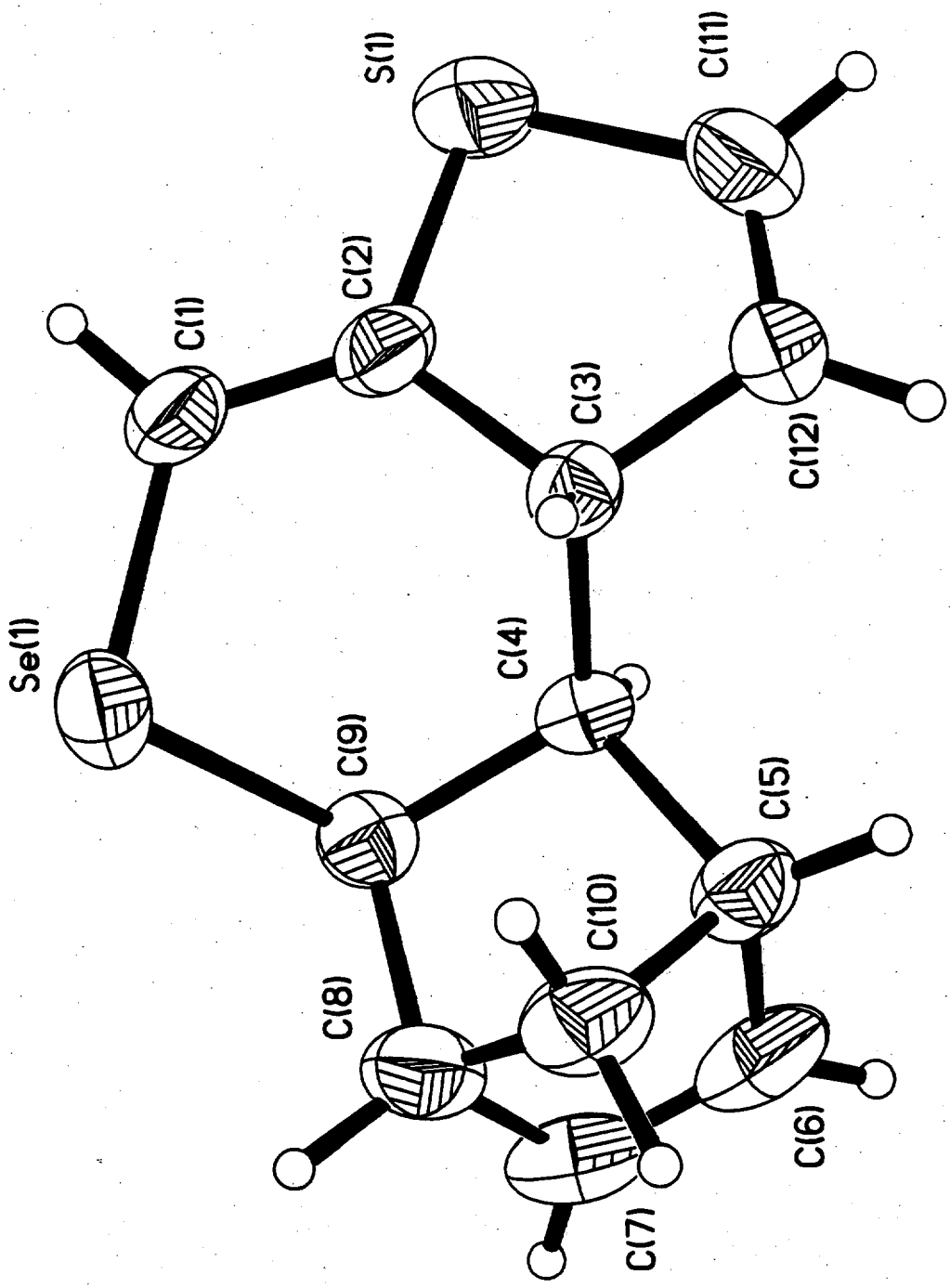
Crystal Structure of **14**



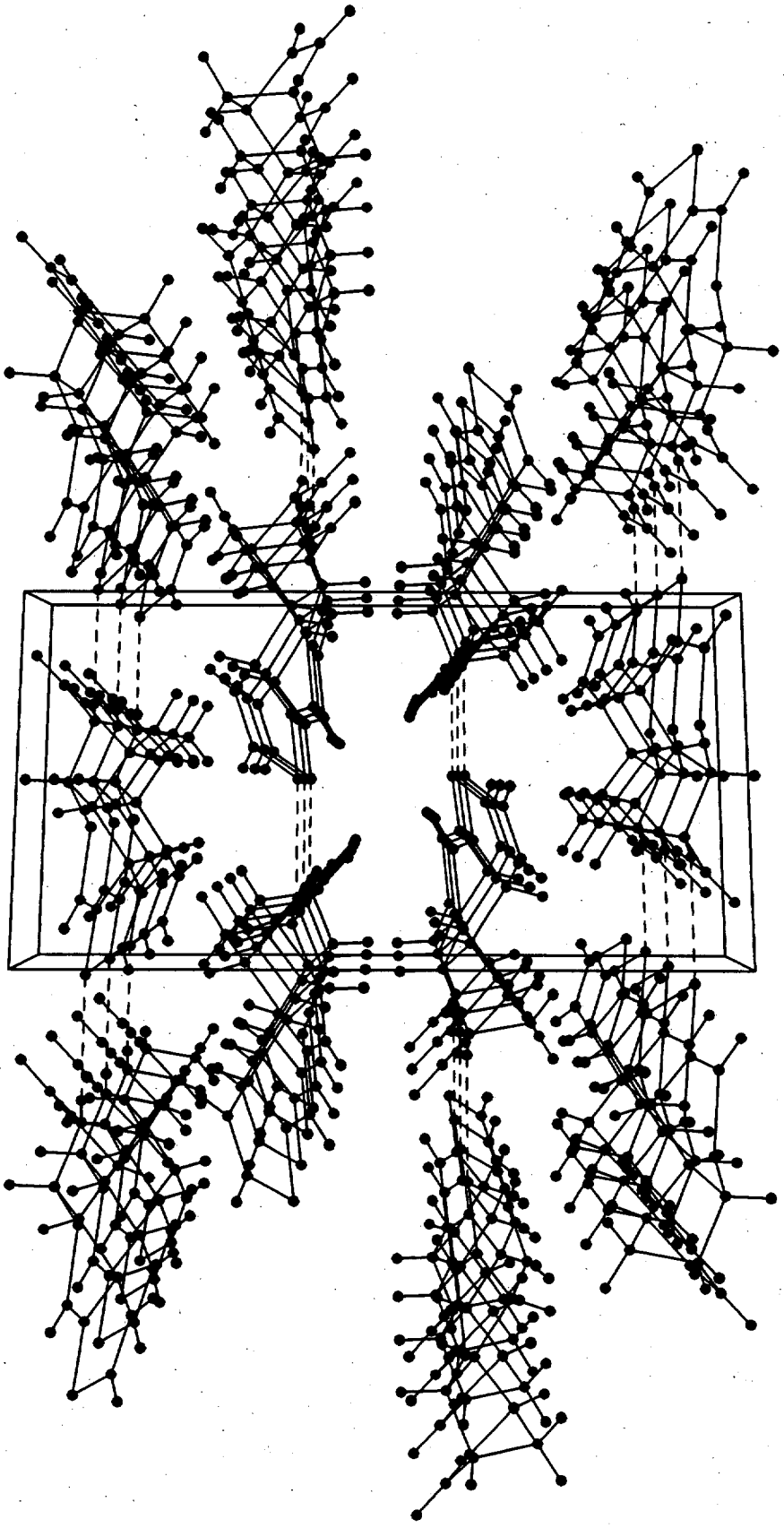


Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	rz43
Empirical formula	$C_{12}H_{12}SSe$
Formula weight	267.24
Temperature	297(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/n$
Unit cell dimensions	a = 7.0649(14) Å alpha = 90° b = 17.227(3) Å beta = 110.72(3)° c = 9.546(2) Å gamma = 90°
Volume, Z	1086.6(4) $Å^3$, 4
Density (calculated)	1.634 Mg/m^3
Absorption coefficient	3.603 mm^{-1}
F(000)	536
Crystal size	0.44 x 0.30 x 0.24 mm
θ range for data collection	2.36 to 24.99°
Limiting indices	$-8 \le h \le 0$, $0 \le k \le 20$, $-10 \le l \le 11$
Reflections collected	2083
Independent reflections	1923 (R_{int} = 0.0408)
Absorption correction	Semi-empirical from psi-scans
Max. and min. transmission	0.9619 and 0.6337
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	1923 / 0 / 128
Goodness-of-fit on F^2	1.033
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0412, wR2 = 0.1209
R indices (all data)	R1 = 0.0713, wR2 = 0.1506
Extinction coefficient	0.0040(16)
Largest diff. peak and hole	0.365 and -0.351 $eÅ^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 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)
Se(1)	9599(1)	1021(1)	3684(1)	53(1)
S(1)	12058(3)	1094(1)	-45(2)	61(1)
C(1)	9845(9)	919(3)	1791(6)	48(1)
C(2)	11477(8)	1197(3)	1591(6)	42(1)
C(3)	13086(7)	1651(3)	2794(6)	35(1)
C(4)	14031(7)	1176(3)	4255(5)	32(1)
C(5)	15299(8)	1686(3)	5618(6)	43(1)
C(6)	16432(10)	1121(4)	6849(7)	60(2)
C(7)	15070(11)	798(4)	7337(7)	60(2)
C(8)	13046(10)	1136(3)	6446(6)	51(2)
C(9)	12462(8)	796(3)	4856(6)	38(1)
C(10)	13641(8)	1957(3)	6207(6)	49(1)
C(11)	14268(10)	1637(4)	730(7)	58(2)
C(12)	14612(8)	1878(3)	2098(6)	48(1)

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

Se(1)-C(1)	1.883(6)	Se(1)-C(9)	1.973(5)
S(1)-C(11)	1.745(7)	S(1)-C(2)	1.758(6)
C(1)-C(2)	1.324(8)	C(2)-C(3)	1.516(7)
C(3)-C(12)	1.505(7)	C(3)-C(4)	1.550(6)
C(4)-C(9)	1.561(7)	C(4)-C(5)	1.563(7)
C(5)-C(6)	1.518(8)	C(5)-C(10)	1.540(7)
C(6)-C(7)	1.330(10)	C(7)-C(8)	1.499(9)
C(8)-C(9)	1.540(7)	C(8)-C(10)	1.514(8)
C(11)-C(12)	1.308(8)		
C(1)-Se(1)-C(9)	95.9(2)	C(11)-S(1)-C(2)	91.4(3)
C(2)-C(1)-Se(1)	119.0(4)	C(1)-C(2)-C(3)	122.4(5)
C(1)-C(2)-S(1)	125.5(4)	C(3)-C(2)-S(1)	112.1(4)
C(2)-C(3)-C(12)	105.2(5)	C(2)-C(3)-C(4)	112.2(4)
C(12)-C(3)-C(4)	112.7(4)	C(3)-C(4)-C(9)	114.6(4)
C(3)-C(4)-C(5)	112.9(4)	C(9)-C(4)-C(5)	101.7(4)
C(6)-C(5)-C(10)	99.9(5)	C(6)-C(5)-C(4)	105.9(4)
C(10)-C(5)-C(4)	100.8(4)	C(7)-C(6)-C(5)	106.9(6)
C(6)-C(7)-C(8)	107.6(6)	C(7)-C(8)-C(9)	106.3(5)
C(7)-C(8)-C(10)	100.9(5)	C(9)-C(8)-C(10)	101.5(4)
C(8)-C(9)-C(4)	103.0(4)	C(8)-C(9)-Se(1)	110.3(4)
C(4)-C(9)-Se(1)	115.3(3)	C(8)-C(10)-C(5)	93.4(4)
C(12)-C(11)-S(1)	114.5(5)	C(11)-C(12)-C(3)	116.8(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Se(1)	37(1)	68(1)	53(1)	12(1)	16(1)	-7(1)
S(1)	69(1)	75(1)	37(1)	-7(1)	18(1)	-10(1)
C(1)	43(3)	55(3)	36(3)	3(2)	1(2)	-16(3)
C(2)	40(3)	45(3)	33(3)	6(2)	1(2)	-5(2)
C(3)	34(3)	32(2)	36(3)	0(2)	8(2)	-2(2)
C(4)	34(3)	33(3)	26(2)	-1(2)	7(2)	4(2)
C(5)	41(3)	47(3)	37(3)	-11(2)	10(2)	-1(2)
C(6)	48(4)	77(4)	40(3)	-16(3)	-4(3)	13(3)
C(7)	74(5)	66(4)	31(3)	2(3)	8(3)	12(3)
C(8)	58(4)	63(4)	37(3)	-3(3)	21(3)	2(3)
C(9)	43(3)	31(2)	38(3)	4(2)	13(2)	0(2)
C(10)	54(3)	50(3)	40(3)	-14(3)	16(3)	7(3)
C(11)	59(4)	72(4)	53(4)	10(3)	31(3)	-2(3)
C(12)	40(3)	58(3)	44(3)	9(3)	12(3)	-9(3)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	8834(9)	676(3)	1009(6)	58
H(3A)	12473(7)	2123(3)	3020(6)	42
H(4A)	14901(7)	770(3)	4090(5)	38
H(5A)	16115(8)	2097(3)	5402(6)	52
H(6A)	17814(10)	1020(4)	7196(7)	72
H(7A)	15327(11)	429(4)	8093(7)	72
H(8A)	12010(10)	1093(3)	6905(6)	62
H(9A)	12669(8)	233(3)	4924(6)	45
H(10A)	14171(8)	2252(3)	7129(6)	58
H(10B)	12560(8)	2240(3)	5465(6)	58
H(11A)	15132(10)	1747(4)	212(7)	70
H(12A)	15744(8)	2174(3)	2614(6)	58

Table 6. Observed and calculated structure factors for 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
2	0	0	818	806	3	4	12	0	239	240	5	2	3	1	79	86	4	0	9	1	261	257	2	1	16	1	96	110	9
4	0	0	547	557	4	5	12	0	233	235	6	3	3	1	696	678	4	1	9	1	277	274	3	2	16	1	209	193	5
6	0	0	98	97	8	6	12	0	68	38	20	4	3	1	193	183	4	2	9	1	337	350	4	3	16	1	73	79	15
1	1	0	502	488	3	1	13	0	164	165	5	5	3	1	411	413	4	3	9	1	288	298	4	4	16	1	0	29	1
2	1	0	475	474	3	2	13	0	163	152	5	6	3	1	154	162	6	4	9	1	284	287	4	-4	17	1	0	19	1
3	1	0	358	364	3	3	13	0	72	53	12	7	3	1	218	218	5	5	9	1	182	179	6	-3	17	1	57	82	23
4	1	0	522	519	4	4	13	0	192	179	6	-7	4	1	192	181	6	6	9	1	172	157	7	-2	17	1	58	74	21
5	1	0	246	244	4	5	13	0	91	85	12	-6	4	1	214	213	5	-7	10	1	160	154	9	-1	17	1	0	16	1
6	1	0	248	244	5	6	13	0	145	147	9	-5	4	1	330	328	4	-6	10	1	116	126	11	0	17	1	36	28	30
7	1	0	73	55	13	0	14	0	543	539	4	-4	4	1	161	160	4	-5	10	1	252	257	5	1	17	1	241	242	5
0	2	0	229	200	1	1	14	0	57	57	14	-3	4	1	817	808	5	-4	10	1	74	99	12	2	17	1	20	49	19
1	2	0	1041	1017	3	2	14	0	162	173	6	-2	4	1	51	63	7	-3	10	1	589	595	5	3	17	1	168	161	7
2	2	0	95	96	3	3	14	0	178	172	5	-1	4	1	153	140	2	-2	10	1	153	144	4	4	17	1	0	28	1
3	2	0	796	812	4	4	14	0	82	81	13	0	4	1	140	135	2	-1	10	1	379	375	3	-3	18	1	82	99	15
4	2	0	212	223	3	5	14	0	56	49	25	1	4	1	287	287	2	0	10	1	41	35	9	-2	18	1	76	77	14
5	2	0	481	474	4	1	15	0	263	251	4	2	4	1	570	555	4	1	10	1	60	73	9	-1	18	1	61	16	17
6	2	0	44	14	22	2	15	0	25	20	25	3	4	1	382	364	4	2	10	1	305	310	3	0	18	1	78	93	9
7	2	0	308	287	5	3	15	0	165	170	6	4	4	1	290	293	4	3	10	1	161	164	5	1	18	1	80	44	12
1	3	0	352	344	3	4	15	0	129	122	8	5	4	1	399	394	4	4	10	1	46	6	20	2	18	1	80	90	14
2	3	0	169	179	3	5	15	0	38	53	37	6	4	1	214	211	5	5	10	1	180	170	6	3	18	1	40	41	40
3	3	0	143	135	3	0	16	0	136	135	6	7	4	1	158	163	7	6	10	1	0	31	1	-3	19	1	34	26	33
4	3	0	739	744	5	1	16	0	56	38	17	-7	5	1	51	25	26	-6	11	1	213	201	7	-2	19	1	192	187	7
5	3	0	47	76	18	2	16	0	126	134	8	-6	5	1	133	142	8	-5	11	1	63	78	19	-1	19	1	88	76	12
6	3	0	349	339	4	3	16	0	148	135	7	-5	5	1	162	164	5	-4	11	1	281	289	5	0	19	1	17	27	17
7	3	0	0	22	1	4	16	0	147	145	8	-4	5	1	646	622	5	-3	11	1	46	2	18	1	19	1	0	35	1
0	4	0	2446	2599	3	1	17	0	63	64	16	-3	5	1	110	114	5	-2	11	1	377	363	4	2	19	1	41	55	41
1	4	0	142	145	2	2	17	0	78	69	13	-2	5	1	1086	1085	4	-1	11	1	40	60	18	-1	20	1	131	127	10
2	4	0	415	421	3	3	17	0	60	71	22	-1	5	1	444	444	3	0	11	1	242	239	4	0	20	1	0	28	1
3	4	0	563	562	4	4	17	0	126	104	9	0	5	1	383	384	2	1	11	1	464	474	4	1	20	1	42	32	41
4	4	0	313	322	4	0	18	0	190	184	6	1	5	1	123	133	3	2	11	1	43	14	15	-8	0	2	249	237	6
5	4	0	208	198	4	1	18	0	28	60	28	2	5	1	329	337	3	3	11	1	75	87	10	-6	0	2	233	245	4
6	4	0	67	67	13	2	18	0	53	11	23	3	5	1	56	46	9	4	11	1	89	88	10	-4	0	2	638	672	5
7	4	0	200	195	5	3	18	0	87	102	15	4	5	1	237	242	4	5	11	1	152	150	7	-2	0	2	97	86	3
1	5	0	1412	1408	3	1	19	0	134	117	8	5	5	1	18	30	18	6	11	1	109	114	12	0	0	2	75	74	2
2	5	0	104	106	3	2	19	0	0	28	1	6	5	1	260	236	5	-6	12	1	163	157	8	2	0	2	942	922	4
3	5	0	435	435	4	0	20	0	66	49	19	7	5	1	41	42	41	-5	12	1	0	9	1	4	0	2	432	420	4
4	5	0	98	103	8	1	20	0	66	48	20	-7	6	1	242	243	6	-4	12	1	64	82	14	6	0	2	387	387	5
5	5	0	326	323	4	-7	0	1	172	166	6	-6	6	1	265	250	5	-3	12	1	55	52	15	-8	1	2	0	60	1
6	5	0	0	44	1	-5	0	1	349	337	3	-5	6	1	379	388	4	-2	12	1	108	106	6	-7	1	2	230	239	5
7	5	0	63	70	18	-3	0	1	1173	1188	4	-4	6	1	42	55	23	-1	12	1	64	64	9	-6	1	2	150	145	6
0	6	0	1033	1039	3	-1	0	1	79	75	2	-3	6	1	636	638	4	0	12	1	317	324	2	-5	1	2	555	585	4
1	6	0	196	189	2	1	0	1	262	254	2	-2	6	1	42	13	10	1	12	1	139	139	5	-4	1	2	143	151	4
2	6	0	307	314	3	3	0	1	499	481	3	-1	6	1	519	508	3	2	12	1	581	592	5	-3	1	2	161	173	3
3	6	0	432	433	4	5	0	1	408	404	4	0	6	1	409	422	4	3	12	1	156	156	5	-2	1	2	532	538	4
4	6	0	355	373	4	7	0	1	192	195	6	1	6	1	40	40	8	4	12	1	227	224	5	-1	1	2	321	317	2
5	6	0	311	309	5	-8	1	1	111	114	10	2	6	1	776	773	4	5	12	1	0	5	1	0	1	2	89	88	2
6	6	0	45	22	32	-7	1	1	143	142	7	3	6	1	70	64	7	6	12	1	154	132	8	1	1	2	218	218	2
7	6	0	158	157	8	-6	1	1	272	275	4	4	6	1	149	148	5	-6	13	1	55	30	29	2	1	2	222	215	3
1	7	0	162	155	3	-5	1	1	197	195	4	5	6	1	245	235	5	-5	13	1	111	103	10	3	1	2	580	574	4
2	7	0	80	40	6	-4	1	1	669	665	4	6	6	1	200	192	6	-4	13	1	100	81	9	4	1	2	297	292	4
3	7	0	137	134	4	-3	1	1	87	76	4	7	6	1	148	167	9	-3	13	1	81	96	11	5	1	2	184	167	5
4	7	0	634	662	5	-2	1	1	1051	1041	3	-7	7	1	213	205	7	-2	13	1	263	263	4	6	1	2	204	208	5
5	7	0	79	83	12	-1	1	1	445	444	3	-6	7	1	93	64	11	-1	13	1	149	148	5	7	1	2	223	220	6
6	7	0	270	266	6	0	1	1	685	688	10	-5	7	1	20	26	20	0	13	1	34	38	18	-8	2	2	64	55	19
7	7	0	0	18	1	1	1	1	915	897	3	-4	7	1	158	157	5	1	13	1	370	362	4	-7	2	2	114	126	9
0	8	0	369	378	3	2	1	1	146	120	3	-3	7	1	207	212	4	2	13	1	192	189	4	-6	2	2	54	50	17
1	8	0	78	76	5	3	1	1	462	440	3	-2	7	1	67	54	6	3	13	1	344	337	4	-5	2	2	311	321	4
2	8	0	102	97	5	4	1	1	242	250	3	-1	7	1	475	465	3	4	13	1	206	213	5	-4	2	2	227	225	3
3	8	0	526	522	4	5	1	1	301	298	4	0	7	1	278	279	7	5	13	1	186	181	6	-3	2	2	468	454	4
4	8	0	42	66	26	6	1	1	287	286	5	1	7	1	1162	1167	4	-5	14	1	126	109	9	-2	2	2	70	68	5
5	8	0	285	281	5	7	1	1	214	213	6	2	7	1	23	20	22	-4	14	1	0	45	1	-1	2	2	1809	1752	4
6	8	0	28	17	27	-8	2	1	164	160	7	3	7	1	328	329	3	-3	14	1	295	295	5	0	2	2	83	81	4
7	8	0	235	223	7	-7	2	1	134	137	7	4	7	1	63	32	11	-2	14	1	120	126	7	1	2	2	534	538	3
1	9	0	754	777	5	-6	2	1	312	319	4	5	7	1	290	315	5	-1	14	1	152	151	6	2	2	2	509	477	4
2	9	0	213	207	3	-5	2	1	207	199	4	6	7	1	61	49	22	0	14	1	148	151	4	3	2	2	565	563	4
3	9	0	301	303	4	-4	2	1	220	218	3	7	7	1	130	128	10	1	14	1	97	95	8	4	2	2	131	130	5
4	9	0	180	172	5	-3	2	1	215	219	3	-7	8	1	122	129	12	2	14	1	63	51	13	5	2	2	72	74	10
5	9	0	245	262	5	-2	2	1	130	131	3	-6	8	1	232	237	6	3	14	1	89	115	11	6	2	2	87	91	10
6	9	0	120	115	10	-1	2	1	284	282	2	-5	8	1	206	206	5	4	14	1	86	86	12	7	2	2	0	23	1
7	9	0	77	72	19	0	2	1	1029	1008	11	-4	8	1	0	17	1	5	14	1	162	140	8	-8	3	2	94	108	12
0	10	0	1072	1071	5	1	2	1	79	80	3	-3	8	1	371	366	3	-5	15	1	84	70	15	-7	3	2	25	67	25
1	10	0	26	51	26	2	2	1	1302	1319	4	-2	8	1	155	155	4	-4	15	1	175	166	7	-6	3	2	108	105	8
2	10	0	339	341	3	3	2	1	0	11	1	-1	8	1	106	114	4	-3	15	1	0	48	1	-5	3	2	303	310	4
3	10	0	20	35	19	4	2	1	314	322	3	0	8	1	348	362	8	-2	15	1	363	367	4	-4	3	2	160	160	4
4	10	0	237	239	4	5	2	1	140	141	5	1	8	1	42	46	11	-1	15	1	111	123	7	-3	3	2	31	35	20
5	10	0	104	83	9	6	2	1	272	265	5	2	8	1	872	847	5	0	15	1	111	102	13	-2	3	2	892	896	4
6	10	0	0	33	1	7	2	1	83	79	13	3	8	1	208	208	4	1	15	1	103	99	7	-1	3	2	180	186	2
1	11	0	257	260	3	-8	3	1	50	45	30	4	8	1	397	401	4	2	15	1	73	47	11	0	3	2	761	774	16
2	11	0	64	79	11	-7	3	1	231	227	5	5	8	1	218	232	5	3	15	1	132	143	8	1	3	2	265	261	2
3	11	0	221	224	4	-6	3	1	215	213	4	6	8	1	219	215	7	4	15	1	0	36	1	2	3	2	692	694	5
4	11	0	379	386	4	-5	3	1	27	29	26	-7	9	1	63	52	25	5	15	1	48	19	42	3	3	2	403	393	4
5	11	0	100	90	10	-4	3	1	248	246	3	-6	9	1	35	65	35	-5	16	1	58	79	26	4	3	2	379	376	4
6	11	0	114	123	12	-3	3	1	282	267	3	-5	9	1	30	33	29	-4	16	1	0	13	1	5	3	2	0	16	1
0	12	0	114	109	5	-2	3	1	613	600	4	-4	9	1	321	311	4	-3	16	1	85	114	13	6	3	2	168	177	6
1	12	0	76	86	8	-1	3	1	875	873	3	-3	9	1	73	76	9	-2	16	1	48	4	23	7	3	2	111	95	10
2	12	0	190	186	4	0	3	1	275	275	1	-2	9	1	561	589	4	-1	16	1	147	140	6	-8	4	2	166	166	8
3	12	0	289	290	4	1	3	1	1628	1574	3	-1	9	1	368	381	3	0	16	1	158	156	4	-7	4	2	51	22	21

Table 6. Observed and calculated structure factors for 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
-6	4	2	179	183	5	-5	10	2	59	13	17	2	17	2	97	85	10	-5	5	3	95	103	8	-1	11	3	126	136	6
-5	4	2	288	292	4	-4	10	2	372	375	4	3	17	2	21	2	20	-4	5	3	0	44	1	0	11	3	275	265	3
-4	4	2	569	575	4	-3	10	2	0	9	1	-4	18	2	91	81	15	-3	5	3	289	277	3	1	11	3	269	264	4
-3	4	2	138	137	4	-2	10	2	94	75	6	-3	18	2	84	90	15	-2	5	3	24	25	23	2	11	3	121	125	6
-2	4	2	400	378	3	-1	10	2	41	61	16	-2	18	2	171	170	7	-1	5	3	42	35	10	3	11	3	106	107	8
-1	4	2	573	587	4	0	10	2	37	21	11	-1	18	2	141	136	8	0	5	3	902	908	3	4	11	3	93	106	11
0	4	2	175	187	1	1	10	2	152	146	4	0	18	2	42	50	41	1	5	3	283	275	3	5	11	3	0	30	1
1	4	2	342	336	3	2	10	2	460	461	4	1	18	2	104	115	11	2	5	3	522	527	4	-6	12	3	96	87	13
2	4	2	691	702	4	3	10	2	0	26	1	2	18	2	0	23	1	3	5	3	65	65	10	-5	12	3	33	35	32
3	4	2	245	243	3	4	10	2	271	273	4	-3	19	2	0	10	1	4	5	3	439	443	5	-4	12	3	287	284	5
4	4	2	328	327	4	5	10	2	78	57	13	-2	19	2	0	39	1	5	5	3	119	122	9	-3	12	3	61	60	15
5	4	2	61	25	13	6	10	2	176	167	7	-1	19	2	14	8	14	6	5	3	146	147	9	-2	12	3	259	258	4
6	4	2	247	251	5	-7	11	2	104	101	13	0	19	2	0	33	1	-8	6	3	56	73	31	-1	12	3	37	67	37
7	4	2	86	81	14	-6	11	2	41	14	41	1	19	2	72	38	15	-7	6	3	220	210	6	0	12	3	186	186	4
-8	5	2	81	16	15	-5	11	2	193	197	6	2	19	2	0	21	1	-6	6	3	90	109	12	1	12	3	33	41	32
-7	5	2	292	295	5	-4	11	2	127	124	7	-1	20	2	51	24	35	-5	6	3	144	127	6	2	12	3	76	79	10
-6	5	2	0	40	1	-3	11	2	139	122	6	0	20	2	40	21	37	-4	6	3	350	363	4	3	12	3	17	9	16
-5	5	2	567	589	5	-2	11	2	400	417	4	-7	0	3	429	445	4	-3	6	3	192	187	4	4	12	3	137	119	7
-4	5	2	124	125	6	-1	11	2	72	62	8	-5	0	3	31	19	31	-2	6	3	422	413	3	5	12	3	81	41	14
-3	5	2	74	83	7	0	11	2	252	255	5	-3	0	3	455	444	3	-1	6	3	298	303	3	-6	13	3	71	82	22
-2	5	2	38	25	12	1	11	2	79	94	8	-1	0	3	238	240	2	0	6	3	533	531	6	-5	13	3	226	235	6
-1	5	2	128	129	3	2	11	2	367	364	4	1	0	3	758	764	5	1	6	3	308	314	3	-4	13	3	0	12	1
0	5	2	187	181	4	3	11	2	244	245	4	3	0	3	506	516	4	2	6	3	239	236	3	-3	13	3	308	294	4
1	5	2	168	170	3	4	11	2	165	154	5	5	0	3	284	285	5	3	6	3	269	279	4	-2	13	3	139	137	6
2	5	2	37	37	12	5	11	2	119	127	9	-8	1	3	225	210	5	4	6	3	239	227	4	-1	13	3	162	157	5
3	5	2	436	462	4	-6	12	2	0	13	1	-7	1	3	99	109	9	5	6	3	244	224	6	0	13	3	249	252	5
4	5	2	91	84	7	-5	12	2	87	94	12	-6	1	3	155	153	6	6	6	3	113	109	12	1	13	3	179	178	5
5	5	2	256	251	4	-4	12	2	8	25	7	-5	1	3	424	425	4	-7	7	3	43	99	42	2	13	3	0	30	1
6	5	2	102	104	10	-3	12	2	173	172	5	-4	1	3	212	216	3	-6	7	3	27	10	27	3	13	3	29	45	29
-7	6	2	49	53	30	-2	12	2	85	68	8	-3	1	3	574	565	4	-5	7	3	264	257	5	4	13	3	131	109	8
-6	6	2	174	172	7	-1	12	2	569	575	5	-2	1	3	103	100	4	-4	7	3	65	59	12	-6	14	3	98	112	15
-5	6	2	206	214	5	0	12	2	87	82	5	-1	1	3	253	245	2	-3	7	3	780	788	5	-5	14	3	33	38	32
-4	6	2	440	445	4	1	12	2	261	260	4	0	1	3	887	863	30	-2	7	3	284	283	3	-4	14	3	66	104	19
-3	6	2	356	346	4	2	12	2	0	4	1	1	1	3	490	487	4	-1	7	3	184	192	3	-3	14	3	55	75	21
-2	6	2	208	197	3	3	12	2	207	210	5	2	1	3	358	349	3	0	7	3	0	19	1	-2	14	3	83	99	11
-1	6	2	637	670	4	4	12	2	0	6	1	3	1	3	191	188	4	1	7	3	140	154	4	-1	14	3	164	151	5
0	6	2	16	15	15	5	12	2	79	66	14	4	1	3	410	418	4	2	7	3	112	114	5	0	14	3	64	54	8
1	6	2	56	61	7	-6	13	2	112	104	12	5	1	3	63	35	14	3	7	3	182	186	4	1	14	3	252	257	5
2	6	2	781	773	4	-5	13	2	170	145	7	6	1	3	161	148	7	4	7	3	87	64	9	2	14	3	0	13	1
3	6	2	244	251	3	-4	13	2	58	79	19	-8	2	3	141	150	8	5	7	3	66	89	18	3	14	3	168	151	6
4	6	2	319	303	4	-3	13	2	82	69	11	-7	2	3	66	81	15	6	7	3	60	37	25	4	14	3	48	15	29
5	6	2	85	64	10	-2	13	2	268	273	4	-6	2	3	173	160	5	-7	8	3	184	164	7	-5	15	3	0	22	1
6	6	2	196	195	6	-1	13	2	152	160	5	-5	2	3	57	72	12	-6	8	3	231	228	6	-4	15	3	29	49	28
-7	7	2	71	60	19	0	13	2	267	255	3	-4	2	3	607	637	4	-5	8	3	67	85	15	-3	15	3	203	197	6
-6	7	2	14	23	14	1	13	2	67	74	11	-3	2	3	184	185	3	-4	8	3	544	554	5	-2	15	3	0	21	1
-5	7	2	53	13	17	2	13	2	82	97	10	-2	2	3	957	933	4	-3	8	3	17	7	17	-1	15	3	52	7	19
-4	7	2	140	154	6	3	13	2	92	92	9	-1	2	3	223	215	2	-2	8	3	402	411	3	0	15	3	269	264	3
-3	7	2	222	205	4	4	13	2	79	86	13	0	2	3	627	623	21	-1	8	3	124	128	4	1	15	3	135	130	6
-2	7	2	778	810	5	5	13	2	62	22	19	1	2	3	90	80	4	0	8	3	436	447	3	2	15	3	99	113	10
-1	7	2	145	148	3	-6	14	2	115	118	13	2	2	3	276	271	3	1	8	3	118	128	4	3	15	3	0	41	1
0	7	2	722	745	3	-5	14	2	103	77	11	3	2	3	106	103	7	2	8	3	169	174	4	4	15	3	180	172	7
1	7	2	53	53	8	-4	14	2	225	212	5	4	2	3	263	260	4	3	8	3	62	59	11	-5	16	3	0	4	1
2	7	2	685	702	5	-3	14	2	140	148	7	5	2	3	94	94	10	4	8	3	116	108	7	-4	16	3	65	66	20
3	7	2	56	20	10	-2	14	2	149	148	6	6	2	3	194	191	6	5	8	3	139	136	7	-3	16	3	0	13	1
4	7	2	296	299	4	-1	14	2	135	140	6	-8	3	3	77	87	17	6	8	3	35	54	35	-2	16	3	140	130	8
5	7	2	95	96	9	0	14	2	56	49	13	-7	3	3	107	112	9	-7	9	3	103	92	13	-1	16	3	49	80	26
6	7	2	103	119	12	1	14	2	134	134	6	-6	3	3	80	96	11	-6	9	3	176	160	7	0	16	3	92	85	24
-7	8	2	0	11	1	2	14	2	159	163	6	-5	3	3	434	433	4	-5	9	3	207	213	5	1	16	3	87	106	12
-6	8	2	84	74	13	3	14	2	92	87	10	-4	3	3	256	257	4	-4	9	3	61	77	15	2	16	3	68	60	15
-5	8	2	231	228	5	4	14	2	137	132	8	-3	3	3	842	814	5	-3	9	3	131	135	6	3	16	3	51	41	27
-4	8	2	306	306	4	5	14	2	40	55	40	-2	3	3	296	294	3	-2	9	3	61	48	10	-4	17	3	49	42	39
-3	8	2	144	152	5	-5	15	2	210	193	6	-1	3	3	224	227	2	-1	9	3	219	217	3	-3	17	3	226	210	6
-2	8	2	365	364	4	-4	15	2	14	22	14	0	3	3	546	547	13	0	9	3	604	621	3	-2	17	3	138	142	8
-1	8	2	846	859	5	-3	15	2	0	16	1	1	3	3	90	120	5	1	9	3	130	121	4	-1	17	3	60	49	19
0	8	2	192	195	2	-2	15	2	91	96	10	2	3	3	70	40	7	2	9	3	227	244	4	0	17	3	53	30	36
1	8	2	144	143	3	-1	15	2	0	20	1	3	3	3	249	235	4	3	9	3	47	35	17	1	17	3	146	150	8
2	8	2	302	316	3	0	15	2	35	9	22	4	3	3	257	261	5	4	9	3	267	271	5	2	17	3	63	32	17
3	8	2	290	293	3	1	15	2	79	77	11	5	3	3	77	106	14	5	9	3	126	140	9	3	17	3	0	48	1
4	8	2	146	126	5	2	15	2	87	83	10	6	3	3	66	59	17	-7	10	3	242	235	7	-3	18	3	57	66	27
5	8	2	37	25	37	3	15	2	212	212	5	-8	4	3	75	101	17	-6	10	3	0	28	1	-2	18	3	44	85	43
6	8	2	26	18	26	4	15	2	11	37	10	-7	4	3	341	341	5	-5	10	3	85	77	12	-1	18	3	0	36	1
-7	9	2	195	195	8	-5	16	2	0	27	1	-6	4	3	263	262	5	-4	10	3	50	75	20	0	18	3	21	38	21
-6	9	2	81	90	15	-4	16	2	72	62	17	-5	4	3	47	62	19	-3	10	3	0	31	1	1	18	3	61	74	22
-5	9	2	349	351	5	-3	16	2	146	151	8	-4	4	3	539	527	4	-2	10	3	54	58	12	2	18	3	0	23	1
-4	9	2	220	220	5	-2	16	2	45	19	30	-3	4	3	249	223	3	-1	10	3	235	245	4	-2	19	3	0	28	1
-3	9	2	147	142	5	-1	16	2	185	183	6	-2	4	3	323	318	3	0	10	3	136	126	10	-1	19	3	38	42	38
-2	9	2	245	250	4	0	16	2	40	32	19	-1	4	3	269	279	3	1	10	3	424	421	4	0	19	3	183	168	8
-1	9	2	241	223	3	1	16	2	140	133	6	0	4	3	791	772	4	2	10	3	77	94	9	1	19	3	0	8	1
0	9	2	168	161	2	2	16	2	0	55	1	1	4	3	469	489	3	3	10	3	322	333	4	-8	0	4	50	57	29
1	9	2	150	156	4	3	16	2	94	90	11	2	4	3	252	249	3	4	10	3	90	94	10	-6	0	4	60	56	14
2	9	2	77	69	7	4	16	2	69	51	18	3	4	3	314	336	4	5	10	3	231	221	6	-4	0	4	138	130	4
3	9	2	265	265	4	-4	17	2	29	11	29	4	4	3	89	93	11	-7	11	3	105	76	13	-2	0	4	1202	1174	4
4	9	2	55	56	16	-3	17	2	35	46	35	5	4	3	234	234	5	-6	11	3	37	56	37	0	0	4	432	428	5
5	9	2	155	161	6	-2	17	2	186	171	6	6	4	3	57	49	22	-5	11	3	106	110	10	2	0	4	613	627	5
6	9	2	48	27	32	-1	17	2	0	21	1	-8	5	3	236	239	7	-4	11	3	86	55	9	4	0	4	92	101	10
-7	10	2	0	9	1	0	17	2	190	178	8	-7	5	3	0	3	1	-3	11	3	502	486	4	6	0	4	62	46	21
-6	10	2	208	203	6	1	17	2	11	11	10	-6	5	3	189	186	6	-2	11	3	136	133	5	-8	1	4	127	135	9

Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

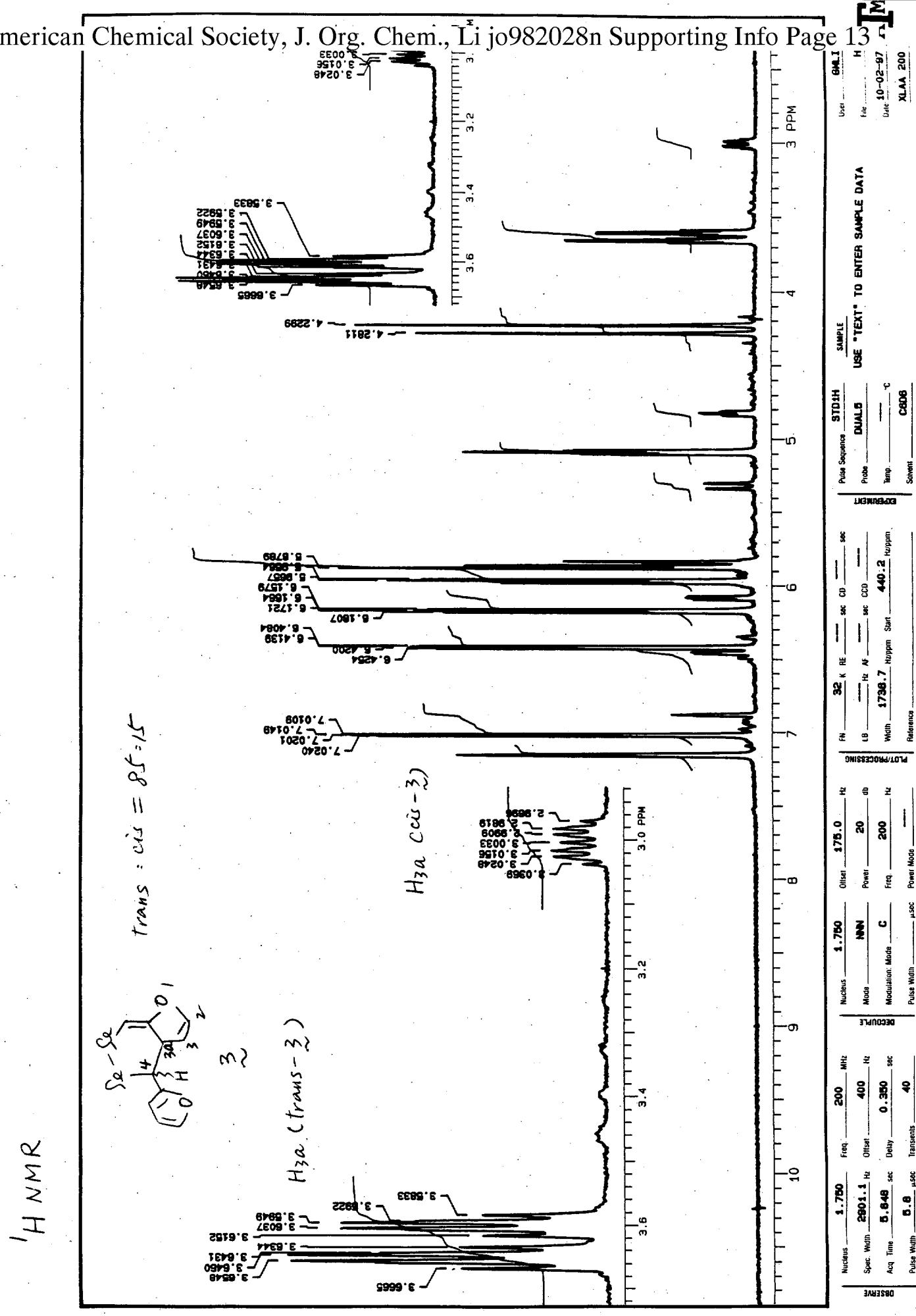
h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-7	1	4	73	68	13	5	6	4	117	110	10	-6	14	4	33	27	32	2	3	5	197	209	5	-3	10	5	351	352	4
-6	1	4	310	324	4	-7	7	4	0	47	1	-5	14	4	0	43	1	3	3	5	310	305	5	-2	10	5	176	186	5
-5	1	4	155	154	5	-6	7	4	515	516	5	-4	14	4	47	42	36	4	3	5	57	16	23	-1	10	5	304	312	4
-4	1	4	155	164	4	-5	7	4	156	159	6	-3	14	4	65	24	16	5	3	5	208	214	7	0	10	5	0	6	1
-3	1	4	800	794	5	-4	7	4	178	176	5	-2	14	4	260	250	5	-8	4	5	97	94	13	1	10	5	110	109	7
-2	1	4	375	382	3	-3	7	4	234	237	4	-1	14	4	141	149	7	-7	4	5	131	148	9	2	10	5	31	56	30
-1	1	4	847	828	5	-2	7	4	357	359	4	0	14	4	199	199	4	-6	4	5	0	28	1	3	10	5	78	70	14
0	1	4	99	90	3	-1	7	4	233	231	4	1	14	4	48	53	22	-5	4	5	643	634	5	4	10	5	0	22	1
1	1	4	512	491	4	0	7	4	359	358	4	2	14	4	193	194	6	-4	4	5	0	22	1	-6	11	5	169	174	8
2	1	4	360	354	4	1	7	4	160	169	4	3	14	4	48	15	27	-3	4	5	351	356	4	-5	11	5	57	78	25
3	1	4	409	405	4	2	7	4	352	363	4	-5	15	4	46	63	46	-2	4	5	339	324	3	-4	11	5	256	252	5
4	1	4	208	197	5	3	7	4	118	133	7	-4	15	4	0	57	1	-1	4	5	637	619	4	-3	11	5	84	75	10
5	1	4	0	22	1	4	7	4	213	211	5	-3	15	4	147	147	8	0	4	5	411	418	9	-2	11	5	233	223	5
6	1	4	98	133	14	5	7	4	0	15	1	-2	15	4	110	92	8	1	4	5	241	250	4	-1	11	5	513	516	4
-8	2	4	0	9	1	-7	8	4	248	233	6	-1	15	4	181	175	6	2	4	5	296	295	4	0	11	5	137	131	13
-7	2	4	349	344	5	-6	8	4	40	23	39	0	15	4	122	122	9	3	4	5	195	197	5	1	11	5	53	58	17
-6	2	4	93	85	9	-5	8	4	418	410	5	1	15	4	208	215	5	4	4	5	158	153	8	2	11	5	53	43	19
-5	2	4	666	693	5	-4	8	4	81	93	11	2	15	4	37	59	37	5	4	5	82	91	17	3	11	5	136	130	8
-4	2	4	184	173	4	-3	8	4	153	146	5	3	15	4	62	77	20	-8	5	5	92	98	14	4	11	5	16	22	16
-3	2	4	133	153	4	-2	8	4	309	315	4	-5	16	4	133	118	11	-7	5	5	90	91	13	-6	12	5	0	70	1
-2	2	4	357	348	3	-1	8	4	44	10	14	-4	16	4	148	152	9	-6	5	5	332	325	5	-5	12	5	49	45	38
-1	2	4	477	459	4	0	8	4	248	247	4	-3	16	4	119	114	10	-5	5	5	80	67	10	-4	12	5	89	85	12
0	2	4	106	106	3	1	8	4	380	377	3	-2	16	4	205	199	6	-4	5	5	660	666	5	-3	12	5	54	46	21
1	2	4	452	444	3	2	8	4	184	197	4	-1	16	4	107	92	9	-3	5	5	267	259	4	-2	12	5	70	105	14
2	2	4	202	195	4	3	8	4	135	144	7	0	16	4	56	56	56	-2	5	5	334	342	3	-1	12	5	110	118	9
3	2	4	149	143	6	4	8	4	84	85	12	1	16	4	45	50	32	-1	5	5	204	204	4	0	12	5	201	210	3
4	2	4	34	5	33	5	8	4	230	229	6	2	16	4	72	95	16	0	5	5	471	477	7	1	12	5	45	45	24
5	2	4	277	277	5	-7	9	4	0	4	1	3	16	4	58	39	23	1	5	5	0	27	1	2	12	5	239	251	5
6	2	4	0	3	1	-6	9	4	116	114	10	-4	17	4	49	83	48	2	5	5	64	63	13	3	12	5	23	4	22
-8	3	4	202	207	7	-5	9	4	75	85	15	-3	17	4	50	14	35	3	5	5	50	47	21	4	12	5	208	209	7
-7	3	4	0	13	1	-4	9	4	176	175	5	-2	17	4	57	38	23	4	5	5	121	113	9	-6	13	5	65	33	22
-6	3	4	567	574	5	-3	9	4	499	497	5	-1	17	4	36	2	36	5	5	5	22	16	22	-5	13	5	72	2	18
-5	3	4	60	67	14	-2	9	4	195	191	4	0	17	4	92	88	22	-7	6	5	165	163	7	-4	13	5	185	170	6
-4	3	4	289	293	4	-1	9	4	472	462	4	1	17	4	0	51	1	-6	6	5	47	44	31	-3	13	5	8	23	7
-3	3	4	417	418	4	0	9	4	0	19	1	2	17	4	57	83	25	-5	6	5	408	416	4	-2	13	5	49	28	23
-2	3	4	325	341	3	1	9	4	204	209	4	-3	18	4	68	63	20	-4	6	5	191	193	5	-1	13	5	164	165	6
-1	3	4	226	225	3	2	9	4	118	118	6	-2	18	4	96	98	13	-3	6	5	368	363	4	0	13	5	310	317	4
0	3	4	379	360	12	3	9	4	273	289	4	-1	18	4	0	43	1	-2	6	5	226	213	4	1	13	5	182	187	6
1	3	4	216	200	3	4	9	4	45	22	28	0	18	4	62	54	13	-1	6	5	397	386	4	2	13	5	0	19	1
2	3	4	471	462	4	5	9	4	18	33	18	1	18	4	47	28	36	0	6	5	275	279	2	3	13	5	164	155	7
3	3	4	126	136	7	-7	10	4	24	67	23	-2	19	4	0	25	1	1	6	5	246	257	4	-5	14	5	224	206	7
4	3	4	276	261	5	-6	10	4	65	63	20	-1	19	4	49	46	38	2	6	5	213	205	4	-4	14	5	115	101	10
5	3	4	0	25	1	-5	10	4	80	64	13	-7	0	5	209	201	5	3	6	5	70	25	12	-3	14	5	140	143	9
6	3	4	241	248	7	-4	10	4	100	101	9	-5	0	5	806	827	5	4	6	5	221	229	6	-2	14	5	243	238	5
-8	4	4	49	40	34	-3	10	4	115	107	7	-3	0	5	523	537	4	5	6	5	88	58	15	-1	14	5	209	191	6
-7	4	4	150	134	7	-2	10	4	455	455	4	-1	0	5	828	805	5	-7	7	5	178	160	8	0	14	5	130	137	5
-6	4	4	37	29	36	-1	10	4	67	54	11	1	0	5	144	155	5	-6	7	5	159	161	7	1	14	5	61	70	18
-5	4	4	266	269	5	0	10	4	345	345	2	3	0	5	278	272	5	-5	7	5	88	100	11	2	14	5	111	94	9
-4	4	4	82	79	9	1	10	4	49	32	13	5	0	5	112	117	11	-4	7	5	31	63	30	3	14	5	113	104	10
-3	4	4	169	175	4	2	10	4	342	346	4	-8	1	5	76	93	16	-3	7	5	17	46	17	-5	15	5	71	46	20
-2	4	4	934	923	5	3	10	4	59	30	15	-7	1	5	172	154	6	-2	7	5	211	210	4	-4	15	5	266	252	6
-1	4	4	68	73	7	4	10	4	71	43	14	-6	1	5	293	299	4	-1	7	5	740	729	4	-3	15	5	163	140	7
0	4	4	440	438	3	5	10	4	41	13	41	-5	1	5	155	160	5	0	7	5	0	11	1	-2	15	5	149	141	8
1	4	4	424	414	3	-7	11	4	63	59	25	-4	1	5	578	566	4	1	7	5	247	253	4	-1	15	5	168	177	7
2	4	4	473	476	4	-6	11	4	257	236	6	-3	1	5	132	119	5	2	7	5	63	40	12	0	15	5	103	95	7
3	4	4	103	103	8	-5	11	4	188	194	7	-2	1	5	299	297	3	3	7	5	330	327	5	1	15	5	33	43	32
4	4	4	114	114	9	-4	11	4	45	27	28	-1	1	5	684	657	4	4	7	5	64	42	18	2	15	5	37	4	37
5	4	4	153	154	8	-3	11	4	296	311	5	0	1	5	480	483	17	5	7	5	190	179	8	-4	16	5	54	78	29
6	4	4	48	10	48	-2	11	4	286	289	4	1	1	5	300	299	4	-7	8	5	0	13	1	-3	16	5	76	102	17
-8	5	4	0	2	1	-1	11	4	313	303	4	2	1	5	151	155	6	-6	8	5	58	63	23	-2	16	5	67	66	18
-7	5	4	40	60	39	0	11	4	233	235	3	3	1	5	70	86	14	-5	8	5	227	226	5	-1	16	5	140	130	8
-6	5	4	89	53	10	1	11	4	268	274	4	4	1	5	93	96	12	-4	8	5	30	52	29	0	16	5	70	73	11
-5	5	4	0	23	1	2	11	4	208	212	5	5	1	5	122	140	11	-3	8	5	72	84	11	1	16	5	11	37	10
-4	5	4	61	54	12	3	11	4	164	176	6	-8	2	5	201	208	7	-2	8	5	199	200	4	2	16	5	53	53	27
-3	5	4	658	649	5	4	11	4	93	94	11	-7	2	5	84	80	12	-1	8	5	191	184	5	-3	17	5	65	50	21
-2	5	4	39	22	17	-6	12	4	76	75	18	-6	2	5	69	27	12	0	8	5	415	414	4	-2	17	5	34	74	34
-1	5	4	873	852	5	-5	12	4	305	307	6	-5	2	5	201	202	4	1	8	5	242	251	4	-1	17	5	70	111	19
0	5	4	0	20	1	-4	12	4	129	102	8	-4	2	5	124	134	6	2	8	5	402	406	4	0	17	5	66	67	13
1	5	4	436	440	4	-3	12	4	158	148	7	-3	2	5	111	119	5	3	8	5	50	71	23	1	17	5	98	91	11
2	5	4	90	88	7	-2	12	4	143	138	6	-2	2	5	562	533	4	4	8	5	256	248	6	-2	18	5	75	69	17
3	5	4	442	446	4	-1	12	4	25	44	24	-1	2	5	212	207	4	5	8	5	0	23	1	-1	18	5	88	85	14
4	5	4	100	95	10	0	12	4	69	77	8	0	2	5	473	480	15	-7	9	5	48	6	47	0	18	5	83	86	20
5	5	4	45	22	44	1	12	4	184	187	5	1	2	5	151	160	5	-6	9	5	201	204	7	-8	0	6	212	213	6
6	5	4	0	23	1	2	12	4	45	44	24	2	2	5	576	574	5	-5	9	5	0	12	1	-6	0	6	328	327	5
-8	6	4	40	10	39	3	12	4	86	101	11	3	2	5	46	36	24	-4	9	5	439	432	4	-4	0	6	349	350	4
-7	6	4	211	196	6	4	12	4	0	8	1	4	2	5	475	471	5	-3	9	5	205	198	5	-2	0	6	476	469	4
-6	6	4	149	154	8	-6	13	4	186	178	8	5	2	5	68	29	19	-2	9	5	151	166	6	0	0	6	400	389	4
-5	6	4	335	333	5	-5	13	4	75	74	18	-8	3	5	59	32	21	-1	9	5	159	165	6	2	0	6	88	95	10
-4	6	4	244	246	4	-4	13	4	161	159	7	-7	3	5	196	191	6	0	9	5	466	465	15	4	0	6	330	330	6
-3	6	4	244	253	4	-3	13	4	223	231	5	-6	3	5	63	66	15	1	9	5	157	159	5	-8	1	6	0	18	1
-2	6	4	574	579	4	-2	13	4	68	77	14	-5	3	5	144	144	6	2	9	5	46	61	23	-7	1	6	287	286	5
-1	6	4	209	210	4	-1	13	4	130	131	7	-4	3	5	250	242	4	3	9	5	104	106	9	-6	1	6	0	35	1
0	6	4	293	295	7	0	13	4	85	91	9	-3	3	5	64	66	9	4	9	5	84	78	13	-5	1	6	171	173	5
1	6	4	248	254	3	1	13	4	21	15	21	-2	3	5	20	34	19	-7	10	5	103	127	14	-4	1	6	401	406	4
2	6	4	395	398	4	2	13	4	133	136	7	-1	3	5	804	787	5	-6	10	5	36	59	35	-3	1	6	197	196	4
3	6	4	110	102	7	3	13	4	92	98	11	0	3	5	341	348	4	-5	10	5	382	377	5	-2	1	6	359	360	4
4	6	4	0	14	1	4	13	4	133	114	9	1	3	5	392	393	4	-4	10	5	185	181	6	-1	1	6	65	67	11

Table 6. Observed and calculated structure factors for 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
0	1	6	314	300	2	-2	8	6	236	229	5	-7	1	7	79	91	15	-2	8	7	269	260	5	2	2	8	0	43	1
1	1	6	565	551	4	-1	8	6	215	219	5	-6	1	7	124	131	9	-1	8	7	66	87	15	3	2	8	171	168	8
2	1	6	502	506	5	0	8	6	208	190	3	-5	1	7	149	143	6	0	8	7	62	40	11	-7	3	8	49	69	44
3	1	6	189	191	6	1	8	6	416	422	4	-4	1	7	0	19	1	1	8	7	40	66	40	-6	3	8	196	185	6
4	1	6	51	23	30	2	8	6	24	10	24	-3	1	7	132	126	6	2	8	7	112	100	9	-5	3	8	36	15	35
5	1	6	202	193	7	3	8	6	74	55	14	-2	1	7	304	312	4	3	8	7	141	148	9	-4	3	8	167	168	7
-8	2	6	47	72	47	4	8	6	0	35	1	-1	1	7	268	264	4	-6	9	7	108	49	10	-3	3	8	82	71	12
-7	2	6	0	46	1	-7	9	6	187	178	8	0	1	7	108	110	10	-5	9	7	91	100	13	-2	3	8	21	16	21
-6	2	6	81	92	12	-6	9	6	124	114	10	1	1	7	81	67	11	-4	9	7	0	15	1	-1	3	8	275	261	5
-5	2	6	206	203	5	-5	9	6	197	197	7	2	1	7	253	260	5	-3	9	7	0	41	1	0	3	8	64	75	12
-4	2	6	0	23	1	-4	9	6	247	249	5	3	1	7	28	30	28	-2	9	7	215	219	5	1	3	8	115	127	9
-3	2	6	668	651	5	-3	9	6	337	333	5	4	1	7	103	138	15	-1	9	7	0	17	1	2	3	8	63	87	22
-2	2	6	123	119	6	-2	9	6	329	322	4	-7	2	7	0	4	1	0	9	7	52	58	14	3	3	8	31	58	31
-1	2	6	214	203	4	-1	9	6	50	53	22	-6	2	7	404	401	5	1	9	7	30	54	30	-7	4	8	126	137	11
0	2	6	221	214	4	0	9	6	192	198	3	-5	2	7	71	69	12	2	9	7	218	201	6	-6	4	8	62	26	20
1	2	6	562	553	4	1	9	6	176	184	5	-4	2	7	264	251	4	3	9	7	50	40	36	-5	4	8	92	76	11
2	2	6	50	66	22	2	9	6	123	108	8	-3	2	7	174	175	5	-6	10	7	0	28	1	-4	4	8	365	345	5
3	2	6	48	60	32	3	9	6	108	108	9	-2	2	7	510	502	4	-5	10	7	91	105	14	-3	4	8	66	111	17
4	2	6	29	66	28	4	9	6	0	34	1	-1	2	7	157	155	5	-4	10	7	60	91	21	-2	4	8	0	39	1
5	2	6	0	26	1	-7	10	6	122	115	12	0	2	7	174	163	4	-3	10	7	163	176	7	-1	4	8	124	127	8
-8	3	6	0	35	1	-6	10	6	246	248	7	1	2	7	119	134	8	-2	10	7	86	74	12	0	4	8	298	287	4
-7	3	6	171	169	7	-5	10	6	62	13	19	2	2	7	188	184	6	-1	10	7	140	127	8	1	4	8	16	27	16
-6	3	6	120	127	9	-4	10	6	140	128	9	3	2	7	65	71	21	0	10	7	132	130	10	2	4	8	0	26	1
-5	3	6	55	43	17	-3	10	6	167	145	6	4	2	7	99	72	13	1	10	7	190	194	6	3	4	8	141	133	10
-4	3	6	455	455	4	-2	10	6	148	146	7	-7	3	7	177	165	7	2	10	7	0	14	1	-7	5	8	0	10	1
-3	3	6	167	164	5	-1	10	6	0	36	1	-6	3	7	86	103	13	3	10	7	205	191	7	-6	5	8	0	42	1
-2	3	6	428	426	4	0	10	6	268	276	3	-5	3	7	337	346	5	-6	11	7	44	38	44	-5	5	8	177	168	7
-1	3	6	0	9	1	1	10	6	151	147	6	-4	3	7	72	59	11	-5	11	7	200	198	7	-4	5	8	38	26	38
0	3	6	441	438	7	2	10	6	56	62	20	-3	3	7	452	447	4	-4	11	7	79	52	14	-3	5	8	189	188	6
1	3	6	333	340	4	3	10	6	79	69	15	-2	3	7	223	228	5	-3	11	7	191	173	6	-2	5	8	42	23	36
2	3	6	484	490	5	-6	11	6	56	12	28	-1	3	7	361	358	4	-2	11	7	200	180	6	-1	5	8	351	340	5
3	3	6	0	35	1	-5	11	6	87	43	13	0	3	7	34	17	27	-1	11	7	231	228	6	0	5	8	101	104	21
4	3	6	0	25	1	-4	11	6	186	171	7	1	3	7	92	97	9	0	11	7	147	158	5	1	5	8	204	192	6
-8	4	6	174	176	8	-3	11	6	37	8	37	2	3	7	139	145	8	1	11	7	11	40	10	2	5	8	29	17	29
-7	4	6	76	38	15	-2	11	6	49	46	25	3	3	7	26	45	25	2	11	7	121	110	9	3	5	8	95	123	14
-6	4	6	187	191	6	-1	11	6	43	62	43	4	3	7	72	49	20	-5	12	7	112	126	12	-7	6	8	89	110	17
-5	4	6	115	124	8	0	11	6	148	139	4	-7	4	7	77	81	17	-4	12	7	153	130	8	-6	6	8	0	47	1
-4	4	6	255	259	4	1	11	6	198	196	5	-6	4	7	177	178	7	-3	12	7	60	67	21	-5	6	8	121	118	10
-3	4	6	528	544	5	2	11	6	193	193	6	-5	4	7	175	178	6	-2	12	7	268	250	5	-4	6	8	245	251	6
-2	4	6	390	385	4	3	11	6	151	140	7	-4	4	7	47	80	24	-1	12	7	84	120	14	-3	6	8	268	270	5
-1	4	6	156	151	5	-6	12	6	0	29	1	-3	4	7	245	249	4	0	12	7	99	106	8	-2	6	8	187	184	6
0	4	6	353	345	14	-5	12	6	85	84	15	-2	4	7	114	116	8	1	12	7	86	67	13	-1	6	8	122	127	9
1	4	6	387	381	4	-4	12	6	60	24	21	-1	4	7	223	235	5	2	12	7	71	73	19	0	6	8	319	309	4
2	4	6	31	33	30	-3	12	6	284	284	5	0	4	7	0	18	1	-5	13	7	83	116	19	1	6	8	18	16	17
3	4	6	105	100	10	-2	12	6	67	72	16	1	4	7	271	280	5	-4	13	7	93	61	12	2	6	8	79	59	15
4	4	6	208	213	7	-1	12	6	173	160	6	2	4	7	37	57	36	-3	13	7	17	74	17	-6	7	8	148	136	9
-7	5	6	296	301	6	0	12	6	43	19	18	3	4	7	296	295	5	-2	13	7	71	113	18	-5	7	8	81	77	15
-6	5	6	94	85	11	1	12	6	271	261	5	4	4	7	66	34	22	-1	13	7	0	83	1	-4	7	8	197	199	7
-5	5	6	288	285	5	2	12	6	31	47	30	-7	5	7	51	51	35	0	13	7	0	8	1	-3	7	8	31	56	30
-4	5	6	0	42	1	3	12	6	0	15	1	-6	5	7	48	82	47	1	13	7	50	34	30	-2	7	8	65	33	17
-3	5	6	298	291	4	-5	13	6	71	69	23	-5	5	7	0	32	1	-4	14	7	83	97	17	-1	7	8	84	93	14
-2	5	6	57	34	14	-4	13	6	196	214	7	-4	5	7	21	39	21	-3	14	7	64	46	22	0	7	8	60	25	12
-1	5	6	56	49	14	-3	13	6	227	226	6	-3	5	7	33	37	33	-2	14	7	0	9	1	1	7	8	20	11	19
0	5	6	0	6	1	-2	13	6	261	274	5	-2	5	7	237	232	5	-1	14	7	61	86	25	2	7	8	32	33	31
1	5	6	381	391	4	-1	13	6	100	101	11	-1	5	7	111	112	9	0	14	7	0	24	1	-6	8	8	55	39	31
2	5	6	175	187	6	0	13	6	213	215	4	0	5	7	89	94	7	1	14	7	81	74	15	-5	8	8	178	157	7
3	5	6	215	216	6	1	13	6	56	49	20	1	5	7	62	76	17	-4	15	7	38	12	38	-4	8	8	83	94	15
4	5	6	45	4	44	2	13	6	123	137	9	2	5	7	278	293	5	-3	15	7	30	39	29	-3	8	8	144	136	8
-7	6	6	97	117	14	-5	14	6	74	90	20	3	5	7	76	70	17	-2	15	7	92	125	14	-2	8	8	0	24	1
-6	6	6	254	248	5	-4	14	6	161	138	8	4	5	7	191	183	8	-1	15	7	81	101	16	-1	8	8	157	140	7
-5	6	6	127	133	8	-3	14	6	88	94	14	-7	6	7	0	22	1	0	15	7	32	35	32	0	8	8	118	119	6
-4	6	6	44	37	25	-2	14	6	100	104	12	-6	6	7	223	223	6	-2	16	7	91	108	16	1	8	8	0	24	1
-3	6	6	469	472	4	-1	14	6	94	79	12	-5	6	7	78	122	15	-6	0	8	86	74	12	2	8	8	0	50	1
-2	6	6	213	205	5	0	14	6	100	102	8	-4	6	7	25	38	25	-4	0	8	490	467	5	-6	9	8	54	33	32
-1	6	6	153	161	6	1	14	6	51	30	25	-3	6	7	278	292	5	-2	0	8	69	69	14	-5	9	8	137	123	9
0	6	6	392	378	6	2	14	6	49	20	33	-2	6	7	250	244	5	0	0	8	409	388	5	-4	9	8	0	28	1
1	6	6	397	393	4	-4	15	6	52	23	35	-1	6	7	256	249	4	2	0	8	72	34	15	-3	9	8	82	94	15
2	6	6	97	113	9	-3	15	6	62	71	21	0	6	7	209	201	5	-7	1	8	40	24	40	-2	9	8	16	16	16
3	6	6	87	77	12	-2	15	6	50	47	32	1	6	7	262	275	5	-6	1	8	136	119	8	-1	9	8	224	208	6
4	6	6	175	178	8	-1	15	6	0	27	1	2	6	7	61	64	19	-5	1	8	88	118	12	0	9	8	142	144	6
-7	7	6	0	23	1	0	15	6	44	12	29	3	6	7	167	183	8	-4	1	8	104	93	9	1	9	8	139	140	9
-6	7	6	93	83	13	1	15	6	116	113	9	-7	7	7	128	114	9	-3	1	8	210	192	5	2	9	8	64	86	24
-5	7	6	54	21	21	-4	16	6	0	13	1	-6	7	7	0	9	1	-2	1	8	43	41	28	-6	10	8	74	65	19
-4	7	6	324	327	5	-3	16	6	115	98	11	-5	7	7	372	370	5	-1	1	8	355	356	5	-5	10	8	83	75	16
-3	7	6	62	90	15	-2	16	6	0	25	1	-4	7	7	79	76	12	0	1	8	59	39	12	-4	10	8	213	205	7
-2	7	6	243	232	5	-1	16	6	62	68	22	-3	7	7	426	436	4	1	1	8	204	200	6	-3	10	8	71	66	17
-1	7	6	64	79	14	0	16	6	57	36	15	-2	7	7	46	80	25	2	1	8	131	125	9	-2	10	8	162	137	7
0	7	6	365	349	15	1	16	6	58	93	27	-1	7	7	365	350	4	3	1	8	69	34	19	-1	10	8	0	16	1
1	7	6	42	70	30	-2	17	6	77	99	20	0	7	7	147	162	15	-7	2	8	230	214	6	0	10	8	269	266	9
2	7	6	303	315	5	-1	17	6	84	56	15	1	7	7	89	99	10	-6	2	8	0	11	1	1	10	8	45	3	45
3	7	6	110	110	10	-7	0	7	98	71	11	2	7	7	0	9	1	-5	2	8	184	194	6	-5	11	8	91	93	16
4	7	6	21	33	21	-5	0	7	116	137	8	3	7	7	50	64	36	-4	2	8	121	126	9	-4	11	8	150	132	9
-7	8	6	88	45	15	-3	0	7	306	306	4	-7	8	7	0	76	1	-3	2	8	441	447	5	-3	11	8	145	116	8
-6	8	6	35	24	34	-1	0	7	217	236	5	-6	8	7	245	241	6	-2	2	8	72	63	12	-2	11	8	37	65	37
-5	8	6	115	123	9	1	0	7	401	405	5	-5	8	7	201	202	6	-1	2	8	209	213	5	-1	11	8	114	116	11
-4	8	6	92	102	11	3	0	7	373	381	5	-4	8	7	8	66	7	0	2	8	147	139	7	0	11	8	8	27	8
-3	8	6	539	536	5	-8	1	7	69	105	21	-3	8	7	55	65	21	1	2	8	82	76	12	1	11	8	53	66	31

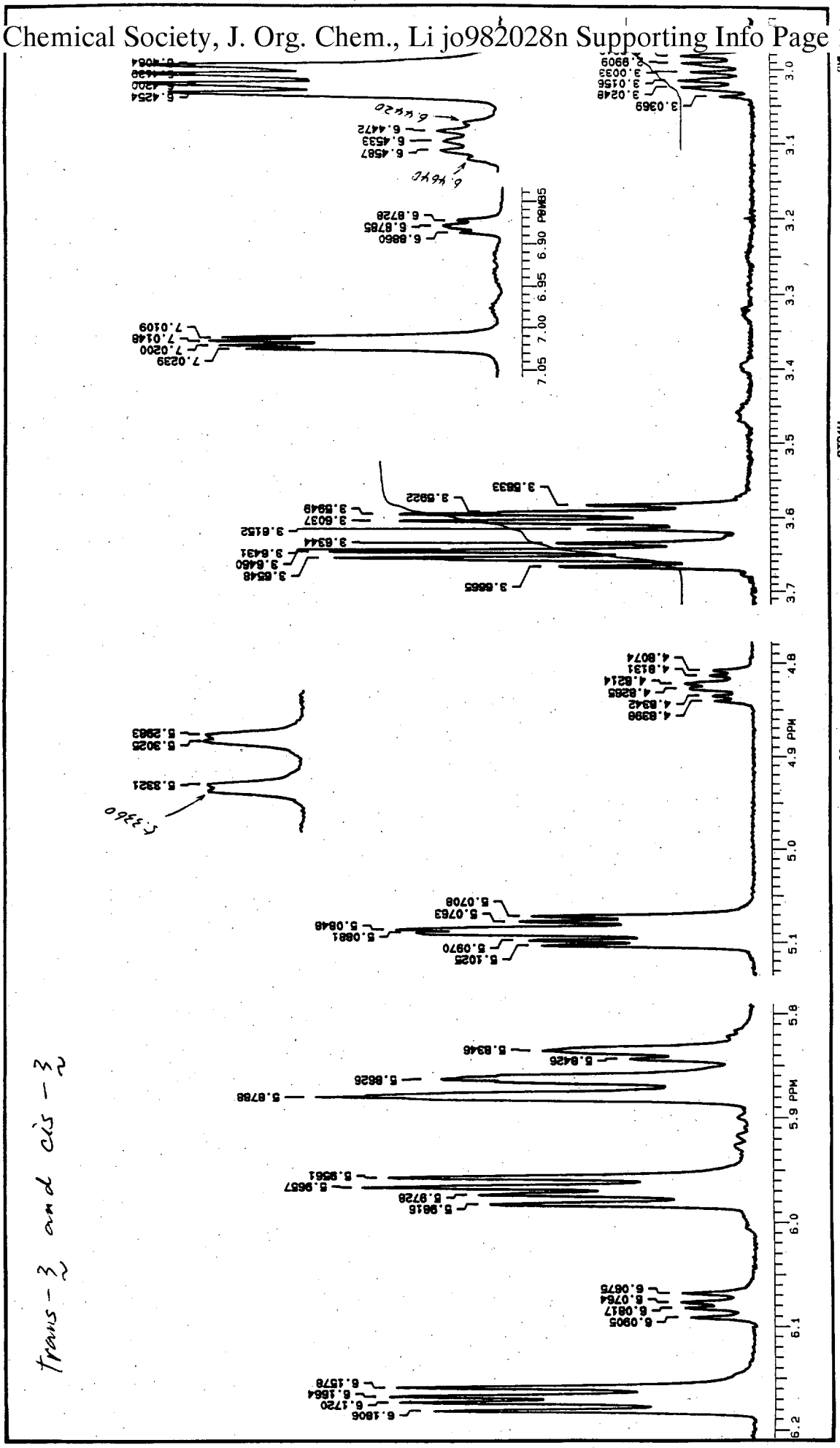
Table 6. Observed and calculated structure factors for 1

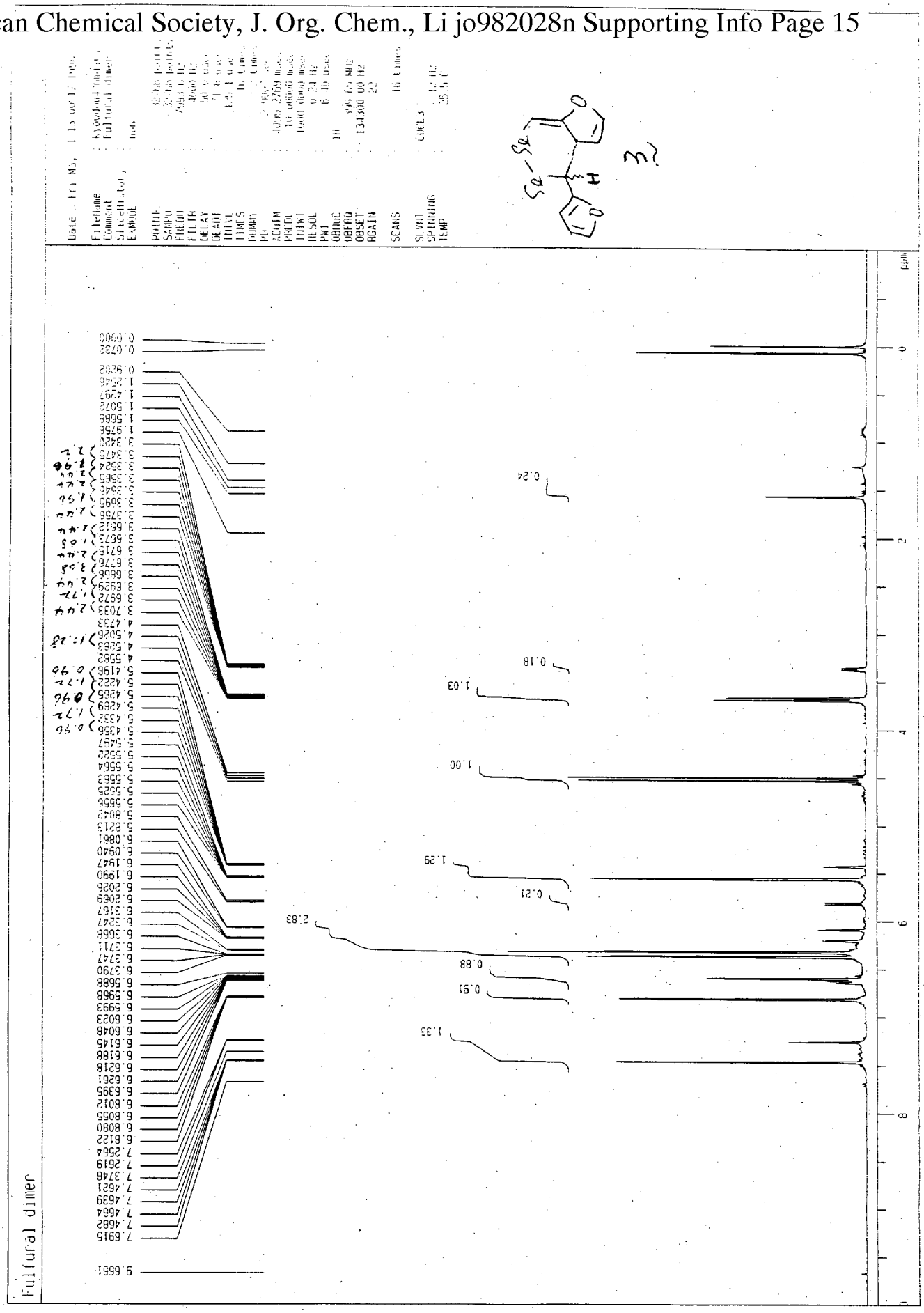
h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	12	8	133	132	11	0	2	9	98	99	8	0	6	9	46	71	22	-4	0	10	197	196	7	-1	5	10	0	8	1
-4	12	8	86	77	16	1	2	9	42	5	42	1	6	9	38	1	38	-2	0	10	199	182	7	0	5	10	0	71	1
-3	12	8	154	136	9	2	2	9	176	172	8	-6	7	9	43	66	43	0	0	10	51	21	21	-5	6	10	75	71	21
-2	12	8	0	13	1	-7	3	9	86	123	18	-5	7	9	35	68	35	-6	1	10	114	80	11	-4	6	10	127	112	10
-1	12	8	101	96	12	-6	3	9	54	51	29	-4	7	9	79	89	15	-5	1	10	196	188	7	-3	6	10	0	15	1
0	12	8	46	17	46	-5	3	9	38	34	38	-3	7	9	42	118	42	-4	1	10	76	50	16	-2	6	10	80	91	18
1	12	8	0	19	1	-4	3	9	59	30	20	-2	7	9	17	47	16	-3	1	10	67	78	20	-1	6	10	154	137	9
-4	13	8	89	82	16	-3	3	9	157	155	7	-1	7	9	32	18	31	-2	1	10	106	105	12	0	6	10	24	12	23
-3	13	8	55	24	30	-2	3	9	64	16	17	0	7	9	68	36	32	-1	1	10	78	22	17	-5	7	10	0	24	1
-2	13	8	25	43	25	-1	3	9	105	110	10	1	7	9	248	237	7	0	1	10	137	139	8	-4	7	10	65	65	24
-1	13	8	135	121	9	0	3	9	24	5	24	-6	8	9	0	55	1	1	1	10	50	33	46	-3	7	10	9	4	9
0	13	8	37	45	37	1	3	9	266	257	6	-5	8	9	20	11	20	-6	2	10	0	16	1	-2	7	10	224	204	6
-3	14	8	0	5	1	2	3	9	0	47	1	-4	8	9	66	72	21	-5	2	10	208	204	7	-1	7	10	62	30	27
-2	14	8	0	23	1	-6	4	9	0	71	1	-3	8	9	0	29	1	-4	2	10	0	56	1	-4	8	10	117	124	13
-1	14	8	62	33	25	-5	4	9	65	100	21	-2	8	9	62	102	23	-3	2	10	134	109	8	-3	8	10	144	107	8
-7	0	9	245	243	6	-4	4	9	59	39	21	-1	8	9	140	153	10	-2	2	10	0	33	1	-2	8	10	0	23	1
-5	0	9	170	165	7	-3	4	9	288	291	5	0	8	9	127	131	16	-1	2	10	324	325	6	-1	8	10	275	252	6
-3	0	9	462	472	4	-2	4	9	98	115	10	1	8	9	0	6	1	0	2	10	41	16	41	-3	9	10	0	48	1
-1	0	9	284	279	5	-1	4	9	258	242	5	-5	9	9	24	43	24	1	2	10	108	111	12	-2	9	10	62	53	23
1	0	9	51	27	33	0	4	9	143	144	15	-4	9	9	168	165	8	-6	3	10	154	164	10	-3	0	11	37	44	37
-7	1	9	50	95	49	1	4	9	37	8	37	-3	9	9	27	74	27	-5	3	10	96	112	15	-1	0	11	71	94	23
-6	1	9	181	177	8	2	4	9	52	28	37	-2	9	9	256	240	6	-4	3	10	80	95	16	-4	1	11	155	155	10
-5	1	9	89	98	13	-6	5	9	220	218	7	-1	9	9	77	111	18	-3	3	10	88	68	14	-3	1	11	112	132	11
-4	1	9	190	183	6	-5	5	9	86	93	13	0	9	9	0	24	1	-2	3	10	221	212	6	-2	1	11	51	45	39
-3	1	9	117	110	10	-4	5	9	307	305	5	-5	10	9	90	104	17	-1	3	10	26	6	25	-1	1	11	29	56	28
-2	1	9	209	179	5	-3	5	9	0	7	1	-4	10	9	54	47	33	0	3	10	202	193	7	-4	2	11	247	243	6
-1	1	9	168	161	7	-2	5	9	348	335	5	-3	10	9	203	200	7	-6	4	10	126	127	12	-3	2	11	0	9	1
0	1	9	27	38	26	-1	5	9	0	19	1	-2	10	9	65	57	22	-5	4	10	141	138	10	-2	2	11	84	111	17
1	1	9	163	161	8	0	5	9	43	15	30	-1	10	9	151	134	9	-4	4	10	172	185	8	-4	3	11	56	76	32
2	1	9	108	100	11	1	5	9	17	17	17	0	10	9	31	14	30	-3	4	10	27	79	26	-3	3	11	220	215	7
-7	2	9	0	58	1	2	5	9	129	133	11	-4	11	9	116	97	11	-2	4	10	112	109	11	-2	3	11	45	21	45
-6	2	9	163	170	8	-6	6	9	142	140	10	-3	11	9	35	38	34	-1	4	10	184	168	7	-4	4	11	58	97	29
-5	2	9	0	12	1	-5	6	9	36	71	36	-2	11	9	66	42	22	0	4	10	0	8	1	-3	4	11	0	40	1
-4	2	9	142	130	7	-4	6	9	0	13	1	-1	11	9	0	17	1	-5	5	10	232	223	7	-2	4	11	0	13	1
-3	2	9	34	9	34	-3	6	9	83	93	14	-3	12	9	75	52	19	-4	5	10	30	40	30	-3	5	11	62	72	28
-2	2	9	55	43	22	-2	6	9	76	94	17	-2	12	9	0	55	1	-3	5	10	51	41	32						
-1	2	9	0	9	1	-1	6	9	58	40	23	-6	0	10	172	157	8	-2	5	10	43	25	43						



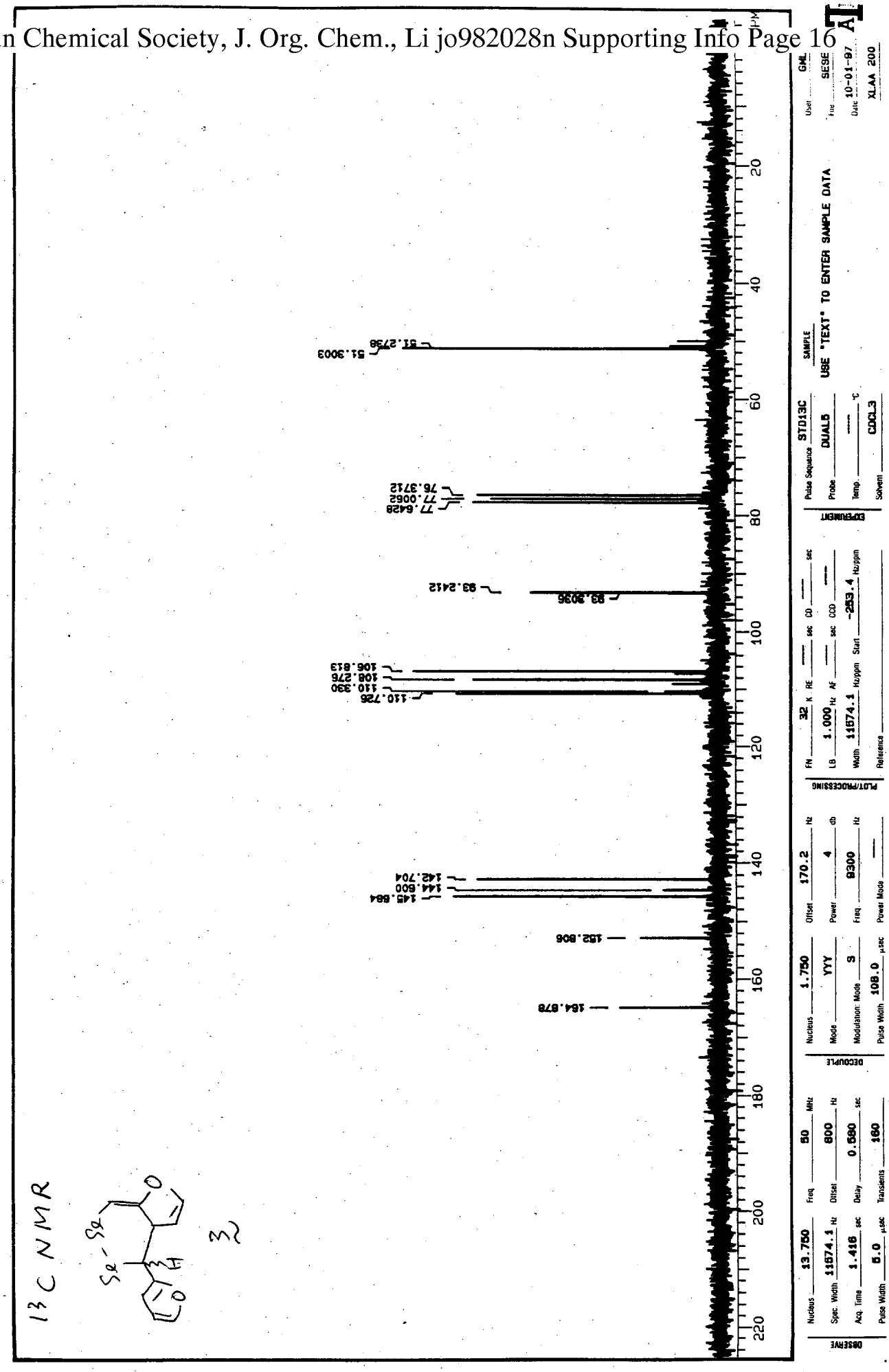
^1H NMR (expansion)

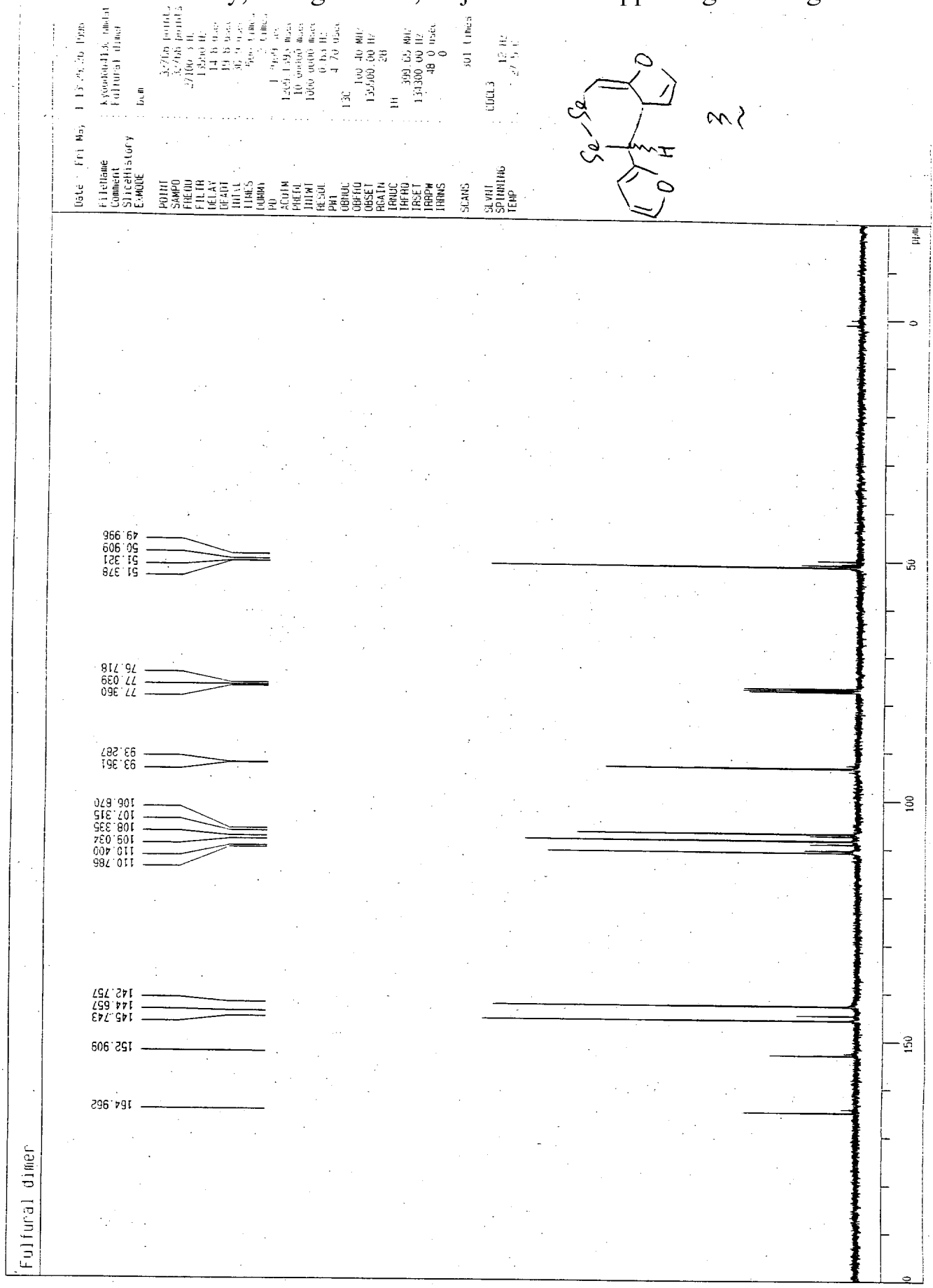
trans-3 and cis-3



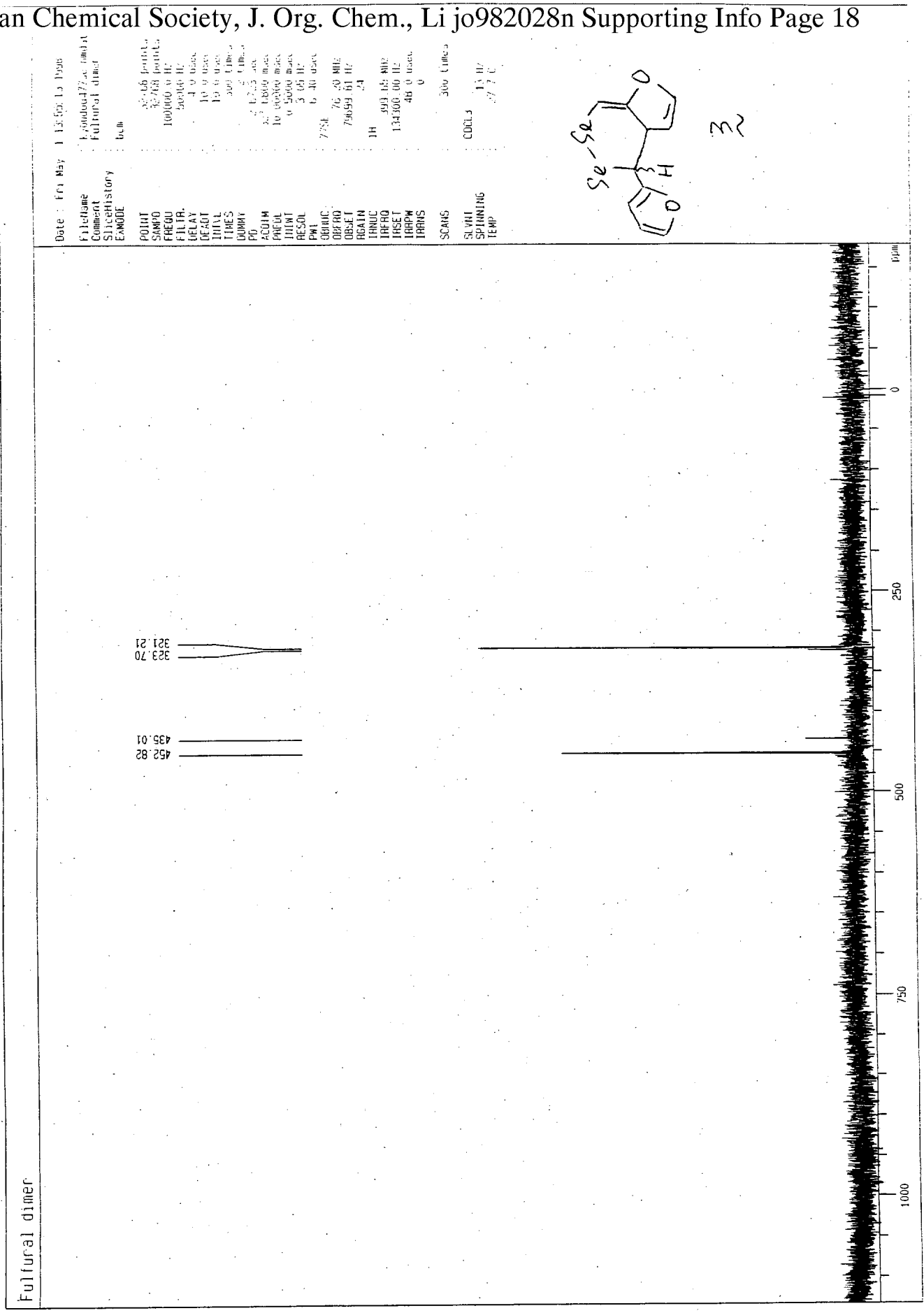


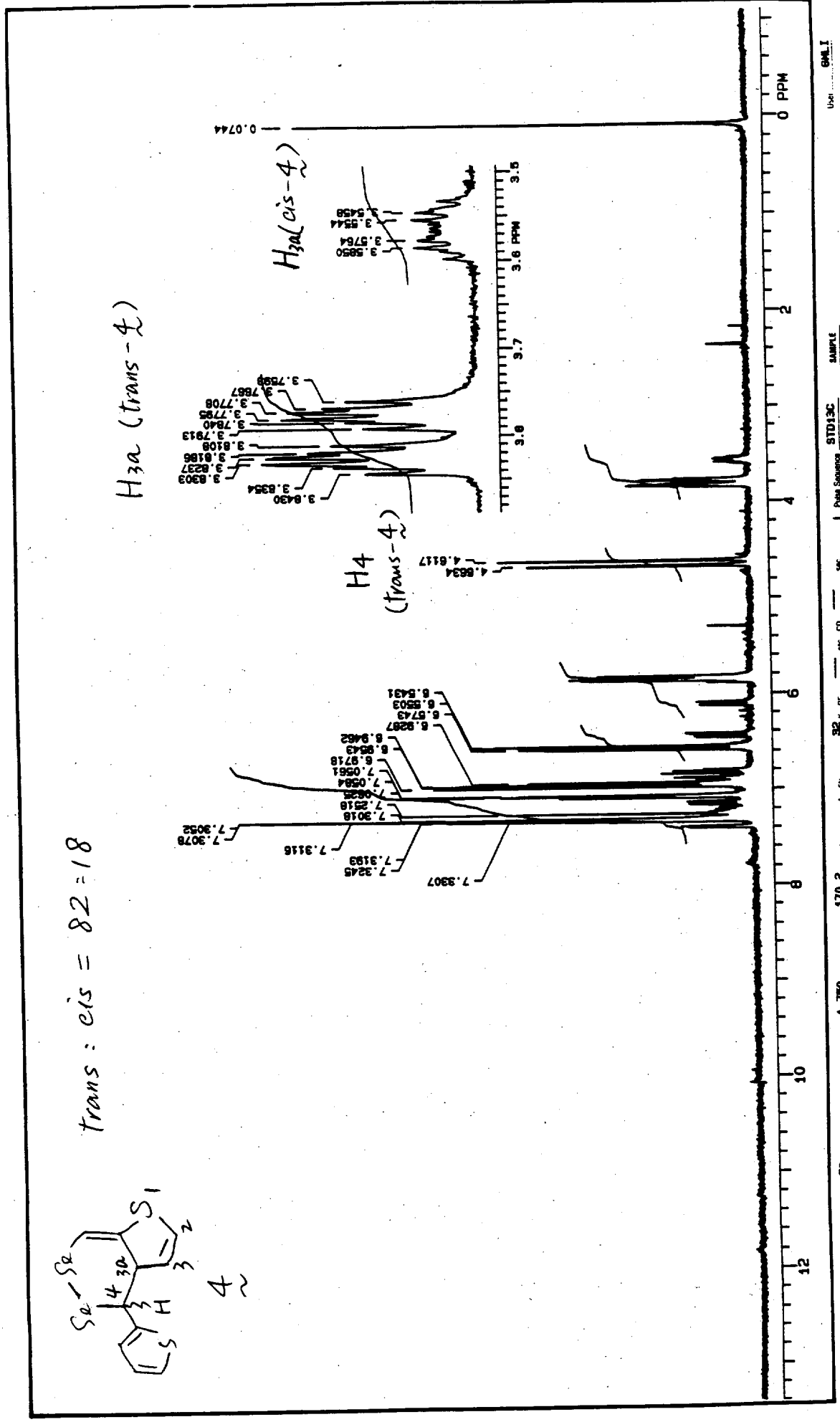
^1H NMR (400 MHz)

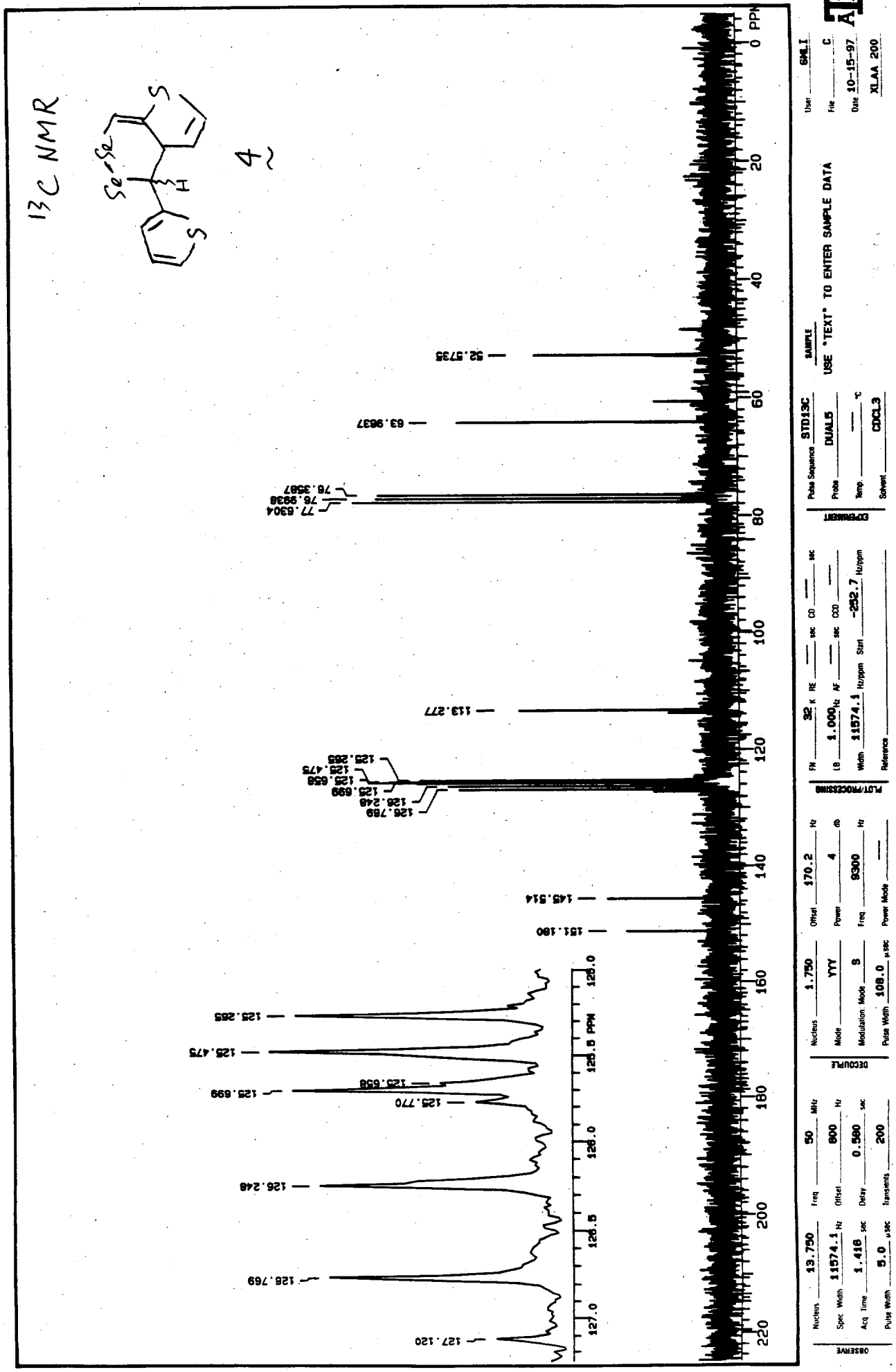


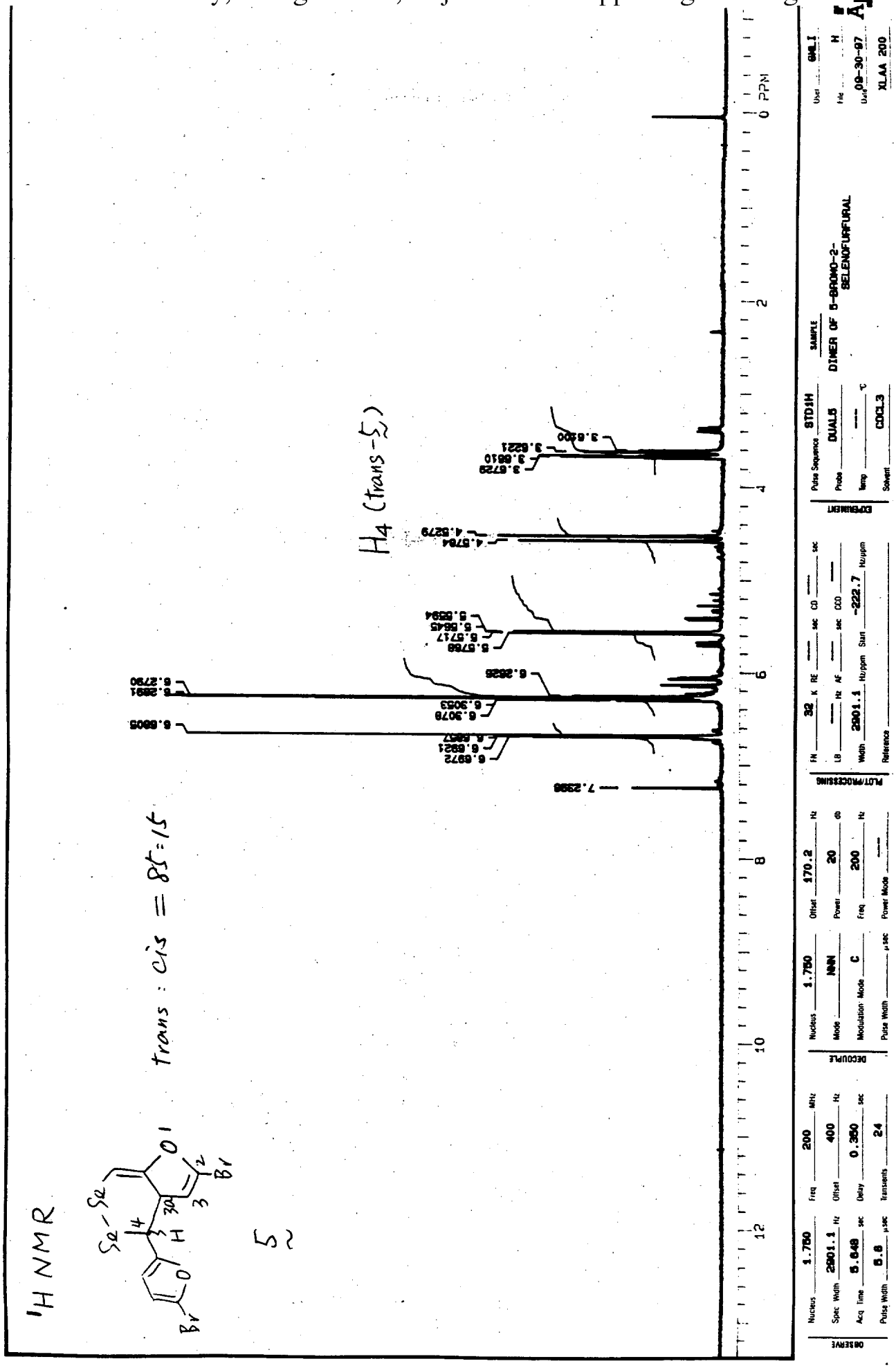


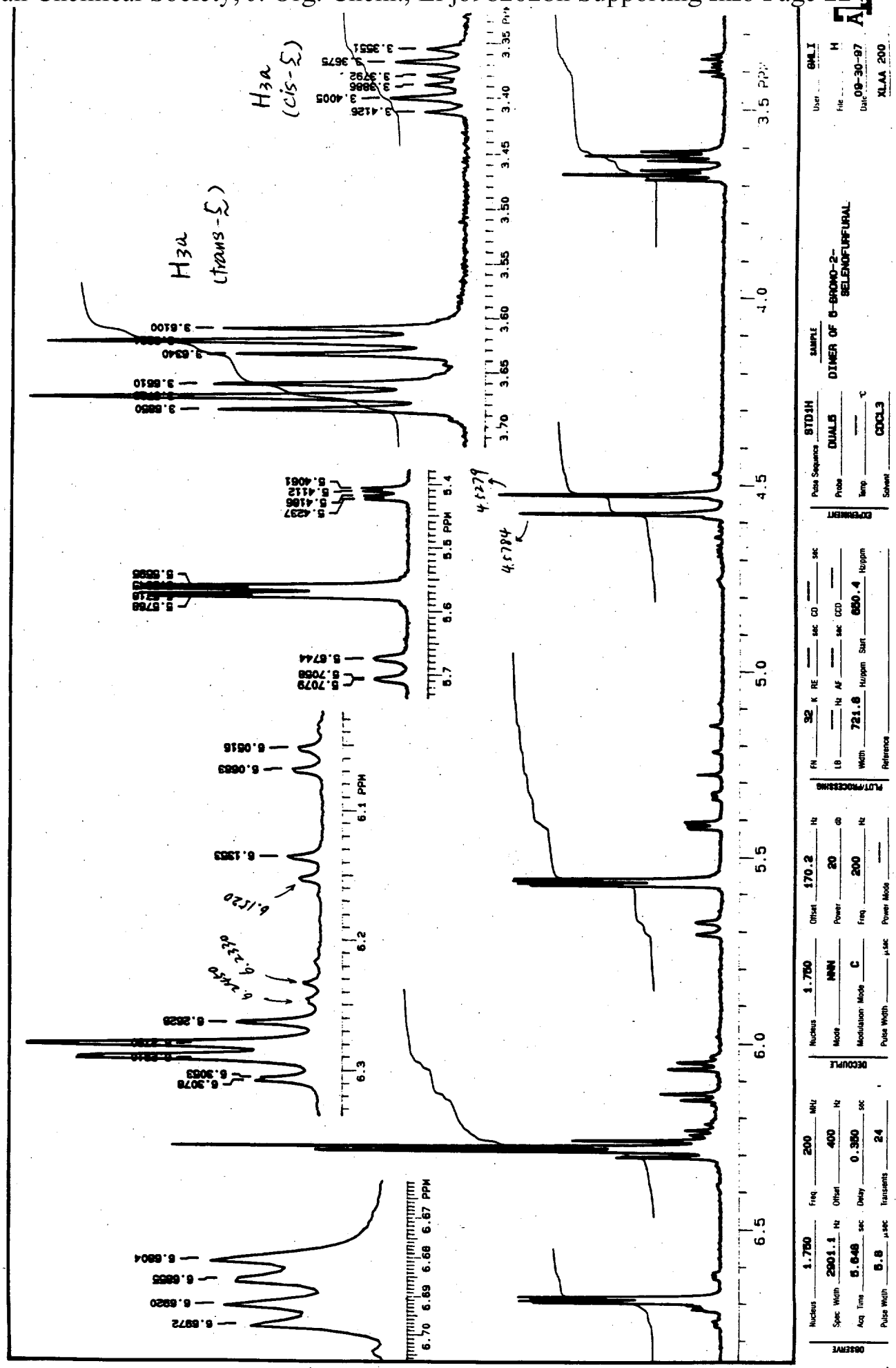
^{13}C NMR

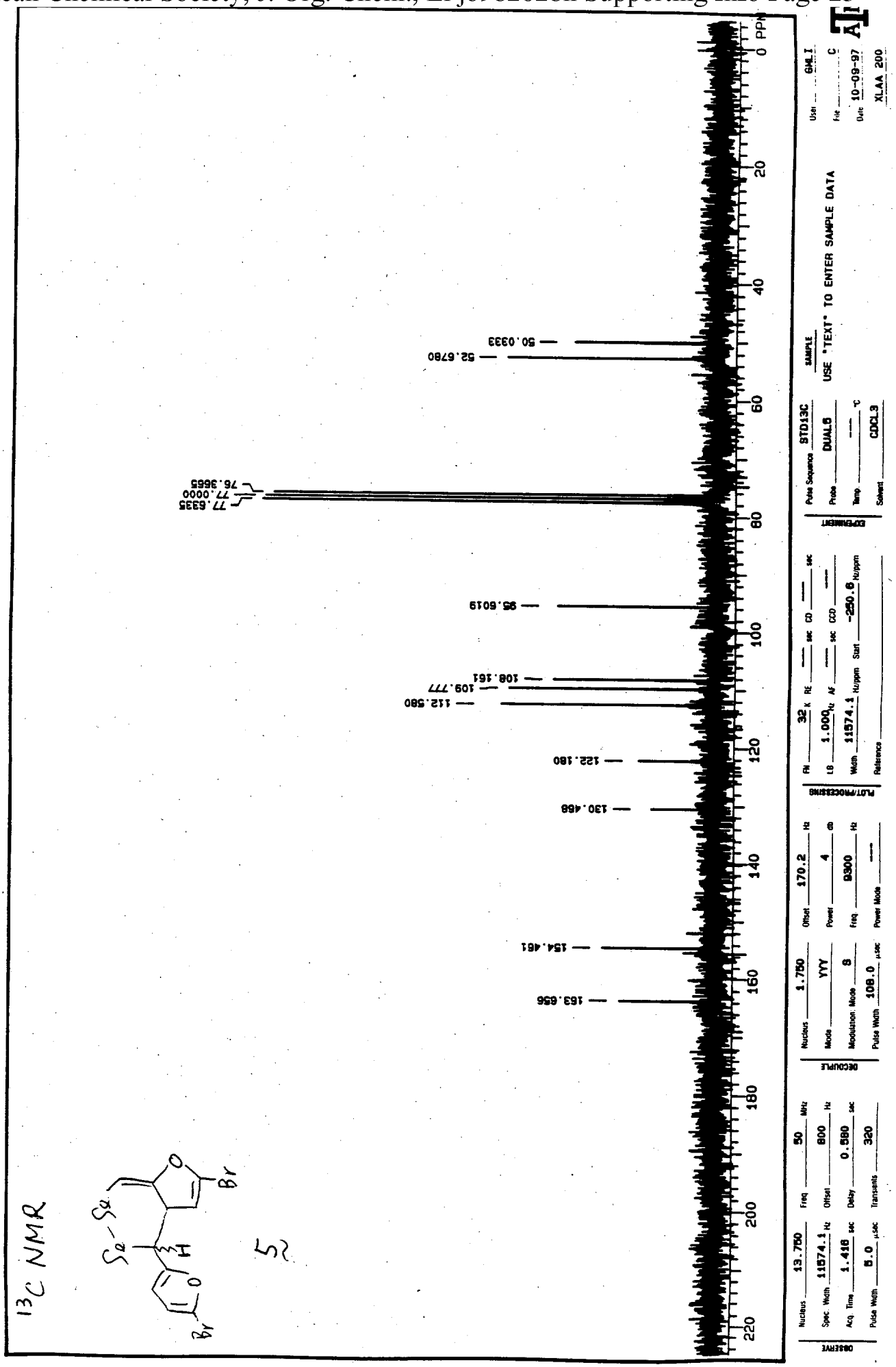




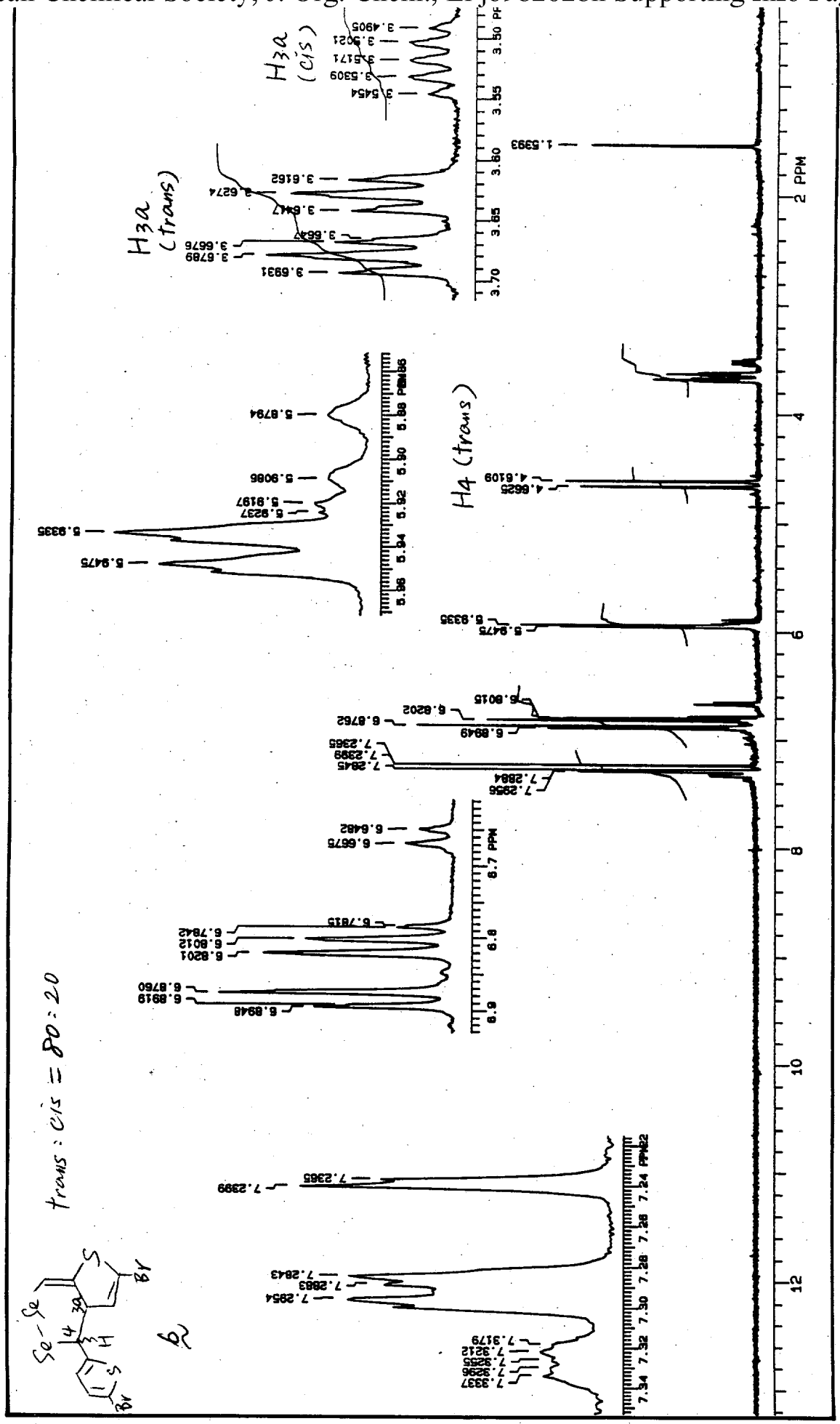


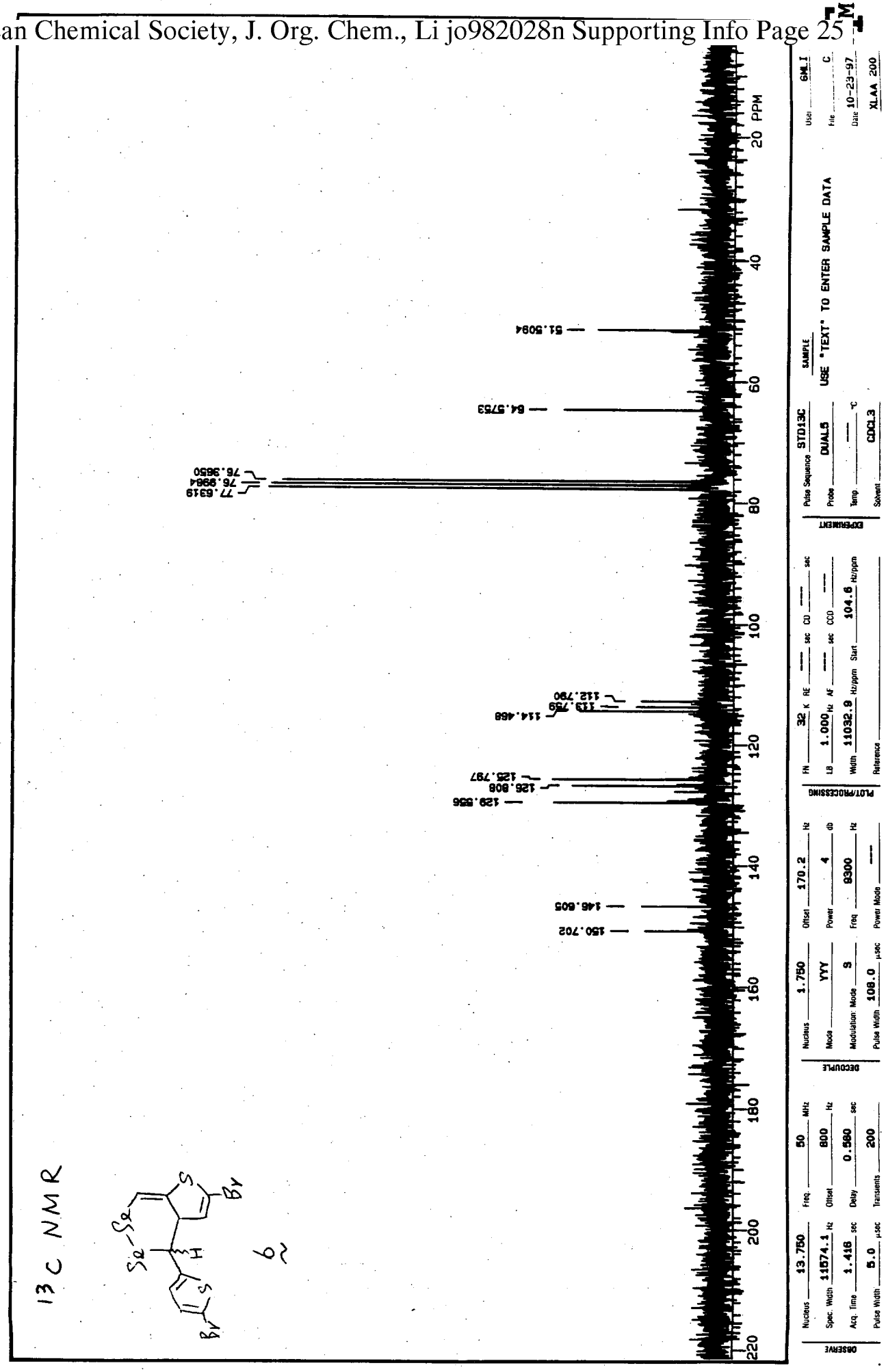




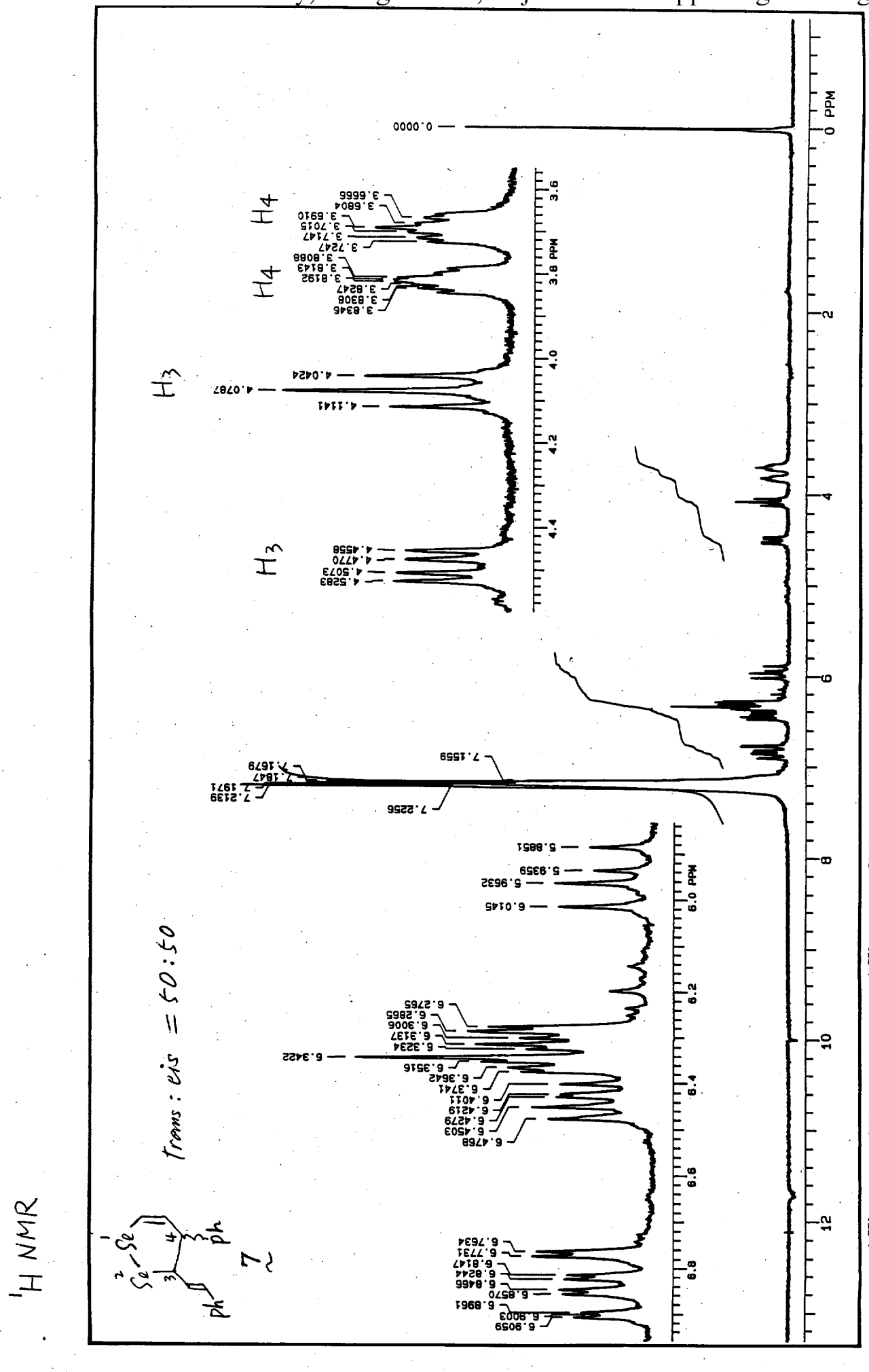


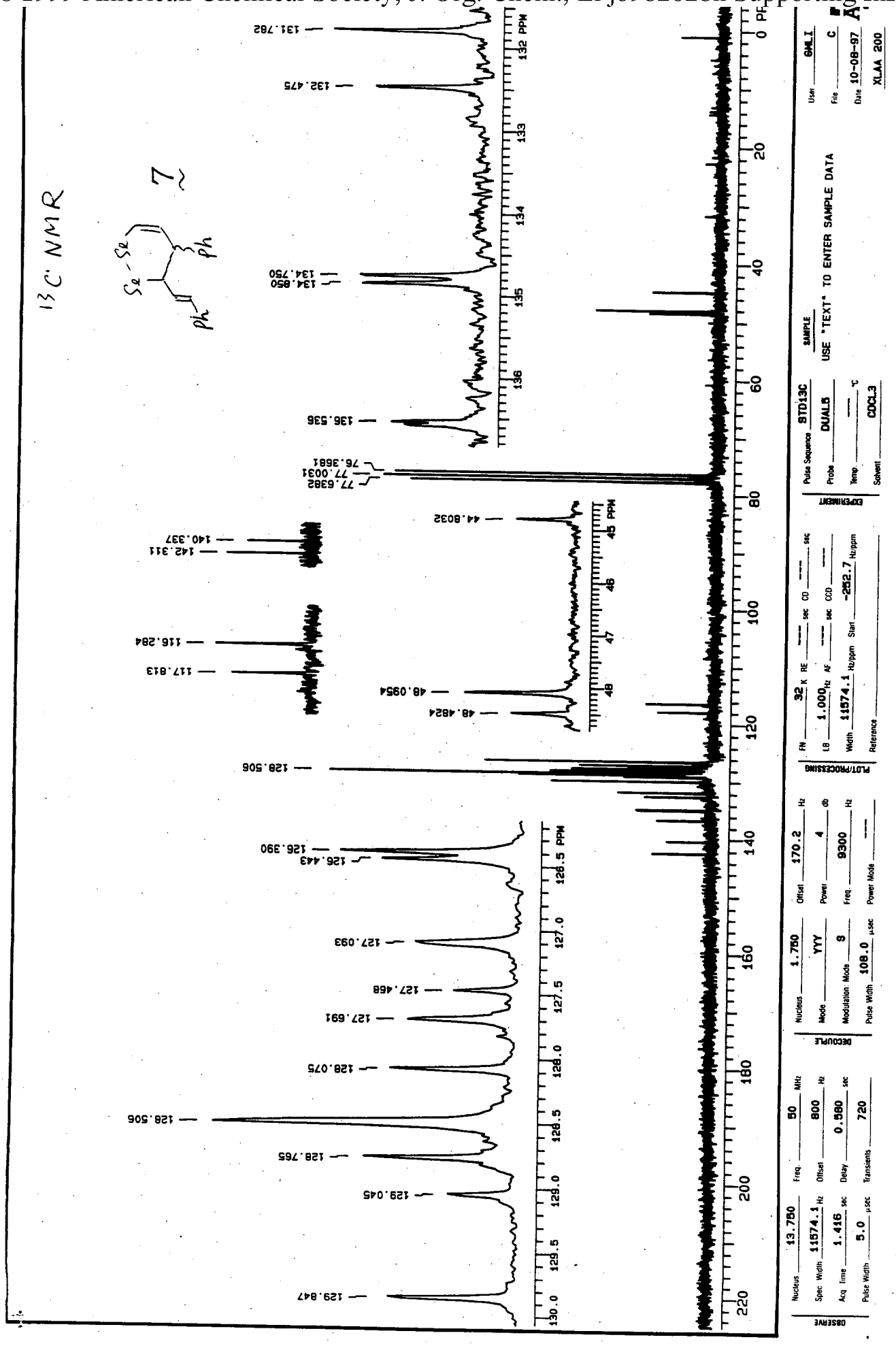
^1H NMR



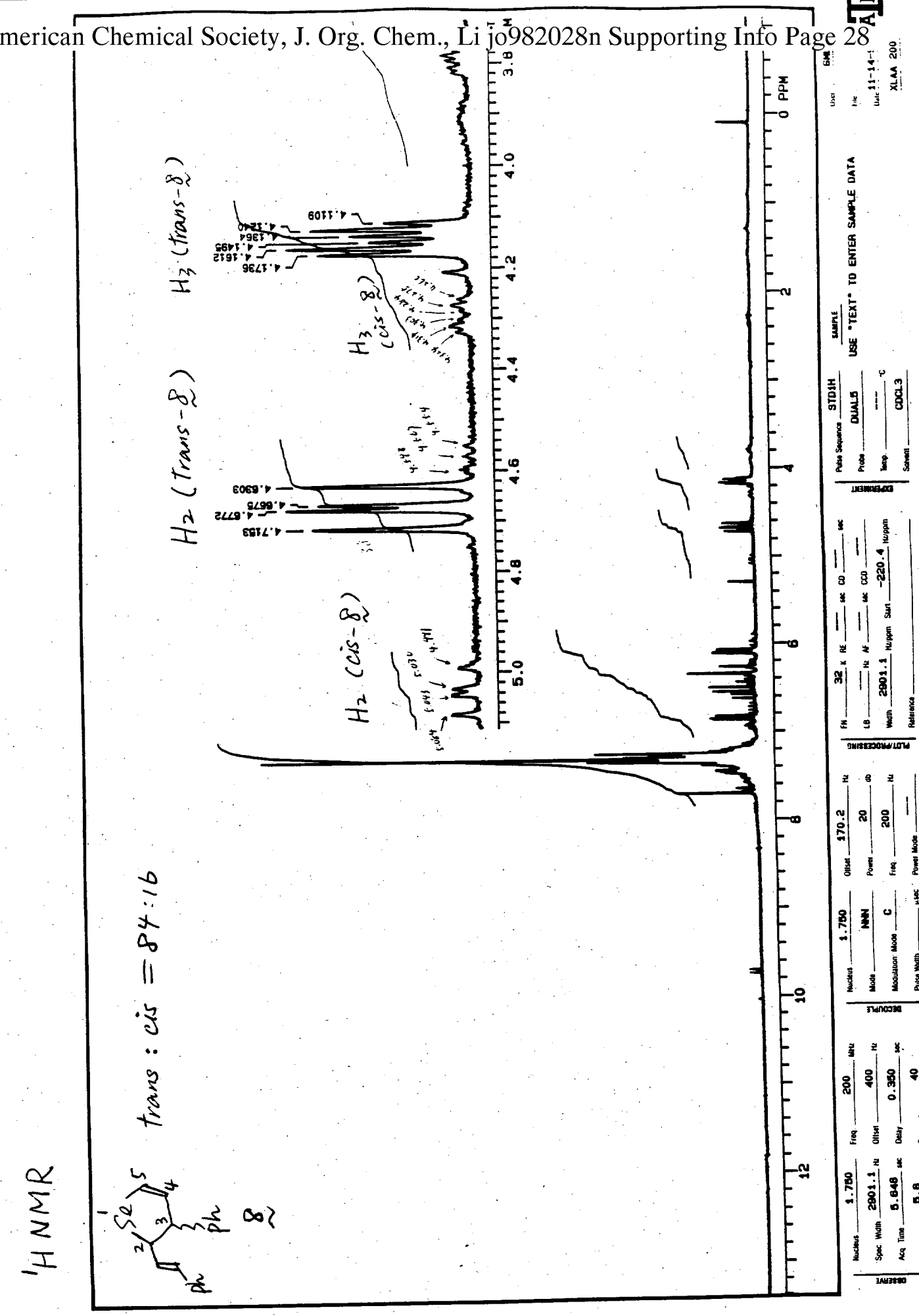


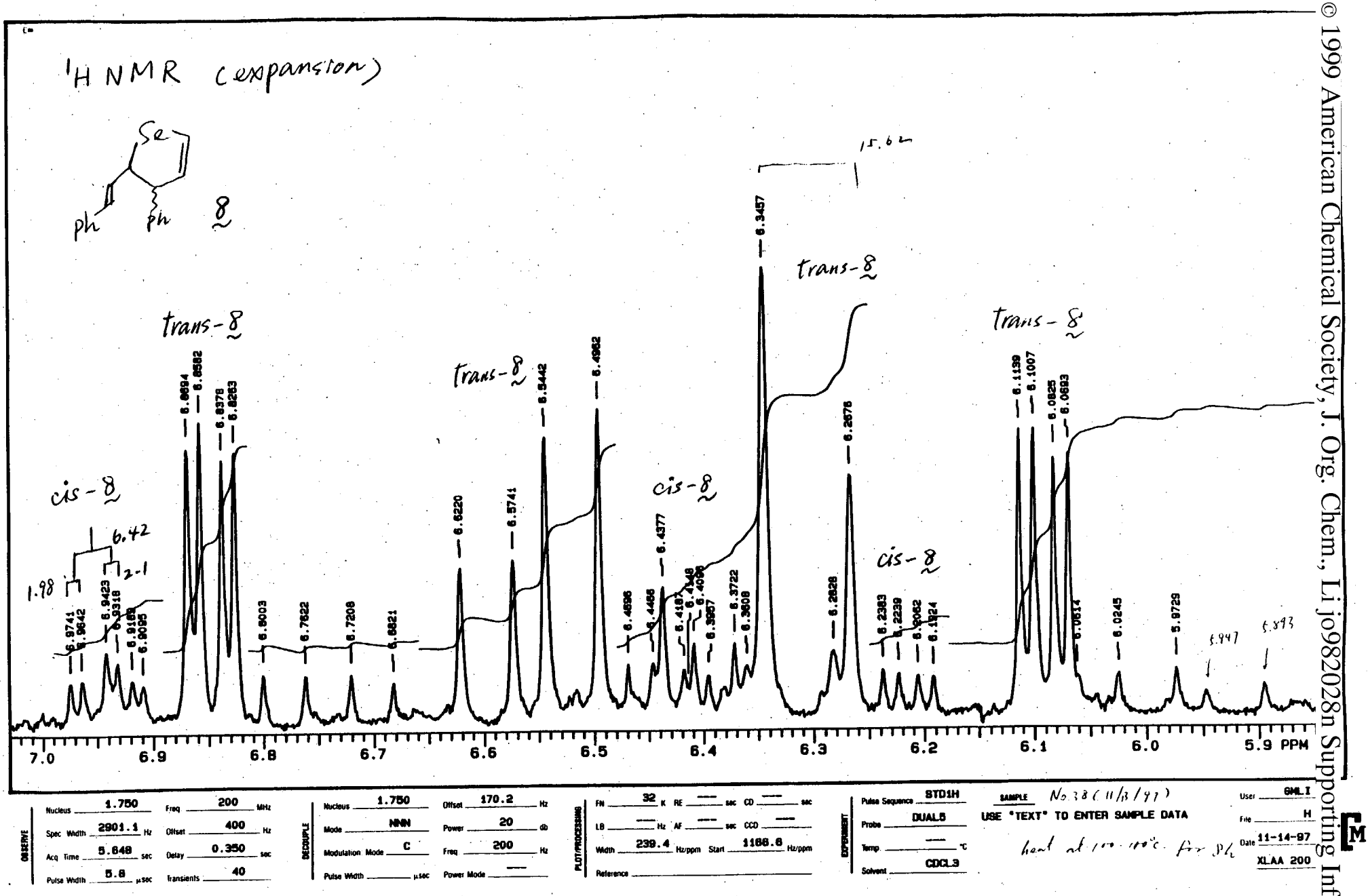
^1H NMR





^1H NMR





OBSERVE: Nucleus 1.750 Freq 200 MHz; Spec Width 2901.1 Hz Offset 400 Hz; Acq Time 5.648 sec Delay 0.350 sec; Pulse Width 5.8 µsec Transients 40

DECOUPLE: Nucleus 1.750 Offset 170.2 Hz; Mode NNN Power 20 db; Modulation Mode C Freq 200 Hz; Pulse Width µsec Power Mode

PLOT/PROCESSING: FN 32 K RE sec CD sec; LB Hz AF sec CCD; Width 239.4 Hz/ppm Start 1186.6 Hz/ppm; Reference

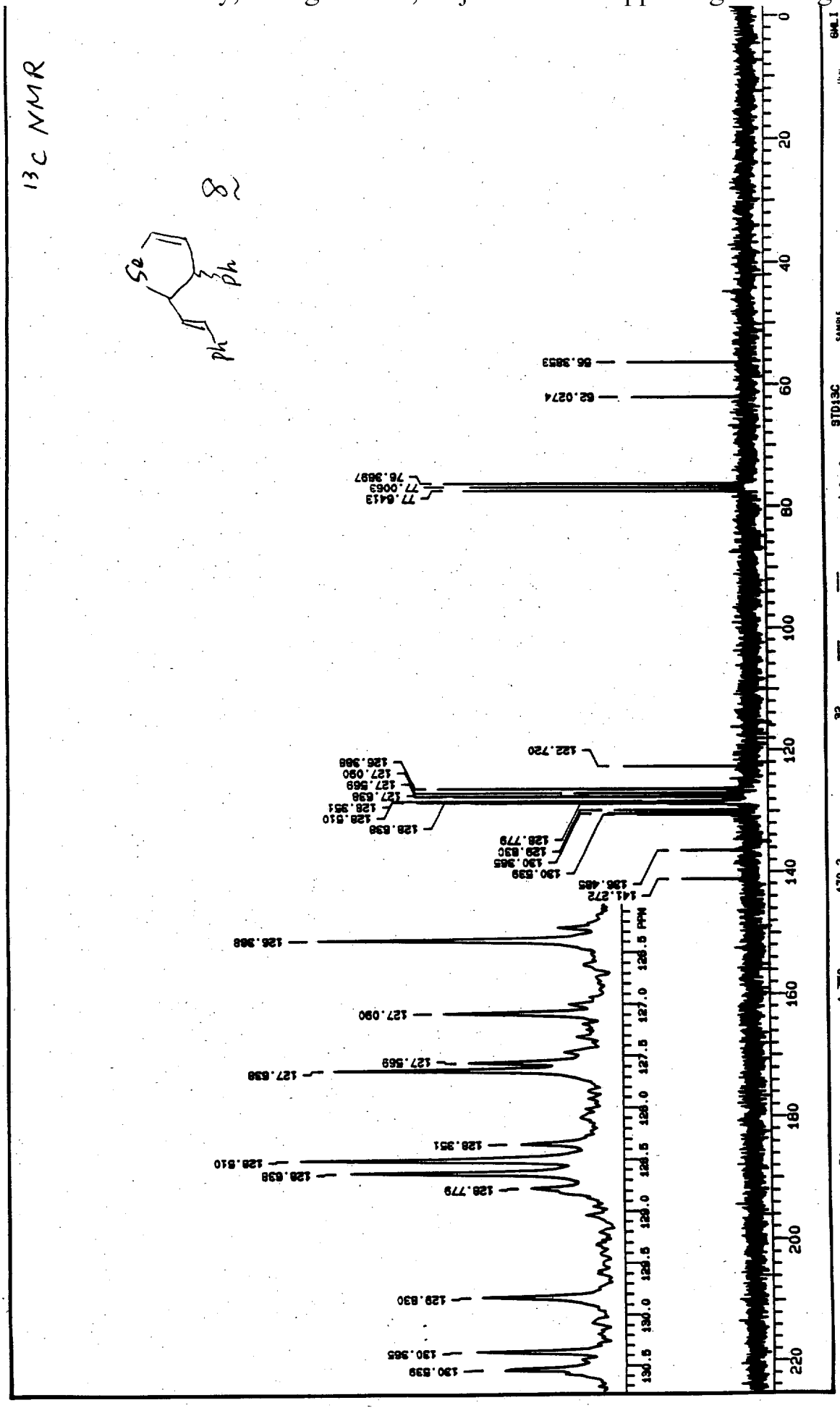
EXPERIMENT: Pulse Sequence STD1H; Probe DUAL5; Temp. °C; Solvent CDCL3

SAMPLE No.38 (11/3/97)

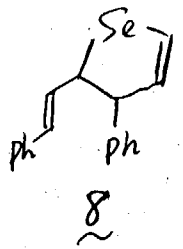
USE "TEXT" TO ENTER SAMPLE DATA

heat at 110-120°C. for 3h

User GMLI; File H; Date 11-14-97; XLAA 200

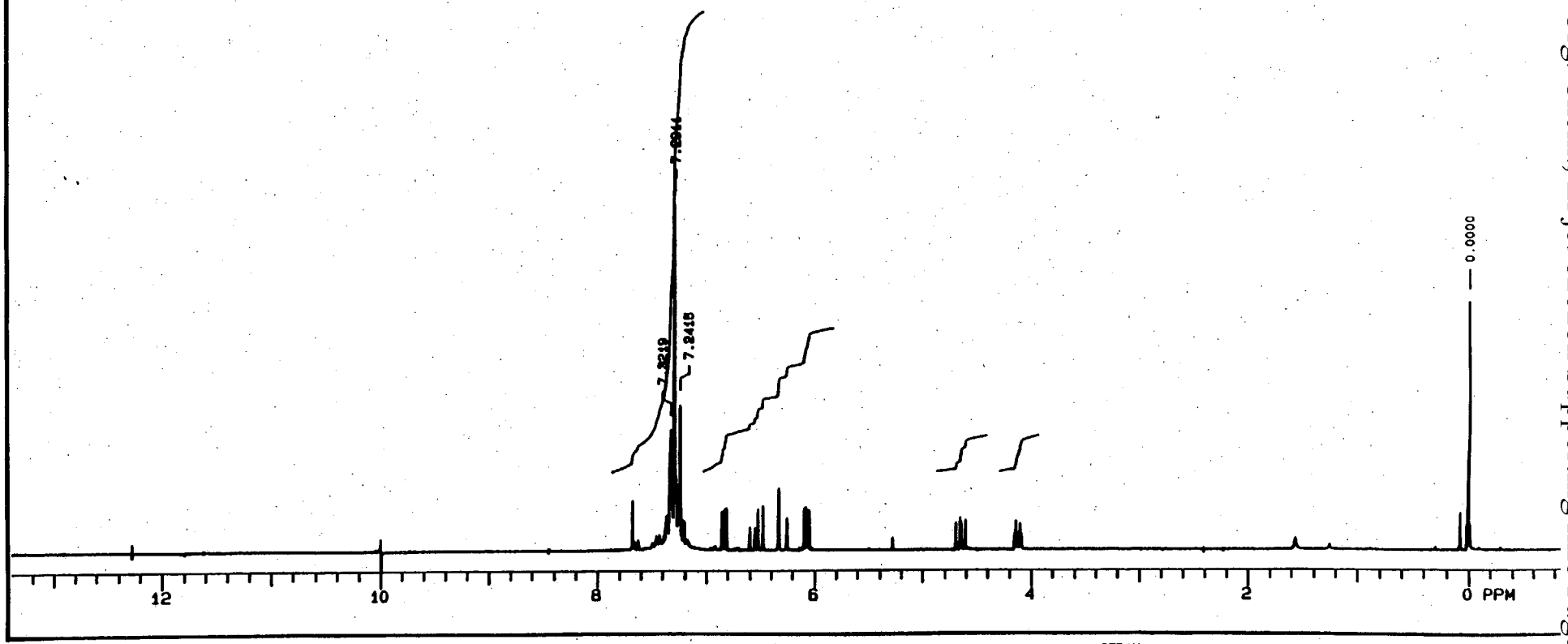


^1H NMR



8

trans-8 (obtained by heating the mixture of trans-8 : cis-8 = 84:16 in toluene at 110°C for 5 hours)



OBSERVE: Nucleus 1.750 Freq. 200 MHz; Spec. Width 2901.1 Hz Offset 400 Hz; Acq. Time 5.648 sec Delay 0.350 sec; Pulse Width 5.8 µsec Transients 40

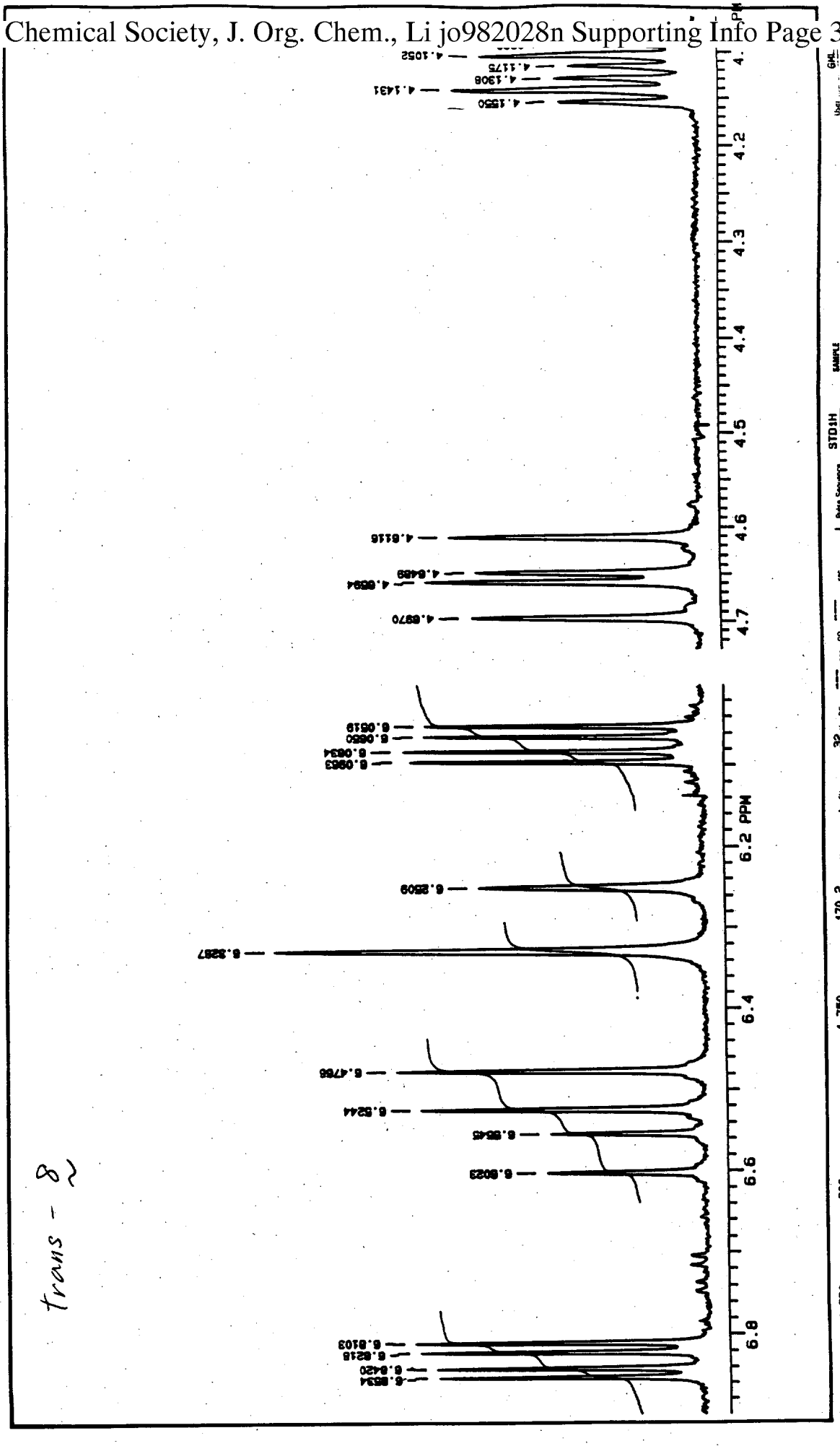
DECOUPLE: Nucleus 1.750 Offset 170.2 Hz; Mode NNN Power 20 db; Modulation Mode C Freq. 200 Hz; Pulse Width ___ µsec Power Mode ---

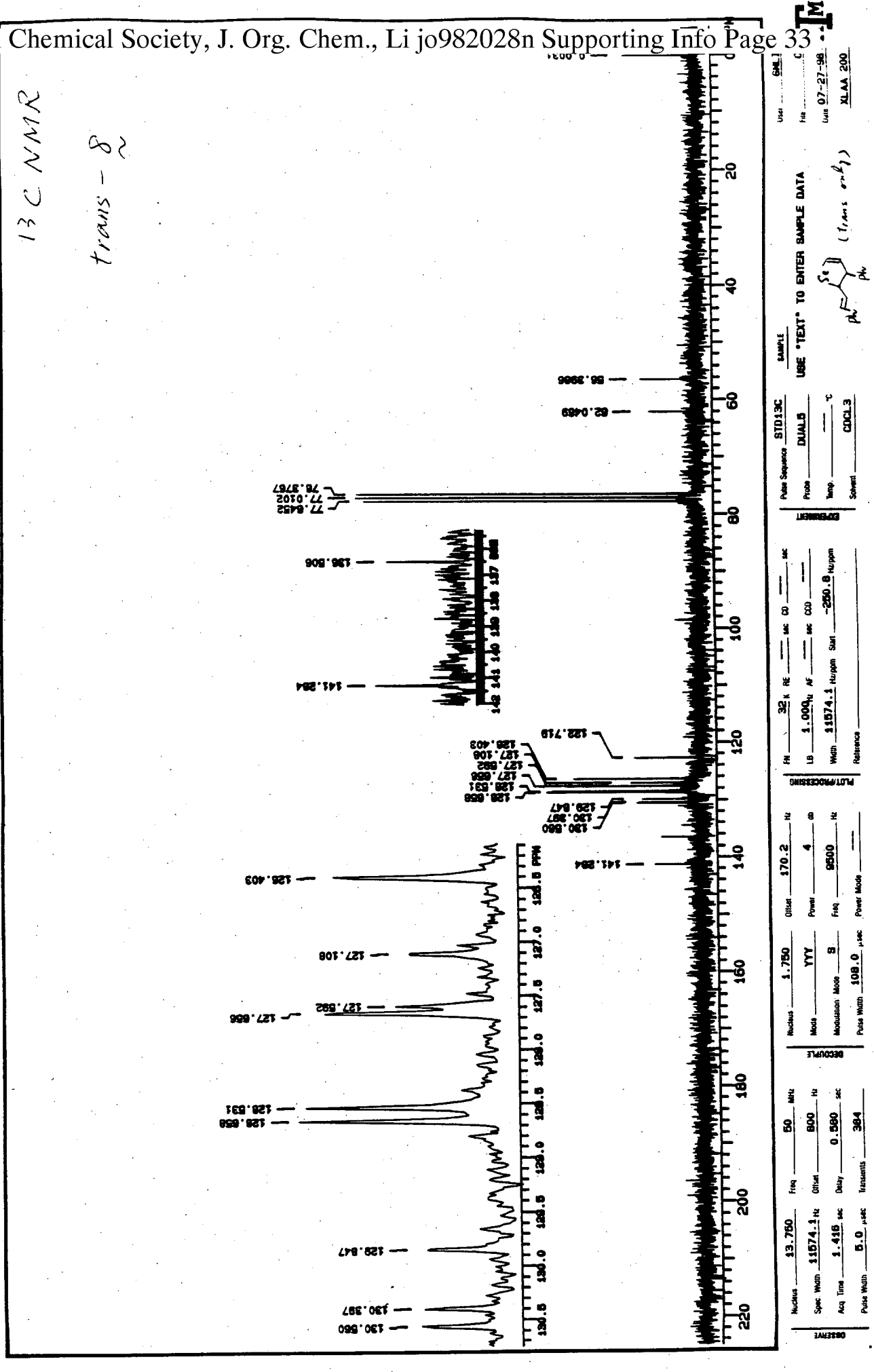
PLOT PROCESSING: FN 32 K RE --- sec CD --- sec; LB --- Hz AF --- sec CCD ---; Width 2901.1 Hz/ppm Start -222.6 Hz/ppm; Reference ___

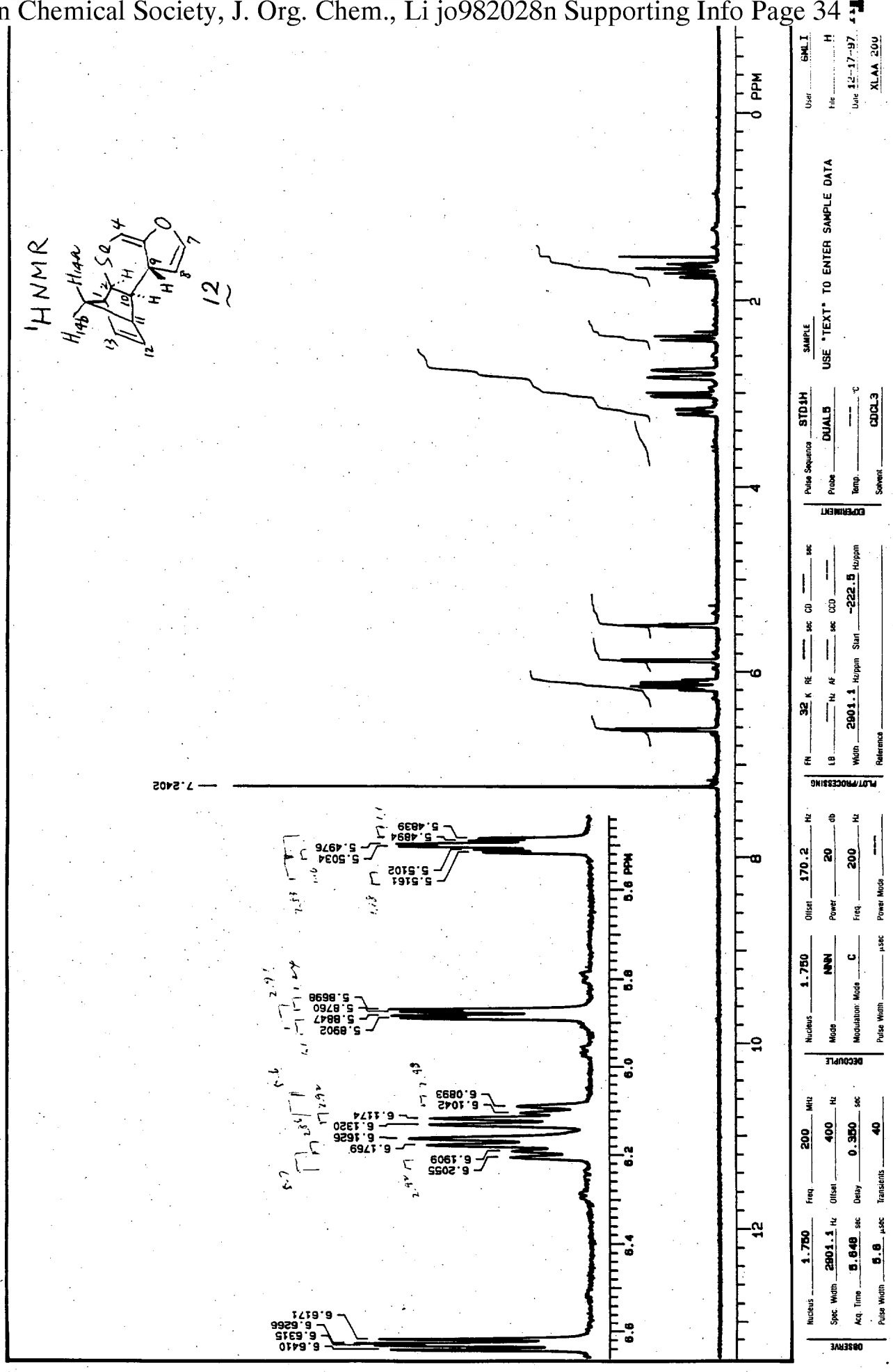
EXPERIMENT: Pulse Sequence STD1H; Probe DUAL5; Temp --- °C; Solvent CDCL3

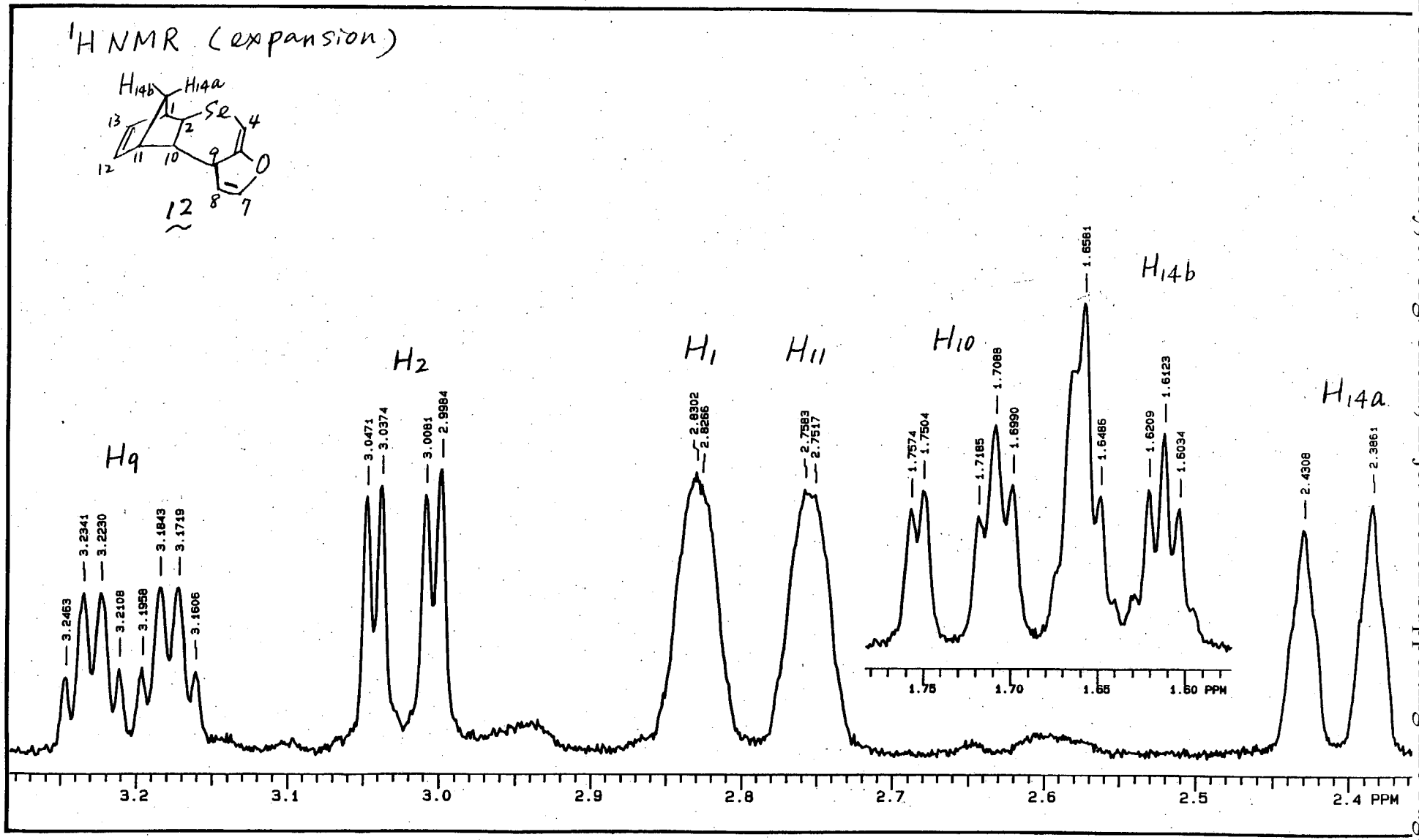
SAMPLE: 8-MEMBER RING FROM DIMER OF SELENOCINNAMALDEHYDE

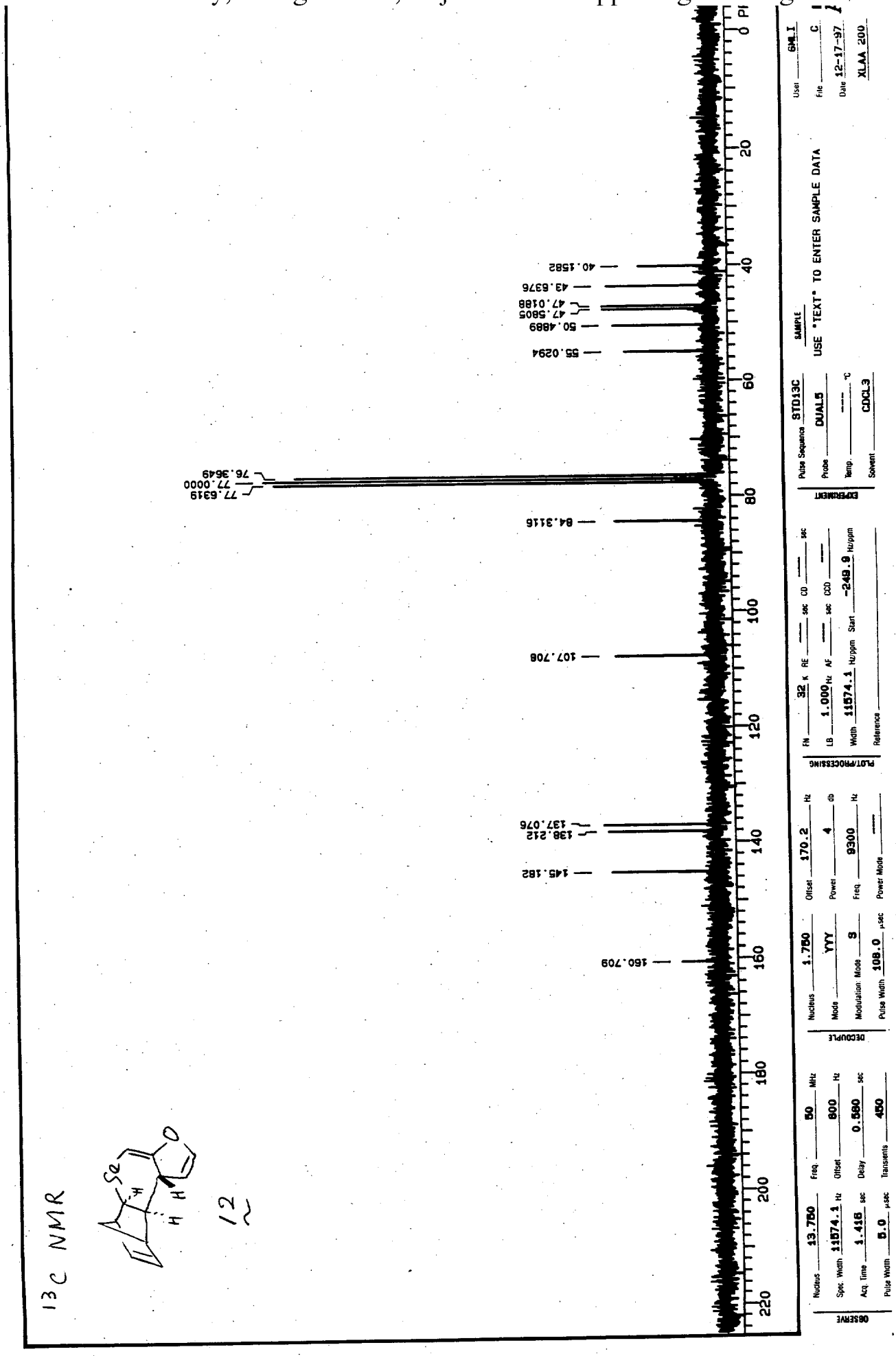
User GHLI; File H; Date 07-21-98; XLAA 200

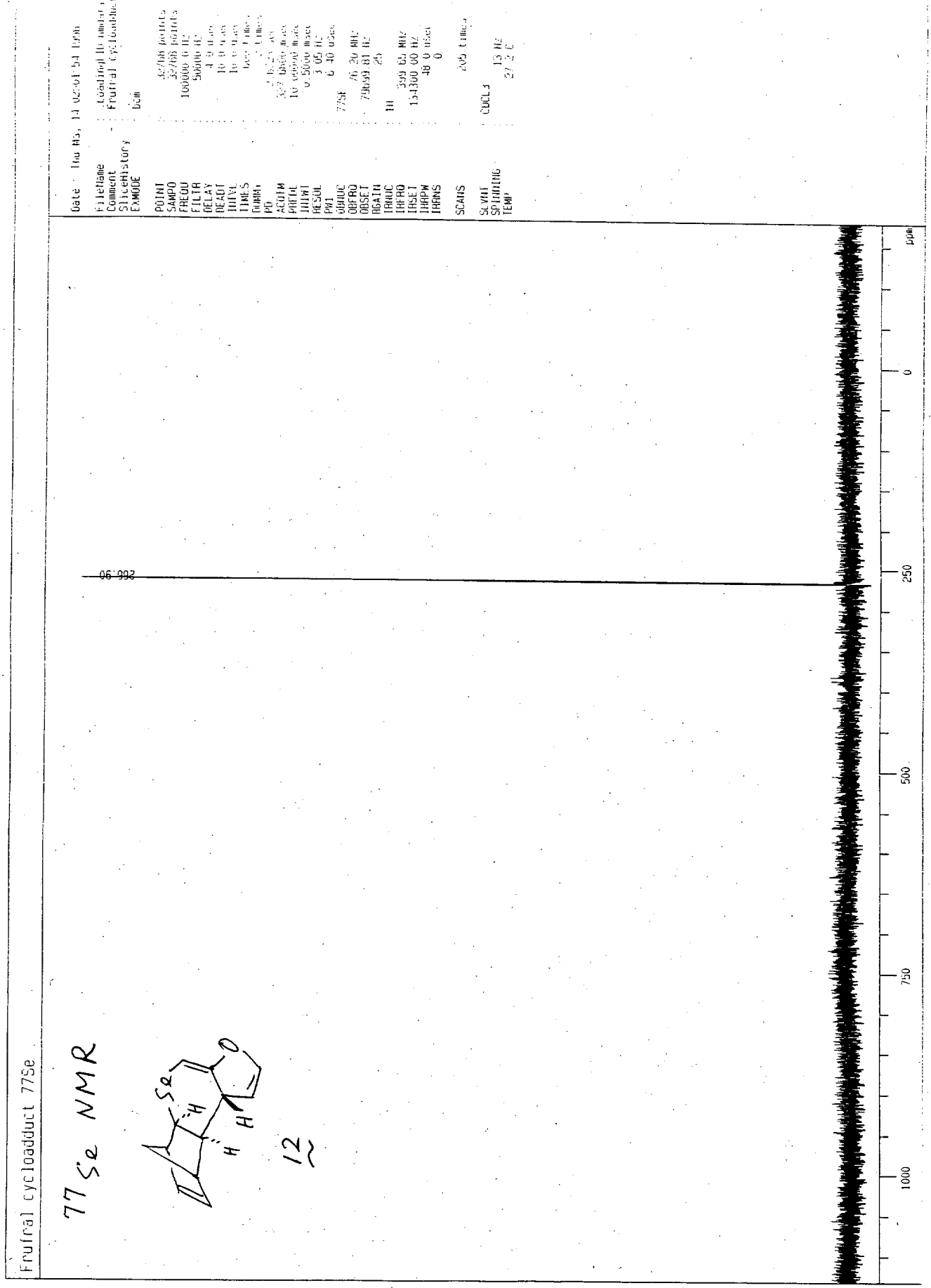




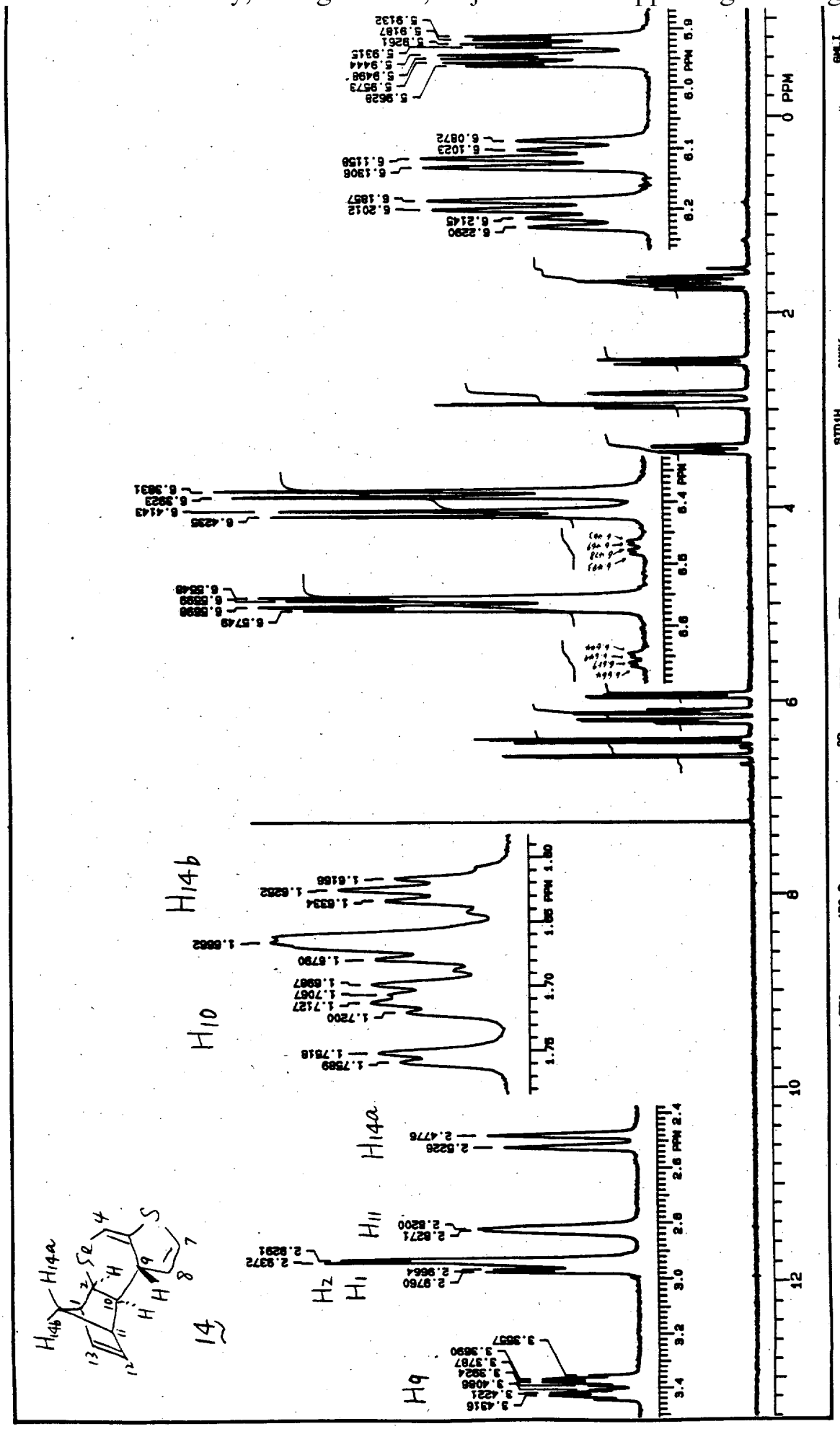








^1H NMR



14