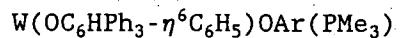




CRYSTALLOGRAPHIC DATA FOR

 $WPO_2C_{63}H_{56}$

formula weight 1059.97

 $a = 11.5631(3)\text{\AA}$ space group $P\bar{1}$ (No. 2) $b = 12.3496(2)\text{\AA}$ $T = 203$ K $c = 18.2185(4)\text{\AA}$ $\lambda = 0.71073\text{\AA}$ $\alpha = 82.6659(16)^\circ$ $\rho_{\text{calc}} = 1.429\text{ g cm}^{-3}$ $\beta = 72.7035(11)^\circ$ $\mu = 2.469\text{ mm}^{-1}$ $\gamma = 86.8784(16)^\circ$

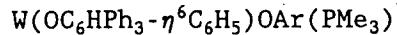
transmission coeff = 0.341-0.641

 $V = 2463.25(13)\text{\AA}^3$ $R(F_o)^a = 0.042$ $Z = 2$ $R_w(F_o^2)^b = 0.111$

$$^a R = \sum | |F_o| - |F_c| | / \sum |F_o| \text{ for } F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$$

$$^b R_w = [\sum w (|F_o^2| - |F_c^2|)^2 / \sum w |F_o^2|^2]^{1/2}$$

CRYSTAL DATA AND DATA COLLECTION PARAMETERS for



formula	$\text{WPO}_2\text{C}_{63}\text{H}_{56}$
formula weight	1059.97
space group	P1 (No. 2)
a, Å	11.5631(3)
b, Å	12.3496(2)
c, Å	18.2185(4)
α , deg	82.6659(16)
β , deg	72.7035(11)
γ , deg	86.8784(16)
V, Å ³	2463.25(13)
Z	2
d_{calc} , g cm ⁻³	1.429
crystal dimensions, mm	0.25x0.22x0.18
temperature, K	203.
radiation (wavelength)	MO K _α (0.71073Å)
monochromator	graphite
linear abs coef, mm ⁻¹	2.469
absorption correction applied	empirical ^a
transmission factors: min, max	0.34, 0.64
diffractometer	Nonius KappaCCD
h, k, l range	0 to 16 -16 to 17 -23 to 25
2 θ range, deg	8.00-61.09
programs used	SHELXL-97
F ₀₀₀	1078.0
weighting	$w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0899P)^2+3.3320P]$ where $P=(F_o^2+2F_c^2)/3$
data collected	25944
unique data	12329
R _{int}	0.041
data used in refinement	12329
cutoff used in R-factor calculations	$F_o^2 > 2.0\sigma(F_o^2)$
data with I>2.0 σ (I)	10849
refined extinction coef	0.0173
number of variables	608
largest shift/esd in final cycle	0.00
R(F _o)	0.042
R _w (F _o ²)	0.111
goodness of fit	0.946

^a Otwinowski Z. & Minor, W. Methods Enzymol., 1996, 276, 307.

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for W(OC₆HPh₃- η^6 C₆H₅)OAr(PMe₃)

Atom	x	y	z	U(Å ²)
W	0.221628(12)	0.146420(11)	0.307767(8)	0.02328(6)
P	0.07787(11)	0.28133(10)	0.26937(8)	0.0373(3)
O(10)	0.0751(3)	0.0529(2)	0.32487(16)	0.0258(8)
O(20)	0.3208(3)	0.1838(2)	0.19845(16)	0.0265(8)
C(1)	0.1008(6)	0.4222(4)	0.2800(5)	0.065(2)
C(2)	-0.0779(5)	0.2590(4)	0.3255(5)	0.058(2)
C(3)	0.0736(7)	0.2864(6)	0.1693(4)	0.067(2)
C(11)	0.0773(4)	-0.0511(3)	0.3579(2)	0.0247(10)
C(12)	0.1693(4)	-0.0803(3)	0.3932(2)	0.0261(10)
C(13)	0.1872(4)	-0.1900(3)	0.4188(2)	0.0278(11)
C(14)	0.1077(4)	-0.2667(3)	0.4111(2)	0.0285(11)
C(15)	0.0091(4)	-0.2365(3)	0.3830(2)	0.0266(11)
C(16)	-0.0098(4)	-0.1256(3)	0.3570(2)	0.0249(10)
C(21)	0.4309(4)	0.1478(3)	0.1604(2)	0.0254(10)
C(22)	0.5276(4)	0.2227(3)	0.1361(2)	0.0282(11)
C(23)	0.6421(4)	0.1880(4)	0.0921(2)	0.0302(11)
C(24)	0.6612(4)	0.0788(4)	0.0804(3)	0.0314(11)
C(25)	0.5689(4)	0.0025(3)	0.1067(2)	0.0289(11)
C(26)	0.4505(4)	0.0380(3)	0.1446(2)	0.0266(10)
C(121)	0.2365(4)	0.0171(3)	0.3973(2)	0.0268(11)
C(122)	0.1661(4)	0.0992(4)	0.4417(2)	0.0356(13)
C(123)	0.1977(5)	0.2089(4)	0.4232(3)	0.0379(14)
C(124)	0.3152(5)	0.2351(4)	0.3702(3)	0.0359(14)
C(125)	0.3963(4)	0.1492(4)	0.3410(3)	0.0328(11)
C(126)	0.3595(4)	0.0393(4)	0.3515(3)	0.0301(11)
C(131)	0.2914(4)	-0.2249(4)	0.4485(3)	0.0343(11)
C(132)	0.3172(5)	-0.1733(4)	0.5053(3)	0.0433(17)
C(133)	0.4161(6)	-0.2082(6)	0.5318(4)	0.059(2)
C(134)	0.4895(6)	-0.2934(6)	0.5024(4)	0.068(2)
C(135)	0.4658(5)	-0.3449(5)	0.4464(4)	0.060(2)
C(136)	0.3675(5)	-0.3108(4)	0.4189(3)	0.0446(15)
C(151)	-0.0718(4)	-0.3236(3)	0.3782(2)	0.0274(11)
C(152)	-0.1068(4)	-0.4091(4)	0.4384(3)	0.0340(11)
C(153)	-0.1856(5)	-0.4885(4)	0.4357(3)	0.0435(15)
C(154)	-0.2294(5)	-0.4855(4)	0.3731(3)	0.0435(14)
C(155)	-0.1928(5)	-0.4053(4)	0.3122(3)	0.0425(15)
C(156)	-0.1148(4)	-0.3243(4)	0.3144(3)	0.0340(11)
C(161)	-0.1163(4)	-0.0839(3)	0.3316(2)	0.0252(10)
C(162)	-0.2344(4)	-0.1050(4)	0.3789(3)	0.0316(11)
C(163)	-0.3331(4)	-0.0648(4)	0.3552(3)	0.0405(15)
C(164)	-0.3166(4)	-0.0036(4)	0.2839(3)	0.0404(15)
C(165)	-0.2004(5)	0.0188(4)	0.2373(3)	0.0396(13)
C(166)	-0.1013(4)	-0.0198(4)	0.2608(3)	0.0315(11)
C(221)	0.5088(4)	0.3335(4)	0.1628(3)	0.0338(11)

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for W(OC₆HPh₃-η⁶C₆H₅)OAr(PMe₃)

Atom	x	y	z	U(Å ²)
C(222)	0.4233(5)	0.4078(4)	0.1460(3)	0.0379(11)
C(223)	0.4088(6)	0.5121(4)	0.1714(3)	0.0493(15)
C(224)	0.4772(7)	0.5409(5)	0.2153(4)	0.061(2)
C(225)	0.5612(7)	0.4654(5)	0.2348(4)	0.060(2)
C(226)	0.5780(5)	0.3638(4)	0.2073(3)	0.0446(17)
C(231)	0.7426(4)	0.2650(4)	0.0508(3)	0.0348(11)
C(232)	0.7221(5)	0.3604(4)	0.0063(3)	0.0423(15)
C(233)	0.8166(6)	0.4265(4)	-0.0393(3)	0.0491(17)
C(234)	0.9337(6)	0.3997(5)	-0.0393(3)	0.0551(18)
C(235)	0.9560(6)	0.3053(6)	0.0042(4)	0.064(2)
C(236)	0.8623(5)	0.2388(5)	0.0478(3)	0.0525(17)
C(251)	0.6012(4)	-0.1130(4)	0.0918(2)	0.0325(11)
C(252)	0.6924(5)	-0.1662(4)	0.1198(3)	0.0428(17)
C(253)	0.7282(6)	-0.2723(5)	0.1047(4)	0.0512(17)
C(254)	0.6758(6)	-0.3261(4)	0.0615(3)	0.0521(17)
C(255)	0.5861(5)	-0.2739(4)	0.0335(3)	0.0463(17)
C(256)	0.5484(5)	-0.1685(4)	0.0486(3)	0.0379(11)
C(261)	0.3468(4)	-0.0380(3)	0.1614(2)	0.0309(11)
C(262)	0.3420(5)	-0.1367(4)	0.2073(3)	0.0424(14)
C(263)	0.2554(6)	-0.2125(4)	0.2118(4)	0.0564(19)
C(264)	0.1735(6)	-0.1904(6)	0.1705(4)	0.065(2)
C(265)	0.1755(5)	-0.0914(6)	0.1249(4)	0.059(2)
C(266)	0.2614(4)	-0.0143(5)	0.1217(3)	0.0417(13)

$$U_{eq} = (1/3) \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for W(OC₆HPh₃-η⁶C₆H₅)OAr(PMe₃)

Atom	x	y	z	U(Å ²)
H(14)	0.121	-0.340	0.425	0.037
H(1A)	0.043	0.469	0.262	0.085
H(1B)	0.181	0.443	0.250	0.085
H(1C)	0.090	0.429	0.333	0.085
H(24)	0.739	0.056	0.054	0.041
H(2A)	-0.086	0.263	0.379	0.076
H(2B)	-0.102	0.188	0.320	0.076
H(2C)	-0.129	0.314	0.308	0.076
H(3A)	0.049	0.217	0.161	0.087
H(3B)	0.153	0.302	0.134	0.087
H(3C)	0.017	0.342	0.160	0.087
H(12A)	0.083	0.094	0.440	0.046
H(12B)	0.165	0.078	0.495	0.046
H(12C)	0.192	0.238	0.471	0.049
H(12D)	0.137	0.247	0.402	0.049
H(12E)	0.303	0.282	0.326	0.047
H(12F)	0.356	0.278	0.396	0.047
H(12G)	0.429	0.169	0.286	0.042
H(12H)	0.463	0.150	0.363	0.042
H(12I)	0.413	-0.005	0.375	0.039
H(12J)	0.371	0.016	0.301	0.039
H(132)	0.268	-0.115	0.526	0.056
H(133)	0.433	-0.173	0.570	0.076
H(134)	0.555	-0.316	0.521	0.088
H(135)	0.515	-0.403	0.427	0.078
H(136)	0.352	-0.346	0.380	0.058
H(152)	-0.077	-0.413	0.481	0.044
H(153)	-0.209	-0.544	0.476	0.056
H(154)	-0.284	-0.538	0.372	0.056
H(155)	-0.220	-0.405	0.269	0.055
H(156)	-0.091	-0.270	0.273	0.044
H(162)	-0.247	-0.147	0.427	0.041
H(163)	-0.411	-0.079	0.387	0.053
H(164)	-0.383	0.022	0.267	0.052
H(165)	-0.189	0.060	0.189	0.052
H(166)	-0.024	-0.003	0.229	0.041
H(222)	0.375	0.388	0.117	0.049
H(223)	0.352	0.562	0.158	0.064
H(224)	0.468	0.610	0.232	0.079
H(225)	0.606	0.483	0.266	0.079
H(226)	0.636	0.315	0.219	0.058
H(232)	0.643	0.380	0.007	0.055
H(233)	0.801	0.489	-0.070	0.064
H(234)	0.997	0.445	-0.068	0.072

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for $W(OC_6HPh_3-\eta^6C_6H_5)OAr(PMe_3)$

Atom	x	y	z	$U(\text{\AA}^2)$
H(235)	1.035	0.287	0.004	0.083
H(236)	0.879	0.175	0.076	0.068
H(252)	0.729	-0.130	0.149	0.056
H(253)	0.788	-0.307	0.124	0.067
H(254)	0.700	-0.397	0.051	0.068
H(255)	0.551	-0.310	0.004	0.060
H(256)	0.487	-0.135	0.030	0.049
H(262)	0.397	-0.152	0.235	0.055
H(263)	0.253	-0.279	0.243	0.073
H(264)	0.116	-0.242	0.173	0.085
H(265)	0.120	-0.076	0.097	0.077
H(266)	0.261	0.053	0.093	0.054

Hydrogens included in calculation of structure factors but not refined
 $B_{iso}(H)=1.3*B_{iso}(C)$

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's

for W(OC₆HPh₃-η⁶C₆H₅)OAr(PMe₃)

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
W	0.01950(10)	0.02543(11)	0.02368(10)	-0.00272(6)	-0.00368(6)	-0.00377(6)
P	0.0233(5)	0.0282(6)	0.0548(7)	0.0012(4)	-0.0048(5)	-0.0007(5)
O(10)	0.0226(13)	0.0227(13)	0.0307(14)	-0.0072(10)	-0.0069(11)	0.0029(10)
O(20)	0.0236(14)	0.0283(14)	0.0256(13)	-0.0009(11)	-0.0041(11)	-0.0032(10)
C(1)	0.039(3)	0.027(3)	0.114(6)	0.000(2)	-0.001(3)	-0.004(3)
C(2)	0.025(2)	0.033(3)	0.105(5)	0.0023(19)	-0.002(3)	-0.006(3)
C(3)	0.068(4)	0.070(4)	0.068(4)	0.003(3)	-0.039(4)	0.015(3)
C(11)	0.0212(17)	0.0260(18)	0.0238(17)	0.0013(14)	-0.0030(14)	-0.0014(14)
C(12)	0.0207(18)	0.0305(19)	0.0255(18)	-0.0046(14)	-0.0057(14)	0.0014(14)
C(13)	0.0217(18)	0.033(2)	0.0269(19)	-0.0012(15)	-0.0073(15)	0.0035(15)
C(14)	0.0245(19)	0.028(2)	0.032(2)	-0.0014(15)	-0.0093(16)	0.0026(15)
C(15)	0.0230(18)	0.0291(19)	0.0263(19)	-0.0031(15)	-0.0052(15)	-0.0024(14)
C(16)	0.0196(17)	0.0278(19)	0.0255(18)	-0.0003(14)	-0.0043(14)	-0.0023(14)
C(21)	0.0227(18)	0.0302(19)	0.0228(17)	-0.0010(14)	-0.0050(14)	-0.0049(14)
C(22)	0.027(2)	0.030(2)	0.0264(19)	-0.0034(15)	-0.0056(15)	-0.0030(15)
C(23)	0.0237(19)	0.037(2)	0.029(2)	-0.0082(16)	-0.0045(16)	-0.0046(16)
C(24)	0.0216(19)	0.036(2)	0.033(2)	-0.0009(16)	-0.0030(16)	-0.0028(17)
C(25)	0.027(2)	0.035(2)	0.0221(18)	-0.0047(16)	-0.0028(15)	-0.0030(15)
C(26)	0.0224(18)	0.033(2)	0.0233(18)	-0.0005(15)	-0.0044(14)	-0.0050(14)
C(121)	0.0269(19)	0.0296(19)	0.0247(18)	-0.0055(15)	-0.0099(15)	0.0022(14)
C(122)	0.034(2)	0.049(3)	0.0237(19)	-0.0089(19)	-0.0063(17)	-0.0051(17)
C(123)	0.049(3)	0.037(2)	0.029(2)	-0.007(2)	-0.010(2)	-0.0095(17)
C(124)	0.047(3)	0.032(2)	0.033(2)	-0.0144(19)	-0.016(2)	-0.0039(16)
C(125)	0.028(2)	0.041(2)	0.033(2)	-0.0123(17)	-0.0144(17)	0.0002(17)
C(126)	0.025(2)	0.038(2)	0.031(2)	-0.0035(16)	-0.0153(17)	0.0006(16)
C(131)	0.026(2)	0.037(2)	0.037(2)	-0.0077(17)	-0.0101(17)	0.0113(17)
C(132)	0.045(3)	0.049(3)	0.039(3)	-0.012(2)	-0.021(2)	0.009(2)
C(133)	0.054(4)	0.073(4)	0.059(4)	-0.015(3)	-0.038(3)	0.012(3)
C(134)	0.042(3)	0.083(5)	0.083(5)	-0.011(3)	-0.040(3)	0.029(4)
C(135)	0.035(3)	0.061(4)	0.078(4)	0.009(3)	-0.018(3)	0.014(3)
C(136)	0.034(2)	0.045(3)	0.053(3)	0.001(2)	-0.015(2)	0.006(2)
C(151)	0.0229(18)	0.0255(19)	0.031(2)	0.0001(14)	-0.0047(15)	-0.0009(15)
C(152)	0.032(2)	0.030(2)	0.038(2)	0.0009(17)	-0.0080(18)	-0.0029(17)
C(153)	0.036(3)	0.028(2)	0.060(3)	-0.0064(18)	-0.006(2)	0.002(2)
C(154)	0.032(2)	0.033(2)	0.066(3)	-0.0064(18)	-0.013(2)	-0.009(2)
C(155)	0.040(3)	0.038(2)	0.055(3)	-0.009(2)	-0.020(2)	-0.007(2)
C(156)	0.031(2)	0.032(2)	0.041(2)	-0.0043(17)	-0.0140(19)	-0.0017(17)
C(161)	0.0213(18)	0.0252(18)	0.0288(19)	-0.0011(14)	-0.0075(15)	-0.0018(14)
C(162)	0.0228(19)	0.039(2)	0.030(2)	-0.0008(16)	-0.0054(16)	0.0020(16)
C(163)	0.022(2)	0.052(3)	0.044(3)	0.0024(19)	-0.0059(18)	-0.003(2)
C(164)	0.030(2)	0.047(3)	0.045(3)	0.0046(19)	-0.016(2)	0.002(2)
C(165)	0.037(2)	0.047(3)	0.034(2)	-0.002(2)	-0.0141(19)	0.0076(19)
C(166)	0.0233(19)	0.036(2)	0.033(2)	-0.0078(16)	-0.0070(16)	0.0040(16)
C(221)	0.030(2)	0.038(2)	0.029(2)	-0.0158(17)	0.0020(16)	-0.0067(16)

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's (Continued)

for $W(OC_6HPh_3 \cdot \eta^6C_6H_5)OAr(PMe_3)$

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
C(222)	0.037(2)	0.035(2)	0.039(2)	-0.0056(18)	-0.0038(19)	-0.0102(18)
C(223)	0.053(3)	0.033(2)	0.052(3)	-0.006(2)	0.003(2)	-0.011(2)
C(224)	0.070(4)	0.041(3)	0.062(4)	-0.021(3)	0.007(3)	-0.026(3)
C(225)	0.070(4)	0.065(4)	0.051(3)	-0.034(3)	-0.016(3)	-0.014(3)
C(226)	0.046(3)	0.048(3)	0.041(3)	-0.018(2)	-0.011(2)	-0.007(2)
C(231)	0.028(2)	0.044(2)	0.030(2)	-0.0104(18)	-0.0028(17)	-0.0051(17)
C(232)	0.036(3)	0.037(2)	0.048(3)	-0.0025(19)	-0.003(2)	-0.005(2)
C(233)	0.051(3)	0.034(3)	0.051(3)	-0.012(2)	0.002(2)	0.000(2)
C(234)	0.044(3)	0.070(4)	0.044(3)	-0.029(3)	0.001(2)	-0.002(3)
C(235)	0.035(3)	0.098(5)	0.054(3)	-0.025(3)	-0.012(3)	0.015(3)
C(236)	0.028(2)	0.074(4)	0.049(3)	-0.012(2)	-0.008(2)	0.013(3)
C(251)	0.028(2)	0.036(2)	0.028(2)	-0.0001(17)	0.0011(16)	-0.0058(16)
C(252)	0.037(3)	0.043(3)	0.048(3)	0.005(2)	-0.012(2)	-0.007(2)
C(253)	0.048(3)	0.044(3)	0.057(3)	0.011(2)	-0.010(3)	-0.007(2)
C(254)	0.056(3)	0.033(3)	0.052(3)	0.005(2)	0.007(3)	-0.006(2)
C(255)	0.055(3)	0.040(3)	0.041(3)	-0.007(2)	-0.005(2)	-0.013(2)
C(256)	0.038(2)	0.038(2)	0.033(2)	-0.0035(19)	-0.0019(19)	-0.0061(18)
C(261)	0.027(2)	0.031(2)	0.030(2)	-0.0050(16)	0.0029(16)	-0.0118(16)
C(262)	0.042(3)	0.038(2)	0.037(2)	-0.005(2)	0.006(2)	-0.0077(19)
C(263)	0.064(4)	0.034(3)	0.050(3)	-0.020(2)	0.023(3)	-0.015(2)
C(264)	0.046(3)	0.076(4)	0.064(4)	-0.035(3)	0.017(3)	-0.039(3)
C(265)	0.033(3)	0.092(5)	0.049(3)	-0.023(3)	0.005(2)	-0.030(3)
C(266)	0.027(2)	0.058(3)	0.038(2)	-0.009(2)	-0.0018(18)	-0.013(2)

The form of the anisotropic temperature factor is:

$$\exp[-2\pi (h^2a^{*2}U(1,1) + k^2b^{*2}U(2,2) + l^2c^{*2}U(3,3) + 2hka^{*}b^{*}U(1,2) + 2hla^{*}c^{*}U(1,3) + 2klb^{*}c^{*}U(2,3))] \text{ where } a^{*}, b^{*}, \text{ and } c^{*} \text{ are reciprocal lattice constants.}$$

Table of Bond Distances in Angstroms

for $W(OC_6HPh_3-\eta^6C_6H_5)OAr(PMe_3)$

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
W	O(20)	1.990(3)	C(131)	C(136)	1.398(7)
W	O(10)	2.028(3)	C(132)	C(133)	1.395(7)
W	C(121)	2.171(4)	C(133)	C(134)	1.375(10)
W	C(124)	2.201(4)	C(134)	C(135)	1.368(11)
W	C(123)	2.267(4)	C(135)	C(136)	1.397(7)
W	C(126)	2.277(4)	C(151)	C(156)	1.395(6)
W	C(125)	2.277(4)	C(151)	C(152)	1.403(6)
W	C(122)	2.335(4)	C(152)	C(153)	1.389(7)
W	P	2.4740(12)	C(153)	C(154)	1.375(8)
P	C(2)	1.804(5)	C(154)	C(155)	1.371(8)
P	C(1)	1.817(6)	C(155)	C(156)	1.394(6)
P	C(3)	1.831(7)	C(161)	C(166)	1.394(6)
O(10)	C(11)	1.349(5)	C(161)	C(162)	1.399(6)
O(20)	C(21)	1.339(5)	C(162)	C(163)	1.382(6)
C(11)	C(16)	1.405(6)	C(163)	C(164)	1.384(7)
C(11)	C(12)	1.407(5)	C(164)	C(165)	1.380(7)
C(12)	C(13)	1.400(6)	C(165)	C(166)	1.379(6)
C(12)	C(121)	1.489(6)	C(221)	C(222)	1.386(7)
C(13)	C(14)	1.402(6)	C(221)	C(226)	1.390(7)
C(13)	C(131)	1.484(6)	C(222)	C(223)	1.409(6)
C(14)	C(15)	1.397(6)	C(223)	C(224)	1.368(9)
C(15)	C(16)	1.418(6)	C(224)	C(225)	1.399(11)
C(15)	C(151)	1.491(6)	C(225)	C(226)	1.393(8)
C(16)	C(161)	1.485(5)	C(231)	C(236)	1.391(7)
C(21)	C(26)	1.414(6)	C(231)	C(232)	1.393(7)
C(21)	C(22)	1.419(6)	C(232)	C(233)	1.390(7)
C(22)	C(23)	1.405(6)	C(233)	C(234)	1.376(9)
C(22)	C(221)	1.494(6)	C(234)	C(235)	1.381(9)
C(23)	C(24)	1.388(6)	C(235)	C(236)	1.377(8)
C(23)	C(231)	1.497(6)	C(251)	C(256)	1.388(7)
C(24)	C(25)	1.395(6)	C(251)	C(252)	1.401(7)
C(25)	C(26)	1.412(6)	C(252)	C(253)	1.389(7)
C(25)	C(251)	1.494(6)	C(253)	C(254)	1.374(9)
C(26)	C(261)	1.498(6)	C(254)	C(255)	1.381(9)
C(121)	C(126)	1.439(6)	C(255)	C(256)	1.386(7)
C(121)	C(122)	1.440(6)	C(261)	C(262)	1.381(7)
C(122)	C(123)	1.396(6)	C(261)	C(266)	1.387(7)
C(123)	C(124)	1.439(7)	C(262)	C(263)	1.386(8)
C(124)	C(125)	1.424(7)	C(263)	C(264)	1.371(11)
C(125)	C(126)	1.417(6)	C(264)	C(265)	1.386(11)
C(131)	C(132)	1.391(7)	C(265)	C(266)	1.397(7)

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.

Table of Bond Angles in Degrees

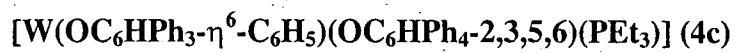
for W(OC₆HPh₃-η⁶C₆H₅)OAr(PMe₃)

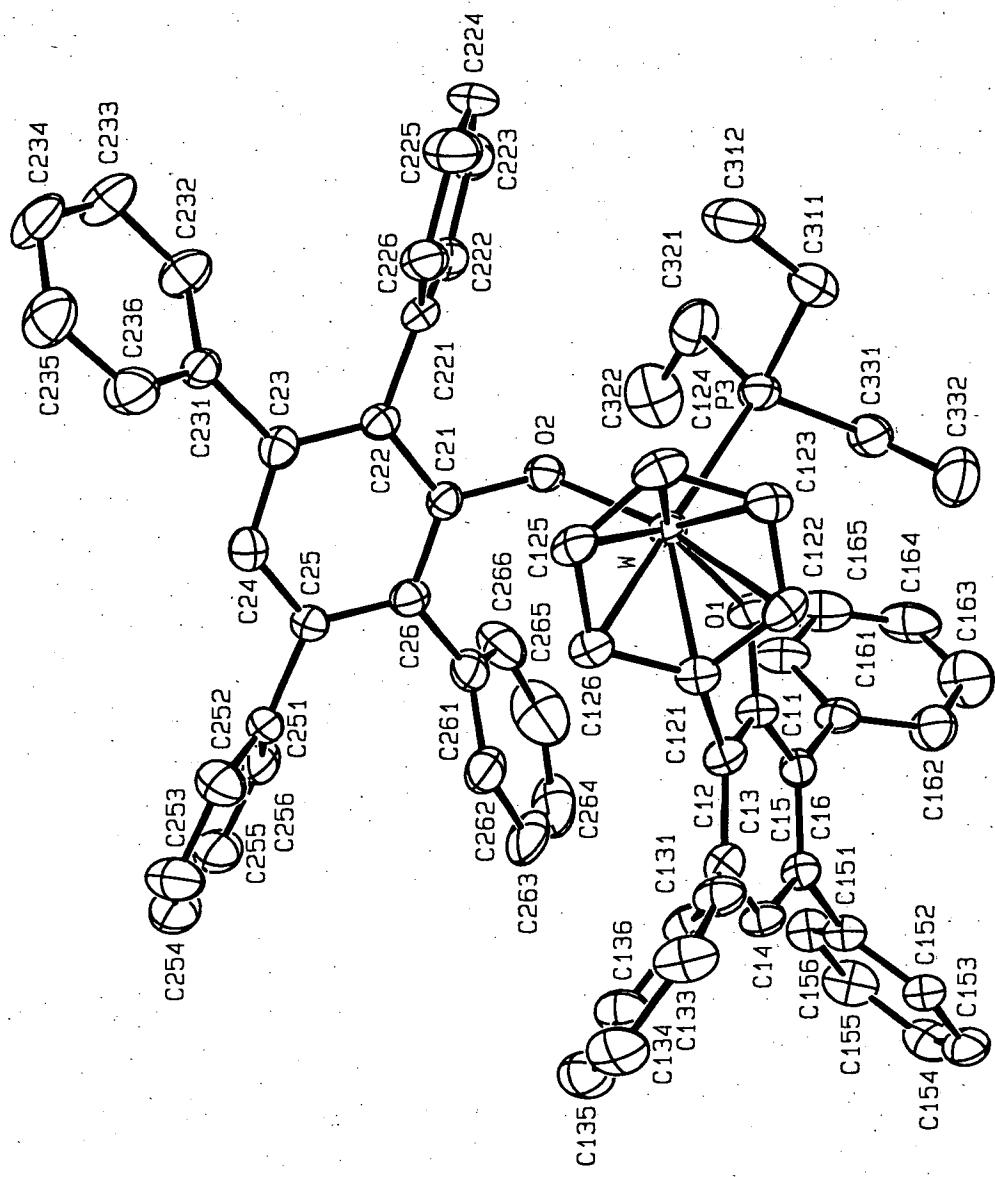
Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
O(20)	W	O(10)	116.33(12)	C(11)	O(10)	W	118.4(2)
O(20)	W	C(121)	132.67(14)	C(21)	O(20)	W	130.2(3)
O(10)	W	C(121)	75.67(13)	O(10)	C(11)	C(16)	120.7(3)
O(20)	W	C(124)	101.71(15)	O(10)	C(11)	C(12)	117.1(3)
O(10)	W	C(124)	141.88(15)	C(16)	C(11)	C(12)	122.2(4)
C(121)	W	C(124)	80.52(16)	C(13)	C(12)	C(11)	119.9(4)
O(20)	W	C(123)	137.01(15)	C(13)	C(12)	C(121)	128.8(4)
O(10)	W	C(123)	104.95(15)	C(11)	C(12)	C(121)	111.3(3)
C(121)	W	C(123)	67.48(17)	C(12)	C(13)	C(14)	117.8(4)
C(124)	W	C(123)	37.54(18)	C(12)	C(13)	C(131)	121.1(4)
O(20)	W	C(126)	98.92(14)	C(14)	C(13)	C(131)	121.0(4)
O(10)	W	C(126)	106.69(13)	C(15)	C(14)	C(13)	122.4(4)
C(121)	W	C(126)	37.67(15)	C(14)	C(15)	C(16)	120.1(4)
C(124)	W	C(126)	67.54(17)	C(14)	C(15)	C(151)	118.6(4)
C(123)	W	C(126)	79.34(18)	C(16)	C(15)	C(151)	121.3(4)
O(20)	W	C(125)	87.26(14)	C(11)	C(16)	C(15)	116.9(4)
O(10)	W	C(125)	141.43(14)	C(11)	C(16)	C(161)	118.8(4)
C(121)	W	C(125)	66.17(16)	C(15)	C(16)	C(161)	124.3(4)
C(124)	W	C(125)	37.03(17)	O(20)	C(21)	C(26)	120.9(4)
C(123)	W	C(125)	65.93(18)	O(20)	C(21)	C(22)	118.3(3)
C(126)	W	C(125)	36.27(15)	C(26)	C(21)	C(22)	120.8(4)
O(20)	W	C(122)	161.80(15)	C(23)	C(22)	C(21)	119.0(4)
O(10)	W	C(122)	78.49(14)	C(23)	C(22)	C(221)	121.1(4)
C(121)	W	C(122)	37.05(16)	C(21)	C(22)	C(221)	119.7(4)
C(124)	W	C(122)	64.73(17)	C(24)	C(23)	C(22)	119.2(4)
C(123)	W	C(122)	35.27(16)	C(24)	C(23)	C(231)	117.5(4)
C(126)	W	C(122)	65.29(17)	C(22)	C(23)	C(231)	123.1(4)
C(125)	W	C(122)	74.63(17)	C(23)	C(24)	C(25)	122.5(4)
O(20)	W	P	82.99(9)	C(24)	C(25)	C(26)	119.0(4)
O(10)	W	P	78.58(8)	C(24)	C(25)	C(251)	117.5(4)
C(121)	W	P	142.84(12)	C(26)	C(25)	C(251)	123.5(4)
C(124)	W	P	105.06(13)	C(25)	C(26)	C(21)	119.0(4)
C(123)	W	P	94.34(14)	C(25)	C(26)	C(261)	119.7(4)
C(126)	W	P	172.57(11)	C(21)	C(26)	C(261)	121.1(4)
C(125)	W	P	137.25(12)	C(126)	C(121)	C(122)	119.6(4)
C(122)	W	P	111.52(13)	C(126)	C(121)	C(12)	123.8(4)
C(2)	P	C(1)	103.0(3)	C(122)	C(121)	C(12)	116.0(4)
C(2)	P	C(3)	103.4(4)	C(126)	C(121)	W	75.2(2)
C(1)	P	C(3)	104.1(4)	C(122)	C(121)	W	77.7(2)
C(2)	P	W	113.7(2)	C(12)	C(121)	W	110.0(3)
C(1)	P	W	115.3(2)	C(123)	C(122)	C(121)	120.9(4)
C(3)	P	W	115.8(2)	C(123)	C(122)	W	69.7(3)

Bond Angles (cont.)

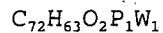
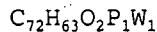
Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
C(121)	C(122)	W	65.3(2)	C(166)	C(165)	C(164)	120.9(4)
C(122)	C(123)	C(124)	118.1(4)	C(165)	C(166)	C(161)	120.7(4)
C(122)	C(123)	W	75.0(3)	C(222)	C(221)	C(226)	118.1(4)
C(124)	C(123)	W	68.7(2)	C(222)	C(221)	C(22)	122.6(4)
C(125)	C(124)	C(123)	119.4(4)	C(226)	C(221)	C(22)	119.3(5)
C(125)	C(124)	W	74.4(2)	C(221)	C(222)	C(223)	121.1(5)
C(123)	C(124)	W	73.7(2)	C(224)	C(223)	C(222)	120.2(6)
C(126)	C(125)	C(124)	122.4(4)	C(223)	C(224)	C(225)	119.2(5)
C(126)	C(125)	W	71.9(2)	C(226)	C(225)	C(224)	120.3(6)
C(124)	C(125)	W	68.6(2)	C(221)	C(226)	C(225)	120.9(6)
C(125)	C(126)	C(121)	116.5(4)	C(236)	C(231)	C(232)	116.9(5)
C(125)	C(126)	W	71.9(2)	C(236)	C(231)	C(23)	121.5(5)
C(121)	C(126)	W	67.2(2)	C(232)	C(231)	C(23)	121.2(4)
C(132)	C(131)	C(136)	118.2(5)	C(233)	C(232)	C(231)	121.8(5)
C(132)	C(131)	C(13)	121.8(4)	C(234)	C(233)	C(232)	119.8(6)
C(136)	C(131)	C(13)	120.1(4)	C(233)	C(234)	C(235)	119.3(5)
C(131)	C(132)	C(133)	120.2(6)	C(236)	C(235)	C(234)	120.6(6)
C(134)	C(133)	C(132)	120.9(6)	C(235)	C(236)	C(231)	121.5(6)
C(135)	C(134)	C(133)	119.8(5)	C(256)	C(251)	C(252)	118.6(4)
C(134)	C(135)	C(136)	120.1(6)	C(256)	C(251)	C(25)	122.9(4)
C(135)	C(136)	C(131)	120.9(6)	C(252)	C(251)	C(25)	118.5(4)
C(156)	C(151)	C(152)	117.5(4)	C(253)	C(252)	C(251)	120.3(5)
C(156)	C(151)	C(15)	122.0(4)	C(254)	C(253)	C(252)	120.6(6)
C(152)	C(151)	C(15)	120.5(4)	C(253)	C(254)	C(255)	119.5(5)
C(153)	C(152)	C(151)	120.9(5)	C(254)	C(255)	C(256)	120.8(5)
C(154)	C(153)	C(152)	120.4(5)	C(255)	C(256)	C(251)	120.4(5)
C(155)	C(154)	C(153)	119.7(4)	C(262)	C(261)	C(266)	119.1(5)
C(154)	C(155)	C(156)	120.6(5)	C(262)	C(261)	C(26)	122.1(4)
C(155)	C(156)	C(151)	120.8(4)	C(266)	C(261)	C(26)	118.3(4)
C(166)	C(161)	C(162)	118.1(4)	C(261)	C(262)	C(263)	120.5(6)
C(166)	C(161)	C(16)	120.8(4)	C(264)	C(263)	C(262)	120.3(6)
C(162)	C(161)	C(16)	121.1(4)	C(263)	C(264)	C(265)	120.3(5)
C(163)	C(162)	C(161)	120.8(4)	C(264)	C(265)	C(266)	119.2(6)
C(162)	C(163)	C(164)	120.4(4)	C(261)	C(266)	C(265)	120.5(6)
C(165)	C(164)	C(163)	119.2(4)				

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.





CRYSTALLOGRAPHIC DATA FOR



formula weight 1175.13

$$a = 10.7808(2) \text{\AA}$$

space group P2₁/c (No. 14)

$$b = 23.9094(9) \text{\AA}$$

$$T = 150. \text{ K}$$

$$c = 22.8885(8) \text{\AA}$$

$$\lambda = 0.71073 \text{\AA}$$

$$\beta = 90.541(2)^\circ$$

$$\rho_{\text{calc}} = 1.323 \text{ g cm}^{-3}$$

$$V = 5899.5(5) \text{\AA}^3$$

$$\mu = 2.069 \text{ mm}^{-1}$$

$$Z = 4$$

$$\text{transmission coeff} = 0.672-0.772$$

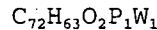
$$R(F_o)^a = 0.050$$

$$R_w(F_o^2)^b = 0.115$$

$$^a R = \sum |||F_o|| - |F_c||| / \sum |F_o| \text{ for } F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$$

$$^b R_w = [\sum w (|F_o^2| - |F_c^2|)^2 / \sum w |F_o^2|^2]^{1/2}$$

CRYSTAL DATA AND DATA COLLECTION PARAMETERS for



formula	$C_{72}H_{63}O_2P_1W_1$
formula weight	1175.13
space group	P2 ₁ /c (No. 14)
a, Å	10.7808(2)
b, Å	23.9094(9)
c, Å	22.8885(8)
β , deg	90.541(2)
V, Å ³	5899.5(5)
Z	4
d_{calc} , g cm ⁻³	1.323
crystal dimensions, mm	0.25x0.13x0.13
temperature, K	150.
radiation (wavelength)	MO K _α (0.71073Å)
monochromator	graphite
linear abs coef, mm ⁻¹	2.069
absorption correction applied	empirical ^a
transmission factors: min, max	0.67, 0.77
diffractometer	Nonius KappaCCD
h, k, l range	0 to 13 0 to 31 -29 to 29
2θ range, deg	10.00-54.94
mosaicity, deg	0.50
programs used	SHELXL-97
F_{000}	2400.0
weighting	$w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0613P)^2+0.0000P]$ where $P=(F_o^2+2Fc^2)/3$
data collected	42791
unique data	13340
R_{int}	0.091
data used in refinement	13044
cutoff used in R-factor calculations	$F_o^2 > 2.0\sigma(F_o^2)$
data with $I > 2.0\sigma(I)$	8936
number of variables	676
largest shift/esd in final cycle	0.02
$R(F_o)$	0.050
$R_w(F_o^2)$	0.115
goodness of fit	0.994

^a Otwinowski Z. & Minor, W. Methods Enzymol., 1996, 276, 307.

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Atom	x	y	z	U(Å ²)
W	0.191081(17)	0.082188(9)	0.265558(8)	0.02323(6)
P(3)	0.09311(13)	-0.00357(6)	0.22357(7)	0.0315(4)
O(1)	0.1216(3)	0.11315(14)	0.19023(15)	0.0263(10)
O(2)	0.3514(3)	0.04304(15)	0.25415(15)	0.0280(10)
C(11)	0.1158(5)	0.1691(2)	0.1827(2)	0.0260(15)
C(12)	0.1365(5)	0.2030(2)	0.2318(2)	0.0267(15)
C(13)	0.1413(4)	0.2612(2)	0.2253(2)	0.0253(14)
C(14)	0.1168(5)	0.2832(2)	0.1698(2)	0.0273(15)
C(15)	0.0857(4)	0.2500(2)	0.1215(2)	0.0257(15)
C(16)	0.0853(4)	0.1917(2)	0.1272(2)	0.0253(15)
C(21)	0.4661(4)	0.0604(2)	0.2745(2)	0.0254(15)
C(22)	0.5225(4)	0.0256(2)	0.3173(2)	0.0240(15)
C(23)	0.6318(4)	0.0439(2)	0.3447(2)	0.0273(15)
C(24)	0.6791(5)	0.0951(2)	0.3287(2)	0.0314(15)
C(25)	0.6301(4)	0.1275(2)	0.2841(2)	0.0267(15)
C(26)	0.5209(5)	0.1097(2)	0.2554(2)	0.0280(15)
C(121)	0.1468(5)	0.1694(2)	0.2859(2)	0.0263(15)
C(122)	0.0353(5)	0.1395(2)	0.3024(2)	0.0286(15)
C(123)	0.0414(5)	0.0898(2)	0.3349(2)	0.0303(15)
C(124)	0.1578(5)	0.0751(2)	0.3612(2)	0.0323(15)
C(125)	0.2620(5)	0.1111(2)	0.3549(2)	0.0294(15)
C(126)	0.2601(5)	0.1581(2)	0.3176(2)	0.0277(15)
C(131)	0.1652(5)	0.2995(2)	0.2759(2)	0.0297(15)
C(132)	0.1055(5)	0.2935(2)	0.3281(2)	0.0324(15)
C(133)	0.1252(6)	0.3313(3)	0.3736(2)	0.0410(17)
C(134)	0.2059(6)	0.3751(3)	0.3669(3)	0.0417(17)
C(135)	0.2677(6)	0.3814(3)	0.3152(3)	0.045(2)
C(136)	0.2472(6)	0.3440(2)	0.2694(3)	0.0370(15)
C(151)	0.0498(5)	0.2780(2)	0.0658(2)	0.0263(15)
C(152)	-0.0498(5)	0.3141(2)	0.0645(2)	0.0297(15)
C(153)	-0.0879(5)	0.3400(2)	0.0130(3)	0.0391(15)
C(154)	-0.0251(6)	0.3302(3)	-0.0384(3)	0.0427(18)
C(155)	0.0777(6)	0.2946(3)	-0.0375(2)	0.0436(18)
C(156)	0.1144(5)	0.2683(2)	0.0137(2)	0.0340(15)
C(161)	0.0500(5)	0.1530(2)	0.0788(2)	0.0307(15)
C(162)	-0.0658(6)	0.1576(3)	0.0514(3)	0.045(2)
C(163)	-0.0984(7)	0.1200(3)	0.0073(3)	0.064(3)
C(164)	-0.0206(7)	0.0792(3)	-0.0101(3)	0.053(2)
C(165)	0.0919(7)	0.0747(3)	0.0159(3)	0.048(2)
C(166)	0.1282(6)	0.1111(2)	0.0603(2)	0.0383(17)
C(221)	0.4637(5)	-0.0287(2)	0.3334(2)	0.0287(15)
C(222)	0.4564(5)	-0.0726(2)	0.2930(3)	0.0364(17)
C(223)	0.4168(5)	-0.1249(3)	0.3092(3)	0.047(2)
C(224)	0.3816(6)	-0.1348(3)	0.3665(3)	0.052(2)

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Atom	X	Y	Z	U(Å ²)
C(225)	0.3827(6)	-0.0921(3)	0.4062(3)	0.051(2)
C(226)	0.4250(5)	-0.0389(2)	0.3903(3)	0.0363(17)
C(231)	0.6993(4)	0.0104(2)	0.3892(2)	0.0293(15)
C(232)	0.7275(5)	-0.0460(3)	0.3823(3)	0.0397(18)
C(233)	0.7933(6)	-0.0755(3)	0.4247(3)	0.045(2)
C(234)	0.8355(6)	-0.0488(3)	0.4747(3)	0.048(2)
C(235)	0.8094(6)	0.0071(3)	0.4829(3)	0.050(2)
C(236)	0.7429(5)	0.0363(3)	0.4403(3)	0.0424(18)
C(251)	0.6959(4)	0.1803(2)	0.2684(3)	0.0323(15)
C(252)	0.7198(5)	0.2195(3)	0.3111(3)	0.0433(18)
C(253)	0.7846(6)	0.2683(3)	0.2975(4)	0.057(2)
C(254)	0.8268(6)	0.2764(3)	0.2420(4)	0.059(3)
C(255)	0.8043(5)	0.2371(3)	0.1998(4)	0.053(2)
C(256)	0.7404(5)	0.1896(3)	0.2118(3)	0.0383(18)
C(261)	0.4731(5)	0.1416(3)	0.2038(3)	0.0360(17)
C(262)	0.4499(5)	0.1994(3)	0.2067(3)	0.0436(18)
C(263)	0.4223(6)	0.2298(3)	0.1562(4)	0.062(2)
C(264)	0.4168(6)	0.2025(5)	0.1029(4)	0.081(3)
C(265)	0.4373(7)	0.1466(4)	0.0992(3)	0.073(3)
C(266)	0.4624(6)	0.1157(3)	0.1495(3)	0.049(2)
C(311)	0.0061(6)	-0.0465(3)	0.2760(3)	0.046(2)
C(312)	0.0831(7)	-0.0699(3)	0.3251(3)	0.055(2)
C(321)	0.1902(6)	-0.0559(3)	0.1879(3)	0.055(2)
C(322)	0.2655(7)	-0.0316(3)	0.1385(3)	0.064(3)
C(331)	-0.0261(5)	0.0099(2)	0.1672(3)	0.0405(17)
C(332)	-0.1383(6)	0.0432(3)	0.1889(4)	0.064(3)
C(901)	0.3464(10)	0.7425(6)	0.5287(4)	0.158(7)
C(902)	0.3846(9)	0.6973(4)	0.5626(5)	0.135(6)
C(903)	0.5006(10)	0.6980(5)	0.5896(4)	0.163(7)
C(904)	0.5784(7)	0.7439(7)	0.5827(5)	0.225(11)
C(905)	0.5401(14)	0.7891(5)	0.5489(6)	0.213(11)
C(906)	0.4241(17)	0.7884(4)	0.5218(4)	0.152(8)

$$U_{eq} = (1/3) \sum_i \sum_j U_{ij} \mathbf{a}_i^* \mathbf{a}_j^* \mathbf{a}_i \mathbf{a}_j$$

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Atom	x	y	z	U(Å ²)
H(14)	0.122	0.322	0.165	0.035
H(24)	0.748	0.109	0.349	0.041
H(122)	-0.042	0.154	0.291	0.037
H(123)	-0.028	0.067	0.339	0.040
H(124)	0.165	0.042	0.382	0.042
H(125)	0.334	0.103	0.376	0.038
H(126)	0.329	0.181	0.314	0.036
H(132)	0.051	0.264	0.333	0.042
H(133)	0.083	0.327	0.409	0.053
H(134)	0.219	0.400	0.397	0.054
H(135)	0.323	0.411	0.311	0.058
H(136)	0.289	0.349	0.234	0.049
H(152)	-0.093	0.321	0.099	0.039
H(153)	-0.156	0.364	0.013	0.051
H(154)	-0.051	0.347	-0.073	0.056
H(155)	0.122	0.288	-0.072	0.057
H(156)	0.182	0.244	0.014	0.044
H(162)	-0.121	0.185	0.063	0.058
H(163)	-0.176	0.123	-0.011	0.083
H(164)	-0.044	0.054	-0.040	0.069
H(165)	0.146	0.047	0.004	0.063
H(166)	0.206	0.107	0.078	0.050
H(222)	0.479	-0.066	0.254	0.047
H(223)	0.414	-0.154	0.282	0.061
H(224)	0.357	-0.170	0.378	0.068
H(225)	0.355	-0.098	0.444	0.066
H(226)	0.427	-0.010	0.418	0.047
H(232)	0.702	-0.064	0.348	0.052
H(233)	0.809	-0.113	0.419	0.059
H(234)	0.881	-0.068	0.503	0.063
H(235)	0.836	0.025	0.517	0.065
H(236)	0.727	0.074	0.446	0.055
H(252)	0.693	0.214	0.349	0.056
H(253)	0.799	0.295	0.326	0.075
H(254)	0.871	0.309	0.233	0.077
H(255)	0.833	0.243	0.162	0.068
H(256)	0.726	0.163	0.182	0.050
H(262)	0.453	0.218	0.243	0.057
H(263)	0.408	0.268	0.158	0.081
H(264)	0.399	0.223	0.069	0.106
H(265)	0.435	0.129	0.063	0.095
H(266)	0.472	0.077	0.147	0.063
H(31A)	-0.060	-0.024	0.292	0.060
H(31B)	-0.032	-0.077	0.255	0.060

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Atom	x	y	z	U(Å ²)
H(31C)	0.134	-0.100	0.311	0.071
H(31D)	0.030	-0.084	0.355	0.071
H(31E)	0.135	-0.041	0.341	0.071
H(32A)	0.246	-0.072	0.217	0.072
H(32B)	0.138	-0.086	0.173	0.072
H(32C)	0.211	-0.019	0.108	0.084
H(32D)	0.320	-0.060	0.123	0.084
H(32E)	0.313	-0.001	0.153	0.084
H(33A)	0.012	0.030	0.135	0.053
H(33B)	-0.055	-0.026	0.152	0.053
H(33C)	-0.176	0.023	0.220	0.083
H(33D)	-0.197	0.048	0.157	0.083
H(33E)	-0.111	0.079	0.202	0.083
H(901)	0.269	0.742	0.511	0.205
H(902)	0.333	0.667	0.567	0.175
H(903)	0.526	0.668	0.612	0.211
H(904)	0.656	0.744	0.601	0.290
H(905)	0.592	0.820	0.544	0.276
H(906)	0.398	0.819	0.499	0.198

Hydrogens included in calculation of structure factors but not refined
 $B_{iso}(H) = 1.3 * B_{iso}(C)$

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
W	0.02729(12)	0.02150(12)	0.02089(11)	0.00067(9)	-0.00110(7)	0.00192(9)
P(3)	0.0355(8)	0.0229(7)	0.0359(8)	-0.0011(6)	-0.0062(6)	0.0003(6)
O(1)	0.0350(19)	0.021(2)	0.0230(19)	0.0045(15)	-0.0014(14)	-0.0014(15)
O(2)	0.0329(19)	0.024(2)	0.027(2)	-0.0015(15)	-0.0072(15)	0.0013(16)
C(11)	0.033(3)	0.019(3)	0.026(3)	0.001(2)	0.002(2)	0.001(2)
C(12)	0.033(3)	0.024(3)	0.023(3)	0.004(2)	0.000(2)	0.001(2)
C(13)	0.029(3)	0.031(3)	0.016(2)	0.004(2)	0.0001(19)	0.002(2)
C(14)	0.039(3)	0.022(3)	0.021(3)	0.003(2)	-0.002(2)	0.003(2)
C(15)	0.030(3)	0.027(3)	0.020(3)	0.001(2)	-0.0015(19)	0.002(2)
C(16)	0.025(3)	0.027(3)	0.024(3)	-0.001(2)	0.0000(19)	0.002(2)
C(21)	0.026(3)	0.025(3)	0.025(3)	0.002(2)	-0.005(2)	-0.004(2)
C(22)	0.025(3)	0.025(3)	0.022(3)	0.002(2)	0.0041(19)	0.004(2)
C(23)	0.027(3)	0.032(3)	0.023(3)	0.002(2)	0.001(2)	0.003(2)
C(24)	0.029(3)	0.033(3)	0.032(3)	-0.002(2)	-0.005(2)	0.000(2)
C(25)	0.025(3)	0.024(3)	0.031(3)	-0.001(2)	0.001(2)	0.003(2)
C(26)	0.029(3)	0.026(3)	0.029(3)	0.002(2)	0.002(2)	0.004(2)
C(121)	0.035(3)	0.024(3)	0.020(3)	0.001(2)	0.001(2)	-0.002(2)
C(122)	0.032(3)	0.031(3)	0.023(3)	0.011(2)	0.007(2)	0.000(2)
C(123)	0.033(3)	0.029(3)	0.029(3)	0.001(2)	0.012(2)	0.003(2)
C(124)	0.049(3)	0.030(3)	0.018(3)	0.009(2)	0.005(2)	0.006(2)
C(125)	0.042(3)	0.025(3)	0.021(3)	0.004(2)	-0.012(2)	-0.001(2)
C(126)	0.036(3)	0.025(3)	0.022(3)	0.003(2)	-0.003(2)	-0.003(2)
C(131)	0.042(3)	0.025(3)	0.022(3)	0.009(2)	-0.004(2)	0.000(2)
C(132)	0.047(3)	0.025(3)	0.025(3)	0.003(2)	-0.006(2)	0.001(2)
C(133)	0.065(4)	0.032(3)	0.026(3)	0.006(3)	-0.002(3)	-0.002(3)
C(134)	0.064(4)	0.030(3)	0.031(3)	0.002(3)	-0.010(3)	-0.014(3)
C(135)	0.057(4)	0.031(4)	0.046(4)	-0.002(3)	-0.012(3)	-0.004(3)
C(136)	0.053(3)	0.029(3)	0.029(3)	0.000(3)	-0.003(3)	-0.003(2)
C(151)	0.037(3)	0.024(3)	0.018(3)	0.000(2)	0.000(2)	0.000(2)
C(152)	0.035(3)	0.025(3)	0.029(3)	0.001(2)	0.000(2)	0.001(2)
C(153)	0.048(3)	0.032(3)	0.037(3)	0.001(3)	-0.010(3)	0.009(3)
C(154)	0.058(4)	0.042(4)	0.028(3)	-0.013(3)	-0.011(3)	0.014(3)
C(155)	0.066(4)	0.045(4)	0.020(3)	-0.005(3)	0.006(3)	-0.004(3)
C(156)	0.042(3)	0.036(3)	0.024(3)	0.001(2)	0.003(2)	-0.001(2)
C(161)	0.043(3)	0.026(3)	0.023(3)	-0.002(2)	-0.004(2)	0.005(2)
C(162)	0.048(4)	0.042(4)	0.044(4)	0.001(3)	-0.015(3)	-0.001(3)
C(163)	0.073(5)	0.063(5)	0.054(5)	-0.011(4)	-0.037(4)	-0.010(4)
C(164)	0.086(5)	0.031(4)	0.042(4)	-0.010(4)	-0.010(3)	-0.010(3)
C(165)	0.084(5)	0.032(4)	0.028(3)	-0.001(3)	0.009(3)	-0.007(3)
C(166)	0.062(4)	0.028(3)	0.025(3)	-0.002(3)	0.005(3)	0.000(2)
C(221)	0.027(3)	0.023(3)	0.036(3)	0.003(2)	-0.005(2)	0.006(2)
C(222)	0.037(3)	0.028(3)	0.044(4)	0.004(2)	-0.004(2)	-0.006(3)
C(223)	0.043(4)	0.029(3)	0.069(5)	0.001(3)	-0.013(3)	-0.004(3)
C(224)	0.044(4)	0.024(3)	0.087(6)	-0.007(3)	-0.004(3)	0.022(4)

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's (Continued)

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
C(225)	0.053(4)	0.038(4)	0.061(5)	-0.001(3)	0.006(3)	0.017(3)
C(226)	0.036(3)	0.030(3)	0.043(4)	0.003(2)	0.003(2)	0.005(3)
C(231)	0.025(3)	0.030(3)	0.033(3)	0.003(2)	0.001(2)	0.006(2)
C(232)	0.050(4)	0.036(4)	0.033(3)	0.013(3)	-0.002(3)	-0.003(3)
C(233)	0.053(4)	0.040(4)	0.043(4)	0.024(3)	-0.004(3)	0.002(3)
C(234)	0.058(4)	0.046(4)	0.041(4)	0.018(3)	-0.021(3)	0.007(3)
C(235)	0.060(4)	0.049(4)	0.041(4)	0.008(3)	-0.020(3)	-0.005(3)
C(236)	0.056(4)	0.032(3)	0.039(4)	-0.001(3)	-0.011(3)	-0.002(3)
C(251)	0.023(3)	0.028(3)	0.046(3)	-0.002(2)	0.000(2)	0.009(3)
C(252)	0.041(3)	0.038(4)	0.051(4)	-0.007(3)	0.004(3)	0.005(3)
C(253)	0.056(4)	0.031(4)	0.085(6)	-0.004(3)	0.002(4)	0.003(4)
C(254)	0.037(4)	0.049(5)	0.092(6)	-0.006(3)	0.007(4)	0.038(4)
C(255)	0.037(3)	0.042(4)	0.079(5)	-0.002(3)	0.008(3)	0.026(4)
C(256)	0.022(3)	0.042(4)	0.051(4)	0.001(2)	0.003(2)	0.022(3)
C(261)	0.026(3)	0.042(4)	0.040(3)	-0.005(2)	0.002(2)	0.015(3)
C(262)	0.026(3)	0.046(4)	0.059(4)	0.002(3)	0.005(3)	0.026(3)
C(263)	0.035(3)	0.072(5)	0.079(6)	0.003(3)	-0.006(3)	0.054(5)
C(264)	0.046(4)	0.109(8)	0.088(7)	-0.019(5)	-0.023(4)	0.072(6)
C(265)	0.078(5)	0.101(8)	0.040(4)	-0.032(5)	-0.012(4)	0.022(4)
C(266)	0.052(4)	0.054(4)	0.041(4)	-0.022(3)	-0.006(3)	0.009(3)
C(311)	0.044(4)	0.037(4)	0.056(4)	-0.012(3)	-0.004(3)	0.010(3)
C(312)	0.072(5)	0.037(4)	0.055(4)	-0.016(3)	-0.012(4)	0.013(3)
C(321)	0.050(4)	0.045(4)	0.071(5)	0.012(3)	-0.013(3)	-0.022(4)
C(322)	0.066(5)	0.069(5)	0.058(5)	-0.003(4)	0.005(4)	-0.025(4)
C(331)	0.044(3)	0.030(3)	0.047(4)	-0.007(3)	-0.019(3)	-0.003(3)
C(332)	0.043(4)	0.057(5)	0.091(6)	0.005(3)	-0.022(4)	-0.008(4)
C(901)	0.202(16)	0.159(15)	0.111(11)	0.074(14)	-0.074(11)	-0.040(10)
C(902)	0.128(10)	0.111(10)	0.165(13)	0.009(8)	-0.037(9)	-0.053(10)
C(903)	0.124(11)	0.211(17)	0.152(12)	0.108(11)	-0.062(10)	-0.037(12)
C(904)	0.124(12)	0.32(3)	0.23(2)	-0.048(17)	0.028(13)	-0.20(2)
C(905)	0.141(16)	0.33(3)	0.168(19)	-0.022(17)	0.024(13)	-0.16(2)
C(906)	0.187(18)	0.147(15)	0.124(13)	0.009(12)	0.040(13)	-0.028(10)

The form of the anisotropic temperature factor is:

$$\exp[-2\pi \{ h^2 a^{*2} U(1,1) + k^2 b^{*2} U(2,2) + l^2 c^{*2} U(3,3) + 2hka^*b^*U(1,2) + 2hla^*c^*U(1,3) + 2klb^*c^*U(2,3) \}] \text{ where } a^*, b^*, \text{ and } c^* \text{ are reciprocal lattice constants.}$$

Table of Bond Distances in Angstroms

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
=====	=====	=====	=====	=====	=====
W	O(2)	1.985(3)	C(132)	C(133)	1.394(7)
W	O(1)	2.014(3)	C(133)	C(134)	1.371(8)
W	C(121)	2.189(5)	C(134)	C(135)	1.373(9)
W	C(124)	2.228(5)	C(135)	C(136)	1.394(8)
W	C(123)	2.281(5)	C(151)	C(152)	1.377(7)
W	C(125)	2.284(5)	C(151)	C(156)	1.406(7)
W	C(126)	2.291(5)	C(152)	C(153)	1.389(7)
W	C(122)	2.332(5)	C(153)	C(154)	1.382(8)
W	P(3)	2.4949(14)	C(154)	C(155)	1.397(9)
P(3)	C(321)	1.829(7)	C(155)	C(156)	1.384(8)
P(3)	C(331)	1.841(5)	C(161)	C(166)	1.377(8)
P(3)	C(311)	1.843(6)	C(161)	C(162)	1.396(7)
O(1)	C(11)	1.351(6)	C(162)	C(163)	1.394(9)
O(2)	C(21)	1.382(6)	C(163)	C(164)	1.349(10)
C(11)	C(12)	1.402(7)	C(164)	C(165)	1.349(9)
C(11)	C(16)	1.417(7)	C(165)	C(166)	1.393(8)
C(12)	C(13)	1.399(7)	C(221)	C(226)	1.393(7)
C(12)	C(121)	1.479(7)	C(221)	C(222)	1.402(7)
C(13)	C(14)	1.397(6)	C(222)	C(223)	1.374(8)
C(13)	C(131)	1.498(7)	C(223)	C(224)	1.390(9)
C(14)	C(15)	1.400(7)	C(224)	C(225)	1.367(9)
C(15)	C(16)	1.400(7)	C(225)	C(226)	1.400(8)
C(15)	C(151)	1.488(7)	C(231)	C(232)	1.392(8)
C(16)	C(161)	1.489(7)	C(231)	C(236)	1.400(8)
C(21)	C(26)	1.391(7)	C(232)	C(233)	1.389(8)
C(21)	C(22)	1.417(7)	C(233)	C(234)	1.385(9)
C(22)	C(23)	1.400(7)	C(234)	C(235)	1.380(9)
C(22)	C(221)	1.493(7)	C(235)	C(236)	1.393(8)
C(23)	C(24)	1.378(7)	C(251)	C(252)	1.378(8)
C(23)	C(231)	1.480(7)	C(251)	C(256)	1.404(8)
C(24)	C(25)	1.383(7)	C(252)	C(253)	1.395(8)
C(25)	C(26)	1.408(7)	C(253)	C(254)	1.365(10)
C(25)	C(251)	1.492(7)	C(254)	C(255)	1.368(10)
C(26)	C(261)	1.491(7)	C(255)	C(256)	1.358(8)
C(121)	C(126)	1.440(7)	C(261)	C(266)	1.393(8)
C(121)	C(122)	1.452(7)	C(261)	C(262)	1.406(8)
C(122)	C(123)	1.402(7)	C(262)	C(263)	1.397(8)
C(123)	C(124)	1.431(7)	C(263)	C(264)	1.385(12)
C(124)	C(125)	1.424(8)	C(264)	C(265)	1.358(12)
C(125)	C(126)	1.411(7)	C(265)	C(266)	1.392(9)
C(131)	C(132)	1.370(7)	C(311)	C(312)	1.499(8)
C(131)	C(136)	1.391(8)	C(321)	C(322)	1.514(10)

Bond Distances (cont.)

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
=====	=====	=====	=====	=====	=====
C(331)	C(332)	1.534(9)	C(903)	C(904)	1.390(9)
C(901)	C(902)	1.390(9)	C(904)	C(905)	1.390(9)
C(901)	C(906)	1.390(9)	C(905)	C(906)	1.390(9)
C(902)	C(903)	1.390(9)			

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.

Table of Bond Angles in Degrees

for C₇₂H₆₃O₂P₁W₁

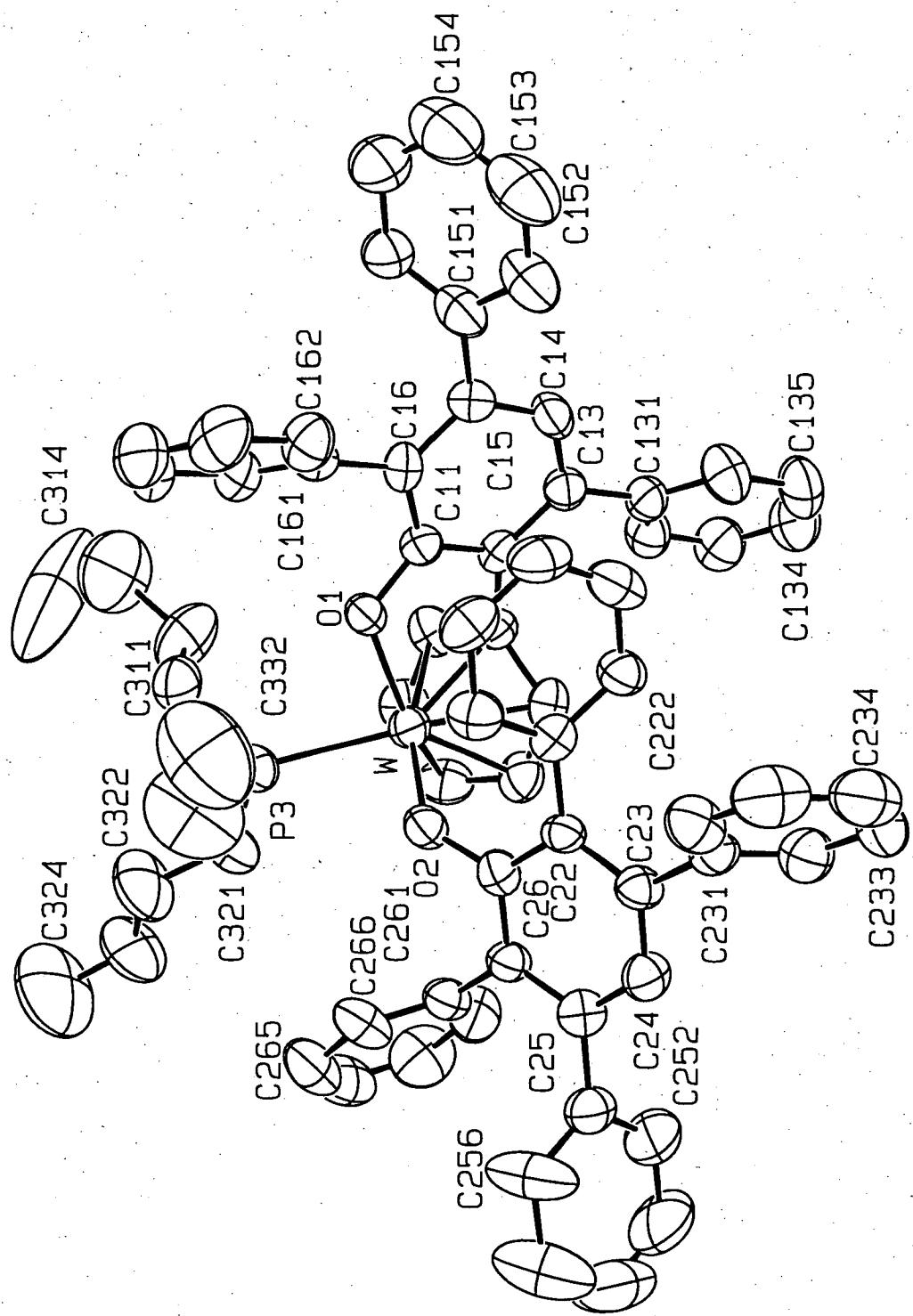
Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====
O(2)	W	O(1)	112.22(14)	C(11)	O(1)	W	119.3(3)
O(2)	W	C(121)	131.96(17)	C(21)	O(2)	W	126.2(3)
O(1)	W	C(121)	75.64(16)	O(1)	C(11)	C(12)	117.6(4)
O(2)	W	C(124)	103.98(17)	O(1)	C(11)	C(16)	120.1(4)
O(1)	W	C(124)	143.79(17)	C(12)	C(11)	C(16)	122.2(5)
C(121)	W	C(124)	80.01(19)	C(13)	C(12)	C(11)	119.6(5)
O(2)	W	C(123)	138.74(17)	C(13)	C(12)	C(121)	128.9(5)
O(1)	W	C(123)	107.82(16)	C(11)	C(12)	C(121)	111.5(5)
C(121)	W	C(123)	67.61(19)	C(14)	C(13)	C(12)	117.6(5)
C(124)	W	C(123)	36.98(19)	C(14)	C(13)	C(131)	120.2(5)
O(2)	W	C(125)	88.64(16)	C(12)	C(13)	C(131)	122.1(4)
O(1)	W	C(125)	140.68(17)	C(13)	C(14)	C(15)	123.1(5)
C(121)	W	C(125)	65.98(18)	C(14)	C(15)	C(16)	119.5(5)
C(124)	W	C(125)	36.8(2)	C(14)	C(15)	C(151)	118.6(5)
C(123)	W	C(125)	65.5(2)	C(16)	C(15)	C(151)	121.9(4)
O(2)	W	C(126)	99.39(16)	C(15)	C(16)	C(11)	117.5(5)
O(1)	W	C(126)	105.67(16)	C(15)	C(16)	C(161)	123.4(5)
C(121)	W	C(126)	37.40(17)	C(11)	C(16)	C(161)	119.1(5)
C(124)	W	C(126)	66.7(2)	O(2)	C(21)	C(26)	122.0(4)
C(123)	W	C(126)	78.66(19)	O(2)	C(21)	C(22)	115.6(5)
C(125)	W	C(126)	35.93(18)	C(26)	C(21)	C(22)	122.3(4)
O(2)	W	C(122)	162.89(16)	C(23)	C(22)	C(21)	118.7(5)
O(1)	W	C(122)	80.24(16)	C(23)	C(22)	C(221)	121.2(4)
C(121)	W	C(122)	37.31(18)	C(21)	C(22)	C(221)	120.1(4)
C(124)	W	C(122)	64.28(19)	C(24)	C(23)	C(22)	118.0(5)
C(123)	W	C(122)	35.36(18)	C(24)	C(23)	C(231)	118.9(5)
C(125)	W	C(122)	74.57(19)	C(22)	C(23)	C(231)	123.1(5)
C(126)	W	C(122)	65.03(18)	C(23)	C(24)	C(25)	123.7(5)
O(2)	W	P(3)	85.86(10)	C(24)	C(25)	C(26)	119.2(5)
O(1)	W	P(3)	79.61(10)	C(24)	C(25)	C(251)	118.1(5)
C(121)	W	P(3)	140.54(14)	C(26)	C(25)	C(251)	122.7(5)
C(124)	W	P(3)	104.14(15)	C(21)	C(26)	C(25)	117.7(5)
C(123)	W	P(3)	91.95(14)	C(21)	C(26)	C(261)	122.5(5)
C(125)	W	P(3)	136.96(14)	C(25)	C(26)	C(261)	119.7(5)
C(126)	W	P(3)	170.23(13)	C(126)	C(121)	C(122)	118.5(5)
C(122)	W	P(3)	108.57(14)	C(126)	C(121)	C(12)	125.5(4)
C(321)	P(3)	C(331)	101.9(3)	C(122)	C(121)	C(12)	115.5(4)
C(321)	P(3)	C(311)	101.9(3)	C(126)	C(121)	W	75.1(3)
C(331)	P(3)	C(311)	101.4(3)	C(122)	C(121)	W	76.7(3)
C(321)	P(3)	W	119.5(2)	C(12)	C(121)	W	110.8(3)
C(331)	P(3)	W	114.61(19)	C(123)	C(122)	C(121)	121.3(5)
C(311)	P(3)	W	115.1(2)	C(123)	C(122)	W	70.3(3)

Bond Angles (cont.)

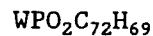
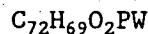
Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====
C(121)	C(122)	W	66.0(3)	C(222)	C(221)	C(22)	120.7(5)
C(122)	C(123)	C(124)	117.9(5)	C(223)	C(222)	C(221)	121.3(6)
C(122)	C(123)	W	74.3(3)	C(222)	C(223)	C(224)	119.8(6)
C(124)	C(123)	W	69.5(3)	C(225)	C(224)	C(223)	120.0(6)
C(125)	C(124)	C(123)	119.8(5)	C(224)	C(225)	C(226)	120.5(6)
C(125)	C(124)	W	73.8(3)	C(221)	C(226)	C(225)	120.2(6)
C(123)	C(124)	W	73.5(3)	C(232)	C(231)	C(236)	116.8(5)
C(126)	C(125)	C(124)	122.4(5)	C(232)	C(231)	C(23)	123.5(5)
C(126)	C(125)	W	72.3(3)	C(236)	C(231)	C(23)	119.6(5)
C(124)	C(125)	W	69.5(3)	C(233)	C(232)	C(231)	121.6(6)
C(125)	C(126)	C(121)	117.5(5)	C(234)	C(233)	C(232)	120.3(6)
C(125)	C(126)	W	71.8(3)	C(235)	C(234)	C(233)	119.6(6)
C(121)	C(126)	W	67.5(3)	C(234)	C(235)	C(236)	119.5(6)
C(132)	C(131)	C(136)	118.6(5)	C(235)	C(236)	C(231)	122.1(6)
C(132)	C(131)	C(13)	122.1(5)	C(252)	C(251)	C(256)	118.9(5)
C(136)	C(131)	C(13)	119.3(5)	C(252)	C(251)	C(25)	119.4(5)
C(131)	C(132)	C(133)	120.9(6)	C(256)	C(251)	C(25)	121.6(5)
C(134)	C(133)	C(132)	120.3(6)	C(251)	C(252)	C(253)	120.1(6)
C(133)	C(134)	C(135)	119.6(5)	C(254)	C(253)	C(252)	119.9(7)
C(134)	C(135)	C(136)	120.3(6)	C(253)	C(254)	C(255)	120.1(7)
C(131)	C(136)	C(135)	120.3(6)	C(256)	C(255)	C(254)	121.2(7)
C(152)	C(151)	C(156)	118.5(5)	C(255)	C(256)	C(251)	119.9(7)
C(152)	C(151)	C(15)	119.9(4)	C(266)	C(261)	C(262)	117.8(6)
C(156)	C(151)	C(15)	121.6(5)	C(266)	C(261)	C(26)	120.3(6)
C(151)	C(152)	C(153)	121.5(5)	C(262)	C(261)	C(26)	121.6(6)
C(154)	C(153)	C(152)	120.2(6)	C(263)	C(262)	C(261)	120.6(7)
C(153)	C(154)	C(155)	119.0(5)	C(264)	C(263)	C(262)	119.4(8)
C(156)	C(155)	C(154)	120.7(5)	C(265)	C(264)	C(263)	120.9(7)
C(155)	C(156)	C(151)	120.1(5)	C(264)	C(265)	C(266)	120.1(8)
C(166)	C(161)	C(162)	117.8(5)	C(265)	C(266)	C(261)	121.1(7)
C(166)	C(161)	C(16)	121.8(5)	C(312)	C(311)	P(3)	114.5(4)
C(162)	C(161)	C(16)	120.4(5)	C(322)	C(321)	P(3)	112.6(5)
C(163)	C(162)	C(161)	119.5(6)	C(332)	C(331)	P(3)	114.3(4)
C(164)	C(163)	C(162)	121.8(6)	C(902)	C(901)	C(906)	120.0(4)
C(163)	C(164)	C(165)	119.0(6)	C(901)	C(902)	C(903)	120.0(4)
C(164)	C(165)	C(166)	121.2(6)	C(904)	C(903)	C(902)	120.0(4)
C(161)	C(166)	C(165)	120.7(6)	C(903)	C(904)	C(905)	120.0(4)
C(226)	C(221)	C(222)	118.1(5)	C(906)	C(905)	C(904)	120.0(4)
C(226)	C(221)	C(22)	120.9(5)	C(905)	C(906)	C(901)	120.0(4)

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.





CRYSTALLOGRAPHIC DATA FOR



formula weight 1181.18

 $a = 11.620(3)\text{\AA}$ space group $P\bar{1}$ (No. 2) $b = 14.612(3)\text{\AA}$ $T = 296.$ K. $c = 18.953(2)\text{\AA}$ $\lambda = 0.71073\text{\AA}$ $\alpha = 102.809(12)^\circ$ $\rho_{\text{calc}} = 1.331\text{g cm}^{-3}$ $\beta = 91.441(15)^\circ$ $\mu = 2.071\text{mm}^{-1}$ $\gamma = 109.153(17)^\circ$

transmission coeff = 0.674-0.951

 $V = 2947(2)\text{\AA}^3$ $R(F_o)^a = 0.040$ $Z = 2$ $R_w(F_o)^b = 0.042$

$$^a R = \Sigma ||F_o| - |F_c|| / \Sigma |F_o|$$

$$^b R_w = [\Sigma w (|F_o| - |F_c|)^2 / \Sigma w |F_o|^2]^{1/2}$$

CRYSTAL DATA AND DATA COLLECTION PARAMETERS for



formula	$WPO_2C_{72}H_{69}$
formula weight	1181.18
space group	P1 (No. 2)
a, Å	11.620(3)
b, Å	14.612(3)
c, Å	18.953(2)
α , deg	102.809(12)
β , deg	91.441(15)
γ , deg	109.153(17)
V, Å ³	2947(2)
Z	2
d_{calc} , g cm ⁻³	1.331
crystal dimensions, mm	0.38x0.25x0.15
temperature, K	296.
radiation (wavelength)	Mo K α (0.71073Å)
monochromator	graphite
linear abs coef, mm ⁻¹	2.071
absorption correction applied	empirical ^a
transmission factors: min, max	0.67, 0.95
diffractometer	Enraf-Nonius CAD4
scan method	$\omega-2\theta$
h, k, l range	0 to 13 -16 to 15 -21 to 21
2θ range, deg	5.38-48.12
scan width, deg	0.73 + 0.49tan(θ)
take-off angle, deg	3.00
programs used	Enraf-Nonius MOLEN
F_{000}	1212.0
p-factor used in weighting	0.000
data collected	9792
unique data	9277
R_{int}	0.033
data with $I > 3.0\sigma(I)$	5621
number of variables	685
largest shift/esd in final cycle	0.07
$R(F_o)$	0.040
$R_w(F_o)$	0.042
goodness of fit	1.133

^a Walker, N.; Stuart, D. Acta Crystallogr., Sect. A 1983, A39, 158.

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom	x	y	z	U(Å ²)
W	0.14755(3)	0.16405(2)	0.204335(18)	0.04494(7)
P(3)	0.05272(18)	0.07847(14)	0.29926(12)	0.0601(7)
O(1)	0.1360(4)	0.2850(3)	0.2765(2)	0.0460(14)
O(2)	0.2877(4)	0.1236(3)	0.2296(2)	0.0503(14)
C(11)	0.1631(5)	0.3717(4)	0.2561(4)	0.045(2)
C(12)	0.1704(5)	0.3671(4)	0.1806(3)	0.044(2)
C(13)	0.2148(5)	0.4549(4)	0.1570(4)	0.046(2)
C(14)	0.2442(6)	0.5453(4)	0.2080(4)	0.052(2)
C(15)	0.2265(6)	0.5520(4)	0.2820(4)	0.048(2)
C(16)	0.1862(6)	0.4637(5)	0.3076(3)	0.047(2)
C(21)	0.3927(6)	0.1241(4)	0.1993(4)	0.045(2)
C(22)	0.4891(5)	0.2147(4)	0.2013(3)	0.042(2)
C(23)	0.5974(6)	0.2097(4)	0.1715(4)	0.048(2)
C(24)	0.6081(6)	0.1190(5)	0.1419(4)	0.054(2)
C(25)	0.5156(6)	0.0300(5)	0.1402(4)	0.051(2)
C(26)	0.4059(6)	0.0321(4)	0.1684(4)	0.046(2)
C(121)	0.1308(6)	0.2630(4)	0.1380(4)	0.047(2)
C(122)	0.0036(6)	0.2021(5)	0.1383(4)	0.058(2)
C(123)	-0.0291(6)	0.1009(5)	0.1269(4)	0.064(3)
C(124)	0.0572(7)	0.0516(5)	0.1024(4)	0.063(3)
C(125)	0.1708(7)	0.1116(5)	0.0852(4)	0.061(3)
C(126)	0.2127(6)	0.2160(5)	0.1041(4)	0.054(2)
C(131)	0.2335(6)	0.4523(5)	0.0796(4)	0.049(2)
C(132)	0.1538(6)	0.3796(5)	0.0220(4)	0.061(2)
C(133)	0.1762(7)	0.3760(6)	-0.0489(4)	0.072(3)
C(134)	0.2748(8)	0.4453(6)	-0.0661(4)	0.081(3)
C(135)	0.3537(8)	0.5183(6)	-0.0120(4)	0.085(3)
C(136)	0.3333(7)	0.5225(5)	0.0610(4)	0.071(3)
C(151)	0.2539(7)	0.6527(5)	0.3312(4)	0.061(3)
C(152)	0.3642(8)	0.7283(5)	0.3314(4)	0.076(3)
C(153)	0.3888(9)	0.8239(6)	0.3749(5)	0.098(4)
C(154)	0.3017(10)	0.8457(6)	0.4172(5)	0.114(4)
C(155)	0.1920(9)	0.7721(6)	0.4164(5)	0.098(4)
C(156)	0.1680(8)	0.6757(5)	0.3740(4)	0.072(3)
C(161)	0.1740(6)	0.4650(4)	0.3859(4)	0.052(2)
C(162)	0.2667(6)	0.5226(5)	0.4406(4)	0.063(3)
C(163)	0.2523(8)	0.5187(6)	0.5116(4)	0.083(3)
C(164)	0.1465(8)	0.4563(6)	0.5297(4)	0.093(3)
C(165)	0.0533(8)	0.4002(6)	0.4768(4)	0.084(3)
C(166)	0.0664(7)	0.4032(5)	0.4047(4)	0.066(3)
C(221)	0.4814(6)	0.3139(5)	0.2367(4)	0.046(2)
C(222)	0.5001(6)	0.3898(5)	0.2007(4)	0.053(2)
C(223)	0.5071(6)	0.4837(5)	0.2368(4)	0.065(3)
C(224)	0.4941(7)	0.5051(5)	0.3103(5)	0.067(3)

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom	x	y	z	U(Å ²)
C(225)	0.4741(7)	0.4323(5)	0.3464(4)	0.066(3)
C(226)	0.4668(6)	0.3359(5)	0.3106(4)	0.060(2)
C(231)	0.7056(6)	0.3003(4)	0.1726(4)	0.052(2)
C(232)	0.7546(7)	0.3179(5)	0.1099(4)	0.069(3)
C(233)	0.8592(7)	0.3981(6)	0.1110(5)	0.084(3)
C(234)	0.9165(7)	0.4613(6)	0.1765(6)	0.095(4)
C(235)	0.8715(7)	0.4450(6)	0.2396(5)	0.089(3)
C(236)	0.7668(7)	0.3656(5)	0.2389(4)	0.069(3)
C(251)	0.5399(6)	-0.0650(5)	0.1141(4)	0.062(3)
C(252)	0.5479(9)	-0.1011(6)	0.0434(5)	0.123(4)
C(253)	0.5674(10)	-0.1897(7)	0.0164(6)	0.130(4)
C(254)	0.5963(9)	-0.2348(7)	0.0654(7)	0.138(5)
C(255)	0.5864(11)	-0.2077(7)	0.1379(7)	0.150(5)
C(256)	0.5541(9)	-0.1199(6)	0.1615(5)	0.114(4)
C(261)	0.3049(6)	-0.0634(4)	0.1632(4)	0.051(2)
C(262)	0.2452(7)	-0.1214(5)	0.0957(5)	0.073(3)
C(263)	0.1584(8)	-0.2167(6)	0.0900(5)	0.095(4)
C(264)	0.1338(7)	-0.2498(6)	0.1520(6)	0.093(3)
C(265)	0.1895(7)	-0.1941(6)	0.2181(5)	0.085(3)
C(266)	0.2734(7)	-0.0999(5)	0.2242(4)	0.072(3)
C(311)	-0.0585(7)	0.1220(6)	0.3477(5)	0.076(3)
C(312)	-0.1665(7)	0.1224(7)	0.3047(6)	0.109(4)
C(313)	-0.2583(10)	0.1553(10)	0.3523(8)	0.162(6)
C(314)	-0.3455(14)	0.0910(15)	0.3674(9)	0.303(9)
C(321)	-0.0289(7)	-0.0550(5)	0.2595(5)	0.077(3)
C(322)	-0.0839(10)	-0.1214(7)	0.3095(6)	0.116(4)
C(323)	-0.1456(10)	-0.2309(6)	0.2726(6)	0.117(4)
C(324)	-0.1905(14)	-0.2963(9)	0.3178(8)	0.200(7)
C(331)	0.1576(8)	0.0792(6)	0.3725(4)	0.080(3)
C(332)	0.2297(8)	0.1802(6)	0.4175(5)	0.088(3)
C(333)	0.3302(11)	0.1792(9)	0.4718(7)	0.152(5)
C(334)	0.4031(14)	0.2758(10)	0.5103(7)	0.185(7)

$$U_{eq} = (1/3) \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom	x	y	z	U(Å ²)
H(141)	0.279	0.607	0.193	0.065
H(241)	0.685	0.117	0.121	0.070
H(1221)	-0.058	0.235	0.147	0.077
H(1231)	-0.110	0.063	0.137	0.084
H(1241)	0.038	-0.020	0.097	0.083
H(1251)	0.223	0.079	0.058	0.079
H(1261)	0.295	0.256	0.095	0.069
H(1321)	0.080	0.330	0.033	0.079
H(1331)	0.120	0.322	-0.088	0.096
H(1341)	0.290	0.443	-0.117	0.105
H(1351)	0.427	0.568	-0.023	0.108
H(1361)	0.390	0.576	0.100	0.095
H(1521)	0.425	0.713	0.299	0.100
H(1531)	0.468	0.875	0.376	0.125
H(1541)	0.318	0.914	0.446	0.141
H(1551)	0.131	0.788	0.447	0.126
H(1561)	0.089	0.624	0.374	0.092
H(1621)	0.343	0.568	0.428	0.082
H(1631)	0.318	0.562	0.550	0.110
H(1641)	0.137	0.450	0.579	0.120
H(1651)	-0.025	0.358	0.490	0.105
H(1661)	-0.001	0.362	0.367	0.088
H(2221)	0.508	0.376	0.148	0.070
H(2231)	0.523	0.536	0.210	0.083
H(2241)	0.500	0.572	0.336	0.088
H(2251)	0.466	0.447	0.399	0.086
H(2261)	0.450	0.284	0.337	0.080
H(2321)	0.713	0.273	0.063	0.089
H(2331)	0.890	0.411	0.065	0.109
H(2341)	0.990	0.518	0.178	0.122
H(2351)	0.914	0.489	0.286	0.115
H(2361)	0.733	0.355	0.285	0.091
H(2521)	0.536	-0.062	0.009	0.146
H(2531)	0.555	-0.220	-0.037	0.165
H(2541)	0.631	-0.288	0.048	0.169
H(2551)	0.596	-0.248	0.172	0.191
H(2561)	0.541	-0.097	0.213	0.145
H(2621)	0.262	-0.096	0.052	0.094
H(2631)	0.119	-0.259	0.042	0.122
H(2641)	0.073	-0.317	0.147	0.119
H(2651)	0.171	-0.220	0.262	0.111
H(2661)	0.311	-0.056	0.274	0.096
H(3111)	-0.018	0.190	0.376	0.100
H(3112)	-0.089	0.083	0.383	0.100

Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations (cont.)

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom	x	y	z	U(Å ²)
H(3121)	-0.210	0.054	0.274	0.139
H(3122)	-0.141	0.163	0.269	0.139
H(3131)	-0.289	0.200	0.332	0.207
H(3132)	-0.212	0.197	0.399	0.207
H(3141)	-0.377	0.114	0.412	0.335
H(3142)	-0.325	0.033	0.373	0.335
H(3143)	-0.415	0.065	0.330	0.335
H(3211)	0.027	-0.083	0.231	0.097
H(3212)	-0.094	-0.062	0.222	0.097
H(3221)	-0.145	-0.097	0.334	0.155
H(3222)	-0.021	-0.114	0.346	0.155
H(3231)	-0.088	-0.255	0.241	0.151
H(3232)	-0.214	-0.240	0.237	0.151
H(3241)	-0.219	-0.366	0.293	0.227
H(3242)	-0.256	-0.284	0.344	0.227
H(3243)	-0.126	-0.289	0.356	0.227
H(3311)	0.216	0.048	0.352	0.104
H(3312)	0.114	0.039	0.403	0.104
H(3321)	0.265	0.225	0.387	0.113
H(3322)	0.174	0.209	0.445	0.113
H(3331)	0.384	0.149	0.445	0.189
H(3332)	0.296	0.141	0.505	0.189
H(3341)	0.439	0.320	0.480	0.217
H(3342)	0.472	0.277	0.542	0.217
H(3343)	0.358	0.310	0.543	0.217

Hydrogens included in calculation of structure factors but not refined
 $B_{iso}(H)=1.3*B_{iso}(C)$

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's

for C₇₂H₆₉O₂PW

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
W	0.04395(12)	0.04385(11)	0.04653(14)	0.01457(9)	0.00557(11)	0.01067(10)
P(3)	0.0606(11)	0.0510(10)	0.0685(13)	0.0151(8)	0.0109(10)	0.0202(9)
O(1)	0.056(2)	0.040(2)	0.044(2)	0.0158(17)	0.008(2)	0.0139(18)
O(2)	0.048(2)	0.047(2)	0.059(3)	0.0142(18)	0.007(2)	0.0208(19)
C(11)	0.044(3)	0.045(3)	0.052(4)	0.019(2)	0.009(3)	0.014(3)
C(12)	0.041(3)	0.051(3)	0.041(4)	0.019(2)	0.006(3)	0.010(3)
C(13)	0.045(3)	0.050(3)	0.048(4)	0.020(3)	0.007(3)	0.015(3)
C(14)	0.053(4)	0.046(3)	0.058(4)	0.011(3)	0.012(3)	0.024(3)
C(15)	0.051(4)	0.044(3)	0.051(4)	0.019(3)	0.004(3)	0.010(3)
C(16)	0.047(4)	0.056(3)	0.040(4)	0.016(3)	0.010(3)	0.016(3)
C(21)	0.042(3)	0.047(3)	0.047(4)	0.012(3)	0.003(3)	0.016(3)
C(22)	0.053(3)	0.041(3)	0.037(4)	0.022(2)	0.004(3)	0.010(3)
C(23)	0.047(4)	0.037(3)	0.056(4)	0.011(3)	0.003(3)	0.008(3)
C(24)	0.045(4)	0.049(4)	0.063(5)	0.012(3)	0.008(4)	0.009(3)
C(25)	0.047(4)	0.050(3)	0.051(4)	0.015(3)	-0.001(3)	0.008(3)
C(26)	0.046(3)	0.040(3)	0.053(4)	0.015(3)	0.006(3)	0.013(3)
C(121)	0.056(4)	0.048(3)	0.041(4)	0.024(3)	0.008(3)	0.010(3)
C(122)	0.054(4)	0.062(4)	0.055(4)	0.014(3)	-0.004(4)	0.019(3)
C(123)	0.046(4)	0.070(4)	0.066(5)	0.011(3)	-0.004(4)	0.013(4)
C(124)	0.071(4)	0.046(4)	0.062(5)	0.018(3)	-0.009(4)	-0.002(4)
C(125)	0.070(4)	0.062(4)	0.045(4)	0.020(3)	0.010(4)	0.008(3)
C(126)	0.049(4)	0.068(4)	0.041(4)	0.015(3)	0.008(3)	0.013(3)
C(131)	0.056(4)	0.058(3)	0.043(4)	0.026(3)	0.008(3)	0.020(3)
C(132)	0.065(4)	0.073(4)	0.052(4)	0.026(3)	0.007(4)	0.024(3)
C(133)	0.077(5)	0.090(5)	0.058(5)	0.036(4)	0.004(4)	0.024(4)
C(134)	0.107(6)	0.100(5)	0.047(4)	0.042(4)	0.013(4)	0.031(4)
C(135)	0.102(6)	0.091(5)	0.069(5)	0.027(4)	0.030(5)	0.043(4)
C(136)	0.079(5)	0.072(4)	0.061(5)	0.015(4)	0.005(4)	0.029(4)
C(151)	0.081(5)	0.046(3)	0.052(4)	0.013(3)	-0.002(4)	0.018(3)
C(152)	0.090(6)	0.059(4)	0.069(5)	0.007(4)	-0.003(5)	0.023(4)
C(153)	0.121(7)	0.057(5)	0.082(6)	-0.007(5)	-0.024(6)	0.012(4)
C(154)	0.189(10)	0.069(5)	0.067(6)	0.028(6)	-0.001(7)	0.011(5)
C(155)	0.152(7)	0.070(5)	0.071(6)	0.042(5)	0.028(6)	0.008(4)
C(156)	0.106(5)	0.055(4)	0.059(5)	0.033(4)	0.021(4)	0.014(4)
C(161)	0.064(4)	0.050(3)	0.056(4)	0.032(3)	0.016(3)	0.018(3)
C(162)	0.063(4)	0.080(4)	0.051(4)	0.030(3)	0.005(4)	0.016(4)
C(163)	0.100(5)	0.108(5)	0.047(5)	0.051(4)	-0.001(4)	0.009(4)
C(164)	0.139(7)	0.109(5)	0.053(5)	0.064(4)	0.028(5)	0.032(4)
C(165)	0.115(6)	0.076(5)	0.073(5)	0.037(4)	0.048(4)	0.030(4)
C(166)	0.084(5)	0.061(4)	0.054(5)	0.026(3)	0.021(4)	0.013(4)
C(221)	0.041(3)	0.051(3)	0.044(4)	0.014(3)	0.001(3)	0.007(3)
C(222)	0.051(4)	0.043(3)	0.063(5)	0.014(3)	0.007(3)	0.015(3)
C(223)	0.064(4)	0.049(3)	0.088(5)	0.019(3)	0.001(4)	0.027(3)
C(224)	0.065(4)	0.044(4)	0.085(6)	0.019(3)	0.004(4)	-0.002(4)

Anisotropic Temperature Factor Coefficients - U's (Continued)

for C₇₂H₆₉O₂PW

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
C(225)	0.071(4)	0.068(4)	0.054(5)	0.028(3)	0.006(4)	-0.005(4)
C(226)	0.066(4)	0.052(4)	0.062(5)	0.022(3)	0.003(4)	0.010(3)
C(231)	0.046(3)	0.048(3)	0.070(5)	0.024(3)	0.013(3)	0.016(3)
C(232)	0.060(4)	0.064(4)	0.085(6)	0.022(3)	0.013(4)	0.021(4)
C(233)	0.074(5)	0.070(4)	0.120(6)	0.024(4)	0.040(5)	0.046(4)
C(234)	0.053(4)	0.065(4)	0.171(9)	0.018(3)	0.016(5)	0.038(5)
C(235)	0.059(5)	0.066(5)	0.124(8)	0.015(4)	-0.012(5)	0.002(5)
C(236)	0.057(4)	0.061(4)	0.084(5)	0.012(3)	-0.001(4)	0.021(4)
C(251)	0.050(4)	0.051(4)	0.085(5)	0.016(3)	0.014(4)	0.015(4)
C(252)	0.190(7)	0.084(5)	0.129(7)	0.080(4)	0.097(6)	0.033(5)
C(253)	0.156(7)	0.099(6)	0.141(8)	0.064(5)	0.075(6)	0.007(6)
C(254)	0.122(6)	0.110(6)	0.204(12)	0.077(4)	0.026(8)	0.027(7)
C(255)	0.200(9)	0.083(5)	0.169(10)	0.066(5)	-0.048(8)	0.017(6)
C(256)	0.168(7)	0.072(4)	0.110(7)	0.070(4)	-0.041(6)	-0.001(5)
C(261)	0.044(3)	0.042(3)	0.068(5)	0.015(3)	0.004(3)	0.017(3)
C(262)	0.071(5)	0.055(4)	0.074(5)	0.007(4)	0.013(4)	0.002(4)
C(263)	0.081(6)	0.057(5)	0.109(7)	-0.001(4)	-0.005(6)	-0.014(5)
C(264)	0.070(5)	0.057(4)	0.151(8)	0.013(4)	0.009(5)	0.038(5)
C(265)	0.079(5)	0.079(4)	0.108(6)	0.022(4)	0.003(5)	0.053(4)
C(266)	0.076(5)	0.059(4)	0.087(5)	0.021(3)	-0.006(4)	0.034(3)
C(311)	0.074(5)	0.070(5)	0.084(6)	0.019(4)	0.030(4)	0.023(4)
C(312)	0.059(4)	0.141(7)	0.131(8)	0.045(4)	0.033(5)	0.023(6)
C(313)	0.089(7)	0.186(10)	0.219(12)	0.041(7)	0.055(8)	0.072(9)
C(314)	0.200(12)	0.291(19)	0.224(13)	-0.071(13)	0.128(10)	-0.105(14)
C(321)	0.085(5)	0.056(4)	0.090(6)	0.017(4)	0.006(5)	0.027(4)
C(322)	0.133(8)	0.070(5)	0.123(8)	-0.005(6)	0.026(7)	0.035(5)
C(323)	0.123(8)	0.062(5)	0.147(8)	-0.002(5)	0.016(7)	0.043(5)
C(324)	0.209(14)	0.115(8)	0.227(13)	-0.026(9)	0.043(11)	0.068(8)
C(331)	0.085(5)	0.077(5)	0.072(5)	0.017(4)	-0.003(5)	0.028(4)
C(332)	0.088(6)	0.100(6)	0.072(5)	0.019(5)	0.011(5)	0.033(4)
C(333)	0.123(8)	0.129(9)	0.155(10)	-0.001(7)	-0.059(7)	0.012(8)
C(334)	0.207(13)	0.177(11)	0.143(10)	0.025(10)	-0.036(10)	0.050(9)

The form of the anisotropic temperature factor is:

$$\exp[-2\pi (h^2a^{*2}U(1,1) + k^2b^{*2}U(2,2) + l^2c^{*2}U(3,3) + 2hka^*b^*U(1,2) + 2hla^*c^*U(1,3) + 2klb^*c^*U(2,3))] \text{ where } a^*, b^*, \text{ and } c^* \text{ are reciprocal lattice constants.}$$

Table of Bond Distances in Angstroms

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
W	P(3)	2.4915(19)	O(1)	C(11)	1.347(7)
W	O(1)	2.025(4)	O(2)	C(21)	1.361(7)
W	O(2)	1.987(4)	C(121)	C(122)	1.455(9)
W	C(121)	2.164(6)	C(121)	C(126)	1.433(8)
W	C(122)	2.343(7)	C(122)	C(123)	1.365(9)
W	C(123)	2.285(6)	C(123)	C(124)	1.446(9)
W	C(124)	2.212(7)	C(124)	C(125)	1.417(9)
W	C(125)	2.272(7)	C(125)	C(126)	1.398(9)
W	C(126)	2.256(7)			

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.

Table of Bond Distances in Angstroms

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
P(3)	C(311)	1.806(8)	C(162)	C(163)	1.371(10)
P(3)	C(321)	1.836(7)	C(163)	C(164)	1.373(12)
P(3)	C(331)	1.821(8)	C(164)	C(165)	1.360(12)
C(11)	C(12)	1.423(8)	C(165)	C(166)	1.387(10)
C(11)	C(16)	1.415(8)	C(221)	C(222)	1.389(8)
C(12)	C(13)	1.394(8)	C(221)	C(226)	1.392(9)
C(12)	C(121)	1.468(8)	C(222)	C(223)	1.366(9)
C(13)	C(14)	1.385(8)	C(223)	C(224)	1.382(10)
C(13)	C(131)	1.482(8)	C(224)	C(225)	1.350(10)
C(14)	C(15)	1.409(9)	C(225)	C(226)	1.395(9)
C(15)	C(16)	1.418(8)	C(231)	C(232)	1.370(9)
C(15)	C(151)	1.485(9)	C(231)	C(236)	1.406(9)
C(16)	C(161)	1.491(9)	C(232)	C(233)	1.380(10)
C(21)	C(22)	1.419(8)	C(233)	C(234)	1.373(12)
C(21)	C(26)	1.401(8)	C(234)	C(235)	1.356(13)
C(22)	C(23)	1.409(8)	C(235)	C(236)	1.375(10)
C(22)	C(221)	1.488(8)	C(251)	C(252)	1.344(11)
C(23)	C(24)	1.368(8)	C(251)	C(256)	1.370(11)
C(23)	C(231)	1.493(8)	C(252)	C(253)	1.376(12)
C(24)	C(25)	1.382(8)	C(253)	C(254)	1.346(16)
C(25)	C(26)	1.401(8)	C(254)	C(255)	1.363(16)
C(25)	C(251)	1.488(9)	C(255)	C(256)	1.435(14)
C(26)	C(261)	1.480(8)	C(261)	C(262)	1.387(9)
C(131)	C(132)	1.403(9)	C(261)	C(266)	1.386(9)
C(131)	C(136)	1.387(9)	C(262)	C(263)	1.405(10)
C(132)	C(133)	1.366(10)	C(263)	C(264)	1.369(12)
C(133)	C(134)	1.360(10)	C(264)	C(265)	1.346(12)
C(134)	C(135)	1.363(11)	C(265)	C(266)	1.379(10)
C(135)	C(136)	1.400(10)	C(311)	C(312)	1.481(11)
C(151)	C(152)	1.390(9)	C(312)	C(313)	1.541(14)
C(151)	C(156)	1.381(10)	C(313)	C(314)	1.225(17)
C(152)	C(153)	1.389(11)	C(321)	C(322)	1.509(11)
C(153)	C(154)	1.381(13)	C(322)	C(323)	1.512(12)
C(154)	C(155)	1.369(13)	C(323)	C(324)	1.407(14)
C(155)	C(156)	1.392(11)	C(331)	C(332)	1.484(10)
C(161)	C(162)	1.380(9)	C(332)	C(333)	1.543(13)
C(161)	C(166)	1.389(9)	C(333)	C(334)	1.403(15)

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.

Table of Bond Angles in Degrees

for C₇₂H₆₉O₂PW

Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
P(3)	W	O(1)	82.04(12)	C(121)	W	C(124)	80.8(2)
P(3)	W	O(2)	83.42(13)	C(121)	W	C(125)	65.9(2)
P(3)	W	C(121)	143.99(18)	C(121)	W	C(126)	37.8(2)
P(3)	W	C(122)	111.27(18)	C(122)	W	C(123)	34.3(2)
P(3)	W	C(123)	93.89(19)	C(122)	W	C(124)	64.6(2)
P(3)	W	C(124)	102.3(2)	C(122)	W	C(125)	74.1(3)
P(3)	W	C(125)	134.45(19)	C(122)	W	C(126)	65.4(2)
P(3)	W	C(126)	169.72(18)	C(123)	W	C(124)	37.5(2)
O(1)	W	O(2)	114.06(16)	C(123)	W	C(125)	64.8(3)
O(1)	W	C(121)	75.5(2)	C(123)	W	C(126)	78.1(2)
O(1)	W	C(122)	79.5(2)	C(124)	W	C(125)	36.8(2)
O(1)	W	C(123)	106.2(2)	C(124)	W	C(126)	67.4(3)
O(1)	W	C(124)	143.1(2)	C(125)	W	C(126)	36.0(2)
O(1)	W	C(125)	140.9(2)	W	O(1)	C(11)	118.4(4)
O(1)	W	C(126)	106.3(2)	W	O(2)	C(21)	133.9(4)
O(2)	W	C(121)	131.5(2)	W	C(121)	C(12)	111.4(4)
O(2)	W	C(122)	161.9(2)	W	C(121)	C(122)	78.0(4)
O(2)	W	C(123)	138.8(2)	W	C(121)	C(126)	74.6(4)
O(2)	W	C(124)	102.8(2)	C(12)	C(121)	C(122)	117.0(6)
O(2)	W	C(125)	88.1(2)	C(12)	C(121)	C(126)	123.8(6)
O(2)	W	C(126)	98.3(2)	C(122)	C(121)	C(126)	118.8(6)
C(121)	W	C(122)	37.4(2)	W	C(122)	C(121)	64.6(3)
C(121)	W	C(123)	66.6(2)	W	C(122)	C(123)	70.6(4)

Bond Angles (cont.)

Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
C(121)	C(122)	C(123)	120.2(6)	W	C(125)	C(124)	69.3(4)
W	C(123)	C(122)	75.2(4)	W	C(125)	C(126)	71.4(4)
W	C(123)	C(124)	68.5(4)	C(124)	C(125)	C(126)	123.5(7)
C(122)	C(123)	C(124)	120.3(6)	W	C(126)	C(121)	67.6(3)
W	C(124)	C(123)	74.0(4)	W	C(126)	C(125)	72.6(4)
W	C(124)	C(125)	73.9(4)	C(121)	C(126)	C(125)	117.1(6)
C(123)	C(124)	C(125)	117.0(6)				

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in
the least significant digits.