

A rational study of crystal engineering of supramolecular assemblies of 1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid

Kapildev K. Arora and V. R. Pedireddi*

*Division of Organic Chemistry, National Chemical Laboratory,
Dr. Homi Bhabha Road, Pune 411 008, India.*

pedireddi@ems.ncl.res.in

Contents of the supplementary material[§]

Content	Page No.	Structure
ORTEP	S2	2a
Table 1	S3	
Table 2	S4	
Table 3	S5	
Table 4	S6	
Table 5	S7-S13	
ORTEP	S14	3a
Table 1	S15	
Table 2	S16	
Table 3	S17	
Table 4	S18	
Table 5	S19-S23	
ORTEP	S24	3b
Table 1	S25	
Table 2	S26	
Table 3	S27	
Table 4	S28	
Table 5	S29-S35	
ORTEP	S36	4a
Table 1	S37	
Table 2	S38	
Table 3	S39	
Table 4	S40	
Table 5	S41-S46	
ORTEP	S47	5a
Table 1	S48	
Table 2	S49	
Table 3	S50	
Table 4	S51	
Table 5	S52-S57	
ORTEP	S58	6a
Table 1	S59	
Table 2	S60	
Table 3	S61	
Table 4	S62	
Table 5	S63-S66	
ORTEP	S67	7a
Table 1	S68	
Table 2	S69	
Table 3	S70	
Table 4	S71	
Table 5	S72-S75	
Summary of crystal data for 2a , 3a , 3b and 4a–7a .	S76	

[§]Table 1: Crystal data and structure refinement; Table 2: Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$); Table 3: Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$]; Table 4: Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$); Table 5: Observed and calculated structure factors.

ORTEP drawing for 2a

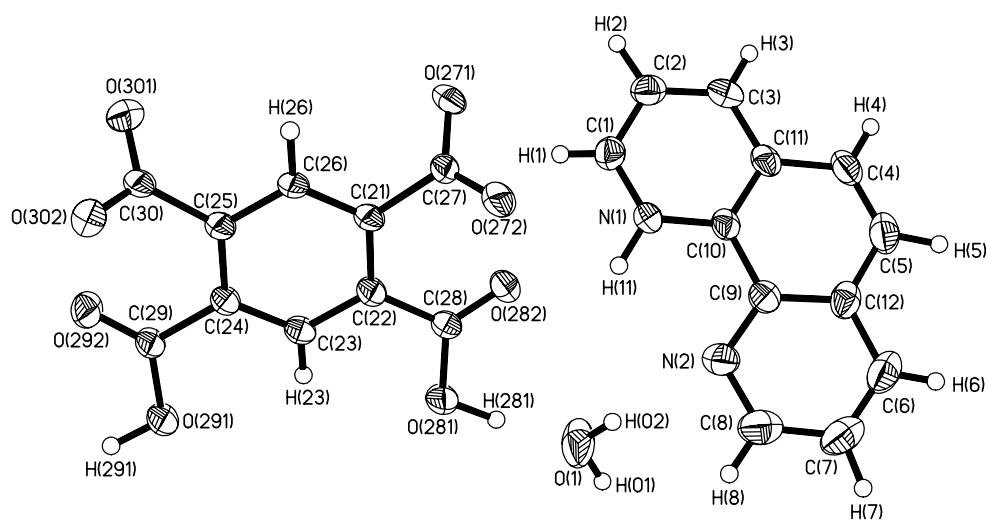


Table 1. Crystal data and structure refinement for 2a.

Identification code	2a	
Empirical formula	C ₂₂ H ₁₆ N ₂ O ₉	
Formula weight	452.37	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 8.001(1) Å	$\alpha = 94.85(1)^\circ$.
	b = 9.822(2) Å	$\beta = 92.10(1)^\circ$.
	c = 12.257(2) Å	$\gamma = 94.63(1)^\circ$.
Volume	955.7(3) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.572 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.124 mm ⁻¹	
F(000)	468	
Crystal size	0.35 x 0.18 x 0.10 mm ³	
Theta range for data collection	1.67 to 23.29°.	
Index ranges	-8 ≤ h ≤ 6, -10 ≤ k ≤ 10, -13 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	4124	
Independent reflections	2723 [R(int) = 0.0481]	
Completeness to theta = 23.29°	98.9 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	2723 / 0 / 363	
Goodness-of-fit on F ²	1.012	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0658, wR2 = 0.1704	
R indices (all data)	R1 = 0.0702, wR2 = 0.1762	
Extinction coefficient	0.056(9)	
Largest diff. peak and hole	0.366 and -0.440 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	U(eq)
C(1)	741(3)	5244(3)	2460(2)	35(1)
C(2)	-24(3)	3933(3)	2319(2)	37(1)
C(3)	131(3)	3085(3)	3135(2)	35(1)
C(4)	1247(4)	2709(3)	4999(2)	40(1)
C(5)	2172(4)	3183(3)	5901(2)	45(1)
C(6)	3993(4)	5061(3)	6948(2)	47(1)
C(7)	4710(4)	6363(4)	7002(2)	52(1)
C(8)	4417(4)	7166(3)	6143(2)	49(1)
C(9)	2800(3)	5409(2)	5183(2)	32(1)
C(10)	1825(3)	4880(2)	4215(2)	28(1)
C(11)	1057(3)	3546(2)	4108(2)	31(1)
C(12)	2998(3)	4535(3)	6017(2)	37(1)
C(21)	2735(3)	8658(2)	361(2)	28(1)
C(22)	2435(3)	9682(2)	1186(2)	28(1)
C(23)	2298(3)	11011(2)	901(2)	30(1)
C(24)	2452(3)	11357(2)	-165(2)	28(1)
C(25)	2732(3)	10331(2)	-986(2)	28(1)
C(26)	2860(3)	9004(2)	-704(2)	29(1)
C(27)	3000(3)	7186(2)	558(2)	28(1)
C(28)	2228(3)	9359(2)	2336(2)	30(1)
C(29)	2243(3)	12786(2)	-446(2)	29(1)
C(30)	2950(3)	10550(2)	-2175(2)	30(1)
N(1)	1628(3)	5676(2)	3378(2)	31(1)
N(2)	3484(3)	6723(2)	5244(2)	40(1)
O(1)	2526(5)	9570(3)	4955(2)	86(1)
O(271)	2050(2)	6273(2)	58(2)	41(1)
O(272)	4226(2)	6952(2)	1174(1)	39(1)
O(281)	2445(2)	10443(2)	3052(1)	41(1)
O(282)	1902(2)	8207(2)	2587(1)	39(1)
O(291)	2565(3)	13702(2)	408(1)	42(1)
O(292)	1815(2)	13053(2)	-1344(1)	40(1)
O(301)	1962(3)	9916(2)	-2859(1)	47(1)
O(302)	4216(2)	11320(2)	-2436(1)	37(1)
H(01)	2420(50)	9830(50)	5660(40)	91(13)
H(02)	2880(60)	8860(50)	4920(30)	86(14)
H(1)	670(40)	5850(30)	1940(20)	42(7)
H(2)	-660(30)	3660(30)	1630(20)	38(7)
H(3)	-390(30)	2250(30)	3040(20)	28(6)
H(4)	630(40)	1840(30)	4920(20)	45(8)
H(5)	2320(40)	2680(30)	6550(30)	49(8)
H(6)	4180(40)	4610(30)	7550(30)	56(9)
H(7)	5390(50)	6800(40)	7610(30)	75(11)
H(8)	4920(50)	8080(40)	6200(30)	78(11)
H(11)	2190(40)	6600(40)	3480(30)	55(9)
H(23)	1960(40)	11700(30)	1470(20)	42(7)
H(26)	3080(30)	8300(30)	-1270(20)	38(7)
H(281)	2360(40)	10140(30)	3820(30)	59(9)
H(291)	2440(50)	14630(40)	150(30)	83(12)
H(302)	5010(50)	12090(40)	-1730(30)	74(10)

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

C(1)-N(1)	1.327(3)	N(1)-C(1)-C(2)	120.4(2)
C(1)-C(2)	1.374(4)	N(1)-C(1)-H(1)	117.3(18)
C(1)-H(1)	0.91(3)	C(2)-C(1)-H(1)	122.3(18)
C(2)-C(3)	1.363(4)	C(3)-C(2)-C(1)	119.3(2)
C(2)-H(2)	0.98(3)	C(3)-C(2)-H(2)	123.4(16)
C(3)-C(11)	1.402(4)	C(1)-C(2)-H(2)	117.4(16)
C(3)-H(3)	0.88(3)	C(2)-C(3)-C(11)	120.3(2)
C(4)-C(5)	1.336(4)	C(2)-C(3)-H(3)	118.1(16)
C(4)-C(11)	1.432(4)	C(11)-C(3)-H(3)	121.6(16)
C(4)-H(4)	0.95(3)	C(5)-C(4)-C(11)	120.8(2)
C(5)-C(12)	1.428(4)	C(5)-C(4)-H(4)	123.3(18)
C(5)-H(5)	0.98(3)	C(11)-C(4)-H(4)	115.8(18)
C(6)-C(7)	1.354(5)	C(4)-C(5)-C(12)	121.6(2)
C(6)-C(12)	1.404(4)	C(4)-C(5)-H(5)	124.9(18)
C(6)-H(6)	0.90(4)	C(12)-C(5)-H(5)	113.5(18)
C(7)-C(8)	1.392(5)	C(7)-C(6)-C(12)	119.4(3)
C(7)-H(7)	0.96(4)	C(7)-C(6)-H(6)	115(2)
C(8)-N(2)	1.330(4)	C(12)-C(6)-H(6)	125(2)
C(8)-H(8)	0.94(4)	C(6)-C(7)-C(8)	119.4(3)
C(9)-N(2)	1.355(3)	C(6)-C(7)-H(7)	125(2)
C(9)-C(12)	1.402(4)	C(8)-C(7)-H(7)	116(2)
C(9)-C(10)	1.431(3)	N(2)-C(8)-C(7)	123.7(3)
C(10)-N(1)	1.354(3)	N(2)-C(8)-H(8)	118(2)
C(10)-C(11)	1.395(3)	C(7)-C(8)-H(8)	118(2)
C(21)-C(26)	1.382(3)	N(2)-C(9)-C(12)	123.5(2)
C(21)-C(22)	1.406(3)	N(2)-C(9)-C(10)	118.5(2)
C(21)-C(27)	1.516(3)	C(12)-C(9)-C(10)	118.0(2)
C(22)-C(23)	1.391(3)	N(1)-C(10)-C(11)	118.4(2)
C(22)-C(28)	1.483(3)	N(1)-C(10)-C(9)	120.1(2)
C(23)-C(24)	1.385(3)	C(11)-C(10)-C(9)	121.4(2)
C(23)-H(23)	0.99(3)	C(10)-C(11)-C(3)	118.6(2)
C(24)-C(25)	1.400(3)	C(10)-C(11)-C(4)	118.5(2)
C(24)-C(29)	1.494(3)	C(3)-C(11)-C(4)	122.9(2)
C(25)-C(26)	1.387(3)	C(9)-C(12)-C(6)	117.2(3)
C(25)-C(30)	1.505(3)	C(9)-C(12)-C(5)	119.7(2)
C(26)-H(26)	0.97(3)	C(6)-C(12)-C(5)	123.1(2)
C(27)-O(271)	1.233(3)	C(26)-C(21)-C(22)	118.8(2)
C(27)-O(272)	1.263(3)	C(26)-C(21)-C(27)	116.57(19)
C(28)-O(282)	1.208(3)	C(22)-C(21)-C(27)	124.6(2)
C(28)-O(281)	1.317(3)	C(23)-C(22)-C(21)	118.7(2)
C(29)-O(292)	1.197(3)	C(23)-C(22)-C(28)	120.1(2)
C(29)-O(291)	1.324(3)	C(21)-C(22)-C(28)	121.2(2)
C(30)-O(301)	1.225(3)	C(24)-C(23)-C(22)	122.2(2)
C(30)-O(302)	1.281(3)	C(24)-C(23)-H(23)	119.5(16)
N(1)-H(11)	0.98(3)	C(22)-C(23)-H(23)	118.0(16)
O(1)-H(01)	0.89(5)	C(23)-C(24)-C(25)	118.9(2)
O(1)-H(02)	0.77(5)	C(23)-C(24)-C(29)	120.7(2)
O(281)-H(281)	1.02(3)	C(25)-C(24)-C(29)	120.4(2)
O(291)-H(291)	1.00(4)	C(26)-C(25)-C(24)	119.0(2)
O(302)-H(302)	1.22(4)	C(26)-C(25)-C(30)	115.9(2)
		C(24)-C(25)-C(30)	125.1(2)
		C(21)-C(26)-C(25)	122.4(2)
		C(21)-C(26)-H(26)	118.8(16)
		C(25)-C(26)-H(26)	118.7(16)
		O(271)-C(27)-O(272)	123.4(2)
		O(271)-C(27)-C(21)	117.7(2)
		O(272)-C(27)-C(21)	118.8(2)
		O(282)-C(28)-O(281)	123.5(2)
		O(282)-C(28)-C(22)	122.9(2)
		O(281)-C(28)-C(22)	113.60(19)
		O(292)-C(29)-O(291)	124.6(2)
		O(292)-C(29)-C(24)	123.0(2)
		O(291)-C(29)-C(24)	112.36(19)
		O(301)-C(30)-O(302)	122.6(2)
		O(301)-C(30)-C(25)	118.3(2)
		O(302)-C(30)-C(25)	118.91(19)
		C(1)-N(1)-C(10)	123.0(2)
		C(1)-N(1)-H(11)	120.6(19)
		C(10)-N(1)-H(11)	116.4(19)
		C(8)-N(2)-C(9)	116.7(2)
		H(01)-O(1)-H(02)	108(4)
		C(28)-O(281)-H(281)	109.2(18)
		C(29)-O(291)-H(291)	107(2)
		C(30)-O(302)-H(302)	119.8(16)

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

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	42(1)	34(1)	31(1)	4(1)	0(1)	10(1)
C(2)	40(1)	36(2)	35(1)	-5(1)	-1(1)	6(1)
C(3)	36(1)	26(1)	42(2)	-4(1)	4(1)	3(1)
C(4)	52(2)	25(1)	43(2)	6(1)	6(1)	10(1)
C(5)	59(2)	40(2)	40(2)	13(1)	6(1)	19(1)
C(6)	50(2)	61(2)	33(2)	3(1)	-5(1)	23(2)
C(7)	46(2)	68(2)	40(2)	-9(2)	-10(1)	16(2)
C(8)	44(2)	46(2)	54(2)	-10(1)	-7(1)	4(1)
C(9)	33(1)	30(1)	34(1)	-1(1)	3(1)	12(1)
C(10)	32(1)	26(1)	28(1)	3(1)	4(1)	12(1)
C(11)	34(1)	24(1)	35(1)	1(1)	7(1)	10(1)
C(12)	42(1)	41(2)	30(1)	4(1)	3(1)	19(1)
C(21)	35(1)	19(1)	28(1)	-2(1)	-2(1)	6(1)
C(22)	37(1)	21(1)	28(1)	1(1)	1(1)	7(1)
C(23)	42(1)	20(1)	29(1)	-3(1)	3(1)	9(1)
C(24)	36(1)	20(1)	28(1)	1(1)	0(1)	7(1)
C(25)	36(1)	21(1)	27(1)	-1(1)	-2(1)	5(1)
C(26)	42(1)	19(1)	25(1)	-3(1)	0(1)	7(1)
C(27)	42(1)	21(1)	24(1)	2(1)	2(1)	7(1)
C(28)	41(1)	20(1)	29(1)	-1(1)	0(1)	7(1)
C(29)	40(1)	21(1)	28(1)	1(1)	4(1)	9(1)
C(30)	43(1)	18(1)	28(1)	-1(1)	-3(1)	7(1)
N(1)	38(1)	24(1)	32(1)	2(1)	-1(1)	6(1)
N(2)	44(1)	34(1)	40(1)	-3(1)	-3(1)	3(1)
O(1)	185(3)	49(2)	31(1)	5(1)	9(2)	49(2)
O(271)	60(1)	18(1)	43(1)	-1(1)	-14(1)	2(1)
O(272)	49(1)	24(1)	44(1)	2(1)	-10(1)	9(1)
O(281)	72(1)	24(1)	27(1)	-3(1)	4(1)	6(1)
O(282)	60(1)	24(1)	33(1)	4(1)	4(1)	2(1)
O(291)	76(1)	18(1)	34(1)	-1(1)	-1(1)	13(1)
O(292)	58(1)	30(1)	34(1)	6(1)	-2(1)	17(1)
O(301)	67(1)	40(1)	30(1)	-1(1)	-7(1)	-12(1)
O(302)	44(1)	36(1)	30(1)	4(1)	0(1)	3(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

Page 1

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	71	69	1	-7	6	0	98	103	2	-3	-7	1	93	92	1	4	-2	1	182	196	2	6	3	1	60	65	1
2	0	0	1159	1401	3	-6	6	0	219	212	2	-2	-7	1	6	7	6	5	-2	1	105	115	1	7	3	1	185	176	2
3	0	0	280	283	1	-5	6	0	132	134	2	-1	-7	1	217	223	7	6	-2	1	18	19	2	8	3	1	135	132	2
4	0	0	537	545	1	-4	6	0	223	218	2	0	-7	1	105	115	3	7	-2	1	68	82	2	-8	4	1	42	44	2
5	0	0	197	213	10	-3	6	0	0	3	1	1	-7	1	84	91	1	8	-2	1	56	61	2	-7	4	1	26	29	3
6	0	0	151	153	1	-2	6	0	238	223	2	2	-7	1	143	131	2	-8	-1	1	78	69	2	-6	4	1	31	33	3
7	0	0	71	82	1	-1	6	0	88	92	1	3	-7	1	26	27	2	-7	-1	1	9	8	2	-5	4	1	0	4	1
8	0	0	24	23	2	0	6	0	253	246	1	4	-7	1	39	39	2	-6	-1	1	0	2	1	-4	4	1	101	91	1
-8	1	0	24	28	2	1	6	0	31	30	2	5	-7	1	27	26	3	-5	-1	1	109	157	108	-3	4	1	159	150	5
-7	1	0	107	117	1	2	6	0	161	156	1	6	-7	1	31	39	3	-4	-1	1	149	149	8	-2	4	1	110	99	1
-6	1	0	99	106	5	3	6	0	109	106	3	7	-7	1	13	15	5	-3	-1	1	254	257	3	-1	4	1	201	205	4
-5	1	0	21	21	1	4	6	0	272	247	2	-7	-6	1	29	29	2	-2	-1	1	126	140	3	2	4	1	374	342	13
-4	1	0	299	306	3	5	6	0	60	59	2	-6	-6	1	7	9	7	-1	-1	1	20	16	1	3	4	1	55	60	1
-3	1	0	108	115	2	6	6	0	171	153	2	-5	-6	1	27	29	2	0	-1	1	146	248	120	4	4	1	154	151	4
-2	1	0	283	276	1	-7	7	0	181	181	2	-4	-6	1	94	85	1	1	-1	1	65	56	4	5	4	1	65	64	1
-1	1	0	162	164	1	-7	7	0	41	37	3	-3	-6	1	66	67	4	2	-1	1	208	234	4	6	4	1	8	7	7
1	1	0	206	208	1	-5	7	0	11	11	7	-2	-6	1	230	214	6	3	-1	1	384	379	1	7	4	1	58	55	2
2	1	0	997	1027	2	-4	7	0	54	50	2	-1	-6	1	72	78	2	4	-1	1	191	99	1	-8	5	1	70	72	2
3	1	0	94	106	1	-3	7	0	99	93	2	0	-6	1	101	112	3	5	-1	1	262	271	3	-7	5	1	44	40	2
4	1	0	307	300	2	-2	7	0	29	31	2	1	-6	1	51	58	1	6	-1	1	39	42	1	-6	5	1	55	51	2
5	1	0	35	41	1	-1	7	0	89	93	1	2	-6	1	40	43	2	7	-1	1	121	135	2	-5	5	1	133	114	2
6	1	0	195	190	2	0	7	0	86	96	1	3	-6	1	146	151	2	8	-1	1	91	102	2	-4	5	1	123	122	2
7	1	0	79	84	1	1	7	0	9	11	5	4	-6	1	0	4	1	-8	0	1	22	19	1	-3	5	1	34	33	1
8	1	0	61	62	1	2	7	0	9	6	2	5	-6	1	22	9	3	-7	0	1	35	39	2	-2	5	1	98	92	1
-8	2	0	0	3	1	3	7	0	51	49	1	6	-6	1	126	125	2	-6	0	1	55	55	1	-1	5	1	275	271	6
-7	2	0	24	29	2	4	7	0	77	65	2	7	-6	1	69	74	2	-5	0	1	71	76	1	1	5	1	11	12	2
-6	2	0	71	78	1	5	7	0	41	40	2	-7	-5	1	25	26	2	-4	0	1	346	348	6	2	5	1	12	8	2
-5	2	0	20	21	1	6	7	0	46	41	2	-6	-5	1	0	7	1	-3	0	1	109	113	1	3	5	1	95	92	2
-4	2	0	57	61	1	-6	8	0	85	86	3	-5	-5	1	61	59	2	-2	0	1	49	57	4	4	5	1	99	92	1
-3	2	0	422	410	2	-5	8	0	18	16	4	-4	-5	1	95	86	2	-1	0	1	20	16	15	5	5	1	71	71	2
-2	2	0	965	904	2	-4	8	0	68	68	2	-3	-5	1	69	66	1	0	0	1	71	88	7	6	5	1	83	83	2
-1	2	0	30	34	2	-3	8	0	8	10	7	-2	-5	1	20	15	1	1	0	1	191	195	1	7	5	1	15	6	4
1	2	0	139	146	1	-2	8	0	29	25	2	-1	-5	1	8	9	2	2	0	1	959	955	3	-7	6	1	81	82	3
2	2	0	224	224	3	-1	8	0	13	3	2	0	-5	1	151	145	1	3	0	1	165	170	4	-6	6	1	172	151	2
3	2	0	196	192	3	0	8	0	19	22	5	1	-5	1	85	84	1	4	0	1	314	299	3	-5	6	1	10	9	10
4	2	0	307	286	6	1	8	0	10	12	3	2	-5	1	194	157	16	5	0	1	45	44	1	-4	6	1	284	249	2
5	2	0	100	100	1	2	8	0	16	26	15	3	-5	1	49	44	2	6	0	1	236	237	3	-3	6	1	30	28	2
6	2	0	62	67	2	3	8	0	15	17	3	4	-5	1	26	23	2	7	0	1	48	47	1	-2	6	1	145	134	1
7	2	0	16	20	16	4	8	0	39	38	2	5	-5	1	245	252	2	8	0	1	50	55	2	-1	6	1	12	11	2
8	2	0	5	6	5	5	8	0	27	21	3	6	-5	1	0	1	1	-8	1	1	121	143	1	1	6	1	45	53	1
-8	3	0	61	70	2	-5	9	0	71	64	3	7	-5	1	15	19	4	-7	1	1	20	20	1	2	6	1	105	113	1
-7	3	0	58	63	2	-4	9	0	81	83	2	8	-5	1	9	6	9	-6	1	1	81	84	4	3	6	1	37	36	1
-6	3	0	63	68	2	-3	9	0	93	87	2	-7	-4	1	55	54	2	-5	1	1	71	75	1	4	6	1	170	153	2
-5	3	0	123	143	1	-2	9	0	8	4	7	-6	-4	1	7	10	7	-4	1	1	240	247	3	5	6	1	44	42	2
-4	3	0	278	275	5	-1	9	0	27	28	2	-5	-4	1	37	40	2	-3	1	1	508	469	28	6	6	1	119	105	2
-3	3	0	12	7	1	0	-9	0	115	129	2	-4	-4	1	145	134	4	-2	1	1	853	841	1	-7	7	1	38	29	3
-2	3	0	716	672	19	1	9	0	54	82	34	-3	-4	1	172	164	3	-1	1	1	115	127	5	-6	7	1	158	153	3
-1	3	0	52	58	1	2	9	0	76	100	52	-2	-4	1	366	322	10	0	1	1	742	724	2	-5	7	1	113	107	2
1	3	0	172	177	4	3	9	0	3	6	3	-1	-4	1	55	67	2	1	1	1	190	207	2	-4	7	1	235	205	2
2	3	0	175	159	3	4	9	0	45	34	2	0	-4	1	365	346	2	2	1	1	317	329	5	-3	7	1	21	19	3
3	3	0	136	132	1	-4	10	0	68	69	2	1	-4	1	203	195	1	3	1	1	237	213	8	-2	7	1	201	207	2
4	3	0	97	104	1	-3	10	0	25	25	3	2	-4	1	475	442	2	4	1	1	71	67	2	-1	7	1	23	23	1
5	3	0	8	5	4	-1	10	0	25	26	2	3	-4	1	168	164	1	5	1	1	92	90	3	1	7	1	33	37	1
6	3	0	94	82	3	0	10	0	16	18	3	4	-4	1	203	198	1	6	1	1	170	174	2	2	7	1	19	13	1
7	3	0	12	7	3	1	10	0	10	8	3	5	-4	1	172	166	2	7	1	1	92	91	2	3	7	1	16	16	3
8	3	0	25	28	2	-2	10	1	91	127	74	6	-4	1	144	156	2	8	1	1	43	46	1	4	7	1	90	89	2
-8	4	0	24	27	2	-1	10	1	29	29	2	7	-4	1	13	13	3	-8	2	1	16	19	2	5	7	1	79	66	2
-7	4	0	0	3	1	0	-10	1	56	58	2	8	-4	1	28	29	2	-7	2	1	19	22	2	6	7	1	54	49	2
-6	4	0	57	61	2	-1	10	1	107	114	2	-8	-3	1	21	21	3	-6	2	1	86	88	1	-6	8	1	92	92	3
-5	4	0	38	36	2	-2	10	1	47	54	2	-7	-3	1	58	64	2	-5	2	1	55	56	1	-5	8	1	54	48	3
-4	4	0	134	138	1	3	-10	1	31	23	3	-6	-3	1	19	23	2	-4	2	1	139	138	1	-4	8	1	276	243	2
-3	4	0	189																										

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4-10	2	20	14	3		-5	-3	2	113	112	1	-3	2	2	58	64	2	5	7	2	75	69	2	-1	-5	3	6	5	2
-4	-9	2	76	61	2	-4	-3	2	387	365	8	-2	2	2	92	97	4	6	7	2	63	56	3	0	-5	3	21	17	1
-3	-9	2	11	4	2	-3	-3	2	92	92	1	-1	2	2	146	161	1	-6	8	2	60	60	3	1	-5	3	92	90	2
-2	-9	2	85	86	4	-2	-3	2	117	122	1	0	2	2	490	498	1	-5	8	2	60	52	3	2	-5	3	106	108	5
-1	-9	2	18	22	1	-1	-3	2	104	101	1	1	2	2	150	161	4	-4	8	2	224	202	2	3	-5	3	303	303	1
0	-9	2	31	37	2	0	-3	2	505	501	4	2	2	2	386	373	2	-3	8	2	123	115	2	4	-5	3	158	164	1
1	-9	2	121	132	2	1	-3	2	350	341	1	3	2	2	240	218	3	-2	8	2	293	287	2	5	-5	3	132	139	2
2	-9	2	81	95	2	2	-3	2	164	145	1	4	2	2	201	195	1	-1	8	2	77	84	2	6	-5	3	76	87	2
3	-9	2	257	253	2	3	-3	2	10	16	4	5	2	2	95	87	3	0	8	2	326	328	2	7	-5	3	60	71	2
4	-9	2	64	56	2	4	-3	2	50	54	1	6	2	2	178	173	5	1	8	2	11	8	2	-7	-4	3	59	61	2
5	-9	2	13	10	3	5	-3	2	57	63	1	7	2	2	49	45	1	5	8	2	40	41	3	-6	-4	3	22	23	2
-5	-8	2	31	32	2	6	-3	2	11	15	5	8	2	2	101	99	1	-5	9	2	51	47	3	-5	-4	3	152	159	1
-4	-8	2	4	8	4	7	-3	2	14	14	3	-8	3	2	40	51	2	-4	9	2	176	144	3	-4	-4	3	74	79	1
-3	-8	2	109	111	4	8	-3	2	75	86	2	-7	3	2	42	45	2	-3	9	2	37	38	2	-3	-4	3	154	154	1
-2	-8	2	8	9	4	-8	-2	2	5	4	5	-6	3	2	39	43	2	-2	9	2	87	87	2	-2	-4	3	300	279	3
-1	-8	2	191	193	1	-7	-2	2	21	17	2	-5	3	2	23	22	1	-1	9	2	19	20	2	-1	-4	3	277	259	3
0	-8	2	36	33	2	-6	-2	2	0	5	1	-4	3	2	394	341	4	0	9	2	80	95	1	0	-4	3	493	458	3
1	-8	2	86	89	1	-5	-2	2	77	75	4	-3	3	2	79	79	1	1	9	2	8	3	3	1	-4	3	150	142	1
2	-8	2	89	87	2	-4	-2	2	85	89	2	-2	3	2	81	90	4	2	9	2	143	133	2	2	-4	3	279	255	2
3	-8	2	63	61	2	-3	-2	2	32	29	2	-1	3	2	204	203	1	-3	10	2	42	42	3	3	-4	3	349	344	1
4	-8	2	35	40	2	-2	-2	2	299	288	4	0	3	2	25	32	1	-2	10	2	67	71	2	4	-4	3	191	198	1
5	-8	2	22	23	2	-1	-2	2	108	109	1	1	3	2	71	77	1	-1	10	2	100	102	2	5	-4	3	103	112	2
6	-8	2	54	60	2	0	-2	2	211	264	33	2	3	2	26	26	1	0	10	2	13	12	3	6	-4	3	89	99	2
-6	-7	2	80	81	2	1	-2	2	133	130	1	3	3	2	116	116	1	1	10	2	16	10	4	7	-4	3	74	78	2
-5	-7	2	77	75	2	2	-2	2	275	260	11	4	3	2	44	38	1	2	10	2	32	28	3	8	-4	3	45	49	2
-4	-7	2	84	84	1	3	-2	2	65	61	3	5	3	2	13	13	2	-2	-10	3	86	97	2	-8	-3	3	41	44	2
-3	-7	2	41	45	1	4	-2	2	95	129	71	6	3	2	145	133	6	-1	-10	3	46	55	2	-7	-3	3	17	14	2
-2	-7	2	75	75	3	5	-2	2	43	51	1	7	3	2	150	136	1	0	-10	3	120	136	2	-6	-3	3	67	67	2
-1	-7	2	16	13	1	6	-2	2	131	141	2	8	3	2	50	53	2	1	-10	3	40	42	2	-5	-3	3	26	26	2
0	-7	2	209	208	3	7	-2	2	96	109	2	-8	4	2	59	60	3	2	-10	3	112	117	2	-4	-3	3	146	144	1
1	-7	2	90	96	1	8	-2	2	47	52	2	-7	4	2	60	61	2	3	-10	3	150	161	2	-3	-3	3	13	11	1
2	-7	2	229	195	2	-8	-1	2	87	84	2	-6	4	2	36	40	2	-4	-9	3	201	179	2	-2	-3	3	14	18	1
3	-7	2	85	90	2	-7	-1	2	38	43	3	-5	4	2	52	52	2	-3	-9	3	39	42	1	-1	-3	3	14	12	1
4	-7	2	145	151	2	-6	-1	2	76	75	7	-4	4	2	81	76	1	-2	-9	3	154	168	14	0	-3	3	191	209	6
5	-7	2	180	192	2	-5	-1	2	217	225	7	-3	4	2	162	151	1	-1	-9	3	20	21	2	1	-3	3	171	164	1
6	-7	2	91	102	2	-4	-1	2	62	63	1	-2	4	2	161	154	5	0	-9	3	23	11	2	2	-3	3	196	201	1
7	-7	2	13	14	5	-3	-1	2	304	307	2	-1	4	2	391	361	1	1	-9	3	153	159	2	3	-3	3	229	204	6
-7	-6	2	6	4	6	-2	-1	2	254	268	2	0	4	2	363	352	1	2	-9	3	72	95	2	4	-3	3	99	105	3
-6	-6	2	83	79	2	-1	-1	2	109	122	1	1	4	2	133	139	1	3	-9	3	157	170	1	5	-3	3	61	62	2
-5	-6	2	24	21	2	0	-2	2	732	763	14	2	4	2	230	213	2	4	-9	3	13	0	3	6	-3	3	16	19	3
-4	-6	2	78	68	1	1	-1	2	406	401	4	3	4	2	161	154	1	5	-9	3	13	12	4	7	-3	3	89	98	2
-3	-6	2	21	23	1	2	-1	2	238	222	3	4	4	2	23	24	13	5	-8	3	5	7	5	8	-3	3	35	37	2
-2	-6	2	192	182	4	3	-1	2	155	149	1	5	4	2	1	1	1	-4	-8	3	89	83	1	-8	-2	3	53	56	2
-1	-6	2	10	9	2	4	-1	2	76	77	1	6	4	2	113	103	2	-3	-8	3	69	68	1	-7	-2	3	43	47	2
0	-6	2	55	53	1	5	-1	2	23	21	1	7	4	2	201	189	2	-2	-8	3	54	60	4	-6	-2	3	164	174	2
1	-6	2	128	134	1	6	-1	2	49	53	1	-8	5	2	6	3	6	-1	-8	3	60	73	8	-5	-2	3	168	176	1
2	-6	2	26	27	2	7	-1	2	80	82	2	-7	5	2	39	39	3	0	-8	3	46	53	2	-4	-2	3	213	211	8
3	-6	2	148	150	2	8	-1	2	45	53	2	-6	5	2	46	38	3	1	-8	3	353	371	2	-3	-2	3	236	242	5
4	-6	2	20	22	2	-8	0	2	10	10	2	-5	5	2	101	89	2	2	-8	3	85	83	3	-2	-2	3	6	10	1
5	-6	2	111	107	2	-7	0	2	34	32	2	-4	5	2	30	31	2	3	-8	3	3	1	3	-1	-2	3	52	59	1
6	-6	2	33	34	2	-6	0	2	74	81	4	-3	5	2	168	168	2	4	-8	3	33	31	2	0	-2	3	431	490	24
7	-6	2	57	61	2	-5	0	2	63	69	1	-2	5	2	214	207	1	5	-8	3	84	90	2	1	-2	3	187	181	3
-7	-5	2	26	26	2	-4	0	2	46	48	1	-1	5	2	196	156	1	6	-8	3	0	4	1	2	-2	3	133	126	3
-6	-5	2	17	22	2	-3	0	2	190	200	1	0	5	2	111	104	1	-6	-7	3	96	96	2	3	-2	3	272	251	9
-5	-5	2	20	16	1	-2	0	2	1174	1292	3	1	5	2	14	14	2	-5	-7	3	20	21	2	4	-2	3	97	91	5
-4	-5	2	99	91	2	-1	0	2	9	8	1	2	5	2	178	177	1	-4	-7	3	51	49	1	5	-2	3	306	308	2
-3	-5	2	221	216	2	0	0	2	179	187	5	3	5	2	13	12	2	-3	-7	3	75	69	1	6	-2	3	0	6	1
-2	-5	2	485	442	5	1	0	2	161	153	3	4	5	2	143	136	1	-2	-7	3	23	25	1	7	-2	3	8	4	8
-1	-5	2	19	6	13	2	0	2	337	304	1	5	5	2	115	105	4	-1	-7	3	22	20	2	8	-2	3	63	72	2
0	-5	2	337	311	6	3	0	2	78	73	1	6	5	2	221	205	2	0	-7	3	79	80	2	-8	-1	3	8	0	7
1	-5	2	86	87	2	4	0	2	160	158	1	7	5	2	53	52	2	1	-7	3	275	283	1	-7	-1	3	43	44	2
2	-5	2																											

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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
3	0	3	396	376	3	-6	6	3	133	117	3	5	-7	4	48	51	2	-2	-1	4	194	124	1	1	4	4	204	199	1
4	0	3	374	330	2	-5	6	3	53	45	3	6	-7	4	45	47	2	-1	-1	4	41	41	3	2	4	4	320	290	2
5	0	3	105	96	2	-4	6	3	8	6	8	6	-6	4	12	15	3	0	-1	4	181	180	4	3	4	4	89	84	1
6	0	3	22	30	13	-3	6	3	6	10	6	-5	-6	4	30	34	3	1	-1	4	172	172	1	4	4	4	346	329	2
7	0	3	24	22	2	-2	6	3	208	186	1	-4	-6	4	65	59	1	2	-1	4	267	270	9	5	4	4	238	211	1
8	0	3	23	20	2	-1	6	3	124	132	1	-3	-6	4	36	37	1	3	-1	4	35	34	1	6	4	4	168	140	6
-8	1	3	3	7	3	0	6	3	12	15	2	-2	-6	4	235	238	5	4	-1	4	58	63	1	7	4	4	71	61	2
-7	1	3	34	39	3	1	6	3	71	74	2	-1	-6	4	87	91	2	5	-1	4	172	172	2	-7	5	4	21	17	4
-6	1	3	95	102	6	2	6	3	89	96	2	0	-6	4	172	177	11	6	-1	4	83	84	2	-6	5	4	166	135	3
-5	1	3	123	120	9	3	6	3	13	11	4	1	-6	4	127	133	2	7	-1	4	0	2	1	-5	5	4	58	61	2
-4	1	3	321	301	4	4	6	3	117	111	2	2	-6	4	118	126	1	8	-1	4	24	24	2	-4	5	4	38	31	1
-3	1	3	85	90	3	5	6	3	30	34	2	3	-6	4	105	104	1	-8	0	4	73	70	2	-3	5	4	170	162	6
-2	1	3	226	230	1	6	6	3	3	6	3	4	-6	4	188	201	2	-7	0	4	6	15	6	-2	5	4	166	151	1
-1	1	3	80	93	1	-6	7	3	95	81	3	5	-6	4	99	105	2	-6	0	4	43	60	30	-1	5	4	8	6	3
0	1	3	207	220	1	-5	7	3	74	61	3	6	-6	4	41	48	2	-5	0	4	62	70	11	0	5	4	136	123	2
1	1	3	137	141	2	-4	7	3	201	183	2	7	-6	4	8	8	7	-4	0	4	198	214	17	1	5	4	0	0	1
2	1	3	291	279	3	-3	7	3	18	16	4	-7	-5	4	50	55	2	-3	0	4	110	122	2	2	5	4	102	104	2
3	1	3	150	136	1	-2	7	3	321	294	8	-6	-5	4	20	17	2	-2	0	4	326	321	1	3	5	4	179	166	2
4	1	3	73	66	1	-1	7	3	54	49	2	-5	-5	4	174	174	10	-1	0	4	381	406	1	4	5	4	126	127	1
5	1	3	93	85	2	0	7	3	111	118	1	-4	-5	4	56	57	2	0	0	4	575	543	10	5	5	4	267	237	4
6	1	3	46	46	2	1	7	3	154	151	2	-3	-5	4	112	112	1	1	0	4	162	156	4	6	5	4	67	53	1
7	1	3	45	58	26	2	7	3	54	46	2	-2	-5	4	186	179	1	2	0	4	103	102	1	-7	6	4	0	4	1
8	1	3	53	52	2	3	7	3	42	38	2	-1	-5	4	52	56	1	3	0	4	325	289	3	-6	6	4	52	42	3
-8	2	3	26	33	2	4	7	3	83	72	2	0	-5	4	208	202	4	4	0	4	16	15	1	-5	6	4	35	36	3
-7	2	3	26	26	2	5	7	3	38	39	3	1	-5	4	53	56	1	5	0	4	0	4	1	-4	6	4	133	124	2
-6	2	3	166	156	6	-6	8	3	15	10	7	2	-5	4	25	22	1	6	0	4	18	18	1	-3	6	4	102	101	1
-5	2	3	200	198	4	-5	8	3	103	84	3	3	-5	4	10	16	2	7	0	4	68	64	2	-2	6	4	113	106	1
-4	2	3	939	850	20	-4	8	3	6	8	6	4	-5	4	13	13	3	8	0	4	18	21	2	-1	6	4	49	50	1
-3	2	3	281	266	3	-3	8	3	136	128	2	5	-5	4	40	44	2	-8	1	4	53	64	2	0	6	4	137	125	2
-2	2	3	462	457	1	-2	8	3	229	221	2	6	-5	4	27	28	2	-7	1	4	70	69	8	1	6	4	141	139	2
-1	2	3	360	345	1	-1	8	3	202	186	5	7	-5	4	47	51	2	-6	1	4	51	51	2	2	6	4	175	164	2
0	2	3	402	376	1	0	8	3	372	382	2	-7	-4	4	21	16	2	-5	1	4	176	165	3	3	6	4	148	139	2
1	2	3	133	146	3	1	8	3	184	177	2	-6	-4	4	16	14	2	-4	1	4	269	258	9	4	6	4	296	282	2
2	2	3	366	340	4	2	8	3	363	315	2	-5	-4	4	72	81	1	-3	1	4	215	216	8	5	6	4	38	37	2
3	2	3	48	48	1	3	8	3	117	111	2	-4	-4	4	84	87	1	-2	1	4	447	484	1	6	6	4	60	46	2
4	2	3	175	164	3	-5	9	3	0	4	1	-3	-4	4	84	88	3	-1	1	4	355	375	1	-6	7	4	98	80	3
5	2	3	6	4	6	-4	9	3	22	20	4	-2	-4	4	66	62	1	0	1	4	197	191	1	-5	7	4	114	104	3
6	2	3	178	153	2	-3	9	3	90	86	2	-1	-4	4	154	161	1	1	1	4	213	218	2	-4	7	4	98	94	2
7	2	3	125	116	2	-2	9	3	12	9	4	0	-4	4	13	9	1	2	1	4	71	71	3	-3	7	4	143	145	2
8	2	3	83	97	43	-1	9	3	98	104	2	1	-4	4	447	416	1	3	1	4	576	518	1	-2	7	4	53	47	5
-8	3	3	0	3	1	0	9	3	14	17	3	2	-4	4	160	147	3	4	1	4	106	110	3	-1	7	4	156	157	2
-7	3	3	50	50	2	1	9	3	24	24	2	3	-4	4	73	71	1	5	1	4	86	90	1	0	7	4	89	88	2
-6	3	3	27	27	4	2	9	3	191	174	2	4	-4	4	70	79	2	6	1	4	110	102	2	1	7	4	88	87	2
-5	3	3	78	72	3	3	9	3	41	38	3	5	-4	4	45	48	2	7	1	4	124	117	2	2	7	4	38	38	2
-4	3	3	398	367	3	-3	10	3	11	0	10	6	-4	4	72	77	2	8	1	4	79	75	2	3	7	4	98	88	2
-3	3	3	158	138	12	-2	10	3	129	122	2	7	-4	4	51	58	2	-8	2	4	54	66	2	4	7	4	37	32	3
-2	3	3	325	334	1	-1	10	3	83	86	2	8	-4	4	61	70	2	-7	2	4	42	41	2	5	7	4	64	63	2
-1	3	3	328	316	1	1	10	3	10	6	9	-8	-3	4	16	15	3	-6	2	4	107	104	3	-5	8	4	119	109	3
0	3	3	335	314	1	-2	10	4	44	44	2	-7	-3	4	62	65	2	-5	2	4	89	84	1	-4	8	4	134	124	3
1	3	3	64	70	1	-1	10	4	30	26	2	-6	-3	4	91	98	2	-4	2	4	262	248	1	-3	8	4	10	8	9
2	3	3	59	61	1	0	10	4	86	90	2	-5	-3	4	0	6	1	-3	2	4	44	45	4	-2	8	4	78	77	2
3	3	3	27	25	1	1	10	4	167	184	2	-4	-3	4	124	148	1	-2	2	4	140	151	1	-1	8	4	69	60	2
4	3	3	25	24	1	2	10	4	80	84	2	-3	-3	4	81	79	3	-1	2	4	118	130	1	0	8	4	261	217	2
5	3	3	41	36	1	3	10	4	31	36	2	-2	-3	4	347	354	4	0	2	4	55	52	1	1	8	4	32	31	2
6	3	3	159	145	2	-4	-9	4	66	61	1	-1	-3	4	139	138	5	1	2	4	95	85	1	2	8	4	13	20	6
7	3	3	46	38	2	-3	-9	4	81	73	3	0	-3	4	24	32	6	2	2	4	174	172	1	3	8	4	43	44	2
-8	4	3	52	51	2	-2	-9	4	98	97	5	1	-3	4	449	426	4	3	2	4	15	16	1	4	8	4	56	52	2
-7	4	3	3	8	3	-1	-9	4	130	138	2	2	-3	4	240	239	2	4	2	4	0	3	1	-4	9	4	162	151	3
-6	4	3	176	170	2	0	-9	4	148	163	2	3	-3	4	184	168	4	5	2	4	31	27	2	-3	9	4	22	21	3
-5	4	3	102	94	2	1	-9	4	124	124	2	4	-3	4	124	123	1	6	2	4	16	19	2	-2	9	4	101	103	2
-4	4	3	188	168	7	2	-9	4	113	128	2	5	-3	4	171	177	2	7											

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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
3	-8	5	68	76	1	4	-2	5	218	199	6	-7	4	5	40	37	3	5	-8	6	50	54	3	-6	-1	6	22	23	2
4	-8	5	128	141	4	5	-2	5	183	180	2	-6	4	5	121	109	3	-5	-7	6	71	71	2	-5	-1	6	50	56	1
5	-8	5	97	109	2	6	-2	5	90	96	2	-5	4	5	136	109	3	-4	-7	6	96	92	4	-4	-1	6	129	134	1
-5	-7	5	30	31	2	7	-2	5	43	35	2	-4	4	5	70	63	5	-3	-7	6	232	217	1	-3	-1	6	30	32	1
-4	-7	5	136	130	1	8	-2	5	33	30	2	-3	4	5	323	304	2	-2	-7	6	51	51	1	-2	-1	6	228	218	1
-3	-7	5	56	54	1	-8	-1	5	35	37	2	-2	4	5	10	1	3	-1	-7	6	143	137	4	-1	-1	6	69	72	3
-2	-7	5	31	29	1	-7	-1	5	71	70	2	-1	4	5	188	190	1	0	-7	6	24	22	1	0	-1	6	228	221	1
-1	-7	5	448	424	4	-6	-1	5	116	118	2	0	4	5	347	335	1	1	-7	6	69	72	2	1	-1	6	252	244	7
0	-7	5	125	115	4	-5	-1	5	132	139	2	1	4	5	42	43	1	2	-7	6	13	12	3	2	-1	6	240	216	1
1	-7	5	63	72	2	-4	-1	5	307	285	13	2	4	5	306	299	2	3	-7	6	28	28	1	3	-1	6	110	110	14
2	-7	5	103	102	1	-3	-1	5	86	91	5	3	4	5	166	159	1	4	-7	6	203	203	1	4	-1	6	41	36	1
3	-7	5	24	22	2	-2	-1	5	612	609	2	4	4	5	13	14	2	5	-7	6	106	111	1	5	-1	6	54	47	3
4	-7	5	158	165	5	-1	-1	5	418	426	1	5	4	5	14	16	2	6	-7	6	100	108	1	6	-1	6	60	57	2
5	-7	5	44	44	1	0	-1	5	508	463	2	6	4	5	105	96	2	-6	-6	6	61	67	2	7	-1	6	12	15	4
6	-7	5	34	37	1	1	-1	5	72	66	4	7	4	5	9	5	4	-5	-6	6	47	43	2	-8	0	6	73	75	2
-6	-6	5	84	84	2	2	-1	5	269	256	9	-7	5	5	12	12	11	-4	-6	6	250	229	3	-7	0	6	26	29	2
-5	-6	5	58	55	3	3	-1	5	137	136	3	-6	5	5	15	10	8	-3	-6	6	222	216	3	-6	0	6	57	55	1
-4	-6	5	22	21	1	4	-1	5	206	176	3	-5	5	5	8	8	7	-2	-6	6	64	67	1	-5	0	6	111	112	1
-3	-6	5	74	72	1	5	-1	5	44	41	1	-4	5	5	29	23	1	-1	-6	6	79	81	2	-4	0	6	14	14	3
-2	-6	5	27	26	1	6	-1	5	29	26	2	-3	5	5	66	64	1	0	-6	6	27	27	1	-3	0	6	14	16	2
-1	-6	5	203	197	3	7	-1	5	21	18	2	-2	5	5	35	42	1	1	-6	6	137	148	1	-2	0	6	79	48	1
0	-6	5	33	31	1	8	-1	5	24	22	2	-1	5	5	32	34	1	2	-6	6	150	151	2	-1	0	6	124	137	1
1	-6	5	100	95	1	-8	0	5	78	74	2	0	5	5	56	62	2	3	-6	6	276	270	3	0	0	6	151	154	8
2	-6	5	55	56	1	-7	0	5	0	4	1	1	5	5	7	0	6	4	-6	6	100	104	2	1	0	6	47	51	1
3	-6	5	108	119	5	-6	0	5	25	23	1	2	5	5	187	177	2	5	-6	6	65	69	2	2	0	6	101	95	2
4	-6	5	106	110	1	-5	0	5	47	46	1	3	5	5	233	225	2	6	-6	6	15	16	2	3	0	6	18	17	1
5	-6	5	74	77	1	-4	0	5	0	1	1	4	5	5	49	48	1	-6	-5	6	50	57	2	4	0	6	62	64	2
6	-6	5	112	119	2	-3	0	5	92	105	1	5	5	5	20	17	2	-5	-5	6	44	46	2	5	0	6	100	93	1
7	-6	5	30	28	2	-2	0	5	320	338	1	6	5	5	17	12	2	-4	-5	6	45	47	2	6	0	6	75	66	2
-7	-5	5	8	5	8	-1	0	5	144	154	1	-6	6	5	31	25	4	-3	-5	6	163	160	2	7	0	6	54	46	2
-6	-5	5	9	14	4	0	0	5	438	394	5	-5	6	5	81	73	3	-2	-5	6	20	16	2	-8	1	6	44	39	2
-5	-5	5	101	107	1	1	0	5	27	23	1	-4	6	5	106	87	3	-1	-5	6	51	51	1	-7	1	6	7	0	4
-4	-5	5	71	77	3	2	0	5	128	129	5	-3	6	5	84	88	2	0	-5	6	6	2	3	-6	1	6	17	20	2
-3	-5	5	111	108	2	3	0	5	79	79	2	-2	6	5	67	68	2	1	-5	6	180	169	9	-5	1	6	183	175	6
-2	-5	5	15	16	1	4	0	5	53	52	2	-1	6	5	54	62	2	2	-5	6	79	81	1	-4	1	6	55	56	3
-1	-5	5	32	31	1	5	0	5	47	35	9	0	6	5	131	127	1	3	-5	6	44	46	3	-3	1	6	197	221	1
0	-5	5	60	60	1	6	0	5	10	8	2	1	6	5	91	100	2	4	-5	6	32	32	1	-2	1	6	117	126	1
1	-5	5	19	13	1	7	0	5	53	56	2	2	6	5	218	217	2	5	-5	6	53	52	3	-1	1	6	123	128	1
2	-5	5	210	207	1	8	0	5	16	15	3	3	6	5	189	186	2	6	-5	6	4	2	4	0	1	6	52	59	1
3	-5	5	99	104	1	-8	1	5	37	32	2	4	6	5	69	76	2	7	-5	6	76	82	2	1	1	6	346	329	6
4	-5	5	34	43	1	-7	1	5	41	38	3	5	6	5	12	6	5	-7	-4	6	79	82	2	2	1	6	102	102	1
5	-5	5	8	9	3	-6	1	5	27	29	1	-6	7	5	120	104	3	-6	-4	6	11	6	3	3	1	6	126	121	1
6	-5	5	24	29	2	-5	1	5	61	60	1	-5	7	5	82	71	3	-5	-4	6	54	59	1	4	1	6	70	73	2
7	-5	5	165	181	2	-4	1	5	99	97	6	-4	7	5	201	181	3	-4	-4	6	81	85	3	5	1	6	68	69	2
-7	-4	5	5	4	5	-3	1	5	46	57	1	-3	7	5	58	58	2	-3	-4	6	9	5	3	6	1	6	16	15	2
-6	-4	5	27	30	2	-2	1	5	154	173	1	-2	7	5	32	32	2	-2	-4	6	163	177	2	7	1	6	109	105	1
-5	-4	5	27	25	2	-1	1	5	221	247	1	-1	7	5	8	2	7	-1	-4	6	143	134	3	-8	2	6	24	24	3
-4	-4	5	124	127	6	0	1	5	310	286	1	0	7	5	66	56	2	0	-4	6	38	38	1	-7	2	6	42	35	1
-3	-4	5	59	59	2	1	1	5	258	245	10	1	7	5	60	62	2	1	-4	6	26	30	1	-6	2	6	37	32	1
-2	-4	5	187	187	6	2	1	5	507	463	13	2	7	5	124	121	2	2	-4	6	101	87	6	-5	2	6	76	76	1
-1	-4	5	147	155	3	3	1	5	87	84	1	3	7	5	101	98	2	3	-4	6	45	48	1	-4	2	6	121	111	2
0	-4	5	237	265	52	4	1	5	98	102	4	4	7	5	29	23	3	4	-4	6	115	118	1	-3	2	6	60	67	1
1	-4	5	168	145	1	5	1	5	26	29	1	5	7	5	9	11	9	5	-4	6	44	47	2	-2	2	6	28	30	1
2	-4	5	178	161	5	6	1	5	5	2	5	-5	8	5	51	42	3	6	-4	6	165	173	2	-1	2	6	85	91	1
3	-4	5	128	131	1	7	1	5	36	35	2	-4	8	5	110	97	3	7	-4	6	134	141	2	0	2	6	75	77	1
4	-4	5	95	94	1	-8	2	5	63	60	2	-3	8	5	33	35	3	-7	-3	6	37	34	2	1	2	6	297	292	4
5	-4	5	9	12	3	-7	2	5	65	61	1	-2	8	5	163	163	2	-6	-3	6	46	45	2	2	2	6	249	253	1
6	-4	5	79	85	2	-6	2	5	270	242	5	-1	8	5	28	25	2	-5	-3	6	29	34	2	3	2	6	35	33	1
7	-4	5	105	116	2	-5	2	5	83	78	2	0	8	5	227	213	2	-4	-3	6	99	107	1	4	2	6	220	203	1
-7	-3	5	25	28	2	-4	2	5	149	132	6	1	8	5	7	7	6	-3	-3	6	5	3	5	5	2	6	54	55	1
-6	-3	5	55	60	2	-3	2	5	72	81	1	2	8	5	120	111	2	-2	-3	6	155	154	1	6	2	6	155	1	

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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
3	4	6	43	45	1	6	-6	7	29	28	2	7	0	7	124	129	2	1	7	7	141	139	2	-1	-2	8	8	7	3
4	4	6	25	30	1	-6	-5	7	84	84	2	-7	1	7	22	21	3	2	7	7	7	6	7	0	-2	8	83	78	1
5	4	6	67	63	1	-5	-5	7	128	136	2	-6	1	7	58	54	1	3	7	7	51	49	1	1	-2	8	69	76	2
6	4	6	43	38	1	-4	-5	7	159	157	2	-5	1	7	51	54	4	-3	8	7	0	0	1	2	-2	8	74	82	3
-7	5	6	69	65	3	-3	-5	7	87	90	1	-4	1	7	137	126	8	-2	8	7	122	120	2	3	-2	8	336	312	7
-6	5	6	39	34	3	-2	-5	7	196	190	3	-3	1	7	62	73	1	-1	8	7	34	33	2	4	-2	8	131	120	4
-5	5	6	94	84	2	-1	-5	7	32	29	1	-2	1	7	73	79	1	0	8	7	96	92	2	5	-2	8	58	51	2
-4	5	6	31	31	1	0	-5	7	57	85	57	-1	1	7	186	196	1	1	8	7	14	7	3	6	-2	8	61	64	2
-3	5	6	66	76	2	1	-5	7	31	36	1	0	1	7	298	284	1	2	8	7	18	17	3	-7	-1	8	41	44	2
-2	5	6	193	189	2	2	-5	7	188	176	1	1	1	7	78	80	3	-1	-9	8	48	46	2	-6	-1	8	31	31	2
-1	5	6	30	25	2	3	-5	7	29	28	1	2	1	7	137	132	13	0	-9	8	46	42	2	-5	-1	8	61	61	2
0	5	6	180	177	2	4	-5	7	59	55	2	3	1	7	83	87	2	1	-9	8	11	11	4	-4	-1	8	62	69	1
1	5	6	45	48	2	5	-5	7	159	167	10	4	1	7	91	94	5	2	-9	8	58	62	2	-3	-1	8	86	84	2
2	5	6	176	184	2	6	-5	7	118	121	2	5	1	7	53	54	1	-3	-8	8	12	13	2	-2	-1	8	35	37	2
3	5	6	156	154	2	-6	-4	7	30	26	2	6	1	7	62	59	1	-2	-8	8	9	2	4	-1	-1	8	80	69	1
4	5	6	114	121	1	-5	-4	7	88	99	2	7	1	7	13	13	4	-1	-8	8	37	41	2	0	-1	8	14	13	1
5	5	6	95	88	2	-4	-4	7	103	104	3	-7	2	7	53	50	1	0	-8	8	12	12	4	1	-1	8	115	127	2
6	5	6	65	60	2	-3	-4	7	43	46	2	-6	2	7	36	33	1	1	-8	8	70	75	2	2	-1	8	200	193	8
-6	6	6	67	59	3	-2	-4	7	22	20	1	-5	2	7	13	11	2	2	-8	8	10	2	5	3	-1	8	106	103	2
-5	6	6	9	12	9	-1	-4	7	130	133	1	-4	2	7	11	7	3	3	-8	8	113	126	2	4	-1	8	53	49	2
-4	6	6	69	72	2	0	-4	7	128	122	5	-3	2	7	45	48	2	4	-8	8	110	112	2	5	-1	8	24	27	3
-3	6	6	22	19	2	1	-4	7	142	135	4	-2	2	7	105	113	1	-4	-7	8	61	61	1	6	-1	8	31	32	2
-2	6	6	39	48	2	2	-4	7	24	19	2	-1	2	7	39	37	1	-3	-7	8	16	19	2	7	-1	8	12	11	4
-1	6	6	58	54	2	3	-4	7	9	7	2	0	2	7	25	19	2	-2	-7	8	66	64	3	-7	0	8	26	24	3
0	6	6	93	103	2	4	-4	7	13	22	7	1	2	7	113	119	1	-1	-7	8	31	31	1	-6	0	8	164	154	2
1	6	6	176	185	2	5	-4	7	224	213	2	2	2	7	10	8	2	0	-7	8	111	117	2	-5	0	8	39	39	2
2	6	6	154	152	2	6	-4	7	124	120	2	3	2	7	139	153	10	1	-7	8	58	52	2	-4	0	8	150	136	9
3	6	6	62	64	2	7	-4	7	3	3	3	4	2	7	59	56	2	2	-7	8	94	93	2	-3	0	8	96	112	1
4	6	6	42	45	2	-7	-3	7	28	31	2	5	2	7	74	59	1	3	-7	8	50	53	2	-2	0	8	117	132	1
5	6	6	49	47	2	-6	-3	7	31	34	2	6	2	7	10	3	3	4	-7	8	43	43	1	-1	0	8	0	3	1
-5	7	6	113	102	3	-5	-3	7	9	11	4	-7	3	7	44	40	3	5	-7	8	61	58	1	0	0	8	236	229	1
-4	7	6	13	12	6	-4	-3	7	53	61	1	-6	3	7	105	87	1	-5	-6	8	81	84	5	1	0	8	13	12	2
-3	7	6	39	37	2	-3	-3	7	182	190	1	-5	3	7	147	135	1	-4	-6	8	87	89	2	2	0	8	78	81	1
-2	7	6	51	55	2	-2	-3	7	20	15	1	-4	3	7	44	41	1	-3	-6	8	82	79	1	3	0	8	66	68	3
-1	7	6	107	100	2	-1	-3	7	42	37	1	-3	3	7	276	287	2	-2	-6	8	236	224	1	4	0	8	214	219	7
0	7	6	83	87	2	0	-3	7	189	183	3	-2	3	7	254	290	1	-1	-6	8	229	216	8	5	0	8	99	96	8
1	7	6	136	150	2	1	-3	7	107	121	26	-1	3	7	320	328	2	0	-6	8	300	278	6	6	0	8	41	36	2
2	7	6	140	146	2	2	-3	7	175	158	3	0	3	7	33	30	2	1	-6	8	280	281	2	-7	1	8	20	9	2
3	7	6	77	77	2	3	-3	7	46	41	1	1	3	7	17	11	2	2	-6	8	390	365	2	-6	1	8	144	133	3
4	7	6	39	37	2	4	-3	7	124	118	8	2	3	7	73	74	1	3	-6	8	197	193	6	-5	1	8	66	62	5
-4	8	6	24	21	4	5	-3	7	71	66	2	3	3	7	19	22	1	4	-6	8	210	196	1	-4	1	8	172	172	5
-3	8	6	50	47	3	6	-3	7	161	157	2	4	3	7	55	56	1	5	-6	8	93	90	2	-3	1	8	66	68	2
-1	8	6	145	144	2	7	-3	7	61	64	2	5	3	7	67	67	2	-6	-5	8	88	91	2	-2	1	8	213	229	1
0	8	6	29	25	2	-7	-2	7	16	14	2	6	3	7	42	39	1	-5	-5	8	188	210	2	-1	1	8	80	92	1
1	8	6	131	141	2	-6	-2	7	0	0	1	-7	4	7	40	34	3	-4	-5	8	54	57	3	0	1	8	98	119	1
2	8	6	114	121	4	-5	-2	7	18	19	2	-6	4	7	30	23	3	-3	-5	8	39	42	1	1	1	8	46	51	1
3	8	6	11	5	5	-4	-2	7	128	123	2	-5	4	7	20	17	3	-2	-5	8	206	205	1	2	1	8	38	37	4
-2	9	6	60	55	2	-3	-2	7	119	122	1	-4	4	7	19	23	2	-1	-5	8	186	176	8	3	1	8	83	85	3
0	9	6	61	65	2	-2	-2	7	104	98	4	-3	4	7	41	39	2	0	-5	8	150	137	4	4	1	8	65	69	6
1	9	6	0	8	1	-1	-2	7	115	105	6	-2	4	7	38	39	2	1	-5	8	37	38	2	5	1	8	119	126	9
-2	-9	7	41	38	2	0	-2	7	72	64	3	-1	4	7	8	4	5	2	-5	8	203	185	7	6	1	8	143	166	14
-1	-9	7	38	38	2	1	-2	7	8	2	2	0	4	7	94	89	2	3	-5	8	132	126	5	-7	2	8	50	44	2
0	-9	7	41	41	2	2	-2	7	60	64	13	1	4	7	8	8	5	4	-5	8	212	194	2	-6	2	8	126	109	1
1	-9	7	44	50	2	3	-2	7	160	147	2	2	4	7	10	13	5	5	-5	8	112	104	2	-5	2	8	14	9	3
2	-9	7	77	76	2	4	-2	7	150	140	1	3	4	7	29	29	1	6	-5	8	8	7	8	-4	2	8	160	136	12
3	-9	7	58	59	2	5	-2	7	221	201	2	4	4	7	51	53	1	-6	-4	8	33	36	2	-3	2	8	69	71	1
-4	-8	7	5	9	4	6	-2	7	45	44	2	5	4	7	67	59	1	-5	-4	8	85	93	2	-2	8	147	151	2	
-3	-8	7	56	58	1	7	-2	7	48	47	2	6	4	7	0	4	1	-4	-4	8	37	40	1	-1	2	8	86	92	1
-2	-8	7	109	101	5	-7	-1	7	39	43	2	-6	5	7	99	79	3	-3	-4	8	32	34	3	0	2	8	22	24	2
-1	-8	7	54	61	2	-6	-1	7	22	18	2	-5	5	7	83	74	3	-2	-4	8	95	95	2	1	2	8	52	50	2
0	-8	7	24	24	2	-5	-1	7	124	132	2	-4	5	7	97	94	3	-1	-4	8	38	39	1	2	2	8	81	89	1
1	-8	7	56																										

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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
2	4	8	8	6	7	-5	-3	9	19	22	2	5	3	9	66	72	6	-2	-2	10	81	75	2	0	6	10	63	67	2
3	4	8	24	21	2	-4	-3	9	62	66	2	-6	4	9	94	79	2	-1	-2	10	56	47	2	1	6	10	28	30	2
4	4	8	115	118	2	-3	-3	9	32	31	2	-5	4	9	74	68	2	0	-2	10	96	95	3	-1	7	11	39	37	2
5	4	8	8	5	4	-2	-3	9	43	47	1	-4	4	9	187	170	2	1	-2	10	110	106	3	0	-7	11	20	24	2
-6	5	8	61	57	3	-1	-3	9	11	8	2	-3	4	9	111	118	2	2	-2	10	312	293	3	1	-7	11	46	44	2
-5	5	8	80	73	4	0	-3	9	98	101	1	-2	4	9	73	75	2	3	-2	10	57	56	2	-2	-6	11	82	73	6
-4	5	8	21	20	2	1	-3	9	34	33	1	-1	4	9	36	34	2	4	-2	10	11	9	5	-1	-6	11	29	31	4
-3	5	8	91	101	2	2	-3	9	43	53	8	0	4	9	11	9	4	5	-2	10	114	112	2	0	-6	11	15	21	3
-2	5	8	72	78	2	3	-3	9	189	176	2	1	4	9	27	25	2	-6	-1	10	62	59	2	1	-6	11	30	28	2
-1	5	8	18	13	2	4	-3	9	128	117	2	2	4	9	25	30	2	-5	-1	10	19	21	3	2	-6	11	20	16	2
0	5	8	73	82	2	5	-3	9	39	37	2	3	4	9	31	35	2	-4	-1	10	8	13	7	3	-6	11	8	10	8
1	5	8	60	63	2	6	-3	9	42	40	2	4	4	9	6	6	3	-3	-1	10	36	38	2	-3	-5	11	75	70	1
2	5	8	0	8	1	-6	-2	9	59	64	2	-5	5	9	24	21	2	-2	-1	10	90	93	2	-2	-5	11	109	95	8
3	5	8	54	61	2	-5	-2	9	72	78	2	-4	5	9	17	16	2	-1	-1	10	69	71	2	-1	-5	11	13	16	3
4	5	8	32	39	2	-4	-2	9	20	18	2	-3	5	9	56	55	2	0	-1	10	81	74	2	0	-5	11	152	133	3
5	5	8	5	7	5	-3	-2	9	30	34	2	-2	5	9	52	53	2	1	-1	10	258	245	2	1	-5	11	123	109	2
-5	6	8	32	28	4	-2	-2	9	90	91	1	-1	5	9	144	160	2	2	-1	10	27	29	1	2	-5	11	61	55	2
-4	6	8	126	123	3	-1	-2	9	57	57	1	0	5	9	4	2	4	3	-1	10	31	30	2	3	-5	11	79	78	2
-3	6	8	98	97	2	0	-2	9	95	92	1	1	5	9	67	67	2	4	-1	10	172	161	3	-4	-4	11	13	3	3
-2	6	8	153	163	2	1	-2	9	254	240	6	2	5	9	54	60	2	5	-1	10	94	95	2	-3	-4	11	67	64	2
-1	6	8	135	138	2	2	-2	9	175	164	3	3	5	9	103	113	2	-6	0	10	57	57	2	-2	-4	11	138	138	5
0	6	8	167	162	2	3	-2	9	182	211	21	4	5	9	58	54	2	-5	0	10	0	6	1	-1	-4	11	79	76	4
1	6	8	110	114	2	4	-2	9	160	145	2	-4	6	9	50	49	2	-4	0	10	67	64	2	0	-4	11	113	105	6
2	6	8	146	144	2	5	-2	9	17	18	3	-3	6	9	23	23	2	-3	0	10	15	10	4	1	-4	11	51	46	1
3	6	8	132	148	2	6	-2	9	31	32	2	-2	6	9	20	25	2	-2	0	10	51	61	2	2	-4	11	18	17	3
4	6	8	113	115	2	-6	-1	9	29	32	2	-1	6	9	58	69	2	-1	0	10	92	92	2	3	-4	11	61	63	2
-4	7	8	75	76	3	-1	-1	9	200	201	2	0	6	9	85	85	2	0	0	10	130	135	2	4	-4	11	31	34	2
-3	7	8	20	21	2	-4	-1	9	9	11	5	1	6	9	21	20	2	1	0	10	153	155	1	-5	-3	11	22	26	2
-2	7	8	19	19	2	-3	-1	9	127	133	2	2	6	9	0	6	1	2	0	10	53	50	1	-4	-3	11	57	64	2
-1	7	8	300	316	2	-2	-1	9	118	122	1	3	6	9	32	33	2	3	0	10	4	0	4	-3	-3	11	40	35	2
0	7	8	5	8	5	-1	-1	9	80	83	2	-3	7	9	74	73	2	4	0	10	63	57	3	-2	-3	11	91	95	2
1	7	8	102	107	2	0	-1	9	233	224	8	-2	7	9	153	169	2	5	0	10	34	35	2	-1	-3	11	39	42	1
2	7	8	116	113	2	1	-1	9	154	158	7	-1	7	9	73	73	2	-6	1	10	69	69	2	0	-3	11	113	120	5
3	7	8	47	51	2	2	-1	9	133	137	1	0	7	9	37	38	2	-5	1	10	6	5	6	1	-3	11	77	73	2
-2	8	8	184	191	2	3	-1	9	254	245	1	1	7	9	57	65	2	-4	1	10	168	158	2	2	-3	11	102	104	5
-1	8	8	197	113	2	4	-1	9	35	33	1	0	-8	10	11	14	4	-3	1	10	109	114	2	3	-3	11	44	43	2
0	8	8	75	77	2	5	-1	9	81	76	2	1	-8	10	8	1	5	-2	1	10	122	136	2	4	-3	11	117	118	2
1	8	8	62	65	2	6	-1	9	75	63	2	-2	-7	10	17	17	2	-1	1	10	8	5	7	-5	-2	11	44	40	2
-2	8	9	72	69	3	-6	0	9	28	26	2	-1	-7	10	58	56	2	0	1	10	178	194	2	-4	-2	11	27	29	2
-1	8	9	11	1	3	-5	0	9	129	138	2	0	-7	10	97	99	2	1	1	10	9	0	5	-3	-2	11	19	16	3
0	8	9	77	71	2	-4	0	9	35	36	2	1	-7	10	135	124	2	2	1	10	256	254	1	-2	-2	11	13	7	4
1	8	9	60	60	2	-3	0	9	58	56	2	2	-7	10	78	80	2	3	1	10	52	49	2	-1	-2	11	128	126	2
2	8	9	59	62	2	-2	0	9	69	76	1	3	-7	10	51	50	2	4	1	10	10	11	2	0	-2	11	38	39	2
3	8	9	3	2	3	-1	0	9	63	64	1	-4	-6	10	89	89	1	5	1	10	17	17	1	1	-2	11	231	218	7
-3	7	9	68	63	2	0	0	9	32	35	2	-3	-6	10	36	36	1	-6	2	10	20	15	3	2	-2	11	169	156	8
-2	7	9	25	23	2	1	0	9	7	6	5	-2	-6	10	23	20	2	-5	2	10	51	46	1	3	-2	11	145	131	3
-1	7	9	153	138	8	2	0	9	81	85	1	-1	-6	10	37	35	1	-4	2	10	96	91	2	4	-2	11	85	78	2
0	7	9	72	66	2	3	0	9	26	27	1	0	-6	10	156	155	2	-3	2	10	158	160	2	-5	-1	11	35	36	2
1	7	9	21	22	2	4	0	9	15	14	2	1	-6	10	93	92	2	-2	2	10	123	133	2	-4	-1	11	50	55	2
2	7	9	42	34	2	5	0	9	55	60	1	2	-6	10	67	61	2	-1	2	10	203	210	2	-3	-1	11	14	10	3
3	7	9	22	18	3	6	0	9	23	23	2	3	-6	10	34	32	2	0	2	10	202	216	2	-2	-1	11	75	79	2
4	7	9	43	41	1	-6	-1	9	169	158	2	4	-6	10	48	42	2	1	2	10	223	247	2	-1	-1	11	215	206	2
-4	6	9	16	15	2	-5	-1	9	68	68	7	-4	-5	10	42	41	1	2	2	10	329	334	4	0	-1	11	149	141	2
-3	6	9	10	12	3	-4	-1	9	173	169	2	-3	-5	10	31	27	1	3	2	10	314	315	2	1	-1	11	165	161	2
-2	6	9	39	35	1	-3	1	9	109	118	2	-2	-5	10	51	50	5	4	2	10	256	254	14	2	-1	11	19	19	1
-1	6	9	11	8	3	-2	1	9	111	113	2	-1	-5	10	83	77	6	5	2	10	72	88	9	3	-1	11	54	51	1
0	6	9	45	61	39	-1	1	9	18	16	2	0	-5	10	19	19	2	-5	3	10	38	32	2	4	-1	11	15	12	2
1	6	9	77	66	2	0	1	9	177	197	1	1	-5	10	4	8	4	-4	3	10	32	36	2	-5	0	11	55	57	2
2	6	9	29	32	2	1	1	9	77	82	1	2	-5	10	111	106	2	-3	3	10	49	59	2	-4	0	11	53	50	2
3	6	9	133	118	2	2	1	9	63	62	1	3	-5	10	84	75	5	-2	3	10	108	120	2	-3	0	11	27	23	3
4	6	9	53	47	5	3	1	9	69	77	3	4	-5	10	58														

Table 5. Observed and calculated structure factors for 2a.

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
-4	3	11	80	83	2	1	-5	12	11	2	4	-4	-1	12	4	4	4	3	1	12	74	74	2	-2	-2	13	13	14	4
-3	3	11	8	7	7	2	-5	12	27	28	2	-3	-1	12	6	6	6	-4	2	12	71	68	3	-1	-2	13	94	79	3
-2	3	11	98	103	2	-3	-4	12	57	46	2	-2	-1	12	52	52	2	-3	2	12	42	46	2	0	-2	13	31	24	3
-1	3	11	45	50	2	-2	-4	12	53	46	1	-1	-1	12	183	182	2	-2	2	12	120	123	2	1	-2	13	81	69	2
0	3	11	60	69	2	-1	-4	12	6	2	5	0	-1	12	104	96	2	-1	2	12	12	14	3	2	-2	13	16	14	2
1	3	11	110	132	2	0	-4	12	48	43	3	1	-1	12	7	0	5	0	2	12	21	25	2	-2	-1	13	60	52	3
2	3	11	102	123	2	1	-4	12	100	87	5	2	-1	12	72	62	2	1	2	12	26	29	2	-1	-1	13	75	70	2
3	3	11	103	115	2	3	-4	12	15	5	3	3	-1	12	45	43	3	2	2	12	57	70	2	0	-1	13	9	12	9
-4	4	11	22	21	2	-3	-3	12	60	62	2	-4	0	12	97	88	2	3	2	12	34	38	2	1	-1	13	31	27	2
-3	4	11	30	34	2	-2	-3	12	105	97	2	-3	0	12	31	26	3	-3	3	12	97	96	2	2	-1	13	44	43	1
-2	4	11	24	24	2	-1	-3	12	15	22	4	-2	0	12	51	45	2	-2	3	12	3	0	3	-2	0	13	209	199	2
-1	4	11	61	67	2	0	-3	12	183	173	6	-1	0	12	146	155	2	-1	3	12	54	56	2	-1	0	13	12	11	4
0	4	11	0	3	1	1	-3	12	7	10	7	0	0	12	39	35	2	0	3	12	73	81	2	0	0	13	9	8	4
1	4	11	75	89	2	2	-3	12	70	67	5	1	0	12	19	22	2	1	3	12	108	120	2	1	0	13	61	59	2
2	4	11	46	56	2	3	-3	12	20	11	3	2	0	12	63	65	2	2	3	12	10	3	3	2	0	13	40	39	1
-3	5	11	41	40	2	-4	-2	12	77	68	2	3	0	12	75	75	2	-2	4	12	108	104	2	-2	1	13	114	108	2
-2	5	11	0	3	1	-3	-2	12	61	56	2	-4	1	12	88	77	2	-1	4	12	43	47	2	-1	1	13	19	14	3
-1	5	11	28	23	2	-2	-2	12	37	38	2	-3	1	12	186	179	2	0	4	12	62	58	2	0	1	13	14	10	3
0	5	11	74	85	2	-1	-2	12	63	60	2	-2	1	12	16	16	3	0	-4	13	35	29	4	1	1	13	34	29	2
1	5	11	65	76	2	0	-2	12	73	67	2	-1	1	12	180	188	2	-2	-3	13	39	35	2	-1	2	13	95	87	2
-2	-5	12	15	13	2	1	-2	12	46	49	2	0	1	12	31	35	2	-1	-3	13	13	9	4	0	2	13	97	102	2
-1	-5	12	20	21	2	2	-2	12	155	140	13	1	1	12	36	38	2	0	-3	13	132	100	3						
0	-5	12	47	40	3	3	-2	12	40	45	1	2	1	12	109	112	2	1	-3	13	87	68	2						

ORTEP drawing for 3a

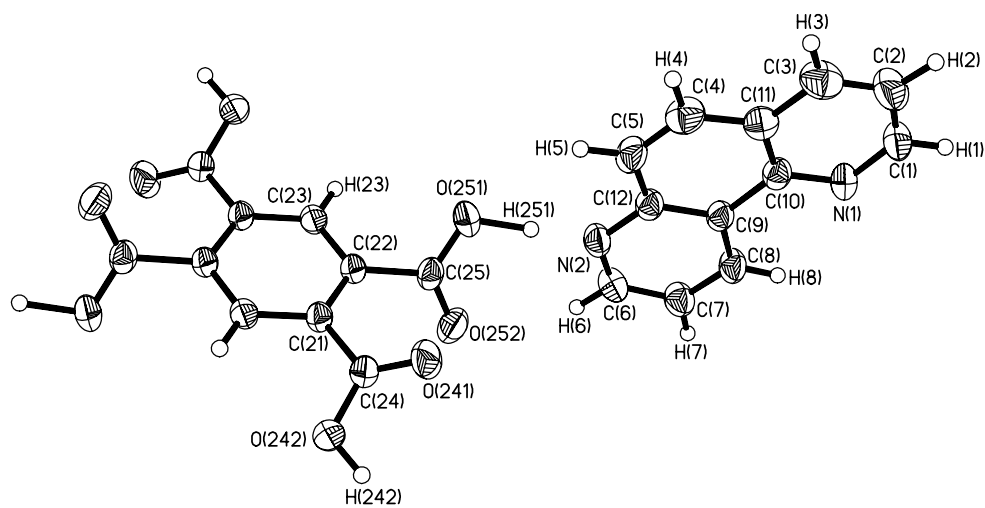


Table 1. Crystal data and structure refinement for 3a.

Identification code	3a	
Empirical formula	C ₁₇ H ₁₁ N ₂ O ₄	
Formula weight	307.28	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 7.084(1) Å	α = 90.68(1)°.
	b = 7.253(1) Å	β = 102.41(1)°.
	c = 13.933(2) Å	γ = 106.30(1)°.
Volume	669.1(2) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.525 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.111 mm ⁻¹	
F(000)	318	
Crystal size	0.24 x 0.12 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.50 to 23.29°.	
Index ranges	-7 ≤ h ≤ 7, -8 ≤ k ≤ 8, -15 ≤ l ≤ 15	
Reflections collected	7055	
Independent reflections	1928 [R(int) = 0.0528]	
Completeness to theta = 23.29°	99.9 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	1928 / 0 / 252	
Goodness-of-fit on F ²	1.045	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0426, wR2 = 0.0925	
R indices (all data)	R1 = 0.0526, wR2 = 0.0984	
Largest diff. peak and hole	0.195 and -0.210 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(1)	6772(4)	3546(3)	-1949(2)	51(1)
C(2)	4825(4)	3406(3)	-2455(2)	58(1)
C(3)	3324(4)	2959(3)	-1962(2)	54(1)
C(4)	2278(3)	2100(3)	-390(2)	47(1)
C(5)	2753(3)	1721(3)	559(2)	43(1)
C(6)	7124(3)	1790(3)	2459(2)	43(1)
C(7)	8725(3)	2472(3)	2012(2)	45(1)
C(8)	8324(3)	2848(3)	1044(1)	40(1)
C(9)	6335(3)	2548(2)	525(1)	33(1)
C(10)	5800(3)	2852(2)	-508(1)	35(1)
C(11)	3770(3)	2647(3)	-960(1)	40(1)
C(12)	4794(3)	1927(2)	1034(1)	34(1)
C(21)	1040(2)	1910(2)	4935(1)	30(1)
C(22)	1433(3)	445(2)	4425(1)	31(1)
C(23)	375(3)	-1445(3)	4489(1)	32(1)
C(24)	2073(3)	3969(2)	4821(1)	33(1)
C(25)	3054(3)	869(2)	3849(1)	34(1)
N(1)	7296(2)	3300(2)	-1005(1)	44(1)
N(2)	5239(2)	1541(2)	1996(1)	39(1)
O(241)	2527(2)	4530(2)	4071(1)	52(1)
O(242)	2412(2)	5091(2)	5629(1)	43(1)
O(251)	2443(2)	321(2)	2933(1)	49(1)
O(252)	4815(2)	1620(2)	4272(1)	49(1)
H(1)	7870(30)	3840(30)	-2300(15)	63(6)
H(2)	4610(30)	3670(30)	-3127(16)	56(6)
H(3)	1990(40)	2800(30)	-2261(15)	59(7)
H(4)	870(30)	2000(30)	-708(15)	54(6)
H(5)	1760(30)	1310(30)	943(14)	50(6)
H(6)	7360(30)	1530(30)	3129(15)	45(6)
H(7)	10150(30)	2690(30)	2400(15)	62(6)
H(8)	9360(30)	3320(30)	729(14)	46(5)
H(23)	650(30)	-2490(30)	4159(12)	32(5)
H(242)	3350(30)	6310(30)	5612(15)	67(7)
H(251)	3830(50)	880(40)	2480(20)	125(11)

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

C(1)-N(1)	1.317(2)	N(1)-C(1)-C(2)	124.6(2)
C(1)-C(2)	1.382(3)	N(1)-C(1)-H(1)	115.7(12)
C(1)-H(1)	0.98(2)	C(2)-C(1)-H(1)	119.7(12)
C(2)-C(3)	1.354(3)	C(3)-C(2)-C(1)	118.8(2)
C(2)-H(2)	0.95(2)	C(3)-C(2)-H(2)	122.9(13)
C(3)-C(11)	1.400(3)	C(1)-C(2)-H(2)	118.3(13)
C(3)-H(3)	0.92(2)	C(2)-C(3)-C(11)	119.6(2)
C(4)-C(5)	1.345(3)	C(2)-C(3)-H(3)	123.1(14)
C(4)-C(11)	1.427(3)	C(11)-C(3)-H(3)	117.2(14)
C(4)-H(4)	0.98(2)	C(5)-C(4)-C(11)	121.79(19)
C(5)-C(12)	1.419(3)	C(5)-C(4)-H(4)	119.8(12)
C(5)-H(5)	0.96(2)	C(11)-C(4)-H(4)	118.4(12)
C(6)-N(2)	1.313(2)	C(4)-C(5)-C(12)	120.16(19)
C(6)-C(7)	1.384(3)	C(4)-C(5)-H(5)	122.6(12)
C(6)-H(6)	0.94(2)	C(12)-C(5)-H(5)	117.2(12)
C(7)-C(8)	1.364(3)	N(2)-C(6)-C(7)	122.53(19)
C(7)-H(7)	1.00(2)	N(2)-C(6)-H(6)	116.9(12)
C(8)-C(9)	1.393(3)	C(7)-C(6)-H(6)	120.5(12)
C(8)-H(8)	0.92(2)	C(8)-C(7)-C(6)	118.7(2)
C(9)-C(12)	1.401(2)	C(8)-C(7)-H(7)	121.3(12)
C(9)-C(10)	1.444(2)	C(6)-C(7)-H(7)	120.0(12)
C(10)-N(1)	1.355(2)	C(7)-C(8)-C(9)	120.09(19)
C(10)-C(11)	1.405(3)	C(7)-C(8)-H(8)	120.7(12)
C(12)-N(2)	1.360(2)	C(9)-C(8)-H(8)	119.3(12)
C(21)-C(23)#1	1.388(2)	C(8)-C(9)-C(12)	118.19(17)
C(21)-C(22)	1.395(2)	C(8)-C(9)-C(10)	122.98(17)
C(21)-C(24)	1.494(2)	C(12)-C(9)-C(10)	118.83(16)
C(22)-C(23)	1.379(2)	N(1)-C(10)-C(11)	122.73(17)
C(22)-C(25)	1.504(2)	N(1)-C(10)-C(9)	117.87(16)
C(23)-C(21)#1	1.388(2)	C(11)-C(10)-C(9)	119.39(16)
C(23)-H(23)	0.968(18)	C(3)-C(11)-C(10)	117.36(19)
C(24)-O(241)	1.201(2)	C(3)-C(11)-C(4)	123.53(19)
C(24)-O(242)	1.319(2)	C(10)-C(11)-C(4)	119.10(18)
C(25)-O(252)	1.223(2)	N(2)-C(12)-C(9)	120.30(16)
C(25)-O(251)	1.276(2)	N(2)-C(12)-C(5)	119.13(17)
N(2)-H(251)	1.31(3)	C(9)-C(12)-C(5)	120.56(17)
O(242)-H(242)	0.95(2)	C(23)#1-C(21)-C(22)	119.63(16)
O(251)-H(251)	1.26(3)	C(23)#1-C(21)-C(24)	120.47(16)
		C(22)-C(21)-C(24)	119.84(15)
		C(23)-C(22)-C(21)	119.22(16)
		C(23)-C(22)-C(25)	119.16(15)
		C(21)-C(22)-C(25)	121.55(15)
		C(22)-C(23)-C(21)#1	121.14(16)
		C(22)-C(23)-H(23)	120.9(10)
		C(21)#1-C(23)-H(23)	117.9(10)
		O(241)-C(24)-O(242)	124.10(16)
		O(241)-C(24)-C(21)	123.29(16)
		O(242)-C(24)-C(21)	112.61(15)
		O(252)-C(25)-O(251)	125.06(17)
		O(252)-C(25)-C(22)	119.86(16)
		O(251)-C(25)-C(22)	115.03(16)
		C(1)-N(1)-C(10)	116.93(18)
		C(6)-N(2)-C(12)	120.10(16)
		C(6)-N(2)-H(251)	117.9(13)
		C(12)-N(2)-H(251)	121.9(13)
		C(24)-O(242)-H(242)	112.1(13)
		C(25)-O(251)-H(251)	111.6(13)

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

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	63(2)	51(1)	39(1)	12(1)	22(1)	9(1)
C(2)	73(2)	60(2)	38(1)	15(1)	13(1)	18(1)
C(3)	54(2)	56(1)	49(1)	6(1)	0(1)	21(1)
C(4)	34(1)	53(1)	56(2)	1(1)	9(1)	15(1)
C(5)	34(1)	48(1)	51(1)	2(1)	20(1)	10(1)
C(6)	49(1)	53(1)	33(1)	4(1)	14(1)	18(1)
C(7)	38(1)	60(1)	38(1)	5(1)	10(1)	15(1)
C(8)	34(1)	51(1)	41(1)	7(1)	18(1)	12(1)
C(9)	33(1)	32(1)	36(1)	1(1)	14(1)	9(1)
C(10)	38(1)	30(1)	38(1)	4(1)	14(1)	10(1)
C(11)	41(1)	36(1)	42(1)	2(1)	9(1)	13(1)
C(12)	37(1)	32(1)	38(1)	1(1)	16(1)	10(1)
C(21)	31(1)	32(1)	27(1)	6(1)	9(1)	7(1)
C(22)	32(1)	33(1)	26(1)	5(1)	10(1)	8(1)
C(23)	37(1)	31(1)	30(1)	2(1)	12(1)	8(1)
C(24)	32(1)	34(1)	34(1)	4(1)	11(1)	9(1)
C(25)	39(1)	28(1)	39(1)	9(1)	17(1)	9(1)
N(1)	46(1)	49(1)	38(1)	10(1)	20(1)	9(1)
N(2)	43(1)	42(1)	37(1)	4(1)	20(1)	12(1)
O(241)	75(1)	39(1)	41(1)	11(1)	28(1)	6(1)
O(242)	51(1)	32(1)	41(1)	-2(1)	18(1)	0(1)
O(251)	46(1)	65(1)	36(1)	0(1)	21(1)	8(1)
O(252)	36(1)	51(1)	54(1)	9(1)	15(1)	1(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3a.

Page 1

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	443	441	1	-3	7	0	49	51	2	2	-1	1	279	282	1	-6	6	1	21	20	5	7	-2	2	20	18	5
2	0	0	449	455	3	-2	7	0	93	94	1	3	-1	1	311	294	1	-5	6	1	25	25	4	-7	-1	2	31	32	3
3	0	0	143	140	1	-1	7	0	13	5	5	4	-1	1	265	253	2	-4	6	1	27	25	3	-6	-1	2	200	201	2
4	0	0	251	252	1	0	7	0	20	15	3	5	-1	1	32	28	2	-3	6	1	23	24	2	-5	-1	2	106	106	1
5	0	0	117	119	1	1	7	0	38	37	3	6	-1	1	23	20	2	-2	6	1	101	101	1	-4	-1	2	134	162	17
6	0	0	9	1	9	-3	8	0	6	5	6	7	-1	1	8	6	8	-1	6	1	14	9	3	-3	-1	2	12	12	3
7	0	0	11	12	11	-2	8	0	12	15	12	-7	0	1	11	8	8	0	6	1	33	51	11	-2	-1	2	324	333	2
-7	1	0	17	11	4	2	-8	1	14	7	6	-6	0	1	8	1	7	1	6	1	8	4	8	-1	-1	2	197	203	1
-6	1	0	39	34	2	-1	-7	1	49	51	3	-5	0	1	139	142	3	2	6	1	12	9	5	0	-1	2	271	266	2
-5	1	0	51	50	1	0	-7	1	60	62	2	-4	0	1	74	76	1	3	6	1	5	7	5	1	-1	2	675	682	1
-4	1	0	46	49	1	1	-7	1	17	8	3	-3	0	1	53	55	1	-5	7	1	47	47	3	2	-1	2	625	623	4
-3	1	0	151	147	1	2	-7	1	88	94	2	-2	0	1	5	6	4	-4	7	1	122	121	3	3	-1	2	238	233	1
-2	1	0	228	234	1	3	-7	1	37	36	2	-1	0	1	229	348	67	-3	7	1	16	16	5	4	-1	2	121	126	1
-1	1	0	65	74	5	4	-7	1	15	7	4	0	0	1	6	7	3	-2	7	1	27	24	2	5	-1	2	11	3	4
0	1	0	77	99	16	5	-7	1	24	30	5	1	0	1	455	457	1	-1	7	1	19	17	3	6	-1	2	14	0	5
1	1	0	13	15	2	-3	-6	1	49	48	3	2	0	1	24	30	1	0	7	1	9	2	9	7	-1	2	10	3	9
2	1	0	216	218	1	-2	-6	1	14	11	4	3	0	1	276	269	1	1	7	1	14	13	4	-7	0	2	52	52	2
3	1	0	18	20	2	-1	-6	1	5	7	5	4	0	1	154	153	1	-3	8	1	34	30	3	-6	0	2	89	89	1
4	1	0	27	27	1	0	-6	1	20	17	2	5	0	1	41	40	1	2	-8	2	55	59	3	-5	0	2	162	164	1
5	1	0	116	119	2	1	-6	1	12	11	3	6	0	1	10	6	10	-1	-7	2	66	78	3	-4	0	2	6	10	6
6	1	0	39	36	2	2	-6	1	134	130	2	7	0	1	16	17	4	0	-7	2	27	28	2	-3	0	2	178	176	1
7	1	0	36	36	3	3	-6	1	27	24	2	-7	1	1	62	64	4	1	-7	2	16	9	4	-2	0	2	131	197	39
-7	2	0	19	16	3	4	-6	1	9	0	8	-6	1	1	17	14	3	2	-7	2	57	62	3	-1	0	2	132	132	1
-6	2	0	140	139	2	5	-6	1	25	25	3	-5	1	1	197	195	2	3	-7	2	56	58	2	0	0	2	387	384	4
-5	2	0	41	40	2	6	-6	1	27	29	4	-4	1	1	127	130	1	4	-7	2	17	13	3	1	0	2	537	544	6
-4	2	0	174	173	1	-4	-5	1	55	50	3	-3	1	1	36	39	2	5	-7	2	21	20	4	2	0	2	31	31	1
-3	2	0	49	50	1	-3	-5	1	44	46	3	-2	1	1	263	265	1	-3	-6	2	61	62	3	3	0	2	44	44	1
-2	2	0	340	326	2	-2	-5	1	83	79	2	-1	1	1	221	221	1	-2	-6	2	38	42	3	4	0	2	27	24	1
-1	2	0	538	528	2	-1	-5	1	127	128	1	0	1	1	200	206	1	-1	-6	2	39	34	2	5	0	2	16	15	3
0	2	0	588	564	3	0	-5	1	56	56	1	1	1	1	0	4	1	0	-6	2	13	1	4	6	0	2	30	24	3
1	2	0	6	2	6	1	-5	1	42	49	6	2	1	1	232	233	1	1	-6	2	36	36	2	7	0	2	11	3	11
2	2	0	207	238	27	2	-5	1	177	178	2	3	1	1	209	205	2	2	-6	2	78	79	2	-7	1	2	19	14	3
3	2	0	25	25	1	3	-5	1	36	39	2	4	1	1	21	22	2	3	-6	2	92	95	2	-6	1	2	33	34	2
4	2	0	86	86	2	4	-5	1	104	110	2	5	1	1	47	49	2	4	-6	2	5	3	4	-5	-1	2	78	78	1
5	2	0	51	49	2	5	-5	1	13	2	6	6	1	1	106	108	2	5	-6	2	34	30	3	-4	1	2	112	132	17
6	2	0	35	31	2	6	-5	1	31	27	3	-7	2	1	29	24	2	6	-6	2	36	32	3	-3	1	2	79	80	1
-7	3	0	29	26	3	7	-5	1	9	5	9	-6	2	1	45	43	2	-4	-5	2	15	9	4	-2	1	2	288	292	3
-6	3	0	8	6	8	-5	-4	1	131	129	3	-5	2	1	110	110	1	-3	-5	2	35	39	3	-1	1	2	108	109	1
-5	3	0	65	67	2	-4	-4	1	130	127	2	-4	2	1	163	182	17	-2	-5	2	47	51	2	0	1	2	71	75	1
-4	3	0	279	271	4	-3	-4	1	21	22	4	-3	2	1	157	162	1	-1	-5	2	60	58	2	1	1	2	180	185	1
-3	3	0	43	47	4	-2	-4	1	53	54	1	-2	2	1	483	459	2	0	-5	2	63	65	1	2	1	2	88	86	1
-2	3	0	49	46	1	-1	-4	1	109	105	1	-1	2	1	1210	1154	2	1	-5	2	26	28	1	3	1	2	160	158	1
-1	3	0	266	264	2	0	-4	1	76	77	1	0	2	1	1295	1291	1	2	-5	2	188	181	3	4	1	2	45	46	2
0	3	0	166	175	8	1	-4	1	109	111	3	1	2	1	25	25	1	3	-5	2	49	53	2	5	1	2	40	44	2
1	3	0	183	183	1	2	-4	1	77	81	1	2	2	1	269	269	1	4	-5	2	89	89	2	6	1	2	56	56	2
2	3	0	144	143	1	3	-4	1	85	80	1	3	2	1	139	148	1	5	-5	2	12	6	8	-7	2	2	31	31	2
3	3	0	107	108	2	4	-4	1	93	94	1	4	2	1	105	105	2	6	-5	2	72	68	2	-6	2	2	37	43	8
4	3	0	68	92	19	5	-4	1	45	44	2	5	2	1	21	19	3	-5	-4	2	151	153	3	-5	2	2	111	113	2
5	3	0	84	88	2	6	-4	1	50	51	2	6	2	1	49	51	3	-4	-4	2	47	46	2	-4	2	2	119	116	1
6	3	0	36	36	3	7	-4	1	43	40	3	-7	3	1	33	29	3	-3	-4	2	83	80	2	-3	2	2	87	87	1
-7	4	0	38	37	4	-6	-3	1	57	55	3	-6	3	1	16	15	2	-2	-4	2	26	28	2	-2	2	2	40	40	1
-6	4	0	53	54	2	-5	-3	1	44	44	3	-5	3	1	5	11	5	-1	-4	2	46	46	1	-1	2	2	295	288	1
-5	4	0	23	22	4	-4	-3	1	72	72	2	-4	3	1	13	10	2	0	-4	2	38	43	3	0	2	2	244	243	2
-4	4	0	54	64	13	-3	-3	1	123	125	1	-3	3	1	24	18	1	1	-4	2	166	160	1	1	2	2	12	6	3
-3	4	0	16	17	2	-2	-3	1	93	98	1	-2	3	1	119	119	2	2	-4	2	42	41	1	2	2	2	11	18	4
-2	4	0	21																										

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	5	2	75	72	2	1	-2	3	51	53	1	3	4	3	46	42	2	1	-2	4	54	54	1	-6	5	4	69	63	3
-3	5	2	37	35	1	2	-2	3	7	8	6	4	4	3	82	79	2	2	-2	4	20	23	2	-5	5	4	18	8	4
-2	5	2	50	49	1	3	-2	3	145	145	2	-7	5	3	47	44	4	3	-2	4	151	157	1	-4	5	4	26	30	4
-1	5	2	20	18	2	4	-2	3	60	56	1	-6	5	3	26	29	4	4	-2	4	56	60	2	-3	5	4	78	79	2
0	5	2	84	86	2	5	-2	3	47	49	2	-5	5	3	17	17	4	5	-2	4	42	43	2	-2	5	4	160	159	2
1	5	2	72	77	2	6	-2	3	9	10	9	-4	5	3	30	24	2	6	-2	4	108	111	3	-1	5	4	55	54	1
2	5	2	48	48	2	7	-2	3	47	51	3	-3	5	3	60	62	1	-7	-1	4	32	24	3	0	5	4	158	158	2
3	5	2	62	63	2	-7	-1	3	21	20	3	-2	5	3	126	130	1	-6	-1	4	36	29	2	1	5	4	199	200	3
4	5	2	0	12	1	-6	-1	3	59	64	3	-1	5	3	51	51	1	-5	-1	4	32	32	2	2	5	4	145	146	2
-6	6	2	18	11	5	-5	-1	3	114	112	1	0	5	3	46	46	2	-4	-1	4	25	25	2	3	5	4	17	16	3
-5	6	2	32	35	4	-4	-1	3	95	99	1	1	5	3	75	76	2	-3	-1	4	250	243	1	-6	6	4	87	80	3
-4	6	2	20	22	3	-3	-1	3	140	136	1	2	5	3	52	51	2	-2	-1	4	561	525	3	-5	6	4	26	24	3
-3	6	2	67	67	1	-2	-1	3	314	313	1	3	5	3	28	28	3	-1	-1	4	188	198	6	-4	6	4	76	75	2
-2	6	2	12	13	4	-1	-1	3	224	217	1	-6	6	3	28	25	4	0	-1	4	46	49	1	-3	6	4	38	38	2
-1	6	2	328	338	3	0	-1	3	297	305	2	-5	6	3	65	64	3	1	-1	4	242	240	2	-2	6	4	33	43	6
0	6	2	31	32	2	1	-1	3	216	221	1	-4	6	3	44	41	3	2	-1	4	52	52	1	-1	6	4	197	200	2
1	6	2	50	48	2	2	-1	3	219	221	1	-3	6	3	11	4	5	3	-1	4	243	245	1	0	6	4	16	16	3
2	6	2	13	10	5	3	-1	3	251	249	1	-2	6	3	277	278	2	4	-1	4	46	43	2	1	6	4	49	45	2
-5	7	2	0	10	1	4	-1	3	77	78	1	-1	6	3	82	89	2	5	-1	4	16	14	3	2	6	4	20	20	3
-4	7	2	21	15	4	5	-1	3	29	30	2	0	6	3	58	61	2	6	-1	4	11	10	11	-5	7	4	56	54	3
-3	7	2	47	43	2	6	-1	3	78	84	2	1	6	3	37	35	2	-7	0	4	84	77	2	-4	7	4	41	37	3
-2	7	2	15	7	4	7	-1	3	53	60	3	2	6	3	11	6	6	-6	0	4	131	135	1	-3	7	4	46	50	2
-1	7	2	19	14	2	-7	0	3	78	80	2	-5	7	3	99	99	3	-5	0	4	123	130	2	-2	7	4	16	16	4
0	7	2	35	32	2	-6	0	3	264	268	2	-4	7	3	43	41	3	-4	0	4	35	39	4	-1	7	4	17	9	4
1	7	2	31	30	3	-5	0	3	202	206	1	-3	7	3	16	12	3	-3	0	4	206	214	1	0	7	4	18	15	4
-1	-7	3	16	12	4	-4	0	3	109	114	1	-2	7	3	76	81	2	-2	0	4	42	47	1	-1	-7	5	17	15	6
0	-7	3	32	35	2	-3	0	3	154	191	33	-1	7	3	55	53	3	-1	0	4	130	129	2	0	-7	5	34	33	3
1	-7	3	12	10	5	-2	0	3	184	184	1	0	7	3	36	37	2	0	0	4	143	147	1	1	-7	5	33	28	3
2	-7	3	11	10	10	-1	0	3	146	141	2	1	7	3	34	32	3	1	0	4	54	59	2	2	-7	5	32	33	3
3	-7	3	83	90	3	0	0	3	439	432	1	-1	-7	4	24	20	8	2	0	4	84	91	1	3	-7	5	34	33	3
4	-7	3	46	45	2	1	0	3	296	295	2	0	-7	4	24	27	3	3	0	4	72	71	1	4	-7	5	32	27	3
5	-7	3	38	39	3	2	0	3	95	96	1	1	-7	4	15	2	5	4	0	4	7	12	6	-3	-6	5	15	15	5
-3	-6	3	29	26	3	3	0	3	70	67	1	2	-7	4	24	25	3	5	0	4	60	65	2	-2	-6	5	40	40	3
-2	-6	3	76	80	2	4	0	3	18	14	2	3	-7	4	53	59	3	6	0	4	30	33	3	-1	-6	5	45	56	9
-1	-6	3	15	19	4	5	0	3	26	27	3	4	-7	4	45	50	3	-7	1	4	10	0	10	0	-6	5	42	44	2
0	-6	3	48	61	10	6	0	3	72	76	2	-3	-6	4	18	14	4	-6	1	4	89	87	1	1	-6	5	117	123	2
1	-6	3	10	9	8	-7	1	3	90	90	2	-2	-6	4	55	55	3	-5	1	4	17	18	3	2	-6	5	50	62	3
2	-6	3	65	67	2	-6	1	3	222	228	5	-1	-6	4	49	53	2	-4	1	4	32	32	1	3	-6	5	11	15	11
3	-6	3	105	103	2	-5	1	3	121	120	1	0	-6	4	70	69	2	-3	1	4	433	409	4	4	-6	5	65	66	2
4	-6	3	42	36	3	-4	1	3	109	110	1	1	-6	4	126	131	2	-2	1	4	147	152	1	5	-6	5	61	57	3
5	-6	3	6	13	6	-3	1	3	210	212	2	2	-6	4	56	61	3	-1	-1	4	59	57	1	-4	-5	5	48	43	3
6	-6	3	14	16	5	-2	1	3	304	303	2	3	-6	4	83	91	2	0	1	4	207	200	1	-3	-5	5	26	25	3
-4	-5	3	17	15	4	-1	1	3	370	367	2	4	-6	4	44	38	2	1	1	4	86	88	1	-2	-5	5	63	61	2
-3	-5	3	87	85	2	0	1	3	39	42	1	5	-6	4	36	33	5	2	1	4	114	112	1	-1	-5	5	62	63	2
-2	-5	3	147	145	2	1	1	3	33	31	1	-4	-5	4	64	58	3	3	1	4	45	44	1	0	-5	5	46	45	2
-1	-5	3	109	105	2	2	1	3	375	367	1	-3	-5	4	16	16	4	4	1	4	59	62	2	1	-5	5	41	39	2
0	-5	3	11	11	4	3	1	3	200	195	1	-2	-5	4	69	73	2	5	1	4	22	21	3	2	-5	5	21	18	3
1	-5	3	56	57	2	4	1	3	0	3	1	-1	-5	4	52	52	2	6	1	4	75	74	2	3	-5	5	14	10	4
2	-5	3	119	120	2	5	1	3	55	58	2	0	-5	4	55	57	2	-7	2	4	141	143	3	4	-5	5	48	46	2
3	-5	3	41	41	2	6	1	3	42	41	3	1	-5	4	24	21	2	-6	2	4	306	301	2	5	-5	5	63	61	3
4	-5	3	46	49	2	-7	2	3	12	2	9	2	-5	4	43	45	2	-5	2	4	13	13	3	6	-5	5	19	11	3
5	-5	3	35	31	3	-6	2	3	149	154	2	3	-5	4	49	45	2	-4	2	4	77	77	1	-5	-4	5	48	42	3
6	-5	3	13	10	7	-5	2	3	144	142	1	4	-5	4	9	2	8	-3	2	4	227	226	1	-4	-4	5	58	58	2
-5	-4	3	10	8	9	-4	2	3	15	16	2	5	-5	4	15	6	4	-2	2	4	218	222	1	-3	-4	5	28	27	2
-4	-4	3	53	54	2	-3	2	3	35	36	1	6	-5	4	21	11	4	-1	2	4	199	243	29	-2	-4	5	90	88	2
-3	-4	3	84	84	3	-2	2	3	41	40	1	-5	-4	4	21	18	4	0	2	4	43	45	1	-1	-4	5	94	93	1
-2	-4	3	36	36	2	-1	2	3	149	155	2	-4	-4	4	75	75	2	1	2	4	106	107	1	0	-4	5	143	141	1
-1	-4	3	117	120	1	0	2	3	258	262	3	-3	-4	4	18	14	3	2	2	4	97	100	1	1	-4	5	359	357	3
0	-4	3	30	25	1	1	2	3	95	91	2	-2	-4	4	12	10	4	3	2	4	79	77	2	2	-4	5	27	25	2
1	-4	3	213	209	2	2	2	3	19	22	2	-1	-4	4	30	28	2	4	2	4	37	35	2	3	-4	5	12	6	5
2	-4	3	23	22	1	3	2	3	14	10	4	0	-4	4	53	57	1	5	2	4	23	21	3	4	-4	5	26	24	3
3	-4	3	42	42	2	4	2</																						

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3a.

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
5	-2	5	35	36	2	-2	5	5	15	15	6	-3	-1	6	160	183	21	-2	6	6	23	23	3	2	0	7	74	71	1
6	-2	5	14	13	7	-1	5	5	10	10	4	-2	-1	6	225	222	2	-1	6	6	63	60	3	3	0	7	115	114	1
-7	-1	5	29	24	3	0	5	5	103	105	2	-1	-1	6	217	202	1	0	6	6	21	22	3	4	0	7	116	118	3
-6	-1	5	66	64	2	0	5	5	71	72	2	0	-1	6	21	19	1	0	6	6	17	3	4	5	0	7	36	43	4
-5	-1	5	52	55	1	2	5	5	17	11	3	1	-1	6	293	289	1	-4	7	6	19	21	3	-7	1	7	29	26	2
-4	-1	5	84	84	1	3	5	5	33	30	2	2	-1	6	96	102	2	-3	7	6	19	6	4	-6	1	7	25	24	3
-3	-1	5	181	171	1	-6	6	5	58	55	3	3	-1	6	39	39	1	-2	7	6	12	4	8	-5	1	7	96	94	2
-2	-1	5	169	164	1	-5	6	5	18	15	4	4	-1	6	22	16	4	-1	7	6	30	27	3	-4	1	7	11	13	8
-1	-1	5	8	4	3	-4	6	5	64	62	2	5	-1	6	12	5	12	0	-7	7	29	22	4	-3	1	7	64	64	1
0	-1	5	35	32	1	-3	6	5	50	54	2	6	-1	6	32	27	3	1	-7	7	16	20	5	-2	1	7	7	8	5
1	-1	5	174	180	2	-2	6	5	24	25	3	-7	0	6	34	30	3	2	-7	7	18	11	5	-1	1	7	145	143	1
2	-1	5	61	63	1	-1	6	5	150	153	2	-6	0	6	25	21	3	-2	-6	7	37	40	3	0	1	7	88	88	1
3	-1	5	146	148	1	0	6	5	41	39	2	-5	0	6	5	4	5	-1	-6	7	47	44	3	1	1	7	41	44	1
4	-1	5	20	20	2	1	6	5	20	17	3	-4	0	6	134	133	1	0	-6	7	83	88	2	2	1	7	4	8	4
5	-1	5	66	67	3	2	6	5	34	30	2	-3	0	6	46	44	1	1	-6	7	21	25	10	3	1	7	12	16	4
6	-1	5	68	74	3	-5	7	5	49	45	3	-2	0	6	76	75	1	2	-6	7	18	18	4	4	1	7	37	37	2
-7	0	5	38	41	3	-4	7	5	17	13	4	-1	0	6	88	92	1	3	-6	7	29	27	4	5	1	7	11	6	11
-6	0	5	23	35	7	-3	7	5	49	45	4	0	0	6	545	520	1	4	-6	7	44	51	3	-7	2	7	16	16	4
-5	0	5	74	78	2	-2	7	5	70	72	2	1	0	6	275	274	2	-4	-5	7	27	25	3	-6	2	7	57	57	2
-4	0	5	23	19	2	-1	7	5	41	40	3	2	0	6	152	154	1	-3	-5	7	4	4	4	-5	2	7	31	33	2
-3	0	5	200	203	1	0	7	5	33	32	3	3	0	6	61	59	1	-2	-5	7	8	6	7	-4	2	7	35	35	2
-2	0	5	196	194	1	-1	-7	6	15	12	5	4	0	6	118	120	2	-1	-5	7	12	8	8	-3	2	7	22	23	2
-1	0	5	201	203	2	0	-7	6	58	61	2	5	0	6	39	36	3	0	-5	7	34	30	3	-2	2	7	153	153	2
0	0	5	64	67	1	1	-7	6	18	8	4	6	0	6	0	2	1	1	-5	7	21	23	5	-1	2	7	69	69	1
1	0	5	71	85	9	2	-7	6	38	38	3	-7	1	6	37	39	2	2	-5	7	111	115	3	0	2	7	412	401	4
2	0	5	54	57	1	3	-7	6	12	12	8	-6	1	6	38	37	2	3	-5	7	126	138	3	1	2	7	40	43	2
3	0	5	59	57	1	-3	-6	6	48	47	3	-5	1	6	25	23	3	4	-5	7	145	147	5	2	2	7	128	129	2
4	0	5	53	55	2	-2	-6	6	42	33	2	-4	1	6	207	200	2	5	-5	7	18	17	3	3	2	7	12	5	4
5	0	5	75	80	2	-1	-6	6	10	5	10	-3	1	6	160	153	1	-5	-4	7	37	34	3	4	2	7	89	88	2
6	0	5	61	62	3	0	-6	6	122	119	4	-2	1	6	113	115	1	-4	-4	7	114	111	2	-7	3	7	35	34	3
-7	1	5	26	28	3	1	-6	6	11	10	10	-1	1	6	118	118	1	-3	-4	7	19	18	3	-6	3	7	42	40	2
-6	1	5	48	47	2	2	-6	6	11	6	11	0	1	6	66	70	1	-2	-4	7	216	207	2	-5	3	7	56	56	2
-5	1	5	110	108	2	3	-6	6	54	54	5	1	1	6	37	37	1	-1	-4	7	106	101	2	-4	3	7	235	230	2
-4	1	5	29	31	1	4	-6	6	92	96	3	2	1	6	116	111	1	0	-4	7	98	105	2	-3	3	7	75	75	2
-3	1	5	314	299	2	5	-6	6	69	70	2	3	1	6	43	48	2	1	-4	7	96	92	2	-2	3	7	16	13	3
-2	1	5	354	352	3	-4	-5	6	18	7	4	4	1	6	29	30	2	2	-4	7	24	22	2	-1	3	7	118	115	1
-1	1	5	106	106	1	-3	-5	6	10	9	10	5	1	6	70	69	2	3	-4	7	66	67	2	0	3	7	48	50	2
0	1	5	155	157	1	-2	-5	6	40	39	2	-7	2	6	47	49	3	4	-4	7	157	156	2	1	3	7	23	20	2
1	1	5	88	87	1	-1	-5	6	38	29	2	-6	2	6	12	8	6	5	-4	7	15	6	6	2	3	7	9	12	9
2	1	5	199	189	6	0	-5	6	38	42	2	-5	2	6	34	30	2	-5	-3	7	9	7	8	3	3	7	50	49	2
3	1	5	31	36	2	1	-5	6	37	36	2	-4	2	6	152	149	2	-4	-3	7	138	137	2	4	3	7	16	3	4
4	1	5	23	19	2	2	-5	6	48	53	3	-3	2	6	74	78	1	-3	-3	7	106	105	2	-7	4	7	28	27	3
5	1	5	26	26	3	3	-5	6	26	25	2	-2	2	6	81	85	1	-2	-3	7	14	16	4	-6	4	7	36	36	2
6	1	5	16	15	4	4	-5	6	163	167	2	-1	2	6	78	76	2	-1	-3	7	93	94	1	-5	4	7	12	1	6
-7	2	5	15	6	6	5	-5	6	55	56	2	0	2	6	67	66	1	0	-3	7	65	75	5	-4	4	7	17	15	4
-6	2	5	62	61	2	-5	-4	6	49	46	3	1	2	6	96	93	2	1	-3	7	47	43	1	-3	4	7	21	16	3
-5	2	5	62	65	2	-4	-4	6	24	20	2	2	2	6	74	76	2	2	-3	7	6	0	5	-2	4	7	44	58	13
-4	2	5	18	17	2	-3	-4	6	49	52	2	3	2	6	54	56	2	3	-3	7	169	173	2	-1	4	7	58	55	2
-3	2	5	114	118	1	-2	-4	6	145	142	2	4	2	6	73	74	2	4	-3	7	123	122	2	0	4	7	14	12	5
-2	2	5	119	123	1	-1	-4	6	75	72	2	5	2	6	22	17	3	5	-3	7	12	2	7	1	4	7	17	14	3
-1	2	5	131	130	1	0	-4	6	137	136	1	-7	3	6	43	41	3	6	-3	7	29	29	4	2	4	7	105	106	2
0	2	5	13	14	2	1	-4	6	43	44	1	-6	3	6	49	50	2	-6	-2	7	62	56	2	3	4	7	25	22	3
1	2	5	141	141	1	2	-4	6	19	13	3	-5	3	6	8	3	8	-5	-2	7	17	14	3	-6	5	7	14	12	6
2	2	5	34	37	2	3	-4	6	61	64	2	-4	3	6	21	17	3	-4	-2	7	17	14	3	-5	5	7	29	28	2
3	2	5	63	66	2	4	-4	6	80	78	2	-3	3	6	242	240	2	-3	-2	7	14	13	4	-4	5	7	145	149	2
4	2	5	17	16	3	5	-4	6	88	83	2	-2	3	6	156	153	1	-2	-2	7	132	133	1	-3	5	7	108	104	2
5	2	5	109	111	2	6	-4	6	33	33	3	-1	3	6	194	194	2	-1	-2	7	7	0	7	-2	5	7	47	48	2
-7	3	5	84	82	3	-6	-3	6	26	23	3	0	3	6	90	89	1	0	-2	7	301	280	1	-1	5	7	34	30	3
-6	3	5	26	27	3	-5	-3	6	48	46	2	1	3	6	109	110	2	1	-2	7	27	30	2	0	5	7	28	29	3
-5	3	5	114	110	2	-4	-3	6	152	155	2	2	3	6	58	57	3	2	-2	7	170	174	1	1	5	7	138	140	2
-4	3	5	196	196	4	-3	-3	6	186	184	2	3	3	6	88	90	2	3	-2	7	28	21	3	2	5	7	25	22	2
-3	3	5	211	207	1	-2	-3	6																					

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3a.

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
-3	-4	8	32	27	2	-2	3	8	95	92	2	4	-1	9	130	135	3	3	-4	10	11	14	10	-1	5	10	19	17	4
-2	-4	8	200	195	2	-1	3	8	69	64	2	5	-1	9	14	0	9	4	-4	10	53	47	2	0	5	10	11	12	7
-1	-4	8	52	55	2	0	3	8	28	25	2	-6	0	9	115	127	3	-5	-3	10	42	37	2	-3	6	10	28	27	3
0	-4	8	15	17	3	0	3	8	52	54	2	-5	0	9	103	107	2	-4	-3	10	71	70	2	-2	6	10	29	30	3
1	-4	8	125	129	3	2	3	8	45	45	2	-4	0	9	2	1	2	-3	-3	10	212	203	2	-2	-5	11	33	29	3
2	-4	8	50	48	3	3	3	8	21	16	3	-3	0	9	36	36	2	-2	-3	10	231	227	2	-1	-5	11	55	55	3
3	-4	8	16	8	4	-7	4	8	21	22	4	-2	0	9	178	175	2	-1	-3	10	52	50	2	0	-5	11	32	27	4
4	-4	8	60	64	2	-6	4	8	55	55	2	-1	0	9	51	53	3	0	-3	10	27	36	9	1	-5	11	8	4	7
5	-4	8	7	0	6	-5	4	8	29	31	3	0	0	9	61	59	1	1	-3	10	61	62	3	2	-5	11	41	43	3
-5	-3	8	58	57	2	-4	4	8	14	6	4	1	0	9	52	51	1	2	-3	10	56	60	2	-3	-4	11	61	57	3
-4	-3	8	130	126	2	-3	4	8	45	44	2	2	0	9	39	36	2	3	-3	10	27	30	3	-2	-4	11	70	67	3
-3	-3	8	34	37	2	-2	4	8	55	55	2	3	0	9	145	149	3	4	-3	10	9	8	9	-1	-4	11	118	116	2
-2	-3	8	67	68	3	-1	4	8	101	105	2	4	0	9	35	33	4	-5	-2	10	29	26	3	0	-4	11	20	17	7
-1	-3	8	53	55	2	0	4	8	116	124	2	5	0	9	35	36	6	-4	-2	10	19	22	5	1	-4	11	61	67	3
0	-3	8	141	144	2	1	4	8	17	13	3	-7	1	9	17	2	4	-3	-2	10	20	21	3	2	-4	11	11	10	10
1	-3	8	27	20	2	2	4	8	129	132	2	-6	1	9	64	75	2	-2	-2	10	50	48	2	3	-4	11	15	1	6
2	-3	8	33	30	2	3	4	8	29	26	2	-5	1	9	47	52	2	-1	-2	10	121	121	2	-4	-3	11	54	51	2
3	-3	8	216	213	2	-6	5	8	39	37	3	-4	1	9	9	1	9	0	-2	10	23	21	3	-3	-3	11	75	75	4
4	-3	8	192	189	2	-5	5	8	5	6	5	-3	1	9	89	91	2	1	-2	10	29	29	2	-2	-3	11	286	280	2
5	-3	8	20	15	3	-4	5	8	38	39	2	-2	1	9	107	109	2	2	-2	10	4	7	4	-1	-3	11	21	20	3
-6	-2	8	39	32	2	-3	5	8	60	59	2	-1	1	9	178	174	1	3	-2	10	19	9	4	0	-3	11	72	97	18
-5	-2	8	129	136	2	-2	5	8	24	26	3	0	1	9	6	2	5	4	-2	10	124	126	3	1	-3	11	48	44	4
-4	-2	8	65	66	2	-1	5	8	9	10	9	1	1	9	107	105	1	-6	-1	10	34	35	3	2	-3	11	36	32	3
-3	-2	8	112	113	2	0	5	8	27	29	3	2	1	9	289	290	2	-5	-1	10	34	34	3	3	-3	11	46	49	2
-2	-2	8	61	64	7	1	5	8	64	60	3	3	1	9	181	235	40	-4	-1	10	52	57	2	4	-3	11	29	21	3
-1	-2	8	90	92	1	2	5	8	54	48	2	4	1	9	34	33	4	-3	-1	10	125	127	2	-5	-2	11	29	22	3
0	-2	8	67	64	1	-5	6	8	37	34	3	-7	2	9	14	3	4	-2	-1	10	221	230	5	-4	-2	11	58	58	3
1	-2	8	133	130	1	-4	6	8	61	61	2	-6	2	9	16	13	4	-1	-1	10	130	126	1	-3	-2	11	78	75	2
2	-2	8	105	107	2	-3	6	8	14	11	6	-5	2	9	23	23	3	0	-1	10	23	23	2	-2	-2	11	27	30	2
3	-2	8	194	199	2	-2	6	8	18	21	4	-4	2	9	98	100	2	1	-1	10	77	76	2	-1	-2	11	55	56	2
4	-2	8	35	30	2	-1	6	8	30	29	3	-3	2	9	88	91	2	2	-1	10	19	23	6	0	-2	11	31	30	3
5	-2	8	28	20	4	0	6	8	12	6	8	-2	2	9	4	15	4	3	-1	10	0	10	1	1	-2	11	41	41	2
-6	-1	8	66	69	2	-1	6	9	79	79	3	-1	2	9	96	96	2	4	-1	10	77	78	3	2	-2	11	15	7	4
-5	-1	8	3	1	3	0	6	9	103	100	3	0	2	9	89	89	1	-6	0	10	13	12	6	3	-2	11	35	26	2
-4	-1	8	7	7	7	1	6	9	17	15	5	1	2	9	27	28	2	-5	0	10	91	105	2	4	-2	11	21	18	4
-3	-1	8	77	76	2	2	6	9	13	2	7	2	2	9	14	11	3	-4	0	10	5	8	4	-6	-1	11	22	14	4
-2	-1	8	188	182	1	3	-6	9	17	12	5	3	2	9	40	40	2	-3	0	10	47	52	2	-5	-1	11	64	66	3
-1	-1	8	59	58	1	-3	-5	9	61	54	3	4	2	9	36	33	3	-2	0	10	104	105	1	-4	-1	11	73	82	2
0	-1	8	33	31	1	-2	-5	9	247	232	2	-7	3	9	55	50	2	-1	0	10	106	133	17	-3	-1	11	223	226	2
1	-1	8	89	85	1	-1	-5	9	188	186	2	-6	3	9	55	58	2	0	0	10	118	121	1	-2	-1	11	137	173	31
2	-1	8	83	79	2	0	-5	9	37	63	29	-5	3	9	114	116	3	1	0	10	71	71	1	-1	-1	11	68	66	2
3	-1	8	370	358	2	1	-5	9	57	57	3	-4	3	9	88	89	2	2	0	10	37	36	2	0	-1	11	57	58	2
4	-1	8	26	28	4	2	-5	9	109	114	3	-3	3	9	75	75	2	3	0	10	86	86	3	1	-1	11	29	28	2
5	-1	8	39	33	4	3	-5	9	23	22	4	-2	3	9	28	26	2	4	0	10	21	13	5	2	-1	11	17	20	3
-7	0	8	17	6	4	4	-5	9	32	35	3	-1	3	9	36	38	2	-6	1	10	29	31	3	3	-1	11	56	58	3
-6	0	8	24	28	3	-4	-4	9	50	48	2	0	3	9	9	2	9	-5	1	10	20	11	3	4	-1	11	36	36	4
-5	0	8	3	12	3	-3	-4	9	21	21	3	1	3	9	59	61	2	-4	1	10	26	27	2	-6	0	11	88	93	3
-4	0	8	64	68	2	-2	-4	9	132	128	2	2	3	9	117	114	2	-3	1	10	65	66	2	-5	0	11	55	59	3
-3	0	8	10	11	4	-1	-4	9	53	49	2	3	3	9	36	35	2	-2	1	10	67	66	2	-4	0	11	52	54	2
-2	0	8	42	38	1	0	-4	9	35	50	17	-6	4	9	25	23	3	-1	1	10	10	3	4	-3	0	11	144	149	2
-1	0	8	172	168	1	1	-4	9	0	5	1	-5	4	9	33	31	2	0	1	10	18	19	2	-2	0	11	29	28	2
0	0	8	273	262	1	2	-4	9	0	1	1	-4	4	9	28	25	3	1	1	10	31	32	2	-1	0	11	121	128	3
1	0	8	27	27	1	3	-4	9	9	4	9	-3	4	9	30	28	2	2	1	10	48	49	2	0	0	11	5	5	5
2	0	8	52	50	1	4	-4	9	24	19	3	-2	4	9	66	65	2	3	1	10	76	78	3	1	0	11	60	60	2
3	0	8	23	23	3	-5	-3	9	8	4	8	-1	4	9	131	133	2	4	1	10	25	21	4	2	0	11	50	53	2
4	0	8	0	2	1	-4	-3	9	90	89	2	0	4	9	50	49	2	-6	2	10	116	125	3	3	0	11	96	92	3
5	0	8	13	0	10	-3	-3	9	52	49	2	1	4	9	13	10	4	-5	2	10	14	17	4	-6	1	11	17	13	4
-7	1	8	19	7	4	-2	-3	9	212	207	2	2	4	9	56	56	2	-4	2	10	154	157	2	-5	1	11	60	59	3
-6	1	8	12	7	5	-1	-3	9	155	154	2	-6	5	9	22	18	3	-3	2	10	171	177	2	-4	1	11	33	37	2
-5	1	8	10	10	9	0	-3	9	32	39	12	-5	5	9	55	53	2	-2	2	10	59	62	2	-3	1	11	157	159	2
-4	1	8	50	61	5	1	-3	9	23	26	3	-4	5	9	12	5	7	-1	2	10	14	11	4	-2	1	11			

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3a.

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
-3	4	11	65	64	2	-2	-1	12	222	221	4	0	3	12	17	13	4	-1	0	13	56	53	2	-2	-1	14	15	18	6
-2	4	11	26	22	4	-1	-1	12	20	15	3	1	3	12	16	7	4	0	0	13	114	118	2	-1	-1	14	35	32	3
-1	4	11	51	52	3	0	-1	12	125	125	2	-5	4	12	87	85	2	1	0	13	26	28	3	0	-1	14	25	24	4
0	4	11	22	19	3	1	-1	12	56	62	10	-4	4	12	24	23	3	2	0	13	17	10	5	1	-1	14	72	59	3
1	4	11	21	17	3	2	-1	12	82	77	3	-3	4	12	59	56	2	-5	1	13	105	109	3	-4	0	14	16	2	5
-4	5	11	25	22	3	3	-1	12	18	2	5	-2	4	12	18	19	4	-4	1	13	21	21	3	-3	0	14	12	15	6
-3	5	11	39	42	3	-5	0	12	47	51	3	-1	4	12	106	104	3	-3	1	13	185	184	2	-2	0	14	41	43	3
-2	5	11	85	85	3	-4	0	12	64	58	2	0	4	12	22	25	3	-2	1	13	136	136	2	-1	0	14	24	24	4
-1	5	11	9	3	9	-3	0	12	31	30	3	-3	5	12	21	18	4	-1	1	13	131	131	2	0	0	14	33	36	3
-1	-5	12	67	66	3	-2	0	12	14	11	5	-2	-4	13	42	40	3	0	1	13	35	38	3	1	0	14	51	46	5
0	-5	12	48	47	3	-1	0	12	94	91	2	-1	-4	13	98	99	3	1	1	13	60	60	3	-4	1	14	23	14	3
1	-5	12	41	43	3	0	0	12	51	54	2	0	-4	13	108	107	3	2	1	13	19	11	6	-3	1	14	94	91	2
-3	-4	12	18	13	4	1	0	12	61	62	2	1	-4	13	20	23	5	-5	2	13	31	32	3	-2	1	14	64	61	2
-2	-4	12	24	21	3	2	0	12	34	31	3	-3	-3	13	28	28	4	-4	2	13	39	40	2	-1	1	14	127	122	2
-1	-4	12	79	74	3	3	0	12	53	47	3	-2	-3	13	29	21	3	-3	2	13	121	119	2	0	1	14	67	69	3
0	-4	12	22	17	5	-6	1	12	21	11	4	-1	-3	13	72	68	2	-2	2	13	91	89	2	1	1	14	72	70	3
1	-4	12	68	78	4	-5	1	12	10	2	9	0	-3	13	37	40	3	-1	2	13	23	23	3	-4	2	14	36	35	4
2	-4	12	52	43	4	-4	1	12	165	171	2	1	-3	13	27	19	4	0	2	13	88	89	2	-3	2	14	47	48	2
-4	-3	12	16	12	5	-3	1	12	276	280	2	2	-3	13	16	13	7	1	2	13	16	11	6	-2	2	14	30	29	2
-3	-3	12	15	7	5	-2	1	12	8	9	8	-4	-2	13	20	23	4	-5	3	13	42	40	2	-1	2	14	29	28	3
-2	-3	12	77	78	2	-1	1	12	82	81	2	-3	-2	13	15	0	7	-4	3	13	162	160	2	0	2	14	68	62	3
-1	-3	12	75	69	2	0	1	12	30	33	2	-2	-2	13	28	25	4	-3	3	13	172	169	2	-3	3	14	60	58	2
0	-3	12	49	67	15	1	1	12	31	33	3	-1	-2	13	24	23	4	-2	3	13	14	10	5	-2	3	14	12	14	7
1	-3	12	83	87	3	2	1	12	79	82	2	0	-2	13	78	85	2	-1	3	13	34	33	3	-1	3	14	40	38	3
2	-3	12	54	53	3	-6	2	12	35	34	3	1	-2	13	45	45	3	0	3	13	18	18	4	-1	-2	15	64	56	3
3	-3	12	15	8	7	-5	2	12	29	26	2	2	-2	13	57	48	3	-4	4	13	98	101	2	-3	-1	15	50	49	5
-5	-2	12	62	56	3	-4	2	12	82	82	2	-5	-1	13	14	6	7	-3	4	13	26	26	3	-2	-1	15	40	39	3
-4	-2	12	7	4	7	-3	2	12	216	211	2	-4	-1	13	16	22	4	-2	4	13	18	9	4	-1	-1	15	33	28	4
-3	-2	12	30	26	3	-2	2	12	81	83	2	-3	-1	13	150	148	2	-2	-3	14	12	10	12	0	-1	15	12	7	11
-2	-2	12	9	6	8	-1	2	12	37	39	2	-2	-1	13	88	83	3	-1	-3	14	76	75	2	-3	0	15	7	3	7
-1	-2	12	19	16	3	0	2	12	37	39	3	-1	-1	13	80	79	3	0	-3	14	26	20	4	-2	0	15	31	28	6
0	-2	12	50	55	2	1	2	12	78	77	2	0	-1	13	34	30	2	-3	-2	14	30	30	4	-1	0	15	27	27	4
1	-2	12	83	90	3	2	2	12	42	40	2	1	-1	13	156	153	3	-2	-2	14	117	118	3	0	0	15	64	59	5
2	-2	12	17	12	3	-5	3	12	76	79	2	2	-1	13	45	38	4	-1	-2	14	33	26	4	-3	1	15	23	24	3
3	-2	12	29	25	3	-4	3	12	94	98	2	-5	0	13	49	49	3	0	-2	14	52	57	3	-2	1	15	48	44	4
-5	-1	12	27	23	3	-3	3	12	149	150	2	-4	0	13	14	1	5	1	-2	14	15	5	14	-1	1	15	60	59	3
-4	-1	12	83	91	2	-2	3	12	40	54	9	-3	0	13	30	25	3	-4	-1	14	44	43	3						
-3	-1	12	286	283	2	-1	3	12	44	38	3	-2	0	13	7	0	7	-3	-1	14	43	38	4						

ORTEP drawing for 3b

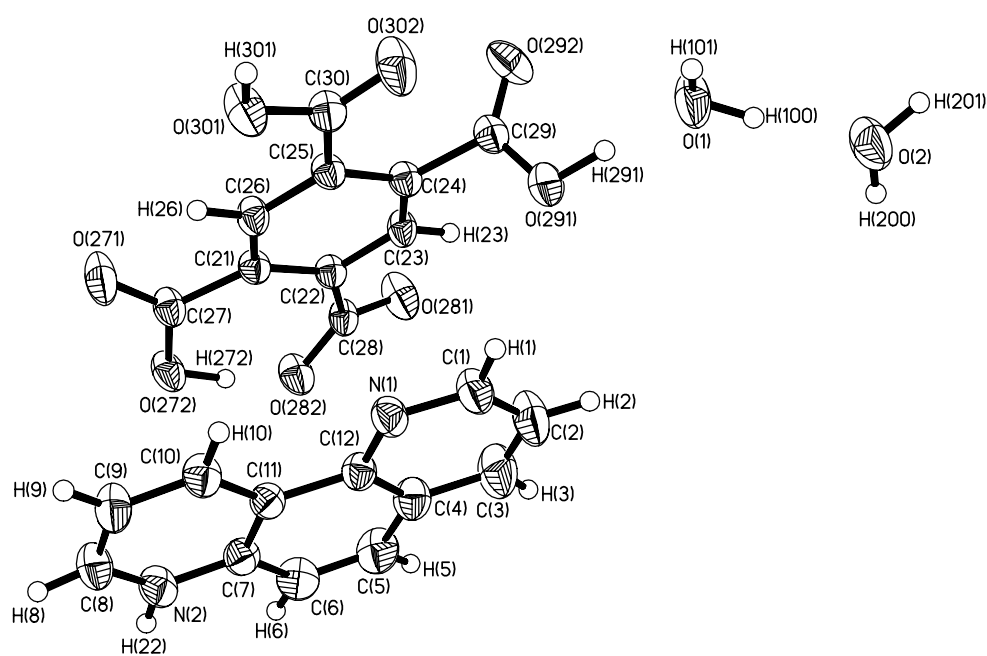


Table 1. Crystal data and structure refinement for 3b.

Identification code	3b	
Empirical formula	C ₂₂ H ₁₈ N ₂ O ₁₀	
Formula weight	470.38	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 9.752(2) Å	α = 80.10(1)°.
	b = 9.822(2) Å	β = 69.38(1)°.
	c = 12.034(3) Å	γ = 67.38(1)°.
Volume	994.9(4) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.570 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.126 mm ⁻¹	
F(000)	488	
Crystal size	0.38 x 0.22 x 0.15 mm ³	
Theta range for data collection	1.81 to 23.47°.	
Index ranges	-10 ≤ h ≤ 10, -10 ≤ k ≤ 10, -13 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	8265	
Independent reflections	2865 [R(int) = 0.0291]	
Completeness to theta = 23.47°	98.0 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	2865 / 0 / 379	
Goodness-of-fit on F ²	1.049	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0379, wR2 = 0.0976	
R indices (all data)	R1 = 0.0435, wR2 = 0.1018	
Largest diff. peak and hole	0.185 and -0.303 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(1)	1538(2)	10252(2)	1744(2)	42(1)
C(2)	2749(3)	10804(3)	1404(2)	57(1)
C(3)	3644(3)	10518(3)	2120(2)	56(1)
C(4)	3329(2)	9688(2)	3178(2)	40(1)
C(5)	4218(2)	9354(2)	3970(2)	47(1)
C(6)	3863(2)	8601(2)	5000(2)	43(1)
C(7)	2590(2)	8111(2)	5300(2)	34(1)
C(8)	1072(2)	6829(2)	6676(2)	42(1)
C(9)	205(2)	7000(2)	5943(2)	41(1)
C(10)	513(2)	7766(2)	4887(2)	37(1)
C(11)	1704(2)	8348(2)	4541(1)	30(1)
C(12)	2082(2)	9184(2)	3449(2)	32(1)
C(21)	3483(2)	5558(2)	2226(1)	27(1)
C(22)	4581(2)	6195(2)	1493(1)	27(1)
C(23)	4350(2)	6922(2)	449(2)	29(1)
C(24)	3076(2)	7072(2)	114(1)	27(1)
C(25)	1998(2)	6437(2)	831(1)	28(1)
C(26)	2227(2)	5692(2)	1864(2)	30(1)
C(27)	3506(2)	4695(2)	3382(2)	32(1)
C(28)	6039(2)	6180(2)	1701(2)	30(1)
C(29)	2928(2)	7916(2)	-1015(2)	30(1)
C(30)	630(2)	6572(2)	473(2)	32(1)
N(1)	1198(2)	9465(2)	2727(1)	35(1)
N(2)	2207(2)	7369(2)	6345(1)	39(1)
O(1)	1591(2)	10721(2)	-2704(1)	53(1)
O(2)	2076(2)	13156(2)	-3830(2)	56(1)
O(271)	2750(2)	3879(2)	3740(1)	54(1)
O(272)	4266(1)	4865(1)	4007(1)	38(1)
O(281)	7068(1)	6421(2)	833(1)	47(1)
O(282)	6139(1)	5948(1)	2743(1)	42(1)
O(291)	2150(2)	9319(1)	-863(1)	45(1)
O(292)	3571(2)	7341(2)	-1972(1)	48(1)
O(301)	-327(2)	5973(2)	1234(1)	45(1)
O(302)	459(2)	7175(2)	-447(1)	52(1)
H(1)	890(20)	10390(20)	1259(17)	46(5)
H(2)	2840(30)	11410(20)	720(20)	65(6)
H(3)	4500(30)	10840(20)	1950(20)	67(7)
H(5)	5100(30)	9640(20)	3756(19)	63(6)
H(6)	4450(20)	8360(20)	5530(18)	49(6)
H(8)	880(20)	6350(20)	7420(20)	55(6)
H(9)	-620(20)	6600(20)	6185(18)	53(6)
H(10)	-60(20)	7889(19)	4359(17)	43(5)
H(22)	2720(30)	7300(20)	6840(20)	60(7)
H(23)	5084(19)	7344(17)	-33(14)	23(4)
H(26)	1530(20)	5229(19)	2344(16)	34(5)
H(100)	1790(30)	11560(30)	-3070(20)	86(8)
H(101)	700(30)	10760(30)	-2760(20)	93(10)
H(200)	2580(40)	13490(40)	-3550(30)	121(12)
H(201)	2400(30)	13350(30)	-4670(30)	79(8)
H(272)	5040(30)	5400(20)	3520(20)	68(7)
H(291)	1950(20)	9870(20)	-1610(20)	63(6)
H(301)	-1330(30)	6200(20)	1040(20)	79(8)

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

C(1)-N(1)	1.309(2)	N(1)-C(1)-C(2)	123.72(19)
C(1)-C(2)	1.391(3)	N(1)-C(1)-H(1)	113.9(11)
C(1)-H(1)	0.96(2)	C(2)-C(1)-H(1)	122.4(11)
C(2)-C(3)	1.357(3)	C(3)-C(2)-C(1)	118.9(2)
C(2)-H(2)	0.93(2)	C(3)-C(2)-H(2)	123.9(15)
C(3)-C(4)	1.393(3)	C(1)-C(2)-H(2)	117.0(15)
C(3)-H(3)	0.95(2)	C(2)-C(3)-C(4)	119.6(2)
C(4)-C(12)	1.399(2)	C(2)-C(3)-H(3)	124.6(14)
C(4)-C(5)	1.423(3)	C(4)-C(3)-H(3)	115.8(14)
C(5)-C(6)	1.335(3)	C(3)-C(4)-C(12)	117.44(18)
C(5)-H(5)	0.94(2)	C(3)-C(4)-C(5)	122.39(18)
C(6)-C(7)	1.411(3)	C(12)-C(4)-C(5)	120.16(17)
C(6)-H(6)	0.94(2)	C(6)-C(5)-C(4)	121.53(18)
C(7)-N(2)	1.347(2)	C(6)-C(5)-H(5)	118.8(13)
C(7)-C(11)	1.400(2)	C(4)-C(5)-H(5)	119.6(13)
C(8)-N(2)	1.317(3)	C(5)-C(6)-C(7)	119.05(18)
C(8)-C(9)	1.373(3)	C(5)-C(6)-H(6)	122.8(12)
C(8)-H(8)	0.92(2)	C(7)-C(6)-H(6)	118.1(12)
C(9)-C(10)	1.359(3)	N(2)-C(7)-C(11)	117.97(16)
C(9)-H(9)	0.96(2)	N(2)-C(7)-C(6)	119.56(16)
C(10)-C(11)	1.392(2)	C(11)-C(7)-C(6)	122.47(16)
C(10)-H(10)	0.95(2)	N(2)-C(8)-C(9)	120.33(18)
C(11)-C(12)	1.435(2)	N(2)-C(8)-H(8)	117.5(13)
C(12)-N(1)	1.355(2)	C(9)-C(8)-H(8)	122.1(13)
C(21)-C(26)	1.393(2)	C(10)-C(9)-C(8)	118.93(18)
C(21)-C(22)	1.406(2)	C(10)-C(9)-H(9)	120.8(12)
C(21)-C(27)	1.501(2)	C(8)-C(9)-H(9)	120.2(12)
C(22)-C(23)	1.381(2)	C(9)-C(10)-C(11)	120.73(17)
C(22)-C(28)	1.522(2)	C(9)-C(10)-H(10)	120.6(11)
C(23)-C(24)	1.385(2)	C(11)-C(10)-H(10)	118.6(11)
C(23)-H(23)	0.935(17)	C(10)-C(11)-C(7)	118.49(15)
C(24)-C(25)	1.385(2)	C(10)-C(11)-C(12)	123.86(15)
C(24)-C(29)	1.488(2)	C(7)-C(11)-C(12)	117.65(15)
C(25)-C(26)	1.374(2)	N(1)-C(12)-C(4)	122.75(16)
C(25)-C(30)	1.494(2)	N(1)-C(12)-C(11)	118.19(15)
C(26)-H(26)	0.937(19)	C(4)-C(12)-C(11)	119.06(15)
C(27)-O(271)	1.218(2)	C(26)-C(21)-C(22)	118.56(15)
C(27)-O(272)	1.294(2)	C(26)-C(21)-C(27)	114.08(14)
C(28)-O(281)	1.231(2)	C(22)-C(21)-C(27)	127.35(14)
C(28)-O(282)	1.266(2)	C(23)-C(22)-C(21)	117.82(14)
C(29)-O(292)	1.216(2)	C(23)-C(22)-C(28)	114.41(14)
C(29)-O(291)	1.302(2)	C(21)-C(22)-C(28)	127.76(14)
C(30)-O(302)	1.198(2)	C(22)-C(23)-C(24)	122.89(16)
C(30)-O(301)	1.300(2)	C(22)-C(23)-H(23)	117.3(10)
N(2)-H(22)	0.88(2)	C(24)-C(23)-H(23)	119.8(9)
O(1)-H(100)	0.92(3)	C(23)-C(24)-C(25)	119.37(15)
O(1)-H(101)	0.88(3)	C(23)-C(24)-C(29)	118.04(15)
O(2)-H(200)	0.86(4)	C(25)-C(24)-C(29)	122.59(14)
O(2)-H(201)	0.95(3)	C(26)-C(25)-C(24)	118.32(15)
O(272)-H(272)	1.04(3)	C(26)-C(25)-C(30)	121.68(15)
O(282)-H(272)	1.37(3)	C(24)-C(25)-C(30)	120.01(14)
O(291)-H(291)	1.01(2)	C(25)-C(26)-C(21)	123.02(16)
O(301)-H(301)	1.02(3)	C(25)-C(26)-H(26)	119.1(11)
		C(21)-C(26)-H(26)	117.8(11)
		O(271)-C(27)-O(272)	120.75(15)
		O(271)-C(27)-C(21)	118.87(15)
		O(272)-C(27)-C(21)	120.32(14)
		O(281)-C(28)-O(282)	122.83(15)
		O(281)-C(28)-C(22)	117.48(15)
		O(282)-C(28)-C(22)	119.67(15)
		O(292)-C(29)-O(291)	125.11(15)
		O(292)-C(29)-C(24)	122.16(15)
		O(291)-C(29)-C(24)	112.54(14)
		O(302)-C(30)-O(301)	123.84(16)
		O(302)-C(30)-C(25)	121.74(15)
		O(301)-C(30)-C(25)	114.41(15)
		C(1)-N(1)-C(12)	117.57(16)
		C(8)-N(2)-C(7)	123.51(16)
		C(8)-N(2)-H(22)	119.6(15)
		C(7)-N(2)-H(22)	116.8(15)
		H(100)-O(1)-H(101)	109(2)
		H(200)-O(2)-H(201)	106(3)
		C(27)-O(272)-H(272)	112.1(12)
		C(28)-O(282)-H(272)	112.8(9)
		C(29)-O(291)-H(291)	112.5(12)
		C(30)-O(301)-H(301)	113.8(13)

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

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	49(1)	44(1)	34(1)	9(1)	-17(1)	-18(1)
C(2)	65(2)	65(1)	44(1)	21(1)	-17(1)	-36(1)
C(3)	55(1)	68(1)	54(1)	17(1)	-15(1)	-40(1)
C(4)	37(1)	42(1)	43(1)	3(1)	-12(1)	-18(1)
C(5)	41(1)	56(1)	56(1)	3(1)	-19(1)	-28(1)
C(6)	41(1)	51(1)	49(1)	2(1)	-25(1)	-19(1)
C(7)	36(1)	31(1)	35(1)	1(1)	-16(1)	-10(1)
C(8)	48(1)	42(1)	37(1)	12(1)	-18(1)	-17(1)
C(9)	43(1)	45(1)	43(1)	13(1)	-20(1)	-23(1)
C(10)	38(1)	41(1)	38(1)	7(1)	-21(1)	-17(1)
C(11)	31(1)	29(1)	31(1)	1(1)	-14(1)	-10(1)
C(12)	32(1)	30(1)	33(1)	2(1)	-12(1)	-11(1)
C(21)	27(1)	31(1)	28(1)	3(1)	-12(1)	-12(1)
C(22)	26(1)	30(1)	28(1)	3(1)	-12(1)	-11(1)
C(23)	27(1)	34(1)	29(1)	8(1)	-10(1)	-18(1)
C(24)	26(1)	31(1)	28(1)	2(1)	-12(1)	-10(1)
C(25)	26(1)	33(1)	26(1)	3(1)	-11(1)	-13(1)
C(26)	28(1)	38(1)	30(1)	7(1)	-10(1)	-19(1)
C(27)	29(1)	41(1)	30(1)	8(1)	-13(1)	-16(1)
C(28)	30(1)	34(1)	33(1)	9(1)	-17(1)	-16(1)
C(29)	27(1)	40(1)	30(1)	6(1)	-14(1)	-16(1)
C(30)	28(1)	37(1)	34(1)	4(1)	-15(1)	-14(1)
N(1)	40(1)	36(1)	32(1)	5(1)	-17(1)	-14(1)
N(2)	44(1)	43(1)	35(1)	7(1)	-23(1)	-14(1)
O(1)	63(1)	55(1)	58(1)	29(1)	-40(1)	-33(1)
O(2)	72(1)	73(1)	43(1)	22(1)	-25(1)	-49(1)
O(271)	64(1)	77(1)	44(1)	31(1)	-31(1)	-52(1)
O(272)	42(1)	54(1)	29(1)	12(1)	-20(1)	-26(1)
O(281)	36(1)	78(1)	42(1)	18(1)	-20(1)	-36(1)
O(282)	44(1)	61(1)	37(1)	12(1)	-24(1)	-31(1)
O(291)	65(1)	34(1)	38(1)	10(1)	-27(1)	-14(1)
O(292)	48(1)	57(1)	30(1)	0(1)	-19(1)	-5(1)
O(301)	36(1)	76(1)	38(1)	18(1)	-20(1)	-36(1)
O(302)	50(1)	72(1)	54(1)	32(1)	-37(1)	-37(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

Page 1

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	45	45	1	-2	5	0	43	38	2	0	-9	1	49	47	2	0	-3	1	133	135	2	-5	2	1	23	20	2
2	0	0	575	576	5	-1	5	0	189	189	1	1	-9	1	23	17	3	1	-3	1	24	26	1	-4	2	1	9	9	6
3	0	0	265	249	2	0	5	0	110	109	1	2	-9	1	49	47	2	2	-3	1	140	139	9	-3	2	1	163	161	1
4	0	0	26	26	2	1	5	0	148	156	1	-8	-8	1	48	47	3	3	-3	1	154	157	1	-2	2	1	388	381	1
5	0	0	254	252	3	2	5	0	96	97	1	-7	-8	1	30	23	5	4	-3	1	161	158	2	-1	2	1	1692	1737	2
6	0	0	38	38	2	3	5	0	88	88	1	-6	-8	1	61	63	3	5	-3	1	91	92	2	0	2	1	368	367	2
7	0	0	31	30	4	4	5	0	199	184	1	-5	-8	1	127	127	2	6	-3	1	19	17	3	1	2	1	466	469	4
8	0	0	78	78	2	5	5	0	6	2	6	-4	-8	1	79	73	2	7	-3	1	37	45	3	2	2	1	158	161	1
9	0	0	12	4	5	6	5	0	47	44	1	-3	-8	1	163	161	2	8	-3	1	12	22	12	3	2	1	572	562	1
-9	1	0	13	7	5	7	5	0	24	25	2	-2	-8	1	42	44	2	-9	-2	1	18	11	3	4	2	1	150	142	1
-8	1	0	93	90	2	8	5	0	47	41	2	-1	-8	1	34	32	2	-8	-2	1	46	45	2	5	2	1	36	40	1
-7	1	0	42	44	2	9	5	0	165	177	2	0	-8	1	9	4	9	-7	-2	1	155	154	2	6	2	1	23	21	2
-6	1	0	11	5	4	10	5	0	98	99	2	1	-8	1	153	152	2	-6	-2	1	61	53	2	7	2	1	21	20	2
-5	1	0	176	168	2	-5	6	0	85	91	3	2	-8	1	43	41	2	-5	-2	1	102	107	1	8	2	1	256	253	2
-4	1	0	155	158	1	-4	6	0	0	4	1	3	-8	1	26	28	4	-4	-2	1	530	491	5	9	2	1	11	16	7
-3	1	0	579	557	3	-3	6	0	15	20	3	-9	-7	1	64	61	3	-3	-2	1	37	44	3	10	2	1	42	42	2
-2	1	0	441	436	1	-2	6	0	19	15	3	-8	-7	1	10	9	10	-2	-2	1	377	377	2	-7	3	1	0	1	1
-1	1	0	278	292	1	-1	6	0	63	64	2	-7	-7	1	79	93	5	-1	-2	1	333	356	3	-6	3	1	115	112	2
0	1	0	219	224	3	0	6	0	120	122	2	-6	-7	1	12	9	3	0	-2	1	266	278	1	-5	3	1	85	87	2
1	1	0	809	876	4	1	6	0	88	89	1	-5	-7	1	58	54	3	1	-2	1	116	114	1	-4	3	1	22	25	2
2	1	0	194	197	1	2	6	0	166	168	2	-4	-7	1	111	117	2	2	-2	1	80	88	1	-3	3	1	99	101	1
3	1	0	196	190	4	3	6	0	147	147	1	-3	-7	1	16	16	3	3	-2	1	14	11	1	-2	3	1	30	27	1
4	1	0	100	93	1	4	6	0	179	176	2	-2	-7	1	255	252	4	4	-2	1	13	2	2	-1	3	1	150	166	6
5	1	0	103	104	1	5	6	0	47	54	5	-1	-7	1	18	16	3	5	-2	1	322	326	1	0	3	1	1238	1256	2
6	1	0	200	199	2	6	6	0	62	62	1	0	-7	1	9	9	7	6	-2	1	19	16	3	1	3	1	2	5	2
7	1	0	135	133	2	7	6	0	101	104	2	1	-7	1	31	28	2	7	-2	1	65	62	2	2	3	1	332	341	1
8	1	0	44	43	2	8	6	0	246	244	2	2	-7	1	140	146	2	8	-2	1	121	115	2	3	3	1	105	103	2
9	1	0	30	29	2	9	6	0	42	43	2	3	-7	1	57	54	2	-9	-1	1	36	37	2	4	3	1	482	468	2
-8	2	0	55	51	3	-4	7	0	77	76	3	4	-7	1	24	26	3	-8	-1	1	115	107	2	5	3	1	314	292	1
-7	2	0	81	81	2	-3	7	0	42	41	3	-9	-6	1	14	3	6	-7	-1	1	23	19	2	6	3	1	179	180	1
-6	2	0	19	16	3	-2	7	0	43	37	2	-8	-6	1	23	18	2	-6	-1	1	24	18	2	7	3	1	96	97	2
-5	2	0	59	59	2	-1	7	0	75	83	2	-7	-6	1	13	11	4	-5	-1	1	177	173	2	8	3	1	214	210	2
-4	2	0	227	220	1	0	7	0	109	110	2	-6	-6	1	39	39	2	-4	-1	1	181	182	1	9	3	1	8	5	8
-3	2	0	73	73	1	1	7	0	77	74	2	-5	-6	1	206	214	3	-3	-1	1	356	350	1	10	3	1	23	20	3
-2	2	0	182	193	1	2	7	0	77	76	2	-4	-6	1	47	42	2	-2	-1	1	350	361	6	-7	4	1	6	10	5
-1	2	0	720	702	7	3	7	0	180	178	2	-3	-6	1	5	6	4	-1	-1	1	200	206	1	-6	4	1	22	21	4
0	2	0	27	30	1	4	7	0	96	100	2	-2	-6	1	99	100	1	0	-1	1	350	348	1	-5	4	1	177	186	5
1	2	0	29	27	1	5	7	0	106	106	3	-1	-6	1	23	24	2	1	-1	1	173	168	1	-4	4	1	24	25	2
2	2	0	412	400	2	6	7	0	15	13	2	0	-6	1	244	251	2	2	-1	1	177	180	1	-3	4	1	42	41	1
3	2	0	407	399	2	7	7	0	147	145	1	1	-6	1	47	47	2	3	-1	1	47	47	1	-2	4	1	278	275	2
4	2	0	387	376	1	8	7	0	205	214	5	2	-6	1	95	99	2	4	-1	1	61	60	1	-1	4	1	103	105	1
5	2	0	144	142	1	9	7	0	44	44	3	3	-6	1	22	28	7	5	-1	1	112	110	1	0	4	1	218	219	1
6	2	0	136	128	2	-3	8	0	25	20	3	4	-6	1	117	123	3	6	-1	1	31	32	2	1	4	1	79	73	1
7	2	0	99	97	2	-2	8	0	119	125	2	5	-6	1	0	8	1	7	-1	1	12	9	4	2	4	1	78	78	1
8	2	0	226	226	2	-1	8	0	98	97	2	6	-6	1	60	57	5	8	-1	1	80	80	2	3	4	1	515	502	1
9	2	0	40	36	2	0	8	0	127	130	2	-9	-5	1	50	55	2	9	-1	1	83	83	2	4	4	1	178	171	1
-8	3	0	81	79	3	1	8	0	55	55	2	-8	-5	1	40	41	2	-9	0	1	10	6	10	5	4	1	156	145	1
-7	3	0	0	5	1	2	8	0	21	23	2	-7	-5	1	10	4	9	-8	0	1	192	189	4	6	4	1	204	200	1
-6	3	0	9	9	8	3	8	0	47	49	2	-6	-5	1	43	38	1	-7	0	1	49	50	2	7	4	1	267	265	2
-5	3	0	7	9	6	4	8	0	8	1	7	-5	-5	1	96	97	1	-6	0	1	73	74	2	8	4	1	108	107	2
-4	3	0	262	257	3	5	8	0	71	73	2	-4	-5	1	29	28	4	-5	0	1	186	182	1	9	4	1	43	41	2
-3	3	0	106	111	2	6	8	0	103	108	2	-3	-5	1	195	180	3	-4	0	1	39	43	1	10	4	1	13	7	9
-2	3	0	193	195	1	7	8	0	69	75	4	-2	-5	1	128	125	1	-3	0	1	196	192	2	-6	5	1	17	7	5
-1	3	0	573	586	1	8	8	0	36	35	3	-1	-5	1	13	7	2	-2	0	1	167	167	3	-5	5	1	40	40	3
0	3	0	685	712	10	9	8	0	94	87	4	0	-5	1	94	100	1	-1	0	1	166	164	1	-4	5	1	65	65	3
1	3	0	152	153	1	-2	9	0	7	2	7	1	-5	1	199	202	1	0	0	1	32	34	2	-3	5	1	93	94	2
2	3	0	197	199	1	-1	9	0	81	84	2	2	-5	1	50	52	2	1	0	1	46	50	1	-2	5	1	283	296	8
3	3	0	195	202	2	0	9	0	123	124	2	3	-5	1	64	65	2	2	0	1	239	241	2	-1	5	1	59	63	2
4	3	0	395	380	1	1	9	0	6	2	6	4	-5	1	12	0	7	3	0	1	200	190	1	0	5	1	62	60	1
5	3	0	135	122	1	2	9	0	26	25	2	5	-5	1	181	186	3	4	0	1	186	176	1	1	5	1	98	100	1
6	3	0	18	18	3	3	9	0	46	42	2	6	-5	1	38	35	3	5	0	1	164	166	3	2	5	1	224	229	1
7																													

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	7	1	24	26	2	-7	-6	2	34	27	3	-5	-1	2	280	272	3	9	3	2	22	19	3	6	9	2	60	62	3
-1	7	1	21	16	3	-6	-6	2	229	231	2	-4	-1	2	194	118	12	10	3	2	126	121	5	7	9	2	44	48	3
0	7	1	42	41	2	-5	-6	2	141	137	1	-3	-1	2	367	361	5	-6	4	2	43	37	3	8	9	2	110	116	3
1	7	1	24	23	2	-4	-6	2	269	273	6	-2	-1	2	346	346	4	-5	4	2	92	89	3	1	10	2	8	2	8
2	7	1	64	61	2	-3	-6	2	14	10	3	-1	-1	2	63	69	1	-4	4	2	74	75	2	2	10	2	25	22	2
3	7	1	163	163	3	-2	-6	2	47	51	2	0	-1	2	306	314	1	-3	4	2	79	79	1	3	10	2	40	38	2
4	7	1	14	13	4	-1	-6	2	46	46	2	1	-1	2	652	645	2	-2	4	2	364	358	1	4	10	2	29	25	4
5	7	1	60	59	1	0	-6	2	317	320	4	2	-1	2	14	13	2	-1	4	2	82	85	1	5	10	2	26	25	5
6	7	1	141	139	2	1	-6	2	155	159	2	3	-1	2	227	232	2	0	4	2	395	390	3	6	10	2	45	39	3
7	7	1	23	21	2	2	-6	2	182	180	2	4	-1	2	363	352	3	1	4	2	89	85	1	7	10	2	13	12	9
8	7	1	114	120	4	3	-6	2	8	6	7	5	-1	2	27	26	1	2	4	2	265	264	1	-4	-10	3	58	60	5
9	7	1	50	45	3	4	-6	2	54	50	3	6	-1	2	20	16	2	3	4	2	317	315	1	-3	-10	3	91	89	3
-3	8	1	13	11	7	5	-6	2	28	23	3	7	-1	2	159	157	2	4	4	2	73	71	1	-2	-10	3	75	73	3
-2	8	1	92	94	2	6	-6	2	77	75	3	8	-1	2	217	206	2	5	4	2	155	154	1	-6	-9	3	53	54	3
-1	8	1	9	8	9	-9	-5	2	61	57	3	9	-1	2	70	65	2	6	4	2	29	22	1	-5	-9	3	56	54	3
0	8	1	23	21	3	-8	-5	2	48	49	3	-8	0	2	232	224	3	7	4	2	383	360	13	-4	-9	3	41	38	3
1	8	1	24	22	2	-7	-5	2	82	79	2	-7	0	2	55	57	2	8	4	2	169	165	2	-3	-9	3	78	78	3
2	8	1	51	52	2	-6	-5	2	15	10	4	-6	0	2	99	101	3	9	4	2	98	99	2	-2	-9	3	224	221	3
3	8	1	21	20	2	-5	-5	2	191	194	2	-5	0	2	10	9	5	10	4	2	106	109	3	-1	-9	3	108	103	2
4	8	1	73	76	2	-4	-5	2	135	134	2	-4	0	2	189	186	3	-6	5	2	65	67	3	0	-9	3	77	76	2
5	8	1	10	6	7	-3	-5	2	33	36	1	-3	0	2	35	34	1	-5	5	2	49	49	3	1	-9	3	33	34	2
6	8	1	19	22	2	-2	-5	2	141	141	1	-2	0	2	575	585	6	-4	5	2	74	77	3	-7	-8	3	13	12	13
7	8	1	51	61	11	-1	-5	2	56	56	1	-1	0	2	87	93	1	-3	5	2	13	8	4	-6	-8	3	39	35	3
8	8	1	21	17	3	0	-5	2	204	193	3	0	0	2	49	51	1	-2	5	2	120	127	2	-5	-8	3	27	29	3
9	8	1	16	9	6	1	-5	2	263	258	1	1	0	2	377	376	1	-1	5	2	149	148	1	-4	-8	3	200	204	3
-2	9	1	54	57	3	2	-5	2	91	95	1	2	0	2	252	277	9	0	5	2	374	377	2	-3	-8	3	79	82	3
-1	9	1	44	43	2	3	-5	2	48	61	11	3	0	2	252	258	1	1	5	2	160	168	2	-2	-8	3	105	101	2
0	9	1	27	22	2	4	-5	2	93	96	2	4	0	2	852	825	2	2	5	2	19	15	1	-1	-8	3	178	172	2
1	9	1	49	51	2	5	-5	2	91	89	3	5	0	2	27	28	1	3	5	2	325	323	1	0	-8	3	45	44	2
2	9	1	33	31	2	6	-5	2	12	10	9	6	0	2	155	161	2	4	5	2	355	351	5	1	-8	3	43	44	2
3	9	1	36	36	2	-9	-4	2	26	24	4	7	0	2	144	137	2	5	5	2	113	110	1	2	-8	3	39	34	2
4	9	1	44	41	2	-8	-4	2	73	88	8	8	0	2	53	49	2	6	5	2	12	11	3	3	-8	3	20	20	3
5	9	1	46	43	2	-7	-4	2	19	14	3	9	0	2	130	127	2	7	5	2	17	12	2	-8	-7	3	20	14	4
6	9	1	138	141	3	-6	-4	2	45	46	2	-8	1	2	61	56	2	8	5	2	300	300	5	-7	-7	3	18	3	6
7	9	1	96	91	3	-5	-4	2	273	272	3	-7	1	2	98	99	2	9	5	2	55	52	3	-6	-7	3	189	194	2
8	9	1	16	18	5	-4	-4	2	156	139	1	-6	1	2	208	209	2	10	5	2	93	92	3	-5	-7	3	209	213	3
0	10	1	10	4	9	-3	-4	2	234	231	1	-5	1	2	37	36	2	-5	6	2	51	55	5	-4	-7	3	171	170	2
1	10	1	15	14	3	-2	-4	2	134	134	1	-4	1	2	277	273	1	-4	6	2	18	16	10	-3	-7	3	131	137	2
2	10	1	26	20	2	-1	-4	2	59	57	1	-3	1	2	109	112	1	-3	6	2	21	17	4	-2	-7	3	19	18	3
3	10	1	95	95	2	0	-4	2	366	343	4	-2	1	2	86	84	1	-2	6	2	27	34	10	-1	-7	3	8	7	8
4	10	1	12	3	7	1	-4	2	104	103	2	-1	1	2	553	543	3	-1	6	2	56	59	2	0	-7	3	5	2	5
5	10	1	47	44	3	2	-4	2	136	137	1	0	1	2	118	123	2	0	6	2	159	163	2	1	-7	3	12	9	5
6	10	1	55	56	3	3	-4	2	85	86	1	1	1	2	131	142	1	1	6	2	47	50	2	2	-7	3	104	100	2
7	10	1	77	77	3	4	-4	2	102	101	2	2	1	2	437	449	3	2	6	2	204	203	1	3	-7	3	64	65	2
-5	-10	2	45	42	3	5	-4	2	56	52	4	3	1	2	344	346	3	3	6	2	99	90	1	4	-7	3	3	1	2
-4	-10	2	16	11	5	6	-4	2	89	94	3	4	1	2	116	117	1	4	6	2	52	55	1	-8	-6	3	81	81	3
-3	-10	2	121	125	3	7	-4	2	56	57	3	5	1	2	265	264	1	5	6	2	30	33	3	-7	-6	3	0	6	1
-2	-10	2	37	30	2	-9	-3	2	70	69	3	6	1	2	77	80	1	6	6	2	54	53	1	-6	-6	3	129	139	2
-1	-10	2	122	122	2	-8	-3	2	91	88	2	7	1	2	43	44	2	7	6	2	97	100	2	-5	-6	3	224	222	3
-7	-9	2	14	18	6	-7	-3	2	77	76	2	8	1	2	49	47	2	8	6	2	24	18	3	-4	-6	3	107	111	3
-6	-9	2	126	134	3	-6	-3	2	88	105	21	9	1	2	54	56	2	9	6	2	118	115	2	-3	-6	3	162	156	1
-5	-9	2	37	37	3	-5	-3	2	137	141	1	10	1	2	23	18	3	10	6	2	65	67	3	-2	-6	3	66	68	1
-4	-9	2	132	131	3	-4	-3	2	356	321	1	-8	2	2	106	104	2	-4	7	2	49	45	3	-1	-6	3	14	16	3
-3	-9	2	75	75	2	-3	-3	2	62	52	1	-7	2	2	28	19	2	-3	7	2	22	26	4	0	-6	3	27	27	2
-2	-9	2	200	197	2	-2	-3	2	125	132	2	-6	2	2	49	53	2	-2	7	2	22	24	3	1	-6	3	90	86	2
-1	-9	2	77	75	2	-1	-3	2	302	302	1	-5	2	2	64	64	2	-1	7	2	65	63	2	2	-6	3	33	29	2
0	-9	2	51	53	2	0	-3	2	174	173	1	-4	2	2	114	119	2	0	7	2	70	68	2	3	-6	3	31	27	2
1	-9	2	25	22	3	1	-3	2	128	129	1	-3	2	2	9	2	4	1	7	2	100	102	2	4	-6	3	19	16	3
2	-9	2	43	38	2	2	-3	2	90	82	1	-2	2	2	115	112	1	2	7	2	184	181	2	5	-6	3	13	1	8
-8	-8	2	23	23	3	3	-3	2	313	315	1	-1	2	2	612	625	6	3	7	2	10	1	6	6	-6	3	133	130	3
-7	-8	2	59	65	3	4	-3	2	444	434	1	0	2	2	1831	2028	2	4	7	2									

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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
3	-4	3	159	160	2	2	1	3	140	146	2	4	6	3	15	14	2	-2	-6	4	209	203	2	5	-1	4	146	137	1
4	-4	3	15	16	3	3	1	3	40	40	1	5	6	3	286	301	2	-1	-6	4	90	87	2	6	-1	4	47	46	2
5	-4	3	16	10	4	4	1	3	31	32	1	6	6	3	95	97	1	0	-6	4	113	112	2	7	-1	4	61	58	2
6	-4	3	94	96	3	5	1	3	270	259	2	7	6	3	233	230	2	1	-6	4	78	79	2	8	-1	4	10	3	7
7	-4	3	32	25	3	6	1	3	70	70	1	8	6	3	68	73	2	2	-6	4	91	91	2	9	-1	4	38	35	2
-9	-3	3	12	4	10	7	1	3	189	186	2	9	6	3	100	105	2	3	-6	4	42	40	2	3	-6	4	7	3	7
-8	-3	3	28	27	3	8	1	3	187	184	1	10	6	3	120	115	3	4	-6	4	79	78	2	-7	0	4	44	38	2
-7	-3	3	58	56	3	9	1	3	24	15	3	-4	7	3	30	29	4	5	-6	4	54	53	3	-6	0	4	93	96	2
-6	-3	3	33	31	2	10	1	3	100	96	2	-3	7	3	90	93	3	-8	-5	4	43	42	3	-5	0	4	94	103	4
-5	-3	3	68	69	1	-7	2	3	53	55	2	-2	7	3	17	14	3	-7	-5	4	145	150	3	-4	0	4	220	221	6
-4	-3	3	16	13	2	-6	2	3	24	25	2	-1	7	3	15	12	4	-6	-5	4	173	174	3	-3	0	4	102	95	1
-3	-3	3	6	13	6	-5	2	3	179	181	2	0	7	3	15	10	3	-5	-5	4	141	147	2	-2	0	4	40	38	1
-2	-3	3	409	393	3	-4	2	3	136	139	2	1	7	3	51	54	2	-4	-5	4	258	259	4	-1	0	4	184	183	3
-1	-3	3	53	55	1	-3	2	3	308	305	1	2	7	3	21	17	2	-3	-5	4	102	105	2	0	0	4	377	383	2
0	-3	3	577	536	4	-2	2	3	227	235	3	3	7	3	244	239	3	-2	-5	4	28	23	1	1	0	4	266	270	2
1	-3	3	127	130	1	-1	2	3	409	413	2	4	7	3	95	96	2	-1	-5	4	115	120	2	2	0	4	478	478	3
2	-3	3	263	253	1	0	2	3	361	383	1	5	7	3	20	22	2	0	-5	4	28	25	1	3	0	4	113	103	1
3	-3	3	103	103	1	1	2	3	400	424	1	6	7	3	67	89	22	1	-5	4	183	180	2	4	0	4	641	632	3
4	-3	3	189	192	1	2	2	3	163	173	3	7	7	3	102	104	2	2	-5	4	112	112	2	5	0	4	32	25	1
5	-3	3	16	10	3	3	2	3	126	128	3	8	7	3	51	52	2	3	-5	4	96	97	2	6	0	4	21	21	2
6	-3	3	62	62	2	4	2	3	430	414	2	9	7	3	74	72	3	4	-5	4	41	40	2	7	0	4	36	34	2
7	-3	3	8	5	7	5	2	3	163	167	1	10	7	3	66	64	3	5	-5	4	102	99	3	8	0	4	169	166	2
-8	-3	3	0	0	1	6	2	3	7	11	7	-2	8	3	59	57	3	6	-5	4	56	54	3	9	0	4	103	95	2
-8	-2	3	67	68	3	7	2	3	51	53	2	-1	8	3	22	23	3	-8	-4	4	31	20	6	10	0	4	87	86	3
-7	-2	3	0	1	1	8	2	3	158	156	3	0	8	3	68	72	2	-7	-4	4	23	30	4	-7	1	4	6	6	6
-6	-2	3	31	28	2	9	2	3	28	33	2	1	8	3	79	76	2	-6	-4	4	274	275	4	-6	1	4	35	37	2
-5	-2	3	31	26	2	10	2	3	62	60	3	2	8	3	111	110	2	-5	-4	4	180	177	2	-5	1	4	16	10	3
-4	-2	3	133	126	1	-7	3	3	26	22	3	3	8	3	78	74	2	-4	-4	4	351	337	3	-4	1	4	102	109	5
-3	-2	3	270	258	1	-6	3	3	73	68	2	4	8	3	153	154	6	-3	-4	4	86	88	1	-3	1	4	24	19	3
-2	-2	3	357	350	2	-5	3	3	7	0	6	5	8	3	73	78	2	-2	-4	4	82	83	1	-2	1	4	10	5	2
-1	-2	3	221	201	1	-4	3	3	117	119	2	6	8	3	23	20	3	-1	-4	4	95	100	1	-1	1	4	243	247	1
0	-2	3	240	242	1	-3	3	3	28	28	1	7	8	3	123	153	34	0	-4	4	195	175	2	0	1	4	411	432	4
1	-2	3	147	147	1	-2	3	3	26	14	2	8	8	3	130	131	2	1	-4	4	146	143	1	1	1	4	201	197	1
2	-2	3	18	14	1	-1	3	3	158	158	1	9	8	3	16	4	6	2	-4	4	249	239	2	2	1	4	123	123	1
3	-2	3	194	212	10	0	3	3	153	159	1	-1	9	3	15	8	5	3	-4	4	79	80	1	3	1	4	179	185	1
4	-2	3	132	132	2	1	3	3	325	332	3	0	9	3	46	48	2	4	-4	4	32	43	14	4	1	4	108	101	1
5	-2	3	236	224	2	2	3	3	255	256	3	1	9	3	37	35	2	5	-4	4	12	8	8	5	1	4	16	13	2
6	-2	3	105	106	2	3	3	3	316	321	2	2	9	3	55	52	2	6	-4	4	73	68	3	6	1	4	164	166	1
7	-2	3	15	10	3	4	3	3	447	430	6	3	9	3	72	71	3	7	-4	4	16	16	5	7	1	4	200	202	2
8	-2	3	25	20	3	5	3	3	152	156	1	4	9	3	82	77	3	-8	-3	4	39	33	4	8	1	4	183	183	2
9	-2	3	0	4	1	6	3	3	9	10	4	5	9	3	51	47	3	-7	-3	4	14	14	13	9	1	4	17	9	4
-8	-1	3	99	102	2	7	3	3	83	86	2	6	9	3	5	0	5	-6	-3	4	31	27	3	10	1	4	99	95	3
-7	-1	3	62	61	2	8	3	3	42	38	2	7	9	3	44	45	3	-5	-3	4	55	52	2	-7	2	4	11	10	5
-6	-1	3	8	9	8	9	3	3	19	21	4	8	9	3	83	87	3	-4	-3	4	10	5	4	-6	2	4	14	12	4
-5	-1	3	52	55	2	10	3	3	92	91	3	9	9	3	118	120	4	-3	-3	4	56	52	1	-5	2	4	27	26	2
-4	-1	3	267	252	5	-6	4	3	65	62	3	1	10	3	11	8	6	-2	-3	4	94	91	1	-4	2	4	85	86	2
-3	-1	3	16	13	2	-5	4	3	10	8	10	2	10	3	35	33	2	-1	-3	4	249	239	1	-3	2	4	184	188	1
-2	-1	3	383	363	2	-4	4	3	19	17	2	3	10	3	0	4	1	0	-3	4	333	307	1	-2	2	4	12	8	3
-1	-1	3	38	28	3	-3	4	3	92	93	1	4	10	3	21	17	5	1	-3	4	384	362	1	-1	2	4	129	137	1
0	-1	3	169	176	1	-2	4	3	76	77	1	5	10	3	28	23	11	2	-3	4	148	155	1	0	2	4	129	133	3
1	-1	3	354	332	2	-1	4	3	861	872	3	6	10	3	70	69	3	3	-3	4	95	96	1	1	2	4	71	65	1
2	-1	3	291	302	1	0	4	3	251	246	3	7	10	3	94	97	3	4	-3	4	148	154	1	2	2	4	442	442	1
3	-1	3	27	26	1	1	4	3	32	28	1	-5	-9	4	32	31	3	5	-3	4	28	25	2	3	2	4	8	7	4
4	-1	3	60	58	1	2	4	3	42	41	1	-4	-9	4	18	13	5	6	-3	4	26	23	2	4	2	4	613	594	3
5	-1	3	9	8	4	3	4	3	176	209	23	-3	-9	4	129	130	3	7	-3	4	11	7	10	5	2	4	91	96	2
6	-1	3	19	17	3	4	4	3	63	66	1	-2	-9	4	102	102	3	8	-3	4	22	22	4	6	2	4	122	124	2
7	-1	3	118	118	2	5	4	3	143	146	2	-1	-9	4	39	38	3	-8	-2	4	45	49	3	7	2	4	294	295	2
8	-1	3	14	9	5	6	4	3	79	79	2	0	-9	4	9	3	9	-7	-2	4	25	29	3	8	2	4	158	156	2
9	-1	3	102	102	3	7	4	3	52	56	1	1	-9	4	66	66	3	-6	-2	4	12	8	8	9	2	4	167	167	3
-8	0	3	38	39	2	8	4	3	102	107	2	-6	-8	4	20	7	4	-5	-2	4	50	50	2	10	2	4	36	34	3
-7	0	3	28	26	3	9	4	3	80	81	2	-5	-8	4	12	12	7	-4	-2	4	86	93							

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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
4	4	4	109	108	1	-5	-8	5	9	11	8	3	-2	5	37	37	1	5	3	5	63	54	1	8	9	5	7	0	6
5	4	4	32	35	1	-4	-8	5	28	27	3	4	-2	5	24	21	1	6	3	5	6	12	5	9	9	5	35	33	3
6	4	4	157	157	1	-3	-8	5	20	21	4	5	-2	5	123	124	1	7	3	5	215	218	2	2	10	5	70	81	3
7	4	4	21	19	2	-2	-8	5	79	82	3	6	-2	5	99	103	3	8	3	5	207	300	2	3	10	5	70	60	3
8	4	4	52	54	2	-1	-8	5	75	71	3	7	-2	5	53	52	2	9	3	5	195	189	3	4	10	5	46	39	3
9	4	4	134	138	4	0	-8	5	59	56	3	8	-2	5	84	83	2	10	3	5	104	104	3	5	10	5	62	59	3
10	4	4	60	61	3	1	-8	5	6	10	6	9	-2	5	15	7	6	-5	4	5	16	15	5	6	10	5	15	2	6
-5	5	4	72	72	3	2	-8	5	11	5	10	-7	-1	5	8	5	7	-4	4	5	73	79	2	7	10	5	32	30	4
-4	5	4	110	113	4	-6	-7	5	67	63	2	-6	-1	5	13	13	7	-3	4	5	100	104	2	-4	-8	6	35	36	3
-3	5	4	105	106	3	-5	-7	5	22	25	3	-5	-1	5	20	10	4	-2	4	5	45	47	1	-3	-8	6	17	8	5
-2	5	4	23	19	2	-4	-7	5	158	157	3	-4	-1	5	167	160	3	-1	4	5	77	85	5	-2	-8	6	11	4	11
-1	5	4	13	8	4	-3	-7	5	84	83	3	-3	-1	5	157	153	2	0	4	5	271	291	7	-1	-8	6	19	18	4
0	5	4	20	15	4	-2	-7	5	310	309	2	-2	-1	5	20	22	1	1	4	5	130	159	22	0	-8	6	199	201	3
1	5	4	119	129	1	-1	-7	5	81	83	3	-1	-1	5	138	126	1	2	4	5	10	12	3	1	-8	6	38	36	3
2	5	4	25	25	1	0	-7	5	83	86	2	0	-1	5	503	480	2	3	4	5	79	78	1	2	-8	6	41	40	3
3	5	4	16	17	2	1	-7	5	65	62	3	1	-1	5	208	200	2	4	4	5	162	160	1	-5	-7	6	23	25	3
4	5	4	134	138	1	2	-7	5	160	159	2	2	-1	5	698	693	6	5	4	5	53	54	1	-4	-7	6	86	79	7
5	5	4	90	90	1	3	-7	5	111	106	2	3	-1	5	10	8	3	6	4	5	136	140	2	-3	-7	6	111	108	3
6	5	4	79	77	1	4	-7	5	159	160	3	4	-1	5	78	86	1	7	4	5	297	302	2	-2	-7	6	140	141	3
7	5	4	54	51	2	-7	-6	5	27	14	4	5	-1	5	127	129	3	8	4	5	273	276	2	-1	-7	6	68	70	3
8	5	4	49	47	2	-6	-6	5	13	4	11	6	-1	5	99	101	2	9	4	5	25	34	5	0	-7	6	15	0	6
9	5	4	149	142	3	-5	-6	5	139	140	2	7	-1	5	49	47	2	10	4	5	16	14	6	1	-7	6	77	82	3
10	5	4	34	26	3	-4	-6	5	210	210	2	8	-1	5	57	55	2	-5	5	5	0	16	1	2	-7	6	45	42	3
-4	6	4	18	17	4	-3	-6	5	17	18	3	9	-1	5	103	107	2	-4	5	5	0	12	1	3	-7	6	64	66	3
-3	6	4	22	28	3	-2	-6	5	199	194	2	-7	0	5	0	6	1	-3	5	5	75	80	3	4	-7	6	78	78	4
-2	6	4	227	247	2	-1	-6	5	123	126	3	-6	0	5	29	31	4	-2	5	5	61	60	2	-6	-6	6	12	2	12
-1	6	4	175	185	3	0	-6	5	40	40	2	-5	0	5	66	63	2	-1	5	5	100	106	2	-5	-6	6	37	39	2
0	6	4	80	82	2	1	-6	5	17	14	3	-4	0	5	45	45	2	0	5	5	144	150	1	-4	-6	6	10	9	10
1	6	4	29	32	2	2	-6	5	26	23	2	-3	0	5	149	146	2	1	5	5	94	97	1	-3	-6	6	26	25	3
2	6	4	23	21	1	3	-6	5	80	78	2	-2	0	5	201	204	1	2	5	5	257	258	1	-2	-6	6	83	88	2
3	6	4	5	11	5	4	-6	5	130	132	2	-1	0	5	363	361	3	3	5	5	188	189	1	-1	-6	6	135	135	2
4	6	4	243	250	3	5	-6	5	0	0	1	0	0	5	2	3	1	4	5	5	310	311	2	0	-6	6	76	75	2
5	6	4	72	86	8	-7	-5	5	25	27	4	1	0	5	152	158	2	5	5	5	62	67	2	1	-6	6	79	79	2
6	6	4	168	179	3	-6	-5	5	161	163	3	2	0	5	35	37	1	6	5	5	5	7	5	2	-6	6	41	40	2
7	6	4	174	175	4	-5	-5	5	65	67	2	3	0	5	196	189	3	7	5	5	157	165	2	3	-6	6	76	73	2
8	6	4	148	152	2	-4	-5	5	15	3	4	4	0	5	54	51	1	8	5	5	97	101	2	4	-6	6	229	226	3
9	6	4	23	21	4	-3	-5	5	100	102	2	5	0	5	208	201	1	9	5	5	22	26	4	5	-6	6	114	111	3
10	6	4	67	65	3	-2	-5	5	20	22	5	6	0	5	81	84	1	10	5	5	73	77	3	-7	-5	6	31	26	7
-3	7	4	29	31	3	-1	-5	5	103	106	2	7	0	5	12	9	4	-4	6	5	19	17	4	-6	-5	6	119	124	5
-2	7	4	75	70	3	0	-5	5	215	207	2	8	0	5	34	32	4	-3	6	5	72	74	3	-5	-5	6	186	183	2
-1	7	4	204	209	2	1	-5	5	64	64	2	9	0	5	154	155	3	-2	6	5	75	80	3	-4	-5	6	31	30	2
0	7	4	146	145	2	2	-5	5	74	75	2	-7	1	5	19	19	4	-1	6	5	353	360	2	-3	-5	6	160	161	2
1	7	4	84	84	2	3	-5	5	132	131	2	-6	1	5	19	17	3	0	6	5	53	60	2	-2	-5	6	198	193	4
2	7	4	99	101	2	4	-5	5	37	34	2	-5	1	5	24	29	9	1	6	5	32	36	2	-1	-5	6	168	169	2
3	7	4	56	59	2	5	-5	5	68	70	3	-4	1	5	128	128	2	2	6	5	11	8	4	0	-5	6	182	182	2
4	7	4	120	115	3	6	-5	5	174	178	3	-3	1	5	11	4	3	3	6	5	56	56	2	1	-5	6	12	12	8
5	7	4	42	39	2	-7	-4	5	95	97	3	-2	1	5	55	48	1	4	6	5	46	44	2	2	-5	6	81	82	3
6	7	4	39	45	7	-6	-4	5	108	113	3	-1	1	5	42	43	1	5	6	5	63	62	2	3	-5	6	57	52	2
7	7	4	85	85	2	-5	-4	5	334	323	2	0	1	5	91	89	1	6	6	5	73	75	2	4	-5	6	86	85	2
8	7	4	275	278	2	-4	-4	5	24	22	2	1	1	5	101	101	2	7	6	5	10	4	7	5	-5	6	34	28	2
9	7	4	11	3	11	-3	-4	5	2	5	1	2	1	5	32	39	1	8	6	5	19	17	3	6	-5	6	163	163	3
10	7	4	59	55	3	-2	-4	5	181	193	4	3	1	5	62	71	1	9	6	5	111	113	2	-7	-4	6	38	40	3
-2	8	4	10	12	10	-1	-4	5	102	102	1	4	1	5	153	152	1	10	6	5	65	61	3	-6	-4	6	22	13	5
-1	8	4	12	4	6	0	-4	5	182	179	1	5	1	5	171	179	1	-3	7	5	57	58	3	-5	-4	6	257	260	3
0	8	4	51	49	2	1	-4	5	124	126	1	6	1	5	151	150	2	-2	7	5	46	51	3	-4	-4	6	76	70	2
1	8	4	39	36	2	2	-4	5	145	146	1	7	1	5	201	203	2	-1	7	5	182	180	2	-3	-4	6	35	34	2
2	8	4	58	61	3	3	-4	5	172	171	1	8	1	5	19	16	3	0	7	5	207	217	2	-2	-4	6	256	256	3
3	8	4	69	70	3	4	-4	5	74	73	2	9	1	5	54	58	3	1	7	5	49	47	2	-1	-4	6	34	31	2
4	8	4	63	60	3	5	-4	5	59	61	2	10	1	5	105	108	3	2	7	5	52	53	2	0	-4	6	66	60	2
5	8	4	93	93	3	6	-4	5	259	255	2	-6	2	5	22	23	3	3	7	5	32	33	3	1	-4	6	215	211	2
6	8	4	90	90	2	7	-4	5	91	93	3	-5	2	5	17	14	3	4	7	5	120	117	2	2	-4	6			

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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	-2	6	92	90	2	4	3	6	86	85	1	6	10	6	129	131	3	-2	-1	7	149	150	2	6	4	7	33	32	2
-1	-2	6	195	194	2	5	3	6	22	21	2	7	10	6	45	42	3	-1	-1	7	85	90	2	7	4	7	41	43	2
0	-2	6	162	168	1	6	3	6	39	39	2	-3	-8	7	21	15	7	0	-1	7	81	81	2	8	4	7	62	55	2
1	-2	6	27	20	1	7	3	6	66	68	2	-2	-8	7	164	165	3	1	-1	7	194	191	1	9	4	7	70	76	3
2	-2	6	123	114	1	8	3	6	95	101	2	-1	-8	7	34	26	3	2	-1	7	133	140	3	10	4	7	102	98	3
3	-2	6	279	278	2	9	3	6	125	140	4	0	-8	7	15	10	7	3	-1	7	95	100	3	-3	5	7	41	40	3
4	-2	6	25	24	2	10	3	6	10	6	10	1	-8	7	21	12	6	4	-1	7	54	53	1	-2	5	7	26	29	3
5	-2	6	90	89	2	-5	4	6	56	57	3	-4	-7	7	47	46	3	5	-1	7	51	49	1	-1	5	7	41	40	4
6	-2	6	219	211	1	-4	4	6	90	95	2	-3	-7	7	19	15	5	6	-1	7	345	343	2	0	5	7	21	22	2
7	-2	6	118	113	2	-3	4	6	9	1	8	-2	-7	7	152	153	4	7	-1	7	74	76	2	1	5	7	114	119	1
8	-2	6	43	40	2	-2	4	6	6	1	5	-1	-7	7	103	111	3	8	-1	7	10	7	9	2	5	7	68	66	3
-7	-1	6	16	16	6	-1	4	6	34	31	2	0	-7	7	37	43	3	9	-1	7	66	62	3	3	5	7	89	92	2
-6	-1	6	53	50	3	0	4	6	82	78	2	1	-7	7	20	16	4	-6	0	7	46	44	3	4	5	7	45	45	2
-5	-1	6	46	45	3	1	4	6	186	186	1	2	-7	7	59	60	3	-5	0	7	48	45	3	5	5	7	103	107	2
-4	-1	6	69	70	3	2	4	6	116	109	1	3	-7	7	33	32	3	-4	0	7	19	19	4	6	5	7	46	49	2
-3	-1	6	75	76	2	3	4	6	61	53	2	-5	-6	7	41	32	2	-3	0	7	136	136	2	7	5	7	313	316	2
-2	-1	6	80	82	2	4	4	6	402	392	1	-4	-6	7	77	82	2	-2	0	7	286	287	2	8	5	7	52	50	2
-1	-1	6	79	77	3	5	4	6	90	89	1	-3	-6	7	36	31	2	-1	0	7	169	175	4	9	5	7	121	116	3
0	-1	6	228	220	3	6	4	6	118	121	2	-2	-6	7	96	100	3	0	0	7	215	210	3	10	5	7	60	59	3
1	-1	6	77	73	1	7	4	6	56	53	2	-1	-6	7	21	21	4	1	0	7	159	168	18	-3	6	7	43	40	5
2	-1	6	104	103	1	8	4	6	175	187	5	0	-6	7	53	50	3	2	0	7	151	148	1	-2	6	7	26	25	3
3	-1	6	277	274	2	9	4	6	20	24	4	1	-6	7	10	1	9	3	0	7	60	57	1	-1	6	7	27	24	2
4	-1	6	19	21	2	10	4	6	9	11	9	2	-6	7	56	58	3	4	0	7	65	65	1	0	6	7	15	5	3
5	-1	6	152	159	4	-4	5	6	97	97	3	3	-6	7	157	163	2	5	0	7	16	13	2	1	6	7	14	7	4
6	-1	6	139	133	2	-3	5	6	88	92	3	4	-6	7	23	25	3	6	0	7	43	42	2	2	6	7	101	103	2
7	-1	6	28	27	2	-2	5	6	33	28	2	5	-6	7	119	115	4	7	0	7	50	47	2	3	6	7	63	84	19
8	-1	6	47	44	2	-1	5	6	55	56	1	-6	-5	7	17	22	7	8	0	7	47	45	2	4	6	7	50	49	2
9	-1	6	67	70	3	0	5	6	49	50	1	-5	-5	7	36	35	3	9	0	7	22	22	3	5	6	7	58	56	2
-6	0	6	0	6	1	1	5	6	146	152	2	-4	-5	7	94	95	4	-6	1	7	96	97	3	6	6	7	16	14	3
-5	0	6	24	24	3	2	5	6	76	82	10	-3	-5	7	165	166	2	-5	1	7	89	91	3	7	6	7	322	317	2
-4	0	6	27	22	3	3	5	6	49	45	2	-2	-5	7	170	168	2	-4	1	7	48	52	3	8	6	7	97	103	2
-3	0	6	93	92	2	4	5	6	78	82	2	-1	-5	7	135	138	2	-3	1	7	24	25	3	9	6	7	96	99	2
-2	0	6	169	167	3	5	5	6	47	45	2	0	-5	7	98	99	2	-2	1	7	62	67	2	10	6	7	20	13	4
-1	0	6	53	53	2	6	5	6	30	34	2	1	-5	7	112	112	2	-1	1	7	216	216	2	-2	7	7	3	11	3
0	0	6	26	26	1	7	5	6	231	235	3	2	-5	7	146	147	2	0	1	7	48	46	1	-1	7	7	8	14	7
1	0	6	232	244	30	8	5	6	139	142	3	3	-5	7	201	203	2	1	1	7	161	158	1	0	7	7	15	13	6
2	0	6	240	229	1	9	5	6	103	108	3	4	-5	7	219	221	4	2	1	7	217	220	3	1	7	7	71	67	3
3	0	6	7	1	6	10	5	6	4	3	3	5	-5	7	131	129	2	3	1	7	145	152	2	2	7	7	20	29	3
4	0	6	62	67	1	-3	6	6	32	29	3	6	-5	7	57	53	3	4	1	7	213	211	2	3	7	7	66	62	3
5	0	6	163	159	1	-2	6	6	5	6	3	6	-4	7	36	31	4	5	1	7	123	130	3	4	7	7	198	201	2
6	0	6	72	71	1	-1	6	6	72	74	2	-5	-4	7	117	118	3	6	1	7	173	179	1	5	7	7	53	53	5
7	0	6	87	86	2	0	6	6	64	70	2	-4	-4	7	88	88	2	7	1	7	132	133	2	6	7	7	209	205	2
8	0	6	37	36	3	1	6	6	25	27	2	-3	-4	7	159	154	2	8	1	7	91	92	2	7	7	7	27	27	2
9	0	6	39	38	3	2	6	6	8	3	7	-2	-4	7	271	269	3	9	1	7	14	16	5	8	7	7	154	161	2
-6	1	6	25	26	3	3	6	6	9	1	8	-1	-4	7	70	73	2	10	1	7	13	12	11	9	7	7	12	5	6
-5	1	6	36	35	3	4	6	6	25	34	11	0	-4	7	45	41	2	-5	2	7	10	10	9	10	7	7	15	12	6
-4	1	6	56	58	3	5	6	6	95	91	2	1	-4	7	80	83	2	-4	2	7	19	18	4	0	8	7	8	6	8
-3	1	6	40	42	1	6	6	6	69	68	2	2	-4	7	12	9	4	-3	2	7	140	141	3	1	8	7	11	10	10
-2	1	6	22	19	2	7	6	6	153	157	2	3	-4	7	134	141	2	-2	2	7	23	22	2	2	8	7	13	5	8
-1	1	6	333	335	2	8	6	6	86	87	2	4	-4	7	139	144	2	-1	2	7	207	208	2	3	8	7	72	76	3
0	1	6	109	112	1	9	6	6	49	57	3	5	-4	7	18	17	3	0	2	7	148	155	6	4	8	7	60	62	3
1	1	6	133	120	2	10	6	6	53	51	3	6	-4	7	26	25	3	1	2	7	26	24	1	5	8	7	77	77	3
2	1	6	284	264	1	-2	7	6	59	58	3	7	-4	7	120	117	3	2	2	7	93	94	1	6	8	7	64	66	3
3	1	6	113	106	1	-1	7	6	40	41	2	-6	-3	7	0	10	1	3	2	7	290	283	1	7	8	7	43	40	2
4	1	6	346	326	2	0	7	6	189	181	3	-5	-3	7	35	42	6	4	2	7	162	156	1	8	8	7	10	4	9
5	1	6	12	3	4	1	7	6	41	41	2	-4	-3	7	73	71	2	5	2	7	93	104	3	9	8	7	37	33	2
6	1	6	132	135	2	2	7	6	100	96	3	-3	-3	7	124	120	2	6	2	7	63	66	2	1	9	7	5	2	5
7	1	6	47	47	2	3	7	6	34	31	4	-2	-3	7	85	87	2	7	2	7	127	126	2	2	9	7	25	20	4
8	1	6	87	96	4	4	7	6	67	69	2	-1	-3	7	0	2	1	8	2	7	17	16	3	3	9	7	31	34	3
9	1	6	26	21	3	5	7	6	69	75	5	0	-3	7	23	28	3	9	2	7	128	141	3	4	9	7	0	1	1
10	1	6	79	77	3	6	7	6	73	74	2	1	-3	7	15	4	5	10	2	7	95	90	3	5	9	7	39	35	3
-6</																													

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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	-5	8	41	45	2	8	1	8	92	95	2	4	8	8	14	9	5	-3	1	9	56	53	3	8	7	9	110	107	2
1	-5	8	44	37	3	9	1	8	66	61	3	5	8	8	89	90	3	-2	1	9	157	155	3	9	7	9	12	4	6
2	-5	8	28	31	3	-4	2	8	62	62	3	6	8	8	152	149	3	-1	1	9	133	144	2	2	8	9	44	42	3
3	-5	8	186	191	2	-3	2	8	26	29	3	7	8	8	163	162	2	0	1	9	82	83	2	3	8	9	17	21	5
4	-5	8	28	23	3	-2	2	8	96	97	3	8	8	8	27	23	3	1	1	9	24	23	2	4	8	9	0	4	1
5	-5	8	85	82	2	-1	2	8	92	93	3	9	8	8	45	44	2	2	1	9	29	28	2	5	8	9	42	39	3
-5	-4	8	44	42	4	0	2	8	8	3	7	3	9	8	46	47	3	3	1	9	59	55	3	6	8	9	85	85	3
-4	-4	8	11	3	7	1	2	8	235	236	4	4	9	8	90	91	3	4	1	9	42	43	2	7	8	9	81	85	2
-3	-4	8	0	2	1	2	2	8	68	65	1	5	9	8	79	73	3	5	1	9	98	100	2	8	8	9	0	5	1
-2	-4	8	66	62	2	3	2	8	52	51	2	6	9	8	76	73	3	6	1	9	260	254	3	4	9	9	98	105	3
-1	-4	8	34	36	2	4	2	8	136	136	2	7	9	8	122	120	3	7	1	9	69	73	2	5	9	9	33	30	4
0	-4	8	121	124	2	5	2	8	99	98	2	-2	-6	9	82	84	3	8	1	9	42	47	3	6	9	9	103	102	3
1	-4	8	13	13	4	6	2	8	143	145	2	-1	-6	9	42	41	3	9	1	9	31	37	3	-2	-5	10	35	34	3
2	-4	8	10	13	7	7	2	8	73	75	2	0	-6	9	36	37	3	-4	2	9	12	2	7	-1	-5	10	58	61	2
3	-4	8	69	72	3	8	2	8	36	46	3	1	-6	9	20	21	4	-3	2	9	14	13	5	0	-5	10	27	27	3
4	-4	8	303	297	2	9	2	8	26	23	3	2	-6	9	47	48	3	-2	2	9	86	84	2	1	-5	10	69	70	3
5	-4	8	68	65	2	10	2	8	73	74	3	3	-6	9	18	12	5	-1	2	9	51	51	2	2	-5	10	93	95	3
-6	-4	8	37	35	4	-4	3	8	36	39	3	-3	-5	9	13	5	7	0	2	9	29	30	2	3	-5	10	55	53	3
-5	-3	8	145	146	4	-3	3	8	75	74	3	-2	-5	9	58	53	2	1	2	9	69	68	2	-3	-4	10	62	63	2
-4	-3	8	115	113	2	-2	3	8	140	141	4	-1	-5	9	10	0	10	2	2	9	91	99	2	-2	-4	10	22	19	3
-3	-3	8	115	110	2	-1	3	8	115	123	1	0	-5	9	35	37	2	3	2	9	135	135	2	-1	-4	10	8	18	7
-2	-3	8	208	210	2	0	3	8	23	23	6	1	-5	9	89	92	3	4	2	9	146	148	2	0	-4	10	134	139	2
-1	-3	8	64	66	2	1	3	8	62	62	1	2	-5	9	114	131	2	5	2	9	103	103	2	1	-4	10	26	20	2
0	-3	8	117	121	2	2	3	8	45	45	1	3	-5	9	43	45	3	6	2	9	8	4	7	2	-4	10	47	49	3
1	-3	8	48	49	2	3	3	8	4	2	4	4	-5	9	98	93	4	7	2	9	41	42	2	3	-4	10	95	102	2
2	-3	8	178	184	2	4	3	8	121	117	2	-4	-4	9	44	41	2	8	2	9	9	11	9	4	-4	10	8	2	7
3	-3	8	217	215	2	5	3	8	68	67	2	-3	-4	9	47	45	2	9	2	9	23	22	3	5	-4	10	44	42	3
4	-3	8	136	136	2	6	3	8	76	75	2	-2	-4	9	96	100	2	-3	3	9	29	31	3	-3	-3	10	53	48	2
5	-3	8	87	84	1	7	3	8	91	88	2	-1	-4	9	152	163	3	-2	3	9	0	4	1	-2	-3	10	149	161	2
6	-3	8	132	129	1	8	3	8	82	102	7	0	-4	9	23	19	3	-1	3	9	11	13	8	-1	-3	10	12	16	6
7	-3	8	17	15	5	9	3	8	31	27	3	1	-4	9	77	89	2	0	3	9	104	123	31	0	-3	10	11	13	8
-5	-2	8	136	136	3	10	3	8	45	39	3	2	-4	9	95	99	2	1	3	9	24	26	3	1	-3	10	79	74	2
-4	-2	8	138	136	3	-3	4	8	47	50	3	3	-4	9	164	180	3	2	3	9	142	147	2	2	-3	10	113	132	2
-3	-2	8	74	74	2	-2	4	8	9	1	8	4	-4	9	72	76	2	3	3	9	87	86	2	3	-3	10	24	18	3
-2	-2	8	341	331	3	-1	4	8	90	100	4	5	-4	9	40	39	3	4	3	9	65	65	2	4	-3	10	14	1	4
-1	-2	8	72	71	2	0	4	8	35	38	4	6	-4	9	67	64	4	5	3	9	55	58	2	5	-3	10	9	1	6
0	-2	8	19	15	3	1	4	8	54	57	1	-4	-3	9	15	12	8	6	3	9	153	156	2	6	-3	10	20	20	6
1	-2	8	85	79	2	2	4	8	40	41	2	-3	-3	9	125	123	2	7	3	9	7	3	7	-3	-2	10	67	68	2
2	-2	8	33	31	2	3	4	8	275	267	2	-2	-3	9	104	102	2	8	3	9	62	61	2	-2	-2	10	38	30	2
3	-2	8	119	118	2	4	4	8	46	48	2	-1	-3	9	25	22	3	9	3	9	78	81	3	-1	-2	10	43	39	2
4	-2	8	86	83	1	5	4	8	86	80	2	0	-3	9	110	121	2	10	3	9	26	26	3	0	-2	10	33	34	2
5	-2	8	194	203	5	6	4	8	145	146	2	1	-3	9	182	183	2	-3	4	9	86	88	3	1	-2	10	21	16	3
6	-2	8	162	165	5	7	4	8	24	31	2	2	-3	9	61	59	2	-2	4	9	75	80	2	2	-2	10	199	205	3
7	-2	8	2	9	2	8	4	8	112	117	2	3	-3	9	141	138	2	-1	4	9	96	93	2	3	-2	10	194	196	2
8	-2	8	70	67	3	9	4	8	186	195	3	4	-3	9	12	7	5	0	4	9	102	106	3	4	-2	10	48	50	10
-5	-1	8	31	31	7	10	4	8	40	37	3	5	-3	9	178	183	2	1	4	9	55	58	2	5	-2	10	72	67	3
-4	-1	8	78	79	3	-3	5	8	50	53	4	6	-3	9	26	23	3	2	4	9	30	28	2	6	-2	10	56	54	3
-3	-1	8	45	43	2	-2	5	8	33	33	5	-4	-2	9	0	8	1	3	4	9	84	87	2	7	-2	10	35	33	3
-2	-1	8	45	44	2	-1	5	8	16	8	3	-3	-2	9	11	11	8	4	4	9	107	105	2	-3	-1	10	87	85	3
-1	-1	8	108	104	2	0	5	8	35	37	5	-2	-2	9	347	341	2	5	4	9	79	79	2	-2	-1	10	47	48	2
0	-1	8	161	163	3	1	5	8	54	53	2	-1	-2	9	60	61	2	6	4	9	76	78	2	-1	-1	10	20	12	3
1	-1	8	157	156	4	2	5	8	30	30	2	0	-2	9	61	58	2	7	4	9	42	45	2	0	-1	10	45	43	3
2	-1	8	158	170	4	3	5	8	164	159	2	1	-2	9	56	59	2	8	4	9	78	80	2	1	-1	10	46	44	2
3	-1	8	58	56	2	4	5	8	102	101	2	2	-2	9	46	39	2	9	4	9	25	15	7	2	-1	10	109	119	7
4	-1	8	16	14	2	5	5	8	9	7	9	3	-2	9	371	378	2	10	4	9	55	48	3	3	-1	10	165	168	2
5	-1	8	104	102	1	6	5	8	25	25	2	4	-2	9	108	115	2	-2	5	9	31	28	5	4	-1	10	208	206	3
6	-1	8	4	5	4	7	5	8	53	56	2	5	-2	9	76	96	20	-1	5	9	29	32	3	5	-1	10	7	2	7
7	-1	8	82	89	2	8	5	8	28	28	2	6	-2	9	23	23	3	0	5	9	38	38	2	6	-1	10	50	51	3
8	-1	8	18	21	5	9	5	8	143	154	3	7	-2	9	215	210	3	1	5	9	73	73	2	7	-1	10	64	69	3
-5	0	8	88	85	3	10	5	8	25	22	4	-4	-1	9	24	25	4	2	5	9	48	55	2	8	-1	10	16	7	4
-4	0	8	70	70	3	-2	6	8	19	16	4	-3	-1	9	151	145	2	3	5	9	33	33	2	-3	0	10	43	48	4
-																													

Table 5. Observed and calculated structure factors for 3b.

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
-1	2	10	52	50	3	5	6	10	6	4	6	-1	0	11	8	13	7	1	5	11	25	14	5	7	1	12	46	48	3
0	2	10	50	47	2	6	6	10	31	30	2	0	0	11	65	64	2	2	5	11	8	7	8	0	2	12	76	75	3
1	2	10	25	26	4	7	6	10	14	11	5	1	0	11	55	57	3	3	5	11	43	33	3	1	2	12	4	1	4
2	2	10	13	9	8	8	6	10	40	39	2	2	0	11	259	257	3	4	5	11	21	15	3	2	2	12	195	195	3
3	2	10	125	123	3	9	6	10	49	53	2	3	0	11	208	213	3	5	5	11	149	143	2	3	2	12	38	41	5
4	2	10	23	23	4	1	7	10	44	45	3	4	0	11	13	19	12	6	5	11	200	189	2	4	2	12	6	0	5
5	2	10	371	364	2	2	7	10	7	1	6	5	0	11	17	11	4	7	5	11	37	29	2	5	2	12	53	50	3
6	2	10	300	297	4	3	7	10	0	2	1	6	0	11	127	125	3	8	5	11	8	1	8	6	2	12	42	38	3
7	2	10	85	90	2	4	7	10	45	42	2	7	0	11	69	68	3	2	6	11	78	76	3	7	2	12	73	73	3
8	2	10	14	13	4	5	7	10	34	30	2	-2	1	11	38	32	7	3	6	11	32	32	4	0	3	12	65	64	6
9	2	10	17	14	4	6	7	10	22	23	3	-1	1	11	53	51	2	4	6	11	15	9	5	1	3	12	96	89	3
-2	3	10	84	86	3	7	7	10	15	11	4	0	1	11	19	13	3	5	6	11	10	9	10	2	3	12	116	115	6
-1	3	10	59	59	2	8	7	10	74	71	2	1	1	11	191	186	3	6	6	11	110	104	2	3	3	12	120	117	4
0	3	10	69	59	3	3	8	10	22	19	4	2	1	11	146	148	3	7	6	11	22	22	3	4	3	12	72	68	3
1	3	10	97	94	3	4	8	10	14	3	8	3	1	11	342	340	3	8	6	11	47	47	2	5	3	12	92	86	3
2	3	10	34	32	3	5	8	10	27	22	4	4	1	11	102	96	3	3	7	11	34	34	3	6	3	12	134	133	4
3	3	10	44	43	3	6	8	10	55	56	3	5	1	11	39	37	3	4	7	11	67	59	2	7	3	12	15	12	8
4	3	10	51	52	2	7	8	10	56	52	2	6	1	11	25	19	3	5	7	11	0	5	1	1	4	12	153	135	3
5	3	10	14	4	4	-1	-4	11	13	3	6	7	1	11	50	42	3	6	7	11	19	14	4	2	4	12	26	25	5
6	3	10	215	207	2	0	-4	11	71	71	2	8	1	11	115	114	2	7	7	11	106	101	3	3	4	12	42	40	4
7	3	10	140	143	2	1	-4	11	68	65	2	-2	2	11	55	59	3	1	-3	12	73	63	3	4	4	12	47	38	4
8	3	10	14	15	4	2	-4	11	72	64	3	-1	2	11	17	11	4	2	-3	12	24	28	3	5	4	12	198	183	3
9	3	10	99	96	5	3	-4	11	35	32	3	0	2	11	30	28	4	3	-3	12	9	7	9	6	4	12	151	146	6
-2	4	10	21	18	3	-2	-3	11	17	8	4	1	2	11	113	105	3	0	-2	12	41	38	3	7	4	12	77	81	5
-1	4	10	36	29	3	-1	-3	11	61	58	2	2	2	11	142	134	3	1	-2	12	22	25	3	2	5	12	35	32	4
0	4	10	44	48	3	0	-3	11	32	31	2	3	2	11	46	43	3	2	-2	12	23	16	4	3	5	12	72	72	5
1	4	10	113	115	3	1	-3	11	38	41	2	4	2	11	89	87	3	3	-2	12	2	13	2	4	5	12	78	72	3
2	4	10	21	17	4	2	-3	11	151	159	2	5	2	11	50	45	3	4	-2	12	39	39	4	5	5	12	38	36	3
3	4	10	60	58	2	3	-3	11	41	41	2	6	2	11	134	132	3	5	-2	12	109	107	3	6	5	12	53	54	3
4	4	10	79	78	2	4	-3	11	111	120	4	7	2	11	52	52	2	0	-1	12	25	29	3	7	5	12	72	75	2
5	4	10	30	27	2	5	-3	11	69	61	3	8	2	11	44	40	2	1	-1	12	10	5	9	4	6	12	106	93	3
6	4	10	84	83	2	-2	-2	11	27	23	4	-1	3	11	19	20	5	2	-1	12	18	11	5	5	6	12	59	56	3
7	4	10	57	54	2	-1	-2	11	258	252	3	0	3	11	10	20	10	3	-1	12	52	56	3	6	6	12	40	37	2
8	4	10	24	25	3	0	-2	11	13	8	6	1	3	11	106	103	3	4	-1	12	89	85	5	2	0	13	90	92	3
9	4	10	0	0	1	1	-2	11	32	38	3	2	3	11	104	102	4	5	-1	12	20	14	4	3	0	13	81	75	3
-1	5	10	48	52	5	2	-2	11	146	148	2	3	3	11	64	64	3	6	-1	12	13	5	12	4	0	13	137	136	3
0	5	10	30	32	4	3	-2	11	51	59	3	4	3	11	161	158	5	-1	0	12	51	49	2	2	1	13	21	23	4
1	5	10	126	125	3	4	-2	11	17	7	5	5	3	11	192	186	3	0	0	12	6	11	5	3	1	13	27	19	4
2	5	10	39	43	2	5	-2	11	39	36	3	6	3	11	147	137	2	1	0	12	22	18	4	4	1	13	50	52	3
3	5	10	46	48	2	6	-2	11	25	24	5	7	3	11	80	87	2	2	0	12	159	168	3	5	1	13	37	33	3
4	5	10	58	56	2	-2	-1	11	50	50	2	8	3	11	17	20	3	3	0	12	75	77	3	2	2	13	176	173	3
5	5	10	42	43	2	-1	-1	11	15	18	4	0	4	11	14	13	8	4	0	12	56	58	3	3	2	13	12	3	12
6	5	10	19	21	3	0	-1	11	73	77	2	1	4	11	20	21	5	5	0	12	12	6	9	4	2	13	14	11	9
7	5	10	84	79	2	1	-1	11	25	17	3	2	4	11	97	94	3	6	0	12	37	34	5	5	2	13	37	22	4
8	5	10	82	82	2	2	-1	11	6	1	6	3	4	11	112	103	3	0	1	12	0	1	1	6	2	13	0	6	1
9	5	10	15	11	5	3	-1	11	31	42	3	4	4	11	100	99	3	1	1	12	71	65	3	3	3	13	168	164	3
0	6	10	43	44	5	4	-1	11	39	36	3	5	4	11	237	226	3	2	1	12	41	38	3	4	3	13	47	43	3
1	6	10	40	38	2	5	-1	11	73	74	3	6	4	11	20	20	3	3	1	12	131	134	3	5	3	13	12	15	12
2	6	10	20	15	3	6	-1	11	12	4	12	7	4	11	99	95	3	4	1	12	88	85	3	6	3	13	63	61	3
3	6	10	21	19	3	7	-1	11	13	11	8	8	4	11	52	50	3	5	1	12	52	52	3	4	4	13	36	29	4
4	6	10	0	4	1	-2	0	11	202	196	2	0	5	11	86	80	3	6	1	12	12	12	11	5	4	13	0	1	1

ORTEP drawing for 4a

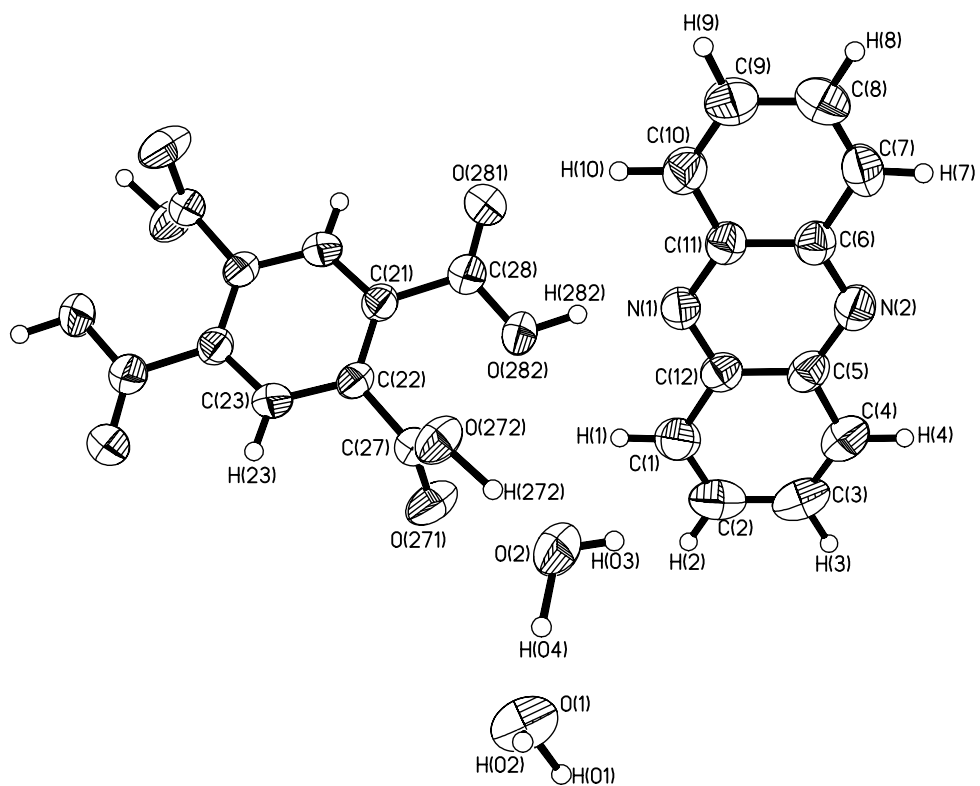


Table 1. Crystal data and structure refinement for 4a.

Identification code	4a	
Empirical formula	C ₁₇ H ₁₅ N ₂ O ₆	
Formula weight	343.31	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 7.084(2) Å	α = 85.52(1)°.
	b = 10.221(3) Å	β = 76.42(1)°.
	c = 11.829(3) Å	γ = 74.67(1)°.
Volume	802.8(4) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.420 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.109 mm ⁻¹	
F(000)	358	
Crystal size	0.38 x 0.14 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.77 to 23.26°.	
Index ranges	-7 ≤ h ≤ 7, -11 ≤ k ≤ 11, -13 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	5502	
Independent reflections	2306 [R(int) = 0.0585]	
Completeness to theta = 23.26°	99.9 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	2306 / 0 / 286	
Goodness-of-fit on F ²	0.904	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0423, wR2 = 0.0697	
R indices (all data)	R1 = 0.0795, wR2 = 0.0803	
Largest diff. peak and hole	0.168 and -0.156 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	U(eq)
C(1)	3600(4)	-366(3)	3287(3)	59(1)
C(2)	3767(4)	-1704(4)	3196(3)	71(1)
C(3)	3260(4)	-2514(3)	4182(4)	72(1)
C(4)	2565(4)	-1968(3)	5240(3)	64(1)
C(5)	2328(3)	-567(3)	5398(3)	48(1)
C(6)	1421(3)	1306(3)	6548(2)	48(1)
C(7)	645(4)	1930(3)	7653(3)	63(1)
C(8)	428(4)	3270(3)	7746(3)	67(1)
C(9)	992(4)	4066(3)	6763(3)	67(1)
C(10)	1753(4)	3517(3)	5699(3)	58(1)
C(11)	1971(3)	2116(3)	5556(2)	46(1)
C(12)	2862(3)	243(3)	4399(2)	45(1)
C(21)	4631(3)	4436(2)	1117(2)	40(1)
C(22)	3811(3)	4072(2)	262(2)	38(1)
C(23)	4206(4)	4641(2)	-840(2)	44(1)
C(27)	2547(4)	3076(3)	448(2)	44(1)
C(28)	4318(4)	3876(2)	2335(2)	49(1)
N(1)	2699(3)	1577(2)	4493(2)	47(1)
N(2)	1618(3)	-31(2)	6464(2)	53(1)
O(1)	-2604(4)	720(3)	-93(2)	86(1)
O(2)	-1267(3)	1763(2)	1487(2)	78(1)
O(271)	3232(3)	1938(2)	69(2)	66(1)
O(272)	688(3)	3548(2)	980(2)	55(1)
O(281)	4761(3)	4346(2)	3107(2)	71(1)
O(282)	3556(3)	2829(2)	2460(2)	65(1)
H(01)	-2040(90)	-540(70)	-230(60)	360(30)
H(02)	-3940(90)	1140(50)	-60(40)	260(30)
H(03)	-1290(70)	1240(50)	2130(40)	220(20)
H(04)	-1870(40)	1310(20)	770(20)	80(8)
H(1)	3890(30)	230(20)	2630(20)	60(8)
H(2)	4180(30)	-2060(20)	2460(20)	62(8)
H(3)	3420(40)	-3520(30)	4110(20)	90(10)
H(4)	2180(30)	-2520(20)	5930(20)	66(9)
H(7)	200(30)	1390(20)	8280(20)	52(7)
H(8)	-80(40)	3670(30)	8460(20)	77(9)
H(9)	870(30)	5040(30)	6890(20)	75(9)
H(10)	2240(30)	4080(20)	4970(20)	74(8)
H(23)	3650(30)	4441(18)	-1397(16)	29(6)
H(272)	-100(40)	2690(30)	1210(20)	90(9)
H(282)	3340(40)	2470(30)	3270(30)	123(13)

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

C(1)-C(2)	1.351(4)	C(2)-C(1)-C(12)	119.4(3)
C(1)-C(12)	1.422(3)	C(2)-C(1)-H(1)	124.1(14)
C(1)-H(1)	0.97(2)	C(12)-C(1)-H(1)	116.5(14)
C(2)-C(3)	1.408(4)	C(1)-C(2)-C(3)	121.4(3)
C(2)-H(2)	0.92(2)	C(1)-C(2)-H(2)	117.7(16)
C(3)-C(4)	1.339(4)	C(3)-C(2)-H(2)	120.8(16)
C(3)-H(3)	1.02(3)	C(4)-C(3)-C(2)	120.5(3)
C(4)-C(5)	1.419(3)	C(4)-C(3)-H(3)	118.7(16)
C(4)-H(4)	0.98(2)	C(2)-C(3)-H(3)	120.7(16)
C(5)-N(2)	1.345(3)	C(3)-C(4)-C(5)	121.1(3)
C(5)-C(12)	1.425(3)	C(3)-C(4)-H(4)	121.4(14)
C(6)-N(2)	1.346(3)	C(5)-C(4)-H(4)	117.6(14)
C(6)-C(11)	1.420(3)	N(2)-C(5)-C(4)	120.5(3)
C(6)-C(7)	1.422(3)	N(2)-C(5)-C(12)	121.4(2)
C(7)-C(8)	1.348(4)	C(4)-C(5)-C(12)	118.1(3)
C(7)-H(7)	0.94(2)	N(2)-C(6)-C(11)	121.5(2)
C(8)-C(9)	1.407(4)	N(2)-C(6)-C(7)	119.6(3)
C(8)-H(8)	0.92(2)	C(11)-C(6)-C(7)	118.9(3)
C(9)-C(10)	1.350(4)	C(8)-C(7)-C(6)	120.1(3)
C(9)-H(9)	0.99(2)	C(8)-C(7)-H(7)	122.5(14)
C(10)-C(11)	1.418(3)	C(6)-C(7)-H(7)	117.2(14)
C(10)-H(10)	1.04(2)	C(7)-C(8)-C(9)	120.8(3)
C(11)-N(1)	1.344(3)	C(7)-C(8)-H(8)	119.9(17)
C(12)-N(1)	1.348(3)	C(9)-C(8)-H(8)	119.3(17)
C(21)-C(23)#1	1.382(3)	C(10)-C(9)-C(8)	121.3(3)
C(21)-C(22)	1.397(3)	C(10)-C(9)-H(9)	121.4(15)
C(21)-C(28)	1.496(3)	C(8)-C(9)-H(9)	117.3(15)
C(22)-C(23)	1.383(3)	C(9)-C(10)-C(11)	119.8(3)
C(22)-C(27)	1.497(3)	C(9)-C(10)-H(10)	122.4(13)
C(23)-C(21)#1	1.382(3)	C(11)-C(10)-H(10)	117.8(13)
C(23)-H(23)	0.905(18)	N(1)-C(11)-C(10)	119.7(2)
C(27)-O(271)	1.212(2)	N(1)-C(11)-C(6)	121.2(2)
C(27)-O(272)	1.298(3)	C(10)-C(11)-C(6)	119.1(2)
C(28)-O(281)	1.203(3)	N(1)-C(12)-C(1)	119.5(2)
C(28)-O(282)	1.305(3)	N(1)-C(12)-C(5)	121.0(2)
O(1)-H(01)	1.25(7)	C(1)-C(12)-C(5)	119.5(3)
O(1)-H(02)	0.92(6)	C(23)#1-C(21)-C(22)	119.2(2)
O(1)-H(04)	1.48(3)	C(23)#1-C(21)-C(28)	117.6(2)
O(2)-H(03)	0.90(5)	C(22)-C(21)-C(28)	123.2(2)
O(2)-H(04)	1.21(3)	C(23)-C(22)-C(21)	118.6(2)
O(2)-H(272)	1.38(3)	C(23)-C(22)-C(27)	117.1(2)
O(272)-H(272)	1.15(3)	C(21)-C(22)-C(27)	124.3(2)
O(282)-H(282)	1.00(3)	C(21)#1-C(23)-C(22)	122.2(2)
		C(21)#1-C(23)-H(23)	118.0(12)
		C(22)-C(23)-H(23)	119.7(12)
		O(271)-C(27)-O(272)	124.0(2)
		O(271)-C(27)-C(22)	120.8(2)
		O(272)-C(27)-C(22)	115.1(2)
		O(281)-C(28)-O(282)	124.2(3)
		O(281)-C(28)-C(21)	122.5(2)
		O(282)-C(28)-C(21)	113.3(2)
		C(11)-N(1)-C(12)	117.6(2)
		C(5)-N(2)-C(6)	117.3(2)
		H(01)-O(1)-H(02)	118(4)
		H(01)-O(1)-H(04)	118(3)
		H(02)-O(1)-H(04)	110(3)
		H(03)-O(2)-H(04)	111(3)
		H(03)-O(2)-H(272)	123(3)
		H(04)-O(2)-H(272)	122.5(15)
		C(27)-O(272)-H(272)	110.4(12)
		C(28)-O(282)-H(282)	113.0(18)

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

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	59(2)	64(2)	56(2)	-7(2)	-11(2)	-20(2)
C(2)	65(2)	75(3)	78(3)	-27(2)	-17(2)	-16(2)
C(3)	65(2)	52(2)	104(3)	-14(2)	-27(2)	-15(2)
C(4)	62(2)	55(2)	82(3)	4(2)	-24(2)	-23(2)
C(5)	44(2)	46(2)	61(2)	6(2)	-19(1)	-18(1)
C(6)	43(2)	51(2)	50(2)	1(2)	-9(1)	-14(1)
C(7)	64(2)	74(2)	47(2)	6(2)	-6(2)	-21(2)
C(8)	69(2)	70(3)	58(2)	-16(2)	-10(2)	-9(2)
C(9)	73(2)	52(2)	72(3)	-10(2)	-13(2)	-9(2)
C(10)	66(2)	47(2)	60(2)	4(2)	-12(2)	-14(1)
C(11)	43(2)	47(2)	49(2)	3(2)	-12(1)	-13(1)
C(12)	40(1)	47(2)	51(2)	-1(2)	-14(1)	-12(1)
C(21)	43(1)	35(1)	41(2)	0(1)	-7(1)	-11(1)
C(22)	40(1)	32(1)	43(2)	-2(1)	-6(1)	-12(1)
C(23)	50(2)	45(2)	43(2)	-3(1)	-13(1)	-20(1)
C(27)	53(2)	42(2)	40(2)	1(1)	-10(1)	-18(1)
C(28)	58(2)	46(2)	44(2)	1(1)	-8(1)	-19(1)
N(1)	48(1)	50(2)	44(1)	2(1)	-10(1)	-14(1)
N(2)	52(1)	56(2)	55(2)	8(1)	-14(1)	-20(1)
O(1)	80(2)	72(2)	112(2)	-13(1)	-22(1)	-24(1)
O(2)	92(2)	84(2)	76(2)	17(1)	-22(1)	-56(1)
O(271)	66(1)	45(1)	85(2)	-16(1)	2(1)	-24(1)
O(272)	47(1)	46(1)	70(1)	-2(1)	-2(1)	-18(1)
O(281)	114(2)	69(1)	46(1)	3(1)	-21(1)	-44(1)
O(282)	98(2)	68(1)	49(1)	18(1)	-22(1)	-53(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

Page 1

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	139	145	2	5	6	0	17	21	9	-2	-6	1	63	64	3	1	0	1	144	147	1	5	6	1	46	47	4
2	0	0	335	343	4	6	6	0	24	28	7	-1	-6	1	53	55	3	2	0	1	1286	1247	22	6	6	1	22	6	8
3	0	0	79	78	2	7	6	0	23	15	7	0	-6	1	86	85	2	3	0	1	161	160	2	7	6	1	40	38	5
4	0	0	44	45	3	-4	7	0	15	10	15	1	-6	1	150	151	3	4	0	1	94	90	3	-4	7	1	8	22	8
5	0	0	30	31	5	-3	7	0	58	52	5	2	-6	1	67	66	4	5	0	1	50	50	4	-3	7	1	14	14	14
6	0	0	44	45	5	-2	7	0	23	9	20	3	-6	1	33	38	8	6	0	1	54	50	4	-2	7	1	31	24	7
7	0	0	0	1	1	-1	7	0	74	72	4	4	-6	1	0	7	1	7	0	1	17	9	16	-1	7	1	28	15	27
-7	1	0	42	44	7	0	7	0	30	28	5	5	-6	1	33	29	9	-7	1	1	50	41	6	0	7	1	33	34	5
-6	1	0	43	44	6	1	7	0	151	150	2	-7	-5	1	29	14	5	-6	1	1	96	96	5	1	7	1	133	156	29
-5	1	0	31	30	5	2	7	0	119	119	3	-6	-5	1	91	91	4	-5	1	1	0	3	1	2	7	1	190	189	6
-4	1	0	77	78	3	3	7	0	39	49	5	-5	-5	1	90	91	3	-4	1	1	176	176	4	3	7	1	34	33	7
-3	1	0	211	210	2	4	7	0	137	141	4	-4	-5	1	30	29	6	-3	1	1	11	15	11	4	7	1	21	12	20
-2	1	0	586	569	3	5	7	0	105	104	4	-3	-5	1	48	43	5	-2	1	1	380	374	2	5	7	1	109	105	4
-1	1	0	666	658	7	6	7	0	73	80	5	-2	-5	1	89	89	3	-1	1	1	431	435	1	6	7	1	51	48	6
0	1	0	117	123	1	7	7	0	14	14	14	-1	-5	1	218	275	61	0	1	1	500	494	4	7	7	1	56	49	6
1	1	0	143	150	1	-3	8	0	49	46	11	0	-5	1	59	57	2	1	1	1	358	363	2	-3	8	1	16	1	16
2	1	0	774	766	4	-2	8	0	11	23	10	1	-5	1	62	61	2	2	1	1	658	634	14	-2	8	1	36	34	17
3	1	0	96	98	2	-1	8	0	65	65	9	2	-5	1	224	219	3	3	1	1	12	6	12	-1	8	1	38	35	16
4	1	0	31	34	5	0	8	0	99	115	7	3	-5	1	10	12	9	4	1	1	274	270	2	0	8	1	130	136	7
5	1	0	83	86	3	1	8	0	45	47	5	4	-5	1	91	90	4	5	1	1	24	20	7	1	8	1	65	76	5
6	1	0	16	15	15	2	8	0	122	121	4	5	-5	1	36	24	7	6	1	1	0	0	1	2	8	1	73	76	4
7	1	0	20	10	9	3	8	0	55	49	9	-7	-4	1	30	24	6	7	1	1	22	15	8	3	8	1	25	22	11
-6	2	0	58	52	5	4	0	0	130	134	4	-6	-4	1	71	70	4	-6	2	1	18	3	18	4	0	1	31	45	8
-5	2	0	54	54	5	5	8	0	16	24	16	-5	-4	1	58	59	4	-5	2	1	46	43	4	5	8	1	44	47	6
-4	2	0	64	64	3	6	8	0	81	72	5	-4	-4	1	43	39	4	-4	2	1	31	28	5	6	8	1	128	129	5
-3	2	0	377	376	5	-2	9	0	60	67	11	-3	-4	1	74	70	3	-3	2	1	44	44	3	-2	9	1	25	35	24
-2	2	0	169	173	2	-1	9	0	12	19	12	-2	-4	1	365	360	3	-2	2	1	191	188	2	-1	9	1	128	132	7
-1	2	0	735	711	6	0	9	0	0	10	1	-1	-4	1	148	146	2	-1	2	1	745	719	5	0	9	1	7	17	7
0	2	0	144	146	1	1	9	0	34	31	18	0	-4	1	166	167	2	0	2	1	266	266	1	1	9	1	29	25	8
1	2	0	228	233	1	2	9	0	10	11	10	1	-4	1	43	46	3	1	2	1	211	216	1	2	9	1	86	85	5
2	2	0	130	130	2	3	9	0	79	78	5	2	-4	1	163	161	2	2	2	1	67	71	5	3	9	1	45	40	7
3	2	0	52	43	3	4	9	0	72	77	5	3	-4	1	22	9	12	3	2	1	24	23	3	4	9	1	20	24	19
4	2	0	22	30	6	5	9	0	51	52	8	4	-4	1	84	78	4	4	2	1	34	36	4	5	9	1	44	50	6
5	2	0	116	123	4	6	9	0	76	79	5	5	-4	1	55	60	5	5	2	1	86	87	3	6	9	1	28	16	10
6	2	0	19	25	15	-1	10	0	43	40	14	6	-4	1	20	8	12	6	2	1	37	30	5	-1	10	1	26	25	25
7	2	0	0	2	1	0	10	0	25	2	24	-7	-3	1	45	41	5	7	2	1	69	55	4	0	10	1	56	56	10
-6	3	0	41	45	6	1	10	0	27	33	27	-6	-3	1	161	163	3	-6	3	1	25	2	9	1	10	1	27	27	26
-5	3	0	19	23	19	2	10	0	85	85	8	-5	-3	1	16	18	16	-5	3	1	0	8	1	2	10	1	47	45	6
-4	3	0	19	27	16	3	10	0	57	56	5	-4	-3	1	433	429	4	-4	3	1	48	47	4	3	10	1	93	90	5
-3	3	0	240	239	3	4	10	0	28	20	9	-3	-3	1	128	127	2	-3	3	1	254	257	2	4	10	1	29	30	9
-2	3	0	23	23	5	5	10	0	9	2	9	-2	-3	1	166	171	4	-2	3	1	114	116	4	5	10	1	14	12	14
-1	3	0	151	152	1	1	11	0	60	58	11	-1	-3	1	229	278	60	-1	3	1	194	195	2	1	11	1	35	8	18
0	3	0	29	30	3	2	11	0	51	58	12	0	-3	1	9	9	9	0	3	1	99	97	1	2	11	1	65	51	10
1	3	0	156	158	1	3	11	0	12	4	12	1	-3	1	319	314	1	1	3	1	297	295	2	3	11	1	30	31	10
2	3	0	0	10	1	-3	-11	1	70	53	9	2	-3	1	72	75	1	2	3	1	197	196	3	-2	-12	2	22	9	22
3	3	0	232	229	3	-2	-11	1	15	11	14	3	-3	1	36	39	3	3	3	1	117	180	59	-1	-11	2	12	11	12
4	3	0	111	111	3	-1	-11	1	14	19	13	4	-3	1	27	15	8	4	3	1	55	52	3	-4	-10	2	15	6	14
5	3	0	0	17	1	-4	-10	1	33	16	7	5	-3	1	14	4	14	5	3	1	20	19	9	-3	-10	2	32	23	9
6	3	0	77	76	4	-3	-10	1	30	23	9	6	-3	1	1	0	1	6	3	1	127	128	3	-2	-10	2	38	34	15
7	3	0	36	33	7	-2	-10	1	83	85	8	-7	-2	1	8	4	7	7	3	1	9	1	9	-1	-10	2	36	34	16
-6	4	0	37	35	6	-1	-10	1	57	61	10	-6	-2	1	47	44	4	-6	4	1	26	25	9	0	-10	2	15	1	15
-5	4	0	21	12	12	0	-10	1	4	6	4	-5	-2	1	179	176	3	-5	4	1	26	21	8	1	-10	2	40	25	18
-4	4	0	67	66	5	1	-10	1	31	42	27	-4	-2	1	62	65	3	-4	4	1	76	73	5	-5	-9	2	80	69	5
-3	4	0	33	35	6	-5	-9	1	16	5	15	-3	-2	1	60	54	3	-3	4	1	139	135	2	-4	-9	2	93	92	5
-2	4	0	17	6	7	-4	-9	1	82	84	5	-2	-2	1	33	29	4	-2	4	1	258	260	3	-3	-9	2	26	17	10
-1	4	0	321	307	3	-3	-9	1	38	34	6	-1	-2	1	255	266	4	-1	4	1	95	97	2	-2	-9	2	39	49	6
0	4	0	72	71	2	-2	-9	1	37	42	6	0	-2	1	241	237	1	0	4	1	153	152	2	-1	-9	2	48	40	11
1	4	0	34	40	4	-1	-9	1	39	36	14	1	-2	1	12	6	11	1	4	1	135	139	1	0	-9	2	0	12	1
2	4	0	385	369	2	0	-9	1	26	13	26	2	-2	1	235	238	2	2	4	1	131	129	2	1	-9	2	28	20	28
3	4	0	84	86	16	1	-9	1	0	14	1	3	-2	1	89	92	2	3	4	1	184	189	2	2	-9	2	31	31	21
4	4	0	62	64	4	2	-9	1	21	30	21	4	-2	1	22	18	6	4	4	1	30	33							

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	-6	2	74	77	4	3	0	2	81	80	2	-2	7	2	0	18	1	-4	-5	3	28	29	6	1	1	3	484	493	3
1	-6	2	16	6	15	4	0	2	341	345	3	-1	7	2	52	47	3	-3	-5	3	7	9	6	2	1	3	68	70	2
2	-6	2	47	45	6	5	0	2	45	46	4	0	7	2	96	92	4	-2	-5	3	0	10	1	3	1	3	28	33	4
3	-6	2	34	33	8	6	0	2	60	59	5	1	7	2	59	60	4	-1	-5	3	43	51	4	4	1	3	212	206	2
4	-6	2	0	9	1	7	0	2	20	6	15	2	7	2	147	142	4	0	-5	3	112	113	2	5	1	3	145	143	3
5	-6	2	46	41	6	-6	1	2	43	32	5	3	7	2	20	22	12	1	-5	3	113	116	2	6	1	3	227	247	6
-7	-5	2	23	20	8	-5	1	2	114	115	3	4	7	2	65	64	5	2	-5	3	72	75	4	7	1	3	42	42	7
-6	-5	2	104	108	4	-4	1	2	129	128	3	5	7	2	87	87	5	3	-5	3	66	66	5	-6	2	3	29	27	10
-5	-5	2	18	21	13	-3	1	2	83	81	3	6	7	2	42	34	6	4	-5	3	103	99	4	-5	2	3	36	37	5
-4	-5	2	14	2	13	-2	1	2	103	104	2	7	7	2	40	37	7	5	-5	3	54	56	6	-4	2	3	73	72	3
-3	-5	2	172	175	3	-1	1	2	216	225	5	-3	8	2	0	10	1	-6	-4	3	91	88	4	-3	2	3	86	82	3
-2	-5	2	122	121	2	0	1	2	230	238	3	-2	8	2	53	52	11	-5	-4	3	34	35	5	-2	2	3	227	230	10
-1	-5	2	14	30	13	1	1	2	170	170	4	-1	8	2	77	76	8	-4	-4	3	108	108	3	-1	2	3	247	252	2
0	-5	2	112	120	8	2	1	2	179	178	2	0	8	2	66	61	4	-3	-4	3	25	26	6	0	2	3	117	115	1
1	-5	2	236	234	2	3	1	2	271	271	3	1	8	2	40	43	6	-2	-4	3	0	4	1	1	2	3	382	386	4
2	-5	2	109	109	4	4	1	2	582	568	10	2	8	2	21	28	13	-1	-4	3	189	190	2	2	2	3	12	12	11
3	-5	2	163	155	4	5	1	2	29	25	5	3	8	2	62	67	5	0	-4	3	0	5	1	3	2	3	81	81	2
4	-5	2	33	38	8	6	1	2	67	69	4	4	8	2	8	6	7	1	-4	3	21	24	4	4	2	3	32	29	4
5	-5	2	16	11	15	7	1	2	31	33	7	5	8	2	17	12	17	2	-4	3	36	37	6	5	2	3	89	88	3
-7	-4	2	30	28	6	-6	2	2	99	97	5	6	8	2	63	56	7	3	-4	3	20	27	13	6	2	3	59	59	4
-6	-4	2	15	3	15	-5	2	2	55	52	4	-2	9	2	53	45	11	4	-4	3	13	12	13	7	2	3	83	81	4
-5	-4	2	65	67	4	-4	2	2	77	83	3	-1	9	2	0	3	1	5	-4	3	68	76	5	-6	3	3	22	3	14
-4	-4	2	28	34	7	-3	2	2	186	191	2	0	9	2	0	2	1	6	-4	3	34	33	8	-5	3	3	14	22	14
-3	-4	2	120	122	3	-2	2	2	27	25	5	1	9	2	48	93	47	-7	-3	3	42	27	5	-4	3	3	27	33	7
-2	-4	2	66	62	3	-1	2	2	131	131	1	2	9	2	85	80	5	-6	-3	3	19	10	10	-3	3	3	2	6	2
-1	-4	2	62	62	3	0	2	2	102	104	2	3	9	2	12	8	12	-5	-3	3	60	61	4	-2	3	3	113	113	2
0	-4	2	31	28	4	1	2	2	120	118	1	4	9	2	54	48	5	-4	-3	3	83	83	3	-1	3	3	23	22	5
1	-4	2	166	166	1	2	2	2	64	63	2	5	9	2	19	5	18	-3	-3	3	83	85	3	0	3	3	31	26	3
2	-4	2	132	136	3	3	2	2	25	27	4	6	9	2	18	11	18	-2	-3	3	248	251	2	1	3	3	180	183	1
3	-4	2	119	126	5	4	2	2	43	42	2	-1	10	2	45	37	12	-1	-3	3	165	174	2	2	3	3	196	198	2
4	-4	2	90	92	4	5	2	2	93	92	3	0	10	2	19	17	19	0	-3	3	196	188	2	3	3	3	430	426	2
5	-4	2	16	4	16	6	2	2	48	48	4	1	10	2	89	90	8	1	-3	3	35	36	2	4	3	3	67	70	3
6	-4	2	52	51	6	7	2	2	76	72	4	2	10	2	60	57	5	2	-3	3	126	130	3	5	3	3	0	1	1
-7	-3	2	36	32	6	-6	3	2	27	20	9	3	10	2	82	79	5	3	-3	3	50	53	4	6	3	3	101	104	3
-6	-3	2	58	54	4	-5	3	2	18	11	18	4	10	2	0	5	1	4	-3	3	73	72	4	7	3	3	90	85	4
-5	-3	2	47	48	4	-4	3	2	76	76	3	5	10	2	22	10	17	5	-3	3	65	72	5	-5	4	3	0	5	1
-4	-3	2	155	154	3	-3	3	2	91	94	3	1	11	2	0	2	1	6	-3	3	20	21	13	-4	4	3	83	77	5
-3	-3	2	124	129	2	-2	3	2	26	22	5	2	11	2	27	34	27	-7	-2	3	10	7	10	-3	4	3	52	51	4
-2	-3	2	430	421	4	-1	3	2	157	157	2	3	11	2	47	46	6	-6	-2	3	23	27	7	-2	4	3	19	21	10
-1	-3	2	524	526	8	0	-3	2	64	65	4	-4	-10	3	36	26	7	-5	-2	3	20	7	10	-1	4	3	185	185	3
0	-3	2	96	96	2	1	3	2	144	146	2	-3	-10	3	15	19	14	-4	-2	3	58	62	3	0	4	3	25	17	5
1	-3	2	15	18	15	2	3	2	94	96	1	-2	-10	3	0	5	1	-3	-2	3	195	198	2	1	4	3	241	239	3
2	-3	2	106	104	3	3	3	2	342	341	1	-1	-10	3	59	45	10	-2	-2	3	294	289	3	2	4	3	6	3	6
3	-3	2	95	103	4	4	3	2	35	32	3	0	-10	3	74	76	10	-1	-2	3	23	25	5	3	4	3	196	191	2
4	-3	2	21	10	13	5	3	2	61	65	3	1	-10	3	31	16	26	0	-2	3	489	477	2	4	4	3	48	47	3
5	-3	2	79	81	5	6	3	2	75	77	3	-5	-9	3	30	21	8	1	-2	3	90	90	1	5	4	3	50	59	10
6	-3	2	21	10	14	7	3	2	19	20	10	-4	-9	3	69	68	5	2	-2	3	95	99	1	6	4	3	74	75	3
-7	-2	2	25	1	7	-5	4	2	23	9	10	-3	-9	3	7	1	6	3	-2	3	36	37	2	7	4	3	35	28	5
-6	-2	2	28	27	6	-4	4	2	39	39	6	-2	-9	3	70	78	8	4	-2	3	16	16	16	-5	5	3	0	11	1
-5	-2	2	56	55	4	-3	4	2	107	106	3	-1	-9	3	96	99	8	5	-2	3	36	43	7	-4	5	3	26	28	8
-4	-2	2	164	162	4	-2	4	2	152	151	2	0	-9	3	41	21	15	6	-2	3	16	13	15	-3	5	3	147	144	3
-3	-2	2	33	42	4	-1	4	2	191	193	2	1	-9	3	11	21	10	7	-2	3	53	43	6	-2	5	3	34	34	4
-2	-2	2	431	432	2	0	4	2	39	42	2	2	-9	3	38	29	15	-6	-1	3	19	17	11	-1	5	3	68	73	2
-1	-2	2	0	13	1	1	4	2	404	401	5	-5	-8	3	18	19	17	-5	-1	3	14	10	13	0	5	3	183	188	2
0	-2	2	86	86	2	2	4	2	222	220	2	-4	-8	3	42	37	5	-4	-1	3	0	7	1	1	5	3	5	4	5
1	-2	2	110	113	2	3	4	2	47	46	3	-3	-8	3	157	177	14	-3	-1	3	45	43	2	2	5	3	265	266	2
2	-2	2	122	123	1	4	4	2	96	94	3	-2	-8	3	151	160	5	-2	-1	3	196	202	2	3	5	3	137	135	2
3	-2	2	72	73	2	5	4	2	79	77	3	-1	-8	3	56	59	6	-1	-1	3	156	158	2	4	5	3	255	256	5
4	-2	2	73	75	3	6	4	2	47	47	4	0	-8	3	37	42	10	0	-1	3	197	199	1	5	5	3	46	40	4
5	-2	2	51	55	6	7	4	2	38	36	5	1	-8	3	50	50	7	1	-1	3	404	418	17	6	5	3	8	15	8
6	-2	2	8	8	8	-5	5	2	0	6	1	2	-8	3	32	17	9	2	-1	3	250	249	2	7	5	3	57	46	

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

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
-1	8	3	81	81	8	0	-4	4	24	26	6	5	2	4	17	14	13	4	10	4	55	51	6	0	-2	5	187	181	3
0	8	3	55	51	4	1	-4	4	162	158	2	6	2	4	30	30	5	5	10	4	86	80	5	1	-2	5	193	191	2
1	8	3	86	85	4	2	-4	4	190	98	4	7	2	4	37	36	4	2	11	4	0	3	1	2	-2	5	321	316	3
2	8	3	29	27	8	3	-4	4	77	80	4	-5	3	4	23	23	8	3	11	4	6	1	5	3	-2	5	79	81	2
3	8	3	72	69	5	4	-4	4	45	41	6	-4	3	4	17	20	16	-2	-10	5	23	9	22	4	-2	5	131	134	4
4	8	3	78	77	11	5	-4	4	35	39	7	-3	3	4	0	7	1	-1	-10	5	35	18	14	5	-2	5	23	29	12
5	8	3	19	10	19	6	-4	4	32	37	8	-2	3	4	63	65	3	0	-10	5	55	49	10	6	-2	5	23	19	12
6	8	3	0	6	1	-6	-3	4	0	10	1	-1	3	4	136	139	8	-4	-9	5	29	17	17	-6	-1	5	111	110	5
-2	9	3	12	2	11	-5	-3	4	74	75	3	0	3	4	152	148	2	-3	-9	5	19	9	18	-5	-1	5	51	50	6
-1	9	3	62	62	10	-4	-3	4	52	51	4	1	3	4	137	160	20	-2	-9	5	18	11	18	-4	-1	5	39	37	5
0	9	3	34	28	16	-3	-3	4	105	106	3	2	3	4	141	142	1	-1	-9	5	67	69	6	-3	-1	5	49	46	3
1	9	3	58	65	5	-2	-3	4	246	239	3	3	3	4	34	30	3	0	-9	5	42	31	9	-2	-1	5	137	138	2
2	9	3	14	30	13	-1	-3	4	65	65	3	4	3	4	0	4	1	1	-9	5	55	55	7	-1	-1	5	241	235	4
3	9	3	89	94	5	0	-3	4	124	124	2	5	3	4	6	7	5	2	-9	5	24	20	23	0	-1	5	336	334	4
4	9	3	21	9	20	1	-3	4	386	374	3	6	3	4	82	82	3	-4	-8	5	25	20	14	1	-1	5	194	214	27
5	9	3	0	13	1	2	-3	4	149	151	3	7	3	4	77	76	4	-3	-8	5	38	31	8	2	-1	5	245	241	2
6	9	3	27	3	10	3	-3	4	47	44	5	-5	4	4	18	2	18	-2	-8	5	32	37	14	3	-1	5	55	55	3
-1	10	3	22	27	21	4	-3	4	51	57	5	-4	4	4	39	40	5	-1	-8	5	88	86	5	4	-1	5	95	97	2
0	10	3	16	22	15	5	-3	4	22	22	14	-3	4	4	26	19	7	0	-8	5	166	166	5	5	-1	5	79	81	4
1	10	3	36	39	17	6	-3	4	18	12	17	-2	4	4	9	6	9	1	-8	5	94	103	5	6	-1	5	36	39	8
2	10	3	18	30	18	-6	-2	4	25	5	7	-1	4	4	127	125	2	2	-8	5	74	73	5	7	-1	5	7	6	7
3	10	3	22	11	13	-5	-2	4	18	5	11	0	4	4	47	46	2	3	-8	5	23	3	22	-6	0	5	42	33	7
4	10	3	38	34	7	-4	-2	4	59	58	4	1	4	4	116	115	1	-5	-7	5	21	9	20	-5	0	5	32	28	8
5	10	3	35	29	9	-3	-2	4	124	125	3	2	4	4	100	99	1	-4	-7	5	19	15	18	-4	0	5	46	42	4
1	11	3	33	22	17	-2	-2	4	166	170	2	3	4	4	25	22	4	-3	-7	5	119	114	3	-3	0	5	94	97	2
2	11	3	0	4	1	-1	-2	4	11	20	11	4	4	4	129	129	2	-2	-7	5	97	103	3	-2	0	5	216	222	6
3	11	3	31	13	7	0	-2	4	694	678	5	5	4	4	63	64	3	-1	-7	5	128	131	3	-1	0	5	293	285	7
-3	10	4	27	8	15	1	-2	4	192	189	2	6	4	4	67	67	4	0	-7	5	69	67	6	0	0	5	54	51	6
-2	10	4	21	11	21	2	-2	4	339	337	3	7	4	4	68	65	4	1	-7	5	81	84	5	1	0	5	194	198	1
-1	10	4	39	37	14	3	-2	4	57	56	5	-4	5	4	6	12	5	2	-7	5	117	114	4	2	0	5	175	204	33
0	10	4	104	102	8	4	-2	4	14	17	13	-3	5	4	92	91	3	3	-7	5	72	65	5	3	0	5	126	126	2
-4	-9	4	21	11	11	5	-2	4	27	27	9	-2	5	4	8	4	7	4	-7	5	90	87	7	4	0	5	66	67	3
-3	-9	4	52	40	5	6	-2	4	20	22	19	-1	5	4	15	0	14	-5	-6	5	21	16	21	5	0	5	82	85	3
-2	-9	4	30	29	16	7	-2	4	26	20	10	0	5	4	22	27	5	-4	-6	5	88	95	5	6	0	5	131	145	4
-1	-9	4	129	129	7	-6	-1	4	2	1	1	1	5	4	40	46	4	-3	-6	5	107	106	3	7	0	5	42	43	6
0	-9	4	108	112	6	-5	-1	4	0	8	1	2	5	4	28	28	5	-2	-6	5	224	228	7	-6	1	5	22	16	12
1	-9	4	57	48	6	-4	-1	4	63	62	3	3	5	4	23	22	4	-1	-6	5	106	101	3	-5	1	5	60	60	10
2	-9	4	12	2	11	-2	-1	4	20	23	6	4	5	4	21	18	6	0	-6	5	31	28	10	-4	1	5	27	26	7
-5	-8	4	16	21	16	-2	-1	4	112	113	2	5	5	4	203	202	3	1	-6	5	43	42	7	-3	1	5	169	163	2
-4	-8	4	13	0	13	-1	-1	4	205	202	2	6	5	4	164	160	3	2	-6	5	52	45	6	-2	1	5	194	204	13
-3	-8	4	65	64	4	0	-1	4	147	151	3	7	5	4	34	26	5	3	-6	5	71	66	5	-1	1	5	261	253	4
-2	-8	4	151	177	20	1	-1	4	246	239	1	-4	6	4	50	54	11	4	-6	5	11	15	10	0	1	5	84	85	2
-1	-8	4	271	276	4	2	-1	4	50	52	2	-3	6	4	147	140	7	5	-6	5	34	22	10	1	1	5	8	11	8
0	-8	4	175	179	4	3	-1	4	68	71	2	-2	6	4	21	7	13	-6	-5	5	39	38	8	2	1	5	192	193	2
1	-8	4	47	46	7	4	-1	4	249	243	2	-1	6	4	39	32	7	-5	-5	5	29	27	9	3	1	5	158	157	2
2	-8	4	50	46	7	5	-1	4	60	62	5	0	6	4	34	29	11	-4	-5	5	160	159	4	4	1	5	107	102	3
3	-8	4	12	1	12	6	-1	4	35	31	8	1	6	4	113	110	4	-3	-5	5	123	120	3	5	1	5	24	26	6
-5	-7	4	38	38	5	7	-1	4	13	10	12	2	6	4	0	8	1	-2	-5	5	63	64	3	6	1	5	69	73	5
-4	-7	4	89	83	3	-6	0	4	46	46	5	3	6	4	92	97	3	-1	-5	5	40	65	23	7	1	5	34	34	7
-3	-7	4	64	63	4	-5	0	4	39	36	5	4	6	4	147	148	3	0	-5	5	11	6	10	-5	2	5	28	29	6
-2	-7	4	83	88	3	-4	0	4	35	58	32	5	6	4	20	13	14	1	-5	5	22	25	21	-4	2	5	0	4	1
-1	-7	4	88	90	3	-3	0	4	221	223	2	6	6	4	17	7	16	2	-5	5	27	27	11	-3	2	5	65	65	3
0	-7	4	95	103	4	-2	0	4	149	146	2	7	6	4	51	48	5	3	-5	5	26	25	12	-2	2	5	113	108	2
1	-7	4	155	156	4	-1	0	4	27	26	3	-3	7	4	82	75	8	4	-5	5	8	4	8	-1	2	5	167	163	2
2	-7	4	196	192	4	0	0	4	192	207	7	-2	7	4	36	39	16	5	-5	5	28	22	9	0	2	5	240	238	3
3	-7	4	37	42	7	1	0	4	426	418	1	-1	7	4	138	138	4	-6	-4	5	30	22	10	1	2	5	75	78	2
4	-7	4	26	25	13	2	0	4	274	266	3	0	7	4	14	16	13	-5	-4	5	103	97	5	2	2	5	188	186	2
-6	-6	4	76	65	6	3	0	4	239	232	2	1	7	4	16	14	15	-4	-4	5	88	95	5	3	2	5	49	77	22
-5	-6	4	12	4	12	4	0	4	181	188	2	2	7	4	13	7	13	-3	-4	5	103	103	3	4	2	5	96	92	2
-4	-6	4	89	91	3	5	0	4	8	11	8	3	7	4	98	99	4	-2	-4	5	40	35	4	5	2	5	21	18	7
-3	-6	4	14	11	14	6	0	4	170	178	4	4	7	4	151	156	4	-1	-4	5	112	115							

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

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
7	4	5	65	63	4	1	-6	6	48	52	7	5	1	6	35	39	4	5	9	6	0	14	1	6	-1	7	53	51	6
-4	5	5	18	16	17	2	-6	6	40	39	12	6	1	6	14	11	13	1	10	6	73	71	8	-5	0	7	14	26	13
-3	5	5	37	30	5	3	-6	6	37	30	8	7	1	6	4	6	4	2	10	6	56	54	5	-4	0	7	64	63	5
-2	5	5	52	43	5	4	-6	6	30	26	10	-5	2	6	20	19	20	3	10	6	46	39	7	-3	0	7	7	10	7
-1	5	5	130	136	2	-5	-5	6	47	50	6	-4	2	6	24	2	11	4	10	6	0	5	1	-2	0	7	215	214	3
0	5	5	13	3	12	-4	-5	6	145	143	5	-3	2	6	74	74	3	-1	-9	7	28	33	27	-1	0	7	62	60	5
1	5	5	14	2	13	-3	-5	6	88	91	5	-2	2	6	112	112	2	0	-9	7	58	48	13	0	0	7	82	79	8
2	5	5	117	119	3	-2	-5	6	105	110	5	-1	2	6	32	28	4	-3	-8	7	0	14	1	1	0	7	75	71	2
3	5	5	57	59	3	-1	-5	6	48	47	4	0	2	6	272	269	4	-2	-8	7	26	12	25	2	0	7	12	17	12
4	5	5	47	54	4	0	-5	6	87	87	3	1	2	6	203	201	2	-1	-8	7	0	7	1	3	0	7	75	75	2
5	5	5	55	56	5	1	-5	6	50	50	6	2	2	6	242	236	2	0	-8	7	7	31	7	4	0	7	0	9	1
6	5	5	18	19	15	2	-5	6	33	37	9	3	2	6	45	77	23	1	-8	7	30	23	30	5	0	7	52	48	5
7	5	5	68	70	5	3	-5	6	47	41	7	4	2	6	53	56	3	2	-8	7	49	44	8	6	0	7	16	12	15
-4	6	5	6	15	5	4	-5	6	31	31	8	5	2	6	0	1	1	-4	-7	7	44	42	8	7	0	7	25	16	12
-3	6	5	105	103	7	5	-5	6	23	20	12	6	2	6	49	52	5	-3	-7	7	24	23	16	-5	1	7	19	4	19
-2	6	5	54	45	5	-5	-4	6	40	48	7	7	2	6	31	37	11	-2	-7	7	74	70	5	-4	1	7	0	5	1
-1	6	5	174	174	4	-4	-4	6	141	142	8	-5	3	6	27	2	8	-1	-7	7	0	6	1	-3	1	7	10	3	10
0	6	5	0	2	1	-3	-4	6	117	122	9	-4	3	6	39	37	7	0	-7	7	26	30	25	-2	1	7	36	34	6
1	6	5	17	13	16	-2	-4	6	0	1	1	-3	3	6	65	68	3	1	-7	7	29	7	28	-1	1	7	15	8	15
2	6	5	30	37	6	-1	-4	6	77	76	3	-2	3	6	5	5	5	2	-7	7	14	7	14	0	1	7	51	51	5
3	6	5	48	49	4	0	-4	6	0	4	1	-1	3	6	76	75	3	3	-7	7	33	35	10	1	1	7	59	55	2
4	6	5	87	88	3	1	-4	6	60	60	3	0	3	6	58	60	3	-4	-6	7	12	4	12	2	1	7	114	114	2
5	6	5	45	47	6	2	-4	6	55	59	5	1	3	6	46	44	3	-3	-6	7	18	22	17	3	1	7	146	147	3
6	6	5	172	176	4	3	-4	6	39	38	6	2	3	6	40	41	3	-2	-6	7	45	51	7	4	1	7	55	78	28
7	6	5	13	12	13	4	-4	6	0	16	1	3	3	6	147	143	2	-1	-6	7	18	25	17	5	1	7	27	18	6
-3	7	5	49	53	12	5	-4	6	25	22	11	4	3	6	216	208	2	0	-6	7	33	18	29	6	1	7	0	19	1
-2	7	5	118	119	7	6	-4	6	20	18	19	5	3	6	27	25	5	1	-6	7	0	12	1	7	1	7	19	25	19
-1	7	5	231	235	4	-5	-3	6	117	110	5	6	3	6	32	33	6	2	-6	7	14	24	13	-4	2	7	47	38	6
0	7	5	44	46	5	-4	-3	6	68	66	5	7	3	6	42	37	5	3	-6	7	16	4	16	-3	2	7	22	32	22
1	7	5	121	121	4	-3	-3	6	46	39	6	-4	4	6	36	39	6	4	-6	7	0	12	1	-2	2	7	87	87	3
2	7	5	67	69	5	-2	-3	6	83	83	4	-3	4	6	20	13	10	-5	-5	7	40	38	9	-1	2	7	6	18	6
3	7	5	47	48	5	-1	-3	6	34	36	5	-2	4	6	54	52	3	-4	-5	7	17	11	16	0	2	7	103	99	3
4	7	5	215	214	3	0	-3	6	247	249	3	-1	4	6	12	2	12	-3	-5	7	23	18	15	1	2	7	140	143	3
5	7	5	110	111	5	1	-3	6	21	17	7	0	4	6	71	71	3	-2	-5	7	85	94	5	2	2	7	243	241	2
6	7	5	66	66	7	2	-3	6	204	200	2	1	4	6	211	212	2	-1	-5	7	0	5	1	3	2	7	47	44	4
7	7	5	14	9	14	3	-3	6	77	80	4	2	4	6	77	99	19	0	-5	7	73	67	4	4	2	7	0	8	1
-2	8	5	14	6	13	4	-3	6	39	34	7	3	4	6	41	37	3	1	-5	7	16	11	16	5	2	7	16	18	16
-1	8	5	29	24	7	5	-3	6	11	11	10	4	4	6	41	41	3	2	-5	7	87	92	4	6	2	7	34	30	4
0	8	5	121	125	4	6	-3	6	22	19	15	5	4	6	20	19	7	3	-5	7	0	16	1	7	2	7	25	22	8
1	8	5	114	111	4	-5	-2	6	21	14	17	6	4	6	5	9	5	4	-5	7	39	27	7	-4	3	7	7	1	7
2	8	5	147	140	4	-4	-2	6	37	37	7	7	4	6	22	20	7	5	-5	7	34	38	8	-3	3	7	58	55	4
3	8	5	187	185	4	-3	-2	6	21	16	17	-3	5	6	48	51	5	-5	-4	7	36	28	8	-2	3	7	22	23	10
4	8	5	65	70	5	-2	-2	6	105	108	10	-2	5	6	21	29	20	-4	-4	7	81	82	5	-1	3	7	0	2	1
5	8	5	54	53	5	-1	-2	6	39	46	6	-1	5	6	72	113	19	-3	-4	7	37	46	8	0	3	7	69	72	3
6	8	5	0	2	1	0	-2	6	26	23	5	0	5	6	96	119	22	-2	-4	7	0	6	1	1	3	7	98	99	2
-1	9	5	30	27	29	1	-2	6	85	83	2	1	5	6	117	140	21	-1	-4	7	68	64	5	2	3	7	0	0	1
0	9	5	20	19	8	2	-2	6	157	164	5	2	5	6	86	90	3	0	-4	7	79	78	4	3	3	7	62	60	3
1	9	5	88	89	4	3	-2	6	29	29	7	3	5	6	97	97	3	1	-4	7	20	14	9	4	3	7	0	7	1
2	9	5	102	104	9	4	-2	6	97	107	4	4	5	6	48	46	4	2	-4	7	34	19	8	5	3	7	0	3	1
3	9	5	109	105	5	5	-2	6	0	3	1	5	5	6	22	25	12	3	-4	7	12	16	12	6	3	7	10	19	10
4	9	5	0	7	1	6	-2	6	26	24	9	6	5	6	0	2	1	4	-4	7	10	21	10	7	3	7	27	22	9
5	9	5	55	53	5	-5	-1	6	153	148	5	7	5	6	39	32	6	5	-4	7	48	50	6	-4	4	7	35	28	16
6	9	5	17	3	17	-4	-1	6	85	86	5	-3	6	6	24	14	13	-5	-3	7	44	38	7	-3	4	7	117	117	3
0	10	5	48	44	11	-3	-1	6	34	36	6	-2	6	6	102	99	4	-4	-3	7	47	47	7	-2	4	7	88	84	3
1	10	5	92	87	4	-2	-1	6	0	8	1	-1	6	6	76	95	8	-3	-3	7	58	54	6	-1	4	7	83	83	4
2	10	5	65	63	5	-1	-1	6	34	38	7	0	6	6	49	45	5	-2	-3	7	20	15	19	0	4	7	60	59	3
3	10	5	9	7	9	0	-1	6	140	140	3	1	6	6	106	113	3	-1	-3	7	98	98	4	1	4	7	45	41	4
4	10	5	35	31	8	1	-1	6	168	165	4	2	6	6	0	12	1	0	-3	7	98	93	4	2	4	7	85	89	3
5	10	5	29	27	8	2	-1	6	158	160	2	3	6	6	72	75	3	1	-3	7	94	89	3	3	4	7	46	49	4
-3	-9	6	29	29	29	3	-1	6	70	67	2	4	6	6	0	20	1	2	-3	7	79	75	4	4	4	7	0	8	1
-2	-9	6	9	3	9	4	-1	6	83	84	4	5	6	6	19	21	19	3	-3	7	75	75	4	5	4	7	45	47	3
-1	-9	6	42	21	16	5	-1	6	9	15	8	6																	

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

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
0	7	7	82	76	4	0	-1	8	47	41	6	2	7	8	70	69	4	-3	1	9	16	17	15	-2	-3	10	63	62	6
1	7	7	145	148	3	1	-1	8	39	43	6	3	7	8	147	147	3	-2	1	9	0	2	1	-1	-3	10	0	3	1
2	7	7	136	135	3	2	-1	8	129	135	3	4	7	8	40	46	5	-1	1	9	60	56	4	0	-3	10	16	16	16
3	7	7	155	157	3	3	-1	8	29	30	5	5	7	8	126	120	4	0	1	9	61	66	6	1	-3	10	34	34	7
4	7	7	47	48	4	4	-1	8	24	24	9	6	7	8	14	5	13	1	1	9	62	65	5	2	-3	10	40	40	13
5	7	7	41	41	4	5	-1	8	43	39	6	0	8	8	34	23	10	2	1	9	105	112	4	3	-3	10	0	7	1
6	7	7	24	26	12	6	-1	8	52	50	6	1	8	8	31	16	6	3	1	9	16	16	15	4	-3	10	33	28	16
-1	8	7	23	14	15	-4	0	8	36	34	7	2	8	8	51	44	5	4	1	9	0	5	1	-3	-2	10	17	25	17
0	8	7	32	34	8	-3	0	8	25	5	8	3	8	8	89	93	4	5	1	9	55	54	5	-2	-2	10	25	23	14
1	8	7	21	21	12	-2	0	8	72	78	4	4	8	8	102	103	4	6	1	9	21	20	10	-1	-2	10	86	81	5
2	8	7	56	54	4	-1	0	8	103	96	4	5	8	8	158	157	4	-3	2	9	46	41	5	0	-2	10	17	10	17
3	8	7	106	104	4	0	0	8	30	35	9	1	9	8	25	19	8	-2	2	9	26	7	8	1	-2	10	0	5	1
4	8	7	33	39	13	1	0	8	84	80	4	2	9	8	29	25	8	-1	2	9	56	56	5	2	-2	10	19	10	19
5	8	7	0	17	1	2	0	8	34	39	7	3	9	8	19	22	18	0	2	9	43	42	6	3	-2	10	59	56	10
6	8	7	16	2	16	3	0	8	102	99	3	4	9	8	13	17	13	1	2	9	47	47	7	4	-2	10	24	30	23
0	9	7	13	14	12	4	0	8	35	35	5	-2	-7	9	58	51	12	2	2	9	68	63	5	5	-2	10	51	51	9
1	9	7	0	5	1	5	0	8	8	10	7	-1	-7	9	0	7	1	3	2	9	29	22	10	-3	-1	10	45	31	8
2	9	7	17	20	14	6	0	8	18	13	17	0	-7	9	24	10	23	4	2	9	62	58	3	-2	-1	10	27	25	11
3	9	7	31	27	7	-4	1	8	36	30	8	1	-7	9	0	27	1	5	2	9	12	6	12	-1	-1	10	5	14	5
4	9	7	19	10	19	-3	1	8	20	16	11	2	-7	9	0	20	1	6	2	9	21	14	10	0	-1	10	133	137	9
5	9	7	21	21	20	-2	1	8	0	3	1	-3	-6	9	44	43	9	-3	3	9	41	34	5	1	-1	10	175	169	7
2	10	7	24	22	8	-1	1	8	13	7	12	-2	-6	9	43	55	8	-2	3	9	10	17	9	2	-1	10	17	6	17
3	10	7	23	9	9	0	1	8	29	31	10	-1	-6	9	35	22	23	-1	3	9	43	42	5	3	-1	10	152	147	6
-2	-8	8	54	45	14	1	1	8	35	29	7	0	-6	9	25	21	25	0	3	9	16	16	15	4	-1	10	49	52	10
-1	-8	8	36	27	28	2	1	8	28	34	9	1	-6	9	78	70	9	1	3	9	11	14	11	5	-1	10	40	34	11
0	-8	8	6	14	5	3	1	8	121	122	3	2	-6	9	0	3	1	2	3	9	14	18	13	-3	0	10	0	17	1
1	-8	8	32	28	32	4	1	8	28	30	5	3	-6	9	0	12	1	3	3	9	54	47	4	-2	0	10	33	30	7
-3	-7	8	34	5	14	5	1	8	2	4	2	-3	-5	9	41	38	8	4	3	9	28	20	5	-1	0	10	11	19	10
-2	-7	8	33	27	9	6	1	8	16	13	16	-2	-5	9	0	0	1	5	3	9	43	57	12	0	0	10	92	97	5
-1	-7	8	38	32	19	7	1	8	39	34	7	-1	-5	9	24	8	13	6	3	9	88	93	4	1	0	10	135	136	6
0	-7	8	32	24	26	-4	2	8	43	24	6	0	-5	9	75	90	9	-3	4	9	51	47	6	2	0	10	276	279	9
1	-7	8	35	28	22	-3	2	8	12	14	11	1	-5	9	17	7	17	-2	4	9	14	4	14	3	0	10	27	15	10
2	-7	8	0	0	1	-2	2	8	43	36	5	2	-5	9	28	34	28	-1	4	9	112	115	5	4	0	10	54	50	10
3	-7	8	13	21	12	-1	2	8	7	2	7	3	-5	9	35	8	18	0	4	9	12	15	12	5	0	10	38	34	10
-4	-6	8	59	56	6	0	2	8	77	83	3	4	-5	9	27	18	21	1	4	9	113	107	4	6	0	10	0	9	1
-3	-6	8	22	21	22	1	2	8	0	3	1	-4	-4	9	39	29	12	2	4	9	48	46	6	-3	1	10	26	21	13
-2	-6	8	64	68	6	2	2	8	184	184	2	-3	-4	9	11	6	10	3	4	9	19	19	19	-2	1	10	28	22	9
-1	-6	8	0	15	1	3	2	8	94	92	3	-2	-4	9	26	25	12	4	4	9	67	69	3	-1	1	10	32	21	7
0	-6	8	46	54	15	4	2	8	128	178	54	-1	-4	9	27	34	11	5	4	9	40	42	4	0	1	10	63	67	4
1	-6	8	35	21	17	5	2	8	122	122	4	0	-4	9	4	21	4	6	4	9	35	32	8	1	1	10	95	105	5
2	-6	8	20	26	20	6	2	8	55	52	5	1	-4	9	83	89	9	-2	5	9	57	60	11	2	1	10	99	102	4
3	-6	8	17	18	17	7	2	8	35	18	7	2	-4	9	24	10	23	-1	5	9	89	89	5	3	1	10	73	76	5
4	-6	8	30	1	10	-4	3	8	8	0	7	3	-4	9	7	5	7	0	5	9	64	70	5	4	1	10	67	64	5
-4	-5	8	0	7	1	-3	3	8	64	59	4	4	-4	9	46	36	11	1	5	9	31	44	11	5	1	10	40	33	8
-3	-5	8	34	32	10	-2	3	8	35	33	6	-4	-3	9	0	22	1	2	5	9	15	26	15	6	1	10	0	1	1
-2	-5	8	17	35	16	-1	3	8	13	17	12	-3	-3	9	29	23	11	3	5	9	45	53	6	-3	2	10	22	5	15
-1	-5	8	22	29	21	0	3	8	27	18	9	-2	-3	9	46	36	7	4	5	9	60	72	13	-2	2	10	12	3	12
0	-5	8	6	19	5	1	3	8	39	36	5	-1	-3	9	77	70	7	5	5	9	7	16	6	-1	2	10	75	78	4
1	-5	8	27	19	26	2	3	8	23	26	6	0	-3	9	26	22	13	6	5	9	17	13	17	0	2	10	113	111	4
2	-5	8	28	26	27	3	3	8	9	12	9	1	-3	9	16	9	16	-1	6	9	31	29	10	1	2	10	130	130	3
3	-5	8	0	5	1	4	3	8	133	144	7	2	-3	9	44	35	12	0	6	9	18	12	17	2	2	10	62	63	6
4	-5	8	35	19	8	5	3	8	28	34	8	3	-3	9	42	35	12	1	6	9	33	28	7	3	2	10	47	48	6
-4	-4	8	40	43	7	6	3	8	44	42	4	4	-3	9	52	49	10	2	6	9	8	7	8	4	2	10	49	48	5
-3	-4	8	19	0	19	7	3	8	0	5	1	5	-3	9	60	59	9	3	6	9	150	152	3	5	2	10	36	33	5
-2	-4	8	7	6	6	-3	4	8	19	13	12	-4	-2	9	34	29	9	4	6	9	36	35	5	6	2	10	67	58	8
-1	-4	8	5	7	4	-2	4	8	27	27	7	-3	-2	9	68	72	7	5	6	9	37	39	5	-2	3	10	25	20	9
0	-4	8	51	45	5	-1	4	8	41	45	5	-2	-2	9	16	12	15	6	6	9	21	12	15	-1	3	10	129	122	4
1	-4	8	41	39	13	0	4	8	53	52	6	-1	-2	9	63	65	6	-1	7	9	14	13	13	0	3	10	70	67	4
2	-4	8	31	19	18	1	4	8	22	15	22	0	-2	9	0	13	1	0	7	9	28	20	11	1	3	10	109	112	4
3	-4	8	24	13	14	2	4	8	37	36	6	1	-2	9	9	14	9	1	7	9	45	37	6	2	3	10	12	23	12
4	-4	8	40	34	5	3	4	8	75	69	3	2	-2	9	0	12	1	2	7	9	60	55	5	3	3	10	16	8	16
5	-4	8	48																										

Table 5. Observed and calculated structure factors for 4a.

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
1	7	10	40	34	7	-2	-1	11	13	15	13	1	2	11	63	60	4	3	6	11	32	29	10	4	1	12	17	19	16
2	7	10	70	66	5	-1	-1	11	19	23	19	2	2	11	65	62	8	4	6	11	16	13	15	-1	2	12	37	29	7
3	7	10	85	85	5	0	-1	11	92	102	5	3	2	11	32	39	9	0	-3	12	17	11	17	0	2	12	0	3	1
4	7	10	52	48	6	1	-1	11	44	45	7	4	2	11	31	30	7	1	-3	12	16	20	15	1	2	12	48	49	5
3	8	10	14	19	14	2	-1	11	82	86	12	5	2	11	14	5	13	2	-3	12	0	12	1	2	2	12	15	15	15
0	-5	11	10	10	10	3	-1	11	64	58	9	-1	3	11	26	15	25	-1	-2	12	27	16	12	3	2	12	28	18	13
1	-5	11	41	52	14	4	-1	11	49	43	11	0	3	11	73	72	5	0	-2	12	0	7	1	4	2	12	22	0	14
2	-5	11	35	37	18	5	-1	11	31	3	14	1	3	11	98	96	5	1	-2	12	53	41	7	0	3	12	0	17	1
-1	-4	11	40	38	9	-2	0	11	0	3	1	2	3	11	28	38	13	2	-2	12	29	26	28	1	3	12	0	0	1
0	-4	11	25	35	24	-1	0	11	37	35	7	3	3	11	7	12	7	3	-2	12	0	2	1	2	3	12	0	4	1
1	-4	11	10	15	10	0	0	11	23	22	19	4	3	11	15	7	14	-1	-1	12	15	11	15	3	3	12	25	20	10
2	-4	11	19	8	19	1	0	11	17	1	16	5	3	11	11	24	11	0	-1	12	19	9	18	4	3	12	18	13	17
3	-4	11	9	16	9	2	0	11	143	142	4	-1	4	11	111	103	5	1	-1	12	24	0	18	1	4	12	29	30	10
-2	-3	11	64	61	16	3	0	11	79	78	5	0	4	11	74	77	6	2	-1	12	52	56	6	2	4	12	15	4	14
-1	-3	11	20	8	20	4	0	11	85	86	8	1	4	11	41	34	7	3	-1	12	117	113	8	3	4	12	67	67	5
0	-3	11	25	28	14	5	0	11	29	22	19	2	4	11	20	12	20	4	-1	12	0	18	1	4	4	12	8	4	7
1	-3	11	15	5	14	-2	1	11	15	4	14	3	4	11	62	57	5	-1	0	12	14	5	13	2	5	12	23	24	15
2	-3	11	0	25	1	-1	1	11	22	22	13	4	4	11	17	17	17	0	0	12	31	28	11	3	5	12	31	34	7
3	-3	11	20	5	20	0	1	11	20	19	20	5	4	11	23	10	11	1	0	12	21	17	21	1	0	13	47	33	7
4	-3	11	33	20	21	1	1	11	20	6	20	0	5	11	6	15	5	2	0	12	21	30	20	2	0	13	27	42	26
-2	-2	11	27	26	14	2	1	11	80	79	5	1	5	11	54	59	7	3	0	12	28	25	11	1	1	13	25	25	11
-1	-2	11	15	10	14	3	1	11	23	18	13	2	5	11	64	63	6	4	0	12	141	145	7	2	1	13	30	24	12
0	-2	11	22	13	21	4	1	11	35	35	12	3	5	11	30	25	8	-1	1	12	19	20	18	2	2	13	23	2	11
1	-2	11	78	73	5	5	1	11	49	41	9	4	5	11	25	25	10	0	1	12	10	3	9						
2	-2	11	14	16	14	-2	2	11	50	33	5	5	5	11	40	31	6	1	1	12	14	15	14						
3	-2	11	0	0	1	-1	2	11	50	46	5	1	6	11	41	43	8	2	1	12	0	5	1						
4	-2	11	29	8	22	0	2	11	61	58	5	2	6	11	0	5	1	3	1	12	45	44	7						

ORTEP drawing for 5a

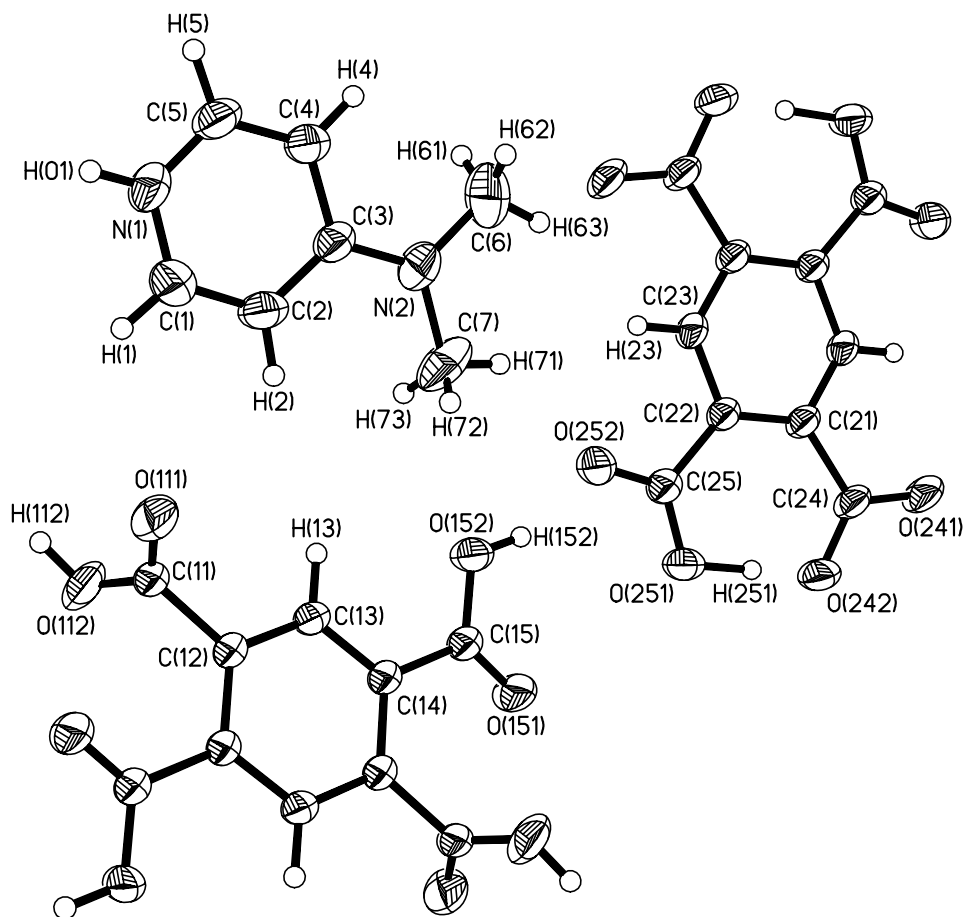


Table 1. Crystal data and structure refinement for 5a.

Identification code	5a	
Empirical formula	C ₁₇ H ₁₆ N ₂ O ₈	
Formula weight	376.32	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 9.230(2) Å	α = 108.46(1)°.
	b = 9.844(2) Å	β = 103.28(1)°.
	c = 10.127(2) Å	γ = 99.61(1)°.
Volume	820.3(3) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.524 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.123 mm ⁻¹	
F(000)	392	
Crystal size	0.44 x 0.21 x 0.09 mm ³	
Theta range for data collection	2.22 to 23.28°.	
Index ranges	-10 ≤ h ≤ 10, -10 ≤ k ≤ 10, -11 ≤ l ≤ 11	
Reflections collected	6808	
Independent reflections	2355 [R(int) = 0.0401]	
Completeness to theta = 23.28°	99.8 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	2355 / 0 / 308	
Goodness-of-fit on F ²	1.048	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0469, wR2 = 0.1205	
R indices (all data)	R1 = 0.0507, wR2 = 0.1241	
Largest diff. peak and hole	0.199 and -0.304 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	U(eq)
C(1)	5260(3)	5989(3)	2449(3)	50(1)
C(2)	4265(3)	5674(2)	3162(2)	46(1)
C(3)	4309(2)	6708(2)	4515(2)	38(1)
C(4)	5433(2)	8082(2)	5034(2)	43(1)
C(5)	6386(3)	8332(2)	4264(2)	46(1)
C(6)	3454(5)	7523(4)	6657(4)	77(1)
C(7)	2229(3)	5000(3)	4732(4)	67(1)
C(11)	2816(2)	1674(2)	-160(2)	37(1)
C(12)	1350(2)	782(2)	-113(2)	34(1)
C(13)	1071(2)	1078(2)	1221(2)	37(1)
C(14)	-256(2)	307(2)	1358(2)	34(1)
C(15)	-519(2)	596(2)	2809(2)	38(1)
C(21)	-1294(2)	3775(2)	9557(2)	33(1)
C(22)	-394(2)	3840(2)	8614(2)	32(1)
C(23)	862(2)	5073(2)	9108(2)	34(1)
C(24)	-2751(2)	2588(2)	9282(2)	37(1)
C(25)	-603(2)	2725(2)	7099(2)	37(1)
N(1)	6309(2)	7302(2)	3001(2)	49(1)
N(2)	3370(2)	6428(2)	5271(2)	50(1)
O(111)	2980(2)	2940(2)	-79(2)	59(1)
O(112)	3882(2)	957(2)	-230(2)	54(1)
O(151)	-1452(2)	-246(2)	3022(2)	53(1)
O(152)	371(2)	1856(2)	3812(2)	54(1)
O(241)	-3476(2)	2820(2)	10167(2)	56(1)
O(242)	-3198(2)	1403(2)	8146(2)	54(1)
O(251)	-1643(2)	1511(2)	6581(2)	57(1)
O(252)	265(2)	3039(2)	6423(2)	50(1)
H(01)	6920(30)	7460(30)	2530(30)	64(8)
H(1)	5260(30)	5320(30)	1540(30)	48(6)
H(2)	3550(30)	4780(30)	2690(30)	61(7)
H(4)	5500(30)	8810(30)	5940(30)	49(6)
H(5)	7170(30)	9270(30)	4560(30)	57(7)
H(13)	1830(30)	1830(20)	2100(30)	47(6)
H(23)	1450(20)	5100(20)	8480(20)	33(5)
H(61)	4440(50)	7800(50)	7280(50)	133(17)
H(62)	3280(40)	8440(50)	6550(40)	127(14)
H(63)	2770(40)	7160(40)	7080(40)	108(11)
H(71)	1760(40)	5020(40)	5410(40)	112(13)
H(72)	1390(40)	4880(40)	3780(50)	120(12)
H(73)	2710(40)	4150(40)	4640(30)	90(10)
H(112)	4740(40)	1510(30)	-210(30)	78(9)
H(152)	150(30)	2060(30)	4650(40)	78(9)
H(251)	-2420(30)	1460(30)	7350(30)	83(8)

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

C(1)-N(1)	1.340(3)	N(1)-C(1)-C(2)	120.7(2)
C(1)-C(2)	1.348(3)	N(1)-C(1)-H(1)	116.6(14)
C(1)-H(1)	0.95(2)	C(2)-C(1)-H(1)	122.7(14)
C(2)-C(3)	1.411(3)	C(1)-C(2)-C(3)	121.0(2)
C(2)-H(2)	0.92(3)	C(1)-C(2)-H(2)	115.3(16)
C(3)-N(2)	1.331(3)	C(3)-C(2)-H(2)	123.6(16)
C(3)-C(4)	1.419(3)	N(2)-C(3)-C(2)	122.87(18)
C(4)-C(5)	1.344(3)	N(2)-C(3)-C(4)	121.48(19)
C(4)-H(4)	0.95(2)	C(2)-C(3)-C(4)	115.65(19)
C(5)-N(1)	1.335(3)	C(5)-C(4)-C(3)	120.4(2)
C(5)-H(5)	0.98(3)	C(5)-C(4)-H(4)	121.1(14)
C(6)-N(2)	1.450(4)	C(3)-C(4)-H(4)	118.4(14)
C(6)-H(61)	0.92(4)	N(1)-C(5)-C(4)	121.3(2)
C(6)-H(62)	0.98(4)	N(1)-C(5)-H(5)	114.8(14)
C(6)-H(63)	0.92(4)	C(4)-C(5)-H(5)	123.9(14)
C(7)-N(2)	1.462(3)	N(2)-C(6)-H(61)	110(3)
C(7)-H(71)	0.89(4)	N(2)-C(6)-H(62)	111(2)
C(7)-H(72)	1.05(4)	H(61)-C(6)-H(62)	104(4)
C(7)-H(73)	1.00(3)	N(2)-C(6)-H(63)	112(2)
C(11)-O(111)	1.205(2)	H(61)-C(6)-H(63)	109(4)
C(11)-O(112)	1.304(2)	H(62)-C(6)-H(63)	110(3)
C(11)-C(12)	1.505(3)	N(2)-C(7)-H(71)	107(2)
C(12)-C(13)	1.382(3)	N(2)-C(7)-H(72)	110(2)
C(12)-C(14)#1	1.399(3)	H(71)-C(7)-H(72)	107(3)
C(13)-C(14)	1.390(3)	N(2)-C(7)-H(73)	112.7(18)
C(13)-H(13)	0.98(2)	H(71)-C(7)-H(73)	105(3)
C(14)-C(12)#1	1.399(3)	H(72)-C(7)-H(73)	114(3)
C(14)-C(15)	1.490(3)	O(111)-C(11)-O(112)	124.63(18)
C(15)-O(151)	1.198(2)	O(111)-C(11)-C(12)	122.10(18)
C(15)-O(152)	1.313(2)	O(112)-C(11)-C(12)	113.20(17)
C(21)-C(23)#2	1.380(3)	C(13)-C(12)-C(14)#1	119.08(17)
C(21)-C(22)	1.411(3)	C(13)-C(12)-C(11)	118.08(16)
C(21)-C(24)	1.533(3)	C(14)#1-C(12)-C(11)	122.83(16)
C(22)-C(23)	1.395(3)	C(12)-C(13)-C(14)	121.69(18)
C(22)-C(25)	1.524(3)	C(12)-C(13)-H(13)	120.1(13)
C(23)-C(21)#2	1.380(3)	C(14)-C(13)-H(13)	118.2(13)
C(23)-H(23)	0.93(2)	C(13)-C(14)-C(12)#1	119.22(17)
C(24)-O(241)	1.225(2)	C(13)-C(14)-C(15)	121.26(17)
C(24)-O(242)	1.275(2)	C(12)#1-C(14)-C(15)	119.51(17)
C(25)-O(252)	1.228(2)	O(151)-C(15)-O(152)	124.17(18)
C(25)-O(251)	1.270(2)	O(151)-C(15)-C(14)	122.74(18)
N(1)-H(01)	0.85(3)	O(152)-C(15)-C(14)	113.09(17)
O(112)-H(112)	0.87(3)	C(23)#2-C(21)-C(22)	117.69(17)
O(152)-H(152)	0.89(3)	C(23)#2-C(21)-C(24)	114.01(16)
O(242)-H(251)	1.21(3)	C(22)-C(21)-C(24)	128.29(17)
O(251)-H(251)	1.18(3)	C(23)-C(22)-C(21)	117.15(17)
		C(23)-C(22)-C(25)	114.35(16)
		C(21)-C(22)-C(25)	128.49(17)
		C(21)#2-C(23)-C(22)	125.16(18)
		C(21)#2-C(23)-H(23)	118.4(12)
		C(22)-C(23)-H(23)	116.5(12)
		O(241)-C(24)-O(242)	121.42(17)
		O(241)-C(24)-C(21)	118.32(17)
		O(242)-C(24)-C(21)	120.25(16)
		O(252)-C(25)-O(251)	122.25(18)
		O(252)-C(25)-C(22)	117.97(17)
		O(251)-C(25)-C(22)	119.78(17)
		C(5)-N(1)-C(1)	120.9(2)
		C(5)-N(1)-H(01)	120.9(18)
		C(1)-N(1)-H(01)	118.2(18)
		C(3)-N(2)-C(6)	121.1(2)
		C(3)-N(2)-C(7)	120.9(2)
		C(6)-N(2)-C(7)	118.0(2)
		C(11)-O(112)-H(112)	111.9(18)
		C(15)-O(152)-H(152)	112.6(19)
		C(24)-O(242)-H(251)	111.0(14)
		C(25)-O(251)-H(251)	112.1(14)

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

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	57(2)	47(1)	41(1)	9(1)	20(1)	7(1)
C(2)	45(1)	34(1)	45(1)	9(1)	10(1)	-4(1)
C(3)	35(1)	36(1)	42(1)	16(1)	14(1)	3(1)
C(4)	45(1)	36(1)	39(1)	8(1)	14(1)	-1(1)
C(5)	42(1)	41(1)	48(1)	15(1)	14(1)	-6(1)
C(6)	87(2)	92(2)	67(2)	28(2)	53(2)	22(2)
C(7)	49(2)	65(2)	97(2)	46(2)	28(2)	-2(1)
C(11)	34(1)	36(1)	30(1)	3(1)	15(1)	-6(1)
C(12)	29(1)	34(1)	33(1)	5(1)	15(1)	-2(1)
C(13)	31(1)	38(1)	30(1)	2(1)	12(1)	-6(1)
C(14)	31(1)	34(1)	30(1)	5(1)	14(1)	-3(1)
C(15)	32(1)	39(1)	32(1)	4(1)	14(1)	-4(1)
C(21)	26(1)	36(1)	32(1)	10(1)	10(1)	-1(1)
C(22)	28(1)	34(1)	30(1)	9(1)	11(1)	1(1)
C(23)	31(1)	39(1)	32(1)	10(1)	17(1)	1(1)
C(24)	28(1)	42(1)	35(1)	11(1)	11(1)	-5(1)
C(25)	34(1)	38(1)	33(1)	7(1)	13(1)	1(1)
N(1)	47(1)	54(1)	49(1)	20(1)	25(1)	2(1)
N(2)	50(1)	51(1)	59(1)	25(1)	29(1)	6(1)
O(111)	56(1)	38(1)	81(1)	12(1)	38(1)	-2(1)
O(112)	32(1)	54(1)	77(1)	25(1)	26(1)	1(1)
O(151)	53(1)	52(1)	40(1)	6(1)	24(1)	-16(1)
O(152)	56(1)	50(1)	34(1)	-4(1)	24(1)	-20(1)
O(241)	40(1)	62(1)	49(1)	5(1)	25(1)	-16(1)
O(242)	49(1)	42(1)	49(1)	-3(1)	23(1)	-16(1)
O(251)	55(1)	45(1)	46(1)	-8(1)	26(1)	-16(1)
O(252)	55(1)	49(1)	36(1)	1(1)	27(1)	-6(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

Page 1

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	132	138	1	-3	5	0	158	166	1	7	-9	1	9	2	4	0	-3	1	84	95	1	-9	2	1	70	65	2
2	0	0	159	166	1	-2	5	0	176	177	3	-4	-8	1	113	124	5	1	-3	1	733	772	8	-8	2	1	30	32	1
3	0	0	500	526	5	-1	5	0	96	93	1	-3	-8	1	99	102	4	2	-3	1	39	42	1	-7	2	1	182	186	6
4	0	0	251	243	2	0	5	0	185	180	4	-2	-8	1	108	112	8	3	-3	1	306	311	2	-6	2	1	135	133	4
5	0	0	79	81	1	1	5	0	84	78	1	-1	-8	1	92	99	3	4	-3	1	34	33	1	-5	2	1	134	127	2
6	0	0	116	118	1	2	5	0	81	80	1	0	-8	1	48	53	1	5	-3	1	35	35	1	-4	2	1	346	342	4
7	0	0	51	49	2	3	5	0	102	104	1	1	-8	1	51	47	1	6	-3	1	51	51	2	-3	2	1	50	55	1
8	0	0	9	3	8	4	5	0	202	207	1	2	-8	1	111	113	1	7	-3	1	34	34	1	-2	2	1	49	49	1
9	0	0	21	21	3	5	5	0	204	212	2	3	-8	1	62	63	1	8	-3	1	64	58	1	-1	2	1	85	95	3
-9	1	0	25	24	4	6	5	0	119	127	1	4	-8	1	20	22	1	9	-3	1	29	25	1	0	2	1	102	101	2
-8	1	0	69	66	4	7	5	0	42	42	1	5	-8	1	43	47	2	-9	-2	1	35	36	2	1	2	1	37	36	1
-7	1	0	3	6	2	-9	6	0	12	7	2	6	-8	1	93	99	1	-8	-2	1	103	109	3	2	2	1	88	98	2
-6	1	0	83	82	2	-8	6	0	76	78	4	7	-8	1	23	24	2	-7	-2	1	21	20	1	3	2	1	48	48	1
-5	1	0	121	130	3	-7	6	0	22	25	2	8	-8	1	21	22	2	-6	-2	1	67	70	1	4	2	1	128	128	1
-4	1	0	200	205	1	-6	6	0	25	20	3	-5	-7	1	32	33	2	-5	-2	1	139	149	7	5	2	1	199	196	1
-3	1	0	76	89	1	-5	6	0	5	4	5	-4	-7	1	170	177	2	-4	-2	1	61	63	1	6	2	1	65	62	1
-2	1	0	51	53	1	-4	6	0	55	53	2	-3	-7	1	276	289	3	-3	-2	1	111	110	2	7	2	1	116	121	2
-1	1	0	120	127	2	-3	6	0	42	45	1	-2	-7	1	9	9	5	-2	-2	1	237	238	5	8	2	1	5	1	5
0	1	0	132	165	33	-2	6	0	49	50	1	-1	-7	1	48	52	1	-1	-2	1	235	227	3	-10	3	1	82	77	3
1	1	0	443	410	7	-1	6	0	71	79	2	0	-7	1	85	86	2	0	-2	1	379	431	4	-9	3	1	24	24	1
2	1	0	35	38	1	0	6	0	75	85	1	1	-7	1	119	113	1	1	-2	1	558	541	2	-8	3	1	32	29	1
3	1	0	37	37	1	1	6	0	62	58	1	2	-7	1	58	58	1	2	-2	1	1705	1903	2	-7	3	1	104	105	2
4	1	0	104	107	1	2	6	0	22	24	2	3	-7	1	40	40	1	3	-2	1	187	186	2	-6	3	1	163	162	2
5	1	0	83	88	1	3	6	0	16	15	1	4	-7	1	121	124	4	4	-2	1	65	66	2	-5	3	1	63	59	2
6	1	0	84	83	1	4	6	0	129	132	5	5	-7	1	25	28	2	5	-2	1	136	140	2	-4	3	1	45	44	1
7	1	0	119	122	2	5	6	0	43	45	1	6	-7	1	24	25	2	6	-2	1	103	102	4	-3	3	1	59	64	2
8	1	0	23	25	2	6	6	0	92	100	2	7	-7	1	40	38	2	7	-2	1	79	79	4	-2	3	1	294	297	2
9	1	0	99	89	2	-8	7	0	9	7	3	8	-7	1	9	12	3	8	-2	1	101	102	4	-1	3	1	271	273	4
-9	2	0	62	61	2	-7	7	0	56	62	1	-6	-6	1	29	29	1	9	-2	1	43	46	2	0	3	1	195	180	1
-8	2	0	50	46	1	-6	7	0	24	27	2	-5	-6	1	10	9	3	-9	-1	1	121	120	2	1	3	1	47	50	1
-7	2	0	91	91	3	-5	7	0	4	4	4	-4	-6	1	66	57	1	-8	-1	1	72	72	2	2	3	1	152	147	1
-6	2	0	103	107	1	-4	7	0	117	119	2	-3	-6	1	198	199	2	-7	-1	1	57	56	2	3	3	1	223	205	3
-5	2	0	25	27	1	-3	7	0	26	25	1	-2	-6	1	60	62	1	-6	-1	1	24	21	1	4	3	1	70	69	1
-4	2	0	97	103	1	-2	7	0	42	40	1	-1	-6	1	127	122	2	-5	-1	1	81	86	1	5	3	1	57	62	1
-3	2	0	148	152	4	-1	7	0	11	5	2	0	-6	1	88	85	1	-4	-1	1	163	160	1	6	3	1	101	104	2
-2	2	0	56	60	1	0	7	0	96	97	1	1	-6	1	26	28	1	-3	-1	1	24	22	1	7	3	1	134	139	2
-1	2	0	731	746	10	1	7	0	135	137	1	2	-6	1	21	21	1	-2	-1	1	134	137	3	8	3	1	62	65	2
0	2	0	422	424	4	2	7	0	89	91	2	3	-6	1	118	123	2	-1	-1	1	257	261	5	-10	4	1	28	26	1
1	2	0	50	48	1	3	7	0	128	131	6	4	-6	1	157	163	2	0	-1	1	289	321	3	-9	4	1	29	24	1
2	2	0	206	201	3	4	7	0	74	82	2	5	-6	1	32	37	1	1	-1	1	12	8	1	-8	4	1	65	68	2
3	2	0	904	858	3	5	7	0	30	27	2	6	-6	1	16	18	1	2	-1	1	118	122	2	-7	4	1	38	41	1
4	2	0	41	43	1	-8	8	0	6	2	6	7	-6	1	51	53	1	3	-1	1	55	52	1	-6	4	1	17	12	1
5	2	0	47	56	3	-7	8	0	34	41	2	8	-6	1	76	81	2	4	-1	1	92	91	1	-5	4	1	102	106	1
6	2	0	73	69	2	-6	8	0	25	25	2	9	-6	1	49	50	1	5	-1	1	75	73	1	-4	4	1	11	5	1
7	2	0	120	121	2	-5	8	0	46	50	1	-7	-5	1	22	21	2	6	-1	1	84	85	1	-3	4	1	197	199	1
8	2	0	27	24	2	-4	8	0	65	67	1	-6	-5	1	103	108	1	7	-1	1	32	36	1	-2	4	1	160	157	4
-9	3	0	10	5	3	-3	8	0	49	51	1	-5	-5	1	116	124	1	8	-1	1	135	129	2	-1	4	1	115	109	1
-8	3	0	41	40	1	-2	8	0	151	143	2	-4	-5	1	210	212	2	9	-1	1	8	4	8	0	4	1	55	52	1
-7	3	0	59	63	4	-1	8	0	25	25	1	-3	-5	1	35	36	1	-9	0	1	132	128	9	1	4	1	145	149	2
-6	3	0	7	10	6	0	8	0	15	10	2	-2	-5	1	61	58	1	-8	0	1	119	115	6	2	4	1	105	102	1
-5	3	0	97	93	2	1	8	0	40	41	2	-1	-5	1	256	244	1	-7	0	1	87	89	1	3	4	1	91	91	1
-4	3	0	104	98	3	2	8	0	28	25	4	0	-5	1	157	161	4	-6	0	1	121	119	2	4	4	1	74	74	1
-3	3	0	168	174	3	3	8	0	14	20	3	1	-5	1	117	110	1	-5	0	1	181	194	4	5	4	1	95	99	1
-2	3	0	139	139	1	4	8	0	39	39	2	2	-5	1	85	76	3	-4	0	1	191	185	1	6	4	1	38	39	1
-1	3	0	172	176	3	-7	9	0	7	2	6	3	-5	1	31	32	1	-3	0	1	35	28	1	7	4	1	22	18	2
0	3	0	54	71	6	-6	9	0	9	7	9	4	-5	1	108	106	1	-2	0	1	113	103	2	-9	5	1	17	19	2
1	3	0	34	31	1	-5	9	0	26	29	2	5	-5	1	33	35	1	-1	0	1	174	181	2	-8	5	1	33	35	2
2	3	0	158	154	2	-4	9	0	86	85	1	6	-5	1	2	2	2	0	0	1	112	103	4	-7	5	1	25	23	1
3	3	0	154	136	3	-3	9	0	84	80	1	7	-5	1	10	3	3	1	0	1	162	166	2	-6	5	1	30	34	1
4	3	0	69	70	1	-2	9	0	7	7	6	8	-5	1	61	65	1	2	0	1	400	417	4	-5	5	1	104	111	1
5	3	0	122	124	1	-1	9	0	179	169	4	9	-5	1	26	24	1	3	0	1	203	201	3	-4	5	1	162	166	1
6	3	0	103	115	6																								

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	7	1	25	29	2	1	-6	2	262	255	3	-3	-1	2	117	116	2	7	3	2	14	13	3	-4	-9	3	16	16	3
-6	7	1	38	41	1	2	-6	2	45	43	1	-2	-1	2	301	297	1	-10	4	2	22	23	1	-3	-9	3	10	14	5
-5	7	1	7	0	5	3	-6	2	58	57	1	-1	-1	2	307	302	3	-9	4	2	8	2	3	-2	-9	3	68	67	2
-4	7	1	35	36	1	4	-6	2	108	114	2	0	-1	2	152	151	5	-8	4	2	21	21	1	-1	-9	3	12	8	3
-3	7	1	26	26	1	5	-6	2	70	70	1	1	-1	2	280	280	2	-7	4	2	70	73	2	0	-9	3	44	41	2
-2	7	1	147	148	1	6	-6	2	28	25	1	2	-1	2	386	393	5	-6	4	2	25	26	1	1	-9	3	16	16	2
-1	7	1	60	59	2	7	-6	2	25	24	1	3	-1	2	203	209	2	-5	4	2	92	93	2	2	-9	3	9	8	4
0	7	1	13	14	3	8	-6	2	45	46	1	4	-1	2	8	8	2	-4	4	2	20	15	3	3	-9	3	7	0	6
1	7	1	171	177	2	7	-5	2	50	53	1	5	-1	2	273	268	4	-3	4	2	298	280	5	4	-9	3	12	10	3
2	7	1	114	116	3	-6	-5	2	36	32	1	6	-1	2	28	25	1	-2	4	2	160	163	1	5	-9	3	67	74	4
3	7	1	94	93	4	-5	-5	2	168	170	1	7	-1	2	95	89	1	-1	4	2	314	299	1	6	-9	3	16	15	4
4	7	1	13	9	3	-4	-5	2	24	22	1	8	-1	2	163	152	8	0	4	2	240	230	1	-5	-8	3	46	46	3
-8	8	1	17	14	3	-3	-5	2	30	20	1	9	-1	2	21	24	3	1	4	2	115	112	1	-4	-8	3	132	148	5
-7	8	1	29	26	2	-2	-5	2	100	99	2	-10	0	2	44	40	2	2	4	2	267	262	1	-3	-8	3	79	94	3
-6	8	1	41	43	1	-1	-5	2	260	260	3	-9	0	2	119	112	6	3	4	2	23	16	1	-2	-8	3	19	23	2
-5	8	1	34	37	1	0	-5	2	124	130	2	-8	0	2	40	41	2	4	4	2	104	108	2	-1	-8	3	55	55	1
-4	8	1	26	23	1	1	-5	2	40	40	1	-7	0	2	50	50	2	5	4	2	23	26	2	0	-8	3	61	61	2
-3	8	1	100	99	1	2	-5	2	216	215	1	-6	0	2	84	88	1	6	4	2	17	14	2	1	-8	3	137	138	1
-2	8	1	182	173	2	3	-5	2	220	221	3	-5	0	2	283	263	2	-9	5	2	36	31	1	2	-8	3	68	67	1
-1	8	1	15	12	2	4	-5	2	85	86	1	-4	0	2	178	181	1	-8	5	2	26	24	2	3	-8	3	83	88	1
0	8	1	210	205	3	5	-5	2	67	69	1	-3	0	2	64	65	1	-7	5	2	30	32	2	4	-8	3	35	37	2
1	8	1	62	61	3	6	-5	2	39	39	1	-2	0	2	573	558	5	-6	5	2	7	5	3	5	-8	3	75	80	3
2	8	1	11	11	3	7	-5	2	15	13	2	-1	0	2	126	128	3	-5	5	2	10	0	2	6	-8	3	6	11	6
3	8	1	68	72	4	8	-5	2	9	1	3	0	0	2	414	387	2	-4	5	2	22	25	1	7	-8	3	31	31	2
-6	9	1	24	22	2	9	-5	2	7	7	7	1	0	2	486	471	4	-3	5	2	61	57	1	-6	-7	3	24	24	1
-5	9	1	30	31	2	-8	-4	2	22	22	2	2	0	2	179	160	1	-2	5	2	44	42	1	-5	-7	3	31	32	1
-4	9	1	59	57	1	-7	-4	2	15	6	2	3	0	2	169	172	1	-1	5	2	18	12	1	-4	-7	3	65	62	1
-3	9	1	9	4	4	-6	-4	2	7	6	5	4	0	2	248	238	2	0	5	2	186	190	4	-3	-7	3	33	30	1
-2	9	1	88	81	3	-5	-4	2	125	129	2	5	0	2	65	68	2	1	5	2	52	66	14	-2	-7	3	125	122	1
-1	9	1	10	5	5	-4	-4	2	59	58	1	6	0	2	14	13	2	2	5	2	74	71	1	-1	-7	3	19	18	1
0	9	1	20	20	2	-3	-4	2	63	68	2	7	0	2	68	68	3	3	5	2	128	132	4	0	-7	3	172	170	3
1	9	1	62	61	2	-2	-4	2	177	172	1	8	0	2	71	71	2	4	5	2	78	76	1	1	-7	3	102	106	2
-3	10	1	39	35	1	-1	-4	2	280	289	2	-10	1	2	25	26	2	5	5	2	13	10	2	2	-7	3	26	22	1
-1	10	2	44	45	2	0	-4	2	74	76	1	-9	1	2	176	173	6	6	5	2	23	22	2	3	-7	3	47	44	1
0	10	2	123	114	2	1	-4	2	116	118	1	-8	1	2	8	11	6	-9	6	2	37	35	1	4	-7	3	105	109	4
1	10	2	53	46	2	2	-4	2	432	410	3	-7	1	2	17	15	1	-8	6	2	71	79	3	5	-7	3	66	63	1
2	10	2	28	23	2	3	-4	2	180	170	1	-6	1	2	229	230	3	-7	6	2	56	62	1	6	-7	3	14	9	2
3	10	2	31	26	1	4	-4	2	526	513	4	-5	1	2	20	17	1	-6	6	2	15	13	1	7	-7	3	44	41	1
4	10	2	21	22	2	5	-4	2	31	35	1	-4	1	2	199	211	5	-5	6	2	7	7	4	8	-7	3	15	12	2
5	10	2	16	21	3	6	-4	2	65	69	1	-3	1	2	198	199	6	-4	6	2	10	2	2	-7	-6	3	84	87	1
-3	-9	2	19	17	3	7	-4	2	10	2	3	-2	1	2	127	135	2	-3	6	2	59	60	1	-6	-6	3	35	33	1
-2	-9	2	166	170	7	8	-4	2	42	41	1	-1	1	2	78	78	1	-2	6	2	71	67	1	-5	-6	3	45	41	1
-1	-9	2	112	121	5	9	-4	2	26	26	2	0	1	2	156	150	1	-1	6	2	104	103	2	-4	-6	3	70	68	3
0	-9	2	20	21	2	-9	-3	2	73	76	2	1	1	2	591	570	5	0	6	2	192	197	3	-3	-6	3	112	114	1
1	-9	2	19	24	2	-8	-3	2	10	5	6	2	1	2	78	70	1	1	6	2	149	149	2	-2	-6	3	80	82	2
2	-9	2	43	42	1	-7	-3	2	210	202	4	3	1	2	84	86	1	2	6	2	248	238	9	-1	-6	3	77	79	1
3	-9	2	35	31	1	-6	-3	2	18	18	1	4	1	2	83	84	1	3	6	2	41	40	2	0	-6	3	195	192	3
4	-9	2	22	20	2	-5	-3	2	8	13	3	5	1	2	92	92	1	4	6	2	58	62	2	1	-6	3	183	189	1
5	-9	2	69	73	3	-4	-3	2	119	117	1	6	1	2	66	67	2	5	6	2	13	15	12	2	-6	3	54	53	1
6	-9	2	37	41	2	-3	-3	2	37	37	1	7	1	2	64	65	2	-8	7	2	41	43	1	3	-6	3	17	12	1
7	-9	2	6	6	5	-2	-3	2	265	250	4	8	1	2	53	50	2	-7	7	2	32	33	1	4	-6	3	243	242	3
-5	-8	2	43	43	3	-1	-3	2	168	171	3	-10	2	2	38	37	2	-6	7	2	62	74	5	5	-6	3	20	19	1
-4	-8	2	62	68	2	0	-3	2	42	57	5	-9	2	2	52	47	2	-5	7	2	32	34	1	6	-6	3	67	74	2
-3	-8	2	57	62	2	1	-3	2	155	162	3	-8	2	2	8	6	4	-4	7	2	121	116	1	7	-6	3	58	54	1
-2	-8	2	9	3	6	2	-3	2	701	705	5	-7	2	2	45	45	1	-3	7	2	6	1	6	8	-6	3	7	4	7
-1	-8	2	111	110	1	3	-3	2	12	8	1	-6	2	2	195	179	3	-2	7	2	102	98	1	-8	-5	3	13	6	2
0	-8	2	26	23	1	4	-3	2	91	88	2	-5	2	2	48	53	1	-1	7	2	30	30	1	-7	-5	3	132	136	1
1	-8	2	43	39	1	5	-3	2	159	166	3	-4	2	2	13	10	1	0	7	2	196	195	3	-6	-5	3	14	12	2
2	-8	2	40	39	1	6	-3	2	93	91	1	-3	2	2	397	373	3	1	7	2	60	55	2	-5	-5	3	150	150	1
3	-8	2	49	50	1	7	-3	2	20	22	1	-2	2	2	131	126	1	2	7	2	18	17	2	-4	-5	3	145	153	1
4	-8	2	31	35	2	8	-3	2	8	4	7	-1	2	2	339	328	1	3	7	2	76	78	2	-3	-5	3	174	166	1
5	-8	2	89																										

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

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
7	-4	3	51	46	1	2	1	3	199	194	1	-8	7	3	52	55	1	-7	-5	4	9	8	4	-10	0	4	46	43	4
8	-4	3	10	4	4	3	1	3	189	176	3	-7	7	3	49	52	1	-6	-5	4	67	64	2	-9	0	4	8	1	8
-9	-3	3	32	29	2	4	1	3	236	222	1	-6	7	3	50	52	1	-5	-5	4	87	88	2	-8	0	4	25	25	1
-9	-3	3	36	35	1	5	1	3	9	0	3	-5	7	3	21	18	1	-4	-5	4	29	34	1	-7	0	4	41	37	1
-7	-3	3	49	49	1	6	1	3	46	43	2	-4	7	3	38	39	1	-3	-5	4	198	206	2	-6	0	4	75	74	1
-6	-3	3	96	98	1	7	1	3	45	41	2	-3	7	3	9	7	3	-2	-5	4	20	19	1	-5	0	4	132	116	1
-5	-3	3	144	148	1	8	1	3	22	18	3	-2	7	3	50	51	1	-1	-5	4	143	154	1	-4	0	4	282	258	3
-4	-3	3	54	51	1	-10	2	3	0	6	1	-1	7	3	59	57	2	0	-5	4	208	225	6	-3	0	4	178	166	1
-3	-3	3	88	80	1	-9	2	3	8	2	8	0	7	3	113	114	3	1	-5	4	8	14	2	-2	0	4	191	188	2
-2	-3	3	107	108	1	-8	2	3	9	4	2	-1	7	3	105	107	6	2	-5	4	115	122	2	-1	0	4	863	748	7
-1	-3	3	100	103	1	-7	2	3	50	50	1	2	7	3	40	44	4	3	-5	4	234	240	2	0	0	4	216	219	3
0	-3	3	167	175	1	-6	2	3	71	74	1	3	7	3	26	17	3	4	-5	4	49	49	1	1	0	4	349	310	1
1	-3	3	104	118	3	-5	2	3	98	96	1	-7	8	3	12	12	5	5	-5	4	125	123	3	2	0	4	298	289	3
2	-3	3	138	153	1	-4	2	3	156	156	3	-6	8	3	48	50	1	6	-5	4	5	1	5	3	0	4	19	22	1
3	-3	3	134	140	1	-3	2	3	419	389	1	-5	8	3	6	1	6	7	-5	4	8	1	6	4	0	4	16	17	1
4	-3	3	121	128	3	-2	2	3	20	18	1	-4	8	3	10	7	3	8	-5	4	26	21	6	5	0	4	73	73	1
5	-3	3	147	144	2	-1	2	3	332	298	3	-3	8	3	113	106	3	-8	-4	4	94	103	2	6	0	4	31	31	1
6	-3	3	101	99	2	0	2	3	351	322	2	-2	8	3	47	48	1	-7	-4	4	92	82	3	7	0	4	20	19	2
7	-3	3	79	75	3	1	2	3	354	330	2	-1	8	3	4	3	4	-6	-4	4	93	96	2	-10	1	4	93	92	7
8	-3	3	34	29	1	2	2	3	30	36	1	0	8	3	92	88	7	-5	-4	4	264	269	4	-9	1	4	188	188	6
-9	-2	3	79	72	3	3	2	3	214	202	1	1	8	3	53	54	3	-4	-4	4	107	107	1	-8	1	4	53	54	1
-8	-2	3	65	71	2	4	2	3	117	117	3	-4	9	3	48	41	1	-3	-4	4	168	164	2	-7	1	4	48	56	5
-7	-2	3	332	323	1	5	2	3	88	86	1	-3	9	3	11	10	3	-2	-4	4	141	142	4	-6	1	4	186	190	1
-6	-2	3	35	36	1	6	2	3	8	7	7	-2	9	3	17	17	2	-1	-4	4	57	53	1	-5	1	4	120	110	1
-5	-2	3	20	21	1	7	2	3	8	8	7	-2	10	4	57	59	2	0	-4	4	58	58	1	-4	1	4	176	174	5
-4	-2	3	103	102	1	-10	3	3	55	55	2	-1	10	4	106	98	4	1	-4	4	133	136	3	-3	1	4	324	326	10
-3	-2	3	496	475	1	-9	3	3	38	37	1	0	10	4	41	39	3	2	-4	4	72	73	1	-2	1	4	30	30	1
-2	-2	3	416	401	3	-8	3	3	18	19	1	1	10	4	65	59	2	3	-4	4	52	53	1	-1	1	4	181	186	2
-1	-2	3	89	99	1	-7	3	3	110	111	5	2	10	4	35	34	1	4	-4	4	14	14	2	0	1	4	135	139	2
0	-2	3	397	397	10	-6	3	3	16	7	4	3	10	4	18	21	3	5	-4	4	137	137	1	1	1	4	212	190	2
1	-2	3	188	207	5	-5	3	3	166	169	2	4	10	4	7	11	7	6	-4	4	32	29	1	2	1	4	76	81	1
2	-2	3	17	18	1	-4	3	3	135	131	1	5	10	4	5	4	5	7	-4	4	48	45	2	3	1	4	89	92	1
3	-2	3	288	291	2	-3	3	3	218	220	1	-4	-9	4	3	3	3	8	-4	4	69	70	3	4	1	4	63	62	1
4	-2	3	73	68	2	-2	3	3	142	135	2	-3	-9	4	30	27	2	-9	-3	4	169	172	5	5	1	4	43	42	1
5	-2	3	23	21	1	-1	3	3	293	261	4	-2	-9	4	4	5	4	-8	-3	4	194	198	3	6	1	4	20	25	2
6	-2	3	118	118	2	0	3	3	110	109	1	-1	-9	4	8	12	5	-7	-3	4	139	148	1	7	1	4	48	48	2
7	-2	3	22	22	1	1	3	3	114	102	1	0	-9	4	61	62	1	-6	-3	4	124	131	1	-10	2	4	37	38	4
8	-2	3	37	33	3	2	3	3	96	96	1	1	-9	4	34	31	1	-5	-3	4	119	123	1	-9	2	4	36	31	2
-9	-1	3	71	73	2	3	3	3	0	2	1	2	-9	4	91	93	3	-4	-3	4	142	145	2	-8	2	4	60	62	2
-8	-1	3	123	127	3	4	3	3	106	104	1	3	-9	4	48	47	1	-3	-3	4	110	107	1	-7	2	4	62	69	7
-7	-1	3	134	136	3	5	3	3	59	61	2	4	-9	4	6	8	5	-2	-3	4	91	89	1	-6	2	4	14	11	1
-6	-1	3	26	24	1	6	3	3	42	39	2	5	-9	4	46	53	1	-1	-3	4	65	78	1	-5	2	4	25	25	1
-5	-1	3	61	57	1	-9	4	3	41	44	2	6	-9	4	15	18	2	0	-3	4	154	159	3	-4	2	4	58	57	1
-4	-1	3	279	259	1	-8	4	3	17	13	2	-5	-8	4	67	65	2	1	-3	4	128	136	4	-3	2	4	267	254	1
-3	-1	3	32	34	1	-7	4	3	33	35	2	-4	-8	4	7	6	6	2	-3	4	23	18	1	-2	2	4	299	261	6
-2	-1	3	399	407	3	-6	4	3	13	13	1	-3	-8	4	122	118	2	3	-3	4	266	280	2	-1	2	4	283	261	3
-1	-1	3	34	34	1	-5	4	3	190	193	3	-2	-8	4	30	26	1	4	-3	4	156	160	5	0	2	4	128	112	1
0	-1	3	232	243	2	-4	4	3	133	131	2	-1	-8	4	91	87	2	5	-3	4	107	115	1	1	2	4	75	74	1
1	-1	3	240	233	1	-3	4	3	209	208	5	0	-8	4	103	97	2	6	-3	4	82	76	2	2	2	4	304	290	2
2	-1	3	308	308	2	-2	4	3	103	93	1	1	-8	4	11	5	2	7	-3	4	25	21	1	3	2	4	157	148	1
3	-1	3	216	212	4	-1	4	3	133	132	1	2	-8	4	67	66	1	8	-3	4	28	25	2	4	2	4	129	123	4
4	-1	3	10	6	1	0	4	3	212	213	1	3	-8	4	31	33	1	-9	-2	4	15	4	3	5	2	4	171	170	1
5	-1	3	44	49	1	1	4	3	157	154	2	4	-8	4	5	1	4	-8	-2	4	19	24	2	6	2	4	19	22	3
6	-1	3	55	63	1	2	4	3	213	215	1	5	-8	4	43	47	2	-7	-2	4	19	17	2	-10	3	4	10	5	8
7	-1	3	53	48	2	3	4	3	181	183	1	6	-8	4	37	45	2	-6	-2	4	104	106	1	-9	3	4	84	88	3
8	-1	3	68	68	4	4	4	3	166	163	1	7	-8	4	19	14	4	-5	-2	4	179	172	2	-8	3	4	16	9	5
-10	0	3	14	12	3	5	4	3	22	22	2	-6	-7	4	70	66	3	-4	-2	4	99	113	1	-7	3	4	38	38	4
-9	0	3	89	86	5	6	4	3	30	31	2	-5	-7	4	69	74	1	-3	-2	4	157	154	1	-6	3	4	147	146	2
-8	0	3	130	130	2	-9	5	3	80	79	2	-4	-7	4	70	70	1	-2	-2	4	265	255	3	-5	3	4	27	24	1
-7	0	3	93	93	1	-8	5	3	19	19	2	-3	-7	4	204	207	5	-1	-2	4	86	93	3	-4	3	4	204	198	4
-6	0	3	27	29	4	-7	5	3	12	4	2	-2	-7	4	0	4	1	0	-2	4	28	25	1	-3	3	4			

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

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
-7	5	4	9	2	2	-1	-6	5	75	80	1	3	-1	5	102	107	1	-4	5	5	69	68	1	-2	-5	6	27	29	1
-6	5	4	47	46	1	0	-6	5	18	18	4	4	-1	5	35	49	11	-3	5	5	60	55	1	-1	-5	6	21	20	2
-5	5	4	109	111	3	1	-6	5	14	17	3	5	-1	5	84	79	1	-2	5	5	29	29	1	0	-5	6	11	7	1
-4	5	4	35	37	1	2	-6	5	63	57	1	6	-1	5	21	22	2	-1	5	5	125	125	4	1	-5	6	27	28	1
-3	5	4	25	20	1	3	-6	5	57	57	1	7	-1	5	66	58	2	0	5	5	8	7	3	2	-5	6	54	57	1
-2	5	4	37	41	1	4	-6	5	154	150	2	-9	0	5	0	4	1	1	5	5	95	92	2	3	-5	6	94	101	3
-1	5	4	13	9	2	5	-6	5	97	91	1	-8	0	5	60	57	1	2	5	5	41	46	1	4	-5	6	22	17	1
0	5	4	25	29	1	6	-6	5	7	6	6	-7	0	5	21	18	1	3	5	5	0	2	1	5	-5	6	56	59	4
1	5	4	136	142	4	7	-6	5	16	17	2	-6	0	5	106	103	1	-8	6	5	19	13	3	6	-5	6	12	11	3
2	5	4	84	80	2	-8	-5	5	26	29	2	-5	0	5	89	87	1	-7	6	5	32	33	1	7	-5	6	17	16	2
3	5	4	123	120	2	-7	-5	5	188	195	6	-4	0	5	17	13	1	-6	6	5	91	90	1	-8	-4	6	28	27	1
4	5	4	2	0	2	-6	-5	5	194	204	8	-3	0	5	105	109	2	-5	6	5	40	39	2	-7	-4	6	107	113	3
-8	6	4	23	25	3	-5	-5	5	252	256	4	-2	0	5	88	83	1	-4	6	5	73	67	1	-6	-4	6	30	30	1
-7	6	4	74	76	1	-4	-5	5	10	2	3	-1	0	5	292	279	3	-3	6	5	161	154	1	-5	-4	6	49	53	2
-6	6	4	98	102	1	-3	-5	5	64	71	2	0	0	5	103	96	1	-2	6	5	11	2	2	-4	-4	6	113	114	1
-5	6	4	118	121	3	-2	-5	5	68	70	1	1	0	5	18	15	1	-1	6	5	6	7	5	-3	-4	6	111	111	1
-4	6	4	23	22	1	-1	-5	5	101	115	1	2	0	5	165	154	2	0	6	5	82	87	3	-2	-4	6	72	82	1
-3	6	4	41	41	1	0	-5	5	108	113	1	3	0	5	169	165	1	1	6	5	37	35	1	-1	-4	6	333	317	4
-2	6	4	120	118	1	1	-5	5	40	40	1	4	0	5	51	52	2	2	6	5	31	30	2	0	-4	6	120	116	4
-1	6	4	109	108	5	2	-5	5	81	83	2	5	0	5	52	50	1	-6	7	5	67	66	1	1	-4	6	91	93	1
0	6	4	59	63	1	3	-5	5	15	18	4	6	0	5	85	84	1	-5	7	5	34	33	1	2	-4	6	53	51	1
1	6	4	37	39	1	4	-5	5	3	3	3	7	0	5	45	42	3	-4	7	5	165	157	1	3	-4	6	83	82	2
2	6	4	97	100	7	5	-5	5	121	124	4	-9	1	5	7	12	6	-3	7	5	135	131	2	4	-4	6	10	12	3
3	6	4	61	61	2	6	-5	5	73	72	1	-8	1	5	141	137	3	-2	7	5	9	9	4	5	-4	6	35	43	7
-7	7	4	40	42	1	7	-5	5	13	9	3	-7	1	5	92	88	1	-1	7	5	37	36	1	6	-4	6	28	23	1
-6	7	4	17	16	1	-8	-4	5	18	16	2	-6	1	5	127	127	1	0	7	5	6	8	6	7	-4	6	7	2	7
-5	7	4	0	5	1	-7	-4	5	33	37	2	-5	1	5	156	149	2	-2	-10	6	25	23	2	-9	-3	6	14	15	2
-4	7	4	12	9	2	-6	-4	5	204	200	1	-4	1	5	103	105	1	-1	-10	6	65	63	2	-8	-3	6	21	16	1
-3	7	4	54	53	1	-5	-4	5	57	58	1	-3	1	5	56	64	1	0	-10	6	21	16	2	-7	-3	6	12	4	2
-2	7	4	51	50	1	-4	-4	5	149	148	1	-2	1	5	44	41	1	1	-10	6	11	14	4	-6	-3	6	125	129	2
-1	7	4	29	25	1	-3	-4	5	152	155	1	-1	1	5	215	225	5	2	-10	6	46	42	4	-5	-3	6	57	54	2
0	7	4	34	37	1	-2	-4	5	19	20	1	0	1	5	155	143	4	3	-10	6	23	26	2	-4	-3	6	39	33	1
1	7	4	17	9	2	-1	-4	5	236	247	2	1	1	5	136	136	1	-4	-9	6	9	1	4	-3	-3	6	25	31	1
-5	8	4	83	84	1	0	-4	5	258	257	4	2	1	5	53	51	1	-3	-9	6	96	92	4	-2	-3	6	26	26	1
-4	8	4	36	30	1	1	-4	5	130	126	2	3	1	5	54	54	2	-2	-9	6	44	43	1	-1	-3	6	149	153	2
-3	8	4	39	39	1	2	-4	5	76	79	2	4	1	5	110	105	2	-1	-9	6	19	16	1	0	-3	6	161	164	3
-2	8	4	66	63	2	3	-4	5	39	41	1	5	1	5	155	147	1	0	-9	6	7	10	6	1	-3	6	3	0	3
-1	8	4	77	73	3	4	-4	5	28	33	2	6	1	5	113	110	3	1	-9	6	21	18	1	2	-3	6	15	18	1
-2	-10	5	23	24	3	5	-4	5	13	9	3	-9	2	5	50	47	2	2	-9	6	41	33	2	3	-3	6	109	109	2
-1	-10	5	46	44	2	6	-4	5	8	4	4	-9	2	5	125	122	1	3	-9	6	22	20	1	4	-3	6	63	64	3
0	-10	5	31	25	2	7	-4	5	42	42	1	-7	2	5	107	105	1	4	-9	6	54	51	1	5	-3	6	11	6	3
1	-10	5	59	57	2	-9	-3	5	17	15	2	-6	2	5	73	77	4	5	-9	6	0	1	1	6	-3	6	55	56	1
2	-10	5	89	86	7	-8	-3	5	23	19	2	-5	2	5	11	4	1	-5	-8	6	51	52	1	7	-3	6	0	2	1
3	-10	5	30	29	2	-7	-3	5	22	17	1	-4	2	5	39	34	1	-4	-8	6	206	203	5	-9	-2	6	27	22	2
4	-10	5	55	58	4	-6	-3	5	214	212	8	-3	2	5	134	124	1	-3	-8	6	114	117	3	-8	-2	6	150	152	1
-4	-9	5	4	0	4	-5	-3	5	28	25	1	-2	2	5	114	110	1	-2	-8	6	87	85	1	-7	-2	6	196	191	2
-3	-9	5	16	18	3	-4	-3	5	193	198	2	-1	2	5	61	54	1	-1	-8	6	68	66	2	-6	-2	6	16	11	2
-2	-9	5	8	4	8	-3	-3	5	65	65	1	0	2	5	87	88	1	0	-8	6	16	14	1	-5	-2	6	49	50	1
-1	-9	5	49	49	2	-2	-3	5	169	166	3	1	2	5	46	45	2	1	-8	6	42	41	1	-4	-2	6	191	199	1
0	-9	5	12	9	4	-1	-3	5	33	34	1	2	2	5	25	25	1	2	-8	6	34	29	1	-3	-2	6	141	142	1
1	-9	5	35	35	1	0	-3	5	129	129	4	3	2	5	141	132	2	3	-8	6	21	20	1	-2	-2	6	117	123	3
2	-9	5	37	39	3	1	-3	5	113	118	2	4	2	5	15	14	2	4	-8	6	22	20	1	-1	-2	6	106	112	2
3	-9	5	40	37	2	2	-3	5	215	223	3	5	2	5	98	92	2	5	-8	6	66	63	3	0	-2	6	202	203	1
4	-9	5	17	11	2	3	-3	5	15	17	2	6	2	5	77	76	2	6	-8	6	55	56	1	1	-2	6	57	59	1
5	-9	5	12	9	3	4	-3	5	8	10	3	-9	3	5	139	136	2	-6	-7	6	44	40	1	2	-2	6	168	168	1
-5	-8	5	53	55	1	5	-3	5	47	45	1	-8	3	5	140	142	2	-5	-7	6	138	141	3	3	-2	6	75	77	1
-4	-8	5	80	80	1	6	-3	5	6	0	6	-7	3	5	16	11	3	-4	-7	6	193	197	3	4	-2	6	50	47	1
-3	-8	5	72	71	1	7	-3	5	14	3	2	-6	3	5	26	24	1	-3	-7	6	88	90	2	5	-2	6	27	25	2
-2	-8	5	28	28	1	-9	-2	5	64	66	2	-5	3	5	28	27	1	-2	-7	6	61	60	1	6	-2	6	8	1	8
-1	-8	5	11	4	2	-8	-2	5	99	97	3	-4	3	5	123	118	1	-1	-7	6	16	15	1	-9	-1	6	19	17	2
0	-8	5	83	84	1	-7	-2	5	121	124	4	-3	3	5	26	28	3	0	-7	6	95	95	1	-8	-1	6	38	39	1
1	-8	5	111	108	2	-6	-2	5	128																				

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

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
3	0	6	63	63	1	3	-9	7	23	21	3	-5	-2	7	207	205	3	0	4	7	8	6	7	-7	-2	8	134	131	6
4	0	6	63	64	2	4	-9	7	17	10	2	-4	-2	7	210	212	2	1	4	7	27	30	2	-6	-2	8	73	69	2
5	0	6	100	89	2	-5	-8	7	125	117	2	-3	-2	7	184	188	1	-6	5	7	80	76	2	-5	-2	8	24	25	1
6	0	6	51	45	2	-4	-8	7	96	91	2	-2	-2	7	6	6	6	-5	5	7	18	16	2	-4	-2	8	127	130	2
-9	1	6	12	9	3	-3	-8	7	7	3	6	-1	-2	7	58	61	1	-4	5	7	16	17	3	-3	-2	8	35	36	1
-7	1	6	233	224	3	-2	-8	7	245	233	2	0	-2	7	85	89	1	-3	5	7	28	34	2	-2	-2	8	106	105	1
-8	1	6	198	195	1	-1	-8	7	15	11	2	1	-2	7	105	110	2	-2	5	7	10	6	4	-1	-2	8	36	33	1
-6	1	6	54	52	1	0	-8	7	37	36	1	2	-2	7	118	122	1	-1	5	7	40	41	2	0	-2	8	8	4	4
-5	1	6	120	117	2	1	-8	7	7	5	6	3	-2	7	38	38	2	0	5	7	46	47	2	1	-2	8	80	82	1
-4	1	6	13	16	4	2	-8	7	0	5	1	4	-2	7	9	5	8	-3	-9	8	26	23	2	2	-2	8	65	67	3
-3	1	6	135	149	5	3	-8	7	43	38	2	5	-2	7	6	5	6	-2	-9	8	59	56	2	3	-2	8	38	35	2
-2	1	6	22	23	1	4	-8	7	28	30	2	6	-2	7	26	25	2	-1	-9	8	54	49	2	4	-2	8	48	49	2
-1	1	6	59	65	3	5	-8	7	16	12	2	-9	-1	7	66	62	5	0	-9	8	50	43	2	-8	-1	8	113	112	3
0	1	6	108	111	1	-6	-7	7	25	23	2	-8	-1	7	51	53	2	1	-9	8	31	22	3	-7	-1	8	7	4	6
1	1	6	17	18	2	-5	-7	7	12	8	4	-7	-1	7	118	112	9	2	-9	8	15	9	3	-6	-1	8	32	35	1
2	1	6	113	115	2	-4	-7	7	98	96	2	-6	-1	7	236	225	3	-4	-8	8	17	12	3	-5	-1	8	23	20	1
3	1	6	81	81	1	-3	-7	7	91	90	2	-5	-1	7	102	110	1	-3	-8	8	128	119	2	-4	-1	8	45	50	1
4	1	6	36	33	2	-2	-7	7	117	115	1	-4	-1	7	63	64	1	-2	-8	8	51	48	2	-3	-1	8	194	196	1
5	1	6	214	204	11	-1	-7	7	31	30	1	-3	-1	7	38	37	1	-1	-8	8	36	30	2	-2	-1	8	22	21	1
-9	2	6	9	6	4	0	-7	7	8	3	3	-2	-1	7	0	2	1	0	-8	8	33	30	1	-1	-1	8	124	116	1
-8	2	6	35	31	1	1	-7	7	45	44	1	-1	-1	7	156	163	4	1	-8	8	67	61	2	0	-1	8	0	3	1
-7	2	6	109	106	1	2	-7	7	11	10	3	0	-1	7	15	14	2	2	-8	8	0	2	1	1	-1	8	183	186	3
-6	2	6	165	151	1	3	-7	7	25	20	2	1	-1	7	199	190	1	3	-8	8	99	88	2	2	-1	8	129	133	1
-5	2	6	184	171	5	4	-7	7	37	37	2	2	-1	7	12	9	2	4	-8	8	23	23	2	3	-1	8	56	54	4
-4	2	6	10	9	3	5	-7	7	23	23	3	3	-1	7	8	2	8	-5	-7	8	49	45	2	4	-1	8	62	59	2
-3	2	6	35	32	2	-7	-6	7	22	21	3	4	-1	7	46	47	2	-4	-7	8	21	15	2	-8	0	8	55	54	2
-2	2	6	64	54	5	-6	-6	7	28	27	2	5	-1	7	81	82	3	-3	-7	8	42	40	2	-7	0	8	37	37	1
-1	2	6	18	11	1	-5	-6	7	20	20	2	-9	0	7	113	114	2	-2	-7	8	132	132	1	-6	0	8	61	57	1
0	2	6	12	6	2	-4	-6	7	51	51	2	-8	0	7	0	5	1	-1	-7	8	37	39	5	-5	0	8	50	52	1
1	2	6	11	10	3	-3	-6	7	86	89	1	-7	0	7	21	14	1	0	-7	8	13	12	2	-4	0	8	251	240	5
2	2	6	34	33	1	-2	-6	7	126	124	1	-6	0	7	100	97	2	1	-7	8	62	58	2	-3	0	8	85	81	3
3	2	6	82	82	1	-1	-6	7	77	78	1	-5	0	7	108	105	1	2	-7	8	9	7	4	-2	0	8	174	168	3
4	2	6	20	17	2	0	-6	7	20	20	1	-4	0	7	246	243	1	3	-7	8	20	18	2	-1	0	8	7	6	6
5	2	6	38	33	3	1	-6	7	217	205	2	-3	0	7	82	79	1	4	-7	8	18	9	5	0	0	8	61	60	1
-9	3	6	53	56	3	2	-6	7	39	38	1	-2	0	7	61	56	1	-6	-6	8	81	84	2	1	0	8	146	141	1
-8	3	6	13	8	3	3	-6	7	9	10	4	-1	0	7	45	45	2	-5	-6	8	35	32	2	2	0	8	39	38	1
-7	3	6	250	240	2	4	-6	7	15	14	3	0	0	7	124	125	1	-4	-6	8	258	245	9	3	0	8	8	2	8
-6	3	6	7	6	7	5	-6	7	28	28	3	1	0	7	45	48	1	-3	-6	8	131	135	2	4	0	8	16	15	4
-5	3	6	207	200	1	6	-6	7	25	25	2	2	0	7	5	0	5	-2	-6	8	40	40	2	-8	1	8	54	52	1
-4	3	6	176	178	3	7	-5	7	39	38	3	3	0	7	45	44	2	-1	-6	8	39	38	1	-7	1	8	28	26	1
-3	3	6	145	148	3	6	-5	7	40	41	2	4	0	7	6	0	5	0	-6	8	29	30	1	-6	1	8	201	202	2
-2	3	6	136	136	1	-5	-5	7	72	65	2	5	0	7	31	29	2	1	-6	8	22	25	1	-5	1	8	86	81	3
-1	3	6	103	103	1	-4	-5	7	118	111	2	-9	1	7	75	71	2	2	-6	8	8	7	4	-4	1	8	83	87	2
0	3	6	124	131	2	-3	-5	7	96	98	1	-8	1	7	47	48	2	3	-6	8	20	19	3	-3	1	8	34	40	3
1	3	6	93	100	1	-2	-5	7	69	70	1	-7	1	7	77	77	1	4	-6	8	6	2	5	-2	1	8	40	50	9
2	3	6	9	4	4	-1	-5	7	127	131	1	-6	1	7	125	123	1	5	-6	8	7	1	7	-1	1	8	11	8	3
3	3	6	96	93	2	0	-5	7	26	28	1	-5	1	7	246	242	1	-7	-5	8	26	28	3	0	1	8	47	51	2
4	3	6	63	61	3	1	-5	7	53	56	1	-4	1	7	15	15	2	-6	-5	8	7	6	6	1	1	8	12	7	2
-8	4	6	133	132	4	2	-5	7	6	6	6	-3	1	7	227	237	9	-5	-5	8	84	81	2	2	1	8	51	54	1
-7	4	6	51	52	2	3	-5	7	21	26	2	-2	1	7	85	86	1	-4	-5	8	143	142	1	3	1	8	40	37	2
-6	4	6	55	57	2	4	-5	7	44	41	2	-1	1	7	196	204	1	-3	-5	8	132	135	1	-8	2	8	27	25	2
-5	4	6	85	86	3	5	-5	7	35	32	2	0	1	7	237	224	8	-2	-5	8	17	19	1	-7	2	8	52	49	2
-4	4	6	37	33	2	6	-5	7	7	0	7	1	1	7	94	95	3	-1	-5	8	36	34	1	-6	2	8	103	101	2
-3	4	6	180	177	2	-8	-4	7	74	63	4	2	1	7	106	104	2	0	-5	8	18	19	1	-5	2	8	29	36	2
-2	4	6	182	185	1	-7	-4	7	34	34	2	3	1	7	128	128	3	1	-5	8	75	77	3	-4	2	8	48	42	5
-1	4	6	115	118	2	-6	-4	7	324	311	7	4	1	7	70	69	2	2	-5	8	67	64	3	-3	2	8	3	11	3
0	4	6	28	22	2	-5	-4	7	159	157	6	-8	2	7	25	22	2	3	-5	8	47	46	2	-2	2	8	59	59	2
1	4	6	7	9	7	-4	-4	7	96	88	1	-7	2	7	78	78	2	4	-5	8	94	100	8	-1	2	8	26	31	2
2	4	6	59	65	1	-3	-4	7	62	68	1	-6	2	7	198	193	2	5	-5	8	19	19	2	0	2	8	24	27	2
3	4	6	20	21	2	-2	-4	7	7	4	5	-5	2	7	7	6	7	-7	-4	8	22	25	3	1	2	8	105	109	3
-8	5	6	4	9	4	-1	-4	7	22	27	1	-4	2	7	129	130	2	-6	-4	8	46	40	2	2	2	8	9	0	5
-7	5	6	19	20	2	0	-4	7	6	0	5	-3	2	7	86														

Table 5. Observed and calculated structure factors for 5a.

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	-7	9	46	47	1	4	-4	9	35	36	4	-5	0	9	46	45	1	-1	-6	10	54	54	1	0	-2	10	12	10	2
1	-7	9	0	0	1	-7	-3	9	25	26	2	-4	0	9	136	141	5	0	-6	10	71	70	1	1	-2	10	12	10	5
2	-7	9	31	35	2	-6	-3	9	70	70	2	-3	0	9	36	31	1	1	-6	10	9	6	4	-6	-1	10	67	67	2
3	-7	9	29	25	2	-5	-3	9	33	37	2	-2	0	9	66	60	3	2	-6	10	5	11	5	-5	-1	10	8	12	5
-6	-6	9	36	29	2	-4	-3	9	10	6	2	-1	0	9	69	73	1	-5	-5	10	60	62	2	-4	-1	10	11	7	3
-5	-6	9	86	92	2	-3	-3	9	62	67	1	0	0	9	24	24	1	-4	-5	10	13	10	3	-3	-1	10	62	65	2
-4	-6	9	33	27	2	-2	-3	9	19	18	1	1	0	9	20	20	2	-3	-5	10	39	41	2	-2	-1	10	16	17	2
-3	-6	9	47	50	2	-1	-3	9	71	74	1	2	0	9	104	102	5	-2	-5	10	47	48	1	-1	-1	10	73	78	1
-2	-6	9	7	7	7	0	-3	9	62	62	1	-7	1	9	80	72	4	-1	-5	10	5	4	4	0	-1	10	39	37	2
-1	-6	9	75	76	1	1	-3	9	14	10	2	-6	1	9	66	72	2	0	-5	10	15	13	2	1	-1	10	64	68	2
0	-6	9	5	0	5	2	-3	9	48	49	2	-5	1	9	12	13	6	1	-5	10	45	46	2	-6	0	10	41	41	2
1	-6	9	18	15	2	3	-3	9	57	61	2	-4	1	9	31	28	3	2	-5	10	10	13	6	-5	0	10	53	52	3
2	-6	9	8	7	5	-7	-2	9	77	74	2	-3	1	9	128	136	2	-6	-4	10	47	43	2	-4	0	10	99	100	2
3	-6	9	12	2	3	-6	-2	9	54	55	2	-2	1	9	22	19	2	-5	-4	10	59	57	2	-3	0	10	57	55	3
-6	-5	9	14	2	3	-5	-2	9	0	4	1	-1	1	9	68	77	2	-4	-4	10	12	14	3	-2	0	10	42	41	1
-5	-5	9	56	55	2	-4	-2	9	138	136	3	0	1	9	25	25	2	-3	-4	10	17	16	1	-1	0	10	66	63	4
-4	-5	9	110	111	2	-3	-2	9	56	60	1	1	1	9	37	35	2	-2	-4	10	64	62	1	0	0	10	30	28	1
-3	-5	9	9	10	5	-2	-2	9	236	235	5	-6	2	9	94	94	2	-1	-4	10	23	24	1	-5	1	10	28	26	2
-2	-5	9	48	51	1	-1	-2	9	130	127	3	-5	2	9	14	10	2	0	-4	10	126	128	1	-4	1	10	60	60	2
-1	-5	9	41	41	1	0	-2	9	58	58	1	-4	2	9	71	70	2	1	-4	10	66	65	2	-3	1	10	60	56	2
0	-5	9	7	0	4	1	-2	9	39	44	1	-3	2	9	37	41	3	2	-4	10	44	45	4	-2	1	10	50	49	2
1	-5	9	11	12	3	2	-2	9	17	13	2	-2	2	9	19	21	2	-6	-3	10	67	65	2	-1	1	10	29	25	2
2	-5	9	20	17	6	3	-2	9	24	22	2	-1	2	9	37	35	2	-5	-3	10	34	34	2	-3	-5	11	15	13	5
3	-5	9	20	23	2	-7	-1	9	30	29	2	0	2	9	27	30	2	-4	-3	10	6	1	6	-2	-5	11	68	74	1
4	-5	9	25	24	2	-6	-1	9	62	62	1	-5	3	9	54	53	2	-3	-3	10	105	112	1	-1	-5	11	30	31	1
-7	-4	9	118	121	2	-5	-1	9	92	94	2	-4	3	9	11	7	4	-2	-3	10	199	207	2	-4	-4	11	17	17	3
-6	-4	9	34	32	2	-4	-1	9	244	249	4	-3	3	9	51	45	2	-1	-3	10	31	27	1	-3	-4	11	27	26	1
-5	-4	9	169	178	2	-3	-1	9	80	74	1	-2	3	9	40	39	2	0	-3	10	135	137	1	-2	-4	11	7	2	7
-4	-4	9	86	84	2	-2	-1	9	138	143	3	-3	-7	10	12	8	3	1	-3	10	12	13	4	-1	-4	11	34	33	1
-3	-4	9	41	36	1	-1	-1	9	49	53	1	-2	-7	10	36	35	2	2	-3	10	35	37	4	-4	-3	11	8	5	5
-2	-4	9	163	166	4	0	-1	9	19	21	2	-1	-7	10	58	55	1	-6	-2	10	10	7	7	-3	-3	11	48	55	1
-1	-4	9	13	9	2	1	-1	9	14	14	2	0	-7	10	20	16	2	-5	-2	10	31	32	3	-2	-3	11	52	52	1
0	-4	9	33	31	1	2	-1	9	15	13	3	1	-7	10	9	11	5	-4	-2	10	67	65	2	-1	-3	11	86	89	2
1	-4	9	10	8	2	3	-1	9	5	2	5	-4	-6	10	14	12	2	-3	-2	10	43	47	1	-4	-2	11	33	33	1
2	-4	9	50	53	5	-7	0	9	35	37	2	-3	-6	10	91	93	3	-2	-2	10	55	59	1	-3	-2	11	65	65	2
3	-4	9	43	44	2	-6	0	9	46	45	1	-2	-6	10	75	76	1	-1	-2	10	68	68	1	-2	-2	11	27	23	1

ORTEP drawing for 6a

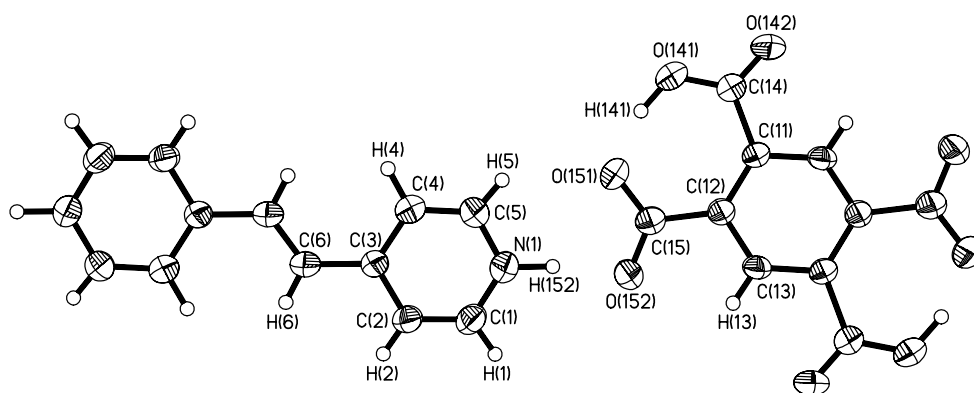


Table 1. Crystal data and structure refinement for 6a.

Identification code	6a	
Empirical formula	C ₂₂ H ₁₆ N ₂ O ₈	
Formula weight	436.37	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 3.850(1) Å	α = 113.46(1)°.
	b = 11.162(3) Å	β = 95.26(1)°.
	c = 12.126(4) Å	γ = 92.35(1)°.
Volume	474.3(2) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.528 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.119 mm ⁻¹	
F(000)	226	
Crystal size	0.48 x 0.08 x 0.02 mm ³	
Theta range for data collection	1.84 to 23.46°.	
Index ranges	-4 ≤ h ≤ 4, -12 ≤ k ≤ 12, -13 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	3977	
Independent reflections	1377 [R(int) = 0.0827]	
Completeness to theta = 23.46°	97.9 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	1377 / 0 / 177	
Goodness-of-fit on F ²	1.072	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0705, wR2 = 0.1693	
R indices (all data)	R1 = 0.0909, wR2 = 0.1839	
Largest diff. peak and hole	0.257 and -0.289 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6a. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	7716(10)	4761(4)	8272(4)	50(1)
C(2)	9002(10)	5323(3)	7575(3)	46(1)
C(3)	8783(9)	4625(3)	6336(3)	40(1)
C(4)	7246(9)	3343(3)	5856(3)	48(1)
C(5)	6022(10)	2833(4)	6597(3)	50(1)
C(6)	10084(10)	5267(3)	5594(3)	46(1)
C(11)	-1206(8)	-538(3)	8750(3)	36(1)
C(12)	849(8)	676(3)	9268(3)	36(1)
C(13)	1915(8)	1157(3)	10506(3)	38(1)
C(14)	-2783(9)	-1314(3)	7433(3)	45(1)
C(15)	2008(9)	1535(3)	8657(3)	46(1)
N(1)	6229(8)	3543(3)	7793(3)	48(1)
O(141)	-1971(8)	-944(3)	6598(2)	67(1)
O(142)	-4747(8)	-2264(3)	7196(2)	68(1)
O(151)	1552(9)	1124(3)	7528(2)	75(1)
O(152)	3531(8)	2631(2)	9284(2)	63(1)
H(1)	7630(90)	5210(40)	9110(40)	56(10)
H(2)	10040(100)	6160(40)	7870(40)	60(11)
H(4)	7100(100)	2820(40)	4980(40)	60(11)
H(5)	4990(90)	2020(40)	6380(30)	52(10)
H(6)	11140(100)	6100(40)	5980(30)	64(12)
H(13)	3280(80)	1920(30)	10800(30)	38(9)
H(141)	-600(140)	-100(50)	6820(40)	94(15)
H(152)	5110(120)	3130(40)	8310(40)	96(16)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 6a.

C(1)-N(1)	1.326(5)	N(1)-C(1)-C(2)	121.4(4)
C(1)-C(2)	1.351(5)	N(1)-C(1)-H(1)	115(2)
C(1)-H(1)	0.94(4)	C(2)-C(1)-H(1)	123(2)
C(2)-C(3)	1.383(5)	C(1)-C(2)-C(3)	120.0(3)
C(2)-H(2)	0.92(4)	C(1)-C(2)-H(2)	124(2)
C(3)-C(4)	1.394(5)	C(3)-C(2)-H(2)	116(2)
C(3)-C(6)	1.463(5)	C(2)-C(3)-C(4)	117.6(3)
C(4)-C(5)	1.348(5)	C(2)-C(3)-C(6)	119.1(3)
C(4)-H(4)	0.98(4)	C(4)-C(3)-C(6)	123.4(3)
C(5)-N(1)	1.340(5)	C(5)-C(4)-C(3)	119.8(3)
C(5)-H(5)	0.90(4)	C(5)-C(4)-H(4)	121(2)
C(6)-C(6)#1	1.315(7)	C(3)-C(4)-H(4)	119(2)
C(6)-H(6)	0.92(4)	N(1)-C(5)-C(4)	121.1(4)
C(11)-C(13)#2	1.376(5)	N(1)-C(5)-H(5)	112(2)
C(11)-C(12)	1.414(4)	C(4)-C(5)-H(5)	127(2)
C(11)-C(14)	1.531(5)	C(6)#1-C(6)-C(3)	125.2(4)
C(12)-C(13)	1.391(5)	C(6)#1-C(6)-H(6)	117(3)
C(12)-C(15)	1.503(5)	C(3)-C(6)-H(6)	118(2)
C(13)-C(11)#2	1.376(5)	C(13)#2-C(11)-C(12)	117.9(3)
C(13)-H(13)	0.91(3)	C(13)#2-C(11)-C(14)	113.0(3)
C(14)-O(142)	1.196(4)	C(12)-C(11)-C(14)	129.2(3)
C(14)-O(141)	1.294(4)	C(13)-C(12)-C(11)	116.5(3)
C(15)-O(152)	1.240(4)	C(13)-C(12)-C(15)	115.2(3)
C(15)-O(151)	1.250(4)	C(11)-C(12)-C(15)	128.3(3)
N(1)-H(152)	1.03(5)	C(11)#2-C(13)-C(12)	125.6(3)
O(141)-H(141)	0.99(5)	C(11)#2-C(13)-H(13)	120(2)
O(151)-H(141)	1.46(6)	C(12)-C(13)-H(13)	114(2)
		O(142)-C(14)-O(141)	121.0(3)
		O(142)-C(14)-C(11)	118.9(3)
		O(141)-C(14)-C(11)	120.1(3)
		O(152)-C(15)-O(151)	120.8(3)
		O(152)-C(15)-C(12)	119.0(3)
		O(151)-C(15)-C(12)	120.1(3)
		C(1)-N(1)-C(5)	120.2(3)
		C(1)-N(1)-H(152)	122(3)
		C(5)-N(1)-H(152)	118(3)
		C(14)-O(141)-H(141)	120(3)
		C(15)-O(151)-H(141)	119.7(19)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6a. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	66(2)	47(2)	34(2)	15(2)	8(2)	4(2)
C(2)	63(2)	36(2)	34(2)	12(2)	1(2)	-1(2)
C(3)	47(2)	39(2)	33(2)	15(2)	-1(2)	-4(1)
C(4)	55(2)	50(2)	35(2)	15(2)	1(2)	-6(2)
C(5)	63(2)	41(2)	44(2)	17(2)	7(2)	-6(2)
C(6)	59(2)	36(2)	34(2)	7(2)	2(2)	-6(2)
C(11)	43(2)	34(2)	27(2)	8(1)	6(1)	2(1)
C(12)	42(2)	33(2)	31(2)	10(1)	8(1)	2(1)
C(13)	47(2)	30(2)	30(2)	4(2)	6(2)	-6(2)
C(14)	56(2)	42(2)	35(2)	14(2)	2(2)	-2(2)
C(15)	57(2)	40(2)	35(2)	10(2)	9(2)	0(2)
N(1)	59(2)	49(2)	39(2)	19(2)	10(2)	0(2)
O(141)	99(2)	63(2)	32(2)	15(1)	-5(1)	-20(2)
O(142)	90(2)	58(2)	40(2)	10(1)	-12(1)	-33(2)
O(151)	118(3)	68(2)	35(2)	21(1)	4(2)	-28(2)
O(152)	94(2)	46(2)	43(2)	14(1)	12(1)	-20(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 6a.

Page 1

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	138	164	16	1	-9	1	13	11	4	0	2	1	267	281	3	-1	-6	2	22	22	2	2	4	2	75	76	2
2	0	0	195	107	1	2	-9	1	35	33	4	1	2	1	14	10	2	0	-6	2	10	14	4	3	4	2	41	45	2
3	0	0	43	46	1	3	-9	1	8	15	7	2	2	1	139	137	4	1	-6	2	59	61	2	-3	5	2	35	27	3
4	0	0	24	20	12	-2	-8	1	70	74	2	3	2	1	46	50	1	2	-6	2	34	34	2	-2	5	2	54	49	2
-4	1	0	26	14	6	-1	-8	1	45	45	2	4	2	1	9	8	9	3	-6	2	0	6	1	-1	5	2	87	92	1
-3	1	0	86	79	1	0	-8	1	13	11	4	-4	3	1	19	20	4	-3	-5	2	8	2	8	0	5	2	31	32	1
-2	1	0	40	37	1	1	-8	1	10	12	7	-3	3	1	42	40	2	-2	-5	2	80	80	2	1	5	2	94	91	2
-1	1	0	330	305	3	2	-8	1	52	56	3	-2	3	1	228	225	3	-1	-5	2	125	123	3	2	5	2	37	35	2
0	1	0	64	56	2	3	-8	1	18	13	5	-1	3	1	11	10	4	0	-5	2	9	3	8	3	5	2	43	39	6
1	1	0	127	190	43	-3	-7	1	14	5	6	0	3	1	53	64	1	1	-5	2	54	53	2	-3	6	2	28	30	3
2	1	0	187	197	2	-2	-7	1	41	38	3	1	3	1	24	26	1	2	-5	2	24	26	2	-2	6	2	28	24	3
3	1	0	56	54	1	-1	-7	1	44	43	2	2	3	1	86	84	2	3	-5	2	81	93	2	-1	6	2	32	34	3
4	1	0	20	6	4	0	-7	1	28	26	2	3	3	1	44	44	2	-3	-4	2	45	47	2	0	6	2	28	26	2
-4	2	0	19	22	4	1	-7	1	88	85	3	-4	4	1	15	3	5	-2	-4	2	28	29	3	1	6	2	90	97	2
-3	2	0	43	45	2	2	-7	1	56	57	2	-3	4	1	96	100	2	-1	-4	2	0	8	1	2	6	2	36	34	3
-2	2	0	94	93	1	3	-7	1	21	21	4	-2	4	1	111	116	1	0	-4	2	176	173	3	3	6	2	55	53	3
-1	2	0	1190	1194	3	-3	-6	1	64	62	3	-1	4	1	87	87	1	1	-4	2	20	19	2	-3	7	2	19	15	4
0	2	0	85	99	1	-2	-6	1	41	37	3	0	4	1	59	61	1	2	-4	2	122	130	1	-2	7	2	18	17	6
1	2	0	56	57	1	-1	-6	1	38	37	2	1	4	1	258	226	1	3	-4	2	120	134	4	-1	7	2	73	77	1
2	2	0	88	111	28	0	-6	1	8	1	7	2	4	1	60	60	3	4	-4	2	23	19	4	0	7	2	35	35	2
3	2	0	28	29	2	1	-6	1	133	132	3	3	4	1	13	6	4	-4	-3	2	5	5	4	1	7	2	12	15	9
4	2	0	7	0	7	2	-6	1	38	33	3	-3	5	1	105	111	2	-3	-3	2	27	26	2	2	7	2	13	4	6
-4	3	0	31	25	7	3	-6	1	50	51	3	-2	5	1	22	22	3	-2	-3	2	34	32	2	-3	8	2	23	11	6
-3	3	0	64	64	1	-3	-5	1	53	48	3	-1	5	1	63	63	2	-1	-3	2	85	80	1	-2	8	2	15	3	6
-2	3	0	214	207	2	-2	-5	1	43	40	1	0	5	1	109	111	5	0	-3	2	134	125	3	-1	8	2	24	19	5
-1	3	0	12	3	4	-1	-5	1	129	114	1	1	5	1	75	74	1	1	-3	2	57	69	9	0	8	2	55	57	2
0	3	0	262	272	2	0	-5	1	125	125	1	2	5	1	16	19	4	2	-3	2	112	117	2	1	8	2	19	15	4
1	3	0	418	399	6	1	-5	1	123	128	3	3	5	1	38	38	2	3	-3	2	57	60	2	2	8	2	47	52	3
2	3	0	147	147	1	2	-5	1	63	68	1	-3	6	1	27	25	4	4	-3	2	17	4	6	-2	9	2	65	58	4
3	3	0	62	64	1	3	-5	1	49	58	3	-2	6	1	24	26	5	-4	-2	2	17	11	3	-1	9	2	21	17	5
4	3	0	34	19	4	-3	-4	1	10	6	10	-1	6	1	18	17	2	-3	-2	2	14	2	3	0	9	2	18	22	4
-4	4	0	0	1	1	-2	-4	1	8	2	8	0	6	1	132	131	1	-2	-2	2	30	30	1	1	9	2	20	21	2
-3	4	0	45	45	2	-1	-4	1	14	14	3	1	6	1	7	15	6	-1	-2	2	188	193	2	-1	10	2	32	29	3
-2	4	0	284	273	13	0	-4	1	143	153	1	2	6	1	34	32	2	0	-2	2	211	203	1	0	10	2	35	29	12
-1	4	0	16	16	2	1	-4	1	85	82	2	3	6	1	17	10	6	1	-2	2	464	456	1	0	-12	3	24	24	4
0	4	0	15	17	2	2	-4	1	200	211	6	-3	7	1	18	2	5	2	-2	2	285	288	4	1	-12	3	31	28	4
1	4	0	159	144	1	3	-4	1	34	36	4	-2	7	1	41	42	2	3	-2	2	32	31	3	-1	-11	3	14	11	6
2	4	0	11	14	4	4	-4	1	23	23	5	-1	7	1	84	85	2	4	-2	2	14	12	7	0	-11	3	74	80	4
3	4	0	17	3	7	-4	-3	1	30	31	5	0	7	1	45	46	2	-4	-1	2	19	24	3	1	-11	3	60	62	2
-3	5	0	73	72	2	-3	-3	1	43	36	9	1	7	1	9	13	9	-3	-1	2	25	19	2	2	-11	3	13	6	8
-2	5	0	41	43	2	-2	-3	1	138	142	1	2	7	1	77	84	2	-2	-1	2	112	108	3	-2	-10	3	39	37	4
-1	5	0	94	100	3	-1	-3	1	135	130	1	-3	8	1	20	19	4	-1	-1	2	34	41	1	-1	-10	3	73	83	2
0	5	0	371	376	2	0	-3	1	26	27	4	-2	8	1	49	47	3	0	-1	2	167	148	9	0	-10	3	69	69	2
1	5	0	188	166	2	1	-3	1	112	119	3	-1	8	1	15	16	4	1	-1	2	46	47	1	1	-10	3	11	3	4
2	5	0	156	152	2	2	-3	1	258	267	4	0	8	1	46	51	2	2	-1	2	52	47	2	2	-10	3	8	8	7
3	5	0	56	48	3	3	-3	1	43	43	2	1	8	1	69	75	2	3	-1	2	3	4	3	-2	-9	3	85	82	3
-3	6	0	51	56	3	4	-3	1	9	5	8	2	8	1	37	41	3	4	-1	2	39	36	3	-1	-9	3	113	121	3
-2	6	0	17	18	4	-4	-2	1	13	9	5	-2	9	1	18	10	10	-4	0	2	12	4	12	0	-9	3	23	28	7
-1	6	0	59	64	1	-3	-2	1	36	35	1	-1	9	1	12	10	11	-3	0	2	22	19	3	1	-9	3	5	4	5
0	6	0	54	56	1	-2	-2	1	16	17	2	0	9	1	39	38	2	-2	0	2	28	26	3	2	-9	3	45	44	3
1	6	0	99	101	1	-1	-2	1	102	120	1	1	9	1	75	78	2	-1	0	2	109	117	14	3	-9	3	17	12	5
2	6	0	27	29	3	0	-2	1	256	258	6	2	9	1	21	24	4	0	0	2	473	423	1	-3	-8	3	39	37	3
3	6	0	15	16	6	1	-2	1	334	345	3	-2	10	1	23	1	5	1	0	2	324	329	9	-2	-8	3	85	84	3
-3	7	0	27	31	3	2	-2	1	139	153	1	-1	10	1	12	18	12	2	0	2	19	18	2	-1	-8	3	52	52	3
-2	7	0	31	31	2	3	-2	1	15	15	3	0	10	1	64	67	4	3	0	2	49	48	1	0	-8	3	19	19	3
-1	7	0	150	150	3	4	-2	1	22	18	7	1	10	1	53	53	2	4	0	2	20	14	4	1	-8	3	26	27	2
0	7	0	66	64	1	-4	-1	1	11	9	10	-1	-11	2	42	43	4	-4	1	2	27	27	2	2	-8	3	22	23	6
1	7	0	121	121	2	-3	-1	1	77	80	2	0	-11	2	29	25	4	-3	1	2	36	40	2	3	-8	3	31	27	7
2	7	0	58	57	3	-2	-1	1	47	59	6	1	-11	2	14	1	5	-2	1	2	59	57	1	-3	-7	3	134	126	3
3	7	0	27	15	4	-1	-1	1	183	179	2	-2	-11	2	16	7	10	-1	-1	2	100	107	1	-2	-7	3	118	113	2
-3	8	0	14	10	9	0	-1	1	207	209	4	-2	-10	2	49	49	3	0	1	2	131	129	2	-1	-7	3	53	52	2
-2	8	0	49	45	4	1	-1	1																					

Table 5. Observed and calculated structure factors for 6a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	-3	3	43	42	2	-1	8	3	83	79	3	-1	0	4	117	118	13	3	-7	5	13	1	12	1	5	5	30	33	3
-3	-3	3	15	16	4	0	8	3	25	26	3	0	0	4	34	32	1	-3	-6	5	64	60	2	2	5	5	31	31	3
-2	-3	3	7	0	6	1	8	3	72	76	4	1	0	4	71	64	2	-2	-6	5	10	12	10	-3	6	5	20	14	5
-1	-3	3	155	160	4	2	8	3	69	68	3	2	0	4	12	1	3	-1	-6	5	37	34	3	-2	6	5	15	6	6
0	-3	3	289	287	4	-2	9	3	54	46	3	3	0	4	34	32	3	0	-6	5	20	13	2	-1	6	5	123	114	3
1	-3	3	30	25	2	-1	9	3	56	51	3	-4	1	4	18	15	5	1	-6	5	249	236	5	0	6	5	207	208	5
2	-3	3	58	62	2	0	9	3	52	54	4	-3	1	4	16	16	5	2	-6	5	20	8	4	1	6	5	32	32	2
3	-3	3	13	8	4	1	9	3	27	27	2	-2	1	4	5	2	5	3	-6	5	32	28	4	2	6	5	26	22	4
4	-3	3	8	0	8	0	-12	4	14	7	6	-1	1	4	175	159	2	-3	-5	5	90	82	2	-2	7	5	50	45	3
-4	-2	3	31	26	3	1	-12	4	43	51	3	0	1	4	115	106	1	-2	-5	5	130	123	5	-1	7	5	9	8	8
-3	-2	3	43	48	2	-1	-11	4	42	35	4	1	1	4	203	182	3	-1	-5	5	150	144	3	0	7	5	67	72	2
-2	-2	3	209	199	1	0	-11	4	8	2	7	2	1	4	22	19	2	0	-5	5	20	20	2	1	7	5	43	37	2
-1	-2	3	298	280	4	1	-11	4	85	79	8	3	1	4	73	81	2	1	-5	5	80	87	1	-1	8	5	107	102	4
0	-2	3	97	102	2	2	-11	4	18	8	5	-4	2	4	8	10	8	2	-5	5	13	9	7	0	8	5	27	24	4
1	-2	3	165	175	1	-2	-10	4	12	8	12	-3	2	4	42	33	6	3	-5	5	28	29	9	1	8	5	20	6	5
2	-2	3	5	2	5	-1	-10	4	75	71	5	-2	2	4	99	94	2	-3	-4	5	41	37	2	0	-12	6	23	23	4
3	-2	3	48	49	2	0	-10	4	109	116	1	-1	2	4	47	48	1	-2	-4	5	86	87	2	1	-12	6	59	62	7
4	-2	3	0	2	1	1	-10	4	34	31	7	0	2	4	168	151	3	-1	-4	5	86	85	2	-1	-11	6	61	57	2
-4	-1	3	7	11	7	2	-10	4	8	6	7	1	2	4	42	39	1	0	-4	5	496	483	1	0	-11	6	32	29	4
-3	-1	3	35	35	2	-2	-9	4	25	23	5	2	2	4	59	81	24	1	-4	5	61	60	1	1	-11	6	70	76	7
-2	-1	3	18	21	2	-1	-9	4	20	24	4	3	2	4	81	83	6	2	-4	5	76	78	2	2	-11	6	27	25	3
-1	-1	3	163	168	2	0	-9	4	100	104	2	-3	3	4	23	26	3	3	-4	5	27	27	6	-2	-10	6	22	5	6
0	-1	3	49	47	2	1	-9	4	13	6	4	-2	3	4	106	112	2	-4	-3	5	35	37	3	-1	-10	6	30	14	4
1	-1	3	112	122	3	2	-9	4	17	14	5	-1	3	4	18	15	2	-3	-3	5	55	55	7	0	-10	6	97	94	4
2	-1	3	81	85	1	3	-9	4	21	22	5	0	3	4	170	162	3	-2	-3	5	12	0	5	1	-10	6	52	49	2
3	-1	3	40	40	4	-3	-8	4	13	0	13	1	3	4	85	89	1	-1	-3	5	49	52	1	2	-10	6	7	3	6
4	-1	3	22	24	6	-2	-8	4	167	164	2	2	3	4	55	53	6	0	-3	5	34	34	1	-2	-9	6	55	51	3
-4	0	3	33	35	2	-1	-8	4	187	179	2	3	3	4	15	11	8	1	-3	5	118	115	3	-1	-9	6	134	126	2
-3	0	3	47	69	14	0	-8	4	0	1	1	-3	4	4	28	30	3	2	-3	5	116	108	6	0	-9	6	113	106	10
-2	0	3	136	148	7	1	-8	4	30	28	2	-2	4	4	56	52	3	3	-3	5	19	22	6	1	-9	6	58	60	2
-1	0	3	112	128	16	2	-8	4	73	74	3	-1	4	4	146	149	7	-4	-2	5	25	28	3	2	-9	6	38	31	3
0	0	3	136	121	3	3	-8	4	17	8	8	0	4	4	62	59	2	-3	-2	5	41	44	3	-3	-8	6	11	8	11
1	0	3	75	48	3	-3	-7	4	34	34	4	1	4	4	79	73	3	-2	-2	5	90	86	2	-2	-8	6	12	0	11
2	0	3	86	88	2	-2	-7	4	66	70	2	2	4	4	143	137	2	-1	-2	5	376	355	6	-1	-8	6	72	72	3
3	0	3	16	19	4	-1	-7	4	66	61	2	3	4	4	26	15	7	0	-2	5	39	52	7	0	-8	6	14	16	7
4	0	3	23	10	9	0	-7	4	29	27	2	-3	5	4	42	39	4	1	-2	5	141	149	2	1	-8	6	21	15	3
-4	1	3	30	27	3	1	-7	4	58	55	1	-2	5	4	11	3	11	2	-2	5	10	8	10	2	-8	6	54	58	2
-3	1	3	40	44	2	2	-7	4	53	54	2	-1	5	4	27	24	2	3	-2	5	10	5	9	3	-8	6	7	6	7
-2	1	3	24	17	2	3	-7	4	1	7	1	0	5	4	140	151	4	-4	-1	5	17	13	6	-3	-7	6	45	36	3
-1	1	3	30	29	1	-3	-6	4	145	135	2	1	5	4	0	2	1	-3	-1	5	59	62	2	-2	-7	6	171	160	4
0	1	3	424	364	2	-2	-6	4	161	153	2	2	5	4	22	26	3	-2	-1	5	56	55	2	-1	-7	6	112	111	3
1	1	3	257	233	8	-1	-6	4	18	23	4	-3	6	4	33	25	3	-1	-1	5	8	2	7	0	-7	6	32	29	2
2	1	3	65	61	1	0	-6	4	38	37	1	-2	6	4	66	56	4	0	-1	5	312	283	6	1	-7	6	73	76	2
3	1	3	13	11	6	1	-6	4	150	147	6	-1	6	4	69	68	3	1	-1	5	265	247	6	2	-7	6	37	46	3
-4	2	3	18	18	3	2	-6	4	21	19	3	0	6	4	22	18	3	2	-1	5	99	104	4	3	-7	6	10	1	9
-3	2	3	29	29	3	3	-6	4	15	16	6	1	6	4	167	170	2	3	-1	5	39	30	5	-3	-6	6	40	41	4
-2	2	3	12	5	7	-3	-5	4	65	68	2	2	6	4	18	5	4	-4	0	5	11	1	11	-2	-6	6	29	28	4
-1	2	3	82	88	1	-2	-5	4	22	23	3	-2	7	4	30	20	3	-3	0	5	35	34	2	-1	-6	6	28	33	3
0	2	3	201	175	4	-1	-5	4	113	119	1	-1	7	4	113	118	7	-2	0	5	91	91	1	0	-6	6	62	56	2
1	2	3	145	126	2	0	-5	4	222	201	4	0	7	4	22	18	3	-1	0	5	60	55	2	1	-6	6	86	93	2
2	2	3	30	30	2	1	-5	4	58	60	2	1	7	4	56	57	2	0	0	5	89	86	3	2	-6	6	19	18	6
3	2	3	21	23	4	2	-5	4	23	21	9	2	7	4	21	17	4	1	0	5	134	126	2	3	-6	6	12	6	7
-4	3	3	20	20	3	3	-5	4	6	6	6	-2	8	4	58	56	3	2	0	5	29	27	2	-3	-5	6	97	93	3
-3	3	3	30	29	3	-3	-4	4	81	75	4	-1	8	4	61	55	3	3	0	5	64	71	2	-2	-5	6	63	63	2
-2	3	3	18	24	5	-2	-4	4	36	36	2	0	8	4	114	126	2	-4	1	5	26	28	3	-1	-5	6	76	84	2
-1	3	3	188	197	5	-1	-4	4	0	7	1	1	8	4	20	16	3	-3	1	5	26	22	4	0	-5	6	141	139	2
0	3	3	212	201	5	0	-4	4	126	133	2	-1	9	4	53	52	3	-2	1	5	24	19	3	1	-5	6	63	64	2
1	3	3	29	26	2	1	-4	4	73	78	2	0	9	4	55	57	3	-1	1	5	242	207	2	2	-5	6	22	16	5
2	3	3	25	23	2	2	-4	4	7	11	6	0	-12	5	60	52	3	0	1	5	304	262	2	3	-5	6	22	20	3
3	3	3	68	76	2	3	-4	4	72	85	10	-1	12	5	2	3	2	1	1	5	144	136	2	-3	-4	6	35	30	6
-3	4	3	46	42	2	-4	-3	4	32	25	4	-1	-11	5	57	50	3	2	1	5	20	13	4	-2	-4	6	15	12	6
-2	4	3	47	48	2	-3	-3	4	17	17																			

Table 5. Observed and calculated structure factors for 6a.

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
-3	0	6	50	56	3	3	-5	7	15	12	6	0	-8	8	24	21	6	1	-11	9	33	28	4	-1	-9	10	18	19	8
-2	0	6	12	0	12	-3	-4	7	52	55	3	1	-8	8	12	9	11	-1	-10	9	20	19	4	0	-9	10	18	13	6
-1	0	6	52	50	1	-2	-4	7	53	56	2	2	-8	8	20	14	4	0	-10	9	13	10	13	1	-9	10	20	19	6
0	0	6	246	221	7	-1	-4	7	45	47	2	-3	-7	8	10	5	9	1	-10	9	30	25	4	-2	-8	10	13	6	13
1	0	6	119	108	1	0	-4	7	98	99	2	-2	-7	8	12	4	12	-2	-9	9	52	48	3	-1	-8	10	112	133	3
2	0	6	38	42	3	1	-4	7	18	17	5	-1	-7	8	26	25	3	-1	-9	9	24	29	6	0	-8	10	67	72	3
3	0	6	16	15	5	2	-4	7	39	37	2	0	-7	8	16	16	11	0	-9	9	19	18	19	1	-8	10	21	9	7
-3	1	6	38	39	2	3	-4	7	26	23	3	1	-7	8	85	77	2	1	-9	9	14	5	13	2	-8	10	58	60	3
-2	1	6	77	74	2	-3	-3	7	21	19	5	2	-7	8	15	13	8	2	-9	9	21	8	5	-2	-7	10	22	21	5
-1	1	6	211	202	1	-2	-3	7	2	16	2	-3	-6	8	49	50	2	-2	-8	9	23	12	5	-1	-7	10	17	19	5
0	1	6	107	98	2	-1	-3	7	13	11	5	-2	-6	8	23	29	7	-1	-8	9	45	41	3	0	-7	10	14	15	13
1	1	6	19	14	4	0	-3	7	29	29	3	-1	-6	8	16	18	5	0	-8	9	41	45	3	1	-7	10	140	139	8
2	1	6	70	74	2	1	-3	7	91	92	4	0	-6	8	72	74	2	1	-8	9	23	21	4	2	-7	10	81	74	2
3	1	6	87	90	4	2	-3	7	42	42	3	1	-6	8	58	55	2	2	-8	9	79	64	3	-2	-6	10	103	107	2
-3	2	6	8	5	7	3	-3	7	56	56	4	2	-6	8	0	6	1	-2	-7	9	32	38	3	-1	-6	10	68	91	3
-2	2	6	24	25	4	-3	-2	7	10	3	10	3	-6	8	27	25	4	-1	-7	9	32	32	3	0	-6	10	16	9	12
-1	2	6	108	101	1	-2	-2	7	41	42	2	-3	-5	8	23	15	4	0	-7	9	19	8	9	1	-6	10	101	96	5
0	2	6	48	45	1	-1	-2	7	75	81	1	-2	-5	8	8	6	7	1	-7	9	43	37	5	2	-6	10	38	30	6
1	2	6	42	43	2	0	-2	7	84	79	1	-1	-5	8	16	23	5	2	-7	9	83	73	5	-3	-5	10	18	16	6
2	2	6	16	11	5	1	-2	7	13	10	6	0	-5	8	55	51	1	-3	-6	9	16	0	7	-2	-5	10	47	45	3
3	2	6	9	11	9	2	-2	7	10	2	10	1	-5	8	80	73	2	-2	-6	9	66	69	2	-1	-5	10	0	9	1
-3	3	6	22	15	4	3	-2	7	22	15	12	2	-5	8	32	30	3	-1	-6	9	37	38	3	0	-5	10	296	303	7
-2	3	6	101	104	2	-3	-1	7	33	35	3	3	-5	8	9	7	8	0	-6	9	52	58	3	1	-5	10	164	151	5
-1	3	6	34	36	2	-2	-1	7	40	37	2	-3	-4	8	20	18	5	1	-6	9	80	70	4	2	-5	10	48	45	3
0	3	6	13	14	10	-1	-1	7	96	92	1	-2	-4	8	3	7	2	2	-6	9	48	43	3	-3	-4	10	64	64	3
1	3	6	134	134	3	0	-1	7	44	40	2	-1	-4	8	70	78	2	-3	-5	9	32	32	5	-2	-4	10	38	36	3
2	3	6	176	174	2	1	-1	7	69	72	1	0	-4	8	90	95	1	-2	-5	9	54	52	2	-1	-4	10	53	55	2
-3	4	6	25	27	4	2	-1	7	89	91	8	1	-4	8	17	18	9	-1	-5	9	11	12	11	0	-4	10	59	64	4
-2	4	6	38	37	3	3	-1	7	23	21	4	2	-4	8	49	51	4	0	-5	9	1	13	1	1	-4	10	3	0	3
-1	4	6	17	18	11	-3	0	7	34	38	3	3	-4	8	12	7	12	1	-5	9	117	106	9	2	-4	10	43	39	4
0	4	6	46	42	2	-2	0	7	34	35	2	-3	-3	8	15	6	14	2	-5	9	12	9	12	-3	-3	10	42	39	3
1	4	6	30	25	3	-1	0	7	60	57	2	-2	-3	8	86	85	3	-3	-4	9	38	33	3	-2	-3	10	30	23	4
2	4	6	82	78	2	0	0	7	100	99	1	-1	-3	8	25	27	2	-2	-4	9	0	0	1	-1	-3	10	284	310	2
-3	5	6	40	43	3	1	0	7	56	53	1	0	-3	8	155	174	10	-1	-4	9	163	177	2	0	-3	10	196	199	6
-2	5	6	23	12	4	2	0	7	13	2	13	1	-3	8	101	105	2	0	-4	9	33	32	2	1	-3	10	77	73	2
-1	5	6	0	3	1	3	0	7	18	17	5	2	-3	8	27	27	3	1	-4	9	24	23	4	2	-3	10	21	22	5
0	5	6	120	125	2	-3	1	7	34	34	3	3	-3	8	33	19	5	2	-4	9	15	10	7	-3	-2	10	22	20	5
1	5	6	141	155	2	-2	1	7	54	54	2	-3	-2	8	6	5	5	-3	-3	9	28	24	4	-2	-2	10	87	94	3
2	5	6	27	21	5	-1	1	7	64	60	2	-2	-2	8	24	27	4	-2	-3	9	0	2	1	-1	-2	10	5	1	5
-2	6	6	13	7	13	0	1	7	40	42	3	-1	-2	8	58	62	1	-1	-3	9	104	109	1	0	-2	10	35	36	2
-1	6	6	100	92	3	1	1	7	104	108	2	0	-2	8	26	25	3	0	-3	9	68	76	1	1	-2	10	98	95	3
0	6	6	43	42	2	2	1	7	0	4	1	1	-2	8	70	66	2	1	-3	9	26	22	4	2	-2	10	85	68	5
1	6	6	101	109	2	3	1	7	30	32	4	2	-2	8	23	15	3	2	-3	9	21	17	4	-3	-1	10	13	14	13
-2	7	6	41	34	4	-3	2	7	14	1	7	3	-2	8	22	18	4	-3	-2	9	15	13	8	-2	-1	10	152	157	5
-1	7	6	74	68	3	-2	2	7	12	2	12	-3	-1	8	78	80	7	-2	-2	9	148	163	2	-1	-1	10	155	161	1
0	7	6	48	58	3	-1	2	7	78	77	2	-2	-1	8	25	16	3	-1	-2	9	20	22	4	0	-1	10	74	73	2
1	7	6	22	17	4	0	2	7	72	68	2	-1	-1	8	110	122	16	0	-2	9	42	42	2	1	-1	10	31	31	4
0	-12	7	45	51	5	1	2	7	38	37	2	0	-1	8	146	143	2	1	-2	9	10	1	9	2	-1	10	25	23	6
-1	-11	7	78	68	2	2	2	7	37	39	5	1	-1	8	52	49	2	2	-2	9	32	28	3	-2	0	10	14	5	14
0	-11	7	84	96	2	-3	3	7	26	6	4	2	-1	8	52	44	7	-3	-1	9	14	7	8	-1	0	10	27	29	3
-1	-11	7	14	4	8	-2	3	7	65	60	2	3	-1	8	28	30	4	-2	-1	9	146	149	3	0	0	10	135	147	2
-2	-10	7	40	34	3	-1	3	7	14	10	5	-3	0	8	77	74	3	-1	-1	9	35	34	3	1	0	10	78	93	2
-1	-10	7	58	55	6	0	3	7	101	102	2	-2	0	8	15	8	5	0	-1	9	29	27	2	2	0	10	32	31	6
0	-10	7	27	24	4	1	3	7	82	78	3	-1	0	8	35	37	2	1	-1	9	39	40	3	-2	1	10	73	75	2
-1	-10	7	48	53	3	2	3	7	6	7	6	0	0	8	24	25	2	2	-1	9	16	4	7	-1	1	10	68	67	3
-2	-10	7	8	4	8	-3	4	7	21	11	4	1	0	8	44	46	2	-3	0	9	77	74	3	0	1	10	19	11	4
-2	-9	7	85	76	2	-2	4	7	37	33	3	2	0	8	3	11	3	-2	0	9	46	52	8	1	1	10	6	3	5
-1	-9	7	86	85	4	-1	4	7	44	45	4	-3	1	8	21	24	7	-1	0	9	68	69	2	-2	2	10	18	8	17
0	-9	7	11	19	10	0	4	7	19	13	4	-2	1	8	44	40	2	0	0	9	12	11	6	-1	2	10	121	118	3
1	-9	7	24	21	6	1	4	7	63	67	2	-1	1	8	95	84	5	1	0	9	17	13	8	0	2	10	65	63	2
2	-9	7	31	27	3	2	4	7	124	130	3	0	1	8	29	24	3	2	0	9	15	15	10	1	2	10	41	38	3
-3	-8	7	28	19	4	-2	5	7	17																				

Table 5. Observed and calculated structure factors for 6a.

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
-1	-4	11	9	7	8	-1	-1	11	50	53	2	-1	-8	12	47	56	3	-1	-4	12	20	11	5	0	0	12	46	46	3
0	-4	11	124	162	30	0	-1	11	22	6	10	0	-8	12	16	9	15	0	-4	12	14	11	6	-1	-7	13	25	15	5
1	-4	11	51	49	3	1	-1	11	64	66	6	1	-8	12	15	2	14	1	-4	12	17	13	7	0	-7	13	16	3	11
2	-4	11	23	18	5	-2	0	11	45	44	4	-1	-7	12	50	41	7	-2	-3	12	11	3	10	-1	-6	13	35	29	4
-2	-3	11	47	55	3	-1	0	11	26	23	6	0	-7	12	17	11	8	-1	-3	12	44	46	3	0	-6	13	19	1	7
-1	-3	11	132	148	2	0	0	11	25	17	5	1	-7	12	75	71	6	0	-3	12	22	2	4	-1	-5	13	25	15	4
0	-3	11	113	116	2	1	0	11	12	9	12	-2	-6	12	57	55	3	1	-3	12	58	58	3	0	-5	13	19	0	6
1	-3	11	18	17	5	-2	1	11	22	6	9	-1	-6	12	23	14	5	-2	-2	12	23	18	5	-1	-4	13	17	7	6
2	-3	11	28	30	11	-1	1	11	16	10	15	0	-6	12	0	5	1	-1	-2	12	15	0	5	0	-4	13	23	3	8
-2	-2	11	34	37	4	0	1	11	67	69	2	1	-6	12	33	21	4	0	-2	12	34	28	8	-1	-3	13	21	11	5
-1	-2	11	92	98	2	1	1	11	25	26	5	-2	-5	12	30	29	4	1	-2	12	45	40	4	0	-3	13	23	8	6
0	-2	11	20	19	3	-1	2	11	53	53	9	-1	-5	12	32	29	4	-1	-1	12	0	2	1	0	-2	13	15	1	15
1	-2	11	34	26	6	0	2	11	16	12	5	0	-5	12	91	99	4	0	-1	12	51	51	5						
2	-2	11	21	11	10	-1	-9	12	23	18	7	1	-5	12	43	33	3	1	-1	12	24	21	6						
-2	-1	11	106	118	3	0	-9	12	28	21	5	-2	-4	12	42	37	3	-1	0	12	38	34	4						

ORTEP drawing for 7a

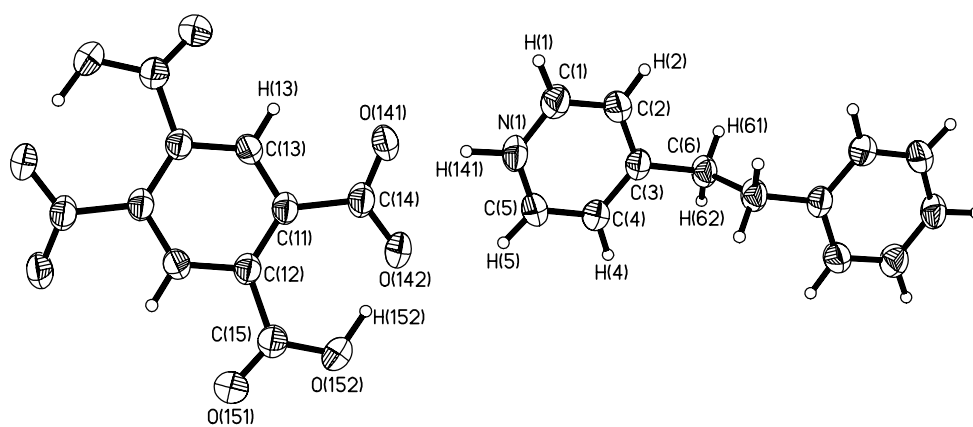


Table 1. Crystal data and structure refinement for 7a.

Identification code	7a	
Empirical formula	C ₂₂ H ₁₈ N ₂ O ₈	
Formula weight	438.38	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 4.321(1) Å	α = 113.91(1)°.
	b = 10.239(2) Å	β = 97.71(1)°.
	c = 12.121(2) Å	γ = 92.57(1)°.
Volume	482.9(2) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.507 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.117 mm ⁻¹	
F(000)	228	
Crystal size	0.17 x 0.16 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.86 to 23.26°.	
Index ranges	-4 ≤ h ≤ 4, -11 ≤ k ≤ 11, -13 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	4061	
Independent reflections	1386 [R(int) = 0.0661]	
Completeness to theta = 23.26°	99.9 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	1386 / 0 / 181	
Goodness-of-fit on F ²	0.968	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0371, wR2 = 0.0820	
R indices (all data)	R1 = 0.0457, wR2 = 0.0858	
Largest diff. peak and hole	0.192 and -0.275 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 7a. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(1)	-3181(4)	5170(2)	1839(2)	50(1)
C(2)	-4697(4)	4790(2)	2603(2)	45(1)
C(3)	-4579(3)	5752(2)	3809(1)	36(1)
C(4)	-2904(4)	7080(2)	4199(2)	44(1)
C(5)	-1418(4)	7421(2)	3409(2)	46(1)
C(6)	-6128(4)	5348(2)	4684(2)	40(1)
C(11)	4115(4)	9302(2)	728(1)	36(1)
C(12)	6355(4)	10524(2)	1255(1)	36(1)
C(13)	2861(4)	8840(2)	-499(1)	39(1)
C(14)	2799(4)	8439(2)	1354(2)	44(1)
C(15)	8127(4)	11268(2)	2559(2)	44(1)
N(1)	-1583(3)	6467(2)	2252(1)	45(1)
O(141)	1278(3)	7252(1)	712(1)	63(1)
O(142)	3215(3)	8947(1)	2504(1)	63(1)
O(151)	10308(3)	12175(1)	2795(1)	66(1)
O(152)	7254(3)	10944(1)	3411(1)	57(1)
H(1)	-3200(40)	4525(19)	1000(17)	65(5)
H(2)	-5810(40)	3877(18)	2285(14)	48(5)
H(4)	-2750(40)	7776(18)	5025(16)	53(5)
H(5)	-180(40)	8284(18)	3610(14)	49(5)
H(13)	1340(40)	8030(16)	-863(13)	40(4)
H(61)	-7980(40)	4679(18)	4254(14)	48(5)
H(62)	-6830(40)	6224(19)	5289(16)	56(5)
H(141)	-420(40)	6790(19)	1696(17)	73(6)
H(152)	5410(60)	10140(30)	3087(19)	98(8)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 7a.

C(1)-N(1)	1.333(2)	N(1)-C(1)-C(2)	120.19(16)
C(1)-C(2)	1.368(2)	N(1)-C(1)-H(1)	117.6(11)
C(1)-H(1)	0.961(18)	C(2)-C(1)-H(1)	122.2(11)
C(2)-C(3)	1.385(2)	C(1)-C(2)-C(3)	120.10(16)
C(2)-H(2)	0.933(16)	C(1)-C(2)-H(2)	118.2(10)
C(3)-C(4)	1.377(2)	C(3)-C(2)-H(2)	121.8(10)
C(3)-C(6)	1.505(2)	C(4)-C(3)-C(2)	117.90(14)
C(4)-C(5)	1.366(2)	C(4)-C(3)-C(6)	120.65(14)
C(4)-H(4)	0.956(16)	C(2)-C(3)-C(6)	121.41(14)
C(5)-N(1)	1.336(2)	C(5)-C(4)-C(3)	120.29(15)
C(5)-H(5)	0.936(17)	C(5)-C(4)-H(4)	118.9(10)
C(6)-C(6)#1	1.533(3)	C(3)-C(4)-H(4)	120.8(10)
C(6)-H(61)	0.964(18)	N(1)-C(5)-C(4)	120.22(16)
C(6)-H(62)	0.992(18)	N(1)-C(5)-H(5)	114.3(10)
C(11)-C(13)	1.386(2)	C(4)-C(5)-H(5)	125.4(10)
C(11)-C(12)	1.410(2)	C(3)-C(6)-C(6)#1	110.71(16)
C(11)-C(14)	1.514(2)	C(3)-C(6)-H(61)	110.3(9)
C(12)-C(13)#2	1.388(2)	C(6)#1-C(6)-H(61)	108.6(10)
C(12)-C(15)	1.520(2)	C(3)-C(6)-H(62)	108.7(10)
C(13)-C(12)#2	1.388(2)	C(6)#1-C(6)-H(62)	111.3(10)
C(13)-H(13)	0.943(15)	H(61)-C(6)-H(62)	107.0(14)
C(14)-O(141)	1.2408(19)	C(13)-C(11)-C(12)	117.42(13)
C(14)-O(142)	1.2584(19)	C(13)-C(11)-C(14)	114.81(13)
C(15)-O(151)	1.2113(19)	C(12)-C(11)-C(14)	127.74(14)
C(15)-O(152)	1.2994(19)	C(13)#2-C(12)-C(11)	117.25(14)
N(1)-H(141)	1.034(19)	C(13)#2-C(12)-C(15)	113.46(13)
O(142)-H(152)	1.38(3)	C(11)-C(12)-C(15)	129.29(13)
O(152)-H(152)	1.03(3)	C(11)-C(13)-C(12)#2	125.33(14)
		C(11)-C(13)-H(13)	118.5(9)
		C(12)#2-C(13)-H(13)	116.2(9)
		O(141)-C(14)-O(142)	121.50(14)
		O(141)-C(14)-C(11)	118.79(14)
		O(142)-C(14)-C(11)	119.70(14)
		O(151)-C(15)-O(152)	120.76(15)
		O(151)-C(15)-C(12)	119.39(14)
		O(152)-C(15)-C(12)	119.84(15)
		C(1)-N(1)-C(5)	121.30(14)
		C(1)-N(1)-H(141)	122.1(10)
		C(5)-N(1)-H(141)	116.6(10)
		C(14)-O(142)-H(152)	114.6(9)
		C(15)-O(152)-H(152)	113.0(12)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 7a. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	66(1)	48(1)	39(1)	20(1)	17(1)	4(1)
C(2)	54(1)	41(1)	42(1)	18(1)	11(1)	-3(1)
C(3)	36(1)	44(1)	37(1)	24(1)	8(1)	4(1)
C(4)	50(1)	46(1)	37(1)	19(1)	9(1)	-1(1)
C(5)	54(1)	43(1)	48(1)	24(1)	11(1)	-4(1)
C(6)	40(1)	47(1)	42(1)	25(1)	13(1)	1(1)
C(11)	44(1)	34(1)	36(1)	17(1)	15(1)	6(1)
C(12)	42(1)	36(1)	34(1)	16(1)	11(1)	5(1)
C(13)	44(1)	34(1)	38(1)	15(1)	11(1)	-2(1)
C(14)	55(1)	43(1)	40(1)	22(1)	17(1)	5(1)
C(15)	55(1)	40(1)	39(1)	18(1)	10(1)	2(1)
N(1)	53(1)	50(1)	45(1)	29(1)	18(1)	5(1)
O(141)	96(1)	46(1)	47(1)	20(1)	22(1)	-18(1)
O(142)	87(1)	66(1)	41(1)	28(1)	15(1)	-17(1)
O(151)	78(1)	66(1)	47(1)	24(1)	-5(1)	-26(1)
O(152)	71(1)	67(1)	34(1)	24(1)	6(1)	-10(1)

Table 5. Observed and calculated structure factors for 7a.

Page 1

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	188	193	1	1	-8	1	41	38	1	2	2	1	122	112	1	-2	-5	2	140	136	1	-4	5	2	19	18	2
2	0	0	175	173	1	2	-8	1	21	19	3	3	2	1	113	111	2	-1	-5	2	175	168	1	-3	5	2	34	36	1
3	0	0	46	48	1	3	-8	1	0	3	1	4	2	1	26	25	2	0	-5	2	88	100	15	-2	5	2	20	17	1
4	0	0	10	11	7	-3	-7	1	50	48	1	-4	3	1	30	26	2	1	-5	2	102	99	1	-1	5	2	94	95	1
-4	1	0	3	8	3	-2	-7	1	0	4	1	-3	3	1	13	13	3	2	-5	2	0	0	1	0	5	2	47	50	5
-3	1	0	130	128	5	-1	-7	1	48	50	1	-2	3	1	261	259	3	3	-5	2	58	57	1	1	5	2	55	53	1
-2	1	0	52	52	1	0	-7	1	21	17	1	-1	3	1	8	12	2	4	-5	2	8	2	8	2	5	2	6	10	6
-1	1	0	134	132	1	1	-7	1	28	27	1	0	3	1	5	6	5	-4	-4	2	74	75	2	3	5	2	0	3	1
0	1	0	107	105	1	2	-7	1	22	20	2	1	3	1	37	39	1	-3	-4	2	71	68	1	-3	6	2	16	20	3
1	1	0	267	262	3	3	-7	1	8	11	8	2	3	1	93	91	1	-2	-4	2	1	7	1	-2	6	2	30	31	1
2	1	0	285	271	2	-3	-6	1	75	78	1	3	3	1	34	34	1	-1	-4	2	4	1	4	-1	6	2	73	75	1
3	1	0	50	47	1	-2	-6	1	57	58	1	4	3	1	18	16	5	0	-4	2	63	67	1	0	6	2	38	38	1
4	1	0	15	16	3	-1	-6	1	34	32	1	-4	4	1	33	36	2	1	-4	2	120	119	1	1	6	2	94	93	1
-4	2	0	9	9	5	0	-6	1	89	87	1	-3	4	1	87	91	1	2	-4	2	333	326	3	2	6	2	29	27	2
-3	2	0	96	93	1	1	-6	1	48	48	1	-2	4	1	237	244	7	3	-4	2	8	3	7	3	6	2	44	46	2
-2	2	0	140	136	1	2	-6	1	45	43	1	-1	4	1	50	55	1	4	-4	2	5	8	4	-3	7	2	14	16	3
-1	2	0	936	1133	54	3	-6	1	25	24	2	0	4	1	11	11	2	-4	-3	2	26	29	2	-2	7	2	13	11	3
0	2	0	49	59	1	4	-6	1	20	21	3	1	4	1	198	187	1	-3	-3	2	30	28	1	-1	7	2	62	61	1
1	2	0	14	16	1	-4	-5	1	11	9	7	2	4	1	74	74	1	-2	-3	2	47	45	1	0	7	2	62	64	1
2	2	0	95	93	1	-3	-5	1	57	60	1	3	4	1	0	2	1	-1	-3	2	71	72	1	1	7	2	0	0	1
3	2	0	27	26	1	-2	-5	1	30	30	1	4	4	1	13	12	4	0	-3	2	147	145	1	2	7	2	24	25	2
4	2	0	8	6	8	-1	-5	1	125	111	1	-4	5	1	31	31	2	1	-3	2	13	14	1	-3	8	2	21	20	3
-4	3	0	60	64	1	0	-5	1	16	16	1	-3	5	1	81	87	1	2	-3	2	213	215	1	-2	8	2	8	10	8
-3	3	0	24	22	1	1	-5	1	107	109	1	-2	5	1	51	52	1	3	-3	2	8	7	5	-1	8	2	42	46	1
-2	3	0	176	178	1	2	-5	1	71	71	1	-1	5	1	30	30	1	4	-3	2	18	15	2	0	8	2	86	85	1
-1	3	0	260	264	1	3	-5	1	14	19	2	0	5	1	86	85	1	-4	-2	2	69	67	2	1	8	2	20	22	2
0	3	0	260	261	1	4	-5	1	10	11	5	1	5	1	40	40	1	-3	-2	2	38	37	1	-2	9	2	6	13	6
1	3	0	470	449	1	-4	-4	1	16	18	3	2	5	1	20	23	2	-2	-2	2	42	44	1	-1	9	2	73	69	3
2	3	0	144	138	1	-3	-4	1	29	29	1	3	5	1	41	40	1	-1	-2	2	223	223	1	0	9	2	28	22	2
3	3	0	76	78	2	-2	-4	1	51	49	1	-4	6	1	44	46	2	0	-2	2	227	229	1	0	-11	3	17	14	4
4	3	0	0	2	1	-1	-4	1	11	8	3	-3	6	1	123	129	1	1	-2	2	688	716	7	1	-11	3	60	57	1
-4	4	0	22	18	2	0	-4	1	138	148	4	-2	6	1	15	17	2	2	-2	2	124	127	1	-1	-10	3	87	89	2
-3	4	0	39	42	1	1	-4	1	163	159	1	-1	6	1	34	34	1	3	-2	2	11	11	3	0	-10	3	77	75	2
-2	4	0	207	203	2	2	-4	1	63	65	1	0	6	1	46	47	1	4	-2	2	38	37	2	1	-10	3	9	6	5
-1	4	0	40	39	1	3	-4	1	21	20	2	1	6	1	38	40	1	-4	-1	2	10	6	5	2	-10	3	18	16	3
0	4	0	10	11	2	4	-4	1	25	23	2	2	6	1	73	75	1	-3	-1	2	17	18	1	-2	-9	3	16	14	3
1	4	0	151	147	1	-4	-3	1	75	76	3	3	6	1	17	14	2	-2	-1	2	200	196	1	-1	-9	3	75	77	2
2	4	0	94	98	1	-3	-3	1	61	58	1	-3	7	1	13	13	6	-1	-1	2	17	21	1	0	-9	3	59	60	1
3	4	0	29	31	1	-2	-3	1	161	155	1	-2	7	1	54	56	1	0	-1	2	138	132	1	1	-9	3	17	15	2
4	4	0	22	23	3	-1	-3	1	123	119	1	-1	7	1	121	121	1	1	-1	2	299	300	1	2	-9	3	36	37	2
-4	5	0	26	26	2	0	-3	1	67	82	10	0	7	1	22	23	1	2	-1	2	22	21	1	3	-9	3	32	34	2
-3	5	0	103	106	2	1	-3	1	175	176	1	1	7	1	29	30	1	3	-1	2	71	70	1	-3	-8	3	45	44	2
-2	5	0	160	168	5	2	-3	1	112	116	1	2	7	1	45	48	1	4	-1	2	0	2	1	-2	-8	3	114	116	1
-1	5	0	101	101	1	3	-3	1	70	73	1	-3	8	1	2	4	2	-4	0	2	42	46	2	-1	-8	3	52	53	2
0	5	0	307	295	2	4	-3	1	7	8	7	-2	8	1	16	17	3	-3	0	2	28	28	1	0	-8	3	52	52	1
1	5	0	95	88	1	-4	-2	1	7	4	6	-1	8	1	79	74	1	-2	0	2	43	41	1	1	-8	3	35	35	1
2	5	0	117	113	1	-3	-2	1	14	16	2	0	8	1	47	47	1	-1	0	2	79	79	1	2	-8	3	14	12	4
3	5	0	38	38	1	-2	-2	1	93	89	1	1	8	1	98	97	1	0	0	2	373	374	1	3	-8	3	10	9	8
-4	6	0	0	0	1	-1	-2	1	132	142	1	2	8	1	26	26	2	1	0	2	303	300	1	-3	-7	3	45	46	1
-3	6	0	9	10	6	0	-2	1	290	298	3	-2	9	1	84	85	2	2	0	2	44	47	1	-2	-7	3	132	134	1
-2	6	0	38	36	2	1	-2	1	88	90	1	-1	9	1	48	49	1	3	0	2	38	40	1	-1	-7	3	6	2	5
-1	6	0	114	113	1	2	-2	1	70	75	1	0	9	1	40	34	2	4	0	2	0	4	1	0	-7	3	5	5	4
0	6	0	111	109	1	3	-2	1	8	7	5	1	9	1	41	40	2	-4	1	2	33	35	1	1	-7	3	108	107	2
1	6	0	99	99	1	4	-2	1	6	1	6	-1	10	2	26	25	3	-3	1	2	139	141	1	2	-7	3	83	84	1
2	6	0	49	52	1	-4	-1	1	20	17	3	0	-10	2	41	42	2	-2	1	2	77	79	1	3	-7	3	30	29	2
3	6	0	8	6	7	-3	-1	1	114	113	1	1	-10	2	16	19	3	-1	1	2	115	126	5	-3	-6	3	65	65	1
-3	7	0	68	69	2	-2	-1	1	84	84	1	2	-10	2	3	5	3	0	1	2	26	26	1	-2	-6	3	1	0	1
-2	7	0	16	15	2	-1	-1	1	181	181	1	-2	-9	2	36	35	2	1	1	2	30	31	1	-1	-6	3	42	40	1
-1	7	0	66	66	1	0	-1	1	160	161	1	-1	-9	2	26	23	2	2	1	2	160	156	1	0	-6	3	103	105	1
0	7	0	21	19	1	1	-1	1	535	551	5	0	-9	2	52	52	2	3	1	2	61	59	1	1	-6	3	54	56	1
1	7	0	45	45	1	2	-1	1	138	135	1	1	-9	2	22	21	2	4	1	2	12	9	5	2	-6	3	32	33	1
2	7	0	50	51	1	3	-1	1	18	20	1	2	-9	2	22	24	2	-4	2	2	48	47	1	3					

Table 5. Observed and calculated structure factors for 7a.

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	-3	3	292	289	2	1	8	3	27	29	2	2	0	4	8	7	3	1	-6	5	173	170	2	3	4	5	21	20	3
3	-3	3	107	108	1	0	9	3	30	22	3	3	0	4	54	54	1	2	-6	5	5	4	5	-3	5	5	31	30	2
4	-3	3	21	18	2	0	-11	4	71	69	2	4	0	4	0	2	1	3	-6	5	68	72	2	-2	5	5	54	54	2
4	-2	3	56	56	2	1	-11	4	92	88	1	-4	1	4	39	41	2	-4	-5	5	15	15	3	-1	5	5	64	62	1
-3	-2	3	31	32	1	-1	-10	4	41	42	2	-3	1	4	0	0	1	-3	-5	5	163	161	1	0	5	5	46	48	2
-2	-2	3	184	190	1	0	-10	4	66	66	2	-2	1	4	54	56	1	-2	-5	5	221	218	1	1	5	5	36	36	2
-1	-2	3	204	234	32	1	-10	4	30	29	2	-1	1	4	36	36	1	-1	-5	5	146	143	1	2	5	5	6	6	6
0	-2	3	98	104	1	2	-10	4	12	10	4	0	1	4	194	190	1	0	-5	5	86	82	1	-3	6	5	10	13	8
1	-2	3	303	301	1	-2	-9	4	5	0	4	1	1	4	181	177	1	1	-5	5	106	108	1	-2	6	5	22	23	2
2	-2	3	77	77	1	-1	-9	4	78	78	2	2	1	4	33	32	1	2	-5	5	26	28	2	-1	6	5	96	93	1
3	-2	3	25	25	1	0	-9	4	126	121	2	3	1	4	120	119	1	3	-5	5	48	51	2	0	6	5	56	56	2
4	-2	3	50	52	2	1	-9	4	25	25	2	4	1	4	7	1	7	4	-5	5	8	2	7	1	6	5	80	81	2
-4	-1	3	49	49	2	2	-9	4	60	61	2	-4	2	4	24	24	2	-4	-4	5	18	15	4	2	6	5	17	19	4
-3	-1	3	22	23	1	3	-9	4	16	17	4	-3	2	4	27	23	5	-3	-4	5	35	35	1	-2	7	5	35	32	2
-2	-1	3	154	150	1	-3	-8	4	3	3	3	-2	2	4	83	85	1	-2	-4	5	56	57	1	-1	7	5	40	37	2
-1	-1	3	247	246	1	-2	-8	4	71	73	2	-1	2	4	148	147	1	-1	-4	5	41	38	1	0	7	5	25	28	3
0	-1	3	34	39	5	-1	-8	4	145	144	5	0	2	4	33	35	1	0	-4	5	464	443	4	1	7	5	10	0	10
1	-1	3	28	27	1	0	-8	4	6	1	5	1	2	4	19	19	1	1	-4	5	69	69	1	-1	-11	6	47	48	3
2	-1	3	168	164	1	1	-8	4	34	34	1	2	2	4	106	106	1	2	-4	5	113	115	2	0	-11	6	28	30	2
3	-1	3	73	72	1	2	-8	4	59	61	2	3	2	4	53	54	1	3	-4	5	16	18	2	1	-11	6	5	0	5
4	-1	3	10	7	9	3	-8	4	1	1	1	-4	3	4	21	21	2	4	-4	5	17	17	4	-2	-10	6	13	10	4
-4	0	3	41	41	2	-3	-7	4	6	1	6	-3	3	4	4	5	3	-4	-3	5	65	65	3	-1	-10	6	5	11	4
-3	0	3	11	7	3	-2	-7	4	8	6	8	-2	3	4	30	47	10	-3	-3	5	136	136	1	0	-10	6	27	24	2
-2	0	3	228	226	2	-1	-7	4	88	88	1	-1	3	4	112	110	1	-2	-3	5	119	120	1	1	-10	6	11	10	3
-1	0	3	136	139	1	0	-7	4	49	50	1	0	3	4	198	194	1	-1	-3	5	25	24	1	2	-10	6	28	27	2
0	0	3	90	87	1	1	-7	4	73	73	1	1	3	4	56	55	1	0	-3	5	49	48	1	-2	-9	6	36	39	2
1	0	3	112	104	1	2	-7	4	17	19	2	2	3	4	22	24	2	1	-3	5	147	144	2	-1	-9	6	130	130	2
2	0	3	80	81	1	3	-7	4	24	21	3	3	3	4	32	32	2	2	-3	5	66	64	1	0	-9	6	0	0	1
3	0	3	79	81	1	-3	-6	4	207	204	1	-4	4	4	5	9	5	3	-3	5	4	1	3	1	-9	6	24	20	2
4	0	3	90	89	2	-2	-6	4	160	157	1	-3	4	4	23	27	2	4	-3	5	31	27	3	2	-9	6	23	24	2
-4	1	3	27	27	2	-1	-6	4	8	9	3	-2	4	4	46	61	16	-4	-2	5	26	25	2	-3	-8	6	9	7	9
-3	1	3	67	67	1	0	-6	4	25	26	1	-1	4	4	39	40	1	-3	-2	5	72	72	1	-2	-8	6	56	57	2
-2	1	3	13	18	2	1	-6	4	178	175	2	0	4	4	16	21	5	-2	-2	5	172	164	1	-1	-8	6	17	19	2
-1	1	3	59	60	1	2	-6	4	39	38	1	1	4	4	128	124	2	-1	-2	5	501	471	1	0	-8	6	8	6	7
0	1	3	432	430	1	3	-6	4	25	29	3	2	4	4	149	148	1	0	-2	5	51	55	1	1	-8	6	63	63	1
1	1	3	231	223	1	4	-6	4	44	45	2	3	4	4	16	12	4	1	-2	5	166	163	1	2	-8	6	36	35	1
2	1	3	50	49	1	-4	-5	4	0	1	1	-3	5	4	28	29	2	2	-2	5	89	92	1	3	-8	6	0	7	1
3	1	3	6	6	6	-3	-5	4	69	70	1	-2	5	4	24	33	10	3	-2	5	31	32	1	-3	-7	6	21	22	2
4	1	3	42	39	2	-2	-5	4	43	41	1	-1	5	4	69	68	1	4	-2	5	17	18	3	-2	-7	6	201	201	5
-4	2	3	36	36	1	-1	-5	4	72	74	1	0	5	4	19	17	2	-4	-1	5	39	40	2	-1	-7	6	76	77	1
-3	2	3	67	72	1	0	-5	4	145	143	1	1	5	4	84	80	2	-3	-1	5	9	11	3	0	-7	6	41	40	1
-2	2	3	15	14	1	1	-5	4	25	20	3	2	5	4	16	15	4	-2	-1	5	45	45	1	1	-7	6	40	42	1
-1	2	3	48	47	1	2	-5	4	15	16	1	-3	6	4	0	4	1	-1	-1	5	4	2	3	2	-7	6	19	19	2
0	2	3	209	198	1	3	-5	4	67	69	2	-2	6	4	11	15	3	0	-1	5	256	241	2	3	-7	6	15	15	4
1	2	3	125	126	1	4	-5	4	20	23	3	-1	6	4	7	3	6	1	-1	5	212	202	1	-3	-6	6	16	14	2
2	2	3	15	13	2	-4	-4	4	172	168	3	0	6	4	84	84	1	2	-1	5	68	70	1	-2	-6	6	97	98	1
3	2	3	90	91	1	-3	-4	4	60	80	26	1	6	4	173	173	2	3	-1	5	44	39	1	-1	-6	6	11	12	2
4	2	3	12	15	6	-2	-4	4	44	46	1	2	6	4	8	3	7	4	-1	5	0	6	1	0	-6	6	100	99	1
-4	3	3	17	15	3	-1	-4	4	33	34	1	-3	7	4	0	0	1	-4	0	5	33	29	1	1	-6	6	34	34	1
-3	3	3	16	13	2	0	-4	4	190	185	1	-2	7	4	3	5	3	-3	0	5	77	74	1	2	-6	6	17	18	2
-2	3	3	87	84	2	1	-4	4	117	123	1	-1	7	4	20	21	2	-2	0	5	111	131	18	3	-6	6	19	18	3
-1	3	3	274	270	1	2	-4	4	9	7	3	0	7	4	58	59	2	-1	0	5	96	94	1	-4	-5	6	13	14	4
0	3	3	138	159	20	3	-4	4	119	120	1	1	7	4	30	29	2	0	0	5	147	147	1	-3	-5	6	129	130	1
1	3	3	76	74	1	4	-4	4	17	20	4	-2	8	4	21	23	4	1	0	5	148	150	1	-2	-5	6	117	119	1
2	3	3	26	26	1	-4	-3	4	25	26	2	-1	8	4	23	23	2	2	0	5	27	26	1	-1	-5	6	38	40	1
3	3	3	87	88	1	-3	-3	4	36	36	1	0	8	4	101	98	2	3	0	5	92	89	1	0	-5	6	35	34	1
-4	4	3	11	12	4	-2	-3	4	175	176	1	0	-11	5	9	10	9	-4	1	5	30	32	2	1	-5	6	24	26	1
-3	4	3	35	36	1	-1	-3	4	301	290	2	1	-11	5	20	21	2	-3	1	5	18	20	2	2	-5	6	26	26	1
-2	4	3	50	51	1	0	-3	4	47	49	1	-2	-10	5	31	25	2	-2	1	5	59	60	1	3	-5	6	18	17	3
-1	4	3	74	72	1	1	-3	4	49	51	1	-1	-10	5	33	31	2	-1	1	5	184	174	1	-4	-4	6	33	33	2
0	4	3	96	97	1	2	-3	4	94	119	18	0	-10	5	89	87	2	0	1	5	172	166	1	-3	-4	6	113	108	2
1	4	3	129	129	2	3	-3	4	51	53	1	1																	

Table 5. Observed and calculated structure factors for 7a.

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
0	-1	6	150	145	1	-4	-5	7	61	60	2	-1	-9	8	47	52	2	1	3	8	53	54	4	0	3	9	42	42	1
1	-1	6	73	74	1	-3	-5	7	46	47	1	0	-9	8	124	122	1	2	3	8	19	14	3	1	3	9	40	39	2
2	-1	6	24	24	1	-2	-5	7	82	84	1	1	-9	8	28	29	2	-2	4	8	64	61	2	-2	4	9	7	1	7
3	-1	6	28	29	1	-1	-5	7	99	99	1	2	-9	8	9	9	8	-1	4	8	34	34	1	-1	4	9	32	33	2
-4	0	6	11	8	4	0	-5	7	26	23	1	-3	-8	8	43	42	2	0	4	8	31	33	2	0	4	9	62	64	1
-3	0	6	68	69	1	1	-5	7	58	61	1	-2	-8	8	26	31	2	1	4	8	1	1	1	-1	-10	10	0	0	1
-2	0	6	32	31	1	2	-5	7	65	64	1	-1	-8	8	37	40	1	-2	5	8	19	19	3	0	-10	10	28	30	2
-1	0	6	115	117	1	3	-5	7	3	1	2	0	-8	8	68	68	1	-1	5	8	24	26	2	-2	-9	10	38	43	2
0	0	6	218	205	2	-4	-4	7	62	58	2	1	-8	8	6	4	5	0	5	8	7	7	6	-1	-9	10	35	37	2
1	0	6	111	110	1	-3	-4	7	64	63	1	2	-8	8	15	16	3	-1	-10	9	33	34	2	0	-9	10	63	64	1
2	0	6	32	30	1	-2	-4	7	112	111	1	-3	-7	8	27	27	2	0	-10	9	79	78	1	1	-9	10	7	7	6
3	0	6	9	11	8	-1	-4	7	81	79	1	-2	-7	8	36	42	2	1	-10	9	0	1	1	-2	-8	10	6	7	6
-4	1	6	48	46	1	0	-4	7	166	162	2	-1	-7	8	127	128	1	-2	-9	9	41	39	2	-1	-8	10	111	117	1
-3	1	6	26	27	1	1	-4	7	6	5	6	0	-7	8	12	13	3	-1	-9	9	40	36	1	0	-8	10	60	60	1
-2	1	6	87	86	1	2	-4	7	12	13	4	1	-7	8	57	60	1	0	-9	9	28	29	2	1	-8	10	22	20	2
-1	1	6	174	171	1	3	-4	7	24	24	2	2	-7	8	71	72	1	1	-9	9	38	38	1	2	-8	10	103	100	3
0	1	6	72	72	1	-4	-3	7	86	83	2	3	-7	8	10	12	10	2	-9	9	52	48	2	-3	-7	10	16	11	4
1	1	6	11	17	3	-3	-3	7	40	40	1	-3	-6	8	12	16	3	-2	-8	9	57	57	2	-2	-7	10	10	12	4
2	1	6	70	72	2	-2	-3	7	25	26	1	-2	-6	8	22	23	1	-1	-8	9	6	5	5	-1	-7	10	18	22	2
3	1	6	107	104	2	-1	-3	7	12	20	3	-1	-6	8	20	21	1	0	-8	9	22	20	2	0	-7	10	4	3	3
-4	2	6	52	50	1	0	-3	7	21	20	1	0	-6	8	43	43	1	1	-8	9	33	31	1	1	-7	10	94	95	2
-3	2	6	80	80	1	1	-3	7	117	112	1	1	-6	8	114	113	1	2	-8	9	66	63	1	2	-7	10	37	37	2
-2	2	6	0	0	1	2	-3	7	39	40	1	2	-6	8	10	10	4	-3	-7	9	54	54	1	-3	-6	10	10	11	9
-1	2	6	119	119	5	3	-3	7	39	38	1	3	-6	8	17	15	4	-2	-7	9	3	9	3	-2	-6	10	121	129	1
0	2	6	26	27	1	-4	-2	7	37	37	2	-3	-5	8	41	42	2	-1	-7	9	28	30	1	-1	-6	10	107	111	1
1	2	6	15	15	2	-3	-2	7	50	51	1	-2	-5	8	0	1	1	0	-7	9	31	31	1	0	-6	10	11	14	5
2	2	6	0	7	1	-2	-2	7	84	84	1	-1	-5	8	14	12	1	1	-7	9	65	61	1	1	-6	10	148	146	3
3	2	6	31	31	2	-1	-2	7	65	64	1	0	-5	8	121	119	1	2	-7	9	69	64	1	2	-6	10	9	10	8
-4	3	6	39	32	2	0	-2	7	48	46	1	1	-5	8	24	26	1	-3	-6	9	43	42	1	-3	-5	10	13	14	3
-3	3	6	38	53	14	1	-2	7	21	22	1	2	-5	8	36	40	1	-2	-6	9	58	58	1	-2	-5	10	46	56	15
-2	3	6	73	75	1	2	-2	7	36	36	1	3	-5	8	18	18	2	-1	-6	9	31	34	1	-1	-5	10	12	10	4
-1	3	6	0	0	1	3	-2	7	22	23	2	-4	-4	8	15	12	4	0	-6	9	4	1	3	0	-5	10	253	244	2
0	3	6	36	38	1	-4	-1	7	12	11	3	-3	-4	8	36	37	1	1	-6	9	118	115	1	1	-5	10	130	127	2
1	3	6	120	119	1	-3	-1	7	0	3	1	-2	-4	8	57	58	1	2	-6	9	60	60	1	2	-5	10	31	29	2
2	3	6	131	130	3	-2	-1	7	21	21	1	-1	-4	8	112	111	1	-3	-5	9	12	19	4	-3	-4	10	79	82	2
3	3	6	39	35	2	-1	-1	7	147	144	1	0	-4	8	174	171	2	-2	-5	9	6	7	5	-2	-4	10	87	91	1
-3	4	6	27	28	2	0	-1	7	58	58	1	1	-4	8	26	25	1	-1	-5	9	15	16	2	-1	-4	10	45	44	2
-2	4	6	56	59	2	1	-1	7	71	71	1	2	-4	8	42	41	1	0	-5	9	42	43	1	0	-4	10	121	121	1
-1	4	6	20	20	2	2	-1	7	75	75	3	3	-4	8	39	38	2	1	-5	9	62	62	2	1	-4	10	42	46	2
0	4	6	38	38	1	3	-1	7	20	21	3	-4	-3	8	40	40	2	2	-5	9	44	43	2	2	-4	10	46	50	2
1	4	6	45	45	2	-4	0	7	33	31	2	-3	-3	8	55	60	1	3	-5	9	15	12	4	-3	-3	10	89	82	2
2	4	6	45	46	2	-3	0	7	134	142	7	-2	-3	8	12	13	2	-3	-4	9	20	23	2	-2	-3	10	17	17	2
-3	5	6	7	13	6	-2	0	7	37	36	1	-1	-3	8	5	8	4	-2	-4	9	67	68	1	-1	-3	10	318	307	3
-2	5	6	18	15	3	-1	0	7	66	67	1	0	-3	8	134	139	5	-1	-4	9	93	95	1	0	-3	10	129	172	49
-1	5	6	8	8	7	0	0	7	92	89	1	1	-3	8	108	108	2	0	-4	9	58	58	1	1	-3	10	80	77	1
0	5	6	84	104	25	1	0	7	51	53	1	2	-3	8	33	31	1	1	-4	9	46	50	2	2	-3	10	24	24	3
1	5	6	61	63	2	2	0	7	18	18	2	3	-3	8	13	14	5	2	-4	9	0	2	1	-3	-2	10	29	28	2
2	5	6	7	3	7	3	0	7	0	1	1	-4	-2	8	17	19	3	3	-4	9	46	41	2	-2	-2	10	57	56	1
-2	6	6	38	37	2	-4	-1	7	0	5	1	-3	-2	8	65	65	1	-3	-3	9	27	30	2	-1	-2	10	52	51	1
-1	6	6	74	71	1	-3	-1	7	44	42	1	-2	-2	8	96	97	1	-2	-3	9	50	50	1	0	-2	10	10	3	3
0	6	6	67	61	2	-2	-1	7	84	84	2	-1	-2	8	32	33	1	-1	-3	9	4	6	4	1	-2	10	65	69	1
1	6	6	22	21	3	-1	-1	7	39	43	1	0	-2	8	28	28	2	0	-3	9	81	81	2	2	-2	10	70	69	2
-1	7	6	50	49	2	0	1	7	25	24	1	1	-2	8	58	56	1	1	-3	9	12	8	3	-3	-1	10	34	32	2
0	7	6	6	0	5	1	1	7	86	85	1	2	-2	8	53	52	1	2	-3	9	16	18	2	-2	-1	10	205	199	2
0	-11	7	78	77	2	2	1	7	8	9	7	3	-2	8	25	28	2	3	-3	9	0	2	1	-1	-1	10	133	129	1
-1	-11	7	55	53	1	3	1	7	14	12	4	-4	-1	8	28	26	2	-3	-2	9	6	10	6	0	-1	10	104	104	1
-2	-10	7	74	70	2	-4	2	7	89	87	2	-3	-1	8	14	16	2	-2	-2	9	114	115	1	1	-1	10	38	43	1
-1	-10	7	60	57	2	-3	2	7	35	33	2	-2	-1	8	150	149	1	-1	-2	9	100	101	1	2	-1	10	0	1	1
0	-10	7	58	58	1	-2	2	7	37	37	2	-1	-1	8	198	199	2	0	-2	9	11	9	3	-3	0	10	42	40	2
1	-10	7	6	1	6	-1	2	7	83	84	1	0	-1	8	115	115	2	1	-2	9	7	7	7	-2	0	10	44	44	2
2	-10	7	18	16	3	0	2	7	55	55	1	1	-1	8	49	49	1	2	-2	9	27	31	2	-1	0	10	53	55	1
-2	-9	7	92	90	2	1	2	7	26	28	1	2	-1	8															

Table 5. Observed and calculated structure factors for 7a.

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
-2	-6	11	0	6	1	-3	-3	11	55	54	2	-1	0	11	12	11	3	-2	-5	12	54	55	3	-1	-1	12	0	4	1
-1	-6	11	43	49	2	-2	-3	11	19	20	2	0	0	11	5	2	4	-1	-5	12	23	23	2	0	-1	12	70	69	1
0	-6	11	20	22	3	-1	-3	11	94	89	1	1	0	11	19	16	2	0	-5	12	99	98	3	-1	0	12	37	35	2
1	-6	11	52	51	2	0	-3	11	149	146	1	-2	1	11	36	33	2	1	-5	12	30	29	3	0	0	12	32	30	2
2	-6	11	35	34	2	1	-3	11	18	20	3	-1	1	11	20	19	2	-2	-4	12	21	19	2	-1	-6	13	34	29	2
-3	-5	11	6	9	6	2	-3	11	21	23	3	0	1	11	64	68	1	-1	-4	12	6	1	6	0	-6	13	4	2	3
-2	-5	11	39	46	2	-3	-2	11	33	33	2	-1	2	11	31	31	2	0	-4	12	0	0	1	-1	-5	13	8	5	8
-1	-5	11	54	53	3	-2	-2	11	51	53	1	-1	-8	12	50	55	2	1	-4	12	20	20	3	0	-5	13	3	9	3
0	-5	11	46	47	2	-1	-2	11	184	177	1	0	-8	12	13	16	4	-2	-3	12	38	35	1	-1	-4	13	0	3	1
1	-5	11	85	81	2	0	-2	11	46	46	1	-2	-7	12	27	26	2	-1	-3	12	57	54	1	0	-4	13	32	30	2
2	-5	11	2	6	1	1	-2	11	24	22	2	-1	-7	12	42	40	2	0	-3	12	33	32	1	-1	-3	13	0	5	1
-3	-4	11	24	25	2	-3	-1	11	52	54	2	0	-7	12	15	14	3	1	-3	12	81	83	2	0	-3	13	33	32	2
-2	-4	11	22	17	2	-2	-1	11	91	91	2	1	-7	12	83	79	2	-2	-2	12	31	31	2	-1	-2	13	12	7	4
-1	-4	11	36	32	1	-1	-1	11	80	76	1	-2	-6	12	78	76	2	-1	-2	12	14	14	3						
0	-4	11	168	166	2	0	-1	11	10	11	4	-1	-6	12	5	6	5	0	-2	12	11	12	4						
1	-4	11	72	70	2	1	-1	11	53	55	1	0	-6	12	34	33	2	1	-2	12	3	8	3						
2	-4	11	16	15	4	-2	0	11	84	84	2	1	-6	12	0	4	1	-2	-1	12	0	2	1						

Table 2. Crystallographic information and intensity data collection parameters for the molecular complexes **2a-7a** and **3b**.

	2a	3a	3b	4a	5a	6a	7a
formula	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : (C ₁₂ H ₈ N ₂) : (H ₂ O)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : 2(C ₁₂ H ₈ N ₂)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : (C ₁₂ H ₈ N ₂) : 2(H ₂ O)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : 2(C ₁₂ H ₈ N ₂) : 4(H ₂ O)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : (C ₇ H ₁₀ N ₂)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : (C ₁₂ H ₁₀ N ₂)	(C ₁₀ H ₆ O ₈) : (C ₁₂ H ₁₂ N ₂)
fw	452.37	307.28	470.38	343.31	376.32	436.37	438.38
crystal morphology	rectangular block	rectangular block	rectangular block	plates	block	rectangular block	rectangular block
crystal color	colorless	colorless	light yellow	yellow	colorless	colorless	colorless
crystal size (mm)	0.35 x 0.18 x 0.10	0.24 x 0.12 x 0.08	0.38 x 0.22 x 0.15	0.38 x 0.14 x 0.08	0.44 x 0.21 x 0.09	0.48 x 0.08 x 0.02	0.17 x 0.16 x 0.08
crystal system	triclinic	triclinic	triclinic	triclinic	triclinic	triclinic	triclinic
space group	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$	P $\bar{1}$
<i>a</i> (Å)	8.001(1)	7.084(1)	9.752(2)	7.084(2)	9.230(2)	3.850(1)	4.321(1)
<i>b</i> (Å)	9.822(2)	7.253(1)	9.822(2)	10.221(3)	9.844(2)	11.162(3)	10.239(2)
<i>c</i> (Å)	12.257(2)	13.933(2)	12.034(3)	11.829(3)	10.127(2)	12.126(4)	12.121(2)
α (deg)	94.85(1)	90.68(1)	80.10(1)	85.52(1)	108.46(1)	113.46(1)	113.91(1)
β (deg)	92.10(1)	102.41(1)	69.38(1)	76.42(1)	103.28(1)	95.26(1)	97.71(1)
γ (deg)	94.63(1)	106.30(1)	67.38(1)	74.67(1)	99.61(1)	92.35(1)	92.57(1)
<i>V</i> (Å ³)	955.7(3)	669.1(2)	994.9(4)	802.8(4)	820.3(3)	474.3(2)	482.9(2)
<i>Z</i>	2	2	2	2	2	2	2
<i>D</i> _{calc} (g cm ⁻³)	1.572	1.525	1.570	1.420	1.524	1.528	1.507
<i>T</i> (K)	293	293	293	293	293	293	293
Mo- $\kappa\alpha$	0.71073	0.71073	0.71073	0.71073	0.71073	0.71073	0.71073
μ (mm ⁻¹)	0.124	0.111	0.126	0.109	0.123	0.119	0.117
2 θ range (deg)	46	46	46	46	46	46	46
limiting indices	-8 ≤ <i>h</i> ≤ 6 -10 ≤ <i>k</i> ≤ 10 -13 ≤ <i>l</i> ≤ 13	-7 ≤ <i>h</i> ≤ 7 -8 ≤ <i>k</i> ≤ 8 -15 ≤ <i>l</i> ≤ 15	-10 ≤ <i>h</i> ≤ 10 -10 ≤ <i>k</i> ≤ 10 -13 ≤ <i>l</i> ≤ 13	-7 ≤ <i>h</i> ≤ 7 -11 ≤ <i>k</i> ≤ 11 -13 ≤ <i>l</i> ≤ 13	-10 ≤ <i>h</i> ≤ 10 -10 ≤ <i>k</i> ≤ 10 -11 ≤ <i>l</i> ≤ 11	-4 ≤ <i>h</i> ≤ 4 -12 ≤ <i>k</i> ≤ 12 -13 ≤ <i>l</i> ≤ 13	-4 ≤ <i>h</i> ≤ 4 -11 ≤ <i>k</i> ≤ 11 -13 ≤ <i>l</i> ≤ 13
<i>F</i> (000)	468	318	488	358	392	226	228
no. reflns measured	4124	7055	8265	5502	6808	3977	4061
no. unique reflns [R(int)]	2723 [0.0481]	1928 [0.0528]	2865 [0.0291]	2306 [0.0585]	2355 [0.0401]	1377 [0.0827]	1386 [0.0661]
no. reflns used	2460	1654	2510	1436	2106	1050	1136
no. parameters	363	252	379	286	308	177	181
reflection\parameter	7.50	7.65	7.56	8.06	7.65	7.78	7.66
GOF on <i>F</i> ²	1.012	1.045	1.049	0.904	1.048	1.072	0.968
<i>R</i> ₁ [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	0.0658	0.0426	0.0379	0.0423	0.0469	0.0705	0.0371
<i>wR</i> ₂	0.1762	0.0984	0.1018	0.0803	0.1241	0.1839	0.0858
Final diff. Four Map (e ⁻ . Å ⁻³) max, min	0.37, -0.44	0.20, -0.21	0.18, -0.30	0.17, -0.16	0.20, -0.30	0.26, -0.29	0.19, -0.28