

Heavily π -Bond Loaded Tungsten Phosphonio-alkylidyne Complexes via a Domino Transylidation Cascade at Organoimido Tungsten Tetrachlorides

Xiaoyan Li, Markus Schopf, Jürgen Stephan, Klaus Harms, Jörg Sundermeyer*

Supplementary Material:

Table 1. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2$) for complex **1**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
W(1)	0.18673(2)	0.25641(2)	0.75356(2)	0.03726(9)
P(1)	0.21529(13)	0.03337(14)	0.65496(11)	0.0414(4)
P(2)	0.31905(12)	0.16718(13)	0.90421(11)	0.0394(4)
P(3)	0.25617(13)	0.46211(14)	0.65706(12)	0.0480(5)
N(1)	0.0522(4)	0.3070(4)	0.7826(3)	0.0435(14)
C(1)	-0.0552(5)	0.3264(5)	0.8020(4)	0.0409(15)
C(2)	-0.1148(5)	0.3591(5)	0.8873(4)	0.0417(16)
C(3)	-0.2195(5)	0.3752(5)	0.9036(5)	0.0542(18)
C(4)	-0.2673(5)	0.3623(6)	0.8412(5)	0.065(2)
C(5)	-0.2111(5)	0.3298(6)	0.7586(5)	0.058(2)
C(6)	-0.1044(5)	0.3122(5)	0.7353(5)	0.0499(18)
C(7)	-0.0611(5)	0.3740(5)	0.9566(4)	0.0469(17)
C(8)	-0.0348(6)	0.2808(6)	1.0077(5)	0.070(2)
C(9)	-0.1210(6)	0.4618(7)	1.0178(5)	0.074(2)
C(10)	-0.0404(6)	0.2850(6)	0.6423(4)	0.056(2)
C(11)	-0.0924(7)	0.2342(7)	0.5890(5)	0.073(2)
C(12)	-0.0114(7)	0.3736(7)	0.5957(5)	0.072(2)
C(13)	0.2297(5)	0.1331(5)	0.7058(4)	0.0423(16)
C(14)	0.1140(5)	-0.0210(5)	0.7168(4)	0.0436(16)
C(15)	0.1200(6)	-0.1225(6)	0.7175(5)	0.062(2)
C(16)	0.0406(7)	-0.1602(7)	0.7684(6)	0.075(2)
C(17)	-0.0454(7)	-0.0998(8)	0.8177(5)	0.070(2)
C(18)	-0.0537(6)	0.0016(8)	0.8168(5)	0.074(3)
C(19)	0.0271(6)	0.0417(7)	0.7670(5)	0.059(2)

C(20)	0.1897(5)	0.0643(5)	0.5484(4)	0.0427(16)
C(21)	0.1410(6)	0.0096(6)	0.5081(4)	0.058(2)
C(22)	0.1264(6)	0.0356(7)	0.4244(5)	0.065(2)
C(23)	0.1642(6)	0.1114(6)	0.3800(5)	0.058(2)
C(24)	0.2110(6)	0.1658(6)	0.4204(5)	0.0576(19)
C(25)	0.2224(2)	0.1433(2)	0.5043(2)	0.0463(17)
C(26)	0.3322(2)	-0.0632(2)	0.6321(2)	0.0467(17)
C(27A)	0.3944(2)	-0.0792(2)	0.5472(2)	0.124(9)
C(28A)	0.4871(2)	-0.1491(2)	0.5312(2)	0.123(9)
C(29)	0.5175(2)	-0.2031(2)	0.6002(2)	0.087(3)
C(30A)	0.4553(2)	-0.1872(2)	0.6852(2)	0.085(5)
C(31A)	0.3626(2)	-0.1172(2)	0.7012(2)	0.074(5)
C(27B)	0.3382(2)	-0.1262(2)	0.5585(2)	0.086(10)
C(28B)	0.4455(2)	-0.2050(2)	0.5401(2)	0.095(13)
C(30B)	0.4940(2)	-0.1418(2)	0.6500(2)	0.090(12)
C(31B)	0.4018(2)	-0.0754(2)	0.6706(2)	0.058(8)
C(32)	0.2310(2)	0.2487(2)	0.8651(2)	0.0440(16)
C(33)	0.4494(5)	0.1465(5)	0.8372(4)	0.0471(17)
C(34)	0.5298(5)	0.1578(6)	0.8691(5)	0.068(2)
C(35)	0.6285(6)	0.1429(8)	0.8157(7)	0.088(3)
C(36)	0.6478(8)	0.1191(9)	0.7301(7)	0.102(4)
C(37)	0.5726(8)	0.1044(12)	0.6979(6)	0.137(6)
C(38)	0.4725(6)	0.1191(9)	0.7501(5)	0.103(4)
C(39)	0.2981(5)	0.0432(5)	0.9182(4)	0.0439(16)
C(40)	0.3756(6)	-0.0392(6)	0.9222(5)	0.060(2)
C(41)	0.3548(7)	-0.1311(6)	0.9408(6)	0.076(3)
C(42)	0.2556(8)	-0.1407(7)	0.9528(6)	0.081(3)
C(43)	0.1785(6)	-0.0612(6)	0.9450(5)	0.064(2)
C(44)	0.1998(5)	0.0306(5)	0.9285(4)	0.0517(18)
C(45)	0.3271(4)	0.2039(5)	1.0116(4)	0.0393(15)
C(46)	0.3391(5)	0.1377(5)	1.0791(4)	0.0480(17)
C(47)	0.3494(6)	0.1683(7)	1.1581(5)	0.060(2)
C(48)	0.3489(6)	0.2664(7)	1.1705(5)	0.068(2)
C(49)	0.3359(6)	0.3324(6)	1.1051(5)	0.061(2)
C(50)	0.3252(5)	0.3006(6)	1.0255(4)	0.0515(18)
C(51)	0.2613(5)	0.3398(5)	0.6639(4)	0.0468(17)

C(52)	0.1268(5)	0.5390(5)	0.6841(4)	0.0438(16)
C(53)	0.0637(6)	0.5321(6)	0.7653(5)	0.058(2)
C(54)	-0.0374(6)	0.5857(6)	0.7862(5)	0.062(2)
C(55)	-0.0744(6)	0.6424(6)	0.7261(6)	0.069(2)
C(56)	-0.0138(7)	0.6510(8)	0.6459(6)	0.088(3)
C(57)	0.0902(4)	0.5994(5)	0.6218(4)	0.065(2)
C(58)	0.3127(4)	0.5028(5)	0.5520(4)	0.084(3)
C(59A)	0.3011(4)	0.4588(5)	0.4790(4)	0.114(10)
C(60A)	0.352(3)	0.502(2)	0.3973(19)	0.102(8)
C(61A)	0.3955(17)	0.582(2)	0.3924(16)	0.086(7)
C(62A)	0.3980(14)	0.6330(19)	0.4681(13)	0.092(6)
C(63A)	0.3618(16)	0.5954(18)	0.5496(13)	0.082(6)
C(59B)	0.278(3)	0.4547(19)	0.4832(14)	0.110(9)
C(60B)	0.298(2)	0.4632(19)	0.3879(14)	0.077(7)
C(61B)	0.374(2)	0.517(3)	0.361(2)	0.081(8)
C(62B)	0.417(2)	0.556(3)	0.421(2)	0.090(8)
C(63B)	0.3779(16)	0.539(2)	0.5098(16)	0.074(7)
C(64)	0.3173(6)	0.5082(6)	0.7311(5)	0.057(2)
C(65)	0.3766(7)	0.4420(7)	0.7752(6)	0.062(3)
C(66)	0.4262(7)	0.4704(10)	0.8344(6)	0.086(3)
C(67)	0.4121(9)	0.5727(13)	0.8475(9)	0.128(5)
C(68)	0.3517(11)	0.6371(11)	0.8073(13)	0.162(7)
C(69)	0.3033(9)	0.6071(8)	0.7503(10)	0.126(5)

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

W(1)-N(1)	1.779(5)	C(9)-H(9A)	0.9800
W(1)-C(13)	1.813(6)	C(9)-H(9B)	0.9800
W(1)-C(32)	1.994(3)	C(9)-H(9C)	0.9800
W(1)-C(51)	2.022(7)	C(10)-C(12)	1.492(11)
P(1)-C(13)	1.714(7)	C(10)-C(11)	1.530(10)
P(1)-C(14)	1.800(7)	C(10)-H(10A)	1.0000
P(1)-C(26)	1.813(3)	C(11)-H(11A)	0.9800
P(1)-C(20)	1.813(6)	C(11)-H(11B)	0.9800
P(2)-C(32)	1.680(3)	C(11)-H(11C)	0.9800
P(2)-C(33)	1.811(7)	C(12)-H(12A)	0.9800
P(2)-C(39)	1.816(7)	C(12)-H(12B)	0.9800
P(2)-C(45)	1.828(6)	C(12)-H(12C)	0.9800
P(3)-C(51)	1.691(7)	C(14)-C(19)	1.386(10)
P(3)-C(58)	1.771(6)	C(14)-C(15)	1.399(10)
P(3)-C(52)	1.815(7)	C(15)-C(16)	1.385(11)
P(3)-C(64)	1.826(8)	C(15)-H(15A)	0.9500
N(1)-C(1)	1.406(8)	C(16)-C(17)	1.359(12)
C(1)-C(2)	1.416(9)	C(16)-H(16A)	0.9500
C(1)-C(6)	1.435(9)	C(17)-C(18)	1.392(12)
C(2)-C(3)	1.375(9)	C(17)-H(17A)	0.9500
C(2)-C(7)	1.517(8)	C(18)-C(19)	1.413(11)
C(3)-C(4)	1.359(10)	C(18)-H(18A)	0.9500
C(3)-H(3A)	0.9500	C(19)-H(19A)	0.9500
C(4)-C(5)	1.370(10)	C(20)-C(25)	1.381(7)
C(4)-H(4A)	0.9500	C(20)-C(21)	1.398(9)
C(5)-C(6)	1.396(9)	C(21)-C(22)	1.402(9)
C(5)-H(5A)	0.9500	C(21)-H(21A)	0.9500
C(6)-C(10)	1.519(10)	C(22)-C(23)	1.375(11)
C(7)-C(8)	1.516(10)	C(22)-H(22A)	0.9500
C(7)-C(9)	1.529(10)	C(23)-C(24)	1.376(10)
C(7)-H(7A)	1.0000	C(23)-H(23A)	0.9500
C(8)-H(8A)	0.9800	C(24)-C(25)	1.383(7)
C(8)-H(8B)	0.9800	C(24)-H(24A)	0.9500
C(8)-H(8C)	0.9800	C(25)-H(25A)	0.9500

C(26)-C(31B)	1.2413	C(39)-C(40)	1.387(9)
C(26)-C(31A)	1.3899	C(40)-C(41)	1.382(11)
C(26)-C(27A)	1.3900	C(40)-H(40A)	0.9500
C(26)-C(27B)	1.4622	C(41)-C(42)	1.381(12)
C(27A)-C(28A)	1.3901	C(41)-H(41A)	0.9500
C(27A)-H(27A)	0.9501	C(42)-C(43)	1.371(11)
C(28A)-C(29)	1.3899	C(42)-H(42A)	0.9500
C(28A)-H(28A)	0.9500	C(43)-C(44)	1.380(10)
C(29)-C(30B)	1.1195	C(43)-H(43A)	0.9500
C(29)-C(30A)	1.3900	C(44)-H(44A)	0.9500
C(29)-C(28B)	1.5484	C(45)-C(50)	1.370(9)
C(29)-H(29A)	0.9500	C(45)-C(46)	1.391(9)
C(29)-H(29B)	0.9500	C(46)-C(47)	1.386(10)
C(30A)-C(31A)	1.3901	C(46)-H(46A)	0.9500
C(30A)-H(30A)	0.9499	C(47)-C(48)	1.390(12)
C(31A)-H(31A)	0.9500	C(47)-H(47A)	0.9500
C(27B)-C(28B)	1.5942	C(48)-C(49)	1.365(11)
C(27B)-H(27A)	1.5503	C(48)-H(48A)	0.9500
C(27B)-H(27B)	0.9500	C(49)-C(50)	1.404(9)
C(28B)-H(28B)	0.9500	C(49)-H(49A)	0.9500
C(30B)-C(31B)	1.3613	C(50)-H(50A)	0.9500
C(30B)-H(30B)	0.9500	C(51)-H(51A)	0.9500
C(31B)-H(31B)	0.9500	C(52)-C(53)	1.366(9)
C(32)-H(32)	0.9500	C(52)-C(57)	1.380(8)
C(33)-C(38)	1.377(10)	C(53)-C(54)	1.389(10)
C(33)-C(34)	1.379(10)	C(53)-H(53A)	0.9500
C(34)-C(35)	1.386(11)	C(54)-C(55)	1.330(10)
C(34)-H(34A)	0.9500	C(54)-H(54A)	0.9500
C(35)-C(36)	1.347(13)	C(55)-C(56)	1.344(11)
C(35)-H(35A)	0.9500	C(55)-H(55A)	0.9500
C(36)-C(37)	1.332(15)	C(56)-C(57)	1.415(9)
C(36)-H(36A)	0.9500	C(56)-H(56A)	0.9500
C(37)-C(38)	1.396(12)	C(57)-H(57A)	0.9500
C(37)-H(37A)	0.9500	C(58)-C(63B)	1.18(2)
C(38)-H(38A)	0.9500	C(58)-C(59A)	1.3900
C(39)-C(44)	1.386(9)	C(58)-C(59B)	1.53(4)

C(58)-C(63A)	1.59(2)	C(32)-W(1)-C(51)	111.4(2)
C(59A)-C(60A)	1.47(3)	C(13)-P(1)-C(14)	114.1(3)
C(59A)-H(59A)	0.9500	C(13)-P(1)-C(26)	111.2(2)
C(60A)-C(61A)	1.39(5)	C(14)-P(1)-C(26)	107.3(3)
C(60A)-H(60A)	0.9500	C(13)-P(1)-C(20)	112.0(3)
C(61A)-C(62A)	1.43(4)	C(14)-P(1)-C(20)	106.9(3)
C(61A)-H(61A)	0.9500	C(26)-P(1)-C(20)	104.8(2)
C(62A)-C(63A)	1.38(2)	C(32)-P(2)-C(33)	115.7(3)
C(62A)-H(62A)	0.9500	C(32)-P(2)-C(39)	114.8(2)
C(63A)-H(63A)	0.9500	C(33)-P(2)-C(39)	102.7(3)
C(59B)-C(60B)	1.46(3)	C(32)-P(2)-C(45)	112.7(2)
C(59B)-H(59B)	0.9500	C(33)-P(2)-C(45)	104.2(3)
C(60B)-C(61B)	1.42(5)	C(39)-P(2)-C(45)	105.4(3)
C(60B)-H(60B)	0.9500	C(51)-P(3)-C(58)	115.1(3)
C(61B)-C(62B)	1.42(6)	C(51)-P(3)-C(52)	113.8(3)
C(61B)-H(61B)	0.9500	C(58)-P(3)-C(52)	104.0(3)
C(62B)-C(63B)	1.39(4)	C(51)-P(3)-C(64)	114.8(3)
C(62B)-H(62B)	0.9500	C(58)-P(3)-C(64)	104.4(3)
C(63B)-H(63B)	0.9500	C(52)-P(3)-C(64)	103.4(3)
C(64)-C(65)	1.371(12)	C(1)-N(1)-W(1)	167.8(5)
C(64)-C(69)	1.383(12)	N(1)-C(1)-C(2)	120.1(5)
C(65)-C(66)	1.413(12)	N(1)-C(1)-C(6)	119.8(6)
C(65)-H(65A)	0.63(9)	C(2)-C(1)-C(6)	120.0(6)
C(66)-C(67)	1.411(16)	C(3)-C(2)-C(1)	118.1(6)
C(66)-H(66A)	0.9500	C(3)-C(2)-C(7)	122.9(6)
C(67)-C(68)	1.331(19)	C(1)-C(2)-C(7)	119.1(5)
C(67)-H(67A)	0.9500	C(4)-C(3)-C(2)	122.6(7)
C(68)-C(69)	1.384(17)	C(4)-C(3)-H(3A)	118.7
C(68)-H(68A)	0.9500	C(2)-C(3)-H(3A)	118.7
C(69)-H(69A)	0.9500	C(3)-C(4)-C(5)	120.2(7)
		C(3)-C(4)-H(4A)	119.9
N(1)-W(1)-C(13)	116.5(3)	C(5)-C(4)-H(4A)	119.9
N(1)-W(1)-C(32)	106.06(18)	C(4)-C(5)-C(6)	121.4(7)
C(13)-W(1)-C(32)	106.5(2)	C(4)-C(5)-H(5A)	119.3
N(1)-W(1)-C(51)	111.7(3)	C(6)-C(5)-H(5A)	119.3
C(13)-W(1)-C(51)	104.5(3)	C(5)-C(6)-C(1)	117.6(6)

C(5)-C(6)-C(10)	122.8(6)	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
C(1)-C(6)-C(10)	119.5(6)	H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(8)-C(7)-C(2)	112.0(6)	P(1)-C(13)-W(1)	154.0(4)
C(8)-C(7)-C(9)	111.5(6)	C(19)-C(14)-C(15)	119.2(7)
C(2)-C(7)-C(9)	112.5(6)	C(19)-C(14)-P(1)	117.6(6)
C(8)-C(7)-H(7A)	106.8	C(15)-C(14)-P(1)	123.2(6)
C(2)-C(7)-H(7A)	106.8	C(16)-C(15)-C(14)	120.5(8)
C(9)-C(7)-H(7A)	106.8	C(16)-C(15)-H(15A)	119.8
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	C(14)-C(15)-H(15A)	119.8
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	C(17)-C(16)-C(15)	121.2(9)
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5	C(17)-C(16)-H(16A)	119.4
C(7)-C(8)-H(8C)	109.5	C(15)-C(16)-H(16A)	119.4
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5	C(16)-C(17)-C(18)	119.3(8)
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5	C(16)-C(17)-H(17A)	120.4
C(7)-C(9)-H(9A)	109.5	C(18)-C(17)-H(17A)	120.4
C(7)-C(9)-H(9B)	109.5	C(17)-C(18)-C(19)	120.6(8)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5	C(17)-C(18)-H(18A)	119.7
C(7)-C(9)-H(9C)	109.5	C(19)-C(18)-H(18A)	119.7
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5	C(14)-C(19)-C(18)	119.2(8)
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5	C(14)-C(19)-H(19A)	120.4
C(12)-C(10)-C(6)	110.6(7)	C(18)-C(19)-H(19A)	120.4
C(12)-C(10)-C(11)	110.7(6)	C(25)-C(20)-C(21)	118.8(5)
C(6)-C(10)-C(11)	113.2(6)	C(25)-C(20)-P(1)	118.6(4)
C(12)-C(10)-H(10A)	107.3	C(21)-C(20)-P(1)	122.6(5)
C(6)-C(10)-H(10A)	107.3	C(20)-C(21)-C(22)	119.8(7)
C(11)-C(10)-H(10A)	107.3	C(20)-C(21)-H(21A)	120.1
C(10)-C(11)-H(11A)	109.5	C(22)-C(21)-H(21A)	120.1
C(10)-C(11)-H(11B)	109.5	C(23)-C(22)-C(21)	120.3(7)
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5	C(23)-C(22)-H(22A)	119.9
C(10)-C(11)-H(11C)	109.5	C(21)-C(22)-H(22A)	119.9
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5	C(22)-C(23)-C(24)	119.7(7)
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5	C(22)-C(23)-H(23A)	120.2
C(10)-C(12)-H(12A)	109.5	C(24)-C(23)-H(23A)	120.2
C(10)-C(12)-H(12B)	109.5	C(23)-C(24)-C(25)	120.5(7)
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5	C(23)-C(24)-H(24A)	119.8
C(10)-C(12)-H(12C)	109.5	C(25)-C(24)-H(24A)	119.8

C(20)-C(25)-C(24)	120.9(5)	C(31A)-C(30A)-H(30A)	120.0
C(20)-C(25)-H(25A)	119.5	C(26)-C(31A)-C(30A)	120.0
C(24)-C(25)-H(25A)	119.5	C(26)-C(31A)-H(31A)	120.0
C(31B)-C(26)-C(31A)	40.8	C(30A)-C(31A)-H(31A)	120.0
C(31B)-C(26)-C(27A)	97.1	C(26)-C(27B)-C(28B)	107.9
C(31A)-C(26)-C(27A)	120.0	C(26)-C(27B)-H(27A)	85.1
C(31B)-C(26)-C(27B)	122.2	C(28B)-C(27B)-H(27A)	98.3
C(31A)-C(26)-C(27B)	112.3	C(26)-C(27B)-H(27B)	126.0
C(27A)-C(26)-C(27B)	45.8	C(28B)-C(27B)-H(27B)	126.0
C(31B)-C(26)-P(1)	126.32(12)	H(27A)-C(27B)-H(27B)	87.1
C(31A)-C(26)-P(1)	119.45(11)	C(29)-C(28B)-C(27B)	118.3
C(27A)-C(26)-P(1)	120.42(11)	C(29)-C(28B)-H(28B)	120.8
C(27B)-C(26)-P(1)	111.47(11)	C(27B)-C(28B)-H(28B)	120.8
C(26)-C(27A)-C(28A)	120.0	C(29)-C(30B)-C(31B)	126.0
C(26)-C(27A)-H(27A)	120.0	C(29)-C(30B)-H(30B)	117.0
C(28A)-C(27A)-H(27A)	120.0	C(31B)-C(30B)-H(30B)	117.0
C(29)-C(28A)-C(27A)	120.0	C(26)-C(31B)-C(30B)	127.5
C(29)-C(28A)-H(28A)	120.0	C(26)-C(31B)-H(31B)	116.3
C(27A)-C(28A)-H(28A)	120.0	C(30B)-C(31B)-H(31B)	116.3
C(30B)-C(29)-C(28A)	98.2	P(2)-C(32)-W(1)	133.48(19)
C(30B)-C(29)-C(30A)	44.7	P(2)-C(32)-H(32)	113.3
C(28A)-C(29)-C(30A)	120.0	W(1)-C(32)-H(32)	113.3
C(30B)-C(29)-C(28B)	117.5	C(38)-C(33)-C(34)	116.6(7)
C(28A)-C(29)-C(28B)	41.9	C(38)-C(33)-P(2)	120.5(6)
C(30A)-C(29)-C(28B)	106.2	C(34)-C(33)-P(2)	122.9(5)
C(30B)-C(29)-H(29A)	124.6	C(33)-C(34)-C(35)	121.4(8)
C(28A)-C(29)-H(29A)	120.0	C(33)-C(34)-H(34A)	119.3
C(30A)-C(29)-H(29A)	120.0	C(35)-C(34)-H(34A)	119.3
C(28B)-C(29)-H(29A)	117.8	C(36)-C(35)-C(34)	120.4(9)
C(30B)-C(29)-H(29B)	121.3	C(36)-C(35)-H(35A)	119.8
C(28A)-C(29)-H(29B)	125.4	C(34)-C(35)-H(35A)	119.8
C(30A)-C(29)-H(29B)	114.6	C(37)-C(36)-C(35)	119.7(9)
C(28B)-C(29)-H(29B)	121.3	C(37)-C(36)-H(36A)	120.2
H(29A)-C(29)-H(29B)	5.4	C(35)-C(36)-H(36A)	120.2
C(29)-C(30A)-C(31A)	120.0	C(36)-C(37)-C(38)	121.0(10)
C(29)-C(30A)-H(30A)	120.0	C(36)-C(37)-H(37A)	119.5

C(38)-C(37)-H(37A)	119.5	C(50)-C(49)-H(49A)	120.0
C(33)-C(38)-C(37)	120.7(9)	C(45)-C(50)-C(49)	121.2(7)
C(33)-C(38)-H(38A)	119.6	C(45)-C(50)-H(50A)	119.4
C(37)-C(38)-H(38A)	119.6	C(49)-C(50)-H(50A)	119.4
C(44)-C(39)-C(40)	118.5(7)	P(3)-C(51)-W(1)	133.2(4)
C(44)-C(39)-P(2)	118.7(5)	P(3)-C(51)-H(51A)	113.4
C(40)-C(39)-P(2)	122.7(5)	W(1)-C(51)-H(51A)	113.4
C(41)-C(40)-C(39)	121.0(7)	C(53)-C(52)-C(57)	120.0(6)
C(41)-C(40)-H(40A)	119.5	C(53)-C(52)-P(3)	119.3(5)
C(39)-C(40)-H(40A)	119.5	C(57)-C(52)-P(3)	120.5(5)
C(42)-C(41)-C(40)	119.0(8)	C(52)-C(53)-C(54)	120.7(7)
C(42)-C(41)-H(41A)	120.5	C(52)-C(53)-H(53A)	119.6
C(40)-C(41)-H(41A)	120.5	C(54)-C(53)-H(53A)	119.6
C(43)-C(42)-C(41)	121.0(8)	C(55)-C(54)-C(53)	119.9(7)
C(43)-C(42)-H(42A)	119.5	C(55)-C(54)-H(54A)	120.1
C(41)-C(42)-H(42A)	119.5	C(53)-C(54)-H(54A)	120.1
C(42)-C(43)-C(44)	119.4(8)	C(54)-C(55)-C(56)	120.6(8)
C(42)-C(43)-H(43A)	120.3	C(54)-C(55)-H(55A)	119.7
C(44)-C(43)-H(43A)	120.3	C(56)-C(55)-H(55A)	119.7
C(43)-C(44)-C(39)	121.0(7)	C(55)-C(56)-C(57)	121.7(8)
C(43)-C(44)-H(44A)	119.5	C(55)-C(56)-H(56A)	119.1
C(39)-C(44)-H(44A)	119.5	C(57)-C(56)-H(56A)	119.1
C(50)-C(45)-C(46)	118.1(6)	C(52)-C(57)-C(56)	117.0(6)
C(50)-C(45)-P(2)	118.6(5)	C(52)-C(57)-H(57A)	121.5
C(46)-C(45)-P(2)	123.2(5)	C(56)-C(57)-H(57A)	121.5
C(47)-C(46)-C(45)	121.1(7)	C(63B)-C(58)-C(59A)	93.1(15)
C(47)-C(46)-H(46A)	119.4	C(63B)-C(58)-C(59B)	103.8(18)
C(45)-C(46)-H(46A)	119.4	C(59A)-C(58)-C(59B)	11.7(13)
C(46)-C(47)-C(48)	119.9(7)	C(63B)-C(58)-C(63A)	37.9(13)
C(46)-C(47)-H(47A)	120.0	C(59A)-C(58)-C(63A)	125.3(7)
C(48)-C(47)-H(47A)	120.0	C(59B)-C(58)-C(63A)	132.9(14)
C(49)-C(48)-C(47)	119.5(7)	C(63B)-C(58)-P(3)	146.4(14)
C(49)-C(48)-H(48A)	120.2	C(59A)-C(58)-P(3)	117.7(2)
C(47)-C(48)-H(48A)	120.2	C(59B)-C(58)-P(3)	108.3(13)
C(48)-C(49)-C(50)	120.1(8)	C(63A)-C(58)-P(3)	116.7(8)
C(48)-C(49)-H(49A)	120.0	C(58)-C(59A)-C(60A)	110.7(17)

C(58)-C(59A)-H(59A)	124.7	C(63B)-C(62B)-H(62B)	122.1
C(60A)-C(59A)-H(59A)	124.7	C(61B)-C(62B)-H(62B)	122.1
C(61A)-C(60A)-C(59A)	125(3)	C(58)-C(63B)-C(62B)	137(3)
C(61A)-C(60A)-H(60A)	117.3	C(58)-C(63B)-H(63B)	111.5
C(59A)-C(60A)-H(60A)	117.3	C(62B)-C(63B)-H(63B)	111.5
C(60A)-C(61A)-C(62A)	123(2)	C(65)-C(64)-C(69)	116.7(9)
C(60A)-C(61A)-H(61A)	118.4	C(65)-C(64)-P(3)	119.1(6)
C(62A)-C(61A)-H(61A)	118.4	C(69)-C(64)-P(3)	124.1(7)
C(63A)-C(62A)-C(61A)	118(2)	C(64)-C(65)-C(66)	123.3(9)
C(63A)-C(62A)-H(62A)	121.1	C(64)-C(65)-H(65A)	116(10)
C(61A)-C(62A)-H(62A)	121.1	C(66)-C(65)-H(65A)	120(10)
C(62A)-C(63A)-C(58)	117.1(18)	C(67)-C(66)-C(65)	116.8(11)
C(62A)-C(63A)-H(63A)	121.4	C(67)-C(66)-H(66A)	121.6
C(58)-C(63A)-H(63A)	121.4	C(65)-C(66)-H(66A)	121.6
C(60B)-C(59B)-C(58)	132(3)	C(68)-C(67)-C(66)	120.1(12)
C(60B)-C(59B)-H(59B)	113.9	C(68)-C(67)-H(67A)	119.9
C(58)-C(59B)-H(59B)	113.9	C(66)-C(67)-H(67A)	119.9
C(61B)-C(60B)-C(59B)	107(3)	C(67)-C(68)-C(69)	121.8(13)
C(61B)-C(60B)-H(60B)	126.6	C(67)-C(68)-H(68A)	119.1
C(59B)-C(60B)-H(60B)	126.6	C(69)-C(68)-H(68A)	119.1
C(62B)-C(61B)-C(60B)	123(3)	C(64)-C(69)-C(68)	121.2(12)
C(62B)-C(61B)-H(61B)	118.4	C(64)-C(69)-H(69A)	119.4
C(60B)-C(61B)-H(61B)	118.4	C(68)-C(69)-H(69A)	119.4
C(63B)-C(62B)-C(61B)	116(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2$ for 1).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}
W(1)	0.03302(13)	0.03772(16)	0.04084(14)	-0.00150(10)	-0.01546(10)	-0.00084(10)
P(1)	0.0404(10)	0.0390(11)	0.0443(10)	-0.0016(8)	-0.0144(8)	-0.0040(8)
P(2)	0.0336(9)	0.0426(11)	0.0422(9)	-0.0007(8)	-0.0150(7)	-0.0032(8)
P(3)	0.0406(10)	0.0466(12)	0.0487(10)	0.0081(9)	-0.0063(8)	-0.0016(9)
N(1)	0.037(3)	0.046(4)	0.044(3)	0.002(3)	-0.015(2)	0.001(3)
C(1)	0.032(3)	0.034(4)	0.056(4)	0.001(3)	-0.016(3)	-0.001(3)
C(2)	0.033(3)	0.048(4)	0.042(4)	0.001(3)	-0.009(3)	-0.007(3)
C(3)	0.041(4)	0.056(5)	0.059(4)	-0.003(4)	-0.005(3)	-0.007(4)
C(4)	0.030(4)	0.090(7)	0.070(5)	-0.010(5)	-0.013(4)	-0.005(4)
C(5)	0.042(4)	0.071(6)	0.064(5)	-0.003(4)	-0.023(4)	-0.009(4)
C(6)	0.038(4)	0.055(5)	0.060(4)	0.003(4)	-0.023(3)	-0.005(3)
C(7)	0.034(4)	0.056(5)	0.051(4)	0.000(3)	-0.008(3)	-0.015(3)
C(8)	0.060(5)	0.082(6)	0.071(5)	0.017(5)	-0.027(4)	-0.016(5)
C(9)	0.066(5)	0.092(7)	0.056(5)	-0.019(5)	-0.001(4)	-0.016(5)
C(10)	0.056(5)	0.070(6)	0.048(4)	-0.003(4)	-0.023(4)	-0.014(4)
C(11)	0.078(6)	0.083(7)	0.062(5)	-0.012(5)	-0.025(4)	-0.017(5)
C(12)	0.081(6)	0.092(7)	0.052(5)	0.004(5)	-0.021(4)	-0.035(5)
C(13)	0.041(4)	0.036(4)	0.048(4)	-0.004(3)	-0.018(3)	0.004(3)
C(14)	0.042(4)	0.050(5)	0.041(4)	0.001(3)	-0.014(3)	-0.010(3)
C(15)	0.056(5)	0.060(6)	0.072(5)	0.010(4)	-0.019(4)	-0.018(4)
C(16)	0.079(6)	0.070(6)	0.081(6)	0.017(5)	-0.020(5)	-0.032(5)
C(17)	0.061(5)	0.101(8)	0.056(5)	0.019(5)	-0.014(4)	-0.039(6)
C(18)	0.056(5)	0.099(8)	0.063(5)	-0.001(5)	-0.009(4)	-0.016(5)
C(19)	0.049(5)	0.069(6)	0.059(5)	0.005(4)	-0.014(4)	-0.013(4)
C(20)	0.039(4)	0.048(4)	0.040(4)	-0.002(3)	-0.009(3)	-0.008(3)
C(21)	0.070(5)	0.063(5)	0.049(4)	0.004(4)	-0.018(4)	-0.030(4)
C(22)	0.070(5)	0.082(6)	0.051(4)	-0.009(4)	-0.022(4)	-0.023(5)
C(23)	0.057(5)	0.071(6)	0.043(4)	0.000(4)	-0.014(3)	-0.005(4)
C(24)	0.060(5)	0.060(5)	0.053(4)	0.008(4)	-0.014(4)	-0.018(4)
C(25)	0.049(4)	0.050(4)	0.047(4)	0.005(3)	-0.020(3)	-0.019(4)
C(26)	0.048(4)	0.038(4)	0.055(4)	-0.004(3)	-0.020(3)	-0.003(3)

C(27A)	0.086(12)	0.178(19)	0.042(7)	-0.022(9)	-0.013(7)	0.094(13)
C(28A)	0.110(14)	0.138(18)	0.065(10)	0.006(10)	-0.003(9)	0.054(14)
C(29)	0.057(6)	0.067(7)	0.130(9)	-0.003(6)	-0.031(6)	0.009(5)
C(30A)	0.049(8)	0.119(15)	0.072(9)	0.022(9)	-0.011(7)	-0.002(8)
C(31A)	0.045(8)	0.106(13)	0.053(8)	0.016(7)	-0.007(6)	0.009(8)
C(27B)	0.055(17)	0.09(2)	0.11(2)	0.020(18)	-0.005(16)	-0.028(16)
C(28B)	0.10(2)	0.029(14)	0.09(2)	0.022(14)	0.042(17)	0.027(15)
C(30B)	0.068(19)	0.08(2)	0.11(3)	-0.04(2)	-0.035(18)	0.035(17)
C(31B)	0.057(16)	0.050(16)	0.043(13)	-0.013(12)	-0.002(11)	0.024(12)
C(32)	0.034(3)	0.038(4)	0.056(4)	-0.003(3)	-0.007(3)	-0.004(3)
C(33)	0.041(4)	0.051(5)	0.044(4)	-0.003(3)	-0.012(3)	0.002(3)
C(34)	0.040(4)	0.088(7)	0.074(5)	-0.023(5)	-0.004(4)	-0.017(4)
C(35)	0.042(5)	0.114(9)	0.106(8)	-0.014(6)	-0.004(5)	-0.026(5)
C(36)	0.056(6)	0.141(11)	0.085(7)	0.009(7)	0.009(5)	-0.009(6)
C(37)	0.062(7)	0.263(18)	0.045(5)	-0.011(7)	0.003(5)	0.022(9)
C(38)	0.047(5)	0.186(12)	0.054(5)	-0.027(6)	-0.014(4)	0.021(6)
C(39)	0.043(4)	0.038(4)	0.054(4)	-0.001(3)	-0.024(3)	-0.003(3)
C(40)	0.054(5)	0.053(5)	0.082(5)	0.002(4)	-0.040(4)	-0.006(4)
C(41)	0.085(6)	0.035(5)	0.124(7)	0.011(5)	-0.063(6)	-0.008(4)
C(42)	0.099(7)	0.047(5)	0.120(8)	0.020(5)	-0.064(6)	-0.028(5)
C(43)	0.066(5)	0.048(5)	0.088(6)	0.010(4)	-0.030(4)	-0.023(4)
C(44)	0.048(4)	0.046(5)	0.062(4)	0.002(4)	-0.018(3)	-0.008(4)
C(45)	0.027(3)	0.049(4)	0.039(3)	-0.001(3)	-0.009(3)	0.000(3)
C(46)	0.038(4)	0.049(5)	0.053(4)	-0.004(3)	-0.014(3)	-0.001(3)
C(47)	0.050(5)	0.076(7)	0.044(4)	0.005(4)	-0.015(4)	0.006(4)
C(48)	0.055(5)	0.089(7)	0.051(5)	-0.020(5)	-0.021(4)	0.012(5)
C(49)	0.055(5)	0.067(6)	0.060(5)	-0.017(4)	-0.021(4)	-0.002(4)
C(50)	0.046(4)	0.054(5)	0.054(4)	-0.005(4)	-0.020(3)	-0.003(4)
C(51)	0.047(4)	0.043(4)	0.046(4)	-0.004(3)	-0.018(3)	0.004(3)
C(52)	0.041(4)	0.043(4)	0.044(4)	0.001(3)	-0.008(3)	-0.004(3)
C(53)	0.059(5)	0.052(5)	0.050(4)	0.006(4)	-0.002(4)	-0.002(4)
C(54)	0.054(5)	0.058(5)	0.061(5)	-0.004(4)	0.009(4)	-0.011(4)
C(55)	0.049(5)	0.073(6)	0.074(6)	-0.006(5)	-0.015(4)	0.008(4)
C(56)	0.064(6)	0.116(9)	0.053(5)	-0.001(5)	-0.011(4)	0.035(6)
C(57)	0.057(5)	0.073(6)	0.045(4)	0.004(4)	-0.005(4)	0.011(4)
C(58)	0.048(5)	0.102(8)	0.068(6)	0.040(5)	0.007(4)	0.015(5)

C(59A)	0.132(16)	0.076(13)	0.069(13)	0.019(12)	0.029(12)	0.041(12)
C(60A)	0.100(15)	0.098(14)	0.069(13)	0.013(12)	0.014(13)	0.009(12)
C(61A)	0.048(10)	0.117(16)	0.069(13)	0.046(12)	-0.004(9)	0.004(10)
C(62A)	0.073(10)	0.122(15)	0.085(12)	0.034(11)	-0.021(9)	-0.033(10)
C(63A)	0.089(12)	0.104(15)	0.056(10)	0.023(10)	-0.006(9)	-0.046(11)
C(59B)	0.137(15)	0.073(14)	0.051(13)	0.024(12)	0.021(12)	0.052(13)
C(60B)	0.075(13)	0.077(14)	0.054(10)	0.012(10)	-0.008(10)	0.016(11)
C(61B)	0.058(14)	0.098(17)	0.066(15)	0.031(14)	-0.006(11)	0.004(12)
C(62B)	0.049(12)	0.130(18)	0.070(14)	0.037(13)	0.000(11)	-0.004(13)
C(63B)	0.046(10)	0.107(16)	0.059(12)	0.034(11)	-0.013(10)	-0.007(11)
C(64)	0.046(4)	0.045(5)	0.079(5)	0.002(4)	-0.019(4)	-0.008(4)
C(65)	0.044(4)	0.088(8)	0.054(5)	-0.010(5)	-0.003(4)	-0.026(5)
C(66)	0.053(5)	0.145(11)	0.068(6)	-0.015(6)	-0.006(4)	-0.044(6)
C(67)	0.072(8)	0.160(14)	0.158(12)	-0.081(11)	-0.007(7)	-0.045(9)
C(68)	0.107(11)	0.106(12)	0.30(2)	-0.063(13)	-0.074(13)	-0.040(9)
C(69)	0.092(8)	0.061(7)	0.246(16)	-0.016(8)	-0.075(10)	-0.019(6)

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

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	-0.2600	0.3962	0.9609	0.065
H(4A)	-0.3399	0.3758	0.8550	0.077
H(5A)	-0.2454	0.3191	0.7162	0.069
H(7A)	0.0053	0.3898	0.9247	0.056
H(8A)	0.0016	0.2256	0.9667	0.104
H(8B)	-0.0980	0.2662	1.0445	0.104
H(8C)	0.0088	0.2903	1.0451	0.104
H(9A)	-0.1420	0.5193	0.9828	0.111
H(9B)	-0.0775	0.4771	1.0529	0.111
H(9C)	-0.1818	0.4452	1.0569	0.111
H(10A)	0.0244	0.2373	0.6467	0.068
H(11A)	-0.1156	0.1794	0.6226	0.109
H(11B)	-0.0436	0.2089	0.5335	0.109
H(11C)	-0.1514	0.2819	0.5767	0.109
H(12A)	0.0256	0.4026	0.6290	0.107
H(12B)	-0.0734	0.4223	0.5907	0.107
H(12C)	0.0326	0.3541	0.5369	0.107
H(15A)	0.1789	-0.1660	0.6829	0.074
H(16A)	0.0463	-0.2294	0.7689	0.090
H(17A)	-0.0992	-0.1266	0.8525	0.084
H(18A)	-0.1144	0.0443	0.8499	0.089
H(19A)	0.0220	0.1108	0.7679	0.071
H(21A)	0.1178	-0.0449	0.5374	0.069
H(22A)	0.0902	0.0006	0.3982	0.078
H(23A)	0.1581	0.1261	0.3219	0.070
H(24A)	0.2357	0.2193	0.3903	0.069
H(25A)	0.2531	0.1826	0.5319	0.056
H(27A)	0.3736	-0.0423	0.5000	0.148
H(28A)	0.5296	-0.1601	0.4732	0.147
H(29A)	0.5808	-0.2510	0.5893	0.104
H(29B)	0.5793	-0.2522	0.5951	0.104

H(30A)	0.4761	-0.2241	0.7324	0.102
H(31A)	0.3201	-0.1063	0.7592	0.089
H(27B)	0.2872	-0.1212	0.5272	0.103
H(28B)	0.4647	-0.2520	0.4934	0.114
H(30B)	0.5428	-0.1355	0.6807	0.108
H(31B)	0.3894	-0.0336	0.7200	0.070
H(32)	0.1948	0.3024	0.9043	0.053
H(34A)	0.5173	0.1763	0.9289	0.082
H(35A)	0.6829	0.1494	0.8397	0.106
H(36A)	0.7147	0.1129	0.6929	0.122
H(37A)	0.5874	0.0836	0.6384	0.164
H(38A)	0.4197	0.1100	0.7253	0.124
H(40A)	0.4440	-0.0323	0.9120	0.072
H(41A)	0.4080	-0.1868	0.9454	0.091
H(42A)	0.2405	-0.2034	0.9666	0.097
H(43A)	0.1111	-0.0693	0.9509	0.077
H(44A)	0.1462	0.0860	0.9241	0.062
H(46A)	0.3402	0.0704	1.0710	0.058
H(47A)	0.3569	0.1222	1.2038	0.072
H(48A)	0.3574	0.2874	1.2240	0.081
H(49A)	0.3342	0.3998	1.1136	0.073
H(50A)	0.3164	0.3471	0.9804	0.062
H(51A)	0.3091	0.3025	0.6157	0.056
H(53A)	0.0893	0.4901	0.8078	0.069
H(54A)	-0.0801	0.5819	0.8434	0.075
H(55A)	-0.1443	0.6771	0.7399	0.083
H(56A)	-0.0416	0.6929	0.6044	0.105
H(57A)	0.1330	0.6061	0.5652	0.077
H(59A)	0.2653	0.4081	0.4815	0.137
H(60A)	0.3546	0.4716	0.3435	0.122
H(61A)	0.4252	0.6039	0.3360	0.103
H(62A)	0.4238	0.6908	0.4626	0.111
H(63A)	0.3659	0.6235	0.6019	0.098
H(59B)	0.2351	0.4110	0.5072	0.132
H(60B)	0.2653	0.4375	0.3508	0.092
H(61B)	0.3987	0.5280	0.3003	0.097

H(62B)	0.4692	0.5912	0.4020	0.108
H(63B)	0.4131	0.5619	0.5458	0.089
H(65A)	0.382(8)	0.397(7)	0.767(7)	0.074
H(66A)	0.4671	0.4230	0.8639	0.104
H(67A)	0.4458	0.5955	0.8851	0.154
H(68A)	0.3416	0.7057	0.8181	0.195
H(69A)	0.2596	0.6552	0.7237	0.152
