

Supporting Information for

Synthesis of [(HIPTNCH₂CH₂)₃N]V Compounds (HIPT = 3,5-(2,4,6-*i*-Pr₃C₆H₂)₂C₆H₃)
and an Evaluation of Vanadium for the Reduction of Dinitrogen to Ammonia

by

Nathan C. Smythe, Richard R. Schrock,* Peter Müller, and Walter W. Weare

For [HIPTN₃N]V(THF) (05099) and [HIPTN₃N]V(NH₃) (03316)

1. Fully labeled thermal ellipsoid drawing
2. Crystal data and structure refinement
3. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters
4. Bond lengths and angles
5. Anisotropic displacement parameters
6. Hydrogen coordinates and isotropic displacement parameters

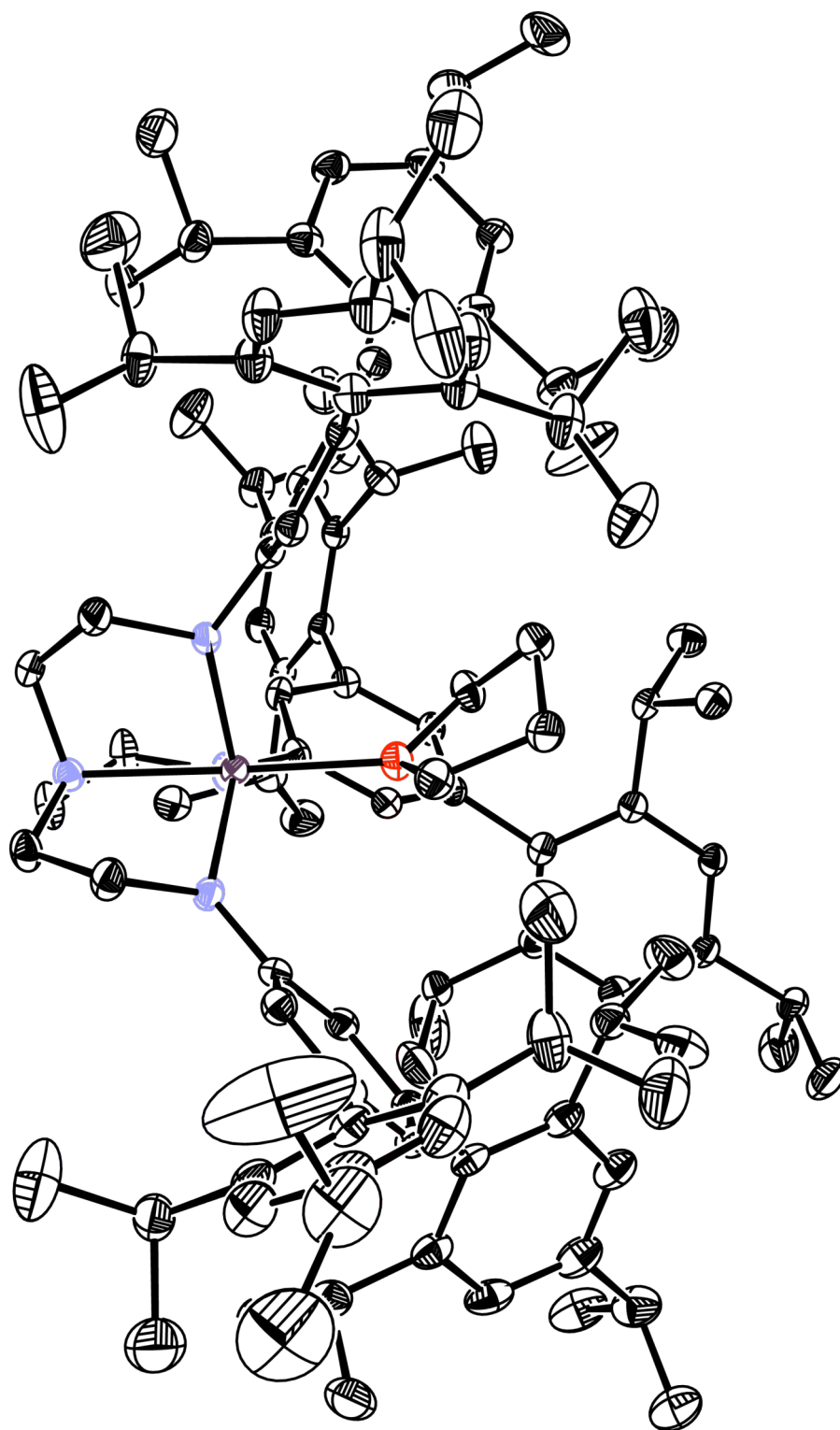


Figure 1. Full ORTEP diagram of [HIPTN₃N]V(THF). Thermal ellipsoids at 50% probability, hydrogen atoms and solvent omitted.

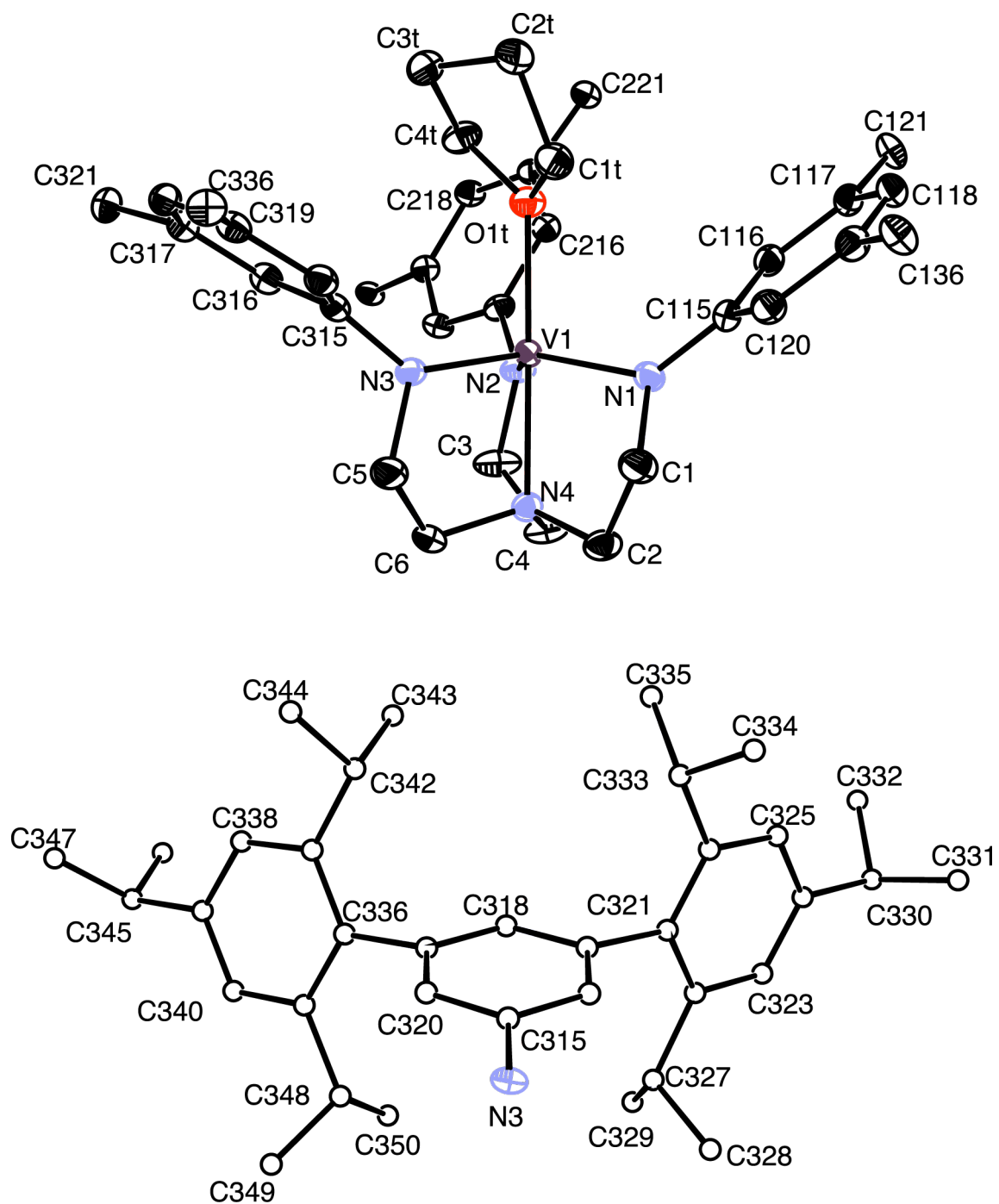


Table 1. Crystal data and structure refinement for [HIPTN₃N]V(THF).

Identification code	05099	
Empirical formula	C ₁₃₂ H ₁₉₉ N ₄ O V	
Formula weight	1908.89	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	$P\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 17.7727(6) Å	a = 113.9930(10)°
	b = 18.3700(7) Å	b = 99.8920(10)°
	c = 21.2032(9) Å	g = 96.5660(10)°
Volume	6098.5(4) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.040 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.130 mm ⁻¹	
F(000)	2100	
Crystal size	0.20 x 0.20 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.40 to 28.28°.	
Index ranges	-23 ≤ h ≤ 23, -24 ≤ k ≤ 24, -28 ≤ l ≤ 27	
Reflections collected	127420	
Independent reflections	30238 [R(int) = 0.0638]	
Completeness to theta = 28.28°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9897 and 0.9745	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	30238 / 397 / 1243	
Goodness-of-fit on F ²	1.043	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0696, wR2 = 0.1764	
R indices (all data)	R1 = 0.1069, wR2 = 0.2005	
Largest diff. peak and hole	0.896 and -0.562 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 05099. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
V(1)	-1403(1)	1478(1)	1270(1)	13(1)
O(1T)	-1320(1)	2090(1)	2388(1)	21(1)
C(1T)	-1595(1)	2863(1)	2654(1)	25(1)
C(2T)	-1224(1)	3291(2)	3445(1)	28(1)
C(3T)	-453(1)	3005(1)	3493(1)	26(1)
C(4T)	-696(1)	2119(1)	2951(1)	25(1)
N(1)	-2446(1)	1684(1)	986(1)	18(1)
N(2)	-1196(1)	390(1)	1092(1)	18(1)
N(3)	-551(1)	2253(1)	1315(1)	19(1)
N(4)	-1495(1)	1034(1)	141(1)	17(1)
C(1)	-2453(1)	1918(2)	401(1)	26(1)
C(2)	-2181(1)	1274(2)	-172(1)	23(1)
C(3)	-1056(2)	-57(2)	382(1)	28(1)
C(4)	-1583(2)	138(1)	-143(1)	25(1)
C(5)	-487(1)	2270(2)	636(1)	29(1)
C(6)	-757(1)	1411(2)	57(1)	24(1)
C(115)	-3037(1)	1881(1)	1338(1)	17(1)
C(116)	-3311(1)	1400(1)	1658(1)	18(1)
C(117)	-3914(1)	1563(1)	2004(1)	18(1)
C(118)	-4255(1)	2224(1)	2038(1)	20(1)
C(119)	-3991(1)	2720(1)	1735(1)	20(1)
C(120)	-3387(1)	2543(1)	1391(1)	20(1)
C(121)	-4225(1)	1007(1)	2298(1)	21(1)
C(122)	-3854(1)	1092(1)	2975(1)	24(1)
C(123)	-4157(1)	563(2)	3233(1)	29(1)
C(124)	-4811(2)	-45(2)	2843(2)	32(1)
C(125)	-5172(1)	-125(2)	2174(1)	31(1)
C(126)	-4889(1)	391(1)	1889(1)	26(1)
C(127)	-3153(1)	1776(2)	3438(1)	26(1)
C(128)	-2567(2)	1563(2)	3922(2)	38(1)

C(129)	-3414(2)	2544(2)	3886(2)	36(1)
C(130)	-5127(2)	-603(2)	3149(2)	38(1)
C(131)	-5125(2)	-1487(2)	2699(2)	44(1)
C(132)	-5923(2)	-478(2)	3281(2)	40(1)
C(133)	-5306(1)	294(2)	1161(1)	31(1)
C(134)	-5469(2)	-586(2)	586(2)	48(1)
C(135)	-6061(2)	621(2)	1208(2)	41(1)
C(136)	-4328(1)	3445(1)	1773(1)	23(1)
C(137)	-4766(1)	3437(2)	1149(1)	27(1)
C(138)	-5023(2)	4142(2)	1186(2)	35(1)
C(139)	-4859(2)	4846(2)	1820(2)	39(1)
C(140)	-4439(2)	4837(2)	2429(2)	37(1)
C(141)	-4172(2)	4149(2)	2423(1)	29(1)
C(142)	-4998(1)	2674(2)	442(1)	30(1)
C(143)	-5856(2)	2285(2)	276(2)	61(1)
C(144)	-4810(3)	2816(2)	-174(2)	64(1)
C(145)	-5104(2)	5628(2)	1846(2)	57(1)
C(146)	-4511(3)	6099(3)	1657(4)	131(3)
C(147)	-5921(3)	5485(3)	1408(3)	86(1)
C(148)	-3691(2)	4188(2)	3109(1)	37(1)
C(149)	-4044(2)	4561(2)	3743(2)	61(1)
C(150)	-2851(2)	4630(2)	3272(2)	59(1)
C(215)	-917(1)	84(1)	1575(1)	16(1)
C(216)	-1266(1)	172(1)	2142(1)	16(1)
C(217)	-1026(1)	-166(1)	2605(1)	16(1)
C(218)	-415(1)	-587(1)	2513(1)	17(1)
C(219)	-65(1)	-691(1)	1953(1)	17(1)
C(220)	-313(1)	-354(1)	1492(1)	18(1)
C(221)	-1444(1)	-185(1)	3156(1)	17(1)
C(222)	-2153(1)	-747(1)	2940(1)	19(1)
C(223)	-2497(1)	-831(1)	3457(1)	22(1)
C(224)	-2145(1)	-393(1)	4181(1)	20(1)
C(225)	-1452(1)	162(1)	4380(1)	19(1)
C(226)	-1093(1)	284(1)	3884(1)	17(1)
C(227)	-2545(1)	-1274(1)	2154(1)	26(1)

C(228)	-3256(2)	-966(2)	1923(2)	52(1)
C(229)	-2747(3)	-2171(2)	1985(2)	61(1)
C(230)	-2509(1)	-503(2)	4746(1)	25(1)
C(231)	-2761(2)	-1394(2)	4582(2)	41(1)
C(232)	-3187(2)	-61(2)	4859(2)	38(1)
C(233)	-333(1)	911(1)	4143(1)	17(1)
C(234)	330(1)	681(2)	4539(1)	26(1)
C(235)	-445(1)	1761(1)	4618(1)	24(1)
C(236)	530(1)	-1215(1)	1809(1)	17(1)
C(237)	1334(1)	-868(1)	2076(1)	19(1)
C(238)	1862(1)	-1384(1)	1927(1)	23(1)
C(239)	1625(1)	-2222(1)	1518(1)	22(1)
C(240)	831(1)	-2544(1)	1251(1)	21(1)
C(241)	274(1)	-2060(1)	1399(1)	19(1)
C(242)	1625(1)	37(1)	2546(1)	23(1)
C(243)	2233(2)	420(2)	2274(2)	43(1)
C(244)	1975(2)	200(2)	3311(1)	38(1)
C(245)	2219(1)	-2774(2)	1401(1)	29(1)
C(246)	2801(2)	-2576(2)	1017(2)	43(1)
C(247)	2650(2)	-2739(2)	2108(1)	32(1)
C(248)	-595(1)	-2448(1)	1130(1)	22(1)
C(249)	-794(2)	-3210(2)	1243(2)	37(1)
C(250)	-901(2)	-2630(2)	356(1)	34(1)
C(315)	45(1)	2861(1)	1882(1)	17(1)
C(316)	709(1)	2647(1)	2162(1)	18(1)
C(317)	1350(1)	3241(1)	2648(1)	18(1)
C(318)	1317(1)	4062(1)	2854(1)	18(1)
C(319)	661(1)	4290(1)	2582(1)	18(1)
C(320)	25(1)	3685(1)	2108(1)	18(1)
C(321)	2102(1)	3036(1)	2900(1)	19(1)
C(322)	2665(1)	2938(1)	2497(1)	21(1)
C(323)	3383(1)	2800(1)	2762(1)	24(1)
C(324)	3555(1)	2758(1)	3407(1)	24(1)
C(325)	2985(1)	2845(1)	3791(1)	23(1)
C(326)	2263(1)	2989(1)	3554(1)	21(1)

C(327)	2502(1)	2963(2)	1776(1)	25(1)
C(328)	2340(2)	2101(2)	1174(1)	35(1)
C(329)	3160(2)	3521(2)	1705(1)	36(1)
C(330)	4344(1)	2617(2)	3687(1)	29(1)
C(331)	4277(2)	1751(2)	3614(2)	42(1)
C(332)	4715(2)	3238(2)	4452(2)	42(1)
C(333)	1669(1)	3099(2)	4006(1)	27(1)
C(334)	1414(2)	2325(2)	4077(2)	64(1)
C(335)	1977(2)	3820(2)	4731(2)	62(1)
C(336)	682(1)	5163(1)	2740(1)	21(1)
C(337)	668(1)	5737(1)	3426(1)	23(1)
C(338)	737(2)	6555(1)	3562(1)	28(1)
C(339)	813(2)	6819(1)	3041(1)	30(1)
C(340)	813(2)	6239(1)	2367(1)	28(1)
C(341)	758(1)	5416(1)	2208(1)	23(1)
C(342)	595(2)	5489(1)	4019(1)	28(1)
C(343)	1335(2)	5859(2)	4620(2)	45(1)
C(344)	-122(2)	5713(2)	4310(2)	43(1)
C(345)	928(2)	7721(2)	3211(1)	38(1)
C(346)	1683(2)	8201(2)	3766(2)	45(1)
C(347)	228(2)	8072(2)	3433(2)	47(1)
C(348)	831(2)	4828(1)	1475(1)	28(1)
C(349)	325(2)	4922(2)	871(2)	59(1)
C(350)	1681(2)	4927(2)	1437(2)	54(1)
C(1X)	5237(2)	1306(2)	5292(2)	63(1)
C(2X)	5983(3)	1917(3)	5558(3)	78(1)
C(3X)	5954(2)	2737(2)	6034(2)	67(1)
C(4X)	6695(2)	3402(2)	6254(2)	73(1)
C(5X)	6601(2)	4257(2)	6707(2)	68(1)
C(6X)	6061(2)	4612(2)	6348(2)	68(1)
C(7X)	6358(2)	4861(2)	5832(2)	65(1)
C(1Y)	1635(3)	-6825(3)	-3450(3)	106(2)
C(2Y)	1506(3)	-6079(4)	-2832(3)	95(2)
C(3Y)	2149(2)	-5702(2)	-2192(2)	72(1)
C(4Y)	2066(3)	-4904(3)	-1592(3)	89(1)

C(5Y)	2798(3)	-4473(3)	-983(2)	85(1)
C(6Y)	2984(3)	-4930(4)	-547(3)	103(2)
C(7Y)	2438(5)	-4961(4)	-111(4)	165(3)

Table 3. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for 05099.

V(1)-N(3)	1.9173(18)	C(122)-C(127)	1.521(3)
V(1)-N(2)	1.9675(18)	C(123)-C(124)	1.380(4)
V(1)-N(1)	1.9760(17)	C(124)-C(125)	1.393(4)
V(1)-O(1T)	2.1399(15)	C(124)-C(130)	1.523(3)
V(1)-N(4)	2.1627(18)	C(125)-C(126)	1.407(3)
O(1T)-C(4T)	1.462(3)	C(126)-C(133)	1.522(3)
O(1T)-C(1T)	1.475(3)	C(127)-C(129)	1.524(4)
C(1T)-C(2T)	1.514(3)	C(127)-C(128)	1.529(3)
C(2T)-C(3T)	1.525(3)	C(130)-C(132)	1.513(4)
C(3T)-C(4T)	1.517(3)	C(130)-C(131)	1.514(4)
N(1)-C(115)	1.390(3)	C(133)-C(135)	1.534(4)
N(1)-C(1)	1.466(3)	C(133)-C(134)	1.535(4)
N(2)-C(215)	1.401(3)	C(136)-C(141)	1.409(3)
N(2)-C(3)	1.474(3)	C(136)-C(137)	1.410(3)
N(3)-C(315)	1.419(3)	C(137)-C(138)	1.397(3)
N(3)-C(5)	1.476(3)	C(137)-C(142)	1.525(3)
N(4)-C(4)	1.483(3)	C(138)-C(139)	1.389(4)
N(4)-C(6)	1.484(3)	C(139)-C(140)	1.385(4)
N(4)-C(2)	1.485(3)	C(139)-C(145)	1.530(4)
C(1)-C(2)	1.508(3)	C(140)-C(141)	1.395(3)
C(3)-C(4)	1.512(3)	C(141)-C(148)	1.525(4)
C(5)-C(6)	1.509(3)	C(142)-C(144)	1.515(4)
C(115)-C(120)	1.402(3)	C(142)-C(143)	1.523(4)
C(115)-C(116)	1.407(3)	C(145)-C(146)	1.496(5)
C(116)-C(117)	1.393(3)	C(145)-C(147)	1.513(5)
C(117)-C(118)	1.399(3)	C(148)-C(149)	1.519(4)
C(117)-C(121)	1.498(3)	C(148)-C(150)	1.526(4)
C(118)-C(119)	1.395(3)	C(215)-C(216)	1.406(3)
C(119)-C(120)	1.396(3)	C(215)-C(220)	1.407(3)
C(119)-C(136)	1.501(3)	C(216)-C(217)	1.394(3)
C(121)-C(126)	1.403(3)	C(217)-C(218)	1.399(3)
C(121)-C(122)	1.412(3)	C(217)-C(221)	1.498(3)
C(122)-C(123)	1.394(3)	C(218)-C(219)	1.387(3)

C(219)-C(220)	1.393(3)	C(317)-C(318)	1.401(3)
C(219)-C(236)	1.497(3)	C(317)-C(321)	1.500(3)
C(221)-C(226)	1.405(3)	C(318)-C(319)	1.395(3)
C(221)-C(222)	1.409(3)	C(319)-C(320)	1.391(3)
C(222)-C(223)	1.396(3)	C(319)-C(336)	1.493(3)
C(222)-C(227)	1.529(3)	C(321)-C(322)	1.405(3)
C(223)-C(224)	1.394(3)	C(321)-C(326)	1.407(3)
C(224)-C(225)	1.385(3)	C(322)-C(323)	1.398(3)
C(224)-C(230)	1.526(3)	C(322)-C(327)	1.525(3)
C(225)-C(226)	1.398(3)	C(323)-C(324)	1.383(3)
C(226)-C(233)	1.525(3)	C(324)-C(325)	1.389(3)
C(227)-C(229)	1.521(4)	C(324)-C(330)	1.520(3)
C(227)-C(228)	1.528(4)	C(325)-C(326)	1.390(3)
C(230)-C(231)	1.521(4)	C(326)-C(333)	1.520(3)
C(230)-C(232)	1.527(3)	C(327)-C(328)	1.532(3)
C(233)-C(234)	1.527(3)	C(327)-C(329)	1.533(3)
C(233)-C(235)	1.533(3)	C(330)-C(331)	1.523(4)
C(236)-C(241)	1.407(3)	C(330)-C(332)	1.523(4)
C(236)-C(237)	1.410(3)	C(333)-C(334)	1.516(4)
C(237)-C(238)	1.394(3)	C(333)-C(335)	1.518(4)
C(237)-C(242)	1.517(3)	C(336)-C(341)	1.404(3)
C(238)-C(239)	1.393(3)	C(336)-C(337)	1.414(3)
C(239)-C(240)	1.388(3)	C(337)-C(338)	1.398(3)
C(239)-C(245)	1.529(3)	C(337)-C(342)	1.521(3)
C(240)-C(241)	1.396(3)	C(338)-C(339)	1.394(3)
C(241)-C(248)	1.528(3)	C(339)-C(340)	1.392(3)
C(242)-C(244)	1.523(3)	C(339)-C(345)	1.526(3)
C(242)-C(243)	1.539(4)	C(340)-C(341)	1.397(3)
C(245)-C(246)	1.519(4)	C(341)-C(348)	1.528(3)
C(245)-C(247)	1.534(3)	C(342)-C(343)	1.527(4)
C(248)-C(250)	1.520(3)	C(342)-C(344)	1.534(4)
C(248)-C(249)	1.527(3)	C(345)-C(346)	1.518(4)
C(315)-C(320)	1.398(3)	C(345)-C(347)	1.524(4)
C(315)-C(316)	1.398(3)	C(348)-C(349)	1.516(4)
C(316)-C(317)	1.397(3)	C(348)-C(350)	1.520(4)

C(1X)-C(2X)	1.492(5)	C(2X)-C(3X)	1.446(5)
C(2X)-C(3X)	1.446(5)	C(3X)-C(4X)	1.551(5)
C(3X)-C(4X)	1.551(5)	C(4X)-C(5X)	1.518(5)
C(4X)-C(5X)	1.518(5)	C(5X)-C(6X)	1.490(5)
C(5X)-C(6X)	1.490(5)	C(6X)-C(7X)	1.494(5)
C(6X)-C(7X)	1.494(5)	C(1Y)-C(2Y)	1.538(7)
C(1Y)-C(2Y)	1.538(7)	C(2Y)-C(3Y)	1.466(6)
C(2Y)-C(3Y)	1.466(6)	C(3Y)-C(4Y)	1.546(6)
C(3Y)-C(4Y)	1.546(6)	C(4Y)-C(5Y)	1.530(6)
C(4Y)-C(5Y)	1.530(6)	C(5Y)-C(6Y)	1.503(6)
C(5Y)-C(6Y)	1.503(6)	C(6Y)-C(7Y)	1.462(7)
C(6Y)-C(7Y)	1.462(7)	N(3)-V(1)-N(2)	115.95(8)
N(3)-V(1)-N(2)	115.95(8)	N(3)-V(1)-N(1)	114.39(8)
N(3)-V(1)-N(1)	114.39(8)	N(2)-V(1)-N(1)	123.82(8)
N(2)-V(1)-N(1)	123.82(8)	N(3)-V(1)-O(1T)	92.87(7)
N(3)-V(1)-O(1T)	92.87(7)	N(2)-V(1)-O(1T)	105.76(7)
N(2)-V(1)-O(1T)	105.76(7)	N(1)-V(1)-O(1T)	94.94(7)
N(1)-V(1)-O(1T)	94.94(7)	N(3)-V(1)-N(4)	82.00(7)
N(3)-V(1)-N(4)	82.00(7)	N(2)-V(1)-N(4)	82.72(7)
N(2)-V(1)-N(4)	82.72(7)	N(1)-V(1)-N(4)	81.06(7)
N(1)-V(1)-N(4)	81.06(7)	O(1T)-V(1)-N(4)	171.42(6)
O(1T)-V(1)-N(4)	171.42(6)	C(4T)-O(1T)-C(1T)	108.32(16)
C(4T)-O(1T)-C(1T)	108.32(16)	C(4T)-O(1T)-V(1)	125.74(13)
C(4T)-O(1T)-V(1)	125.74(13)	C(1T)-O(1T)-V(1)	117.55(12)
C(1T)-O(1T)-V(1)	117.55(12)	O(1T)-C(1T)-C(2T)	105.71(18)
O(1T)-C(1T)-C(2T)	105.71(18)	C(1T)-C(2T)-C(3T)	102.48(18)
C(1T)-C(2T)-C(3T)	102.48(18)	C(4T)-C(3T)-C(2T)	101.82(18)
C(4T)-C(3T)-C(2T)	101.82(18)	O(1T)-C(4T)-C(3T)	105.91(18)
O(1T)-C(4T)-C(3T)	105.91(18)	C(115)-N(1)-C(1)	115.49(17)
C(115)-N(1)-C(1)	115.49(17)	C(115)-N(1)-V(1)	132.55(14)
C(115)-N(1)-V(1)	132.55(14)	C(1)-N(1)-V(1)	108.66(13)
C(1)-N(1)-V(1)	108.66(13)	C(215)-N(2)-C(3)	113.11(17)
C(215)-N(2)-C(3)	113.11(17)	C(215)-N(2)-V(1)	129.86(14)
C(215)-N(2)-V(1)	129.86(14)	C(3)-N(2)-V(1)	113.41(13)
C(1X)-C(2X)	1.492(5)	C(315)-N(3)-C(5)	109.97(17)

C(315)-N(3)-V(1)	133.48(14)	C(125)-C(124)-C(130)	121.6(2)
C(5)-N(3)-V(1)	116.52(14)	C(124)-C(125)-C(126)	122.1(2)
C(4)-N(4)-C(6)	111.32(18)	C(121)-C(126)-C(125)	118.4(2)
C(4)-N(4)-C(2)	112.40(17)	C(121)-C(126)-C(133)	120.9(2)
C(6)-N(4)-C(2)	111.68(17)	C(125)-C(126)-C(133)	120.7(2)
C(4)-N(4)-V(1)	105.85(12)	C(122)-C(127)-C(129)	110.67(19)
C(6)-N(4)-V(1)	106.86(12)	C(122)-C(127)-C(128)	114.2(2)
C(2)-N(4)-V(1)	108.36(13)	C(129)-C(127)-C(128)	109.4(2)
N(1)-C(1)-C(2)	108.01(18)	C(132)-C(130)-C(131)	112.2(2)
N(4)-C(2)-C(1)	110.79(18)	C(132)-C(130)-C(124)	111.1(2)
N(2)-C(3)-C(4)	108.41(18)	C(131)-C(130)-C(124)	112.4(2)
N(4)-C(4)-C(3)	108.93(18)	C(126)-C(133)-C(135)	110.0(2)
N(3)-C(5)-C(6)	107.82(19)	C(126)-C(133)-C(134)	112.8(2)
N(4)-C(6)-C(5)	109.23(18)	C(135)-C(133)-C(134)	111.0(2)
N(1)-C(115)-C(120)	123.03(19)	C(141)-C(136)-C(137)	119.9(2)
N(1)-C(115)-C(116)	119.69(19)	C(141)-C(136)-C(119)	120.2(2)
C(120)-C(115)-C(116)	117.28(19)	C(137)-C(136)-C(119)	119.7(2)
C(117)-C(116)-C(115)	121.74(19)	C(138)-C(137)-C(136)	118.8(2)
C(116)-C(117)-C(118)	119.30(19)	C(138)-C(137)-C(142)	119.1(2)
C(116)-C(117)-C(121)	120.26(19)	C(136)-C(137)-C(142)	122.1(2)
C(118)-C(117)-C(121)	120.34(18)	C(139)-C(138)-C(137)	121.9(2)
C(119)-C(118)-C(117)	120.54(19)	C(140)-C(139)-C(138)	118.3(2)
C(118)-C(119)-C(120)	119.03(19)	C(140)-C(139)-C(145)	120.2(3)
C(118)-C(119)-C(136)	122.34(19)	C(138)-C(139)-C(145)	121.4(3)
C(120)-C(119)-C(136)	118.62(19)	C(139)-C(140)-C(141)	122.2(3)
C(119)-C(120)-C(115)	122.1(2)	C(140)-C(141)-C(136)	118.8(2)
C(126)-C(121)-C(122)	120.0(2)	C(140)-C(141)-C(148)	119.5(2)
C(126)-C(121)-C(117)	119.3(2)	C(136)-C(141)-C(148)	121.6(2)
C(122)-C(121)-C(117)	120.71(19)	C(144)-C(142)-C(143)	110.9(3)
C(123)-C(122)-C(121)	119.3(2)	C(144)-C(142)-C(137)	113.6(2)
C(123)-C(122)-C(127)	119.9(2)	C(143)-C(142)-C(137)	110.9(2)
C(121)-C(122)-C(127)	120.7(2)	C(146)-C(145)-C(147)	112.3(4)
C(124)-C(123)-C(122)	121.9(2)	C(146)-C(145)-C(139)	110.6(3)
C(123)-C(124)-C(125)	118.3(2)	C(147)-C(145)-C(139)	113.5(3)
C(123)-C(124)-C(130)	120.1(2)	C(149)-C(148)-C(141)	113.4(3)

C(149)-C(148)-C(150)	110.8(3)	C(226)-C(233)-C(235)	110.93(17)
C(141)-C(148)-C(150)	110.9(2)	C(234)-C(233)-C(235)	110.02(18)
N(2)-C(215)-C(216)	120.40(18)	C(241)-C(236)-C(237)	120.46(18)
N(2)-C(215)-C(220)	121.91(18)	C(241)-C(236)-C(219)	118.88(18)
C(216)-C(215)-C(220)	117.60(18)	C(237)-C(236)-C(219)	120.66(18)
C(217)-C(216)-C(215)	121.42(18)	C(238)-C(237)-C(236)	118.3(2)
C(216)-C(217)-C(218)	119.29(19)	C(238)-C(237)-C(242)	120.07(19)
C(216)-C(217)-C(221)	123.44(18)	C(236)-C(237)-C(242)	121.55(18)
C(218)-C(217)-C(221)	116.92(18)	C(239)-C(238)-C(237)	122.4(2)
C(219)-C(218)-C(217)	120.61(19)	C(240)-C(239)-C(238)	118.0(2)
C(218)-C(219)-C(220)	119.48(18)	C(240)-C(239)-C(245)	121.0(2)
C(218)-C(219)-C(236)	120.51(18)	C(238)-C(239)-C(245)	120.9(2)
C(220)-C(219)-C(236)	119.85(18)	C(239)-C(240)-C(241)	122.1(2)
C(219)-C(220)-C(215)	121.58(19)	C(240)-C(241)-C(236)	118.71(19)
C(226)-C(221)-C(222)	120.11(19)	C(240)-C(241)-C(248)	120.28(19)
C(226)-C(221)-C(217)	120.54(18)	C(236)-C(241)-C(248)	121.00(18)
C(222)-C(221)-C(217)	118.96(18)	C(237)-C(242)-C(244)	111.11(19)
C(223)-C(222)-C(221)	119.02(19)	C(237)-C(242)-C(243)	112.1(2)
C(223)-C(222)-C(227)	119.45(19)	C(244)-C(242)-C(243)	109.2(2)
C(221)-C(222)-C(227)	121.51(19)	C(246)-C(245)-C(239)	112.6(2)
C(224)-C(223)-C(222)	121.7(2)	C(246)-C(245)-C(247)	110.2(2)
C(225)-C(224)-C(223)	118.07(19)	C(239)-C(245)-C(247)	110.98(19)
C(225)-C(224)-C(230)	120.20(19)	C(250)-C(248)-C(249)	110.5(2)
C(223)-C(224)-C(230)	121.7(2)	C(250)-C(248)-C(241)	111.93(19)
C(224)-C(225)-C(226)	122.4(2)	C(249)-C(248)-C(241)	112.82(19)
C(225)-C(226)-C(221)	118.60(19)	C(320)-C(315)-C(316)	118.77(19)
C(225)-C(226)-C(233)	119.46(18)	C(320)-C(315)-N(3)	120.74(18)
C(221)-C(226)-C(233)	121.94(18)	C(316)-C(315)-N(3)	120.01(19)
C(229)-C(227)-C(228)	112.1(3)	C(317)-C(316)-C(315)	121.07(19)
C(229)-C(227)-C(222)	111.9(2)	C(316)-C(317)-C(318)	118.72(19)
C(228)-C(227)-C(222)	110.7(2)	C(316)-C(317)-C(321)	122.42(18)
C(231)-C(230)-C(224)	112.7(2)	C(318)-C(317)-C(321)	118.56(18)
C(231)-C(230)-C(232)	111.1(2)	C(319)-C(318)-C(317)	121.22(19)
C(224)-C(230)-C(232)	110.96(19)	C(320)-C(319)-C(318)	118.86(19)
C(226)-C(233)-C(234)	111.95(17)	C(320)-C(319)-C(336)	121.00(19)

C(318)-C(319)-C(336)	119.81(19)	C(339)-C(340)-C(341)	122.0(2)
C(319)-C(320)-C(315)	121.32(19)	C(340)-C(341)-C(336)	118.9(2)
C(322)-C(321)-C(326)	120.24(19)	C(340)-C(341)-C(348)	118.9(2)
C(322)-C(321)-C(317)	119.20(19)	C(336)-C(341)-C(348)	122.09(19)
C(326)-C(321)-C(317)	120.45(19)	C(337)-C(342)-C(343)	111.0(2)
C(323)-C(322)-C(321)	118.6(2)	C(337)-C(342)-C(344)	112.3(2)
C(323)-C(322)-C(327)	119.8(2)	C(343)-C(342)-C(344)	110.4(2)
C(321)-C(322)-C(327)	121.62(19)	C(346)-C(345)-C(347)	111.6(2)
C(324)-C(323)-C(322)	122.1(2)	C(346)-C(345)-C(339)	111.2(2)
C(323)-C(324)-C(325)	118.3(2)	C(347)-C(345)-C(339)	111.5(2)
C(323)-C(324)-C(330)	121.0(2)	C(349)-C(348)-C(350)	110.7(3)
C(325)-C(324)-C(330)	120.7(2)	C(349)-C(348)-C(341)	113.1(2)
C(324)-C(325)-C(326)	122.1(2)	C(350)-C(348)-C(341)	110.0(2)
C(325)-C(326)-C(321)	118.8(2)	C(3X)-C(2X)-C(1X)	115.8(4)
C(325)-C(326)-C(333)	119.7(2)	C(2X)-C(3X)-C(4X)	116.8(3)
C(321)-C(326)-C(333)	121.51(19)	C(5X)-C(4X)-C(3X)	113.9(3)
C(322)-C(327)-C(328)	110.4(2)	C(6X)-C(5X)-C(4X)	116.4(3)
C(322)-C(327)-C(329)	112.8(2)	C(5X)-C(6X)-C(7X)	115.5(4)
C(328)-C(327)-C(329)	110.9(2)	C(3Y)-C(2Y)-C(1Y)	115.6(4)
C(324)-C(330)-C(331)	110.8(2)	C(2Y)-C(3Y)-C(4Y)	116.4(4)
C(324)-C(330)-C(332)	112.0(2)	C(5Y)-C(4Y)-C(3Y)	114.4(4)
C(331)-C(330)-C(332)	111.2(2)	C(6Y)-C(5Y)-C(4Y)	113.5(4)
C(334)-C(333)-C(335)	111.1(3)	C(7Y)-C(6Y)-C(5Y)	114.9(6)
C(334)-C(333)-C(326)	110.8(2)		
C(335)-C(333)-C(326)	111.8(2)		
C(341)-C(336)-C(337)	120.2(2)		
C(341)-C(336)-C(319)	119.01(19)		
C(337)-C(336)-C(319)	120.68(19)		
C(338)-C(337)-C(336)	118.7(2)		
C(338)-C(337)-C(342)	119.5(2)		
C(336)-C(337)-C(342)	121.85(19)		
C(339)-C(338)-C(337)	122.0(2)		
C(340)-C(339)-C(338)	118.2(2)		
C(340)-C(339)-C(345)	120.7(2)		
C(338)-C(339)-C(345)	121.1(2)		

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 05099. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2 [h^2 a^* 2U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
V(1)	13(1)	14(1)	14(1)	7(1)	4(1)	4(1)
O(1T)	24(1)	23(1)	18(1)	9(1)	5(1)	7(1)
C(1T)	26(1)	23(1)	25(1)	7(1)	8(1)	8(1)
C(2T)	27(1)	28(1)	24(1)	6(1)	9(1)	5(1)
C(3T)	25(1)	27(1)	21(1)	9(1)	3(1)	2(1)
C(4T)	30(1)	25(1)	19(1)	11(1)	1(1)	5(1)
N(1)	17(1)	25(1)	17(1)	12(1)	6(1)	7(1)
N(2)	26(1)	18(1)	13(1)	8(1)	5(1)	8(1)
N(3)	19(1)	21(1)	13(1)	7(1)	3(1)	-1(1)
N(4)	17(1)	17(1)	16(1)	7(1)	3(1)	5(1)
C(1)	26(1)	37(1)	23(1)	18(1)	9(1)	16(1)
C(2)	26(1)	30(1)	18(1)	13(1)	4(1)	12(1)
C(3)	48(2)	25(1)	15(1)	9(1)	8(1)	18(1)
C(4)	42(1)	17(1)	13(1)	6(1)	2(1)	6(1)
C(5)	29(1)	33(1)	19(1)	11(1)	5(1)	-7(1)
C(6)	23(1)	32(1)	16(1)	10(1)	8(1)	2(1)
C(115)	14(1)	20(1)	17(1)	8(1)	2(1)	3(1)
C(116)	16(1)	19(1)	18(1)	8(1)	2(1)	4(1)
C(117)	15(1)	18(1)	19(1)	7(1)	3(1)	2(1)
C(118)	17(1)	22(1)	20(1)	7(1)	7(1)	5(1)
C(119)	19(1)	19(1)	21(1)	8(1)	3(1)	6(1)
C(120)	21(1)	23(1)	20(1)	12(1)	5(1)	6(1)
C(121)	19(1)	20(1)	28(1)	11(1)	13(1)	7(1)
C(122)	23(1)	26(1)	31(1)	16(1)	13(1)	12(1)
C(123)	29(1)	34(1)	37(1)	23(1)	16(1)	12(1)
C(124)	34(1)	31(1)	44(2)	23(1)	20(1)	12(1)
C(125)	24(1)	22(1)	45(2)	11(1)	14(1)	1(1)
C(126)	23(1)	22(1)	32(1)	9(1)	13(1)	6(1)
C(127)	22(1)	36(1)	27(1)	19(1)	8(1)	7(1)
C(128)	31(1)	43(2)	41(2)	19(1)	1(1)	14(1)

C(129)	28(1)	32(1)	43(2)	14(1)	-1(1)	6(1)
C(130)	33(1)	42(2)	49(2)	31(1)	11(1)	6(1)
C(131)	40(2)	37(2)	73(2)	37(2)	25(2)	12(1)
C(132)	39(2)	41(2)	55(2)	31(2)	21(1)	6(1)
C(133)	25(1)	31(1)	31(1)	7(1)	7(1)	-2(1)
C(134)	49(2)	39(2)	38(2)	2(1)	10(1)	3(1)
C(135)	28(1)	45(2)	39(2)	12(1)	0(1)	4(1)
C(136)	24(1)	25(1)	28(1)	15(1)	14(1)	10(1)
C(137)	26(1)	33(1)	32(1)	20(1)	14(1)	14(1)
C(138)	38(1)	40(2)	42(2)	27(1)	16(1)	20(1)
C(139)	46(2)	37(2)	54(2)	30(1)	24(1)	22(1)
C(140)	51(2)	26(1)	40(2)	12(1)	22(1)	15(1)
C(141)	37(1)	24(1)	32(1)	13(1)	15(1)	11(1)
C(142)	30(1)	40(2)	26(1)	17(1)	9(1)	17(1)
C(143)	43(2)	68(2)	46(2)	-1(2)	14(2)	2(2)
C(144)	99(3)	63(2)	41(2)	26(2)	34(2)	19(2)
C(145)	75(2)	41(2)	79(2)	39(2)	30(2)	35(2)
C(146)	95(4)	91(4)	301(9)	149(5)	97(5)	57(3)
C(147)	95(3)	81(3)	119(4)	63(3)	40(3)	61(3)
C(148)	57(2)	23(1)	26(1)	8(1)	7(1)	10(1)
C(149)	72(2)	78(3)	40(2)	27(2)	23(2)	19(2)
C(150)	52(2)	78(3)	42(2)	23(2)	5(2)	13(2)
C(215)	21(1)	13(1)	14(1)	5(1)	1(1)	2(1)
C(216)	17(1)	14(1)	17(1)	6(1)	4(1)	4(1)
C(217)	18(1)	14(1)	14(1)	5(1)	4(1)	3(1)
C(218)	21(1)	18(1)	16(1)	9(1)	5(1)	7(1)
C(219)	19(1)	15(1)	17(1)	7(1)	4(1)	5(1)
C(220)	22(1)	17(1)	15(1)	7(1)	7(1)	5(1)
C(221)	20(1)	18(1)	18(1)	10(1)	7(1)	8(1)
C(222)	20(1)	21(1)	17(1)	8(1)	4(1)	6(1)
C(223)	20(1)	24(1)	23(1)	11(1)	6(1)	3(1)
C(224)	21(1)	26(1)	20(1)	13(1)	9(1)	8(1)
C(225)	21(1)	22(1)	16(1)	10(1)	6(1)	6(1)
C(226)	18(1)	17(1)	18(1)	9(1)	6(1)	7(1)
C(227)	26(1)	27(1)	18(1)	6(1)	4(1)	-1(1)

C(228)	37(2)	78(2)	26(1)	11(2)	-3(1)	18(2)
C(229)	104(3)	29(2)	30(2)	4(1)	7(2)	-13(2)
C(230)	23(1)	34(1)	21(1)	17(1)	8(1)	3(1)
C(231)	55(2)	40(2)	35(2)	24(1)	14(1)	-1(1)
C(232)	33(1)	63(2)	35(2)	30(1)	20(1)	19(1)
C(233)	19(1)	20(1)	16(1)	9(1)	7(1)	4(1)
C(234)	22(1)	26(1)	29(1)	14(1)	4(1)	5(1)
C(235)	26(1)	20(1)	25(1)	9(1)	9(1)	4(1)
C(236)	20(1)	20(1)	15(1)	10(1)	7(1)	8(1)
C(237)	22(1)	20(1)	17(1)	10(1)	6(1)	7(1)
C(238)	20(1)	29(1)	23(1)	12(1)	6(1)	7(1)
C(239)	26(1)	26(1)	21(1)	12(1)	11(1)	13(1)
C(240)	28(1)	19(1)	19(1)	8(1)	9(1)	9(1)
C(241)	23(1)	19(1)	16(1)	10(1)	8(1)	6(1)
C(242)	23(1)	21(1)	23(1)	9(1)	2(1)	5(1)
C(243)	57(2)	34(2)	33(2)	13(1)	9(1)	-7(1)
C(244)	56(2)	31(1)	23(1)	8(1)	8(1)	12(1)
C(245)	33(1)	29(1)	31(1)	13(1)	14(1)	19(1)
C(246)	50(2)	53(2)	55(2)	38(2)	34(2)	36(2)
C(247)	31(1)	36(1)	39(2)	21(1)	12(1)	17(1)
C(248)	22(1)	19(1)	25(1)	8(1)	8(1)	4(1)
C(249)	34(1)	37(2)	45(2)	25(1)	9(1)	0(1)
C(250)	28(1)	42(2)	31(1)	18(1)	4(1)	1(1)
C(315)	18(1)	19(1)	15(1)	8(1)	6(1)	1(1)
C(316)	21(1)	14(1)	19(1)	8(1)	8(1)	4(1)
C(317)	19(1)	18(1)	18(1)	9(1)	7(1)	6(1)
C(318)	20(1)	16(1)	17(1)	6(1)	4(1)	0(1)
C(319)	22(1)	17(1)	17(1)	8(1)	8(1)	4(1)
C(320)	18(1)	21(1)	17(1)	10(1)	6(1)	7(1)
C(321)	17(1)	15(1)	23(1)	7(1)	3(1)	3(1)
C(322)	20(1)	17(1)	22(1)	6(1)	5(1)	3(1)
C(323)	20(1)	24(1)	27(1)	8(1)	10(1)	6(1)
C(324)	17(1)	23(1)	26(1)	7(1)	4(1)	4(1)
C(325)	19(1)	28(1)	23(1)	12(1)	3(1)	5(1)
C(326)	17(1)	22(1)	26(1)	12(1)	6(1)	4(1)

C(327)	26(1)	30(1)	22(1)	12(1)	11(1)	11(1)
C(328)	41(2)	34(1)	22(1)	5(1)	5(1)	3(1)
C(329)	44(2)	35(1)	30(1)	14(1)	13(1)	4(1)
C(330)	18(1)	37(1)	34(1)	16(1)	6(1)	11(1)
C(331)	26(1)	42(2)	59(2)	23(2)	4(1)	15(1)
C(332)	22(1)	52(2)	39(2)	11(1)	-3(1)	10(1)
C(333)	21(1)	41(1)	32(1)	24(1)	12(1)	12(1)
C(334)	57(2)	68(2)	114(3)	66(2)	58(2)	29(2)
C(335)	47(2)	77(3)	47(2)	6(2)	28(2)	16(2)
C(336)	24(1)	18(1)	21(1)	9(1)	6(1)	7(1)
C(337)	31(1)	19(1)	21(1)	9(1)	8(1)	7(1)
C(338)	45(1)	17(1)	21(1)	5(1)	10(1)	10(1)
C(339)	47(2)	20(1)	25(1)	11(1)	11(1)	9(1)
C(340)	45(1)	22(1)	23(1)	14(1)	10(1)	8(1)
C(341)	31(1)	19(1)	20(1)	8(1)	7(1)	6(1)
C(342)	47(2)	19(1)	23(1)	10(1)	14(1)	11(1)
C(343)	67(2)	44(2)	24(1)	17(1)	5(1)	8(2)
C(344)	65(2)	36(2)	45(2)	24(1)	34(2)	19(1)
C(345)	74(2)	19(1)	25(1)	12(1)	15(1)	11(1)
C(346)	72(2)	23(1)	39(2)	12(1)	19(2)	4(1)
C(347)	87(2)	27(1)	28(1)	12(1)	4(2)	26(2)
C(348)	46(1)	19(1)	20(1)	8(1)	12(1)	9(1)
C(349)	97(3)	52(2)	22(1)	7(1)	5(2)	40(2)
C(350)	60(2)	39(2)	50(2)	0(1)	32(2)	5(2)
C(1X)	66(2)	64(2)	66(2)	39(2)	11(2)	11(2)
C(2X)	80(3)	69(3)	98(3)	41(3)	41(3)	17(2)
C(3X)	60(2)	72(3)	59(2)	21(2)	17(2)	-3(2)
C(4X)	73(3)	74(3)	87(3)	47(3)	22(2)	20(2)
C(5X)	68(2)	59(2)	68(3)	23(2)	10(2)	2(2)
C(6X)	66(2)	60(2)	55(2)	11(2)	2(2)	6(2)
C(7X)	72(2)	46(2)	62(2)	29(2)	-13(2)	-16(2)
C(1Y)	108(4)	103(4)	81(4)	34(3)	-6(3)	-18(3)
C(2Y)	65(3)	139(5)	92(4)	66(4)	12(3)	16(3)
C(3Y)	69(3)	66(3)	93(3)	44(2)	31(2)	9(2)
C(4Y)	90(3)	101(4)	97(4)	59(3)	33(3)	26(3)

C(5Y)	79(3)	102(4)	67(3)	33(3)	23(2)	0(3)
C(6Y)	106(4)	129(5)	62(3)	35(3)	20(3)	-6(3)
C(7Y)	203(8)	123(6)	116(5)	4(4)	77(6)	-40(5)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 05099.

	x	y	z	U(eq)
H(1T1)	-2171	2759	2566	30
H(1T2)	-1431	3198	2416	30
H(2T1)	-1549	3122	3716	34
H(2T2)	-1137	3889	3622	34
H(3T1)	-61	3313	3363	31
H(3T2)	-238	3057	3975	31
H(4T1)	-250	1925	2757	30
H(4T2)	-885	1774	3171	30
H(1A)	-2101	2453	573	31
H(1B)	-2987	1960	211	31
H(2A)	-2611	791	-443	28
H(2B)	-2040	1486	-507	28
H(3A)	-1169	-649	242	34
H(3B)	-503	109	390	34
H(4A)	-1441	-83	-606	30
H(4B)	-2132	-116	-215	30
H(5A)	61	2483	662	34
H(5B)	-816	2629	535	34
H(6A)	-843	1417	-415	29
H(6B)	-353	1090	88	29
H(116)	-3079	953	1638	21
H(118)	-4669	2335	2270	24
H(120)	-3206	2882	1186	24
H(123)	-3906	623	3690	35
H(125)	-5624	-541	1903	37
H(127)	-2872	1903	3113	31
H(12A)	-2132	2029	4198	58
H(12B)	-2371	1092	3632	58
H(12C)	-2826	1432	4247	58

H(12D)	-2955	2979	4177	54
H(12E)	-3713	2433	4196	54
H(12F)	-3743	2715	3572	54
H(130)	-4766	-440	3623	45
H(13A)	-5326	-1821	2919	65
H(13B)	-4591	-1548	2665	65
H(13C)	-5457	-1666	2222	65
H(13D)	-6110	-839	3482	60
H(13E)	-6289	-604	2830	60
H(13F)	-5885	89	3615	60
H(133)	-4957	636	1018	38
H(13G)	-5736	-614	129	72
H(13H)	-5800	-939	717	72
H(13I)	-4975	-768	543	72
H(13J)	-6326	556	737	61
H(13K)	-5936	1199	1543	61
H(13L)	-6404	317	1372	61
H(138)	-5317	4139	766	42
H(140)	-4329	5314	2866	45
H(142)	-4689	2274	500	36
H(14A)	-5992	1798	-180	92
H(14B)	-6179	2674	247	92
H(14C)	-5949	2133	653	92
H(14D)	-4974	2304	-610	96
H(14E)	-4247	3013	-76	96
H(14F)	-5088	3222	-236	96
H(145)	-5106	5972	2352	68
H(14G)	-4674	6600	1682	197
H(14H)	-4465	5768	1174	197
H(14I)	-4005	6237	1992	197
H(14J)	-6291	5191	1559	128
H(14K)	-5942	5161	904	128
H(14L)	-6057	6009	1476	128
H(148)	-3676	3615	3029	44
H(14M)	-3710	4567	4165	92

H(14N)	-4565	4238	3644	92
H(14O)	-4084	5120	3828	92
H(15A)	-2553	4644	3712	89
H(15B)	-2845	5188	3328	89
H(15C)	-2615	4342	2879	89
H(216)	-1673	467	2210	20
H(218)	-238	-803	2836	21
H(220)	-68	-421	1113	21
H(223)	-2983	-1198	3313	27
H(225)	-1211	471	4872	22
H(227)	-2161	-1216	1875	31
H(22A)	-3498	-1309	1418	78
H(22B)	-3093	-403	1998	78
H(22C)	-3634	-987	2205	78
H(22D)	-2994	-2488	1477	91
H(22E)	-3108	-2248	2265	91
H(22F)	-2270	-2355	2104	91
H(230)	-2100	-244	5203	29
H(23A)	-2990	-1431	4959	62
H(23B)	-2307	-1651	4555	62
H(23C)	-3150	-1673	4126	62
H(23D)	-3410	-140	5224	58
H(23E)	-3588	-281	4412	58
H(23F)	-2997	521	5014	58
H(233)	-181	931	3717	21
H(23G)	806	1097	4695	38
H(23H)	419	153	4221	38
H(23I)	189	646	4954	38
H(23J)	50	2153	4777	35
H(23K)	-611	1752	5032	35
H(23L)	-843	1920	4347	35
H(238)	2405	-1155	2111	28
H(240)	660	-3112	959	26
H(242)	1169	309	2544	27
H(24A)	2407	1002	2593	65

H(24B)	1999	348	1794	65
H(24C)	2682	154	2263	65
H(24D)	2157	787	3603	57
H(24E)	2416	-74	3324	57
H(24F)	1578	-10	3497	57
H(245)	1925	-3346	1096	34
H(24G)	3167	-2946	955	64
H(24H)	3089	-2013	1298	64
H(24I)	2522	-2643	550	64
H(24J)	3026	-3098	2019	49
H(24K)	2273	-2918	2329	49
H(24L)	2926	-2179	2426	49
H(248)	-878	-2040	1415	27
H(24M)	-597	-3081	1745	55
H(24N)	-551	-3637	949	55
H(24O)	-1361	-3402	1107	55
H(25A)	-1459	-2875	204	51
H(25B)	-618	-3009	61	51
H(25C)	-821	-2123	302	51
H(316)	724	2088	2019	21
H(318)	1750	4472	3184	22
H(320)	-432	3836	1934	21
H(323)	3766	2733	2491	29
H(325)	3092	2805	4229	28
H(327)	2019	3186	1731	30
H(32A)	2234	2126	715	53
H(32B)	1885	1770	1203	53
H(32C)	2795	1855	1218	53
H(32D)	3025	3516	1235	54
H(32E)	3646	3326	1760	54
H(32F)	3227	4077	2074	54
H(330)	4697	2685	3386	35
H(33A)	4792	1673	3796	63
H(33B)	4082	1365	3111	63
H(33C)	3915	1658	3886	63

H(33D)	5224	3129	4611	63
H(33E)	4375	3196	4759	63
H(33F)	4786	3787	4478	63
H(333)	1199	3211	3755	32
H(33G)	1030	2408	4368	96
H(33H)	1868	2187	4305	96
H(33I)	1178	1880	3604	96
H(33J)	1577	3875	5005	92
H(33K)	2104	4317	4671	92
H(33L)	2447	3733	4986	92
H(338)	732	6944	4023	34
H(340)	851	6409	2004	33
H(342)	530	4883	3816	34
H(34A)	1274	5690	4994	68
H(34B)	1426	6453	4817	68
H(34C)	1780	5669	4434	68
H(34D)	-146	5542	4688	65
H(34E)	-595	5437	3925	65
H(34F)	-81	6303	4500	65
H(345)	971	7768	2764	46
H(34G)	1744	8775	3860	67
H(34H)	2124	7987	3589	67
H(34I)	1667	8150	4206	67
H(34J)	318	8649	3534	71
H(34K)	158	8016	3861	71
H(34L)	-241	7777	3047	71
H(348)	656	4262	1415	33
H(34M)	395	4531	416	88
H(34N)	477	5476	921	88
H(34O)	-224	4820	886	88
H(35A)	1723	4547	966	82
H(35B)	1990	4811	1802	82
H(35C)	1878	5487	1518	82
H(1X1)	5319	772	4979	95
H(1X2)	4839	1470	5026	95

H(1X3)	5063	1274	5696	95
H(2X1)	6384	1729	5806	94
H(2X2)	6156	1932	5143	94
H(3X1)	5838	2729	6472	81
H(3X2)	5511	2899	5807	81
H(4X1)	7131	3272	6522	88
H(4X2)	6839	3389	5819	88
H(5X1)	6414	4254	7120	82
H(5X2)	7122	4622	6895	82
H(6X1)	5942	5095	6718	81
H(6X2)	5566	4208	6093	81
H(7X1)	5961	5078	5619	97
H(7X2)	6471	4388	5458	97
H(7X3)	6835	5282	6082	97
H(1Y1)	1176	-7032	-3851	160
H(1Y2)	1716	-7251	-3294	160
H(1Y3)	2095	-6669	-3599	160
H(2Y1)	1407	-5663	-3003	114
H(2Y2)	1030	-6244	-2698	114
H(3Y1)	2635	-5591	-2336	86
H(3Y2)	2212	-6103	-1995	86
H(4Y1)	1930	-4527	-1799	106
H(4Y2)	1628	-5027	-1395	106
H(5Y1)	3247	-4393	-1183	102
H(5Y2)	2725	-3928	-667	102
H(6Y1)	2997	-5494	-872	124
H(6Y2)	3513	-4674	-231	124
H(7Y1)	2592	-5286	140	247
H(7Y2)	1910	-5209	-417	247
H(7Y3)	2446	-4407	236	247

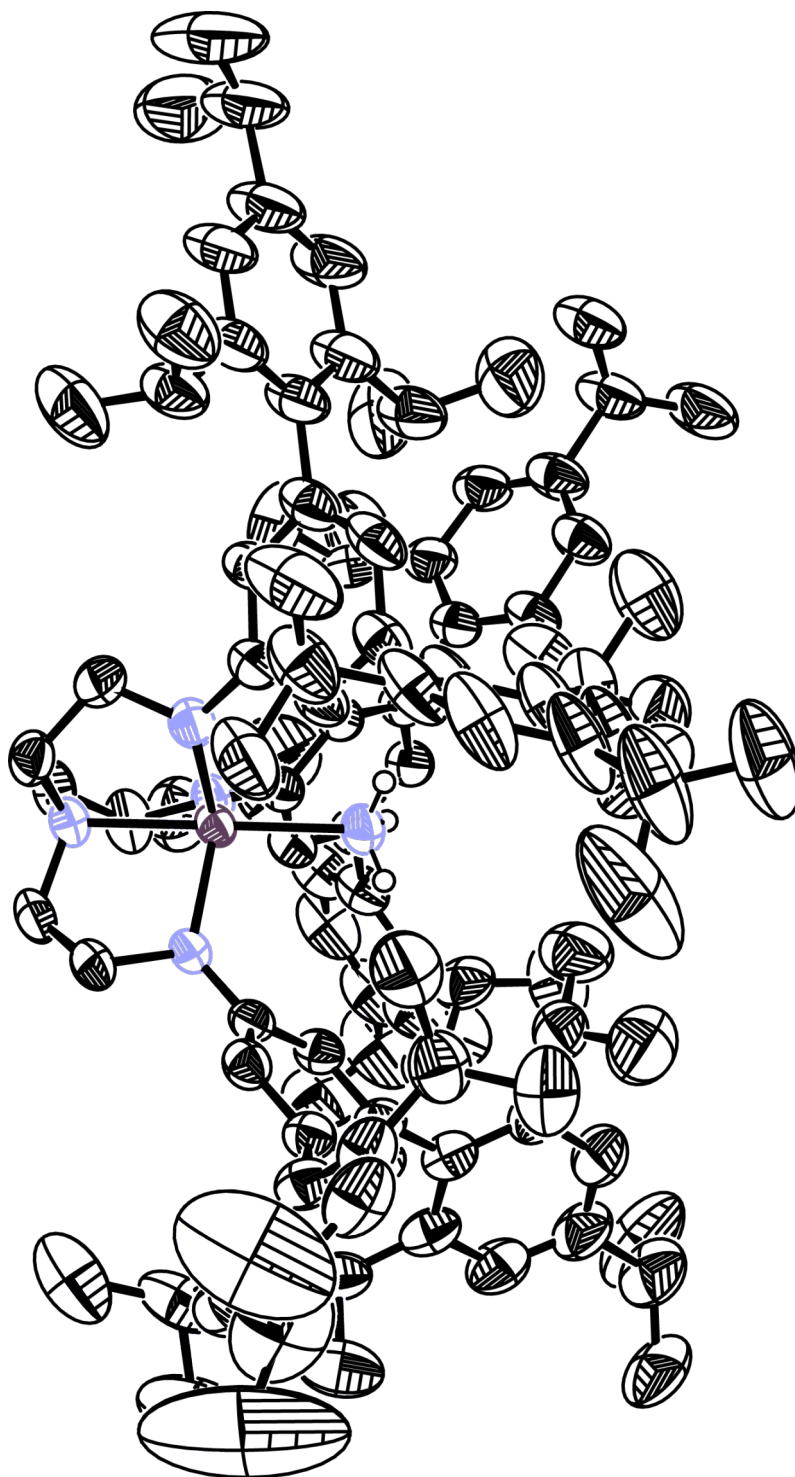


Figure 3. Full ORTEP of $[\text{HIPTN}_3\text{N}]\text{V}(\text{NH}_3)$. Thermal ellipsoids at 50% probability, hydrogen atoms, solvent, and disorder not shown.

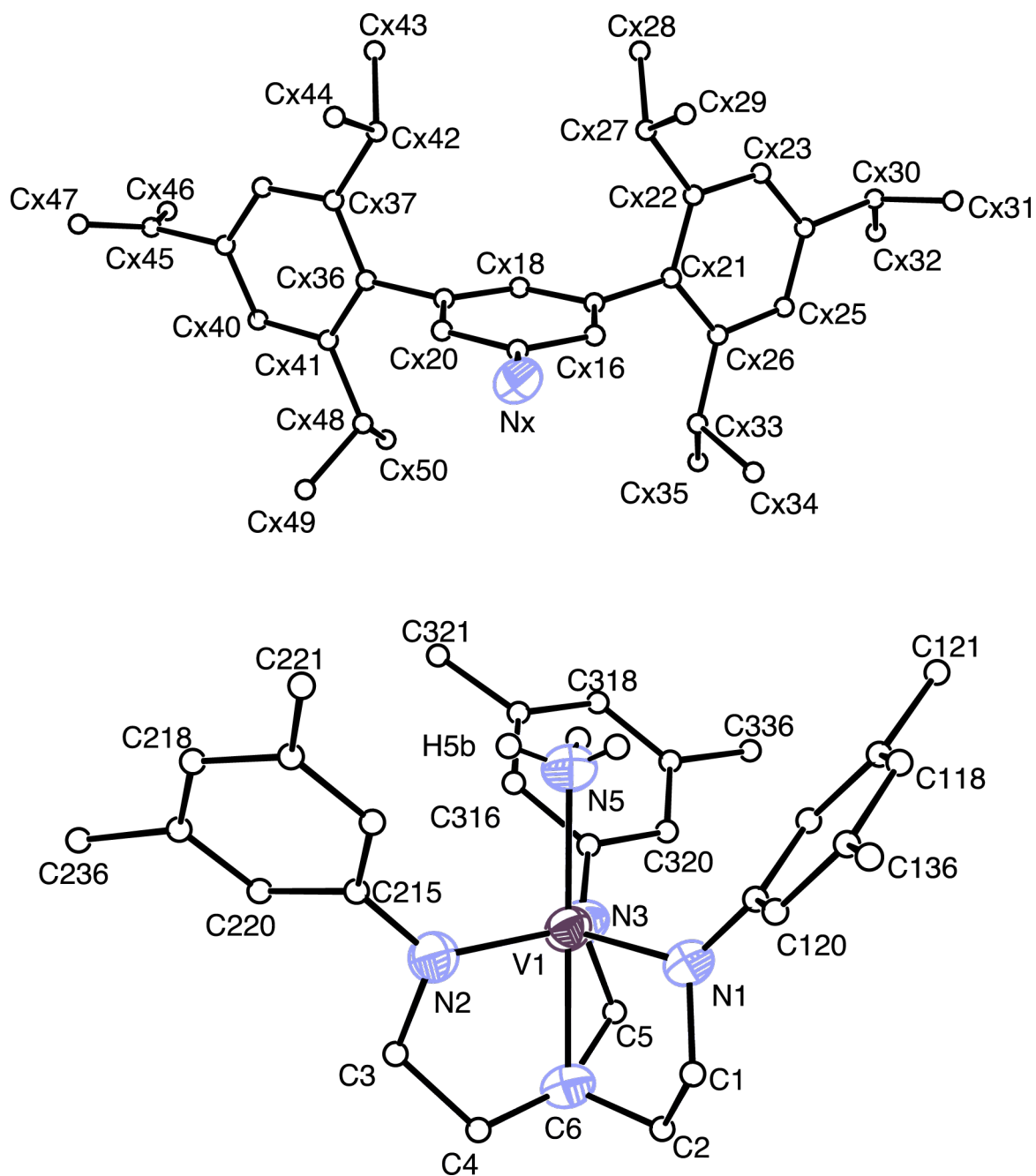


Figure 4. ORTEP labeling scheme for [HIPTN₃N]V(NH₃). Disorder, non-amine hydrogens, and solvent omitted.

Table 6. Crystal data and structure refinement for 03316.

Identification code	03316	
Empirical formula	C ₁₂₁ H ₁₇₈ N ₅ V	
Formula weight	1753.62	
Temperature	193(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	Cc	
Unit cell dimensions	a = 16.1153(4) Å	a = 90°
	b = 39.7548(11) Å	b = 93.0540(10)°
	c = 18.0197(5) Å	g = 90°
Volume	11528.1(5) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.010 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.132 mm ⁻¹	
F(000)	3848	
Crystal size	0.20 x 0.17 x 0.10 mm ³	
Theta range for data collection	1.99 to 25.03°	
Index ranges	-18 ≤ h ≤ 19, -47 ≤ k ≤ 41, -21 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	29563	
Independent reflections	15469 [R(int) = 0.0305]	
Completeness to theta = 25.03°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9869 and 0.9741	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	15469 / 3023 / 1536	
Goodness-of-fit on F ²	1.015	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0584, wR2 = 0.1452	
R indices (all data)	R1 = 0.0766, wR2 = 0.1585	
Absolute structure parameter	-0.009(19)	
Largest diff. peak and hole	0.317 and -0.268 e.Å ⁻³	

Table 7. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 03316. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
N(4)	7167(1)	5965(1)	6189(1)	45(1)
N(5)	7948(1)	6198(1)	8456(1)	51(1)
V(1)	7557(1)	6079(1)	7320(1)	39(1)
C(1)	8658(1)	6031(1)	6133(1)	56(1)
C(2)	7827(1)	6082(1)	5717(1)	57(1)
C(3)	6749(1)	5472(1)	6865(1)	64(1)
C(4)	7054(1)	5596(1)	6148(1)	58(1)
C(5)	6393(1)	6478(1)	6455(1)	65(1)
C(6)	6377(1)	6148(1)	6031(1)	57(1)
N(1)	8601(1)	6187(1)	6868(1)	44(1)
C(115)	9357(1)	6298(1)	7199(1)	44(1)
C(116)	9394(1)	6608(1)	7578(1)	47(1)
C(117)	10140(1)	6727(1)	7901(1)	53(1)
C(118)	10859(1)	6534(1)	7860(1)	58(1)
C(119)	10835(1)	6229(1)	7480(1)	52(1)
C(120)	10094(1)	6116(1)	7156(1)	50(1)
C(121)	10211(1)	7058(1)	8302(1)	61(1)
C(122)	10474(1)	7343(1)	7923(1)	65(1)
C(123)	10631(1)	7639(1)	8332(1)	81(1)
C(124)	10552(1)	7653(1)	9090(1)	86(1)
C(125)	10268(1)	7372(1)	9440(1)	87(1)
C(126)	10099(1)	7072(1)	9063(1)	71(1)
C(127)	10609(1)	7336(1)	7099(1)	74(1)
C(128)	10192(1)	7634(1)	6686(1)	92(1)
C(129)	11537(1)	7336(1)	6948(1)	110(1)
C(130)	10771(1)	7975(1)	9521(1)	109(1)
C(131)	10064(1)	8203(1)	9473(1)	173(1)
C(132)	11579(1)	8123(1)	9315(1)	123(1)
C(133)	9794(1)	6772(1)	9493(1)	82(1)
C(134)	8941(1)	6833(1)	9774(1)	116(1)
C(135)	10407(1)	6667(1)	10112(1)	134(1)

C(136)	11611(1)	6025(1)	7438(1)	60(1)
C(137)	11852(1)	5808(1)	8024(1)	68(1)
C(138)	12565(1)	5612(1)	7947(1)	90(1)
C(139)	13034(1)	5620(1)	7332(1)	97(1)
C(140)	12791(1)	5845(1)	6778(1)	91(1)
C(141)	12091(1)	6050(1)	6816(1)	74(1)
C(142)	11356(1)	5778(1)	8712(1)	81(1)
C(143)	10858(1)	5455(1)	8720(1)	115(1)
C(144)	11882(1)	5815(1)	9440(1)	136(1)
C(145)	13802(1)	5394(1)	7279(1)	167(1)
C(146)	13637(1)	5036(1)	7331(1)	252(1)
C(147)	14403(1)	5519(1)	6819(2)	361(2)
C(148)	11872(1)	6301(1)	6193(1)	97(1)
C(149)	11557(1)	6126(1)	5486(1)	127(1)
C(150)	12601(1)	6529(1)	6048(1)	162(1)
N(2)	7290(1)	5604(1)	7474(1)	48(1)
C(215)	7290(1)	5413(1)	8123(1)	52(1)
C(216)	8011(1)	5376(1)	8586(1)	55(1)
C(217)	8030(1)	5172(1)	9209(1)	63(1)
C(218)	7307(1)	5002(1)	9387(1)	69(1)
C(219)	6582(1)	5035(1)	8949(1)	67(1)
C(220)	6575(1)	5240(1)	8330(1)	59(1)
C(221)	8832(1)	5094(1)	9647(1)	69(1)
C(222)	9314(1)	4822(1)	9419(1)	83(1)
C(223)	10037(1)	4742(1)	9850(1)	103(1)
C(224)	10275(1)	4912(1)	10484(1)	105(1)
C(225)	9787(1)	5177(1)	10694(1)	95(1)
C(226)	9070(1)	5271(1)	10291(1)	78(1)
C(227)	9094(1)	4620(1)	8722(1)	91(1)
C(228)	9692(1)	4680(1)	8132(1)	108(1)
C(229)	9029(1)	4242(1)	8892(1)	130(1)
C(230)	11089(1)	4820(1)	10923(1)	136(1)
C(231)	11078(1)	4902(1)	11718(1)	155(1)
C(232)	11800(1)	4933(1)	10532(1)	240(1)
C(233)	8536(1)	5550(1)	10574(1)	84(1)
C(234)	9042(1)	5855(1)	10804(1)	148(1)

C(235)	8048(1)	5425(1)	11229(1)	120(1)
C(236)	5804(1)	4842(1)	9096(1)	73(1)
C(237)	5187(1)	4986(1)	9513(1)	89(1)
C(238)	4456(1)	4808(1)	9610(1)	100(1)
C(239)	4328(1)	4493(1)	9300(1)	105(1)
C(240)	4953(1)	4354(1)	8910(1)	92(1)
C(241)	5688(1)	4519(1)	8799(1)	82(1)
C(242)	5308(1)	5339(1)	9855(1)	90(1)
C(243)	5353(1)	5321(1)	10696(1)	123(1)
C(244)	4642(1)	5585(1)	9579(1)	137(1)
C(245)	3482(1)	4318(1)	9373(1)	127(1)
C(246)	2848(1)	4469(1)	8840(1)	178(1)
C(247)	3532(1)	3944(1)	9316(1)	183(1)
C(248)	6327(1)	4362(1)	8317(1)	80(1)
C(249)	6058(1)	4375(1)	7516(1)	119(1)
C(250)	6541(1)	4000(1)	8561(1)	109(1)
N(3)	6646(1)	6402(1)	7229(1)	47(1)
C(315)	6362(1)	6632(1)	7747(1)	46(1)
C(316)	6012(1)	6519(1)	8398(1)	50(1)
C(317)	5685(1)	6741(1)	8899(1)	51(1)
C(318)	5730(1)	7086(1)	8764(1)	54(1)
C(319)	6060(1)	7208(1)	8120(1)	54(1)
C(320)	6378(1)	6981(1)	7623(1)	52(1)
C(321)	5210(1)	6625(1)	9545(1)	56(1)
C(322)	4342(1)	6622(1)	9473(1)	69(1)
C(323)	3901(1)	6532(1)	10097(1)	75(1)
C(324)	4288(1)	6440(1)	10755(1)	74(1)
C(325)	5141(1)	6433(1)	10806(1)	71(1)
C(326)	5623(1)	6528(1)	10217(1)	60(1)
C(327)	3879(1)	6710(1)	8755(1)	86(1)
C(328)	3089(1)	6901(1)	8856(1)	145(1)
C(329)	3701(1)	6392(1)	8290(1)	159(1)
C(330)	3756(1)	6340(1)	11406(1)	90(1)
C(331)	3597(1)	5971(1)	11425(1)	96(1)
C(332)	4024(1)	6491(1)	12117(1)	129(1)
C(333)	6557(1)	6515(1)	10300(1)	67(1)

C(334)	6874(1)	6156(1)	10228(1)	93(1)
C(335)	6938(1)	6676(1)	11007(1)	105(1)
C(336)	6089(1)	7577(1)	7968(1)	63(1)
C(337)	5403(1)	7731(1)	7587(1)	79(1)
C(338)	5459(1)	8077(1)	7450(1)	99(1)
C(339)	6130(1)	8269(1)	7666(1)	108(1)
C(340)	6782(1)	8111(1)	8039(1)	94(1)
C(341)	6782(1)	7768(1)	8205(1)	74(1)
C(342)	4642(1)	7526(1)	7340(1)	98(1)
C(343)	3833(1)	7720(1)	7454(1)	171(1)
C(344)	4674(1)	7429(1)	6523(1)	136(1)
C(345)	6157(2)	8644(1)	7505(1)	157(1)
C(346)	5927(1)	8853(1)	8100(1)	162(1)
C(347)	6340(1)	8742(1)	6807(1)	135(1)
C(348)	7511(1)	7613(1)	8641(1)	83(1)
C(349)	8311(1)	7642(1)	8232(1)	116(1)
C(350)	7629(1)	7759(1)	9414(1)	134(1)
C(15C)	6341(3)	6626(1)	7754(2)	51(1)
C(16C)	5998(2)	6504(1)	8404(2)	51(1)
C(17C)	5680(2)	6718(1)	8928(2)	55(1)
C(18C)	5709(4)	7064(1)	8802(2)	55(1)
C(19C)	6038(3)	7195(1)	8162(2)	58(1)
C(20C)	6347(4)	6977(1)	7651(3)	53(1)
C(21C)	5267(2)	6597(1)	9608(2)	59(1)
C(22C)	5740(2)	6533(1)	10264(2)	62(1)
C(23C)	5355(2)	6420(2)	10903(2)	68(1)
C(24C)	4522(2)	6374(2)	10914(2)	74(1)
C(25C)	4065(3)	6434(2)	10261(2)	71(1)
C(26C)	4403(2)	6570(2)	9627(2)	67(1)
C(27C)	6671(2)	6586(1)	10329(3)	69(1)
C(28C)	6865(4)	6902(1)	10780(4)	80(2)
C(29C)	7048(4)	6279(1)	10752(4)	93(2)
C(30C)	4137(4)	6237(1)	11619(2)	93(1)
C(31C)	4332(7)	6451(1)	12268(1)	90(2)
C(32C)	4275(8)	5877(1)	11708(2)	129(2)
C(33C)	3864(3)	6598(1)	8922(2)	73(1)

C(34C)	4095(3)	6846(1)	8351(2)	109(2)
C(35C)	3754(3)	6245(1)	8585(3)	112(2)
C(36C)	5995(2)	7569(1)	8065(1)	69(1)
C(37C)	6659(2)	7775(1)	8316(2)	78(1)
C(38C)	6602(3)	8124(1)	8210(4)	90(1)
C(39C)	5895(3)	8272(1)	7902(4)	103(1)
C(40C)	5260(3)	8066(1)	7655(4)	96(1)
C(41C)	5298(2)	7718(1)	7706(3)	83(1)
C(42C)	7442(2)	7615(2)	8673(2)	83(1)
C(43C)	7482(1)	7654(1)	9509(1)	101(2)
C(44C)	8211(1)	7764(1)	8347(1)	88(2)
C(45C)	5843(3)	8654(1)	7781(3)	136(1)
C(46C)	5588(1)	8730(1)	7013(1)	165(2)
C(47C)	6533(1)	8828(1)	8134(1)	162(1)
C(48C)	4563(2)	7505(2)	7428(2)	95(1)
C(49C)	4312(2)	7580(3)	6627(1)	114(2)
C(50C)	3834(2)	7557(3)	7919(1)	116(2)
C(1X)	7239(2)	7740(1)	5967(2)	172(1)
C(2X)	7682(1)	7418(1)	6018(2)	163(1)
C(3X)	8313(1)	7379(1)	5470(2)	167(1)
C(4X)	8843(2)	7066(1)	5469(1)	183(1)
C(5X)	8861(2)	6830(1)	4817(2)	199(1)
C(6X)	9630(1)	6692(1)	4557(2)	196(1)
C(7X)	10348(2)	6916(1)	4703(3)	193(1)
C(1Y)	6989(2)	7730(1)	6141(3)	172(1)
C(2Y)	7697(2)	7691(1)	5702(3)	170(1)
C(3Y)	7946(2)	7333(1)	5812(3)	168(1)
C(4Y)	8634(2)	7253(1)	5298(3)	174(1)
C(5Y)	9105(2)	6939(1)	5565(2)	186(1)
C(6Y)	9853(2)	6920(2)	5119(2)	197(1)
C(7Y)	9564(3)	7006(2)	4388(2)	196(1)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [°] for 03316.

N(4)-C(2)	1.4733(13)	C(130)-C(131)	1.4539(19)
N(4)-C(4)	1.4779(12)	C(130)-C(132)	1.4935(19)
N(4)-C(6)	1.4799(13)	C(133)-C(135)	1.5086(18)
N(4)-V(1)	2.1486(7)	C(133)-C(134)	1.5107(17)
N(5)-V(1)	2.1623(8)	C(136)-C(141)	1.3995(17)
V(1)-N(3)	1.9520(8)	C(136)-C(137)	1.4026(16)
V(1)-N(1)	1.9555(8)	C(137)-C(138)	1.4016(16)
V(1)-N(2)	1.9576(7)	C(137)-C(142)	1.5148(18)
C(1)-N(1)	1.4703(12)	C(138)-C(139)	1.373(2)
C(1)-C(2)	1.5128(14)	C(139)-C(140)	1.382(2)
C(3)-N(2)	1.4636(13)	C(139)-C(145)	1.536(2)
C(3)-C(4)	1.4922(16)	C(140)-C(141)	1.3964(16)
C(5)-N(3)	1.4642(13)	C(141)-C(148)	1.5290(18)
C(5)-C(6)	1.5175(15)	C(142)-C(143)	1.5117(18)
N(1)-C(115)	1.4000(11)	C(142)-C(144)	1.5293(18)
C(115)-C(120)	1.3970(13)	C(145)-C(147)	1.400(3)
C(115)-C(116)	1.4065(13)	C(145)-C(146)	1.453(2)
C(116)-C(117)	1.3910(13)	C(148)-C(149)	1.5155(19)
C(117)-C(118)	1.3932(14)	C(148)-C(150)	1.5173(19)
C(117)-C(121)	1.5038(14)	N(2)-C(215)	1.3947(12)
C(118)-C(119)	1.3943(14)	C(215)-C(216)	1.4019(14)
C(119)-C(120)	1.3761(13)	C(215)-C(220)	1.4084(15)
C(119)-C(136)	1.4952(14)	C(216)-C(217)	1.3842(14)
C(121)-C(126)	1.3937(16)	C(217)-C(218)	1.3993(16)
C(121)-C(122)	1.3994(15)	C(217)-C(221)	1.5106(16)
C(122)-C(123)	1.4054(16)	C(218)-C(219)	1.3810(16)
C(122)-C(127)	1.5118(18)	C(219)-C(220)	1.3822(15)
C(123)-C(124)	1.3801(19)	C(219)-C(236)	1.5063(16)
C(124)-C(125)	1.3726(18)	C(221)-C(226)	1.3909(15)
C(124)-C(130)	1.5291(19)	C(221)-C(222)	1.4066(16)
C(125)-C(126)	1.3935(16)	C(222)-C(223)	1.4025(19)
C(126)-C(133)	1.5163(17)	C(222)-C(227)	1.5159(17)
C(127)-C(129)	1.5345(16)	C(223)-C(224)	1.3644(18)
C(127)-C(128)	1.5351(17)	C(224)-C(225)	1.3794(19)

C(224)-C(230)	1.539(2)	C(322)-C(323)	1.4076(18)
C(225)-C(226)	1.3827(18)	C(322)-C(327)	1.4998(19)
C(226)-C(233)	1.5111(17)	C(323)-C(324)	1.3598(18)
C(227)-C(228)	1.4918(19)	C(324)-C(325)	1.3738(18)
C(227)-C(229)	1.5390(17)	C(324)-C(330)	1.540(2)
C(230)-C(232)	1.449(2)	C(325)-C(326)	1.4006(18)
C(230)-C(231)	1.4694(18)	C(326)-C(333)	1.5052(17)
C(233)-C(234)	1.5053(18)	C(327)-C(328)	1.501(2)
C(233)-C(235)	1.5367(19)	C(327)-C(329)	1.535(2)
C(236)-C(241)	1.3980(15)	C(330)-C(332)	1.460(2)
C(236)-C(237)	1.4012(18)	C(330)-C(331)	1.4892(17)
C(237)-C(238)	1.3941(19)	C(333)-C(334)	1.5232(16)
C(237)-C(242)	1.5406(17)	C(333)-C(335)	1.5247(18)
C(238)-C(239)	1.3798(18)	C(336)-C(341)	1.3976(17)
C(239)-C(240)	1.3752(19)	C(336)-C(337)	1.4108(17)
C(239)-C(245)	1.545(2)	C(337)-C(338)	1.3986(19)
C(240)-C(241)	1.3797(18)	C(337)-C(342)	1.521(2)
C(241)-C(248)	1.5185(18)	C(338)-C(339)	1.362(2)
C(242)-C(244)	1.5142(19)	C(339)-C(340)	1.369(2)
C(242)-C(243)	1.5156(17)	C(339)-C(345)	1.522(2)
C(245)-C(246)	1.490(2)	C(340)-C(341)	1.3968(17)
C(245)-C(247)	1.4911(18)	C(341)-C(348)	1.509(2)
C(248)-C(249)	1.4855(16)	C(342)-C(344)	1.523(2)
C(248)-C(250)	1.5360(16)	C(342)-C(343)	1.539(2)
N(3)-C(315)	1.4016(13)	C(345)-C(347)	1.365(2)
N(3)-C(15C)	1.406(4)	C(345)-C(346)	1.422(2)
C(315)-C(316)	1.4024(15)	C(348)-C(350)	1.511(2)
C(315)-C(320)	1.4053(15)	C(348)-C(349)	1.523(2)
C(316)-C(317)	1.3857(15)	C(15C)-C(16C)	1.407(5)
C(317)-C(318)	1.3972(15)	C(15C)-C(20C)	1.409(5)
C(317)-C(321)	1.5003(16)	C(16C)-C(17C)	1.389(5)
C(318)-C(319)	1.3900(16)	C(17C)-C(18C)	1.393(4)
C(319)-C(320)	1.3884(16)	C(17C)-C(21C)	1.505(4)
C(319)-C(336)	1.4932(15)	C(18C)-C(19C)	1.396(5)
C(321)-C(322)	1.3981(16)	C(19C)-C(20C)	1.378(5)
C(321)-C(326)	1.4054(16)	C(19C)-C(36C)	1.498(4)

C(21C)-C(22C)	1.396(4)	C(1Y)-C(2Y)	1.430(6)
C(21C)-C(26C)	1.398(5)	C(2Y)-C(3Y)	1.488(5)
C(22C)-C(23C)	1.409(5)	C(3Y)-C(4Y)	1.516(6)
C(22C)-C(27C)	1.514(5)	C(4Y)-C(5Y)	1.527(5)
C(23C)-C(24C)	1.357(5)	C(5Y)-C(6Y)	1.485(5)
C(24C)-C(25C)	1.376(5)	C(6Y)-C(7Y)	1.415(5)
C(24C)-C(30C)	1.541(6)	C(2)-N(4)-C(4)	112.04(8)
C(25C)-C(26C)	1.402(6)	C(2)-N(4)-C(6)	111.90(8)
C(26C)-C(33C)	1.505(5)	C(4)-N(4)-C(6)	112.03(8)
C(27C)-C(28C)	1.518(6)	C(2)-N(4)-V(1)	107.31(6)
C(27C)-C(29C)	1.547(6)	C(4)-N(4)-V(1)	106.60(6)
C(30C)-C(32C)	1.456(4)	C(6)-N(4)-V(1)	106.54(6)
C(30C)-C(31C)	1.465(5)	N(3)-V(1)-N(1)	118.67(3)
C(33C)-C(34C)	1.487(5)	N(3)-V(1)-N(2)	118.43(3)
C(33C)-C(35C)	1.535(4)	N(1)-V(1)-N(2)	118.19(3)
C(36C)-C(41C)	1.397(5)	N(3)-V(1)-N(4)	82.99(3)
C(36C)-C(37C)	1.402(4)	N(1)-V(1)-N(4)	82.33(3)
C(37C)-C(38C)	1.403(5)	N(2)-V(1)-N(4)	82.90(3)
C(37C)-C(42C)	1.524(5)	N(3)-V(1)-N(5)	96.57(3)
C(38C)-C(39C)	1.373(6)	N(1)-V(1)-N(5)	97.57(3)
C(39C)-C(40C)	1.369(6)	N(2)-V(1)-N(5)	97.63(3)
C(39C)-C(45C)	1.536(5)	N(4)-V(1)-N(5)	179.43(3)
C(40C)-C(41C)	1.387(5)	N(1)-C(1)-C(2)	107.12(8)
C(41C)-C(48C)	1.519(6)	N(4)-C(2)-C(1)	108.54(8)
C(42C)-C(43C)	1.513(4)	N(2)-C(3)-C(4)	108.64(9)
C(42C)-C(44C)	1.520(5)	N(4)-C(4)-C(3)	109.30(8)
C(45C)-C(47C)	1.429(6)	N(3)-C(5)-C(6)	107.34(8)
C(45C)-C(46C)	1.454(5)	N(4)-C(6)-C(5)	109.66(8)
C(48C)-C(49C)	1.509(5)	C(115)-N(1)-C(1)	115.05(7)
C(48C)-C(50C)	1.521(5)	C(115)-N(1)-V(1)	129.84(6)
C(1X)-C(2X)	1.467(3)	C(1)-N(1)-V(1)	112.20(6)
C(2X)-C(3X)	1.464(3)	C(120)-C(115)-N(1)	122.40(8)
C(3X)-C(4X)	1.508(3)	C(120)-C(115)-C(116)	117.83(8)
C(4X)-C(5X)	1.504(3)	N(1)-C(115)-C(116)	119.75(8)
C(5X)-C(6X)	1.456(3)	C(117)-C(116)-C(115)	120.86(8)
C(6X)-C(7X)	1.472(4)	C(116)-C(117)-C(118)	119.65(9)

C(116)-C(117)-C(121)	122.70(9)	C(139)-C(138)-C(137)	123.84(13)
C(118)-C(117)-C(121)	117.65(9)	C(138)-C(139)-C(140)	116.87(12)
C(117)-C(118)-C(119)	120.20(9)	C(138)-C(139)-C(145)	121.13(15)
C(120)-C(119)-C(118)	119.48(9)	C(140)-C(139)-C(145)	121.99(15)
C(120)-C(119)-C(136)	120.70(9)	C(139)-C(140)-C(141)	122.66(13)
C(118)-C(119)-C(136)	119.81(9)	C(140)-C(141)-C(136)	118.73(11)
C(119)-C(120)-C(115)	121.95(9)	C(140)-C(141)-C(148)	120.05(12)
C(126)-C(121)-C(122)	120.44(10)	C(136)-C(141)-C(148)	121.21(10)
C(126)-C(121)-C(117)	119.81(9)	C(143)-C(142)-C(137)	112.22(11)
C(122)-C(121)-C(117)	119.42(10)	C(143)-C(142)-C(144)	110.11(11)
C(121)-C(122)-C(123)	118.21(11)	C(137)-C(142)-C(144)	113.74(11)
C(121)-C(122)-C(127)	121.84(10)	C(147)-C(145)-C(146)	121.45(18)
C(123)-C(122)-C(127)	119.94(10)	C(147)-C(145)-C(139)	114.55(16)
C(124)-C(123)-C(122)	121.95(11)	C(146)-C(145)-C(139)	114.71(14)
C(125)-C(124)-C(123)	118.25(11)	C(149)-C(148)-C(150)	110.93(12)
C(125)-C(124)-C(130)	121.38(13)	C(149)-C(148)-C(141)	111.80(11)
C(123)-C(124)-C(130)	120.36(12)	C(150)-C(148)-C(141)	111.39(11)
C(124)-C(125)-C(126)	122.22(13)	C(215)-N(2)-C(3)	113.94(8)
C(125)-C(126)-C(121)	118.82(11)	C(215)-N(2)-V(1)	130.84(6)
C(125)-C(126)-C(133)	118.94(11)	C(3)-N(2)-V(1)	111.53(6)
C(121)-C(126)-C(133)	122.24(10)	N(2)-C(215)-C(216)	121.21(9)
C(122)-C(127)-C(129)	111.48(11)	N(2)-C(215)-C(220)	121.62(9)
C(122)-C(127)-C(128)	112.32(10)	C(216)-C(215)-C(220)	117.14(9)
C(129)-C(127)-C(128)	108.63(10)	C(217)-C(216)-C(215)	121.69(10)
C(131)-C(130)-C(132)	115.51(12)	C(216)-C(217)-C(218)	119.14(10)
C(131)-C(130)-C(124)	109.38(13)	C(216)-C(217)-C(221)	121.67(10)
C(132)-C(130)-C(124)	112.65(13)	C(218)-C(217)-C(221)	118.76(9)
C(135)-C(133)-C(134)	111.58(11)	C(219)-C(218)-C(217)	120.82(10)
C(135)-C(133)-C(126)	112.26(11)	C(218)-C(219)-C(220)	119.22(10)
C(134)-C(133)-C(126)	111.74(11)	C(218)-C(219)-C(236)	122.54(10)
C(141)-C(136)-C(137)	120.31(10)	C(220)-C(219)-C(236)	118.16(10)
C(141)-C(136)-C(119)	120.13(10)	C(219)-C(220)-C(215)	121.97(10)
C(137)-C(136)-C(119)	119.56(10)	C(226)-C(221)-C(222)	120.05(11)
C(138)-C(137)-C(136)	117.50(11)	C(226)-C(221)-C(217)	121.51(10)
C(138)-C(137)-C(142)	120.56(11)	C(222)-C(221)-C(217)	118.30(9)
C(136)-C(137)-C(142)	121.93(10)	C(223)-C(222)-C(221)	117.81(11)

C(223)-C(222)-C(227)	119.36(11)	C(246)-C(245)-C(247)	113.28(13)
C(221)-C(222)-C(227)	122.81(11)	C(246)-C(245)-C(239)	109.96(13)
C(224)-C(223)-C(222)	122.71(13)	C(247)-C(245)-C(239)	113.14(12)
C(223)-C(224)-C(225)	117.95(12)	C(249)-C(248)-C(241)	111.65(11)
C(223)-C(224)-C(230)	120.37(13)	C(249)-C(248)-C(250)	111.12(10)
C(225)-C(224)-C(230)	121.60(12)	C(241)-C(248)-C(250)	111.76(10)
C(224)-C(225)-C(226)	122.29(12)	C(315)-N(3)-C(15C)	1.85(17)
C(225)-C(226)-C(221)	119.17(11)	C(315)-N(3)-C(5)	114.60(8)
C(225)-C(226)-C(233)	119.66(11)	C(15C)-N(3)-C(5)	114.91(16)
C(221)-C(226)-C(233)	121.10(11)	C(315)-N(3)-V(1)	130.16(6)
C(228)-C(227)-C(222)	112.08(11)	C(15C)-N(3)-V(1)	130.45(17)
C(228)-C(227)-C(229)	110.53(11)	C(5)-N(3)-V(1)	112.66(6)
C(222)-C(227)-C(229)	111.52(10)	N(3)-C(315)-C(316)	120.49(9)
C(232)-C(230)-C(231)	117.22(14)	N(3)-C(315)-C(320)	121.97(9)
C(232)-C(230)-C(224)	110.48(12)	C(316)-C(315)-C(320)	117.47(10)
C(231)-C(230)-C(224)	113.19(13)	C(317)-C(316)-C(315)	121.65(10)
C(234)-C(233)-C(226)	112.01(11)	C(316)-C(317)-C(318)	119.16(10)
C(234)-C(233)-C(235)	110.05(12)	C(316)-C(317)-C(321)	122.55(9)
C(226)-C(233)-C(235)	110.10(10)	C(318)-C(317)-C(321)	118.02(9)
C(241)-C(236)-C(237)	119.87(11)	C(319)-C(318)-C(317)	120.87(10)
C(241)-C(236)-C(219)	119.68(10)	C(320)-C(319)-C(318)	118.91(10)
C(237)-C(236)-C(219)	120.43(10)	C(320)-C(319)-C(336)	120.31(10)
C(238)-C(237)-C(236)	119.10(11)	C(318)-C(319)-C(336)	120.77(10)
C(238)-C(237)-C(242)	120.25(12)	C(319)-C(320)-C(315)	121.89(10)
C(236)-C(237)-C(242)	120.66(11)	C(322)-C(321)-C(326)	120.25(11)
C(239)-C(238)-C(237)	121.29(13)	C(322)-C(321)-C(317)	118.77(10)
C(240)-C(239)-C(238)	118.40(13)	C(326)-C(321)-C(317)	120.97(10)
C(240)-C(239)-C(245)	122.28(12)	C(321)-C(322)-C(323)	118.25(11)
C(238)-C(239)-C(245)	119.26(13)	C(321)-C(322)-C(327)	121.78(11)
C(239)-C(240)-C(241)	122.59(12)	C(323)-C(322)-C(327)	119.98(11)
C(240)-C(241)-C(236)	118.70(11)	C(324)-C(323)-C(322)	122.54(12)
C(240)-C(241)-C(248)	120.02(10)	C(323)-C(324)-C(325)	118.29(12)
C(236)-C(241)-C(248)	121.14(11)	C(323)-C(324)-C(330)	119.04(12)
C(244)-C(242)-C(243)	110.85(11)	C(325)-C(324)-C(330)	122.65(12)
C(244)-C(242)-C(237)	112.55(11)	C(324)-C(325)-C(326)	122.57(12)
C(243)-C(242)-C(237)	110.68(10)	C(325)-C(326)-C(321)	118.04(11)

C(325)-C(326)-C(333)	120.56(11)	C(16C)-C(15C)-C(20C)	117.1(4)
C(321)-C(326)-C(333)	121.37(11)	C(17C)-C(16C)-C(15C)	122.1(4)
C(322)-C(327)-C(328)	113.56(13)	C(16C)-C(17C)-C(18C)	118.4(4)
C(322)-C(327)-C(329)	110.40(12)	C(16C)-C(17C)-C(21C)	123.5(3)
C(328)-C(327)-C(329)	110.32(12)	C(18C)-C(17C)-C(21C)	118.0(3)
C(332)-C(330)-C(331)	115.25(12)	C(17C)-C(18C)-C(19C)	121.4(4)
C(332)-C(330)-C(324)	114.40(13)	C(20C)-C(19C)-C(18C)	118.9(3)
C(331)-C(330)-C(324)	111.99(12)	C(20C)-C(19C)-C(36C)	124.3(3)
C(326)-C(333)-C(334)	111.18(11)	C(18C)-C(19C)-C(36C)	116.8(3)
C(326)-C(333)-C(335)	115.10(11)	C(19C)-C(20C)-C(15C)	122.0(4)
C(334)-C(333)-C(335)	109.93(10)	C(22C)-C(21C)-C(26C)	117.7(3)
C(341)-C(336)-C(337)	120.35(11)	C(22C)-C(21C)-C(17C)	120.3(3)
C(341)-C(336)-C(319)	120.67(10)	C(26C)-C(21C)-C(17C)	121.8(3)
C(337)-C(336)-C(319)	118.99(10)	C(21C)-C(22C)-C(23C)	120.4(3)
C(338)-C(337)-C(336)	117.14(13)	C(21C)-C(22C)-C(27C)	122.3(3)
C(338)-C(337)-C(342)	122.33(13)	C(23C)-C(22C)-C(27C)	117.3(3)
C(336)-C(337)-C(342)	120.53(12)	C(24C)-C(23C)-C(22C)	122.3(4)
C(339)-C(338)-C(337)	123.85(15)	C(23C)-C(24C)-C(25C)	116.7(4)
C(338)-C(339)-C(340)	117.49(13)	C(23C)-C(24C)-C(30C)	120.2(4)
C(338)-C(339)-C(345)	121.67(17)	C(25C)-C(24C)-C(30C)	123.0(4)
C(340)-C(339)-C(345)	120.84(17)	C(24C)-C(25C)-C(26C)	123.4(4)
C(339)-C(340)-C(341)	122.82(15)	C(21C)-C(26C)-C(25C)	118.7(3)
C(340)-C(341)-C(336)	118.34(13)	C(21C)-C(26C)-C(33C)	120.3(3)
C(340)-C(341)-C(348)	120.00(13)	C(25C)-C(26C)-C(33C)	119.0(4)
C(336)-C(341)-C(348)	121.65(11)	C(22C)-C(27C)-C(28C)	109.5(4)
C(337)-C(342)-C(344)	110.45(13)	C(22C)-C(27C)-C(29C)	106.7(4)
C(337)-C(342)-C(343)	111.49(13)	C(28C)-C(27C)-C(29C)	108.9(4)
C(344)-C(342)-C(343)	109.14(12)	C(32C)-C(30C)-C(31C)	117.2(3)
C(347)-C(345)-C(346)	127.29(14)	C(32C)-C(30C)-C(24C)	111.7(5)
C(347)-C(345)-C(339)	117.80(16)	C(31C)-C(30C)-C(24C)	112.0(4)
C(346)-C(345)-C(339)	114.77(16)	C(34C)-C(33C)-C(26C)	118.6(4)
C(341)-C(348)-C(350)	112.32(13)	C(34C)-C(33C)-C(35C)	111.1(3)
C(341)-C(348)-C(349)	111.95(12)	C(26C)-C(33C)-C(35C)	108.5(4)
C(350)-C(348)-C(349)	110.48(12)	C(41C)-C(36C)-C(37C)	119.0(3)
N(3)-C(15C)-C(16C)	120.7(3)	C(41C)-C(36C)-C(19C)	120.2(3)
N(3)-C(15C)-C(20C)	122.2(3)	C(37C)-C(36C)-C(19C)	120.8(3)

C(36C)-C(37C)-C(38C)	119.3(3)
C(36C)-C(37C)-C(42C)	119.5(3)
C(38C)-C(37C)-C(42C)	121.1(4)
C(39C)-C(38C)-C(37C)	121.7(4)
C(40C)-C(39C)-C(38C)	117.6(3)
C(40C)-C(39C)-C(45C)	120.9(4)
C(38C)-C(39C)-C(45C)	121.3(4)
C(39C)-C(40C)-C(41C)	123.2(4)
C(40C)-C(41C)-C(36C)	118.9(4)
C(40C)-C(41C)-C(48C)	120.2(4)
C(36C)-C(41C)-C(48C)	120.8(3)
C(43C)-C(42C)-C(44C)	110.6(3)
C(43C)-C(42C)-C(37C)	111.6(3)
C(44C)-C(42C)-C(37C)	110.3(4)
C(47C)-C(45C)-C(46C)	119.8(4)
C(47C)-C(45C)-C(39C)	112.4(4)
C(46C)-C(45C)-C(39C)	110.4(4)
C(49C)-C(48C)-C(41C)	111.7(5)
C(49C)-C(48C)-C(50C)	110.8(3)
C(41C)-C(48C)-C(50C)	110.2(5)
C(3X)-C(2X)-C(1X)	113.8(2)
C(2X)-C(3X)-C(4X)	120.1(2)
C(5X)-C(4X)-C(3X)	123.3(2)
C(6X)-C(5X)-C(4X)	122.6(2)
C(5X)-C(6X)-C(7X)	112.9(3)
C(1Y)-C(2Y)-C(3Y)	104.3(4)
C(2Y)-C(3Y)-C(4Y)	108.7(3)
C(3Y)-C(4Y)-C(5Y)	110.3(4)
C(6Y)-C(5Y)-C(4Y)	106.0(4)
C(7Y)-C(6Y)-C(5Y)	104.8(4)

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 03316. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2p^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(4)	51(1)	51(1)	34(1)	-4(1)	5(1)	4(1)
N(5)	60(1)	53(1)	40(1)	-8(1)	7(1)	-3(1)
V(1)	46(1)	37(1)	34(1)	0(1)	8(1)	2(1)
C(1)	56(1)	70(1)	43(1)	-11(1)	15(1)	-1(1)
C(2)	73(1)	66(1)	33(1)	-1(1)	10(1)	1(1)
C(3)	79(1)	52(1)	61(1)	-4(1)	2(1)	-17(1)
C(4)	75(1)	50(1)	49(1)	-12(1)	2(1)	-4(1)
C(5)	78(1)	64(1)	52(1)	-1(1)	-2(1)	28(1)
C(6)	63(1)	67(1)	40(1)	-2(1)	-4(1)	16(1)
N(1)	49(1)	49(1)	35(1)	-3(1)	9(1)	-4(1)
C(115)	46(1)	45(1)	41(1)	3(1)	9(1)	-4(1)
C(116)	48(1)	43(1)	52(1)	0(1)	10(1)	1(1)
C(117)	54(1)	45(1)	62(1)	-3(1)	7(1)	-6(1)
C(118)	46(1)	54(1)	72(1)	-3(1)	1(1)	-6(1)
C(119)	49(1)	53(1)	55(1)	0(1)	9(1)	-1(1)
C(120)	59(1)	45(1)	47(1)	-2(1)	10(1)	1(1)
C(121)	51(1)	56(1)	75(1)	-6(1)	3(1)	-3(1)
C(122)	53(1)	49(1)	94(1)	-7(1)	3(1)	-7(1)
C(123)	87(1)	53(1)	104(1)	0(1)	-3(1)	-17(1)
C(124)	92(1)	66(1)	100(1)	-22(1)	-2(1)	-22(1)
C(125)	112(1)	67(1)	83(1)	-21(1)	3(1)	-22(1)
C(126)	79(1)	56(1)	78(1)	-15(1)	2(1)	-13(1)
C(127)	69(1)	56(1)	100(1)	1(1)	18(1)	-13(1)
C(128)	88(1)	81(1)	109(1)	16(1)	2(1)	-3(1)
C(129)	80(1)	101(1)	153(1)	23(1)	40(1)	12(1)
C(130)	133(1)	68(1)	125(1)	-28(1)	-2(1)	-23(1)
C(131)	152(1)	111(1)	250(2)	-103(1)	-47(1)	19(1)
C(132)	141(1)	83(1)	141(1)	-18(1)	-31(1)	-44(1)
C(133)	112(1)	62(1)	71(1)	-11(1)	6(1)	-22(1)
C(134)	137(1)	92(1)	123(1)	-29(1)	48(1)	-35(1)
C(135)	178(1)	107(1)	112(1)	36(1)	-37(1)	-38(1)

C(136)	45(1)	63(1)	74(1)	-4(1)	5(1)	-2(1)
C(137)	62(1)	66(1)	76(1)	-11(1)	-7(1)	9(1)
C(138)	63(1)	93(1)	111(1)	-17(1)	-23(1)	23(1)
C(139)	54(1)	109(1)	127(1)	-34(1)	-2(1)	24(1)
C(140)	56(1)	97(1)	122(1)	-23(1)	26(1)	-1(1)
C(141)	57(1)	74(1)	94(1)	-11(1)	21(1)	2(1)
C(142)	85(1)	87(1)	70(1)	8(1)	-5(1)	15(1)
C(143)	132(1)	120(1)	94(1)	-7(1)	17(1)	-16(1)
C(144)	153(2)	169(2)	83(1)	-7(1)	-16(1)	-18(1)
C(145)	88(1)	189(1)	220(2)	-54(1)	-16(1)	69(1)
C(146)	241(2)	172(1)	355(4)	71(2)	132(2)	149(1)
C(147)	98(1)	283(3)	720(5)	70(3)	183(2)	78(1)
C(148)	103(1)	83(1)	109(1)	15(1)	62(1)	16(1)
C(149)	172(2)	126(1)	86(1)	21(1)	39(1)	40(1)
C(150)	166(1)	100(1)	228(2)	37(1)	100(1)	-4(1)
N(2)	65(1)	37(1)	44(1)	1(1)	5(1)	-1(1)
C(215)	69(1)	36(1)	51(1)	-2(1)	17(1)	2(1)
C(216)	72(1)	42(1)	53(1)	5(1)	18(1)	3(1)
C(217)	91(1)	44(1)	55(1)	8(1)	22(1)	12(1)
C(218)	111(1)	47(1)	54(1)	11(1)	34(1)	2(1)
C(219)	95(1)	44(1)	65(1)	2(1)	35(1)	-2(1)
C(220)	76(1)	40(1)	63(1)	0(1)	24(1)	-5(1)
C(221)	104(1)	58(1)	47(1)	21(1)	22(1)	25(1)
C(222)	120(1)	73(1)	59(1)	23(1)	33(1)	35(1)
C(223)	150(1)	98(1)	62(1)	22(1)	28(1)	72(1)
C(224)	143(1)	126(1)	47(1)	26(1)	17(1)	79(1)
C(225)	132(1)	110(1)	45(1)	19(1)	15(1)	65(1)
C(226)	109(1)	76(1)	50(1)	19(1)	14(1)	40(1)
C(227)	121(1)	78(1)	76(1)	2(1)	36(1)	28(1)
C(228)	182(1)	79(1)	65(1)	-2(1)	39(1)	-2(1)
C(229)	180(1)	84(1)	136(1)	6(1)	90(1)	-4(1)
C(230)	163(1)	186(1)	59(1)	31(1)	8(1)	110(1)
C(231)	152(1)	247(2)	64(1)	22(1)	-6(1)	86(1)
C(232)	129(1)	483(3)	111(1)	114(2)	25(1)	144(1)
C(233)	102(1)	74(1)	74(1)	-5(1)	0(1)	33(1)
C(234)	128(1)	80(1)	233(2)	-29(1)	-32(1)	26(1)

C(235)	149(1)	131(1)	83(1)	-6(1)	38(1)	47(1)
C(236)	101(1)	48(1)	75(1)	-4(1)	46(1)	-12(1)
C(237)	125(1)	59(1)	87(1)	-7(1)	58(1)	-20(1)
C(238)	124(1)	73(1)	111(1)	-20(1)	77(1)	-19(1)
C(239)	141(1)	70(1)	113(1)	-16(1)	84(1)	-30(1)
C(240)	130(1)	54(1)	98(1)	-11(1)	71(1)	-24(1)
C(241)	121(1)	52(1)	76(1)	-3(1)	50(1)	-13(1)
C(242)	113(1)	64(1)	99(1)	-24(1)	61(1)	-17(1)
C(243)	185(2)	83(1)	101(1)	-19(1)	14(1)	-3(1)
C(244)	223(2)	65(1)	122(1)	-25(1)	-9(1)	12(1)
C(245)	148(1)	89(1)	153(1)	-24(1)	102(1)	-48(1)
C(246)	158(1)	180(2)	202(2)	-20(2)	66(1)	-67(1)
C(247)	193(1)	97(1)	275(2)	-46(1)	169(1)	-63(1)
C(248)	111(1)	52(1)	81(1)	-7(1)	49(1)	-9(1)
C(249)	160(1)	121(1)	81(1)	-2(1)	58(1)	20(1)
C(250)	144(1)	85(1)	103(1)	15(1)	43(1)	21(1)
N(3)	52(1)	51(1)	39(1)	-1(1)	4(1)	12(1)
C(315)	44(1)	46(1)	47(1)	-3(1)	6(1)	4(1)
C(316)	56(1)	40(1)	55(1)	-4(1)	12(1)	2(1)
C(317)	55(1)	46(1)	53(1)	-7(1)	14(1)	-1(1)
C(318)	60(1)	45(1)	59(1)	-10(1)	16(1)	2(1)
C(319)	56(1)	47(1)	60(1)	-1(1)	9(1)	6(1)
C(320)	54(1)	51(1)	51(1)	5(1)	12(1)	5(1)
C(321)	67(1)	41(1)	62(1)	-12(1)	25(1)	-3(1)
C(322)	68(1)	66(1)	73(1)	-13(1)	25(1)	-15(1)
C(323)	69(1)	72(1)	86(1)	-11(1)	32(1)	-14(1)
C(324)	87(1)	60(1)	81(1)	-6(1)	46(1)	-1(1)
C(325)	81(1)	65(1)	70(1)	0(1)	33(1)	5(1)
C(326)	76(1)	42(1)	64(1)	-1(1)	32(1)	6(1)
C(327)	64(1)	109(1)	86(1)	1(1)	12(1)	-37(1)
C(328)	112(1)	213(2)	107(2)	11(1)	-4(1)	40(1)
C(329)	187(2)	172(1)	115(1)	-54(1)	-22(1)	-35(1)
C(330)	99(1)	78(1)	99(1)	5(1)	55(1)	-9(1)
C(331)	120(1)	72(1)	102(1)	4(1)	60(1)	-5(1)
C(332)	180(1)	117(1)	100(1)	-26(1)	88(1)	-45(1)
C(333)	74(1)	67(1)	60(1)	10(1)	24(1)	11(1)

C(334)	97(1)	79(1)	107(1)	16(1)	30(1)	37(1)
C(335)	90(1)	133(1)	92(1)	-24(1)	16(1)	11(1)
C(336)	75(1)	47(1)	68(1)	-2(1)	26(1)	15(1)
C(337)	91(1)	69(1)	77(1)	15(1)	26(1)	30(1)
C(338)	136(1)	74(1)	90(1)	20(1)	34(1)	51(1)
C(339)	178(1)	48(1)	104(1)	11(1)	53(1)	24(1)
C(340)	141(1)	43(1)	102(1)	0(1)	41(1)	-4(1)
C(341)	98(1)	40(1)	85(1)	-8(1)	30(1)	1(1)
C(342)	90(1)	105(1)	99(1)	24(1)	-7(1)	32(1)
C(343)	91(1)	214(2)	207(2)	6(2)	11(1)	56(1)
C(344)	129(1)	164(2)	112(1)	-2(1)	-12(1)	6(1)
C(345)	274(2)	49(1)	155(1)	17(1)	60(1)	46(1)
C(346)	218(2)	57(1)	219(1)	-18(1)	85(1)	25(1)
C(347)	183(2)	67(1)	157(1)	34(1)	27(1)	-19(1)
C(348)	89(1)	56(1)	104(1)	-12(1)	10(1)	-15(1)
C(349)	103(1)	122(1)	126(1)	-1(1)	29(1)	-5(1)
C(350)	176(2)	139(2)	88(1)	-8(1)	8(1)	22(2)
C(15C)	51(2)	50(1)	51(1)	-2(1)	10(1)	4(2)
C(16C)	54(2)	48(1)	52(1)	-5(1)	12(1)	2(1)
C(17C)	60(1)	48(1)	58(1)	-8(1)	17(1)	-2(1)
C(18C)	59(2)	49(1)	59(1)	-7(1)	14(1)	1(2)
C(19C)	63(2)	50(1)	62(1)	-2(1)	16(1)	6(1)
C(20C)	54(2)	52(1)	54(1)	1(1)	10(1)	4(2)
C(21C)	68(1)	48(2)	65(1)	-11(1)	28(1)	-2(1)
C(22C)	71(1)	54(2)	64(1)	0(1)	31(1)	2(1)
C(23C)	79(1)	60(3)	70(1)	-3(2)	37(1)	-2(2)
C(24C)	82(1)	68(2)	77(1)	-5(1)	43(1)	-10(2)
C(25C)	75(1)	62(2)	80(1)	-15(1)	37(1)	-9(2)
C(26C)	70(1)	61(2)	72(1)	-18(1)	29(1)	-12(2)
C(27C)	67(1)	76(2)	68(2)	11(1)	28(1)	13(2)
C(28C)	61(3)	100(1)	79(4)	-2(2)	-9(3)	11(2)
C(29C)	99(2)	99(1)	82(4)	29(2)	9(2)	16(2)
C(30C)	102(2)	89(1)	94(1)	12(1)	57(1)	-8(2)
C(31C)	108(5)	99(2)	64(1)	27(1)	34(3)	36(4)
C(32C)	161(7)	87(1)	147(4)	26(1)	70(5)	-17(3)
C(33C)	70(2)	76(1)	75(1)	-23(1)	25(1)	-32(2)

C(34C)	69(4)	140(2)	116(2)	35(1)	-19(3)	-57(2)
C(35C)	151(6)	88(1)	98(3)	-46(1)	8(3)	-15(2)
C(36C)	83(1)	52(1)	74(2)	3(1)	22(1)	11(1)
C(37C)	100(1)	47(1)	88(2)	-3(1)	21(1)	2(1)
C(38C)	129(1)	49(1)	96(2)	3(2)	41(1)	3(1)
C(39C)	150(1)	58(1)	105(2)	6(1)	45(2)	30(1)
C(40C)	127(1)	72(1)	92(2)	13(2)	34(2)	40(1)
C(41C)	94(1)	71(1)	84(2)	11(1)	20(1)	26(1)
C(42C)	94(1)	60(2)	97(1)	-9(2)	10(1)	-5(1)
C(43C)	142(3)	67(5)	95(1)	1(3)	6(1)	17(4)
C(44C)	98(1)	56(4)	111(2)	-34(3)	9(1)	-25(2)
C(45C)	210(2)	57(1)	148(2)	9(2)	72(2)	40(1)
C(46C)	251(4)	88(3)	164(1)	61(2)	82(2)	23(4)
C(47C)	218(2)	57(1)	219(1)	-18(1)	85(1)	25(1)
C(48C)	85(1)	102(2)	99(1)	12(2)	9(1)	25(1)
C(49C)	101(3)	134(6)	107(1)	17(3)	-5(1)	28(4)
C(50C)	83(1)	137(6)	129(2)	24(5)	21(1)	35(3)
C(1X)	111(2)	247(2)	161(2)	76(2)	22(2)	-26(1)
C(2X)	122(1)	216(1)	152(1)	64(1)	7(1)	-49(1)
C(3X)	127(1)	216(1)	159(1)	57(1)	9(1)	-40(1)
C(4X)	146(1)	220(1)	183(1)	55(1)	13(1)	-34(1)
C(5X)	170(1)	223(1)	205(1)	52(1)	30(1)	-27(1)
C(6X)	174(1)	217(2)	202(2)	70(1)	54(1)	-34(1)
C(7X)	177(1)	212(2)	194(3)	50(2)	50(2)	-28(1)
C(1Y)	127(2)	233(2)	154(2)	70(2)	1(1)	-28(1)
C(2Y)	131(1)	220(1)	160(1)	68(1)	6(1)	-40(1)
C(3Y)	129(1)	214(1)	161(1)	63(1)	3(1)	-46(1)
C(4Y)	138(1)	215(1)	167(1)	59(1)	8(1)	-47(1)
C(5Y)	152(1)	219(1)	189(1)	60(1)	22(1)	-37(1)
C(6Y)	166(1)	228(2)	199(1)	53(1)	38(1)	-38(1)
C(7Y)	166(2)	212(3)	213(1)	86(2)	44(1)	-41(2)

Table 10. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 03316.

	x	y	z	U(eq)
H(5A)	7632(3)	6370(1)	8620(3)	61
H(5B)	7856(3)	6023(1)	8759(2)	61
H(5C)	8469(2)	6257(1)	8510(3)	61
H(1A)	8781	5788	6186	67
H(1B)	9106	6137	5861	67
H(2A)	7746	6323	5596	69
H(2B)	7808	5953	5246	69
H(3A)	6170	5548	6921	77
H(3B)	6756	5223	6874	77
H(4A)	7588	5487	6050	70
H(4B)	6647	5539	5736	70
H(5A)	6793	6635	6242	78
H(5B)	5836	6583	6424	78
H(6A)	5905	6009	6181	68
H(6B)	6301	6192	5491	68
H(116)	8902	6738	7613	57
H(118)	11367	6612	8091	69
H(120)	10084	5908	6895	60
H(123)	10795	7836	8078	98
H(125)	10185	7383	9958	105
H(127)	10358	7123	6889	89
H(12A)	10286	7616	6154	139
H(12B)	10431	7845	6881	139
H(12C)	9594	7630	6758	139
H(12D)	11603	7327	6411	164
H(12E)	11804	7139	7185	164
H(12F)	11796	7541	7153	164
H(130)	10848	7908	10055	131
H(13A)	9567	8084	9624	260
H(13B)	9973	8282	8960	260

H(13C)	10175	8395	9802	260
H(13D)	12019	7954	9382	184
H(13E)	11713	8318	9634	184
H(13F)	11535	8195	8794	184
H(133)	9742	6580	9136	98
H(13G)	8765	6635	10049	174
H(13H)	8545	6875	9352	174
H(13I)	8959	7030	10104	174
H(13J)	10185	6474	10375	201
H(13K)	10500	6855	10459	201
H(13L)	10934	6604	9903	201
H(138)	12735	5465	8342	108
H(140)	13114	5861	6353	109
H(142)	10947	5967	8694	97
H(14A)	10543	5448	9170	173
H(14B)	11236	5262	8715	173
H(14C)	10473	5447	8281	173
H(14D)	12192	6027	9434	204
H(14E)	12271	5626	9494	204
H(14F)	11517	5816	9859	204
H(145)	14084	5435	7778	200
H(14G)	13177	4999	7656	378
H(14H)	14135	4921	7538	378
H(14I)	13488	4946	6835	378
H(14J)	14430	5765	6864	542
H(14K)	14255	5458	6302	542
H(14L)	14946	5423	6968	542
H(148)	11412	6446	6362	116
H(14M)	11415	6294	5103	190
H(14N)	11061	5994	5585	190
H(14O)	11990	5976	5313	190
H(15A)	12795	6638	6513	242
H(15B)	12426	6700	5682	242
H(15C)	13053	6395	5857	242
H(216)	8500	5494	8468	66
H(218)	7315	4862	9815	83

H(220)	6073	5265	8034	71
H(223)	10376	4563	9694	123
H(225)	9949	5300	11130	114
H(227)	8535	4697	8524	109
H(22A)	9524	4547	7690	161
H(22B)	10251	4611	8314	161
H(22C)	9694	4919	8003	161
H(22A)	8873	4120	8434	195
H(22B)	8605	4206	9255	195
H(22C)	9567	4159	9097	195
H(230)	11114	4569	10905	163
H(23A)	10572	4810	11920	232
H(23B)	11086	5147	11782	232
H(23C)	11566	4804	11982	232
H(23D)	11740	4860	10012	361
H(23E)	12308	4835	10766	361
H(23F)	11834	5178	10552	361
H(233)	8128	5618	10164	100
H(23G)	8675	6030	10985	223
H(23H)	9328	5940	10376	223
H(23I)	9453	5793	11201	223
H(23J)	7703	5607	11408	180
H(23K)	8437	5350	11631	180
H(23L)	7691	5236	11065	180
H(238)	4037	4904	9895	120
H(240)	4875	4134	8709	110
H(242)	5853	5427	9699	108
H(24A)	5793	5163	10862	184
H(24B)	4820	5242	10867	184
H(24C)	5477	5544	10903	184
H(24D)	4634	5598	9036	206
H(24E)	4762	5808	9791	206
H(24F)	4099	5508	9732	206
H(245)	3301	4369	9883	152
H(24G)	2844	4714	8904	267
H(24H)	2298	4378	8936	267

H(24I)	2984	4414	8330	267
H(24J)	3963	3860	9673	274
H(24K)	3671	3881	8811	274
H(24L)	2995	3845	9425	274
H(248)	6848	4498	8384	96
H(24M)	6486	4273	7221	178
H(24N)	5974	4610	7364	178
H(24O)	5536	4250	7434	178
H(25A)	6732	3999	9086	164
H(25B)	6981	3912	8260	164
H(25C)	6045	3858	8492	164
H(316)	5998	6285	8497	60
H(318)	5531	7240	9117	65
H(320)	6613	7064	7186	62
H(323)	3311	6535	10057	90
H(325)	5415	6360	11258	85
H(327)	4249	6857	8468	104
H(32A)	2840	6965	8368	217
H(32B)	3212	7103	9150	217
H(32C)	2700	6758	9114	217
H(32D)	4226	6281	8189	238
H(32E)	3407	6454	7820	238
H(32F)	3355	6238	8565	238
H(330)	3199	6442	11280	108
H(33A)	3418	5893	10926	144
H(33B)	3161	5924	11769	144
H(33C)	4108	5854	11593	144
H(33D)	4111	6733	12051	194
H(33E)	4544	6386	12303	194
H(33F)	3595	6455	12475	194
H(333)	6769	6645	9873	80
H(33G)	7481	6154	10296	140
H(33H)	6707	6069	9734	140
H(33I)	6636	6015	10609	140
H(33J)	7544	6652	11018	157
H(33K)	6724	6563	11441	157

H(33L)	6792	6915	11016	157
H(338)	5004	8184	7190	119
H(340)	7256	8241	8192	113
H(342)	4638	7315	7643	118
H(34A)	3386	7629	7123	256
H(34B)	3914	7958	7340	256
H(34C)	3682	7697	7971	256
H(34D)	4754	7632	6226	204
H(34E)	4152	7320	6357	204
H(34F)	5138	7274	6462	204
H(345)	6756	8656	7679	189
H(34G)	6003	8730	8570	243
H(34H)	5343	8919	8021	243
H(34I)	6277	9055	8120	243
H(34J)	6727	8581	6602	202
H(34K)	6597	8966	6829	202
H(34L)	5829	8751	6488	202
H(348)	7389	7368	8697	99
H(34M)	8757	7521	8510	174
H(34N)	8464	7879	8188	174
H(34O)	8227	7543	7735	174
H(35A)	8089	7643	9685	201
H(35B)	7118	7729	9679	201
H(35C)	7755	7999	9381	201
H(16C)	5985	6269	8488	61
H(18C)	5500	7213	9159	66
H(20C)	6572	7066	7216	64
H(23M)	5691	6376	11341	82
H(25D)	3489	6380	10239	85
H(27C)	6900	6605	9826	83
H(28A)	7469	6934	10832	121
H(28B)	6645	6878	11274	121
H(28C)	6609	7097	10527	121
H(29A)	6950	6076	10454	139
H(29B)	6786	6254	11228	139
H(29C)	7647	6312	10844	139

H(30C)	3523	6261	11520	111
H(31A)	4392	6685	12106	134
H(31B)	4853	6375	12519	134
H(31C)	3882	6436	12611	134
H(32G)	4066	5760	11258	194
H(32H)	3981	5796	12135	194
H(32I)	4872	5834	11791	194
H(33M)	3303	6667	9077	87
H(34P)	3668	6849	7943	163
H(34Q)	4631	6783	8157	163
H(34R)	4140	7070	8575	163
H(35D)	3529	6094	8953	168
H(35E)	4293	6160	8441	168
H(35F)	3369	6256	8146	168
H(38C)	7065	8261	8355	108
H(40C)	4769	8165	7438	115
H(42C)	7428	7369	8556	100
H(43A)	8004	7558	9718	152
H(43B)	7012	7537	9714	152
H(43C)	7458	7894	9636	152
H(44A)	8708	7685	8631	132
H(44B)	8184	8010	8371	132
H(44C)	8235	7693	7827	132
H(45C)	5358	8725	8068	163
H(46A)	5535	8974	6950	248
H(46B)	5052	8622	6887	248
H(46C)	6006	8644	6686	248
H(47A)	6539	8791	8672	243
H(47B)	6482	9069	8029	243
H(47C)	7051	8743	7942	243
H(48C)	4732	7263	7464	114
H(49A)	3816	7449	6476	171
H(49B)	4767	7518	6313	171
H(49C)	4191	7820	6570	171
H(50A)	3395	7394	7783	174
H(50B)	3617	7786	7850	174

H(50C)	4020	7524	8441	174
H(1X1)	6847	7754	6363	259
H(1X2)	6935	7757	5483	259
H(1X3)	7640	7925	6021	259
H(2X1)	7953	7397	6522	196
H(2X2)	7274	7233	5953	196
H(3X1)	8694	7574	5525	200
H(3X2)	8027	7397	4971	200
H(4X1)	9423	7140	5579	219
H(4X2)	8686	6929	5898	219
H(5X1)	8503	6637	4931	239
H(5X2)	8582	6948	4388	239
H(6X1)	9559	6650	4016	236
H(6X2)	9743	6473	4805	236
H(7X1)	10809	6842	4410	290
H(7X2)	10519	6908	5232	290
H(7X3)	10193	7147	4563	290
H(1Y1)	6804	7964	6122	257
H(1Y2)	7140	7667	6657	257
H(1Y3)	6539	7584	5945	257
H(2Y1)	8151	7844	5876	204
H(2Y2)	7549	7738	5172	204
H(3Y1)	7464	7184	5700	202
H(3Y2)	8145	7296	6335	202
H(4Y1)	9023	7446	5285	208
H(4Y2)	8393	7216	4787	208
H(5Y1)	9268	6957	6101	223
H(5Y2)	8756	6736	5484	223
H(6Y1)	10284	7080	5309	236
H(6Y2)	10089	6690	5134	236
H(7Y1)	10040	7037	4078	294
H(7Y2)	9243	7215	4400	294
H(7Y3)	9210	6825	4181	294
