



Figure 16. Stereo view of unit cell contents of JFA01.

Table 5. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for JFA01 (CCDC 197024). U^{eq} is defined as the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U^{eq}
Br(1)	4290(1)	8079(1)	7556(1)	21(1)
O(1A)	11045(2)	9700(1)	4643(1)	23(1)
O(2A)	12094(2)	8675(1)	5443(1)	20(1)
O(3A)	13729(2)	10844(1)	8792(1)	32(1)
N(1A)	9773(2)	8481(1)	6688(1)	16(1)
N(2A)	10437(2)	9596(1)	5813(1)	16(1)
C(1A)	8489(3)	8759(2)	6989(1)	15(1)
C(2A)	7183(2)	8289(2)	7069(1)	16(1)
C(3A)	6082(3)	8706(2)	7418(1)	15(1)
C(4A)	6223(3)	9549(2)	7667(1)	17(1)
C(5A)	7542(3)	10004(2)	7562(1)	16(1)
C(6A)	8670(3)	9613(2)	7230(1)	15(1)
C(7A)	10220(3)	9943(2)	7069(1)	16(1)
C(8A)	10099(3)	10756(2)	6595(1)	18(1)
C(9A)	9604(3)	10422(2)	5808(1)	17(1)
C(10A)	10714(3)	9218(2)	6558(1)	15(1)
C(11A)	11392(3)	9998(2)	7770(1)	18(1)
C(12A)	11093(3)	10666(2)	8325(1)	25(1)
C(13A)	12299(3)	10626(2)	8997(1)	26(1)
C(14A)	9856(3)	7662(2)	6307(1)	20(1)
C(15A)	8885(3)	7614(2)	5563(1)	21(1)
C(16A)	8085(3)	6926(2)	5321(2)	20(1)
C(17A)	7203(3)	6809(2)	4593(1)	19(1)
C(18A)	7148(3)	7419(2)	4028(1)	21(1)
C(19A)	6281(3)	7286(2)	3356(1)	22(1)
C(20A)	5473(3)	6519(2)	3228(2)	27(1)
C(21A)	5522(3)	5906(2)	3783(2)	27(1)
C(22A)	6362(3)	6051(2)	4450(2)	22(1)
C(23A)	11184(3)	9358(2)	5245(1)	18(1)
C(24A)	12987(3)	8233(2)	4918(1)	23(1)
C(25A)	14125(4)	8850(2)	4664(2)	49(1)
C(26A)	11917(3)	7875(2)	4285(2)	41(1)
C(27A)	13755(4)	7523(2)	5389(2)	40(1)
Br(2)	10555(1)	3102(1)	7477(1)	22(1)
O(1B)	4125(2)	4801(1)	10400(1)	21(1)
O(2B)	2696(2)	3987(1)	9543(1)	19(1)
O(3B)	1307(2)	5642(1)	6120(1)	31(1)
N(1B)	5063(2)	3729(1)	8287(1)	16(1)
N(2B)	4519(2)	4817(1)	9198(1)	15(1)
C(1B)	6405(3)	3947(2)	8011(1)	15(1)
C(2B)	7642(3)	3425(2)	7927(1)	17(1)
C(3B)	8815(3)	3802(2)	7598(1)	16(1)
C(4B)	8803(3)	4646(2)	7356(1)	18(1)
C(5B)	7540(3)	5154(2)	7458(1)	18(1)
C(6B)	6367(3)	4815(2)	7792(1)	15(1)
C(7B)	4898(3)	5235(2)	7972(1)	16(1)

C(8B)	5227(3)	5985(2)	8516(1)	18(1)
C(9B)	5587(3)	5549(2)	9264(1)	18(1)
C(10B)	4212(3)	4506(2)	8432(1)	16(1)
C(11B)	3862(3)	5520(2)	7275(1)	19(1)
C(12B)	3430(3)	4809(2)	6728(1)	20(1)
C(13B)	2621(3)	5166(2)	6001(1)	26(1)
C(14B)	4911(3)	2923(2)	8674(1)	19(1)
C(15B)	5941(3)	2840(2)	9403(1)	21(1)
C(16B)	6704(3)	2133(2)	9618(1)	19(1)
C(17B)	7655(3)	1981(2)	10327(2)	19(1)
C(18B)	7799(3)	2574(2)	10910(1)	19(1)
C(19B)	8752(3)	2399(2)	11555(2)	23(1)
C(20B)	9544(3)	1636(2)	11644(2)	29(1)
C(21B)	9411(3)	1040(2)	11073(2)	28(1)
C(22B)	8478(3)	1217(2)	10427(2)	23(1)
C(23B)	3815(3)	4549(2)	9767(1)	17(1)
C(24B)	1873(3)	3506(2)	10079(1)	21(1)
C(25B)	975(3)	4129(2)	10506(2)	26(1)
C(26B)	2967(3)	2965(2)	10581(1)	29(1)
C(27B)	795(3)	2950(2)	9569(1)	30(1)

Table 6. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for JFA01 (CCDC 197024)

Br(1)-C(3A)	1.901(2)	C(19A)-H(19A)	0.9500
O(1A)-C(23A)	1.215(3)	C(20A)-C(21A)	1.386(4)
O(2A)-C(23A)	1.351(3)	C(20A)-H(20A)	0.9500
O(2A)-C(24A)	1.484(3)	C(21A)-C(22A)	1.365(4)
O(3A)-C(13A)	1.404(3)	C(21A)-H(21A)	0.9500
O(3A)-H(3A)	0.8400	C(22A)-H(22A)	0.9500
N(1A)-C(1A)	1.390(3)	C(24A)-C(25A)	1.502(4)
N(1A)-C(10A)	1.450(3)	C(24A)-C(26A)	1.506(4)
N(1A)-C(14A)	1.455(3)	C(24A)-C(27A)	1.506(4)
N(2A)-C(23A)	1.351(3)	C(25A)-H(25A)	0.9800
N(2A)-C(10A)	1.475(3)	C(25A)-H(25B)	0.9800
N(2A)-C(9A)	1.476(3)	C(25A)-H(25C)	0.9800
C(1A)-C(2A)	1.388(3)	C(26A)-H(26A)	0.9800
C(1A)-C(6A)	1.397(3)	C(26A)-H(26B)	0.9800
C(2A)-C(3A)	1.388(3)	C(26A)-H(26C)	0.9800
C(2A)-H(2A)	0.9500	C(27A)-H(27A)	0.9800
C(3A)-C(4A)	1.384(3)	C(27A)-H(27B)	0.9800
C(4A)-C(5A)	1.395(3)	C(27A)-H(27C)	0.9800
C(4A)-H(4A)	0.9500	Br(2)-C(3B)	1.916(2)
C(5A)-C(6A)	1.372(3)	O(1B)-C(23B)	1.221(3)
C(5A)-H(5A)	0.9500	O(2B)-C(23B)	1.342(3)
C(6A)-C(7A)	1.525(3)	O(2B)-C(24B)	1.491(3)
C(7A)-C(8A)	1.526(3)	O(3B)-C(13B)	1.415(3)
C(7A)-C(11A)	1.547(3)	O(3B)-H(3B)	0.8400
C(7A)-C(10A)	1.558(3)	N(1B)-C(1B)	1.388(3)
C(8A)-C(9A)	1.540(3)	N(1B)-C(14B)	1.451(3)
C(8A)-H(8A1)	0.9900	N(1B)-C(10B)	1.461(3)
C(8A)-H(8A2)	0.9900	N(2B)-C(23B)	1.343(3)
C(9A)-H(9A1)	0.9900	N(2B)-C(9B)	1.470(3)
C(9A)-H(9A2)	0.9900	N(2B)-C(10B)	1.475(3)
C(10A)-H(10A)	1.0000	C(1B)-C(2B)	1.384(3)
C(11A)-C(12A)	1.497(3)	C(1B)-C(6B)	1.402(3)
C(11A)-H(11A)	0.9900	C(2B)-C(3B)	1.390(3)
C(11A)-H(11B)	0.9900	C(2B)-H(2B)	0.9500
C(12A)-C(13A)	1.523(3)	C(3B)-C(4B)	1.381(3)
C(12A)-H(12A)	0.9900	C(4B)-C(5B)	1.397(3)
C(12A)-H(12B)	0.9900	C(4B)-H(4B)	0.9500
C(13A)-H(13A)	0.9900	C(5B)-C(6B)	1.372(3)
C(13A)-H(13B)	0.9900	C(5B)-H(5B)	0.9500
C(14A)-C(15A)	1.517(3)	C(6B)-C(7B)	1.525(3)
C(14A)-H(14A)	0.9900	C(7B)-C(8B)	1.533(3)
C(14A)-H(14B)	0.9900	C(7B)-C(11B)	1.538(3)
C(15A)-C(16A)	1.323(3)	C(7B)-C(10B)	1.575(3)
C(15A)-H(15A)	0.9500	C(8B)-C(9B)	1.524(3)
C(16A)-C(17A)	1.467(4)	C(8B)-H(8B1)	0.9900
C(16A)-H(16A)	0.9500	C(8B)-H(8B2)	0.9900
C(17A)-C(18A)	1.398(3)	C(9B)-H(9B1)	0.9900
C(17A)-C(22A)	1.396(3)	C(9B)-H(9B2)	0.9900
C(18A)-C(19A)	1.381(3)	C(10B)-H(10B)	1.0000
C(18A)-H(18A)	0.9500	C(11B)-C(12B)	1.505(3)
C(19A)-C(20A)	1.391(4)	C(11B)-H(11C)	0.9900

C(11B)-H(11D)	0.9900	C(3A)-C(4A)-C(5A)	118.3(2)
C(12B)-C(13B)	1.533(3)	C(3A)-C(4A)-H(4A)	120.9
C(12B)-H(12C)	0.9900	C(5A)-C(4A)-H(4A)	120.9
C(12B)-H(12D)	0.9900	C(6A)-C(5A)-C(4A)	120.2(2)
C(13B)-H(13C)	0.9900	C(6A)-C(5A)-H(5A)	119.9
C(13B)-H(13D)	0.9900	C(4A)-C(5A)-H(5A)	119.9
C(14B)-C(15B)	1.521(3)	C(5A)-C(6A)-C(1A)	119.9(2)
C(14B)-H(14C)	0.9900	C(5A)-C(6A)-C(7A)	131.1(2)
C(14B)-H(14D)	0.9900	C(1A)-C(6A)-C(7A)	109.0(2)
C(15B)-C(16B)	1.321(3)	C(6A)-C(7A)-C(8A)	112.8(2)
C(15B)-H(15B)	0.9500	C(6A)-C(7A)-C(11A)	112.4(2)
C(16B)-C(17B)	1.473(4)	C(8A)-C(7A)-C(11A)	114.7(2)
C(16B)-H(16B)	0.9500	C(6A)-C(7A)-C(10A)	101.64(19)
C(17B)-C(22B)	1.388(3)	C(8A)-C(7A)-C(10A)	104.99(19)
C(17B)-C(18B)	1.402(3)	C(11A)-C(7A)-C(10A)	109.2(2)
C(18B)-C(19B)	1.388(3)	C(7A)-C(8A)-C(9A)	104.16(19)
C(18B)-H(18B)	0.9500	C(7A)-C(8A)-H(8A1)	110.9
C(19B)-C(20B)	1.374(4)	C(9A)-C(8A)-H(8A1)	110.9
C(19B)-H(19B)	0.9500	C(7A)-C(8A)-H(8A2)	110.9
C(20B)-C(21B)	1.389(4)	C(9A)-C(8A)-H(8A2)	110.9
C(20B)-H(20B)	0.9500	H(8A1)-C(8A)-H(8A2)	108.9
C(21B)-C(22B)	1.381(4)	N(2A)-C(9A)-C(8A)	101.73(19)
C(21B)-H(21B)	0.9500	N(2A)-C(9A)-H(9A1)	111.4
C(22B)-H(22B)	0.9500	C(8A)-C(9A)-H(9A1)	111.4
C(24B)-C(26B)	1.502(3)	N(2A)-C(9A)-H(9A2)	111.4
C(24B)-C(27B)	1.516(3)	C(8A)-C(9A)-H(9A2)	111.4
C(24B)-C(25B)	1.525(3)	H(9A1)-C(9A)-H(9A2)	109.3
C(25B)-H(25D)	0.9800	N(1A)-C(10A)-N(2A)	115.61(19)
C(25B)-H(25E)	0.9800	N(1A)-C(10A)-C(7A)	104.97(18)
C(25B)-H(25F)	0.9800	N(2A)-C(10A)-C(7A)	104.02(19)
C(26B)-H(26D)	0.9800	N(1A)-C(10A)-H(10A)	110.6
C(26B)-H(26E)	0.9800	N(2A)-C(10A)-H(10A)	110.6
C(26B)-H(26F)	0.9800	C(7A)-C(10A)-H(10A)	110.6
C(27B)-H(27D)	0.9800	C(12A)-C(11A)-C(7A)	116.4(2)
C(27B)-H(27E)	0.9800	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.2
C(27B)-H(27F)	0.9800	C(7A)-C(11A)-H(11A)	108.2
		C(12A)-C(11A)-H(11B)	108.2
C(23A)-O(2A)-C(24A)	122.26(19)	C(7A)-C(11A)-H(11B)	108.2
C(13A)-O(3A)-H(3A)	109.5	H(11A)-C(11A)-H(11B)	107.3
C(1A)-N(1A)-C(10A)	109.57(19)	C(11A)-C(12A)-C(13A)	110.8(2)
C(1A)-N(1A)-C(14A)	123.6(2)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	109.5
C(10A)-N(1A)-C(14A)	122.91(19)	C(13A)-C(12A)-H(12A)	109.5
C(23A)-N(2A)-C(10A)	124.2(2)	C(11A)-C(12A)-H(12B)	109.5
C(23A)-N(2A)-C(9A)	121.6(2)	C(13A)-C(12A)-H(12B)	109.5
C(10A)-N(2A)-C(9A)	111.96(18)	H(12A)-C(12A)-H(12B)	108.1
C(2A)-C(1A)-N(1A)	127.6(2)	O(3A)-C(13A)-C(12A)	109.7(2)
C(2A)-C(1A)-C(6A)	121.8(2)	O(3A)-C(13A)-H(13A)	109.7
N(1A)-C(1A)-C(6A)	110.6(2)	C(12A)-C(13A)-H(13A)	109.7
C(1A)-C(2A)-C(3A)	116.4(2)	O(3A)-C(13A)-H(13B)	109.7
C(1A)-C(2A)-H(2A)	121.8	C(12A)-C(13A)-H(13B)	109.7
C(3A)-C(2A)-H(2A)	121.8	H(13A)-C(13A)-H(13B)	108.2
C(4A)-C(3A)-C(2A)	123.4(2)	N(1A)-C(14A)-C(15A)	114.6(2)
C(4A)-C(3A)-Br(1)	118.72(18)	N(1A)-C(14A)-H(14A)	108.6
C(2A)-C(3A)-Br(1)	117.85(18)	C(15A)-C(14A)-H(14A)	108.6

N(1A)-C(14A)-H(14B)	108.6	C(23B)-O(2B)-C(24B)	121.67(19)
C(15A)-C(14A)-H(14B)	108.6	C(13B)-O(3B)-H(3B)	109.5
H(14A)-C(14A)-H(14B)	107.6	C(1B)-N(1B)-C(14B)	121.5(2)
C(16A)-C(15A)-C(14A)	123.9(3)	C(1B)-N(1B)-C(10B)	110.43(19)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	118.0	C(14B)-N(1B)-C(10B)	122.60(18)
C(14A)-C(15A)-H(15A)	118.0	C(23B)-N(2B)-C(9B)	122.0(2)
C(15A)-C(16A)-C(17A)	127.2(3)	C(23B)-N(2B)-C(10B)	126.0(2)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	116.4	C(9B)-N(2B)-C(10B)	111.62(18)
C(17A)-C(16A)-H(16A)	116.4	C(2B)-C(1B)-N(1B)	128.5(2)
C(18A)-C(17A)-C(22A)	117.5(2)	C(2B)-C(1B)-C(6B)	121.3(2)
C(18A)-C(17A)-C(16A)	123.5(2)	N(1B)-C(1B)-C(6B)	110.2(2)
C(22A)-C(17A)-C(16A)	119.0(2)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	116.4(2)
C(19A)-C(18A)-C(17A)	121.5(2)	C(1B)-C(2B)-H(2B)	121.8
C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.2	C(3B)-C(2B)-H(2B)	121.8
C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.2	C(4B)-C(3B)-C(2B)	124.1(2)
C(18A)-C(19A)-C(20A)	119.4(3)	C(4B)-C(3B)-Br(2)	118.21(18)
C(18A)-C(19A)-H(19A)	120.3	C(2B)-C(3B)-Br(2)	117.67(18)
C(20A)-C(19A)-H(19A)	120.3	C(3B)-C(4B)-C(5B)	117.6(2)
C(21A)-C(20A)-C(19A)	119.7(3)	C(3B)-C(4B)-H(4B)	121.2
C(21A)-C(20A)-H(20A)	120.2	C(5B)-C(4B)-H(4B)	121.2
C(19A)-C(20A)-H(20A)	120.2	C(6B)-C(5B)-C(4B)	120.3(2)
C(22A)-C(21A)-C(20A)	120.4(3)	C(6B)-C(5B)-H(5B)	119.8
C(22A)-C(21A)-H(21A)	119.8	C(4B)-C(5B)-H(5B)	119.8
C(20A)-C(21A)-H(21A)	119.8	C(5B)-C(6B)-C(1B)	120.1(2)
C(21A)-C(22A)-C(17A)	121.5(3)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	130.1(2)
C(21A)-C(22A)-H(22A)	119.2	C(1B)-C(6B)-C(7B)	109.8(2)
C(17A)-C(22A)-H(22A)	119.2	C(6B)-C(7B)-C(8B)	111.5(2)
O(1A)-C(23A)-O(2A)	125.0(2)	C(6B)-C(7B)-C(11B)	112.1(2)
O(1A)-C(23A)-N(2A)	125.2(2)	C(8B)-C(7B)-C(11B)	111.46(19)
O(2A)-C(23A)-N(2A)	109.8(2)	C(6B)-C(7B)-C(10B)	101.80(19)
O(2A)-C(24A)-C(25A)	109.8(2)	C(8B)-C(7B)-C(10B)	104.52(19)
O(2A)-C(24A)-C(26A)	109.6(2)	C(11B)-C(7B)-C(10B)	114.8(2)
C(25A)-C(24A)-C(26A)	112.0(2)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	104.4(2)
O(2A)-C(24A)-C(27A)	101.76(19)	C(9B)-C(8B)-H(8B1)	110.9
C(25A)-C(24A)-C(27A)	111.8(2)	C(7B)-C(8B)-H(8B1)	110.9
C(26A)-C(24A)-C(27A)	111.4(3)	C(9B)-C(8B)-H(8B2)	110.9
C(24A)-C(25A)-H(25A)	109.5	C(7B)-C(8B)-H(8B2)	110.9
C(24A)-C(25A)-H(25B)	109.5	H(8B1)-C(8B)-H(8B2)	108.9
H(25A)-C(25A)-H(25B)	109.5	N(2B)-C(9B)-C(8B)	102.1(2)
C(24A)-C(25A)-H(25C)	109.5	N(2B)-C(9B)-H(9B1)	111.3
H(25A)-C(25A)-H(25C)	109.5	C(8B)-C(9B)-H(9B1)	111.3
H(25B)-C(25A)-H(25C)	109.5	N(2B)-C(9B)-H(9B2)	111.3
C(24A)-C(26A)-H(26A)	109.5	C(8B)-C(9B)-H(9B2)	111.3
C(24A)-C(26A)-H(26B)	109.5	H(9B1)-C(9B)-H(9B2)	109.2
H(26A)-C(26A)-H(26B)	109.5	N(1B)-C(10B)-N(2B)	113.86(19)
C(24A)-C(26A)-H(26C)	109.5	N(1B)-C(10B)-C(7B)	104.60(18)
H(26A)-C(26A)-H(26C)	109.5	N(2B)-C(10B)-C(7B)	103.70(19)
H(26B)-C(26A)-H(26C)	109.5	N(1B)-C(10B)-H(10B)	111.4
C(24A)-C(27A)-H(27A)	109.5	N(2B)-C(10B)-H(10B)	111.4
C(24A)-C(27A)-H(27B)	109.5	C(7B)-C(10B)-H(10B)	111.4
H(27A)-C(27A)-H(27B)	109.5	C(12B)-C(11B)-C(7B)	114.7(2)
C(24A)-C(27A)-H(27C)	109.5	C(12B)-C(11B)-H(11C)	108.6
H(27A)-C(27A)-H(27C)	109.5	C(7B)-C(11B)-H(11C)	108.6
H(27B)-C(27A)-H(27C)	109.5	C(12B)-C(11B)-H(11D)	108.6

C(7B)-C(11B)-H(11D)	108.6	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120.3
H(11C)-C(11B)-H(11D)	107.6	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120.3
C(11B)-C(12B)-C(13B)	111.4(2)	C(22B)-C(21B)-C(20B)	119.8(3)
C(11B)-C(12B)-H(12C)	109.3	C(22B)-C(21B)-H(21B)	120.1
C(13B)-C(12B)-H(12C)	109.3	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.1
C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.3	C(21B)-C(22B)-C(17B)	121.9(3)
C(13B)-C(12B)-H(12D)	109.3	C(21B)-C(22B)-H(22B)	119.1
H(12C)-C(12B)-H(12D)	108.0	C(17B)-C(22B)-H(22B)	119.1
O(3B)-C(13B)-C(12B)	110.9(2)	O(1B)-C(23B)-O(2B)	124.4(2)
O(3B)-C(13B)-H(13C)	109.5	O(1B)-C(23B)-N(2B)	124.5(2)
C(12B)-C(13B)-H(13C)	109.5	O(2B)-C(23B)-N(2B)	111.1(2)
O(3B)-C(13B)-H(13D)	109.5	O(2B)-C(24B)-C(26B)	110.5(2)
C(12B)-C(13B)-H(13D)	109.5	O(2B)-C(24B)-C(27B)	101.47(19)
H(13C)-C(13B)-H(13D)	108.1	C(26B)-C(24B)-C(27B)	111.4(2)
N(1B)-C(14B)-C(15B)	114.8(2)	O(2B)-C(24B)-C(25B)	110.5(2)
N(1B)-C(14B)-H(14C)	108.6	C(26B)-C(24B)-C(25B)	112.1(2)
C(15B)-C(14B)-H(14C)	108.6	C(27B)-C(24B)-C(25B)	110.4(2)
N(1B)-C(14B)-H(14D)	108.6	C(24B)-C(25B)-H(25D)	109.5
C(15B)-C(14B)-H(14D)	108.6	C(24B)-C(25B)-H(25E)	109.5
H(14C)-C(14B)-H(14D)	107.5	H(25D)-C(25B)-H(25E)	109.5
C(16B)-C(15B)-C(14B)	123.9(2)	C(24B)-C(25B)-H(25F)	109.5
C(16B)-C(15B)-H(15B)	118.0	H(25D)-C(25B)-H(25F)	109.5
C(14B)-C(15B)-H(15B)	118.0	H(25E)-C(25B)-H(25F)	109.5
C(15B)-C(16B)-C(17B)	127.5(3)	C(24B)-C(26B)-H(26D)	109.5
C(15B)-C(16B)-H(16B)	116.3	C(24B)-C(26B)-H(26E)	109.5
C(17B)-C(16B)-H(16B)	116.3	H(26D)-C(26B)-H(26E)	109.5
C(22B)-C(17B)-C(18B)	117.6(2)	C(24B)-C(26B)-H(26F)	109.5
C(22B)-C(17B)-C(16B)	118.9(2)	H(26D)-C(26B)-H(26F)	109.5
C(18B)-C(17B)-C(16B)	123.5(2)	H(26E)-C(26B)-H(26F)	109.5
C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.4(2)	C(24B)-C(27B)-H(27D)	109.5
C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.8	C(24B)-C(27B)-H(27E)	109.5
C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.8	H(27D)-C(27B)-H(27E)	109.5
C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.9(3)	C(24B)-C(27B)-H(27F)	109.5
C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.5	H(27D)-C(27B)-H(27F)	109.5
C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.5	H(27E)-C(27B)-H(27F)	109.5
C(19B)-C(20B)-C(21B)	119.3(3)		

Table 7. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for JFA01 (CCDC 197024). The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Br(1)	168(1)	227(1)	246(1)	57(2)	36(1)	-14(2)
O(1A)	318(11)	258(11)	131(10)	24(8)	46(8)	36(8)
O(2A)	210(10)	238(11)	159(10)	-13(8)	45(8)	79(8)
O(3A)	258(11)	334(13)	326(12)	73(9)	-82(9)	-69(9)
N(1A)	170(11)	142(11)	181(12)	-19(9)	51(10)	-32(9)
N(2A)	168(11)	182(11)	135(11)	9(9)	8(9)	19(9)
C(1A)	194(13)	174(14)	84(13)	-3(10)	12(11)	44(11)
C(2A)	199(12)	159(16)	123(12)	21(10)	18(10)	2(10)
C(3A)	134(13)	176(13)	151(14)	52(11)	28(10)	-17(10)
C(4A)	148(13)	237(14)	111(13)	39(11)	-3(10)	56(11)
C(5A)	194(14)	152(13)	135(14)	5(11)	-20(11)	38(11)
C(6A)	142(13)	211(14)	90(13)	-2(11)	-1(10)	-1(11)
C(7A)	162(13)	195(14)	134(13)	-27(11)	17(11)	-12(11)
C(8A)	208(14)	151(14)	184(14)	-21(11)	54(11)	-15(11)
C(9A)	183(14)	150(13)	185(14)	8(11)	34(11)	-7(11)
C(10A)	149(13)	190(14)	109(13)	-24(10)	-3(10)	14(11)
C(11A)	142(13)	215(15)	173(14)	-7(11)	18(11)	16(11)
C(12A)	232(15)	256(16)	247(16)	-36(12)	-21(12)	12(12)
C(13A)	279(16)	295(17)	181(15)	-22(12)	-49(12)	-2(13)
C(14A)	202(14)	163(14)	243(15)	-32(12)	46(12)	6(11)
C(15A)	209(14)	236(16)	192(14)	22(12)	39(11)	41(12)
C(16A)	211(15)	195(15)	208(15)	-13(11)	70(12)	13(11)
C(17A)	132(13)	249(15)	199(15)	-47(12)	32(11)	34(11)
C(18A)	188(14)	184(14)	260(16)	-35(12)	60(12)	9(11)
C(19A)	191(14)	232(15)	226(15)	9(12)	29(12)	11(12)
C(20A)	250(16)	329(18)	209(16)	-10(13)	-55(13)	-23(13)
C(21A)	228(15)	260(16)	306(17)	-52(13)	17(13)	-65(12)
C(22A)	234(15)	177(14)	272(16)	17(12)	84(12)	14(12)
C(23A)	146(13)	191(15)	194(15)	-20(11)	25(11)	-28(11)
C(24A)	278(14)	220(20)	224(13)	-16(13)	130(11)	78(13)
C(25A)	450(20)	311(19)	780(30)	-43(18)	390(20)	15(16)
C(26A)	522(19)	380(20)	311(17)	-136(14)	13(15)	97(15)
C(27A)	490(20)	385(19)	354(19)	4(15)	159(16)	246(16)
Br(2)	191(1)	237(1)	232(1)	-8(2)	51(1)	40(2)
O(1B)	242(10)	259(11)	126(10)	-9(8)	11(8)	-36(8)
O(2B)	198(10)	243(10)	140(9)	7(8)	45(8)	-73(8)
O(3B)	261(11)	318(12)	305(12)	-85(9)	-108(9)	109(9)
N(1B)	169(11)	129(11)	168(12)	26(9)	27(9)	-1(9)
N(2B)	146(11)	184(12)	107(11)	-12(9)	1(9)	-33(9)
C(1B)	146(13)	195(14)	110(13)	-31(10)	-7(10)	-22(11)
C(2B)	191(13)	164(13)	148(13)	-14(10)	7(11)	-16(11)
C(3B)	114(13)	229(15)	145(14)	-49(11)	25(10)	43(11)
C(4B)	172(13)	202(15)	168(14)	2(11)	37(11)	-30(11)
C(5B)	208(14)	156(14)	166(14)	-2(11)	11(11)	-24(11)
C(6B)	164(13)	179(14)	97(13)	14(10)	-14(10)	-9(10)
C(7B)	170(13)	169(14)	124(13)	37(10)	11(11)	-4(10)

C(8B)	189(14)	197(14)	160(14)	-2(11)	45(11)	3(11)
C(9B)	174(13)	192(14)	163(14)	0(11)	16(11)	-34(11)
C(10B)	131(13)	175(14)	160(14)	-10(11)	19(11)	3(11)
C(11B)	207(14)	204(15)	158(14)	-2(11)	-4(11)	-1(12)
C(12B)	185(14)	259(15)	166(14)	-21(11)	11(11)	30(12)
C(13B)	269(16)	305(17)	174(15)	-39(12)	-35(12)	38(13)
C(14B)	189(12)	182(17)	201(13)	5(11)	13(10)	-50(11)
C(15B)	237(14)	205(16)	200(14)	3(10)	56(11)	-31(11)
C(16B)	166(14)	218(15)	205(15)	-28(12)	46(11)	-54(12)
C(17B)	157(14)	194(15)	234(15)	18(11)	73(11)	-46(11)
C(18B)	168(14)	203(15)	221(15)	25(12)	66(11)	-5(11)
C(19B)	216(15)	223(15)	270(16)	-31(12)	64(12)	-42(12)
C(20B)	273(17)	327(18)	251(17)	61(13)	-42(13)	35(14)
C(21B)	300(17)	234(16)	302(17)	0(13)	20(14)	48(13)
C(22B)	242(15)	224(16)	231(15)	-41(12)	14(12)	-35(12)
C(23B)	149(13)	167(14)	188(15)	49(11)	4(11)	26(11)
C(24B)	192(13)	256(15)	188(14)	22(12)	46(11)	-50(12)
C(25B)	292(16)	256(16)	259(16)	25(12)	110(13)	-48(13)
C(26B)	313(14)	256(19)	308(15)	102(14)	128(12)	26(14)
C(27B)	339(15)	297(19)	292(14)	-4(14)	125(12)	-160(14)

Table 8. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for JFA01 (CCDC 197024).

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U^{iso}
H(3A)	14390	10496	8988	47
H(2A)	7051	7713	6895	19
H(4A)	5442	9811	7903	20
H(5A)	7659	10587	7722	20
H(8A1)	11095	11056	6625	21
H(8A2)	9331	11159	6751	21
H(9A1)	8486	10332	5717	21
H(9A2)	9916	10823	5433	21
H(10A)	11820	9078	6689	18
H(11A)	11441	9426	8014	21
H(11B)	12409	10112	7617	21
H(12A)	10072	10568	8479	30
H(12B)	11099	11246	8099	30
H(13A)	12031	11032	9378	31
H(13B)	12337	10036	9207	31
H(14A)	9535	7196	6624	24
H(14B)	10932	7553	6237	24
H(15A)	8850	8106	5252	25
H(16A)	8081	6458	5655	24
H(18A)	7720	7937	4109	25
H(19A)	6237	7716	2983	26
H(20A)	4891	6416	2764	32
H(21A)	4968	5383	3698	32
H(22A)	6376	5626	4825	27
H(25A)	13584	9311	4372	73
H(25B)	14786	8540	4361	73
H(25C)	14747	9100	5093	73
H(26A)	11243	7447	4469	61
H(26B)	12510	7601	3930	61
H(26C)	11304	8345	4042	61
H(27A)	14380	7775	5816	60
H(27B)	14406	7186	5100	60
H(27C)	12979	7146	5557	60
H(3B)	527	5394	5908	46
H(2B)	7688	2841	8085	20
H(4B)	9624	4874	7127	21
H(5B)	7493	5737	7296	21
H(8B1)	6106	6330	8397	22
H(8B2)	4327	6367	8507	22
H(9B1)	6660	5349	9347	21
H(9B2)	5393	5941	9669	21
H(10B)	3093	4431	8277	19
H(11C)	2917	5771	7424	23
H(11D)	4388	5980	7030	23
H(12C)	2749	4395	6938	25
H(12D)	4361	4494	6632	25
H(13C)	3330	5544	5770	31

H(13D)	2323	4683	5659	31
H(14C)	5137	2441	8350	23
H(14D)	3838	2861	8769	23
H(15B)	6040	3326	9721	25
H(16B)	6631	1668	9277	23
H(18B)	7242	3100	10862	23
H(19B)	8857	2814	11941	28
H(20B)	10175	1516	12092	35
H(21B)	9962	512	11126	34
H(22B)	8396	805	10040	28
H(25D)	1686	4480	10836	39
H(25E)	315	3800	10797	39
H(25F)	348	4506	10160	39
H(26D)	3505	2567	10286	43
H(26E)	2403	2634	10914	43
H(26F)	3709	3341	10870	43
H(27D)	86	3321	9256	45
H(27E)	218	2571	9862	45
H(27F)	1383	2599	9259	45

Table 9. Selected torsion angles [°] for JFA01 (CCDC 197024)

C(6A)-C(7A)-C(11A)-C(12A)	-68.1(3)	C(6B)-C(7B)-C(11B)-C(12B)	56.7(3)
C(7A)-C(11A)-C(12A)-C(13A)	177.9(2)	C(7B)-C(11B)-C(12B)-C(13B)	-170.8(2)
C(11A)-C(12A)-C(13A)-O(3A)	64.7(3)	C(11B)-C(12B)-C(13B)-O(3B)	-57.3(3)

Table 10. Hydrogen bonds for JFA01 (CCDC 197024) [\AA and $^\circ$].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	\angle (DHA)
O(3A)-H(3A)...O(1B)#1	0.84	1.94	2.772(2)	169.9
O(3B)-H(3B)...O(1A)#2	0.84	1.94	2.769(3)	170.8

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

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