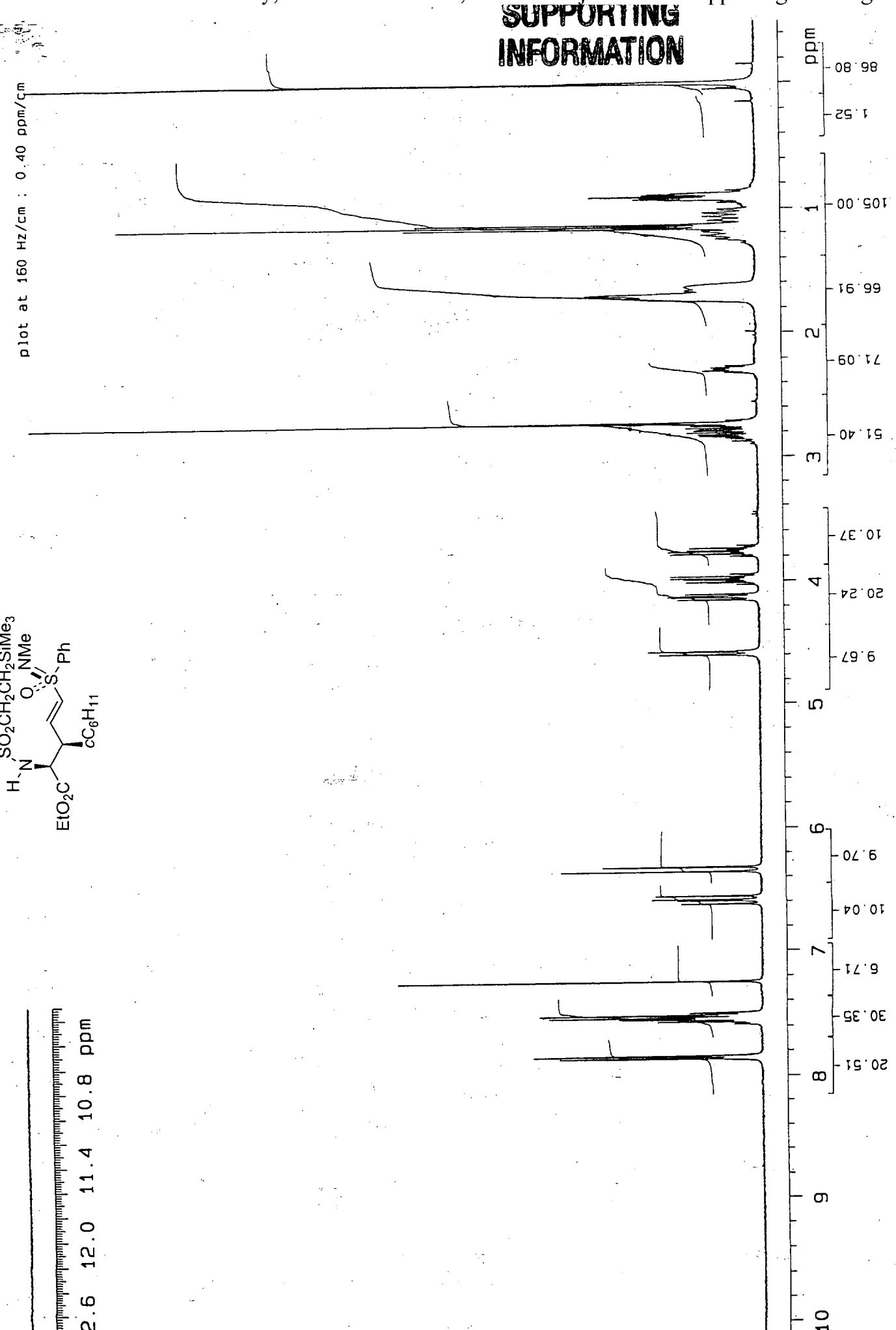
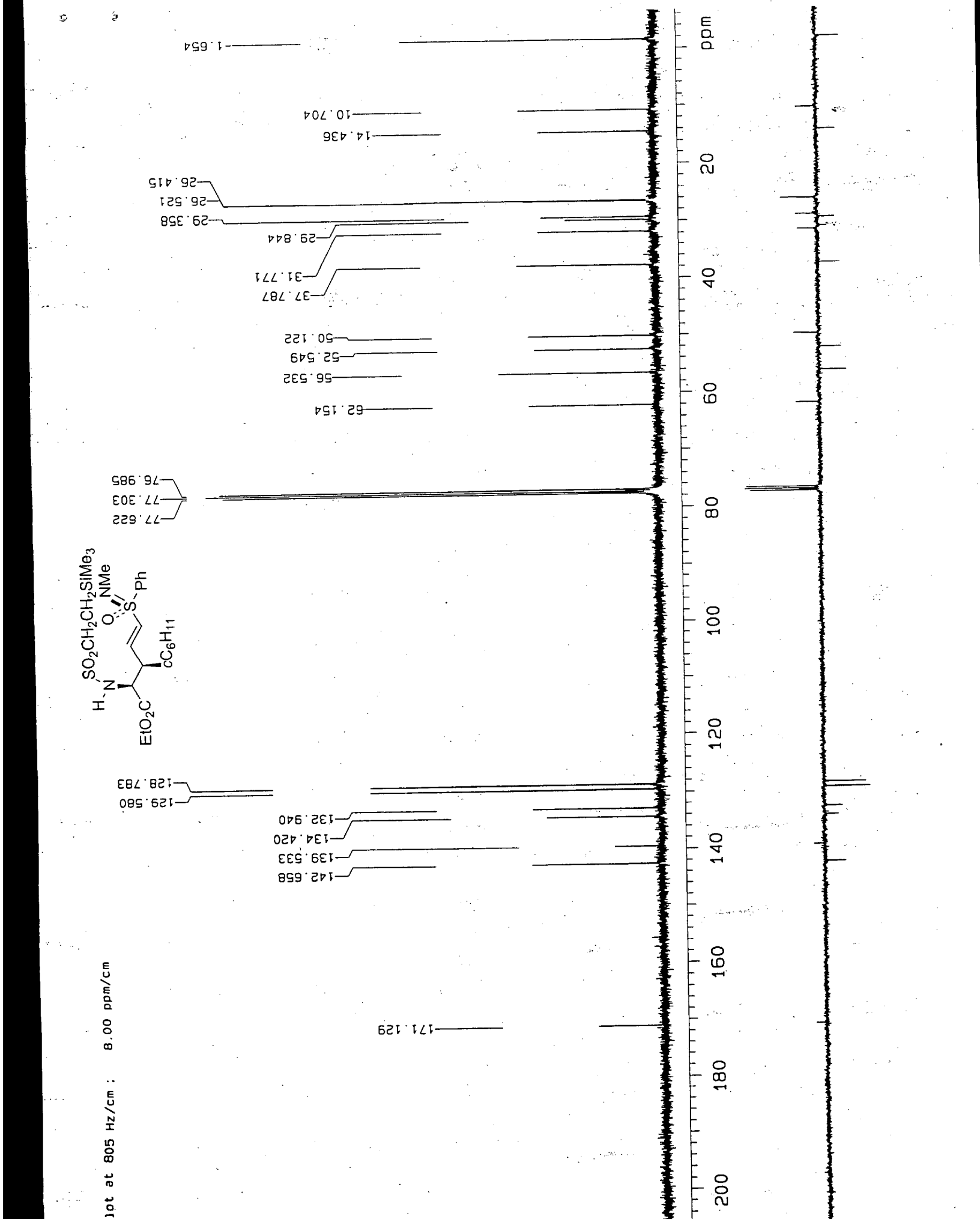
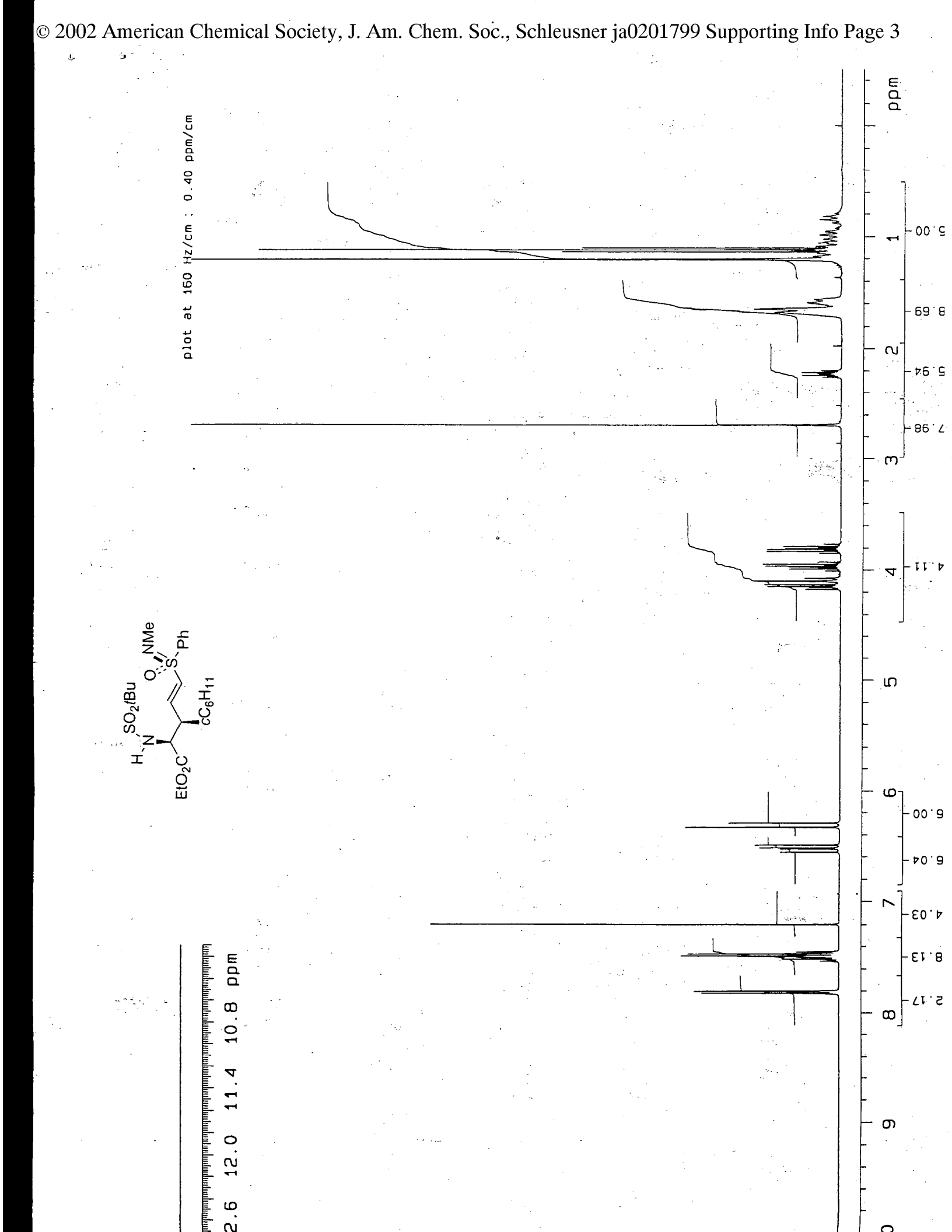
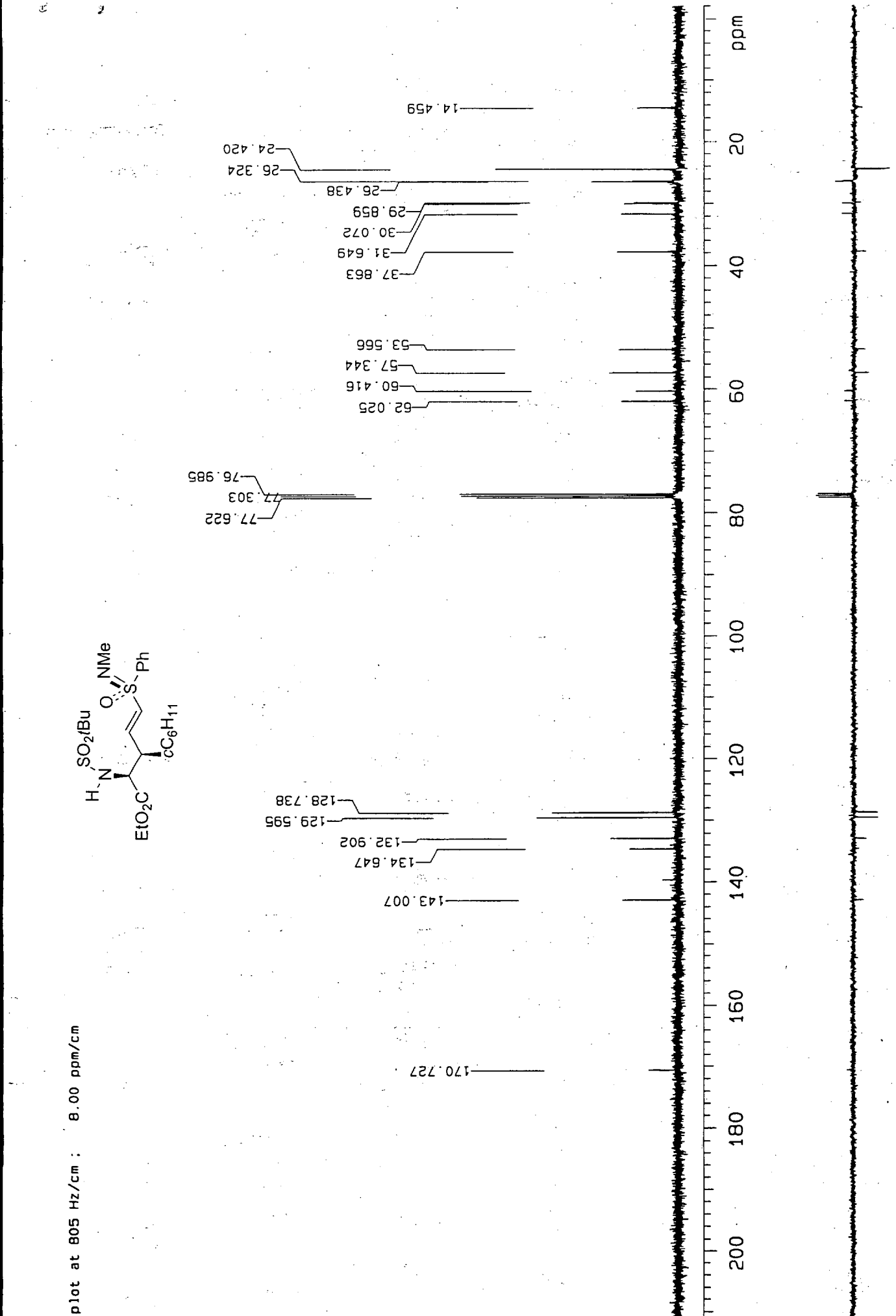
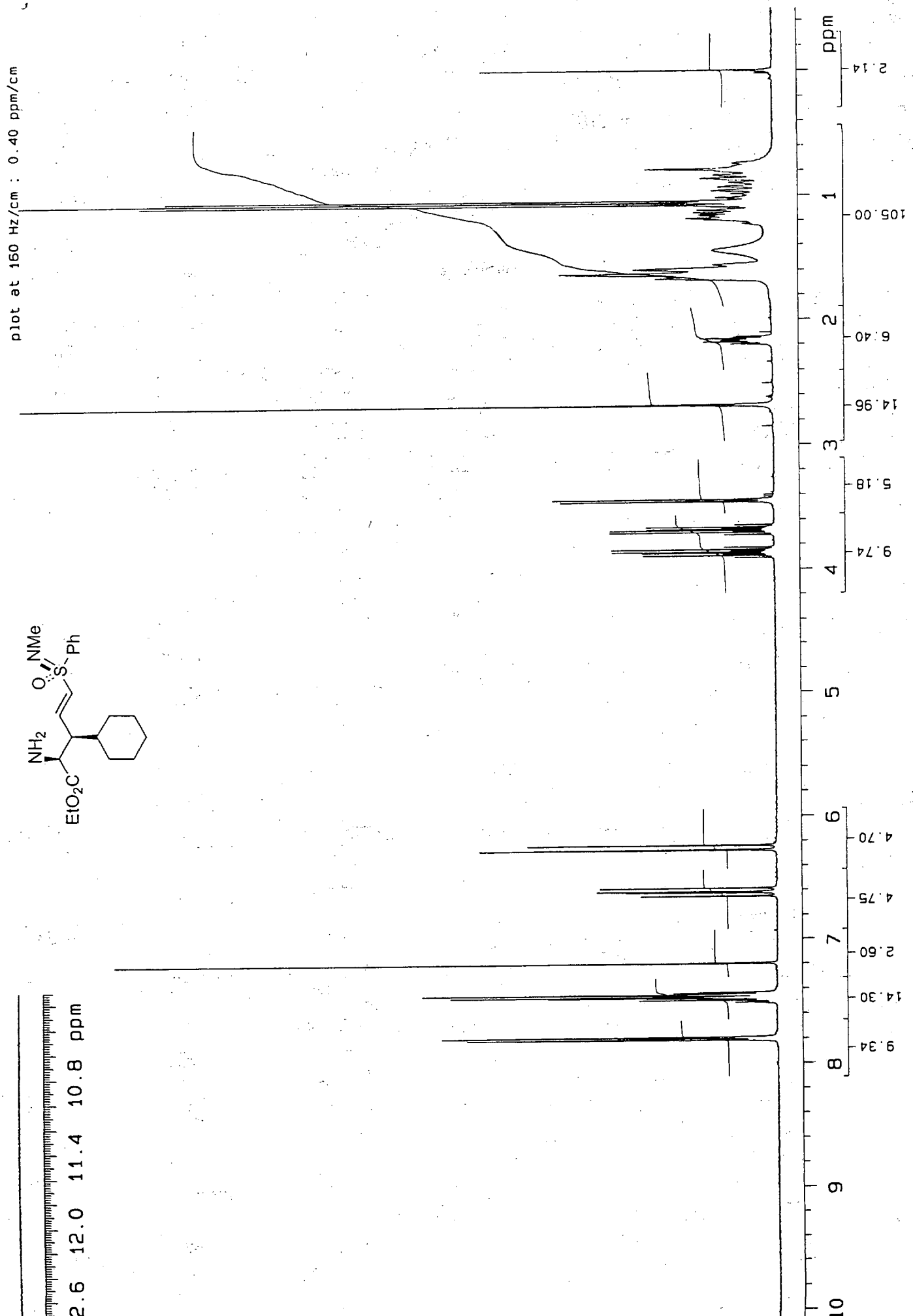
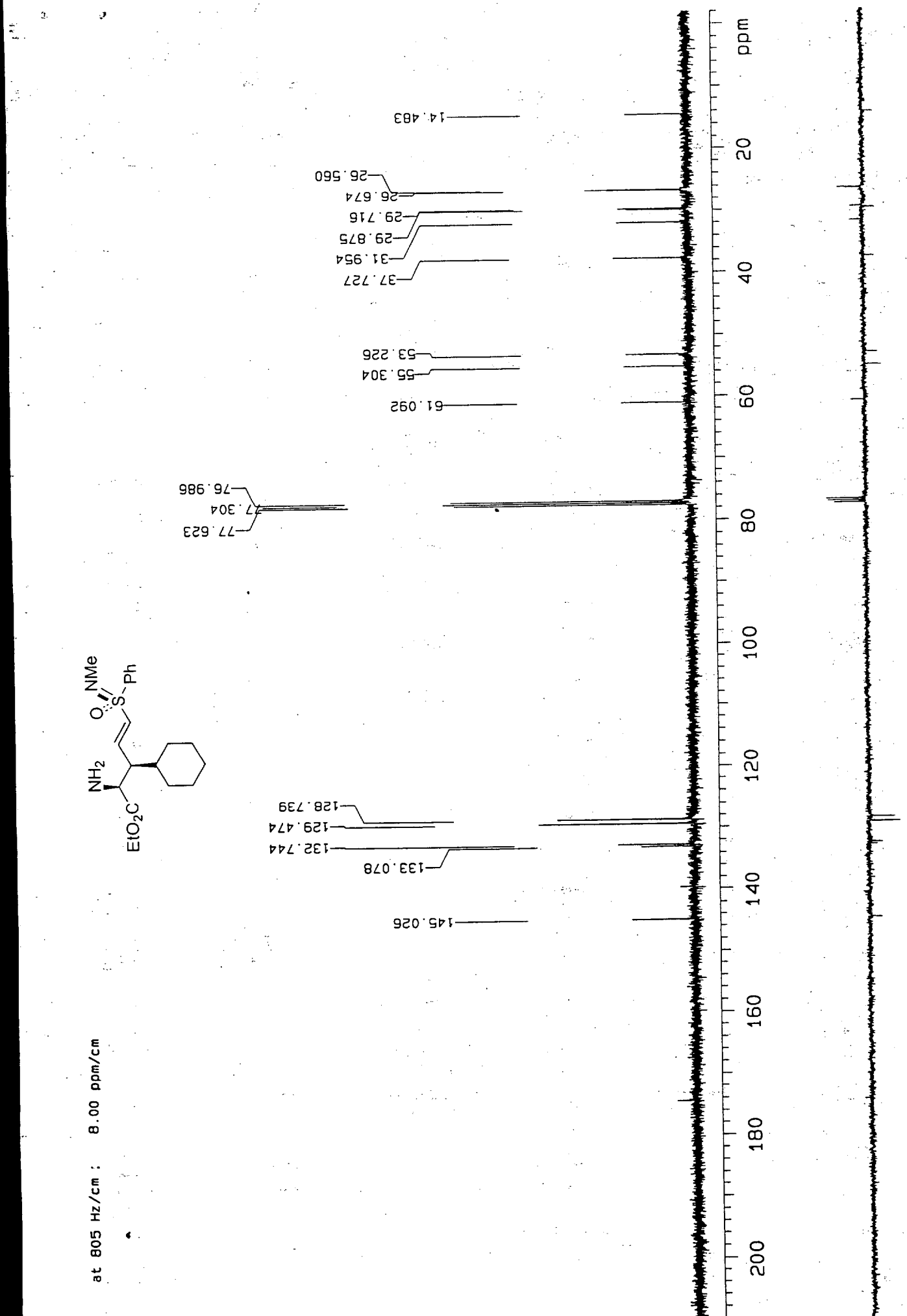


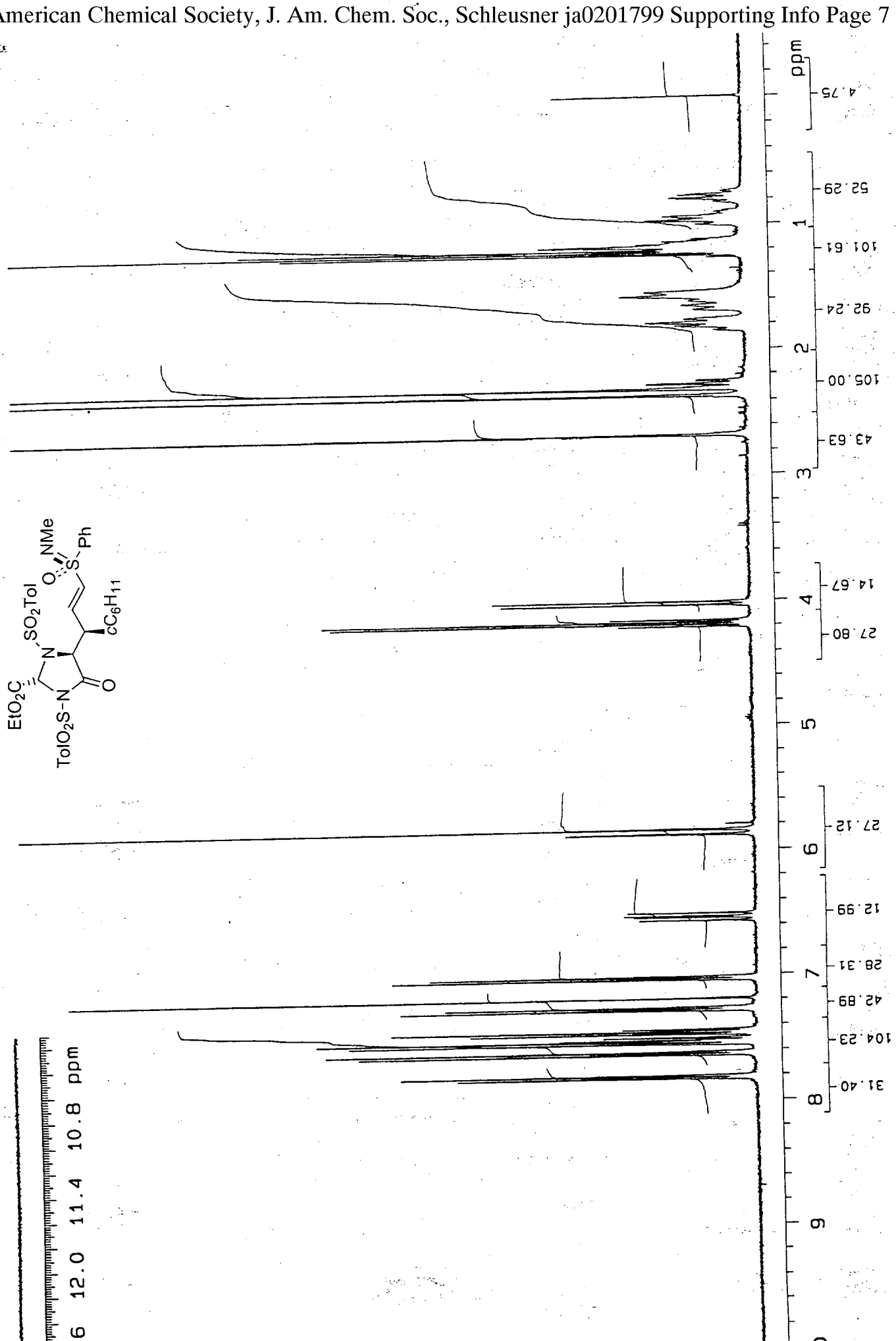


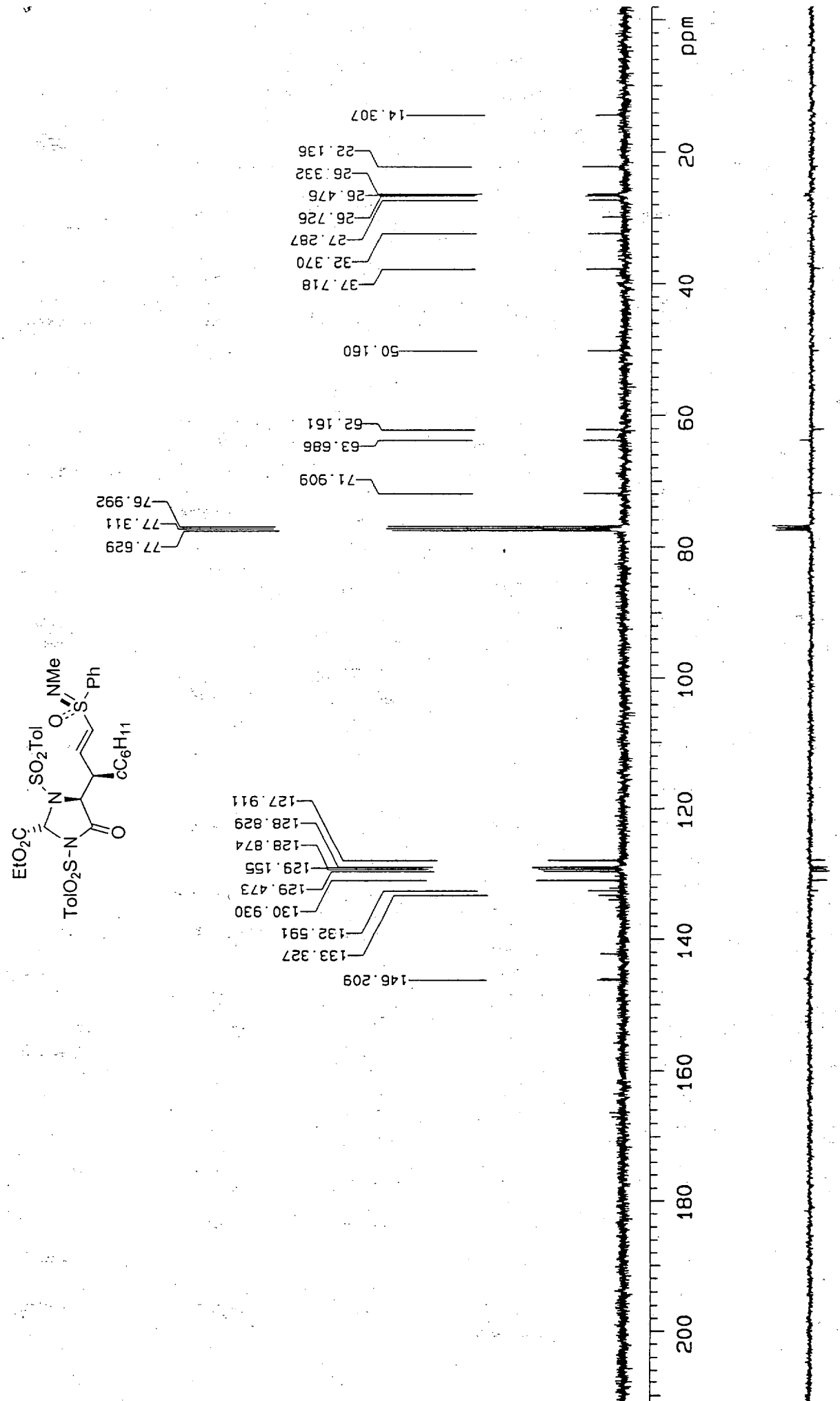


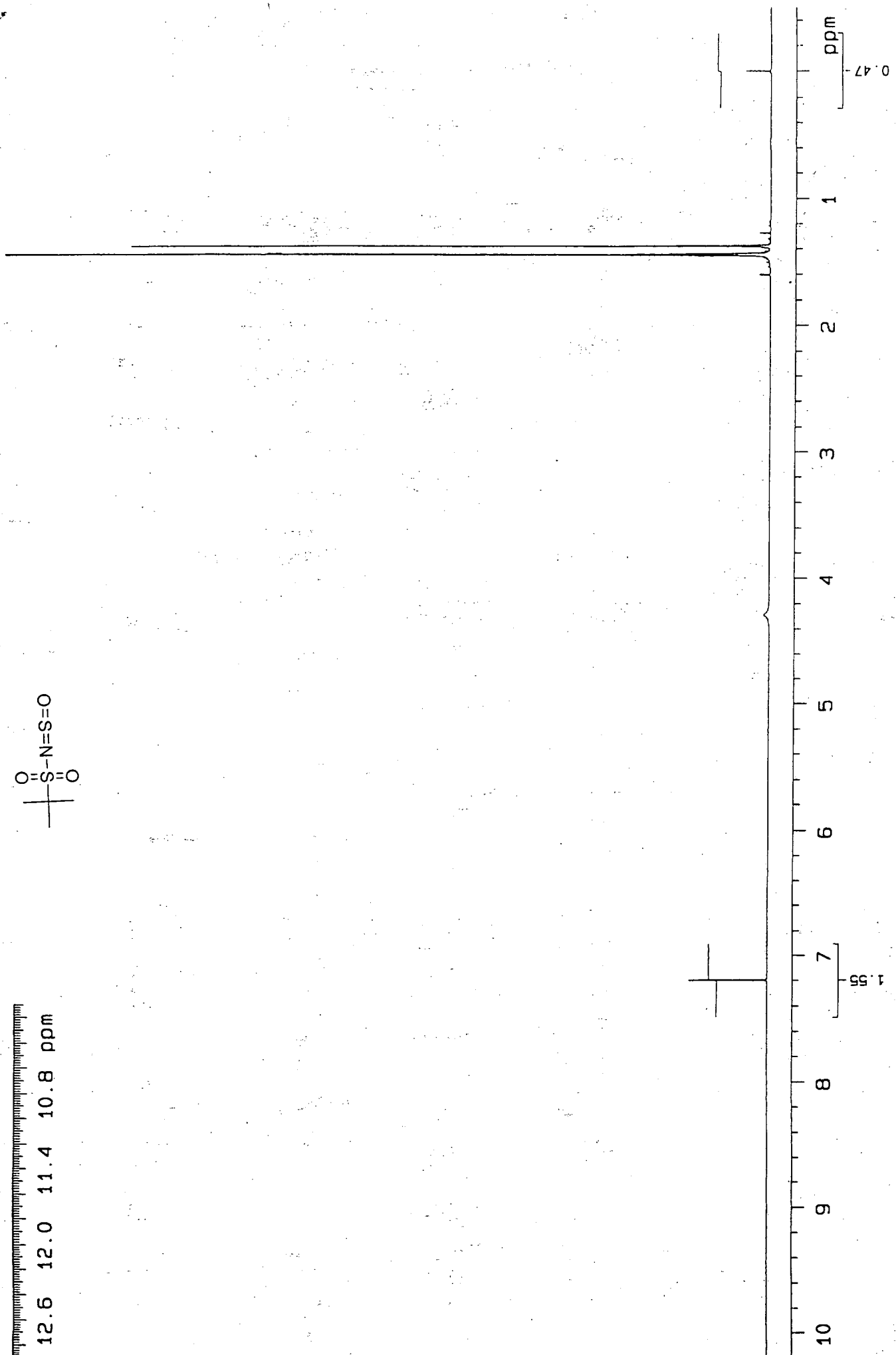


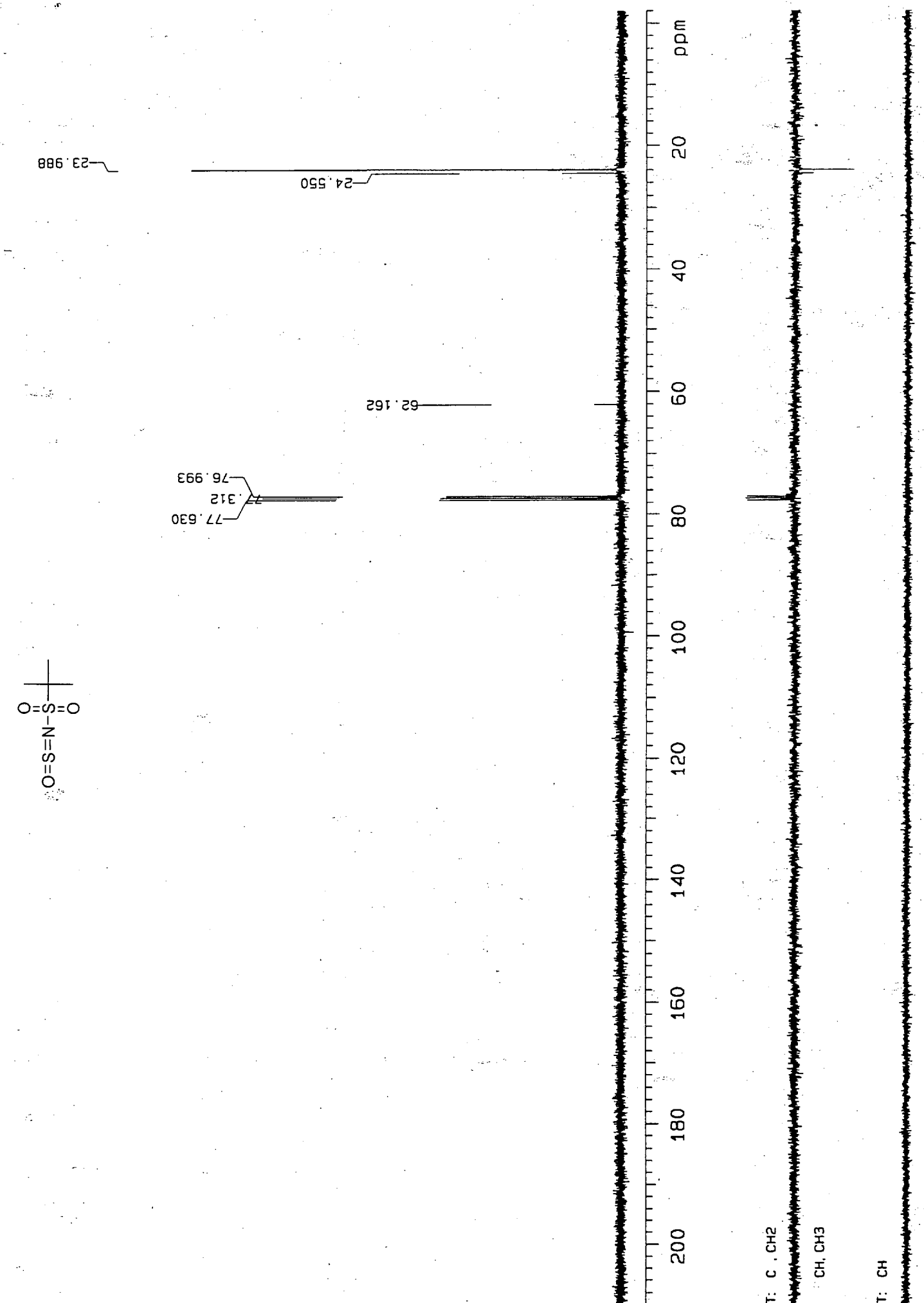


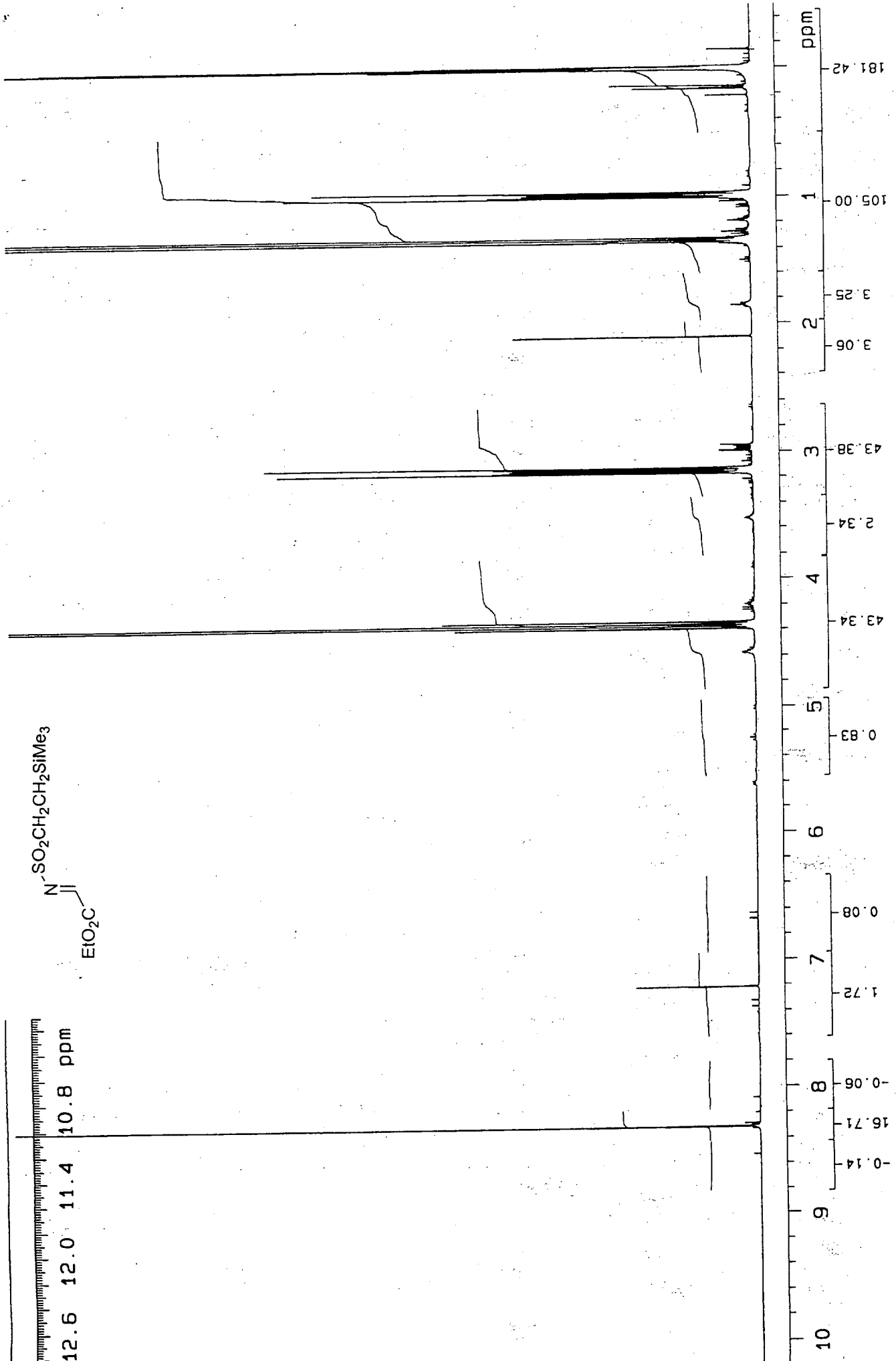


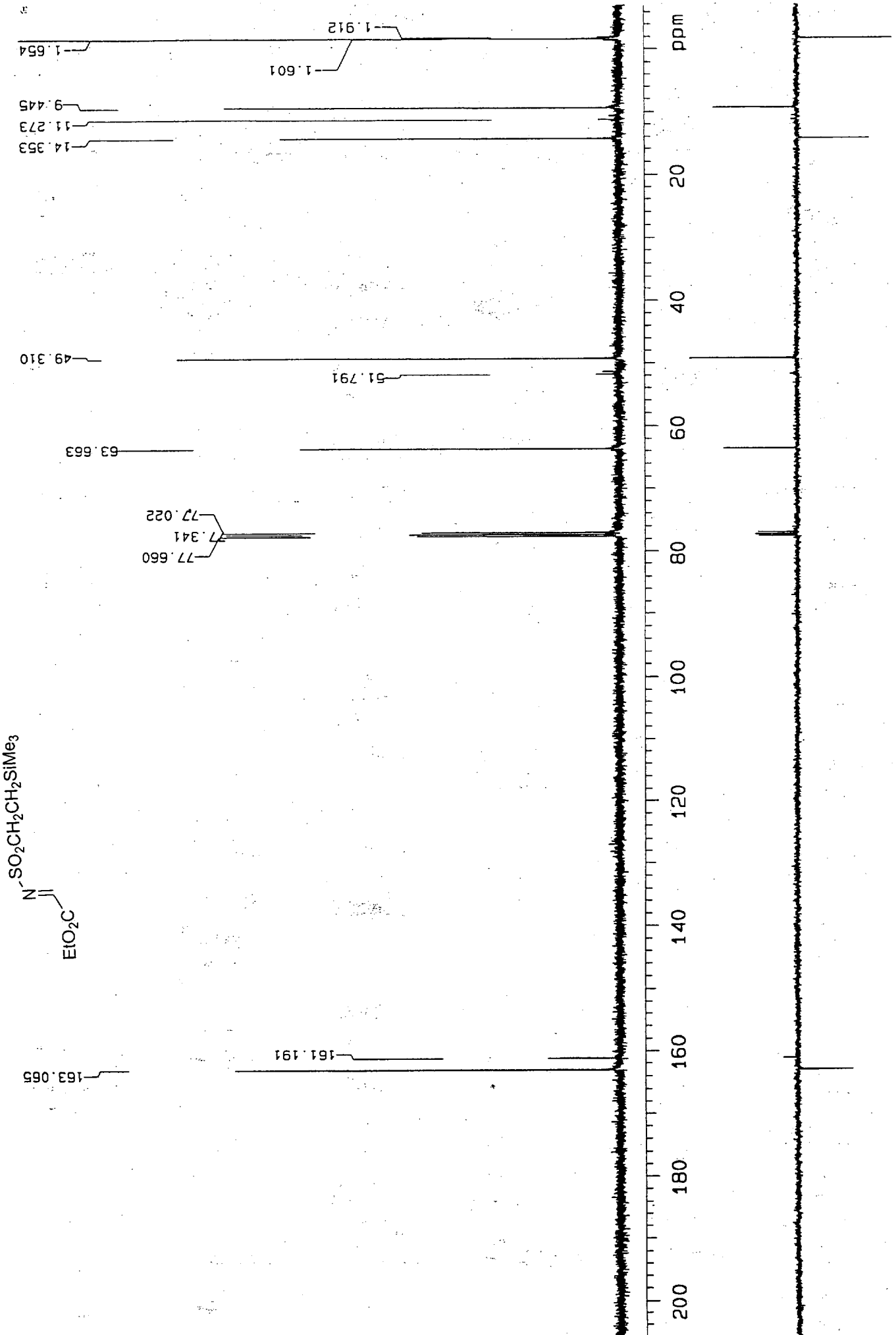

EtO2C
SO2Tol
N
NMe
O
S
Ph
cC6H11
O
TolO2S-N
ppm
4.75
52.29
101.61
92.24
105.00
43.63
14.67
27.80
27.12
12.99
28.31
42.89
104.23
31.40
12.6 12.0 11.4 10.8 ppm







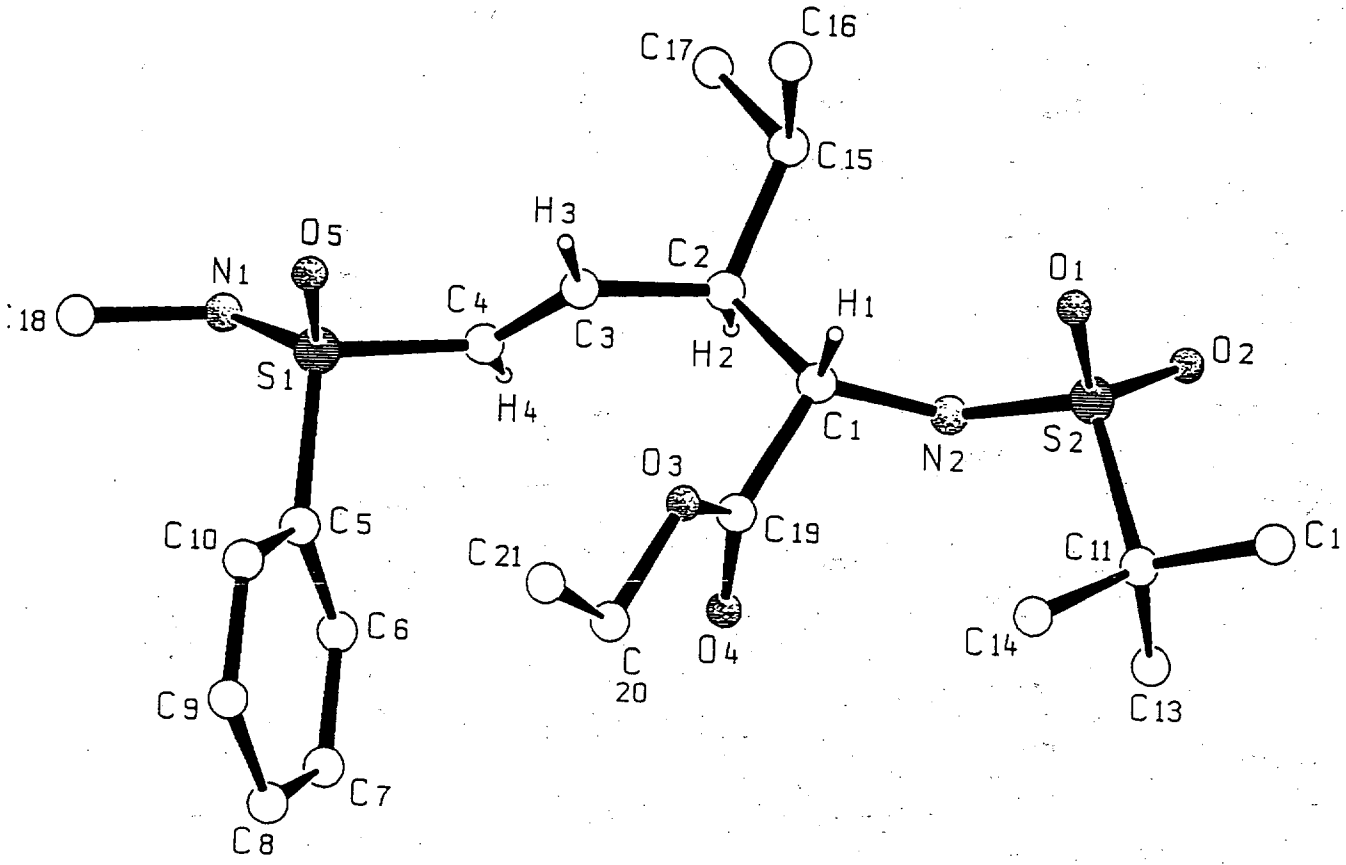

N
SO2CH2CH2SiMe3
EtO2C
ppm
181.42
105.00
3.25
3.06
43.38
2.34
43.34
0.83
0.08
1.72
-0.06
16.71
-0.14
12.6
12.0
11.4
10.8
ppm


1.912
1.654
1.601
9.445
11.273
14.353
49.310
51.791
63.663
77.022
77.341
77.660
161.191
163.065
ppm
20
40
60
80
100
120
140
160
180
200
$SO_2CH_2CH_2SiMe_3$
N
EtO_2C

Structure report No. AC/249

Internal code: GR0440

Date: 15.05.01



Experimental Details

Crystal data:

Chemical formula	:	$C_{21}H_{34}N_2O_5S_2$
formula weight	:	458.6
Crystal system	:	orthorhombic
Space group (No.)	:	$P\,2_1\,2_1\,2_1$
Z	:	4
a (Å)	:	8.371(1)
b (Å)	:	13.892(6)
c (Å)	:	21.229(2)
α (°)	:	90.0
β (°)	:	90.0
γ (°)	:	90.0
cell volume	:	2468.72Å^3
Density calc.	:	1.234g/cm^3
Radiation	:	CuK_α(1.54179Å)
θ range for lattice parameters	:	°< θ < °
Absorption coefficient	:	2.22mm^{-1}
Temperature	:	150K
Crystal source	:	recrystallized from
Crystal colour	:	colourless
Crystal shape	:	irregular
Crystal size	:	0.56x0.20x0.20mm

Data Collection

Diffractometer type	:	CAD4 Enraf-Nonius
Collection method	:	ω/2θ
Absorption correction	:	none
No. of reflections measured	:	6003
No. of independent reflections	:	5052
No. of observed reflections	:	3137
θ_{max} (°)	:	79.9
h_{min} -> h_{max}	:	0 -> 10[a)]
k_{min} -> k_{max}	:	0 -> 17[a)]
l_{min} -> l_{max}	:	0 -> 26[a)]
Criterion for observed	:	$I > 2\sigma(I)$
R_{int}	:	0.08(12)

Standard reflections	:	2 2 -2;	1 2 -5;	2 1 -2
Variation	:	1225(42)	483(20)	456(17)
Refinement:				
On	:	F		
Treatment of hydrogens	:	Positions calculated. Us fixed at 1.5 times U of the relevant heavy atom. prior to final refinement. Not refined.		
R	:	0.10		
R_w	:	0.11		
Weighting sheme	:	$w=1/\sigma^2$		
No. of parameters refined	:	271		
No. of reflections in refmnt.	:	3130		
Residual electron density	:	-5.06/+2.99e/Å^3 predominately located in the vicinity of the sulfur atoms. No indications for missing atoms or solvent. Poor crystal quality.		
r*[1]	:	not refined		
XABS[2]	:	0.007(92)[b]		
Goodness of fit	:	1.980		
Solution	:	XTAL3.4[3]		
Remarks	:	[a]Friedel pairs collected [b]From separate calculation		

Definitions:

$$U_{eq} = 1/3 \sum_i \sum_j \cdot U_{ij} \cdot a_i^* \cdot a_j^* \cdot \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

The anisotropic displacement factor in the structure factor expression is:

$$t = \exp[-2 \cdot \pi^2 \cdot (\sum_i \sum_j \cdot U_{ij} \cdot h_i \cdot h_j \cdot a_i^* \cdot a_j^*)]$$

Literature:

[1] a)A.C.Larson; Crystallographic Computing. F.R.Ahmed, S.R. Hall, C.P.Huber, eds., Munksgaard. Copenhagen: 291-294, (1970). b)W.H.Zachariasen; Acta Cryst. 23, 558-564(1967).

[2] H.D.Flack; Acta Cryst. A39, 876-881(1983)

[3] S.R.Hall, D.J. du Boulay and R.Olthof-Hazekamp; Eds. XTAL3.7 System. University of Western Australia. Perth (2000).

[4] G.M.Sheldrick in Crystallographic Computing 3, Eds. G.M.Sheldrick, C.Krueger, and R.Goddard; Oxford University Press, 1985, p.175-189.

Atomic Positional and Isotropic Displacement Parameters

Atom	x/a	y/b	z/c		U_{eq} /Å^2
S1	0.3921(3)	1.1946(2)	0.6564(1)	*	0.021(1)
S2	0.4902(3)	0.6513(2)	0.6250(1)	*	0.025(1)
O1	0.3831(8)	0.6613(6)	0.5719(3)	*	0.036(4)
O2	0.4558(9)	0.5816(5)	0.6733(3)	*	0.031(4)
O3	0.5877(8)	0.9413(5)	0.5558(3)	*	0.026(4)
O4	0.7135(8)	0.9164(6)	0.6481(3)	*	0.031(4)
O5	0.3035(8)	1.1972(6)	0.5978(3)	*	0.028(4)
N1	0.3432(9)	1.2584(7)	0.7112(3)	*	0.025(5)
N2	0.5000(9)	0.7546(7)	0.6608(3)	*	0.026(5)
C1	0.456(1)	0.8444(8)	0.6310(4)	*	0.021(5)
C2	0.345(1)	0.9046(8)	0.6761(4)	*	0.024(6)
C3	0.335(1)	1.0078(8)	0.6537(4)	*	0.023(5)
C4	0.394(1)	1.0780(8)	0.6869(4)	*	0.025(5)
C5	0.594(1)	1.2125(7)	0.6358(4)	*	0.023(5)
C6	0.718(1)	1.1902(9)	0.6753(4)	*	0.030(6)
C7	0.873(1)	1.2042(8)	0.6600(5)	*	0.035(6)
C8	0.911(1)	1.2444(9)	0.6004(5)	*	0.035(7)
C9	0.790(1)	1.2685(8)	0.5604(5)	*	0.030(6)
C10	0.630(1)	1.2527(9)	0.5759(4)	*	0.031(6)
C11	0.687(1)	0.6229(9)	0.5940(5)	*	0.030(6)
C12	0.668(2)	0.527(1)	0.5611(6)	*	0.06(1)
C13	0.803(1)	0.618(1)	0.6495(6)	*	0.046(8)
C14	0.738(1)	0.702(1)	0.5479(5)	*	0.041(7)
C15	0.181(1)	0.8560(9)	0.6843(5)	*	0.033(6)
C16	0.085(1)	0.852(1)	0.6242(6)	*	0.052(9)
C17	0.087(1)	0.906(1)	0.7372(5)	*	0.045(8)
C18	0.338(1)	1.3632(9)	0.6956(4)	*	0.030(6)
C19	0.602(1)	0.9042(7)	0.6146(4)	*	0.022(5)
C20	0.721(1)	0.9978(9)	0.5350(5)	*	0.031(6)
C21	0.673(1)	1.042(1)	0.4718(5)	*	0.046(8)
H20a	0.7486(-)	1.0432(-)	0.5661(-)		0.045(-)
H9	0.8137(-)	1.3041(-)	0.5209(-)		0.047(-)
H6	0.6899(-)	1.1737(-)	0.7183(-)		0.045(-)
H7	0.9583(-)	1.1849(-)	0.6870(-)		0.052(-)
H8	1.0179(-)	1.2554(-)	0.5868(-)		0.052(-)
H10	0.5477(-)	1.2677(-)	0.5461(-)		0.045(-)
H2	0.3886(-)	0.9016(-)	0.7172(-)		0.036(-)
H13c	0.8425(-)	0.5546(-)	0.6566(-)		0.069(-)
H13a	0.7475(-)	0.6385(-)	0.6870(-)		0.069(-)
H13b	0.8899(-)	0.6604(-)	0.6424(-)		0.069(-)
H14c	0.8417(-)	0.6872(-)	0.5313(-)		0.062(-)
H14b	0.7399(-)	0.7600(-)	0.5695(-)		0.062(-)
H14a	0.6643(-)	0.7046(-)	0.5135(-)		0.062(-)
H12c	0.7757(-)	0.4927(-)	0.5614(-)		0.090(-)
H12a	0.6446(-)	0.5341(-)	0.5174(-)		0.090(-)
H12b	0.5972(-)	0.4854(-)	0.5805(-)		0.090(-)
H17a	0.0082(-)	0.8647(-)	0.7524(-)		0.068(-)
H17b	0.0412(-)	0.9620(-)	0.7189(-)		0.068(-)
H17c	0.1595(-)	0.9238(-)	0.7693(-)		0.068(-)
H16b	0.0512(-)	0.7862(-)	0.6136(-)		0.078(-)
H16a	0.1520(-)	0.8714(-)	0.5880(-)		0.078(-)
H16c	-0.0048(-)	0.8913(-)	0.6247(-)		0.078(-)
H15	0.2031(-)	0.7893(-)	0.6987(-)		0.051(-)
H3	0.2810(-)	1.0168(-)	0.6143(-)		0.035(-)
H4	0.4308(-)	1.0650(-)	0.7295(-)		0.038(-)
H18a	0.2319(-)	1.3881(-)	0.7007(-)		0.045(-)
H18b	0.3714(-)	1.3738(-)	0.6535(-)		0.045(-)
H18c	0.4072(-)	1.3988(-)	0.7233(-)		0.045(-)

H20b	0.8145(-)	0.9549(-)	0.5296(-)	0.045(-)
H21b	0.5571(-)	1.0501(-)	0.4697(-)	0.066(-)
H21a	0.7031(-)	1.0040(-)	0.4364(-)	0.066(-)
H21c	0.7181(-)	1.1052(-)	0.4666(-)	0.066(-)
H1	0.4008(-)	0.8304(-)	0.5925(-)	0.033(-)
H	0.6175(-)	0.7626(-)	0.6740(-)	0.039(-)

Atomic Displacement Parameters

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S1	0.021(1)	0.025(1)	0.016(1)	-0.001(1)	0.001(1)	0.000(1)
S2	0.032(1)	0.022(1)	0.022(1)	-0.002(1)	-0.002(1)	-0.001(1)
O1	0.039(4)	0.038(5)	0.030(4)	-0.004(4)	-0.017(4)	-0.001(4)
O2	0.042(5)	0.019(4)	0.033(4)	-0.006(4)	0.003(3)	-0.001(3)
O3	0.030(4)	0.031(5)	0.017(3)	-0.006(4)	0.003(3)	0.003(3)
O4	0.032(4)	0.033(5)	0.027(4)	-0.006(4)	0.001(3)	0.003(4)
O5	0.021(3)	0.042(5)	0.022(3)	0.006(4)	-0.006(3)	-0.005(4)
N1	0.024(5)	0.032(6)	0.018(4)	0.005(4)	0.000(3)	-0.002(4)
N2	0.021(4)	0.040(6)	0.016(4)	0.003(5)	-0.000(4)	0.002(4)
C1	0.026(5)	0.022(6)	0.016(4)	-0.005(5)	-0.003(4)	-0.004(4)
C2	0.025(5)	0.030(6)	0.016(5)	0.001(5)	0.001(4)	0.000(4)
C3	0.024(5)	0.027(6)	0.019(5)	0.003(5)	0.004(4)	-0.003(5)
C4	0.034(6)	0.025(6)	0.015(4)	0.005(6)	0.001(5)	0.006(4)
C5	0.031(6)	0.020(6)	0.019(5)	0.007(5)	-0.005(4)	-0.005(4)
C6	0.024(5)	0.045(8)	0.022(5)	-0.005(6)	-0.003(4)	0.006(5)
C7	0.034(6)	0.038(7)	0.033(6)	-0.004(6)	-0.009(5)	0.007(6)
C8	0.015(5)	0.037(7)	0.052(7)	0.002(5)	0.009(5)	-0.004(6)
C9	0.036(6)	0.025(7)	0.031(6)	-0.003(5)	0.010(5)	0.009(5)
C10	0.037(7)	0.031(7)	0.024(5)	0.001(6)	-0.000(5)	0.001(5)
C11	0.027(6)	0.029(7)	0.034(6)	0.010(5)	0.003(5)	0.008(5)
C12	0.09(1)	0.034(9)	0.065(9)	0.007(8)	0.031(8)	-0.009(7)
C13	0.041(7)	0.051(9)	0.046(7)	0.002(7)	-0.009(6)	0.013(7)
C14	0.044(7)	0.049(9)	0.028(6)	0.003(7)	0.005(5)	0.003(6)
C15	0.026(6)	0.041(8)	0.033(6)	0.009(6)	0.011(5)	-0.002(6)
C16	0.027(6)	0.08(1)	0.045(7)	-0.009(7)	-0.004(6)	-0.019(8)
C17	0.048(8)	0.054(9)	0.033(6)	-0.002(7)	0.014(6)	-0.006(6)
C18	0.040(7)	0.031(7)	0.020(5)	0.006(6)	-0.003(4)	-0.003(5)
C19	0.021(5)	0.019(6)	0.025(5)	0.013(5)	-0.005(4)	0.001(4)
C20	0.028(6)	0.031(7)	0.033(6)	0.003(5)	0.004(5)	0.009(5)
C21	0.063(9)	0.050(9)	0.023(6)	0.001(7)	0.002(6)	0.011(6)
H20a	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H9	0.047(-)	0.047(-)	0.047(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H6	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H7	0.052(-)	0.052(-)	0.052(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H8	0.052(-)	0.052(-)	0.052(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H10	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H2	0.036(-)	0.036(-)	0.036(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H13c	0.069(-)	0.069(-)	0.069(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H13a	0.069(-)	0.069(-)	0.069(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H13b	0.069(-)	0.069(-)	0.069(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H14c	0.062(-)	0.062(-)	0.062(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H14b	0.062(-)	0.062(-)	0.062(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H14a	0.062(-)	0.062(-)	0.062(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H12c	0.090(-)	0.090(-)	0.090(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H12a	0.090(-)	0.090(-)	0.090(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H12b	0.090(-)	0.090(-)	0.090(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H17a	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H17b	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H17c	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H16b	0.078(-)	0.078(-)	0.078(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H16a	0.078(-)	0.078(-)	0.078(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H16c	0.078(-)	0.078(-)	0.078(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H15	0.051(-)	0.051(-)	0.051(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H3	0.035(-)	0.035(-)	0.035(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H4	0.038(-)	0.038(-)	0.038(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H18a	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H18b	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H18c	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)

H20b	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H21b	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H21a	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H21c	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H1	0.033(-)	0.033(-)	0.033(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H	0.039(-)	0.039(-)	0.039(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)

Bond Distances	(Angstroms)
S1-O5	1.449(7)
S1-N1	1.519(9)
S1-C4	1.74(1)
S1-C5	1.76(1)
S2-O2	1.439(7)
S2-O1	1.447(7)
S2-N2	1.625(9)
S2-C11	1.82(1)
O3-C19	1.36(1)
O3-C20	1.43(1)
O4-C19	1.18(1)
C5-C6	1.37(1)
C5-C10	1.42(1)
C6-H6	.97(1)
C6-C7	1.35(1)
C7-H7	.96(1)
C7-C8	1.42(2)
C8-H8	.95(1)
C8-C9	1.37(2)
C9-H9	1.00(1)
C9-C10	1.39(2)
C11-C12	1.52(2)
C11-C13	1.53(2)
C11-C14	1.53(2)
C12-H12b	.92(1)
C12-H12a	.95(1)
C12-H12c	1.02(1)
C14-H14b	.93(1)
C14-H14a	.96(1)
C14-H14c	.96(1)
C15-H15	.99(1)
C15-C16	1.51(2)
C15-C17	1.53(2)
C15-C2	1.54(1)
C16-H16c	.93(1)
C16-H16b	.98(1)
C16-H16a	.99(1)
C18-H18b	.95(1)
C18-H18a	.96(1)
C18-H18c	.96(1)
C18-N1	1.49(2)
C19-C1	1.52(1)
C20-H20a	.94(1)
C20-H20b	.99(1)
C20-C21	1.53(2)
C21-H21a	.96(1)
C21-H21c	.96(1)
C21-H21b	.97(1)
C2-H2	.945(9)
C2-C3	1.51(2)
C2-C1	1.58(1)
C3-H3	.958(9)
C3-C4	1.30(1)
N2-H	1.029(8)
N2-C1	1.45(1)
C4-H4	.974(9)
C1-H1	.960(9)
C10-H10	.96(1)
C13-H13b	.95(1)
C13-H13c	.96(1)

C13-H13a	.96(1)
C17-H17a	.93(1)
C17-H17c	.94(1)
C17-H17b	.95(1)

Bond Angles	(degrees)
O5-S1-N1	120.4(4)
O5-S1-C4	110.2(5)
O5-S1-C5	105.9(4)
N1-S1-C4	105.0(5)
N1-S1-C5	111.5(5)
C4-S1-C5	102.4(5)
O2-S2-O1	119.6(4)
O2-S2-N2	105.8(4)
O2-S2-C11	107.0(5)
O1-S2-N2	108.1(4)
O1-S2-C11	107.4(5)
N2-S2-C11	108.4(5)
C19-O3-C20	115.0(7)
C6-C5-C10	118.4(9)
C6-C5-S1	122.8(7)
C10-C5-S1	118.8(8)
H6-C6-C7	119(1)
H6-C6-C5	117(1)
C7-C6-C5	123(1)
H7-C7-C6	122(1)
H7-C7-C8	119(1)
C6-C7-C8	119(1)
H8-C8-C9	118(1)
H8-C8-C7	123(1)
C9-C8-C7	119(1)
H9-C9-C8	120(1)
H9-C9-C10	118(1)
C8-C9-C10	122(1)
C12-C11-C13	112(1)
C12-C11-C14	111(1)
C12-C11-S2	105.4(8)
C13-C11-C14	110.2(9)
C13-C11-S2	107.8(8)
C14-C11-S2	109.2(8)
H12b-C12-H12a	112(1)
H12b-C12-H12c	106(1)
H12b-C12-C11	114(1)
H12a-C12-H12c	104(1)
H12a-C12-C11	112(1)
H12c-C12-C11	108(1)
H14b-C14-H14a	111(1)
H14b-C14-H14c	110(1)
H14b-C14-C11	108(1)
H14a-C14-H14c	108(1)
H14a-C14-C11	110(1)
H14c-C14-C11	110(1)
H15-C15-C16	109(1)
H15-C15-C17	107.0(9)
H15-C15-C2	106.1(9)
C16-C15-C17	111.3(9)
C16-C15-C2	113.4(9)
C17-C15-C2	109.9(9)
H16c-C16-H16b	109(1)
H16c-C16-H16a	108(1)
H16c-C16-C15	113(1)
H16b-C16-H16a	104(1)
H16b-C16-C15	113(1)
H16a-C16-C15	110.1(9)

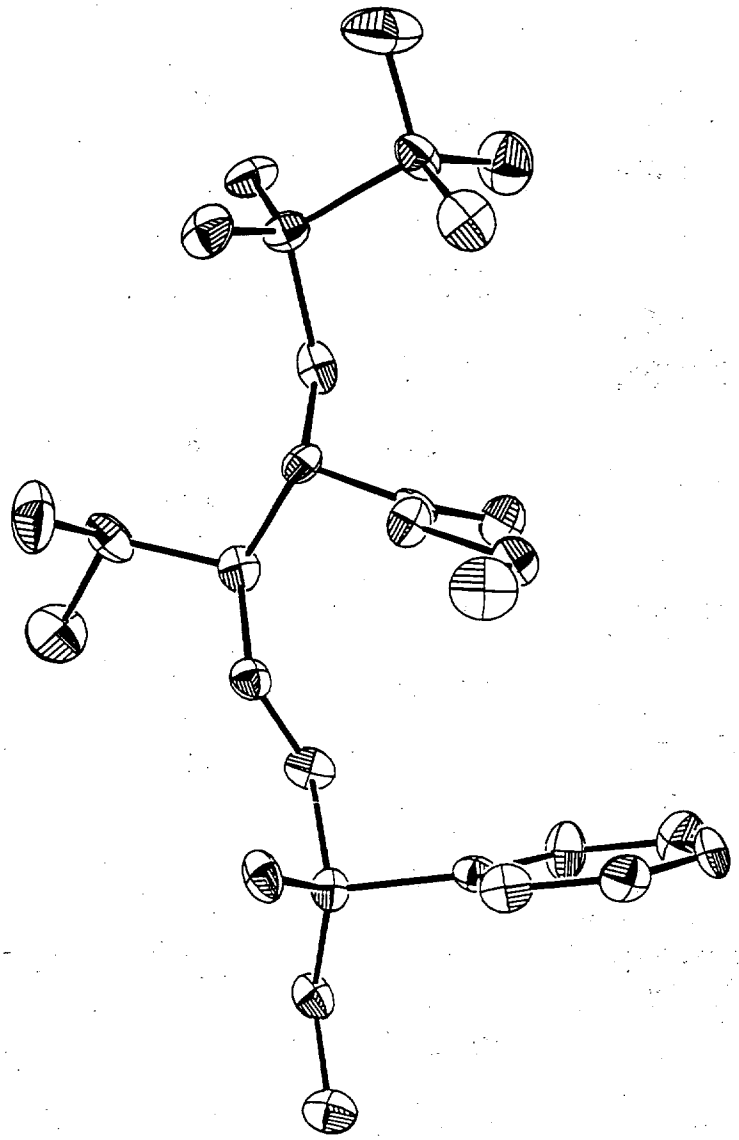
H18b-C18-H18a	109(1)
H18b-C18-H18c	109(1)
H18b-C18-N1	111(1)
H18a-C18-H18c	108(1)
H18a-C18-N1	111(1)
H18c-C18-N1	110.4(9)
O4-C19-O3	124.6(9)
O4-C19-C1	125.1(9)
O3-C19-C1	110.4(8)
H20a-C20-H20b	107(1)
H20a-C20-O3	110.0(9)
H20a-C20-C21	114(1)
H20b-C20-O3	109(1)
H20b-C20-C21	111(1)
O3-C20-C21	106.6(8)
H21a-C21-H21c	108(1)
H21a-C21-H21b	107(1)
H21a-C21-C20	113(1)
H21c-C21-H21b	107(1)
H21c-C21-C20	111(1)
H21b-C21-C20	110(1)
H2-C2-C3	110.7(9)
H2-C2-C15	102.7(8)
H2-C2-C1	108.0(9)
C3-C2-C15	113.5(8)
C3-C2-C1	110.2(8)
C15-C2-C1	111.3(9)
H3-C3-C4	124(1)
H3-C3-C2	115(1)
C4-C3-C2	121.2(9)
H-N2-C1	105.5(8)
H-N2-S2	105.7(6)
C1-N2-S2	123.0(6)
H4-C4-C3	119(1)
H4-C4-S1	121.3(8)
C3-C4-S1	119.5(8)
C18-N1-S1	114.0(6)
H1-C1-N2	108.7(9)
H1-C1-C19	107.8(8)
H1-C1-C2	109.8(8)
N2-C1-C19	111.7(8)
N2-C1-C2	109.9(7)
C19-C1-C2	108.9(8)
H10-C10-C9	120(1)
H10-C10-C5	122(1)
C9-C10-C5	119(1)
H13b-C13-H13c	109(1)
H13b-C13-H13a	109(1)
H13b-C13-C11	110(1)
H13c-C13-H13a	108(1)
H13c-C13-C11	112(1)
H13a-C13-C11	109(1)
H17a-C17-H17c	112(1)
H17a-C17-H17b	111(1)
H17a-C17-C15	110(1)
H17c-C17-H17b	110(1)
H17c-C17-C15	109(1)
H17b-C17-C15	106.1(9)

Dihedral Angles (degrees)

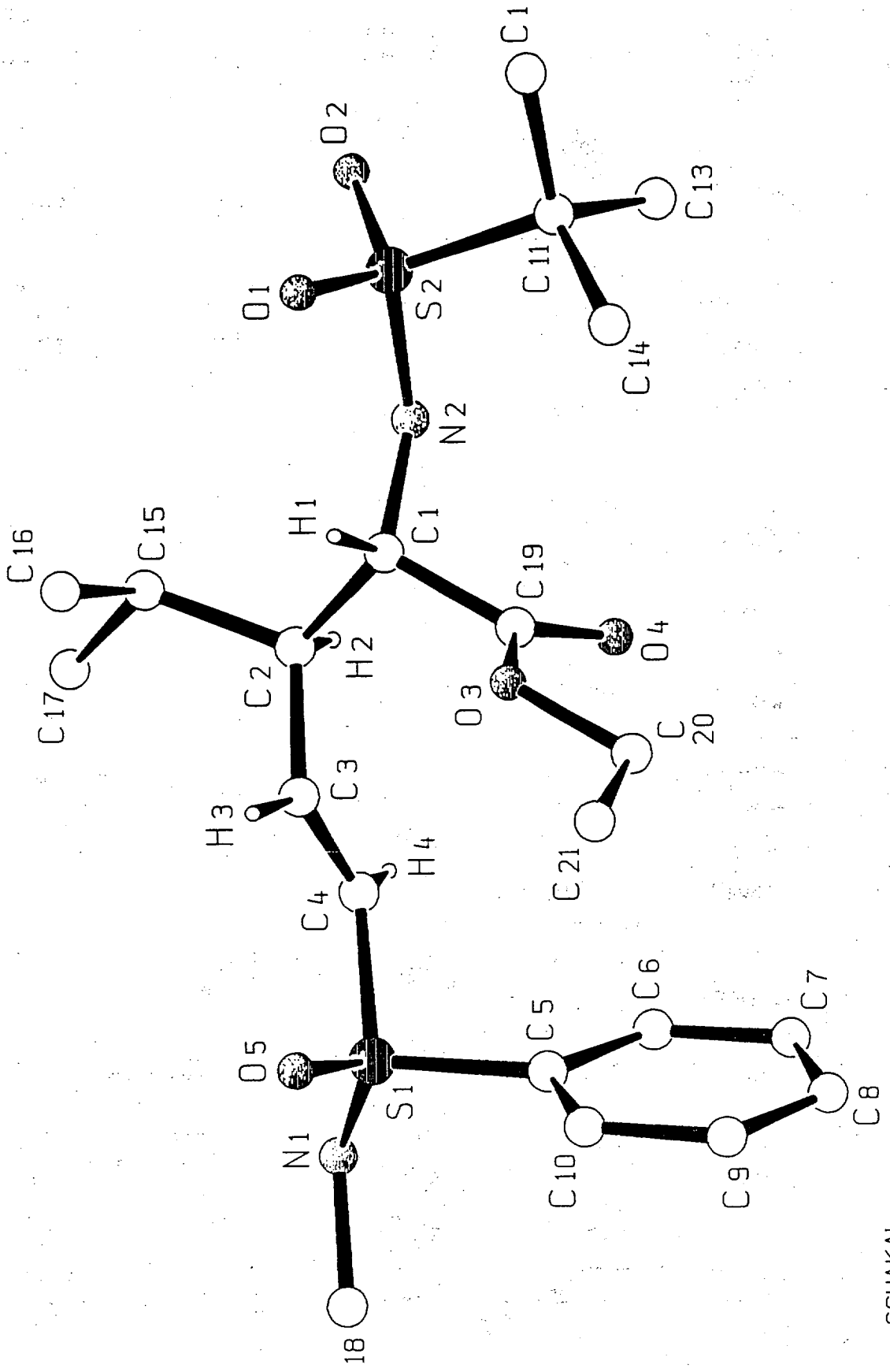
O5-S1-C5-C6	-162.5(9)
O5-S1-C5-C10	18(1)
C4-S1-C5-C6	-47(1)
C4-S1-C5-C10	133.7(8)
N1-S1-C5-C6	65(1)
N1-S1-C5-C10	-114.5(9)
O5-S1-C4-C3	7(1)
O5-S1-C4-H4	-168.7(9)
C5-S1-C4-C3	-105.7(9)
C5-S1-C4-H4	79(1)
N1-S1-C4-C3	137.7(9)
N1-S1-C4-H4	-38(1)
O5-S1-N1-C18	-56.6(8)
C5-S1-N1-C18	68.3(8)
C4-S1-N1-C18	178.5(7)
N2-S2-C11-C12	-179.7(7)
N2-S2-C11-C14	-59.7(8)
N2-S2-C11-C13	60.0(9)
O1-S2-C11-C12	-63.0(9)
O1-S2-C11-C14	56.9(9)
O1-S2-C11-C13	176.7(8)
O2-S2-C11-C12	66.6(8)
O2-S2-C11-C14	-173.4(7)
O2-S2-C11-C13	-53.7(9)
C11-S2-N2-C1	96.1(8)
C11-S2-N2-H	-24.7(7)
O1-S2-N2-C1	-20.0(8)
O1-S2-N2-H	-140.9(5)
O2-S2-N2-C1	-149.3(7)
O2-S2-N2-H	89.8(6)
C20-O3-C19-O4	0(1)
C20-O3-C19-C1	-178.8(8)
C19-O3-C20-C21	-173.3(9)
C19-O3-C20-H20a	-49(1)
C19-O3-C20-H20b	68(1)
S1-C5-C6-C7	-179.7(9)
S1-C5-C6-H6	-10(2)
C10-C5-C6-C7	0(2)
C10-C5-C6-H6	169(1)
S1-C5-C10-C9	178.7(8)
S1-C5-C10-H10	-3(2)
C6-C5-C10-C9	0(2)
C6-C5-C10-H10	178(1)
C5-C6-C7-C8	0(2)
C5-C6-C7-H7	-176(1)
H6-C6-C7-C8	-169(1)
H6-C6-C7-H7	14(2)
C6-C7-C8-C9	0(2)
C6-C7-C8-H8	-179(1)
H7-C7-C8-C9	177(1)
H7-C7-C8-H8	-3(2)
C7-C8-C9-C10	-2(2)
C7-C8-C9-H9	172(1)
H8-C8-C9-C10	178(1)
H8-C8-C9-H9	-8(2)
C8-C9-C10-C5	2(2)
C8-C9-C10-H10	-177(1)
H9-C9-C10-C5	-172(1)
H9-C9-C10-H10	9(2)

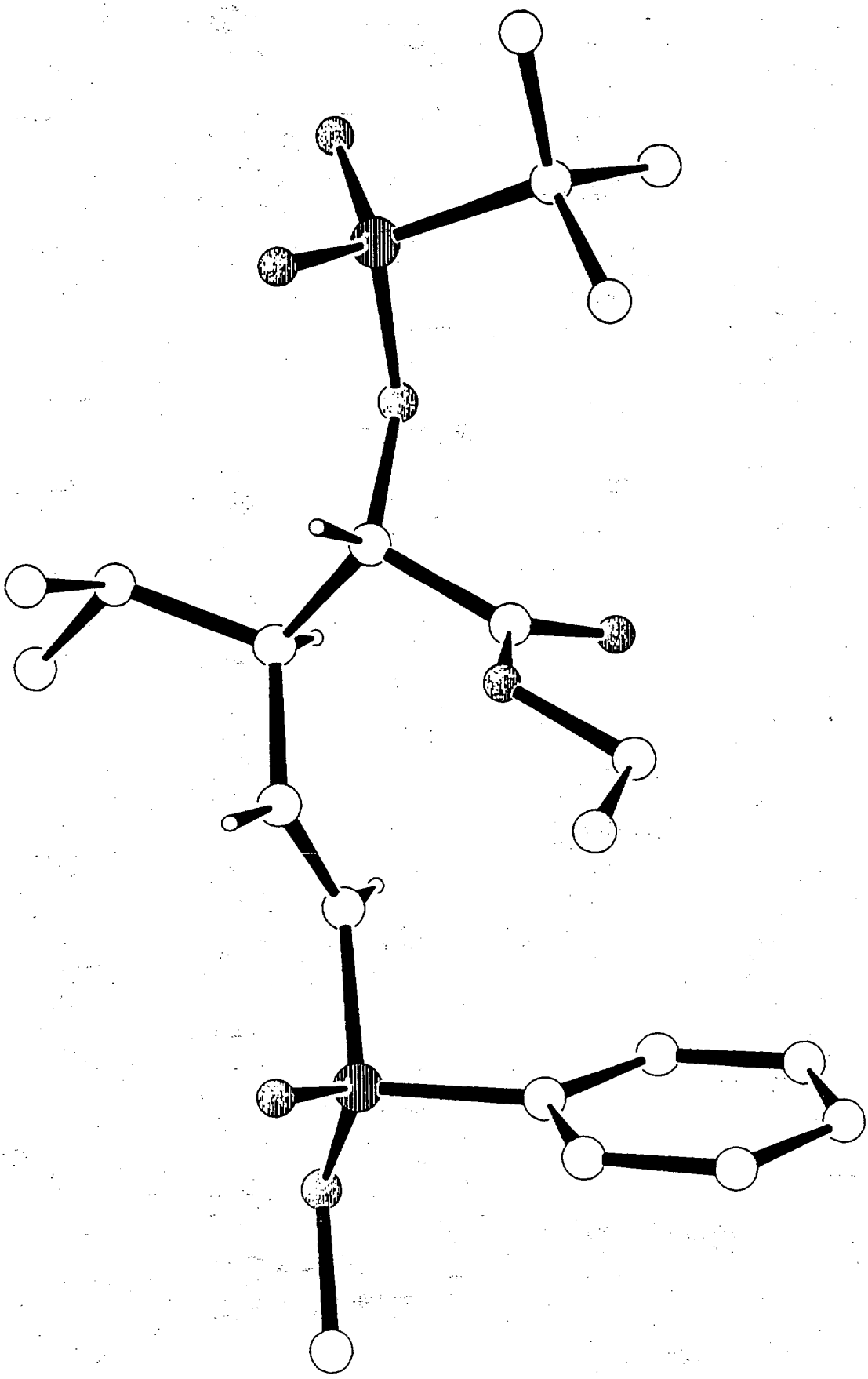
S2-C11-C12-H12c	-153.4(9)
S2-C11-C12-H12a	93(1)
S2-C11-C12-H12b	-35(1)
C14-C11-C12-H12c	88(1)
C14-C11-C12-H12a	-26(2)
C14-C11-C12-H12b	-154(1)
C13-C11-C12-H12c	-36(1)
C13-C11-C12-H12a	-150(1)
C13-C11-C12-H12b	82(2)
S2-C11-C14-H14c	180.0(8)
S2-C11-C14-H14b	60(1)
S2-C11-C14-H14a	-61(1)
C12-C11-C14-H14c	-64(1)
C12-C11-C14-H14b	176(1)
C12-C11-C14-H14a	55(1)
C13-C11-C14-H14c	62(1)
C13-C11-C14-H14b	-59(1)
C13-C11-C14-H14a	-180(1)
S2-C11-C13-H13c	113(1)
S2-C11-C13-H13a	-6(1)
S2-C11-C13-H13b	-125(1)
C12-C11-C13-H13c	-3(1)
C12-C11-C13-H13a	-122(1)
C12-C11-C13-H13b	119(1)
C14-C11-C13-H13c	-128(1)
C14-C11-C13-H13a	113(1)
C14-C11-C13-H13b	-6(1)
C2-C15-C16-H16b	125(1)
C2-C15-C16-H16a	10(2)
C2-C15-C16-H16c	-111(1)
C17-C15-C16-H16b	-111(1)
C17-C15-C16-H16a	134(1)
C17-C15-C16-H16c	13(2)
H15-C15-C16-H16b	7(1)
H15-C15-C16-H16a	-108(1)
H15-C15-C16-H16c	131(1)
C16-C15-C2-C3	60(1)
C16-C15-C2-C1	-65(1)
C16-C15-C2-H2	180(1)
C17-C15-C2-C3	-65(1)
C17-C15-C2-C1	169.9(8)
C17-C15-C2-H2	54(1)
H15-C15-C2-C3	179.6(8)
H15-C15-C2-C1	55(1)
H15-C15-C2-H2	-61(1)
C16-C15-C17-H17a	75(1)
C16-C15-C17-H17b	-45(1)
C16-C15-C17-H17c	-163(1)
C2-C15-C17-H17a	-159(1)
C2-C15-C17-H17b	81(1)
C2-C15-C17-H17c	-37(1)
H15-C15-C17-H17a	-44(1)
H15-C15-C17-H17b	-164(1)
H15-C15-C17-H17c	78(1)
H18a-C18-N1-S1	118.1(8)
H18b-C18-N1-S1	-3(1)
H18c-C18-N1-S1	-122.9(8)
O3-C19-C1-C2	-102.6(9)
O3-C19-C1-N2	135.8(8)
O3-C19-C1-H1	16(1)
O4-C19-C1-C2	78(1)
O4-C19-C1-N2	-44(1)
O4-C19-C1-H1	-163(1)

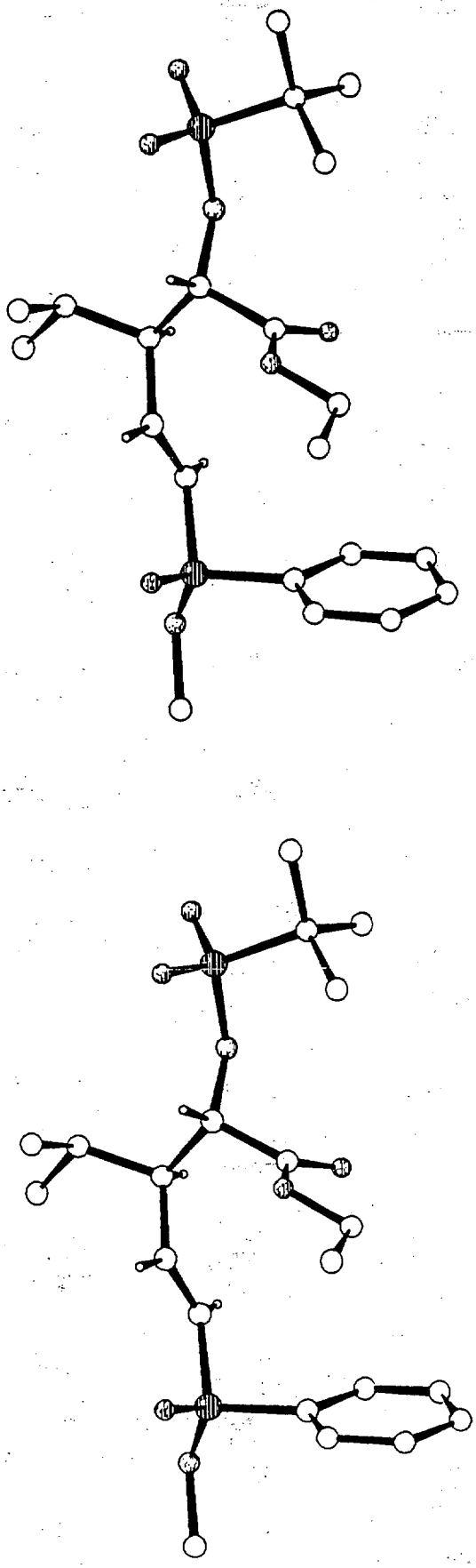
O3-C20-C21-H21b	28(1)
O3-C20-C21-H21a	-92(1)
O3-C20-C21-H21c	146(1)
H20a-C20-C21-H21b	-94(1)
H20a-C20-C21-H21a	146(1)
H20a-C20-C21-H21c	24(2)
H20b-C20-C21-H21b	146(1)
H20b-C20-C21-H21a	26(2)
H20b-C20-C21-H21c	-96(1)
C15-C2-C3-C4	121(1)
C15-C2-C3-H3	-59(1)
C1-C2-C3-C4	-114(1)
C1-C2-C3-H3	67(1)
H2-C2-C3-C4	6(1)
H2-C2-C3-H3	-173.5(9)
C15-C2-C1-C19	169.2(8)
C15-C2-C1-N2	-68(1)
C15-C2-C1-H1	51(1)
C3-C2-C1-C19	42(1)
C3-C2-C1-N2	165.0(8)
C3-C2-C1-H1	-76(1)
H2-C2-C1-C19	-79(1)
H2-C2-C1-N2	44(1)
H2-C2-C1-H1	163.4(9)
C2-C3-C4-S1	175.3(7)
C2-C3-C4-H4	-9(2)
H3-C3-C4-S1	-6(1)
H3-C3-C4-H4	170(1)
S2-N2-C1-C19	-106.0(8)
S2-N2-C1-C2	132.9(7)
S2-N2-C1-H1	13(1)
H-N2-C1-C19	15(1)
H-N2-C1-C2	-106.1(8)
H-N2-C1-H1	133.8(8)



gr0440



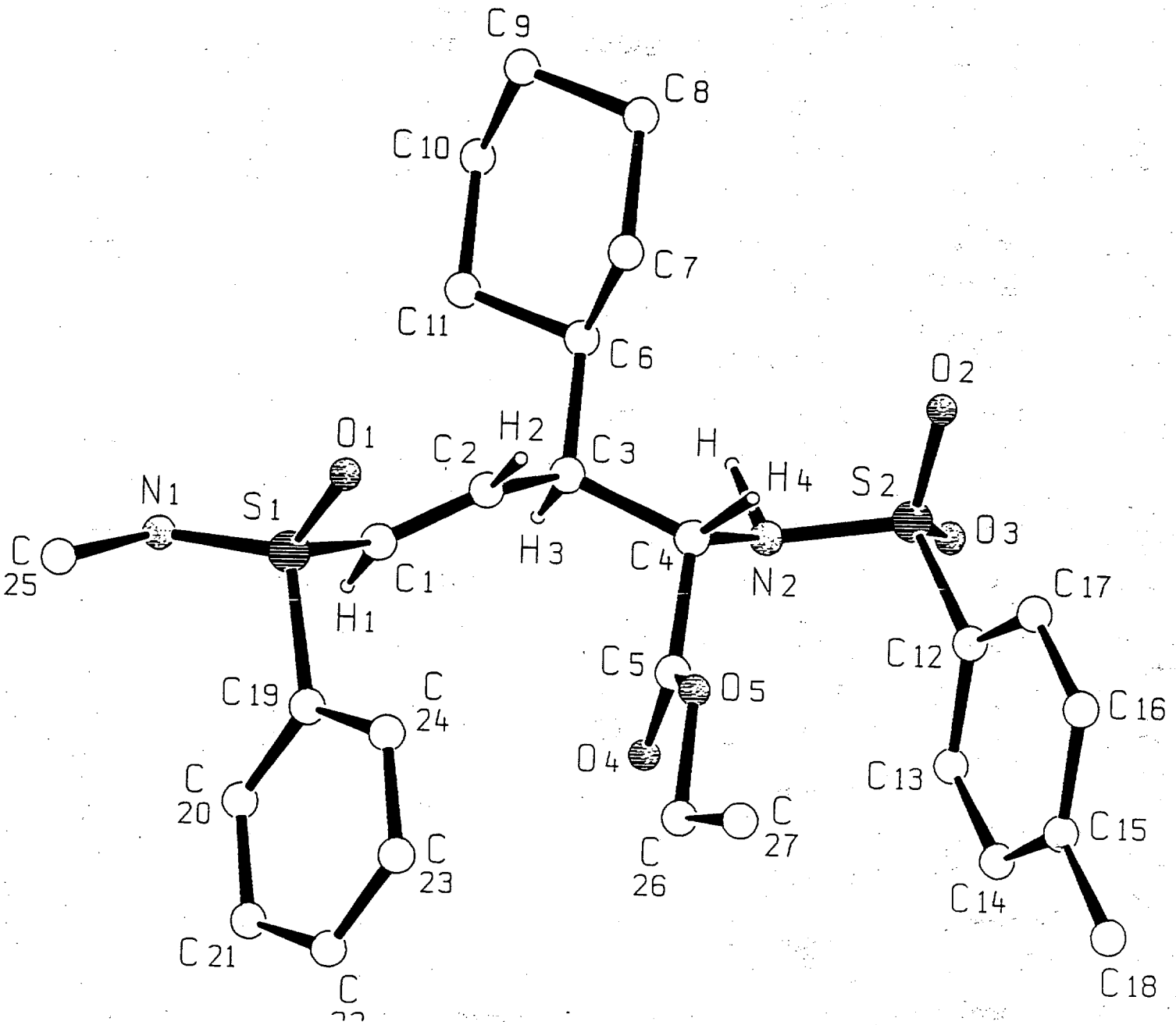




Structure report No. AC/248

Internal code: GR0397

Date: 14.05.01



Experimental Details

Crystal data:

Chemical formula	:	$C_{27}H_{36}N_2O_5S_2$
formula weight	:	532.73
Crystal system	:	orthorhombic
Space group (No.)	:	$P\,2_1\,2_1\,2_1$ (19)
Z	:	4
a (Å)	:	10.800(2)
b (Å)	:	11.984(4)
c (Å)	:	21.870(5)
α (°)	:	90.0
β (°)	:	90.0
γ (°)	:	90.0
cell volume	:	2830.5Å^3
Density calc.	:	1.250g/cm^3
Radiation	:	CuK_α(1.54179Å)
θ range for lattice parameters	:	11.57°< θ < °25.55
Absorption coefficient	:	2.015mm^{-1}
Temperature	:	150K
Crystal source	:	recrystallized from
Crystal colour	:	colourless
Crystal shape	:	irregular
Crystal size	:	0.6x0.6x0.2mm

Data Collection

Diffractometer type	:	CAD4 Enraf-Nonius
Collection method	:	ω/2θ
Absorption correction	:	none
No. of reflections measured	:	6520
No. of independent reflections	:	5405
No. of observed reflections	:	4660
θ_{max} (°)	:	75.5
h_{min} -> h_{max}	:	0 -> 11[a)]
k_{min} -> k_{max}	:	0 -> 15[a)]
l_{min} -> l_{max}	:	0 -> 27[a)]
Criterion for observed	:	$I > 2\sigma(I)$
R_{int}	:	0.03(4)

Standard reflections	:	-1 1 5; -1 1 6; -1 1 7
Variation	:	2327(48) 3957(84) 655(19)
Refinement:		
On	:	F
Treatment of hydrogens	:	Positions calculated. Us fixed at 1.5 times U of the relevant heavy atom. prior to final refinement. Not refined.
R	:	0.061
R_w	:	0.067
Weighting sheme	:	$w=1/\sigma^2$
No. of parameters refined	:	325
No. of reflections in refmnt.	:	4653
Residual electron density	:	$-0.63/+0.83 e/Å^3$
r*[1]	:	not refined
XABS[2]	:	0.0008(378)
Goodness of fit	:	2.174
Solution	:	XTAL3.4[3]
Remarks	:	[a]Friedel pairs collected [b]From separate calculation

Definitions:

$$U_{eq} = 1/3 \sum_i \sum_j \cdot U_{ij} \cdot a_i^* \cdot a_j^* \cdot \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

The anisotropic displacement factor in the structure factor expression is:

$$t = \exp[-2 \cdot \pi^2 \cdot (\sum_i \sum_j \cdot U_{ij} \cdot h_i \cdot h_j \cdot a_i^* \cdot a_j^*)]$$

Literature:

[1] a)A.C.Larson; Crystallographic Computing. F.R.Ahmed, S.R. Hall, C.P.Huber, eds., Munksgaard. Copenhagen: 291-294, (1970). b)W.H.Zachariasen; Acta Cryst. 23, 558-564(1967).

[2] H.D.Flack; Acta Cryst. A39, 876-881(1983)

[3] S.R.Hall, G.S.D.King and J.M. Stewart; Eds. XTAL3.4 User's Manual. Universities of Western Australia, Leuven and Maryland. Lamb: Perth (1995).

[4] G.M.Sheldrick in Crystallographic Computing 3, Eds. G.M.Sheldrick, C.Krueger, and R.Goddard; Oxford University Press, 1985, p.175-189.

Atomic Positional and Isotropic Displacement Parameters

Atom	x/a	y/b	z/c	U_{eq}/ Å^2
S1	-0.1978(1)	0.12248(8)	0.62106(4)*	0.0274(5)
S2	0.2862(1)	0.58661(8)	0.58087(5)*	0.0345(6)
O1	-0.2449(3)	0.1869(2)	0.6724(1) *	0.036(2)
O2	0.2084(4)	0.6641(2)	0.6120(1) *	0.047(2)
O3	0.3613(4)	0.6249(3)	0.5309(1) *	0.048(2)
O4	0.2511(4)	0.2601(3)	0.5755(1) *	0.063(3)
O5	0.1807(3)	0.2929(2)	0.6703(1) *	0.040(2)
N1	-0.2820(4)	0.0652(3)	0.5750(2) *	0.034(2)
N2	0.2034(4)	0.4883(3)	0.5540(2) *	0.034(2)
C1	-0.1057(5)	0.2099(3)	0.5750(2) *	0.030(3)
C2	-0.0730(5)	0.3079(3)	0.5944(2) *	0.029(2)
C3	0.0022(5)	0.3897(3)	0.5582(2) *	0.031(2)
C4	0.1217(5)	0.4206(4)	0.5930(2) *	0.029(2)
C5	0.1920(5)	0.3154(4)	0.6102(2) *	0.039(3)
C6	-0.0723(5)	0.4936(3)	0.5393(2) *	0.031(3)
C7	-0.1347(5)	0.5549(4)	0.5919(2) *	0.039(3)
C8	-0.2033(6)	0.6592(4)	0.5682(2) *	0.047(3)
C9	-0.2977(6)	0.6285(4)	0.5191(3) *	0.056(4)
C10	-0.2337(6)	0.5656(4)	0.4666(2) *	0.055(4)
C11	-0.1674(5)	0.4628(4)	0.4904(2) *	0.044(3)
C12	0.3824(5)	0.5259(4)	0.6372(2) *	0.031(3)
C13	0.4647(5)	0.4424(4)	0.6219(2) *	0.039(3)
C14	0.5389(5)	0.3954(4)	0.6669(2) *	0.045(3)
C15	0.5294(5)	0.4307(4)	0.7272(2) *	0.042(3)
C16	0.4472(5)	0.5161(4)	0.7411(2) *	0.043(3)
C17	0.3725(5)	0.5632(4)	0.6969(2) *	0.036(3)
C18	0.6078(6)	0.3765(5)	0.7764(3) *	0.063(4)
C19	-0.0947(4)	0.0238(3)	0.6532(2) *	0.026(2)
C20	-0.0559(5)	-0.0653(3)	0.6181(2) *	0.035(3)
C21	0.0200(5)	-0.1450(4)	0.6423(2) *	0.042(3)
C22	0.0614(5)	-0.1351(4)	0.7032(2) *	0.044(3)
C23	0.0231(5)	-0.0454(4)	0.7381(2) *	0.044(3)
C24	-0.0554(5)	0.0349(4)	0.7138(2) *	0.038(3)
C25	-0.3576(6)	-0.0300(4)	0.5958(2) *	0.046(3)
C26	0.2465(6)	0.1939(4)	0.6911(2) *	0.052(3)
C27	0.2483(6)	0.2025(5)	0.7607(2) *	0.057(4)
H18a	0.5592(-)	0.3839(-)	0.8183(-)	0.093(-)
H27a	0.3168(-)	0.2817(-)	0.7624(-)	0.084(-)
H24	-0.0829(-)	0.1011(-)	0.7360(-)	0.056(-)
H2	-0.0984(-)	0.3318(-)	0.6388(-)	0.045(-)
H9a	-0.3400(-)	0.6885(-)	0.5000(-)	0.084(-)
H6	-0.0233(-)	0.5539(-)	0.5208(-)	0.045(-)
H22	0.0943(-)	-0.1978(-)	0.7228(-)	0.065(-)
H7a	-0.0663(-)	0.5806(-)	0.6233(-)	0.060(-)
H23	0.0521(-)	-0.0390(-)	0.7837(-)	0.066(-)
H3	0.0326(-)	0.3575(-)	0.5245(-)	0.048(-)
H27b	0.1692(-)	0.1926(-)	0.7882(-)	0.084(-)
H18b	0.6332(-)	0.2929(-)	0.7727(-)	0.093(-)
H	0.1459(-)	0.5249(-)	0.5225(-)	0.051(-)
H7b	-0.2073(-)	0.5031(-)	0.6079(-)	0.060(-)
H11a	-0.2293(-)	0.4017(-)	0.5147(-)	0.066(-)
H26b	0.2092(-)	0.1226(-)	0.6793(-)	0.078(-)
H8b	-0.2465(-)	0.7031(-)	0.6030(-)	0.069(-)
H25b	-0.3585(-)	-0.0928(-)	0.5683(-)	0.068(-)
H17	0.3095(-)	0.6284(-)	0.7106(-)	0.054(-)
H1	-0.0720(-)	0.1781(-)	0.5356(-)	0.045(-)
H9b	-0.3590(-)	0.5706(-)	0.5272(-)	0.084(-)
H21	0.0474(-)	-0.2075(-)	0.6181(-)	0.062(-)
H8a	-0.1329(-)	0.7124(-)	0.5502(-)	0.069(-)

H13	0.4731(-)	0.4310(-)	0.5795(-)	0.060(-)
H10a	-0.1952(-)	0.6218(-)	0.4511(-)	0.081(-)
H14	0.5749(-)	0.3314(-)	0.6531(-)	0.066(-)
H4	0.1129(-)	0.4698(-)	0.6313(-)	0.045(-)
H27c	0.3084(-)	0.1374(-)	0.7691(-)	0.084(-)
H20	-0.0839(-)	-0.0725(-)	0.5732(-)	0.051(-)
H25a	-0.4444(-)	-0.0008(-)	0.6083(-)	0.068(-)
H25c	-0.3143(-)	-0.0633(-)	0.6353(-)	0.068(-)
H16	0.4410(-)	0.5460(-)	0.7862(-)	0.063(-)
H26a	0.3394(-)	0.1963(-)	0.6749(-)	0.078(-)
H11b	-0.1175(-)	0.4254(-)	0.4533(-)	0.066(-)
H10b	-0.3031(-)	0.5397(-)	0.4351(-)	0.081(-)
H18c	0.6894(-)	0.4271(-)	0.7782(-)	0.093(-)

Atomic Displacement Parameters

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S1	0.0381(7)	0.0185(4)	0.0256(4)	0.0041(5)	0.0014(5)	0.0029(4)
S2	0.0432(8)	0.0233(5)	0.0369(6)	0.0073(5)	0.0010(6)	0.0046(4)
O1	0.047(2)	0.032(2)	0.030(1)	0.011(1)	0.004(2)	-0.000(1)
O2	0.056(3)	0.031(2)	0.053(2)	0.023(2)	-0.007(2)	-0.002(1)
O3	0.054(3)	0.047(2)	0.043(2)	-0.009(2)	0.003(2)	0.016(2)
O4	0.104(4)	0.053(2)	0.033(2)	0.043(2)	0.011(2)	0.000(2)
O5	0.058(3)	0.033(2)	0.029(2)	0.013(2)	0.007(2)	0.011(1)
N1	0.044(3)	0.029(2)	0.030(2)	-0.003(2)	-0.003(2)	0.006(1)
N2	0.044(3)	0.028(2)	0.030(2)	0.003(2)	0.003(2)	0.007(1)
C1	0.044(3)	0.021(2)	0.026(2)	0.003(2)	0.007(2)	0.003(2)
C2	0.046(3)	0.018(2)	0.024(2)	0.002(2)	0.004(2)	0.002(2)
C3	0.053(3)	0.018(2)	0.024(2)	-0.000(2)	0.003(2)	-0.000(2)
C4	0.039(3)	0.027(2)	0.021(2)	0.005(2)	0.003(2)	0.002(2)
C5	0.056(4)	0.031(2)	0.029(2)	0.008(2)	0.005(2)	0.003(2)
C6	0.046(3)	0.019(2)	0.027(2)	-0.001(2)	-0.000(2)	0.004(2)
C7	0.057(4)	0.028(2)	0.032(2)	0.009(2)	0.007(2)	0.005(2)
C9	0.049(4)	0.045(3)	0.075(4)	0.005(3)	-0.014(3)	0.017(3)
C10	0.072(5)	0.039(3)	0.053(3)	-0.005(3)	-0.028(3)	0.005(2)
C11	0.058(4)	0.031(2)	0.044(3)	-0.004(2)	-0.015(3)	0.002(2)
C12	0.037(3)	0.024(2)	0.032(2)	0.002(2)	0.003(2)	0.001(2)
C13	0.049(4)	0.034(2)	0.035(2)	0.014(2)	0.005(2)	-0.002(2)
C14	0.051(4)	0.035(3)	0.048(3)	0.017(2)	0.004(3)	-0.005(2)
C15	0.042(4)	0.035(3)	0.048(3)	0.004(2)	-0.003(3)	0.008(2)
C16	0.050(4)	0.046(3)	0.033(2)	0.001(3)	-0.006(2)	-0.002(2)
C17	0.039(3)	0.030(2)	0.040(2)	0.010(2)	0.008(2)	-0.003(2)
C18	0.060(5)	0.067(4)	0.063(4)	0.013(4)	-0.019(3)	0.009(3)
C19	0.033(3)	0.020(2)	0.026(2)	0.002(2)	0.000(2)	0.004(2)
C20	0.041(3)	0.024(2)	0.039(2)	0.003(2)	0.002(2)	0.003(2)
C21	0.047(4)	0.025(2)	0.053(3)	0.005(2)	0.009(3)	0.003(2)
C22	0.034(3)	0.032(3)	0.067(3)	0.001(2)	-0.004(3)	0.019(2)
C23	0.049(4)	0.039(3)	0.043(3)	0.002(2)	-0.005(3)	0.013(2)
C24	0.049(4)	0.031(2)	0.032(2)	0.003(2)	-0.004(2)	0.003(2)
C25	0.056(4)	0.046(3)	0.036(2)	-0.013(3)	-0.006(3)	0.008(2)
C26	0.073(5)	0.042(3)	0.042(3)	0.023(3)	0.010(3)	0.016(2)
C27	0.074(5)	0.059(3)	0.037(3)	0.022(3)	0.001(3)	0.022(3)
H18a	0.093(-)	0.093(-)	0.093(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H27a	0.084(-)	0.084(-)	0.084(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H24	0.056(-)	0.056(-)	0.056(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H2	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H9a	0.084(-)	0.084(-)	0.084(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H6	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H22	0.065(-)	0.065(-)	0.065(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H7a	0.060(-)	0.060(-)	0.060(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H23	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H3	0.048(-)	0.048(-)	0.048(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H27b	0.084(-)	0.084(-)	0.084(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H18b	0.093(-)	0.093(-)	0.093(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H	0.051(-)	0.051(-)	0.051(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H7b	0.060(-)	0.060(-)	0.060(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H11a	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H26b	0.078(-)	0.078(-)	0.078(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H8b	0.069(-)	0.069(-)	0.069(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H25b	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H17	0.054(-)	0.054(-)	0.054(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H1	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H9b	0.084(-)	0.084(-)	0.084(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H21	0.062(-)	0.062(-)	0.062(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)

H8a	0.069(-)	0.069(-)	0.069(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H13	0.060(-)	0.060(-)	0.060(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H10a	0.081(-)	0.081(-)	0.081(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H14	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H4	0.045(-)	0.045(-)	0.045(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H27c	0.084(-)	0.084(-)	0.084(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H20	0.051(-)	0.051(-)	0.051(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H25a	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H25c	0.068(-)	0.068(-)	0.068(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H16	0.063(-)	0.063(-)	0.063(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H26a	0.078(-)	0.078(-)	0.078(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H11b	0.066(-)	0.066(-)	0.066(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H10b	0.081(-)	0.081(-)	0.081(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
H18c	0.093(-)	0.093(-)	0.093(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)

Bond Distances (Angstroms)

S2-O2	1.426(4)
S2-O3	1.437(4)
S2-N2	1.592(4)
S2-C12	1.768(5)
S1-O1	1.455(3)
S1-N1	1.520(4)
S1-C1	1.761(4)
S1-C19	1.770(4)
C13-H13	.942(5)
C13-C12	1.379(7)
C13-C14	1.389(7)
C8-H8b	1.036(5)
C8-H8a	1.068(6)
C8-C9	1.525(8)
C8-C7	1.543(7)
C6-H6	.982(4)
C6-C7	1.522(6)
C6-C11	1.528(7)
C6-C3	1.540(6)
C9-H9a	.949(6)
C9-H9b	.975(6)
C9-C10	1.539(8)
C12-C17	1.384(6)
C10-H10a	.861(5)
C10-H10b	1.064(6)
C10-C11	1.517(7)
C1-H1	1.011(4)
C1-C2	1.297(6)
C11-H11b	1.073(5)
C11-H11a	1.123(5)
C7-H7a	1.055(5)
C7-H7b	1.060(5)
C2-H2	1.050(4)
C2-C3	1.499(6)
C3-H3	.895(4)
C3-C4	1.543(7)
C5-O4	1.192(6)
C5-O5	1.348(5)
C5-C4	1.520(7)
C4-H4	1.028(4)
C4-N2	1.470(6)
N1-C25	1.474(7)
O5-C26	1.456(6)
N2-H	1.026(4)
C21-H21	.964(5)
C21-C20	1.365(7)
C21-C22	1.410(8)
C26-H26b	.979(5)
C26-H26a	1.064(6)
C26-C27	1.525(7)
C20-H20	1.032(5)
C20-C19	1.380(6)
C16-H16	1.051(5)
C16-C17	1.381(7)
C16-C15	1.387(7)
C22-H22	.936(5)
C22-C23	1.382(7)
C24-H24	.976(5)
C24-C23	1.389(7)
C24-C19	1.398(6)
C25-H25b	.964(5)

C25-H25a	1.038(6)
C25-H25c	1.060(5)
C14-H14	.911(5)
C14-C15	1.388(7)
C27-H27c	1.032(6)
C27-H27b	1.051(6)
C27-H27a	1.203(6)
C23-H23	1.047(5)
C18-H18b	1.042(6)
C18-H18a	1.060(6)
C18-H18c	1.071(6)
C18-C15	1.515(8)
C17-H17	1.078(5)

Bond Angles	(degrees)
O2-S2-O3	119.2(2)
O2-S2-N2	109.1(2)
O2-S2-C12	106.4(2)
O3-S2-N2	105.8(2)
O3-S2-C12	109.2(2)
N2-S2-C12	106.4(2)
O1-S1-N1	122.8(2)
O1-S1-C1	108.9(2)
O1-S1-C19	105.5(2)
N1-S1-C1	103.2(2)
N1-S1-C19	109.8(2)
C1-S1-C19	105.6(2)
H13-C13-C12	113.9(5)
H13-C13-C14	125.7(5)
C12-C13-C14	119.7(4)
H8b-C8-H8a	106.7(4)
H8b-C8-C9	109.8(5)
H8b-C8-C7	112.5(4)
H8a-C8-C9	111.2(4)
H8a-C8-C7	105.4(5)
C9-C8-C7	111.2(4)
H6-C6-C7	101.2(3)
H6-C6-C11	104.7(4)
H6-C6-C3	115.1(5)
C7-C6-C11	110.3(4)
C7-C6-C3	114.7(3)
C11-C6-C3	110.1(3)
H9a-C9-H9b	106.9(6)
H9a-C9-C8	116.7(5)
H9a-C9-C10	104.9(5)
H9b-C9-C8	119.9(5)
H9b-C9-C10	95.3(4)
C8-C9-C10	110.1(5)
C13-C12-C17	120.8(4)
C13-C12-S2	120.6(3)
C17-C12-S2	118.6(4)
H10a-C10-H10b	108.3(5)
H10a-C10-C11	122.9(6)
H10a-C10-C9	97.3(5)
H10b-C10-C11	108.6(4)
H10b-C10-C9	108.0(5)
C11-C10-C9	110.6(4)
H1-C1-C2	121.4(4)
H1-C1-S1	117.9(3)
C2-C1-S1	120.3(3)
H11b-C11-H11a	112.6(4)
H11b-C11-C10	108.4(4)
H11b-C11-C6	107.0(5)
H11a-C11-C10	114.3(5)
H11a-C11-C6	103.1(4)
C10-C11-C6	111.2(4)
H7a-C7-H7b	118.3(4)
H7a-C7-C6	108.9(5)
H7a-C7-C8	108.6(4)
H7b-C7-C6	107.2(4)
H7b-C7-C8	103.3(5)
C6-C7-C8	110.5(4)
H2-C2-C1	118.6(4)
H2-C2-C3	116.8(4)
C1-C2-C3	124.6(4)