $231(1)$ $42(3)$ C(6) $5462(8)$ $-3033(8)$ $604(1)$ $25(2)$ C(61) $4379(8)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $29(2)$ C(62) $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ C(7) $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ C(71) $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ C(72) $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ C(8) $10235(9)$ $-209(9)(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ C(71) $9194(4)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ C(72) $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$	C(1)	6615(8)	2598(8)	84(1)	28(2)
C(12) $/435(9)$ $3636(9)$ $52(1)$ $34(2)$ $C(2)$ $6338(9)$ $1903(9)$ $518(1)$ $34(2)$ $C(21)$ $5154(9)$ $1440(10)$ $462(1)$ $39(3)$ $C(22)$ $7084(10)$ $3170(10)$ $499(1)$ $42(3)$ $C(3)$ $11009(9)$ $4356(9)$ $253(1)$ $50(3)$ $C(31)$ $10584(9)$ $4924(9)$ $158(1)$ $72(4)$ $C(32)$ $11253(17)$ $4662(17)$ $397(2)$ $92(6)$ $C(4)$ $10289(11)$ $1188(11)$ $727(1)$ $46(3)$ $C(41)$ $10276(18)$ $267(17)$ $800(2)$ $99(6)$ $C(42)$ $11010(30)$ $2270(30)$ $725(3)$ $189(14)$ $C(5)$ $3967(8)$ $-1735(8)$ $91(1)$ $28(2)$ $C(51)$ $3440(9)$ $-2895(9)$ $27(1)$ $35(2)$ $C(52)$ $3426(10)$ $-1715(10)$ $231(1)$ $42(3)$ $C(6)$ $5462(8)$ $-3033(8)$ $604(1)$ $25(2)$ $C(61)$ $4379(8)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $29(2)$ $C(62)$ $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ $C(71)$ $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ $C(71)$ $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(71)$ $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ $C(72)$ $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235($	C(11)	5618(9)	2087(9)	-14(1)	32(2)
C(2)5154(9)1040(0)462(1)30(1)C(22)7084(10)3170(10)499(1)42(3)C(3)1100(9)4356(9)253(1)50(3)C(3)10584(9)4924(9)158(1)72(4)C(32)11253(17)4662(17)397(2)92(6)C(4)10289(11)1188(11)727(1)46(3)C(41)10276(18)267(17)800(2)99(6)C(42)1101(30)2270(30)725(3)189(14)C(5)3967(8)-1735(8)91(1)28(2)C(51)3440(9)-2895(9)27(1)35(2)C(52)3426(10)-1715(10)231(1)42(3)C(6)5462(8)-3033(8)604(1)25(2)C(61)4379(8)-3776(9)523(1)29(2)C(62)6020(9)-3694(9)660(1)33(2)C(7)9672(10)-2873(10)442(1)39(3)C(71)9194(14)-2837(14)589(2)74(5)C(72)9448(18)-369(10)-53(1)48(3)C(8)10236(9)-2099(9)-85(1)31(2)C(81)9457(11)-3369(10)-53(1)48(3)C(9)5780(7)-4490(7)149(1)20(2)C(91)5937(9)-5130(9)271(1)30(2)C(92)5616(9)-2616(8)-305(1)23(2)C(100)6253(8)-1345(8)-305(1)23(2)C(101)5462(8)-864(8)-301(1)27	C(12)	6338(9)	3030(9) 1903(9)	52(1) 518(1)	34(2) 34(2)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(21)	5154(9)	1440(10)	462(1)	39(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(22)	7084(10)	3170(10)	499(1)́	42(3)
C (31)10584(9)4924(9)158(1) $72(4)$ C (32)11253(17)4662(17)397(2)92(6)C (4)10289(11)1188(11)727(1)46(3)C (41)10276(18)267(17)800(2)99(6)C (42)11010(30)2270(30)725(3)189(14)C (5)3967(8)-1735(8)91(1)28(2)C (51)3440(9)-2895(9)27(1)35(2)C (52)3426(10)-1715(10)231(1)42(3)C (6)5462(8)-3033(8)604(1)25(2)C (61)4379(8)-3776(9)523(1)29(2)C (62)6020(9)-3694(9)660(1)33(2)C (7)9672(10)-2673(10)442(1)39(3)C (71)9194(14)-2837(14)559(2)74(5)C (72)9448(18)-3674(17)379(2)104(7)C (8)10235(9)-2099(9)-85(1)31(2)C (81)9457(11)-3639(10)-533(1)48(3)C (82)11398(11)-1639(11)-32(1)49(3)C (82)1398(11)-1639(11)-32(1)49(3)C (9)5780(7)-4490(7)149(1)20(2)C (91)5937(9)-9425(9)104(1)34(2)C (100)6253(8)-1345(8)-305(1)23(2)C (101)5462(8)-864(8)-301(1)27(2)C (102)5616(9)-2616(9)-320(1)32(2)C (110)12567(9)<	C(3)	11009(9)	4356(9)	253(1)	50(3)
C(32)1123(17)402(17) $357(2)$ $92(0)$ C(4)10239(11)1188(11)727(1)46(3)C(41)10276(18)267(17) $800(2)$ 99(6)C(42)11010(30)2270(30)725(3)189(14)C(5)3967(8)-1735(8)91(1)28(2)C(51)3440(9)-2895(9)27(1)35(2)C(52)3426(10)-1715(10)231(1)42(3)C(6)5462(8)-3033(8)604(1)25(2)C(61)4379(8)-3776(9)523(1)29(2)C(62)6020(9)-3694(9)660(1)33(2)C(77)9672(10)-2673(10)442(1)39(3)C(71)9194(14)-2837(14)589(2)74(5)C(72)9448(18)-3674(17)379(2)104(7)C(8)10235(9)-2099(9)-85(1)31(2)C(8)10235(9)-2099(9)-85(1)31(2)C(81)9457(11)-3369(10)-53(1)48(3)C(82)11398(11)-1639(11)-32(1)49(3)C(9)5780(7)-4490(7)149(1)20(2)C(91)5937(9)-5130(9)271(1)30(2)C(92)4597(9)-4925(9)104(1)34(2)C(100)6253(8)-1345(8)-305(1)23(2)C(101)5462(8)-864(8)-301(1)27(2)C(102)5616(9)-2616(9)-320(1)32(2)C(110)12567(9)1584(9)	C(31)	10584(9)	4924(9)	158(1)	72(4) 02(6)
C(41) $10276(18)$ $267(17)$ $800(2)$ $99(6)$ C(42) $11010(30)$ $2270(30)$ $725(3)$ $189(14)$ C(5) $3967(8)$ $-1735(8)$ $91(1)$ $28(2)$ C(51) $3440(9)$ $-2895(9)$ $27(1)$ $35(2)$ C(52) $3426(10)$ $-1715(10)$ $231(1)$ $42(3)$ C(6) $5462(8)$ $-3033(8)$ $604(1)$ $25(2)$ C(61) $4379(8)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $29(2)$ C(62) $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ C(7) $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ C(71) $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ C(72) $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ C(8) $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ C(81) $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ C(82) $11388(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ C(9) $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ C(91) $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ C(92) $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ C(100) $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ C(101) $562(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ C(102) $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ C(110) $1257(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ C(111) $13133(11)$ $1511(11)$ $201($	C(4)	10289(11)	1188(11)	727(1)	46(3)
C(42)11010(30)2270(30)725(3)189(14) $C(5)$ 3967(8)-1735(8)91(1)28(2) $C(51)$ 3440(9)-2895(9)27(1)35(2) $C(52)$ 3426(10)-1715(10)231(1)42(3) $C(6)$ 5462(8)-3033(8)604(1)25(2) $C(61)$ 4379(8)-3776(9)523(1)29(2) $C(62)$ 6020(9)-3694(9)660(1)33(2) $C(7)$ 9672(10)-2673(10)442(1)39(3) $C(71)$ 9194(14)-2837(14)589(2)74(5) $C(72)$ 9448(18)-3674(17)379(2)104(7) $C(8)$ 10235(9)-2099(9)-85(1)31(2) $C(81)$ 9457(11)-3369(10)-53(1)48(3) $C(82)$ 11398(11)-1639(11)-32(1)49(3) $C(9)$ 5780(7)-4490(7)149(1)20(2) $C(9)$ 5780(7)-4490(7)149(1)30(2) $C(92)$ 4597(9)-1345(8)-305(1)23(2) $C(100)$ 6253(8)-1345(8)-305(1)23(2) $C(110)$ 5462(8)-864(8)-301(1)27(2) $C(110)$ 12567(9)1584(9)331(1)35(2) $C(110)$ 1267(9)1584(9)331(1)35(2) $C(111)$ 1313(11)1511(11)201(1)46(3) $C(112)$ 13038(15)2801(14)378(2)79(5)	C(41)	10276(18)	267(17)	800(2)	99(6)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(42)	11010(30)	2270(30)	725(3)	189(14)
C(51) $3440(9)$ $-2895(9)$ $27(1)$ $35(2)$ C(52) $3426(10)$ $-1715(10)$ $231(1)$ $42(3)$ C(6) $5462(8)$ $-3033(8)$ $604(1)$ $25(2)$ C(61) $4379(8)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $29(2)$ C(62) $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ C(7) $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ C(71) $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ C(72) $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ C(8) $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ C(81) $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ C(82) $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ C(9) $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ C(91) $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ C(100) $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ C(101) $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ C(102) $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ C(110) $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ C(111) $13133(11)$ $1511(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(5)	3967(8)	-1735(8)	91(1)	28(2)
C(2) $342(0)$ $-113(0)$ $231(1)$ $42(0)$ $C(6)$ $5462(8)$ $-3033(8)$ $604(1)$ $25(2)$ $C(61)$ $4379(8)$ $-3776(9)$ $523(1)$ $29(2)$ $C(62)$ $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ $C(7)$ $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ $C(7)$ $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(8)$ $1338(1)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $48(3)$ $C(8)$ $1398(1)$ $-1639(1)$ $-32(1)$ $30(2)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $30(2)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $30(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ </td <td>C(51)</td> <td>3440(9)</td> <td>-2895(9)</td> <td>27(1)</td> <td>35(2)</td>	C(51)	3440(9)	-2895(9)	27(1)	35(2)
C(61)4379(8)-3776(9)523(1)29(2)C(62) $6020(9)$ -3694(9) $660(1)$ 33(2)C(7) $9672(10)$ -2673(10) $442(1)$ 39(3)C(7) $948(18)$ -3674(17)379(2)104(7)C(8) $10235(9)$ -2099(9)-85(1)31(2)C(81) $9457(11)$ -3369(10)-53(1)48(3)C(82) $11398(11)$ -1639(11)-32(1)49(3)C(82) $11398(11)$ -1639(11)-32(1)49(3)C(82) $11398(11)$ -1639(11)-32(1)49(3)C(9) $5780(7)$ -4490(7)149(1)20(2)C(91) $5937(9)$ -5130(9)271(1)30(2)C(92) $4597(9)$ -4425(8)-305(1)23(2)C(100) $6253(8)$ -1345(8)-305(1)23(2)C(101) $5462(8)$ -864(8)-301(1)27(2)C(102) $5616(9)$ -2616(9)-320(1)32(2)C(110) $12567(9)$ $1584(9)$ 331(1)35(2)C(111) $13133(11)$ $1511(11)$ 201(1)46(3)C(112) $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$	C(6)	5462(8)	-3033(8)	604(1)	25(2)
C(62) $6020(9)$ $-3694(9)$ $660(1)$ $33(2)$ $C(7)$ $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ $C(7)$ $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ $C(72)$ $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(81)$ $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ $C(82)$ $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ $C(91)$ $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(61)	4379(8)	-3776(9)	523(1)	29(2)
C(7) $9672(10)$ $-2673(10)$ $442(1)$ $39(3)$ $C(7)$ $9194(14)$ $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ $C(72)$ $9448(18)$ $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(81)$ $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ $C(82)$ $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ $C(91)$ $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(62)	6020(9)	-3694(9)	660(1)	33(2)
C(7)9194(14) $-2837(14)$ $589(2)$ $74(5)$ $C(72)$ 9448(18) $-3674(17)$ $379(2)$ $104(7)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(81)$ $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ $C(82)$ $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ $C(91)$ $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(7)	9672(10)	-2673(10)	442(1)	39(3)
C(12) $C(10)$ $C(11)$ $C(11)$ $C(11)$ $C(11)$ $C(8)$ $10235(9)$ $-2099(9)$ $-85(1)$ $31(2)$ $C(81)$ $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ $C(82)$ $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ $C(91)$ $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(71) C(72)	9194(14) 9448(18)	-2837(14) -3674(17)	589(2) 379(2)	74(5) 104(7)
C(81) $9457(11)$ $-3369(10)$ $-53(1)$ $48(3)$ $C(82)$ $11398(11)$ $-1639(11)$ $-32(1)$ $49(3)$ $C(9)$ $5780(7)$ $-4490(7)$ $149(1)$ $20(2)$ $C(9)$ $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(8)	10235(9)	-2099(9)	-85(1)	31(2)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(81)	9457(11)	-3369(10)	-53(1)	48(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(82)	11398(11)	-1639(11)	-32(1)	49(3)
C(91) $5937(9)$ $-5130(9)$ $271(1)$ $30(2)$ $C(92)$ $4597(9)$ $-4925(9)$ $104(1)$ $34(2)$ $C(100)$ $6253(8)$ $-1345(8)$ $-305(1)$ $23(2)$ $C(101)$ $5462(8)$ $-864(8)$ $-301(1)$ $27(2)$ $C(102)$ $5616(9)$ $-2616(9)$ $-320(1)$ $32(2)$ $C(110)$ $12567(9)$ $1584(9)$ $331(1)$ $35(2)$ $C(111)$ $13133(11)$ $1511(11)$ $201(1)$ $46(3)$ $C(112)$ $13038(15)$ $2801(14)$ $378(2)$ $79(5)$	C(9)	5780(7)	-4490(7)	149(1)	20(2)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(91)	5937(9) 4597(9)	-3130(9) -4925(9)	∠/1(1) 104(1)	3U(∠) 34(2)
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C(100)	6253(8)	-1345(8)	-305(1)	23(2)
C(102)5616(9)-2616(9)-320(1)32(2)C(110)12567(9)1584(9)331(1)35(2)C(111)13133(11)1511(11)201(1)46(3)C(112)13038(15)2801(14)378(2)79(5)	C(101)	5462(8)	-864(8)	-301(1)	27(2)
C(110)12567(9)1584(9)331(1)35(2)C(111)13133(11)1511(11)201(1)46(3)C(112)13038(15)2801(14)378(2)79(5)	C(102)	5616(9)	-2616(9)	-320(1)	32(2)
C(112) 13038(15) 1511(11) 201(1) 46(3) C(112) 13038(15) 2801(14) 378(2) 79(5)	C(110)	12567(9)	1584(9)	331(1)	35(2)
	C(112)	13038(15)	2801(14)	378(2)	40(3) 79(5)

Table 2.Atomic coordinates ($x \ 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$) for5.U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

Table	2	continued

C(120)	11060(9)	2888(9)	-188(1)	33(2)
C(121)	12175(11)	3419(11)	-128(1)	51(3)
C(122)	11098(10)	2605(10)	-342(1)	37(2)
Sn(13)	9753(1)	5078(1)	-486(1)	21(1)
Sn(14)	8451(1)	4803(1)	-789(1)	24(1)
Sn(15)	7054(1)	4319(1)	-489(1)	19(1)
V(1)	7905(1)	2708(1)	-317(1)	19(1)
V(2)	7598(1)	1235(1)	-616(1)	21(1)
V(3)	9926(1)	3428(1)	-746(1)	22(1)
V(4)	6007(1)	2344(1)	-740(1)	23(1)
C(13)	11256(10)	6259(10)	-379(1)	41(3)
C(131)	12221(15)	6058(15)	-402(2)	79(5)
C(132)	11564(9)	7446(9)	-406(1)	36(2)
C(14)	8705(12)	5714(12)	-981(2)	57(4)
C(141)	9336(18)	6886(16)	-963(2)	98(6)
C(142)	7689(16)	5333(17)	-1065(2)	91(6)
C(15)	6109(8)	4959(8)	-384(1)	26(2)
C(151)	4946(12)	4563(12)	-448(2)	57(3)
C(152)	6031(15)	4756(14)	-230(2)	72(4)
O(200)	2043(7)	386(7)	9695(1)	42(2)
S(200)	3149(2)	1302(2)	9640(1)	34(1)
C(201)	4088(10)	762(10)	9635(1)	39(3)
C(202)	2989(10)	1364(10)	9457(1)	40(3)
O(301)	1988(10)	7154(10)	9211(2)	55(4)
S(301)	2710(3)	8414(3)	9228(1)	42(1)
C(301)	4011(13)	8695(16)	9296(2)	54(5)
C(302)	3135(14)	8964(13)	9056(1)	54(4)
O(305)	2150(40)	7040(30)	9215(9)	55(4)
S(305)	3118(12)	8088(12)	9157(2)	42(1)
C(306)	4220(40)	8610(50)	9280(7)	54(5)
C(307)	2770(50)	9150(40)	9162(6)	54(4)
O(401)	5872(10)	5704(12)	9187(2)	62(5)
S(401)	4766(4)	5155(4)	9112(1)	50(1)
C(401)	3832(19)	5440(20)	9202(3)	93(8)
C(402)	4132(16)	3692(11)	9140(3)	76(6)
O(405)	5784(18)	5570(30)	9236(3)	62(5)
S(405)	4601(9)	4662(9)	9205(1)	50(1)
C(406)	3700(40)	5100(50)	9246(5)	03(8)
C(400)	4450(30)	4560(40)	9019(2)	76(6)
O(500)	9711(6)	7545(6)	9502(1)	22(2)
S(500)	0080(3)	8208(2)	0457(1)	35(2)
C(501)	9000(3)	0200(2)	9437(1)	30(1)
C(502)	7850(10)	7077(11)	3312(1)	35(3)
0(002)	7000(10)	1311(11)	9370(1)	45(5)

Sn(1)-O(28)	2 016(6)
	2.020(6)
Sh(1)-O(12)	2.029(0)
Sn(1)-C(1)	2.162(10)
Sn(1)-O(24)	2.197(6)
Sn(1)-Q(25)	2 206(6)
	2.249(6)
51(1)-0(34)	2.340(0)
Sn(1)-Sn(3)	3.2558(9)
Sn(1)-Sn(5)	3,2636(8)
Sn(2) O(25)	2,061(6)
51(2)-0(25)	2.001(0)
Sn(2)-O(20)	2.092(6)
Sn(2)-O(24)	2.099(6)
Sp(2)-Q(15)	2 156(6)
	2.100(0)
Sn(2)-O(37)	2.179(6)
Sn(2)-C(2)	2.180(11)
Sn(2)-Sn(4)	3.2942(9)
Sp(3)-O(24)	2,007(6)
	2.007(0)
Sn(3)-O(14)	2.043(6)
Sn(3)-O(28)	2.059(6)
Sn(3)-Q(27)	2 098(7)
Sn(3) C(2)	2.199(11)
31(3)-C(3)	2.100(11)
Sn(3)-Sn(11)	3.1988(10)
Sn(4)-O(20)	2.084(6)
Sn(4) - O(37)	2 102(7)
$S_{n}(4) O(4)$	2.102(7)
Sn(4)-O(14)	2.107(6)
Sn(4)-O(13)	2.116(7)
Sn(4)-O(36)	2.128(7)
$\operatorname{Sp}(4)$ - $\operatorname{C}(4)$	2 168(13)
	2.100(13)
Sn(4)-Sn(11)	3.2899(9)
Sn(5)-O(25)	2.016(6)
Sn(5)-Q(12)	2.045(6)
Sp(5)-Q(26)	2,050(6)
	2.000(0)
Sn(5)-O(16)	2.101(6)
Sn(5)-C(5)	2.146(10)
Sn(5)-Sn(9)	3 2189(8)
$S_{n}(5) S_{n}(10)$	3 2800(8)
	3.2090(0)
Sn(6)-O(20)	2.078(6)
Sn(6)-O(26)	2.100(5)
Sn(6)-Q(15)	2 112(6)
Sn(6) C(6)	2 122(0)
31(6)-C(6)	2.132(9)
Sn(6)-O(36)	2.136(6)
Sn(6)-O(19)	2.140(6)
Sn(6)-Sn(9)	3 2984(8)
$S_{\rm P}(7) O(10)$	2.019(6)
31(7)-0(19)	2.010(0)
Sn(7)-O(13)	2.030(7)
Sn(7)-O(22)	2.079(6)
Sn(z) - O(29)	2 106(6)
	2.100(0)
Sn(7)- $C(7)$	2.120(12)
Sn(7)-Sn(11)	3.1976(9)
Sn(7)-Sn(9)	3,2039(9)
Sn(8)-Q(18)	2.069(5)
	2.111(6)
Sn(8)-O(17)	2.111(6)
Sn(8)-O(23)	2.123(6)
Sn(8)-O(22)	2.126(6)
Sn(8) - O(29)	2 137(7)
	2.150(10)
	2.159(10)
Sn(9)-O(22)	2.030(6)
Sn(9)-O(16)	2.037(6)
Sn(9)-O(19)	2.077(5)
Sp(0) Q(26)	2,080(6)
Sin(9) - O(20)	2.009(0)
30(a)-C(a)	2.134(9)
Sn(10)-O(18)	2.089(6)
Sn(10)-O(16)	2.094(6)
Sp(10)-Q(21)	2 103(6)
$S_{n}(10) O(21)$	2.110(0)
Sn(10)-O(23)	2.110(0)
Sn(10)-O(12)	2.135(6)
Sn(10)-C(100)	2.147(9)
Sp(11)-Q(29)	2027(7)
Sn(11) O(27)	2.021(6)
$S_1(11) - O(27)$	2.031(0)
Sn(11)-O(14)	2.076(7)
Sn(11)-O(13)	2.092(6)
Sn(11)-C(110)	2.125(11)
$S_{n}(12) \cap (18)$	2,006(6)
	2.030(0)
Sn(12)-O(17)	2.110(6)
Sn(12)-O(28)	2.120(6)
Sn(12)-O(27)	2 131(6)
$S_{n}(12) O(21)$	2 122(6)
SII(12)-O(21)	2.133(0)
Sn(12)-C(120)	2.159(11)
O(1)-V(3)	1.685(6)
O(1)-Sn(13)	2 118(6)
O(2) Sp(12)	2 108(6)
	2.100(0)
U(2)-Sn(15)	2.128(7)
O(3)-Sn(15)	2.123(6)
Q(3)-Sn(14)	2 138(7)
O(4) V(2)	1 700(7)
U(4)-V(Z)	1.790(7)
	a (11/1/7)

Table 3.Bond lengths [A] and angles [deg] for 5.

1.719(6) 2.083(6)
2.094(6) 2.106(6) 2.106(6) 1.715(6)
2.099(6) 1.701(7) 2.109(6)
1.735(7) 1.846(7) 1.637(7)
1.734(7) 2.130(7) 1.753(6)
1.619(7) 2.124(7) 2.133(7)
1.602(7) 1.645(6) 1.707(7)
2.090(7) 1.508(14) 1.557(14) 1.520(15)
1.529(13) 1.529(16) 1.42(2) 1.4922
1.32(3) 1.44(2) 1.511(14)
1.531(14) 1.528(13) 1.548(14) 1.39(2)
1.510(19) 1.483(16) 1.557(16)
1.489(13) 1.534(13) 1.521(13)
1.532(13) 1.487(16) 1.531(19) 1.445(16)
1.525(15) 2.146(12) 2.141(14)
2.152(10) 1.491(16) 1.50(2) 1.41(2)
1.46(2) 1.476(17) 1.536(16)
1.503(8) 1.766(12) 1.786(12)
1.515(12) 1.757(13) 1.776(12) 1.49(2)
1.757(19) 1.757(19) 1.497(11)
1.748(15) 1.768(14) 1.506(12) 1.761(18)
1.778(18) 1.513(7) 1.764(13)
1.810(12) 97.6(2) 130.1(3)
74.6(2) 128.9(2) 97.5(3)
128.2(2) 74.2(2) 93.3(3)
72.7(2) 76.5(2) 79.7(2)

Table 3 continued
C(1)-Sn(1)-O(34)
O(24)-Sn(1)-O(34)
O(25)-Sn(1)-O(34) O(28)-Sn(1)-Sn(3)
O(12)-Sn(1)-Sn(3)
C(1)-Sn(1)-Sn(3)
O(24)-Sn(1)-Sn(3) O(25)-Sn(1)-Sn(3)
O(34)-Sn(1)-Sn(3)
O(28)-Sn(1)-Sn(5)
O(12)-Sn(1)-Sn(5) C(1)-Sn(1)-Sn(5)
O(24)-Sn(1)-Sn(5)
O(25)-Sn(1)-Sn(5)
O(34)-Sn(1)-Sn(5) Sn(3)-Sn(1)-Sn(5)
O(25)-Sn(2)-O(20)
O(25)-Sn(2)-O(24)
O(20)-Sn(2)-O(24) O(25)-Sn(2)-O(15)
O(20)-Sn(2)-O(15)
O(24)-Sn(2)-O(15)
O(25)-Sn(2)-O(37) O(20)-Sn(2)-O(37)
O(24)-Sn(2)-O(37)
O(15)-Sn(2)-O(37)
O(25)-Sn(2)- $O(2)$
O(24)-Sn(2)-C(2)
O(15)-Sn(2)-C(2)
O(37)-Sn(2)-C(2) O(25)-Sn(2)-Sn(4)
O(20)-Sn(2)-Sn(4)
O(24)-Sn(2)-Sn(4)
O(15)-Sn(2)-Sn(4) O(37)-Sn(2)-Sn(4)
C(2)-Sn(2)-Sn(4)
O(24)-Sn(3)-O(14)
O(24)-Sn(3)-O(28) O(14)-Sn(3)-O(28)
O(24)-Sn(3)-O(27)
O(14)-Sn(3)-O(27)
O(28)-Sh(3)-O(27) O(24)-Sh(3)-C(3)
O(14)-Sn(3)-C(3)
O(28)-Sn(3)-C(3) O(27) Sn(3) C(3)
O(24)-Sn(3)-Sn(11)
O(14)-Sn(3)-Sn(11)
O(28)-Sn(3)-Sn(11) O(27) Sn(3) Sn(11)
C(3)-Sn(3)-Sn(11)
O(24)-Sn(3)-Sn(1)
O(14)-Sn(3)-Sn(1) O(28)-Sn(3)-Sn(1)
O(27)-Sn(3)-Sn(1)
C(3)-Sn(3)-Sn(1)
Sn(11)-Sn(3)-Sn(1) O(20)-Sn(4)-O(37)
O(20)-Sn(4)-O(14)
O(37)-Sn(4)-O(14)
O(20)-Sn(4)- $O(13)O(37)$ -Sn(4)- $O(13)$
O(14)-Sn(4)-O(13)
O(20)-Sn(4)-O(36)
O(37)-Sn(4)-O(36) O(14)-Sn(4)-O(36)
O(13)-Sn(4)-O(36)
O(20)-Sn(4)-C(4)
O(37)-SI(4)-C(4) O(14)-SI(4)-C(4)
O(13)-Sn(4)-C(4)
O(36)-Sn(4)-C(4) O(20)-Sn(4)-Sn(11)
O(37)-Sn(4)-Sn(11)
O(14)-Sn(4)-Sn(11)
O(13)-Sn(4)-Sn(11) O(36)-Sn(4)-Sn(11)
C(4)-Sn(4)-Sn(11)
O(20)-Sn(4)-Sn(2)
O(37)-Sn(4)-Sn(2) O(14)-Sn(4)-Sn(2)
O(13)-Sn(4)-Sn(2)
O(36)-Sn(4)-Sn(2)
Sn(11)-Sn(4)-Sn(2)

82.2(3) 141.4(2)	
141.4(2)	
145.8(2)	
37.42(16)	
117.61(17)	
120.0(3)	
37 17(16)	
100.87(16)	
110 72(18)	
117 27(10)	
117.27(10)	
30.94(17)	
112.0(3)	
101.62(16)	
37.30(15)	
114.14(17)	
113.40(2)	
89.5(2)	
77.7(2)	
90.7(2)	
89.9(2)	
75.2(2)	
161.4(2)	
160.9(2)	
76.5(2)	
89.4(2)	
98.8(2)	
104.9(3)	
161.1(3)	
104.1(3)	
92 3(3)	
91 8(3)	
125 20(16)	
37 82(10)	
31.02(10) 97.52(17)	
01.00(17)	
00.40(16)	
38.84(18)	
129.8(3)	
98.8(2)	
77.9(2)	
136.6(3)	
138.1(3)	
77.6(2)	
77.3(2)	
111.0(3)	
108.5(3)	
113.0(3)	
109 5(3)	
122 53(17)	
39 42(19)	
106 45(17)	
20 /6(16)	
118 3(3)	
118.3(3)	
118.3(3) 41.41(17)	
118.3(3) 41.41(17) 124.77(18)	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3)	
38.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 70.4(2)	
36.50(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 90.0(2)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 5.40(16)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3)	
36.40(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.6(4)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4) 96.8(4) 96.4(4)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 96.4(4) 88.45(16)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.6(4) 98	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4) 98.8(4) 96.4(4) 88.45(16) 126.32(17) 37.84(18)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 126.32(17) 37.81(18) 82.32(17)	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 91.8(4) 92.8(4) 93.8(4) 93.8(4) 94.8(4) 94.8(4) 95.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 97.8(4) 96.8(4) 97.8(4) 97.8(4) 97.8(4) 96.8(4) 97.8(4) 96.8(4) 97.8(4) 96.8(4) 97	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.6(4) 98	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.0(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 96.8(4) 97.8(118) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 90.07(4) 100.7(4)	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 96.4(4) 88.45(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.00(17) 107.6(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.8(18) 100.7(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.8(18) 100.7(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.8(18) 100.7(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.8(18) 100.7(4) 107.6(4) 100.7(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.6(4) 107.8(18) 107.6(4) 107.8(18) 107.6(4) 107.8(18) 107.6(4) 107.8(18) 107.6(18) 107.5(4) 107.5(4) 107.5(4) 107.5(4) 107.5(4) 107.5(4) 107.8(18) 107.5(4) 107	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 99.8(4) 91.2(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.00(17) 40.55(16) 100.55(16) 1	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.6(4) 96.4(4) 88.45(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.00(17) 40.55(16) 86.47(18) 36.07(18) 36	
36.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.0(2) 89.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.8(4) 96.4(4) 88.45(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.30(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.30(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.30(17) 127.84(18) 100.7(4) 120.7(17) 40.55(16) 86.47(18) 122.97(17) 127.84(17) 127.84(18) 122.97(17) 127.84(18) 127.	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.0(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 99.1(3) 160.5(2) 99.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 98.8(4) 98.8(4) 96.4(4) 88.45(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.00(17) 40.55(16) 86.47(18) 122.97(17) 88.87(17)	
38.46(16) 118.3(3) 41.41(17) 124.77(18) 36.50(17) 107.04(18) 120.0(3) 120.13(3) 78.4(2) 89.6(2) 87.1(2) 159.9(2) 76.1(3) 75.9(2) 99.1(3) 160.5(2) 90.7(3) 170.5(4) 97.8(4) 99.8(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 98.6(4) 97.8(16) 126.32(17) 37.81(18) 38.32(17) 127.84(18) 100.7(4) 38.00(17) 40.55(16) 86.47(18) 122.97(17) 88.87(17) 138.1(4)	

O(25)-Sn(5)-O(12) O(25)-Sn(5)-O(26)
O(25)-Sn(5)-O(26)
O(25)-Sn(5)-O(26)
O(AO) O= (E) O(OO)
O(12)-Sn(5)-O(26)
O(25)-Sn(5)-O(16)
O(12) Sp(E) $O(16)$
0(12)-31(3)-0(10)
O(26)-Sn(5)-O(16)
O(25)-Sn(5)-C(5)
O(12) Sp(5) C(5)
0(12)-01(3)-0(3)
O(26)-Sn(5)-C(5)
O(16)-Sn(5)-C(5)
O(25) - Sn(5) - Sn(0)
0(23)-01(3)-01(3)
O(12)-Sn(5)-Sn(9)
O(26)-Sn(5)-Sn(9)
O(16)-Sn(5)-Sn(9)
C(E) Cr(E) Cr(O)
C(5)-SII(5)-SII(9)
O(25)-Sn(5)-Sn(1)
O(12)-Sn(5)-Sn(1)
O(26)-Sn(5)-Sn(1)
O(16) Sp(5) Sp(1)
O(10) - O(10) - O(10)
C(5)-SII(5)-SII(1)
Sn(9)-Sn(5)-Sn(1)
O(25)-Sn(5)-Sn(10)
O(12) - Sn(5) - Sn(10)
O(26) Sp(5) Sp(10)
0(20)-31(3)-31(10)
O(16)-Sn(5)-Sn(10)
C(5)-Sn(5)-Sn(10)
Sn(9)-Sn(5)-Sn(10)
$S_{n}(1) S_{n}(5) S_{n}(10)$
31(1)-31(3)-31(10)
O(20)-Sn(6)-O(26)
O(20)-Sn(6)-O(15)
O(26)-Sn(6)-O(15)
O(20) Sp(6) $O(6)$
0(20)-31(0)-0(0)
O(26)-Sn(6)-C(6)
O(15)-Sn(6)-C(6)
O(20)-Sn(6)-O(36)
O(26) Sn(6) O(26)
0(20)-31(0)-0(30)
O(15)-Sn(6)- $O(36)$
C(6)-Sn(6)-O(36)
O(20)-Sn(6)- $O(19)$
O(26) Sp(6) $O(10)$
0(20)-31(0)-0(19)
O(15)-Sn(6)- $O(19)$
C(6)-Sn(6)-O(19)
O(36)-Sn(6)-O(19)
O(20)-Sn(6)-Sn(9)
0(20)-01(0)-01(9)
O(26)-Sn(6)-Sn(9)
O(15)-Sn(6)-Sn(9)
O(10) O(0) O(0)
C(6)-Sn(6)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22)
C(6) Sn(6) Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(12) Sn(7)-O(22)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(19)-Sn(7)-O(29) O(19)-Sn(7)-O(29)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(29) O(12)-Sn(7)-O(12)-Sn(7)-O(12) O(12)-Sn(7)-O(12)-Sn(7)-O(12)-Sn(7)-Sn
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(19)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(19)-Sn(7)-Sn(11)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(11)-Sn(11) O(13)-Sn(11)-Sn(11) O(13)-Sn(11)-Sn(11) O(13)-Sn(11)-Sn(11)-Sn(11) O(13)-Sn(11
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-Sn(11)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(2)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(10)-Sn(11) O(19)-Sn(10)-Sn(11) O(19)-Sn(10)-Sn(11)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(20)-Sn(7)-Sn(20)-Sn(2
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(12) O(13)-Sn(12)-Sn(12) O(13)-Sn(12)-Sn(12) O(13)-Sn(12)-Sn(12)-Sn(12) O(13)-Sn(12)-
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(20)-Sn(7
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(23)-Sn(7)-
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(11) O(19)-Sn(7)-Sn(19) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(27)-Sn(7)-
S(i)) Sn(i)) Sn(i)) C(6)-Sn(i)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) Sn(11)-Sn(7)-Sn(9)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(18)-Sn(8)-O(17)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(11)-Sn(7)-Sn(9) O(11)-Sn(7)-Sn(9) O(11)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(8)-O(17) O(18)-Sn(8)-O(17) O(18)-Sn(8)-O(17)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(21)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(23)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(18)-Sn(8)-O(23) O(11)-Sn(8)
S(1) S(1) S(6) Sn(6) S(6) Sn(6) S(19) Sn(6) S(19) Sn(7) S(19) Sn(7) S(19) Sn(7) S(19) Sn(7) S(11) Sn(7) S(11) Sn(7) S(11) Sn(7) S(11) Sn(7) S(11) Sn(7) S(12) Sn(7) S(11) Sn(7) S(12) Sn(7) S(11) Sn(7) S(12) Sn(7) S(12) Sn(7) S(13) Sn(7) S(13) Sn(7) S(11) Sn(7) S(12) Sn(7) S(12)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(18)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8
S(i) Sin(j) Sin(j) S(i) Sin(j) Sin(j) O(36) Sin(i) Sin(j) O(19) Sin(i) Col(2) O(19) Sin(i) Col(2) O(19) Sin(i) Col(2) O(13) Sin(i) Col(i) O(13) Sin(i) Sin(i) O(13) Sin(i) Sin(i) O(13) Sin(i) Sin(i) O(13) Sin(i) Sin(i) O(13) Sin(i) Sin(i) O(
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(36)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(8)-O(23) O(13)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(13)
S(i)) Sn(i)) Sn(i)) C(6)-Sn(i))-Sn(i)) O(19)-Sn(i)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(13)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(18)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(22) O(13)-S
S(i) S(i) S(i) S(i) S(i) S(i) S(i) S(i)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(13)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(29) O(23)-Sn(8)-Sn(8)-O(29) O(23)-Sn(8)-Sn(8)-O(29) O(23)-Sn(8)
S(i), Sn(i), Sn(
S(i) S(i) S(i)
C(6)-Sn(6)-Sn(9) C(6)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-C(7) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(22)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(23) O(17)-Sn(8)-O(29) O(17)-Sn(8)-O(29) O(17)-Sn(8)-O(29) </td
S(i), Sn(i), Sn(
S(i), Sin(6), Sin(9) C(6), Sin(6), Sin(9) O(19), Sin(6), Sin(9) O(19), Sin(7), O(13) O(19), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(29) O(22), Sin(7), O(29) O(22), Sin(7), C(7) O(13), Sin(7), C(7) O(13), Sin(7), Sin(11) O(22), Sin(7), Sin(9) O(13), Sin(7), Sin(9) O(22), Sin(7), Sin(9) O(22), Sin(7), Sin(9) O(22), Sin(7), Sin(9) O(17), Sin(8), O(23) O(18), Sin(8), O(23) O(17), Sin(8), O(23) O(17), Sin(8), O(22) O(17), Sin(8), O(23) O(17), Sin(8), O(23) O(23), Sin
S(i)) Sn(i)) Sn(i)) C(6)-Sn(i)-Sn(9) O(19)-Sn(6)-Sn(9) O(19)-Sn(7)-O(13) O(19)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(13)-Sn(7)-O(22) O(19)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-O(29) O(22)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-C(7) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(29)-Sn(7)-Sn(11) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(13)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(22)-Sn(7)-Sn(9) O(23)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(23) O(18)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(17)-Sn(8)-O(22) O(23)-Sn(8)-O(29) O(22)-Sn(8)-O(29) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8) O(22)-Sn(8)-C(8)
S(i), Sin(6), Sin(9) C(6), Sin(6), Sin(9) O(19), Sin(6), Sin(9) O(19), Sin(7), O(13) O(19), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(22) O(13), Sin(7), O(29) O(22), Sin(7), O(29) O(13), Sin(7), C(7) O(29), Sin(7), C(7) O(29), Sin(7), Cin(11) O(29), Sin(7), Sin(11) O(29), Sin(7), Sin(9) O(13), Sin(7), Sin(9) O(22), Sin(7), Sin(9) O(23), Sin(8), O(23) O(17), Sin(8), O(23) O(17), Sin(8), O(22) O(13), Sin(8), O(22) O(22), Sin(8), O(22) O(23), Sin(8), O(23) O(22), Sin(8), O(23) O(22), Sin(8), O(23) O(22), Sin(8), O(23) O(22), Sin(8), O(23) O(23), Sin(8), O(23) O(2

98.8(2)
90.0(2)
127 0(2)
137.0(2)
77 4(2)
77 3(2)
109 2(3)
114.4(3)
107 1(3)
112.1(3)
122.13(17)
106.47(16)
39.40(16)
38.21(15)
119.2(3)
41.54(17)
36.59(16)
125.36(16)
107.13(16)
119.5(3)
120.24(2)
111.10(17)
39.10(15)
109.58(16)
38.31(15)
119.1(3)
71.426(19)
71.840(19)
88.2(2)
76.5(2)
90.0(2)
170.6(3)
100.4(3)
99.5(3)
75.8(2)
160.1(2)
97.6(2)
96.5(3)
87.1(2)
75.8(2)
158.7(2)
96.6(3)
91.3(2)
00.20(10)
37.90(10)
120.03(17)
100.9(3)
127.93(19)
37.07(13)
77 2(2)
77.2(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102 5(4)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 121.3(4) 121.3(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 121.3(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 121.3(4) 121.3(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 38.22(3) 117.50(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 100.4(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 158.6(2) 88.7(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.8(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 121.3(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 90.2(3) 158.8(2) 75.6(2)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.8(2) 75.6(2) 167.6(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 75.8(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.8(2) 75.6(2) 167.6(3) 96.6(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.8(2) 75.6(2) 167.6(3) 96.6(3) 96.6(3) 96.6(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 125.2(3) 117.50(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.8(2) 75.6(2) 167.6(3) 96.6(3) 96.3(3) 101.7(3)
77.2(2) 135.5(2) 136.7(2) 78.0(3) 77.2(2) 108.6(4) 102.5(4) 121.3(4) 114.4(4) 120.83(17) 39.84(18) 105.85(16) 38.43(19) 117.3(3) 39.18(15) 120.38(18) 38.22(16) 106.98(18) 38.22(16) 106.98(18) 38.22(16) 105.85(2) 75.8(2) 75.8(2) 75.8(2) 75.8(2) 100.4(3) 87.9(2) 158.6(2) 88.7(2) 89.3(2) 90.2(3) 158.6(2) 88.7(2) 90.2(3) 158.6(3) 96.6(3) 96.6(3) 96.3(3) 101.7(3) 100.7(3) 100.7(3)

O(22)-Sn(9)-O(19) O(16)-Sn(9)-O(19) O(22)-Sn(9)-O(26)
O(16)-Sn(9)-O(19) O(22)-Sn(9)-O(26)
O(10)-Sn(9)-O(19) O(22)-Sn(9)-O(26)
O(22)-Sn(9)-O(26)
- () - (-) - (-)
O(16)-Sn(9)-O(26)
0(19)-Sn(9)-0(26)
0(22)-51(9)-0(9)
O(16)-Sn(9)-C(9)
O(19)-Sn(9)-C(9)
O(26) Sn(0) C(0)
0(26)-51(9)-0(9)
O(22)-Sn(9)-Sn(7)
O(16)-Sn(9)-Sn(7)
O(10) - Sn(0) - Sn(7)
O(26)-Sn(9)-Sn(7)
C(9)-Sn(9)-Sn(7)
O(22)-Sn(9)-Sn(5)
O(22) - O((3) - O((3))
O(16)-Sh(9)-Sh(5)
O(19)-Sn(9)-Sn(5)
O(26) - Sn(9) - Sn(5)
C(20) Cn(0) Cn(0)
C(9)-Sn(9)-Sn(5)
Sn(7)-Sn(9)-Sn(5)
O(22)-Sn(9)-Sn(6)
O(16) Sn(0) Sn(6)
0(10)-31(9)-31(0)
O(19)-Sn(9)-Sn(6)
O(26)-Sn(9)-Sn(6)
C(0) Sp(0) Sp(6)
5n(7)-5n(9)-5n(6)
Sn(5)-Sn(9)-Sn(6)
O(18)-Sn(10)-O(16)
O(10) = O(10) = O(10)
U(18)-SN(10)-U(21)
O(16)-Sn(10)-O(21)
O(18)-Sn(10)-O(23)
O(10) O(10) O(20)
O(16)-Sh(10)-O(23)
O(21)-Sn(10)-O(23)
O(18)-Sn(10)-O(12)
O(16) Sn(10) O(12)
0(10)-0(12)
O(21)-Sn(10)-O(12)
O(23)-Sn(10)-O(12)
O(18) Sp(10) $C(100)$
0(10)-0(10)
O(16)-Sn(10)-C(100)
O(21)-Sn(10)-C(100)
O(23)-Sp(10)-C(100)
O(23) - O(10) - O(100)
O(12)-Sn(10)-C(100)
O(18)-Sn(10)-Sn(5)
O(16)-Sn(10)-Sn(5)
O(10) O(10) O(10) O(0)
O(21)-Sn(10)-Sn(5)
$O(00) O_{-}(40) O_{-}(F)$
O(23)-Sn(10)-Sn(5)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(20)-Sn(5)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27) Sn(11)-O(14)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(20)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(20)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(27) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(20)-Sn(11)-O(7) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) C(100)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(17)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(17)-O(17) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(110)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(20)-Sn(11)-O(7) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(110) O(27)-Sn(11)-C(110)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(15) O(29)-Sn(11)-O(17) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(15) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(17) O(29)-Sn(11)-O(17) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(110) O(12)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) C(110)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(12) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(11)-Sn(2)-Sn(
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(11)-Sn(11)-Sn(3) Sn(7)-Sn(11)-Sn(3)
O(2)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(14)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(11)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4) O(21)-Sn(11)-Sn(4)
O(2)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4)
O(2)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(10)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)-O(17)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(29)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) Sn(7)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) Sn(7)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) Sn(11)-Sn(4)-O(17) O(18)-Sn(12)-O(17) O(18)-Sn(12)-O(17)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)-O(28) O(12)-Sn(12
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)- $O(28)O(17)$ -Sn(12)-
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(21)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4)
O(2)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(12) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(11)-Sn(1)-Sn(4)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-C(110) O(13)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(7) O(23)-Sn(11)-Sn(3) O(23)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(23)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(14)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) Sn(7)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) Sn(12)-O(27) O(17)-Sn(12)-O(27) O(27)-Sn(12)-O(27) O(27)-Sn(12)-O(27) O(28)-Sn(12)-O(27) O(28)-Sn(12)-O(27)
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(14)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(21)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)-O(27) O(18)-Sn(12)-O(27) O(17)-Sn(12)-O(27) O(28)-Sn(12)-O(27) O(29)-Sn(12)-O(27) O(29)-Sn(20)-O(27) O(29)-Sn(20)-O(27) O(21)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27) O(21)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-O(27)-Sn(20)-S
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(29)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)- $O(28)O(17)$ -Sn(12)- $O(27)O(28)$ -Sn(2)- $O(27)$ - $O(28)$ - $O(2$
$\begin{array}{l} O(23) - Sn(10) - Sn(5) \\ O(12) - Sn(10) - Sn(5) \\ O(20) - Sn(11) - O(27) \\ O(29) - Sn(11) - O(14) \\ O(27) - Sn(11) - O(14) \\ O(29) - Sn(11) - O(13) \\ O(27) - Sn(11) - O(110) \\ O(27) - Sn(11) - O(110) \\ O(27) - Sn(11) - C(110) \\ O(27) - Sn(11) - Sn(7) \\ O(27) - Sn(11) - Sn(7) \\ O(29) - Sn(11) - Sn(3) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(3) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(3) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(3) \\ O(13) - Sn(11) - Sn(3) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(4) \\ O(27) - Sn(11) - Sn(4) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(4) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(4) \\ O(14) - Sn(11) - Sn(4) \\ O(13) - Sn(11) - Sn(2) \\ O(28) - Sn(12) - O(27) \\ O(28) - Sn(12) - O(27) \\ O(28) - Sn(12) - O(27) \\ O(28) - Sn(12) - O(21) \\ O(21) - Sn(12) - O(21) \\ O(21) - Sn(12) - O(21) \\ O(21) - Sn($
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(29)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(13)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(14)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(3) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)- $O(28)O(18)$ -Sn(12)- $O(27)O(18)$ -Sn(12)- $O(27)O(28)$ -Sn(2)- $O(21)O(28)$ -Sn(2)- $O(21)$
O(23)-Sn(10)-Sn(5) O(12)-Sn(10)-Sn(5) O(29)-Sn(11)-O(27) O(29)-Sn(11)-O(14) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-O(13) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-C(110) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(27)-Sn(11)-Sn(7) O(29)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(3) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(27)-Sn(11)-Sn(4) O(13)-Sn(12)- $O(28)O(17)$ -Sn(12)- $O(28)O(17)$ -Sn(12)- $O(27)O(28)$ -Sn(12)- $O(27)O(27)$ -Sn(12)- $O(21)O(27)$ -Sn(21)- $O(21)O(27)$ -Sn(21)- $O(21)O(27)$ -Sn(21)- $O(21)O(27)$ -Sn(21)- $O(21)O(27)$ -Sn(2

77.1(2)
136.9(2)
77.9(2)
77.4(2)
103.4(3)
113.6(3)
118.8(3)
39.32(17)
37.88(17)
106.82(16)
116.5(2)
39.66(16)
106.45(16)
38.53(15)
118.10(2)
109.94(18)
109.74(17) 39.24(17)
38.17(15)
123.2(2)
72.30(2) 71.393(19)
88.8(2)
75.5(2)
162.0(2) 75.5(2)
89.5(2)
94.9(2)
87.9(2) 75.6(2)
94.8(2)
157.9(2)
169.4(3) 100 7(3)
95.8(3)
99.5(3)
99.2(3) 89.08(15)
38.46(16)
130.72(17)
126.51(16) 37 17(16)
101.4(3)
98.4(3)
138.9(3)
78.4(2)
137.3(3)
77.3(3)
107.1(4)
112.3(3)
114.4(3)
122.32(19)
107.46(17)
38.43(18)
122.91(18)
39.99(18)
38.69(17)
119.4(3)
118.98(3)
111.40(18)
38.47(17)
38.83(19)
119.6(3)
72.34(2)
75.3(2)
87.9(2)
137.0(2) 87.7(2)
89.2(3)
75.3(2)
74.7(2) 94.2(3)
95.5(2)

O(18)-Sn(12)-C(120)
O(17)-Sn(12)-C(120)
O(28)-Sn(12)-C(120)
O(27)-Sn(12)-C(120)
O(21)-Sn(12)-C(120)
V(3)-O(1)-Sn(13)
Sp(13)-O(2)-Sp(15)
Sn(15) - O(2) - Sn(15)
31(15)-0(3)-31(14)
V(2)-O(4)-V(3)
V(4)-O(5)-Sn(15)
Sn(14)-O(6)-Sn(13)
Sn(14)-O(6)-Sn(15)
Sn(13)-O(6)-Sn(15)
V(1)-O(7)-Sn(15)
V(1) - O(8) - Sn(13)
V(2) O(0) V(4)
V(2) - O(9) - V(4)
V(3)-O(11)-Sn(14)
Sn(1)-O(12)-Sn(5)
Sn(1)-O(12)-Sn(10)
Sn(5)-O(12)-Sn(10)
Sn(7)-O(13)-Sn(11)
Sn(7)-O(13)-Sn(4)
Sn(11) - O(13) - Sn(4)
Sn(11) = O(13) = On(4) Sn(2) = O(14) = Sn(14)
SI(3)-O(14)-SI(11)
Sn(3)-O(14)-Sn(4)
Sn(11)-O(14)-Sn(4)
Sn(6)-O(15)-Sn(2)
Sn(9)-O(16)-Sn(10)
Sn(9)-O(16)-Sn(5)
Sn(10)-O(16)-Sn(5)
Sn(12)-O(17)-Sn(8)
Sn(12) = O(17) = Sn(0)
Sn(8)-O(18)-Sn(10)
Sn(8)-O(18)-Sn(12)
Sn(10)-O(18)-Sn(12)
Sn(7)-O(19)-Sn(9)
Sn(7)-O(19)-Sn(6)
Sn(9)-O(19)-Sn(6)
Sn(6)-O(20)-Sn(4)
Sn(6) O(20) Sn(4)
Sn(0) = O(20) = Sn(2)
Sn(4)-O(20)-Sn(2)
Sn(10)-O(21)-Sn(12)
Sn(9)-O(22)-Sn(7)
Sn(9)-O(22)-Sn(8)
Sn(7)-O(22)-Sn(8)
Sn(10)-O(23)-Sn(8)
Sn(3)-O(24)-Sn(2)
Sn(3) - O(24) - Sn(1)
Sn(3) - O(24) - Sn(1)
SI(2)-O(24)-SI(1)
Sn(5)-O(25)-Sn(2)
Sn(5)-O(25)-Sn(1)
Sn(2)-O(25)-Sn(1)
Sn(5)-O(26)-Sn(9)
Sn(5)-O(26)-Sn(6)
Sn(9)-O(26)-Sn(6)
Sn(11)-O(27)-Sn(3)
Sn(11)-O(27)-Sn(12)
Sn(3) - O(27) - Sn(12)
Sn(3) = O(27) = On(12)
SI(1)-O(20)-SI(3)
Sn(1)-O(28)-Sn(12)
Sn(3)-O(28)-Sn(12)
Sn(11)-O(29)-Sn(7)
Sn(11)-O(29)-Sn(8)
Sn(7)-O(29)-Sn(8)
V(2)-O(30)-V(1)
Sn(13)-O(32)-Sn(14)
$V(1)_{-}O(34)_{-}Sp(1)$
V(4) O(35) Sp(14)
V(4) = O(33) = SII(14)
Sn(4)-O(36)-Sn(6)
Sn(4)-O(37)-Sn(2)
U(11)-U(1)-U(12)
C(11)-C(1)-Sn(1)
C(12)-C(1)-Sn(1)
C(21)-C(2)-C(22)
C(21)-C(2)-Sn(2)
C(22)-C(2)-Sn(2)
C(32)- $C(3)$ - $C(31)$
C(32) C(3) C(31)
O(32) - O(3) - O(3)
U(31)-U(3)-ON(3)
C(42)-C(4)-C(41)
C(42)-C(4)-Sn(4)
C(41)-C(4)-Sn(4)
C(51)-C(5)-C(52)
C(51)-C(5)-Sn(5)
C(52)-C(5)-Sn(5)
C(61)-C(6)-C(62)
C(61)-C(6)-Sn(6)

170.4(3)	
100.5(3) 98.2(3)	
100.9(3)	
97.3(3)	
129.3(3) 103.1(3)	
102.0(3)	
136.1(4)	
123.3(3)	
104.1(3)	
104.0(3)	
125.9(3)	
148.1(4)	
124.4(3)	
134.8(3)	
103.7(2)	
101.7(3) 135.6(3)	
102.9(3)	
101.9(3)	
133.2(3) 103 7(3)	
102.3(3)	
133.8(3)	
102.1(2) 103.2(2)	
103.4(3)	
105.7(3)	
105.4(3)	
102.9(2)	
134.6(3)	
102.9(3)	
105.7(3)	
104.2(3)	
103.3(2)	
133.9(3)	
104.2(3)	
133.0(3)	
101.4(2)	
104.2(3) 134 1(3)	
101.2(2)	
105.2(3)	
102.1(2) 132.8(3)	
103.9(3)	
101.5(3)	
134.4(3) 102.8(3)	
106.1(3)	
135.0(3)	
104.5(3)	
132.5(3)	
102.9(3)	
140.5(3)	
171.5(4)	
127.2(3)	
102.2(3)	
113.2(8)	
109.8(7) 111 1(7)	
113.7(9)	
110.4(7)	
111.1(7) 121.6(0)	
110.4(10)	
107.1(3)	
133(2) 113 7(17)	
111.7(11)	
112.7(9)	
106.7(7)	
112.6(8)	
112.8(6)	

C(62) C(6) Sp(6)
C(02)- $C(0)$ - $SI(0)$
C(72) - C(7) - C(71)
C(72)- $C(7)$ - $Sin(7)$
C(77)- $C(7)$ - $C(7)$ - $C(81)$
C(82)-C(8)-C(01)
C(81)-C(8)-Sn(8)
C(92)-C(9)-C(91)
C(92)- $C(9)$ - $Sn(9)$
C(91)- $C(9)$ - $Sn(9)$
C(102)-C(100)-C(101)
C(102)- $C(100)$ - $Sn(10)$
C(101)-C(100)-Sn(10)
C(111)-C(110)-C(112)
C(111)-C(110)-Sn(11)
C(112)-C(110)-Sn(11)
C(121)-C(120)-C(122)
C(121)-C(120)-Sn(12)
C(122)-C(120)-Sn(12)
O(6)-Sn(13)-O(2)
O(6)-Sn(13)-O(8)
O(2)-Sn(13)-O(8)
O(6)-Sn(13)-O(1)
O(2)-Sn(13)-O(1)
O(8)-Sn(13)-O(1)
O(6)-Sn(13)-O(32)
O(2)-Sn(13)-O(32)
O(8)-Sn(13)-O(32)
O(1)-Sn(13)-O(32)
O(6)-Sn(13)-C(13)
O(2)-Sn(13)-C(13)
O(8)-Sn(13)-C(13)
O(1)-Sn(13)-C(13)
O(32)-Sn(13)-C(13)
O(35)-Sn(14)-O(6)
O(35)-Sn(14)-O(11)
O(6)-Sn(14)-O(11)
O(35)-Sn(14)-O(32)
O(6)-Sn(14)-O(32)
O(11)-Sn(14)-O(32)
O(35)-Sn(14)-O(3)
O(6)-Sn(14)-O(3)
O(11)-Sn(14)-O(3)
O(32)-Sn(14)-O(3)
O(35)-Sn(14)-C(14)
O(6)-Sn(14)-C(14)
O(11)-Sn(14)-C(14)
O(32)-Sn(14)-C(14)
O(3)-Sn(14)-C(14)
O(5)-Sn(15)-O(7)
O(5)-Sn(15)-O(6)
O(7)-Sn(15)-O(6)
O(5)-Sn(15)-O(3)
O(7)-Sn(15)-O(3)
O(6)-Sn(15)-O(3)
O(5)-Sn(15)-O(2)
O(7)-Sn(15)-O(2)
O(6)-Sn(15)-O(2)
O(3)-Sn(15)-O(2)
O(3)-SII(15)- $O(15)$
O(7)-SII(15)- $O(15)$
O(0)-SII(15)-O(15) O(3)-Sn(15)-C(15)
O(3)-Sn(15)-O(15) O(2)-Sn(15)-C(15)
O(2)-O(13)-O(13)
O(34)-V(1)-O(0)
O(3+)-V(1)-O(7)
O(34)- $V(1)$ - $O(30)$
O(3+)-V(1)-O(30)
O(7)-V(1)-O(30)
O(33)-V(2)-O(9)
O(33)-V(2)-O(30)
O(9) - V(2) - O(30)
O(33)-V(2)-O(4)
O(9) - V(2) - O(4)
O(30)-V(2)-O(4)
O(10)-V(3)-O(1)
O(10)-V(3)-O(11)
O(1)-V(3)-O(11)
O(10)-V(3)-O(4)
O(1)-V(3)-O(4)
O(11)-V(3)-O(4)
O(31)-V(4)-O(35)
O(31)-V(4)-O(5)
O(35)-V(4)-O(5)
0 (0 ()) ((() 0 (0)

444 0(7)
111.0(7)
112.6(14)
115.2(11)
107.1(9)
113.8(10)
112.8(8)
110.1(7)
115.1(8)
113 7(6)
111 1(6)
111 0(8)
112.1(6)
112.1(6)
112.6(6)
111.6(11)
109.5(8)
107.8(9)
110.0(10)
111 /(9)
111.4(0)
111.0(7)
76.4(2)
88.0(2)
85.6(2)
85.0(2)
160.2(2)
87 0(2)
76 4(3)
01 7(2)
31.7(3)
164.4(3)
90.4(2)
175.0(4)
99.7(4)
94.9(4)
99 3(4)
100.7(4)
100.7(4)
86.5(2)
89.7(3)
89.1(2)
162.9(2)
76.5(2)
88.9(3)
88 0(3)
76 1(2)
165 2(2)
165.2(2)
88.2(3)
96.9(4)
175.5(4)
93.9(4)
100.2(4)
100 9(4)
84 0(2)
04.0(2)
89.5(2)
85.1(2)
91.0(3)
160.8(2)
76.2(2)
1649(2)
90 5(2)
75 0(2)
70.9(2)
09.0(3)
100.5(3)
101.6(3)
168.4(3)
97.6(3)
94.4(3)
109.9(3)
108 3(3)
110 7(3)
105 7(3)
105.7(5)
107.6(3)
114.4(3)
107.5(3)
107.2(3)
111.1(3)
106.9(3)
112 4(3)
111 5(2)
100.0(0)
109.2(3)
109.4(3)
110.9(3)
106.7(3)
112.8(3)
107.8(3)
110.6(3)
108 9(3)
108 8(3)
100.0(3)
107.2(3)

1	1	n
1	4	υ

U11	U22	U33	U23	U13	U12	
			. =	- / ->	- (
Sn(1)	27(1)	18(1)	15(1)	3(1)	3(1)	15(1)
Sn(2)	27(1)	19(1)	14(1)	3(1) 5(1)	2(1)	12(1) 5(1)
Sn(4)	23(1)	21(1)	20(1)	4(1)	-4(1)	7(1)
Sn(5)	19(1)	19(1)	15(1)	3(1)	1(1)	11(1)
Sn(6)	22(1)	17(1)	15(1)	5(1)	1(1)	9(1)
Sn(7)	23(1)	24(1)	26(1)	8(1)	1(1)	15(1)
Sn(8)	24(1)	24(1)	25(1)	8(1)	6(1)	17(1)
Sn(9)	22(1)	15(1)	18(1)	5(1)	1(1)	10(1)
Sn(10) Sn(11)	23(1)	29(1)	28(1)	3(1) 7(1)	2(1) 0(1)	9(1)
Sn(12)	23(1)	20(1)	21(1)	7(1)	7(1)	11(1)
O(1)	26(3)	31(4)	13(3)	9(2)	8(2)	18(3)
O(2)	37(4)	19(3)	22(3)	-5(3)	-2(3)	17(3)
O(3)	45(4)	32(4)	32(4)	12(3)	8(3)	29(4)
O(4) O(5)	33(4) 25(3)	27(4) 31(4)	23(3) 11(3)	-b(3) 0(2)	2(3) 5(2)	19(3)
O(6)	16(3)	18(3)	25(3)	2(2)	2(2)	8(3)
O(7)	28(3)	21(3)	10(3)	6(2)	6(2)	14(3)
O(8)	30(4)	24(3)	17(3)	4(2)	7(3)	17(3)
O(9)	36(4)	28(4)	14(3)	4(3)	3(3)	16(3)
O(10)	27(4)	45(4)	23(3)	5(3)	11(3)	20(3)
O(11)	33(4) 23(3)	30(4) 14(3)	14(3) 20(3)	-2(2)	0(3) 1(2)	17(3)
O(12) O(13)	25(3)	32(4)	17(3)	3(3)	-5(3)	14(3)
O(14)	22(3)	20(3)	27(3)	6(3)	3(3)	6(3)
O(15)	21(3)	18(3)	20(3)	8(2)	2(2)	8(3)
O(16)	21(3)	20(3)	15(3)	5(2)	4(2)	14(3)
O(17)	36(4)	32(4)	27(3)	12(3)	19(3) 5(2)	24(3)
O(13) O(19)	25(3)	18(3)	9(3)	4(2)	-2(2)	10(3)
O(20)	22(3)	17(3)	14(3)	7(2)	1(2)	8(3)
O(21)	32(4)	25(3)	11(3)	8(2)	3(2)	18(3)
O(22)	20(3)	12(3)	26(3)	8(2)	7(2)	9(3)
O(23)	32(4)	27(3)	10(3)	0(2)	5(2)	21(3)
O(24) O(25)	31(4)	24(3) 15(3)	15(3)	5(Z)	4(3)	17(3)
O(26)	23(3)	15(3)	8(3)	-2(2) 0(2)	1(2)	8(3)
O(27)	25(3)	25(3)	20(3)	8(3)	0(3)	12(3)
O(28)	26(3)	24(3)	13(3)	2(2)	1(2)	14(3)
O(29)	25(3)	35(4)	19(3)	12(3)	3(3)	13(3)
O(30)	35(4)	20(3)	10(3)	2(2)	-1(2)	18(3)
O(37)	39(4)	23(4)	23(3)	-10(3) 6(3)	10(3)	24(4) 9(3)
O(33)	44(4)	28(4)	20(3)	-7(3)	-4(3)	25(3)
O(34)	45(4)	26(3)	14(3)	2(2)	9(3)	26(3)
O(35)	31(4)	36(4)	13(3)	-2(3)	4(3)	21(3)
O(36)	29(4)	24(3)	20(3)	-1(3)	-9(3)	11(3)
O(37) Sn(13)	29(4) 25(1)	22(3) 18(1)	20(1)	0(2)	-4(3)	10(1)
Sn(14)	33(1)	26(1)	16(1)	9(1)	6(1)	18(1)
Sn(15)	29(1)	19(1)	16(1)	3(1)	3(1)	17(1)
V(1)	28(1)	19(1)	14(1)	4(1)	2(1)	15(1)
V(2)	30(1)	20(1)	16(1)	0(1)	2(1)	15(1)
V(3)	27(1)	30(1)	11(1)	(1)	3(1)	16(1)
O(200)	41(5)	41(5)	42(4)	9(4)	20(4)	20(4)
S(200)	32(1)	29(1)	42(2)	4(1)	11(1)	16(1)
O(301)	44(7)	50(6)	49(5)	8(5)	2(5)	7(5)
S(301)	34(2)	34(2)	44(2)	2(2)	9(2)	7(2)
U(305) S(305)	44(7) 34(2)	5U(6) 34(2)	49(5) 44(2)	8(5) 2(2)	∠(5) 9(2)	7(5) 7(2)
O(401)	48(6)	5 4 (2)	++(<i>∠)</i> 67(12)	<u>د(د)</u> 41(8)	-14(7)	16(5)
S(401)	50(3)	49(3)	46(2)	10(2)	-8(2)	20(2)
O(405)	48(6)	56(7)	67(12)	41(8)	-14(7)	16(5)
S(405)	50(3)	49(3)	46(2)	10(2)	-8(2)	20(2)
O(500)	48(5) 51(2)	27(4)	31(4)	9(3)	12(3)	24(4)
3(300)	51(2)	30(1)	∠3(1)	0(1)	10(1)	23(1)

Table 4.Anisotropic displacement parameters $(A^2 x \ 10^3)$ for 5. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U 11 + ... + 2 h k a^* b^* U 12$].

A F C Unspl Link (14) 8977 5643 -710 613) (12) 5732 575 644 613) (14) 5135 575 644 613) (14) 1058 385 -169 613) (14) 10577 65527 -708 613) (14) 10537 65527 -708 613) (14) 10537 65527 -708 613) (14) 6331 2554 173 613) (14) 5284 1338 16 613 (11) 5284 1338 16 613 (11) 5284 1338 16 613 (11) 5313 1225 566 613 (12) 740 3222 613 613 (12) 741 533 613 613 (12) 741 533 613 613 (12) </th <th>ימטול ט.</th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th>	ימטול ט.				
41A) 843 6133 -400 613 42A) 6377 5447 716 613 45A) 6372 -1985 940 613 45A) 816 946 -265 613 45A) 1027 677 7407 613 45A) 10287 683 613 45A) 816 425 683 613 45A) 816 425 683 613 4111 5372 2533 -168 613 4111 5372 4273 60 613 4112 7173 4273 60 613 4123 8626 41387 116 613 4124 813 125 56 613 4123 616 613 613 4123 617 613 613 4123 7173 827 613 4123 7173 828 613		λ	у	Z	U(eq)
quayquaygetq564.47.76613170.6573.77.76614.9613170.6573.77.76614.9613170.610.53763.227.708613170.610.53763.227.708613170.663.312.654179613170.763.231.33613613170.763.312.654179613170.769.81.331.66613170.77.704.77560613171.77.704.77560613171.77.704.77560613171.77.704.77560613171.77.704.77560613171.77.707.707.70613171.77.707.70613613171.77.707.70613613171.77.707.70613613171.77.707.70613613171.77.707.70613613172.77.707.70613613173.77.70613613613173.77.707.70613613173.77.707.70613613173.77.707.70613613173.77.707.70613613174.77.707.707.70613174.77.70 <td>H(1A)</td> <td>8643</td> <td>6138</td> <td>-400</td> <td>61(3)</td>	H(1A)	8643	6138	-400	61(3)
TA)573573673614613140.)2456945945945945140.)10587632708613140.)774975708613140.)774975708613140.)774975708613140.)633125541796131411150823313613141121508233146131411215082331486131411215081238148613141215081238148613141215081237603613141216131257508613141216131257508613141216131257508613141216131257508613141216131257508613141216131257508613142380624138401613142381312575086131423111714025201736131423111752841361314231117140213661314231117140214061314231117140214061314231117140214061314231117244140613 <td>H(2A)</td> <td>6977</td> <td>5454</td> <td>-716</td> <td>61(3)</td>	H(2A)	6977	5454	-716	61(3)
145.0) 82.81 1.995 2.440 818] 146.0) 105.87 85.5 -7.05 81.3] 143.0) 105.87 85.5 -7.05 81.3] 143.0) 15.44 1.42.5 6.86 9.13 143.1 81.46 1.42.5 6.86 9.13 141.1 5.86 2.33 1.3 61.3] 141.12 5.86 2.33 1.6 61.3] 141.12 7.07 4.27.9 6.0 81.3] 141.13 5.86 2.33 1.6 61.3] 141.21 7.07.8 4.27.9 6.0 81.3] 141.21 7.07.8 4.27.9 6.2 61.3] 142.21 7.7.0 4.27.9 6.2 61.3] 142.21 4.9.9 1.85.7 6.0 6.3 142.21 4.9.9 8.5.2 6.0 8.13 142.21 4.9.9 8.5.2 6.0 8.13 142.21 4.9	H(7A)	5737	-573	614	61(3)
Number Number Number Number Number Number Number 1163 1163 1163 1163 1163 Number 1164 1125 668 61(3) Number 1173 61(3) 61(3) Number 1173 61(3) 61(3) Number 1173 61(3) 61(3) Number 1055 1233 10 61(3) Number 1051 322 61(3) 61(3) Number 1057 10 61(3) 61(3) Number 1051 322 61(3) 61(3) Number 1051 322 61(3) 61(3) Number 1051 322 61(3) 61(3) Number 1151 322 61(3) 61(3) Number 1151 322 61(3) 61(3) Number 1151 322 61(3) 61(3) Num 11151 1152	H(5A)	8328	-1995	-240	61(3)
Hah 11087 385 11087 1118 Hah 1724 975 740 61(3) HSA 1425 688 61(3) HA 6220 2333 1-13 61(3) H1 5202 2333 1-13 61(3) H11 5202 2333 1-13 61(3) H11 5202 2333 1-13 61(3) H121 7740 3328 -42 61(3) H121 620 1737 620 61(3) H121 6775 3562 560 61(3) H211 6775 3562 560 61(3) H211 11716 4494 212 61(3) H211 11716 4494 212 61(3) H211 11716 4494 212 61(3) H211 11716 4495 62 61(3) H211 11716 4495 61(3) H212	H(6A)	8416	949	-295	61(3)
13.1 17.24 5.27.5 1.40 6.13 14.0) 67.31 25.54 17.9 61.31 14.11 5.20.1 25.33 1.3 61.33 14.11.2 5.66.2 1.33.8 1.6 61.33 14.12.1 5.66.2 1.33.8 1.6 61.33 14.12.1 5.77.5 3.26.2 4.2 61.33 14.12.1 5.77.6 5.20.2 81.33 14.23.1 6.20.2 4.3.37 61.33 14.23.1 6.20.2 81.33 1.6 14.23.1 6.20.2 81.33 1.6 14.24.1 6.77.7 7.40 3.35.2 5.50 66.33 14.23.1 47.19 6.3.3 4.3.3 61.33 14.24.1 67.7 7.7.7 7.3 61.33 14.23.1 11.012 5.22 5.5.0 61.33 14.24.1 10.02.7 7.24 4.24 4.25 61.33 14.24.1 10.12.7	H(4A)	11068	385	-169	61(3)
Name 9 448 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 428 9 4333 9 438 9 438 <th< td=""><td>H(3A)</td><td>10537</td><td>6352</td><td>-708</td><td>61(3)</td></th<>	H(3A)	10537	6352	-708	61(3)
and (11) cs33 cs44 cp79 cs63 (112) cs05 133 16 cs63 (112) cs05 133 16 cs63 (113) cs05 133 16 cs63 (113) cs05 133 cs63 cs63 (113) cs05 133 cs63 cs63 (112) cs05 133 cs63 cs63 (122) cs76 157 cs0 cs63 cs63 (121) ds13 ts25 cs60 cs63 cs63 cs63 (121) ds13 ts25 cs60 cs63 cs63<	H(9A)	7574	-975	740	61(3)
4111 D220 D233 13 110 110 4112 5056 1339 16 613 4113 5064 2033 -108 613 41121 7773 4279 60 613 41221 7740 3928 -42 613 4121 773 4279 60 613 4121 5180 1551 560 613 4213 4213 4225 500 613 4213 4719 633 483 613 4213 7175 3522 500 613 4231 7185 3401 433 613 4231 1012 720 173 613 4231 10667 4756 62 613 4331 10667 4756 770 613 4314 9640 426 792 613 4314 9640 4265 770 613 <	⊓(6A) ⊔(1)	6140	1420	000	61(3)
4112) 9086 133 16 #10) 4113) 5664 2063 -108 613) 4121) 7073 4279 60 613) 4123) 8062 4133 113 613 4123) 8062 4133 113 613 4121 6270 1551 636 613 4121 6775 3552 650 613 4122) 7120 3352 650 613 4122) 7120 3352 650 613 41221 10565 4385 440 613 4121 10565 4385 440 613 4131 10565 4385 440 613 4132 10565 4385 440 613 4141 10565 4385 440 613 4132 10565 4385 440 613 4132 10565 4385 440 613 </td <td>(1)</td> <td>5260</td> <td>2533</td> <td>12</td> <td>61(3)</td>	(1)	5260	2533	12	61(3)
et113 9864 203 -108 et103 (f(2) 7740 3228 -42 61(3) (f(2) 8062 4138 118 61(3) (f(2) 8740 3228 -42 61(3) (f(2) 8775 623 610 613 (f(2) 6775 3352 650 61(3) (f(2) 7120 3352 401 613 (f(2) 7120 3352 401 613 (f(2) 7125 3424 416 613 (f(2) 7257 3552 650 61(3) (f(2) 9008 4661 179 61(3) (f(3) 10557 4756 62 61(3) (f(4) 10567 4756 62 613 (f(4) 10577 4542 446 610 (f(4) 10577 457 698 61(3) (f(4) 10672 257 693 <	H(112)	5095	1330	-15	61(3)
11/21 7073 4279 60 8163 (122) 7740 3328 42 613 (123) 8062 4138 118 613 (121) 5160 1551 362 613 (121) 5160 1551 362 613 (121) 6175 3552 550 613 (122) 7120 3352 401 613 (122) 7120 3352 401 613 (122) 7120 3352 401 613 (123) 10655 4385 449 613 (131) 10655 4385 449 613 (132) 10655 4385 449 613 (132) 10677 424 432 613 (132) 10677 4324 435 613 (132) 10672 456 770 613 (132) 10672 456 779 613	H(112)	5864	2063	-108	61(3)
14/22 7740 3228 -42 *10 14(3) 6276 1757 620 61(3) 14(2) 6276 1757 620 61(3) 14(2) 4319 1825 506 61(3) 14(21) 4319 1825 506 61(3) 14(22) 4775 5362 450 61(3) 14(22) 7740 3352 401 61(3) 14(22) 7740 5353 61(3) 61(3) 14(23) 7625 3401 533 61(3) 14(23) 7626 7720 173 61(3) 14(31) 11012 5720 173 61(3) 14(31) 11622 5464 405 61(3) 14(32) 11682 5464 405 61(3) 14(32) 11682 357 769 61(3) 14(32) 11677 4242 435 61(3) 14(41) 9466 732	H(121)	7073	4279	60	61(3)
41/23 BOR2 4138 118 116 116 120 6776 1757 620 613 1211 5180 1551 362 613 1212 4133 1825 506 613 1213 4719 653 483 613 12210 6775 3301 533 613 12230 7825 3401 533 613 1231 10667 4756 622 613 1313 10667 4756 622 613 14231 10667 4756 62 613 14231 10667 4756 62 613 1433 10667 4756 770 613 1424 456 773 613 613 1424 456 773 613 613 1424 1077 247 842 613 1424 1077 247 816 613	H(122)	7740	3928	-42	61(3)
120 6276 1737 620 61(a) 12(1) 5180 1551 362 61(a) 12(12) 4113 1825 506 61(a) 12(12) 6775 3552 401 61(a) 12(21) 6775 3552 401 61(a) 12(22) 7126 3527 401 61(a) 12(31) 10677 4756 62 61(a) 13(31) 10657 4756 62 61(a) 13(32) 10685 4385 449 61(a) 13(22) 11687 4258 770 61(a) 13(22) 11687 4268 436 61(a) 13(22) 11687 4268 436 61(a) 14(21) 10685 4385 449 61(a) 14(22) 11677 4548 435 61(a) 14(22) 1077 2544 818 61(a) 14(41) 10746 2337	H(123)	8062	4138	118	61(3)
H211) 5180 1551 382 613 (212) 4813 1825 566 613 (221) 6775 3552 501 613 (222) 7170 3552 403 613 (222) 7170 3552 403 613 (211) 11718 4404 212 613 (311) 11012 7720 173 613 (312) 0665 4385 449 613 (322) 116827 5464 405 613 (322) 116827 5464 405 613 (322) 116827 555 770 613 (410) 10953 255 779 613 (442) 1177 2404 694 613 (412) 1177 2404 694 613 (412) 1177 2414 694 613 (412) 1177 2414 613 613	H(2)	6276	1757	620	61(3)
1/212) 4813 1825 506 61(a) 1/23) 4779 553 453 61(a) 1/221) 6775 3552 500 61(a) 1/223) 7125 3401 532 61(a) 1/223) 7125 3401 532 61(a) 1/211 11012 6720 173 61(a) 1/313 10657 4756 622 61(a) 1/321 10565 4385 449 61(a) 1/322 11682 5464 405 61(a) 1/323 11677 4342 435 61(a) 1/324 435 779 61(a) 1/327 2404 662 61(a) 1/410 10745 2537 789 61(a) 1/425 11072 2574 818 61(a) 1/426 1307 1241 25 61(a) 1/425 2631 2767 61(a)	H(211)	5180	1551	362	61(3)
(13) 4719 653 483 613 (122) 7720 3352 401 613 (123) 7625 3401 533 613 (13) 11718 4494 212 613 (11) 10805 4661 179 613 (11) 10805 4661 179 613 (13) 10857 4756 62 613 (132) 10857 4345 613 613 (132) 1182 5464 405 613 (141) 9768 1246 782 613 (1441) 9640 425 770 613 (141) 1027 257 789 613 (141) 1027 257 789 613 (142) 1177 2404 614 613 (142) 1177 2404 614 613 (142) 1177 2404 613	H(212)	4813	1825	506	61(3)
1(22) 775 3552 500 61(3) 1(22) 7120 3352 401 633 61(3) 1(23) 1726 3401 633 61(3) 1(31) 11112 5720 173 61(3) 1(31) 11012 5720 173 61(3) 1(32) 9806 4681 405 61(3) 1(32) 10665 4685 469 61(3) 1(32) 11677 4342 435 61(3) 1(32) 11677 4342 435 61(3) 1(41) 9640 425 770 61(3) 1(422) 11077 2454 694 61(3) 1(410) 10853 255 779 61(3) 1(422) 11077 2441 642 61(3) 1(421) 1267 3561 8 61(3) 1(422) 1107 2451 846 61(3) 1(422) 3521 <t< td=""><td>H(213)</td><td>4719</td><td>653</td><td>483</td><td>61(3)</td></t<>	H(213)	4719	653	483	61(3)
1/22) 7120 3352 401 61(3) 1/23) 7825 3401 533 61(3) 1/31) 11012 5720 173 61(3) 1/312 9002 4668 173 61(3) 1/312 9002 4668 173 61(3) 1/321 10665 4285 449 61(3) 1/322) 11682 5464 405 61(3) 1/323) 11677 4342 435 61(3) 1/4161 10227 357 899 61(3) 1/4161 10227 2574 616 61(3) 1/4161 10227 2574 618 61(3) 1/4260 10772 2574 616 61(3) 1/4261 3620 -3367 82 61(3) 1/427 3637 426 61(3) 1/428 -3360 -3387 82 61(3) 1/421 26512 -7559 867	H(221)	6775	3552	550	61(3)
(123) 7825 3401 533 61(3) (13) 11718 4494 212 61(3) (1312) 8008 4661 173 61(3) (1313) 10855 4785 62 61(3) (1313) 10855 4785 62 61(3) (140) 10852 4564 405 61(3) (1422) 11677 4342 435 61(3) (140) 9768 1255 779 61(3) (1416) 10953 255 779 61(3) (1422) 11777 2404 694 61(3) (1420) 10774 2574 682 61(3) (1421) 3801 -2207 58 61(3) (151) 3821 2867 -58 61(3) (162) 3992 -963 267 61(3) (162) 3457 -4391 582 61(3) (162) 3457 -4362	H(222)	7120	3352	401	61(3)
(13) 11718 4494 212 61(3) (311) 1012 5720 173 61(3) (312) 9806 4661 179 61(3) (321) 10565 4385 449 61(3) (322) 116827 5464 405 61(3) (322) 116827 5464 405 61(3) (414) 9766 2265 770 61(3) (414) 10227 357 899 61(3) (442) 10746 2637 662 61(3) (422) 11072 2574 818 61(3) (422) 300 -3387 92 61(3) (451) 2603 -3160 8 61(3) (451) 2603 -3343 497 61(3) (452) 239 236 61(3) (452) 245 -683 61(3) (452) 3873 -4391 582 61(3)	H(223)	7825	3401	533	61(3)
(11) 11012 5720 173 61(3) (131) 10657 4766 62 61(3) (1321) 10656 4385 449 61(3) (1323) 11677 4342 435 61(3) (144) 9464 425 61(3) (144) 9464 425 61(3) (144) 9464 425 61(3) (144) 10053 225 779 61(3) (142) 10074 2257 652 61(3) (142) 10774 2397 92 61(3) (142) 1072 2574 814 61(3) (142) 1072 257 658 61(3) (142) 3500 -3397 92 61(3) (151) 3601 -2200 297 61(3) (152) 2645 -1968 216 61(3) (152) 2645 -1968 617 613 (162	H(3)	11718	4494	212	61(3)
(112) 9808 4661 179 61(3) (131) 10667 4756 62 61(3) (132) 11662 6484 405 61(3) (133) 11677 4342 435 61(3) (133) 11677 4342 435 61(3) (140) 9760 1255 779 61(3) (141) 10227 2557 799 61(3) (142) 10746 2557 779 61(3) (1420) 11072 2574 818 61(3) (1421) 2600 -3397 92 61(3) (151) 3601 -2200 257 61(3) (152) 3005 -2200 257 61(3) (151) 3625 -2200 257 61(3) (152) 3635 -2200 257 61(3) (152) 3647 -4062 467 61(3) (1611) 3673 -4391	H(311)	11012	5720	173	61(3)
1(13) 10657 4766 62 61(3) 1(321) 10655 4385 449 61(3) 1(322) 11677 4342 435 61(3) 1(44) 9768 1246 792 61(3) 1(416) 10220 355 879 61(3) 1(416) 10223 255 770 61(3) 1(420) 10726 2557 769 61(3) 1(420) 10726 2574 818 61(3) 1(420) 1072 2574 818 61(3) 1(421) 2603 -3160 8 61(3) 1(51) 3601 -2200 297 61(3) 1(52) 2645 -1968 267 61(3) 1(52) 2645 -1968 267 61(3) 1(52) 2645 -1968 267 61(3) 1(52) 2454 -4025 440 61(3) 1(52) 4447 -4025	H(312)	9808	4661	179	61(3)
(121) 10565 4385 449 613 (1322) 11677 4342 435 613 (1323) 11677 4342 435 613 (144) 9788 1246 772 613 (1416) 10227 357 793 613 (1416) 10953 2557 773 613 (1422) 10747 2354 614 613 (1426) 11077 2434 614 613 (1462) 11077 2414 55 613 (1412) 2663 3160 8 613 (152) 3650 -3367 58 613 (152) 3651 -2267 58 613 (152) 3651 -2267 58 613 (152) 3652 -3343 497 613 (153) 4036 -3343 497 613 (161) 4547 -4025 583	H(313)	10657	4756	62	61(3)
11.422) 11.682 5464 405 613 1(232) 11.677 43.42 435 613 1(4) 9768 12.46 792 613 1(41) 10227 357 899 613 1(412) 10053 255 773 613 1(422) 11727 2404 684 613 1(422) 11072 2574 818 613 1(422) 11072 2574 818 613 1(421) 3801 -2697 52 613 1(51) 3801 -2200 297 613 1(52) 3742 -963 267 613 1(52) 3744 -4250 883 613 1(52) 3747 -4052 883 613 1(52) 3733 -4391 586 613 1(62) 665 -3133 710 613 1(62) 6655 -3133 701	H(321)	10565	4385	449	61(3)
114.4) 9788 1246 752 613 144.4) 9640 -425 770 613 1414.1) 10953 255 779 613 1441.0) 10953 255 779 613 1442.1) 10746 2637 662 613 1442.2) 1177 2404 694 613 1425) 1177 2574 818 613 1451) 3600 -3397 92 613 1451) 3601 -2200 297 613 1452) 2645 -1966 216 613 1452) 361 -2759 687 613 1452) 3732 -4351 582 613 1452) 3646 -4052 440 613 1452) 6187 -4052 447 613 1452) 6187 -4053 613 613 1452) 6187 -4052 440 <	H(322)	11682	5464	405	61(3)
14) 9708 1246 792 613 1414) 9640 425 770 613 1416) 10227 357 899 613 1442) 10746 2657 662 613 1442) 10746 2657 662 613 1422) 11072 2574 818 613 1422) 3877 -1241 25 613 1451) 2660 -3160 8 613 1451 3821 -2200 297 613 1452) 3821 -2200 297 613 1452) 3742 -963 267 613 1452) 3742 -963 267 613 1452) 3747 -4062 440 613 1452) 4547 -4062 440 613 1462) 653 -3193 710 613 1462) 6695 -3193 710 613	H(323)	11677	4342	435	61(3)
1111 9940 -425 //0 61(3) 1441D 10983 255 779 61(3) 1442A 10746 2637 662 61(3) 1442B 11727 2404 694 61(3) 1450 3877 -1241 25 61(3) 1451 2663 -3160 8 61(3) 1451 3800 -3387 92 61(3) 14512 3001 -2200 297 61(3) 14520 2445 -1968 216 61(3) 14521 3601 -2200 297 61(3) 14521 367 -4381 562 61(3) 14521 367 -4381 563 61(3) 14521 4467 -4052 446 61(3) 14521 4467 -4052 563 61(3) 14521 4467 -4052 563 61(3) 14521 4467 -4052 56	⊐(4)	9768	1246	792	61(3)
1415) 10227 357 889 61(3) 144C) 10746 255 779 61(3) 1442B) 11772 2404 662 61(3) 1442D) 11072 2574 818 61(3) 1442D) 3000 -33877 92 61(3) 1451) 2663 -3160 8 61(3) 1451) 3600 -33877 92 61(3) 1452) 3621 -2867 -58 61(3) 1452) 3621 -2200 297 61(3) 1452) 2445 -1968 216 61(3) 1452) 3572 -4391 582 61(3) 1462) 4547 -4062 440 61(3) 1461) 4367 -4391 586 61(3) 1462) 6197 -4025 583 61(3) 1462) 6197 -4025 583 61(3) 1462) 6197 -4063	H(41A)	9640	-425	770	61(3)
141(-) 10953 235 7/9 613 1422) 10746 2337 662 613 1422b 11727 2404 694 613 1450 3877 -1241 25 613 1451 2663 -3160 8 613 1513 3821 -2807 56 613 1513 3621 -2807 56 613 1523 2501 -2807 56 613 1523 3502 -963 276 613 1523 3792 -963 276 613 1523 3792 -963 277 613 1523 3792 -4062 440 613 1611 435 -3133 710 613 1612 4347 -4062 483 613 1613 4424 733 613 14613 1614 -4062 583 613 1462	H(41B)	10227	357	899	61(3)
11-2-A) 10/40 2637 662 613 142E) 11072 2574 818 613 1442C) 11072 2574 818 613 1451 2663 -3160 8 613 14511 2663 -3160 8 613 14513 3821 -2867 -58 613 14513 3601 -2200 297 613 14522 2645 -1968 216 613 14523 3792 -963 267 613 14521 4547 -4062 440 613 14611 3673 -4391 582 613 14621 4547 -4062 440 613 14621 4547 -4062 440 613 14621 4547 723 613 613 14621 4547 723 613 613 14621 6197 -4025 583 613 <td>H(41C)</td> <td>10953</td> <td>255</td> <td>779</td> <td>61(3)</td>	H(41C)	10953	255	779	61(3)
112.0112.12404 654 $61(3)$ 142.010722574818 $61(3)$ 145.12663-124125 $61(3)$ 1451.12663-338792 $61(3)$ 1451.23500-338792 $61(3)$ 1451.33621-2200297 $61(3)$ 1452.12664-1968216 $61(3)$ 1452.22645-1968216 $61(3)$ 146.1524.9-2759667 $61(3)$ 146.13873-4391582 $61(3)$ 146.16197-4025583 $61(3)$ 146.2400261(3) 6055 -3133 710146.34036-3343497 $61(3)$ 146.34036-3379566 $61(3)$ 146.25512-4274723 $61(3)$ 147.110489-2208450 $61(3)$ 147.19300-2137664 $61(3)$ 147.28663-4109358 $61(3)$ 147.29650-4088443 $61(3)$ 147.29876-3518294 $61(3)$ 147.19339-347746 $61(3)$ 148 $61(3)$ $61(3)$ $61(3)$ 149.11287-2009 -75 $61(3)$ 149.11286 -1722 68 $61(3)$ 149.11393 -565 $61(3)$ 149.11483 -632 $61(3)$ 149.1 <td>1(42A)</td> <td>10740</td> <td>2037</td> <td>604</td> <td>61(3)</td>	1(42A)	10740	2037	604	61(3)
11012 2.014 0.10 0.13 145) 3877 1.241 25 61(3) 14511 2663 -3160 8 61(3) 14511 3500 -3387 92 61(3) 14513 3821 -2867 -58 61(3) 14521 3501 -2200 297 61(3) 14522 2645 -1968 216 61(3) 14523 3792 -963 267 61(3) 14521 4547 -4062 440 61(3) 14613 4036 -3343 497 61(3) 14621 6197 -4025 583 61(3) 14621 6197 -4025 583 61(3) 1471 9571 -3101 649 61(3) 1471 947 -3193 586 61(3) 1471 9663 -4109 358 61(3) 14721 8663 -4109 358 6	¬(42Б) ⊣(42С)	11/2/	2404	094	61(3)
110261122001(3)1511260-3160861(3)1512360-33979261(3)15133221-220029761(3)15222645-198621661(3)15222645-198626761(3)15233792-86326761(3)16222647-406240061(3)16113673-433155261(3)16214547-406240061(3)16225512-427472361(3)16225512-427472361(3)16236695-319371061(3)170110489-220845061(3)17119300-213762461(3)17218663-410935861(3)17218663-410935861(3)17229650-408844361(3)17218663-17226861(3)1721939-34774661(3)16138749-3632-10061(3)17219802-3782-8761(3)16221186-17226861(3)16138749-3632-10061(3)1614-46076861(3)162197561(3)16221186-172268163-17226861(3)1621	⊓(42C) ⊣(5)	2977	2074	010 25	61(3)
111 2500 -507 52 6103 1121 3501 -2867 -58 613 11513 3821 -2867 -58 613 11521 3501 -2200 297 613 11522 2845 -1968 216 613 11622 2847 -4062 440 613 11613 4036 -3343 497 613 11613 4036 -3343 497 613 11622 4547 -4025 583 613 11621 6197 -4025 583 613 11622 5512 -4274 723 613 1171 9571 -3101 649 613 1171 9571 -3101 649 613 11721 8663 -4199 358 613 11721 8663 -4199 358 613 11721 8663 -4199 368 613 </td <td>-1(5)</td> <td>2663</td> <td>-1241</td> <td>25</td> <td>61(3)</td>	-1(5)	2663	-1241	25	61(3)
1131 3821 -2867 -58 613 11521 3601 -2200 297 613 11521 3501 -2200 297 613 1152 2845 -1968 216 613 1152 249 -2759 687 613 11611 3873 -4391 582 613 11611 3873 -4391 582 613 11622 4547 -4062 440 613 11623 4036 -3343 497 613 11623 6955 -3193 710 613 11622 5512 -4274 723 613 11623 6955 -3193 710 613 1177 10489 -2208 450 613 11711 9571 -3171 624 613 11711 9571 -3177 624 613 11721 8407 -3379 586 613 11711 9571 -3177 624 613 11721 8407 -3782 -75 613 11722 9856 -3684 413 613 11723 9876 -3622 -100 613 11724 9802 -3782 -87 613 11833 -2658 -56 613 11833 -2568 -56 613 11833 -5627 56 613 11833 -5627 56 613 <t< td=""><td>H(512)</td><td>3500</td><td>-3397</td><td>92</td><td>61(3)</td></t<>	H(512)	3500	-3397	92	61(3)
1622)3501 -2200 2076131622)2645-19682166131623)3792-963267613163)4605249-27596876131611)3873-43915826131612)4547-40624406131613)4036-33434976131621)6197-40255836131622)5512-42747236131623)6695-3193710613177)10489-2208450613171)9571-31016496131711)9571-31016496131721)8663-41093586131722)9650-40884436131721)8663-41093586131722)9650-40884436131721)8663-41093586131722)9650-408844361317218663-410961317229802-37724661318138749-3632-10061318231133-858-5661318231133-858-5661318231133-858-566131995151-460768613199503618561319115099-5844241613	H(513)	3821	-2867	-58	61(3)
1622 2646 -1968 216 610 1623 3792 -963 267 $61(3)$ 1616 5249 -2759 687 $61(3)$ 1611 3873 -4391 582 $61(3)$ 1611 3873 -4391 582 $61(3)$ 1612 4547 -4062 440 $61(3)$ 1613 4036 -33433 497 $61(3)$ 1622 5512 -4274 723 $61(3)$ 1622 5512 -4274 723 $61(3)$ 1622 5512 -4274 723 $61(3)$ 1771 10489 -2208 450 $61(3)$ 1771 9571 -3101 649 $61(3)$ 1771 9863 -4109 358 $61(3)$ 1771 8663 -4109 358 $61(3)$ 1722 9650 -4068 443 $61(3)$ 1722 9650 -4068 443 $61(3)$ 1722 9802 -3782 -87 $61(3)$ 1833 -858 -56 $61(3)$ 1621 1722 668 $61(3)$ 1621 1729 -2039 -75 $61(3)$ 1621 1729 -2039 -75 $61(3)$ 1621 1729 -2039 -75 $61(3)$ 1621 1729 -2039 -75 $61(3)$ 1621 1729 -2039 -75 $61(3)$ 1621 1739 <	H(521)	3501	-22007	297	61(3)
1623 3792 -963 267 $61(3)$ 116 5249 -2759 687 $61(3)$ 116 3373 -4391 582 $61(3)$ 1161 3373 -4062 440 $61(3)$ 11612 4547 -4062 440 $61(3)$ 1162 4547 -4062 440 $61(3)$ 1162 6197 -4025 583 $61(3)$ 1162 6197 -4225 583 $61(3)$ 1162 6695 -3193 710 $61(3)$ 117 10489 -2208 450 $61(3)$ 1171 9571 -3101 649 $61(3)$ 1171 9571 -3101 624 $61(3)$ 1171 9571 -3177 624 $61(3)$ 1172 8407 -3279 586 $61(3)$ 1172 9650 -4088 443 $61(3)$ 1172 9650 -4088 443 $61(3)$ 1172 9876 -3518 294 $61(3)$ 1172 9802 -3777 46 $61(3)$ 1183 -3652 -100 $61(3)$ 1182 11336 -1722 68 $61(3)$ 1182 11336 -5586 $61(3)$ 119 6151 -4607 68 $61(3)$ 119 11729 -2039 -75 $61(3)$ 119 11833 -858 -56 $61(3)$ 119 11833 <	H(522)	2645	-1968	216	61(3)
160^{+} 5249 -2759 687 610^{+} $1(611)$ 3673 -4391 582 $61(3)$ $1(612)$ 4547 -4062 440 $61(3)$ $1(613)$ 4036 -33433 497 $61(3)$ $1(621)$ 6197 -4025 583 $61(3)$ $1(622)$ 5512 -4274 723 $61(3)$ $1(623)$ 6695 -3193 710 $61(3)$ $1(71)$ 9571 -3101 649 $61(3)$ $1(712)$ 8407 -3379 586 $61(3)$ $1(711)$ 9571 -3101 649 $61(3)$ $1(721)$ 8663 -4109 358 $61(3)$ $1(722)$ 9650 -4088 443 $61(3)$ $1(723)$ 9876 -3518 294 $61(3)$ $1(724)$ 9602 -3782 -87 $61(3)$ $1(811)$ 9339 -3477 46 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(9)$ 61545 349 <td>H(523)</td> <td>3792</td> <td>-963</td> <td>267</td> <td>61(3)</td>	H(523)	3792	-963	267	61(3)
$\dot{1}611$ 38734391562 $61(3)$ 11612 4547-4062440 $61(3)$ 11613 4036-3343497 $61(3)$ 11621 6197 -4025583 $61(3)$ 11622 5512-4274723 $61(3)$ 11622 5512-4274723 $61(3)$ 11623 6695-3193710 $61(3)$ 117 01489-2208450 $61(3)$ 1171 9571-3101649 $61(3)$ 1171 9571-3101624 $61(3)$ 11713 9300-2137624 $61(3)$ 11721 8663-4109358 $61(3)$ 11723 9876-3518294 $61(3)$ 11723 9876-3518294 $61(3)$ 11723 9876-3518294 $61(3)$ 11723 9876-3518294 $61(3)$ 11833 -3632-100 $61(3)$ 11833 -858-56 $61(3)$ 11823 -172268 $61(3)$ 11833 -858-56 $61(3)$ 1193 6714-4762297 $61(3)$ 1193 6714-4762297 $61(3)$ 1193 6714-4762297 $61(3)$ 1193 6714-4762297 $61(3)$ 1193 6714-4762297 $61(3)$ 1193 6714-4762291 $61(3)$ 1192 <td>H(6)</td> <td>5249</td> <td>-2759</td> <td>687</td> <td>61(3)</td>	H(6)	5249	-2759	687	61(3)
i(612) 4547 4062 440 $6i(3)$ $i(613)$ 4036 -3343 497 $6i(3)$ $i(621)$ 6197 -4025 583 $6i(3)$ $i(622)$ 5512 -4274 723 $6i(3)$ $i(623)$ 6695 -3193 710 $6i(3)$ $i(77)$ 10489 -2208 450 $6i(3)$ $i(71)$ 9571 -3101 649 $6i(3)$ $i(712)$ 8407 -3379 566 $6i(3)$ $i(713)$ 9300 -2137 624 $6i(3)$ $i(721)$ 8663 -4109 358 $6i(3)$ $i(722)$ 9650 -4088 443 $6i(3)$ $i(723)$ 9876 -3518 294 $6i(3)$ $i(811)$ 9339 -3477 46 $6i(3)$ $i(812)$ 9802 -3782 -87 $6i(3)$ $i(813)$ 8749 -3632 -100 $6i(3)$ $i(821)$ 11333 -858 -56 $6i(3)$ $i(90)$ 6151 -4607 68 $6i(3)$ $i(911)$ 5695 -5145 349 $6i(3)$ $i(922)$ 4329 -5627 56 $6i(3)$ $i(921)$ 4559 -5145 349 $6i(3)$ $i(921)$ 4559 -717 223 $6i(3)$ $i(921)$ 4559 -717 66 $6i(3)$ $i(921)$ 4559 -717 $6i(3)$ $i(101)$ 4559 -717 $6i($	H(611)	3873	-4391	582	61(3)
(1613) 4036 -3343 497 61(3) (1621) 6197 -4025 583 61(3) (1622) 5512 -4274 723 61(3) (1622) 6695 -3193 710 61(3) (17) 10489 -2208 450 61(3) (1712) 8407 -3379 586 61(3) (1712) 8407 -3379 586 61(3) (1722) 9650 -4088 443 61(3) (1722) 9650 -4088 443 61(3) (1722) 9650 -4088 443 61(3) (1723) 976 -3518 294 61(3) (1811) 9339 -3477 46 61(3) (1812) 9802 -3782 -100 61(3) (1821) 11729 -2039 -75 61(3) (1822) 11386 -1722 68 61(3) (1621) 11729 -2039 -75 61(3) (1622) 11386 -1722 <td< td=""><td>H(612)</td><td>4547</td><td>-4062</td><td>440</td><td>61(3)</td></td<>	H(612)	4547	-4062	440	61(3)
(421) 6197 -4025 583 61(3) (4622) 5512 -4274 723 61(3) (4623) 6695 -3193 710 61(3) (471) 10489 -2208 450 61(3) (4711) 9571 -3101 649 61(3) (4712) 8407 -3379 586 61(3) (4721) 8663 -4109 358 61(3) (4721) 9650 -4088 443 61(3) (4722) 9650 -4088 443 61(3) (4721) 9876 -3518 294 61(3) (4721) 9339 -3477 46 61(3) (4811) 9339 -3477 46 61(3) (4812) 9802 -3782 -87 61(3) (4811) 9339 -3632 -100 61(3) (4821) 11729 -2039 -75 61(3) (4821) 11833 -886 -56 61(3) (492) 6151 -4607 68	H(613)	4036	-3343	497	61(3)
(4622) 5512 -4274 723 61(3) (4623) 6695 -3193 710 61(3) 1(7) 10489 -2208 450 61(3) 1(711) 9571 -3101 649 61(3) 1(712) 8407 -3379 586 61(3) 1(713) 9300 -2137 624 61(3) 1(721) 8663 -4109 558 61(3) 1(721) 9650 -4088 443 61(3) 1(723) 9876 -3518 294 61(3) 1(721) 9650 -3632 -100 61(3) 1(81) 10287 -2039 -75 61(3) 1(812) 9802 -3722 68 61(3) 1(822) 11386 -1722 68 61(3) 1(823) 11833 -858 -56 61(3) 1(90) 6151 -4607 68 61(3) 1(91) 5699 -5845 241 61(3) 1(921) 4139 -5036 185<	H(621)	6197	-4025	583	61(3)
(4623) 6695 -3193 710 61(3) (17) 10489 -2208 450 61(3) (1711) 9571 -3101 649 61(3) (1712) 8407 -3379 586 61(3) (1713) 9300 -2137 624 61(3) (1721) 8663 -4109 358 61(3) (1722) 9650 -3518 294 61(3) (1723) 9876 -3518 294 61(3) (1811) 9339 -3477 46 61(3) (1812) 9802 -3782 -87 61(3) (1821) 11729 -2039 -75 61(3) (1821) 11386 -1722 68 61(3) (1822) 11386 -1722 68 61(3) (1821) 11729 -2039 -75 61(3) (190) 6151 -4607 68 61(3) (1912) 5495 -5145 349 61(3) (1914) 1625 5131 -22	H(622)	5512	-4274	723	61(3)
(7)10489-220845061(3) (711) 9571-310164961(3) (1712) 8407-337958661(3) (1713) 9300-213762461(3) (1711) 8663-410935861(3) (1721) 9650-408844361(3) (1722) 9650-408844361(3) (1723) 9876-351829461(3) (18) 10287-2024-18861(3) (1811) 9339-34774661(3) (1812) 9802-3782-8761(3) (1823) 11833-858-5661(3) (1823) 11833-858-5661(3) (1911) 5699-588424161(3) (1911) 5699-514534961(3) (1921) 4395-514534961(3) (1922) 4329-66275661(3) (1921) 4399-1051-38761(3) (100) 6711-1047-39061(3) (101) 4959-1177-22361(3) (102) 5037-1051-38761(3) (103) 5893-63-29161(3) (104) 5175-2822-40461(3) (105) 5131-2944-24061(3) (110) 12667115740661(3) (110) 1266711571667125 </td <td>H(623)</td> <td>6695</td> <td>-3193</td> <td>710</td> <td>61(3)</td>	H(623)	6695	-3193	710	61(3)
(1711) 9571 -3101 649 $61(3)$ (1712) 8407 -3379 586 $61(3)$ (1713) 9300 -2137 624 $61(3)$ (1721) 8663 -4109 358 $61(3)$ (1722) 9950 -4088 443 $61(3)$ (1723) 9876 -3518 294 $61(3)$ (161) 10287 -2024 -188 $61(3)$ (161) 9339 -3477 46 $61(3)$ (1611) 9339 -3477 46 $61(3)$ (1612) 9802 -3782 -87 $61(3)$ (1613) 8749 -3652 -100 $61(3)$ (1622) 11386 -1722 68 $61(3)$ (1623) 11833 -858 -56 $61(3)$ (1623) 11833 -858 -56 $61(3)$ (1911) 5699 -5145 349 $61(3)$ (1912) 6151 -4607 68 $61(3)$ (1912) 6154 -4762 297 $61(3)$ (1921) 4139 -5036 185 $61(3)$ (1922) 4329 -5627 56 $61(3)$ (100) 6714 -4762 297 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (103) 6593 -53 -291 $61(3)$ (104) 5175 -2	H(7)	10489	-2208	450	61(3)
1(712) 8407 -3379 586 61(3) 1(713) 9300 -2137 624 61(3) 1(721) 8663 -4109 358 61(3) 1(722) 9650 -4088 443 61(3) 1(723) 9876 -3518 294 61(3) 1(723) 9876 -3632 -188 61(3) 1(81) 9339 -3477 46 61(3) 1(812) 9802 -3782 -87 61(3) 1(812) 9802 -3632 -100 61(3) 1(821) 11729 -2039 -75 61(3) 1(822) 11386 -1722 68 61(3) 1(823) 11833 -858 -56 61(3) 1(911) 5699 -5884 241 61(3) 1(911) 5699 -5884 241 61(3) 1(912) 4329 -5036 185 61(3) 1(921) 4329 -5036 185 61(3) 1(922) 4329 -5627 <td< td=""><td>H(711)</td><td>9571</td><td>-3101</td><td>649</td><td>61(3)</td></td<>	H(711)	9571	-3101	649	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(712)	8407	-3379	586	61(3)
1(/21)8663 -4109 358 $61(3)$ $1(722)$ 9650 -4088 443 $61(3)$ $1(723)$ 9876 -3518 294 $61(3)$ $1(81)$ 10287 -2024 -188 $61(3)$ $1(81)$ 9339 -3477 46 $61(3)$ $1(812)$ 9802 -3782 -87 $61(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(821)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(821)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5884 241 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(102)$ 6714 -1047 -390 $61(3)$ $1(103)$ 5893 -63 -2911 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 2177 $61(3)$ $1(114)$ 12497	4(713)	9300	-2137	624	61(3)
1/22) 960 -4088 443 $61(3)$ $1(723)$ 9876 -3518 294 $61(3)$ $1(6)$ 10287 -2024 -188 $61(3)$ $1(811)$ 9339 -3477 46 $61(3)$ $1(812)$ 9802 -3782 -87 $61(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -566 $61(3)$ $1(99)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4529 -5627 56 $61(3)$ $1(923)$ 4559 -1177 -223 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $1(101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2882 -404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(111)$ 12261 737 178 $61(3)$ $1(114)$ 12497 </td <td>H(721)</td> <td>8663</td> <td>-4109</td> <td>358</td> <td>61(3)</td>	H(721)	8663	-4109	358	61(3)
11/2.3) $95/6$ -3518 294 $61(3)$ $4(8)$ 10287 -2024 -188 $61(3)$ $4(81)$ 9339 -3477 46 $61(3)$ $1(812)$ 9802 -3782 -87 $61(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5884 241 $61(3)$ $1(921)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(923)$ 4559 -4395 42 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -3900 $61(3)$ $1(101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(111)$ 12861 737 178 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	1(722)	9650	-4088	443	61(3)
100 10207 -2024 -168 $01(3)$ $1(811)$ 9302 -3782 -87 $61(3)$ $1(812)$ 9802 -3782 -87 $61(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5884 241 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(923)$ 4559 -4395 42 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1051 -387 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -2400 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	⊓(723) ⊔(9)	90/0 40207	-3518	∠94 100	01(3) 61(2)
1(0+1) 3533 -3477 40 $01(3)$ $1(812)$ 9602 -3762 -87 $61(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5145 349 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(913)$ 6714 -4762 297 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -3900 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -3900 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -3877 $61(3)$ $1(103)$ 5893 -63 -291 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(111)$ 12861 737 178 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	1(0) 1(914)	10207	-2024	-100	01(3) 61(3)
1012 5002 -5102 -67 $01(3)$ $1(813)$ 8749 -3632 -100 $61(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(91)$ 6699 -5584 241 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5145 349 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(923)$ 4559 -1177 -3300 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -3807 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -3877 $61(3)$ $1(103)$ 5893 -63 -2911 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -2400 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 4066 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	1(011) 	9303 0803	-3411	40 _97	61(3)
1000 0175 -302 -100 $01(3)$ $1(821)$ 11729 -2039 -75 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(9)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5884 241 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(923)$ 4559 -1047 -390 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -3877 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -3877 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(111)$ 12975 1867 125 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	1(01∠) - (813)	9002 87/0	-3102	-07 -100	61(3)
1,02,, 112.0 2003 703 $01(3)$ $1(822)$ 11386 -1722 68 $61(3)$ $1(823)$ 11833 -858 -56 $61(3)$ $1(91)$ 6151 -4607 68 $61(3)$ $1(911)$ 5699 -5884 241 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(913)$ 6714 -4762 297 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $1(101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $1(103)$ 5893 -63 -2911 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(105)$ 5131 -2944 -2400 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(111)$ 12975 1867 125 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	H(821)	11720	-3032 -2030	-75	61(3)
(102) (112) (00) (010) (4823) 11833 -858 -56 $61(3)$ (49) 6151 -4607 68 $61(3)$ (4911) 5699 -5884 241 $61(3)$ (4912) 5495 -5145 349 $61(3)$ (4913) 6714 -4762 297 $61(3)$ (4921) 4139 -5036 185 $61(3)$ (4922) 4329 -5627 56 $61(3)$ (4923) 4559 -4395 42 $61(3)$ (100) 6711 -1047 -390 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (104) 5175 -2822 -404 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (110) 12667 1157 406 $61(3)$ (111) 13928 1882 217 $61(3)$ (111) 12975 1867 125 $61(3)$ (1114) 12497 3031 360 $61(3)$	1(822)	11386	-1722	-73 68	61(3)
(19) $(151$ -4607 60 010 (19) 6151 -4607 68 $61(3)$ (1911) 5699 -5884 241 $61(3)$ (192) 5495 -5145 349 $61(3)$ (1921) 4139 -5036 185 $61(3)$ (1922) 4329 -5627 56 $61(3)$ (100) 6711 -1047 -390 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (103) 5893 -63 -291 $61(3)$ (104) 5175 -2822 -404 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (110) 12667 1157 406 $61(3)$ (111) 13928 1882 217 $61(3)$ (111) 12861 737 178 $61(3)$ (1114) 12497 3031 360 $61(3)$	H(823)	11833	-858	-56	61(3)
1(911) 1001 1001 001 0110 $1(911)$ 5699 -5884 2411 $61(3)$ $1(912)$ 5495 -5145 349 $61(3)$ $1(921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $1(100)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $1(101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $1(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $1(104)$ 5175 -2883 -324 $61(3)$ $1(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $1(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $1(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $1(112)$ 12975 1867 125 $61(3)$ $1(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	H(9)	6151	-4607	68	61(3)
(4)912) 5495 -5145 3449 $61(3)$ $(4)913)$ 6714 -4762 297 $61(3)$ $(4)921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $(4)922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $(4)923)$ 4559 -4395 42 $61(3)$ $(4)00)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $(4)101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $(4)102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $(4)102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $(4)104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $(4)105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $(4)106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $(4)110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $(4)111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $(4)112)$ 12975 1867 125 $61(3)$ $(4)114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	H(911)	5699	-5884	241	61(3)
(4)913) 6714 4762 297 $61(3)$ $(4)921)$ 4139 -5036 185 $61(3)$ $(4)922)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $(4)923)$ 4559 -4395 42 $61(3)$ (100) 6711 -1047 -390 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (103) 5893 -63 -291 $61(3)$ (104) 5175 -2822 -404 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (116) 6140 -2883 -324 $61(3)$ (111) 12667 1157 406 $61(3)$ (111) 12975 1867 125 $61(3)$ (111) 12975 1867 125 $61(3)$ (114) 12497 3031 360 $61(3)$	H(912)	5495	-5145	349	61(3)
(4)21) 4139 -5036 185 $61(3)$ $(4)22)$ 4329 -5627 56 $61(3)$ $(4)23)$ 4559 -4395 42 $61(3)$ (100) 6711 -1047 -390 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (104) 5175 -2822 -404 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (106) 6140 -2883 -324 $61(3)$ (110) 12667 1157 406 $61(3)$ (111) 13928 1882 217 $61(3)$ (111) 12975 1867 125 $61(3)$ (114) 12497 3031 360 $61(3)$	H(913)	6714	-4762	297	61(3)
(922) 4329 -5627 56 $61(3)$ (1923) 4559 -4395 42 $61(3)$ (100) 6711 -1047 -390 $61(3)$ (101) 4959 -1177 -223 $61(3)$ (102) 5037 -1051 -387 $61(3)$ (103) 5893 -63 -291 $61(3)$ (104) 5175 -2822 -404 $61(3)$ (105) 5131 -2944 -240 $61(3)$ (105) 6140 -2883 -324 $61(3)$ (110) 12667 1157 406 $61(3)$ (111) 13928 1882 217 $61(3)$ (1112) 12975 1867 125 $61(3)$ (1114) 12497 3031 360 $61(3)$	H(921)	4139	-5036	185	61(3)
4(923) 4559 -4395 42 $61(3)$ $4(100)$ 6711 -1047 -390 $61(3)$ $4(101)$ 4959 -1177 -223 $61(3)$ $4(102)$ 5037 -1051 -387 $61(3)$ $4(103)$ 5893 -63 -291 $61(3)$ $4(104)$ 5175 -2822 -404 $61(3)$ $4(105)$ 5131 -2944 -240 $61(3)$ $4(106)$ 6140 -2883 -324 $61(3)$ $4(110)$ 12667 1157 406 $61(3)$ $4(111)$ 13928 1882 217 $61(3)$ $4(112)$ 12975 1867 125 $61(3)$ $4(113)$ 12861 737 178 $61(3)$ $4(114)$ 12497 3031 360 $61(3)$	H(922)	4329	-5627	56	61 (3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(923)	4559	-4395	42	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(100)	6711	-1047	-390	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(101)	4959	-1177	-223	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(102)	5037	-1051	-387	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(103)	5893	-63	-291	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(104)	5175	-2822	-404	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(105)	5131	-2944	-240	61(3)
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H(106)	6140	-2883	-324	61(3)
H(111)13928188221761(3)H(112)12975186712561(3)H(113)1286173717861(3)H(114)12497303136061(3)	H(110)	12667	1157	406	61(3)
H(112)12975186712561(3)H(113)1286173717861(3)H(114)12497303136061(3)	H(111)	13928	1882	217	61(3)
H(113) 12861 737 178 61(3) H(114) 12497 3031 360 61(3)	H(112)	12975	1867	125	61(3)
H(114) 12497 3031 360 61(3)	H(113)	12861	737	178	61(3)
	H(114)	12497	3031	360	61(3)

Table 5.	Hydrogen coordinates	(x 10 ⁴)	and isotropic displacement	parameters	$(A^2 \times 10^3)$) for 5.
----------	----------------------	-----------------------	----------------------------	------------	---------------------	----------

H(115)	13715	2276	207	61(2)
11(113)	13/15	3270	321	01(3)
H(116)	13197	2858	477	61(3)
H(120)	10788	3423	-183	61(3)
11(120)	10700	0420	100	01(0)
H(121)	12666	4067	-183	61(3)
H(122)	12448	2899	-129	61(3)
	10150	2000		01(0)
H(123)	12152	3642	-33	61(3)
H(124)	11322	2049	-349	61(3)
	11609	2270	201	61(2)
H(123)	11020	3270	-391	01(3)
H(126)	10368	2319	-383	61(3)
	11091	6122	279	61(2)
11(13)	11001	0135	-270	01(5)
H(131)	12909	6719	-377	61(3)
H(132)	12247	5885	-499	61(3)
11(102)	12211	5000	044	01(0)
H(133)	12122	5441	-344	61(3)
H(134)	11543	7559	-505	61(3)
H(125)	12207	7029	271	61(2)
11(133)	12307	7930	-371	01(3)
H(136)	11041	7604	-359	61(3)
H(14)	9186	5531	-1038	61(3)
	0100	7400	010	01(0)
H(141)	8895	7136	-913	61(3)
H(142)	9541	7246	-1053	61(3)
H(1/13)	10002	7075	-910	61(3)
11(14-3)	10002	1015	-310	01(3)
H(144)	7880	5725	-1154	61(3)
H(145)	7171	5483	-1016	61(3)
	70.40	45.40	1010	
H(140)	7349	4542	-1082	61(3)
H(15)	6533	5776	-396	61(3)
H(151)	4660	5020	-414	61(2)
П(131)	4000	5030	-414	01(3)
H(152)	4444	3799	-421	61(3)
H(153)	5005	4611	-548	61(3)
11(100)	5005	4011	040	01(0)
H(154)	5455	3998	-211	61(3)
H(155)	5852	5266	-184	61(3)
	6707	4070	100	61(2)
H(100)	6/3/	4670	-196	61(3)
H(201)	3746	66	9584	61(3)
	1251	630	0720	61(3)
11(201)	42.04	000	3723	01(3)
H(201)	4770	1292	9589	61(3)
H(202)	2818	1945	9436	61(3)
11(202)	2010	0.57	0100	01(0)
H(202)	2390	657	9424	61(3)
H(202)	3674	1526	9410	61(3)
	1115	9520	0226	61(2)
П(301)	4415	0009	9220	01(3)
H(301)	3892	8230	9377	61(3)
H(301)	4438	9470	9323	61(3)
	4400	0070	0020	01(0)
H(302)	2496	8872	9004	61(3)
H(303)	3454	8570	9009	61(3)
	2695	0747	0061	61(2)
11(302)	3005	3747	9001	01(3)
H(306)	4854	8601	9239	61(3)
H(306)	3981	8150	9363	61(3)
1(000)	4407	0000	0004	01(0)
H(306)	4427	9366	9304	61(3)
H(307)	2022	8869	9126	61(3)
	3288	0772	9105	61(3)
	0200	0400	0057	
H(307)	2807	9403	9257	61(3)
H(401)	3922	5393	9302	61(3)
H(401)	2077	1005	0176	61(2)
H(401)	3077	4905	9170	01(3)
H(401)	3984	6183	9179	61(3)
H(402)	3505	3450	9202	61(3)
	4660	0100	0100	64(0)
H(402)	4009	3523	9180	61(3)
H(402)	3877	3308	9051	61(3)
			0245	61(2)
	2724	E33E		01131
H(40D)	3731	5335	9343	01(0)
H(40D) H(40E)	3731 2947	5335 4648	9219	61(3)
H(40D) H(40E) H(40E)	3731 2947 3936	5335 4648 5873	9345 9219 9194	61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40C)	3731 2947 3936	5335 4648 5873	9219 9194	61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G)	3731 2947 3936 4886	5335 4648 5873 4255	9343 9219 9194 8981	61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H)	3731 2947 3936 4886 4714	5335 4648 5873 4255 5299	9243 9219 9194 8981 8981	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H)	3731 2947 3936 4886 4714 3676	5335 4648 5873 4255 5299 4088	9343 9219 9194 8981 8981	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(2)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40G) H(40H) H(40I)	3731 2947 3936 4886 4714 3676	5335 4648 5873 4255 5299 4088	9249 9219 9194 8981 8981 8995	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(401) H(501)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877	9343 9219 9194 8981 8981 8995 9571	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(40I) H(501)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690	9219 9219 8981 8981 8995 9571 9564	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(501) H(501) H(501)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9026	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690	9249 9219 9194 8981 8981 8995 9571 9564	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(501) H(501) H(501)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120	9219 9219 9194 8981 8981 8995 9571 9564 9431	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(501) H(501) H(501) H(502)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805 7350	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120 8024	9219 9219 9194 8981 8981 8995 9571 9564 9431 9436	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(401) H(501) H(501) H(502) H(502)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805 7350 7489	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120 8024 7246	9219 9219 9194 8981 8981 8995 9571 9564 9431 9436 9327	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(501) H(501) H(501) H(502) H(502)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805 7350 7489	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120 8024 7246	9219 9219 9194 8981 8981 8995 9571 9564 9431 9436 9327	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40H) H(501) H(501) H(501) H(502) H(502) H(502)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805 7350 7489 8042	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120 8024 7246 8536	9219 9219 9194 8981 8995 9571 9564 9431 9436 9327 9298	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)
H(40D) H(40E) H(40F) H(40G) H(40H) H(40I) H(501) H(501) H(501) H(502) H(502) H(502)	3731 2947 3936 4886 4714 3676 10248 9028 9805 7350 7489 8042	5335 4648 5873 4255 5299 4088 9877 9690 10120 8024 7246 8536	9219 9219 9194 8981 8995 9571 9564 9431 9436 9327 9298	61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3) 61(3)

8.6 [(iPrSn)₈ (MoO₄)₄ (SnO₆) (OH)₈] · H₂O · 6 DMF(6)



Table 1. Crystal data and structure refinement for 6.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions

Volume Z, Calculated density Absorption coefficient F(000) Crystal size Theta range for data collection Limiting indices Reflections collected / unique Completeness to theta Absorption correction Max. and min. transmission Refinement method Data / restraints / parameters Goodness-of-fit on F^2 Final R indices [I>2sigma(I)] R indices (all data) Largest diff. peak and hole

 $C_{42} H_{12.5} Mo_4 N_6 O_{37} Sn_9$ 2645.05 293(2) K 0.71073 A Monoclinic, C2/c a = 25.540(9) Å α = 90 ° $b = 21.936(7) \text{ Å } \beta = 101.26(4) ^{\circ}$ c = 15.616(6) Å γ = 90 ° 8580(5) A³ 4, 2.048 Mg/m³ 3.207 mm⁻ 4882 0.3 mm x 0.2 mm x 0.1 mm 1.93 to 22.00 deg. -26≤h≤1, -1≤k≤23, -16≤l≤16 5978 / 5195 [R(int) = 0.0441] = 22.00 98.5 % Empirical 0.1373 and 0.1004 Full-matrix least-squares on F² 5195 / 31 / 320 1.031 R1 = 0.0619, wR2 = 0.1542 R1 = 0.0915, wR2 = 0.1746 1.152 and -0.901 e.Å⁻³
	X	у	Z	U(eq)
Sp(1)	0	2001(1)	7600	41(1)
SII(1) Sp(2)	0 769/1)	2091(1)	6560(1)	41(1) 54(1)
Sn(2) Sn(3)	800(1)	3069(1)	8710(1)	52(1)
Sn(4)	886(1)	853(1)	6846(1)	49(1)
Sn(5)	76(1)	1802(1)	5458(1)	50(1)
Mo(1)	-453(1)	418(1)	6057(1)	52(1)
Mo(1) Mo(2)	1698(1)	2295(1)	7690(1)	56(1)
$\Omega(1)$	-378(4)	2290(4)	6167(6)	48(3)
O(2)	281(4)	1452(4)	6755(6)	46(2)
O(3)	606(4)	2670(4)	7469(6)	46(2)
O(4)	612(4)	2558(5)	5657(7)	60(3)
O(5)	989(4)	3741(5)	7822(7)	60(3)
O(6)	1556(4)	2874(5)	6859(8)	64(3)
O(7)	747(4)	1200(5)	5527(7)	57(3)
O(9)	1396(4)	1576(5)	7332(7)	59(3)
O(10)	1533(4)	2564(5)	8685(7)	59(3)
O(11)	-47(4)	3551(5)	6462(8)	62(3)
O(12)	2362(5)	2178(6)	7879(9)	76(4)
O(13)	223(4)	221(5)	6457(7)	62(3)
O(14)	-804(4)	657(5)	6866(7)	59(3)
O(15)	-787(4)	-196(5)	5554(7)	61(3)
O(16)	-462(4)	1033(5)	5286(7)	56(3)
C(20)	964(9)	4008(11)	5791(14)	108(8)
C(21)	643(10)	4086(15)	4932(16)	153(11)
C(22)	1496(9)	4249(14)	5905(17)	141(10)
C(30)	1080(7)	3461(8)	9985(12)	77(5)
C(31)	1093(0)	3230(12)	10444(17)	120(9)
C(32)	1515(6)	4120(9)	6772(11)	64(5)
C(41)	1985(10)	322(15)	7449(17)	154(12)
C(42)	1321(11)	-389(10)	6811(19)	145(11)
C(50)	-267(14)	1958(17)	4104(14)	66(7)
C(51)	-130(30)	1420(30)	3670(50)	170(19)
C(52)	-26(15)	2477(17)	3760(30)	130(13)
C(60)	-99(14)	1902(18)	4076(13)	66(7)
C(61)	110(20)	1430(30)	3590(50)	170(19)
C(62)	-669(15)	1950(40)	3750(50)	130(13)
O(100)	1368(6)	2466(8)	4620(11)	131(6)
C(100)	1627(10)	2024(10)	4885(11)	143(11)
N(100)	1929(9)	1740(9)	4429(17)	161(10)
C(101)	2050(17)	1960(20)	3560(20)	240(20)
C(102)	2140(20)	1091(11)	4540(30)	330(30)
O(200)	2956(8)	732(12)	1512(14)	210(11)
C(200)	2632(10)	1117(10)	1239(14)	150(11)
N(200)	2285(7)	1056(9)	512(12)	106(6)
C(201)	2343(17)	430(12)	120(30)	227(19)
O(202)	1910(10)	1372(13)	7400(40)	230(20) 510(40)
C(300)	4∠1/(11) 2802(11)	420(0)	7490(40)	310(40) 310(30)
N(300)	30U3(11) 2728(7)	430(9) 1020(0)	7∠00(40) 7169(19)	310(30)
C(301)	4200(10)	1452(10)	7/100(10)	410(40)
C(302)	3207(10)	1293(16)	6720(30)	380(40)
O(500)	5000	406(9)	2500	109(7)
0,000)	0000	100(0)	2000	100(1)

Table 2.Atomic coordinates ($x \ 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$) for6. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

Sn(1)-Q(3)	2 009(9)
$S_{n}(1) O(2) \# 1$	2,000(0)
51(1)-0(3)#1	2.009(9)
Sn(1)-O(2)	2.039(9)
Sn(1)-O(2)#1	2.039(9)
Sn(1)-O(1)#1	2.161(9)
Sn(1)-Q(1)	2 161(9)
$S_{n}(1) S_{n}(2)$	2 2022(17)
	3.2922(17)
Sn(1)-Sn(3)#1	3.2922(17)
Sn(1)-Sn(5)#1	3.2945(17)
Sn(1)-Sn(5)	3.2945(17)
$S_{n}(2) - O(3)$	2 064(9)
$S_{n}(2) C(20)$	2.00+(3)
	2.10(2)
Sn(2)-O(4)	2.121(11)
Sn(2)-O(11)	2.134(10)
Sn(2)-O(6)	2.174(10)
Sn(2)-O(5)	2 179(11)
$S_{n}(2) O(1) \# 1$	2.050(0)
	2.030(9)
Sn(3)-O(3)	2.096(9)
Sn(3)-O(5)	2.142(10)
Sn(3)-C(30)	2.159(19)
Sn(3)-Q(11)#1	2 166(10)
Sn(3) - O(10)	2 181(11)
$O_{-}(0) = O_{-}(0)$	2.101(11)
Sn(4)-O(2)	2.013(9)
Sn(4)-O(9)	2.098(11)
Sn(4)-O(14)#1	2.108(11)
Sn(4)-C(40)	2.137(17)
Sn(4)-O(7)	2 159(10)
O(4) O(12)	2.100(10)
511(4)-0(13)	2.160(11)
Sn(5)-O(1)	2.054(10)
Sn(5)-C(60)	2.127(19)
Sn(5)-O(4)	2.134(10)
Sn(5)-O(2)	2 134(9)
$S_{n}(5) - O(7)$	21/8(11)
Sn(5) - O(7)	2.140(11)
51(5)-C(50)	2.151(19)
Sn(5)-O(16)	2.158(11)
Mo(1)-O(15)	1.702(10)
Mo(1)-O(14)	1.766(11)
Mo(1)-O(13)	1 770(11)
$M_{O}(1) = O(16)$	1 807(10)
$M_{0}(2) O(10)$	1.007(10)
MO(2)-O(12)	1.004(12)
Mo(2)-O(10)	1.788(11)
Mo(2)-O(9)	1.795(11)
Mo(2)-O(6)	1.802(11)
Q(1)-Sn(3)#1	2.050(9)
O(11)-Sp(3)#1	2 166(10)
$O(14) S_{2}(4) + 1$	2.100(10)
0(14)-5(1(4)#1	2.108(11)
C(20)-C(22)	1.436(13)
C(20)-C(21)	1.439(13)
C(30)-C(32)	1.449(13)
C(30)-C(31)	1.450(13)
C(40)-C(42)	1 1 1 1 (1 1)
C(40) - C(41)	1.441(14)
C(40) - C(41)	1.450(14)
C(50)-C(51)	1.445(14)
C(50)-C(52)	1.446(14)
C(60)-C(62)	1,448(14)
C(60)-C(61)	1 446(14)
O(100) - C(100)	1 2009(11)
O(100)-O(100)	1.2003(11)
	1.3039(11)
N(100)-C(101)	1.5209(12)
N(100)-C(102)	1.5210(11)
O(200)-C(200)	1.2010(11)
C(200)-N(200)	1.3040(12)
N(200) - C(202)	1 5210(11)
N(200) C(201)	1 5200(11)
N(200)-C(201)	1.5209(11)
O(300)-C(300)	1.2010(11)
C(300)-N(300)	1.3040(11)
N(300)-C(302)	1.5210(12)
N(300)-C(301)	1.5211(12)
$\Omega(3) - Sn(1) - \Omega(3) \# 1$	101 6(6)
O(3) - O(3) + O(3) + O(3)	101.0(0)
O(3)-SII(1)-O(2)	93.0(4)
O(3) = -O(1) - O(2)	143.7(4)
U(3)-Sn(1)-U(2)#1	143.7(4)
O(3)#1-Sn(1)-O(2)#1	93.6(4)
O(2)-Sn(1)-O(2)#1	93.1(5)
O(3)-Sn(1)-O(1)#1	72.2(4)
O(3)#1-Sn(1)-O(1)#1	92 9(4)
$O(0)^{m+1} O(1)^{m+1} O(1)^{m+1} O(2) S_{m}(1) O(1)^{m+1} O(2) S_{m}(1) O(2) S_{m}(1$	102.3(4)
O(2) - O(1) - O(1) + 1	123.2(4)
O(2)#1-SN(1)- $O(1)$ #1	(4.3(4)
O(3)-Sn(1)-O(1)	92.9(4)
O(3)#1-Sn(1)-O(1)	72.2(4)
O(2)-Sn(1)-O(1)	74.3(4)
O(2)#1-Sn(1)-O(1)	123 2(4)
O(1) # 1 - Sp(1) - O(1)	156 7(5)
$O(1)\pi 1^{-}O(1)$ O(2) Sp(1) Sp(2)	27 6(2)
O(3)-OI(1)-OI(3)	37.0(3)
U(3)#1-SN(1)-SN(3)	oo.2(3)

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 6.

O(2)-Sn(1)-Sn(3) O(2)#1-Sn(1)-Sn(3) O(1)#1-Sn(1)-Sn(3) O(1)-Sn(1)-Sn(3) O(3)-Sn(1)-Sn(3)#1 O(3)#1-Sn(1)-Sn(3)#1 O(2)-Sn(1)-Sn(3)#1 O(2)#1-Sn(1)-Sn(3)#1 O(1)#1-Sn(1)-Sn(3)#1 O(1)-Sn(1)-Sn(3)#1 O(1)-Sn(1)-Sn(3)#1 O(3)-Sn(1)-Sn(5)#1 O(3)#1-Sn(1)-Sn(5)#1 O(2)-Sn(1)-Sn(5)#1 O(2)#1-Sn(1)-Sn(5)#1 O(1)#1-Sn(1)-Sn(5)#1 O(1)-Sn(1)-Sn(5)#1 Sn(3)-Sn(1)-Sn(5)#1 Sn(3)#1-Sn(1)-Sn(5)#1 O(3)-Sn(1)-Sn(5) O(3)#1-Sn(1)-Sn(5) O(2)-Sn(1)-Sn(5) O(2)#1-Sn(1)-Sn(5) O(1)#1-Sn(1)-Sn(5) O(1)-Sn(1)-Sn(5) Sn(3)-Sn(1)-Sn(5) Sn(3)#1-Sn(1)-Sn(5) Sn(5)#1-Sn(1)-Sn(5) O(3)-Sn(2)-C(20) O(3)-Sn(2)-O(20) O(3)-Sn(2)-O(4) C(20)-Sn(2)-O(4) O(3)-Sn(2)-O(11) C(20)-Sn(2)-O(11) O(4)-Sn(2)-O(11) O(3)-Sn(2)-O(6) C(20)-Sn(2)-O(6) O(4)-Sn(2)-O(6) O(11)-Sn(2)-O(6) O(3)-Sn(2)-O(5) C(20)-Sn(2)-O(5) O(4)-Sn(2)-O(5) O(11)-Sn(2)-O(5) O(6)-Sn(2)-O(5) O(1)#1-Sn(3)-O(3) O(1)#1-Sn(3)-O(5) O(3)-Sn(3)-O(5) O(3)-Sn(3)-O(5) O(1)#1-Sn(3)-C(30) O(3)-Sn(3)-C(30) O(5)-Sn(3)-C(30) O(1)#1-Sn(3)-O(11)#1 O(3)-Sn(3)-O(11)#1 O(5)-Sn(3)-O(11)#1 C(30)-Sn(3)-O(11)#1 O(1)#1-Sn(3)-O(10) O(3)-Sn(3)-O(10) O(5)-Sn(3)-O(10) C(30)-Sn(3)-O(10) O(11)#1-Sn(3)-O(10) O(1)#1-Sn(3)-Sn(1) O(3)-Sn(3)-Sn(1) O(5)-Sn(3)-Sn(1) C(30)-Sn(3)-Sn(1) O(11)#1-Sn(3)-Sn(1) O(10)-Sn(3)-Sn(1) O(2)-Sn(4)-O(9) O(2)-Sn(4)-O(14)#1 O(9)-Sn(4)-O(14)#1 O(2)-Sn(4)-C(40) O(9)-Sn(4)-C(40) O(9)-Sn(4)-C(40) O(14)#1-Sn(4)-C(40) O(2)-Sn(4)-O(7) O(9)-Sn(4)-O(7) O(14)#1-Sn(4)-O(7) C(40)-Sn(4)-O(7) O(2)-Sn(4)-O(13) O(9)-Sn(4)-O(13) O(14)#1-Sn(4)-O(13) C(40)-Sn(4)-O(13) O(7)-Sn(4)-O(13) O(7)-Sn(5)-C(60) O(1)-Sn(5)-O(4) C(60)-Sn(5)-O(4) O(1)-Sn(5)-O(2) C(60)-Sn(5)-O(2) O(4)-Sn(5)-O(2) O(1)-Sn(5)-O(7)

121.8(3)
111.6(3)
37.4(3) 122 1(3)
88.2(3)
37.6(3) 111.6(3)
121.8(3)
122.1(3)
37.4(3) 98.70(6)
109.6(3)
84.7(3)
38.9(3)
37.4(3)
150.7(3) 73 58(4)
122.26(4)
84.7(3)
109.6(3) 38.9(3)
120.9(3)
150.7(3) 37 4(3)
122.26(4)
73.58(4)
157.78(6)
85.6(4)
102.9(7)
84.4(4) 95.4(7)
95.9(4)
83.0(4)
82.7(4)
167.5(4)
74.3(4) 97 2(7)
158.0(4)
91.1(4)
86.0(4) 72.8(4)
145.4(4)
74.4(4)
174.5(5)
104.3(6)
87.0(4) 92.6(4)
83.7(4)
92.7(6)
92.7(4) 79.7(4)
92.1(4)
95.0(5)
39.8(3)
35.8(3)
105.6(3)
79.0(3)
95.6(3)
89.0(4)
88.8(4)
173.0(5) 95.0(5)
97.8(5)
73.8(4)
93.0(4) 162.5(4)
99.3(5)
81.5(4) 167 1(4)
85.4(4)
97.2(5)
89.1(4) 117 7(11)
86.0(4)
93.9(10)
74.0(3) 164.6(11)
96.3(4)
145.2(4)

Table 3 continued	
C(60)-Sn(5)-O(7)	97.0(11)
O(4)-Sn(5)-O(7)	89.3(4)
O(2)-Sn(5)-O(7)	71.7(4)
O(1)-Sn(5)-C(50)	106.4(11)
O(4) Sp(5) O(50)	12.3(16)
O(2)-Sn(5)-C(50)	96.4(9) 165.3(9)
O(7)-Sn(5)-C(50)	108.4(11)
O(1)-Sn(5)-O(16)	93.5(4)
C(60)-Sn(5)-O(16)	87.3(10)
O(4)-Sn(5)-O(16)	178.8(4)
O(2)-SI(5)-O(16) O(7)-Sp(5)-O(16)	82.5(4) 90.5(4)
C(50)-Sn(5)-O(16)	82.8(9)
O(1)-Sn(5)-Sn(1)	39.8(3)
C(60)-Sn(5)-Sn(1)	157.1(11)
O(4)-Sn(5)-Sn(1)	82.3(3)
O(2)-Sn(5)-Sn(1)	36.9(2)
O(7)-Sh(5)-Sh(1) O(50)-Sh(5)-Sh(1)	105.4(3)
O(16)-Sn(5)-Sn(1)	96.6(3)
O(15)-Mo(1)-O(14)	106.6(5)
O(15)-Mo(1)-O(13)	109.7(5)
O(14)-Mo(1)-O(13)	114.6(5)
O(13)-MO(1)-O(16) O(14)-MO(1)-O(16)	10.1(5)
O(13)-Mo(1)-O(16)	107.6(5)
O(12)-Mo(2)-O(10)	107.3(6)
O(12)-Mo(2)-O(9)	106.2(5)
O(10)-Mo(2)-O(9)	113.6(5)
O(12)-MO(2)-O(6) O(10) Mo(2) O(6)	106.7(6)
O(9)-MO(2)-O(6)	112.4(5)
Sn(3)#1-O(1)-Sn(5)	148.0(5)
Sn(3)#1-O(1)-Sn(1)	102.8(4)
Sn(5)-O(1)-Sn(1)	102.8(4)
Sn(4)-O(2)-Sn(7) Sn(4)-O(2)-Sn(5)	110 1(4)
Sn(1)-O(2)-Sn(5)	104.3(4)
Sn(1)-O(3)-Sn(2)	133.7(5)
Sn(1)-O(3)-Sn(3)	106.6(4)
Sn(2)-O(3)-Sn(3) Sn(2)-O(4)-Sn(5)	108.5(4)
Sn(3)-O(5)-Sn(2)	102.8(4)
Mo(2)-O(6)-Sn(2)	119.8(5)
Sn(5)-O(7)-Sn(4)	104.3(4)
Mo(2)-O(9)-Sn(4) Mo(2) O(10) Sn(3)	167.2(6) 122.1(6)
Sn(2)-O(11)-Sn(3)#1	135 0(5)
Mo(1)-O(13)-Sn(4)	126.4(5)
Mo(1)-O(14)-Sn(4)#1	154.5(6)
Mo(1)-O(16)-Sn(5)	125.1(5)
C(22)-C(20)-C(21) C(22)-C(20)-Sp(2)	115.1(17)
C(21)-C(20)-Sn(2)	117.7(17)
C(32)-C(30)-C(31)	112(2)
C(32)-C(30)-Sn(3)	113.5(15)
C(31)-C(30)-Sn(3) C(42)-C(40)-C(41)	115.2(15) 111(2)
C(42)-C(40)-Sn(4)	109.3(15)
C(41)-C(40)-Sn(4)	112.9(16)
C(51)-C(50)-C(52)	108(4)
C(51)-C(50)-Sn(5)	104(4)
C(52)-C(50)-SI(5) C(62)-C(60)-C(61)	108 5(19)
C(62)-C(60)-Sn(5)	111(4)
C(61)-C(60)-Sn(5)	116(4)
O(100)-C(100)-N(100)	122.84(16)
C(100)-N(100)-C(101) C(100)-N(100)-C(102)	126(2) 128(3)
C(101)-N(100)-C(102)	106(3)
O(200)-C(200)-N(200)	122.80(16)
C(200)-N(200)-C(202)	122(2)
C(200)-N(200)-C(201)	109.7(18)
O(202)-N(200)-O(201) O(300)-C(300)-N(300)	128(3) 124 77(17)
C(300)-N(300)-C(302)	120.3(9)
C(300)-N(300)-C(301)	121.3(5)
C(302)-N(300)-C(301)	117.44(12)

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Sn(1)	53(1)	28(1)	44(1)	0	14(1)	0
Sn(2)	65(1)	35(1)	66(1)	7(1)	22(1)	-5(1)
Sn(3)	62(1)	36(1)	59(1)	-6(1)	14(1)	-6(1)
Sn(4)	60(1)	32(1)	57(1)	1(1)	19(1)	5(1)
Sn(5)	68(1)	38(1)	47(1)	1(1)	17(1)	3(1)
Mo(1)	65(1)	38(1)	55(1)	-9(1)	16(1)	-3(1)
Mo(2)	57(1)	43(1)	71(1)	-1(1)	15(1)	-4(1)
O(1)	56(6)	35(6)	55(6)	17(5)	12(5)	14(5)
O(2)	68(7)	26(5)	48(6)	-3(4)	22(5)	8(5)
O(3)	62(6)	34(6)	44(6)	1(5)	16(5)	-9(5)
O(4)	77(7)	50(7)	58(7)	-2(6)	26(6)	-13(6)
O(5)	79(7)	36(6)	69(7)	2(5)	25(6)	-7(5)
O(6)	57(7)	47(7)	91(9)	14(6)	23(6)	9(5)
O(7)	77(7)	46(7)	51(6)	-6(5)	21(5)	-1(5)
O(9)	62(7)	45(7)	72(7)	-10(6)	19(6)	5(5)
O(10)	64(7)	40(6)	75(8)	-8(6)	16(6)	-2(5)
O(11)	60(7)	38(6)	91(9)	10(6)	25(6)	2(5)
O(12)	73(8)	58(8)	100(10)	-8(7)	23(7)	0(6)
O(13)	78(7)	33(6)	69(8)	-3(5)	2(6)	5(5)
O(14)	52(6)	52(7)	76(8)	-9(6)	16(5)	-8(5)
O(15)	84(8)	32(6)	68(7)	-15(5)	16(6)	-22(5)
O(16)	70(7)	50(7)	51(6)	1(5)	18(5)	-3(5)
O(500)	87(14)	60(13)	180(20)	0	33(14)	0

Table 4.Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 6. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [$h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12$].

H(20) B08 4340 6080 250(30) H(211) 304 3890 4905 250(30) H(212) 826 3807 4908 250(30) H(211) 526 3807 4908 250(30) H(221) 168 4153 4411 220(30) H(222) 1480 4683 529 250(30) H(222) 1480 4683 529 250(30) H(331) 1575 4070 5479 250(30) H(312) 1585 3381 10159 250(30) H(312) 1523 4285 9720 250(30) H(321) 712 4285 9720 250(30) H(321) 116 4281 10886 260(30) H(321) 116 4281 10886 260(30) H(321) 116 4285 9720 250(30) H(411) 1220 225 7387 250(30) H(421) <td< th=""><th></th><th>Х</th><th>у</th><th>Z</th><th>U(eq)</th></td<>		Х	у	Z	U(eq)
H211) 304 3890 4905 250(30) H212) B22 3907 4508 250(30) H213) 599 4513 4611 250(30) H221) 1688 4153 6481 250(30) H222) 1480 4683 5529 250(30) H223) 1675 4070 5479 250(30) H(311) 1591 2799 10442 250(30) H(311) 1658 3381 11036 250(30) H(321) 712 4252 9681 250(30) H(322) 1328 4285 9720 250(30) H(421) 1019 4285 9726 250(30) H(421) 1020 777 8011 250(30) H(421) 1014 4486 6354 250(30) H(421) 1014 4481 6354 250(30) H(421) 1014 4485 3657 250(30) H(421) <t< td=""><td>H(20)</td><td>808</td><td>4340</td><td>6080</td><td>250(30)</td></t<>	H(20)	808	4340	6080	250(30)
H1212 B22 3007 4508 250(30) H(213) 598 4513 4481 250(30) H(221) 1688 4153 6481 250(30) H(222) 1440 4683 5529 250(30) H(222) 1475 4070 5479 250(30) H(31) 1591 2799 10442 250(30) H(312) 1658 3381 10159 250(30) H(321) 712 4252 9681 260(30) H(322) 1329 4285 9720 260(30) H(321) 166 4261 10586 250(30) H(421) 2120 726 7387 250(30) H(411) 2120 726 7387 250(30) H(411) 2120 726 7687 250(30) H(411) 2120 255 260(30) 108 H(411) 2120 256 7687 250(30) H(411) <t< td=""><td>H(211)</td><td>304</td><td>3890</td><td>4905</td><td>250(30)</td></t<>	H(211)	304	3890	4905	250(30)
Heiran 589 4513 4611 250(30) H(22) 1688 4153 6641 250(30) H(22) 1480 4683 6529 250(30) H(30) 824 3326 10336 250(30) H(31) 1591 2799 10442 250(30) H(312) 1668 3381 11036 250(30) H(311) 172 4252 9681 250(30) H(321) 712 4252 9681 250(30) H(322) 1329 4285 9720 250(30) H(421) 1016 278 7287 250(30) H(421) 1014 448 6354 250(30) H(421)	H(212)	822	3907	4508	250(30)
H221 1888 4153 6481 250(30) H222) 1480 4683 5829 250(30) H(30) 824 3326 10336 250(30) H(31) 1591 2799 10442 250(30) H(312) 1658 3381 10159 250(30) H(312) 172 4252 9681 250(30) H(321) 712 4252 9681 250(30) H(322) 1329 4285 9720 250(30) H(421) 106 4261 10586 250(30) H(411) 2120 726 7387 250(30) H(411) 2120 726 7387 250(30) H(411) 114 4486 6354 250(30) H(411) 2120 726 7387 250(30) H(411) 2120 726 7387 250(30) H(411) 1488 6354 250(30) H(411) 1485 <td< td=""><td>H(213)</td><td>589</td><td>4513</td><td>4811</td><td>250(30)</td></td<>	H(213)	589	4513	4811	250(30)
H222)14804835829250(30)H(30)824332610336250(30)H(31)1651279910336250(30)H(312)1658338111036250(30)H(313)1670338110159250(30)H(321)71242529681250(30)H(322)132942659720250(30)H(322)13294265720250(30)H(40)16192796205250(30)H(411)21207267385250(30)H(412)2254297387250(30)H(421)1014-448654250(30)H(422)1525-672673250(30)H(422)1585-6727367250(30)H(422)1585-6726736250(30)H(422)123214353607250(30)H(421)-16328404056250(30)H(60)-65520084021250(30)H(51)-16825153148200(30)H(51)-16825153148250(30)H(52)-3642381250(30)H(61)761633286250(30)H(61)761633286250(30)H(62)-87266250(30)H(62)-77260(30)250(30)H(61)17816953346250(30)H(62)-87266250	H(221)	1688	4153	6481	250(30)
H(20)H97540705479250(30)H(31)1591279910442250(30)H(311)1591279910442250(30)H(312)1870338110159250(30)H(313)1870338110159250(30)H(322)13294265970250(30)H(322)1329426110556250(30)H(40)16192736205250(30)H(41)21207267387250(30)H(41)12127767387250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(422)1523-4567367250(30)H(421)10133883100250(30)H(421)-16710634005250(30)H(422)15338404005250(30)H(51)-7810683262250(30)H(61)-7810583262250(30)H(61)-7810583264250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-84015823396250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7372013130250(30) <tr< td=""><td>H(222)</td><td>1480</td><td>4683</td><td>5829</td><td>250(30)</td></tr<>	H(222)	1480	4683	5829	250(30)
H(30)824332610336250(30)H(311)159123991042250(30)H(312)1581338111056250(30)H(32)1724529881250(30)H(32)1724529881250(30)H(32)1724529881250(30)H(32)1106466110586250(30)H(40)1619279250(30)H(41)21207787387250(30)H(42)11212778011250(30)H(42)11224486527367250(30)H(42)11224687367250(30)H(42)11234687367250(30)H(42)12234683607250(30)H(42)122310634021250(30)H(51)-65720084021250(30)H(52)-61710634064250(30)H(51)-61710634064250(30)H(52)-61824193653250(30)H(52)-787250(30)250(30)H(52)-78720013130250(30)H(52)-7872003342250(30)H(52)-78720013130250(30)H(52)-78720013130250(30)H(52)-78720013130250(30)H(62)-78720013133250(30)H(62)-787	H(223)	1675	4070	5479	250(30)
High High High HighConConConHigh High High1658338111036250(30)High High1870338110159250(30)High High137942859720250(30)High High2796205250(30)High High2796205250(30)High High2796205250(30)High High2767385250(30)High High2778011250(30)High High2778011250(30)High High2778011250(30)High High2778011250(30)High High1595-6726738250(30)High High1595-6726738250(30)High High-65520084005250(30)High High-655200840021250(30)High High-655200840021250(30)High High-65520083100250(30)High High-7810633643250(30)High High701553250(30)High High7015523984250(30)High High73720013130250(30)High High73720013130250(30)High High73720013130250(30)High High73720013130250(30)Hi	H(30)	824	3326	10336	250(30)
Hi312)1658338111036250(30)H(32)71242529681250(30)H(32)71242529681250(30)H(32)132942559720250(30)H(32)1106426110586250(30)H(41)16192796205250(30)H(41)21207267387250(30)H(412)2254297387250(30)H(42)10144486354250(30)H(42)10144486354250(30)H(42)12334667387250(30)H(42)12334687387250(30)H(42)12334687387250(30)H(42)12334687387250(30)H(42)12334687387250(30)H(42)1634005250(30)H(51)-18710634005250(30)H(51)-18714353148250(30)H(52)-16324193153250(30)H(52)-16324193164250(30)H(62)-7372011553250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7372013130250(30)H(62)-7381261	H(311)	1591	2799	10442	250(30)
H1311870338110153250(30)H132171242529661250(30)H1322132942559720250(30)H14201166426110586250(30)H141121237287387250(30)H141222542378011250(30)H141318912778011250(30)H14211014-4486354250(30)H14221223-4667387250(30)H14231995-6726738250(30)H14231995-6726738250(30)H162123214353607250(30)H1621-23214353607250(30)H1611-16825153148250(50)H1622-16825153148250(50)H1622-168255153148250(30)H1621-7722013130250(30)H1621-7810583626250(30)H161316413723831250(30)H1610-7810583626250(30)H1611173119433123250(30)H162224193332250(30)H161316783624250(30)H1610-7810583626250(30)H1610173119433123250(30)H1621-7372013130250(30)H162224191037<	H(312)	1658	3381	11036	250(30)
H132171242529681220100H1322132942859720220100H13231106428110586250100H44016192796205250100H441121207287387250100H44112917788011250100H4422254297387250100H442110144486354250100H442110144486354250100H44231595-6726738250100H44231595-6726738250100H450-65520084021250130H451-18710634005250130H511-18710634005250130H513-36113883100250130H613-36424193453250130H613-36424193453250130H61448413723831250130H6187015532990250130H6187015823894250130H6187015823894250130H61973720013130250130H620-84015823894250130H621-84015823894250130H622-1685133250130H6144548104333250130H617218516863396250130	H(313)	1870	3381	10159	250(30)
H322 1329 4285 9720 250(30) H323 1106 4261 10586 250(30) H440 1619 2212 726 7395 250(30) H411 2120 726 7397 250(30) H4133 1881 2777 801 250(30) H4421 1014 -448 6354 250(30) H4422 1223 -456 7387 250(30) H4423 1595 -672 6738 250(30) H4423 1595 -672 6738 250(30) H4421 232 1435 3607 250(30) H4511 -187 1083 3100 250(30) H613 -361 1388 3100 250(30) H621 -103 2840 4056 250(30) H623 354 2419 3853 250(30) H6141 484 1372 3831 250(30) H6162	H(321)	712	4252	9681	250(30)
H323)1106426110656250(30)H(40)16192796205250(30)H(411)21207267395250(30)H(412)2244297387250(30)H(413)189127778011250(30)H(421)1014-4486334250(30)H(422)1223-4567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(51)-18710634005250(30)H(51)-18710634005250(30)H(51)-36113883100250(30)H(52)-35424193853250(30)H(62)-5822893942250(30)H(62)-5822893942250(30)H(61)5922813431250(30)H(61)7810583626250(30)H(62)-73720113130250(30)H(62)-73720113130250(30)H(101)215223873624250(30)H(101)161318785438250(30)H(101)215510445153250(30)H(101)12144333250(30)H(101)215510145150250(30)H(101)2152381-402250(30)H(101)2163392-11250(30)H(101) <t< td=""><td>H(322)</td><td>1329</td><td>4285</td><td>9720</td><td>250(30)</td></t<>	H(322)	1329	4285	9720	250(30)
H40016192796205250(30)H(411)21207267395250(30)H(412)2254297387250(30)H(413)18912778011250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(422)1223-4567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(50)-65520084021250(30)H(511)-118710634005250(30)H(512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(623)35424193853250(30)H(610)5922893942250(30)H(624)-80722914018250(30)H(612)-73720013130260(30)H(625)-73720013130260(30)H(101)231516663366250(30)H(101)2315166633624250(30)H(102)218223673624250(30)H(101)2195121535250(30)H(102)21848104333250(30)H(101)2195121536250(30)H(102)18648104333250(30)H(101)2195121536250(30) <t< td=""><td>H(323)</td><td>1106</td><td>4261</td><td>10586</td><td>250(30)</td></t<>	H(323)	1106	4261	10586	250(30)
Hqi1121207267395250(30)H(412)254297367250(30)H(413)18912778011250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(422)1223-4567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(421)-165520084021250(30)H(50)-65520084021250(30)H(51)-16710634005250(30)H(51)-10328404056250(30)H(521)-10328404056250(30)H(621)-10328404056250(30)H(622)-16825153148250(30)H(614)48413723831250(30)H(615)7015532990250(30)H(616)5922914018250(30)H(624)-80722914018250(30)H(625)-73720013130250(30)H(626)-73720013130250(30)H(101)21519663386250(30)H(101)121519663386250(30)H(101)21511965-26250(30)H(101)215210145153250(30)H(101)21521095-26250(30)H(101)215319963386250(30)H(101)21541995-26250(30)<	H(40)	1619	279	6205	250(30)
Hqi122254297387250(30)H(413)18912778011250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(422)1223-4567367250(30)H(423)1695-6726738250(30)H(50)-65520084021250(30)H(511)-18710634005250(30)H(512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61B)7015532990250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(101)21516963396250(30)H(101)173119433123250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)26814731560250(30)H(101)218510145153250(30)H(102)26814731560250(30)H(101)21848104333250(30)H(102)26814731560250(30)H(101)2195121535250(30) <t< td=""><td>H(411)</td><td>2120</td><td>726</td><td>7395</td><td>250(30)</td></t<>	H(411)	2120	726	7395	250(30)
H(413)B91277B011250(30)H(421)1014-4486354250(30)H(422)1223-4567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(424)-65520084021250(30)H(51)-16520084021250(30)H(51)-16710634005250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-18825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(60)5922893842250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61C)-7810583266250(30)H(61C)-7810583326250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(101)218223673224250(30)H(101)218223673224250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)18548104333250(30)H(102)2285121535250(30)H(101)218223673624250(30)H(102)18548104333250(30)H(101)218223673624250(30)H(102)26814731560250(30)	H(412)	2254	29	7387	250(30)
H(421)10144486354250(30)H(422)12234567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(50)-65520084021250(30)H(511)-18710634005250(30)H(512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(616)5922893842250(30)H(617)-7810582890250(30)H(618)7015532990250(30)H(628)-84012823894250(30)H(628)-84012823894250(30)H(628)-84013723130250(30)H(101)218223673824250(30)H(101)218223673264250(30)H(101)218223673264250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)225510145153250(30)H(102)2256121535250(30)H(102)2256121535250(30)H(201)229510145153250(30)H(201)2295121535250(30)	H(413)	1891	277	8011	250(30)
H422)1223-4567367250(30)H(423)1595-6726738250(30)H(50)-65520084021250(30)H(51)-18710634005250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(60)5922893942250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61B)7015532990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(101)173119433123250(30)H(101)173119433123250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)285121535250(30)H(102)285121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(202)16841431-401250(30)H(201	H(421)	1014	-448	6354	250(30)
H423)1595-6726738250(30)H(50)-65520084021250(30)H(511)-18710634005250(30)H(512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193653250(30)H(614)48413723831250(30)H(615)7015532990250(30)H(616)-7810583626250(30)H(62A)-80722914018250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(101)161318785438250(30)H(101)218223673624250(30)H(101)218223673624250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)227510145153250(30)H(102)2285121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(202)168413917027250(30) <tr<< td=""><td>H(422)</td><td>1223</td><td>-456</td><td>7367</td><td>250(30)</td></tr<<>	H(422)	1223	-456	7367	250(30)
H(50)'-65520084021250(20)H(511)-18710634005250(30)H(513)-36113883100250(30)H(514)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(614)48413723811250(30)H(615)7015532990250(30)H(616)7810583626250(30)H(617)-7810583862250(30)H(628)-84015823894250(30)H(626)-73720013130250(30)H(627)-73720013130250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)218223673624250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)227510145153250(30)H(101)2393392-11250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2693392-11250(30)H(201)2693392-11250(30)H(201)2693392-11250(30)H(201)2693392-11250(30)H(201)2693392-11250(30)H(202)168413917027250(30)	H(423)	1595	-672	6738	250(30)
H(51)-18710634005250(30)H(512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(60)5922893942250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61B)7015532990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(61B)7015823894250(30)H(62A)-80722914018250(30)H(62B)-84015823896250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(100)161318785438250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)218223673624250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)255121535250(30)H(102)26814731560250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2055121535250(30)H(201)2683392-11250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)17101706532250(30)	H(50)	-655	2008	4021	250(30)
H (512)23214353607250(30)H(513)-36113883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(60)5922893942250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61C)-7810582990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(101)215116963396250(30)H(101)215223673624250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)27510144333250(30)H(102)27510145153250(30)H(201)2093392-11250(30)H(201)2683392-11250(30)H(202)16841431-401250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)17101706532250(30)H(301)408418667368250(30)H(301)408418667368250(30)H(301)408418667368250(30)	H(511)	-187	1063	4005	250(30)
H(513)-36118883100250(30)H(521)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61B)7015532990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(61C)-77810583626250(30)H(62A)-80722914018250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(100)161318785438250(30)H(101)218223673624250(30)H(101)218223673624250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)255121535250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2095121535250(30)H(201)2693392-11250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)1291905-26250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)48813728004250(30)H(301)445413917027250(30)H(302)319917186864250(30)<	H(512)	232	1435	3607	250(30)
H(221)-10328404056250(30)H(522)-16825153148250(30)H(60)5922893942250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61F)7015532990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)218223673624250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)227510145153250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(201)2295121535250(30)H(202)16841431-401250(30)H(202)168413917027250(30)H(301)408418667368250(30)H(301)438813728004250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)319917186864250(30)<	H(513)	-361	1388	3100	250(30)
H(522)-16825153148250(30)H(523)35424193853250(30)H(610)5922893942250(30)H(61A)48413723831250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(62A)-80722914018250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(100)161318785438250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)25510145153250(30)H(102)262814731560250(30)H(200)262814731560250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2295121535250(30)H(202)16841431-401250(30)H(202)1281905-26250(30)H(202)1701706532250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)438813728004250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)319917886916250(30) <td>H(521)</td> <td>-103</td> <td>2840</td> <td>4056</td> <td>250(30)</td>	H(521)	-103	2840	4056	250(30)
H(523) 354 2419 3853 $250(30)$ $H(60)$ 59 2289 3942 $250(30)$ $H(61A)$ 484 1372 3831 $250(30)$ $H(61B)$ 70 1553 2990 $250(30)$ $H(61C)$ -78 1058 3626 $250(30)$ $H(62A)$ -807 2291 4018 $250(30)$ $H(62B)$ -840 1582 3994 $250(30)$ $H(62C)$ -737 2001 3130 $250(30)$ $H(101)$ 1613 1878 5438 $250(30)$ $H(101)$ 2182 2367 3624 $250(30)$ $H(101)$ 1731 1943 3123 $250(30)$ $H(102)$ 2419 1037 4222 $250(30)$ $H(102)$ 2275 1014 5153 $250(30)$ $H(102)$ 2275 1014 5153 $250(30)$ $H(201)$ 2079 381 -402 $250(30)$ $H(201)$ 2295 121 535 $250(30)$ $H(201)$ 2295 121 535 $250(30)$ $H(202)$ 1684 1431 -402 $250(30)$ $H(202)$ 129 1905 -26 $250(30)$ $H(202)$ 1684 1866 7388 $250(30)$ $H(301)$ 4084 1866 7388 $250(30)$ $H(301)$ 4388 1372 8004 $250(30)$ $H(301)$ 4388 1372 8004 $250(30)$ <	H(522)	-168	2515	3148	250(30)
H(60)5922893942250(30) $H(61A)$ 48413723831250(30) $H(61B)$ 7015532990250(30) $H(61C)$ -7810583626250(30) $H(62A)$ -80722914018250(30) $H(62C)$ -73720013130250(30) $H(62C)$ -73720013130250(30) $H(101)$ 21516963966250(30) $H(101)$ 215169633624250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2093392-11250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(301)$ 48813728004250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 316712486100250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(523)	354	2419	3853	250(30)
H(61Å)48413723831250(30) $H(61B)$ 7015532990250(30) $H(61C)$ -7810583626250(30) $H(62A)$ -80722914018250(30) $H(62B)$ -84015823894250(30) $H(62C)$ -73720013130250(30) $H(100)$ 161318785438250(30) $H(101)$ 231516963396250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(202)$ 168418667388250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(301)$ 43881372804250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(60)	59	2289	3942	250(30)
H(61B)7015532990250(30)H(61C)-7810583626250(30)H(62A)-80722914018250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(100)161318785438250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)173119433123250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)227510145153250(30)H(102)227510145153250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2095121535250(30)H(201)2693392-11250(30)H(202)16841431-401250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)17101706532250(30)H(300)35071896986250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)438813728004250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(61A)	484	1372	3831	250(30)
H(61C)-781058 3626 $250(30)$ $H(62A)$ -80722914018 $250(30)$ $H(62B)$ -8401582 3894 $250(30)$ $H(62C)$ -7372001 3130 $250(30)$ $H(100)$ 16131878 5438 $250(30)$ $H(101)$ 23151696 3396 $250(30)$ $H(101)$ 21822367 3624 $250(30)$ $H(101)$ 17311943 3123 $250(30)$ $H(102)$ 24191037 4222 $250(30)$ $H(102)$ 1854810 4333 $250(30)$ $H(102)$ 227510145153 $250(30)$ $H(201)$ 2079381-402 $250(30)$ $H(201)$ 2079381-402 $250(30)$ $H(201)$ 2295121535 $250(30)$ $H(201)$ 2693392-11 $250(30)$ $H(202)$ 16841431-401 $250(30)$ $H(202)$ 17101706 532 $250(30)$ $H(300)$ 35071896986 $250(30)$ $H(301)$ 445413917027 $250(30)$ $H(301)$ 43881372 8004 $250(30)$ $H(301)$ 43881372 8004 $250(30)$ $H(302)$ 31991718 6864 $250(30)$ $H(302)$ 31671248 6100 $250(30)$	H(61B)	70	1553	2990	250(30)
H(62A)-80722914018250(30)H(62B)-84015823894250(30)H(62C)-73720013130250(30)H(100)161318785438250(30)H(101)231516963396250(30)H(101)173119433123250(30)H(101)173119433123250(30)H(102)241910374222250(30)H(102)227510145153250(30)H(102)227510145153250(30)H(200)262814731660250(30)H(201)2079381-402250(30)H(201)2093392-11250(30)H(201)2693392-11250(30)H(202)17101706532250(30)H(202)17101706532250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)445413728004250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)316712486100250(30)	H(61C)	-78	1058	3626	250(30)
H(62B)-84015823894250(30) $H(62C)$ -73720013130250(30) $H(100)$ 161318785438250(30) $H(101)$ 231516963396250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(62A)	-807	2291	4018	250(30)
H(62C)-73720013130250(30) $H(100)$ 161318785438250(30) $H(101)$ 231516963396250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 295121535250(30) $H(201)$ 295121535250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(62B)	-840	1582	3894	250(30)
H(100)161318785438250(30) $H(101)$ 231516963396250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 28510145153250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2055121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(62C)	-737	2001	3130	250(30)
H(101)231516963396250(30) $H(101)$ 218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(100)	1613	1878	5438	250(30)
H(101)218223673624250(30) $H(101)$ 173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(101)	2315	1696	3396	250(30)
H(101)173119433123250(30) $H(102)$ 241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 445813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(101)	2182	2367	3624	250(30)
H(102)241910374222250(30) $H(102)$ 18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(101)	1731	1943	3123	250(30)
H(102)18548104333250(30) $H(102)$ 227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(102)	2419	1037	4222	250(30)
H(102)227510145153250(30) $H(200)$ 262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(102)	1854	810	4333	250(30)
H(200)262814731560250(30) $H(201)$ 2079381-402250(30) $H(201)$ 2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 292110866916250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(102)	2275	1014	5153	250(30)
H(201) 2079 381 -402 $250(30)$ $H(201)$ 2295 121 535 $250(30)$ $H(201)$ 2693 392 -11 $250(30)$ $H(202)$ 1684 1431 -401 $250(30)$ $H(202)$ 2129 1905 -26 $250(30)$ $H(202)$ 1710 1706 532 $250(30)$ $H(300)$ 3507 189 6986 $250(30)$ $H(301)$ 4084 1866 7368 $250(30)$ $H(301)$ 4454 1391 7027 $250(30)$ $H(302)$ 3199 1718 6864 $250(30)$ $H(302)$ 2921 1086 6916 $250(30)$ $H(302)$ 3167 1248 6100 $250(30)$	H(200)	2628	1473	1560	250(30)
H(201)2295121535250(30) $H(201)$ 2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 292110866916250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(201)	2079	381	-402	250(30)
H(201)2693392-11250(30) $H(202)$ 16841431-401250(30) $H(202)$ 21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 292110866916250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(201)	2295	121	535	250(30)
H(202)16841431-401250(30) $H(202)$ 21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(201)	2693	392	-11	250(30)
H(202)21291905-26250(30) $H(202)$ 17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(302)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(202)	1684	1431	-401	250(30)
H(202)17101706532250(30) $H(300)$ 35071896986250(30) $H(301)$ 408418667368250(30) $H(301)$ 445413917027250(30) $H(301)$ 438813728004250(30) $H(301)$ 319917186864250(30) $H(302)$ 292110866916250(30) $H(302)$ 316712486100250(30)	H(202)	2129	1905	-26	250(30)
H(300)35071896986250(30)H(301)408418667368250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(202)	1710	1706	532	250(30)
H(301)408418667368250(30)H(301)445413917027250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(300)	3507	189	6986	250(30)
H(301)445413917027250(30)H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(301)	4084	1866	7368	250(30)
H(301)438813728004250(30)H(302)319917186864250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(301)	4454	1391	7027	250(30)
H(302)319917186864250(30)H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(301)	4388	1372	8004	250(30)
H(302)292110866916250(30)H(302)316712486100250(30)	H(302)	3199	1718	6864	250(30)
H(302) 3167 1248 6100 250(30)	H(302)	2921	1086	6916	250(30)
	H(302)	3167	1248	6100	250(30)

Table 5. Hydrogen coordinates ($x \ 10^4$) and isotropic displacement parameters ($A^2 x \ 10^3$) for 6.

8.7 [(iPrSn)₆(MoO₄)₄O₂(OH)₆] · 4 DMSO (7)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 7.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions	C ₂₆ H ₇₂ Mo ₄ O ₂₈ S ₄ Sn ₆ 2056.98 293(2) K 0.71073 Å Monoclinic, P2(1)/n $a = 10.4671(19) Å \alpha = 90 °$ $b = 21.373(3) Å \beta = 108.971(11) °$ c = 14.5669(19) Å y = 90 °
Volume	3081.9(8) Å ³
Z, Calculated density	2, 2.217 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.377 mm⁻¹
F(000)	1968
Crystal size	0.5 mm x 0.3 mm x 0.2 mm
Theta range for data collection	2.11 to 22.00 °
Limiting indices	-11≤h≤1, -1≤k≤22, -14≤l≤15
Reflections collected / unique	4788 / 3758 [R(int) = 0.0297]
Completeness to theta	= 22.00 99.4 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3758 / 30 / 248
Goodness-of-fit on F^2	1.044
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0521, wR2 = 0.1326
R indices (all data)	R1 = 0.0564, w $R2 = 0.1367$
Largest diff. peak and hole	2.008 and -1.131 e.A ^{-s}

	X	V	Z	U(eq)	
		,		-(
Sn(1)	3104(1)	8861(1)	6116(1)	57(1)	
Sn(3)	3610(1)	10390(1)	6605(1)	52(1)	
Sn(2)	6208(1)	9412(1)	7139(1)	55(1)	
Mo(1)	5547(1)	8491(1)	5009(1)	63(1)	
Mo(2)	1722(1)	9927(1)	4211(1)	59(1)	
O(1)	4852(8)	8716(4)	7324(6)	62(2)	
O(2)	2488(7)	9598(3)	6853(5)	56(2)	
O(3)	5358(8)	10132(4)	7751(5)	61(2)	
O(4)	4385(6)	9617(3)	6068(5)	46(2)	
O(5)	3976(9)	8363(4)	5200(7)	75(2)	
O(6)	1748(8)	9188(4)	4759(6)	70(2)	
O(7)	6662(8)	8773(4)	6136(6)	67(2)	
O(8)	2116(8)	10483(4)	5179(6)	67(2)	
O(9)	5304(8)	9001(4)	4009(6)	64(2)	
O(10)	2833(7)	9931(4)	3524(6)	62(2)	
O(11)	6174(12)	7804(5)	4762(8)	97(3)	
O(12)	125(8)	10085(5)	3441(6)	84(3)	
C(10)	1866(15)	8094(7)	6321(12)	91(4)	
C(11)	521(18)	8321(10)	6320(16)	133(7)	
C(12)	1720(30)	7610(11)	5570(17)	175(10)	
C(20)	7966(15)	9199(7)	8360(10)	83(4)	
C(21)	7610(20)	8934(11)	9191(15)	156(9)	
C(22)	8840(20)	9760(9)	8708(16)	146(8)	
C(30)	2882(13)	11111(6)	7350(9)	74(4)	
C(31)	1816(16)	11514(8)	6667(12)	103(5)	
C(32)	2495(16)	10843(7)	8175(10)	91(4)	
O(1A)	5555(16)	7560(7)	7493(13)	101(5)	
S(1A)	6360(8)	7175(4)	7028(6)	111(2)	
C(11A)	6650(30)	6376(6)	7510(20)	130(9)	
C(12A)	8087(15)	7400(11)	7260(20)	124(9)	
O(1B)	5900(30)	7604(10)	7940(20)	101(5)	
S(1B)	6628(13)	7019(6)	7798(9)	111(2)	
C(11B)	5820(30)	6644(18)	6630(20)	130(9)	
C(12B)	8270(20)	7156(19)	7690(30)	124(9)	
0(2A)	6780(20)	912(11)	-890(11)	98(5)	
S(ZA)	6989(14)	933(6)	160(9)	141(3)	
C(21A)	6610(60)	1704(13)	580(30)	201(18)	
	5920(60) 6260(20)	47U(ZU)	620(30) 1040(12)	45U(4U) 09(5)	
		1000(11)	-1040(12)	90(0)	
3(2D) C(21D)	0100(14) 7680(40)	1194(6)	-01(10)	141(3)	
C(21D)	7000(40) 5910(70)	1490(30) 550(20)	620(20)	201(10)	
0(220)	5610(70)	550(20)	000(30)	430(40)	

Table 2.Atomic coordinates ($x \ 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$)7.U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

Sn(1)-O(1)	2.109(8)
Sn(1)-O(4)	2.114(7)
Sn(1)-O(2)	2.122(7)
Sn(1)-O(5)	2.130(8)
Sn(1)-O(6)	2.142(8)
Sn(1)-C(10)	2.170(16)
Sn(3)-O(4)	2.101(7)
Sn(3)-O(9)#1	2.109(8)
Sn(3)-O(3)	2.111(8)
Sn(3)-O(2)	2.156(7)
Sn(3)-C(30)	2.162(13)
Sn(3)-O(8)	2.164(8)
Sn(2)-O(4)	2.082(7)
Sn(2)-O(3)	2.114(8)
Sn(2)-O(10)#1	2.131(8)
Sn(2)-O(1)	2.132(8)
Sn(2)-C(20)	2.151(14)
Sn(2)-O(7)	2.164(8)
Mo(1)-O(11)	1.694(9)
MO(1)-O(9)	1.771(8)
Mo(1)-O(5)	1.776(9)
MO(1)-O(7)	1.781(9)
M0(2)-O(12)	1.717(8)
M0(2)-O(10)	1.764(8)
M0(2)-O(6)	1.765(9)
M0(2)-U(8)	1.789(8)
O(9)-Sn(3)#1	2.109(8)
O(10)-Sh(2)#1	2.131(8)
C(10) - C(12)	1.479(14)
C(10)- $C(11)$	1.400(14)
C(20) - C(21)	1.407(14)
C(20) - C(22)	1.495(14)
C(30) - C(31)	1.501(13)
O(14) S(14)	1.503(13)
O(1A) - O(12A)	1.490(11)
S(1A) - C(12A)	1.793(12)
$O(1R) \circ O(1R)$	1.530(12)
S(1B)-C(12B)	1.800(13)
S(1B)-C(12B)	1.800(13)
$O(2\Delta)$ - $S(2\Delta)$	1 474(12)
$S(2\Delta)$ - $C(22\Delta)$	1 788(14)
S(2A)-C(21A)	1 848(13)
O(2R)-S(2R)	1 481(12)
S(2B)-C(22B)	1 785(14)
S(2B)-C(21B)	1 849(13)
O(2D) O(2D) O(4)	75 7(3)
O(1) - Sn(1) - O(2)	90.6(3)
O(4)-Sn(1)- $O(2)$	75 5(3)
O(1)-Sn(1)-O(5)	91 0(3)
O(4)-Sn(1)-O(5)	87 5(3)
O(2)-Sn(1)-O(5)	162 0(3)
O(1)-Sn(1)-O(6)	162.4(3)
O(4)-Sn(1)-O(6)	87.6(3)
O(2)-Sn(1)-O(6)	90.3(3)
O(5)-Sn(1)-O(6)	82.8(4)
O(1)-Sn(1)-C(10)	99.7(5)
O(4)-Sn(1)-C(10)	174.3(5)
O(2)-Sn(1)-C(10)	101.4(4)
O(5)-Sn(1)-C(10)	96.0(5)
O(6)-Sn(1)-C(10)	97.3(5)
O(4)-Sn(3)-O(9)#1	90.1(3)
O(4)-Sn(3)-O(3)	75.4(3)
O(9)#1-Sn(3)-O(3)	92.8(3)
O(4)-Sn(3)-O(2)	75.1(3)
O(9)#1-Sn(3)-O(2)	162.5(3)
O(3)-Sn(3)-O(2)	92.4(3)
O(4)-Sn(3)-C(30)	171.8(4)
O(9)#1-Sn(3)-C(30)	95.7(4)
O(3)-Sn(3)-C(30)	98.4(4)
O(2)-Sn(3)-C(30)	100.1(4)
O(4)-Sn(3)-O(8)	07 0(2)
O(9)#1-Sn(3)-O(8)	07.0(3)
	81.8(3)
O(3)-Sn(3)-O(8)	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3)
O(3)-Sn(3)-Ó(8) O(2)-Sn(3)-O(8)	81.8(3) 162.4(3) 88.3(3)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) C(30)-Sn(3)-O(8)	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) C(30)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(3)	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) C(30)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(3) O(4)-Sn(2)-O(10)#1	87.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 88.5(3)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) C(30)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(3) O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(3)-Sn(2)-O(10)#1 O(3)-Sn(2)-O(10)#1	87.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) C(30)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(3) O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(3)-Sn(2)-O(10)#1 O(4)-Sn(2)-O(1)	87.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3) 75.9(3) 92.0(2)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(3) O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(3)-Sn(2)-O(1))#1 O(4)-Sn(2)-O(1) O(4)-Sn(2)-O(1) O(3)-Sn(2)-O(1) O(4)-	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3) 75.9(3) 93.8(3) 404.4(2)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(10) O(4)-Sn(2)-O(10) O(4)-Sn(2)-O(10) O(4)-Sn(2)-O(10) O(4)-Sn(2)-O(1) O(3)-Sn(2)-O(1) O(3)-Sn(2)-O(1) O(10) P(10) P(10) P(10) O(10) P(10) O(10)	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3) 75.9(3) 93.8(3) 161.4(3) 472.5(4)
O(3)-Sn(3)-O(8) O(2)-Sn(3)-O(8) O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(4)-Sn(2)-O(10)#1 O(4)-Sn(2)-O(1) O(3)-Sn(2)-O(1) O(3)-Sn(2)-O(1) O(10)#1-Sn(2)-O(1) O(4)-Sn(2)-O(1)	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3) 75.9(3) 93.8(3) 161.4(3) 173.5(4) 09.8(4)
$\begin{array}{l} O(3)-Sn(3)-O(8) \\ O(2)-Sn(3)-O(8) \\ O(3)-Sn(2)-O(3) \\ O(4)-Sn(2)-O(3) \\ O(4)-Sn(2)-O(10)\#1 \\ O(3)-Sn(2)-O(10)\#1 \\ O(3)-Sn(2)-O(10)\#1 \\ O(3)-Sn(2)-O(1) \\ O(10)\#1-Sn(2)-O(1) \\ O(10)\#1-Sn(2)-O(1) \\ O(4)-Sn(2)-C(20) \\ O(3)-Sn(2)-C(20) \\ O(3)-Sn(2)-C(20) \\ O(3)-Sn(2)-C(20) \\ O(10)\#1-Sn(2)-C(20) \\ O(10)\#1-$	87.8(3) 81.8(3) 162.4(3) 88.3(3) 98.8(4) 75.8(3) 88.5(3) 92.1(3) 75.9(3) 93.8(3) 161.4(3) 173.5(4) 99.8(4) 96.4(4)

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 7.

Table 3 continued	
O(1)-Sn(2)-C(20)	100.0(4)
O(4)-Sn(2)-O(7)	88.6(3)
O(3)-Sn(2)-O(7)	163.6(3)
O(10)#1-Sn(2)-O(7)	82.6(3)
O(1)-Sn(2)-O(7)	86.9(3)
C(20)-Sn(2)-O(7)	96.2(4)
O(11)-Mo(1)-O(9)	108.7(4)
O(11)-MO(1)-O(5)	110.0(5)
O(9)-MO(1)-O(5)	109.3(4)
O(11) - IVIO(1) - O(7)	107.6(5)
$O(5)-M_0(1)-O(7)$	105.2(4)
O(12)-MO(2)-O(10)	108.0(4)
O(12) - MO(2) - O(6)	110.0(4)
O(10)-MO(2)-O(6)	110.2(4)
O(12)-Mo(2)-O(8)	108.1(4)
O(10)-Mo(2)-O(8)	114.7(4)
O(6)-Mo(2)-O(8)	105.9(4)
Sn(1)-O(1)-Sn(2)	103.0(3)
Sn(1)-O(2)-Sn(3)	103.1(3)
Sn(3)-O(3)-Sn(2)	103.4(3)
Sn(2)-O(4)-Sn(3)	104.9(3)
Sn(2)-O(4)-Sn(1)	104.5(3)
Sn(3)-O(4)-Sn(1)	105.2(3)
Mo(1)-O(5)-Sn(1)	128.9(5)
MO(2)-O(0)-SII(1) Mo(1) $O(7)$ Sp(2)	120.1(4) 127.0(4)
Mo(2)-O(8)-Sn(2)	127.9(4) 127.2(4)
$M_0(2) - O(0) - O(3)$ $M_0(1) - O(9) - S_n(3) \# 1$	140 9(5)
Mo(2)-O(10)-Sn(2)#1	139 1(5)
C(12)-C(10)-C(11)	111.1(17)
C(12)-C(10)-Sn(1)	110.3(14)
C(11)-C(10)-Sn(1)	111.1(12)
C(21)-C(20)-C(22)	108.5(16)
C(21)-C(20)-Sn(2)	112.5(13)
C(22)-C(20)-Sn(2)	112.1(12)
C(31)-C(30)-C(32)	114.4(12)
C(31)-C(30)-Sn(3)	112.5(10)
C(32)-C(30)-Sn(3)	111.1(9)
O(1A) - S(1A) - O(12A)	116.6(9)
O(1A) - O(1A) - O(11A) O(12A) = S(1A) - O(11A)	112.0(0)
O(1B)-S(1B)-C(12B)	30.4(7)
O(1B)-S(1B)-C(11B)	1132(10)
C(12B)-S(1B)-C(11B)	98.8(8)
O(2A)-S(2A)-C(22A)	118.3(12)
O(2A)-S(2A)-C(21A)	113.5(11)
C(22Á)-Š(2Á)-Č(21Á)	98.2(8)
O(2B)-S(2B)-C(22B)	118.1(13)
O(2B)-S(2B)-C(21B)	112.7(11)
C(22B)-S(2B)-C(21B)	98.4(8)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -x+1,-y+2,-z+1

	U11	U22	U33	U23	U13	U12	
Sn(1)	54(1)	63(1)	59(1)	2(1)	25(1)	-4(1)	
Sn(3)	48(1)	60(1)	52(1)	0(1)	21(1)	7(1)	
Sn(2)	42(1)	72(1)	52(1)	8(1)	16(1)	8(1)	
Mo(1)	71(1)	62(1)	62(1)	1(1)	29(1)	15(1)	
Mo(2)	37(1)	82(1)	55(1)	-2(1)	12(1)	8(1)	
O(1)	59(5)	65(5)	67(5)	14(4)	27(4)	10(4)	
O(2)	48(4)	65(5)	63(5)	0(4)	29(4)	7(4)	
O(3)	54(5)	71(5)	57(5)	-6(4)	16(4)	6(4)	
O(4)	38(4)	52(4)	50(4)	3(3)	19(3)	2(3)	
O(5)	92(6)	64(5)	85(6)	-4(4)	51(5)	-4(5)	
O(6)	53(5)	90(6)	63(5)	4(4)	11(4)	-19(4)	
O(7)	68(5)	78(6)	62(5)	8(4)	28(4)	19(4)	
O(8)	61(5)	82(6)	59(5)	4(4)	21(4)	19(4)	
O(9)	62(5)	65(5)	67(5)	8(4)	26(4)	0(4)	
O(10)	39(4)	74(5)	76(5)	5(4)	20(4)	-1(4)	
O(11)	126(9)	76(6)	102(7)	0(6)	52(7)	32(6)	
O(12)	39(5)	141(9)	72(6)	-4(6)	16(4)	8(5)	

Table 4. Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 7. The anisotropic displacement factorexponent takes the form: -2 pi² [h² a^{*2} U11 + ... + 2 h k a* b* U12].

Table 5. Hydrogen coordinates ($x \ 10^4$) and isotropic displacement parameters ($A^2 \ x \ 10^3$) for 7.

	X	у	Z	U(eq)
11(4)	F130	0001	7404	400(47)
H(1)	5179	8261	7434	196(17)
H(2)	1465	9613	6788	196(17)
H(3)	5897	10380	8339	196(17)
H(100)	2326	7905	6956	196(17)
H(111)	641	8637	6808	196(17)
H(112)	17	7978	6454	196(17)
H(113)	38	8494	5695	196(17)
H(121)	2604	7469	5588	196(17)
H(122)	1258	7783	4942	196(17)
H(123)	1220	7263	5691	196(17)
H(200)	8496	8885	8151	196(17)
H(211)	7073	8565	8983	196(17)
H(212)	7116	9238	9422	196(17)
H(213)	8427	8827	9704	196(17)
H(221)	9086	9935	8180	196(17)
H(222)	9646	9639	9220	196(17)
H(223)	8361	10067	8948	196(17)
H(300)	3654	11387	7646	196(17)
H(311)	2137	11667	6161	196(17)
H(312)	1617	11861	7016	196(17)
H(313)	1012	11271	6385	196(17)
H(321)	3227	10595	8580	196(17)
H(322)	1707	10585	7922	196(17)
H(323)	2303	11177	8551	196(17)
H(11A)	5803	6190	7487	196(17)
H(11A)	7238	6388	8175	196(17)
H(11A)	7061	6131	7133	196(17)
H(12A)	8119	7809	6998	196(17)
$H(12\Delta)$	8522	7105	6965	196(17)
$H(12\Lambda)$	8545	7408	7951	196(17)
H(11B)	4978	6464	6618	196(17)
H(11B)	6402	6321	6528	196(17)
H(11B)	5662	6949	6119	196(17)
H(12B)	8858	7330	8283	196(17)
H(12B)	8188	7330	7166	196(17)
H(12D)	9637	6769	7556	196(17)
H(12D) H(21A)	7226	2010	102	196(17)
$\Pi(21A)$	6704	1670	432	190(17)
H(21A)	5701	1922	1202	196(17)
$\Pi(2 1 A)$	5701	1022	462	190(17)
$\Pi(ZZA)$	1007	54	403	190(17)
$\Pi(ZZA)$	4997	599	4040	190(17)
П(ZZA) Ц(21Р)	0103	212 1967	1313	190(17)
П(ZID)	(901	1007	202	190(17)
Π(Z1B)	83/6	11/8	918	196(17)
П(21B)	1522	1567	1423	196(17)
	4944	364	254	196(17)
H(22B)	5807	689	1221	196(17)
H(22B)	6503	240	676	196(17)

Table 6.Hydrogen bonds for 7 [A and deg.].

D-HA	d(D-H)	d(HA)	d(DA)	<(DHA)	
O(2)-H(2)O(12)#2	1.04	1.71	2.713(10)	158.6	
O(1)-H(1)O(1A)	1.03	1.54	2.567(16)	173.9	
O(1)-H(1)O(1B)	1.03	1.65	2.65(2)	162.9	
O(3)-H(3)O(2A)#3	1.01	1.65	2.65(2)	166.5	
O(3)-H(3)O(2B)#3	1.01	1.70	2.63(2)	150.6	

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -x+1,-y+2,-z+1 #2 -x,-y+2,-z+1 #3 x,y+1,z+1

8.8 Na[(i PrSn)₁₂O₆(OH)₂₂](CH₃COO)₃ · H₂O · 5 DMSO (8)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 8.

$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	o
Volume 10189.0(8) Å ³	
Z, Calculated density 4, 1.969 Mg/m ³	
Absorption coefficient 3.066 mm ⁻¹	
F(000) 5880	
Crystal size 0.3 mm x 0.3 mm x 0.2 mm	
Theta range for data collection 1.92 to 24.00 °	
Limiting indices -25≤h≤25, 0≤k≤19, 0≤l≤31	
Reflections collected / unique 15982 [R(int) = 0.0487]	
Completeness to theta = 24.00 99.9 %	
Refinement method Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters 15982 / 78 / 684	
Goodness-of-fit on F^2 1.066	
Final R indices [I>2sigma(I)] R1 = 0.0619, wR2 = 0.1636	
R indices (all data) $R1 = 0.0811, wR2 = 0.1803$	
Largest diff. peak and hole 1.533 and -1.665 e.A ⁻³	

	Х	V	Z	U(eq)
		,		- (- 1)
Sn(1)	8491(1)	1645(1)	1682(1)	76(1)
Sn(2) Sn(3)	8521(1) 8446(1)	371(1) -2115(1)	729(1) 2063(1)	76(1) 73(1)
Sn(4)	6725(1)	1716(1)	1827(1)	79(1)
Sn(5)	7592(1)	1319(1)	2804(1)	77(1)
Sn(6)	7241(1)	-1795(1)	2721(1)	75(1)
Sn(7) Sn(8)	8521(1)	-764(1) -657(1)	2952(1)	74(1) 80(1)
Sn(9)	6303(1)	266(1)	2575(1)	77(1)
Sn(10)	6093(1)	-313(1)	1255(1)	79(1)́
Sn(11)	6887(1)	-2018(1)	1338(1)	79(1)
Sn(12) O(1)	9267(1) 9383(3)	-80(1) 1157(5)	1768(1) 1803(3)	73(1) 83(2)
O(2)	5998(3)	-1610(5)	1214(3)	85(2)
O(3)	6815(4)	-699(5)	2885(3)	82(2)
O(4)	8586(4)	1593(5)	915(3)	86(2)
O(5)	6990(3) 6751(4)	-783(5) 1002(5)	1215(3)	73(2) 83(2)
O(7)	7556(3)	1757(5)	1492(3)	81(2)
O(8)	8903(3)	-1259(5)	1666(3)	80(2)
O(9)	8875(3)	-9(4)	2442(3)	73(2)
O(10)	6316(4)	-252(6)	493(3)	90(2)
O(12)	7040(4)	-1909(6)	578(3)	92(2)
O(13)	6433(4)	875(5)	1297(3)	86(2)
O(14)	6759(3)	-1736(5)	2062(3)	76(2)
O(15)	8454(3)	413(4)	1476(3)	69(2)
O(16)	8990(4) 6144(3)	-1746(5) -422(5)	2008(3) 1984(3)	82(2) 79(2)
O(18)	9368(3)	-422(3)	999(3)	81(2)
O(19)	7157(4)	2312(4)	2428(3)	83(2)
O(20)	5965(4)	1358(5)	2244(3)	91(2)
O(21)	7923(4)	215(4)	3095(3)	79(2)
O(22) O(23)	7586(4)	495(5)	2302(3) 635(3)	80(2)
O(24)	7054(3)	762(5)	2241(3)	75(2)
O(25)	8148(3)	-827(5)	702(3)	80(2)
O(26)	7833(3)	-2029(5)	1464(3)	79(2)
O(27) O(28)	8290(3)	-2722(5) 1281(5)	2424(3)	00(2) 79(2)
Na(1)	7618(2)	-185(3)	1821(2)	74(1)
C(10)	8746(7)	2851(9)	1769(6)	115(5)
C(11)	9121(9)	2982(14)	2220(7)	175(9)
C(12) C(20)	8296(14) 8884(6)	3501(18) 610(8)	1685(12) 14(4)	350(20)
C(21)	8558(9)	1219(10)	-285(6)	154(7)
C(22)	9058(12)	-108(11)	-264(6)	232(13)
C(30)	8958(5)	-3163(8)	1932(5)	97(4)
C(32)	8689(6) 9611(5)	-3761(10) -3034(9)	1589(6)	131(6) 106(4)
C(40)	6308(6)	2715(8)	1460(6)	112(5)
C(41)	6669(8)	3464(11)	1442(9)	184(9)
C(42)	5662(6)	2875(13)	1547(9)	179(9)
C(50) C(51)	7957(6) 8606(6)	2056(9) 1979(14)	3363(5) 3506(8)	103(4)
C(52)	7582(9)	2260(19)	3781(8)	242(14)
C(60)	6690(5)	-2571(8)	3142(4)	89(3)
C(61)	6377(8)	-2180(11)	3550(5)	145(7)
C(62)	6263(8) 9150(5)	-3033(12) -642(9)	2820(6) 3575(5)	173(9) 125(5)
C(71)	8871(8)	-421(13)	4037(5)	162(8)
C(72)	9704(8)	-181(18)	3484(8)	300(20)
C(80)	7270(6)	-654(8)	-298(5)	109(4)
C(81)	7047(9) 6034(10)	120(8)	-507(7)	149(7)
C(90)	5510(5)	-37(9)	2959(4)	102(4)
C(91)	5527(8)	98(12)	3494(4)	141(6)
C(92)	4919(7)	195(12)	2729(5)	142(6)
C(100) C(101)	5159(7) 4912(10)	-94(9) 705(10)	1136(5) 1266(7)	112(5) 178(9)
C(102)	4896(8)	-398(9)	667(5)	128(6)
C(110)	6780(5)	-3295(7)	1402(5)	95(4)
C(111)	6142(5)	-3524(10)	1481(6)	131(6)
C(112) C(120)	7036(6) 10142(5)	-3758(10) -504(7)	995(5) 2010(4)	123(5) 85(3)
C(121)	10484(6)	126(8)	2286(5)	107(4)
C(122)	10505(7)	-852(8)	1614(5)	108(4)
O(160)	9445(5)	-1709(6)	806(4)	112(3)
U(161) C(162)	8739(6)	-2008(8)	267(5)	133(4)
C(162)	9212(0) 9548(9)	-2130(10) -2899(12)	+04(0) 360(7)	142(6)
O(170)	6272(6)	1458(8)	350(5)	138(4)

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

Table	2	continue	d

O(171)	7164(7)	1949(9)	447(5)	150(4)
C(172)	6651(9)	1909(12)	274(7)	126(5)
C(173)	6532(12)	2561(16)	-114(10)	197(10)
O(180)	7515(5)	-1137(7)	4204(4)	122(3)
O(181)	7150(6)	-95(8)	3830(5)	136(4)
C(182)	7229(7)	-510(10)	4204(6)	107(4)
C(183)	6914(10)	-278(14)	4642(8)	163(8)
O(200)	5296(9)	-2427(15)	504(7)	131(5)
S(200)	5609(7)	-2629(10)	41(6)	208(5)
C(201)	6341(12)	-3090(30)	46(13)	231(19)
C(202)	5760(20)	-1880(20)	-409(14)	412
O(200)	5349(11)	-2656(15)	642(5)	131(5)
S(200)	5283(7)	-2885(10)	112(6)	208(5)
C(201)	5171(19)	-2150(20)	-359(8)	231(19)
C(202)	5850(20)	-3450(30)	-190(11)	412
O(300)	10575(12)	1998(15)	1758(6)	97(4)
S(300)	10722(4)	1552(6)	1299(3)	108(2)
C(301)	10268(10)	2030(20)	828(10)	117(7)
C(302)	11426(6)	1970(20)	1122(12)	125(8)
O(300)	10462(10)	2106(14)	1701(5)	97(4)
S(300)	10754(3)	2203(5)	1217(3)	108(2)
C(301)	10280(9)	1617(15)	811(9)	117(7)
C(302)	11407(7)	1572(15)	1182(12)	125(8)
O(400)	7809(10)	-4185(10)	2785(8)	142(6)
S(400)	7561(6)	-5010(9)	2666(6)	199(4)
C(401)	7811(14)	-5260(40)	3276(9)	280(30)
C(402)	6770(6)	-5100(30)	2770(14)	250(20)
O(400)	7762(13)	-4054(16)	3021(13)	142(6)
S(400)	7373(10)	-4798(12)	3012(8)	199(4)
C(401)	7690(30)	-5790(20)	3080(20)	280(30)
C(402)	7100(40)	-4930(40)	2396(14)	250(20)
O(500)	9057(8)	2948(10)	453(6)	199(7)
S(500)	8832(6)	3587(8)	102(5)	284(5)
C(501)	8871(13)	4575(13)	364(15)	380(30)
C(502)	8026(6)	3500(20)	105(16)	400(30)
O(600)	6260(6)	-6947(10)	2853(5)	184(6)
S(600)	5773(3)	-6746(4)	3203(2)	159(2)
C(601)	5038(6)	-6964(14)	2942(8)	190(10)
C(602)	5765(10)	-7516(13)	3660(8)	228(13)
O(900)	7730(6)	-2934(8)	42(5)	149(4)

Sn(1)-O(28)	2.012(8)
Sn(1)-C(10)	2.099(15)
Sn(1)-O(15)	2.129(7)
Sn(1)-O(7)	2.132(8)
Sn(1)-O(4)	2.132(8)
Sn(1)-O(1)	2.160(8)
Sn(1)-Na(1)	3.640(4)
Sn(2)-O(15)	2.071(7)
Sn(2)-O(23)	2.095(8)
Sn(2)-O(4)	2.104(8)
Sn(2)-O(18)	2.136(8)
Sn(2)-O(25)	2.161(8)
Sn(2)-C(20)	2.189(11)
Sn(3)-O(22)	2.075(8)
Sn(3)-O(8)	2.081(8)
Sn(3)-O(26)	2.104(7)
Sn(3)-O(27)	2.107(8)
Sn(3)-O(16)	2.116(8)
Sn(3)-C(30)	2.123(12)
Sn(3)-Na(1)	3.750(5)
Sn(4)-O(24)	2.073(7)
Sn(4)-O(7)	2.094(8)
Sn(4)-O(13)	2.108(8)
Sn(4)-O(19)	2.132(8)
Sn(4)-C(40)	2.141(14)
Sn(4) - O(20)	2.159(9)
Sn(4)-Na(1)	3.737(5)
Sn(5)-O(28)	2.022(8)
Sn(5)-C(50)	2.110(13)
Sn(5)-O(21)	2.128(7)
SII(5)-O(24)	2.130(7)
Sn(5)-O(19) Sn(5) O(6)	2.100(0)
Sn(5)-O(6) Sn(5) No(4)	2.109(0)
Sh(5)-Na(1) Sh(6) O(14)	3.090(4)
Sin(0) - O(14)	2.079(0)
Sn(6) - O(22) Sn(6) $O(27)$	2.094(7)
Sn(0) - O(27) Sn(6) O(3)	2.110(0)
Sn(0)-O(3) Sn(6)-O(60)	2.114(0)
Sn(6)-O(11)	2.149(12)
Sn(0)=O(11) Sn(7)=O(0)	2.152(0)
Sn(7) - O(16)	2 106(8)
Sn(7)-O(22)	2 122(7)
Sn(7)-O(11)	2 133(8)
Sn(7)-O(21)	2 147(7)
Sn(7)-C(70)	2 185(12)
Sn(8)-O(5)	2 087(7)
Sn(8)-O(10)	2 110(8)
Sn(8)-O(23)	2 121(8)
Sn(8)-O(12)	2.137(9)
Sn(8)-O(25)	2 152(8)
Sn(8)-C(80)	2.178(15)
Sn(9)-O(17)	2.013(8)
Sn(9)-O(24)	2.103(7)
Sn(9)-O(3)	2.131(8)
Sn(9)-C(90)	2.146(12)
Sn(9)-O(20)	2.157(9)
Sn(9)-O(6)	2.177(8)
Sn(9)-Na(1)	3.721(4)
Sn(10)-O(17)	2.015(8)
Sn(10)-O(13)	2.120(9)
Sn(10)-C(100)	2.122(13)
Sn(10)-O(5)	2.149(7)
Sn(10)-O(2)	2.173(9)
Sn(10)-O(10)	2.175(8)
Sn(10)-Na(1)	3.689(4)
Sn(11)-O(14)	2.077(8)
Sn(11)-O(5)	2.098(8)
Sn(11)-O(2)	2.105(8)
Sn(11)-O(26)	2.120(7)
Sn(11)-O(12)	2.138(8)
Sn(11)-C(110)	2.148(12)
Sn(11)-Na(1)	3.686(4)
Sn(12)-O(1)	2.0//(8)
Sn(12)-O(9)	2.081(7)
Sn(12)-O(15)	2.116(7)
SII(12)-U(18) Sm(12)-U(18)	2.130(δ) 2.141(0)
SII(12)-U(0) Sm(12) C(120)	2.141(δ) 2.452(12)
SII(12)-C(12U) Sp(12) No(1)	2.133(12) 2.677(4)
SH(12)-IVd(1)	3.0//(4) 0.9590
	0.0000
	0.0000
	0.0000
O(4)-TI(4) O(5) No(4)	0.0000
U(J)-INd(1)	2.300(0)

Table 3.Bond lengths [A] and angles [deg] for 8.

Table 3	3 continued
O(6)-H	(6)
O(7)-H O(8)-H	(7) (8)
O(9)-H	(9)
O(10)-I O(11)-I	H(10) H(11)
O(12)-I	H(12)
O(13)-I O(15)-I	H(13) Na(1)
O(16)-I	H(16) H(17)
O(17)-I	H(18)
O(19)-I	H(19) H(20)
O(21)-I	H(21)
O(22)-I O(23)-I	Na(1) H(23)
O(24)-I	Na(1)
O(25)-I	H(25) H(26)
O(27)-I	H(27) C(12)
C(10)-	C(11)
C(10)-I C(11)-I	H(10) H(111)
C(11)-I	H(112)
C(11)-I	H(113) H(121)
C(12)-I	H(122)
C(20)-0	C(22)
C(20)-0	C(21) H(20)
C(21)-I	H(211)
C(21)-I C(21)-I	H(212) H(213)
C(22)-I	H(221)
C(22)-I C(22)-I	H(222) H(223)
C(30)-0	C(31)
C(30)-I	H(30)
C(31)-I	H(311) H(312)
C(31)-I	H(313)
C(32)-I C(32)-I	H(321) H(322)
C(32)-I	H(323)
C(40)-(C(42)
C(40)-I	H(40) H(411)
C(41)-I	H(412)
C(41)-I C(42)-I	H(413) H(421)
C(42)-I	H(422)
C(42)-I	H(423) C(52)
C(50)-0	C(51)
C(51)-I	H(511)
C(51)-I C(51)-I	H(512) H(513)
C(52)-I	H(521)
C(52)-I C(52)-I	H(522) H(523)
C(60)-(C(62)
C(60)-I	H(60)
C(61)-I	H(611) H(612)
C(61)-I	H(613)
C(62)-I C(62)-I	H(621) H(622)
C(62)-I	H(623)
C(70)-0	C(72)
C(70)-I	H(70) H(711)
C(71)-I	H(712)
C(71)-I C(72)-I	H(713) H(721)
C(72)-I	H(722)
C(72)-I C(80)-0	⊟(723) C(81)
C(80)-0	C(82)

0.8580	ſ
0.0500	, ,
0.8580	J
0.8580)
0.8580)
0.8580	ĥ
0.0500	, ,
0.8580	J
0.8580)
0 8580)
2.2200	0
2.339(8)
0.8580)
0 8580)
0.0000	Ś
0.0000	,
0.8580)
0.8580)
0.0500	5
0.6560	,
2.407(8)
0 8580)
2 2460	0
2.340(9)
0.8580)
0.8580)
0 8580	h
0.0000	
1.487(4)
1.487(4)
0 0800	۰.,
0.9000	
U.9600	J
0.9600)
0.0600	5
0.9000	,
0.9600	J
0.9600)
0.0000	5
0.9000	
1.479(4)
1 480	4
0.000	<u>, , , , , , , , , , , , , , , , , , , </u>
0.9800	J
0.9600)
0 9600	h
0.3000	
0.9600)
0.9600)
0.0600	5
0.9000	,
0.9600)
1 484(4)
4 407(
1.487(4)
0.9800)
0.9800))
0.9800)
0.9800 0.9600 0.9600)))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600)))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600)))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486()))) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487())) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800))) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800))) (4) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600))) (4) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600 0.9600))) (4) (4))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600))) (4) (4)))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600))) (4) (4))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.486(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))) (4) (4))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))) (4)))))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.486(1.487(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))) (4) (4)))))))
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600))) (4) (4))))))) (4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.4856 1.4886)) (4) (4) (4) (4)
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	(1)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.4867 0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.4856 1.4880 0.9800	(1)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	(1)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 1.485(1.488(0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	(4)
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600	
0.9800 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600	
0.9800 0.9600	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	$ \begin{array}{c}) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) $
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	$ \begin{array}{c}) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) $
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000)
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	$\begin{array}{c}) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) $
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000))))))))))))))))))))))))))))))))))))))
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	$\begin{array}{c}) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) $
0.9800 0.96000 0.96000 0.96000 0.960000000000	$\begin{array}{c}) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) \\) $

Table 3 continued
C(80)-H(80)
C(81)-H(811)
C(81)-H(813)
C(82)-H(821) C(82)-H(822)
C(82)-H(823)
C(90)-C(92) C(90)-C(91)
C(90)-H(90)
C(91)-H(911) C(91)-H(912)
C(91)-H(913)
C(92)-H(922)
C(92)-H(923) C(100)-C(101)
C(100)-C(102)
C(100)-H(100) C(101)-H(101)
C(101)-H(101)
C(102)-H(102)
C(102)-H(102) C(102)-H(102)
C(110)-C(112)
C(110)-C(111) C(110)-H(110)
C(111)-H(111)
C(111)-H(111) C(111)-H(111)
C(112)-H(112)
C(112)-H(112) C(112)-H(112)
C(120)-C(121)
C(120)-C(122) C(120)-H(120)
C(121)-H(121) C(121)-H(121)
C(121)-H(121)
C(122)-H(122) C(122)-H(122)
C(122)-H(122)
O(160)-C(162) O(161)-C(162)
C(162)-C(163)
C(163)-H(163)
C(163)-H(163) O(170)-C(172)
O(171)-C(172)
C(172)-C(173) C(173)-H(173)
C(173)-H(173)
O(180)-C(182)
O(181)-C(182)
C(183)-H(183)
C(183)-H(183) C(183)-H(183)
O(200)-S(200)
S(200)-C(202) S(200)-C(201)
C(201)-H(201)
C(201)-H(201) C(201)-H(201)
C(202)-H(202) C(202)-H(202)
C(202)-H(202)
O(200)-S(200) S(200)-C(202)
S(200)-C(201)
C(201)-H(201) C(201)-H(201)
C(201)-H(201)
C(202)-H(202)
C(202)-H(202) O(300)-S(300)
S(300)-C(302)
S(300)-C(301) C(301)-H(301)
C(301)-H(301)
C(302)-H(302)

0.9800
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.488(4)
1.489(4)
0.9800
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.488(4)
1.488(4)
0.9800
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.492(4)
1.492(4)
0.9800
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.469(3)
1.498(16)
0.9800
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9000
1.231(10)
1.213(10)
1.50(2)
0.9600
0.9000
0.9000
1.13(2)
1.22(2) 1.54(2)
0.0600
0.9000
0.9000
0.9000
1.222(10)
1.230(10)
0.9600
0.9600
0.9600
1 5120(10)
1 7979(10)
1 7979(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.5119(10)
1.7979(10)
1.7980(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.5120(10)
1.7980(10)
1.7981(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600

C(302)-H(302)
C(302)-H(302)
O(300)- $S(300)$
S(200) C(202)
S(300) - C(302)
S(300)-C(301)
C(301)-H(301)
C(301)-H(301)
C(301)-H(301)
C(302)-H(302)
C(302)-H(302)
$C(202) \square (202)$
$C(302) - \Pi(302)$
O(400)-S(400)
S(400)-C(401)
S(400)-C(402)
C(401)-H(401)
C(401)-H(401)
$C(401) \sqcup (401)$
$C(401) - \Pi(401)$
C(402)-H(402)
C(402)-H(402)
C(402)-H(402)
O(400)-S(400)
S(400)-C(401)
S(400)-C(402)
$C(401) \sqcup (401)$
$C(401) - \Pi(401)$
$C(401) - \Pi(401)$
C(401)-H(401)
C(402)-H(402)
C(402)-H(402)
C(402)-H(402)
O(500)- $S(500)$
S(500) C(502)
S(500) - C(502)
S(500)-C(501)
C(501)-H(501)
C(501)-H(501)
C(501)-H(501)
C(502)-H(502)
C(502)-H(502)
C(502) - I(502)
O(600)-S(600)
S(600)-C(602)
S(600)-C(601)
C(601)-H(601)
C(601)-H(601)
C(601)-H(601)
C(602)-H(602)
$C(602) = \Pi(002)$
$C(002) - \Pi(002)$
C(602)-H(602)
O(900)-H(901)
O(900)-H(902)
O(28)-Sn(1)-C(10)
O(28)-Sn(1)-O(15)
C(10)-Sn(1)-O(15)
$O(28)_{-}Sn(1)_{-}O(7)$
O(20) - O(1) - O(7)
C(10)-Sn(1)-O(7)
O(15)-Sn(1)-O(7)
O(28)-Sn(1)-O(4)
C(10)-Sn(1)-O(4)
O(15)-Sn(1)-O(4)
O(7)-Sn(1)-O(4)
O(28)-Sn(1)-O(1)
C(10)-Sn(1)-O(1)
O(15) Sp(1) $O(1)$
O(13) = O(1) = O(1)
O(7)-Sn(1)-O(1)
O(4)-Sn(1)-O(1)
O(28)-Sn(1)-Na(1)
C(10)-Sn(1)-Na(1)
O(15)-Sn(1)-Na(1)
O(7)-Sn(1)-Na(1)
O(4)-Sn(1)-Na(1)
O(1)-Sn(1)-Na(1)
O(15) Sp(2) O(22)
O(15) - O(23)
U(15)-Sn(2)-U(4)
U(23)-Sn(2)-O(4)
O(15)-Sn(2)-O(18)
O(23)-Sn(2)-O(18)
O(4)-Sn(2)-O(18)
$\Omega(15)$ -Sn(2)- $\Omega(25)$
$O(23)_{Sn}(2) O(25)$
$O(4) S_{2}(2) O(20)$
O(4)-ON(2)-O(25)
U(18)-Sn(2)-U(25)
(1(15)-Sn(2)-C(20))
0(10)=01(2)=0(20)
O(23)-Sn(2)-C(20)
O(23)-Sn(2)-C(20) O(23)-Sn(2)-C(20) O(4)-Sn(2)-C(20)
O(13)-Sn(2)-C(20) O(23)-Sn(2)-C(20) O(4)-Sn(2)-C(20) O(18)-Sn(2)-C(20)
O(23)-Sn(2)-C(20) O(4)-Sn(2)-C(20) O(18)-Sn(2)-C(20) O(25)-Sn(2)-C(20)
O(13)-Sn(2)-C(20) O(23)-Sn(2)-C(20) O(4)-Sn(2)-C(20) O(18)-Sn(2)-C(20) O(25)-Sn(2)-C(20) O(22)-Sn(3)-O(8)

0.9600
0.9600
1.5120(10)
1 7979(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.5120(10)
1.7980(10)
1.7980(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.5120(10)
1.7980(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.7979(10)
1.7979(10)
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
0.9600
1.5120(10)
1.7978(10)
1.7979(10)
0 0000
0.9600
0.9600 0.9600 0.9600
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104 5(5)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.9(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(5) 72.8(3) 95.7(5) 72.8(3) 90.9(3) 61.0(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 162.4(3) 90.9(3) 163.8(5) 37.4(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 09.2(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.2(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.2(2) 99.2(2) 99.1(2) 90.8(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 96.3(2) 98.2(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 98.2(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3) 89.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 98.2(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 450.2(2)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.2(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 159.3(3) 101.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 95.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.1(2) 99.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 159.3(3) 101.7(3) 91.4(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.1(2) 99.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 159.3(3) 101.7(3) 91.4(3) 73.1(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(3) 74.4(3) 74.4(3) 89.7(3) 75.3(3) 101.7(3) 91.4(3) 73.1(3) 157.7(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 159.3(3) 101.7(3) 91.4(3) 73.1(3) 157.7(3) 91.1(3) 157.7(3) 91.1(3)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 76.0(3) 159.3(3) 101.7(3) 91.1(3) 157.7(3) 91.1(3) 157.7(3) 91.1(3) 158.3(4)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(2) 99.1(3) 74.4(3) 89.7(3) 71.5(3) 155.3(4) 105.5(4) 91.1(3) 158.3(4) 105.5(4) 91.0(4)
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.2(2) 91.2(3) 10.2(3
0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.9600 0.8578 0.8582 104.5(5) 86.9(3) 163.8(5) 90.4(3) 101.6(5) 89.6(3) 158.8(3) 96.7(5) 72.7(3) 83.7(3) 88.6(3) 95.7(5) 72.8(3) 162.4(3) 90.9(3) 61.0(2) 158.8(5) 37.4(2) 65.3(2) 99.2(2) 99.1(2) 90.8(3) 74.4(3) 89.7(3) 74.4(3) 89.7(3) 74.4(3) 89.7(3) 74.4(3) 89.7(3) 74.4(3) 89.7(3) 74.4(3) 89.7(3) 71.7(3) 91.1(3) 158.3(4) 105.5(4) 91.7(4) 106.9(4)

O(8)-Sn(3)-O(26) O(22)-Sn(3)-O(27) O(8)-Sn(3)-O(27) O(26)-Sn(3)-O(27) O(22)-Sn(3)-O(16) O(8)-Sn(3)-O(16) O(26)-Sn(3)-O(16) O(27)-Sn(3)-O(16) O(22)-Sn(3)-O(16) O(22)-Sn(3)-C(30) O(8)-Sn(3)-C(30) O(26)-Sn(3)-C(30) O(27)-Sn(3)-C(30) O(16)-Sn(3)-C(30) O(22)-Sn(3)-Na(1) O(8)-Sn(3)-Na(1) O(26)-Sn(3)-Na(1) O(27)-Sn(3)-Na(1) O(16)-Sn(3)-Na(1) C(30)-Sn(3)-Na(1) O(24)-Sn(4)-O(7) O(24)-Sn(4)-O(13) O(7)-Sn(4)-O(13) O(24)-Sn(4)-O(19) O(7)-Sn(4)-O(19) O(13)-Sn(4)-O(19) O(24)-Sn(4)-C(40) O(7)-Sn(4)-C(40) O(13)-Sn(4)-C(40) O(19)-Sn(4)-C(40) O(24)-Sn(4)-O(20) O(7)-Sn(4)-O(20) O(13)-Sn(4)-O(20) O(19)-Sn(4)-O(20) C(40)-Sn(4)-O(20) O(24)-Sn(4)-Na(1) O(7)-Sn(4)-Na(1) O(13)-Sn(4)-Na(1) O(19)-Sn(4)-Na(1) C(40)-Sn(4)-Na(1) O(20)-Sn(4)-Na(1) O(28)-Sn(5)-C(50) O(28)-Sn(5)-O(21) C(50)-Sn(5)-O(21) O(28)-Sn(5)-O(24) C(50)-Sn(5)-O(24) O(21)-Sn(5)-O(24) O(28)-Sn(5)-O(19) C(50)-Sn(5)-O(19) O(21)-Sn(5)-O(19) O(24)-Sn(5)-O(19) O(28)-Sn(5)-O(6) C(50)-Sn(5)-O(6) O(21)-Sn(5)-O(6) O(24)-Sn(5)-O(6) O(19)-Sn(5)-O(6) O(28)-Sn(5)-Na(1) C(50)-Sn(5)-Na(1) O(21)-Sn(5)-Na(1) O(24)-Sn(5)-Na(1) O(19)-Sn(5)-Na(1) O(6)-Sn(5)-Na(1) O(14)-Sn(6)-O(22) O(14)-Sn(6)-O(27) O(22)-Sn(6)-O(27) O(14)-Sn(6)-O(3) O(22)-Sn(6)-O(3) O(27)-Sn(6)-O(3) O(14)-Sn(6)-C(60) O(22)-Sn(6)-C(60) O(27)-Sn(6)-C(60) O(3)-Sn(6)-C(60) O(14)-Sn(6)-O(11) O(22)-Sn(6)-O(11) O(27)-Sn(6)-O(11) O(27)-Sn(6)-O(11) O(3)-Sn(6)-O(11) O(9)-Sn(6)-O(11) O(9)-Sn(7)-O(16) O(9)-Sn(7)-O(22) O(16)-Sn(7)-O(22) O(9)-Sn(7)-O(11) O(16)-Sn(7)-O(11) O(16)-Sn(7)-O(11)

O(22)-Sn(7)-O(11) O(9)-Sn(7)-O(21) O(16)-Sn(7)-O(21) O(22)-Sn(7)-O(21)

Table 3 continued O(22)-Sn(3)-O(26)

86 8(3)	
01 0(2)	
75 4(0)	
75.1(3)	
161.9(3)
86.8(3)	
75.8(3)	
86 5(3)	
150 0/2	•
120.9(3)
99.8(3)	
164.3(4	.)
101 5(4	í
101.3(4	2
105.0(4)
94.9(4)	
94 4(4)	
26 4 (2)	
36.1(2)	
64.3(2)	
60 2(2)	
00.2(2)	
97.9(2)	
98.9(2)	
159.7(4	.)
00 0(0)	′
00.2(3)	
88.1(3)	
88.4(3)	
77 8(3)	
11.0(0)	
86.9(3)	
165.2(3)
173 4(5	ń
00 4(5)	'
98.1(5)	
94.1(5)	
$100\dot{4}(5$	١
76 2(2)	'
10.3(3)	
164.1(3)
87 6(3)	
02 1(2)	
93.1(3)	
97.6(5)	
34.5(2)	
63 2(2)	
00.2(2)	
65.5(2)	
100.0(2)
151 4(4	í.
101 2/2	1
101.2(2	ļ
100.4(4	.)
00 0(0)	
00.0(3)	
96 3(5)	
96.3(5)	
96.3(5) 87.9(3)	
96.3(5) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4	.)
96.3(5) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3)	.)
96.3(5) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3)	.)
96.3(5) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3)	.)
96.3(5) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5)	.)
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3	.) .)
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3)))
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3)	.))
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3	。)))
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3 98.8(4)))
96.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3 98.8(4) 85.6(3)))
60.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3 98.8(4) 85.6(3)	·) ·)
86.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3))))))
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3))))
96.3(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2)	-) -)
96.3(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 155.4(4)	·) ·)
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4)	·) ·)
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2)	·) ·)
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 155.9(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2)	·) ·)
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.3(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	·) ·) ·)
96.3(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	
06.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2)	
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.2(2) 87.8(3)	
06.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 87.8(3) 88.2(3)	
80.6(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 88.8(3) 88.2(3) 74.7(3)	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2	
06.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 88.2(3) 88.2(3) 92.6(3)	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4 94.3(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 100.8(
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(2) 100.8(
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 88.2(3) 88.2(3) 88.2(3) 92.6(3	
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 75.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	
80.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 74.7(3) 82.6(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(4) 165.9(4) 95.7(4) 97.8(
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 75.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 94.6(3) 90.5(3) 90.5(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.7(4) 97.8(4) 160.7(3) 74.7(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 100.2(2) 87.8(3) 85.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 95.7(4) 97.8(4) 160.7(3) 94.7(3) 95.7(4) 95.	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(
85.6(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 78.8(4) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 82.6(3) 74.7(3) 82.6(3) 92.6(3) 165.9(4) 95.7(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 167.9(4	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2)	
00.0(3) 96.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 93.4(5) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 75.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 102.4(4) 95.7(4) 97.8(4) 160.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 96.3(4) 90.8(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 166.1(3) 100.2(4) 100.2(2) 87.8(3) 100.2(4) 97.8(4) 160.7(3) 94.7(3) 95.3(4) 96.3(4) 96.3(4) 96.3(4) 96.8(3) 96.3(4) 97.8(4) 9	
action action bcols bcols bcols<	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(2) 166.1(4) 71.0(2) 85.6(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 105.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(3) 87.2(3) 96.3(4) 90.8(3) 86.8(3) 75.0(3) 75.0(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 98.8(4) 90.5(3) 99.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(3) 87.2(3) 94.3(3) 94.3(3) 94.3(3) 94.3(3) 94.3(3) 92.6(3) 92.6(3) 94.7(3) 87.2(3) 94.3(3) 94.3(3) 87.2(3) 94.3(3) 86.8(3) 75.0(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 150.3(3) 159.3(3) 159.3(3) 150.3(3) 150.3(3) 159.3(3) 150.3(
00.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 93.8(4) 85.6(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 74.3(3) 90.5(3) 75.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 87.8(3) 85.6(3) 92.6(3) 166.1(3) 74.7(3) 85.6(3) 92.8(3) 74.7(3) 87.8(4) 166.7(3) 97.8(4) 160.7(3) 97.8(4) 97	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 88.2(3) 100.2(2) 87.8(3) 85.6(3) 92.6(3) 92.6(3) 100.2(4) 100.2(2) 87.8(3) 100.2(4) 97.8(4) 160.7(3) 94.7(3) 95.7(4) 97.8(4) 160.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 94.7(3) 95.3(4) 90.8(3) 159.3(3) 92.8(3) 159.3(3) 159.3(3) 92.8(3) 159.3(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 85.6(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(3) 87.2(3) 96.3(4) 90.8(3) 86.8(3) 75.0(3) 159.3(3) 92.8(3) 74.5(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.2(2) 87.8(3) 82.6(3) 74.7(3) 82.6(3) 74.7(3) 82.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(2) 87.8(3) 92.6(3) 100.2(3) 92.6(3) 100.7(3) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(3) 87.2(3) 86.8(3) 75.0(3) 159.3(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3)	
80.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 98.8(4) 159.9(3) 98.8(4) 74.3(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(3) 87.2(3) 94.3(3) 94.5(3) 85.6(3) 92.8(3) 71.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 74.5(3) 7	
00.0(3) 90.3(5) 87.9(3) 166.9(4) 94.0(3) 93.4(5) 170.1(3) 75.8(3) 159.9(3) 90.5(3) 59.8(2) 156.1(4) 71.0(2) 36.5(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(2) 100.8(3) 85.6(3) 92.6(3) 165.9(4) 95.7(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(4) 97.8(4) 165.9(3) 87.2(3) 96.3(3) 74.7(3) 87.2(3) 96.3(3) 74.7(3) 87.2(3) 96.3(4) 90.8(3) 86.8(3) 75.0(3) 159.3(3) 74.7(3) 85.1(3) 167.2(3) 92.8(3) 74.5(3) 85.1(3) 167.2(3) 85.1(3)	

O(11)-Sn(7)-O(21) O(9)-Sn(7)-C(70) O(16)-Sn(7)-C(70) O(22)-Sn(7)-C(70) O(11)-Sn(7)-C(70) O(21)-Sn(7)-C(70) O(5)-Sn(8)-O(10) O(5)-Sn(8)-O(23) O(10)-Sn(8)-O(23) O(5)-Sn(8)-O(12) O(10)-Sn(8)-O(12) O(23)-Sn(8)-O(12) O(5)-Sn(8)-O(25) O(10)-Sn(8)-O(25) O(23)-Sn(8)-O(25) O(12)-Sn(8)-O(25) O(5)-Sn(8)-C(80) O(10)-Sn(8)-C(80) O(23)-Sn(8)-C(80) O(12)-Sn(8)-C(80) O(25)-Sn(8)-C(80) O(17)-Sn(9)-O(24) O(17)-Sn(9)-O(3) O(24)-Sn(9)-O(3) O(17)-Sn(9)-C(90) O(24)-Sn(9)-C(90) O(3)-Sn(9)-C(90) O(17)-Sn(9)-O(20) O(24)-Sn(9)-O(20) O(3)-Sn(9)-O(20) C(90)-Sn(9)-O(20) O(17)-Sn(9)-O(6) O(24)-Sn(9)-O(6) O(3)-Sn(9)-O(6) C(90)-Sn(9)-O(6) O(20)-Sn(9)-O(6) O(17)-Sn(9)-Na(1) O(24)-Sn(9)-Na(1) O(3)-Sn(9)-Na(1) C(90)-Sn(9)-Na(1) O(20)-Sn(9)-Na(1) O(6)-Sn(9)-Na(1) O(17)-Sn(10)-O(13) O(17)-Sn(10)-C(100) O(13)-Sn(10)-C(100) O(17)-Sn(10)-O(5) O(13)-Sn(10)-O(5) C(100)-Sn(10)-O(5) O(17)-Sn(10)-O(2) O(13)-Sn(10)-O(2) C(100)-Sn(10)-O(2) O(5)-Sn(10)-O(2) O(17)-Sn(10)-O(10) O(13)-Sn(10)-O(10) C(100)-Sn(10)-O(10) O(5)-Sn(10)-O(10) O(2)-Sn(10)-O(10) O(17)-Sn(10)-Na(1) O(13)-Sn(10)-Na(1) C(100)-Sn(10)-Na(1) O(5)-Sn(10)-Na(1) O(2)-Sn(10)-Na(1) O(10)-Sn(10)-Na(1) O(14)-Sn(11)-O(5) O(14)-Sn(11)-O(2) O(5)-Sn(11)-O(2) O(14)-Sn(11)-O(26) O(5)-Sn(11)-O(26) O(2)-Sn(11)-O(26) O(14)-Sn(11)-O(12) O(5)-Sn(11)-O(12) O(2)-Sn(11)-O(12) O(26)-Sn(11)-O(12) O(14)-Sn(11)-C(110) O(5)-Sn(11)-C(110) O(2)-Sn(11)-C(110) O(26)-Sn(11)-C(110) O(12)-Sn(11)-C(110) O(14)-Sn(11)-Na(1) O(5)-Sn(11)-Na(1) O(2)-Sn(11)-Na(1) O(26)-Sn(11)-Na(1) O(12)-Sn(11)-Na(1) C(110)-Sn(11)-Na(1) O(1)-Sn(12)-O(9) O(1)-Sn(12)-O(15)

Table 3 continued

86.9(3) 103 3(4) 93.0(4) 164.6(4) 96.9(4) 99.7(4) 76.6(3) 90.8(3) 94.1(3) 75.1(3) 97.8(4) 158.9(3) 89.3(3) 160.7(3) 72.8(3) 91.1(3) 167 9(4) 95.1(4) 98.7(4) 97.6(4) 100.7(4) 89.4(3) 88.3(3) 92.9(3) 98.1(4) 170.3(4) 93.5(4) 95.1(3) 75.7(3) 168.1(3) 97.3(4) 162.5(3) 74.8(3) 85.3(3) 98.5(4) 88.2(3) 63.4(2) 35.3(2) 69.6(2) 154.4(4) 101.7(2) 99.1(2) 91.3(3) 100.9(4) 101.1(5) 89.9(3) 90.8(3) 163.6(4) 87.9(3) 164.7(3) 94.0(4) 73.9(3) 163.4(3) 85.2(3) 95.7(4) 74.0(3) 91.2(3) 64.2(2) 66.6(2) 159.3(4) 37.0(2) 99.5(2) 99.7(2) 87.3(3) 85.6(3) 76.4(3) 90.7(3) 85.5(3) 161.7(3) 162.1(3) 74.8(3) 89.7(3) 88.3(3) 97.2(4) 175.5(4) 103.1(4) 95.2(4) 100.7(4) 62.6(2) 36.6(2) 101.0(2) 61.6(2) 101.6(3) 147.0(3) 87.6(3) 74.7(3)

O(9)-Sn(12)-O(15) O(1)-Sn(12)-O(18) O(9)-Sn(12)-O(18) O(15)-Sn(12)-O(18) O(1)-Sn(12)-O(8) O(9)-Sn(12)-O(8) O(15)-Sn(12)-O(8) O(15)-Sn(12)-O(8) O(18)-Sn(12)-O(8) O(1)-Sn(12)-C(120) O(9)-Sn(12)-C(120) O(15)-Sn(12)-C(120) O(18)-Sn(12)-C(120) O(8)-Sn(12)-C(120) O(1)-Sn(12)-Na(1) O(9)-Sn(12)-Na(1) O(15)-Sn(12)-Na(1) O(18)-Sn(12)-Na(1) O(8)-Sn(12)-Na(1) C(120)-Sn(12)-Na(1) Sn(12)-O(1)-Sn(1) Sn(12)-O(1)-H(1) Sn(1)-O(1)-H(1) Sn(1)-O(1)-H(1) Sn(11)-O(2)-Sn(10) Sn(11)-O(2)-H(2) Sn(10)-O(2)-H(2) Sn(6)-O(2)-Sn(9) Sn(6)-O(3)-H(3) Sn(9)-O(3)-H(3) Sn(2)-O(4)-Sn(1) Sn(2)-O(4)-H(4) Sn(1)-O(4)-H(4) Sn(8)-O(5)-Sn(11) Sn(8)-O(5)-Sn(10) Sn(11)-O(5)-Sn(10) Sn(8)-O(5)-Na(1) Sn(11)-O(5)-Na(1) Sn(10)-O(5)-Na(1) Sn(10)-C(5)-Na(1) Sn(5)-O(6)-Sn(9) Sn(5)-O(6)-H(6) Sn(9)-O(6)-H(6) Sn(4)-O(7)-Sn(1) Sn(4)-O(7)-H(7) Sn(1)-O(7)-H(7) Sn(3)-O(8)-Sn(12) Sn(3)-O(8)-H(8) Sn(12)-O(8)-H(8) Sn(7)-O(9)-Sn(12) Sn(7)-O(9)-H(9) Sn(12)-O(9)-H(9) Sn(8)-O(10)-Sn(10) Sn(8)-O(10)-H(10) Sn(10)-O(10)-H(10) Sn(10)-O(11)-Sn(6) Sn(7)-O(11)-H(11) Sn(6)-O(11)-H(11) Sn(8)-O(12)-Sn(11) Sn(8)-O(12)-H(12) Sn(11)-O(12)-H(12) Sn(4)-O(13)-Sn(10) Sn(4)-O(13)-H(13) Sn(10)-O(13)-H(13) Sn(10)-O(13)-I(13) Sn(11)-O(14)-Sn(6) Sn(2)-O(15)-Sn(12) Sn(2)-O(15)-Sn(1) Sn(12)-O(15)-Sn(1) Sn(2)-O(15)-Na(1) Sn(12)-O(15)-Na(1) Sn(1)-O(15)-Na(1) Sn(1)-O(15)-Na(1) Sn(7)-O(16)-Sn(3) Sn(7)-O(16)-H(16) Sn(3)-O(16)-H(16) Sn(9)-O(17)-Sn(10) Sn(9)-O(17)-H(17) Sn(10)-O(17)-H(17) Sn(2)-O(18)-Sn(12) Sn(2)-O(18)-H(18) Sn(12)-O(18)-H(18) Sn(4)-O(19)-Sn(5) Sn(4)-O(19)-H(19) Sn(5)-O(19)-H(19) Sn(9)-O(20)-Sn(4) Sn(9)-O(20)-H(20) Sn(4)-O(20)-H(20) Sn(5)-O(21)-Sn(7) Sn(5)-O(21)-H(21)

Sn(7)-O(21)-H(21)

86.4	(3)	
160.	9(3)
75.0 164.	2() 3)
90.0 89.5	(3 (3)	
85.5 101.	(3 6())
98.3 174	(4) ⊿	` ۱
100.	5(4)
94.1 99.7	(3)	
61.2 36.4	(2 (2)	
100. 65.7	3((2	2)
149. 104	6(3)
128.	4		'
124.	20(3)
116. 126.	9 0		
143. 112.	5(9	4)
102. 105	6 8(3)
134.	4		'
106.	5(3)
105. 104.	5(0(3)
118. 111.	6(4(3)
109. 102	7(3)
99.2	2		'
139.	o 1(4)
100. 119.	9 9		
138. 119.	5(8	4)
100. 139	4 0(4	۱
112.	0		'
101.	3 8(3)
110. 99.7	1	_	
103. 119.	5(9	3)
120. 103.	1 3(3)
115.	4 4		'
139.	3(4)
103.	3 8		
138. 105.	1(9(4 3)
107. 104.	1(4(3)
118.	3(3)
109.	0(3)
104. 122.	0(8	3)
114. 139.	3 2(4)
109. 99.7	6		
102 110	9(1	3)
101.	6	0	、
101.	4(6	3)
118. 101.	4 0(3)
111. 111.	4 4		
142. 103	7(1	4)
113.	4		

Sn(3)-O(22)-Sn(6) Sn(3)-O(22)-Sn(7) Sn(6)-O(22)-Sn(7) Sn(3)-O(22)-Na(1) Sn(6)-O(22)-Na(1) Sn(7)-O(22)-Na(1) Sn(2)-O(23)-Sn(8) Sn(2)-O(23)-H(23) Sn(8)-O(23)-H(23) Sn(4)-O(24)-Sn(9) Sn(4)-O(24)-Sn(5) Sn(9)-O(24)-Sn(5) Sn(4)-O(24)-Na(1) Sn(9)-O(24)-Na(1) Sn(5)-O(24)-Na(1) Sn(8)-O(25)-Sn(2) Sn(8)-O(25)-H(25) Sn(2)-O(25)-H(25) Sn(3)-O(26)-Sn(11) Sn(3)-O(26)-H(26) Sn(11)-O(26)-H(26) Sn(3)-O(27)-Sn(6) Sn(3)-O(27)-H(27) Sn(6)-O(27)-H(27) Sn(1)-O(28)-Sn(5) O(15)-Na(1)-O(24) O(15)-Na(1)-O(5) O(24)-Na(1)-O(5) O(15)-Na(1)-O(22) O(24)-Na(1)-O(22) O(5)-Na(1)-O(22) O(15)-Na(1)-Sn(1) O(24)-Na(1)-Sn(1) O(5)-Na(1)-Sn(1) O(22)-Na(1)-Sn(1) O(15)-Na(1)-Sn(12) O(24)-Na(1)-Sn(12) O(5)-Na(1)-Sn(12) O(22)-Na(1)-Sn(12) Sn(1)-Na(1)-Sn(12) O(15)-Na(1)-Sn(11) O(24)-Na(1)-Sn(11) O(5)-Na(1)-Sn(11) O(22)-Na(1)-Sn(11) Sn(1)-Na(1)-Sn(11) Sn(12)-Na(1)-Sn(11) O(12)-Na(1)-Sn(10) O(24)-Na(1)-Sn(10) O(5)-Na(1)-Sn(10) O(22)-Na(1)-Sn(10) Sn(1)-Na(1)-Sn(10) Sn(12)-Na(1)-Sn(10) Sn(11)-Na(1)-Sn(10) O(15)-Na(1)-Sn(5) O(24)-Na(1)-Sn(5) O(5)-Na(1)-Sn(5)O(22)-Na(1)-Sn(5)O(22)-Na(1)-Sn(5)Sn(1)-Na(1)-Sn(5) Sn(12)-Na(1)-Sn(5) Sn(11)-Na(1)-Sn(5) Sn(10)-Na(1)-Sn(5) O(15)-Na(1)-Sn(9) O(24)-Na(1)-Sn(9) O(5)-Na(1)-Sn(9) O(22)-Na(1)-Sn(9) Sn(1)-Na(1)-Sn(9) Sn(12)-Na(1)-Sn(9) Sn(11)-Na(1)-Sn(9) Sn(10)-Na(1)-Sn(9) Sn(5)-Na(1)-Sn(9) O(15)-Na(1)-Sn(4) O(24)-Na(1)-Sn(4) O(5)-Na(1)-Sn(4) O(22)-Na(1)-Sn(4) Sn(1)-Na(1)-Sn(4) Sn(12)-Na(1)-Sn(4) Sn(12) Na(1) Sn(4) Sn(11)-Na(1)-Sn(4) Sn(5)-Na(1)-Sn(4) Sn(5)-Na(1)-Sn(4) O(15)-Na(1)-Sn(3) O(24)-Na(1)-Sn(3) O(5)-Na(1)-Sn(3) O(22)-Na(1)-Sn(3) Sn(1)-Na(1)-Sn(3)

Sn(12)-Na(1)-Sn(3)

Table 3 continued

105.9(3) 104.9(3) 105.9(3) 113.4(3) 113.4(3) 112.6(3) 108.1(4) 117.0 131.8 105.8(3) 104.2(3) 106.6(3) 115.4(3) 113.4(3) 110.8(3) 104.6(3) 117 5 120.0 137.7(4) 102.4 102.5 104.2(3) 126.6 1237 139.0(4) 111.1(3) 110.6(3) 108.6(3) 109.6(3) 108.7(3) 108.3(3) 33.58(19) 77.6(2) 125.6(2) 120.8(2) 32.47(18) 122.6(2) 123.9(2) 77.1(2) 54.59(6) 123.5(2) 119.9(2) 32.00(19) 76.3(2) 152.27(13) 116.92(12) 125.7(2) 75.4(2) 33.26(18) 119.1(2) 119.24(12) 152.68(13) 53.99(6) 92.4(2) 32.77(19) 141.4(2) 91.5(2) 62.04(7) 92.21(9) 144.03(13) 108.13(11) 142.3(2) 31.24(19) 91.3(2) 90.8(2) 108.75(11) 144.71(12) 91.37(9) 61.26(7) 54.59(6) 94.0(2) 30.09(19) 93.4(2) 138.8(2) 64.91(8) 119.34(11) 118.38(11) 64.51(7) 53.11(6) 53.05(6) 92.6(2) 139.2(2) 92.2(2) 30.51(19) 118.48(11) 64.21(7)

Sn(11)-Na(1)-Sn(3)
Sn(10)-Na(1)-Sn(3)
Sn(5)-Na(1)-Sn(3)
Sn(0) Na(1) Sn(3)
Sn(3) - Na(1) - Sn(3)
Sn(4)-INa(1)-Sn(3)
C(12)-C(10)-C(11)
C(12)-C(10)-Sn(1)
C(11)-C(10)-Sn(1)
C(12)-C(10)-H(10)
C(11)-C(10)-H(10)
$S_{p}(1) C(10) H(10)$
C(10)-C(11)-H(111)
C(10)-C(11)-H(112)
H(111)-C(11)-H(112)
C(10)-C(11)-H(113)
H(111)-C(11)-H(113)
H(112) C(11) H(112)
$\Gamma(112) = C(11) = \Gamma(113)$
C(10)-C(12)-H(121)
C(10)-C(12)-H(122)
H(121)-C(12)-H(122)
C(10)-C(12)-H(123)
$H(121)-\dot{C}(12)-\dot{H}(123)$
H(122)-C(12)-H(123)
C(22) C(20) C(21)
C(22) - C(20) - C(21)
C(22)-C(20)-Sn(2)
C(21)-C(20)-Sn(2)
C(22)-C(20)-H(20)
C(21)-C(20)-H(20)
Sn(2)-C(20)-H(20)
C(20) C(21) H(211)
$C(20) - C(21) - \Gamma(211)$
C(20)-C(21)-H(212)
H(211)-C(21)-H(212)
C(20)-C(21)-H(213)
H(211)-C(21)-H(213)
H(212)-C(21)-H(213)
C(20) C(22) U(221)
$C(20) - C(22) - \Gamma(221)$
H(221)-C(22)-H(222)
C(20)-C(22)-H(223)
H(221)-C(22)-H(223)
H(222)-C(22)-H(223)
C(31) - C(30) - C(32)
C(31)- $C(30)$ - $Sn(3)$
C(21) C(20) Cn(0)
C(32)- $C(30)$ - $SII(3)$
C(32)-C(30)-Sh(3) C(31)-C(30)-H(30)
C(32)-C(30)-Sh(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30)
C(32)-C(30)-Sfi(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30)
C(32)-C(30)-Sn(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(311)
C(32)-C(30)-S11(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(311) C(30)-C(31)-H(312)
C(32)-C(30)-SII(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(312)
C(32)-C(30)-Bh(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(312) C(30)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(312)
C(32)-C(30)-5h(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(311) C(30)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(312) C(30)-C(31)-H(313)
C(32)-C(30)-B(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(312) C(30)-C(31)-H(312) C(30)-C(31)-H(313) H(311)-C(31)-H(313)
C(32)-C(30)-Bi(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(311) C(30)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(313) H(311)-C(31)-H(313) H(312)-C(31)-H(313)
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-5h(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ \end{array}$
C(32)-C(30)-B(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) Sn(3)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(311) C(30)-C(31)-H(312) C(30)-C(31)-H(313) H(311)-C(31)-H(313) H(312)-C(31)-H(313) C(30)-C(32)-H(321) C(30)-C(32)-H(322)
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ \end{array}$
C(32)-C(30)-Bh(3) C(31)-C(30)-H(30) C(32)-C(30)-H(30) C(30)-C(31)-H(310) C(30)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(312) H(311)-C(31)-H(313) H(311)-C(31)-H(313) H(311)-C(31)-H(313) C(30)-C(32)-H(321) C(30)-C(32)-H(322) H(321)-C(32)-H(322)
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(32)\\ C(30)-C(32)\\ C(30)-C(32)\\ C(30)-C(32)-H(32)\\ C(30)-$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(310)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(32)\\ H(321)-C(32)-H(32)\\$
$\begin{array}{c} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(32)-H($
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(312)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(32)-C(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)\\ H(3$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(310)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ H(311)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(4$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-H(32)-H(32)-H(32)-H(32)-H(32)\\ H(32)-$
$\begin{array}{c} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(40)-H(40)\\ C(40)$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ Sn(4)-C(41)-H(41)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(41)\\ C(40)-C(41)-H(411)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(30)-H(30)\\ Sn(3)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)-H(40)\\ C(41)-C(40)-C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(41$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(41)-H(41)\\ C(40)-C(41)-H(41)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(412)$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(411)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-H(413)\\ H(41)-C(41)-$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(32)-C(40)-Sn(4)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(42)-H(421)\\ C(40)-C(42)-H(421)$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(42)-H(421)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(41)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(42)-H(421)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(421)\\ C(40)-C(42)-H(421)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(40)-C(42)-H(42)\\ C(4$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-S(1)(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-S(4)\\ C(42)-C(40)-S(4)\\ C(42)-C(40)-S(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ C(40)-C(42)-H(4$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H($
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H($
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(310)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(40)-Sn(4)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ C(52)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(52)-C(50)-C(51)\\ C(51)-C(50)-C(51)\\ C(51$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(423)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(42)-H(42)\\ H(42)-C(4$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(41)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-Sn(5)\\ C(52)-C(50)-H(50)\\ C(52)-C(50)-H(50)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ C(22)-C(50)-Sh(5)\\ C(51)-C(50)-Sh(5)\\ C(51)-C(50)-H(50)\\ C(5$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ H(322)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-Sn(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ H(411)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C(42)-H(422)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(42)-H(423)\\ C(52)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-H(50)\\ Sn(5)-C(50)-H(50)\\ Sn(5)$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-511(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ C(30)-C(32)-H(321)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ C(30)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-C(42)\\ C(41)-C(40)-F(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(412)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(422)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-Sn(5)\\ C(51)-C(50)-H(50)\\ C(50)-C(51)-H(50)\\ C(50)-C(51)-H(50)\\ C(50)-C(51)-H(51)\\ \end{array}$
$\begin{array}{l} C(32)-C(30)-Sh(3)\\ C(31)-C(30)-H(30)\\ C(32)-C(30)-H(30)\\ C(30)-C(31)-H(31)\\ C(30)-C(31)-H(311)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(312)\\ C(30)-C(31)-H(313)\\ H(311)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(31)-H(313)\\ H(312)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(322)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ H(321)-C(32)-H(323)\\ C(41)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-Sh(4)\\ C(42)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(40)-H(40)\\ C(41)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(412)\\ C(40)-C(41)-H(413)\\ H(411)-C(41)-H(413)\\ H(412)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(422)\\ C(40)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ H(421)-C(42)-H(423)\\ C(52)-C(50)-Sh(5)\\ C(52)-C(50)-Sh(5)\\ C(51)-C(50)-H(50)\\ C(51)-C(50)-H(50)\\ C(51)-C(51)-H(511)\\ C(50)-C(51)-H(511)\\ \end{array}$

64.00(7)
117.60(11)
117.66(12)
169.26(13)
112.2(4) 120.1(17)
112.2(13)
103.3 103.3
103.3
109.5
109.5
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5
113.5(4)
115.4(7)
103.2
103.2
103.2 109.5
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5
109.5
109.5
109.5
109.5
112.6(4) 116.9(9)
115.9(9)
102.9 102.9
102.9
109.5
109.5
109.5
109.5
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5 109.5
112.4(4)
116.2(12)
102.4
102.4
102.4
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5 109.5
109.5
109.5
109.5
109.5
112.3(4) 119.1(13)
119.3(11)
100.3 100.3
100.3
109.5
109.5

C(50)-C(51)-H(513)
H(511) - C(51) - H(513)
H(512)-C(51)-H(513)
C(50)-C(52)-H(521)
C(50)-C(52)-H(522)
H(521)-C(52)-H(522)
C(50)-C(52)-H(523)
L(521) C(52) L(522)
П(521)-С(52)-П(525)
H(522)-C(52)-H(523)
$C(e_2)$
0(02)-0(00)-0(01)
C(62)-C(60)-Sn(6)
C(61)-C(60)-Sn(6)
C(62)-C(60)-H(60)
C(61)-C(60)-H(60)
SI(0)-C(00)-H(00)
C(60)-C(61)-H(611)
H(611)-C(61)-H(612)
C(60)-C(61)-H(613)
H(612)-C(61)-H(613)
C(60)-C(62)-H(621)
C(60)-C(62)-H(622)
H(621)-C(62)-H(622)
0(00)-0(02)-11(023)
H(621)-C(62)-H(623)
H(622)-C(62)-H(623)
C(72) $C(70)$ $C(71)$
C(72)- $C(70)$ - $C(71)$
C(72)-C(70)-Sn(7)
C(71)-C(70)-Sn(7)
C(72) $C(70)$ $U(70)$
C(72) - C(70) - H(70)
C(71)-C(70)-H(70)
Sn(7)-C(70)-H(70)
C(70)-C(71)-H(711)
C(70)-C(71)-H(712)
$\dot{\mu}(711)$ $\dot{C}(71)$ $\dot{\mu}(712)$
$\Pi(711) = O(71) = \Pi(712)$
C(70)-C(71)-H(713)
H(711)-C(71)-H(713)
L(740) C(74) L(740)
$\Pi(1 2) - C(1) - \Pi(1 3)$
C(70)-C(72)-H(721)
C(70)
H(721)-C(72)-H(722)
C(70)-C(72)-H(723)
H(721) - C(72) - H(723)
H(722)-C(72)-H(723)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(90)-C(81)-H(80)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(81) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) C(80)-C(82)-H(821)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) C(80)-C(82)-H(822)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(822)-C(82)-H(822)
H(T21)-C(T2)-H(T23) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(823)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) C(80)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(82) H(82)-C(82)-H(82) H(82)-C(82)-H(82) H(82)-C(82)-H(82) H(82)-C(82)-H(82) H(82)-C(82)
H(121)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C(82)-C(82)-H(82) C
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(821) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(90)-Sn(9)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) C(82)-C(82)-H(823) C(82)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-Sp(9) C(91)-C(91
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(82)-C(82)-H(823) H(82)-C(82)-H(82) H(82)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-Sn(9) C(92)-C(90)-H(90)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-C(90) H(823)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) H(80)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-L(90) C(91)-C
$\begin{array}{l} \label{eq:constraint} (122)-C(72)-H(723)\\ C(81)-C(80)-C(82)\\ C(81)-C(80)-Sn(8)\\ C(82)-C(80)-Sn(8)\\ C(82)-C(80)-H(80)\\ C(82)-C(80)-H(80)\\ C(80)-C(81)-H(81)\\ C(80)-C(81)-H(812)\\ C(80)-C(81)-H(812)\\ H(811)-C(81)-H(813)\\ H(811)-C(81)-H(813)\\ H(812)-C(81)-H(813)\\ H(812)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ H(821)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(822)\\ C(80)-C(82)-H(823)\\ H(821)-C(82)-H(823)\\ H(821)-C(82)-H(823)\\ H(821)-C(82)-H(823)\\ H(821)-C(82)-H(823)\\ H(822)-C(90)-C(91)\\ C(92)-C(90)-Sn(9)\\ C(91)-C(90)-Sn(9)\\ C(91)-C(90)-H(90)\\ C(91)-C(90)-H(90)\\ C(91)-C(90)-H(90)\\ C(91)-C(90)-H(90)\\ C(91)-C(90)-H(90)\\ C(90)-C(90)-H(90)\\ C(90)-C(9$
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(80)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(90)-H(9) Sn(9)-C(9)-Sn
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-H(823) H(822)-C(80)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(911)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(80)-C(91)- C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(91) C(90)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(911)
$\begin{array}{l} (122) - C(72) - H(723) \\ (21) - C(80) - C(82) \\ (21) - C(80) - Sn(8) \\ (22) - C(80) - Sn(8) \\ (23) - C(80) - Sn(8) \\ (24) - C(80) - Sn(8) \\ (25) - C(80) - H(80) \\ (26) - C(81) - H(81) \\ (26) - C(81) - H(81) \\ (26) - C(81) - H(812) \\ (26) - C(81) - H(812) \\ (26) - C(81) - H(813) \\ (26) - C(81) - H(813) \\ (26) - C(81) - H(813) \\ (26) - C(82) - H(821) \\ (26) - C(82) - H(822) \\ (26) - C(82) - H(822) \\ (26) - C(82) - H(823) \\ (26) - C(80) - C(9) \\ (26) - C(90) - Sn(9) \\ (29) - C(90) - Sn(9) \\ (29) - C(90) - H(90) \\ (29) - C(90) - H(90) \\ (29) - C(91) - H(91) \\ (29) - C(91) - H(911) \\ (20) - C(91) - H(912) \\ (21) - C(91) $
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(80)-Sn(9) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(912) H(91)-C(91)-H(91)-C(91)-H(912) H(91)-C(91)-H(91)-C(
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(811) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(910) C(90)-C(91)-H(912) C(90)-C(91)-H(912) C(90)-C(91)-H(912)
$\begin{array}{l} (122) - C(72) - H(723) \\ (21) - C(80) - C(82) \\ (21) - C(80) - Sn(8) \\ (22) - C(80) - Sn(8) \\ (23) - C(80) - H(80) \\ (24) - C(80) - H(80) \\ (26) - C(81) - H(81) \\ (26) - C(81) - H(81) \\ (26) - C(81) - H(812) \\ (26) - C(81) - H(812) \\ (26) - C(81) - H(813) \\ H(811) - C(81) - H(813) \\ H(811) - C(81) - H(813) \\ H(812) - C(82) - H(822) \\ H(821) - C(82) - H(823) \\ H(821) - C(82) - H(823) \\ H(821) - C(82) - H(823) \\ H(822) - C(90) - C(91) \\ C(92) - C(90) - Sn(9) \\ C(91) - C(90) - Sn(9) \\ C(91) - C(90) - H(90) \\ Sn(9) - C(91) - H(90) \\ Sn(9) - C(91) - H(911) \\ C(90) - C(91) - H(912) \\ H(911) - C(91) - H(913) \\ H(911) - C(91) - H(913) \\ \end{array}$
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-L(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(91) Sn(9)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(91
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-C(1) C(92)-C(90)-Sn(9) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(91)-
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(912) C(90)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921) H(913)-C(92)-H(921)-H(913) H(912)-C(92)-H(921) H(912)-C(92)-H(92) H(912)-C(92)-H(92) H(912)-C(92)-H(92) H(912)-C(92)-H(92) H(912)-C(92)-H(92) H(912)-C
$\begin{array}{l} (122)-C(72)-H(723)\\ (23)-C(72)-H(723)\\ (24)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(81)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(91)-H(911)\\ (290)-C(91)-H(912)\\ (290)-C(91)-H(913)\\ (291)-C(92)-H(921)\\ (290)-C(92)-H(921)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(92)\\ (290)-C(92)-H(92)\\ $
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(90)-Sn(9) C(92)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(921) C(90)-C(92)-H(921) C(90)-C(92)-H(921) C(90)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(92) C(90)-C(92)-H(9
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) C(92)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(923) C(90)-C(92)-H(923)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(92) H(921)-C(92)-H(92) H(92)-C(92)-H(92) H(92)-C(92)-H(92) H(92)-C(92)-H(92) H(92
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-C(9) C(90)-C(90)-H(90) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(90)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(923) H(921)-C(92)-H(923) H(92)-C(92)-H(92) H(92)-C(92)-H(92) H(92)-C(92)-H(92)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(80)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(923) H(922)-C(92)-H(923) H(92)-C(92)-H(923) H(92)-C(92)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-Sn(8) C(81)-C(80)-H(80) Sn(8)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) K(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(812) C(80)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(90)-C(91)-H(910) Sn(9)-C(91)-H(911) C(90)-C(91)-H(912) C(90)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(92)-H(922)
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(822)-C(80)-C(91) C(90)-C(91)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(92)-H(923) H(922)-C(92)-H(923) H(923)-C(
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) C(80)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-C(91) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(91) C(90)-C(91)-H(912) H(911)-C(91)-H(912) H(911)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) C(90)-C(92)-H(922) H(921)-C(92)-H(923) H(921)-C(92)-H(923) H(921)-C(92)-H(923) H(921)-C(100)-Sn(10) C(90)-C(10)-L(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-C(100)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10)-Sn(10)-Sn(10) C(10)-Sn(10
$\begin{array}{l} (122)-C(72)-H(723)\\ (23)-C(72)-H(723)\\ (24)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(81)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-H(813)\\ (261)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-Sn(9)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (292)-C(90)-H(90)\\ (290)-C(91)-H(913)\\ (291)-C(91)-H(913)\\ (291)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(922)\\ (290)-C(92)-H(923)\\ (101)-C(100)-Sn(10)\\ (2102)-C(100)-Sn(10)\\ (2102)-C($
H(722)-C(72)-H(723) C(81)-C(80)-C(82) C(81)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-Sn(8) C(82)-C(80)-H(80) C(80)-C(80)-H(80) C(80)-C(81)-H(81) C(80)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(812) H(811)-C(81)-H(813) H(811)-C(81)-H(813) H(812)-C(81)-H(813) H(812)-C(82)-H(822) C(80)-C(82)-H(822) H(821)-C(82)-H(823) C(80)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) H(821)-C(82)-H(823) C(92)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-Sn(9) C(91)-C(90)-H(90) Sn(9)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(911)-C(91)-H(913) H(912)-C(92)-H(922) H(922)-C(92)-H(923) H(922)-C(92)-H(923) H(922)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10) C(101)-C(100)-Sn(10)
$\begin{array}{l} (122)-C(72)-H(723)\\ (23)-C(72)-H(723)\\ (24)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-Sn(8)\\ (262)-C(80)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(80)\\ (260)-C(81)-H(81)\\ (260)-C(81)-H(81)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(81)-H(812)\\ (260)-C(82)-H(821)\\ (260)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(822)\\ (260)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(82)-H(823)\\ (262)-C(90)-Sn(9)\\ (262)-C(90)-Sn(9)\\ (262)-C(90)-Sn(9)\\ (262)-C(90)-H(90)\\ (262)-C(92)-H(922)\\ (260)-C(92)-H(922)\\ (262)-C(92)-H(922)\\ (262)-C(92)-H(923)\\ (210)-C(100)-C(100)-Sn(10)\\ (2102)-C(100)-Sn(10)\\ (2102)-C(100)-Sn(10)\\ (2102)-C(100)-H(100)\\ (2102)-C(100)-H(100$

$\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 11. 10. 15. 06. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	555555555767000555555	4) 11) 10)
	09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 13. 15. 15. 03. 03. 03. 03. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	5555555140888555555555555555555555555555	4) 7) 6)
$\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	09. 09. 09. 09. 09. 11. 11. 10. 08. 08. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	5555557000005555555	4) 11) 12)
$\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 01. 17. 17. 02. 02. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	555555923555555555555555555555555555555	4) 10) 10)
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	09. 09. 09. 09. 09. 12. 18. 15. 02. 02.	555551(- 93555	4) 11) 10)

Sn(10)-C(1	00)-H(100)
C(100)-C(1 C(100)-C(1	101)-H(101) 101)-H(101)
H(101)-C(1	101)-H(101)
C(100)-C(1	101)-H(101)
H(101)-C(1	101)-H(101)
C(100)-C(1	102)-H(102)
C(100)-C(1) H(102)-C(1)	102)-H(102) 102)-H(102)
C(100)-C(1	102)-H(102)
H(102)-C(1	102)-H(102)
C(112)-C(1	102)-r1(102) 110)-C(111)
C(112)-C(1	110)-Sn(11)
C(111)-C(1) C(112)-C(1)	110)-Sn(11) 110)-H(110)
C(111)-C(1	110)-H(110)
Sn(11)-C(1	10)-H(110)
C(110)-C(1	111)-H(111)
H(111)-C(1	111)-H(111)
C(110)-C(1 H(111)-C(1	111)-H(111) 111)-H(111)
H(111)-C(1	111)-H(111)
C(110)-C(1)	112)-H(112)
H(112)-C(1	112)-H(112)
C(110)-C(1	112)-H(112)
H(112)-C(1 H(112)-C(1	12)-H(112) 12)-H(112)
C(121)-C(1	120)-C(122)
C(121)-C(1	120)-Sn(12)
C(122)-C(C(121)-C(1	120)-31(12) 120)-H(120)
C(122)-C(1	120)-H(120)
Sn(12)-C(1 C(120)-C(1	20)-H(120) 21)-H(121)
C(120)-C(1	121)-H(121)
H(121)-C(1	121)-H(121)
H(121)-C(1	121)-H(121) 121)-H(121)
H(121)-C(1	121)-H(121)
C(120)-C(1	22)-H(122) 22)-H(122)
H(122)-C(1	122)-H(122)
C(120)-C(1	(122)-H(122)
H(122)-C(1	122)-H(122) 122)-H(122)
O(161)-C(162)-O(160)
O(161)-C(162)-C(163) 162)-C(163)
C(162)-C(1	163)-H(163)
C(162)-C(1	163)-H(163)
C(162)-C(163)-H(163)
H(163)-C(1	163)-H(163)
H(163)-C(1	163)-H(163) 172)-O(171)
O(170)-C(172)-C(173)
O(171)-C(172)-C(173)
C(172)-C(173)-H(173)
H(173)-C(1	173)-H(173)
H(173)-C(1	173)-H(173) 173)-H(173)
H(173)-C(1	173)-H(173)
O(180)-C(182)-O(181)
O(180)-C(182)-C(183)
C(182)-C(1	183)-H(183)
C(182)-C(1 H(183)-C(1	183)-H(183) 183)-H(183)
C(182)-C(1	183)-H(183)
H(183)-C(1	183)-H(183)
O(200)-S(2	200)-C(202)
O(200)-S(2	200)-C(201)
C(202)-S(2 S(200)-C(2	200)-C(201) 201)-H(201)
S(200)-C(2	201)-H(201)
H(201)-C(2	201)-H(201)
H(201)-C(2	201)-H(201)
H(201)-C(2	201)-H(201)
J(200)-U(2	LUZ)-M(ZUZ)

$\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	02. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 11. 13. 12. 06. 06. 06. 09. 09.	5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5) 0) 0)
$1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\$	09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 11. 13. 06. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	3 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5	
$\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 $	09. 09. 09. 09. 24. 18. 16. 09. 09. 09. 09. 30(12(09. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	55554795555522255555 222555555555555555555555	7) 7) 6)
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	09. 09. 22. 19. 18. 09. 09. 09. 09. 22. 22. 6.0 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09. 09.	5 5 1 (11) 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5	7) 7) 7) 12)

S(200)-C(202)-H(202)
H(202)-C(202)-H(202)
S(200)-C(202)-H(202)
H(202)-C(202)-H(202)
O(200)-S(200)-C(202)
O(200)-S(200)-C(201)
C(202)- $S(200)$ - $C(201)S(200)$ $C(201)$ $H(201)$
S(200)-C(201)-H(201)
H(201)-C(201)-H(201)
S(200)-C(201)-H(201)
H(201)-C(201)-H(201) H(201)-C(201)-H(201)
S(200)-C(202)-H(202)
S(200)-C(202)-H(202)
H(202)-C(202)-H(202)
S(200)-C(202)-H(202) H(202)-C(202)-H(202)
H(202)-C(202)-H(202)
O(300)-S(300)-C(302)
O(300)-S(300)-C(301)
C(302)-S(300)-C(301) S(300)-C(301)-H(301)
S(300)-C(301)-H(301)
H(301)-C(301)-H(301)
S(300)-C(301)-H(301)
H(301)-C(301)-H(301) H(301)-C(301)-H(301)
S(300)-C(302)-H(302)
S(300)-C(302)-H(302)
H(302)-C(302)-H(302)
S(300)-C(302)-H(302) H(302)-C(302)-H(302)
H(302)-C(302)-H(302)
O(300)-S(300)-C(302)
O(300)-S(300)-C(301)
C(302)-S(300)-C(301) S(300)-C(301)-H(301)
S(300)-C(301)-H(301)
H(301)-C(301)-H(301)
S(300)-C(301)-H(301)
H(301)-C(301)-H(301)
S(300)-C(302)-H(302)
S(300)-C(302)-H(302)
H(302)-C(302)-H(302) S(300)-C(302)-H(302)
H(302)-C(302)-H(302)
H(302)-C(302)-H(302)
O(400)-S(400)-C(401)
C(401)-S(400)-C(402)
S(400)-C(401)-H(401)
S(400)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401) S(400)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401)
S(400)-C(402)-H(402)
H(402)-C(402)-H(402)
S(400)-C(402)-H(402)
H(402)-C(402)-H(402)
H(402)-C(402)-H(402) O(400)-S(400)-C(401)
O(400)-S(400)-C(402)
C(401)-S(400)-C(402)
S(400)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401)
S(400)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401)
H(401)-C(401)-H(401) S(400)-C(402)-H(402)
S(400)-C(402)-H(402)
H(402)-C(402)-H(402)
S(400)-C(402)-H(402)
H(402)-C(402)-H(402) H(402)-C(402)-H(402)
O(500)-S(500)-C(502)
O(500)-S(500)-C(501)
C(502)-S(500)-C(501) S(500)-C(501)-H(501)
S(500)-C(501)-H(501)

109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 122.14(12) 122.12(12) 96.03(7) 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5
109.5 109.5 109.5 109.5 104.5(18) 104.7(17) 96.03(7) 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5
109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5
109.5 109.5 109.5 109.5 85(2) 113(2) 96.03(7) 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5
109.5 109.5 109.5 109.5 122(3) 107(3) 96.03(7) 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 109.5
109.5 109.5 109.5 109.5 109.5 104.4(18) 112.2(18) 96.04(7) 109.5 109.5

Sp(1)	70(4)					
31(1)	78(1)	70(1)	80(1)	2(1)	5(1)	3(1)
Sn(2)	74(1)	85(1)	69(1)	3(1)	7(1)	3(1)
Sn(3)	74(1)	69(1)	76(1)	0(1)	6(1)	5(1)
Sn(4)	78(1)	79(1)	80(1)	6(1)	5(1)	12(1)
Sn(5)	85(1)	74(1)	73(1)	-6(1)	2(1)	8(1)
Sn(6)	77(1)	75(1)	73(1)	6(1)	9(1)	2(1)
Sn(7)	79(1)	76(1)	68(1)	1(1)	-1(1)	6(1)
Sn(8)	75(1)	100(1)	67(1)	-3(1)	3(1)	1(1)
Sn(9)	74(1)	85(1)	72(1)	1(1)	10(1)	9(1)
Sn(10)	69(1)	95(1)	73(1)	1(1)	2(1)	3(1)
Sn(11)	74(1)	85(1)	77(1)	-7(1)	4(1)	-4(1)
Sn(12)	68(1)	73(1)	77(1)	0(1)	2(1)	2(1)
O(1)	77(5)	68(5)	103(6)	7(4)	2(4)	0(4)
O(2)	69(4)	99(6)	86(5)	-11(4)	0(4)	1(4)
O(3)	91(5)	75(5)	82(5)	-1(4)	11(4)	9(4)
O(4)	107(6)	74(5)	78(5)	9(4)	17(4)	-3(4)
O(5)	67(4)	85(5)	66(4)	-2(4)	2(3)	1(4)
O(6)	92(5)	82(5)	76(5)	0(4)	8(4)	10(4)
O(7)	79(5)	88(5)	78(5)	3(4)	9(4)	14(4)
O(8)	80(5)	83(5)	77(5)	1(4)	7(4)	4(4)
O(9)	84(5)	70(4)	65(4)	-4(3)	5(4)	4(4)
O(10)	75(5)	122(7)	72(5)	4(5)	-1(4)	14(5)
O(11)	98(6)	70(5)	78(5)	13(4)	3(4)	-4(4)
O(12)	90(5)	113(7)	74(5)	-19(5)	10(4)	-1(5)
O(13)	87(5)	92(6)	78(5)	3(4)	2(4)	8(4)
O(14)	75(5)	78(5)	75(5)	0(4)	2(4)	7(4)
O(15)	64(4)	78(5)	66(4)	-1(3)	2(3)	2(3)
O(16)	88(5)	78(5)	79(5)	-4(4)	-2(4)	3(4)
0(17)	81(5)	87(5)	71(5)	2(4)	9(4)	5(4)
0(18)	74(5)	93(5)	76(5)	3(4)	11(4)	9(4)
O(19)	87(5)	64(4)	100(6)	-3(4)	13(4)	7(4)
0(20)	94(6)	95(6)	83(5)	-1(4)	8(4)	14(5)
0(21)	96(5)	63(4) 70(5)	76(5)	-6(4)	-2(4)	12(4)
0(22)	73(4)	79(5)	68(4) 70(5)	7(4)	1(3)	1(4)
0(23)	87(5)	79(5)	73(5)	0(4)	4(4)	1(4)
0(24)	70(4)	8U(3) 01(5)	(4(5)	(4) (4)	4(3)	-1(4)
0(25)	69(J)	91(5)	09(4) 74(5)	4(4)	D(4)	-3(4) 7(4)
O(20)	00(4)	94(3) 74(5)	74(3) 04(6)	-2(4) 1(4)	4(4) 17(4)	((4)
O(21)	31(3) 75(5)	74(3) 86(5)	34(0) 76(5)	F(4)	1(4)	-4(4)
U(20) Na(1)	68(2)	79(3)	75(3)	-5(2)	(4)	4(4) -8(2)
140(1)	00(2)	13(3)	10(0)	-0(2)	0(2)	-0(2)

Table 4.	Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 8. The anisotropic displacement factor
	exponent takes the form: $-2 pi^2 [h^2 a^{*2} U 1 1 + + 2 h k a^{*} b^{*} U 1 2].$

	Х	у	Z	U(eq)
H(1)	9709	1428	1778	205(8)
H(2)	5779	-1869	1005	205(8)
H(3)	6923	-514	3165	205(8)
H(4)	8724	2012	775	205(8)
H(6)	6887	672	3350	205(8)
H(7)	7442	1818	1193	205(8)
H(8)	9070	-1396	1402	205(8)
H(9)	8675	430	2413	205(8)
H(10)	6303	258	451	205(8)
H(11)	7770	-1401	3580	205(8)
H(12)	7260	-2225	413	205(8)
H(13)	6382	1054	1006	205(8)
H(16)	9128	-2133	2845	205(8)
H(17)	6351	-855	2009	205(8)
H(18)	9394	-585	939	205(8)
H(19)	6867	2552	2566	205(8)
H(20)	5884	1711	2459	205(8)
H(21)	7688	122	3329	205(8)
H(23)	7450	969	578	205(8)
H(25)	8339	-1207	563	205(8)
H(26)	7945	-2415	1282	205(8)
H(27)	///9	-3200	2539	205(8)
H(10)	9030	2934	1509	205(8)
⊓(111) H(112)	2220	2042 3017	2402	∠UD(Ŏ) 205/9)
□(11Z) □(112)	0000	3017	2493	200(0)
H(113)	3044 8060	3413 3390	2191 1304	205(8)
H(122)	8500	2001 2001	1094	203(0)
H(123)	8036	3528	1956	205(8)
H(20)	9271	870	93	205(8)
H(211)	8349	1579	-76	205(8)
H(212)	8273	957	-502	205(8)
H(213)	8840	1517	-470	205(8)
H(221)	9190	-523	-43	205(8)
H(222)	9379	28	-473	205(8)
H(223)	8718	-295	-457	205(8)
H(30)	8956	-3443	2244	205(8)
H(311)	8269	-3825	1652	205(8)
H(312)	8891	-4266	1632	205(8)
H(313)	8732	-3578	1261	205(8)
H(321)	9764	-2643	2087	205(8)
H(322)	9667	-2843	1534	205(8)
H(323)	9823	-3531	1906	205(8)
H(40)	6296	2539	1120	205(8)
H(411)	7077	3333	1368	205(8)
H(412)	6664	3729	1751	205(8)
H(413)	6501	3812	1195	205(8)
ロ(421) ロ(422)	5447	23/0	1009	205(8)
L(422)	5628	3153	1209	205(8)
H(423) H(50)	7961	2575	3105	205(8)
H(511)	8827	1811	3231	205(8)
H(512)	8654	1588	3761	205(8)
H(513)	8757	2488	3620	205(8)
H(521)	7170	2320	3671	205(8)
H(522)	7722	2754	3925	205(8)
H(523)	7612	1838	4018	205(8)
H(60)	6964	-2968	3292	205(8)
H(611)	6667	-1907	3757	205(8)
H(612)	6174	-2581	3734	205(8)
H(613)	6089	-1800	3421	205(8)
H(621)	6477	-3269	2560	205(8)
H(622)	5958	-2678	2689	205(8)
H(623)	6077	-3448	3005	205(8)
H(70)	9295	-1190	3633	205(8)
H(711)	8442	-478	4003	205(8)
H(712)	8969	126	4116	205(8)
H(713)	9022	-767	4292	205(8)
H(721)	9793	-216	3146	205(8)
H(722)	10034	-400	3676	205(8)
H(723)	9646	3/1	35/1	205(8)
Π(ðU)	7695	-712	-3/8	205(8)
п(811) Ц(810)	(2/5	555	-365	205(8)
Π(812)	6630	185	-439	205(8)
п(ठ13) Ц(рэт)	7094	117	-853	205(8)
⊓(o∠1) ⊔(o20)	/U8/ 6094	-1840	-300	205(8)
11(022)	0904	1309	-004	200(0)
Π(823)	0014 5500	-1300	-445	205(8)
П(90) Ц(014)	5502	-024	2935	205(8)
п(911) Ц(012)	5910	-13	303U 2627	205(8)
⊓(91∠) ⊔(012)	⊃∠1∠ 5474	-200	3037	203(8)
୮(୬୮၃)	54/1	δεσ	3500	205(8)
L(021)	4000	00	7007	JUE (0)

Table 5.	Hydrogen coordinates	(x 10 ⁴)) and isotropic displacement paramete	ers (A	² x 10 ³) for 8.
----------	----------------------	-----------------------	---------------------------------------	--------	--------------------------------	----------

Table 5 continued	

H(023)	4605	-113	2871	205(8)
11(323)	4003	-115	2071	205(0)
H(100)	4977	-449	1374	205(8)
H(101)	5086	874	1573	205(8)
H(101)	4483	669	1288	205(8)
H(101)	5009	1089	1021	205(8)
	5009	1003	1021	205(0)
H(102)	5056	-921	603	205(8)
H(102)	4996	-38	410	205(8)
H(102)	4466	-431	687	205(8)
	7010	-3454	1607	205(8)
	7010	-5454	1037	205(0)
H(111)	5984	-3198	1735	205(8)
H(111)	6124	-4080	1573	205(8)
H(111)	5906	-3443	1186	205(8)
	7445	-3594	952	205(8)
	7445	-5554	302	205(0)
$\Pi(112)$	6802	-3038	701	205(8)
H(112)	7026	-4321	1069	205(8)
H(120)	10072	-941	2240	205(8)
H(121)	10242	331	2540	205(8)
	10594	EE A	2070	205(8)
11(121)	10304	554	2070	203(8)
H(121)	10847	-102	2426	205(8)
H(122)	10273	-1257	1444	205(8)
H(122)	10866	-1088	1752	205(8)
H(122)	10609	-435	1301	205(8)
	10003	-400	1551	205(0)
H(163)	9914	-2927	555	205(8)
H(163)	9642	-2889	23	205(8)
H(163)	9303	-3359	423	205(8)
H(173)	6886	2885	-144	205(8)
H(173)	6203	2802	_20	200(0)
1(173)	0203	2033	-20	200(0)
H(173)	6433	2311	-421	205(8)
H(183)	6724	234	4591	205(8)
H(183)	7198	-242	4912	205(8)
H(183)	6614	-673	4711	205(8)
11(100)	0014	-075	4711	205(0)
H(201)	6326	-3599	206	205(8)
H(201)	6626	-2747	216	205(8)
H(201)	6463	-3163	-282	205(8)
H(202)	5465	-1466	-400	205(8)
H(202)	5751	2126	705	205(0)
H(202)	5751	-2120	-723	203(8)
H(202)	6154	-1656	-343	205(8)
H(201)	4810	-1849	-304	205(8)
H(201)	5135	-2411	-669	205(8)
	5508	-1787	-357	205(8)
	6019	2945	20	205(0)
H(202)	0100	-3645	20	205(8)
H(202)	6163	-3092	-288	205(8)
H(202)	5672	-3708	-471	205(8)
H(301)	9856	1863	854	205(8)
L(201)	10/10	1972	516	205(8)
	10410	1073	510	203(8)
H(301)	10295	2600	863	205(8)
H(302)	11719	1920	1385	205(8)
H(302)	11372	2531	1044	205(8)
H(302)	11564	1693	842	205(8)
L(201)	0994	1840	700	205(8)
	40054	1049	150	205(0)
H(301)	10254	1078	931	205(8)
H(301)	10447	1611	494	205(8)
H(302)	11685	1696	1445	205(8)
H(302)	11596	1663	878	205(8)
H(302)	11288	1010	1202	205(9)
11(302)	0242	F201	2201	205(0)
	0242	-5301	3291	∠U5(8)
H(401)	7638	-5761	3368	205(8)
H(401)	7687	-4845	3494	205(8)
H(402)	6558	-4661	2614	205(8)
H(402)	6706	-5083	3113	205(8)
	6600	-0000	2620	200(0)
		-0090	2039	205(6)
H(401)	7862	-5846	3403	205(8)
H(401)	7991	-5867	2847	205(8)
H(401)	7374	-6181	3031	205(8)
H(402)	6750	-4595	2337	205(8)
	6092	= 1030 E 101	2007	200(0)
	0903	-0464	2340	205(8)
H(402)	7404	-4790	2177	205(8)
H(501)	9283	4750	385	205(8)
H(501)	8713	4562	684	205(8)
H(501)	8639	4941	164	205(8)
H(502)	7004	3009	40	200(0)
	7904	3008	-49	205(8)
H(502)	/84/	3946	-69	205(8)
H(502)	7897	3505	434	205(8)
H(601)	4954	-6610	2674	205(8)
HIGOI	4741	-6890	3183	205(8)
H(601)	5027	-7510	2820	200(0)
	JUZ7	-7310	2030	200(0)
H(602)	6131	-7491	3856	205(8)
H(602)	5734	-8033	3507	205(8)
L(602)	5427	-7437	3862	205(8)
FI(002)	÷ ·=·	-	-	(-)
H(901)	8073	-2703	19	205(8)
H(902) H(901)	8073	-2703	19	205(8)
H(902) H(901) H(902)	8073 7660	-2703 -3213	19 -216	205(8) 205(8)

8.9 Na₃VO₃ · 7 H₂O (9)



 Table 1.
 Crystal data and structure refinement for 9.

Empirical formula Formula weight Temperature Wavelength Crystal system, space group Unit cell dimensions	H ₁₄ Na ₃ O ₁₁ V 310.02 293(2) K 0.71073 Å Orthorhombic, Pca2(1) a = 12.6663(12) Å α = 90 °. b = 6.6299(9) Å β = 90 °. c = 12 9715(19) Å γ = 90 °
Volume	$1089.3(2) A^3$
Z. Calculated density	$4.1.890 \text{ Mg/m}^3$
Absorption coefficient	1.070 mm^{-1}
F(000)	632
Crystal size	0.3 mm x 0.6 mm x 0.4 mm
Theta range for data collection	3.07 to 24.99 deg.
Limiting indices	-15<=h<=15, -7<=k<=7, -15<=l<=15
Reflections collected / unique	1992 / 1899 [R(int) = 0.0138]
Completeness to theta	= 24.99 100.0 %
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	1899 / 22 / 181
Goodness-of-fit on F^2	1.019
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0279, wR2 = 0.0747
R indices (all data)	R1 = 0.0291, wR2 = 0.0759
Absolute structure parameter	0.00(3)
Extinction coefficient	0.0153(14)
Largest diff. peak and hole	0.324 and -0.385 e.A ⁻³

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

	Х	у	Z	U(eq)	
V(1)	2569(1)	12452(1)	8083(1)	15(1)	
O(1)	2296(2)	9958(3)	8054(2)	30(1)	
O(11)	1582(2)	13635(3)	7438(2)	36(1)	
O(12)	3798(2)	12923(3)	7505(2)	25(1)	
O(13)	2593(2)	13289(3)	9326(2)	25(1)	
Na(1)	2300(1)	8682(2)	6378(1)	29(1)	
Na(2)	4334(1)	7730(2)	5059(1)	31(1)	
Na(3)	470(1)	7904(2)	4822(1)	29(1)	
O(2)	760(2)	6741(3)	6482(2)	31(1)	
O(3)	3864(2)	6865(3)	6774(2)	35(1)	
O(4)	2400(2)	7369(3)	4646(2)	27(1)	
O(5)	-1278(1)	8904(3)	5578(1)	26(1)	
O(6)	6078(2)	8621(3)	5651(1)	29(1)	
O(7)	-130(2)	4957(3)	3948(2)	28(1)	
O(8)	-57(2)	9970(3)	3460(2)	46(1)	

V(1)-O(1)	1 6896(19)
	1 606(2)
V(1)-O(11)	1.090(2)
V(1)-O(13)	1.705(2)
V(1)-O(12)	1.756(2)
V(1)-Na(1)	3.3549(14)
	2 333(2)
$N_{2}(1) \cap Q(2)$	2.341(2)
$\operatorname{Na}(1)$ - $\operatorname{O}(2)$	2.341(2)
Na(1)-O(3)	2.375(2)
Na(1)-O(4)	2.413(3)
Na(1)-Q(6)#1	2 546(2)
$N_2(1) O(5) \# 2$	2 623(2)
$N_{a}(1) = O(3) + 2$	2.023(2)
Na(1)-Na(3)	3.1167(16)
Na(1)-Na(2)	3.1561(17)
Na(1)-H(22)	2.53(3)
Na(1)-H(32)	2 61(4)
$N_{2}(2) \cap (3)$	2 272(2)
Na(2)-O(3)	2.373(3)
Na(2)-O(7)#3	2.390(2)
Na(2)-O(6)	2.412(2)
Na(2)-O(5)#2	2.456(2)
Na(2)-O(4)	2 519(3)
	2.600(2)
Na(z) - O(0) # z	2.000(3)
Na(2)-Na(3)#2	3.2471(18)
Na(2)-Na(3)#3	4.0150(18)
Na(2)-H(42)	2.65(4)
Na(2)-H(61)	2 66(4)
$N_{2}(2) H(62)$	2.61(4)
$N_{2}(2) = 0$	2.01(4)
Na(3)-O(2)	2.317(2)
Na(3)-O(8)	2.333(2)
Na(3)-O(7)	2.383(2)
Na(3)-O(4)	2 481(2)
$N_{2}(3) O(5)$	2.511(2)
	2.311(2)
Na(3)-O(6)#1	2.657(2)
Na(3)-Na(2)#1	3.2471(17)
Na(3)-Na(2)#4	4.0150(18)
Na(3)-H(21)	2 63(3)
$N_{2}(3) H(51)$	2.61(4)
$N_{0}(0) - 1(01)$	2.01(+)
Na(3)-FI(71)	2.64(3)
O(2)-H(21)	0.793(6)
O(2)-H(22)	0.793(6)
O(3)-H(31)	0.793(6)
O(3)-H(32)	0.793(6)
O(4)-H(41)	0.793(6)
O(4) H(42)	0.702(6)
$O(4) - \Pi(42)$	0.793(0)
O(5)-Na(2)#1	2.456(2)
O(5)-Na(1)#1	2.623(2)
O(5)-H(51)	0.793(6)
O(5)-H(52)	0.793(6)
O(6)-Na(1)#2	2 546(2)
O(6) Na(3)#2	2.657(2)
O(0) + I(0,1)	2.037(2)
O(0)-FI(01)	0.793(6)
O(6)-H(62)	0.793(6)
O(7)-Na(2)#4	2.390(2)
O(7)-H(71)	0.793(6)
O(7) - H(72)	0 793(6)
O(8)-N(2)#1	2 688(3)
O(0) H(0(1))	0.702(6)
	0.793(0)
O(8)-H(82)	0.793(6)
O(1)-V(1)-O(11)	106.89(10)
O(1)-V(1)-O(13)	110.07(11)
Q(11)-V(1)-Q(13)	109.20(10)
$\Omega(1) - V(1) - \Omega(12)$	110 24(10)
O(1) V(1) O(12)	110.24(10)
O(11) - V(1) - O(12)	111.12(11)
O(13)-V(1)-O(12)	109.29(10)
O(1)-V(1)-Na(1)	40.12(9)
O(11)-V(1)-Na(1)	86.83(8)
Q(13)-V(1)-Na(1)	150 16(7)
O(12) - V(1) - Na(1)	86 60(7)
V(4) O(4) N(4)	440.05(40)
V(1)-O(1)-Na(1)	112.05(12)
O(1)-Na(1)-O(2)	98.25(8)
O(1)-Na(1)-O(3)	89.12(8)
O(2)-Na(1)-O(3)	113.81(9)
Q(1)-Na(1)-Q(4)	177 13(8)
O(2) Np(1) $O(4)$	94 21(9)
O(2) - Iva(1) - O(4)	04.21(0)
U(3)-INA(1)-U(4)	88.53(8)
O(1)-Na(1)-O(6)#1	95.09(7)
O(2)-Na(1)-O(6)#1	84.31(7)
O(3)-Na(1)-O(6)#1	160.66(8)
O(4)-Na(1)-O(6)#1	86 60(8)
$O(1)-N_2(1)-O(5)#2$	08 58(7)
O(1)-ina(1)- $O(3)$ #2 O(3) No(4) $O(5)$ #2	30.30(7)
O(2)-Na(1)- $O(5)$ #2	158.48(8)
O(3)-Na(1)-O(5)#2	79.78(7)
O(4)-Na(1)-O(5)#2	79.37(7)
O(6)#1-Na(1)-O(5)#2	80.93(7)
O(1)-Na(1)-Na(3)	131 44(6)
	101.77(0) 47 69(6)
()(2)-Na(1)-Na(3)	

Table 3. Bond length	[A] and angles [deg] for 9
----------------------	----------------------------

O(3)-Na(1)-Na(3) O(4)-Na(1)-Na(3) O(6)#1-Na(1)-Na(3) O(5)#2-Na(1)-Na(3) O(1)-Na(1)-Na(2) O(2)-Na(1)-Na(2) O(3)-Na(1)-Na(2) O(3)-Na(1)-Na(2) O(4)-Na(1)-Na(2) O(6)#1-Na(1)-Na(2) O(5)#2-Na(1)-Na(2) Na(3)-Na(1)-Na(2) O(1)-Na(1)-V(1) O(2)-Na(1)-V(1) O(3)-Na(1)-V(1) O(4)-Na(1)-V(1) O(6)#1-Na(1)-V(1) O(5)#2-Na(1)-V(1) Na(3)-Na(1)-V(1) Na(2)-Na(1)-V(1) O(1)-Na(1)-H(22) O(2)-Na(1)-H(22) O(3)-Na(1)-H(22) O(4)-Na(1)-H(22) O(6)#1-Na(1)-H(22) O(5)#2-Na(1)-H(22) Na(3)-Na(1)-H(22) Na(2)-Na(1)-H(22) V(1)-Na(1)-H(22) O(1)-Na(1)-H(32) O(2)-Na(1)-H(32) O(3)-Na(1)-H(32) O(4)-Na(1)-H(32) O(6)#1-Na(1)-H(32) O(5)#2-Na(1)-H(32) Na(3)-Na(1)-H(32) Na(2)-Na(1)-H(32) V(1)-Na(1)-H(32) H(22)-Na(1)-H(32) O(3)-Na(2)-O(7)#3 O(3)-Na(2)-O(6) O(7)#3-Na(2)-O(6) O(3)-Na(2)-O(5)#2 O(7)#3-Na(2)-O(5)#2 O(6)-Na(2)-O(5)#2 O(3)-Na(2)-O(4) O(7)#3-Na(2)-O(4) O(6)-Na(2)-O(4) O(5)#2-Na(2)-O(4) O(3)-Na(2)-O(8)#2 O(7)#3-Na(2)-O(8)#2 O(6)-Na(2)-O(8)#2 O(5)#2-Na(2)-O(8)#2 O(4)-Na(2)-O(8)#2 O(3)-Na(2)-Na(1) O(7)#3-Na(2)-Na(1) O(6)-Na(2)-Na(1) O(5)#2-Na(2)-Na(1) O(4)-Na(2)-Na(1) O(8)#2-Na(2)-Na(1) O(3)-Na(2)-Na(3)#2 O(7)#3-Na(2)-Na(3)#2 O(6)-Na(2)-Na(3)#2 O(5)#2-Na(2)-Na(3)#2 O(4)-Na(2)-Na(3)#2 O(8)#2-Na(2)-Na(3)#2 Na(1)-Na(2)-Na(3)#2 O(3)-Na(2)-Na(3)#3 O(7)#3-Na(2)-Na(3)#3 O(6)-Na(2)-Na(3)#3 O(5)#2-Na(2)-Na(3)#3 O(4)-Na(2)-Na(3)#3 O(8)#2-Na(2)-Na(3)#3 Na(1)-Na(2)-Na(3)#3 Na(3)#2-Na(2)-Na(3)#3 O(3)-Na(2)-H(42) O(7)#3-Na(2)-H(42) O(6)-Na(2)-H(42) O(5)#2-Na(2)-H(42) O(4)-Na(2)-H(42) O(8)#2-Na(2)-H(42) Na(1)-Na(2)-H(42) Na(3)#2-Na(2)-H(42) Na(3)#3-Na(2)-H(42) O(3)-Na(2)-H(61) O(7)#3-Na(2)-H(61) O(6)-Na(2)-H(61)

132.57(8) 51 41(6)54.85(5) 110.80(6) 125.42(6) 126.98(7) 48.31(6) 51.70(6) 115.85(6) 49.24(5) 102.88(5) 27.82(5) 117.13(7) 98.68(7) 151.34(7) 77.43(5) 74.74(5) 128.74(4) 115.06(4) 95.3(9) 18.3(3) 95.8(3) 86.6(9) 102.5(3) 165.3(9) 62.1(6) 117.9(7) 119.9(9) 72.7(6) 121.0(7) 17.5(4)104.8(6) 152.7(5) 77.1(8) 149.8(4) 59.1(8) 81.3(4) 102.8(7) 117 15(9) 89.46(9) 96.55(8) 83.33(9) 158.75(10) 88.83(7) 86.12(9) 94.43(8) 169.00(9) 80.66(7) 158.86(9) 82.87(8) 81.04(7) 77.67(7) 99.71(8) 48.36(6) 135.06(7) 121.74(7) 54.00(6) 48.74(7) 122.62(6) 114.57(7) 118.76(7) 53.57(5) 49.91(5) 119.71(7) 45.08(5) 103.59(5) 86.38(7) 32.68(6) 85.64(6) 168.36(7) 104.11(6) 111.46(6) 121.35(4) 131.54(5) 103.0(4) 90.6(9) 160.9(6) 78.5(9) 17.4(3) 82.3(3) 61.2(6) 107.6(7) 109.2(9) 74.3(5) 96.3(8) 17.1(4)

O(5)#2-Na(2)-H(61) O(4) - Na(2) - H(61)O(8)#2-Na(2)-H(61) Na(1)-Na(2)-H(61) Na(3)#2-Na(2)-H(61) Na(3)#3-Na(2)-H(61) H(42)-Na(2)-H(61) O(3)-Na(2)-H(62) O(7)#3-Na(2)-H(62) O(6)-Na(2)-H(62) O(5)#2-Na(2)-H(62) O(4)-Na(2)-H(62) O(8)#2-Na(2)-H(62) Na(1)-Na(2)-H(62) Na(3)#2-Na(2)-H(62) Na(3)#3-Na(2)-H(62) H(42)-Na(2)-H(62) H(61)-Na(2)-H(62) O(2)-Na(3)-O(8) O(2)-Na(3)-O(7) O(8)-Na(3)-O(7) O(2)-Na(3)-O(4) O(8)-Na(3)-O(4) O(7)-Na(3)-O(4) O(2)-Na(3)-O(5) O(8)-Na(3)-O(5) O(7)-Na(3)-O(5) O(4)-Na(3)-O(5) O(2)-Na(3)-O(6)#1 O(8)-Na(3)-O(6)#1 O(7)-Na(3)-O(6)#1 O(4)-Na(3)-O(6)#1 O(5)-Na(3)-O(6)#1 O(2)-Na(3)-Na(1) O(8)-Na(3)-Na(1) O(7)-Na(3)-Na(1) O(4)-Na(3)-Na(1) O(5)-Na(3)-Na(1) O(6)#1-Na(3)-Na(1) O(2)-Na(3)-Na(2)#1 O(8)-Na(3)-Na(2)#1 O(7)-Na(3)-Na(2)#1 O(4)-Na(3)-Na(2)#1 O(5)-Na(3)-Na(2)#1 O(6)#1-Na(3)-Na(2)#1 O(0)#1-Na(3)-Na(2)#1 O(2)-Na(3)-Na(2)#4 O(8)-Na(3)-Na(2)#4 O(7)-Na(3)-Na(2)#4 O(7)-Na(3)-Na(2)#4 O(5)-Na(3)-Na(2)#4 O(6)#1-Na(3)-Na(2)#4 Na(1)-Na(3)-Na(2)#4 Na(2)#1-Na(3)-Na(2)#4 O(2)-Na(3)-H(21) O(8)-Na(3)-H(21) O(7)-Na(3)-H(21) O(4)-Na(3)-H(21) O(5)-Na(3)-H(21) O(6)#1-Na(3)-H(21) Na(1)-Na(3)-H(21) Na(2)#1-Na(3)-H(21) Na(2)#4-Na(3)-H(21) O(2)-Na(3)-H(51) O(8)-Na(3)-H(51) O(7)-Na(3)-H(51) O(4)-Na(3)-H(51) O(5)-Na(3)-H(51) O(6)#1-Na(3)-H(51) Na(1)-Na(3)-H(51) Na(2)#1-Na(3)-H(51) Na(2)#4-Na(3)-H(51) H(21)-Na(3)-H(51) O(2)-Na(3)-H(71) O(8)-Na(3)-H(71) O(7)-Na(3)-H(71) O(4)-Na(3)-H(71) O(5)-Na(3)-H(71) O(6)#1-Na(3)-H(71) Na(1)-Na(3)-H(71) Na(2)#1-Na(3)-H(71) Na(2)#4-Na(3)-H(71) H(21)-Na(3)-H(71) H(51)-Na(3)-H(71) Na(3)-O(2)-Na(1) Na(3)-O(2)-H(21)

Table 3 continued

94.7(8) 160.3(5) 98.0(4) 113.4(7) 68.6(6) 77.2(7) 173.0(12) 101.3(6) 79.6(5) 17.6(4) 103.0(6) 172.0(5) 74.4(7) 139.1(4) 60.0(7) 73.7(7) 155.7(7) 27.5(3) 160.84(10) 102.67(9) 91.72(9) 83.21(9) 107.27(10) 98.82(8) 82.20(7) 83.57(9) 96.95(7) 160.51(9) 82.32(8) 83.15(8) 174.87(9) 82.85(7) 82.44(7) 48.34(6) 127.33(7) 132.90(7) 49.48(7) 111.05(7) 51.58(5) 106.18(6) 54.66(8) 129.40(7) 124.96(7) 48.45(5) 46.93(5) 96.93(4) 71.07(6) 120.10(7) 32.79(6) 103.13(6) 84.23(5) 151.59(6) 111.77(4) 131.54(5) 16.9(4) 147.8(5) 100.5(8) 100.1(4) 65.6(4) 83.9(8) 61.7(6) 95.7(6) 67.8(8) 90.5(7) 79.5(8) 79.9(4) 173.2(8) 17.7(3) 99.0(4) 127.1(4) 59.4(6) 72.1(6) 73.6(8) 116.6(6) 75.7(5) 17.2(4) 109.3(5) 88.8(5) 157.9(4) 149.7(3) 113.3(3) 45.6(6) 110.9(11) 71.1(Ô) 83.98(8) 105(2)

Table 3 continued	
Na(1)-O(2)-H(21)	138(3)
Na(3)-O(2)-H(22)	138(3)
Na(1)-O(2)-H(22)	94(2)
H(21)-O(2)-H(22)	104.45(19)
Na(2)-O(3)-Na(1)	83.33(8)
Na(2)-O(3)-H(31)	125(2)
Na(1)-O(3)-H(31)	118(3)
Na(2)-O(3)-H(32)	123(3)
Na(1)-O(3)-H(32)	99(3) 104 45(10)
$\Pi(31)-\Omega(3)-\Pi(32)$	104.45(19)
Na(1) - O(4) - Na(3) Na(1) $O(4) Na(3)$	79.11(6) 79.56(8)
$N_{2}(3) - O(4) - N_{2}(2)$	157 70(12)
Na(3)-O(4)-H(41)	125(3)
Na(3)-O(4)-H(41)	100(2)
Na(2)-O(4)-H(41)	97(2)
Na(1)-O(4)-H(42)	130(3)
Na(3)-O(4)-H(42)	98(3)
Na(2)-O(4)-H(42)	90(3)
H(41)-O(4)-H(42)	104.46(18)
Na(2)#1-O(5)-Na(3)	81.64(7)
Na(2)#1-O(5)-Na(1)#1	76.75(6)
Na(3)-O(5)-Na(1)#1	157.08(8)
Na(2)#1-O(5)-H(51)	122(3)
Na(3)-O(5)-H(51)	88(3)
Na(1)#1-O(5)-H(51)	110(3)
Na(2)#1-O(5)-H(52)	133(3)
Na(3)-O(5)-H(52)	96(3)
Na(1)#1-O(5)-H(52)	93(3)
H(51)-O(5)-H(52)	104.46(19)
Na(2)-O(6)-Na(1)#2	147.84(9)
Na(2)-U(6)-Na(3)#2	79.50(7) 72.57(6)
Na(1)#2-O(0)-Na(3)#2 Na(2) O(6) H(61)	(0) (0)
$N_{2}(1) \#_{2}(0(6) - H(61))$	99(3)
Na(3)#2-O(6)-H(61)	149(3)
Na(2)-Q(6)-H(62)	95(3)
Na(1)#2-O(6)-H(62)	109(3)
Na(3)#2-O(6)-H(62)	106(3)
H(61)-O(6)-H(62)	104.44(18)
Na(3)-O(7)-Na(2)#4	114.53(11)
Na(3)-O(7)-H(71)	100(3)
Na(2)#4-O(7)-H(71)	120(3)
Na(3)-O(7)-H(72)	117(3)
Na(2)#4-O(7)-H(72)	101(3)
H(71)-O(7)-H(72)	104.46(19)
Na(3)-O(8)-Na(2)#1	80.25(9)
Na(3)-O(8)-H(81)	130(2)
Na(2)#1-O(8)-H(81)	101(3)
Na(3)-U(δ)-Π(δ2)	12b(2)
Na(2)#1-U(δ)-H(δ2)	09(3) 104 49(10)
Π(01)-Ψ(0)-Π(02)	104.40(13)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 x-1/2,-y+2,z #2 x+1/2,-y+2,z #3 x+1/2,-y+1,z #4 x-1/2,-y+1,z
	U11	U22	U33	U23	U13	U12
\/(1)	10(1)	16(1)	12(1)	2/1)	0(1)	0(1)
$\mathcal{O}(1)$	10(1)	22(1)	24(1)	2(1)	3(1)	0(1)
O(1)	4J(1) 24(1)	22(1)	24(1)	0(1) 6(1)	-5(1)	-3(1)
O(11)	22(1)	28(1)	29(1)	0(1)	-3(1)	-2(1)
O(12)	22(1)	10(1)	17(1)	-3(1)	3(1)	-2(1)
Na(1)	28(1)	33(1)	25(1)	-7(1)	1(1)	0(1)
Na(2)	28(1)	34(1)	31(1)	-7(1)	5(1)	-2(1)
Na(3)	31(1)	32(1)	24(1)	3(1)	-2(1)	2(1)
O(2)	31(1)	32(1)	29(1)	11(1)	6(1)	4(1)
O(3)	44(1)	29(1)	32(1)	8(1)	0(1)	1(1)
O(4)	40(1)́	20(1)	22(1)	-2(1)	4(1)	-3(1́)
O(5)	30(1)	25(1)	24(1)	2(1)	-5(1)	-4(1)
O(6)	30(1)	29(1)	27(1)	-1(1)	2(1)	1(1)
O(7)	29(1)	31(1)	25(1)	1(1)	-2(1)	6(1)
O(8)	35(1)	54(2)	48(2)	30(1)	-18(1)	-20(1)

Table 4.Anisotropic displacement parameters $(A^2 \times 10^3)$ for 9. The anisotropic displacement factor
exponent takes the form: -2 pi² [h² a*² U11 + ... + 2 h k a* b* U12].

Table 5.	Hydrogen coordinates	(x 10 ⁴)	and isotropic displacement parameters	(A ² x 10 ³) for 9.
----------	----------------------	-----------------------	---------------------------------------	--

	Х	у	Z	U(eq)	
LI(21)	200(14)	6800(50)	6750/20)	EE(2)	
⊓(∠1) H(22)	200(14)	5810(40)	6750(30)	55(3)	
H(31)	3800(30)	57/5(19)	6980(20)	55(3)	
H(32)	4050(40)	7490(40)	7262(16)	55(3)	
H(41)	2410(30)	6207(17)	4500(30)	55(3)	
H(42)	2490(30)	7940(60)	4114(17)	55(3)	
H(51)	-1550(30)	8150(50)	5180(20)	55(3)	
H(52)	-1220(30)	8270(50)	6092(17)	55(3)	
H(61)	6120(30)	7910(50)	6142(17)	55(3)	
H(62)	6380(30)	8020(50)	5212(19)	55(3)	
H(71)	-537(19)	5440(50)	3556(15)	55(3)	
H(72)	280(20)	4390(50)	3592(16)	55(3)	
H(81)	274(18)	10750(40)	3130(20)	55(3)	
H(82)	-638(10)	10050(50)	3230(30)	55(3)	

9 Veröffentlichungen

$\label{eq:monorganotin-polyoxometal-compounds^{1}} III. Synthesis and crystal structure of [(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}] \cdot 3DMSO$

Maher Izaaryene, Guido Kastner and Hans Reuter*

Universität Osnabrück, Institut für Chemie, Anorganische Chemie II, Barbarastr. 7, 49069 Osnabrück, Germany

Received November 4, 2004; accepted January 31, 2005

Organotin compounds / Vanadium / Heteropolyoxometal compounds / Single crystal structure analysis / X-ray diffraction

Abstract. The synthesis, molecular and crystal structure of $(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2} \cdot 3 DMSO$ (1) are described. The yellow compound crystallizes in the monoclinic space group P2(1)/n (No. 14) with a = 17.961(5) Å, c = 26.748(6) Å, b = 19.222(4) Å, $\beta = 106.776(2)^{\circ},$ $V = 8842(4) \text{ Å}^3$, Z = 4. The neutral monoorganotin-polyoxovanadium molecule (ⁿBuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂ × (dmso)₂ (1a) shows the same distorted icosahedral arrangement of the metal atoms and a very similar metal-oxygen framework as the well known $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ ion (2) from which it can be derived formally by substitution of three square pyramidally coordinated $\{RSnO_4\}$ groups by three $\{OVO_4\}$ groups of the same geometry. In addition, two further $\{RSnO_4\}$ groups are replaced by two octahedral {RSnO₃Cl(dmso)} units.

Introduction

Our interest in the field of monoorganotin-polyoxometalcompounds was started by a work of Müller et al. where they describe the anion $[(VO)_{12}O_{12}F_2(OH)_6]^{6-}$ [1]. The structure of this anion is characterized by a central sixmembered ring of edge condensed, square-pyramidally coordinated $\{OVO_4\}$ units. This ring is capped at both sides by two trimeric units each consiting of three edge-sharing $\{OVO_4F\}$ octahedra with one common fluorine atom located inside the VO-cage.

This metalate ion is isostructural with the long known isopolyoxotin cation $[(RSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ (2) [2, $R = {}^{i}Pr$] [3, 4, 5, $R = {}^{n}Bu$], the structure of which is shown schematically in Fig. 1. This structural relationship between both compounds was the starting point for our search for mixed monoorganotin-polyoxometal compounds.

In the past, we were able to show that it is possible to replace one of the square pyramidally coordinated $\{RSnO_4\}$ groups of the $[(^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_6]^{2+}$ cage ion by a {OVO₄} group [6]. The resulting ion of the composition $[({}^{i}PrSn)_{11}(VO)O_{14}(OH)_{6}]^{+}$ (3) was the first example of a mixed monoorganotin polyoxovanadium compound with icosahedral metal arrangement.

We now report on the synthesis and crystal structure of $[({}^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}] \cdot 3 DMSO$ (1) in which the substitution of three organotin groups by oxovanadium groups was achieved. As usually, we prepared this compound in an aprotic polar solvent via self-organization of appropriate precursors. Although the composition of 1 is somewhat different to the composition of the mixture of the two precursors we found that its formation is strictly related to the experimental conditions we describe. Small deviations in composition, precursors, temperature and solvent lead to the formation of other compounds, as well as applying stoichiometric amounts of the precursors keeping all other conditions constant.

Experimental section

Synthesis

1 g (4.34 mmol) $^{n}BuSn(OH)_{2}Cl$ [synthesis see Ref. 2] and 0.18 g (0.5 mmol) vanadiumoxide acetylacetonate were dis-

Fig. 1. Schematic ball-and-stick model of the tin-oxygen framework within the $[({}^{i}PrSn)_{12}O_{14}(OH)_{6}]^{2+}$ – ion, **2**; tin atoms are shown as grey, oxygen atoms as white balls; bonds from tin to carbon are indicated by short sticks; in the case of the $[(VO)_{12}O_{12}F_{2}(OH)_{6}]^{6-}$ – ion the two oxygen atoms inside the cage are replaced by fluorine atoms, whereas the additional oxygen atoms at vanadium adopt the positions of the carbon atoms bonded to tin.



¹ For Part II see Main Group Met. Chem. **23(7)** (2000) 331–336.

^{*} Correspondence author (e-mail: hreuter@rz.uni-osnabrueck.de)

solved in 25 ml dimethylsulfoxide, DMSO. This suspension was stirred at room temperature for 24 hours. After this time most of the compounds were dissolved and the liquid had turned green. The solution was filtered off from undissolved material into a crystallization vessel and the solvent was left to evaporate. During some weeks the solvent volume reduced to half of the inital value and clear, slightly yellow needles of the title compound formed.

These are stable within the mother liquid for months but weather outside it within several minutes, probably, by loss of solvent molecules.

X-ray crystallography

A single crystal of **1** was selected under a polarisation microscop and placed in a sealed Lindemann capillary for crystal data determination and intensity data collection on a Simens *P*4 four-circle diffractometer with graphite-monochromated Mo K_{α} radiation. The measurement was carried out at ambient temperature (293 K). The unit cell was refined from 42 reflections in the range of range $4.84^{\circ} \le \theta \le$ 12.57° . A total of 12 847 reflections were collected in the range $1.91^{\circ} \le \theta \le 22^{\circ}$ giving 10733 independent reflections ($R_{int} = 0.0365$) and 9108 reflections with $I > 2\sigma(I)$.

The structure was solved by standard Direct Methods and refined from successive difference Fourier syntheses. Four of the five solvent molecules were statistically disordered (for details see below). Their geometries as well as those of the n-butyl groups were constraint with respect to bond lengths and angles. The refined structure model includes besides the atomic coordinates of all non-H atoms (H-atoms were fixed), anisotropic thermal parameters for Sn-, V-, Cl- and O-atoms of 1a, isotropic thermal parameters for all C- and S-atoms, the O-atoms of the solvent molecules and one common isotropic thermal parameter for all H atoms. The site occupation factors of the disordered parts of the solvent molecules were also refined. The final cycle of refinement converged at $R_1 = 0.0622$, $wR_2 = 0.1632$ [I > $2\sigma(I)$]. In the final difference Fourier map the largest peak and hole were 1.209 $eÅ^{-3}$ and $-1.452 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$, respectively. Further crystallographic data are summarized in Table 1. Structure solution and refinement were carried out using the SHELXTL program package $[8]^2$.

Results and discussion

The asymmetric unit of the crystal structure of **1** consists of one neutral (${}^{\rm B}$ BuSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmso)₂ molecule **1a** and **3** DMSO molecules not coordinated to tin atoms but bonded via hydrogen bridges to the neutral molecule. As all atoms are in general positions, the cage molecule has C₁ symmetry for crystallography reasons. As can be seen from Fig. 2, the local symmetry of the metaloxygen framework, however, shows a mirror plane in addition. The deviation [pm] of the corresponding atoms

Table 1. Crystal data, data collection and structure refinement parameters of $[(^{n}BuSn)_{9}(V^{V}O)_{3}O_{14}(OH)_{6}Cl_{2}(dmso)_{2}]$ 3DMSO.

Empirical formula	$C_{46}H_{117}Cl_2O_{28}S_5Sn_9V_3$		
	2130.01 202(2) K		
Temperature	293(2) K		
wavelength	0./1069 A		
Crystal system	Monoclinic		
Space group	P2(1)/n (no. 14)		
Unit cell dimensions	a = 17.961(5) A		
	b = 19.222(4) Å		
	c = 26.748(6) Å		
	$\beta = 106.776(2)^{\circ}$		
Volume	8842(4) Å ³		
Ζ	4		
Density (calculated)	1.931 g/cm ³		
Absorption coefficient	3.036 mm^{-1}		
F(000)	5000		
Crystal size	0.5 \times 0.5 \times 0.6 mm ³		
Crystal description	fragment of a broad needle		
Crystal colour	yellow		
θ range for data collection	1.91 to 22°.		
Index ranges	$\begin{array}{l} -18 \leq h \leq 1, -1 \leq k \leq 20, \\ -27 \leq l \leq 28 \end{array}$		
Absorption correction	empirical from psi-Scans		
max./min. transmission	0.9928/0.4906		
Reflections collected	12874		
Independent reflections	10733 [$R(int) = 0.0365$]		
Completeness	99.0%		
Refinement method	full-matrix least-squares on F^2		
Data/restraints/parameters	10733/99/585		
Goodness-of-fit on F^2	1.027		
Final <i>R</i> indices $[I > 2\sigma(I)]$	$R_1 = 0.0622, wR_2 = 0.1632$		
Final R indices [all data]	$R_1^a = 0.0734, w R_2^b = 0.1712$		
Largest diff. peak and hole	1.209 and $-1.452\ e{\rm \AA}^{-3}$		

a: $R_1 = \sum (|F_0| - |F_c|) / \sum |F_0|$ b: $wR_2 = [\sum w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$

from their least-squares plane are as follows: O(21) = 0.6, V(1) = -0.5, Sn(2) = -0.2, O(9) = 0.7, O(10) = -0.9, Sn(7) = 1.1, Sn(8) = -0.5, O(19) = -0.1, O(20) = -0.2.

One structural feature of the cage molecule $1a^3$ which is also present in the parent molecule 2, is characterized by two trimeric building units wherein each of the three {ⁿBuSnO₅} octahedra shares two edges with the two other one. Such trimeric building units, Fig. 3, are typical for compounds of the Keggin structure types realized in many heteropolyoxometalates [9] as well as in the supramolecular monoorganotin ion [Na \subset (ⁱPrSn)₁₂O₄(OH)₂₄]⁵⁺ [10].

² Crystallographic data for the structural analysis have been deposited with the Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC No. 252569 for compound **1**. Copies of this information may be obtained free of charge from The Director of the CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ (Fax: +44-(1223)-336-033 or e-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk).

³ We were also able to synthesize the corresponding isopropyl molecule which we could isolate from dmso solution in two different compounds. Compound A crystallized monoclinic, space group $P_{2_1/c}$ (no. 14) with a = 14.345(4), b = 21.640(5), c = 27.309(6) Å, $\beta = 97.00(2)^{\circ}$, V = 8413(3) Å³, Z = 4, compound B crystallized tetragonal, space group $I4_1/a$ (no. 88) with a = 23.245(1), c = 53.472(1) Å, V = 31 595(9) Å³, Z = 16. Although crystals of both compounds were of bad quality we could collect data sets and determine the structures, thus confirming the presence of the (¹PrSn)₉(V^VO)₃O₁₄(OH)₆Cl₂(dmso)₂ – molecule. These results are not acceptable by our standards.



Fig. 2. Ball-and-stick model of **1a**, showing the atomic numbering scheme used; for lack of space the signs for Sn(11) [opposite to Sn(9)], O(12) [opposite to O(15)] and O(22) [bonded to V(3)] were omitted; atoms were shown as thermal displacement ellipsoids representing the 50% level; the ⁿBu groups were omitted for clarity but their positions in relation to the metal oxygen framework were indicated by their bonds to the corresponding tin atoms; the position of the dmso molecules coordinated to Sn(9) and Sn(11) are marked by dashed lines.

In contrast to **2**, however, three of the six square pyramidally coordinated {RSnO₄} groups whithin the central ring connecting both trimeric building units are substituted by {OVO₄} units having a square pyramidal coordination as shown on the right side of Fig. 4. From the remaining three tin positions only one [Sn(7)] shows a square pyramidal coordination as the left side of Fig. 4 demonstrates. Two further positions are replaced by {ⁿBuSnO₃Cl(dmso)} groups of octahedral shape.

Because two tin sites in this ring are no longer fivefold, square-pyramidally coordinated, the metal-oxygen skeleton of the cage molecule shows some differences to that found in **2**. Two of the formerly μ_3 -oxygen atoms [O(7)/O(8)] now are only twofold coordinated each bridging one tin and vanadium atom.

A further distortion of the metal-oxygen framework arises from the fact that the three edge-sharing {OVO₄} groups show shorter metal-oxygen_{basal}-bonds ($d_{V-O} =$ 1.708-2.069 Å, $\overline{d}_{V-O} =$ 1.895 Å) than those of the



M. Izaaryene, G. Kastner and H. Reuter

2.097 Å, $\overline{d}_{Sn-O} = 2.049$ Å). The V–O_{apical} distances are 1.598(10), 1.577(9) and 1.590(9) Å for V(1), V(3) and V(5), respectively and the calculation of V–O bond valences [13] for these vanadium atoms gave a valence sum of +5.218, +4.877 and +5.050, respectively, which is in good agreement with V^V.

The metal atoms of **1a** are arranged in the form of a distorted icosahedron with V...V distances of 2.990 Å $[d_{V(1)-V(3)}]$ and 2.978 Å $[d_{V(1)-V(5)}]$, V...Sn distances in the range 3.193–3.676 Å and Sn...Sn distances from 3.250 to 3.829 Å.

The great differences in Sn...Sn distances arises from the different coordination spheres, especially, found around Sn(9) and Sn(11). In both cases a chlorine atom and a slightly disordered dmso molecule are coordinated to the tin atom (see Fig. 5). The corresponding tin chlorine distances are $d_{\text{Sn}(9)-\text{Cl}(2)} = 2.587(4)$ Å and $d_{\text{Sn}(11)-\text{Cl}(1)} = 2.517(4)$ Å. These values are very similar to corresponding tin-chlorine distances in octahedrally coordinated monoorganotin building units found for example in (¹PrSn)₉O₈(OH)₆Cl₅ · 6 DMSO (**5**) [11], $d_{\text{Sn-Cl}} = 2.504-$ 2.554 Å where, in addition, the corresponding chlorine atoms are involved in hydrogen bridges.

The coordinative Sn–O bond lengths are 2.253/ 234.1 Å [Sn(9)] and 2.430/2.216 [Sn(11)] for each of disordered dmso molecules. Especially in the case of the longer bonds lengths these values indicate a much weaker bond than it is normally observed. For example, in other compounds with coordinative O_{DMSO} -Sn bonds and octahedrally coordinated tin atoms like ⁱPrSnCl₃ · 2DMSO [12] the tin oxygen distances are in the range 2.186– 2.203 Å. For further geometrical details around Sn(9) and Sn(11) see Table 2.

The crystal structure of **1** is completed by a number of intra- and intermolecular hydrogen bonds. As the refinement of hydrogen atom positions in this structure was not very reliable hydrogen bonds will only be discussed in terms of donor-acceptor distances.

Within the cage molecule **1a**, two intramolecular hydrogen contacts exist because of geometrical conditions.

Fig. 4. Perspective view of the square pyramidal coordination sphere around Sn(7) and V(1) with the atomic numbering scheme used; carbon and hydrogen atoms are shown as spheres with arbitrary radii; in both cases the basal positions are formed by oxygen atoms whereas the organic ligand and O(21) occupy the apical positions within the coordination polyhedra at tin or vanadium, respectively; V(3) and V(5) show a similar geometry.

Fig. 3. Polyhedra model of 1a showing the different coordination polyhedra around tin and vanadium as well as their interconnection scheme; same orientation as in Fig. 2; oct = octahedral, spy = square pyramidal coordination.





Fig. 5. Perspective view of the distorted octahedral coordination sphere around Sn(9) with the atomic numbering scheme used; carbon and hydrogen atoms are shown as spheres with arbitrary radii; the coordinative bond between one of the two disordered dmso-molecules and the tin atom is indicated by a broken rod, bonds within the dmso-molecule by open rods; the same geometry is adopt from Sn(11).

These contacts exist between the μ_2 -OH groups of O(13) and O(16) towards Cl(2) and Cl(1), respectively. In these special cases, the O...Cl distances are 3.117(12) Å and 3.172(10) Å. Intramolecular hydrogen contacts with similar O...Cl distances and geometries were observed in **5**.

Intermolecular hydrogen bonds connect the three additional DMSO molecules with **1a**. One solvent molecule acts as hydrogen bond acceptor for the μ_2 -OH group of O(3), the O(3)...O(300)/O(305) distances are 2.623/ 2.711 Å. This DMSO molecule is disordered with a site occupation of 50% and 50% for the two positions of the sulphur atom at both sides of the O–C–C plane. A second DMSO molecule shows no disorder. It recieves a hydrogen bond from the μ_2 -OH group of O(6), the O(6)...O(200) distance being 2.740 Å. A third DMSO molecule is disordered again (50/50) mainly with respect to the sulfur position and bonds to the μ_2 -OH group of O(20) with O(20)...O(500)/O(505) distances of 2.566 and 2.782 Å, respectively.

Table 2. Selected bond angles within the octahedral coordination spheres of Sn(9) and Sn(11); O₁ is the oxygen atom *trans* to the organic moiety [O(12)/O(15)], O₂ is *trans* to the chlorine atom [O(11)/O(14)] and O₃ is the third oxygen atom [O(17)/O(18)] in the {RSnO₃Cl(dmso)}-octahedron; O_{dmso} = O(600)/Sn(9) and O(400)/Sn(11).

Angles	Sn(9)	Sn(11)	
C-Sn-Cl	91.0(4)	96.0(5)	
C-Sn-O ₁	163.9(4)	160.8(5)	
C-Sn-O ₂	104.7(4)	97.6(5)	
C-Sn-O ₃	99.6(4)	103.3(5)	
C-Sn-O _{dmso}	80.5(6)	83.1(8)	
Cl-Sn-O ₁	84.8(2)	88.3(3)	
Cl-Sn-O ₂	159.4(2)	163.9(3)	
Cl-Sn-O ₃	93.4(2)	89.6(3)	
Cl-Sn-O _{dmso}	90.0(4)	90.0(4)	
$O_1 - Sn - O_2$	76.4(3)	76.1(3)	
$O_1 - Sn - O_3$	96.2(3)	95.4(3)	
O ₁ -Sn-O _{dmso}	83.9(6)	78.2(6)	
$O_2 - Sn - O_3$	96.8(3)	95.7(3)	
O ₂ -Sn-O _{dmso}	79.9(5)	83.0(4)	
O ₃ -Sn-O _{dmso}	176.6(5)	173.6(6)	

In contrast to all other μ_2 -OH groups of **1a** the μ_2 -OH group of O(10) does not act as hydrogen bond donor in our structure model.

Conclusion

The isolation of **1** shows that it is possible to substitute three of the square-pyramidal { $RSnO_4$ } groups by square pyramidal { OVO_4 } groups under retention of the icosahedral metal arrangement. Because the V $-O_{basal}$ single bonds are shorter than the corresponding Sn-O bonds and because all three { OVO_4 } units are condensed with each other the metal-oxygen framework is stressed and obviously forced to incorporate sixfold octahedrally coordinated organotin moieties.

Acknowledgments. The authors gratefully acknowledge financial support from the Lichtenberg Stiftung of the Federal State of Lower Saxony within the Graduate School "Synthesis and Characterisation of Surfaces and Interfaces Assembled from Clusters and Molecules" and would like to thank Prof. Dr. K. Jurkschat and Dr. M. Schürmann, University of Dortmund, for the data collection in case of compound B of the isopropyl molecule.

References

- Müller, A.; Rohlfing, R.; Krickemeyer, E.; Bögge, H.: Steuerung der Verknüpfung anorganischer Einheiten in V–O-Verbindungen: von Clusterhüllen als molekularen Containern über Clusteraggregate zu Festkörperstrukturen. Angew. Chem. **105** (1993) 916–918.
- [2] Puff, H.; Reuter, H.: Zur Hydrolyse von Monoorganylzinn-trihalogeniden III. Isolierung und Röntgenstrukturanalyse von Verbindungen mit dem neuartigen Käfig-Ion [(ⁱPrSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺. J. Organomet. Chem. **373** (1989) 173–184.
- [3] Dakternieks, D.; Zhu, H.; Tiekink, E. R.T.; Colton, R.: Synthesis, structure and reactions of [(BuSn)₁₂O₁₄(OH)₆]Cl₂ · 2 H₂O: solution studies using ¹¹⁹Sn NMR and electrospray mass spectrometry. J. Organomet. Chem. **476** (1994) 33–40.
- [4] Banse, F.; Ribot, F.; Tolédano, P.; Maquet, J.; Sanchez, C.: Hydrolysis of Monobutyltin Trialkoxides: Synthesis and Characterizations of [(BuSn)₁₂O₁₄(OH)₆](OH)₂. Inorg. Chem. **34** (1995) 6371–6379.
- [5] Eychenne-Baron, C.; Ribot, F.; Sanchez, C.: New synthesis of the nanobuilding block [(BuSn)₁₂O₁₄(OH)₆]²⁺ and exchange properties of [(BuSn)₁₂O₁₄(OH)₆](O₃SC₆H₄CH₃)₂. J. Organomet. Chem. **567** (1998) 137–142.
- [6] Reuter, H.; Kastner, G.; Monoorganotin-polyoxometal-compounds I. Synthesis and Crystal Structure of $[(^{i}PrSn)_{11}(V^{IV}O)O_{14}(OH)_6]Cl \cdot 2DMF \cdot H_2O$. The first example in a series of monoorganotin-polyoxometal-compounds with icosahedral metal arrangement and various contents of tin and vanadium. J. Organomet. Chem. **598** (2000) 381–386.
- [7] Siemens XSCANS, Version 2.2, Siemens Analytical X-Ray Instruments Inc, Madison (WI 53719), USA, 1996.
- [8] Sheldrick, G. M.: Program Package SHELXTL, Release 5.1. Siemens Analytical X-Ray Instruments Inc, Madison (WI 53719), USA, 1997.
- [9] Keggin, J. F.: Structure of the Molecule of 12-Phosphotungstic Acid. Nature 131 (1933) 908–909.
- [10] Reuter, H.: Einschluss von Metallatomen in einem durch organische Reste stabilisierten Zinn-Sauerstoff-Käfig: Kristallstruktur von [(ⁱPrSn)₁₂O₄(OH)₂₄][Ag₇I₁₁]NaClH₂O · 10DMSO. Angew. Chem. **103** (1991) 1487–1489.
- [11] Puff, H.; Reuter, H.: Zur Hydrolyse von Monoorganylzinn-trihalogeniden II. Darstellung und Struktur des i-Propylzinn-oxid-hydroxid-chlorids (i-PrSn)₉O₈(OH)₆Cl₅ · 6DMSO. J. Organomet. Chem. **368** (1989) 173–183.
- [12] Kastner, G.; Reuter, H.: Coordination complexes of tin: II. Investigations into the crystal chemistry of ⁱPrSnCl₃ · 2DMSO. Main Group Metal Chemistry 22 (1999) 605–609.
- [13] Willis, A. S.; Brown, I.: VaList, CEA, France, 1999.