

SUPPLEMENTARY MATERIAL

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF DICARBORANYLMETHYLAMMONIUM POLYOXOMETALLATES

Ramón Macías, John D. Kennedy and Mark Thornton-Pett

1. [C₂B₁₀H₁₁CH₂NH₃]₂[C₂B₁₀H₁₁CH₂NH=CMe₂]₂[Mo₈O₂₆]·4.5Me₂CO (5)

Table 1. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $^{1/3}$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
C(1)	1195.7(4)	1464.1(4)	323.3(3)	46.4(11)
C(2)	1183.9(4)	1315.6(4)	331.1(3)	47.9(11)
B(3)	1059.9(6)	1347.7(6)	274.1(4)	71(2)
B(4)	1138.1(7)	1482.4(6)	235.0(4)	68.4(18)
B(5)	1306.8(6)	1529.2(5)	273.2(3)	54.0(14)
B(6)	1333.3(5)	1421.0(5)	337.3(3)	48.6(13)
B(7)	1284.7(6)	1269.4(5)	289.0(3)	57.3(14)
B(8)	1117.9(7)	1223.7(6)	250.4(4)	75(2)
B(9)	1089.1(9)	1331.0(7)	188.2(5)	98(3)
B(10)	1241.2(9)	1441.5(7)	184.6(4)	84(2)
B(11)	1362.8(7)	1404.3(6)	248.5(4)	68.4(18)
B(12)	1229.4(9)	1281.0(7)	196.0(4)	85(2)
C(13)	1174.8(5)	1535.9(4)	389.4(4)	76(2)
N(14)	1259.4(4)	1667.7(4)	405.7(3)	65.4(12)
C(15)	1333.2(5)	1712.9(7)	466.2(3)	76(2)
C(16)	1403.8(6)	1855.0(6)	473.6(4)	90(2)
C(17)	1360.0(5)	1653.6(6)	533.7(3)	70.4(16)

B(5ab) ^u	700.2(7)	684.3(7)	75.2(4)	68.0(13)
C(1a) ^{pu}	820.9(10)	825.2(11)	132.1(6)	49(2)
C(2a) ^{pu}	762.7(10)	943.8(10)	138.0(6)	58(2)
B(3a) ^{pu}	873.9(13)	951.9(10)	84.2(6)	60(2)
B(4a) ^{pu}	835.7(13)	798.1(11)	45.9(6)	58(2)
B(6a) ^{pu}	665.8(13)	796.0(14)	140.2(7)	56(2)
B(7a) ^{pu}	612.5(19)	902(2)	90.5(11)	75(3)
B(8a) ^{pu}	738.4(15)	999.6(13)	54.8(7)	78(3)
B(9a) ^{pu}	781.3(14)	903.8(12)	-4.4(6)	75(3)
B(10a) ^{pu}	680.2(15)	746.4(14)	-8.1(7)	73(3)
B(11a) ^{pu}	572.7(13)	747.9(14)	50.6(7)	72(2)
B(12a) ^{pu}	622(3)	870(3)	-4.8(9)	83(3)
C(13a) ^{pu}	923.3(16)	811.1(18)	196.0(9)	54(3)
C(1b) ^{pu}	763.7(12)	798.3(13)	128.6(7)	45(2)
C(2b) ^{pu}	658.5(12)	851.6(13)	152.8(8)	53(2)
B(3b) ^{pu}	745.0(17)	934.6(16)	96.3(10)	74(3)
B(4b) ^{pu}	759.5(19)	812(2)	36.7(9)	80(3)
B(5b) ^{pu}	625.6(12)	692.3(13)	144.1(7)	54(2)
B(7b) ^{pu}	506.1(13)	760.1(15)	117.1(8)	66(3)
B(8b) ^{pu}	580(2)	910(3)	84.0(17)	84(4)

Table 1. (continued)

B(9b) ^{pu}	633(3)	881(4)	12.6(14)	96(5)
B(10b) ^{pu}	602(2)	716(2)	-7.7(10)	84(4)
B(11b) ^{pu}	524.5(15)	644.9(16)	57.5(7)	65(2)
B(12b) ^{pu}	496.8(17)	775.7(17)	23.4(9)	80(3)
C(13b) ^{pu}	898.2(16)	826.0(18)	180.6(10)	42(3)
N(14b)	883.5(4)	743.3(4)	248.2(2)	59.5(11)
Mo(1)	1096.40(3)	1022.07(3)	434.276(19)	32.75(12)
Mo(2)	993.92(3)	742.28(3)	481.233(19)	33.40(12)
Mo(3)	702.07(3)	749.07(3)	430.40(2)	38.39(13)
Mo(4)	807.62(3)	1032.09(3)	384.38(2)	36.48(12)
O(1b)	1085.8(3)	958.9(3)	349.65(16)	42.6(7)
O(1a)	1246.3(3)	1141.7(3)	456.33(16)	39.6(7)
O(2b)	991.5(3)	696.4(3)	392.66(16)	39.8(7)
O(2a)	1060.4(3)	649.1(3)	532.28(16)	42.1(7)
O(3b)	707.0(3)	698.0(3)	344.43(17)	48.2(8)
O(3a)	558.4(3)	659.0(3)	445.3(2)	50.9(8)
O(4b)	814.3(3)	965.5(3)	302.74(16)	47.5(7)
O(4a)	738.3(3)	1143.8(3)	364.05(17)	46.3(7)
O(12)	1146.4(2)	899.2(2)	493.11(15)	34.7(6)
O(14)	994.2(3)	1134.6(2)	413.21(15)	35.2(6)
O(23)	818.1(3)	671.6(3)	485.56(16)	38.9(7)
O(34)	670.6(3)	904.6(3)	408.93(16)	41.4(7)
O(123)	913.1(2)	905.4(2)	449.21(15)	33.7(6)
O(1s)	802.1(4)	485.6(4)	196.2(2)	72.6(11)
C(1s)	746.4(5)	399.3(5)	226.5(3)	57.4(13)
C(2s)	687.3(7)	269.5(6)	187.6(4)	96(2)
O(2s)	223.3(4)	811.0(4)	278.8(2)	77.2(12)
C(3s)	737.8(6)	417.1(5)	303.9(3)	64.6(14)
C(4s)	298.0(6)	881.0(6)	247.6(4)	70.9(16)
O(3s) ^p	1031.8(13)	658.9(14)	79.6(8)	58(4)
C(5s)	433.8(7)	942.6(9)	279.4(4)	119(3)
C(6s)	250.5(7)	918.3(11)	177.1(5)	160(5)
C(7s) ^p	1025.7(19)	580(2)	39.0(9)	50(5)
C(8s) ^p	898.9(14)	445.2(14)	15.2(7)	99(6)

Key to superscripts on atoms with refinement constraints/restraints:

u - U_{iso} or U_{ij} restraint (rigid bond)

p - partial occupancy constraint

Table 2. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	37(2)	40(2)	62(3)	12(2)	7(2)	14.3(19)
C(2)	39(2)	36(2)	67(3)	10(2)	6(2)	12.2(19)
B(3)	50(3)	55(4)	89(5)	19(3)	-15(3)	8(3)
B(4)	71(4)	56(4)	70(4)	16(3)	-6(3)	21(3)
B(5)	58(3)	43(3)	67(4)	11(3)	26(3)	17(3)
B(6)	35(3)	41(3)	69(4)	-1(3)	9(2)	14(2)
B(7)	64(4)	43(3)	65(4)	-2(3)	14(3)	19(3)
B(8)	87(5)	45(3)	69(4)	-2(3)	-17(4)	7(3)
B(9)	113(7)	62(4)	81(5)	4(4)	-32(5)	8(4)
B(10)	127(7)	62(4)	60(4)	12(3)	17(4)	27(4)
B(11)	81(5)	52(4)	80(5)	4(3)	34(4)	24(3)
B(12)	136(7)	57(4)	61(4)	0(3)	23(4)	29(4)
C(13)	78(4)	28(2)	155(6)	26(3)	84(4)	27(2)
N(14)	61(3)	68(3)	77(3)	7(2)	23(2)	31(2)
C(15)	35(3)	137(6)	56(3)	-38(4)	-1(2)	38(3)
C(16)	67(4)	81(5)	125(6)	-7(4)	35(4)	25(3)
C(17)	67(4)	101(5)	60(4)	17(3)	23(3)	45(3)
B(5ab)	75(4)	75(3)	59(3)	10(2)	14(3)	31(3)
C(1a)	55(5)	60(5)	42(4)	12(3)	13(4)	30(4)
C(2a)	73(6)	69(4)	39(4)	8(4)	-1(4)	41(4)
B(3a)	85(5)	54(4)	38(5)	8(4)	11(4)	21(4)
B(4a)	78(5)	56(5)	40(5)	-1(4)	12(4)	22(4)
B(6a)	49(5)	79(6)	45(4)	13(4)	3(4)	31(5)
B(7a)	81(6)	95(7)	54(7)	3(5)	-14(5)	53(6)
B(8a)	122(8)	65(5)	49(6)	12(4)	-4(5)	45(5)
B(9a)	111(7)	71(6)	39(4)	10(4)	5(4)	27(5)
B(10a)	93(7)	71(5)	41(4)	-4(4)	-1(4)	20(5)
B(11a)	67(5)	89(6)	50(6)	6(5)	-10(4)	26(4)
B(12a)	104(6)	91(8)	45(5)	10(5)	-15(5)	39(6)
C(13a)	57(7)	58(8)	56(7)	14(5)	8(5)	34(5)
C(1b)	57(5)	58(5)	39(4)	24(4)	22(4)	36(4)
C(2b)	43(5)	68(6)	58(5)	3(4)	-1(4)	38(5)
B(3b)	77(7)	69(5)	73(9)	41(5)	-11(6)	32(5)
B(4b)	81(6)	120(9)	43(6)	33(6)	21(6)	32(7)
B(5b)	52(6)	60(6)	48(5)	13(5)	7(4)	17(4)

Table 2. (continued)

B(7b)	53(5)	86(8)	55(6)	-13(5)	-7(5)	30(5)
B(8b)	79(9)	80(6)	90(10)	10(6)	-29(7)	50(7)
B(9b)	97(10)	107(9)	70(7)	41(8)	-15(7)	31(7)
B(10b)	90(9)	118(10)	43(5)	13(5)	11(4)	35(7)
B(11b)	71(5)	81(6)	42(6)	-1(4)	6(5)	29(5)
B(12b)	80(6)	98(9)	58(6)	7(6)	-12(5)	38(6)
C(13b)	44(6)	37(6)	58(8)	29(5)	20(5)	27(5)
N(14b)	71(3)	49(2)	52(3)	7(2)	-11(2)	25(2)
Mo(1)	30.09(19)	31.8(2)	39.2(2)	1.04(15)	5.51(14)	15.63(14)
Mo(2)	30.58(19)	30.1(2)	41.7(2)	0.33(15)	3.86(15)	15.74(14)
Mo(3)	28.9(2)	33.3(2)	50.9(2)	-2.75(16)	-0.17(16)	13.31(15)
Mo(4)	33.2(2)	36.4(2)	40.0(2)	-0.19(16)	-1.77(15)	18.04(15)
O(1b)	46.6(17)	45.0(17)	42.9(17)	-1.2(13)	12.8(13)	23.4(14)
O(1a)	34.1(15)	38.5(16)	48.8(18)	3.1(13)	8.3(13)	16.4(12)
O(2b)	41.9(16)	35.5(15)	44.9(17)	-3.3(13)	6.7(13)	19.5(13)
O(2a)	41.7(16)	36.5(16)	51.1(18)	4.2(13)	4.3(13)	20.6(13)
O(3b)	49.6(18)	43.0(17)	48.8(19)	-7.9(14)	-5.9(14)	22.1(14)
O(3a)	33.2(16)	35.8(16)	78(2)	-4.0(15)	4.9(15)	9.2(13)
O(4b)	49.6(18)	52.5(19)	40.4(17)	-4.0(14)	-1.8(14)	24.8(15)
O(4a)	40.5(16)	42.4(17)	55.3(19)	5.1(14)	-3.7(14)	21.0(13)
O(12)	30.3(14)	35.8(15)	41.2(16)	1.8(12)	4.1(11)	18.1(11)
O(14)	36.3(15)	33.0(14)	39.2(16)	2.6(12)	5.0(12)	17.5(12)
O(23)	35.3(15)	32.3(14)	48.8(18)	-1.5(13)	5.9(13)	13.5(12)
O(34)	30.3(14)	40.7(16)	51.9(18)	-1.7(13)	-1.5(12)	16.9(12)
O(123)	28.9(14)	35.5(14)	37.8(15)	-0.5(12)	1.5(11)	16.3(11)
O(1s)	107(3)	58(2)	54(2)	10.9(19)	10(2)	31(2)
C(1s)	62(3)	55(3)	57(3)	10(3)	0(2)	28(3)
C(2s)	124(6)	64(4)	72(4)	-13(3)	0(4)	5(4)
O(2s)	88(3)	54(2)	113(3)	24(2)	51(3)	36(2)
C(3s)	82(4)	60(3)	63(3)	13(3)	16(3)	37(3)
C(4s)	60(3)	70(4)	98(5)	36(3)	21(3)	36(3)
O(3s)	67(9)	68(9)	57(9)	0(7)	11(7)	47(8)
C(5s)	77(5)	149(8)	104(6)	32(5)	11(4)	5(5)
C(6s)	67(5)	235(12)	151(8)	117(9)	3(5)	13(6)
C(7s)	58(11)	92(15)	22(9)	19(9)	-3(8)	57(11)
C(8s)	150(13)	158(14)	68(8)	66(9)	66(9)	129(13)

Table 3. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(2)	11628.	12730.	3820.	57.
H(3)	9604.	13289.	2839.	85.
H(4)	10904.	15539.	2182.	82.
H(5)	13693.	16306.	2813.	65.
H(6)	14116.	14502.	3880.	58.
H(7)	13322.	11986.	3077.	69.
H(8)	10559.	11223.	2436.	91.
H(9)	10074.	13010.	1392.	117.
H(10)	12605.	14838.	1333.	101.
H(11)	14628.	14236.	2394.	82.
H(12)	12415.	12180.	1521.	102.
H(13a)	10841.	15340.	3799.	91.
H(13b)	11893.	14913.	4330.	91.
H(14)	12581.	17176.	3709.	78.
H(16a)	13727.	18900.	4296.	134.
H(16b)	14965.	18706.	4798.	134.
H(16c)	13874.	18956.	5163.	134.
H(17a)	13007.	16603.	5647.	106.
H(17b)	14489.	16968.	5601.	106.
H(17c)	13481.	15645.	5210.	106.
H(5a)	6859.	5819.	800.	82.
H(5b)	7521.	6137.	758.	82.
H(2a)	7918.	10113.	1887.	69.
H(3a)	9745.	10201.	967.	72.
H(4a)	9149.	7655.	331.	70.
H(6a)	6311.	7626.	1903.	68.
H(7a)	5382.	9395.	1064.	90.
H(8a)	7473.	11001.	472.	94.
H(9a)	8206.	9416.	-524.	91.
H(10a)	6524.	6783.	-585.	87.
H(11a)	4706.	6834.	404.	86.
H(12a)	5537.	8839.	-535.	99.
H(13a)	9798.	7735.	1752.	64.
H(13b)	9773.	8968.	2191.	64.
H(2b)	6778.	8994.	2093.	64.
H(3b)	8204.	10300.	1103.	88.
H(4b)	8407.	8250.	78.	96.

Table 3. (continued)

H(5b1)	6186.	6275.	1880.	65.
H(7b)	4230.	7433.	1448.	80.
H(8b)	5452.	9924.	894.	101.
H(9b)	6328.	9450.	-315.	116.
H(10b)	5811.	6663.	-639.	101.
H(11b)	4523.	5479.	427.	77.
H(12b)	4023.	7666.	-134.	96.
H(13c)	9346.	9168.	1988.	50.
H(13d)	9579.	8049.	1536.	50.
H(14a)	9527.	7454.	2833.	89.
H(14b)	8394.	6621.	2289.	89.
H(14c)	8309.	7760.	2681.	89.
H(14d)	9620.	7594.	2784.	89.
H(14e)	8506.	6600.	2312.	89.
H(14f)	8294.	7639.	2732.	89.
H(2s1)	5943.	2514.	1709.	144.
H(2s2)	7030.	2084.	2209.	144.
H(2s3)	7257.	2633.	1455.	144.
H(3s1)	7747.	5070.	3219.	97.
H(3s2)	7858.	3701.	3334.	97.
H(3s3)	6473.	3860.	3076.	97.
H(5s1)	4475.	10288.	2996.	178.
H(5s2)	4837.	9450.	2416.	178.
H(5s3)	4618.	8955.	3183.	178.
H(6s1)	2490.	8569.	1380.	239.
H(6s2)	3074.	10019.	1713.	239.
H(6s3)	1632.	9211.	1747.	239.
H(8s1)	8365.	4438.	455.	148.
H(8s2)	9292.	3727.	226.	148.
H(8s3)	8578.	4408.	-363.	148.

Table 4. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

C(1)-C(13)	1.547(7)	C(1)-C(2)	1.646(6)
C(1)-B(5)	1.705(7)	C(1)-B(4)	1.705(8)
C(1)-B(3)	1.729(7)	C(1)-B(6)	1.732(7)
C(2)-B(7)	1.686(8)	C(2)-B(8)	1.693(8)
C(2)-B(6)	1.699(6)	C(2)-B(3)	1.725(7)
B(3)-B(9)	1.721(12)	B(3)-B(4)	1.762(9)
B(3)-B(8)	1.784(11)	B(4)-B(9)	1.752(10)
B(4)-B(10)	1.776(12)	B(4)-B(5)	1.784(9)
B(5)-B(11)	1.784(8)	B(5)-B(10)	1.794(10)
B(5)-B(6)	1.796(8)	B(6)-B(7)	1.767(8)
B(6)-B(11)	1.775(9)	B(7)-B(12)	1.761(10)
B(7)-B(8)	1.767(9)	B(7)-B(11)	1.777(9)
B(8)-B(12)	1.750(11)	B(8)-B(9)	1.771(10)
B(9)-B(10)	1.781(12)	B(9)-B(12)	1.810(13)
B(10)-B(12)	1.790(10)	B(10)-B(11)	1.800(11)
B(11)-B(12)	1.774(10)	C(13)-N(14)	1.468(6)
N(14)-C(15)	1.249(7)	C(15)-C(17)	1.479(8)
C(15)-C(16)	1.530(9)	B(5ab)-C(1b)	1.483(16)
B(5ab)-B(4b)	1.639(18)	B(5ab)-B(5b)	1.682(15)
B(5ab)-B(10a)	1.743(15)	B(5ab)-B(11a)	1.781(15)
B(5ab)-B(11b)	1.835(17)	B(5ab)-B(10b)	1.841(19)
B(5ab)-B(4a)	1.846(14)	B(5ab)-C(1a)	1.854(13)
B(5ab)-B(6a)	1.888(16)	C(1a)-C(13a)	1.543(15)
C(1a)-C(2a)	1.664(15)	C(1a)-B(4a)	1.684(16)
C(1a)-B(6a)	1.701(15)	C(1a)-B(3a)	1.723(16)
C(2a)-B(7a)	1.66(2)	C(2a)-B(6a)	1.683(18)
C(2a)-B(8a)	1.712(15)	C(2a)-B(3a)	1.732(16)
B(3a)-B(4a)	1.731(16)	B(3a)-B(9a)	1.745(16)
B(3a)-B(8a)	1.762(18)	B(4a)-B(9a)	1.730(17)
B(4a)-B(10a)	1.743(19)	B(6a)-B(7a)	1.73(2)
B(6a)-B(11a)	1.764(17)	B(7a)-B(11a)	1.75(3)
B(7a)-B(8a)	1.76(3)	B(7a)-B(12a)	1.84(3)
B(8a)-B(9a)	1.746(19)	B(8a)-B(12a)	1.78(3)
B(9a)-B(12a)	1.71(3)	B(9a)-B(10a)	1.766(19)
B(10a)-B(12a)	1.72(3)	B(10a)-B(11a)	1.78(2)
B(11a)-B(12a)	1.77(3)	C(13a)-N(14b)	1.326(18)
C(1b)-C(13b)	1.560(18)	C(1b)-C(2b)	1.605(16)
C(1b)-B(5b)	1.715(18)	C(1b)-B(3b)	1.727(19)
C(1b)-B(4b)	1.733(19)	C(2b)-B(7b)	1.680(19)
C(2b)-B(3b)	1.69(2)	C(2b)-B(8b)	1.69(2)
C(2b)-B(5b)	1.704(18)	B(3b)-B(8b)	1.74(3)
B(3b)-B(9b)	1.76(3)	B(3b)-B(4b)	1.81(3)
B(4b)-B(10b)	1.77(3)	B(4b)-B(9b)	1.81(4)

Table 4. (continued)

B(5b)-B(7b)	1.742(19)	B(5b)-B(11b)	1.747(18)
B(7b)-B(12b)	1.76(2)	B(7b)-B(11b)	1.76(2)
B(7b)-B(8b)	1.82(3)	B(8b)-B(9b)	1.63(5)
B(8b)-B(12b)	1.73(3)	B(9b)-B(12b)	1.67(4)
B(9b)-B(10b)	1.78(4)	B(10b)-B(12b)	1.71(3)
B(10b)-B(11b)	1.72(2)	B(11b)-B(12b)	1.72(2)
C(13b)-N(14b)	1.607(16)	Mo(1)-O(1b)	1.681(3)
Mo(1)-O(1a)	1.752(3)	Mo(1)-O(12)	1.952(3)
Mo(1)-O(14)	1.958(3)	Mo(1)-O(123)	2.139(3)
Mo(1)-O(123) ^(a)	2.337(3)	Mo(1)-Mo(2)	3.2139(5)
Mo(2)-O(2a)	1.692(3)	Mo(2)-O(2b)	1.713(3)
Mo(2)-O(23)	1.898(3)	Mo(2)-O(12)	2.002(3)
Mo(2)-O(14) ^(a)	2.327(3)	Mo(2)-O(123)	2.335(2)
Mo(3)-O(3a)	1.693(3)	Mo(3)-O(3b)	1.708(3)
Mo(3)-O(34)	1.930(3)	Mo(3)-O(23)	1.944(3)
Mo(3)-O(1a) ^(a)	2.287(3)	Mo(3)-O(123)	2.413(3)
Mo(4)-O(4a)	1.691(3)	Mo(4)-O(4b)	1.703(3)
Mo(4)-O(34)	1.889(3)	Mo(4)-O(14)	1.998(3)
Mo(4)-O(12) ^(a)	2.303(3)	Mo(4)-O(123)	2.355(3)
O(1a)-Mo(3) ^(a)	2.287(3)	O(12)-Mo(4) ^(a)	2.303(3)
O(14)-Mo(2) ^(a)	2.327(3)	O(123)-Mo(1) ^(a)	2.337(3)
O(1s)-C(1s)	1.206(6)	C(1s)-C(3s)	1.485(7)
C(1s)-C(2s)	1.489(8)	O(2s)-C(4s)	1.216(6)
C(4s)-C(5s)	1.451(9)	C(4s)-C(6s)	1.457(9)
O(3s)-C(7s)	1.12(2)	C(7s)-C(8s) ^(b)	1.51(2)
C(7s)-C(8s)	1.69(3)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) 2-x, 2-y, 1-z

(b) 2-x, 1-y, -z

Table 5. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

C(13)-C(1)-C(2)	115.6(4)	C(13)-C(1)-B(5)	124.1(4)
C(2)-C(1)-B(5)	110.2(4)	C(13)-C(1)-B(4)	123.1(4)
C(2)-C(1)-B(4)	110.2(4)	B(5)-C(1)-B(4)	63.1(4)
C(13)-C(1)-B(3)	115.2(4)	C(2)-C(1)-B(3)	61.4(3)
B(5)-C(1)-B(3)	114.0(4)	B(4)-C(1)-B(3)	61.8(4)
C(13)-C(1)-B(6)	116.3(4)	C(2)-C(1)-B(6)	60.3(3)
B(5)-C(1)-B(6)	63.0(3)	B(4)-C(1)-B(6)	114.8(4)
B(3)-C(1)-B(6)	113.7(4)	C(1)-C(2)-B(7)	112.6(4)
C(1)-C(2)-B(8)	112.2(4)	B(7)-C(2)-B(8)	63.1(4)
C(1)-C(2)-B(6)	62.4(3)	B(7)-C(2)-B(6)	62.9(3)
B(8)-C(2)-B(6)	115.5(4)	C(1)-C(2)-B(3)	61.7(3)
B(7)-C(2)-B(3)	115.5(5)	B(8)-C(2)-B(3)	62.9(4)
B(6)-C(2)-B(3)	115.7(4)	B(9)-B(3)-C(2)	104.4(5)
B(9)-B(3)-C(1)	105.1(5)	C(2)-B(3)-C(1)	56.9(3)
B(9)-B(3)-B(4)	60.4(4)	C(2)-B(3)-B(4)	104.0(4)
C(1)-B(3)-B(4)	58.5(3)	B(9)-B(3)-B(8)	60.7(5)
C(2)-B(3)-B(8)	57.7(3)	C(1)-B(3)-B(8)	104.2(4)
B(4)-B(3)-B(8)	108.3(5)	C(1)-B(4)-B(9)	104.8(4)
C(1)-B(4)-B(3)	59.8(3)	B(9)-B(4)-B(3)	58.6(4)
C(1)-B(4)-B(10)	105.2(5)	B(9)-B(4)-B(10)	60.6(5)
B(3)-B(4)-B(10)	107.8(5)	C(1)-B(4)-B(5)	58.5(3)
B(9)-B(4)-B(5)	108.7(5)	B(3)-B(4)-B(5)	108.6(4)
B(10)-B(4)-B(5)	60.5(4)	C(1)-B(5)-B(11)	104.8(4)
C(1)-B(5)-B(4)	58.4(3)	B(11)-B(5)-B(4)	107.8(5)
C(1)-B(5)-B(10)	104.4(4)	B(11)-B(5)-B(10)	60.4(4)
B(4)-B(5)-B(10)	59.5(4)	C(1)-B(5)-B(6)	59.2(3)
B(11)-B(5)-B(6)	59.4(3)	B(4)-B(5)-B(6)	107.9(4)
B(10)-B(5)-B(6)	107.7(4)	C(2)-B(6)-C(1)	57.3(3)
C(2)-B(6)-B(7)	58.2(3)	C(1)-B(6)-B(7)	104.8(4)
C(2)-B(6)-B(11)	103.9(4)	C(1)-B(6)-B(11)	104.1(4)
B(7)-B(6)-B(11)	60.2(3)	C(2)-B(6)-B(5)	103.7(4)
C(1)-B(6)-B(5)	57.8(3)	B(7)-B(6)-B(5)	108.0(4)
B(11)-B(6)-B(5)	59.9(3)	C(2)-B(7)-B(12)	104.0(5)
C(2)-B(7)-B(6)	58.9(3)	B(12)-B(7)-B(6)	108.4(4)
C(2)-B(7)-B(8)	58.6(4)	B(12)-B(7)-B(8)	59.5(4)
B(6)-B(7)-B(8)	108.5(4)	C(2)-B(7)-B(11)	104.3(4)
B(12)-B(7)-B(11)	60.2(4)	B(6)-B(7)-B(11)	60.1(3)
B(8)-B(7)-B(11)	107.8(5)	C(2)-B(8)-B(12)	104.2(5)
C(2)-B(8)-B(7)	58.3(3)	B(12)-B(8)-B(7)	60.1(4)
C(2)-B(8)-B(9)	103.6(5)	B(12)-B(8)-B(9)	61.9(5)
B(7)-B(8)-B(9)	109.2(5)	C(2)-B(8)-B(3)	59.4(3)
B(12)-B(8)-B(3)	108.1(5)	B(7)-B(8)-B(3)	108.6(4)
B(9)-B(8)-B(3)	57.9(5)	B(3)-B(9)-B(4)	61.0(4)

Table 5. (continued)

B(3)-B(9)-B(8)	61.4(4)	B(4)-B(9)-B(8)	109.3(5)
B(3)-B(9)-B(10)	109.5(5)	B(4)-B(9)-B(10)	60.3(4)
B(8)-B(9)-B(10)	107.5(6)	B(3)-B(9)-B(12)	108.2(5)
B(4)-B(9)-B(12)	107.9(5)	B(8)-B(9)-B(12)	58.5(4)
B(10)-B(9)-B(12)	59.8(5)	B(4)-B(10)-B(9)	59.0(5)
B(4)-B(10)-B(12)	107.7(5)	B(9)-B(10)-B(12)	60.9(5)
B(4)-B(10)-B(5)	60.0(4)	B(9)-B(10)-B(5)	107.0(5)
B(12)-B(10)-B(5)	106.9(5)	B(4)-B(10)-B(11)	107.5(5)
B(9)-B(10)-B(11)	107.7(5)	B(12)-B(10)-B(11)	59.2(4)
B(5)-B(10)-B(11)	59.5(4)	B(12)-B(11)-B(6)	107.5(5)
B(12)-B(11)-B(7)	59.5(4)	B(6)-B(11)-B(7)	59.6(3)
B(12)-B(11)-B(5)	108.0(5)	B(6)-B(11)-B(5)	60.6(3)
B(7)-B(11)-B(5)	108.1(4)	B(12)-B(11)-B(10)	60.1(4)
B(6)-B(11)-B(10)	108.4(5)	B(7)-B(11)-B(10)	107.7(5)
B(5)-B(11)-B(10)	60.1(4)	B(8)-B(12)-B(7)	60.5(4)
B(8)-B(12)-B(11)	108.7(5)	B(7)-B(12)-B(11)	60.4(4)
B(8)-B(12)-B(10)	108.1(6)	B(7)-B(12)-B(10)	108.9(5)
B(11)-B(12)-B(10)	60.7(4)	B(8)-B(12)-B(9)	59.6(5)
B(7)-B(12)-B(9)	107.7(5)	B(11)-B(12)-B(9)	107.6(5)
B(10)-B(12)-B(9)	59.3(5)	N(14)-C(13)-C(1)	113.9(4)
C(15)-N(14)-C(13)	123.7(6)	N(14)-C(15)-C(17)	131.0(7)
N(14)-C(15)-C(16)	115.1(7)	C(17)-C(15)-C(16)	113.8(5)
C(1b)-B(5ab)-B(4b)	67.2(9)	C(1b)-B(5ab)-B(5b)	65.3(7)
B(4b)-B(5ab)-B(5b)	119.6(10)	C(1b)-B(5ab)-B(10a)	103.2(8)
B(4b)-B(5ab)-B(10a)	39.0(7)	B(5b)-B(5ab)-B(10a)	128.2(8)
C(1b)-B(5ab)-B(11a)	86.1(7)	B(4b)-B(5ab)-B(11a)	73.9(9)
B(5b)-B(5ab)-B(11a)	67.9(7)	B(10a)-B(5ab)-B(11a)	60.8(7)
C(1b)-B(5ab)-B(11b)	110.5(8)	B(4b)-B(5ab)-B(11b)	108.4(9)
B(5b)-B(5ab)-B(11b)	59.4(6)	B(10a)-B(5ab)-B(11b)	82.3(8)
B(11a)-B(5ab)-B(11b)	36.6(6)	C(1b)-B(5ab)-B(10b)	112.2(9)
B(4b)-B(5ab)-B(10b)	60.6(9)	B(5b)-B(5ab)-B(10b)	107.6(8)
B(10a)-B(5ab)-B(10b)	26.6(6)	B(11a)-B(5ab)-B(10b)	41.1(7)
B(11b)-B(5ab)-B(10b)	55.8(8)	C(1b)-B(5ab)-B(4a)	67.9(7)
B(4b)-B(5ab)-B(4a)	29.1(7)	B(5b)-B(5ab)-B(4a)	132.7(7)
B(10a)-B(5ab)-B(4a)	58.0(7)	B(11a)-B(5ab)-B(4a)	103.0(7)
B(11b)-B(5ab)-B(4a)	136.9(8)	B(10b)-B(5ab)-B(4a)	84.0(8)
C(1b)-B(5ab)-C(1a)	16.6(6)	B(4b)-B(5ab)-C(1a)	60.7(8)
B(5b)-B(5ab)-C(1a)	80.5(7)	B(10a)-B(5ab)-C(1a)	99.4(7)
B(11a)-B(5ab)-C(1a)	98.3(7)	B(11b)-B(5ab)-C(1a)	126.5(7)
B(10b)-B(5ab)-C(1a)	115.5(9)	B(4a)-B(5ab)-C(1a)	54.2(5)
C(1b)-B(5ab)-B(6a)	37.5(6)	B(4b)-B(5ab)-B(6a)	84.1(9)
B(5b)-B(5ab)-B(6a)	36.0(6)	B(10a)-B(5ab)-B(6a)	104.0(7)
B(11a)-B(5ab)-B(6a)	57.4(6)	B(11b)-B(5ab)-B(6a)	73.4(7)
B(10b)-B(5ab)-B(6a)	95.8(8)	B(4a)-B(5ab)-B(6a)	98.7(7)
C(1a)-B(5ab)-B(6a)	54.1(5)	C(13a)-C(1a)-C(2a)	119.8(11)

Table 5. (continued)

C(13a)-C(1a)-B(4a)	119.1(11)	C(2a)-C(1a)-B(4a)	109.6(9)
C(13a)-C(1a)-B(6a)	120.7(11)	C(2a)-C(1a)-B(6a)	60.0(7)
B(4a)-C(1a)-B(6a)	113.7(9)	C(13a)-C(1a)-B(3a)	114.9(11)
C(2a)-C(1a)-B(3a)	61.5(7)	B(4a)-C(1a)-B(3a)	61.1(7)
B(6a)-C(1a)-B(3a)	112.9(9)	C(13a)-C(1a)-B(5ab)	120.7(11)
C(2a)-C(1a)-B(5ab)	111.8(7)	B(4a)-C(1a)-B(5ab)	62.7(6)
B(6a)-C(1a)-B(5ab)	64.0(7)	B(3a)-C(1a)-B(5ab)	114.1(8)
B(7a)-C(2a)-C(1a)	110.4(10)	B(7a)-C(2a)-B(6a)	62.3(9)
C(1a)-C(2a)-B(6a)	61.1(7)	B(7a)-C(2a)-B(8a)	62.9(10)
C(1a)-C(2a)-B(8a)	109.9(8)	B(6a)-C(2a)-B(8a)	114.0(9)
B(7a)-C(2a)-B(3a)	113.3(11)	C(1a)-C(2a)-B(3a)	60.9(6)
B(6a)-C(2a)-B(3a)	113.4(8)	B(8a)-C(2a)-B(3a)	61.5(7)
C(1a)-B(3a)-C(2a)	57.6(6)	C(1a)-B(3a)-B(4a)	58.4(6)
C(2a)-B(3a)-B(4a)	104.4(8)	C(1a)-B(3a)-B(9a)	104.7(8)
C(2a)-B(3a)-B(9a)	104.6(9)	B(4a)-B(3a)-B(9a)	59.7(7)
C(1a)-B(3a)-B(8a)	105.0(9)	C(2a)-B(3a)-B(8a)	58.7(7)
B(4a)-B(3a)-B(8a)	107.3(9)	B(9a)-B(3a)-B(8a)	59.7(8)
C(1a)-B(4a)-B(9a)	107.0(9)	C(1a)-B(4a)-B(3a)	60.6(6)
B(9a)-B(4a)-B(3a)	60.5(7)	C(1a)-B(4a)-B(10a)	106.4(9)
B(9a)-B(4a)-B(10a)	61.1(8)	B(3a)-B(4a)-B(10a)	110.2(10)
C(1a)-B(4a)-B(5ab)	63.1(6)	B(9a)-B(4a)-B(5ab)	109.8(9)
B(3a)-B(4a)-B(5ab)	114.1(8)	B(10a)-B(4a)-B(5ab)	58.0(6)
C(2a)-B(6a)-C(1a)	58.9(7)	C(2a)-B(6a)-B(7a)	58.1(9)
C(1a)-B(6a)-B(7a)	105.3(11)	C(2a)-B(6a)-B(11a)	105.1(9)
C(1a)-B(6a)-B(11a)	105.0(9)	B(7a)-B(6a)-B(11a)	60.1(10)
C(2a)-B(6a)-B(5ab)	109.3(8)	C(1a)-B(6a)-B(5ab)	61.9(6)
B(7a)-B(6a)-B(5ab)	108.4(10)	B(11a)-B(6a)-B(5ab)	58.2(7)
C(2a)-B(7a)-B(6a)	59.6(8)	C(2a)-B(7a)-B(11a)	107.0(10)
B(6a)-B(7a)-B(11a)	61.0(9)	C(2a)-B(7a)-B(8a)	60.1(9)
B(6a)-B(7a)-B(8a)	109.6(11)	B(11a)-B(7a)-B(8a)	108.4(13)
C(2a)-B(7a)-B(12a)	105.3(14)	B(6a)-B(7a)-B(12a)	107.6(14)
B(11a)-B(7a)-B(12a)	59.1(12)	B(8a)-B(7a)-B(12a)	59.4(12)
C(2a)-B(8a)-B(9a)	105.4(8)	C(2a)-B(8a)-B(7a)	57.0(8)
B(9a)-B(8a)-B(7a)	107.9(11)	C(2a)-B(8a)-B(3a)	59.8(6)
B(9a)-B(8a)-B(3a)	59.6(7)	B(7a)-B(8a)-B(3a)	107.1(9)
C(2a)-B(8a)-B(12a)	105.4(11)	B(9a)-B(8a)-B(12a)	57.8(12)
B(7a)-B(8a)-B(12a)	62.6(12)	B(3a)-B(8a)-B(12a)	106.3(12)
B(12a)-B(9a)-B(4a)	107.8(11)	B(12a)-B(9a)-B(3a)	110.6(10)
B(4a)-B(9a)-B(3a)	59.8(6)	B(12a)-B(9a)-B(8a)	62.2(11)
B(4a)-B(9a)-B(8a)	108.0(8)	B(3a)-B(9a)-B(8a)	60.6(7)
B(12a)-B(9a)-B(10a)	59.3(11)	B(4a)-B(9a)-B(10a)	59.8(8)
B(3a)-B(9a)-B(10a)	108.5(9)	B(8a)-B(9a)-B(10a)	108.9(10)
B(12a)-B(10a)-B(4a)	106.7(12)	B(12a)-B(10a)-B(5ab)	112.7(10)
B(4a)-B(10a)-B(5ab)	64.0(7)	B(12a)-B(10a)-B(9a)	58.6(12)
B(4a)-B(10a)-B(9a)	59.1(8)	B(5ab)-B(10a)-B(9a)	113.0(9)

Table 5. (continued)

B(12a)-B(10a)-B(11a)	60.8(11)	B(4a)-B(10a)-B(11a)	107.2(9)
B(5ab)-B(10a)-B(11a)	60.6(6)	B(9a)-B(10a)-B(11a)	106.6(10)
B(7a)-B(11a)-B(6a)	58.9(8)	B(7a)-B(11a)-B(12a)	63.0(12)
B(6a)-B(11a)-B(12a)	109.0(11)	B(7a)-B(11a)-B(5ab)	112.5(9)
B(6a)-B(11a)-B(5ab)	64.4(7)	B(12a)-B(11a)-B(5ab)	108.3(13)
B(7a)-B(11a)-B(10a)	108.1(12)	B(6a)-B(11a)-B(10a)	107.6(9)
B(12a)-B(11a)-B(10a)	57.7(12)	B(5ab)-B(11a)-B(10a)	58.6(7)
B(9a)-B(12a)-B(10a)	62.1(12)	B(9a)-B(12a)-B(11a)	109.9(15)
B(10a)-B(12a)-B(11a)	61.5(11)	B(9a)-B(12a)-B(8a)	60.0(11)
B(10a)-B(12a)-B(8a)	109.4(15)	B(11a)-B(12a)-B(8a)	106.1(10)
B(9a)-B(12a)-B(7a)	106.0(13)	B(10a)-B(12a)-B(7a)	106.9(13)
B(11a)-B(12a)-B(7a)	57.8(11)	B(8a)-B(12a)-B(7a)	58.0(11)
N(14b)-C(13a)-C(1a)	118.2(13)	B(5ab)-C(1b)-C(13b)	123.8(12)
B(5ab)-C(1b)-C(2b)	110.6(10)	C(13b)-C(1b)-C(2b)	120.0(13)
B(5ab)-C(1b)-B(5b)	63.0(7)	C(13b)-C(1b)-B(5b)	122.9(11)
C(2b)-C(1b)-B(5b)	61.7(8)	B(5ab)-C(1b)-B(3b)	113.9(10)
C(13b)-C(1b)-B(3b)	111.1(12)	C(2b)-C(1b)-B(3b)	60.7(9)
B(5b)-C(1b)-B(3b)	114.5(10)	B(5ab)-C(1b)-B(4b)	60.7(9)
C(13b)-C(1b)-B(4b)	117.6(12)	C(2b)-C(1b)-B(4b)	109.3(11)
B(5b)-C(1b)-B(4b)	112.8(11)	B(3b)-C(1b)-B(4b)	63.0(11)
C(1b)-C(2b)-B(7b)	113.2(11)	C(1b)-C(2b)-B(3b)	63.3(9)
B(7b)-C(2b)-B(3b)	118.1(11)	C(1b)-C(2b)-B(8b)	112.7(13)
B(7b)-C(2b)-B(8b)	65.5(13)	B(3b)-C(2b)-B(8b)	62.2(12)
C(1b)-C(2b)-B(5b)	62.3(8)	B(7b)-C(2b)-B(5b)	62.0(8)
B(3b)-C(2b)-B(5b)	117.3(11)	B(8b)-C(2b)-B(5b)	116.1(14)
C(2b)-B(3b)-C(1b)	56.1(7)	C(2b)-B(3b)-B(8b)	59.0(12)
C(1b)-B(3b)-B(8b)	104.5(13)	C(2b)-B(3b)-B(9b)	100.0(16)
C(1b)-B(3b)-B(9b)	103.9(16)	B(8b)-B(3b)-B(9b)	55.4(17)
C(2b)-B(3b)-B(4b)	102.4(11)	C(1b)-B(3b)-B(4b)	58.6(9)
B(8b)-B(3b)-B(4b)	105.8(15)	B(9b)-B(3b)-B(4b)	61.0(17)
B(5ab)-B(4b)-C(1b)	52.1(7)	B(5ab)-B(4b)-B(10b)	65.3(10)
C(1b)-B(4b)-B(10b)	104.5(11)	B(5ab)-B(4b)-B(3b)	102.7(10)
C(1b)-B(4b)-B(3b)	58.3(8)	B(10b)-B(4b)-B(3b)	107.7(13)
B(5ab)-B(4b)-B(9b)	107.4(15)	C(1b)-B(4b)-B(9b)	101.5(14)
B(10b)-B(4b)-B(9b)	59.8(15)	B(3b)-B(4b)-B(9b)	58.2(13)
B(5ab)-B(5b)-C(2b)	97.2(9)	B(5ab)-B(5b)-C(1b)	51.8(6)
C(2b)-B(5b)-C(1b)	56.0(7)	B(5ab)-B(5b)-B(7b)	109.5(9)
C(2b)-B(5b)-B(7b)	58.3(8)	C(1b)-B(5b)-B(7b)	105.1(10)
B(5ab)-B(5b)-B(11b)	64.7(7)	C(2b)-B(5b)-B(11b)	102.9(10)
C(1b)-B(5b)-B(11b)	104.3(10)	B(7b)-B(5b)-B(11b)	60.6(8)
C(2b)-B(7b)-B(5b)	59.7(7)	C(2b)-B(7b)-B(12b)	101.2(11)
B(5b)-B(7b)-B(12b)	106.3(11)	C(2b)-B(7b)-B(11b)	103.3(10)
B(5b)-B(7b)-B(11b)	59.8(8)	B(12b)-B(7b)-B(11b)	58.3(9)
C(2b)-B(7b)-B(8b)	57.5(9)	B(5b)-B(7b)-B(8b)	107.7(11)
B(12b)-B(7b)-B(8b)	57.9(12)	B(11b)-B(7b)-B(8b)	105.1(14)

Table 5. (continued)

B(9b)-B(8b)-C(2b)	105.3(17)	B(9b)-B(8b)-B(12b)	59.4(18)
C(2b)-B(8b)-B(12b)	101.9(16)	B(9b)-B(8b)-B(3b)	62.7(16)
C(2b)-B(8b)-B(3b)	58.8(9)	B(12b)-B(8b)-B(3b)	108.9(17)
B(9b)-B(8b)-B(7b)	108.(2)	C(2b)-B(8b)-B(7b)	57.0(11)
B(12b)-B(8b)-B(7b)	59.3(12)	B(3b)-B(8b)-B(7b)	108.0(12)
B(8b)-B(9b)-B(12b)	63.5(19)	B(8b)-B(9b)-B(3b)	61.9(14)
B(12b)-B(9b)-B(3b)	111.3(18)	B(8b)-B(9b)-B(10b)	111.(2)
B(12b)-B(9b)-B(10b)	59.2(15)	B(3b)-B(9b)-B(10b)	109.2(18)
B(8b)-B(9b)-B(4b)	110.9(15)	B(12b)-B(9b)-B(4b)	107.(2)
B(3b)-B(9b)-B(4b)	60.9(13)	B(10b)-B(9b)-B(4b)	58.9(16)
B(12b)-B(10b)-B(11b)	60.2(10)	B(12b)-B(10b)-B(4b)	107.5(15)
B(11b)-B(10b)-B(4b)	108.0(12)	B(12b)-B(10b)-B(9b)	57.1(16)
B(11b)-B(10b)-B(9b)	105.6(16)	B(4b)-B(10b)-B(9b)	61.3(15)
B(12b)-B(10b)-B(5ab)	104.5(11)	B(11b)-B(10b)-B(5ab)	61.9(8)
B(4b)-B(10b)-B(5ab)	54.0(8)	B(9b)-B(10b)-B(5ab)	100.2(12)
B(12b)-B(11b)-B(10b)	59.6(11)	B(12b)-B(11b)-B(5b)	108.0(11)
B(10b)-B(11b)-B(5b)	110.2(12)	B(12b)-B(11b)-B(7b)	60.8(9)
B(10b)-B(11b)-B(7b)	109.8(14)	B(5b)-B(11b)-B(7b)	59.5(8)
B(12b)-B(11b)-B(5ab)	104.4(11)	B(10b)-B(11b)-B(5ab)	62.3(9)
B(5b)-B(11b)-B(5ab)	55.9(6)	B(7b)-B(11b)-B(5ab)	102.1(9)
B(9b)-B(12b)-B(10b)	63.7(18)	B(9b)-B(12b)-B(11b)	110.9(17)
B(10b)-B(12b)-B(11b)	60.3(10)	B(9b)-B(12b)-B(8b)	57.1(17)
B(10b)-B(12b)-B(8b)	110.1(14)	B(11b)-B(12b)-B(8b)	111.0(12)
B(9b)-B(12b)-B(7b)	109.1(13)	B(10b)-B(12b)-B(7b)	110.3(12)
B(11b)-B(12b)-B(7b)	60.8(9)	B(8b)-B(12b)-B(7b)	62.8(13)
C(1b)-C(13b)-N(14b)	109.6(12)	C(13a)-N(14b)-C(13b)	13.2(10)
O(1b)-Mo(1)-O(1a)	105.05(15)	O(1b)-Mo(1)-O(12)	101.11(13)
O(1a)-Mo(1)-O(12)	96.81(12)	O(1b)-Mo(1)-O(14)	100.98(13)
O(1a)-Mo(1)-O(14)	95.86(12)	O(12)-Mo(1)-O(14)	150.66(11)
O(1b)-Mo(1)-O(123)	97.60(13)	O(1a)-Mo(1)-O(123)	157.34(12)
O(12)-Mo(1)-O(123)	79.02(10)	O(14)-Mo(1)-O(123)	79.12(11)
O(1b)-Mo(1)-O(123) ^(a)	173.42(12)	O(1a)-Mo(1)-O(123) ^(a)	81.51(11)
O(12)-Mo(1)-O(123) ^(a)	78.37(10)	O(14)-Mo(1)-O(123) ^(a)	77.48(10)
O(123)-Mo(1)-O(123) ^(a)	75.83(11)	O(1b)-Mo(1)-Mo(2)	89.14(10)
O(1a)-Mo(1)-Mo(2)	132.96(9)	O(12)-Mo(1)-Mo(2)	36.15(8)
O(14)-Mo(1)-Mo(2)	125.67(8)	O(123)-Mo(1)-Mo(2)	46.57(7)
O(123) ^(a) -Mo(1)-Mo(2)	86.67(7)	O(2a)-Mo(2)-O(2b)	105.47(14)
O(2a)-Mo(2)-O(23)	101.34(13)	O(2b)-Mo(2)-O(23)	102.06(13)
O(2a)-Mo(2)-O(12)	100.49(13)	O(2b)-Mo(2)-O(12)	96.05(13)
O(23)-Mo(2)-O(12)	146.63(11)	O(2a)-Mo(2)-O(14) ^(a)	90.03(12)
O(2b)-Mo(2)-O(14) ^(a)	161.90(12)	O(23)-Mo(2)-O(14) ^(a)	83.53(11)
O(12)-Mo(2)-O(14) ^(a)	71.51(10)	O(2a)-Mo(2)-O(123)	160.93(12)
O(2b)-Mo(2)-O(123)	93.26(12)	O(23)-Mo(2)-O(123)	77.71(10)
O(12)-Mo(2)-O(123)	73.45(10)	O(14) ^(a) -Mo(2)-O(123)	70.90(10)
O(2a)-Mo(2)-Mo(1)	135.56(10)	O(2b)-Mo(2)-Mo(1)	83.86(10)

Table 5. (continued)

O(23)-Mo(2)-Mo(1)	119.40(8)	O(12)-Mo(2)-Mo(1)	35.12(7)
O(14) ^(a) -Mo(2)-Mo(1)	78.46(7)	O(123)-Mo(2)-Mo(1)	41.70(6)
O(3a)-Mo(3)-O(3b)	105.96(16)	O(3a)-Mo(3)-O(34)	102.18(13)
O(3b)-Mo(3)-O(34)	98.04(14)	O(3a)-Mo(3)-O(23)	101.23(14)
O(3b)-Mo(3)-O(23)	98.58(13)	O(34)-Mo(3)-O(23)	146.19(12)
O(3a)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	91.08(14)	O(3b)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	162.96(13)
O(34)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	77.49(12)	O(23)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	78.01(11)
O(3a)-Mo(3)-O(123)	161.30(14)	O(3b)-Mo(3)-O(123)	92.74(13)
O(34)-Mo(3)-O(123)	75.02(10)	O(23)-Mo(3)-O(123)	74.97(10)
O(1a) ^(a) -Mo(3)-O(123)	70.23(9)	O(4a)-Mo(4)-O(4b)	105.66(15)
O(4a)-Mo(4)-O(34)	101.15(14)	O(4b)-Mo(4)-O(34)	100.98(14)
O(4a)-Mo(4)-O(14)	101.96(13)	O(4b)-Mo(4)-O(14)	96.33(14)
O(34)-Mo(4)-O(14)	146.05(12)	O(4a)-Mo(4)-O(12) ^(a)	90.74(13)
O(4b)-Mo(4)-O(12) ^(a)	161.80(12)	O(34)-Mo(4)-O(12) ^(a)	83.09(11)
O(14)-Mo(4)-O(12) ^(a)	72.10(10)	O(4a)-Mo(4)-O(123)	162.37(13)
O(4b)-Mo(4)-O(123)	91.82(12)	O(34)-Mo(4)-O(123)	77.18(10)
O(14)-Mo(4)-O(123)	73.27(10)	O(12) ^(a) -Mo(4)-O(123)	71.63(9)
Mo(1)-O(1a)-Mo(3) ^(a)	115.72(14)	Mo(1)-O(12)-Mo(2)	108.73(12)
Mo(1)-O(12)-Mo(4) ^(a)	110.73(12)	Mo(2)-O(12)-Mo(4) ^(a)	103.84(11)
Mo(1)-O(14)-Mo(4)	109.31(12)	Mo(1)-O(14)-Mo(2) ^(a)	110.80(12)
Mo(4)-O(14)-Mo(2) ^(a)	103.11(11)	Mo(2)-O(23)-Mo(3)	115.48(14)
Mo(4)-O(34)-Mo(3)	116.22(14)	Mo(1)-O(123)-Mo(2)	91.73(9)
Mo(1)-O(123)-Mo(1) ^(a)	104.17(11)	Mo(2)-O(123)-Mo(1) ^(a)	98.29(10)
Mo(1)-O(123)-Mo(4)	91.67(10)	Mo(2)-O(123)-Mo(4)	163.27(13)
Mo(1) ^(a) -O(123)-Mo(4)	96.74(9)	Mo(1)-O(123)-Mo(3)	163.30(14)
Mo(2)-O(123)-Mo(3)	86.35(9)	Mo(1) ^(a) -O(123)-Mo(3)	92.52(9)
Mo(4)-O(123)-Mo(3)	85.70(8)	O(1s)-C(1s)-C(3s)	121.7(5)
O(1s)-C(1s)-C(2s)	120.6(5)	C(3s)-C(1s)-C(2s)	117.7(5)
O(2s)-C(4s)-C(5s)	123.8(6)	O(2s)-C(4s)-C(6s)	120.1(6)
C(5s)-C(4s)-C(6s)	115.7(6)	O(3s)-C(7s)-C(8s) ^(b)	138.(2)
O(3s)-C(7s)-C(8s)	124.6(17)	C(8s) ^(b) -C(7s)-C(8s)	96.9(15)

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) 2-x, 2-y, 1-z

(b) 2-x, 1-y, -z

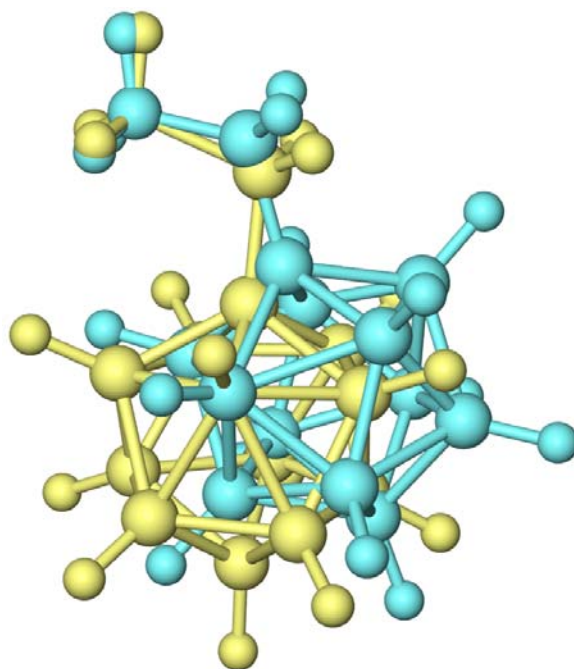


Figure 1. Model used for the disordered $[\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{11}\text{CH}_2\text{NH}_3]^+$ cation in **5**

2. $[\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{11}\text{CH}_2\text{NH}_3]_2[\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{11}\text{CH}_2\text{NH}_2\text{CHMe}_2]_2[\text{Mo}_8\text{O}_{26}] \cdot 2\text{MeCN}$ (6**)**

Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Mo(1)	-454.27(11)	6706.96(11)	-164.85(13)	192.6(7)
Mo(2)	1001.54(11)	5375.18(11)	10.21(12)	177.2(7)
Mo(3)	-22.80(11)	4442.13(11)	-1915.19(13)	194.9(7)
Mo(4)	-1537.90(12)	5763.26(11)	-2110.62(13)	207.4(7)
O(12)	540.4(9)	6196.3(9)	734.2(10)	199(3)
O(14)	-1495.5(10)	6535.9(9)	-1075.1(11)	229(3)
O(23)	899.3(9)	4349.1(9)	-716.3(10)	197(3)
O(24)	-1159.0(10)	4700.2(9)	-2417.8(11)	230(3)
O(123)	-251.5(9)	5458.0(8)	-836.9(11)	192(3)
O(1a)	76.2(10)	7276.7(10)	-802.9(12)	259(3)
O(2a)	1429.4(10)	6014.7(9)	-663.2(11)	236(3)
O(3a)	443.8(10)	5116.5(10)	-2525.0(11)	257(3)
O(4a)	-1006.4(10)	6337.3(10)	-2769.3(11)	259(3)
O(1b)	-744.3(10)	7396.9(10)	591.9(11)	264(3)
O(2b)	1821.2(9)	5056.2(9)	969.6(11)	223(3)
O(3b)	25.6(11)	3502.9(10)	-2433.4(11)	271(3)
O(4b)	-2534.8(10)	5788.6(10)	-2782.6(12)	299(4)
N(12a)	677.2(12)	6906.0(12)	-2432.9(14)	257(4)

N(12b)	2261.1(14)	1447.1(13)	-246.1(15)	328(5)
N(3s)	3899(3)	466(2)	411(3)	796(10)
C(1a)	2052.5(14)	7088.9(14)	-2858.1(16)	246(5)
C(2a)	2234.0(15)	8063.5(15)	-3025(2)	330(5)
C(11a)	1158.8(15)	6782.6(15)	-3156.4(17)	285(5)
C(1b)	3115.3(14)	2754.7(14)	-220.1(17)	261(5)
C(2b)	2666.2(16)	3651.5(16)	-492(2)	388(6)
C(11b)	2715.9(16)	2142.1(15)	335.8(18)	310(5)
C(13b)	1979.1(18)	779.0(17)	366.8(19)	387(6)
C(14b)	1325(2)	1094(2)	839(2)	498(7)
C(15b)	1672(3)	44.1(19)	-280(2)	571(9)
C(1s)	5152(3)	-196(3)	1653(3)	767(12)
C(2s)	4452(3)	179(2)	957(3)	639(10)
B(3a)	2379.5(18)	7719(2)	-1865(2)	347(6)
B(4a)	2780.2(18)	6703.8(19)	-1896(2)	342(6)
B(5a)	2819.6(19)	6487.4(18)	-3093(2)	337(6)
B(6a)	2436.4(19)	7357(2)	-3827(2)	360(7)
B(7a)	3115(2)	8196(2)	-3403(3)	437(8)
B(8a)	3075(2)	8422(2)	-2201(3)	453(8)

Table 2. (continued)

B(9a)	3460.2(19)	7548(2)	-1469(2)	411(7)
B(10a)	3737.1(18)	6788.9(19)	-2229(2)	350(6)
B(11a)	3518.5(19)	7187(2)	-3423(2)	365(7)
B(12a)	3917.1(18)	7846(2)	-2414(2)	378(7)
B(3b)	2653(2)	2977(2)	-1401(2)	476(9)
B(4b)	3642(2)	2481(2)	-1032(3)	466(8)
B(5b)	4163.9(19)	2875(2)	112(3)	429(8)
B(6b)	3510(2)	3605.8(19)	461(2)	395(7)
B(7b)	3356(2)	4440.0(19)	-374(3)	401(7)
B(8b)	2826(2)	4048(2)	-1516(3)	517(9)
B(9b)	3482(3)	3307(3)	-1864(3)	591(11)
B(10b)	4420(2)	3258(2)	-930(3)	537(10)
B(11b)	4333(2)	3951(2)	-6(2)	429(8)
B(12b)	3911(2)	4228(2)	-1241(2)	385(7)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo(1)	21.85(11)	15.92(10)	20.80(11)	0.66(7)	6.90(8)	1.25(7)
Mo(2)	18.25(11)	16.63(10)	18.94(10)	0.31(6)	5.99(7)	-0.61(6)
Mo(3)	23.95(11)	17.34(10)	17.98(11)	-0.76(7)	6.79(8)	-0.27(7)
Mo(4)	22.28(11)	20.02(11)	19.38(11)	1.93(7)	4.35(8)	1.02(7)
O(12)	20.9(7)	19.0(7)	20.2(7)	-0.3(6)	5.7(6)	-1.7(6)
O(14)	23.4(8)	21.0(7)	24.7(8)	1.2(6)	7.1(6)	2.9(6)
O(23)	20.6(8)	18.5(7)	21.4(7)	0.3(6)	8.0(6)	1.2(6)
O(24)	25.1(8)	23.0(8)	19.8(7)	-1.0(6)	3.9(6)	-1.4(6)
O(123)	21.5(8)	16.8(7)	20.0(7)	-1.0(5)	6.8(6)	0.2(6)
O(1a)	29.5(9)	21.2(8)	28.8(8)	3.9(6)	10.7(7)	1.8(6)
O(2a)	24.1(8)	21.8(8)	26.5(8)	2.0(6)	9.4(6)	-0.8(6)
O(3a)	30.7(9)	23.2(8)	25.1(8)	0.5(6)	10.5(7)	0.0(7)
O(4a)	31.2(9)	22.4(8)	25.0(8)	1.7(6)	8.7(7)	1.8(7)
O(1b)	32.4(9)	21.8(8)	26.6(8)	-0.8(6)	10.5(7)	3.8(7)
O(2b)	21.8(8)	21.8(8)	23.7(8)	1.1(6)	6.6(6)	-0.1(6)
O(3b)	35.7(9)	22.0(8)	24.8(8)	-2.2(6)	9.8(7)	0.5(7)
O(4b)	27.2(9)	30.2(9)	29.4(9)	2.6(7)	2.0(7)	1.2(7)
N(12a)	25.1(10)	21.9(9)	32.5(10)	3.7(8)	11.6(8)	0.0(8)
N(12b)	36.5(12)	32.0(11)	27.5(10)	-0.8(9)	3.9(9)	-2.3(9)
N(3s)	82(3)	62(2)	107(3)	7(2)	46(2)	19.2(19)
C(1a)	24.5(11)	26.6(11)	23.8(11)	4.0(9)	8.6(9)	1.7(9)
C(2a)	23.5(12)	26.7(12)	47.6(15)	10.4(11)	7.1(11)	2.3(9)
C(11a)	27.6(12)	33.2(12)	25.9(11)	0.8(10)	9.1(10)	-2.1(10)
C(1b)	23.5(11)	24.6(11)	27.9(12)	-1.4(9)	2.2(9)	4.6(9)
C(2b)	30.2(13)	29.8(13)	61.4(18)	13.7(12)	20.9(13)	10.2(11)
C(11b)	33.3(13)	27.4(12)	30.6(12)	-1.1(10)	4.8(10)	1.8(10)
C(13b)	48.2(17)	34.9(14)	30.6(13)	7.1(11)	5.6(12)	-0.2(12)
C(14b)	55.8(19)	45.8(17)	49.9(17)	13.6(14)	17.3(15)	-0.2(14)
C(15b)	89(3)	40.6(17)	39.0(16)	2.7(13)	11.6(16)	-21.8(17)
C(1s)	66(3)	67(2)	109(3)	6(2)	43(2)	-1(2)
C(2s)	65(2)	48.1(19)	93(3)	2.9(19)	46(2)	6.3(18)
B(3a)	26.3(14)	45.3(17)	32.5(15)	-9.4(13)	7.7(11)	0.4(12)
B(4a)	27.8(14)	44.0(17)	31.8(14)	14.4(12)	9.7(12)	6.9(12)
B(5a)	34.0(15)	31.7(14)	40.1(16)	-0.4(12)	17.8(13)	4.6(12)
B(6a)	31.6(15)	51.0(18)	27.9(14)	11.2(13)	11.9(12)	1.1(13)

Table 3. (continued)

B(7a)	29.8(16)	42.8(17)	60(2)	23.9(16)	15.1(15)	1.0(13)
B(8a)	28.6(16)	37.0(17)	69(2)	-11.0(16)	9.8(15)	-4.0(13)
B(9a)	24.8(14)	64(2)	32.5(15)	-4.4(14)	3.5(12)	-0.7(14)
B(10a)	27.1(14)	41.7(16)	38.0(15)	13.7(13)	11.7(12)	8.5(12)
B(11a)	30.4(15)	49.4(18)	32.4(15)	9.3(13)	13.2(12)	2.5(13)
B(12a)	22.8(14)	41.8(17)	48.6(18)	3.8(14)	9.0(13)	-0.9(12)
B(3b)	46.2(19)	55(2)	31.1(16)	9.7(14)	-9.3(14)	-19.4(16)
B(4b)	54(2)	42.1(18)	53(2)	-16.1(15)	30.9(17)	-5.5(15)
B(5b)	22.6(14)	39.1(17)	61(2)	4.9(15)	0.9(14)	2.9(12)
B(6b)	58(2)	29.6(15)	31.2(15)	-5.5(12)	11.5(14)	-8.1(14)
B(7b)	48.9(19)	27.0(14)	50.4(19)	2.8(13)	23.4(16)	0.1(13)
B(8b)	36.0(17)	58(2)	52(2)	28.1(17)	-5.3(15)	-11.0(15)
B(9b)	85(3)	67(2)	29.9(16)	-11.7(16)	22.7(18)	-34(2)
B(10b)	45(2)	49(2)	80(3)	-4.6(18)	39(2)	0.0(15)
B(11b)	37.1(17)	42.0(18)	41.8(17)	4.9(14)	-4.4(14)	-12.1(14)
B(12b)	36.3(16)	47.6(18)	32.6(15)	0.7(13)	10.4(13)	-9.9(13)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(12e)	966.	6697.	-1855.	39.
H(12c)	180.	6641.	-2629.	39.
H(12d)	589.	7456.	-2369.	39.
H(12f)	2599.	1207.	-587.	39.
H(12g)	1802.	1654.	-685.	39.
H(2a)	1706.	8502.	-3301.	40.
H(11d)	868.	7069.	-3759.	34.
H(11c)	1164.	6185.	-3303.	34.
H(2b)	2057.	3783.	-326.	47.
H(11e)	3156.	1909.	872.	37.
H(11f)	2324.	2447.	625.	37.
H(13a)	2473.	601.	886.	46.
H(14d)	818.	1229.	342.	75.
H(14f)	1531.	1592.	1216.	75.
H(14e)	1202.	668.	1268.	75.
H(15f)	1523.	-405.	103.	86.
H(15e)	2111.	-144.	-573.	86.
H(15d)	1182.	205.	-789.	86.
H(1s)	5196.	40.	2294.	115.
H(2s)	5666.	-86.	1459.	115.
H(3s)	5066.	-795.	1673.	115.
H(3a)	1992.	7895.	-1363.	42.
H(4a)	2660.	6205.	-1407.	41.
H(5a)	2725.	5843.	-3388.	40.
H(6a)	2083.	7298.	-4603.	43.
H(7a)	3216.	8693.	-3905.	52.
H(8a)	3149.	9070.	-1916.	54.
H(9a)	3800.	7610.	-690.	49.
H(10a)	4263.	6349.	-1951.	42.
H(11a)	3896.	7009.	-3935.	44.
H(12a)	4561.	8107.	-2256.	45.
H(3b)	2086.	2661.	-1848.	57.
H(4b)	3736.	1829.	-1244.	56.
H(5b)	4600.	2480.	657.	51.
H(6b)	3500.	3695.	1233.	47.
H(7b)	3253.	5087.	-153.	48.
H(8b)	2372.	4436.	-2049.	62.

Table 4. (continued)

H(9b)	3475.	3200.	-2638.	71.
H(10b)	5035.	3126.	-1081.	64.
H(11b)	4888.	4275.	458.	52.
H(12b)	4183.	4731.	-1601.	46.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

Mo(1)-O(1a)	1.6969(16)	Mo(1)-O(1b)	1.7097(15)
Mo(1)-O(14)	1.9036(16)	Mo(1)-O(12)	1.9977(15)
Mo(1)-O(123)	2.2998(14)	Mo(1)-O(23) ^(a)	2.3539(14)
Mo(1)-Mo(2)	3.2037(2)	Mo(2)-O(2a)	1.6915(15)
Mo(2)-O(2b)	1.7485(15)	Mo(2)-O(23)	1.9433(14)
Mo(2)-O(12)	1.9591(15)	Mo(2)-O(123)	2.1320(15)
Mo(2)-O(123) ^(a)	2.3531(15)	Mo(3)-O(3b)	1.7018(16)
Mo(3)-O(3a)	1.7043(16)	Mo(3)-O(24)	1.8900(16)
Mo(3)-O(23)	1.9949(15)	Mo(3)-O(12) ^(a)	2.3284(15)
Mo(3)-O(123)	2.3525(14)	Mo(4)-O(4b)	1.6923(16)
Mo(4)-O(4a)	1.7216(16)	Mo(4)-O(24)	1.9210(15)
Mo(4)-O(14)	1.9276(15)	Mo(4)-O(2b) ^(a)	2.2470(15)
Mo(4)-O(123)	2.4816(15)	O(12)-Mo(3) ^(a)	2.3284(15)
O(23)-Mo(1) ^(a)	2.3539(14)	O(123)-Mo(2) ^(a)	2.3531(15)
O(2b)-Mo(4) ^(a)	2.2470(15)	N(12a)-C(11a)	1.478(3)
N(12b)-C(11b)	1.486(3)	N(12b)-C(13b)	1.540(3)
N(3s)-C(2s)	1.143(5)	C(1a)-C(11a)	1.522(3)
C(1a)-C(2a)	1.634(3)	C(1a)-B(4a)	1.703(4)
C(1a)-B(5a)	1.706(3)	C(1a)-B(3a)	1.721(4)
C(1a)-B(6a)	1.727(3)	C(2a)-B(8a)	1.686(4)
C(2a)-B(7a)	1.702(4)	C(2a)-B(3a)	1.711(4)
C(2a)-B(6a)	1.715(4)	C(1b)-C(11b)	1.526(3)
C(1b)-C(2b)	1.632(3)	C(1b)-B(4b)	1.686(4)
C(1b)-B(5b)	1.699(4)	C(1b)-B(3b)	1.708(4)
C(1b)-B(6b)	1.718(4)	C(2b)-B(8b)	1.685(4)
C(2b)-B(6b)	1.691(4)	C(2b)-B(3b)	1.695(5)
C(2b)-B(7b)	1.696(4)	C(13b)-C(14b)	1.511(4)
C(13b)-C(15b)	1.514(4)	C(1s)-C(2s)	1.458(6)
B(3a)-B(9a)	1.764(4)	B(3a)-B(8a)	1.776(5)
B(3a)-B(4a)	1.776(4)	B(4a)-B(5a)	1.768(4)
B(4a)-B(9a)	1.778(5)	B(4a)-B(10a)	1.782(4)
B(5a)-B(10a)	1.770(4)	B(5a)-B(11a)	1.772(4)
B(5a)-B(6a)	1.775(4)	B(6a)-B(11a)	1.767(4)
B(6a)-B(7a)	1.771(5)	B(7a)-B(11a)	1.768(5)
B(7a)-B(12a)	1.773(5)	B(7a)-B(8a)	1.779(5)
B(8a)-B(12a)	1.774(4)	B(8a)-B(9a)	1.780(5)
B(9a)-B(10a)	1.778(5)	B(9a)-B(12a)	1.781(4)
B(10a)-B(12a)	1.767(4)	B(10a)-B(11a)	1.776(4)
B(11a)-B(12a)	1.782(5)	B(3b)-B(9b)	1.761(5)
B(3b)-B(8b)	1.769(5)	B(3b)-B(4b)	1.785(5)
B(4b)-B(9b)	1.765(6)	B(4b)-B(5b)	1.766(5)
B(4b)-B(10b)	1.783(5)	B(5b)-B(6b)	1.764(5)
B(5b)-B(10b)	1.767(5)	B(5b)-B(11b)	1.779(5)

Table 5. (continued)

B(6b)-B(11b)	1.764(5)	B(6b)-B(7b)	1.778(4)
B(7b)-B(12b)	1.762(4)	B(7b)-B(11b)	1.763(5)
B(7b)-B(8b)	1.767(5)	B(8b)-B(12b)	1.772(5)
B(8b)-B(9b)	1.777(6)	B(9b)-B(10b)	1.779(6)
B(9b)-B(12b)	1.788(5)	B(10b)-B(11b)	1.769(5)
B(10b)-B(12b)	1.784(5)	B(11b)-B(12b)	1.786(4)

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $-x, 1-y, -z$

3. [C₂B₁₀H₁₁CH₂NH₃]₄[Mo₈O₂₆]·2MeCN·2EtO (7)

Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Mo(1)	98.74(4)	535.77(3)	500.99(4)	34.17(16)
Mo(2)	-11.24(4)	461.30(3)	296.12(4)	37.27(17)
Mo(3)	-155.38(4)	587.64(3)	298.90(4)	39.33(18)
Mo(4)	-43.08(4)	662.01(3)	506.15(4)	36.72(17)
O(1a)	183.7(3)	500.8(3)	593.3(3)	39.9(10)
O(1b)	137.9(3)	602.0(3)	435.5(3)	42.3(11)
O(2a)	-11.8(3)	376.3(3)	231.9(3)	43.9(11)
O(2b)	36.2(3)	528.6(3)	240.5(3)	42.6(11)
O(3a)	-256.6(3)	595.5(3)	233.9(4)	47.7(12)
O(3b)	-103.3(3)	649.8(3)	240.1(3)	42.4(11)
O(4a)	-64.5(3)	722.1(3)	593.5(3)	42.2(11)
O(4b)	8.3(3)	719.4(2)	442.9(3)	41.7(10)
O(12)	84.2(3)	444.0(2)	415.1(3)	38.5(10)
O(14)	58.5(3)	607.2(2)	587.5(3)	36.4(10)
O(23)	-123.7(3)	490.3(3)	249.7(3)	41.0(10)
O(34)	-148.8(3)	651.0(3)	415.1(3)	41.9(10)
O(123)	-27.7(3)	548.7(2)	419.4(3)	38.5(10)
C(1a)	207.6(4)	729.6(4)	243.2(5)	41.4(15)
C(2a)	225.6(5)	819.1(4)	210.6(5)	48.4(17)
B(3a)	252.6(6)	742.0(6)	146.5(7)	53(2)
B(4a)	287.3(5)	669.8(5)	238.6(7)	51(2)
B(5a)	275.5(5)	706.5(5)	352.9(6)	46.7(19)
B(6a)	233.3(6)	801.8(5)	332.3(6)	50(2)
B(7a)	304.5(6)	862.5(6)	294.1(8)	57(2)

B(8a)	316.9(6)	826.6(6)	180.2(8)	60(2)
B(9a)	359.4(6)	730.9(6)	200.4(7)	59(2)
B(10a)	374.7(6)	708.3(6)	329.9(7)	53(2)
B(11a)	340.1(5)	790.9(6)	386.6(7)	53(2)
B(12a)	392.3(6)	804.9(5)	293.9(7)	54(2)
C(13a)	119.0(4)	698.6(4)	209.1(5)	42.3(15)
N(14a)	66.5(4)	713.9(3)	275.1(4)	40.9(13)
C(1b)	-310.6(4)	698.0(4)	557.9(5)	44.1(16)
C(2b)	-272.1(6)	610.5(5)	563.0(8)	72(3)
B(3b)	-255.2(7)	661.5(7)	668.8(9)	80(4)
B(4b)	-346.2(8)	712.3(6)	657.2(9)	73(3)
B(5b)	-413.6(7)	692.1(6)	541.3(11)	87(4)
B(6b)	-363.3(11)	627.4(6)	480.6(9)	103(5)

Table 2. (continued)

B(7b)	-342.2(8)	540.5(5)	549.3(8)	70(3)
B(8b)	-277.2(7)	562.2(7)	665.4(9)	76(3)
B(9b)	-325.8(11)	626.4(7)	725.5(9)	101(5)
B(10b)	-426.5(10)	643.8(7)	645.3(16)	123(7)
B(11b)	-436.6(8)	591.6(6)	536.2(13)	110(6)
B(12b)	-383.3(6)	549.5(6)	650.0(8)	61(3)
C(13b) ^u	-274.3(6)	760.2(5)	507.4(7)	70(2)
N(14b) ^{pu}	-291.0(10)	844.7(8)	532.7(12)	43(3)
N(14c) ^{pu}	-235.8(8)	819.2(7)	563.1(8)	55(3)
O(1s)	-176.7(4)	572.4(4)	-37.5(6)	96(2)
C(2s)	-180.8(7)	489.5(6)	-27.9(8)	84(3)
C(3s)	-266.9(8)	469.5(6)	-20.4(9)	94(4)
C(4as) ^{pu}	-100.6(6)	602.7(5)	-73.4(6)	39.0(19)
C(4bs) ^{pu}	-99(2)	581(2)	20(3)	63(9)
C(5s) ^u	-28.6(7)	603.4(6)	9.2(8)	90(3)
N(6s)	-475.2(9)	532.6(8)	178.8(9)	133(4)
C(7s)	-445.4(11)	567.6(9)	95.3(12)	125(5)
C(8s)	-420.4(11)	590.3(8)	27.2(13)	127(5)

Key to superscripts on atoms with refinement constraints/restraints:

u - U_{iso} or U_{ij} restraint (rigid bond)

p - partial occupancy constraint

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo(1)	4.60(3)	2.53(3)	3.33(3)	0.01(2)	1.42(2)	-0.09(2)
Mo(2)	5.27(4)	2.85(3)	3.24(3)	-0.02(2)	1.46(3)	-0.03(2)
Mo(3)	5.19(4)	3.04(3)	3.61(3)	0.18(2)	1.25(3)	0.16(2)
Mo(4)	5.15(4)	2.59(3)	3.50(3)	-0.02(2)	1.56(3)	0.05(2)
O(1a)	4.8(3)	3.4(2)	3.9(2)	0.0(2)	1.4(2)	-0.1(2)
O(1b)	5.6(3)	3.2(2)	4.5(3)	-0.1(2)	2.3(2)	-0.3(2)
O(2a)	6.2(3)	2.8(2)	4.1(3)	-0.4(2)	1.3(2)	0.0(2)
O(2b)	5.8(3)	3.5(2)	3.7(2)	0.6(2)	1.7(2)	-0.2(2)
O(3a)	5.2(3)	3.7(3)	5.2(3)	-0.4(2)	1.1(2)	0.2(2)
O(3b)	5.6(3)	3.4(2)	4.0(2)	0.4(2)	1.8(2)	0.2(2)
O(4a)	5.6(3)	3.2(2)	4.3(3)	-0.4(2)	2.1(2)	-0.1(2)
O(4b)	5.6(3)	3.0(2)	4.4(3)	0.1(2)	2.2(2)	0.0(2)
O(12)	5.5(3)	2.9(2)	3.4(2)	-0.06(18)	1.8(2)	0.0(2)
O(14)	4.8(3)	2.8(2)	3.3(2)	0.02(18)	1.2(2)	-0.29(19)
O(23)	5.3(3)	3.6(2)	3.5(2)	-0.40(19)	1.4(2)	-0.3(2)
O(34)	5.3(3)	3.2(2)	4.2(3)	0.1(2)	1.4(2)	0.4(2)
O(123)	4.8(3)	3.0(2)	4.0(2)	-0.03(19)	1.7(2)	-0.14(19)
C(1a)	4.9(4)	3.7(4)	3.7(3)	0.7(3)	0.9(3)	0.1(3)
C(2a)	5.7(4)	4.3(4)	4.6(4)	0.9(3)	1.4(3)	0.3(3)
B(3a)	5.6(5)	6.1(6)	4.5(5)	0.3(4)	1.8(4)	0.4(4)
B(4a)	5.0(5)	4.7(5)	5.4(5)	0.0(4)	1.1(4)	0.8(4)
B(5a)	4.9(5)	5.0(5)	3.9(4)	1.3(4)	0.6(4)	-0.5(4)
B(6a)	5.6(5)	5.1(5)	4.6(5)	-0.5(4)	1.8(4)	-0.9(4)
B(7a)	4.8(5)	4.6(5)	7.4(6)	0.0(4)	1.3(4)	-0.9(4)
B(8a)	5.0(5)	6.9(6)	6.4(6)	2.3(5)	2.0(5)	-0.2(4)
B(9a)	5.1(5)	7.3(6)	5.7(5)	0.2(5)	2.0(4)	0.2(5)
B(10a)	5.0(5)	5.3(5)	5.2(5)	0.9(4)	0.9(4)	0.2(4)
B(11a)	4.8(5)	5.9(5)	5.2(5)	0.4(4)	1.3(4)	-0.8(4)
B(12a)	4.9(5)	5.2(5)	6.0(5)	1.0(4)	1.3(4)	0.1(4)
C(13a)	4.5(4)	4.6(4)	3.5(3)	0.4(3)	1.0(3)	0.1(3)
N(14a)	5.2(3)	3.5(3)	3.8(3)	0.1(2)	1.4(3)	-0.4(2)
C(1b)	5.0(4)	3.8(4)	4.6(4)	0.1(3)	1.6(3)	0.5(3)
C(2b)	8.3(6)	4.6(4)	10.9(8)	3.3(5)	6.2(6)	2.8(4)
B(3b)	6.9(7)	6.9(7)	7.6(7)	2.7(6)	-2.2(6)	-2.5(6)
B(4b)	10.6(9)	4.4(5)	9.4(8)	-1.7(5)	6.9(7)	-2.1(5)

Table 3. (continued)

B(5b)	5.3(6)	3.4(5)	15.4(12)	0.7(6)	-0.9(7)	-0.1(4)
B(6b)	19.8(16)	3.4(5)	5.6(6)	-0.1(5)	-0.4(8)	-0.1(7)
B(7b)	11.7(9)	3.5(5)	6.6(6)	0.0(4)	3.8(6)	0.6(5)
B(8b)	6.0(6)	6.9(7)	9.5(8)	4.6(6)	1.2(6)	-0.5(5)
B(9b)	19.1(16)	6.6(7)	6.5(7)	-1.5(6)	6.9(9)	-5.4(9)
B(10b)	11.2(11)	4.1(6)	27(2)	-0.5(9)	13.7(14)	-1.1(6)
B(11b)	7.2(7)	3.8(5)	17.8(15)	1.5(7)	-4.1(9)	-1.3(5)
B(12b)	5.8(6)	4.5(5)	8.9(7)	-0.4(5)	3.4(5)	-1.0(4)
C(13b)	9.9(7)	3.4(4)	9.5(7)	1.0(4)	5.8(6)	1.1(4)
N(14b)	4.5(9)	2.2(6)	6.0(10)	-0.2(6)	1.2(7)	-0.1(6)
N(14c)	6.8(8)	5.3(7)	5.1(6)	0.3(5)	2.6(6)	-1.4(6)
O(1s)	7.4(4)	7.4(5)	12.5(6)	-4.5(4)	0.0(4)	1.3(4)
C(2s)	10.4(8)	7.1(6)	7.2(6)	-1.6(5)	1.6(6)	2.1(6)
C(3s)	14.6(11)	5.7(6)	9.7(8)	-0.6(5)	6.2(8)	-0.7(6)
C(4as)	6.0(5)	2.8(4)	3.2(4)	-0.1(3)	1.7(4)	0.1(4)
C(4bs)	11.4(9)	6.2(6)	8.8(7)	-0.2(5)	1.7(6)	0.4(6)
C(5s)	16.8(12)	13.1(10)	11.6(9)	1.2(8)	6.6(9)	2.5(8)
N(6s)	17.3(15)	9.0(10)	10.8(11)	-0.5(8)	3.4(11)	5.3(10)
C(7s)	17.4(15)	8.2(9)	13.2(13)	2.1(9)	5.4(12)	5.2(9)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(2a)	1729.	8570.	1693.	58.
H(3a)	2222.	7267.	671.	64.
H(4a)	2805.	6060.	2199.	61.
H(5a)	2611.	6665.	4095.	56.
H(6a)	1902.	8253.	3741.	60.
H(7a)	3089.	9267.	3109.	68.
H(8a)	3294.	8669.	1229.	72.
H(9a)	4013.	7077.	1566.	71.
H(10a)	4267.	6699.	3718.	64.
H(11a)	3692.	8073.	4659.	64.
H(12a)	4565.	8300.	3123.	65.
H(13a)	920.	7217.	1434.	51.
H(13b)	1215.	6413.	1999.	51.
H(14a)	906.	6933.	3361.	61.
H(14b)	159.	6915.	2497.	61.
H(14c)	604.	7665.	2807.	61.
H(2b)	-2177.	5994.	5327.	87.
H(3b)	-1934.	6851.	7117.	95.
H(4b)	-3469.	7705.	6938.	88.
H(5b)	-4589.	7369.	5002.	105.
H(6b)	-3742.	6281.	3980.	124.
H(7b)	-3385.	4827.	5131.	84.
H(8b)	-2307.	5187.	7072.	91.
H(9b)	-3128.	6266.	8084.	121.
H(10b)	-4815.	6551.	6744.	147.
H(11b)	-4978.	5683.	4915.	133.
H(12b)	-4092.	4981.	6813.	74.
H(13c)	-2962.	7531.	4348.	84.
H(13d)	-2135.	7523.	5243.	84.
H(13e)	-2351.	7352.	4751.	84.
H(13f)	-3201.	7827.	4541.	84.
H(14d)	-2820.	8495.	5995.	64.
H(14e)	-3446.	8574.	5018.	64.
H(14f)	-2563.	8774.	5117.	64.
H(14g)	-2732.	8477.	5851.	83.
H(14h)	-2114.	8504.	5263.	83.
H(14i)	-1962.	8000.	6160.	83.

Table 4. (continued)

H(2s1)	-1386.	4716.	324.	100.
H(2s2)	-1701.	4634.	-863.	100.
H(3s1)	-2750.	4916.	409.	141.
H(3s2)	-2733.	4125.	-198.	141.
H(3s3)	-3083.	4914.	-776.	141.
H(4s1)	-914.	5679.	-1261.	47.
H(4s2)	-1120.	6562.	-1012.	47.
H(4b1)	-1063.	6154.	739.	76.
H(4b2)	-861.	5289.	506.	76.
H(5s1)	191.	6222.	-122.	135.
H(5s2)	-175.	5503.	360.	135.
H(5s3)	-380.	6383.	608.	135.
H(5s1)	130.	6058.	737.	135.
H(5s2)	-334.	6549.	-227.	135.
H(5s3)	-116.	5646.	-330.	135.
H(8s1)	-3619.	5760.	389.	190.
H(8s2)	-4262.	6473.	217.	190.
H(8s3)	-4529.	5659.	-346.	190.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

Mo(1)-O(1b)	1.695(4)	Mo(1)-O(1a)	1.747(5)
Mo(1)-O(12)	1.950(4)	Mo(1)-O(14)	1.962(4)
Mo(1)-O(123)	2.126(5)	Mo(1)-O(123) ^(a)	2.336(4)
Mo(1)-Mo(2)	3.2192(8)	Mo(2)-O(2b)	1.701(4)
Mo(2)-O(2a)	1.706(4)	Mo(2)-O(23)	1.884(5)
Mo(2)-O(12)	1.992(4)	Mo(2)-O(14) ^(a)	2.313(4)
Mo(2)-O(123)	2.353(4)	Mo(3)-O(3a)	1.697(5)
Mo(3)-O(3b)	1.718(4)	Mo(3)-O(23)	1.929(4)
Mo(3)-O(34)	1.931(4)	Mo(3)-O(1a) ^(a)	2.273(4)
Mo(3)-O(123)	2.429(5)	Mo(4)-O(4b)	1.701(4)
Mo(4)-O(4a)	1.708(4)	Mo(4)-O(34)	1.889(5)
Mo(4)-O(14)	2.003(4)	Mo(4)-O(12) ^(a)	2.319(4)
Mo(4)-O(123)	2.337(4)	O(1a)-Mo(3) ^(a)	2.273(4)
O(12)-Mo(4) ^(a)	2.319(4)	O(14)-Mo(2) ^(a)	2.313(4)
O(123)-Mo(1) ^(a)	2.336(4)	C(1a)-C(13a)	1.523(9)
C(1a)-C(2a)	1.648(9)	C(1a)-B(5a)	1.691(10)
C(1a)-B(4a)	1.695(11)	C(1a)-B(6a)	1.724(11)
C(1a)-B(3a)	1.733(11)	C(2a)-B(7a)	1.681(12)
C(2a)-B(8a)	1.698(12)	C(2a)-B(6a)	1.700(11)
C(2a)-B(3a)	1.722(12)	B(3a)-B(9a)	1.752(13)
B(3a)-B(4a)	1.764(13)	B(3a)-B(8a)	1.786(14)
B(4a)-B(5a)	1.778(12)	B(4a)-B(9a)	1.784(13)
B(4a)-B(10a)	1.787(13)	B(5a)-B(6a)	1.769(13)
B(5a)-B(10a)	1.775(12)	B(5a)-B(11a)	1.787(12)
B(6a)-B(11a)	1.753(13)	B(6a)-B(7a)	1.768(12)
B(7a)-B(11a)	1.764(13)	B(7a)-B(12a)	1.771(13)
B(7a)-B(8a)	1.772(15)	B(8a)-B(9a)	1.775(15)
B(8a)-B(12a)	1.782(13)	B(9a)-B(12a)	1.795(14)
B(9a)-B(10a)	1.803(13)	B(10a)-B(12a)	1.773(13)
B(10a)-B(11a)	1.790(13)	B(11a)-B(12a)	1.766(13)
C(13a)-N(14a)	1.462(8)	C(1b)-C(13b)	1.494(10)
C(1b)-C(2b)	1.623(10)	C(1b)-B(4b)	1.671(11)
C(1b)-B(5b)	1.678(13)	C(1b)-B(3b)	1.696(12)
C(1b)-B(6b)	1.700(13)	C(2b)-B(7b)	1.651(15)
C(2b)-B(6b)	1.671(17)	C(2b)-B(3b)	1.674(16)
C(2b)-B(8b)	1.675(13)	B(3b)-B(9b)	1.701(17)
B(3b)-B(4b)	1.722(17)	B(3b)-B(8b)	1.734(15)
B(4b)-B(9b)	1.733(18)	B(4b)-B(5b)	1.740(18)
B(4b)-B(10b)	1.756(15)	B(5b)-B(10b)	1.74(2)
B(5b)-B(6b)	1.74(2)	B(5b)-B(11b)	1.758(14)
B(6b)-B(11b)	1.73(2)	B(6b)-B(7b)	1.752(14)
B(7b)-B(8b)	1.732(17)	B(7b)-B(12b)	1.733(14)
B(7b)-B(11b)	1.770(18)	B(8b)-B(9b)	1.716(19)

Table 5. (continued)

B(8b)-B(12b)	1.743(14)	B(9b)-B(10b)	1.78(2)
B(9b)-B(12b)	1.795(15)	B(10b)-B(11b)	1.74(2)
B(10b)-B(12b)	1.760(15)	B(11b)-B(12b)	1.754(18)
C(13b)-N(14c)	1.330(14)	C(13b)-N(14b)	1.529(15)
O(1s)-C(4bs)	1.34(4)	O(1s)-C(2s)	1.427(12)
O(1s)-C(4as)	1.578(12)	C(2s)-C(3s)	1.512(15)
C(4as)-C(5s)	1.426(13)	C(4bs)-C(5s)	1.28(4)
N(6s)-C(7s)	1.51(2)	C(7s)-C(8s)	1.204(19)

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $-x, 1-y, 1-z$

Table 6. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

O(1b)-Mo(1)-O(1a)	105.8(2)	O(1b)-Mo(1)-O(12)	101.9(2)
O(1a)-Mo(1)-O(12)	96.9(2)	O(1b)-Mo(1)-O(14)	99.56(19)
O(1a)-Mo(1)-O(14)	95.96(19)	O(12)-Mo(1)-O(14)	150.88(18)
O(1b)-Mo(1)-O(123)	96.6(2)	O(1a)-Mo(1)-O(123)	157.60(19)
O(12)-Mo(1)-O(123)	79.20(18)	O(14)-Mo(1)-O(123)	78.94(17)
O(1b)-Mo(1)-O(123) ^(a)	172.5(2)	O(1a)-Mo(1)-O(123) ^(a)	81.55(18)
O(12)-Mo(1)-O(123) ^(a)	78.58(17)	O(14)-Mo(1)-O(123) ^(a)	77.64(16)
O(123)-Mo(1)-O(123) ^(a)	76.05(18)	O(1b)-Mo(1)-Mo(2)	89.66(16)
O(1a)-Mo(1)-Mo(2)	132.63(15)	O(12)-Mo(1)-Mo(2)	35.69(13)
O(14)-Mo(1)-Mo(2)	125.86(13)	O(123)-Mo(1)-Mo(2)	46.94(11)
O(123) ^(a) -Mo(1)-Mo(2)	86.46(11)	O(2b)-Mo(2)-O(2a)	105.8(2)
O(2b)-Mo(2)-O(23)	102.2(2)	O(2a)-Mo(2)-O(23)	100.3(2)
O(2b)-Mo(2)-O(12)	96.6(2)	O(2a)-Mo(2)-O(12)	101.7(2)
O(23)-Mo(2)-O(12)	145.80(18)	O(2b)-Mo(2)-O(14) ^(a)	162.87(19)
O(2a)-Mo(2)-O(14) ^(a)	89.18(19)	O(23)-Mo(2)-O(14) ^(a)	82.86(17)
O(12)-Mo(2)-O(14) ^(a)	71.68(16)	O(2b)-Mo(2)-O(123)	93.89(19)
O(2a)-Mo(2)-O(123)	160.20(19)	O(23)-Mo(2)-O(123)	77.37(17)
O(12)-Mo(2)-O(123)	73.02(17)	O(14) ^(a) -Mo(2)-O(123)	71.02(15)
O(2b)-Mo(2)-Mo(1)	85.11(16)	O(2a)-Mo(2)-Mo(1)	136.52(16)
O(23)-Mo(2)-Mo(1)	118.68(13)	O(12)-Mo(2)-Mo(1)	34.82(12)
O(14) ^(a) -Mo(2)-Mo(1)	78.17(11)	O(123)-Mo(2)-Mo(1)	41.31(11)
O(3a)-Mo(3)-O(3b)	104.9(2)	O(3a)-Mo(3)-O(23)	102.0(2)
O(3b)-Mo(3)-O(23)	97.9(2)	O(3a)-Mo(3)-O(34)	103.1(2)
O(3b)-Mo(3)-O(34)	97.8(2)	O(23)-Mo(3)-O(34)	145.65(19)
O(3a)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	92.9(2)	O(3b)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	162.2(2)
O(23)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	77.92(18)	O(34)-Mo(3)-O(1a) ^(a)	77.80(17)
O(3a)-Mo(3)-O(123)	163.0(2)	O(3b)-Mo(3)-O(123)	92.06(19)
O(23)-Mo(3)-O(123)	74.70(17)	O(34)-Mo(3)-O(123)	74.39(17)
O(1a) ^(a) -Mo(3)-O(123)	70.12(15)	O(4b)-Mo(4)-O(4a)	105.1(2)
O(4b)-Mo(4)-O(34)	102.7(2)	O(4a)-Mo(4)-O(34)	101.7(2)
O(4b)-Mo(4)-O(14)	95.4(2)	O(4a)-Mo(4)-O(14)	100.7(2)
O(34)-Mo(4)-O(14)	146.31(18)	O(4b)-Mo(4)-O(12) ^(a)	162.51(18)
O(4a)-Mo(4)-O(12) ^(a)	88.99(18)	O(34)-Mo(4)-O(12) ^(a)	84.15(18)
O(14)-Mo(4)-O(12) ^(a)	71.37(16)	O(4b)-Mo(4)-O(123)	93.74(18)
O(4a)-Mo(4)-O(123)	160.81(18)	O(34)-Mo(4)-O(123)	77.40(17)
O(14)-Mo(4)-O(123)	73.23(16)	O(12) ^(a) -Mo(4)-O(123)	71.83(15)
Mo(1)-O(1a)-Mo(3) ^(a)	116.4(2)	Mo(1)-O(12)-Mo(2)	109.5(2)
Mo(1)-O(12)-Mo(4) ^(a)	109.84(18)	Mo(2)-O(12)-Mo(4) ^(a)	103.83(19)
Mo(1)-O(14)-Mo(4)	108.7(2)	Mo(1)-O(14)-Mo(2) ^(a)	111.07(18)
Mo(4)-O(14)-Mo(2) ^(a)	103.72(18)	Mo(2)-O(23)-Mo(3)	116.7(2)
Mo(4)-O(34)-Mo(3)	116.9(2)	Mo(1)-O(123)-Mo(1) ^(a)	103.95(18)
Mo(1)-O(123)-Mo(4)	92.35(16)	Mo(1) ^(a) -O(123)-Mo(4)	97.01(16)
Mo(1)-O(123)-Mo(2)	91.75(16)	Mo(1) ^(a) -O(123)-Mo(2)	97.66(16)

Table 6. (continued)

Mo(4)-O(123)-Mo(2)	163.3(2)	Mo(1)-O(123)-Mo(3)	164.1(2)
Mo(1) ^(a) -O(123)-Mo(3)	91.96(15)	Mo(4)-O(123)-Mo(3)	86.17(14)
Mo(2)-O(123)-Mo(3)	85.47(15)	C(13a)-C(1a)-C(2a)	118.1(6)
C(13a)-C(1a)-B(5a)	124.1(6)	C(2a)-C(1a)-B(5a)	109.9(6)
C(13a)-C(1a)-B(4a)	119.2(6)	C(2a)-C(1a)-B(4a)	110.1(6)
B(5a)-C(1a)-B(4a)	63.4(5)	C(13a)-C(1a)-B(6a)	120.5(6)
C(2a)-C(1a)-B(6a)	60.5(4)	B(5a)-C(1a)-B(6a)	62.4(5)
B(4a)-C(1a)-B(6a)	114.5(6)	C(13a)-C(1a)-B(3a)	113.0(6)
C(2a)-C(1a)-B(3a)	61.2(5)	B(5a)-C(1a)-B(3a)	114.2(6)
B(4a)-C(1a)-B(3a)	61.9(5)	B(6a)-C(1a)-B(3a)	113.6(6)
C(1a)-C(2a)-B(7a)	112.7(6)	C(1a)-C(2a)-B(8a)	112.6(6)
B(7a)-C(2a)-B(8a)	63.3(6)	C(1a)-C(2a)-B(6a)	62.0(4)
B(7a)-C(2a)-B(6a)	63.1(5)	B(8a)-C(2a)-B(6a)	115.8(6)
C(1a)-C(2a)-B(3a)	61.8(5)	B(7a)-C(2a)-B(3a)	115.6(6)
B(8a)-C(2a)-B(3a)	63.0(6)	B(6a)-C(2a)-B(3a)	115.5(6)
C(2a)-B(3a)-C(1a)	57.0(4)	C(2a)-B(3a)-B(9a)	103.9(7)
C(1a)-B(3a)-B(9a)	105.1(6)	C(2a)-B(3a)-B(4a)	103.6(6)
C(1a)-B(3a)-B(4a)	58.0(5)	B(9a)-B(3a)-B(4a)	61.0(5)
C(2a)-B(3a)-B(8a)	57.8(5)	C(1a)-B(3a)-B(8a)	104.5(6)
B(9a)-B(3a)-B(8a)	60.2(6)	B(4a)-B(3a)-B(8a)	108.5(7)
C(1a)-B(4a)-B(3a)	60.1(5)	C(1a)-B(4a)-B(5a)	58.2(4)
B(3a)-B(4a)-B(5a)	108.5(6)	C(1a)-B(4a)-B(9a)	105.3(6)
B(3a)-B(4a)-B(9a)	59.2(5)	B(5a)-B(4a)-B(9a)	108.2(6)
C(1a)-B(4a)-B(10a)	104.6(6)	B(3a)-B(4a)-B(10a)	108.0(7)
B(5a)-B(4a)-B(10a)	59.7(5)	B(9a)-B(4a)-B(10a)	60.6(5)
C(1a)-B(5a)-B(6a)	59.7(4)	C(1a)-B(5a)-B(10a)	105.3(6)
B(6a)-B(5a)-B(10a)	107.8(6)	C(1a)-B(5a)-B(4a)	58.4(4)
B(6a)-B(5a)-B(4a)	108.3(6)	B(10a)-B(5a)-B(4a)	60.4(5)
C(1a)-B(5a)-B(11a)	105.1(6)	B(6a)-B(5a)-B(11a)	59.1(5)
B(10a)-B(5a)-B(11a)	60.3(5)	B(4a)-B(5a)-B(11a)	108.3(6)
C(2a)-B(6a)-C(1a)	57.5(4)	C(2a)-B(6a)-B(11a)	104.1(6)
C(1a)-B(6a)-B(11a)	105.2(6)	C(2a)-B(6a)-B(7a)	57.9(5)
C(1a)-B(6a)-B(7a)	105.0(6)	B(11a)-B(6a)-B(7a)	60.1(5)
C(2a)-B(6a)-B(5a)	104.0(6)	C(1a)-B(6a)-B(5a)	57.9(4)
B(11a)-B(6a)-B(5a)	61.0(5)	B(7a)-B(6a)-B(5a)	108.5(7)
C(2a)-B(7a)-B(11a)	104.4(6)	C(2a)-B(7a)-B(6a)	59.0(5)
B(11a)-B(7a)-B(6a)	59.5(5)	C(2a)-B(7a)-B(12a)	104.4(7)
B(11a)-B(7a)-B(12a)	59.9(5)	B(6a)-B(7a)-B(12a)	107.6(7)
C(2a)-B(7a)-B(8a)	58.8(5)	B(11a)-B(7a)-B(8a)	108.7(7)
B(6a)-B(7a)-B(8a)	108.7(6)	B(12a)-B(7a)-B(8a)	60.4(5)
C(2a)-B(8a)-B(7a)	57.9(5)	C(2a)-B(8a)-B(9a)	103.9(6)
B(7a)-B(8a)-B(9a)	108.4(7)	C(2a)-B(8a)-B(12a)	103.3(6)
B(7a)-B(8a)-B(12a)	59.8(5)	B(9a)-B(8a)-B(12a)	60.6(5)
C(2a)-B(8a)-B(3a)	59.2(5)	B(7a)-B(8a)-B(3a)	108.0(6)
B(9a)-B(8a)-B(3a)	58.9(5)	B(12a)-B(8a)-B(3a)	107.3(7)
B(3a)-B(9a)-B(8a)	60.9(6)	B(3a)-B(9a)-B(4a)	59.8(5)

Table 6. (continued)

B(8a)-B(9a)-B(4a)	108.1(6)	B(3a)-B(9a)-B(12a)	108.2(7)
B(8a)-B(9a)-B(12a)	59.9(6)	B(4a)-B(9a)-B(12a)	107.0(7)
B(3a)-B(9a)-B(10a)	107.8(6)	B(8a)-B(9a)-B(10a)	107.4(7)
B(4a)-B(9a)-B(10a)	59.8(5)	B(12a)-B(9a)-B(10a)	59.1(5)
B(12a)-B(10a)-B(5a)	107.7(6)	B(12a)-B(10a)-B(4a)	107.8(6)
B(5a)-B(10a)-B(4a)	59.9(5)	B(12a)-B(10a)-B(11a)	59.4(5)
B(5a)-B(10a)-B(11a)	60.2(5)	B(4a)-B(10a)-B(11a)	107.8(6)
B(12a)-B(10a)-B(9a)	60.2(5)	B(5a)-B(10a)-B(9a)	107.6(6)
B(4a)-B(10a)-B(9a)	59.6(5)	B(11a)-B(10a)-B(9a)	107.6(7)
B(6a)-B(11a)-B(7a)	60.4(5)	B(6a)-B(11a)-B(12a)	108.5(6)
B(7a)-B(11a)-B(12a)	60.2(5)	B(6a)-B(11a)-B(5a)	59.9(5)
B(7a)-B(11a)-B(5a)	107.9(6)	B(12a)-B(11a)-B(5a)	107.5(7)
B(6a)-B(11a)-B(10a)	107.9(6)	B(7a)-B(11a)-B(10a)	108.0(7)
B(12a)-B(11a)-B(10a)	59.8(5)	B(5a)-B(11a)-B(10a)	59.5(5)
B(11a)-B(12a)-B(7a)	59.8(5)	B(11a)-B(12a)-B(10a)	60.8(5)
B(7a)-B(12a)-B(10a)	108.4(7)	B(11a)-B(12a)-B(8a)	108.2(6)
B(7a)-B(12a)-B(8a)	59.9(5)	B(10a)-B(12a)-B(8a)	108.4(7)
B(11a)-B(12a)-B(9a)	109.0(7)	B(7a)-B(12a)-B(9a)	107.6(7)
B(10a)-B(12a)-B(9a)	60.7(5)	B(8a)-B(12a)-B(9a)	59.5(6)
N(14a)-C(13a)-C(1a)	116.1(6)	C(13b)-C(1b)-C(2b)	117.9(6)
C(13b)-C(1b)-B(4b)	124.9(7)	C(2b)-C(1b)-B(4b)	108.9(6)
C(13b)-C(1b)-B(5b)	120.8(7)	C(2b)-C(1b)-B(5b)	109.4(6)
B(4b)-C(1b)-B(5b)	62.6(7)	C(13b)-C(1b)-B(3b)	120.2(7)
C(2b)-C(1b)-B(3b)	60.5(6)	B(4b)-C(1b)-B(3b)	61.5(7)
B(5b)-C(1b)-B(3b)	113.0(8)	C(13b)-C(1b)-B(6b)	114.3(8)
C(2b)-C(1b)-B(6b)	60.3(6)	B(4b)-C(1b)-B(6b)	113.1(8)
B(5b)-C(1b)-B(6b)	62.2(8)	B(3b)-C(1b)-B(6b)	112.4(7)
C(1b)-C(2b)-B(7b)	113.6(7)	C(1b)-C(2b)-B(6b)	62.1(5)
B(7b)-C(2b)-B(6b)	63.7(7)	C(1b)-C(2b)-B(3b)	61.9(6)
B(7b)-C(2b)-B(3b)	115.1(7)	B(6b)-C(2b)-B(3b)	115.1(8)
C(1b)-C(2b)-B(8b)	112.3(7)	B(7b)-C(2b)-B(8b)	62.8(6)
B(6b)-C(2b)-B(8b)	115.2(8)	B(3b)-C(2b)-B(8b)	62.4(7)
C(2b)-B(3b)-C(1b)	57.6(5)	C(2b)-B(3b)-B(9b)	104.9(7)
C(1b)-B(3b)-B(9b)	106.2(9)	C(2b)-B(3b)-B(4b)	104.2(7)
C(1b)-B(3b)-B(4b)	58.5(6)	B(9b)-B(3b)-B(4b)	60.8(8)
C(2b)-B(3b)-B(8b)	58.8(6)	C(1b)-B(3b)-B(8b)	106.0(7)
B(9b)-B(3b)-B(8b)	59.9(7)	B(4b)-B(3b)-B(8b)	108.3(8)
C(1b)-B(4b)-B(3b)	60.0(6)	C(1b)-B(4b)-B(9b)	105.9(8)
B(3b)-B(4b)-B(9b)	59.0(8)	C(1b)-B(4b)-B(5b)	58.9(6)
B(3b)-B(4b)-B(5b)	108.8(8)	B(9b)-B(4b)-B(5b)	109.1(8)
C(1b)-B(4b)-B(10b)	105.1(9)	B(3b)-B(4b)-B(10b)	107.9(8)
B(9b)-B(4b)-B(10b)	61.3(8)	B(5b)-B(4b)-B(10b)	59.6(9)
C(1b)-B(5b)-B(10b)	105.6(9)	C(1b)-B(5b)-B(4b)	58.5(5)
B(10b)-B(5b)-B(4b)	60.7(8)	C(1b)-B(5b)-B(6b)	59.5(7)
B(10b)-B(5b)-B(6b)	107.0(8)	B(4b)-B(5b)-B(6b)	107.7(8)
C(1b)-B(5b)-B(11b)	105.7(8)	B(10b)-B(5b)-B(11b)	59.6(9)

Table 6. (continued)

B(4b)-B(5b)-B(11b)	108.1(9)	B(6b)-B(5b)-B(11b)	59.3(8)
C(2b)-B(6b)-C(1b)	57.6(6)	C(2b)-B(6b)-B(11b)	104.7(8)
C(1b)-B(6b)-B(11b)	105.8(9)	C(2b)-B(6b)-B(5b)	104.1(8)
C(1b)-B(6b)-B(5b)	58.3(5)	B(11b)-B(6b)-B(5b)	60.7(8)
C(2b)-B(6b)-B(7b)	57.6(6)	C(1b)-B(6b)-B(7b)	105.0(8)
B(11b)-B(6b)-B(7b)	61.0(7)	B(5b)-B(6b)-B(7b)	108.7(10)
C(2b)-B(7b)-B(8b)	59.3(6)	C(2b)-B(7b)-B(12b)	105.5(7)
B(8b)-B(7b)-B(12b)	60.4(6)	C(2b)-B(7b)-B(6b)	58.7(7)
B(8b)-B(7b)-B(6b)	108.4(8)	B(12b)-B(7b)-B(6b)	107.8(8)
C(2b)-B(7b)-B(11b)	104.0(7)	B(8b)-B(7b)-B(11b)	107.9(9)
B(12b)-B(7b)-B(11b)	60.1(8)	B(6b)-B(7b)-B(11b)	59.0(8)
C(2b)-B(8b)-B(9b)	104.2(8)	C(2b)-B(8b)-B(7b)	57.9(6)
B(9b)-B(8b)-B(7b)	109.6(9)	C(2b)-B(8b)-B(3b)	58.8(6)
B(9b)-B(8b)-B(3b)	59.1(7)	B(7b)-B(8b)-B(3b)	108.1(7)
C(2b)-B(8b)-B(12b)	104.1(8)	B(9b)-B(8b)-B(12b)	62.5(7)
B(7b)-B(8b)-B(12b)	59.8(6)	B(3b)-B(8b)-B(12b)	109.1(8)
B(3b)-B(9b)-B(8b)	61.0(7)	B(3b)-B(9b)-B(4b)	60.2(6)
B(8b)-B(9b)-B(4b)	108.6(7)	B(3b)-B(9b)-B(10b)	107.9(9)
B(8b)-B(9b)-B(10b)	106.9(9)	B(4b)-B(9b)-B(10b)	60.0(8)
B(3b)-B(9b)-B(12b)	108.2(8)	B(8b)-B(9b)-B(12b)	59.5(6)
B(4b)-B(9b)-B(12b)	107.5(10)	B(10b)-B(9b)-B(12b)	59.0(7)
B(11b)-B(10b)-B(5b)	60.8(8)	B(11b)-B(10b)-B(4b)	108.4(9)
B(5b)-B(10b)-B(4b)	59.8(6)	B(11b)-B(10b)-B(12b)	60.2(7)
B(5b)-B(10b)-B(12b)	108.9(9)	B(4b)-B(10b)-B(12b)	108.1(9)
B(11b)-B(10b)-B(9b)	108.6(8)	B(5b)-B(10b)-B(9b)	107.2(8)
B(4b)-B(10b)-B(9b)	58.7(8)	B(12b)-B(10b)-B(9b)	61.0(7)
B(6b)-B(11b)-B(10b)	107.6(8)	B(6b)-B(11b)-B(12b)	107.8(8)
B(10b)-B(11b)-B(12b)	60.6(8)	B(6b)-B(11b)-B(5b)	60.0(7)
B(10b)-B(11b)-B(5b)	59.6(8)	B(12b)-B(11b)-B(5b)	108.2(9)
B(6b)-B(11b)-B(7b)	60.0(8)	B(10b)-B(11b)-B(7b)	106.9(9)
B(12b)-B(11b)-B(7b)	58.9(6)	B(5b)-B(11b)-B(7b)	107.3(8)
B(7b)-B(12b)-B(8b)	59.8(7)	B(7b)-B(12b)-B(11b)	61.0(8)
B(8b)-B(12b)-B(11b)	108.1(8)	B(7b)-B(12b)-B(10b)	107.5(8)
B(8b)-B(12b)-B(10b)	106.6(7)	B(11b)-B(12b)-B(10b)	59.2(9)
B(7b)-B(12b)-B(9b)	106.0(7)	B(8b)-B(12b)-B(9b)	58.0(7)
B(11b)-B(12b)-B(9b)	107.1(8)	B(10b)-B(12b)-B(9b)	60.0(8)
N(14c)-C(13b)-C(1b)	117.2(9)	N(14c)-C(13b)-N(14b)	40.4(7)
C(1b)-C(13b)-N(14b)	116.0(8)	C(4bs)-O(1s)-C(2s)	96.8(17)
C(4bs)-O(1s)-C(4as)	54.3(16)	C(2s)-O(1s)-C(4as)	114.9(7)
O(1s)-C(2s)-C(3s)	107.6(8)	C(5s)-C(4as)-O(1s)	108.7(8)
C(5s)-C(4bs)-O(1s)	137.(3)	C(4bs)-C(5s)-C(4as)	59.4(17)
C(8s)-C(7s)-N(6s)	175.4(15)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $-x, 1-y, 1-z$

4. [C₂B₁₀H₁₁CH₂NH₃]₂[C₂B₁₀H₁₁CH₂NH₂Et]₂ [Mo₈O₂₆]·24MeCN (8)Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $^{1/3}$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Mo(1)	4514.2(8)	213.2(8)	3883.2(7)	31.3(3)
Mo(2)	2615.2(8)	761.3(8)	5040.9(7)	33.6(3)
Mo(3)	2284.6(9)	-1953.8(8)	5484.6(7)	34.2(3)
Mo(4)	4265.6(8)	-2442.8(8)	4382.0(7)	32.6(3)
O(1')	3162(7)	-239(7)	2986(6)	41(2)
O(1)	5701(7)	1139(6)	3507(5)	37.9(19)
O(2')	1336(7)	282(7)	4111(6)	41(2)
O(2)	2310(7)	1990(7)	5488(6)	47(2)
O(3')	1033(7)	-2354(6)	4525(6)	43(2)
O(3)	1713(7)	-2716(7)	6222(6)	44(2)
O(4')	2941(7)	-2805(6)	3474(6)	41(2)
O(4)	5139(7)	-3514(6)	4389(5)	36.9(18)
O(11)	3737(6)	-749(6)	4799(5)	31.9(17)
O(12)	3979(6)	1443(6)	4471(5)	33.2(18)
O(14)	5319(6)	-1154(6)	3931(5)	32.1(17)
O(23)	2139(6)	-396(6)	5756(5)	36.2(19)
O(34)	3447(7)	-2920(6)	5255(6)	36.9(19)
C(1a)	4171(10)	-4661(9)	7345(8)	36(3)
N(11a)	2949(8)	-5205(7)	5739(6)	33(2)
C(11a)	2856(10)	-5120(10)	6643(9)	40(3)
C(12a)	1610(10)	-5618(9)	5073(9)	41(3)
C(13a)	1713(14)	-5852(12)	4163(10)	55(4)
C(2a)	4877(10)	-3256(9)	7467(9)	42(3)
B(3a)	4046(15)	-3761(13)	8200(11)	47(4)
B(4a)	4384(14)	-5189(13)	8349(11)	50(4)
B(5a)	5311(12)	-5484(12)	7647(10)	40(3)
B(6a)	5600(12)	-4223(12)	7067(10)	42(3)
B(7a)	6545(13)	-2990(13)	7822(10)	42(3)
B(8a)	5598(14)	-2707(13)	8523(12)	53(4)
B(9a)	5318(13)	-3924(11)	9115(11)	46(4)
B(10a)	6095(15)	-4990(14)	8769(12)	56(4)
B(11a)	6860(14)	-4420(14)	7968(11)	50(4)
B(12a)	6872(13)	-3477(15)	8883(12)	57(4)
C(1b)	-1122(10)	-750(9)	2066(9)	38(3)
C(11b)	-690(10)	-1634(10)	2698(9)	40(3)
N(11b)	641(8)	-1820(8)	2753(8)	46(3)
C(2b)	-1382(11)	457(10)	2472(8)	40(3)

Table 2. (continued)

B(3b)	-73(13)	563(13)	2076(11)	48(4)
B(4b)	-603(14)	-520(12)	1178(11)	47(4)
B(5b)	-2239(14)	-1252(12)	1079(11)	48(4)
B(6b)	-2728(13)	-673(12)	1946(10)	42(3)
B(7b)	-2729(14)	841(14)	1819(10)	47(4)
B(8b)	-1107(16)	1588(12)	1887(11)	49(4)
B(9b)	-642(13)	1002(12)	1015(9)	39(3)
B(10b)	-1984(13)	-145(12)	398(11)	46(4)
B(11b)	-3300(15)	-264(17)	886(12)	59(5)
B(12b)	-2282(14)	1147(13)	857(11)	49(4)
N(1s)	1363(11)	-2791(10)	1218(8)	56(3)
C(2s)	2424(12)	-2330(12)	1347(9)	48(3)
C(3s)	3799(12)	-1732(11)	1516(10)	53(3)
N(4s)	-491(11)	-4394(10)	2457(10)	59(3)
C(5s)	-621(13)	-4850(12)	1783(12)	54(4)
C(6s)	-769(15)	-5411(14)	913(10)	70(4)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mo(1)	29.4(5)	26.1(5)	40.5(7)	7.7(4)	12.6(5)	7.2(4)
Mo(2)	29.5(5)	29.8(5)	45.0(7)	8.6(4)	14.1(5)	9.3(4)
Mo(3)	30.0(5)	29.1(5)	46.0(7)	8.7(5)	14.6(5)	6.6(4)
Mo(4)	30.5(5)	26.2(5)	42.9(7)	7.2(4)	12.7(5)	7.2(4)
O(1')	34(4)	40(4)	50(6)	11(4)	12(4)	10(3)
O(1)	33(4)	31(4)	51(6)	9(4)	16(4)	5(3)
O(2')	25(4)	41(4)	54(6)	11(4)	8(4)	2(3)
O(2)	33(4)	49(5)	66(7)	13(4)	19(4)	18(4)
O(3')	41(4)	33(4)	59(6)	12(4)	18(4)	9(3)
O(3)	36(4)	44(5)	59(6)	16(4)	24(4)	4(3)
O(4')	38(4)	31(4)	56(6)	3(4)	16(4)	11(3)
O(4)	37(4)	32(4)	42(5)	4(4)	9(4)	14(3)
O(11)	27(3)	31(4)	39(5)	8(3)	9(3)	8(3)
O(12)	28(3)	28(4)	45(5)	9(3)	13(4)	5(3)
O(14)	28(3)	24(4)	44(5)	3(3)	10(4)	6(3)
O(23)	27(4)	34(4)	51(6)	9(4)	15(4)	10(3)
O(34)	30(4)	29(4)	51(6)	3(4)	12(4)	6(3)
C(1a)	36(6)	27(5)	45(8)	9(5)	12(6)	7(4)
N(11a)	32(4)	26(5)	40(6)	3(4)	8(4)	4(4)
C(11a)	31(5)	34(6)	62(9)	10(6)	24(6)	9(5)
C(12a)	30(5)	28(6)	63(10)	11(6)	11(6)	6(4)
C(13a)	61(8)	44(8)	58(10)	5(7)	20(8)	4(6)
C(2a)	34(6)	28(6)	54(9)	7(6)	3(6)	1(4)
B(3a)	52(8)	44(8)	48(11)	7(7)	23(8)	8(6)
B(4a)	43(7)	47(8)	60(12)	23(8)	14(8)	12(6)
B(5a)	36(6)	39(7)	46(10)	12(7)	11(7)	13(5)
B(6a)	30(6)	53(8)	49(10)	15(7)	20(7)	7(6)
B(7a)	32(6)	53(8)	32(9)	2(7)	-2(6)	5(6)
B(8a)	42(7)	37(8)	68(13)	4(8)	3(8)	3(6)
B(9a)	50(8)	28(7)	63(12)	6(7)	21(8)	10(6)
B(10a)	53(9)	55(9)	67(13)	21(9)	19(9)	21(7)
B(11a)	39(7)	65(10)	46(11)	-3(8)	9(7)	21(7)
B(12a)	29(7)	70(11)	66(13)	9(9)	6(8)	7(7)
C(1b)	33(5)	25(5)	56(9)	2(5)	20(6)	-1(4)
C(11b)	26(5)	47(7)	49(9)	16(6)	12(5)	11(5)

Table 3. (continued)

N(11b)	32(5)	32(5)	74(9)	19(5)	20(5)	1(4)
C(2b)	50(7)	44(7)	28(7)	2(5)	14(6)	16(5)
B(3b)	37(7)	49(8)	68(12)	19(8)	26(8)	11(6)
B(4b)	50(8)	40(8)	59(12)	8(7)	26(8)	13(6)
B(5b)	51(8)	32(7)	50(11)	2(7)	2(8)	4(6)
B(6b)	37(7)	43(8)	42(10)	6(7)	10(7)	1(6)
B(7b)	52(8)	60(9)	41(10)	14(8)	20(8)	28(7)
B(8b)	72(10)	26(7)	48(11)	2(7)	21(8)	6(6)
B(9b)	40(7)	44(8)	29(9)	8(6)	5(6)	4(6)
B(10b)	46(7)	38(7)	53(11)	14(7)	10(7)	14(6)
B(11b)	41(8)	87(12)	48(12)	24(9)	7(8)	19(8)
B(12b)	50(8)	50(9)	47(11)	18(8)	13(8)	11(7)
N(1s)	52(7)	59(7)	66(9)	10(6)	24(6)	23(6)
C(2s)	42(7)	57(8)	47(9)	8(7)	15(6)	15(6)
C(3s)	55(8)	47(7)	60(10)	7(7)	22(7)	11(6)
N(4s)	49(6)	47(7)	82(11)	-1(7)	29(7)	4(5)
C(5s)	50(8)	46(8)	69(12)	13(8)	23(8)	8(6)
C(6s)	70(10)	74(11)	47(11)	3(8)	8(8)	-7(8)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(11a)	3467.	-5723.	5687.	40.
H(11a)	3355.	-4478.	5630.	40.
H(11a)	2445.	-5912.	6761.	48.
H(11b)	2260.	-4595.	6685.	48.
H(12a)	1093.	-5010.	5078.	49.
H(12a)	1127.	-6349.	5234.	49.
H(13a)	2216.	-5138.	4008.	83.
H(13b)	822.	-6077.	3747.	83.
H(13c)	2166.	-6494.	4144.	83.
H(2a)	4429.	-2658.	7010.	50.
H(3a)	3104.	-3549.	8253.	56.
H(4a)	3670.	-5920.	8513.	60.
H(5a)	5198.	-6404.	7355.	47.
H(6a)	5668.	-4304.	6385.	51.
H(7a)	7244.	-2261.	7645.	51.
H(8a)	5684.	-1785.	8801.	63.
H(9a)	5227.	-3809.	9789.	55.
H(10a)	6527.	-5590.	9231.	67.
H(11c)	7784.	-4644.	7891.	60.
H(12a)	7814.	-3083.	9412.	69.
H(11d)	-699.	-1348.	3285.	48.
H(11e)	-1342.	-2400.	2510.	48.
H(11f)	634.	-2157.	2229.	68.
H(11g)	867.	-2304.	3169.	68.
H(11h)	1241.	-1114.	2896.	68.
H(2b)	-1156.	662.	3193.	47.
H(3b)	990.	822.	2479.	58.
H(4b)	107.	-979.	988.	57.
H(5b)	-2607.	-2204.	808.	58.
H(6b)	-3404.	-1224.	2264.	51.
H(7b)	-3410.	1291.	2053.	57.
H(8b)	-724.	2536.	2166.	59.
H(9b)	38.	1559.	703.	47.
H(10b)	-2185.	-345.	-321.	55.
H(11f)	-4368.	-547.	494.	71.
H(12b)	-2689.	1801.	437.	59.
H(3s1)	4298.	-1822.	2110.	80.

Table 4. (continued)

H(3s2)	3862.	-892.	1453.	80.
H(3s3)	4168.	-2076.	1099.	80.
H(6s1)	-974.	-4859.	482.	104.
H(6s2)	-1491.	-6121.	768.	104.
H(6s3)	58.	-5626.	907.	104.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

Mo(1)-O(1')	1.711(8)	Mo(1)-O(1)	1.761(7)
Mo(1)-O(12)	1.951(7)	Mo(1)-O(14)	1.965(7)
Mo(1)-O(11)	2.144(7)	Mo(1)-O(11) ^(a)	2.367(8)
Mo(1)-Mo(4)	3.2164(12)	Mo(2)-O(2')	1.704(8)
Mo(2)-O(2)	1.706(8)	Mo(2)-O(23)	1.900(7)
Mo(2)-O(12)	1.997(7)	Mo(2)-O(14) ^(a)	2.317(7)
Mo(2)-O(11)	2.411(7)	Mo(3)-O(3)	1.694(7)
Mo(3)-O(3')	1.712(9)	Mo(3)-O(23)	1.898(7)
Mo(3)-O(34)	1.948(7)	Mo(3)-O(1) ^(a)	2.300(8)
Mo(3)-O(11)	2.422(6)	Mo(4)-O(4')	1.698(8)
Mo(4)-O(4)	1.714(7)	Mo(4)-O(34)	1.906(8)
Mo(4)-O(14)	1.986(6)	Mo(4)-O(11)	2.288(7)
Mo(4)-O(12) ^(a)	2.298(8)	O(1)-Mo(3) ^(a)	2.300(8)
O(11)-Mo(1) ^(a)	2.367(8)	O(12)-Mo(4) ^(a)	2.298(8)
O(14)-Mo(2) ^(a)	2.317(7)	C(1a)-C(11a)	1.519(16)
C(1a)-C(2a)	1.636(14)	C(1a)-B(5a)	1.697(15)
C(1a)-B(6a)	1.711(15)	C(1a)-B(4a)	1.731(19)
C(1a)-B(3a)	1.74(2)	N(11a)-C(11a)	1.486(15)
N(11a)-C(12a)	1.506(14)	C(12a)-C(13a)	1.516(18)
C(2a)-B(7a)	1.688(16)	C(2a)-B(8a)	1.69(2)
C(2a)-B(6a)	1.696(18)	C(2a)-B(3a)	1.728(18)
B(3a)-B(9a)	1.76(2)	B(3a)-B(8a)	1.79(2)
B(3a)-B(4a)	1.79(2)	B(4a)-B(10a)	1.74(2)
B(4a)-B(5a)	1.77(2)	B(4a)-B(9a)	1.80(2)
B(5a)-B(10a)	1.77(2)	B(5a)-B(11a)	1.79(2)
B(5a)-B(6a)	1.802(18)	B(6a)-B(11a)	1.75(2)
B(6a)-B(7a)	1.76(2)	B(7a)-B(11a)	1.78(2)
B(7a)-B(8a)	1.78(2)	B(7a)-B(12a)	1.79(2)
B(8a)-B(9a)	1.77(2)	B(8a)-B(12a)	1.78(2)
B(9a)-B(10a)	1.79(2)	B(9a)-B(12a)	1.800(19)
B(10a)-B(12a)	1.77(2)	B(10a)-B(11a)	1.80(2)
B(11a)-B(12a)	1.79(2)	C(1b)-C(11b)	1.534(15)
C(1b)-C(2b)	1.633(15)	C(1b)-B(4b)	1.688(18)
C(1b)-B(5b)	1.69(2)	C(1b)-B(3b)	1.703(16)
C(1b)-B(6b)	1.714(16)	C(11b)-N(11b)	1.478(12)
C(2b)-B(8b)	1.683(17)	C(2b)-B(3b)	1.692(16)
C(2b)-B(7b)	1.699(18)	C(2b)-B(6b)	1.725(18)
B(3b)-B(4b)	1.75(2)	B(3b)-B(8b)	1.78(2)
B(3b)-B(9b)	1.78(2)	B(4b)-B(5b)	1.76(2)
B(4b)-B(10b)	1.81(2)	B(4b)-B(9b)	1.817(19)
B(5b)-B(10b)	1.762(19)	B(5b)-B(11b)	1.77(2)
B(5b)-B(6b)	1.78(2)	B(6b)-B(11b)	1.77(2)
B(6b)-B(7b)	1.79(2)	B(7b)-B(8b)	1.76(2)

Table 5. (continued)

B(7b)-B(12b)	1.78(2)	B(7b)-B(11b)	1.81(3)
B(8b)-B(12b)	1.76(2)	B(8b)-B(9b)	1.77(2)
B(9b)-B(12b)	1.765(19)	B(9b)-B(10b)	1.77(2)
B(10b)-B(12b)	1.77(2)	B(10b)-B(11b)	1.79(2)
B(11b)-B(12b)	1.79(2)	N(1s)-C(2s)	1.116(15)
C(2s)-C(3s)	1.447(17)	N(4s)-C(5s)	1.144(18)
C(5s)-C(6s)	1.47(2)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) 1-x, -y, 1-z

Table 6. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

O(1')-Mo(1)-O(1)	104.8(4)	O(1')-Mo(1)-O(12)	100.8(3)
O(1)-Mo(1)-O(12)	97.7(3)	O(1')-Mo(1)-O(14)	101.3(3)
O(1)-Mo(1)-O(14)	95.9(3)	O(12)-Mo(1)-O(14)	150.0(3)
O(1')-Mo(1)-O(11)	98.2(3)	O(1)-Mo(1)-O(11)	157.0(3)
O(12)-Mo(1)-O(11)	79.1(3)	O(14)-Mo(1)-O(11)	78.0(3)
O(1')-Mo(1)-O(11) ^(a)	174.7(3)	O(1)-Mo(1)-O(11) ^(a)	80.5(3)
O(12)-Mo(1)-O(11) ^(a)	77.7(3)	O(14)-Mo(1)-O(11) ^(a)	78.5(3)
O(11)-Mo(1)-O(11) ^(a)	76.6(3)	O(1')-Mo(1)-Mo(4)	90.9(2)
O(1)-Mo(1)-Mo(4)	131.6(2)	O(12)-Mo(1)-Mo(4)	124.3(2)
O(14)-Mo(1)-Mo(4)	35.73(19)	O(11)-Mo(1)-Mo(4)	45.28(19)
O(11) ^(a) -Mo(1)-Mo(4)	85.91(16)	O(2')-Mo(2)-O(2)	105.6(4)
O(2')-Mo(2)-O(23)	99.6(3)	O(2)-Mo(2)-O(23)	102.5(4)
O(2')-Mo(2)-O(12)	97.0(3)	O(2)-Mo(2)-O(12)	102.4(3)
O(23)-Mo(2)-O(12)	144.9(3)	O(2')-Mo(2)-O(14) ^(a)	163.1(3)
O(2)-Mo(2)-O(14) ^(a)	89.3(3)	O(23)-Mo(2)-O(14) ^(a)	84.6(3)
O(12)-Mo(2)-O(14) ^(a)	71.4(3)	O(2')-Mo(2)-O(11)	93.6(3)
O(2)-Mo(2)-O(11)	160.6(3)	O(23)-Mo(2)-O(11)	76.3(3)
O(12)-Mo(2)-O(11)	72.0(2)	O(14) ^(a) -Mo(2)-O(11)	71.3(3)
O(3)-Mo(3)-O(3')	105.0(4)	O(3)-Mo(3)-O(23)	103.6(4)
O(3')-Mo(3)-O(23)	100.1(3)	O(3)-Mo(3)-O(34)	99.7(3)
O(3')-Mo(3)-O(34)	98.4(4)	O(23)-Mo(3)-O(34)	145.2(3)
O(3)-Mo(3)-O(1) ^(a)	92.5(3)	O(3')-Mo(3)-O(1) ^(a)	162.4(3)
O(23)-Mo(3)-O(1) ^(a)	77.5(3)	O(34)-Mo(3)-O(1) ^(a)	76.0(3)
O(3)-Mo(3)-O(11)	162.1(3)	O(3')-Mo(3)-O(11)	92.6(3)
O(23)-Mo(3)-O(11)	76.0(3)	O(34)-Mo(3)-O(11)	73.9(3)
O(1) ^(a) -Mo(3)-O(11)	69.9(3)	O(4')-Mo(4)-O(4)	106.6(4)
O(4')-Mo(4)-O(34)	100.7(3)	O(4)-Mo(4)-O(34)	99.2(3)
O(4')-Mo(4)-O(14)	96.7(3)	O(4)-Mo(4)-O(14)	101.4(3)
O(34)-Mo(4)-O(14)	147.9(3)	O(4')-Mo(4)-O(11)	94.0(3)
O(4)-Mo(4)-O(11)	159.4(3)	O(34)-Mo(4)-O(11)	77.9(3)
O(14)-Mo(4)-O(11)	74.2(3)	O(4')-Mo(4)-O(12) ^(a)	164.4(3)
O(4)-Mo(4)-O(12) ^(a)	86.5(3)	O(34)-Mo(4)-O(12) ^(a)	85.0(3)
O(14)-Mo(4)-O(12) ^(a)	72.0(3)	O(11)-Mo(4)-O(12) ^(a)	72.9(3)
O(4')-Mo(4)-Mo(1)	85.6(2)	O(4)-Mo(4)-Mo(1)	136.6(2)
O(34)-Mo(4)-Mo(1)	119.6(2)	O(14)-Mo(4)-Mo(1)	35.29(19)
O(11)-Mo(4)-Mo(1)	41.75(17)	O(12) ^(a) -Mo(4)-Mo(1)	79.01(17)
Mo(1)-O(1)-Mo(3) ^(a)	116.8(4)	Mo(1)-O(11)-Mo(4)	93.0(3)
Mo(1)-O(11)-Mo(1) ^(a)	103.4(3)	Mo(4)-O(11)-Mo(1) ^(a)	96.7(2)
Mo(1)-O(11)-Mo(2)	91.4(2)	Mo(4)-O(11)-Mo(2)	165.4(3)
Mo(1) ^(a) -O(11)-Mo(2)	95.8(3)	Mo(1)-O(11)-Mo(3)	163.5(4)
Mo(4)-O(11)-Mo(3)	87.3(2)	Mo(1) ^(a) -O(11)-Mo(3)	92.9(3)
Mo(2)-O(11)-Mo(3)	84.6(2)	Mo(1)-O(12)-Mo(2)	111.6(3)
Mo(1)-O(12)-Mo(4) ^(a)	109.7(3)	Mo(2)-O(12)-Mo(4) ^(a)	103.4(3)

Table 6. (continued)

Mo(1)-O(14)-Mo(4)	109.0(3)	Mo(1)-O(14)-Mo(2) ^(a)	111.6(3)
Mo(4)-O(14)-Mo(2) ^(a)	103.1(3)	Mo(3)-O(23)-Mo(2)	117.8(4)
Mo(4)-O(34)-Mo(3)	115.2(4)	C(11a)-C(1a)-C(2a)	118.9(9)
C(11a)-C(1a)-B(5a)	122.6(10)	C(2a)-C(1a)-B(5a)	111.3(8)
C(11a)-C(1a)-B(6a)	120.4(10)	C(2a)-C(1a)-B(6a)	60.8(7)
B(5a)-C(1a)-B(6a)	63.8(7)	C(11a)-C(1a)-B(4a)	118.5(9)
C(2a)-C(1a)-B(4a)	110.2(10)	B(5a)-C(1a)-B(4a)	62.2(8)
B(6a)-C(1a)-B(4a)	114.6(9)	C(11a)-C(1a)-B(3a)	112.9(9)
C(2a)-C(1a)-B(3a)	61.4(8)	B(5a)-C(1a)-B(3a)	114.3(10)
B(6a)-C(1a)-B(3a)	114.4(10)	B(4a)-C(1a)-B(3a)	62.1(8)
C(11a)-N(11a)-C(12a)	112.1(8)	N(11a)-C(11a)-C(1a)	114.7(8)
N(11a)-C(12a)-C(13a)	112.2(9)	C(1a)-C(2a)-B(7a)	112.6(9)
C(1a)-C(2a)-B(8a)	112.7(10)	B(7a)-C(2a)-B(8a)	63.8(8)
C(1a)-C(2a)-B(6a)	61.8(7)	B(7a)-C(2a)-B(6a)	62.9(8)
B(8a)-C(2a)-B(6a)	115.8(10)	C(1a)-C(2a)-B(3a)	62.4(7)
B(7a)-C(2a)-B(3a)	116.5(10)	B(8a)-C(2a)-B(3a)	63.0(9)
B(6a)-C(2a)-B(3a)	116.0(9)	C(2a)-B(3a)-C(1a)	56.2(7)
C(2a)-B(3a)-B(9a)	103.6(10)	C(1a)-B(3a)-B(9a)	105.1(10)
C(2a)-B(3a)-B(8a)	57.4(8)	C(1a)-B(3a)-B(8a)	103.3(10)
B(9a)-B(3a)-B(8a)	59.9(8)	C(2a)-B(3a)-B(4a)	103.4(10)
C(1a)-B(3a)-B(4a)	58.6(8)	B(9a)-B(3a)-B(4a)	60.7(8)
B(8a)-B(3a)-B(4a)	107.5(10)	C(1a)-B(4a)-B(10a)	103.9(10)
C(1a)-B(4a)-B(5a)	58.0(7)	B(10a)-B(4a)-B(5a)	60.7(9)
C(1a)-B(4a)-B(3a)	59.3(8)	B(10a)-B(4a)-B(3a)	107.4(10)
B(5a)-B(4a)-B(3a)	108.4(10)	C(1a)-B(4a)-B(9a)	104.1(10)
B(10a)-B(4a)-B(9a)	60.6(9)	B(5a)-B(4a)-B(9a)	109.2(10)
B(3a)-B(4a)-B(9a)	58.7(8)	C(1a)-B(5a)-B(4a)	59.9(7)
C(1a)-B(5a)-B(10a)	104.0(10)	B(4a)-B(5a)-B(10a)	58.9(8)
C(1a)-B(5a)-B(11a)	103.8(9)	B(4a)-B(5a)-B(11a)	108.2(11)
B(10a)-B(5a)-B(11a)	60.7(9)	C(1a)-B(5a)-B(6a)	58.5(6)
B(4a)-B(5a)-B(6a)	108.4(9)	B(10a)-B(5a)-B(6a)	106.6(10)
B(11a)-B(5a)-B(6a)	58.4(8)	C(2a)-B(6a)-C(1a)	57.4(6)
C(2a)-B(6a)-B(11a)	104.6(11)	C(1a)-B(6a)-B(11a)	104.9(10)
C(2a)-B(6a)-B(7a)	58.3(8)	C(1a)-B(6a)-B(7a)	105.5(10)
B(11a)-B(6a)-B(7a)	61.0(9)	C(2a)-B(6a)-B(5a)	103.7(9)
C(1a)-B(6a)-B(5a)	57.7(6)	B(11a)-B(6a)-B(5a)	60.5(8)
B(7a)-B(6a)-B(5a)	109.0(11)	C(2a)-B(7a)-B(6a)	58.8(7)
C(2a)-B(7a)-B(11a)	103.5(9)	B(6a)-B(7a)-B(11a)	59.2(8)
C(2a)-B(7a)-B(8a)	58.1(8)	B(6a)-B(7a)-B(8a)	107.8(9)
B(11a)-B(7a)-B(8a)	107.6(10)	C(2a)-B(7a)-B(12a)	103.4(9)
B(6a)-B(7a)-B(12a)	107.3(10)	B(11a)-B(7a)-B(12a)	60.1(9)
B(8a)-B(7a)-B(12a)	59.7(8)	C(2a)-B(8a)-B(9a)	104.9(10)
C(2a)-B(8a)-B(12a)	103.9(12)	B(9a)-B(8a)-B(12a)	61.0(8)
C(2a)-B(8a)-B(7a)	58.1(8)	B(9a)-B(8a)-B(7a)	109.7(11)
B(12a)-B(8a)-B(7a)	60.4(9)	C(2a)-B(8a)-B(3a)	59.6(8)

Table 6. (continued)

B(9a)-B(8a)-B(3a)	59.4(8)	B(12a)-B(8a)-B(3a)	108.0(10)
B(7a)-B(8a)-B(3a)	109.0(12)	B(3a)-B(9a)-B(8a)	60.8(8)
B(3a)-B(9a)-B(10a)	106.9(12)	B(8a)-B(9a)-B(10a)	106.6(11)
B(3a)-B(9a)-B(4a)	60.5(8)	B(8a)-B(9a)-B(4a)	108.1(12)
B(10a)-B(9a)-B(4a)	58.2(8)	B(3a)-B(9a)-B(12a)	108.2(11)
B(8a)-B(9a)-B(12a)	59.8(8)	B(10a)-B(9a)-B(12a)	59.0(9)
B(4a)-B(9a)-B(12a)	106.2(11)	B(4a)-B(10a)-B(12a)	110.0(10)
B(4a)-B(10a)-B(5a)	60.4(9)	B(12a)-B(10a)-B(5a)	109.0(11)
B(4a)-B(10a)-B(9a)	61.2(9)	B(12a)-B(10a)-B(9a)	60.9(8)
B(5a)-B(10a)-B(9a)	109.5(10)	B(4a)-B(10a)-B(11a)	109.0(11)
B(12a)-B(10a)-B(11a)	60.2(9)	B(5a)-B(10a)-B(11a)	60.1(9)
B(9a)-B(10a)-B(11a)	109.1(10)	B(6a)-B(11a)-B(7a)	59.8(8)
B(6a)-B(11a)-B(5a)	61.1(8)	B(7a)-B(11a)-B(5a)	108.6(9)
B(6a)-B(11a)-B(12a)	107.9(10)	B(7a)-B(11a)-B(12a)	60.1(9)
B(5a)-B(11a)-B(12a)	107.3(10)	B(6a)-B(11a)-B(10a)	107.6(10)
B(7a)-B(11a)-B(10a)	107.0(10)	B(5a)-B(11a)-B(10a)	59.2(9)
B(12a)-B(11a)-B(10a)	59.0(9)	B(10a)-B(12a)-B(8a)	107.0(10)
B(10a)-B(12a)-B(11a)	60.8(10)	B(8a)-B(12a)-B(11a)	107.7(12)
B(10a)-B(12a)-B(7a)	108.2(12)	B(8a)-B(12a)-B(7a)	60.0(9)
B(11a)-B(12a)-B(7a)	59.8(9)	B(10a)-B(12a)-B(9a)	60.1(8)
B(8a)-B(12a)-B(9a)	59.3(8)	B(11a)-B(12a)-B(9a)	109.0(11)
B(7a)-B(12a)-B(9a)	108.0(10)	C(11b)-C(1b)-C(2b)	117.5(11)
C(11b)-C(1b)-B(4b)	123.6(9)	C(2b)-C(1b)-B(4b)	111.0(8)
C(11b)-C(1b)-B(5b)	119.5(9)	C(2b)-C(1b)-B(5b)	110.8(9)
B(4b)-C(1b)-B(5b)	62.6(9)	C(11b)-C(1b)-B(3b)	120.9(10)
C(2b)-C(1b)-B(3b)	60.9(7)	B(4b)-C(1b)-B(3b)	62.2(8)
B(5b)-C(1b)-B(3b)	113.3(10)	C(11b)-C(1b)-B(6b)	111.8(8)
C(2b)-C(1b)-B(6b)	62.0(7)	B(4b)-C(1b)-B(6b)	115.4(10)
B(5b)-C(1b)-B(6b)	62.8(8)	B(3b)-C(1b)-B(6b)	114.7(9)
N(11b)-C(11b)-C(1b)	113.7(8)	C(1b)-C(2b)-B(8b)	112.3(9)
C(1b)-C(2b)-B(3b)	61.6(7)	B(8b)-C(2b)-B(3b)	63.7(8)
C(1b)-C(2b)-B(7b)	112.2(10)	B(8b)-C(2b)-B(7b)	62.7(8)
B(3b)-C(2b)-B(7b)	115.8(10)	C(1b)-C(2b)-B(6b)	61.3(7)
B(8b)-C(2b)-B(6b)	114.7(10)	B(3b)-C(2b)-B(6b)	114.7(10)
B(7b)-C(2b)-B(6b)	63.0(8)	C(2b)-B(3b)-C(1b)	57.5(6)
C(2b)-B(3b)-B(4b)	105.2(10)	C(1b)-B(3b)-B(4b)	58.5(8)
C(2b)-B(3b)-B(8b)	57.9(7)	C(1b)-B(3b)-B(8b)	104.5(9)
B(4b)-B(3b)-B(8b)	109.1(11)	C(2b)-B(3b)-B(9b)	104.2(9)
C(1b)-B(3b)-B(9b)	105.4(11)	B(4b)-B(3b)-B(9b)	61.8(9)
B(8b)-B(3b)-B(9b)	59.5(8)	C(1b)-B(4b)-B(3b)	59.3(8)
C(1b)-B(4b)-B(5b)	58.9(8)	B(3b)-B(4b)-B(5b)	107.9(10)
C(1b)-B(4b)-B(10b)	104.3(9)	B(3b)-B(4b)-B(10b)	106.9(10)
B(5b)-B(4b)-B(10b)	59.2(8)	C(1b)-B(4b)-B(9b)	104.7(10)
B(3b)-B(4b)-B(9b)	60.0(8)	B(5b)-B(4b)-B(9b)	106.1(9)
B(10b)-B(4b)-B(9b)	58.5(8)	C(1b)-B(5b)-B(4b)	58.6(8)

Table 6. (continued)

C(1b)-B(5b)-B(10b)	106.1(10)	B(4b)-B(5b)-B(10b)	61.9(8)
C(1b)-B(5b)-B(11b)	105.9(11)	B(4b)-B(5b)-B(11b)	110.8(10)
B(10b)-B(5b)-B(11b)	61.0(8)	C(1b)-B(5b)-B(6b)	59.2(8)
B(4b)-B(5b)-B(6b)	109.1(11)	B(10b)-B(5b)-B(6b)	109.0(10)
B(11b)-B(5b)-B(6b)	59.9(9)	C(1b)-B(6b)-C(2b)	56.7(6)
C(1b)-B(6b)-B(11b)	104.9(10)	C(2b)-B(6b)-B(11b)	104.4(10)
C(1b)-B(6b)-B(5b)	58.0(8)	C(2b)-B(6b)-B(5b)	102.9(9)
B(11b)-B(6b)-B(5b)	59.8(9)	C(1b)-B(6b)-B(7b)	104.2(8)
C(2b)-B(6b)-B(7b)	57.8(7)	B(11b)-B(6b)-B(7b)	60.9(9)
B(5b)-B(6b)-B(7b)	107.6(10)	C(2b)-B(7b)-B(8b)	58.2(8)
C(2b)-B(7b)-B(12b)	103.7(9)	B(8b)-B(7b)-B(12b)	59.7(8)
C(2b)-B(7b)-B(6b)	59.2(7)	B(8b)-B(7b)-B(6b)	108.0(9)
B(12b)-B(7b)-B(6b)	107.1(10)	C(2b)-B(7b)-B(11b)	104.0(10)
B(8b)-B(7b)-B(11b)	107.7(10)	B(12b)-B(7b)-B(11b)	60.0(9)
B(6b)-B(7b)-B(11b)	59.0(9)	C(2b)-B(8b)-B(7b)	59.1(7)
C(2b)-B(8b)-B(12b)	105.1(10)	B(7b)-B(8b)-B(12b)	60.7(9)
C(2b)-B(8b)-B(9b)	105.2(9)	B(7b)-B(8b)-B(9b)	109.3(11)
B(12b)-B(8b)-B(9b)	60.0(8)	C(2b)-B(8b)-B(3b)	58.4(7)
B(7b)-B(8b)-B(3b)	108.5(9)	B(12b)-B(8b)-B(3b)	108.0(11)
B(9b)-B(8b)-B(3b)	60.4(8)	B(12b)-B(9b)-B(8b)	59.7(9)
B(12b)-B(9b)-B(10b)	60.2(8)	B(8b)-B(9b)-B(10b)	107.8(10)
B(12b)-B(9b)-B(3b)	107.6(9)	B(8b)-B(9b)-B(3b)	60.1(8)
B(10b)-B(9b)-B(3b)	107.2(9)	B(12b)-B(9b)-B(4b)	108.0(9)
B(8b)-B(9b)-B(4b)	106.7(9)	B(10b)-B(9b)-B(4b)	60.6(8)
B(3b)-B(9b)-B(4b)	58.2(8)	B(5b)-B(10b)-B(9b)	107.8(11)
B(5b)-B(10b)-B(12b)	107.3(11)	B(9b)-B(10b)-B(12b)	59.7(8)
B(5b)-B(10b)-B(11b)	59.7(8)	B(9b)-B(10b)-B(11b)	108.4(12)
B(12b)-B(10b)-B(11b)	60.3(9)	B(5b)-B(10b)-B(4b)	58.9(8)
B(9b)-B(10b)-B(4b)	60.9(8)	B(12b)-B(10b)-B(4b)	107.9(11)
B(11b)-B(10b)-B(4b)	107.3(11)	B(5b)-B(11b)-B(6b)	60.2(9)
B(5b)-B(11b)-B(12b)	106.3(10)	B(6b)-B(11b)-B(12b)	107.4(12)
B(5b)-B(11b)-B(10b)	59.3(8)	B(6b)-B(11b)-B(10b)	107.9(10)
B(12b)-B(11b)-B(10b)	59.3(8)	B(5b)-B(11b)-B(7b)	107.2(11)
B(6b)-B(11b)-B(7b)	60.0(9)	B(12b)-B(11b)-B(7b)	59.3(9)
B(10b)-B(11b)-B(7b)	106.9(11)	B(8b)-B(12b)-B(9b)	60.3(8)
B(8b)-B(12b)-B(7b)	59.6(9)	B(9b)-B(12b)-B(7b)	108.6(10)
B(8b)-B(12b)-B(10b)	108.1(10)	B(9b)-B(12b)-B(10b)	60.1(8)
B(7b)-B(12b)-B(10b)	108.9(10)	B(8b)-B(12b)-B(11b)	108.2(10)
B(9b)-B(12b)-B(11b)	108.8(10)	B(7b)-B(12b)-B(11b)	60.8(9)
B(10b)-B(12b)-B(11b)	60.4(9)	N(1s)-C(2s)-C(3s)	180.(2)
N(4s)-C(5s)-C(6s)	178.7(14)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) 1-x, -y, 1-z

5. [C₂B₁₀H₁₁CH₂NH=CH(CH₃)₂]₄[W₁₀O₃₂][H₂O]₂[(CH₃)₂CO]₄ (10)Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
W(1)	9678.2(2)	6735.67(17)	528.03(13)	22.29(9)
W(2)	7936.9(2)	8380.43(18)	486.30(13)	21.37(8)
W(3)	10979.6(2)	9415.36(18)	1569.30(12)	20.68(8)
W(4)	11796.8(2)	8751.48(18)	65.44(13)	20.24(8)
W(5)	8748.7(2)	7702.99(18)	-1028.73(13)	21.49(8)
O(1)	9580(4)	5429(3)	762(3)	30.7(10)
O(2)	6520(4)	8156(4)	664(3)	29.6(9)
O(3)	11781(4)	9976(4)	2532(2)	28.4(9)
O(4)	13200(4)	8685(4)	-38(3)	27.2(9)
O(5)	7915(4)	6828(4)	-1934(2)	30.3(9)
O(12)	8171(4)	6979(3)	690(2)	25.1(9)
O(13)	10611(4)	7832(4)	1553(2)	24.4(8)
O(14)	11317(4)	7242(3)	380(2)	26.5(9)
O(15)	8815(4)	6361(3)	-529(2)	25.4(9)
O(23)	9202(4)	9204(3)	1470(2)	23.8(8)
O(24)	11846(4)	10149(3)	-208(2)	22.3(9)
O(25)	7413(4)	7714(3)	-597(2)	26.3(9)
O(34)	12326(4)	9454(3)	1141(2)	23.6(8)
O(35)	8954(4)	9141(3)	-1236(2)	22.3(9)
O(45)	10526(4)	7923(3)	-919(2)	23.6(8)
O(123)	9854(3)	8507(3)	268(2)	22.2(9)
C(11a)	12591(6)	5840(5)	1868(4)	29.0(12)
N(12a)	12874(5)	6166(4)	1186(3)	26.2(10)
C(13a)	13572(5)	5820(5)	845(3)	27.1(12)
C(14a)	14307(6)	5079(5)	1147(4)	36.0(15)
C(15a)	13620(6)	6122(6)	98(4)	34.4(14)
C(1a)	13490(5)	6685(5)	2632(4)	26.7(12)
C(2a)	12808(6)	7306(5)	3138(4)	31.6(13)
B(3a)	13779(7)	8135(6)	2714(4)	30.8(14)
B(4a)	15029(6)	7565(6)	2787(4)	28.6(14)
B(5a)	14694(7)	6373(7)	3223(4)	35.1(16)
B(6a)	13247(8)	6178(7)	3431(4)	36.2(16)
B(7a)	13478(8)	7453(8)	4098(5)	42.1(18)
B(8a)	13817(7)	8644(7)	3668(5)	38.9(17)
B(9a)	15268(7)	8813(6)	3463(4)	35.5(16)
B(10a)	15840(7)	7721(7)	3782(4)	37.5(17)
B(11a)	14724(8)	6871(8)	4174(5)	41.2(17)

Table 2. (continued)

B(12a)	15098(8)	8398(8)	4341(5)	40.9(17)
C(11b)	8419(6)	1320(6)	2244(4)	30.5(13)
N(12b)	7480(5)	1815(4)	1876(3)	27.8(10)
C(13b)	6240(6)	1296(5)	1600(3)	31.2(13)
C(14b)	5595(6)	92(6)	1675(5)	44.4(17)
C(15b)	5418(7)	1867(7)	1187(4)	44.7(18)
C(1b)	9066(6)	1826(5)	3112(4)	26.4(12)
C(2b)	10360(7)	1489(6)	3498(4)	42.0(16)
B(3b)	8964(7)	880(7)	3708(4)	33.8(15)
B(4b)	8246(7)	1940(6)	3729(4)	29.2(14)
B(5b)	9247(8)	3208(6)	3528(4)	33.6(15)
B(6b)	10526(7)	2872(6)	3405(4)	33.0(15)
B(7b)	11485(8)	2667(8)	4238(5)	47(2)
B(8b)	10480(8)	1405(8)	4446(5)	47(2)
B(9b)	9149(8)	1719(7)	4609(4)	37.7(16)
B(10b)	9316(7)	3147(7)	4492(4)	36.9(16)
B(11b)	10756(8)	3734(7)	4265(5)	39.3(17)
B(12b)	10690(8)	2809(8)	4929(4)	41.1(18)
O(1s)	15773(9)	3508(7)	2672(5)	105(3)
C(1s)	15506(8)	3360(7)	3238(5)	52.1(19)
C(2s)	14437(11)	2289(9)	3208(8)	88(4)
C(3s)	16236(11)	4187(9)	3992(5)	71(3)
O(2s)	9773(4)	6153(4)	2713(3)	41.4(11)
C(4s)	9122(6)	6750(6)	2766(4)	35.9(14)
C(5s)	9722(8)	7996(6)	3172(4)	45.6(17)
C(6s)	7679(7)	6250(8)	2419(5)	56(2)
O(1w)	8703(7)	3948(4)	1714(4)	60.0(16)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
W(1)	18.79(13)	18.88(13)	30.38(14)	8.53(9)	7.49(10)	7.84(9)
W(2)	15.72(13)	21.24(13)	28.26(14)	6.90(10)	7.96(10)	7.11(9)
W(3)	18.09(13)	22.13(14)	21.86(14)	5.90(9)	6.33(10)	7.23(10)
W(4)	17.13(13)	21.00(14)	25.02(14)	6.18(9)	8.02(10)	8.87(9)
W(5)	19.65(13)	18.45(13)	24.49(14)	2.80(9)	4.83(10)	7.36(10)
O(1)	29(2)	19(2)	45(3)	11.4(19)	13(2)	8.5(18)
O(2)	19(2)	32(2)	41(2)	13.5(19)	12.4(18)	9.6(17)
O(3)	26(2)	31(2)	23(2)	7.5(17)	4.5(17)	5.6(17)
O(4)	24(2)	27(2)	35(2)	9.5(17)	13.4(18)	11.4(17)
O(5)	32(2)	23(2)	27(2)	-1.9(16)	0.4(18)	7.9(17)
O(12)	22(2)	22(2)	32(2)	12.1(16)	8.5(17)	6.0(16)
O(13)	24(2)	28(2)	24(2)	10.5(16)	8.9(17)	9.9(17)
O(14)	24(2)	22(2)	32(2)	5.3(17)	4.9(18)	10.7(17)
O(15)	23(2)	20(2)	30(2)	5.7(16)	4.4(17)	8.3(16)
O(23)	23(2)	27(2)	23(2)	7.2(16)	9.0(16)	9.7(16)
O(24)	20(2)	21(2)	26(2)	4.9(17)	6.1(17)	8.8(16)
O(25)	23(2)	22(2)	30(2)	4.9(16)	6.4(18)	6.1(16)
O(34)	21(2)	19.6(19)	28(2)	5.5(16)	6.6(17)	6.0(16)
O(35)	21(2)	20(2)	28(2)	6.7(17)	9.1(17)	8.5(17)
O(45)	26(2)	19.0(19)	26(2)	2.6(16)	6.9(17)	11.2(16)
O(123)	13(2)	28(2)	29(2)	4.7(18)	9.3(18)	10.3(17)
C(11a)	19(3)	23(3)	37(3)	6(2)	5(2)	3(2)
N(12a)	21(2)	21(2)	31(3)	3.6(19)	3(2)	5.4(18)
C(13a)	19(3)	24(3)	30(3)	2(2)	2(2)	4(2)
C(14a)	24(3)	26(3)	55(4)	5(3)	8(3)	12(2)
C(15a)	23(3)	34(3)	41(4)	3(3)	9(3)	6(3)
C(1a)	20(3)	24(3)	35(3)	8(2)	9(2)	7(2)
C(2a)	25(3)	36(3)	37(3)	6(3)	13(3)	15(3)
B(3a)	26(3)	28(3)	36(4)	7(3)	6(3)	12(3)
B(4a)	15(3)	35(4)	33(4)	9(3)	5(3)	6(3)
B(5a)	33(4)	40(4)	37(4)	15(3)	8(3)	21(3)
B(6a)	37(4)	35(4)	32(4)	10(3)	12(3)	6(3)
B(7a)	44(5)	53(5)	34(4)	5(3)	15(4)	23(4)
B(8a)	33(4)	34(4)	42(4)	-3(3)	5(3)	12(3)
B(9a)	27(4)	31(4)	38(4)	4(3)	4(3)	3(3)

Table 3. (continued)

B(10a)	27(4)	48(5)	31(4)	3(3)	-1(3)	16(3)
B(11a)	42(4)	48(5)	36(4)	13(3)	12(3)	19(4)
B(12a)	35(4)	52(5)	31(4)	4(3)	6(3)	15(4)
C(11b)	29(3)	36(3)	28(3)	2(2)	7(3)	18(3)
N(12b)	29(3)	27(3)	27(3)	8(2)	8(2)	10(2)
C(13b)	32(3)	38(3)	22(3)	1(2)	8(2)	13(3)
C(14b)	25(3)	44(4)	55(4)	7(3)	12(3)	3(3)
C(15b)	45(4)	75(5)	29(3)	16(3)	16(3)	37(4)
C(1b)	24(3)	22(3)	34(3)	7(2)	12(2)	8(2)
C(2b)	35(4)	48(4)	45(4)	9(3)	11(3)	20(3)
B(3b)	33(4)	34(4)	37(4)	15(3)	13(3)	13(3)
B(4b)	22(3)	37(4)	29(3)	6(3)	9(3)	11(3)
B(5b)	43(4)	27(3)	30(4)	4(3)	13(3)	11(3)
B(6b)	30(4)	30(4)	31(4)	1(3)	7(3)	5(3)
B(7b)	31(4)	62(6)	41(4)	9(4)	9(3)	11(4)
B(8b)	40(4)	63(6)	38(4)	19(4)	6(4)	24(4)
B(9b)	35(4)	47(5)	29(4)	9(3)	10(3)	13(3)
B(10b)	32(4)	43(4)	29(4)	5(3)	12(3)	5(3)
B(11b)	35(4)	33(4)	36(4)	3(3)	9(3)	-3(3)
B(12b)	34(4)	56(5)	27(4)	11(3)	9(3)	8(3)
O(1s)	121(7)	101(6)	66(5)	-12(4)	54(5)	-6(5)
C(1s)	47(4)	52(5)	57(5)	7(4)	20(4)	18(4)
C(2s)	69(7)	67(7)	109(9)	6(6)	38(7)	-2(5)
C(3s)	83(7)	68(6)	44(5)	7(4)	1(5)	24(5)
O(2s)	26(2)	36(3)	60(3)	9(2)	13(2)	9.2(19)
C(4s)	32(3)	43(4)	34(3)	9(3)	13(3)	13(3)
C(5s)	57(5)	43(4)	42(4)	8(3)	25(4)	18(3)
C(6s)	30(4)	76(6)	60(5)	11(4)	12(4)	21(4)
O(1w)	90(5)	31(3)	67(4)	12(2)	50(4)	9(3)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(11a)	12646.	5067.	1888.	35.
H(11b)	11692.	5774.	1813.	35.
H(12a)	12533.	6649.	988.	31.
H(14a)	13902.	4300.	809.	54.
H(14b)	14298.	5033.	1671.	54.
H(14c)	15201.	5417.	1159.	54.
H(15a)	13140.	6639.	-22.	52.
H(15b)	13232.	5416.	-314.	52.
H(15c)	14521.	6512.	138.	52.
H(2a)	11751.	7148.	2904.	38.
H(3a)	13439.	8532.	2225.	37.
H(4a)	15532.	7597.	2347.	34.
H(5a)	14976.	5617.	3065.	42.
H(6a)	12567.	5304.	3410.	43.
H(7a)	12939.	7418.	4519.	51.
H(8a)	13515.	9393.	3811.	47.
H(9a)	15945.	9684.	3476.	43.
H(10a)	16895.	7868.	4008.	45.
H(11c)	15036.	6452.	4656.	49.
H(12a)	15656.	8983.	4929.	49.
H(11d)	9093.	1450.	1996.	37.
H(11e)	7979.	474.	2154.	37.
H(12b)	7788.	2536.	1838.	33.
H(14d)	5895.	50.	2216.	67.
H(14e)	5812.	-455.	1357.	67.
H(14f)	4657.	-104.	1499.	67.
H(15d)	5011.	1454.	642.	67.
H(15e)	5945.	2668.	1223.	67.
H(15f)	4749.	1862.	1418.	67.
H(2b)	10697.	929.	3147.	50.
H(3b)	8371.	-67.	3514.	41.
H(4b)	7171.	1690.	3546.	35.
H(5b)	8845.	3796.	3217.	40.
H(6b)	10982.	3250.	2988.	40.
H(7b)	12556.	2904.	4398.	56.
H(8b)	10897.	814.	4744.	56.
H(9b)	8683.	1340.	5021.	45.

Table 4. (continued)

H(10b)	8955.	3705.	4827.	44.
H(11f)	11356.	4680.	4450.	47.
H(12b)	11248.	3147.	5562.	49.
H(2s1)	14723.	1966.	3652.	131.
H(2s2)	14207.	1718.	2728.	131.
H(2s3)	13681.	2481.	3224.	131.
H(3s1)	16939.	4818.	3938.	106.
H(3s2)	16595.	3790.	4370.	106.
H(3s3)	15657.	4504.	4169.	106.
H(5s1)	10664.	8221.	3360.	68.
H(5s2)	9420.	8120.	3610.	68.
H(5s3)	9478.	8465.	2812.	68.
H(6s1)	7407.	5441.	2149.	84.
H(6s2)	7386.	6692.	2053.	84.
H(6s3)	7299.	6290.	2830.	84.
H(1w)	9007.	4602.	2129.	90.
H(2w)	9046.	4099.	1461.	90.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

W(1)-O(1)	1.718(4)	W(1)-O(15)	1.855(4)
W(1)-O(14)	1.910(4)	W(1)-O(12)	1.949(4)
W(1)-O(13)	1.986(4)	W(1)-O(123)	2.282(4)
W(2)-O(2)	1.702(4)	W(2)-O(23)	1.907(4)
W(2)-O(12)	1.917(4)	W(2)-O(25)	1.917(4)
W(2)-O(24) ^(a)	1.930(4)	W(2)-O(123)	2.320(3)
W(3)-O(3)	1.702(4)	W(3)-O(13)	1.884(4)
W(3)-O(34)	1.921(4)	W(3)-O(23)	1.939(4)
W(3)-O(35) ^(a)	1.963(4)	W(3)-O(123)	2.335(4)
W(4)-O(4)	1.708(4)	W(4)-O(24)	1.865(4)
W(4)-O(45)	1.913(4)	W(4)-O(34)	1.913(4)
W(4)-O(14)	2.001(4)	W(4)-O(123)	2.309(3)
W(5)-O(5)	1.711(4)	W(5)-O(35)	1.841(4)
W(5)-O(25)	1.925(4)	W(5)-O(45)	1.932(4)
W(5)-O(15)	2.023(4)	W(5)-O(123)	2.304(4)
O(24)-W(2) ^(a)	1.930(4)	O(35)-W(3) ^(a)	1.963(4)
C(11a)-N(12a)	1.463(8)	C(11a)-C(1a)	1.526(8)
N(12a)-C(13a)	1.289(8)	C(13a)-C(15a)	1.487(9)
C(13a)-C(14a)	1.496(8)	C(1a)-C(2a)	1.642(8)
C(1a)-B(5a)	1.697(9)	C(1a)-B(4a)	1.698(8)
C(1a)-B(3a)	1.715(9)	C(1a)-B(6a)	1.738(9)
C(2a)-B(7a)	1.689(10)	C(2a)-B(8a)	1.694(10)
C(2a)-B(3a)	1.708(9)	C(2a)-B(6a)	1.736(10)
B(3a)-B(9a)	1.757(10)	B(3a)-B(4a)	1.777(9)
B(3a)-B(8a)	1.783(11)	B(4a)-B(9a)	1.768(10)
B(4a)-B(5a)	1.770(10)	B(4a)-B(10a)	1.775(10)
B(5a)-B(10a)	1.758(11)	B(5a)-B(6a)	1.768(11)
B(5a)-B(11a)	1.777(11)	B(6a)-B(11a)	1.745(11)
B(6a)-B(7a)	1.786(11)	B(7a)-B(8a)	1.763(12)
B(7a)-B(12a)	1.771(12)	B(7a)-B(11a)	1.782(11)
B(8a)-B(9a)	1.774(11)	B(8a)-B(12a)	1.786(11)
B(9a)-B(10a)	1.783(11)	B(9a)-B(12a)	1.808(11)
B(10a)-B(11a)	1.782(12)	B(10a)-B(12a)	1.798(11)
B(11a)-B(12a)	1.786(12)	C(11b)-N(12b)	1.459(7)
C(11b)-C(1b)	1.526(8)	N(12b)-C(13b)	1.293(8)
C(13b)-C(15b)	1.464(9)	C(13b)-C(14b)	1.502(10)
C(1b)-C(2b)	1.670(9)	C(1b)-B(6b)	1.674(9)
C(1b)-B(4b)	1.691(8)	C(1b)-B(3b)	1.714(9)
C(1b)-B(5b)	1.724(9)	C(2b)-B(6b)	1.714(10)
C(2b)-B(3b)	1.730(10)	C(2b)-B(8b)	1.738(11)
C(2b)-B(7b)	1.750(11)	B(3b)-B(8b)	1.762(11)
B(3b)-B(4b)	1.766(10)	B(3b)-B(9b)	1.773(11)
B(4b)-B(10b)	1.774(10)	B(4b)-B(9b)	1.778(10)

Table 5. (continued)

B(4b)-B(5b)	1.799(10)	B(5b)-B(6b)	1.718(10)
B(5b)-B(11b)	1.756(11)	B(5b)-B(10b)	1.774(10)
B(6b)-B(11b)	1.711(10)	B(6b)-B(7b)	1.732(12)
B(7b)-B(11b)	1.784(13)	B(7b)-B(12b)	1.788(11)
B(7b)-B(8b)	1.802(13)	B(8b)-B(12b)	1.777(13)
B(8b)-B(9b)	1.790(12)	B(9b)-B(12b)	1.759(11)
B(9b)-B(10b)	1.781(11)	B(10b)-B(12b)	1.772(12)
B(10b)-B(11b)	1.785(11)	B(11b)-B(12b)	1.789(12)
O(1s)-C(1s)	1.189(11)	C(1s)-C(3s)	1.476(12)
C(1s)-C(2s)	1.498(13)	O(2s)-C(4s)	1.224(8)
C(4s)-C(5s)	1.490(10)	C(4s)-C(6s)	1.499(10)

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $2-x, 2-y, -z$

Table 6. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

O(1)-W(1)-O(15)	104.58(19)	O(1)-W(1)-O(14)	102.64(18)
O(15)-W(1)-O(14)	91.52(19)	O(1)-W(1)-O(12)	103.29(18)
O(15)-W(1)-O(12)	88.66(18)	O(14)-W(1)-O(12)	153.14(17)
O(1)-W(1)-O(13)	101.92(19)	O(15)-W(1)-O(13)	153.43(17)
O(14)-W(1)-O(13)	84.49(17)	O(12)-W(1)-O(13)	83.46(17)
O(1)-W(1)-O(123)	177.73(19)	O(15)-W(1)-O(123)	77.69(15)
O(14)-W(1)-O(123)	77.15(14)	O(12)-W(1)-O(123)	76.66(14)
O(13)-W(1)-O(123)	75.81(15)	O(2)-W(2)-O(23)	102.9(2)
O(2)-W(2)-O(12)	98.01(18)	O(23)-W(2)-O(12)	89.32(18)
O(2)-W(2)-O(25)	104.0(2)	O(23)-W(2)-O(25)	152.99(17)
O(12)-W(2)-O(25)	88.56(18)	O(2)-W(2)-O(24) ^(a)	98.68(18)
O(23)-W(2)-O(24) ^(a)	87.78(17)	O(12)-W(2)-O(24) ^(a)	163.30(17)
O(25)-W(2)-O(24) ^(a)	86.60(17)	O(2)-W(2)-O(123)	174.32(17)
O(23)-W(2)-O(123)	77.53(15)	O(12)-W(2)-O(123)	76.32(15)
O(25)-W(2)-O(123)	75.81(16)	O(24) ^(a) -W(2)-O(123)	86.99(15)
O(3)-W(3)-O(13)	99.25(19)	O(3)-W(3)-O(34)	104.03(19)
O(13)-W(3)-O(34)	90.90(17)	O(3)-W(3)-O(23)	103.36(19)
O(13)-W(3)-O(23)	89.49(17)	O(34)-W(3)-O(23)	152.17(17)
O(3)-W(3)-O(35) ^(a)	99.03(19)	O(13)-W(3)-O(35) ^(a)	161.70(17)
O(34)-W(3)-O(35) ^(a)	85.52(16)	O(23)-W(3)-O(35) ^(a)	85.46(16)
O(3)-W(3)-O(123)	175.62(17)	O(13)-W(3)-O(123)	76.38(15)
O(34)-W(3)-O(123)	76.49(15)	O(23)-W(3)-O(123)	76.57(14)
O(35) ^(a) -W(3)-O(123)	85.34(15)	O(4)-W(4)-O(24)	100.10(18)
O(4)-W(4)-O(45)	103.67(19)	O(24)-W(4)-O(45)	90.08(17)
O(4)-W(4)-O(34)	102.37(19)	O(24)-W(4)-O(34)	91.75(17)
O(45)-W(4)-O(34)	153.15(17)	O(4)-W(4)-O(14)	94.26(18)
O(24)-W(4)-O(14)	165.62(17)	O(45)-W(4)-O(14)	85.84(17)
O(34)-W(4)-O(14)	85.80(17)	O(4)-W(4)-O(123)	169.08(17)
O(24)-W(4)-O(123)	90.82(15)	O(45)-W(4)-O(123)	75.90(16)
O(34)-W(4)-O(123)	77.28(15)	O(14)-W(4)-O(123)	74.82(14)
O(5)-W(5)-O(35)	101.06(19)	O(5)-W(5)-O(25)	103.5(2)
O(35)-W(5)-O(25)	93.08(17)	O(5)-W(5)-O(45)	103.22(19)
O(35)-W(5)-O(45)	91.26(17)	O(25)-W(5)-O(45)	151.52(18)
O(5)-W(5)-O(15)	93.42(19)	O(35)-W(5)-O(15)	165.45(18)
O(25)-W(5)-O(15)	84.92(17)	O(45)-W(5)-O(15)	83.90(17)
O(5)-W(5)-O(123)	167.50(17)	O(35)-W(5)-O(123)	91.44(16)
O(25)-W(5)-O(123)	76.08(15)	O(45)-W(5)-O(123)	75.68(15)
O(15)-W(5)-O(123)	74.08(15)	W(2)-O(12)-W(1)	116.0(2)
W(3)-O(13)-W(1)	116.7(2)	W(1)-O(14)-W(4)	115.57(19)
W(1)-O(15)-W(5)	116.3(2)	W(2)-O(23)-W(3)	116.44(19)
W(4)-O(24)-W(2) ^(a)	174.6(2)	W(2)-O(25)-W(5)	117.5(2)
W(4)-O(34)-W(3)	116.8(2)	W(5)-O(35)-W(3) ^(a)	173.6(2)
W(4)-O(45)-W(5)	117.1(2)	W(1)-O(123)-W(5)	91.91(13)

Table 6. (continued)

W(1)-O(123)-W(4)	92.27(12)	W(5)-O(123)-W(4)	90.65(12)
W(1)-O(123)-W(2)	90.91(13)	W(5)-O(123)-W(2)	90.54(13)
W(4)-O(123)-W(2)	176.56(18)	W(1)-O(123)-W(3)	91.07(14)
W(5)-O(123)-W(3)	177.01(19)	W(4)-O(123)-W(3)	89.39(13)
W(2)-O(123)-W(3)	89.25(12)	N(12a)-C(11a)-C(1a)	114.3(5)
C(13a)-N(12a)-C(11a)	126.7(5)	N(12a)-C(13a)-C(15a)	119.3(5)
N(12a)-C(13a)-C(14a)	123.1(6)	C(15a)-C(13a)-C(14a)	117.6(5)
C(11a)-C(1a)-C(2a)	116.3(5)	C(11a)-C(1a)-B(5a)	120.6(5)
C(2a)-C(1a)-B(5a)	110.6(5)	C(11a)-C(1a)-B(4a)	124.6(5)
C(2a)-C(1a)-B(4a)	110.8(5)	B(5a)-C(1a)-B(4a)	62.9(4)
C(11a)-C(1a)-B(3a)	119.0(5)	C(2a)-C(1a)-B(3a)	61.1(4)
B(5a)-C(1a)-B(3a)	114.5(5)	B(4a)-C(1a)-B(3a)	62.7(4)
C(11a)-C(1a)-B(6a)	112.7(5)	C(2a)-C(1a)-B(6a)	61.7(4)
B(5a)-C(1a)-B(6a)	62.0(4)	B(4a)-C(1a)-B(6a)	114.3(5)
B(3a)-C(1a)-B(6a)	114.6(5)	C(1a)-C(2a)-B(7a)	112.2(5)
C(1a)-C(2a)-B(8a)	112.0(5)	B(7a)-C(2a)-B(8a)	62.8(5)
C(1a)-C(2a)-B(3a)	61.6(4)	B(7a)-C(2a)-B(3a)	115.5(5)
B(8a)-C(2a)-B(3a)	63.2(4)	C(1a)-C(2a)-B(6a)	61.8(4)
B(7a)-C(2a)-B(6a)	62.8(4)	B(8a)-C(2a)-B(6a)	114.9(5)
B(3a)-C(2a)-B(6a)	115.1(5)	C(2a)-B(3a)-C(1a)	57.4(4)
C(2a)-B(3a)-B(9a)	103.9(5)	C(1a)-B(3a)-B(9a)	104.2(5)
C(2a)-B(3a)-B(4a)	104.2(5)	C(1a)-B(3a)-B(4a)	58.2(4)
B(9a)-B(3a)-B(4a)	60.0(4)	C(2a)-B(3a)-B(8a)	58.0(4)
C(1a)-B(3a)-B(8a)	104.5(5)	B(9a)-B(3a)-B(8a)	60.1(4)
B(4a)-B(3a)-B(8a)	108.0(5)	C(1a)-B(4a)-B(9a)	104.5(5)
C(1a)-B(4a)-B(5a)	58.5(4)	B(9a)-B(4a)-B(5a)	107.8(5)
C(1a)-B(4a)-B(10a)	104.3(5)	B(9a)-B(4a)-B(10a)	60.4(4)
B(5a)-B(4a)-B(10a)	59.5(4)	C(1a)-B(4a)-B(3a)	59.1(4)
B(9a)-B(4a)-B(3a)	59.5(4)	B(5a)-B(4a)-B(3a)	108.0(5)
B(10a)-B(4a)-B(3a)	107.9(5)	C(1a)-B(5a)-B(10a)	105.1(5)
C(1a)-B(5a)-B(6a)	60.2(4)	B(10a)-B(5a)-B(6a)	108.2(5)
C(1a)-B(5a)-B(4a)	58.6(4)	B(10a)-B(5a)-B(4a)	60.4(4)
B(6a)-B(5a)-B(4a)	109.3(5)	C(1a)-B(5a)-B(11a)	105.1(5)
B(10a)-B(5a)-B(11a)	60.5(5)	B(6a)-B(5a)-B(11a)	59.0(4)
B(4a)-B(5a)-B(11a)	108.8(5)	C(2a)-B(6a)-C(1a)	56.4(4)
C(2a)-B(6a)-B(11a)	104.0(5)	C(1a)-B(6a)-B(11a)	104.7(5)
C(2a)-B(6a)-B(5a)	103.2(5)	C(1a)-B(6a)-B(5a)	57.9(4)
B(11a)-B(6a)-B(5a)	60.8(4)	C(2a)-B(6a)-B(7a)	57.3(4)
C(1a)-B(6a)-B(7a)	103.4(5)	B(11a)-B(6a)-B(7a)	60.6(5)
B(5a)-B(6a)-B(7a)	108.1(6)	C(2a)-B(7a)-B(8a)	58.7(4)
C(2a)-B(7a)-B(12a)	105.3(6)	B(8a)-B(7a)-B(12a)	60.7(5)
C(2a)-B(7a)-B(11a)	104.3(5)	B(8a)-B(7a)-B(11a)	108.5(6)
B(12a)-B(7a)-B(11a)	60.4(5)	C(2a)-B(7a)-B(6a)	59.9(4)
B(8a)-B(7a)-B(6a)	109.2(5)	B(12a)-B(7a)-B(6a)	108.0(6)
B(11a)-B(7a)-B(6a)	58.6(4)	C(2a)-B(8a)-B(7a)	58.5(4)

Table 6. (continued)

C(2a)-B(8a)-B(9a)	103.8(5)	B(7a)-B(8a)-B(9a)	108.2(6)
C(2a)-B(8a)-B(3a)	58.8(4)	B(7a)-B(8a)-B(3a)	108.2(5)
B(9a)-B(8a)-B(3a)	59.2(4)	C(2a)-B(8a)-B(12a)	104.5(5)
B(7a)-B(8a)-B(12a)	59.9(5)	B(9a)-B(8a)-B(12a)	61.1(4)
B(3a)-B(8a)-B(12a)	108.6(5)	B(3a)-B(9a)-B(4a)	60.5(4)
B(3a)-B(9a)-B(8a)	60.7(4)	B(4a)-B(9a)-B(8a)	108.9(5)
B(3a)-B(9a)-B(10a)	108.4(5)	B(4a)-B(9a)-B(10a)	60.0(4)
B(8a)-B(9a)-B(10a)	107.9(6)	B(3a)-B(9a)-B(12a)	108.8(5)
B(4a)-B(9a)-B(12a)	108.6(5)	B(8a)-B(9a)-B(12a)	59.8(4)
B(10a)-B(9a)-B(12a)	60.1(4)	B(5a)-B(10a)-B(4a)	60.1(4)
B(5a)-B(10a)-B(11a)	60.3(5)	B(4a)-B(10a)-B(11a)	108.4(5)
B(5a)-B(10a)-B(9a)	107.6(5)	B(4a)-B(10a)-B(9a)	59.6(4)
B(11a)-B(10a)-B(9a)	108.0(5)	B(5a)-B(10a)-B(12a)	108.4(6)
B(4a)-B(10a)-B(12a)	108.7(5)	B(11a)-B(10a)-B(12a)	59.9(5)
B(9a)-B(10a)-B(12a)	60.6(4)	B(6a)-B(11a)-B(5a)	60.3(4)
B(6a)-B(11a)-B(10a)	108.1(5)	B(5a)-B(11a)-B(10a)	59.2(4)
B(6a)-B(11a)-B(7a)	60.8(5)	B(5a)-B(11a)-B(7a)	107.8(6)
B(10a)-B(11a)-B(7a)	107.4(6)	B(6a)-B(11a)-B(12a)	109.2(6)
B(5a)-B(11a)-B(12a)	108.1(6)	B(10a)-B(11a)-B(12a)	60.5(5)
B(7a)-B(11a)-B(12a)	59.5(5)	B(7a)-B(12a)-B(8a)	59.4(5)
B(7a)-B(12a)-B(11a)	60.1(5)	B(8a)-B(12a)-B(11a)	107.3(6)
B(7a)-B(12a)-B(10a)	107.2(6)	B(8a)-B(12a)-B(10a)	106.7(5)
B(11a)-B(12a)-B(10a)	59.6(5)	B(7a)-B(12a)-B(9a)	106.4(6)
B(8a)-B(12a)-B(9a)	59.1(4)	B(11a)-B(12a)-B(9a)	106.7(5)
B(10a)-B(12a)-B(9a)	59.3(4)	N(12b)-C(11b)-C(1b)	113.7(5)
C(13b)-N(12b)-C(11b)	126.3(6)	N(12b)-C(13b)-C(15b)	120.5(6)
N(12b)-C(13b)-C(14b)	121.8(6)	C(15b)-C(13b)-C(14b)	117.7(6)
C(11b)-C(1b)-C(2b)	113.7(5)	C(11b)-C(1b)-B(6b)	117.0(5)
C(2b)-C(1b)-B(6b)	61.7(4)	C(11b)-C(1b)-B(4b)	123.7(5)
C(2b)-C(1b)-B(4b)	112.6(5)	B(6b)-C(1b)-B(4b)	112.2(5)
C(11b)-C(1b)-B(3b)	117.5(5)	C(2b)-C(1b)-B(3b)	61.5(4)
B(6b)-C(1b)-B(3b)	112.1(5)	B(4b)-C(1b)-B(3b)	62.5(4)
C(11b)-C(1b)-B(5b)	121.8(5)	C(2b)-C(1b)-B(5b)	112.5(5)
B(6b)-C(1b)-B(5b)	60.7(4)	B(4b)-C(1b)-B(5b)	63.6(4)
B(3b)-C(1b)-B(5b)	114.8(5)	C(1b)-C(2b)-B(6b)	59.3(4)
C(1b)-C(2b)-B(3b)	60.5(4)	B(6b)-C(2b)-B(3b)	109.4(5)
C(1b)-C(2b)-B(8b)	108.5(5)	B(6b)-C(2b)-B(8b)	109.4(6)
B(3b)-C(2b)-B(8b)	61.1(5)	C(1b)-C(2b)-B(7b)	108.1(5)
B(6b)-C(2b)-B(7b)	60.0(5)	B(3b)-C(2b)-B(7b)	111.6(5)
B(8b)-C(2b)-B(7b)	62.2(5)	C(1b)-B(3b)-C(2b)	58.0(4)
C(1b)-B(3b)-B(8b)	105.5(5)	C(2b)-B(3b)-B(8b)	59.7(4)
C(1b)-B(3b)-B(4b)	58.1(4)	C(2b)-B(3b)-B(4b)	106.2(5)
B(8b)-B(3b)-B(4b)	109.0(6)	C(1b)-B(3b)-B(9b)	104.9(5)
C(2b)-B(3b)-B(9b)	107.1(5)	B(8b)-B(3b)-B(9b)	60.8(5)
B(4b)-B(3b)-B(9b)	60.3(4)	C(1b)-B(4b)-B(3b)	59.4(4)

Table 6. (continued)

C(1b)-B(4b)-B(10b)	105.1(5)	B(3b)-B(4b)-B(10b)	108.2(5)
C(1b)-B(4b)-B(9b)	105.7(5)	B(3b)-B(4b)-B(9b)	60.1(4)
B(10b)-B(4b)-B(9b)	60.2(4)	C(1b)-B(4b)-B(5b)	59.1(4)
B(3b)-B(4b)-B(5b)	108.6(5)	B(10b)-B(4b)-B(5b)	59.5(4)
B(9b)-B(4b)-B(5b)	108.1(5)	B(6b)-B(5b)-C(1b)	58.2(4)
B(6b)-B(5b)-B(11b)	59.0(4)	C(1b)-B(5b)-B(11b)	104.8(5)
B(6b)-B(5b)-B(10b)	106.1(6)	C(1b)-B(5b)-B(10b)	103.7(5)
B(11b)-B(5b)-B(10b)	60.8(4)	B(6b)-B(5b)-B(4b)	105.1(5)
C(1b)-B(5b)-B(4b)	57.3(4)	B(11b)-B(5b)-B(4b)	107.9(5)
B(10b)-B(5b)-B(4b)	59.5(4)	C(1b)-B(6b)-B(11b)	109.1(5)
C(1b)-B(6b)-C(2b)	59.0(4)	B(11b)-B(6b)-C(2b)	110.7(6)
C(1b)-B(6b)-B(5b)	61.1(4)	B(11b)-B(6b)-B(5b)	61.6(4)
C(2b)-B(6b)-B(5b)	110.6(5)	C(1b)-B(6b)-B(7b)	108.8(6)
B(11b)-B(6b)-B(7b)	62.4(5)	C(2b)-B(6b)-B(7b)	61.1(5)
B(5b)-B(6b)-B(7b)	113.0(6)	B(6b)-B(7b)-C(2b)	59.0(4)
B(6b)-B(7b)-B(11b)	58.2(5)	C(2b)-B(7b)-B(11b)	105.8(6)
B(6b)-B(7b)-B(12b)	104.7(6)	C(2b)-B(7b)-B(12b)	104.5(6)
B(11b)-B(7b)-B(12b)	60.1(5)	B(6b)-B(7b)-B(8b)	105.8(6)
C(2b)-B(7b)-B(8b)	58.6(5)	B(11b)-B(7b)-B(8b)	107.9(6)
B(12b)-B(7b)-B(8b)	59.3(5)	C(2b)-B(8b)-B(3b)	59.2(4)
C(2b)-B(8b)-B(12b)	105.5(6)	B(3b)-B(8b)-B(12b)	106.8(6)
C(2b)-B(8b)-B(9b)	106.0(5)	B(3b)-B(8b)-B(9b)	59.9(4)
B(12b)-B(8b)-B(9b)	59.1(5)	C(2b)-B(8b)-B(7b)	59.2(5)
B(3b)-B(8b)-B(7b)	107.8(6)	B(12b)-B(8b)-B(7b)	59.9(5)
B(9b)-B(8b)-B(7b)	107.6(6)	B(12b)-B(9b)-B(3b)	107.1(5)
B(12b)-B(9b)-B(4b)	107.3(5)	B(3b)-B(9b)-B(4b)	59.6(4)
B(12b)-B(9b)-B(10b)	60.1(5)	B(3b)-B(9b)-B(10b)	107.5(5)
B(4b)-B(9b)-B(10b)	59.8(4)	B(12b)-B(9b)-B(8b)	60.1(5)
B(3b)-B(9b)-B(8b)	59.3(4)	B(4b)-B(9b)-B(8b)	107.2(5)
B(10b)-B(9b)-B(8b)	108.1(6)	B(12b)-B(10b)-B(5b)	107.6(5)
B(12b)-B(10b)-B(4b)	106.9(6)	B(5b)-B(10b)-B(4b)	60.9(4)
B(12b)-B(10b)-B(9b)	59.3(5)	B(5b)-B(10b)-B(9b)	109.1(5)
B(4b)-B(10b)-B(9b)	60.0(4)	B(12b)-B(10b)-B(11b)	60.4(5)
B(5b)-B(10b)-B(11b)	59.1(4)	B(4b)-B(10b)-B(11b)	107.7(5)
B(9b)-B(10b)-B(11b)	108.3(6)	B(6b)-B(11b)-B(5b)	59.4(4)
B(6b)-B(11b)-B(7b)	59.4(5)	B(5b)-B(11b)-B(7b)	108.7(5)
B(6b)-B(11b)-B(10b)	105.9(5)	B(5b)-B(11b)-B(10b)	60.1(4)
B(7b)-B(11b)-B(10b)	108.1(6)	B(6b)-B(11b)-B(12b)	105.5(6)
B(5b)-B(11b)-B(12b)	107.6(5)	B(7b)-B(11b)-B(12b)	60.0(5)
B(10b)-B(11b)-B(12b)	59.4(4)	B(9b)-B(12b)-B(10b)	60.6(5)
B(9b)-B(12b)-B(8b)	60.8(5)	B(10b)-B(12b)-B(8b)	109.2(6)
B(9b)-B(12b)-B(7b)	109.6(6)	B(10b)-B(12b)-B(7b)	108.5(6)
B(8b)-B(12b)-B(7b)	60.7(5)	B(9b)-B(12b)-B(11b)	109.1(6)
B(10b)-B(12b)-B(11b)	60.2(4)	B(8b)-B(12b)-B(11b)	108.7(6)
B(7b)-B(12b)-B(11b)	59.8(5)	O(1s)-C(1s)-C(3s)	121.9(9)

Table 6. (continued)

O(1s)-C(1s)-C(2s)	120.3(9)	C(3s)-C(1s)-C(2s)	117.8(9)
O(2s)-C(4s)-C(5s)	121.8(6)	O(2s)-C(4s)-C(6s)	120.8(7)
C(5s)-C(4s)-C(6s)	117.4(6)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $2-x, 2-y, -z$

Table 9. Hydrogen bonded distances (Å) and angles (°). Standard uncertainties are included in parentheses for values which do not involve constrained hydrogen atoms.

Atoms (D-H...A)	D-H	H...A	D...A	∠DHA
N(12a)-H(12a)...O(14)	0.88	1.94	2.787(6)	161.2
N(12b)-H(12b)...O(1w)	0.88	1.84	2.701(7)	167.7
O(1w)-H(1w)...O(2s)	0.947(5)	1.895(5)	2.808(7)	161.3(3)
O(1w)-H(2w)...O(1)	0.700(5)	2.271(4)	2.862(7)	143.2(5)

6. [C₂B₁₀H₁₁CH₂NH₃]₂[C₅H₅NH]₂[W₁₀O₃₂]·2MeCN·2(Et₂O) (11)

Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
C(1)	1736(10)	2797(9)	2151(4)	24(2)
C(11)	560(9)	2776(9)	2190(5)	21(2)
N(11)	60(7)	3888(8)	2132(4)	21.3(19)
C(2)	2193(9)	2072(9)	1624(5)	22(2)
B(3)	2337(11)	1494(11)	2290(5)	26(3)
B(4)	2597(13)	2674(14)	2741(6)	37(4)
B(5)	2525(11)	3934(13)	2309(6)	31(3)
B(6)	2241(11)	3516(11)	1596(6)	26(3)
B(7)	3307(11)	2695(12)	1384(6)	27(3)
B(8)	3350(12)	1410(12)	1816(6)	31(3)
B(9)	3669(11)	1841(13)	2534(6)	32(3)
B(10)	3779(12)	3332(13)	2553(7)	37(3)
B(11)	3574(12)	3859(12)	1846(6)	33(3)
B(12)	4263(12)	2557(12)	1972(6)	30(3)
W(1)	178.8(4)	6985.4(4)	1000.34(18)	20.08(13)
O(1)	230(6)	5771(7)	1408(3)	25.7(17)
W(2)	1883.9(3)	8858.5(4)	562.13(18)	19.41(12)
O(2a)	1696(6)	7980(6)	-123(3)	20.9(16)
O(2b)	3219(6)	8814(7)	717(3)	23.0(16)
W(3)	-145.4(4)	9718.1(4)	1219.49(17)	18.66(12)
O(3a)	-1558(6)	9315(6)	968(3)	21.9(16)
O(3b)	-300(6)	10278(6)	1882(3)	23.5(17)
W(4)	1756.4(3)	11602.1(4)	-295.67(18)	19.84(12)

O(4b)	3074(6)	11897(7)	-237(3)	25.0(17)
O(4a)	1303(6)	12894(6)	-751(3)	24.4(17)
W(5)	-277.3(4)	12480.3(4)	363.45(17)	19.76(12)
O(5a)	-442(7)	13331(6)	938(3)	26.3(17)
O(5b)	-302(6)	13576(6)	-214(3)	24.8(17)
O(12)	1591(6)	7429(6)	964(3)	21.0(16)
O(13)	-27(6)	8119(6)	1528(3)	22.2(16)
O(123)	81(6)	8631(6)	447(3)	23.3(17)
O(23)	1361(6)	9631(6)	1198(3)	21.8(16)
O(24)	1777(6)	10199(6)	134(3)	23.1(16)
O(35)	-188(6)	11019(7)	790(3)	27.4(18)
O(45)	1221(6)	12345(6)	346(3)	20.2(16)
N(1s)	2010(11)	8034(13)	2692(6)	59(4)
C(1s)	2589(12)	7693(15)	2382(7)	52(4)

Table 2. (continued)

C(2s)	3339(13)	7282(15)	1988(6)	53(4)
C(3s)	2708(13)	4971(13)	-471(7)	49(4)
C(4s)	2694(14)	5165(14)	-1102(7)	55(4)
O(1s)	3458(8)	5738(8)	-201(4)	43(2)
C(5s)	3588(14)	5528(13)	412(6)	51(4)
C(6s)	4469(14)	6216(13)	662(6)	50(4)
N(7s)	3785(8)	7838(9)	-649(4)	31(2)
C(8s)	3170(12)	8405(13)	-1032(6)	44(3)
C(9s)	3504(12)	9429(13)	-1230(6)	45(4)
C(10s)	4436(14)	9898(11)	-1018(6)	46(4)
C(11s)	5055(12)	9286(12)	-633(6)	42(3)
C(12s)	4696(11)	8265(11)	-442(6)	38(3)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	44(7)	17(5)	10(5)	-3(4)	0(4)	3(5)
C(11)	23(6)	16(5)	24(6)	-1(4)	4(4)	2(4)
N(11)	28(5)	20(5)	16(4)	1(3)	1(4)	1(4)
C(2)	24(6)	16(5)	27(6)	-3(4)	6(4)	3(5)
B(3)	40(8)	24(7)	13(6)	-1(5)	-3(5)	8(6)
B(4)	42(9)	56(10)	12(6)	-2(6)	-1(6)	-7(7)
B(5)	28(7)	32(8)	32(8)	-15(6)	4(6)	-9(6)
B(6)	32(7)	21(6)	26(7)	-7(5)	8(5)	0(6)
B(7)	23(7)	27(7)	31(7)	-1(5)	5(5)	10(5)
B(8)	41(8)	29(7)	23(7)	-2(5)	3(6)	4(6)
B(9)	23(7)	46(9)	26(7)	-5(6)	3(5)	11(6)
B(10)	34(8)	40(9)	38(8)	-12(7)	0(6)	-7(7)
B(11)	39(8)	23(7)	40(8)	-3(6)	18(6)	-8(6)
B(12)	35(8)	35(8)	20(7)	-4(5)	2(6)	-4(6)
W(1)	27.9(3)	14.3(2)	17.8(2)	3.60(16)	-0.04(16)	-0.39(18)
O(1)	30(4)	27(4)	19(4)	6(3)	-4(3)	-2(4)
W(2)	22.8(2)	17.1(2)	18.1(2)	1.33(16)	0.45(16)	0.27(17)
O(2a)	25(4)	15(4)	23(4)	7(3)	6(3)	6(3)
O(2b)	15(4)	29(4)	26(4)	9(3)	0(3)	3(3)
W(3)	26.2(2)	15.5(2)	14.2(2)	0.78(15)	1.45(16)	0.05(17)
O(3a)	24(4)	23(4)	20(4)	2(3)	7(3)	-3(3)
O(3b)	34(5)	21(4)	16(4)	0(3)	6(3)	3(3)
W(4)	22.8(2)	17.9(2)	18.7(2)	1.27(16)	0.44(16)	-1.23(17)
O(4b)	22(4)	22(4)	31(4)	1(3)	0(3)	-8(3)
O(4a)	32(4)	24(4)	17(4)	0(3)	5(3)	-2(3)
W(5)	27.4(3)	15.8(2)	15.9(2)	-1.12(16)	0.81(17)	1.06(17)
O(5a)	40(5)	18(4)	21(4)	1(3)	3(3)	7(3)
O(5b)	31(4)	17(4)	27(4)	-2(3)	6(3)	0(3)
O(12)	24(4)	21(4)	18(4)	-1(3)	-1(3)	-2(3)
O(13)	25(4)	21(4)	21(4)	3(3)	2(3)	-1(3)
O(123)	34(5)	16(4)	19(4)	3(3)	3(3)	0(3)
O(23)	26(4)	19(4)	20(4)	3(3)	5(3)	0(3)
O(24)	23(4)	22(4)	24(4)	-1(3)	3(3)	3(3)
O(35)	34(5)	25(4)	23(4)	-1(3)	-1(3)	1(4)
O(45)	20(4)	11(3)	29(4)	1(3)	-1(3)	-3(3)

Table 3. (continued)

N(1s)	48(8)	78(10)	50(8)	-20(7)	8(6)	22(7)
C(1s)	35(8)	66(11)	53(10)	-6(8)	-8(7)	3(8)
C(2s)	52(10)	72(11)	35(8)	-11(7)	-2(7)	11(8)
C(3s)	51(9)	35(8)	62(10)	-8(7)	8(7)	-6(7)
C(4s)	56(10)	47(9)	60(10)	5(8)	-15(8)	-3(8)
O(1s)	46(6)	36(5)	49(6)	8(4)	12(4)	-5(5)
C(5s)	65(11)	41(9)	47(9)	8(7)	11(7)	-7(8)
C(6s)	74(11)	44(8)	33(8)	5(6)	-5(7)	19(8)
N(7s)	31(6)	24(5)	39(6)	5(4)	9(5)	-7(4)
C(8s)	34(8)	57(9)	44(8)	0(7)	15(6)	-4(7)
C(9s)	48(9)	49(9)	40(8)	18(7)	23(7)	26(7)
C(10s)	77(12)	22(7)	41(8)	-5(6)	24(8)	-4(7)
C(11s)	59(9)	37(8)	31(7)	-6(6)	16(6)	-18(7)
C(12s)	48(8)	28(7)	37(7)	-2(5)	1(6)	-2(6)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(14a)	242.	2269.	1889.	25.
H(14b)	407.	2447.	2562.	25.
H(11a)	222.	4213.	1799.	32.
H(11b)	296.	4339.	2429.	32.
H(11c)	-652.	3807.	2133.	32.
H(2)	1638.	1632.	1304.	27.
H(3)	1916.	717.	2430.	31.
H(4)	2354.	2671.	3188.	44.
H(5)	2233.	4765.	2469.	37.
H(6)	1755.	4051.	1283.	31.
H(7)	3530.	2703.	933.	32.
H(8)	3597.	568.	1647.	37.
H(9)	4149.	1294.	2844.	38.
H(10)	4323.	3769.	2879.	45.
H(11)	3989.	4640.	1707.	40.
H(12)	5124.	2471.	1907.	36.
H(2s1)	3950.	6947.	2204.	80.
H(2s2)	3571.	7919.	1760.	80.
H(2s3)	2999.	6706.	1737.	80.
H(7a)	2000.	5113.	-337.	59.
H(7b)	2909.	4175.	-379.	59.
H(4s1)	3397.	5013.	-1231.	83.
H(4s2)	2497.	5956.	-1188.	83.
H(4s3)	2180.	4653.	-1299.	83.
H(8a)	3731.	4712.	484.	61.
H(8b)	2931.	5732.	590.	61.
H(6s1)	4320.	7024.	592.	76.
H(6s2)	5118.	6005.	488.	76.
H(6s3)	4556.	6079.	1073.	76.
H(7s)	3583.	7168.	-531.	37.
H(8s)	2505.	8102.	-1168.	53.
H(9s)	3083.	9818.	-1518.	54.
H(10s)	4647.	10631.	-1136.	55.
H(11s)	5729.	9564.	-498.	50.
H(12s)	5108.	7859.	-157.	45.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

C(1)-C(11)	1.505(16)	C(1)-C(2)	1.648(14)
C(1)-B(5)	1.696(17)	C(1)-B(4)	1.711(18)
C(1)-B(6)	1.720(17)	C(1)-B(3)	1.733(16)
C(11)-N(11)	1.456(13)	C(2)-B(8)	1.697(18)
C(2)-B(6)	1.700(17)	C(2)-B(3)	1.708(16)
C(2)-B(7)	1.725(17)	B(3)-B(4)	1.77(2)
B(3)-B(8)	1.77(2)	B(3)-B(9)	1.80(2)
B(4)-B(9)	1.77(2)	B(4)-B(10)	1.77(2)
B(4)-B(5)	1.80(2)	B(5)-B(6)	1.763(18)
B(5)-B(11)	1.79(2)	B(5)-B(10)	1.80(2)
B(6)-B(7)	1.766(18)	B(6)-B(11)	1.80(2)
B(7)-B(11)	1.77(2)	B(7)-B(12)	1.783(19)
B(7)-B(8)	1.82(2)	B(8)-B(9)	1.784(19)
B(8)-B(12)	1.80(2)	B(9)-B(10)	1.76(2)
B(9)-B(12)	1.78(2)	B(10)-B(11)	1.78(2)
B(10)-B(12)	1.79(2)	B(11)-B(12)	1.78(2)
W(1)-O(1)	1.720(8)	W(1)-O(13)	1.855(7)
W(1)-O(12)	1.878(8)	W(1)-O(4a) ^(a)	1.937(8)
W(1)-O(5b) ^(a)	1.984(8)	W(1)-O(17)	2.332(7)
W(2)-O(2b)	1.711(7)	W(2)-O(24)	1.870(8)
W(2)-O(23)	1.912(7)	W(2)-O(2a)	1.917(7)
W(2)-O(12)	1.978(7)	W(2)-O(123)	2.304(8)
W(3)-O(3b)	1.718(7)	W(3)-O(35)	1.832(8)
W(3)-O(3a)	1.910(8)	W(3)-O(23)	1.923(8)
W(3)-O(13)	2.018(7)	W(3)-O(123)	2.260(7)
O(3a)-W(4) ^(a)	1.918(7)	W(4)-O(4b)	1.707(8)
W(4)-O(45)	1.913(7)	W(4)-O(3a) ^(a)	1.917(7)
W(4)-O(4a)	1.924(8)	W(4)-O(24)	1.936(8)
W(4)-O(123) ^(a)	2.353(8)	W(5)-O(5a)	1.708(7)
W(5)-O(5b)	1.872(8)	W(5)-O(45)	1.915(7)
W(5)-O(2a) ^(a)	1.928(8)	W(5)-O(35)	1.990(8)
W(5)-O(123) ^(a)	2.342(7)	N(1s)-C(1s)	1.15(2)
C(1s)-C(2s)	1.46(2)	C(3s)-O(1s)	1.428(17)
C(3s)-C(4s)	1.50(2)	O(1s)-C(5s)	1.464(18)
C(5s)-C(6s)	1.47(2)	N(7s)-C(12s)	1.323(17)
N(7s)-C(8s)	1.330(18)	C(8s)-C(9s)	1.37(2)
C(9s)-C(10s)	1.37(2)	C(10s)-C(11s)	1.36(2)
C(11s)-C(12s)	1.372(18)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $-x, 2-y, -z$

Table 6. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

C(11)-C(1)-C(2)	116.4(9)	C(11)-C(1)-B(5)	125.0(9)
C(2)-C(1)-B(5)	109.8(9)	C(11)-C(1)-B(4)	121.9(9)
C(2)-C(1)-B(4)	109.2(9)	B(5)-C(1)-B(4)	63.6(9)
C(11)-C(1)-B(6)	118.8(9)	C(2)-C(1)-B(6)	60.6(7)
B(5)-C(1)-B(6)	62.1(8)	B(4)-C(1)-B(6)	114.0(10)
C(11)-C(1)-B(3)	113.6(9)	C(2)-C(1)-B(3)	60.6(7)
B(5)-C(1)-B(3)	114.2(10)	B(4)-C(1)-B(3)	61.7(8)
B(6)-C(1)-B(3)	113.2(9)	N(11)-C(11)-C(1)	114.1(9)
C(1)-C(2)-B(8)	112.5(9)	C(1)-C(2)-B(6)	61.8(7)
B(8)-C(2)-B(6)	115.9(9)	C(1)-C(2)-B(3)	62.2(7)
B(8)-C(2)-B(3)	62.5(8)	B(6)-C(2)-B(3)	115.5(9)
C(1)-C(2)-B(7)	111.8(9)	B(8)-C(2)-B(7)	64.3(8)
B(6)-C(2)-B(7)	62.1(7)	B(3)-C(2)-B(7)	115.8(9)
C(2)-B(3)-C(1)	57.2(6)	C(2)-B(3)-B(4)	104.1(9)
C(1)-B(3)-B(4)	58.6(7)	C(2)-B(3)-B(8)	58.4(7)
C(1)-B(3)-B(8)	105.2(9)	B(4)-B(3)-B(8)	108.1(10)
C(2)-B(3)-B(9)	103.9(10)	C(1)-B(3)-B(9)	104.6(10)
B(4)-B(3)-B(9)	59.8(8)	B(8)-B(3)-B(9)	60.1(8)
C(1)-B(4)-B(3)	59.8(7)	C(1)-B(4)-B(9)	106.4(10)
B(3)-B(4)-B(9)	61.0(8)	C(1)-B(4)-B(10)	105.3(10)
B(3)-B(4)-B(10)	108.5(10)	B(9)-B(4)-B(10)	59.4(9)
C(1)-B(4)-B(5)	57.8(7)	B(3)-B(4)-B(5)	108.0(9)
B(9)-B(4)-B(5)	108.0(10)	B(10)-B(4)-B(5)	60.6(9)
C(1)-B(5)-B(6)	59.6(7)	C(1)-B(5)-B(11)	106.4(9)
B(6)-B(5)-B(11)	60.9(8)	C(1)-B(5)-B(4)	58.6(7)
B(6)-B(5)-B(4)	107.9(10)	B(11)-B(5)-B(4)	107.2(11)
C(1)-B(5)-B(10)	104.8(10)	B(6)-B(5)-B(10)	108.0(10)
B(11)-B(5)-B(10)	59.5(9)	B(4)-B(5)-B(10)	59.2(9)
C(2)-B(6)-C(1)	57.6(7)	C(2)-B(6)-B(5)	104.3(10)
C(1)-B(6)-B(5)	58.3(7)	C(2)-B(6)-B(7)	59.7(7)
C(1)-B(6)-B(7)	106.5(9)	B(5)-B(6)-B(7)	108.3(10)
C(2)-B(6)-B(11)	104.3(10)	C(1)-B(6)-B(11)	104.8(10)
B(5)-B(6)-B(11)	60.2(8)	B(7)-B(6)-B(11)	59.4(8)
C(2)-B(7)-B(6)	58.3(7)	C(2)-B(7)-B(11)	104.6(9)
B(6)-B(7)-B(11)	61.2(8)	C(2)-B(7)-B(12)	103.7(9)
B(6)-B(7)-B(12)	108.9(10)	B(11)-B(7)-B(12)	60.1(8)
C(2)-B(7)-B(8)	57.1(7)	B(6)-B(7)-B(8)	106.7(10)
B(11)-B(7)-B(8)	107.5(10)	B(12)-B(7)-B(8)	59.9(8)
C(2)-B(8)-B(3)	59.0(7)	C(2)-B(8)-B(9)	104.8(9)
B(3)-B(8)-B(9)	60.7(8)	C(2)-B(8)-B(12)	104.1(10)
B(3)-B(8)-B(12)	108.6(10)	B(9)-B(8)-B(12)	59.7(8)
C(2)-B(8)-B(7)	58.6(7)	B(3)-B(8)-B(7)	108.2(10)
B(9)-B(8)-B(7)	106.9(10)	B(12)-B(8)-B(7)	59.0(8)

Table 6. (continued)

B(10)-B(9)-B(4)	60.3(9)	B(10)-B(9)-B(8)	108.6(11)
B(4)-B(9)-B(8)	106.9(10)	B(10)-B(9)-B(12)	60.7(9)
B(4)-B(9)-B(12)	108.6(11)	B(8)-B(9)-B(12)	60.6(8)
B(10)-B(9)-B(3)	107.9(10)	B(4)-B(9)-B(3)	59.3(8)
B(8)-B(9)-B(3)	59.2(8)	B(12)-B(9)-B(3)	108.0(10)
B(9)-B(10)-B(4)	60.3(9)	B(9)-B(10)-B(11)	108.5(10)
B(4)-B(10)-B(11)	108.4(10)	B(9)-B(10)-B(12)	60.3(8)
B(4)-B(10)-B(12)	108.2(10)	B(11)-B(10)-B(12)	59.8(8)
B(9)-B(10)-B(5)	108.5(10)	B(4)-B(10)-B(5)	60.3(9)
B(11)-B(10)-B(5)	59.9(9)	B(12)-B(10)-B(5)	107.6(10)
B(7)-B(11)-B(10)	108.4(10)	B(7)-B(11)-B(12)	60.4(8)
B(10)-B(11)-B(12)	60.5(8)	B(7)-B(11)-B(5)	107.3(10)
B(10)-B(11)-B(5)	60.7(8)	B(12)-B(11)-B(5)	108.8(10)
B(7)-B(11)-B(6)	59.4(8)	B(10)-B(11)-B(6)	107.4(10)
B(12)-B(11)-B(6)	107.6(10)	B(5)-B(11)-B(6)	58.9(7)
B(11)-B(12)-B(7)	59.5(8)	B(11)-B(12)-B(9)	107.4(10)
B(7)-B(12)-B(9)	108.5(10)	B(11)-B(12)-B(10)	59.8(8)
B(7)-B(12)-B(10)	107.2(10)	B(9)-B(12)-B(10)	58.9(8)
B(11)-B(12)-B(8)	108.0(10)	B(7)-B(12)-B(8)	61.1(8)
B(9)-B(12)-B(8)	59.7(8)	B(10)-B(12)-B(8)	106.5(10)
O(1)-W(1)-O(13)	102.9(3)	O(1)-W(1)-O(12)	105.0(3)
O(13)-W(1)-O(12)	90.8(3)	O(1)-W(1)-O(4a) ^(a)	103.1(3)
O(13)-W(1)-O(4a) ^(a)	88.2(3)	O(12)-W(1)-O(4a) ^(a)	151.4(3)
O(1)-W(1)-O(5b) ^(a)	104.1(3)	O(13)-W(1)-O(5b) ^(a)	152.9(3)
O(12)-W(1)-O(5b) ^(a)	84.8(3)	O(4a) ^(a) -W(1)-O(5b) ^(a)	83.2(3)
O(1)-W(1)-O(123)	179.1(3)	O(13)-W(1)-O(123)	77.0(3)
O(12)-W(1)-O(123)	75.9(3)	O(4a) ^(a) -W(1)-O(123)	76.0(3)
O(5b) ^(a) -W(1)-O(123)	76.0(3)	O(2b)-W(2)-O(24)	100.0(3)
O(2b)-W(2)-O(23)	104.1(4)	O(24)-W(2)-O(23)	90.4(3)
O(2b)-W(2)-O(2a)	103.0(3)	O(24)-W(2)-O(2a)	90.0(3)
O(23)-W(2)-O(2a)	152.5(3)	O(2b)-W(2)-O(12)	95.2(3)
O(24)-W(2)-O(12)	164.9(3)	O(23)-W(2)-O(12)	86.6(3)
O(2a)-W(2)-O(12)	85.9(3)	O(2b)-W(2)-O(123)	169.9(3)
O(24)-W(2)-O(123)	90.1(3)	O(23)-W(2)-O(123)	75.4(3)
O(2a)-W(2)-O(123)	77.1(3)	O(12)-W(2)-O(123)	74.8(3)
W(2)-O(2a)-W(5) ^(a)	117.1(4)	O(3b)-W(3)-O(35)	100.4(3)
O(3b)-W(3)-O(3a)	102.1(3)	O(35)-W(3)-O(3a)	92.7(3)
O(3b)-W(3)-O(23)	103.0(3)	O(35)-W(3)-O(23)	91.1(3)
O(3a)-W(3)-O(23)	153.5(3)	O(3b)-W(3)-O(13)	92.3(3)
O(35)-W(3)-O(13)	167.2(3)	O(3a)-W(3)-O(13)	85.6(3)
O(23)-W(3)-O(13)	84.9(3)	O(3b)-W(3)-O(123)	168.0(3)
O(35)-W(3)-O(123)	91.6(3)	O(3a)-W(3)-O(123)	77.4(3)
O(23)-W(3)-O(123)	76.3(3)	O(13)-W(3)-O(123)	75.7(3)
W(3)-O(3a)-W(4) ^(a)	117.4(4)	O(4b)-W(4)-O(45)	104.3(3)
O(4b)-W(4)-O(3a) ^(a)	104.5(3)	O(45)-W(4)-O(3a) ^(a)	151.2(3)

Table 6. (continued)

O(4b)-W(4)-O(4a)	97.9(4)	O(45)-W(4)-O(4a)	88.3(3)
O(3a) ^(a) -W(4)-O(4a)	88.1(3)	O(4b)-W(4)-O(24)	98.9(3)
O(45)-W(4)-O(24)	88.2(3)	O(3a) ^(a) -W(4)-O(24)	87.1(3)
O(4a)-W(4)-O(24)	163.2(3)	O(4b)-W(4)-O(123) ^(a)	173.6(3)
O(45)-W(4)-O(123) ^(a)	76.5(3)	O(3a) ^(a) -W(4)-O(123) ^(a)	74.9(3)
O(4a)-W(4)-O(123) ^(a)	75.7(3)	O(24)-W(4)-O(123) ^(a)	87.5(3)
W(4)-O(4a)-W(1) ^(a)	118.2(4)	O(5a)-W(5)-O(5b)	100.2(3)
O(5a)-W(5)-O(45)	104.2(4)	O(5b)-W(5)-O(45)	90.3(3)
O(5a)-W(5)-O(2a) ^(a)	103.4(4)	O(5b)-W(5)-O(2a) ^(a)	90.8(3)
O(45)-W(5)-O(2a) ^(a)	151.8(3)	O(5a)-W(5)-O(35)	96.3(3)
O(5b)-W(5)-O(35)	163.5(3)	O(45)-W(5)-O(35)	85.4(3)
O(2a) ^(a) -W(5)-O(35)	85.7(3)	O(5a)-W(5)-O(123) ^(a)	177.8(3)
O(5b)-W(5)-O(123) ^(a)	77.8(3)	O(45)-W(5)-O(123) ^(a)	76.7(3)
O(2a) ^(a) -W(5)-O(123) ^(a)	75.9(3)	O(35)-W(5)-O(123) ^(a)	85.7(3)
W(5)-O(5b)-W(1) ^(a)	116.9(4)	W(1)-O(12)-W(2)	118.1(4)
W(1)-O(13)-W(3)	116.0(4)	W(3)-O(123)-W(2)	91.3(3)
W(3)-O(123)-W(1)	91.3(3)	W(2)-O(123)-W(1)	91.1(3)
W(3)-O(123)-W(5) ^(a)	178.6(4)	W(2)-O(123)-W(5) ^(a)	89.8(3)
W(1)-O(123)-W(5) ^(a)	89.4(2)	W(3)-O(123)-W(4) ^(a)	90.3(3)
W(2)-O(123)-W(4) ^(a)	178.1(3)	W(1)-O(123)-W(4) ^(a)	90.0(3)
W(5) ^(a) -O(123)-W(4) ^(a)	88.6(3)	W(2)-O(23)-W(3)	116.7(4)
W(2)-O(24)-W(4)	176.5(5)	W(3)-O(35)-W(5)	176.4(5)
W(4)-O(45)-W(5)	117.8(4)	N(1s)-C(1s)-C(2s)	178.8(19)
O(1s)-C(3s)-C(4s)	107.7(12)	C(3s)-O(1s)-C(5s)	110.9(11)
O(1s)-C(5s)-C(6s)	109.3(12)	C(12s)-N(7s)-C(8s)	121.1(12)
N(7s)-C(8s)-C(9s)	119.3(14)	C(10s)-C(9s)-C(8s)	120.8(14)
C(11s)-C(10s)-C(9s)	118.2(13)	C(10s)-C(11s)-C(12s)	119.5(14)
N(7s)-C(12s)-C(11s)	120.9(13)		

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) $-x, 2-y, -z$

Table 9. Hydrogen bonded distances (Å) and angles (°). Standard uncertainties are included in parentheses for values which do not involve constrained hydrogen atoms.

Atoms (D-H...A)	D-H	H...A	D...A	∠DHA
N(11)-H(11a)...O(1)	0.91	2.05	2.813(12)	140.5
N(11)-H(11a)...O(5a) ^(a)	0.91	2.38	2.915(12)	117.7
N(11)-H(11b)...O(3b) ^(b)	0.91	1.96	2.839(12)	160.5
N(11)-H(11c)...N(1s) ^(b)	0.91	2.02	2.874(16)	155.9
N(7s)-H(7s)...O(1s)	0.88	1.86	2.730(13)	167.1

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) +x, -1+y, +z

(b) -x, -1/2+y, 1/2-z

7. C₂B₁₀H₁₁CH₂NHCOC₆H₄-2-(OMe) (2)

Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) with standard uncertainties (s.u.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
C(1)	-3830(2)	3894.8(6)	7553.4(15)	177(3)
C(2)	-6257(2)	3845.5(6)	7100.1(15)	189(3)
B(3)	-5043(3)	4255.5(7)	6144.5(17)	204(4)
B(4)	-2795(3)	3882.0(7)	6174.3(17)	205(4)
B(5)	-2754(2)	3277.2(7)	7210.9(17)	196(3)
B(6)	-4959(2)	3271.7(7)	7846.7(17)	195(3)
B(7)	-6999(2)	3203.7(7)	6456.4(18)	218(4)
B(8)	-7045(3)	3806.6(7)	5408.5(17)	220(4)
B(9)	-4834(3)	3815.3(8)	4772.5(17)	221(4)
B(10)	-3415(3)	3206.1(7)	5430.7(17)	217(4)
B(11)	-4757(2)	2829.3(7)	6477.3(17)	210(4)
B(12)	-6049(3)	3161.0(8)	4957.1(18)	226(4)
C(13)	-2975(2)	4230.5(6)	8833.1(14)	197(3)
N(14)	-1970.8(18)	4747.3(5)	8612.4(12)	188(3)
C(15)	-2821(2)	5257.8(6)	8625.7(14)	179(3)
O(15)	-4561.0(15)	5316.3(4)	8736.8(11)	220(3)
C(16)	-1562(2)	5769.7(6)	8554.9(14)	179(3)
C(17)	17(2)	5804.8(6)	7878.2(14)	186(3)
C(18)	989(2)	6321.1(7)	7880.6(15)	219(3)
C(19)	456(2)	6789.9(6)	8541.0(16)	232(3)
C(20)	-1085(2)	6751.0(6)	9215.9(15)	229(3)
C(21)	-2097(2)	6246.3(6)	9204.9(15)	208(3)
C(22)	706(2)	5316.7(6)	7137.5(15)	215(3)
O(22)	1740.9(15)	4897.9(4)	8051.8(11)	226(3)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C(1)	169(7)	178(7)	188(7)	6(6)	45(6)	-2(5)
C(2)	174(7)	189(7)	204(7)	-4(6)	42(6)	-4(6)
B(3)	225(8)	206(8)	183(8)	18(7)	47(6)	14(7)
B(4)	216(8)	213(9)	198(8)	-4(7)	72(7)	-4(6)
B(5)	199(8)	185(8)	209(8)	-1(7)	55(6)	12(6)
B(6)	205(8)	166(8)	218(8)	2(7)	52(7)	-7(6)
B(7)	199(8)	211(9)	243(9)	-45(7)	48(7)	-19(6)
B(8)	227(9)	229(9)	192(8)	-20(7)	18(7)	17(7)
B(9)	240(9)	238(9)	185(8)	-10(7)	46(7)	14(7)
B(10)	231(8)	225(9)	204(8)	-27(7)	67(7)	8(7)
B(11)	208(8)	194(9)	233(8)	-30(7)	57(7)	-4(6)
B(12)	218(8)	235(9)	223(9)	-44(7)	41(7)	-1(7)
C(13)	222(7)	191(8)	180(7)	-2(6)	45(6)	-27(6)
N(14)	177(6)	183(6)	209(6)	-7(5)	53(5)	-17(5)
C(15)	183(7)	210(8)	141(7)	-12(6)	27(5)	-15(6)
O(15)	174(5)	235(6)	260(6)	-8(4)	66(4)	-11(4)
C(16)	174(7)	190(8)	164(7)	13(6)	16(5)	5(6)
C(17)	172(7)	207(8)	170(7)	11(6)	20(5)	1(6)
C(18)	205(8)	239(8)	215(8)	27(6)	53(6)	-13(6)
C(19)	241(8)	182(8)	261(8)	17(6)	31(6)	-29(6)
C(20)	246(8)	186(8)	242(8)	-13(6)	22(6)	28(6)
C(21)	195(7)	223(8)	206(7)	4(6)	41(6)	12(6)
C(22)	220(8)	223(8)	212(7)	2(6)	71(6)	-7(6)
O(22)	171(5)	207(6)	297(6)	-8(4)	44(4)	5(4)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^2$) with s.u.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(2)	-7229.	4069.	7686.	23.
H(3)	-5143.	4726.	6062.	24.
H(4)	-1398.	4108.	6101.	25.
H(5)	-1330.	3107.	7816.	24.
H(6)	-5002.	3105.	8871.	23.
H(7)	-8396.	2986.	6563.	26.
H(8)	-8475.	3983.	4826.	26.
H(9)	-4790.	3995.	3761.	26.
H(10)	-2438.	2984.	4848.	26.
H(11)	-4665.	2360.	6587.	25.
H(12)	-6807.	2909.	4063.	27.
H(13a)	-4067.	4324.	9288.	24.
H(13b)	-2029.	3987.	9450.	24.
H(14)	-763.	4727.	8464.	23.
H(18)	2043.	6352.	7418.	26.
H(19)	1145.	7136.	8530.	28.
H(20)	-1445.	7068.	9682.	27.
H(21)	-3175.	6223.	9648.	25.
H(22a)	-454.	5140.	6541.	26.
H(22b)	1595.	5459.	6566.	26.
H(22)	2906.	5007.	8360.	34.

Table 5. Interatomic distances (Å) with s.u.s in parentheses.

C(1)-C(13)	1.533(2)	C(1)-C(2)	1.646(2)
C(1)-B(4)	1.704(2)	C(1)-B(5)	1.712(2)
C(1)-B(3)	1.726(2)	C(1)-B(6)	1.727(2)
C(2)-B(8)	1.693(2)	C(2)-B(7)	1.694(2)
C(2)-B(3)	1.714(2)	C(2)-B(6)	1.717(2)
B(3)-B(9)	1.773(2)	B(3)-B(8)	1.780(2)
B(3)-B(4)	1.783(2)	B(4)-B(5)	1.777(2)
B(4)-B(9)	1.786(2)	B(4)-B(10)	1.787(2)
B(5)-B(6)	1.776(2)	B(5)-B(10)	1.778(2)
B(5)-B(11)	1.779(2)	B(6)-B(11)	1.773(2)
B(6)-B(7)	1.779(2)	B(7)-B(8)	1.780(2)
B(7)-B(11)	1.781(2)	B(7)-B(12)	1.785(2)
B(8)-B(12)	1.779(2)	B(8)-B(9)	1.780(2)
B(9)-B(12)	1.794(3)	B(9)-B(10)	1.795(2)
B(10)-B(12)	1.784(2)	B(10)-B(11)	1.791(2)
B(11)-B(12)	1.795(2)	C(13)-N(14)	1.4497(18)
N(14)-C(15)	1.3480(19)	C(15)-O(15)	1.2386(18)
C(15)-C(16)	1.505(2)	C(16)-C(21)	1.398(2)
C(16)-C(17)	1.410(2)	C(17)-C(18)	1.397(2)
C(17)-C(22)	1.513(2)	C(18)-C(19)	1.389(2)
C(19)-C(20)	1.387(2)	C(20)-C(21)	1.386(2)
C(22)-O(22)	1.4428(18)		

Table 6. Angles between interatomic vectors ($^{\circ}$) with s.u.s in parentheses.

C(13)-C(1)-C(2)	117.45(12)	C(13)-C(1)-B(4)	123.66(12)
C(2)-C(1)-B(4)	110.39(11)	C(13)-C(1)-B(5)	120.78(12)
C(2)-C(1)-B(5)	110.01(11)	B(4)-C(1)-B(5)	62.71(9)
C(13)-C(1)-B(3)	118.60(12)	C(2)-C(1)-B(3)	61.07(9)
B(4)-C(1)-B(3)	62.64(9)	B(5)-C(1)-B(3)	114.28(11)
C(13)-C(1)-B(6)	113.91(12)	C(2)-C(1)-B(6)	61.12(9)
B(4)-C(1)-B(6)	114.23(11)	B(5)-C(1)-B(6)	62.18(9)
B(3)-C(1)-B(6)	114.23(11)	C(1)-C(2)-B(8)	112.18(11)
C(1)-C(2)-B(7)	112.26(11)	B(8)-C(2)-B(7)	63.42(10)
C(1)-C(2)-B(3)	61.75(9)	B(8)-C(2)-B(3)	62.99(10)
B(7)-C(2)-B(3)	115.83(12)	C(1)-C(2)-B(6)	61.77(9)
B(8)-C(2)-B(6)	115.55(12)	B(7)-C(2)-B(6)	62.89(10)
B(3)-C(2)-B(6)	115.37(11)	C(2)-B(3)-C(1)	57.18(8)
C(2)-B(3)-B(9)	104.03(12)	C(1)-B(3)-B(9)	104.76(12)
C(2)-B(3)-B(8)	57.91(9)	C(1)-B(3)-B(8)	104.45(12)
B(9)-B(3)-B(8)	60.12(10)	C(2)-B(3)-B(4)	103.71(11)
C(1)-B(3)-B(4)	58.07(9)	B(9)-B(3)-B(4)	60.32(10)
B(8)-B(3)-B(4)	107.81(12)	C(1)-B(4)-B(5)	58.88(9)
C(1)-B(4)-B(3)	59.29(9)	B(5)-B(4)-B(3)	108.42(12)
C(1)-B(4)-B(9)	105.10(11)	B(5)-B(4)-B(9)	108.19(12)
B(3)-B(4)-B(9)	59.56(9)	C(1)-B(4)-B(10)	105.04(12)
B(5)-B(4)-B(10)	59.86(10)	B(3)-B(4)-B(10)	108.01(12)
B(9)-B(4)-B(10)	60.32(10)	C(1)-B(5)-B(6)	59.33(9)
C(1)-B(5)-B(4)	58.41(9)	B(6)-B(5)-B(4)	108.34(12)
C(1)-B(5)-B(10)	105.03(12)	B(6)-B(5)-B(10)	108.33(12)
B(4)-B(5)-B(10)	60.32(10)	C(1)-B(5)-B(11)	105.34(11)
B(6)-B(5)-B(11)	59.83(9)	B(4)-B(5)-B(11)	108.72(12)
B(10)-B(5)-B(11)	60.48(10)	C(2)-B(6)-C(1)	57.11(8)
C(2)-B(6)-B(11)	104.08(12)	C(1)-B(6)-B(11)	104.96(12)
C(2)-B(6)-B(5)	103.95(11)	C(1)-B(6)-B(5)	58.50(9)
B(11)-B(6)-B(5)	60.16(9)	C(2)-B(6)-B(7)	57.94(9)
C(1)-B(6)-B(7)	104.55(11)	B(11)-B(6)-B(7)	60.20(9)
B(5)-B(6)-B(7)	107.89(12)	C(2)-B(7)-B(6)	59.17(9)
C(2)-B(7)-B(8)	58.26(9)	B(6)-B(7)-B(8)	108.26(12)
C(2)-B(7)-B(11)	104.66(11)	B(6)-B(7)-B(11)	59.72(9)
B(8)-B(7)-B(11)	108.27(12)	C(2)-B(7)-B(12)	104.19(12)
B(6)-B(7)-B(12)	108.14(12)	B(8)-B(7)-B(12)	59.86(10)
B(11)-B(7)-B(12)	60.42(10)	C(2)-B(8)-B(12)	104.50(12)
C(2)-B(8)-B(7)	58.32(9)	B(12)-B(8)-B(7)	60.21(10)
C(2)-B(8)-B(3)	59.09(9)	B(12)-B(8)-B(3)	108.40(12)
B(7)-B(8)-B(3)	108.40(12)	C(2)-B(8)-B(9)	104.62(12)
B(12)-B(8)-B(9)	60.54(10)	B(7)-B(8)-B(9)	108.59(12)
B(3)-B(8)-B(9)	59.73(10)	B(3)-B(9)-B(8)	60.15(9)

Table 6. (continued)

B(3)-B(9)-B(4)	60.12(9)	B(8)-B(9)-B(4)	107.68(12)
B(3)-B(9)-B(12)	108.07(12)	B(8)-B(9)-B(12)	59.71(10)
B(4)-B(9)-B(12)	107.50(12)	B(3)-B(9)-B(10)	108.08(12)
B(8)-B(9)-B(10)	107.34(12)	B(4)-B(9)-B(10)	59.85(10)
B(12)-B(9)-B(10)	59.62(10)	B(5)-B(10)-B(12)	107.93(12)
B(5)-B(10)-B(4)	59.81(9)	B(12)-B(10)-B(4)	107.92(12)
B(5)-B(10)-B(11)	59.77(9)	B(12)-B(10)-B(11)	60.26(10)
B(4)-B(10)-B(11)	107.76(12)	B(5)-B(10)-B(9)	107.77(12)
B(12)-B(10)-B(9)	60.16(10)	B(4)-B(10)-B(9)	59.84(10)
B(11)-B(10)-B(9)	108.25(12)	B(6)-B(11)-B(5)	60.01(9)
B(6)-B(11)-B(7)	60.08(9)	B(5)-B(11)-B(7)	107.68(12)
B(6)-B(11)-B(10)	107.90(12)	B(5)-B(11)-B(10)	59.75(9)
B(7)-B(11)-B(10)	107.55(12)	B(6)-B(11)-B(12)	107.99(12)
B(5)-B(11)-B(12)	107.44(12)	B(7)-B(11)-B(12)	59.89(10)
B(10)-B(11)-B(12)	59.67(10)	B(8)-B(12)-B(10)	107.85(12)
B(8)-B(12)-B(7)	59.93(10)	B(10)-B(12)-B(7)	107.71(12)
B(8)-B(12)-B(9)	59.75(10)	B(10)-B(12)-B(9)	60.22(10)
B(7)-B(12)-B(9)	107.74(12)	B(8)-B(12)-B(11)	107.74(12)
B(10)-B(12)-B(11)	60.07(10)	B(7)-B(12)-B(11)	59.68(10)
B(9)-B(12)-B(11)	108.15(12)	N(14)-C(13)-C(1)	114.79(12)
C(15)-N(14)-C(13)	122.37(12)	O(15)-C(15)-N(14)	122.34(13)
O(15)-C(15)-C(16)	119.72(13)	N(14)-C(15)-C(16)	117.90(12)
C(21)-C(16)-C(17)	119.46(13)	C(21)-C(16)-C(15)	114.67(13)
C(17)-C(16)-C(15)	125.85(13)	C(18)-C(17)-C(16)	118.18(13)
C(18)-C(17)-C(22)	118.08(13)	C(16)-C(17)-C(22)	123.74(13)
C(19)-C(18)-C(17)	121.80(14)	C(20)-C(19)-C(18)	119.72(14)
C(21)-C(20)-C(19)	119.49(14)	C(20)-C(21)-C(16)	121.33(14)
O(22)-C(22)-C(17)	111.85(12)		

Table 9. Hydrogen bonded distances (Å) and angles (°). Standard uncertainties are included in parentheses for values which do not involve constrained hydrogen atoms.

Atoms (D-H...A)	D-H	H...A	D...A	∠DHA
N(14)-H(14)...O(22)	0.88	1.91	2.7651(16)	164.3
O(22)-H(22)...O(15) ^(a)	0.84	1.86	2.6914(15)	169.3

Key giving operations for symmetry related atoms:

(a) 1+x, +y, +z