

J | A | C | S

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

J. Am. Chem. Soc., 1996, 118(50), 12580-12587, DOI: [10.1021/ja962573a](https://doi.org/10.1021/ja962573a)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

O(1)	0.5093(6)	0.3567(1)	0.8522(6)	4.9(3)
O(2)	0.6309(8)	0.2972(2)	0.8888(7)	6.8(3)
C(1)	0.509(1)	0.3614(2)	0.6947(9)	3.9(4)
C(2)	0.5913(9)	0.3926(2)	0.6816(9)	3.7(3)
C(3)	0.586(1)	0.4029(2)	0.518(1)	3.5(3)
C(4)	0.733(1)	0.4144(2)	0.5169(9)	4.4(4)
C(5)	0.735(1)	0.4238(2)	0.368(1)	5.4(4)
C(6)	0.588(1)	0.4220(2)	0.217(1)	5.8(4)
C(7)	0.438(1)	0.4112(2)	0.213(1)	5.5(4)
C(8)	0.4368(9)	0.4019(2)	0.362(1)	4.4(3)
C(9)	0.693(1)	0.4196(2)	0.8291(9)	4.2(4)
C(10)	0.626(1)	0.4558(3)	0.832(1)	4.8(4)
C(11)	0.722(1)	0.4821(2)	0.965(1)	5.5(4)
C(12)	0.884(1)	0.4722(3)	1.093(1)	5.6(5)
C(13)	0.946(1)	0.4362(3)	1.088(1)	5.3(4)
C(14)	0.857(1)	0.4095(2)	0.957(1)	4.5(4)
C(15)	0.450(1)	0.4680(2)	0.697(1)	6.9(5)
C(16)	0.983(1)	0.5013(3)	1.233(1)	8.1(5)
C(17)	0.938(1)	0.3709(3)	0.959(1)	6.8(4)
C(18)	0.398(1)	0.3337(2)	0.5584(9)	3.8(4)
C(19)	0.463(1)	0.3074(2)	0.485(1)	4.0(3)
C(20)	0.351(1)	0.2834(2)	0.356(1)	4.9(4)
C(21)	0.177(1)	0.2842(3)	0.297(1)	5.7(4)
C(22)	0.114(1)	0.3096(3)	0.371(1)	5.7(4)
C(23)	0.222(1)	0.3346(2)	0.501(1)	4.3(4)
C(24)	0.653(1)	0.3047(2)	0.543(1)	5.7(4)
C(25)	0.059(1)	0.2568(3)	0.156(1)	9.9(6)
C(26)	0.142(1)	0.3625(3)	0.572(1)	7.8(5)
C(27)	0.561(1)	0.3217(3)	0.930(1)	5.7(5)
C(28)	0.521(1)	0.3168(3)	1.073(1)	10.3(6)
H(4)	0.8363	0.4158	0.6219	5.2
H(5)	0.8396	0.4317	0.3723	6.5
H(6)	0.5886	0.4281	0.1139	6.9
H(7)	0.3342	0.4102	0.1082	6.5
H(8)	0.3317	0.3945	0.3580	5.3
H(11)	0.6762	0.5070	0.9674	6.6
H(13)	1.0557	0.4285	1.1775	6.4
H(20)	0.3962	0.2658	0.3065	5.9
H(22)	-0.0054	0.3101	0.3332	6.9
H(151)	0.3802	0.4733	0.7471	8.3
H(152)	0.4591	0.4909	0.6411	8.3
H(153)	0.4006	0.4475	0.6160	8.3
H(161)	1.0915	0.4906	1.3117	9.7
H(162)	1.0004	0.5245	1.1853	9.7
H(163)	0.9204	0.5072	1.2908	9.7
H(171)	0.9625	0.3573	1.0598	8.1
H(172)	0.8616	0.3559	0.8628	8.1
H(173)	1.0414	0.3753	0.9546	8.1
H(241)	0.6919	0.2791	0.5840	6.8
H(242)	0.6724	0.3103	0.4507	6.8
H(243)	0.7130	0.3230	0.6322	6.8
H(251)	-0.0562	0.2613	0.1301	11.9
H(252)	0.0701	0.2613	0.0570	11.9
H(253)	0.0891	0.2305	0.1917	11.9
H(261)	0.2290	0.3776	0.6602	9.3
H(262)	0.0649	0.3794	0.4844	9.3
H(263)	0.0808	0.3482	0.6166	9.3
H(281)	0.5792	0.3362	1.1561	12.2
H(282)	0.4010	0.3192	1.0298	12.2
H(283)	0.5574	0.2916	1.1220	12.2

U values for (4-(Z))

atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
O(1)	0.089(4)	0.049(4)	0.058(4)	-0.007(3)	0.043(3)	0.003(3)
O(2)	0.109(5)	0.072(5)	0.081(4)	0.016(4)	0.049(4)	0.024(3)
C(1)	0.051(5)	0.052(5)	0.045(5)	0.010(4)	0.025(4)	0.011(4)
C(2)	0.050(5)	0.048(5)	0.040(5)	0.009(4)	0.020(4)	0.004(4)
C(3)	0.046(5)	0.042(5)	0.049(5)	0.002(4)	0.025(4)	-0.001(4)
C(4)	0.051(5)	0.061(5)	0.049(5)	0.004(4)	0.021(4)	0.006(4)
C(5)	0.081(7)	0.062(6)	0.083(7)	0.001(5)	0.055(6)	0.013(5)
C(6)	0.102(8)	0.077(6)	0.062(6)	0.003(6)	0.056(6)	0.018(5)
C(7)	0.081(7)	0.071(6)	0.050(6)	0.002(5)	0.027(5)	0.013(5)
C(8)	0.050(5)	0.055(5)	0.063(6)	-0.004(4)	0.028(5)	0.009(4)
C(9)	0.055(6)	0.059(6)	0.047(5)	0.002(5)	0.024(5)	0.006(5)
C(10)	0.067(6)	0.057(6)	0.063(6)	0.010(5)	0.035(5)	0.003(5)
C(11)	0.094(7)	0.055(6)	0.079(6)	-0.017(6)	0.056(6)	-0.015(5)
C(12)	0.075(7)	0.082(8)	0.059(6)	-0.036(6)	0.036(6)	-0.009(6)
C(13)	0.063(6)	0.080(7)	0.051(6)	-0.010(6)	0.021(5)	0.004(6)
C(14)	0.061(6)	0.063(6)	0.049(5)	-0.007(5)	0.027(5)	0.000(5)
C(15)	0.102(8)	0.054(6)	0.108(8)	0.024(5)	0.052(7)	0.004(5)
C(16)	0.126(8)	0.107(8)	0.086(7)	-0.056(7)	0.060(6)	-0.033(6)
C(17)	0.069(6)	0.084(7)	0.072(6)	0.009(5)	0.006(5)	0.008(5)
C(18)	0.046(5)	0.053(6)	0.045(5)	-0.002(4)	0.021(4)	0.005(4)
C(19)	0.048(5)	0.049(5)	0.051(5)	0.007(4)	0.019(5)	0.002(4)
C(20)	0.082(7)	0.050(6)	0.062(6)	0.005(5)	0.042(5)	-0.005(5)
C(21)	0.062(7)	0.073(7)	0.063(6)	-0.004(6)	0.015(5)	-0.003(5)
C(22)	0.051(6)	0.069(7)	0.095(7)	-0.010(5)	0.033(6)	-0.001(6)
C(23)	0.060(6)	0.044(5)	0.067(6)	0.002(5)	0.035(5)	-0.005(4)
C(24)	0.076(6)	0.057(6)	0.095(7)	0.015(5)	0.049(5)	-0.002(5)
C(25)	0.107(8)	0.127(9)	0.118(8)	-0.032(7)	0.034(7)	-0.050(7)
C(26)	0.065(6)	0.109(8)	0.128(8)	0.004(5)	0.051(6)	-0.006(6)
C(27)	0.092(8)	0.068(7)	0.063(7)	-0.017(6)	0.043(6)	-0.004(6)
C(28)	0.25(1)	0.094(7)	0.099(8)	-0.017(8)	0.13(1)	0.000(6)
H(4)	0.0655					
H(5)	0.0821					
H(6)	0.0876					
H(7)	0.0826					
H(8)	0.0666					
H(11)	0.0839					
H(13)	0.0809					
H(20)	0.0742					
H(22)	0.0873					
H(151)	0.1050					
H(152)	0.1050					
H(153)	0.1050					
H(161)	0.1226					
H(162)	0.1226					
H(163)	0.1226					
H(171)	0.1031					
H(172)	0.1031					
H(173)	0.1031					
H(241)	0.0864					
H(242)	0.0864					
H(243)	0.0864					
H(251)	0.1507					
H(252)	0.1507					
H(253)	0.1507					
H(261)	0.1182					
H(262)	0.1182					
H(263)	0.1182					
H(281)	0.1542					
H(282)	0.1542					
H(283)	0.1542					

Positional parameters and B(eq) for 4-(E)

atom	x	y	z	B(eq)
O(1)	0.2147(4)	0.6781(3)	0.3390(7)	4.3(3)
O(2)	0.1541(5)	0.6720(4)	0.5864(8)	7.8(4)
C(1)	0.1549(5)	0.7329(3)	0.300(1)	3.3(4)
C(2)	0.0855(5)	0.7209(4)	0.196(1)	3.3(4)
C(3)	0.0681(5)	0.6522(4)	0.129(1)	3.5(4)
C(4)	0.0701(5)	0.6439(4)	-0.037(1)	4.9(5)
C(5)	0.0528(8)	0.5798(5)	-0.106(1)	6.7(6)
C(6)	0.0380(7)	0.5262(5)	-0.011(2)	6.5(6)
C(7)	0.0343(7)	0.5330(5)	0.154(2)	6.2(6)
C(8)	0.0510(6)	0.5972(4)	0.221(1)	5.3(5)
C(9)	0.0227(5)	0.7759(4)	0.1338(9)	3.1(4)
C(10)	0.0571(5)	0.8264(4)	0.032(1)	3.5(4)
C(11)	-0.0050(6)	0.8769(4)	-0.019(1)	4.4(4)
C(12)	-0.0956(6)	0.8782(4)	0.025(1)	4.6(5)
C(13)	-0.1320(5)	0.8258(5)	0.118(1)	4.3(4)
C(14)	-0.0739(5)	0.7745(4)	0.172(1)	3.4(4)
C(15)	0.1562(6)	0.8272(4)	-0.028(1)	4.7(4)
C(16)	-0.1621(7)	0.9353(5)	-0.033(1)	7.0(6)
C(17)	-0.1168(6)	0.7202(5)	0.269(1)	5.2(5)
C(18)	0.1893(5)	0.7975(4)	0.370(1)	3.3(4)
C(19)	0.2797(5)	0.8198(4)	0.330(1)	3.8(4)
C(20)	0.3117(6)	0.8804(5)	0.393(1)	5.0(5)
C(21)	0.2549(7)	0.9203(4)	0.496(1)	5.4(5)
C(22)	0.1692(6)	0.8964(4)	0.532(1)	4.8(5)
C(23)	0.1327(5)	0.8367(4)	0.473(1)	4.1(4)
C(24)	0.3452(6)	0.7815(5)	0.226(1)	5.9(5)
C(25)	0.2935(8)	0.9855(5)	0.561(2)	9.2(8)
C(26)	0.0376(5)	0.8142(4)	0.529(1)	5.3(5)
C(27)	0.2107(6)	0.6536(4)	0.492(1)	5.1(5)
C(28)	0.2828(7)	0.5999(4)	0.514(1)	6.6(6)
H(4)	0.0832	0.6813	-0.1040	5.9
H(5)	0.0517	0.5748	-0.2194	8.0
H(6)	0.0298	0.4830	-0.0574	7.7
H(7)	0.0209	0.4956	0.2214	7.5
H(8)	0.0503	0.6021	0.3339	6.3
H(11)	0.0180	0.9115	-0.0874	5.3
H(13)	-0.1970	0.8254	0.1451	5.2
H(20)	0.3730	0.8955	0.3659	6.0
H(22)	0.1311	0.9222	0.6029	5.8
H(151)	0.1902	0.7911	0.0186	5.7
H(152)	0.1564	0.8225	-0.1416	5.7
H(153)	0.1851	0.8687	0.0003	5.7
H(161)	-0.1383	0.9775	0.0018	8.4
H(162)	-0.1659	0.9348	-0.1466	8.4
H(163)	-0.2231	0.9286	0.0111	8.4
H(171)	-0.1435	0.7389	0.3636	6.2
H(172)	-0.1645	0.6986	0.2085	6.2
H(173)	-0.0700	0.6883	0.2978	6.2
H(241)	0.3150	0.7419	0.1881	7.1
H(242)	0.3627	0.8087	0.1367	7.1
H(243)	0.3997	0.7696	0.2848	7.1
H(251)	0.3486	0.9766	0.6218	11.0
H(252)	0.3083	1.0146	0.4745	11.0
H(253)	0.2477	1.0062	0.6278	11.0
H(261)	-0.0079	0.8471	0.5003	6.3
H(262)	0.0222	0.7726	0.4787	6.3
H(263)	0.0381	0.8085	0.6416	6.3
H(281)	0.2789	0.5826	0.6200	7.9
H(282)	0.2717	0.5646	0.4395	7.9
H(283)	0.3436	0.6181	0.4965	7.9

atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
O(1)	0.065(4)	0.047(3)	0.051(4)	0.005(3)	-0.009(3)	0.001(3)
O(2)	0.109(6)	0.117(6)	0.070(5)	0.028(5)	0.025(5)	0.026(5)
C(1)	0.056(5)	0.031(4)	0.040(5)	0.019(4)	0.010(5)	0.001(4)
C(2)	0.035(4)	0.050(5)	0.039(5)	0.000(4)	0.003(4)	0.006(4)
C(3)	0.037(4)	0.047(5)	0.051(6)	0.004(4)	0.000(4)	0.005(5)
C(4)	0.053(5)	0.058(6)	0.076(7)	0.001(5)	-0.010(5)	-0.007(5)
C(5)	0.107(9)	0.057(6)	0.089(8)	0.013(6)	-0.019(7)	-0.020(6)
C(6)	0.064(6)	0.059(7)	0.12(1)	0.002(5)	-0.033(7)	-0.024(8)
C(7)	0.066(6)	0.046(6)	0.12(1)	-0.010(5)	-0.005(7)	0.014(7)
C(8)	0.064(6)	0.061(6)	0.076(7)	-0.006(5)	-0.012(5)	0.006(6)
C(9)	0.040(4)	0.043(4)	0.037(5)	-0.003(4)	-0.005(4)	0.007(4)
C(10)	0.050(5)	0.039(4)	0.045(5)	-0.004(4)	-0.004(4)	-0.003(5)
C(11)	0.072(6)	0.044(5)	0.051(6)	-0.005(5)	-0.002(5)	0.002(5)
C(12)	0.056(5)	0.046(5)	0.072(7)	0.013(5)	-0.014(6)	-0.017(5)
C(13)	0.036(4)	0.074(6)	0.054(6)	0.007(5)	-0.007(4)	-0.018(5)
C(14)	0.045(5)	0.045(5)	0.040(5)	-0.003(4)	-0.012(4)	-0.011(4)
C(15)	0.064(5)	0.063(5)	0.053(5)	0.001(5)	0.008(5)	0.015(5)
C(16)	0.095(7)	0.076(6)	0.096(8)	0.026(6)	-0.024(7)	0.003(6)
C(17)	0.046(5)	0.076(6)	0.075(7)	0.001(5)	0.003(5)	0.005(6)
C(18)	0.043(5)	0.040(5)	0.041(5)	0.004(4)	-0.003(4)	0.003(4)
C(19)	0.043(4)	0.055(5)	0.048(5)	-0.001(4)	0.005(4)	0.002(5)
C(20)	0.050(5)	0.084(7)	0.057(6)	-0.025(5)	-0.020(5)	0.013(6)
C(21)	0.079(7)	0.050(5)	0.075(7)	0.000(5)	-0.014(6)	-0.005(6)
C(22)	0.065(6)	0.054(5)	0.064(6)	0.014(5)	-0.013(6)	-0.015(5)
C(23)	0.055(5)	0.054(5)	0.048(5)	0.007(4)	-0.007(5)	0.000(5)
C(24)	0.068(6)	0.082(7)	0.075(7)	0.011(6)	0.015(6)	-0.011(6)
C(25)	0.15(1)	0.063(7)	0.14(1)	-0.031(7)	0.01(1)	-0.019(7)
C(26)	0.055(5)	0.089(7)	0.056(6)	0.009(5)	0.009(5)	-0.030(6)
C(27)	0.055(6)	0.053(6)	0.086(9)	-0.004(5)	-0.020(6)	0.006(6)
C(28)	0.094(7)	0.058(5)	0.100(9)	0.008(5)	-0.048(7)	0.011(7)
H(4)	0.0742					
H(5)	0.1007					
H(6)	0.0980					
H(7)	0.0944					
H(8)	0.0798					
H(11)	0.0666					
H(13)	0.0653					
H(20)	0.0762					
H(22)	0.0730					
H(151)	0.0717					
H(152)	0.0717					
H(153)	0.0717					
H(161)	0.1064					
H(162)	0.1064					
H(163)	0.1064					
H(171)	0.0784					
H(172)	0.0784					
H(173)	0.0784					
H(241)	0.0895					
H(242)	0.0895					
H(243)	0.0895					
H(251)	0.1390					
H(252)	0.1390					
H(253)	0.1390					
H(261)	0.0795					
H(262)	0.0795					
H(263)	0.0795					
H(281)	0.1005					
H(282)	0.1005					
H(283)	0.1005					