

4a

Table 1S. Atomic coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for 4a.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
P(1)	1136.9(4)	9871.0(4)	1211(2)	57(1)
C(9)	504(1)	9125(1)	-1334(5)	44(1)
C(16)	1204(1)	11301(1)	4432(5)	45(1)
C(19)	521(1)	10701(1)	2448(5)	43(1)
C(2)	487(1)	9922(1)	547(5)	46(1)
C(14)	713(2)	11106(1)	1510(6)	51(1)
C(1)	248(1)	9580(1)	-682(5)	43(1)
C(3)	236(1)	10336(1)	1233(5)	44(1)
C(17)	979(2)	10916(1)	5411(6)	56(1)
C(15)	1048(2)	11402(1)	2494(5)	52(1)
C(24)	1403(2)	9978(1)	-1020(7)	58(1)
C(20)	1629(1)	11579(1)	5397(6)	53(1)
C(6)	1004(1)	8268(1)	-2501(6)	51(1)
C(5)	906(2)	8377(2)	-512(7)	62(1)
C(25)	1921(2)	10040(1)	-1319(7)	59(1)
C(4)	663(2)	8792(1)	70(6)	57(1)
C(18)	648(2)	10619(1)	4428(6)	57(1)
C(10)	1278(2)	7805(2)	-3106(7)	63(1)
C(7)	847(2)	8607(2)	-3890(6)	60(1)
C(8)	601(2)	9025(2)	-3334(6)	58(1)
C(27)	2727(2)	10234(2)	-126(10)	86(2)
C(26)	2235(2)	10181(2)	209(8)	70(1)
C(29)	2616(2)	10024(2)	-3563(10)	91(2)
C(30)	2123(2)	9967(2)	-3246(8)	75(1)
C(22)	1674(2)	12091(2)	4587(10)	102(2)
C(21)	2094(2)	11297(2)	4907(10)	95(2)
C(13)	1038(2)	7360(2)	-2096(12)	110(2)
C(12)	1239(2)	7705(2)	-5352(10)	122(3)
C(11)	1793(2)	7843(2)	-2447(12)	118(3)
C(23)	1575(2)	11604(2)	7678(7)	85(2)
C(28)	2919(2)	10152(2)	-2014(11)	91(2)

Table 25. Bond lengths [Å] and angles [°] for 4a.

P(1)-C(24)	1.676(5)	P(1)-C(2)	1.847(4)
C(9)-C(4)	1.379(5)	C(9)-C(8)	1.381(5)
C(9)-C(1)	1.499(5)	C(16)-C(15)	1.383(5)
C(16)-C(17)	1.386(5)	C(16)-C(20)	1.537(5)
C(19)-C(18)	1.377(5)	C(19)-C(14)	1.380(5)
C(19)-C(3)	1.508(5)	C(2)-C(3)	1.405(5)
C(2)-C(1)	1.407(5)	C(14)-C(15)	1.390(5)
C(1)-C(3)#1	1.400(5)	C(3)-C(1)#1	1.400(5)
C(17)-C(18)	1.387(5)	C(24)-C(25)	1.450(6)
C(20)-C(22)	1.511(6)	C(20)-C(23)	1.522(6)
C(20)-C(21)	1.532(6)	C(6)-C(5)	1.379(6)
C(6)-C(7)	1.378(6)	C(6)-C(10)	1.534(5)
C(5)-C(4)	1.376(5)	C(25)-C(26)	1.387(6)
C(25)-C(30)	1.408(7)	C(10)-C(11)	1.486(7)
C(10)-C(12)	1.518(7)	C(10)-C(13)	1.543(8)
C(7)-C(8)	1.385(5)	C(27)-C(28)	1.377(8)
C(27)-C(26)	1.380(7)	C(29)-C(28)	1.368(8)
C(29)-C(30)	1.382(7)		
C(24)-P(1)-C(2)	101.43(19)	C(4)-C(9)-C(8)	117.0(3)
C(4)-C(9)-C(1)	120.7(3)	C(8)-C(9)-C(1)	122.3(3)
C(15)-C(16)-C(17)	116.8(3)	C(15)-C(16)-C(20)	121.6(3)
C(17)-C(16)-C(20)	121.5(3)	C(18)-C(19)-C(14)	117.7(3)
C(18)-C(19)-C(3)	122.2(3)	C(14)-C(19)-C(3)	119.7(3)
C(3)-C(2)-C(1)	120.0(3)	C(3)-C(2)-P(1)	117.3(3)
C(1)-C(2)-P(1)	122.6(3)	C(19)-C(14)-C(15)	120.9(3)
C(3)#1-C(1)-C(2)	118.9(3)	C(3)#1-C(1)-C(9)	120.6(3)
C(2)-C(1)-C(9)	120.4(3)	C(1)#1-C(3)-C(2)	121.1(3)
C(1)#1-C(3)-C(19)	121.6(3)	C(2)-C(3)-C(19)	117.2(3)
C(16)-C(17)-C(18)	121.4(4)	C(16)-C(15)-C(14)	121.6(4)
C(25)-C(24)-P(1)	124.8(3)	C(22)-C(20)-C(23)	108.6(4)
C(22)-C(20)-C(21)	109.0(4)	C(23)-C(20)-C(21)	108.4(4)
C(22)-C(20)-C(16)	112.3(3)	C(23)-C(20)-C(16)	111.3(3)
C(21)-C(20)-C(16)	107.2(3)	C(5)-C(6)-C(7)	115.6(4)
C(5)-C(6)-C(10)	121.7(4)	C(7)-C(6)-C(10)	122.7(4)
C(4)-C(5)-C(6)	122.9(4)	C(26)-C(25)-C(30)	117.3(4)
C(26)-C(25)-C(24)	123.1(4)	C(30)-C(25)-C(24)	119.6(4)
C(5)-C(4)-C(9)	121.1(4)	C(19)-C(18)-C(17)	121.3(4)
C(11)-C(10)-C(12)	111.6(5)	C(11)-C(10)-C(6)	109.4(4)
C(12)-C(10)-C(6)	111.8(4)	C(11)-C(10)-C(13)	109.7(5)
C(12)-C(10)-C(13)	104.6(5)	C(6)-C(10)-C(13)	109.5(4)
C(6)-C(7)-C(8)	122.4(4)	C(9)-C(8)-C(7)	121.1(4)
C(28)-C(27)-C(26)	120.2(5)	C(27)-C(26)-C(25)	121.5(5)
C(28)-C(29)-C(30)	120.8(6)	C(29)-C(30)-C(25)	120.6(5)
C(29)-C(28)-C(27)	119.6(5)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x, -y+2, -z

Table 35. Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $4a$ .

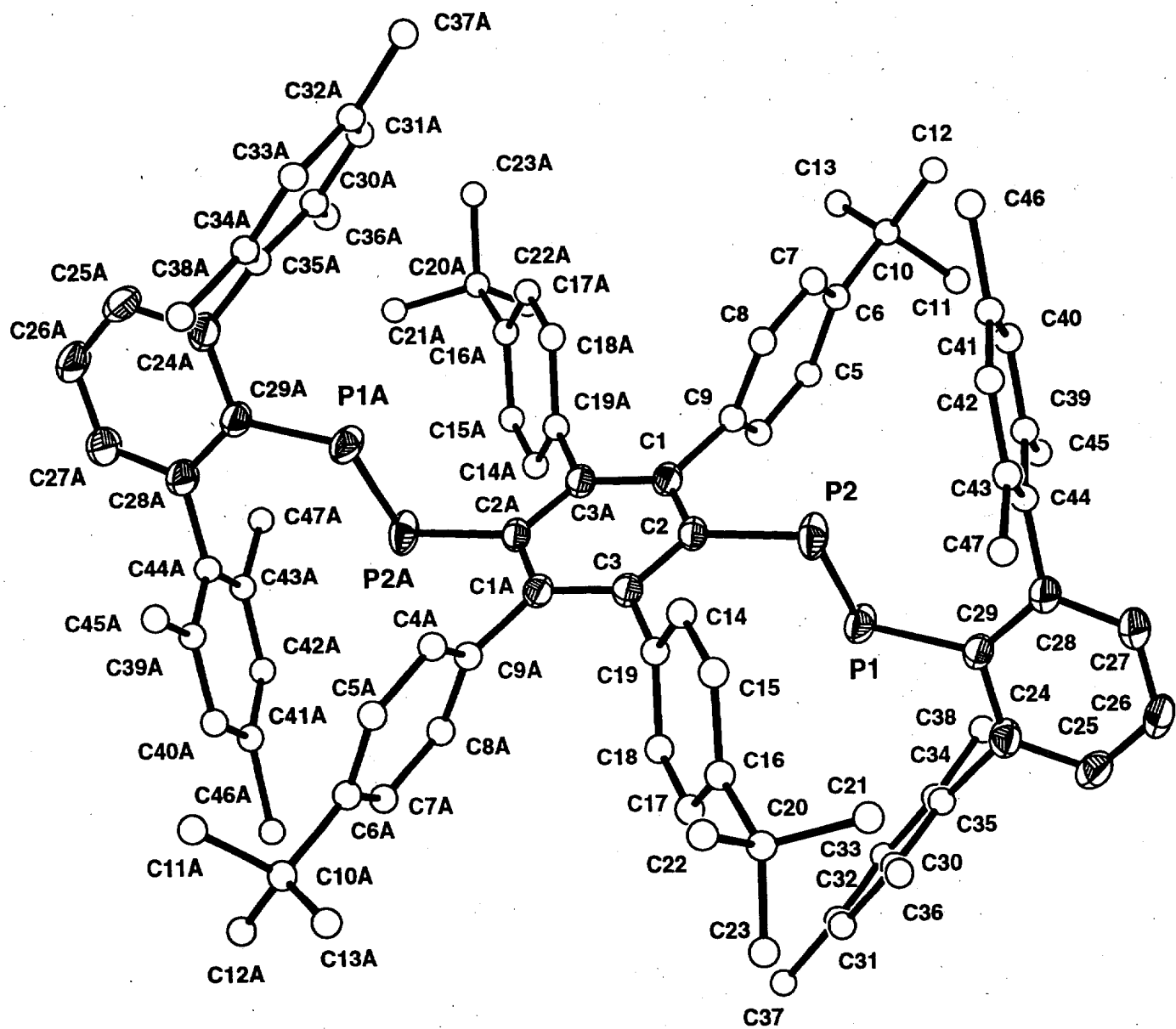
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [ (ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12} ]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
P(1)	51(1)	62(1)	58(1)	-7(1)	-12(1)	3(1)
C(9)	49(2)	40(2)	44(2)	-6(2)	-6(2)	-2(2)
C(16)	50(2)	45(2)	41(2)	-6(2)	-1(2)	-2(2)
C(19)	49(2)	38(2)	43(2)	-8(2)	-1(2)	0(2)
C(2)	50(2)	43(2)	44(2)	-2(2)	-6(2)	1(2)
C(14)	68(3)	50(2)	35(2)	0(2)	-9(2)	-7(2)
C(1)	50(2)	40(2)	40(2)	-4(2)	-2(2)	0(2)
C(3)	54(2)	38(2)	41(2)	-5(2)	-6(2)	-4(2)
C(17)	76(3)	53(2)	37(2)	2(2)	-14(2)	-8(2)
C(15)	68(3)	50(2)	38(2)	0(2)	2(2)	-14(2)
C(24)	59(2)	45(2)	69(3)	-2(2)	-12(2)	3(2)
C(20)	57(2)	52(2)	50(2)	-8(2)	-5(2)	-8(2)
C(6)	52(2)	47(2)	55(2)	-5(2)	-4(2)	4(2)
C(5)	82(3)	47(2)	57(3)	3(2)	-8(2)	14(2)
C(25)	58(2)	42(2)	76(3)	4(2)	-4(2)	7(2)
C(4)	79(3)	51(2)	41(2)	-5(2)	-4(2)	7(2)
C(18)	75(3)	50(2)	46(2)	5(2)	-12(2)	-16(2)
C(10)	61(3)	60(3)	69(3)	-13(2)	-7(2)	14(2)
C(7)	75(3)	61(2)	43(2)	-10(2)	2(2)	14(2)
C(8)	76(3)	52(2)	47(2)	-1(2)	-6(2)	12(2)
C(27)	63(3)	73(3)	122(5)	-3(3)	-12(3)	-14(2)
C(26)	60(3)	58(3)	91(3)	-4(2)	-5(3)	-12(2)
C(29)	74(4)	91(4)	106(4)	15(3)	19(3)	5(3)
C(30)	69(3)	78(3)	79(3)	8(3)	3(3)	8(2)
C(22)	122(5)	66(3)	118(5)	15(3)	-55(4)	-41(3)
C(21)	53(3)	111(4)	119(5)	-35(4)	4(3)	-5(3)
C(13)	96(4)	60(3)	174(7)	-30(4)	-3(4)	12(3)
C(12)	128(5)	122(5)	114(5)	-62(4)	-32(4)	64(4)
C(11)	70(3)	111(5)	174(7)	-55(5)	-30(4)	29(3)
C(23)	82(3)	112(4)	59(3)	-23(3)	-10(3)	-30(3)
C(28)	64(3)	75(3)	135(5)	18(4)	10(4)	-5(3)

Table #5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $4a$ .

	x	y	z	U(eq)
H(14)	616	11183	188	62
H(17)	1054	10855	6772	67
H(15)	1171	11677	1826	62
H(24)	1201	9999	-2160	69
H(5)	1009	8158	489	74
H(4)	605	8848	1448	68
H(18)	507	10357	5126	68
H(7)	910	8552	-5264	71
H(8)	498	9244	-4334	70
H(27)	2933	10327	939	103
H(26)	2109	10242	1503	84
H(29)	2745	9974	-4859	109
H(30)	1920	9878	-4326	90
H(22A)	1370	12263	4791	153
H(22B)	1748	12078	3158	153
H(22C)	1934	12258	5292	153
H(21A)	2124	11261	3457	142
H(21B)	2080	10978	5531	142
H(21C)	2373	11473	5422	142
H(13A)	1194	7065	-2568	165
H(13B)	695	7352	-2440	165
H(13C)	1073	7385	-644	165
H(12A)	1420	7950	-6090	182
H(12B)	900	7715	-5756	182
H(12C)	1372	7386	-5645	182
H(11A)	1946	8117	-3115	177
H(11B)	1964	7546	-2797	177
H(11C)	1805	7890	-998	177
H(23A)	1831	11806	8234	127
H(23B)	1598	11280	8240	127
H(23C)	1261	11744	8015	127
H(28)	3255	10183	-2237	109



5

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

	x	y	z	U(eq)
P(1)	2627(1)	4024(2)	1866.5(9)	61(1)
P(2)	4054(2)	4508(1)	1989.9(9)	58(1)
Cl(1)	3036(3)	1393(3)	5813(2)	160(1)
Cl(2)	5545(4)	1169(4)	5647(3)	205(2)
Cl(3)	3797(3)	3113(3)	6388(2)	162(1)
C(1)	5361(4)	3953(4)	254(3)	41(1)
C(2)	4606(4)	4769(4)	853(3)	39(1)
C(3)	4257(4)	5820(4)	603(3)	41(1)
C(4)	5427(6)	2015(5)	244(4)	63(2)
C(5)	5922(7)	968(5)	411(5)	78(2)
C(6)	6793(6)	700(5)	867(4)	66(2)
C(7)	7131(6)	1538(5)	1161(4)	67(2)
C(8)	6633(5)	2582(5)	1000(4)	55(1)
C(9)	5793(5)	2833(4)	520(3)	44(1)
C(10)	7377(9)	-458(6)	1016(6)	102(3)
C(11)	6370(20)	-1007(11)	1332(18)	330(17)
C(12)	7945(15)	-603(8)	1679(9)	200(8)
C(13)	8000(20)	-1017(12)	249(9)	400(20)
C(14)	3907(5)	6993(5)	1903(4)	57(2)
C(15)	3176(6)	7761(5)	2527(4)	64(2)
C(16)	1979(5)	8258(5)	2541(4)	57(2)
C(17)	1569(5)	7954(5)	1873(4)	58(2)
C(18)	2289(5)	7183(5)	1247(4)	56(1)
C(19)	3474(4)	6686(4)	1254(3)	42(1)
C(20)	1164(6)	9077(5)	3259(4)	69(2)
C(21)	1070(15)	8556(10)	4079(7)	226(9)
C(22)	1697(12)	9948(9)	3316(10)	193(7)
C(23)	-82(10)	9494(12)	3167(10)	219(9)
C(24)	536(5)	4049(4)	3041(3)	48(1)
C(25)	-219(5)	3961(5)	3835(4)	62(2)
C(26)	235(6)	3695(6)	4539(4)	72(2)
C(27)	1457(5)	3504(6)	4453(4)	68(2)
C(28)	2249(5)	3580(5)	3681(3)	53(1)
C(29)	1776(4)	3880(4)	2959(3)	47(1)
C(30)	-524(5)	5450(5)	2202(4)	57(2)
C(31)	-1135(6)	5738(5)	1563(4)	69(2)
C(32)	-1274(6)	4975(6)	1030(4)	69(2)
C(33)	-779(5)	3918(6)	1146(4)	63(2)
C(34)	-172(5)	3600(5)	1780(4)	54(1)
C(35)	-50(4)	4378(4)	2314(3)	46(1)
C(36)	-383(7)	6298(5)	2768(5)	77(2)
C(37)	-1960(8)	5311(7)	338(5)	98(3)
C(38)	356(7)	2427(5)	1885(5)	79(2)
C(39)	4322(6)	2333(6)	3346(4)	65(2)
C(40)	5547(6)	2106(7)	3353(4)	80(2)
C(41)	6002(6)	2867(8)	3651(5)	90(2)
C(42)	5244(6)	3836(7)	3958(4)	84(2)
C(43)	4026(5)	4100(6)	3975(3)	62(2)

C(44)	3571(5)	3338(5)	3659(3)	54(2)
C(45)	3879(7)	1517(6)	2982(6)	92(2)
C(46)	7354(7)	2565(11)	3633(7)	149(5)
C(47)	3238(7)	5199(7)	4287(5)	87(2)
C(48)	4180(8)	2040(9)	5650(6)	118(3)

---



Table S3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 5.

P(1)-C(29)	1.843(5)	P(1)-P(2)	2.008(2)
P(2)-C(2)	1.854(5)	C1(1)-C(48)	1.748(11)
C1(2)-C(48)	1.709(9)	C1(3)-C(48)	1.738(11)
C(1)-C(2)	1.401(7)	C(1)-C(3)#1	1.402(7)
C(1)-C(9)	1.507(7)	C(2)-C(3)	1.407(7)
C(3)-C(1)#1	1.402(7)	C(3)-C(19)	1.496(7)
C(4)-H(4)	0.9300	C(4)-C(9)	1.370(8)
C(4)-C(5)	1.385(8)	C(5)-H(5)	0.9301
C(5)-C(6)	1.378(9)	C(6)-C(7)	1.385(9)
C(6)-C(10)	1.527(9)	C(7)-H(7)	0.9300
C(7)-C(8)	1.381(8)	C(8)-H(8)	0.9301
C(8)-C(9)	1.376(7)	C(10)-C(12)	1.382(12)
C(10)-C(13)	1.379(15)	C(10)-C(11)	1.53(2)
C(11)-H(11A)	0.9600	C(11)-H(11B)	0.9600
C(11)-H(11C)	0.9600	C(12)-H(12B)	0.9599
C(12)-H(12A)	0.9600	C(12)-H(12C)	0.9600
C(13)-H(13C)	0.9600	C(13)-H(13A)	0.9600
C(13)-H(13B)	0.9600	C(14)-H(14)	0.9300
C(14)-C(19)	1.379(7)	C(14)-C(15)	1.380(8)
C(15)-H(15)	0.9299	C(15)-C(16)	1.387(8)
C(16)-C(17)	1.387(8)	C(16)-C(20)	1.534(8)
C(17)-H(17)	0.9300	C(17)-C(18)	1.382(8)
C(18)-H(18)	0.9300	C(18)-C(19)	1.383(7)
C(20)-C(22)	1.454(12)	C(20)-C(21)	1.475(13)
C(20)-C(23)	1.473(12)	C(21)-H(21C)	0.9600
C(21)-H(21A)	0.9600	C(21)-H(21B)	0.9601
C(22)-H(22A)	0.9599	C(22)-H(22B)	0.9600
C(22)-H(22C)	0.9600	C(23)-H(23B)	0.9599
C(23)-H(23C)	0.9600	C(23)-H(23A)	0.9600
C(24)-C(25)	1.398(8)	C(24)-C(29)	1.400(7)
C(24)-C(35)	1.506(7)	C(25)-H(25)	0.9301
C(25)-C(26)	1.374(8)	C(26)-H(26)	0.9301
C(26)-C(27)	1.374(8)	C(27)-H(27)	0.9300
C(27)-C(28)	1.387(8)	C(28)-C(29)	1.419(7)
C(28)-C(44)	1.505(7)	C(30)-C(35)	1.388(8)
C(30)-C(31)	1.392(8)	C(30)-C(36)	1.511(8)
C(31)-H(31)	0.9300	C(31)-C(32)	1.391(9)
C(32)-C(33)	1.376(9)	C(32)-C(37)	1.529(9)
C(33)-H(33)	0.9300	C(33)-C(34)	1.386(8)
C(34)-C(35)	1.397(8)	C(34)-C(38)	1.515(9)
C(36)-H(36C)	0.9600	C(36)-H(36B)	0.9600
C(36)-H(36A)	0.9601	C(37)-H(37B)	0.9599
C(37)-H(37C)	0.9600	C(37)-H(37A)	0.9600
C(38)-H(38B)	0.9599	C(38)-H(38C)	0.9600
C(38)-H(38A)	0.9601	C(39)-C(44)	1.393(9)
C(39)-C(40)	1.405(9)	C(39)-C(45)	1.488(10)
C(40)-H(40)	0.9300	C(40)-C(41)	1.390(11)
C(41)-C(42)	1.357(11)	C(41)-C(46)	1.536(10)
C(42)-H(42)	0.9300	C(42)-C(43)	1.384(9)
C(43)-C(44)	1.403(8)	C(43)-C(47)	1.501(10)
C(45)-H(45B)	0.9600	C(45)-H(45C)	0.9600
C(45)-H(45A)	0.9600	C(46)-H(46A)	0.9600
C(46)-H(46B)	0.9600	C(46)-H(46C)	0.9600
C(47)-H(47A)	0.9599	C(47)-H(47B)	0.9600
C(47)-H(47C)	0.9601	C(48)-D(48A)	0.9599

C(29)-P(1)-P(2)	106.30(18)	C(2)-P(2)-P(1)	97.52(16)
C(2)-C(1)-C(3)#1	119.8(4)	C(2)-C(1)-C(9)	120.9(4)
C(3)#1-C(1)-C(9)	119.3(4)	C(1)-C(2)-C(3)	120.3(4)
C(1)-C(2)-P(2)	121.6(4)	C(3)-C(2)-P(2)	118.1(4)
C(1)#1-C(3)-C(2)	119.9(4)	C(1)#1-C(3)-C(19)	120.5(4)
C(2)-C(3)-C(19)	119.5(4)	H(4)-C(4)-C(9)	119.3(3)
H(4)-C(4)-C(5)	119.4(4)	C(9)-C(4)-C(5)	121.3(5)
H(5)-C(5)-C(6)	119.1(4)	H(5)-C(5)-C(4)	119.1(4)
C(6)-C(5)-C(4)	121.9(6)	C(5)-C(6)-C(7)	116.2(6)
C(5)-C(6)-C(10)	121.8(6)	C(7)-C(6)-C(10)	122.0(6)
H(7)-C(7)-C(8)	119.0(3)	H(7)-C(7)-C(6)	119.0(3)
C(8)-C(7)-C(6)	122.0(5)	H(8)-C(8)-C(9)	119.4(3)
H(8)-C(8)-C(7)	119.5(3)	C(9)-C(8)-C(7)	121.1(5)
C(4)-C(9)-C(8)	117.5(5)	C(4)-C(9)-C(1)	121.2(5)
C(8)-C(9)-C(1)	121.1(5)	C(12)-C(10)-C(13)	117.2(14)
C(12)-C(10)-C(6)	115.4(7)	C(13)-C(10)-C(6)	110.5(8)
C(12)-C(10)-C(11)	101.5(12)	C(13)-C(10)-C(11)	102.2(16)
C(6)-C(10)-C(11)	108.3(9)	H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5	H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-C(10)	110.0(6)	H(11B)-C(11)-C(10)	110.4(9)
H(11C)-C(11)-C(10)	108.0(11)	H(12B)-C(12)-H(12A)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-C(10)	109.5(8)	H(12A)-C(12)-C(10)	109.4(5)
H(12C)-C(12)-C(10)	109.5(8)	H(13C)-C(13)-H(13A)	109.5
H(13C)-C(13)-H(13B)	109.5	H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13C)-C(13)-C(10)	106.5(15)	H(13A)-C(13)-C(10)	111.4(10)
H(13B)-C(13)-C(10)	110.5(8)	H(14)-C(14)-C(19)	119.5(3)
H(14)-C(14)-C(15)	119.5(3)	C(19)-C(14)-C(15)	121.0(5)
H(15)-C(15)-C(14)	118.8(3)	H(15)-C(15)-C(16)	118.8(3)
C(14)-C(15)-C(16)	122.4(6)	C(15)-C(16)-C(17)	115.7(5)
C(15)-C(16)-C(20)	121.8(6)	C(17)-C(16)-C(20)	122.5(5)
H(17)-C(17)-C(18)	118.8(3)	H(17)-C(17)-C(16)	118.8(3)
C(18)-C(17)-C(16)	122.4(5)	H(18)-C(18)-C(17)	119.6(3)
H(18)-C(18)-C(19)	119.6(3)	C(17)-C(18)-C(19)	120.8(5)
C(14)-C(19)-C(18)	117.6(5)	C(14)-C(19)-C(3)	120.6(5)
C(18)-C(19)-C(3)	121.8(5)	C(22)-C(20)-C(21)	107.8(11)
C(22)-C(20)-C(23)	110.3(10)	C(21)-C(20)-C(23)	106.3(11)
C(22)-C(20)-C(16)	110.1(7)	C(21)-C(20)-C(16)	108.7(6)
C(23)-C(20)-C(16)	113.4(6)	H(21C)-C(21)-H(21A)	109.5
H(21C)-C(21)-H(21B)	109.5	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
H(21C)-C(21)-C(20)	109.6(5)	H(21A)-C(21)-C(20)	109.6(7)
H(21B)-C(21)-C(20)	109.3(8)	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
H(22A)-C(22)-C(20)	109.6(6)	H(22B)-C(22)-C(20)	109.3(7)
H(22C)-C(22)-C(20)	109.5(5)	H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23A)	109.5	H(23C)-C(23)-H(23A)	109.5
H(23B)-C(23)-C(20)	109.4(8)	H(23C)-C(23)-C(20)	109.4(8)
H(23A)-C(23)-C(20)	109.6(5)	C(25)-C(24)-C(29)	119.7(5)
C(25)-C(24)-C(35)	117.4(5)	C(29)-C(24)-C(35)	122.9(4)
H(25)-C(25)-C(26)	119.4(3)	H(25)-C(25)-C(24)	119.4(3)
C(26)-C(25)-C(24)	121.3(5)	H(26)-C(26)-C(25)	120.5(3)
H(26)-C(26)-C(27)	120.5(3)	C(25)-C(26)-C(27)	119.0(5)
H(27)-C(27)-C(26)	118.9(3)	H(27)-C(27)-C(28)	118.8(3)
C(26)-C(27)-C(28)	122.3(5)	C(27)-C(28)-C(29)	118.7(5)
C(27)-C(28)-C(44)	117.6(5)	C(29)-C(28)-C(44)	123.6(4)
C(24)-C(29)-C(28)	119.0(4)	C(24)-C(29)-P(1)	113.5(4)
C(28)-C(29)-P(1)	127.4(4)	C(35)-C(30)-C(31)	119.3(5)
C(35)-C(30)-C(36)	120.5(5)	C(31)-C(30)-C(36)	120.2(6)

H(31)-C(31)-C(32)	119.2(4)	H(31)-C(31)-C(30)	119.3(4)
C(32)-C(31)-C(30)	121.4(6)	C(33)-C(32)-C(31)	118.0(5)
C(33)-C(32)-C(37)	121.5(6)	C(31)-C(32)-C(37)	120.4(7)
H(33)-C(33)-C(32)	118.9(4)	H(33)-C(33)-C(34)	118.9(4)
C(32)-C(33)-C(34)	122.2(6)	C(33)-C(34)-C(35)	119.0(6)
C(33)-C(34)-C(38)	120.3(6)	C(35)-C(34)-C(38)	120.7(5)
C(30)-C(35)-C(34)	120.0(5)	C(30)-C(35)-C(24)	120.1(5)
C(34)-C(35)-C(24)	119.8(5)	H(36C)-C(36)-H(36B)	109.5
H(36C)-C(36)-H(36A)	109.5	H(36B)-C(36)-H(36A)	109.5
H(36C)-C(36)-C(30)	109.5(4)	H(36B)-C(36)-C(30)	109.5(3)
H(36A)-C(36)-C(30)	109.4(4)	H(37B)-C(37)-H(37C)	109.5
H(37B)-C(37)-H(37A)	109.5	H(37C)-C(37)-H(37A)	109.5
H(37B)-C(37)-C(32)	109.4(4)	H(37C)-C(37)-C(32)	109.4(4)
H(37A)-C(37)-C(32)	109.6(4)	H(38B)-C(38)-H(38C)	109.5
H(38B)-C(38)-H(38A)	109.5	H(38C)-C(38)-H(38A)	109.5
H(38B)-C(38)-C(34)	109.5(3)	H(38C)-C(38)-C(34)	109.5(4)
H(38A)-C(38)-C(34)	109.4(3)	C(44)-C(39)-C(40)	118.1(7)
C(44)-C(39)-C(45)	122.3(6)	C(40)-C(39)-C(45)	119.6(7)
H(40)-C(40)-C(41)	119.4(4)	H(40)-C(40)-C(39)	119.6(5)
C(41)-C(40)-C(39)	121.0(7)	C(42)-C(41)-C(40)	119.3(6)
C(42)-C(41)-C(46)	122.5(8)	C(40)-C(41)-C(46)	118.2(8)
H(42)-C(42)-C(41)	119.0(4)	H(42)-C(42)-C(43)	118.9(5)
C(41)-C(42)-C(43)	122.1(7)	C(42)-C(43)-C(44)	118.5(7)
C(42)-C(43)-C(47)	119.9(6)	C(44)-C(43)-C(47)	121.5(6)
C(39)-C(44)-C(43)	120.9(5)	C(39)-C(44)-C(28)	118.6(6)
C(43)-C(44)-C(28)	120.5(6)	H(45B)-C(45)-H(45C)	109.5
H(45B)-C(45)-H(45A)	109.5	H(45C)-C(45)-H(45A)	109.5
H(45B)-C(45)-C(39)	109.5(4)	H(45C)-C(45)-C(39)	109.5(4)
H(45A)-C(45)-C(39)	109.5(4)	H(46A)-C(46)-H(46B)	109.5
H(46A)-C(46)-H(46C)	109.5	H(46B)-C(46)-H(46C)	109.5
H(46A)-C(46)-C(41)	109.4(6)	H(46B)-C(46)-C(41)	109.5(6)
H(46C)-C(46)-C(41)	109.5(5)	H(47A)-C(47)-H(47B)	109.5
H(47A)-C(47)-H(47C)	109.5	H(47B)-C(47)-H(47C)	109.5
H(47A)-C(47)-C(43)	109.5(4)	H(47B)-C(47)-C(43)	109.4(4)
H(47C)-C(47)-C(43)	109.5(3)	D(48A)-C(48)-Cl(2)	107.3(3)
D(48A)-C(48)-Cl(3)	107.2(3)	Cl(2)-C(48)-Cl(3)	112.5(6)
D(48A)-C(48)-Cl(1)	107.3(3)	Cl(2)-C(48)-Cl(1)	111.3(7)
Cl(3)-C(48)-Cl(1)	110.9(5)		

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1, -y+1, -z

Table 7S. Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for 5.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [ (ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12} ]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
P(1)	45(1)	110(1)	35(1)	19(1)	-12(1)	-33(1)
P(2)	69(1)	84(1)	31(1)	14(1)	-11(1)	-41(1)
Cl(1)	173(3)	155(3)	149(3)	28(2)	-32(2)	-48(2)
Cl(2)	165(3)	244(4)	175(3)	-10(3)	-91(3)	43(3)
Cl(3)	185(3)	170(3)	122(2)	-5(2)	-25(2)	-46(2)
C(1)	37(3)	57(3)	35(3)	10(2)	-11(2)	-20(2)
C(2)	39(3)	50(3)	33(3)	10(2)	-11(2)	-21(2)
C(3)	38(3)	50(3)	36(3)	9(2)	-10(2)	-17(2)
C(4)	75(4)	57(4)	69(4)	16(3)	-42(3)	-21(3)
C(5)	111(6)	51(4)	87(5)	12(3)	-52(4)	-24(4)
C(6)	85(5)	52(4)	58(4)	3(3)	-30(3)	-2(3)
C(7)	68(4)	70(4)	66(4)	14(3)	-36(3)	-10(3)
C(8)	65(4)	55(4)	56(3)	13(3)	-28(3)	-23(3)
C(9)	45(3)	48(3)	38(3)	11(2)	-11(2)	-13(2)
C(10)	153(8)	50(4)	102(6)	0(4)	-63(6)	3(5)
C(11)	350(30)	100(10)	680(50)	165(19)	-360(30)	-108(14)
C(12)	340(20)	68(6)	231(15)	36(7)	-205(16)	5(9)
C(13)	620(40)	153(13)	136(12)	21(10)	77(18)	240(20)
C(14)	49(3)	69(4)	51(3)	0(3)	-12(3)	-12(3)
C(15)	62(4)	73(4)	59(4)	-10(3)	-18(3)	-20(3)
C(16)	52(3)	51(3)	64(4)	-1(3)	-9(3)	-14(3)
C(17)	45(3)	59(4)	65(4)	4(3)	-12(3)	-7(3)
C(18)	54(3)	63(4)	52(3)	4(3)	-16(3)	-15(3)
C(19)	42(3)	51(3)	34(3)	8(2)	-8(2)	-16(2)
C(20)	67(4)	55(4)	76(4)	-16(3)	-6(3)	-10(3)
C(21)	330(20)	128(10)	91(8)	-25(7)	85(10)	39(11)
C(22)	169(12)	121(9)	255(16)	-110(10)	22(11)	-45(8)
C(23)	89(7)	251(16)	264(17)	-191(15)	-38(9)	46(9)
C(24)	47(3)	59(3)	45(3)	13(3)	-11(2)	-25(3)
C(25)	39(3)	88(5)	58(4)	11(3)	-6(3)	-23(3)
C(26)	53(4)	113(6)	49(4)	28(4)	-1(3)	-29(4)
C(27)	59(4)	102(5)	41(3)	25(3)	-10(3)	-19(3)
C(28)	45(3)	74(4)	39(3)	14(3)	-9(2)	-17(3)
C(29)	40(3)	64(4)	37(3)	11(2)	-7(2)	-19(3)
C(30)	57(3)	62(4)	57(3)	4(3)	-21(3)	-18(3)
C(31)	71(4)	69(4)	76(4)	17(3)	-36(4)	-18(3)
C(32)	59(4)	103(6)	58(4)	16(4)	-27(3)	-33(4)
C(33)	60(4)	77(5)	62(4)	-7(3)	-22(3)	-29(3)
C(34)	43(3)	65(4)	55(3)	-1(3)	-5(3)	-20(3)
C(35)	34(3)	63(4)	44(3)	7(3)	-8(2)	-18(3)
C(36)	101(5)	62(4)	80(5)	3(3)	-38(4)	-27(4)
C(37)	101(6)	130(7)	86(5)	20(5)	-58(5)	-41(5)
C(38)	78(5)	67(4)	87(5)	-9(4)	-14(4)	-18(4)
C(39)	58(4)	88(5)	51(3)	23(3)	-17(3)	-20(4)
C(40)	56(4)	106(6)	65(4)	15(4)	-15(3)	-1(4)
C(41)	48(4)	155(8)	67(4)	-6(5)	-21(3)	-20(5)
C(42)	51(4)	144(7)	59(4)	-9(4)	-15(3)	-28(5)
C(43)	55(4)	99(5)	35(3)	1(3)	-14(3)	-23(3)

C(44)	46(3)	79(4)	35(3)	19(3)	-10(2)	-15(3)
C(45)	85(5)	73(5)	120(7)	18(5)	-31(5)	-18(4)
C(46)	45(4)	252(14)	139(9)	-41(9)	-26(5)	-17(6)
C(47)	76(5)	122(7)	62(4)	-20(4)	-10(4)	-28(5)
C(48)	93(6)	157(9)	86(6)	23(6)	-23(5)	-4(6)

---

Table S. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for 5.

	x	y	z	U(eq)
H(4)	4835(6)	2165(5)	-60(4)	75
H(5)	5660(7)	431(5)	209(5)	93
H(7)	7710(6)	1393(5)	1477(4)	80
H(8)	6869(5)	3125(5)	1220(4)	66
H(11A)	6710(20)	-1725(11)	1464(18)	496
H(11B)	5940(20)	-1012(11)	904(18)	496
H(11C)	5830(20)	-615(11)	1839(18)	496
H(12A)	8265(15)	-1352(8)	1733(9)	299
H(12B)	7373(15)	-292(8)	2202(9)	299
H(12C)	8592(15)	-268(8)	1561(9)	299
H(13A)	8770(20)	-1480(12)	290(9)	601
H(13B)	8130(20)	-537(12)	-196(9)	601
H(13C)	7510(20)	-1435(12)	120(9)	601
H(14)	4703(5)	6678(5)	1921(4)	69
H(15)	3497(6)	7953(5)	2954(4)	76
H(17)	779(5)	8281(5)	1846(4)	70
H(18)	1973(5)	6995(5)	815(4)	67
H(21A)	1865(15)	8219(10)	4148(7)	339
H(21B)	638(15)	8029(10)	4081(7)	339
H(21C)	644(15)	9079(10)	4541(7)	339
H(22A)	2162(12)	10049(9)	2760(10)	290
H(22B)	2215(12)	9780(9)	3701(10)	290
H(22C)	1068(12)	10590(9)	3525(10)	290
H(23A)	-507(10)	10086(12)	3573(10)	329
H(23B)	-488(10)	8942(12)	3270(10)	329
H(23C)	-61(10)	9724(12)	2598(10)	329
H(25)	-1044(5)	4086(5)	3889(4)	74
H(26)	-277(6)	3646(6)	5065(4)	87
H(27)	1764(5)	3316(6)	4928(4)	82
H(31)	-1456(6)	6456(5)	1489(4)	83
H(33)	-854(5)	3400(6)	788(4)	76
H(36A)	-790(7)	6235(5)	3349(5)	116
H(36B)	-730(7)	6990(5)	2587(5)	116
H(36C)	460(7)	6208(5)	2727(5)	116
H(37A)	-1472(8)	4970(7)	-203(5)	147
H(37B)	-2140(8)	6070(7)	303(5)	147
H(37C)	-2700(8)	5104(7)	482(5)	147
H(38A)	1223(7)	2257(5)	1718(5)	118
H(38B)	82(7)	2008(5)	1530(5)	118
H(38C)	98(7)	2271(5)	2472(5)	118
H(40)	6063(6)	1436(7)	3155(4)	96
H(42)	5552(6)	4339(7)	4163(4)	101
H(45A)	3087(7)	1531(6)	3320(6)	139
H(45B)	4421(7)	825(6)	2987(6)	139
H(45C)	3842(7)	1671(6)	2405(6)	139
H(46A)	7724(7)	3062(11)	3308(7)	224
H(46B)	7735(7)	1860(11)	3372(7)	224
H(46C)	7448(7)	2584(11)	4206(7)	224
H(47A)	3731(7)	5642(7)	4379(5)	131

H(47B)	2668(7)	5161(7)	4814(5)	131
H(47C)	2810(7)	5498(7)	3867(5)	131
D(48A)	4249(8)	2322(9)	5093(6)	142

---