

Terms & Conditions

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



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1998 American Chemical Society

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	vdec2
Empirical formula	$C_{66}H_{82}Cl_2O_{10}$
Formula weight	1106.22
Temperature	153(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/n$
Unit cell dimensions	$a = 18.357(3) \text{ Å}$ $\alpha = 90^\circ$ $b = 16.843(2) \text{ Å}$ $\beta = 111.64^\circ$ $c = 21.972(4) \text{ Å}$ $\gamma = 90^\circ$
Volume	$6315(2) \text{ Å}^3$
Z	4
Density (calculated)	1.164 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.158 mm^{-1}
F(000)	2368
Crystal size	0.80 x 0.15 x 0.15 mm
θ range for data collection	2.18 to 20.00°
Index ranges	$-6 \leq h \leq 17$, $-10 \leq k \leq 16$, $-21 \leq l \leq 19$
Reflections collected	6682
Independent reflections	5883 ($R_{\text{int}} = 0.0519$)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	5882 / 0 / 543
Goodness-of-fit on F^2	1.034
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0790$, $wR2 = 0.1677$
R indices (all data)	$R1 = 0.1738$, $wR2 = 0.2196$
Largest diff. peak and hole	0.669 and -0.271 eÅ^{-3}

RECEIVED
OCT 23 1991

Table 2. Atomic coordinates [$x 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
C(1A)	-4776(5)	4195(5)	8250(4)	20(2)
C(2A)	-4813(5)	3884(5)	7662(4)	19(2)
C(3A)	-4180(5)	4019(5)	7467(4)	22(2)
C(4A)	-3529(5)	4442(5)	7855(4)	27(2)
C(5A)	-2837(6)	4613(6)	7635(5)	44(3)
C(6A)	-2653(10)	5493(8)	7705(7)	148(8)
C(7A)	-3015(6)	4426(6)	6932(5)	57(3)
C(8A)	-2152(7)	4122(13)	8040(7)	192(11)
C(9A)	-3518(5)	4710(5)	8449(4)	30(2)
C(10A)	-4132(5)	4609(5)	8668(4)	21(2)
C(11A)	-4095(5)	4950(5)	9321(4)	31(2)
O(1A)	-5415(3)	4080(3)	8454(3)	27(2)
C(12A)	-5970(5)	4659(6)	8284(4)	31(2)
O(2A)	-5943(4)	5223(4)	7966(3)	55(2)
C(13A)	-6617(5)	4484(6)	8533(5)	48(3)
C(1B)	-3136(5)	4052(5)	10175(4)	21(2)
C(2B)	-3307(5)	4782(5)	9873(4)	23(2)
C(3B)	-2728(5)	5364(5)	10083(4)	26(2)
C(4B)	-2007(5)	5231(5)	10577(4)	26(2)
C(5B)	-1360(6)	5875(6)	10807(4)	39(3)
C(6B)	-600(6)	5538(6)	10754(5)	64(3)
C(7B)	-1207(6)	6074(6)	11530(5)	58(3)
C(8B)	-1573(6)	6633(6)	10407(5)	61(3)
C(9B)	-1869(5)	4489(5)	10870(4)	28(2)
C(10B)	-2437(5)	3890(5)	10675(4)	22(2)
C(11B)	-2292(5)	3097(5)	11037(4)	31(2)
O(1B)	-3684(3)	3433(3)	9923(2)	27(2)
C(12B)	-4280(6)	3356(6)	10138(5)	47(3)
O(2B)	-4350(5)	3754(5)	10562(4)	79(3)
C(13B)	-4841(6)	2722(6)	9751(4)	51(3)
C(1C)	-2684(5)	1728(5)	10544(4)	23(2)
C(2C)	-2196(5)	2388(5)	10636(4)	25(2)
C(3C)	-1621(5)	2374(5)	10378(4)	28(2)
C(4C)	-1507(5)	1718(5)	10020(4)	32(2)
C(5C)	-851(6)	1728(6)	9741(5)	47(3)
C(6C)	-81(6)	1698(9)	10309(6)	111(6)
C(7C)	-873(7)	978(8)	9343(6)	93(5)
C(8C)	-940(9)	2440(9)	9327(8)	149(8)
C(9C)	-2023(5)	1086(5)	9939(4)	35(3)
C(10C)	-2610(5)	1067(5)	10182(4)	28(2)
C(11C)	-3156(6)	358(5)	10083(4)	39(3)
O(1C)	-3307(3)	1731(3)	10768(3)	30(2)
C(12C)	-3138(7)	1513(5)	11407(5)	32(3)
O(2C)	-2500(4)	1331(4)	11774(3)	40(2)
C(13C)	-3867(6)	1572(6)	11562(5)	53(3)
C(1D)	-3829(5)	422(5)	8842(4)	23(2)
C(2D)	-3458(5)	-23(5)	9414(4)	27(2)
C(3D)	-3451(5)	-840(5)	9338(4)	33(2)
C(4D)	-3795(5)	-1219(5)	8749(4)	25(2)
C(5D)	-3720(6)	-2126(6)	8694(4)	38(3)
C(6D)	-3952(6)	-2544(6)	9215(5)	54(3)
C(7D)	-4215(8)	-2451(6)	8038(5)	89(5)

C(8D)	-2870(6)	-2341(6)	8854(6)	70(4)
C(9D)	-4183(5)	-760(5)	8199(4)	21(2)
C(10D)	-4198(5)	73(5)	8240(4)	23(2)
C(11D)	-4577(5)	554(5)	7619(4)	26(2)
O(1D)	-3825(3)	1262(3)	8903(3)	26(2)
C(12D)	-3331(6)	1660(6)	8655(4)	29(2)
O(2D)	-2972(4)	1339(4)	8376(3)	34(2)
C(13D)	-3360(5)	2530(5)	8778(4)	33(3)
C(1E)	-5091(5)	1970(5)	7449(4)	23(2)
C(2E)	-5143(5)	1200(5)	7653(4)	26(2)
C(3E)	-5737(5)	1044(5)	7883(4)	22(2)
C(4E)	-6252(5)	1616(5)	7922(4)	25(2)
C(5E)	-6934(5)	1444(5)	8155(4)	30(2)
C(6E)	-7033(6)	552(5)	8249(5)	50(3)
C(7E)	-6786(6)	1860(6)	8807(4)	55(3)
C(8E)	-7705(5)	1754(6)	7650(5)	53(3)
C(9E)	-6163(5)	2392(5)	7726(3)	19(2)
C(10E)	-5585(5)	2578(5)	7485(4)	20(2)
C(11E)	-5516(5)	3414(5)	7232(4)	23(2)
O(1E)	-4479(3)	2168(3)	7232(3)	28(2)
C(12E)	-4507(6)	1851(5)	6654(5)	27(2)
O(2E)	-5049(4)	1467(4)	6298(3)	35(2)
C(13E)	-3776(5)	2039(5)	6535(4)	36(3)
Cl(1)	-5642(2)	6721(2)	6550(2)	78(1)
Cl(2)	-5944(2)	5084(2)	6167(2)	85(1)
C(1)	-5406(6)	5748(5)	6792(4)	49(3)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

C(1A)-C(2A)	1.372(10)	C(1A)-C(10A)	1.387(10)
C(1A)-O(1A)	1.415(9)	C(2A)-C(3A)	1.397(11)
C(2A)-C(11E)	1.512(11)	C(3A)-C(4A)	1.381(11)
C(4A)-C(9A)	1.372(10)	C(4A)-C(5A)	1.544(12)
C(5A)-C(7A)	1.492(12)	C(5A)-C(8A)	1.49(2)
C(5A)-C(6A)	1.514(14)	C(9A)-C(10A)	1.391(11)
C(10A)-C(11A)	1.523(10)	C(11A)-C(2B)	1.533(11)
O(1A)-C(12A)	1.359(10)	C(12A)-O(2A)	1.191(10)
C(12A)-C(13A)	1.509(12)	C(1B)-C(10B)	1.374(11)
C(1B)-C(2B)	1.378(11)	C(1B)-O(1B)	1.413(9)
C(2B)-C(3B)	1.393(10)	C(3B)-C(4B)	1.386(11)
C(4B)-C(9B)	1.385(11)	C(4B)-C(5B)	1.549(12)
C(5B)-C(8B)	1.518(12)	C(5B)-C(7B)	1.543(12)
C(5B)-C(6B)	1.551(13)	C(9B)-C(10B)	1.400(11)
C(10B)-C(11B)	1.527(11)	C(11B)-C(2C)	1.530(11)
O(1B)-C(12B)	1.348(12)	C(12B)-O(2B)	1.193(11)
C(12B)-C(13B)	1.508(13)	C(1C)-C(2C)	1.395(11)
C(1C)-O(1C)	1.403(9)	C(1C)-C(10C)	1.403(11)
C(2C)-C(3C)	1.370(11)	C(3C)-C(4C)	1.416(11)
C(4C)-C(9C)	1.393(11)	C(4C)-C(5C)	1.539(13)
C(5C)-C(8C)	1.478(14)	C(5C)-C(6C)	1.503(13)
C(5C)-C(7C)	1.529(13)	C(9C)-C(10C)	1.368(11)
C(10C)-C(11C)	1.524(11)	C(11C)-C(2D)	1.510(11)
O(1C)-C(12C)	1.370(10)	C(12C)-O(2C)	1.191(10)
C(12C)-C(13C)	1.501(13)	C(1D)-C(10D)	1.375(10)
C(1D)-C(2D)	1.406(11)	C(1D)-O(1D)	1.422(9)
C(2D)-C(3D)	1.386(11)	C(3D)-C(4D)	1.371(11)
C(4D)-C(9D)	1.390(10)	C(4D)-C(5D)	1.543(12)
C(5D)-C(7D)	1.495(13)	C(5D)-C(8D)	1.511(13)
C(5D)-C(6D)	1.532(12)	C(9D)-C(10D)	1.405(11)
C(10D)-C(11D)	1.519(10)	C(11D)-C(2E)	1.525(11)
O(1D)-C(12D)	1.390(10)	C(12D)-O(2D)	1.183(10)
C(12D)-C(13D)	1.494(12)	C(1E)-C(2E)	1.387(11)
C(1E)-C(10E)	1.390(11)	C(1E)-O(1E)	1.412(9)
C(2E)-C(3E)	1.385(11)	C(3E)-C(4E)	1.374(10)
C(4E)-C(9E)	1.404(11)	C(4E)-C(5E)	1.544(12)
C(5E)-C(7E)	1.528(11)	C(5E)-C(8E)	1.532(12)
C(5E)-C(6E)	1.537(12)	C(9E)-C(10E)	1.386(10)
C(10E)-C(11E)	1.536(11)	O(1E)-C(12E)	1.362(10)
C(12E)-O(2E)	1.202(10)	C(12E)-C(13E)	1.493(12)
Cl(1)-C(1)	1.728(10)	Cl(2)-C(1)	1.764(9)
C(2A)-C(1A)-C(10A)	123.4(8)	C(2A)-C(1A)-O(1A)	119.1(7)
C(10A)-C(1A)-O(1A)	117.5(7)	C(1A)-C(2A)-C(3A)	117.9(8)
C(1A)-C(2A)-C(11E)	121.5(7)	C(3A)-C(2A)-C(11E)	120.6(7)
C(4A)-C(3A)-C(2A)	121.5(8)	C(9A)-C(4A)-C(3A)	117.6(8)
C(9A)-C(4A)-C(5A)	120.7(8)	C(3A)-C(4A)-C(5A)	121.8(8)
C(7A)-C(5A)-C(8A)	108.2(10)	C(7A)-C(5A)-C(6A)	105.5(9)
C(8A)-C(5A)-C(6A)	112.0(13)	C(7A)-C(5A)-C(4A)	113.3(8)
C(8A)-C(5A)-C(4A)	108.6(8)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	109.3(9)
C(4A)-C(9A)-C(10A)	124.0(8)	C(1A)-C(10A)-C(9A)	115.6(7)
C(1A)-C(10A)-C(11A)	123.1(7)	C(9A)-C(10A)-C(11A)	121.3(8)
C(10A)-C(11A)-C(2B)	112.2(7)	C(12A)-O(1A)-C(1A)	116.1(7)
O(2A)-C(12A)-O(1A)	123.0(9)	O(2A)-C(12A)-C(13A)	125.2(9)
O(1A)-C(12A)-C(13A)	111.8(9)	C(10B)-C(1B)-C(2B)	122.8(8)
C(10B)-C(1B)-O(1B)	119.2(7)	C(2B)-C(1B)-O(1B)	117.9(7)
C(1B)-C(2B)-C(3B)	117.3(8)	C(1B)-C(2B)-C(11A)	121.8(8)
C(3B)-C(2B)-C(11A)	121.0(7)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	122.5(8)
C(9B)-C(4B)-C(3B)	117.9(8)	C(9B)-C(4B)-C(5B)	119.6(8)

C(3B)-C(4B)-C(5B)	122.5(8)	C(8B)-C(5B)-C(7B)	108.9(8)
C(8B)-C(5B)-C(4B)	113.5(8)	C(7B)-C(5B)-C(4B)	108.4(7)
C(8B)-C(5B)-C(6B)	108.0(8)	C(7B)-C(5B)-C(6B)	109.2(8)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	108.8(8)	C(4B)-C(9B)-C(10B)	121.3(8)
C(1B)-C(10B)-C(9B)	118.2(8)	C(1B)-C(10B)-C(11B)	121.5(8)
C(9B)-C(10B)-C(11B)	120.3(7)	C(10B)-C(11B)-C(2C)	114.7(6)
C(12B)-O(1B)-C(1B)	119.1(7)	O(2B)-C(12B)-O(1B)	123.7(10)
O(2B)-C(12B)-C(13B)	126.1(10)	O(1B)-C(12B)-C(13B)	110.1(10)
C(2C)-C(1C)-O(1C)	120.5(7)	C(2C)-C(1C)-C(10C)	121.6(8)
O(1C)-C(1C)-C(10C)	117.7(8)	C(3C)-C(2C)-C(1C)	118.5(8)
C(3C)-C(2C)-C(11B)	121.4(8)	C(1C)-C(2C)-C(11B)	120.2(7)
C(2C)-C(3C)-C(4C)	122.6(9)	C(9C)-C(4C)-C(3C)	115.8(8)
C(9C)-C(4C)-C(5C)	123.5(8)	C(3C)-C(4C)-C(5C)	120.7(8)
C(8C)-C(5C)-C(6C)	113.2(12)	C(8C)-C(5C)-C(7C)	110.2(10)
C(6C)-C(5C)-C(7C)	105.4(10)	C(8C)-C(5C)-C(4C)	109.3(9)
C(6C)-C(5C)-C(4C)	107.7(8)	C(7C)-C(5C)-C(4C)	111.1(9)
C(10C)-C(9C)-C(4C)	124.3(9)	C(9C)-C(10C)-C(1C)	117.3(8)
C(9C)-C(10C)-C(11C)	122.3(8)	C(1C)-C(10C)-C(11C)	120.4(8)
C(2D)-C(11C)-C(10C)	117.2(7)	C(12C)-O(1C)-C(1C)	117.0(7)
O(2C)-C(12C)-O(1C)	123.8(9)	O(2C)-C(12C)-C(13C)	126.9(9)
O(1C)-C(12C)-C(13C)	109.3(9)	C(10D)-C(1D)-C(2D)	122.4(8)
C(10D)-C(1D)-O(1D)	120.1(7)	C(2D)-C(1D)-O(1D)	117.5(7)
C(3D)-C(2D)-C(1D)	116.3(8)	C(3D)-C(2D)-C(11C)	121.6(8)
C(1D)-C(2D)-C(11C)	121.8(8)	C(4D)-C(3D)-C(2D)	123.7(9)
C(3D)-C(4D)-C(9D)	118.1(8)	C(3D)-C(4D)-C(5D)	120.8(8)
C(9D)-C(4D)-C(5D)	121.0(8)	C(7D)-C(5D)-C(8D)	110.3(9)
C(7D)-C(5D)-C(6D)	108.3(9)	C(8D)-C(5D)-C(6D)	105.3(8)
C(7D)-C(5D)-C(4D)	113.4(8)	C(8D)-C(5D)-C(4D)	109.4(8)
C(6D)-C(5D)-C(4D)	109.8(8)	C(4D)-C(9D)-C(10D)	121.0(8)
C(1D)-C(10D)-C(9D)	118.3(8)	C(1D)-C(10D)-C(11D)	122.4(7)
C(9D)-C(10D)-C(11D)	119.2(7)	C(10D)-C(11D)-C(2E)	115.6(7)
C(12D)-O(1D)-C(1D)	115.1(7)	O(2D)-C(12D)-O(1D)	123.5(8)
O(2D)-C(12D)-C(13D)	127.3(9)	O(1D)-C(12D)-C(13D)	109.2(8)
C(2E)-C(1E)-C(10E)	123.1(8)	C(2E)-C(1E)-O(1E)	119.2(7)
C(10E)-C(1E)-O(1E)	117.5(7)	C(3E)-C(2E)-C(1E)	116.9(8)
C(3E)-C(2E)-C(11D)	121.6(8)	C(1E)-C(2E)-C(11D)	121.4(8)
C(4E)-C(3E)-C(2E)	122.8(8)	C(3E)-C(4E)-C(9E)	118.1(7)
C(3E)-C(4E)-C(5E)	123.4(8)	C(9E)-C(4E)-C(5E)	118.4(7)
C(7E)-C(5E)-C(8E)	108.7(8)	C(7E)-C(5E)-C(6E)	108.1(7)
C(8E)-C(5E)-C(6E)	107.9(8)	C(7E)-C(5E)-C(4E)	109.8(7)
C(8E)-C(5E)-C(4E)	110.0(7)	C(6E)-C(5E)-C(4E)	112.2(7)
C(10E)-C(9E)-C(4E)	121.4(8)	C(9E)-C(10E)-C(1E)	117.5(8)
C(9E)-C(10E)-C(11E)	121.5(7)	C(1E)-C(10E)-C(11E)	120.9(7)
C(2A)-C(11E)-C(10E)	114.8(7)	C(12E)-O(1E)-C(1E)	117.4(7)
O(2E)-C(12E)-O(1E)	123.8(8)	O(2E)-C(12E)-C(13E)	125.6(9)
O(1E)-C(12E)-C(13E)	110.6(9)	Cl(1)-C(1)-Cl(2)	110.9(5)

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(6A)	255(20)	126(13)	146(13)	-92(11)	170(15)	-161(14)
C(7A)	56(8)	63(8)	71(8)	-15(7)	45(7)	-24(7)
C(8A)	51(10)	414(32)	138(14)	175(18)	67(10)	96(15)
C(11A)	32(6)	16(5)	43(6)	8(5)	11(5)	2(5)
O(1A)	24(4)	29(4)	30(4)	6(3)	12(3)	6(3)
C(12A)	20(6)	36(7)	33(6)	-5(6)	3(5)	6(6)
O(2A)	56(5)	45(5)	71(5)	32(4)	33(4)	28(4)
C(13A)	46(7)	54(7)	53(7)	1(6)	30(6)	10(6)
C(6B)	55(8)	61(8)	79(8)	12(7)	30(7)	-27(7)
C(7B)	51(8)	36(7)	70(8)	-12(6)	2(6)	-16(6)
C(8B)	42(7)	42(7)	77(8)	7(6)	-6(6)	-22(6)
C(11B)	33(6)	29(6)	26(5)	-5(5)	3(5)	-1(5)
O(1B)	24(4)	27(4)	27(3)	-3(3)	7(3)	-9(3)
C(12B)	44(8)	46(8)	46(7)	6(6)	10(7)	-17(7)
O(2B)	74(6)	110(7)	72(6)	-42(6)	49(5)	-38(6)
C(13B)	43(7)	56(8)	51(7)	12(6)	15(6)	-20(7)
C(6C)	32(8)	205(17)	88(10)	-70(11)	13(7)	-6(10)
C(7C)	66(9)	133(12)	102(10)	-80(10)	57(8)	-28(9)
C(8C)	166(16)	133(14)	237(19)	98(14)	180(16)	89(13)
C(11C)	57(7)	22(6)	31(6)	6(5)	7(5)	-9(6)
O(1C)	29(4)	34(4)	27(4)	5(3)	9(3)	6(3)
C(12C)	45(8)	13(6)	37(7)	-9(5)	14(6)	-17(6)
O(2C)	32(5)	51(5)	25(4)	8(4)	-3(4)	-8(4)
C(13C)	50(8)	61(8)	49(7)	-6(6)	18(6)	0(7)
C(6D)	54(8)	34(6)	76(8)	5(6)	26(7)	-3(6)
C(7D)	136(13)	20(6)	76(9)	-10(6)	-3(9)	16(8)
C(8D)	74(9)	43(8)	103(10)	16(7)	43(8)	24(7)
C(11D)	26(6)	21(5)	25(5)	-2(4)	3(5)	1(5)
O(1D)	36(4)	17(3)	27(4)	0(3)	13(3)	3(3)
C(12D)	32(7)	34(7)	16(5)	2(5)	2(5)	-9(6)
O(2D)	36(4)	33(4)	34(4)	-7(3)	13(4)	-3(3)
C(13D)	44(7)	13(6)	35(6)	3(5)	6(5)	-1(5)
C(6E)	52(7)	45(7)	63(7)	4(6)	34(6)	-7(6)
C(7E)	61(8)	67(8)	51(7)	-14(6)	36(6)	-21(7)
C(8E)	33(7)	66(8)	62(7)	12(6)	18(6)	-9(6)
C(11E)	23(6)	20(5)	25(5)	3(4)	8(4)	0(5)
O(1E)	23(4)	26(4)	34(4)	0(3)	10(3)	1(3)
C(12E)	25(7)	19(6)	36(7)	13(5)	9(5)	4(5)
O(2E)	43(5)	33(4)	32(4)	-2(3)	16(4)	-10(4)
C(13E)	32(7)	37(6)	44(6)	13(5)	19(5)	13(5)
Cl(1)	108(3)	46(2)	97(2)	2(2)	59(2)	4(2)
Cl(2)	105(3)	58(2)	72(2)	1(2)	10(2)	-17(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	-4196(5)	3815(5)	7059(4)	27
H(6A1)	-2224(50)	5605(14)	7552(59)	223
H(6A2)	-2496(72)	5647(17)	8165(11)	223
H(6A3)	-3119(23)	5794(8)	7441(48)	223
H(7A1)	-3457(24)	4751(27)	6657(5)	86
H(7A2)	-3150(36)	3862(10)	6852(8)	86
H(7A3)	-2554(14)	4541(36)	6823(9)	86
H(8A1)	-1961(63)	4309(64)	8494(20)	288
H(8A2)	-1733(40)	4169(85)	7866(53)	288
H(8A3)	-2312(27)	3565(18)	8025(67)	288
H(9A)	-3063(5)	4980(5)	8726(4)	35
H(11A)	-4522(5)	4718(5)	9437(4)	38
H(11B)	-4179(5)	5531(5)	9276(4)	38
H(13A)	-6405(9)	4176(28)	8939(15)	72
H(13B)	-7030(16)	4178(28)	8204(12)	72
H(13C)	-6834(22)	4984(6)	8619(25)	72
H(3B)	-2831(5)	5871(5)	9880(4)	31
H(6B1)	-687(13)	5437(36)	10293(6)	95
H(6B2)	-458(22)	5040(21)	11001(27)	95
H(6B3)	-174(11)	5923(17)	10933(29)	95
H(7B1)	-1140(37)	5581(6)	11781(8)	87
H(7B2)	-1653(17)	6372(32)	11557(5)	87
H(7B3)	-730(21)	6396(32)	11710(10)	87
H(8B1)	-1135(16)	7008(16)	10567(21)	92
H(8B2)	-2039(23)	6870(20)	10450(25)	92
H(8B3)	-1681(36)	6511(8)	9945(7)	92
H(9B)	-1379(5)	4385(5)	11210(4)	34
H(11C)	-2735(5)	2988(5)	11178(4)	38
H(11D)	-1812(5)	3144(5)	11436(4)	38
H(13D)	-4563(9)	2215(10)	9803(23)	76
H(13E)	-5054(26)	2870(18)	9287(6)	76
H(13F)	-5270(18)	2670(24)	9913(19)	76
H(3C)	-1287(5)	2822(5)	10441(4)	34
H(6C1)	-67(23)	1230(32)	10577(27)	166
H(6C2)	-20(26)	2179(28)	10575(27)	166
H(6C3)	348(7)	1668(60)	10144(6)	166
H(7C1)	-411(26)	964(26)	9221(36)	139
H(7C2)	-1349(26)	979(25)	8946(20)	139
H(7C3)	-874(49)	509(8)	9607(15)	139
H(8C1)	-1470(28)	2454(41)	8993(40)	223
H(8C2)	-556(54)	2422(41)	9113(53)	223
H(8C3)	-852(75)	2918(10)	9600(11)	223
H(9C)	-1964(5)	638(5)	9698(4)	42
H(11E)	-2878(6)	-54(5)	10407(4)	47
H(11F)	-3614(6)	529(5)	10186(4)	47
H(13G)	-4298(10)	1296(30)	11223(16)	80
H(13H)	-4005(19)	2132(6)	11575(28)	80
H(13I)	-3774(12)	1327(31)	11988(14)	80
H(3D)	-3192(5)	-1155(5)	9715(4)	40
H(6D1)	-4493(13)	-2404(28)	9153(19)	81
H(6D2)	-3600(23)	-2375(28)	9651(5)	81
H(6D3)	-3912(34)	-3120(6)	9173(19)	81
H(7D1)	-4748(14)	-2238(39)	7908(19)	134

H(7D2)	-4232(41)	-3031(7)	8061(12)	134
H(7D3)	-3991(28)	-2296(42)	7714(10)	134
H(8D1)	-2554(8)	-2133(34)	9288(15)	105
H(8D2)	-2690(13)	-2109(33)	8526(19)	105
H(8D3)	-2817(8)	-2919(6)	8853(32)	105
H(9D)	-4442(5)	-1012(5)	7788(4)	26
H(11G)	-4864(5)	186(5)	7259(4)	31
H(11H)	-4158(5)	806(5)	7504(4)	31
H(13J)	-3020(22)	2649(6)	9230(8)	50
H(13K)	-3900(7)	2684(7)	8709(23)	50
H(13L)	-3180(27)	2826(5)	8476(16)	50
H(3E)	-5790(5)	519(5)	8020(4)	26
H(6E1)	-7119(32)	272(7)	7837(9)	75
H(6E2)	-7484(20)	469(6)	8378(26)	75
H(6E3)	-6559(14)	347(9)	8591(19)	75
H(7E1)	-6728(36)	2432(7)	8757(9)	83
H(7E2)	-6306(20)	1651(26)	9139(8)	83
H(7E3)	-7230(18)	1765(31)	8945(16)	83
H(8E1)	-7798(17)	1504(26)	7225(8)	80
H(8E2)	-7673(13)	2331(7)	7609(21)	80
H(8E3)	-8137(7)	1625(30)	7793(15)	80
H(9E)	-6506(5)	2797(5)	7759(3)	23
H(11I)	-5492(5)	3366(5)	6791(4)	28
H(11J)	-5997(5)	3716(5)	7186(4)	28
H(13M)	-3319(5)	1929(28)	6933(9)	54
H(13N)	-3777(14)	2601(9)	6419(23)	54
H(13O)	-3750(15)	1710(21)	6176(16)	54
H(1A)	-5521(6)	5642(5)	7191(4)	59
H(1B)	-4838(6)	5663(5)	6901(4)	59

Table 6. Crystal data and structure refinement for 3.NaClO4.

Identification code	andy5na
Empirical formula	C ₈₆ H ₁₂₄ ClNaO ₁₅
Formula weight	1456.29
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /c
Unit cell dimensions	$a = 25.275(11) \text{ Å}$ $\alpha = 90^\circ$ $b = 19.985(9) \text{ Å}$ $\beta = 92.69(3)^\circ$ $c = 17.044(7) \text{ Å}$ $\gamma = 90^\circ$
Volume	8600(6) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.125 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.109 mm ⁻¹
F(000)	3152
Crystal size	0.32 x 0.24 x 0.18 mm
θ range for data collection	2.04 to 22.50°
Index ranges	$-27 \leq h \leq 27, -21 \leq k \leq 0, 0 \leq l \leq 18$
Reflections collected	11685
Independent reflections	11226 ($R_{\text{int}} = 0.0515$)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	11129 / 740 / 1008
Goodness-of-fit on F^2	1.213
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.1264, wR2 = 0.3003$
R indices (all data)	$R1 = 0.2270, wR2 = 0.4107$
Extinction coefficient	0.0003(3)
Largest diff. peak and hole	1.157 and -0.482 eÅ ⁻³

RECEIVED
OCT 23 1997
of Organic Chemistry

Table 7. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 3.NaClO₄. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Na(1)	1908(1)	4977(2)	1678(2)	40(1)
O(2S)	2612(2)	5445(3)	2411(4)	39(2)
C(2S)	3136(6)	5435(8)	2607(10)	108(6)
Cl(1)	937(2)	3777(2)	5318(3)	44(1)
O(1)	1010(6)	4016(7)	6034(9)	90(6)
O(2)	1372(4)	3474(6)	5066(7)	53(4)
O(3)	850(6)	4297(7)	4825(9)	74(5)
O(4)	538(6)	3350(7)	5276(9)	77(5)
Cl(2)	2267(3)	3593(3)	6653(4)	52(2)
O(5)	2205(5)	3086(6)	6060(9)	37(4)
O(6)	2303(8)	3303(9)	7336(11)	88(7)
O(7)	1915(11)	4074(11)	6619(12)	132(11)
O(8)	2739(9)	3871(13)	6585(16)	166(14)
O(1A)	2043(2)	6570(3)	2979(4)	33(2)
O(2A)	1488(2)	5478(3)	2779(4)	38(2)
C(1A)	2462(3)	7518(5)	3609(6)	40(3)
C(2A)	2703(4)	8128(5)	3529(6)	38(3)
C(3A)	2758(3)	8432(5)	2803(6)	38(3)
C(4A)	2589(3)	8076(5)	2147(6)	31(2)
C(5A)	2371(3)	7453(5)	2190(6)	34(3)
C(6A)	2289(3)	7186(5)	2916(7)	37(3)
C(7A)	2262(3)	7046(5)	1462(6)	33(2)
C(8A)	3020(4)	9126(5)	2757(7)	44(3)
C(9A)	3068(4)	9362(6)	1916(7)	58(3)
C(10A)	2691(4)	9630(6)	3185(8)	61(4)
C(11A)	3571(4)	9096(6)	3167(7)	54(3)
C(12A)	1488(3)	6637(5)	3011(6)	39(3)
C(13A)	1228(3)	5961(5)	2932(5)	27(2)
C(14A)	639(3)	5927(5)	3028(6)	35(2)
C(15A)	358(4)	6548(6)	2757(8)	66(4)
C(16A)	411(4)	5327(5)	2579(7)	50(3)
C(17A)	575(4)	5813(7)	3907(6)	70(4)
O(1B)	2212(2)	5768(3)	739(4)	32(2)
O(2B)	1231(2)	5811(4)	1065(5)	52(2)
C(1B)	2750(3)	6702(4)	1162(5)	25(2)
C(2B)	3239(3)	6975(5)	1259(6)	37(3)
C(3B)	3688(3)	6660(5)	1008(6)	38(3)
C(4B)	3625(3)	6051(5)	649(6)	34(2)
C(5B)	3140(3)	5733(5)	564(5)	27(2)
C(6B)	2704(3)	6085(4)	810(5)	26(2)
C(7B)	3113(3)	5026(5)	236(6)	40(3)
C(8B)	4243(4)	6947(6)	1170(9)	74(5)
C(9B)	4231(5)	7675(7)	1380(11)	120(7)
C(10B)	4551(7)	6863(9)	461(14)	187(13)
C(11B)	4498(7)	6566(12)	1869(16)	211(14)
C(12B)	1861(3)	6029(5)	143(5)	30(2)
C(13B)	1307(3)	6000(5)	411(6)	30(2)
C(14B)	860(4)	6208(5)	-158(6)	43(3)
C(15B)	1061(5)	6665(9)	-800(8)	100(6)
C(16B)	482(5)	6639(7)	284(8)	81(4)

C(17B)	611(6)	5586(7)	-454(11)	138(9)
O(1C)	2438(2)	4174(3)	1091(4)	41(2)
O(2C)	1624(3)	4551(4)	208(5)	64(2)
C(1C)	3311(3)	4527(5)	847(6)	35(2)
C(2C)	3857(4)	4465(5)	1005(6)	36(2)
C(3C)	4060(4)	4032(5)	1563(7)	42(3)
C(4C)	3708(4)	3645(5)	1986(7)	48(3)
C(5C)	3169(4)	3680(5)	1829(7)	42(3)
C(6C)	2982(3)	4120(5)	1264(6)	38(3)
C(7C)	2804(4)	3255(5)	2268(7)	50(3)
C(8C)	4659(4)	3964(6)	1726(7)	50(3)
C(9C)	4826(4)	3230(6)	1586(8)	70(4)
C(10C)	4977(4)	4382(7)	1202(9)	84(5)
C(11C)	4790(4)	4134(8)	2572(8)	84(5)
C(12C)	2260(4)	3731(5)	486(7)	46(3)
C(13C)	1801(4)	4021(5)	44(6)	39(3)
C(14C)	1562(4)	3611(6)	-653(7)	54(3)
C(15C)	1887(5)	3015(6)	-852(8)	76(4)
C(16C)	1015(6)	3395(10)	-389(12)	176(12)
C(17C)	1498(9)	4070(9)	-1366(10)	153(9)
O(1D)	2110(2)	4153(3)	2991(4)	34(2)
O(2D)	1361(2)	4082(4)	1820(4)	48(2)
C(1D)	2843(4)	3408(5)	3139(7)	41(3)
C(2D)	3215(4)	3094(5)	3623(8)	48(3)
C(3D)	3303(4)	3272(6)	4409(8)	59(4)
C(4D)	2992(4)	3770(6)	4695(7)	57(3)
C(5D)	2610(4)	4103(5)	4228(6)	41(3)
C(6D)	2531(3)	3886(5)	3475(7)	39(3)
C(7D)	2326(4)	4680(5)	4559(7)	49(3)
C(8D)	3713(4)	2916(6)	4935(7)	61(4)
C(9D)	3698(8)	3115(14)	5770(9)	259(19)
C(10D)	3628(7)	2204(8)	4891(15)	264(20)
C(11D)	4238(4)	3074(8)	4662(9)	112(6)
C(12D)	1631(4)	3801(5)	3148(7)	51(3)
C(13D)	1287(3)	3747(5)	2400(6)	34(2)
C(14D)	849(4)	3225(5)	2385(6)	44(3)
C(15D)	403(4)	3436(6)	1793(7)	57(3)
C(16D)	1102(4)	2579(5)	2067(7)	61(3)
C(17D)	640(4)	3097(5)	3182(7)	54(3)
O(1E)	1862(2)	5972(3)	4607(4)	39(2)
O(2E)	1355(3)	6873(4)	5445(4)	49(2)
C(1E)	2652(4)	5322(6)	4555(6)	47(3)
C(2E)	3194(4)	5300(6)	4522(8)	67(4)
C(3E)	3489(5)	5886(8)	4446(10)	97(6)
C(4E)	3229(4)	6489(7)	4420(9)	80(5)
C(5E)	2688(4)	6523(6)	4480(6)	46(3)
C(6E)	2405(4)	5942(6)	4560(6)	40(3)
C(7E)	2414(4)	7193(5)	4394(6)	46(3)
C(8E)	4114(6)	5820(8)	4465(12)	127(7)
C(9E)	4352(5)	6501(8)	4232(13)	177(11)
C(10E)	4245(7)	5319(10)	3866(15)	274(20)
C(11E)	4321(7)	5621(12)	5275(15)	231(16)
C(12E)	1666(4)	5770(5)	5334(6)	39(3)
C(13E)	1355(3)	6310(5)	5700(6)	34(2)
C(14E)	1020(3)	6128(5)	6387(6)	33(2)
C(15E)	898(4)	6748(5)	6842(7)	51(3)
C(16E)	1318(4)	5641(6)	6937(6)	55(3)
C(17E)	517(4)	5814(5)	6050(6)	48(3)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [°] for 3.NaClO4.

Na(1)-O(2D)	2.281(8)	Na(1)-O(2S)	2.323(7)
Na(1)-O(1C)	2.344(7)	Na(1)-O(1B)	2.401(7)
Na(1)-O(2A)	2.416(8)	Na(1)-O(2B)	2.575(8)
Na(1)-O(2C)	2.709(9)	Na(1)-O(1D)	2.805(7)
O(2S)-C(2S)	1.350(15)	Cl(1)-O(4)	1.320(14)
Cl(1)-O(1)	1.315(15)	Cl(1)-O(3)	1.348(13)
Cl(1)-O(2)	1.342(11)	Cl(2)-O(6)	1.30(2)
Cl(2)-O(7)	1.31(2)	Cl(2)-O(8)	1.32(2)
Cl(2)-O(5)	1.434(15)	O(1A)-C(6A)	1.385(11)
O(1A)-C(12A)	1.412(10)	O(2A)-C(13A)	1.203(10)
C(1A)-C(2A)	1.373(13)	C(1A)-C(6A)	1.408(14)
C(1A)-C(7E)	1.496(14)	C(2A)-C(3A)	1.391(14)
C(3A)-C(4A)	1.375(13)	C(3A)-C(8A)	1.541(13)
C(4A)-C(5A)	1.366(12)	C(5A)-C(6A)	1.372(14)
C(5A)-C(7A)	1.498(13)	C(7A)-C(1B)	1.521(12)
C(8A)-C(10A)	1.516(14)	C(8A)-C(9A)	1.520(15)
C(8A)-C(11A)	1.529(13)	C(12A)-C(13A)	1.506(13)
C(13A)-C(14A)	1.508(12)	C(14A)-C(15A)	1.491(13)
C(14A)-C(17A)	1.532(14)	C(14A)-C(16A)	1.522(14)
O(1B)-C(6B)	1.395(10)	O(1B)-C(12B)	1.417(10)
O(2B)-C(13B)	1.201(10)	C(1B)-C(6B)	1.375(12)
C(1B)-C(2B)	1.352(12)	C(2B)-C(3B)	1.384(13)
C(3B)-C(4B)	1.368(13)	C(3B)-C(8B)	1.531(13)
C(4B)-C(5B)	1.381(12)	C(5B)-C(6B)	1.390(12)
C(5B)-C(7B)	1.520(12)	C(7B)-C(1C)	1.510(13)
C(8B)-C(10B)	1.48(2)	C(8B)-C(9B)	1.50(2)
C(8B)-C(11B)	1.53(2)	C(12B)-C(13B)	1.492(12)
C(13B)-C(14B)	1.512(13)	C(14B)-C(17B)	1.47(2)
C(14B)-C(15B)	1.53(2)	C(14B)-C(16B)	1.513(15)
O(1C)-C(6C)	1.398(10)	O(1C)-C(12C)	1.416(11)
O(2C)-C(13C)	1.190(11)	C(1C)-C(2C)	1.398(12)
C(1C)-C(6C)	1.384(13)	C(2C)-C(3C)	1.370(14)
C(3C)-C(4C)	1.404(14)	C(3C)-C(8C)	1.533(13)
C(4C)-C(5C)	1.376(13)	C(5C)-C(6C)	1.371(14)
C(5C)-C(7C)	1.481(14)	C(7C)-C(1D)	1.515(15)
C(8C)-C(10C)	1.48(2)	C(8C)-C(11C)	1.50(2)
C(8C)-C(9C)	1.548(15)	C(12C)-C(13C)	1.473(13)
C(13C)-C(14C)	1.543(14)	C(14C)-C(15C)	1.496(15)
C(14C)-C(17C)	1.52(2)	C(14C)-C(16C)	1.54(2)
O(1D)-C(6D)	1.420(11)	O(1D)-C(12D)	1.437(11)
O(2D)-C(13D)	1.216(11)	C(1D)-C(6D)	1.380(14)
C(1D)-C(2D)	1.373(14)	C(2D)-C(3D)	1.39(2)
C(3D)-C(4D)	1.37(2)	C(3D)-C(8D)	1.515(14)
C(4D)-C(5D)	1.392(14)	C(5D)-C(6D)	1.361(14)
C(5D)-C(7D)	1.482(14)	C(7D)-C(1E)	1.525(15)
C(8D)-C(10D)	1.44(2)	C(8D)-C(11D)	1.460(14)
C(8D)-C(9D)	1.48(2)	C(12D)-C(13D)	1.512(14)
C(13D)-C(14D)	1.520(13)	C(14D)-C(17D)	1.503(14)
C(14D)-C(15D)	1.537(13)	C(14D)-C(16D)	1.548(15)
O(1E)-C(6E)	1.380(11)	O(1E)-C(12E)	1.415(10)
O(2E)-C(13E)	1.207(11)	C(1E)-C(2E)	1.377(14)
C(1E)-C(6E)	1.387(14)	C(2E)-C(3E)	1.40(2)
C(3E)-C(4E)	1.37(2)	C(3E)-C(8E)	1.58(2)
C(4E)-C(5E)	1.377(14)	C(5E)-C(6E)	1.376(14)
C(5E)-C(7E)	1.512(14)	C(8E)-C(10E)	1.48(2)
C(8E)-C(11E)	1.51(2)	C(8E)-C(9E)	1.55(2)
C(12E)-C(13E)	1.489(13)	C(13E)-C(14E)	1.519(13)
C(14E)-C(17E)	1.508(13)	C(14E)-C(15E)	1.502(13)
C(14E)-C(16E)	1.527(13)		

O(2D)-Na(1)-O(2S)	135.3(3)	O(2D)-Na(1)-O(1C)	82.5(3)
O(2S)-Na(1)-O(1C)	93.8(2)	O(2D)-Na(1)-O(1B)	143.3(3)
O(2S)-Na(1)-O(1B)	80.4(2)	O(1C)-Na(1)-O(1B)	87.7(3)
O(2D)-Na(1)-O(2A)	87.2(3)	O(2S)-Na(1)-O(2A)	76.6(2)
O(1C)-Na(1)-O(2A)	153.6(3)	O(1B)-Na(1)-O(2A)	114.2(3)
O(2D)-Na(1)-O(2B)	99.0(3)	O(2S)-Na(1)-O(2B)	115.8(3)
O(1C)-Na(1)-O(2B)	130.7(3)	O(1B)-Na(1)-O(2B)	62.0(2)
O(2A)-Na(1)-O(2B)	74.9(3)	O(2D)-Na(1)-O(2C)	73.6(3)
O(2S)-Na(1)-O(2C)	141.9(3)	O(1C)-Na(1)-O(2C)	61.5(2)
O(1B)-Na(1)-O(2C)	70.7(2)	O(2A)-Na(1)-O(2C)	137.8(3)
O(2B)-Na(1)-O(2C)	71.7(3)	O(2D)-Na(1)-O(1D)	62.8(2)
O(2S)-Na(1)-O(1D)	72.6(2)	O(1C)-Na(1)-O(1D)	81.5(2)
O(1B)-Na(1)-O(1D)	150.0(2)	O(2A)-Na(1)-O(1D)	72.2(2)
O(2B)-Na(1)-O(1D)	142.7(3)	O(2C)-Na(1)-O(1D)	125.7(2)
C(2S)-O(2S)-Na(1)	147.7(8)	O(4)-Cl(1)-O(1)	111.0(10)
O(4)-Cl(1)-O(3)	111.2(9)	O(1)-Cl(1)-O(3)	108.1(9)
O(4)-Cl(1)-O(2)	109.0(9)	O(1)-Cl(1)-O(2)	112.3(9)
O(3)-Cl(1)-O(2)	105.1(9)	O(6)-Cl(2)-O(7)	112.6(13)
O(6)-Cl(2)-O(8)	104.0(14)	O(7)-Cl(2)-O(8)	107.6(15)
O(6)-Cl(2)-O(5)	108.5(11)	O(7)-Cl(2)-O(5)	115.7(13)
O(8)-Cl(2)-O(5)	107.7(12)	C(6A)-O(1A)-C(12A)	111.6(7)
C(13A)-O(2A)-Na(1)	140.0(6)	C(2A)-C(1A)-C(6A)	117.2(10)
C(2A)-C(1A)-C(7E)	122.0(9)	C(6A)-C(1A)-C(7E)	120.7(9)
C(1A)-C(2A)-C(3A)	122.6(10)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	117.2(9)
C(4A)-C(3A)-C(8A)	122.8(10)	C(2A)-C(3A)-C(8A)	119.9(9)
C(5A)-C(4A)-C(3A)	122.6(10)	C(4A)-C(5A)-C(6A)	118.8(9)
C(4A)-C(5A)-C(7A)	120.6(9)	C(6A)-C(5A)-C(7A)	120.4(9)
C(5A)-C(6A)-O(1A)	120.2(9)	C(5A)-C(6A)-C(1A)	121.3(9)
O(1A)-C(6A)-C(1A)	118.6(9)	C(5A)-C(7A)-C(1B)	113.8(7)
C(10A)-C(8A)-C(9A)	108.5(10)	C(10A)-C(8A)-C(11A)	108.3(9)
C(9A)-C(8A)-C(11A)	109.4(8)	C(10A)-C(8A)-C(3A)	109.1(8)
C(9A)-C(8A)-C(3A)	112.4(9)	C(11A)-C(8A)-C(3A)	109.1(9)
O(1A)-C(12A)-C(13A)	109.9(7)	O(2A)-C(13A)-C(12A)	120.0(7)
O(2A)-C(13A)-C(14A)	122.7(8)	C(12A)-C(13A)-C(14A)	117.3(8)
C(15A)-C(14A)-C(17A)	110.9(10)	C(15A)-C(14A)-C(13A)	112.8(8)
C(17A)-C(14A)-C(13A)	105.2(8)	C(15A)-C(14A)-C(16A)	109.7(8)
C(17A)-C(14A)-C(16A)	108.7(9)	C(13A)-C(14A)-C(16A)	109.5(8)
C(6B)-O(1B)-C(12B)	114.9(6)	C(6B)-O(1B)-Na(1)	123.6(5)
C(12B)-O(1B)-Na(1)	120.7(5)	C(13B)-O(2B)-Na(1)	116.5(6)
C(6B)-C(1B)-C(2B)	118.3(8)	C(6B)-C(1B)-C(7A)	119.9(7)
C(2B)-C(1B)-C(7A)	121.8(8)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	122.4(9)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	117.6(8)	C(4B)-C(3B)-C(8B)	120.0(9)
C(2B)-C(3B)-C(8B)	122.2(9)	C(3B)-C(4B)-C(5B)	122.6(9)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	116.6(8)	C(4B)-C(5B)-C(7B)	119.4(8)
C(6B)-C(5B)-C(7B)	123.9(8)	C(1B)-C(6B)-C(5B)	122.2(8)
C(1B)-C(6B)-O(1B)	120.2(8)	C(5B)-C(6B)-O(1B)	117.4(8)
C(1C)-C(7B)-C(5B)	110.6(8)	C(10B)-C(8B)-C(9B)	108.8(13)
C(10B)-C(8B)-C(11B)	111.3(16)	C(9B)-C(8B)-C(11B)	108.1(14)
C(10B)-C(8B)-C(3B)	108.8(12)	C(9B)-C(8B)-C(3B)	112.2(10)
C(11B)-C(8B)-C(3B)	107.6(12)	O(1B)-C(12B)-C(13B)	109.3(7)
O(2B)-C(13B)-C(12B)	119.4(8)	O(2B)-C(13B)-C(14B)	122.2(8)
C(12B)-C(13B)-C(14B)	118.4(8)	C(17B)-C(14B)-C(15B)	114.2(13)
C(17B)-C(14B)-C(16B)	112.3(11)	C(15B)-C(14B)-C(16B)	104.8(10)
C(17B)-C(14B)-C(13B)	106.4(9)	C(15B)-C(14B)-C(13B)	111.1(8)
C(16B)-C(14B)-C(13B)	108.0(9)	C(6C)-O(1C)-C(12C)	112.4(7)
C(6C)-O(1C)-Na(1)	122.6(5)	C(12C)-O(1C)-Na(1)	124.8(5)
C(13C)-O(2C)-Na(1)	114.3(7)	C(2C)-C(1C)-C(6C)	117.5(9)
C(2C)-C(1C)-C(7B)	118.9(9)	C(6C)-C(1C)-C(7B)	123.6(8)
C(3C)-C(2C)-C(1C)	121.6(9)	C(2C)-C(3C)-C(4C)	118.6(9)
C(2C)-C(3C)-C(8C)	121.1(10)	C(4C)-C(3C)-C(8C)	120.3(10)
C(5C)-C(4C)-C(3C)	121.2(10)	C(6C)-C(5C)-C(4C)	118.3(10)
C(6C)-C(5C)-C(7C)	121.3(9)	C(4C)-C(5C)-C(7C)	120.4(10)

C(5C)-C(6C)-O(1C)	120.1(9)	C(5C)-C(6C)-C(1C)	122.8(8)
O(1C)-C(6C)-C(1C)	117.2(9)	C(5C)-C(7C)-C(1D)	111.5(9)
C(10C)-C(8C)-C(11C)	110.5(10)	C(10C)-C(8C)-C(3C)	113.4(10)
C(11C)-C(8C)-C(3C)	109.0(9)	C(10C)-C(8C)-C(9C)	106.3(10)
C(11C)-C(8C)-C(9C)	108.2(11)	C(3C)-C(8C)-C(9C)	109.2(8)
O(1C)-C(12C)-C(13C)	110.0(8)	O(2C)-C(13C)-C(12C)	121.7(9)
O(2C)-C(13C)-C(14C)	121.1(10)	C(12C)-C(13C)-C(14C)	117.2(9)
C(15C)-C(14C)-C(17C)	109.7(11)	C(15C)-C(14C)-C(16C)	110.7(12)
C(17C)-C(14C)-C(16C)	109.9(15)	C(15C)-C(14C)-C(13C)	113.4(9)
C(17C)-C(14C)-C(13C)	108.6(11)	C(16C)-C(14C)-C(13C)	104.4(10)
C(6D)-O(1D)-C(12D)	108.8(7)	C(6D)-O(1D)-Na(1)	142.0(5)
C(12D)-O(1D)-Na(1)	108.2(5)	C(13D)-O(2D)-Na(1)	129.5(7)
C(6D)-C(1D)-C(2D)	117.1(11)	C(6D)-C(1D)-C(7C)	122.3(9)
C(2D)-C(1D)-C(7C)	120.5(9)	C(3D)-C(2D)-C(1D)	122.4(10)
C(4D)-C(3D)-C(2D)	117.3(10)	C(4D)-C(3D)-C(8D)	121.2(13)
C(2D)-C(3D)-C(8D)	121.5(11)	C(3D)-C(4D)-C(5D)	122.5(12)
C(6D)-C(5D)-C(4D)	117.0(10)	C(6D)-C(5D)-C(7D)	123.7(9)
C(4D)-C(5D)-C(7D)	119.3(11)	C(5D)-C(6D)-C(1D)	123.5(9)
C(5D)-C(6D)-O(1D)	120.0(9)	C(1D)-C(6D)-O(1D)	116.5(10)
C(5D)-C(7D)-C(1E)	112.5(8)	C(10D)-C(8D)-C(11D)	109.4(12)
C(10D)-C(8D)-C(9D)	107.7(12)	C(11D)-C(8D)-C(9D)	108.3(12)
C(10D)-C(8D)-C(3D)	109.7(11)	C(11D)-C(8D)-C(3D)	108.4(9)
C(9D)-C(8D)-C(3D)	113.3(11)	O(1D)-C(12D)-C(13D)	109.5(9)
O(2D)-C(13D)-C(12D)	122.8(9)	O(2D)-C(13D)-C(14D)	120.3(9)
C(12D)-C(13D)-C(14D)	116.9(9)	C(17D)-C(14D)-C(13D)	112.9(9)
C(17D)-C(14D)-C(15D)	111.2(8)	C(13D)-C(14D)-C(15D)	109.5(8)
C(17D)-C(14D)-C(16D)	110.1(9)	C(13D)-C(14D)-C(16D)	105.4(8)
C(15D)-C(14D)-C(16D)	107.5(9)	C(6E)-O(1E)-C(12E)	115.3(7)
C(2E)-C(1E)-C(6E)	118.6(11)	C(2E)-C(1E)-C(7D)	120.8(10)
C(6E)-C(1E)-C(7D)	120.6(9)	C(1E)-C(2E)-C(3E)	120.9(12)
C(4E)-C(3E)-C(2E)	118.8(10)	C(4E)-C(3E)-C(8E)	123.3(12)
C(2E)-C(3E)-C(8E)	117.6(13)	C(5E)-C(4E)-C(3E)	121.1(12)
C(6E)-C(5E)-C(4E)	119.3(11)	C(6E)-C(5E)-C(7E)	121.3(9)
C(4E)-C(5E)-C(7E)	119.3(10)	C(5E)-C(6E)-O(1E)	119.6(9)
C(5E)-C(6E)-C(1E)	121.1(9)	O(1E)-C(6E)-C(1E)	119.2(9)
C(5E)-C(7E)-C(1A)	114.5(9)	C(10E)-C(8E)-C(11E)	112.0(15)
C(10E)-C(8E)-C(9E)	108.5(13)	C(11E)-C(8E)-C(9E)	110.2(13)
C(10E)-C(8E)-C(3E)	107.3(13)	C(11E)-C(8E)-C(3E)	110.1(14)
C(9E)-C(8E)-C(3E)	108.7(14)	O(1E)-C(12E)-C(13E)	111.9(8)
O(2E)-C(13E)-C(12E)	121.1(9)	O(2E)-C(13E)-C(14E)	120.6(9)
C(12E)-C(13E)-C(14E)	118.3(9)	C(17E)-C(14E)-C(15E)	110.5(8)
C(17E)-C(14E)-C(13E)	107.3(8)	C(15E)-C(14E)-C(13E)	109.7(8)
C(17E)-C(14E)-C(16E)	110.5(8)	C(15E)-C(14E)-C(16E)	108.4(9)
C(13E)-C(14E)-C(16E)	110.5(7)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 9. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 3.NaClO4.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Na(1)	34(2)	35(2)	53(3)	4(2)	10(2)	1(2)
O(2S)	23(3)	51(4)	43(4)	9(4)	4(3)	0(3)
C(2S)	97(13)	109(13)	119(15)	1(11)	7(11)	9(10)
Cl(1)	51(3)	42(3)	38(3)	6(3)	4(2)	6(2)
O(1)	124(14)	39(9)	103(15)	3(10)	-34(12)	18(9)
O(2)	32(7)	83(10)	45(9)	-28(8)	18(6)	-7(7)
O(3)	80(11)	65(10)	76(12)	-2(9)	-14(9)	-9(8)
O(4)	82(11)	74(11)	77(12)	2(9)	23(9)	-5(9)
Cl(2)	64(4)	50(4)	42(5)	14(4)	18(4)	1(3)
O(5)	25(8)	30(8)	57(11)	8(8)	3(7)	-9(6)
O(6)	96(16)	74(14)	92(18)	15(14)	-16(13)	41(12)
O(7)	243(33)	95(18)	61(17)	14(14)	35(19)	77(21)
O(8)	165(29)	167(29)	160(30)	-108(24)	-49(24)	-33(24)
O(1A)	24(3)	42(4)	34(4)	-10(3)	8(3)	-3(3)
O(2A)	24(3)	38(4)	52(5)	4(4)	8(3)	3(3)
C(1A)	23(5)	52(7)	45(7)	-13(6)	6(5)	-3(5)
C(2A)	34(5)	59(7)	23(6)	-16(5)	7(5)	-7(5)
C(3A)	20(5)	48(6)	46(7)	-12(6)	7(5)	-4(5)
C(4A)	20(5)	44(6)	29(6)	-5(5)	2(4)	0(4)
C(5A)	15(5)	41(6)	47(7)	-18(5)	7(5)	-4(4)
C(6A)	20(5)	40(6)	51(8)	-9(6)	13(5)	-4(4)
C(7A)	26(5)	40(6)	33(6)	2(5)	5(4)	-4(4)
C(8A)	29(5)	44(6)	60(8)	-14(6)	8(5)	-7(5)
C(9A)	61(7)	59(8)	54(8)	7(6)	6(6)	-20(6)
C(10A)	40(6)	56(7)	86(10)	-25(7)	-7(6)	-4(6)
C(11A)	31(6)	65(8)	66(8)	-7(7)	-1(5)	-17(5)
C(12A)	21(5)	48(6)	47(7)	-4(6)	4(5)	2(4)
C(13A)	24(5)	40(6)	17(5)	7(5)	9(4)	-1(5)
C(14A)	25(5)	39(6)	42(7)	11(5)	2(5)	1(4)
C(15A)	25(6)	61(8)	110(11)	14(8)	-7(6)	-2(5)
C(16A)	26(5)	67(8)	58(8)	-3(6)	2(5)	-7(5)
C(17A)	36(6)	138(12)	36(7)	10(8)	11(5)	-17(7)
O(1B)	17(3)	34(4)	44(4)	5(3)	-9(3)	-2(3)
O(2B)	23(3)	77(5)	54(6)	7(5)	-6(3)	1(3)
C(1B)	18(5)	38(6)	21(5)	1(5)	4(4)	-3(4)
C(2B)	28(5)	41(6)	42(7)	-11(5)	1(5)	-1(5)
C(3B)	25(5)	53(7)	37(6)	-9(6)	0(5)	-12(5)
C(4B)	24(5)	47(6)	32(6)	-4(5)	5(4)	-5(4)
C(5B)	24(5)	42(6)	15(5)	-4(4)	-3(4)	-6(4)
C(6B)	25(5)	29(5)	23(5)	12(4)	-5(4)	-3(4)
C(7B)	18(5)	41(6)	61(8)	-13(6)	-6(5)	-3(4)
C(8B)	27(6)	78(9)	119(12)	-58(9)	23(7)	-22(6)
C(9B)	38(7)	97(11)	230(21)	-102(13)	50(10)	-39(7)
C(10B)	117(14)	160(17)	300(30)	-149(19)	159(18)	-103(13)
C(11B)	96(14)	229(26)	294(34)	-14(24)	-151(20)	-18(15)
C(12B)	22(5)	42(6)	24(6)	-7(5)	-8(4)	-2(4)
C(13B)	30(5)	45(6)	13(5)	9(5)	-4(4)	3(4)
C(14B)	26(5)	63(7)	40(7)	4(6)	-6(5)	1(5)
C(15B)	58(8)	176(16)	66(10)	45(11)	-8(7)	20(10)
C(16B)	63(8)	115(12)	63(9)	2(9)	-18(7)	38(8)
C(17B)	129(14)	69(10)	203(20)	-38(11)	-139(14)	27(9)
O(1C)	23(3)	40(4)	61(5)	-12(4)	-5(3)	1(3)

O(2C)	45(4)	37(4)	107(7)	-14(5)	-21(4)	6(4)
C(1C)	28(5)	27(5)	48(7)	-11(5)	-10(5)	4(4)
C(2C)	31(5)	44(6)	34(6)	-5(5)	0(5)	2(5)
C(3C)	30(5)	40(6)	55(8)	-19(6)	-2(5)	8(5)
C(4C)	30(6)	41(6)	72(9)	-9(6)	-9(6)	3(5)
C(5C)	28(6)	36(6)	60(8)	-7(6)	-1(5)	1(5)
C(6C)	26(5)	31(6)	58(8)	-18(6)	0(5)	-1(5)
C(7C)	32(6)	37(6)	82(10)	2(6)	2(6)	2(5)
C(8C)	22(5)	62(7)	66(8)	-20(7)	-6(5)	-1(5)
C(9C)	35(6)	75(9)	97(11)	-23(8)	-6(7)	16(6)
C(10C)	19(6)	102(11)	129(14)	27(10)	-8(7)	0(6)
C(11C)	34(6)	130(12)	85(11)	-33(10)	-17(7)	-8(7)
C(12C)	30(5)	42(6)	66(8)	-23(6)	-9(5)	1(5)
C(13C)	33(6)	41(6)	42(7)	-8(6)	-1(5)	-6(5)
C(14C)	42(6)	64(8)	55(8)	-28(7)	1(6)	-4(6)
C(15C)	71(8)	55(8)	100(12)	-41(8)	-20(8)	-1(7)
C(16C)	74(10)	223(21)	238(24)	-190(20)	79(13)	-95(13)
C(17C)	256(25)	112(14)	87(14)	-16(12)	-37(15)	107(16)
O(1D)	21(3)	38(4)	44(4)	13(3)	-6(3)	-2(3)
O(2D)	36(4)	52(5)	54(5)	21(4)	-12(4)	-10(3)
C(1D)	25(5)	32(6)	67(9)	9(6)	14(5)	1(5)
C(2D)	27(6)	36(6)	82(10)	5(6)	-7(6)	8(5)
C(3D)	15(5)	70(8)	91(11)	44(8)	0(6)	4(5)
C(4D)	37(6)	86(9)	47(8)	24(7)	-6(6)	13(6)
C(5D)	31(5)	50(7)	42(7)	13(6)	3(5)	6(5)
C(6D)	25(5)	34(6)	58(8)	12(6)	-11(5)	1(4)
C(7D)	31(6)	68(8)	49(7)	6(6)	10(5)	6(5)
C(8D)	35(6)	83(9)	64(9)	35(7)	0(6)	21(6)
C(9D)	210(24)	509(51)	58(13)	76(21)	-6(14)	241(31)
C(10D)	170(20)	148(19)	454(46)	218(26)	-197(26)	-79(16)
C(11D)	45(8)	151(15)	138(15)	89(12)	-16(9)	6(9)
C(12D)	35(6)	51(7)	66(9)	15(6)	-8(6)	-6(5)
C(13D)	28(5)	31(5)	44(7)	7(5)	3(5)	8(4)
C(14D)	32(5)	52(7)	47(7)	17(6)	-3(5)	-5(5)
C(15D)	36(6)	72(8)	58(8)	16(7)	-24(6)	-17(6)
C(16D)	59(7)	51(7)	73(9)	-4(7)	-1(7)	-5(6)
C(17D)	31(6)	56(7)	75(9)	14(7)	7(6)	-3(5)
O(1E)	24(3)	65(5)	30(4)	4(4)	5(3)	4(3)
O(2E)	43(4)	51(5)	54(5)	5(4)	19(4)	2(4)
C(1E)	35(6)	77(8)	29(7)	-11(6)	8(5)	-1(6)
C(2E)	32(6)	73(9)	98(11)	-19(8)	17(6)	9(6)
C(3E)	34(7)	96(11)	162(16)	-68(11)	30(8)	-22(8)
C(4E)	40(7)	73(9)	129(14)	-37(9)	30(8)	0(6)
C(5E)	38(6)	58(7)	42(7)	-1(6)	13(5)	1(6)
C(6E)	31(6)	69(8)	19(6)	-4(6)	3(4)	5(6)
C(7E)	39(6)	58(7)	41(7)	-16(6)	6(5)	-6(5)
C(8E)	45(9)	147(17)	191(22)	-45(16)	14(11)	-28(10)
C(9E)	45(9)	131(16)	362(34)	-72(19)	82(14)	-30(10)
C(10E)	123(17)	213(25)	503(50)	-217(31)	209(26)	-66(16)
C(11E)	46(11)	227(28)	418(49)	-9(30)	-28(19)	46(14)
C(12E)	36(5)	58(7)	23(6)	13(5)	7(5)	7(5)
C(13E)	23(5)	44(6)	34(6)	4(5)	-6(4)	5(5)
C(14E)	34(5)	36(6)	29(6)	7(5)	11(5)	6(4)
C(15E)	47(6)	52(7)	55(8)	4(6)	14(6)	-3(5)
C(16E)	65(7)	69(8)	33(7)	12(6)	25(6)	16(6)
C(17E)	37(6)	54(7)	53(8)	1(6)	15(5)	-3(5)

Table 10. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3.NaClO4.

	x	y	z	U(eq)
H(2S1)	3224(10)	5026(28)	2878(63)	162
H(2S2)	3224(10)	5809(35)	2942(58)	162
H(2S3)	3333(6)	5464(60)	2140(11)	162
H(2A)	2836(4)	8347(5)	3978(6)	46
H(4A)	2624(3)	8268(5)	1656(6)	37
H(7A1)	2113(3)	7336(5)	1052(6)	39
H(7A2)	1999(3)	6709(5)	1568(6)	39
H(9A1)	3288(23)	9057(20)	1643(13)	87
H(9A2)	3225(26)	9800(16)	1917(7)	87
H(9A3)	2723(5)	9380(34)	1657(14)	87
H(10A)	2857(16)	10062(9)	3169(39)	92
H(10B)	2665(25)	9493(20)	3722(14)	92
H(10C)	2343(10)	9655(28)	2937(28)	92
H(11A)	3723(12)	9536(8)	3184(37)	81
H(11B)	3793(9)	8802(28)	2882(24)	81
H(11C)	3542(5)	8931(33)	3693(15)	81
H(12A)	1356(3)	6927(5)	2590(6)	47
H(12B)	1402(3)	6839(5)	3507(6)	47
H(15A)	-11(7)	6511(18)	2857(44)	98
H(15B)	398(27)	6605(21)	2203(12)	98
H(15C)	507(21)	6926(8)	3034(34)	98
H(16A)	33(4)	5326(19)	2604(34)	75
H(16B)	553(20)	4922(5)	2809(24)	75
H(16C)	504(22)	5353(18)	2040(10)	75
H(17A)	205(4)	5798(42)	4011(10)	105
H(17B)	741(28)	6173(21)	4200(7)	105
H(17C)	739(28)	5398(20)	4062(12)	105
H(2B)	3274(3)	7390(5)	1503(6)	44
H(4B)	3921(3)	5842(5)	454(6)	41
H(7B1)	2750(3)	4920(5)	72(6)	48
H(7B2)	3327(3)	4996(5)	-221(6)	48
H(9B1)	4006(43)	7739(11)	1811(51)	181
H(9B2)	4096(49)	7927(10)	935(25)	181
H(9B3)	4583(9)	7823(18)	1527(78)	181
H(10D)	4377(44)	7097(86)	29(33)	281
H(10E)	4575(70)	6396(11)	336(72)	281
H(10F)	4900(27)	7043(95)	557(43)	281
H(11D)	4468(86)	6093(12)	1775(65)	317
H(11E)	4321(63)	6679(93)	2337(29)	317
H(11F)	4865(24)	6686(94)	1933(91)	317
H(12C)	1887(3)	5770(5)	-334(5)	36
H(12D)	1955(3)	6489(5)	31(5)	36
H(15D)	1256(37)	6405(12)	-1161(36)	151
H(15E)	1287(35)	7003(33)	-565(10)	151
H(15F)	765(6)	6874(44)	-1076(44)	151
H(16D)	200(20)	6789(39)	-70(14)	121
H(16E)	668(10)	7018(25)	504(46)	121
H(16F)	337(28)	6381(15)	699(35)	121
H(17D)	346(43)	5691(9)	-857(64)	207
H(17E)	449(50)	5358(38)	-31(23)	207
H(17F)	875(13)	5302(33)	-667(80)	207
H(2C)	4087(4)	4725(5)	723(6)	44
H(4C)	3840(4)	3360(5)	2380(7)	58

H(7C1)	2890(4)	2788(5)	2185(7)	60
H(7C2)	2444(4)	3330(5)	2067(7)	60
H(9C1)	4668(27)	2945(8)	1963(31)	104
H(9C2)	5205(5)	3194(10)	1643(50)	104
H(9C3)	4710(29)	3096(14)	1066(18)	104
H(10G)	4865(26)	4298(35)	665(9)	125
H(10H)	5345(5)	4272(35)	1281(42)	125
H(10I)	4925(29)	4846(7)	1321(37)	125
H(11G)	4612(30)	3828(29)	2904(8)	125
H(11H)	4676(33)	4582(17)	2676(15)	125
H(11I)	5166(6)	4101(46)	2676(16)	125
H(12E)	2162(4)	3306(5)	712(7)	55
H(12F)	2544(4)	3650(5)	134(7)	55
H(15G)	2232(13)	3160(6)	-994(51)	114
H(15H)	1717(19)	2780(26)	-1285(34)	114
H(15I)	1922(29)	2724(22)	-405(18)	114
H(16G)	1058(6)	3065(72)	19(81)	264
H(16H)	813(29)	3208(92)	-827(29)	264
H(16I)	832(32)	3776(20)	-193(110)	264
H(17G)	1415(65)	3806(12)	-1827(18)	229
H(17H)	1822(23)	4309(61)	-1431(57)	229
H(17I)	1217(44)	4382(54)	-1289(43)	229
H(2D)	3415(4)	2750(5)	3420(8)	58
H(4D)	3038(4)	3889(6)	5221(7)	68
H(7D1)	2240(4)	4577(5)	5095(7)	59
H(7D2)	1996(4)	4749(5)	4256(7)	59
H(9D1)	3757(126)	3588(31)	5817(24)	389
H(9D2)	3969(85)	2880(123)	6071(32)	389
H(9D3)	3358(46)	3006(147)	5964(53)	389
H(10J)	3267(36)	2105(16)	4998(192)	396
H(10K)	3860(94)	1983(15)	5272(135)	396
H(10L)	3701(126)	2048(27)	4375(61)	396
H(11J)	4294(20)	3549(11)	4687(68)	168
H(11K)	4262(17)	2925(55)	4129(26)	168
H(11L)	4503(5)	2852(51)	4989(46)	168
H(12G)	1441(4)	4039(5)	3544(7)	61
H(12H)	1716(4)	3358(5)	3347(7)	61
H(15J)	548(6)	3518(35)	1291(12)	85
H(15K)	239(19)	3836(21)	1974(21)	85
H(15L)	144(15)	3085(16)	1743(32)	85
H(16J)	1198(27)	2651(13)	1536(16)	92
H(16K)	851(11)	2219(10)	2082(42)	92
H(16L)	1412(17)	2468(22)	2387(27)	92
H(17J)	364(19)	2767(25)	3139(9)	81
H(17K)	500(25)	3505(9)	3386(18)	81
H(17L)	921(7)	2937(33)	3531(13)	81
H(2E)	3367(4)	4889(6)	4550(8)	81
H(4E)	3421(4)	6881(7)	4360(9)	96
H(7E1)	2560(4)	7493(5)	4796(6)	55
H(7E2)	2041(4)	7134(5)	4487(6)	55
H(9E1)	4731(6)	6468(30)	4243(116)	266
H(9E2)	4251(66)	6839(22)	4596(67)	266
H(9E3)	4222(62)	6620(48)	3712(45)	266
H(10M)	4582(64)	5424(103)	3662(150)	410
H(10N)	3978(74)	5326(126)	3447(104)	410
H(10O)	4259(142)	4883(25)	4101(54)	410
H(11M)	4195(91)	5931(81)	5653(23)	347
H(11N)	4701(7)	5627(136)	5294(50)	347
H(11O)	4200(91)	5179(55)	5392(66)	347
H(12I)	1961(4)	5645(5)	5689(6)	47
H(12J)	1443(4)	5379(5)	5252(6)	47
H(15M)	681(23)	6633(7)	7269(24)	76
H(15N)	714(24)	7062(14)	6503(12)	76

H(150)	1223(4)	6945(19)	7047(34)	76
H(16M)	1388(24)	5235(14)	6659(13)	82
H(16N)	1106(12)	5542(28)	7376(22)	82
H(16O)	1647(13)	5839(15)	7123(32)	82
H(17M)	600(4)	5407(18)	5783(34)	72
H(17N)	343(14)	6118(14)	5687(30)	72
H(17O)	287(12)	5715(31)	6468(8)	72

Table 11. Crystal data and structure refinement for 3.RbClO₄.

Identification code	aww1
Empirical formula	C ₈₅ H ₁₂₀ ClO ₁₄ Rb
Formula weight	1486.73
Temperature	293(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	P-1
Unit cell dimensions	$a = 14.174(13) \text{ Å}$ $\alpha = 95.32(6)^\circ$ $b = 15.196(12) \text{ Å}$ $\beta = 90.54(7)^\circ$ $c = 22.214(17) \text{ Å}$ $\gamma = 113.81(7)^\circ$
Volume	4353(6) Å ³
Z	2
Density (calculated)	1.134 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.517 mm ⁻¹
F(000)	1592
Crystal size	1.40 x 0.90 x 0.60 mm
θ range for data collection	2.00 to 56.56°
Index ranges	$-15 \leq h \leq 15$, $-16 \leq k \leq 16$, $0 \leq l \leq 24$
Reflections collected	11950
Independent reflections	11587 ($R_{\text{int}} = 0.1870$)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	11584 / 64 / 942
Goodness-of-fit on F^2	1.004
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.1597$, $wR_2 = 0.3768$
R indices (all data)	$R_1 = 0.1907$, $wR_2 = 0.4265$
Extinction coefficient	0.0030(5)
Largest diff. peak and hole	3.303 and -1.965 eÅ ⁻³

RECEIVED
OCT 23 1997
Journal of Organic Chemistry

Table 12. Atomic coordinates [$x 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 x 10^3$] for 3.RbClO₄. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Rb(1)	2943(1)	593(1)	2473(1)	60(1)
O(1A)	4067(4)	-600(4)	2768(3)	43(1)
O(2A)	2653(9)	-2261(7)	3064(6)	131(5)
C(1A)	5902(6)	394(6)	2795(4)	40(2)
C(2A)	6804(7)	945(6)	3158(4)	46(2)
C(3A)	6817(7)	1130(6)	3785(4)	45(2)
C(4A)	5895(6)	731(6)	4049(4)	41(2)
C(5A)	4955(6)	165(6)	3717(4)	38(2)
C(6A)	5001(6)	-12(6)	3094(4)	39(2)
C(7A)	3984(7)	-279(6)	4043(4)	43(2)
C(8A)	7845(7)	1687(7)	4144(5)	56(2)
C(9A)	8565(11)	2467(12)	3811(7)	121(7)
C(10A)	8332(11)	1015(12)	4273(9)	122(6)
C(11A)	7690(11)	2136(13)	4754(7)	117(6)
C(12A)	4028(7)	-1491(7)	2469(5)	52(2)
C(13A)	3141(9)	-2342(8)	2649(5)	69(3)
C(14A)	2882(10)	-3310(8)	2290(5)	77(3)
C(15P)	2312(32)	-4040(13)	2645(14)	381(37)
C(16P)	3760(19)	-3408(16)	2095(21)	444(47)
C(17P)	2250(33)	-3343(23)	1787(14)	363(35)
O(1B)	2103(4)	-188(4)	3589(3)	44(1)
O(2B)	854(9)	-1210(6)	2705(4)	113(4)
C(1B)	3521(7)	396(6)	4340(4)	40(2)
C(2B)	3975(7)	993(7)	4869(4)	44(2)
C(3B)	3545(7)	1565(7)	5168(4)	47(2)
C(4B)	2631(7)	1554(7)	4932(4)	49(2)
C(5B)	2135(7)	976(7)	4407(4)	48(2)
C(6B)	2566(7)	382(7)	4120(4)	42(2)
C(7B)	1119(7)	960(7)	4163(4)	50(2)
C(8B)	4055(9)	2194(7)	5775(4)	59(3)
C(9B)	5184(11)	2376(12)	5844(7)	103(5)
C(10B)	3497(14)	1659(11)	6299(6)	104(5)
C(11B)	3997(14)	3172(9)	5788(7)	108(5)
C(12B)	1386(7)	-1146(7)	3703(4)	52(2)
C(13B)	691(9)	-1613(8)	3160(5)	68(3)
C(14B)	-200(9)	-2597(9)	3203(6)	78(3)
C(15B)	141(11)	-3227(9)	3561(8)	100(5)
C(16B)	-516(15)	-3092(11)	2559(9)	148(8)
C(17B)	-1026(13)	-2408(16)	3463(12)	162(9)
O(1C)	1281(5)	1185(5)	2895(3)	54(2)
O(2C)	1148(8)	356(8)	1775(4)	93(3)
C(1C)	1266(7)	1909(7)	3912(4)	45(2)
C(2C)	1336(7)	2703(7)	4288(4)	46(2)
C(3C)	1519(7)	3599(7)	4081(4)	46(2)
C(4C)	1646(7)	3644(7)	3461(4)	53(2)
C(5C)	1580(7)	2847(7)	3057(4)	47(2)
C(6C)	1348(7)	1973(7)	3299(4)	47(2)
C(7C)	1945(8)	2969(8)	2424(4)	58(3)
C(8C)	1653(8)	4502(7)	4494(5)	56(2)
C(9C)	2793(10)	5160(10)	4555(8)	102(5)

C(10C)	1251(14)	4252(11)	5121(6)	103(5)
C(11C)	1050(12)	5012(10)	4244(7)	94(4)
C(12C)	254(9)	689(10)	2619(6)	80(4)
C(13C)	332(11)	273(9)	1964(6)	79(4)
C(14C)	-716(13)	-289(12)	1632(8)	128(7)
C(15C)	-716(30)	336(23)	1201(18)	540(58)
C(16C)	-1590(17)	-482(28)	1982(16)	442(45)
C(17C)	-747(17)	-1157(18)	1334(13)	240(18)
O(1D)	2805(5)	2642(5)	1327(3)	62(2)
O(2D)	2082(11)	4027(9)	1239(5)	128(5)
C(1D)	3044(7)	3076(7)	2392(4)	47(2)
C(2D)	3683(7)	3306(7)	2919(4)	51(2)
C(3D)	4692(7)	3375(7)	2917(4)	48(2)
C(4D)	5020(8)	3166(7)	2367(4)	53(2)
C(5D)	4440(8)	2925(7)	1817(4)	51(2)
C(6D)	3453(8)	2903(7)	1848(4)	51(2)
C(7D)	4860(8)	2662(9)	1235(5)	61(3)
C(8D)	5360(8)	3624(8)	3498(5)	60(3)
C(9D)	6395(13)	4386(19)	3430(8)	175(12)
C(10D)	4926(16)	4019(17)	4028(8)	144(8)
C(11D)	5432(22)	2724(14)	3658(11)	206(14)
C(12D)	3110(10)	3263(10)	857(5)	76(3)
C(13D)	2485(10)	3821(10)	800(6)	78(3)
C(14D)	2412(12)	4192(11)	199(6)	87(4)
C(15D)	3473(18)	4679(18)	-15(10)	170(10)
C(16D)	1769(19)	3338(16)	-259(8)	156(9)
C(17D)	1979(26)	4938(22)	288(9)	214(15)
O(1E)	4467(4)	773(5)	1547(3)	54(2)
O(2E)	2774(6)	-813(6)	1475(4)	84(3)
C(1E)	5723(8)	2348(7)	1372(4)	52(2)
C(2E)	6741(8)	2994(7)	1404(4)	55(2)
C(3E)	7538(8)	2804(7)	1636(4)	54(2)
C(4E)	7268(7)	1905(7)	1847(4)	49(2)
C(5E)	6256(7)	1224(6)	1829(4)	45(2)
C(6E)	5498(7)	1445(7)	1576(4)	51(2)
C(7E)	5971(8)	270(6)	2110(4)	52(2)
C(8E)	8657(8)	3540(8)	1686(5)	66(3)
C(9E)	8844(14)	4285(18)	1262(13)	206(15)
C(10E)	8879(16)	3998(20)	2314(10)	214(16)
C(11E)	9393(13)	3073(17)	1633(18)	250(19)
C(12E)	4181(7)	220(8)	966(4)	61(3)
C(13E)	3138(8)	-587(8)	994(5)	60(3)
C(14E)	2569(10)	-1126(11)	395(5)	84(4)
C(15E)	1819(24)	-2110(15)	490(9)	235(18)
C(16E)	3271(14)	-1083(15)	-103(7)	130(7)
C(17E)	1978(18)	-562(23)	233(9)	179(11)
Cl(1)	5708(3)	8009(3)	683(2)	99(1)
O(1)	6048(18)	7986(20)	1211(9)	312(18)
O(2)	5172(18)	7102(13)	448(11)	309(16)
O(3)	6521(19)	8360(16)	349(11)	296(16)
O(4)	5158(23)	8457(22)	693(17)	434(29)

Table 13. Bond lengths [Å] and angles [°] for 3.RbCl04.

Rb(1)-O(2C)	2.843(9)	Rb(1)-O(2E)	2.871(9)
Rb(1)-O(1B)	2.904(6)	Rb(1)-O(1E)	2.946(6)
Rb(1)-O(1A)	2.965(6)	Rb(1)-O(1C)	2.971(7)
Rb(1)-O(2B)	3.206(10)	Rb(1)-C(13E)	3.663(11)
Rb(1)-C(6A)	3.685(8)	Rb(1)-C(13C)	3.684(13)
Rb(1)-C(6D)	3.694(9)	Rb(1)-C(6B)	3.726(8)
O(1A)-C(6A)	1.407(10)	O(1A)-C(12A)	1.431(11)
O(2A)-C(13A)	1.186(13)	C(1A)-C(6A)	1.381(12)
C(1A)-C(2A)	1.407(12)	C(1A)-C(7E)	1.524(13)
C(2A)-C(3A)	1.394(13)	C(3A)-C(4A)	1.363(12)
C(3A)-C(8A)	1.528(13)	C(4A)-C(5A)	1.413(12)
C(5A)-C(6A)	1.394(12)	C(5A)-C(7A)	1.494(12)
C(7A)-C(1B)	1.531(12)	C(8A)-C(9A)	1.48(2)
C(8A)-C(10A)	1.49(2)	C(8A)-C(11A)	1.52(2)
C(12A)-C(13A)	1.485(14)	C(13A)-C(14A)	1.51(2)
C(14A)-C(16P)	1.38(2)	C(14A)-C(17P)	1.41(2)
C(14A)-C(15P)	1.40(2)	O(1B)-C(6B)	1.381(11)
O(1B)-C(12B)	1.447(10)	O(2B)-C(13B)	1.206(13)
C(1B)-C(2B)	1.391(13)	C(1B)-C(6B)	1.427(12)
C(2B)-C(3B)	1.376(13)	C(3B)-C(4B)	1.386(13)
C(3B)-C(8B)	1.562(14)	C(4B)-C(5B)	1.386(14)
C(5B)-C(6B)	1.392(13)	C(5B)-C(7B)	1.525(12)
C(7B)-C(1C)	1.532(12)	C(8B)-C(10B)	1.52(2)
C(8B)-C(11B)	1.519(15)	C(8B)-C(9B)	1.51(2)
C(12B)-C(13B)	1.477(14)	C(13B)-C(14B)	1.53(2)
C(14B)-C(17B)	1.43(2)	C(14B)-C(16B)	1.53(2)
C(14B)-C(15B)	1.51(2)	O(1C)-C(6C)	1.399(11)
O(1C)-C(12C)	1.441(13)	O(2C)-C(13C)	1.20(2)
C(1C)-C(6C)	1.377(13)	C(1C)-C(2C)	1.371(13)
C(2C)-C(3C)	1.402(13)	C(3C)-C(4C)	1.394(13)
C(3C)-C(8C)	1.521(14)	C(4C)-C(5C)	1.410(14)
C(5C)-C(6C)	1.394(13)	C(5C)-C(7C)	1.505(13)
C(7C)-C(1D)	1.502(14)	C(8C)-C(11C)	1.50(2)
C(8C)-C(9C)	1.52(2)	C(8C)-C(10C)	1.53(2)
C(12C)-C(13C)	1.55(2)	C(13C)-C(14C)	1.52(2)
C(14C)-C(17C)	1.40(2)	C(14C)-C(15C)	1.41(2)
C(14C)-C(16C)	1.41(2)	O(1D)-C(6D)	1.393(12)
O(1D)-C(12D)	1.426(12)	O(2D)-C(13D)	1.213(15)
C(1D)-C(6D)	1.394(13)	C(1D)-C(2D)	1.401(13)
C(2D)-C(3D)	1.391(13)	C(3D)-C(4D)	1.367(14)
C(3D)-C(8D)	1.516(14)	C(4D)-C(5D)	1.399(14)
C(5D)-C(6D)	1.388(14)	C(5D)-C(7D)	1.514(14)
C(7D)-C(1E)	1.519(14)	C(8D)-C(9D)	1.48(2)
C(8D)-C(11D)	1.49(2)	C(8D)-C(10D)	1.52(2)
C(12D)-C(13D)	1.46(2)	C(13D)-C(14D)	1.51(2)
C(14D)-C(17D)	1.49(2)	C(14D)-C(15D)	1.49(2)
C(14D)-C(16D)	1.53(2)	O(1E)-C(6E)	1.402(11)
O(1E)-C(12E)	1.433(12)	O(2E)-C(13E)	1.208(12)
C(1E)-C(2E)	1.376(14)	C(1E)-C(6E)	1.398(14)
C(2E)-C(3E)	1.381(14)	C(3E)-C(4E)	1.389(13)
C(3E)-C(8E)	1.523(14)	C(4E)-C(5E)	1.387(13)
C(5E)-C(6E)	1.379(13)	C(5E)-C(7E)	1.533(12)
C(8E)-C(10E)	1.47(2)	C(8E)-C(9E)	1.48(2)
C(8E)-C(11E)	1.48(3)	C(12E)-C(13E)	1.499(14)
C(13E)-C(14E)	1.53(2)	C(14E)-C(15E)	1.48(2)
C(14E)-C(16E)	1.48(2)	C(14E)-C(17E)	1.48(3)
Cl(1)-O(4)	1.22(2)	Cl(1)-O(1)	1.27(2)
Cl(1)-O(3)	1.32(2)	Cl(1)-O(2)	1.329(15)

O(2C)-Rb(1)-O(2E)	74.7(3)	O(2C)-Rb(1)-O(1B)	102.8(3)
O(2E)-Rb(1)-O(1B)	115.5(2)	O(2C)-Rb(1)-O(1E)	102.8(2)
O(2E)-Rb(1)-O(1E)	53.4(2)	O(1B)-Rb(1)-O(1E)	147.2(2)
O(2C)-Rb(1)-O(1A)	137.8(2)	O(2E)-Rb(1)-O(1A)	69.1(2)
O(1B)-Rb(1)-O(1A)	75.0(2)	O(1E)-Rb(1)-O(1A)	72.3(2)
O(2C)-Rb(1)-O(1C)	54.2(2)	O(2E)-Rb(1)-O(1C)	126.4(2)
O(1B)-Rb(1)-O(1C)	67.3(2)	O(1E)-Rb(1)-O(1C)	145.4(2)
O(1A)-Rb(1)-O(1C)	142.3(2)	O(2C)-Rb(1)-O(2B)	63.5(3)
O(2E)-Rb(1)-O(2B)	77.0(3)	O(1B)-Rb(1)-O(2B)	49.2(2)
O(1E)-Rb(1)-O(2B)	130.2(3)	O(1A)-Rb(1)-O(2B)	87.3(3)
O(1C)-Rb(1)-O(2B)	67.2(3)	O(2C)-Rb(1)-C(13E)	74.5(3)
O(2E)-Rb(1)-C(13E)	16.2(2)	O(1B)-Rb(1)-C(13E)	131.7(2)
O(1E)-Rb(1)-C(13E)	40.4(2)	O(1A)-Rb(1)-C(13E)	76.7(2)
O(1C)-Rb(1)-C(13E)	128.6(2)	O(2B)-Rb(1)-C(13E)	91.4(3)
O(2C)-Rb(1)-C(6A)	158.6(2)	O(2E)-Rb(1)-C(6A)	85.7(2)
O(1B)-Rb(1)-C(6A)	77.6(2)	O(1E)-Rb(1)-C(6A)	71.1(2)
O(1A)-Rb(1)-C(6A)	21.1(2)	O(1C)-Rb(1)-C(6A)	139.8(2)
O(2B)-Rb(1)-C(6A)	104.0(3)	C(13E)-Rb(1)-C(6A)	89.3(2)
O(2C)-Rb(1)-C(13C)	15.1(3)	O(2E)-Rb(1)-C(13C)	85.7(3)
O(1B)-Rb(1)-C(13C)	88.8(3)	O(1E)-Rb(1)-C(13C)	117.9(3)
O(1A)-Rb(1)-C(13C)	139.2(2)	O(1C)-Rb(1)-C(13C)	41.1(2)
O(2B)-Rb(1)-C(13C)	55.1(3)	C(13E)-Rb(1)-C(13C)	87.9(3)
C(6A)-Rb(1)-C(13C)	158.8(3)	O(2C)-Rb(1)-C(6D)	72.3(3)
O(2E)-Rb(1)-C(6D)	107.4(2)	O(1B)-Rb(1)-C(6D)	133.8(2)
O(1E)-Rb(1)-C(6D)	74.1(2)	O(1A)-Rb(1)-C(6D)	139.1(2)
O(1C)-Rb(1)-C(6D)	74.1(2)	O(2B)-Rb(1)-C(6D)	132.8(3)
C(13E)-Rb(1)-C(6D)	92.3(2)	C(6A)-Rb(1)-C(6D)	123.1(2)
C(13C)-Rb(1)-C(6D)	78.0(3)	O(2C)-Rb(1)-C(6B)	114.8(3)
O(2E)-Rb(1)-C(6B)	131.9(2)	O(1B)-Rb(1)-C(6B)	19.4(2)
O(1E)-Rb(1)-C(6B)	142.1(2)	O(1A)-Rb(1)-C(6B)	76.8(2)
O(1C)-Rb(1)-C(6B)	68.3(2)	O(2B)-Rb(1)-C(6B)	68.3(2)
C(13E)-Rb(1)-C(6B)	147.1(2)	C(6A)-Rb(1)-C(6B)	72.1(2)
C(13C)-Rb(1)-C(6B)	99.8(3)	C(6D)-Rb(1)-C(6B)	120.6(2)
C(6A)-O(1A)-C(12A)	115.5(7)	C(6A)-O(1A)-Rb(1)	109.7(4)
C(12A)-O(1A)-Rb(1)	130.2(5)	C(6A)-C(1A)-C(2A)	116.5(8)
C(6A)-C(1A)-C(7E)	124.3(8)	C(2A)-C(1A)-C(7E)	119.2(8)
C(3A)-C(2A)-C(1A)	123.6(8)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	116.8(8)
C(4A)-C(3A)-C(8A)	123.4(8)	C(2A)-C(3A)-C(8A)	119.7(8)
C(3A)-C(4A)-C(5A)	123.2(8)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.1(8)
C(6A)-C(5A)-C(7A)	122.9(7)	C(4A)-C(5A)-C(7A)	119.8(8)
C(1A)-C(6A)-C(5A)	122.7(7)	C(1A)-C(6A)-O(1A)	120.4(8)
C(5A)-C(6A)-O(1A)	116.8(7)	C(1A)-C(6A)-Rb(1)	111.4(5)
C(5A)-C(6A)-Rb(1)	103.3(5)	O(1A)-C(6A)-Rb(1)	49.3(3)
C(5A)-C(7A)-C(1B)	117.7(7)	C(9A)-C(8A)-C(10A)	109.2(12)
C(9A)-C(8A)-C(11A)	108.4(12)	C(10A)-C(8A)-C(11A)	106.4(13)
C(9A)-C(8A)-C(3A)	111.5(9)	C(10A)-C(8A)-C(3A)	110.0(10)
C(11A)-C(8A)-C(3A)	111.2(9)	O(1A)-C(12A)-C(13A)	112.2(8)
O(2A)-C(13A)-C(12A)	120.7(10)	O(2A)-C(13A)-C(14A)	121.1(10)
C(12A)-C(13A)-C(14A)	118.2(9)	C(16P)-C(14A)-C(17P)	109.8(16)
C(16P)-C(14A)-C(15P)	111.9(16)	C(17P)-C(14A)-C(15P)	108.7(16)
C(16P)-C(14A)-C(13A)	111.5(12)	C(17P)-C(14A)-C(13A)	106.0(14)
C(15P)-C(14A)-C(13A)	108.7(13)	C(6B)-O(1B)-C(12B)	111.7(6)
C(6B)-O(1B)-Rb(1)	116.2(5)	C(12B)-O(1B)-Rb(1)	131.2(5)
C(13B)-O(2B)-Rb(1)	124.9(8)	C(2B)-C(1B)-C(6B)	117.0(8)
C(2B)-C(1B)-C(7A)	120.9(7)	C(6B)-C(1B)-C(7A)	121.9(8)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	122.4(8)	C(2B)-C(3B)-C(4B)	119.0(9)
C(2B)-C(3B)-C(8B)	120.9(8)	C(4B)-C(3B)-C(8B)	120.0(8)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	121.6(8)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	118.6(8)
C(4B)-C(5B)-C(7B)	120.8(8)	C(6B)-C(5B)-C(7B)	120.6(9)
O(1B)-C(6B)-C(5B)	120.0(7)	O(1B)-C(6B)-C(1B)	118.6(7)
C(5B)-C(6B)-C(1B)	121.3(8)	O(1B)-C(6B)-Rb(1)	44.3(3)
C(5B)-C(6B)-Rb(1)	115.4(5)	C(1B)-C(6B)-Rb(1)	103.0(5)
C(5B)-C(7B)-C(1C)	112.0(8)	C(10B)-C(8B)-C(11B)	110.7(11)

C(10B)-C(8B)-C(9B)	108.6(11)	C(11B)-C(8B)-C(9B)	107.5(11)
C(10B)-C(8B)-C(3B)	108.8(9)	C(11B)-C(8B)-C(3B)	110.0(8)
C(9B)-C(8B)-C(3B)	111.3(9)	O(1B)-C(12B)-C(13B)	109.2(7)
O(2B)-C(13B)-C(12B)	118.9(10)	O(2B)-C(13B)-C(14B)	123.1(11)
C(12B)-C(13B)-C(14B)	118.0(9)	C(17B)-C(14B)-C(16B)	110.3(15)
C(17B)-C(14B)-C(15B)	113.2(15)	C(16B)-C(14B)-C(15B)	108.3(13)
C(17B)-C(14B)-C(13B)	106.7(13)	C(16B)-C(14B)-C(13B)	107.3(11)
C(15B)-C(14B)-C(13B)	111.0(10)	C(6C)-O(1C)-C(12C)	110.7(7)
C(6C)-O(1C)-Rb(1)	129.4(5)	C(12C)-O(1C)-Rb(1)	119.5(6)
C(13C)-O(2C)-Rb(1)	126.6(8)	C(6C)-C(1C)-C(2C)	119.3(8)
C(6C)-C(1C)-C(7B)	119.6(9)	C(2C)-C(1C)-C(7B)	121.1(8)
C(1C)-C(2C)-C(3C)	123.0(8)	C(2C)-C(3C)-C(4C)	115.8(9)
C(2C)-C(3C)-C(8C)	123.8(8)	C(4C)-C(3C)-C(8C)	120.3(8)
C(3C)-C(4C)-C(5C)	123.2(9)	C(4C)-C(5C)-C(6C)	117.1(8)
C(4C)-C(5C)-C(7C)	121.5(9)	C(6C)-C(5C)-C(7C)	120.3(8)
C(1C)-C(6C)-O(1C)	121.7(8)	C(1C)-C(6C)-C(5C)	121.4(9)
O(1C)-C(6C)-C(5C)	116.7(8)	C(1D)-C(7C)-C(5C)	111.5(8)
C(11C)-C(8C)-C(9C)	110.4(11)	C(11C)-C(8C)-C(3C)	111.0(9)
C(9C)-C(8C)-C(3C)	108.1(9)	C(11C)-C(8C)-C(10C)	106.3(11)
C(9C)-C(8C)-C(10C)	109.6(12)	C(3C)-C(8C)-C(10C)	111.4(9)
O(1C)-C(12C)-C(13C)	108.5(10)	O(2C)-C(13C)-C(14C)	125.8(13)
O(2C)-C(13C)-C(12C)	121.0(10)	C(14C)-C(13C)-C(12C)	113.1(13)
O(2C)-C(13C)-Rb(1)	38.3(6)	C(14C)-C(13C)-Rb(1)	153.4(8)
C(12C)-C(13C)-Rb(1)	85.6(6)	C(17C)-C(14C)-C(15C)	109.6(17)
C(17C)-C(14C)-C(16C)	109.7(16)	C(15C)-C(14C)-C(16C)	109.2(16)
C(17C)-C(14C)-C(13C)	109.7(13)	C(15C)-C(14C)-C(13C)	101.8(17)
C(16C)-C(14C)-C(13C)	116.4(15)	C(6D)-O(1D)-C(12D)	117.5(8)
C(6D)-C(1D)-C(2D)	117.2(9)	C(6D)-C(1D)-C(7C)	121.9(9)
C(2D)-C(1D)-C(7C)	120.7(8)	C(6D)-C(1D)-Rb(1)	77.4(5)
C(2D)-C(1D)-Rb(1)	83.8(5)	C(7C)-C(1D)-Rb(1)	105.5(6)
C(3D)-C(2D)-C(1D)	123.0(9)	C(4D)-C(3D)-C(2D)	115.8(9)
C(4D)-C(3D)-C(8D)	122.8(9)	C(2D)-C(3D)-C(8D)	121.4(9)
C(3D)-C(4D)-C(5D)	125.5(10)	C(6D)-C(5D)-C(4D)	115.6(9)
C(6D)-C(5D)-C(7D)	123.1(9)	C(4D)-C(5D)-C(7D)	121.2(9)
C(5D)-C(6D)-C(1D)	122.8(9)	C(5D)-C(6D)-O(1D)	119.9(9)
C(1D)-C(6D)-O(1D)	117.2(9)	C(5D)-C(6D)-Rb(1)	81.9(5)
C(1D)-C(6D)-Rb(1)	81.0(5)	O(1D)-C(6D)-Rb(1)	104.5(5)
C(5D)-C(7D)-C(1E)	110.5(8)	C(9D)-C(8D)-C(11D)	111.0(17)
C(9D)-C(8D)-C(3D)	111.4(10)	C(11D)-C(8D)-C(3D)	107.9(10)
C(9D)-C(8D)-C(10D)	105.2(15)	C(11D)-C(8D)-C(10D)	107.9(16)
C(3D)-C(8D)-C(10D)	113.4(10)	O(1D)-C(12D)-C(13D)	113.3(10)
O(2D)-C(13D)-C(12D)	120.2(10)	O(2D)-C(13D)-C(14D)	120.8(12)
C(12D)-C(13D)-C(14D)	118.9(11)	C(17D)-C(14D)-C(15D)	107.1(19)
C(17D)-C(14D)-C(16D)	113.0(18)	C(15D)-C(14D)-C(16D)	109.6(16)
C(17D)-C(14D)-C(13D)	109.3(12)	C(15D)-C(14D)-C(13D)	108.7(13)
C(16D)-C(14D)-C(13D)	109.1(13)	C(6E)-O(1E)-C(12E)	111.1(7)
C(6E)-O(1E)-Rb(1)	126.8(5)	C(12E)-O(1E)-Rb(1)	121.8(5)
C(13E)-O(2E)-Rb(1)	122.4(7)	C(2E)-C(1E)-C(6E)	117.5(9)
C(2E)-C(1E)-C(7D)	121.1(9)	C(6E)-C(1E)-C(7D)	120.3(9)
C(1E)-C(2E)-C(3E)	123.6(9)	C(2E)-C(3E)-C(4E)	116.5(9)
C(2E)-C(3E)-C(8E)	122.8(9)	C(4E)-C(3E)-C(8E)	120.6(9)
C(5E)-C(4E)-C(3E)	122.7(9)	C(6E)-C(5E)-C(4E)	118.1(8)
C(6E)-C(5E)-C(7E)	120.4(8)	C(4E)-C(5E)-C(7E)	121.5(8)
C(5E)-C(6E)-C(1E)	121.6(9)	C(5E)-C(6E)-O(1E)	119.8(8)
C(1E)-C(6E)-O(1E)	118.6(9)	C(1A)-C(7E)-C(5E)	112.4(7)
C(10E)-C(8E)-C(9E)	110.1(19)	C(10E)-C(8E)-C(11E)	102(2)
C(9E)-C(8E)-C(11E)	112.9(18)	C(10E)-C(8E)-C(3E)	107.5(11)
C(9E)-C(8E)-C(3E)	111.8(11)	C(11E)-C(8E)-C(3E)	112.1(11)
O(1E)-C(12E)-C(13E)	108.6(8)	O(2E)-C(13E)-C(12E)	120.9(10)
O(2E)-C(13E)-C(14E)	121.5(10)	C(12E)-C(13E)-C(14E)	117.6(9)
O(2E)-C(13E)-Rb(1)	41.5(6)	C(12E)-C(13E)-Rb(1)	87.5(6)
C(14E)-C(13E)-Rb(1)	145.8(8)	C(15E)-C(14E)-C(16E)	114.9(18)
C(15E)-C(14E)-C(17E)	108(2)	C(16E)-C(14E)-C(17E)	106.3(15)

C(15E)-C(14E)-C(13E)	110.3(11)	C(16E)-C(14E)-C(13E)	113.2(11)
C(17E)-C(14E)-C(13E)	103.3(14)	O(4)-Cl(1)-O(1)	111.9(19)
O(4)-Cl(1)-O(3)	114.1(18)	O(1)-Cl(1)-O(3)	107.0(15)
O(4)-Cl(1)-O(2)	109.8(17)	O(1)-Cl(1)-O(2)	107.7(16)
O(3)-Cl(1)-O(2)	106.0(13)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 14. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 3.RbClO4.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Rb(1)	62(1)	72(1)	55(1)	25(1)	9(1)	33(1)
O(1A)	41(3)	34(3)	49(3)	11(3)	-1(3)	10(3)
O(2A)	130(9)	58(5)	165(11)	6(6)	90(8)	-4(5)
C(1A)	41(5)	29(4)	50(5)	17(4)	5(4)	12(4)
C(2A)	31(5)	41(5)	62(6)	11(4)	4(4)	9(4)
C(3A)	39(5)	39(5)	53(6)	12(4)	-3(4)	11(4)
C(4A)	41(5)	41(5)	43(5)	14(4)	-1(4)	17(4)
C(5A)	37(5)	26(4)	56(5)	17(4)	1(4)	14(4)
C(6A)	38(5)	27(4)	50(5)	8(4)	-7(4)	10(4)
C(7A)	43(5)	38(5)	48(5)	16(4)	0(4)	15(4)
C(8A)	37(5)	63(6)	58(6)	17(5)	-8(4)	8(5)
C(9A)	88(10)	106(12)	106(11)	50(9)	-33(8)	-35(9)
C(10A)	79(9)	109(12)	174(17)	38(11)	-51(10)	30(9)
C(11A)	67(9)	134(14)	105(11)	-37(10)	-21(8)	6(9)
C(12A)	46(5)	44(5)	57(6)	6(4)	8(4)	9(4)
C(13A)	71(7)	53(6)	75(7)	16(5)	36(6)	14(5)
C(14A)	87(9)	48(6)	72(8)	1(5)	13(6)	4(6)
C(15P)	746(91)	38(10)	264(41)	24(16)	226(52)	54(24)
C(16P)	190(28)	114(20)	883(116)	-258(44)	184(48)	-27(19)
C(17P)	577(80)	253(37)	292(41)	-208(35)	-317(52)	261(47)
O(1B)	50(3)	40(3)	41(3)	13(3)	-2(3)	16(3)
O(2B)	155(9)	59(5)	70(6)	13(5)	-39(6)	-14(5)
C(1B)	47(5)	35(4)	45(5)	17(4)	6(4)	21(4)
C(2B)	45(5)	52(5)	44(5)	19(4)	1(4)	26(4)
C(3B)	50(5)	47(5)	52(5)	19(4)	2(4)	26(4)
C(4B)	58(6)	51(5)	52(6)	11(4)	2(5)	36(5)
C(5B)	48(5)	62(6)	50(5)	30(5)	9(4)	33(5)
C(6B)	48(5)	53(5)	37(5)	25(4)	11(4)	28(4)
C(7B)	52(6)	50(5)	59(6)	20(4)	4(4)	29(5)
C(8B)	80(7)	56(6)	51(6)	1(5)	-16(5)	39(6)
C(9B)	92(10)	112(11)	100(10)	-48(9)	-40(8)	51(9)
C(10B)	152(14)	89(10)	51(7)	-5(7)	-14(8)	30(9)
C(11B)	186(16)	60(8)	89(9)	-22(7)	-53(10)	69(9)
C(12B)	44(5)	42(5)	60(6)	26(4)	2(4)	4(4)
C(13B)	74(7)	54(6)	63(7)	16(5)	-12(5)	11(5)
C(14B)	58(7)	56(7)	104(10)	15(7)	-3(6)	4(6)
C(15B)	92(10)	51(7)	141(13)	47(8)	24(9)	4(7)
C(16B)	151(16)	63(9)	161(18)	-1(10)	-65(14)	-22(10)
C(17B)	64(10)	141(18)	268(29)	42(18)	38(13)	24(11)
O(1C)	58(4)	55(4)	53(4)	-2(3)	-12(3)	28(3)
O(2C)	100(7)	124(8)	68(5)	-16(5)	-21(5)	64(6)
C(1C)	41(5)	49(5)	49(5)	21(4)	3(4)	19(4)
C(2C)	47(5)	56(6)	41(5)	17(4)	3(4)	24(4)
C(3C)	45(5)	49(5)	48(5)	15(4)	1(4)	22(4)
C(4C)	55(6)	56(6)	56(6)	20(5)	2(4)	27(5)
C(5C)	54(6)	59(6)	38(5)	15(4)	-1(4)	32(5)
C(6C)	44(5)	54(6)	56(6)	10(4)	0(4)	33(4)
C(7C)	74(7)	65(6)	47(5)	18(5)	1(5)	39(6)
C(8C)	61(6)	46(5)	63(6)	6(5)	3(5)	23(5)
C(9C)	74(9)	84(9)	124(12)	-22(9)	14(8)	14(7)
C(10C)	153(14)	88(10)	69(8)	-5(7)	30(9)	51(10)
C(11C)	134(12)	74(8)	97(10)	-4(7)	-9(9)	67(9)

C(12C)	66(7)	82(8)	97(9)	-9(7)	-24(6)	38(6)
C(13C)	89(9)	75(8)	83(8)	-20(7)	-42(7)	49(7)
C(14C)	122(13)	133(14)	145(15)	-75(12)	-82(12)	90(12)
C(15C)	523(71)	239(39)	671(91)	205(51)	-516(73)	-58(41)
C(16C)	127(20)	631(79)	519(67)	-470(66)	-194(32)	221(36)
C(17C)	155(20)	239(31)	304(36)	-174(29)	-138(22)	104(20)
O(1D)	67(4)	76(5)	43(4)	16(3)	-4(3)	28(4)
O(2D)	204(13)	156(11)	93(7)	67(7)	62(8)	133(10)
C(1D)	58(6)	46(5)	44(5)	18(4)	2(4)	25(4)
C(2D)	59(6)	52(6)	43(5)	14(4)	2(4)	22(5)
C(3D)	54(6)	44(5)	48(5)	18(4)	6(4)	19(4)
C(4D)	57(6)	51(6)	56(6)	18(5)	0(5)	25(5)
C(5D)	60(6)	49(5)	48(5)	20(4)	8(4)	23(5)
C(6D)	65(6)	43(5)	52(6)	22(4)	5(5)	26(5)
C(7D)	60(6)	83(7)	50(6)	24(5)	14(5)	36(6)
C(8D)	67(7)	57(6)	57(6)	7(5)	-8(5)	25(5)
C(9D)	85(12)	265(28)	84(11)	39(14)	-21(9)	-26(14)
C(10D)	162(17)	199(20)	92(11)	-59(12)	-65(11)	113(16)
C(11D)	339(32)	104(13)	183(20)	-11(13)	-185(22)	107(18)
C(12D)	90(9)	112(10)	47(6)	40(6)	8(6)	55(8)
C(13D)	91(9)	102(10)	57(7)	34(7)	7(6)	51(8)
C(14D)	123(11)	100(10)	63(7)	28(7)	8(7)	66(9)
C(15D)	194(22)	176(21)	126(16)	107(16)	41(15)	42(17)
C(16D)	243(25)	151(18)	79(11)	1(11)	-61(13)	89(17)
C(17D)	419(42)	289(32)	102(14)	87(18)	48(19)	300(34)
O(1E)	38(3)	69(4)	43(4)	10(3)	8(3)	8(3)
O(2E)	79(5)	75(5)	59(5)	11(4)	13(4)	-8(4)
C(1E)	54(6)	63(6)	43(5)	22(5)	9(4)	25(5)
C(2E)	65(7)	53(6)	58(6)	31(5)	24(5)	29(5)
C(3E)	54(6)	50(6)	51(5)	19(4)	14(4)	12(5)
C(4E)	40(5)	51(5)	56(6)	23(4)	13(4)	15(4)
C(5E)	43(5)	41(5)	45(5)	14(4)	11(4)	8(4)
C(6E)	42(5)	61(6)	47(5)	21(5)	15(4)	12(5)
C(7E)	57(6)	28(4)	60(6)	16(4)	2(5)	3(4)
C(8E)	44(6)	54(6)	81(8)	26(6)	6(5)	-3(5)
C(9E)	85(12)	182(22)	277(30)	173(23)	-16(15)	-52(13)
C(10E)	124(16)	232(27)	118(16)	-38(17)	10(12)	-87(18)
C(11E)	45(10)	132(18)	541(59)	64(26)	75(19)	-3(10)
C(12E)	41(5)	79(7)	49(6)	5(5)	5(4)	8(5)
C(13E)	52(6)	69(7)	53(6)	17(5)	8(5)	16(5)
C(14E)	67(8)	102(10)	57(7)	11(7)	-15(6)	10(7)
C(15E)	331(35)	114(16)	90(13)	32(11)	-65(17)	-88(20)
C(16E)	140(15)	152(17)	70(10)	-33(10)	-18(10)	41(13)
C(17E)	158(19)	301(36)	95(13)	50(17)	-22(13)	105(22)
Cl(1)	118(3)	85(2)	85(2)	18(2)	-5(2)	31(2)
O(1)	266(26)	342(35)	207(22)	120(23)	-77(19)	-18(23)
O(2)	306(27)	178(18)	318(30)	-158(20)	5(23)	10(18)
O(3)	311(29)	197(21)	267(25)	39(18)	154(24)	-19(20)
O(4)	388(42)	367(41)	665(70)	-137(43)	-171(43)	319(39)

Table 15. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3.RbClO4.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	7426(7)	1201(6)	2970(4)	55
H(4A)	5884(6)	837(6)	4468(4)	49
H(7A1)	4117(7)	-626(6)	4356(4)	51
H(7A2)	3465(7)	-754(6)	3758(4)	51
H(9A1)	8280(51)	2932(52)	3758(55)	182
H(9A2)	8667(84)	2196(17)	3423(27)	182
H(9A3)	9216(37)	2780(69)	4038(32)	182
H(10A)	8396(100)	674(76)	3901(11)	183
H(10B)	7910(58)	560(67)	4535(52)	183
H(10C)	9005(47)	1379(17)	4467(60)	183
H(11A)	7282(89)	1634(13)	4992(24)	175
H(11B)	7341(94)	2549(75)	4695(8)	175
H(11C)	8349(12)	2509(84)	4961(28)	175
H(12A)	4664(7)	-1554(7)	2566(5)	63
H(12B)	3974(7)	-1477(7)	2035(5)	63
H(15D)	1647(206)	-4029(332)	2703(270)	572
H(15E)	2672(268)	-3935(290)	3031(120)	572
H(15F)	2226(476)	-4657(41)	2445(150)	572
H(16D)	3573(76)	-4043(242)	1887(377)	667
H(16E)	4219(329)	-3320(688)	2437(38)	667
H(16F)	4098(400)	-2931(445)	1825(344)	667
H(17D)	2169(439)	-2744(193)	1797(170)	544
H(17E)	1585(182)	-3867(308)	1800(169)	544
H(17F)	2565(256)	-3441(498)	1420(14)	544
H(2B)	4591(7)	1007(7)	5026(4)	53
H(4B)	2343(7)	1944(7)	5132(4)	58
H(7B1)	640(7)	847(7)	4486(4)	60
H(7B2)	820(7)	429(7)	3845(4)	60
H(9B1)	5242(11)	1784(23)	5910(54)	154
H(9B2)	5506(25)	2850(66)	6182(34)	154
H(9B3)	5521(23)	2608(82)	5482(23)	154
H(10D)	3571(79)	1058(42)	6295(33)	156
H(10E)	2777(23)	1534(78)	6259(30)	156
H(10F)	3790(65)	2049(39)	6675(6)	156
H(11D)	4270(86)	3460(39)	5427(26)	162
H(11E)	4393(79)	3585(31)	6135(31)	162
H(11F)	3290(18)	3088(14)	5811(55)	162
H(12C)	985(7)	-1102(7)	4047(4)	62
H(12D)	1763(7)	-1530(7)	3797(4)	62
H(15G)	818(38)	-3159(64)	3451(39)	150
H(15H)	-336(50)	-3891(13)	3475(40)	150
H(15I)	156(85)	-3031(54)	3986(8)	150
H(16G)	53(46)	-3193(115)	2384(29)	222
H(16H)	-710(130)	-2690(60)	2320(23)	222
H(16I)	-1092(88)	-3704(59)	2568(12)	222
H(17G)	-1163(105)	-1957(114)	3240(56)	243
H(17H)	-836(63)	-2140(137)	3877(29)	243
H(17I)	-1634(45)	-3001(29)	3447(85)	243
H(2C)	1257(7)	2645(7)	4700(4)	55
H(4C)	1780(7)	4229(7)	3307(4)	64
H(7C1)	1505(8)	2412(8)	2153(4)	69
H(7C2)	1891(8)	3538(8)	2290(4)	69
H(9C1)	2897(14)	5731(41)	4821(44)	153

H(9C2)	3036(23)	5341(69)	4164(11)	153
H(9C3)	3169(15)	4827(32)	4719(50)	153
H(10G)	525(22)	3848(71)	5082(8)	155
H(10H)	1366(85)	4836(12)	5375(18)	155
H(10I)	1610(64)	3915(76)	5299(23)	155
H(11G)	332(16)	4582(28)	4200(46)	142
H(11H)	1295(57)	5208(70)	3857(23)	142
H(11I)	1137(69)	5571(45)	4516(25)	142
H(12E)	-78(9)	1136(10)	2609(6)	96
H(12F)	-157(9)	170(10)	2852(6)	96
H(15J)	-34(228)	639(722)	1057(440)	810
H(15K)	-922(990)	823(571)	1385(163)	810
H(15L)	-1191(755)	-28(163)	868(282)	810
H(16J)	-2135(266)	-1081(374)	1818(277)	663
H(16K)	-1817(475)	33(370)	1973(375)	663
H(16L)	-1413(209)	-530(729)	2392(104)	663
H(17J)	-1448(33)	-1579(101)	1211(140)	360
H(17K)	-472(245)	-1464(122)	1603(49)	360
H(17L)	-341(214)	-1022(33)	983(85)	360
H(2D)	3422(7)	3418(7)	3287(4)	61
H(4D)	5684(8)	3187(7)	2357(4)	63
H(7D1)	5120(8)	3216(9)	1005(5)	73
H(7D2)	4309(8)	2141(9)	992(5)	73
H(9D1)	6865(42)	4379(109)	3742(63)	263
H(9D2)	6358(36)	5005(25)	3463(100)	263
H(9D3)	6636(74)	4268(92)	3041(42)	263
H(10J)	4841(126)	4584(72)	3927(31)	216
H(10K)	5394(68)	4186(123)	4377(23)	216
H(10L)	4270(66)	3536(45)	4116(51)	216
H(11J)	4758(41)	2261(72)	3737(116)	310
H(11K)	5881(167)	2870(37)	4014(73)	310
H(11L)	5704(189)	2460(104)	3329(50)	310
H(12G)	3057(10)	2875(10)	475(5)	92
H(12H)	3827(10)	3706(10)	934(5)	92
H(15M)	3553(55)	4308(81)	-370(57)	254
H(15N)	3969(19)	4729(141)	298(37)	254
H(15O)	3581(61)	5314(59)	-111(92)	254
H(16M)	2065(83)	2869(64)	-286(62)	234
H(16N)	1761(121)	3562(26)	-648(20)	234
H(16O)	1075(40)	3046(84)	-130(44)	234
H(17M)	2429(113)	5515(72)	124(119)	322
H(17N)	1922(219)	5081(160)	712(12)	322
H(17O)	1309(93)	4697(81)	85(111)	322
H(2E)	6901(8)	3592(7)	1261(4)	66
H(4E)	7787(7)	1755(7)	2007(4)	59
H(7E1)	5312(8)	-197(6)	1931(4)	63
H(7E2)	6487(8)	16(6)	2016(4)	63
H(9E1)	8572(198)	3975(17)	864(27)	309
H(9E2)	9573(19)	4662(140)	1251(103)	309
H(9E3)	8510(188)	4700(125)	1396(70)	309
H(10M)	8248(35)	3958(194)	2489(45)	320
H(10N)	9346(181)	4665(54)	2318(14)	320
H(10O)	9188(208)	3671(133)	2545(33)	320
H(11M)	9966(141)	3448(147)	1407(144)	375
H(11N)	9052(80)	2434(103)	1427(149)	375
H(11O)	9639(216)	3035(239)	2030(19)	375
H(12I)	4685(7)	-41(8)	857(4)	74
H(12J)	4161(7)	630(8)	661(4)	74
H(15P)	1438(175)	-2077(30)	840(90)	353
H(15Q)	2182(33)	-2511(65)	550(148)	353
H(15R)	1351(165)	-2380(96)	141(64)	353
H(16P)	3615(91)	-1499(86)	-42(38)	195
H(16Q)	3773(76)	-431(24)	-107(45)	195

H(16R)	2877(22)	-1292(110)	-483(9)	195
H(17P)	1923(153)	-579(139)	-199(10)	268
H(17Q)	2328(92)	96(44)	409(85)	268
H(17R)	1299(60)	-838(100)	385(90)	268

Table 16. Crystal data and structure refinement for 3.

Identification code	aww7
Empirical formula	$C_{86}H_{122}Cl_2O_{10}$
Formula weight	1386.74
Temperature	293(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Unit cell dimensions	$a = 18.964(7)$ Å $\alpha = 90^\circ$ $b = 16.617(5)$ Å $\beta = 103.17(3)^\circ$ $c = 27.424(8)$ Å $\gamma = 90^\circ$
Volume	8415(5) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.095 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.109 mm ⁻¹
F(000)	3008
Crystal size	1.40 x 0.90 x 0.60 mm
θ range for data collection	2.39 to 57.49°
Index ranges	$0 \leq h \leq 20, 0 \leq k \leq 18, -29 \leq l \leq 29$
Reflections collected	11931
Independent reflections	11522 ($R_{int} = 0.0802$)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	11520 / 12 / 945
Goodness-of-fit on F^2	1.066
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0903, wR2 = 0.2495$
R indices (all data)	$R1 = 0.1161, wR2 = 0.2803$
Extinction coefficient	0.0017(2)
Largest diff. peak and hole	0.553 and -0.674 eÅ ⁻³

RECEIVED
OCT 23 1997
Journal of Organic Chemistry

Table 17. Atomic coordinates [$x \times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 3. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
O(1A)	7534(2)	-76(2)	2807(1)	62(1)
O(2A)	6684(2)	80(3)	3472(1)	105(1)
C(1A)	8187(2)	-1333(2)	2951(1)	54(1)
C(2A)	8163(2)	-2162(3)	2956(2)	57(1)
C(3A)	7516(2)	-2594(2)	2824(2)	54(1)
C(4A)	6890(2)	-2144(2)	2665(1)	52(1)
C(5A)	6879(2)	-1310(2)	2645(1)	47(1)
C(6A)	7538(2)	-911(2)	2820(1)	51(1)
C(7A)	6188(2)	-860(2)	2424(1)	49(1)
C(8A)	7520(2)	-3512(3)	2813(2)	65(1)
C(9A)	8008(4)	-3846(4)	3291(3)	114(2)
C(10A)	6771(3)	-3870(3)	2757(3)	129(3)
C(11A)	7823(5)	-3779(4)	2376(3)	126(3)
C(12A)	7792(3)	337(3)	3270(2)	80(2)
C(13A)	7257(3)	408(3)	3587(2)	79(1)
C(14A)	7475(4)	901(4)	4071(2)	106(2)
C(15A)	8118(7)	580(7)	4388(3)	212(6)
C(16A)	7761(9)	1714(5)	3956(3)	257(8)
C(17A)	6870(7)	938(13)	4306(5)	336(13)
O(1B)	9493(2)	665(2)	2921(1)	60(1)
O(2B)	9798(4)	910(5)	3870(2)	192(3)
C(1B)	9278(2)	579(3)	2030(2)	55(1)
C(2B)	8998(2)	155(3)	1594(2)	62(1)
C(3B)	8702(2)	-608(3)	1602(2)	62(1)
C(4B)	8697(2)	-934(3)	2064(2)	61(1)
C(5B)	8963(2)	-533(3)	2508(2)	53(1)
C(6B)	9257(2)	232(2)	2483(1)	52(1)
C(7B)	8911(2)	-914(3)	3000(2)	61(1)
C(8B)	8357(3)	-1034(3)	1115(2)	79(1)
C(9B)	7613(4)	-715(6)	937(3)	141(3)
C(10B)	8763(5)	-889(8)	725(3)	204(6)
C(11B)	8284(9)	-1926(5)	1193(3)	256(8)
C(12B)	10205(3)	481(3)	3176(2)	75(1)
C(13B)	10294(4)	630(4)	3713(2)	100(2)
C(14B)	10998(4)	403(4)	4064(2)	114(3)
C(15B)	11134(7)	890(6)	4524(3)	233(7)
C(16B)	11635(5)	481(10)	3812(5)	244(7)
C(17B)	10937(7)	-468(5)	4161(4)	217(6)
O(1C)	8115(2)	2053(2)	1639(1)	64(1)
O(2C)	8728(3)	3519(2)	1941(2)	125(2)
C(1C)	8380(2)	2403(2)	879(2)	51(1)
C(2C)	8847(2)	2427(3)	562(2)	62(1)
C(3C)	9551(2)	2160(3)	697(2)	71(1)
C(4C)	9778(2)	1876(3)	1185(2)	71(1)
C(5C)	9337(2)	1833(3)	1516(2)	57(1)
C(6C)	8632(2)	2116(2)	1362(2)	52(1)
C(7C)	9622(2)	1400(3)	2007(2)	66(1)
C(8C)	10046(4)	2138(6)	339(3)	122(3)
C(9C)	9721(4)	2417(7)	-164(3)	163(4)
C(10C)	10717(5)	2631(12)	544(4)	274(10)
C(11C)	10348(9)	1298(9)	335(5)	276(10)
C(12C)	8228(3)	2304(3)	2138(2)	71(1)

C(13C)	8576(3)	3115(3)	2262(2)	71(1)
C(14C)	8701(3)	3403(3)	2797(2)	80(1)
C(15C)	7960(4)	3630(5)	2892(3)	144(3)
C(16C)	9145(4)	4178(4)	2861(3)	130(3)
C(17C)	9039(8)	2759(5)	3153(3)	239(7)
O(1D)	6380(1)	2180(1)	1094(1)	50(1)
O(2D)	6509(3)	3381(3)	1718(2)	112(1)
C(1D)	6130(2)	1034(2)	548(1)	44(1)
C(2D)	6272(2)	636(2)	135(1)	50(1)
C(3D)	6800(2)	873(2)	-104(2)	54(1)
C(4D)	7221(2)	1534(2)	93(2)	57(1)
C(5D)	7107(2)	1959(2)	499(1)	49(1)
C(6D)	6540(2)	1726(2)	710(1)	44(1)
C(7D)	7599(2)	2661(2)	705(2)	53(1)
C(8D)	6906(3)	460(3)	-584(2)	67(1)
C(9D)	7692(4)	427(7)	-594(4)	181(5)
C(10D)	6549(7)	957(6)	-1025(2)	190(5)
C(11D)	6631(6)	-388(4)	-620(3)	166(4)
C(12D)	5975(2)	2878(2)	922(2)	55(1)
C(13D)	6129(3)	3526(3)	1314(2)	72(1)
C(14D)	5795(5)	4338(3)	1183(3)	119(2)
C(15D)	5227(16)	4366(17)	705(10)	183(15)
C(16D)	5541(21)	4641(18)	1634(10)	266(23)
C(17D)	6490(14)	4789(12)	1128(17)	276(32)
C(15X)	5009(14)	4226(14)	1203(23)	261(40)
C(16X)	5784(30)	4598(16)	671(9)	192(30)
C(17X)	6082(23)	4961(13)	1543(10)	162(18)
O(1E)	5792(1)	613(1)	1871(1)	48(1)
O(2E)	6919(2)	1880(2)	2735(1)	71(1)
C(1E)	6019(2)	-804(2)	1855(1)	45(1)
C(2E)	5968(2)	-1498(2)	1566(1)	50(1)
C(3E)	5772(2)	-1499(2)	1053(1)	48(1)
C(4E)	5644(2)	-757(2)	818(1)	49(1)
C(5E)	5698(2)	-34(2)	1082(1)	43(1)
C(6E)	5862(2)	-75(2)	1600(1)	42(1)
C(7E)	5540(2)	754(2)	797(1)	46(1)
C(8E)	5664(3)	-2283(2)	751(2)	61(1)
C(9E)	4915(5)	-2586(5)	729(4)	180(5)
C(10E)	5722(5)	-2163(3)	219(2)	119(3)
C(11E)	6225(6)	-2898(4)	988(3)	171(4)
C(12E)	6440(2)	1070(2)	2056(1)	46(1)
C(13E)	6360(2)	1644(2)	2462(1)	50(1)
C(14E)	5629(2)	1950(3)	2525(2)	64(1)
C(15E)	5130(3)	2166(3)	2029(2)	78(1)
C(16E)	5295(3)	1292(4)	2788(2)	88(2)
C(17E)	5753(3)	2702(4)	2859(2)	105(2)
Cl(1)	3703(2)	2491(3)	1035(2)	251(2)
Cl(2)	2625(4)	3202(6)	393(3)	467(6)
C(1)	2998(10)	3183(7)	995(4)	252(8)

Table 18. Bond lengths [Å] and angles [°] for 3.

O(1A)-C(6A)	1.388(5)	O(1A)-C(12A)	1.429(5)
O(2A)-C(13A)	1.191(6)	C(1A)-C(2A)	1.377(6)
C(1A)-C(6A)	1.392(5)	C(1A)-C(7B)	1.518(6)
C(2A)-C(3A)	1.396(6)	C(3A)-C(4A)	1.387(6)
C(3A)-C(8A)	1.526(6)	C(4A)-C(5A)	1.386(5)
C(5A)-C(6A)	1.399(5)	C(5A)-C(7A)	1.510(5)
C(7A)-C(1E)	1.522(5)	C(8A)-C(11A)	1.509(8)
C(8A)-C(10A)	1.516(7)	C(8A)-C(9A)	1.526(7)
C(12A)-C(13A)	1.483(8)	C(13A)-C(14A)	1.533(7)
C(14A)-C(17A)	1.440(13)	C(14A)-C(15A)	1.430(11)
C(14A)-C(16A)	1.516(12)	O(1B)-C(6B)	1.384(5)
O(1B)-C(12B)	1.407(5)	O(2B)-C(13B)	1.213(8)
C(1B)-C(6B)	1.378(6)	C(1B)-C(2B)	1.386(6)
C(1B)-C(7C)	1.519(6)	C(2B)-C(3B)	1.388(6)
C(3B)-C(4B)	1.382(6)	C(3B)-C(8B)	1.521(6)
C(4B)-C(5B)	1.378(6)	C(5B)-C(6B)	1.396(6)
C(5B)-C(7B)	1.515(6)	C(8B)-C(10B)	1.473(9)
C(8B)-C(9B)	1.484(8)	C(8B)-C(11B)	1.508(11)
C(12B)-C(13B)	1.465(7)	C(13B)-C(14B)	1.505(8)
C(14B)-C(17B)	1.481(11)	C(14B)-C(15B)	1.471(9)
C(14B)-C(16B)	1.528(13)	O(1C)-C(6C)	1.375(5)
O(1C)-C(12C)	1.400(5)	O(2C)-C(13C)	1.194(6)
C(1C)-C(2C)	1.374(6)	C(1C)-C(6C)	1.388(6)
C(1C)-C(7D)	1.511(5)	C(2C)-C(3C)	1.374(6)
C(3C)-C(4C)	1.390(6)	C(3C)-C(8C)	1.507(7)
C(4C)-C(5C)	1.370(6)	C(5C)-C(6C)	1.390(6)
C(5C)-C(7C)	1.513(6)	C(8C)-C(9C)	1.454(9)
C(8C)-C(10C)	1.510(14)	C(8C)-C(11C)	1.510(13)
C(12C)-C(13C)	1.506(7)	C(13C)-C(14C)	1.509(7)
C(14C)-C(17C)	1.492(9)	C(14C)-C(16C)	1.528(8)
C(14C)-C(15C)	1.533(8)	O(1D)-C(6D)	1.384(4)
O(1D)-C(12D)	1.411(4)	O(2D)-C(13D)	1.198(6)
C(1D)-C(2D)	1.390(5)	C(1D)-C(6D)	1.403(5)
C(1D)-C(7E)	1.510(5)	C(2D)-C(3D)	1.374(6)
C(3D)-C(4D)	1.393(6)	C(3D)-C(8D)	1.536(6)
C(4D)-C(5D)	1.377(6)	C(5D)-C(6D)	1.386(5)
C(5D)-C(7D)	1.521(5)	C(8D)-C(10D)	1.494(9)
C(8D)-C(9D)	1.497(9)	C(8D)-C(11D)	1.497(8)
C(12D)-C(13D)	1.503(6)	C(13D)-C(14D)	1.500(8)
C(14D)-C(17X)	1.45(2)	C(14D)-C(15D)	1.50(2)
C(14D)-C(16X)	1.46(2)	C(14D)-C(16D)	1.51(2)
C(14D)-C(15X)	1.52(2)	C(14D)-C(17D)	1.55(2)
O(1E)-C(6E)	1.388(4)	O(1E)-C(12E)	1.435(4)
O(2E)-C(13E)	1.215(5)	C(1E)-C(2E)	1.388(5)
C(1E)-C(6E)	1.397(5)	C(2E)-C(3E)	1.373(5)
C(3E)-C(4E)	1.386(5)	C(3E)-C(8E)	1.532(5)
C(4E)-C(5E)	1.394(5)	C(5E)-C(6E)	1.383(5)
C(5E)-C(7E)	1.518(5)	C(8E)-C(9E)	1.496(8)
C(8E)-C(10E)	1.503(7)	C(8E)-C(11E)	1.512(7)
C(12E)-C(13E)	1.500(5)	C(13E)-C(14E)	1.523(6)
C(14E)-C(15E)	1.513(7)	C(14E)-C(16E)	1.524(7)
C(14E)-C(17E)	1.536(7)	Cl(1)-C(1)	1.747(14)
Cl(2)-C(1)	1.642(12)		
C(6A)-O(1A)-C(12A)	117.3(3)	C(2A)-C(1A)-C(6A)	118.5(4)
C(2A)-C(1A)-C(7B)	119.3(4)	C(6A)-C(1A)-C(7B)	121.4(4)
C(1A)-C(2A)-C(3A)	122.8(4)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	116.2(4)
C(4A)-C(3A)-C(8A)	122.7(4)	C(2A)-C(3A)-C(8A)	120.8(4)
C(5A)-C(4A)-C(3A)	123.8(4)	C(4A)-C(5A)-C(6A)	117.1(4)

C(4A)-C(5A)-C(7A)	121.0(3)	G(6A)-C(5A)-C(7A)	121.8(3)
O(1A)-C(6A)-C(1A)	120.7(4)	O(1A)-C(6A)-C(5A)	117.8(3)
C(1A)-C(6A)-C(5A)	121.2(4)	C(5A)-C(7A)-C(1E)	113.9(3)
C(11A)-C(8A)-C(10A)	108.8(6)	C(11A)-C(8A)-C(9A)	107.9(5)
C(10A)-C(8A)-C(9A)	108.4(5)	C(11A)-C(8A)-C(3A)	108.3(4)
C(10A)-C(8A)-C(3A)	112.7(4)	C(9A)-C(8A)-C(3A)	110.5(4)
O(1A)-C(12A)-C(13A)	114.7(4)	O(2A)-C(13A)-C(12A)	120.9(5)
O(2A)-C(13A)-C(14A)	121.4(6)	C(12A)-C(13A)-C(14A)	117.6(5)
C(17A)-C(14A)-C(15A)	113.6(10)	C(17A)-C(14A)-C(16A)	114.5(11)
C(15A)-C(14A)-C(16A)	99.3(9)	C(17A)-C(14A)-C(13A)	109.0(6)
C(15A)-C(14A)-C(13A)	110.5(6)	C(16A)-C(14A)-C(13A)	109.6(6)
C(6B)-O(1B)-C(12B)	113.7(3)	C(6B)-C(1B)-C(2B)	118.7(4)
C(6B)-C(1B)-C(7C)	121.0(4)	C(2B)-C(1B)-C(7C)	120.2(4)
C(1B)-C(2B)-C(3B)	121.9(4)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	117.4(4)
C(4B)-C(3B)-C(8B)	122.1(4)	C(2B)-C(3B)-C(8B)	120.5(4)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	122.9(4)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.8(4)
C(4B)-C(5B)-C(7B)	120.0(4)	C(6B)-C(5B)-C(7B)	122.2(4)
C(1B)-C(6B)-O(1B)	119.6(4)	C(1B)-C(6B)-C(5B)	121.3(4)
O(1B)-C(6B)-C(5B)	119.0(3)	C(5B)-C(7B)-C(1A)	110.7(3)
C(10B)-C(8B)-C(9B)	108.5(7)	C(10B)-C(8B)-C(11B)	110.1(8)
C(9B)-C(8B)-C(11B)	106.7(8)	C(10B)-C(8B)-C(3B)	111.7(5)
C(9B)-C(8B)-C(3B)	108.0(4)	C(11B)-C(8B)-C(3B)	111.7(5)
O(1B)-C(12B)-C(13B)	109.9(4)	O(2B)-C(13B)-C(12B)	120.1(5)
O(2B)-C(13B)-C(14B)	121.1(6)	C(12B)-C(13B)-C(14B)	118.8(6)
C(17B)-C(14B)-C(15B)	112.9(8)	C(17B)-C(14B)-C(13B)	105.4(7)
C(15B)-C(14B)-C(13B)	111.5(6)	C(17B)-C(14B)-C(16B)	105.4(9)
C(15B)-C(14B)-C(16B)	109.8(9)	C(13B)-C(14B)-C(16B)	111.6(7)
C(6C)-O(1C)-C(12C)	123.3(3)	C(2C)-C(1C)-C(6C)	118.8(4)
C(2C)-C(1C)-C(7D)	121.3(4)	C(6C)-C(1C)-C(7D)	119.8(3)
C(3C)-C(2C)-C(1C)	123.1(4)	C(2C)-C(3C)-C(4C)	116.0(4)
C(2C)-C(3C)-C(8C)	122.9(4)	C(4C)-C(3C)-C(8C)	121.1(4)
C(5C)-C(4C)-C(3C)	123.6(4)	C(4C)-C(5C)-C(6C)	118.1(4)
C(4C)-C(5C)-C(7C)	117.8(4)	C(6C)-C(5C)-C(7C)	123.7(4)
O(1C)-C(6C)-C(1C)	114.9(3)	O(1C)-C(6C)-C(5C)	124.4(4)
C(1C)-C(6C)-C(5C)	120.3(4)	C(5C)-C(7C)-C(1B)	113.3(4)
C(9C)-C(8C)-C(10C)	108.7(7)	C(9C)-C(8C)-C(3C)	114.8(5)
C(10C)-C(8C)-C(3C)	110.0(7)	C(9C)-C(8C)-C(11C)	111.5(9)
C(10C)-C(8C)-C(11C)	102.4(9)	C(3C)-C(8C)-C(11C)	108.7(6)
O(1C)-C(12C)-C(13C)	116.7(4)	O(2C)-C(13C)-C(14C)	121.9(5)
O(2C)-C(13C)-C(12C)	120.2(5)	C(14C)-C(13C)-C(12C)	117.8(4)
C(17C)-C(14C)-C(13C)	111.0(5)	C(17C)-C(14C)-C(16C)	112.7(7)
C(13C)-C(14C)-C(16C)	109.8(5)	C(17C)-C(14C)-C(15C)	109.8(7)
C(13C)-C(14C)-C(15C)	107.2(5)	C(16C)-C(14C)-C(15C)	106.0(5)
C(6D)-O(1D)-C(12D)	113.0(3)	C(2D)-C(1D)-C(6D)	116.9(3)
C(2D)-C(1D)-C(7E)	121.5(3)	C(6D)-C(1D)-C(7E)	121.5(3)
C(3D)-C(2D)-C(1D)	123.4(4)	C(2D)-C(3D)-C(4D)	117.1(4)
C(2D)-C(3D)-C(8D)	122.1(4)	C(4D)-C(3D)-C(8D)	120.7(4)
C(5D)-C(4D)-C(3D)	122.5(4)	C(4D)-C(5D)-C(6D)	118.3(4)
C(4D)-C(5D)-C(7D)	119.9(4)	C(6D)-C(5D)-C(7D)	121.8(3)
C(5D)-C(6D)-O(1D)	119.4(3)	C(5D)-C(6D)-C(1D)	121.5(3)
O(1D)-C(6D)-C(1D)	119.1(3)	C(1C)-C(7D)-C(5D)	111.9(3)
C(10D)-C(8D)-C(9D)	105.9(7)	C(10D)-C(8D)-C(11D)	112.3(7)
C(9D)-C(8D)-C(11D)	107.3(6)	C(10D)-C(8D)-C(3D)	108.8(4)
C(9D)-C(8D)-C(3D)	110.9(4)	C(11D)-C(8D)-C(3D)	111.5(4)
O(1D)-C(12D)-C(13D)	110.3(4)	O(2D)-C(13D)-C(14D)	122.3(5)
O(2D)-C(13D)-C(12D)	119.6(4)	C(14D)-C(13D)-C(12D)	118.0(5)
C(17X)-C(14D)-C(13D)	114.0(14)	C(15D)-C(14D)-C(13D)	114.8(11)
C(17X)-C(14D)-C(16X)	111.4(13)	C(13D)-C(14D)-C(16X)	114.2(15)
C(15D)-C(14D)-C(16D)	113.9(13)	C(13D)-C(14D)-C(16D)	107.4(12)
C(17X)-C(14D)-C(15X)	106.4(14)	C(13D)-C(14D)-C(15X)	104.2(10)
C(16X)-C(14D)-C(15X)	105.7(15)	C(15D)-C(14D)-C(17D)	110.9(13)
C(13D)-C(14D)-C(17D)	97.9(9)	C(16D)-C(14D)-C(17D)	110.8(13)
C(6E)-O(1E)-C(12E)	116.5(3)	C(2E)-C(1E)-C(6E)	117.0(3)

C(2E)-C(1E)-C(7A)	120.3(3)	C(6E)-C(1E)-C(7A)	122.5(3)
C(3E)-C(2E)-C(1E)	123.6(3)	C(2E)-C(3E)-C(4E)	116.9(3)
C(2E)-C(3E)-C(8E)	121.8(3)	C(4E)-C(3E)-C(8E)	121.3(3)
C(3E)-C(4E)-C(5E)	122.8(3)	C(6E)-C(5E)-C(4E)	117.5(3)
C(6E)-C(5E)-C(7E)	122.9(3)	C(4E)-C(5E)-C(7E)	119.5(3)
C(5E)-C(6E)-O(1E)	118.9(3)	C(5E)-C(6E)-C(1E)	122.0(3)
O(1E)-C(6E)-C(1E)	118.7(3)	C(1D)-C(7E)-C(5E)	114.8(3)
C(9E)-C(8E)-C(10E)	106.5(6)	C(9E)-C(8E)-C(11E)	111.1(7)
C(10E)-C(8E)-C(11E)	107.9(6)	C(9E)-C(8E)-C(3E)	108.5(4)
C(10E)-C(8E)-C(3E)	112.4(4)	C(11E)-C(8E)-C(3E)	110.4(4)
O(1E)-C(12E)-C(13E)	112.1(3)	O(2E)-C(13E)-C(12E)	116.2(3)
O(2E)-C(13E)-C(14E)	120.8(4)	C(12E)-C(13E)-C(14E)	123.0(3)
C(15E)-C(14E)-C(13E)	112.2(4)	C(15E)-C(14E)-C(16E)	110.7(4)
C(13E)-C(14E)-C(16E)	107.5(4)	C(15E)-C(14E)-C(17E)	108.8(4)
C(13E)-C(14E)-C(17E)	108.6(4)	C(16E)-C(14E)-C(17E)	109.0(4)
Cl(2)-C(1)-Cl(1)	103.0(6)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 19. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 3.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1A)	72(2)	46(2)	63(2)	3(1)	1(1)	-2(1)
O(2A)	111(3)	127(4)	80(2)	-31(2)	23(2)	-34(3)
C(1A)	52(2)	57(3)	49(2)	13(2)	4(2)	-2(2)
C(2A)	55(2)	55(3)	59(2)	11(2)	7(2)	5(2)
C(3A)	62(3)	46(2)	53(2)	9(2)	13(2)	5(2)
C(4A)	54(2)	51(2)	49(2)	5(2)	9(2)	-7(2)
C(5A)	53(2)	47(2)	40(2)	5(2)	10(2)	-1(2)
C(6A)	62(2)	45(2)	45(2)	6(2)	9(2)	-2(2)
C(7A)	54(2)	48(2)	43(2)	3(2)	8(2)	2(2)
C(8A)	68(3)	49(2)	74(3)	9(2)	10(2)	4(2)
C(9A)	137(5)	64(3)	119(5)	29(3)	-17(4)	-2(3)
C(10A)	95(4)	52(3)	231(9)	10(4)	15(5)	-4(3)
C(11A)	197(8)	77(4)	112(5)	-6(4)	53(5)	25(5)
C(12A)	77(3)	63(3)	87(3)	-23(3)	-9(3)	-1(2)
C(13A)	100(4)	67(3)	62(3)	-2(2)	1(3)	-2(3)
C(14A)	143(6)	100(5)	57(3)	-18(3)	-13(3)	-13(4)
C(15A)	286(14)	217(11)	82(5)	-29(6)	-66(7)	45(10)
C(16A)	521(25)	103(7)	102(6)	-41(5)	-24(10)	-54(10)
C(17A)	215(12)	597(33)	220(13)	-300(18)	100(10)	-117(16)
O(1B)	59(2)	66(2)	50(2)	1(1)	3(1)	-2(1)
O(2B)	191(6)	293(9)	71(3)	-43(4)	-10(3)	117(6)
C(1B)	49(2)	64(3)	50(2)	6(2)	9(2)	5(2)
C(2B)	59(3)	73(3)	53(2)	5(2)	13(2)	6(2)
C(3B)	59(2)	70(3)	56(3)	-8(2)	11(2)	7(2)
C(4B)	60(3)	60(3)	60(3)	-1(2)	12(2)	1(2)
C(5B)	45(2)	60(3)	53(2)	8(2)	8(2)	4(2)
C(6B)	48(2)	60(3)	47(2)	3(2)	7(2)	4(2)
C(7B)	54(2)	67(3)	59(2)	13(2)	5(2)	-3(2)
C(8B)	87(3)	87(4)	57(3)	-15(3)	6(2)	6(3)
C(9B)	87(4)	216(9)	102(5)	-51(5)	-13(4)	6(5)
C(10B)	186(9)	337(15)	110(6)	-123(8)	81(6)	-96(9)
C(11B)	493(23)	96(6)	117(7)	-47(5)	-60(10)	-14(9)
C(12B)	65(3)	92(4)	59(3)	9(2)	-1(2)	-4(3)
C(13B)	129(5)	87(4)	65(3)	-19(3)	-17(3)	40(4)
C(14B)	153(6)	73(4)	83(4)	-13(3)	-45(4)	32(4)
C(15B)	312(14)	169(9)	133(7)	-74(6)	-126(8)	112(9)
C(16B)	96(6)	393(22)	203(12)	2(13)	-47(7)	14(9)
C(17B)	360(17)	87(5)	139(7)	6(5)	-76(9)	51(8)
O(1C)	60(2)	83(2)	54(2)	-4(2)	23(1)	-15(2)
O(2C)	222(5)	71(2)	102(3)	1(2)	81(3)	-27(3)
C(1C)	58(2)	41(2)	56(2)	2(2)	18(2)	-4(2)
C(2C)	68(3)	66(3)	56(2)	13(2)	19(2)	-2(2)
C(3C)	62(3)	91(3)	67(3)	16(3)	30(2)	6(2)
C(4C)	60(3)	89(3)	66(3)	16(3)	20(2)	3(2)
C(5C)	56(2)	63(3)	54(2)	11(2)	15(2)	-5(2)
C(6C)	54(2)	54(2)	52(2)	0(2)	18(2)	-8(2)
C(7C)	60(3)	74(3)	59(3)	12(2)	5(2)	-9(2)
C(8C)	96(4)	189(8)	99(5)	54(5)	60(4)	32(5)
C(9C)	121(6)	299(13)	83(4)	62(6)	52(4)	43(7)
C(10C)	102(6)	583(30)	147(8)	123(13)	49(6)	-65(11)
C(11C)	395(21)	276(16)	243(13)	107(12)	250(15)	203(16)
C(12C)	74(3)	84(3)	62(3)	-6(2)	29(2)	-21(3)

C(13C)	85(3)	62(3)	74(3)	2(2)	34(3)	0(2)
C(14C)	101(4)	67(3)	73(3)	-10(2)	25(3)	-15(3)
C(15C)	141(6)	162(7)	156(7)	-86(6)	93(5)	-67(5)
C(16C)	129(6)	114(5)	155(7)	-51(5)	51(5)	-55(5)
C(17C)	479(21)	120(7)	67(4)	-13(4)	-43(7)	88(10)
O(1D)	65(2)	39(1)	47(1)	-2(1)	13(1)	4(1)
O(2D)	134(3)	96(3)	92(3)	-43(2)	-5(3)	15(3)
C(1D)	49(2)	35(2)	45(2)	4(2)	8(2)	4(2)
C(2D)	62(2)	37(2)	49(2)	-2(2)	10(2)	-1(2)
C(3D)	65(2)	47(2)	52(2)	0(2)	18(2)	4(2)
C(4D)	66(3)	52(2)	58(2)	0(2)	24(2)	-5(2)
C(5D)	56(2)	41(2)	50(2)	4(2)	12(2)	0(2)
C(6D)	52(2)	37(2)	40(2)	3(2)	7(2)	7(2)
C(7D)	55(2)	40(2)	65(2)	1(2)	12(2)	-4(2)
C(8D)	89(3)	62(3)	56(3)	-11(2)	30(2)	-3(2)
C(9D)	125(6)	263(12)	173(8)	-137(8)	72(6)	-15(7)
C(10D)	347(14)	163(8)	54(4)	-10(4)	35(6)	95(9)
C(11D)	291(12)	102(5)	149(7)	-78(5)	141(8)	-78(6)
C(12D)	61(2)	40(2)	63(2)	-4(2)	13(2)	6(2)
C(13D)	84(3)	52(3)	81(3)	-17(2)	20(3)	0(2)
C(14D)	166(7)	49(3)	148(7)	-19(4)	45(6)	15(4)
C(15D)	216(29)	111(22)	196(22)	8(16)	-6(19)	99(20)
C(16D)	395(60)	149(31)	303(32)	-63(24)	180(36)	119(35)
C(17D)	239(28)	84(13)	535(92)	68(29)	152(38)	-20(15)
C(15X)	152(25)	70(16)	543(122)	-12(33)	43(41)	66(16)
C(16X)	375(83)	55(12)	112(18)	16(10)	-13(26)	34(28)
C(17X)	271(48)	59(11)	155(22)	-45(12)	47(22)	12(17)
O(1E)	46(1)	41(1)	56(2)	-10(1)	11(1)	0(1)
O(2E)	64(2)	80(2)	67(2)	-26(2)	13(2)	-14(2)
C(1E)	44(2)	42(2)	48(2)	2(2)	9(2)	2(2)
C(2E)	61(2)	35(2)	50(2)	4(2)	8(2)	3(2)
C(3E)	58(2)	36(2)	48(2)	-2(2)	9(2)	-3(2)
C(4E)	62(2)	40(2)	43(2)	0(2)	6(2)	-1(2)
C(5E)	46(2)	37(2)	43(2)	3(2)	7(2)	0(2)
C(6E)	43(2)	37(2)	47(2)	-5(2)	10(2)	-1(2)
C(7E)	50(2)	38(2)	48(2)	3(2)	7(2)	3(2)
C(8E)	91(3)	37(2)	55(2)	-5(2)	14(2)	0(2)
C(9E)	178(8)	143(7)	251(11)	-129(7)	117(8)	-110(6)
C(10E)	234(8)	59(3)	69(3)	-18(3)	45(4)	-5(4)
C(11E)	265(10)	67(4)	127(6)	-41(4)	-65(6)	80(5)
C(12E)	47(2)	43(2)	48(2)	-3(2)	11(2)	-4(2)
C(13E)	58(2)	44(2)	49(2)	-4(2)	16(2)	-2(2)
C(14E)	68(3)	62(3)	67(3)	-14(2)	23(2)	4(2)
C(15E)	75(3)	76(3)	82(3)	3(3)	17(3)	23(3)
C(16E)	74(3)	110(4)	89(4)	8(3)	39(3)	4(3)
C(17E)	114(5)	98(4)	104(4)	-42(4)	27(4)	20(4)
Cl(1)	274(4)	222(4)	233(4)	-14(3)	10(3)	66(3)
Cl(2)	330(7)	675(16)	319(7)	56(8)	-89(6)	177(9)
C(1)	521(26)	139(8)	121(7)	-3(6)	125(12)	69(12)

Table 20. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 3.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	8595(2)	-2445(3)	3051(2)	69
H(4A)	6453(2)	-2417(2)	2566(1)	62
H(7A1)	6226(2)	-320(2)	2561(1)	59
H(7A2)	5789(2)	-1126(2)	2524(1)	59
H(9A1)	7810(15)	-3711(26)	3573(3)	171
H(9A2)	8483(8)	-3617(24)	3335(10)	171
H(9A3)	8039(23)	-4420(5)	3265(8)	171
H(10A)	6562(14)	-3679(29)	3024(13)	194
H(10B)	6805(5)	-4446(4)	2772(24)	194
H(10C)	6470(10)	-3711(30)	2441(10)	194
H(11A)	7760(28)	-4350(7)	2332(14)	189
H(11B)	8329(8)	-3650(31)	2441(10)	189
H(11C)	7572(21)	-3507(26)	2078(5)	189
H(12A)	7943(3)	874(3)	3198(2)	96
H(12B)	8216(3)	57(3)	3459(2)	96
H(15A)	8369(33)	1000(16)	4598(31)	319
H(15B)	8426(29)	366(64)	4185(3)	319
H(15C)	7991(8)	160(47)	4592(31)	319
H(16A)	7364(12)	2081(26)	3853(54)	386
H(16B)	8014(70)	1657(16)	3692(39)	386
H(16C)	8086(65)	1919(42)	4250(16)	386
H(17A)	6798(85)	421(44)	4442(82)	504
H(17B)	6442(30)	1090(148)	4062(23)	504
H(17C)	6966(61)	1330(114)	4570(64)	504
H(2B)	9008(2)	388(3)	1287(2)	74
H(4B)	8506(2)	-1447(3)	2077(2)	73
H(7B1)	8966(2)	-503(3)	3257(2)	74
H(7B2)	9299(2)	-1302(3)	3102(2)	74
H(9B1)	7350(12)	-776(38)	1196(10)	211
H(9B2)	7370(13)	-1006(29)	645(16)	211
H(9B3)	7636(4)	-155(12)	856(24)	211
H(10D)	8631(44)	-374(30)	573(28)	305
H(10E)	8649(47)	-1302(38)	475(22)	305
H(10F)	9273(5)	-897(67)	873(8)	305
H(11D)	7985(66)	-2015(6)	1427(44)	384
H(11E)	8754(10)	-2155(16)	1322(54)	384
H(11F)	8066(78)	-2176(15)	879(11)	384
H(12C)	10544(3)	811(3)	3048(2)	90
H(12D)	10309(3)	-79(3)	3121(2)	90
H(15D)	10730(34)	841(63)	4679(27)	349
H(15E)	11194(72)	1443(14)	4442(7)	349
H(15F)	11565(42)	702(54)	4751(21)	349
H(16D)	11483(21)	766(76)	3502(27)	366
H(16E)	11802(49)	-46(10)	3748(48)	366
H(16F)	12021(30)	770(75)	4028(24)	366
H(17D)	10809(65)	-752(10)	3849(4)	325
H(17E)	10570(44)	-552(8)	4346(39)	325
H(17F)	11393(19)	-664(16)	4352(39)	325
H(2C)	8679(2)	2635(3)	242(2)	75
H(4C)	10256(2)	1706(3)	1291(2)	85
H(7C1)	9535(2)	1730(3)	2278(2)	79
H(7C2)	10142(2)	1333(3)	2056(2)	79
H(9C1)	9317(29)	2079(30)	-310(12)	244