

C(22)-C(20)-C(19)	104.7(7)	C(102)-C(101)-C(114)	119.4(8)
C(102)-C(101)-C(115)	126.0(9)	C(114)-C(101)-C(115)	114.5(8)
C(101)-C(102)-C(103)	126.8(8)	C(102)-C(103)-C(104)	113.6(7)
C(105)-C(104)-C(116)	114.8(6)	C(105)-C(104)-C(103)	109.2(7)
C(116)-C(104)-C(103)	110.5(7)	C(104)-C(105)-C(106)	111.5(6)
C(104)-C(105)-C(114)	111.7(6)	C(106)-C(105)-C(114)	111.9(5)
C(107)-C(106)-C(105)	112.1(5)	O(104)-C(107)-C(106)	105.9(5)
O(104)-C(107)-C(108)	111.0(5)	C(106)-C(107)-C(108)	114.0(6)
O(103)-C(108)-O(102)	104.4(6)	O(103)-C(108)-C(109)	113.5(7)
O(102)-C(108)-C(109)	110.3(7)	O(103)-C(108)-C(107)	106.5(6)
O(102)-C(108)-C(107)	111.1(6)	C(109)-C(108)-C(107)	110.9(7)
C(110)-C(109)-C(108)	123.0(9)	C(109)-C(110)-C(111)	122.1(9)
O(101)-C(111)-C(110)	122.7(10)	O(101)-C(111)-C(112)	119.3(10)
C(110)-C(111)-C(112)	118.0(8)	O(102)-C(112)-C(113)	115.7(6)
O(102)-C(112)-C(111)	113.2(7)	C(113)-C(112)-C(111)	113.4(8)
C(112)-C(113)-C(114)	116.0(7)	C(101)-C(114)-C(105)	110.5(7)
C(101)-C(114)-C(113)	111.8(6)	C(105)-C(114)-C(113)	114.1(6)
C(117)-C(116)-C(118)	110.6(8)	C(117)-C(116)-C(104)	112.5(8)
C(118)-C(116)-C(104)	114.1(7)	O(105)-C(119)-O(104)	123.3(6)
O(105)-C(119)-C(120)	126.1(7)	O(104)-C(119)-C(120)	110.5(6)
C(119)-C(120)-C(121)	106.8(7)	C(119)-C(120)-C(123)	109.1(7)
C(121)-C(120)-C(123)	114.6(10)	C(119)-C(120)-C(122)	109.4(7)
C(121)-C(120)-C(122)	111.7(10)	C(123)-C(120)-C(122)	105.2(11)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for compound 41.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	91(6)	136(8)	27(3)	-30(4)	-6(3)	-1(6)
O(2)	49(3)	47(3)	34(3)	5(2)	-9(2)	-8(2)
O(3)	61(4)	51(3)	32(3)	2(2)	-1(3)	-16(3)
O(4)	41(3)	48(3)	17(2)	0(2)	-6(2)	3(2)
O(5)	61(4)	67(4)	35(3)	-6(3)	-4(3)	23(3)
O(101)	87(6)	149(9)	43(4)	35(5)	19(4)	28(6)
O(102)	38(3)	46(3)	25(2)	-2(2)	-5(2)	-1(2)
O(103)	48(3)	47(3)	43(3)	-6(2)	-13(2)	16(3)
O(104)	34(2)	44(3)	22(2)	6(2)	-3(2)	-9(2)
O(105)	81(5)	66(4)	36(3)	14(3)	-12(3)	-35(4)
C(1)	62(5)	59(5)	26(3)	-11(3)	-7(3)	-14(4)
C(2)	47(5)	88(7)	36(4)	-11(4)	-8(3)	-7(5)
C(3)	40(4)	87(7)	41(4)	-9(4)	-7(3)	-10(4)
C(4)	38(4)	37(4)	38(4)	5(3)	-8(3)	0(3)
C(5)	29(3)	40(4)	31(3)	3(3)	-5(3)	-6(3)
C(6)	31(3)	39(3)	24(3)	-2(2)	-4(2)	-5(3)
C(7)	33(3)	32(3)	15(2)	-4(2)	-2(2)	1(3)
C(8)	26(3)	61(5)	25(3)	1(3)	-1(2)	-6(3)
C(9)	42(4)	63(5)	36(4)	11(3)	11(3)	3(4)
C(10)	55(5)	63(5)	34(4)	-3(4)	12(3)	-8(4)
C(11)	42(4)	89(7)	30(4)	-12(4)	6(3)	-9(4)
C(12)	48(4)	56(5)	25(3)	10(3)	2(3)	-6(4)
C(13)	45(4)	69(5)	19(3)	-4(3)	-4(3)	-5(4)
C(14)	38(4)	58(5)	27(3)	-1(3)	-9(3)	-7(3)
C(15)	64(6)	105(9)	42(5)	-4(5)	-12(4)	-18(6)
C(16)	31(3)	57(5)	44(4)	-13(4)	-1(3)	-1(3)
C(17)	42(5)	60(5)	67(6)	-10(4)	2(4)	6(4)
C(18)	50(5)	69(6)	33(4)	8(4)	6(3)	7(4)
C(19)	52(4)	44(4)	22(3)	2(3)	1(3)	10(3)
C(20)	49(4)	64(5)	22(3)	0(3)	-2(3)	12(4)
C(21)	123(11)	82(8)	32(4)	-7(5)	-1(5)	-15(7)
C(22)	75(7)	140(13)	39(5)	29(6)	0(5)	-24(8)
C(23)	56(6)	111(9)	39(4)	0(5)	-11(4)	19(6)
C(101)	60(5)	55(5)	35(4)	4(3)	-17(4)	7(4)
C(102)	63(6)	81(7)	41(4)	-12(4)	-28(4)	35(5)
C(103)	27(3)	68(5)	51(5)	1(4)	-5(3)	5(4)
C(104)	30(3)	48(4)	49(4)	-6(3)	-4(3)	-3(3)
C(105)	20(3)	38(3)	24(3)	-3(2)	0(2)	1(2)
C(106)	35(3)	35(3)	22(3)	-3(2)	-1(2)	0(3)
C(107)	23(3)	43(4)	22(3)	10(3)	-6(2)	-3(3)
C(108)	37(4)	44(4)	39(4)	-1(3)	-7(3)	1(3)
C(109)	35(4)	77(6)	54(5)	-8(4)	17(4)	-15(4)
C(110)	46(5)	77(6)	45(5)	10(4)	21(4)	6(4)
C(111)	58(5)	61(6)	45(5)	-1(4)	8(4)	6(4)
C(112)	39(4)	66(5)	21(3)	-12(3)	-6(3)	9(4)
C(113)	44(4)	49(4)	36(4)	-16(3)	1(3)	1(4)
C(114)	53(4)	36(4)	32(3)	-3(3)	-16(3)	10(3)
C(115)	78(7)	76(7)	45(5)	4(5)	-23(5)	24(6)

C(116)	41(4)	39(4)	55(5)	-4(3)	14(4)	0(3)
C(117)	41(5)	73(7)	77(7)	6(5)	0(4)	-5(5)
C(118)	61(5)	55(5)	27(3)	-3(3)	1(3)	-3(4)
C(119)	36(4)	49(4)	29(3)	-5(3)	-6(3)	-8(3)
C(120)	52(5)	68(6)	18(3)	3(3)	-10(3)	-19(4)
C(121)	144(12)	85(8)	26(4)	-7(4)	-20(5)	-38(8)
C(122)	89(9)	132(13)	42(5)	-3(6)	0(5)	2(9)
C(123)	165(15)	92(9)	28(4)	-7(5)	-8(6)	64(9)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for compound 41.

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	406	3857	1176	72
H(10A)	9530	-1194	912	69
H(2A)	7280	7612	1736	68
H(3B)	7329	7179	1109	67
H(3C)	7955	6081	1326	67
H(4A)	6250	4804	1276	45
H(5A)	4827	6935	1054	40
H(6A)	3844	4424	1094	38
H(6B)	4084	5172	753	38
H(7A)	2558	6750	1088	32
H(9A)	145	6462	1341	56
H(10B)	432	6839	1899	61
H(12A)	2844	4007	1943	51
H(13A)	4856	4704	1862	54
H(14A)	3715	6881	1550	49
H(15A)	5841	8292	2123	105
H(15B)	4877	7180	2204	105
H(15C)	4427	8367	1990	105
H(16A)	5925	4538	701	53
H(17A)	8018	4442	505	84
H(17B)	7904	3915	878	84
H(17C)	8462	5288	813	84
H(18A)	6538	5986	287	76
H(18B)	6849	7001	570	76
H(18C)	5434	6542	514	76
H(21A)	706	5295	-168	119
H(21B)	106	4933	186	119
H(21C)	1590	4827	130	119
H(22A)	2149	7184	-199	127
H(22B)	2912	6649	115	127
H(22C)	2316	8027	129	127
H(23A)	-284	7375	-151	103
H(23B)	-46	8277	162	103
H(23C)	-913	7060	202	103
H(10C)	2823	2838	386	74
H(10D)	2141	1114	727	58
H(10E)	2699	2162	971	58
H(10F)	3836	-155	782	51
H(10G)	5198	1974	1024	33
H(10H)	5932	176	1318	37
H(10I)	6201	-534	973	37
H(10J)	7449	1759	995	35
H(10K)	9990	1433	760	66
H(11A)	9701	1918	223	67
H(11B)	7285	-856	138	51
H(11C)	5256	-265	213	51
H(11D)	6366	1937	537	48
H(11E)	4355	3472	-35	100
H(11F)	5399	2425	-106	100

H(11G)	5706	3577	138	100
H(11H)	4075	-513	1345	54
H(11I)	2109	-1037	1120	96
H(11J)	1559	276	1247	96
H(11K)	2025	-750	1511	96
H(11L)	3371	876	1771	71
H(11M)	3098	1933	1496	71
H(11N)	4508	1482	1565	71
H(12B)	10453	3041	1875	127
H(12C)	9792	3035	2233	127
H(12D)	9139	3742	1927	127
H(12E)	7138	2452	2027	132
H(12F)	7750	1621	2317	132
H(12G)	7171	955	1994	132
H(12H)	10462	539	1891	143
H(12I)	9145	-177	1917	143
H(12J)	9720	508	2238	143

Table 1. Crystal data and structure refinement for compound 45.

Identification code	19
Empirical formula	$C_{26}H_{40}O_6$
Formula weight	448.58
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	$P2_12_12_1$
Unit cell dimensions	$a = 11.3457(12)$ Å $\alpha = 90^\circ$ $b = 11.8402(13)$ Å $\beta = 90^\circ$ $c = 40.203(5)$ Å $\gamma = 90^\circ$
Volume, Z	5400.6(10) Å ³ , 8
Density (calculated)	1.103 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.077 mm ⁻¹
F(000)	1952
θ range for data collection	1.79 to 28.26°
Limiting indices	$-12 \leq h \leq 15$, $-13 \leq k \leq 11$, $-50 \leq l \leq 52$
Reflections collected	16799
Independent reflections	9419 ($R_{int} = 0.1094$)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	9419 / 0 / 579
Goodness-of-fit on F^2	0.931
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0879$, $wR2 = 0.1275$
R indices (all data)	$R1 = 0.2856$, $wR2 = 0.1803$
Absolute structure parameter	-2(2)
Extinction coefficient	0.0023(3)
Largest diff. peak and hole	0.207 and -0.158 eÅ ⁻³

compound 45.

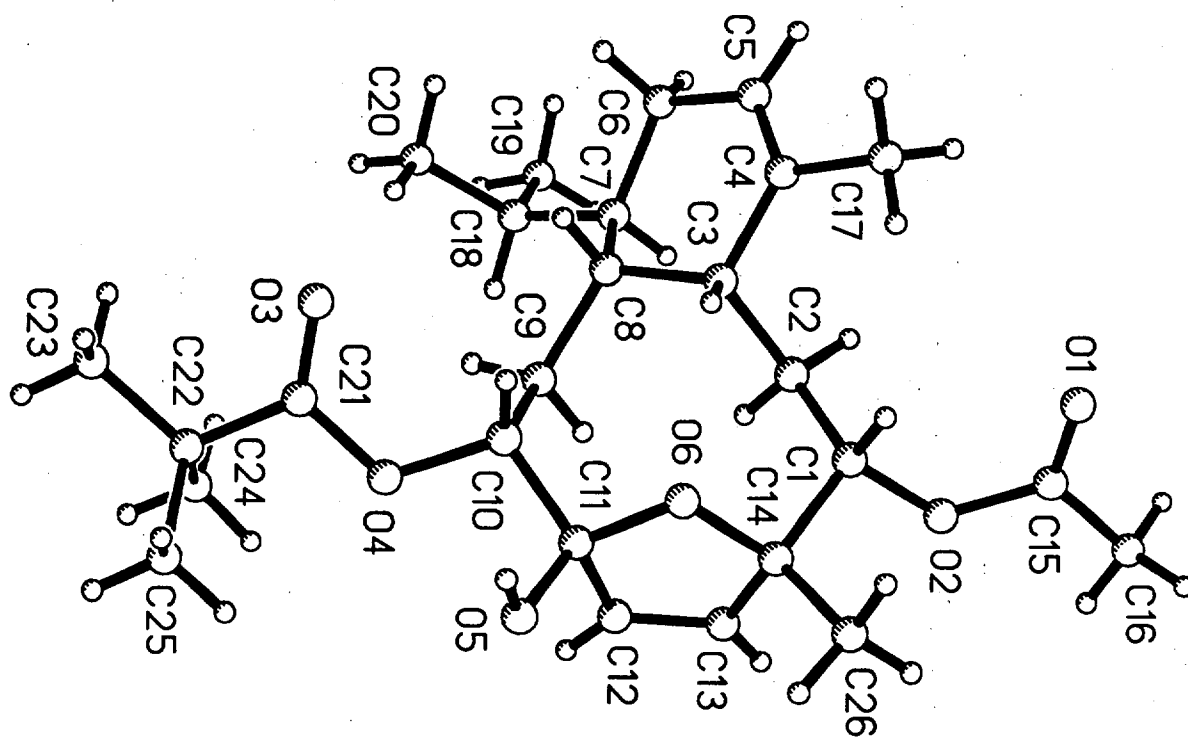


Table 2. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for compound 45. $U(\text{eq})$ is def one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
O(1)	1976(4)	3676(5)	7730(2)	75(2)
O(2)	1731(4)	3342(5)	7187(1)	68(2)
O(3)	536(5)	-3051(4)	6839(1)	78(2)
O(4)	104(4)	-1539(5)	6534(1)	62(1)
O(5)	-1397(4)	81(4)	6709(1)	73(2)
O(6)	-57(4)	847(5)	7083(1)	53(1)
C(1)	1375(6)	2171(7)	7246(2)	57(2)
C(2)	2426(6)	1412(6)	7186(2)	55(2)
C(3)	2320(6)	211(6)	7342(2)	50(2)
C(4)	3085(8)	120(8)	7646(2)	65(2)
C(5)	4084(8)	-433(7)	7647(2)	71(3)
C(6)	4578(7)	-1095(7)	7353(2)	85(3)
C(7)	3931(6)	-837(6)	7026(2)	53(2)
C(8)	2585(5)	-746(6)	7096(2)	49(2)
C(9)	1850(5)	-689(5)	6770(2)	51(2)
C(10)	510(6)	-801(6)	6802(2)	51(2)
C(11)	-193(6)	266(7)	6772(2)	55(2)
C(12)	239(7)	1134(8)	6525(2)	67(3)
C(13)	504(7)	2100(8)	6670(2)	70(2)
C(14)	271(6)	2008(7)	7029(2)	56(2)
C(15)	1991(7)	4016(8)	7449(3)	68(3)
C(16)	2309(7)	5199(7)	7347(2)	94(3)
C(17)	2677(7)	748(6)	7950(2)	82(3)
C(18)	4318(6)	-1615(7)	6747(2)	66(2)
C(19)	5660(6)	-1528(7)	6676(2)	96(3)
C(20)	3955(7)	-2832(7)	6795(2)	101(3)
C(21)	209(7)	-2654(10)	6582(2)	68(3)
C(22)	-152(9)	-3302(9)	6279(2)	84(3)
C(23)	-105(9)	-4556(9)	6344(2)	122(4)
C(24)	629(9)	-2957(8)	5990(2)	136(4)
C(25)	-1431(9)	-2960(9)	6193(2)	140(4)
C(26)	-721(7)	2786(7)	7151(2)	94(3)
O(11)	-942(5)	9309(6)	9573(2)	90(2)
O(12)	-696(4)	7522(5)	9391(1)	83(2)
O(13)	5800(5)	5340(6)	9582(2)	101(2)
O(14)	4076(5)	4415(4)	9550(1)	68(2)
O(15)	2444(4)	4543(4)	10012(1)	76(2)
O(16)	1794(4)	6289(4)	9819(1)	58(1)
C(101)	515(6)	7473(7)	9524(2)	62(2)
C(102)	1339(6)	7643(6)	9227(2)	62(2)
C(103)	2641(5)	7939(7)	9328(2)	47(2)
C(104)	2890(6)	9179(8)	9277(2)	56(2)
C(105)	3552(7)	9522(7)	9024(2)	72(2)
C(106)	4075(7)	8765(7)	8766(2)	83(3)
C(107)	3647(6)	7566(7)	8786(2)	60(2)
C(108)	3541(6)	7206(6)	9152(2)	47(2)
C(109)	3385(6)	5913(6)	9197(2)	50(2)
C(110)	3457(6)	5484(7)	9560(2)	57(2)

C(111)	2263 (7)	5218 (8)	9729 (2)	61 (2)
C(112)	1339 (8)	4685 (8)	9523 (2)	76 (3)
C(113)	414 (8)	5334 (9)	9505 (2)	80 (3)
C(114)	585 (6)	6381 (9)	9710 (2)	68 (2)
C(115)	-1303 (8)	8457 (12)	9443 (2)	87 (4)
C(116)	-2571 (7)	8333 (9)	9307 (2)	143 (4)
C(117)	2348 (7)	9990 (6)	9518 (2)	79 (2)
C(118)	4367 (6)	6772 (6)	8558 (2)	62 (2)
C(119)	4304 (7)	7124 (7)	8195 (2)	93 (3)
C(120)	5632 (6)	6615 (7)	8664 (2)	78 (3)
C(121)	5275 (9)	4482 (9)	9576 (2)	70 (3)
C(122)	5792 (7)	3311 (8)	9592 (2)	73 (2)
C(123)	7147 (8)	3387 (9)	9598 (3)	152 (5)
C(124)	5444 (9)	2632 (8)	9292 (3)	169 (5)
C(125)	5370 (10)	2749 (8)	9905 (3)	173 (5)
C(126)	-207 (6)	6407 (7)	10019 (2)	102 (3)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for compound 45.

O(1)-C(15)	1.197(9)	O(2)-C(15)	1.355(9)
O(2)-C(1)	1.465(8)	O(3)-C(21)	1.195(8)
O(4)-C(21)	1.339(9)	O(4)-C(10)	1.461(7)
O(5)-C(11)	1.406(7)	O(6)-C(11)	1.437(8)
O(6)-C(14)	1.440(8)	C(1)-C(2)	1.513(8)
C(1)-C(14)	1.541(8)	C(2)-C(3)	1.559(8)
C(3)-C(4)	1.503(9)	C(3)-C(8)	1.533(8)
C(4)-C(5)	1.309(9)	C(4)-C(17)	1.502(10)
C(5)-C(6)	1.526(10)	C(6)-C(7)	1.537(8)
C(7)-C(18)	1.517(9)	C(7)-C(8)	1.557(8)
C(8)-C(9)	1.556(8)	C(9)-C(10)	1.531(8)
C(10)-C(11)	1.500(8)	C(11)-C(12)	1.509(9)
C(12)-C(13)	1.319(9)	C(13)-C(14)	1.470(9)
C(14)-C(26)	1.534(9)	C(15)-C(16)	1.504(10)
C(18)-C(20)	1.511(9)	C(18)-C(19)	1.552(8)
C(21)-C(22)	1.496(11)	C(22)-C(23)	1.508(10)
C(22)-C(24)	1.517(10)	C(22)-C(25)	1.546(11)
O(11)-C(115)	1.208(11)	O(12)-C(115)	1.320(11)
O(12)-C(101)	1.476(7)	O(13)-C(121)	1.178(9)
O(14)-C(121)	1.366(10)	O(14)-C(110)	1.448(7)
O(15)-C(111)	1.404(8)	O(16)-C(111)	1.423(8)
O(16)-C(114)	1.444(8)	C(101)-C(114)	1.495(9)
C(101)-C(102)	1.529(8)	C(102)-C(103)	1.572(8)
C(103)-C(104)	1.509(9)	C(103)-C(108)	1.517(8)
C(104)-C(105)	1.328(9)	C(104)-C(117)	1.497(9)
C(105)-C(106)	1.495(10)	C(106)-C(107)	1.503(9)
C(107)-C(108)	1.535(8)	C(107)-C(118)	1.545(9)
C(108)-C(109)	1.551(8)	C(109)-C(110)	1.547(8)
C(110)-C(111)	1.548(9)	C(111)-C(112)	1.478(10)
C(112)-C(113)	1.303(10)	C(113)-C(114)	1.503(10)
C(114)-C(126)	1.534(8)	C(115)-C(116)	1.546(11)
C(118)-C(120)	1.509(9)	C(118)-C(119)	1.520(8)
C(121)-C(122)	1.506(11)	C(122)-C(125)	1.502(10)
C(122)-C(124)	1.502(10)	C(122)-C(123)	1.540(10)
C(15)-O(2)-C(1)	119.3(6)	C(21)-O(4)-C(10)	117.1(6)
C(11)-O(6)-C(14)	110.6(6)	O(2)-C(1)-C(2)	108.6(6)
O(2)-C(1)-C(14)	104.5(6)	C(2)-C(1)-C(14)	118.4(6)
C(1)-C(2)-C(3)	114.6(6)	C(4)-C(3)-C(8)	111.1(6)
C(4)-C(3)-C(2)	110.4(6)	C(8)-C(3)-C(2)	113.5(5)
C(5)-C(4)-C(17)	120.7(8)	C(5)-C(4)-C(3)	122.5(8)
C(17)-C(4)-C(3)	116.7(8)	C(4)-C(5)-C(6)	124.9(8)
C(5)-C(6)-C(7)	112.7(6)	C(18)-C(7)-C(6)	112.0(6)
C(18)-C(7)-C(8)	117.4(6)	C(6)-C(7)-C(8)	109.2(6)
C(3)-C(8)-C(9)	114.0(5)	C(3)-C(8)-C(7)	111.1(5)
C(9)-C(8)-C(7)	112.1(5)	C(10)-C(9)-C(8)	117.2(6)
O(4)-C(10)-C(11)	106.1(6)	O(4)-C(10)-C(9)	107.6(5)
C(11)-C(10)-C(9)	116.7(6)	O(5)-C(11)-O(6)	109.7(6)
O(5)-C(11)-C(10)	113.6(6)	O(6)-C(11)-C(10)	106.0(6)
O(5)-C(11)-C(12)	107.6(6)	O(6)-C(11)-C(12)	102.2(6)
C(10)-C(11)-C(12)	117.0(6)	C(13)-C(12)-C(11)	112.0(8)
C(12)-C(13)-C(14)	109.1(8)	O(6)-C(14)-C(13)	105.5(6)
O(6)-C(14)-C(26)	109.6(6)	C(13)-C(14)-C(26)	113.6(7)
O(6)-C(14)-C(1)	104.1(6)	C(13)-C(14)-C(1)	113.6(6)
C(26)-C(14)-C(1)	109.8(6)	O(1)-C(15)-O(2)	122.2(9)

O(1)-C(15)-C(16)	125.0(10)	O(2)-C(15)-C(16)	112.8(9)
C(20)-C(18)-C(7)	113.9(7)	C(20)-C(18)-C(19)	110.7(7)
C(7)-C(18)-C(19)	112.3(6)	O(3)-C(21)-O(4)	122.6(8)
O(3)-C(21)-C(22)	126.0(10)	O(4)-C(21)-C(22)	111.3(8)
C(21)-C(22)-C(23)	110.7(8)	C(21)-C(22)-C(24)	109.0(8)
C(23)-C(22)-C(24)	112.1(8)	C(21)-C(22)-C(25)	107.8(8)
C(23)-C(22)-C(25)	109.2(8)	C(24)-C(22)-C(25)	107.8(8)
C(115)-O(12)-C(101)	117.4(7)	C(121)-O(14)-C(110)	115.5(6)
C(111)-O(16)-C(114)	110.2(6)	O(12)-C(101)-C(114)	105.3(6)
O(12)-C(101)-C(102)	106.3(5)	C(114)-C(101)-C(102)	118.1(6)
C(101)-C(102)-C(103)	113.7(5)	C(104)-C(103)-C(108)	111.5(6)
C(104)-C(103)-C(102)	111.0(6)	C(108)-C(103)-C(102)	112.6(6)
C(105)-C(104)-C(117)	122.2(9)	C(105)-C(104)-C(103)	120.5(7)
C(117)-C(104)-C(103)	117.3(7)	C(104)-C(105)-C(106)	125.0(8)
C(105)-C(106)-C(107)	113.7(7)	C(106)-C(107)-C(108)	109.8(6)
C(106)-C(107)-C(118)	111.8(7)	C(108)-C(107)-C(118)	116.1(6)
C(103)-C(108)-C(107)	110.0(6)	C(103)-C(108)-C(109)	115.7(6)
C(107)-C(108)-C(109)	113.2(6)	C(110)-C(109)-C(108)	115.4(6)
O(14)-C(110)-C(109)	106.8(5)	O(14)-C(110)-C(111)	105.0(6)
C(109)-C(110)-C(111)	115.9(6)	O(15)-C(111)-O(16)	110.9(6)
O(15)-C(111)-C(112)	108.3(7)	O(16)-C(111)-C(112)	104.9(7)
O(15)-C(111)-C(110)	110.1(6)	O(16)-C(111)-C(110)	105.0(6)
C(112)-C(111)-C(110)	117.4(7)	C(113)-C(112)-C(111)	110.6(9)
C(112)-C(113)-C(114)	110.6(8)	O(16)-C(114)-C(101)	105.5(6)
O(16)-C(114)-C(113)	103.1(7)	C(101)-C(114)-C(113)	115.6(7)
O(16)-C(114)-C(126)	108.2(6)	C(101)-C(114)-C(126)	110.9(7)
C(113)-C(114)-C(126)	112.7(8)	O(11)-C(115)-O(12)	126.3(9)
O(11)-C(115)-C(116)	123.2(12)	O(12)-C(115)-C(116)	110.4(10)
C(120)-C(118)-C(119)	110.4(6)	C(120)-C(118)-C(107)	114.3(6)
C(119)-C(118)-C(107)	112.2(6)	O(13)-C(121)-O(14)	123.7(9)
O(13)-C(121)-C(122)	126.6(10)	O(14)-C(121)-C(122)	109.7(8)
C(125)-C(122)-C(124)	110.6(9)	C(125)-C(122)-C(121)	108.7(7)
C(124)-C(122)-C(121)	110.8(7)	C(125)-C(122)-C(123)	109.4(8)
C(124)-C(122)-C(123)	107.7(8)	C(121)-C(122)-C(123)	109.6(8)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for compound 45.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form $\exp[-2\pi^2(ha^*)^2U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	75(4)	61(5)	89(4)	0(4)	-16(4)	-11(3)
O(2)	77(4)	51(5)	76(4)	1(3)	1(3)	-6(3)
O(3)	98(4)	57(4)	81(4)	4(3)	-19(4)	3(3)
O(4)	61(3)	54(4)	71(4)	-4(3)	-11(3)	-5(3)
O(5)	44(3)	82(4)	94(4)	4(3)	-22(3)	9(3)
O(6)	51(3)	49(4)	59(3)	-8(3)	1(2)	-5(3)
C(1)	59(5)	42(6)	69(5)	2(4)	3(4)	-8(5)
C(2)	48(5)	56(6)	61(5)	0(4)	-6(4)	-2(4)
C(3)	47(5)	50(6)	52(5)	4(5)	-8(4)	-9(4)
C(4)	66(6)	79(7)	51(6)	18(5)	-14(5)	-36(5)
C(5)	68(6)	64(7)	80(7)	30(5)	-26(5)	-23(5)
C(6)	53(5)	113(8)	90(6)	8(6)	-25(5)	17(5)
C(7)	49(5)	46(6)	65(5)	12(5)	-10(4)	0(4)
C(8)	46(5)	39(5)	62(5)	12(4)	-17(4)	-10(4)
C(9)	44(4)	45(5)	63(5)	-2(4)	-3(4)	5(4)
C(10)	51(5)	64(6)	39(4)	-10(4)	-6(4)	-5(4)
C(11)	42(5)	53(6)	71(6)	1(5)	-12(4)	8(4)
C(12)	67(6)	78(8)	57(6)	9(6)	-11(5)	24(5)
C(13)	71(6)	76(8)	62(6)	14(5)	-11(5)	6(5)
C(14)	50(5)	50(7)	68(6)	11(5)	-3(4)	10(4)
C(15)	54(5)	37(8)	113(9)	12(7)	-6(6)	12(5)
C(16)	78(6)	56(8)	150(8)	20(6)	-21(6)	-7(5)
C(17)	117(7)	72(7)	58(6)	-2(5)	-16(5)	-17(5)
C(18)	37(5)	66(7)	96(6)	8(6)	-6(5)	-5(4)
C(19)	59(6)	101(8)	127(7)	20(6)	18(5)	21(5)
C(20)	83(6)	63(8)	157(8)	-8(6)	9(6)	5(5)
C(21)	58(6)	85(9)	61(6)	-6(7)	-8(5)	-4(5)
C(22)	96(8)	87(9)	68(7)	-19(6)	7(6)	-18(6)
C(23)	152(10)	89(10)	124(8)	-26(7)	14(7)	-18(8)
C(24)	174(10)	139(10)	94(7)	-35(6)	61(8)	-40(8)
C(25)	125(9)	175(11)	121(8)	-35(7)	-44(7)	-30(9)
C(26)	71(6)	72(7)	138(7)	-22(6)	-9(5)	12(5)
O(11)	70(4)	92(6)	109(5)	-2(4)	-6(4)	27(4)
O(12)	40(3)	115(6)	95(4)	-27(4)	-11(3)	10(3)
O(13)	68(4)	69(6)	167(6)	11(5)	11(4)	-1(4)
O(14)	67(4)	53(4)	84(4)	9(3)	7(3)	4(3)
O(15)	79(4)	76(4)	73(4)	26(3)	1(3)	-17(3)
O(16)	53(3)	54(4)	67(3)	-2(3)	3(3)	-1(3)
C(101)	45(5)	80(8)	61(5)	-13(5)	-13(4)	1(4)
C(102)	54(5)	83(7)	49(5)	-8(4)	-5(4)	11(4)
C(103)	38(4)	65(7)	39(4)	-1(4)	8(4)	3(4)
C(104)	49(5)	58(7)	61(6)	-2(5)	-10(4)	19(5)
C(105)	77(6)	50(7)	89(6)	16(6)	5(5)	8(5)
C(106)	92(7)	54(8)	102(7)	24(6)	23(6)	21(6)
C(107)	52(5)	67(7)	61(5)	10(5)	12(4)	17(5)
C(108)	42(4)	54(6)	45(5)	1(4)	-2(4)	7(4)

C(109)	44(4)	48(6)	57(5)	11(4)	4(4)	9(4)
C(110)	63(5)	47(6)	62(5)	-1(4)	1(4)	2(4)
C(111)	54(6)	61(7)	67(6)	4(5)	-2(5)	-10(5)
C(112)	70(6)	76(8)	84(6)	-3(5)	10(6)	-23(6)
C(113)	70(7)	101(9)	67(6)	-7(6)	-1(5)	-42(6)
C(114)	37(5)	100(9)	66(6)	-2(6)	7(5)	6(5)
C(115)	47(7)	157(14)	56(6)	4(7)	7(5)	10(7)
C(116)	50(6)	252(13)	129(8)	-33(9)	-30(6)	34(7)
C(117)	88(6)	77(7)	71(5)	-12(5)	-19(5)	25(5)
C(118)	51(5)	77(7)	58(5)	8(5)	-10(4)	5(4)
C(119)	93(6)	135(9)	50(5)	-2(5)	1(5)	32(6)
C(120)	76(6)	107(8)	51(5)	-3(5)	10(4)	16(5)
C(121)	92(8)	57(9)	61(6)	13(5)	-8(5)	13(6)
C(122)	86(7)	63(8)	69(6)	-2(6)	-6(5)	20(6)
C(123)	83(8)	168(11)	205(12)	-40(9)	2(8)	40(7)
C(124)	185(11)	128(11)	194(11)	-85(9)	-65(10)	73(9)
C(125)	192(12)	124(11)	205(11)	100(9)	58(10)	73(9)
C(126)	66(6)	152(9)	88(6)	17(6)	37(5)	11(6)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for compound 45.

	x	y	z	U(eq)
H(5A)	-1684(4)	-289(4)	6861(1)	110
H(1A)	1142(6)	2099(7)	7480(2)	68
H(2A)	3123(6)	1776(6)	7276(2)	66
H(2B)	2539(6)	1333(6)	6948(2)	66
H(3A)	1502(6)	118(6)	7415(2)	59
H(5B)	4525(8)	-422(7)	7842(2)	85
H(6A)	4519(7)	-1896(7)	7400(2)	103
H(6B)	5407(7)	-913(7)	7327(2)	103
H(7A)	4185(6)	-78(6)	6960(2)	64
H(8A)	2358(5)	-1449(6)	7207(2)	59
H(9A)	2018(5)	26(5)	6662(2)	61
H(9B)	2126(5)	-1283(5)	6623(2)	61
H(10A)	328(6)	-1158(6)	7016(2)	62
H(12A)	309(7)	1002(8)	6298(2)	80
H(13A)	793(7)	2738(8)	6562(2)	84
H(16A)	2257(7)	5266(7)	7110(2)	142
H(16B)	3099(7)	5365(7)	7417(2)	142
H(16C)	1774(7)	5723(7)	7449(2)	142
H(17A)	1933(7)	1101(6)	7905(2)	124
H(17B)	3248(7)	1314(6)	8007(2)	124
H(17C)	2591(7)	228(6)	8132(2)	124
H(18A)	3916(6)	-1351(7)	6545(2)	80
H(19A)	5873(6)	-749(7)	6646(2)	144
H(19B)	5845(6)	-1943(7)	6477(2)	144
H(19C)	6091(6)	-1837(7)	6860(2)	144
H(20A)	4228(7)	-3274(7)	6610(2)	151
H(20B)	3112(7)	-2879(7)	6808(2)	151
H(20C)	4296(7)	-3117(7)	6997(2)	151
H(23A)	-339(9)	-4956(9)	6147(2)	182
H(23B)	-630(9)	-4741(9)	6523(2)	182
H(23C)	685(9)	-4768(9)	6403(2)	182
H(24A)	402(9)	-3369(8)	5795(2)	204
H(24B)	1436(9)	-3122(8)	6043(2)	204
H(24C)	544(9)	-2162(8)	5950(2)	204
H(25A)	-1684(9)	-3365(9)	5998(2)	210
H(25B)	-1464(9)	-2163(9)	6150(2)	210
H(25C)	-1940(9)	-3141(9)	6376(2)	210
H(26A)	-828(7)	2685(7)	7386(2)	140
H(26B)	-1439(7)	2602(7)	7037(2)	140
H(26C)	-515(7)	3558(7)	7106(2)	140
H(15A)	2956(4)	4827(4)	10129(1)	114
H(10B)	627(6)	8098(7)	9681(2)	74
H(10C)	1030(6)	8246(6)	9089(2)	74
H(10D)	1344(6)	6958(6)	9095(2)	74
H(10E)	2717(5)	7788(7)	9567(2)	57
H(10F)	3702(7)	10292(7)	9007(2)	86
H(10G)	4926(7)	8770(7)	8790(2)	99
H(10H)	3889(7)	9064(7)	8548(2)	99
H(10I)	2843(6)	7569(7)	8697(2)	72

H(10J)	4302 (6)	7389 (6)	9254 (2)	56
H(10K)	2626 (6)	5698 (6)	9106 (2)	60
H(10L)	3988 (6)	5532 (6)	9067 (2)	60
H(11A)	3900 (6)	6025 (7)	9695 (2)	69
H(11B)	1408 (8)	3984 (8)	9421 (2)	92
H(11C)	-259 (8)	5172 (9)	9381 (2)	95
H(11F)	-2671 (7)	7592 (9)	9215 (2)	215
H(11G)	-2705 (7)	8890 (9)	9138 (2)	215
H(11H)	-3125 (7)	8441 (9)	9485 (2)	215
H(11I)	1905 (7)	9579 (6)	9682 (2)	118
H(11J)	1833 (7)	10497 (6)	9402 (2)	118
H(11K)	2959 (7)	10415 (6)	9627 (2)	118
H(11L)	3993 (6)	6027 (6)	8573 (2)	75
H(11M)	3494 (7)	7221 (7)	8132 (2)	139
H(11N)	4658 (7)	6551 (7)	8059 (2)	139
H(11O)	4719 (7)	7824 (7)	8165 (2)	139
H(12C)	5658 (6)	6392 (7)	8894 (2)	117
H(12D)	6052 (6)	7312 (7)	8636 (2)	117
H(12E)	5992 (6)	6040 (7)	8530 (2)	117
H(12F)	7418 (8)	3746 (9)	9398 (3)	228
H(12G)	7474 (8)	2640 (9)	9612 (3)	228
H(12H)	7393 (8)	3820 (9)	9787 (3)	228
H(12I)	5719 (9)	3004 (8)	9095 (3)	253
H(12J)	4601 (9)	2566 (8)	9284 (3)	253
H(12K)	5789 (9)	1894 (8)	9306 (3)	253
H(12L)	5600 (10)	3193 (8)	10094 (3)	260
H(12M)	5715 (10)	2010 (8)	9922 (3)	260
H(12N)	4527 (10)	2683 (8)	9900 (3)	260
H(12O)	-149 (6)	5699 (7)	10134 (2)	152
H(12P)	-1010 (6)	6531 (7)	9953 (2)	152
H(12Q)	40 (6)	7007 (7)	10164 (2)	152
