

Table 4. Crystal data and structure refinement for **2**

Date collec données	03-May-2001
Refinement Directory	DKA600:[Clients.Pharmacie.AC_1.SNBL]
Empirical formula	C ₂₅ H ₄₀ O ₃
Formula weight	388.57
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.9002(5) Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
Unit cell dimensions	a = 5.9941(12) Å α = 90 ° b = 14.864(3) Å β = 90 ° c = 26.194(5) Å γ = 90 °
Volume	2333.8(8) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.106 g cm ⁻³
Absorption coefficient	0.070 mm ⁻¹
F(000)	856
Crystal size	300 x 40 x 40 µm
Theta range for data collection	1.55 to 23.25 °
Index ranges	-6<=h<=6, -16<=k<=16, -29<=l<=28
Reflections collected	23867
Independent reflections	3144 [R _{int} = 0.0572]
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3141 / 0 / 340
Goodness-of-fit on F ²	3.287
Final R indices [I>2sigma(I)]	R ₁ = 0.0585, wR ₂ = 0.0615
R indices (all data)	R ₁ = 0.0624, wR ₂ = 1.1031
Absolute structure parameter	-1(2)
Extinction coefficient	0.0063(10)
Largest diff. peak and hole	0.200 and -0.151 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	U_{eq}
O(1)	11998(3)	3851(2)	6145(1)	69(1)
O(2)	14977(4)	3599(2)	5676(1)	71(1)
O(3)	7462(4)	6287(1)	1486(1)	54(1)
C(1)	9057(6)	9107(2)	3157(1)	49(1)
C(2)	9882(5)	9096(2)	2615(1)	50(1)
C(3)	8844(5)	8857(2)	2198(1)	45(1)
C(4)	6513(5)	8486(2)	2188(1)	51(1)
C(5)	6128(6)	7702(2)	1814(1)	49(1)
C(6)	7482(5)	6871(2)	1931(1)	41(1)
C(7)	6678(4)	6354(2)	2391(1)	39(1)
C(8)	7668(5)	6372(2)	2844(1)	43(1)
C(9)	9628(5)	6909(2)	3029(1)	43(1)
C(10)	9050(4)	7481(2)	3501(1)	34(1)
C(11)	10044(4)	8433(2)	3542(1)	39(1)
C(12)	9383(5)	8690(2)	4083(1)	53(1)
C(13)	9436(7)	7825(3)	4396(1)	67(1)
C(14)	9621(4)	7041(2)	4016(1)	38(1)
C(15)	8405(4)	6177(2)	4166(1)	39(1)
C(16)	5879(4)	6280(2)	4210(1)	57(1)
C(17)	9378(5)	5803(2)	4663(1)	48(1)
C(18)	8652(6)	4838(2)	4795(1)	60(1)
C(19)	9946(6)	4490(2)	5246(1)	53(1)
C(20)	11686(5)	3943(2)	5239(1)	47(1)
C(21)	12849(5)	3784(2)	5730(1)	49(1)
C(22)	12624(6)	3509(2)	4767(1)	82(1)
C(23)	12611(5)	8425(2)	3498(1)	58(1)
C(24)	9894(6)	8992(2)	1681(1)	87(2)
C(25)	4607(5)	5804(2)	2314(1)	58(1)

Table 6. Bond lengths [Å] and angles [°] for **2**.

O(1)-C(21)	1.203(3)
O(2)-C(21)	1.313(3)
O(2)-H(2)	1.33(6)
O(3)-C(6)	1.454(3)
O(3)-H(3)	0.89(4)
C(1)-C(2)	1.502(4)
C(1)-C(11)	1.539(4)
C(1)-H(1A)	1.11(3)
C(1)-H(1B)	0.93(3)
C(2)-C(3)	1.308(4)
C(2)-H(2)	0.95(3)
C(3)-C(4)	1.502(4)
C(3)-C(24)	1.507(4)
C(4)-C(5)	1.540(4)
C(4)-H(4A)	0.99(3)
C(4)-H(4B)	0.92(3)
C(5)-C(6)	1.510(4)
C(5)-H(5A)	0.98(3)
C(5)-H(5B)	1.02(3)
C(6)-C(7)	1.507(3)
C(6)-H(6)	1.11(2)
C(7)-C(8)	1.327(3)
C(7)-C(25)	1.500(4)
C(8)-C(9)	1.501(4)
C(8)-H(8)	1.00(2)
C(9)-C(10)	1.540(4)
C(9)-H(9A)	0.99(2)
C(9)-H(9B)	0.98(3)
C(10)-C(14)	1.538(3)
C(10)-C(11)	1.539(3)
C(10)-H(10)	1.01(2)
C(11)-C(12)	1.520(4)
C(11)-C(23)	1.543(4)
C(12)-C(13)	1.526(5)
C(12)-H(12A)	0.98(3)
C(12)-H(12B)	0.98(3)
C(13)-C(14)	1.538(4)
C(13)-H(13A)	0.81(3)
C(13)-H(13B)	1.01(3)
C(14)-C(15)	1.528(4)
C(14)-H(14)	1.00(2)
C(15)-C(16)	1.526(3)
C(15)-C(17)	1.530(4)
C(15)-H(15)	1.00(2)
C(16)-H(16A)	0.96
C(16)-H(16B)	0.96
C(16)-H(16C)	0.96
C(16)-H(16D)	0.96
C(16)-H(16E)	0.96
C(16)-H(16F)	0.96
C(17)-C(18)	1.539(4)
C(17)-H(17A)	0.93(3)
C(17)-H(17B)	1.01(3)
C(18)-C(19)	1.505(4)
C(18)-H(18A)	0.91(3)
C(18)-H(18B)	1.11(3)
C(19)-C(20)	1.323(4)
C(19)-H(19)	0.95(3)
C(20)-C(21)	1.482(4)
C(20)-C(22)	1.505(4)
C(22)-H(22A)	0.96
C(22)-H(22B)	0.96
C(22)-H(22C)	0.96
C(22)-H(22D)	0.96
C(22)-H(22E)	0.96
C(22)-H(22F)	0.96
C(23)-H(23A)	0.96
C(23)-H(23B)	0.96

C(23)-H(23C)	0.96
C(23)-H(23D)	0.96
C(23)-H(23E)	0.96
C(23)-H(23F)	0.96
C(24)-H(24A)	0.71(2)
C(24)-H(24B)	0.71(2)
C(24)-H(24C)	0.71(2)
C(25)-H(25A)	0.989(14)
C(25)-H(25B)	0.989(14)
C(25)-H(25C)	0.989(14)
C(21)-O(2)-H(2)	106(2)
C(6)-O(3)-H(3)	112(2)
C(2)-C(1)-C(11)	118.9(2)
C(2)-C(1)-H(1A)	108.0(13)
C(11)-C(1)-H(1A)	106.0(13)
C(2)-C(1)-H(1B)	108(2)
C(11)-C(1)-H(1B)	107(2)
H(1A)-C(1)-H(1B)	109(2)
C(3)-C(2)-C(1)	129.5(3)
C(3)-C(2)-H(2)	116(2)
C(1)-C(2)-H(2)	115(2)
C(2)-C(3)-C(4)	123.8(3)
C(2)-C(3)-C(24)	121.1(3)
C(4)-C(3)-C(24)	115.0(3)
C(3)-C(4)-C(5)	115.4(3)
C(3)-C(4)-H(4A)	109(2)
C(5)-C(4)-H(4A)	107(2)
C(3)-C(4)-H(4B)	108(2)
C(5)-C(4)-H(4B)	110(2)
H(4A)-C(4)-H(4B)	108(2)
C(6)-C(5)-C(4)	114.1(2)
C(6)-C(5)-H(5A)	117(2)
C(4)-C(5)-H(5A)	104(2)
C(6)-C(5)-H(5B)	109.7(14)
C(4)-C(5)-H(5B)	109(2)
H(5A)-C(5)-H(5B)	102(2)
O(3)-C(6)-C(7)	109.5(2)
O(3)-C(6)-C(5)	108.7(2)
C(7)-C(6)-C(5)	114.1(2)
O(3)-C(6)-H(6)	105.4(12)
C(7)-C(6)-H(6)	112.3(13)
C(5)-C(6)-H(6)	106.5(12)
C(8)-C(7)-C(25)	120.0(2)
C(8)-C(7)-C(6)	124.1(3)
C(25)-C(7)-C(6)	115.9(2)
C(7)-C(8)-C(9)	130.5(3)
C(7)-C(8)-H(8)	119(2)
C(9)-C(8)-H(8)	110.4(14)
C(8)-C(9)-C(10)	112.2(2)
C(8)-C(9)-H(9A)	108(2)
C(10)-C(9)-H(9A)	107.6(14)
C(8)-C(9)-H(9B)	106(2)
C(10)-C(9)-H(9B)	108(2)
H(9A)-C(9)-H(9B)	115(2)
C(14)-C(10)-C(11)	104.2(2)
C(14)-C(10)-C(9)	114.8(2)
C(11)-C(10)-C(9)	118.4(2)
C(14)-C(10)-H(10)	104.9(13)
C(11)-C(10)-H(10)	104.6(12)
C(9)-C(10)-H(10)	108.7(13)
C(12)-C(11)-C(10)	101.2(2)
C(12)-C(11)-C(1)	110.3(2)
C(10)-C(11)-C(1)	113.9(2)
C(12)-C(11)-C(23)	109.4(2)
C(10)-C(11)-C(23)	112.0(2)
C(1)-C(11)-C(23)	109.8(2)
C(11)-C(12)-C(13)	106.6(2)
C(11)-C(12)-H(12A)	112(2)
C(13)-C(12)-H(12A)	106(2)
C(11)-C(12)-H(12B)	115(2)
C(13)-C(12)-H(12B)	116(2)
H(12A)-C(12)-H(12B)	101(2)

C(12)-C(13)-C(14)	106.9(2)
C(12)-C(13)-H(13A)	109(3)
C(14)-C(13)-H(13A)	112(3)
C(12)-C(13)-H(13B)	112(2)
C(14)-C(13)-H(13B)	112(2)
H(13A)-C(13)-H(13B)	105(3)
C(15)-C(14)-C(10)	118.6(2)
C(15)-C(14)-C(13)	115.8(2)
C(10)-C(14)-C(13)	103.3(2)
C(15)-C(14)-H(14)	102.0(13)
C(10)-C(14)-H(14)	106.3(14)
C(13)-C(14)-H(14)	110.6(14)
C(16)-C(15)-C(14)	114.1(2)
C(16)-C(15)-C(17)	110.6(2)
C(14)-C(15)-C(17)	110.1(2)
C(16)-C(15)-H(15)	103.1(14)
C(14)-C(15)-H(15)	109.6(13)
C(17)-C(15)-H(15)	109.1(14)
C(15)-C(16)-H(16A)	109.5(2)
C(15)-C(16)-H(16B)	109.5(2)
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
C(15)-C(16)-H(16C)	109.5(2)
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
C(15)-C(16)-H(16D)	109.5(2)
H(16A)-C(16)-H(16D)	141.1
H(16B)-C(16)-H(16D)	56.3
H(16C)-C(16)-H(16D)	56.3
C(15)-C(16)-H(16E)	109.5(2)
H(16A)-C(16)-H(16E)	56.3
H(16B)-C(16)-H(16E)	141.1
H(16C)-C(16)-H(16E)	56.3
H(16D)-C(16)-H(16E)	109.5
C(15)-C(16)-H(16F)	109.5(2)
H(16A)-C(16)-H(16F)	56.3
H(16B)-C(16)-H(16F)	56.3
H(16C)-C(16)-H(16F)	141.1
H(16D)-C(16)-H(16F)	109.5
H(16E)-C(16)-H(16F)	109.5
C(15)-C(17)-C(18)	114.9(3)
C(15)-C(17)-H(17A)	108(2)
C(18)-C(17)-H(17A)	105(2)
C(15)-C(17)-H(17B)	110(2)
C(18)-C(17)-H(17B)	110(2)
H(17A)-C(17)-H(17B)	108(2)
C(19)-C(18)-C(17)	110.5(3)
C(19)-C(18)-H(18A)	110(2)
C(17)-C(18)-H(18A)	103(2)
C(19)-C(18)-H(18B)	108.5(14)
C(17)-C(18)-H(18B)	109.8(14)
H(18A)-C(18)-H(18B)	115(2)
C(20)-C(19)-C(18)	127.4(3)
C(20)-C(19)-H(19)	119(2)
C(18)-C(19)-H(19)	114(2)
C(19)-C(20)-C(21)	117.2(3)
C(19)-C(20)-C(22)	124.7(3)
C(21)-C(20)-C(22)	118.1(3)
O(1)-C(21)-O(2)	121.8(3)
O(1)-C(21)-C(20)	124.8(3)
O(2)-C(21)-C(20)	113.4(3)
C(20)-C(22)-H(22A)	109.5(2)
C(20)-C(22)-H(22B)	109.5(2)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
C(20)-C(22)-H(22C)	109.5(2)
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(20)-C(22)-H(22D)	109.5(2)
H(22A)-C(22)-H(22D)	141.1
H(22B)-C(22)-H(22D)	56.3
H(22C)-C(22)-H(22D)	56.3
C(20)-C(22)-H(22E)	109.5(2)
H(22A)-C(22)-H(22E)	56.3
H(22B)-C(22)-H(22E)	141.1

H(22C)-C(22)-H(22E)	56.3
H(22D)-C(22)-H(22E)	109.5
C(20)-C(22)-H(22F)	109.5(2)
H(22A)-C(22)-H(22F)	56.3
H(22B)-C(22)-H(22F)	56.3
H(22C)-C(22)-H(22F)	141.1
H(22D)-C(22)-H(22F)	109.5
H(22E)-C(22)-H(22F)	109.5
C(11)-C(23)-H(23A)	109.5(2)
C(11)-C(23)-H(23B)	109.5(2)
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(11)-C(23)-H(23C)	109.5(2)
H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
C(11)-C(23)-H(23D)	109.5(2)
H(23A)-C(23)-H(23D)	141.1
H(23B)-C(23)-H(23D)	56.3
H(23C)-C(23)-H(23D)	56.3
C(11)-C(23)-H(23E)	109.5(2)
H(23A)-C(23)-H(23E)	56.3
H(23B)-C(23)-H(23E)	141.1
H(23C)-C(23)-H(23E)	56.3
H(23D)-C(23)-H(23E)	109.5
C(11)-C(23)-H(23F)	109.5(2)
H(23A)-C(23)-H(23F)	56.3
H(23B)-C(23)-H(23F)	56.3
H(23C)-C(23)-H(23F)	141.1
H(23D)-C(23)-H(23F)	109.5
H(23E)-C(23)-H(23F)	109.5
C(3)-C(24)-H(24A)	109.5(2)
C(3)-C(24)-H(24B)	109.5(2)
H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(3)-C(24)-H(24C)	109.5(2)
H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(7)-C(25)-H(25A)	109.47(14)
C(7)-C(25)-H(25B)	109.5(2)
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5
C(7)-C(25)-H(25C)	109.5(2)
H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O(1)	59(1)	109(2)	40(1)	16(1)	4(1)	2(1)
O(2)	62(2)	104(2)	46(1)	2(1)	-6(1)	17(1)
O(3)	55(1)	72(1)	33(1)	-14(1)	4(1)	0(1)
C(1)	57(2)	36(2)	53(2)	1(2)	-10(2)	0(2)
C(2)	46(2)	49(2)	54(2)	17(2)	-6(2)	-2(2)
C(3)	50(2)	40(2)	45(2)	9(1)	-6(2)	-10(1)
C(4)	52(2)	42(2)	58(2)	0(2)	-7(2)	6(2)
C(5)	48(2)	54(2)	43(2)	3(2)	-10(2)	-6(2)
C(6)	51(2)	47(2)	26(1)	-7(1)	1(1)	1(2)
C(7)	52(2)	31(2)	32(2)	-5(1)	6(1)	-2(1)
C(8)	60(2)	32(2)	37(2)	1(1)	2(2)	-4(1)
C(9)	46(2)	47(2)	36(2)	5(1)	-1(1)	11(2)
C(10)	31(2)	40(2)	31(1)	-4(1)	-1(1)	8(1)
C(11)	35(2)	41(2)	42(2)	1(1)	-8(1)	-1(1)
C(12)	58(2)	51(2)	48(2)	-10(2)	-7(2)	-3(2)
C(13)	97(4)	69(2)	36(2)	-8(2)	-7(2)	-2(2)
C(14)	35(2)	47(2)	33(2)	4(1)	-5(1)	3(1)
C(15)	34(2)	49(2)	33(2)	-2(1)	-1(1)	3(1)
C(16)	53(2)	68(2)	50(2)	15(2)	2(2)	4(2)
C(17)	49(2)	57(2)	37(2)	11(1)	-1(1)	3(2)
C(18)	59(2)	69(2)	51(2)	19(2)	-13(2)	-3(2)
C(19)	61(2)	60(2)	39(2)	15(2)	-8(2)	-5(2)
C(20)	52(2)	55(2)	33(2)	6(1)	-6(1)	-8(2)
C(21)	51(2)	54(2)	43(2)	11(2)	3(2)	-3(2)
C(22)	86(2)	108(3)	50(2)	-13(2)	-20(2)	9(2)
C(23)	46(2)	63(2)	63(2)	12(2)	-11(2)	-11(2)
C(24)	101(3)	100(3)	61(2)	31(2)	-6(2)	-39(3)
C(25)	78(2)	52(2)	45(2)	-2(1)	1(2)	-13(2)

Table 8. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2**.

	x	y	z	U _{eq}
H(2)	15803(89)	3535(35)	6145(22)	225(22)
H(3)	6086(61)	6209(25)	1363(14)	110(16)
H(1A)	7239(47)	8980(16)	3151(9)	59
H(1B)	9305(41)	9679(18)	3286(9)	59
H(2)	11373(45)	9289(17)	2574(10)	60
H(4A)	5461(44)	8969(17)	2089(10)	61
H(4B)	6162(44)	8311(17)	2515(11)	61
H(5A)	4510(49)	7631(17)	1804(10)	58
H(5B)	6463(40)	7915(17)	1451(10)	58
H(6)	9238(41)	7095(16)	1972(9)	50
H(8)	7058(40)	5995(16)	3125(9)	51
H(9A)	10086(41)	7326(15)	2753(9)	52
H(9B)	10761(42)	6472(18)	3132(10)	52
H(10)	7375(40)	7577(14)	3511(9)	41
H(12A)	7845(47)	8907(17)	4101(10)	63
H(12B)	10193(47)	9205(17)	4227(10)	63
H(13A)	8308(53)	7793(22)	4567(14)	80
H(13B)	10693(51)	7824(20)	4651(12)	80
H(14)	11195(40)	6831(15)	3988(9)	46
H(15)	8583(38)	5717(15)	3889(10)	46
H(16A)	5230(4)	5714(2)	4305(1)	86
H(16B)	5282(4)	6468(2)	3887(1)	86
H(16C)	5535(4)	6723(2)	4464(1)	86
H(16D)	5468(4)	6889(2)	4132(1)	86
H(16E)	5416(4)	6136(2)	4551(1)	86
H(16F)	5163(4)	5880(2)	3973(1)	86
H(17A)	10929(45)	5771(17)	4629(10)	57
H(17B)	9043(41)	6222(18)	4955(10)	57
H(18A)	7184(51)	4904(19)	4880(11)	72
H(18B)	8967(44)	4388(18)	4464(11)	72
H(19)	9454(44)	4720(17)	5566(10)	64
H(22A)	13881(6)	3142(2)	4857(1)	122
H(22B)	13089(6)	3967(2)	4531(1)	122
H(22C)	11499(6)	3141(2)	4610(1)	122
H(22D)	11765(6)	3691(2)	4475(1)	122
H(22E)	12556(6)	2866(2)	4801(1)	122
H(22F)	14147(6)	3692(2)	4722(1)	122
H(23A)	13031(5)	8263(2)	3156(1)	86
H(23B)	13215(5)	7995(2)	3733(1)	86
H(23C)	13183(5)	9013(2)	3576(1)	86
H(23D)	13255(5)	8584(2)	3821(1)	86
H(23E)	13071(5)	8852(2)	3243(1)	86
H(23F)	13103(5)	7835(2)	3401(1)	86
H(24A)	9158(21)	8834(5)	1488(5)	131
H(24B)	10911(28)	8749(7)	1668(1)	131
H(24C)	10108(8)	9456(13)	1642(2)	131
H(25A)	4922(11)	5308(10)	2074(6)	87
H(25B)	3412(19)	6190(6)	2173(7)	87
H(25C)	4120(19)	5553(10)	2646(5)	87