

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for zn90. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Zn(1)	36(1)	61(1)	37(1)	1(1)	4(1)	8(1)
Zn(2)	20(1)	55(1)	29(1)	0	1(1)	0
O(1)	56(3)	80(3)	40(2)	17(2)	7(2)	23(2)
O(2)	57(3)	74(3)	50(2)	13(2)	3(2)	19(2)
O(3)	47(2)	90(3)	47(2)	9(2)	2(2)	-2(2)
O(4)	43(2)	104(4)	51(2)	30(2)	-5(2)	-25(2)
O(5)	38(2)	121(5)	77(3)	-1(3)	-14(2)	10(3)
O(6)	42(4)	62(5)	110(6)	20(5)	-35(4)	-16(4)
O(7)	34(3)	78(5)	52(3)	0	12(3)	0
O(8)	19(2)	51(3)	37(3)	0	0(2)	0
C(1)	36(3)	87(5)	37(3)	13(3)	2(3)	-4(3)
C(2)	33(3)	62(4)	56(4)	21(3)	2(3)	11(3)
C(3)	43(3)	88(5)	51(3)	24(3)	1(3)	22(3)
C(4)	32(3)	100(6)	58(4)	28(4)	1(3)	9(3)
C(5)	27(3)	93(5)	60(4)	37(4)	7(3)	1(3)
C(6)	55(4)	91(6)	79(5)	45(4)	14(4)	23(4)
C(7)	56(4)	97(6)	58(4)	30(4)	13(3)	4(4)
C(8)	43(3)	90(5)	54(4)	34(4)	1(3)	-2(3)
C(9)	35(3)	110(6)	71(4)	33(4)	-3(3)	-4(3)
C(10)	37(3)	111(6)	49(3)	29(4)	-2(3)	-10(3)
C(11)	46(4)	86(5)	63(4)	42(4)	2(3)	10(3)
C(12)	39(3)	108(6)	71(4)	42(4)	2(3)	22(4)
C(13)	28(3)	94(5)	68(4)	35(4)	2(3)	7(3)
C(14)	47(4)	102(6)	72(4)	36(4)	-7(3)	-22(4)
C(15)	48(4)	190(9)	48(4)	31(5)	1(3)	-44(5)
C(16)	50(4)	146(8)	52(4)	19(4)	3(3)	-29(4)
C(17)	40(3)	72(4)	58(4)	20(3)	3(3)	-22(3)
C(18)	54(4)	100(6)	51(4)	17(4)	-3(3)	-20(4)
C(19)	41(4)	118(6)	72(4)	42(4)	1(3)	-14(4)
C(20)	40(3)	79(5)	55(4)	-2(3)	0(3)	-14(3)
C(21)	54(5)	135(7)	61(4)	40(5)	-9(3)	37(5)
C(22)	67(5)	161(9)	116(7)	47(7)	13(5)	22(6)
C(23)	55(4)	103(6)	63(4)	33(4)	-6(3)	12(4)
C(24)	90(6)	117(8)	89(6)	23(6)	10(5)	3(6)
C(25)	72(6)	144(9)	113(7)	25(7)	-22(5)	21(6)
C(26)	37(4)	178(10)	110(7)	28(7)	-14(4)	23(5)
C(27)	100(6)	134(7)	105(6)	18(6)	-16(5)	49(6)
O(9)	98(10)	49(8)	42(6)	0	-1(7)	0
C(28)	101(14)	24(9)	41(9)	0	-16(10)	0
N(1)	51(8)	62(10)	36(7)	0	0(6)	0
C(29)	160(30)	89(17)	41(11)	0	17(14)	0
C(30)	86(15)	90(16)	51(11)	0	1(11)	0
O(10)	94(6)	177(10)	111(7)	0	-8(5)	0
O(11)	58(6)	143(11)	137(10)	58(9)	7(7)	0(7)
O(12)	200(30)	132(17)	90(14)	0	-18(14)	0

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for zn90.

	x	y	z	U(eq)
H(6)	342	5651	-333	107
H(7)	7034	2684	2406	82
H(3)	6095	3714	1878	73 (5)
H(4)	5987	4377	1163	73 (5)
H(6)	4280	5319	1915	73 (5)
H(7)	4440	4678	2645	73 (5)
H(9)	6176	5408	821	73 (5)
H(11)	4795	6259	-251	73 (5)
H(13)	3836	5360	989	73 (5)
H(15)	7036	6066	551	73 (5)
H(16)	8154	6368	111	73 (5)
H(18)	6932	6382	-1254	73 (5)
H(19)	5823	6055	-797	73 (5)
H(22)	3581	6733	-221	73 (5)
H(23)	2259	6845	-607	73 (5)
H(25)	1740	5165	-80	73 (5)
H(26)	2958	5060	292	73 (5)
H(28)	4262	2500	647	73 (5)
H(29A)	6017	2238	1666	73 (5)
H(29B)	6090	2924	1431	73 (5)
H(29C)	6208	2337	1053	73 (5)
H(30A)	4673	2730	1933	73 (5)
H(30B)	4389	2072	1714	73 (5)
H(30C)	4057	2697	1459	73 (5)
H(11A)	2440 (20)	4529 (16)	2447 (13)	22 (9)
H(11B)	3080 (20)	3884 (18)	2886 (15)	14 (10)
H(12A)	9520 (30)	7500	400 (20)	27 (13)
H(12B)	10060 (40)	7500	1100 (30)	34 (19)

