

Table 1. Crystal data and structure refinement for 2.

Identification code	2
Empirical formula	C ₂₇ H ₃₇ Br O ₄
Formula weight	505.48
Temperature	298(2) K
Wavelength	1.54180 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P 2 ₁ /c
Unit cell dimensions	a = 12.7860(2) Å b = 4.9600(10) Å β = 103.100(4)° c = 22.162(3) Å
Volume	1368.9(3) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.226 Mg/m ³
Absorption coefficient	2.260 mm ⁻¹
F(000)	532
Crystal size	0.45 x 0.10 x 0.06 mm
Theta range for data collection	3.55 to 69.86 deg.
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 15, 0 ≤ k ≤ 6, -26 ≤ l ≤ 26
Reflections collected / unique	2693 / 2574 [R(int) = 0.0269]
Completeness to theta = 69.86	99.5 %
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	2574 / 0 / 149
Goodness-of-fit on F ²	1.033
Final R indices [I > 2σ(I)]	R ₁ = 0.0581, wR ₂ = 0.1564
R indices (all data)	R ₁ = 0.0843, wR ₂ = 0.1779
Largest diff. peak and hole	0.409 and -0.391 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Br(1)	203(1)	1010(3)	913(1)	89(1)
O(1)	-3397(2)	4307(5)	-533(1)	77(1)
O(2)	-1369(2)	-2274(5)	1383(1)	75(1)
C(1)	-3504(2)	983(6)	201(1)	54(1)
C(2)	-2857(2)	2714(6)	-60(1)	59(1)
C(3)	-1753(2)	2685(7)	157(2)	64(1)
C(4)	-1274(2)	1019(7)	631(1)	63(1)
C(5)	-1899(2)	-696(6)	905(1)	60(1)
C(6)	-3001(2)	-675(6)	684(1)	59(1)
C(7)	-4670(2)	971(6)	-43(1)	58(1)
C(8)	-2800(3)	5935(8)	-861(2)	85(1)
C(9)	-3587(5)	7480(13)	-1334(3)	128(2)
C(10)	-4303(7)	5968(17)	-1764(3)	205(4)
C(11)	-2007(3)	-4038(7)	1673(2)	68(1)
C(12)	-1247(3)	-5440(9)	2196(2)	88(1)
C(13)	-1859(4)	-7244(10)	2551(2)	103(1)
C(14)	-78(15)	1200(50)	846(10)	191(12)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 2.

Br(1)-C(4)	1.850(3)
O(1)-C(2)	1.368(4)
O(1)-C(8)	1.419(4)
O(2)-C(5)	1.367(4)
O(2)-C(11)	1.443(4)
C(1)-C(6)	1.387(4)
C(1)-C(2)	1.404(4)
C(1)-C(7)	1.466(4)
C(2)-C(3)	1.385(4)
C(3)-C(4)	1.367(4)
C(4)-C(5)	1.396(4)
C(4)-C(14)	1.498(19)
C(5)-C(6)	1.383(4)
C(7)-C(7)#1	1.323(5)
C(8)-C(9)	1.491(7)
C(9)-C(10)	1.382(8)
C(11)-C(12)	1.503(5)
C(12)-C(13)	1.519(6)
C(2)-O(1)-C(8)	119.0(2)
C(5)-O(2)-C(11)	117.6(2)
C(6)-C(1)-C(2)	117.8(2)
C(6)-C(1)-C(7)	122.5(2)
C(2)-C(1)-C(7)	119.7(3)
O(1)-C(2)-C(3)	124.7(3)
O(1)-C(2)-C(1)	115.3(2)
C(3)-C(2)-C(1)	120.0(3)
C(4)-C(3)-C(2)	121.1(3)
C(3)-C(4)-C(5)	120.1(2)
C(3)-C(4)-C(14)	117.1(9)
C(5)-C(4)-C(14)	122.7(9)
C(3)-C(4)-Br(1)	120.4(2)
C(5)-C(4)-Br(1)	119.4(2)
C(14)-C(4)-Br(1)	3.7(10)
O(2)-C(5)-C(6)	124.3(3)
O(2)-C(5)-C(4)	117.0(2)
C(6)-C(5)-C(4)	118.6(3)
C(5)-C(6)-C(1)	122.3(3)
C(7)#1-C(7)-C(1)	125.3(4)
O(1)-C(8)-C(9)	107.3(3)
C(10)-C(9)-C(8)	116.2(5)
O(2)-C(11)-C(12)	107.0(3)
C(11)-C(12)-C(13)	110.7(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x-1, -y, -z

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br(1)	40(1)	132(1)	93(1)	5(1)	12(1)	-11(1)
O(1)	55(1)	79(2)	95(2)	27(1)	15(1)	-14(1)
O(2)	50(1)	84(2)	84(1)	11(1)	4(1)	-3(1)
C(1)	41(1)	53(2)	70(2)	-3(1)	13(1)	-9(1)
C(2)	48(1)	56(2)	72(2)	-1(2)	14(1)	-9(1)
C(3)	48(1)	70(2)	76(2)	-4(2)	20(1)	-17(1)
C(4)	39(1)	77(2)	73(2)	-8(2)	12(1)	-10(1)
C(5)	47(1)	65(2)	68(2)	-5(2)	9(1)	-2(1)
C(6)	44(1)	57(2)	74(2)	-1(2)	12(1)	-10(1)
C(7)	42(1)	57(2)	73(2)	3(2)	10(1)	-5(1)
C(8)	81(2)	81(3)	101(3)	21(2)	35(2)	-11(2)
C(9)	144(5)	127(4)	119(4)	47(4)	39(3)	-19(4)
C(10)	272(11)	184(8)	121(5)	27(5)	-34(6)	-1(7)
C(11)	59(2)	69(2)	73(2)	-1(2)	8(1)	-6(2)
C(12)	81(2)	96(3)	80(2)	12(2)	7(2)	9(2)
C(13)	129(4)	89(3)	91(3)	8(2)	27(2)	-2(3)

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

	x	y	z	U(eq)
H(3)	-1231	4016	17	80
H(6)	-3519	-1814	873	70
H(7)	-5043	2681	-248	80
H(8A)	-2283	7294	-547	100
H(8B)	-2319	4670	-1088	100
H(9A)	-3160	8778	-1587	140
H(9B)	-4058	8694	-1090	140
H(10A)	-4856	7231	-2083	240
H(10B)	-4746	4670	-1520	240
H(10C)	-3847	4753	-2017	240
H(11A)	-2555	-2876	1864	90
H(11B)	-2420	-5328	1310	90
H(12A)	-715	-6689	2001	100
H(12B)	-782	-3975	2506	100
H(13A)	-1300	-8268	2918	140
H(13B)	-2324	-8714	2243	140
H(13C)	-2390	-6001	2748	140
H(14A)	158	-230	1220	170
H(14B)	185	3192	1008	170
H(14C)	286	643	469	170

Table 6. Torsion angles [deg] for 2.

C(8)-O(1)-C(2)-C(3)	4.4(5)
C(8)-O(1)-C(2)-C(1)	-174.3(3)
C(6)-C(1)-C(2)-O(1)	-179.8(3)
C(7)-C(1)-C(2)-O(1)	0.5(4)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	1.4(4)
C(7)-C(1)-C(2)-C(3)	-178.3(3)
O(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-179.6(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-1.0(5)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	0.1(5)
C(2)-C(3)-C(4)-C(14)	-178.1(10)
C(2)-C(3)-C(4)-Br(1)	180.0(2)
C(11)-O(2)-C(5)-C(6)	0.2(4)
C(11)-O(2)-C(5)-C(4)	179.5(3)
C(3)-C(4)-C(5)-O(2)	-178.9(3)
C(14)-C(4)-C(5)-O(2)	-0.8(12)
Br(1)-C(4)-C(5)-O(2)	1.2(4)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	0.4(5)
C(14)-C(4)-C(5)-C(6)	178.5(11)
Br(1)-C(4)-C(5)-C(6)	-179.5(2)
O(2)-C(5)-C(6)-C(1)	179.3(3)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	0.1(5)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-1.0(4)
C(7)-C(1)-C(6)-C(5)	178.7(3)
C(6)-C(1)-C(7)-C(7)#1	-18.0(6)
C(2)-C(1)-C(7)-C(7)#1	161.6(4)
C(2)-O(1)-C(8)-C(9)	-178.7(4)
O(1)-C(8)-C(9)-C(10)	-59.4(7)
C(5)-O(2)-C(11)-C(12)	-177.5(3)
O(2)-C(11)-C(12)-C(13)	177.1(3)

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

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	0	0	533	601	2	-1	1	1	352	339	2	10	4	1	19	18	6	-3	2	2	252	259	3	-9	1	3	225	227	3
2	0	0	388	430	2	0	1	1	641	587	19	11	4	1	0	1	9	-2	2	2	148	155	2	-8	1	3	221	225	3
3	0	0	190	214	2	1	1	1	552	545	3	-8	5	1	10	7	9	-1	2	2	76	55	1	-7	1	3	79	79	2
4	0	0	66	53	1	2	1	1	140	127	2	-7	5	1	6	13	6	0	2	2	129	118	4	-6	1	3	324	314	3
5	0	0	176	186	2	3	1	1	63	66	1	-6	5	1	38	52	4	1	2	2	51	39	2	-5	1	3	425	415	3
6	0	0	871	843	5	4	1	1	227	207	2	-5	5	1	0	9	1	2	2	2	71	64	1	-4	1	3	57	58	1
7	0	0	365	346	3	5	1	1	55	61	1	-4	5	1	6	6	6	3	2	2	0	7	1	-3	1	3	38	51	2
8	0	0	155	161	2	6	1	1	98	88	1	-3	5	1	7	18	7	4	2	2	73	68	1	-2	1	3	66	71	1
9	0	0	168	172	2	7	1	1	128	128	2	-2	5	1	38	35	4	5	2	2	0	18	1	-1	1	3	1071	1056	5
10	0	0	50	52	3	8	1	1	0	22	1	-1	5	1	21	16	6	6	2	2	118	118	2	0	1	3	503	491	5
11	0	0	92	93	2	9	1	1	29	31	4	0	5	1	75	83	2	7	2	2	100	99	2	1	1	3	543	522	3
12	0	0	94	110	2	10	1	1	53	54	3	1	5	1	19	9	8	8	2	2	92	91	2	2	1	3	33	37	2
13	0	0	97	96	2	11	1	1	76	72	2	2	5	1	15	7	14	9	2	2	53	54	2	3	1	3	446	455	3
14	0	0	17	9	6	12	1	1	120	125	2	3	5	1	0	4	1	10	2	2	111	103	2	4	1	3	21	11	3
15	0	0	21	29	4	13	1	1	47	45	2	4	5	1	21	22	6	11	2	2	11	9	10	5	1	3	467	444	3
1	1	0	56	45	1	14	1	1	69	71	2	5	5	1	10	10	9	12	2	2	0	9	1	6	1	3	350	349	3
2	1	0	68	67	1	-14	2	1	98	91	2	6	5	1	20	17	6	13	2	2	30	24	3	7	1	3	157	158	2
3	1	0	172	158	2	-13	2	1	111	110	2	7	5	1	11	0	10	14	2	2	26	21	3	8	1	3	198	201	3
4	1	0	139	125	2	-12	2	1	73	76	2	8	5	1	0	0	10	-13	3	2	17	16	6	9	1	3	142	139	2
5	1	0	180	163	2	-11	2	1	75	82	2	-1	6	1	54	54	2	-12	3	2	46	45	3	10	1	3	117	118	2
6	1	0	158	161	2	-10	2	1	127	114	2	0	6	1	2	23	2	-11	3	2	109	93	2	11	1	3	81	77	2
7	1	0	16	12	6	-9	2	1	86	96	2	-1	6	1	32	30	3	-10	3	2	30	22	4	12	1	3	136	126	2
8	1	0	182	188	2	-8	2	1	132	128	2	-15	0	2	109	107	2	-9	3	2	86	80	2	13	1	3	115	116	2
9	1	0	123	117	2	-7	2	1	218	207	3	-14	0	2	125	131	2	-8	3	2	50	43	2	14	1	3	108	104	2
10	1	0	180	184	2	-6	2	1	83	79	2	-13	0	2	169	168	2	-7	3	2	195	203	3	-14	2	3	11	6	10
11	1	0	128	131	2	-5	2	1	146	150	2	-12	0	2	183	177	2	-6	3	2	32	41	4	-13	2	3	16	15	7
12	1	0	58	48	2	-4	2	1	80	79	1	-11	0	2	196	207	3	-5	3	2	115	100	2	-12	2	3	28	32	4
13	1	0	30	37	3	-3	2	1	245	239	2	-10	0	2	130	127	2	-4	3	2	28	12	4	-11	2	3	0	21	1
14	1	0	67	73	2	-2	2	1	118	115	1	-9	0	2	289	289	2	-3	3	2	195	182	3	-10	2	3	38	27	3
0	2	0	74	81	1	-1	2	1	149	134	2	-8	0	2	177	187	2	-2	3	2	118	122	2	-9	2	3	359	363	4
1	2	0	34	40	2	0	2	1	98	95	3	-7	0	2	369	376	2	-1	3	2	234	223	3	-8	2	3	184	190	2
2	2	0	170	165	2	1	2	1	302	280	2	-6	0	2	846	866	5	0	3	2	128	127	1	-7	2	3	89	84	2
3	2	0	277	272	3	2	2	1	268	248	2	-5	0	2	353	355	4	1	3	2	248	241	3	-6	2	3	157	167	2
4	2	0	108	116	1	3	2	1	177	181	2	-4	0	2	826	863	2	2	3	2	361	350	3	-5	2	3	208	197	3
5	2	0	0	5	1	4	2	1	349	340	3	-3	0	2	967	1036	5	3	3	2	64	56	2	-4	2	3	46	52	2
6	2	0	23	11	3	5	2	1	200	189	2	-2	0	2	979	1104	9	4	3	2	115	119	2	-3	2	3	555	522	3
7	2	0	80	83	2	6	2	1	302	298	3	-1	0	2	436	486	5	5	3	2	77	74	2	-2	2	3	505	492	3
8	2	0	29	20	4	7	2	1	189	172	2	0	0	2	966	1085	5	6	3	2	42	29	3	-1	2	3	291	285	2
9	2	0	125	127	2	8	2	1	250	247	3	1	0	2	71	67	4	7	3	2	174	172	2	0	2	3	392	375	9
10	2	0	28	12	3	9	2	1	85	81	2	2	0	2	871	962	1	8	3	2	354	365	4	1	2	3	415	387	3
11	2	0	19	14	8	10	2	1	140	144	2	3	0	2	443	480	2	9	3	2	29	23	5	2	2	3	430	405	3
12	2	0	29	26	4	11	2	1	89	90	2	4	0	2	261	285	3	10	3	2	50	51	3	3	2	3	108	104	1
13	2	0	52	44	2	12	2	1	96	95	2	5	0	2	612	626	3	11	3	2	18	19	7	4	2	3	24	11	4
14	2	0	45	38	2	13	2	1	76	78	2	6	0	2	75	57	1	12	3	2	7	4	6	5	2	3	210	216	3
1	3	0	98	85	2	14	2	1	83	78	2	7	0	2	124	119	1	-11	4	2	12	9	12	6	2	3	293	286	3
2	3	0	133	123	2	-13	3	1	26	26	3	8	0	2	141	159	2	-10	4	2	0	11	1	7	2	3	82	79	2
3	3	0	276	258	3	-12	3	1	36	36	3	9	0	2	196	204	3	-9	4	2	81	84	2	8	2	3	211	202	3
4	3	0	29	22	4	-11	3	1	10	22	10	10	0	2	144	155	2	-8	4	2	97	96	2	9	2	3	0	8	1
5	3	0	257	260	3	-10	3	1	51	50	3	11	0	2	23	20	4	-7	4	2	12	20	12	10	2	3	45	38	3
6	3	0	164	161	2	-9	3	1	33	25	5	12	0	2	173	178	2	-6	4	2	20	17	8	11	2	3	11	22	4
7	3	0	175	168	2	-8	3	1	98	104	2	13	0	2	194	205	3	-5	4	2	0	13	1	12	2	3	28	26	4
8	3	0	268	253	3	-7	3	1	65	55	2	14	0	2	130	134	2	-4	4	2	25	15	5	13	2	3	38	32	3
9	3	0	158	151	2	-6	3	1	120	123	2	-15	1	2	12	33	12	-3	4	2	42	43	3	-13	3	3	25	24	4
10	3	0	43	43	3	-5	3	1	92	85	2	-14	1	2	65	67	2	-2	4	2	90	87	2	-12	3	3	33	33	4
11	3	0	128	131	2	-4	3	1	49	48	2	-13	1	2	38	37	3	-1	4	2	0	2	1	-11	3	3	33	32	4
12	3	0	91	96	2	-3	3	1	0	10	1	-12	1	2	21	19	6	0	4	2	77	75	2	-10	3	3	5	10	4
13	3	0	55	51	2	-2	3	1	90	78	2	-11	1	2	0	20	1	1	4	2	0	4	1	-9	3	3	0	23	1
0	4	0	81	75	2	-1	3	1	39	32	3	-10	1	2	50	50	3	2	4	2	44	38	3	-8	3	3	21	7	6
1	4	0	7	3	7	0	3	1	79	71	1	-9	1	2	67	63	2	3	4	2	15	8	15	-7	3	3	43	49	3
2	4	0	89	94	2	1	3	1	36	36	3	-8	1	2	52	45	2	4	4	2	58	53	3	-6	3	3	31	26	4

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

Page 2

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s												
4	4	3	55	50	3	-5	2	4	176	167	2	-5	1	5	116	101	1	8	4	5	0	16	1	1	2	6	119	111	1	
5	4	3	21	14	7	-4	2	4	312	304	3	-4	1	5	278	264	2	9	4	5	47	39	3	2	2	6	344	333	2	
6	4	3	36	42	4	-3	2	4	105	116	1	-3	1	5	131	135	2	10	4	5	21	19	4	1	2	6	42	51	3	
7	4	3	32	24	4	-2	2	4	208	177	2	-2	1	5	51	46	1	-8	5	5	0	5	5	1	4	2	6	17	5	6
8	4	3	59	68	3	-1	2	4	86	82	1	-1	1	5	1165	1169	6	-7	5	5	22	24	5	5	2	6	56	60	2	
9	4	3	39	32	3	0	2	4	101	95	3	0	1	5	650	651	2	-6	5	5	11	9	11	5	2	6	207	197	3	
10	4	3	29	29	3	1	2	4	128	112	2	1	1	5	232	215	2	-5	5	5	20	4	11	5	2	6	172	176	2	
-8	5	3	0	4	1	2	2	4	210	175	2	2	1	5	488	501	3	-4	5	5	13	11	12	8	2	6	58	53	2	
-7	5	3	0	2	1	3	2	4	32	28	3	3	1	5	298	297	2	-3	5	5	13	16	12	9	2	6	87	85	2	
-6	5	3	57	53	3	4	2	4	345	337	3	4	1	5	30	51	3	-2	5	5	33	31	4	10	2	6	24	30	3	
-5	5	3	10	21	9	5	2	4	125	123	2	5	1	5	497	495	3	-1	5	5	127	134	2	11	2	6	52	46	3	
-4	5	3	22	17	6	6	2	4	116	114	2	6	1	5	202	190	3	0	5	5	27	25	9	12	2	6	11	10	11	
-3	5	3	21	5	6	7	2	4	73	69	2	7	1	5	147	137	2	0	5	5	0	7	1	13	2	6	19	7	4	
-2	5	3	0	0	1	8	2	4	130	130	3	8	1	5	148	149	2	2	5	5	0	3	1	11	2	6	25	24	3	
-1	5	3	68	66	3	9	2	4	41	40	3	9	1	5	122	115	2	3	5	5	19	1	6	12	2	6	20	29	6	
0	0	5	95	89	2	10	2	4	107	102	2	10	1	5	131	134	2	4	5	5	0	14	1	10	2	6	103	95	2	
1	0	5	10	18	10	11	2	4	51	51	2	11	1	5	0	7	1	5	5	71	77	2	11	2	6	29	31	4		
2	0	5	45	40	3	12	2	4	45	44	2	12	1	5	31	30	4	6	5	5	0	3	4	12	2	6	100	100	2	
3	0	5	42	43	3	13	2	4	14	12	9	13	1	5	10	6	9	7	5	5	18	5	4	13	2	6	92	90	2	
4	0	5	33	32	3	-13	3	4	0	14	1	-14	2	5	23	24	3	7	5	5	24	27	4	14	2	6	83	78	2	
5	0	5	33	3	3	-12	3	4	13	24	13	-14	2	5	71	72	2	-15	0	6	24	27	4	15	2	6	110	104	2	
6	0	5	13	12	12	-11	3	4	64	71	3	-13	2	5	81	78	2	-14	0	6	18	24	7	16	2	6	0	14	5	
7	0	5	16	11	5	-10	3	4	63	65	3	-12	2	5	143	150	2	-13	0	6	91	88	2	17	2	6	21	20	5	
8	0	5	110	114	2	-9	3	4	86	96	2	-11	2	5	74	81	2	-12	0	6	77	81	2	18	2	6	17	15	7	
-14	0	4	47	52	2	-7	3	4	50	45	3	-10	2	5	0	11	1	-10	0	6	186	183	3	19	2	6	21	18	5	
-13	0	4	124	127	2	-6	3	4	148	150	2	-9	2	5	259	266	4	-8	0	6	189	183	3	20	2	6	67	66	2	
-12	0	4	152	159	2	-5	3	4	75	65	2	-8	2	5	152	144	2	-7	0	6	232	238	3	21	2	6	101	95	2	
-11	0	4	179	186	2	-4	3	4	206	218	2	-7	2	5	308	305	3	-6	0	6	290	288	3	22	2	6	87	85	2	
-10	0	4	114	122	2	-3	3	4	183	183	2	-6	2	5	390	381	3	-5	0	6	331	331	3	23	2	6	16	14	10	
-9	0	4	150	159	2	-2	3	4	131	137	2	-5	2	5	100	100	2	-4	0	6	306	335	3	24	2	6	87	85	2	
-8	0	4	80	79	2	-1	3	4	54	56	2	-4	2	5	236	208	3	-3	0	6	540	556	3	25	2	6	103	101	2	
-7	0	4	68	69	1	0	3	4	144	143	2	-3	2	5	342	327	3	-2	0	6	737	790	4	26	2	6	99	97	2	
-6	0	4	155	156	2	1	3	4	175	174	2	-1	2	5	92	97	1	-1	0	6	229	249	2	27	2	6	157	152	2	
-5	0	4	118	136	2	2	3	4	239	237	3	0	2	5	226	209	2	0	0	6	1013	1067	5	28	2	6	21	17	6	
-4	0	4	130	146	2	2	3	4	0	17	1	1	1	5	152	161	6	1	0	6	395	429	4	29	2	6	82	74	2	
-3	0	4	556	596	3	4	3	4	74	74	2	2	2	5	135	121	3	2	0	6	770	804	4	30	2	6	26	26	4	
-2	0	4	198	195	2	5	3	4	27	14	4	3	2	5	303	300	2	3	0	6	460	480	3	31	2	6	43	44	2	
-1	0	4	419	471	2	6	3	4	91	85	2	4	4	5	62	54	2	4	0	6	176	189	2	32	2	6	21	19	5	
0	0	4	152	144	1	7	3	4	63	60	2	5	2	5	149	123	2	5	0	6	185	182	2	33	2	6	49	47	3	
1	0	4	544	605	3	8	3	4	142	149	2	6	2	5	139	139	2	6	0	6	145	139	2	34	2	6	0	13	1	
2	0	4	495	489	3	9	3	4	37	37	2	7	2	5	234	215	3	7	0	6	196	191	3	35	2	6	41	42	3	
3	0	4	358	360	2	10	3	4	41	36	3	8	2	5	98	92	2	8	0	6	51	38	2	36	2	6	90	95	2	
4	0	4	519	511	3	11	3	4	43	43	3	9	2	5	44	42	3	9	0	6	54	57	2	37	2	6	25	27	3	
5	0	4	537	565	3	12	3	4	70	65	2	10	2	5	147	147	2	10	0	6	75	74	2	38	2	6	59	54	3	
6	0	4	297	313	3	-11	4	4	0	8	3	11	2	5	123	120	2	11	0	6	86	96	2	39	2	6	91	99	2	
7	0	4	318	345	3	-10	4	4	46	48	3	12	2	5	61	61	2	12	0	6	51	45	2	40	2	6	25	23	3	
8	0	4	260	254	3	-9	4	4	10	17	10	13	2	5	97	93	2	13	0	6	50	46	2	41	2	6	91	99	2	
9	0	4	285	289	3	-8	4	4	54	51	3	-13	3	5	0	4	1	14	0	6	68	58	2	42	2	6	110	109	2	

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	1	7	223	224	2	0	5	7	0	13	1	-12	3	8	23	24	5	-9	2	9	96	99	2	-3	0	10	34	10	2
3	1	7	224	218	3	1	5	7	58	69	3	-11	3	8	36	30	3	-8	2	9	250	246	3	-2	0	10	289	301	3
4	1	7	26	12	3	2	5	7	29	27	4	-10	3	8	26	29	4	-7	2	9	72	79	2	-1	0	10	170	171	3
5	1	7	228	224	3	3	5	7	41	43	3	-9	3	8	18	17	9	-6	2	9	205	208	3	0	0	10	240	274	3
6	1	7	7	4	6	4	5	7	43	38	5	-8	3	8	50	55	3	-5	2	9	204	214	3	1	0	10	215	218	3
7	1	7	29	27	3	5	5	7	23	28	5	-7	3	8	45	43	3	-4	2	9	54	43	2	2	0	10	345	388	3
8	1	7	80	86	2	6	5	7	13	13	9	-6	3	8	78	80	2	-3	2	9	86	96	2	3	0	10	390	408	3
9	1	7	173	176	2	-15	0	8	111	116	2	-5	3	8	26	35	5	-2	2	9	572	563	4	4	0	10	448	471	3
10	1	7	17	17	9	-14	0	8	111	116	2	-4	3	8	163	143	2	-1	2	9	336	334	3	5	0	10	151	151	2
11	1	7	35	35	3	-13	0	8	82	86	2	-3	3	8	37	45	3	0	2	9	65	71	1	6	0	10	97	97	2
12	1	7	80	84	2	-12	0	8	181	179	2	-2	3	8	161	152	2	1	2	9	217	214	3	7	0	10	144	146	2
13	1	7	55	55	2	-11	0	8	62	62	2	-1	3	8	133	138	2	2	2	9	30	34	3	8	0	10	109	105	2
-14	2	7	72	73	2	-10	0	8	241	245	3	0	3	8	142	147	1	3	2	9	18	8	5	9	0	10	132	132	2
-13	2	7	36	31	2	-9	0	8	364	378	4	1	3	8	146	136	2	4	2	9	204	203	3	10	0	10	137	132	2
-12	2	7	58	57	3	-8	0	8	276	286	3	2	3	8	46	49	3	5	2	9	119	105	2	11	0	10	71	72	2
-11	2	7	73	67	2	-7	0	8	226	231	3	3	3	8	117	114	2	6	2	9	0	12	1	12	0	10	53	48	2
-10	2	7	10	16	9	-6	0	8	237	235	3	4	3	8	77	83	2	7	2	9	107	114	2	-15	1	10	38	41	2
-9	2	7	61	63	2	-5	0	8	140	139	2	5	3	8	120	122	2	8	2	9	0	3	1	-14	1	10	53	52	2
-8	2	7	161	158	2	-4	0	8	156	146	2	6	3	8	24	33	6	9	2	9	42	48	3	-13	1	10	104	102	2
-7	2	7	83	90	2	-3	0	8	349	378	2	7	3	8	73	75	2	10	2	9	52	47	2	-12	1	10	46	46	3
-6	2	7	169	155	2	-2	0	8	270	263	2	8	3	8	11	9	11	11	2	9	68	71	2	-11	1	10	10	6	9
-5	2	7	92	85	2	-1	0	8	157	162	2	9	3	8	38	39	3	12	2	9	39	34	2	-10	1	10	145	144	2
-4	2	7	141	137	2	0	0	8	74	82	1	10	3	8	0	14	1	-13	3	9	0	1	1	-9	1	10	56	61	2
-3	2	7	72	54	1	1	0	8	106	109	1	-11	3	8	25	30	4	-12	3	9	0	1	1	-8	1	10	172	171	2
-2	2	7	586	580	4	2	0	8	189	201	2	-11	4	8	11	24	11	-11	3	9	10	11	10	-7	1	10	307	309	3
-1	2	7	61	56	2	3	0	8	273	261	3	-10	4	8	49	44	2	-10	3	9	16	7	10	-6	1	10	163	165	2
0	2	7	37	31	4	4	0	8	56	53	1	-9	4	8	12	7	11	-9	3	9	20	3	7	-5	1	10	13	8	9
1	2	7	273	263	3	5	0	8	124	140	1	-8	4	8	24	2	4	-8	3	9	0	0	1	-4	1	10	185	187	3
2	2	7	244	242	3	6	0	8	244	240	3	-7	4	8	73	72	2	-7	3	9	13	2	13	-3	1	10	27	24	2
3	2	7	230	227	3	7	0	8	154	168	2	-6	4	8	54	61	3	-6	3	9	0	10	1	-2	1	10	214	217	3
4	2	7	257	247	3	8	0	8	232	220	3	-5	4	8	25	7	4	-5	3	9	15	16	14	-1	1	10	66	67	1
5	2	7	146	146	2	9	0	8	92	107	2	-4	4	8	28	35	5	-4	3	9	18	16	10	0	1	10	40	50	1
6	2	7	121	123	2	10	0	8	70	72	2	-3	4	8	8	15	7	-3	3	9	0	2	1	1	1	10	240	227	3
7	2	7	318	317	4	11	0	8	133	140	2	-2	4	8	117	123	2	-2	3	9	0	15	1	2	1	10	162	173	2
8	2	7	45	37	3	12	0	8	99	101	2	-1	4	8	81	89	2	-1	3	9	15	6	10	3	1	10	22	21	4
9	2	7	71	67	2	13	0	8	91	92	2	0	4	8	108	107	1	0	3	9	49	54	2	4	1	10	38	38	2
10	2	7	52	57	3	-15	1	8	0	2	1	1	4	8	15	22	14	1	3	9	21	17	6	5	1	10	86	88	2
11	2	7	53	54	2	-14	1	8	0	8	7	2	4	8	41	38	3	2	3	9	39	39	3	6	1	10	171	171	2
12	2	7	69	64	2	-13	1	8	18	7	6	3	4	8	13	19	13	3	3	9	29	22	5	7	1	10	80	79	2
-13	3	7	0	2	1	-12	1	8	89	91	2	4	4	8	73	74	3	4	3	9	39	35	3	8	1	10	56	56	2
-12	3	7	13	20	13	-11	1	8	100	98	2	5	4	8	29	25	3	5	3	9	25	14	5	9	1	10	8	10	7
-11	3	7	38	40	4	-10	1	8	201	203	3	6	4	8	22	21	6	6	3	9	0	2	1	10	1	10	71	75	2
-10	3	7	35	31	4	-9	1	8	190	197	3	7	4	8	34	41	3	7	3	9	0	2	1	11	1	10	53	54	2
-9	3	7	44	41	3	-8	1	8	96	100	2	8	4	8	19	5	5	8	3	9	31	31	4	12	1	10	74	67	2
-8	3	7	59	56	2	-7	1	8	84	76	2	9	4	8	38	35	2	9	3	9	38	36	2	-14	2	10	25	22	3
-7	3	7	0	26	1	-6	1	8	36	44	2	-8	5	8	11	6	10	10	3	9	28	24	4	-13	2	10	0	9	1
-6	3	7	34	29	4	-5	1	8	249	246	3	-7	5	8	23	15	4	-11	4	9	0	5	1	-12	2	10	73	67	2
-5	3	7	56	56	2	-4	1	8	377	401	3	-6	5	8	0	2	1	-10	4	9	0	18	1	-11	2	10	0	25	1
-4	3	7	8	2	7	-3	1	8	473	472	3	-5	5	8	48	43	3	-9	4	9	16	14	8	-10	2	10	50	46	3
-3	3	7	23	29	5	-2	1	8	303	331	2	-4	5	8	11	8	10	-8	4	9	57	54	2	-9	2	10	63	57	2
-2	3	7	36	28	3	-1	1	8	121	127	1	-3	5	8	40	39	3	-7	4	9	29	26	4	-8	2	10	60	53	3
-1	3	7	62	57	2	0	1	8	241	255	2	-2	5	8	7	0	7	-6	4	9	0	5	1	-7	2	10	66	62	2
0	3	7	33	32	2	1	1	8	477	466	3	-1	5	8	25	29	5	-5	4	9	21	17	7	-6	2	10	35	35	3
1	3	7	53	43	2	2	1	8	144	158	2	0	5	8	0	3	1	-4	4	9	27	27	5	-5	2	10	41	43	3
2	3	7	16	4	7	3	1	8	98	90	1	1	5	8	21	20	5	-3	4	9	47	45	3	-4	2	10	111	125	3
3	3	7	0	7	1	4	1	8	110	106	1	2	5	8	11	11	10	-2	4	9	192	204	3	-3	2	10	190	174	3
4	3	7	0	15	1	5	1	8	195	197	3	3	5	8	0	16	1	-1	4	9	13	13	13	-2	2	10	224	206	3
5	3	7	27	18	4	6	1	8	90	91	2	4	5	8	19	11	5	0	4	9	69	68	2	-1	2	10	142	141	2
6	3	7	8	2	7	7	1	8	275	265	3	5	5	8	0	8	1	1	4	9	47	52	3	0	2	10	85	84	1
7	3	7	0	14	1	8	1	8	149	143	2	6	5	8	23	24	4	2	4	9	20	17	7	1	2	10	69	66	2
8	3	7	19	7	6	9	1																						

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

Page 4

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s											
10	3	10	57	48	2	-8	3	11	36	41	3	1	1	12	62	67	2	-8	1	13	61	66	2	2	5	13	0	8	1
-11	4	10	13	19	11	-7	3	11	9	4	8	2	1	12	9	29	9	-7	1	13	177	171	2	-14	0	14	117	114	2
-10	4	10	5	9	5	-6	3	11	13	4	13	3	1	12	53	63	2	-6	1	13	159	168	2	-13	0	14	66	66	2
-9	4	10	21	10	5	-5	3	11	39	38	4	4	1	12	31	33	3	-5	1	13	83	85	2	-12	0	14	65	61	3
-8	4	10	27	36	4	-4	3	11	67	69	3	5	1	12	133	134	2	-4	1	13	181	178	2	-11	0	14	154	155	2
-7	4	10	0	15	1	-3	3	11	59	76	3	6	1	12	194	202	3	-3	1	13	124	127	2	-10	0	14	113	114	2
-6	4	10	0	11	1	-2	3	11	98	88	2	7	1	12	65	72	2	-2	1	13	138	129	2	-9	0	14	136	142	2
-5	4	10	30	29	4	-1	3	11	0	2	1	8	1	12	21	28	5	-1	1	13	46	53	2	-8	0	14	330	348	4
-4	4	10	55	55	3	0	3	11	62	53	2	9	1	12	0	19	1	0	1	13	157	159	1	-7	0	14	160	164	2
-3	4	10	23	22	6	1	3	11	0	3	1	10	1	12	42	43	3	1	1	13	9	32	9	-6	0	14	112	119	2
-2	4	10	164	163	2	2	3	11	73	69	2	11	1	12	36	35	3	2	1	13	34	33	3	-5	0	14	43	47	2
-1	4	10	0	13	1	3	3	11	35	35	4	-14	2	12	20	12	4	3	1	13	20	11	5	-4	0	14	58	53	2
0	4	10	51	47	2	4	3	11	64	64	2	-13	2	12	28	30	4	4	1	13	40	26	3	-3	0	14	20	8	4
1	4	10	13	12	13	5	3	11	0	28	1	-12	2	12	25	23	5	5	1	13	25	30	4	-2	0	14	41	40	2
2	4	10	19	26	10	6	3	11	17	12	6	-11	2	12	14	17	14	6	1	13	11	15	10	-1	0	14	104	105	2
3	4	10	0	6	1	7	3	11	6	1	6	-10	2	12	8	15	7	7	1	13	62	63	2	0	0	14	196	183	2
4	4	10	69	73	3	8	3	11	0	5	1	-9	2	12	19	5	5	8	1	13	64	56	2	1	0	14	90	94	2
5	4	10	35	41	3	9	3	11	0	2	1	-8	2	12	67	61	2	9	1	13	31	37	4	2	0	14	135	147	2
6	4	10	56	56	2	10	3	11	0	2	1	-7	2	12	43	41	3	10	1	13	67	66	2	3	0	14	104	109	2
7	4	10	0	4	1	-10	4	11	0	17	1	-6	2	12	13	24	12	-14	2	13	55	53	4	4	0	14	183	202	2
8	4	10	12	12	11	-9	4	11	28	22	3	-5	2	12	99	81	2	-13	2	13	18	14	5	5	0	14	356	379	4
-7	5	10	17	7	6	-8	4	11	57	63	3	-4	2	12	12	9	11	-13	2	13	15	3	6	6	0	14	74	73	2
-6	5	10	19	9	5	-7	4	11	0	2	1	-3	2	12	0	11	1	-12	2	13	30	25	3	7	0	14	80	86	2
-5	5	10	0	8	1	-6	4	11	39	43	4	-2	2	12	124	114	2	-11	2	13	10	9	10	8	0	14	98	106	2
-4	5	10	12	0	11	-5	4	11	15	23	15	-1	2	12	82	84	2	-10	2	13	27	22	4	9	0	14	105	106	2
-3	5	10	0	1	1	-4	4	11	29	38	5	0	2	12	52	47	5	-9	2	13	55	52	3	10	0	14	82	84	2
-2	5	10	22	13	5	-3	4	11	0	23	1	1	2	12	22	5	3	-8	2	13	0	6	1	11	0	14	112	103	2
-1	5	10	0	4	1	-2	4	11	74	71	3	2	2	12	55	49	2	-7	2	13	33	26	4	-14	1	14	16	11	6
0	5	10	21	24	4	-1	4	11	19	19	8	3	2	12	25	23	5	-6	2	13	37	36	3	-13	1	14	24	15	4
1	5	10	0	2	1	0	4	11	19	25	19	4	2	12	42	35	3	-5	2	13	114	122	2	-12	1	14	69	74	2
2	5	10	26	22	4	1	4	11	50	54	3	5	2	12	0	4	1	-4	2	13	69	58	2	-11	1	14	66	64	2
3	5	10	0	1	1	2	4	11	41	38	3	6	2	12	0	12	1	-3	2	13	153	164	2	-10	1	14	22	22	6
4	5	10	17	10	6	3	4	11	44	47	3	7	2	12	0	14	1	-2	2	13	88	88	2	-9	1	14	33	37	3
5	5	10	0	1	1	4	4	11	12	3	11	8	2	12	16	16	8	-1	2	13	155	154	2	-8	1	14	51	45	3
-15	1	11	23	25	3	5	4	11	0	1	1	9	2	12	13	22	12	0	2	13	92	93	2	-7	1	14	104	113	2
-14	1	11	50	48	2	6	4	11	26	36	5	10	2	12	11	3	10	2	2	13	131	135	2	-6	1	14	107	105	2
-13	1	11	21	31	6	7	4	11	0	1	1	11	2	12	34	32	2	2	2	13	123	118	2	-5	1	14	156	166	2
-12	1	11	20	17	6	8	4	11	0	7	1	-12	3	12	72	63	3	3	2	13	130	136	2	-4	1	14	67	61	2
-11	1	11	77	77	2	-7	5	11	9	3	9	-11	3	12	42	40	3	4	2	13	134	136	2	-3	1	14	136	149	2
-10	1	11	26	23	5	-6	5	11	6	11	5	-10	3	12	32	30	3	5	2	13	66	62	2	-2	1	14	72	71	2
-9	1	11	140	144	2	-5	5	11	11	23	10	-9	3	12	27	34	5	6	2	13	72	78	3	-1	1	14	99	102	2
-8	1	11	111	108	2	-4	5	11	29	31	4	-8	3	12	93	97	2	7	2	13	40	44	3	0	1	14	121	123	1
-7	1	11	11	6	11	-3	5	11	0	3	1	-7	3	12	104	107	2	8	2	13	95	92	2	1	1	14	98	107	2
-6	1	11	92	86	2	-2	5	11	6	21	6	-6	3	12	0	22	1	9	2	13	15	15	10	2	1	14	114	120	2
-5	1	11	134	139	2	-1	5	11	0	4	1	-5	3	12	29	11	4	10	2	13	39	38	3	3	1	14	110	111	2
-4	1	11	192	187	2	0	5	11	43	41	2	-4	3	12	31	27	4	-12	3	13	19	17	5	4	1	14	24	25	5
-3	1	11	261	263	3	1	5	11	0	1	1	-3	3	12	287	308	4	-11	3	13	9	14	9	5	1	14	0	21	1
-2	1	11	270	273	3	2	5	11	18	13	6	-2	3	12	34	45	4	-10	3	13	9	13</							

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
5	3	14	8	5	7	5	3	15	29	18	3	9	2	16	0	4	1	4	3	17	0	5	1	4	3	18	31	30	4
6	3	14	33	27	3	6	3	15	16	23	7	-11	3	16	31	25	3	5	3	17	18	4	3	5	3	18	21	18	4
7	3	14	13	9	13	7	3	15	26	21	3	-10	3	16	26	20	4	6	3	17	15	2	5	6	3	18	10	12	9
8	3	14	57	52	2	8	3	15	0	3	1	-9	3	16	96	95	2	-8	4	17	19	18	5	-7	4	18	0	8	1
-10	4	14	12	5	11	-9	4	15	22	22	4	-8	3	16	0	35	1	-7	4	17	13	12	13	-6	4	18	8	8	1
-9	4	14	33	26	5	-8	4	15	17	21	7	-7	3	16	58	53	3	-6	4	17	0	17	1	-5	4	18	0	2	3
-8	4	14	27	28	5	-7	4	15	9	2	9	-6	3	16	58	50	3	-5	4	17	33	32	3	-4	4	18	46	43	3
-7	4	14	0	2	1	-6	4	15	0	2	1	-5	3	16	18	3	7	-4	4	17	46	47	3	-3	4	18	49	45	3
-6	4	14	12	4	12	-5	4	15	35	31	3	-4	3	16	24	23	4	-3	4	17	7	13	6	-2	4	18	19	9	5
-5	4	14	0	2	1	-4	4	15	18	31	9	-3	3	16	90	92	2	-2	4	17	31	25	4	-1	4	18	9	8	8
-4	4	14	18	7	9	-3	4	15	36	43	3	-2	3	16	0	13	1	-1	4	17	23	19	5	0	4	18	17	13	4
-3	4	14	0	8	1	-2	4	15	62	64	2	-1	3	16	46	45	3	0	4	17	0	3	1	1	4	18	0	2	1
-2	4	14	0	31	1	-1	4	15	0	9	1	0	3	16	48	49	2	1	4	17	19	18	6	2	4	18	11	7	10
-1	4	14	0	26	1	0	4	15	26	18	3	1	3	16	0	5	1	2	4	17	17	17	6	-12	1	19	39	35	3
0	4	14	18	7	4	1	4	15	0	11	1	2	3	16	46	48	3	3	4	17	27	26	4	-11	1	19	34	30	3
1	4	14	7	13	7	2	4	15	0	4	1	3	3	16	0	3	1	-13	0	18	32	28	3	-10	1	19	70	73	2
2	4	14	10	10	10	3	4	15	19	6	5	4	3	16	10	9	10	-12	0	18	78	81	2	-9	1	19	93	89	2
3	4	14	30	26	3	4	4	15	19	19	5	5	3	16	22	20	4	-11	0	18	67	67	2	-8	1	19	56	52	2
4	4	14	0	6	1	5	4	15	0	8	1	6	3	16	25	17	3	-10	0	18	91	84	2	-7	1	19	15	5	11
5	4	14	17	22	8	-3	5	15	12	9	11	7	3	16	34	37	3	-9	0	18	51	45	3	-6	1	19	74	67	2
6	4	14	13	10	7	-2	5	15	10	3	10	-9	4	16	0	4	1	-8	0	18	104	109	2	-5	1	19	40	45	3
-5	5	14	17	3	5	-1	5	15	16	15	7	-8	4	16	8	12	8	-7	0	18	112	104	2	-4	1	19	60	61	2
-4	5	14	16	18	7	-14	0	16	30	31	3	-7	4	16	9	7	8	-6	0	18	102	105	2	-3	1	19	95	90	2
-3	5	14	0	0	1	-13	0	16	26	37	5	-6	4	16	31	18	4	-5	0	18	109	104	2	-2	1	19	65	61	2
-2	5	14	0	3	1	-12	0	16	30	28	3	-5	4	16	29	33	4	-4	0	18	137	131	2	-1	1	19	23	4	4
-1	5	14	0	3	1	-11	0	16	50	45	3	-4	4	16	50	56	2	-3	0	18	97	98	2	0	1	19	50	45	2
0	5	14	5	8	5	-10	0	16	53	52	3	-3	4	16	41	38	3	-2	0	18	64	68	2	1	1	19	23	28	5
1	5	14	9	8	9	-9	0	16	38	35	3	-2	4	16	46	50	3	-1	0	18	157	152	2	2	1	19	0	4	1
-14	1	15	35	40	2	-8	0	16	29	20	4	-1	4	16	12	8	12	0	0	18	46	44	2	3	1	19	5	3	4
-13	1	15	88	87	2	-7	0	16	63	67	2	0	4	16	27	25	3	1	0	18	60	53	2	4	1	19	98	95	2
-12	1	15	35	35	3	-6	0	16	80	76	2	1	4	16	33	35	4	2	0	18	17	20	9	5	1	19	13	13	12
-11	1	15	0	24	1	-5	0	16	41	41	3	2	4	16	24	23	4	3	0	18	30	31	3	6	1	19	25	19	4
-10	1	15	124	120	2	-4	0	16	121	117	2	3	4	16	13	21	13	4	0	18	49	50	3	7	1	19	34	28	3
-9	1	15	88	85	2	-3	0	16	154	161	2	4	4	16	16	6	7	5	0	18	82	81	2	-12	2	19	25	30	4
-8	1	15	0	3	1	-2	0	16	161	171	2	-13	1	17	54	53	2	6	0	18	17	15	6	-11	2	19	24	27	4
-7	1	15	64	73	3	-1	0	16	319	318	3	-12	1	17	50	53	3	7	0	18	0	16	1	-10	2	19	31	26	3
-6	1	15	45	43	3	0	0	16	54	49	4	-11	1	17	67	59	2	8	0	18	24	18	3	-9	2	19	0	8	1
-5	1	15	92	97	10	1	0	16	95	100	2	-10	1	17	54	53	3	-13	1	18	27	23	3	-8	2	19	30	17	4
-4	1	15	17	10	6	2	0	16	109	113	2	-9	1	17	60	64	3	-12	1	18	24	27	5	-7	2	19	42	48	3
-3	1	15	26	24	3	3	0	16	36	41	3	-8	1	17	46	41	3	-11	1	18	49	43	2	-6	2	19	16	23	14
-2	1	15	54	46	2	4	0	16	114	115	2	-7	1	17	28	25	4	-10	1	18	0	11	1	-5	2	19	0	10	1
-1	1	15	107	107	2	5	0	16	258	264	3	-6	1	17	95	94	2	-9	1	18	51	55	3	-4	2	19	125	131	2
0	1	15	20	12	3	6	0	16	80	77	2	-5	1	17	150	135	2	-8	1	18	24	27	6	-3	2	19	58	54	3
1	1	15	83	83	2	7	0	16	0	8	1	-4	1	17	81	87	2	-7	1	18	57	56	3	-2	2	19	71	70	2
2	1	15	88	93	2	8	0	16	46	39	2	-3	1	17	120	112	2	-6	1	18	80	74	3	-1	2	19	53	60	3
3	1	15	189	200	2	9	0	16	9	16	8	-2	1	17	99	88	2	-5	1	18	25	6	4	0	2	19	0	4	1
4	1	15	83	80	2	10	0	16	13	19	7	-1	1	17	153	157	2	-4	1	18	50	39	2	1	2	19	15	11	8
5	1	15	122	124	2	-14	1	16	16	7	6	0	1	17	110	111	4	-3	1	18	36	35	3	2	2	19	101	109	2
6	1	15	40	42	3	-13	1	16	8	7	7	1	1	17	32	25	3	-2	1	18	43	40	3	3	2	19	62	55	2
7	1	15	0	19	1	-12	1	16	91	93	2	2	1	17	11	17	10	-1	1	18	23	23	5	4	2	19	37	32	3
8	1	15	37	40	3	-11	1	16	132	127	2	3	1	17	61	63	2	0	1	18	30	33	2	5	2	19	35	34	3
9	1	15	54	55	2	-10	1	16	25	26	6	4	1	17	13	8	13	1	1	18	82	88	2	6	2	19	0	2	1
10	1	15	53	45	2	-9	1	16	36	36	3	5	1	17	110	118	2	2	1	18	45	51	3	7	2	19	43	40	2
-13	2	15	61	55	2	-8	1	16	35	24	3	6	1	17	71	69	2	3	1	18	79	84	2	-10	3	19	15	11	6
-12	2	15	49	48	2	-7	1	16	27	26	4	7	1	17	16	10	5	4	1	18	102	102	2	-9	3	19	16	9	6
-11	2	15	54	58	2	-6	1	16	79	83	2	8	1	17	23	21	4	5	1	18	16	11	7	-8	3	19	6	3	6
-10	2	15	43	47	3	-5	1	16	156	155	2	9	1	17	0	9	1	6	1	18	46	41	3	-7	3	19	0	2	1
-9	2	15	135	131	2	-4	1	16	0	7	1	-12	2	17	31	32	3	7	1	18	41	37	3	-6	3	19	0	6	1
-8	2	15	80	82	2	-3	1	16	27	33	4	-11	2	17	69	70	2	8	1	18	39	38	3	-5	3	19	15	10	14
-7	2	15	53	48	3	-2	1	16	19	13	7	-10	2	17	13	18	12	-12	2	18	0	5	1	-4	3	19	0	7	1
-6	2																												

Table 7. Observed and calculated structure factors for 2

Page 6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	0	20	75	78	2	-1	3	20	29	24	3	-2	3	21	6	12	6	0	2	22	17	8	3	-7	0	24	27	28	3
5	0	20	10	20	9	0	3	20	31	37	3	-1	3	21	9	6	9	1	2	22	17	0	5	-6	0	24	10	7	9
6	0	20	55	50	2	1	3	20	0	12	1	0	3	21	19	19	4	2	2	22	11	2	10	-5	0	24	70	73	2
7	0	20	31	31	3	2	3	20	0	3	1	1	3	21	9	6	8	3	2	22	0	21	1	-4	0	24	130	124	2
-12	1	20	18	8	4	3	3	20	0	7	1	2	3	21	0	2	1	4	2	22	20	23	4	-3	0	24	9	2	9
-11	1	20	17	8	5	4	3	20	22	14	3	3	3	21	0	0	1	-7	3	22	16	1	4	-2	0	24	50	47	3
-10	1	20	63	58	2	-4	4	20	0	11	1	-11	0	22	28	36	4	-6	3	22	25	27	4	-1	0	24	14	2	10
-9	1	20	38	37	3	-3	4	20	0	9	1	-10	0	22	0	13	1	-5	3	22	0	7	1	0	0	24	19	13	5
-8	1	20	16	18	10	-2	4	20	26	13	3	-9	0	22	15	2	7	-4	3	22	26	19	4	1	0	24	0	5	1
-7	1	20	0	14	1	-1	4	20	13	5	8	-8	0	22	20	16	5	-3	3	22	0	2	1	2	0	24	50	52	2
-6	1	20	20	33	7	-11	1	21	0	2	1	-7	0	22	73	68	3	-2	3	22	20	12	5	3	0	24	0	8	1
-5	1	20	11	11	10	-10	1	21	27	28	4	-6	0	22	32	32	4	-1	3	22	0	7	1	-9	1	24	0	3	1
-4	1	20	95	96	2	-9	1	21	33	28	3	-5	0	22	56	50	3	0	3	22	14	1	4	-8	1	24	0	7	1
-3	1	20	145	140	2	-8	1	21	0	4	1	-4	0	22	69	63	2	1	3	22	0	9	1	-7	1	24	6	5	6
-2	1	20	65	60	2	-7	1	21	25	12	4	-3	0	22	24	23	6	-10	1	23	14	13	6	-6	1	24	9	4	9
-1	1	20	45	44	3	-6	1	21	6	14	6	-2	0	22	60	56	3	-9	1	23	19	17	6	-5	1	24	58	50	2
0	1	20	9	8	9	-5	1	21	112	99	2	-1	0	22	64	64	2	-8	1	23	22	21	5	-4	1	24	10	13	9
1	1	20	21	11	6	-4	1	21	19	14	6	0	0	22	72	73	6	-7	1	23	0	5	1	-3	1	24	20	12	5
2	1	20	8	8	7	-3	1	21	64	72	3	1	0	22	26	23	4	-6	1	23	17	5	6	-2	1	24	0	14	1
3	1	20	64	65	2	-2	1	21	54	48	2	2	0	22	57	58	2	-5	1	23	91	86	2	-1	1	24	21	6	4
4	1	20	67	64	2	-1	1	21	50	46	3	3	0	22	26	29	4	-4	1	23	71	61	2	0	1	24	0	11	1
5	1	20	20	17	5	0	1	21	46	40	4	4	0	22	35	37	3	-3	1	23	0	14	1	1	1	24	24	26	4
6	1	20	32	27	3	1	1	21	67	73	3	5	0	22	0	13	1	-2	1	23	58	54	3	2	1	24	17	20	6
7	1	20	9	3	9	2	1	21	55	53	3	-11	1	22	0	4	1	-1	1	23	0	2	1	3	1	24	22	17	3
-11	2	20	26	21	3	3	1	21	21	19	5	-10	1	22	28	24	3	0	1	23	0	13	1	-7	2	24	18	15	5
-10	2	20	59	58	2	4	1	21	69	72	2	-9	1	22	27	32	5	1	1	23	33	35	3	-6	2	24	0	7	1
-9	2	20	30	21	3	5	1	21	32	30	3	-8	1	22	34	23	3	2	1	23	28	36	4	-5	2	24	0	13	1
-8	2	20	23	32	6	-6	1	21	17	12	4	-7	1	22	36	35	3	3	1	23	11	6	11	-4	2	24	11	4	10
-7	2	20	0	4	1	-10	2	21	51	53	2	-6	1	22	31	31	4	4	1	23	19	24	4	-3	2	24	0	9	1
-6	2	20	61	59	3	-9	2	21	26	23	4	-5	1	22	68	67	2	-9	2	23	27	21	3	-2	2	24	0	12	1
-5	2	20	18	1	7	-8	2	21	11	10	11	-4	1	22	7	1	7	-8	2	23	0	6	1	-1	2	24	23	17	4
-4	2	20	60	57	2	-7	2	21	21	30	6	-3	1	22	47	47	3	-7	2	23	7	17	6	0	2	24	0	2	1
-3	2	20	0	0	1	-6	2	21	69	63	2	-2	1	22	32	30	3	-6	2	23	20	19	5	1	2	24	8	1	8
-2	2	20	18	19	5	-5	2	21	0	21	1	-1	1	22	15	15	9	-5	2	23	14	15	11	-8	1	25	11	9	10
-1	2	20	35	31	3	-4	2	21	57	49	2	0	1	22	0	11	1	-4	2	23	9	1	9	-7	1	25	11	13	11
0	2	20	18	16	4	-3	2	21	4	13	4	1	1	22	46	47	2	-3	2	23	23	23	5	-6	1	25	8	2	8
1	2	20	19	10	4	-2	2	21	56	61	3	2	1	22	39	34	3	-2	2	23	0	10	1	-5	1	25	0	16	1
2	2	20	26	23	4	-1	2	21	42	42	3	3	1	22	7	12	6	-1	2	23	0	1	1	-4	1	25	11	12	10
3	2	20	0	13	1	0	2	21	0	16	1	4	1	22	0	12	1	0	2	23	0	9	1	-3	1	25	0	1	1
4	2	20	26	37	4	1	2	21	6	14	6	5	1	22	8	4	7	1	2	23	27	20	3	-2	1	25	24	19	3
5	2	20	21	17	5	2	2	21	0	12	1	-10	2	22	0	3	1	2	2	23	30	28	3	-1	1	25	0	3	1
6	2	20	0	19	1	3	2	21	0	0	1	-9	2	22	0	0	1	3	2	23	56	50	2	0	1	25	9	7	9
-9	3	20	13	7	7	4	2	21	26	29	4	-8	2	22	31	28	3	-5	3	23	18	9	5	-5	2	25	16	11	5
-8	3	20	0	6	1	5	2	21	9	23	9	-7	2	22	0	3	1	-4	3	23	0	0	1	-5	2	25	32	28	2
-7	3	20	21	16	5	-8	3	21	12	2	8	-6	2	22	14	19	13	-3	3	23	16	5	4	-4	2	25	10	6	10
-6	3	20	50	47	3	-7	3	21	0	10	1	-5	2	22	24	16	4	-2	3	23	13	5	12	-3	2	25	23	28	4
-5	3	20	0	9	1	-6	3	21	6	12	6	-4	2	22	24	1	5	-1	3	23	0	10	1	-2	2	25	19	15	4
-4	3	20	63	55	2	-5	3	21	21	11	4	-3	2	22	0	6	1	-10	0	24	47	47	2	-1	2	25	22	18	4
-3	3	20	12	13	12	-4	3	21	15	8	8	-2	2	22	35	25	3	-9	0	24	15	21	8	0	0	26	50	50	4
-2	3	20	0	24	1	-3	3	21	9	1	9	-1	2	22	26	24	5	-8	0	24	0	5	1	0	0	26	50	50	4

Table 1. Crystal data and structure refinement for 3.

Identification code	3
Empirical formula	C ₂₈ H ₃₈ O ₅
Formula weight	454.58
Temperature	298(2) K
Wavelength	1.54180 Å
Crystal system, space group	Triclinic, P $\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 4.3338(4) \text{ Å}$ $\alpha = 69.577(3)^\circ$ $b = 10.8355(3) \text{ Å}$ $\beta = 88.566(2)^\circ$ $c = 14.9591(3) \text{ Å}$ $\gamma = 83.458(2)^\circ$
Volume	653.94(6) Å ³
Z, Calculated density	1, 1.154 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.621 mm ⁻¹
F(000)	246
Crystal size	1.06 x 0.10 x 0.06 mm
Theta range for data collection	3.15 to 69.83 deg.
Limiting indices	$-4 \leq h \leq 4$, $-13 \leq k \leq 13$, $-18 \leq l \leq 18$
Reflections collected / unique	5526 / 2410 [R(int) = 0.0604]
Completeness to theta = 69.83	97.1 %
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	2410 / 0 / 168
Goodness-of-fit on F ²	1.041
Final R indices [I > 2σ(I)]	R ₁ = 0.0593, wR ₂ = 0.1730
R indices (all data)	R ₁ = 0.0660, wR ₂ = 0.1825
Largest diff. peak and hole	0.209 and -0.251 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	U(eq)
O(1)	-95(3)	7404(1)	5315(1)	55(1)
C(1)	-559(4)	8730(1)	3621(1)	48(1)
C(2)	381(4)	8916(1)	2695(1)	49(1)
C(3)	2524(4)	7956(1)	2528(1)	47(1)
C(4)	3631(4)	6832(1)	3282(1)	46(1)
C(5)	2705(3)	6637(1)	4213(1)	41(1)
C(6)	604(3)	7618(1)	4382(1)	43(1)
C(7)	-1140(30)	10023(12)	1849(8)	47(2)
O(5)	-2672(7)	10973(3)	1983(2)	75(1)
C(7A)	-710(40)	10213(14)	1932(10)	61(3)
O(2)	3402(3)	8210(1)	1600(1)	64(1)
C(8)	5404(4)	7220(2)	1382(1)	59(1)
C(9)	6045(6)	7724(2)	334(1)	74(1)
C(10)	7818(7)	6664(3)	22(2)	94(1)
C(11)	-2394(4)	8286(2)	5551(1)	53(1)
C(12)	-2384(5)	7891(2)	6620(1)	66(1)
C(13)	-3127(6)	6502(2)	7133(2)	85(1)
C(14)	3849(3)	5450(1)	5013(1)	44(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 3.

O(1)-C(6)	1.3639(17)
O(1)-C(11)	1.4263(17)
C(1)-C(2)	1.386(2)
C(1)-C(6)	1.392(2)
C(2)-C(3)	1.399(2)
C(2)-C(7A)	1.502(15)
C(2)-C(7)	1.508(12)
C(3)-O(2)	1.3708(18)
C(3)-C(4)	1.386(2)
C(4)-C(5)	1.391(2)
C(5)-C(6)	1.4064(19)
C(5)-C(14)	1.4636(19)
C(7)-O(5)	1.235(12)
O(2)-C(8)	1.424(2)
C(8)-C(9)	1.500(2)
C(9)-C(10)	1.511(3)
C(11)-C(12)	1.504(2)
C(12)-C(13)	1.500(3)
C(14)-C(14)#1	1.323(3)
C(6)-O(1)-C(11)	119.77(11)
C(2)-C(1)-C(6)	121.33(14)
C(1)-C(2)-C(3)	118.93(13)
C(1)-C(2)-C(7A)	117.8(6)
C(3)-C(2)-C(7A)	122.9(6)
C(1)-C(2)-C(7)	122.0(4)
C(3)-C(2)-C(7)	118.5(4)
C(7A)-C(2)-C(7)	13.3(9)
O(2)-C(3)-C(4)	124.02(14)
O(2)-C(3)-C(2)	116.09(12)
C(4)-C(3)-C(2)	119.89(14)
C(3)-C(4)-C(5)	121.60(14)
C(4)-C(5)-C(6)	118.40(12)
C(4)-C(5)-C(14)	122.00(13)
C(6)-C(5)-C(14)	119.60(13)
O(1)-C(6)-C(1)	124.46(13)
O(1)-C(6)-C(5)	115.71(12)
C(1)-C(6)-C(5)	119.81(13)
O(5)-C(7)-C(2)	118.8(9)
C(3)-O(2)-C(8)	118.27(12)
O(2)-C(8)-C(9)	108.42(14)
C(8)-C(9)-C(10)	111.58(17)
O(1)-C(11)-C(12)	107.40(13)
C(13)-C(12)-C(11)	113.99(16)
C(14)#1-C(14)-C(5)	126.08(17)

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

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	57(1)	56(1)	42(1)	-14(1)	2(1)	22(1)
C(1)	47(1)	41(1)	49(1)	-13(1)	-3(1)	10(1)
C(2)	51(1)	41(1)	45(1)	-7(1)	-6(1)	6(1)
C(3)	52(1)	45(1)	39(1)	-9(1)	-1(1)	3(1)
C(4)	50(1)	42(1)	41(1)	-11(1)	-1(1)	9(1)
C(5)	40(1)	39(1)	41(1)	-11(1)	-3(1)	5(1)
C(6)	41(1)	44(1)	41(1)	-13(1)	-1(1)	4(1)
C(7)	59(4)	36(3)	37(3)	-8(2)	-4(3)	10(3)
O(5)	96(2)	56(1)	58(1)	-13(1)	-7(1)	34(1)
C(7A)	82(6)	49(4)	49(3)	-18(2)	-20(3)	4(3)
O(2)	82(1)	56(1)	39(1)	-6(1)	6(1)	15(1)
C(8)	67(1)	59(1)	44(1)	-14(1)	3(1)	5(1)
C(9)	92(2)	77(1)	46(1)	-17(1)	11(1)	-3(1)
C(10)	116(2)	103(2)	70(1)	-44(1)	26(1)	-9(2)
C(11)	50(1)	51(1)	58(1)	-22(1)	6(1)	10(1)
C(12)	69(1)	70(1)	63(1)	-33(1)	10(1)	7(1)
C(13)	103(2)	81(1)	65(1)	-20(1)	20(1)	-7(1)
C(14)	47(1)	43(1)	36(1)	-9(1)	0(1)	8(1)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1)	-1992	9357	3743	57
H(4)	4923	6094	3236	72(6)
H(7)	-680	9949	1364	56
H(7AA)	128	10220	1330	73
H(7AB)	-9	10926	2086	73
H(7AC)	-2935	10323	1893	73
H(8A)	4474	6409	1635	79(4)
H(8B)	7468	7048	1796	79(4)
H(9A)	7296	8417	214	96(5)
H(9B)	4099	7958	14	96(5)
H(10A)	6504	5989	66	113
H(10B)	9613	6278	428	113
H(10C)	8461	7050	-625	113
H(11A)	-1707	9203	5246	64
H(11B)	-4346	8224	5207	64
H(12A)	-352	7981	6832	79
H(12B)	-3888	8498	6796	79
H(13A)	-3184	6333	7807	102
H(13B)	-1560	5888	7003	102
H(13C)	-5113	6396	6916	102
H(14)	2661	5252	5639	49

Table 6. Torsion angles [deg] for 3.

C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	0.5(2)
C(6)-C(1)-C(2)-C(7A)	-173.2(6)
C(6)-C(1)-C(2)-C(7)	172.2(6)
C(1)-C(2)-C(3)-O(2)	-178.86(14)
C(7A)-C(2)-C(3)-O(2)	-5.5(6)
C(7)-C(2)-C(3)-O(2)	9.1(6)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	1.0(2)
C(7A)-C(2)-C(3)-C(4)	174.4(6)
C(7)-C(2)-C(3)-C(4)	-171.0(6)
O(2)-C(3)-C(4)-C(5)	178.76(14)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-1.1(3)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.3(2)
C(3)-C(4)-C(5)-C(14)	179.67(14)
C(11)-O(1)-C(6)-C(1)	6.6(2)
C(11)-O(1)-C(6)-C(5)	-174.90(13)
C(2)-C(1)-C(6)-O(1)	176.51(14)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-1.9(2)
C(4)-C(5)-C(6)-O(1)	-176.76(13)
C(14)-C(5)-C(6)-O(1)	3.2(2)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	1.8(2)
C(14)-C(5)-C(6)-C(1)	-178.18(14)
C(1)-C(2)-C(7)-O(5)	18.7(12)
C(3)-C(2)-C(7)-O(5)	-169.5(7)
C(7A)-C(2)-C(7)-O(5)	-57(4)
C(4)-C(3)-O(2)-C(8)	4.6(3)
C(2)-C(3)-O(2)-C(8)	-175.52(14)
C(3)-O(2)-C(8)-C(9)	-179.65(15)
O(2)-C(8)-C(9)-C(10)	-172.67(18)
C(6)-O(1)-C(11)-C(12)	-173.62(14)
O(1)-C(11)-C(12)-C(13)	-60.3(2)
C(4)-C(5)-C(14)-C(14)#1	10.7(3)
C(6)-C(5)-C(14)-C(14)#1	-169.28(19)

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

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	0	0	65	67	6	1	12	0	11	12	1	-1	0	1	88	81	1	0	11	1	21	22	1	4	-1	2	35	33	2
2	0	0	53	52	5	-1	-12	1	5	2	1	0	0	1	318	341	7	1	11	1	29	31	1	-4	0	2	9	7	1
3	0	0	158	156	14	0	-12	1	4	3	1	1	0	1	693	619	3	2	11	1	17	16	1	-3	0	2	28	23	1
4	0	0	49	52	5	-2	-11	1	8	7	1	2	0	1	89	86	4	3	11	1	8	8	1	-2	0	2	89	77	1
-4	1	0	26	26	1	-1	-11	1	10	8	1	3	0	1	25	22	1	-1	12	1	22	20	1	-1	0	2	321	282	5
-3	1	0	8	5	2	0	-11	1	10	9	1	4	0	1	59	64	3	0	12	1	10	9	1	0	0	2	32	31	1
-2	1	0	98	101	7	-1	-11	1	2	4	2	-4	1	1	39	42	4	1	12	1	6	5	1	1	0	2	367	332	5
-1	1	0	337	350	18	-3	-10	1	7	4	1	-3	1	1	112	110	11	2	12	1	13	14	1	2	0	2	70	62	1
0	1	0	170	170	3	-2	-10	1	12	10	1	-2	1	1	8	3	11	-2	-11	2	11	11	1	3	0	2	18	16	1
1	1	0	257	263	9	-1	-10	1	32	34	1	-1	1	1	242	238	14	-1	-11	2	6	8	1	4	0	2	1	0	1
2	1	0	19	20	1	0	-10	1	28	29	1	0	1	1	394	415	12	0	-11	2	0	2	1	-4	1	2	19	21	1
3	1	0	12	14	1	-1	-10	1	20	19	1	1	1	1	170	177	8	1	-11	2	14	13	1	-3	1	2	69	61	5
4	1	0	73	69	1	2	-10	1	6	4	1	2	1	1	119	118	4	-3	-10	2	14	14	1	-2	1	2	134	127	7
-4	2	0	63	68	4	-3	-9	1	5	9	4	3	1	1	54	53	2	-2	-10	2	11	11	1	-1	1	2	94	89	3
-3	2	0	59	58	3	-2	-9	1	19	20	1	4	1	1	17	17	1	-1	-10	2	13	12	1	0	1	2	112	118	1
-2	2	0	14	17	1	-1	-9	1	6	7	1	-4	2	1	13	14	1	0	-10	2	7	9	1	1	1	2	515	526	38
-1	2	0	10	9	1	0	-9	1	4	0	1	-3	2	1	147	149	12	1	-10	2	16	16	1	2	1	2	51	44	2
0	2	0	679	706	11	1	-9	1	16	13	1	-2	2	1	160	148	9	2	-10	2	5	0	1	3	1	2	46	46	2
1	2	0	94	106	3	2	-9	1	15	14	1	-1	2	1	168	173	3	-3	-9	2	0	0	1	4	1	2	12	11	1
2	2	0	36	35	1	3	-9	1	4	3	1	0	2	1	219	210	4	-2	-9	2	0	2	1	-4	2	2	18	18	1
3	2	0	65	62	1	-4	-8	1	4	5	4	1	2	1	1054	1156	46	-1	-9	2	13	15	1	-3	2	2	33	36	3
4	2	0	43	44	1	-3	-8	1	0	3	1	2	2	1	60	60	2	0	-9	2	0	1	1	-2	2	2	362	350	22
-4	3	0	12	12	1	-2	-8	1	25	25	1	3	2	1	25	30	1	1	-9	2	25	24	1	-1	2	2	62	58	1
-3	3	0	31	31	1	-1	-8	1	23	23	1	4	2	1	71	76	1	2	-9	2	10	10	1	0	2	2	132	137	1
-2	3	0	95	92	3	0	-8	1	1	4	1	-4	3	1	11	13	1	-4	-8	2	14	12	1	1	2	2	767	808	40
-1	3	0	56	54	1	1	-8	1	8	6	1	-3	3	1	56	61	2	-3	-8	2	4	5	2	2	2	2	171	176	6
0	3	0	53	57	1	2	-8	1	44	43	1	-2	3	1	21	11	1	-2	-8	2	8	8	1	3	2	2	27	34	1
1	3	0	35	44	2	3	-8	1	19	18	1	-1	3	1	163	155	1	-1	-8	2	0	3	1	4	2	2	32	34	1
2	3	0	55	50	2	-4	-7	1	8	9	1	0	3	1	36	38	1	0	-8	2	41	40	1	-4	3	2	0	4	1
3	3	0	10	13	4	-3	-7	1	11	9	1	1	3	1	347	374	12	3	-8	2	24	25	1	-3	3	2	51	55	2
4	3	0	36	38	1	-2	-7	1	43	43	1	2	3	1	162	171	7	2	-8	2	8	9	1	-2	3	2	107	104	5
-4	4	0	10	14	1	-1	-7	1	11	10	1	3	3	1	0	2	1	3	-8	2	26	23	1	-1	3	2	63	56	1
-3	4	0	31	30	1	0	-7	1	19	20	1	4	3	1	18	18	1	-4	-7	2	21	20	1	0	3	2	304	312	4
-2	4	0	68	71	1	1	-7	1	146	142	3	-4	4	1	1	3	1	-3	-7	2	1	6	1	1	3	2	310	332	12
-1	4	0	50	45	1	2	-7	1	50	48	1	-3	4	1	143	149	6	-2	-7	2	38	39	1	2	3	2	231	231	9
0	4	0	30	32	1	3	-7	1	31	32	1	-2	4	1	15	19	1	-1	-7	2	21	20	1	3	3	2	27	24	1
1	4	0	24	26	1	-4	-6	1	22	24	1	-1	4	1	31	29	1	0	-7	2	14	16	1	4	3	2	28	27	1
2	4	0	123	123	6	-3	-6	1	11	12	1	0	4	1	45	45	1	1	-7	2	48	45	1	-4	4	2	11	13	1
3	4	0	35	33	2	-2	-6	1	18	18	1	1	4	1	189	198	4	2	-7	2	12	13	1	-3	4	2	21	23	1
4	4	0	5	4	5	-1	-6	1	236	266	13	3	4	1	31	34	1	3	-7	2	8	8	1	-2	4	2	238	231	5
-4	5	0	11	13	1	0	-6	1	100	99	1	3	4	1	38	35	1	-4	-6	2	35	38	1	-1	4	2	60	49	1
-3	5	0	49	49	1	1	-6	1	8	8	1	4	4	1	0	1	1	-3	-6	2	25	24	1	0	4	2	61	57	1
-2	5	0	135	136	1	2	-6	1	280	275	1	-4	5	1	21	24	1	-2	-6	2	2	1	2	1	4	2	139	131	2
-1	5	0	59	62	2	3	-6	1	76	74	1	-3	5	1	9	11	1	-1	-6	2	69	75	1	2	4	2	258	259	11
0	5	0	23	25	1	-4	-5	1	11	12	1	-2	5	1	42	40	1	0	-6	2	124	121	1	3	4	2	41	39	1
1	5	0	2	5	2	-4	-5	1	30	29	1	-1	5	1	118	106	4	1	-6	2	12	11	1	4	4	2	3	6	3
2	5	0	22	20	1	-3	-5	1	39	39	2	0	5	1	8	2	1	2	-6	2	68	68	1	-4	5	2	11	13	1
3	5	0	5	4	1	-2	-5	1	50	52	1	1	5	1	174	196	6	3	-6	2	89	86	1	-3	5	2	7	6	1
4	5	0	15	14	1	-1	-5	1	99	111	1	2	5	1	88	88	3	-4	-6	2	0	6	1	-2	5	2	16	14	1
-4	6	0	32	34	1	0	-5	1	123	118	2	3	5	1	6	8	1	-4	-5	2	25	25	1	-1	5	2	41	41	1
-3	6	0	15	15	1	1	-5	1	9	9	1	4	5	1	9	10	1	-3	-5	2	29	29	2	0	5	2	27	19	1
-2	6	0	189	192	1	2	-5	1	31	31	1	-4	6	1	12	12	1	-2	-5	2	49	47	2	1	5	2	10	15	1
-1	6	0	65	66	2	3	-5	1	184	184	3	-3	6	1	12	15	1	-1	-5	2	36	34	1	2	5	2	175	181	7
0	6	0	72	73	1	4	-5	1	11	11	1	-2	6	1	23	20	1	0	-5	2	50	40	1	3	5	2	39	42	1
1	6	0	101	116	2	-4	-4	1	2	5	2	-1	6	1	135	135	2	2	-5	2	70	71	1	4	5	2	5	1	4
2	6	0	80	82	1	-3	-4	1	22	20	1	0	6	1	40	41	1	3	-5	2	10	9	1	-3	6	2	11	11	1
3	6	0	4	3	1	-2	-4	1	30	22	1	1	6	1	26	30	1	-4	-5	2	12	11	1	-2	6	2	176	172	1
4	6	0	6	7	6	-1	-4	1	234	270	15	2	6	1	59	63	2	-4	-4	2	13	12	1	-1	6	2	4	2	1
-4	7	0	33	34	1	0	-4	1	10	6	1	3	6	1	26	23	1	-3	-4	2	15	15	1	0	6	2	16	17	1
-3	7	0	181	177	1	1	-4	1	46	37	2	-4	7	1	14	13	1	-2	-4	2	48	56	2	1	6	2	7	8	1
-2	7	0	16	17	1	2	-4	1	102	105	1	-3	7	1	0	1	1	-1	-4	2	10	13	1	2	6	2	51	51	2
-1	7	0	27	28	1	3	-4	1	49	50																			

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

Page 2

h k l			10Fo	10Fc	10s	h k l			10Fo	10Fc	10s	h k l			10Fo	10Fc	10s	h k l			10Fo	10Fc	10s	
2	10	2	0	1	1	-4	0	3	6	6	1	3	10	3	12	12	1	0	0	4	220	235	6	
3	10	2	37	35	1	-3	0	0	58	59	1	-2	11	3	24	23	1	1	1	4	87	73	1	
-2	11	2	35	32	1	-2	0	0	32	27	1	-1	11	3	29	30	1	1	2	0	18	22	1	
-1	11	2	9	2	1	-1	0	0	6	8	1	0	11	3	113	111	1	1	3	0	4	31	31	1
0	11	2	7	7	1	0	0	0	83	83	1	1	11	3	4	5	2	1	4	0	4	24	26	1
1	11	2	42	45	1	2	0	0	32	28	1	2	11	3	0	4	1	1	-4	1	4	30	31	1
2	11	2	3	1	2	2	0	0	133	127	1	3	11	3	15	14	1	1	-3	1	4	14	12	1
3	11	2	3	1	1	3	0	0	14	11	1	-1	12	3	0	5	1	1	-2	1	4	82	72	1
-1	12	2	0	4	1	4	0	0	14	14	1	0	12	3	41	38	1	1	-1	1	4	149	141	3
0	12	2	44	42	1	-4	1	3	17	16	1	1	12	3	85	88	1	1	0	1	4	126	140	3
1	12	2	19	21	1	-3	1	1	12	14	1	2	12	3	4	7	1	1	1	1	4	14	17	1
2	12	2	16	13	1	-2	1	1	72	63	2	-1	-11	4	26	24	1	1	2	1	4	80	78	2
-1	11	3	17	19	1	-1	1	1	193	173	3	-2	-10	4	7	7	1	1	3	1	4	8	7	1
0	11	3	38	37	1	0	0	1	16	18	1	-1	-10	4	51	55	1	1	4	1	4	14	10	1
-2	10	3	17	14	1	1	1	1	429	434	13	0	-10	4	11	9	1	1	-4	2	4	12	13	1
-1	10	3	30	32	1	2	1	1	136	126	7	1	-10	4	0	1	1	1	-3	2	4	37	34	2
0	10	3	10	8	1	3	1	1	33	35	1	-3	-9	4	21	20	1	1	-2	2	4	111	100	3
-3	9	3	18	15	1	-4	2	2	6	4	2	-1	-9	4	14	16	1	1	0	2	4	170	177	1
-2	9	3	12	10	1	-3	2	3	32	33	2	0	-9	4	38	39	1	1	1	2	4	66	64	1
-1	9	3	31	36	1	-2	2	2	91	86	3	1	-9	4	61	62	1	1	2	2	4	17	17	1
0	9	3	12	12	1	-1	2	2	166	158	1	2	-9	4	0	1	1	1	3	2	4	65	65	2
-1	9	3	3	1	2	4	1	1	362	384	8	-3	-8	4	5	6	1	1	4	2	4	11	12	1
-2	9	3	13	14	1	1	2	2	22	21	1	-2	-8	4	22	21	1	1	-4	3	4	8	8	1
-3	8	3	14	13	1	2	2	3	275	280	14	-1	-8	4	20	20	1	1	-3	3	4	19	20	1
-1	8	3	3	4	3	4	2	3	28	27	2	0	-8	4	15	16	1	1	-2	3	4	91	93	2
0	8	3	21	21	1	-4	3	3	5	4	5	2	-8	4	26	23	1	1	-1	3	4	315	286	10
1	8	3	62	61	1	-3	3	3	81	85	3	-4	-7	4	15	13	1	1	0	3	4	109	114	1
2	8	3	22	24	1	-2	3	3	217	196	8	-3	-7	4	34	34	1	1	2	3	4	43	44	1
3	8	3	15	15	1	-1	3	3	88	80	1	-2	-7	4	12	11	1	1	3	3	4	11	2	1
-4	7	3	7	7	1	0	3	3	144	150	1	-1	-7	4	6	6	1	1	4	3	4	15	17	1
-3	7	3	24	22	1	1	1	3	255	262	7	0	-7	4	12	14	1	1	-4	4	4	45	48	1
-2	7	3	5	4	2	2	3	3	192	196	8	1	-7	4	30	33	1	1	-3	4	4	22	21	1
-1	7	3	0	6	1	3	3	3	20	21	1	2	-7	4	3	3	3	1	-2	4	4	97	98	1
0	7	3	59	63	1	4	3	3	26	25	1	3	-7	4	9	8	1	1	-1	4	4	235	214	7
1	7	3	4	5	1	-4	4	3	54	62	3	-4	-6	4	8	8	1	1	0	4	4	111	114	1
2	7	3	33	33	1	-3	4	3	40	40	1	-3	-6	4	10	9	1	1	1	4	4	55	60	1
-4	6	3	0	7	1	-1	4	3	78	71	2	-2	-6	4	9	9	1	1	2	4	4	65	58	3
-3	6	3	26	22	1	0	4	3	403	350	11	-1	-6	4	36	42	1	1	3	4	4	127	130	6
-2	6	3	8	6	1	1	4	3	112	111	1	0	-6	4	11	10	1	1	4	4	4	15	17	3
-1	6	3	15	19	1	2	4	3	83	90	3	1	-6	4	49	49	1	1	-4	5	4	14	17	1
0	6	3	11	7	1	3	4	3	439	447	19	2	-6	4	75	73	1	1	-3	5	4	29	30	1
1	6	3	8	6	1	4	4	3	55	55	0	-4	-5	4	17	17	1	1	-2	5	4	155	154	1
2	6	3	15	15	1	-4	5	3	17	16	1	-3	-5	4	62	62	1	1	0	5	4	83	85	2
-4	5	3	13	14	1	-3	5	3	11	6	1	-2	-5	4	11	10	1	1	1	5	4	85	86	1
-3	5	3	21	22	1	-2	5	3	24	25	1	-1	-5	4	19	19	1	1	2	5	4	165	166	7
-2	5	3	40	40	1	-1	5	3	100	88	3	0	-5	4	39	37	1	1	3	5	4	7	2	1
-1	5	3	19	18	1	0	5	3	80	77	1	1	-5	4	50	49	1	1	4	5	4	0	1	1
0	5	3	11	11	1	1	5	3	31	34	1	2	-5	4	4	1	2	1	-4	6	4	11	13	1
1	5	3	57	58	1	2	5	3	15	16	1	3	-5	4	25	24	1	1	-3	6	4	49	52	2
2	5	3	25	18	1	3	5	3	116	116	5	4	-5	4	14	13	1	1	-2	6	4	30	30	1
3	5	3	9	9	1	4	5	3	0	3	1	-4	-4	4	5	4	5	1	-1	6	4	116	102	3
-2	5	3	85	84	1	-4	6	3	11	9	1	-3	-4	4	0	1	1	1	0	6	4	187	180	3
-3	5	3	45	44	1	-3	6	3	13	13	1	-2	-4	4	12	13	1	1	1	6	4	46	50	1
-4	4	3	16	18	1	-2	6	3	42	44	1	-1	-4	4	27	29	1	1	2	6	4	21	22	1
-1	4	3	3	2	2	-1	6	3	178	162	5	0	-4	4	42	44	1	1	3	6	4	190	193	7
-2	4	3	90	84	4	0	6	3	72	71	1	1	-4	4	63	52	1	1	4	6	4	22	22	1
-3	4	3	35	36	1	1	6	3	34	36	1	2	-4	4	24	22	1	1	-4	7	4	4	2	1
-4	4	3	4	5	1	2	6	3	88	82	4	3	-4	4	2	2	2	1	-3	7	4	10	10	1
0	4	3	296	289	5	3	6	3	62	64	2	4	-4	4	32	33	1	1	-2	7	4	5</		

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

Page 3

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s											
-3	1	5	36	34	1	2	12	5	28	27	1	-3	2	6	17	19	1	0	-8	7	11	11	1	3	3	7	10	9	1
-2	1	1	9	10	1	0	13	5	10	10	1	-2	2	6	15	19	1	1	-8	7	21	22	1	4	3	7	34	35	2
-1	1	1	8	9	1	1	13	5	40	42	1	-1	2	6	69	63	4	0	-8	7	46	43	1	-4	4	7	16	18	1
0	1	1	66	72	1	-1	-10	6	0	5	1	0	2	6	56	77	1	-3	-7	7	67	63	1	-3	4	7	37	38	1
1	1	1	27	30	1	0	-10	6	6	5	1	1	2	6	25	28	1	-2	-7	7	51	48	1	-2	4	7	22	22	1
2	1	1	128	123	1	-2	-9	6	0	2	1	2	2	6	16	15	1	-1	-7	7	17	18	1	-1	4	7	36	32	2
3	1	1	59	56	1	-1	-9	6	19	23	1	3	2	6	91	88	2	0	-7	7	55	60	1	0	4	7	48	45	1
4	1	1	20	19	1	0	-9	6	31	31	1	4	2	6	16	17	1	1	-7	7	38	40	1	1	4	7	14	12	1
-4	2	5	20	21	1	-1	-9	6	5	5	1	-4	3	6	0	2	1	2	-7	7	14	14	1	2	4	7	8	3	1
-3	2	5	7	6	1	-3	-8	6	60	57	1	-3	3	6	62	62	1	-3	-6	7	2	2	2	3	4	7	28	24	1
-2	2	5	65	56	1	-2	-8	6	7	6	2	-2	3	6	14	18	1	-2	-6	7	165	165	2	4	4	7	8	8	1
-1	2	5	25	18	1	-1	-8	6	14	18	1	-1	3	6	25	31	1	-1	-6	7	8	10	1	-4	5	7	10	13	1
0	2	5	58	64	2	0	-8	6	26	30	1	0	3	6	39	36	1	0	-6	7	30	31	1	-3	5	7	0	3	1
1	2	5	116	112	2	1	-8	6	35	36	1	1	3	6	84	89	1	1	-6	7	82	88	1	-2	5	7	89	83	1
2	2	5	110	96	3	2	-8	6	8	9	1	2	3	6	6	2	1	2	-6	7	18	18	1	-1	5	7	40	32	2
3	2	5	8	3	1	-3	-7	6	60	54	1	3	3	6	71	73	2	3	-6	7	9	7	1	0	5	7	36	34	1
4	2	5	3	3	2	-2	-7	6	34	32	1	4	3	6	13	13	1	-4	-5	7	5	3	1	2	5	7	7	10	1
-4	3	5	21	20	1	-1	-7	6	45	48	1	-4	4	6	5	4	5	-3	-5	7	5	3	1	3	5	7	0	3	1
-3	3	5	35	34	1	0	-7	6	47	50	1	-3	4	6	4	4	2	-2	-5	7	34	35	1	4	5	7	14	14	1
-2	3	5	11	5	1	1	-7	6	24	25	1	-2	4	6	32	27	1	-1	-5	7	6	5	1	-4	6	7	28	32	1
-1	3	5	144	123	5	2	-7	6	76	74	1	-1	4	6	176	153	7	2	-5	7	48	48	1	-3	6	7	29	30	1
0	1	3	35	35	1	3	-7	6	24	20	1	0	4	6	28	25	1	3	-5	7	25	31	1	-2	6	7	53	51	1
1	3	5	47	41	1	-4	-6	6	6	7	1	1	4	6	48	45	1	4	-4	7	32	34	1	-1	6	7	37	28	1
2	3	5	101	101	4	-3	-6	6	45	43	2	2	4	6	57	55	1	3	-5	7	66	66	1	0	6	7	101	99	1
3	3	5	35	32	1	-2	-6	6	60	59	1	3	4	6	34	32	1	-4	-4	7	6	5	1	0	6	7	23	21	1
4	3	5	14	12	1	-1	-6	6	0	4	1	4	4	6	0	0	1	-3	-4	7	12	10	1	2	6	7	17	17	1
-4	4	5	25	27	1	0	-6	6	22	22	1	-4	5	6	18	19	1	-2	-4	7	104	111	4	3	6	7	27	27	1
-3	4	5	24	25	1	1	-6	6	102	109	1	-3	5	6	26	29	1	-1	-4	7	21	24	1	4	6	7	17	17	1
-2	4	5	40	33	1	2	-6	6	0	0	1	-2	5	6	51	46	1	4	-4	7	19	17	1	3	6	7	0	3	1
-1	4	5	54	54	1	3	-6	6	3	3	2	1	5	6	17	15	1	2	-4	7	61	61	1	-4	7	7	45	50	1
0	4	5	123	117	1	-4	-5	6	10	9	1	0	5	6	29	26	1	3	-4	7	11	10	1	-3	7	7	33	39	1
1	4	5	96	91	2	-3	-5	6	14	14	1	1	5	6	41	45	1	-4	-3	7	24	24	1	0	7	7	25	21	1
2	4	5	15	19	1	-2	-5	6	15	15	1	2	5	6	19	18	1	-3	-3	7	18	18	1	1	7	7	8	8	1
3	4	5	8	7	2	1	-5	6	23	29	1	4	5	6	14	16	1	-2	-3	7	25	23	1	1	7	7	56	55	1
-4	5	5	48	56	2	2	-5	6	24	24	1	-3	6	6	34	40	1	0	-3	7	58	57	1	2	7	7	29	28	1
-3	5	5	0	6	1	2	-5	6	17	16	1	-2	6	6	0	0	1	2	-3	7	17	15	1	4	7	7	23	24	1
-2	5	5	41	44	1	3	-5	6	5	6	2	-1	6	6	35	37	1	3	-3	7	4	0	1	4	7	7	12	14	1
-1	5	5	32	34	1	-4	-4	6	13	11	1	0	6	6	68	71	2	4	-3	7	11	11	1	-2	8	7	18	22	1
0	1	5	162	150	1	-2	-4	6	24	23	1	1	6	6	85	89	2	-4	-2	7	16	14	1	0	8	7	55	54	2
1	5	5	20	22	1	-1	-4	6	25	27	1	2	6	6	38	38	1	-3	-2	7	16	16	1	1	8	7	5	6	5
2	5	5	99	102	2	0	-4	6	10	8	1	3	6	6	25	24	1	-2	-2	7	47	49	2	2	8	7	54	55	1
3	5	5	70	71	3	1	-4	6	89	89	1	4	6	6	18	21	1	-1	-2	7	89	97	1	3	8	7	24	22	1
-4	6	5	23	22	1	2	-4	6	21	22	1	-4	7	6	25	24	1	0	-2	7	86	83	1	4	8	7	4	4	3
-3	6	5	3	2	3	3	-4	6	9	7	1	-3	7	6	67	75	1	2	-2	7	74	73	1	-3	9	7	21	25	1
-2	6	5	75	83	1	4	-4	6	20	22	1	-2	7	6	22	23	1	3	-2	7	14	14	1	-2	9	7	57	60	2
-1	6	5	56	51	1	-4	-4	6	14	12	1	-1	7	6	36	33	1	4	-2	7	33	33	1	-1	9	7	0	3	1
0	1	6	40	34	1	-3	-3	6	3	1	2	2	7	6	75	70	1	-4	-1	7	72	73	2	2	9	7	57	59	1
1	6	5	236	232	2	-2	-3	6	0	6	1	3	7	6	60	64	1	-3	-1	7	49	49	1	4	9	7	7	7	1
2	6	5	116	128	3	1	-3	6	21	18	2	4	7	6	27	31	1	-2	-1	7	108	99	1	-2	10	7	9	4	1
3	6	5	18	19	1	0	-3	6	26	27	1	-3	8	6	9	10	1	0	-1	7	46								

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	-5	8	69	67	1	-4	6	8	4	1	2	4	-2	9	2	3	2	1	9	9	15	15	1	-3	3	10	28	28	1
1	-5	8	61	71	1	-3	6	8	24	26	1	-4	-1	9	22	22	1	2	9	9	0	0	1	-2	3	10	221	214	1
2	-5	8	26	28	1	-2	6	8	61	61	2	-3	-1	9	36	36	1	3	9	9	16	13	1	-1	3	10	8	9	1
3	-5	8	11	10	1	-1	6	8	20	18	1	-2	-1	9	6	9	1	-2	10	9	37	37	1	0	3	10	35	40	1
-4	-4	8	12	11	1	0	6	8	12	13	1	-1	-1	9	57	58	2	-1	10	9	12	14	1	1	3	10	30	29	1
-3	-4	8	16	16	1	1	6	8	6	4	1	0	-1	9	77	83	1	0	10	9	7	7	1	2	3	10	98	103	3
-2	-4	8	36	33	1	2	6	8	8	8	1	1	-1	9	12	15	1	1	10	9	16	18	1	3	3	10	12	12	1
-1	-4	8	261	273	2	3	6	8	25	24	1	2	-1	9	2	0	2	2	10	9	20	16	1	4	3	10	16	17	1
0	-4	8	35	32	1	4	6	8	16	15	1	3	-1	9	7	8	1	-2	11	9	20	20	1	-4	4	10	16	16	1
1	-4	8	7	5	1	-3	7	8	0	6	1	4	-1	9	16	14	1	-2	11	9	16	18	1	-3	4	10	18	17	1
2	-4	8	112	118	1	-2	7	8	10	14	1	-4	0	9	29	30	2	-1	11	9	66	66	1	-2	4	10	0	4	1
3	-4	8	0	0	1	-1	7	8	79	73	1	3	0	9	59	60	2	0	11	9	9	9	1	-1	4	10	1	3	1
-4	-3	8	17	17	1	0	7	8	3	2	3	-2	0	9	2	0	2	1	11	9	4	4	3	0	4	10	58	54	1
-3	-3	8	12	9	1	1	7	8	20	26	1	-1	0	9	48	52	1	2	11	9	13	14	1	1	4	10	15	16	1
-2	-3	8	14	3	1	2	7	8	25	24	1	0	0	9	11	12	1	3	11	9	17	16	1	2	4	10	49	49	1
-1	-3	8	21	24	1	3	7	8	4	2	2	1	0	9	35	36	1	-1	12	9	6	6	1	3	4	10	4	3	4
0	-3	8	18	17	1	4	7	8	2	3	2	2	0	9	64	67	1	0	12	9	40	40	1	4	4	10	5	7	2
1	-3	8	10	8	1	-3	8	8	46	49	1	3	0	9	3	6	3	1	12	9	1	2	1	-4	5	10	3	4	2
2	-3	8	13	14	1	-2	8	8	21	24	1	4	0	9	21	20	1	2	12	9	2	0	2	-3	5	10	3	3	2
3	-3	8	27	25	1	-1	8	8	25	26	1	-4	1	9	25	25	1	-2	-7	10	0	3	1	-2	5	10	300	288	7
-4	-2	8	26	28	1	0	8	8	18	22	1	-3	1	9	83	79	1	-1	-7	10	0	1	1	-1	5	10	21	20	1
-3	-2	8	23	22	1	1	8	8	11	8	1	-2	1	9	36	33	1	0	-7	10	0	1	1	0	5	10	5	3	1
-2	-2	8	11	11	1	2	8	8	17	17	1	-1	1	9	13	15	1	1	-7	10	2	6	1	1	5	10	137	133	1
-1	-2	8	30	29	1	3	8	8	18	20	1	0	1	9	54	57	1	-2	-6	10	18	17	1	2	5	10	53	52	1
0	-2	8	91	97	1	4	8	8	5	2	1	1	1	9	233	237	1	-1	-6	10	10	11	1	3	5	10	13	13	1
1	-2	8	67	73	1	-3	9	8	9	11	1	2	1	9	22	20	1	0	-6	10	5	6	1	4	5	10	18	22	1
2	-2	8	28	26	1	-2	9	8	81	83	2	3	1	9	17	17	1	1	-6	10	0	6	1	-3	6	10	28	26	1
3	-2	8	34	37	1	-1	9	8	29	30	1	4	1	9	2	3	2	2	-6	10	4	1	2	-2	6	10	42	43	2
-4	-1	8	27	26	1	0	9	8	7	6	1	-4	2	9	24	24	1	-3	-5	10	0	2	1	-1	6	10	152	146	8
-3	-1	8	10	8	1	1	9	8	6	9	2	-3	2	9	52	50	1	-2	-5	10	0	3	1	0	6	10	24	24	1
-2	-1	8	22	21	1	2	9	8	41	42	1	-2	2	9	67	63	1	-1	-5	10	6	2	1	1	6	10	13	12	1
-1	-1	8	29	30	1	3	9	8	9	10	1	-1	2	9	113	100	2	0	-5	10	65	64	1	2	6	10	93	89	1
0	-1	8	6	7	1	4	9	8	16	19	1	0	2	9	12	9	1	1	-5	10	12	14	1	3	6	10	2	0	2
1	-1	8	9	4	1	-2	10	8	0	4	1	1	2	9	108	111	1	2	-5	10	7	3	1	4	6	10	5	4	1
2	-1	8	258	261	2	-1	10	8	37	39	1	2	2	9	6	3	3	-3	-4	10	10	11	1	-3	7	10	10	7	1
3	-1	8	27	25	1	0	10	8	25	25	1	3	2	9	3	2	3	-2	-4	10	61	61	1	-2	7	10	56	54	2
-4	0	8	5	1	1	1	10	8	34	34	1	4	2	9	3	2	3	-1	-4	10	36	34	1	-1	7	10	13	13	1
-3	0	8	8	7	1	2	10	8	15	15	1	-4	3	9	0	2	1	0	-4	10	88	87	1	0	7	10	5	2	1
-2	0	8	36	36	2	-2	11	8	12	15	1	-3	3	9	191	185	1	2	-4	10	29	29	1	2	7	10	14	11	1
-1	0	8	28	27	1	-1	11	8	24	24	1	-2	3	9	107	104	3	3	-4	10	14	15	1	3	7	10	3	9	2
0	0	8	50	41	1	0	11	8	9	7	1	-1	3	9	14	10	1	3	-4	10	38	37	1	4	7	10	5	2	1
1	0	8	5	4	1	1	11	8	20	23	1	0	3	9	124	131	3	-2	-3	10	6	5	1	-3	8	10	8	5	1
2	0	8	48	49	1	2	11	8	28	30	1	1	3	9	155	153	1	-1	-3	10	121	120	1	-2	8	10	22	24	1
3	0	8	68	67	1	3	11	8	6	5	1	2	3	9	5	7	1	0	-3	10	162	165	1	-1	8	10	21	23	1
-4	0	8	38	39	1	-1	12	8	9	6	1	4	3	9	28	29	1	1	-3	10	0	2	1	0	8	10	12	10	1
-3	0	8	5	1	1	0	12	8	29	27	1	-4	4	9	32	30	1	2	-3	10	48	51	1	1	8	10	21	21	1
-2	0	8	30	30	1	1	12	8	0	1	1	-3	4	9	6	5	3	3	-3	10	28	29	1	2	8	10	14	11	1
-1	0	8	76	78	1	2	12	8	19	18	1	-2	4	9	209	199	5	4	-2	10	0	3	1	3	8	10	29	27	1
0	0	8	117	113	1	0	13	8	6	4	1	-1	4	9	36	33	1	-4	-2	10	47	49	1	4	8	10	7	8	1
1	0	8	35	34	1	1	13	8	5	3	1	0	4	9	5	5	1	2	-2	10	0	1	1	-3	9	10	0	1	1
2	0	8	62	61	1	-1	-8	9	11	9	1	1	4	9	153	150	1	-1	-2	10	19	19	1	-2	9	10	9	7	1
3	0	8	217	213	5	0	-8	9	1	1	1	2	4	9	27	27	1	0	-2	10	258	261	2	-1	9	10	20	18	1
-4	1	8	8	10	1	-2	-7	9	6	2	1	3	4	9	3	2	3	1	-2	10	11	8	1	0	9	10	72	73	1
-3	1	8	7	13	1	-1	-7	9	44	44	1	4	4	9	15	17	1	2	-2	10	15	17	1	1	9	10	21	19	1
-2	1	8	37	35	1	0	-7	9	0	2	1	-4	5	9	18	17	1	3	-2	10	43	46	1	2	9	10	15	14	1
-1	1	8	20	18	1	1	-7	9	0	0	1	-3	5	9	44	44	1	4	-1	10	17	18	1	3	9	10	8	7	1
0	1	8	24	23	1	-3	-6	9	21	22	1	-2	5	9	81	80	3	-4	-1	10	31	32	1	-2	10	10	10	13	1
1	1	8	149	142	1	-2	-6	9	13	12	1	-1	5	9	12	10	1	-2	-1	10	9	11	1	-1	10	10	11	12	1
2	1	8	40	35	1	-1	-6	9	9	9	1	0	5	9	30	33	1	0	-1	10	7	10	1	0	10	10	9	6	1
3	1	8	71	67	1	0	-6	9	8	6	1	1	5	9	68	63	1	1	-1	10	139	143	1	1	10	10	3	2	3
-4	2	8	164	175	4	1	-6	9	15	15	1	2	5	9	9	8	1	2	-1	10	55	55	1	2	10	10	0	4	1
-3	2	8	17	16	1	2	-6	9	2	1	1	3	5	9	30	28	1	2	-										

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
2	-3	11	20	21	1	0	9	11	6	2	1	-2	6	12	24	24	1	0	4	13	15	15	1	2	4	14	8	8	1	
-3	-3	11	4	0	1	0	9	11	22	22	1	-1	6	12	56	53	2	3	4	13	13	15	1	1	3	4	14	83	82	1
-3	-2	11	24	23	1	2	9	11	17	13	1	0	6	12	65	67	1	-3	5	14	42	41	1	1	-3	5	14	14	13	1
-2	-2	11	27	27	1	3	9	11	9	7	1	1	6	12	48	49	1	3	4	13	63	61	1	1	-2	5	14	18	18	1
-1	-2	11	87	88	1	-2	10	11	4	3	2	2	6	12	6	4	4	-3	5	13	7	8	1	1	-1	5	14	10	11	1
0	-2	11	7	9	1	-1	10	11	36	36	1	-3	6	12	14	11	1	-2	5	13	2	6	2	1	0	5	14	11	9	1
1	-2	11	109	111	1	0	10	11	5	4	1	-1	5	13	20	21	1	-1	5	13	22	22	1	1	0	5	14	32	35	1
2	-2	11	50	50	1	1	10	11	3	0	3	-2	7	12	13	11	1	0	5	13	66	70	1	1	2	5	14	10	10	1
3	-2	11	4	0	1	2	10	11	6	6	1	-1	7	12	148	141	5	1	5	13	10	9	1	1	-2	5	14	22	21	1
-3	-1	11	85	87	1	3	10	11	7	7	1	0	7	12	115	117	1	2	5	13	6	3	1	1	-2	6	14	20	20	1
-2	-1	11	29	29	1	-1	11	11	10	10	1	1	7	12	6	7	6	-3	5	13	8	5	1	1	-1	6	14	24	27	1
-1	-1	11	34	32	1	0	11	11	20	17	1	2	7	12	27	28	1	-3	6	13	14	14	1	1	0	6	14	52	54	1
0	-1	11	203	205	1	1	11	11	25	26	1	-2	7	12	19	21	1	-2	6	13	12	11	1	1	1	6	14	8	8	1
1	-1	11	99	102	2	2	11	11	9	8	1	-3	8	12	11	11	1	-1	6	13	72	71	2	2	2	6	14	7	6	1
2	-1	11	20	21	1	0	12	11	2	2	2	-2	8	12	48	44	1	0	6	13	47	48	1	1	-2	7	14	24	22	1
3	-1	11	43	43	1	1	12	11	0	0	1	-1	8	12	0	3	1	1	6	13	6	3	1	1	-2	7	14	28	27	1
-4	0	11	13	14	1	-1	-6	12	18	15	1	0	8	12	128	129	1	2	6	13	14	13	1	1	-1	7	14	5	6	1
-3	0	11	24	23	1	0	-6	12	53	48	1	1	8	12	0	1	1	3	6	13	6	6	1	1	0	7	14	7	7	1
-2	0	11	25	29	1	-2	-5	12	4	4	1	2	8	12	22	19	1	-3	7	13	57	56	1	1	2	7	14	53	54	1
-1	0	11	9	11	1	-1	-5	12	15	14	1	3	8	12	32	30	1	-2	7	13	27	26	1	1	3	7	14	12	13	1
0	0	11	48	47	1	0	-5	12	0	1	1	-2	9	12	17	15	1	-1	7	13	16	14	1	1	3	7	14	3	4	3
1	0	11	264	267	1	-1	-5	12	20	16	1	-1	9	12	9	6	1	0	7	13	103	99	1	2	-2	8	14	6	7	1
2	0	11	0	1	1	-2	-4	12	3	5	2	0	9	12	85	83	1	1	7	13	4	1	1	1	-1	8	14	13	14	1
3	0	11	0	2	1	-1	-4	12	32	31	1	1	9	12	9	8	1	2	7	13	5	3	1	1	0	8	14	1	5	1
-4	1	11	7	9	1	0	-4	12	6	8	1	2	9	12	11	12	1	3	7	13	0	1	1	1	2	8	14	2	2	2
-3	1	11	55	55	1	1	-4	12	7	7	1	3	9	12	16	15	1	-2	8	13	19	19	1	1	2	8	14	13	13	1
-2	1	11	12	11	1	-2	-4	12	9	10	1	-2	10	12	0	2	1	-1	8	13	31	32	1	1	-3	8	14	0	1	1
-1	1	11	19	14	1	-3	-3	12	0	4	1	0	10	12	10	10	1	0	8	13	29	32	1	1	-2	9	14	44	44	1
0	1	11	29	32	1	-2	-3	12	14	13	1	0	10	12	52	52	1	-1	8	13	44	46	1	1	-1	9	14	7	7	1
1	1	11	0	0	1	-1	-3	12	14	14	1	1	10	12	19	20	1	2	8	13	27	26	1	1	0	9	14	31	28	1
2	1	11	23	19	1	0	-3	12	7	7	1	2	10	12	3	2	2	3	8	13	0	4	1	1	1	9	14	76	77	1
3	1	11	8	7	1	-1	-3	12	42	43	1	3	10	12	11	8	1	-2	9	13	13	13	1	1	2	9	14	7	5	1
-4	1	11	15	16	1	-2	-3	12	5	6	1	0	11	12	7	7	1	-1	9	13	12	9	1	1	-1	10	14	24	22	1
-3	2	11	5	1	1	-3	-2	12	6	6	1	1	11	12	16	16	1	0	9	13	122	119	1	1	0	10	14	27	26	1
-2	2	11	29	31	1	-2	-2	12	10	10	1	1	11	12	15	14	1	1	9	13	41	43	1	1	2	10	14	17	17	1
-1	2	11	0	2	1	-1	-2	12	41	42	1	2	11	12	19	17	1	3	9	13	6	8	6	1	0	11	14	13	12	1
0	2	11	20	25	1	0	-2	12	22	19	1	1	12	12	17	17	1	-1	10	13	13	16	1	1	1	11	14	66	66	1
1	2	11	8	10	1	1	-2	12	10	9	1	-1	-5	13	9	8	1	0	10	13	20	20	1	1	0	-3	15	24	23	1
2	2	11	69	74	1	2	-2	12	16	16	1	0	-5	13	45	41	1	1	10	13	82	82	1	1	-1	-2	15	31	27	1
3	2	11	15	16	1	-3	-1	12	19	21	1	-2	-4	13	4	4	2	2	10	13	5	4	1	1	0	-2	15	22	20	1
-4	2	11	0	2	1	-2	-1	12	90	93	1	-1	-4	13	6	5	1	-1	11	13	19	17	1	1	-2	-1	15	11	11	1
-3	3	11	11	13	1	-1	-1	12	9	8	1	0	-4	13	14	13	1	0	11	13	5	5	1	1	-2	-1	15	6	3	1
-2	3	11	16	15	1	0	-1	12	56	61	1	-2	-3	13	45	42	1	2	11	13	28	26	1	1	-1	-1	15	9	10	1
-1	3	11	13	14	1	-1	-1	12	116	115	1	-2	-3	13	9	5	1	-1	11	13	0	2	1	1	1	-1	15	16	15	1
0	3	11	142	139	5	2	-1	12	7	7	1	-1	-3	13	43	39	1	0	-4	14	40	36	1	1	1	-1	15	4	1	3
1	3	11	3	2	3	-3	-1	12	26	26	1	0	-3	13	16	16	1	-2	-3	14	9	7	1	1	-2	0	15	29	30	1
2	3	11	28	34	1	-2	0	12	8	7	1	-3	-1	13	25	23	1	0	-3	14	10	7	1	1	-1	0	15	7	5	1
3	3	11	66	67	1	-1	0	12	53	59	1	-2	-2	13	2	2	2	-1	-3	14	16	13	1	1	1	0	15	15	17	1
-4	3	11	5	0	1	0	0	12	45	46	1	-3	-2	13	18	15	1	0	-3	14	23	20	1	1	1	0	15	12	11	1
-3	4	11	7	4	1	1	0	12	45	45	1	-1	-2	13	9	8	1	-2	-2	14	0	2	1	1	-2	0	15	11	10	1
-2	4	11	32	31	1	2	0	12	74	72	1	0	-2	13	30	30	1	-1	-2	14	17	14	1	1	-1	1	15	2	0	1
-1	4	11	4	3	3	-3	0	12	25	25	1	1	-2	13	8	8	1	0	-2	14	3	3	2	1	0	1	15	20	16	1
0	4	11	44	41	1	-2	1	12	5	6	2	2	-2	13	3	1	2	2	-2	14	10	11	1	1	1	1	15	10	8	1
1	4	11	83	89	1	-3	-1	12	104	112	3	-3	-1	13	0	4	1	-2	-2	14	19	18	1	1	2	1	15	6	6	1
2	4	11	17	17	1	-1	1	12	5	8	1	-2	-1	13	23	24	1	-1	-1	14	6	5	3	1	2	1	15	4	2	2
3	4	11	17	18	1	0	1	12	8	8	1	-1	-1	13	7	4	1	0	-1	14	17	11	1	1	-1	2	15	2	2	1
-4	4	11	26	27	1	1	1	12	178	177	1	0	-1	13	24	22	1	0	-1	14	49	45	1	2	-1	2	15	0	0	1
-3	4	11	7	6	1	2	1	12	0	3	1	1	-1	13	0	2	1	2	-1	14	6	4	2	1	0	2	15	15	17	1
-2	5	11	18	16	1	3	1	12	30	28	1	2	-1	13	54	54	1	1	-1	14	5	5	4	1	1	2	15	6	7	1
-1	5	11																												

Table 8. Observed and calculated structure factors for 3

Page 6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	8	15	27	26	1	0	1	16	0	3	1	2	4	16	22	25	1	1	8	16	27	29	1	1	4	17	5	6	4
1	8	15	0	0	1	1	1	16	15	15	1	-2	5	16	13	15	1	-1	5	16	0	1	1	-1	5	17	16	15	1
2	8	15	10	9	1	2	1	16	10	10	1	-1	5	16	4	0	1	-1	9	16	0	1	1	0	5	17	8	8	1
-1	9	15	26	25	1	-2	2	16	0	3	1	0	5	16	16	19	1	0	9	16	10	9	1	1	5	17	13	17	1
0	9	15	5	5	1	-1	2	16	0	3	1	1	5	16	50	54	1	1	9	16	10	11	1	-2	5	17	15	15	1
1	9	15	0	7	1	0	2	16	12	11	1	2	5	16	0	0	1	0	0	17	38	31	1	-1	6	17	23	23	1
2	9	15	21	19	1	1	2	16	7	5	1	-2	6	16	19	15	1	-1	1	17	0	1	1	0	6	17	19	20	1
0	10	15	24	25	1	2	2	16	21	21	1	-1	6	16	17	19	1	0	1	17	24	20	1	1	6	17	20	20	1
1	10	15	17	17	1	-2	3	16	3	1	2	0	6	16	4	2	1	-1	1	17	0	0	1	-1	7	17	14	16	1
-1	-1	16	52	44	1	-1	3	16	0	1	1	1	6	16	47	47	1	-1	2	17	14	13	1	0	7	17	5	4	1
0	-1	16	2	3	2	0	3	16	5	4	1	2	6	16	18	16	1	0	2	17	0	5	1	1	7	17	22	25	1
1	-1	16	13	13	1	1	3	16	24	21	1	-1	7	16	5	0	1	1	2	17	10	10	1	0	8	17	4	3	1
-1	0	16	14	10	1	2	3	16	0	2	1	0	7	16	3	6	2	-1	3	17	21	17	1	1	8	17	1	3	1
0	0	16	11	10	1	-2	4	16	6	5	1	1	7	16	34	35	1	0	3	17	11	14	1	0	3	18	3	2	1
1	0	16	5	6	1	-1	4	16	7	12	2	2	7	16	0	2	1	1	3	17	15	15	1	0	4	18	15	13	1
-2	1	16	33	26	1	0	4	16	28	31	1	-1	8	16	14	14	1	-1	4	17	21	19	1	0	5	18	11	8	1
-1	1	16	3	2	3	1	4	16	28	29	1	0	8	16	2	3	2	0	4	17	12	11	1	0	6	18	12	8	1

Table 1. Crystal data and structure refinement for 4.

Identification code	4
Empirical formula	C ₃₄ H ₄₂ O ₄
Formula weight	514.68
Temperature	298(2) K
Wavelength	1.54060 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P2 ₁ /c
Unit cell dimensions	a = 14.680(8) Å b = 7.6311(4) Å β = 126.10(2)° c = 16.255(3) Å
Volume	1471.3(9) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.162 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.585 mm ⁻¹
F(000)	556
Crystal size	0.35 x 0.30 x 0.07 mm
Theta range for data collection	3.72 to 75.01 deg.
Limiting indices	-18 ≤ h ≤ 14, 0 ≤ k ≤ 9, 0 ≤ l ≤ 20
Reflections collected / unique	3034 / 3034 [R(int) = 0.0000]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3034 / 0 / 188
Goodness-of-fit on F ²	1.041
Final R indices [I > 2σ(I)]	R ₁ = 0.0490, wR ₂ = 0.1346
R indices (all data)	R ₁ = 0.0761, wR ₂ = 0.1539
Extinction coefficient	0.0010(4)
Largest diff. peak and hole	.141 and -.122 e.Å ⁻³

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

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
O(1)	4570(1)	6708(2)	5831(1)	76(1)
O(2)	2167(1)	6837(2)	7450(1)	78(1)
C(1)	4265(2)	8103(3)	7004(2)	70(1)
C(2)	3654(2)	8125(3)	7405(2)	72(1)
C(3)	2821(2)	6894(3)	7105(2)	63(1)
C(4)	2607(2)	5575(2)	6405(1)	57(1)
C(5)	3222(2)	5590(2)	6012(1)	58(1)
C(6)	4044(2)	6839(3)	6298(2)	61(1)
C(7)	1724(2)	4254(2)	6094(1)	59(1)
C(8)	1708(2)	2661(2)	5754(1)	58(1)
C(9)	826(2)	1326(2)	5381(1)	53(1)
C(10)	-193(2)	1634(2)	5237(1)	58(1)
C(11)	-998(2)	337(2)	4865(1)	57(1)
C(12)	5488(2)	7842(3)	6143(2)	76(1)
C(13)	5858(2)	7490(3)	5480(2)	90(1)
C(14)	6866(3)	8562(5)	5776(3)	137(1)
C(15)	2194(2)	8311(3)	8007(2)	82(1)
C(16)	1354(2)	7968(4)	8239(2)	86(1)
C(17)	163(2)	7820(5)	7320(2)	112(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 4.

O(1)-C(6)	1.369(2)
O(1)-C(12)	1.420(2)
O(2)-C(3)	1.367(3)
O(2)-C(15)	1.430(3)
C(1)-C(6)	1.383(3)
C(1)-C(2)	1.386(3)
C(2)-C(3)	1.383(3)
C(3)-C(4)	1.410(3)
C(4)-C(5)	1.380(3)
C(4)-C(7)	1.477(3)
C(5)-C(6)	1.385(3)
C(7)-C(8)	1.330(3)
C(8)-C(9)	1.468(2)
C(9)-C(10)	1.392(3)
C(9)-C(11)#1	1.397(3)
C(10)-C(11)	1.378(2)
C(11)-C(9)#1	1.397(3)
C(12)-C(13)	1.490(3)
C(13)-C(14)	1.500(4)
C(15)-C(16)	1.508(3)
C(16)-C(17)	1.491(4)
C(6)-O(1)-C(12)	118.9(2)
C(3)-O(2)-C(15)	118.1(2)
C(6)-C(1)-C(2)	119.9(2)
C(3)-C(2)-C(1)	120.7(2)
O(2)-C(3)-C(2)	124.5(2)
O(2)-C(3)-C(4)	115.6(2)
C(2)-C(3)-C(4)	119.9(2)
C(5)-C(4)-C(3)	118.3(2)
C(5)-C(4)-C(7)	122.0(2)
C(3)-C(4)-C(7)	119.7(2)
C(4)-C(5)-C(6)	121.9(2)
O(1)-C(6)-C(1)	125.3(2)
O(1)-C(6)-C(5)	115.3(2)
C(1)-C(6)-C(5)	119.4(2)
C(8)-C(7)-C(4)	124.3(2)
C(7)-C(8)-C(9)	127.0(2)
C(10)-C(9)-C(11)#1	117.5(2)
C(10)-C(9)-C(8)	123.4(2)
C(11)#1-C(9)-C(8)	119.0(2)
C(11)-C(10)-C(9)	120.8(2)
C(10)-C(11)-C(9)#1	121.7(2)
O(1)-C(12)-C(13)	107.8(2)
C(12)-C(13)-C(14)	112.4(2)
O(2)-C(15)-C(16)	107.5(2)
C(17)-C(16)-C(15)	114.3(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x, -y, -z+1

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	76(1)	66(1)	90(1)	-17(1)	50(1)	-23(1)
O(2)	103(1)	61(1)	85(1)	-15(1)	63(1)	-16(1)
C(1)	65(1)	57(1)	71(1)	-11(1)	30(1)	-17(1)
C(2)	77(1)	60(1)	64(1)	-15(1)	34(1)	-16(1)
C(3)	70(1)	52(1)	59(1)	-3(1)	33(1)	-6(1)
C(4)	56(1)	44(1)	54(1)	-1(1)	24(1)	-5(1)
C(5)	56(1)	46(1)	59(1)	-3(1)	27(1)	-6(1)
C(6)	56(1)	53(1)	62(1)	-1(1)	27(1)	-7(1)
C(7)	61(1)	50(1)	58(1)	-3(1)	31(1)	-7(1)
C(8)	57(1)	50(1)	63(1)	-3(1)	33(1)	-8(1)
C(9)	57(1)	46(1)	51(1)	-2(1)	29(1)	-7(1)
C(10)	62(1)	44(1)	64(1)	-5(1)	35(1)	-3(1)
C(11)	57(1)	50(1)	64(1)	-2(1)	35(1)	-3(1)
C(12)	68(1)	60(1)	93(2)	-10(1)	44(1)	-17(1)
C(13)	96(2)	68(1)	120(2)	-18(1)	73(2)	-22(1)
C(14)	133(3)	129(3)	202(4)	-62(3)	128(3)	-61(2)
C(15)	98(2)	67(1)	78(2)	-18(1)	51(1)	-7(1)
C(16)	96(2)	88(2)	74(2)	-2(1)	50(1)	8(1)
C(17)	104(2)	132(3)	92(2)	2(2)	53(2)	3(2)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1)	4854(2)	8984(3)	7199(2)	94(8)
H(2)	3806(2)	9019(3)	7996(2)	97(8)
H(5)	3092(2)	4616(2)	5507(1)	73(6)
H(7)	1085(2)	4588(2)	6191(1)	89(7)
H(8)	2420(2)	2338(2)	5800(1)	68(6)
H(10)	-294(2)	2862(2)	5394(1)	77(6)
H(11)	-1714(2)	523(2)	4800(1)	63(5)
H(12A)	6112(2)	7476(3)	6886(2)	104(6)
H(12B)	5320(2)	9159(3)	6186(2)	104(6)
H(13A)	5185(2)	7712(3)	4705(2)	118(7)
H(13B)	5983(2)	6224(3)	5505(2)	118(7)
H(14A)	6989(15)	8461(32)	5259(11)	197(11)
H(14B)	7519(5)	8143(25)	6412(12)	197(11)
H(14C)	6737(10)	9768(7)	5846(22)	197(11)
H(15A)	3016(2)	8409(3)	8706(2)	106(6)
H(15B)	1963(2)	9510(3)	7617(2)	106(6)
H(16A)	1632(2)	6810(4)	8694(2)	115(6)
H(16B)	1418(2)	9182(4)	8694(2)	115(6)
H(17A)	-322(4)	7657(38)	7528(2)	193(10)
H(17B)	92(6)	6835(23)	6919(11)	193(10)
H(17C)	-48(8)	8871(16)	6923(11)	193(10)

Table 6. Torsion angles [deg] for 4.

C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	0.0(3)
C(15)-O(2)-C(3)-C(2)	12.0(3)
C(15)-O(2)-C(3)-C(4)	-168.5(2)
C(1)-C(2)-C(3)-O(2)	-178.9(2)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	1.6(3)
O(2)-C(3)-C(4)-C(5)	178.5(2)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-2.0(3)
O(2)-C(3)-C(4)-C(7)	-0.1(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(7)	179.5(2)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	1.0(3)
C(7)-C(4)-C(5)-C(6)	179.5(2)
C(12)-O(1)-C(6)-C(1)	5.9(3)
C(12)-O(1)-C(6)-C(5)	-174.7(2)
C(2)-C(1)-C(6)-O(1)	178.3(2)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-1.0(3)
C(4)-C(5)-C(6)-O(1)	-178.9(2)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	0.5(3)
C(5)-C(4)-C(7)-C(8)	26.5(3)
C(3)-C(4)-C(7)-C(8)	-155.0(2)
C(4)-C(7)-C(8)-C(9)	-176.4(2)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	6.8(3)
C(7)-C(8)-C(9)-C(11)#1	-174.4(2)
C(11)#1-C(9)-C(10)-C(11)	-0.1(3)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	178.7(2)
C(9)-C(10)-C(11)-C(9)#1	0.1(3)
C(6)-O(1)-C(12)-C(13)	-177.0(2)
O(1)-C(12)-C(13)-C(14)	-177.2(2)
C(3)-O(2)-C(15)-C(16)	176.6(2)
O(2)-C(15)-C(16)-C(17)	-62.9(3)

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

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	0	0	186	197	1	10	6	0	24	23	2	-6	3	1	154	161	2	8	6	1	24	27	2	-1	1	2	0	8	1
2	0	0	86	91	1	11	6	0	15	8	2	-5	3	1	218	207	2	9	6	1	12	17	5	0	1	2	593	583	3
3	0	0	94	91	1	12	6	0	252	246	3	-4	3	1	245	238	2	10	6	1	49	48	1	1	1	2	2115	2049	13
4	0	0	89	90	1	2	7	0	47	39	2	-3	3	1	461	451	2	11	6	1	16	14	2	2	1	2	417	443	2
5	0	0	274	275	2	3	7	0	74	75	1	-2	3	1	20	2	1	-10	7	1	4	3	3	3	1	2	293	296	2
6	0	0	79	69	1	4	7	0	68	62	1	-1	3	1	160	151	1	-9	7	1	45	46	1	4	1	2	298	294	2
7	0	0	222	226	2	5	7	0	56	60	1	0	3	1	38	26	1	-8	7	1	7	5	6	5	1	2	21	27	2
8	0	0	115	118	1	6	7	0	0	9	1	1	3	1	177	190	1	-7	7	1	22	23	2	6	1	2	272	273	2
9	0	0	90	87	1	7	7	0	18	15	3	2	3	1	23	29	2	-6	7	1	14	17	14	7	1	2	187	183	2
10	0	0	30	32	2	8	7	0	9	6	7	3	3	1	147	136	2	-5	7	1	14	8	4	8	1	2	55	63	1
11	0	0	82	79	1	9	7	0	29	28	2	4	3	1	39	32	1	-4	7	1	41	41	2	9	1	2	107	107	1
12	0	0	55	58	2	10	7	0	16	16	2	5	3	1	115	110	1	-3	7	1	10	14	9	10	1	2	8	16	7
13	0	0	5	16	4	0	8	0	160	160	2	6	3	1	0	1	1	-2	7	1	40	39	2	11	1	2	0	16	1
14	0	0	27	30	2	1	8	0	58	57	1	7	3	1	45	46	1	-1	7	1	167	163	2	12	1	2	22	19	2
1	1	1	692	693	6	2	8	0	70	66	3	8	3	1	19	18	3	0	7	1	122	123	1	13	1	2	4	12	3
2	1	1	164	175	1	3	8	0	19	19	3	9	3	1	12	17	12	1	7	1	18	13	3	-15	2	2	25	29	2
3	1	1	53	57	1	4	8	0	33	34	2	10	3	1	37	35	2	2	7	1	64	67	1	-14	2	2	22	18	2
4	1	1	64	76	1	5	8	0	25	24	2	11	3	1	45	43	2	3	7	1	91	87	1	-13	2	2	10	6	10
5	1	1	236	242	2	6	8	0	6	5	6	12	3	1	12	8	12	4	7	1	11	19	10	-12	2	2	23	25	3
6	1	1	104	112	1	7	8	0	41	34	1	13	3	1	10	5	5	5	7	1	12	11	11	-11	2	2	0	4	1
7	1	1	69	69	1	8	8	0	10	9	10	-14	4	1	9	14	6	6	7	1	24	23	2	-10	2	2	99	100	1
8	1	1	17	13	3	1	9	0	65	61	1	-13	4	1	28	27	2	7	7	1	0	8	1	-9	2	2	118	116	1
9	1	1	119	120	1	2	9	0	44	43	1	-12	4	1	5	10	4	8	7	1	17	13	3	-8	2	2	40	42	1
10	1	1	125	124	2	3	9	0	21	19	2	-11	4	1	0	12	1	9	7	1	14	10	3	-7	2	2	90	89	1
11	1	1	91	90	1	4	9	0	9	13	9	-10	4	1	106	112	1	-8	8	1	18	15	2	-6	2	2	146	152	2
12	1	1	18	15	3	5	9	0	23	21	2	-9	4	1	15	9	3	-7	8	1	9	1	6	-5	2	2	57	54	1
13	1	1	26	23	3	-15	1	1	9	5	8	-8	4	1	20	19	3	-6	8	1	0	3	1	-4	2	2	75	80	1
14	1	1	16	17	3	-14	1	1	33	28	1	-7	4	1	16	21	4	-5	8	1	23	22	2	-3	2	2	13	15	2
0	2	0	1322	1302	9	-13	1	1	32	31	2	-6	4	1	94	97	1	-4	8	1	33	32	2	-2	2	2	181	174	1
1	2	0	361	360	2	-12	1	1	12	2	12	-5	4	1	33	29	1	-3	8	1	9	8	8	-1	2	2	531	519	3
2	2	0	360	375	2	-11	1	1	48	48	1	-4	4	1	272	250	2	-2	8	1	38	34	2	0	2	2	499	507	2
3	2	0	125	112	1	-10	1	1	91	95	1	-3	4	1	334	318	2	-1	8	1	28	27	2	1	2	2	66	42	1
4	2	0	147	145	1	-9	1	1	70	73	1	-2	4	1	118	109	1	0	8	1	50	50	2	2	2	2	251	264	2
5	2	0	501	496	3	-8	1	1	12	1	3	-1	4	1	69	73	1	1	8	1	0	6	1	3	2	2	163	169	2
6	2	0	77	77	1	-7	1	1	175	179	2	0	4	1	60	61	1	2	8	1	22	20	3	4	2	2	160	160	2
7	2	0	178	176	2	-6	1	1	0	12	1	1	4	1	164	154	2	3	8	1	49	48	1	5	2	2	22	12	1
8	2	0	44	46	1	-5	1	1	226	238	2	2	4	1	18	12	2	4	8	1	20	19	2	6	2	2	39	37	1
9	2	0	16	15	4	-4	1	1	134	138	1	3	4	1	42	37	1	5	8	1	20	16	2	7	2	2	51	52	1
10	2	0	21	17	2	-3	1	1	427	423	2	4	4	1	95	100	1	6	8	1	0	10	1	8	2	2	69	72	1
11	2	0	10	0	9	-2	1	1	552	541	2	5	4	1	88	94	1	7	8	1	44	37	1	9	2	2	14	19	14
12	2	0	45	44	2	-1	1	1	30	28	1	6	4	1	105	108	1	-5	9	1	16	12	2	10	2	2	14	10	4
13	2	0	17	14	3	0	1	1	62	69	1	7	4	1	27	26	2	-4	9	1	24	23	2	11	2	2	17	14	3
14	2	0	40	34	1	1	1	1	734	755	3	8	4	1	76	77	1	-3	9	1	22	23	2	12	2	2	15	17	3
1	3	0	71	57	1	2	1	1	275	261	1	9	4	1	75	80	1	-2	9	1	26	24	2	13	2	2	13	13	3
2	3	0	151	150	1	3	1	1	138	141	1	10	4	1	16	9	3	-1	9	1	29	23	1	-15	3	2	0	13	1
3	3	0	67	60	1	4	1	1	54	50	1	11	4	1	8	18	8	0	9	1	31	27	2	-14	3	2	27	26	1
4	3	0	32	33	1	5	1	1	21	21	1	12	4	1	15	14	2	1	9	1	73	74	1	-13	3	2	9	12	9
5	3	0	66	62	1	6	1	1	183	193	2	-13	5	1	8	6	7	2	9	1	0	9	1	-12	3	2	0	2	1
6	3	0	92	98	1	7	1	1	12	10	12	-12	5	1	10	4	10	3	9	1	6	5	6	-11	3	2	61	62	1
7	3	0	0	4	1	8	1	1	61	57	1	-11	5	1	0	12	3	4	9	1	11	11	3	-10	3	2	53	51	1
8	3	0	9	14	9	9	1	1	59	58	1	-10	5	1	20	22	3	-15	0	2	23	23	2	-9	3	2	15	12	3
9	3	0	18	8	3	10	1	1	37	32	2	-9	5	1	52	51	1	-14	0	2	79	80	1	-8	3	2	20	22	2
10	3	0	0	8	1	11	1	1	22	20	3	-8	5	1	0	0	1	-13	0	2	126	128	2	-7	3	2	53	56	1
11	3	0	24	22	2	12	1	1	16	6	2	-7	5	1	0	0	1	-12	0	2	119	115	1	-6	3	2	146	140	2
12	3	0	0	1	1	13	1	1	27	28	2	-6	5	1	61	64	1	-11	0	2	7	6	6	-5	3	2	198	195	2
13	3	0	26	32	2	14	1	1	5	9	5	-5	5	1	106	106	1	-10	0	2	97	97	1	-4	3	2	250	235	2
14	3	0	11	9	4	-15	2	1	27	31	2	-4	5	1	80	84	1	-9	0	2	72	72	1	-3	3	2	26	21	1
0	4	0	43	49	1	-14	2	1	0	2	2	-3	5	1	84	84	1	-8	0	2	122	117	2	-2	3	2	284	282	2
1	4	0	31	33	1	-13	2	1	13	19	5	-2	5	1	22	18	2	-7	0	2	133	133	1	-1	3	2	117	120	1
2	4	0	0	11	1	-12	2	1	48	53	2	-1	5	1	7	2	6	-6	0	2	7	8	6	0	3	2	13	22	2
3	4	0	81	88	1	-11	2	1	21	16	2	0	5	1	29	23	1	-5	0	2	390	399	2						

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
7	4	2	9	16	9	-2	9	2	12	3	3	-13	4	3	13	12	4	-8	8	3	31	28	1	-5	2	4	74	81	1
8	4	2	28	32	2	-1	9	2	8	13	8	-12	4	3	10	20	10	-7	8	3	8	8	1	-4	2	4	106	105	1
9	4	2	9	10	9	0	9	2	26	28	2	-11	4	3	92	95	1	-6	8	3	37	38	1	-3	2	4	187	186	1
10	4	2	0	2	1	1	9	2	41	46	1	-10	4	3	0	11	1	-5	8	3	28	31	2	-2	2	4	99	106	1
11	4	2	13	13	13	2	9	2	14	14	2	-9	4	3	15	23	5	-4	8	3	29	27	2	-1	2	4	107	119	1
12	4	2	6	6	6	3	9	2	18	19	2	-8	4	3	111	112	1	-3	8	3	31	35	2	0	2	4	278	286	2
-13	5	2	9	2	9	-16	1	3	19	19	2	-7	4	3	88	85	1	-2	8	3	37	31	1	1	2	4	127	127	1
-12	5	2	28	28	2	-15	1	3	26	25	2	-6	4	3	56	52	1	-1	8	3	9	15	8	2	2	4	394	400	2
-11	5	2	15	7	3	-14	1	3	26	26	2	-5	4	3	135	139	2	0	8	3	61	62	1	3	2	4	259	272	2
-10	5	2	14	8	4	-13	1	3	51	48	1	-4	4	3	313	291	2	1	8	3	23	22	2	4	2	4	241	234	2
-9	5	2	115	126	1	-12	1	3	54	52	1	-3	4	3	98	96	1	2	8	3	0	5	1	5	2	4	134	126	2
-8	5	2	135	146	2	-11	1	3	75	75	1	-2	4	3	420	415	3	3	8	3	38	34	3	6	2	4	64	66	1
-7	5	2	70	66	1	-10	1	3	37	36	2	-1	4	3	6	11	5	4	8	3	6	3	6	7	2	4	26	20	2
-6	5	2	99	95	1	-9	1	3	36	37	2	0	4	3	89	91	1	5	8	3	0	2	1	8	2	4	48	47	2
-5	5	2	24	24	2	-8	1	3	23	26	2	1	4	3	93	95	1	6	8	3	25	19	1	9	2	4	52	54	1
-4	5	2	54	52	1	-7	1	3	284	285	2	2	4	3	239	238	2	-6	9	3	0	3	1	10	2	4	17	15	3
-3	5	2	171	176	2	-6	1	3	11	7	10	3	4	3	19	10	2	-5	9	3	12	10	3	11	2	4	7	11	7
-2	5	2	98	96	1	-5	1	3	63	63	1	4	4	3	54	65	1	-4	9	3	8	11	8	12	2	4	18	17	2
-1	5	2	84	83	1	-4	1	3	24	19	1	5	4	3	138	151	2	-3	9	3	0	5	1	-15	3	4	19	21	2
0	5	2	19	15	2	-3	1	3	66	69	1	6	4	3	41	48	1	-2	9	3	12	17	11	-14	3	4	12	15	11
1	5	2	136	136	2	-2	1	3	161	154	1	7	4	3	29	35	2	-1	9	3	0	13	1	-13	3	4	0	21	1
2	5	2	5	4	5	-1	1	3	118	122	1	8	4	3	27	26	2	0	9	3	53	53	1	-12	3	4	22	16	2
3	5	2	109	103	1	0	1	3	765	761	4	9	4	3	7	20	7	1	9	3	30	31	1	-11	3	4	9	15	9
4	5	2	140	140	2	1	1	3	715	726	3	10	4	3	0	4	1	2	9	3	23	28	2	-10	3	4	21	20	3
5	5	2	54	55	1	2	1	3	420	442	2	11	4	3	15	16	3	-16	0	4	18	17	3	-9	3	4	48	52	1
6	5	2	66	65	1	3	1	3	27	28	1	-14	5	3	27	23	1	-15	0	4	81	81	1	-8	3	4	85	80	1
7	5	2	78	82	1	4	1	3	86	92	1	-13	5	3	9	7	9	-14	0	4	140	135	2	-7	3	4	12	12	4
8	5	2	47	56	2	5	1	3	139	130	2	-12	5	3	36	38	2	-13	0	4	0	2	1	-6	3	4	156	150	2
9	5	2	14	6	3	6	1	3	106	102	1	-11	5	3	16	8	3	-12	0	4	103	99	1	-5	3	4	172	171	2
10	5	2	4	6	4	7	1	3	128	125	2	-10	5	3	44	43	2	-11	0	4	0	12	1	-4	3	4	184	173	2
11	5	2	7	10	7	8	1	3	42	46	2	-9	5	3	40	47	2	-10	0	4	48	51	1	-3	3	4	44	42	1
-12	6	2	9	11	8	9	1	3	24	23	2	-8	5	3	57	53	1	-9	0	4	171	181	2	-2	3	4	315	298	2
-11	6	2	31	33	2	10	1	3	36	34	2	-7	5	3	0	4	1	-8	0	4	123	110	1	-1	3	4	139	139	2
-10	6	2	17	16	3	11	1	3	7	11	7	-6	5	3	33	35	2	-7	0	4	236	232	2	0	3	4	63	60	1
-9	6	2	10	0	8	12	1	3	24	25	2	-5	5	3	58	63	1	-6	0	4	203	185	2	1	3	4	128	134	1
-8	6	2	0	8	1	13	1	3	19	18	2	-4	5	3	84	83	1	-5	0	4	19	13	1	2	3	4	50	52	1
-7	6	2	33	35	2	-15	2	3	21	22	2	-3	5	3	256	247	2	-4	0	4	116	108	1	3	3	4	120	127	1
-6	6	2	0	8	1	-14	2	3	12	11	5	-2	5	3	71	66	1	-3	0	4	475	489	2	4	3	4	55	53	1
-5	6	2	13	15	13	-13	2	3	29	27	2	-1	5	3	84	85	1	-2	0	4	1145	1153	9	5	3	4	79	78	1
-4	6	2	9	9	9	-12	2	3	16	19	4	0	5	3	37	39	1	-1	0	4	876	909	4	6	3	4	100	101	1
-3	6	2	218	216	3	-11	2	3	84	86	1	1	5	3	42	42	1	0	0	4	141	135	1	7	3	4	20	19	3
-2	6	2	25	28	2	-10	2	3	29	31	2	2	5	3	129	131	2	2	0	4	328	351	2	8	3	4	13	7	5
-1	6	2	7	4	7	-9	2	3	147	146	2	3	5	3	201	208	2	2	0	4	339	360	2	9	3	4	20	24	3
0	6	2	96	101	2	-8	2	3	146	143	2	4	5	3	56	62	1	3	0	4	174	181	2	10	3	4	8	2	8
1	6	2	140	145	2	-7	2	3	81	80	1	5	5	3	29	27	2	4	0	4	162	165	2	11	3	4	13	10	3
2	6	2	266	270	3	-6	2	3	151	145	2	6	5	3	24	26	2	5	0	4	210	211	2	-15	4	4	17	18	2
3	6	2	95	99	1	-5	2	3	182	172	2	7	5	3	17	9	2	6	0	4	25	17	2	-14	4	4	9	11	8
4	6	2	72	75	1	-4	2	3	88	82	1	8	5	3	36	36	2	7	0	4	176	176	2	-13	4	4	16	6	3
5	6	2	122	121	2	-3	2	3	21	5	1	9	5	3	7	8	6	8	0	4	185	180	2	-12	4	4	9	4	9
6	6	2	48	44	1	-2	2	3	527	515	3	10	5	3	25	26	2	9	0	4	68	63	1	-11	4	4	0	8	1
7	6	2	55	56	1	-1	2	3	118	120	1	-12	6	3	9	10	8	10	0	4	94	90	1	-10	4	4	61	60	1
8	6	2	27	26	2	0	1	3	281	273	2	-11	6	3	39	34	1	11	0	4	34	34	2	-9	4	4	14	13	4
9	6	2	23	22	2	1	2	3	446	449	2	-10	6	3	30	36	2	12	0	4	0	2	1	-8	4	4	54	59	1
10	6	2	21	16	2	2	3	3	380	391	2	-9	6	3	12	9	11	-16	1	4	19	18	2	-7	4	4	77	79	1
-11	7	2	17	18	2	3	2	3	262	252	2	-8	6	3	12	1	5	-15	1	4	29	24	1	-6	4	4	13	10	3
-10	7	2	0	9	1	4	5	2	45	49	1	-7	6	3	38	44	2	-14	1	4	78	79	1	-5	4	4	193	181	2
-9	7	2	0	9	1	5	2	2	40	32	1	-6	6	3	44	48	1	-13	1	4	65	72	1	-4	4	4	10	10	9
-8	7	2	21	22	3	6	2	2	44	44	1	-5	6	3	48	46	1	-12	1	4	175	177	2	-3	4	4	108	104	1
-7	7	2	9	5	8	7	2	2	13	9	4	-4	6	3	26	25	2	-11	1	4	158	163	2	-2	4	4	78	79	1
-6	7	2	14	12	5	8	2	2	19	18	3	-3	6	3	148	150	2	-10	1	4	75	74	1	-1	4	4	0	7	1
-5	7	2	8	13	7	9	2	2	0	9	1	-2	6	3	64	67	1	-9	1	4	82	80	1						

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

Page 3

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s											
7	5	4	7	4	7	8	1	5	27	26	2	-6	5	5	20	15	2	-2	0	6	276	282	2	7	3	6	46	45	2
8	5	4	18	13	2	9	1	5	22	23	3	-5	5	5	17	22	3	-1	0	6	241	247	2	8	3	6	7	10	6
9	5	4	19	15	2	10	1	5	43	42	1	-4	5	5	14	14	14	0	0	6	393	416	2	9	3	6	6	0	6
10	5	4	0	4	1	11	1	5	30	26	1	-3	5	5	148	144	2	1	0	6	325	331	2	10	3	6	15	12	2
-13	6	4	23	23	2	-16	2	5	0	7	1	-2	5	5	29	19	2	2	0	6	27	32	1	-15	4	6	19	14	2
-12	6	4	0	1	1	-15	2	5	22	18	2	-1	5	5	137	128	2	3	0	6	76	76	1	-14	4	6	8	12	8
-11	6	4	22	23	3	-14	2	5	33	28	2	0	5	5	22	26	3	4	0	6	95	99	1	-13	4	6	0	3	1
-10	6	4	5	5	5	-13	2	5	91	93	1	1	5	5	23	22	2	5	0	6	132	134	2	-12	4	6	9	7	9
-9	6	4	37	38	1	-12	2	5	26	24	2	2	5	5	235	242	3	6	0	6	35	35	2	-11	4	6	0	13	1
-8	6	4	72	77	1	-11	2	5	59	56	1	3	5	5	32	30	2	7	0	6	26	26	2	-10	4	6	33	34	2
-7	6	4	69	74	1	-10	2	5	106	108	1	4	5	5	71	73	1	8	0	6	124	117	2	-9	4	6	96	107	1
-6	6	4	20	28	3	-9	2	5	130	127	2	5	5	5	82	82	1	9	0	6	26	30	1	-8	4	6	7	18	7
-5	6	4	108	111	1	-8	2	5	121	118	1	6	5	5	49	52	1	10	0	6	49	49	1	-7	4	6	64	66	7
-4	6	4	0	0	1	-7	2	5	90	84	1	7	5	5	27	29	2	11	0	6	0	4	1	-6	4	6	34	36	2
-3	6	4	45	40	2	-6	2	5	268	266	2	8	5	5	11	4	10	-17	1	6	9	13	9	-5	4	6	143	138	2
-2	6	4	110	114	1	-5	2	5	187	187	2	9	5	5	0	9	1	-16	1	6	29	28	2	-4	4	6	104	99	1
-1	6	4	54	60	1	-4	2	5	198	187	2	-13	6	5	0	7	1	-15	1	6	21	25	2	-3	4	6	115	103	3
0	6	4	152	152	2	-3	2	5	91	82	1	-12	6	5	14	17	4	-14	1	6	44	42	2	-2	4	6	13	3	4
1	6	4	111	116	1	-2	2	5	328	331	2	-11	6	5	52	51	1	-13	1	6	138	140	2	-1	4	6	13	14	4
2	6	4	88	85	1	-1	0	2	176	168	2	-10	6	5	24	18	2	-12	1	6	0	1	1	0	4	6	16	6	3
3	6	4	0	8	1	0	2	2	128	131	2	-9	6	5	0	7	1	-11	1	6	60	59	1	1	4	6	69	62	1
4	6	4	58	57	1	1	2	2	170	166	2	-8	6	5	93	97	1	-10	1	6	0	21	1	2	4	6	13	13	12
5	6	4	33	34	2	2	2	2	327	336	2	-7	6	5	5	6	5	-9	1	6	13	13	3	3	4	6	25	24	3
6	6	4	41	34	1	3	2	2	280	296	2	-6	6	5	19	20	3	-8	1	6	339	333	2	4	4	6	56	53	1
7	6	4	15	13	3	4	2	2	41	45	1	-5	6	5	69	77	1	-7	1	6	186	184	2	5	4	6	79	72	1
8	6	4	42	38	1	5	2	2	91	95	1	-4	6	5	52	52	1	-6	1	6	187	190	2	6	4	6	18	21	4
9	6	4	8	9	8	6	2	2	43	43	2	-3	6	5	47	50	2	-5	1	6	266	267	2	7	4	6	54	52	2
-11	7	4	11	9	10	7	2	2	49	46	1	-2	6	5	102	94	1	-4	1	6	69	68	1	8	4	6	12	2	3
-10	7	4	21	23	2	8	2	2	19	19	3	-1	6	5	28	23	2	-3	1	6	72	75	1	9	4	6	11	1	10
-9	7	4	13	18	12	9	2	2	12	11	12	0	6	5	70	66	1	-2	1	6	352	347	2	-15	5	6	0	2	1
-8	7	4	22	24	3	10	2	2	35	31	1	1	6	5	49	48	1	-1	1	6	185	185	2	-14	5	6	0	2	1
-7	7	4	24	24	2	11	2	2	0	0	1	2	6	5	27	28	2	0	1	6	51	52	1	-13	5	6	12	11	12
-6	7	4	9	3	9	-16	3	5	0	0	4	3	6	5	114	117	5	1	1	6	50	52	1	-12	5	6	5	7	5
-5	7	4	39	41	1	-15	3	5	4	11	4	4	6	5	12	13	5	2	1	6	109	108	1	-11	5	6	25	24	2
-4	7	4	43	44	2	-14	3	5	14	8	4	5	6	5	27	24	2	3	1	6	52	53	1	-10	5	6	157	158	2
-3	7	4	83	85	1	-13	3	5	5	4	5	6	6	5	43	44	1	4	1	6	34	40	2	-9	5	6	17	19	3
-2	7	4	62	61	1	-12	3	5	21	15	3	7	6	5	11	15	11	5	1	6	45	45	1	-8	5	6	52	56	0
-1	7	4	11	1	10	-11	3	5	0	14	1	8	6	5	11	13	10	6	1	6	22	16	2	-7	5	6	7	0	7
0	7	4	11	10	10	-10	3	5	112	116	1	-12	7	5	35	35	1	7	1	6	46	40	2	-6	5	6	12	8	4
1	7	4	71	68	1	-9	3	5	66	58	1	-11	7	5	0	4	1	8	1	6	55	52	2	-5	5	6	53	53	1
2	7	4	32	34	2	-8	3	5	20	14	2	-10	7	5	0	9	1	9	1	6	7	21	6	-4	5	6	84	84	1
3	7	4	61	57	1	-7	3	5	33	34	1	-9	7	5	24	28	2	10	1	6	10	2	10	-3	5	6	87	76	1
4	7	4	26	25	2	-6	3	5	103	97	1	-8	7	5	9	11	8	-17	2	6	0	2	2	-2	5	6	22	16	3
5	7	4	21	15	2	-5	3	5	129	124	1	-7	7	5	0	7	1	-16	2	6	22	20	2	-1	5	6	7	12	7
6	7	4	37	37	1	-4	3	5	97	98	1	-6	7	5	47	48	2	-15	2	6	11	3	10	0	5	6	65	70	1
7	7	4	45	40	1	-3	3	5	338	316	2	-5	7	5	54	58	2	-14	2	6	34	39	2	1	5	6	176	175	2
-9	8	4	25	24	2	-2	3	5	263	258	2	-4	7	5	41	38	2	-13	2	6	48	48	1	2	5	6	147	152	2
-8	8	4	0	1	1	-1	3	5	323	318	2	-3	7	5	19	19	3	-12	2	6	86	85	1	3	5	6	32	28	2
-7	8	4	10	5	5	0	3	5	30	34	1	-2	7	5	125	128	2	-11	2	6	192	206	2	4	5	6	82		

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-9	8	6	21	22	2	4	3	7	219	224	3	-10	8	7	0	4	1	9	2	8	16	17	3	-12	7	8	9	6	9
-8	8	6	23	25	2	5	3	7	79	81	1	-9	8	7	5	3	5	-17	3	8	2	5	2	-11	7	8	24	25	2
-7	8	6	31	34	2	6	3	7	45	44	1	-8	8	7	0	2	2	-16	3	8	27	29	2	-10	7	8	0	6	1
-6	8	6	36	36	1	7	3	7	30	31	2	-7	8	7	23	28	2	-15	3	8	18	6	2	-9	7	8	0	5	1
-5	8	6	18	17	2	8	3	7	13	20	5	-6	8	7	9	0	8	-14	3	8	12	9	4	-8	7	8	50	50	1
-4	8	6	0	10	4	9	3	7	21	16	2	-5	8	7	0	8	1	-13	3	8	0	3	1	-7	7	8	9	9	8
-3	8	6	13	10	4	-16	4	7	37	35	1	-4	8	7	0	9	1	-12	3	8	70	75	1	-6	7	8	83	85	1
-2	8	6	29	33	2	-15	4	7	7	3	6	-3	8	7	62	64	1	-11	3	8	91	95	1	-5	7	8	30	24	2
-1	8	6	0	0	2	-14	4	7	17	21	4	-2	8	7	39	37	1	-10	3	8	99	99	1	-4	7	8	52	51	1
0	8	6	17	18	2	-13	4	7	37	37	2	-1	8	7	47	50	1	-9	3	8	42	41	2	-3	7	8	14	21	13
1	8	6	48	46	1	-12	4	7	24	19	2	0	8	7	24	24	2	-8	3	8	182	174	2	-2	7	8	5	1	5
2	8	6	36	35	1	-11	4	7	88	86	1	1	8	7	17	12	2	-7	3	8	107	104	1	-1	7	8	18	17	3
3	8	6	0	10	1	-10	4	7	32	32	2	2	8	7	13	7	3	-6	3	8	165	170	2	0	7	8	54	52	1
-5	9	6	9	12	7	-9	4	7	95	92	1	-17	0	8	18	16	2	-5	3	8	59	56	1	1	7	8	46	44	1
-4	9	6	19	19	2	-8	4	7	0	10	1	-16	0	8	0	2	1	-4	3	8	65	64	1	2	7	8	9	9	9
-3	9	6	5	1	4	-7	4	7	55	52	1	-15	0	8	0	8	1	-3	3	8	64	60	1	3	7	8	19	13	2
-2	9	6	9	11	8	-6	4	7	0	13	1	-14	0	8	51	53	2	-2	3	8	0	10	1	4	7	8	0	10	1
-1	9	6	34	36	1	-5	4	7	8	7	8	-13	0	8	23	24	2	-1	3	8	25	29	2	-9	8	8	6	1	5
-17	1	7	18	15	2	-4	4	7	34	30	1	-12	0	8	66	58	1	0	3	8	59	61	1	-8	8	8	8	19	7
-16	1	7	23	21	2	-3	4	7	70	76	1	-11	0	8	43	47	1	1	3	8	28	31	2	-7	8	8	46	48	1
-15	1	7	38	37	2	-2	4	7	122	114	1	-10	0	8	37	35	1	2	3	8	36	36	2	-6	8	8	22	17	2
-14	1	7	9	8	9	-1	4	7	51	44	1	-9	0	8	93	87	1	3	3	8	32	36	2	-5	8	8	35	32	1
-13	1	7	86	84	1	0	4	7	25	24	2	-8	0	8	101	104	1	4	3	8	92	89	1	-4	8	8	43	44	1
-12	1	7	89	89	1	1	4	7	38	42	2	-7	0	8	533	510	3	5	3	8	81	74	1	-3	8	8	0	8	1
-11	1	7	14	14	13	2	4	7	44	44	2	-6	0	8	33	28	1	6	3	8	81	78	1	-2	8	8	26	22	2
-10	1	7	33	31	1	3	4	7	281	288	3	-5	0	8	179	159	2	7	3	8	11	3	5	-1	8	8	25	25	2
-9	1	7	43	38	1	4	4	7	21	26	3	-4	0	8	253	264	2	8	3	8	10	5	9	0	8	8	53	51	1
-8	1	7	181	180	2	5	4	7	135	135	2	-3	0	8	33	25	1	-16	4	8	4	3	3	1	8	8	30	33	1
-7	1	7	25	32	1	6	4	7	55	54	1	-2	0	8	81	88	1	-15	4	8	0	3	1	-18	1	9	12	10	3
-6	1	7	79	71	1	7	4	7	20	20	3	-1	0	8	116	114	1	-14	4	8	0	4	1	-17	1	9	0	15	1
-5	1	7	38	31	1	8	4	7	16	10	2	0	0	8	135	140	2	-13	4	8	5	18	5	-16	1	9	19	13	2
-4	1	7	125	119	1	-15	5	7	10	6	9	1	0	8	153	158	2	-12	4	8	0	3	1	-15	1	9	32	32	2
-3	1	7	0	1	1	-14	5	7	36	26	1	2	0	8	104	103	1	-11	4	8	75	76	1	-14	1	9	55	51	1
-2	1	7	202	195	2	-13	5	7	19	23	3	3	0	8	75	76	1	-10	4	8	8	7	7	-13	1	9	9	1	9
-1	1	7	354	363	2	-12	5	7	45	43	1	4	0	8	40	40	2	-9	4	8	146	148	2	-12	1	9	41	44	2
0	1	7	81	45	1	-11	5	7	67	65	1	5	0	8	14	13	4	-8	4	8	20	16	3	-11	1	9	32	34	2
1	1	7	168	170	2	-10	5	7	52	44	1	6	0	8	0	7	1	-7	4	8	14	12	4	-10	1	9	85	86	1
2	1	7	32	31	2	-9	5	7	12	6	12	7	0	8	73	71	1	-6	4	8	92	86	1	-9	1	9	44	39	1
3	1	7	82	85	1	-8	5	7	66	63	1	8	0	8	78	74	1	-5	4	8	73	75	1	-8	1	9	0	0	1
4	1	7	17	14	3	-7	5	7	24	23	2	9	0	8	11	12	11	-4	4	8	17	14	3	-7	1	9	133	134	2
5	1	7	21	25	3	-6	5	7	31	29	2	-17	1	8	27	21	4	-3	4	8	39	38	1	-6	1	9	229	220	2
6	1	7	58	58	1	-5	5	7	5	10	5	-16	1	8	13	13	4	-2	4	8	0	2	1	-5	1	9	147	137	2
7	1	7	29	27	2	-4	5	7	55	50	1	-15	1	8	48	42	2	-1	4	8	52	52	1	-4	1	9	135	132	2
8	1	7	11	7	6	-3	5	7	58	54	1	-14	1	8	32	28	2	0	4	8	13	6	12	-3	1	9	135	138	2
9	1	7	62	58	1	-2	5	7	51	54	1	-13	1	8	152	152	2	1	4	8	41	42	2	-2	1	9	130	136	2
10	1	7	17	19	2	-1	5	7	77	79	1	-12	1	8	125	122	1	2	4	8	62	62	1	-1	1	9	0	7	1
11	1	7	0	11	1	0	5	7	74	76	1	-11	1	8	119	117	1	3	4	8	36	32	2	0	1	9	59	55	1
12	1	7	0	14	9	1	5	7	8	12	7	-10	1	8	0	7	1	4	4	8	11	0	8	1	1	9	20	20	3
13	1	7	30	26	2	2	5	7	46	45	2	-9	1	8	52	44	1	5	4	8	38	32	2	2	1	9	47	40	1
14	1	7	45	45	1	3	5	7	32	33	2	-8	1	8	42	47	1	6	4	8	8	14	8	3	1	9	73	68	1
15	1	7	5	5	5	4	5	7	98	99	1	-7	1	8	13	14	2	7	4	8	21	21	2	4	1	9	48	45	1
16	1	7	36	38	2	5	5	7	62	64	1	-6	1	8	442	428	3	-15	5	8	0	6	1	5	1	9	39	37	2
17	1	7	229	229	2	6	5	7	28	27	2	-5	1	8	314	288	2	-14	5	8	13	5	2	6	1	9	7	3	7
18	1	7	28	19	2	7	5	7	14	12	3	-4	1	8	241	238	2	-13	5	8	27	22	2	7	1	9	17	20	3
19	1	7	147	149	2	-14	6	7	8	0	7	-3	1	8	138	144	2	-12	5	8	13	16	12	8	1	9	57	56	1
20	1	7	138	138	2	-13	6	7	9	15	8	-2	1	8	172	181	2	-11	5	8	87	89	1	-17	2	9	10	4	9
21	1	7	185	179	2	-12	6	7	9	16	9	-1	1	8	124	124	1	-10	5	8	25	22	2	-16	2	9	23	20	2
22	1	7	28	21	1	-11	6	7	61	59	1	0	1	8	275	267	2	-9	5	8	35	38	2	-15	2	9	0	7	1
23	1	7	0	14	1	-10	6	7	39	39	2	1	1	8	103	99	1	-8	5	8	13	8	5	-14	2	9	56	58	1
24	1	7	38	33	1	-9	6	7	66	70	1	2	1	8	133	139	2	-7	5	8	63	63	1	-13	2	9	40	36	2
25	1	7	47	51	1	-8	6	7	20	21	3	3	1	8	77	78	1	-6	5	8	11	3	10	-12	2	9	130	128	2
26	1	7	266	259	2																								

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	3	9	52	48	1	-9	8	9	0	2	1	-11	3	10	61	65	1	1	7	10	5	4	5	-3	4	11	44	46	2
-4	3	9	115	106	1	-8	8	9	7	1	7	-10	3	10	30	32	2	-2	4	11	8	12	8	-2	4	11	40	46	2
-3	3	9	0	16	1	-7	8	9	11	8	4	-9	3	10	31	33	2	-1	4	11	13	13	3	-1	4	11	52	55	1
-2	3	9	0	3	1	-6	8	9	23	19	2	-8	3	10	189	192	2	0	4	11	11	14	4	0	4	11	32	36	2
-1	3	9	68	71	1	-5	8	9	41	39	1	-7	3	10	77	81	1	1	4	11	34	37	2	1	4	11	79	76	1
0	3	9	0	8	1	-4	8	9	39	40	1	-6	3	10	94	90	1	-4	4	11	36	37	1	2	4	11	23	23	2
1	3	9	15	11	3	-3	8	9	47	50	1	-5	3	10	45	43	1	-3	4	11	10	17	5	3	4	11	14	7	3
2	3	9	58	55	1	-2	8	9	0	3	1	-4	3	10	61	60	1	-2	4	11	6	6	6	4	4	11	27	20	1
3	3	9	16	14	3	-1	8	9	10	10	10	-3	3	10	17	6	2	-18	1	11	20	18	2	-15	5	11	0	4	1
4	3	9	58	59	1	0	8	9	18	17	2	-2	3	10	26	26	2	-17	1	11	4	8	4	-14	5	11	0	2	1
5	3	9	28	29	2	-18	0	10	10	6	9	-1	3	10	32	36	2	-16	1	11	0	8	1	-13	5	11	0	4	1
6	3	9	79	72	1	-17	0	10	15	10	3	0	3	10	109	110	1	-15	1	11	0	5	1	-12	5	11	10	17	10
7	3	9	0	0	1	-16	0	10	5	3	4	1	3	10	29	30	2	-14	1	11	0	1	1	-11	5	11	33	33	2
-16	4	9	0	4	1	-15	0	10	8	1	8	2	3	10	0	9	1	-13	1	11	61	65	1	-10	5	11	91	92	1
-15	4	9	23	20	2	-14	0	10	100	98	1	3	3	10	65	68	1	-12	1	11	0	7	1	-9	5	11	69	64	1
-14	4	9	11	8	10	-13	0	10	43	38	2	4	3	10	55	56	1	-11	1	11	17	0	3	-8	5	11	80	75	1
-13	4	9	5	3	5	-12	0	10	69	72	1	5	3	10	48	45	1	-10	1	11	63	64	1	-7	5	11	18	13	3
-12	4	9	0	15	1	-11	0	10	80	82	1	6	3	10	19	16	2	-9	1	11	79	81	1	-6	5	11	18	17	4
-11	4	9	146	145	2	-10	0	10	0	19	1	-16	4	10	8	11	8	-8	1	11	63	67	1	-5	5	11	15	12	4
-10	4	9	211	208	3	-9	0	10	44	50	1	-15	4	10	0	2	1	-7	1	11	67	61	1	-4	5	11	82	86	1
-9	4	9	131	133	2	-8	0	10	145	132	2	-14	4	10	6	9	6	-6	1	11	115	112	1	-3	5	11	8	2	7
-8	4	9	67	69	1	-7	0	10	113	118	1	-13	4	10	12	9	11	-5	1	11	92	94	1	-2	5	11	42	46	2
-7	4	9	16	17	4	-6	0	10	156	153	2	-12	4	10	26	26	2	-4	1	11	22	22	2	-1	5	11	11	5	6
-6	4	9	7	16	7	-5	0	10	236	244	2	-11	4	10	112	108	1	-3	1	11	7	15	7	0	5	11	10	16	10
-5	4	9	72	69	1	-4	0	10	158	161	2	-10	4	10	42	43	2	-2	1	11	0	2	1	1	5	11	0	9	1
-4	4	9	31	34	2	-3	0	10	61	59	1	-9	4	10	106	97	1	-1	1	11	0	2	1	2	5	11	26	26	2
-3	4	9	22	19	2	-2	0	10	56	57	1	-8	4	10	16	12	3	0	1	11	0	13	1	3	5	11	13	12	4
-2	4	9	58	53	1	-1	0	10	90	93	1	-7	4	10	79	71	1	1	1	11	10	1	9	-14	6	11	13	12	3
-1	4	9	28	26	2	0	0	10	53	57	1	-6	4	10	37	35	1	2	1	11	48	51	1	-13	6	11	2	11	2
0	4	9	79	81	1	1	0	10	159	156	2	-5	4	10	49	43	1	3	1	11	18	13	3	-12	6	11	21	13	2
1	4	9	90	93	1	2	0	10	22	23	2	-4	4	10	0	6	1	4	1	11	20	21	3	-11	6	11	0	13	1
2	4	9	40	47	2	3	0	10	46	52	1	-3	4	10	0	3	1	5	1	11	22	20	2	-10	6	11	22	20	2
3	4	9	38	35	2	4	0	10	44	48	2	-2	4	10	9	7	9	6	1	11	26	25	2	-9	6	11	49	49	2
4	4	9	69	68	1	5	0	10	4	8	4	-1	4	10	22	21	3	-17	2	11	22	17	2	-8	6	11	62	58	1
5	4	9	52	51	1	6	0	10	36	32	1	0	4	10	11	3	6	-16	2	11	9	2	8	-7	6	11	14	12	4
6	4	9	17	8	2	7	0	10	82	81	1	1	4	10	48	49	2	-15	2	11	42	45	2	-6	6	11	54	51	1
7	4	9	11	6	4	-18	1	10	29	22	1	2	4	10	5	14	5	-14	2	11	11	10	10	-5	6	11	31	28	2
-15	5	9	44	37	1	-17	1	10	13	15	13	3	4	10	12	9	5	-13	2	11	34	36	2	-4	6	11	38	38	2
-14	5	9	6	7	5	-16	1	10	8	9	8	4	4	10	23	25	3	-12	2	11	66	62	1	-3	6	11	7	13	7
-13	5	9	11	8	10	-15	1	10	28	30	2	5	4	10	34	34	1	-11	2	11	42	43	2	-2	6	11	44	45	1
-12	5	9	58	53	1	-14	1	10	29	35	2	6	4	10	0	12	1	-10	2	11	16	22	4	-1	6	11	5	3	5
-11	5	9	20	25	4	-13	1	10	49	55	1	-15	5	10	8	6	8	-9	2	11	168	165	2	0	6	11	21	18	2
-10	5	9	120	122	1	-12	1	10	15	9	3	-14	5	10	19	19	2	-8	2	11	86	88	1	1	6	11	11	14	10
-9	5	9	97	93	1	-11	1	10	16	15	3	-13	5	10	0	7	1	-7	2	11	67	62	1	2	6	11	19	21	2
-8	5	9	9	7	9	-10	1	10	28	28	2	-12	5	10	40	38	2	-6	2	11	117	111	1	-12	7	11	13	17	3
-7	5	9	46	45	1	-9	1	10	39	40	1	-11	5	10	37	35	1	-5	2	11	38	30	1	-11	7	11	25	23	2
-6	5	9	5	11	5	-8	1	10	32	38	2	-10	5	10	71	73	1	-4	2	11	19	20	3	-10	7	11	19	19	2
-5	5	9	31	36	2	-7	1	10	101	99	1	-9	5	10	77	79	1	-3	2	11	174	174	2	-9	7	11	0	4	1
-4	5	9	0	3	1	-6	1	10	135	126	2	-8	5	10	0	3	1	-2	2	11	85	92	1	-8	7	11	28	33	2
-3	5	9	49	51	1	-5	1	10	0	1	1	-7	5	10	39	28	2	-1	2	11	59	61	1	-7	7	11	24	22	2
-2	5	9	17	25	4	-4	1	10	123	117	2	-6	5	10	8	13	7	0	2	11	0	10	1	-6	7	11	33	35	2
-1	5	9	0	1	1	-3	1	10	133	136	2	-5	5	10	40	40	2	-1	2	11	0	0	1	-5	7	11	7	3	7
0	5	9	84	83	1	-2	1	10	74	73	1	-4	5	10	0	4	1	2	2	11	0	5	1	-4	7	11	12	18	12
1	5	9	32	34	2	-1	1	10	28	33	2	-3	5	10	28	31	2	3	2	11	69	66	1	-3	7	11	8	4	8
2	5	9	46	39	2	0	1	10	106	118	1	-2	5	10	74	75	1	4	2	11	8	10	8	-2	7	11	17	11	2
3	5	9	0	6	1	1	1	10	0	10	1	-1	5	10	66	66	1	5	2	11	47	43	1	-1	7	11	29	26	1
4	5	9	38	44	1	2	1	10	71	70	1	0	5	10	90	91	1	6	2	11	9	10	8	0	7	11	12	10	3
5	5	9	19	17	2	3	1	10	3	5	3	1	5	10	22	25	3	-17	3	11	13	13	3	-7	8	11	8	8	7
6	5	9	23	24	2	4	1	10	18	13	3	2	5	10	0	4	1	-16	3	11	11	7	11	-6	8	11	0	10	1
-14	6	9	0	4	1	5	1	10	52	48	1	3	5	10	0	0	1	-15	3	11	0	2	1	-5	8	11	11	16	4
-13	6	9	24	19	2	6	1	10	31	32	1	4	5																

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-9	1	12	65	68	1	-3	5	12	23	29	3	0	3	13	33	32	2	-7	1	14	73	75	1	-3	6	14	17	16	2
-8	1	12	83	80	1	-2	5	12	51	46	1	0	1	3	13	7	6	-6	1	14	109	111	1	-17	1	15	16	18	3
-7	1	12	3	3	2	-1	5	12	11	18	10	2	3	13	10	3	7	-5	1	14	119	119	1	-16	1	15	17	16	2
-6	1	12	0	4	1	0	5	12	29	30	2	3	3	13	14	13	3	-4	1	14	10	8	9	-15	1	15	11	15	5
-5	1	12	105	107	1	1	5	12	7	14	7	-16	4	13	12	13	11	-3	1	14	28	31	2	-14	1	15	17	15	3
-4	1	12	20	20	3	2	5	12	9	6	6	-15	4	13	27	24	2	-2	1	14	0	3	1	-13	1	15	0	18	1
-3	1	12	121	126	1	-13	6	12	9	0	9	-14	4	13	0	7	1	-1	1	14	9	17	8	-12	1	15	0	6	1
-2	1	12	35	31	2	-12	6	12	18	16	2	-13	4	13	0	3	1	0	1	14	14	6	4	-11	1	15	25	23	2
-1	1	12	53	51	1	-11	6	12	11	12	11	-12	4	13	0	14	1	1	1	14	18	17	3	-10	1	15	0	13	1
0	1	12	75	76	1	-10	6	12	48	50	1	-11	4	13	12	18	11	2	1	14	32	25	2	-9	1	15	14	19	5
1	1	12	49	48	2	-9	6	12	30	28	2	-10	4	13	56	55	2	3	1	14	6	5	5	-8	1	15	68	76	1
2	1	12	25	20	2	-8	6	12	10	5	9	-9	4	13	79	76	1	-17	2	14	20	18	2	-7	1	15	10	7	9
3	1	12	0	10	1	-7	6	12	50	49	2	-8	4	13	44	41	2	-16	2	14	8	2	8	-6	1	15	67	68	1
4	1	12	0	0	1	-6	6	12	31	29	2	-7	4	13	53	46	1	-15	2	14	24	23	2	-5	1	15	40	41	2
5	1	12	25	22	2	-5	6	12	14	17	5	-6	4	13	9	5	9	-14	2	14	12	23	11	-4	1	15	46	47	2
-18	2	12	8	1	8	-4	6	12	16	3	3	-5	4	13	0	20	1	-13	2	14	18	23	3	-3	1	15	0	4	1
-17	2	12	23	23	2	-3	6	12	14	18	4	-4	4	13	55	52	2	-12	2	14	27	33	3	-2	1	15	18	17	3
-16	2	12	18	20	2	-2	6	12	15	16	3	-3	4	13	64	68	2	-11	2	14	0	10	1	-1	1	15	8	7	8
-15	2	12	0	4	1	-1	6	12	34	32	2	-2	4	13	27	28	2	-10	2	14	14	5	3	0	1	15	20	13	2
-14	2	12	70	67	1	0	6	12	0	5	1	-1	4	13	83	78	1	-9	2	14	11	22	11	1	1	15	0	7	1
-13	2	12	0	6	1	1	6	12	10	9	10	0	4	13	0	6	1	-8	2	14	105	100	1	-17	2	15	15	12	3
-12	2	12	55	54	1	-11	7	12	0	7	1	1	4	13	11	10	11	-7	2	14	73	72	1	-16	2	15	7	12	7
-11	2	12	9	19	9	-10	7	12	22	22	2	-6	2	14	9	5	6	-6	2	14	100	99	1	-15	2	15	10	12	8
-10	2	12	107	97	1	-9	7	12	12	15	4	-15	5	13	10	5	9	-5	2	14	15	16	4	-14	2	15	9	7	8
-9	2	12	14	6	5	-8	7	12	18	21	3	-14	5	13	0	3	1	-4	2	14	50	51	2	-13	2	15	17	15	3
-8	2	12	65	64	1	-7	7	12	27	30	2	-13	5	13	4	6	4	-3	2	14	36	36	2	-12	2	15	45	43	1
-7	2	12	137	140	2	-6	7	12	0	20	1	-12	5	13	13	2	3	-2	2	14	0	14	1	-11	2	15	19	18	3
-6	2	12	94	88	1	-5	7	12	9	12	9	-11	5	13	0	5	1	-1	2	14	12	8	11	-10	2	15	51	47	2
-5	2	12	89	81	1	-4	7	12	18	15	2	-10	5	13	0	8	1	0	2	14	6	4	5	-9	2	15	71	71	1
-4	2	12	0	17	1	-3	7	12	8	0	8	-9	5	13	0	6	1	1	2	14	0	8	1	-8	2	15	38	37	2
-3	2	12	103	102	1	-2	7	12	0	9	1	-8	5	13	95	88	1	2	2	14	10	12	6	-7	2	15	68	70	1
-2	2	12	86	94	1	-18	1	13	0	2	1	-7	5	13	57	58	2	-17	3	14	7	4	6	-6	2	15	0	2	1
-1	2	12	39	41	2	-17	1	13	0	1	1	-6	5	13	53	53	1	-16	3	14	9	9	9	-5	2	15	5	4	5
0	2	12	0	0	1	-16	1	13	10	4	9	-5	5	13	64	66	1	-15	3	14	8	12	8	-4	2	15	42	42	2
1	2	12	90	87	1	-15	1	13	19	22	3	-4	5	13	0	10	1	-14	3	14	35	34	1	-3	2	15	32	39	2
2	2	12	14	1	3	-14	1	13	40	44	2	-3	5	13	53	57	1	-13	3	14	32	31	2	-2	2	15	16	18	4
3	2	12	12	2	11	-13	1	13	0	2	1	-2	5	13	12	7	11	-12	3	14	9	8	9	-1	2	15	23	22	2
4	2	12	15	5	3	-12	1	13	49	50	1	-1	5	13	49	47	1	-11	3	14	23	20	2	0	2	15	24	23	2
5	2	12	0	14	1	-11	1	13	45	39	1	0	5	13	4	5	4	-10	3	14	83	81	1	1	2	15	13	3	3
-17	3	12	0	5	1	-10	1	13	26	28	2	1	5	13	10	8	5	-9	3	14	19	21	4	-16	3	15	21	18	2
-16	3	12	0	8	1	-9	1	13	14	0	4	-13	6	13	17	14	2	-8	3	14	48	41	1	-15	3	15	14	0	2
-15	3	12	0	7	1	-8	1	13	29	32	2	-12	6	13	0	2	1	-7	3	14	53	47	1	-14	3	15	29	27	2
-14	3	12	11	7	11	-7	1	13	114	119	1	-11	6	13	0	10	1	-6	3	14	46	46	2	-13	3	15	42	41	2
-13	3	12	43	45	2	-6	1	13	13	16	6	-10	6	13	0	6	1	-5	3	14	12	6	12	-12	3	15	46	46	2
-12	3	12	45	42	2	-5	1	13	31	26	2	-9	6	13	46	48	1	-4	3	14	12	12	12	-11	3	15	44	40	2
-11	3	12	54	51	1	-4	1	13	12	8	12	-8	6	13	33	30	2	-3	3	14	16	6	4	-10	3	15	0	7	1
-10	3	12	124	126	1	-3	1	13	11	14	7	-7	6	13	11	2	5	-2	3	14	64	65	2	-9	3	15	20	12	3
-9	3	12	134	135	2	-2	1	13	25	20	2	-6	6	13	21	24	2	-1	3	14	51	51	1	-8	3	15	18	15	4
-8	3	12	14	11	6	-1	1	13	18	14	3	-5	6	13	0	7	1	0	3	14	35	31	2	-7	3	15	0	5	1
-7	3	12	46	47	2	0	1	13	0	5	1	-4	6	13	0	4	1	-1	3	14	28	24	2	-6	3	15	40	41	2
-6	3	12	8	9	7	1	1	13	10	7	10	-3	6	13	8	4	8	2	3	14	43	41	1	-5	3	15	0	0	1
-5	3	12	0	0	1	2	1	13	22	26	3	-2	6	13	4	5	4	-16	4	14	15	13	3	-4	3	15	19	22	4
-4	3	12	41	41	2	3	1	13	10	4	9	-1	6	13	0	4	1	-15	4	14	0	8	1	-3	3	15	66	65	1
-3	3	12	47	44	1	4	1	13	22	21	2	-10	7	13	0	8	1	-14	4	14	16	9	3	-2	3	15	21	17	2
-2	3	12	17	12	3	-17	2	13	22	15	2	-9	7	13	21	22	2	-13	4	14	42	41	2	-1	3	15	30	30	2
-1	3	12	21	26	3	-16	2	13	10	9	6	-8	7	13	9	12	7	-12	4	14	69	65	1	0	3	15	47	45	1
0	3	12	0	1	1	-15	2	13	30	28	2	-7	7	13	29	31	2	-11	4	14	49	48	2	-15	4	15	11	8	3
1	3	12	16	16	4	-14	2	13	15	16	4	-6	7	13	8	10	8	-10	4	14	29	25	2	-14	4	15	4	6	4
2	3	12	44	41	2	-13	2	13	20	27	3	-5	7	13	9	9	8	-9	4	14	46	49	2	-13	4	15	6	8	6
3	3	12	33	37	2	-12	2	13	30	32	2	-4	7	13	0	10	1	-8	4	14	0	3	1	-12	4	15	33	29	2
4	3	12	0	9	1	-11	2																						

Table 7. Observed and calculated structure factors for 4

Page 7

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-15	0	16	25	25	2	-2	2	16	21	20	2	-11	1	17	0	13	1	-11	5	17	25	33	2	-10	3	18	14	17	3
-14	0	16	28	28	2	-1	2	16	0	2	1	-10	1	17	10	11	10	-10	5	17	19	11	2	-9	3	18	0	17	1
-13	0	16	17	11	2	0	2	16	19	16	2	-9	1	17	14	13	13	-9	5	17	17	15	2	-8	3	18	23	23	2
-12	0	16	0	11	1	-16	3	16	0	6	1	-8	1	17	7	6	7	-8	5	17	16	24	3	-7	3	18	4	13	4
-11	0	16	72	75	2	-15	3	16	29	28	2	-7	1	17	12	17	6	-7	5	17	14	26	4	-6	3	18	17	15	2
-10	0	16	31	28	2	-14	3	16	38	36	1	-6	1	17	28	29	2	-16	0	18	14	19	4	-5	3	18	0	15	1
-9	0	16	18	16	4	-13	3	16	0	2	1	-5	1	17	49	45	1	-15	0	18	6	0	5	-12	4	18	0	5	1
-8	0	16	66	69	1	-12	3	16	22	21	3	-4	1	17	27	22	2	-14	0	18	12	5	3	-11	4	18	8	9	7
-7	0	16	67	70	2	-11	3	16	64	62	1	-3	1	17	18	14	2	-13	0	18	10	3	10	-10	4	18	10	11	10
-6	0	16	126	128	2	-10	3	16	33	31	2	-2	1	17	13	15	4	-12	0	18	12	14	5	-9	4	18	0	3	1
-5	0	16	98	96	1	-9	3	16	21	17	2	-16	2	17	5	7	5	-11	0	18	11	15	10	-8	4	18	4	0	4
-4	0	16	63	65	2	-8	3	16	0	14	1	-15	2	17	0	4	1	-10	0	18	0	3	1	-15	1	19	0	2	1
-3	0	16	9	18	8	-7	3	16	7	0	7	-14	2	17	8	1	7	-9	0	18	19	18	3	-14	1	19	0	3	1
-2	0	16	26	22	2	-6	3	16	9	7	9	-13	2	17	0	7	1	-8	0	18	18	28	4	-13	1	19	0	3	1
-1	0	16	7	7	7	-5	3	16	7	7	6	-12	2	17	12	8	5	-7	0	18	12	0	5	-12	1	19	9	3	9
0	0	16	6	2	6	-4	3	16	13	1	4	-11	2	17	21	17	2	-6	0	18	76	76	1	-11	1	19	7	3	7
-17	1	16	13	9	3	-3	3	16	32	32	2	-10	2	17	66	61	1	-5	0	18	34	35	2	-10	1	19	0	2	1
-16	1	16	17	11	3	-2	3	16	27	27	1	-9	2	17	16	16	4	-4	0	18	55	53	1	-9	1	19	0	2	1
-15	1	16	12	0	4	-1	3	16	29	28	2	-8	2	17	5	4	5	-3	0	18	7	2	7	-9	1	19	13	12	4
-14	1	16	11	7	11	-15	4	16	3	3	3	-7	2	17	0	12	1	-16	1	18	10	2	4	-8	1	19	5	10	5
-13	1	16	0	11	1	-14	4	16	16	15	2	-6	2	17	0	5	1	-15	1	18	13	10	3	-7	1	19	5	10	5
-12	1	16	35	36	2	-13	4	16	32	34	2	-5	2	17	48	49	2	-14	1	18	10	10	10	-6	1	19	34	36	2
-11	1	16	18	15	3	-12	4	16	11	23	10	-4	2	17	34	32	1	-13	1	18	0	13	1	-5	1	19	0	3	1
-10	1	16	22	24	3	-11	4	16	18	13	2	-3	2	17	24	21	2	-12	1	18	3	4	2	-14	2	19	0	2	1
-9	1	16	15	4	3	-10	4	16	0	7	1	-2	2	17	0	0	1	-11	1	18	23	20	2	-13	2	19	12	12	3
-8	1	16	28	28	2	-9	4	16	22	19	2	-15	3	17	0	12	1	-10	1	18	37	40	2	-12	2	19	26	27	2
-7	1	16	93	95	1	-8	4	16	11	4	10	-14	3	17	24	26	2	-9	1	18	30	29	2	-11	2	19	28	32	2
-6	1	16	85	88	2	-7	4	16	0	10	1	-13	3	17	25	29	2	-8	1	18	0	6	1	-10	2	19	9	8	8
-5	1	16	56	55	2	-6	4	16	5	8	4	-12	3	17	24	24	2	-7	1	18	44	48	2	-9	2	19	16	13	3
-4	1	16	0	2	1	-5	4	16	9	10	8	-11	3	17	7	15	6	-6	1	18	10	4	9	-8	2	19	0	3	1
-3	1	16	40	33	2	-4	4	16	18	10	2	-10	3	17	25	28	2	-5	1	18	42	41	2	-7	2	19	0	0	1
-2	1	16	10	3	10	-3	4	16	20	16	2	-9	3	17	18	17	3	-4	1	18	31	33	1	-6	2	19	0	4	1
-1	1	16	21	19	2	-2	4	16	32	33	1	-8	3	17	13	13	4	-3	1	18	10	9	6	-12	3	19	9	12	7
0	1	16	5	5	5	-13	5	16	17	14	2	-7	3	17	21	13	2	-15	2	18	13	12	3	-11	3	19	13	13	3
-17	2	16	8	8	8	-12	5	16	27	28	2	-6	3	17	0	3	1	-14	2	18	0	2	1	-10	3	19	0	4	1
-16	2	16	0	9	1	-11	5	16	13	6	3	-5	3	17	0	5	1	-13	2	18	0	0	1	-9	3	19	25	9	3
-15	2	16	8	12	7	-10	5	16	10	3	6	-4	3	17	10	3	6	-12	2	18	21	23	2	-8	3	19	10	9	1
-14	2	16	18	9	2	-9	5	16	22	23	2	-3	3	17	25	23	2	-11	2	18	8	8	7	-13	0	20	0	3	1
-13	2	16	0	6	1	-8	5	16	8	25	8	-14	4	17	0	11	1	-10	2	18	0	7	1	-12	0	20	0	6	1
-12	2	16	24	20	2	-7	5	16	15	15	4	-13	4	17	0	11	1	-9	2	18	0	10	1	-11	0	20	0	6	1
-11	2	16	77	75	1	-6	5	16	0	0	1	-12	4	17	11	11	10	-8	2	18	19	24	3	-10	0	20	10	5	9
-10	2	16	18	12	3	-5	5	16	5	2	5	-11	4	17	6	12	5	-7	2	18	38	37	2	-9	0	20	8	1	8
-9	2	16	12	11	6	-4	5	16	10	11	4	-10	4	17	6	3	6	-6	2	18	18	15	3	-8	0	20	8	3	8
-8	2	16	44	44	2	-17	1	17	14	14	3	-9	4	17	41	41	2	-5	2	18	32	36	2	-13	1	20	0	13	1
-7	2	16	33	33	2	-16	1	17	20	21	2	-8	4	17	25	20	2	-4	2	18	10	4	10	-12	1	20	0	7	1
-6	2	16	47	43	2	-15	1	17	7	5	7	-7	4	17	0	7	1	-14	3	18	6	2	6	-11	1	20	7	19	6
-5	2	16	9	2	8	-14	1	17	0	0	1	-6	4	17	0	0	1	-13	3	18	5	15	5	-10	1	20	13	14	3
-4	2	16	63	64	1	-13	1	17	0	8	1	-5	4	17	10	4	10	-12	3	18	23	28	2	-9	1	20	10	11	10
-3	2	16	0	8	1	-12	1	17	0	8	1	-4	4	17	0	11	1	-11	3	18	0	8	1						

Table 1. Crystal data and structure refinement for 5.

Identification code	5
Empirical formula	C40 H54 O6
Formula weight	630.83
Temperature	296(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P21/c
Unit cell dimensions	a = 9.38740(10) Å b = 25.2723(4) Å β = 104.483(2)° c = 8.1122(3) Å
Volume	1863.39(8) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.124 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.586 mm ⁻¹
F(000)	684
Crystal size	0.99 x 0.42 x 0.10 mm
Theta range for data collection	3.50 to 74.90 deg.
Limiting indices	-11 ≤ h ≤ 11, 0 ≤ k ≤ 31, -10 ≤ l ≤ 0
Reflections collected / unique	3832 / 3832 [R(int) = 0.0000]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3832 / 3 / 231
Goodness-of-fit on F ²	0.826
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0758, wR2 = 0.2060
R indices (all data)	R1 = 0.1021, wR2 = 0.2395
Extinction coefficient	0.0012(5)
Largest diff. peak and hole	.557 and -.226 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	U(eq)
O(1)	7291(2)	5074(1)	3464(3)	79(1)
O(2)	1738(2)	6761(1)	286(3)	75(1)
O(3)	-2466(2)	6714(1)	3994(3)	82(1)
C(1)	4894(3)	5357(1)	3696(3)	60(1)
C(2)	6111(3)	5034(1)	4172(3)	59(1)
C(3)	3759(3)	5336(1)	4505(3)	56(1)
C(4)	2471(3)	5684(1)	4066(3)	62(1)
C(5)	2233(3)	6079(1)	2984(4)	61(1)
C(6)	900(3)	6410(1)	2564(3)	59(1)
C(7)	657(3)	6749(1)	1150(3)	60(1)
C(8)	-623(3)	7053(1)	720(4)	68(1)
C(9)	-1638(3)	7024(1)	1676(4)	70(1)
C(10)	-1402(3)	6700(1)	3098(4)	64(1)
C(11)	-138(3)	6395(1)	3519(4)	63(1)
C(12)	7067(5)	5166(2)	1745(5)	123(2)
C(13)	8384(6)	5027(2)	1164(6)	128(2)
C(14A)	9464(13)	4614(7)	1998(22)	121(5)
C(14B)	8742(21)	4513(8)	1335(25)	153(6)
C(15)	1503(4)	7067(1)	-1239(4)	80(1)
C(16)	2852(4)	7010(2)	-1927(4)	91(1)
C(17)	4159(5)	7277(2)	-866(6)	125(2)
C(18)	-2271(3)	6384(1)	5465(4)	74(1)
C(19)	-3527(4)	6470(1)	6267(5)	89(1)
C(20)	-3430(5)	6112(2)	7784(5)	100(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for 5.

O(1)-C(2)	1.373(3)
O(1)-C(12)	1.376(4)
O(2)-C(7)	1.370(3)
O(2)-C(15)	1.429(3)
O(3)-C(10)	1.374(3)
O(3)-C(18)	1.430(4)
C(1)-C(2)	1.379(3)
C(1)-C(3)	1.385(3)
C(2)-C(3)#1	1.404(3)
C(3)-C(2)#1	1.404(3)
C(3)-C(4)	1.465(3)
C(4)-C(5)	1.312(4)
C(5)-C(6)	1.472(3)
C(6)-C(11)	1.389(4)
C(6)-C(7)	1.404(4)
C(7)-C(8)	1.394(4)
C(8)-C(9)	1.372(4)
C(9)-C(10)	1.386(4)
C(10)-C(11)	1.384(4)
C(12)-C(13)	1.472(5)
C(13)-C(14B)	1.34(2)
C(13)-C(14A)	1.50(2)
C(15)-C(16)	1.513(5)
C(16)-C(17)	1.474(5)
C(18)-C(19)	1.497(4)
C(19)-C(20)	1.512(5)
C(2)-O(1)-C(12)	120.1(3)
C(7)-O(2)-C(15)	118.8(2)
C(10)-O(3)-C(18)	117.9(2)
C(2)-C(1)-C(3)	121.7(2)
O(1)-C(2)-C(1)	122.4(2)
O(1)-C(2)-C(3)#1	116.4(2)
C(1)-C(2)-C(3)#1	121.0(2)
C(1)-C(3)-C(2)#1	117.3(2)
C(1)-C(3)-C(4)	123.2(2)
C(2)#1-C(3)-C(4)	119.6(2)
C(5)-C(4)-C(3)	127.8(3)
C(4)-C(5)-C(6)	125.5(3)
C(11)-C(6)-C(7)	118.6(2)
C(11)-C(6)-C(5)	122.0(2)
C(7)-C(6)-C(5)	119.4(2)
O(2)-C(7)-C(8)	124.2(2)
O(2)-C(7)-C(6)	116.2(2)
C(8)-C(7)-C(6)	119.6(3)
C(9)-C(8)-C(7)	120.4(3)
C(8)-C(9)-C(10)	120.9(2)
O(3)-C(10)-C(11)	125.1(3)
O(3)-C(10)-C(9)	116.1(2)
C(11)-C(10)-C(9)	118.8(3)
C(10)-C(11)-C(6)	121.7(3)
O(1)-C(12)-C(13)	110.9(3)
C(14B)-C(13)-C(12)	113.9(10)
C(12)-C(13)-C(14A)	123.3(7)
O(2)-C(15)-C(16)	107.8(3)

C(17)-C(16)-C(15)	113.2(3)
O(3)-C(18)-C(19)	109.2(3)
C(18)-C(19)-C(20)	111.9(3)

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

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 5. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	73(1)	99(2)	73(1)	22(1)	30(1)	24(1)
O(2)	77(1)	71(1)	75(1)	24(1)	18(1)	16(1)
O(3)	65(1)	76(1)	107(2)	7(1)	26(1)	17(1)
C(1)	63(2)	57(1)	60(2)	14(1)	17(1)	14(1)
C(2)	59(1)	62(1)	60(2)	9(1)	21(1)	11(1)
C(3)	58(1)	49(1)	59(1)	7(1)	13(1)	12(1)
C(4)	58(1)	59(1)	69(2)	11(1)	18(1)	14(1)
C(5)	57(1)	56(1)	70(2)	9(1)	15(1)	11(1)
C(6)	57(1)	47(1)	67(2)	3(1)	7(1)	8(1)
C(7)	59(1)	49(1)	66(2)	4(1)	5(1)	4(1)
C(8)	66(2)	54(1)	73(2)	7(1)	-2(1)	8(1)
C(9)	55(1)	56(1)	88(2)	-1(1)	-2(1)	11(1)
C(10)	54(1)	50(1)	84(2)	-3(1)	11(1)	5(1)
C(11)	60(2)	53(1)	73(2)	5(1)	11(1)	9(1)
C(12)	98(3)	207(5)	71(2)	45(3)	37(2)	27(3)
C(13)	135(4)	167(4)	103(3)	38(3)	66(3)	34(4)
C(14A)	118(8)	132(13)	137(14)	11(9)	81(9)	39(8)
C(14B)	257(18)	107(7)	127(14)	-19(9)	105(15)	0(15)
C(15)	81(2)	83(2)	66(2)	18(2)	2(2)	-3(2)
C(16)	99(2)	100(3)	71(2)	9(2)	18(2)	0(2)
C(17)	97(3)	168(5)	117(3)	-20(3)	38(3)	-12(3)
C(18)	62(2)	64(2)	94(2)	-8(2)	18(2)	0(1)
C(19)	84(2)	65(2)	126(3)	-7(2)	43(2)	1(2)
C(20)	105(3)	88(2)	117(3)	-9(2)	45(2)	-5(2)

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

U(eq)	x	y	z	
H(1)	4773 (3)	5626 (1)	2820 (3)	91 (10)
H(4)	1654 (3)	5582 (1)	4590 (3)	95 (10)
H(5)	3098 (3)	6181 (1)	2411 (4)	77 (9)
H(8)	-761 (3)	7322 (1)	-170 (4)	86 (10)
H(9)	-2500 (3)	7273 (1)	1393 (4)	96 (10)
H(11)	38 (3)	6159 (1)	4578 (4)	85 (9)
H(12A)	6830 (5)	5536 (2)	1507 (5)	147
H(12B)	6239 (5)	4956 (2)	1126 (5)	147
H(13A)	8939 (6)	5352 (2)	1186 (6)	154
H(13B)	8042 (6)	4926 (2)	-23 (6)	154
H(14A)	10235 (13)	4588 (7)	1417 (22)	169 (17)
H(14B)	8972 (13)	4279 (7)	1947 (22)	169 (17)
H(14C)	9877 (13)	4708 (7)	3166 (22)	169 (17)
H(14D)	9607 (21)	4452 (8)	934 (25)	169 (17)
H(14E)	7944 (21)	4305 (8)	681 (25)	169 (17)
H(14F)	8932 (21)	4415 (8)	2513 (25)	169 (17)
H(15A)	1317 (4)	7477 (1)	-994 (4)	108 (8)
H(15B)	538 (4)	6972 (1)	-1994 (4)	108 (8)
H(16A)	2473 (4)	7253 (2)	-3202 (4)	120 (9)
H(16B)	3080 (4)	6605 (2)	-2002 (4)	120 (9)
H(17A)	5063 (5)	7198 (2)	-1430 (6)	205 (16)
H(17B)	4409 (5)	7088 (2)	170 (6)	205 (16)
H(17C)	3850 (5)	7628 (2)	-630 (6)	205 (16)
H(18A)	-2259 (3)	5994 (1)	4999 (4)	89 (7)
H(18B)	-1330 (3)	6453 (1)	6199 (4)	89 (7)
H(19A)	-3673 (4)	6763 (1)	6405 (5)	136 (12)
H(19B)	-4541 (4)	6341 (1)	5405 (5)	136 (12)
H(20A)	-3358 (5)	5762 (2)	7373 (5)	128 (8)
H(20B)	-2428 (5)	6121 (2)	8573 (5)	128 (8)
H(20C)	-4262 (5)	6167 (2)	8373 (5)	128 (8)

Table 6. Torsion angles [deg] for 5.

C(12)-O(1)-C(2)-C(1)	-40.2(5)
C(12)-O(1)-C(2)-C(3)#1	143.7(4)
C(3)-C(1)-C(2)-O(1)	-175.4(3)
C(3)-C(1)-C(2)-C(3)#1	0.5(5)
C(2)-C(1)-C(3)-C(2)#1	-0.5(5)
C(2)-C(1)-C(3)-C(4)	178.2(3)
C(1)-C(3)-C(4)-C(5)	-5.3(5)
C(2)#1-C(3)-C(4)-C(5)	173.4(3)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	178.7(3)
C(4)-C(5)-C(6)-C(11)	12.1(4)
C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	-167.4(3)
C(15)-O(2)-C(7)-C(8)	-5.6(4)
C(15)-O(2)-C(7)-C(6)	175.2(2)
C(11)-C(6)-C(7)-O(2)	178.0(2)
C(5)-C(6)-C(7)-O(2)	-2.5(4)
C(11)-C(6)-C(7)-C(8)	-1.3(4)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	178.2(2)
O(2)-C(7)-C(8)-C(9)	-178.8(3)
C(6)-C(7)-C(8)-C(9)	0.4(4)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	1.0(4)
C(18)-O(3)-C(10)-C(11)	-0.9(4)
C(18)-O(3)-C(10)-C(9)	179.7(2)
C(8)-C(9)-C(10)-O(3)	178.0(2)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-1.5(4)
O(3)-C(10)-C(11)-C(6)	-178.8(2)
C(9)-C(10)-C(11)-C(6)	0.6(4)
C(7)-C(6)-C(11)-C(10)	0.8(4)
C(5)-C(6)-C(11)-C(10)	-178.7(2)
C(2)-O(1)-C(12)-C(13)	-161.8(4)
O(1)-C(12)-C(13)-C(14B)	63.4(11)
O(1)-C(12)-C(13)-C(14A)	28.4(10)
C(7)-O(2)-C(15)-C(16)	-179.9(3)
O(2)-C(15)-C(16)-C(17)	-69.7(4)
C(10)-O(3)-C(18)-C(19)	178.6(2)
O(3)-C(18)-C(19)-C(20)	177.2(3)

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