

Table 1. Crystal data and structure refinement for **3**.

Identification code	an50	
Empirical formula	C ₁₅ H ₁₃ N O ₃	
Formula weight	255.26	
Temperature	198(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P n a 21	
Unit cell dimensions	a = 14.127(1) Å	α = 90°.
	b = 11.910(2) Å	β = 90°.
	c = 7.618(2) Å	γ = 90°.
Volume	1281.7(4) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.323 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.093 mm ⁻¹	
F(000)	536	
Crystal size	0.32 x 0.11 x 0.10 mm ³	
Theta range for data collection	3.35 to 25.40°.	
Index ranges	-17 ≤ h ≤ 17, -14 ≤ k ≤ 14, -9 ≤ l ≤ 7	
Reflections collected	7318	
Independent reflections	2201 [R(int) = 0.0868]	
Completeness to theta = 25.40°	99.7 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9908 and 0.9709	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	1582 / 1 / 178	
Goodness-of-fit on F ²	1.067	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0464, wR2 = 0.0940	
R indices (all data)	R1 = 0.0829, wR2 = 0.1111	
Absolute structure parameter	0.4(18)	
Largest diff. peak and hole	0.163 and -0.180 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for an50. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(1)	7334(2)	7932(3)	1341(4)	39(1)
C(2)	6904(2)	7022(2)	2102(4)	37(1)
C(3)	6012(2)	7107(2)	2943(4)	35(1)
C(4)	5572(2)	8141(2)	3071(4)	34(1)
C(4A)	6007(2)	9077(2)	2379(4)	33(1)
C(4B)	5789(2)	10267(2)	2367(4)	38(1)
C(5)	5075(2)	10902(2)	3125(5)	47(1)
C(6)	5134(3)	12058(3)	3010(5)	59(1)
C(7)	5886(3)	12564(3)	2165(5)	65(1)
C(8)	6588(3)	11959(3)	1339(5)	57(1)
C(8A)	6534(2)	10792(2)	1467(4)	44(1)
N(9)	7172(2)	9989(2)	902(4)	45(1)
C(9A)	6876(2)	8958(2)	1498(4)	38(1)
O(10)	7285(2)	5962(2)	2090(3)	47(1)
C(10)	8154(2)	5806(3)	1152(5)	62(1)
C(11)	5536(2)	6103(2)	3679(4)	37(1)
O(11)	5917(2)	5337(2)	4441(3)	56(1)
O(12)	4605(2)	6119(2)	3377(3)	43(1)
C(12)	4066(2)	5184(3)	4035(5)	52(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for an50.

C(1)-C(2)	1.372(4)
C(1)-C(9A)	1.389(4)
C(1)-H(1)	0.9500
C(2)-O(10)	1.372(3)
C(2)-C(3)	1.417(4)
C(3)-C(4)	1.382(4)
C(3)-C(11)	1.482(4)
C(4)-C(4A)	1.377(4)
C(4)-H(4)	0.9500
C(4A)-C(9A)	1.406(4)
C(4A)-C(4B)	1.451(4)
C(4B)-C(5)	1.387(4)
C(4B)-C(8A)	1.403(5)
C(5)-C(6)	1.383(4)
C(5)-H(5)	0.9500
C(6)-C(7)	1.381(5)
C(6)-H(6)	0.9500
C(7)-C(8)	1.377(5)
C(7)-H(7)	0.9500
C(8)-C(8A)	1.395(4)
C(8)-H(8)	0.9500
C(8A)-N(9)	1.383(4)
N(9)-C(9A)	1.374(4)
N(9)-H(9)	0.87(3)
O(10)-C(10)	1.433(4)
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-O(11)	1.208(3)
C(11)-O(12)	1.336(4)
O(12)-C(12)	1.439(3)
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800

C(2)-C(1)-C(9A)	116.9(3)
C(2)-C(1)-H(1)	121.6
C(9A)-C(1)-H(1)	121.6
C(1)-C(2)-O(10)	123.4(3)
C(1)-C(2)-C(3)	121.9(3)
O(10)-C(2)-C(3)	114.7(2)
C(4)-C(3)-C(2)	119.7(2)
C(4)-C(3)-C(11)	119.2(3)
C(2)-C(3)-C(11)	121.1(2)
C(4A)-C(4)-C(3)	119.6(3)
C(4A)-C(4)-H(4)	120.2
C(3)-C(4)-H(4)	120.2
C(4)-C(4A)-C(9A)	119.4(3)
C(4)-C(4A)-C(4B)	134.3(3)
C(9A)-C(4A)-C(4B)	106.2(2)
C(5)-C(4B)-C(8A)	120.5(3)
C(5)-C(4B)-C(4A)	133.2(3)
C(8A)-C(4B)-C(4A)	106.2(3)
C(6)-C(5)-C(4B)	118.2(3)
C(6)-C(5)-H(5)	120.9
C(4B)-C(5)-H(5)	120.9
C(7)-C(6)-C(5)	120.7(3)
C(7)-C(6)-H(6)	119.7
C(5)-C(6)-H(6)	119.7
C(8)-C(7)-C(6)	122.6(3)
C(8)-C(7)-H(7)	118.7
C(6)-C(7)-H(7)	118.7
C(7)-C(8)-C(8A)	116.8(3)
C(7)-C(8)-H(8)	121.6
C(8A)-C(8)-H(8)	121.6
N(9)-C(8A)-C(8)	129.2(3)
N(9)-C(8A)-C(4B)	109.5(3)
C(8)-C(8A)-C(4B)	121.2(3)
C(9A)-N(9)-C(8A)	108.5(3)
C(9A)-N(9)-H(9)	125.5(19)

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

C(8A)-N(9)-H(9)	125.8(19)
N(9)-C(9A)-C(1)	128.0(3)
N(9)-C(9A)-C(4A)	109.5(3)
C(1)-C(9A)-C(4A)	122.4(2)
C(2)-O(10)-C(10)	117.3(2)
O(10)-C(10)-H(10A)	109.5
O(10)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
O(10)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
O(11)-C(11)-O(12)	122.2(3)
O(11)-C(11)-C(3)	126.1(3)
O(12)-C(11)-C(3)	111.7(3)
C(11)-O(12)-C(12)	116.7(2)
O(12)-C(12)-H(12A)	109.5
O(12)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
O(12)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for an50. 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}
C(1)	29(2)	55(2)	34(2)	1(2)	4(2)	-3(1)
C(2)	35(2)	43(2)	33(2)	-1(2)	-2(2)	5(1)
C(3)	38(2)	35(2)	31(2)	2(1)	-4(1)	1(1)
C(4)	32(2)	38(2)	33(2)	2(1)	1(1)	-3(1)
C(4A)	35(2)	37(2)	28(2)	3(1)	-2(1)	-3(1)
C(4B)	50(2)	36(2)	29(2)	3(1)	-3(1)	-5(2)
C(5)	63(2)	40(2)	39(2)	2(1)	3(2)	1(2)
C(6)	93(3)	41(2)	41(2)	2(2)	-1(2)	7(2)
C(7)	104(3)	37(2)	54(2)	4(2)	-6(3)	-2(2)
C(8)	87(3)	41(2)	42(2)	11(2)	-8(2)	-18(2)
C(8A)	59(2)	45(2)	28(2)	3(2)	-7(2)	-9(2)
N(9)	44(2)	49(2)	43(2)	7(1)	5(2)	-12(1)
C(9A)	37(2)	42(2)	34(2)	6(2)	-3(1)	-9(1)
O(10)	48(1)	45(1)	47(1)	2(1)	9(1)	12(1)
C(10)	45(2)	76(3)	65(3)	-1(2)	11(2)	20(2)
C(11)	41(2)	36(2)	32(2)	1(1)	2(1)	1(1)
O(11)	49(1)	49(1)	68(2)	25(1)	-5(1)	1(1)
O(12)	40(1)	40(1)	48(1)	8(1)	-1(1)	-6(1)
C(12)	53(2)	43(2)	60(2)	7(2)	-2(2)	-15(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)
 for an50.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	7919	7863	734	47
H(4)	4974	8205	3632	41
H(5)	4559	10551	3708	57
H(6)	4652	12510	3518	70
H(7)	5922	13360	2152	78
H(8)	7084	12318	713	68
H(10A)	8657	6244	1715	93
H(10B)	8075	6058	-63	93
H(10C)	8325	5008	1163	93
H(12A)	4251	5031	5251	78
H(12B)	4192	4520	3312	78
H(12C)	3390	5364	3990	78
H(9)	7700(20)	10120(20)	350(40)	39(9)

Table 6. Torsion angles [°] for an50.

C(9A)-C(1)-C(2)-O(10)	-178.3(3)
C(9A)-C(1)-C(2)-C(3)	2.8(4)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-2.7(4)
O(10)-C(2)-C(3)-C(4)	178.4(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(11)	176.9(3)
O(10)-C(2)-C(3)-C(11)	-2.1(4)
C(2)-C(3)-C(4)-C(4A)	0.0(4)
C(11)-C(3)-C(4)-C(4A)	-179.5(3)
C(3)-C(4)-C(4A)-C(9A)	2.3(4)
C(3)-C(4)-C(4A)-C(4B)	-175.6(3)
C(4)-C(4A)-C(4B)-C(5)	3.4(6)
C(9A)-C(4A)-C(4B)-C(5)	-174.7(3)
C(4)-C(4A)-C(4B)-C(8A)	178.6(3)
C(9A)-C(4A)-C(4B)-C(8A)	0.5(3)
C(8A)-C(4B)-C(5)-C(6)	-1.8(5)
C(4A)-C(4B)-C(5)-C(6)	172.9(3)
C(4B)-C(5)-C(6)-C(7)	-0.2(5)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	2.8(6)
C(6)-C(7)-C(8)-C(8A)	-3.2(6)
C(7)-C(8)-C(8A)-N(9)	-174.1(3)
C(7)-C(8)-C(8A)-C(4B)	1.2(5)
C(5)-C(4B)-C(8A)-N(9)	177.4(3)
C(4A)-C(4B)-C(8A)-N(9)	1.5(3)
C(5)-C(4B)-C(8A)-C(8)	1.3(5)
C(4A)-C(4B)-C(8A)-C(8)	-174.7(3)
C(8)-C(8A)-N(9)-C(9A)	172.8(3)
C(4B)-C(8A)-N(9)-C(9A)	-3.0(3)
C(8A)-N(9)-C(9A)-C(1)	-175.3(3)
C(8A)-N(9)-C(9A)-C(4A)	3.3(3)
C(2)-C(1)-C(9A)-N(9)	177.9(3)
C(2)-C(1)-C(9A)-C(4A)	-0.5(4)
C(4)-C(4A)-C(9A)-N(9)	179.3(3)
C(4B)-C(4A)-C(9A)-N(9)	-2.3(3)
C(4)-C(4A)-C(9A)-C(1)	-2.1(4)

C(4B)-C(4A)-C(9A)-C(1)	176.3(3)
C(1)-C(2)-O(10)-C(10)	-3.2(4)
C(3)-C(2)-O(10)-C(10)	175.7(3)
C(4)-C(3)-C(11)-O(11)	-141.4(3)
C(2)-C(3)-C(11)-O(11)	39.0(5)
C(4)-C(3)-C(11)-O(12)	39.7(4)
C(2)-C(3)-C(11)-O(12)	-139.8(3)
O(11)-C(11)-O(12)-C(12)	1.2(4)
C(3)-C(11)-O(12)-C(12)	-180.0(3)

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

Table 7. Observed and calculated structure factors for an50

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	-9	32	54	10	3	4	-7	0	28	1	8	4	-6	80	84	10	0	3	-5	188	182	4	0	11	-5	86	80	11
0	1	-9	0	21	1	4	4	-7	88	93	10	9	4	-6	45	40	16	1	3	-5	169	166	2	1	11	-5	65	54	9
1	1	-9	48	52	5	5	4	-7	21	7	20	10	4	-6	30	49	20	2	3	-5	58	53	2	2	11	-5	10	24	10
2	1	-9	32	32	12	6	4	-7	45	42	9	11	4	-6	0	17	1	3	3	-5	95	94	2	3	11	-5	18	35	18
3	1	-9	34	43	7	7	4	-7	22	13	22	12	4	-6	28	32	27	4	3	-5	69	61	4	4	11	-5	49	39	11
1	2	-9	0	4	1	8	4	-7	0	24	1	1	5	-6	84	84	2	5	3	-5	93	84	9	5	11	-5	54	49	7
2	2	-9	63	65	4	9	4	-7	34	14	21	2	5	-6	49	48	4	6	3	-5	194	197	4	1	12	-5	29	42	28
0	0	-8	67	54	6	0	5	-7	35	52	16	3	5	-6	68	67	4	7	3	-5	104	105	3	0	0	-4	291	297	5
2	0	-8	71	75	3	1	5	-7	87	84	2	4	5	-6	91	88	5	8	3	-5	180	178	5	2	0	-4	433	432	8
4	0	-8	84	87	3	2	5	-7	42	44	6	5	5	-6	97	95	5	9	3	-5	12	10	12	4	0	-4	336	348	10
6	0	-8	67	69	4	3	5	-7	0	4	1	6	5	-6	42	51	7	10	3	-5	17	40	16	6	0	-4	286	290	9
8	0	-8	45	51	11	4	5	-7	0	32	1	7	5	-6	26	25	25	11	3	-5	44	50	12	8	0	-4	93	95	9
1	1	-8	33	34	4	5	5	-7	20	22	20	8	5	-6	74	70	7	12	3	-5	71	72	6	10	0	-4	163	167	10
2	1	-8	46	40	3	6	5	-7	63	74	17	9	5	-6	29	16	23	13	3	-5	26	7	26	12	0	-4	116	113	5
3	1	-8	97	95	3	7	5	-7	53	50	52	10	5	-6	0	25	1	1	4	-5	41	41	4	14	0	-4	45	21	11
4	1	-8	55	58	5	8	5	-7	24	18	23	11	5	-6	0	19	1	2	4	-5	120	128	2	1	1	-4	177	181	2
5	1	-8	82	77	2	9	5	-7	0	31	1	0	6	-6	128	132	4	3	4	-5	66	68	4	2	1	-4	158	158	2
6	1	-8	24	17	11	1	6	-7	99	94	3	1	6	-6	44	44	8	4	4	-5	18	19	17	3	1	-4	323	318	4
7	1	-8	53	52	6	2	6	-7	0	6	1	2	6	-6	11	5	10	5	4	-5	65	63	4	4	1	-4	213	216	7
8	1	-8	10	24	9	3	6	-7	0	14	1	3	6	-6	84	87	3	6	4	-5	88	89	7	5	1	-4	324	319	10
0	2	-8	72	74	3	4	6	-7	110	114	5	4	6	-6	21	38	20	7	4	-5	16	24	15	6	1	-4	189	200	5
1	2	-8	39	40	3	5	6	-7	39	28	9	5	6	-6	28	28	12	8	4	-5	59	72	6	7	1	-4	124	123	3
2	2	-8	60	61	3	6	6	-7	9	21	9	6	6	-6	105	110	14	9	4	-5	68	71	9	8	1	-4	63	60	3
3	2	-8	84	88	2	7	6	-7	0	23	1	7	6	-6	51	53	11	10	4	-5	110	112	17	9	1	-4	156	161	3
4	2	-8	63	53	3	8	6	-7	44	34	17	8	6	-6	37	13	25	11	4	-5	54	72	16	10	1	-4	75	70	11
5	2	-8	16	32	15	0	7	-7	113	112	4	9	6	-6	28	29	27	12	4	-5	6	30	5	11	1	-4	30	37	11
6	2	-8	70	56	6	1	7	-7	104	101	3	10	6	-6	18	37	18	13	4	-5	0	15	1	12	1	-4	83	85	4
7	2	-8	51	77	13	2	7	-7	83	79	4	1	7	-6	63	61	4	0	5	-5	104	104	3	13	1	-4	69	65	4
8	2	-8	57	55	8	3	7	-7	47	45	5	2	7	-6	81	79	3	1	5	-5	64	67	3	14	1	-4	10	7	9
1	3	-8	88	88	2	4	7	-7	36	37	10	3	7	-6	34	42	8	2	5	-5	38	51	5	15	1	-4	25	12	25
2	3	-8	56	54	3	5	7	-7	28	17	17	4	7	-6	151	150	4	3	5	-5	91	93	3	0	2	-4	200	205	4
3	3	-8	84	81	4	6	7	-7	77	99	16	5	7	-6	152	154	19	4	5	-5	49	42	8	1	2	-4	135	140	2
4	3	-8	76	76	6	7	7	-7	0	58	1	6	7	-6	40	25	8	5	5	-5	33	43	8	2	2	-4	206	205	2
5	3	-8	63	66	9	1	8	-7	112	102	3	7	7	-6	29	25	23	6	5	-5	15	35	15	3	2	-4	161	167	2
6	3	-8	74	65	7	2	8	-7	67	71	8	8	7	-6	43	43	18	7	5	-5	130	129	6	4	2	-4	142	153	4
7	3	-8	62	60	7	3	8	-7	23	25	22	9	7	-6	31	25	31	8	5	-5	12	11	12	5	2	-4	193	201	3
0	4	-8	40	38	7	4	8	-7	31	47	10	0	8	-6	183	176	4	9	5	-5	16	45	16	6	2	-4	164	158	3
1	4	-8	16	20	15	5	8	-7	74	67	5	1	8	-6	55	47	5	10	5	-5	0	6	1	7	2	-4	55	55	4
2	4	-8	42	53	10	0	9	-7	109	111	5	2	8	-6	75	78	3	11	5	-5	19	21	18	8	2	-4	79	74	5
3	4	-8	39	42	6	1	9	-7	37	30	9	3	8	-6	132	127	3	12	5	-5	27	23	26	9	2	-4	47	53	3
4	4	-8	47	45	9	2	9	-7	32	31	14	4	8	-6	0	25	1	13	5	-5	0	33	1	10	2	-4	71	70	3
5	4	-8	40	21	7	0	0	-6	133	128	3	5	8	-6	67	63	3	1	6	-5	164	161	3	11	2	-4	63	67	4
6	4	-8	0	31	1	2	0	-6	82	84	3	6	8	-6	41	54	8	2	6	-5	127	126	2	12	2	-4	80	72	4
1	5	-8	47	50	6	4	0	-6	114	112	3	7	8	-6	41	38	40	3	6	-5	90	95	7	13	2	-4	63	65	5
2	5	-8	29	34	19	6	0	-6	225	224	9	8	8	-6	39	12	39	4	6	-5	52	54	6	14	2	-4	28	29	28
3	5	-8	0	22	1	8	0	-6	67	53	10	1	9	-6	61	54	5	5	6	-5	74	83	2	15	2	-4	24	0	24
4	5	-8	21	16	20	10	0	-6	130	126	4	2	9	-6	115	113	4	6	6	-5	96	100	11	1	3	-4	70	76	2
5	5	-8	19	7	18	12	0	-6	77	62	13	3	9	-6	22	21	22	7	6	-5	124	121	4	2	3	-4	220	221	3
0	6	-8	33	27	27	1	1	-6	100	98	1	4	9	-6	38	40	7	8	6	-5	64	74	40	3	3	-4	190	188	3
1	6	-8	0	6	1	2	1	-6	15	11	12	5	9	-6	56	58	7	9	6	-5	45	32	17	4	3	-4	138	133	2
2	6	-8	37	49	8	3	1	-6	69	72	2	6	9	-6	30	38	15	10	6	-5	43	37	16	5	3	-4	136	133	4
3	6	-8	22	16	21	4	1	-6	134	133	3	7	9	-6	42	45	33	11	6	-5	52	16	13	6	3	-4	81	82	3
4	6	-8	37	38	21	5	1	-6	207	197	3	0	10	-6	66	67	7	12	6	-5	6	44	6	7	3	-4	58	56	4
1	7	-8	52	39	8	6	1	-6	61	61	4	1	10	-6	19	31	19	0	7	-5	108	107	4	8	3	-4	102	103	4
2	0	-7	39	42	5	7	1	-6	102	107	13	2	10	-6	45	48	9	1	7	-5	107	107	2	9	3	-4	76	92	5
4	0	-7	16	29	15	8	1	-6	112	115	7	3	10	-6	49	47	9	2	7	-5	14	25	13	10	3	-4	75	82	12
6	0	-7	46	41	5	9	1	-6	52	39	7	4	10	-6	9	28	9	3	7	-5	26	36	8	11	3	-4	74	84	7
8	0	-7	101	100	5	10	1	-6	40	40	10	5	10	-6	23	26	23	4	7	-5	76	77	3	12	3	-4	42	37	8
10	0	-7	42	30	14	11	1	-6	76	67	4	2	0	-5	105	106	2	5	7	-5	32	39	5	13	3	-4	33	39	33
0	1	-7	51	45	3	12	1	-6	16	25	16	4	0	-5	270	269	8	6	7	-5	75	80	7	14	3	-4	98	89	6
1	1	-7	86	85	1	0	2	-6	180	182	3	6	0	-5	44	4													

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

Table 7. Observed and calculated structure factors for an50

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	6	-4	21	8	15	15	1	-3	31	28	12	3	8	-3	134	137	2	13	2	-2	7	21	7	12	8	-2	0	13	1
5	6	-4	115	112	3	16	1	-3	20	36	20	4	8	-3	128	129	3	14	2	-2	47	45	6	13	8	-2	0	18	1
6	6	-4	152	152	3	1	2	-3	307	323	4	5	8	-3	89	86	4	15	2	-2	35	39	9	1	9	-2	155	159	3
7	6	-4	115	117	7	2	2	-3	171	167	2	6	8	-3	124	128	3	16	2	-2	27	12	22	2	9	-2	223	217	3
8	6	-4	92	99	12	3	2	-3	292	297	4	7	8	-3	13	36	13	1	3	-2	265	259	4	3	9	-2	24	27	23
9	6	-4	101	107	17	4	2	-3	208	212	7	8	8	-3	11	22	10	2	3	-2	26	32	4	4	9	-2	76	82	3
10	6	-4	72	79	17	5	2	-3	335	330	5	9	8	-3	83	75	5	3	3	-2	148	151	2	5	9	-2	19	7	19
11	6	-4	37	34	12	6	2	-3	67	67	3	10	8	-3	31	24	13	4	3	-2	148	148	2	6	9	-2	60	66	6
12	6	-4	37	34	12	7	2	-3	20	27	7	11	8	-3	67	66	8	5	3	-2	256	240	4	7	9	-2	128	131	3
13	6	-4	0	31	1	8	2	-3	60	64	3	12	8	-3	32	27	32	6	3	-2	63	62	4	8	9	-2	175	177	3
1	7	-4	118	119	3	9	2	-3	80	86	3	13	8	-3	0	32	1	7	3	-2	196	190	4	9	9	-2	43	34	9
2	7	-4	56	54	3	10	2	-3	27	23	8	0	9	-3	271	268	15	8	3	-2	111	111	13	10	9	-2	76	73	5
3	7	-4	158	158	2	11	2	-3	22	38	21	1	9	-3	131	131	3	9	3	-2	118	119	5	11	9	-2	54	65	12
4	7	-4	56	50	4	12	2	-3	37	34	6	2	9	-3	49	43	6	10	3	-2	86	89	3	12	9	-2	15	27	15
5	7	-4	119	120	2	13	2	-3	99	99	3	3	9	-3	76	77	3	11	3	-2	144	138	3	0	10	-2	225	229	5
6	7	-4	122	118	3	14	2	-3	40	42	9	4	9	-3	207	201	3	12	3	-2	50	60	5	1	10	-2	101	101	3
7	7	-4	14	26	14	15	2	-3	38	28	8	5	9	-3	58	53	6	13	3	-2	19	31	18	2	10	-2	279	270	5
8	7	-4	39	37	12	0	3	-3	179	175	9	6	9	-3	160	163	3	14	3	-2	25	30	13	3	10	-2	73	65	4
9	7	-4	48	44	11	1	3	-3	161	152	3	7	9	-3	60	64	4	15	3	-2	59	50	11	4	10	-2	41	36	8
10	7	-4	54	70	24	2	3	-3	172	177	2	8	9	-3	27	45	22	16	3	-2	33	25	15	5	10	-2	36	29	9
11	7	-4	24	16	23	3	3	-3	101	104	2	9	9	-3	70	74	5	0	4	-2	290	286	4	6	10	-2	25	34	22
12	7	-4	28	32	27	4	3	-3	138	142	2	10	9	-3	101	93	6	1	4	-2	156	155	2	7	10	-2	34	33	9
0	8	-4	48	56	7	5	3	-3	153	143	6	11	9	-3	17	26	16	2	4	-2	163	169	2	8	10	-2	18	21	18
1	8	-4	39	11	6	6	3	-3	118	117	3	12	9	-3	40	43	22	3	4	-2	186	193	3	9	10	-2	0	39	1
2	8	-4	122	125	3	7	3	-3	141	149	5	1	10	-3	95	91	4	4	4	-2	366	351	5	10	10	-2	41	45	17
3	8	-4	226	221	3	8	3	-3	162	172	9	2	10	-3	49	38	9	5	4	-2	146	148	2	11	10	-2	31	33	31
4	8	-4	51	53	4	9	3	-3	72	80	9	3	10	-3	0	12	1	6	4	-2	22	44	22	1	11	-2	62	56	5
5	8	-4	28	35	9	10	3	-3	168	189	20	4	10	-3	156	160	3	7	4	-2	91	83	5	2	11	-2	42	48	13
6	8	-4	61	70	5	11	3	-3	0	29	1	5	10	-3	0	3	1	8	4	-2	72	65	5	3	11	-2	99	95	3
7	8	-4	44	51	5	12	3	-3	75	77	8	6	10	-3	62	58	7	9	4	-2	124	120	4	4	11	-2	80	75	6
8	8	-4	42	50	13	13	3	-3	92	83	8	7	10	-3	12	25	11	10	4	-2	135	139	4	5	11	-2	56	55	7
9	8	-4	70	65	11	14	3	-3	0	14	1	8	10	-3	16	32	16	11	4	-2	121	123	4	6	11	-2	67	68	10
10	8	-4	5	33	4	15	3	-3	28	20	22	9	10	-3	42	47	13	12	4	-2	111	115	4	7	11	-2	29	33	14
11	8	-4	48	43	10	1	4	-3	149	150	2	10	10	-3	38	31	17	13	4	-2	103	103	5	8	11	-2	32	38	14
12	8	-4	43	60	17	2	4	-3	72	70	2	0	11	-3	54	55	13	14	4	-2	23	39	23	9	11	-2	51	36	11
1	9	-4	99	93	3	3	4	-3	54	56	3	1	11	-3	31	44	13	15	4	-2	28	38	27	10	11	-2	38	31	37
2	9	-4	149	146	3	4	4	-3	204	197	3	2	11	-3	118	111	3	1	5	-2	176	175	2	0	12	-2	80	90	8
3	9	-4	89	87	3	5	4	-3	208	206	3	3	11	-3	87	76	6	2	5	-2	216	210	3	1	12	-2	0	26	1
4	9	-4	68	62	4	6	4	-3	82	87	4	4	11	-3	23	34	23	3	5	-2	253	248	4	2	12	-2	27	25	16
5	9	-4	95	102	4	7	4	-3	31	31	8	5	11	-3	68	63	5	4	5	-2	161	158	3	3	12	-2	42	44	11
6	9	-4	55	64	4	8	4	-3	87	98	12	6	11	-3	57	56	7	5	5	-2	122	120	6	4	12	-2	56	38	6
7	9	-4	7	11	7	9	4	-3	200	197	5	7	11	-3	25	7	25	6	5	-2	0	3	1	5	12	-2	0	18	1
8	9	-4	27	31	27	10	4	-3	136	132	4	8	11	-3	46	30	17	7	5	-2	118	118	4	6	12	-2	46	34	16
9	9	-4	67	74	7	11	4	-3	67	76	12	9	11	-3	0	17	1	8	5	-2	31	43	9	7	12	-2	0	29	1
10	9	-4	10	59	9	12	4	-3	36	49	16	1	12	-3	19	45	19	9	5	-2	313	308	6	8	12	-2	40	35	12
11	9	-4	36	6	24	13	4	-3	99	103	4	2	12	-3	34	24	11	10	5	-2	67	73	13	1	13	-2	62	55	7
0	10	-4	143	135	5	14	4	-3	43	41	22	3	12	-3	46	32	19	11	5	-2	139	133	4	2	13	-2	26	23	26
1	10	-4	98	96	5	15	4	-3	88	84	8	4	12	-3	48	37	14	12	5	-2	50	46	6	3	13	-2	44	29	11
2	10	-4	156	157	3	0	5	-3	249	256	4	5	12	-3	63	62	28	13	5	-2	188	179	4	4	13	-2	0	28	1
3	10	-4	40	45	15	1	5	-3	221	220	3	6	12	-3	42	39	14	14	5	-2	0	23	1	5	13	-2	58	32	15
4	10	-4	0	26	1	2	5	-3	118	125	2	7	12	-3	28	24	28	15	5	-2	70	68	6	6	13	-2	47	22	11
5	10	-4	7	9	7	3	5	-3	106	102	2	0	13	-3	66	47	9	0	6	-2	371	366	6	0	14	-2	74	66	12
6	10	-4	24	20	24	4	5	-3	139	145	2	1	13	-3	21	12	20	1	6	-2	87	86	2	1	14	-2	7	5	6
7	10	-4	29	3	29	5	5	-3	113	112	2	2	13	-3	45	46	11	2	6	-2	112	110	2	4	0	-1	390	384	9
8	10	-4	52	50	14	6	5	-3	126	124	2	3	13	-3	59	54	9	3	6	-2	97	94	2	6	0	-1	278	269	8
9	10	-4	21	26	21	7	5	-3	118	116	3	4	13	-3	70	55	11	4	6	-2	195	193	2	8	0	-1	417	403	8
1	11	-4	35	33	13	8	5	-3	30	53	29	2	0	-2	1696	1693	48	5	6	-2	163	170	2	10	0	-1	137	127	4
2	11	-4	41	25	12	9	5	-3	149	146	7	4	0	-2	91	106	5	6	6	-2	77	84	4	12	0	-1	73	84	10
3	11	-4	71	61	8	10	5	-3	34	53	34	6	0	-2	292	271	10	7	6	-2	171	167	3	14	0	-1	105	100	7
4	11	-4	0	20	1	11																							

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

14 1 -3 29 28 12 2 8 -3 0 16 1 12 2 -2 65 70 6 11 8 -2 23 33 22 0 3 -1 586 615 11

Table 7. Observed and calculated structure factors for an50

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	3	-1	144	150	2	1	9	-1	66	64	8	14	2	0	33	44	13	12	8	0	63	53	5	10	2	1	62	62	4
2	3	-1	246	263	3	2	9	-1	87	87	3	15	2	0	71	59	6	13	8	0	0	28	1	11	2	1	123	123	3
3	3	-1	26	6	4	3	9	-1	85	84	3	16	2	0	78	74	7	14	8	0	0	1	1	12	2	1	72	71	4
4	3	-1	62	61	2	4	9	-1	0	30	1	1	3	0	230	234	3	1	9	0	115	117	2	13	2	1	84	83	4
5	3	-1	165	166	4	5	9	-1	16	17	15	2	3	0	33	34	3	2	9	0	126	124	2	14	2	1	35	34	7
6	3	-1	209	206	3	6	9	-1	202	205	4	3	3	0	72	72	2	3	9	0	101	98	3	15	2	1	31	33	14
7	3	-1	185	180	13	7	9	-1	40	49	9	4	3	0	104	106	2	4	9	0	114	115	3	16	2	1	0	40	1
8	3	-1	89	90	2	8	9	-1	122	116	3	5	3	0	171	175	2	5	9	0	74	73	4	0	3	1	610	615	11
9	3	-1	167	166	3	9	9	-1	0	29	1	6	3	0	58	56	4	6	9	0	68	69	5	1	3	1	145	150	2
10	3	-1	88	91	2	10	9	-1	112	106	4	7	3	0	171	152	3	7	9	0	55	69	6	2	3	1	246	263	3
11	3	-1	51	50	4	11	9	-1	42	58	13	8	3	0	279	275	4	8	9	0	191	201	3	3	3	1	20	6	12
12	3	-1	54	60	4	12	9	-1	40	28	10	9	3	0	0	7	1	9	9	0	101	105	3	4	3	1	62	61	3
13	3	-1	35	39	8	13	9	-1	40	47	13	10	3	0	21	7	10	10	9	0	28	17	12	5	3	1	169	166	2
14	3	-1	74	84	4	1	10	-1	209	201	3	11	3	0	74	79	3	11	9	0	57	56	6	6	3	1	204	206	3
15	3	-1	29	41	20	2	10	-1	162	166	3	12	3	0	9	26	9	12	9	0	32	1	13	7	3	1	187	180	4
16	3	-1	55	51	12	3	10	-1	53	56	4	13	3	0	79	72	4	13	9	0	44	35	12	8	3	1	89	90	2
1	4	-1	355	366	6	4	10	-1	120	124	5	14	3	0	26	25	16	0	10	0	489	484	14	9	3	1	167	166	3
2	4	-1	146	155	3	5	10	-1	125	128	4	15	3	0	20	21	20	1	10	0	43	40	11	10	3	1	89	91	3
3	4	-1	316	310	5	6	10	-1	75	87	4	16	3	0	23	9	23	2	10	0	61	55	6	11	3	1	51	50	4
4	4	-1	198	192	3	7	10	-1	110	109	3	0	4	0	159	145	4	3	10	0	142	141	4	12	3	1	54	60	6
5	4	-1	45	43	5	8	10	-1	75	77	4	1	4	0	206	212	4	4	10	0	139	136	3	13	3	1	35	39	8
6	4	-1	89	86	6	9	10	-1	24	28	24	2	4	0	89	87	2	5	10	0	78	71	4	14	3	1	78	84	5
7	4	-1	143	147	3	10	10	-1	32	40	31	3	4	0	75	76	2	6	10	0	37	38	10	15	3	1	27	41	16
8	4	-1	65	69	3	11	10	-1	32	27	15	4	4	0	290	285	3	7	10	0	54	69	5	16	3	1	22	51	21
9	4	-1	63	70	4	12	10	-1	43	6	35	5	4	0	319	314	3	8	10	0	0	21	1	1	4	1	357	366	5
10	4	-1	16	13	15	0	11	-1	210	210	5	6	4	0	375	358	6	9	10	0	37	59	10	2	4	1	146	155	2
11	4	-1	223	224	4	1	11	-1	55	55	5	7	4	0	76	80	3	10	10	0	0	12	1	3	4	1	314	310	4
12	4	-1	45	56	10	2	11	-1	94	94	3	8	4	0	40	41	4	11	10	0	23	15	22	4	4	1	197	192	3
13	4	-1	149	148	4	3	11	-1	129	128	3	9	4	0	2	14	2	12	10	0	0	14	1	5	4	1	49	43	2
14	4	-1	29	15	13	4	11	-1	58	55	7	10	4	0	201	198	3	1	11	0	156	153	5	6	4	1	80	86	2
15	4	-1	18	17	18	5	11	-1	33	38	10	11	4	0	159	157	3	2	11	0	93	84	5	7	4	1	141	147	3
16	4	-1	0	14	1	6	11	-1	90	90	4	12	4	0	113	103	3	3	11	0	51	59	6	8	4	1	71	69	2
0	5	-1	265	257	5	7	11	-1	0	25	1	13	4	0	93	95	3	4	11	0	70	74	5	9	4	1	66	70	3
1	5	-1	290	284	4	8	11	-1	50	49	9	14	4	0	79	78	4	5	11	0	7	19	7	10	4	1	15	13	15
2	5	-1	259	260	5	9	11	-1	22	31	22	15	4	0	25	33	24	6	11	0	10	27	9	11	4	1	227	224	4
3	5	-1	364	354	4	10	11	-1	29	2	28	16	4	0	78	60	8	7	11	0	27	11	27	12	4	1	53	57	5
4	5	-1	228	225	3	1	12	-1	94	100	4	1	5	0	20	20	9	8	11	0	93	88	4	13	4	1	155	148	3
5	5	-1	299	293	4	2	12	-1	35	42	11	2	5	0	96	105	2	9	11	0	27	7	22	14	4	1	28	15	14
6	5	-1	110	111	3	3	12	-1	0	34	1	3	5	0	426	413	5	10	11	0	23	23	22	15	4	1	9	17	8
7	5	-1	96	93	5	4	12	-1	0	29	1	4	5	0	43	42	5	0	12	0	38	27	33	16	4	1	0	14	1
8	5	-1	73	74	5	5	12	-1	27	15	19	5	5	0	305	299	4	1	12	0	37	14	10	0	5	1	265	257	5
9	5	-1	85	90	4	6	12	-1	27	11	18	6	5	0	26	37	7	2	12	0	54	50	6	1	5	1	297	283	4
10	5	-1	121	119	3	7	12	-1	30	31	15	7	5	0	180	175	3	3	12	0	18	24	17	2	5	1	263	260	4
11	5	-1	159	163	3	8	12	-1	34	42	14	8	5	0	0	54	1	4	12	0	18	4	18	3	5	1	354	353	5
12	5	-1	56	55	6	9	12	-1	28	10	28	9	5	0	67	67	3	5	12	0	12	5	12	4	5	1	230	225	3
13	5	-1	112	111	4	0	13	-1	44	41	12	10	5	0	83	78	4	6	12	0	19	26	19	5	5	1	301	293	4
14	5	-1	40	38	9	1	13	-1	41	14	9	11	5	0	433	427	7	7	12	0	43	22	13	6	5	1	110	111	2
15	5	-1	61	56	7	2	13	-1	47	26	10	12	5	0	25	22	15	8	12	0	30	14	17	7	5	1	94	92	2
1	6	-1	148	139	3	3	13	-1	32	42	15	13	5	0	114	119	4	9	12	0	33	0	26	8	5	1	78	74	3
2	6	-1	128	125	3	4	13	-1	22	24	21	14	5	0	7	37	6	1	13	0	51	43	6	9	5	1	89	90	3
3	6	-1	279	269	3	5	13	-1	28	30	26	15	5	0	12	14	11	2	13	0	0	33	1	10	5	1	122	119	3
4	6	-1	58	61	3	6	13	-1	46	35	12	0	6	0	324	328	6	3	13	0	0	3	1	11	5	1	165	163	3
5	6	-1	197	191	3	7	13	-1	33	31	32	1	6	0	198	190	3	4	13	0	25	33	24	12	5	1	51	55	4
6	6	-1	122	120	2	1	14	-1	47	21	14	2	6	0	22	13	9	5	13	0	33	17	17	13	5	1	107	111	4
7	6	-1	76	82	2	2	14	-1	35	27	26	3	6	0	325	313	4	6	13	0	0	29	1	14	5	1	48	38	7
8	6	-1	109	112	6	3	14	-1	44	32	43	4	6	0	62	56	4	7	13	0	11	2	11	15	5	1	39	56	8
9	6	-1	174	184	12	4	0	0	81	88	3	5	6	0	145	140	3	0	14	0	69	68	17	1	6	1	146	139	2
10	6	-1	33	39	9	6	0	0	438	411	13	6	6	0	140	139	3	1	14	0	6	14	6	2	6	1	128	125	2
11	6	-1	249	241	7	8	0	0	277	273	12	7	6	0	119	116	3	2	14	0	77	74	12	3	6	1	280	269	3
12	6	-1	0	24	1	10																							

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

0 9 -1 240 232 8 13 2 0 26 14 13 11 8 0 0 9 1 9 2 1 0 17 1 7 8 1 101 96 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for an50

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
8	8	1	140	128	3	6	2	2	189	186	5	5	8	2	59	67	4	12	2	3	24	34	8	2	9	3	40	43	7
9	8	1	52	47	4	7	2	2	168	172	2	6	8	2	62	71	4	13	2	3	86	99	3	3	9	3	61	77	6
10	8	1	28	16	14	8	2	2	68	64	2	7	8	2	25	34	8	14	2	3	35	43	6	4	9	3	198	201	9
11	8	1	110	105	4	9	2	2	110	105	2	8	8	2	51	50	4	15	2	3	25	28	13	5	9	3	56	54	4
12	8	1	35	33	8	10	2	2	98	102	3	9	8	2	51	49	4	0	3	3	179	175	3	6	9	3	156	163	3
13	8	1	33	39	11	11	2	2	42	37	4	10	8	2	78	75	3	1	3	3	163	152	2	7	9	3	60	64	8
14	8	1	32	14	31	12	2	2	66	70	6	11	8	2	33	33	7	2	3	3	172	177	3	8	9	3	37	45	8
0	9	1	240	233	4	13	2	2	0	21	1	12	8	2	22	14	22	3	3	3	109	104	3	9	9	3	73	74	3
1	9	1	64	64	3	14	2	2	57	45	15	13	8	2	0	18	1	4	3	3	140	142	3	10	9	3	94	93	8
2	9	1	85	87	3	15	2	2	4	39	4	1	9	2	163	160	3	5	3	3	157	143	3	11	9	3	33	26	9
3	9	1	84	85	3	16	2	2	29	12	16	2	9	2	218	217	3	6	3	3	121	118	2	12	9	3	30	43	18
4	9	1	0	30	1	1	3	2	266	259	4	3	9	2	30	27	8	7	3	3	148	149	2	1	10	3	96	90	5
5	9	1	29	17	12	2	3	2	32	32	3	4	9	2	66	82	5	8	3	3	162	172	8	2	10	3	53	38	5
6	9	1	204	205	4	3	3	2	151	151	2	5	9	2	0	7	1	9	3	3	72	79	4	3	10	3	5	12	4
7	9	1	15	49	15	4	3	2	152	148	2	6	9	2	59	66	4	10	3	3	185	189	15	4	10	3	159	160	4
8	9	1	118	116	3	5	3	2	247	240	4	7	9	2	128	131	3	11	3	3	24	29	9	5	10	3	24	3	16
9	9	1	35	29	8	6	3	2	64	62	2	8	9	2	176	177	3	12	3	3	73	77	3	6	10	3	63	58	5
10	9	1	118	106	4	7	3	2	194	190	3	9	9	2	41	34	5	13	3	3	88	83	4	7	10	3	39	25	7
11	9	1	61	58	4	8	3	2	97	110	9	10	9	2	68	73	4	14	3	3	17	14	16	8	10	3	14	32	14
12	9	1	31	28	11	9	3	2	112	119	6	11	9	2	62	65	5	15	3	3	20	20	19	9	10	3	46	47	5
13	9	1	51	47	20	10	3	2	80	89	5	12	9	2	0	27	1	1	4	3	148	150	2	10	10	3	22	31	15
1	10	1	206	201	3	11	3	2	125	138	13	0	10	2	218	229	15	2	4	3	71	69	2	0	11	3	39	55	13
2	10	1	157	166	3	12	3	2	58	60	5	1	10	2	91	101	3	3	4	3	58	56	3	1	11	3	40	44	9
3	10	1	46	56	6	13	3	2	29	31	9	2	10	2	275	270	4	4	4	3	203	197	5	2	11	3	111	111	6
4	10	1	118	123	4	14	3	2	23	30	22	3	10	2	63	65	4	5	4	3	203	206	3	3	11	3	87	76	5
5	10	1	119	128	3	15	3	2	52	50	9	4	10	2	34	36	7	6	4	3	86	87	2	4	11	3	25	34	24
6	10	1	81	87	4	16	3	2	41	25	27	5	10	2	21	29	20	7	4	3	30	31	9	5	11	3	60	63	4
7	10	1	113	109	3	0	4	2	287	286	7	6	10	2	4	34	4	8	4	3	95	98	3	6	11	3	46	56	5
8	10	1	78	77	3	1	4	2	160	155	3	7	10	2	32	33	7	9	4	3	200	197	3	7	11	3	0	7	1
9	10	1	29	28	11	2	4	2	171	170	2	8	10	2	30	21	9	10	4	3	138	132	8	8	11	3	30	30	8
10	10	1	47	40	6	3	4	2	190	193	3	9	10	2	37	39	7	11	4	3	71	76	6	9	11	3	28	17	8
11	10	1	8	27	8	4	4	2	366	351	4	10	10	2	56	45	6	12	4	3	55	49	3	1	12	3	18	45	17
12	10	1	20	5	20	5	4	2	145	148	2	11	10	2	26	33	24	13	4	3	99	103	3	2	12	3	20	24	19
0	11	1	208	210	4	6	4	2	40	44	3	1	11	2	42	56	8	14	4	3	44	41	8	3	12	3	51	32	8
1	11	1	56	55	4	7	4	2	84	83	2	2	11	2	44	48	6	15	4	3	93	84	4	4	12	3	8	36	7
2	11	1	92	94	4	8	4	2	68	66	2	3	11	2	97	95	4	0	5	3	251	256	5	5	12	3	44	62	8
3	11	1	126	128	4	9	4	2	124	120	3	4	11	2	73	75	4	1	5	3	230	219	3	6	12	3	41	39	9
4	11	1	55	55	8	10	4	2	141	139	3	5	11	2	61	55	4	2	5	3	125	125	2	7	12	3	7	24	6
5	11	1	45	38	6	11	4	2	123	123	2	6	11	2	50	68	8	3	5	3	105	102	2	0	13	3	31	47	31
6	11	1	86	90	4	12	4	2	104	115	7	7	11	2	35	33	9	4	5	3	141	145	3	1	13	3	42	12	12
7	11	1	26	25	16	13	4	2	103	103	6	8	11	2	34	38	9	5	5	3	119	112	2	2	13	3	43	46	17
8	11	1	44	49	7	14	4	2	29	38	13	9	11	2	40	35	10	6	5	3	125	124	2	3	13	3	51	54	10
9	11	1	4	31	3	15	4	2	50	38	6	10	11	2	42	31	10	7	5	3	113	116	2	4	13	3	42	55	20
10	11	1	27	2	27	1	5	2	185	176	2	0	12	2	76	90	7	8	5	3	44	53	6	6	0	4	294	290	9
1	12	1	98	100	3	2	5	2	216	210	3	1	12	2	29	26	16	9	5	3	141	146	5	8	0	4	97	95	7
2	12	1	47	42	7	3	5	2	261	248	3	2	12	2	16	25	16	10	5	3	49	53	6	10	0	4	166	167	8
3	12	1	37	34	8	4	5	2	160	158	2	3	12	2	32	44	12	11	5	3	85	81	4	12	0	4	106	113	3
4	12	1	15	29	15	5	5	2	129	120	2	4	12	2	34	38	9	12	5	3	62	62	8	14	0	4	8	21	8
5	12	1	27	15	17	6	5	2	0	3	1	5	12	2	17	18	16	13	5	3	55	56	4	3	1	4	328	318	9
6	12	1	43	11	10	7	5	2	120	118	2	6	12	2	34	34	12	14	5	3	22	12	14	4	1	4	210	216	4
7	12	1	56	31	6	8	5	2	31	43	5	7	12	2	0	28	1	1	6	3	209	209	4	5	1	4	325	319	8
8	12	1	0	42	1	9	5	2	309	308	4	8	12	2	40	35	10	2	6	3	151	146	3	6	1	4	204	200	4
9	12	1	47	10	8	10	5	2	76	73	4	1	13	2	54	55	15	3	6	3	64	65	3	7	1	4	127	123	3
0	13	1	37	41	36	11	5	2	134	133	3	2	13	2	0	23	1	4	6	3	93	96	2	8	1	4	63	60	6
1	13	1	22	14	21	12	5	2	43	46	5	3	13	2	34	29	11	5	6	3	63	53	3	9	1	4	161	160	3
2	13	1	24	26	24	13	5	2	178	179	3	4	13	2	30	28	17	6	6	3	55	57	6	10	1	4	70	70	5
3	13	1	50	42	14	14	5	2	35	23	13	5	13	2	0	32	1	7	6	3	58	58	5	11	1	4	38	37	3
4	13	1	19	24	18	15	5	2	66	68	5	6	13	2	0	22	1	8	6	3	124	124	6	12	1	4	80	84	2
5	13	1	0	30	1	0	6	2	369	366	7	0	14	2	0	66	1	9	6	3	173	176	6	13	1	4	72	65	3
6	13	1	43	35	11	1	6	2	93																				

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

5 2 2 106 99 2 4 8 2 54 64 5 11 2 3 42 38 7 1 9 3 133 131 4 2 4 4 353 344 5

Table 7. Observed and calculated structure factors for an50

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	4	4	61	63	6	6	9	4	64	64	5	3	4	5	68	68	6	1	10	5	45	33	6	5	7	6	156	154	4
4	4	4	82	83	3	7	9	4	0	11	1	4	4	5	40	19	11	2	10	5	48	47	5	6	7	6	41	25	9
5	4	4	62	53	6	8	9	4	31	31	10	5	4	5	65	62	4	3	10	5	63	58	5	7	7	6	34	25	11
6	4	4	82	82	4	9	9	4	85	74	5	6	4	5	96	89	3	4	10	5	54	44	7	8	7	6	53	43	9
7	4	4	144	142	4	10	9	4	43	59	20	7	4	5	33	24	8	5	10	5	50	44	8	9	7	6	0	25	1
8	4	4	176	170	4	11	9	4	6	6	6	8	4	5	72	72	4	6	10	5	0	23	1	0	8	6	177	176	4
9	4	4	47	52	5	0	10	4	142	135	4	9	4	5	66	71	4	7	10	5	43	11	43	1	8	6	49	47	4
10	4	4	48	43	9	1	10	4	96	96	3	10	4	5	127	112	4	8	10	5	26	24	26	2	8	6	82	78	5
11	4	4	27	36	26	2	10	4	158	157	6	11	4	5	81	72	5	0	11	5	86	80	5	3	8	6	126	127	4
12	4	4	32	34	11	3	10	4	39	45	6	12	4	5	31	30	14	1	11	5	61	54	5	4	8	6	28	24	19
13	4	4	37	49	12	4	10	4	33	26	11	13	4	5	32	15	14	2	11	5	33	24	16	5	8	6	72	63	6
14	4	4	38	28	6	5	10	4	0	9	1	0	5	5	110	104	3	3	11	5	32	35	8	6	8	6	56	54	7
1	5	4	223	222	3	6	10	4	18	20	17	1	5	5	66	67	2	4	11	5	35	39	24	7	8	6	48	38	17
2	5	4	45	43	2	7	10	4	25	3	24	2	5	5	52	51	7	5	11	5	63	49	11	8	8	6	33	12	33
3	5	4	32	30	22	8	10	4	43	50	11	3	5	5	93	93	3	1	12	5	45	42	11	1	9	6	53	55	4
4	5	4	90	90	3	9	10	4	6	26	6	4	5	5	45	42	6	9	1	6	12	39	12	2	9	6	115	113	6
5	5	4	40	37	6	1	11	4	45	33	8	5	5	5	42	43	7	10	1	6	0	40	1	3	9	6	0	21	1
6	5	4	46	45	6	2	11	4	24	25	23	6	5	5	28	35	28	11	1	6	60	67	14	4	9	6	13	40	12
7	5	4	89	84	4	3	11	4	61	61	7	7	5	5	135	130	4	6	2	6	158	152	6	5	9	6	61	59	8
8	5	4	12	14	12	4	11	4	0	20	1	8	5	5	0	11	1	7	2	6	83	86	8	6	9	6	26	38	26
9	5	4	116	118	4	5	11	4	103	106	4	9	5	5	47	45	6	8	2	6	68	57	10	7	9	6	25	45	25
10	5	4	8	3	7	6	11	4	72	67	6	10	5	5	0	6	1	9	2	6	19	14	19	0	10	6	71	67	5
11	5	4	83	81	7	7	11	4	29	35	29	11	5	5	32	21	12	10	2	6	60	62	13	1	10	6	37	31	9
12	5	4	31	30	6	8	11	4	35	28	12	12	5	5	0	23	1	11	2	6	30	30	30	2	10	6	47	48	5
13	5	4	76	73	3	0	12	4	36	13	15	13	5	5	49	33	10	12	2	6	35	19	34	3	10	6	58	47	6
0	6	4	87	89	3	1	12	4	40	45	9	1	6	5	160	161	2	4	3	6	84	88	6	4	10	6	10	28	10
1	6	4	64	57	5	2	12	4	8	35	8	2	6	5	124	126	2	5	3	6	112	107	3	5	10	6	29	26	29
2	6	4	172	175	3	3	12	4	11	33	10	3	6	5	96	96	3	6	3	6	44	34	12	7	3	7	36	42	25
3	6	4	95	91	3	4	12	4	36	30	19	4	6	5	62	54	4	7	3	6	77	72	3	8	3	7	60	61	12
4	6	4	13	8	12	5	12	4	60	61	8	5	6	5	82	83	4	8	3	6	59	56	6	9	3	7	0	35	1
5	6	4	114	112	8	8	0	5	155	154	6	6	6	5	98	100	7	9	3	6	67	59	4	10	3	7	51	66	19
6	6	4	153	152	4	10	0	5	49	55	15	7	6	5	118	121	4	10	3	6	70	69	4	5	4	7	9	7	9
7	6	4	125	118	9	12	0	5	89	98	10	8	6	5	71	75	5	11	3	6	24	28	15	6	4	7	60	42	10
8	6	4	99	99	14	5	1	5	162	154	6	9	6	5	39	32	11	12	3	6	49	56	25	7	4	7	17	13	16
9	6	4	100	107	11	6	1	5	183	181	7	10	6	5	39	37	10	2	4	6	19	39	19	8	4	7	41	24	22
10	6	4	74	79	6	7	1	5	94	94	7	11	6	5	0	16	1	3	4	6	13	22	13	9	4	7	40	14	33
11	6	4	36	34	6	8	1	5	82	79	8	12	6	5	34	43	34	4	4	6	64	65	4	3	5	7	20	4	19
12	6	4	37	34	7	9	1	5	104	101	7	0	7	5	105	107	6	5	4	6	12	5	12	4	5	7	15	32	15
13	6	4	26	31	11	10	1	5	73	59	10	1	7	5	103	107	2	6	4	6	87	88	4	5	5	7	26	22	25
1	7	4	121	119	2	11	1	5	36	8	35	2	7	5	16	25	16	7	4	6	54	49	5	6	5	7	69	74	6
2	7	4	56	54	3	12	1	5	42	37	22	3	7	5	31	36	8	8	4	6	92	84	4	7	5	7	58	50	6
3	7	4	157	158	2	13	1	5	83	70	4	4	7	5	86	77	4	9	4	6	42	40	6	8	5	7	0	18	1
4	7	4	48	50	5	3	2	5	166	157	6	5	7	5	37	39	9	10	4	6	51	49	7	9	5	7	47	31	8
5	7	4	123	120	4	4	2	5	123	124	3	6	7	5	83	80	6	11	4	6	41	17	29	2	6	7	0	6	1
6	7	4	117	117	5	5	2	5	66	67	3	7	7	5	55	54	11	1	5	6	89	84	3	3	6	7	45	14	8
7	7	4	19	26	18	6	2	5	21	26	20	8	7	5	91	90	4	2	5	6	44	48	8	4	6	7	115	114	4
8	7	4	21	37	21	7	2	5	188	185	4	9	7	5	33	40	32	3	5	6	60	67	5	5	6	7	0	28	1
9	7	4	29	44	7	8	2	5	104	102	4	10	7	5	56	46	7	4	5	6	82	88	4	6	6	7	13	21	12
10	7	4	76	70	8	9	2	5	74	73	3	11	7	5	49	43	15	5	5	6	99	95	7	7	6	7	0	23	1
11	7	4	0	16	1	10	2	5	0	6	1	1	8	5	216	208	3	6	5	6	37	51	8	8	6	7	36	34	13
12	7	4	0	32	1	11	2	5	102	97	4	2	8	5	76	77	3	7	5	6	30	25	30	1	7	7	105	101	8
0	8	4	54	56	5	12	2	5	42	33	6	3	8	5	95	97	3	8	5	6	72	70	6	2	7	7	82	79	5
1	8	4	25	11	8	13	2	5	37	13	8	4	8	5	135	130	3	9	5	6	0	16	1	3	7	7	45	45	10
2	8	4	125	125	3	14	2	5	58	50	6	5	8	5	173	157	7	10	5	6	0	25	1	4	7	7	37	37	37
3	8	4	225	221	3	1	3	5	170	166	5	6	8	5	21	12	20	11	5	6	0	19	1	5	7	7	23	17	22
4	8	4	49	53	6	2	3	5	60	54	4	7	8	5	67	53	12	0	6	6	132	132	4	6	7	7	108	99	7
5	8	4	39	35	7	3	3	5	96	94	5	8	8	5	65	46	6	1	6	6	55	44	7	7	7	7	62	58	7
6	8	4	69	70	11	4	3	5	70	61	3	9	8	5	41	45	19	2	6	6	0	5	1	1	8	7	111	102	6
7	8	4	49	51	8	5	3	5	85	84	3	10	8	5	22	25	21	3	6	6	96	87	5	2	8	7	68	71	8
8	8	4	35	50	7	6	3	5	193	197	4	0	9	5	103	103	4	4	6	6	28	38	21	3	8	7	35	25	13
9	8	4	73	65	6	7	3	5	112	105	3	1	9	5															

Table 1. Crystal data and structure refinement for **12**.

Identification code	an59	
Empirical formula	C ₂₈ H ₂₀ N ₂ O ₅ S	
Formula weight	496.52	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P 2 ₁ /c	
Unit cell dimensions	a = 12.061(1) Å	α = 90°.
	b = 22.545(1) Å	β = 107.45(1)°.
	c = 9.161(1) Å	γ = 90°.
Volume	2376.4(3) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.388 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.180 mm ⁻¹	
F(000)	1032	
Crystal size	0.25 x 0.09 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	3.06 to 27.00°.	
Index ranges	-15 ≤ h ≤ 13, -28 ≤ k ≤ 27, -10 ≤ l ≤ 11	
Reflections collected	36307	
Independent reflections	5184 [R(int) = 0.0590]	
Completeness to theta = 27.00°	99.8 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9858 and 0.8976	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	3315 / 0 / 331	
Goodness-of-fit on F ²	1.037	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0524, wR2 = 0.1031	
R indices (all data)	R1 = 0.1021, wR2 = 0.1213	
Largest diff. peak and hole	0.226 and -0.332 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for an59. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	2982(2)	135(1)	9813(2)	35(1)
C(2)	3740(2)	458(1)	11001(3)	38(1)
O(2)	3585(2)	1052(1)	10974(2)	56(1)
C(3)	4635(2)	178(1)	12166(3)	37(1)
C(10)	5400(2)	543(1)	13370(3)	43(1)
O(4)	6219(1)	243(1)	14402(2)	49(1)
O(3)	5324(2)	1083(1)	13447(2)	69(1)
C(11)	7050(2)	592(1)	15554(3)	61(1)
C(4)	4761(2)	-437(1)	12144(2)	37(1)
C(4A)	4032(2)	-768(1)	10990(2)	34(1)
C(4B)	3888(2)	-1396(1)	10670(3)	37(1)
C(5)	4393(2)	-1904(1)	11447(3)	47(1)
C(6)	3985(2)	-2451(1)	10843(3)	56(1)
C(7)	3106(2)	-2494(1)	9462(3)	57(1)
C(8)	2588(2)	-2001(1)	8665(3)	50(1)
C(8A)	2977(2)	-1453(1)	9296(3)	38(1)
N(9)	2576(2)	-890(1)	8787(2)	40(1)
C(9A)	3168(2)	-476(1)	9816(2)	33(1)
N(1')	858(2)	752(1)	6370(2)	40(1)
C(2')	1860(2)	427(1)	7120(3)	39(1)
C(3')	2029(2)	431(1)	8636(2)	36(1)
C(3A')	1102(2)	779(1)	8903(2)	36(1)
C(4')	804(2)	913(1)	10224(3)	49(1)
C(5')	-144(2)	1269(1)	10104(3)	59(1)
C(6')	-801(2)	1495(1)	8694(3)	55(1)
C(7')	-537(2)	1363(1)	7370(3)	44(1)
C(7A')	407(2)	995(1)	7492(2)	35(1)
S	574(1)	953(1)	4561(1)	41(1)
O(1A)	-608(1)	1149(1)	4083(2)	52(1)
O(1B)	924(2)	468(1)	3808(2)	56(1)
C(12)	1491(2)	1558(1)	4577(3)	43(1)

C(13)	2567(3)	1450(1)	4403(4)	65(1)
C(14)	3304(3)	1921(2)	4449(4)	84(1)
C(15)	2974(3)	2486(2)	4667(4)	82(1)
C(16)	1921(3)	2584(1)	4860(5)	94(1)
C(17)	1159(3)	2118(1)	4813(4)	73(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for an59.

C(1)-C(9A)	1.395(3)
C(1)-C(2)	1.397(3)
C(1)-C(3')	1.479(3)
C(2)-O(2)	1.353(3)
C(2)-C(3)	1.417(3)
O(2)-H(2)	0.8200
C(3)-C(4)	1.396(3)
C(3)-C(10)	1.460(3)
C(10)-O(3)	1.225(3)
C(10)-O(4)	1.329(3)
O(4)-C(11)	1.451(3)
C(11)-H(11A)	0.9600
C(11)-H(11B)	0.9600
C(11)-H(11C)	0.9600
C(4)-C(4A)	1.376(3)
C(4)-H(4)	0.9300
C(4A)-C(9A)	1.415(3)
C(4A)-C(4B)	1.445(3)
C(4B)-C(5)	1.390(3)
C(4B)-C(8A)	1.407(3)
C(5)-C(6)	1.381(3)
C(5)-H(5)	0.9300
C(6)-C(7)	1.388(4)
C(6)-H(6)	0.9300
C(7)-C(8)	1.372(4)
C(7)-H(7)	0.9300
C(8)-C(8A)	1.385(3)
C(8)-H(8)	0.9300
C(8A)-N(9)	1.389(3)
N(9)-C(9A)	1.367(3)
N(9)-H(9)	0.83(2)
N(1')-C(2')	1.405(3)
N(1')-C(7A')	1.409(3)
N(1')-S	1.6515(18)

C(2')-C(3')	1.342(3)
C(2')-H(2')	0.9300
C(3')-C(3A')	1.445(3)
C(3A')-C(4')	1.395(3)
C(3A')-C(7A')	1.400(3)
C(4')-C(5')	1.375(4)
C(4')-H(4')	0.9300
C(5')-C(6')	1.393(4)
C(5')-H(5')	0.9300
C(6')-C(7')	1.376(3)
C(6')-H(6')	0.9300
C(7')-C(7A')	1.386(3)
C(7')-H(7')	0.9300
S-O(1B)	1.4219(18)
S-O(1A)	1.4309(17)
S-C(12)	1.754(2)
C(12)-C(17)	1.361(4)
C(12)-C(13)	1.376(4)
C(13)-C(14)	1.378(4)
C(13)-H(13)	0.9300
C(14)-C(15)	1.367(5)
C(14)-H(14)	0.9300
C(15)-C(16)	1.352(5)
C(15)-H(15)	0.9300
C(16)-C(17)	1.389(4)
C(16)-H(16)	0.9300
C(17)-H(17)	0.9300

C(9A)-C(1)-C(2)	116.38(19)
C(9A)-C(1)-C(3')	122.41(19)
C(2)-C(1)-C(3')	121.20(19)
O(2)-C(2)-C(1)	116.52(19)
O(2)-C(2)-C(3)	121.6(2)
C(1)-C(2)-C(3)	121.9(2)
C(2)-O(2)-H(2)	109.5
C(4)-C(3)-C(2)	119.5(2)

C(4)-C(3)-C(10)	121.5(2)
C(2)-C(3)-C(10)	119.0(2)
O(3)-C(10)-O(4)	121.2(2)
O(3)-C(10)-C(3)	124.2(2)
O(4)-C(10)-C(3)	114.6(2)
C(10)-O(4)-C(11)	116.44(19)
O(4)-C(11)-H(11A)	109.5
O(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
O(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(4A)-C(4)-C(3)	120.2(2)
C(4A)-C(4)-H(4)	119.9
C(3)-C(4)-H(4)	119.9
C(4)-C(4A)-C(9A)	119.12(19)
C(4)-C(4A)-C(4B)	134.2(2)
C(9A)-C(4A)-C(4B)	106.60(19)
C(5)-C(4B)-C(8A)	119.1(2)
C(5)-C(4B)-C(4A)	134.2(2)
C(8A)-C(4B)-C(4A)	106.58(19)
C(6)-C(5)-C(4B)	118.9(2)
C(6)-C(5)-H(5)	120.6
C(4B)-C(5)-H(5)	120.6
C(5)-C(6)-C(7)	120.6(2)
C(5)-C(6)-H(6)	119.7
C(7)-C(6)-H(6)	119.7
C(8)-C(7)-C(6)	122.0(2)
C(8)-C(7)-H(7)	119.0
C(6)-C(7)-H(7)	119.0
C(7)-C(8)-C(8A)	117.2(2)
C(7)-C(8)-H(8)	121.4
C(8A)-C(8)-H(8)	121.4
C(8)-C(8A)-N(9)	129.5(2)
C(8)-C(8A)-C(4B)	122.1(2)
N(9)-C(8A)-C(4B)	108.44(19)

C(9A)-N(9)-C(8A)	109.61(19)
C(9A)-N(9)-H(9)	127.7(17)
C(8A)-N(9)-H(9)	122.4(17)
N(9)-C(9A)-C(1)	128.5(2)
N(9)-C(9A)-C(4A)	108.65(18)
C(1)-C(9A)-C(4A)	122.86(19)
C(2')-N(1')-C(7A')	108.00(17)
C(2')-N(1')-S	121.50(15)
C(7A')-N(1')-S	128.11(15)
C(3')-C(2')-N(1')	110.09(19)
C(3')-C(2')-H(2')	125.0
N(1')-C(2')-H(2')	125.0
C(2')-C(3')-C(3A')	107.13(19)
C(2')-C(3')-C(1)	126.5(2)
C(3A')-C(3')-C(1)	126.36(19)
C(4')-C(3A')-C(7A')	119.1(2)
C(4')-C(3A')-C(3')	132.7(2)
C(7A')-C(3A')-C(3')	108.14(19)
C(5')-C(4')-C(3A')	118.8(2)
C(5')-C(4')-H(4')	120.6
C(3A')-C(4')-H(4')	120.6
C(4')-C(5')-C(6')	121.1(2)
C(4')-C(5')-H(5')	119.5
C(6')-C(5')-H(5')	119.5
C(7')-C(6')-C(5')	121.4(2)
C(7')-C(6')-H(6')	119.3
C(5')-C(6')-H(6')	119.3
C(6')-C(7')-C(7A')	117.4(2)
C(6')-C(7')-H(7')	121.3
C(7A')-C(7')-H(7')	121.3
C(7')-C(7A')-C(3A')	122.2(2)
C(7')-C(7A')-N(1')	131.3(2)
C(3A')-C(7A')-N(1')	106.50(18)
O(1B)-S-O(1A)	120.23(11)
O(1B)-S-N(1')	105.92(10)
O(1A)-S-N(1')	106.21(10)

O(1B)-S-C(12)	108.85(11)
O(1A)-S-C(12)	109.26(11)
N(1')-S-C(12)	105.31(11)
C(17)-C(12)-C(13)	121.1(3)
C(17)-C(12)-S	120.5(2)
C(13)-C(12)-S	118.4(2)
C(12)-C(13)-C(14)	118.8(3)
C(12)-C(13)-H(13)	120.6
C(14)-C(13)-H(13)	120.6
C(15)-C(14)-C(13)	120.7(3)
C(15)-C(14)-H(14)	119.6
C(13)-C(14)-H(14)	119.6
C(16)-C(15)-C(14)	119.8(3)
C(16)-C(15)-H(15)	120.1
C(14)-C(15)-H(15)	120.1
C(15)-C(16)-C(17)	120.8(3)
C(15)-C(16)-H(16)	119.6
C(17)-C(16)-H(16)	119.6
C(12)-C(17)-C(16)	118.9(3)
C(12)-C(17)-H(17)	120.6
C(16)-C(17)-H(17)	120.6

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for an59. 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}
C(1)	37(1)	35(1)	32(1)	4(1)	8(1)	3(1)
C(2)	42(1)	30(1)	43(1)	2(1)	13(1)	3(1)
O(2)	58(1)	30(1)	67(1)	-1(1)	-1(1)	4(1)
C(3)	34(1)	34(1)	41(1)	-2(1)	8(1)	0(1)
C(10)	37(1)	42(1)	47(1)	-8(1)	8(1)	-2(1)
O(4)	40(1)	48(1)	50(1)	-15(1)	-2(1)	-1(1)
O(3)	65(1)	40(1)	83(2)	-18(1)	-6(1)	-1(1)
C(11)	45(2)	71(2)	59(2)	-28(2)	1(1)	-8(1)
C(4)	32(1)	36(1)	37(1)	3(1)	4(1)	4(1)
C(4A)	34(1)	31(1)	37(1)	1(1)	10(1)	2(1)
C(4B)	35(1)	34(1)	43(1)	-1(1)	12(1)	2(1)
C(5)	44(1)	38(1)	56(2)	5(1)	9(1)	6(1)
C(6)	57(2)	34(1)	76(2)	6(1)	22(2)	10(1)
C(7)	60(2)	35(1)	77(2)	-14(1)	22(2)	-6(1)
C(8)	49(2)	42(1)	54(2)	-12(1)	11(1)	-5(1)
C(8A)	39(1)	35(1)	40(1)	-2(1)	12(1)	2(1)
N(9)	41(1)	39(1)	34(1)	-3(1)	1(1)	1(1)
C(9A)	33(1)	35(1)	29(1)	1(1)	8(1)	2(1)
N(1')	45(1)	43(1)	27(1)	5(1)	7(1)	9(1)
C(2')	45(1)	36(1)	38(1)	3(1)	13(1)	10(1)
C(3')	41(1)	31(1)	34(1)	4(1)	7(1)	1(1)
C(3A')	35(1)	40(1)	32(1)	4(1)	8(1)	-1(1)
C(4')	47(2)	65(2)	34(1)	8(1)	12(1)	5(1)
C(5')	50(2)	87(2)	44(2)	2(1)	22(1)	11(2)
C(6')	39(1)	73(2)	51(2)	-1(1)	14(1)	13(1)
C(7')	35(1)	53(2)	39(1)	5(1)	5(1)	5(1)
C(7A')	37(1)	37(1)	31(1)	1(1)	10(1)	-1(1)
S	46(1)	46(1)	27(1)	2(1)	4(1)	1(1)
O(1A)	40(1)	71(1)	36(1)	7(1)	-1(1)	0(1)
O(1B)	78(1)	52(1)	35(1)	-7(1)	16(1)	1(1)
C(12)	46(1)	46(1)	36(1)	4(1)	11(1)	2(1)

C(13)	57(2)	62(2)	78(2)	-14(2)	26(2)	-4(2)
C(14)	67(2)	89(3)	108(3)	-25(2)	43(2)	-21(2)
C(15)	82(2)	68(2)	106(3)	-5(2)	40(2)	-23(2)
C(16)	100(3)	44(2)	152(4)	-3(2)	58(3)	-3(2)
C(17)	68(2)	49(2)	114(3)	9(2)	44(2)	7(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)
 for an59.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	4098	1205	11672	84
H(11A)	7527	815	15081	92
H(11B)	7531	333	16315	92
H(11C)	6642	859	16028	92
H(4)	5340	-623	12913	44
H(5)	4995	-1877	12358	57
H(6)	4301	-2795	11366	67
H(7)	2862	-2868	9065	68
H(8)	2001	-2034	7741	59
H(2')	2337	236	6636	47
H(4')	1238	764	11169	58
H(5')	-351	1361	10977	70
H(6')	-1430	1740	8647	66
H(7')	-974	1515	6429	53
H(13)	2794	1065	4256	77
H(14)	4033	1854	4331	101
H(15)	3472	2802	4681	99
H(16)	1705	2968	5028	113
H(17)	433	2187	4941	88
H(9)	2010(20)	-835(11)	8020(30)	47(7)

Table 6. Torsion angles [°] for an59.

C(9A)-C(1)-C(2)-O(2)	178.0(2)
C(3')-C(1)-C(2)-O(2)	-2.8(3)
C(9A)-C(1)-C(2)-C(3)	-1.3(3)
C(3')-C(1)-C(2)-C(3)	177.9(2)
O(2)-C(2)-C(3)-C(4)	-180.0(2)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-0.7(3)
O(2)-C(2)-C(3)-C(10)	0.5(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(10)	179.8(2)
C(4)-C(3)-C(10)-O(3)	-179.7(2)
C(2)-C(3)-C(10)-O(3)	-0.2(4)
C(4)-C(3)-C(10)-O(4)	1.1(3)
C(2)-C(3)-C(10)-O(4)	-179.3(2)
O(3)-C(10)-O(4)-C(11)	-3.6(3)
C(3)-C(10)-O(4)-C(11)	175.6(2)
C(2)-C(3)-C(4)-C(4A)	0.9(3)
C(10)-C(3)-C(4)-C(4A)	-179.6(2)
C(3)-C(4)-C(4A)-C(9A)	1.0(3)
C(3)-C(4)-C(4A)-C(4B)	-176.4(2)
C(4)-C(4A)-C(4B)-C(5)	3.8(5)
C(9A)-C(4A)-C(4B)-C(5)	-173.8(3)
C(4)-C(4A)-C(4B)-C(8A)	179.7(2)
C(9A)-C(4A)-C(4B)-C(8A)	2.1(2)
C(8A)-C(4B)-C(5)-C(6)	0.1(3)
C(4A)-C(4B)-C(5)-C(6)	175.6(2)
C(4B)-C(5)-C(6)-C(7)	1.7(4)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	-1.8(4)
C(6)-C(7)-C(8)-C(8A)	-0.1(4)
C(7)-C(8)-C(8A)-N(9)	-176.4(2)
C(7)-C(8)-C(8A)-C(4B)	2.0(4)
C(5)-C(4B)-C(8A)-C(8)	-2.0(3)
C(4A)-C(4B)-C(8A)-C(8)	-178.6(2)
C(5)-C(4B)-C(8A)-N(9)	176.6(2)
C(4A)-C(4B)-C(8A)-N(9)	0.0(2)
C(8)-C(8A)-N(9)-C(9A)	176.3(2)

C(4B)-C(8A)-N(9)-C(9A)	-2.3(3)
C(8A)-N(9)-C(9A)-C(1)	-174.6(2)
C(8A)-N(9)-C(9A)-C(4A)	3.6(3)
C(2)-C(1)-C(9A)-N(9)	-178.8(2)
C(3')-C(1)-C(9A)-N(9)	2.0(4)
C(2)-C(1)-C(9A)-C(4A)	3.3(3)
C(3')-C(1)-C(9A)-C(4A)	-175.9(2)
C(4)-C(4A)-C(9A)-N(9)	178.49(19)
C(4B)-C(4A)-C(9A)-N(9)	-3.5(2)
C(4)-C(4A)-C(9A)-C(1)	-3.2(3)
C(4B)-C(4A)-C(9A)-C(1)	174.8(2)
C(7A')-N(1')-C(2')-C(3')	2.7(3)
S-N(1')-C(2')-C(3')	166.50(16)
N(1')-C(2')-C(3')-C(3A')	-0.5(3)
N(1')-C(2')-C(3')-C(1)	179.5(2)
C(9A)-C(1)-C(3')-C(2')	-59.1(3)
C(2)-C(1)-C(3')-C(2')	121.8(3)
C(9A)-C(1)-C(3')-C(3A')	121.0(2)
C(2)-C(1)-C(3')-C(3A')	-58.2(3)
C(2')-C(3')-C(3A')-C(4')	176.7(3)
C(1)-C(3')-C(3A')-C(4')	-3.3(4)
C(2')-C(3')-C(3A')-C(7A')	-1.9(3)
C(1)-C(3')-C(3A')-C(7A')	178.1(2)
C(7A')-C(3A')-C(4')-C(5')	-2.1(4)
C(3')-C(3A')-C(4')-C(5')	179.4(3)
C(3A')-C(4')-C(5')-C(6')	0.0(4)
C(4')-C(5')-C(6')-C(7')	1.0(4)
C(5')-C(6')-C(7')-C(7A')	0.2(4)
C(6')-C(7')-C(7A')-C(3A')	-2.4(4)
C(6')-C(7')-C(7A')-N(1')	176.0(2)
C(4')-C(3A')-C(7A')-C(7')	3.4(3)
C(3')-C(3A')-C(7A')-C(7')	-177.8(2)
C(4')-C(3A')-C(7A')-N(1')	-175.3(2)
C(3')-C(3A')-C(7A')-N(1')	3.5(2)
C(2')-N(1')-C(7A')-C(7')	177.6(2)
S-N(1')-C(7A')-C(7')	15.2(4)

C(2')-N(1')-C(7A')-C(3A')	-3.8(2)
S-N(1')-C(7A')-C(3A')	-166.17(17)
C(2')-N(1')-S-O(1B)	38.2(2)
C(7A')-N(1')-S-O(1B)	-161.57(19)
C(2')-N(1')-S-O(1A)	167.08(17)
C(7A')-N(1')-S-O(1A)	-32.6(2)
C(2')-N(1')-S-C(12)	-77.1(2)
C(7A')-N(1')-S-C(12)	83.2(2)
O(1B)-S-C(12)-C(17)	160.8(2)
O(1A)-S-C(12)-C(17)	27.7(3)
N(1')-S-C(12)-C(17)	-86.0(2)
O(1B)-S-C(12)-C(13)	-21.6(2)
O(1A)-S-C(12)-C(13)	-154.7(2)
N(1')-S-C(12)-C(13)	91.6(2)
C(17)-C(12)-C(13)-C(14)	-1.0(4)
S-C(12)-C(13)-C(14)	-178.5(2)
C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	0.1(5)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	1.0(6)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-1.2(6)
C(13)-C(12)-C(17)-C(16)	0.7(5)
S-C(12)-C(17)-C(16)	178.2(3)
C(15)-C(16)-C(17)-C(12)	0.4(6)

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	440	445	2	11	6	0	93	82	6	7	13	0	432	425	2	4	21	0	33	13	13	-7	2	1	40	36	6
3	0	0	932	970	4	12	6	0	39	1	27	8	13	0	60	73	7	5	21	0	52	41	13	-6	2	1	64	62	3
4	0	0	234	225	2	13	6	0	56	68	38	9	13	0	44	31	12	6	21	0	19	48	18	-5	2	1	242	253	1
5	0	0	815	799	5	14	6	0	42	46	42	10	13	0	80	73	8	7	21	0	47	6	19	-4	2	1	625	636	2
6	0	0	602	601	3	1	7	0	43	35	4	11	13	0	11	15	11	8	21	0	83	73	8	-3	2	1	215	234	1
7	0	0	442	443	3	2	7	0	110	100	2	12	13	0	133	117	7	9	21	0	63	80	21	-2	2	1	56	52	2
8	0	0	416	403	3	3	7	0	207	232	1	13	13	0	92	84	14	10	21	0	0	17	1	-1	2	1	200	229	2
9	0	0	415	406	3	4	7	0	453	457	2	0	14	0	465	462	2	0	22	0	113	116	5	1	2	1	1247	1307	5
10	0	0	24	22	24	5	7	0	124	129	2	1	14	0	278	262	1	1	22	0	159	154	3	2	2	1	639	656	2
11	0	0	47	56	14	6	7	0	100	112	3	2	14	0	150	152	2	2	22	0	64	58	7	3	2	1	58	63	2
12	0	0	188	194	5	7	7	0	84	79	4	3	14	0	65	62	4	3	22	0	41	20	12	4	2	1	129	158	1
13	0	0	161	164	11	8	7	0	0	12	1	4	14	0	48	57	6	4	22	0	67	70	11	5	2	1	516	517	2
14	0	0	45	96	45	9	7	0	63	64	5	5	14	0	159	160	2	5	22	0	0	37	1	6	2	1	31	22	7
2	1	0	1240	1275	4	10	7	0	11	43	11	6	14	0	242	242	2	6	22	0	34	40	26	7	2	1	64	51	4
3	1	0	40	5	3	11	7	0	81	79	8	7	14	0	275	282	2	7	22	0	123	124	6	8	2	1	159	165	2
4	1	0	247	268	1	12	7	0	0	27	1	8	14	0	168	171	3	8	22	0	78	77	9	9	2	1	53	42	6
5	1	0	606	596	2	13	7	0	82	88	12	9	14	0	36	44	19	9	22	0	0	38	1	10	2	1	185	194	3
6	1	0	187	193	2	14	7	0	59	4	27	10	14	0	118	119	5	1	23	0	32	43	15	11	2	1	180	177	3
7	1	0	0	19	1	0	8	0	87	92	2	11	14	0	26	4	25	2	23	0	49	49	8	12	2	1	119	103	7
8	1	0	183	173	2	1	8	0	72	86	2	12	14	0	83	68	13	3	23	0	70	70	8	13	2	1	38	7	38
9	1	0	43	37	7	2	8	0	155	164	1	1	15	0	35	35	7	4	23	0	146	127	6	14	2	1	3	46	3
10	1	0	23	40	22	3	8	0	610	612	2	2	15	0	184	182	2	5	23	0	89	89	9	-14	3	1	42	16	42
11	1	0	60	67	7	4	8	0	182	184	2	3	15	0	290	287	1	6	23	0	175	182	5	-13	3	1	33	14	32
12	1	0	69	80	7	5	8	0	201	196	1	4	15	0	141	132	2	7	23	0	0	28	1	-12	3	1	4	37	4
13	1	0	46	55	46	6	8	0	129	129	2	5	15	0	331	322	3	8	23	0	76	68	10	-11	3	1	88	86	4
14	1	0	0	41	1	7	8	0	45	23	7	6	15	0	408	410	2	0	24	0	21	19	21	-10	3	1	146	154	3
2	2	0	699	717	2	8	8	0	29	38	18	7	15	0	280	273	3	1	24	0	98	102	5	-9	3	1	176	165	2
3	2	0	105	111	1	9	8	0	251	251	3	8	15	0	84	80	6	2	24	0	99	109	5	-8	3	1	204	209	2
4	2	0	34	14	4	10	8	0	0	39	1	9	15	0	30	66	30	3	24	0	91	79	6	-7	3	1	50	50	4
5	2	0	174	169	1	11	8	0	96	85	5	10	15	0	65	50	11	4	24	0	27	38	27	-6	3	1	104	94	2
6	2	0	103	107	2	12	8	0	60	79	18	11	15	0	0	19	1	5	24	0	53	22	18	-5	3	1	150	148	2
7	2	0	464	445	2	13	8	0	59	63	18	12	15	0	88	103	11	6	24	0	43	2	24	-4	3	1	173	161	1
8	2	0	57	50	5	14	8	0	22	34	22	0	16	0	250	241	3	7	24	0	20	9	20	-3	3	1	399	414	1
9	2	0	109	105	3	1	9	0	11	17	10	1	16	0	368	366	2	8	24	0	21	25	20	-2	3	1	446	455	1
10	2	0	37	35	12	2	9	0	180	194	1	2	16	0	93	95	3	1	25	0	21	30	20	-1	3	1	158	163	1
11	2	0	125	127	4	3	9	0	1256	1252	4	3	16	0	8	39	8	2	25	0	82	72	11	0	3	1	0	15	1
12	2	0	158	154	4	4	9	0	1078	1050	3	4	16	0	74	65	4	3	25	0	122	116	7	1	3	1	537	546	1
13	2	0	85	86	13	5	9	0	50	50	5	5	16	0	28	23	19	4	25	0	0	4	1	2	3	1	95	100	1
14	2	0	60	52	20	6	9	0	396	389	2	6	16	0	105	102	4	5	25	0	56	86	24	3	3	1	42	20	4
1	3	0	170	168	1	7	9	0	66	61	5	7	16	0	225	222	3	6	25	0	31	38	31	4	3	1	62	69	2
2	3	0	986	1014	3	8	9	0	64	69	7	8	16	0	55	40	13	7	25	0	30	18	29	5	3	1	504	480	2
3	3	0	808	838	2	9	9	0	100	92	4	9	16	0	168	156	5	0	26	0	83	80	17	6	3	1	442	424	2
4	3	0	462	490	1	10	9	0	61	41	8	10	16	0	137	142	5	1	26	0	36	29	36	7	3	1	19	29	18
5	3	0	26	29	9	11	9	0	38	49	25	11	16	0	31	9	30	2	26	0	60	49	14	8	3	1	112	113	2
6	3	0	483	487	2	12	9	0	175	171	5	12	16	0	41	12	41	3	26	0	162	150	6	9	3	1	106	113	3
7	3	0	198	188	2	13	9	0	27	38	27	1	17	0	286	288	2	4	26	0	37	51	36	10	3	1	59	70	7
8	3	0	126	117	2	0	10	0	220	207	2	2	17	0	24	5	15	5	26	0	45	47	26	11	3	1	217	216	3
9	3	0	122	123	3	1	10	0	295	301	1	3	17	0	299	305	2	6	26	0	43	13	43	12	3	1	43	27	25
10	3	0	22	35	22	2	10	0	606	601	2	4	17	0	50	43	6	1	27	0	82	60	13	13	3	1	79	78	12
11	3	0	155	146	3	3	10	0	203	213	2	5	17	0	73	63	5	2	27	0	27	15	27	14	3	1	33	9	32
12	3	0	96	92	7	4	10	0	189	188	2	6	17	0	484	496	3	3	27	0	0	2	1	-14	4	1	44	62	44
13	3	0	107	102	13	5	10	0	89	76	3	7	17	0	129	119	4	4	27	0	48	44	48	-13	4	1	136	148	7
14	3	0	42	18	41	6	10	0	263	257	2	8	17	0	205	205	3	5	27	0	104	103	10	-12	4	1	129	127	5
0	4	0	868	909	5	7	10	0	180	187	2	9	17	0	26	11	25	0	28	0	19	35	19	-11	4	1	64	65	10
1	4	0	1510	1597	7	8	10	0	44	12	9	10	17	0	9	4	8	1	28	0	28	33	28	-10	4	1	170	162	2
2	4	0	1271	1295	4	9	10	0	10	31	9	11	17	0	57	45	18	2	28	0	49	19	26	-9	4	1	127	129	2
3	4	0	505	514	2	10	10	0	377	369	3	0	18	0	324	327	3	3	28	0	0	27	1	-8	4	1	61	60	4
4	4	0	166	169	1	11	10	0	27	45	27	1	18	0	29	12	13	-15	1	1	68	11	67	-7	4	1	40	44	5
5	4	0	156	149	2	12	10	0	56	28	15	2	18	0	139	143	2	-14	1										

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	5	1	55	63	2	8	8	1	222	231	2	-9	12	1	40	58	11	7	15	1	48	55	10	5	19	1	169	176	3
1	5	1	285	313	1	9	8	1	118	116	3	-8	12	1	0	7	1	8	15	1	133	134	4	6	19	1	91	97	5
2	5	1	144	151	1	10	8	1	59	16	7	-7	12	1	54	50	6	9	15	1	103	99	5	7	19	1	38	24	17
3	5	1	501	496	2	11	8	1	16	12	16	-6	12	1	56	57	7	10	15	1	88	86	16	8	19	1	65	72	11
4	5	1	725	731	2	12	8	1	81	75	11	-5	12	1	174	160	2	11	15	1	103	82	8	9	19	1	32	25	32
5	5	1	689	655	2	13	8	1	36	53	35	-4	12	1	130	129	2	12	15	1	56	42	41	10	19	1	0	20	1
6	5	1	178	168	2	-14	9	1	0	17	1	-3	12	1	151	147	1	-12	16	1	0	10	1	-10	20	1	37	38	37
7	5	1	267	271	1	-13	9	1	60	28	15	-2	12	1	458	443	1	-11	16	1	19	3	19	-9	20	1	50	28	17
8	5	1	333	336	2	-12	9	1	90	106	9	-1	12	1	425	385	1	-10	16	1	85	90	7	-8	20	1	110	108	7
9	5	1	296	292	2	-11	9	1	136	143	5	0	12	1	488	470	2	-9	16	1	54	53	10	-7	20	1	83	94	7
10	5	1	182	185	3	-10	9	1	67	69	7	1	12	1	251	238	1	-8	16	1	0	4	1	-6	20	1	52	57	10
11	5	1	145	129	5	-9	9	1	37	2	13	2	12	1	158	145	1	-7	16	1	24	16	24	-5	20	1	104	100	4
12	5	1	84	95	17	-8	9	1	89	94	4	3	12	1	239	227	2	-6	16	1	258	254	2	-4	20	1	146	150	3
13	5	1	39	10	39	-7	9	1	263	267	2	4	12	1	31	43	9	-5	16	1	184	179	2	-3	20	1	229	234	2
14	5	1	54	38	34	-6	9	1	160	177	2	5	12	1	275	276	2	-4	16	1	160	156	2	-2	20	1	366	378	2
-14	6	1	100	117	11	-5	9	1	156	158	2	6	12	1	134	131	2	-3	16	1	110	116	2	-1	20	1	285	291	2
-13	6	1	135	137	7	-4	9	1	151	144	2	7	12	1	348	346	2	-2	16	1	383	374	1	0	20	1	210	216	2
-12	6	1	20	1	19	-3	9	1	243	218	1	8	12	1	19	5	18	-1	16	1	167	166	2	1	20	1	48	59	8
-11	6	1	150	151	3	-2	9	1	472	456	1	9	12	1	86	91	5	0	16	1	130	128	2	2	20	1	50	49	6
-10	6	1	50	61	8	-1	9	1	155	166	1	10	12	1	91	93	6	1	16	1	263	259	2	3	20	1	76	81	4
-9	6	1	64	68	5	0	9	1	78	79	2	11	12	1	129	133	6	2	16	1	132	134	2	4	20	1	148	145	2
-8	6	1	155	161	2	1	9	1	82	93	2	12	12	1	49	37	30	3	16	1	146	146	2	5	20	1	188	186	3
-7	6	1	54	43	4	2	9	1	340	334	1	-13	13	1	55	8	44	4	16	1	379	378	2	6	20	1	44	26	11
-6	6	1	460	444	2	3	9	1	111	117	1	-12	13	1	0	51	1	5	16	1	10	13	10	7	20	1	33	17	33
-5	6	1	96	101	2	4	9	1	162	149	1	-11	13	1	45	20	30	6	16	1	32	23	15	8	20	1	22	7	22
-4	6	1	125	132	2	5	9	1	193	205	1	-10	13	1	121	100	5	7	16	1	154	165	3	9	20	1	0	1	1
-3	6	1	738	731	2	6	9	1	30	29	7	-9	13	1	107	105	4	8	16	1	30	10	30	10	20	1	18	48	17
-2	6	1	451	455	1	7	9	1	160	158	2	-8	13	1	41	35	10	9	16	1	56	69	10	-10	21	1	0	42	1
-1	6	1	20	27	8	8	9	1	217	223	2	-7	13	1	78	73	4	10	16	1	68	78	14	-9	21	1	33	15	32
0	6	1	259	263	1	9	9	1	155	161	3	-6	13	1	0	0	1	11	16	1	43	15	43	-8	21	1	0	19	1
1	6	1	463	467	2	10	9	1	31	19	17	-5	13	1	0	23	1	-12	17	1	59	38	22	-7	21	1	0	56	1
2	6	1	95	93	1	11	9	1	127	128	7	-4	13	1	229	225	2	-11	17	1	0	39	1	-6	21	1	48	45	12
3	6	1	67	69	3	12	9	1	0	5	1	-3	13	1	69	74	4	-10	17	1	32	32	31	-5	21	1	49	67	10
4	6	1	391	366	1	13	9	1	21	24	20	-2	13	1	204	201	1	-9	17	1	50	35	13	-4	21	1	17	5	17
5	6	1	30	16	7	-14	10	1	0	14	1	-1	13	1	69	74	2	-8	17	1	70	66	8	-3	21	1	208	218	2
6	6	1	59	57	3	-13	10	1	130	112	7	0	13	1	175	170	1	-7	17	1	173	161	3	-2	21	1	138	142	3
7	6	1	56	41	4	-12	10	1	70	43	13	1	13	1	18	13	18	-6	17	1	69	60	5	-1	21	1	147	153	3
8	6	1	339	346	2	-11	10	1	158	143	5	2	13	1	37	35	7	-5	17	1	38	38	10	0	21	1	134	140	3
9	6	1	34	50	12	-10	10	1	161	164	3	3	13	1	92	73	2	-4	17	1	83	82	4	1	21	1	181	187	2
10	6	1	175	174	4	-9	10	1	67	70	19	4	13	1	89	89	2	-3	17	1	144	154	3	2	21	1	146	142	3
11	6	1	129	130	5	-8	10	1	19	13	17	5	13	1	164	178	2	-2	17	1	32	7	10	3	21	1	189	193	2
12	6	1	75	46	12	-7	10	1	47	52	7	6	13	1	314	316	2	-1	17	1	189	187	2	4	21	1	194	197	2
13	6	1	0	42	1	-6	10	1	345	343	2	7	13	1	113	108	3	0	17	1	33	44	8	5	21	1	21	38	21
-14	7	1	0	26	1	-5	10	1	231	223	2	8	13	1	136	145	3	1	17	1	28	38	11	6	21	1	41	8	24
-13	7	1	104	112	9	-4	10	1	145	161	2	9	13	1	57	44	9	2	17	1	107	101	2	7	21	1	78	76	14
-12	7	1	62	57	8	-3	10	1	192	200	1	10	13	1	125	116	5	3	17	1	183	179	2	8	21	1	105	100	8
-11	7	1	30	36	29	-2	10	1	610	580	2	11	13	1	0	5	1	4	17	1	93	101	3	9	21	1	0	9	1
-10	7	1	49	46	12	-1	10	1	510	488	2	12	13	1	49	30	29	5	17	1	220	221	2	-9	22	1	28	6	27
-9	7	1	71	73	4	0	10	1	344	328	1	-13	14	1	54	83	53	6	17	1	47	54	9	-8	22	1	13	38	12
-8	7	1	397	374	2	1	10	1	116	114	2	-12	14	1	126	124	6	7	17	1	27	56	27	-7	22	1	62	45	12
-7	7	1	38	29	9	2	10	1	82	81	2	-11	14	1	115	85	7	8	17	1	76	55	6	-6	22	1	7	45	7
-6	7	1	64	64	4	3	10	1	209	211	1	-10	14	1	123	123	5	9	17	1	9	30	9	-5	22	1	32	5	32
-5	7	1	94	97	2	4	10	1	202	197	1	-9	14	1	0	15	1	10	17	1	86	82	10	-4	22	1	75	74	6
-4	7	1	66	58	3	5	10	1	39	36	7	-8	14	1	24	60	24	11	17	1	44	62	43	-3	22	1	0	26	1
-3	7	1	486	474	1	6	10	1	145	145	2	-7	14	1	40	31	10	-11	18	1	56	33	21	-2	22	1	38	52	11
-2	7	1	849	852	2	7	10	1	56	53	9	-6	14	1	230	224	2	-10	18	1	50	54	22	-1	22	1	30	37	16
-1	7	1	617	633	2	8	10	1	42	32	11	-5	14	1	291	286	2	-9	18	1	35	38	28	0	22	1	135	145	3
0	7	1	202	219	1	9	10	1	76	78	7	-4	14	1	184	180	2	-8	18	1	126	126	4	1	22	1	49	70	9
1	7	1	16	10	16	10	10	1	86	88	7	-3	14	1															

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

7 8 1 131 139 2 -10 12 1 72 69 8 6 15 1 173 182 4 4 19 1 200 195 2 0 24 1 0 40 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	24	1	31	26	31	2	1	2	228	234	1	8	4	2	173	176	2	-12	8	2	0	22	1	-1	11	2	188	180	1
2	24	1	36	52	36	3	1	2	552	548	2	9	4	2	61	70	6	-11	8	2	86	87	5	0	11	2	46	51	3
3	24	1	67	79	35	4	1	2	312	308	1	10	4	2	97	95	4	-10	8	2	88	91	5	1	11	2	30	2	7
4	24	1	156	139	6	5	1	2	21	23	20	11	4	2	0	52	1	-9	8	2	41	37	8	2	11	2	357	346	1
5	24	1	23	64	22	6	1	2	148	155	2	12	4	2	33	55	32	-8	8	2	69	73	4	3	11	2	124	114	2
6	24	1	153	142	6	7	1	2	130	133	2	13	4	2	0	18	1	-7	8	2	113	118	2	4	11	2	105	104	2
7	24	1	46	21	36	8	1	2	43	33	8	-15	5	2	74	61	73	-6	8	2	216	208	2	5	11	2	160	157	2
-7	25	1	0	29	1	9	1	2	105	107	3	-14	5	2	0	14	1	-5	8	2	122	115	2	6	11	2	152	152	2
-6	25	1	97	81	9	10	1	2	54	47	8	-13	5	2	75	75	12	-4	8	2	335	328	1	7	11	2	51	54	11
-5	25	1	0	44	1	11	1	2	81	63	9	-12	5	2	62	68	7	-3	8	2	140	139	1	8	11	2	167	182	4
-4	25	1	0	23	1	12	1	2	0	0	1	-11	5	2	63	72	7	-2	8	2	56	49	2	9	11	2	108	116	4
-3	25	1	0	27	1	13	1	2	71	88	16	-10	5	2	95	104	3	-1	8	2	192	191	1	10	11	2	45	21	16
-2	25	1	42	51	32	-15	2	2	44	63	44	-9	5	2	122	117	3	0	8	2	504	488	1	11	11	2	21	38	21
-1	25	1	63	50	13	-14	2	2	115	106	8	-8	5	2	37	45	6	1	8	2	338	321	1	12	11	2	54	7	18
0	25	1	128	129	6	-13	2	2	62	71	9	-7	5	2	26	18	9	2	8	2	236	221	1	-13	12	2	64	66	22
1	25	1	88	87	10	-12	2	2	0	32	1	-6	5	2	16	19	15	3	8	2	42	50	3	-12	12	2	0	6	1
2	25	1	113	103	7	-11	2	2	9	23	8	-5	5	2	286	289	1	4	8	2	56	51	4	-11	12	2	0	10	1
3	25	1	64	36	13	-10	2	2	153	155	2	-4	5	2	83	90	2	5	8	2	160	154	1	-10	12	2	55	47	9
4	25	1	35	42	34	-9	2	2	67	63	5	-3	5	2	68	70	1	6	8	2	104	94	2	-9	12	2	338	341	2
5	25	1	21	51	21	-8	2	2	16	34	16	-2	5	2	386	408	1	7	8	2	160	155	2	-8	12	2	241	242	2
6	25	1	65	47	18	-7	2	2	23	21	12	-1	5	2	451	466	1	8	8	2	86	80	4	-7	12	2	236	235	2
-6	26	1	58	59	14	-6	2	2	303	296	1	0	5	2	25	13	10	9	8	2	107	99	4	-6	12	2	33	19	9
-5	26	1	0	26	1	-5	2	2	199	198	1	1	5	2	192	182	1	10	8	2	82	101	11	-5	12	2	81	81	3
-4	26	1	49	29	21	-4	2	2	226	231	1	2	5	2	115	107	1	11	8	2	58	38	15	-4	12	2	91	86	2
-3	26	1	86	69	12	-3	2	2	754	750	2	3	5	2	223	214	1	12	8	2	0	13	1	-3	12	2	204	195	1
-2	26	1	0	14	1	-2	2	2	610	605	2	4	5	2	101	100	2	13	8	2	26	14	25	-2	12	2	104	108	2
-1	26	1	64	59	15	-1	2	2	452	464	1	5	5	2	36	18	5	-14	9	2	29	17	28	-1	12	2	62	51	2
0	26	1	28	1	28	0	2	2	519	539	1	6	5	2	37	31	7	-13	9	2	66	41	18	0	12	2	390	389	1
1	26	1	57	50	17	1	2	2	97	100	2	7	5	2	37	44	8	-12	9	2	128	125	6	1	12	2	61	69	2
2	26	1	54	44	20	2	2	2	524	533	2	8	5	2	71	72	4	-11	9	2	123	127	4	2	12	2	133	127	2
3	26	1	23	13	22	3	2	2	602	593	2	9	5	2	28	42	18	-10	9	2	27	54	26	3	12	2	135	130	2
4	26	1	43	20	42	4	2	2	136	127	2	10	5	2	144	137	3	-9	9	2	34	52	23	4	12	2	101	100	2
5	26	1	0	17	1	5	2	2	99	98	2	11	5	2	106	103	6	-8	9	2	341	339	2	5	12	2	35	17	7
-5	27	1	0	1	1	6	2	2	204	198	2	12	5	2	110	90	10	-7	9	2	199	188	2	6	12	2	38	46	7
-4	27	1	0	64	1	7	2	2	128	122	2	13	5	2	14	44	13	-6	9	2	416	418	2	7	12	2	6	33	5
-3	27	1	0	9	1	8	2	2	25	27	19	-14	6	2	0	14	1	-5	9	2	90	81	3	8	12	2	152	142	3
-2	27	1	35	2	35	9	2	2	275	273	2	-13	6	2	64	66	16	-4	9	2	135	148	1	9	12	2	18	16	17
-1	27	1	0	7	1	10	2	2	132	134	4	-12	6	2	55	26	8	-3	9	2	490	483	1	10	12	2	106	85	8
0	27	1	0	39	1	11	2	2	88	82	9	-11	6	2	31	28	18	-2	9	2	179	190	1	11	12	2	78	25	12
1	27	1	47	16	24	12	2	2	0	29	1	-10	6	2	47	42	7	-1	9	2	151	160	1	12	12	2	36	32	35
2	27	1	127	128	7	13	2	2	39	12	39	-9	6	2	78	75	4	0	9	2	302	299	1	-13	13	2	28	47	27
3	27	1	100	86	12	-15	3	2	37	91	37	-8	6	2	300	299	1	1	9	2	362	346	1	-12	13	2	105	95	9
4	27	1	57	41	37	-14	3	2	125	106	13	-7	6	2	259	253	1	2	9	2	459	438	1	-11	13	2	119	112	5
-3	28	1	40	32	40	-13	3	2	67	62	9	-6	6	2	182	186	1	3	9	2	393	387	1	-10	13	2	36	23	17
-2	28	1	0	17	1	-12	3	2	199	199	4	-5	6	2	319	328	1	4	9	2	114	113	2	-9	13	2	390	398	3
-1	28	1	23	26	23	-11	3	2	279	274	2	-4	6	2	202	204	1	5	9	2	0	18	1	-8	13	2	0	17	1
0	28	1	42	52	41	-10	3	2	202	195	2	-3	6	2	334	341	1	6	9	2	37	39	7	-7	13	2	131	131	3
1	28	1	49	17	37	-9	3	2	0	6	1	-2	6	2	99	105	1	7	9	2	109	107	3	-6	13	2	62	65	5
2	28	1	79	49	33	-8	3	2	313	304	1	-1	6	2	249	253	1	8	9	2	151	149	3	-5	13	2	77	71	3
-14	0	2	149	161	10	-7	3	2	218	199	1	0	6	2	551	572	2	9	9	2	147	140	2	-4	13	2	297	287	1
-13	0	2	141	150	6	-6	3	2	178	160	1	1	6	2	308	333	2	10	9	2	0	28	1	-3	13	2	51	62	5
-12	0	2	94	69	6	-5	3	2	174	170	1	2	6	2	494	483	1	11	9	2	90	104	12	-2	13	2	163	182	1
-11	0	2	89	98	7	-4	3	2	391	397	1	3	6	2	81	58	2	12	9	2	29	45	28	-1	13	2	247	242	1
-10	0	2	92	93	5	-3	3	2	37	55	4	4	6	2	217	222	1	-14	10	2	100	86	14	0	13	2	62	73	3
-9	0	2	93	110	4	-2	3	2	927	956	2	5	6	2	30	30	7	-13	10	2	113	107	9	1	13	2	128	120	1
-8	0	2	306	307	2	-1	3	2	46	31	3	6	6	2	189	193	2	-12	10	2	68	58	9	2	13	2	19	3	18
-7	0	2	115	106	5	0	3	2	329	324	1	7	6	2	177	186	2	-11	10	2	75	72	12	3	13	2	216	214	1
-6	0	2	365	351	2	1	3	2	724	735	2	8	6	2	225	225	2	-10	10	2	0	11	1	4	13	2	263	262	1
-5	0	2	432	441	3	2	3	2	502	501	2	9	6	2	87	74	5	-9	10	2	188	177	3	5	13	2	0		

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

1 1 2 514 538 3 7 4 2 171 178 2 -13 8 2 79 65 8 -2 11 2 10 15 9 -12 15 2 0 23 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-11	15	2	133	121	5	-10	19	2	69	56	12	6	23	2	89	94	17	-8	2	3	89	98	3	1	5	3	413	422	1
-10	15	2	133	137	4	-9	19	2	76	84	11	7	23	2	57	46	37	-7	2	3	64	49	4	2	5	3	792	740	3
-9	15	2	230	218	3	-8	19	2	125	130	5	-8	24	2	95	73	9	-6	2	3	97	95	2	3	5	3	507	497	2
-8	15	2	234	241	3	-7	19	2	70	66	7	-7	24	2	10	22	9	-5	2	3	288	286	1	4	5	3	110	107	2
-7	15	2	0	24	1	-6	19	2	35	12	18	-6	24	2	0	23	1	-4	2	3	392	397	1	5	5	3	59	59	4
-6	15	2	112	106	3	-5	19	2	251	250	2	-5	24	2	58	55	12	-3	2	3	873	883	2	6	5	3	234	239	2
-5	15	2	137	137	2	-4	19	2	16	4	15	-4	24	2	2	27	1	-2	2	3	69	71	2	7	5	3	48	49	6
-4	15	2	14	25	13	-3	19	2	121	112	3	-3	24	2	44	22	17	-1	2	3	687	697	2	8	5	3	16	9	15
-3	15	2	204	210	2	-2	19	2	317	318	2	-2	24	2	64	65	11	0	2	3	1361	1386	4	9	5	3	87	76	5
-2	15	2	186	184	2	-1	19	2	76	78	4	-1	24	2	65	59	8	1	2	3	511	494	2	10	5	3	98	97	5
-1	15	2	155	146	2	0	19	2	62	66	5	0	24	2	0	12	1	2	2	3	297	300	2	11	5	3	59	69	12
0	15	2	132	134	2	1	19	2	52	67	5	1	24	2	94	88	9	3	2	3	233	215	1	12	5	3	99	87	10
1	15	2	132	121	2	2	19	2	33	27	11	2	24	2	74	60	10	4	2	3	233	206	2	-15	6	3	84	31	33
2	15	2	411	416	2	3	19	2	229	233	2	3	24	2	40	37	40	5	2	3	195	205	2	-14	6	3	78	73	14
3	15	2	251	254	1	4	19	2	144	141	2	4	24	2	0	14	1	6	2	3	101	109	3	-13	6	3	42	57	16
4	15	2	524	523	2	5	19	2	155	141	3	5	24	2	57	11	26	7	2	3	553	556	2	-12	6	3	53	61	7
5	15	2	116	127	2	6	19	2	116	118	4	6	24	2	20	37	19	8	2	3	169	179	3	-11	6	3	133	141	2
6	15	2	0	24	1	7	19	2	85	97	8	-7	25	2	52	55	19	9	2	3	388	384	2	-10	6	3	310	314	2
7	15	2	32	50	18	8	19	2	62	13	12	-6	25	2	9	28	9	10	2	3	343	350	3	-9	6	3	38	44	7
8	15	2	15	6	15	9	19	2	89	62	9	-5	25	2	29	48	28	11	2	3	84	99	8	-8	6	3	140	136	2
9	15	2	42	47	19	-11	20	2	14	7	13	-4	25	2	33	54	32	12	2	3	33	30	32	-7	6	3	84	86	3
10	15	2	48	37	18	-10	20	2	52	17	51	-3	25	2	79	75	10	-15	3	3	0	22	1	-6	6	3	26	25	9
11	15	2	21	5	21	-9	20	2	43	52	18	-2	25	2	99	88	8	-14	3	3	0	5	1	-5	6	3	183	185	1
-12	16	2	31	19	31	-8	20	2	193	185	4	-1	25	2	91	82	8	-13	3	3	53	50	15	-4	6	3	481	475	1
-11	16	2	51	52	21	-7	20	2	35	1	21	0	25	2	45	31	21	-12	3	3	128	136	5	-3	6	3	407	408	1
-10	16	2	137	138	4	-6	20	2	0	21	1	1	25	2	65	64	13	-11	3	3	46	46	8	-2	6	3	137	132	1
-9	16	2	78	80	7	-5	20	2	244	254	2	2	25	2	38	46	37	-10	3	3	53	57	5	-1	6	3	763	761	2
-8	16	2	59	62	11	-4	20	2	193	195	2	3	25	2	40	50	39	-9	3	3	112	109	2	0	6	3	323	311	2
-7	16	2	122	116	3	-3	20	2	183	185	2	4	25	2	107	88	11	-8	3	3	46	43	4	1	6	3	202	192	2
-6	16	2	203	201	2	-2	20	2	192	196	2	5	25	2	74	78	18	-7	3	3	171	153	2	2	6	3	77	78	2
-5	16	2	305	298	2	-1	20	2	117	113	3	6	25	2	0	8	1	-6	3	3	163	174	2	3	6	3	0	17	1
-4	16	2	45	69	6	0	20	2	175	175	2	-6	26	2	60	33	14	-5	3	3	241	229	1	4	6	3	288	263	1
-3	16	2	174	181	2	1	20	2	185	189	2	-5	26	2	119	103	7	-4	3	3	122	124	1	5	6	3	325	325	2
-2	16	2	59	53	4	2	20	2	29	25	15	-4	26	2	79	88	12	-3	3	3	267	277	1	6	6	3	151	147	2
-1	16	2	113	109	3	3	20	2	20	30	20	-3	26	2	15	12	15	-2	3	3	25	17	5	7	6	3	22	16	21
0	16	2	101	98	2	4	20	2	97	114	4	-2	26	2	39	30	39	-1	3	3	84	90	1	8	6	3	354	354	2
1	16	2	219	221	2	5	20	2	37	40	10	-1	26	2	43	4	25	0	3	3	461	471	2	9	6	3	131	126	3
2	16	2	298	300	1	6	20	2	35	18	35	0	26	2	132	116	7	1	3	3	502	494	2	10	6	3	23	37	22
3	16	2	36	48	7	7	20	2	0	24	1	1	26	2	73	38	16	2	3	3	619	603	2	11	6	3	75	72	8
4	16	2	145	150	2	8	20	2	0	14	1	2	26	2	0	16	1	3	3	3	276	253	1	12	6	3	58	36	32
5	16	2	153	162	3	9	20	2	128	109	12	3	26	2	111	89	11	4	3	3	312	301	2	-14	7	3	29	21	28
6	16	2	128	128	3	-10	21	2	0	42	1	4	26	2	34	61	33	5	3	3	371	359	2	-13	7	3	33	28	33
7	16	2	112	113	4	-9	21	2	49	39	16	5	26	2	38	42	37	6	3	3	106	108	3	-12	7	3	22	17	22
8	16	2	31	38	31	-8	21	2	49	3	15	-5	27	2	91	62	11	7	3	3	57	57	6	-11	7	3	164	163	2
9	16	2	43	58	42	-7	21	2	0	11	1	-4	27	2	0	15	1	8	3	3	210	208	2	-10	7	3	37	27	14
10	16	2	114	114	8	-6	21	2	32	40	23	-3	27	2	0	18	1	9	3	3	114	120	4	-9	7	3	82	87	3
11	16	2	95	61	10	-5	21	2	96	105	5	-2	27	2	86	70	11	10	3	3	83	89	6	-8	7	3	38	33	7
-12	17	2	72	66	15	-4	21	2	21	14	20	-1	27	2	0	38	1	11	3	3	0	16	1	-7	7	3	155	152	2
-11	17	2	24	20	24	-3	21	2	123	129	4	0	27	2	0	20	1	12	3	3	30	26	30	-6	7	3	176	179	2
-10	17	2	158	157	4	-2	21	2	95	95	3	1	27	2	8	8	7	-15	4	3	68	77	67	-5	7	3	75	69	3
-9	17	2	140	144	4	-1	21	2	95	99	4	2	27	2	69	70	19	-14	4	3	0	19	1	-4	7	3	87	93	2
-8	17	2	199	208	3	0	21	2	0	4	1	3	27	2	55	32	30	-13	4	3	74	66	8	-3	7	3	56	66	2
-7	17	2	162	176	3	1	21	2	33	22	14	-3	28	2	64	32	23	-12	4	3	58	66	8	-2	7	3	63	59	2
-6	17	2	0	22	1	2	21	2	71	67	5	-2	28	2	24	32	24	-11	4	3	12	16	11	-1	7	3	145	133	2
-5	17	2	198	200	2	3	21	2	40	29	12	-1	28	2	0	25	1	-10	4	3	118	114	3	0	7	3	194	204	2
-4	17	2	218	214	2	4	21	2	113	114	4	0	28	2	0	7	1	-9	4	3	117	117	2	1	7	3	157	162	2
-3	17	2	103	103	3	5	21	2	37	39	24	1	28	2	154	129	11	-8	4	3	92	91	3	2	7	3	383	337	1
-2	17	2	69	74	4	6	21	2	0	7	1	-15	1	3	42	46	42	-7	4	3	95	94	3	3	7	3	538	529	2
-1	17	2	290	296	2	7	21	2	34	24	34	-14	1	3	0	35	1	-6	4	3	11	4	10</						

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

-11 19 2 75 89 12 5 23 2 123 124 10 -9 2 3 88 92 3 0 5 3 303 298 2 11 8 3 55 51 22

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
12	8	3	16	26	16	-2	12	3	390	380	1	-7	16	3	110	113	4	-2	20	3	42	52	7	-4	26	3	54	6	25
-14	9	3	21	19	21	-1	12	3	0	8	1	-6	16	3	23	13	23	-1	20	3	36	43	11	-3	26	3	0	0	1
-13	9	3	0	2	1	0	12	3	483	481	2	-5	16	3	78	74	3	0	20	3	111	109	4	-2	26	3	40	4	39
-12	9	3	18	14	17	1	12	3	203	195	2	-4	16	3	141	135	2	1	20	3	60	67	4	-1	26	3	0	18	1
-11	9	3	8	33	8	2	12	3	22	16	22	-3	16	3	35	7	8	2	20	3	56	35	7	0	26	3	10	0	10
-10	9	3	166	164	3	3	12	3	96	92	3	-2	16	3	104	105	2	3	20	3	103	118	3	1	26	3	69	68	18
-9	9	3	34	5	15	4	12	3	316	322	1	-1	16	3	112	113	2	4	20	3	24	21	24	2	26	3	0	14	1
-8	9	3	20	10	20	5	12	3	30	31	9	0	16	3	346	340	1	5	20	3	25	74	24	3	26	3	26	57	25
-7	9	3	210	210	2	6	12	3	245	251	3	1	16	3	206	216	2	6	20	3	99	84	6	-4	27	3	53	68	53
-6	9	3	247	250	2	7	12	3	333	330	2	2	16	3	403	405	2	7	20	3	0	13	1	-3	27	3	0	26	1
-5	9	3	115	109	2	8	12	3	95	93	4	3	16	3	21	23	16	8	20	3	159	134	12	-2	27	3	33	56	33
-4	9	3	281	269	1	9	12	3	121	121	4	4	16	3	268	276	1	-10	21	3	0	7	1	-1	27	3	91	43	47
-3	9	3	128	118	1	10	12	3	48	35	15	5	16	3	92	95	3	-9	21	3	38	62	38	0	27	3	14	19	14
-2	9	3	96	93	1	11	12	3	35	7	34	6	16	3	24	12	24	-8	21	3	35	18	35	1	27	3	68	6	26
-1	9	3	319	310	2	-13	13	3	19	14	18	7	16	3	141	152	4	-7	21	3	0	24	1	2	27	3	132	102	12
0	9	3	0	33	1	-12	13	3	171	174	7	8	16	3	40	15	23	-6	21	3	247	244	3	-15	0	4	86	5	31
1	9	3	27	9	12	-11	13	3	0	9	1	9	16	3	10	40	9	-5	21	3	50	42	9	-14	0	4	34	6	33
2	9	3	0	14	1	-10	13	3	40	1	27	10	16	3	100	45	28	-4	21	3	35	22	10	-13	0	4	62	38	62
3	9	3	160	163	1	-9	13	3	0	29	1	-12	17	3	0	40	1	-3	21	3	223	226	3	-12	0	4	62	64	30
4	9	3	28	20	12	-8	13	3	91	75	4	-11	17	3	98	90	9	-2	21	3	0	14	1	-11	0	4	210	209	3
5	9	3	83	79	2	-7	13	3	69	85	5	-10	17	3	70	61	11	-1	21	3	80	70	4	-10	0	4	78	70	9
6	9	3	17	2	16	-6	13	3	30	32	15	-9	17	3	12	3	11	0	21	3	47	54	8	-9	0	4	62	64	8
7	9	3	0	7	1	-5	13	3	230	223	1	-8	17	3	24	18	23	1	21	3	163	159	2	-8	0	4	231	230	3
8	9	3	103	109	4	-4	13	3	151	138	3	-7	17	3	110	104	4	2	21	3	99	111	4	-7	0	4	567	559	3
9	9	3	36	27	13	-3	13	3	89	88	2	-6	17	3	197	197	2	3	21	3	284	291	2	-6	0	4	1591	1565	7
10	9	3	0	4	1	-2	13	3	78	78	2	-5	17	3	131	133	2	4	21	3	209	199	3	-5	0	4	508	517	7
11	9	3	0	5	1	-1	13	3	184	178	1	-4	17	3	25	18	13	5	21	3	53	51	25	-4	0	4	75	56	3
12	9	3	32	12	31	0	13	3	45	61	8	-3	17	3	223	221	2	6	21	3	86	87	22	-3	0	4	553	523	2
-14	10	3	0	17	1	1	13	3	35	17	10	-2	17	3	148	149	2	7	21	3	86	86	19	-2	0	4	274	272	2
-13	10	3	26	20	26	2	13	3	48	48	7	-1	17	3	101	97	3	8	21	3	0	40	1	-1	0	4	291	284	2
-12	10	3	0	5	1	3	13	3	24	21	24	0	17	3	304	308	1	-9	22	3	37	32	37	0	0	4	385	360	2
-11	10	3	0	0	1	4	13	3	111	117	2	1	17	3	43	15	11	-8	22	3	0	37	1	1	0	4	856	870	4
-10	10	3	76	85	7	5	13	3	61	59	5	2	17	3	259	267	1	-7	22	3	36	17	25	2	0	4	420	388	3
-9	10	3	0	30	1	6	13	3	119	131	3	3	17	3	101	103	3	-6	22	3	50	1	12	3	0	4	33	41	22
-8	10	3	12	25	12	7	13	3	43	58	13	4	17	3	161	160	2	-5	22	3	36	6	16	4	0	4	556	541	3
-7	10	3	101	112	4	8	13	3	82	72	5	5	17	3	53	45	5	-4	22	3	0	7	1	5	0	4	379	384	3
-6	10	3	159	159	1	9	13	3	36	10	36	6	17	3	72	57	10	-3	22	3	147	161	3	6	0	4	107	108	5
-5	10	3	207	211	1	10	13	3	0	40	1	7	17	3	42	45	18	-2	22	3	25	22	24	7	0	4	551	555	3
-4	10	3	269	260	1	11	13	3	63	52	16	8	17	3	48	9	17	-1	22	3	75	66	7	8	0	4	268	265	3
-3	10	3	318	307	1	-13	14	3	73	61	15	9	17	3	59	56	17	0	22	3	140	145	4	9	0	4	118	132	6
-2	10	3	148	143	1	-12	14	3	59	37	18	10	17	3	46	68	46	1	22	3	94	87	4	10	0	4	43	43	43
-1	10	3	207	198	2	-11	14	3	147	134	5	-12	18	3	103	91	12	2	22	3	58	27	16	11	0	4	180	171	7
0	10	3	398	392	2	-10	14	3	119	116	6	-11	18	3	14	4	14	3	22	3	7	5	6	12	0	4	119	126	10
1	10	3	16	4	16	-9	14	3	46	48	11	-10	18	3	38	20	37	4	22	3	51	35	25	-15	1	4	83	54	35
2	10	3	105	99	3	-8	14	3	21	10	20	-9	18	3	172	174	4	5	22	3	69	73	50	-14	1	4	75	82	21
3	10	3	28	34	10	-7	14	3	47	39	9	-8	18	3	20	18	19	6	22	3	44	33	43	-13	1	4	34	48	33
4	10	3	204	194	1	-6	14	3	45	53	6	-7	18	3	49	40	12	7	22	3	102	84	22	-12	1	4	14	10	13
5	10	3	199	199	2	-5	14	3	168	161	1	-6	18	3	43	32	12	-9	23	3	25	1	24	-11	1	4	200	199	3
6	10	3	33	24	10	-4	14	3	48	40	4	-5	18	3	94	106	3	-8	23	3	26	9	25	-10	1	4	161	165	3
7	10	3	30	56	15	-3	14	3	228	230	1	-4	18	3	72	69	5	-7	23	3	0	30	1	-9	1	4	249	245	2
8	10	3	66	62	7	-2	14	3	91	98	2	-3	18	3	104	102	3	-6	23	3	46	36	14	-8	1	4	141	137	2
9	10	3	45	40	9	-1	14	3	19	10	18	-2	18	3	89	89	3	-5	23	3	0	5	1	-7	1	4	121	132	2
10	10	3	45	60	28	0	14	3	0	13	1	-1	18	3	205	204	2	-4	23	3	50	45	11	-6	1	4	352	355	2
11	10	3	49	22	24	1	14	3	214	211	2	0	18	3	542	547	2	-3	23	3	115	118	5	-5	1	4	550	558	2
12	10	3	36	30	36	2	14	3	216	216	2	1	18	3	131	134	4	-2	23	3	0	15	1	-4	1	4	320	312	1
-14	11	3	34	29	34	3	14	3	13	1	12	2	18	3	102	106	2	-1	23	3	0	0	1	-3	1	4	206	203	1
-13	11	3	95	82	13	4	14	3	85	82	4	3	18	3	0	16	1	0	23	3	0	15	1	-2	1	4	145	144	1
-12	11	3	120	119	8	5	14	3	23	22	16	4	18	3	89	103	3	1	23	3	0	4	1	-1	1	4	815	833	2
-11	11	3	0	34	1	6	14	3	34	27	13	5	18	3	79	86	4	2	23	3	59	29	15	0	1	4	449	457	2
-10	11																												

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

-3 12 3 572 553 2 -8 16 3 0 13 1 -3 20 3 24 34 23 -5 26 3 43 51 32 6 2 4 72 57 5

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
7	2	4	258	259	2	-11	6	4	90	87	5	4	9	4	57	65	4	-4	13	4	308	300	1	-3	17	4	101	94	2
8	2	4	168	165	3	-10	6	4	29	3	21	5	9	4	477	467	2	-3	13	4	292	288	1	-2	17	4	336	329	1
9	2	4	64	59	8	-9	6	4	0	29	1	6	9	4	151	149	2	-2	13	4	273	271	2	-1	17	4	195	197	3
10	2	4	75	90	8	-8	6	4	244	238	2	7	9	4	106	93	4	-1	13	4	256	255	2	0	17	4	169	179	4
11	2	4	48	18	17	-7	6	4	228	223	2	8	9	4	210	217	3	0	13	4	332	335	2	1	17	4	421	421	3
12	2	4	55	42	17	-6	6	4	51	63	6	9	9	4	66	66	7	1	13	4	207	197	2	2	17	4	304	309	3
-15	3	4	74	19	73	-5	6	4	128	136	2	10	9	4	33	12	33	2	13	4	26	33	26	3	17	4	164	155	6
-14	3	4	68	60	18	-4	6	4	115	133	2	11	9	4	0	8	1	3	13	4	48	53	10	4	17	4	88	68	13
-13	3	4	79	63	7	-3	6	4	7	35	7	-14	10	4	85	87	26	4	13	4	144	142	6	5	17	4	129	118	4
-12	3	4	139	124	4	-2	6	4	107	103	1	-13	10	4	81	92	18	5	13	4	292	299	2	6	17	4	37	43	36
-11	3	4	281	281	3	-1	6	4	286	277	2	-12	10	4	42	42	30	6	13	4	93	91	4	7	17	4	67	11	28
-10	3	4	228	226	3	0	6	4	287	274	2	-11	10	4	62	48	11	7	13	4	163	164	3	8	17	4	161	140	9
-9	3	4	161	147	2	1	6	4	332	324	1	-10	10	4	52	58	7	8	13	4	146	142	4	9	17	4	24	35	23
-8	3	4	8	14	7	2	6	4	164	165	1	-9	10	4	88	86	4	9	13	4	82	82	10	-11	18	4	93	81	10
-7	3	4	19	11	19	3	6	4	225	221	2	-8	10	4	100	92	3	10	13	4	44	1	30	-10	18	4	102	95	8
-6	3	4	187	193	1	4	6	4	367	367	2	-7	10	4	94	101	3	-13	14	4	35	36	34	-9	18	4	0	4	1
-5	3	4	597	597	2	5	6	4	209	202	2	-6	10	4	555	544	2	-12	14	4	143	128	6	-8	18	4	17	41	17
-4	3	4	106	98	2	6	6	4	125	137	3	-5	10	4	167	173	1	-11	14	4	0	17	1	-7	18	4	192	195	3
-3	3	4	39	39	5	7	6	4	19	20	19	-4	10	4	231	231	1	-10	14	4	51	67	14	-6	18	4	129	140	2
-2	3	4	241	258	1	8	6	4	168	183	3	-3	10	4	364	358	1	-9	14	4	0	7	1	-5	18	4	6	12	6
-1	3	4	313	324	1	9	6	4	18	46	17	-2	10	4	296	281	1	-8	14	4	69	83	8	-4	18	4	157	158	2
0	3	4	171	170	1	10	6	4	89	92	7	-1	10	4	611	593	2	-7	14	4	168	163	2	-3	18	4	109	104	2
1	3	4	851	852	3	11	6	4	58	46	16	0	10	4	49	49	7	-6	14	4	66	74	3	-2	18	4	31	2	12
2	3	4	228	220	2	-14	7	4	45	41	45	1	10	4	163	164	2	-5	14	4	211	205	1	-1	18	4	20	7	19
3	3	4	91	90	2	-13	7	4	18	6	17	2	10	4	301	301	2	-4	14	4	88	90	2	0	18	4	0	2	1
4	3	4	111	104	3	-12	7	4	184	187	3	3	10	4	372	365	2	-3	14	4	54	45	4	1	18	4	70	26	10
5	3	4	280	277	2	-11	7	4	92	85	4	4	10	4	123	131	2	-2	14	4	17	20	16	2	18	4	193	196	4
6	3	4	331	324	2	-10	7	4	114	119	3	5	10	4	144	142	2	-1	14	4	174	186	3	3	18	4	60	54	10
7	3	4	291	294	2	-9	7	4	282	282	2	6	10	4	108	111	4	0	14	4	34	16	12	4	18	4	169	165	4
8	3	4	288	285	2	-8	7	4	219	221	2	7	10	4	175	191	3	1	14	4	85	78	5	5	18	4	16	14	15
9	3	4	215	217	3	-7	7	4	47	49	8	8	10	4	57	50	9	2	14	4	47	37	9	6	18	4	85	50	13
10	3	4	9	17	9	-6	7	4	12	24	12	9	10	4	15	33	14	3	14	4	97	82	6	7	18	4	0	47	1
11	3	4	0	2	1	-5	7	4	236	219	2	10	10	4	55	61	16	4	14	4	35	46	34	8	18	4	70	72	31
12	3	4	71	82	14	-4	7	4	408	407	1	11	10	4	62	39	15	5	14	4	14	17	13	-11	19	4	107	105	9
-15	4	4	0	2	1	-3	7	4	285	299	1	-14	11	4	56	15	46	6	14	4	43	41	9	-10	19	4	107	86	8
-14	4	4	48	42	34	-2	7	4	550	552	1	-13	11	4	2	31	2	7	14	4	123	127	4	-9	19	4	98	89	10
-13	4	4	0	2	1	-1	7	4	528	520	2	-12	11	4	71	64	30	8	14	4	26	38	26	-8	19	4	100	76	7
-12	4	4	0	4	1	0	7	4	138	136	2	-11	11	4	41	7	18	9	14	4	41	28	21	-7	19	4	120	120	4
-11	4	4	25	17	24	1	7	4	38	50	8	-10	11	4	5	14	5	10	14	4	55	42	54	-6	19	4	24	15	23
-10	4	4	93	99	5	2	7	4	64	74	4	-9	11	4	0	12	1	-13	15	4	93	83	12	-5	19	4	211	207	2
-9	4	4	191	188	2	3	7	4	98	95	2	-8	11	4	240	244	2	-12	15	4	144	138	6	-4	19	4	59	46	5
-8	4	4	115	109	2	4	7	4	74	79	3	-7	11	4	37	29	9	-11	15	4	0	37	1	-3	19	4	26	22	18
-7	4	4	116	117	2	5	7	4	297	298	2	-6	11	4	178	177	2	-10	15	4	92	94	8	-2	19	4	129	133	2
-6	4	4	211	215	2	6	7	4	354	356	2	-5	11	4	56	58	4	-9	15	4	31	3	31	-1	19	4	179	187	4
-5	4	4	235	227	2	7	7	4	118	111	3	-4	11	4	297	284	2	-8	15	4	46	64	13	0	19	4	83	77	7
-4	4	4	129	122	2	8	7	4	160	166	3	-3	11	4	345	337	1	-7	15	4	30	42	13	1	19	4	74	73	8
-3	4	4	73	56	2	9	7	4	101	88	5	-2	11	4	187	180	2	-6	15	4	0	4	1	2	19	4	57	25	14
-2	4	4	201	196	1	10	7	4	15	2	15	-1	11	4	155	152	2	-5	15	4	49	47	5	3	19	4	0	16	1
-1	4	4	489	476	1	11	7	4	104	105	8	0	11	4	143	146	3	-4	15	4	138	131	2	4	19	4	53	75	14
0	4	4	302	297	2	-14	8	4	81	33	19	1	11	4	38	26	11	-3	15	4	24	2	11	5	19	4	0	27	1
1	4	4	437	419	2	-13	8	4	0	1	1	2	11	4	189	189	3	-2	15	4	84	87	2	6	19	4	122	105	10
2	4	4	346	335	2	-12	8	4	62	61	8	3	11	4	95	94	4	-1	15	4	37	31	16	7	19	4	43	23	43
3	4	4	179	174	2	-11	8	4	54	64	10	4	11	4	93	96	3	0	15	4	384	385	2	8	19	4	63	67	62
4	4	4	70	55	3	-10	8	4	39	0	18	5	11	4	315	328	2	1	15	4	364	367	2	-10	20	4	23	46	22
5	4	4	305	315	2	-9	8	4	17	44	16	6	11	4	108	128	3	2	15	4	169	169	3	-9	20	4	0	16	1
6	4	4	46	50	7	-8	8	4	87	87	4	7	11	4	103	96	5	3	15	4	0	2	1	-8	20	4	157	150	5
7	4	4	85	87	5	-7	8	4	72	66	4	8	11	4	66	79	10	4	15	4	138	142	5	-7	20	4	138	125	5
8	4	4	49	51	9	-6	8	4	69	69	4	9	11	4	51	41	13	5	15	4	39	40	7	-6	20	4	38	38	13
9	4	4	0	2	1	-5	8	4	59	55	3	10	11	4	0	5	1	6	15	4	0								

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

-12 6 4 47 28 14 3 9 4 44 46 5 -5 13 4 226 221 1 -4 17 4 211 208 2 -6 22 4 122 117 7

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	22	4	98	104	8	-7	2	5	68	71	3	5	5	5	197	196	2	-3	9	5	119	120	2	-7	13	5	164	162	3
-4	22	4	42	36	17	-6	2	5	37	45	7	6	5	5	92	96	4	-2	9	5	125	113	3	-6	13	5	133	139	2
-3	22	4	0	2	1	-5	2	5	458	430	2	7	5	5	39	43	13	-1	9	5	73	65	5	-5	13	5	154	156	3
-2	22	4	97	81	7	-4	2	5	208	187	1	8	5	5	30	42	29	0	9	5	54	37	6	-4	13	5	79	87	3
-1	22	4	67	49	11	-3	2	5	227	246	1	9	5	5	56	60	13	1	9	5	85	76	4	-3	13	5	119	122	2
0	22	4	60	47	12	-2	2	5	105	110	2	10	5	5	120	110	6	2	9	5	58	41	8	-2	13	5	0	34	1
1	22	4	94	94	11	-1	2	5	512	520	2	11	5	5	56	48	19	3	9	5	212	199	2	-1	13	5	0	6	1
2	22	4	137	132	7	0	2	5	373	375	2	-14	6	5	51	57	26	4	9	5	93	94	4	0	13	5	173	175	3
3	22	4	155	118	9	1	2	5	459	461	2	-13	6	5	36	21	35	5	9	5	0	6	1	1	13	5	110	106	4
4	22	4	16	62	16	2	2	5	35	4	9	-12	6	5	83	86	7	6	9	5	41	37	9	2	13	5	216	208	3
5	22	4	73	31	19	3	2	5	25	12	21	-11	6	5	0	37	1	7	9	5	26	14	25	3	13	5	209	209	3
6	22	4	82	63	22	4	2	5	245	246	2	-10	6	5	11	2	11	8	9	5	0	7	1	4	13	5	0	34	1
-8	23	4	52	72	30	5	2	5	28	33	18	-9	6	5	85	78	4	9	9	5	0	6	1	5	13	5	124	122	4
-7	23	4	44	0	43	6	2	5	246	247	2	-8	6	5	34	15	10	10	9	5	66	50	20	6	13	5	13	33	12
-6	23	4	13	55	12	7	2	5	274	272	2	-7	6	5	74	80	4	-14	10	5	36	31	35	7	13	5	56	8	18
-5	23	4	109	109	8	8	2	5	110	122	5	-6	6	5	87	82	3	-13	10	5	50	35	31	8	13	5	68	57	16
-4	23	4	117	125	7	9	2	5	86	95	12	-5	6	5	98	101	3	-12	10	5	29	39	29	9	13	5	15	22	14
-3	23	4	101	95	6	10	2	5	32	45	32	-4	6	5	343	344	1	-11	10	5	21	15	20	-13	14	5	62	48	18
-2	23	4	122	108	8	11	2	5	50	41	25	-3	6	5	156	160	1	-10	10	5	42	1	12	-12	14	5	0	1	1
-1	23	4	76	88	14	-15	3	5	66	57	32	-2	6	5	60	72	3	-9	10	5	63	53	6	-11	14	5	50	35	22
0	23	4	23	15	22	-14	3	5	0	17	1	-1	6	5	133	137	2	-8	10	5	188	188	2	-10	14	5	33	27	33
1	23	4	69	54	14	-13	3	5	62	44	11	0	6	5	51	52	3	-7	10	5	0	18	1	-9	14	5	113	110	5
2	23	4	60	38	35	-12	3	5	0	23	1	1	6	5	350	339	1	-6	10	5	254	257	2	-8	14	5	38	55	11
3	23	4	60	13	29	-11	3	5	40	40	13	2	6	5	147	142	3	-5	10	5	136	138	2	-7	14	5	208	209	2
4	23	4	0	1	1	-10	3	5	51	54	7	3	6	5	133	127	3	-4	10	5	126	124	2	-6	14	5	141	146	2
5	23	4	103	94	14	-9	3	5	123	117	3	4	6	5	29	12	11	-3	10	5	128	124	1	-5	14	5	180	187	2
-7	24	4	49	29	48	-8	3	5	166	164	2	5	6	5	324	320	2	-2	10	5	213	215	2	-4	14	5	66	70	3
-6	24	4	40	46	39	-7	3	5	207	210	2	6	6	5	85	77	5	-1	10	5	81	81	5	-3	14	5	36	43	13
-5	24	4	58	57	15	-6	3	5	201	201	2	7	6	5	47	47	12	0	10	5	111	105	3	-2	14	5	308	306	3
-4	24	4	0	10	1	-5	3	5	193	201	1	8	6	5	63	52	8	1	10	5	211	217	2	-1	14	5	30	26	26
-3	24	4	0	18	1	-4	3	5	240	237	1	9	6	5	89	76	8	2	10	5	158	161	3	0	14	5	309	306	3
-2	24	4	50	1	34	-3	3	5	12	13	11	10	6	5	55	44	14	3	10	5	0	15	1	1	14	5	294	291	3
-1	24	4	0	61	1	-2	3	5	72	67	3	-14	7	5	59	76	26	4	10	5	52	37	6	2	14	5	68	78	9
0	24	4	0	36	1	-1	3	5	450	444	2	-13	7	5	56	44	21	5	10	5	40	55	12	3	14	5	47	58	15
1	24	4	83	53	13	0	3	5	336	314	2	-12	7	5	39	43	17	6	10	5	73	82	5	4	14	5	28	46	28
2	24	4	0	37	1	1	3	5	45	70	4	-11	7	5	35	13	24	7	10	5	64	75	7	5	14	5	45	42	14
3	24	4	0	21	1	2	3	5	46	39	6	-10	7	5	67	75	7	8	10	5	77	64	7	6	14	5	103	100	4
4	24	4	37	13	36	3	3	5	120	111	3	-9	7	5	185	187	2	9	10	5	13	19	12	7	14	5	44	60	24
-6	25	4	0	41	1	4	3	5	113	94	3	-8	7	5	258	254	2	10	10	5	37	58	36	8	14	5	33	19	32
-5	25	4	0	19	1	5	3	5	327	325	2	-7	7	5	149	149	2	-14	11	5	32	24	31	9	14	5	167	137	20
-4	25	4	61	59	20	6	3	5	90	98	4	-6	7	5	0	15	1	-13	11	5	8	56	7	-12	15	5	43	56	42
-3	25	4	6	31	6	7	3	5	75	69	9	-5	7	5	65	64	4	-12	11	5	123	105	7	-11	15	5	94	71	10
-2	25	4	100	83	14	8	3	5	67	76	7	-4	7	5	309	304	2	-11	11	5	90	74	7	-10	15	5	51	36	15
-1	25	4	32	54	31	9	3	5	45	55	15	-3	7	5	92	97	2	-10	11	5	0	26	1	-9	15	5	30	32	29
0	25	4	0	27	1	10	3	5	0	26	1	-2	7	5	80	76	2	-9	11	5	170	177	4	-8	15	5	32	17	16
1	25	4	40	13	40	11	3	5	32	34	32	-1	7	5	320	313	2	-8	11	5	155	165	4	-7	15	5	135	130	3
2	25	4	0	9	1	-15	4	5	0	18	1	0	7	5	217	209	2	-7	11	5	44	40	9	-6	15	5	80	89	4
3	25	4	80	44	36	-14	4	5	70	4	18	1	7	5	136	154	3	-6	11	5	75	71	5	-5	15	5	17	19	16
-5	26	4	114	119	10	-13	4	5	46	39	19	2	7	5	49	55	4	-5	11	5	182	187	2	-4	15	5	0	20	1
-4	26	4	107	109	13	-12	4	5	21	8	21	3	7	5	56	61	4	-4	11	5	311	307	1	-3	15	5	32	11	23
-3	26	4	38	38	37	-11	4	5	41	14	14	4	7	5	310	320	2	-3	11	5	69	78	3	-2	15	5	148	156	4
-2	26	4	82	56	15	-10	4	5	30	16	18	5	7	5	222	227	2	-2	11	5	181	182	3	-1	15	5	80	70	6
-1	26	4	31	58	30	-9	4	5	108	107	3	6	7	5	68	80	6	-1	11	5	76	76	6	0	15	5	0	9	1
0	26	4	197	180	8	-8	4	5	67	67	4	7	7	5	39	64	13	0	11	5	89	83	6	1	15	5	33	26	26
1	26	4	114	89	20	-7	4	5	155	149	2	8	7	5	0	27	1	1	11	5	126	130	3	2	15	5	23	27	22
2	26	4	111	75	22	-6	4	5	3	17	3	9	7	5	74	71	10	2	11	5	232	240	2	3	15	5	127	128	5
-2	27	4	114	104	11	-5	4	5	32	29	6	10	7	5	73	85	19	3	11	5	193	183	3	4	15	5	0	4	1
-1	27	4	0	17	1	-4	4	5	108	100	2	-14	8	5	46	31	45	4	11	5	346	342	3	5	15	5	142	140	7
-15	1	5	0	17	1	-3	4	5	101	113	3	-13	8	5	73	79	13	5	11	5	17	3	17	6	15	5	46	59	38
-14																													

-8 2 5 280 286 2 4 5 5 161 158 2 -4 9 5 204 204 1 -8 13 5 57 56 7 -2 17 5 221 232 4

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-1	17	5	20	37	19	4	22	5	21	20	21	-5	2	6	181	174	2	-11	6	6	56	54	9	-13	10	6	112	96	9
0	17	5	108	116	5	5	22	5	0	6	1	-4	2	6	108	108	2	-10	6	6	77	70	6	-12	10	6	0	3	1
1	17	5	209	217	4	-8	23	5	46	1	45	-3	2	6	134	120	2	-9	6	6	90	87	4	-11	10	6	38	5	18
2	17	5	115	118	6	-7	23	5	31	12	30	-2	2	6	38	16	7	-8	6	6	45	44	8	-10	10	6	109	111	4
3	17	5	84	92	9	-6	23	5	133	96	18	-1	2	6	159	158	2	-7	6	6	217	220	2	-9	10	6	28	36	22
4	17	5	119	120	6	-5	23	5	0	14	1	0	2	6	46	43	5	-6	6	6	188	191	2	-8	10	6	194	196	2
5	17	5	67	60	11	-4	23	5	49	19	26	1	2	6	193	199	2	-5	6	6	228	225	1	-7	10	6	39	48	10
6	17	5	9	23	8	-3	23	5	104	93	12	2	2	6	138	141	2	-4	6	6	85	86	2	-6	10	6	370	365	2
7	17	5	38	1	38	-2	23	5	44	64	34	3	2	6	26	40	25	-3	6	6	397	398	1	-5	10	6	147	155	2
8	17	5	48	10	47	-1	23	5	35	8	34	4	2	6	291	295	3	-2	6	6	90	89	3	-4	10	6	13	32	12
-11	18	5	40	3	40	0	23	5	0	8	1	5	2	6	22	46	22	-1	6	6	65	69	3	-3	10	6	336	329	2
-10	18	5	58	34	19	1	23	5	63	60	15	6	2	6	95	97	4	0	6	6	82	77	2	-2	10	6	250	245	2
-9	18	5	99	101	8	2	23	5	56	27	19	7	2	6	50	22	11	1	6	6	17	12	17	-1	10	6	81	76	5
-8	18	5	139	130	5	3	23	5	57	5	56	8	2	6	43	17	19	2	6	6	74	77	4	0	10	6	73	70	6
-7	18	5	87	84	10	4	23	5	93	32	30	9	2	6	40	6	25	3	6	6	134	130	3	1	10	6	141	144	3
-6	18	5	0	10	1	-7	24	5	64	29	35	10	2	6	66	59	13	4	6	6	183	185	2	2	10	6	104	108	5
-5	18	5	98	100	4	-6	24	5	46	28	45	-14	3	6	0	23	1	5	6	6	75	61	6	3	10	6	266	257	4
-4	18	5	117	122	3	-5	24	5	49	5	48	-13	3	6	0	10	1	6	6	6	200	203	3	4	10	6	31	34	19
-3	18	5	124	127	5	-4	24	5	62	16	33	-12	3	6	95	78	11	7	6	6	97	78	7	5	10	6	86	90	5
-2	18	5	186	192	4	-3	24	5	11	16	10	-11	3	6	160	164	4	8	6	6	36	9	35	6	10	6	128	116	4
-1	18	5	295	282	4	-2	24	5	0	33	1	-10	3	6	328	328	2	9	6	6	55	0	17	7	10	6	183	184	4
0	18	5	97	105	6	-1	24	5	66	51	15	-9	3	6	372	368	2	-14	7	6	18	10	17	8	10	6	0	14	1
1	18	5	31	24	30	0	24	5	21	29	20	-8	3	6	68	69	5	-13	7	6	50	19	29	9	10	6	72	79	21
2	18	5	74	71	10	1	24	5	52	18	35	-7	3	6	266	269	2	-12	7	6	105	97	6	-13	11	6	60	64	16
3	18	5	0	0	1	2	24	5	90	60	17	-6	3	6	53	58	4	-11	7	6	75	57	7	-12	11	6	18	17	18
4	18	5	50	49	16	3	24	5	0	12	1	-5	3	6	121	122	2	-10	7	6	79	86	6	-11	11	6	60	83	9
5	18	5	50	1	17	-5	25	5	92	91	20	-4	3	6	114	113	2	-9	7	6	173	170	2	-10	11	6	25	49	25
6	18	5	41	37	41	-4	25	5	0	4	1	-3	3	6	186	186	2	-8	7	6	305	303	2	-9	11	6	48	15	11
7	18	5	131	125	13	-3	25	5	41	21	41	-2	3	6	251	239	1	-7	7	6	168	167	2	-8	11	6	50	45	8
-11	19	5	99	80	11	-2	25	5	39	30	39	-1	3	6	33	41	11	-6	7	6	190	183	2	-7	11	6	88	81	4
-10	19	5	47	28	26	-1	25	5	57	57	26	0	3	6	62	54	4	-5	7	6	26	38	9	-6	11	6	104	91	3
-9	19	5	63	54	12	0	25	5	0	28	1	1	3	6	78	80	3	-4	7	6	81	79	3	-5	11	6	88	83	3
-8	19	5	54	22	13	1	25	5	0	15	1	2	3	6	63	78	5	-3	7	6	89	89	2	-4	11	6	7	20	7
-7	19	5	117	121	4	-2	26	5	0	51	1	3	3	6	180	180	2	-2	7	6	12	18	12	-3	11	6	175	178	3
-6	19	5	113	124	4	-14	0	6	89	18	17	4	3	6	27	9	18	-1	7	6	333	326	2	-2	11	6	50	62	9
-5	19	5	53	60	6	-13	0	6	181	185	12	5	3	6	0	39	1	0	7	6	266	261	3	-1	11	6	63	70	7
-4	19	5	139	136	2	-12	0	6	272	269	5	6	3	6	129	129	4	1	7	6	189	188	3	0	11	6	118	117	4
-3	19	5	0	25	1	-11	0	6	285	289	8	7	3	6	27	31	27	2	7	6	15	6	15	1	11	6	35	25	21
-2	19	5	61	40	10	-10	0	6	40	25	22	8	3	6	72	49	10	3	7	6	79	65	3	2	11	6	189	200	4
-1	19	5	3	14	2	-9	0	6	494	497	3	9	3	6	63	26	15	4	7	6	23	44	23	3	11	6	203	222	5
0	19	5	37	6	26	-8	0	6	325	326	2	10	3	6	117	104	7	5	7	6	63	52	6	4	11	6	48	79	15
1	19	5	29	22	28	-7	0	6	132	146	3	-14	4	6	62	75	19	6	7	6	58	65	10	5	11	6	47	39	8
2	19	5	0	45	1	-6	0	6	111	105	3	-13	4	6	93	95	8	7	7	6	50	48	11	6	11	6	0	32	1
3	19	5	50	7	22	-5	0	6	238	237	2	-12	4	6	153	154	8	8	7	6	154	153	6	7	11	6	53	2	14
4	19	5	108	99	7	-4	0	6	333	330	3	-11	4	6	199	201	3	9	7	6	0	43	1	8	11	6	36	32	36
5	19	5	66	68	17	-3	0	6	648	649	3	-10	4	6	212	209	2	-14	8	6	70	64	23	-13	12	6	71	50	15
6	19	5	50	12	30	-2	0	6	37	32	9	-9	4	6	36	33	14	-13	8	6	38	32	37	-12	12	6	84	61	12
7	19	5	35	13	34	-1	0	6	185	184	3	-8	4	6	192	196	2	-12	8	6	0	2	1	-11	12	6	54	45	15
-10	20	5	10	11	10	0	0	6	314	306	3	-7	4	6	87	87	3	-11	8	6	30	0	30	-10	12	6	72	74	7
-9	20	5	65	59	13	1	0	6	179	179	3	-6	4	6	162	157	2	-10	8	6	136	139	4	-9	12	6	39	18	12
-8	20	5	153	158	5	2	0	6	9	11	8	-5	4	6	161	167	2	-9	8	6	89	79	4	-8	12	6	79	61	6
-7	20	5	105	102	6	3	0	6	31	28	31	-4	4	6	85	82	3	-8	8	6	99	105	4	-7	12	6	259	252	2
-6	20	5	54	60	10	4	0	6	648	650	4	-3	4	6	549	531	2	-7	8	6	39	43	11	-6	12	6	107	116	3
-5	20	5	67	80	7	5	0	6	0	4	1	-2	4	6	132	134	2	-6	8	6	151	152	3	-5	12	6	135	140	2
-4	20	5	33	4	15	6	0	6	156	161	4	-1	4	6	294	300	2	-5	8	6	77	72	3	-4	12	6	66	77	6
-3	20	5	0	1	1	7	0	6	296	307	5	0	4	6	230	225	2	-4	8	6	86	81	3	-3	12	6	50	54	12
-2	20	5	50	18	16	8	0	6	74	76	16	1	4	6	18	8	18	-3	8	6	76	76	2	-2	12	6	174	175	3
-1	20	5	40	18	26	9	0	6	99	77	20	2	4	6	298	299	2	-2	8	6	287	275	2	-1	12	6	105	108	5
0	20	5	87	83	9	10	0	6	48	58	43	3	4	6	156	158	3	-1	8	6	132	135	3	0	12	6	50	18	12
1																													

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

3 22 5 36 10 36 -6 2 6 70 74 4 -12 6 6 123 123 4 9 9 6 23 34 23 -9 14 6 51 50 10

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-8	14	6	89	80	5	-9	19	6	105	102	15	7	1	7	49	43	15	7	5	7	105	95	8	-11	10	7	0	12	1
-7	14	6	50	35	13	-8	19	6	34	72	33	8	1	7	149	134	6	8	5	7	80	78	9	-10	10	7	0	0	1
-6	14	6	65	44	7	-7	19	6	36	21	35	9	1	7	75	65	13	-14	6	7	0	24	1	-9	10	7	130	128	4
-5	14	6	31	3	14	-6	19	6	89	78	13	-14	2	7	51	28	20	-13	6	7	29	26	29	-8	10	7	49	58	8
-4	14	6	28	19	11	-5	19	6	0	23	1	-13	2	7	34	17	34	-12	6	7	0	19	1	-7	10	7	88	83	4
-3	14	6	125	122	4	-4	19	6	16	15	15	-12	2	7	62	63	11	-11	6	7	7	36	6	-6	10	7	140	149	2
-2	14	6	66	50	7	-3	19	6	57	37	22	-11	2	7	194	205	4	-10	6	7	41	36	19	-5	10	7	68	67	4
-1	14	6	38	33	17	-2	19	6	27	53	26	-10	2	7	0	30	1	-9	6	7	145	138	3	-4	10	7	181	178	2
0	14	6	46	15	23	-1	19	6	0	3	1	-9	2	7	67	62	5	-8	6	7	86	84	5	-3	10	7	145	130	4
1	14	6	110	110	6	0	19	6	69	81	13	-8	2	7	234	231	2	-7	6	7	152	146	2	-2	10	7	61	71	11
2	14	6	133	135	6	1	19	6	34	19	34	-7	2	7	149	150	2	-6	6	7	39	43	7	-1	10	7	126	133	4
3	14	6	20	26	20	2	19	6	121	109	7	-6	2	7	80	70	4	-5	6	7	47	29	7	0	10	7	140	147	4
4	14	6	129	138	6	3	19	6	63	42	17	-5	2	7	37	32	9	-4	6	7	68	60	4	1	10	7	50	37	15
5	14	6	46	6	23	4	19	6	132	137	10	-4	2	7	149	164	2	-3	6	7	15	22	15	2	10	7	46	61	19
6	14	6	0	26	1	5	19	6	42	15	42	-3	2	7	86	90	3	-2	6	7	274	268	2	3	10	7	93	111	10
7	14	6	107	84	12	-9	20	6	83	21	20	-2	2	7	387	390	2	-1	6	7	121	124	2	4	10	7	67	52	11
8	14	6	68	16	33	-8	20	6	0	53	1	-1	2	7	277	276	2	0	6	7	150	149	2	5	10	7	25	30	24
-12	15	6	34	0	34	-7	20	6	68	76	20	0	2	7	359	359	2	1	6	7	272	260	2	6	10	7	20	25	20
-11	15	6	0	23	1	-6	20	6	0	6	1	1	2	7	299	298	2	2	6	7	38	51	8	7	10	7	40	20	39
-10	15	6	39	23	26	-5	20	6	73	3	21	2	2	7	232	229	2	3	6	7	63	69	5	-13	11	7	44	12	44
-9	15	6	51	36	12	-4	20	6	120	128	15	3	2	7	22	23	22	4	6	7	118	118	3	-12	11	7	45	68	21
-8	15	6	80	72	6	-3	20	6	170	180	5	4	2	7	123	132	3	5	6	7	36	52	18	-11	11	7	89	91	11
-7	15	6	0	13	1	-2	20	6	53	68	21	-5	2	7	60	65	8	6	6	7	133	126	5	-10	11	7	119	110	4
-6	15	6	102	98	3	-1	20	6	109	109	9	6	2	7	72	66	7	7	6	7	119	110	6	-9	11	7	56	62	8
-5	15	6	28	35	13	0	20	6	21	44	21	7	2	7	25	5	24	8	6	7	39	9	39	-8	11	7	45	4	9
-4	15	6	24	19	24	1	20	6	40	19	40	8	2	7	103	114	7	-13	7	7	46	57	32	-7	11	7	107	106	3
-3	15	6	105	116	5	2	20	6	0	18	1	-14	3	7	0	18	1	-12	7	7	0	36	1	-6	11	7	0	8	1
-2	15	6	259	259	3	3	20	6	43	7	43	-13	3	7	32	1	32	-11	7	7	25	31	24	-5	11	7	109	118	3
-1	15	6	252	258	3	4	20	6	99	85	16	-12	3	7	24	46	23	-10	7	7	44	25	14	-4	11	7	266	275	2
0	15	6	224	224	3	5	20	6	0	3	1	-11	3	7	24	50	23	-9	7	7	50	56	9	-3	11	7	334	329	3
1	15	6	39	39	39	-9	21	6	50	64	49	-10	3	7	216	228	3	-8	7	7	87	90	4	-2	11	7	305	305	3
2	15	6	65	43	12	-8	21	6	72	44	32	-9	3	7	85	84	5	-7	7	7	82	79	4	-1	11	7	48	77	12
3	15	6	44	11	25	-7	21	6	34	9	33	-8	3	7	46	53	8	-6	7	7	70	76	4	0	11	7	64	65	8
4	15	6	0	7	1	-6	21	6	73	25	23	-7	3	7	51	42	5	-5	7	7	216	215	2	1	11	7	212	210	5
5	15	6	0	19	1	-5	21	6	58	6	22	-6	3	7	154	160	2	-4	7	7	344	347	1	2	11	7	100	96	11
6	15	6	0	2	1	-4	21	6	66	6	15	-5	3	7	106	98	3	-3	7	7	77	79	4	3	11	7	174	185	6
7	15	6	0	13	1	-3	21	6	114	78	11	-4	3	7	241	232	2	-2	7	7	44	26	9	4	11	7	218	217	4
-11	16	6	0	25	1	-2	21	6	42	32	42	-3	3	7	0	7	1	-1	7	7	33	32	7	5	11	7	253	254	4
-10	16	6	47	63	19	-1	21	6	47	53	23	-2	3	7	270	271	2	0	7	7	10	0	10	6	11	7	168	158	6
-9	16	6	42	55	22	0	21	6	0	30	1	-1	3	7	319	317	2	1	7	7	198	209	2	7	11	7	90	39	20
-8	16	6	48	43	10	1	21	6	88	70	13	0	3	7	68	74	4	2	7	7	261	265	2	-12	12	7	27	21	27
-7	16	6	64	41	8	2	21	6	44	68	44	1	3	7	84	79	4	3	7	7	26	29	14	-11	12	7	0	21	1
-6	16	6	132	137	3	3	21	6	64	47	23	2	3	7	236	228	2	4	7	7	146	150	3	-10	12	7	48	61	18
-5	16	6	75	76	4	4	21	6	64	96	27	3	3	7	159	159	2	5	7	7	99	126	5	-9	12	7	36	21	26
-4	16	6	155	154	4	-8	22	6	0	38	1	4	3	7	14	39	14	6	7	7	0	11	1	-8	12	7	43	26	11
-3	16	6	183	184	4	-7	22	6	0	7	1	5	3	7	86	70	6	7	7	7	20	20	19	-7	12	7	166	159	3
-2	16	6	187	184	4	-6	22	6	35	36	34	6	3	7	97	77	9	8	7	7	22	16	22	-6	12	7	40	43	10
-1	16	6	109	92	5	-5	22	6	49	41	25	7	3	7	58	31	19	-13	8	7	0	4	1	-5	12	7	36	19	9
0	16	6	87	88	7	-4	22	6	90	84	14	8	3	7	47	34	21	-12	8	7	21	6	21	-4	12	7	176	169	3
1	16	6	0	20	1	-3	22	6	55	55	25	-14	4	7	0	27	1	-11	8	7	48	5	13	-3	12	7	63	49	8
2	16	6	132	117	8	-2	22	6	43	35	43	-13	4	7	37	16	36	-10	8	7	20	33	20	-2	12	7	53	51	10
3	16	6	87	102	9	-1	22	6	35	34	35	-12	4	7	53	54	17	-9	8	7	64	66	7	-1	12	7	178	184	4
4	16	6	30	24	29	0	22	6	29	11	28	-11	4	7	76	78	11	-8	8	7	82	82	5	0	12	7	0	12	1
5	16	6	0	24	1	1	22	6	92	73	16	-10	4	7	18	13	17	-7	8	7	169	173	2	1	12	7	0	37	1
6	16	6	81	60	14	2	22	6	62	58	26	-9	4	7	59	48	7	-6	8	7	251	251	1	2	12	7	267	262	4
7	16	6	34	14	34	3	22	6	78	61	29	-8	4	7	122	129	3	-5	8	7	106	102	3	3	12	7	55	72	18
-11	17	6	79	100	14	-7	23	6	32	50	32	-7	4	7	203	203	2	-4	8	7	175	184	2	4	12	7	163	161	5
-10	17	6	74	77	15	-6	23	6	51	59	51	-6	4	7	123	130	2	-3	8	7	146	146	2	5	12	7	51	22	19
-9	17	6	0	9	1	-5	23	6	57	8	56	-5	4	7	136	143	2	-2	8	7	293	299	2	6	12	7	0	23	1
-8	17</																												

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

-10 19 6 172 153 9 6 1 7 85 97 6 6 5 7 127 128 5 -12 10 7 24 14 24 1 14 7 231 241 5

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

Page 10

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	14	7	181	184	5	1	20	7	114	118	17	-5	3	8	25	43	25	4	7	8	107	108	6	3	12	8	0	1	1
3	14	7	75	68	12	2	20	7	52	51	51	-4	3	8	44	53	7	5	7	8	0	11	1	4	12	8	28	7	28
4	14	7	71	51	13	3	20	7	167	110	23	-3	3	8	112	107	3	6	7	8	90	59	11	5	12	8	55	25	28
5	14	7	66	49	14	-7	21	7	24	12	23	-2	3	8	37	29	9	-13	8	8	0	8	1	-11	13	8	8	26	8
6	14	7	103	86	14	-6	21	7	0	50	1	-1	3	8	24	31	24	-12	8	8	23	32	23	-10	13	8	18	1	18
-11	15	7	0	58	1	-5	21	7	132	111	16	0	3	8	72	83	4	-11	8	8	0	2	1	-9	13	8	42	36	30
-10	15	7	54	35	22	-4	21	7	50	73	25	1	3	8	33	38	13	-10	8	8	23	43	23	-8	13	8	67	43	8
-9	15	7	58	64	11	-3	21	7	0	20	1	2	3	8	28	21	28	-9	8	8	38	14	21	-7	13	8	0	17	1
-8	15	7	42	26	15	-2	21	7	58	2	24	3	3	8	23	30	22	-8	8	8	35	18	15	-6	13	8	53	40	10
-7	15	7	61	47	10	-1	21	7	112	87	11	4	3	8	99	92	5	-7	8	8	45	13	10	-5	13	8	127	115	6
-6	15	7	84	75	4	0	21	7	56	54	23	5	3	8	147	135	4	-6	8	8	198	205	2	-4	13	8	71	59	16
-5	15	7	242	245	3	1	21	7	78	69	15	6	3	8	72	75	8	-5	8	8	14	34	14	-3	13	8	46	28	23
-4	15	7	54	28	11	2	21	7	0	44	1	7	3	8	49	11	21	-4	8	8	45	52	9	-2	13	8	29	0	29
-3	15	7	130	127	5	-6	22	7	38	1	37	-13	4	8	26	26	26	-3	8	8	75	76	4	-1	13	8	0	2	1
-2	15	7	106	106	6	-5	22	7	87	0	18	-12	4	8	52	63	24	-2	8	8	29	3	29	0	13	8	135	134	7
-1	15	7	83	98	8	-4	22	7	0	12	1	-11	4	8	157	156	5	-1	8	8	31	11	31	1	13	8	0	49	1
0	15	7	31	44	30	-3	22	7	17	0	17	-10	4	8	31	29	26	0	8	8	147	147	5	2	13	8	101	105	10
1	15	7	22	60	22	-2	22	7	58	57	26	-9	4	8	17	21	17	1	8	8	25	28	24	3	13	8	127	97	8
2	15	7	147	146	6	-1	22	7	27	27	27	-8	4	8	42	25	13	2	8	8	71	87	14	4	13	8	74	45	15
3	15	7	80	103	13	0	22	7	59	21	36	-7	4	8	30	2	12	3	8	8	102	97	6	5	13	8	30	14	29
4	15	7	167	167	6	-3	23	7	0	1	1	-6	4	8	178	177	2	4	8	8	123	127	8	-11	14	8	0	18	1
5	15	7	129	108	7	-2	23	7	0	29	1	-5	4	8	0	3	1	5	8	8	76	73	14	-10	14	8	52	56	51
6	15	7	118	116	12	-13	0	8	18	43	18	-4	4	8	88	86	3	6	8	8	40	44	39	-9	14	8	0	20	1
-11	16	7	0	38	1	-12	0	8	198	209	7	-3	4	8	91	87	3	-12	9	8	71	79	14	-8	14	8	56	54	15
-10	16	7	66	27	28	-11	0	8	52	28	52	-2	4	8	15	18	15	-11	9	8	104	101	6	-7	14	8	40	39	40
-9	16	7	0	43	1	-10	0	8	123	120	7	-1	4	8	68	72	5	-10	9	8	36	46	36	-6	14	8	66	46	13
-8	16	7	0	35	1	-9	0	8	145	145	4	0	4	8	20	6	20	-9	9	8	35	29	17	-5	14	8	44	36	26
-7	16	7	25	12	25	-8	0	8	118	117	6	1	4	8	46	27	8	-8	9	8	78	88	5	-4	14	8	81	65	13
-6	16	7	83	83	10	-7	0	8	219	225	3	2	4	8	147	153	3	-7	9	8	19	35	18	-3	14	8	61	64	12
-5	16	7	140	138	5	-6	0	8	313	322	3	3	4	8	123	124	3	-6	9	8	37	36	10	-2	14	8	133	121	6
-4	16	7	342	344	4	-5	0	8	87	95	6	4	4	8	100	93	6	-5	9	8	22	1	21	-1	14	8	174	169	7
-3	16	7	67	39	10	-4	0	8	79	65	6	5	4	8	71	59	9	-4	9	8	39	55	7	0	14	8	0	28	1
-2	16	7	145	153	8	-3	0	8	131	136	4	6	4	8	155	142	7	-3	9	8	114	119	3	1	14	8	43	26	38
-1	16	7	0	47	1	-2	0	8	103	105	5	7	4	8	58	19	21	-2	9	8	297	304	3	2	14	8	0	4	1
0	16	7	93	75	12	-1	0	8	71	50	7	-13	5	8	0	15	1	-1	9	8	113	108	5	3	14	8	37	62	37
1	16	7	38	48	37	0	0	8	123	124	6	-12	5	8	27	42	27	0	9	8	43	47	23	4	14	8	125	120	9
2	16	7	15	25	14	1	0	8	414	419	3	-11	5	8	81	105	11	1	9	8	151	152	7	-10	15	8	26	1	25
3	16	7	47	20	24	2	0	8	63	42	15	-10	5	8	59	59	18	2	9	8	39	50	39	-9	15	8	55	73	23
4	16	7	44	3	39	3	0	8	41	34	27	-9	5	8	0	27	1	3	9	8	0	28	1	-8	15	8	0	33	1
5	16	7	58	65	24	4	0	8	130	133	7	-8	5	8	119	113	5	4	9	8	52	46	22	-7	15	8	30	33	30
-10	17	7	115	99	14	5	0	8	31	31	31	-7	5	8	93	95	5	5	9	8	56	51	17	-6	15	8	0	11	1
-9	17	7	0	20	1	6	0	8	73	66	12	-6	5	8	40	45	8	6	9	8	57	43	28	-5	15	8	186	196	6
-8	17	7	0	19	1	7	0	8	117	112	9	-5	5	8	180	187	2	-12	10	8	0	7	1	-4	15	8	57	84	17
-7	17	7	59	51	15	-13	1	8	22	29	21	-4	5	8	154	157	2	-11	10	8	75	81	9	-3	15	8	56	60	38
-6	17	7	67	70	33	-12	1	8	69	78	11	-3	5	8	128	131	3	-10	10	8	33	11	32	-2	15	8	51	47	23
-5	17	7	105	99	7	-11	1	8	144	155	6	-2	5	8	132	142	2	-9	10	8	63	73	8	-1	15	8	59	12	20
-4	17	7	68	61	12	-10	1	8	110	109	6	-1	5	8	130	137	2	-8	10	8	82	97	5	0	15	8	57	42	18
-3	17	7	22	55	22	-9	1	8	114	115	4	0	5	8	41	44	10	-7	10	8	160	159	3	1	15	8	80	75	16
-2	17	7	77	83	11	-8	1	8	122	117	3	1	5	8	107	109	3	-6	10	8	53	42	7	2	15	8	58	73	20
-1	17	7	128	127	7	-7	1	8	48	46	8	2	5	8	137	141	3	-5	10	8	175	174	2	3	15	8	30	49	30
0	17	7	64	64	14	-6	1	8	29	24	16	3	5	8	119	122	5	-4	10	8	120	122	3	4	15	8	0	51	1
1	17	7	52	53	20	-5	1	8	143	145	2	4	5	8	0	13	1	-3	10	8	80	87	10	-10	16	8	0	44	1
2	17	7	35	46	34	-4	1	8	24	2	18	5	5	8	95	72	8	-2	10	8	233	228	6	-9	16	8	48	16	47
3	17	7	43	68	32	-3	1	8	17	4	16	6	5	8	28	7	27	-1	10	8	124	116	6	-8	16	8	45	24	24
4	17	7	32	41	32	-2	1	8	60	53	6	7	5	8	0	12	1	0	10	8	49	44	45	-7	16	8	34	68	34
5	17	7	47	61	46	-1	1	8	33	8	12	-13	6	8	4	25	3	1	10	8	188	195	5	-6	16	8	42	50	41
-10	18	7	0	3	1	0	1	8	110	104	4	-12	6	8	101	90	7	2	10	8	58	38	19	-5	16	8	73	69	15
-9	18	7	90	85	22	1	1	8	12	27	12	-11	6	8	80	72	8	3	10	8	99	84	10	-4	16	8	66	46	15
-8	18	7	134	118	10	2	1	8	62	78	8	-10	6	8	29	27	28	4	10	8	237	227	5	-3	16	8	113	109	8
-7	18	7	154	132	6	3	1	8	21	34	20	-9	6	8	100														

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

Page 11

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	19	8	50	25	49	-4	5	9	157	157	3	3	10	9	45	83	37	-8	0	10	50	63	33	-4	6	10	107	111	8
-2	19	8	83	35	13	-3	5	9	44	51	10	4	10	9	56	19	56	-7	0	10	80	93	10	-3	6	10	67	66	16
-1	19	8	86	76	21	-2	5	9	166	164	3	-11	11	9	0	40	1	-6	0	10	53	7	14	-2	6	10	97	90	10
0	19	8	62	52	20	-1	5	9	191	195	3	-10	11	9	0	5	1	-5	0	10	64	29	12	-1	6	10	164	149	6
1	19	8	178	156	7	0	5	9	148	143	3	-9	11	9	103	98	10	-4	0	10	145	144	5	0	6	10	42	34	42
-6	20	8	41	62	41	1	5	9	96	95	6	-8	11	9	121	126	7	-3	0	10	63	76	12	1	6	10	58	81	19
-5	20	8	78	73	18	2	5	9	43	16	42	-7	11	9	30	35	30	-2	0	10	81	70	9	2	6	10	82	83	16
-4	20	8	93	71	14	3	5	9	0	6	1	-6	11	9	64	63	12	-1	0	10	263	264	10	3	6	10	67	49	26
-3	20	8	41	47	41	4	5	9	110	109	12	-5	11	9	47	28	22	0	0	10	140	126	9	-10	7	10	0	18	1
-2	20	8	0	58	1	5	5	9	104	95	18	-4	11	9	0	73	1	1	0	10	49	10	33	-9	7	10	35	11	35
-1	20	8	149	106	10	-12	6	9	47	41	23	-3	11	9	105	99	7	2	0	10	77	70	35	-8	7	10	98	107	8
0	20	8	0	20	1	-11	6	9	54	42	17	-2	11	9	0	26	1	3	0	10	0	20	1	-7	7	10	68	32	12
-3	21	8	58	44	23	-10	6	9	100	95	8	-1	11	9	154	160	7	-11	1	10	29	26	29	-6	7	10	78	70	12
-12	1	9	58	66	20	-9	6	9	49	52	19	0	11	9	151	150	7	-10	1	10	28	11	28	-5	7	10	149	142	6
-11	1	9	130	125	7	-8	6	9	39	29	15	1	11	9	146	140	7	-9	1	10	75	2	11	-4	7	10	131	123	7
-10	1	9	124	117	6	-7	6	9	31	31	18	2	11	9	58	36	19	-8	1	10	115	111	6	-3	7	10	134	132	7
-9	1	9	81	75	8	-6	6	9	35	21	14	3	11	9	60	3	59	-7	1	10	48	36	11	-2	7	10	61	71	21
-8	1	9	42	25	11	-5	6	9	30	46	15	-10	12	9	25	0	24	-6	1	10	56	57	8	-1	7	10	116	104	10
-7	1	9	32	7	15	-4	6	9	108	96	4	-9	12	9	34	6	34	-5	1	10	135	134	4	0	7	10	54	41	21
-6	1	9	52	31	9	-3	6	9	129	134	3	-8	12	9	30	19	29	-4	1	10	110	105	5	1	7	10	27	39	26
-5	1	9	0	5	1	-2	6	9	46	31	19	-7	12	9	196	189	5	-3	1	10	97	95	5	2	7	10	53	59	52
-4	1	9	132	136	3	-1	6	9	143	156	4	-6	12	9	68	67	14	-2	1	10	104	95	5	-10	8	10	0	2	1
-3	1	9	194	196	2	0	6	9	30	23	30	-5	12	9	176	181	6	-1	1	10	0	4	1	-9	8	10	0	58	1
-2	1	9	286	283	3	1	6	9	100	101	6	-4	12	9	0	44	1	0	1	10	45	25	23	-8	8	10	85	88	10
-1	1	9	114	124	5	2	6	9	21	46	20	-3	12	9	97	89	11	1	1	10	27	34	27	-7	8	10	37	4	36
0	1	9	325	321	2	3	6	9	56	51	19	-2	12	9	34	26	34	2	1	10	73	87	15	-6	8	10	79	66	12
1	1	9	28	1	28	4	6	9	67	47	18	-1	12	9	71	86	14	3	1	10	38	35	37	-5	8	10	29	23	29
2	1	9	76	81	8	5	6	9	151	103	10	0	12	9	55	13	45	-11	2	10	20	9	19	-4	8	10	92	43	12
3	1	9	23	49	23	-12	7	9	48	18	48	1	12	9	125	110	12	-10	2	10	0	14	1	-3	8	10	65	54	15
4	1	9	0	44	1	-11	7	9	24	30	23	2	12	9	36	42	35	-9	2	10	81	79	10	-2	8	10	54	11	21
5	1	9	109	99	7	-10	7	9	44	27	18	3	12	9	60	70	33	-8	2	10	44	23	18	-1	8	10	13	23	13
-12	2	9	119	122	7	-9	7	9	45	56	14	-10	13	9	95	25	39	-7	2	10	67	51	9	0	8	10	0	16	1
-11	2	9	49	36	17	-8	7	9	61	50	9	-9	13	9	51	29	26	-6	2	10	43	47	13	1	8	10	0	5	1
-10	2	9	35	25	35	-7	7	9	35	28	16	-8	13	9	52	35	25	-5	2	10	40	28	17	2	8	10	20	3	20
-9	2	9	31	23	30	-6	7	9	63	81	7	-7	13	9	70	84	13	-4	2	10	126	120	4	-10	9	10	0	23	1
-8	2	9	19	12	19	-5	7	9	47	44	8	-6	13	9	88	110	13	-3	2	10	18	2	18	-9	9	10	0	37	1
-7	2	9	38	17	11	-4	7	9	17	40	16	-5	13	9	59	46	18	-2	2	10	42	31	16	-8	9	10	0	15	1
-6	2	9	114	108	3	-3	7	9	84	79	9	-4	13	9	46	34	30	-1	2	10	127	135	8	-7	9	10	47	55	21
-5	2	9	10	17	9	-2	7	9	0	7	1	-3	13	9	140	131	7	0	2	10	52	44	17	-6	9	10	82	91	14
-4	2	9	159	167	3	-1	7	9	58	59	16	-2	13	9	16	16	15	1	2	10	0	11	1	-5	9	10	53	32	22
-3	2	9	160	166	3	0	7	9	138	134	6	-1	13	9	135	142	8	2	2	10	50	50	26	-4	9	10	155	166	7
-2	2	9	104	91	4	1	7	9	71	67	13	0	13	9	55	50	21	3	2	10	29	39	29	-3	9	10	140	120	7
-1	2	9	64	62	7	2	7	9	56	40	21	1	13	9	80	80	14	-11	3	10	32	35	32	-2	9	10	79	82	14
0	2	9	55	41	8	3	7	9	13	60	12	2	13	9	42	0	42	-10	3	10	0	11	1	-1	9	10	48	72	29
1	2	9	55	54	11	4	7	9	77	14	18	3	13	9	30	18	29	-9	3	10	40	7	34	0	9	10	31	19	30
2	2	9	115	107	6	5	7	9	29	20	29	-9	14	9	0	36	1	-8	3	10	55	69	11	1	9	10	0	42	1
3	2	9	104	108	7	-12	8	9	28	9	28	-8	14	9	64	16	17	-7	3	10	117	109	5	2	9	10	121	97	11
4	2	9	139	140	8	-11	8	9	28	39	28	-7	14	9	193	184	5	-6	3	10	130	134	4	-9	10	10	56	33	23
5	2	9	31	32	30	-10	8	9	38	35	21	-6	14	9	0	9	1	-5	3	10	204	202	3	-8	10	10	0	5	1
-12	3	9	57	45	16	-9	8	9	31	8	30	-5	14	9	29	33	29	-4	3	10	166	159	3	-7	10	10	71	78	13
-11	3	9	11	10	10	-8	8	9	37	50	16	-4	14	9	104	114	11	-3	3	10	128	133	4	-6	10	10	50	46	25
-10	3	9	49	50	15	-7	8	9	150	143	4	-3	14	9	130	110	9	-2	3	10	105	107	7	-5	10	10	90	86	14
-9	3	9	62	56	8	-6	8	9	225	228	2	-2	14	9	38	41	38	-1	3	10	0	17	1	-4	10	10	76	72	14
-8	3	9	0	17	1	-5	8	9	94	93	4	-1	14	9	37	6	36	0	3	10	59	37	23	-3	10	10	71	22	46
-7	3	9	83	91	4	-4	8	9	112	103	4	0	14	9	64	25	18	1	3	10	107	66	21	-2	10	10	132	132	8
-6	3	9	74	71	5	-3	8	9	146	144	4	1	14	9	140	111	12	2	3	10	121	117	13	-1	10	10	90	88	19
-5	3	9	67	62	7	-2	8	9	128	133	6	2	14	9	150	139	15	3	3	10	0	75	1	0	10	10	96	80	12
-4	3	9	93	93	4	-1	8	9	61	27	23	-9	15	9	130	113	17	-11	4	10	58	65	23	1	10	10	58	44	29
-3	3	9	34	20	14	0	8	9	127	107	7	-8	15	9	44	16	43	-10	4	10	66	79	12	-9	11</				

Supplementary Material (ESI) for Organic & Biomolecular Chemistry
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2008

-5 5 9 77 77 4 2 10 9 44 63 33 -9 0 10 56 72 27 -5 6 10 32 0 32 -7 1 11 44 37 21

Table 7. Observed and calculated structure factors for an59

Page 12

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-6	1	11	38	18	38	-2	2	11	80	83	12	-7	4	11	85	47	15	-2	5	11	111	108	10	-3	7	11	107	94	12
-5	1	11	30	37	30	-1	2	11	60	16	26	-6	4	11	99	85	11	-1	5	11	120	97	13	-2	7	11	61	67	30
-4	1	11	77	92	10	0	2	11	0	68	1	-5	4	11	145	141	10	-8	6	11	14	6	13	-1	7	11	57	40	56
-3	1	11	241	235	4	-9	3	11	81	76	12	-4	4	11	105	111	8	-7	6	11	62	39	62	-7	8	11	86	63	15
-2	1	11	71	77	17	-8	3	11	26	34	25	-3	4	11	14	21	14	-6	6	11	0	26	1	-6	8	11	98	100	13
-1	1	11	13	80	12	-7	3	11	51	65	18	-2	4	11	103	114	12	-5	6	11	55	58	22	-5	8	11	105	144	24
0	1	11	145	142	18	-6	3	11	44	9	44	-1	4	11	16	42	16	-4	6	11	57	10	46	-4	8	11	41	52	40
-9	2	11	38	36	37	-5	3	11	10	20	10	0	4	11	0	22	1	-3	6	11	52	34	35	-3	8	11	40	50	39
-8	2	11	0	22	1	-4	3	11	95	103	11	-8	5	11	75	37	25	-2	6	11	0	19	1	-2	8	11	77	85	76
-7	2	11	31	51	30	-3	3	11	104	111	8	-7	5	11	0	1	1	-1	6	11	0	9	1	-6	9	11	67	31	27
-6	2	11	78	75	14	-2	3	11	58	50	20	-6	5	11	17	51	17	-7	7	11	82	94	16	-5	9	11	0	14	1
-5	2	11	90	79	10	-1	3	11	85	52	18	-5	5	11	33	6	33	-6	7	11	40	20	40	-4	9	11	52	67	51
-4	2	11	127	130	9	0	3	11	73	17	22	-4	5	11	75	69	13	-5	7	11	28	15	28	-3	9	11	0	26	1
-3	2	11	65	65	15	-8	4	11	0	5	1	-3	5	11	80	57	13	-4	7	11	68	49	25						