

Table 2. Atomic coordinates and U_{eq} for 3a

Atom	x	y	z	U_{eq}
C1	0.5856(6)	0.2586(6)	0.1703(4)	0.035(3)
C2	0.5600(6)	0.3297(6)	0.1529(4)	0.033(3)
C3	0.5991(6)	0.3458(6)	0.1069(4)	0.026(2)
C4	0.6640(7)	0.2866(7)	0.0804(4)	0.039(3)
C5	0.6839(7)	0.2177(6)	0.0989(4)	0.043(3)
C6	0.6945(7)	0.5278(6)	0.0669(4)	0.041(3)
C7	0.6528(6)	0.4975(6)	0.0570(4)	0.033(3)
C8	0.6296(6)	0.4512(5)	0.0920(4)	0.027(2)
C9	0.6492(6)	0.4387(6)	0.1352(4)	0.033(3)
C10	0.6886(6)	0.4723(6)	0.1421(4)	0.036(3)
C11	0.3695(7)	0.5594(7)	0.0942(4)	0.039(3)
C12	0.4455(6)	0.5075(6)	0.0756(4)	0.029(2)
C13	0.4956(6)	0.4777(5)	0.1043(4)	0.026(2)
C14	0.4638(6)	0.5056(6)	0.1516(4)	0.030(2)
C15	0.3875(6)	0.5551(6)	0.1682(4)	0.032(2)
C16	0.5795(6)	0.4217(5)	0.0839(3)	0.023(2)
C17	0.5589(7)	0.2630(6)	0.3507(4)	0.040(3)
C18	0.5420(7)	0.3311(6)	0.3622(4)	0.042(3)
C19	0.4859(6)	0.3643(6)	0.4061(4)	0.033(3)
C20	0.4506(7)	0.3219(7)	0.4359(4)	0.045(3)
C21	0.4741(8)	0.2527(7)	0.4228(4)	0.045(3)
C22	0.2533(7)	0.5917(7)	0.4327(4)	0.043(3)
C23	0.3223(6)	0.5446(6)	0.4435(4)	0.036(3)
C24	0.3817(6)	0.4903(6)	0.4111(4)	0.028(2)
C25	0.3701(6)	0.4855(6)	0.3690(4)	0.032(3)
C26	0.3016(7)	0.5329(7)	0.3598(4)	0.038(3)
C27	0.6014(7)	0.5168(6)	0.4011(4)	0.038(3)
C28	0.5502(6)	0.4869(6)	0.4236(4)	0.032(3)
C29	0.5154(6)	0.4728(5)	0.3971(4)	0.025(2)
C30	0.5317(7)	0.4915(6)	0.3476(4)	0.035(3)
C31	0.5859(7)	0.5174(6)	0.3273(4)	0.039(3)
C32	0.4577(6)	0.4406(6)	0.4219(3)	0.026(2)
C33	0.7589(7)	-0.0622(7)	0.1452(5)	0.048(3)
C34	0.7858(7)	-0.1397(7)	0.1497(5)	0.048(3)
C35	0.7730(7)	-0.1710(7)	0.1947(5)	0.045(3)
C36	0.7360(6)	-0.1276(5)	0.2383(4)	0.030(2)
C37	0.7288(7)	-0.1586(6)	0.2830(4)	0.039(3)
C38	0.6940(7)	-0.1206(6)	0.3256(5)	0.039(3)
C39	0.6870(7)	-0.1572(7)	0.3732(4)	0.043(3)
C40	0.6433(8)	-0.1158(7)	0.4130(5)	0.050(3)
C41	0.6071(8)	-0.0388(7)	0.4108(5)	0.054(4)
C42	0.6177(7)	-0.0002(6)	0.3673(5)	0.043(3)
C43	0.6595(7)	-0.0408(6)	0.3235(5)	0.038(3)
C44	0.6701(6)	-0.0090(6)	0.2757(4)	0.035(3)
C45	0.7067(6)	-0.0485(6)	0.2332(4)	0.035(3)
C46	0.7186(7)	-0.0160(6)	0.1842(4)	0.038(3)
C47	0.8393(6)	0.6134(6)	0.1199(4)	0.032(2)
C48	0.8758(7)	0.6357(7)	0.0763(4)	0.043(3)
C49	0.9282(7)	0.6641(7)	0.0711(4)	0.044(3)
C50	0.9444(6)	0.6702(6)	0.1097(4)	0.035(3)
C51	0.9079(6)	0.6511(6)	0.1579(4)	0.030(2)
C52	0.9222(6)	0.6604(6)	0.1985(4)	0.031(2)
C53	0.8819(6)	0.6484(6)	0.2445(4)	0.027(2)
C54	0.8957(6)	0.6628(6)	0.2870(4)	0.033(3)
C55	0.8516(6)	0.6567(6)	0.3326(4)	0.033(3)
C56	0.7949(6)	0.6327(6)	0.3394(4)	0.036(3)
C57	0.7792(6)	0.6154(6)	0.3033(4)	0.030(2)

C58	0.8235(6)	0.6235(6)	0.2527(4)	0.026(2)
C59	0.8118(6)	0.6116(6)	0.2113(4)	0.030(2)
C60	0.8521(6)	0.6234(6)	0.1635(4)	0.028(2)
C61	0.1018(6)	0.7245(6)	0.1835(4)	0.030(2)
C62	0.0751(7)	0.7511(6)	0.1453(4)	0.037(3)
C63	-0.0028(7)	0.8018(6)	0.1491(4)	0.040(3)
C64	-0.0552(7)	0.8273(6)	0.1939(4)	0.038(3)
C65	-0.0319(6)	0.8004(6)	0.2361(4)	0.030(2)
C66	-0.0860(7)	0.8223(6)	0.2809(4)	0.038(3)
C67	-0.0666(6)	0.7970(6)	0.3240(4)	0.033(3)
C68	-0.1253(7)	0.8167(7)	0.3716(5)	0.048(3)
C69	-0.1076(7)	0.7978(7)	0.4136(5)	0.046(3)
C70	-0.0301(7)	0.7546(7)	0.4113(4)	0.048(3)
C71	0.0326(6)	0.7255(6)	0.3671(4)	0.039(3)
C72	0.0135(6)	0.7475(6)	0.3224(4)	0.032(3)
C73	0.0673(6)	0.7250(6)	0.2768(4)	0.028(2)
C74	0.0472(6)	0.7489(5)	0.2319(4)	0.029(2)
C75	0.6241(9)	0.0397(8)	0.0896(5)	0.061(4)
C76	0.6679(10)	0.0687(10)	0.0491(6)	0.086(5)
C77	0.5358(8)	0.0376(7)	0.1927(6)	0.062(4)
C78	0.4746(10)	0.0272(8)	0.1786(7)	0.086(6)
C79	0.5070(7)	0.1730(7)	0.1342(5)	0.050(3)
C80	0.4420(8)	0.2170(8)	0.1762(5)	0.065(4)
C81	0.8807(10)	0.0160(11)	0.1290(7)	0.091(6)
C82	0.8737(13)	0.0316(11)	0.0775(8)	0.135(9)
C83	0.8161(8)	0.0399(8)	0.2315(5)	0.061(4)
C84	0.8948(9)	0.0240(11)	0.2341(7)	0.095(6)
C85	0.8123(10)	0.1600(9)	0.1638(7)	0.082(6)
C86	0.7559(12)	0.2187(10)	0.2045(7)	0.101(6)
C87	0.9621(13)	0.4423(11)	0.1353(12)	0.166(14)
C88	1.0304(19)	0.426(3)	0.1193(15)	0.41(4)
C89	0.9372(17)	0.4560(16)	0.0342(16)	0.32(3)
C90	0.8918(11)	0.4674(17)	0.0035(9)	0.137(12)
C91	0.8744(12)	0.3768(8)	0.1188(12)	0.135(11)
C92	0.903(4)	0.332(3)	0.140(2)	0.44(2)
C93	0.6775(9)	0.7525(8)	0.1480(6)	0.066(4)
C94	0.6101(9)	0.8281(8)	0.1529(7)	0.081(5)
C95	0.5800(11)	0.6783(12)	0.1851(8)	0.122(8)
C96	0.5365(11)	0.6468(12)	0.1806(9)	0.126(9)
C97	0.6195(13)	0.7121(10)	0.0866(9)	0.136(11)
C98	0.6903(17)	0.7174(13)	0.0329(8)	0.153(12)
C99	0.2178(8)	0.8050(8)	0.0945(5)	0.059(4)
C100	0.2639(9)	0.7578(8)	0.0506(5)	0.070(4)
C101	0.3400(8)	0.7381(8)	0.1371(6)	0.066(4)
C102	0.3613(9)	0.8006(8)	0.1156(6)	0.070(4)
C103	0.1827(9)	0.8272(8)	0.1961(6)	0.072(5)
C104	0.1132(11)	0.8882(10)	0.1902(7)	0.105(7)
C105	0.1446(8)	0.5651(8)	0.1277(5)	0.057(4)
C106	0.1988(9)	0.5655(10)	0.0754(5)	0.083(6)
C107	0.1166(7)	0.5546(7)	0.2319(5)	0.051(3)
C108	0.0892(8)	0.4967(8)	0.2360(6)	0.072(5)
C109	0.2689(8)	0.4660(7)	0.1664(5)	0.056(4)
C110	0.3040(8)	0.4395(8)	0.2079(6)	0.074(5)
C111	0.6562(12)	0.0543(10)	0.4650(6)	0.093(6)
C112	0.5731(12)	0.1086(11)	0.5003(7)	0.106(7)
C113	0.7671(9)	0.0093(8)	0.3684(7)	0.086(6)
C114	0.8347(11)	-0.0099(9)	0.3904(10)	0.139(10)
C115	0.6963(9)	0.1614(8)	0.3999(6)	0.067(4)
C116	0.7407(9)	0.1800(8)	0.3506(6)	0.078(5)
C117	0.4736(9)	0.0390(8)	0.3337(6)	0.063(4)
C118	0.4022(9)	0.0447(9)	0.3272(6)	0.080(5)
C119	0.3794(9)	0.1581(9)	0.4029(5)	0.068(4)

C120	0.3827(10)	0.1053(9)	0.4481(6)	0.080(5)
C121	0.4465(9)	0.1839(8)	0.3018(6)	0.068(4)
C122	0.4124(13)	0.2645(9)	0.3111(7)	0.110(7)
C123	0.0209(8)	0.5778(8)	0.3709(5)	0.055(4)
C124	-0.0097(8)	0.5218(8)	0.3881(5)	0.058(4)
C125	0.0344(8)	0.5809(8)	0.4664(4)	0.054(4)
C126	0.0754(10)	0.5887(9)	0.4981(5)	0.077(5)
C127	0.1617(8)	0.4770(7)	0.3948(5)	0.057(4)
C128	0.2022(9)	0.4519(8)	0.3433(6)	0.071(4)
C129	0.1045(9)	0.8373(7)	0.3350(6)	0.062(4)
C130	0.1234(11)	0.8997(9)	0.3253(7)	0.096(6)
C131	0.2691(16)	0.7240(16)	0.3195(17)	0.27(3)
C132	0.300(2)	0.687(2)	0.2828(9)	0.25(2)
C133	0.191(2)	0.7751(14)	0.4053(15)	0.23(2)
C134	0.126(3)	0.796(3)	0.4468(12)	0.33(4)
C135	0.5924(10)	0.7379(10)	0.3867(5)	0.080(5)
C136	0.5818(10)	0.6951(10)	0.4339(6)	0.089(6)
C137	0.6123(9)	0.7600(8)	0.2859(6)	0.071(4)
C138	0.5554(9)	0.8429(8)	0.2965(6)	0.074(5)
C139	0.5023(10)	0.7020(10)	0.3457(10)	0.144(11)
C140	0.456(3)	0.720(5)	0.328(3)	0.90(8)
C141	0.8916(10)	0.4434(11)	0.2763(9)	0.183(15)
C142	0.9583(12)	0.3670(11)	0.2707(10)	0.181(14)
C143	0.7849(14)	0.3846(11)	0.3227(13)	0.178(15)
C144	0.7657(14)	0.3708(14)	0.2890(10)	0.165(12)
C145	0.830(2)	0.440(2)	0.3718(14)	0.36(4)
C146	0.7937(11)	0.4630(12)	0.4201(7)	0.107(7)
F1	0.6585(14)	0.0371(13)	0.7527(11)	0.319(16)
F2	0.5694(11)	0.1492(16)	0.7513(8)	0.275(13)
F3	0.5973(11)	0.1114(12)	0.8146(6)	0.211(9)
F4	0.6862(10)	0.1249(11)	0.7076(5)	0.183(7)
F5	0.7183(8)	0.0855(10)	0.7764(6)	0.183(7)
F6	0.6351(13)	0.1883(10)	0.7712(7)	0.213(8)
F7	0.8419(9)	0.2840(10)	0.0520(6)	0.188(7)
F8	0.8554(9)	0.1942(10)	0.0213(8)	0.210(8)
F9	0.8860(18)	0.2722(11)	-0.0264(7)	0.276(13)
F10	0.9437(11)	0.1729(12)	0.0524(6)	0.222(10)
F11	0.9566(11)	0.2669(10)	0.0101(7)	0.220(9)
F12	0.9761(13)	0.1701(10)	-0.0248(6)	0.242(11)
F13	0.6331(8)	0.3158(6)	0.4446(4)	0.122(4)
F14	0.6291(8)	0.2442(6)	0.5092(4)	0.128(5)
F15	0.5702(6)	0.3645(6)	0.5163(4)	0.107(3)
F16	0.7378(7)	0.2451(7)	0.4664(5)	0.150(5)
F17	0.6773(7)	0.3699(6)	0.4749(4)	0.109(4)
F18	0.6719(9)	0.2987(6)	0.5410(5)	0.144(5)
F19	0.4627(7)	0.3177(6)	-0.0253(3)	0.102(3)
F20	0.5113(6)	0.3732(5)	0.0007(3)	0.088(3)
F21	0.5417(6)	0.2551(5)	0.0188(4)	0.109(4)
F22	0.3893(5)	0.3999(6)	0.0337(4)	0.120(4)
F23	0.4200(7)	0.2816(6)	0.0533(4)	0.113(4)
F24	0.4686(7)	0.3379(5)	0.0770(3)	0.096(3)
F25	0.7260(5)	0.6657(6)	0.5559(3)	0.119(4)
F26	0.6803(5)	0.7301(6)	0.4969(3)	0.090(3)
F27	0.7455(7)	0.6097(7)	0.4927(6)	0.155(6)
F28	0.8465(5)	0.6108(6)	0.5035(3)	0.107(4)
F29	0.7801(8)	0.7312(7)	0.5088(5)	0.138(5)
F30	0.8016(8)	0.6770(7)	0.4439(3)	0.150(5)
F31	0.4730(19)	0.3898(19)	0.2636(7)	0.272(16)
F32	0.6061(14)	0.361(2)	0.2459(9)	0.32(2)
F33	0.516(2)	0.4841(12)	0.2469(8)	0.290(18)
N1	0.6454(6)	0.2034(5)	0.1440(3)	0.037(2)
N2	0.7102(5)	0.5170(5)	0.1092(3)	0.035(2)

N3	0.3380(5)	0.5843(5)	0.1406(3)	0.030(2)
N4	0.5293(6)	0.2211(5)	0.3822(4)	0.043(2)
N5	0.2434(5)	0.5860(5)	0.3907(3)	0.036(2)
N6	0.6201(5)	0.5310(5)	0.3525(3)	0.033(2)
O1	0.5993(4)	0.4174(4)	0.0319(2)	0.0265(16)
O2	0.4413(4)	0.4400(4)	0.4741(2)	0.0290(16)
P1	0.5835(2)	0.08677(18)	0.14802(12)	0.0444(8)
P2	0.7958(2)	0.0802(2)	0.17486(15)	0.0548(10)
P3	0.8874(2)	0.4578(2)	0.10212(17)	0.0689(12)
P4	0.6661(2)	0.6798(2)	0.13156(17)	0.0609(11)
P5	0.24000(19)	0.75699(19)	0.14867(12)	0.0438(8)
P6	0.18832(18)	0.55825(18)	0.17415(12)	0.0395(7)
P7	0.6751(3)	0.0845(2)	0.40013(15)	0.0603(10)
P8	0.4667(2)	0.12304(18)	0.35288(12)	0.0454(8)
P9	0.08982(18)	0.57181(18)	0.40072(12)	0.0400(8)
P10	0.1726(2)	0.7517(2)	0.35740(17)	0.0650(11)
P11	0.59991(19)	0.6933(2)	0.33413(13)	0.0479(9)
P12	0.8038(2)	0.45981(19)	0.32139(13)	0.0490(9)
P13	0.6478(4)	0.1113(4)	0.7604(2)	0.111(2)
P14	0.9113(4)	0.2259(4)	0.0145(2)	0.1008(19)
P15	0.6565(2)	0.3053(2)	0.49235(14)	0.0549(9)
P16	0.4648(2)	0.32699(19)	0.02585(13)	0.0457(8)
P17	0.7652(2)	0.6689(2)	0.49937(12)	0.0555(10)
P18	0.5308(18)	0.4119(16)	0.2529(4)	0.305(11)
Pt1	0.68180(3)	0.09190(2)	0.167552(17)	0.03702(12)
Pt2	0.77401(3)	0.56652(3)	0.118802(16)	0.03382(12)
Pt3	0.21848(2)	0.65436(2)	0.166388(15)	0.03088(11)
Pt4	0.57390(3)	0.10816(3)	0.371686(18)	0.04387(14)
Pt5	0.13690(3)	0.65797(3)	0.375670(16)	0.03433(12)
Pt6	0.70089(3)	0.57490(3)	0.323357(15)	0.03308(12)