ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1998, 17(19), 4275-4281, DOI:10.1021/om980288p

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	keiz
Empirical formula	$C_{30}H_{22}O_5P_2W$
Formula weight	708.27
Temperature	296(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	Pc
Crystal color	Colorless
Unit cell dimensions	a = 8.798(2) Å alpha = 90° b = 13.936(3) Å beta = 96.54(3)° c = 11.266(2) Å gamma = 90°
Volume, Z	1372.3(5) $Å^3$, 2
Density (calculated)	1.714 Mg/m^3
Absorption coefficient	4.364 mm^{-1}
F(000)	692
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.20 mm
θ range for data collection	2.33 to 30.07°
Limiting indices	$-12 \le h \le 12$, $0 \le k \le 19$, $-1 \le l \le 15$
Reflections collected	4589
Independent reflections	4589 (R_{int} = 0.0000)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4585 / 15 / 409
Goodness-of-fit on F^2	1.034
Final R indices [$I>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0589, wR2 = 0.1384
R indices (all data)	R1 = 0.0637, wR2 = 0.1444
Absolute structure parameter	0.02(6)
Extinction coefficient	8766(395)
Largest diff. peak and hole	4.865 and -1.882 $eÅ^{-3}$

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)
W	5000	1254(1)	5000	47(1)
P(1)	2638(6)	2273(3)	4990(6)	43(1)
P(2)	3813(7)	3885(3)	3505(6)	46(1)
O(1)	2851(30)	-567(15)	5029(30)	106(9)
O(2)	5338(62)	1034(22)	7810(9)	129(17)
O(3)	7028(23)	3130(11)	5399(22)	76(6)
O(4)	4810(45)	1400(21)	2188(7)	99(11)
O(5)	7875(20)	-76(16)	4829(27)	93(7)
C(1)	3707(30)	48(14)	4945(40)	106(14)
C(2)	5130(25)	1193(15)	6804(8)	51(5)
C(3)	6315(24)	2445(11)	5231(22)	60(5)
C(4)	4978(30)	1463(18)	3217(8)	569(150)
C(5)	6796(20)	368(17)	4895(26)	64(6)
C(50)	3032(28)	3575(14)	4902(22)	50(4)
C(11)	2348(32)	2515(17)	7411(21)	56(5)
C(12)	1691(39)	2385(19)	8461(21)	67(7)
C(13)	399(38)	1858(20)	8461(26)	70(7)
C(14)	-268(46)	1455(23)	7375(35)	73(8)
C(15)	360(30)	1598(22)	6373(24)	62(5)
C(16)	1747(25)	2135(15)	6359(19)	50(4)
C(21)	-208(30)	2697(18)	3725(21)	58(5)
C(22)	-1395(28)	2568(21)	2902(26)	64(6)

C(23)	-1357(29)	1817(27)	1998(24)	75(8)
C(24)	-145(37)	1272(18)	2084(33)	66(7)
C(25)	1125(32)	1385(18)	2978(26)	59(5)
C(26)	1066(28)	2107(16)	3799(22)	56(5)
C(31)	1284(38)	5121(19)	2702(25)	67(6)
C(32)	26(37)	5360(24)	1958(29)	77(8)
C(33)	-519(34)	4807(25)	997(24)	73(7)
C(34)	261(34)	3980(24)	811(24)	66(6)
C(35)	1551(35)	3723(16)	1568(24)	59(5)
C(36)	2073(28)	4280(15)	2532(19)	53(4)
C(41)	5747(29)	5388(18)	3115(24)	61(5)
C(42)	6374(43)	6355(28)	3439(49)	104(16)
C(43)	6244(47)	6833(22)	4359(32)	81(8)
C(44)	5342(27)	6472(18)	5271(18)	49(4)
C(45)	4614(39)	5556(19)	4929(26)	72(9)
C(46)	4741(24)	5038(12)	3900(20)	48(4)

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

W-C(5)	2.019(8)	W-C(3)	2.023(8)
W-C(2)	2.025(8)	W-C(1)	2.026(8)
W-C(4)	2.028(9)	W-P(1)	2.516(5)
P(1)-C(26)	1.83(3)	P(1)-C(16)	1.82(2)
P(1)-C(50)	1.85(2)	P(2)-C(50)	1.84(2)
P(2)-C(36)	1.86(3)	P(2)-C(46)	1.83(2)
O(1)-C(1)	1.152(9)	O(2)-C(2)	1.148(9)
O(3)-C(3)	1.147(8)	O(4)-C(4)	1.155(9)
O(5)-C(5)	1.142(8)	C(11)-C(12)	1.39(3)
C(11)-C(16)	1.35(3)	C(12)-C(13)	1.35(4)
C(13)-C(14)	1.41(5)	C(14)-C(15)	1.33(4)
C(15)-C(16)	1.43(3)	C(21)-C(22)	1.33(4)
C(21)-C(26)	1.38(3)	C(22)-C(23)	1.46(4)
C(23)-C(24)	1.30(5)	C(24)-C(25)	1.43(4)
C(25)-C(26)	1.37(3)	C(31)-C(32)	1.35(4)
C(31)-C(36)	1.39(3)	C(32)-C(33)	1.37(5)
C(33)-C(34)	1.37(5)	C(34)-C(35)	1.39(4)
C(35)-C(36)	1.37(3)	C(41)-C(42)	1.49(4)
C(41)-C(46)	1.41(3)	C(42)-C(43)	1.25(6)
C(43)-C(44)	1.46(4)	C(44)-C(45)	1.46(4)
C(45)-C(46)	1.38(3)		

C(5)-W-C(3)	94.0(10)	C(5)-W-C(2)	94.5(11)
C(3)-W-C(2)	86.5(9)	C(5)-W-C(1)	86.1(14)
C(3)-W-C(1)	174(2)	C(2)-W-C(1)	87.9(14)
C(5)-W-C(4)	87.1(12)	C(3)-W-C(4)	87.1(9)
C(2)-W-C(4)	173.5(9)	C(1)-W-C(4)	98.5(14)
C(5)-W-P(1)	175.1(8)	C(3)-W-P(1)	89.8(7)
C(2)-W-P(1)	88.9(7)	C(1)-W-P(1)	90.4(9)
C(4)-W-P(1)	90.0(9)	C(26)-P(1)-C(16)	104.2(10)
C(26)-P(1)-C(50)	102.4(11)	C(16)-P(1)-C(50)	104.5(10)
C(26)-P(1)-W	119.2(7)	C(16)-P(1)-W	111.8(7)
C(50)-P(1)-W	113.2(8)	C(50)-P(2)-C(36)	102.2(10)
C(50)-P(2)-C(46)	101.4(10)	C(36)-P(2)-C(46)	101.4(9)
O(1)-C(1)-W	170(4)	O(2)-C(2)-W	169(3)
O(3)-C(3)-W	177(2)	O(4)-C(4)-W	166(2)
O(5)-C(5)-W	175(3)	P(2)-C(50)-P(1)	111.5(11)
C(12)-C(11)-C(16)	123(2)	C(13)-C(12)-C(11)	120(3)
C(12)-C(13)-C(14)	119(2)	C(15)-C(14)-C(13)	120(3)
C(14)-C(15)-C(16)	122(3)	C(15)-C(16)-C(11)	116(2)
C(15)-C(16)-P(1)	121(2)	C(11)-C(16)-P(1)	123(2)
C(22)-C(21)-C(26)	122(2)	C(23)-C(22)-C(21)	120(2)
C(22)-C(23)-C(24)	117(2)	C(23)-C(24)-C(25)	124(3)
C(26)-C(25)-C(24)	118(2)	C(25)-C(26)-C(21)	119(3)
C(25)-C(26)-P(1)	120(2)	C(21)-C(26)-P(1)	121(2)
C(32)-C(31)-C(36)	121(3)	C(33)-C(32)-C(31)	123(3)
C(32)-C(33)-C(34)	117(3)	C(35)-C(34)-C(33)	121(3)
C(34)-C(35)-C(36)	121(3)	C(35)-C(36)-C(31)	117(3)
C(35)-C(36)-P(2)	119(2)	C(31)-C(36)-P(2)	124(2)
C(42)-C(41)-C(46)	114(3)	C(41)-C(42)-C(43)	128(4)
C(44)-C(43)-C(42)	121(3)	C(45)-C(44)-C(43)	112(2)
C(44)-C(45)-C(46)	127(3)	C(45)-C(46)-C(41)	118(2)
C(45)-C(46)-P(2)	126(2)	C(41)-C(46)-P(2)	117(2)

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form.

$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \ldots + 2hka^*b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
W	47(1)	46(1)	47(1)	-4(1)	5(1)	1(1)
P(1)	41(2)	48(2)	43(2)	1(2)	11(2)	1(2)
P(2)	52(3)	46(2)	44(2)	-4(2)	14(2)	2(2)
O(1)	130(24)	76(13)	109(19)	16(15)	0(19)	-21(15)
O(2)	211(46)	82(14)	108(27)	38(17)	71(29)	15(23)
O(3)	80(13)	61(9)	89(15)	-24(10)	21(12)	-24(9)
O(4)	132(26)	146(25)	15(6)	-21(8)	-6(9)	23(18)
O(5)	63(12)	97(15)	119(20)	-6(15)	12(13)	35(11)
C(1)	91	51	157(38)	-21(17)	-66(23)	4(13)
C(2)	38(9)	70(13)	46(10)	5(9)	8(8)	-10(8)
C(3)	54(11)	78(14)	47(10)	1(10)	2(9)	11(10)
C(4)	34	50(14)	1564(434)	219(67)	-168(53)	-32(9)
C(5)	47(10)	85(16)	59(13)	-15(13)	2(10)	-4(11)
C(50)	59(11)	42(7)	53(10)	2(8)	22(9)	-4(8)
C(11)	69(15)	56(10)	45(9)	-12(8)	11(10)	-4(10)
C(12)	99(20)	65(13)	39(9)	-2(9)	9(11)	8(13)
C(13)	88(19)	68(13)	59(13)	14(12)	34(14)	-5(13)
C(14)	73(19)	81(15)	67(17)	29(15)	19(16)	12(15)
C(15)	58(12)	77(14)	51(11)	3(11)	9(10)	-17(11)
C(16)	52(10)	51(8)	46(9)	6(8)	6(8)	-5(8)
C(21)	66(13)	65(11)	44(10)	1(9)	8(10)	2(10)
C(22)	43(10)	83(15)	65(13)	11(12)	8(10)	1(10)
C(23)	50(12)	118(24)	52(12)	13(14)	-12(10)	-23(13)
C(24)	61(14)	73(17)	62(15)	-24(12)	-1(13)	-5(10)
C(25)	45(11)	73(13)	57(13)	-16(10)	-3(10)	-1(9)
C(26)	62(12)	55(10)	55(11)	2(9)	23(10)	-3(9)
C(31)	84(18)	66(12)	56(12)	-10(11)	28(13)	-4(12)
C(32)	74(17)	81(17)	75(17)	10(14)	9(14)	29(14)
C(33)	60(14)	105(20)	51(12)	6(14)	-12(11)	-2(14)
C(34)	63(14)	91(16)	44(10)	9(12)	1(10)	-5(12)
C(35)	66(14)	66(13)	45(10)	6(9)	7(10)	1(9)
C(36)	68(12)	50(9)	44(9)	-3(8)	26(9)	-1(8)
C(41)	58(12)	67(12)	62(13)	13(11)	20(11)	-1(10)
C(42)	73(19)	114(27)	116(33)	38(24)	-24(21)	-63(20)
C(43)	105(24)	64(13)	72(17)	0(14)	1(18)	-8(15)
C(44)	55(12)	62(10)	31(8)	-2	3(7)	-1
C(45)	111(29)	61(11)	47(12)	0	16(17)	0(12)
C(46)	47(10)	41(7)	55(10)	-4(8)	3(8)	6(6)

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

	x	y	z	U(eq)
H(6A)	2092(28)	3930(14)	4949(22)	60
H(6B)	3757(28)	3762(14)	5576(22)	60
H(11A)	3238(32)	2878(17)	7433(21)	68
H(12A)	2139(39)	2662(19)	9167(21)	81
H(13A)	-40(38)	1762(20)	9164(26)	84
H(14A)	-1152(46)	1088(23)	7362(35)	88
H(15A)	-112(30)	1344(22)	5662(24)	74
H(21A)	-233(30)	3198(18)	4267(21)	70
H(22A)	-2255(28)	2956(21)	2899(26)	77
H(23A)	-2157(29)	1733(27)	1393(24)	90
H(24A)	-107(37)	781(18)	1529(33)	80
H(25A)	1970(32)	981(18)	3004(26)	71
H(31A)	1624(38)	5525(19)	3334(25)	81
H(32A)	-491(37)	5922(24)	2105(29)	92
H(33A)	-1382(34)	4985(25)	492(24)	88
H(34A)	-79(34)	3585(24)	170(24)	80
H(35A)	2073(35)	3163(16)	1419(24)	71
H(41A)	5996(29)	5046(18)	2455(24)	73
H(42A)	6937(43)	6641(28)	2884(49)	125
H(43A)	6727(47)	7425(22)	4463(32)	97
H(44A)	5243(27)	6787(18)	5985(18)	59
H(45A)	3997(39)	5293(19)	5462(26)	87

Table 1. Crystal data and structure refinement for 2.

Identification code	keiy
Empirical formula	$C_{35}H_{22}O_{10}P_2W_2$
Formula weight	1032.17
Temperature	296(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P21/c
Unit cell dimensions	a = 17.494(8) Å alpha = 90° b = 10.332(4) Å beta = 93.67(4)° c = 19.796(9) Å gamma = 90°
Volume, Z	3571(3) Å^3, 4
Density (calculated)	1.920 Mg/m^3
Absorption coefficient	6.583 mm^{-1}
F(000)	1960
Crystal size	0.40 x 0.12 x 0.10 mm
Crystal color	colorless
θ range for data collection	2.06 to 27.57°
Limiting indices	$-22 \le h \le 22$, $0 \le k \le 13$, $0 \le l \le 25$
Reflections collected	8437
Independent reflections	8193 (R_{int} = 0.0314)
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	8193 / 0 / 442
Goodness-of-fit on F^2	1.152
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0386, wR2 = 0.0646
R indices (all data)	R1 = 0.0794, wR2 = 0.0672
Largest diff. peak and hole	1.075 and -1.672 eÅ^{-3}

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 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)
W(1)	1342(2)	2247(3)	4673(2)	34(1)
W(2)	3711(1)	7522(1)	4731(1)	34(1)
P(1)	1792(1)	3782(2)	3781(1)	32(1)
P(2)	3270(1)	5931(2)	3809(1)	30(1)
C(11)	542(5)	4755(9)	2983(5)	60(3)
C(12)	-72(7)	5552(12)	2857(6)	88(4)
C(13)	-173(6)	6608(12)	3253(6)	83(4)
C(14)	314(6)	6811(10)	3800(6)	72(3)
C(15)	909(5)	5983(8)	3942(5)	52(3)
C(16)	1044(5)	4954(7)	3526(5)	34(2)
C(21)	2409(5)	1852(8)	2997(5)	44(2)
C(22)	2716(5)	1354(9)	2419(5)	55(3)
C(23)	2714(6)	2066(11)	1852(5)	72(3)
C(24)	2405(6)	3323(10)	1833(5)	71(3)
C(25)	2077(5)	3840(9)	2393(4)	53(3)
C(26)	2103(5)	3123(7)	2986(4)	36(2)
C(31)	3068(5)	6333(8)	2402(4)	48(2)
C(32)	2688(5)	6891(10)	1832(5)	64(3)
C(33)	2090(5)	7765(10)	1888(4)	63(3)
C(34)	1839(5)	8058(9)	2503(5)	63(3)
C(35)	2219(4)	7504(8)	3086(4)	46(2)
C(36)	2822(4)	6631(7)	3037(4)	32(2)

C(41)	4630(5)	5593(8)	3231(4)	42(2)
C(42)	5244(6)	4966(11)	2974(5)	65(3)
C(43)	5275(6)	3702(12)	2992(5)	75(4)
C(44)	4690(6)	3006(9)	3265(5)	70(3)
C(45)	4078(5)	3644(8)	3525(4)	47(2)
C(46)	4053(5)	4948(7)	3493(4)	34(2)
C(50)	2588(4)	4778(7)	4166(4)	33(2)
C(1)	1171(6)	737(9)	4026(5)	58(3)
O(1)	1054(5)	-143(6)	3699(4)	76(3)
C(2)	215(5)	2817(9)	4435(5)	58(3)
O(2)	-385(4)	3113(8)	4316(4)	99(3)
C(3)	1461(5)	3782(8)	5354(5)	48(3)
O(3)	1535(4)	4605(6)	5723(3)	70(2)
C(4)	2446(5)	1683(8)	4890(5)	46(2)
O(4)	3057(4)	1371(6)	5001(4)	73(2)
C(5)	973(6)	1032(8)	5390(5)	55(3)
O(5)	790(4)	374(6)	5803(4)	86(3)
C(9)	2616(5)	8116(8)	4858(4)	41(2)
O(9)	2024(4)	8451(6)	4957(3)	70(2)
C(6)	3826(5)	8903(9)	3997(5)	51(3)
O(6)	3880(5)	9679(7)	3595(4)	86(3)
C(7)	4843(5)	6922(10)	4705(5)	59(3)
O(7)	5456(4)	6604(8)	4727(4)	101(3)
C(8)	3524(5)	6110(8)	5444(4)	42(2)
O(8)	3387(4)	5363(6)	5832(3)	75(2)
C(10)	4085(6)	8833(8)	5453(5)	57(3)
O(10)	4281(5)	9555(7)	5848(4)	91(3)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 2.

W(1)-C(5)	2.031(10)	W(1)-C(1)	2.029(11)
W(1)-C(4)	2.037(9)	W(1)-C(3)	2.084(10)
W(1)-C(2)	2.083(9)	W(1)-P(1)	2.536(2)
W(2)-C(10)	2.045(10)	W(2)-C(9)	2.043(9)
W(2)-C(6)	2.056(9)	W(2)-C(8)	2.071(9)
W(2)-C(7)	2.078(9)	W(2)-P(2)	2.540(2)
P(1)-C(26)	1.829(8)	P(1)-C(16)	1.830(9)
P(1)-C(50)	1.856(8)	P(2)-C(36)	1.822(8)
P(2)-C(46)	1.846(8)	P(2)-C(50)	1.858(7)
C(11)-C(16)	1.359(12)	C(11)-C(12)	1.365(12)
C(12)-C(13)	1.361(14)	C(13)-C(14)	1.350(14)
C(14)-C(15)	1.362(11)	C(15)-C(16)	1.374(11)
C(21)-C(22)	1.395(11)	C(21)-C(26)	1.418(10)
C(22)-C(23)	1.341(12)	C(23)-C(24)	1.407(13)
C(24)-C(25)	1.388(11)	C(25)-C(26)	1.385(11)
C(31)-C(36)	1.388(10)	C(31)-C(32)	1.397(11)
C(32)-C(33)	1.392(12)	C(33)-C(34)	1.355(11)
C(34)-C(35)	1.416(11)	C(35)-C(36)	1.396(10)
C(41)-C(46)	1.341(10)	C(41)-C(42)	1.378(11)
C(42)-C(43)	1.307(13)	C(43)-C(44)	1.388(12)
C(44)-C(45)	1.384(11)	C(45)-C(46)	1.350(10)
C(1)-O(1)	1.127(11)	C(2)-O(2)	1.104(10)
C(3)-O(3)	1.124(10)	C(4)-O(4)	1.123(9)
C(5)-O(5)	1.125(10)	C(9)-O(9)	1.121(9)
C(6)-O(6)	1.138(9)	C(7)-O(7)	1.120(10)
C(8)-O(8)	1.125(9)	C(10)-O(10)	1.119(10)
C(5)-W(1)-C(1)	85.7(4)	C(5)-W(1)-C(4)	90.8(4)
C(1)-W(1)-C(4)	90.8(4)	C(5)-W(1)-C(3)	92.3(3)
C(1)-W(1)-C(3)	177.0(3)	C(4)-W(1)-C(3)	91.5(4)
C(5)-W(1)-C(2)	89.7(4)	C(1)-W(1)-C(2)	88.6(4)
C(4)-W(1)-C(2)	179.1(3)	C(3)-W(1)-C(2)	89.2(4)
C(5)-W(1)-P(1)	179.4(2)	C(1)-W(1)-P(1)	94.7(3)
C(4)-W(1)-P(1)	89.7(2)	C(3)-W(1)-P(1)	87.3(2)
C(2)-W(1)-P(1)	89.8(3)	C(10)-W(2)-C(9)	88.6(4)
C(10)-W(2)-C(6)	89.6(4)	C(9)-W(2)-C(6)	90.8(3)
C(10)-W(2)-C(8)	92.7(3)	C(9)-W(2)-C(8)	86.4(3)
C(6)-W(2)-C(8)	176.3(4)	C(10)-W(2)-C(7)	87.3(4)
C(9)-W(2)-C(7)	174.4(3)	C(6)-W(2)-C(7)	93.1(4)
C(8)-W(2)-C(7)	89.9(4)	C(10)-W(2)-P(2)	178.3(3)
C(9)-W(2)-P(2)	92.2(2)	C(6)-W(2)-P(2)	88.9(3)
C(8)-W(2)-P(2)	88.8(2)	C(7)-W(2)-P(2)	92.0(3)
C(26)-P(1)-C(16)	104.9(4)	C(26)-P(1)-C(50)	107.6(3)
C(16)-P(1)-C(50)	104.5(4)	C(26)-P(1)-W(1)	119.3(3)
C(16)-P(1)-W(1)	110.9(3)	C(50)-P(1)-W(1)	108.6(2)
C(36)-P(2)-C(46)	102.9(4)	C(36)-P(2)-C(50)	108.7(4)
C(46)-P(2)-C(50)	106.6(3)	C(36)-P(2)-W(2)	116.2(3)
C(46)-P(2)-W(2)	113.7(3)	C(50)-P(2)-W(2)	108.3(2)
C(16)-C(11)-C(12)	120.9(10)	C(13)-C(12)-C(11)	120.5(12)
C(14)-C(13)-C(12)	119.2(11)	C(13)-C(14)-C(15)	120.1(11)
C(14)-C(15)-C(16)	121.4(10)	C(11)-C(16)-C(15)	117.6(9)
C(11)-C(16)-P(1)	122.1(7)	C(15)-C(16)-P(1)	119.7(8)
C(22)-C(21)-C(26)	119.6(9)	C(23)-C(22)-C(21)	120.3(9)
C(24)-C(23)-C(22)	120.5(10)	C(23)-C(24)-C(25)	120.8(10)

C(26)-C(25)-C(24)	118.6(9)	C(25)-C(26)-C(21)	120.0(8)
C(25)-C(26)-P(1)	122.3(6)	C(21)-C(26)-P(1)	117.6(7)
C(36)-C(31)-C(32)	118.8(8)	C(33)-C(32)-C(31)	121.5(8)
C(32)-C(33)-C(34)	120.5(9)	C(33)-C(34)-C(35)	118.6(8)
C(36)-C(35)-C(34)	121.5(8)	C(31)-C(36)-C(35)	119.1(8)
C(31)-C(36)-P(2)	122.0(6)	C(35)-C(36)-P(2)	118.9(6)
C(46)-C(41)-C(42)	122.2(9)	C(43)-C(42)-C(41)	119.5(10)
C(42)-C(43)-C(44)	119.8(10)	C(43)-C(44)-C(45)	120.3(9)
C(46)-C(45)-C(44)	118.8(9)	C(41)-C(46)-C(45)	119.4(8)
C(41)-C(46)-P(2)	116.8(6)	C(45)-C(46)-P(2)	123.8(7)
P(1)-C(50)-P(2)	133.1(4)	O(1)-C(1)-W(1)	175.6(9)
O(2)-C(2)-W(1)	179.1(9)	O(3)-C(3)-W(1)	179.1(9)
O(4)-C(4)-W(1)	179.1(8)	O(5)-C(5)-W(1)	177.5(10)
O(9)-C(9)-W(2)	176.9(8)	O(6)-C(6)-W(2)	178.8(9)
O(7)-C(7)-W(2)	176.4(9)	O(8)-C(8)-W(2)	176.7(8)
O(10)-C(10)-W(2)	179.2(10)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 2.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \ldots + 2hka^*b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
W(1)	36(1)	30(1)	38(1)	3(1)	7(1)	2(1)
W(2)	37(1)	31(1)	33(1)	-2(1)	-2(1)	0(1)
P(1)	33(1)	28(1)	34(1)	-1(1)	5(1)	1(1)
P(2)	30(1)	30(1)	29(1)	2(1)	4(1)	2(1)
C(11)	54(7)	66(7)	56(7)	-4(6)	-24(5)	8(6)
C(12)	64(9)	100(10)	95(10)	1(8)	-37(8)	15(8)
C(13)	58(8)	87(9)	104(11)	62(8)	23(8)	31(7)
C(14)	73(8)	58(7)	87(9)	16(7)	27(7)	33(6)
C(15)	53(6)	48(6)	55(7)	-1(5)	5(5)	15(5)
C(16)	36(5)	25(4)	40(6)	3(4)	7(5)	0(4)
C(21)	42(6)	45(5)	44(6)	-7(4)	10(5)	-3(4)
C(22)	54(7)	48(6)	65(7)	-16(5)	8(6)	4(5)
C(23)	87(9)	89(9)	41(6)	-41(6)	9(6)	-3(7)
C(24)	91(9)	89(8)	34(6)	-15(6)	2(6)	-2(7)
C(25)	74(8)	49(6)	35(6)	-11(5)	3(6)	-10(5)
C(26)	39(6)	34(5)	36(5)	-9(4)	3(4)	-2(4)
C(31)	46(6)	65(6)	33(5)	14(5)	0(5)	11(5)
C(32)	63(7)	99(8)	32(6)	8(6)	14(5)	-2(6)
C(33)	67(7)	77(8)	43(6)	22(6)	-18(5)	3(6)
C(34)	56(7)	73(7)	58(7)	17(6)	-15(6)	19(6)
C(35)	46(5)	53(6)	38(5)	-2(5)	2(4)	2(5)
C(36)	34(5)	27(4)	34(5)	7(4)	7(4)	1(4)
C(41)	39(6)	44(5)	45(6)	10(4)	7(5)	7(4)
C(42)	58(8)	83(8)	53(7)	-5(6)	2(6)	14(7)
C(43)	43(7)	114(10)	69(8)	-22(8)	17(6)	16(7)
C(44)	81(8)	47(6)	78(8)	-24(6)	-31(7)	27(6)
C(45)	43(6)	40(5)	58(6)	-1(5)	3(5)	13(5)
C(46)	30(5)	35(5)	37(5)	-7(4)	5(4)	3(4)
C(50)	32(5)	35(4)	33(5)	4(4)	5(4)	5(4)
C(1)	62(7)	36(6)	78(8)	14(6)	18(6)	10(5)
O(1)	108(7)	45(4)	75(6)	-19(4)	0(5)	-5(4)
C(2)	40(5)	57(6)	77(7)	-1(6)	12(5)	0(5)
O(2)	39(4)	126(7)	130(7)	19(6)	-4(5)	13(5)
C(3)	62(7)	38(5)	45(6)	18(5)	22(6)	-3(5)
O(3)	95(6)	53(4)	64(5)	-32(4)	14(4)	3(4)
C(4)	55(6)	37(5)	44(6)	-4(4)	6(5)	12(5)
O(4)	47(4)	70(5)	101(6)	8(4)	-2(5)	19(4)
C(5)	66(7)	29(5)	73(8)	-11(5)	19(6)	2(5)
O(5)	101(7)	65(5)	97(6)	41(4)	43(5)	-1(4)
C(9)	55(6)	44(5)	22(5)	-8(4)	-7(5)	5(5)
O(9)	59(5)	85(5)	65(5)	-2(4)	13(4)	24(4)
C(6)	43(6)	64(7)	46(6)	12(5)	0(5)	-4(5)
O(6)	98(7)	80(5)	78(6)	43(5)	0(5)	-13(5)
C(7)	46(6)	85(8)	45(6)	-30(5)	1(5)	2(6)
O(7)	49(5)	130(7)	121(7)	-32(6)	-7(5)	19(5)
C(8)	47(6)	48(6)	30(5)	-11(4)	-4(5)	-3(5)
O(8)	109(7)	60(5)	56(5)	23(4)	1(5)	-9(4)

C(10)	79(8)	20(5)	72(8)	-9(5)	2(7)	-3(5)
O(10)	118(7)	56(5)	92(6)	-31(4)	-39(5)	0(5)

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

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	619(5)	4065(9)	2693(5)	72
H(12A)	-425(7)	5373(12)	2498(6)	106
H(13A)	-572(6)	7182(12)	3148(6)	99
H(14A)	243(6)	7518(10)	4080(6)	86
H(15A)	1230(5)	6118(8)	4328(5)	62
H(21A)	2405(5)	1354(8)	3388(5)	52
H(22A)	2923(5)	525(9)	2426(5)	66
H(23A)	2918(6)	1725(11)	1468(5)	87
H(24A)	2420(6)	3814(10)	1440(5)	85
H(25A)	1845(5)	4649(9)	2372(4)	63
H(31A)	3477(5)	5772(8)	2357(4)	58
H(32A)	2838(5)	6673(10)	1404(5)	77
H(33A)	1862(5)	8150(10)	1502(4)	76
H(34A)	1425(5)	8613(9)	2541(5)	76
H(35A)	2064(4)	7726(8)	3512(4)	55
H(41A)	4615(5)	6493(8)	3221(4)	51
H(42A)	5632(6)	5439(11)	2790(5)	78
H(43A)	5688(6)	3271(12)	2822(5)	90
H(44A)	4710(6)	2107(9)	3273(5)	85
H(45A)	3692(5)	3182(8)	3718(4)	57
H(50A)	2915(4)	4156(7)	4410(4)	40
H(50B)	2351(4)	5277(7)	4511(4)	40