

Synthese von Heterocyclen mit Phosphor – Phosphor-Bindung: Reaktionen von Phosphano-substituierten Cyan(triphenylphosphoranyliden)methanen mit Dichlororganylphosphanen

Hansjörg Grützmacher* und Hans Pritzkow

Anorganisch-Chemisches Institut der Universität Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 270, D-6900 Heidelberg

Eingegangen am 16. Februar 1989

Key Words: Phosphanophosphonium salts / Phosphorus - phosphorus bonds

Die Reaktion der Phosphanyl-substituierten Cyan(triphenylphosphoranyliden)methane 3 und 6 mit Dichlororganylphosphanen und Natrium-tetraphenylborat oder Aluminium-trichlorid führt in hohen Ausbeuten zu den neuen Heterocyclen 7a, b und 10a, c, d mit Phosphor – Phosphor-Bindung. Diese besitzen ein gefaltetes Ringgerüst. Ihre Entstehung kann durch eine zweifache Umlagerung einer der Diisopropylamino-Gruppen oder der Cyan(triphenylphosphoranyliden)methyl-Gruppe erklärt werden. Eine weitere Funktionalisierung zu dem vicinalen Dichlor- $\lambda^3 \lambda^4$ -diphosphan-Derivat 11 ist möglich.

Heterocyclen mit Phosphor-Phosphor-Bindung sind Gegenstand fortwährenden Interesses¹⁻⁴). Wir berichten hier über eine ergiebige Synthese, die unter Phosphor-Phosphor-Verknüpfung zu bisher unbekannten monocyclischen Verbindungen führt. Phosphor-Ylide mit Phosphanyl-Substituenten am ylidischen Kohlenstoff sind lange bekannt^{5,6)}. Sie werden wie normale Phosphane oxidativ von Alkylhalogeniden am Phosphor der Phosphanyl-Gruppe angegriffen⁵⁾ und nicht am carbanoiden Zentrum des Moleküls. Die Reaktion von tertiären Alkyl- und Aminophosphanen mit Halogenorganylphosphanen läßt unter P-P-Verknüpfung Diphosphanium(1 +)-Salze entstehen⁷). Cyan(triphenylphosphoranyliden)methane verfügen über eine aktivierte Kohlenstoff-Stickstoff-Dreifachbindung. Dieses kann der IR-Absorption bei niedrigen Wellenzahlen ($\tilde{v}_{C=N} = 2130 \text{ cm}^{-1}$ für Ph₃P = CHCN⁸) entnommen werden. Uns erschien daher ein Ylid der allgemeinen Form $R_3P = C(CN)(PR'_2)$ als ein vielversprechender Kandidat zum gezielten Aufbau neuartiger Heterocyclen mit Phosphor-Phosphor-Bindung.

Wird das nach Bestmann et al. erzeugte Natrium-Salz 1 des Cyan(triphenylphosphoranyliden)methans⁹⁾ mit Chlorobis(diisopropylamino)phosphan (2) umgesetzt, so wird 3 nach Entfernen des Lösungsmittels und Umkristallisation aus Acetonitril als leuchtend gelber, luft- und feuchtigkeitsempfindlicher Feststoff erhalten. In geringem Maße (< 5%) tritt das Cumulen 4 auf, das bisher nicht analysenrein erhalten wurde und dessen Existenz nur durch ³¹P-NMR- und IR-Spektrum wahrscheinlich gemacht werden konnte¹⁰. In gleicher Weise kann 6 aus 1 und Dichlor(diisopropylamino)phosphan (**5a**) gewonnen werden.

Synthesis of Heterocycles with Phosphorus – Phosphorus Bond: Reactions of Phosphino-Substituted Cyano(triphenylphosphoranylidene)methanes with Dichloroorganylphosphines

The reaction of the phosphinyl-substituted cyano(triphenylphosphoranylidene)methanes 3 and 6 with dichloroorganylphosphines in the presence of sodium tetraphenylborate or aluminum trichloride leads to the new heterocycles 7a, b and 10a, c, d in high yields. The five-membered ring skeleton containing a phosphorus – phosphorus bond is, in contrast to known compounds with comparable features, folded. The formation of the heterocycles is best rationalized by a double rearrangement of one of the diisopropyl amino groups or the cyano(triphenylphosphoranylidene)methyl group, the latter one migrating preferentially. Further treatment of 7a with a solution of HCl in ether yields the vicinal dichloro- $\lambda^3\lambda^4$ -diphosphorus species 11.



6 weist im ³¹P-NMR-Spektrum bei 27 °C ein AMX-Spinsystem auf, welches das unsymmetrische 6B erwarten ließ. Die Einkristall-Röntgen-Strukturanalyse (Abb. 1) zeigt jedoch im Festkörper das – in der Zeichenebene symmetrische – Isomer 6A. Versuche, NMR-Spektren bei erhöhter Temperatur zu erhalten, scheitern an der Thermolabilität von 6. Wir nehmen an, daß 6 auch in Lösung die in Abb. 1 gezeigte asymmetrische Struktur hat, die einem verdrillten 6A entspricht.

Der P1-C1- und P3-C3-Abstand beträgt im Mittel 1.71 Å und liegt im Bereich der Abstände, die für resonanzstabilisierte Phosphor-Ylide gefunden werden¹¹. Mit 1.80 Å als



Abb. 1. Molekülstruktur von 6 im Kristall

Mittelwert ist der C1-P2- bzw. C3-P2-Abstand etwas kürzer als eine normale P(III) – C(sp²)-Bindung (1.83–1.86 Å¹²⁾). Die Winkelsumme am zentralen Phosphor P2 ergibt 316° und läßt keine nennenswerte Einebnung der pyramidalen Umgebung des Phosphor-Atoms erkennen. Die Bindungsverkürzung an P2 ist somit elektrostatischen Effekten und nicht (pd) π -Überlappungen zuzuschreiben⁵⁾. Die Atomparameter sind in Tab. 1, Bindungslängen und -winkel in Tab. 2 zusammengefaßt.

3 reagiert mit den Dichlorphosphanen 5a, b in Gegenwart von Natrium-tetraphenylborat (NaBPh₄) nahezu quantitativ zu den Ringverbindungen 7a, b mit einem bisher unbekannten P-P-N-C-C-Gerüst. Ist in der Reaktionslösung kein NaBPh₄ vorhanden, so wird mit 5a keine Reaktion, mit 5b die Entstehung mehrerer Produkte, unter anderen Ph(*i*Pr₂N)PCl, beobachtet.



7a und b sind wenig hydrolyseempfindliche, farblose Festkörper, die nach Kristallisation aus Acetonitril oder Dimethoxyethan (DME) rein erhalten werden. Die Knüpfung einer Phosphor-Phosphor-Bindung wird im ³¹P-NMR-Spektrum durch die große Kopplungskonstante angezeigt (7a: $J_{PP} = 418$ Hz; 7b: J = 410 Hz). Sie ist gleichzeitig Indiz für die Entstehung eines Chlorphosphoniumphosphans und damit einer Umlagerung, denn in sterisch vergleichbaren Phosphoniumchlorphosphanen wie [Me(iPr_2N)₂P-P(N*i*-Pr₂)Cl][⊕] werden kleinere Kopplungen beobachtet¹³.

Tab. 1. Atomparameter für 6

Atom	x	Y	2	Ū
P1	0.20263(12)	0.37073(6)	0.36393(8)	0.043
P.2	0.19725(12)	0.36142(6)	0.18955(8)	0.039
P3	0.24113(13)	0.24242(6)	0.11325(8)	0.048
C11	0.2148(3)	0.29532(19)	0.40224(17)	0.047
C12	0.3067(3)	0.25895(19)	0.38193(17)	0.059
C13	0.3211(3)	0.20103(19)	0.41199(17)	0.082
C14	0.2435(3)	0.17947(19)	0.46235(17)	0.083
C15	0.1516(3)	0.21584(19)	0.48267(17)	0.089
C16	0.1372(3)	0.27376(19)	0.45261(17)	0.074
C21	0.0445(3)	0.38368(14)	0.34928(17)	0.044
C22	-0.0046(3)	0.43415(14)	0.38090(17)	0.055
C23	-0.1275(3)	0.44328(14)	0.37019(17)	0.069
C24	-0.2012(3)	0.40195(14)	0.32787(17)	0.078
C25	-0.1521(3)	0.35148(14)	0.29625(17)	0.077
C26	-0.0292(3)	0.34234(14)	0.30696(17)	0.063
C31	0.2682(3)	0.42031(19)	0.43869(18)	0.047
C32	0.2820(3)	0.48069(19)	0.42042(18)	0.061
033	0.3345(3)	0.52027(19)	0.4/049(18)	0.088
C34	0.3/33(3)	0.439940(19)	0.55042(18)	0 103
C35	0.3355(3)	A 30051/10)	0.50000(10) 0.51282(18)	0.103
C30	0.3089(3)	0.39931(19) 0.3932(-2)	0.2824(3)	0.075
N1	0.4899(4)	0.3032(2)	0 3046 (3)	0.039
C2	0 3922(5)	0 4048(2)	0.2959(3)	0.080
<u> </u>	0.2982(4)	0.3067(2)	0.1574(3)	0.041
NO	0.5246(4)	0 3184 (2)	0 1598(3)	0.090
C4	0.4225(5)	0.3137(3)	0.1586(3)	0.059
N3	0.2027(4)	0.42191(18)	0.1313(2)	0.048
C5	0.3109(5)	0.4567(3)	0.1242(3)	0.064
C6	0.3285(6)	0.4667(3)	0.0385(3)	0.101
C7	0.3154(6)	0.5173(2)	0.1666(4)	0.098
C8	0.0881(5)	0.4511(3)	0.1010(4)	0.068
C9	0.0111(6)	0.4111(3)	0.0467(4)	0.131
C10	0.0215(6)	0.4747(3)	0.1654(4)	0.125
C41	0.2024(3)	0.24670(14)	0.0104(3)	0.048
C42	0.1345(3)	0.20306(14)	-0.0318(3)	0.060
C43	0.1098(3)	0.20855(14)	-0.1118(3)	0.072
C44	0.1532(3)	0.25768(14)	-0.1496(3)	0.085
C45	0.2212(3)	0.30132(14)	-0.1074(3)	0.087
C46	0.2458(3)	0.29583(14)	-0.0274(3)	0.070
C51	0.3519(3)	0.18400(17)	0.12919(15)	0.050
C52	0.3863(3)	0.14827(17)	0.06987(15)	0.063
C53	0.4759(3) 0.5309(3)	0.10546(17)	0.08582(15)	0.083
C55	0.4964(3)	0.13411(17)	0.22041(15)	0.083
C56	0.4069(3)	0.17692(17)	0.20446(15)	0.072
C61	0.1059(3)	0.21950(17)	0.1500(2)	0.052
C62	0.1097(3)	0.18105(17)	0.2134(2)	0.085
C63	0.0048(3)	0.16568(17)	0.2436(2)	0.108
C64	-0.1039(3) -0.1077(3)	0.18875(17)	0.2105(2)	0.092
C65	-0.0028(3)	0.24257(17)	0.1168(2)	0.061
NIA	0.7054(9)	0.5528(3)	0.1939(6)	0.147
C2A	0.6577(7)	0.4448(3)	0.1483(5)	0.100
C1A	0.6820(9)	0.5024(4)	0.1733(6)	0.127

Tab. 2. Ausgewählte Abstände [Å] und Winkel [°] für 6

P1 - C11 1.807(4)	P2 - C3 1.801(5)	C3 - P3 1.717(5)
P1 - C21 1.799(4)	P2 - N3 1.693(4)	N2 - C4 1.156(8)
P1 - C31 1.801(4)	C1 - C2 1.467(7)	P3 - C41 1.799(4)
P1 - C1 1.703(5)	N1 - C2 1.171(7)	P3 - C51 1.805(4)
P2 - C1 1.792(5)	C3 - C4 1.412(8)	P3 - C61 1.797(4)
C21 -P1 -C11 103.5(1)	N3 -P2 -C1 106.4(2)	P3 -C3 -P2 119.0(2)
C31 -P1 -C11 107.2(1)	N3 -P2 -C3 106.5(2)	P3 -C3 -C4 114.9(3)
C31 -P1 -C21 108.9(1)	P2 -C1 -P1 120.8(2)	N2 -C4 -C3 178.9(6)
C1 -P1 -C11 116.0(2)	C2 -C1 -P1 114.9(3)	C41 -P3 -C3 116.1(2)
C1 -P1 -C21 112.4(1)	C2 -C1 -P2 123.8(3)	C51 -P3 -C3 108.3(2)
C1 -P1 -C31 108.6(2)	N1 -C2 -C1 177.9(5)	C51 -P3 -C41 106.1(1)
C3 -P2 -C1 103.1(2)	C4 -C3 -P2 125.9(3)	

Zur Klärung der Bindungsverhältnisse wurde von 7a eine Einkristall-Röntgen-Strukturanalyse angefertigt, deren Ergebnis Abb. 2 zeigt. In Tab. 3 sind die Atomparameter, in Tab. 4 Bindungsabstände und -winkel aufgeführt. Auffällig ist die Faltung des Fünfringes, P2 weicht um 0.75 Å stark von der Ebene durch C1, C2, N1 und P1 ab. (max. Abweichungen ± 0.0013 Å). In literaturbekannten Heterocyclen wie 8, in denen die P-P-Bindung gleichfalls von Atomen im sp²-Hybridzustand flankiert ist, wird ein nahezu planares Molekülgerüst gefunden¹⁴. Ursache der strukturellen Be-



Abb. 2. Molekülstruktur des Kations von 7a im Kristall

sonderheiten von 7a könnte eine Wechselwirkung durch den Raum zwischen dem dreifach koordinierten carbanoiden Kohlenstoff-Atom C1 und dem vierfach koordinierten Onium-Zentrum P1 sein (Abstand C1 – P1: 2.616 Å, vander-Waals-Kontakt ca. 3.5 Å). Die Bindungsabstände innerhalb des Ringes (C1 – C2 1.48, C2 – N1 1.35, N1 – P1 1.60, P1 – P2 2.23, P2 – C1 1.81 Å) legen eine erhebliche Beteiligung der Resonanzstruktur 7aB nahe. In der nachstehenden Arbeit wird gezeigt, daß diese Effekte in verwandten Systemen zu einer Ringkontraktion führen¹⁵⁾. Die Winkelsumme am fast planaren Kohlenstoff-Atom C1 beträgt 357.7°. Der Phosphor – Phosphor-Abstand liegt im erwarteten Bereich für Einfachbindungen¹⁴⁾.



Wird 6 mit den Dichlorphosphanen 5a,c und NaBPh₄ in Tetrahydrofuran (THF), bzw. 5d und Aluminium-trichlorid in Methylenchlorid, umgesetzt, so entstehen nicht die Bicyclen 9, sondern 10a,c,d in guter Ausbeute. Offensichtlich wird im Reaktionskomplex die Ph₃P-C-CN-Einheit leichter als eine N*i*Pr₂-Gruppe übertragen. Strukturbeweisend ist das ³¹P-NMR-Spektrum, in dem keine ⁴J_{PP}-Kopplung zwischen diesem Phosphor-Atom der umgelagerten

Tab. 3. Atomparameter für 7a

Atom X Y Z Ū P1 0.10296(3) 0.12101(11) 0.42099(5) 0.03 P3 0.06657(3) 0.23358(11) 0.42898(14) 0.04 C1 0.01465(11) 0.3749(4) 0.01465(11) 0.3749(4) 0.04613(11) 0.3749(4) 0.0443(3) C2 0.13371(11) 0.1261(4) 0.48133(12) 0.03 N1 0.13779(9) 0.0643(3) 0.48133(12) 0.03 C3 0.13348(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.3448(17) -0.1286(4) 0.44722(19) 0.05 C7 0.11055(14) 0.2479(5) 0.3288(2) 0.109 C6 0.9663(14) 0.2479(5) 0.3288(2) 0.06 C10 0.1924(15) 0.3479(14) 0.455(3) 0.44722(19) 0.04 C11 0.19031(16) 0.4904(5) 0.5563(2) 0.0573(2) 0.057 C11 0.19033(16) 0.4902(2) 0.5704(11) 0.047 C14					
P1 0.10296(3) 0.12101(11) 0.42099(5) 0.03 P2 0.06657(3) 0.23358(11) 0.42993(5) 0.03 P3 0.06657(3) 0.23358(11) 0.48888(4) 0.03 C1 0.04749(3) 0.01865(11) 0.37469(4) 0.04 C1 0.1014(11) 0.2161(4) 0.48888(14) 0.02 C1 0.13371(11) 0.1364(14) 0.48133(12) 0.03 C2 0.1337(11) 0.1383(11) 0.0412(19) 0.05 C3 0.13418(17) 0.1265(14) 0.4055(2) 0.1328(11) C3 0.13277(11) 0.415(5) 0.3363(17) 0.05 C3 0.12277(11) 0.415(5) 0.4387(2) 0.06 C1 0.13051(4) 0.494(5) 0.4345(3) 0.13 C1 0.16929(13) 0.3898(5) 0.4337(2) 0.06 C1 0.1277(11) 0.3512(12) 0.07 C1 0.12716(10) 0.5813(2) 0.5531(2) 0.017 C1	Atom	x	Y	z	ប៊
P2 0.06536(3) 0.23358(11) 0.42993(5) 0.03 P3 0.06657(3) 0.23358(11) 0.48888(4) 0.03 C1 0.04749(3) 0.01865(11) 0.37469(4) 0.04 C1 0.04749(3) 0.01865(11) 0.37469(4) 0.04 C2 0.13371(11) 0.1261(4) 0.48588(14) 0.02 D1 0.13379(1) 0.13834(13) 0.48133(12) 0.03 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.33834(13) 0.44512(19) 0.07 C3 0.14334(14) 0.1073(5) 0.33363(17) 0.05 C4 0.1453(14) 0.4055(1) 0.3438(2) 0.169 C4 0.14377(11) 0.415(3) 0.4579(14) 0.05641(19) 0.07 C1 0.19053(16) 0.3387(4) 0.4345(3) 0.13 C1 0.19054(16) 0.433(2) 0.5664(11) 0.06 C1 0.19054(10) 0.3812(2) <t< td=""><td>P1</td><td>0.10296(3)</td><td>0.12101(11)</td><td>0.42009(5)</td><td>0.036</td></t<>	P1	0.10296(3)	0.12101(11)	0.42009(5)	0.036
P3 0.06657(3) 0.23358(11) 0.40088(4) 0.03 C1 0.0140(11) 0.2161(4) 0.40088(4) 0.02 C2 0.1337(11) 0.1169(4) 0.40088(14) 0.02 C1 0.1337(11) 0.10643(13) 0.40388(14) 0.03 C2 0.1333(11) 0.0071(3) 0.38834(13) 0.04 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.1334(14) 0.0052(5) 0.39867(19) 0.06 C5 0.36818(14) 0.705(5) 0.3288(2) 0.09 C6 0.06618(14) 0.1703(5) 0.3288(2) 0.07 C1 0.11057(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C6 0.06818(14) 0.73782(6) 0.3738(2) 0.06 C1 0.1037160 0.3436(2) 0.6504(11) 0.047 C1 0.1037161 0.4436(3) 0.431(3) 0.1411 0.097 C1 0.1037161 0.5434(2) 0.5506(11) 0.0328(1)	P2	0.08548(3)	0.30592(11)	0.42993(5)	0.038
C1 0.04749(3) 0.01865(11) 0.07469(4) 0.014 C1 0.10140(11) 0.2161(4) 0.48588(14) 0.02 C1 0.13371(11) 0.1643(3) 0.48133(12) 0.03 N1 0.13371(11) 0.107(13) 0.18834(13) 0.04 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.3987(19) 0.05 C4 0.13418(17) -0.1286(4) 0.44722(19) 0.05 C5 0.18921(13) 0.0419(5) 0.3288(2) 0.09 C6 0.0643(14) 0.0789(5) 0.28599(19) 0.07 C7 0.11055(14) 0.4789(14) 0.4307(2) 0.06 C8 0.0643(14) 0.782(6) 0.4803(2) 0.06 C10 0.1922(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C11 0.1905(16) 0.4304(5) 0.513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.6145(2) 0.5032(11) 0.06 C14 0.08478(18) 0.545(2) 0.5004(11) 0.09 <t< td=""><td>P3</td><td>0.06657(3)</td><td>0 23358(11)</td><td>0 48888 (4)</td><td>0 036</td></t<>	P 3	0.06657(3)	0 23358(11)	0 48888 (4)	0 036
C1 0.10140(11) 0.2161(4) 0.48588(14) 0.02 C2 0.13371(11) 0.1169(4) 0.51155(15) 0.02 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.38813(12) 0.03 N2 0.11533(11) 0.1071(3) 0.38813(12) 0.04 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39867(19) 0.06 C4 0.13418(17) -0.1286(4) 0.44722(19) 0.05 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C7 0.11055(14) 0.2497(5) 0.32884(2) 0.09 C8 0.05643(14) 0.0789(5) 0.328599(19) 0.07 N3 0.12377(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.5064(19) 0.04 C10 0.1924(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.5265(12) 0.3728(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.5265(12) 0.3728(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.5265(12) 0.3728(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.5654(2) 0.53039(11) 0.04 C16 0.11563(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C17 0.12718(18) 0.56145(5) 0.4345(3) 0.13 C17 0.12718(9) 0.5654(2) 0.50039(11) 0.04 C16 0.11563(9) 0.4924(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.53511(11) 0.07 C21 0.05388(9) 0.4952(3) 0.40543(8) 0.04 C22 -0.0006(6) 0.1926(3) 0.40543(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.31640(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.1367(3) 0.31873(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C26 -0.0544(7) -0.136(3) 0.51244(9) 0.05 C28 0.05864(7) -0.0287(3) 0.49533(9) 0.05 C29 0.05560(7) -0.0287(3) 0.56734(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.1356(3) 0.564808(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.0287(3) 0.56739(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.0287(3) 0.56739(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.0287(3) 0.56739(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.0287(3) 0.56739(9) 0.07 C30 0.0569(7) -0.0287(3) 0.56731(18) 0.04 C37 0.22443(13) 0.2145(5) 0.64425(17) 0.04 C37 0.22443(13) 0.2155(5) 0.58443(19) 0.04 C37 0.22443(13) 0.2477(17) 0.741(3) 0.3325(11) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1577(4) 0.5596(2) 0.107 C30 0.18679(14) 0.2253(5) 0.64225(19) 0.07 C30 0.18679(14) 0.2253(5) 0.28843(18) 0.04 C31 0.16430(15) -0.1673(5) 0.28843(18) 0.04 C32 0.24439(15) -0.1771(11) 0.7556(6) 0.129 C33 0.22443(14) 0.0270(5) 0.5864(18) 0.04 C34 0.17194(8) -0.0977(3) 0.3335(11) 0.04 C34 0.17194(8) -0.0977(2) 0.32637(11) 0.05 C30 0.22435(6)	c1	0.000007(0)	0.01965(11)	0.37469(4)	0.046
C1 0.10140(11) 0.1281(4) 0.08155(12) 0.02 N1 0.1377(11) 0.1269(4) 0.81155(15) 0.02 N1 0.1373(11) 0.0739(4) 0.48113(12) 0.03 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.13418(17) -0.1286(4) 0.4055(2) 0.13 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C6 0.06618(14) 0.2497(5) 0.3288(2) 0.09 C7 0.11055(14) 0.2497(5) 0.2288(2) 0.09 C8 0.05643(14) 0.0789(5) 0.26599(19) 0.07 N3 0.12377(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.6145(5) 0.4345(3) 0.13 C14 0.08872(19) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.16 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.50544(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.05384(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4307(3) 0.35405(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.44253(8) 0.03 C23 -0.00473(6) 0.3167(3) 0.31840(8) 0.04 C24 -0.0573(6) 0.3167(3) 0.31843(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1926(3) 0.43543(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1926(3) 0.43543(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1926(3) 0.43543(8) 0.04 C26 -0.05409(6) 0.1926(3) 0.5548(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.136(3) 0.55134(4) 0.03 C22 0.05560(7) -0.136(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C32 0.05560(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C32 0.05560(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.07 C33 0.16599(14) 0.1455(5) 0.5843(19) 0.07 C34 0.20546(14) 0.2573(5) 0.63731(18) 0.06 C35 0.16460(14) 0.2573(5) 0.63731(18) 0.06 C36 0.1935(13) -0.0270(5) 0.58640(18) 0.04 C36 0.1935(13) -0.0270(5) 0.58640(18) 0.04 C36 0.1935(13) -0.0270(5) 0.58640(18) 0.04 C36 0.1795(4) 0.0257(4) 0.33351(1) 0.05 C37 0.22433(19) -0.2351(3) 0.3325(11) 0.05 C34 0.2265(19) -0.3389(3) 0.22375(11) 0.05 C34 0.2265(19) -0.3384(3) 0.22375(11) 0.05 C34 0.22619(19) -0.3263(3) 0.22375(11) 0.05 C34 0.22435(6) -0.1937(3) 0.28187(C1	0.04/45(3)	0.01605(11)	0.3/403(4)	0.040
$ \begin{array}{c} C_2 & 0.1337(11) & 0.169(4) & 0.5169(13) & 0.0413(12) & 0.03\\ N1 & 0.11533(11) & 0.1071(3) & 0.38813(12) & 0.03\\ N2 & 0.14334(14) & 0.0052(5) & 0.39967(19) & 0.06\\ C4 & 0.13418(17) & -0.1286(4) & 0.44972(19) & 0.05\\ C5 & 0.18921(13) & 0.0419(6) & 0.44722(19) & 0.05\\ C6 & 0.06518(14) & 0.2797(5) & 0.3288(2) & 0.07\\ N3 & 0.12377(11) & 0.4115(3) & 0.45799(14) & 0.05\\ C9 & 0.16329(13) & 0.3984(5) & 0.56641(19) & 0.46\\ C10 & 0.19124(15) & 0.3782(6) & 0.4903(2) & 0.06\\ C11 & 0.19053(16) & 0.4904(5) & 0.52859(19) & 0.07\\ C12 & 0.1037(16) & 0.5187(4) & 0.4307(2) & 0.07\\ C13 & 0.08472(19) & 0.520(5) & 0.3728(2) & 0.07\\ C13 & 0.08472(19) & 0.520(5) & 0.3728(2) & 0.07\\ C14 & 0.08472(19) & 0.520(5) & 0.3728(2) & 0.16\\ C15 & 0.07827(9) & 0.3681(2) & 0.5503(11) & 0.04\\ C16 & 0.11563(9) & 0.4914(2) & 0.5503(11) & 0.04\\ C16 & 0.10136(9) & 0.4302(2) & 0.57049(11) & 0.09\\ C20 & 0.05244(9) & 0.4006(2) & 0.53531(11) & 0.09\\ C21 & 0.00538(9) & 0.4992(2) & 0.57049(11) & 0.09\\ C22 & -0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.40543(8) & 0.04\\ C23 & -0.04071(6) & 0.4177(3) & 0.3180(8) & 0.04\\ C24 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.31873(8) & 0.04\\ C25 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.33680(8) & 0.04\\ C26 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.36810(8) & 0.04\\ C27 & 0.06266(7) & -0.2287(3) & 0.55038(9) & 0.07\\ C13 & 0.05560(7) & -0.1356(3) & 0.5448(8) & 0.04\\ C27 & 0.06266(7) & -0.1356(3) & 0.5448(8) & 0.04\\ C27 & 0.06266(7) & -0.237(13) & 0.31819(8) & 0.04\\ C28 & 0.05844(7) & -0.150(3) & 0.56339(12) & 0.07\\ C13 & 0.05699(1) & -0.150(3) & 0.56343(19) & 0.06\\ C28 & 0.05844(7) & -0.1507(3) & 0.55038(9) & 0.07\\ C13 & 0.0569(7) & -0.0350(3) & 0.56340(18) & 0.04\\ C27 & 0.0626(7) & 0.0287(13) & 0.5633(12) & 0.06\\ C128 & 0.0784(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.07\\ C13 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.60485117) & 0.04\\ C24 & 0.077(15) & 0.0361(16) & 0.7587(10) & 0.19\\ C14 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.2436(11) & 0.05\\ C14 & 0.20546(14) & 0.2250(13) & 0.32576(11) & 0.05\\ C14 & 0.2185(2) & 90.3281(2) & 0.23355(11) & 0.04\\ C14 & 0.15952(9) & -0.2369(3) & 0.22375(11) & 0.$	CI 60	0.10140(11)	0.2161(4)	0.48588(14)	0.020
N1 0.13/9(9) 0.0643(3) 0.4813(2) 0.03 N2 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.14348(17) -0.1286(4) 0.4055(2) 0.13 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C6 0.06618(14) 0.2703(5) 0.3385(17) 0.05 C6 0.06543(14) 0.2797(5) 0.3288(2) 0.09 C8 0.05643(14) 0.0789(5) 0.28599(19) 0.07 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.0478(18) 0.5445(5) 0.43045(3) 0.13 C14 0.08872(19) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.16 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.56054(11) 0.04 C16 0.112563(9) 0.4992(2) 0.56054(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4062(3) 0.5131(1) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.44250(8) 0.04 C23 -0.00471(6) 0.3167(3) 0.31840(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.31860(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.38819(8) 0.04 C26 -0.01344(6) 0.1655(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.05607(7) -0.1336(3) 0.55038(9) 0.07 C13 0.06598(7) -0.0287(3) 0.55038(9) 0.07 C13 0.06598(7) -0.0287(3) 0.55038(9) 0.07 C13 0.06599(7) -0.0336(3) 0.56048(19) 0.05 C24 -0.0573(6) 0.3167(3) 0.31849(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.38819(8) 0.04 C26 -0.01344(6) 0.1655(3) 0.58408(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.1336(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.136(5) 0.5840(19) 0.05 C32 0.05560(7) -0.227(4) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0356(1) 0.55038(9) 0.07 C31 0.26546(14) 0.2555(5) 0.63731(18) 0.66 C32 0.05560(7) -0.136(5) 0.58403(19) 0.04 C33 0.16599(14) 0.1263(12) 0.5843(19) 0.04 C34 0.22545(14) 0.227(5) 0.5844(19) 0.05 C34 0.22645(14) 0.227(5) 0.5844(19) 0.05 C34 0.22645(7) 0.0899(3) 0.37271(10) 0.65 C34 0.1792(8) -0.2391(3) 0.37271(10) 0.65 C34 0.22645(19) -0.2391(3) 0.37271(10) 0.65 C34 0.17129(8) 0.2555(2) 0.28614(15) 0.05 C34 0.17129(8) 0.2351(12) 0.23576(11) 0.05 C34 0.22433(6) -0.1838(3) 0.23575(11)	C2	0.133/1(11)	0.1169(4)	0.51155(15)	0.028
N2 0.11533(11) 0.1071(3) 0.38834(13) 0.06 C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.13418(17) -0.1286(4) 0.4055(2) 0.13 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C6 0.06618(14) 0.2709(5) 0.3288(2) 0.07 N3 0.12377(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.6145(5) 0.4305(3) 0.130 C14 0.08872(19) 0.5290(5) 0.4305(3) 0.137 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.53039(11) 0.04 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.53039(11) 0.04 C16 0.11353(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C13 0.06478(18) 0.6145(5) 0.4305(3) 0.13 C14 0.08872(19) 0.5654(2) 0.50039(11) 0.04 C15 0.07827(9) 0.5654(2) 0.50039(11) 0.04 C16 0.11353(9) 0.4922(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.53531(11) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3266(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3266(3) 0.42250(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.318819(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C26 -0.03544(7) -0.1305(3) 0.56124(9) 0.05 C28 0.05264(7) -0.1305(3) 0.56124(9) 0.05 C28 0.05264(7) -0.1305(3) 0.56124(9) 0.05 C28 0.05260(7) -0.0150(3) 0.56124(9) 0.05 C28 0.05260(7) -0.0150(3) 0.56129(19) 0.05 C28 0.05260(7) -0.0150(3) 0.56129(19) 0.05 C28 0.0560(7) -0.0150(3) 0.56129(19) 0.05 C28 0.05660(7) -0.0150(3) 0.56129(19) 0.05 C28 0.05660(7) -0.0150(3) 0.56129(19) 0.05 C28 0.05660(7) -0.0150(3) 0.56129(12) 0.03 C30 0.15699(14) 0.1555(5) 0.64255(17) 0.045 C31 0.2266(14) 0.2253(5) 0.6425(17) 0.045 C32 0.05660(7) -0.1305(3) 0.56348(9) 0.05 C33 0.16599(14) 0.1557(4) 0.5596(2) 0.100 C34 0.22546(14) 0.2253(5) 0.6425(17) 0.045 C34 0.22546(14) 0.2555(2) 0.2864(15) 0.05 C34 0.1797(16) -0.1577(4) 0.5596(2) 0.100 C34 0.22546(14) 0.2555(2) 0.2864(15) 0.05 C34 0.22646(19) -0.2329(1) 0.3335(11) 0.045 C34 0.22646(19) -0.2651(3) 0.43185(11) 0.055 C34 0.22646(19) -0.2655(2) 0.28641(15) 0.05 C35 0.22435(6) -0.1977(3) 0.28036(11) 0.045 C55 0.02435(6) -0.1	NI	0.13//9(9)	0.0643(3)	0.48133(12)	0.036
C3 0.14334(14) 0.0052(5) 0.39967(19) 0.06 C4 0.14348(17) -0.1286(4) 0.4055(2) 0.13 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C7 0.11055(14) 0.2497(5) 0.3288(2) 0.09 C8 0.05643(14) 0.0789(5) 0.28599(19) 0.07 C9 0.16529(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4003(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.6145(5) 0.4304(2) 0.07 C14 0.08872(19) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.17 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.55034(11) 0.04 C16 0.11563(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5530(2) 0.57049(11) 0.04 C18 0.1035(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4062(3) 0.3180(8) 0.04 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.42250(8) 0.04 C23 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.31840(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.3360(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.3360(8) 0.04 C25 -0.05844(7) -0.1405(3) 0.51214(9) 0.05 C24 -0.0656(7) -0.1336(3) 0.54808(9) 0.07 C13 0.06266(7) -0.0287(3) 0.55038(9) 0.05 C24 -0.05590(7) -0.136(3) 0.55038(9) 0.05 C24 -0.05590(7) -0.136(3) 0.56124(9) 0.07 C31 0.06266(7) -0.0287(3) 0.55038(9) 0.05 C32 0.06405(7) 0.0899(3) 0.51214(9) 0.06 C32 0.06405(7) 0.0899(3) 0.51214(9) 0.06 C32 0.06405(7) 0.0899(3) 0.51214(9) 0.05 C34 0.20546(14) 0.2553(5) 0.63425(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2553(5) 0.63425(17) 0.04 C35 0.1660(14) 0.2573(5) 0.5844(7) 0.03 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58044(19) 0.04 C37 0.2443(13) 0.015(5) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.58044(19) 0.03 C34 0.2265(19) -0.2391(3) 0.32771(11) 0.06 C34 0.2265(19) -0.2391(3) 0.32771(11) 0.05 C35 0.02876(6) -0.1838(3) 0.22375(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1955(2	N2	0.11533(11)	0.1071(3)	0.38834(13)	0.044
C4 0.13418(17) -0.1286(4) 0.4055(2) 0.13 C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C6 0.06618(14) 0.1703(5) 0.33363(17) 0.05 C7 0.11055(14) 0.2497(5) 0.2285(2) 0.07 N3 0.12377(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C9 0.16529(13) 0.3398(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.529(5) 0.1728(2) 0.07 C13 0.08472(19) 0.529(5) 0.1728(2) 0.07 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.5003(11) 0.04 C16 0.11563(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5554(2) 0.60074(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.55531(11) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2655(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42250(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.1657(3) 0.31891(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.3680(8) 0.04 C26 -0.0344(6) 0.1906(3) 0.3680(8) 0.04 C27 0.06266(7) -0.1365(3) 0.3680(8) 0.04 C26 -0.0344(6) 0.1906(3) 0.51214(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.1365(3) 0.51244(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.1365(3) 0.55038(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.1365(3) 0.55038(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.1365(3) 0.55038(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.0287(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.0287(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.05609(7) -0.1365(5) 0.64225(19) 0.067 C30 0.05699(7) -0.1365(5) 0.64225(19) 0.05 C31 0.06405(7) -0.0287(3) 0.55038(9) 0.05 C32 0.06405(7) -0.0257(3) 0.45038(9) 0.05 C33 0.16599(14) 0.2553(5) 0.64225(19) 0.067 C34 0.20546(14) 0.2553(5) 0.64225(19) 0.067 C35 0.16460(14) 0.2553(5) 0.64252(19) 0.057 C36 0.1599(14) -0.2573(5) 0.64225(19) 0.057 C30 0.15699(14) -0.2573(5) 0.64252(19) 0.057 C31 0.16459(14) 0.2555(2) 0.28640(14) 0.057 C33 0.16459(14) -0.2573(1) 0.3335(11) 0.045 C34 0.2246(14) 0.2555(2) 0.2864(15) 0.057 C34 0.2245(13) 0.0157(5) 0.2864(14) 0.057 C34 0.2245(13) 0.02455(12) 0.737(11) 0.055 C35 0.18676(8) 0.1267(12) 0.24359(11) 0.057 C36 0.1945(8) 0.2555(2) 0.28614(15) 0.057 C37 0.22483(16) -0.2266(3) 0.24788(11) 0.057 C36 0.22483(19) -0.2	C3	0.14334(14)	0.0052(5)	0.39967(19)	0.063
C5 0.18921(13) 0.0419(6) 0.44722(19) 0.05 C6 0.08618(14) 0.1703(5) 0.3385(17) 0.05 C7 0.11055(14) 0.2497(5) 0.28599(19) 0.07 C8 0.05643(14) 0.0789(5) 0.28599(19) 0.07 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.17 C13 0.08478(18) 0.6445(5) 0.4345(3) 0.13 C14 0.08478(18) 0.6445(2) 0.55034(1) 0.04 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.56064(11) 0.09 C16 0.11563(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C18 0.10135(9) 0.4592(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.05384(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.05384(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.53531(1) 0.07 C12 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.42250(8) 0.03 C23 -0.0071(6) 0.4177(3) 0.31845(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.31973(8) 0.04 C25 -0.05404(9) 0.4006(1) 0.31973(8) 0.04 C26 -0.05404(6) 0.1906(3) 0.3680(8) 0.04 C27 0.06266(7) -0.2287(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.05560(7) -0.1336(3) 0.54808(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1336(3) 0.54808(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1336(3) 0.56739(9) 0.05 C23 0.05604(7) 0.0899(3) 0.51244(9) 0.03 C124 0.06599(14) 0.12551(4) 0.56334(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1336(5) 0.58404(7) 0.04 C27 0.05260(7) 0.0899(3) 0.51244(9) 0.03 C128 0.05560(7) -0.1336(5) 0.58408(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1336(5) 0.58408(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1557(4) 0.55038(9) 0.07 C10 0.05699(7) -0.1557(4) 0.55038(9) 0.07 C13 0.16400(14) 0.2253(5) 0.5840(18) 0.04 C14 0.15952(9) -0.4393(3) 0.32676(11) 0.05 C14 0.2459(14) 0.2253(5) 0.5840(18) 0.04 C15 0.1640(14) 0.2557(4) 0.25873(10) 0.19 C14 0.16592(9) -0.3439(3) 0.32676(11) 0.05 C14 0.16431(6) -0.1557(4) 0.28245(11) 0.05 C14 0.2459(14) 0.2255(1) 0.2455(1) 0.05 C14 0.2459(14) 0.2255(2) 0.2455(1) 0.05 C14 0.1815(8) 0.1067(2) 0.28517(10) 0.05 C15 0.18676(8) 0.1967(2) 0.28517(11) 0.05 C16 0.24857(9) -0.3266(3) 0.24788(11) 0.05 C17 0.24857(9) -0.3266(3) 0.24788(11) 0.05 C17 0.24857(9) -0.3266(3) 0.24788(1	C4	0.13418(17)	-0.1286(4)	0.4055(2)	0.133
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C5	0.18921(13)	0.0419(6)	0.44722(19)	0.051
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C6	0.08618(14)	0.1703(5)	0.33363(17)	0.055
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C7	0.11055(14)	0.2497(5)	0.3288(2)	0.092
N3 0.12377(11) 0.4115(3) 0.45799(14) 0.05 C9 0.16929(13) 0.3898(5) 0.50641(19) 0.04 C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.5487(4) 0.4307(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5287(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.6145(5) 0.4345(3) 0.13 C14 0.08872(19) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.16 C15 0.07827(9) 0.361(2) 0.5039(11) 0.04 C16 0.11553(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5654(2) 0.50582(11) 0.06 C18 0.10135(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4092(3) 0.40543(8) 0.04 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42520(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42520(8) 0.03 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.33405(8) 0.04 C25 -0.05409(9) 0.1655(3) 0.338405(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.338405(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.338405(8) 0.04 C25 -0.05409(7) -0.1255(3) 0.58214(9) 0.05 C24 -0.06733(6) 0.1906(3) 0.38405(8) 0.04 C25 -0.05844(7) -0.1405(3) 0.551214(9) 0.05 C28 0.05844(7) -0.1336(3) 0.5408(9) 0.07 C31 0.06625(7) -0.0136(3) 0.55038(9) 0.04 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66426(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2573(5) 0.66426(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2573(5) 0.66426(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2573(5) 0.64226(19) 0.07 C31 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66485(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2573(5) 0.65323(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2573(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2573(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2573(5) 0.65324(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.106 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58943(18) 0.06 C36 0.19136(13) -0.2651(3) 0.3335(11) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5595(2) 0.106 C34 0.20549(5) 0.1263(12) 0.7360(8) 0.106 C34 0.20549(5) 0.1263(12) 0.7360(8) 0.106 C34 0.1719(8) -0.2851(3) 0.33275(11) 0.05 C34 0.1719(8) -0.2651(3) 0.33257(11) 0.05 C34 0.18123(9) -0.2651(3) 0.43185(11) 0.05 C34 0.18123(9) -0.2651(3) 0.23273(15) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2935(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2935(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2935(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.26033(11) 0.05 C35 0.02435(C8	0.05643(14)	0.0789(5)	0.28599(19)	0.071
$\begin{array}{cccccc} C9 & 0.16929(13) & 0.3898(5) & 0.50641(19) & 0.04\\ C10 & 0.19124(15) & 0.3782(6) & 0.4903(2) & 0.06\\ C11 & 0.19053(16) & 0.4904(5) & 0.5513(2) & 0.07\\ C12 & 0.11037(16) & 0.5387(4) & 0.4307(2) & 0.07\\ C13 & 0.08478(18) & 0.6145(5) & 0.4345(3) & 0.13\\ C14 & 0.08872(19) & 0.5290(5) & 0.3728(2) & 0.16\\ C15 & 0.07827(9) & 0.3681(2) & 0.55064(11) & 0.05\\ C17 & 0.12718(9) & 0.5544(2) & 0.56064(11) & 0.05\\ C17 & 0.12718(9) & 0.5654(2) & 0.60074(11) & 0.09\\ C18 & 0.10135(9) & 0.5654(2) & 0.60074(11) & 0.09\\ C19 & 0.06398(9) & 0.4992(2) & 0.57049(11) & 0.09\\ C20 & 0.05244(9) & 0.4006(2) & 0.55331(11) & 0.07\\ C21 & 0.01358(6) & 0.2665(3) & 0.42250(8) & 0.03\\ C22 & -0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.40543(8) & 0.04\\ C23 & -0.04071(6) & 0.4177(3) & 0.34405(8) & 0.04\\ C24 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.31873(8) & 0.04\\ C25 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.38819(8) & 0.04\\ C26 & -0.01344(6) & 0.1655(3) & 0.38819(8) & 0.04\\ C26 & -0.05409(7) & -0.1405(3) & 0.5428(9) & 0.07\\ C30 & 0.05560(7) & -0.136(3) & 0.5428(9) & 0.07\\ C30 & 0.05699(7) & -0.1405(3) & 0.55038(9) & 0.06\\ C24 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.51444(9) & 0.03\\ C25 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.51444(9) & 0.03\\ C26 & 0.05560(7) & 0.0399(3) & 0.5144(9) & 0.03\\ C30 & 0.05699(7) & -0.0150(3) & 0.56329(12) & 0.03\\ C33 & 0.16599(14) & 0.2273(5) & 0.64226(19) & 0.06\\ C35 & 0.16450(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.06\\ C35 & 0.16460(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.06\\ C34 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.58943(19) & 0.04\\ C37 & 0.22443(13) & 0.015(5) & 0.58943(19) & 0.04\\ C38 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.109\\ C14 & 0.4589(4) & 0.0077(11) & 0.7656(6) & 0.286\\ C24 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7857(10) & 0.19\\ C34 & 0.20546(5) & 00677(11) & 0.556(6) & 0.286\\ C34 & 0.2701(7) & -0.2651(3) & 0.3333(11) & 0.04\\ C34 & 0.23431(9) & -0.2251(4) & 0.3277(11) & 0.55\\ C34 & 0.4719(8) & -0.0877(2) & 0.28328(15) & 0.07\\ C34 & 0.2433(19) & -0.2651(3) & 0.2735(11) & 0.05\\ C34 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.2936(11) & 0.05\\ C34 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.26038(11) & 0.06\\ C55$	N 3	0.12377(11)	0.4115(3)	0.45799(14)	0.054
C10 0.19124(15) 0.3782(6) 0.4903(2) 0.06 C11 0.19053(16) 0.4904(5) 0.5513(2) 0.07 C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.5145(5) 0.4345(3) 0.13 C14 0.08872(19) 0.3681(2) 0.57039(11) 0.04 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.59303(11) 0.04 C16 0.1155(9) 0.5554(2) 0.59582(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5554(2) 0.59582(11) 0.06 C18 0.10135(9) 0.4942(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4922(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4922(2) 0.57049(11) 0.09 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42550(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42540(8) 0.04 C23 -0.06471(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C23 -0.06471(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.1167(3) 0.33405(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.336405(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1905(3) 0.38405(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1905(3) 0.38405(8) 0.04 C25 -0.05694(7) -0.1336(3) 0.56119(9) 0.07 C31 0.0626(7) -0.0287(3) 0.551214(9) 0.06 C32 0.06640(17) -0.1336(3) 0.55038(9) 0.05 C28 0.05694(7) -0.1336(3) 0.55038(9) 0.05 C31 0.066121(7) 0.0967(3) 0.55038(9) 0.03 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66425(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.253(5) 0.63731(18) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.63731(18) 0.06 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.106 C34 0.4770(7) -0.166(2) 0.7587(10) 0.19 C34 0.20546(14) 0.253(5) 0.63731(18) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.63731(18) 0.06 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.03 C14 0.4589(4) -0.2157(4) 0.5583(6) 0.106 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.2782(10) 0.03 C34 0.20546(14) 0.2553(5) 0.2382(15) 0.07 C34 0.20546(14) 0.2555(2) 0.2436(18) 0.04 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.55 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.55 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.55 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.55 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.05 C34 0.21852(9) -0.3339(3) 0.32775(11) 0.055 C35 0.01857(6) 0.0501(2) 0.24359(15) 0.07 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2935(11) 0.04 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2935(11) 0.04 C35 0.02435(6)	C9	0.16929(13)	0.3898(5)	0.50641(19)	0.049
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C10	0.19124(15)	0.3782(6)	0.4903(2)	0.068
C12 0.11037(16) 0.5387(4) 0.4307(2) 0.07 C13 0.08478(18) 0.5145(5) 0.4345(3) 0.13 C14 0.08872(9) 0.5290(5) 0.3728(2) 0.16 C15 0.07827(9) 0.3681(2) 0.53039(11) 0.04 C16 0.11563(9) 0.4343(2) 0.56064(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5554(2) 0.57049(11) 0.09 C10 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.573531(11) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.40543(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.3167(3) 0.31973(8) 0.04 C24 -0.0673(6) 0.3167(3) 0.33680(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C26 -0.05244(7) -0.1405(3) 0.5513(9) 0.05 C28 0.05584(7) -0.1405(3) 0.551214(9) 0.06 C29 0.05560(7) -0.1336(3) 0.551214(9) 0.07 C31 0.06129(7) -0.0150(3) 0.55038(9) 0.05 C32 0.06405(7) 0.0899(3) 0.55144(9) 0.03 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66425(19) 0.07 C31 0.06121(7) 0.0967(3) 0.55038(9) 0.05 C32 0.06405(7) 0.0899(3) 0.51444(9) 0.03 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66425(19) 0.06 C34 0.2546(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.64226(19) 0.06 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58440(18) 0.04 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58440(18) 0.04 C37 0.22433(13) 0.0115(5) 0.58933(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5593(6) 0.100 C34 0.2548(4) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.63731(18) 0.64 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58640(18) 0.04 C37 0.22433(13) 0.0115(5) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.100 C34 0.4771(5) 0.361(16) 0.7553(6) 0.103 N1A 0.5049(5) 0.1263(12) 0.7387(10) 0.15 C35 0.16450(14) 0.02573(5) 0.2782(2) 0.03 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.3277(10) 0.15 C35 0.16430(15) 0.2782(2) 0.03 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32776(11) 0.05 C34 0.1724(8) 0.1822(2) 0.2435(15) 0.07 C34 0.18123(9) -0.2265(3) 0.1263(15) 0.05 C34 0.17124(8) 0.1822(2) 0.24359(15) 0.05 C35 0.18676(8) 0.1967(2) 0.23253(11) 0.04 C34 0.2185(9) -0.2391(3) 0.32576(11) 0.05 C35 0.08876(6) -0.137(3) 0.2936(11) 0.05 C35 0.08876(6) -0.137(3) 0.2936(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22375(1	C11	0.19053(16)	0.4904(5)	0.5513(2)	0.075
$\begin{array}{ccccc} 13 & 0.08478(18) & 0.6145(5) & 0.4345(3) & 0.13\\ C14 & 0.08872(19) & 0.5290(5) & 0.3728(2) & 0.16\\ C15 & 0.07827(9) & 0.361(2) & 0.53039(11) & 0.04\\ C16 & 0.11553(9) & 0.4343(2) & 0.55064(11) & 0.05\\ C17 & 0.12718(9) & 0.5301(2) & 0.59582(11) & 0.06\\ C18 & 0.10135(9) & 0.4992(2) & 0.57049(11) & 0.09\\ C19 & 0.06398(9) & 0.4992(2) & 0.57049(11) & 0.09\\ C20 & 0.05244(9) & 0.4006(2) & 0.53531(11) & 0.07\\ C21 & 0.01358(6) & 0.2665(3) & 0.42520(8) & 0.03\\ C22 & -0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.40543(8) & 0.04\\ C23 & -0.04071(6) & 0.4177(3) & 0.35405(8) & 0.04\\ C24 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.31697(8) & 0.04\\ C25 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.33680(8) & 0.04\\ C26 & -0.01344(6) & 0.1655(3) & 0.38819(8) & 0.04\\ C26 & -0.01344(7) & -0.1405(3) & 0.551214(9) & 0.06\\ C29 & 0.05560(7) & -0.1336(3) & 0.5408(9) & 0.07\\ C30 & 0.05699(7) & -0.0150(3) & 0.55038(9) & 0.07\\ C30 & 0.05699(7) & -0.0150(3) & 0.55038(9) & 0.03\\ C32 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.55124(9) & 0.07\\ C31 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.60485(17) & 0.04\\ C33 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.60485(17) & 0.04\\ C34 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.66425(17) & 0.04\\ C35 & 0.16450(14) & 0.2253(5) & 0.56324(18) & 0.04\\ C36 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.10\\ C14 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.19\\ C38 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.10\\ C14 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.19\\ C38 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.10\\ C14 & 0.4589(4) & -0.0717(11) & 0.7656(6) & 0.28\\ C38 & 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.2782(2) & 0.03\\ C34 & 0.1236(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.322\\ C44 & 0.2331(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.322\\ C44 & 0.2331(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.3325(11) & 0.06\\ C44 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43252(51) & 0.07\\ C44 & 0.2343(15) & -0.265(3) & 0.1263(12) & 0.2432(15) & 0.07\\ C34 & 0.17124(8) & 0.1625(2) & 0.23257(11) & 0.06\\ C34 & 0.2345(6) & -0.1537(3) & 0.23057(11) & 0.06\\ C44 & 0.2345(6) & -0.1537(3) & 0.23057(11) & 0.05\\ C55 & 0.2435(6) & -0.1537(3) & 0.2638(11) & 0.04\\ C35 & 0.2435(6) & -0.1537(3) & $	c12	0 11037(16)	0 5387(4)	0 4307 (2)	0 078
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C1 3	0.00470(10)	0.5145(5)	0 4345/ 31	· 0 1 31
$\begin{array}{ccccc} 1.1 & 0.1083(2(13) & 0.1250(13) & 0.132(12) & 0.16 \\ 1.1553(9) & 0351(2) & 0.5503(11) & 0.04 \\ 1.1 & 0.1155(9) & 0.5554(2) & 0.55952(11) & 0.06 \\ 1.1 & 0.10135(9) & 0.5654(2) & 0.5054(11) & 0.07 \\ 1.1 & 0.05244(9) & 0.4092(2) & 0.57049(11) & 0.09 \\ 1.1 & 0.05244(9) & 0.4092(2) & 0.57049(11) & 0.07 \\ 1.2 & 0.005244(9) & 0.4092(2) & 0.57049(11) & 0.07 \\ 1.2 & 0.0006(6) & 0.3926(3) & 0.42520(8) & 0.03 \\ 1.2 & 0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.42520(8) & 0.03 \\ 1.2 & 0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.42530(8) & 0.04 \\ 1.2 & -0.06773(6) & 0.1167(3) & 0.315405(8) & 0.04 \\ 1.2 & -0.06773(6) & 0.1167(3) & 0.315405(8) & 0.04 \\ 1.2 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.336405(8) & 0.04 \\ 1.2 & -0.05540(7) & 0.0155(3) & 0.38819(8) & 0.04 \\ 1.2 & 0.05560(7) & -0.1336(3) & 0.5403(8) & 0.04 \\ 1.2 & 0.05659(17) & -0.1336(3) & 0.5403(8) & 9) & 0.05 \\ 1.2 & 0.06645(7) & -0.1336(3) & 0.55038(9) & 0.06 \\ 1.2 & 0.06645(7) & -0.0136(3) & 0.55038(9) & 0.06 \\ 1.2 & 0.06405(7) & 0.01573(5) & 0.63731(18) & 0.06 \\ 1.2 & 0.06405(7) & 0.0270(5) & 0.56426(19) & 0.06 \\ 1.2 & 0.06405(7) & 0.0270(5) & 0.56426(19) & 0.06 \\ 1.3 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.64226(19) & 0.06 \\ 1.3 & 0.1659(14) & 0.2573(5) & 0.64226(19) & 0.06 \\ 1.3 & 0.16459(14) & 0.0273(5) & 0.56373(18) & 0.06 \\ 1.3 & 0.16459(14) & 0.0273(5) & 0.58943(19) & 0.04 \\ 1.3 & 0.2048(13) & -0.071(5) & 0.5894(19) & 0.04 \\ 1.3 & 0.16459(4) & -0.071(5) & 0.5894(19) & 0.04 \\ 1.3 & 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.787(10) & 0.15 \\ 1.2 & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7653(6) & 0.106 \\ 1.4 & 0.15952(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.3335(11) & 0.04 \\ 1.4 & 0.15952(9) & -0.2439(3) & 0.3277(11) & 0.05 \\ 1.4 & 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.3277(11) & 0.05 \\ 1.4 & 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.3277(11) & 0.05 \\ 1.4 & 0.15952(9) & -0.2651(3) & 0.43125(11) & 0.05 \\ 1.4 & 0.1233(16) & -0.0551(2) & 0.24329(15) & 0.07 \\ 1.4 & 0.18150(8) & 0.2555(2) & 0.28614(15) & 0.07 \\ 1.4 & 0.2335(6) & -0.1537(3) & 0.2935(11) & 0.04 \\ 1.4 & 0.2335(6) & -0.1537(3) & 0.2935(11) & 0.04 \\ 1.4 & 0.2345(6) & -0.1537(3) & 0.2335(11) & 0.04 \\ $	C1 4	0.08478(18)	0.0140(5)	0.4343(3)	0.151
C13 0.07 $\pm 2/19$, 0.36 $\pm 1/2$, 0.5 $\pm 3/11$, 0.04 C16 0.12718(9) 0.343(2) 0.55064(11) 0.05 C17 0.12718(9) 0.5554(2) 0.6074(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C10 0.05244(9) 0.4006(2) 0.55531(11) 0.07 C21 0.01588(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.42550(8) 0.03 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.31973(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33819(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33819(8) 0.04 C27 0.06266(7) -0.0287(3) 0.45533(9) 0.05 C28 0.05580(7) -0.1363(3) 0.54208(9) 0.07 C30 0.05699(7) -0.1405(3) 0.5408(9) 0.07 C30 0.05699(7) -0.0150(3) 0.56719(9) 0.07 C31 0.06405(7) 0.0899(3) 0.51444(9) 0.03 N4 0.15966(9) 0.0766(3) 0.5524(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16450(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.2253(5) 0.63731(18) 0.04 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.56440(18) 0.04 C33 0.16599(14) 0.0157(5) 0.58943(19) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2253(5) 0.5674(18) 0.04 C35 0.16460(14) 0.0273(5) 0.5674(18) 0.04 C36 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.100 C14 0.4589(4) -0.0717(11) 0.7565(6) 0.28 C24 0.4770(7) -0.166(2) 0.7567(10) 0.19 C24 0.4770(7) -0.166(2) 0.7567(10) 0.19 C24 0.4770(7) -0.166(2) 0.7567(10) 0.19 C24 0.4770(7) -0.166(2) 0.7567(10) 0.19 C24 0.4770(7) -0.2391(3) 0.3335(11) 0.04 C31 0.22642(9) -0.2391(3) 0.3277(11) 0.055 C34 0.21262(9) -0.2491(3) 0.3277(11) 0.055 C34 0.21262(9) -0.399(3) 0.3277(11) 0.055 C34 0.21262(9) -0.1997(3) 0.32858(11) 0.04 C34 0.2126(9) -0.2555(2) 0.28614(15) 0.07 C34 0.18123(9) -0.2261(3) 0.423525(11) 0.04 C34 0.1815(8) 0.2555(2) 0.28614(15) 0.07 C34 0.1815(8) 0.2555(2) 0.28614(15) 0.07 C34 0.18175(8) 0.0664(2) 0.22375(11) 0.05 C35 0.0876(6) -0.137(3) 0.29351(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1577(3) 0.29351(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1577(3) 0.29351(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.29351(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22339(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.153	C14	0.03872(1)	0.3230(3)	0.5/20(2/	0.100
Cle 0.1155(9) 0.4343(2) 0.5004(11) 0.05 Cl 0.1155(9) 0.5530(2) 0.59582(1) 0.06 Cl 0.05244(9) 0.5554(2) 0.60074(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.492(2) 0.57049(11) 0.09 C21 0.0158(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.40543(8) 0.04 C23 -0.064071(6) 0.4177(3) 0.31973(8) 0.04 C23 -0.064071(6) 0.4177(3) 0.31973(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C26 -0.01344(6) 0.1655(3) 0.3819(8) 0.04 C27 0.0626(7) -0.0287(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.05844(7) -0.1405(3) 0.51214(9) 0.06 C29 0.05560(7) -0.1336(3) 0.551214(9) 0.07 C31 0.06121(7) 0.0967(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0150(3) 0.55134(9) 0.07 C31 0.06591(4) 0.1456(5) 0.66425(17) 0.04 C32 0.06460(14) 0.02573(5) 0.64226(19) 0.06 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66425(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2253(5) 0.63731(18) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.63731(18) 0.06 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.58943(19) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.100 C1A 0.4589(4) -0.0717(11) 0.7656(6) 0.284 C38 0.17097(16) -0.1577(4) 0.5596(2) 0.100 C1A 0.4589(4) -0.0717(11) 0.7657(6) 0.126 C2A 0.4771(7) -0.166(2) 0.7387(10) 0.19 C2A 0.4770(7) -0.1673(5) 0.2782(2) 0.03 N1A 0.501(2) -0.2474(17) 0.741(3) 0.322 N1B 0.5049(5) 0.1263(12) 0.7360(8) 0.100 B 0.16430(15) -0.1673(5) 0.2782(2) 0.03 C34 0.21260(9) -0.3699(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.21260(9) -0.3699(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.21862(9) -0.1977(3) 0.38589(11) 0.04 C34 0.21852(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.17520(9) -0.3439(3) 0.32771(10) 0.055 C34 0.21862(9) -0.1973(3) 0.32573(11) 0.055 C35 0.18676(8) 0.1967(2) 0.23253(11) 0.055 C35 0.18676(8) 0.1967(2) 0.23253(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.2936(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22375(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22375(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22375(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22353(11) 0.055 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22432(15) 0.057 C35 0	C15	0.07827(9)	0.3681(2)	0.53039(11)	0.041
$\begin{array}{ccccc} C12 & 0.1218(9) & 0.5330(2) & 0.5932(11) & 0.06 \\ C13 & 0.0135(9) & 0.5654(2) & 0.60074(11) & 0.09 \\ C19 & 0.06398(9) & 0.4992(2) & 0.57049(11) & 0.09 \\ C20 & 0.05244(9) & 0.4006(2) & 0.53531(11) & 0.07 \\ C21 & 0.01358(6) & 0.2665(3) & 0.44250(8) & 0.03 \\ C22 & -0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.44250(8) & 0.05 \\ C23 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.35405(8) & 0.05 \\ C24 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.33680(8) & 0.04 \\ C25 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.33680(8) & 0.04 \\ C25 & -0.05844(7) & -0.1405(3) & 0.55124(9) & 0.05 \\ C28 & 0.05560(7) & -0.1336(3) & 0.54808(9) & 0.07 \\ C29 & 0.05560(7) & -0.1336(3) & 0.554808(9) & 0.07 \\ C30 & 0.0599(7) & -0.0150(3) & 0.55038(9) & 0.05 \\ C29 & 0.05560(7) & 0.0899(3) & 0.55484(9) & 0.07 \\ C31 & 0.06121(7) & 0.0967(3) & 0.55038(9) & 0.06 \\ C23 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.54444(9) & 0.03 \\ N4 & 0.15966(9) & 0.0766(3) & 0.56329(12) & 0.03 \\ C35 & 0.16450(14) & 0.2253(5) & 0.66425(17) & 0.04 \\ C34 & 0.20546(14) & 0.0270(5) & 0.56840(18) & 0.04 \\ C37 & 0.22443(13) & 0.0115(5) & 0.58943(19) & 0.04 \\ C37 & 0.22443(13) & 0.0157(4) & 0.5596(2) & 0.100 \\ C1A & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.19 \\ C2A & 0.4770(5) & -0.1673(5) & 0.2782(2) & 0.03 \\ C1A & 0.4599(4) & -0.0717(11) & 0.7656(6) & 0.280 \\ C2A & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7587(6) & 0.100 \\ N1A & 0.5049(5) & 0.1263(12) & 0.7327(11) & 0.05 \\ C44 & 0.12129(9) & -0.2474(17) & 0.711(1) & 0.7556(6) & 0.206 \\ C34 & 0.12120(9) & -0.2651(3) & 0.3335(11) & 0.04 \\ C41 & 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.32277(11) & 0.05 \\ C44 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.33257(11) & 0.05 \\ C44 & 0.23431(9) & -0.255(2) & 0.28024(15) & 0.07 \\ C45 & 0.21662(9) & -0.1673(5) & 0.2732(2) & 0.033 \\ C45 & 0.21862(9) & -0.1838(3) & 0.22375(11) & 0.05 \\ C46 & 0.17124(8) & 0.1927(13) & 0.32573(15) & 0.05 \\ C46 & 0.17124(8) & 0.1927(13) & 0.32573(15) & 0.05 \\ C46 & 0.18175(8) & 0.0665(2) & 0.12339(15) & 0.05 \\ C55 & 0.02835(6) & -0.1537(3) & 0.28182(15) & 0.07 \\ C46 & 0.17124(8) & 0.1825(2) & 0.23253(15) & 0.05 \\ C55 & 0.24351(6) & -0.1537(3) & 0.28138(11) & 0.06 $	CIP	0.11563(9)	0.4343(2)	0.56064(11)	0.050
C18 0.1015(9) 0.5654(2) 0.60074(11) 0.09 C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.57049(11) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42250(8) 0.03 C22 -0.0006(6) 0.3926(3) 0.42520(8) 0.05 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C23 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.31973(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1655(3) 0.38819(8) 0.04 C26 -0.01344(6) 0.1655(3) 0.38819(8) 0.04 C27 0.06266(7) -0.0227(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.055844(7) -0.1405(3) 0.551214(9) 0.07 C31 0.06129(7) -0.0150(3) 0.55639(9) 0.07 C31 0.06599(7) -0.0150(3) 0.556349(9) 0.07 C31 0.06405(7) 0.0899(3) 0.55144(9) 0.03 N4 0.15966(9) 0.0766(3) 0.56329(12) 0.03 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66425(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.2253(5) 0.64226(19) 0.06 C35 0.16460(14) 0.0573(5) 0.63731(18) 0.06 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.5843(18) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.03 C1A 0.4589(4) -0.0717(11) 0.7556(6) 0.226 C2A 0.4771(5) 0.0361(16) 0.7653(6) 0.109 C1A 0.4589(5) 0.1263(12) 0.7587(10) 0.197 C2B 0.4771(5) -0.1263(12) 0.7367(10) 0.197 C2B 0.4771(5) 0.361(16) 0.7587(10) 0.197 C2B 0.4771(7) -0.166(2) 0.7587(10) 0.197 C2B 0.4770(7) -0.1663(12) 0.7367(10) 0.197 C2B 0.4771(5) 0.3291(3) 0.33335(11) 0.04 C34 0.21260(9) -0.2491(3) 0.32776(11) 0.05 C43 0.21260(9) -0.3439(3) 0.32776(11) 0.05 C44 0.23431(9) -0.2391(3) 0.32776(11) 0.05 C45 0.16430(15) -0.1673(5) 0.27782(2) 0.037 C47 0.16623(8) 0.0507(2) 0.28588(11) 0.04 C44 0.23431(9) -0.2651(3) 0.42152(11) 0.05 C45 0.18123(9) -0.2655(2) 0.28614(15) 0.077 C46 0.17124(8) 0.1822(2) 0.24359(15) 0.07 C47 0.16623(8) 0.0507(2) 0.28388(15) 0.07 C48 0.17124(8) 0.1822(2) 0.24359(15) 0.05 C43 0.21852(9) -0.1397(3) 0.22575(11) 0.05 C44 0.23431(9) -0.2265(3) 0.12939(11) 0.05 C55 0.02435(6) -0.1537(3) 0.20351(11) 0.05 C55 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22938(11) 0.05 C55 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22938(11) 0.05 C55 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22938(11) 0.05 C55 0.02435(6) -0.1537(3) 0.26038(11) 0.04 C55 0.02	C17	0.12/18(9)	0.5330(2)	0.59582(11)	0.067
C19 0.06398(9) 0.4992(2) 0.57049(11) 0.09 C20 0.05244(9) 0.4006(2) 0.53531(11) 0.07 C21 0.01358(6) 0.2665(3) 0.42526(8) 0.03 C22 -0.00006(6) 0.3926(3) 0.40543(8) 0.04 C23 -0.04071(6) 0.4177(3) 0.35405(8) 0.04 C24 -0.06773(6) 0.3167(3) 0.31973(8) 0.04 C25 -0.05409(6) 0.1906(3) 0.33680(8) 0.04 C26 -0.01344(6) 0.1655(3) 0.38819(8) 0.04 C27 0.06266(7) -0.0287(3) 0.49533(9) 0.05 C28 0.05584(7) -0.1336(3) 0.551214(9) 0.06 C29 0.05560(7) -0.1336(3) 0.55038(9) 0.07 C30 0.05699(7) -0.0150(3) 0.55038(9) 0.07 C30 0.05699(7) -0.0150(3) 0.55038(9) 0.07 C31 0.06421(7) 0.0967(3) 0.55038(9) 0.06 C22 0.06405(7) 0.0899(3) 0.55424(9) 0.03 N4 0.15956(9) 0.0766(3) 0.55221(2) 0.03 C33 0.16599(14) 0.1456(5) 0.66485(17) 0.04 C34 0.20546(14) 0.2253(5) 0.66425(17) 0.04 C35 0.16450(14) 0.0573(5) 0.56394(18) 0.04 C36 0.19136(13) -0.0270(5) 0.56840(18) 0.04 C38 0.17097(16) -0.1557(4) 0.5596(2) 0.100 C1A 0.4589(4) -0.0717(11) 0.7556(6) 0.28 C3A 0.4770(7) -0.166(2) 0.7587(10) 0.19 C2A 0.4771(5) 0.0361(16) 0.7553(6) 0.106 N1A 0.501(2) -0.2474(17) 0.741(3) 0.32 C1A 0.4589(4) -0.1673(5) 0.2782(2) 0.03 C34 0.17097(16) -0.1557(4) 0.33335(11) 0.04 C34 0.21260(9) -0.2651(12) 0.7360(8) 0.106 C1A 0.4589(9) -0.2651(12) 0.7361(10) 0.19 C2A 0.4771(7) 0.166(2) 0.7587(10) 0.19 C34 0.18123(9) -0.2251(3) 0.33277(11) 0.05 C34 0.18123(9) -0.2251(3) 0.33277(11) 0.05 C34 0.17124(8) 0.1822(2) 0.24328(15) 0.07 C34 0.21862(9) -0.3499(3) 0.32771(11) 0.05 C34 0.21862(9) -0.1967(3) 0.32575(11) 0.05 C34 0.17149(8) -0.0087(2) 0.28328(15) 0.07 C34 0.18150(8) 0.2255(2) 0.28614(15) 0.05 C35 0.08876(6) 0.1967(2) 0.32573(15) 0.05 C35 0.08876(6) 0.01977(3) 0.13951(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.12939(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.12939(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.12939(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22430(15) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22430(15) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22430(15) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.22430(15) 0.05 C35 0.02435(6) -0.1537(3) 0.24339(11) 0.05 C35 0.02435(6) -0	C18	0.10135(9)	0.5654(2)	0.60074(11)	0.099
$\begin{array}{ccccc} 220 & 0.05244(9) & 0.4006(2) & 0.53531(11) & 0.07, \\ 221 & 0.01358(6) & 0.266(3) & 0.42250(8) & 0.03, \\ 222 & -0.00006(6) & 0.3926(3) & 0.4250(8) & 0.05, \\ 223 & -0.04071(6) & 0.4177(3) & 0.34405(8) & 0.04; \\ 224 & -0.06773(6) & 0.3167(3) & 0.31973(8) & 0.04; \\ 225 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.33819(8) & 0.04; \\ 225 & -0.05409(6) & 0.1906(3) & 0.38819(8) & 0.04; \\ 226 & -0.01344(7) & -0.1405(3) & 0.49533(9) & 0.05; \\ 228 & 0.05844(7) & -0.1405(3) & 0.5408(9) & 0.07; \\ 229 & 0.05560(7) & -0.136(3) & 0.5408(9) & 0.07; \\ 230 & 0.05699(7) & -0.0150(3) & 0.56719(9) & 0.07; \\ 230 & 0.05699(7) & -0.0150(3) & 0.56408(9) & 0.07; \\ 231 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.51444(9) & 0.03; \\ 232 & 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.51444(9) & 0.03; \\ 233 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.66426(19) & 0.06; \\ 235 & 0.16460(14) & 0.2253(5) & 0.63731(18) & 0.06; \\ 235 & 0.16460(14) & 0.270(5) & 0.58640(18) & 0.04; \\ 236 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(19) & 0.04; \\ 238 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.106; \\ 244 & 0.2341(3) & 0.0115(5) & 0.58743(19) & 0.04; \\ 238 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.106; \\ 248 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.19; \\ 248 & 0.17097(16) & -0.1263(12) & 0.7367(10) & 0.19; \\ 248 & 0.16430(15) & 0.037(16) & 0.7657(6) & 0.286; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.322; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.322; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2391(3) & 0.33335(11) & 0.04; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43185(11) & 0.055; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.432525(11) & 0.066; \\ 244 & 0.23431(9) & -0.2651(2) & 0.23430(15) & 0.07; \\ 246 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.23430(15) & 0.07; \\ 248 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.23430(15) & 0.07; \\ 248 & 0.18175(8) & 0.0664(2) & 0.32430(15) & 0.05; \\ 250 & 0.18676(8) & 0.1965(3) & 0.12737(11) & 0.055; \\ 251 & 0.18676(8) & 0.1965(3) & 0.12739(11) & 0.05; \\ 254 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.28188(11) & 0.065; \\ 254 & 0.04513(6) & -0.2266(3) & 0.24339(11) & 0.105; \\ 255 & 0.02435(6) & -0.1386(3) & 0.22375(11) & 0.065; \\ 256 & 0.27$	C19	0.06398(9)	0.4992(2)	0.57049(11)	0.098
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C20	0.05244(9)	0.4006(2)	0.53531(11)	0.073
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C21	0.01358(6)	0.2665(3)	0.42250(8)	0.030
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C22	-0.00006(6)	0.3926(3)	0.40543(8)	0.042
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C23	-0.04071(6)	0.4177(3)	0.35405(8)	0.054
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C24	-0.06773(6)	0.3167(3)	0.31973(8)	0.041
$\begin{array}{cccccc} & -0.0134((6) & 0.1655(3) & 0.38819(8) & 0.04(5) \\ c27 & 0.06266(7) & -0.0287(3) & 0.49533(9) & 0.05(5) \\ c28 & 0.0554(7) & -0.1306(3) & 0.51214(9) & 0.06(5) \\ c29 & 0.05569(7) & -0.0150(3) & 0.55038(9) & 0.07(5) \\ c30 & 0.0669(7) & -0.0150(3) & 0.55038(9) & 0.06(5) \\ c31 & 0.06121(7) & 0.0967(3) & 0.55038(9) & 0.06(5) \\ c32 & 0.06405(7) & 0.0399(3) & 0.55038(9) & 0.06(5) \\ c32 & 0.06405(7) & 0.0399(3) & 0.55038(9) & 0.06(5) \\ c33 & 0.16599(14) & 0.1456(5) & 0.66426(19) & 0.06(5) \\ c34 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.06(5) \\ c35 & 0.16460(14) & 0.0273(5) & 0.5893(19) & 0.04(5) \\ c36 & 0.19136(13) & -0.0270(5) & 0.58943(19) & 0.04(5) \\ c38 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.106(5) \\ c38 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.106(5) \\ c28 & 0.4771(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.197 \\ c28 & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7653(6) & 0.106(5) \\ c38 & 0.16430(15) & -0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106(5) \\ c38 & 0.16430(15) & -0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106(5) \\ c34 & 0.4770(7) & -0.1663(12) & 0.7360(8) & 0.106(5) \\ c34 & 0.18123(9) & -0.2291(3) & 0.3333(51(1) & 0.04(5) \\ c34 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43252(11) & 0.056(5) \\ c34 & 0.21260(9) & -0.3699(3) & 0.3277(11) & 0.056(5) \\ c34 & 0.21260(9) & -0.3699(3) & 0.3277(11) & 0.056(5) \\ c34 & 0.21260(9) & -0.3659(3) & 0.32775(11) & 0.057(5) \\ c34 & 0.17149(8) & -0.0087(2) & 0.28328(15) & 0.077(5) \\ c34 & 0.17149(8) & 0.1822(2) & 0.2432(15) & 0.077(5) \\ c35 & 0.0876(6) & 0.1967(2) & 0.32573(15) & 0.056(5) \\ c55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.055(5) \\ c55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057(5) \\ c55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057(5) \\ c55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.22375(11) & 0.057(5) \\ c56 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.22375(11) & 0.057(5) \\ c56 & 0.04513(6) & -0.2266(3) & 0.24788(11) & 0.056(5) \\ c56 & 0.04513(6) & -0.2305(3) & 0.24738(11) & 0.057(5) \\ c56 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.2638(11) & 0.068(5) \\ c56 & 0.24337(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068(5) \\ c56 & 0.24337(9) & -0.3666(3) &$	C25	-0.05409(6)	0.1906(3)	0.33680(8)	0.041
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C26	-0.01344(6)	0.1655(3)	0.38819(8)	0.041
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C27	0.06266(7)	-0.0287(3)	0.49533(9)	0.050
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C28	0.05844(7)	-0.1405(3)	0.51214(9)	0.069
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C29	0.05560(7)	-0.1336(3)	0.54808(9)	0.073
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 30	0.05699(7)	-0.0150(3)	0 56719(9)	0 077
$\begin{array}{cccccc} 0.06405(7) & 0.0899(3) & 0.51444(9) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.03\\ 0.55329(12) & 0.06\\ 0.2263(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.06\\ 0.553 & 0.16640(14) & 0.0253(5) & 0.63731(18) & 0.06\\ 0.553 & 0.16460(14) & 0.0573(5) & 0.63731(18) & 0.06\\ 0.553 & 0.16460(14) & 0.0115(5) & 0.58640(18) & 0.04\\ 0.2243(13) & -0.027(5) & 0.58640(18) & 0.04\\ 0.2243(13) & -0.027(5) & 0.58640(18) & 0.04\\ 0.224 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7553(6) & 0.106\\ 0.28 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7553(6) & 0.106\\ 0.14 & 0.501(2) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.326\\ 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.3335(11) & 0.04\\ 0.18123(9) & -0.2391(3) & 0.3335(11) & 0.04\\ 0.18123(9) & -0.2391(3) & 0.33267(11) & 0.05\\ 0.24 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43255(11) & 0.06\\ 0.18123(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.06\\ 0.18123(9) & -0.3699(3) & 0.32271(11) & 0.06\\ 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43185(11) & 0.04\\ 0.23431(9) & -0.255(2) & 0.24369(15) & 0.07\\ 0.18576(8) & 0.0687(2) & 0.24328(15) & 0.07\\ 0.18576(8) & 0.0687(2) & 0.24328(15) & 0.07\\ 0.18576(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.07\\ 0.18576(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.07\\ 0.18576(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.1967(2) & 0.32375(11) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.1965(2) & 0.22375(11) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.1965(2) & 0.22375(11) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.1965(2) & 0.22375(11) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.1965(2) & 0.22375(11) & 0.05\\ 0.55 & 0.048719(6) & -0.1337(3) & 0.19051(11) & 0.05\\ 0.55 & 0.048719(6) & -0.1377(3) & 0.19051(11) & 0.05\\ 0.55 & 0.048719(6) & -0.2266(3) & 0.17192(11) & 0.05\\ 0.55 & 0.048719(6) & -0.2266(3) & 0.27339(11) & 0.05\\ 0.18576(8) & 0.0666(2) & 0.22433(11) & 0.06\\ 0.55 & 0.04719(6) & -0.2266(3) & 0.24339(11) & 0.05\\ 0.02435(6) & 9) & -0.3626(3) & 0.22433(11) & 0.06\\ 0.02435(6) & 9) & -0.3626(3) & 0.22438(11) & 0.06\\ 0.02019(9) & -0.3626(3) & 0.24339(11) & 0.10\\ 0.55 & 0.2935(1) & 9) & -0.3666(3) & 0.26038(11) & 0.06\\ 0.02019(9) & -0.3621(3) & 0.26038(11) & $	C 31	0.06121(7)	0 0967(3)	0 55038(9)	0 061
$ \begin{array}{c} 0.1556(6) & 9) & 0.0766(3) & 0.56329(12) & 0.037\\ C13 & 0.20546(14) & 0.1456(5) & 0.64226(19) & 0.067\\ C14 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.64226(19) & 0.067\\ C15 & 0.16460(14) & 0.0573(5) & 0.64226(19) & 0.067\\ C15 & 0.19136(13) & -0.0270(5) & 0.58640(18) & 0.047\\ C17 & 0.22443(13) & 0.015(5) & 0.58943(19) & 0.047\\ C18 & 0.4797(16) & -0.1557(4) & 0.5596(2) & 0.107\\ C14 & 0.4589(4) & -0.0717(11) & 0.7557(6) & 0.126\\ C24 & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7557(10) & 0.197\\ C2B & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7557(6) & 0.107\\ C2B & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7553(6) & 0.107\\ C14 & 0.4589(4) & -0.0717(11) & 0.7567(6) & 0.107\\ C2B & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7553(6) & 0.107\\ C2B & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7653(6) & 0.106\\ C14 & 0.4589(5) & 0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106\\ C34 & 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.27782(2) & 0.037\\ C40 & 0.18123(9) & -0.2391(3) & 0.33235(11) & 0.047\\ C41 & 0.15552(9) & -0.3439(3) & 0.32676(11) & 0.057\\ C43 & 0.21260(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.066\\ C44 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.44185(11) & 0.057\\ C45 & 0.21862(9) & -0.1997(2) & 0.28328(15) & 0.077\\ C46 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.077\\ C46 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.077\\ C46 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.077\\ C48 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.077\\ C50 & 0.18676(8) & 0.2555(2) & 0.28614(15) & 0.077\\ C51 & 0.0876(6) & -0.137(3) & 0.19051(11) & 0.055\\ C52 & 0.11160(6) & -0.1838(3) & 0.22375(11) & 0.057\\ C55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057\\ C55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057\\ C55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057\\ C55 & 0.02435(6) & -0.138(3) & 0.22375(11) & 0.064\\ C55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.2638(11) & 0.048\\ C59 & 0.17903(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068\\ C59 & 0.17903(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068\\ C50 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.2638(11) & 0.068\\ C51 & 0.24837(9) & -0.2501(3) & 0.26187(11) & 0.068\\ C52 & 0.24837(9) & -0.2501(3) & 0.26187(11) & 0.068\\ C53 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.26187(11) & 0.068\\ C54 & 0$	C 3 2	0.06405(7)	0 0899(3)	0 51444 (9)	0 033
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	NA	0 15966 (9)	0.0766(3)	0 56329(12)	0 037
$\begin{array}{ccccc} 3.3 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.64226(17) & 0.067 \\ 3.3 & 0.20546(14) & 0.2253(5) & 0.64226(18) & 0.047 \\ 3.3 & 0.16426(14) & 0.0573(5) & 0.64226(18) & 0.047 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.1557(4) & 0.5594(2) & 0.107 \\ 3.3 & 0.17097(16) & -0.166(2) & 0.7567(10) & 0.197 \\ 3.3 & 0.16430(15) & -0.167(15) & 0.7653(6) & 0.106 \\ 3.3 & 0.16430(15) & -0.1263(12) & 0.7653(6) & 0.106 \\ 3.3 & 0.16430(15) & -0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106 \\ 3.4 & 0.15952(9) & -0.2391(3) & 0.3335(11) & 0.042 \\ 3.4 & 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.32676(11) & 0.055 \\ 3.4 & 0.21260(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.066 \\ 3.4 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43185(11) & 0.055 \\ 3.4 & 0.21260(9) & -0.1997(3) & 0.38589(11) & 0.047 \\ 3.4 & 0.23431(9) & -0.2651(2) & 0.24361(15) & 0.077 \\ 3.4 & 0.16523(8) & 0.0507(2) & 0.24328(15) & 0.077 \\ 3.4 & 0.16523(8) & 0.0507(2) & 0.24328(15) & 0.077 \\ 3.4 & 0.18150(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.076 \\ 3.4 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.19051(11) & 0.055 \\ 5.5 & 0.18476(8) & 0.1967(2) & 0.32330(15) & 0.055 \\ 5.5 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.19051(11) & 0.057 \\ 5.5 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ 5.5 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ 5.5 & 0.04513(6) & -0.2266(3) & 0.17192(11) & 0.057 \\ 5.5 & 0.07419(6) & -0.2329(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ 5.5 & 0.07419(6) & -0.2266(3) & 0.24339(11) & 0.067 \\ 5.5 & 0.02433(6) & -0.1537(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ 5.5 & 0.02433(6) & -0.1537(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ 5.5 & 0.02433(6) & -0.1537(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ 5.5 & 0.02433(6) & -0.1537(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ 5.5 & 0.02433(6) & -0.2266(3) & 0.24339(11) & 0.107 \\ 5.5 & 0.02638(6) & 9) & -0.2266(3) & 0.24339(11) & 0.107 \\ 5.5 & 0.02638(6) & 9) & -0.2326(13) & 0.24339(11) & 0.107 \\ 5.5 & 0.19054(9) & -0.2266(13) & 0.2438$	C]]	0.16599(14)	0.1456(5)	0.50525(12)	0.040
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C34	0.10555(14)	0.2253(5)	0.64006(19)	0.042
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 3 5	0.16460(14)	0.2233(3)	0.04220(19)	0.007
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C35	0.10136(14)	0.0373(5)	0.63/31(18)	0.001
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 36	0.19136(13)	~0.02/0(5)	0.58640(18)	0.049
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	(3)	0.22443(13)	0.0115(5)	0.58945(19)	0.045
$\begin{array}{ccccc} 1.4 & 0.4359(4) & -0.071(11) & 0.7656(6) & 0.286 \\ 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.197 \\ 0.286 & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7587(16) & 0.197 \\ 0.7867(16) & 0.501(2) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.327 \\ 0.501(2) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.327 \\ 0.501(2) & -0.2474(17) & 0.7360(8) & 0.106 \\ 0.5049(5) & 0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106 \\ 0.5049(5) & -0.239(13) & 0.3335(11) & 0.047 \\ 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.32676(11) & 0.055 \\ 0.17520(9) & -0.3439(3) & 0.32676(11) & 0.065 \\ 0.17520(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.065 \\ 0.17520(9) & -0.3699(3) & 0.43525(11) & 0.065 \\ 0.12650 & 0.21862(9) & -0.1969(3) & 0.43525(11) & 0.065 \\ 0.12662 & 0.21662(9) & -0.1967(3) & 0.38589(11) & 0.047 \\ 0.16623(8) & -0.0087(2) & 0.28328(15) & 0.077 \\ 0.16623(8) & 0.1555(2) & 0.24512(15) & 0.077 \\ 0.18676(8) & 0.2555(2) & 0.24512(15) & 0.075 \\ 0.18676(8) & 0.1967(2) & 0.32573(15) & 0.064 \\ 0.551 & 0.18175(8) & 0.6645(2) & 0.32430(15) & 0.055 \\ 0.18175(8) & 0.0645(2) & 0.32357(11) & 0.055 \\ 0.552 & 0.11160(6) & -0.1838(3) & 0.22375(11) & 0.054 \\ 0.554 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.19051(11) & 0.055 \\ 0.555 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ 0.575 & 0.09081(6) & -0.2266(3) & 0.127192(11) & 0.055 \\ 0.575 & 0.09081(6) & -0.2266(3) & 0.24788(11) & 0.088 \\ 0.59 & 0.17903(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.088 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.26338(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.2638(11) & 0.088 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.3666(3) & 0.24788(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2305(1) & 0.048 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2305(1) & 0.2638(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.2638(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.26187(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.26187(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ 0.56 & 0.20219($	C38	0.17097(16)	-0.1557(4)	0.5596(2)	0.100
$\begin{array}{ccccc} 228 & 0.4770(7) & -0.166(2) & 0.7587(10) & 0.19\\ 228 & 0.4771(5) & 0.0361(16) & 0.7553(6) & 0.106\\ N1A & 0.501(2) & -0.2474(17) & 0.741(3) & 0.326\\ N1B & 0.5049(5) & 0.1263(12) & 0.7360(8) & 0.106\\ 8 & 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.2782(2) & 0.033\\ C40 & 0.18123(9) & -0.2391(3) & 0.33335(11) & 0.04\\ C41 & 0.15952(9) & -0.3699(3) & 0.32676(11) & 0.065\\ C42 & 0.17520(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.066\\ C43 & 0.21862(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.066\\ C44 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43185(11) & 0.044\\ C54 & 0.21862(9) & -0.1997(3) & 0.38589(11) & 0.046\\ C45 & 0.21862(9) & -0.1997(3) & 0.38589(11) & 0.046\\ C46 & 0.17149(8) & -0.0087(2) & 0.24369(15) & 0.077\\ C49 & 0.18150(8) & 0.2555(2) & 0.248614(15) & 0.055\\ C50 & 0.18676(8) & 0.1967(2) & 0.32257(11) & 0.056\\ C51 & 0.18676(8) & 0.1967(2) & 0.32257(11) & 0.056\\ C55 & 0.04876(6) & -0.1474(3) & 0.2305(11) & 0.052\\ C54 & 0.04513(6) & -0.1537(3) & 0.19051(11) & 0.052\\ C55 & 0.04719(6) & -0.2329(3) & 0.12939(11) & 0.057\\ C58 & 0.09081(6) & -0.2266(3) & 0.17192(11) & 0.057\\ C58 & 0.19054(9) & -0.2462(3) & 0.2293(511) & 0.064\\ C59 & 0.1793(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.082\\ C59 & 0.1793(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.082\\ C59 & 0.1793(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.082\\ C50 & 0.20219(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.082\\ C51 & 0.2368(6) & -0.1973(3) & 0.26038(11) & 0.062\\ C51 & 0.2368(6) & -0.3738(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.20219(9) & -0.3666(3) & 0.24389(11) & 0.068\\ C52 & 0.24337(9) & -0.3666(3) & 0.24339(11) & 0.102\\ C53 & 0.2638(19) & -0.3738(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.22651(19) & -0.4321(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.22651(19) & -0.366(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.22638(19) & -0.3738(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.22638(19) & -0.3738(3) & 0.26038(11) & 0.068\\ C51 & 0.24337(9) & -0.2501(3) & 0.28137(11) & 0.068\\ C51 & 0.24337(9) & -0.2501(3) & 0.28137(11) & 0.068\\ C51 & 0.24337(9) & -0.2501(3) & 0.28137(11) & 0.068\\ C51 & 0.24337(9) & -0.2501(3) & 0.28137(11) & 0.068\\ C51 & 0.24337(9) & -0.2501(3) & 0.28137(11) & 0.$	CIA	0.4589(4)	-0.0/1/(11)	0./656(6)	0.280
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C2A	0.4770(7)	-0.166(2)	0.7587(10)	0.197
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C28	0.4771(5)	0.0361(16)	0.7653(6)	0.108
$ \begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$	NIA	0.501(2)	-0.2474(17)	0.741(3)	0.320
$ \begin{array}{ccccc} 8 & 0.16430(15) & -0.1673(5) & 0.2782(2) & 0.033 \\ C40 & 0.18123(9) & -0.2391(3) & 0.33335(11) & 0.044 \\ C41 & 0.15952(9) & -0.3439(3) & 0.32676(11) & 0.065 \\ C42 & 0.17520(9) & -0.3699(3) & 0.37271(11) & 0.065 \\ C43 & 0.21260(9) & -0.3699(3) & 0.42525(11) & 0.065 \\ C44 & 0.23431(9) & -0.2651(3) & 0.43185(11) & 0.055 \\ C45 & 0.21862(9) & -0.1997(3) & 0.38589(11) & 0.045 \\ C46 & 0.17149(8) & -0.0087(2) & 0.28328(15) & 0.077 \\ C47 & 0.16623(8) & 0.0501(2) & 0.24512(15) & 0.077 \\ C48 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.077 \\ C48 & 0.17124(8) & 0.1822(2) & 0.24512(15) & 0.075 \\ C50 & 0.18676(8) & 0.1967(2) & 0.32573(15) & 0.064 \\ C51 & 0.18175(8) & 0.0646(2) & 0.32573(15) & 0.055 \\ C55 & 0.08876(6) & -0.1838(3) & 0.22375(11) & 0.055 \\ C55 & 0.02435(6) & -0.1537(3) & 0.19051(11) & 0.055 \\ C55 & 0.02435(6) & -0.1956(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ C58 & 0.09081(6) & -0.2226(3) & 0.12939(11) & 0.057 \\ C58 & 0.19054(9) & -0.2462(3) & 0.2433(11) & 0.068 \\ C59 & 0.17903(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.088 \\ C50 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.2433(11) & 0.107 \\ C51 & 0.2386(19) & -0.2305(11) & 0.048 \\ C59 & 0.17903(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.088 \\ C59 & 0.1293(19) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.088 \\ C50 & 0.20219(9) & -0.4321(3) & 0.2433(11) & 0.107 \\ C51 & 0.2386(19) & -0.2501(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C52 & 0.24337(9) & -0.3666(3) & 0.2438(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.366(4) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.366(4) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C54 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.26038(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.2501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.3501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ C53 & 0.202319(9) & -0.8501(3) & 0.28187(11) & 0.068 \\ $	NIB	0.5049(5)	0.1263(12)	0.7360(8)	0.108
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	в	0.16430(15)	-0.1673(5)	0.2782(2)	0.038
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C40	0.18123(9)	~0.2391(3)	0.33335(11)	0.043
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C41	0.15952(9)	-0.3439(3)	0.32676(11)	0.053
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C42	0.17520(9)	-0.4093(3)	0.37271(11)	0.069
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C43	0.21260(9)	-0.3699(3)	0.42525(11)	0.066
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C44	0.23431(9)	-0.2651(3)	0.43185(11)	0.055
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C45	0.21862(9)	-0.1997(3)	0.38589(11)	0.049
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C46	0.17149(8)	-0.0087(2)	0.28328(15)	0.037
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C47	0.16623(8)	0.0501(2)	0.24369(15)	0.073
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	48	0 17124(8)	0 1822(2)	0 24512(15)	0 078
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 4 0	0.10150(0)	0.25555(2)	0.20514(15)	0.051
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	0.4.9	0.10130(8)	0.2000(2)	0.20014(15)	0.051
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 50	0.10175(8)	0.130/(2)	0.32430/3(13)	0.064
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	101	0.101/5(8)	0.0646(2)	0.32430(15)	0.053
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	-52	0.11160(6)	-0.1838(3)	0.223/5(11)	0.051
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$:53	0.08876(6)	-0.1474(3)	0.23305(11)	0.049
$\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$	54	0.04513(6)	~0.1537(3)	0.19051(11)	0.052
$\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$	C55	0.02435(6)	-0.1965(3)	0.13868(11)	0.048
$\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$	56	0.04719(6)	-0.2329(3)	0.12939(11)	0.057
$\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$:57	0.09081(6)	~0.2266(3)	0.17192(11)	0.051
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	58	0.19054(9)	-0.2428(3)	0.26936(11)	0.048
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	259	0.17903(9)	-0.3666(3)	0.24788(11)	0.085
261 0.23686(9) -0.3738(3) 0.26038(1) 0.078 562 0.24837(9) -0.2501(3) 0.28187(1) 0.078 563 0.22521(9) -0.1846(3) 0.28187(1) 0.068	C60	0,20219(9)	-0.4321(3)	0.24339(11)	0.100
(52 0.24837(9) - 0.2501(3) 0.28187(11) 0.068	C61	0.23686(9)	-0.3738(3)	0.26038(11)	0.078
(11) (11) (11) (11) (11) (11)	262	0.24837 (9)	-0.2501(3)	0.28187(11)	0.068
	63	0.22521(9)	-0.1846(3)	0.28636(11)	0.049

Tab. 4. Ausgewählte Abstände [Å] und Winkel [°] für 7a

	P1 - P2	2.228(2)	P2 ~ N3	1.677(4)	P3 - C15 1.815(3)
	P1 - N1	1.605(3)	C1 - C2	1.476(6)	P3 - C21 1.812(2)
	P1 - C1	2.090(2)	C1 - P3	1.732(6)	P3 - C32 1.809(4)
	P1 - N2	1.626(6)	C2 - N1	1.352(8)	
i	P2 - C1	1.808(5)	C2 - N4	1.336(5)	
N1	-P1 -P2	103.1(1)	C1 -P2 -P1	80.1(1)	N1 -C2 -C1 118.3(3)
• C1	-P1 -P2	99.9(1)	N3 -P2 -P1	107.8(2)	N4 -C2 -C1 124.0(5)
C1	-P1 -N1	108.2(1)	N3 -P2 -C1	106.8(1)	N4 -C2 -N1 117.7(3)
N2	~P1 -P2	123.7(1)	C2 -C1 -P2	116.9(4)	C2 -N1 -P1 110.2(2)
N 2	-P1 _N1	113.4(2)	P3 -C1 -P2	112.2(1)	
N 2	-P1 -C1	107.2(1)	P3 -C1 -C2	128.6(4)	

Gruppierung und den übrigen beobachtet wird. Im IR-Spektrum wird \tilde{v}_{CN} bei 2180 cm⁻¹ gefunden.



Somit ist folgender Mechanismus zur Entstehung der Heterocyclen wahrscheinlich: Das im ersten Reaktionsschritt entstandene Diphosphanium(1+)-Salz lagert sich unter Wanderung der am besten anionisch mesomeriestabilisierten Gruppe um. Anschließender nucleophiler Angriff der Nitril-Gruppe durch das freie Elektronenpaar am Stickstoff-Atom und erneute Umlagerung beschließen die Reaktionssequenz. Die Reaktion von 7a mit etherischer HCl führt quantitativ (³¹P-NMR) zu dem vicinalen Dichlor- $\lambda^{3}\lambda^{4}$ -diphosphan-Derivat 11. Die Protonierung des formal ylidischen Kohlenstoff-Atoms C1 wird nicht beobachtet und erlaubt daher diese Funktionalisierung des Heterocyclus. Der Austausch der Phosphor-ständigen Diisopropylamino-Gruppe durch einen elektronegativeren Chlor-Substituenten ist von einer deutlichen Abnahme der Phosphor-Phosphor-Kopplungskonstanten um ca. 100 Hz begleitet.

Spektren

Besonders aussagekräftig für die Strukturen von 7a, b, 10a, c, d und 11 sind die ³¹P-NMR-Spektren, denen ein AMX-Spinsystem gemein ist.

Die Daten sind in Tab. 5 zusammengefaßt.

Da die Rotationen der $NiPr_2$ -Gruppen über einen weiten Temperaturbereich eingefroren sind, werden komplexe Multipletts in den ¹H-NMR- und breite Linien in den ¹³C-NMR-Spektren für die diastereotopen Methyl- und Methin-Protonen bzw. -Kohlenstoff-Atome beobachtet.

Für die Cyclen **7a,b** und **11** ist im – bei Raumtemperatur aufgenommenen – ¹H-NMR-Spektrum ein Multiplett bei sehr hohem Feld ($\delta = -0.1$) charakteristisch. Diese Hochfeldlage wird einer Methyl-Gruppe der in 4-Position des Ringes gebundenen Diisopropylamino-Gruppe zugeordnet und durch den diamagnetischen Ringstromeffekt eines Phenyl-Ringes des Triphenylphosphan-Substituenten verursacht (siehe Abb. 2). Das Fehlen dieser Signale ist ein weiTab. 5. ³¹P-NMR-Daten von 3, 5, 7a, 7b, 10a, 10c, 10d und 11 (3 und 5 in C_6D_6 , 7a-11 in CDCl₃, δ in ppm, J in Hz)



δ	P _A	P _M	P _x	Pγ
3	20.9 (d, J = 198)	_	40.1 (d, J = 198)	
6	$1.40 (\mathrm{dd}, J_{\mathrm{AM}} =$	21.1 (d, $J_{AM} =$	21.2 (d, $J_{AX} =$	-
	154,	154)	205)	
	$J_{\rm AX} = 205)$			
7a	$18.5 (\mathrm{dd}, J_{\mathrm{AM}} =$	45.9 (dd, $J_{MX} =$	$102.0 (dd, J_{MX} =$	-
	161,	418,	418,	
	$J_{\rm AX} = 117)$	$J_{\rm AM} = 161$	$J_{\rm AX} = 117.3$)	
7 b	14.7 (dd, $J_{AM} =$	47.3 (dd, $J_{MX} =$	91.1 (dd, $J_{MX} =$	-
	161,	410,	410,	
	$J_{\rm AX} = 88)$	$J_{\rm AM} = 161)$	$J_{\rm AX} = 88)$	
10a	17.8 (dd, $J_{AM} =$	39.4 (dd, $J_{MX} =$	102.3 (dd, $J_{MX} =$	18.4
	154,	424,	424,	
	$J_{AX} = 117)$	$J_{\rm AM} = 154)$	$J_{AX} = 117$)	
10c	21.4 (dd, $J_{AM} =$	71.7 (dd, $J_{MX} =$	$127.8 (\mathrm{dd}, J_{\mathrm{MX}} =$	22.6
	140,	476,	476,	
	$J_{\rm AX} = 80)$	$J_{\rm AM} = 140$)	$J_{\rm AX} = 80)$	
10d	16.8 (dd, $J_{AM} =$	45.7 (dd, $J_{MX} =$	94.6 (dd, $J_{MX} =$	17.6
	146,	425,	425,	
	$J_{\rm AX} = 88)$	$J_{\rm AM} = 146)$	$J_{\rm AX} = 88)$	
11	16.5 (dd, $J_{AM} =$	65.4 (dd, $J_{MX} =$	94.2 (dd, $J_{MX} =$	_
	146,	300,	300,	
	$J_{\rm AX} = 95)$	$J_{\rm AM} = 146$)	$J_{\rm AX} = 95)$	

terer Beweis für die Wanderung der $Ph_3P - C - CN$ -Gruppe, die zu **10a, c, d** führt.

Ein Resonanzsignal für die Cyan-Funktion kann unter den Aufnahmebedingungen in keinem ¹³C-NMR-Spektrum beobachtet werden. Gleichfalls lassen sich die Absorptionen der ylidischen Kohlenstoff-Atome von **10a,c,d** nicht sicher ermitteln, für **11** fällt dieses Signal mit dem eines Methin-Kohlenstoff-Atoms zusammen. Der Interpretation der ¹³C-NMR-Spektren von **3** und **6** wurden Literaturdaten zugrunde gelegt¹⁶.

Für die Förderung dieser Arbeit danken wir der Deutschen Forschungsgemeinschaft und Herrn Prof. W. Sundermeyer. H. G. dankt dem Fonds der Chemischen Industrie für ein Liebig-Stipendium.

Experimenteller Teil

³¹P-NMR-, ¹¹B-NMR- und ¹H-NMR-Spektren: Jeol FX 90 Q (36.19, 28.69 und 89.55 MHz); H₃PO₄ (ext.), BF₃ (ext.) und TMS (int.) als Standards. – ¹³C-NMR-Spektren: Bruker AC 200 (50.323 MHz); TMS (int.) als Standard. – Massenspektren: Finnigan MAT 8230. – Elementaranalysen: Mikroanalytisches Laboratorium der Universität Heidelberg.

Allgemeine Arbeitsbedingungen: Alle Umsetzungen wurden in sorgfältig getrockneten Lösungsmitteln in ausgeheizten Apparaturen durchgeführt.

Cyanbis (diisopropylamino) phosphonio (triphenylphosphoranyliden)methan (3): Eine Lösung von Natrium-cyan(triphenylphosphoranyliden)methanid (1) wird aus 3.01 g (10.0 mmol) Cyan(triphenylphosphoranyliden)methan¹⁷⁾ und 1.90 g (10.4 mmol) Na-N(SiMe₃)₂ in 50 ml Toluol bereitet. Diese wird auf -78 °C gekühlt, und anschließend wird eine Lösung von 2.66 g (10.0 mmol) 2 in 10 ml Toluol zugetropft. Man läßt auf Raumtemp. erwärmen und filtriert den gelartigen Niederschlag über eine G(IV)-Fritte ab. Das Filtrat wird i. Vak. eingeengt und der Rückstand aus ca. 40 ml Acetonitril umkristallisiert. Es werden 4.78 g (90%) leuchtend gelbe Kristalle erhalten; Schmp. 163 °C. – ¹H-NMR (C₆D₆): $\delta = 1.26$ (d, J = 6.6 Hz, 12H, CH₃), 1.30 (d, J = 6.6 Hz, 12H, CH₃), 4.00 (dsept, ³J_{PH} = 12.2 Hz, J = 6.6 Hz, 4H, CH), 6.91 – 7.08 (m, 9H, aromat. CH), 7.56 – 7.82 (m, 6H, aromat. CH). – ¹³C-NMR (C₆D₆): $\delta = 14.2$ (dd, ¹J_{CP(V)} = 117 Hz, ¹J_{CP(III)} = 42.4 Hz, C_{ylid}), 24.28 (d, ³J_{CP} = 6 Hz, CH₃), 25.35 (d, ³J_{CP} = 8.8 Hz, CH₃), 47.6 (d, ²J_{CP} = 13.2 Hz, CH), 127.8 (dd, ¹J_{CP} = 88 Hz, ²J_{CP} = 6 Hz, C-1), 128.9 (d, ³J_{CP} = 11.7 Hz, C_m), 132.2 (d, ⁴J_{CP} = 3 Hz, C_p), 134.4 (dd, ²J_{CP} = 8.8 Hz, ⁴J_{CP} = 3 Hz, C₀). – IR (KBr): $\tilde{\nu} = 2125$ cm⁻¹ (CN).

Cyan[{cyan(triphenylphosphoranyliden)methyl](diisopropylamino)phosphonio](triphenylphosphoranyliden)methan (6): Zu einer Lösung von 10.0 mmol 1 in 50 ml Toluol werden bei $-78 \,^{\circ}C 1.09 \,^{\circ}g$ (5.4 mmol) **5a** getropft. Nach Erwärmen auf Raumtemp. wird der Niederschlag abfiltriert. Das in Toluol unlösliche **6** wird mit 20 ml CH₂Cl₂ extrahiert. Der Extrakt wird i. Vak. eingedampft und der gelbe Rückstand mit 40 ml Acetonitril gewaschen. Dabei wird ein Äquivalent Acetonitril angelagert; Ausb. 3.26 g (86%) **6** · CH₃CN, Zers. ab 78 °C. - ¹H-NMR (CDCl₃): δ = 0.65 (d, J = 6.1 Hz, 12H, CH₃), 1.93 (s, 3H, CH₃CN), 3.83 (m, 2H, CH), 7.76 (m, 30H, aromat. CH). - ¹³C-NMR (CDCl₃): δ = 0.9 (s, CH₃CN), 14.6 (ddd, ¹J_{CP}V) = 120.7 Hz, ¹J_{CP(III)} = 49.2 Hz, ³J_{CP} = 12.2 Hz, Cy_{iid}), 23.7 (d, ³J_{CP} = 6.4 Hz, CH₃), 46.8 (d, ²J_{CP} = 10.2 Hz, CH), 126.9 (dd, ¹J_{CP} = 90.6 Hz, ³J_{CP} = 4 Hz, C-1), 128.2 (m, C_m), 131.8 (br. s, C_p), 134.0 (br. s, C₀). - IR (KBr): \tilde{v} = 2135 cm⁻¹ (CN).

$C_{46}H_{44}N_3P_3 \cdot CH_3CN$ (772.9)	Ber. C 74.60 H 6.13 N 7.	25
	Gef. C 74.53 H 6.20 N 7.	15

Allgemeine Arbeitsvorschrift zur Darstellung von 7a,b, 10a,c,d: 2.65 g (5 mmol) 3 (bzw. 3.80 g $6 \cdot CH_3CN$) und 1.71 g (5 mmol) NaBPh₄ werden in 30 ml THF gelöst. Anschließend werden 1.01 g (5 mmol) 5a oder 0.89 g (5 mmol) 5b (bzw. 1.01 g 5a oder 0.79 g 5c) bei Raumtemp. zugegeben. Es fällt sofort NaCl aus, das durch Filtration abgetrennt wird. Das Filtrat wird i. Vak. eingedampft und der Rückstand aus ca. 20 ml Acetonitril oder DME umkristallisiert. 7a lagert ein Äquivalent Acetonitril an. Zur Darstellung von 10d wird wie eben beschrieben verfahren, jedoch 0.34 g (10 mmol) statt NaBPh₄ und als Lösungsmittel CH₂Cl₂ statt THF verwendet.

[2-Chlor-2,3,5-tris(diisopropylamino)-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3-azadiphospholium]-tetraphenylborat (7**a**): Ausb. 4.47 g (88%), Schmp. 148 °C (Zers.). – ¹H-NMR (CDCl₃): δ = -0.14 (m, 3H, CH₃), 1.06–1.53 (m, 33 H, CH₃), 1.87 (s, 3H, CH₃CN), 2.96–3.84 (m, 6H, CH), 6.39–7.46 (m, 35 H, aromat. CH). – Ausgewählte ¹³C-NMR-Daten (CDCl₃): δ = 36.4 (ddd, ¹J_{CP} = 104.7 Hz, ¹J_{CP} = 43.8 Hz, ²J_{CP} = 34.22 Hz, C_{ylid}), 177.1 (dd, ²J_{CP} = 30.8 Hz, ²J_{CP} = 8.5 Hz, CN). – ¹¹B-NMR (CDCl₃): δ = -6.37 (s, BPh₄⁻). – FAB-MS [*p*-Nitrobenzylethanol (NBA)]: *m/z* (%) = 697 (70) [M⁺ – BPh₄], 431 (100) [Ph₃P = C(CN)PNiPr₂⁺].

[2-Chlor-3,5-bis(diisopropylamino)-2-phenyl-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3-azadiphospholium]-tetraphenylborat (7b): Ausb. 4.27 g (86%), Schmp. 141 °C (Zers.). – ¹H-NMR (CDCl₃): $\delta = -0.11$ (m, 3H, CH₃), 0.46 – 1.71 (m, 21 H, CH₃), 2.93 – 4.13 (m, 4H, CH), 6.73 – 8.1 (m, 40 H, aromat. CH). – Ausgewählte ¹³C-NMR-Daten (CDCl₃): $\delta = 37.8$ (d,,1", ¹J_{CP} = 109.2 Hz, ¹J_{CP} + ²J_{CP} = 30 Hz, C_{ylid}), 179.9 (dd, ²J_{CP} = 27.7 Hz, ²J_{CP} = 8 Hz, CN). – ¹¹B-NMR (CDCl₃): $\delta = -6.37$ (s, BPh₄⁻). [2-Chlor-5-{cyan(triphenylphosphoranyliden)methyl}-2,3-bis(diisopropylamino)-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3-azadiphospholium]-tetraphenylborat (**10a**): Ausb. 5.17 g (85%), Schmp. 203°C (Zers.). - ¹H-NMR (CDCl₃): $\delta = 0.71$ (d, J = 6.8 Hz, 6H, CH₃), 1.03 (m, 15H, CH₃), 1.47 (m, 3H, CH₃), 3.39 (m, 4H, CH), 6.82 - 7.96 (m, 50 H, aromat. CH). - Ausgewählte ¹³C-NMR-Daten (CDCl₃): $\delta = 184.4$ (m, CN). - ¹¹B-NMR (CDCl₃): $\delta = -6.37$ (s, BPh₄⁻). - IR (KBr): $\tilde{v} = 2180$ cm⁻¹ (CN). - FD-MS (10 kV): m/z (%) = 897 (100) [M⁺ - BPh₄].

```
C<sub>76</sub>H<sub>78</sub>N<sub>4</sub>BClP<sub>4</sub> (1217.6) Ber. C 74.97 H 6.46 N 4.60
Gef. C 74.44 H 6.36 N 4.57
```

[2-tert-Butyl-2-chlor-5-{cyan(triphenylphosphoranyliden}methyl}-3-diisopropylamino-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3azadiphospholium]-tetraphenylborat (10c): Ausb. 4.57 g (78%), Schmp. 198 °C (Zers.). – ¹H-NMR (CDCl₃): $\delta = 0.62-1.43$ (m, 21 H, CH₃), 4.02 (m, 2 H, CH), 6.65-7.78 (m, 50 H, aromat. CH). – Ausgewählte ¹³C-NMR-Daten (CDCl₃): $\delta = 176.1$ (m, CN). – ¹¹B-NMR (CDCl₃): $\delta = -6.37$ (s, BPh₄). – IR (KBr): $\tilde{v} = 2180$ cm⁻¹ (CN). – FAB-MS (NBA): m/z (%) = 854 (80) [M⁺ – BPh₄], 431 (100) [Ph₃P = C(CN)PNiPr⁺].

 $C_{74}H_{73}BClN_3P_4$ (1174.4) Ber. C 75.67 H 6.26 N 3.57 Gef. C 75.35 H 6.38 N 3.39

[2-Chlor-5-{cyan(triphenylphosphoranyliden}methyl}-3-diisopropylamino-2-methyl-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3-azadiphospholium]-tetrachloroaluminat (**10d**): Ausb. 3.80 g (81%), Schmp. 162°C (Zers.). – ¹H-NMR (CDCl₃): δ = 0.72–1.36 (m, 12H, CH₃), 1.94 (d, ²J_{PH} = 12 Hz, 3H, CH₃), 2.97–4.15 (m, 2H, CH), 7.33–7.96 (m, 30 H, aromat. CH).

[2,3-Dichlor-2,5-bis(diisopropylamino)-4-(triphenylphosphoranyliden)-3H-1,2,3-azadiphospholium]-chlorotriphenylborat (11): Zu einer Lösung von 2.03 g (2 mmol) 7a in 20 ml CH₂Cl₂ werden 20 ml einer 0.4 m etherischen HCl-Lösung bei Raumtemp. getropft. I. Vak. werden alle flüchtigen Bestandteile abgedampft, und der Rückstand wird aus Acetonitril/Ether (1:1) umkristallisiert. Es werden 1.06 g (56%) farblose Kristalle 11 · CH₃CN isoliert. Die in der Mutterlauge verbleibende Restmenge von 11 konnte nicht von den Ammonium-Salzen getrennt werden; Schmp. 126°C (Zers.). – ¹H-NMR $(CDCl_3)$: $\delta = -0.02$ (br. m, 3H, CH₃), 1.23 (br. m) und 1.32 (d, J = 7.0 Hz) und 1.39 (d, J = 6.3 Hz) (zus. 21 H, CH₃), 3.25 - 3.90 (m, 4H, CH), 6.90-7.60 (m, 30H, aromat. CH). - Ausgewählte ¹³C-NMR-Daten: $\delta = 47.6$ (m, C_{ylid}), 172.7 (dm, ¹J_{CP} = 29.1 Hz, CN). $- {}^{11}$ B-NMR (CDCl₃): $\delta = 3.53$ (s, BClPh²). - FD-MS (10 kV): m/z (%) = 632 (60) [M⁺ - BClPh₃] und weitere Fragmente. C₅₀H₅₈BCl₃N₃P₃ · CH₃CN (952.2) Ber. C 65.60 H 6.45 N 5.88

Gef. C 65.32 H 6.08 N 5.79

Einkristall-Röntgen-Strukturanalysen von 6 und 7a: Einzelheiten zu den Einkristall-Röntgen-Strukturanalysen sind in Tab. 6 zusammengefaßt. Die Reflexintensitäten wurden mit einem Stoe-Siemens-Vierkreisdiffraktometer (Mo- K_{α} -Strahlung, Graphitmonochromator, ω -Scan) gemessen. Eine empirische Absorptionskorrektur wurde bei beiden Verbindungen durchgeführt.

Die Strukturen wurden mit Direkten Methoden gelöst. Bei der Verfeinerung (Blockmatrix, $w = 1/\sigma_F^2$) wurden die Nichtwasserstoff-Atome anisotrop, die Phenyl-Ringe und die Methyl-Gruppen als starre Gruppen mit Wasserstoff-Atomen (C-H 0.95, C-C 1.395 Å), mit je einem gemeinsamen isotropen Temperaturfaktor für die Wasserstoff-Atome behandelt. Beide Strukturen enthalten ein Acetonitril-Molekül, das in 7a fehlgeordnet ist.

Alle Berechnungen wurden mit den Programmsystemen SHELX 76 und SHELXS 86 durchgeführt¹⁸⁾.

Tab. 6. Angaben zu den Röntgenstrukturanalysen

	6	7a
Formel	$C_{46}H_{44}N_3P_3$	$(C_{38}H_{57}CIN_4P_3)^{\oplus}[C_{24}H_{20}B]^{\Theta}$
Molmasse	772.9	1058.6
Kristallsystem	monoklin	monoklin
Raumgruppe	$P2_1/n$	C_2/c
Lenparameter	a = 11.303(3) b = 22.275(5)	47.140(10) 10.448(2)
β [°], V [Å ³])	c = 17.427(4)	35.952(11)
	$\beta = 96.57(2)^{2}$	137.36(2)
7	V = 4359	11996
d $\left[q \cdot cm^{-3} \right]$	4 1 1 7 8	8 1 172
$\mu(Mo-K_{\alpha})$ [cm ⁻¹]	1.7	1.8
Kristallgröße	0.57 · 0.30 ·	0.45 · 0.80 · 0.84
[mm]	0.61	
$2\Theta_{max}[^{\circ}]$	45	48
gemessene	$\frac{\pm}{12}$, 25, 16 5871	$\pm 33, 11, 41$ 9996
Reflexe	2011	,,,,,,
beobachtete	3180 ($I > 2\sigma_l$)	5410 $(I > 2\sigma_I)$
Reflexe Zabi dor	441	641
Variablen	441	041
R-Werte	R = 0.061	R = 0.059
	$R_{\rm w} = 0.032$	$R_{\rm w} = 0.032$
Restelektronen- dichte [e/Å ³]	0.25	0.3

CAS-Registry-Nummern

1: 105663-75-0 / 3: 120362-95-0 / 5a: 921-26-6 / 5b: 644-97-3 / 5c: 07-7 / 11: 120363-10-2 / ClP(NiPr)2: 56183-63-2 / NaBPh4: 143-66-8 / AlCl₃: 7446-70-0

¹⁾ H. W. Roesky, J. Organomet. Chem. 281 (1985) 69.

- ²⁾ G. Bettermann, H. Buhl, R. Schmutzler, D. Schömburg, U. Wermuth, Phosphorus Sulfur 18 (1983) 77.
- ³⁾ G. Baccolini, E. Mezzina, E. Todesco, E. Foresti, J. Chem. Soc., Chem. Commun. 1988, 304.
- ⁴⁾ H. W. Roesky, U. Scholz, A. Schmidpeter, K. Karaghiosoff, W. S. Sheldrick, *Chem. Ber.* 121 (1988) 1681.
 ⁵⁾ S. Sheldrick, *Chem. Little and Cham. Cham.* 600 (1066) 40
- ⁵⁾ K. Issleib, R. Lindner, Liebigs Ann. Chem. 699 (1966) 40.
- ⁷⁷ K. Issleto, K. Lindner, Lieoigs Ann. Chem. 97 (1900) 40.
 ⁶¹ H. Schmidbaur, Adv. Organomet. Chem. 9 (1970) 259.
 ⁷¹ J. C. Summers, H. Sisler, Inorg. Chem. 9 (1970) 862; C. W. Schultz, R. W. Parry, Inorg. Chem. 15 (1976) 3046; M. G. Thomas, C. W. Schultz, R. W. Parry, Inorg. Chem. 16 (1977) 994.
 ⁸¹ H. J. Bestmann, S. Pfohl, Liebigs Ann. Chem. 1974, 1688.
 ⁹¹ H. Bestmann, M. Schmidt, Angew. Chem 99 (1987) 64: Angew.
- ⁹⁾ H. J. Bestmann, M. Schmidt, Angew. Chem. 99 (1987) 64; Angew.
- ¹⁰⁾ 4: ³¹P-NMR (CDCl₃): $\delta = -2.22$ (s, PPh₃), 83.68 [s, P(NiPr₂)₂]. ⁻¹⁰⁾ 4: ³¹P-NMR (CDCl₃): $\delta = -2.22$ (s, PPh₃), 83.68 [s, P(NiPr₂)₂]. ⁻¹¹ D. Lappas, D. M. Hoffman, K. Folding, J. C. Huffman, Angew. Chem. **100** (1988) 585; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **27** (1988) 587 und dort zitierte Literatur.
- ¹²⁾ H. Schmidbaur, C. Paschalidis, G. Reber, G. Müller, Chem. Ber. 121 (1988) 1241.
- ¹³⁾ H. Grützmacher, unveröffentlichte Ergebnisse; vgl. auch A. H.
- ¹⁴ D. Gruzmacher, unveronentifichte Ergebnisse, vgl. auch A. H. Cowley, M. Lattman, J. C. Wilburn, *Inorg. Chem.* 20 (1981) 2916.
 ¹⁴ D. Schomburg, *Acta Crystallogr., Ser. A*, 40 (1984) C265; W. S. Sheldrick, S. Pohl, H. Zamankhan, M. Banek, D. Amirzadeh-Asl, H. W. Roesky, *Chem. Ber.* 114 (1981) 2132; H. W. Roesky, H. Zamankhan, W. S. Sheldrick, A. H. Cowley, S. K. Mehrotra, *Inorg. Chem.* 20 (1981) 2910; D. Schomburg, G. Bettermann, L. Ernet P. Schwutzler Angaw. *Chem* 97 (1985) 071; *Angaw. Chem* Ernst, R. Schmutzler, Angew. Chem. 97 (1985) 971; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 24 (1985) 975.
- ¹⁵⁾ H. Grützmacher, H. Pritzkow, Chem. Ber. 122 (1989)1417, nachstehend.
- 16) T. A. Albright, M. D. Gordon, W. J. Freeman, E. E. Schweizer, J. Am. Chem. Soc. 98 (1976) 6249.
- J. Am. Chem. Soc. 36 (1970) 0249.
 ¹⁷⁾ H. J. Bestmann, S. Pfohl, Liebigs Ann. Chem. 1974, 1688.
 ¹⁸⁾ G. M. Sheldrick, SHELX 76, A Program for Crystal Structure Determination, Cambridge 1976. ^{18b)} G. M. Sheldrick, SHELXS 86, Programm zur Strukturlösung, Göttingen 1986. -^{18c)} Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, Gesellschaft für wissenschaftlich-technische Information mbH, D-7514 Eggenstein-Leopoldshafen 2, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-53785, der Autorennamen und des Zeitschriftenzitats angefordert werden.

[47/89]