ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1996, 15(18), 3798-3803, DOI:10.1021/om9605084

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	ga6
Empirical formula	$C_{74}H_{80}Ga_3K_2O_{0.50}$
Crystal color, habit	Red
Crystal size	.24 x .44 x .16 mm
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2(1)/n
Unit cell dimensions	a = 16.3439(3) Å α = 90° b = 19.5981(3) Å β = 92.97° c = 20.7553(4) Å γ = 90°
Volume	6639.2(2) Å^3
Peaks to determine cell	?
θ range of cell peaks	? to ?°
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Z	4
Formula weight	1264.74
Density (calculated)	1.265 Mg/m^3
Absorption coefficient	1.375 mm^{-1}
F(000)	2636

Data Collection

Diffractometer	CCD SMART SYSTEM
θ range for data collection	1.43 to 28.17°
Index ranges	$-21 \le h \le 21$, $-24 \le k \le 25$, $-26 \le l \le 14$
Scan Type	omega
Scan Time	30 sec / frame
Scan Range	.3 ° in omega
Detector-to-sample distance	5.700 cm
Standard peaks	? peaks remeasured at end showed a maximum variation of ? %.
Reflections collected	36237
Independent reflections	15011 (R_{int} = 0.0433)

Solution and Refinement

Solution	direct methods
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Hydrogen atoms	?
Weighting scheme	$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (?P)^2 + ?P]$ where $P = [F_o^2 + 2F_c^2]/3$
Data / restraints / parameters	15010 / 904 / 736
Goodness-of-fit on F^2	1.130
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0552, wR2 = 0.1186
R indices (all data)	R1 = 0.0734, wR2 = 0.1280
Observed data [I>2σ(I)]	12164
Extinction coefficient	0.00034(7)
Largest diff. peak and hole	0.838 and -0.595 $eÅ^{-3}$
Largest and mean Δ / esd	-6.039 and 0.056

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ga(1)	4611(1)	7262(1)	643(1)	22(1)
Ga(2)	4664(1)	8190(1)	1417(1)	22(1)
Ga(3)	4698(1)	7012(1)	1785(1)	22(1)
K(1)	2663(1)	7512(1)	1262(1)	26(1)
K(2)	6661(1)	7499(1)	1294(1)	28(1)
C(1A)	4529(2)	6818(2)	-247(2)	21(1)
C(2A)	3767(2)	6726(2)	-600(2)	22(1)
C(3A)	3720(2)	6363(2)	-1186(2)	26(1)
C(4A)	4422(2)	6100(2)	-1447(2)	29(1)
C(5A)	5179(2)	6198(2)	-1117(2)	28(1)
C(6A)	5236(2)	6546(2)	-530(2)	24(1)
C(7A)	2978(2)	7014(2)	-369(2)	22(1)
C(8A)	2390(2)	6571(2)	-113(2)	28(1)
C(9A)	1629(2)	6832(2)	53(2)	29(1)
C(10A)	1425(2)	7524(2)	-41(2)	28(1)
C(11A)	2016(2)	7953(2)	-282(2)	27(1)
C(12A)	2787(2)	7713(2)	-446(2)	23(1)
C(13A)	6086(2)	6618(2)	-206(2)	23(1)
C(14A)	6406(2)	6087(2)	195(2)	26(1)
C(15A)	7226(2)	6130(2)	435(2)	30(1)
C(16A)	7736(2)	6672(2)	279(2)	33(1)
C(17A)	7400(2)	7200(2)	-107(2)	33(1)
C(18A)	6583(2)	7179(2)	-353(2)	27(1)
C(19A)	2573(3)	5815(2)	-28(2)	38(1)
C(20A)	577(2)	7783(2)	93(2)	42(1)
C(21A)	3398(2)	8210(2)	-720(2)	29(1)
C(22A)	5868(2)	5491(2)	363(2)	35(1)
C(23A)	8637(2)	6689(3)	525(3)	48(1)
C(24A)	6226(2)	7751(2)	-776(2)	37(1)
C(1B)	4658(2)	9229(2)	1533(2)	22(1)
C(2B)	3933(2)	9588(2)	1666(2)	24(1)
C(3B)	3934(2)	10300(2)	1742(2)	29(1)
C(4B)	4652(2)	10676(2)	1684(2)	32(1)
C(5B)	5371(2)	10337(2)	1555(2)	30(1)
C(6B)	5382(2)	9621(2)	1482(2)	24(1)
C(7B)	3120(2)	9232(2)	1744(2)	24(1)
C(8B)	2521(2)	9225(2)	1228(2)	26(1)
C(9B)	1738(2)	8957(2)	1330(2)	29(1)
C(10B)	1529(2)	8709(2)	1926(2)	31(1)
C(11B)	2135(2)	8710(2)	2433(2)	31(1)
C(12B)	2927(2)	8968(2)	2351(2)	28(1)
C(13B)	6198(2)	9305(2)	1338(2)	25(1)
C(14B)	6411(2)	9200(2)	699(2)	30(1)
C(15B)	7210(2)	8981(2)	577(2)	36(1)
C(16B)	7799(2)	8869(2)	1086(2)	40(1)
C(17B)	7575(2)	8955(2)	1711(2)	40(1)
C(18B)	6780(2)	9173(2)	1855(2)	34(1)

C(19B)	2705(3)	9523(2)	575(2)	38(1)
C(20B)	658(2)	8485(2)	2046(2)	42(1)
C(21B)	3552(3)	8987(2)	2917(2)	36(1)
C(22B)	5795(2)	9344(2)	145(2)	34(1)
C(23B)	8680(2)	8689(3)	934(3)	59(2)
C(24B)	6554(3)	9277(2)	2543(2)	46(1)
C(1C)	4757(2)	6366(2)	2559(2)	26(1)
C(2C)	4042(2)	6041(2)	2773(2)	27(1)
C(3C)	4079(3)	5587(2)	3294(2)	39(1)
C(4C)	4829(3)	5437(2)	3621(2)	47(1)
C(5C)	5537(3)	5739(2)	3420(2)	40(1)
C(6C)	5513(2)	6198(2)	2898(2)	27(1)
C(7C)	3204(2)	6181(2)	2458(2)	26(1)
C(8C)	2709(2)	6699(2)	2713(2)	28(1)
C(9C)	1904(2)	6786(2)	2457(2)	30(1)
C(10C)	1573(2)	6374(2)	1956(2)	30(1)
C(11C)	2080(2)	5880(2)	1700(2)	30(1)
C(12C)	2892(2)	5774(2)	1942(2)	29(1)
C(13C)	6313(2)	6513(2)	2724(2)	25(1)
C(14C)	6545(2)	7167(2)	2943(2)	26(1)
C(15C)	7332(2)	7411(2)	2827(2)	29(1)
C(16C)	7901(2)	7021(2)	2504(2)	31(1)
C(17C)	7652(2)	6385(2)	2268(2)	30(1)
C(18C)	6871(2)	6119(2)	2371(2)	29(1)
C(19C)	3059(3)	7149(2)	3254(2)	37(1)
C(20C)	681(2)	6443(3)	1712(2)	43(1)
C(21C)	3422(3)	5226(2)	1654(2)	37(1)
C(22C)	5957(2)	7608(2)	3306(2)	32(1)
C(23C)	8767(2)	7284(2)	2427(2)	41(1)
C(24C)	6621(3)	5420(2)	2120(2)	41(1)
C(1S)	9564(8)	4701(8)	1064(7)	77(4)
C(2S)	10081(17)	4664(15)	571(11)	148(8)
O(3S)	9918(8)	4645(6)	-89(6)	110(4)
C(4S)	10363(31)	5133(31)	-417(29)	157(48)
C(5S)	10045(11)	5704(9)	-793(9)	100(5)

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

Ga(1)-C(1A)	2.040(3)	Ga(1)-Ga(3)	2.4187(5)
Ga(1)-Ga(2)	2.4260(5)	Ga(1)-K(1)	3.5294(8)
Ga(1)-K(2)	3.5777(8)	Ga(2)-C(1B)	2.050(3)
Ga(2)-Ga(3)	2.4317(5)	Ga(2)-K(1)	3.5289(8)
Ga(2)-K(2)	3.5567(8)	Ga(3)-C(1C)	2.043(3)
Ga(3)-K(2)	3.5488(8)	Ga(3)-K(1)	3.5817(8)
K(1)-C(9C)	3.169(4)	K(1)-C(9B)	3.217(4)
K(1)-C(9A)	3.238(4)	K(1)-C(10C)	3.239(4)
K(1)-C(10A)	3.292(4)	K(1)-C(10B)	3.332(4)
K(1)-C(8B)	3.366(4)	K(1)-C(8C)	3.406(4)
K(1)-C(8A)	3.407(4)	K(1)-C(11A)	3.432(4)
K(1)-C(11C)	3.474(4)	K(1)-C(11B)	3.520(4)
K(2)-C(16A)	3.244(4)	K(2)-C(17A)	3.259(4)
K(2)-C(16C)	3.281(4)	K(2)-C(16B)	3.307(4)
K(2)-C(17B)	3.315(4)	K(2)-C(15C)	3.316(4)
K(2)-C(17C)	3.338(4)	K(2)-C(15A)	3.374(4)
K(2)-C(15B)	3.404(4)	K(2)-C(18A)	3.470(4)
K(2)-C(18B)	3.484(4)	K(2)-C(14C)	3.498(4)
C(1A)-C(2A)	1.424(4)	C(1A)-C(6A)	1.425(5)
C(2A)-C(3A)	1.405(5)	C(2A)-C(7A)	1.510(4)
C(3A)-C(4A)	1.393(5)	C(4A)-C(5A)	1.395(5)
C(5A)-C(6A)	1.394(5)	C(6A)-C(13A)	1.520(5)
C(7A)-C(12A)	1.413(5)	C(7A)-C(8A)	1.419(5)
C(8A)-C(9A)	1.403(5)	C(8A)-C(19A)	1.519(5)
C(9A)-C(10A)	1.408(5)	C(10A)-C(11A)	1.394(5)
C(10A)-C(20A)	1.514(5)	C(11A)-C(12A)	1.403(5)
C(12A)-C(21A)	1.524(5)	C(13A)-C(18A)	1.410(5)
C(13A)-C(14A)	1.416(5)	C(14A)-C(15A)	1.407(5)
C(14A)-C(22A)	1.514(5)	C(15A)-C(16A)	1.398(5)
C(16A)-C(17A)	1.403(6)	C(16A)-C(23A)	1.534(5)
C(17A)-C(18A)	1.405(5)	C(18A)-C(24A)	1.521(5)
C(1B)-C(2B)	1.417(5)	C(1B)-C(6B)	1.420(5)
C(2B)-C(3B)	1.403(5)	C(2B)-C(7B)	1.517(5)
C(3B)-C(4B)	1.396(5)	C(4B)-C(5B)	1.389(5)
C(5B)-C(6B)	1.413(5)	C(6B)-C(13B)	1.513(5)
C(7B)-C(12B)	1.413(5)	C(7B)-C(8B)	1.414(5)
C(8B)-C(9B)	1.410(5)	C(8B)-C(19B)	1.520(5)
C(9B)-C(10B)	1.390(5)	C(10B)-C(11B)	1.408(5)
C(10B)-C(20B)	1.521(5)	C(11B)-C(12B)	1.408(5)
C(12B)-C(21B)	1.517(5)	C(13B)-C(14B)	1.404(5)
C(13B)-C(18B)	1.419(5)	C(14B)-C(15B)	1.410(5)
C(14B)-C(22B)	1.516(5)	C(15B)-C(16B)	1.409(6)
C(16B)-C(17B)	1.376(7)	C(16B)-C(23B)	1.530(6)
C(17B)-C(18B)	1.414(6)	C(18B)-C(24B)	1.508(6)
C(1C)-C(2C)	1.422(5)	C(1C)-C(6C)	1.428(5)
C(2C)-C(3C)	1.399(5)	C(2C)-C(7C)	1.513(5)
C(3C)-C(4C)	1.400(6)	C(4C)-C(5C)	1.383(6)
C(5C)-C(6C)	1.407(5)	C(6C)-C(13C)	1.507(5)
C(7C)-C(12C)	1.410(5)	C(7C)-C(8C)	1.417(5)
C(8C)-C(9C)	1.404(5)	C(8C)-C(19C)	1.516(5)
C(9C)-C(10C)	1.404(6)	C(10C)-C(11C)	1.396(5)
C(10C)-C(20C)	1.526(5)	C(11C)-C(12C)	1.410(5)
C(12C)-C(21C)	1.523(5)	C(13C)-C(14C)	1.406(5)
C(13C)-C(18C)	1.426(5)	C(14C)-C(15C)	1.404(5)

C(14C)-C(22C)	1.521(5)	C(15C)-C(16C)	1.401(5)
C(16C)-C(17C)	1.392(5)	C(16C)-C(23C)	1.524(5)
C(17C)-C(18C)	1.406(5)	C(18C)-C(24C)	1.514(5)
C(18)-C(28)	1.36(2)	C(28)-O(38)	1.38(2)
O(38)-C(48)	1.40(3)	C(48)-C(58)	1.45(3)

C(1A)-Ga(1)-Ga(3)	143.03(10)	C(1A)-Ga(1)-Ga(2)	156.69(10)
Ga(3)-Ga(1)-Ga(2)	60.26(2)	C(1A)-Ga(1)-K(1)	111.76(9)
Ga(3)-Ga(1)-K(1)	71.28(2)	Ga(2)-Ga(1)-K(1)	69.89(2)
C(1A)-Ga(1)-K(2)	114.43(9)	Ga(3)-Ga(1)-K(2)	69.52(2)
Ga(2)-Ga(1)-K(2)	69.65(2)	K(1)-Ga(1)-K(2)	133.60(2)
C(1B)-Ga(2)-Ga(1)	145.30(10)	C(1B)-Ga(2)-Ga(3)	154.97(10)
Ga(1)-Ga(2)-Ga(3)	59.73(2)	C(1B)-Ga(2)-K(1)	112.00(9)
Ga(1)-Ga(2)-K(1)	69.91(2)	Ga(3)-Ga(2)-K(1)	71.18(2)
C(1B)-Ga(2)-K(2)	113.36(9)	Ga(1)-Ga(2)-K(2)	70.59(2)
Ga(3)-Ga(2)-K(2)	69.81(2)	K(1)-Ga(2)-K(2)	134.42(2)
C(1C)-Ga(3)-Ga(1)	153.38(10)	C(1C)-Ga(3)-Ga(2)	146.60(10)
Ga(1)-Ga(3)-Ga(2)	60.02(2)	C(1C)-Ga(3)-K(2)	112.67(10)
Ga(1)-Ga(3)-K(2)	70.81(2)	Ga(2)-Ga(3)-K(2)	70.16(2)
C(1C)-Ga(3)-K(1)	114.46(10)	Ga(1)-Ga(3)-K(1)	68.95(2)
Ga(2)-Ga(3)-K(1)	68.84(2)	K(2)-Ga(3)-K(1)	132.73(2)
C(9C)-K(1)-C(9B)	99.03(10)	C(9C)-K(1)-C(9A)	102.24(10)
C(9B)-K(1)-C(9A)	99.75(10)	C(9C)-K(1)-C(10C)	25.28(10)
C(9B)-K(1)-C(10C)	108.47(10)	C(9A)-K(1)-C(10C)	77.53(10)
C(9C)-K(1)-C(10A)	113.41(10)	C(9B)-K(1)-C(10A)	76.10(10)
C(9A)-K(1)-C(10A)	24.89(9)	C(10C)-K(1)-C(10A)	92.37(10)
C(9C)-K(1)-C(10B)	75.11(10)	C(9B)-K(1)-C(10B)	24.42(10)
C(9A)-K(1)-C(10B)	109.36(10)	C(10C)-K(1)-C(10B)	88.30(10)
C(10A)-K(1)-C(10B)	90.20(10)	C(9C)-K(1)-C(8B)	115.78(10)
C(9B)-K(1)-C(8B)	24.60(9)	C(9A)-K(1)-C(8B)	111.24(10)
C(10C)-K(1)-C(8B)	131.13(9)	C(10A)-K(1)-C(8B)	86.41(9)
C(10B)-K(1)-C(8B)	42.91(9)	C(9C)-K(1)-C(8C)	24.32(9)
C(9B)-K(1)-C(8C)	111.23(10)	C(9A)-K(1)-C(8C)	118.63(9)
C(10C)-K(1)-C(8C)	43.25(9)	C(10A)-K(1)-C(8C)	135.57(9)
C(10B)-K(1)-C(8C)	87.16(9)	C(8B)-K(1)-C(8C)	118.92(9)
C(9C)-K(1)-C(8A)	111.91(10)	C(9B)-K(1)-C(8A)	118.17(9)
C(9A)-K(1)-C(8A)	24.21(8)	C(10C)-K(1)-C(8A)	87.04(10)
C(10A)-K(1)-C(8A)	42.94(9)	C(10B)-K(1)-C(8A)	132.54(9)
C(8B)-K(1)-C(8A)	121.11(9)	C(8C)-K(1)-C(8A)	118.90(9)
C(9C)-K(1)-C(11A)	136.90(9)	C(9B)-K(1)-C(11A)	72.35(9)
C(9A)-K(1)-C(11A)	42.05(9)	C(10C)-K(1)-C(11A)	116.04(9)
C(10A)-K(1)-C(11A)	23.82(9)	C(10B)-K(1)-C(11A)	93.35(9)
C(8B)-K(1)-C(11A)	73.26(9)	C(8C)-K(1)-C(11A)	159.28(9)
C(8A)-K(1)-C(11A)	48.23(9)	C(9C)-K(1)-C(11C)	42.04(10)
C(9B)-K(1)-C(11C)	131.58(9)	C(9A)-K(1)-C(11C)	71.60(10)
C(10C)-K(1)-C(11C)	23.67(9)	C(10A)-K(1)-C(11C)	93.22(10)
C(10B)-K(1)-C(11C)	111.95(9)	C(8B)-K(1)-C(11C)	154.80(9)
C(8C)-K(1)-C(11C)	48.00(9)	C(8A)-K(1)-C(11C)	72.24(9)
C(11A)-K(1)-C(11C)	113.65(9)	C(9C)-K(1)-C(11B)	68.80(10)
C(9B)-K(1)-C(11B)	41.40(9)	C(9A)-K(1)-C(11B)	132.33(9)
C(10C)-K(1)-C(11B)	89.56(10)	C(10A)-K(1)-C(11B)	113.62(9)
C(10B)-K(1)-C(11B)	23.52(9)	C(8B)-K(1)-C(11B)	47.94(9)
C(8C)-K(1)-C(11B)	72.30(9)	C(8A)-K(1)-C(11B)	156.01(9)
C(11A)-K(1)-C(11B)	113.75(9)	C(11C)-K(1)-C(11B)	110.67(9)
C(16A)-K(2)-C(17A)	24.93(10)	C(16A)-K(2)-C(16C)	91.20(10)
C(17A)-K(2)-C(16C)	112.92(10)	C(16A)-K(2)-C(16B)	89.65(11)
C(17A)-K(2)-C(16B)	78.03(11)	C(16C)-K(2)-C(16B)	90.15(10)
C(16A)-K(2)-C(17B)	110.35(11)	C(17A)-K(2)-C(17B)	101.82(11)

C(16C)-K(2)-C(17B)	78.12(10)	C(16B)-K(2)-C(17B)
C(16A)-K(2)-C(15C)	115.72(10)	C(17A)-K(2)-C(15C)
C(16C)-K(2)C)	24.52(9)	C(16B)-K(2)-C(15C)
C(17B)-K(2)-C(15C)	70.85(11)	C(16A)-K(2)-C(17C)
C(17A)-K(2)-C(17C)	103.46(10)	C(16C)-K(2)-C(17C)
C(16B)-K(2)-C(17C)	110.59(10)	C(17B)-K(2)-C(17C)
C(15C)-K(2)-C(17C)	42.17(9)	C(16A)-K(2)-C(15A)
C(17A)-K(2)-C(15A)	42.45(10)	C(16C)-K(2)-C(15A)
C(16B)-K(2)-C(15A)	113.92(11)	C(17B)-K(2)-C(15A)
C(15C)-K(2)-C(15A)	112.33(9)	C(17C)-K(2)-C(15A)
C(16A)-K(2)-C(15B)	88.79(10)	C(17A)-K(2)-C(15B)
C(16C)-K(2)-C(15B)	114.33(10)	C(16B)-K(2)-C(15B)
C(17B)-K(2)-C(15B)	41.78(11)	C(15C)-K(2)-C(15B)
C(17C)-K(2)-C(15B)	133.82(9)	C(15A)-K(2)-C(15B)
C(16A)-K(2)-C(18A)	42.64(9)	C(17A)-K(2)-C(18A)
C(16C)-K(2)-C(18A)	133.82(9)	C(16B)-K(2)-C(18A)
C(17B)-K(2)-C(18A)	113.92(11)	C(15C)-K(2)-C(18A)
C(17C)-K(2)-C(18A)	118.09(9)	C(15A)-K(2)-C(18A)
C(15B)-K(2)-C(18A)	73.79(10)	C(16A)-K(2)-C(18B)
C(17A)-K(2)-C(18B)	116.78(10)	C(16C)-K(2)-C(18B)
C(16B)-K(2)-C(18B)	42.00(11)	C(17B)-K(2)-C(18B)
C(15C)-K(2)-C(18B)	73.62(9)	C(17C)-K(2)-C(18B)
C(15A)-K(2)-C(18B)	155.91(10)	C(15B)-K(2)-C(18B)
C(18A)-K(2)-C(18B)	119.84(10)	C(16A)-K(2)-C(14C)
C(17A)-K(2)-C(14C)	151.77(10)	C(16C)-K(2)-C(14C)
C(16B)-K(2)-C(14C)	109.73(11)	C(17B)-K(2)-C(14C)
C(15C)-K(2)-C(14C)	23.59(8)	C(17C)-K(2)-C(14C)
C(15A)-K(2)-C(14C)	113.53(9)	C(15B)-K(2)-C(14C)
C(18A)-K(2)-C(14C)	158.26(9)	C(18B)-K(2)-C(14C)
C(2A)-C(1A)-C(6A)	116.5(3)	C(2A)-C(1A)-Ga(1)
C(6A)-C(1A)-Ga(1)	121.1(2)	C(3A)-C(2A)-C(1A)
C(3A)-C(2A)-C(7A)	117.0(3)	C(1A)-C(2A)-C(7A)
C(4A)-C(3A)-C(2A)	120.9(3)	C(3A)-C(4A)-C(5A)
C(6A)-C(5A)-C(4A)	120.9(3)	C(5A)-C(6A)-C(1A)
C(5A)-C(6A)-C(13A)	116.8(3)	C(1A)-C(6A)-C(13A)
C(12A)-C(7A)-C(8A)	119.1(3)	C(12A)-C(7A)-C(2A)
C(8A)-C(7A)-C(2A)	119.8(3)	C(9A)-C(8A)-C(7A)
C(9A)-C(8A)-C(19A)	119.9(3)	C(7A)-C(8A)-C(19A)
C(9A)-C(8A)-K(1)	71.1(2)	C(7A)-C(8A)-K(1)
C(19A)-C(8A)-K(1)	114.5(2)	C(8A)-C(9A)-C(10A)
C(8A)-C(9A)-K(1)	84.7(2)	C(10A)-C(9A)-K(1)
C(11A)-C(10A)-C(9A)	117.8(3)	C(11A)-C(10A)-C(20A)
C(9A)-C(10A)-C(20A)	120.7(3)	C(11A)-C(10A)-K(1)
C(9A)-C(10A)-K(1)	75.4(2)	C(20A)-C(10A)-K(1)
C(10A)-C(11A)-C(12A)	122.3(3)	C(10A)-C(11A)-K(1)
C(12A)-C(11A)-K(1)	84.6(2)	C(11A)-C(12A)-C(7A)
C(11A)-C(12A)-C(21A)	119.4(3)	C(7A)-C(12A)-C(21A)
C(18A)-C(13A)-C(14A)	120.1(3)	C(18A)-C(13A)-C(6A)
C(14A)-C(13A)-C(6A)	119.6(3)	C(15A)-C(14A)-C(13A)
C(15A)-C(14A)-C(22A)	121.2(3)	C(13A)-C(14A)-C(22A)
C(16A)-C(15A)-C(14A)	122.1(3)	C(16A)-C(15A)-K(2)
C(14A)-C(15A)-K(2)	87.3(2)	C(15A)-C(16A)-C(17A)
C(15A)-C(16A)-C(23A)	120.9(4)	C(17A)-C(16A)-C(23A)
C(15A)-C(16A)-K(2)	83.1(2)	C(17A)-C(16A)-K(2)
C(23A)-C(16A)-K(2)	108.4(3)	C(16A)-C(17A)-C(18A)
C(16A)-C(17A)-K(2)	76.9(2)	C(18A)-C(17A)-K(2)
C(17A)-C(18A)-C(13A)	119.4(3)	C(17A)-C(18A)-C(24A)
C(13A)-C(18A)-C(24A)	119.4(3)	C(17A)-C(18A)-K(2)

		23.98(12)
		136.69(10)
		90.39(11)
		78.74(10)
		24.27(9)
		101.96(10)
		24.29(9)
		90.15(10)
		133.66(10)
		70.30(9)
		69.22(10)
		24.19(10)
		112.45(10)
		111.22(10)
		23.84(9)
		90.60(11)
		158.32(9)
		48.22(9)
		131.65(10)
		89.51(10)
		23.84(10)
		113.37(9)
		48.01(11)
		126.93(10)
		42.31(9)
		87.19(11)
		48.31(9)
		127.93(10)
		81.54(9)
		122.3(2)
		121.1(3)
		121.9(3)
		119.0(3)
		121.6(3)
		121.7(3)
		121.0(3)
		119.7(3)
		120.4(3)
		85.5(2)
		121.6(3)
		79.7(2)
		121.5(4)
		83.7(2)
		112.4(2)
		72.4(2)
		119.5(3)
		121.1(3)
		120.1(3)
		118.7(3)
		120.1(3)
		72.6(2)
		118.2(3)
		121.0(4)
		78.2(2)
		121.4(4)
		86.5(2)
		121.1(3)
		69.6(2)

C(13A)-C(18A)-K(2)	85.4(2)	C(24A)-C(18A)-K(2)	115.4(2)
C(2B)-C(1B)-C(6B)	117.0(3)	C(2B)-C(1B)-Ga(2)	121.7(2)
C(6B)-C(1B)-Ga(2)	121.3(2)	C(3B)-C(2B)-C(1B)	121.3(3)
C(3B)-C(2B)-C(7B)	116.2(3)	C(1B)-C(2B)-C(7B)	122.5(3)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	120.8(3)	C(5B)-C(4B)-C(3B)	119.1(3)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	120.8(3)	C(5B)-C(6B)-C(1B)	120.9(3)
C(5B)-C(6B)-C(13B)	116.4(3)	C(1B)-C(6B)-C(13B)	122.7(3)
C(12B)-C(7B)-C(8B)	119.6(3)	C(12B)-C(7B)-C(2B)	120.1(3)
C(8B)-C(7B)-C(2B)	119.9(3)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	119.2(3)
C(9B)-C(8B)-C(19B)	120.0(3)	C(7B)-C(8B)-C(19B)	120.8(3)
C(9B)-C(8B)-K(1)	71.8(2)	C(7B)-C(8B)-K(1)	87.1(2)
C(19B)-C(8B)-K(1)	112.6(2)	C(10B)-C(9B)-C(8B)	122.1(3)
C(10B)-C(9B)-K(1)	82.4(2)	C(8B)-C(9B)-K(1)	83.6(2)
C(9B)-C(10B)-C(11B)	118.0(3)	C(9B)-C(10B)-C(20B)	121.5(4)
C(11B)-C(10B)-C(20B)	120.5(4)	C(9B)-C(10B)-K(1)	73.1(2)
C(11B)-C(10B)-K(1)	85.7(2)	C(20B)-C(10B)-K(1)	114.1(2)
C(12B)-C(11B)-C(10B)	121.8(4)	C(12B)-C(11B)-K(1)	84.1(2)
C(10B)-C(11B)-K(1)	70.8(2)	C(11B)-C(12B)-C(7B)	119.3(3)
C(11B)-C(12B)-C(21B)	120.1(3)	C(7B)-C(12B)-C(21B)	120.6(3)
C(14B)-C(13B)-C(18B)	119.8(3)	C(14B)-C(13B)-C(6B)	120.7(3)
C(18B)-C(13B)-C(6B)	119.3(3)	C(13B)-C(14B)-C(15B)	119.5(4)
C(13B)-C(14B)-C(22B)	120.2(3)	C(15B)-C(14B)-C(22B)	120.3(4)
C(16B)-C(15B)-C(14B)	121.1(4)	C(16B)-C(15B)-K(2)	74.1(2)
C(14B)-C(15B)-K(2)	85.1(2)	C(17B)-C(16B)-C(15B)	118.8(4)
C(17B)-C(16B)-C(23B)	121.5(4)	C(15B)-C(16B)-C(23B)	119.6(5)
C(17B)-C(16B)-K(2)	78.3(2)	C(15B)-C(16B)-K(2)	81.8(2)
C(23B)-C(16B)-K(2)	112.4(3)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	121.9(4)
C(16B)-C(17B)-K(2)	77.7(2)	C(18B)-C(17B)-K(2)	84.8(2)
C(17B)-C(18B)-C(13B)	118.9(4)	C(17B)-C(18B)-C(24B)	120.9(4)
C(13B)-C(18B)-C(24B)	120.2(4)	C(17B)-C(18B)-K(2)	71.4(2)
C(13B)-C(18B)-K(2)	84.0(2)	C(24B)-C(18B)-K(2)	115.6(3)
C(2C)-C(1C)-C(6C)	116.5(3)	C(2C)-C(1C)-Ga(3)	121.1(3)
C(6C)-C(1C)-Ga(3)	122.4(3)	C(3C)-C(2C)-C(1C)	121.6(3)
C(3C)-C(2C)-C(7C)	116.8(3)	C(1C)-C(2C)-C(7C)	121.6(3)
C(2C)-C(3C)-C(4C)	120.6(4)	C(5C)-C(4C)-C(3C)	119.2(4)
C(4C)-C(5C)-C(6C)	121.0(4)	C(5C)-C(6C)-C(1C)	121.0(3)
C(5C)-C(6C)-C(13C)	117.2(3)	C(1C)-C(6C)-C(13C)	121.8(3)
C(12C)-C(7C)-C(8C)	119.9(3)	C(12C)-C(7C)-C(2C)	120.7(3)
C(8C)-C(7C)-C(2C)	119.3(3)	C(9C)-C(8C)-C(7C)	119.2(3)
C(9C)-C(8C)-C(19C)	121.3(3)	C(7C)-C(8C)-C(19C)	119.5(3)
C(9C)-C(8C)-K(1)	68.3(2)	C(7C)-C(8C)-K(1)	89.5(2)
C(19C)-C(8C)-K(1)	111.9(2)	C(8C)-C(9C)-C(10C)	121.8(3)
C(8C)-C(9C)-K(1)	87.4(2)	C(10C)-C(9C)-K(1)	80.2(2)
C(11C)-C(10C)-C(9C)	118.0(3)	C(11C)-C(10C)-C(20C)	120.7(4)
C(9C)-C(10C)-C(20C)	121.3(4)	C(11C)-C(10C)-K(1)	87.6(2)
C(9C)-C(10C)-K(1)	74.6(2)	C(20C)-C(10C)-K(1)	109.2(2)
C(10C)-C(11C)-C(12C)	122.2(4)	C(10C)-C(11C)-K(1)	68.7(2)
C(12C)-C(11C)-K(1)	87.8(2)	C(11C)-C(12C)-C(7C)	118.9(3)
C(11C)-C(12C)-C(21C)	120.6(4)	C(7C)-C(12C)-C(21C)	120.5(3)
C(14C)-C(13C)-C(18C)	119.4(3)	C(14C)-C(13C)-C(6C)	121.2(3)
C(18C)-C(13C)-C(6C)	119.2(3)	C(15C)-C(14C)-C(13C)	119.3(3)
C(15C)-C(14C)-C(22C)	120.0(3)	C(13C)-C(14C)-C(22C)	120.7(3)
C(15C)-C(14C)-K(2)	70.9(2)	C(13C)-C(14C)-K(2)	83.2(2)
C(22C)-C(14C)-K(2)	116.6(2)	C(16C)-C(15C)-C(14C)	122.1(3)
C(16C)-C(15C)-K(2)	76.3(2)	C(14C)-C(15C)-K(2)	85.5(2)
C(17C)-C(16C)-C(15C)	118.0(3)	C(17C)-C(16C)-C(23C)	121.5(4)
C(15C)-C(16C)-C(23C)	120.5(4)	C(17C)-C(16C)-K(2)	80.2(2)
C(15C)-C(16C)-K(2)	79.2(2)	C(23C)-C(16C)-K(2)	111.2(3)

C(16C)-C(17C)-C(18C)	122.0(3)	C(16C)-C(17C)-K(2)	75.6(2)
C(18C)-C(17C)-K(2)	85.3(2)	C(17C)-C(18C)-C(13C)	119.1(3)
C(17C)-C(18C)-C(24C)	120.9(4)	C(13C)-C(18C)-C(24C)	119.9(3)
C(17C)-C(18C)-K(2)	71.2(2)	C(13C)-C(18C)-K(2)	82.3(2)
C(24C)-C(18C)-K(2)	117.6(2)	C(1S)-C(2S)-O(3S)	131(2)
C(4S)-O(3S)-C(2S)	113(4)	C(5S)-C(4S)-O(3S)	128(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 1.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2$ [$(ha^*)^2U_{11}$ + ... + $2hka^*b^*U_{12}$]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ga(1)	18(1)	27(1)	21(1)	-5(1)	0(1)	1(1)
Ga(2)	19(1)	15(1)	32(1)	-2(1)	2(1)	0(1)
Ga(3)	19(1)	22(1)	25(1)	6(1)	0(1)	0(1)
K(1)	18(1)	28(1)	31(1)	1(1)	3(1)	-1(1)
K(2)	19(1)	30(1)	35(1)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(1A)	22(2)	20(2)	21(2)	-4(1)	1(1)	-1(1)
C(2A)	22(2)	20(2)	24(2)	-1(1)	1(1)	1(1)
C(3A)	28(2)	25(2)	24(2)	-3(1)	-6(1)	0(1)
C(4A)	40(2)	22(2)	24(2)	-5(1)	2(2)	1(2)
C(5A)	28(2)	28(2)	27(2)	-3(2)	6(1)	4(1)
C(6A)	24(2)	22(2)	25(2)	0(1)	3(1)	3(1)
C(7A)	18(2)	28(2)	19(2)	-5(1)	-3(1)	2(1)
C(8A)	25(2)	30(2)	29(2)	0(2)	1(1)	-1(1)
C(9A)	21(2)	38(2)	27(2)	-5(2)	3(1)	-7(2)
C(10A)	19(2)	42(2)	24(2)	-7(2)	-1(1)	4(2)
C(11A)	24(2)	27(2)	30(2)	-5(2)	-2(1)	4(1)
C(12A)	21(2)	26(2)	22(2)	-3(1)	-2(1)	0(1)
C(13A)	21(2)	22(2)	27(2)	-6(1)	5(1)	3(1)
C(14A)	21(2)	22(2)	35(2)	-3(2)	4(1)	3(1)
C(15A)	24(2)	25(2)	41(2)	-3(2)	-2(2)	5(1)
C(16A)	20(2)	36(2)	42(2)	-8(2)	5(2)	2(2)
C(17A)	28(2)	35(2)	38(2)	1(2)	7(2)	-4(2)
C(18A)	26(2)	29(2)	28(2)	2(2)	9(1)	2(1)
C(19A)	41(2)	28(2)	46(2)	2(2)	7(2)	-2(2)
C(20A)	22(2)	57(3)	46(2)	-4(2)	5(2)	4(2)
C(21A)	26(2)	25(2)	37(2)	2(2)	4(2)	-1(1)
C(22A)	29(2)	23(2)	52(3)	1(2)	-2(2)	-2(2)
C(23A)	21(2)	54(3)	67(3)	0(2)	-3(2)	-2(2)
C(24A)	34(2)	35(2)	44(2)	10(2)	9(2)	-1(2)
C(1B)	23(2)	17(2)	27(2)	-3(1)	-1(1)	0(1)
C(2B)	27(2)	19(2)	26(2)	-3(1)	-1(1)	-1(1)
C(3B)	30(2)	23(2)	34(2)	-8(2)	3(2)	5(1)
C(4B)	41(2)	16(2)	38(2)	-4(2)	-1(2)	1(2)
C(5B)	29(2)	19(2)	42(2)	1(2)	-2(2)	-7(1)
C(6B)	24(2)	20(2)	28(2)	-2(1)	-7(1)	0(1)
C(7B)	25(2)	16(2)	31(2)	-6(1)	4(1)	4(1)
C(8B)	30(2)	19(2)	31(2)	-1(1)	2(2)	3(1)
C(9B)	24(2)	23(2)	38(2)	-2(2)	-2(2)	5(1)
C(10B)	25(2)	25(2)	43(2)	-3(2)	9(2)	4(1)
C(11B)	32(2)	26(2)	34(2)	-4(2)	7(2)	2(2)
C(12B)	33(2)	22(2)	29(2)	-6(2)	4(2)	4(1)
C(13B)	20(2)	15(2)	40(2)	5(1)	-4(1)	-6(1)
C(14B)	23(2)	20(2)	46(2)	12(2)	0(2)	0(1)
C(15B)	26(2)	24(2)	58(3)	8(2)	8(2)	0(2)
C(16B)	20(2)	23(2)	77(3)	5(2)	-5(2)	1(1)
C(17B)	27(2)	25(2)	67(3)	-2(2)	-19(2)	-3(2)
C(18B)	32(2)	22(2)	47(2)	0(2)	-13(2)	-6(2)

C(19B)	42(2)	32(2)	39(2)	7(2)	-4(2)	-7(2)
C(20B)	25(2)	50(3)	50(3)	-2(2)	10(2)	-1(2)
C(21B)	43(2)	34(2)	30(2)	-2(2)	-3(2)	-3(2)
C(22B)	30(2)	34(2)	38(2)	11(2)	2(2)	5(2)
C(23B)	22(2)	46(3)	109(5)	8(3)	-2(2)	3(2)
C(24B)	51(3)	39(2)	47(3)	-1(2)	-19(2)	-1(2)
C(1C)	26(2)	24(2)	27(2)	4(1)	0(1)	1(1)
C(2C)	25(2)	23(2)	31(2)	6(2)	3(1)	-1(1)
C(3C)	35(2)	32(2)	50(3)	20(2)	7(2)	-5(2)
C(4C)	46(2)	43(3)	52(3)	31(2)	0(2)	0(2)
C(5C)	33(2)	42(2)	43(2)	19(2)	-5(2)	2(2)
C(6C)	27(2)	23(2)	31(2)	7(2)	-2(2)	-1(1)
C(7C)	24(2)	22(2)	33(2)	11(2)	4(1)	-4(1)
C(8C)	30(2)	23(2)	31(2)	5(2)	8(2)	-1(1)
C(9C)	26(2)	30(2)	35(2)	8(2)	11(2)	2(2)
C(10C)	24(2)	34(2)	32(2)	11(2)	6(2)	-2(2)
C(11C)	27(2)	30(2)	33(2)	2(2)	5(2)	-8(2)
C(12C)	27(2)	22(2)	38(2)	9(2)	10(2)	-4(1)
C(13C)	22(2)	24(2)	27(2)	6(1)	-7(1)	3(1)
C(14C)	25(2)	31(2)	22(2)	3(1)	-6(1)	2(1)
C(15C)	28(2)	29(2)	29(2)	-4(2)	-9(2)	-1(2)
C(16C)	21(2)	38(2)	32(2)	3(2)	-6(1)	0(2)
C(17C)	23(2)	32(2)	35(2)	-1(2)	-2(2)	7(2)
C(18C)	27(2)	27(2)	33(2)	4(2)	-7(2)	5(1)
C(19C)	38(2)	37(2)	37(2)	-2(2)	4(2)	1(2)
C(20C)	25(2)	59(3)	45(2)	4(2)	7(2)	3(2)
C(21C)	38(2)	27(2)	47(2)	-2(2)	6(2)	2(2)
C(22C)	30(2)	38(2)	29(2)	-3(2)	1(2)	2(2)
C(23C)	26(2)	47(3)	50(3)	-5(2)	1(2)	-2(2)
C(24C)	42(2)	23(2)	58(3)	-1(2)	1(2)	2(2)

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

	x	y	z	U(eq)
H(3AA)	3214(2)	6299(2)	-1401(2)	31
H(4AA)	4387(2)	5863(2)	-1835(2)	35
H(5AA)	5651(2)	6030(2)	-1291(2)	33
H(9AA)	1191(2)	6509(2)	142(2)	34
H(11A)	1872(2)	8430(2)	-374(2)	33
H(15A)	7468(2)	5738(2)	667(2)	36
H(17A)	7772(2)	7536(2)	-284(2)	40
H(19A)	2620(18)	5608(4)	-443(2)	57
H(19B)	2137(9)	5602(4)	190(13)	57
H(19C)	3078(10)	5759(2)	224(12)	57
H(20A)	181(3)	7578(12)	-205(10)	62
H(20B)	561(6)	8270(3)	44(15)	62
H(20C)	451(8)	7665(14)	526(5)	62
H(21A)	3125(4)	8630(5)	-833(12)	44
H(21B)	3621(12)	8015(6)	-1097(8)	44
H(21C)	3833(9)	8296(11)	-402(5)	44
H(22A)	6164(7)	5197(8)	663(11)	53
H(22B)	5715(14)	5240(9)	-22(3)	53
H(22C)	5385(9)	5657(2)	555(13)	53
H(23A)	8940(5)	6354(12)	298(12)	71
H(23B)	8675(3)	6589(17)	979(4)	71
H(23C)	8860(6)	7134(6)	453(15)	71
H(24A)	6037(17)	7568(3)	-1186(6)	56
H(24B)	6640(6)	8089(8)	-838(12)	56
H(24C)	5775(12)	7957(10)	-569(7)	56
H(3BA)	3451(2)	10523(2)	1831(2)	35
H(4BA)	4648(2)	11148(2)	1731(2)	38
H(5BA)	5852(2)	10585(2)	1517(2)	36
H(9BA)	1295(2)	9053(2)	1006(2)	34
H(11B)	1994(2)	8548(2)	2860(2)	37
H(15B)	7380(2)	8970(2)	131(2)	43
H(17B)	8004(2)	8949(2)	2058(2)	48
H(19D)	2816(18)	10002(4)	620(3)	56
H(19E)	2240(7)	9457(14)	279(4)	56
H(19F)	3174(11)	9298(11)	413(7)	56
H(20D)	318(5)	8880(2)	2090(15)	62
H(20E)	659(3)	8219(13)	2434(8)	62
H(20F)	448(7)	8215(13)	1688(7)	62
H(21D)	3745(13)	9446(3)	2982(9)	54
H(21E)	4006(9)	8696(12)	2829(6)	54
H(21F)	3303(5)	8831(14)	3299(3)	54
H(22D)	6022(7)	9213(14)	-254(2)	51
H(22E)	5668(13)	9822(3)	134(9)	51
H(22F)	5304(7)	9087(11)	204(7)	51
H(23D)	9008(6)	9095(4)	948(19)	89
H(23E)	8684(4)	8491(18)	511(8)	89
H(23F)	8899(8)	8368(15)	1246(11)	89
H(24D)	6477(20)	9755(3)	2621(5)	69

H(24E)	6985(10)	9106(15)	2830(2)	69
H(24F)	6055(11)	9037(14)	2615(5)	69
H(3CA)	3601(3)	5382(2)	3424(2)	47
H(4CA)	4850(3)	5137(2)	3969(2)	56
H(5CA)	6036(3)	5637(2)	3633(2)	48
H(9CA)	1523(2)	7049(2)	2711(2)	36
H(11C)	1849(2)	5572(2)	1366(2)	36
H(15C)	7521(2)	7831(2)	3043(2)	35
H(17C)	8062(2)	6085(2)	2087(2)	36
H(19G)	3185(17)	6876(3)	3630(5)	56
H(19H)	2664(7)	7491(10)	3353(10)	56
H(19I)	3549(10)	7366(12)	3121(6)	56
H(20G)	355(4)	6107(11)	1918(12)	65
H(20H)	640(4)	6374(17)	1253(3)	65
H(20I)	485(6)	6891(6)	1811(14)	65
H(21G)	3628(15)	4925(9)	1989(3)	56
H(21H)	3873(10)	5437(2)	1451(12)	56
H(21I)	3100(5)	4969(10)	1338(10)	56
H(22G)	5690(13)	7333(4)	3616(9)	49
H(22H)	5553(10)	7800(11)	3007(2)	49
H(22I)	6255(3)	7968(8)	3525(11)	49
H(23G)	9154(2)	6974(9)	2630(13)	62
H(23H)	8826(6)	7725(7)	2625(13)	62
H(23I)	8867(7)	7321(15)	1976(2)	62
H(24G)	6575(19)	5113(4)	2477(2)	62
H(24H)	7028(10)	5252(7)	1842(12)	62
H(24I)	6103(10)	5451(3)	1883(13)	62
H(1SA)	9865(13)	4618(51)	1465(8)	115
H(1SB)	9141(38)	4363(34)	1002(23)	115
H(1SC)	9320(49)	5146(18)	1071(28)	115
H(2SA)	10410(17)	4261(15)	664(11)	178
H(2SB)	10448(17)	5048(15)	639(11)	178
H(4SA)	10743(31)	5329(31)	-95(29)	188
H(4SB)	10693(31)	4875(31)	-706(29)	188
H(5SA)	10047(71)	6105(16)	-528(18)	150
H(5SB)	9495(29)	5607(27)	-950(50)	150
H(5SC)	10382(44)	5780(41)	-1152(36)	150

References

Data Collection:
SMART Software Reference Manual (1994). Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise, Drive, Madison, WI 53719-1173, USA.

Data Reduction:
SAINT Version 4 Software Reference Manual (1995). Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise, Drive, Madison, WI 53719-1173, USA.

Structure Solution, Refinement, and Graphics:
G.N. Sheldrick (1994). SHELXTL Version 5 Reference Manual. Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise, Drive, Madison, WI 53719-1173, USA.

Neutral atom scattering factors were taken from:
International Tables for Crystallography, Vol. C, Tables 6.1.1.4, 4.2.6.8, and 4.2.4.2, Kluwer: Boston.