

Table 4S. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for **2:5**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
P(1)	38(1)	47(1)	48(1)	2(1)	11(1)	3(1)
P(2)	93(1)	51(1)	55(1)	-5(1)	21(1)	-22(1)
F(1)	192(7)	162(6)	185(6)	-37(5)	5(5)	-116(5)
F(4)	79(3)	88(3)	160(5)	-14(3)	-46(3)	3(2)
F(5)	110(4)	128(4)	160(5)	-48(4)	67(4)	-19(3)
F(6)	132(4)	87(3)	93(3)	17(2)	1(3)	6(3)
F(8)	82(3)	70(2)	135(4)	-54(3)	-4(3)	-3(2)
F(9)	123(4)	136(4)	92(3)	-49(3)	12(3)	53(3)
F(10)	41(2)	86(3)	165(4)	23(3)	-13(3)	-7(2)
F(11)	56(2)	93(3)	104(3)	-31(2)	-25(2)	17(2)
F(12)	77(3)	71(2)	102(3)	25(2)	33(2)	-8(2)
O(1)	39(2)	41(2)	29(2)	2(1)	5(1)	-2(1)
O(2)	32(2)	53(2)	41(2)	14(2)	9(2)	0(1)
O(3)	37(2)	32(2)	36(2)	2(1)	3(1)	-6(1)
O(4)	40(2)	39(2)	33(2)	13(1)	6(1)	1(1)
O(5)	37(2)	36(2)	30(1)	5(1)	6(1)	2(1)
O(6)	41(2)	43(2)	27(1)	10(1)	5(1)	8(1)
O(7)	32(2)	44(2)	38(2)	-2(1)	13(1)	2(1)
O(8)	42(2)	38(2)	40(2)	-5(1)	2(2)	9(1)
O(9)	36(2)	67(2)	36(2)	-14(2)	2(2)	12(2)
O(10)	40(2)	61(2)	31(2)	8(1)	12(2)	7(2)
O(11)	101(5)	97(4)	109(4)	24(3)	-35(4)	-30(3)
O(12)	183(10)	172(9)	201(10)	-67(8)	15(7)	-16(7)
N(1)	66(3)	50(2)	25(2)	3(2)	10(2)	29(2)
N(2)	30(2)	31(2)	21(2)	1(1)	2(1)	0(1)
C(1)	38(3)	44(3)	39(2)	-7(2)	5(2)	4(2)
C(2)	37(3)	62(3)	31(2)	-4(2)	9(2)	0(2)
C(3)	44(3)	62(3)	41(3)	18(2)	8(2)	-9(2)
C(4)	40(3)	45(3)	48(3)	6(2)	1(2)	-13(2)
C(5)	53(3)	30(2)	38(2)	3(2)	12(2)	-3(2)
C(6)	47(3)	37(2)	31(2)	13(2)	10(2)	7(2)
C(7)	37(3)	43(2)	35(2)	8(2)	6(2)	4(2)
C(8)	33(3)	36(2)	35(2)	7(2)	9(2)	10(2)
C(9)	22(2)	39(2)	35(2)	5(2)	2(2)	-1(2)
C(10)	25(2)	34(2)	34(2)	3(2)	5(2)	1(2)
C(11)	26(2)	39(2)	31(2)	6(2)	3(2)	-1(2)
C(12)	33(3)	34(2)	43(2)	10(2)	5(2)	2(2)
C(13)	42(3)	35(2)	48(3)	0(2)	6(2)	2(2)
C(14)	35(3)	38(2)	36(2)	-3(2)	4(2)	-1(2)
C(15)	26(2)	42(2)	36(2)	13(2)	3(2)	-1(2)
C(16)	29(3)	53(3)	32(2)	12(2)	9(2)	5(2)
C(17)	48(3)	58(3)	32(2)	-8(2)	12(2)	11(2)
C(18)	39(3)	46(3)	40(2)	-7(2)	1(2)	14(2)
C(19)	50(3)	36(2)	37(2)	-4(2)	7(2)	7(2)
C(20)	46(3)	54(3)	30(2)	-6(2)	2(2)	10(2)
C(21)	36(3)	76(4)	42(3)	-5(2)	6(2)	9(2)
C(22)	45(3)	56(3)	41(3)	2(2)	12(2)	14(2)
C(23)	23(2)	51(3)	34(2)	9(2)	5(2)	3(2)
C(24)	38(3)	57(3)	44(3)	19(2)	7(2)	-5(2)
C(25)	52(3)	43(3)	59(3)	19(2)	-1(3)	-7(2)
C(26)	42(3)	44(3)	48(3)	4(2)	-1(2)	-4(2)

C(27)	22(2)	41(2)	33(2)	7(2)	1(2)	0(2)
C(28)	21(2)	41(2)	34(2)	7(2)	-1(2)	3(2)
C(29)	50(3)	56(3)	34(2)	20(2)	-12(2)	-22(2)
C(30)	30(3)	145(7)	67(4)	67(5)	7(3)	0(4)
C(31)	83(6)	154(8)	63(4)	71(5)	43(4)	77(6)
C(32)	171(9)	38(3)	46(3)	17(2)	41(4)	38(4)
C(33)	67(4)	30(2)	36(2)	7(2)	4(2)	-9(2)
C(34)	33(2)	33(2)	20(2)	8(2)	4(2)	2(2)
C(35)	60(4)	64(3)	24(2)	13(2)	10(2)	28(3)
C(36)	34(3)	48(3)	23(2)	7(2)	2(2)	-8(2)
C(37)	23(2)	43(2)	24(2)	8(2)	0(2)	1(2)
C(38)	20(2)	35(2)	25(2)	2(2)	0(2)	1(2)
C(39)	21(2)	40(2)	23(2)	6(2)	1(2)	2(2)
C(40)	50(3)	40(2)	25(2)	7(2)	-3(2)	4(2)
C(41)	68(4)	37(2)	35(2)	-2(2)	-9(2)	11(2)
C(42)	46(3)	47(3)	25(2)	-4(2)	-3(2)	11(2)
C(43)	33(2)	44(2)	22(2)	6(2)	3(2)	11(2)
C(44)	43(3)	32(2)	32(2)	-6(2)	1(2)	3(2)
C(45)	43(3)	32(2)	24(2)	-6(2)	1(2)	-6(2)
C(46)	41(3)	40(2)	30(2)	-7(2)	4(2)	-6(2)
C(47)	70(4)	45(3)	25(2)	0(2)	0(2)	-10(2)
C(48)	61(4)	55(3)	33(2)	1(2)	-13(3)	2(3)
C(49)	39(3)	71(4)	46(3)	-8(3)	-1(2)	-3(2)
C(50)	36(3)	55(3)	32(2)	-1(2)	4(2)	-9(2)
C(52)	150(11)	98(7)	103(7)	-29(6)	-20(7)	39(7)
C(54)	118(8)	101(6)	94(6)	23(5)	-23(5)	0(5)
C(55)	81(5)	77(4)	45(3)	6(3)	-9(3)	-19(4)
C(56)	115(7)	77(5)	66(4)	-3(3)	13(4)	-27(4)

---