JP99 1589 V-

7/16

Supplementary Materials

revised 30 June 1999

Proofs and correspondence to:
Dr. J. Klinowski
Department of Chemistry, University of Cambridge
Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, U.K.
telephone: 01223–33 65 14
FAX: 01223–33 63 62
e-mail: jk18@cam.ac.uk

X-Ray Diffraction and ^{13}C Solid-State NMR Studies of the Dimethylformamide Solvate of Tetra(C-undecyl)calix[4]resorcinarene

Marek Pietraszkiewicz,[a*] Oksana Pietraszkiewicz,[a] Waclaw Kolodziejski,[b] Krzysztof Wozniak,[c] Neil Feeder,[d] Francesca Benevelli,[d] Jacek Klinowski[d*]

[a]Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa, Poland.

[b]Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Medical University of Warsaw, ul. Banacha 1, 02-097 Warszawa, Poland.

[c]Department of Chemistry, University of Warsaw, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Poland.

[d]Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, United Kingdom.

KEYWORDS: Calixarenes, X-ray structure, ^{13}C CP/MAS NMR, Dimethylformamide, Tetra(C-undecyl)calix[4]-resorcinarene

Abstract. Lipophilic tetra(C-undecyl)calix[4]resorcinarene obtained from resorcinol and lauryl aldehyde forms solvates with many organic solvents. Particularly good quality crystals are obtained from dimethylformamide. Single crystal X-ray diffraction (XRD) analysis of the solvate shows that the calix[4]resorcinarene molecules form centrosymmetric dimers held by Van der Waals interactions of the C-undecyl aliphatic chains. The dimers are associated into layers with hydroxyl groups at the surfaces. Three types of solvent molecules are embedded in the crystal lattice: disordered isolated molecules located just above the cavities formed by the resorcinol units, clusters of four DMF molecules located between the calixarene layers, and single DMF molecules located inside the layers close to the alkyl chains. The solvent molecules join the layers of calix[4]resorcinarenes by means of various hydrogen bonds. The ^{13}C CP/MAS spectra are in agreement with the XRD results.

Table 1. Atomic coordinates for non-hydrogen atoms ($x10^4$),and equivalent / isotropic displacement parameters ($Å^2x10^3$) for CAV11/DMF. U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U_{eq}/U_{iso}
O(1)	4952(5)	1131(2)	9237(5)	39(2)
O(2)	7229(5)	778(2)	6068(5)	44(2)
O(3)	6287(6)	654(2)	3942(5)	49(2)
O(4)	3881(6)	1123(2)	1541(6)	41(2)
O(5)	2497(5)	1728(2)	1122(5)	36(2)
O(6)	231(7)	2059(3)	4318(6)	38(2)
O(7)	536(5)	1655(2)	6234(5)	41(2)
O(8)	2902(5)	1192(2)	8696(5)	35(2)
O(9)	-704(7)	2536(3)	848(8)	89(3)
O(10)	4299(5)	-412(2)	10107(5)	40(2)
O(11)	-655(5)	-1472(2)	9899(5)	51(2)
O(12)	-345(7)	313(3)	11425(7)	82(3)
O(13)	1107(5)	-1584(2)	7075(5)	46(2)
N(1)	1018(8)	2726(3)	715(8)	51(3)
N(2)	3122(6)	84(2)	9807(6)	32(2)
N(3)	531(6)	-1044(3)	11060(7)	37(2)
N(4)	-484(10)	471(4)	13382(10)	82(4)
N(5)	2285(7)	-1553(3)	8491(7)	49(3)
C(1)	5432(7)	1237(3)	8273(7)	25(2)
C(2)	6098(7)	946(3)	7666(8)	35(3)
C(3)	6560(8)	1055(3)	6684(8)	35(3)
C(4)	6339(7)	1439(3)	6281(7)	24(2)
C(5)	5648(7)	1713(3)	6882(7)	26(2)
C(6)	5191(7)	1636(3)	7900(7)	24(2)
C(7)	4432(7)	1937(3)	8542(7)	25(2)
C(8)	4853(7)	2436(3)	8752(7)	32(3)
C(9)	5815(7)	2538(3)	9511(7)	37(3)
C(10)	6163(9)	3047(4)	9656(9)	77(4)
C(11)	6970(9)	3202(4)	10459(9)	75(4)
C(12)	7358(11)	3688(4)	10376(11)	108(6)
C(13)	6673(10)	4060(4)	10777(9)	86(5)
C(14)	7120(9)	4518(4)	10591(9)	73(4)
C(15)	6461(10)	4897(4)	10975(10)	80(4)
C(16)	6897(9)	5354(4)	10725(9)	69(4)
C(17)	6256(10)	5743(4)	11112(11)	88(5)
C(18)	6726(9)	6189(4)	10819(9)	92(5)
C(19)	5833(8)	1018(3)	3643(8)	32(3)
C(20)	5119(8)	926(3)	2759(8)	36(3)
C(21)	4623(8)	1265(3)	2407(7)	30(3)
C(22)	4844(7)	1708(3)	2870(7)	27(2)
C(23)	5582(7)	1792(3)	3766(7)	23(2)
C(24)	6094(7)	1459(3)	4170(7)	27(2)
C(25)	6849(7)	1564(3)	5209(7)	28(3)
C(26)	7328(7)	2051(3)	5407(7)	28(2)
C(27)	8093(7)	2147(3)	6422(8)	36(3)
C(28)	8613(7)	2615(3)	6572(8)	39(3)
C(29)	9287(8)	2731(3)	7644(8)	51(3)
C(30)	9879(11)	3185(4)	7792(11)	97(5)
C(31)	9414(12)	3556(4)	7988(13)	134(8)
C(32)	9996(11)	4013(4)	8076(12)	104(5)
C(33)	9363(10)	4394(4)	8213(12)	96(5)
C(34)	9813(10)	4847(4)	8147(10)	77(4)
C(35)	9170(11)	5227(4)	8274(12)	106(5)
C(36)	9609(10)	5673(4)	8191(12)	124(6)

C(37)	2326(8)	1899(3)	2267(8)	28(3)
C(38)	1344(8)	1891(3)	2705(7)	30(3)
C(39)	1186(8)	2061(3)	3846(8)	26(2)
C(40)	1994(8)	2239(3)	4571(7)	26(2)
C(41)	2968(7)	2229(3)	4130(7)	29(3)
C(42)	3158(7)	2072(3)	2967(7)	21(2)
C(43)	4265(7)	2082(3)	2509(7)	25(2)
C(44)	4808(7)	2553(2)	2846(7)	26(2)
C(45)	4258(7)	2923(3)	2415(7)	37(3)
C(46)	4665(7)	3384(3)	3012(7)	34(3)
C(47)	4150(7)	3766(3)	2590(8)	40(3)
C(48)	4474(8)	4226(3)	3253(8)	44(3)
C(49)	3974(8)	4606(3)	2807(8)	46(3)
C(50)	4297(7)	5071(3)	3453(7)	36(3)
C(51)	3859(8)	5452(3)	2985(8)	51(3)
C(52)	4216(8)	5918(3)	3648(8)	43(3)
C(53)	3799(8)	6290(3)	3128(9)	54(3)
C(54)	4190(8)	6752(3)	3751(8)	56(3)
C(55)	1489(7)	1755(3)	6776(7)	28(2)
C(56)	1770(7)	1455(3)	7460(7)	31(3)
C(57)	2692(8)	1508(3)	8044(7)	26(2)
C(58)	3385(7)	1875(3)	7924(7)	24(2)
C(59)	3061(7)	2161(3)	7210(7)	29(3)
C(60)	2132(7)	2119(3)	6620(7)	23(2)
C(61)	1853(8)	2434(3)	5838(7)	31(3)
C(62)	2384(7)	2913(2)	6138(7)	32(3)
C(63)	1961(7)	3242(3)	5418(7)	30(2)
C(64)	2370(8)	3716(3)	5837(7)	41(3)
C(65)	1913(7)	4064(3)	5245(8)	40(3)
C(66)	2264(8)	4542(3)	5776(8)	54(3)
C(67)	1752(8)	4902(3)	5284(8)	53(3)
C(68)	2058(8)	5372(3)	5871(8)	53(3)
C(69)	1544(9)	5743(3)	5425(9)	66(4)
C(70)	1861(10)	6213(3)	6107(9)	73(4)
C(71)	1339(11)	6573(3)	5736(10)	95(5)
C(72)	1668(10)	7032(3)	6420(9)	98(5)
C(73)	109(11)	2504(4)	370(10)	60(4)
C(74)	1060(9)	3017(4)	1819(10)	99(5)
C(75)	1954(8)	2660(3)	68(9)	69(4)
C(76)	3643(8)	-140(3)	10444(9)	40(3)
C(77)	3336(8)	47(3)	8572(7)	50(3)
C(78)	2301(7)	345(3)	10279(8)	44(3)
C(79)	-237(8)	-1105(4)	10297(8)	42(3)
C(80)	1001(8)	-600(3)	11519(9)	72(4)
C(81)	949(7)	-1424(3)	11464(8)	51(3)
C(82)	-216(10)	560(4)	12346(13	75(4)
C(83)	-309(12)	804(4)	14424(11	125(6)
C(84)	-969(11)	65(5)	13492(12	126(6)
C(85)	1623(9)	-1772(3)	7737(9)	45(3)
C(86)	2899(8)	-1791(4)	9190(9)	78(4)
C(87)	2482(8)	-1080(3)	8637(9)	66(4)
N(6)	3151(7)	693(3)	4565(8)	43(2)
O(14)	2745(6)	31(2)	3384(6)	60(2)
C(88)	2820(19)	450(8)	3650(20)	53(7)
C(89)	3178(23)	1146(14)	4965(47)	127(17)
C(90)	3733(17)	458(7)	5417(17)	63(7)
N(6')	3151(7)	693(3)	4565(8)	43(2)
O(14')	2745(6)	31(2)	3384(6)	60(2)
C(88')	3250(18)	285(8)	4204(23)	51(6)
C(89')	2304(17)	915(6)	3937(18)	56(7)
C(90')	3752(17)	1047(11)	5208(38)	102(16)

H(1)	5270(37)	945(22)	9495(43)	47
H(2)	7308(54)	564(16)	6390(42)	52
H(3)	6598(62)	731(8)	4555(42)	59
H(4)	3489(87)	1313(33)	1378(93)	69(52)
H(5)	1968(19)	1598(25)	826(20)	44
H(6)	-191(86)	1916(34)	4006(91)	70(50)
H(7)	430(29)	1845(16)	5837(59)	49
H(8)	3672(85)	1261(32)	9022(84)	92(42)
H(2)	6232(7)	682(3)	7916(8)	42
H(5)	5479(7)	1965(3)	6589(7)	32
H(7)	4335(7)	1848(3)	9294(7)	30
H(8)	5002(7)	2523(3)	8016(7)	39
H(8)	4320(7)	2618(3)	9102(7)	39
H(9A)	6360(7)	2362(3)	9167(7)	45
H(9B)	5676(7)	2457(3)	10257(7)	45
H(10A)	6375(9)	3112(4)	8914(9)	93
H(10B)	5574(9)	3217(4)	9882(9)	93
H(11A)	7531(9)	3008(4)	10314(9)	90
H(11B)	6729(9)	3190(4)	11229(9)	90
H(12A)	7997(11)	3754(4)	10811(11)	129
H(12B)	7517(11)	3697(4)	9580(11)	129
H(13A)	6547(10)	4070(4)	11588(9)	103
H(13B)	6020(10)	3994(4)	10372(9)	103
H(14A)	7774(9)	4582(4)	10996(9)	88
H(14B)	7251(9)	4505(4)	9780(9)	88
H(15A)	6360(10)	4921(4)	11794(10)	96
H(15B)	5795(10)	4827(4)	10599(10)	96
H(16A)	7567(9)	5420(4)	11093(9)	82
H(16B)	6993(9)	5329(4)	9905(9)	82
H(17A)	6170(10)	5776(4)	11936(11)	105
H(17B)	5582(10)	5678(4)	10753(11)	105
H(18A)	6254(28)	6418(7)	11016(65)	139
H(18B)	6860(59)	6153(8)	10012(16)	139
H(18C)	7355(33)	6274(14)	11245(54)	139
H(20)	4972(8)	632(3)	2398(8)	43
H(23)	5739(7)	2088(3)	4110(7)	27
H(25)	7414(7)	1369(3)	5033(7)	34
H(26A)	7676(7)	2107(3)	4717(7)	34
H(26B)	6785(7)	2255(3)	5548(7)	34
H(27A)	7735(7)	2109(3)	7119(8)	43
H(27B)	8611(7)	1930(3)	6303(8)	43
H(28A)	9029(7)	2642(3)	5906(8)	47
H(28B)	8093(7)	2830(3)	6606(8)	47
H(29A)	8859(8)	2722(3)	8308(8)	61
H(29B)	9773(8)	2503(3)	7631(8)	61
H(30A)	10367(11)	3196(4)	8418(11)	116
H(30B)	10275(11)	3192(4)	7104(11)	116
H(31A)	9049(12)	3557(4)	8700(13)	161
H(31B)	8898(12)	3538(4)	7386(13)	161
H(32A)	10472(11)	4051(4)	8723(12)	125
H(32B)	10398(11)	4014(4)	7389(12)	125
H(33A)	9039(10)	4410(4)	8953(12)	116
H(33B)	8820(10)	4325(4)	7636(12)	116
H(34A)	10351(10)	4918(4)	8730(10)	92
H(34B)	10144(10)	4831(4)	7410(10)	92
H(35A)	8625(11)	5153(4)	7699(12)	128
H(35B)	8848(11)	5246(4)	9016(12)	128
H(36A)	9164(34)	5892(4)	8550(65)	148
H(36B)	9685(61)	5699(10)	7398(12)	148
H(36C)	10268(31)	5721(11)	8570(64)	148
H(38)	790(8)	1771(3)	2230(7)	36

H(41)	3522(7)	2332(3)	4622(7)	35
H(43)	4210(7)	2021(3)	1669(7)	30
H(44A)	4868(7)	2624(2)	3676(7)	31
H(44B)	5495(7)	2550(2)	2543(7)	31
H(45A)	4350(7)	2900(3)	1594(7)	45
H(45B)	3529(7)	2883(3)	2552(7)	45
H(46A)	5396(7)	3419(3)	2889(7)	41
H(46B)	4562(7)	3407(3)	3831(7)	41
H(47A)	4307(7)	3759(3)	1788(8)	48
H(47B)	3413(7)	3714(3)	2644(8)	48
H(48A)	5213(8)	4275(3)	3214(8)	53
H(48B)	4301(8)	4235(3)	4053(8)	53
H(49A)	4141(8)	4594(3)	2005(8)	55
H(49B)	3235(8)	4557(3)	2852(8)	55
H(50A)	4095(7)	5088(3)	4246(7)	43
H(50B)	5039(7)	5112(3)	3447(7)	43
H(51A)	3117(8)	5416(3)	3005(8)	61
H(51B)	4053(8)	5435(3)	2189(8)	61
H(52A)	3995(8)	5942(3)	4437(8)	52
H(52B)	4959(8)	5952(3)	3656(8)	52
H(53A)	3056(8)	6265(3)	3152(9)	65
H(53B)	3993(8)	6258(3)	2330(9)	65
H(54A)	3947(34)	6977(3)	3357(27)	67
H(54B)	4926(8)	6773(7)	3766(40)	67
H(54C)	3944(34)	6796(7)	4523(16)	67
H(56)	1323(7)	1210(3)	7526(7)	37
H(59)	3510(7)	2403(3)	7121(7)	35
H(61)	1117(8)	2468(3)	5931(7)	37
H(62A)	2290(7)	3027(2)	6945(7)	39
H(62B)	3114(7)	2899(2)	6011(7)	39
H(63A)	2146(7)	3154(3)	4623(7)	36
H(63B)	1219(7)	3225(3)	5454(7)	36
H(64A)	3106(8)	3734(3)	5736(7)	49
H(64B)	2246(8)	3789(3)	6653(7)	49
H(65A)	2102(7)	4013(3)	4444(8)	48
H(65B)	1172(7)	4028(3)	5277(8)	48
H(66A)	2137(8)	4582(3)	6593(8)	65
H(66B)	2998(8)	4584(3)	5680(8)	65
H(67A)	1916(8)	4876(3)	4478(8)	63
H(67B)	1015(8)	4850(3)	5335(8)	63
H(69A)	2793(8)	5424(3)	5804(8)	63
H(68B)	1912(8)	5393(3)	6681(8)	63
H(69A)	806(9)	5689(3)	5462(9)	79
H(69B)	1717(9)	5736(3)	4626(9)	79
H(70A)	1723(10)	6214(3)	6912(9)	88
H(70B)	2594(10)	6273(3)	6035(9)	88
H(71A)	606(11)	6516(3)	5811(10)	114
H(71B)	1475(11)	6574(3)	4931(10)	114
H(72A)	1296(41)	7255(4)	6145(43)	118
H(72B)	2389(14)	7094(11)	6329(50)	118
H(72C)	1526(53)	7034(8)	7216(13)	118
H(73A)	109(11)	2304(4)	-318(10)	72
H(74A)	1742(9)	3154(4)	1965(10)	119
H(74B)	877(9)	2846(4)	2408(10)	119
H(74C)	588(9)	3246(4)	1817(10)	119
H(75A)	2507(8)	2848(3)	464(9)	82
H(75B)	1860(8)	2735(3)	-680(9)	82
H(75C)	2112(8)	2352(3)	-6(9)	82
H(76A)	3512(8)	-91(3)	11226(9)	48
H(77A)	2892(8)	230(3)	8233(7)	60
H(77B)	3217(8)	-259(3)	8205(7)	60

H(77C)	4037(8)	147(3)	8474(7)	60
H(78A)	2009(7)	484(3)	9694(8)	53
H(78B)	2562(7)	571(3)	10898(8)	53
H(78C)	1783(7)	154(3)	10560(8)	53
H(79A)	-471(8)	-854(4)	10050(8)	50
H(80A)	1539(8)	-626(3)	12054(9)	86
H(80B)	492(8)	-418(3)	11903(9)	86
H(80C)	1281(8)	-463(3)	10903(9)	86
H(81A)	1495(7)	-1318(3)	12008(8)	61
H(81B)	1208(7)	-1621(3)	10825(8)	61
H(81C)	419(7)	-1582(3)	11825(8)	61
H(82A)	102(10)	842(4)	12329(13)	90
H(83A)	-549(12)	679(4)	15076(11)	150
H(83B)	-675(12)	1063(4)	14361(11)	150
H(83C)	410(12)	890(4)	14519(11)	150
H(84A)	-1102(11)	58(5)	14286(12)	151
H(84B)	-538(11)	-171(5)	13200(12)	151
H(84C)	-1605(11)	23(5)	13065(12)	151
H(85A)	1527(9)	-2080(3)	7685(9)	54
H(86A)	3341(8)	-1579(4)	9695(9)	93
H(86B)	3305(8)	-1993(4)	8700(9)	93
H(86C)	2455(8)	-1957(4)	9634(9)	93
H(87A)	2990(8)	-985(3)	9232(9)	79
H(87B)	1861(8)	-937(3)	8845(9)	79
H(87C)	2727(8)	-998(3)	7931(9)	79
H(88A)	2598(19)	604(8)	3088(20)	63
H(89A)	3486(23)	1210(14)	5718(47)	153
H(89B)	2493(23)	1242(14)	4998(47)	153
H(89C)	3574(23)	1303(14)	4457(47)	153
H(90A)	3949(17)	673(7)	6080(17)	75
H(90B)	4321(17)	329(7)	5050(17)	75
H(90C)	3287(17)	226(7)	5648(17)	75
H(88C)	3746(18)	152(8)	4574(23)	62
H(89D)	2289(17)	1225(6)	4274(18)	68
H(89E)	1647(17)	763(6)	4016(18)	68
H(89F)	2461(17)	891(6)	3138(18)	68
H(90D)	3392(17)	1316(11)	5285(38)	122
H(90E)	4387(17)	1091(11)	4824(38)	122
H(90F)	3890(17)	979(11)	5954(38)	122

Table 2. Structural parameters of hydrogen bonds and close contacts in CAV11/DMF.

Hydrogen bond D-H...A Sym. Code	Donor-H D-H [Å]	Acceptor...H A...H [Å]	Donor....Acceptor D...A [Å]	D-H...A [°]
O1-H1....O10 1-X,-Y,2-Z	O1-H1 0.82	H1...O10 1.89	O1...O10 2.680	O1-H1...O10 161
O2-H2...O14 1-X,-Y, 1-Z	O2-H2 0.82	H2...O14 1.90	O2...O14 2.644	O2-H2...O14 150
O3-H3...O2	O3-H3 0.82	H3...O2 1.94	O3...O2 2.740	O3-H3...O2 167
O4-H4...O5	O4-H4 0.73	H4...O5 2.05	O4...O5 2.769	O4-H4...O5 170

O5-H5...O11 -X,-Y, 1-Z	O5-H5 0.82	H5...O11 1.90	O5...O11 2.691	O5-H5...O11 162
O6-H6...O1 -X,-Y, 1-Z	O6-H6 0.71	H6...O13 1.90	O6...O13 2.577	O6-H6....O13 162
O7-H7...O6	O7-H7 0.82	H7...O6 2.05	O7...O6 2.796	O7-H7....O6 151
O8-H8...O1	O8-H8 1.10	H8...O1 1.76	O8...O1 2.780	O8-H8....O1 153

Table 3. Bond lengths and valence angles for CAV11/DMF.

Bond	Bond length [Å]
O(1)-C(1)	1.380(9)
O(1)-H(1)	0.82
O(2)-C(3)	1.380(9)
O(2)-H(2)	0.82
O(3)-C(19)	1.386(9)
O(3)-H(3)	0.82
O(4)-C(21)	1.401(10)
O(4)-H(4)	0.84(10)
O(5)-C(37)	1.391(9)
O(5)-H(5)	0.82
O(6)-C(39)	1.372(11)
O(6)-H(6)	0.74(10)
O(7)-C(55)	1.389(10)
O(7)-H(7)	0.82
O(8)-C(57)	1.370(10)
O(8)-H(8)	1.07(11)
O(9)-C(73)	1.210(12)
O(10)-C(76)	1.251(10)
O(11)-C(79)	1.224(10)
O(12)-C(82)	1.218(12)
O(13)-C(85)	1.262(10)
N(1)-C(73)	1.352(12)
N(1)-C(74)	1.448(11)
N(1)-C(75)	1.454(11)
N(2)-C(76)	1.314(11)
N(2)-C(78)	1.437(10)
N(2)-C(77)	1.476(10)
N(3)-C(79)	1.329(11)
N(3)-C(81)	1.458(10)
N(3)-C(80)	1.461(10)
N(4)-C(82)	1.342(14)
N(4)-C(84)	1.376(14)
N(4)-C(83)	1.463(13)
N(5)-C(85)	1.304(11)
N(5)-C(87)	1.425(10)
N(5)-C(86)	1.456(11)
C(1)-C(2)	1.397(11)
C(1)-C(6)	1.412(11)
C(2)-C(3)	1.390(11)
C(2)-H(2)	0.93
C(3)-C(4)	1.381(11)
C(4)-C(5)	1.387(11)
C(4)-C(25)	1.528(11)
C(5)-C(6)	1.394(11)
C(5)-H(5)	0.93
C(6)-C(7)	1.515(11)
C(7)-C(58)	1.534(11)
C(7)-C(8)	1.555(10)
C(7)-H(7)	0.98
C(8)-C(9)	1.525(10)
C(8)-H(8)	0.97
C(8)-H(8)	0.97
C(9)-C(10)	1.563(12)
C(9)-H(9A)	0.97
C(9)-H(9B)	0.97
C(10)-C(11)	1.417(12)
C(10)-H(10A)	0.97
C(10)-H(10B)	0.97
C(11)-C(12)	1.548(13)
C(11)-H(11A)	0.97
C(11)-H(11B)	0.97

C(12)-C(13)	1.51(2)
C(12)-H(12A)	0.97
C(12)-H(12B)	0.97
C(13)-C(14)	1.525(13)
C(13)-H(13A)	0.97
C(13)-H(13B)	0.97
C(14)-C(15)	1.496(14)
C(14)-H(14A)	0.97
C(14)-H(14B)	0.97
C(15)-C(16)	1.541(13)
C(15)-H(15A)	0.97
C(15)-H(15B)	0.97
C(16)-C(17)	1.505(14)
C(16)-H(16A)	0.97
C(16)-H(16B)	0.97
C(17)-C(18)	1.546(13)
C(17)-H(17A)	0.97
C(17)-H(17B)	0.97
C(18)-H(18A)	0.96
C(18)-H(18B)	0.96
C(18)-H(18C)	0.96
C(19)-C(20)	1.377(11)
C(19)-C(24)	1.399(11)
C(20)-C(21)	1.374(11)
C(20)-H(20)	0.93
C(21)-C(22)	1.376(11)
C(22)-C(23)	1.409(11)
C(22)-C(43)	1.525(11)
C(23)-C(24)	1.397(11)
C(23)-H(23)	0.93
C(24)-C(25)	1.550(11)
C(25)-C(26)	1.547(10)
C(25)-H(25)	0.98
C(26)-C(27)	1.535(10)
C(26)-H(26A)	0.97
C(26)-H(26B)	0.97
C(27)-C(28)	1.519(10)
C(27)-H(27A)	0.97
C(27)-H(27B)	0.97
C(28)-C(29)	1.519(11)
C(28)-H(28A)	0.97
C(28)-H(28B)	0.97
C(29)-C(30)	1.519(13)
C(29)-H(29A)	0.97
C(29)-H(29B)	0.97
C(30)-C(31)	1.30(2)
C(30)-H(30A)	0.97
C(30)-H(30B)	0.97
C(31)-C(32)	1.52(2)
C(31)-H(31A)	0.97
C(31)-H(31B)	0.97
C(32)-C(33)	1.457(14)
C(32)-H(32A)	0.97
C(32)-H(32B)	0.97
C(33)-C(34)	1.476(13)
C(33)-H(33A)	0.97
C(33)-H(33B)	0.97
C(34)-C(35)	1.461(14)
C(34)-H(34A)	0.97
C(34)-H(34B)	0.97
C(35)-C(36)	1.455(14)
C(35)-H(35A)	0.97
C(35)-H(35B)	0.97
C(36)-H(36A)	0.96
C(36)-H(36B)	0.96
C(36)-H(36C)	0.96

C(37)-C(42)	1.383(11)
C(37)-C(38)	1.388(11)
C(38)-C(39)	1.381(11)
C(38)-H(38)	0.93
C(39)-C(40)	1.380(11)
C(40)-C(41)	1.379(11)
C(40)-C(61)	1.532(11)
C(41)-C(42)	1.407(11)
C(41)-H(41)	0.93
C(42)-C(43)	1.549(11)
C(43)-C(44)	1.544(10)
C(43)-H(43)	0.98
C(44)-C(45)	1.529(10)
C(44)-H(44A)	0.97
C(44)-H(44B)	0.97
C(45)-C(46)	1.520(10)
C(45)-H(45A)	0.97
C(45)-H(45B)	0.97
C(46)-C(47)	1.530(10)
C(46)-H(46A)	0.97
C(46)-H(46B)	0.97
C(47)-C(48)	1.517(11)
C(47)-H(47A)	0.97
C(47)-H(47B)	0.97
C(48)-C(49)	1.531(11)
C(48)-H(48A)	0.97
C(48)-H(48B)	0.97
C(49)-C(50)	1.521(10)
C(49)-H(49A)	0.97
C(49)-H(49B)	0.97
C(50)-C(51)	1.507(10)
C(50)-H(50A)	0.97
C(50)-H(50B)	0.97
C(51)-C(52)	1.542(11)
C(51)-H(51A)	0.97
C(51)-H(51B)	0.97
C(52)-C(53)	1.506(11)
C(52)-H(52A)	0.97
C(52)-H(52B)	0.97
C(53)-C(54)	1.524(11)
C(53)-H(53A)	0.97
C(53)-H(53B)	0.97
C(54)-H(54A)	0.96
C(54)-H(54B)	0.96
C(54)-H(54C)	0.96
C(55)-C(56)	1.381(11)
C(55)-C(60)	1.384(11)
C(56)-C(57)	1.372(11)
C(56)-H(56)	0.93
C(57)-C(58)	1.417(11)
C(58)-C(59)	1.392(10)
C(59)-C(60)	1.386(11)
C(59)-H(59)	0.93
C(60)-C(61)	1.499(11)
C(61)-C(62)	1.554(10)
C(61)-H(61)	0.98
C(62)-C(63)	1.544(10)
C(62)-H(62A)	0.97
C(62)-H(62B)	0.97
C(63)-C(64)	1.504(10)
C(63)-H(63A)	0.97
C(63)-H(63B)	0.97
C(64)-C(65)	1.517(10)
C(64)-H(64A)	0.97
C(64)-H(64B)	0.97
C(65)-C(66)	1.519(10)

C(65)-H(65A)	0.97
C(65)-H(65B)	0.97
C(66)-C(67)	1.515(11)
C(66)-H(66A)	0.97
C(66)-H(66B)	0.97
C(67)-C(68)	1.504(11)
C(67)-H(67A)	0.97
C(67)-H(67B)	0.97
C(68)-C(69)	1.519(12)
C(68)-H(69A)	0.97
C(68)-H(68B)	0.97
C(69)-C(70)	1.546(12)
C(69)-H(69A)	0.97
C(69)-H(69B)	0.97
C(70)-C(71)	1.454(13)
C(70)-H(70A)	0.97
C(70)-H(70B)	0.97
C(71)-C(72)	1.522(12)
C(71)-H(71A)	0.97
C(71)-H(71B)	0.97
C(72)-H(72A)	0.96
C(72)-H(72B)	0.96
C(72)-H(72C)	0.96
C(73)-H(73A)	0.93
C(74)-H(74A)	0.96
C(74)-H(74B)	0.96
C(74)-H(74C)	0.96
C(75)-H(75A)	0.96
C(75)-H(75B)	0.96
C(75)-H(75C)	0.96
C(76)-H(76A)	0.93
C(77)-H(77A)	0.96
C(77)-H(77B)	0.96
C(77)-H(77C)	0.96
C(78)-H(78A)	0.96
C(78)-H(78B)	0.96
C(78)-H(78C)	0.96
C(79)-H(79A)	0.93
C(80)-H(80A)	0.96
C(80)-H(80B)	0.96
C(80)-H(80C)	0.96
C(81)-H(81A)	0.96
C(81)-H(81B)	0.96
C(81)-H(81C)	0.96
C(82)-H(82A)	0.93
C(83)-H(83A)	0.96
C(83)-H(83B)	0.96
C(83)-H(83C)	0.96
C(84)-H(84A)	0.96
C(84)-H(84B)	0.96
C(84)-H(84C)	0.96
C(85)-H(85A)	0.93
C(86)-H(86A)	0.96
C(86)-H(86B)	0.96
C(86)-H(86C)	0.96
C(87)-H(87A)	0.96
C(87)-H(87B)	0.96
C(87)-H(87C)	0.96
N(6)-C(88)	1.26(2)
N(6)-C(89)	1.38(4)
N(6)-C(90)	1.55(2)
O(14)-C(88)	1.26(2)
C(88)-H(88A)	0.93
C(89)-H(89A)	0.96
C(89)-H(89B)	0.96
C(89)-H(89C)	0.96

C(90)-H(90A)	0.96
C(90)-H(90B)	0.96
C(90)-H(90C)	0.96
N(6')-C(88')	1.26(2)
N(6')-C(90')	1.40(3)
N(6')-C(89')	1.58(2)
O(14')-C(88')	1.28(3)
C(88')-H(88C)	0.93
C(89')-H(89D)	0.96
C(89')-H(89E)	0.96
C(89')-H(89F)	0.96
C(90')-H(90D)	0.96
C(90')-H(90E)	0.96
C(90')-H(90F)	0.96

Valence angle	Value [°]
C(1)-O(1)-H(1)	109.4(5)
C(3)-O(2)-H(2)	109.5(5)
C(19)-O(3)-H(3)	109.4(5)
C(21)-O(4)-H(4)	118(8)
C(37)-O(5)-H(5)	109.4(5)
C(39)-O(6)-H(6)	119(9)
C(55)-O(7)-H(7)	109.6(5)
C(57)-O(8)-H(8)	109(5)
C(73)-N(1)-C(74)	117.5(10)
C(73)-N(1)-C(75)	123.1(10)
C(74)-N(1)-C(75)	119.3(10)
C(76)-N(2)-C(78)	121.0(9)
C(76)-N(2)-C(77)	119.9(9)
C(78)-N(2)-C(77)	119.1(8)
C(79)-N(3)-C(81)	120.8(8)
C(79)-N(3)-C(80)	122.1(9)
C(81)-N(3)-C(80)	117.1(8)
C(82)-N(4)-C(84)	120.6(12)
C(82)-N(4)-C(83)	121.7(12)
C(84)-N(4)-C(83)	117.7(12)
C(85)-N(5)-C(87)	122.5(9)
C(85)-N(5)-C(86)	120.6(9)
C(87)-N(5)-C(86)	116.8(9)
O(1)-C(1)-C(2)	120.4(8)
O(1)-C(1)-C(6)	117.8(9)
C(2)-C(1)-C(6)	121.7(9)
C(3)-C(2)-C(1)	119.6(9)
C(3)-C(2)-H(2)	120.2(6)
C(1)-C(2)-H(2)	120.2(5)
O(2)-C(3)-C(4)	118.1(9)
O(2)-C(3)-C(2)	121.2(8)
C(4)-C(3)-C(2)	120.6(9)
C(3)-C(4)-C(5)	118.3(9)
C(3)-C(4)-C(25)	121.1(9)
C(5)-C(4)-C(25)	120.6(8)
C(4)-C(5)-C(6)	124.2(8)
C(4)-C(5)-H(5)	117.9(5)
C(6)-C(5)-H(5)	117.9(5)
C(5)-C(6)-C(1)	115.4(9)
C(5)-C(6)-C(7)	123.5(8)
C(1)-C(6)-C(7)	120.9(8)
C(6)-C(7)-C(58)	111.2(7)
C(6)-C(7)-C(8)	111.5(7)
C(58)-C(7)-C(8)	111.5(7)
C(6)-C(7)-H(7)	107.4(4)
C(58)-C(7)-H(7)	107.5(4)
C(8)-C(7)-H(7)	107.4(4)
C(9)-C(8)-C(7)	114.9(7)
C(9)-C(8)-H(8)	108.5(5)
C(7)-C(8)-H(8)	108.5(4)
C(9)-C(8)-H(8)	108.5(5)

C(7)-C(8)-H(8)	108.5(5)
H(8)-C(8)-H(8)	107.5
C(8)-C(9)-C(10)	110.2(7)
C(8)-C(9)-H(9A)	109.6(5)
C(10)-C(9)-H(9A)	109.6(6)
C(8)-C(9)-H(9B)	109.6(5)
C(10)-C(9)-H(9B)	109.7(5)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.1
C(11)-C(10)-C(9)	116.4(9)
C(11)-C(10)-H(10A)	108.2(6)
C(9)-C(10)-H(10A)	108.2(5)
C(11)-C(10)-H(10B)	108.2(7)
C(9)-C(10)-H(10B)	108.2(6)
H(10A)-C(10)-H(10B)	107.3
C(10)-C(11)-C(12)	111.0(11)
C(10)-C(11)-H(11A)	109.4(7)
C(12)-C(11)-H(11A)	109.5(7)
C(10)-C(11)-H(11B)	109.4(6)
C(12)-C(11)-H(11B)	109.4(6)
H(11A)-C(11)-H(11B)	108.0
C(13)-C(12)-C(11)	118.7(11)
C(13)-C(12)-H(12A)	107.6(7)
C(11)-C(12)-H(12A)	107.5(7)
C(13)-C(12)-H(12B)	107.7(7)
C(11)-C(12)-H(12B)	107.7(6)
H(12A)-C(12)-H(12B)	107.1
C(12)-C(13)-C(14)	113.5(10)
C(12)-C(13)-H(13A)	108.9(7)
C(14)-C(13)-H(13A)	108.8(6)
C(12)-C(13)-H(13B)	108.8(7)
C(14)-C(13)-H(13B)	108.9(7)
H(13A)-C(13)-H(13B)	107.7
C(15)-C(14)-C(13)	115.1(11)
C(15)-C(14)-H(14A)	108.6(6)
C(13)-C(14)-H(14A)	108.5(7)
C(15)-C(14)-H(14B)	108.5(6)
C(13)-C(14)-H(14B)	108.4(6)
H(14A)-C(14)-H(14B)	107.5
C(14)-C(15)-C(16)	114.6(11)
C(14)-C(15)-H(15A)	108.5(7)
C(16)-C(15)-H(15A)	108.7(6)
C(14)-C(15)-H(15B)	108.6(6)
C(16)-C(15)-H(15B)	108.7(6)
H(15A)-C(15)-H(15B)	107.5
C(17)-C(16)-C(15)	115.8(11)
C(17)-C(16)-H(16A)	108.2(6)
C(15)-C(16)-H(16A)	108.4(6)
C(17)-C(16)-H(16B)	108.4(7)
C(15)-C(16)-H(16B)	108.4(6)
H(16A)-C(16)-H(16B)	107.4
C(16)-C(17)-C(18)	113.2(11)
C(16)-C(17)-H(17A)	109.0(7)
C(18)-C(17)-H(17A)	109.0(6)
C(16)-C(17)-H(17B)	108.9(6)
C(18)-C(17)-H(17B)	108.8(7)
H(17A)-C(17)-H(17B)	107.8
C(17)-C(18)-H(18A)	109.6(7)
C(17)-C(18)-H(18B)	109.5(6)
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(17)-C(18)-H(18C)	109.3(6)
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.47(5)
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.47(10)
C(20)-C(19)-O(3)	116.3(8)
C(20)-C(19)-C(24)	120.7(9)
O(3)-C(19)-C(24)	122.9(9)
C(19)-C(20)-C(21)	120.5(9)

C(19)-C(20)-H(20)	119.7(5)
C(21)-C(20)-H(20)	119.7(6)
C(20)-C(21)-C(22)	122.3(9)
C(20)-C(21)-O(4)	114.7(9)
C(22)-C(21)-O(4)	123.0(9)
C(21)-C(22)-C(23)	115.8(8)
C(21)-C(22)-C(43)	122.2(9)
C(23)-C(22)-C(43)	121.8(8)
C(24)-C(23)-C(22)	124.0(8)
C(24)-C(23)-H(23)	118.1(5)
C(22)-C(23)-H(23)	118.0(5)
C(23)-C(24)-C(19)	116.5(8)
C(23)-C(24)-C(25)	122.2(8)
C(19)-C(24)-C(25)	121.0(8)
C(4)-C(25)-C(26)	112.5(7)
C(4)-C(25)-C(24)	110.4(7)
C(26)-C(25)-C(24)	113.1(7)
C(4)-C(25)-H(25)	106.8(5)
C(26)-C(25)-H(25)	106.8(5)
C(24)-C(25)-H(25)	106.8(5)
C(27)-C(26)-C(25)	112.5(7)
C(27)-C(26)-H(26A)	109.1(5)
C(25)-C(26)-H(26A)	109.1(4)
C(27)-C(26)-H(26B)	109.1(5)
C(25)-C(26)-H(26B)	109.1(5)
H(26A)-C(26)-H(26B)	107.8
C(28)-C(27)-C(26)	112.6(7)
C(28)-C(27)-H(27A)	109.1(5)
C(26)-C(27)-H(27A)	109.1(5)
C(28)-C(27)-H(27B)	109.0(5)
C(26)-C(27)-H(27B)	109.1(5)
H(27A)-C(27)-H(27B)	107.8
C(29)-C(28)-C(27)	113.1(8)
C(29)-C(28)-H(28A)	109.0(5)
C(27)-C(28)-H(28A)	109.0(5)
C(29)-C(28)-H(28B)	108.9(5)
C(27)-C(28)-H(28B)	108.9(5)
H(28A)-C(28)-H(28B)	107.8
C(30)-C(29)-C(28)	115.1(9)
C(30)-C(29)-H(29A)	108.5(6)
C(28)-C(29)-H(29A)	108.6(5)
C(30)-C(29)-H(29B)	108.4(7)
C(28)-C(29)-H(29B)	108.5(5)
H(29A)-C(29)-H(29B)	107.5
C(31)-C(30)-C(29)	121.5(14)
C(31)-C(30)-H(30A)	107.1(10)
C(29)-C(30)-H(30A)	107.0(7)
C(31)-C(30)-H(30B)	106.8(9)
C(29)-C(30)-H(30B)	106.9(6)
H(30A)-C(30)-H(30B)	106.7
C(30)-C(31)-C(32)	122(2)
C(30)-C(31)-H(31A)	106.7(9)
C(32)-C(31)-H(31A)	106.8(7)
C(30)-C(31)-H(31B)	107.0(10)
C(32)-C(31)-H(31B)	107.0(9)
H(31A)-C(31)-H(31B)	106.6
C(33)-C(32)-C(31)	115.4(12)
C(33)-C(32)-H(32A)	108.2(8)
C(31)-C(32)-H(32A)	108.6(9)
C(33)-C(32)-H(32B)	108.5(8)
C(31)-C(32)-H(32B)	108.4(7)
H(32A)-C(32)-H(32B)	107.4
C(32)-C(33)-C(34)	120.9(12)
C(32)-C(33)-H(33A)	107.3(8)
C(34)-C(33)-H(33A)	107.2(7)
C(32)-C(33)-H(33B)	107.0(8)

C(34)-C(33)-H(33B)	106.9(8)
H(33A)-C(33)-H(33B)	106.8
C(35)-C(34)-C(33)	120.5(12)
C(35)-C(34)-H(34A)	107.2(7)
C(33)-C(34)-H(34A)	107.0(8)
C(35)-C(34)-H(34B)	107.3(8)
C(33)-C(34)-H(34B)	107.3(7)
H(34A)-C(34)-H(34B)	106.8
C(36)-C(35)-C(34)	120.6(13)
C(36)-C(35)-H(35A)	107.2(8)
C(34)-C(35)-H(35A)	107.2(7)
C(36)-C(35)-H(35B)	107.2(8)
C(34)-C(35)-H(35B)	107.2(8)
H(35A)-C(35)-H(35B)	106.8
C(35)-C(36)-H(36A)	109.4(8)
C(35)-C(36)-H(36B)	109.5(8)
H(36A)-C(36)-H(36B)	109.5
C(35)-C(36)-H(36C)	109.6(8)
H(36A)-C(36)-H(36C)	109.5
H(36B)-C(36)-H(36C)	109.47(8)
C(42)-C(37)-C(38)	120.5(9)
C(42)-C(37)-O(5)	118.6(9)
C(38)-C(37)-O(5)	120.9(8)
C(39)-C(38)-C(37)	120.2(9)
C(39)-C(38)-H(38)	119.9(6)
C(37)-C(38)-H(38)	119.8(5)
O(6)-C(39)-C(40)	116.5(9)
O(6)-C(39)-C(38)	122.3(9)
C(40)-C(39)-C(38)	121.1(10)
C(41)-C(40)-C(39)	117.8(9)
C(41)-C(40)-C(61)	119.4(9)
C(39)-C(40)-C(61)	122.8(9)
C(40)-C(41)-C(42)	122.8(8)
C(40)-C(41)-H(41)	118.6(5)
C(42)-C(41)-H(41)	118.6(6)
C(37)-C(42)-C(41)	117.5(9)
C(37)-C(42)-C(43)	121.9(8)
C(41)-C(42)-C(43)	120.7(8)
C(22)-C(43)-C(44)	114.3(7)
C(22)-C(43)-C(42)	110.6(7)
C(44)-C(43)-C(42)	110.7(7)
C(22)-C(43)-H(43)	106.9(5)
C(44)-C(43)-H(43)	107.0(4)
C(42)-C(43)-H(43)	107.0(4)
C(45)-C(44)-C(43)	114.1(7)
C(45)-C(44)-H(44A)	108.7(5)
C(43)-C(44)-H(44A)	108.8(4)
C(45)-C(44)-H(44B)	108.8(5)
C(43)-C(44)-H(44B)	108.7(5)
H(44A)-C(44)-H(44B)	107.6
C(46)-C(45)-C(44)	111.4(7)
C(46)-C(45)-H(45A)	109.2(5)
C(44)-C(45)-H(45A)	109.3(5)
C(46)-C(45)-H(45B)	109.4(5)
C(44)-C(45)-H(45B)	109.4(5)
H(45A)-C(45)-H(45B)	108.0
C(45)-C(46)-C(47)	113.3(7)
C(45)-C(46)-H(46A)	109.0(5)
C(47)-C(46)-H(46A)	109.0(5)
C(45)-C(46)-H(46B)	108.8(5)
C(47)-C(46)-H(46B)	108.8(5)
H(46A)-C(46)-H(46B)	107.7
C(48)-C(47)-C(46)	114.0(7)
C(48)-C(47)-H(47A)	108.7(5)
C(46)-C(47)-H(47A)	108.7(5)
C(48)-C(47)-H(47B)	108.8(5)

C(46)-C(47)-H(47B)	108.8(5)
H(47A)-C(47)-H(47B)	107.6
C(47)-C(48)-C(49)	113.6(7)
C(47)-C(48)-H(48A)	108.9(5)
C(49)-C(48)-H(48A)	108.8(5)
C(47)-C(48)-H(48B)	108.8(5)
C(49)-C(48)-H(48B)	108.9(5)
H(48A)-C(48)-H(48B)	107.7
C(50)-C(49)-C(48)	114.4(8)
C(50)-C(49)-H(49A)	108.7(5)
C(48)-C(49)-H(49A)	108.7(5)
C(50)-C(49)-H(49B)	108.6(5)
C(48)-C(49)-H(49B)	108.6(5)
H(49A)-C(49)-H(49B)	107.6
C(51)-C(50)-C(49)	115.2(8)
C(51)-C(50)-H(50A)	108.5(5)
C(49)-C(50)-H(50A)	108.5(5)
C(51)-C(50)-H(50B)	108.5(5)
C(49)-C(50)-H(50B)	108.4(5)
H(50A)-C(50)-H(50B)	107.5
C(50)-C(51)-C(52)	113.9(8)
C(50)-C(51)-H(51A)	108.8(5)
C(52)-C(51)-H(51A)	108.8(6)
C(50)-C(51)-H(51B)	108.8(5)
C(52)-C(51)-H(51B)	108.8(5)
H(51A)-C(51)-H(51B)	107.7
C(53)-C(52)-C(51)	112.4(8)
C(53)-C(52)-H(52A)	109.2(6)
C(51)-C(52)-H(52A)	109.1(5)
C(53)-C(52)-H(52B)	109.1(6)
C(51)-C(52)-H(52B)	109.1(6)
H(52A)-C(52)-H(52B)	107.8
C(52)-C(53)-C(54)	112.4(8)
C(52)-C(53)-H(53A)	109.1(6)
C(54)-C(53)-H(53A)	109.0(6)
C(52)-C(53)-H(53B)	109.2(6)
C(54)-C(53)-H(53B)	109.2(5)
H(53A)-C(53)-H(53B)	107.8
C(53)-C(54)-H(54A)	109.5(5)
C(53)-C(54)-H(54B)	109.4(6)
H(54A)-C(54)-H(54B)	109.5
C(53)-C(54)-H(54C)	109.6(6)
H(54A)-C(54)-H(54C)	109.5
H(54B)-C(54)-H(54C)	109.5
C(56)-C(55)-C(60)	121.8(9)
C(56)-C(55)-O(7)	115.4(8)
C(60)-C(55)-O(7)	122.8(8)
C(57)-C(56)-C(55)	122.0(9)
C(57)-C(56)-H(56)	119.0(6)
C(55)-C(56)-H(56)	119.0(6)
O(8)-C(57)-C(56)	117.5(9)
O(8)-C(57)-C(58)	123.3(9)
C(56)-C(57)-C(58)	119.1(9)
C(59)-C(58)-C(57)	116.1(9)
C(59)-C(58)-C(7)	123.6(8)
C(57)-C(58)-C(7)	120.3(8)
C(60)-C(59)-C(58)	126.2(9)
C(60)-C(59)-H(59)	116.9(5)
C(58)-C(59)-H(59)	116.9(6)
C(55)-C(60)-C(59)	114.9(8)
C(55)-C(60)-C(61)	122.2(9)
C(59)-C(60)-C(61)	122.9(8)
C(60)-C(61)-C(40)	112.2(7)
C(60)-C(61)-C(62)	114.8(7)
C(40)-C(61)-C(62)	110.9(7)
C(60)-C(61)-H(61)	106.1(5)

C(40)-C(61)-H(61)	106.0(6)
C(62)-C(61)-H(61)	106.1(5)
C(63)-C(62)-C(61)	112.7(7)
C(63)-C(62)-H(62A)	109.0(4)
C(61)-C(62)-H(62A)	109.0(5)
C(63)-C(62)-H(62B)	109.1(5)
C(61)-C(62)-H(62B)	109.1(5)
H(62A)-C(62)-H(62B)	107.8
C(64)-C(63)-C(62)	111.8(7)
C(64)-C(63)-H(63A)	109.2(5)
C(62)-C(63)-H(63A)	109.2(5)
C(64)-C(63)-H(63B)	109.2(5)
C(62)-C(63)-H(63B)	109.3(5)
H(63A)-C(63)-H(63B)	107.9
C(63)-C(64)-C(65)	115.0(8)
C(63)-C(64)-H(64A)	108.5(5)
C(65)-C(64)-H(64A)	108.5(5)
C(63)-C(64)-H(64B)	108.5(5)
C(65)-C(64)-H(64B)	108.5(5)
H(64A)-C(64)-H(64B)	107.5
C(66)-C(65)-C(64)	113.3(8)
C(66)-C(65)-H(65A)	108.9(5)
C(64)-C(65)-H(65A)	108.9(5)
C(66)-C(65)-H(65B)	108.9(6)
C(64)-C(65)-H(65B)	108.9(5)
H(65A)-C(65)-H(65B)	107.7
C(67)-C(66)-C(65)	115.2(8)
C(67)-C(66)-H(66A)	108.5(5)
C(65)-C(66)-H(66A)	108.5(5)
C(67)-C(66)-H(66B)	108.5(6)
C(65)-C(66)-H(66B)	108.5(6)
H(66A)-C(66)-H(66B)	107.5
C(68)-C(67)-C(66)	114.4(8)
C(68)-C(67)-H(67A)	108.6(5)
C(66)-C(67)-H(67A)	108.7(6)
C(68)-C(67)-H(67B)	108.6(6)
C(66)-C(67)-H(67B)	108.7(6)
H(67A)-C(67)-H(67B)	107.6
C(67)-C(68)-C(69)	116.2(9)
C(67)-C(68)-H(69A)	108.2(6)
C(69)-C(68)-H(69A)	108.2(6)
C(67)-C(68)-H(68B)	108.2(5)
C(69)-C(68)-H(68B)	108.3(6)
H(69A)-C(68)-H(68B)	107.4
C(68)-C(69)-C(70)	113.0(9)
C(68)-C(69)-H(69A)	108.9(6)
C(70)-C(69)-H(69A)	108.9(6)
C(68)-C(69)-H(69B)	109.0(6)
C(70)-C(69)-H(69B)	109.1(6)
H(69A)-C(69)-H(69B)	107.8
C(71)-C(70)-C(69)	114.2(10)
C(71)-C(70)-H(70A)	108.8(7)
C(69)-C(70)-H(70A)	108.8(6)
C(71)-C(70)-H(70B)	108.6(8)
C(69)-C(70)-H(70B)	108.7(6)
H(70A)-C(70)-H(70B)	107.6
C(70)-C(71)-C(72)	113.0(11)
C(70)-C(71)-H(71A)	108.9(8)
C(72)-C(71)-H(71A)	109.0(8)
C(70)-C(71)-H(71B)	109.1(7)
C(72)-C(71)-H(71B)	109.0(6)
H(71A)-C(71)-H(71B)	107.8
C(71)-C(72)-H(72A)	109.5(7)
C(71)-C(72)-H(72B)	109.4(8)
H(72A)-C(72)-H(72B)	109.5
C(71)-C(72)-H(72C)	109.4(6)

H(72A)-C(72)-H(72C)	109.5
H(72B)-C(72)-H(72C)	109.5
O(9)-C(73)-N(1)	127.7(12)
O(9)-C(73)-H(73A)	116.1(8)
N(1)-C(73)-H(73A)	116.1(7)
N(1)-C(74)-H(74A)	109.4(6)
N(1)-C(74)-H(74B)	109.5(6)
H(74A)-C(74)-H(74B)	109.5
N(1)-C(74)-H(74C)	109.5(6)
H(74A)-C(74)-H(74C)	109.5
H(74B)-C(74)-H(74C)	109.5
N(1)-C(75)-H(75A)	109.5(6)
N(1)-C(75)-H(75B)	109.5(6)
H(75A)-C(75)-H(75B)	109.5
N(1)-C(75)-H(75C)	109.5(5)
H(75A)-C(75)-H(75C)	109.5
H(75B)-C(75)-H(75C)	109.5
O(10)-C(76)-N(2)	126.6(10)
O(10)-C(76)-H(76A)	116.7(6)
N(2)-C(76)-H(76A)	116.6(6)
N(2)-C(77)-H(77A)	109.5(5)
N(2)-C(77)-H(77B)	109.4(4)
H(77A)-C(77)-H(77B)	109.5
N(2)-C(77)-H(77C)	109.5(5)
H(77A)-C(77)-H(77C)	109.5
H(77B)-C(77)-H(77C)	109.5
N(2)-C(78)-H(78A)	109.5(5)
N(2)-C(78)-H(78B)	109.5(5)
H(78A)-C(78)-H(78B)	109.5
N(2)-C(78)-H(78C)	109.4(5)
H(78A)-C(78)-H(78C)	109.5
H(78B)-C(78)-H(78C)	109.5
O(11)-C(79)-N(3)	124.0(10)
O(11)-C(79)-H(79A)	118.0(6)
N(3)-C(79)-H(79A)	118.1(6)
N(3)-C(80)-H(80A)	109.5(5)
N(3)-C(80)-H(80B)	109.5(6)
H(80A)-C(80)-H(80B)	109.5
N(3)-C(80)-H(80C)	109.4(5)
H(80A)-C(80)-H(80C)	109.5
H(80B)-C(80)-H(80C)	109.5
N(3)-C(81)-H(81A)	109.5(5)
N(3)-C(81)-H(81B)	109.5(5)
H(81A)-C(81)-H(81B)	109.5
N(3)-C(81)-H(81C)	109.5(5)
H(81A)-C(81)-H(81C)	109.5
H(81B)-C(81)-H(81C)	109.5
O(12)-C(82)-N(4)	127.2(13)
O(12)-C(82)-H(82A)	116.4(8)
N(4)-C(82)-H(82A)	116.5(8)
N(4)-C(83)-H(83A)	109.5(7)
N(4)-C(83)-H(83B)	109.4(6)
H(83A)-C(83)-H(83B)	109.5
N(4)-C(83)-H(83C)	109.5(8)
H(83A)-C(83)-H(83C)	109.5
H(83B)-C(83)-H(83C)	109.5
N(4)-C(84)-H(84A)	109.4(8)
N(4)-C(84)-H(84B)	109.4(9)
H(84A)-C(84)-H(84B)	109.5
N(4)-C(84)-H(84C)	109.6(8)
H(84A)-C(84)-H(84C)	109.5
H(84B)-C(84)-H(84C)	109.5
O(13)-C(85)-N(5)	123.1(9)
O(13)-C(85)-H(85A)	118.4(6)
N(5)-C(85)-H(85A)	118.5(6)
N(5)-C(86)-H(86A)	109.5(6)

N(5)-C(86)-H(86B)	109.4(6)
H(86A)-C(86)-H(86B)	109.5
N(5)-C(86)-H(86C)	109.5(6)
H(86A)-C(86)-H(86C)	109.5
H(86B)-C(86)-H(86C)	109.5
N(5)-C(87)-H(87A)	109.4(5)
N(5)-C(87)-H(87B)	109.5(6)
H(87A)-C(87)-H(87B)	109.5
N(5)-C(87)-H(87C)	109.5(6)
H(87A)-C(87)-H(87C)	109.5
H(87B)-C(87)-H(87C)	109.5
C(88)-N(6)-C(89)	133(3)
C(88)-N(6)-C(90)	117(2)
C(89)-N(6)-C(90)	110(2)
O(14)-C(88)-N(6)	129(2)
O(14)-C(88)-H(88A)	115.2(13)
N(6)-C(88)-H(88A)	115.3(14)
N(6)-C(89)-H(89A)	111(2)
N(6)-C(89)-H(89B)	109.9(13)
H(89A)-C(89)-H(89B)	109.5
N(6)-C(89)-H(89C)	107(2)
H(89A)-C(89)-H(89C)	109.47(6)
H(89B)-C(89)-H(89C)	109.5
N(6)-C(90)-H(90A)	109.5(8)
N(6)-C(90)-H(90B)	109.4(9)
H(90A)-C(90)-H(90B)	109.5
N(6)-C(90)-H(90C)	109.5(8)
H(90A)-C(90)-H(90C)	109.5
H(90B)-C(90)-H(90C)	109.5
C(88')-N(6')-C(90')	136(2)
C(88')-N(6')-C(89')	116(2)
C(90')-N(6')-C(89')	106(2)
N(6')-C(88')-O(14')	127(3)
N(6')-C(88')-H(88C)	116(2)
O(14')-C(88')-H(88C)	116.4(13)
N(6')-C(89')-H(89D)	109.4(8)
N(6')-C(89')-H(89E)	109.6(8)
H(89D)-C(89')-H(89E)	109.5
N(6')-C(89')-H(89F)	109.4(8)
H(89D)-C(89')-H(89F)	109.5
H(89E)-C(89')-H(89F)	109.5
N(6')-C(90')-H(90D)	110(2)
N(6')-C(90')-H(90E)	110.8(14)
H(90D)-C(90')-H(90E)	109.5
N(6')-C(90')-H(90F)	107(2)
H(90D)-C(90')-H(90F)	109.5
H(90E)-C(90')-H(90F)	109.5

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 x 10^3$) for CAV11/DMF. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11} + ... + 2hka^*b^*U_{12}]$

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O(1)	43(5)	36(4)	45(4)	23(3)	-2(4)	12(4)
O(2)	45(5)	43(5)	49(5)	20(4)	-1(4)	12(4)
O(3)	70(6)	32(4)	43(5)	-2(3)	-16(4)	11(4)
O(4)	47(6)	35(4)	35(5)	-5(4)	-11(4)	0(4)
O(5)	39(5)	42(4)	24(4)	-1(3)	-7(3)	-7(4)
O(6)	29(6)	54(5)	30(5)	2(4)	-5(4)	0(4)
O(7)	32(5)	50(5)	48(5)	29(3)	-8(4)	-5(4)
O(8)	36(5)	36(4)	38(4)	22(3)	-3(4)	-2(4)
O(9)	37(6)	126(8)	104(8)	27(6)	5(6)	-10(6)
O(10)	39(5)	35(4)	48(5)	17(3)	-5(4)	-1(4)
O(11)	38(5)	73(5)	37(4)	-7(4)	-6(4)	4(4)
O(12)	109(8)	74(6)	61(6)	-3(5)	-9(6)	19(6)
O(13)	32(5)	61(5)	43(5)	11(4)	-7(4)	-1(4)
N(1)	41(7)	49(6)	61(7)	3(5)	6(6)	1(5)
N(2)	40(6)	24(5)	32(5)	9(4)	-4(5)	1(4)
N(3)	31(6)	42(5)	37(5)	13(4)	-8(5)	-10(5)
N(4)	118(11)	55(7)	77(9)	17(7)	-9(8)	23(8)
N(5)	44(7)	56(6)	42(6)	-3(5)	-13(5)	1(5)
C(1)	17(7)	43(6)	15(5)	10(5)	-6(5)	-7(5)
C(2)	34(7)	31(6)	41(7)	14(5)	1(6)	-4(6)
C(3)	33(8)	33(6)	41(7)	8(5)	12(6)	20(6)
C(4)	21(7)	25(5)	27(6)	8(5)	-3(5)	-3(5)
C(5)	23(7)	29(6)	28(6)	9(5)	-6(5)	2(5)
C(6)	22(7)	21(5)	31(6)	11(5)	-4(5)	-1(5)
C(7)	30(7)	32(6)	17(5)	15(4)	-5(5)	-4(5)
C(8)	52(8)	29(6)	15(5)	2(4)	-6(5)	2(5)
C(9)	35(7)	48(7)	28(6)	6(5)	-5(5)	1(6)
C(10)	93(11)	90(9)	46(8)	32(7)	-45(8)	-57(8)
C(11)	67(10)	99(10)	55(8)	10(7)	9(8)	-22(8)
C(12)	171(17)	46(8)	85(10)	-18(7)	53(10)	-68(10)
C(13)	123(13)	79(10)	36(7)	-21(7)	15(8)	-63(10)
C(14)	86(12)	69(9)	56(8)	2(7)	2(8)	-37(9)
C(15)	86(12)	74(9)	71(9)	3(7)	-18(8)	-36(9)
C(16)	77(11)	83(9)	39(7)	6(7)	-8(7)	-33(9)
C(17)	88(12)	80(10)	82(10)	-11(8)	-15(9)	-33(9)
C(18)	110(13)	87(10)	79(10)	20(8)	-44(9)	-23(9)
C(19)	38(8)	32(6)	29(6)	9(5)	3(6)	-11(9)
C(20)	45(8)	27(6)	33(6)	-7(5)	-2(6)	16(6)
C(21)	29(7)	35(6)	23(6)	1(5)	2(5)	10(6)
C(22)	22(6)	34(6)	24(6)	2(4)	-6(5)	-4(6)
C(23)	20(6)	19(5)	26(6)	-2(4)	5(5)	6(5)
C(24)	32(7)	30(6)	21(6)	4(5)	9(5)	-12(5)
C(25)	37(7)	16(5)	34(6)	7(4)	7(5)	12(5)
C(26)	27(7)	33(6)	28(6)	11(4)	3(5)	3(5)
C(27)	22(7)	29(6)	56(7)	11(5)	-6(6)	9(5)
C(28)	21(7)	45(7)	49(7)	3(5)	10(6)	-2(5)
C(29)	50(8)	59(7)	36(7)	1(5)	-8(6)	-6(5)
C(30)	140(16)	63(9)	73(10)	-10(8)	-6(10)	-24(6)
C(31)	167(19)	52(9)	181(17)	15(10)	108(14)	-42(11)
C(32)	117(14)	58(9)	133(13)	6(9)	58(11)	-15(11)
C(33)	84(12)	60(9)	135(13)	-6(9)	18(10)	-8(10)
C(34)	84(12)	65(9)	82(10)	12(8)	18(8)	-12(9)
C(35)	107(14)	75(11)	129(13)	0(10)	-28(11)	6(9)
C(36)	121(15)	81(11)	177(16)	52(11)	17(12)	-3(11)
C(37)	33(7)	34(6)	16(6)	5(5)	-8(6)	-13(11)
C(38)	33(8)	37(6)	19(6)	5(5)	-12(5)	4(6)
C(39)	16(7)	31(6)	28(6)	0(5)	-4(6)	0(6)
C(40)	30(7)	23(5)	23(6)	[illegible]	[illegible]	[illegible]

C(41)	30(7)	34(6)	24(6)	9(5)	-21(5)	-4(5)
C(42)	11(6)	28(5)	25(6)	6(4)	-8(5)	2(5)
C(43)	27(7)	28(6)	23(5)	10(4)	-2(5)	5(5)
C(44)	26(7)	22(5)	30(6)	8(4)	6(5)	-6(5)
C(45)	44(8)	35(6)	34(6)	9(5)	-12(6)	3(6)
C(46)	31(7)	38(6)	34(6)	10(5)	0(5)	5(6)
C(47)	26(7)	46(7)	50(7)	14(5)	-9(6)	-2(6)
C(48)	51(8)	35(6)	48(7)	13(5)	-17(6)	5(6)
C(49)	53(8)	36(6)	46(7)	4(5)	-5(6)	0(6)
C(50)	33(7)	38(6)	34(6)	1(5)	-4(5)	-2(6)
C(51)	63(9)	41(7)	53(7)	20(6)	-17(7)	9(6)
C(52)	56(8)	32(6)	42(7)	10(5)	-10(6)	-3(6)
C(53)	62(9)	26(6)	72(8)	3(6)	-20(7)	6(6)
C(54)	63(9)	36(6)	71(8)	11(6)	-2(7)	14(6)
C(55)	15(7)	43(7)	27(6)	10(5)	0(5)	5(5)
C(56)	23(7)	30(6)	40(6)	8(5)	-2(6)	-2(5)
C(57)	23(7)	36(6)	18(5)	3(5)	7(5)	-1(5)
C(58)	36(7)	28(5)	10(5)	7(4)	4(5)	12(5)
C(59)	37(7)	22(5)	27(6)	6(4)	7(5)	-9(5)
C(60)	29(7)	17(5)	22(5)	3(4)	-6(5)	-4(5)
C(61)	40(7)	23(5)	28(6)	2(4)	3(5)	0(5)
C(62)	41(7)	27(6)	27(6)	-1(4)	-7(5)	7(5)
C(63)	26(7)	33(6)	30(6)	5(5)	-2(5)	5(5)
C(64)	56(8)	30(6)	39(6)	6(5)	-1(6)	15(6)
C(65)	45(8)	32(6)	43(7)	9(5)	-5(6)	-9(6)
C(66)	66(9)	26(6)	68(8)	5(5)	-18(7)	-7(6)
C(67)	77(10)	28(6)	53(7)	9(5)	1(7)	-5(7)
C(68)	73(9)	29(6)	55(7)	5(5)	11(7)	-2(7)
C(69)	89(11)	37(7)	72(9)	9(6)	17(8)	15(7)
C(70)	120(12)	30(7)	71(9)	13(6)	16(8)	10(8)
C(71)	167(16)	43(8)	77(10)	11(7)	24(10)	11(9)
C(72)	165(15)	38(7)	83(10)	-7(7)	25(10)	-8(9)
C(73)	69(11)	53(8)	54(9)	6(6)	-22(8)	-17(9)
C(74)	90(12)	83(10)	105(11)	-38(8)	-15(9)	0(9)
C(75)	52(9)	74(9)	88(10)	32(7)	19(8)	8(7)
C(76)	39(8)	28(6)	53(8)	10(6)	1(7)	-7(6)
C(77)	74(9)	39(6)	39(7)	7(5)	-16(6)	11(6)
C(78)	29(8)	41(6)	60(8)	-1(6)	4(6)	6(6)
C(79)	36(8)	59(8)	33(7)	16(6)	-4(6)	13(7)
C(80)	55(9)	57(8)	99(10)	8(7)	-25(8)	-11(7)
C(81)	25(7)	54(7)	76(8)	19(6)	-13(6)	-4(6)
C(82)	102(13)	48(8)	78(11)	20(8)	4(10)	8(8)
C(83)	199(19)	89(11)	88(12)	4(9)	-30(12)	53(12)
C(84)	133(16)	140(15)	110(13)	48(12)	-16(11)	-14(13)
C(85)	62(9)	32(6)	42(7)	10(6)	-2(7)	-3(6)
C(86)	53(10)	117(11)	64(9)	17(8)	-16(8)	13(8)
C(87)	46(9)	53(8)	88(9)	-10(7)	-17(7)	-15(7)
N(6)	40(7)	38(6)	48(7)	0(5)	10(6)	-5(6)
O(14)	90(7)	21(4)	64(6)	-7(4)	-21(5)	1(4)
C(88)	71(21)	38(17)	49(17)	5(15)	-25(14)	14(15)
C(89)	51(24)	54(17)	250(47)	-41(24)	82(35)	-18(25)
C(90)	88(21)	49(14)	53(15)	25(12)	-37(15)	-22(14)
N(6')	40(7)	38(6)	48(7)	0(5)	10(6)	-5(6)
O(14')	90(7)	21(4)	64(6)	-7(4)	-21(5)	1(4)
C(88')	59(19)	39(6)	58(17)	5(17)	10(14)	30(15)
C(89')	69(20)	27(13)	72(17)	1(12)	27(15)	8(14)
C(90')	100(28)	34(13)	100(23)	-122(31)	70(23)	-64(20)