

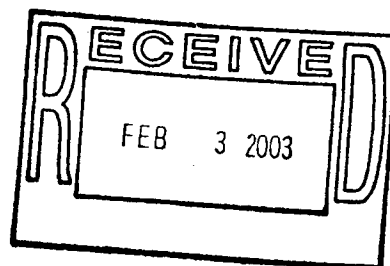
Supporting Information for

Synthesis and Structures of 15- and 18-Membered Unsaturated Selenacrown Ethers and Their Complexation with Silver Trifluoroacetate

Toshio Shimizu, Mari Kawaguchi, Takahiro Tsuchiya, Kazunori Hirabayashi,
and Nobumasa Kamigata*

*Department of Chemistry, Graduate School of Science, Tokyo Metropolitan University,
Minami-ohsawa, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan*

Table of Contents	page
Spectral data of 15-US-5 (1), 18-US-6 (2), $\text{Ag}^{\text{I}}(15\text{-US-5})(\text{CF}_3\text{COO})$ (3), and $\text{Ag}_5^{\text{I}}(18\text{-US-6})_3(\text{CF}_3\text{COO})_5$ (4)	S 2
X-Ray analysis of 15-US-5 (1)	S 4
X-Ray analysis of 18-US-6 (2)	S 16
X-Ray analysis of $\text{Ag}_5^{\text{I}}(18\text{-US-6})_3(\text{CF}_3\text{COO})_5$ (4)	S 39



Spectral data
of
15-US-5 (1), 18-US-6 (2), Ag^I(15-US-5)(CF₃COO) (3),
and Ag^I₅(18-US-6)₃(CF₃COO)₅ (4)

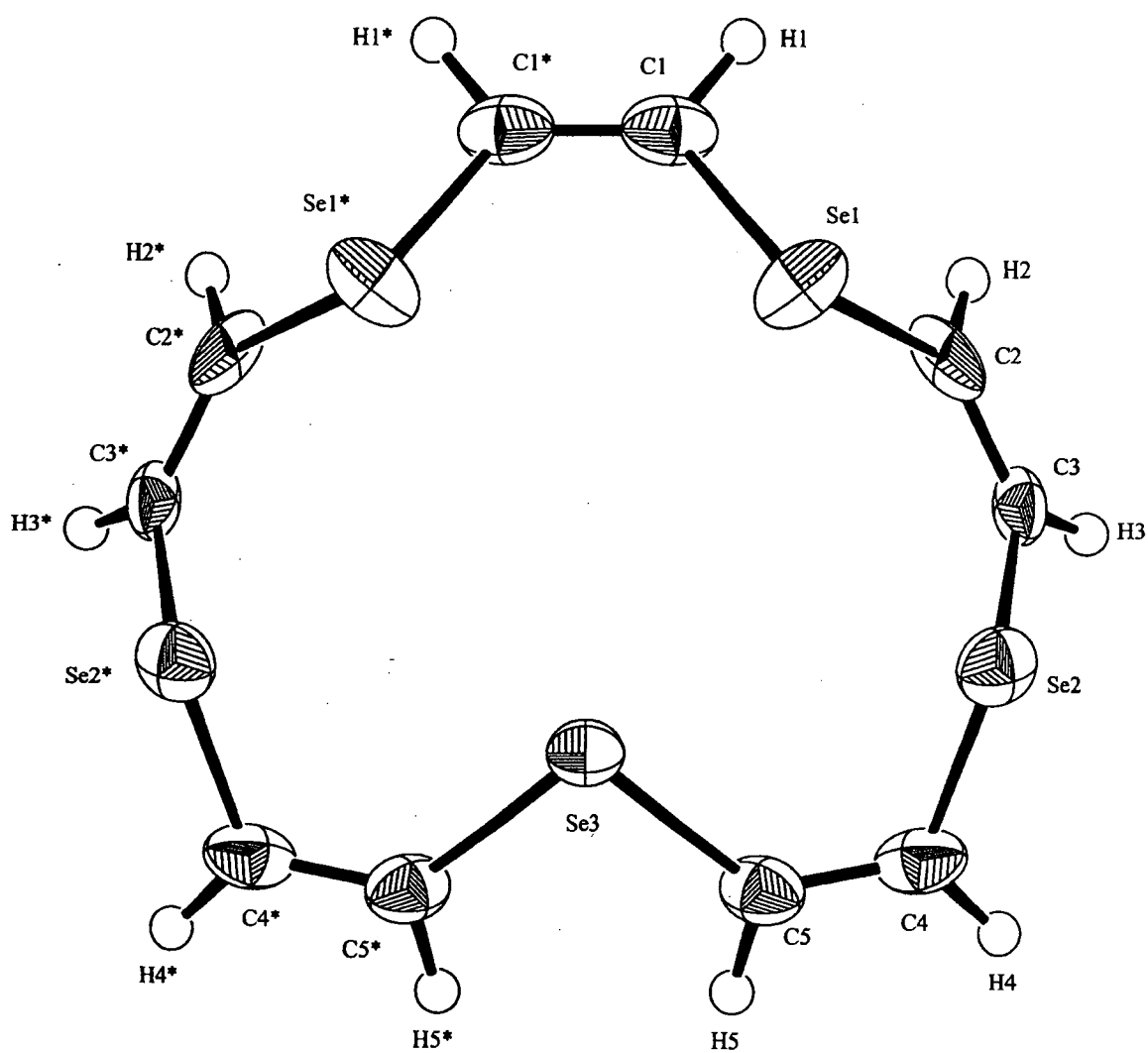
15-US-5 (1): Mp 131.5-133.5 °C (colorless prisms from acetone-hexane); ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ 7.16 (s, 10H); ^{13}C NMR (125 MHz, CDCl_3) δ 127.0; ^{77}Se NMR (95 MHz, CDCl_3) δ 336.5; IR (KBr) ν_{max} 3004, 1531, 1246, 716, 677, 646 cm^{-1} ; UV (MeCN) λ_{max} 252 (ϵ 2.0×10^4) nm; (EtOH) λ_{max} 259 (ϵ 1.5×10^4) nm; (CH_2Cl_2) λ_{max} 260 (ϵ 2.2×10^4) nm; (cyclohexane) λ_{max} 261 (ϵ 2.2×10^4) nm; MS (FAB) m/z 526 (M^+ , $^{80}\text{Se}_3^{78}\text{Se}_2$). Anal. Calcd for $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{Se}_5$: C, 22.88; H, 1.92. Found: C, 23.01; H, 1.89.

18-US-6 (2): Mp 150.0-151.0 °C (colorless prisms from acetone-hexane); ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ 7.12 (s, 12H); ^{13}C NMR (125 MHz, CDCl_3) δ 125.7; ^{77}Se NMR (95 MHz, CDCl_3) δ 350.1; IR (KBr) ν_{max} 3014, 1539, 1239, 718, 644, 629 cm^{-1} ; UV (MeCN) λ_{max} 262 (ϵ 2.7×10^4) nm; (EtOH) λ_{max} 266 (ϵ 1.9×10^4) nm; (CH_2Cl_2) λ_{max} 269 (ϵ 2.8×10^4) nm; (cyclohexane) λ_{max} 271 (ϵ : not determined) nm; MS (FAB) m/z 632 (M^+ , $^{80}\text{Se}_4^{78}\text{Se}_2$). Anal. Calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{Se}_6$: C, 22.88; H, 1.92. Found: C, 22.95; H, 2.05.

$\text{Ag}^{\text{I}}(15\text{-US-5})(\text{CF}_3\text{COO})$ (3): Mp 151.5 °C (decomp., colorless prisms from acetone-hexane); ^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.46 (s, 10H); ^{13}C NMR (100 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 128.2; ^{77}Se NMR (95 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 277.5; IR (KBr) ν_{max} 3005, 1683, 1247, 1208, 1129, 716, 689, 677, 647 cm^{-1} ; MS (FAB) m/z 633 ($\text{M}^+-\text{CF}_3\text{COO}$, $^{107}\text{Ag}^{80}\text{Se}_3^{78}\text{Se}_2$). Anal. Calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{AgF}_3\text{O}_2\text{Se}_5$: C, 19.32; H, 1.35. Found: C, 19.36; H, 1.52.

$\text{Ag}_3^{\text{I}}(18\text{-US-6})_3(\text{CF}_3\text{COO})_3$ (4): Mp 129.5 °C (decomp., yellow prisms from acetone-hexane); ^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.51 (s, 12H); ^{13}C NMR (100 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 117.5 (q, $J = 286$ Hz), 126.9, 158.1 (q, $J = 31$ Hz); ^{77}Se NMR (95 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 315.7; IR (KBr) ν_{max} 3014, 1683, 1239, 1207, 1132, 718, 644, 628 cm^{-1} ; MS (FAB) m/z 961 $\{(\text{2}+\text{CF}_3\text{COOAg}_2)^+, ^{109}\text{Ag}^{107}\text{Ag}^{80}\text{Se}_4^{78}\text{Se}_2\}$, 739 $\{(\text{2}+\text{Ag})^+, ^{107}\text{Ag}^{80}\text{Se}_4^{78}\text{Se}_2\}$. Anal. Calcd for $\text{C}_{46}\text{H}_{36}\text{Ag}_5\text{F}_{15}\text{O}_{10}\text{Se}_{18}$: C, 18.45; H, 1.21. Found: C, 18.41; H, 1.27.

X-Ray Structure
of
15-US-5 (1)



```

data_General
_audit_creation_date          'Fri Mar 22 17:08:03 2002'
_audit_creation_method        'by teXsan'
_audit_update_record          ?
#-----
# PROCESSING SUMMARY (IUCr Office Use Only)
_journal_date_rcd_electronic  ?
_journal_date_from_coeditor   ?
_journal_date_accepted        ?
_journal_coeditor_code        ?
#-----
# SUBMISSION DETAILS
_publ_contact_author_name      'Nobumasa Kamigata'
_publ_contact_author_address
;
  ENTER ADDRESS
;
_publ_contact_author_email      'kamigata-nobumasa@c.metro-u.ac.jp'
_publ_contact_author_fax        '+81 426 (77) 2525'
_publ_contact_author_phone      '+81 426 (77) 2556'
_publ_contact_letter
;
  ENTER TEXT OF LETTER
;
_publ_requested_journal         'Org. Lett.'
_publ_requested_category        ' CHOOSE FI FM FO CI CM CO or AD'

_publ_requested_coeditor_name   ?
#-----
# TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title
;
  Synthesis and Structures of 15- and 18-Membered Unsaturated Selenacrown
  Ethers and Their Complexation with Silver Trifluoroacetate
;

_publ_section_title_footnote
;
  ENTER FOOTNOTE TO TITLE OF PAPER
;
loop_
_publ_author_name
_publ_author_footnote
_publ_author_address
'Toshio Shimizu'
;
  FIRST AUTHORS FOOTNOTES
;
;
  Minami-ohsawa, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan
;
_publ_section_synopsis
;
  ENTER SYNOPSIS
;
#-----
# TEXT

_publ_section_abstract
;

```

```

ENTER ABSTRACT
;
_publ_section_comment
;
ENTER TEXT
;

_publ_section_acknowledgements
;
ENTER ACKNOWLEDGEMENTS
;

_publ_section_references
;
ENTER OTHER REFERENCES
Molecular Structure Corporation, Rigaku Corporation. (2000). teXsan.
Single Crystal Structure Analysis Software. Version 1.11.
MSC, 3200 Research Forest Drive, The Woodlands, TX 77381, USA.
Rigaku, 3-9-12 Akishima, Tokyo, Japan.
North, A.C.T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968).
Acta Cryst. A24, 351-359.
;

_publ_section_figure_captions
;
ENTER FIGURE CAPTIONS
;

_publ_section_exptl_prep
;
ENTER COMPOUND PREPARATION DETAILS
;

_publ_section_exptl_refinement
;
ENTER SPECIAL DETAILS OF THE REFINEMENT
;
#-----
data_master_file_afc7*.xtl
#-----
# CHEMICAL DATA
_chemical_formula_sum          'C10 H10 Se5 '
_chemical_formula_moiety       'C10 H10 Se5 '
_chemical_formula_weight       524.99
_chemical_melting_point        ?
#-----
# CRYSTAL DATA
_symmetry_cell_setting         orthorhombic
_symmetry_space_group_name_H-M 'P 21/n 21/m 21/a'
_symmetry_Int_Tables_number    62
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z
1/2+x,1/2-y,1/2-z
-x,1/2+y,-z
1/2-x,-y,1/2+z
-x,-y,-z
1/2-x,1/2+y,1/2+z
x,1/2-y,z
1/2+x,y,1/2-z

```

```

_cell_length_a      8.746(2)
_cell_length_b      18.482(4)
_cell_length_c      8.728(3)
_cell_angle_alpha    90
_cell_angle_beta     90
_cell_angle_gamma    90
_cell_volume         1410(1)
_cell_formula_units_Z 4
_cell_measurement_reflns_used 25
_cell_measurement_theta_min 14.4
_cell_measurement_theta_max 15.0
_cell_measurement_temperature 173.2
#-----
_exptl_crystal_description 'prismatic'
_exptl_crystal_colour      'colorless'
_exptl_crystal_size_max    0.400
_exptl_crystal_size_mid    0.400
_exptl_crystal_size_min    0.030
_exptl_crystal_size_rad    ?
_exptl_crystal_density_diffn 2.471
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_absorpt_coefficient_mu 12.951
_exptl_absorpt_correction_type psi-scan
_exptl_absorpt_process_details '(North, Phillips & Mathews, 1968)'
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.199
_exptl_absorpt_correction_T_max 0.998
#-----
# EXPERIMENTAL DATA
_diffn_radiation_type      'Mo K $\alpha$ '
_diffn_radiation_wavelength 0.7107
_diffn_measurement_device_type 'Rigaku AFC7R'
_diffn_measurement_method   ' $\psi$ w-2 $\psi$ q'
_diffn_reflns_number        1889
_diffn_reflns_av_R_equivalents ?
_diffn_reflns_theta_max     27.49
_diffn_measured_fraction_theta_max 0.9988
_diffn_reflns_theta_full    27.49
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.9988
_diffn_reflns_limit_h_min    0
_diffn_reflns_limit_h_max    11
_diffn_reflns_limit_k_min     0
_diffn_reflns_limit_k_max     24
_diffn_reflns_limit_l_min    -11
_diffn_reflns_limit_l_max     0
_diffn_standards_number      3
_diffn_standards_interval_count 150
_diffn_standards_decay_%     2.09
#-----
# REFINEMENT DATA
_refine_special_details
;
Refinement using reflections with  $F^2 > 0.0 \sigma(F^2)$ . The weighted
R-factor (wR) and goodness of fit (S) are based on  $F^2$ . R-factor (gt) are
based on F. The threshold expression of  $F^2 > 2.0 \sigma(F^2)$  is used only
for calculating R-factor (gt).
;
_reflns_number_total        1666
_reflns_number_gt           800
_reflns_threshold_expression ' $F^2 > 2.0 \sigma(F^2)$ '
_refine_ls_structure_factor_coef 'Fsqd'

```



```

_refine_ls_R_factor_gt          0.0692
_refine_ls_wR_factor_ref        0.1657
_refine_ls_hydrogen_treatment    noref
_refine_ls_number_reflns        1349
_refine_ls_number_parameters     70
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.379
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
  'w = 1/[ $\sigma^2(F_o^2) + (0.05500(\text{Max}(\text{Fo}^2, 0) + 2\text{Fc}^2)/3)^2$ ]'
_refine_ls_shift/su_max          0.0002
_refine_diff_density_max         2.47
_refine_diff_density_min        -2.23
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       ?
_refine_ls_abs_structure_details ?
_refine_ls_abs_structure_Flack   ?
loop
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
  'C' 'C' 0.003 0.002
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1)
;
  'H' 'H' 0.000 0.000
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Table 6.1.1.2)
;
  'Se' 'Se' -0.093 2.226
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1)
;
#-----
# ATOMIC COORDINATES AND DISPLACEMENT PARAMETERS
loop
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Se(1)  Se 0.4022(2)  0.3420(1)  0.0008(2)  0.0451(4)  Uani 1.00 d . . .
Se(2)  Se 0.7205(2)  0.42760(9)  0.1210(2)  0.0413(4)  Uani 1.00 d . . .
Se(3)  Se 0.8148(2)  0.2500      0.0985(2)  0.0342(5)  Uani 1.00 d S . .
C(1)   C 0.320(1)    0.2852(8)  -0.162(1)  0.042(4)   Uani 1.00 d . . .
C(2)   C 0.520(2)    0.4053(8)  -0.125(2)  0.040(4)   Uani 1.00 d . . .
C(3)   C 0.644(1)    0.4374(7)  -0.081(2)  0.034(4)   Uani 1.00 d . . .
C(4)   C 0.924(2)    0.395(1)   0.074(2)   0.043(4)   Uani 1.00 d . . .
C(5)   C 0.955(1)    0.3266(9)  0.073(2)   0.039(4)   Uani 1.00 d . . .
H(1)   H 0.2612      0.3166     -0.2298     0.0505     Uiso 1.00 calc . . .
H(2)   H 0.4855      0.4141     -0.2262     0.0493     Uiso 1.00 calc . . .
H(3)   H 0.6983      0.4666     -0.1524     0.0401     Uiso 1.00 calc . . .
H(4)   H 1.0025      0.4292     0.0524      0.0519     Uiso 1.00 calc . . .

```

H(5)	H	1.0590	0.3136	0.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5*)	C	0.955(1)	0.1734(9)	0.073(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1*)	C	0.320(1)	0.2148(8)	-0.162(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.924(2)	0.105(1)	0.074(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5*)	H	1.0590	0.1864	0.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	0.4022(2)	0.1580(1)	0.0008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	0.2612	0.1834	-0.2298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2*)	Se	0.7205(2)	0.07240(9)	0.1210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4*)	H	1.0025	0.0708	0.0524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2*)	C	0.520(2)	0.0947(8)	-0.125(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.644(1)	0.0626(7)	-0.081(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
H(2*)	H	0.4855	0.0859	-0.2262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.6983	0.0334	-0.1524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	0.4022(2)	0.3420(1)	1.0008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.7205(2)	0.42760(9)	1.1210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.8148(2)	0.2500	1.0985(2)	0.0342(5)	Uani 1.00 d S . . .
C(1*)	C	0.320(1)	0.2852(8)	0.838(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.520(2)	0.4053(8)	0.875(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.644(1)	0.4374(7)	0.919(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.924(2)	0.395(1)	1.074(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.955(1)	0.3266(9)	1.073(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	0.2612	0.3166	0.7702	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
H(2*)	H	0.4855	0.4141	0.7738	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.6983	0.4666	0.8476	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	1.0025	0.4292	1.0524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	1.0590	0.3136	1.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5**)	C	0.955(1)	0.1734(9)	1.073(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1**)	C	0.320(1)	0.2148(8)	0.838(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4**)	C	0.924(2)	0.105(1)	1.074(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5**)	H	1.0590	0.1864	1.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1**)	Se	0.4022(2)	0.1580(1)	1.0008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1**)	H	0.2612	0.1834	0.7702	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2**)	Se	0.7205(2)	0.07240(9)	1.1210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4**)	H	1.0025	0.0708	1.0524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2**)	C	0.520(2)	0.0947(8)	0.875(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3**)	C	0.644(1)	0.0626(7)	0.919(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
H(2**)	H	0.4855	0.0859	0.7738	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3**)	H	0.6983	0.0334	0.8476	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	-0.0978(2)	0.1580(1)	0.4992(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.2205(2)	0.07240(9)	0.3790(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.3148(2)	0.2500	0.4015(2)	0.0342(5)	Uani 1.00 d S . . .
C(1*)	C	-0.180(1)	0.2148(8)	0.662(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.020(2)	0.0947(8)	0.625(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.144(1)	0.0626(7)	0.581(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.424(2)	0.105(1)	0.426(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.455(1)	0.1734(9)	0.427(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	-0.2388	0.1834	0.7298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
H(2*)	H	-0.0145	0.0859	0.7262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.1983	0.0334	0.6524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	0.5025	0.0708	0.4476	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	0.5590	0.1864	0.4437	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5**)	C	0.455(1)	0.3266(9)	0.427(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1**)	C	-0.180(1)	0.2852(8)	0.662(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4**)	C	0.424(2)	0.395(1)	0.426(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5**)	H	0.5590	0.3136	0.4437	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1**)	Se	-0.0978(2)	0.3420(1)	0.4992(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1**)	H	-0.2388	0.3166	0.7298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2**)	Se	0.2205(2)	0.42760(9)	0.3790(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4**)	H	0.5025	0.4292	0.4476	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2**)	C	0.020(2)	0.4053(8)	0.625(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3**)	C	0.144(1)	0.4374(7)	0.581(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .

H(2**)	H	-0.0145	0.4141	0.7262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3**)	H	0.1983	0.4666	0.6524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	0.5978(2)	0.8420(1)	-0.0008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.2795(2)	0.92760(9)	-0.1210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.1852(2)	0.7500	-0.0985(2)	0.0342(5)	Uani 1.00 d S . . .
C(1*)	C	0.680(1)	0.7852(8)	0.162(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.480(2)	0.9053(8)	0.125(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.356(1)	0.9374(7)	0.081(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.076(2)	0.895(1)	-0.074(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.045(1)	0.8266(9)	-0.073(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	0.7388	0.8166	0.2298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
H(2*)	H	0.5145	0.9141	0.2262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.3017	0.9666	0.1524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	-0.0025	0.9292	-0.0524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	-0.0590	0.8136	-0.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5**)	C	0.045(1)	0.6734(9)	-0.073(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1**)	C	0.680(1)	0.7148(8)	0.162(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4**)	C	0.076(2)	0.605(1)	-0.074(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5**)	H	-0.0590	0.6864	-0.0563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1**)	Se	0.5978(2)	0.6580(1)	-0.0008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1**)	H	0.7388	0.6834	0.2298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2**)	Se	0.2795(2)	0.57240(9)	-0.1210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4**)	H	-0.0025	0.5708	-0.0524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2**)	C	0.480(2)	0.5947(8)	0.125(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3**)	C	0.356(1)	0.5626(7)	0.081(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
H(2**)	H	0.5145	0.5859	0.2262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3**)	H	0.3017	0.5334	0.1524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	0.5978(2)	0.8420(1)	0.9992(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.2795(2)	0.92760(9)	0.8790(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.1852(2)	0.7500	0.9015(2)	0.0342(5)	Uani 1.00 d S . . .
C(1*)	C	0.680(1)	0.7852(8)	1.162(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.480(2)	0.9053(8)	1.125(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.356(1)	0.9374(7)	1.081(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.076(2)	0.895(1)	0.926(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.045(1)	0.8266(9)	0.927(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	0.7388	0.8166	1.2298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
H(2*)	H	0.5145	0.9141	1.2262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.3017	0.9666	1.1524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	-0.0025	0.9292	0.9476	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	-0.0590	0.8136	0.9437	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5**)	C	0.045(1)	0.6734(9)	0.927(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1**)	C	0.680(1)	0.7148(8)	1.162(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4**)	C	0.076(2)	0.605(1)	0.926(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5**)	H	-0.0590	0.6864	0.9437	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1**)	Se	0.5978(2)	0.6580(1)	0.9992(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1**)	H	0.7388	0.6834	1.2298	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2**)	Se	0.2795(2)	0.57240(9)	0.8790(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4**)	H	-0.0025	0.5708	0.9476	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2**)	C	0.480(2)	0.5947(8)	1.125(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3**)	C	0.356(1)	0.5626(7)	1.081(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
H(2**)	H	0.5145	0.5859	1.2262	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3**)	H	0.3017	0.5334	1.1524	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	1.0978(2)	0.6580(1)	0.5008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.7795(2)	0.57240(9)	0.6210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.6852(2)	0.7500	0.5985(2)	0.0342(5)	Uani 1.00 d S . . .
C(1*)	C	1.180(1)	0.7148(8)	0.338(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.980(2)	0.5947(8)	0.375(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.856(1)	0.5626(7)	0.419(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.576(2)	0.605(1)	0.574(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.545(1)	0.6734(9)	0.573(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	1.2388	0.6834	0.2702	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .

H(2*)	H	1.0145	0.5859	0.2738	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.8017	0.5334	0.3476	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	0.4975	0.5708	0.5524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	0.4410	0.6864	0.5563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
C(5**)	C	0.545(1)	0.8266(9)	0.573(2)	0.039(4)	Uani 1.00 d . . .
C(1**)	C	1.180(1)	0.7852(8)	0.338(1)	0.042(4)	Uani 1.00 d . . .
C(4**)	C	0.576(2)	0.895(1)	0.574(2)	0.043(4)	Uani 1.00 d . . .
H(5**)	H	0.4410	0.8136	0.5563	0.0463	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1**)	Se	1.0978(2)	0.8420(1)	0.5008(2)	0.0451(4)	Uani 1.00 d . . .
H(1**)	H	1.2388	0.8166	0.2702	0.0505	Uiso 1.00 calc . . .
Se(2**)	Se	0.7795(2)	0.92760(9)	0.6210(2)	0.0413(4)	Uani 1.00 d . . .
H(4**)	H	0.4975	0.9292	0.5524	0.0519	Uiso 1.00 calc . . .
C(2**)	C	0.980(2)	0.9053(8)	0.375(2)	0.040(4)	Uani 1.00 d . . .
C(3**)	C	0.856(1)	0.9374(7)	0.419(2)	0.034(4)	Uani 1.00 d . . .
H(2**)	H	1.0145	0.9141	0.2738	0.0493	Uiso 1.00 calc . . .
H(3**)	H	0.8017	0.9666	0.3476	0.0401	Uiso 1.00 calc . . .
o		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
a		1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
b		0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
c		0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
(	F)	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP

loop_

_atom_site_aniso_label

_atom_site_aniso_U_11

_atom_site_aniso_U_22

_atom_site_aniso_U_33

_atom_site_aniso_U_12

_atom_site_aniso_U_13

_atom_site_aniso_U_23

Se(1)	0.0479(9)	0.057(1)	0.0306(7)	-0.0188(8)	0.0047(8)	-0.0055(8)
Se(2)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	-0.0015(8)	-0.0013(7)	-0.0102(7)
Se(3)	0.0251(9)	0.041(1)	0.036(1)	0.0000	0.0019(10)	0.0000
C(1)	0.029(6)	0.06(1)	0.035(7)	0.006(7)	0.000(6)	-0.010(7)
C(2)	0.045(8)	0.040(9)	0.036(8)	0.012(7)	0.003(7)	0.029(8)
C(3)	0.031(7)	0.020(8)	0.050(8)	-0.001(6)	0.011(7)	0.008(7)
C(4)	0.034(7)	0.06(1)	0.038(8)	-0.011(8)	-0.009(7)	0.016(8)
C(5)	0.028(6)	0.05(1)	0.041(8)	0.000(7)	0.002(7)	0.010(7)
C(5*)	0.028(6)	0.05(1)	0.041(8)	0.000(7)	0.002(7)	-0.010(7)
C(1*)	0.029(6)	0.06(1)	0.035(7)	-0.006(7)	0.000(6)	0.010(7)
C(4*)	0.034(7)	0.06(1)	0.038(8)	0.011(8)	-0.009(7)	-0.016(8)
Se(1*)	0.0479(9)	0.057(1)	0.0306(7)	0.0188(8)	0.0047(8)	0.0055(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(7)	0.0102(7)
C(2*)	0.045(8)	0.040(9)	0.036(8)	-0.012(7)	0.003(7)	-0.029(8)
C(3*)	0.031(7)	0.020(8)	0.050(8)	0.001(6)	0.011(7)	-0.008(7)
Se(1*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	-0.0015(8)	-0.0013(8)	-0.0102(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	-0.0015(8)	-0.0013(7)	-0.0102(7)
Se(3*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.036(1)	-0.0015	-0.0013(10)	-0.0102
C(1*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	-0.001(7)	-0.001(6)	-0.010(7)
C(2*)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	-0.001(7)	-0.001(7)	-0.010(8)
C(3*)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	-0.001(6)	-0.001(7)	-0.010(7)
C(4*)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(8)	-0.001(7)	-0.010(8)
C(5*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(7)	-0.001(7)	-0.010(7)
C(5**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(7)	-0.001(7)	-0.010(7)

C(1**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	-0.001(7)	-0.001(6)	-0.010(7)
C(4**)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(8)	-0.001(7)	-0.010(8)
Se(1**)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	-0.0015(8)	-0.0013(8)	-0.0102(8)
Se(2**)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	-0.0015(8)	-0.0013(7)	-0.0102(7)
C(2**)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	-0.001(7)	-0.001(7)	-0.010(8)
C(3**)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	-0.001(6)	-0.001(7)	-0.010(7)
Se(1*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	0.0013(8)	-0.0102(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	0.0013(7)	-0.0102(7)
Se(3*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.036(1)	0.0015	0.0013(10)	-0.0102
C(1*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	0.001(6)	-0.010(7)
C(2*)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	0.001(7)	-0.010(8)
C(3*)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	0.001(7)	-0.010(7)
C(4*)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	0.001(7)	-0.010(8)
C(5*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	0.001(7)	-0.010(7)
C(5**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	0.001(7)	-0.010(7)
C(1**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	0.001(6)	-0.010(7)
C(4**)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	0.001(7)	-0.010(8)
Se(1**)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	0.0013(8)	-0.0102(8)
Se(2**)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	0.0013(7)	-0.0102(7)
C(2**)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	0.001(7)	-0.010(8)
C(3**)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	0.001(7)	-0.010(7)
Se(1*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(8)	0.0102(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(7)	0.0102(7)
Se(3*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.036(1)	0.0015	-0.0013(10)	0.0102
C(1*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	-0.001(6)	0.010(7)
C(2*)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(8)
C(3*)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	-0.001(7)	0.010(7)
C(4*)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	-0.001(7)	0.010(8)
C(5*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(7)
C(5**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(7)
C(1**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	-0.001(6)	0.010(7)
C(4**)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	-0.001(7)	0.010(8)
Se(1**)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(8)	0.0102(8)
Se(2**)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(7)	0.0102(7)
C(2**)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(8)
C(3**)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	-0.001(7)	0.010(7)
Se(1*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(8)	0.0102(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(7)	0.0102(7)
Se(3*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.036(1)	0.0015	-0.0013(10)	0.0102
C(1*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	-0.001(6)	0.010(7)
C(2*)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(8)
C(3*)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	-0.001(7)	0.010(7)
C(4*)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	-0.001(7)	0.010(8)
C(5*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(7)
C(5**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(7)
C(1**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	0.001(7)	-0.001(6)	0.010(7)
C(4**)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	0.001(8)	-0.001(7)	0.010(8)
Se(1**)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(8)	0.0102(8)
Se(2**)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	0.0015(8)	-0.0013(7)	0.0102(7)
C(2**)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	0.001(7)	-0.001(7)	0.010(8)
C(3**)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	0.001(6)	-0.001(7)	0.010(7)
Se(1*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.0361(7)	-0.0015(8)	0.0013(8)	0.0102(8)
Se(2*)	0.0434(8)	0.0445(9)	0.0361(7)	-0.0015(8)	0.0013(7)	0.0102(7)
Se(3*)	0.0434(9)	0.044(1)	0.036(1)	-0.0015	0.0013(10)	0.0102
C(1*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	-0.001(7)	0.001(6)	0.010(7)
C(2*)	0.043(8)	0.044(9)	0.036(8)	-0.001(7)	0.001(7)	0.010(8)
C(3*)	0.043(7)	0.044(8)	0.036(8)	-0.001(6)	0.001(7)	0.010(7)
C(4*)	0.043(7)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(8)	0.001(7)	0.010(8)
C(5*)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(7)	0.001(7)	0.010(7)
C(5**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(8)	-0.001(7)	0.001(7)	0.010(7)
C(1**)	0.043(6)	0.04(1)	0.036(7)	-0.001(7)	0.001(6)	0.010(7)

```

C(4**) 0.043(7)    0.04(1)    0.036(8)    -0.001(8)    0.001(7)    0.010(8)
Se(1**) 0.0434(9)  0.044(1)    0.0361(7)  -0.0015(8)  0.0013(8)  0.0102(8)
Se(2**) 0.0434(8)  0.0445(9)  0.0361(7)  -0.0015(8)  0.0013(7)  0.0102(7)
C(2**) 0.043(8)    0.044(9)    0.036(8)    -0.001(7)    0.001(7)    0.010(8)
C(3**) 0.043(7)    0.044(8)    0.036(8)    -0.001(6)    0.001(7)    0.010(7)
#-----
_computing_data_collection      'MSC/AFC Diffractometer Control'
_computing_cell_refinement      'MSC/AFC Diffractometer Control'
_computing_data_reduction      'teXsan Ver. 1.11'
_computing_structure_solution  'SIR92'
_computing_structure_refinement 'teXsan Ver. 1.10'
_computing_publication_material 'teXsan Ver. 1.11'
_computing_molecular_graphics  '?'
#-----
_geom_special_details
;
?
;
loop_
_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_1
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Se(1)    C(1)    1.91(1)    . . yes
Se(1)    C(2)    1.91(1)    . . yes
Se(2)    C(3)    1.90(1)    . . yes
Se(2)    C(4)    1.93(2)    . . yes
Se(3)    C(5)    1.89(2)    . . yes
Se(3)    C(5)    1.89(2)    . 7_555 yes
C(1)    C(1)    1.30(3)    . 7_555 yes
C(1)    H(1)    0.976      . . no
C(2)    C(3)    1.29(2)    . . yes
C(2)    H(2)    0.947      . . no
C(3)    H(3)    0.948      . . no
C(4)    C(5)    1.29(2)    . . yes
C(4)    H(4)    0.952      . . no
C(5)    H(5)    0.950      . . no
#-----
loop_
_geom_angle_atom_site_label_1
_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_2
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle_publ_flag
C(1)    Se(1)    C(2)    96.5(7)    . . . yes
C(3)    Se(2)    C(4)    99.1(6)    . . . yes
C(5)    Se(3)    C(5)    97.1(9)    . . 7_555 yes
Se(1)    C(1)    C(1)    123.4(5)   . . 7_555 yes
Se(1)    C(1)    H(1)    108.9      . . . no
C(1)    C(1)    H(1)    126.5      7_555 . . no
Se(1)    C(2)    C(3)    124(1)     . . . yes
Se(1)    C(2)    H(2)    118.0      . . . no
C(3)    C(2)    H(2)    117.6      . . . no
Se(2)    C(3)    C(2)    121(1)     . . . yes
Se(2)    C(3)    H(3)    119.1      . . . no
C(2)    C(3)    H(3)    119.2      . . . no

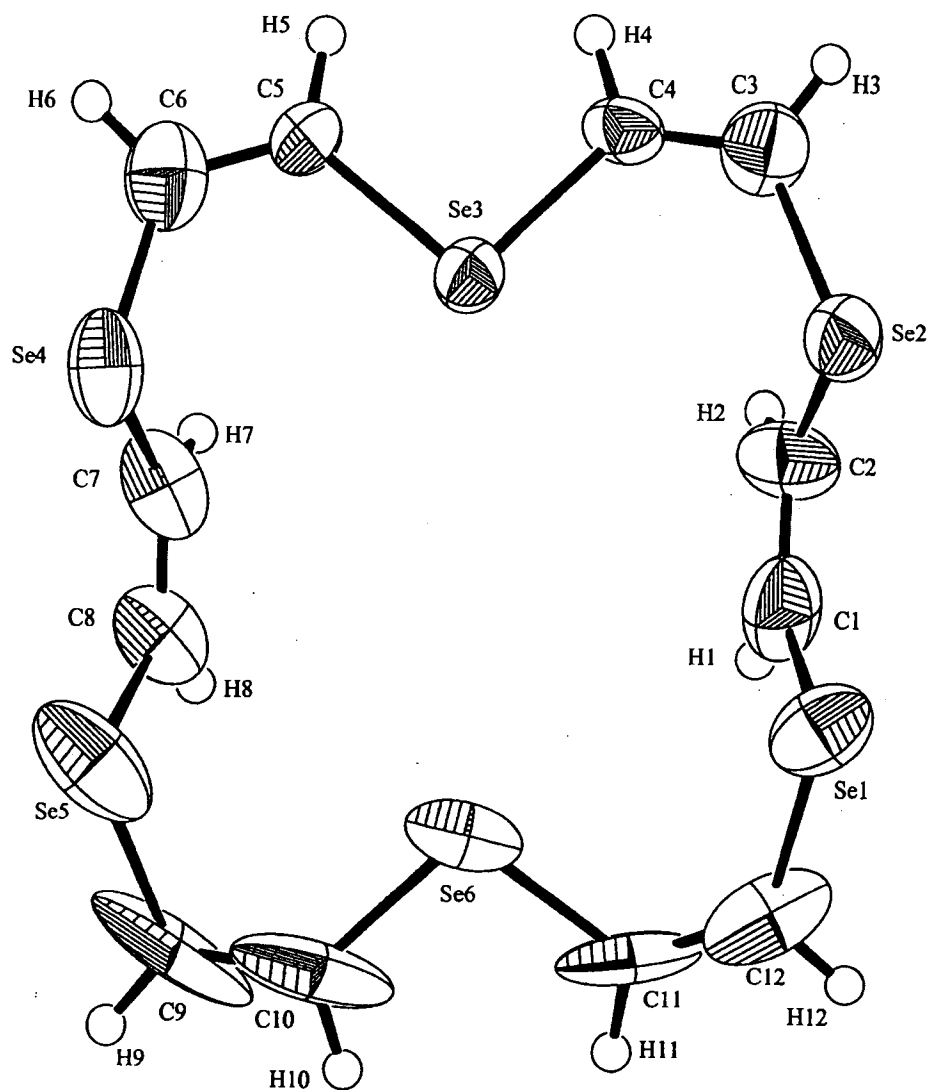
```

```

Se(2)    C(4)    C(5)    120(1)    . . . yes
Se(2)    C(4)    H(4)    119.8    . . . no
C(5)     C(4)    H(4)    120.0    . . . no
Se(3)    C(5)    C(4)    126(1)    . . . yes
Se(3)    C(5)    H(5)    116.8    . . . no
C(4)     C(5)    H(5)    116.6    . . . no
#-----
loop_
_geom_torsion_atom_site_label_1
_geom_torsion_atom_site_label_2
_geom_torsion_atom_site_label_3
_geom_torsion_atom_site_label_4
_geom_torsion
_geom_torsion_site_symmetry_1
_geom_torsion_site_symmetry_2
_geom_torsion_site_symmetry_3
_geom_torsion_site_symmetry_4
_geom_torsion_publ_flag
Se(1)    C(1)    C(1)    Se(1)    0.0    . . 7_555 7_555 yes
Se(1)    C(2)    C(3)    Se(2)    -2(1)   . . . . yes
Se(2)    C(4)    C(5)    Se(3)    4(2)   . . . . yes
C(1)     Se(1)    C(2)    C(3)    -152(1) . . . . yes
C(1)     C(1)    Se(1)    C(2)    -131.6(5) . 7_555 7_555 7_555 yes
C(2)     C(3)    Se(2)    C(4)    125(1)  . . . . yes
C(3)     Se(2)    C(4)    C(5)    -95(1)  . . . . yes
C(4)     C(5)    Se(3)    C(5)    178(1)  . . . 7_555 yes
C(4)     C(5)    Se(3)    C(5)    178(1)  . . . 7_555 yes
#-----
loop_
_geom_contact_atom_site_label_1
_geom_contact_atom_site_label_2
_geom_contact_distance
_geom_contact_site_symmetry_1
_geom_contact_site_symmetry_2
_geom_contact_publ_flag
#-----
#-----

```

X-Ray Structure
of
18-US-6 (2)



```

data_General
_audit_creation_date      'Fri May 17 20:15:37 2002'
_audit_creation_method    'by texsan'
_audit_update_record      ?
#-----
# PROCESSING SUMMARY (IUCr Office Use Only)
_journal_date_rcd_electronic ?
_journal_date_from_coeditor ?
_journal_date_accepted      ?
_journal_coeditor_code      ?
#-----
# SUBMISSION DETAILS
_publ_contact_author_name   'Nobumasa Kamigata'
_publ_contact_author_address
;
  ENTER ADDRESS
;
_publ_contact_author_email   'kamigata-nobumasa@c.metro-u.ac.jp'
_publ_contact_author_fax     '+81 426 (77) 2525'
_publ_contact_author_phone   '+81 426 (779 2556'
_publ_contact_letter
;
  ENTER TEXT OF LETTER
;
_publ_requested_journal      'Org. Lett.'
_publ_requested_category     ' CHOOSE FI FM FO CI CM CO or AD'

_publ_requested_coeditor_name ?
#-----
# TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title
;
  Synthesis and Structures of 15- and 18-Membered Unsaturated Selenacrown
  Ethers and Their Complexation with Silver Trifluoroacetate
;

_publ_section_title_footnote
;
  ENTER FOOTNOTE TO TITLE OF PAPER
;
loop_
  _publ_author_name
  _publ_author_footnote
  _publ_author_address
  ' Toshio Shimizu'
;
  FIRST AUTHORS FOOTNOTES
;
;
  Minami-ohsawa, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan
;
_publ_section_synopsis
;
  ENTER SYNOPSIS
;
#-----
# TEXT

_publ_section_abstract
;

```

```

ENTER ABSTRACT
;

_publ_section_comment
;
ENTER TEXT
;

_publ_section_acknowledgements
;
ENTER ACKNOWLEDGEMENTS
;

_publ_section_references
;
ENTER OTHER REFERENCES
Molecular Structure Corporation. (2000). teXsan.
Single Crystal Structure Analysis Software. Version 1.11.
MSC, 3200 Research Forest Drive, The Woodlands, TX 77381, USA.
Rigaku, 3-9-12 Akishima, Tokyo, Japan.
North, A.C.T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968).
Acta Cryst. A24, 351-359.
;

_publ_section_figure_captions
;
ENTER FIGURE CAPTIONS
;

_publ_section_exptl_prep
;
ENTER COMPOUND PREPARATION DETAILS
;

_publ_section_exptl_refinement
;
ENTER SPECIAL DETAILS OF THE REFINEMENT
;
#-----
data_master_file_afc7*.xtl
#-----
# CHEMICAL DATA
_chemical_formula_sum          'C12 H12 Se6 '
_chemical_formula_moiety       'C12 H12 Se6 '
_chemical_formula_weight       629.99
_chemical_melting_point        ?
#-----
# CRYSTAL DATA
_symmetry_cell_setting         orthorhombic
_symmetry_space_group_name_H-M 'P 21/b 21/c 21/a'
_symmetry_Int_Tables_number    61
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
x,y,z
1/2+x,1/2-y,-z
-x,1/2+y,1/2-z
1/2-x,-y,1/2+z
-x,-y,-z
1/2-x,1/2+y,z
x,1/2-y,1/2+z
1/2+x,y,1/2-z

```

```

_cell_length_a      15.928(4)
_cell_length_b      19.985(4)
_cell_length_c      10.844(4)
_cell_angle_alpha    90
_cell_angle_beta     90
_cell_angle_gamma    90
_cell_volume         3451(1)
_cell_formula_units_Z 8
_cell_measurement_reflns_used 24
_cell_measurement_theta_min 13.9
_cell_measurement_theta_max 14.9
_cell_measurement_temperature 243.2
#-----
_exptl_crystal_description 'prismatic'
_exptl_crystal_colour      'colorless'
_exptl_crystal_size_max    0.400
_exptl_crystal_size_mid    0.400
_exptl_crystal_size_min    0.250
_exptl_crystal_size_rad    ?
_exptl_crystal_density_diffn 2.424
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_absorpt_coefficient_mu 12.704
_exptl_absorpt_correction_type psi-scan
_exptl_absorpt_process_details '(North, Phillips & Mathews, 1968)'
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.758
_exptl_absorpt_correction_T_max 0.899
#-----
# EXPERIMENTAL DATA
_diffn_radiation_type      'Mo K $\alpha$ '
_diffn_radiation_wavelength 0.7107
_diffn_measurement_device_type 'Rigaku AFC7R'
_diffn_measurement_method   ' $\psi$ w-2 $\psi$ q'
_diffn_reflns_number        4018
_diffn_reflns_av_R_equivalents ?
_diffn_reflns_theta_max     27.49
_diffn_measured_fraction_theta_max 0.9030
_diffn_reflns_theta_full    27.49
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.9030
_diffn_reflns_limit_h_min    0
_diffn_reflns_limit_h_max    18
_diffn_reflns_limit_k_min    0
_diffn_reflns_limit_k_max    25
_diffn_reflns_limit_l_min    0
_diffn_reflns_limit_l_max    14
_diffn_standards_number      3
_diffn_standards_interval_count 150
_diffn_standards_decay_%     1.05
#-----
# REFINEMENT DATA
_refine_special_details
;
Refinement using reflections with  $F^2 > 0.0 \sigma(F^2)$ . The weighted
R-factor (wR) and goodness of fit (S) are based on  $F^2$ . R-factor (gt) are
based on F. The threshold expression of  $F^2 > 2.0 \sigma(F^2)$  is used only
for calculating R-factor (gt).
;
_reflns_number_total        3575
_reflns_number_gt           1080
_reflns_threshold_expression  $F^2 > 2.0 \sigma(F^2)$ 
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd

```

```

_refine_ls_R_factor_gt          0.0505
_refine_ls_wR_factor_ref        0.1299
_refine_ls_hydrogen_treatment   noref
_refine_ls_number_reflns        2621
_refine_ls_number_parameters     163
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   0.907
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
  'w = 1/[ $\sigma^2(F_o^2) + (0.05000(\text{Max}(\text{Fo}^2, 0) + 2\text{Fc}^2)/3)^2$ ]'
_refine_ls_shift/su_max          0.0399
_refine_diff_density_max         3.05
_refine_diff_density_min        -2.56
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       ?
_refine_ls_abs_structure_details ?
_refine_ls_abs_structure_Flack   ?
loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
  'C' 'C' 0.003 0.002
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1)
;
  'H' 'H' 0.000 0.000
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Table 6.1.1.2)
;
  'Se' 'Se' -0.093 2.226
;International Tables for Crystallography
(1992, Vol. C, Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1)
;
#-----
# ATOMIC COORDINATES AND DISPLACEMENT PARAMETERS
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Se(1) Se 0.0691(1) 0.17478(8) 0.6363(1) 0.0742(5) Uani 1.00 d . . .
Se(2) Se 0.21135(10) 0.21903(7) 0.8617(1) 0.0643(5) Uani 1.00 d . . .
Se(3) Se 0.20897(8) 0.06770(6) 1.0135(1) 0.0457(4) Uani 1.00 d . . .
Se(4) Se 0.2075(1) -0.10419(6) 0.9993(2) 0.0724(5) Uani 1.00 d . . .
Se(5) Se 0.0523(1) -0.14295(9) 0.7866(2) 0.1000(7) Uani 1.00 d . . .
Se(6) Se 0.00731(9) 0.01502(8) 0.6841(1) 0.0723(5) Uani 1.00 d . . .
C(1) C 0.0442(10) 0.1822(7) 0.806(1) 0.072(5) Uani 1.00 d . . .
C(2) C 0.0971(8) 0.1982(7) 0.893(1) 0.065(5) Uani 1.00 d . . .
C(3) C 0.2513(9) 0.2071(7) 1.026(1) 0.066(5) Uani 1.00 d . . .
C(4) C 0.2462(8) 0.1499(6) 1.083(1) 0.047(4) Uani 1.00 d . . .
C(5) C 0.2492(8) 0.0110(6) 1.1418(10) 0.046(4) Uani 1.00 d . . .
C(6) C 0.2465(9) -0.0549(7) 1.136(1) 0.075(5) Uani 1.00 d . . .

```

C(7)	C	0.0926(8)	-0.0750(6)	1.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(8)	C	0.0355(8)	-0.0896(6)	0.926(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	
C(9)	C	-0.051(1)	-0.1185(10)	0.704(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	
C(10)	C	-0.062(1)	-0.059(1)	0.664(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	
C(11)	C	-0.0637(8)	0.0806(9)	0.608(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	
C(12)	C	-0.0368(9)	0.1420(9)	0.587(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	
H(1)	H	-0.0121	0.1734	0.8298	0.0865	Uiso	1.00	calc	
H(2)	H	0.0774	0.1996	0.9753	0.0780	Uiso	1.00	calc	
H(3)	H	0.2757	0.2441	1.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	
H(4)	H	0.2626	0.1491	1.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	
H(5)	H	0.2724	0.0311	1.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	
H(6)	H	0.2657	-0.0793	1.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	
H(7)	H	0.0761	-0.0488	1.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	
H(8)	H	-0.0190	-0.0714	0.9376	0.0747	Uiso	1.00	calc	
H(9)	H	-0.0936	-0.1510	0.6928	0.1506	Uiso	1.00	calc	
H(10)	H	-0.1124	-0.0519	0.6181	0.1366	Uiso	1.00	calc	
H(11)	H	-0.1192	0.0686	0.5853	0.0964	Uiso	1.00	calc	
H(12)	H	-0.0732	0.1717	0.5448	0.0998	Uiso	1.00	calc	
Se(1*)	Se	0.0691(1)	1.17478(8)	0.6363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	
Se(2*)	Se	0.21135(10)	1.21903(7)	0.8617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	
Se(3*)	Se	0.20897(8)	1.06770(6)	1.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	
Se(4*)	Se	0.2075(1)	0.89581(6)	0.9993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	
Se(5*)	Se	0.0523(1)	0.85705(9)	0.7866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	
Se(6*)	Se	0.00731(9)	1.01502(8)	0.6841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	
C(1*)	C	0.0442(10)	1.1822(7)	0.806(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	
C(2*)	C	0.0971(8)	1.1982(7)	0.893(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(3*)	C	0.2513(9)	1.2071(7)	1.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	
C(4*)	C	0.2462(8)	1.1499(6)	1.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	
C(5*)	C	0.2492(8)	1.0110(6)	1.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	
C(6*)	C	0.2465(9)	0.9451(7)	1.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	
C(7*)	C	0.0926(8)	0.9250(6)	1.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(8*)	C	0.0355(8)	0.9104(6)	0.926(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	
C(9*)	C	-0.051(1)	0.8815(10)	0.704(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	
C(10*)	C	-0.062(1)	0.941(1)	0.664(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	
C(11*)	C	-0.0637(8)	1.0806(9)	0.608(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	
C(12*)	C	-0.0368(9)	1.1420(9)	0.587(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	
H(1*)	H	-0.0121	1.1734	0.8298	0.0865	Uiso	1.00	calc	
H(2*)	H	0.0774	1.1996	0.9753	0.0780	Uiso	1.00	calc	
H(3*)	H	0.2757	1.2441	1.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	
H(4*)	H	0.2626	1.1491	1.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	
H(5*)	H	0.2724	1.0311	1.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	
H(6*)	H	0.2657	0.9207	1.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	
H(7*)	H	0.0761	0.9512	1.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	
H(8*)	H	-0.0190	0.9286	0.9376	0.0747	Uiso	1.00	calc	
H(9*)	H	-0.0936	0.8490	0.6928	0.1506	Uiso	1.00	calc	
H(10*)	H	-0.1124	0.9481	0.6181	0.1366	Uiso	1.00	calc	
H(11*)	H	-0.1192	1.0686	0.5853	0.0964	Uiso	1.00	calc	
H(12*)	H	-0.0732	1.1717	0.5448	0.0998	Uiso	1.00	calc	
Se(1*)	Se	1.0691(1)	0.17478(8)	0.6363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	
Se(2*)	Se	1.21135(10)	0.21903(7)	0.8617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	
Se(3*)	Se	1.20897(8)	0.06770(6)	1.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	
Se(4*)	Se	1.2075(1)	-0.10419(6)	0.9993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	
Se(5*)	Se	1.0523(1)	-0.14295(9)	0.7866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	
Se(6*)	Se	1.00731(9)	0.01502(8)	0.6841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	
C(1*)	C	1.0442(10)	0.1822(7)	0.806(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	
C(2*)	C	1.0971(8)	0.1982(7)	0.893(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(3*)	C	1.2513(9)	0.2071(7)	1.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	
C(4*)	C	1.2462(8)	0.1499(6)	1.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	
C(5*)	C	1.2492(8)	0.0110(6)	1.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	
C(6*)	C	1.2465(9)	-0.0549(7)	1.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	
C(7*)	C	1.0926(8)	-0.0750(6)	1.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	

C(8*)	C	1.0355(8)	-0.0896(6)	0.926(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	0.949(1)	-0.1185(10)	0.704(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	0.938(1)	-0.059(1)	0.664(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	0.9363(8)	0.0806(9)	0.608(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	0.9632(9)	0.1420(9)	0.587(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	0.9879	0.1734	0.8298	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	1.0774	0.1996	0.9753	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	1.2757	0.2441	1.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	1.2626	0.1491	1.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	1.2724	0.0311	1.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	1.2657	-0.0793	1.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	1.0761	-0.0488	1.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	0.9810	-0.0714	0.9376	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	0.9064	-0.1510	0.6928	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	0.8876	-0.0519	0.6181	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	0.8808	0.0686	0.5853	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	0.9268	0.1717	0.5448	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	1.0691(1)	1.17478(8)	0.6363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	1.21135(10)	1.21903(7)	0.8617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	1.20897(8)	1.06770(6)	1.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	1.2075(1)	0.89581(6)	0.9993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	1.0523(1)	0.85705(9)	0.7866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	1.00731(9)	1.01502(8)	0.6841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	1.0442(10)	1.1822(7)	0.806(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	1.0971(8)	1.1982(7)	0.893(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	1.2513(9)	1.2071(7)	1.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	1.2462(8)	1.1499(6)	1.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	1.2492(8)	1.0110(6)	1.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	1.2465(9)	0.9451(7)	1.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	1.0926(8)	0.9250(6)	1.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	1.0355(8)	0.9104(6)	0.926(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	0.949(1)	0.8815(10)	0.704(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	0.938(1)	0.941(1)	0.664(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	0.9363(8)	1.0806(9)	0.608(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	0.9632(9)	1.1420(9)	0.587(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	0.9879	1.1734	0.8298	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	1.0774	1.1996	0.9753	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	1.2757	1.2441	1.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	1.2626	1.1491	1.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	1.2724	1.0311	1.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	1.2657	0.9207	1.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	1.0761	0.9512	1.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	0.9810	0.9286	0.9376	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	0.9064	0.8490	0.6928	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	0.8876	0.9481	0.6181	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	0.8808	1.0686	0.5853	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	0.9268	1.1717	0.5448	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	0.5691(1)	0.32522(8)	0.3637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	0.71135(10)	0.28097(7)	0.1383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	0.70897(8)	0.43230(6)	-0.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	0.7075(1)	0.60419(6)	0.0007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	0.5523(1)	0.64295(9)	0.2134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	0.50731(9)	0.48498(8)	0.3159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	0.5442(10)	0.3178(7)	0.194(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	0.5971(8)	0.3018(7)	0.107(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	0.7513(9)	0.2929(7)	-0.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	0.7462(8)	0.3501(6)	-0.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	0.7492(8)	0.4890(6)	-0.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	0.7465(9)	0.5549(7)	-0.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	0.5926(8)	0.5750(6)	-0.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	0.5355(8)	0.5896(6)	0.074(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.

C(9*)	C	0.449(1)	0.6185(10)	0.296(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	0.438(1)	0.559(1)	0.336(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	0.4363(8)	0.4194(9)	0.392(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	0.4632(9)	0.3580(9)	0.413(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	0.4879	0.3266	0.1702	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	0.5774	0.3004	0.0247	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	0.7757	0.2559	-0.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	0.7626	0.3509	-0.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	0.7724	0.4689	-0.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	0.7657	0.5793	-0.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	0.5761	0.5488	-0.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	0.4810	0.5714	0.0624	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	0.4064	0.6510	0.3072	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	0.3876	0.5519	0.3819	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	0.3808	0.4314	0.4147	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	0.4268	0.3283	0.4552	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	-0.0691(1)	0.67478(8)	0.8637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	-0.21135(10)	0.71903(7)	0.6383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	-0.20897(8)	0.56770(6)	0.4865(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	-0.2075(1)	0.39581(6)	0.5007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	-0.0523(1)	0.35705(9)	0.7134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	-0.00731(9)	0.51502(8)	0.8159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	-0.0442(10)	0.6822(7)	0.694(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	-0.0971(8)	0.6982(7)	0.607(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	-0.2513(9)	0.7071(7)	0.474(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	-0.2462(8)	0.6499(6)	0.417(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	-0.2492(8)	0.5110(6)	0.3582(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	-0.2465(9)	0.4451(7)	0.364(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	-0.0926(8)	0.4250(6)	0.490(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	-0.0355(8)	0.4104(6)	0.574(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	0.051(1)	0.3815(10)	0.796(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	0.062(1)	0.441(1)	0.836(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	0.0637(8)	0.5806(9)	0.892(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	0.0368(9)	0.6420(9)	0.913(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	0.0121	0.6734	0.6702	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	-0.0774	0.6996	0.5247	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	-0.2757	0.7441	0.4321	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	-0.2626	0.6491	0.3329	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	-0.2724	0.5311	0.2866	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	-0.2657	0.4207	0.2943	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	-0.0761	0.4512	0.4207	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	0.0190	0.4286	0.5624	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	0.0936	0.3490	0.8072	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	0.1124	0.4481	0.8819	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	0.1192	0.5686	0.9147	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	0.0732	0.6717	0.9552	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	0.9309(1)	0.67478(8)	0.8637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	0.78865(10)	0.71903(7)	0.6383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	0.79103(8)	0.56770(6)	0.4865(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	0.7925(1)	0.39581(6)	0.5007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	0.9477(1)	0.35705(9)	0.7134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	0.99269(9)	0.51502(8)	0.8159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	0.9558(10)	0.6822(7)	0.694(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	0.9029(8)	0.6982(7)	0.607(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	0.7487(9)	0.7071(7)	0.474(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	0.7538(8)	0.6499(6)	0.417(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	0.7508(8)	0.5110(6)	0.3582(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	0.7535(9)	0.4451(7)	0.364(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	0.9074(8)	0.4250(6)	0.490(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	0.9645(8)	0.4104(6)	0.574(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	1.051(1)	0.3815(10)	0.796(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.

C(10*)	C	1.062(1)	0.441(1)	0.836(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	1.0637(8)	0.5806(9)	0.892(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	1.0368(9)	0.6420(9)	0.913(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	1.0121	0.6734	0.6702	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	0.9226	0.6996	0.5247	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	0.7243	0.7441	0.4321	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	0.7374	0.6491	0.3329	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	0.7276	0.5311	0.2866	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	0.7343	0.4207	0.2943	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	0.9239	0.4512	0.4207	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	1.0190	0.4286	0.5624	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	1.0936	0.3490	0.8072	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	1.1124	0.4481	0.8819	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	1.1192	0.5686	0.9147	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	1.0732	0.6717	0.9552	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	0.4309(1)	-0.17478(8)	0.1363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	0.28865(10)	-0.21903(7)	0.3617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	0.29103(8)	-0.06770(6)	0.5135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	0.2925(1)	0.10419(6)	0.4993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	0.4477(1)	0.14295(9)	0.2866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	0.49269(9)	-0.01502(8)	0.1841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	0.4558(10)	-0.1822(7)	0.306(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	0.4029(8)	-0.1982(7)	0.393(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	0.2487(9)	-0.2071(7)	0.526(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	0.2538(8)	-0.1499(6)	0.583(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	0.2508(8)	-0.0110(6)	0.6418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	0.2535(9)	0.0549(7)	0.636(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	0.4074(8)	0.0750(6)	0.510(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	0.4645(8)	0.0896(6)	0.426(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	0.551(1)	0.1185(10)	0.204(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	0.562(1)	0.059(1)	0.164(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	0.5637(8)	-0.0806(9)	0.108(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	0.5368(9)	-0.1420(9)	0.087(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	0.5121	-0.1734	0.3298	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	0.4226	-0.1996	0.4753	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	0.2243	-0.2441	0.5679	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	0.2374	-0.1491	0.6671	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	0.2276	-0.0311	0.7134	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	0.2343	0.0793	0.7057	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	0.4239	0.0488	0.5793	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	0.5190	0.0714	0.4376	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	0.5936	0.1510	0.1928	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	0.6124	0.0519	0.1181	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	0.6192	-0.0686	0.0853	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	0.5732	-0.1717	0.0448	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	0.4309(1)	0.82522(8)	0.1363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	0.28865(10)	0.78097(7)	0.3617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	0.29103(8)	0.93230(6)	0.5135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	0.2925(1)	1.10419(6)	0.4993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	0.4477(1)	1.14295(9)	0.2866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	0.49269(9)	0.98498(8)	0.1841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	0.4558(10)	0.8178(7)	0.306(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	0.4029(8)	0.8018(7)	0.393(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	0.2487(9)	0.7929(7)	0.526(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	0.2538(8)	0.8501(6)	0.583(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	0.2508(8)	0.9890(6)	0.6418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	0.2535(9)	1.0549(7)	0.636(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	0.4074(8)	1.0750(6)	0.510(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	0.4645(8)	1.0896(6)	0.426(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	0.551(1)	1.1185(10)	0.204(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	0.562(1)	1.059(1)	0.164(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .

C(11*)	C	0.5637(8)	0.9194(9)	0.108(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	
C(12*)	C	0.5368(9)	0.8580(9)	0.087(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	
H(1*)	H	0.5121	0.8266	0.3298	0.0865	Uiso	1.00	calc	
H(2*)	H	0.4226	0.8004	0.4753	0.0780	Uiso	1.00	calc	
H(3*)	H	0.2243	0.7559	0.5679	0.0793	Uiso	1.00	calc	
H(4*)	H	0.2374	0.8509	0.6671	0.0565	Uiso	1.00	calc	
H(5*)	H	0.2276	0.9689	0.7134	0.0556	Uiso	1.00	calc	
H(6*)	H	0.2343	1.0793	0.7057	0.0902	Uiso	1.00	calc	
H(7*)	H	0.4239	1.0488	0.5793	0.0783	Uiso	1.00	calc	
H(8*)	H	0.5190	1.0714	0.4376	0.0747	Uiso	1.00	calc	
H(9*)	H	0.5936	1.1510	0.1928	0.1506	Uiso	1.00	calc	
H(10*)	H	0.6124	1.0519	0.1181	0.1366	Uiso	1.00	calc	
H(11*)	H	0.6192	0.9314	0.0853	0.0964	Uiso	1.00	calc	
H(12*)	H	0.5732	0.8283	0.0448	0.0998	Uiso	1.00	calc	
Se(1*)	Se	-0.0691(1)	-0.17478(8)	0.3637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	
Se(2*)	Se	-0.21135(10)	-0.21903(7)	0.1383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	
Se(3*)	Se	-0.20897(8)	-0.06770(6)	-0.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	
Se(4*)	Se	-0.2075(1)	0.10419(6)	0.0007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	
Se(5*)	Se	-0.0523(1)	0.14295(9)	0.2134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	
Se(6*)	Se	-0.00731(9)	-0.01502(8)	0.3159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	
C(1*)	C	-0.0442(10)	-0.1822(7)	0.194(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	
C(2*)	C	-0.0971(8)	-0.1982(7)	0.107(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(3*)	C	-0.2513(9)	-0.2071(7)	-0.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	
C(4*)	C	-0.2462(8)	-0.1499(6)	-0.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	
C(5*)	C	-0.2492(8)	-0.0110(6)	-0.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	
C(6*)	C	-0.2465(9)	0.0549(7)	-0.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	
C(7*)	C	-0.0926(8)	0.0750(6)	-0.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(8*)	C	-0.0355(8)	0.0896(6)	0.074(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	
C(9*)	C	0.051(1)	0.1185(10)	0.296(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	
C(10*)	C	0.062(1)	0.059(1)	0.336(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	
C(11*)	C	0.0637(8)	-0.0806(9)	0.392(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	
C(12*)	C	0.0368(9)	-0.1420(9)	0.413(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	
H(1*)	H	0.0121	-0.1734	0.1702	0.0865	Uiso	1.00	calc	
H(2*)	H	-0.0774	-0.1996	0.0247	0.0780	Uiso	1.00	calc	
H(3*)	H	-0.2757	-0.2441	-0.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	
H(4*)	H	-0.2626	-0.1491	-0.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	
H(5*)	H	-0.2724	-0.0311	-0.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	
H(6*)	H	-0.2657	0.0793	-0.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	
H(7*)	H	-0.0761	0.0488	-0.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	
H(8*)	H	0.0190	0.0714	0.0624	0.0747	Uiso	1.00	calc	
H(9*)	H	0.0936	0.1510	0.3072	0.1506	Uiso	1.00	calc	
H(10*)	H	0.1124	0.0519	0.3819	0.1366	Uiso	1.00	calc	
H(11*)	H	0.1192	-0.0686	0.4147	0.0964	Uiso	1.00	calc	
H(12*)	H	0.0732	-0.1717	0.4552	0.0998	Uiso	1.00	calc	
Se(1*)	Se	-0.0691(1)	0.82522(8)	0.3637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	
Se(2*)	Se	-0.21135(10)	0.78097(7)	0.1383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	
Se(3*)	Se	-0.20897(8)	0.93230(6)	-0.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	
Se(4*)	Se	-0.2075(1)	1.10419(6)	0.0007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	
Se(5*)	Se	-0.0523(1)	1.14295(9)	0.2134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	
Se(6*)	Se	-0.00731(9)	0.98498(8)	0.3159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	
C(1*)	C	-0.0442(10)	0.8178(7)	0.194(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	
C(2*)	C	-0.0971(8)	0.8018(7)	0.107(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(3*)	C	-0.2513(9)	0.7929(7)	-0.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	
C(4*)	C	-0.2462(8)	0.8501(6)	-0.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	
C(5*)	C	-0.2492(8)	0.9890(6)	-0.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	
C(6*)	C	-0.2465(9)	1.0549(7)	-0.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	
C(7*)	C	-0.0926(8)	1.0750(6)	-0.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	
C(8*)	C	-0.0355(8)	1.0896(6)	0.074(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	
C(9*)	C	0.051(1)	1.1185(10)	0.296(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	
C(10*)	C	0.062(1)	1.059(1)	0.336(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	
C(11*)	C	0.0637(8)	0.9194(9)	0.392(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	

C(12*)	C	0.0368(9)	0.8580(9)	0.413(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	0.0121	0.8266	0.1702	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	-0.0774	0.8004	0.0247	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	-0.2757	0.7559	-0.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	-0.2626	0.8509	-0.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	-0.2724	0.9689	-0.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	-0.2657	1.0793	-0.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	-0.0761	1.0488	-0.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	0.0190	1.0714	0.0624	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	0.0936	1.1510	0.3072	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	0.1124	1.0519	0.3819	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	0.1192	0.9314	0.4147	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	0.0732	0.8283	0.4552	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	0.9309(1)	-0.17478(8)	0.3637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	0.78865(10)	-0.21903(7)	0.1383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	0.79103(8)	-0.06770(6)	-0.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	0.7925(1)	0.10419(6)	0.0007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	0.9477(1)	0.14295(9)	0.2134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	0.99269(9)	-0.01502(8)	0.3159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	0.9558(10)	-0.1822(7)	0.194(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	0.9029(8)	-0.1982(7)	0.107(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	0.7487(9)	-0.2071(7)	-0.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	0.7538(8)	-0.1499(6)	-0.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	0.7508(8)	-0.0110(6)	-0.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	0.7535(9)	0.0549(7)	-0.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	0.9074(8)	0.0750(6)	-0.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	0.9645(8)	0.0896(6)	0.074(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	1.051(1)	0.1185(10)	0.296(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	1.062(1)	0.059(1)	0.336(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	1.0637(8)	-0.0806(9)	0.392(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	1.0368(9)	-0.1420(9)	0.413(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
H(1*)	H	1.0121	-0.1734	0.1702	0.0865	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(2*)	H	0.9226	-0.1996	0.0247	0.0780	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(3*)	H	0.7243	-0.2441	-0.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(4*)	H	0.7374	-0.1491	-0.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(5*)	H	0.7276	-0.0311	-0.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(6*)	H	0.7343	0.0793	-0.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(7*)	H	0.9239	0.0488	-0.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(8*)	H	1.0190	0.0714	0.0624	0.0747	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(9*)	H	1.0936	0.1510	0.3072	0.1506	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(10*)	H	1.1124	0.0519	0.3819	0.1366	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(11*)	H	1.1192	-0.0686	0.4147	0.0964	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
H(12*)	H	1.0732	-0.1717	0.4552	0.0998	Uiso	1.00	calc	.	.	.	.
Se(1*)	Se	0.9309(1)	0.82522(8)	0.3637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(2*)	Se	0.78865(10)	0.78097(7)	0.1383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(3*)	Se	0.79103(8)	0.93230(6)	-0.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(4*)	Se	0.7925(1)	1.10419(6)	0.0007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(5*)	Se	0.9477(1)	1.14295(9)	0.2134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
Se(6*)	Se	0.99269(9)	0.98498(8)	0.3159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(1*)	C	0.9558(10)	0.8178(7)	0.194(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(2*)	C	0.9029(8)	0.8018(7)	0.107(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(3*)	C	0.7487(9)	0.7929(7)	-0.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(4*)	C	0.7538(8)	0.8501(6)	-0.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(5*)	C	0.7508(8)	0.9890(6)	-0.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(6*)	C	0.7535(9)	1.0549(7)	-0.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(7*)	C	0.9074(8)	1.0750(6)	-0.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(8*)	C	0.9645(8)	1.0896(6)	0.074(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(9*)	C	1.051(1)	1.1185(10)	0.296(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(10*)	C	1.062(1)	1.059(1)	0.336(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(11*)	C	1.0637(8)	0.9194(9)	0.392(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	.	.	.	.
C(12*)	C	1.0368(9)	0.8580(9)	0.413(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	.	.	.	.

H(1*)	H	1.0121	0.8266	0.1702	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	0.9226	0.8004	0.0247	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	0.7243	0.7559	-0.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	0.7374	0.8509	-0.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	0.7276	0.9689	-0.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	0.7343	1.0793	-0.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	0.9239	1.0488	-0.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	1.0190	1.0714	0.0624	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	1.0936	1.1510	0.3072	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	1.1124	1.0519	0.3819	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	1.1192	0.9314	0.4147	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	1.0732	0.8283	0.4552	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	0.4309(1)	0.67478(8)	0.6363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	0.28865(10)	0.71903(7)	0.8617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	0.29103(8)	0.56770(6)	1.0135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	0.2925(1)	0.39581(6)	0.9993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	0.4477(1)	0.35705(9)	0.7866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	0.49269(9)	0.51502(8)	0.6841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	0.4558(10)	0.6822(7)	0.806(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	0.4029(8)	0.6982(7)	0.893(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	0.2487(9)	0.7071(7)	1.026(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	0.2538(8)	0.6499(6)	1.083(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	0.2508(8)	0.5110(6)	1.1418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	0.2535(9)	0.4451(7)	1.136(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	0.4074(8)	0.4250(6)	1.010(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	0.4645(8)	0.4104(6)	0.926(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	0.551(1)	0.3815(10)	0.704(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	0.562(1)	0.441(1)	0.664(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	0.5637(8)	0.5806(9)	0.608(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	0.5368(9)	0.6420(9)	0.587(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	0.5121	0.6734	0.8298	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	0.4226	0.6996	0.9753	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	0.2243	0.7441	1.0679	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	0.2374	0.6491	1.1671	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	0.2276	0.5311	1.2134	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	0.2343	0.4207	1.2057	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	0.4239	0.4512	1.0793	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	0.5190	0.4286	0.9376	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	0.5936	0.3490	0.6928	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	0.6124	0.4481	0.6181	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	0.6192	0.5686	0.5853	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	0.5732	0.6717	0.5448	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	0.0691(1)	0.32522(8)	0.1363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	0.21135(10)	0.28097(7)	0.3617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	0.20897(8)	0.43230(6)	0.5135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	0.2075(1)	0.60419(6)	0.4993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	0.0523(1)	0.64295(9)	0.2866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	0.00731(9)	0.48498(8)	0.1841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	0.0442(10)	0.3178(7)	0.306(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	0.0971(8)	0.3018(7)	0.393(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	0.2513(9)	0.2929(7)	0.526(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	0.2462(8)	0.3501(6)	0.583(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	0.2492(8)	0.4890(6)	0.6418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	0.2465(9)	0.5549(7)	0.636(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	0.0926(8)	0.5750(6)	0.510(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	0.0355(8)	0.5896(6)	0.426(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	-0.051(1)	0.6185(10)	0.204(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	-0.062(1)	0.559(1)	0.164(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	-0.0637(8)	0.4194(9)	0.108(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	-0.0368(9)	0.3580(9)	0.087(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	-0.0121	0.3266	0.3298	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .

H(2*)	H	0.0774	0.3004	0.4753	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	0.2757	0.2559	0.5679	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	0.2626	0.3509	0.6671	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	0.2724	0.4689	0.7134	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	0.2657	0.5793	0.7057	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	0.0761	0.5488	0.5793	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	-0.0190	0.5714	0.4376	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	-0.0936	0.6510	0.1928	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	-0.1124	0.5519	0.1181	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	-0.1192	0.4314	0.0853	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	-0.0732	0.3283	0.0448	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	1.0691(1)	0.32522(8)	0.1363(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	1.21135(10)	0.28097(7)	0.3617(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	1.20897(8)	0.43230(6)	0.5135(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	1.2075(1)	0.60419(6)	0.4993(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	1.0523(1)	0.64295(9)	0.2866(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	1.00731(9)	0.48498(8)	0.1841(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	1.0442(10)	0.3178(7)	0.306(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	1.0971(8)	0.3018(7)	0.393(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	1.2513(9)	0.2929(7)	0.526(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	1.2462(8)	0.3501(6)	0.583(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	1.2492(8)	0.4890(6)	0.6418(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	1.2465(9)	0.5549(7)	0.636(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	1.0926(8)	0.5750(6)	0.510(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	1.0355(8)	0.5896(6)	0.426(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	0.949(1)	0.6185(10)	0.204(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	0.938(1)	0.559(1)	0.164(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	0.9363(8)	0.4194(9)	0.108(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	0.9632(9)	0.3580(9)	0.087(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	0.9879	0.3266	0.3298	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	1.0774	0.3004	0.4753	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .
H(3*)	H	1.2757	0.2559	0.5679	0.0793	Uiso	1.00	calc	. . .
H(4*)	H	1.2626	0.3509	0.6671	0.0565	Uiso	1.00	calc	. . .
H(5*)	H	1.2724	0.4689	0.7134	0.0556	Uiso	1.00	calc	. . .
H(6*)	H	1.2657	0.5793	0.7057	0.0902	Uiso	1.00	calc	. . .
H(7*)	H	1.0761	0.5488	0.5793	0.0783	Uiso	1.00	calc	. . .
H(8*)	H	0.9810	0.5714	0.4376	0.0747	Uiso	1.00	calc	. . .
H(9*)	H	0.9064	0.6510	0.1928	0.1506	Uiso	1.00	calc	. . .
H(10*)	H	0.8876	0.5519	0.1181	0.1366	Uiso	1.00	calc	. . .
H(11*)	H	0.8808	0.4314	0.0853	0.0964	Uiso	1.00	calc	. . .
H(12*)	H	0.9268	0.3283	0.0448	0.0998	Uiso	1.00	calc	. . .
Se(1*)	Se	0.5691(1)	0.17478(8)	0.8637(1)	0.0742(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(2*)	Se	0.71135(10)	0.21903(7)	0.6383(1)	0.0643(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(3*)	Se	0.70897(8)	0.06770(6)	0.4865(1)	0.0457(4)	Uani	1.00	d	. . .
Se(4*)	Se	0.7075(1)	-0.10419(6)	0.5007(2)	0.0724(5)	Uani	1.00	d	. . .
Se(5*)	Se	0.5523(1)	-0.14295(9)	0.7134(2)	0.1000(7)	Uani	1.00	d	. . .
Se(6*)	Se	0.50731(9)	0.01502(8)	0.8159(1)	0.0723(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(1*)	C	0.5442(10)	0.1822(7)	0.694(1)	0.072(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(2*)	C	0.5971(8)	0.1982(7)	0.607(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(3*)	C	0.7513(9)	0.2071(7)	0.474(1)	0.066(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(4*)	C	0.7462(8)	0.1499(6)	0.417(1)	0.047(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(5*)	C	0.7492(8)	0.0110(6)	0.3582(10)	0.046(4)	Uani	1.00	d	. . .
C(6*)	C	0.7465(9)	-0.0549(7)	0.364(1)	0.075(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(7*)	C	0.5926(8)	-0.0750(6)	0.490(1)	0.065(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(8*)	C	0.5355(8)	-0.0896(6)	0.574(1)	0.062(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(9*)	C	0.449(1)	-0.1185(10)	0.796(2)	0.127(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(10*)	C	0.438(1)	-0.059(1)	0.836(1)	0.114(7)	Uani	1.00	d	. . .
C(11*)	C	0.4363(8)	0.0806(9)	0.892(1)	0.081(5)	Uani	1.00	d	. . .
C(12*)	C	0.4632(9)	0.1420(9)	0.913(1)	0.083(6)	Uani	1.00	d	. . .
H(1*)	H	0.4879	0.1734	0.6702	0.0865	Uiso	1.00	calc	. . .
H(2*)	H	0.5774	0.1996	0.5247	0.0780	Uiso	1.00	calc	. . .

H(3*)	H	0.7757	0.2441	0.4321	0.0793	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	0.7626	0.1491	0.3329	0.0565	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	0.7724	0.0311	0.2866	0.0556	Uiso 1.00 calc . . .
H(6*)	H	0.7657	-0.0793	0.2943	0.0902	Uiso 1.00 calc . . .
H(7*)	H	0.5761	-0.0488	0.4207	0.0783	Uiso 1.00 calc . . .
H(8*)	H	0.4810	-0.0714	0.5624	0.0747	Uiso 1.00 calc . . .
H(9*)	H	0.4064	-0.1510	0.8072	0.1506	Uiso 1.00 calc . . .
H(10*)	H	0.3876	-0.0519	0.8819	0.1366	Uiso 1.00 calc . . .
H(11*)	H	0.3808	0.0686	0.9147	0.0964	Uiso 1.00 calc . . .
H(12*)	H	0.4268	0.1717	0.9552	0.0998	Uiso 1.00 calc . . .
Se(1*)	Se	0.5691(1)	1.17478(8)	0.8637(1)	0.0742(5)	Uani 1.00 d . . .
Se(2*)	Se	0.71135(10)	1.21903(7)	0.6383(1)	0.0643(5)	Uani 1.00 d . . .
Se(3*)	Se	0.70897(8)	1.06770(6)	0.4865(1)	0.0457(4)	Uani 1.00 d . . .
Se(4*)	Se	0.7075(1)	0.89581(6)	0.5007(2)	0.0724(5)	Uani 1.00 d . . .
Se(5*)	Se	0.5523(1)	0.85705(9)	0.7134(2)	0.1000(7)	Uani 1.00 d . . .
Se(6*)	Se	0.50731(9)	1.01502(8)	0.8159(1)	0.0723(5)	Uani 1.00 d . . .
C(1*)	C	0.5442(10)	1.1822(7)	0.694(1)	0.072(5)	Uani 1.00 d . . .
C(2*)	C	0.5971(8)	1.1982(7)	0.607(1)	0.065(5)	Uani 1.00 d . . .
C(3*)	C	0.7513(9)	1.2071(7)	0.474(1)	0.066(5)	Uani 1.00 d . . .
C(4*)	C	0.7462(8)	1.1499(6)	0.417(1)	0.047(4)	Uani 1.00 d . . .
C(5*)	C	0.7492(8)	1.0110(6)	0.3582(10)	0.046(4)	Uani 1.00 d . . .
C(6*)	C	0.7465(9)	0.9451(7)	0.364(1)	0.075(5)	Uani 1.00 d . . .
C(7*)	C	0.5926(8)	0.9250(6)	0.490(1)	0.065(5)	Uani 1.00 d . . .
C(8*)	C	0.5355(8)	0.9104(6)	0.574(1)	0.062(5)	Uani 1.00 d . . .
C(9*)	C	0.449(1)	0.8815(10)	0.796(2)	0.127(7)	Uani 1.00 d . . .
C(10*)	C	0.438(1)	0.941(1)	0.836(1)	0.114(7)	Uani 1.00 d . . .
C(11*)	C	0.4363(8)	1.0806(9)	0.892(1)	0.081(5)	Uani 1.00 d . . .
C(12*)	C	0.4632(9)	1.1420(9)	0.913(1)	0.083(6)	Uani 1.00 d . . .
H(1*)	H	0.4879	1.1734	0.6702	0.0865	Uiso 1.00 calc . . .
H(2*)	H	0.5774	1.1996	0.5247	0.0780	Uiso 1.00 calc . . .
H(3*)	H	0.7757	1.2441	0.4321	0.0793	Uiso 1.00 calc . . .
H(4*)	H	0.7626	1.1491	0.3329	0.0565	Uiso 1.00 calc . . .
H(5*)	H	0.7724	1.0311	0.2866	0.0556	Uiso 1.00 calc . . .
H(6*)	H	0.7657	0.9207	0.2943	0.0902	Uiso 1.00 calc . . .
H(7*)	H	0.5761	0.9512	0.4207	0.0783	Uiso 1.00 calc . . .
H(8*)	H	0.4810	0.9286	0.5624	0.0747	Uiso 1.00 calc . . .
H(9*)	H	0.4064	0.8490	0.8072	0.1506	Uiso 1.00 calc . . .
H(10*)	H	0.3876	0.9481	0.8819	0.1366	Uiso 1.00 calc . . .
H(11*)	H	0.3808	1.0686	0.9147	0.0964	Uiso 1.00 calc . . .
H(12*)	H	0.4268	1.1717	0.9552	0.0998	Uiso 1.00 calc . . .
o		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
a		1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
b		0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
c		0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP . .
(	F)	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP
(	F)	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	Uiso 0.00 d SP

```

loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_12
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_23

```

Se(1)	0.078(1)	0.098(1)	0.0469(8)	0.0139(10)	0.0008(9)	0.0038(9)
Se(2)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3)	0.0525(8)	0.0431(7)	0.0415(7)	0.0005(7)	-0.0017(7)	0.0035(7)
Se(4)	0.083(1)	0.0451(8)	0.089(1)	0.0143(9)	0.0252(10)	0.0013(9)
Se(5)	0.104(1)	0.093(1)	0.103(1)	-0.034(1)	0.041(1)	-0.052(1)
Se(6)	0.0523(9)	0.109(1)	0.0557(9)	-0.0219(10)	0.0000(8)	-0.0257(10)
C(1)	0.09(1)	0.062(9)	0.061(9)	-0.003(9)	0.011(9)	0.017(8)
C(2)	0.07(1)	0.08(1)	0.048(9)	0.004(8)	-0.003(8)	-0.028(8)
C(3)	0.08(1)	0.065(9)	0.053(9)	0.005(9)	0.002(8)	-0.003(7)
C(4)	0.051(8)	0.049(8)	0.042(7)	0.004(7)	-0.007(7)	-0.016(7)
C(5)	0.054(8)	0.048(7)	0.037(7)	0.000(7)	-0.005(7)	0.007(7)
C(6)	0.08(1)	0.059(9)	0.09(1)	0.010(9)	0.010(10)	0.005(9)
C(7)	0.064(9)	0.058(9)	0.07(1)	-0.008(8)	0.038(8)	-0.011(8)
C(8)	0.047(8)	0.074(10)	0.066(10)	-0.018(8)	0.029(8)	-0.005(8)
C(9)	0.10(1)	0.18(2)	0.09(1)	-0.13(1)	0.07(1)	-0.08(1)
C(10)	0.09(1)	0.22(2)	0.041(10)	-0.08(1)	0.014(9)	-0.05(1)
C(11)	0.024(8)	0.19(2)	0.029(8)	-0.01(1)	-0.005(7)	-0.009(10)
C(12)	0.039(9)	0.16(2)	0.049(9)	0.02(1)	0.015(7)	0.03(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)

C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	-0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	-0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	-0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	-0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	-0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	-0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	-0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	-0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	-0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	-0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	-0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	-0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	-0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	-0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	-0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	-0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	-0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	-0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	-0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	-0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	-0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	-0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	-0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)

C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	-0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)

Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	-0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	-0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	-0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	-0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	-0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	-0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	-0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	-0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	-0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	-0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	-0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	-0.01(1)	-0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	0.0031(9)	0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	0.0031(9)	0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	0.0031(7)	0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	0.0031(10)	0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	0.003(1)	0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	0.0031(8)	0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	0.003(9)	0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	0.003(8)	0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	0.003(7)	0.007(7)

C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	0.003(7)	0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	0.003(10)	0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	0.003(8)	0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	0.003(9)	0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	0.003(7)	0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	0.003(7)	0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	-0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	-0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	-0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	-0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	-0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	-0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	-0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	-0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	0.0076(10)	-0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	0.0076(9)	-0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	0.0076(7)	-0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	0.0076(9)	-0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.008(1)	-0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	0.0076(10)	-0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	0.008(9)	-0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	0.008(7)	-0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(9)	-0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	0.008(8)	-0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	0.01(1)	-0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.007(10)
C(12*)	0.083(9)	0.06(2)	0.053(9)	0.01(1)	-0.003(7)	-0.01(1)
Se(1*)	0.083(1)	0.057(1)	0.0534(8)	-0.0076(10)	0.0031(9)	-0.0068(9)
Se(2*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.0534(9)	-0.0076(9)	0.0031(9)	-0.0068(7)
Se(3*)	0.0830(8)	0.0565(7)	0.0534(7)	-0.0076(7)	0.0031(7)	-0.0068(7)
Se(4*)	0.083(1)	0.0565(8)	0.053(1)	-0.0076(9)	0.0031(10)	-0.0068(9)
Se(5*)	0.083(1)	0.057(1)	0.053(1)	-0.008(1)	0.003(1)	-0.007(1)
Se(6*)	0.0830(9)	0.057(1)	0.0534(9)	-0.0076(10)	0.0031(8)	-0.0068(10)
C(1*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(9)	-0.007(8)
C(2*)	0.08(1)	0.06(1)	0.053(9)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(3*)	0.08(1)	0.057(9)	0.053(9)	-0.008(9)	0.003(8)	-0.007(7)
C(4*)	0.083(8)	0.057(8)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(5*)	0.083(8)	0.057(7)	0.053(7)	-0.008(7)	0.003(7)	-0.007(7)
C(6*)	0.08(1)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(9)	0.003(10)	-0.007(9)
C(7*)	0.083(9)	0.057(9)	0.05(1)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(8*)	0.083(8)	0.057(10)	0.053(10)	-0.008(8)	0.003(8)	-0.007(8)
C(9*)	0.08(1)	0.06(2)	0.05(1)	-0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(10*)	0.08(1)	0.06(2)	0.053(10)	-0.01(1)	0.003(9)	-0.01(1)
C(11*)	0.083(8)	0.06(2)	0.053(8)	-0.01(1)	0.003(7)	-0.007(10)

```

C(12*) 0.083(9) 0.06(2) 0.053(9) -0.01(1) 0.003(7) -0.01(1)
Se(1*) 0.083(1) 0.057(1) 0.0534(8) -0.0076(10) 0.0031(9) -0.0068(9)
Se(2*) 0.083(1) 0.0565(8) 0.0534(9) -0.0076(9) 0.0031(9) -0.0068(7)
Se(3*) 0.0830(8) 0.0565(7) 0.0534(7) -0.0076(7) 0.0031(7) -0.0068(7)
Se(4*) 0.083(1) 0.0565(8) 0.053(1) -0.0076(9) 0.0031(10) -0.0068(9)
Se(5*) 0.083(1) 0.057(1) 0.053(1) -0.008(1) 0.003(1) -0.007(1)
Se(6*) 0.0830(9) 0.057(1) 0.0534(9) -0.0076(10) 0.0031(8) -0.0068(10)
C(1*) 0.08(1) 0.057(9) 0.053(9) -0.008(9) 0.003(9) -0.007(8)
C(2*) 0.08(1) 0.06(1) 0.053(9) -0.008(8) 0.003(8) -0.007(8)
C(3*) 0.08(1) 0.057(9) 0.053(9) -0.008(9) 0.003(8) -0.007(7)
C(4*) 0.083(8) 0.057(8) 0.053(7) -0.008(7) 0.003(7) -0.007(7)
C(5*) 0.083(8) 0.057(7) 0.053(7) -0.008(7) 0.003(7) -0.007(7)
C(6*) 0.08(1) 0.057(9) 0.05(1) -0.008(9) 0.003(10) -0.007(9)
C(7*) 0.083(9) 0.057(9) 0.05(1) -0.008(8) 0.003(8) -0.007(8)
C(8*) 0.083(8) 0.057(10) 0.053(10) -0.008(8) 0.003(8) -0.007(8)
C(9*) 0.08(1) 0.06(2) 0.05(1) -0.01(1) 0.00(1) -0.01(1)
C(10*) 0.08(1) 0.06(2) 0.053(10) -0.01(1) 0.003(9) -0.01(1)
C(11*) 0.083(8) 0.06(2) 0.053(8) -0.01(1) 0.003(7) -0.007(10)
C(12*) 0.083(9) 0.06(2) 0.053(9) -0.01(1) 0.003(7) -0.01(1)
#-----
_computing_data_collection 'MSC/AFC Diffractometer Control'
_computing_cell_refinement 'MSC/AFC Diffractometer Control'
_computing_data_reduction 'teXsan Ver. 1.11'
_computing_structure_solution SIR92
_computing_structure_refinement 'teXsan Ver. 1.10'
_computing_publication_material 'teXsan Ver. 1.11'
_computing_molecular_graphics ?
#-----
_geom_special_details
;
;
loop_
_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_1
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Se(1) C(1) 1.89(1) . . yes
Se(1) C(12) 1.89(2) . . yes
Se(2) C(2) 1.90(1) . . yes
Se(2) C(3) 1.91(1) . . yes
Se(3) C(4) 1.90(1) . . yes
Se(3) C(5) 1.91(1) . . yes
Se(4) C(6) 1.88(1) . . yes
Se(4) C(7) 1.92(1) . . yes
Se(5) C(8) 1.87(1) . . yes
Se(5) C(9) 1.94(2) . . yes
Se(6) C(10) 1.86(2) . . yes
Se(6) C(11) 1.92(2) . . yes
C(1) C(2) 1.31(2) . . yes
C(1) H(1) 0.949 . . no
C(2) H(2) 0.951 . . no
C(3) C(4) 1.30(2) . . yes
C(3) H(3) 0.950 . . no
C(4) H(4) 0.950 . . no
C(5) C(6) 1.32(2) . . yes
C(5) H(5) 0.950 . . no
C(6) H(6) 0.950 . . no
C(7) C(8) 1.32(2) . . yes

```

C(7)	H(7)	0.951	. . no
C(8)	H(8)	0.949	. . no
C(9)	C(10)	1.27(2)	. . yes
C(9)	H(9)	0.949	. . no
C(10)	H(10)	0.952	. . no
C(11)	C(12)	1.32(2)	. . yes
C(11)	H(11)	0.950	. . no
C(12)	H(12)	0.950	. . no

#-----

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1

_geom_angle_atom_site_label_2

_geom_angle_atom_site_label_3

_geom_angle

_geom_angle_site_symmetry_1

_geom_angle_site_symmetry_2

_geom_angle_site_symmetry_3

_geom_angle_publ_flag

C(1)	Se(1)	C(12)	96.5(6)	. . . yes
C(2)	Se(2)	C(3)	97.3(6)	. . . yes
C(4)	Se(3)	C(5)	96.9(5)	. . . yes
C(6)	Se(4)	C(7)	96.2(6)	. . . yes
C(8)	Se(5)	C(9)	96.3(6)	. . . yes
C(10)	Se(6)	C(11)	98.2(7)	. . . yes
Se(1)	C(1)	C(2)	125(1)	. . . yes
Se(1)	C(1)	H(1)	117.0	. . . no
C(2)	C(1)	H(1)	117.1	. . . no
Se(2)	C(2)	C(1)	123(1)	. . . yes
Se(2)	C(2)	H(2)	118.6	. . . no
C(1)	C(2)	H(2)	118.3	. . . no
Se(2)	C(3)	C(4)	122(1)	. . . yes
Se(2)	C(3)	H(3)	119.0	. . . no
C(4)	C(3)	H(3)	119.0	. . . no
Se(3)	C(4)	C(3)	126.3(10)	. . . yes
Se(3)	C(4)	H(4)	116.8	. . . no
C(3)	C(4)	H(4)	116.8	. . . no
Se(3)	C(5)	C(6)	123(1)	. . . yes
Se(3)	C(5)	H(5)	118.4	. . . no
C(6)	C(5)	H(5)	118.4	. . . no
Se(4)	C(6)	C(5)	124(1)	. . . yes
Se(4)	C(6)	H(6)	117.6	. . . no
C(5)	C(6)	H(6)	117.6	. . . no
Se(4)	C(7)	C(8)	123(1)	. . . yes
Se(4)	C(7)	H(7)	118.6	. . . no
C(8)	C(7)	H(7)	118.3	. . . no
Se(5)	C(8)	C(7)	125(1)	. . . yes
Se(5)	C(8)	H(8)	117.0	. . . no
C(7)	C(8)	H(8)	117.1	. . . no
Se(5)	C(9)	C(10)	120(1)	. . . yes
Se(5)	C(9)	H(9)	119.6	. . . no
C(10)	C(9)	H(9)	119.5	. . . no
Se(6)	C(10)	C(9)	127(1)	. . . yes
Se(6)	C(10)	H(10)	115.9	. . . no
C(9)	C(10)	H(10)	116.1	. . . no
Se(6)	C(11)	C(12)	121(1)	. . . yes
Se(6)	C(11)	H(11)	119.3	. . . no
C(12)	C(11)	H(11)	119.4	. . . no
Se(1)	C(12)	C(11)	124(1)	. . . yes
Se(1)	C(12)	H(12)	117.8	. . . no
C(11)	C(12)	H(12)	117.8	. . . no

#-----

```

loop_
_geom_torsion_atom_site_label_1
_geom_torsion_atom_site_label_2
_geom_torsion_atom_site_label_3
_geom_torsion_atom_site_label_4
_geom_torsion
_geom_torsion_site_symmetry_1
_geom_torsion_site_symmetry_2
_geom_torsion_site_symmetry_3
_geom_torsion_site_symmetry_4
_geom_torsion_publ_flag
Se(1)      C(1)      C(2)      Se(2)      1(1)      . . . . . yes
Se(1)      C(12)     C(11)     Se(6)      -3(1)     . . . . . yes
Se(2)      C(3)      C(4)      Se(3)      5(1)     . . . . . yes
Se(3)      C(5)      C(6)      Se(4)      2(1)     . . . . . yes
Se(4)      C(7)      C(8)      Se(5)      2(1)     . . . . . yes
Se(5)      C(9)      C(10)     Se(6)      -4(2)     . . . . . yes
C(1)       Se(1)     C(12)     C(11)     -73(1)    . . . . . yes
C(1)       C(2)      Se(2)     C(3)      -162(1)   . . . . . yes
C(2)       Se(2)     C(3)      C(4)      61(1)     . . . . . yes
C(2)       C(1)      Se(1)     C(12)     174(1)    . . . . . yes
C(3)       C(4)      Se(3)     C(5)      165(1)    . . . . . yes
C(4)       Se(3)     C(5)      C(6)      -173(1)   . . . . . yes
C(5)       C(6)      Se(4)     C(7)      -65(1)    . . . . . yes
C(6)       Se(4)     C(7)      C(8)      173(1)    . . . . . yes
C(7)       C(8)      Se(5)     C(9)      -167(1)   . . . . . yes
C(8)       Se(5)     C(9)      C(10)     66(1)     . . . . . yes
C(9)       C(10)     Se(6)     C(11)     -175(1)   . . . . . yes
C(10)      Se(6)     C(11)     C(12)     -172(1)   . . . . . yes
C(10)      Se(6)     C(11)     C(12)     -172(1)   . . . . . yes

```

```

#-----
loop_
_geom_contact_atom_site_label_1
_geom_contact_atom_site_label_2
_geom_contact_distance
_geom_contact_site_symmetry_1
_geom_contact_site_symmetry_2
_geom_contact_publ_flag
C(9)       C(12)      3.48(2)    . 5_554 ?
C(10)      C(12)      3.56(2)    . 5_554 ?
C(10)      C(11)      3.60(2)    . 5_554 ?
#-----
#-----

```

X-Ray Structure

of

