

Figure: Infrared spectrum for a crystal containing U_{28a}

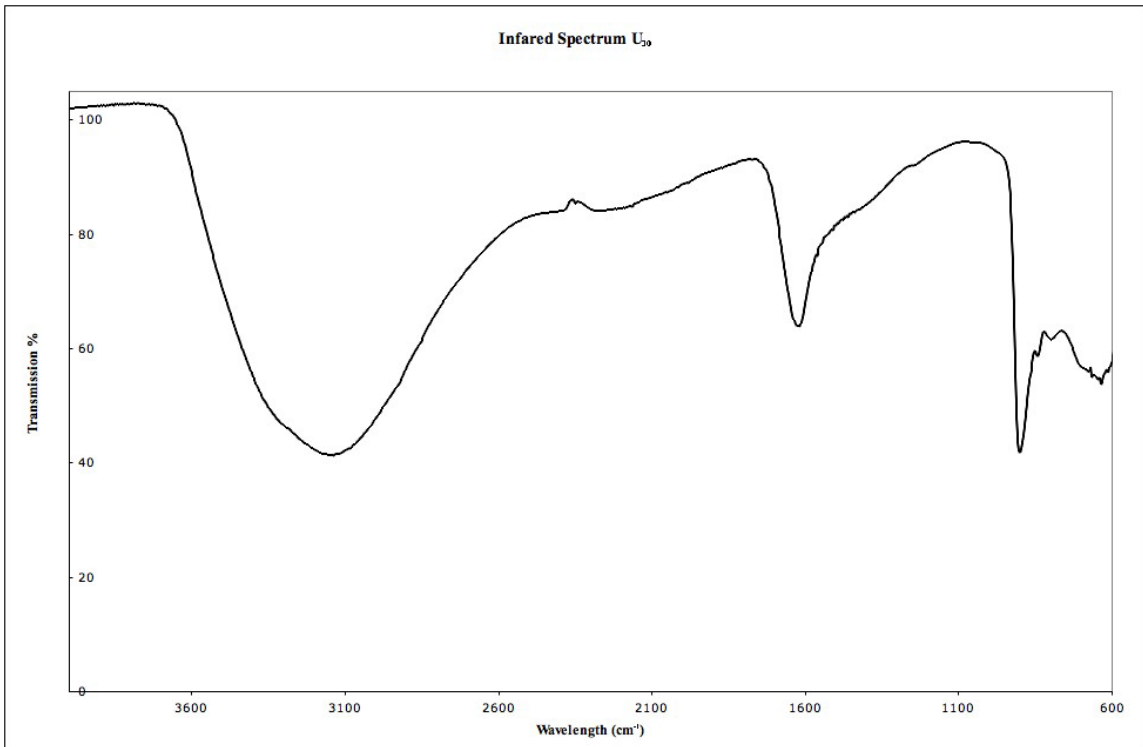


Figure: Infrared spectrum for a crystal containing U₃₀.

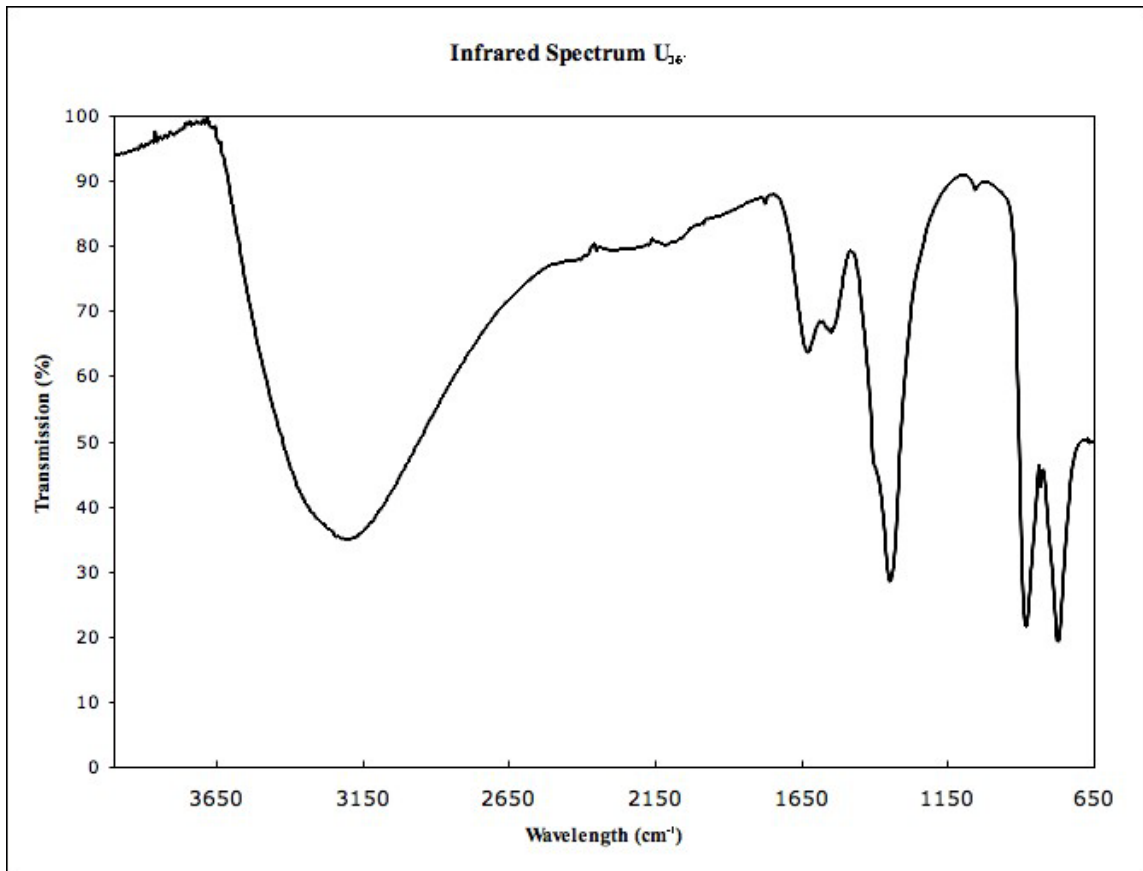


Figure: Infrared spectrum for a crystal containing U_{36a}

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
For U28a

Crystal Data			
Formula	O14O U28, Na10, O4 S, 56(O), 4(Na)		
Formula Weight	10218.77		
Crystal System	Triclinic		
Space group	P-1	(No. 2)	
a, b, c [Angstrom]	18.593(3)	18.648(3)	36.533(5)
alpha, beta, gamma [deg]	75.820(4)	89.250(4)	62.279(4)
V [Ang**3]	10796(3)		
Z	2		
D(calc) [g/cm**3]	3.144		
Mu(MoKa) [/mm]	21.064		
F(000)	8692		
Crystal Size [mm]	0.02 x 0.10 x 0.10		
Data Collection			
Temperature (K)	120		
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073	
Theta Min-Max [Deg]	1.8, 22.5		
Dataset	-20: 20 ; -19: 20 ; -39: 39		
Tot., Uniq. Data, R(int)	94832,	28217,	0.212
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	8823		
Refinement			
Nref, Npar	28217, 1118		
R, wR2, S	0.0636, 0.1640, 0.65		
w = 1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0000P)^2^]	where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3		
Max. and Av. Shift/Error	0.02, 0.00		
Min. and Max. Resd. Dens. [e/Ang^3]	-2.00, 2.96		

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
U1	0.52109(10)	0.13922(11)	0.15788(5)	0.0207(7)
U2	-0.11119(11)	0.37451(11)	0.20117(6)	0.0239(7)
U3	0.32546(11)	0.35482(10)	0.17505(5)	0.0208(7)
U4	0.18670(10)	0.37081(10)	0.08229(5)	0.0183(6)
U5	0.22996(11)	-0.24395(11)	0.16214(6)	0.0240(7)
U6	0.38149(10)	0.15506(10)	0.06522(5)	0.0190(7)
U7	0.15419(11)	-0.25655(11)	0.26230(6)	0.0248(7)
U8	-0.14359(11)	0.17076(11)	0.19657(6)	0.0254(7)
U9	-0.05910(11)	0.17774(11)	0.09082(5)	0.0221(7)
U10	-0.02423(10)	0.37990(10)	0.09551(5)	0.0201(7)
U11	0.45614(11)	-0.25460(11)	0.14825(6)	0.0240(7)
U12	0.34889(11)	-0.03337(11)	0.06107(5)	0.0223(7)
U13	0.12157(11)	-0.02258(11)	0.07485(5)	0.0222(7)
U14	0.24836(11)	0.34844(11)	0.27570(6)	0.0249(7)
U15	-0.04797(11)	-0.03370(11)	0.28080(6)	0.0261(7)
U16	0.62443(11)	-0.06677(11)	0.24075(6)	0.0271(7)
U17	0.59188(11)	-0.27770(11)	0.23591(6)	0.0279(7)
U18	0.01281(12)	0.36103(11)	0.29023(6)	0.0283(7)
U19	0.01970(12)	-0.02075(12)	0.38856(6)	0.0364(8)
U20	0.40774(13)	0.15779(13)	0.37023(6)	0.0390(8)
U21	0.32670(13)	-0.35880(12)	0.36046(6)	0.0396(8)
U22	0.04910(13)	0.17640(13)	0.39273(6)	0.0381(8)
U23	0.54630(12)	-0.36998(12)	0.34592(6)	0.0389(8)
U24	0.59195(13)	-0.04683(13)	0.35345(6)	0.0418(8)
U25	0.27484(14)	0.08759(13)	0.44640(6)	0.0446(9)
U26	0.58419(13)	-0.25376(13)	0.41909(7)	0.0469(8)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
U27	0.22551(14)	-0.23542(14)	0.43938(6)	0.0476(9)
U28	0.38691(15)	-0.16705(14)	0.47625(6)	0.0518(9)
O1	0.0850(16)	0.3518(16)	0.0556(8)	0.022(8)
O2	-0.0916(15)	0.0210(15)	0.2146(8)	0.013(7)
O3	0.2079(16)	0.4133(17)	0.2087(8)	0.024(8)
O4	0.0471(15)	0.1264(15)	0.0512(8)	0.015(7)
O5	0.1112(18)	-0.2061(18)	0.1969(9)	0.034(9)
O6	0.2978(15)	0.1166(15)	0.0355(7)	0.013(7)
O7	0.4674(17)	0.1920(17)	0.0948(8)	0.025(8)
O8	-0.0284(17)	0.4272(17)	0.2253(9)	0.032(9)
O9	0.4396(16)	0.2875(16)	0.1445(8)	0.020(8)
O10	0.5936(16)	-0.0122(16)	0.1746(8)	0.018(8)
O11	0.2646(16)	-0.3209(16)	0.2275(8)	0.018(8)
O12	0.3636(16)	0.3185(16)	0.2397(8)	0.018(8)
O13	0.1902(17)	-0.1700(16)	0.0973(8)	0.022(8)
O14	0.5778(17)	0.0842(17)	0.2221(8)	0.026(8)
O15	0.2513(15)	-0.0746(16)	0.0494(8)	0.017(7)
O16	-0.0079(15)	0.0333(15)	0.0996(7)	0.012(7)
O17	0.3161(14)	-0.0165(14)	0.1052(7)	0.002(6)
O18	0.5587(17)	-0.2255(17)	0.1692(9)	0.031(9)
O19	0.5143(17)	-0.3329(17)	0.2095(9)	0.032(9)
O20	-0.1601(16)	0.2248(17)	0.1301(8)	0.023(8)
O21	-0.0404(15)	0.1434(15)	0.2024(8)	0.015(7)
O22	0.3444(17)	-0.2767(17)	0.1292(9)	0.028(8)
O23	0.2838(17)	0.3916(17)	0.1100(9)	0.031(9)
O24	0.4011(18)	-0.1811(18)	0.0847(9)	0.033(9)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
O25	0.2224(16)	-0.3341(16)	0.1534(8)	0.023(8)
O26	0.0195(15)	0.1473(15)	0.1280(8)	0.015(7)
O27	0.1211(16)	-0.3358(16)	0.2612(8)	0.021(8)
O28	0.3136(18)	0.3041(18)	0.0572(9)	0.033(9)
O29	0.0423(18)	-0.1828(18)	0.2966(9)	0.034(9)
O30	0.4338(15)	0.1243(16)	0.1734(8)	0.017(7)
O31	-0.1763(15)	0.2878(16)	0.2230(8)	0.016(7)
O32	0.1653(15)	-0.0120(15)	0.1149(7)	0.011(7)
O33	-0.1348(15)	0.2018(15)	0.0525(8)	0.013(7)
O34	-0.1308(18)	0.1148(19)	0.2668(9)	0.040(10)
O35	0.3548(16)	-0.1210(17)	0.4250(8)	0.025(8)
O36	0.1324(18)	0.3721(18)	0.3094(9)	0.035(9)
O37	-0.1266(16)	0.4108(16)	0.1340(8)	0.020(8)
O38	0.3069(16)	0.2699(16)	0.1854(8)	0.019(8)
O39	0.4246(15)	0.1692(15)	0.0210(8)	0.014(7)
O40	0.3854(16)	-0.0409(16)	0.0152(8)	0.018(7)
O41	0.0338(19)	0.3081(19)	0.3571(9)	0.042(10)
O42	0.2044(17)	0.0241(17)	0.0351(9)	0.030(9)
O43	0.4467(16)	0.0047(16)	0.0745(8)	0.024(8)
O44	0.6565(18)	-0.2041(18)	0.2581(9)	0.034(9)
O45	0.0131(16)	-0.1507(16)	0.2548(8)	0.021(8)
O46	0.0427(16)	0.2865(16)	0.1314(8)	0.021(8)
O47	0.5138(16)	0.1011(16)	0.0992(8)	0.017(7)
O48	-0.1013(18)	0.3452(18)	0.2680(9)	0.037(9)
O49	0.2542(15)	0.2509(15)	0.2722(8)	0.015(7)
O50	-0.1872(18)	0.3198(18)	0.1787(9)	0.036(9)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O51	0.6407(17)	-0.1755(17)	0.2163(9)	0.028(8)
O52	-0.0407(15)	0.2988(15)	0.0584(7)	0.012(7)
O53	0.4954(15)	-0.1937(15)	0.2443(8)	0.014(7)
O54	0.661(2)	-0.113(2)	0.3053(10)	0.056(11)
O55	0.2425(17)	0.4493(18)	0.2782(9)	0.032(9)
O56	-0.1051(18)	0.3243(18)	0.0837(9)	0.035(9)
O57	0.1191(17)	-0.1456(17)	0.1159(8)	0.024(8)
O58	0.3417(15)	0.1373(15)	0.1085(7)	0.011(7)
O59	-0.0889(15)	0.4757(15)	0.0578(8)	0.016(7)
O60	0.2110(15)	0.2813(15)	0.1203(7)	0.012(7)
O61	0.3092(19)	0.192(2)	0.4132(9)	0.045(10)
O62	-0.0147(17)	0.2816(17)	0.2051(8)	0.028(8)
O63	0.6908(16)	-0.3612(16)	0.2293(8)	0.020(8)
O64	0.2365(15)	-0.1605(15)	0.1751(8)	0.016(7)
O65	0.0999(17)	-0.0281(17)	0.3562(9)	0.031(9)
O66	0.1860(15)	-0.1798(15)	0.2637(7)	0.011(7)
O67	0.1193(15)	0.1311(15)	0.3612(7)	0.011(7)
O68	0.7280(15)	-0.0906(15)	0.2355(8)	0.016(7)
O69	-0.0784(16)	0.4476(16)	0.1427(8)	0.024(8)
O70	0.4740(17)	-0.2572(17)	0.3313(9)	0.031(9)
O71	0.2516(18)	0.2838(18)	0.0402(9)	0.033(9)
O72	-0.081(2)	0.020(2)	0.3325(10)	0.049(10)
O73	0.0592(17)	0.4389(17)	0.1081(8)	0.027(8)
O74	0.3024(16)	-0.2493(16)	0.3405(8)	0.021(8)
O75	-0.1351(17)	-0.0509(18)	0.2848(9)	0.033(9)
O76	0.0441(17)	-0.0193(17)	0.2757(8)	0.029(8)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang^2] -----
O77	0.3871(19)	-0.1688(19)	0.1668(10)	0.046(10)
O78	0.5218(16)	-0.0419(16)	0.2466(8)	0.021(8)
O79	0.2120(16)	0.4367(16)	0.1280(8)	0.021(8)
O80	0.1515(15)	0.4674(15)	0.0420(7)	0.013(7)
O81	0.279(2)	0.056(2)	0.4024(10)	0.052(11)
O82	0.5268(17)	-0.3421(17)	0.1320(8)	0.030(9)
O83	0.3738(18)	-0.3254(18)	0.1714(9)	0.036(9)
O84	0.1021(17)	0.4197(18)	0.2655(9)	0.032(9)
O85	-0.056(2)	0.464(2)	0.2965(10)	0.054(11)
O86	0.3547(16)	0.1160(17)	0.3484(8)	0.025(8)
O87	0.2687(19)	-0.3602(19)	0.3041(9)	0.044(10)
O88	0.3704(19)	0.2745(19)	0.3178(9)	0.044(10)
O89	0.3395(17)	0.4492(17)	0.1687(8)	0.029(8)
O90	0.5000(17)	-0.0440(18)	0.3346(9)	0.033(9)
O91	0.0744(18)	-0.0339(18)	0.0342(9)	0.038(9)
O92	0.272(2)	-0.180(2)	0.4818(10)	0.059(11)
O93	-0.2500(17)	0.1928(18)	0.1951(9)	0.033(9)
O94	-0.2061(17)	0.4704(17)	0.1980(8)	0.030(9)
O95	0.0862(18)	0.2531(19)	0.2826(9)	0.042(10)
O96	0.202(2)	-0.325(2)	0.3284(11)	0.072(13)
O97	0.149(2)	0.196(2)	0.4244(10)	0.053(11)
O98	0.4710(17)	-0.1642(17)	0.0959(8)	0.028(8)
O99	0.2444(17)	-0.1687(18)	0.3992(9)	0.033(9)
O100	0.4897(18)	-0.1796(18)	0.3852(9)	0.036(9)
O101	0.6095(17)	0.1488(17)	0.1455(8)	0.030(9)
O102	0.222(2)	-0.319(2)	0.4005(10)	0.055(11)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O103	0.4709(17)	0.2597(17)	0.1868(9)	0.031(9)
O105	0.6318(19)	-0.020(2)	0.2920(10)	0.048(10)
O106	0.298(2)	0.287(2)	0.3391(11)	0.062(12)
O107	-0.0253(19)	-0.0782(19)	0.3485(10)	0.045(10)
O108	0.651(2)	-0.193(2)	0.3801(12)	0.081(14)
O109	0.455(2)	0.205(3)	0.3944(12)	0.092(15)
O110	0.349(2)	-0.467(2)	0.3801(11)	0.074(13)
O111	-0.032(2)	0.290(2)	0.3408(10)	0.054(11)
O112	0.524(2)	0.098(2)	0.3329(11)	0.065(12)
O113	-0.1325(18)	0.1371(19)	0.1381(9)	0.040(9)
O115	-0.017(2)	0.214(2)	0.4270(11)	0.064(12)
O118	-0.057(2)	-0.013(2)	0.4227(11)	0.066(12)
O119	0.418(2)	-0.210(2)	0.5262(11)	0.068(12)
O120	0.446(2)	-0.404(2)	0.3259(12)	0.082(14)
O121	0.618(2)	-0.477(2)	0.3637(11)	0.070(13)
O122	0.577(2)	-0.379(2)	0.2833(11)	0.074(13)
O123	0.505(2)	0.008(2)	0.3994(12)	0.090(15)
O124	0.144(2)	0.114(2)	0.4488(12)	0.079(13)
O125	0.576(2)	-0.368(2)	0.4097(11)	0.074(13)
O126	0.083(2)	0.032(2)	0.4247(12)	0.086(14)
O127	0.091(2)	-0.170(2)	0.4118(10)	0.055(11)
O128	-0.028(2)	0.127(2)	0.3685(11)	0.074(13)
O129	0.393(2)	-0.041(2)	0.4800(10)	0.058(11)
O130	0.610(2)	-0.144(2)	0.4131(11)	0.068(12)
O131	0.629(2)	-0.339(2)	0.3016(12)	0.089(15)
O132	0.682(2)	-0.043(2)	0.3736(12)	0.084(14)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
O133	0.677(2)	-0.329(2)	0.4543(10)	0.054(11)
O134	0.106(3)	-0.130(3)	0.4468(14)	0.118(18)
O135	0.271(2)	0.130(2)	0.4886(11)	0.065(12)
O136	0.286(2)	-0.042(2)	0.4843(12)	0.079(13)
O137	0.507(2)	-0.279(2)	0.4643(12)	0.088(15)
O138	0.385(3)	0.105(3)	0.4314(12)	0.090(15)
O139	0.448(3)	-0.376(3)	0.3927(15)	0.127(19)
O140	0.342(2)	-0.270(2)	0.4785(11)	0.064(12)
O141	0.209(2)	-0.306(2)	0.4799(11)	0.070(13)
O142	0.631(2)	-0.340(2)	0.3796(12)	0.079(13)
O143	0.521(2)	-0.178(2)	0.4620(11)	0.077(13)
O144	0.316(3)	-0.350(3)	0.4219(13)	0.107(17)
Na5	0.1672(12)	-0.1243(12)	0.3211(6)	0.044(6)
Na6	0.2140(11)	0.1678(11)	0.3276(5)	0.037(5)
Na7	0.2150(11)	-0.0273(11)	0.3911(6)	0.042(6)
Na8	0.4964(12)	-0.1407(12)	0.2998(6)	0.046(6)
Na9	0.3780(12)	-0.2051(12)	0.3755(6)	0.045(6)
Na10	0.6546(13)	-0.4096(13)	0.0543(6)	0.059(7)
Na11	-0.2521(12)	0.3685(12)	-0.0398(6)	0.048(6)
Na12	-0.3430(14)	0.2111(14)	0.0327(7)	0.074(8)
Na13	-0.2683(13)	0.6952(13)	0.0834(7)	0.064(7)
Na14	0.0588(14)	0.6999(14)	0.0613(7)	0.075(8)
S1	0.2849(8)	-0.0203(8)	0.3034(4)	0.036(5)
O104	0.3112(18)	-0.0560(18)	0.3433(9)	0.037(9)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang^2] -----
O114	0.246(2)	0.072(2)	0.2944(10)	0.051(11)
O116	0.362(2)	-0.060(2)	0.2840(10)	0.060(11)
O117	0.230(2)	-0.052(2)	0.2934(11)	0.066(12)
O145	0.1999(18)	0.1182(19)	0.1421(9)	0.040(10)
O146	0.169(2)	0.211(2)	0.2063(11)	0.068(12)
O147	0.143(2)	0.009(2)	0.2055(11)	0.065(12)
O148	0.362(2)	-0.005(2)	0.1905(12)	0.082(14)
O149	0.7659(16)	-0.3789(17)	0.0337(8)	0.024(8)
O150	0.7200(19)	-0.440(2)	0.1193(10)	0.050(10)
O151	-0.004(2)	0.141(2)	-0.0162(10)	0.055(11)
O152	-0.2911(18)	0.3163(18)	0.0184(9)	0.036(9)
O153	0.0157(19)	0.7953(19)	0.1021(10)	0.048(10)
O154	-0.2183(19)	0.1148(19)	0.0127(9)	0.043(10)
O155	0.1298(16)	0.6317(17)	0.0142(8)	0.025(8)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O156	-0.4635(19)	0.288(2)	0.0555(10)	0.048(10)
O157	-0.136(2)	0.617(2)	0.1232(10)	0.052(11)
O158	0.5897(18)	-0.2599(19)	0.0551(9)	0.042(10)
O159	-0.270(2)	0.137(2)	0.1006(10)	0.051(10)
O160	0.610(2)	-0.370(2)	-0.0114(10)	0.054(11)
O161	0.1861(19)	0.6004(19)	0.0972(10)	0.046(10)
O162	-0.418(2)	0.259(2)	-0.0280(11)	0.077(13)
O163	0.549(2)	-0.436(2)	0.0812(10)	0.056(11)
O164	-0.372(2)	0.090(2)	0.0529(10)	0.059(11)
O165	-0.3248(19)	0.508(2)	-0.0526(10)	0.049(10)
O166	0.026(2)	0.600(2)	0.1093(12)	0.091(15)
O167	-0.167(2)	0.226(2)	-0.0385(11)	0.067(12)
O168	-0.230(2)	0.793(2)	0.0388(11)	0.077(13)
O169	-0.061(2)	0.724(2)	0.0233(12)	0.088(14)
O170	-0.351(2)	0.352(2)	-0.0747(11)	0.075(13)
O171	0.739(3)	-0.558(3)	0.0554(13)	0.099(16)
O172	0.376(3)	0.097(3)	0.2605(13)	0.095(15)
O173	0.823(3)	-0.344(3)	0.2888(14)	0.122(19)
O174	0.615(3)	-0.236(3)	0.5276(13)	0.096(15)
O175	-0.285(3)	-0.074(3)	0.1236(13)	0.098(16)
O176	0.0716(15)	0.1152(15)	0.2807(7)	0.011(7)
O177	0.3366(18)	-0.1806(18)	0.2567(9)	0.037(9)
O178	0.461(2)	0.147(2)	0.2634(11)	0.061(11)
O179	0.5668(17)	-0.5692(17)	0.1278(8)	0.026(8)
O180	0.4559(19)	0.5112(19)	0.1650(10)	0.046(10)
O181	0.043(2)	-0.030(2)	0.1769(11)	0.059(11)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O182	0.104(2)	0.371(2)	0.1856(11)	0.064(12)
O183	-0.0127(19)	0.5716(19)	0.0196(9)	0.044(10)
O184	0.495(2)	-0.054(2)	0.1482(11)	0.061(12)
O185	-0.2296(19)	0.0149(19)	0.0804(9)	0.043(10)
O186	-0.053(3)	0.179(3)	0.2931(13)	0.097(15)
O187	0.5674(19)	0.4108(19)	0.2152(9)	0.042(10)
O188	0.700(2)	0.103(2)	0.2558(11)	0.062(12)
O189	0.9047(19)	-0.2166(19)	0.2504(9)	0.046(10)
O190	0.484(2)	-0.599(2)	0.1010(11)	0.063(12)
O191	0.783(2)	0.005(2)	0.1839(12)	0.079(14)
O192	0.142(2)	0.194(2)	0.0516(11)	0.063(12)
O193	-0.178(3)	-0.087(3)	0.0407(13)	0.093(15)
O194	0.554(2)	-0.032(2)	0.4716(11)	0.071(13)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U28a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O195	0.414(3)	0.067(3)	-0.0380(14)	0.112(17)
O196	0.331(2)	-0.487(2)	0.2333(11)	0.074(13)
O197	0.914(3)	-0.318(3)	0.2215(13)	0.093(15)
O198	-0.025(3)	0.780(3)	0.1767(14)	0.117(18)
O199	0.783(2)	-0.229(2)	0.1795(12)	0.090(15)
O200	-0.176(2)	-0.173(2)	0.3218(12)	0.089(15)
Na1	0.2622(9)	-0.0433(9)	0.1668(4)	0.008(4)
Na2	0.2941(9)	0.1517(9)	0.1706(5)	0.013(4)
Na3	0.0828(10)	0.1599(10)	0.1832(5)	0.023(5)
Na4	0.4023(11)	-0.0357(11)	0.3791(5)	0.034(5)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U Tensor

Table S3 - (An)isotropic Displacement Parameters
For U28a

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
U1	0.0161(11)	0.0173(11)	0.0295(13)	-0.0049(10)	0.0000(10)	-0.0092(9)
U2	0.0190(11)	0.0188(11)	0.0309(14)	-0.0056(10)	0.0030(10)	-0.0071(9)
U3	0.0202(11)	0.0155(11)	0.0291(13)	-0.0058(10)	0.0008(10)	-0.0104(9)
U4	0.0159(10)	0.0133(10)	0.0260(13)	-0.0031(9)	0.0012(9)	-0.0082(9)
U5	0.0313(12)	0.0187(11)	0.0293(13)	-0.0088(10)	0.0029(10)	-0.0167(10)
U6	0.0171(11)	0.0157(10)	0.0254(13)	-0.0051(9)	0.0029(9)	-0.0089(9)
U7	0.0308(12)	0.0198(11)	0.0279(13)	-0.0044(10)	0.0015(10)	-0.0164(10)
U8	0.0176(11)	0.0268(12)	0.0320(14)	-0.0042(10)	0.0032(10)	-0.0125(10)
U9	0.0182(11)	0.0221(11)	0.0259(13)	-0.0013(10)	-0.0029(10)	-0.0119(9)
U10	0.0147(10)	0.0174(11)	0.0250(13)	-0.0001(9)	-0.0018(9)	-0.0076(9)
U11	0.0267(12)	0.0184(11)	0.0313(14)	-0.0114(10)	0.0086(10)	-0.0121(10)
U12	0.0258(11)	0.0212(11)	0.0272(13)	-0.0110(10)	0.0084(10)	-0.0151(10)
U13	0.0272(12)	0.0217(11)	0.0233(13)	-0.0068(10)	0.0001(10)	-0.0158(10)
U14	0.0270(12)	0.0209(11)	0.0300(13)	-0.0108(10)	0.0010(10)	-0.0120(10)
U15	0.0246(11)	0.0278(12)	0.0292(13)	-0.0045(10)	0.0034(10)	-0.0168(10)
U16	0.0150(11)	0.0240(12)	0.0382(14)	-0.0061(10)	-0.0035(10)	-0.0069(9)
U17	0.0222(11)	0.0183(11)	0.0374(14)	-0.0078(10)	-0.0019(10)	-0.0048(10)
U18	0.0307(12)	0.0220(11)	0.0351(14)	-0.0137(10)	0.0090(11)	-0.0122(10)
U19	0.0411(14)	0.0393(13)	0.0303(14)	-0.0076(11)	0.0076(11)	-0.0214(12)
U20	0.0407(14)	0.0442(14)	0.0362(15)	-0.0132(12)	-0.0029(12)	-0.0223(12)
U21	0.0508(15)	0.0280(13)	0.0325(15)	-0.0024(11)	-0.0025(12)	-0.0153(11)
U22	0.0394(13)	0.0442(14)	0.0319(15)	-0.0139(12)	0.0083(11)	-0.0193(12)
U23	0.0370(13)	0.0272(13)	0.0419(16)	-0.0026(11)	-0.0055(12)	-0.0097(11)
U24	0.0370(13)	0.0426(14)	0.0421(16)	-0.0105(12)	-0.0101(12)	-0.0160(12)
U25	0.0553(15)	0.0449(15)	0.0359(15)	-0.0166(12)	0.0000(12)	-0.0228(13)
U26	0.0426(14)	0.0417(14)	0.0409(16)	-0.0051(12)	-0.0107(12)	-0.0102(12)

Table S3 - (An)isotropic Displacement Parameters (continued)
For U28a

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
U27	0.0567(16)	0.0481(15)	0.0351(16)	-0.0025(12)	0.0005(13)	-0.0266(13)
U28	0.0684(17)	0.0495(15)	0.0296(15)	-0.0043(12)	-0.0103(13)	-0.0243(14)
S1	0.028(8)	0.026(8)	0.050(11)	-0.011(8)	0.002(8)	-0.010(7)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 \cdot (\pi^2) \cdot U \cdot (\sin(\theta) / \lambda)^2$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 \cdot (\pi^2) \cdot \sum_{ij} h(i) \cdot h(j) \cdot U(i,j) \cdot A^*(i) \cdot A^*(j)$, for
Anisotropic Atoms. $A^*(i)$ are Reciprocal Axial Lengths and
 $h(i)$ are the Reflection Indices.

Table S4 - Bond Distances (Angstrom)
For U28a

U1	-O7	2.31(3)	U4	-O71	2.41(3)
U1	-O9	2.38(3)	U4	-O73	2.42(3)
U1	-O10	2.41(3)	U4	-O79	2.47(3)
U1	-O14	2.36(3)	U4	-O80	1.86(3)
U1	-O30	1.83(3)	U5	-O5	2.43(3)
U1	-O47	2.44(3)	U5	-O11	2.38(3)
U1	-O101	1.78(3)	U5	-O13	2.36(3)
U1	-O103	2.49(3)	U5	-O22	2.33(3)
U2	-O8	2.45(3)	U5	-O25	1.85(3)
U2	-O31	2.43(3)	U5	-O57	2.35(3)
U2	-O37	2.36(3)	U5	-O64	1.79(3)
U2	-O48	2.36(3)	U5	-O83	2.36(4)
U2	-O50	2.34(3)	U6	-O6	2.36(3)
U2	-O62	1.80(3)	U6	-O7	2.37(3)
U2	-O69	2.47(3)	U6	-O28	2.40(3)
U2	-O94	1.82(3)	U6	-O39	1.81(3)
U3	-O3	2.42(3)	U6	-O43	2.41(3)
U3	-O9	2.34(3)	U6	-O47	2.40(3)
U3	-O12	2.31(3)	U6	-O58	1.76(3)
U3	-O23	2.34(3)	U6	-O71	2.45(3)
U3	-O38	1.73(3)	U7	-O5	2.34(3)
U3	-O79	2.36(3)	U7	-O11	2.38(3)
U3	-O89	1.86(3)	U7	-O27	1.86(3)
U3	-O103	2.42(3)	U7	-O29	2.43(3)
U4	-O1	2.34(3)	U7	-O45	2.41(3)
U4	-O23	2.31(3)	U7	-O66	1.80(3)
U4	-O28	2.39(3)	U7	-O87	2.33(3)
U4	-O60	1.76(3)	U7	-O96	2.40(4)

Table S4 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U28a

U8	-O2	2.40(3)	U11	-O77	1.81(3)
U8	-O20	2.35(3)	U11	-O82	1.79(3)
U8	-O21	1.74(3)	U11	-O83	2.47(4)
U8	-O31	2.42(3)	U11	-O98	2.33(3)
U8	-O34	2.49(3)	U12	-O6	2.42(3)
U8	-O50	2.42(3)	U12	-O15	2.36(3)
U8	-O93	1.82(4)	U12	-O17	1.77(2)
U8	-O113	2.35(3)	U12	-O24	2.38(3)
U9	-O4	2.40(3)	U12	-O40	1.81(3)
U9	-O16	2.34(3)	U12	-O42	2.48(3)
U9	-O20	2.32(3)	U12	-O43	2.33(3)
U9	-O26	1.79(3)	U12	-O98	2.48(3)
U9	-O33	1.82(3)	U13	-O4	2.38(3)
U9	-O52	2.45(3)	U13	-O13	2.35(3)
U9	-O56	2.40(3)	U13	-O15	2.42(3)
U9	-O113	2.38(3)	U13	-O16	2.40(3)
U10	-O1	2.42(3)	U13	-O32	1.78(3)
U10	-O37	2.29(3)	U13	-O42	2.41(3)
U10	-O46	1.79(3)	U13	-O57	2.43(3)
U10	-O52	2.38(3)	U13	-O91	1.84(3)
U10	-O56	2.28(4)	U14	-O3	2.40(3)
U10	-O59	1.84(3)	U14	-O12	2.41(3)
U10	-O69	2.33(3)	U14	-O36	2.38(4)
U10	-O73	2.38(3)	U14	-O49	1.81(3)
U11	-O18	2.39(3)	U14	-O55	1.86(3)
U11	-O19	2.30(3)	U14	-O84	2.39(3)
U11	-O22	2.44(3)	U14	-O88	2.36(4)
U11	-O24	2.35(3)	U14	-O106	2.30(4)

Table S4 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U28a

U15	-O2	2.37(3)	U18	-O84	2.44(3)
U15	-O29	2.40(3)	U18	-O85	1.82(3)
U15	-O34	2.38(3)	U18	-O95	1.92(3)
U15	-O45	2.37(3)	U18	-O111	2.38(4)
U15	-O72	2.30(4)	U19	-O65	1.87(3)
U15	-O75	1.79(4)	U19	-O72	2.51(4)
U15	-O76	1.85(3)	U19	-O107	2.37(4)
U15	-O107	2.38(4)	U19	-O118	1.86(4)
U16	-O10	2.34(3)	U19	-O126	2.42(4)
U16	-O14	2.44(3)	U19	-O127	2.38(3)
U16	-O44	2.26(3)	U19	-O128	2.38(4)
U16	-O51	2.30(3)	U19	-O134	2.49(5)
U16	-O54	2.30(4)	U20	-O61	2.36(4)
U16	-O68	1.78(3)	U20	-O86	1.80(3)
U16	-O78	1.77(3)	U20	-O88	2.34(3)
U16	-O105	2.28(4)	U20	-O106	2.33(4)
U17	-O18	2.36(3)	U20	-O109	1.86(5)
U17	-O19	2.45(3)	U20	-O112	2.49(4)
U17	-O44	2.47(3)	U20	-O123	2.47(4)
U17	-O51	2.43(3)	U20	-O138	2.33(5)
U17	-O53	1.84(3)	U21	-O74	1.82(3)
U17	-O63	1.84(3)	U21	-O87	2.35(3)
U17	-O122	2.35(4)	U21	-O96	2.34(4)
U17	-O131	2.35(4)	U21	-O102	2.37(4)
U18	-O8	2.34(3)	U21	-O110	1.81(4)
U18	-O36	2.45(4)	U21	-O120	2.44(4)
U18	-O41	2.36(3)	U21	-O139	2.41(6)
U18	-O48	2.45(4)	U21	-O144	2.29(5)

Table S4 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U28a

U22	-O41	2.37(3)	U25	-O129	2.41(4)
U22	-O67	1.78(3)	U25	-O135	1.88(4)
U22	-O97	2.41(4)	U25	-O136	2.39(4)
U22	-O111	2.34(4)	U25	-O138	2.26(6)
U22	-O115	1.78(4)	U26	-O100	1.87(3)
U22	-O124	2.38(4)	U26	-O108	2.31(4)
U22	-O126	2.43(4)	U26	-O125	2.31(4)
U22	-O128	2.31(4)	U26	-O130	2.27(4)
U23	-O70	1.83(3)	U26	-O133	1.88(4)
U23	-O120	2.40(4)	U26	-O137	2.28(4)
U23	-O121	1.76(4)	U26	-O142	2.29(4)
U23	-O122	2.38(4)	U26	-O143	2.31(4)
U23	-O125	2.42(4)	U27	-O92	2.42(4)
U23	-O131	2.37(4)	U27	-O99	1.82(3)
U23	-O139	2.51(6)	U27	-O102	2.37(4)
U23	-O142	2.35(4)	U27	-O127	2.32(4)
U24	-O54	2.41(4)	U27	-O134	2.25(5)
U24	-O90	1.83(3)	U27	-O140	2.34(4)
U24	-O105	2.36(4)	U27	-O141	1.85(4)
U24	-O108	2.35(4)	U27	-O144	2.26(5)
U24	-O112	2.31(4)	U28	-O35	1.83(3)
U24	-O123	2.39(4)	U28	-O92	2.26(4)
U24	-O130	2.38(4)	U28	-O119	1.79(4)
U24	-O132	1.88(4)	U28	-O129	2.44(4)
U25	-O61	2.38(4)	U28	-O136	2.30(4)
U25	-O81	1.83(3)	U28	-O137	2.37(4)
U25	-O97	2.25(4)	U28	-O140	2.41(4)
U25	-O124	2.25(4)	U28	-O143	2.46(4)

Table S4 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U28a

S1	-O117	1.48(4)	O37	-O69	1.44(4)
S1	-O116	1.53(4)	O41	-O111	1.57(5)
S1	-O104	1.43(3)	O44	-O51	1.47(4)
S1	-O114	1.47(4)	O52	-O56	1.47(4)
O7	-O47	1.47(4)	O54	-O105	1.50(5)
O9	-O103	1.53(4)	O61	-O138	1.56(6)
O13	-O57	1.41(5)	O72	-O107	1.58(5)
O15	-O42	1.57(4)	O87	-O96	1.50(5)
O20	-O113	1.42(4)	O88	-O106	1.50(5)
O22	-O83	1.54(4)	O92	-O140	1.61(5)
O23	-O79	1.46(4)	O97	-O124	1.61(5)
O24	-O98	1.55(5)	O102	-O144	1.70(7)
O28	-O71	1.55(5)	O108	-O130	1.65(5)
O29	-O45	1.50(4)	O122	-O131	1.69(6)
O31	-O50	1.56(4)	O125	-O142	1.65(6)
O36	-O84	1.59(4)	O127	-O134	1.71(6)

Table S5 - Bond Angles (Degrees)
For U28a

O7	-U1	-O9	71.3(10)	O8	-U2	-O31	141.1(10)
O7	-U1	-O10	110.2(10)	O8	-U2	-O37	111.1(11)
O7	-U1	-O14	179.2(11)	O8	-U2	-O48	68.5(11)
O7	-U1	-O30	93.3(12)	O8	-U2	-O50	178.2(11)
O7	-U1	-O47	35.9(10)	O8	-U2	-O62	84.1(13)
O7	-U1	-O101	90.1(13)	O8	-U2	-O69	76.7(10)
O7	-U1	-O103	107.9(10)	O8	-U2	-O94	93.3(13)
O9	-U1	-O10	174.6(11)	O31	-U2	-O37	107.6(10)
O9	-U1	-O14	109.2(10)	O31	-U2	-O48	73.0(11)
O9	-U1	-O30	90.8(12)	O31	-U2	-O50	38.2(10)
O9	-U1	-O47	107.1(10)	O31	-U2	-O62	90.1(12)
O9	-U1	-O101	91.6(12)	O31	-U2	-O69	142.0(10)
O9	-U1	-O103	36.6(10)	O31	-U2	-O94	91.9(13)
O10	-U1	-O14	69.4(10)	O37	-U2	-O48	177.1(10)
O10	-U1	-O30	84.0(12)	O37	-U2	-O50	69.4(11)
O10	-U1	-O47	74.4(9)	O37	-U2	-O62	93.2(11)
O10	-U1	-O101	93.6(12)	O37	-U2	-O69	34.5(10)
O10	-U1	-O103	141.6(10)	O37	-U2	-O94	87.7(11)
O14	-U1	-O30	87.4(12)	O48	-U2	-O50	111.0(12)
O14	-U1	-O47	143.6(10)	O48	-U2	-O62	89.7(12)
O14	-U1	-O101	89.3(12)	O48	-U2	-O69	145.0(11)
O14	-U1	-O103	72.7(10)	O48	-U2	-O94	89.4(12)
O30	-U1	-O47	91.9(12)	O50	-U2	-O62	94.2(13)
O30	-U1	-O101	176.4(13)	O50	-U2	-O69	103.9(11)
O30	-U1	-O103	88.5(12)	O50	-U2	-O94	88.4(13)
O47	-U1	-O101	89.9(12)	O62	-U2	-O69	90.3(12)
O47	-U1	-O103	143.7(10)	O62	-U2	-O94	177.4(16)
O101	-U1	-O103	91.9(12)	O69	-U2	-O94	89.1(12)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O3	-U3	-O9	175.3(10)	O1	-U4	-O23	178.0(11)
O3	-U3	-O12	68.7(10)	O1	-U4	-O28	111.5(11)
O3	-U3	-O23	110.1(11)	O1	-U4	-O60	89.8(12)
O3	-U3	-O38	82.6(12)	O1	-U4	-O71	73.9(11)
O3	-U3	-O79	74.1(10)	O1	-U4	-O73	69.2(10)
O3	-U3	-O89	91.5(12)	O1	-U4	-O79	142.7(10)
O3	-U3	-O103	140.8(10)	O1	-U4	-O80	86.1(11)
O9	-U3	-O12	110.0(10)	O23	-U4	-O28	70.5(11)
O9	-U3	-O23	71.2(11)	O23	-U4	-O60	89.9(12)
O9	-U3	-O38	92.8(12)	O23	-U4	-O71	108.0(12)
O9	-U3	-O79	107.3(10)	O23	-U4	-O73	108.8(11)
O9	-U3	-O89	93.1(12)	O23	-U4	-O79	35.4(11)
O9	-U3	-O103	37.5(10)	O23	-U4	-O80	94.2(12)
O12	-U3	-O23	178.6(12)	O28	-U4	-O60	93.2(12)
O12	-U3	-O38	85.4(12)	O28	-U4	-O71	37.6(12)
O12	-U3	-O79	142.7(10)	O28	-U4	-O73	179.3(13)
O12	-U3	-O89	89.9(11)	O28	-U4	-O79	105.9(11)
O12	-U3	-O103	72.5(11)	O28	-U4	-O80	91.0(12)
O23	-U3	-O38	93.8(12)	O60	-U4	-O71	91.0(11)
O23	-U3	-O79	36.2(11)	O60	-U4	-O73	86.8(11)
O23	-U3	-O89	90.8(12)	O60	-U4	-O79	88.3(11)
O23	-U3	-O103	108.7(11)	O60	-U4	-O80	175.0(14)
O38	-U3	-O79	93.2(12)	O71	-U4	-O73	143.1(12)
O38	-U3	-O89	173.5(13)	O71	-U4	-O79	143.4(11)
O38	-U3	-O103	89.8(13)	O71	-U4	-O80	90.6(11)
O79	-U3	-O89	87.8(12)	O73	-U4	-O79	73.4(11)
O79	-U3	-O103	144.9(10)	O73	-U4	-O80	89.1(11)
O89	-U3	-O103	93.0(13)	O79	-U4	-O80	93.3(10)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O5	-U5	-O11	67.8(11)	O6	-U6	-O7	179.1(9)
O5	-U5	-O13	110.3(11)	O6	-U6	-O28	110.3(11)
O5	-U5	-O22	178.1(12)	O6	-U6	-O39	88.7(11)
O5	-U5	-O25	92.2(12)	O6	-U6	-O43	69.0(10)
O5	-U5	-O57	75.5(11)	O6	-U6	-O47	143.4(9)
O5	-U5	-O64	84.4(12)	O6	-U6	-O58	90.7(11)
O5	-U5	-O83	141.6(11)	O6	-U6	-O71	73.2(10)
O11	-U5	-O13	176.9(11)	O7	-U6	-O28	70.4(11)
O11	-U5	-O22	112.3(11)	O7	-U6	-O39	90.8(12)
O11	-U5	-O25	86.5(11)	O7	-U6	-O43	110.3(10)
O11	-U5	-O57	143.1(11)	O7	-U6	-O47	35.8(10)
O11	-U5	-O64	88.5(11)	O7	-U6	-O58	89.8(12)
O11	-U5	-O83	74.0(11)	O7	-U6	-O71	107.5(11)
O13	-U5	-O22	69.7(11)	O28	-U6	-O39	90.3(11)
O13	-U5	-O25	91.3(11)	O28	-U6	-O43	178.2(11)
O13	-U5	-O57	34.8(11)	O28	-U6	-O47	106.2(11)
O13	-U5	-O64	93.7(11)	O28	-U6	-O58	91.8(12)
O13	-U5	-O83	108.1(11)	O28	-U6	-O71	37.2(12)
O22	-U5	-O25	89.7(12)	O39	-U6	-O43	91.3(11)
O22	-U5	-O57	104.5(11)	O39	-U6	-O47	89.1(12)
O22	-U5	-O64	93.8(12)	O39	-U6	-O58	177.9(12)
O22	-U5	-O83	38.4(11)	O39	-U6	-O71	92.5(12)
O25	-U5	-O57	92.6(12)	O43	-U6	-O47	74.6(10)
O25	-U5	-O64	174.7(12)	O43	-U6	-O58	86.6(11)
O25	-U5	-O83	89.4(13)	O43	-U6	-O71	141.9(11)
O57	-U5	-O64	90.4(12)	O47	-U6	-O58	90.1(12)
O57	-U5	-O83	142.9(11)	O47	-U6	-O71	143.3(10)
O64	-U5	-O83	90.8(12)	O58	-U6	-O71	89.3(12)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

05	-U7	-011	69.3(11)	O2	-U8	-020	111.5(10)
05	-U7	-027	85.3(12)	O2	-U8	-021	83.3(11)
05	-U7	-029	109.8(11)	O2	-U8	-031	142.0(9)
05	-U7	-045	73.6(11)	O2	-U8	-034	68.8(10)
05	-U7	-066	95.0(11)	O2	-U8	-050	176.4(11)
05	-U7	-087	139.1(12)	O2	-U8	-093	93.3(12)
05	-U7	-096	172.9(11)	O2	-U8	-0113	76.4(10)
011	-U7	-027	90.3(12)	O20	-U8	-021	95.0(12)
011	-U7	-029	176.4(11)	O20	-U8	-031	106.3(10)
011	-U7	-045	142.7(10)	O20	-U8	-034	178.2(12)
011	-U7	-066	90.0(11)	O20	-U8	-050	68.6(10)
011	-U7	-087	70.2(11)	O20	-U8	-093	90.4(13)
011	-U7	-096	107.3(11)	O20	-U8	-0113	35.1(11)
027	-U7	-029	93.1(12)	O21	-U8	-031	89.6(11)
027	-U7	-045	89.6(12)	O21	-U8	-034	86.9(13)
027	-U7	-066	179.6(13)	O21	-U8	-050	93.2(12)
027	-U7	-087	89.6(13)	O21	-U8	-093	174.5(13)
027	-U7	-096	88.5(13)	O21	-U8	-0113	92.3(13)
029	-U7	-045	36.2(10)	O31	-U8	-034	73.6(10)
029	-U7	-066	86.6(12)	O31	-U8	-050	37.7(10)
029	-U7	-087	111.0(11)	O31	-U8	-093	90.4(12)
029	-U7	-096	74.1(12)	O31	-U8	-0113	141.4(10)
045	-U7	-066	90.3(12)	O34	-U8	-050	111.3(11)
045	-U7	-087	147.1(11)	O34	-U8	-093	87.8(13)
045	-U7	-096	110.0(11)	O34	-U8	-0113	145.0(11)
066	-U7	-087	90.3(12)	O50	-U8	-093	90.2(13)
066	-U7	-096	91.2(12)	O50	-U8	-0113	103.7(11)
087	-U7	-096	37.1(12)	O93	-U8	-0113	91.2(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O4	-U9	-O16	69.5(9)	O1	-U10	-O37	177.5(11)
O4	-U9	-O20	178.8(10)	O1	-U10	-O46	89.4(12)
O4	-U9	-O26	87.6(11)	O1	-U10	-O52	75.1(10)
O4	-U9	-O33	89.8(12)	O1	-U10	-O56	111.9(11)
O4	-U9	-O52	74.3(9)	O1	-U10	-O59	88.2(11)
O4	-U9	-O56	109.7(11)	O1	-U10	-O69	141.3(11)
O4	-U9	-O113	144.0(10)	O1	-U10	-O73	68.7(10)
O16	-U9	-O20	109.6(10)	O37	-U10	-O46	91.1(12)
O16	-U9	-O26	85.1(11)	O37	-U10	-O52	107.3(10)
O16	-U9	-O33	91.3(11)	O37	-U10	-O56	70.6(11)
O16	-U9	-O52	143.7(9)	O37	-U10	-O59	91.2(12)
O16	-U9	-O56	177.0(12)	O37	-U10	-O69	36.2(11)
O16	-U9	-O113	74.5(10)	O37	-U10	-O73	108.9(10)
O20	-U9	-O26	91.6(12)	O46	-U10	-O52	91.2(11)
O20	-U9	-O33	91.0(12)	O46	-U10	-O56	92.7(13)
O20	-U9	-O52	106.6(10)	O46	-U10	-O59	177.5(14)
O20	-U9	-O56	71.2(11)	O46	-U10	-O69	89.5(11)
O20	-U9	-O113	35.1(11)	O46	-U10	-O73	87.5(12)
O26	-U9	-O33	176.2(12)	O52	-U10	-O56	36.8(11)
O26	-U9	-O52	90.6(11)	O52	-U10	-O59	89.1(11)
O26	-U9	-O56	91.9(12)	O52	-U10	-O69	143.6(11)
O26	-U9	-O113	88.1(13)	O52	-U10	-O73	143.8(10)
O33	-U9	-O52	91.4(11)	O56	-U10	-O59	89.0(12)
O33	-U9	-O56	91.6(12)	O56	-U10	-O69	106.8(12)
O33	-U9	-O113	92.4(13)	O56	-U10	-O73	179.5(13)
O52	-U9	-O56	35.3(10)	O59	-U10	-O69	91.8(11)
O52	-U9	-O113	141.5(10)	O59	-U10	-O73	90.9(12)
O56	-U9	-O113	106.2(11)	O69	-U10	-O73	72.7(11)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O18	-U11	-O19	68.1(11)	O6	-U12	-O15	112.0(10)
O18	-U11	-O22	175.7(11)	O6	-U12	-O17	89.5(10)
O18	-U11	-O24	112.5(12)	O6	-U12	-O24	178.4(11)
O18	-U11	-O77	84.3(14)	O6	-U12	-O40	85.2(11)
O18	-U11	-O82	94.5(13)	O6	-U12	-O42	74.4(10)
O18	-U11	-O83	142.3(11)	O6	-U12	-O43	69.3(10)
O18	-U11	-O98	73.7(11)	O6	-U12	-O98	142.4(11)
O19	-U11	-O22	111.4(11)	O15	-U12	-O17	93.3(12)
O19	-U11	-O24	177.0(11)	O15	-U12	-O24	68.3(11)
O19	-U11	-O77	89.0(13)	O15	-U12	-O40	92.3(12)
O19	-U11	-O82	88.5(12)	O15	-U12	-O42	37.8(10)
O19	-U11	-O83	74.9(11)	O15	-U12	-O43	178.3(9)
O19	-U11	-O98	141.5(12)	O15	-U12	-O98	105.6(10)
O22	-U11	-O24	68.3(12)	O17	-U12	-O24	92.1(11)
O22	-U11	-O77	91.5(14)	O17	-U12	-O40	173.4(13)
O22	-U11	-O82	89.7(13)	O17	-U12	-O42	89.4(12)
O22	-U11	-O83	36.6(11)	O17	-U12	-O43	85.5(12)
O22	-U11	-O98	107.1(11)	O17	-U12	-O98	88.7(11)
O24	-U11	-O77	94.1(14)	O24	-U12	-O40	93.3(12)
O24	-U11	-O82	88.5(12)	O24	-U12	-O42	106.0(11)
O24	-U11	-O83	104.8(12)	O24	-U12	-O43	110.4(11)
O24	-U11	-O98	38.8(12)	O24	-U12	-O98	37.3(12)
O77	-U11	-O82	177.4(16)	O40	-U12	-O42	92.9(12)
O77	-U11	-O83	88.0(14)	O40	-U12	-O43	89.0(12)
O77	-U11	-O98	92.6(13)	O40	-U12	-O98	93.2(11)
O82	-U11	-O83	91.6(13)	O42	-U12	-O43	143.4(10)
O82	-U11	-O98	89.3(12)	O42	-U12	-O98	143.1(11)
O83	-U11	-O98	143.6(11)	O43	-U12	-O98	73.1(10)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O4	-U13	-O13	177.6(11)	O3	-U14	-O12	67.4(10)
O4	-U13	-O15	109.6(10)	O3	-U14	-O36	111.2(11)
O4	-U13	-O16	68.8(9)	O3	-U14	-O49	92.9(11)
O4	-U13	-O32	90.0(11)	O3	-U14	-O55	85.9(12)
O4	-U13	-O42	71.6(10)	O3	-U14	-O84	72.2(11)
O4	-U13	-O57	144.4(11)	O3	-U14	-O88	137.7(11)
O4	-U13	-O91	90.2(12)	O3	-U14	-O106	174.8(13)
O13	-U13	-O15	71.9(10)	O12	-U14	-O36	176.1(10)
O13	-U13	-O16	109.8(10)	O12	-U14	-O49	87.7(12)
O13	-U13	-O32	91.9(11)	O12	-U14	-O55	91.5(12)
O13	-U13	-O42	109.9(11)	O12	-U14	-O84	139.6(10)
O13	-U13	-O57	34.2(11)	O12	-U14	-O88	70.6(11)
O13	-U13	-O91	87.8(12)	O12	-U14	-O106	107.9(12)
O15	-U13	-O16	178.3(9)	O36	-U14	-O49	88.7(12)
O15	-U13	-O32	91.2(12)	O36	-U14	-O55	92.1(13)
O15	-U13	-O42	38.0(10)	O36	-U14	-O84	39.0(11)
O15	-U13	-O57	106.0(10)	O36	-U14	-O88	111.0(11)
O15	-U13	-O91	90.1(13)	O36	-U14	-O106	73.6(13)
O16	-U13	-O32	88.3(11)	O49	-U14	-O55	178.8(14)
O16	-U13	-O42	140.3(9)	O49	-U14	-O84	92.2(12)
O16	-U13	-O57	75.7(10)	O49	-U14	-O88	91.0(12)
O16	-U13	-O91	90.4(13)	O49	-U14	-O106	89.2(13)
O32	-U13	-O42	89.7(12)	O55	-U14	-O84	87.8(13)
O32	-U13	-O57	88.7(11)	O55	-U14	-O88	89.6(13)
O32	-U13	-O91	178.5(15)	O55	-U14	-O106	91.9(13)
O42	-U13	-O57	143.9(11)	O84	-U14	-O88	149.7(11)
O42	-U13	-O91	91.8(13)	O84	-U14	-O106	112.5(13)
O57	-U13	-O91	90.3(13)	O88	-U14	-O106	37.5(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O2	-U15	-O29	110.7(10)	O10	-U16	-O14	69.1(10)
O2	-U15	-O34	71.2(10)	O10	-U16	-O44	110.6(11)
O2	-U15	-O45	74.1(9)	O10	-U16	-O51	73.0(10)
O2	-U15	-O72	134.9(11)	O10	-U16	-O54	174.6(13)
O2	-U15	-O75	86.5(13)	O10	-U16	-O68	88.7(12)
O2	-U15	-O76	92.8(12)	O10	-U16	-O78	91.9(12)
O2	-U15	-O107	171.4(12)	O10	-U16	-O105	137.7(11)
O29	-U15	-O34	176.5(13)	O14	-U16	-O44	175.2(12)
O29	-U15	-O45	36.7(10)	O14	-U16	-O51	141.8(10)
O29	-U15	-O72	114.1(11)	O14	-U16	-O54	107.1(11)
O29	-U15	-O75	90.7(13)	O14	-U16	-O68	92.1(12)
O29	-U15	-O76	87.6(13)	O14	-U16	-O78	87.2(12)
O29	-U15	-O107	74.8(11)	O14	-U16	-O105	68.8(11)
O34	-U15	-O45	145.2(10)	O44	-U16	-O51	37.6(11)
O34	-U15	-O72	64.3(12)	O44	-U16	-O54	73.5(12)
O34	-U15	-O75	92.4(13)	O44	-U16	-O68	92.7(13)
O34	-U15	-O76	89.4(13)	O44	-U16	-O78	88.1(13)
O34	-U15	-O107	103.7(11)	O44	-U16	-O105	111.7(12)
O45	-U15	-O72	150.2(11)	O51	-U16	-O54	111.0(12)
O45	-U15	-O75	87.1(13)	O51	-U16	-O68	90.8(12)
O45	-U15	-O76	90.6(12)	O51	-U16	-O78	90.4(13)
O45	-U15	-O107	111.0(10)	O51	-U16	-O105	149.3(12)
O72	-U15	-O75	88.2(14)	O54	-U16	-O68	87.6(14)
O72	-U15	-O76	93.9(14)	O54	-U16	-O78	91.6(14)
O72	-U15	-O107	39.4(12)	O54	-U16	-O105	38.3(12)
O75	-U15	-O76	177.7(12)	O68	-U16	-O78	178.8(15)
O75	-U15	-O107	86.9(14)	O68	-U16	-O105	89.0(13)
O76	-U15	-O107	94.1(13)	O78	-U16	-O105	89.9(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O18	-U17	-O19	66.3(11)	O8	-U18	-O36	109.3(11)
O18	-U17	-O44	109.0(11)	O8	-U18	-O41	171.3(12)
O18	-U17	-O51	74.1(11)	O8	-U18	-O48	68.8(11)
O18	-U17	-O53	92.4(12)	O8	-U18	-O84	71.2(11)
O18	-U17	-O63	89.6(12)	O8	-U18	-O85	84.9(13)
O18	-U17	-O122	135.2(12)	O8	-U18	-O95	94.1(12)
O18	-U17	-O131	176.0(11)	O8	-U18	-O111	136.8(13)
O19	-U17	-O44	172.7(10)	O36	-U18	-O41	75.8(12)
O19	-U17	-O51	140.2(11)	O36	-U18	-O48	176.2(10)
O19	-U17	-O53	89.3(12)	O36	-U18	-O84	38.0(11)
O19	-U17	-O63	93.1(12)	O36	-U18	-O85	91.1(15)
O19	-U17	-O122	69.0(12)	O36	-U18	-O95	88.6(13)
O19	-U17	-O131	111.3(12)	O36	-U18	-O111	114.0(12)
O44	-U17	-O51	35.0(11)	O41	-U18	-O48	106.6(12)
O44	-U17	-O53	85.3(12)	O41	-U18	-O84	113.4(12)
O44	-U17	-O63	92.5(12)	O41	-U18	-O85	87.9(14)
O44	-U17	-O122	115.8(12)	O41	-U18	-O95	93.1(12)
O44	-U17	-O131	73.6(12)	O41	-U18	-O111	38.7(13)
O51	-U17	-O53	88.8(12)	O48	-U18	-O84	139.9(11)
O51	-U17	-O63	90.2(12)	O48	-U18	-O85	91.9(15)
O51	-U17	-O122	150.7(12)	O48	-U18	-O95	88.3(13)
O51	-U17	-O131	108.4(12)	O48	-U18	-O111	68.1(12)
O53	-U17	-O63	177.4(14)	O84	-U18	-O85	86.7(15)
O53	-U17	-O122	91.0(13)	O84	-U18	-O95	92.4(13)
O53	-U17	-O131	90.7(13)	O84	-U18	-O111	151.9(12)
O63	-U17	-O122	88.8(13)	O85	-U18	-O95	178.8(15)
O63	-U17	-O131	87.3(13)	O85	-U18	-O111	93.3(15)
O122	-U17	-O131	42.3(14)	O95	-U18	-O111	87.9(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O65	-U19	-O72	89.9(13)	O61	-U20	-O86	90.0(13)
O65	-U19	-O107	86.3(14)	O61	-U20	-O88	109.5(12)
O65	-U19	-O118	177.0(17)	O61	-U20	-O106	73.4(13)
O65	-U19	-O126	85.6(14)	O61	-U20	-O109	85.8(16)
O65	-U19	-O127	88.5(13)	O61	-U20	-O112	170.3(12)
O65	-U19	-O128	85.4(13)	O61	-U20	-O123	103.9(13)
O65	-U19	-O134	100.2(16)	O61	-U20	-O138	38.8(16)
O72	-U19	-O107	37.6(11)	O86	-U20	-O88	93.5(13)
O72	-U19	-O118	92.9(15)	O86	-U20	-O106	83.7(13)
O72	-U19	-O126	144.1(12)	O86	-U20	-O109	175.6(18)
O72	-U19	-O127	109.0(12)	O86	-U20	-O112	89.7(13)
O72	-U19	-O128	79.7(12)	O86	-U20	-O123	83.8(13)
O72	-U19	-O134	147.3(15)	O86	-U20	-O138	93.4(17)
O107	-U19	-O118	96.5(15)	O88	-U20	-O106	37.4(13)
O107	-U19	-O126	171.8(13)	O88	-U20	-O109	86.7(16)
O107	-U19	-O127	71.5(12)	O88	-U20	-O112	80.2(12)
O107	-U19	-O128	116.7(13)	O88	-U20	-O123	146.5(13)
O107	-U19	-O134	111.5(15)	O88	-U20	-O138	147.5(15)
O118	-U19	-O126	91.5(15)	O106	-U20	-O109	93.8(18)
O118	-U19	-O127	91.5(14)	O106	-U20	-O112	116.2(13)
O118	-U19	-O128	94.2(14)	O106	-U20	-O123	167.3(13)
O118	-U19	-O134	77.9(18)	O106	-U20	-O138	112.2(17)
O126	-U19	-O127	106.5(13)	O109	-U20	-O112	94.8(17)
O126	-U19	-O128	64.4(13)	O109	-U20	-O123	98.4(17)
O126	-U19	-O134	68.3(16)	O109	-U20	-O138	84.0(19)
O127	-U19	-O128	169.4(14)	O112	-U20	-O123	66.4(13)
O127	-U19	-O134	41.2(15)	O112	-U20	-O138	131.5(16)
O128	-U19	-O134	131.7(16)	O123	-U20	-O138	65.9(16)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

074	-U21	-087	91.2(12)	041	-U22	-067	87.1(12)
074	-U21	-096	87.5(13)	041	-U22	-097	75.0(12)
074	-U21	-0102	90.9(13)	041	-U22	-0111	39.0(13)
074	-U21	-0110	179.0(18)	041	-U22	-0115	97.0(14)
074	-U21	-0120	90.2(13)	041	-U22	-0124	114.0(13)
074	-U21	-0139	86.2(16)	041	-U22	-0126	171.5(13)
074	-U21	-0144	94.9(16)	041	-U22	-0128	116.4(13)
087	-U21	-096	37.3(13)	067	-U22	-097	91.0(13)
087	-U21	-0102	107.1(13)	067	-U22	-0111	88.7(12)
087	-U21	-0110	88.3(15)	067	-U22	-0115	175.5(14)
087	-U21	-0120	79.8(13)	067	-U22	-0124	97.6(13)
087	-U21	-0139	145.2(16)	067	-U22	-0126	84.7(13)
087	-U21	-0144	149.1(18)	067	-U22	-0128	84.7(13)
096	-U21	-0102	70.0(13)	097	-U22	-0111	113.9(13)
096	-U21	-0110	91.5(16)	097	-U22	-0115	88.1(16)
096	-U21	-0120	116.9(14)	097	-U22	-0124	39.3(12)
096	-U21	-0139	173.2(15)	097	-U22	-0126	102.8(13)
096	-U21	-0144	112.6(18)	097	-U22	-0128	167.6(12)
0102	-U21	-0110	88.5(15)	0111	-U22	-0115	95.7(15)
0102	-U21	-0120	173.0(14)	0111	-U22	-0124	152.1(13)
0102	-U21	-0139	107.6(16)	0111	-U22	-0126	142.8(13)
0102	-U21	-0144	42.7(18)	0111	-U22	-0128	77.8(13)
0110	-U21	-0120	90.5(15)	0115	-U22	-0124	79.0(16)
0110	-U21	-0139	94.8(18)	0115	-U22	-0126	91.2(15)
0110	-U21	-0144	85.2(18)	0115	-U22	-0128	95.3(16)
0120	-U21	-0139	65.6(16)	0124	-U22	-0126	65.0(13)
0120	-U21	-0144	130.4(18)	0124	-U22	-0128	129.7(13)
0139	-U21	-0144	66(2)	0126	-U22	-0128	65.2(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O70	-U23	-O120	91.7(14)	O54	-U24	-O90	87.7(14)
O70	-U23	-O121	175.0(17)	O54	-U24	-O105	36.7(12)
O70	-U23	-O122	94.7(13)	O54	-U24	-O108	72.8(13)
O70	-U23	-O125	93.1(13)	O54	-U24	-O112	113.6(13)
O70	-U23	-O131	86.5(14)	O54	-U24	-O123	168.4(13)
O70	-U23	-O139	84.2(16)	O54	-U24	-O130	113.6(12)
O70	-U23	-O142	88.4(14)	O54	-U24	-O132	95.5(15)
O120	-U23	-O121	91.8(16)	O90	-U24	-O105	91.9(14)
O120	-U23	-O122	78.6(14)	O90	-U24	-O108	90.8(14)
O120	-U23	-O125	125.7(14)	O90	-U24	-O112	87.2(14)
O120	-U23	-O131	119.8(14)	O90	-U24	-O123	81.6(14)
O120	-U23	-O139	64.5(16)	O90	-U24	-O130	95.8(14)
O120	-U23	-O142	166.0(14)	O90	-U24	-O132	176.2(15)
O121	-U23	-O122	89.6(15)	O105	-U24	-O108	109.2(13)
O121	-U23	-O125	81.9(15)	O105	-U24	-O112	77.4(13)
O121	-U23	-O131	94.9(16)	O105	-U24	-O123	147.6(12)
O121	-U23	-O139	94.1(18)	O105	-U24	-O130	149.0(12)
O121	-U23	-O142	87.4(16)	O105	-U24	-O132	89.4(16)
O122	-U23	-O125	154.3(14)	O108	-U24	-O112	173.2(14)
O122	-U23	-O131	41.8(14)	O108	-U24	-O123	102.6(13)
O122	-U23	-O139	143.0(16)	O108	-U24	-O130	40.9(13)
O122	-U23	-O142	115.3(14)	O108	-U24	-O132	92.2(15)
O125	-U23	-O131	114.5(14)	O112	-U24	-O123	70.7(13)
O125	-U23	-O139	62.3(16)	O112	-U24	-O130	132.9(13)
O125	-U23	-O142	40.4(14)	O112	-U24	-O132	89.6(15)
O131	-U23	-O139	169.9(15)	O123	-U24	-O130	63.4(13)
O131	-U23	-O142	74.2(14)	O123	-U24	-O132	95.4(16)
O139	-U23	-O142	101.7(16)	O130	-U24	-O132	84.9(16)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O61	-U25	-O81	88.2(14)	O100	-U26	-O108	87.2(15)
O61	-U25	-O97	79.8(13)	O100	-U26	-O125	90.9(14)
O61	-U25	-O124	121.8(13)	O100	-U26	-O130	87.3(14)
O61	-U25	-O129	112.6(13)	O100	-U26	-O133	178.1(16)
O61	-U25	-O135	86.0(14)	O100	-U26	-O137	90.3(15)
O61	-U25	-O136	161.9(13)	O100	-U26	-O142	91.0(14)
O61	-U25	-O138	39.2(15)	O100	-U26	-O143	86.7(14)
O81	-U25	-O97	90.0(15)	O108	-U26	-O125	121.4(14)
O81	-U25	-O124	91.3(16)	O108	-U26	-O130	42.3(13)
O81	-U25	-O129	94.6(14)	O108	-U26	-O133	94.6(15)
O81	-U25	-O135	174.1(17)	O108	-U26	-O137	162.6(13)
O81	-U25	-O136	92.4(15)	O108	-U26	-O142	79.5(14)
O81	-U25	-O138	87.2(17)	O108	-U26	-O143	111.0(13)
O97	-U25	-O124	42.0(14)	O125	-U26	-O130	163.7(14)
O97	-U25	-O129	166.8(13)	O125	-U26	-O133	88.5(15)
O97	-U25	-O135	87.8(15)	O125	-U26	-O137	75.8(13)
O97	-U25	-O136	118.2(14)	O125	-U26	-O142	42.0(14)
O97	-U25	-O138	119.0(16)	O125	-U26	-O143	127.4(14)
O124	-U25	-O129	125.4(14)	O130	-U26	-O133	93.7(15)
O124	-U25	-O135	90.8(16)	O130	-U26	-O137	120.4(13)
O124	-U25	-O136	76.2(14)	O130	-U26	-O142	121.8(14)
O124	-U25	-O138	161.0(16)	O130	-U26	-O143	68.7(14)
O129	-U25	-O135	88.7(14)	O133	-U26	-O137	87.8(15)
O129	-U25	-O136	49.3(14)	O133	-U26	-O142	89.8(15)
O129	-U25	-O138	73.7(16)	O133	-U26	-O143	92.3(14)
O135	-U25	-O136	93.5(15)	O137	-U26	-O142	117.8(14)
O135	-U25	-O138	89.1(17)	O137	-U26	-O143	51.7(13)
O136	-U25	-O138	122.8(16)	O142	-U26	-O143	169.2(14)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O92	-U27	-O99	89.0(13)	O35	-U28	-O92	88.5(14)
O92	-U27	-O102	162.9(13)	O35	-U28	-O119	178.9(18)
O92	-U27	-O127	122.6(12)	O35	-U28	-O129	89.6(13)
O92	-U27	-O134	79.1(17)	O35	-U28	-O136	87.1(14)
O92	-U27	-O140	39.4(12)	O35	-U28	-O137	90.3(14)
O92	-U27	-O141	91.6(15)	O35	-U28	-O140	92.4(13)
O92	-U27	-O144	120.1(17)	O35	-U28	-O143	86.3(14)
O99	-U27	-O102	90.6(13)	O92	-U28	-O119	92.0(16)
O99	-U27	-O127	87.7(14)	O92	-U28	-O129	123.2(13)
O99	-U27	-O134	93.9(17)	O92	-U28	-O136	73.4(13)
O99	-U27	-O140	94.8(14)	O92	-U28	-O137	118.9(13)
O99	-U27	-O141	178.3(16)	O92	-U28	-O140	40.2(13)
O99	-U27	-O144	89.5(16)	O92	-U28	-O143	166.6(12)
O102	-U27	-O127	74.4(13)	O119	-U28	-O129	89.3(14)
O102	-U27	-O134	117.9(17)	O119	-U28	-O136	92.1(16)
O102	-U27	-O140	123.7(13)	O119	-U28	-O137	90.3(16)
O102	-U27	-O141	88.3(14)	O119	-U28	-O140	88.6(15)
O102	-U27	-O144	42.9(17)	O119	-U28	-O143	93.4(16)
O127	-U27	-O134	44.0(16)	O129	-U28	-O136	49.8(14)
O127	-U27	-O140	161.6(12)	O129	-U28	-O137	117.8(13)
O127	-U27	-O141	93.3(16)	O129	-U28	-O140	163.1(13)
O127	-U27	-O144	117.2(17)	O129	-U28	-O143	69.1(12)
O134	-U27	-O140	117.5(17)	O136	-U28	-O137	167.4(14)
O134	-U27	-O141	87.8(18)	O136	-U28	-O140	113.5(14)
O134	-U27	-O144	161(2)	O136	-U28	-O143	118.6(13)
O140	-U27	-O141	84.6(16)	O137	-U28	-O140	78.9(13)
O140	-U27	-O144	81.1(17)	O137	-U28	-O143	48.8(13)
O141	-U27	-O144	88.7(17)	O140	-U28	-O143	127.7(12)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

O104	-S1	-O116	105(2)	U12	-O15	-O42	75.5(17)
O104	-S1	-O117	107(2)	U9	-O16	-U13	109.2(11)
O114	-S1	-O116	114(2)	U11	-O18	-U17	110.9(13)
O114	-S1	-O117	114(2)	U11	-O19	-U17	111.1(13)
O116	-S1	-O117	106(2)	U9	-O20	-O113	75.0(19)
O104	-S1	-O114	110(2)	U8	-O20	-U9	125.2(13)
U4	-O1	-U10	109.0(11)	U8	-O20	-O113	72.3(17)
U8	-O2	-U15	109.8(11)	U5	-O22	-O83	71.8(18)
U3	-O3	-U14	109.0(12)	U5	-O22	-U11	120.8(13)
U9	-O4	-U13	107.9(11)	U11	-O22	-O83	72.8(19)
U5	-O5	-U7	109.5(14)	U3	-O23	-O79	72.5(17)
U6	-O6	-U12	108.0(10)	U3	-O23	-U4	126.7(15)
U6	-O7	-O47	73.2(18)	U4	-O23	-O79	78.3(19)
U1	-O7	-U6	125.7(14)	U12	-O24	-O98	74.8(16)
U1	-O7	-O47	77.2(16)	U11	-O24	-U12	122.9(14)
U2	-O8	-U18	109.3(13)	U11	-O24	-O98	69.9(16)
U1	-O9	-O103	76.0(16)	U4	-O28	-U6	120.5(14)
U1	-O9	-U3	124.2(13)	U4	-O28	-O71	71.8(18)
U3	-O9	-O103	74.0(17)	U6	-O28	-O71	73.4(17)
U1	-O10	-U16	110.3(11)	U15	-O29	-O45	70.6(16)
U5	-O11	-U7	109.8(12)	U7	-O29	-O45	71.1(17)
U3	-O12	-U14	112.3(13)	U7	-O29	-U15	126.5(14)
U13	-O13	-O57	76.2(17)	U8	-O31	-O50	71.1(15)
U5	-O13	-U13	123.9(12)	U2	-O31	-O50	68.1(17)
U5	-O13	-O57	72.3(17)	U2	-O31	-U8	118.2(12)
U1	-O14	-U16	108.8(12)	U8	-O34	-U15	106.6(12)
U13	-O15	-O42	70.8(16)	U14	-O36	-O84	70.9(17)
U12	-O15	-U13	121.8(12)	U14	-O36	-U18	126.1(13)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

U18	-036	-084	70.4(18)	U9	-052	-056	70.3(16)
U10	-037	-069	73.4(18)	U9	-052	-U10	118.5(10)
U2	-037	-U10	126.9(14)	U24	-054	-0105	70.1(19)
U2	-037	-069	76.9(16)	U16	-054	-U24	128.4(16)
U18	-041	-0111	71.2(18)	U16	-054	-0105	70.3(19)
U22	-041	-0111	69.8(18)	U10	-056	-052	75.2(19)
U18	-041	-U22	127.1(15)	U9	-056	-U10	125.1(15)
U13	-042	-015	71.2(16)	U9	-056	-052	74.3(16)
U12	-042	-U13	116.8(13)	U5	-057	-U13	120.5(15)
U12	-042	-015	66.7(16)	U13	-057	-013	69.6(17)
U6	-043	-U12	109.2(12)	U5	-057	-013	72.9(18)
U16	-044	-U17	130.4(15)	U20	-061	-U25	118.8(14)
U16	-044	-051	72.8(17)	U25	-061	-0138	66(2)
U17	-044	-051	71.0(18)	U20	-061	-0138	70(2)
U7	-045	-U15	129.1(13)	U10	-069	-037	70.4(16)
U7	-045	-029	72.8(17)	U2	-069	-037	68.7(16)
U15	-045	-029	72.8(16)	U2	-069	-U10	120.3(12)
U1	-047	-07	67.0(15)	U6	-071	-028	69.5(17)
U1	-047	-U6	118.4(12)	U4	-071	-U6	117.6(13)
U6	-047	-07	71.0(18)	U4	-071	-028	70.6(17)
U2	-048	-U18	108.5(14)	U19	-072	-0107	66.5(18)
U2	-050	-031	73.7(17)	U15	-072	-U19	124.1(16)
U8	-050	-031	71.2(15)	U15	-072	-0107	73.3(18)
U2	-050	-U8	121.6(14)	U4	-073	-U10	107.6(11)
U16	-051	-U17	130.2(14)	U3	-079	-U4	118.9(11)
U16	-051	-044	69.6(17)	U3	-079	-023	71.3(17)
U17	-051	-044	74.0(19)	U4	-079	-023	66.4(17)
U10	-052	-056	68.0(16)	U11	-083	-022	70.6(18)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

U5	-083	-022	69.8(18)	U3	-0103	-09	68.5(17)
U5	-083	-U11	118.3(13)	U24	-0105	-054	73(2)
U18	-084	-036	71.5(18)	U16	-0105	-U24	131.4(17)
U14	-084	-036	70.1(18)	U16	-0105	-054	71.3(19)
U14	-084	-U18	126.3(13)	U14	-0106	-U20	131.5(17)
U21	-087	-096	71(2)	U20	-0106	-088	71.8(19)
U7	-087	-U21	130.7(15)	U14	-0106	-088	73(2)
U7	-087	-096	74(2)	U15	-0107	-072	67.3(18)
U20	-088	-0106	70.8(19)	U15	-0107	-U19	126.4(15)
U14	-088	-U20	127.8(17)	U19	-0107	-072	75.9(19)
U14	-088	-0106	69(2)	U24	-0108	-0130	70.5(18)
U27	-092	-U28	123.1(16)	U24	-0108	-U26	122.2(17)
U28	-092	-0140	75(2)	U26	-0108	-0130	68(2)
U27	-092	-0140	67.6(19)	U22	-0111	-041	71.3(18)
U7	-096	-U21	127.3(18)	U18	-0111	-U22	127.5(18)
U21	-096	-087	72(2)	U18	-0111	-041	70.1(19)
U7	-096	-087	68.9(19)	U20	-0112	-U24	110.9(16)
U25	-097	-0124	69.1(19)	U8	-0113	-U9	122.3(15)
U22	-097	-0124	69(2)	U8	-0113	-020	72.6(17)
U22	-097	-U25	120.4(15)	U9	-0113	-020	69.9(18)
U12	-098	-024	67.9(16)	U21	-0120	-U23	112.5(15)
U11	-098	-U12	119.5(14)	U23	-0122	-0131	68.9(19)
U11	-098	-024	71.3(17)	U17	-0122	-0131	68.8(19)
U27	-0102	-0144	65(2)	U17	-0122	-U23	125.9(15)
U21	-0102	-U27	116.5(17)	U20	-0123	-U24	108.7(16)
U21	-0102	-0144	66(2)	U22	-0124	-097	71(2)
U1	-0103	-U3	116.1(13)	U22	-0124	-U25	121.5(18)
U1	-0103	-09	67.5(15)	U25	-0124	-097	69(2)

Table S5 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U28a

U26	-O125	-O142	68.2(18)	U19	-O134	-O127	66(2)
U23	-O125	-U26	119.4(16)	U25	-O136	-U28	119.4(18)
U23	-O125	-O142	67.6(19)	U26	-O137	-U28	120.9(16)
U19	-O126	-U22	111.0(16)	U20	-O138	-U25	125(2)
U19	-O127	-U27	119.0(16)	U20	-O138	-O61	72(2)
U19	-O127	-O134	73(2)	U25	-O138	-O61	75(3)
U27	-O127	-O134	66(2)	U21	-O139	-U23	110(2)
U19	-O128	-U22	116.8(16)	U28	-O140	-O92	65.0(19)
U25	-O129	-U28	113.1(16)	U27	-O140	-O92	73(2)
U26	-O130	-O108	70.0(19)	U27	-O140	-U28	120.2(15)
U24	-O130	-O108	68.6(19)	U26	-O142	-O125	69.8(19)
U24	-O130	-U26	122.5(17)	U23	-O142	-U26	123.4(17)
U23	-O131	-O122	69.3(19)	U23	-O142	-O125	72(2)
U17	-O131	-U23	126.3(18)	U26	-O143	-U28	115.9(16)
U17	-O131	-O122	68.9(19)	U27	-O144	-O102	72(2)
U27	-O134	-O127	70(2)	U21	-O144	-U27	125(2)
U19	-O134	-U27	118(2)	U21	-O144	-O102	71(2)

Table S6 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
For U30

Crystal Data			
Formula	O150 U30, 4(Mg O6), 65(O), Li		
Formula Weight	11069.08		
Crystal System	Tetragonal		
Space group	P-4m2	(No.115)	
a, b, c [Angstrom]	22.308(2)	22.308(2)	28.918(4)
V [Ang**3]	14391(3)		
Z	2		
D(calc) [g/cm**3]	2.555		
Mu(MoKa) [/mm]	16.919		
F(000)	9446		
Crystal Size [mm]	0.05 x 0.12 x 0.13		
Data Collection			
Temperature (K)	120		
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073	
Theta Min-Max [Deg]	1.5, 23.3		
Dataset	-24: 24 ; -24: 24 ; -32: 32		
Tot., Uniq. Data, R(int)	134538,	10992,	0.155
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	8853		
Refinement			
Nref, Npar	10992, 354		
R, wR2, S	0.0511, 0.1438, 1.18		
w = 1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0754P)^2^]	where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3		
Max. and Av. Shift/Error	0.01, 0.00		
Flack x	-0.005(16)		
Min. and Max. Resd. Dens. [e/Ang^3]	-1.22, 3.25		

Table S7 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms For U30

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
U1	0.86857(4)	0.68236(4)	0.55050(3)	0.0269(3)
U2	1	0.58563(5)	0.48110(4)	0.0252(4)
U3	1	0.78386(5)	0.61635(5)	0.0309(4)
U4	0.74738(4)	0.59719(4)	0.62228(3)	0.0285(3)
U5	0.72092(4)	0.65268(4)	0.76240(4)	0.0377(3)
U6	0.69923(6)	1/2	0.84350(5)	0.0402(5)
U7	1	0.81326(6)	0.74834(5)	0.0394(5)
U8	0.90758(5)	0.66115(5)	0.94683(4)	0.0494(4)
U9	0.81989(7)	1/2	0.95339(6)	0.0547(6)
U10	0.85218(5)	0.75986(5)	0.83030(4)	0.0457(4)
O1	0.8217(6)	0.7240(6)	0.5124(5)	0.022(3)
O2	1	0.5971(9)	0.4198(7)	0.033(5)
O3	0.7961(7)	0.6033(7)	0.5499(5)	0.035(4)
O4	0.7049(10)	1/2	0.6327(8)	0.037(6)
O5	1	0.5695(9)	0.5419(7)	0.031(5)
O6	0.8990(6)	0.6164(6)	0.4890(5)	0.028(4)
O7	1.0620(9)	1/2	0.4686(7)	0.024(5)
O8	1	0.7073(9)	0.6376(7)	0.028(5)
O9	0.8976(7)	0.7711(7)	0.5923(5)	0.031(4)
O10	0.7893(7)	0.6122(7)	0.7591(5)	0.034(4)
O11	0.7946(6)	0.6930(6)	0.6083(5)	0.026(3)
O12	0.9388(6)	0.6708(6)	0.4906(5)	0.029(4)
O13	0.8886(7)	0.6942(8)	0.8088(6)	0.042(4)
O14	1.0627(7)	0.8120(7)	0.6797(6)	0.039(4)
O15	0.8134(6)	0.5743(6)	0.6525(5)	0.028(4)
O16	0.9121(6)	0.6402(6)	0.5901(5)	0.021(3)

Table S7 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms For U30

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
O17	0.6903(7)	0.6093(7)	0.6947(6)	0.040(4)
O18	0.9397(7)	0.7606(7)	0.5532(6)	0.044(4)
O19	0.6516(7)	0.6925(7)	0.7643(6)	0.040(4)
O20	0.7227(7)	0.6658(7)	0.6822(5)	0.035(4)
O21	0.9300(8)	0.6224(8)	0.8970(6)	0.051(5)
O22	0.8967(8)	0.8178(8)	0.7722(6)	0.048(5)
O23	1	0.8943(11)	0.7450(8)	0.042(6)
O24	0.6822(7)	0.6213(7)	0.5924(5)	0.032(4)
O25	0.8605(10)	1/2	0.8998(8)	0.043(6)
O26	0.6894(9)	0.6028(9)	0.8306(7)	0.060(5)
O27	0.7721(11)	1/2	0.8198(9)	0.043(6)
O28	1	0.8626(9)	0.5979(7)	0.030(5)
O29	0.7388(9)	1/2	0.5886(7)	0.029(5)
O30	0.7743(8)	0.7454(8)	0.7715(6)	0.049(5)
O31	0.7308(7)	0.4677(7)	0.9164(6)	0.039(4)
O32	0.7576(8)	0.7165(8)	0.8196(6)	0.049(5)
O33	0.8152(7)	0.8268(7)	0.8506(6)	0.040(4)
O34	1	0.7329(10)	0.7475(8)	0.036(6)
O35	0.9371(7)	0.8189(7)	0.8145(6)	0.039(4)
O36	0.8976(8)	0.7536(8)	0.9057(7)	0.054(5)
O37	0.6275(13)	1/2	0.8644(10)	0.063(8)
O38	0.8341(9)	0.7181(9)	0.9029(7)	0.062(6)
O39	0.8846(9)	0.6975(9)	0.9973(8)	0.069(6)
O40	0.6664(9)	0.5684(9)	0.7867(7)	0.059(5)
O41	1	0.7109(15)	0.9557(12)	0.087(10)
O42	0.8885(10)	0.4297(10)	0.9876(8)	0.078(7)

Table S7 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms For U30

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O43	1	0.6387(13)	0.9844(10)	0.068(8)
O44	0.7778(14)	1/2	1.0048(11)	0.076(9)
O45	0.8161(12)	0.6030(12)	0.9569(9)	0.097(8)
Mg1	0.8284(4)	0.6804(5)	0.3731(3)	0.053(3)
O46	0.7549(9)	0.6453(9)	0.3407(7)	0.069(6)
O47	0.8223(12)	0.7572(12)	0.3314(9)	0.098(8)
O48	0.7716(7)	0.7172(8)	0.4226(6)	0.041(4)
O49	0.9019(8)	0.7181(8)	0.4076(6)	0.048(5)
O50	0.8372(9)	0.6031(9)	0.4100(7)	0.059(5)
O51	0.8801(15)	0.6413(14)	0.3210(12)	0.132(11)
O52	0.9102(12)	1/2	0.6062(10)	0.064(8)
O53	0.8642(13)	1/2	0.7253(10)	0.069(8)
O54	0.7095(9)	0.6293(8)	0.4813(7)	0.057(5)
O55	1	0.5758(16)	0.6463(12)	0.094(11)
O56	1	0.6217(15)	0.7979(11)	0.079(9)
O57	1.1018(13)	1/2	0.3773(11)	0.073(9)
O58	1.1545(9)	0.7384(9)	0.6883(7)	0.069(6)

Table S7 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms
For U30

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O59	0.8913(10)	0.5631(11)	0.8131(8)	0.081(7)
O60	1.1717(15)	1/2	0.5092(12)	0.088(10)
O61	1.0848(11)	0.6267(11)	0.7035(8)	0.087(7)
O62	0.5830(18)	1/2	0.6114(14)	0.115(14)
O63	0.674(2)	1/2	0.5113(17)	0.141(17)
O64	0.7553(15)	0.7812(15)	0.9486(12)	0.136(11)
O65	1	1/2	0.8730(19)	0.099(17)
O66	1	1/2	0.7515(18)	0.094(16)
O67	0.5622(16)	0.6141(15)	0.6773(12)	0.144(12)
O68	0.8378(13)	0.8772(13)	0.5858(11)	0.112(9)
O69	1	0.736(2)	0.3456(17)	0.145(18)
O70	0.8615(16)	0.9431(17)	0.5077(13)	0.158(13)
O71	0.8742(18)	0.9176(17)	0.6687(14)	0.172(15)

Table S7 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms
For U30

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
O72	1	1	0.8639(19)	0.099(17)
O73	0.719(2)	0.853(2)	0.7664(16)	0.188(17)
O74	0.647(2)	0.739(2)	0.9822(16)	0.187(17)
Li1	1	1/2	0.596(4)	0.07(3)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U Tensor

Table S8 - (An)isotropic Displacement Parameters
For U30

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
U1	0.0210(4)	0.0253(5)	0.0343(5)	0.0023(4)	-0.0015(4)	0.0031(4)
U2	0.0160(6)	0.0249(7)	0.0348(7)	0.0007(6)	0	0
U3	0.0269(7)	0.0269(7)	0.0389(8)	-0.0019(6)	0	0
U4	0.0232(5)	0.0286(5)	0.0338(5)	0.0011(4)	0.0016(4)	0.0039(4)
U5	0.0372(6)	0.0384(6)	0.0374(6)	0.0001(5)	0.0070(5)	0.0062(4)
U6	0.0427(9)	0.0401(8)	0.0377(8)	0	0.0095(7)	0
U7	0.0357(8)	0.0412(8)	0.0414(8)	-0.0085(7)	0	0
U8	0.0557(7)	0.0525(7)	0.0399(6)	-0.0044(6)	0.0046(6)	0.0010(5)
U9	0.0490(9)	0.0750(12)	0.0402(9)	0	0.0086(8)	0
U10	0.0462(6)	0.0505(7)	0.0403(6)	-0.0080(5)	0.0064(5)	0.0087(5)
Mg1	0.039(5)	0.078(7)	0.041(6)	-0.008(5)	-0.001(4)	0.024(5)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 \cdot (\text{Pi}^2) \cdot U \cdot (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda})^2$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 \cdot (\text{Pi}^2) \cdot \text{Sum}_{ij} (h(i) \cdot h(j) \cdot U(i,j) \cdot \text{Astar}(i) \cdot \text{Astar}(j))$, for
Anisotropic Atoms. $\text{Astar}(i)$ are Reciprocal Axial Lengths and
 $h(i)$ are the Reflection Indices.

Table S9 - Bond Distances (Angstrom)
For U30

U1	-O1	1.781(14)	U4	-O17	2.466(17)
U1	-O3	2.393(16)	U4	-O20	2.377(15)
U1	-O6	2.406(14)	U4	-O24	1.775(15)
U1	-O9	2.408(15)	U4	-O29	2.385(8)
U1	-O11	2.361(14)	U5	-O10	1.775(16)
U1	-O12	2.350(14)	U5	-O17	2.288(17)
U1	-O16	1.772(14)	U5	-O19	1.784(16)
U1	-O18	2.360(16)	U5	-O20	2.338(15)
U2	-O2	1.79(2)	U5	-O26	2.37(2)
U2	-O5	1.80(2)	U5	-O30	2.401(18)
U2	-O6	2.366(13)	U5	-O32	2.331(18)
U2	-O7	2.386(12)	U5	-O40	2.35(2)
U2	-O12	2.356(13)	U6	-O26	2.33(2)
U2	-O7_a	2.386(12)	U6	-O27	1.76(2)
U2	-O6_b	2.366(13)	U6	-O31	2.337(17)
U2	-O12_b	2.356(13)	U6	-O37	1.71(3)
U3	-O8	1.82(2)	U6	-O40	2.36(2)
U3	-O9	2.405(16)	U6	-O26_c	2.33(2)
U3	-O14	2.389(17)	U6	-O31_c	2.337(17)
U3	-O18	2.327(17)	U6	-O40_c	2.36(2)
U3	-O28	1.84(2)	U7	-O14	2.428(17)
U3	-O9_b	2.405(16)	U7	-O22	2.408(18)
U3	-O14_b	2.389(17)	U7	-O23	1.81(2)
U3	-O18_b	2.327(17)	U7	-O34	1.79(2)
U4	-O3	2.362(15)	U7	-O35	2.376(17)
U4	-O4	2.385(9)	U7	-O14_b	2.428(17)
U4	-O11	2.417(13)	U7	-O22_b	2.408(18)
U4	-O15	1.787(14)	U7	-O35_b	2.376(17)

Table S9 - Bond Distances (Angstrom)
For U30

U8	-O21	1.753(18)	U10	-O33	1.804(16)
U8	-O36	2.391(18)	U10	-O35	2.352(16)
U8	-O38	2.43(2)	U10	-O36	2.41(2)
U8	-O39	1.75(2)	U10	-O38	2.33(2)
U8	-O41	2.355(16)	Mg1	-O51	2.09(3)
U8	-O43	2.384(15)	Mg1	-O48	2.081(19)
U8	-O45	2.44(3)	Mg1	-O46	2.04(2)
U8	-O42_c	2.38(2)	Mg1	-O47	2.10(3)
U9	-O25	1.80(2)	Mg1	-O49	2.10(2)
U9	-O31	2.369(16)	Mg1	-O50	2.04(2)
U9	-O42	2.40(2)	O4	-O29	1.48(3)
U9	-O44	1.76(3)	O6	-O12	1.504(19)
U9	-O45	2.30(3)	O9	-O18	1.49(2)
U9	-O31_c	2.369(16)	O17	-O20	1.50(2)
U9	-O42_c	2.40(2)	O22	-O35	1.52(2)
U9	-O45_c	2.30(3)	O26	-O40	1.57(3)
U10	-O13	1.787(17)	O30	-O32	1.58(2)
U10	-O22	2.341(18)	O31	-O31_c	1.44(2)
U10	-O30	2.452(18)	O36	-O38	1.63(3)
U10	-O32	2.342(18)			

Table S10 - Bond Angles (Degrees)
For U30

O1	-U1	-O3	89.0(6)	O2	-U2	-O5	176.7(9)
O1	-U1	-O6	91.6(6)	O2	-U2	-O6	93.1(4)
O1	-U1	-O9	92.3(6)	O2	-U2	-O7	88.0(7)
O1	-U1	-O11	88.6(6)	O2	-U2	-O12	90.0(6)
O1	-U1	-O12	89.6(6)	O2	-U2	-O7_a	88.0(7)
O1	-U1	-O16	177.2(6)	O2	-U2	-O6_b	93.1(4)
O1	-U1	-O18	91.7(6)	O2	-U2	-O12_b	90.0(6)
O3	-U1	-O6	74.6(5)	O5	-U2	-O6	87.9(4)
O3	-U1	-O9	142.3(5)	O5	-U2	-O7	89.3(7)
O3	-U1	-O11	66.9(5)	O5	-U2	-O12	92.7(6)
O3	-U1	-O12	111.4(5)	O5	-U2	-O7_a	89.3(7)
O3	-U1	-O16	89.1(6)	O5	-U2	-O6_b	87.9(4)
O3	-U1	-O18	178.5(5)	O5	-U2	-O12_b	92.7(6)
O6	-U1	-O9	142.9(5)	O6	-U2	-O7	143.0(5)
O6	-U1	-O11	141.5(5)	O6	-U2	-O12	37.2(5)
O6	-U1	-O12	36.9(5)	O6	-U2	-O7_a	72.2(5)
O6	-U1	-O16	89.9(6)	O6	-U2	-O6_b	144.4(5)
O6	-U1	-O18	106.7(5)	O6	-U2	-O12_b	107.9(5)
O9	-U1	-O11	75.5(5)	O7	-U2	-O12	178.0(6)
O9	-U1	-O12	106.3(5)	O7	-U2	-O7_a	70.9(6)
O9	-U1	-O16	88.0(6)	O6_b	-U2	-O7	72.2(5)
O9	-U1	-O18	36.4(5)	O7	-U2	-O12_b	109.1(5)
O11	-U1	-O12	177.5(5)	O7_a	-U2	-O12	109.1(5)
O11	-U1	-O16	88.8(6)	O6_b	-U2	-O12	107.9(5)
O11	-U1	-O18	111.9(5)	O12	-U2	-O12_b	70.8(5)
O12	-U1	-O16	93.0(6)	O6_b	-U2	-O7_a	143.0(5)
O12	-U1	-O18	70.0(5)	O7_a	-U2	-O12_b	178.0(6)
O16	-U1	-O18	90.2(6)	O6_b	-U2	-O12_b	37.2(5)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

O8	-U3	-O9	89.2(4)	O3	-U4	-O4	110.3(7)
O8	-U3	-O14	89.3(6)	O3	-U4	-O11	66.4(5)
O8	-U3	-O18	93.2(7)	O3	-U4	-O15	94.1(6)
O8	-U3	-O28	177.1(9)	O3	-U4	-O17	169.7(5)
O8	-U3	-O9_b	89.2(4)	O3	-U4	-O20	135.7(5)
O8	-U3	-O14_b	89.3(6)	O3	-U4	-O24	85.9(6)
O8	-U3	-O18_b	93.2(7)	O3	-U4	-O29	74.2(6)
O9	-U3	-O14	144.0(5)	O4	-U4	-O11	176.5(6)
O9	-U3	-O18	36.6(5)	O4	-U4	-O15	90.3(7)
O9	-U3	-O28	91.7(4)	O4	-U4	-O17	77.7(6)
O9	-U3	-O9_b	143.6(5)	O4	-U4	-O20	113.7(6)
O9	-U3	-O14_b	72.3(5)	O4	-U4	-O24	90.7(7)
O9	-U3	-O18_b	107.2(5)	O4	-U4	-O29	36.2(7)
O14	-U3	-O18	177.5(6)	O11	-U4	-O15	88.6(5)
O14	-U3	-O28	88.4(6)	O11	-U4	-O17	105.7(5)
O9_b	-U3	-O14	72.3(5)	O11	-U4	-O20	69.7(5)
O14	-U3	-O14_b	71.7(5)	O11	-U4	-O24	90.4(6)
O14	-U3	-O18_b	108.8(6)	O11	-U4	-O29	140.4(6)
O18	-U3	-O28	89.2(6)	O15	-U4	-O17	92.4(6)
O9_b	-U3	-O18	107.2(5)	O15	-U4	-O20	91.1(6)
O14_b	-U3	-O18	108.8(6)	O15	-U4	-O24	179.0(7)
O18	-U3	-O18_b	70.6(6)	O15	-U4	-O29	90.4(6)
O9_b	-U3	-O28	91.7(4)	O17	-U4	-O20	36.0(5)
O14_b	-U3	-O28	88.4(6)	O17	-U4	-O24	87.6(6)
O18_b	-U3	-O28	89.2(6)	O17	-U4	-O29	113.9(6)
O9_b	-U3	-O14_b	144.0(5)	O20	-U4	-O24	88.3(6)
O9_b	-U3	-O18_b	36.6(5)	O20	-U4	-O29	149.9(6)
O14_b	-U3	-O18_b	177.5(5)	O24	-U4	-O29	90.6(7)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

O10	-U5	-O17	89.7(6)	O26	-U6	-O27	91.4(5)
O10	-U5	-O19	178.5(7)	O26	-U6	-O31	118.4(6)
O10	-U5	-O20	89.8(6)	O26	-U6	-O37	88.2(5)
O10	-U5	-O26	93.5(7)	O26	-U6	-O40	39.1(7)
O10	-U5	-O30	91.0(7)	O26	-U6	-O26_c	158.6(7)
O10	-U5	-O32	92.7(7)	O26	-U6	-O31_c	82.5(6)
O10	-U5	-O40	93.1(7)	O26	-U6	-O40_c	119.7(7)
O17	-U5	-O19	88.8(7)	O27	-U6	-O31	94.2(9)
O17	-U5	-O20	37.8(6)	O27	-U6	-O37	177.8(13)
O17	-U5	-O26	115.1(6)	O27	-U6	-O40	90.9(8)
O17	-U5	-O30	127.3(6)	O26_c	-U6	-O27	91.4(5)
O17	-U5	-O32	166.0(6)	O27	-U6	-O31_c	94.2(9)
O17	-U5	-O40	76.3(6)	O27	-U6	-O40_c	90.9(8)
O19	-U5	-O20	89.0(7)	O31	-U6	-O37	87.9(10)
O19	-U5	-O26	87.2(7)	O31	-U6	-O40	157.1(6)
O19	-U5	-O30	89.9(7)	O26_c	-U6	-O31	82.5(6)
O19	-U5	-O32	88.8(7)	O31	-U6	-O31_c	35.9(5)
O19	-U5	-O40	86.6(7)	O31	-U6	-O40_c	121.5(6)
O20	-U5	-O26	152.7(6)	O37	-U6	-O40	87.5(9)
O20	-U5	-O30	89.6(6)	O26_c	-U6	-O37	88.2(5)
O20	-U5	-O32	128.4(6)	O31_c	-U6	-O37	87.9(10)
O20	-U5	-O40	114.0(6)	O37	-U6	-O40_c	87.5(9)
O26	-U5	-O30	117.4(6)	O26_c	-U6	-O40	119.7(7)
O26	-U5	-O32	78.5(7)	O31_c	-U6	-O40	121.5(6)
O26	-U5	-O40	38.9(7)	O40	-U6	-O40_c	80.6(7)
O30	-U5	-O32	38.9(6)	O26_c	-U6	-O31_c	118.4(6)
O30	-U5	-O40	156.1(6)	O26_c	-U6	-O40_c	39.1(7)
O32	-U5	-O40	117.3(7)	O31_c	-U6	-O40_c	157.1(6)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

O14	-U7	-022	141.8(6)	O21	-U8	-036	92.5(7)
O14	-U7	-023	88.2(7)	O21	-U8	-038	91.2(8)
O14	-U7	-034	88.7(7)	O21	-U8	-039	178.1(9)
O14	-U7	-035	177.4(5)	O21	-U8	-041	94.1(10)
O14	-U7	-014_b	70.3(5)	O21	-U8	-043	91.4(9)
O14	-U7	-022_b	71.6(6)	O21	-U8	-045	94.3(9)
O14	-U7	-035_b	108.6(5)	O21	-U8	-042_c	92.2(8)
O22	-U7	-023	88.5(5)	O36	-U8	-038	39.4(6)
O22	-U7	-034	92.6(5)	O36	-U8	-039	89.3(8)
O22	-U7	-035	37.0(6)	O36	-U8	-041	74.3(9)
O14_b	-U7	-022	71.6(6)	O36	-U8	-043	119.2(8)
O22	-U7	-022_b	146.3(6)	O36	-U8	-045	116.2(8)
O22	-U7	-035_b	109.4(6)	O36	-U8	-042_c	164.4(7)
O23	-U7	-034	176.2(10)	O38	-U8	-039	89.8(8)
O23	-U7	-035	89.4(7)	O38	-U8	-041	113.6(9)
O14_b	-U7	-023	88.2(7)	O38	-U8	-043	158.6(8)
O22_b	-U7	-023	88.5(5)	O38	-U8	-045	77.1(8)
O23	-U7	-035_b	89.4(7)	O38	-U8	-042_c	125.6(7)
O34	-U7	-035	93.7(7)	O39	-U8	-041	87.0(10)
O14_b	-U7	-034	88.7(7)	O39	-U8	-043	88.3(9)
O22_b	-U7	-034	92.6(5)	O39	-U8	-045	84.3(9)
O34	-U7	-035_b	93.7(7)	O39	-U8	-042_c	85.9(9)
O14_b	-U7	-035	108.6(5)	O41	-U8	-043	45.0(10)
O22_b	-U7	-035	109.4(6)	O41	-U8	-045	166.2(10)
O35	-U7	-035_b	72.4(6)	O41	-U8	-042_c	120.2(10)
O14_b	-U7	-022_b	141.8(6)	O43	-U8	-045	123.9(9)
O14_b	-U7	-035_b	177.4(5)	O42_c	-U8	-043	75.5(8)
O22_b	-U7	-035_b	37.0(6)	O42_c	-U8	-045	48.6(8)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

O25	-U9	-O31	91.9(8)	O13	-U10	-O22	90.6(7)
O25	-U9	-O42	92.0(8)	O13	-U10	-O30	88.5(7)
O25	-U9	-O44	178.0(13)	O13	-U10	-O32	91.4(7)
O25	-U9	-O45	93.3(7)	O13	-U10	-O33	178.6(8)
O25	-U9	-O31_c	91.9(8)	O13	-U10	-O35	91.5(7)
O25	-U9	-O42_c	92.0(8)	O13	-U10	-O36	94.4(7)
O25	-U9	-O45_c	93.3(7)	O13	-U10	-O38	93.7(7)
O31	-U9	-O42	121.4(7)	O22	-U10	-O30	82.9(6)
O31	-U9	-O44	86.2(11)	O22	-U10	-O32	121.0(6)
O31	-U9	-O45	107.0(8)	O22	-U10	-O33	88.3(7)
O31	-U9	-O31_c	35.4(5)	O22	-U10	-O35	37.8(6)
O31	-U9	-O42_c	156.7(7)	O22	-U10	-O36	120.2(6)
O31	-U9	-O45_c	71.7(8)	O22	-U10	-O38	160.1(7)
O42	-U9	-O44	89.5(10)	O30	-U10	-O32	38.3(6)
O42	-U9	-O45	131.0(9)	O30	-U10	-O33	90.6(7)
O31_c	-U9	-O42	156.7(7)	O30	-U10	-O35	120.6(6)
O42	-U9	-O42_c	81.4(8)	O30	-U10	-O36	156.7(6)
O42	-U9	-O45_c	49.8(8)	O30	-U10	-O38	116.7(6)
O44	-U9	-O45	86.7(7)	O32	-U10	-O33	88.5(7)
O31_c	-U9	-O44	86.2(11)	O32	-U10	-O35	158.7(6)
O42_c	-U9	-O44	89.5(10)	O32	-U10	-O36	118.3(6)
O44	-U9	-O45_c	86.7(7)	O32	-U10	-O38	78.4(7)
O31_c	-U9	-O45	71.7(8)	O33	-U10	-O35	88.2(6)
O42_c	-U9	-O45	49.8(8)	O33	-U10	-O36	86.9(7)
O45	-U9	-O45_c	173.4(9)	O33	-U10	-O38	87.6(7)
O31_c	-U9	-O42_c	121.4(7)	O35	-U10	-O36	82.5(6)
O31_c	-U9	-O45_c	107.0(8)	O35	-U10	-O38	122.5(7)
O42_c	-U9	-O45_c	131.0(9)	O36	-U10	-O38	40.1(7)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

O46	-Mg1	-O51	87.3(11)	U1	-O12	-O6	73.6(8)
O47	-Mg1	-O48	91.9(10)	U2	-O12	-O6	71.8(7)
O47	-Mg1	-O49	89.8(10)	U3	-O14	-U7	107.0(6)
O47	-Mg1	-O50	176.2(11)	U4	-O17	-U5	128.2(7)
O47	-Mg1	-O51	87.8(12)	U4	-O17	-O20	68.8(8)
O48	-Mg1	-O49	89.5(8)	U5	-O17	-O20	72.9(8)
O48	-Mg1	-O50	91.9(8)	U1	-O18	-U3	125.4(7)
O48	-Mg1	-O51	176.0(11)	U1	-O18	-O9	73.6(9)
O49	-Mg1	-O50	90.9(8)	U3	-O18	-O9	74.5(9)
O49	-Mg1	-O51	94.5(11)	U4	-O20	-U5	130.3(7)
O50	-Mg1	-O51	88.4(11)	U4	-O20	-O17	75.3(9)
O46	-Mg1	-O48	88.7(8)	U5	-O20	-O17	69.3(9)
O46	-Mg1	-O49	178.2(9)	U7	-O22	-U10	126.1(8)
O46	-Mg1	-O47	89.9(10)	U7	-O22	-O35	70.4(9)
O46	-Mg1	-O50	89.6(9)	U10	-O22	-O35	71.5(9)
U1	-O3	-U4	110.3(6)	U6	-O26	-O40	71.3(10)
U4	-O4	-U4_c	130.7(10)	U5	-O26	-U6	124.5(9)
U4	-O4	-O29	71.9(6)	U5	-O26	-O40	69.7(10)
U4_c	-O4	-O29	71.9(6)	U4_c	-O29	-O4	71.9(6)
U1	-O6	-U2	121.2(6)	U4	-O29	-O4	71.9(6)
U1	-O6	-O12	69.5(7)	U4	-O29	-U4_c	130.8(9)
U2	-O6	-O12	71.0(7)	U5	-O30	-U10	122.7(7)
U2	-O7	-U2_a	106.4(8)	U5	-O30	-O32	68.1(9)
U1	-O9	-O18	70.1(8)	U10	-O30	-O32	67.0(9)
U3	-O9	-O18	68.8(9)	U6	-O31	-U9	124.5(7)
U1	-O9	-U3	119.9(6)	U6	-O31	-O31_c	72.0(10)
U1	-O11	-U4	109.5(5)	U9	-O31	-O31_c	72.3(9)
U1	-O12	-U2	124.1(6)	U10	-O32	-O30	74.6(9)

Table S10 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U30

U5	-O32	-U10	131.5(8)	U8	-O38	-O36	69.0(10)
U5	-O32	-O30	73.0(9)	U10	-O38	-O36	72.5(10)
U7	-O35	-U10	127.0(7)	U5	-O40	-U6	124.5(9)
U7	-O35	-O22	72.6(9)	U5	-O40	-O26	71.4(10)
U10	-O35	-O22	70.7(9)	U6	-O40	-O26	69.6(10)
U8	-O36	-U10	122.7(8)	U8	-O41	-U8_b	122.2(14)
U8	-O36	-O38	71.7(10)	U8_c	-O42	-U9	117.7(9)
U10	-O36	-O38	67.4(10)	U8	-O43	-U8_b	119.8(12)
U8	-O38	-U10	124.2(9)	U8	-O45	-U9	119.7(11)

Table S11 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
For U36a

Crystal Data			
Formula	O180 U36, 2(I O5), 74(O), 16(K), 4(Li)		
Formula Weight	13700.24		
Crystal System	Orthorhombic		
Space group	Pmmn	(No. 59)	
a, b, c [Angstrom]	27.580(4)	22.008(3)	22.940(4)
V [Ang**3]	13924(4)		
Z	2		
D(calc) [g/cm**3]	3.268		
Mu(MoKa) [/mm]	21.426		
F(000)	11692		
Crystal Size [mm]	0.08 x 0.08 x 0.10		
Data Collection			
Temperature (K)	120		
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073	
Theta Min-Max [Deg]	1.5, 25.0		
Dataset	-32: 32 ; -26: 26 ; -27: 27		
Tot., Uniq. Data, R(int)	153640,	12957,	0.141
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	7580		
Refinement			
Nref, Npar	12957, 445		
R, wR2, S	0.0462, 0.1344, 0.93		
w = 1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0602P)^2^]	where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3		
Max. and Av. Shift/Error	0.00, 0.00		
Min. and Max. Resd. Dens. [e/Ang^3]	-1.42, 2.85		

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms
For U36a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
U1	0.68010(4)	1/4	0.19314(5)	0.0342(4)
U2	3/4	0.56773(5)	0.65955(5)	0.0311(4)
U3	3/4	0.33805(5)	0.99191(5)	0.0344(4)
U4	0.55167(3)	0.34859(4)	0.80987(3)	0.0331(3)
U5	0.62666(3)	0.51661(4)	0.55871(3)	0.0324(3)
U6	0.53519(3)	0.40503(4)	0.62918(3)	0.0319(3)
U7	0.60311(3)	0.38347(4)	0.27743(3)	0.0331(3)
U8	0.52116(4)	1/4	0.35796(5)	0.0340(4)
U9	0.67153(3)	0.49648(3)	0.37559(3)	0.0322(3)
U10	0.49808(4)	1/4	0.52564(5)	0.0339(4)
U11	0.64354(3)	0.43462(4)	0.90729(3)	0.0345(3)
U12	3/4	0.53797(5)	0.82633(5)	0.0348(4)
O1	0.5955(4)	0.4534(6)	0.3551(5)	0.031(3)
O2	3/4	0.3526(8)	1.0667(8)	0.036(5)
O3	0.7021(5)	0.5617(6)	0.7449(6)	0.040(4)
O4	0.6693(5)	0.4544(6)	0.2809(6)	0.037(3)
O5	0.5885(5)	0.4440(6)	0.8300(6)	0.038(4)
O6	0.4809(5)	0.4505(6)	0.6318(6)	0.039(4)
O7	0.5901(4)	0.3604(6)	0.6275(5)	0.034(3)
O8	0.6633(5)	0.4498(6)	0.5666(6)	0.036(3)
O9	0.5133(5)	0.3558(6)	0.7160(5)	0.035(3)
O10	0.6666(5)	0.5388(6)	0.4707(6)	0.040(4)
O11	0.6687(5)	0.5703(6)	0.6329(6)	0.037(3)
O12	0.6911(5)	0.4260(6)	0.4076(5)	0.034(3)
O13	0.7002(5)	0.5132(6)	0.9066(6)	0.037(3)
O14	0.6683(7)	1/4	0.1167(8)	0.040(5)

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U36a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
O15	3/4	0.3102(9)	0.1809(8)	0.041(5)
O16	0.6802(5)	0.3910(6)	0.8589(5)	0.034(3)
O17	0.5395(5)	0.3130(6)	0.2780(6)	0.036(3)
O18	0.5887(5)	0.3519(6)	0.9061(5)	0.036(3)
O19	3/4	0.3205(8)	0.9152(8)	0.039(5)
O20	0.6544(5)	0.3542(6)	0.1980(5)	0.034(3)
O21	0.5858(5)	0.4907(6)	0.6465(5)	0.036(3)
O22	0.5602(5)	0.4522(6)	0.5412(6)	0.042(4)
O23	0.6069(4)	0.3246(5)	0.7770(5)	0.031(3)
O24	3/4	0.4874(8)	0.6540(8)	0.040(5)
O25	0.5899(5)	0.5837(6)	0.5509(6)	0.041(4)
O26	0.5407(7)	1/4	0.8515(8)	0.037(5)
O27	0.4597(7)	1/4	0.3347(8)	0.043(5)
O28	0.6508(5)	0.5661(6)	0.3454(6)	0.035(3)
O29	0.4328(6)	1/4	0.5204(8)	0.033(5)
O30	3/4	0.4606(8)	0.7996(8)	0.034(5)
O31	0.5381(5)	0.4150(6)	0.7322(6)	0.038(4)
O32	0.5302(5)	0.3546(6)	0.3302(6)	0.039(4)
O33	0.7024(7)	1/4	1.0064(8)	0.037(5)
O34	0.6120(5)	0.3136(6)	0.2031(6)	0.040(4)
O35	0.6383(4)	0.3385(5)	0.3270(5)	0.028(3)
O36	3/4	0.5121(8)	0.3349(8)	0.035(5)
O37	3/4	0.5386(8)	0.3945(8)	0.036(5)
O38	3/4	0.6481(9)	0.6668(8)	0.044(5)
O39	0.4977(5)	0.3522(6)	0.5514(5)	0.035(3)
O40	0.6977(5)	0.5759(6)	0.5777(6)	0.037(3)

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U36a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O41	0.6932(6)	1/4	0.2698(7)	0.029(4)
O42	0.5825(6)	1/4	0.3855(7)	0.032(5)
O43	0.5690(5)	0.4333(6)	0.2308(5)	0.037(3)
O44	0.6195(5)	0.5068(6)	0.4562(6)	0.040(4)
O45	0.4963(5)	0.3743(6)	0.8422(6)	0.037(3)
O46	0.4892(5)	0.3178(6)	0.6071(6)	0.038(3)
O47	0.7005(5)	0.4234(6)	0.9819(6)	0.040(4)
O48	0.6045(5)	0.4776(6)	0.9555(6)	0.041(4)
O49	0.5626(7)	1/4	0.5339(9)	0.048(6)
O50	0.6670(5)	0.3720(6)	0.9879(6)	0.037(3)
O51	0.6662(5)	0.5252(6)	0.8567(6)	0.041(4)
O52	3/4	0.6160(10)	0.8506(10)	0.062(7)
O53	0.5018(5)	0.3112(6)	0.4400(6)	0.046(4)
O54	0.5183(7)	1/4	0.7906(8)	0.041(5)
*I1	0.69933(14)	1/4	0.78031(18)	0.0403(12)
O56	0.6761(5)	1/4	0.8442(6)	0.016(4)
O58	3/4	0.3147(10)	0.7810(10)	0.059(6)
*O60	0.6799(14)	1/4	0.6986(17)	0.047(11)
*I2	3/4	0.31537(17)	0.40613(16)	0.0333(12)
O55	3/4	0.3415(6)	0.3412(6)	0.009(3)
O57	0.7008(8)	1/4	0.4060(10)	0.059(6)
*O59	3/4	0.3367(14)	0.4835(14)	0.023(8)
O61	0.6505(4)	0.4516(5)	0.7329(5)	0.021(3)

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U36a

Atom ----	x ---	y ---	z ---	U(eq) [Ang ²] -----
O62	0.5118(5)	0.4408(6)	0.4406(6)	0.044(4)
O63	0.4293(9)	1/4	0.7021(10)	0.071(7)
O64	0.4523(6)	0.4154(7)	0.2921(7)	0.063(5)
O65	0.6286(7)	0.4028(8)	0.0924(8)	0.080(6)
O66	0.6936(7)	0.3779(8)	0.6858(8)	0.080(6)
O67	0.6815(7)	0.6789(9)	0.5035(8)	0.094(6)
O68	0.5287(7)	0.5452(9)	0.8229(9)	0.099(7)
O69	0.6617(9)	0.3165(11)	0.5325(11)	0.131(9)
O70	0.6053(8)	0.6202(10)	0.8778(9)	0.114(8)
O71	0.6215(13)	1/4	0.9497(15)	0.134(13)
O72	3/4	0.6625(12)	0.4078(11)	0.086(8)
O73	3/4	0.6007(15)	0.2535(14)	0.119(11)
O74	3/4	0.4146(16)	0.2393(15)	0.138(13)

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U36a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O75	0.5198(8)	0.3535(10)	0.9922(9)	0.107(7)
O76	0.4758(12)	1/4	0.9411(15)	0.128(12)
O77	0.6215(9)	0.6831(12)	0.6350(11)	0.139(9)
O78	0.6536(9)	0.5363(11)	0.1979(11)	0.136(9)
O79	0.4193(15)	1/4	0.7964(17)	0.162(15)
O80	0.6950(13)	0.5978(17)	0.9908(16)	0.223(16)
O81	0.4457(14)	0.5050(16)	0.8913(16)	0.222(16)
O82	0.6367(14)	0.6636(16)	0.7555(16)	0.236(16)
K1	0.5999(2)	0.3626(3)	0.4517(3)	0.065(2)
K2	0.5807(3)	1/4	0.6768(3)	0.048(3)
K3	0.60012(18)	0.6321(2)	0.4343(2)	0.0510(19)
K4	3/4	0.4622(3)	0.5086(3)	0.045(3)
K5	0.4385(3)	0.4397(4)	0.7511(4)	0.113(4)

Table S12 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U36a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
Li1	0.6506(17)	1/4	0.343(2)	0.034(12)
Li2	3/4	0.371(3)	0.837(3)	0.059(16)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U Tensor

Starred Atom sites have a S.O.F less than 1.0

Table S13 - (An)isotropic Displacement Parameters
For U36a

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
U1	0.0261(6)	0.0453(7)	0.0311(6)	0	-0.0004(5)	0
U2	0.0262(6)	0.0289(6)	0.0383(7)	0.0016(5)	0	0
U3	0.0337(7)	0.0385(7)	0.0310(6)	0.0006(5)	0	0
U4	0.0288(4)	0.0351(5)	0.0355(5)	-0.0008(4)	0.0032(4)	0.0025(4)
U5	0.0236(4)	0.0358(5)	0.0379(5)	0.0031(4)	-0.0020(4)	-0.0005(3)
U6	0.0228(4)	0.0349(5)	0.0381(5)	0.0032(4)	-0.0029(4)	-0.0004(3)
U7	0.0249(4)	0.0406(5)	0.0338(5)	0.0035(4)	-0.0025(4)	0.0011(4)
U8	0.0268(6)	0.0368(7)	0.0383(7)	0	0.0014(5)	0
U9	0.0237(4)	0.0356(5)	0.0373(5)	0.0032(4)	-0.0014(4)	0.0024(3)
U10	0.0245(6)	0.0372(7)	0.0400(7)	0	0.0040(5)	0
U11	0.0334(5)	0.0358(5)	0.0343(5)	-0.0010(4)	0.0026(4)	0.0025(4)
U12	0.0355(7)	0.0323(7)	0.0366(7)	-0.0011(5)	0	0
I1	0.035(2)	0.042(2)	0.044(2)	0	0.0009(19)	0
I2	0.027(2)	0.037(2)	0.036(2)	0.0010(18)	0	0
K1	0.058(4)	0.064(4)	0.072(4)	-0.005(3)	0.006(3)	-0.012(3)
K2	0.062(5)	0.036(4)	0.047(4)	0	-0.008(4)	0
K3	0.040(3)	0.050(3)	0.063(4)	0.003(3)	0.006(3)	0.016(2)
K4	0.025(4)	0.059(5)	0.052(5)	0.000(4)	0	0
K5	0.075(5)	0.107(6)	0.156(8)	0.025(6)	0.036(5)	0.036(4)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi} ** 2) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda}) ** 2$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 * (\text{Pi} ** 2) * \text{Sum}ij(h(i) * h(j) * U(i, j) * \text{Astar}(i) * \text{Astar}(j))$, for
Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial Lengths and
h(i) are the Reflection Indices.

Table S14 - Bond Distances (Angstrom)
For U36a

U1	-O14	1.784(18)	U4	-O26	2.390(8)
U1	-O15	2.356(11)	U4	-O31	2.335(14)
U1	-O20	2.403(13)	U4	-O45	1.790(14)
U1	-O34	2.354(14)	U4	-O54	2.398(8)
U1	-O41	1.795(16)	U5	-O8	1.793(13)
U1	-O15_g	2.356(11)	U5	-O10	2.351(14)
U1	-O20_i	2.403(13)	U5	-O11	2.374(14)
U1	-O34_i	2.354(14)	U5	-O21	2.377(12)
U2	-O3	2.366(14)	U5	-O22	2.352(14)
U2	-O11	2.325(14)	U5	-O25	1.800(13)
U2	-O24	1.773(18)	U5	-O40	2.394(14)
U2	-O38	1.78(2)	U5	-O44	2.370(14)
U2	-O40	2.375(14)	U6	-O6	1.802(14)
U2	-O3_h	2.366(14)	U6	-O7	1.806(12)
U2	-O11_h	2.325(14)	U6	-O9	2.346(12)
U2	-O40_h	2.375(14)	U6	-O21	2.379(13)
U3	-O2	1.745(18)	U6	-O22	2.372(14)
U3	-O19	1.802(18)	U6	-O31	2.375(14)
U3	-O33	2.364(11)	U6	-O39	2.367(12)
U3	-O47	2.333(13)	U6	-O46	2.356(13)
U3	-O50	2.410(14)	U7	-O1	2.364(12)
U3	-O33_g	2.364(11)	U7	-O4	2.403(14)
U3	-O47_h	2.333(13)	U7	-O17	2.342(14)
U3	-O50_h	2.410(14)	U7	-O20	2.395(12)
U4	-O5	2.378(13)	U7	-O32	2.432(14)
U4	-O9	2.405(12)	U7	-O34	2.309(14)
U4	-O18	2.433(12)	U7	-O35	1.793(11)
U4	-O23	1.780(11)	U7	-O43	1.798(13)

Table S14 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U36a

U8	-O17	2.354(14)	U11	-O47	2.336(14)
U8	-O27	1.777(19)	U11	-O48	1.810(14)
U8	-O32	2.402(13)	U11	-O50	2.395(14)
U8	-O42	1.806(17)	U11	-O51	2.390(13)
U8	-O53	2.375(14)	U12	-O3	2.347(14)
U8	-O17_i	2.354(14)	U12	-O13	2.361(14)
U8	-O32_i	2.402(13)	U12	-O30	1.810(18)
U8	-O53_i	2.375(14)	U12	-O51	2.430(14)
U9	-O1	2.349(11)	U12	-O52	1.81(2)
U9	-O4	2.362(14)	U12	-O3_h	2.347(14)
U9	-O10	2.376(14)	U12	-O13_h	2.361(14)
U9	-O12	1.799(13)	U12	-O51_h	2.430(14)
U9	-O28	1.776(13)	I1	-O58_a	1.995(16)
U9	-O36	2.382(8)	I1	-O58	1.995(16)
U9	-O37	2.394(8)	I1	-O60	1.95(4)
U9	-O44	2.352(14)	I1	-O56	1.600(14)
U10	-O29	1.804(17)	I1	-I1_a	2.795(5)
U10	-O39	2.326(13)	I2	-O57	1.978(15)
U10	-O46	2.404(14)	I2	-O59	1.84(3)
U10	-O49	1.790(19)	I2	-O55	1.597(14)
U10	-O53	2.384(14)	I2	-O57_d	1.978(15)
U10	-O39_i	2.326(13)	I2	-I2_d	2.877(5)
U10	-O46_i	2.404(14)	O9	-O31	1.518(19)
U10	-O53_i	2.384(14)	O10	-O44	1.515(19)
U11	-O5	2.343(14)	O11	-O40	1.503(19)
U11	-O13	2.331(14)	O13	-O51	1.503(19)
U11	-O16	1.782(13)	O17	-O32	1.529(19)
U11	-O18	2.367(13)	O20	-O34	1.476(19)

Table S14 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U36a

O26	-O54	1.53(3)	O39	-O46	1.504(18)
O36	-O37	1.49(3)	O47	-O50	1.467(19)

Table S15 - Bond Angles (Degrees)
For U36a

O14	-U1	-O15	91.8(7)	O3	-U2	-O11	71.4(5)
O14	-U1	-O20	89.5(3)	O3	-U2	-O24	90.2(6)
O14	-U1	-O34	87.1(6)	O3	-U2	-O38	88.8(6)
O14	-U1	-O41	178.9(8)	O3	-U2	-O40	108.6(5)
O14	-U1	-O15_g	91.8(7)	O3	-U2	-O3_h	67.9(5)
O14	-U1	-O20_i	89.5(3)	O3	-U2	-O11_h	139.3(5)
O14	-U1	-O34_i	87.1(6)	O3	-U2	-O40_h	176.3(5)
O15	-U1	-O20	73.2(5)	O11	-U2	-O24	90.3(4)
O15	-U1	-O34	109.3(5)	O11	-U2	-O38	90.0(4)
O15	-U1	-O41	87.3(6)	O11	-U2	-O40	37.3(5)
O15	-U1	-O15_g	68.4(6)	O3_h	-U2	-O11	139.3(5)
O15	-U1	-O20_i	141.6(5)	O11	-U2	-O11_h	149.4(5)
O15	-U1	-O34_i	177.5(5)	O11	-U2	-O40_h	112.1(5)
O20	-U1	-O34	36.2(5)	O24	-U2	-O38	178.8(8)
O20	-U1	-O41	90.8(3)	O24	-U2	-O40	91.1(6)
O15_g	-U1	-O20	141.6(5)	O3_h	-U2	-O24	90.2(6)
O20	-U1	-O20_i	145.3(5)	O11_h	-U2	-O24	90.3(4)
O20	-U1	-O34_i	109.1(5)	O24	-U2	-O40_h	91.1(6)
O34	-U1	-O41	93.8(5)	O38	-U2	-O40	89.9(6)
O15_g	-U1	-O34	177.5(5)	O3_h	-U2	-O38	88.8(6)
O20_i	-U1	-O34	109.1(5)	O11_h	-U2	-O38	90.0(4)
O34	-U1	-O34_i	73.0(5)	O38	-U2	-O40_h	89.9(6)
O15_g	-U1	-O41	87.3(6)	O3_h	-U2	-O40	176.3(5)
O20_i	-U1	-O41	90.8(3)	O11_h	-U2	-O40	112.1(5)
O34_i	-U1	-O41	93.8(5)	O40	-U2	-O40_h	74.8(5)
O15_g	-U1	-O20_i	73.2(5)	O3_h	-U2	-O11_h	71.4(5)
O15_g	-U1	-O34_i	109.3(5)	O3_h	-U2	-O40_h	108.6(5)
O20_i	-U1	-O34_i	36.2(5)	O11_h	-U2	-O40_h	37.3(5)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

O2	-U3	-O19	178.2(8)	O5	-U4	-O9	107.7(5)
O2	-U3	-O33	90.7(7)	O5	-U4	-O18	67.6(5)
O2	-U3	-O47	87.1(6)	O5	-U4	-O23	88.8(5)
O2	-U3	-O50	88.9(4)	O5	-U4	-O26	141.1(5)
O2	-U3	-O33_g	90.7(7)	O5	-U4	-O31	70.4(5)
O2	-U3	-O47_h	87.1(6)	O5	-U4	-O45	90.3(5)
O2	-U3	-O50_h	88.9(4)	O5	-U4	-O54	177.2(5)
O19	-U3	-O33	87.8(6)	O9	-U4	-O18	174.3(4)
O19	-U3	-O47	94.4(6)	O9	-U4	-O23	91.0(5)
O19	-U3	-O50	91.7(4)	O9	-U4	-O26	111.2(5)
O19	-U3	-O33_g	87.8(6)	O9	-U4	-O31	37.3(5)
O19	-U3	-O47_h	94.4(6)	O9	-U4	-O45	88.6(5)
O19	-U3	-O50_h	91.7(4)	O9	-U4	-O54	74.1(5)
O33	-U3	-O47	110.4(5)	O18	-U4	-O23	92.0(5)
O33	-U3	-O50	74.5(5)	O18	-U4	-O26	73.6(5)
O33	-U3	-O33_g	67.5(6)	O18	-U4	-O31	137.8(5)
O33	-U3	-O47_h	176.9(6)	O18	-U4	-O45	88.4(5)
O33	-U3	-O50_h	141.9(5)	O18	-U4	-O54	110.8(5)
O47	-U3	-O50	36.0(5)	O23	-U4	-O26	90.5(6)
O33_g	-U3	-O47	176.9(6)	O23	-U4	-O31	90.0(5)
O47	-U3	-O47_h	71.6(5)	O23	-U4	-O45	178.8(5)
O47	-U3	-O50_h	107.6(5)	O23	-U4	-O54	89.0(6)
O33_g	-U3	-O50	141.9(5)	O26	-U4	-O31	148.5(5)
O47_h	-U3	-O50	107.6(5)	O26	-U4	-O45	90.8(6)
O50	-U3	-O50_h	143.6(4)	O26	-U4	-O54	37.2(6)
O33_g	-U3	-O47_h	110.4(5)	O31	-U4	-O45	88.9(5)
O33_g	-U3	-O50_h	74.5(5)	O31	-U4	-O54	111.4(5)
O47_h	-U3	-O50_h	36.0(5)	O45	-U4	-O54	92.0(6)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

O8	-U5	-O10	89.6(5)	O6	-U6	-O7	179.0(6)
O8	-U5	-O11	93.5(5)	O6	-U6	-O9	90.8(5)
O8	-U5	-O21	89.1(5)	O6	-U6	-O21	92.4(5)
O8	-U5	-O22	87.8(5)	O6	-U6	-O22	91.6(5)
O8	-U5	-O25	179.9(8)	O6	-U6	-O31	86.8(5)
O8	-U5	-O40	88.1(5)	O6	-U6	-O39	86.3(5)
O8	-U5	-O44	94.2(5)	O6	-U6	-O46	90.7(5)
O10	-U5	-O11	106.5(5)	O7	-U6	-O9	89.0(5)
O10	-U5	-O21	178.0(4)	O7	-U6	-O21	86.7(5)
O10	-U5	-O22	110.1(5)	O7	-U6	-O22	88.6(5)
O10	-U5	-O25	90.5(5)	O7	-U6	-O31	92.5(5)
O10	-U5	-O40	70.1(5)	O7	-U6	-O39	94.8(5)
O10	-U5	-O44	37.4(5)	O7	-U6	-O46	90.2(5)
O11	-U5	-O21	75.1(5)	O9	-U6	-O21	112.0(4)
O11	-U5	-O22	143.4(5)	O9	-U6	-O22	177.6(5)
O11	-U5	-O25	86.5(5)	O9	-U6	-O31	37.5(4)
O11	-U5	-O40	36.7(5)	O9	-U6	-O39	107.5(4)
O11	-U5	-O44	142.9(5)	O9	-U6	-O46	70.6(5)
O21	-U5	-O22	68.3(5)	O21	-U6	-O22	68.0(4)
O21	-U5	-O25	90.8(5)	O21	-U6	-O31	75.0(4)
O21	-U5	-O40	111.4(5)	O21	-U6	-O39	140.5(4)
O21	-U5	-O44	141.2(5)	O21	-U6	-O46	175.9(5)
O22	-U5	-O25	92.2(5)	O22	-U6	-O31	142.8(5)
O22	-U5	-O40	176.0(5)	O22	-U6	-O39	72.6(4)
O22	-U5	-O44	73.2(5)	O22	-U6	-O46	109.3(5)
O25	-U5	-O40	91.8(5)	O31	-U6	-O39	144.1(4)
O25	-U5	-O44	85.9(5)	O31	-U6	-O46	107.9(5)
O40	-U5	-O44	107.4(5)	O39	-U6	-O46	37.1(5)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

01	-U7	-04	67.6(4)	017	-U8	-027	88.3(6)
01	-U7	-017	111.1(4)	017	-U8	-032	37.5(5)
01	-U7	-020	143.2(4)	017	-U8	-042	94.1(5)
01	-U7	-032	73.8(4)	017	-U8	-053	109.4(5)
01	-U7	-034	178.4(5)	017	-U8	-017_i	72.2(5)
01	-U7	-035	86.0(5)	017	-U8	-032_i	109.6(5)
01	-U7	-043	90.3(5)	017	-U8	-053_i	178.4(5)
04	-U7	-017	177.6(5)	027	-U8	-032	91.1(4)
04	-U7	-020	75.6(5)	027	-U8	-042	177.0(8)
04	-U7	-032	141.4(5)	027	-U8	-053	91.4(6)
04	-U7	-034	112.1(5)	017_i	-U8	-027	88.3(6)
04	-U7	-035	85.8(5)	027	-U8	-032_i	91.1(4)
04	-U7	-043	91.2(5)	027	-U8	-053_i	91.4(6)
017	-U7	-020	105.6(5)	032	-U8	-042	89.7(4)
017	-U7	-032	37.3(5)	032	-U8	-053	71.9(5)
017	-U7	-034	69.1(5)	017_i	-U8	-032	109.6(5)
017	-U7	-035	92.1(5)	032	-U8	-032_i	146.9(5)
017	-U7	-043	90.9(5)	032	-U8	-053_i	141.0(5)
020	-U7	-032	142.8(5)	042	-U8	-053	86.2(5)
020	-U7	-034	36.5(5)	017_i	-U8	-042	94.1(5)
020	-U7	-035	90.8(5)	032_i	-U8	-042	89.7(4)
020	-U7	-043	91.2(5)	042	-U8	-053_i	86.2(5)
032	-U7	-034	106.4(5)	017_i	-U8	-053	178.4(4)
032	-U7	-035	89.3(5)	032_i	-U8	-053	141.0(5)
032	-U7	-043	91.3(5)	053	-U8	-053_i	69.1(5)
034	-U7	-035	92.5(5)	017_i	-U8	-032_i	37.5(5)
034	-U7	-043	91.3(5)	017_i	-U8	-053_i	109.4(5)
035	-U7	-043	175.9(6)	032_i	-U8	-053_i	71.9(5)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

O1	-U9	-O4	68.6(4)	O29	-U10	-O39	90.7(4)
O1	-U9	-O10	106.9(4)	O29	-U10	-O46	87.1(6)
O1	-U9	-O12	90.1(5)	O29	-U10	-O49	177.7(9)
O1	-U9	-O28	89.0(5)	O29	-U10	-O53	89.3(6)
O1	-U9	-O36	142.3(5)	O29	-U10	-O39_i	90.7(4)
O1	-U9	-O37	178.4(4)	O29	-U10	-O46_i	87.1(6)
O1	-U9	-O44	69.6(4)	O29	-U10	-O53_i	89.3(6)
O4	-U9	-O10	175.2(5)	O39	-U10	-O46	37.0(4)
O4	-U9	-O12	92.6(5)	O39	-U10	-O49	88.7(4)
O4	-U9	-O28	88.4(5)	O39	-U10	-O53	70.3(4)
O4	-U9	-O36	73.7(5)	O39	-U10	-O39_i	150.6(4)
O4	-U9	-O37	110.0(5)	O39	-U10	-O46_i	113.7(4)
O4	-U9	-O44	138.2(5)	O39	-U10	-O53_i	139.1(4)
O10	-U9	-O12	88.9(5)	O46	-U10	-O49	91.1(6)
O10	-U9	-O28	90.1(5)	O46	-U10	-O53	107.1(5)
O10	-U9	-O36	110.8(5)	O39_i	-U10	-O46	113.7(4)
O10	-U9	-O37	74.6(5)	O46	-U10	-O46_i	76.7(5)
O10	-U9	-O44	37.4(5)	O46	-U10	-O53_i	174.6(5)
O12	-U9	-O28	178.4(6)	O49	-U10	-O53	92.6(6)
O12	-U9	-O36	90.7(6)	O39_i	-U10	-O49	88.7(4)
O12	-U9	-O37	89.4(6)	O46_i	-U10	-O49	91.1(6)
O12	-U9	-O44	86.9(5)	O49	-U10	-O53_i	92.6(6)
O28	-U9	-O36	90.9(6)	O39_i	-U10	-O53	139.1(4)
O28	-U9	-O37	91.6(6)	O46_i	-U10	-O53	174.6(5)
O28	-U9	-O44	91.5(6)	O53	-U10	-O53_i	68.8(5)
O36	-U9	-O37	36.3(6)	O39_i	-U10	-O46_i	37.0(4)
O36	-U9	-O44	148.1(5)	O39_i	-U10	-O53_i	70.3(4)
O37	-U9	-O44	111.8(5)	O46_i	-U10	-O53_i	107.1(5)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

O5	-U11	-O13	111.3(5)	O3	-U12	-O13	110.2(5)
O5	-U11	-O16	86.8(5)	O3	-U12	-O30	86.5(6)
O5	-U11	-O18	69.2(4)	O3	-U12	-O51	73.7(5)
O5	-U11	-O47	177.8(5)	O3	-U12	-O52	91.9(7)
O5	-U11	-O48	91.8(5)	O3	-U12	-O3_h	68.5(5)
O5	-U11	-O50	144.1(5)	O3	-U12	-O13_h	178.5(5)
O5	-U11	-O51	74.3(5)	O3	-U12	-O51_h	142.1(5)
O13	-U11	-O16	90.9(5)	O13	-U12	-O30	92.7(6)
O13	-U11	-O18	177.4(5)	O13	-U12	-O51	36.5(5)
O13	-U11	-O47	68.4(5)	O13	-U12	-O52	88.8(7)
O13	-U11	-O48	90.9(5)	O3_h	-U12	-O13	178.5(5)
O13	-U11	-O50	104.5(5)	O13	-U12	-O13_h	71.2(5)
O13	-U11	-O51	37.1(5)	O13	-U12	-O51_h	107.6(5)
O16	-U11	-O18	86.6(5)	O30	-U12	-O51	89.3(4)
O16	-U11	-O47	91.0(5)	O30	-U12	-O52	178.2(9)
O16	-U11	-O48	178.1(6)	O3_h	-U12	-O30	86.5(6)
O16	-U11	-O50	91.0(5)	O13_h	-U12	-O30	92.7(6)
O16	-U11	-O51	89.9(5)	O30	-U12	-O51_h	89.3(4)
O18	-U11	-O47	110.9(4)	O51	-U12	-O52	91.2(4)
O18	-U11	-O48	91.7(5)	O3_h	-U12	-O51	142.1(5)
O18	-U11	-O50	74.9(4)	O13_h	-U12	-O51	107.6(5)
O18	-U11	-O51	143.4(4)	O51	-U12	-O51_h	144.0(5)
O47	-U11	-O48	90.4(5)	O3_h	-U12	-O52	91.9(7)
O47	-U11	-O50	36.1(5)	O13_h	-U12	-O52	88.8(7)
O47	-U11	-O51	105.6(5)	O51_h	-U12	-O52	91.2(4)
O48	-U11	-O50	89.4(5)	O3_h	-U12	-O13_h	110.2(5)
O48	-U11	-O51	90.9(5)	O3_h	-U12	-O51_h	73.7(5)
O50	-U11	-O51	141.7(5)	O13_h	-U12	-O51_h	36.5(5)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

O58_a	-I1	-O60	101.6(10)	U9	-O10	-O44	70.4(7)
I1_a	-I1	-O58_a	45.5(5)	U5	-O10	-U9	137.2(6)
I1_a	-I1	-O56	113.6(5)	U2	-O11	-O40	73.2(8)
O56	-I1	-O58_a	105.9(7)	U5	-O11	-O40	72.4(7)
O58	-I1	-O60	101.6(10)	U2	-O11	-U5	130.4(6)
I1_a	-I1	-O58	45.5(4)	U12	-O13	-O51	74.2(8)
O58	-I1	-O58_a	91.1(6)	U11	-O13	-U12	124.5(6)
O56	-I1	-O58	105.9(7)	U11	-O13	-O51	73.6(7)
O56	-I1	-O60	140.4(13)	U1	-O15	-U1_g	109.8(8)
I1_a	-I1	-O60	106.0(12)	U7	-O17	-U8	123.7(6)
I2_d	-I2	-O57	43.3(5)	U8	-O17	-O32	72.9(7)
O55	-I2	-O57	105.1(7)	U7	-O17	-O32	74.5(7)
I2_d	-I2	-O55	111.1(5)	U4	-O18	-U11	107.6(5)
O55	-I2	-O57_d	105.1(7)	U1	-O20	-U7	117.8(5)
O55	-I2	-O59	144.1(11)	U7	-O20	-O34	68.6(7)
O57	-I2	-O59	100.8(10)	U1	-O20	-O34	70.1(7)
O57_d	-I2	-O59	100.8(10)	U5	-O21	-U6	109.1(5)
O57	-I2	-O57_d	86.7(7)	U5	-O22	-U6	110.2(5)
I2_d	-I2	-O59	104.8(10)	U4	-O26	-O54	71.7(5)
I2_d	-I2	-O57_d	43.3(5)	U4	-O26	-U4_i	130.4(8)
U7	-O1	-U9	109.5(4)	U4_i	-O26	-O54	71.7(5)
U2	-O3	-U12	110.9(6)	U4	-O31	-O9	73.8(7)
U7	-O4	-U9	107.8(5)	U6	-O31	-O9	70.2(7)
U4	-O5	-U11	110.2(5)	U4	-O31	-U6	135.0(6)
U6	-O9	-O31	72.3(7)	U8	-O32	-O17	69.6(7)
U4	-O9	-O31	68.8(7)	U7	-O32	-U8	117.9(6)
U4	-O9	-U6	132.6(6)	U7	-O32	-O17	68.2(7)
U5	-O10	-O44	72.0(7)	U3	-O33	-U3_g	110.1(8)

Table S15 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U36a

U7	-O34	-O20	74.9(7)	U6	-O46	-O39	71.9(7)
U1	-O34	-O20	73.8(8)	U6	-O46	-U10	128.2(6)
U1	-O34	-U7	123.5(6)	U10	-O46	-O39	68.7(7)
U9	-O36	-O37	72.3(5)	U3	-O47	-O50	74.8(8)
U9	-O36	-U9_h	130.6(8)	U11	-O47	-O50	74.1(8)
U9_h	-O36	-O37	72.3(5)	U3	-O47	-U11	123.4(6)
U9_h	-O37	-O36	71.4(5)	U3	-O50	-O47	69.2(7)
U9	-O37	-O36	71.4(5)	U11	-O50	-O47	69.8(7)
U9	-O37	-U9_h	129.4(8)	U3	-O50	-U11	117.7(6)
U6	-O39	-O46	71.0(7)	U12	-O51	-O13	69.2(7)
U10	-O39	-O46	74.3(7)	U11	-O51	-U12	119.0(6)
U6	-O39	-U10	131.7(6)	U11	-O51	-O13	69.3(7)
U2	-O40	-U5	126.9(6)	U8	-O53	-U10	110.0(5)
U2	-O40	-O11	69.6(7)	U4_i	-O54	-O26	71.1(5)
U5	-O40	-O11	70.9(7)	U4	-O54	-U4_i	129.6(8)
U9	-O44	-O10	72.2(7)	U4	-O54	-O26	71.1(5)
U5	-O44	-O10	70.6(7)	I1	-O58	-I1_a	88.9(9)
U5	-O44	-U9	137.6(6)	I2	-O57	-I2_d	93.4(9)

Table S16 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
For U44a

Crystal Data			
Formula	O110 U22, 21(O), 4(Na), 3(Li)		
Formula Weight	7445.44		
Crystal System	Triclinic		
Space group	P-1	(No. 2)	
a, b, c [Angstrom]	19.5335(19)	19.852(2)	28.963(3)
alpha, beta, gamma [deg]	89.418(2)	71.838(2)	61.544(2)
V [Ang**3]	9252.8(16)		
Z	2		
D(calc) [g/cm**3]	2.672		
Mu(MoKa) [/mm]	19.266		
F(000)	6250		
Crystal Size [mm]	0.01 x 0.01 x 0.06		
Data Collection			
Temperature (K)	120		
Radiation [Angstrom]	MoKa	0.71073	
Theta Min-Max [Deg]	1.6, 25.1		
Dataset	-23: 23 ; -23: 23 ; -34: 34		
Tot., Uniq. Data, R(int)	103442,	32934,	0.138
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]	11622		
Refinement			
Nref, Npar	32934, 751		
R, wR2, S	0.0468, 0.1025, 0.61		
w = 1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0000P)^2^]	where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3		
Max. and Av. Shift/Error	0.00, 0.00		
Min. and Max. Resd. Dens. [e/Ang^3]	-1.40, 2.86		

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
U1	0.73851(6)	0.83065(5)	0.17225(3)	0.0243(4)
U2	1.21396(7)	1.01209(5)	0.12898(3)	0.0259(4)
U3	0.12002(6)	1.39703(5)	0.11155(3)	0.0267(4)
U4	1.28372(7)	0.89848(5)	-0.01144(3)	0.0269(4)
U5	0.33684(6)	1.32788(5)	0.01093(3)	0.0248(3)
U6	1.19898(6)	1.00664(5)	-0.11130(4)	0.0260(4)
U7	0.33898(7)	0.88197(5)	0.22324(3)	0.0265(4)
U8	0.59285(6)	0.78504(5)	0.12973(3)	0.0247(4)
U9	0.65932(6)	0.94926(5)	0.31244(3)	0.0261(4)
U10	0.52287(7)	1.33793(5)	0.05164(3)	0.0264(4)
U11	1.05869(6)	1.23335(5)	0.17253(4)	0.0288(4)
U12	0.72330(6)	1.11086(5)	0.25189(4)	0.0279(4)
U13	0.46254(7)	1.44501(5)	0.18259(3)	0.0270(4)
U14	-0.00537(6)	1.34187(5)	0.31347(4)	0.0292(4)
U15	0.56255(7)	1.32994(5)	0.28625(4)	0.0291(4)
U16	0.27145(6)	0.98414(5)	0.35697(4)	0.0273(4)
U17	0.05934(7)	1.50412(5)	0.25270(4)	0.0288(4)
U18	0.22348(7)	1.53039(5)	0.28594(4)	0.0294(4)
U19	0.43662(6)	1.02019(5)	0.40187(3)	0.0266(4)
U20	0.09581(7)	1.22029(5)	0.40288(3)	0.0286(4)
U21	0.32453(7)	1.40728(5)	0.38736(3)	0.0291(4)
U22	0.26410(6)	1.25689(5)	0.44359(3)	0.0285(4)
O1	1.2331(9)	0.8898(8)	-0.0760(5)	0.027(4)
O2	0.2139(10)	1.3160(9)	0.0346(6)	0.039(5)
O3	1.2124(9)	1.0283(8)	-0.0352(5)	0.028(4)
O4	0.6410(10)	0.7871(8)	0.1955(6)	0.037(5)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O5	0.3754(9)	0.8770(8)	0.2959(5)	0.023(4)
O6	1.1687(9)	1.1184(8)	-0.1473(5)	0.027(4)
O7	0.2297(9)	0.9623(8)	0.2939(5)	0.027(4)
O8	0.5620(10)	0.7746(9)	0.0585(6)	0.043(5)
O9	0.7628(9)	0.8617(8)	0.2421(5)	0.022(4)
O10	0.5713(9)	1.3606(8)	0.1118(5)	0.024(4)
O11	0.2230(9)	1.4323(8)	0.0745(5)	0.029(4)
O12	0.3499(10)	1.5281(9)	0.2502(6)	0.037(5)
O13	0.5557(9)	1.0354(8)	0.3816(5)	0.023(4)
O14	0.5565(10)	0.9157(8)	0.3477(6)	0.033(4)
O15	0.3227(10)	1.0012(8)	0.4183(6)	0.031(4)
O16	0.7188(9)	0.7926(8)	0.1016(5)	0.028(4)
O17	1.1471(9)	1.1329(8)	0.1022(5)	0.026(4)
O18	1.1025(9)	1.1071(8)	0.1935(6)	0.032(4)
O19	0.4596(9)	0.7948(8)	0.1551(5)	0.027(4)
O20	0.8187(9)	1.0148(8)	0.1852(5)	0.030(4)
O21	0.4208(9)	1.4468(8)	0.1137(5)	0.028(4)
O22	0.5038(9)	1.4420(8)	0.2508(5)	0.025(4)
O23	0.4657(10)	1.3273(8)	-0.0069(6)	0.031(4)
O24	0.7586(10)	0.9875(8)	0.2776(6)	0.034(4)
O25	1.3177(10)	0.9234(9)	0.0571(6)	0.044(5)
O26	0.0229(9)	1.4822(8)	0.1844(5)	0.024(4)
O27	0.0200(9)	1.3507(8)	0.3878(5)	0.030(4)
O28	0.1627(9)	1.0932(8)	0.4189(5)	0.026(4)
O29	0.3658(9)	1.2975(8)	0.4289(5)	0.030(4)
O30	0.5583(9)	1.4013(8)	0.0147(5)	0.028(4)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O31	1.3777(8)	0.8866(7)	-0.0541(5)	0.016(4)
O32	0.0241(9)	1.2263(8)	0.3478(5)	0.028(4)
O33	0.6880(9)	1.2348(8)	0.2259(5)	0.032(4)
O34	0.0964(10)	1.5313(9)	0.3211(6)	0.043(5)
O35	0.3059(9)	1.0431(8)	0.3196(5)	0.023(4)
O36	0.1007(9)	1.3006(7)	0.2795(5)	0.018(4)
O37	0.0239(10)	1.3580(8)	0.1487(6)	0.035(5)
O38	0.6966(9)	1.0466(8)	0.3217(5)	0.024(4)
O39	0.4615(9)	0.9705(8)	0.4520(5)	0.023(4)
O40	0.0093(8)	1.2388(7)	0.4511(5)	0.011(3)
O41	0.1907(8)	1.3358(7)	0.1406(5)	0.014(4)
O42	0.9657(10)	1.3300(9)	0.2425(6)	0.043(5)
O43	0.6239(10)	1.2117(8)	0.3205(6)	0.035(5)
O44	0.2917(10)	0.8948(8)	0.1558(6)	0.034(5)
O45	1.3387(9)	0.7618(8)	-0.0312(5)	0.026(4)
O46	1.2852(9)	1.0433(8)	0.1361(5)	0.024(4)
O47	0.1576(9)	1.5479(8)	0.2273(6)	0.032(4)
O48	1.1835(9)	1.1354(8)	-0.1031(5)	0.023(4)
O49	0.5415(8)	0.8886(7)	0.1349(5)	0.014(4)
O50	0.8259(9)	0.7335(8)	0.1611(5)	0.029(4)
O51	0.2234(9)	0.9473(8)	0.1977(5)	0.023(4)
O52	0.3152(9)	0.8054(8)	0.2395(5)	0.030(4)
O53	0.5791(9)	1.3849(8)	0.2114(5)	0.027(4)
O54	0.4394(9)	1.3689(7)	0.1978(5)	0.019(4)
O55	0.0843(9)	1.5092(8)	0.1649(5)	0.026(4)
O56	0.6510(9)	0.9246(8)	0.1813(5)	0.022(4)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O57	0.3923(10)	0.9321(8)	0.3802(6)	0.032(4)
O58	0.6385(9)	1.1151(8)	0.2379(5)	0.023(4)
O59	0.7031(10)	0.8350(8)	0.2604(5)	0.032(4)
O60	1.0941(9)	1.0428(8)	-0.0781(5)	0.026(4)
O61	0.7191(9)	0.8920(8)	0.3494(5)	0.031(4)
O62	0.3998(9)	1.3966(8)	0.0326(5)	0.030(4)
O63	0.4163(9)	1.0653(8)	0.3513(5)	0.029(4)
O64	1.1545(9)	1.2209(8)	0.1791(5)	0.031(4)
O65	0.3186(10)	1.5361(9)	0.2124(6)	0.038(5)
O66	0.1681(9)	1.6341(8)	0.3045(5)	0.026(4)
O67	0.0520(9)	1.4611(8)	0.0792(5)	0.027(4)
O68	0.6469(9)	0.6846(8)	0.1248(6)	0.033(4)
O69	0.9725(9)	1.2361(8)	0.1612(5)	0.030(4)
O70	0.4909(9)	1.5181(8)	0.1645(5)	0.024(4)
O71	0.3683(9)	1.2635(8)	0.0530(5)	0.023(4)
O72	-0.0133(10)	1.4687(9)	0.3229(6)	0.045(5)
O73	0.1828(8)	1.2014(7)	0.3512(5)	0.018(4)
O74	0.1247(9)	1.2983(8)	0.4485(5)	0.029(4)
O75	0.2749(9)	1.4308(8)	0.2670(5)	0.023(4)
O76	0.3648(9)	0.9595(8)	0.2056(5)	0.028(4)
O77	0.9834(10)	1.2576(9)	0.2605(6)	0.036(5)
O78	0.4825(9)	0.7915(8)	0.1990(6)	0.031(4)
O79	0.8030(10)	1.0847(9)	0.1667(6)	0.041(5)
O80	0.5978(9)	1.0052(8)	0.2775(5)	0.023(4)
O81	1.1904(8)	0.9084(7)	0.0300(5)	0.014(4)
O82	0.3028(9)	1.3959(7)	-0.0299(5)	0.021(4)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O83	0.1483(9)	1.4082(8)	0.2367(5)	0.024(4)
O84	0.6413(9)	0.7742(8)	0.0417(5)	0.030(4)
O85	0.3434(8)	1.3440(7)	0.3371(5)	0.010(3)
O86	0.4370(10)	1.4252(8)	0.3476(6)	0.034(4)
O87	-0.0261(9)	1.6032(8)	0.2682(5)	0.032(4)
O88	0.3007(9)	1.2251(8)	0.3788(5)	0.029(4)
O89	0.6193(10)	1.3673(9)	0.3046(6)	0.039(5)
O90	0.4876(9)	1.2797(8)	0.0880(5)	0.024(4)
O91	1.1407(9)	0.9846(8)	0.1229(5)	0.027(4)
O92	1.3052(8)	0.9680(7)	-0.1412(5)	0.017(4)
O93	0.2298(10)	1.2937(9)	0.5057(6)	0.040(5)
O94	0.3050(9)	1.4646(8)	0.4399(5)	0.028(4)
O95	0.2095(10)	1.3902(8)	0.4317(6)	0.036(5)
O96	0.4645(10)	1.3562(9)	0.3682(6)	0.041(5)
O97	0.3184(10)	1.1274(8)	0.4583(6)	0.034(4)
O98	0.2131(11)	1.5073(9)	0.3695(6)	0.046(5)
O99	0.3832(10)	1.1476(8)	0.4499(5)	0.032(4)
O100	0.0832(10)	1.3008(8)	0.1027(6)	0.036(5)
O101	0.1297(10)	1.0875(8)	0.3825(6)	0.036(5)
O102	0.2420(10)	0.9218(8)	0.3913(6)	0.036(5)
O103	0.2837(9)	1.5178(8)	0.3476(5)	0.025(4)
O104	1.3704(10)	0.7728(9)	0.0078(6)	0.042(5)
O105	0.5089(9)	1.2909(8)	0.2655(5)	0.026(4)
O106	0.1631(10)	1.2206(8)	0.4606(6)	0.035(4)
O107	-0.1110(9)	1.3804(8)	0.3514(5)	0.030(4)
O108	1.2739(10)	0.9970(9)	0.0433(6)	0.037(5)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O109	-0.0383(10)	1.4608(9)	0.2833(6)	0.039(5)
O110	0.8060(10)	1.1113(9)	0.2676(6)	0.041(5)
O111	0.3403(13)	1.3009(11)	0.1703(8)	0.085(7)
O112	0.2522(15)	1.2975(13)	0.2876(9)	0.112(9)
O113	0.4570(14)	1.1715(12)	0.2893(8)	0.100(8)
O114	0.2672(14)	1.1348(12)	0.2366(8)	0.100(8)
O115	0.4616(15)	1.0264(13)	0.2296(9)	0.108(9)
O116	0.5158(17)	1.1766(15)	0.1685(10)	0.141(11)
O117	0.4746(9)	0.6677(8)	0.1083(5)	0.025(4)
O118	1.2945(9)	0.7703(8)	0.1042(5)	0.032(4)
O119	0.3000(10)	1.6784(9)	0.1920(6)	0.040(5)
O120	0.2497(11)	0.9661(10)	0.5072(6)	0.057(6)
O121	0.3849(9)	1.5864(8)	0.0827(5)	0.032(4)
O122	1.4527(15)	0.9180(13)	0.0606(9)	0.114(9)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
----	---	---	---	-----
O123	0.2324(13)	1.1200(11)	0.5547(8)	0.085(7)
O124	0.3799(14)	0.9569(12)	0.5502(8)	0.105(8)
O125	0.7778(14)	1.0317(12)	0.3809(8)	0.105(8)
O126	0.4217(16)	1.0653(14)	0.1446(9)	0.127(10)
O127	1.3628(11)	0.7729(10)	-0.1492(7)	0.056(6)
O128	0.5024(15)	0.9091(13)	0.2707(9)	0.101(8)
O129	0.2786(13)	1.4441(11)	0.1477(7)	0.074(7)
O130	0.5021(14)	1.1812(12)	0.3571(8)	0.089(7)
O131	0.1544(19)	1.1089(16)	0.2690(11)	0.157(12)
Na1	0.2258(7)	1.2702(6)	0.2095(4)	0.057(3)
Na2	0.3316(7)	1.1489(6)	0.2998(4)	0.063(4)
Na3	0.5644(10)	1.0643(8)	0.2087(6)	0.115(6)
Na4	0.3890(11)	1.2873(10)	0.2467(7)	0.140(7)

Table S17 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Displacement
Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
For U44a

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
Li1	0.361(3)	1.673(3)	0.1219(17)	0.046(13)
Li2	0.260(3)	1.012(3)	0.5638(18)	0.058(15)
Li3	0.407(3)	0.985(3)	0.132(2)	0.070(17)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U Tensor

Table S18 - (An)isotropic Displacement Parameters
For U44a

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
U1	0.0355(7)	0.0220(6)	0.0198(6)	0.0036(4)	-0.0130(5)	-0.0155(5)
U2	0.0405(7)	0.0227(6)	0.0200(6)	0.0051(5)	-0.0148(5)	-0.0173(5)
U3	0.0384(7)	0.0212(6)	0.0224(6)	0.0058(5)	-0.0179(6)	-0.0119(5)
U4	0.0465(8)	0.0226(6)	0.0196(6)	0.0065(5)	-0.0153(6)	-0.0210(6)
U5	0.0424(7)	0.0195(5)	0.0178(6)	0.0047(4)	-0.0141(5)	-0.0172(5)
U6	0.0378(7)	0.0242(6)	0.0214(6)	0.0063(5)	-0.0135(5)	-0.0177(5)
U7	0.0442(7)	0.0226(6)	0.0201(6)	0.0065(5)	-0.0156(5)	-0.0197(6)
U8	0.0401(7)	0.0212(6)	0.0202(6)	0.0045(4)	-0.0148(5)	-0.0183(5)
U9	0.0371(7)	0.0228(6)	0.0203(6)	0.0061(5)	-0.0174(5)	-0.0120(5)
U10	0.0481(8)	0.0204(5)	0.0219(6)	0.0069(5)	-0.0186(6)	-0.0216(6)
U11	0.0388(8)	0.0247(6)	0.0252(6)	0.0051(5)	-0.0179(6)	-0.0135(6)
U12	0.0386(7)	0.0271(6)	0.0256(6)	0.0052(5)	-0.0199(6)	-0.0169(6)
U13	0.0478(8)	0.0212(6)	0.0230(6)	0.0078(5)	-0.0199(6)	-0.0209(6)
U14	0.0337(7)	0.0256(6)	0.0224(6)	0.0026(5)	-0.0128(5)	-0.0086(5)
U15	0.0448(8)	0.0245(6)	0.0273(6)	0.0062(5)	-0.0223(6)	-0.0184(6)
U16	0.0398(7)	0.0240(6)	0.0209(6)	0.0065(5)	-0.0154(5)	-0.0151(5)
U17	0.0425(8)	0.0205(6)	0.0216(6)	0.0039(5)	-0.0174(6)	-0.0107(5)
U18	0.0474(8)	0.0187(5)	0.0243(6)	0.0064(5)	-0.0206(6)	-0.0133(5)
U19	0.0391(7)	0.0241(6)	0.0174(6)	0.0065(5)	-0.0161(5)	-0.0126(5)
U20	0.0379(7)	0.0264(6)	0.0197(6)	0.0053(5)	-0.0132(5)	-0.0129(5)
U21	0.0463(8)	0.0228(6)	0.0206(6)	0.0044(5)	-0.0187(6)	-0.0147(5)
U22	0.0417(7)	0.0237(6)	0.0179(6)	0.0042(4)	-0.0159(5)	-0.0114(5)

=====

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where
 $T = 8 * (\text{Pi}^{**2}) * U * (\text{Sin}(\text{Theta}) / \text{Lambda})^{**2}$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 * (\text{Pi}^{**2}) * \text{Sum}_{ij} (h(i) * h(j) * U(i,j) * \text{Astar}(i) * \text{Astar}(j))$, for
Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial Lengths and
h(i) are the Reflection Indices.

Table S19 - Bond Distances (Angstrom)
For U44a

U1	-O4	2.36(2)	U4	-O45	2.391(14)
U1	-O9	2.367(16)	U4	-O81	1.761(16)
U1	-O16	2.389(16)	U4	-O104	2.437(17)
U1	-O50	1.808(15)	U4	-O108	2.427(18)
U1	-O56	1.778(15)	U5	-O2	2.41(2)
U1	-O59	2.419(14)	U5	-O11	2.401(14)
U1	-O6_d	2.397(18)	U5	-O23	2.40(2)
U1	-O48_d	2.416(16)	U5	-O62	2.422(18)
U2	-O17	2.381(14)	U5	-O71	1.784(14)
U2	-O18	2.326(16)	U5	-O82	1.807(13)
U2	-O25	2.363(17)	U5	-O8_c	2.421(16)
U2	-O46	1.835(19)	U5	-O84_c	2.333(15)
U2	-O91	1.811(19)	U6	-O1	2.403(14)
U2	-O108	2.343(16)	U6	-O3	2.366(15)
U2	-O44_b	2.379(15)	U6	-O6	2.334(14)
U2	-O51_b	2.367(14)	U6	-O48	2.432(15)
U3	-O2	2.373(16)	U6	-O60	1.738(18)
U3	-O11	2.381(18)	U6	-O92	1.738(16)
U3	-O26	2.330(14)	U6	-O20_d	2.345(15)
U3	-O37	2.32(2)	U6	-O79_d	2.455(18)
U3	-O41	1.788(15)	U7	-O5	2.410(16)
U3	-O55	2.398(15)	U7	-O7	2.321(14)
U3	-O67	1.845(16)	U7	-O19	2.393(15)
U3	-O100	2.381(18)	U7	-O44	2.371(18)
U4	-O1	2.414(17)	U7	-O51	2.358(18)
U4	-O3	2.489(14)	U7	-O52	1.808(16)
U4	-O25	2.404(19)	U7	-O76	1.857(16)
U4	-O31	1.770(16)	U7	-O78	2.362(18)

Table S19 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U44a

U8	-O4	2.381(19)	U11	-O69	1.79(2)
U8	-O8	2.359(18)	U11	-O77	2.429(17)
U8	-O16	2.416(19)	U11	-O37_b	2.391(15)
U8	-O19	2.384(19)	U11	-O100_b	2.463(16)
U8	-O49	1.790(12)	U12	-O20	2.299(14)
U8	-O68	1.737(14)	U12	-O24	2.388(15)
U8	-O78	2.395(18)	U12	-O33	2.401(14)
U8	-O84	2.399(14)	U12	-O38	2.431(14)
U9	-O9	2.327(14)	U12	-O43	2.387(16)
U9	-O13	2.297(14)	U12	-O58	1.789(19)
U9	-O14	2.35(2)	U12	-O79	2.375(17)
U9	-O24	2.35(2)	U12	-O110	1.81(2)
U9	-O38	2.410(17)	U13	-O10	2.342(14)
U9	-O59	2.359(15)	U13	-O12	2.306(17)
U9	-O61	1.814(16)	U13	-O21	2.373(16)
U9	-O80	1.779(16)	U13	-O22	2.345(16)
U10	-O10	2.363(17)	U13	-O53	2.425(18)
U10	-O21	2.370(14)	U13	-O54	1.787(15)
U10	-O23	2.362(19)	U13	-O65	2.365(19)
U10	-O30	1.883(16)	U13	-O70	1.805(16)
U10	-O62	2.363(18)	U14	-O27	2.380(16)
U10	-O90	1.789(16)	U14	-O32	2.374(14)
U10	-O45_d	2.347(17)	U14	-O36	1.749(17)
U10	-O104_d	2.370(16)	U14	-O72	2.461(17)
U11	-O17	2.391(14)	U14	-O107	1.775(17)
U11	-O18	2.373(14)	U14	-O109	2.369(16)
U11	-O42	2.356(16)	U14	-O42_a	2.337(18)
U11	-O64	1.84(2)	U14	-O77_a	2.411(19)

Table S19 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U44a

U15	-O22	2.361(14)	U18	-O66	1.799(14)
U15	-O33	2.369(15)	U18	-O75	1.733(14)
U15	-O43	2.438(15)	U18	-O98	2.423(16)
U15	-O53	2.418(14)	U18	-O103	2.378(17)
U15	-O86	2.383(17)	U19	-O13	2.379(19)
U15	-O89	1.79(2)	U19	-O14	2.323(16)
U15	-O96	2.411(17)	U19	-O15	2.34(2)
U15	-O105	1.799(19)	U19	-O39	1.809(14)
U16	-O5	2.345(14)	U19	-O57	2.451(19)
U16	-O7	2.339(17)	U19	-O63	1.761(14)
U16	-O15	2.391(19)	U19	-O97	2.360(16)
U16	-O28	2.395(14)	U19	-O99	2.464(15)
U16	-O35	1.807(16)	U20	-O27	2.411(14)
U16	-O57	2.40(2)	U20	-O28	2.345(14)
U16	-O101	2.401(18)	U20	-O32	2.398(17)
U16	-O102	1.774(17)	U20	-O40	1.700(15)
U17	-O26	2.408(16)	U20	-O73	1.757(15)
U17	-O34	2.455(19)	U20	-O74	2.409(17)
U17	-O47	2.383(19)	U20	-O101	2.421(15)
U17	-O55	2.446(14)	U20	-O106	2.43(2)
U17	-O72	2.401(18)	U21	-O29	2.393(14)
U17	-O83	1.795(15)	U21	-O85	1.759(14)
U17	-O87	1.811(15)	U21	-O86	2.33(2)
U17	-O109	2.38(2)	U21	-O94	1.737(15)
U18	-O12	2.34(2)	U21	-O95	2.39(2)
U18	-O34	2.36(2)	U21	-O96	2.29(2)
U18	-O47	2.363(18)	U21	-O98	2.347(19)
U18	-O65	2.394(18)	U21	-O103	2.373(14)

Table S19 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
For U44a

U22	-029	2.402(19)	O22	-053	1.46(2)
U22	-074	2.396(19)	O23	-062	1.51(2)
U22	-088	1.786(14)	O24	-038	1.48(2)
U22	-093	1.740(16)	O25	-0108	1.43(2)
U22	-095	2.404(14)	O26	-055	1.49(3)
U22	-097	2.361(14)	O28	-0101	1.43(3)
U22	-099	2.366(17)	O37	-0100	1.49(2)
U22	-0106	2.32(2)	O42	-077	1.44(2)
O6	-048	1.47(2)	O44	-051	1.43(2)
O8	-084	1.47(3)	O45	-0104	1.51(3)
O9	-059	1.46(3)	O72	-0109	1.42(3)
O12	-065	1.39(3)	O74	-0106	1.45(2)
O15	-057	1.51(2)	O86	-096	1.42(2)
O19	-078	1.47(2)	O97	-099	1.45(3)
O20	-079	1.41(2)	O98	-0103	1.44(3)

Table S20 - Bond Angles (Degrees)
For U44a

O4	-U1	-O9	110.3(6)	O17	-U2	-O18	68.3(5)
O4	-U1	-O16	69.3(6)	O17	-U2	-O25	105.7(5)
O4	-U1	-O50	92.9(7)	O17	-U2	-O46	86.2(6)
O4	-U1	-O56	85.5(7)	O17	-U2	-O91	92.4(7)
O4	-U1	-O59	74.9(6)	O17	-U2	-O108	70.4(5)
O4	-U1	-O6_d	176.5(5)	O17	-U2	-O44_b	173.9(7)
O4	-U1	-O48_d	142.7(6)	O17	-U2	-O51_b	145.7(5)
O9	-U1	-O16	177.1(5)	O18	-U2	-O25	172.9(6)
O9	-U1	-O50	89.7(6)	O18	-U2	-O46	92.4(7)
O9	-U1	-O56	92.9(6)	O18	-U2	-O91	85.8(7)
O9	-U1	-O59	35.4(6)	O18	-U2	-O108	138.4(6)
O6_d	-U1	-O9	71.1(5)	O18	-U2	-O44_b	112.7(5)
O9	-U1	-O48_d	106.8(6)	O18	-U2	-O51_b	77.8(5)
O16	-U1	-O50	87.5(6)	O25	-U2	-O46	90.8(7)
O16	-U1	-O56	90.0(6)	O25	-U2	-O91	90.9(7)
O16	-U1	-O59	144.0(6)	O25	-U2	-O108	35.3(6)
O6_d	-U1	-O16	109.4(5)	O25	-U2	-O44_b	73.7(6)
O16	-U1	-O48_d	73.9(6)	O25	-U2	-O51_b	108.5(5)
O50	-U1	-O56	177.3(7)	O46	-U2	-O91	178.0(7)
O50	-U1	-O59	91.2(6)	O46	-U2	-O108	89.2(7)
O6_d	-U1	-O50	90.3(7)	O44_b	-U2	-O46	87.8(7)
O48_d	-U1	-O50	91.1(6)	O46	-U2	-O51_b	90.6(6)
O56	-U1	-O59	90.5(6)	O91	-U2	-O108	91.6(7)
O6_d	-U1	-O56	91.2(7)	O44_b	-U2	-O91	93.7(7)
O48_d	-U1	-O56	88.8(6)	O51_b	-U2	-O91	89.9(6)
O6_d	-U1	-O59	106.5(6)	O44_b	-U2	-O108	108.9(6)
O48_d	-U1	-O59	142.1(6)	O51_b	-U2	-O108	143.8(5)
O6_d	-U1	-O48_d	35.6(5)	O44_b	-U2	-O51_b	34.9(5)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O2	-U3	-O11	69.1(6)	O1	-U4	-O3	69.6(5)
O2	-U3	-O26	176.3(5)	O1	-U4	-O25	172.5(5)
O2	-U3	-O37	110.3(6)	O1	-U4	-O31	92.5(6)
O2	-U3	-O41	89.6(6)	O1	-U4	-O45	77.3(5)
O2	-U3	-O55	142.8(6)	O1	-U4	-O81	86.4(6)
O2	-U3	-O67	88.6(6)	O1	-U4	-O104	113.7(6)
O2	-U3	-O100	73.5(6)	O1	-U4	-O108	139.2(5)
O11	-U3	-O26	110.6(6)	O3	-U4	-O25	104.4(5)
O11	-U3	-O37	177.5(6)	O3	-U4	-O31	87.3(6)
O11	-U3	-O41	84.6(6)	O3	-U4	-O45	146.3(5)
O11	-U3	-O55	73.9(5)	O3	-U4	-O81	93.3(6)
O11	-U3	-O67	92.2(7)	O3	-U4	-O104	172.3(7)
O11	-U3	-O100	142.3(5)	O3	-U4	-O108	70.0(5)
O26	-U3	-O37	70.1(6)	O25	-U4	-O31	91.7(7)
O26	-U3	-O41	94.0(6)	O25	-U4	-O45	109.1(5)
O26	-U3	-O55	36.8(6)	O25	-U4	-O81	89.6(7)
O26	-U3	-O67	87.8(6)	O25	-U4	-O104	72.9(6)
O26	-U3	-O100	107.0(6)	O25	-U4	-O108	34.4(6)
O37	-U3	-O41	93.0(7)	O31	-U4	-O45	88.4(6)
O37	-U3	-O55	106.8(6)	O31	-U4	-O81	178.5(6)
O37	-U3	-O67	90.3(7)	O31	-U4	-O104	85.6(6)
O37	-U3	-O100	36.9(6)	O31	-U4	-O108	91.2(7)
O41	-U3	-O55	90.3(6)	O45	-U4	-O81	90.4(6)
O41	-U3	-O67	176.6(7)	O45	-U4	-O104	36.4(6)
O41	-U3	-O100	90.5(6)	O45	-U4	-O108	143.5(6)
O55	-U3	-O67	89.5(6)	O81	-U4	-O104	94.0(6)
O55	-U3	-O100	143.7(6)	O81	-U4	-O108	90.3(7)
O67	-U3	-O100	91.7(7)	O104	-U4	-O108	107.1(6)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O2	-U5	-O11	68.2(6)	O1	-U6	-O3	71.8(5)
O2	-U5	-O23	173.0(5)	O1	-U6	-O6	178.6(6)
O2	-U5	-O62	144.4(5)	O1	-U6	-O48	144.7(5)
O2	-U5	-O71	86.5(7)	O1	-U6	-O60	90.3(6)
O2	-U5	-O82	93.3(7)	O1	-U6	-O92	86.8(6)
O2	-U5	-O8_c	106.1(6)	O1	-U6	-O20_d	107.5(5)
O2	-U5	-O84_c	70.2(6)	O1	-U6	-O79_d	73.5(5)
O11	-U5	-O23	113.3(6)	O3	-U6	-O6	108.9(5)
O11	-U5	-O62	76.8(6)	O3	-U6	-O48	73.1(5)
O11	-U5	-O71	94.0(6)	O3	-U6	-O60	86.5(7)
O11	-U5	-O82	84.0(6)	O3	-U6	-O92	90.4(7)
O8_c	-U5	-O11	172.2(7)	O3	-U6	-O20_d	178.0(6)
O11	-U5	-O84_c	137.9(7)	O3	-U6	-O79_d	145.1(5)
O23	-U5	-O62	36.5(5)	O6	-U6	-O48	35.9(5)
O23	-U5	-O71	86.5(7)	O6	-U6	-O60	90.9(6)
O23	-U5	-O82	93.7(7)	O6	-U6	-O92	92.0(6)
O8_c	-U5	-O23	73.0(6)	O6	-U6	-O20_d	71.8(5)
O23	-U5	-O84_c	108.8(6)	O6	-U6	-O79_d	105.9(5)
O62	-U5	-O71	89.7(7)	O48	-U6	-O60	91.8(6)
O62	-U5	-O82	89.3(7)	O48	-U6	-O92	89.3(6)
O8_c	-U5	-O62	109.3(6)	O20_d	-U6	-O48	107.7(5)
O62	-U5	-O84_c	145.2(6)	O48	-U6	-O79_d	141.7(5)
O71	-U5	-O82	178.0(6)	O60	-U6	-O92	176.3(7)
O8_c	-U5	-O71	90.9(6)	O20_d	-U6	-O60	91.6(7)
O71	-U5	-O84_c	89.9(6)	O60	-U6	-O79_d	90.3(7)
O8_c	-U5	-O82	91.1(6)	O20_d	-U6	-O92	91.4(7)
O82	-U5	-O84_c	91.9(6)	O79_d	-U6	-O92	91.0(7)
O8_c	-U5	-O84_c	35.9(7)	O20_d	-U6	-O79_d	34.1(5)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

05	-U7	-07	65.1(6)	04	-U8	-08	173.2(7)
05	-U7	-019	109.6(6)	04	-U8	-016	68.5(6)
05	-U7	-044	175.2(6)	04	-U8	-019	114.2(6)
05	-U7	-051	140.2(5)	04	-U8	-049	92.5(6)
05	-U7	-052	88.9(6)	04	-U8	-068	85.7(7)
05	-U7	-076	91.5(6)	04	-U8	-078	78.6(6)
05	-U7	-078	73.7(6)	04	-U8	-084	138.0(7)
07	-U7	-019	174.6(6)	08	-U8	-016	105.8(6)
07	-U7	-044	110.2(6)	08	-U8	-019	71.9(6)
07	-U7	-051	75.1(5)	08	-U8	-049	90.7(6)
07	-U7	-052	88.8(6)	08	-U8	-068	91.0(7)
07	-U7	-076	92.2(6)	08	-U8	-078	107.4(7)
07	-U7	-078	138.8(6)	08	-U8	-084	35.9(7)
019	-U7	-044	75.2(6)	016	-U8	-019	172.3(5)
019	-U7	-051	110.3(5)	016	-U8	-049	84.6(6)
019	-U7	-052	90.8(6)	016	-U8	-068	92.9(7)
019	-U7	-076	88.2(6)	016	-U8	-078	146.7(6)
019	-U7	-078	35.9(6)	016	-U8	-084	69.9(6)
044	-U7	-051	35.1(5)	019	-U8	-049	88.1(7)
044	-U7	-052	91.2(7)	019	-U8	-068	94.5(7)
044	-U7	-076	88.5(7)	019	-U8	-078	35.7(6)
044	-U7	-078	111.1(6)	019	-U8	-084	107.8(6)
051	-U7	-052	91.7(7)	049	-U8	-068	177.2(9)
051	-U7	-076	88.5(7)	049	-U8	-078	91.8(6)
051	-U7	-078	146.1(5)	049	-U8	-084	89.4(6)
052	-U7	-076	179.1(6)	068	-U8	-078	89.9(7)
052	-U7	-078	90.3(7)	068	-U8	-084	90.6(6)
076	-U7	-078	89.0(7)	078	-U8	-084	143.3(7)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O9	-U9	-O13	179.1(7)	O10	-U10	-O21	66.2(6)
O9	-U9	-O14	112.0(6)	O10	-U10	-O23	174.9(5)
O9	-U9	-O24	69.5(6)	O10	-U10	-O30	88.1(6)
O9	-U9	-O38	105.7(6)	O10	-U10	-O62	138.0(5)
O9	-U9	-O59	36.2(6)	O10	-U10	-O90	91.2(7)
O9	-U9	-O61	89.6(6)	O10	-U10	-O45_d	73.5(5)
O9	-U9	-O80	91.6(6)	O10	-U10	-O104_d	110.7(6)
O13	-U9	-O14	67.3(6)	O21	-U10	-O23	109.2(6)
O13	-U9	-O24	111.2(6)	O21	-U10	-O30	90.2(6)
O13	-U9	-O38	75.1(6)	O21	-U10	-O62	71.9(6)
O13	-U9	-O59	143.1(7)	O21	-U10	-O90	88.4(6)
O13	-U9	-O61	90.9(6)	O21	-U10	-O45_d	139.6(6)
O13	-U9	-O80	87.9(6)	O21	-U10	-O104_d	176.9(7)
O14	-U9	-O24	178.0(5)	O23	-U10	-O30	89.7(7)
O14	-U9	-O38	142.3(5)	O23	-U10	-O62	37.3(5)
O14	-U9	-O59	75.8(6)	O23	-U10	-O90	91.0(7)
O14	-U9	-O61	91.3(7)	O23	-U10	-O45_d	111.2(6)
O14	-U9	-O80	86.9(7)	O23	-U10	-O104_d	73.9(6)
O24	-U9	-O38	36.2(5)	O30	-U10	-O62	90.0(7)
O24	-U9	-O59	105.7(6)	O30	-U10	-O90	178.6(6)
O24	-U9	-O61	90.1(7)	O30	-U10	-O45_d	90.4(6)
O24	-U9	-O80	91.8(7)	O30	-U10	-O104_d	90.3(6)
O38	-U9	-O59	141.8(6)	O62	-U10	-O90	89.7(7)
O38	-U9	-O61	90.3(7)	O45_d	-U10	-O62	148.5(5)
O38	-U9	-O80	90.9(7)	O62	-U10	-O104_d	111.2(6)
O59	-U9	-O61	90.4(6)	O45_d	-U10	-O90	90.5(7)
O59	-U9	-O80	89.6(6)	O90	-U10	-O104_d	91.1(6)
O61	-U9	-O80	178.1(8)	O45_d	-U10	-O104_d	37.3(6)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O17	-U11	-O18	67.3(5)	O20	-U12	-O24	71.2(5)
O17	-U11	-O42	176.6(7)	O20	-U12	-O33	108.7(5)
O17	-U11	-O64	86.5(6)	O20	-U12	-O38	107.0(5)
O17	-U11	-O69	87.4(6)	O20	-U12	-O43	179.3(5)
O17	-U11	-O77	143.2(5)	O20	-U12	-O58	91.6(7)
O17	-U11	-O37_b	110.5(5)	O20	-U12	-O79	35.1(5)
O17	-U11	-O100_b	74.8(5)	O20	-U12	-O110	90.9(7)
O18	-U11	-O42	111.2(6)	O24	-U12	-O33	179.9(8)
O18	-U11	-O64	84.8(7)	O24	-U12	-O38	35.7(5)
O18	-U11	-O69	91.9(7)	O24	-U12	-O43	109.4(5)
O18	-U11	-O77	76.2(5)	O24	-U12	-O58	92.0(7)
O18	-U11	-O37_b	176.3(7)	O24	-U12	-O79	106.3(6)
O18	-U11	-O100_b	141.8(5)	O24	-U12	-O110	89.9(7)
O42	-U11	-O64	96.5(7)	O33	-U12	-O38	144.4(5)
O42	-U11	-O69	89.6(7)	O33	-U12	-O43	70.7(5)
O42	-U11	-O77	35.1(5)	O33	-U12	-O58	88.0(7)
O37_b	-U11	-O42	71.2(6)	O33	-U12	-O79	73.6(5)
O42	-U11	-O100_b	106.9(5)	O33	-U12	-O110	90.1(7)
O64	-U11	-O69	173.8(6)	O38	-U12	-O43	73.7(5)
O64	-U11	-O77	95.0(7)	O38	-U12	-O58	90.6(6)
O37_b	-U11	-O64	92.1(7)	O38	-U12	-O79	142.0(5)
O64	-U11	-O100_b	87.8(7)	O38	-U12	-O110	89.7(7)
O69	-U11	-O77	89.3(7)	O43	-U12	-O58	88.2(7)
O37_b	-U11	-O69	91.0(7)	O43	-U12	-O79	144.3(5)
O69	-U11	-O100_b	91.6(7)	O43	-U12	-O110	89.3(7)
O37_b	-U11	-O77	106.2(5)	O58	-U12	-O79	91.0(7)
O77	-U11	-O100_b	141.9(5)	O58	-U12	-O110	177.3(7)
O37_b	-U11	-O100_b	35.7(5)	O79	-U12	-O110	90.4(7)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O10	-U13	-O12	176.5(7)	O27	-U14	-O32	69.0(5)
O10	-U13	-O21	66.5(6)	O27	-U14	-O36	90.5(7)
O10	-U13	-O22	113.4(6)	O27	-U14	-O72	74.9(5)
O10	-U13	-O53	77.7(5)	O27	-U14	-O107	86.1(7)
O10	-U13	-O54	88.6(6)	O27	-U14	-O109	108.6(6)
O10	-U13	-O65	142.3(6)	O27	-U14	-O42_a	177.0(6)
O10	-U13	-O70	88.3(6)	O27	-U14	-O77_a	142.3(5)
O12	-U13	-O21	110.3(6)	O32	-U14	-O36	88.8(6)
O12	-U13	-O22	69.9(6)	O32	-U14	-O72	143.8(6)
O12	-U13	-O53	105.5(6)	O32	-U14	-O107	87.9(6)
O12	-U13	-O54	90.1(6)	O32	-U14	-O109	177.1(5)
O12	-U13	-O65	34.5(6)	O32	-U14	-O42_a	108.7(6)
O12	-U13	-O70	93.0(6)	O32	-U14	-O77_a	73.3(5)
O21	-U13	-O22	179.4(4)	O36	-U14	-O72	88.8(7)
O21	-U13	-O53	144.2(5)	O36	-U14	-O107	175.9(7)
O21	-U13	-O54	87.1(6)	O36	-U14	-O109	92.9(6)
O21	-U13	-O65	75.8(6)	O36	-U14	-O42_a	91.4(7)
O21	-U13	-O70	92.0(6)	O36	-U14	-O77_a	90.5(7)
O22	-U13	-O53	35.7(5)	O72	-U14	-O107	92.4(7)
O22	-U13	-O54	92.3(6)	O72	-U14	-O109	34.0(6)
O22	-U13	-O65	104.3(6)	O42_a	-U14	-O72	107.5(6)
O22	-U13	-O70	88.6(6)	O72	-U14	-O77_a	142.8(6)
O53	-U13	-O54	90.8(7)	O107	-U14	-O109	90.3(7)
O53	-U13	-O65	140.0(5)	O42_a	-U14	-O107	91.9(7)
O53	-U13	-O70	88.1(7)	O77_a	-U14	-O107	90.9(7)
O54	-U13	-O65	89.5(7)	O42_a	-U14	-O109	73.7(6)
O54	-U13	-O70	176.9(7)	O77_a	-U14	-O109	109.0(6)
O65	-U13	-O70	93.2(7)	O42_a	-U14	-O77_a	35.3(6)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O22	-U15	-O33	108.4(5)	O5	-U16	-O7	65.8(6)
O22	-U15	-O43	178.2(5)	O5	-U16	-O15	110.8(6)
O22	-U15	-O53	35.6(5)	O5	-U16	-O28	178.6(7)
O22	-U15	-O86	72.1(5)	O5	-U16	-O35	87.5(6)
O22	-U15	-O89	89.2(7)	O5	-U16	-O57	74.1(6)
O22	-U15	-O96	106.1(5)	O5	-U16	-O101	144.1(6)
O22	-U15	-O105	90.6(6)	O5	-U16	-O102	89.5(6)
O33	-U15	-O43	70.3(5)	O7	-U16	-O15	176.5(6)
O33	-U15	-O53	72.8(5)	O7	-U16	-O28	112.9(6)
O33	-U15	-O86	179.4(6)	O7	-U16	-O35	87.3(7)
O33	-U15	-O89	89.6(7)	O7	-U16	-O57	140.0(5)
O33	-U15	-O96	145.2(5)	O7	-U16	-O101	78.3(6)
O33	-U15	-O105	88.4(7)	O7	-U16	-O102	91.6(7)
O43	-U15	-O53	143.0(5)	O15	-U16	-O28	70.5(6)
O43	-U15	-O86	109.2(5)	O15	-U16	-O35	91.8(7)
O43	-U15	-O89	92.2(7)	O15	-U16	-O57	36.7(5)
O43	-U15	-O96	75.0(6)	O15	-U16	-O101	105.1(6)
O43	-U15	-O105	88.0(7)	O15	-U16	-O102	89.2(7)
O53	-U15	-O86	107.7(5)	O28	-U16	-O35	93.1(6)
O53	-U15	-O89	90.0(7)	O28	-U16	-O57	107.2(6)
O53	-U15	-O96	141.5(6)	O28	-U16	-O101	34.6(6)
O53	-U15	-O105	88.5(6)	O28	-U16	-O102	89.9(6)
O86	-U15	-O89	90.1(7)	O35	-U16	-O57	90.0(7)
O86	-U15	-O96	34.3(5)	O35	-U16	-O101	91.0(7)
O86	-U15	-O105	92.0(7)	O35	-U16	-O102	176.9(7)
O89	-U15	-O96	94.7(7)	O57	-U16	-O101	141.7(6)
O89	-U15	-O105	177.7(7)	O57	-U16	-O102	89.0(8)
O96	-U15	-O105	87.6(7)	O101	-U16	-O102	91.6(7)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O26	-U17	-O34	177.6(5)	O12	-U18	-O34	179.2(5)
O26	-U17	-O47	110.6(6)	O12	-U18	-O47	110.0(6)
O26	-U17	-O55	35.8(6)	O12	-U18	-O65	34.0(6)
O26	-U17	-O72	107.6(6)	O12	-U18	-O66	91.8(7)
O26	-U17	-O83	91.8(6)	O12	-U18	-O75	89.1(7)
O26	-U17	-O87	89.9(6)	O12	-U18	-O98	106.3(7)
O26	-U17	-O109	73.2(6)	O12	-U18	-O103	71.7(6)
O34	-U17	-O47	67.6(6)	O34	-U18	-O47	69.5(6)
O34	-U17	-O55	142.4(6)	O34	-U18	-O65	145.5(6)
O34	-U17	-O72	74.3(7)	O34	-U18	-O66	88.8(7)
O34	-U17	-O83	89.6(7)	O34	-U18	-O75	90.3(7)
O34	-U17	-O87	88.7(7)	O34	-U18	-O98	74.2(7)
O34	-U17	-O109	108.6(6)	O34	-U18	-O103	108.8(6)
O47	-U17	-O55	74.8(6)	O47	-U18	-O65	76.0(7)
O47	-U17	-O72	141.8(6)	O47	-U18	-O66	89.0(6)
O47	-U17	-O83	85.5(7)	O47	-U18	-O75	89.3(7)
O47	-U17	-O87	91.0(7)	O47	-U18	-O98	143.6(7)
O47	-U17	-O109	176.3(6)	O47	-U18	-O103	177.2(5)
O55	-U17	-O72	143.3(7)	O65	-U18	-O66	92.3(6)
O55	-U17	-O83	89.0(6)	O65	-U18	-O75	87.6(6)
O55	-U17	-O87	90.5(6)	O65	-U18	-O98	140.1(7)
O55	-U17	-O109	109.0(6)	O65	-U18	-O103	105.7(6)
O72	-U17	-O83	91.2(6)	O66	-U18	-O75	178.2(7)
O72	-U17	-O87	91.2(6)	O66	-U18	-O98	92.5(6)
O72	-U17	-O109	34.5(6)	O66	-U18	-O103	88.8(6)
O83	-U17	-O87	176.5(8)	O75	-U18	-O98	88.7(6)
O83	-U17	-O109	94.4(7)	O75	-U18	-O103	92.9(7)
O87	-U17	-O109	89.1(7)	O98	-U18	-O103	34.9(7)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O13	-U19	-O14	66.3(6)	O27	-U20	-O28	176.8(7)
O13	-U19	-O15	177.3(5)	O27	-U20	-O32	68.1(5)
O13	-U19	-O39	90.9(7)	O27	-U20	-O40	88.3(6)
O13	-U19	-O57	140.9(5)	O27	-U20	-O73	90.7(6)
O13	-U19	-O63	88.0(7)	O27	-U20	-O74	74.6(5)
O13	-U19	-O97	111.6(6)	O27	-U20	-O101	143.5(6)
O13	-U19	-O99	76.6(6)	O27	-U20	-O106	109.5(5)
O14	-U19	-O15	111.2(6)	O28	-U20	-O32	110.0(5)
O14	-U19	-O39	88.2(6)	O28	-U20	-O40	89.1(6)
O14	-U19	-O57	74.8(7)	O28	-U20	-O73	91.8(6)
O14	-U19	-O63	89.4(6)	O28	-U20	-O74	107.3(6)
O14	-U19	-O97	177.6(7)	O28	-U20	-O101	34.8(6)
O14	-U19	-O99	142.9(7)	O28	-U20	-O106	72.3(5)
O15	-U19	-O39	90.1(7)	O32	-U20	-O40	89.1(7)
O15	-U19	-O57	36.6(6)	O32	-U20	-O73	88.3(7)
O15	-U19	-O63	90.9(7)	O32	-U20	-O74	142.7(5)
O15	-U19	-O97	70.9(6)	O32	-U20	-O101	75.4(6)
O15	-U19	-O99	105.9(6)	O32	-U20	-O106	177.2(5)
O39	-U19	-O57	91.4(7)	O40	-U20	-O73	177.4(8)
O39	-U19	-O63	177.6(7)	O40	-U20	-O74	91.6(6)
O39	-U19	-O97	90.7(6)	O40	-U20	-O101	91.6(6)
O39	-U19	-O99	91.9(6)	O40	-U20	-O106	89.5(7)
O57	-U19	-O63	88.0(7)	O73	-U20	-O74	90.5(6)
O57	-U19	-O97	107.5(7)	O73	-U20	-O101	87.8(6)
O57	-U19	-O99	142.3(6)	O73	-U20	-O106	93.2(7)
O63	-U19	-O97	91.7(6)	O74	-U20	-O101	141.8(6)
O63	-U19	-O99	90.0(6)	O74	-U20	-O106	35.0(5)
O97	-U19	-O99	35.0(7)	O101	-U20	-O106	107.0(6)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

O29	-U21	-085	87.2(5)	O29	-U22	-074	143.6(5)
O29	-U21	-086	110.7(6)	O29	-U22	-088	88.4(7)
O29	-U21	-094	88.7(6)	O29	-U22	-093	88.1(8)
O29	-U21	-095	68.2(6)	O29	-U22	-095	67.9(6)
O29	-U21	-096	75.1(6)	O29	-U22	-097	111.0(6)
O29	-U21	-098	144.9(7)	O29	-U22	-099	75.2(6)
O29	-U21	-0103	178.7(6)	O29	-U22	-0106	177.9(5)
O85	-U21	-086	94.7(7)	O74	-U22	-088	90.3(7)
O85	-U21	-094	175.5(6)	O74	-U22	-093	91.0(8)
O85	-U21	-095	87.7(7)	O74	-U22	-095	75.7(6)
O85	-U21	-096	90.1(7)	O74	-U22	-097	105.4(6)
O85	-U21	-098	89.8(6)	O74	-U22	-099	141.2(6)
O85	-U21	-0103	94.1(6)	O74	-U22	-0106	35.9(5)
O86	-U21	-094	88.4(7)	O88	-U22	-093	175.7(8)
O86	-U21	-095	177.4(6)	O88	-U22	-095	90.9(6)
O86	-U21	-096	35.7(6)	O88	-U22	-097	91.3(6)
O86	-U21	-098	104.5(6)	O88	-U22	-099	90.4(6)
O86	-U21	-0103	69.0(6)	O88	-U22	-0106	93.6(7)
O94	-U21	-095	89.2(7)	O93	-U22	-095	85.4(7)
O94	-U21	-096	90.5(8)	O93	-U22	-097	92.4(7)
O94	-U21	-098	92.6(7)	O93	-U22	-099	91.2(7)
O94	-U21	-0103	90.1(6)	O93	-U22	-0106	89.9(8)
O95	-U21	-096	143.4(6)	O95	-U22	-097	177.6(7)
O95	-U21	-098	76.7(6)	O95	-U22	-099	143.1(7)
O95	-U21	-0103	112.0(6)	O95	-U22	-0106	111.3(6)
O96	-U21	-098	139.9(6)	O97	-U22	-099	35.8(7)
O96	-U21	-0103	104.6(6)	O97	-U22	-0106	69.7(6)
O98	-U21	-0103	35.5(7)	O99	-U22	-0106	105.4(6)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

U4	-O1	-U6	108.0(6)	U7	-O19	-U8	127.0(7)
U3	-O2	-U5	109.0(7)	U7	-O19	-O78	70.9(9)
U4	-O3	-U6	106.7(6)	U8	-O19	-O78	72.6(11)
U1	-O4	-U8	109.9(6)	U12	-O20	-O79	75.4(9)
U7	-O5	-U16	110.6(7)	U6_d	-O20	-U12	127.1(8)
U6	-O6	-O48	75.7(8)	U6_d	-O20	-O79	77.2(10)
U1_d	-O6	-U6	123.3(8)	U10	-O21	-U13	111.0(7)
U1_d	-O6	-O48	72.9(10)	U13	-O22	-U15	124.3(7)
U7	-O7	-U16	114.0(8)	U13	-O22	-O53	75.1(9)
U8	-O8	-O84	73.5(10)	U15	-O22	-O53	74.3(8)
U5_c	-O8	-U8	120.8(8)	U5	-O23	-U10	126.0(7)
U5_c	-O8	-O84	68.8(9)	U5	-O23	-O62	72.5(11)
U1	-O9	-U9	124.4(8)	U10	-O23	-O62	71.4(10)
U1	-O9	-O59	74.3(9)	U9	-O24	-U12	122.6(8)
U9	-O9	-O59	73.1(8)	U9	-O24	-O38	74.1(11)
U10	-O10	-U13	112.4(8)	U12	-O24	-O38	73.8(8)
U3	-O11	-U5	109.0(6)	U2	-O25	-U4	121.4(9)
U13	-O12	-U18	128.4(8)	U2	-O25	-O108	71.6(9)
U13	-O12	-O65	75.1(10)	U4	-O25	-O108	73.7(11)
U18	-O12	-O65	75.2(12)	U3	-O26	-U17	123.3(8)
U9	-O13	-U19	110.9(7)	U3	-O26	-O55	74.1(8)
U9	-O14	-U19	111.1(6)	U17	-O26	-O55	73.5(9)
U16	-O15	-U19	124.2(7)	U14	-O27	-U20	107.6(6)
U16	-O15	-O57	71.9(10)	U16	-O28	-U20	123.7(6)
U19	-O15	-O57	75.9(11)	U16	-O28	-O101	72.9(9)
U1	-O16	-U8	107.9(6)	U20	-O28	-O101	75.5(8)
U2	-O17	-U11	109.1(5)	U21	-O29	-U22	107.9(7)
U2	-O18	-U11	111.6(7)	U14	-O32	-U20	108.3(7)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

U12	-033	-U15	108.0(6)	U3	-055	-U17	118.8(6)
U17	-034	-U18	107.0(6)	U3	-055	-026	69.1(8)
U3	-037	-O100	73.7(11)	U17	-055	-026	70.7(8)
U3	-037	-U11_a	124.4(8)	U16	-057	-U19	119.0(6)
U11_a	-037	-O100	74.8(8)	U16	-057	-015	71.5(11)
U9	-038	-U12	118.3(6)	U19	-057	-015	67.6(10)
U9	-038	-024	69.7(10)	U1	-059	-U9	120.6(6)
U12	-038	-024	70.5(8)	U1	-059	-09	70.3(8)
U11	-042	-077	75.3(9)	U9	-059	-09	70.7(8)
U11	-042	-U14_b	124.8(8)	U5	-062	-U10	124.9(6)
U14_b	-042	-077	75.1(10)	U5	-062	-023	71.0(10)
U12	-043	-U15	106.2(6)	U10	-062	-023	71.3(10)
U7	-044	-051	71.9(10)	U13	-065	-U18	123.0(7)
U2_a	-044	-U7	127.1(7)	U13	-065	-012	70.4(11)
U2_a	-044	-051	72.1(8)	U18	-065	-012	70.8(11)
U4	-045	-O104	73.5(8)	U14	-072	-U17	118.5(7)
U4	-045	-U10_d	128.0(8)	U14	-072	-O109	69.5(10)
U10_d	-045	-O104	72.2(10)	U17	-072	-O109	71.9(10)
U17	-047	-U18	109.4(6)	U20	-074	-U22	120.7(6)
U6	-048	-06	68.4(8)	U20	-074	-O106	73.3(10)
U1_d	-048	-U6	118.4(6)	U22	-074	-O106	69.3(11)
U1_d	-048	-06	71.5(9)	U11	-077	-042	69.7(9)
U7	-051	-044	73.0(11)	U11	-077	-U14_b	118.5(8)
U2_a	-051	-U7	128.4(8)	U14_b	-077	-042	69.5(10)
U2_a	-051	-044	73.0(8)	U7	-078	-U8	128.0(7)
U13	-053	-U15	118.5(7)	U7	-078	-019	73.2(10)
U13	-053	-022	69.2(10)	U8	-078	-019	71.8(10)
U15	-053	-022	70.1(8)	U12	-079	-020	69.5(9)

Table S20 - Bond Angles (Degrees) (continued)
For U44a

U6_d	-079	-U12	118.8(8)	U3	-O100	-O37	69.4(10)
U6_d	-079	-O20	68.7(9)	U3	-O100	-U11_a	118.8(7)
U8	-084	-O8	70.6(9)	U11_a	-O100	-O37	69.5(8)
U5_c	-084	-U8	122.8(7)	U16	-O101	-U20	120.2(9)
U5_c	-084	-O8	75.3(9)	U16	-O101	-O28	72.5(10)
U15	-086	-U21	124.1(7)	U20	-O101	-O28	69.7(9)
U15	-086	-O96	73.9(10)	U18	-O103	-U21	122.6(7)
U21	-086	-O96	70.5(11)	U18	-O103	-O98	74.2(10)
U21	-095	-U22	107.8(7)	U21	-O103	-O98	71.3(9)
U15	-096	-U21	124.8(8)	U4	-O104	-O45	70.1(8)
U15	-096	-O86	71.8(10)	U4	-O104	-U10_d	124.7(7)
U21	-096	-O86	73.9(12)	U10_d	-O104	-O45	70.5(8)
U19	-097	-U22	124.1(7)	U20	-O106	-U22	123.0(7)
U19	-097	-O99	76.5(9)	U20	-O106	-O74	71.7(10)
U22	-097	-O99	72.3(8)	U22	-O106	-O74	74.8(11)
U18	-098	-U21	121.8(8)	U2	-O108	-U4	121.3(8)
U18	-098	-O103	70.9(9)	U2	-O108	-O25	73.1(9)
U21	-098	-O103	73.2(10)	U4	-O108	-O25	71.9(10)
U19	-099	-U22	119.3(8)	U14	-O109	-U17	123.3(9)
U19	-099	-O97	68.6(8)	U14	-O109	-O72	76.5(10)
U22	-099	-O97	71.9(10)	U17	-O109	-O72	73.7(12)

