

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for **6**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2[h^2a^*{}^2U^{11} + \dots + 2hka^*b^*U^{12}]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Li(1)	0.0317(19)	0.0220(17)	0.0327(18)	0.0092(14)	0.0057(14)	0.0099(14)
P(1)	0.0228(3)	0.0200(3)	0.0303(3)	0.0092(2)	0.0082(2)	0.0098(2)
P(2)	0.0213(3)	0.0200(3)	0.0265(3)	0.0088(2)	0.0064(2)	0.0092(2)
N(1)	0.0434(11)	0.0320(10)	0.0467(11)	0.0192(9)	0.0128(9)	0.0166(9)
N(2)	0.0338(10)	0.0307(10)	0.0542(12)	0.0175(9)	0.0145(9)	0.0104(8)
N(3)	0.0400(11)	0.0339(10)	0.0329(10)	0.0061(8)	0.0038(8)	0.0166(9)
C(1)	0.0231(10)	0.0206(10)	0.0288(10)	0.0092(8)	0.0074(8)	0.0092(8)
C(2)	0.0267(11)	0.0220(10)	0.0299(11)	0.0094(9)	0.0083(8)	0.0081(9)
C(3)	0.0207(10)	0.0265(11)	0.0298(11)	0.0069(9)	0.0047(8)	0.0097(8)
C(4)	0.0360(12)	0.0289(11)	0.0427(13)	0.0108(10)	0.0123(10)	0.0153(10)
C(5)	0.0431(14)	0.0404(13)	0.0409(13)	0.0047(11)	0.0158(11)	0.0231(11)
C(6)	0.0436(14)	0.0559(16)	0.0307(12)	0.0132(11)	0.0148(10)	0.0247(12)
C(7)	0.0462(14)	0.0454(14)	0.0358(12)	0.0199(11)	0.0164(11)	0.0226(11)
C(8)	0.0330(12)	0.0316(12)	0.0312(11)	0.0089(9)	0.0094(9)	0.0158(10)
C(9)	0.0252(11)	0.0209(10)	0.0404(12)	0.0166(9)	0.0076(9)	0.0090(8)
C(10)	0.0311(12)	0.0367(12)	0.0445(13)	0.0235(10)	0.0126(10)	0.0165(10)
C(11)	0.0274(12)	0.0509(15)	0.0669(17)	0.0386(13)	0.0134(11)	0.0196(11)
C(12)	0.0329(13)	0.0416(13)	0.0532(15)	0.0282(12)	-0.0019(11)	0.0117(11)
C(13)	0.0447(14)	0.0319(12)	0.0397(13)	0.0158(10)	0.0023(11)	0.0154(10)
C(14)	0.0319(12)	0.0259(11)	0.0399(12)	0.0130(10)	0.0069(10)	0.0141(9)
C(15)	0.0306(11)	0.0196(10)	0.0275(10)	0.0057(8)	0.0042(9)	0.0123(9)
C(16)	0.0371(12)	0.0292(11)	0.0336(12)	0.0122(10)	0.0075(10)	0.0123(10)
C(17)	0.0619(17)	0.0367(13)	0.0332(12)	0.0175(11)	0.0094(11)	0.0180(12)
C(18)	0.0637(17)	0.0358(13)	0.0369(13)	0.0119(11)	-0.0075(12)	0.0237(12)
C(19)	0.0412(14)	0.0373(13)	0.0439(14)	0.0086(11)	-0.0046(11)	0.0209(11)
C(20)	0.0333(12)	0.0306(12)	0.0360(12)	0.0099(10)	0.0049(9)	0.0161(10)
C(21)	0.0180(10)	0.0217(10)	0.0313(11)	0.0097(9)	0.0064(8)	0.0065(8)
C(22)	0.0286(11)	0.0283(11)	0.0334(11)	0.0144(9)	0.0110(9)	0.0131(9)
C(23)	0.0347(12)	0.0300(11)	0.0409(13)	0.0118(10)	0.0145(10)	0.0176(10)
C(24)	0.0329(12)	0.0336(12)	0.0329(12)	0.0077(10)	0.0139(10)	0.0106(10)
C(25)	0.0474(14)	0.0389(13)	0.0320(12)	0.0184(10)	0.0151(10)	0.0152(11)
C(26)	0.0408(13)	0.0283(11)	0.0369(12)	0.0158(10)	0.0126(10)	0.0172(10)
C(27)	0.0545(16)	0.0518(16)	0.0636(17)	0.0236(14)	0.0151(13)	0.0322(13)
C(28)	0.0652(17)	0.0441(14)	0.0462(15)	0.0228(12)	0.0134(13)	0.0209(13)
C(29)	0.0564(16)	0.0321(13)	0.0683(17)	0.0287(13)	0.0152(13)	0.0144(12)
C(30)	0.0472(15)	0.0424(14)	0.0783(19)	0.0368(14)	0.0271(14)	0.0101(12)
C(31)	0.0365(14)	0.0479(15)	0.0741(18)	0.0272(14)	0.0240(13)	0.0183(12)
C(32)	0.0304(13)	0.0349(13)	0.0685(18)	0.0097(13)	0.0020(12)	0.0047(11)
C(33)	0.0394(14)	0.0458(14)	0.0452(14)	0.0040(12)	-0.0056(11)	0.0176(12)
C(34)	0.0655(17)	0.0502(15)	0.0348(13)	0.0147(12)	0.0050(12)	0.0230(13)
C(35)	0.0540(16)	0.0445(14)	0.0424(14)	0.0059(11)	0.0086(12)	0.0257(12)
C(36)	0.072(2)	0.094(3)	0.094(3)	0.031(2)	0.0007(19)	0.029(2)
C(37)	0.0501(18)	0.083(2)	0.078(2)	0.0231(19)	-0.0041(16)	0.0230(17)
C(38)	0.067(2)	0.074(2)	0.0501(17)	0.0069(16)	0.0096(14)	0.0389(17)
C(39)	0.081(3)	0.118(3)	0.089(3)	0.039(2)	0.026(2)	0.054(2)

C(40)	0.073(3)	0.148(4)	0.086(3)	0.043(3)	0.010(2)	0.053(3)
C(41)	0.075(3)	0.150(4)	0.065(2)	0.037(3)	0.0135(19)	0.055(3)
C(42)	0.0483(17)	0.110(3)	0.0390(16)	0.0168(17)	0.0091(13)	0.0301(18)
C(48)	0.42(4)	0.067(7)	0.034(5)	0.025(5)	0.042(13)	0.128(16)
C(47)	0.17(2)	0.34(4)	0.39(5)	0.34(4)	0.21(3)	0.20(3)
C(49)	0.18(3)	0.17(2)	0.20(3)	0.17(2)	0.16(2)	0.15(2)
C(44)	0.165(12)	0.108(10)	0.116(11)	0.098(10)	0.086(11)	0.098(10)
C(46)	0.116(9)	0.059(5)	0.041(4)	0.023(4)	0.014(5)	0.028(6)
C(43)	0.18(2)	0.070(8)	0.101(12)	0.062(8)	0.001(12)	0.020(10)
C(45)	0.16(2)	0.052(6)	0.035(6)	0.021(5)	0.032(8)	0.063(10)

Table 5. Hydrogen coordinates and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for **6**.

	x	y	z	U
H(2A)	-0.0765	0.5282	0.0695	0.033
H(2B)	0.0423	0.5047	0.0952	0.033
H(4)	-0.0398	0.9172	0.2921	0.044
H(5)	-0.1212	0.9272	0.4339	0.053
H(6)	-0.1618	0.7824	0.4810	0.052
H(7)	-0.1228	0.6291	0.3844	0.048
H(8)	-0.0457	0.6174	0.2413	0.039
H(10)	-0.2175	0.7737	0.1361	0.041
H(11)	-0.3861	0.7152	0.0059	0.051
H(12)	-0.3734	0.6354	-0.1607	0.050
H(13)	-0.1888	0.6171	-0.1984	0.047
H(14)	-0.0200	0.6740	-0.0691	0.039
H(16)	0.1776	0.6334	0.2645	0.041
H(17)	0.2780	0.6118	0.3911	0.053
H(18)	0.4911	0.6497	0.4137	0.056
H(19)	0.6053	0.7097	0.3080	0.052
H(20)	0.5061	0.7306	0.1809	0.041
H(22)	0.3359	0.5275	0.0363	0.035
H(23)	0.3890	0.4397	-0.1138	0.042
H(24)	0.3874	0.4991	-0.2395	0.043
H(25)	0.3340	0.6495	-0.2134	0.047
H(26)	0.2844	0.7391	-0.0629	0.040
H(27A)	0.1601	1.1110	0.2160	0.081
H(27B)	0.0562	0.9979	0.1301	0.081
H(27C)	0.1244	1.1002	0.1053	0.081
H(28A)	0.1840	0.9828	-0.0321	0.077
H(28B)	0.1112	0.8829	-0.0055	0.077
H(28C)	0.2544	0.9119	-0.0133	0.077
H(29A)	0.3681	1.1731	0.2025	0.061
H(29B)	0.3477	1.1424	0.0849	0.061
H(30A)	0.4522	1.0255	0.0587	0.065
H(30B)	0.5410	1.1442	0.1472	0.065
H(31A)	0.5113	0.9045	0.0960	0.078
H(31B)	0.5572	0.9310	0.2106	0.078
H(31C)	0.6334	1.0135	0.1663	0.078
H(32A)	0.4924	1.1693	0.3146	0.062
H(32B)	0.6133	1.1409	0.3173	0.062
H(33A)	0.5071	0.9975	0.3616	0.059
H(33B)	0.5118	1.1129	0.4427	0.059
H(34A)	0.3304	0.8756	0.3767	0.078
H(34B)	0.2062	0.8987	0.3877	0.078
H(34C)	0.3306	0.9756	0.4756	0.078
H(35A)	0.3242	1.1349	0.4694	0.075
H(35B)	0.1993	1.0609	0.3819	0.075
H(35C)	0.3183	1.1463	0.3662	0.075

H(36A)	0.9310	1.4697	0.3487	0.138
H(36B)	0.9225	1.3896	0.2350	0.138
H(36C)	1.0524	1.4505	0.3167	0.138
H(38)	0.9635	1.2206	0.2081	0.081
H(39)	0.9156	1.0745	0.2503	0.113
H(40)	0.8467	1.0837	0.3975	0.124
H(41)	0.8321	1.2497	0.5034	0.117
H(42)	0.8756	1.3945	0.4632	0.086
H(48)	0.6685	0.6643	0.6728	0.196
H(47)	0.7913	0.6049	0.5501	0.243
H(49)	0.4505	0.5796	0.6261	0.150
H(46)	0.6703	0.4547	0.3978	0.088
H(43A)	0.2771	0.4355	0.3932	0.179
H(43B)	0.2758	0.4663	0.5092	0.179
H(43C)	0.2688	0.3469	0.4357	0.179
H(45)	0.4719	0.3714	0.3577	0.092