

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
C(19)	0.041(5)	0.040(5)	0.064(7)	0.001(4)	0.019(4)	-0.011(5)
C(20)	0.047(6)	0.097(9)	0.086(9)	0.031(6)	-0.001(6)	-0.036(7)
C(21)	0.046(7)	0.14(1)	0.14(1)	0.025(8)	0.018(8)	-0.07(1)
C(22)	0.066(8)	0.09(1)	0.17(2)	0.020(8)	0.061(10)	-0.04(1)
C(23)	0.12(1)	0.073(8)	0.10(1)	0.026(8)	0.077(10)	0.011(8)
C(24)	0.065(6)	0.048(6)	0.066(7)	0.016(5)	0.027(5)	-0.005(5)
C(25)	0.030(4)	0.045(5)	0.038(5)	0.008(4)	0.005(3)	0.004(4)
C(26)	0.041(5)	0.052(5)	0.038(5)	0.013(4)	0.009(4)	0.001(4)
C(27)	0.047(5)	0.070(7)	0.058(7)	0.012(5)	0.025(5)	0.021(6)
C(28)	0.051(6)	0.055(6)	0.060(7)	-0.002(5)	0.008(5)	0.006(5)
C(29)	0.044(5)	0.058(6)	0.056(7)	-0.004(5)	-0.004(5)	-0.009(5)
C(30)	0.043(5)	0.052(5)	0.033(5)	0.002(4)	0.004(4)	-0.008(4)
C(31)	0.050(5)	0.078(7)	0.050(6)	0.022(5)	0.026(5)	0.007(5)
C(32)	0.065(7)	0.065(7)	0.054(7)	0.012(5)	0.018(5)	-0.004(5)
C(33)	0.032(4)	0.040(5)	0.036(5)	0.008(4)	0.005(3)	-0.001(4)
C(34)	0.036(4)	0.048(5)	0.031(5)	0.014(4)	0.003(3)	-0.012(4)
C(35)	0.036(4)	0.036(4)	0.042(5)	0.010(4)	0.004(4)	-0.005(4)
C(36)	0.092(8)	0.047(6)	0.062(8)	0.014(6)	-0.006(6)	-0.004(5)
C(37)	0.10(1)	0.053(7)	0.09(1)	-0.003(7)	-0.021(8)	0.004(7)
C(38)	0.064(7)	0.061(7)	0.072(8)	0.011(6)	0.010(6)	0.021(6)
C(39)	0.084(8)	0.061(7)	0.079(8)	0.024(6)	0.039(7)	0.009(6)
C(40)	0.079(7)	0.042(5)	0.058(7)	0.013(5)	0.026(6)	-0.003(5)
C(41)	0.033(4)	0.036(4)	0.032(5)	0.012(3)	-0.005(3)	-0.005(3)
C(42)	0.038(4)	0.038(4)	0.041(5)	0.015(4)	0.008(4)	0.008(4)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
C(43)	0.035(4)	0.028(4)	0.046(5)	0.011(3)	0.006(4)	0.000(4)
C(44)	0.029(4)	0.034(4)	0.038(5)	0.009(3)	0.008(3)	0.006(4)
C(45)	0.047(5)	0.050(5)	0.048(6)	0.028(4)	0.001(4)	0.003(4)
C(46)	0.055(6)	0.076(7)	0.055(6)	0.041(5)	0.007(5)	0.010(6)
C(47)	0.045(5)	0.067(6)	0.048(6)	0.016(5)	-0.001(4)	0.017(5)
C(48)	0.047(5)	0.042(5)	0.043(5)	0.010(4)	0.008(4)	0.001(4)
C(49)	0.032(4)	0.037(5)	0.047(5)	0.009(4)	0.004(4)	0.000(4)
C(50)	0.043(5)	0.088(8)	0.14(1)	0.038(6)	0.043(7)	0.071(8)
C(51)	0.066(7)	0.13(1)	0.13(1)	0.070(8)	0.055(7)	0.094(10)
C(52)	0.039(5)	0.097(9)	0.11(1)	0.024(6)	0.029(6)	0.072(8)
C(53)	0.051(6)	0.063(7)	0.12(1)	0.024(5)	0.013(6)	0.042(7)
C(54)	0.039(5)	0.071(7)	0.108(10)	0.021(5)	0.016(6)	0.040(7)
C(55)	0.12(1)	0.12(1)	0.15(1)	0.070(10)	0.06(1)	0.09(1)
C(56)	0.10(1)	0.20(2)	0.23(2)	0.12(1)	0.09(1)	0.14(2)
C(57)	0.064(8)	0.16(1)	0.19(2)	0.030(9)	0.052(10)	0.13(1)
C(58)	0.078(8)	0.066(8)	0.16(1)	0.020(7)	-0.028(8)	0.036(9)
C(59)	0.046(6)	0.090(9)	0.11(1)	0.024(6)	0.004(6)	0.014(8)
C(60)	0.058(6)	0.043(5)	0.107(9)	0.037(5)	0.042(6)	0.033(6)
C(61)	0.061(6)	0.043(5)	0.111(9)	0.035(5)	0.052(6)	0.028(6)
C(62)	0.064(7)	0.049(6)	0.17(1)	0.040(6)	0.060(8)	0.041(8)
C(63)	0.070(8)	0.066(7)	0.15(1)	0.044(7)	0.072(9)	0.063(9)
C(64)	0.088(8)	0.072(8)	0.13(1)	0.058(7)	0.075(8)	0.068(8)
C(65)	0.058(6)	0.049(5)	0.094(8)	0.033(5)	0.043(6)	0.035(6)
C(66)	0.060(6)	0.064(7)	0.13(1)	0.043(6)	0.043(7)	0.030(7)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(67)	0.068(6)	0.057(6)	0.069(7)	0.038(5)	0.029(5)	0.011(5)
C(68)	0.044(5)	0.045(5)	0.057(6)	0.030(4)	0.015(4)	0.020(4)
C(69)	0.055(5)	0.042(5)	0.039(5)	0.026(4)	0.003(4)	0.011(4)
C(70)	0.064(6)	0.042(5)	0.063(7)	0.031(5)	0.003(5)	0.011(5)
C(71)	0.052(5)	0.044(5)	0.060(6)	0.033(5)	-0.003(4)	-0.009(5)
C(72)	0.037(4)	0.045(5)	0.073(7)	0.023(4)	0.013(4)	0.003(5)
C(73)	0.049(5)	0.041(5)	0.046(5)	0.022(4)	0.003(4)	0.005(4)
C(74)	0.092(8)	0.058(7)	0.15(1)	0.060(7)	0.091(9)	0.062(8)
C(75)	0.095(9)	0.060(7)	0.16(1)	0.062(7)	0.091(10)	0.059(9)
C(76)	0.096(9)	0.074(8)	0.16(1)	0.060(8)	0.077(9)	0.049(9)
C(77)	0.10(1)	0.066(8)	0.20(2)	0.052(8)	0.10(1)	0.06(1)
C(78)	0.11(1)	0.061(8)	0.19(2)	0.065(9)	0.11(1)	0.07(1)
C(79)	0.089(8)	0.066(7)	0.14(1)	0.061(7)	0.078(8)	0.071(8)
C(80)	0.106(9)	0.077(8)	0.13(1)	0.061(8)	0.075(9)	0.050(8)
C(81)	0.11(1)	0.076(8)	0.18(2)	0.070(8)	0.11(1)	0.083(10)
C(82)	0.085(8)	0.067(7)	0.14(1)	0.058(6)	0.083(8)	0.059(7)
C(83)	0.077(7)	0.058(7)	0.15(1)	0.052(6)	0.078(8)	0.056(8)
C(84)	0.076(7)	0.055(6)	0.16(1)	0.053(6)	0.090(8)	0.062(8)
C(85)	0.12(1)	0.060(7)	0.14(1)	0.063(8)	0.081(10)	0.053(8)
C(86)	0.14(1)	0.064(8)	0.12(1)	0.054(9)	0.08(1)	0.036(9)
C(87)	0.12(1)	0.10(1)	0.13(1)	0.075(10)	0.06(1)	0.029(10)
C(88)	0.12(1)	0.13(1)	0.13(1)	0.10(1)	0.07(1)	0.08(1)
C(89)	0.085(9)	0.078(9)	0.13(1)	0.052(8)	0.069(9)	0.060(9)
C(90a)	0.04(1)	0.05(1)	0.03(1)	0.03(1)	0.004(8)	-0.001(10)

Table 2. Anisotropic Displacement Parameters (continued)

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
C(90b)	0.04(1)	0.04(1)	0.04(1)	0.019(9)	0.010(8)	0.014(10)
C(91a)	0.034(9)	0.04(1)	0.06(1)	0.015(8)	0.019(9)	0.016(10)
C(91b)	0.06(1)	0.026(9)	0.04(1)	0.018(9)	0.010(9)	-0.003(8)
C(92a)	0.05(1)	0.05(1)	0.04(1)	0.017(9)	0.009(8)	0.017(9)
C(92b)	0.038(9)	0.034(9)	0.05(1)	0.011(7)	0.011(8)	0.004(8)
C(93a)	0.034(8)	0.040(9)	0.034(9)	0.016(7)	0.010(7)	0.010(7)
C(93b)	0.07(1)	0.044(10)	0.025(9)	0.021(9)	0.015(8)	-0.004(7)
C(94a)	0.05(1)	0.04(1)	0.07(2)	0.022(10)	0.01(1)	0.00(1)
C(94b)	0.06(2)	0.04(1)	0.13(3)	0.02(1)	0.08(2)	0.04(2)
C(95a)	0.07(2)	0.06(1)	0.07(2)	0.03(1)	0.03(1)	-0.01(1)
C(95b)	0.05(2)	0.08(2)	0.12(3)	0.02(1)	0.06(2)	0.01(2)
C(96a)	0.06(1)	0.10(2)	0.06(1)	0.04(1)	0.02(1)	0.02(1)
C(96b)	0.13(2)	0.03(1)	0.08(2)	0.01(1)	0.07(2)	-0.01(1)
C(97a)	0.037(9)	0.08(1)	0.04(1)	0.013(9)	0.000(8)	0.011(10)
C(97b)	0.10(2)	0.04(1)	0.09(2)	-0.01(1)	0.06(2)	0.01(1)
C(98a)	0.034(9)	0.06(1)	0.030(10)	0.005(8)	-0.024(7)	-0.004(9)
C(98b)	0.05(1)	0.04(1)	0.06(1)	-0.007(8)	0.006(9)	0.011(9)

The general temperature factor expression:

$$\exp(-2\pi^2(a^{*2}U_{11}h^2 + b^{*2}U_{22}k^2 + c^{*2}U_{33}l^2 + 2a^*b^*U_{12}hk + 2a^*c^*U_{13}hl + 2b^*c^*U_{23}kl))$$

Table 3. Bond Lengths(Å)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ta(1)	N(1)	1.772(7)	Ta(1)	N(2)	2.030(7)
Ta(1)	C(1)	2.461(8)	Ta(1)	C(2)	2.424(7)
Ta(1)	C(3)	2.498(7)	Ta(1)	C(4)	2.577(7)
Ta(1)	C(5)	2.543(8)	Ta(1)	C(18)	2.216(9)
Ta(2)	N(3)	1.767(6)	Ta(2)	N(4)	2.019(9)
Ta(2)	C(50)	2.41(1)	Ta(2)	C(51)	2.48(1)
Ta(2)	C(52)	2.55(1)	Ta(2)	C(53)	2.49(1)
Ta(2)	C(54)	2.46(1)	Ta(2)	C(67)	2.204(10)
N(1)	C(11)	1.41(1)	N(2)	C(25)	1.466(9)
N(2)	C(33)	1.42(1)	N(3)	C(60)	1.412(10)
N(4)	C(74)	1.49(2)	N(4)	C(82)	1.45(1)
C(1)	C(2)	1.41(1)	C(1)	C(5)	1.38(1)
C(1)	C(6)	1.50(1)	C(2)	C(3)	1.44(1)
C(2)	C(7)	1.49(1)	C(3)	C(4)	1.37(1)
C(3)	C(8)	1.49(1)	C(4)	C(5)	1.42(1)
C(4)	C(9)	1.52(1)	C(5)	C(10)	1.49(1)
C(11)	C(12)	1.44(1)	C(11)	C(16)	1.38(1)
C(12)	C(13)	1.36(1)	C(12)	C(17)	1.51(1)
C(13)	C(14)	1.37(1)	C(14)	C(15)	1.38(1)
C(15)	C(16)	1.39(1)	C(18)	C(19)	1.51(1)
C(19)	C(20)	1.39(1)	C(19)	C(24)	1.36(1)
C(20)	C(21)	1.37(1)	C(21)	C(22)	1.37(2)
C(22)	C(23)	1.37(2)	C(23)	C(24)	1.39(1)
C(25)	C(26)	1.40(1)	C(25)	C(30)	1.39(1)

Table 3. Bond Lengths(Å) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(26)	C(27)	1.38(1)	C(26)	C(31)	1.50(1)
C(27)	C(28)	1.36(1)	C(28)	C(29)	1.40(1)
C(29)	C(30)	1.42(1)	C(30)	C(32)	1.51(1)
C(33)	C(34)	1.54(1)	C(33)	C(41)	1.35(1)
C(34)	C(35)	1.53(1)	C(35)	C(36)	1.37(1)
C(35)	C(40)	1.38(1)	C(36)	C(37)	1.41(2)
C(37)	C(38)	1.33(2)	C(38)	C(39)	1.33(1)
C(39)	C(40)	1.39(1)	C(41)	C(42)	1.42(1)
C(42)	C(43)	1.33(1)	C(43)	C(44)	1.47(1)
C(44)	C(45)	1.38(1)	C(44)	C(49)	1.38(1)
C(45)	C(46)	1.37(1)	C(46)	C(47)	1.38(1)
C(47)	C(48)	1.39(1)	C(48)	C(49)	1.37(1)
C(50)	C(51)	1.43(1)	C(50)	C(54)	1.43(1)
C(50)	C(55)	1.51(1)	C(51)	C(52)	1.41(1)
C(51)	C(56)	1.51(2)	C(52)	C(53)	1.42(2)
C(52)	C(57)	1.51(1)	C(53)	C(54)	1.42(1)
C(53)	C(58)	1.50(1)	C(54)	C(59)	1.50(2)
C(60)	C(61)	1.41(2)	C(60)	C(65)	1.40(1)
C(61)	C(62)	1.39(1)	C(61)	C(66)	1.50(2)
C(62)	C(63)	1.38(2)	C(63)	C(64)	1.37(2)
C(64)	C(65)	1.41(1)	C(67)	C(68)	1.51(1)
C(68)	C(69)	1.41(1)	C(68)	C(73)	1.38(1)
C(69)	C(70)	1.36(1)	C(70)	C(71)	1.38(1)
C(71)	C(72)	1.39(1)	C(72)	C(73)	1.39(1)

Table 3. Bond Lengths($\text{\AA}$) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(74)	C(75)	1.40(2)	C(74)	C(79)	1.41(1)
C(75)	C(76)	1.38(2)	C(75)	C(80)	1.51(1)
C(76)	C(77)	1.37(2)	C(77)	C(78)	1.40(2)
C(78)	C(79)	1.38(2)	C(79)	C(81)	1.51(2)
C(82)	C(83)	1.53(1)	C(82)	C(90a)	1.38(2)
C(82)	C(90b)	1.38(2)	C(83)	C(84)	1.50(2)
C(84)	C(85)	1.39(1)	C(84)	C(89)	1.37(2)
C(85)	C(86)	1.35(2)	C(86)	C(87)	1.37(2)
C(87)	C(88)	1.41(2)	C(88)	C(89)	1.36(2)
C(90a)	C(90b)	0.76(2)	C(90a)	C(91a)	1.48(2)
C(90a)	C(91b)	1.60(3)	C(90b)	C(91a)	1.75(2)
C(90b)	C(91b)	1.41(3)	C(91a)	C(91b)	0.93(2)
C(91a)	C(92a)	1.26(2)	C(91a)	C(92b)	1.83(3)
C(91b)	C(92a)	1.63(3)	C(91b)	C(92b)	1.36(2)
C(92a)	C(92b)	1.36(2)	C(92a)	C(93a)	1.50(2)
C(92b)	C(93b)	1.47(2)	C(93a)	C(93b)	1.60(2)
C(93a)	C(94a)	1.41(3)	C(93a)	C(94b)	1.44(4)
C(93a)	C(98a)	1.42(2)	C(93b)	C(94b)	1.39(3)
C(93b)	C(98b)	1.37(2)	C(94a)	C(94b)	0.70(4)
C(94a)	C(95a)	1.42(4)	C(94a)	C(95b)	1.69(4)
C(94b)	C(95a)	1.61(3)	C(94b)	C(95b)	1.43(3)
C(95a)	C(95b)	0.98(3)	C(95a)	C(96a)	1.36(3)
C(95b)	C(96a)	1.67(4)	C(95b)	C(96b)	1.42(4)
C(96a)	C(97a)	1.36(3)	C(96b)	C(97b)	1.34(4)

Table 3. Bond Lengths(Å) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(97a)	C(98a)	1.38(2)	C(97b)	C(98a)	1.69(3)
C(97b)	C(98b)	1.37(2)	C(98a)	C(98b)	1.79(3)

Table 4. Bond Lengths(Å)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(6)	H(1)	0.95	C(6)	H(2)	0.95
C(6)	H(3)	0.95	C(7)	H(4)	0.95
C(7)	H(5)	0.95	C(7)	H(6)	0.95
C(8)	H(7)	0.95	C(8)	H(8)	0.95
C(8)	H(9)	0.95	C(9)	H(10)	0.95
C(9)	H(11)	0.95	C(9)	H(12)	0.96
C(10)	H(13)	0.95	C(10)	H(14)	0.95
C(10)	H(15)	0.95	C(13)	H(16)	0.95
C(14)	H(17)	0.95	C(15)	H(18)	0.95
C(16)	H(19)	0.95	C(17)	H(20)	0.95
C(17)	H(21)	0.95	C(17)	H(22)	0.95
C(18)	H(23)	0.95	C(18)	H(24)	0.95
C(20)	H(25)	0.95	C(21)	H(26)	0.95
C(22)	H(27)	0.95	C(23)	H(28)	0.95
C(24)	H(29)	0.95	C(27)	H(30)	0.95
C(28)	H(31)	0.95	C(29)	H(32)	0.95
C(31)	H(33)	0.95	C(31)	H(34)	0.95
C(31)	H(35)	0.95	C(32)	H(36)	0.95
C(32)	H(37)	0.95	C(32)	H(38)	0.95
C(34)	H(39)	0.95	C(34)	H(40)	0.95
C(36)	H(41)	0.95	C(37)	H(42)	0.95
C(38)	H(43)	0.95	C(39)	H(44)	0.95
C(40)	H(45)	0.95	C(41)	H(46)	0.95
C(42)	H(47)	0.95	C(43)	H(48)	0.95

Table 4. Bond Lengths(Å) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(45)	H(49)	0.95	C(46)	H(50)	0.95
C(47)	H(51)	0.95	C(48)	H(52)	0.95
C(49)	H(53)	0.95	C(55)	H(54)	0.95
C(55)	H(55)	0.95	C(55)	H(56)	0.94
C(56)	H(57)	0.95	C(56)	H(58)	0.95
C(56)	H(59)	0.95	C(57)	H(60)	0.96
C(57)	H(61)	0.94	C(57)	H(62)	0.95
C(58)	H(63)	0.95	C(58)	H(64)	0.95
C(58)	H(65)	0.95	C(59)	H(66)	0.95
C(59)	H(67)	0.95	C(59)	H(68)	0.95
C(62)	H(69)	0.95	C(63)	H(70)	0.95
C(64)	H(71)	0.95	C(65)	H(72)	0.95
C(66)	H(73)	0.95	C(66)	H(74)	0.95
C(66)	H(75)	0.95	C(67)	H(76)	0.95
C(67)	H(77)	0.95	C(69)	H(78)	0.95
C(70)	H(79)	0.95	C(71)	H(80)	0.95
C(72)	H(81)	0.95	C(73)	H(82)	0.95
C(76)	H(83)	0.95	C(77)	H(84)	0.95
C(78)	H(85)	0.95	C(80)	H(86)	0.95
C(80)	H(87)	0.94	C(80)	H(88)	0.95
C(81)	H(89)	0.95	C(81)	H(90)	0.95
C(81)	H(91)	0.95	C(83)	H(92)	0.95
C(83)	H(93)	0.95	C(85)	H(94)	0.95
C(86)	H(95)	0.95	C(87)	H(96)	0.95

Table 4. Bond Lengths($\text{\AA}$) (continued)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
C(88)	H(97)	0.95	C(89)	H(98)	0.95
C(90a)	H(99a)	0.98	C(90b)	H(99b)	0.96
C(91a)	H(100a)	0.98	C(91a)	H(100b)	1.08
C(91b)	H(100b)	0.98	C(92a)	H(101a)	0.58
C(92b)	H(101b)	0.97	C(94a)	H(102a)	0.99
C(94a)	H(102b)	0.99	C(94b)	H(102b)	1.11
C(95a)	H(103a)	1.01	C(95a)	H(103b)	0.74
C(95b)	H(103b)	1.01	C(96a)	H(104a)	0.97
C(96b)	H(104b)	0.97	C(97a)	H(105a)	0.95
C(97a)	H(106b)	1.23	C(97b)	H(105b)	0.94
C(97b)	H(106a)	0.76	C(98a)	H(106a)	0.96
C(98b)	H(106b)	0.95			

Table 5. Bond Angles(°)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
N(1)	Ta(1)	N(2)	100.3(3)	N(1)	Ta(1)	C(1)	97.9(3)
N(1)	Ta(1)	C(2)	96.8(3)	N(1)	Ta(1)	C(3)	126.8(3)
N(1)	Ta(1)	C(4)	149.4(3)	N(1)	Ta(1)	C(5)	126.1(3)
N(1)	Ta(1)	C(18)	97.9(3)	N(2)	Ta(1)	C(1)	149.6(3)
N(2)	Ta(1)	C(2)	119.5(3)	N(2)	Ta(1)	C(3)	94.8(3)
N(2)	Ta(1)	C(4)	102.5(3)	N(2)	Ta(1)	C(5)	133.0(3)
N(2)	Ta(1)	C(18)	108.7(3)	C(1)	Ta(1)	C(2)	33.5(3)
C(1)	Ta(1)	C(3)	54.9(3)	C(1)	Ta(1)	C(4)	53.4(3)
C(1)	Ta(1)	C(5)	31.9(3)	C(1)	Ta(1)	C(18)	92.6(3)
C(2)	Ta(1)	C(3)	34.0(3)	C(2)	Ta(1)	C(4)	54.0(3)
C(2)	Ta(1)	C(5)	54.2(3)	C(2)	Ta(1)	C(18)	125.7(3)
C(3)	Ta(1)	C(4)	31.3(3)	C(3)	Ta(1)	C(5)	53.4(3)
C(3)	Ta(1)	C(18)	124.8(3)	C(4)	Ta(1)	C(5)	32.1(3)
C(4)	Ta(1)	C(18)	93.9(3)	C(5)	Ta(1)	C(18)	75.3(3)
N(3)	Ta(2)	N(4)	99.8(3)	N(3)	Ta(2)	C(50)	99.1(4)
N(3)	Ta(2)	C(51)	131.0(3)	N(3)	Ta(2)	C(52)	149.1(4)
N(3)	Ta(2)	C(53)	121.1(4)	N(3)	Ta(2)	C(54)	94.3(4)
N(3)	Ta(2)	C(67)	98.8(3)	N(4)	Ta(2)	C(50)	113.9(4)
N(4)	Ta(2)	C(51)	93.4(4)	N(4)	Ta(2)	C(52)	106.1(4)
N(4)	Ta(2)	C(53)	138.4(3)	N(4)	Ta(2)	C(54)	147.2(3)
N(4)	Ta(2)	C(67)	100.1(3)	C(50)	Ta(2)	C(51)	33.9(3)
C(50)	Ta(2)	C(52)	55.0(3)	C(50)	Ta(2)	C(53)	55.6(4)
C(50)	Ta(2)	C(54)	34.0(3)	C(50)	Ta(2)	C(67)	137.9(4)
C(51)	Ta(2)	C(52)	32.4(3)	C(51)	Ta(2)	C(53)	54.7(4)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(51)	Ta(2)	C(54)	55.8(4)	C(51)	Ta(2)	C(67)	125.1(3)
C(52)	Ta(2)	C(53)	32.6(4)	C(52)	Ta(2)	C(54)	54.8(4)
C(52)	Ta(2)	C(67)	93.1(3)	C(53)	Ta(2)	C(54)	33.3(3)
C(53)	Ta(2)	C(67)	82.6(4)	C(54)	Ta(2)	C(67)	106.8(4)
Ta(1)	N(1)	C(11)	171.5(6)	Ta(1)	N(2)	C(25)	127.1(5)
Ta(1)	N(2)	C(33)	120.5(5)	C(25)	N(2)	C(33)	112.3(7)
Ta(2)	N(3)	C(60)	174.1(8)	Ta(2)	N(4)	C(74)	120.7(5)
Ta(2)	N(4)	C(82)	127.2(7)	C(74)	N(4)	C(82)	111.6(9)
Ta(1)	C(1)	C(2)	71.8(4)	Ta(1)	C(1)	C(5)	77.4(5)
Ta(1)	C(1)	C(6)	121.2(6)	C(2)	C(1)	C(5)	108.8(9)
C(2)	C(1)	C(6)	126.4(10)	C(5)	C(1)	C(6)	124.7(10)
Ta(1)	C(2)	C(1)	74.7(4)	Ta(1)	C(2)	C(3)	75.8(4)
Ta(1)	C(2)	C(7)	121.5(6)	C(1)	C(2)	C(3)	106.5(8)
C(1)	C(2)	C(7)	128(1)	C(3)	C(2)	C(7)	124.8(10)
Ta(1)	C(3)	C(2)	70.2(4)	Ta(1)	C(3)	C(4)	77.5(5)
Ta(1)	C(3)	C(8)	128.1(6)	C(2)	C(3)	C(4)	107.9(8)
C(2)	C(3)	C(8)	125.3(10)	C(4)	C(3)	C(8)	125(1)
Ta(1)	C(4)	C(3)	71.2(4)	Ta(1)	C(4)	C(5)	72.7(4)
Ta(1)	C(4)	C(9)	127.8(6)	C(3)	C(4)	C(5)	108.6(8)
C(3)	C(4)	C(9)	126(1)	C(5)	C(4)	C(9)	124(1)
Ta(1)	C(5)	C(1)	70.7(5)	Ta(1)	C(5)	C(4)	75.2(5)
Ta(1)	C(5)	C(10)	129.0(6)	C(1)	C(5)	C(4)	108.2(8)
C(1)	C(5)	C(10)	125(1)	C(4)	C(5)	C(10)	124(1)
N(1)	C(11)	C(12)	120.3(8)	N(1)	C(11)	C(16)	122.7(8)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(12)	C(11)	C(16)	117.0(8)	C(11)	C(12)	C(13)	118.8(9)
C(11)	C(12)	C(17)	120.5(8)	C(13)	C(12)	C(17)	120.6(8)
C(12)	C(13)	C(14)	122.6(9)	C(13)	C(14)	C(15)	120.1(9)
C(14)	C(15)	C(16)	118(1)	C(11)	C(16)	C(15)	123.2(9)
Ta(1)	C(18)	C(19)	121.9(6)	C(18)	C(19)	C(20)	120.8(10)
C(18)	C(19)	C(24)	123.1(9)	C(20)	C(19)	C(24)	115.8(9)
C(19)	C(20)	C(21)	123(1)	C(20)	C(21)	C(22)	118(1)
C(21)	C(22)	C(23)	119(1)	C(22)	C(23)	C(24)	119(1)
C(19)	C(24)	C(23)	122(1)	N(2)	C(25)	C(26)	117.7(7)
N(2)	C(25)	C(30)	121.0(7)	C(26)	C(25)	C(30)	121.3(7)
C(25)	C(26)	C(27)	118.7(8)	C(25)	C(26)	C(31)	122.1(7)
C(27)	C(26)	C(31)	119.1(8)	C(26)	C(27)	C(28)	121.5(8)
C(27)	C(28)	C(29)	120.5(8)	C(28)	C(29)	C(30)	119.4(9)
C(25)	C(30)	C(29)	118.6(8)	C(25)	C(30)	C(32)	124.0(8)
C(29)	C(30)	C(32)	117.4(8)	N(2)	C(33)	C(34)	116.2(7)
N(2)	C(33)	C(41)	121.1(8)	C(34)	C(33)	C(41)	122.7(7)
C(33)	C(34)	C(35)	116.2(6)	C(34)	C(35)	C(36)	120.2(8)
C(34)	C(35)	C(40)	121.7(7)	C(36)	C(35)	C(40)	118.1(9)
C(35)	C(36)	C(37)	119(1)	C(36)	C(37)	C(38)	122(1)
C(37)	C(38)	C(39)	119(1)	C(38)	C(39)	C(40)	121(1)
C(35)	C(40)	C(39)	120.3(9)	C(33)	C(41)	C(42)	127.7(8)
C(41)	C(42)	C(43)	122.6(7)	C(42)	C(43)	C(44)	128.9(7)
C(43)	C(44)	C(45)	123.2(8)	C(43)	C(44)	C(49)	120.1(7)
C(45)	C(44)	C(49)	116.7(8)	C(44)	C(45)	C(46)	121.5(8)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(45)	C(46)	C(47)	120.5(8)	C(46)	C(47)	C(48)	119.2(9)
C(47)	C(48)	C(49)	118.8(9)	C(44)	C(49)	C(48)	123.2(8)
Ta(2)	C(50)	C(51)	75.6(7)	Ta(2)	C(50)	C(54)	74.7(7)
Ta(2)	C(50)	C(55)	125.7(10)	C(51)	C(50)	C(54)	108.0(8)
C(51)	C(50)	C(55)	124.2(9)	C(54)	C(50)	C(55)	126(1)
Ta(2)	C(51)	C(50)	70.4(6)	Ta(2)	C(51)	C(52)	76.5(6)
Ta(2)	C(51)	C(56)	124(1)	C(50)	C(51)	C(52)	108.0(9)
C(50)	C(51)	C(56)	124.6(9)	C(52)	C(51)	C(56)	127.0(9)
Ta(2)	C(52)	C(51)	71.1(6)	Ta(2)	C(52)	C(53)	71.3(6)
Ta(2)	C(52)	C(57)	129.0(10)	C(51)	C(52)	C(53)	108.0(8)
C(51)	C(52)	C(57)	127(1)	C(53)	C(52)	C(57)	124(1)
Ta(2)	C(53)	C(52)	76.1(7)	Ta(2)	C(53)	C(54)	72.2(7)
Ta(2)	C(53)	C(58)	128.7(8)	C(52)	C(53)	C(54)	108.9(9)
C(52)	C(53)	C(58)	125(1)	C(54)	C(53)	C(58)	124(1)
Ta(2)	C(54)	C(50)	71.3(8)	Ta(2)	C(54)	C(53)	74.5(8)
Ta(2)	C(54)	C(59)	122.1(7)	C(50)	C(54)	C(53)	106.9(9)
C(50)	C(54)	C(59)	125.7(10)	C(53)	C(54)	C(59)	127(1)
N(3)	C(60)	C(61)	120.1(10)	N(3)	C(60)	C(65)	120.1(10)
C(61)	C(60)	C(65)	119.7(8)	C(60)	C(61)	C(62)	118(1)
C(60)	C(61)	C(66)	121.4(8)	C(62)	C(61)	C(66)	120(1)
C(61)	C(62)	C(63)	122(1)	C(62)	C(63)	C(64)	119.4(10)
C(63)	C(64)	C(65)	120(1)	C(60)	C(65)	C(64)	119(1)
Ta(2)	C(67)	C(68)	125.9(6)	C(67)	C(68)	C(69)	119.8(7)
C(67)	C(68)	C(73)	123.4(7)	C(69)	C(68)	C(73)	116.7(7)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(68)	C(69)	C(70)	121.4(8)	C(69)	C(70)	C(71)	121.4(8)
C(70)	C(71)	C(72)	118.7(7)	C(71)	C(72)	C(73)	119.7(8)
C(68)	C(73)	C(72)	122.0(8)	N(4)	C(74)	C(75)	120.2(9)
N(4)	C(74)	C(79)	118(1)	C(75)	C(74)	C(79)	121(1)
C(74)	C(75)	C(76)	117(1)	C(74)	C(75)	C(80)	124(1)
C(76)	C(75)	C(80)	118(1)	C(75)	C(76)	C(77)	122(1)
C(76)	C(77)	C(78)	119(1)	C(77)	C(78)	C(79)	120(1)
C(74)	C(79)	C(78)	118(1)	C(74)	C(79)	C(81)	123(1)
C(78)	C(79)	C(81)	117(1)	N(4)	C(82)	C(83)	116.1(7)
N(4)	C(82)	C(90a)	117(1)	N(4)	C(82)	C(90b)	118(1)
C(83)	C(82)	C(90a)	122(1)	C(83)	C(82)	C(90b)	124(1)
C(90a)	C(82)	C(90b)	32.1(9)	C(82)	C(83)	C(84)	115(1)
C(83)	C(84)	C(85)	120(1)	C(83)	C(84)	C(89)	122.6(10)
C(85)	C(84)	C(89)	117(1)	C(84)	C(85)	C(86)	120(1)
C(85)	C(86)	C(87)	121(1)	C(86)	C(87)	C(88)	118(1)
C(87)	C(88)	C(89)	119(1)	C(84)	C(89)	C(88)	122(1)
C(82)	C(90a)	C(90b)	73(2)	C(82)	C(90a)	C(91a)	128(1)
C(82)	C(90a)	C(91b)	113(1)	C(90b)	C(90a)	C(91a)	96(2)
C(90b)	C(90a)	C(91b)	61(2)	C(91a)	C(90a)	C(91b)	35.0(10)
C(82)	C(90b)	C(90a)	74(2)	C(82)	C(90b)	C(91a)	110(1)
C(82)	C(90b)	C(91b)	127(1)	C(90a)	C(90b)	C(91a)	57(2)
C(90a)	C(90b)	C(91b)	89(2)	C(91a)	C(90b)	C(91b)	32.3(10)
C(90a)	C(91a)	C(90b)	25.8(8)	C(90a)	C(91a)	C(91b)	79(1)
C(90a)	C(91a)	C(92a)	125(1)	C(90a)	C(91a)	C(92b)	106(1)

Table 5. Bond Angles(°).(continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(90b)	C(91a)	C(91b)	53(1)	C(90b)	C(91a)	C(92a)	120(1)
C(90b)	C(91a)	C(92b)	86(1)	C(91b)	C(91a)	C(92a)	94(2)
C(91b)	C(91a)	C(92b)	46(1)	C(92a)	C(91a)	C(92b)	48(1)
C(90a)	C(91b)	C(90b)	28.5(9)	C(90a)	C(91b)	C(91a)	65(1)
C(90a)	C(91b)	C(92a)	97(1)	C(90a)	C(91b)	C(92b)	127(1)
C(90b)	C(91b)	C(91a)	93(2)	C(90b)	C(91b)	C(92a)	119(1)
C(90b)	C(91b)	C(92b)	122(1)	C(91a)	C(91b)	C(92a)	50(1)
C(91a)	C(91b)	C(92b)	103(2)	C(92a)	C(91b)	C(92b)	53(1)
C(91a)	C(92a)	C(91b)	34(1)	C(91a)	C(92a)	C(92b)	88(1)
C(91a)	C(92a)	C(93a)	125(1)	C(91b)	C(92a)	C(92b)	53(1)
C(91b)	C(92a)	C(93a)	123(1)	C(92b)	C(92a)	C(93a)	98(1)
C(91a)	C(92b)	C(91b)	29.8(10)	C(91a)	C(92b)	C(92a)	43(1)
C(91a)	C(92b)	C(93b)	118(1)	C(91b)	C(92b)	C(92a)	73(1)
C(91b)	C(92b)	C(93b)	130(1)	C(92a)	C(92b)	C(93b)	90(1)
C(92a)	C(93a)	C(93b)	80(1)	C(92a)	C(93a)	C(94a)	121(1)
C(92a)	C(93a)	C(94b)	117(1)	C(92a)	C(93a)	C(98a)	119(1)
C(93b)	C(93a)	C(94a)	80(1)	C(93b)	C(93a)	C(94b)	53(1)
C(93b)	C(93a)	C(98a)	109(1)	C(94a)	C(93a)	C(94b)	28(1)
C(94a)	C(93a)	C(98a)	119(1)	C(94b)	C(93a)	C(98a)	115(1)
C(92b)	C(93b)	C(93a)	90(1)	C(92b)	C(93b)	C(94b)	120(1)
C(92b)	C(93b)	C(98b)	120(1)	C(93a)	C(93b)	C(94b)	57(1)
C(93a)	C(93b)	C(98b)	126(1)	C(94b)	C(93b)	C(98b)	118(1)
C(93a)	C(94a)	C(94b)	77(4)	C(93a)	C(94a)	C(95a)	116(2)
C(93a)	C(94a)	C(95b)	108(1)	C(94b)	C(94a)	C(95a)	92(4)

Table 5. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(94b)	C(94a)	C(95b)	56(3)	C(95a)	C(94a)	C(95b)	35(1)
C(93a)	C(94b)	C(93b)	69(1)	C(93a)	C(94b)	C(94a)	73(5)
C(93a)	C(94b)	C(95a)	104(2)	C(93a)	C(94b)	C(95b)	122(2)
C(93b)	C(94b)	C(94a)	137(5)	C(93b)	C(94b)	C(95a)	148(2)
C(93b)	C(94b)	C(95b)	118(2)	C(94a)	C(94b)	C(95a)	61(3)
C(94a)	C(94b)	C(95b)	98(4)	C(95a)	C(94b)	C(95b)	37(1)
C(94a)	C(95a)	C(94b)	25(1)	C(94a)	C(95a)	C(95b)	87(2)
C(94a)	C(95a)	C(96a)	122(2)	C(94b)	C(95a)	C(95b)	61(2)
C(94b)	C(95a)	C(96a)	115(2)	C(95b)	C(95a)	C(96a)	89(3)
C(94a)	C(95b)	C(94b)	24(1)	C(94a)	C(95b)	C(95a)	57(2)
C(94a)	C(95b)	C(96a)	93(2)	C(94a)	C(95b)	C(96b)	141(2)
C(94b)	C(95b)	C(95a)	81(3)	C(94b)	C(95b)	C(96a)	108(2)
C(94b)	C(95b)	C(96b)	119(2)	C(95a)	C(95b)	C(96a)	54(2)
C(95a)	C(95b)	C(96b)	145(3)	C(96a)	C(95b)	C(96b)	91(2)
C(95a)	C(96a)	C(95b)	36(1)	C(95a)	C(96a)	C(97a)	119(1)
C(95b)	C(96a)	C(97a)	110(1)	C(95b)	C(96b)	C(97b)	120(1)
C(96a)	C(97a)	C(98a)	121(1)	C(96b)	C(97b)	C(98a)	141(2)
C(96b)	C(97b)	C(98b)	119(2)	C(98a)	C(97b)	C(98b)	70(1)
C(93a)	C(98a)	C(97a)	120(1)	C(93a)	C(98a)	C(97b)	123(1)
C(93a)	C(98a)	C(98b)	159(1)	C(97a)	C(98a)	C(97b)	115(1)
C(97a)	C(98a)	C(98b)	70(1)	C(97b)	C(98a)	C(98b)	46.3(10)
C(93b)	C(98b)	C(97b)	124(2)	C(93b)	C(98b)	C(98a)	140(1)
C(97b)	C(98b)	C(98a)	62(1)				

Table 6. Bond Angles(°)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(1)	C(6)	H(1)	109.4	C(1)	C(6)	H(2)	109.4
C(1)	C(6)	H(3)	109.7	H(1)	C(6)	H(2)	109.2
H(1)	C(6)	H(3)	109.6	H(2)	C(6)	H(3)	109.5
C(2)	C(7)	H(4)	109.7	C(2)	C(7)	H(5)	109.8
C(2)	C(7)	H(6)	109.7	H(4)	C(7)	H(5)	109.4
H(4)	C(7)	H(6)	109.2	H(5)	C(7)	H(6)	109.1
C(3)	C(8)	H(7)	109.5	C(3)	C(8)	H(8)	109.6
C(3)	C(8)	H(9)	109.4	H(7)	C(8)	H(8)	109.5
H(7)	C(8)	H(9)	109.4	H(8)	C(8)	H(9)	109.5
C(4)	C(9)	H(10)	109.4	C(4)	C(9)	H(11)	109.5
C(4)	C(9)	H(12)	109.0	H(10)	C(9)	H(11)	110.2
H(10)	C(9)	H(12)	109.4	H(11)	C(9)	H(12)	109.3
C(5)	C(10)	H(13)	109.5	C(5)	C(10)	H(14)	109.4
C(5)	C(10)	H(15)	109.4	H(13)	C(10)	H(14)	109.4
H(13)	C(10)	H(15)	109.5	H(14)	C(10)	H(15)	109.5
C(12)	C(13)	H(16)	118.4	C(14)	C(13)	H(16)	119.0
C(13)	C(14)	H(17)	119.9	C(15)	C(14)	H(17)	119.9
C(14)	C(15)	H(18)	120.9	C(16)	C(15)	H(18)	120.9
C(11)	C(16)	H(19)	118.4	C(15)	C(16)	H(19)	118.4
C(12)	C(17)	H(20)	109.5	C(12)	C(17)	H(21)	109.6
C(12)	C(17)	H(22)	109.5	H(20)	C(17)	H(21)	109.4
H(20)	C(17)	H(22)	109.4	H(21)	C(17)	H(22)	109.4
Ta(1)	C(18)	H(23)	106.3	Ta(1)	C(18)	H(24)	106.5
C(19)	C(18)	H(23)	106.2	C(19)	C(18)	H(24)	106.3

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
H(23)	C(18)	H(24)	109.4	C(19)	C(20)	H(25)	118.5
C(21)	C(20)	H(25)	118.4	C(20)	C(21)	H(26)	120.9
C(22)	C(21)	H(26)	120.1	C(21)	C(22)	H(27)	120.1
C(23)	C(22)	H(27)	120.0	C(22)	C(23)	H(28)	120.2
C(24)	C(23)	H(28)	120.5	C(19)	C(24)	H(29)	118.7
C(23)	C(24)	H(29)	118.6	C(26)	C(27)	H(30)	119.2
C(28)	C(27)	H(30)	119.4	C(27)	C(28)	H(31)	120.0
C(29)	C(28)	H(31)	119.5	C(28)	C(29)	H(32)	120.3
C(30)	C(29)	H(32)	120.3	C(26)	C(31)	H(33)	109.4
C(26)	C(31)	H(34)	109.5	C(26)	C(31)	H(35)	109.5
H(33)	C(31)	H(34)	109.4	H(33)	C(31)	H(35)	109.4
H(34)	C(31)	H(35)	109.6	C(30)	C(32)	H(36)	109.7
C(30)	C(32)	H(37)	109.3	C(30)	C(32)	H(38)	109.4
H(36)	C(32)	H(37)	109.5	H(36)	C(32)	H(38)	109.8
H(37)	C(32)	H(38)	109.1	C(33)	C(34)	H(39)	107.7
C(33)	C(34)	H(40)	107.8	C(35)	C(34)	H(39)	107.7
C(35)	C(34)	H(40)	107.8	H(39)	C(34)	H(40)	109.6
C(35)	C(36)	H(41)	120.3	C(37)	C(36)	H(41)	120.5
C(36)	C(37)	H(42)	119.0	C(38)	C(37)	H(42)	118.9
C(37)	C(38)	H(43)	120.6	C(39)	C(38)	H(43)	120.3
C(38)	C(39)	H(44)	119.6	C(40)	C(39)	H(44)	119.2
C(35)	C(40)	H(45)	119.8	C(39)	C(40)	H(45)	119.9
C(33)	C(41)	H(46)	116.0	C(42)	C(41)	H(46)	116.4
C(41)	C(42)	H(47)	118.8	C(43)	C(42)	H(47)	118.7

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(42)	C(43)	H(48)	115.7	C(44)	C(43)	H(48)	115.5
C(44)	C(45)	H(49)	119.2	C(46)	C(45)	H(49)	119.2
C(45)	C(46)	H(50)	119.7	C(47)	C(46)	H(50)	119.8
C(46)	C(47)	H(51)	120.3	C(48)	C(47)	H(51)	120.5
C(47)	C(48)	H(52)	120.6	C(49)	C(48)	H(52)	120.7
C(44)	C(49)	H(53)	118.5	C(48)	C(49)	H(53)	118.3
C(50)	C(55)	H(54)	109.3	C(50)	C(55)	H(55)	109.3
C(50)	C(55)	H(56)	109.7	H(54)	C(55)	H(55)	109.1
H(54)	C(55)	H(56)	109.5	H(55)	C(55)	H(56)	110.0
C(51)	C(56)	H(57)	109.8	C(51)	C(56)	H(58)	109.6
C(51)	C(56)	H(59)	109.5	H(57)	C(56)	H(58)	109.5
H(57)	C(56)	H(59)	109.3	H(58)	C(56)	H(59)	109.2
C(52)	C(57)	H(60)	109.3	C(52)	C(57)	H(61)	110.0
C(52)	C(57)	H(62)	109.4	H(60)	C(57)	H(61)	109.7
H(60)	C(57)	H(62)	108.4	H(61)	C(57)	H(62)	109.9
C(53)	C(58)	H(63)	110.0	C(53)	C(58)	H(64)	109.5
C(53)	C(58)	H(65)	109.7	H(63)	C(58)	H(64)	109.4
H(63)	C(58)	H(65)	109.3	H(64)	C(58)	H(65)	108.9
C(54)	C(59)	H(66)	109.5	C(54)	C(59)	H(67)	109.5
C(54)	C(59)	H(68)	109.3	H(66)	C(59)	H(67)	109.6
H(66)	C(59)	H(68)	109.4	H(67)	C(59)	H(68)	109.6
C(61)	C(62)	H(69)	118.8	C(63)	C(62)	H(69)	118.8
C(62)	C(63)	H(70)	120.5	C(64)	C(63)	H(70)	120.1
C(63)	C(64)	H(71)	119.7	C(65)	C(64)	H(71)	119.8

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(60)	C(65)	H(72)	120.2	C(64)	C(65)	H(72)	120.2
C(61)	C(66)	H(73)	109.6	C(61)	C(66)	H(74)	109.6
C(61)	C(66)	H(75)	109.5	H(73)	C(66)	H(74)	109.6
H(73)	C(66)	H(75)	109.3	H(74)	C(66)	H(75)	109.3
Ta(2)	C(67)	H(76)	105.0	Ta(2)	C(67)	H(77)	105.1
C(68)	C(67)	H(76)	105.2	C(68)	C(67)	H(77)	105.4
H(76)	C(67)	H(77)	109.7	C(68)	C(69)	H(78)	119.3
C(70)	C(69)	H(78)	119.3	C(69)	C(70)	H(79)	119.5
C(71)	C(70)	H(79)	119.1	C(70)	C(71)	H(80)	120.7
C(72)	C(71)	H(80)	120.7	C(71)	C(72)	H(81)	120.0
C(73)	C(72)	H(81)	120.2	C(68)	C(73)	H(82)	119.0
C(72)	C(73)	H(82)	119.0	C(75)	C(76)	H(83)	118.6
C(77)	C(76)	H(83)	118.5	C(76)	C(77)	H(84)	120.4
C(78)	C(77)	H(84)	120.2	C(77)	C(78)	H(85)	119.9
C(79)	C(78)	H(85)	120.0	C(75)	C(80)	H(86)	109.5
C(75)	C(80)	H(87)	109.8	C(75)	C(80)	H(88)	109.3
H(86)	C(80)	H(87)	109.8	H(86)	C(80)	H(88)	108.8
H(87)	C(80)	H(88)	109.6	C(79)	C(81)	H(89)	110.0
C(79)	C(81)	H(90)	109.7	C(79)	C(81)	H(91)	109.8
H(89)	C(81)	H(90)	109.1	H(89)	C(81)	H(91)	109.3
H(90)	C(81)	H(91)	108.9	C(82)	C(83)	H(92)	108.3
C(82)	C(83)	H(93)	108.4	C(84)	C(83)	H(92)	107.7
C(84)	C(83)	H(93)	107.8	H(92)	C(83)	H(93)	109.5
C(84)	C(85)	H(94)	119.2	C(86)	C(85)	H(94)	120.0

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C(85)	C(86)	H(95)	118.9	C(87)	C(86)	H(95)	119.3
C(86)	C(87)	H(96)	120.8	C(88)	C(87)	H(96)	121.0
C(87)	C(88)	H(97)	120.0	C(89)	C(88)	H(97)	120.9
C(84)	C(89)	H(98)	118.9	C(88)	C(89)	H(98)	118.3
C(82)	C(90a)	H(99a)	123.3	C(90b)	C(90a)	H(99a)	132.0
C(91a)	C(90a)	H(99a)	100.4	C(91b)	C(90a)	H(99a)	122.8
C(82)	C(90b)	H(99b)	116.7	C(90a)	C(90b)	H(99b)	107.4
C(91a)	C(90b)	H(99b)	122.4	C(91b)	C(90b)	H(99b)	116.1
C(90a)	C(91a)	H(100a)	117.2	C(90a)	C(91a)	H(100b)	108.5
C(90b)	C(91a)	H(100a)	114.4	C(90b)	C(91a)	H(100b)	91.1
C(91b)	C(91a)	H(100a)	95.5	C(91b)	C(91a)	H(100b)	57.6
C(92a)	C(91a)	H(100a)	117.7	C(92a)	C(91a)	H(100b)	113.7
C(92b)	C(91a)	H(100a)	114.2	C(92b)	C(91a)	H(100b)	83.7
H(100a)	C(91a)	H(100b)	38.1	C(90a)	C(91b)	H(100b)	105.6
C(90b)	C(91b)	H(100b)	118.7	C(91a)	C(91b)	H(100b)	68.7
C(92a)	C(91b)	H(100b)	94.5	C(92b)	C(91b)	H(100b)	118.3
C(91a)	C(92a)	H(101a)	147.5	C(91b)	C(92a)	H(101a)	156.6
C(92b)	C(92a)	H(101a)	115.1	C(93a)	C(92a)	H(101a)	75.7
C(91a)	C(92b)	H(101b)	118.2	C(91b)	C(92b)	H(101b)	114.0
C(92a)	C(92b)	H(101b)	110.3	C(93b)	C(92b)	H(101b)	115.1
C(93a)	C(94a)	H(102a)	122.3	C(93a)	C(94a)	H(102b)	143.8
C(94b)	C(94a)	H(102a)	100.8	C(94b)	C(94a)	H(102b)	80.4
C(95a)	C(94a)	H(102a)	120.9	C(95a)	C(94a)	H(102b)	92.4
C(95b)	C(94a)	H(102a)	118.8	C(95b)	C(94a)	H(102b)	82.7

Table 6. Bond Angles(°) (continued)

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
H(102a)	C(94a)	H(102b)	36.1	C(93a)	C(94b)	H(102b)	126.8
C(93b)	C(94b)	H(102b)	131.3	C(94a)	C(94b)	H(102b)	61.2
C(95a)	C(94b)	H(102b)	78.5	C(95b)	C(94b)	H(102b)	92.1
C(94a)	C(95a)	H(103a)	119.8	C(94a)	C(95a)	H(103b)	136.6
C(94b)	C(95a)	H(103a)	121.1	C(94b)	C(95a)	H(103b)	121.3
C(95b)	C(95a)	H(103a)	94.8	C(95b)	C(95a)	H(103b)	70.1
C(96a)	C(95a)	H(103a)	117.3	C(96a)	C(95a)	H(103b)	94.4
H(103a)	C(95a)	H(103b)	33.2	C(94a)	C(95b)	H(103b)	93.8
C(94b)	C(95b)	H(103b)	116.9	C(95a)	C(95b)	H(103b)	43.7
C(96a)	C(95b)	H(103b)	68.1	C(96b)	C(95b)	H(103b)	123.2
C(95a)	C(96a)	H(104a)	120.3	C(95b)	C(96a)	H(104a)	116.5
C(97a)	C(96a)	H(104a)	119.9	C(95b)	C(96b)	H(104b)	120.9
C(97b)	C(96b)	H(104b)	117.8	C(96a)	C(97a)	H(105a)	118.7
C(96a)	C(97a)	H(106b)	156.4	C(98a)	C(97a)	H(105a)	120.2
C(98a)	C(97a)	H(106b)	82.4	H(105a)	C(97a)	H(106b)	37.8
C(96b)	C(97b)	H(105b)	118.2	C(96b)	C(97b)	H(106a)	146.1
C(98a)	C(97b)	H(105b)	66.2	C(98a)	C(97b)	H(106a)	12.5
C(98b)	C(97b)	H(105b)	122.6	C(98b)	C(97b)	H(106a)	78.9
H(105b)	C(97b)	H(106a)	54.1	C(93a)	C(98a)	H(106a)	120.1
C(97a)	C(98a)	H(106a)	119.8	C(97b)	C(98a)	H(106a)	9.9
C(98b)	C(98a)	H(106a)	52.9	C(93b)	C(98b)	H(106b)	118.4
C(97b)	C(98b)	H(106b)	117.6	C(98a)	C(98b)	H(106b)	70.3