

Table 2S. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 2:5. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
P(1)	3456(1)	3548(1)	619(1)	44(1)
P(2)	11191(2)	3795(1)	3741(1)	65(1)
F(1)	9890(8)	3509(3)	3473(3)	180(3)
F(2)	11765(8)	3289(3)	3487(3)	95(2)
F(3)	10481(13)	3483(5)	4182(4)	64(3)
F(2')	12440(14)	3465(6)	3431(5)	89(4)
F(3')	12127(14)	3311(5)	4197(5)	80(3)
F(3'')	11142(14)	3433(5)	4226(4)	59(3)
F(4)	12408(5)	4143(2)	3968(2)	112(2)
F(5)	10302(5)	4304(2)	3963(2)	129(2)
F(6)	11144(5)	4197(2)	3256(2)	105(2)
F(7)	4063(9)	4114(4)	327(3)	82(2)
F(7')	3754(8)	3906(4)	127(3)	78(2)
F(8)	3185(4)	4060(2)	994(2)	97(1)
F(9)	3703(5)	3029(2)	242(2)	117(2)
F(10)	4904(4)	3479(2)	844(2)	99(2)
F(11)	1990(4)	3605(2)	383(2)	86(1)
F(12)	3013(4)	3081(2)	1005(2)	82(1)
O(1)	12420(3)	650(1)	1586(1)	36(1)
O(2)	11219(3)	1138(1)	728(1)	42(1)
O(3)	9165(3)	1987(1)	608(1)	35(1)
O(4)	6646(3)	1982(1)	1007(1)	37(1)
O(5)	5583(3)	977(1)	1439(1)	34(1)
O(6)	5150(3)	610(1)	3197(1)	37(1)
O(7)	6271(3)	1064(1)	4080(1)	37(1)
O(8)	8279(3)	1858(1)	4344(1)	40(1)
O(9)	10774(3)	1741(2)	3937(1)	46(1)
O(10)	11952(3)	853(2)	3366(1)	43(1)
O(11)	9752(6)	3044(2)	1850(2)	105(2)
O(12)	5154(11)	2467(5)	2543(4)	185(4)
N(1)	8963(5)	787(2)	3853(1)	47(1)
N(2)	8210(3)	912(1)	1044(1)	27(1)
C(1)	12303(5)	317(2)	1127(2)	40(1)
C(2)	12296(5)	748(2)	695(2)	43(1)
C(3)	11334(5)	1676(2)	467(2)	49(1)
C(4)	10516(5)	2132(2)	688(2)	45(1)
C(5)	8356(5)	2488(2)	652(2)	40(1)
C(6)	6953(5)	2317(2)	575(2)	38(1)
C(7)	5289(5)	1896(2)	1027(2)	38(1)
C(8)	5100(4)	1558(2)	1506(2)	34(1)
C(9)	5566(4)	598(2)	1854(2)	32(1)
C(10)	5353(4)	787(2)	2341(2)	31(1)
C(11)	5388(4)	376(2)	2734(2)	32(1)
C(12)	5641(4)	-209(2)	2646(2)	37(1)
C(13)	5860(5)	-380(2)	2150(2)	41(1)
C(14)	5829(4)	15(2)	1755(2)	36(1)
C(15)	5301(4)	243(2)	3641(2)	35(1)
C(16)	5265(5)	641(2)	4091(2)	38(1)
C(17)	6104(5)	1551(2)	4409(2)	46(1)

C(18)	6957(5)	2037(2)	4257(2)	42(1)
C(19)	9172(5)	2333(2)	4294(2)	41(1)
C(20)	10532(5)	2099(2)	4370(2)	43(1)
C(21)	12118(5)	1735(3)	3845(2)	51(1)
C(22)	12253(5)	1457(2)	3331(2)	47(1)
C(23)	12010(4)	517(2)	2931(2)	36(1)
C(24)	11843(5)	-77(2)	2996(2)	46(1)
C(25)	11843(6)	-438(2)	2574(2)	51(1)
C(26)	12036(5)	-219(2)	2091(2)	45(1)
C(27)	12217(4)	372(2)	2039(2)	32(1)
C(28)	12207(4)	748(2)	2457(2)	32(1)
C(29)	11458(5)	232(2)	4538(2)	47(1)
C(30)	12547(6)	-110(4)	4559(3)	80(3)
C(31)	12500(9)	-660(5)	4383(3)	98(4)
C(32)	11312(10)	-891(3)	4183(2)	83(3)
C(33)	10181(6)	-549(2)	4169(2)	44(1)
C(34)	10276(4)	16(2)	4344(1)	28(1)
C(35)	9078(6)	392(2)	4318(2)	49(1)
C(36)	8772(5)	488(2)	3361(2)	35(1)
C(37)	8722(4)	891(2)	2903(2)	30(1)
C(38)	8845(4)	642(2)	2427(1)	27(1)
C(39)	8828(4)	981(2)	1987(1)	28(1)
C(40)	8698(5)	1582(2)	2027(2)	39(1)
C(41)	8555(6)	1833(2)	2498(2)	47(1)
C(42)	8557(5)	1490(2)	2935(2)	39(1)
C(43)	9065(4)	680(2)	1491(1)	33(1)
C(44)	8178(5)	505(2)	594(2)	36(1)
C(45)	7330(5)	735(2)	142(2)	33(1)
C(46)	7876(5)	989(2)	-269(2)	37(1)
C(47)	7097(6)	1201(2)	-685(2)	47(1)
C(48)	5762(6)	1154(2)	-692(2)	51(1)
C(49)	5200(6)	905(3)	-286(2)	53(1)
C(50)	5986(5)	690(2)	127(2)	41(1)
C(52)	5827(13)	2899(5)	2502(4)	119(4)
C(51)	6467(24)	3180(9)	1953(8)	108(6)
C(53)	6745(18)	3224(7)	2935(6)	80(4)
C(51')	5828(23)	3113(10)	2061(9)	112(7)
C(53')	6110(25)	3155(11)	3001(9)	127(8)
C(54)	11765(10)	2664(4)	2196(3)	106(3)
C(55)	10856(8)	3143(3)	2028(2)	69(2)
C(56)	11362(9)	3742(3)	2070(3)	86(2)
