

Table S1. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å<sup>2</sup>) for 1.

Atom	Wyck.	Symm.	Occ.	x	y	z	U
C1	2i	1		0.3138(5)	1.2338(5)	0.0660(4)	
C2	2i	1		-0.5844(6)	0.6731(5)	0.1760(5)	
C65	2i	1		0.0219(4)	0.5981(3)	0.2864(3)	
H15	2i	1		0.07320	0.61790	0.32140	0.0710
C20	2i	1		-0.2128(4)	1.2485(3)	0.1572(3)	
C25	2i	1		-0.3275(5)	1.3168(4)	0.1432(4)	
H21	2i	1		-0.39730	1.30850	0.18640	0.0840
C21	2i	1		-0.1111(5)	1.2637(4)	0.0916(3)	
H20	2i	1		-0.03330	1.21970	0.10070	0.0850
C22	2i	1		-0.1231(7)	1.3434(5)	0.0125(4)	
H24	2i	1		-0.05440	1.35120	-0.03180	0.1190
C23	2i	1		-0.2345(8)	1.4094(5)	-0.0002(4)	
H23	2i	1		-0.24190	1.46350	-0.05310	0.1120
C24	2i	1		-0.3368(6)	1.3979(5)	0.0636(4)	
H22	2i	1		-0.41300	1.44440	0.05400	0.1020
C30	2i	1		0.1272(4)	0.9670(4)	0.3799(3)	
H41A	2i	1		0.05180	0.98710	0.41750	0.0870
H41B	2i	1		0.17960	1.02520	0.36610	0.0870
H41C	2i	1		0.17320	0.89910	0.41040	0.0870
C40	2i	1		0.0860(6)	0.9117(5)	0.1344(4)	
H40A	2i	1		0.15220	0.85120	0.12820	0.1280
H40B	2i	1		0.10350	0.97690	0.08930	0.1280
H40C	2i	1		0.00620	0.89200	0.12770	0.1280
C54	2i	1		-0.3483(6)	0.5982(5)	0.5422(5)	
H12	2i	1		-0.38880	0.53510	0.55730	0.1260
C60	2i	1		-0.0974(3)	0.6588(3)	0.2731(3)	
C61	2i	1		-0.1712(4)	0.6274(4)	0.2211(3)	
H14	2i	1		-0.25130	0.66690	0.21200	0.0780
C62	2i	1		-0.1280(5)	0.5389(4)	0.1826(4)	
H18	2i	1		-0.17810	0.51930	0.14680	0.0950
C63	2i	1		-0.0111(5)	0.4790(4)	0.1968(4)	
H17	2i	1		0.01710	0.41790	0.17150	0.0890
C64	2i	1		0.0640(5)	0.5081(4)	0.2475(4)	
H16	2i	1		0.14380	0.46750	0.25610	0.0860
C70	2i	1		-0.5078(4)	0.9426(4)	0.3766(3)	
H43A	2i	1		-0.58430	0.99490	0.37690	0.0910
H43B	2i	1		-0.45660	0.95160	0.41920	0.0910
H43C	2i	1		-0.52900	0.86820	0.39250	0.0910
C80	2i	1		-0.3633(5)	1.0151(4)	0.1105(3)	
H42A	2i	1		-0.27290	1.00410	0.09540	0.1070
H42B	2i	1		-0.39580	1.09190	0.08870	0.1070
H42C	2i	1		-0.40130	0.96940	0.08350	0.1070
O1	2i	1		-0.0714(3)	1.0731(2)	0.2450(2)	
O2	2i	1		-0.0424(3)	0.8290(2)	0.3328(2)	
O3	2i	1		-0.2501(3)	0.8503(2)	0.2662(2)	
O4	2i	1		-0.3121(3)	1.0858(2)	0.2831(2)	
O5	2i	1		0.2145(5)	1.0797(4)	0.1775(3)	
O6	2i	1		0.2074(4)	1.2508(4)	0.2201(3)	
O7	2i	1		0.4030(3)	1.1282(3)	0.2127(2)	
O8	2i	1		-0.5164(4)	0.8329(4)	0.2195(3)	
O9	2i	1	0.85	-0.5467(4)	0.6665(4)	0.3331(3)	
O10	2i	1		-0.7262(4)	0.7907(4)	0.2758(3)	
F1	2i	1		0.2114(4)	1.2789(4)	0.0303(3)	
F2	2i	1		0.3781(4)	1.1639(4)	0.0196(3)	
F3	2i	1		0.3831(5)	1.3113(4)	0.0562(3)	
F4	2i	1		-0.6269(4)	0.7428(5)	0.1008(3)	
F5	2i	1		-0.6528(5)	0.5914(4)	0.2023(4)	
F6	2i	1		-0.4674(4)	0.6319(4)	0.1537(3)	
S1	2i	1		0.28141(10)	1.16762(10)	0.18183(7)	

S2	2i	1	0.85	-0.59658(12)	0.74816(11)	0.26200(9)	
S2'	2i	1	0.15	-0.6053(9)	0.7900(8)	0.2035(7)	0.071(2)
O9'	2i	1	0.15	-0.618(4)	0.842(4)	0.120(3)	0.153(13)
C10	2i	1		-0.1949(3)	1.2132(3)	0.3471(3)	
C11	2i	1		-0.3045(4)	1.2345(4)	0.4031(3)	
H2	2i	1		-0.37890	1.21090	0.39600	0.0740
C12	2i	1		-0.3049(5)	1.2903(5)	0.4691(3)	
H3	2i	1		-0.37910	1.30420	0.50640	0.0920
C13	2i	1		-0.1956(6)	1.3251(4)	0.4796(3)	
H4	2i	1		-0.19600	1.36240	0.52450	0.0900
C14	2i	1		-0.0861(5)	1.3061(4)	0.4251(3)	
H5	2i	1		-0.01250	1.33060	0.43270	0.0820
C15	2i	1		-0.0854(4)	1.2498(3)	0.3583(3)	
H6	2i	1		-0.01100	1.23660	0.32100	0.0680
C50	2i	1		-0.2279(4)	0.7259(3)	0.4342(3)	
C51	2i	1		-0.2306(5)	0.7859(5)	0.4980(4)	
H8	2i	1		-0.18900	0.84840	0.48380	0.0970
C52	2i	1		-0.2931(7)	0.7551(7)	0.5815(4)	
H9	2i	1		-0.29840	0.79870	0.62280	0.1200
C53	2i	1		-0.3481(6)	0.6597(7)	0.6042(4)	
H10	2i	1		-0.38580	0.63610	0.66240	0.1240
C55	2i	1		-0.2875(5)	0.6318(4)	0.4570(4)	
H11	2i	1		-0.28660	0.59050	0.41460	0.0950
P1	2i	1		-0.19638(9)	1.14555(8)	0.25879(7)	
P2	2i	1		-0.15357(9)	0.77447(8)	0.32337(7)	
Sn1	2i	1		0.07718(2)	0.94444(2)	0.26139(2)	
Sn2	2i	1		-0.40653(2)	0.97137(2)	0.24866(2)	

Table S2. Anisotropic displacement parameters (in Å<sup>2</sup>) for 1.

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
C1	0.070(3)	0.091(4)	0.069(3)	-0.015(3)	-0.008(3)	0.003(3)
C2	0.078(4)	0.096(4)	0.110(5)	-0.030(3)	0.008(3)	-0.056(4)
C65	0.048(2)	0.047(2)	0.085(3)	-0.0017(17)	-0.015(2)	-0.016(2)
C20	0.054(2)	0.0410(19)	0.056(2)	-0.0114(16)	-0.0119(17)	-0.0136(17)
C25	0.066(3)	0.063(3)	0.082(3)	-0.001(2)	-0.023(2)	-0.013(2)
C21	0.072(3)	0.066(3)	0.067(3)	-0.009(2)	0.004(2)	-0.008(2)
C22	0.126(6)	0.089(4)	0.069(3)	-0.015(4)	-0.001(3)	0.001(3)
C23	0.145(6)	0.073(4)	0.066(3)	-0.021(4)	-0.040(4)	-0.003(3)
C24	0.095(4)	0.065(3)	0.098(4)	0.005(3)	-0.053(4)	-0.012(3)
C30	0.058(2)	0.057(2)	0.064(3)	-0.0147(19)	-0.0149(19)	-0.014(2)
C40	0.092(4)	0.097(4)	0.075(3)	0.002(3)	-0.016(3)	-0.038(3)
C54	0.105(5)	0.080(4)	0.115(5)	-0.026(4)	0.026(4)	-0.006(4)
C60	0.0395(18)	0.0378(18)	0.061(2)	-0.0071(14)	-0.0060(16)	-0.0078(16)
C61	0.058(3)	0.056(3)	0.087(3)	-0.001(2)	-0.024(2)	-0.025(2)
C62	0.091(4)	0.068(3)	0.093(4)	-0.017(3)	-0.019(3)	-0.036(3)
C63	0.078(3)	0.054(3)	0.092(4)	-0.012(2)	0.009(3)	-0.030(3)
C64	0.059(3)	0.048(2)	0.101(4)	0.004(2)	-0.003(2)	-0.016(2)
C70	0.048(2)	0.070(3)	0.063(3)	-0.016(2)	0.0057(19)	-0.014(2)
C80	0.072(3)	0.077(3)	0.056(3)	0.006(2)	-0.004(2)	-0.013(2)
O1	0.0536(17)	0.0443(15)	0.086(2)	0.0033(13)	-0.0117(15)	-0.0141(14)
O2	0.0515(16)	0.0482(15)	0.082(2)	-0.0164(12)	-0.0114(14)	-0.0128(14)
O3	0.0532(16)	0.0485(16)	0.0721(19)	0.0061(13)	-0.0139(14)	-0.0089(14)
O4	0.0521(16)	0.0530(16)	0.079(2)	-0.0223(13)	-0.0079(14)	-0.0170(14)
O5	0.156(4)	0.125(4)	0.100(3)	-0.096(3)	-0.014(3)	0.015(3)
O6	0.112(3)	0.140(4)	0.109(3)	0.059(3)	-0.021(3)	-0.066(3)
O7	0.066(2)	0.092(3)	0.076(2)	0.0194(19)	-0.0153(17)	-0.0144(19)
O8	0.129(3)	0.100(3)	0.109(3)	-0.071(3)	-0.002(3)	-0.042(2)
O9	0.089(3)	0.102(3)	0.062(2)	0.011(3)	-0.016(2)	-0.007(2)
O10	0.071(2)	0.111(3)	0.093(3)	0.022(2)	-0.0065(19)	-0.042(2)
F1	0.096(3)	0.204(5)	0.091(2)	0.003(3)	-0.033(2)	0.035(3)
F2	0.161(4)	0.192(5)	0.074(2)	0.020(4)	0.003(2)	-0.051(3)
F3	0.173(4)	0.149(4)	0.137(4)	-0.101(4)	-0.015(3)	0.038(3)
F4	0.128(3)	0.191(5)	0.082(2)	-0.012(3)	-0.027(2)	-0.049(3)
F5	0.164(4)	0.137(4)	0.182(4)	-0.095(3)	0.024(3)	-0.084(3)
F6	0.094(3)	0.149(4)	0.146(3)	0.007(2)	0.012(2)	-0.096(3)
S1	0.0522(6)	0.0633(6)	0.0563(6)	-0.0047(5)	-0.0009(5)	-0.0079(5)
S2	0.0539(7)	0.0528(7)	0.0539(7)	-0.0095(5)	-0.0050(5)	-0.0203(6)
C10	0.0460(19)	0.0370(18)	0.052(2)	-0.0095(15)	-0.0081(16)	-0.0048(15)
C11	0.055(2)	0.068(3)	0.066(3)	-0.016(2)	-0.001(2)	-0.019(2)
C12	0.076(3)	0.084(4)	0.070(3)	-0.009(3)	0.011(3)	-0.029(3)
C13	0.108(4)	0.061(3)	0.060(3)	-0.012(3)	-0.017(3)	-0.018(2)
C14	0.076(3)	0.061(3)	0.079(3)	-0.018(2)	-0.026(3)	-0.020(2)
C15	0.049(2)	0.053(2)	0.073(3)	-0.0137(18)	-0.0064(19)	-0.017(2)
C50	0.044(2)	0.048(2)	0.064(2)	-0.0021(17)	-0.0107(17)	-0.0105(18)
C51	0.084(4)	0.094(4)	0.075(3)	-0.018(3)	-0.017(3)	-0.032(3)
C52	0.105(5)	0.125(6)	0.071(4)	0.003(4)	-0.016(3)	-0.036(4)
C53	0.090(4)	0.121(6)	0.071(4)	0.015(4)	0.006(3)	-0.001(4)
C55	0.085(4)	0.064(3)	0.085(4)	-0.026(3)	0.019(3)	-0.016(3)
P1	0.0389(5)	0.0350(4)	0.0594(6)	-0.0075(4)	-0.0062(4)	-0.0098(4)
P2	0.0411(5)	0.0343(5)	0.0633(6)	-0.0062(4)	-0.0119(4)	-0.0101(4)
Sn1	0.03745(14)	0.04396(15)	0.05761(17)	-0.00613(10)	-0.00814(11)	-0.01376(11)
Sn2	0.03542(13)	0.04091(14)	0.05224(16)	-0.00717(10)	-0.00641(10)	-0.01000(11)

Table S3. Selected geometric parameters (Å, °) for 1.

C1—F1	1.288(7)	O2—Sn1	2.093(3)
C1—F3	1.289(9)	O3—P2	1.515(3)
C1—F2	1.311(8)	O3—Sn2	2.066(3)
C1—S1	1.792(6)	O4—P1	1.513(3)
C2—F6	1.306(7)	O4—Sn2	2.101(3)
C2—F5	1.309(8)	O5—S1	1.434(6)
C2—F4	1.362(8)	O5—Sn1	2.434(5)
C2—S2'	1.595(13)	O6—S1	1.397(5)
C2—S2	1.792(8)	O7—S1	1.428(3)
C65—C60	1.392(5)	O8—S2'	1.257(12)
C65—C64	1.386(7)	O8—S2	1.448(5)
C20—C21	1.381(6)	O8—Sn2	2.421(6)
C20—C25	1.390(6)	O9—S2	1.409(4)
C20—P1	1.783(4)	O10—S2	1.410(4)
C25—C24	1.396(8)	O10—S2'	1.584(10)
C21—C22	1.385(7)	F4—O9'	1.369(55)
C22—C23	1.346(10)	F4—S2'	1.891(13)
C23—C24	1.366(9)	S2—S2'	0.939(10)
C30—Sn1	2.090(5)	S2'—O9'	1.315(44)
C40—Sn1	2.097(7)	C10—C11	1.383(6)
C54—C53	1.375(12)	C10—C15	1.384(6)
C54—C55	1.382(9)	C10—P1	1.785(5)
C60—C61	1.377(7)	C11—C12	1.376(8)
C60—P2	1.786(4)	C12—C13	1.367(9)
C61—C62	1.367(8)	C13—C14	1.364(7)
C62—C63	1.369(7)	C14—C15	1.390(7)
C63—C64	1.358(9)	C50—C55	1.381(7)
C70—Sn2	2.094(4)	C50—C51	1.379(9)
C80—Sn2	2.079(4)	C50—P2	1.789(4)
O1—P1	1.506(3)	C51—C52	1.363(8)
O1—Sn1	2.063(3)	C52—C53	1.368(12)
O2—P2	1.517(4)		
F1—C1—F3	107.26(51)	S2—S2'—O9'	175.95(225)
F1—C1—F2	108.78(51)	O8—S2'—O9'	101.75(211)
F3—C1—F2	105.76(53)	S2—S2'—C2	85.91(76)
F1—C1—S1	112.02(43)	O8—S2'—C2	123.17(80)
F3—C1—S1	110.91(43)	O9'—S2'—C2	90.11(227)
F2—C1—S1	111.81(43)	S2—S2'—O10	61.84(58)
F6—C2—F5	108.52(57)	O8—S2'—O10	114.14(74)
F6—C2—F4	106.96(54)	O9'—S2'—O10	118.86(208)
F5—C2—F4	108.83(58)	C2—S2'—O10	107.15(67)
F6—C2—S2'	116.77(61)	S2—S2'—F4	129.57(89)
F5—C2—S2'	129.36(63)	O8—S2'—F4	130.54(75)
F4—C2—S2'	79.07(57)	O9'—S2'—F4	46.38(199)
F6—C2—S2	112.28(48)	C2—S2'—F4	45.02(40)
F5—C2—S2	110.37(47)	O10—S2'—F4	114.76(62)
F4—C2—S2	109.77(49)	F4—O9'—S2'	89.56(281)
S2'—C2—S2	31.51(39)	C11—C10—C15	118.71(36)
C60—C65—C64	119.83(39)	C11—C10—P1	120.66(33)
C21—C20—C25	118.57(44)	C15—C10—P1	120.58(30)
C21—C20—P1	120.74(34)	C12—C11—C10	120.85(43)
C25—C20—P1	120.68(35)	C13—C12—C11	119.62(48)
C20—C25—C24	119.34(50)	C12—C13—C14	121.00(56)
C20—C21—C22	121.09(46)	C13—C14—C15	119.52(43)
C23—C22—C21	119.82(58)	C10—C15—C14	120.3(4)
C22—C23—C24	120.81(71)	C55—C50—C51	118.70(44)
C23—C24—C25	120.35(56)	C55—C50—P2	121.72(36)
C53—C54—C55	118.94(63)	C51—C50—P2	119.53(38)
C61—C60—C65	118.73(36)	C52—C51—C50	121.09(55)

C61—C60—P2	120.87(33)	C53—C52—C51	119.61(62)
C65—C60—P2	120.40(29)	C52—C53—C54	120.88(72)
C62—C61—C60	120.79(45)	C50—C55—C54	120.66(52)
C63—C62—C61	120.07(48)	O1—P1—O4	115.56(18)
C64—C63—C62	120.51(53)	O1—P1—C20	106.80(18)
C63—C64—C65	120.07(48)	O4—P1—C20	109.24(18)
P1—O1—Sn1	162.71(19)	O1—P1—C10	110.04(17)
P2—O2—Sn1	141.97(19)	O4—P1—C10	106.19(16)
P2—O3—Sn2	151.88(19)	C20—P1—C10	108.89(21)
P1—O4—Sn2	144.22(19)	O3—P2—O2	114.49(18)
S1—O5—Sn1	145.35(32)	O3—P2—C60	106.70(16)
S2'—O8—S2	39.84(48)	O2—P2—C60	109.84(16)
S2'—O8—Sn2	159.20(56)	O3—P2—C50	109.88(19)
S2—O8—Sn2	143.16(29)	O2—P2—C50	106.53(19)
S2—O10—S2'	35.97(38)	C60—P2—C50	109.35(20)
O9'—F4—C2	98.51(199)	O1—Sn1—O2	92.63(11)
O9'—F4—S2'	44.06(202)	O1—Sn1—C30	97.39(15)
C2—F4—S2'	55.91(48)	O2—Sn1—C30	91.40(15)
O6—S1—O7	115.53(25)	O1—Sn1—C40	96.07(19)
O6—S1—O5	114.41(30)	O2—Sn1—C40	98.55(19)
O7—S1—O5	113.15(27)	C30—Sn1—C40	162.85(21)
O6—S1—C1	104.51(27)	O1—Sn1—O5	86.88(15)
O7—S1—C1	105.27(23)	O2—Sn1—O5	179.43(14)
O5—S1—C1	102.08(27)	C30—Sn1—O5	88.95(17)
S2'—S2—O10	82.20(64)	C40—Sn1—O5	81.21(20)
S2'—S2—O9	159.69(67)	O3—Sn2—C80	93.76(17)
O10—S2—O9	116.61(28)	O3—Sn2—C70	101.68(15)
S2'—S2—O8	59.04(66)	C80—Sn2—C70	162.01(18)
O10—S2—O8	113.58(27)	O3—Sn2—O4	91.21(11)
O9—S2—O8	114.75(28)	C80—Sn2—O4	98.78(16)
S2'—S2—C2	62.58(68)	C70—Sn2—O4	90.16(15)
O10—S2—C2	105.43(30)	O3—Sn2—O8	87.59(14)
O9—S2—C2	102.78(31)	C80—Sn2—O8	84.98(18)
O8—S2—C2	101.19(29)	C70—Sn2—O8	86.48(17)
S2—S2'—O8	81.13(75)	O4—Sn2—O8	176.13(14)

Table S4. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å<sup>2</sup>) for 2.

Atom	Wyck.	Symm.	Occ.	x	y	z	U
C1	4c	1		0.9325(7)	0.8668(9)	0.7982(14)	
C10	4c	1		0.5729(4)	0.8712(4)	0.4254(6)	
C11	4c	1		0.5261(5)	0.8936(6)	0.3134(7)	
H11	4c	1		0.47150	0.91970	0.32160	0.1050
C12	4c	1		0.5605(8)	0.8771(7)	0.1893(8)	
H12	4c	1		0.52680	0.88950	0.11370	0.1360
C13	4c	1		0.6428(8)	0.8432(6)	0.1741(9)	
H13	4c	1		0.66590	0.83500	0.08860	0.1150
C14	4c	1		0.6903(8)	0.8216(6)	0.2803(9)	
H14	4c	1		0.74620	0.79770	0.27000	0.1150
C15	4c	1		0.6548(6)	0.8354(5)	0.4091(8)	
H15	4c	1		0.68740	0.82010	0.48400	0.0950
C20	4c	1		0.5241(4)	0.7920(3)	0.6698(7)	
C21	4c	1		0.5685(6)	0.7736(5)	0.7802(8)	
H21	4c	1		0.60800	0.80810	0.82040	0.0910
C22	4c	1		0.5546(8)	0.7022(7)	0.8337(11)	
H22	4c	1		0.58470	0.68940	0.91230	0.1320
C23	4c	1		0.5010(9)	0.6514(6)	0.7795(14)	
H23	4c	1		0.49350	0.60400	0.81990	0.1350
C24	4c	1		0.4585(7)	0.6670(5)	0.6698(12)	
H24	4c	1		0.42020	0.63130	0.63030	0.1150
C25	4c	1		0.4714(6)	0.7378(4)	0.6133(8)	
H25	4c	1		0.44260	0.74880	0.53280	0.0900
C30	4c	1		0.7651(4)	1.0601(4)	0.4946(7)	
C32	4c	1	0.5	0.8566(18)	1.0151(16)	0.497(3)	
C33'	4c	1	0.5	0.7247(17)	1.1408(15)	0.450(3)	
C40	4c	1		0.6876(5)	1.0702(4)	0.8713(6)	
O1	4c	1		0.6007(3)	0.9298(2)	0.6720(4)	
O2	4c	1		0.4386(3)	0.9213(2)	0.5876(4)	
O5	4c	1		0.7892(3)	0.9337(3)	0.7213(6)	
O6	4c	1		0.7738(5)	0.8336(5)	0.8832(8)	
O7	4c	1		0.8116(5)	0.8046(5)	0.6525(8)	
F1	4c	1		0.9651(5)	0.7998(5)	0.8378(9)	
F2	4c	1		0.9758(5)	0.8874(8)	0.6935(11)	
F3	4c	1		0.9455(6)	0.9141(6)	0.8941(10)	
P1	4c	1		0.53106(11)	0.88505(8)	0.59243(14)	
S1	4c	1		0.81278(14)	0.85656(11)	0.7588(2)	
Sn1	4c	1		0.68208(2)	1.02438(2)	0.66562(4)	
C33	4c	1	0.5	0.779(2)	1.1407(11)	0.513(3)	
C32'	4c	1	0.5	0.8593(14)	1.0626(16)	0.547(2)	
C42'	4c	1	0.5	0.688(3)	1.1581(16)	0.846(3)	
C42	4c	1	0.5	0.6239(19)	1.1396(13)	0.8852(16)	
C43'	4c	1	0.5	0.7837(10)	1.0715(16)	0.9169(15)	
H43A	4c	1	0.5	0.78650	1.09120	1.00650	0.1920
H43B	4c	1	0.5	0.81860	1.10360	0.85850	0.1920
H43C	4c	1	0.5	0.80780	1.02060	0.91530	0.1920
C41'	4c	1	0.5	0.6456(16)	1.0151(11)	0.9598(10)	
H41A	4c	1	0.5	0.64760	1.03390	1.05000	0.1760
H41B	4c	1	0.5	0.67780	0.96750	0.95450	0.1760
H41C	4c	1	0.5	0.58370	1.00740	0.93350	0.1760
C31	4c	1	0.5	0.7167(17)	1.052(3)	0.3634(14)	
C31'	4c	1	0.5	0.7621(17)	1.0042(15)	0.390(3)	

Table S5. Anisotropic displacement parameters (in Å<sup>2</sup>) for 2.

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
C1	0.065(5)	0.180(12)	0.116(9)	0.027(7)	-0.020(6)	0.024(9)
C10	0.067(4)	0.048(3)	0.043(3)	-0.003(3)	0.001(3)	0.001(3)
C11	0.067(4)	0.145(8)	0.051(4)	-0.004(5)	-0.007(3)	0.018(4)
C12	0.130(9)	0.17(1)	0.040(4)	-0.032(8)	-0.001(5)	0.013(5)
C13	0.129(8)	0.107(7)	0.050(4)	-0.022(6)	0.024(5)	-0.003(5)
C14	0.120(7)	0.094(6)	0.073(5)	0.013(6)	0.025(5)	-0.011(5)
C15	0.097(6)	0.084(5)	0.057(4)	0.026(4)	0.010(4)	-0.001(4)
C20	0.066(3)	0.045(3)	0.053(3)	-0.004(3)	0.006(3)	0.003(3)
C21	0.085(5)	0.076(5)	0.068(4)	-0.006(4)	-0.007(4)	0.026(4)
C22	0.139(9)	0.107(7)	0.083(6)	0.020(7)	0.006(7)	0.038(6)
C23	0.139(9)	0.068(6)	0.13(1)	-0.008(6)	0.038(8)	0.033(7)
C24	0.120(7)	0.056(4)	0.112(7)	-0.018(4)	0.019(8)	0.010(6)
C25	0.085(5)	0.057(4)	0.082(5)	-0.009(4)	0.013(4)	-0.001(4)
C30	0.054(3)	0.073(4)	0.053(3)	-0.006(3)	0.011(3)	0.006(3)
C32	0.096(15)	0.13(2)	0.109(18)	0.039(15)	0.045(15)	0.020(16)
C33'	0.102(15)	0.091(15)	0.103(17)	-0.036(12)	0.001(13)	0.016(12)
C40	0.071(4)	0.078(4)	0.044(3)	-0.009(4)	-0.005(3)	-0.011(3)
O1	0.061(2)	0.051(2)	0.0453(18)	-0.0101(17)	-0.005(2)	-0.002(2)
O2	0.058(2)	0.061(3)	0.050(2)	0.005(2)	-0.0003(19)	-0.004(2)
O5	0.064(3)	0.075(3)	0.095(4)	0.007(2)	-0.018(3)	0.012(3)
O6	0.109(5)	0.169(7)	0.115(5)	0.011(5)	0.026(4)	0.071(5)
O7	0.146(6)	0.132(6)	0.112(5)	0.045(5)	-0.037(6)	-0.049(5)
F1	0.124(5)	0.195(8)	0.202(8)	0.088(6)	-0.044(6)	0.022(7)
F2	0.085(4)	0.337(14)	0.192(8)	0.001(6)	0.027(5)	0.077(9)
F3	0.145(6)	0.186(8)	0.213(8)	0.019(6)	-0.115(7)	-0.031(7)
P1	0.0542(8)	0.0434(7)	0.0391(7)	-0.0032(6)	-0.0016(6)	0.0003(6)
S1	0.0686(10)	0.0818(12)	0.0677(10)	0.012(1)	-0.006(1)	0.0032(9)
Sn1	0.0493(2)	0.0520(2)	0.03779(18)	-0.00584(17)	-0.00020(17)	0.00028(17)
C33	0.20(3)	0.052(10)	0.14(2)	-0.044(14)	0.12(2)	-0.026(12)
C32'	0.063(10)	0.15(2)	0.092(16)	-0.015(14)	0.00(1)	0.038(16)
C42'	0.31(5)	0.090(16)	0.100(19)	-0.03(2)	-0.01(3)	-0.065(16)
C42	0.17(2)	0.092(14)	0.027(6)	0.052(15)	-0.012(9)	-0.014(7)
C43'	0.055(8)	0.26(3)	0.065(9)	0.037(12)	-0.041(7)	-0.111(14)
C41'	0.21(2)	0.126(14)	0.015(4)	-0.098(15)	0.044(8)	-0.027(7)
C31	0.111(18)	0.38(6)	0.018(6)	-0.14(3)	-0.003(8)	0.026(14)
C31'	0.107(18)	0.126(18)	0.090(16)	-0.038(13)	0.041(14)	-0.044(14)

Table S6. Selected geometric parameters (Å, °) for 2.

C1—F2	1.278(17)	C30—C32	
C1—F3	1.281(18)	C30—C33'	1.563(28)
C1—F1	1.328(17)	C30—Sn1	1.596(27)
C1—S1	1.818(11)	C32—C32'	2.193(7)
C10—C15	1.371(11)	C33'—C33	0.971(39)
C10—C11	1.372(10)	C40—C41'	1.019(40)
C10—P1	1.796(6)	C40—C43'	1.448(19)
C11—C12	1.371(11)	C40—C42	1.489(16)
C12—C13	1.360(17)	C40—C42'	1.542(26)
C13—C14	1.327(14)	C40—Sn1	1.559(29)
C14—C15	1.410(12)	O1—P1	2.208(6)
C20—C21	1.323(11)	O1—Sn1	1.517(4)
C20—C25	1.35(1)	O2—P1	2.046(4)
C20—P1	1.806(6)	O2—Sn1 <sup>i</sup>	1.505(5)
C21—C22	1.375(15)	O5—S1	2.163(4)
C22—C23	1.307(17)	O5—Sn1	1.444(6)
C23—C24	1.292(18)	O6—S1	2.308(5)
C24—C25	1.375(12)	O7—S1	1.427(8)
C30—C31'	1.432(29)	Sn1—O2 <sup>i</sup>	1.399(9)
C30—C33	1.437(21)	C42'—C42	2.163(4)
C30—C32'	1.486(21)	C31—C31'	1.073(49)
C30—C31	1.500(19)		1.104(50)
F2—C1—F3	110.82(122)	C32'—C32—C30	67.15(205)
F2—C1—F1	108.19(125)	C33—C33'—C30	62.13(187)
F3—C1—F1	107.08(124)	C41'—C40—C43'	103.33(119)
F2—C1—S1	109.63(76)	C41'—C40—C42	102.06(116)
F3—C1—S1	111.79(86)	C43'—C40—C42	122.71(127)
F1—C1—S1	109.22(76)	C41'—C40—C42'	139.29(134)
C15—C10—C11	118.50(65)	C43'—C40—C42'	91.77(190)
C15—C10—P1	118.36(52)	C42—C40—C42'	40.50(138)
C11—C10—P1	123.13(49)	C41'—C40—Sn1	108.12(51)
C12—C11—C10	119.44(66)	C43'—C40—Sn1	109.00(69)
C13—C12—C11	121.57(90)	C42—C40—Sn1	110.34(73)
C14—C13—C12	120.43(104)	C42'—C40—Sn1	101.98(113)
C13—C14—C15	119.02(83)	P1—O1—Sn1	143.02(25)
C10—C15—C14	120.93(79)	P1—O2—Sn1 <sup>i</sup>	156.83(27)
C21—C20—C25	117.57(69)	S1—O5—Sn1	150.55(33)
C21—C20—P1	123.27(54)	O2—P1—O1	114.38(25)
C25—C20—P1	119.17(46)	O2—P1—C10	109.78(26)
C20—C21—C22	118.16(81)	O1—P1—C10	108.92(26)
C23—C22—C21	123.19(109)	O2—P1—C20	110.03(24)
C24—C23—C22	120.08(122)	O1—P1—C20	106.25(24)
C23—C24—C25	118.15(97)	C10—P1—C20	107.20(31)
C20—C25—C24	122.76(69)	O7—S1—O6	118.26(48)
C31'—C30—C33	140.19(145)	O7—S1—O5	114.08(44)
C31'—C30—C32'	107.83(141)	O6—S1—O5	113.10(43)
C33—C30—C32'	78.03(156)	O7—S1—C1	103.93(56)
C31'—C30—C31	44.17(132)	O6—S1—C1	103.32(51)
C33—C30—C31	105.82(171)	O5—S1—C1	101.42(49)
C32'—C30—C31	139.14(115)	O1—Sn1—O2 <sup>i</sup>	83.34(16)
C31'—C30—C32	72.16(150)	O1—Sn1—C30	125.63(20)
C33—C30—C32	111.68(143)	O2 <sup>i</sup> —Sn1—C30	93.06(19)
C32'—C30—C32	37.03(128)	O1—Sn1—C40	106.65(21)
C31—C30—C32	112.14(144)	O2 <sup>i</sup> —Sn1—C40	101.90(21)
C31'—C30—C33'	112.90(149)	C30—Sn1—C40	126.96(24)
C33—C30—C33'	38.80(123)	O1—Sn1—O5	80.66(16)
C32'—C30—C33'	114.93(135)	O2 <sup>i</sup> —Sn1—O5	162.27(16)
C31—C30—C33'	70.24(139)	C30—Sn1—O5	90.09(21)
C32—C30—C33'	140.58(144)	C40—Sn1—O5	90.01(24)



C31'—C30—Sn1  
C33—C30—Sn1  
C32'—C30—Sn1  
C31—C30—Sn1  
C32—C30—Sn1  
C33'—C30—Sn1

110.89(121) C33'—C33—C30  
105.05(109) C32—C32'—C30  
104.83(86) C42—C42'—C40  
112.86(68) C42'—C42—C40  
109.06(107) C31'—C31—C30  
105.15(106) C31—C31'—C30

79.08(196)  
75.82(210)  
68.89(198)  
70.61(227)  
64.68(167)  
71.15(198)

**Symmetry codes:**

(i) 1-x, 2-y, z.