



Figure S1. Disordered molecular geometry and complete atomic-labeling scheme for $3 \cdot \text{CS}_2$.

Table S1. Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $3 \cdot \text{CS}_2$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Re(1)	9761(1)	2500	5581(1)	31(1)
Re(2)	8341(1)	1287(1)	5626(1)	28(1)
C(400)	9882(11)	2500	4592(11)	47(5)
N(1)	9959(13)	2500	4019(10)	76(7)
C(401)	10250(2)	2500	3319(13)	134(16)
C(402)	9645	2500	2822	50
C(403)	9799	2026	2206	50
C(404)	9281	1926	1715	50
C(405)	8610	2298	1838	50
C(406)	8469	2848	2446	50
C(407)	8987	2922	2938	50
C(101)	10455(8)	1448(14)	5659(6)	46(4)
O(101)	10862(6)	836(10)	5709(6)	62(3)
C(201)	8263(7)	1153(11)	4661(8)	38(3)
O(201)	8220(6)	1102(9)	4099(6)	59(3)
C(202)	8575(8)	-114(14)	5720(7)	47(4)
O(202)	8724(8)	-982(10)	5776(6)	77(4)
C(203)	7387(8)	893(11)	5760(7)	39(3)
O(203)	6830(5)	641(9)	5827(5)	54(3)
C(1)	9521(6)	1935(10)	6628(5)	25(3)
C(2)	8860(6)	1386(9)	6671(5)	25(3)
C(3)	8216(5)	1934(9)	6698(6)	24(3)
C(4)	10485(6)	1954(10)	7460(6)	29(3)
C(5)	9998(6)	1427(9)	7082(6)	27(3)
C(6)	9660(6)	562(9)	7364(6)	29(3)
C(7)	8958(7)	551(8)	7131(6)	28(3)
C(8)	8432(7)	219(10)	7553(7)	37(3)
C(9)	7797(7)	744(10)	7578(6)	37(3)
C(10)	7707(6)	1621(10)	7181(6)	31(3)
C(11)	7377(9)	2500	7471(10)	39(5)
C(12)	10759(9)	2500	8532(9)	35(4)
C(13)	10644(6)	1608(11)	8125(6)	34(3)
C(14)	10337(6)	756(10)	8388(6)	33(3)
C(15)	9826(7)	227(10)	7997(6)	35(3)
C(16)	9290(8)	-125(10)	8437(7)	46(4)
C(17)	8607(8)	-113(10)	8218(7)	43(4)
C(18)	8058(8)	230(12)	8657(7)	46(4)
C(19)	7557(7)	770(12)	8268(7)	45(4)
C(20)	7239(7)	1614(14)	8530(7)	46(4)
C(21)	7136(9)	2500	8113(9)	35(4)
C(22)	10540(9)	2500	9200(9)	38(5)
C(23)	10203(7)	1589(11)	9473(6)	34(3)
C(24)	40110(7)	759(10)	9079(6)	36(3)
C(25)	9457(8)	215(11)	9107(7)	41(3)
C(26)	8941(8)	531(11)	9524(7)	42(4)

C(27)	8214(8)	532(14)	9298(7)	50(4)
C(28)	7890(7)	1429(15)	9581(7)	53(5)
C(29)	7408(7)	1926(14)	9205(7)	52(4)
C(30)	9650(7)	1950(11)	9918(6)	37(3)
C(31)	9037(8)	1423(12)	9947(6)	43(4)
C(32)	8375(7)	1974(13)	9969(6)	46(4)
C(500)	6795(15)	2500	3681(8)	79(8)
S(1)	7136(6)	2500	3008(4)	115(4)
S(2)	6490(4)	2500	4369(3)	78(2)

Table S2. Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3-CS₂

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Re(1)	22(1)	51(1)	21(1)	0	2(1)	0
Re(2)	25(1)	35(1)	22(1)	-5(1)	-3(1)	0(1)
C(400)	45(13)	60(15)	38(13)	0	6(10)	0
N(1)	92(16)	110(2)	24(11)	0	23(10)	0
C(401)	180(4)	190(4)	35(16)	0	10(2)	0
C(101)	33(8)	77(12)	27(8)	-16(7)	5(6)	1(8)
O(101)	48(7)	78(8)	61(7)	-11(6)	-2(5)	29(7)
C(201)	35(8)	45(9)	35(9)	-9(7)	-7(6)	3(6)
O(201)	70(8)	77(8)	31(6)	-10(6)	-11(5)	-5(6)
C(202)	53(9)	61(11)	27(8)	-11(7)	0(7)	3(8)
O(202)	116(12)	52(8)	63(8)	-14(6)	-8(8)	24(8)
C(203)	43(9)	42(8)	32(7)	-4(7)	-4(6)	-1(7)
O(203)	37(6)	78(8)	45(6)	-17(6)	2(5)	-19(6)
C(1)	21(6)	40(7)	14(6)	-9(5)	3(5)	0(5)
C(2)	34(7)	25(6)	17(6)	-6(5)	-3(5)	-5(5)
C(3)	18(6)	32(7)	21(6)	3(5)	-8(5)	-6(5)
C(4)	18(6)	40(7)	28(7)	0(6)	2(5)	5(5)
C(5)	22(6)	35(7)	25(7)	-4(6)	-1(5)	12(5)
C(6)	31(7)	24(6)	34(7)	-6(6)	-5(5)	8(5)
C(7)	42(7)	13(6)	30(7)	-2(5)	-3(6)	0(5)
C(8)	48(8)	30(7)	34(7)	7(6)	-10(6)	-9(6)
C(9)	38(8)	40(8)	31(7)	3(6)	-6(6)	-19(6)
C(10)	15(6)	47(8)	30(7)	-1(6)	-6(5)	-11(6)
C(11)	22(10)	57(13)	38(11)	0	2(8)	0
C(12)	28(10)	41(11)	35(11)	0	-13(8)	0
C(13)	27(7)	46(8)	29(7)	-6(6)	-13(6)	14(6)
C(14)	29(7)	31(7)	38(8)	3(6)	-10(6)	13(6)
C(15)	39(8)	30(7)	34(7)	1(6)	-3(6)	7(6)
C(16)	66(10)	26(7)	44(8)	13(7)	-12(8)	0(7)
C(17)	59(9)	31(7)	39(8)	7(6)	-9(7)	-20(7)
C(18)	50(9)	59(10)	30(8)	14(7)	-5(7)	-27(8)
C(19)	37(8)	58(10)	39(8)	20(8)	-9(7)	-27(7)
C(20)	25(7)	80(11)	33(8)	0(8)	5(6)	-15(7)
C(21)	23(9)	61(13)	20(10)	0	1(7)	0
C(22)	24(10)	65(14)	24(10)	0	-16(8)	0
C(23)	33(7)	44(8)	26(7)	7(6)	-13(6)	4(6)
C(24)	39(8)	39(8)	29(7)	15(6)	-15(6)	4(6)
C(25)	56(9)	39(8)	29(7)	14(7)	-12(7)	-2(7)
C(26)	63(10)	35(8)	29(7)	21(6)	-8(7)	-8(7)
C(27)	49(9)	69(11)	33(8)	16(8)	4(7)	-22(8)
C(28)	32(8)	104(14)	21(7)	18(8)	10(6)	-16(9)
C(29)	30(8)	97(12)	28(7)	2(8)	8(6)	-9(8)
C(30)	36(7)	53(8)	23(7)	5(6)	-13(6)	-2(7)
C(31)	52(9)	55(10)	20(7)	11(7)	-7(6)	-8(7)
C(32)	46(8)	79(10)	13(6)	8(7)	10(6)	-7(7)
C(500)	82(19)	65(18)	90(2)	0	21(17)	0
S(1)	158(9)	72(5)	114(7)	0	59(7)	0
S(2)	84(5)	75(5)	73(5)	0	17(4)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form : $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

Table S3. Interatomic Distances (Å) and Esd's for 3·CS₂

Re(1)-C(101)	1.94(2)	Re(1)-C(400)	2.00(2)
Re(1)-C(1)	2.27(1)	Re(1)-Re(2)	3.1858(8)
Re(1)-H(2)	1.7(1)	Re(2)-C(202)	1.91(2)
Re(2)-C(203)	1.94(2)	Re(2)-C(201)	1.95(2)
Re(2)-C(3)	2.32(1)	Re(2)-C(2)	2.33(1)
Re(2)-Re(2)#1	3.194(1)	Re(2)-H(1)	1.71(7)
Re(2)-H(2)	1.9(1)	C(400)-N(1)	1.16(3)
N(1)-C(401)	1.51(3)	C(401)-C(402)	1.54(4)
C(402)-C(407)	1.41	C(402)-C(403)	1.41
C(403)-C(404)	1.41	C(404)-C(405)	1.41
C(405)-C(406)	1.44	C(406)-C(407)	1.41
C(101)-O(101)	1.13(2)	C(201)-O(201)	1.13(2)
C(202)-O(202)	1.18(2)	C(203)-O(203)	1.14(2)
C(1)-C(5)	1.46(2)	C(1)-C(2)	1.48(2)
C(1)-C(1)#1	1.49(3)	C(2)-C(3)	1.44(2)
C(2)-C(7)	1.45(2)	C(3)-C(10)	1.44(2)
C(3)-C(3)#1	1.49(2)	C(4)-C(5)	1.40(2)
C(4)-C(4)#1	1.44(3)	C(4)-C(13)	1.44(2)
C(5)-C(6)	1.43(2)	C(6)-C(15)	1.38(2)
C(6)-C(7)	1.44(2)	C(7)-C(8)	1.40(2)
C(8)-C(9)	1.42(2)	C(8)-C(17)	1.44(2)
C(9)-C(10)	1.41(2)	C(9)-C(19)	1.46(2)
C(10)-C(11)	1.44(2)	C(11)-C(21)	1.37(3)
C(12)-C(22)	1.41(3)	C(12)-C(13)	1.45(2)
C(13)-C(14)	1.38(2)	C(14)-C(15)	1.44(2)
C(14)-C(24)	1.45(2)	C(15)-C(16)	1.44(2)
C(16)-C(17)	1.40(2)	C(16)-C(25)	1.45(2)
C(17)-C(18)	1.45(2)	C(18)-C(27)	1.38(2)
C(18)-C(19)	1.43(2)	C(19)-C(20)	1.37(2)
C(20)-C(21)	1.45(2)	C(20)-C(29)	1.45(2)
C(22)-C(23)	1.47(2)	C(23)-C(24)	1.36(2)
C(23)-C(30)	1.47(2)	C(24)-C(25)	1.46(2)
C(25)-C(26)	1.37(2)	C(26)-C(31)	1.46(2)
C(26)-C(27)	1.48(2)	C(27)-C(28)	1.45(2)
C(28)-C(29)	1.37(2)	C(28)-C(32)	1.42(2)
C(29)-C(29)#1	1.51(4)	C(30)-C(31)	1.38(2)
C(30)-C(30)#1	1.45(3)	C(31)-C(32)	1.47(2)
C(32)-C(32)#1	1.39(3)	C(500)-S(2)	1.501(8)
C(500)-S(1)	1.503(8)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 x, -y+1/2, z

Table S4. Interatomic Angles (deg) and Esd's for 3·CS₂

C(101)#1-Re(1)-C(101)	91.2(9)	C(101)-Re(1)-C(400)	89.9(6)
C(101)-Re(1)-C(1)#1	107.6(5)	C(400)-Re(1)-C(1)	160.1(3)
C(101)-Re(1)-C(1)	80.5(5)	C(101)#1-Re(1)-Re(2)	163.1(5)
C(1)#1-Re(1)-C(1)	38.2(6)	C(400)-Re(1)-Re(2)	97.4(5)
C(101)-Re(1)-Re(2)	103.9(5)	C(1)-Re(1)-Re(2)	68.5(3)
C(1)#1-Re(1)-Re(2)	87.8(3)	C(400)-Re(1)-Re(2)#1	97.4(5)
C(101)-Re(1)-Re(2)#1	163.1(5)	Re(2)-Re(1)-Re(2)#1	60.17(2)
C(1)-Re(1)-Re(2)#1	87.8(3)	C(202)-Re(2)-C(201)	91.7(6)
C(202)-Re(2)-C(203)	87.5(7)	C(202)-Re(2)-C(3)	106.7(5)
C(203)-Re(2)-C(201)	92.3(6)	C(201)-Re(2)-C(3)	160.5(5)
C(203)-Re(2)-C(3)	82.5(5)	C(203)-Re(2)-C(2)	107.6(5)
C(202)-Re(2)-C(2)	82.0(5)	C(3)-Re(2)-C(2)	36.2(4)
C(201)-Re(2)-C(2)	158.8(5)	C(203)-Re(2)-Re(1)	164.2(4)
C(202)-Re(2)-Re(1)	106.3(5)	C(3)-Re(2)-Re(1)	86.1(3)
C(201)-Re(2)-Re(1)	94.9(4)	C(202)-Re(2)-Re(2)#1	165.0(5)
C(2)-Re(2)-Re(1)	67.9(3)	C(201)-Re(2)-Re(2)#1	95.2(4)
C(203)-Re(2)-Re(2)#1	105.5(4)	C(2)-Re(2)-Re(2)#1	86.8(3)
C(3)-Re(2)-Re(2)#1	68.5(3)	N(1)-C(400)-Re(1)	179(2)
Re(1)-Re(2)-Re(2)#1	59.915(11)	N(1)-C(401)-C(402)	108(2)
C(400)-N(1)-C(401)	166(3)	C(407)-C(402)-C(401)	125.7(9)
C(407)-C(402)-C(403)	120.494(1)	C(404)-C(403)-C(402)	120
C(403)-C(402)-C(401)	113.9(9)	C(404)-C(405)-C(406)	120
C(403)-C(404)-C(405)	120	C(406)-C(407)-C(402)	120
C(407)-C(406)-C(405)	120	O(201)-C(201)-Re(2)	178.2(13)
O(101)-C(101)-Re(1)	179.4(11)	O(203)-C(203)-Re(2)	178.1(13)
O(202)-C(202)-Re(2)	179.6(12)	C(5)-C(1)-C(1)#1	117.3(7)
C(5)-C(1)-C(2)	106.8(10)	C(5)-C(1)-Re(1)	126.5(8)
C(2)-C(1)-C(1)#1	119.4(7)	C(1)#1-C(1)-Re(1)	70.9(3)
C(2)-C(1)-Re(1)	113.1(7)	C(3)-C(2)-C(1)	120.6(10)
C(3)-C(2)-C(7)	118.1(10)	C(3)-C(2)-Re(2)	71.8(6)
C(7)-C(2)-C(1)	107.2(10)	C(1)-C(2)-Re(2)	110.5(7)
C(7)-C(2)-Re(2)	126.0(8)	C(10)-C(3)-C(3)#1	106.6(7)
C(10)-C(3)-C(2)	118.3(11)	C(10)-C(3)-Re(2)	126.0(8)
C(2)-C(3)-C(3)#1	120.0(6)	C(3)#1-C(3)-Re(2)	111.5(3)
C(2)-C(3)-Re(2)	72.1(6)	C(5)-C(4)-C(13)	119.3(12)
C(5)-C(4)-C(4)#1	119.8(7)	C(4)-C(5)-C(6)	119.5(11)
C(4)#1-C(4)-C(13)	108.4(7)	C(6)-C(5)-C(1)	108.7(10)
C(4)-C(5)-C(1)	122.7(11)	C(15)-C(6)-C(7)	121.0(12)
C(15)-C(6)-C(5)	120.7(11)	C(8)-C(7)-C(6)	119.8(11)
C(5)-C(6)-C(7)	108.3(10)	C(6)-C(7)-C(2)	108.9(10)
C(8)-C(7)-C(2)	121.9(11)	C(7)-C(8)-C(17)	118.9(12)
C(7)-C(8)-C(9)	120.3(12)	C(10)-C(9)-C(8)	119.1(12)
C(9)-C(8)-C(17)	108.7(13)	C(8)-C(9)-C(19)	108.8(12)
C(10)-C(9)-C(19)	118.3(13)	C(9)-C(10)-C(11)	118.9(12)
C(9)-C(10)-C(3)	121.8(12)	C(21)-C(11)-C(10)#1	122.0(10)
C(3)-C(10)-C(11)	110.1(12)	C(10)#1-C(11)-C(10)	106.5(15)
C(21)-C(11)-C(10)	122.0(10)	C(22)-C(12)-C(13)#1	119.4(10)
C(22)-C(12)-C(13)	119.4(10)	C(14)-C(13)-C(4)	121.3(12)
C(13)-C(12)-C(13)#1	108.5(15)	C(4)-C(13)-C(12)	107.3(12)

C(14)-C(13)-C(12)	120.9(13)	C(13)-C(14)-C(24)	119.6(12)
C(13)-C(14)-C(15)	118.8(11)	C(6)-C(15)-C(16)	119.8(12)
C(15)-C(14)-C(24)	108.1(11)	C(16)-C(15)-C(14)	108.6(12)
C(6)-C(15)-C(14)	120.3(12)	C(17)-C(16)-C(25)	119.8(14)
C(17)-C(16)-C(15)	119.3(12)	C(16)-C(17)-C(8)	121.1(13)
C(15)-C(16)-C(25)	107.8(13)	C(8)-C(17)-C(18)	107.0(13)
C(16)-C(17)-C(18)	120.7(13)	C(27)-C(18)-C(17)	119.4(14)
C(27)-C(18)-C(19)	120.9(16)	C(20)-C(19)-C(18)	119.7(13)
C(19)-C(18)-C(17)	108.7(12)	C(18)-C(19)-C(9)	106.8(13)
C(20)-C(19)-C(9)	121.7(13)	C(19)-C(20)-C(29)	119.0(14)
C(19)-C(20)-C(21)	119.4(12)	C(11)-C(21)-C(20)#1	119.6(10)
C(21)-C(20)-C(29)	109.9(15)	C(20)#1-C(21)-C(20)	107.2(16)
C(11)-C(21)-C(20)	119.6(10)	C(12)-C(22)-C(23)	119.2(9)
C(12)-C(22)-C(23)#1	119.2(9)	C(24)-C(23)-C(22)	119.9(12)
C(23)#1-C(22)-C(23)	109.1(16)	C(22)-C(23)-C(30)	106.6(12)
C(24)-C(23)-C(30)	120.9(12)	C(23)-C(24)-C(25)	119.2(13)
C(23)-C(24)-C(14)	121.0(12)	C(26)-C(25)-C(16)	119.7(14)
C(14)-C(24)-C(25)	107.4(11)	C(16)-C(25)-C(24)	108.1(12)
C(26)-C(25)-C(24)	120.7(13)	C(25)-C(26)-C(27)	120.7(13)
C(25)-C(26)-C(31)	120.4(14)	C(18)-C(27)-C(28)	120.1(15)
C(31)-C(26)-C(27)	107.3(14)	C(28)-C(27)-C(26)	107.1(13)
C(18)-C(27)-C(26)	119.6(15)	C(29)-C(28)-C(27)	118.1(14)
C(29)-C(28)-C(32)	121.0(17)	C(28)-C(29)-C(20)	122.2(16)
C(32)-C(28)-C(27)	109.7(13)	C(20)-C(29)-C(29)#1	106.5(10)
C(28)-C(29)-C(29)#1	118.6(11)	C(31)-C(30)-C(23)	119.5(13)
C(31)-C(30)-C(30)#1	120.2(9)	C(30)-C(31)-C(26)	119.3(13)
C(30)#1-C(30)-C(23)	108.8(8)	C(26)-C(31)-C(32)	107.6(12)
C(30)-C(31)-C(32)	120.4(13)	C(32)#1-C(32)-C(31)	119.4(9)
C(32)#1-C(32)-C(28)	120.4(10)	S(2)-C(500)-S(1)	177(2)
C(28)-C(32)-C(31)	108.3(14)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 x, -y+1/2, z