Table 1. Crystal data and structure refinement for pgamat43.

Identification code pgamat43

Empirical formula C42 H91 Br3 Mg3 O9 Zn2

Formula weight 1183.55

Temperature 123(2) K

Wavelength 0.71069 Å

Crystal system monoclinic

Space group P 21/n

Unit cell dimensions a = 11.9374(2) Å = 90°.

b = 19.2841(3) Å = 101.776(2)°.

c = 24.3668(4) Å  = 90°.

Volume 5491.23(15) Å3

Z 4

Density (calculated) 1.432 Mg/m3

Absorption coefficient 3.136 mm-1

F(000) 2464

Crystal size 0.2 x 0.1 x 0.06 mm3

Theta range for data collection 2.76 to 26.00°.

Index ranges -11<=h<=14, -22<=k<=23, -28<=l<=30

Reflections collected 38318

Independent reflections 10771 [R(int) = 0.0388]

Completeness to theta = 26.00° 99.9 %

Refinement method Full-matrix least-squares on F2

Data / restraints / parameters 10771 / 34 / 590

Goodness-of-fit on F2 1.031

Final R indices [I>2sigma(I)] R1 = 0.0484, wR2 = 0.1052

R indices (all data) R1 = 0.0846, wR2 = 0.1147

Largest diff. peak and hole 0.823 and -0.506 e.Å-3

Table 2. Atomic coordinates ( x 104) and equivalent isotropic displacement parameters (Å2x 103)

for pgamat43. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

C(14) 5414(11) 7346(5) 5520(5) 41(4)

C(15) 5929(13) 6741(6) 5881(5) 38(4)

C(13) 6196(11) 7944(5) 5735(5) 23(3)

C(16) 6658(12) 7055(6) 6404(5) 23(4)

C(18) 3727(12) 7116(12) 7397(6) 49(4)

C(22) 11950(12) 8934(8) 7516(9) 31(5)

C(23) 11990(16) 9622(10) 7801(12) 50(6)

Zn(1) 2(5) 6695(4) 4973(3) 41(1)

Zn(2) 1824(3) 6840(2) 5781(2) 41(1)

C(29) -270(11) 6280(7) 5716(4) 59(3)

C(30) -836(12) 5593(8) 5593(7) 72(5)

C(36) 2396(11) 5351(4) 5701(4) 56(3)

C(33) -1225(11) 6914(7) 4303(6) 96(5)

C(34) -2398(12) 6655(10) 4211(7) 145

C(35) 2868(11) 6037(4) 5957(5) 72(4)

C(14A) 6278(9) 7391(4) 5436(4) 47(3)

C(13A) 5745(9) 7896(4) 5788(3) 28(2)

C(15A) 6546(9) 6765(4) 5816(3) 34(2)

C(16A) 7018(9) 7113(4) 6371(3) 22(2)

C(18A) 4080(20) 6821(11) 7296(9) 29(6)

C(22A) 11860(9) 9097(6) 7306(7) 47(3)

C(23A) 11794(9) 9793(5) 7573(6) 35(3)

C(36A) 2890(30) 5600(20) 5743(19) 145(18)

C(33A) -1646(16) 6992(13) 4003(10) 84(8)

C(34A) -2592 6997 4334 109(10)

C(35A) 1920(30) 5859(14) 6008(12) 97(9)

Zn(1A) -282(11) 6800(8) 4882(6) 55(2)

Zn(2A) 1369(9) 6772(4) 5777(3) 52(2)

C(29A) -880(20) 6616(11) 5611(9) 54(6)

C(30A) -1410(20) 5873(16) 5590(16) 78(10)

Mg(1) 6334(1) 9959(1) 6995(1) 19(1)

Mg(2) 6412(1) 8428(1) 7043(1) 21(1)

Mg(3) 8374(1) 9242(1) 7657(1) 18(1)

Br(1) 4627(1) 9148(1) 6494(1) 34(1)

Br(2) 8320(1) 7861(1) 7632(1) 23(1)

Br(3) 8174(1) 10624(1) 7559(1) 23(1)

O(1) 7473(2) 9208(1) 6831(1) 18(1)

O(2) 6625(2) 9221(1) 7640(1) 18(1)

O(3) 6205(3) 10585(1) 6285(1) 24(1)

O(4) 5225(2) 10659(2) 7269(1) 25(1)

O(5) 6398(3) 7786(1) 6355(1) 30(1)

O(6) 5391(2) 7708(2) 7350(1) 28(1)

O(7) 10085(2) 9242(2) 7603(1) 24(1)

O(8) 8905(3) 9299(2) 8535(1) 25(1)

C(1) 7969(4) 9153(2) 6345(2) 25(1)

C(2) 8721(4) 9764(3) 6275(2) 33(1)

C(3) 6219(4) 9245(2) 8155(2) 24(1)

C(4) 4932(4) 9225(2) 8068(2) 33(1)

C(5) 6453(4) 11323(2) 6319(2) 30(1)

C(6) 5680(5) 11624(3) 5810(2) 43(1)

C(7) 5707(6) 11071(3) 5374(2) 55(2)

C(8) 5782(4) 10405(2) 5695(2) 32(1)

C(9) 4118(4) 10839(2) 6923(2) 32(1)

C(10) 3900(4) 11573(3) 7102(2) 37(1)

C(11) 4372(4) 11545(3) 7729(2) 39(1)

C(12) 5438(4) 11099(2) 7773(2) 30(1)

C(17) 4367(5) 7424(3) 7007(3) 52(2)

C(19) 4586(5) 6912(3) 7900(3) 46(2)

C(20) 5612(4) 7368(2) 7893(2) 34(1)

C(21) 10734(4) 8744(3) 7341(2) 33(1)

C(24) 10894(4) 9722(3) 7919(2) 39(1)

C(25) 9253(6) 8705(3) 8897(2) 50(2)

C(26) 9466(6) 8961(3) 9488(2) 51(2)

C(27) 8745(5) 9619(3) 9435(2) 46(2)

C(28) 8891(5) 9898(3) 8889(2) 37(1)

C(31) 1460(6) 6887(3) 4717(3) 68(2)

C(37) 1536(5) 7785(3) 6019(2) 43(1)

C(38) 416(5) 8146(3) 5773(3) 67(2)

C(32) 1514(7) 7600(4) 4467(3) 83(2)

O(9) 2268(7) 5449(4) 9808(3) 52(2)

C(39) 2839(13) 4842(6) 9644(6) 63(4)

C(40) 3361(12) 5084(5) 9169(5) 59(3)

C(41) 3608(11) 5844(5) 9280(6) 63(4)

C(42) 2885(9) 6060(5) 9695(5) 44(3)

O(9A) 2106(10) 5671(6) 9657(5) 55(3)

C(41A) 3910(20) 5953(11) 9439(13) 108(10)

C(42A) 2842(17) 6240(10) 9581(11) 87(8)

C(39A) 2680(14) 5016(7) 9635(7) 34(4)

C(40A) 3650(20) 5200(12) 9352(11) 115(11)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for pgamat43.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

C(14)-C(13) 1.508(9)

C(14)-C(15) 1.514(9)

C(14)-H(14A) 0.9900

C(14)-H(14B) 0.9900

C(15)-C(16) 1.516(9)

C(15)-H(15A) 0.9900

C(15)-H(15B) 0.9900

C(13)-O(5) 1.511(12)

C(13)-H(13A) 0.9900

C(13)-H(13B) 0.9900

C(16)-O(5) 1.444(13)

C(16)-H(16A) 0.9900

C(16)-H(16B) 0.9900

C(18)-C(17) 1.461(12)

C(18)-C(19) 1.482(14)

C(18)-H(18A) 0.9900

C(18)-H(18B) 0.9900

C(22)-C(21) 1.473(14)

C(22)-C(23) 1.495(9)

C(22)-H(22A) 0.9900

C(22)-H(22B) 0.9900

C(23)-C(24) 1.409(16)

C(23)-H(23A) 0.9900

C(23)-H(23B) 0.9900

Zn(1)-C(31) 1.999(9)

Zn(1)-C(33) 2.002(15)

Zn(1)-C(29) 2.065(12)

Zn(1)-Zn(2) 2.635(6)

Zn(2)-C(37) 1.965(6)

Zn(2)-C(35) 1.979(10)

Zn(2)-C(31) 2.541(7)

C(29)-C(30) 1.489(18)

C(29)-H(29A) 0.9900

C(29)-H(29B) 0.9900

C(30)-H(30A) 0.9800

C(30)-H(30B) 0.9800

C(30)-H(30C) 0.9800

C(36)-C(35) 1.520(9)

C(36)-H(36A) 0.9800

C(36)-H(36B) 0.9800

C(36)-H(36C) 0.9800

C(33)-C(34) 1.461(9)

C(33)-H(33A) 0.9900

C(33)-H(33B) 0.9900

C(34)-H(34A) 0.9800

C(34)-H(34B) 0.9800

C(34)-H(34C) 0.9800

C(35)-H(35A) 0.9900

C(35)-H(35B) 0.9900

C(14A)-C(15A) 1.515(8)

C(14A)-C(13A) 1.520(8)

C(14A)-H(14C) 0.9900

C(14A)-H(14D) 0.9900

C(13A)-O(5) 1.457(9)

C(13A)-H(13C) 0.9900

C(13A)-H(13D) 0.9900

C(15A)-C(16A) 1.510(8)

C(15A)-H(15C) 0.9900

C(15A)-H(15D) 0.9900

C(16A)-O(5) 1.491(9)

C(16A)-H(16C) 0.9900

C(16A)-H(16D) 0.9900

C(18A)-C(17) 1.435(18)

C(18A)-C(19) 1.48(2)

C(18A)-H(18C) 0.9900

C(18A)-H(18D) 0.9900

C(22A)-C(23A) 1.502(8)

C(22A)-C(21) 1.525(11)

C(22A)-H(22C) 0.9900

C(22A)-H(22D) 0.9900

C(23A)-C(24) 1.502(11)

C(23A)-H(23C) 0.9900

C(23A)-H(23D) 0.9900

C(36A)-C(35A) 1.516(10)

C(36A)-H(36D) 0.9800

C(36A)-H(36E) 0.9800

C(36A)-H(36F) 0.9800

C(33A)-C(34A) 1.515(5)

C(33A)-Zn(1A) 2.44(3)

C(33A)-H(33C) 0.9900

C(33A)-H(33D) 0.9900

C(34A)-H(34D) 0.9800

C(34A)-H(34E) 0.9800

C(34A)-H(34F) 0.9800

C(35A)-Zn(2A) 1.93(3)

C(35A)-H(35C) 0.9900

C(35A)-H(35D) 0.9900

Zn(1A)-C(29A) 2.07(2)

Zn(1A)-C(31) 2.204(15)

Zn(1A)-Zn(2A) 2.625(12)

Zn(2A)-C(37) 2.038(9)

C(29A)-C(30A) 1.57(4)

C(29A)-H(29C) 0.9900

C(29A)-H(29D) 0.9900

C(30A)-H(30D) 0.9800

C(30A)-H(30E) 0.9800

C(30A)-H(30F) 0.9800

Mg(1)-O(1) 2.080(3)

Mg(1)-O(3) 2.088(3)

Mg(1)-O(4) 2.093(3)

Mg(1)-O(2) 2.097(3)

Mg(1)-Br(1) 2.6585(15)

Mg(1)-Br(3) 2.6699(15)

Mg(1)-Mg(2) 2.9557(19)

Mg(1)-Mg(3) 2.973(2)

Mg(2)-O(5) 2.080(3)

Mg(2)-O(6) 2.084(3)

Mg(2)-O(2) 2.090(3)

Mg(2)-O(1) 2.098(3)

Mg(2)-Br(1) 2.6634(15)

Mg(2)-Br(2) 2.6670(15)

Mg(2)-Mg(3) 2.959(2)

Mg(3)-O(7) 2.074(3)

Mg(3)-O(1) 2.079(3)

Mg(3)-O(2) 2.080(3)

Mg(3)-O(8) 2.107(3)

Mg(3)-Br(2) 2.6633(14)

Mg(3)-Br(3) 2.6823(14)

O(1)-C(1) 1.432(5)

O(2)-C(3) 1.435(5)

O(3)-C(5) 1.452(5)

O(3)-C(8) 1.465(5)

O(4)-C(9) 1.459(5)

O(4)-C(12) 1.472(5)

O(6)-C(17) 1.440(6)

O(6)-C(20) 1.454(5)

O(7)-C(24) 1.441(5)

O(7)-C(21) 1.460(5)

O(8)-C(28) 1.444(5)

O(8)-C(25) 1.454(6)

C(1)-C(2) 1.513(6)

C(1)-H(1A) 0.9900

C(1)-H(1B) 0.9900

C(2)-H(2A) 0.9800

C(2)-H(2B) 0.9800

C(2)-H(2C) 0.9800

C(3)-C(4) 1.508(6)

C(3)-H(3A) 0.9900

C(3)-H(3B) 0.9900

C(4)-H(4A) 0.9800

C(4)-H(4B) 0.9800

C(4)-H(4C) 0.9800

C(5)-C(6) 1.504(7)

C(5)-H(5A) 0.9900

C(5)-H(5B) 0.9900

C(6)-C(7) 1.509(7)

C(6)-H(6A) 0.9900

C(6)-H(6B) 0.9900

C(7)-C(8) 1.497(7)

C(7)-H(7A) 0.9900

C(7)-H(7B) 0.9900

C(8)-H(8A) 0.9900

C(8)-H(8B) 0.9900

C(9)-C(10) 1.519(6)

C(9)-H(9A) 0.9900

C(9)-H(9B) 0.9900

C(10)-C(11) 1.517(7)

C(10)-H(10A) 0.9900

C(10)-H(10B) 0.9900

C(11)-C(12) 1.521(6)

C(11)-H(11A) 0.9900

C(11)-H(11B) 0.9900

C(12)-H(12A) 0.9900

C(12)-H(12B) 0.9900

C(17)-H(17A) 0.9900

C(17)-H(17B) 0.9900

C(19)-C(20) 1.509(7)

C(19)-H(19A) 0.9900

C(19)-H(19B) 0.9900

C(20)-H(20A) 0.9900

C(20)-H(20B) 0.9900

C(21)-H(21A) 0.9900

C(21)-H(21B) 0.9900

C(24)-H(24A) 0.9900

C(24)-H(24B) 0.9900

C(25)-C(26) 1.495(7)

C(25)-H(25A) 0.9900

C(25)-H(25B) 0.9900

C(26)-C(27) 1.524(8)

C(26)-H(26A) 0.9900

C(26)-H(26B) 0.9900

C(27)-C(28) 1.477(7)

C(27)-H(27A) 0.9900

C(27)-H(27B) 0.9900

C(28)-H(28A) 0.9900

C(28)-H(28B) 0.9900

C(31)-C(32) 1.511(9)

C(31)-H(31A) 0.9900

C(31)-H(31B) 0.9900

C(37)-C(38) 1.518(7)

C(37)-H(37A) 0.9900

C(37)-H(37B) 0.9900

C(38)-H(38A) 0.9800

C(38)-H(38B) 0.9800

C(38)-H(38C) 0.9800

C(32)-H(32A) 0.9800

C(32)-H(32B) 0.9800

C(32)-H(32C) 0.9800

O(9)-C(42) 1.446(8)

O(9)-C(39) 1.451(8)

C(39)-C(40) 1.498(9)

C(39)-H(39A) 0.9900

C(39)-H(39B) 0.9900

C(40)-C(41) 1.509(9)

C(40)-H(40A) 0.9900

C(40)-H(40B) 0.9900

C(41)-C(42) 1.517(8)

C(41)-H(41A) 0.9900

C(41)-H(41B) 0.9900

C(42)-H(42A) 0.9900

C(42)-H(42B) 0.9900

O(9A)-C(42A) 1.441(10)

O(9A)-C(39A) 1.443(9)

C(41A)-C(40A) 1.489(10)

C(41A)-C(42A) 1.492(10)

C(41A)-H(41C) 0.9900

C(41A)-H(41D) 0.9900

C(42A)-H(42C) 0.9900

C(42A)-H(42D) 0.9900

C(39A)-C(40A) 1.504(10)

C(39A)-H(39C) 0.9900

C(39A)-H(39D) 0.9900

C(40A)-H(40C) 0.9900

C(40A)-H(40D) 0.9900

C(13)-C(14)-C(15) 103.7(9)

C(13)-C(14)-H(14A) 111.0

C(15)-C(14)-H(14A) 111.0

C(13)-C(14)-H(14B) 111.0

C(15)-C(14)-H(14B) 111.0

H(14A)-C(14)-H(14B) 109.0

C(14)-C(15)-C(16) 106.0(9)

C(14)-C(15)-H(15A) 110.5

C(16)-C(15)-H(15A) 110.5

C(14)-C(15)-H(15B) 110.5

C(16)-C(15)-H(15B) 110.5

H(15A)-C(15)-H(15B) 108.7

C(14)-C(13)-O(5) 98.9(8)

C(14)-C(13)-H(13A) 112.0

O(5)-C(13)-H(13A) 112.0

C(14)-C(13)-H(13B) 112.0

O(5)-C(13)-H(13B) 112.0

H(13A)-C(13)-H(13B) 109.7

O(5)-C(16)-C(15) 104.1(8)

O(5)-C(16)-H(16A) 110.9

C(15)-C(16)-H(16A) 110.9

O(5)-C(16)-H(16B) 110.9

C(15)-C(16)-H(16B) 110.9

H(16A)-C(16)-H(16B) 109.0

C(17)-C(18)-C(19) 106.2(9)

C(17)-C(18)-H(18A) 110.5

C(19)-C(18)-H(18A) 110.5

C(17)-C(18)-H(18B) 110.5

C(19)-C(18)-H(18B) 110.5

H(18A)-C(18)-H(18B) 108.7

C(21)-C(22)-C(23) 106.9(11)

C(21)-C(22)-H(22A) 110.3

C(23)-C(22)-H(22A) 110.3

C(21)-C(22)-H(22B) 110.3

C(23)-C(22)-H(22B) 110.3

H(22A)-C(22)-H(22B) 108.6

C(24)-C(23)-C(22) 105.9(11)

C(24)-C(23)-H(23A) 110.6

C(22)-C(23)-H(23A) 110.6

C(24)-C(23)-H(23B) 110.6

C(22)-C(23)-H(23B) 110.6

H(23A)-C(23)-H(23B) 108.7

C(31)-Zn(1)-C(33) 104.2(5)

C(31)-Zn(1)-C(29) 130.3(5)

C(33)-Zn(1)-C(29) 125.2(6)

C(31)-Zn(1)-Zn(2) 64.8(3)

C(33)-Zn(1)-Zn(2) 160.4(5)

C(29)-Zn(1)-Zn(2) 68.8(4)

C(37)-Zn(2)-C(35) 143.4(3)

C(37)-Zn(2)-C(31) 105.3(3)

C(35)-Zn(2)-C(31) 102.6(4)

C(37)-Zn(2)-Zn(1) 98.7(2)

C(35)-Zn(2)-Zn(1) 117.8(3)

C(31)-Zn(2)-Zn(1) 45.4(2)

C(30)-C(29)-Zn(1) 108.3(9)

C(30)-C(29)-H(29A) 110.0

Zn(1)-C(29)-H(29A) 110.0

C(30)-C(29)-H(29B) 110.0

Zn(1)-C(29)-H(29B) 110.0

H(29A)-C(29)-H(29B) 108.4

C(34)-C(33)-Zn(1) 124.8(12)

C(34)-C(33)-H(33A) 106.1

Zn(1)-C(33)-H(33A) 106.1

C(34)-C(33)-H(33B) 106.1

Zn(1)-C(33)-H(33B) 106.1

H(33A)-C(33)-H(33B) 106.3

C(33)-C(34)-H(34A) 109.5

C(33)-C(34)-H(34B) 109.5

H(34A)-C(34)-H(34B) 109.5

C(33)-C(34)-H(34C) 109.5

H(34A)-C(34)-H(34C) 109.5

H(34B)-C(34)-H(34C) 109.5

C(36)-C(35)-Zn(2) 115.3(7)

C(36)-C(35)-H(35A) 108.5

Zn(2)-C(35)-H(35A) 108.5

C(36)-C(35)-H(35B) 108.5

Zn(2)-C(35)-H(35B) 108.5

H(35A)-C(35)-H(35B) 107.5

C(15A)-C(14A)-C(13A) 103.1(7)

C(15A)-C(14A)-H(14C) 111.1

C(13A)-C(14A)-H(14C) 111.1

C(15A)-C(14A)-H(14D) 111.1

C(13A)-C(14A)-H(14D) 111.1

H(14C)-C(14A)-H(14D) 109.1

O(5)-C(13A)-C(14A) 103.7(6)

O(5)-C(13A)-H(13C) 111.0

C(14A)-C(13A)-H(13C) 111.0

O(5)-C(13A)-H(13D) 111.0

C(14A)-C(13A)-H(13D) 111.0

H(13C)-C(13A)-H(13D) 109.0

C(16A)-C(15A)-C(14A) 100.8(7)

C(16A)-C(15A)-H(15C) 111.6

C(14A)-C(15A)-H(15C) 111.6

C(16A)-C(15A)-H(15D) 111.6

C(14A)-C(15A)-H(15D) 111.6

H(15C)-C(15A)-H(15D) 109.4

O(5)-C(16A)-C(15A) 105.8(6)

O(5)-C(16A)-H(16C) 110.6

C(15A)-C(16A)-H(16C) 110.6

O(5)-C(16A)-H(16D) 110.6

C(15A)-C(16A)-H(16D) 110.6

H(16C)-C(16A)-H(16D) 108.7

C(17)-C(18A)-C(19) 107.7(11)

C(17)-C(18A)-H(18C) 110.2

C(19)-C(18A)-H(18C) 110.2

C(17)-C(18A)-H(18D) 110.2

C(19)-C(18A)-H(18D) 110.2

H(18C)-C(18A)-H(18D) 108.5

C(23A)-C(22A)-C(21) 104.5(7)

C(23A)-C(22A)-H(22C) 110.9

C(21)-C(22A)-H(22C) 110.9

C(23A)-C(22A)-H(22D) 110.9

C(21)-C(22A)-H(22D) 110.9

H(22C)-C(22A)-H(22D) 108.9

C(22A)-C(23A)-C(24) 105.6(7)

C(22A)-C(23A)-H(23C) 110.6

C(24)-C(23A)-H(23C) 110.6

C(22A)-C(23A)-H(23D) 110.6

C(24)-C(23A)-H(23D) 110.6

H(23C)-C(23A)-H(23D) 108.8

C(35A)-C(36A)-H(36D) 109.5

C(35A)-C(36A)-H(36E) 109.5

H(36D)-C(36A)-H(36E) 109.5

C(35A)-C(36A)-H(36F) 109.5

H(36D)-C(36A)-H(36F) 109.5

H(36E)-C(36A)-H(36F) 109.5

C(34A)-C(33A)-Zn(1A) 88.3(11)

C(34A)-C(33A)-H(33C) 113.9

Zn(1A)-C(33A)-H(33C) 113.9

C(34A)-C(33A)-H(33D) 113.9

Zn(1A)-C(33A)-H(33D) 113.9

H(33C)-C(33A)-H(33D) 111.1

C(33A)-C(34A)-H(34D) 109.5

C(33A)-C(34A)-H(34E) 109.5

H(34D)-C(34A)-H(34E) 109.5

C(33A)-C(34A)-H(34F) 109.5

H(34D)-C(34A)-H(34F) 109.5

H(34E)-C(34A)-H(34F) 109.5

C(36A)-C(35A)-Zn(2A) 115(2)

C(36A)-C(35A)-H(35C) 108.6

Zn(2A)-C(35A)-H(35C) 108.6

C(36A)-C(35A)-H(35D) 108.6

Zn(2A)-C(35A)-H(35D) 108.6

H(35C)-C(35A)-H(35D) 107.5

C(29A)-Zn(1A)-C(31) 132.1(8)

C(29A)-Zn(1A)-C(33A) 119.6(8)

C(31)-Zn(1A)-C(33A) 108.3(6)

C(29A)-Zn(1A)-Zn(2A) 67.4(7)

C(31)-Zn(1A)-Zn(2A) 64.9(3)

C(33A)-Zn(1A)-Zn(2A) 170.4(9)

C(35A)-Zn(2A)-C(37) 141.7(10)

C(35A)-Zn(2A)-Zn(1A) 114.6(11)

C(37)-Zn(2A)-Zn(1A) 103.5(4)

C(30A)-C(29A)-Zn(1A) 109.7(18)

C(30A)-C(29A)-H(29C) 109.7

Zn(1A)-C(29A)-H(29C) 109.7

C(30A)-C(29A)-H(29D) 109.7

Zn(1A)-C(29A)-H(29D) 109.7

H(29C)-C(29A)-H(29D) 108.2

C(29A)-C(30A)-H(30D) 109.5

C(29A)-C(30A)-H(30E) 109.5

H(30D)-C(30A)-H(30E) 109.5

C(29A)-C(30A)-H(30F) 109.5

H(30D)-C(30A)-H(30F) 109.5

H(30E)-C(30A)-H(30F) 109.5

O(1)-Mg(1)-O(3) 100.64(13)

O(1)-Mg(1)-O(4) 172.22(13)

O(3)-Mg(1)-O(4) 86.98(13)

O(1)-Mg(1)-O(2) 69.90(11)

O(3)-Mg(1)-O(2) 170.48(13)

O(4)-Mg(1)-O(2) 102.51(13)

O(1)-Mg(1)-Br(1) 88.42(9)

O(3)-Mg(1)-Br(1) 92.30(10)

O(4)-Mg(1)-Br(1) 92.88(10)

O(2)-Mg(1)-Br(1) 86.50(9)

O(1)-Mg(1)-Br(3) 86.08(9)

O(3)-Mg(1)-Br(3) 93.56(9)

O(4)-Mg(1)-Br(3) 91.92(9)

O(2)-Mg(1)-Br(3) 86.98(9)

Br(1)-Mg(1)-Br(3) 172.61(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(2) 45.21(8)

O(3)-Mg(1)-Mg(2) 127.36(10)

O(4)-Mg(1)-Mg(2) 130.39(10)

O(2)-Mg(1)-Mg(2) 45.01(8)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2) 56.34(4)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2) 116.33(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(3) 44.37(9)

O(3)-Mg(1)-Mg(3) 129.19(11)

O(4)-Mg(1)-Mg(3) 128.87(10)

O(2)-Mg(1)-Mg(3) 44.39(8)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3) 116.20(5)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3) 56.45(4)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3) 59.88(5)

O(5)-Mg(2)-O(6) 89.07(13)

O(5)-Mg(2)-O(2) 167.34(14)

O(6)-Mg(2)-O(2) 103.56(13)

O(5)-Mg(2)-O(1) 97.71(13)

O(6)-Mg(2)-O(1) 173.03(14)

O(2)-Mg(2)-O(1) 69.70(11)

O(5)-Mg(2)-Br(1) 91.85(10)

O(6)-Mg(2)-Br(1) 93.50(10)

O(2)-Mg(2)-Br(1) 86.50(9)

O(1)-Mg(2)-Br(1) 87.93(9)

O(5)-Mg(2)-Br(2) 93.19(10)

O(6)-Mg(2)-Br(2) 91.83(9)

O(2)-Mg(2)-Br(2) 87.44(9)

O(1)-Mg(2)-Br(2) 86.20(9)

Br(1)-Mg(2)-Br(2) 172.73(6)

O(5)-Mg(2)-Mg(1) 124.56(10)

O(6)-Mg(2)-Mg(1) 131.58(11)

O(2)-Mg(2)-Mg(1) 45.20(8)

O(1)-Mg(2)-Mg(1) 44.74(8)

Br(1)-Mg(2)-Mg(1) 56.18(4)

Br(2)-Mg(2)-Mg(1) 116.55(6)

O(5)-Mg(2)-Mg(3) 126.72(11)

O(6)-Mg(2)-Mg(3) 129.24(11)

O(2)-Mg(2)-Mg(3) 44.66(8)

O(1)-Mg(2)-Mg(3) 44.64(8)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3) 116.51(5)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3) 56.22(4)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) 60.35(5)

O(7)-Mg(3)-O(1) 105.10(13)

O(7)-Mg(3)-O(2) 175.24(13)

O(1)-Mg(3)-O(2) 70.25(11)

O(7)-Mg(3)-O(8) 88.16(13)

O(1)-Mg(3)-O(8) 166.70(13)

O(2)-Mg(3)-O(8) 96.51(13)

O(7)-Mg(3)-Br(2) 91.03(9)

O(1)-Mg(3)-Br(2) 86.66(9)

O(2)-Mg(3)-Br(2) 87.74(9)

O(8)-Mg(3)-Br(2) 94.32(9)

O(7)-Mg(3)-Br(3) 93.71(9)

O(1)-Mg(3)-Br(3) 85.78(9)

O(2)-Mg(3)-Br(3) 86.99(9)

O(8)-Mg(3)-Br(3) 92.38(9)

Br(2)-Mg(3)-Br(3) 171.91(6)

O(7)-Mg(3)-Mg(2) 131.03(10)

O(1)-Mg(3)-Mg(2) 45.14(8)

O(2)-Mg(3)-Mg(2) 44.94(8)

O(8)-Mg(3)-Mg(2) 125.73(10)

Br(2)-Mg(3)-Mg(2) 56.34(4)

Br(3)-Mg(3)-Mg(2) 115.82(6)

O(7)-Mg(3)-Mg(1) 132.38(11)

O(1)-Mg(3)-Mg(1) 44.40(8)

O(2)-Mg(3)-Mg(1) 44.86(8)

O(8)-Mg(3)-Mg(1) 124.76(10)

Br(2)-Mg(3)-Mg(1) 116.09(6)

Br(3)-Mg(3)-Mg(1) 56.06(4)

Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) 59.77(5)

Mg(1)-Br(1)-Mg(2) 67.47(4)

Mg(3)-Br(2)-Mg(2) 67.44(4)

Mg(1)-Br(3)-Mg(3) 67.49(4)

C(1)-O(1)-Mg(3) 125.7(3)

C(1)-O(1)-Mg(1) 127.3(2)

Mg(3)-O(1)-Mg(1) 91.24(12)

C(1)-O(1)-Mg(2) 121.5(2)

Mg(3)-O(1)-Mg(2) 90.21(12)

Mg(1)-O(1)-Mg(2) 90.05(12)

C(3)-O(2)-Mg(3) 119.9(3)

C(3)-O(2)-Mg(2) 128.2(2)

Mg(3)-O(2)-Mg(2) 90.40(12)

C(3)-O(2)-Mg(1) 126.8(2)

Mg(3)-O(2)-Mg(1) 90.75(12)

Mg(2)-O(2)-Mg(1) 89.80(12)

C(5)-O(3)-C(8) 108.3(3)

C(5)-O(3)-Mg(1) 122.7(3)

C(8)-O(3)-Mg(1) 128.9(3)

C(9)-O(4)-C(12) 109.1(3)

C(9)-O(4)-Mg(1) 121.8(3)

C(12)-O(4)-Mg(1) 128.8(3)

C(16)-O(5)-C(13A) 106.5(6)

C(16)-O(5)-C(16A) 18.2(6)

C(13A)-O(5)-C(16A) 108.5(4)

C(16)-O(5)-C(13) 105.5(7)

C(13A)-O(5)-C(13) 22.7(5)

C(16A)-O(5)-C(13) 100.2(6)

C(16)-O(5)-Mg(2) 123.2(5)

C(13A)-O(5)-Mg(2) 126.3(3)

C(16A)-O(5)-Mg(2) 125.1(3)

C(13)-O(5)-Mg(2) 131.2(4)

C(17)-O(6)-C(20) 109.3(4)

C(17)-O(6)-Mg(2) 122.3(3)

C(20)-O(6)-Mg(2) 128.1(3)

C(24)-O(7)-C(21) 107.4(3)

C(24)-O(7)-Mg(3) 121.8(3)

C(21)-O(7)-Mg(3) 130.1(3)

C(28)-O(8)-C(25) 107.7(4)

C(28)-O(8)-Mg(3) 127.7(3)

C(25)-O(8)-Mg(3) 124.4(3)

O(1)-C(1)-C(2) 113.0(4)

O(1)-C(1)-H(1A) 109.0

C(2)-C(1)-H(1A) 109.0

O(1)-C(1)-H(1B) 109.0

C(2)-C(1)-H(1B) 109.0

H(1A)-C(1)-H(1B) 107.8

C(1)-C(2)-H(2A) 109.5

C(1)-C(2)-H(2B) 109.5

H(2A)-C(2)-H(2B) 109.5

C(1)-C(2)-H(2C) 109.5

H(2A)-C(2)-H(2C) 109.5

H(2B)-C(2)-H(2C) 109.5

O(2)-C(3)-C(4) 113.1(4)

O(2)-C(3)-H(3A) 109.0

C(4)-C(3)-H(3A) 109.0

O(2)-C(3)-H(3B) 109.0

C(4)-C(3)-H(3B) 109.0

H(3A)-C(3)-H(3B) 107.8

C(3)-C(4)-H(4A) 109.5

C(3)-C(4)-H(4B) 109.5

H(4A)-C(4)-H(4B) 109.5

C(3)-C(4)-H(4C) 109.5

H(4A)-C(4)-H(4C) 109.5

H(4B)-C(4)-H(4C) 109.5

O(3)-C(5)-C(6) 104.4(4)

O(3)-C(5)-H(5A) 110.9

C(6)-C(5)-H(5A) 110.9

O(3)-C(5)-H(5B) 110.9

C(6)-C(5)-H(5B) 110.9

H(5A)-C(5)-H(5B) 108.9

C(5)-C(6)-C(7) 102.1(4)

C(5)-C(6)-H(6A) 111.4

C(7)-C(6)-H(6A) 111.4

C(5)-C(6)-H(6B) 111.4

C(7)-C(6)-H(6B) 111.4

H(6A)-C(6)-H(6B) 109.2

C(8)-C(7)-C(6) 104.3(4)

C(8)-C(7)-H(7A) 110.9

C(6)-C(7)-H(7A) 110.9

C(8)-C(7)-H(7B) 110.9

C(6)-C(7)-H(7B) 110.9

H(7A)-C(7)-H(7B) 108.9

O(3)-C(8)-C(7) 106.3(4)

O(3)-C(8)-H(8A) 110.5

C(7)-C(8)-H(8A) 110.5

O(3)-C(8)-H(8B) 110.5

C(7)-C(8)-H(8B) 110.5

H(8A)-C(8)-H(8B) 108.7

O(4)-C(9)-C(10) 104.1(4)

O(4)-C(9)-H(9A) 110.9

C(10)-C(9)-H(9A) 110.9

O(4)-C(9)-H(9B) 110.9

C(10)-C(9)-H(9B) 110.9

H(9A)-C(9)-H(9B) 109.0

C(11)-C(10)-C(9) 101.9(4)

C(11)-C(10)-H(10A) 111.4

C(9)-C(10)-H(10A) 111.4

C(11)-C(10)-H(10B) 111.4

C(9)-C(10)-H(10B) 111.4

H(10A)-C(10)-H(10B) 109.3

C(10)-C(11)-C(12) 103.0(4)

C(10)-C(11)-H(11A) 111.2

C(12)-C(11)-H(11A) 111.2

C(10)-C(11)-H(11B) 111.2

C(12)-C(11)-H(11B) 111.2

H(11A)-C(11)-H(11B) 109.1

O(4)-C(12)-C(11) 105.5(4)

O(4)-C(12)-H(12A) 110.6

C(11)-C(12)-H(12A) 110.6

O(4)-C(12)-H(12B) 110.6

C(11)-C(12)-H(12B) 110.6

H(12A)-C(12)-H(12B) 108.8

C(18A)-C(17)-O(6) 106.3(8)

C(18A)-C(17)-C(18) 31.2(6)

O(6)-C(17)-C(18) 105.8(6)

C(18A)-C(17)-H(17A) 81.9

O(6)-C(17)-H(17A) 110.6

C(18)-C(17)-H(17A) 110.6

C(18A)-C(17)-H(17B) 134.1

O(6)-C(17)-H(17B) 110.6

C(18)-C(17)-H(17B) 110.6

H(17A)-C(17)-H(17B) 108.7

C(18A)-C(19)-C(18) 30.5(6)

C(18A)-C(19)-C(20) 102.9(9)

C(18)-C(19)-C(20) 105.3(6)

C(18A)-C(19)-H(19A) 83.9

C(18)-C(19)-H(19A) 110.7

C(20)-C(19)-H(19A) 110.7

C(18A)-C(19)-H(19B) 135.9

C(18)-C(19)-H(19B) 110.7

C(20)-C(19)-H(19B) 110.7

H(19A)-C(19)-H(19B) 108.8

O(6)-C(20)-C(19) 106.0(4)

O(6)-C(20)-H(20A) 110.5

C(19)-C(20)-H(20A) 110.5

O(6)-C(20)-H(20B) 110.5

C(19)-C(20)-H(20B) 110.5

H(20A)-C(20)-H(20B) 108.7

O(7)-C(21)-C(22) 106.8(6)

O(7)-C(21)-C(22A) 106.5(5)

C(22)-C(21)-C(22A) 22.6(7)

O(7)-C(21)-H(21A) 110.4

C(22)-C(21)-H(21A) 110.4

C(22A)-C(21)-H(21A) 90.1

O(7)-C(21)-H(21B) 110.4

C(22)-C(21)-H(21B) 110.4

C(22A)-C(21)-H(21B) 128.7

H(21A)-C(21)-H(21B) 108.6

C(23)-C(24)-O(7) 110.6(7)

C(23)-C(24)-C(23A) 25.5(10)

O(7)-C(24)-C(23A) 103.7(5)

C(23)-C(24)-H(24A) 109.5

O(7)-C(24)-H(24A) 109.5

C(23A)-C(24)-H(24A) 90.1

C(23)-C(24)-H(24B) 109.5

O(7)-C(24)-H(24B) 109.5

C(23A)-C(24)-H(24B) 133.2

H(24A)-C(24)-H(24B) 108.1

O(8)-C(25)-C(26) 107.2(4)

O(8)-C(25)-H(25A) 110.3

C(26)-C(25)-H(25A) 110.3

O(8)-C(25)-H(25B) 110.3

C(26)-C(25)-H(25B) 110.3

H(25A)-C(25)-H(25B) 108.5

C(25)-C(26)-C(27) 102.2(4)

C(25)-C(26)-H(26A) 111.3

C(27)-C(26)-H(26A) 111.3

C(25)-C(26)-H(26B) 111.3

C(27)-C(26)-H(26B) 111.3

H(26A)-C(26)-H(26B) 109.2

C(28)-C(27)-C(26) 102.2(5)

C(28)-C(27)-H(27A) 111.3

C(26)-C(27)-H(27A) 111.3

C(28)-C(27)-H(27B) 111.3

C(26)-C(27)-H(27B) 111.3

H(27A)-C(27)-H(27B) 109.2

O(8)-C(28)-C(27) 105.4(4)

O(8)-C(28)-H(28A) 110.7

C(27)-C(28)-H(28A) 110.7

O(8)-C(28)-H(28B) 110.7

C(27)-C(28)-H(28B) 110.7

H(28A)-C(28)-H(28B) 108.8

C(32)-C(31)-Zn(1) 113.9(5)

C(32)-C(31)-Zn(1A) 105.2(6)

Zn(1)-C(31)-Zn(1A) 9.9(4)

C(32)-C(31)-Zn(2) 115.6(5)

Zn(1)-C(31)-Zn(2) 69.8(2)

Zn(1A)-C(31)-Zn(2) 77.5(4)

C(32)-C(31)-H(31A) 108.8

Zn(1)-C(31)-H(31A) 108.8

Zn(1A)-C(31)-H(31A) 117.4

Zn(2)-C(31)-H(31A) 40.6

C(32)-C(31)-H(31B) 108.8

Zn(1)-C(31)-H(31B) 108.8

Zn(1A)-C(31)-H(31B) 108.8

Zn(2)-C(31)-H(31B) 131.7

H(31A)-C(31)-H(31B) 107.7

C(38)-C(37)-Zn(2) 120.1(4)

C(38)-C(37)-Zn(2A) 107.3(5)

Zn(2)-C(37)-Zn(2A) 15.9(2)

C(38)-C(37)-H(37A) 107.3

Zn(2)-C(37)-H(37A) 107.3

Zn(2A)-C(37)-H(37A) 105.0

C(38)-C(37)-H(37B) 107.3

Zn(2)-C(37)-H(37B) 107.3

Zn(2A)-C(37)-H(37B) 122.3

H(37A)-C(37)-H(37B) 106.9

C(37)-C(38)-H(38A) 109.5

C(37)-C(38)-H(38B) 109.5

H(38A)-C(38)-H(38B) 109.5

C(37)-C(38)-H(38C) 109.5

H(38A)-C(38)-H(38C) 109.5

H(38B)-C(38)-H(38C) 109.5

C(31)-C(32)-H(32A) 109.5

C(31)-C(32)-H(32B) 109.5

H(32A)-C(32)-H(32B) 109.5

C(31)-C(32)-H(32C) 109.5

H(32A)-C(32)-H(32C) 109.5

H(32B)-C(32)-H(32C) 109.5

C(42)-O(9)-C(39) 108.6(8)

O(9)-C(39)-C(40) 104.7(9)

O(9)-C(39)-H(39A) 110.8

C(40)-C(39)-H(39A) 110.8

O(9)-C(39)-H(39B) 110.8

C(40)-C(39)-H(39B) 110.8

H(39A)-C(39)-H(39B) 108.9

C(39)-C(40)-C(41) 105.1(10)

C(39)-C(40)-H(40A) 110.7

C(41)-C(40)-H(40A) 110.7

C(39)-C(40)-H(40B) 110.7

C(41)-C(40)-H(40B) 110.7

H(40A)-C(40)-H(40B) 108.8

C(40)-C(41)-C(42) 105.6(9)

C(40)-C(41)-H(41A) 110.6

C(42)-C(41)-H(41A) 110.6

C(40)-C(41)-H(41B) 110.6

C(42)-C(41)-H(41B) 110.6

H(41A)-C(41)-H(41B) 108.7

O(9)-C(42)-C(41) 106.5(8)

O(9)-C(42)-H(42A) 110.4

C(41)-C(42)-H(42A) 110.4

O(9)-C(42)-H(42B) 110.4

C(41)-C(42)-H(42B) 110.4

H(42A)-C(42)-H(42B) 108.6

C(42A)-O(9A)-C(39A) 110.8(13)

C(40A)-C(41A)-C(42A) 103.4(19)

C(40A)-C(41A)-H(41C) 111.1

C(42A)-C(41A)-H(41C) 111.1

C(40A)-C(41A)-H(41D) 111.1

C(42A)-C(41A)-H(41D) 111.1

H(41C)-C(41A)-H(41D) 109.0

O(9A)-C(42A)-C(41A) 108.6(17)

O(9A)-C(42A)-H(42C) 110.0

C(41A)-C(42A)-H(42C) 110.0

O(9A)-C(42A)-H(42D) 110.0

C(41A)-C(42A)-H(42D) 110.0

H(42C)-C(42A)-H(42D) 108.4

O(9A)-C(39A)-C(40A) 103.0(14)

O(9A)-C(39A)-H(39C) 111.2

C(40A)-C(39A)-H(39C) 111.2

O(9A)-C(39A)-H(39D) 111.2

C(40A)-C(39A)-H(39D) 111.2

H(39C)-C(39A)-H(39D) 109.1

C(41A)-C(40A)-C(39A) 108.8(18)

C(41A)-C(40A)-H(40C) 109.9

C(39A)-C(40A)-H(40C) 109.9

C(41A)-C(40A)-H(40D) 109.9

C(39A)-C(40A)-H(40D) 109.9

H(40C)-C(40A)-H(40D) 108.3

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters (Å2x 103)for pgamat43. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

U11 U22 U33 U23 U13 U12

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

C(18) 33(7) 58(11) 59(7) -5(7) 19(6) -15(6)

Zn(1) 45(2) 46(1) 31(1) -2(1) 6(1) -12(1)

Zn(2) 44(1) 35(1) 41(1) -5(1) 2(1) 5(1)

C(29) 65(8) 77(9) 40(6) -10(6) 24(6) -39(7)

C(30) 68(10) 90(12) 55(7) 13(8) 5(9) -45(8)

C(36) 99(10) 33(5) 38(6) -1(4) 15(6) 24(6)

C(35) 88(10) 42(6) 68(7) -13(5) -29(6) 23(6)

C(18A) 25(11) 17(9) 46(11) -7(7) 9(8) -11(7)

Zn(1A) 67(6) 61(5) 44(5) -11(3) 25(4) -23(4)

Zn(2A) 73(4) 38(2) 51(2) 4(1) 25(3) 13(3)

C(29A) 63(16) 53(14) 49(12) 12(10) 21(12) -13(11)

C(30A) 58(18) 90(20) 85(18) 30(17) 24(18) -26(16)

Mg(1) 17(1) 15(1) 26(1) 1(1) 3(1) 1(1)

Mg(2) 19(1) 16(1) 24(1) 1(1) 0(1) -2(1)

Mg(3) 14(1) 16(1) 22(1) 0(1) 3(1) 0(1)

Br(1) 23(1) 22(1) 48(1) 4(1) -11(1) -2(1)

Br(2) 20(1) 16(1) 30(1) 1(1) 0(1) 2(1)

Br(3) 19(1) 17(1) 31(1) -1(1) 2(1) -2(1)

O(1) 19(2) 17(2) 21(2) 3(1) 6(1) 1(1)

O(2) 15(2) 17(2) 22(2) 1(1) 5(1) -1(1)

O(3) 27(2) 16(2) 27(2) 2(1) 1(1) -1(1)

O(4) 18(2) 25(2) 32(2) 0(1) 3(1) 4(1)

O(5) 46(2) 16(2) 21(2) 1(1) -5(2) 4(2)

O(6) 19(2) 23(2) 38(2) 6(2) -4(2) -9(1)

O(7) 13(2) 25(2) 34(2) -8(1) 3(1) -2(1)

O(8) 32(2) 24(2) 21(2) -1(1) 4(1) 3(1)

C(1) 25(3) 27(3) 24(2) 1(2) 6(2) 5(2)

C(2) 29(3) 44(3) 29(3) 8(2) 15(2) 4(2)

C(3) 21(2) 24(2) 28(3) 6(2) 11(2) -1(2)

C(4) 27(3) 35(3) 43(3) 9(2) 18(2) 2(2)

C(5) 38(3) 15(2) 37(3) 4(2) 10(2) -1(2)

C(6) 44(3) 28(3) 50(3) 12(3) -4(3) 6(3)

C(7) 81(5) 37(3) 37(3) 11(3) -10(3) -1(3)

C(8) 39(3) 31(3) 23(3) 2(2) -3(2) 0(2)

C(9) 16(2) 31(3) 46(3) 5(2) 1(2) 6(2)

C(10) 26(3) 38(3) 47(3) 5(3) 9(3) 16(2)

C(11) 38(3) 34(3) 47(3) 0(2) 15(3) 13(2)

C(12) 34(3) 25(3) 31(3) -8(2) 5(2) 5(2)

C(17) 38(3) 55(4) 57(4) 7(3) -8(3) -27(3)

C(19) 39(3) 41(3) 62(4) 4(3) 22(3) -8(3)

C(20) 36(3) 23(3) 40(3) 9(2) 2(2) -3(2)

C(21) 16(2) 37(3) 49(3) -14(2) 10(2) 0(2)

C(24) 19(3) 42(3) 56(4) -16(3) 6(3) -10(2)

C(25) 74(5) 36(3) 31(3) 6(3) -8(3) 17(3)

C(26) 60(4) 53(4) 34(3) 1(3) -6(3) 3(3)

C(27) 50(4) 55(4) 31(3) -10(3) 4(3) 3(3)

C(28) 46(4) 31(3) 35(3) -13(2) 7(3) 1(3)

C(31) 85(5) 76(5) 55(4) -1(4) 42(4) 9(4)

C(37) 38(3) 39(3) 50(4) -7(3) 7(3) -5(3)

C(38) 62(5) 65(4) 68(5) -15(4) 3(4) 24(4)

C(32) 98(6) 99(6) 62(5) 14(4) 38(4) -29(5)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 5. Torsion angles [°] for pgamat43.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

C(13)-C(14)-C(15)-C(16) 21.0(15)

C(15)-C(14)-C(13)-O(5) -40.0(12)

C(14)-C(15)-C(16)-O(5) 7.9(14)

C(21)-C(22)-C(23)-C(24) 15.1(17)

C(31)-Zn(1)-Zn(2)-C(37) 103.0(3)

C(33)-Zn(1)-Zn(2)-C(37) 43.6(16)

C(29)-Zn(1)-Zn(2)-C(37) -95.4(4)

C(31)-Zn(1)-Zn(2)-C(35) -80.0(6)

C(33)-Zn(1)-Zn(2)-C(35) -139.3(16)

C(29)-Zn(1)-Zn(2)-C(35) 81.6(7)

C(33)-Zn(1)-Zn(2)-C(31) -59.4(16)

C(29)-Zn(1)-Zn(2)-C(31) 161.6(5)

C(31)-Zn(1)-C(29)-C(30) -113.3(9)

C(33)-Zn(1)-C(29)-C(30) 60.3(12)

Zn(2)-Zn(1)-C(29)-C(30) -135.4(10)

C(31)-Zn(1)-C(33)-C(34) 159.3(14)

C(29)-Zn(1)-C(33)-C(34) -15.7(17)

Zn(2)-Zn(1)-C(33)-C(34) -147.3(15)

C(37)-Zn(2)-C(35)-C(36) 161.9(7)

C(31)-Zn(2)-C(35)-C(36) -59.1(10)

Zn(1)-Zn(2)-C(35)-C(36) -13.2(12)

C(15A)-C(14A)-C(13A)-O(5) 37.1(9)

C(13A)-C(14A)-C(15A)-C(16A) -42.2(10)

C(14A)-C(15A)-C(16A)-O(5) 32.0(9)

C(21)-C(22A)-C(23A)-C(24) 19.5(10)

C(34A)-C(33A)-Zn(1A)-C(29A) 7.0(16)

C(34A)-C(33A)-Zn(1A)-C(31) -171.8(9)

C(34A)-C(33A)-Zn(1A)-Zn(2A) -128(4)

C(36A)-C(35A)-Zn(2A)-C(37) -97(3)

C(36A)-C(35A)-Zn(2A)-Zn(1A) 89(3)

C(29A)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(35A) 83.9(12)

C(31)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(35A) -91.3(10)

C(33A)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(35A) -138(5)

C(29A)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(37) -92.3(7)

C(31)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(37) 92.5(4)

C(33A)-Zn(1A)-Zn(2A)-C(37) 46(5)

C(31)-Zn(1A)-C(29A)-C(30A) -109.4(18)

C(33A)-Zn(1A)-C(29A)-C(30A) 72.1(19)

Zn(2A)-Zn(1A)-C(29A)-C(30A) -115.3(17)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) -62.38(17)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) 2.1(2)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) 126.36(18)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) -170.29(18)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) 65.53(13)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) -115.60(13)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(5) -116.32(14)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) 171.84(18)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) -123.66(18)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) 0.6(2)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) 63.93(17)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) -60.25(14)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) 118.62(14)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(6) 117.90(14)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) 107.91(16)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) 172.41(17)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) -63.35(17)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) -124.18(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) 54.69(12)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(2) 53.97(11)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) 64.49(17)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) -171.26(18)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) -107.91(16)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) 127.90(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) -53.22(12)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-O(1) -53.94(12)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) -127.90(12)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) -63.41(13)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) 60.83(13)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) 124.18(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) 178.87(7)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(1) 178.16(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) 52.44(12)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) 116.93(13)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) -118.82(14)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) -55.48(12)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) -179.66(7)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) -0.78(9)

Mg(3)-Mg(1)-Mg(2)-Br(2) -1.50(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) 53.94(12)

O(3)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) 118.43(13)

O(4)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) -117.32(14)

O(2)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) -53.97(11)

Br(1)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) -178.16(6)

Br(3)-Mg(1)-Mg(2)-Mg(3) 0.72(6)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) -8.87(19)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) 116.79(18)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) -176.53(18)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) -67.74(17)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) -123.52(13)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) 56.58(13)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(7) -121.81(14)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) 58.86(16)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) -175.47(18)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) -108.79(16)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) -55.78(12)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) 124.31(12)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(1) -54.07(11)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) 167.66(17)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) -66.68(17)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) 108.79(16)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) 53.01(12)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) -126.89(12)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(2) 54.72(11)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) -133.88(16)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) -8.22(19)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) 58.46(16)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) 167.25(17)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) 111.47(12)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) -68.43(12)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-O(8) 113.18(13)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) -65.45(12)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) 60.21(13)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) 126.89(12)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) -124.31(12)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) 179.90(7)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(2) -178.39(6)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) 112.22(12)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) -122.11(13)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) -55.43(12)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) 53.36(12)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) -2.42(9)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) 177.67(7)

Mg(1)-Mg(2)-Mg(3)-Br(3) -0.71(6)

O(5)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) 112.94(13)

O(6)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) -121.40(14)

O(2)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) -54.72(11)

O(1)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) 54.07(11)

Br(1)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) -1.71(6)

Br(2)-Mg(2)-Mg(3)-Mg(1) 178.39(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) 64.66(17)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) 4.2(2)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) -120.56(17)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) 174.64(18)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) 121.50(13)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) -59.44(13)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(7) 119.79(14)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) -60.48(16)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) 174.78(17)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) 109.97(16)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) 56.84(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) -124.10(12)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(1) 55.13(11)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) -109.97(16)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) -170.46(17)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) 64.80(16)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) -53.13(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) 125.93(12)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(2) -54.84(11)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) -169.86(17)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) 129.66(16)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) 4.91(19)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) -59.89(16)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) -113.02(12)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) 66.04(12)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-O(8) -114.73(13)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) -53.63(12)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) -114.11(13)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) 121.14(13)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) 56.34(12)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) 3.21(9)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) -177.73(7)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-Br(2) 1.50(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) 124.10(12)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) 63.62(12)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) -61.13(12)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) -125.93(12)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) -179.06(7)

Mg(2)-Mg(1)-Mg(3)-Br(3) 179.23(6)

O(1)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) -55.13(11)

O(3)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) -115.61(13)

O(4)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) 119.65(13)

O(2)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) 54.84(11)

Br(1)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) 1.71(6)

Br(3)-Mg(1)-Mg(3)-Mg(2) -179.23(6)

O(1)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) 34.07(9)

O(3)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) 134.66(10)

O(4)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) -138.25(10)

O(2)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) -35.88(8)

Br(3)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) -7.9(5)

Mg(3)-Mg(1)-Br(1)-Mg(2) -1.78(6)

O(5)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) -131.42(11)

O(6)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) 139.41(11)

O(2)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) 36.02(8)

O(1)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) -33.76(9)

Br(2)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) 2.4(5)

Mg(3)-Mg(2)-Br(1)-Mg(1) 1.79(6)

O(7)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) -140.97(10)

O(1)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) -35.91(9)

O(2)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) 34.43(9)

O(8)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) 130.80(10)

Br(3)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) -15.0(4)

Mg(1)-Mg(3)-Br(2)-Mg(2) -1.55(6)

O(5)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) 133.10(11)

O(6)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) -137.74(11)

O(2)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) -34.24(8)

O(1)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) 35.57(9)

Br(1)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) -0.7(5)

Mg(1)-Mg(2)-Br(2)-Mg(3) 1.57(6)

O(1)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) -35.48(8)

O(3)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) -135.92(10)

O(4)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) 136.99(10)

O(2)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) 34.56(8)

Br(1)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) 6.6(5)

Mg(2)-Mg(1)-Br(3)-Mg(3) -0.74(6)

O(7)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) 140.40(10)

O(1)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) 35.51(9)

O(2)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) -34.89(9)

O(8)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) -131.29(10)

Br(2)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) 14.6(4)

Mg(2)-Mg(3)-Br(3)-Mg(1) 0.74(6)

O(7)-Mg(3)-O(1)-C(1) 3.4(3)

O(2)-Mg(3)-O(1)-C(1) -175.5(3)

O(8)-Mg(3)-O(1)-C(1) 178.6(5)

Br(2)-Mg(3)-O(1)-C(1) -86.7(3)

Br(3)-Mg(3)-O(1)-C(1) 96.1(3)

Mg(2)-Mg(3)-O(1)-C(1) -130.3(3)

Mg(1)-Mg(3)-O(1)-C(1) 139.7(3)

O(7)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) -136.25(12)

O(2)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) 44.78(11)

O(8)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) 38.9(6)

Br(2)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) 133.58(9)

Br(3)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) -43.54(8)

Mg(2)-Mg(3)-O(1)-Mg(1) 90.06(12)

O(7)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) 133.69(12)

O(2)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) -45.28(11)

O(8)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) -51.1(6)

Br(2)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) 43.52(8)

Br(3)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) -133.60(9)

Mg(1)-Mg(3)-O(1)-Mg(2) -90.06(12)

O(3)-Mg(1)-O(1)-C(1) -2.0(3)

O(4)-Mg(1)-O(1)-C(1) -170.2(9)

O(2)-Mg(1)-O(1)-C(1) 176.9(3)

Br(1)-Mg(1)-O(1)-C(1) 90.1(3)

Br(3)-Mg(1)-O(1)-C(1) -94.9(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(1)-C(1) 131.2(4)

Mg(3)-Mg(1)-O(1)-C(1) -138.6(4)

O(3)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) 136.66(12)

O(4)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) -31.6(10)

O(2)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) -44.44(11)

Br(1)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) -131.29(9)

Br(3)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) 43.77(9)

Mg(2)-Mg(1)-O(1)-Mg(3) -90.21(12)

O(3)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) -133.12(12)

O(4)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) 58.7(10)

O(2)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) 45.77(11)

Br(1)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) -41.07(9)

Br(3)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) 133.98(9)

Mg(3)-Mg(1)-O(1)-Mg(2) 90.21(12)

O(5)-Mg(2)-O(1)-C(1) -2.8(3)

O(6)-Mg(2)-O(1)-C(1) 163.6(10)

O(2)-Mg(2)-O(1)-C(1) 178.6(3)

Br(1)-Mg(2)-O(1)-C(1) -94.4(3)

Br(2)-Mg(2)-O(1)-C(1) 89.9(3)

Mg(1)-Mg(2)-O(1)-C(1) -135.4(3)

Mg(3)-Mg(2)-O(1)-C(1) 133.4(3)

O(5)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) -136.18(12)

O(6)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) 30.2(11)

O(2)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) 45.20(11)

Br(1)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) 132.23(9)

Br(2)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) -43.47(8)

Mg(1)-Mg(2)-O(1)-Mg(3) 91.24(12)

O(5)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) 132.58(12)

O(6)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) -61.0(11)

O(2)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) -46.04(11)

Br(1)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) 40.99(9)

Br(2)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) -134.71(9)

Mg(3)-Mg(2)-O(1)-Mg(1) -91.24(12)

O(7)-Mg(3)-O(2)-C(3) 169.2(15)

O(1)-Mg(3)-O(2)-C(3) -178.7(3)

O(8)-Mg(3)-O(2)-C(3) -0.1(3)

Br(2)-Mg(3)-O(2)-C(3) 94.0(3)

Br(3)-Mg(3)-O(2)-C(3) -92.1(3)

Mg(2)-Mg(3)-O(2)-C(3) 135.8(3)

Mg(1)-Mg(3)-O(2)-C(3) -134.4(3)

O(7)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) 33.4(16)

O(1)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) 45.48(11)

O(8)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) -135.87(12)

Br(2)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) -41.77(9)

Br(3)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) 132.08(9)

Mg(1)-Mg(3)-O(2)-Mg(2) 89.80(12)

O(7)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) -56.4(16)

O(1)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) -44.32(11)

O(8)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) 134.33(12)

Br(2)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) -131.57(9)

Br(3)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) 42.28(9)

Mg(2)-Mg(3)-O(2)-Mg(1) -89.80(12)

O(5)-Mg(2)-O(2)-C(3) 178.8(6)

O(6)-Mg(2)-O(2)-C(3) 3.2(3)

O(1)-Mg(2)-O(2)-C(3) -175.0(3)

Br(1)-Mg(2)-O(2)-C(3) 96.0(3)

Br(2)-Mg(2)-O(2)-C(3) -88.1(3)

Mg(1)-Mg(2)-O(2)-C(3) 139.5(4)

Mg(3)-Mg(2)-O(2)-C(3) -129.8(3)

O(5)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) -51.4(7)

O(6)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) 132.98(12)

O(1)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) -45.18(11)

Br(1)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) -134.27(9)

Br(2)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) 41.71(9)

Mg(1)-Mg(2)-O(2)-Mg(3) -90.75(12)

O(5)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) 39.3(7)

O(6)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) -136.28(12)

O(1)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) 45.57(11)

Br(1)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) -43.52(8)

Br(2)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) 132.46(9)

Mg(3)-Mg(2)-O(2)-Mg(1) 90.75(12)

O(1)-Mg(1)-O(2)-C(3) 173.7(3)

O(3)-Mg(1)-O(2)-C(3) -179.7(7)

O(4)-Mg(1)-O(2)-C(3) -4.5(3)

Br(1)-Mg(1)-O(2)-C(3) -96.7(3)

Br(3)-Mg(1)-O(2)-C(3) 86.8(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(2)-C(3) -140.3(3)

Mg(3)-Mg(1)-O(2)-C(3) 129.3(3)

O(1)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) 44.41(11)

O(3)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) 51.0(8)

O(4)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) -133.81(12)

Br(1)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) 134.01(9)

Br(3)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) -42.52(9)

Mg(2)-Mg(1)-O(2)-Mg(3) 90.39(12)

O(1)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) -45.98(11)

O(3)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) -39.4(8)

O(4)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) 135.79(12)

Br(1)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) 43.62(8)

Br(3)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) -132.91(9)

Mg(3)-Mg(1)-O(2)-Mg(2) -90.39(12)

O(1)-Mg(1)-O(3)-C(5) -123.7(3)

O(4)-Mg(1)-O(3)-C(5) 54.7(3)

O(2)-Mg(1)-O(3)-C(5) -130.0(8)

Br(1)-Mg(1)-O(3)-C(5) 147.4(3)

Br(3)-Mg(1)-O(3)-C(5) -37.1(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(3)-C(5) -164.4(3)

Mg(3)-Mg(1)-O(3)-C(5) -85.5(3)

O(1)-Mg(1)-O(3)-C(8) 61.8(4)

O(4)-Mg(1)-O(3)-C(8) -119.7(4)

O(2)-Mg(1)-O(3)-C(8) 55.6(9)

Br(1)-Mg(1)-O(3)-C(8) -27.0(4)

Br(3)-Mg(1)-O(3)-C(8) 148.5(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(3)-C(8) 21.2(4)

Mg(3)-Mg(1)-O(3)-C(8) 100.1(4)

O(1)-Mg(1)-O(4)-C(9) -137.2(9)

O(3)-Mg(1)-O(4)-C(9) 54.4(3)

O(2)-Mg(1)-O(4)-C(9) -124.8(3)

Br(1)-Mg(1)-O(4)-C(9) -37.8(3)

Br(3)-Mg(1)-O(4)-C(9) 147.8(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(4)-C(9) -84.5(3)

Mg(3)-Mg(1)-O(4)-C(9) -165.3(3)

O(1)-Mg(1)-O(4)-C(12) 50.8(11)

O(3)-Mg(1)-O(4)-C(12) -117.6(3)

O(2)-Mg(1)-O(4)-C(12) 63.2(4)

Br(1)-Mg(1)-O(4)-C(12) 150.2(3)

Br(3)-Mg(1)-O(4)-C(12) -24.1(3)

Mg(2)-Mg(1)-O(4)-C(12) 103.6(3)

Mg(3)-Mg(1)-O(4)-C(12) 22.8(4)

C(15)-C(16)-O(5)-C(13A) -10.6(12)

C(15)-C(16)-O(5)-C(16A) -110(2)

C(15)-C(16)-O(5)-C(13) -34.2(12)

C(15)-C(16)-O(5)-Mg(2) 148.4(7)

C(14A)-C(13A)-O(5)-C(16) -35.9(10)

C(14A)-C(13A)-O(5)-C(16A) -16.9(9)

C(14A)-C(13A)-O(5)-C(13) 54.7(13)

C(14A)-C(13A)-O(5)-Mg(2) 166.0(5)

C(15A)-C(16A)-O(5)-C(16) 77(2)

C(15A)-C(16A)-O(5)-C(13A) -9.7(9)

C(15A)-C(16A)-O(5)-C(13) -31.5(8)

C(15A)-C(16A)-O(5)-Mg(2) 167.5(5)

C(14)-C(13)-O(5)-C(16) 46.8(11)

C(14)-C(13)-O(5)-C(13A) -49.2(12)

C(14)-C(13)-O(5)-C(16A) 64.7(9)

C(14)-C(13)-O(5)-Mg(2) -136.0(7)

O(6)-Mg(2)-O(5)-C(16) -49.8(8)

O(2)-Mg(2)-O(5)-C(16) 134.5(9)

O(1)-Mg(2)-O(5)-C(16) 128.6(8)

Br(1)-Mg(2)-O(5)-C(16) -143.3(7)

Br(2)-Mg(2)-O(5)-C(16) 42.0(8)

Mg(1)-Mg(2)-O(5)-C(16) 167.6(7)

Mg(3)-Mg(2)-O(5)-C(16) 91.2(8)

O(6)-Mg(2)-O(5)-C(13A) 104.9(6)

O(2)-Mg(2)-O(5)-C(13A) -70.8(9)

O(1)-Mg(2)-O(5)-C(13A) -76.7(6)

Br(1)-Mg(2)-O(5)-C(13A) 11.5(6)

Br(2)-Mg(2)-O(5)-C(13A) -163.3(6)

Mg(1)-Mg(2)-O(5)-C(13A) -37.7(6)

Mg(3)-Mg(2)-O(5)-C(13A) -114.1(6)

O(6)-Mg(2)-O(5)-C(16A) -71.7(6)

O(2)-Mg(2)-O(5)-C(16A) 112.5(8)

O(1)-Mg(2)-O(5)-C(16A) 106.6(6)

Br(1)-Mg(2)-O(5)-C(16A) -165.2(6)

Br(2)-Mg(2)-O(5)-C(16A) 20.0(6)

Mg(1)-Mg(2)-O(5)-C(16A) 145.6(5)

Mg(3)-Mg(2)-O(5)-C(16A) 69.3(6)

O(6)-Mg(2)-O(5)-C(13) 133.5(7)

O(2)-Mg(2)-O(5)-C(13) -42.3(10)

O(1)-Mg(2)-O(5)-C(13) -48.2(7)

Br(1)-Mg(2)-O(5)-C(13) 40.0(7)

Br(2)-Mg(2)-O(5)-C(13) -134.8(7)

Mg(1)-Mg(2)-O(5)-C(13) -9.2(7)

Mg(3)-Mg(2)-O(5)-C(13) -85.5(7)

O(5)-Mg(2)-O(6)-C(17) -49.4(4)

O(2)-Mg(2)-O(6)-C(17) 129.7(4)

O(1)-Mg(2)-O(6)-C(17) 144.1(11)

Br(1)-Mg(2)-O(6)-C(17) 42.4(4)

Br(2)-Mg(2)-O(6)-C(17) -142.5(4)

Mg(1)-Mg(2)-O(6)-C(17) 88.7(4)

Mg(3)-Mg(2)-O(6)-C(17) 171.3(4)

O(5)-Mg(2)-O(6)-C(20) 124.5(4)

O(2)-Mg(2)-O(6)-C(20) -56.4(4)

O(1)-Mg(2)-O(6)-C(20) -42.0(13)

Br(1)-Mg(2)-O(6)-C(20) -143.7(3)

Br(2)-Mg(2)-O(6)-C(20) 31.4(4)

Mg(1)-Mg(2)-O(6)-C(20) -97.4(4)

Mg(3)-Mg(2)-O(6)-C(20) -14.8(4)

O(1)-Mg(3)-O(7)-C(24) 132.8(3)

O(2)-Mg(3)-O(7)-C(24) 144.5(15)

O(8)-Mg(3)-O(7)-C(24) -46.1(4)

Br(2)-Mg(3)-O(7)-C(24) -140.4(3)

Br(3)-Mg(3)-O(7)-C(24) 46.1(3)

Mg(2)-Mg(3)-O(7)-C(24) 175.6(3)

Mg(1)-Mg(3)-O(7)-C(24) 91.8(4)

O(1)-Mg(3)-O(7)-C(21) -57.5(4)

O(2)-Mg(3)-O(7)-C(21) -45.8(17)

O(8)-Mg(3)-O(7)-C(21) 123.6(4)

Br(2)-Mg(3)-O(7)-C(21) 29.3(4)

Br(3)-Mg(3)-O(7)-C(21) -144.2(4)

Mg(2)-Mg(3)-O(7)-C(21) -14.7(4)

Mg(1)-Mg(3)-O(7)-C(21) -98.4(4)

O(7)-Mg(3)-O(8)-C(28) 103.8(4)

O(1)-Mg(3)-O(8)-C(28) -71.6(7)

O(2)-Mg(3)-O(8)-C(28) -77.1(4)

Br(2)-Mg(3)-O(8)-C(28) -165.3(4)

Br(3)-Mg(3)-O(8)-C(28) 10.1(4)

Mg(2)-Mg(3)-O(8)-C(28) -114.4(4)

Mg(1)-Mg(3)-O(8)-C(28) -39.2(4)

O(7)-Mg(3)-O(8)-C(25) -82.6(4)

O(1)-Mg(3)-O(8)-C(25) 102.1(7)

O(2)-Mg(3)-O(8)-C(25) 96.6(4)

Br(2)-Mg(3)-O(8)-C(25) 8.3(4)

Br(3)-Mg(3)-O(8)-C(25) -176.2(4)

Mg(2)-Mg(3)-O(8)-C(25) 59.3(4)

Mg(1)-Mg(3)-O(8)-C(25) 134.5(4)

Mg(3)-O(1)-C(1)-C(2) -62.5(4)

Mg(1)-O(1)-C(1)-C(2) 63.1(5)

Mg(2)-O(1)-C(1)-C(2) -179.0(3)

Mg(3)-O(2)-C(3)-C(4) -180.0(3)

Mg(2)-O(2)-C(3)-C(4) -62.4(4)

Mg(1)-O(2)-C(3)-C(4) 63.3(4)

C(8)-O(3)-C(5)-C(6) 26.1(5)

Mg(1)-O(3)-C(5)-C(6) -149.4(3)

O(3)-C(5)-C(6)-C(7) -37.6(5)

C(5)-C(6)-C(7)-C(8) 35.1(6)

C(5)-O(3)-C(8)-C(7) -3.7(5)

Mg(1)-O(3)-C(8)-C(7) 171.3(3)

C(6)-C(7)-C(8)-O(3) -19.9(6)

C(12)-O(4)-C(9)-C(10) 22.5(5)

Mg(1)-O(4)-C(9)-C(10) -150.9(3)

O(4)-C(9)-C(10)-C(11) -37.9(5)

C(9)-C(10)-C(11)-C(12) 38.9(5)

C(9)-O(4)-C(12)-C(11) 2.2(5)

Mg(1)-O(4)-C(12)-C(11) 174.9(3)

C(10)-C(11)-C(12)-O(4) -25.9(5)

C(19)-C(18A)-C(17)-O(6) 25(2)

C(19)-C(18A)-C(17)-C(18) -69(2)

C(20)-O(6)-C(17)-C(18A) -11.0(14)

Mg(2)-O(6)-C(17)-C(18A) 163.9(13)

C(20)-O(6)-C(17)-C(18) 21.5(12)

Mg(2)-O(6)-C(17)-C(18) -163.6(11)

C(19)-C(18)-C(17)-C(18A) 67.7(19)

C(19)-C(18)-C(17)-O(6) -27.8(16)

C(17)-C(18A)-C(19)-C(18) 69.9(17)

C(17)-C(18A)-C(19)-C(20) -28(2)

C(17)-C(18)-C(19)-C(18A) -66.2(17)

C(17)-C(18)-C(19)-C(20) 23.4(16)

C(17)-O(6)-C(20)-C(19) -6.7(5)

Mg(2)-O(6)-C(20)-C(19) 178.7(3)

C(18A)-C(19)-C(20)-O(6) 21.0(13)

C(18)-C(19)-C(20)-O(6) -10.4(11)

C(24)-O(7)-C(21)-C(22) 0.8(11)

Mg(3)-O(7)-C(21)-C(22) -170.0(10)

C(24)-O(7)-C(21)-C(22A) -22.8(9)

Mg(3)-O(7)-C(21)-C(22A) 166.4(8)

C(23)-C(22)-C(21)-O(7) -9.7(13)

C(23)-C(22)-C(21)-C(22A) 82.8(19)

C(23A)-C(22A)-C(21)-O(7) 1.3(10)

C(23A)-C(22A)-C(21)-C(22) -93.0(18)

C(22)-C(23)-C(24)-O(7) -15.0(17)

C(22)-C(23)-C(24)-C(23A) -93(2)

C(21)-O(7)-C(24)-C(23) 9.1(14)

Mg(3)-O(7)-C(24)-C(23) -179.1(14)

C(21)-O(7)-C(24)-C(23A) 34.9(7)

Mg(3)-O(7)-C(24)-C(23A) -153.3(6)

C(22A)-C(23A)-C(24)-C(23) 75.8(16)

C(22A)-C(23A)-C(24)-O(7) -33.5(8)

C(28)-O(8)-C(25)-C(26) -0.6(6)

Mg(3)-O(8)-C(25)-C(26) -175.3(4)

O(8)-C(25)-C(26)-C(27) 23.4(7)

C(25)-C(26)-C(27)-C(28) -36.9(6)

C(25)-O(8)-C(28)-C(27) -23.6(6)

Mg(3)-O(8)-C(28)-C(27) 150.9(4)

C(26)-C(27)-C(28)-O(8) 37.7(6)

C(33)-Zn(1)-C(31)-C(32) 52.8(7)

C(29)-Zn(1)-C(31)-C(32) -132.6(7)

Zn(2)-Zn(1)-C(31)-C(32) -109.9(5)

C(33)-Zn(1)-C(31)-Zn(1A) 23(3)

C(29)-Zn(1)-C(31)-Zn(1A) -162(4)

Zn(2)-Zn(1)-C(31)-Zn(1A) -140(4)

C(33)-Zn(1)-C(31)-Zn(2) 162.6(5)

C(29)-Zn(1)-C(31)-Zn(2) -22.7(6)

C(29A)-Zn(1A)-C(31)-C(32) -121.6(12)

C(33A)-Zn(1A)-C(31)-C(32) 57.0(10)

Zn(2A)-Zn(1A)-C(31)-C(32) -115.6(5)

C(29A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(1) 30(3)

C(33A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(1) -151(4)

Zn(2A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(1) 36(3)

C(29A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(2) -8.2(11)

C(33A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(2) 170.4(9)

Zn(2A)-Zn(1A)-C(31)-Zn(2) -2.2(3)

C(37)-Zn(2)-C(31)-C(32) 20.5(6)

C(35)-Zn(2)-C(31)-C(32) -135.5(6)

Zn(1)-Zn(2)-C(31)-C(32) 107.7(6)

C(37)-Zn(2)-C(31)-Zn(1) -87.1(3)

C(35)-Zn(2)-C(31)-Zn(1) 116.8(4)

C(37)-Zn(2)-C(31)-Zn(1A) -80.6(4)

C(35)-Zn(2)-C(31)-Zn(1A) 123.4(6)

Zn(1)-Zn(2)-C(31)-Zn(1A) 6.6(6)

C(35)-Zn(2)-C(37)-C(38) -168.9(8)

C(31)-Zn(2)-C(37)-C(38) 52.6(6)

Zn(1)-Zn(2)-C(37)-C(38) 6.6(5)

C(35)-Zn(2)-C(37)-Zn(2A) -130.1(16)

C(31)-Zn(2)-C(37)-Zn(2A) 91.5(11)

Zn(1)-Zn(2)-C(37)-Zn(2A) 45.5(10)

C(35A)-Zn(2A)-C(37)-C(38) -152.2(14)

Zn(1A)-Zn(2A)-C(37)-C(38) 22.2(6)

C(35A)-Zn(2A)-C(37)-Zn(2) 62.4(17)

Zn(1A)-Zn(2A)-C(37)-Zn(2) -123.1(12)

C(42)-O(9)-C(39)-C(40) -30.4(13)

O(9)-C(39)-C(40)-C(41) 29.4(14)

C(39)-C(40)-C(41)-C(42) -18.0(15)

C(39)-O(9)-C(42)-C(41) 19.0(13)

C(40)-C(41)-C(42)-O(9) -0.1(14)

C(39A)-O(9A)-C(42A)-C(41A) 6(3)

C(40A)-C(41A)-C(42A)-O(9A) 9(3)

C(42A)-O(9A)-C(39A)-C(40A) -18(2)

C(42A)-C(41A)-C(40A)-C(39A) -20(3)

O(9A)-C(39A)-C(40A)-C(41A) 24(3)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: