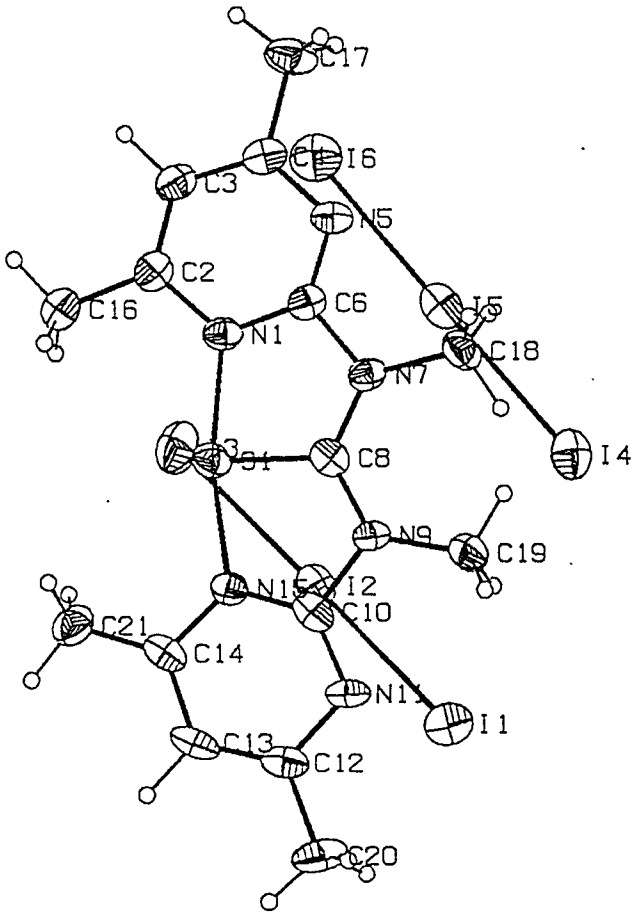
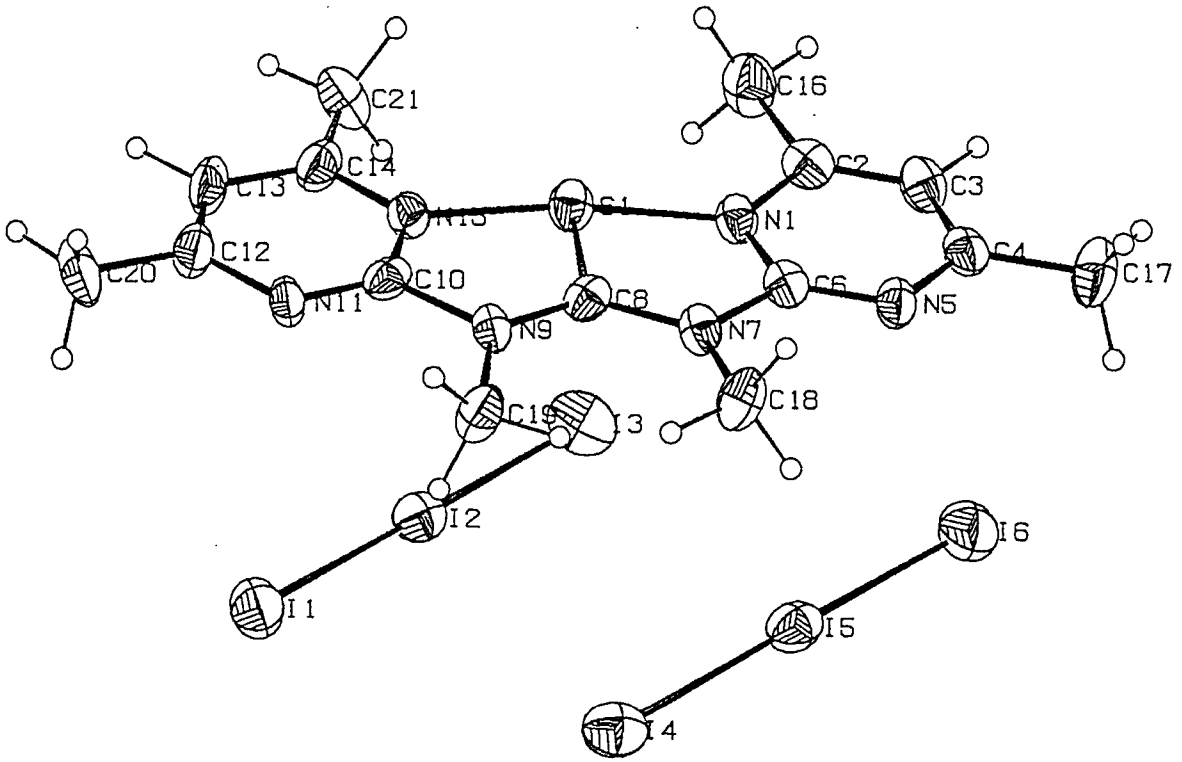
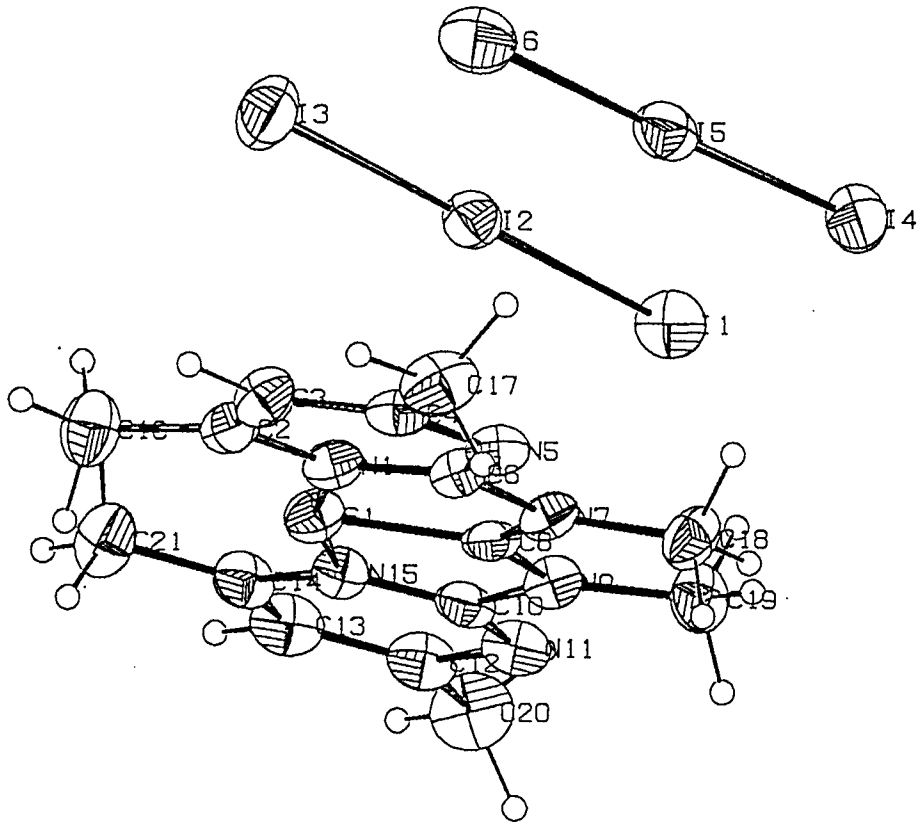
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
J. Am. Chem. Soc., 1996, 118(27), 6355-6369, DOI:10.1021/ja952591c


C17
C1
I6
C3
N5
C2
C16
C6
I5
N1
C18
N7
I4
C8
N9
C19
N15
I2
C10
C21
C14
N11
I1
C13
C12
C20

S43


C21
C16
C14
C2
C13
C3
N15
C1
N1
C12
C4
C17
C20
C10
N11
C8
C6
N5
N9
N7
C18
C19
I3
I2
I6
I1
I5
I4



S45

...coordination no. 1 48 atoms

	cm	nb	aw	x	y	z	b					
1	I 1	0	1.00000	0.34339	0.02575	0.33163	0.02006	0.00085	0.03033	0.00050	-0.00020	0.01722
2	I 2	0	1.00000	0.11944	0.07720	0.24156	0.01366	0.00090	0.02085	-0.00119	-0.00067	0.01129
3	I 3	0	1.00000	-0.11019	0.12886	0.15212	0.01363	0.00139	0.03389	0.00157	-0.00088	0.00866
4	I 4	0	1.00000	0.51659	0.12628	0.28202	0.01604	0.00125	0.02878	-0.00054	-0.00099	0.01708
5	I 5	0	1.00000	0.30685	0.18214	0.22313	0.01682	0.00099	0.02071	-0.00219	-0.00098	0.01472
6	I 6	0	1.00000	0.10039	0.23685	0.15649	0.02414	0.00105	0.02785	0.00005	-0.00081	0.01919
7	S 1	0	1.00000	0.09487	0.12415	0.71133	0.01234	0.00060	0.02005	-0.00057	-0.00025	0.00645
8	N 1	0	1.00000	0.10554	0.17178	0.68671	0.01248	0.00051	0.01684	0.00007	-0.00012	0.00582
9	N 5	0	1.00000	0.27544	0.21489	0.70608	0.01517	0.00047	0.01823	0.00003	0.00031	0.00893
10	N 7	0	1.00000	0.33612	0.15670	0.73951	0.01130	0.00053	0.01691	0.00066	0.00018	0.00358
11	N 9	0	1.00000	0.34960	0.09592	0.77113	0.01243	0.00042	0.01884	0.00029	-0.00037	0.00854
12	N 11	0	1.00000	0.32291	0.03705	0.80443	0.01903	0.00036	0.02030	0.00017	-0.00021	0.01513
13	N 15	0	1.00000	0.12920	0.07616	0.74247	0.01230	0.00052	0.01830	-0.00050	-0.00071	0.01035
14	C 2	0	1.00000	-0.00452	0.19482	0.66013	0.01250	0.00076	0.01813	0.00064	0.00011	0.00702
15	C 3	0	1.00000	0.02719	0.22771	0.64955	0.01365	0.00062	0.02497	0.00111	-0.00021	0.00838
16	C 4	0	1.00000	0.16805	0.23738	0.67818	0.01646	0.00059	0.01458	0.00068	-0.00019	0.00857
17	C 6	0	1.00000	0.23708	0.18353	0.70743	0.01152	0.00059	0.01631	0.00043	-0.00009	0.00580
18	C 8	0	1.00000	0.28012	0.12524	0.74368	0.01183	0.00070	0.01127	-0.00063	0.00082	0.00359
19	C 10	0	1.00000	0.26371	0.06739	0.77566	0.01420	0.00074	0.01341	-0.00198	-0.00045	0.01058
20	C 12	0	1.00000	0.22762	0.01147	0.80019	0.02016	0.00049	0.02409	-0.00059	0.00081	0.01623
21	C 13	0	1.00000	0.08170	0.01874	0.75891	0.02098	0.00050	0.02564	-0.00298	-0.00074	0.01461
22	C 14	0	1.00000	0.03038	0.05201	0.73115	0.01584	0.00064	0.02246	-0.00209	-0.00002	0.01466
23	C 16	0	1.00000	-0.14789	0.18058	0.64996	0.01426	0.00083	0.04091	0.00105	0.00039	0.01770
24	C 17	0	1.00000	0.20714	0.27377	0.67238	0.02219	0.00060	0.03217	-0.00031	0.00267	0.00900
25	C 18	0	1.00000	0.48892	0.16551	0.77624	0.01021	0.00075	0.02983	-0.00123	0.00184	0.00384
26	C 19	0	1.00000	0.49976	0.08946	0.78453	0.01422	0.00069	0.03508	-0.00045	0.00225	0.01888
27	C 20	0	1.00000	0.28741	-0.02284	0.83411	0.02644	0.00053	0.03842	0.00126	-0.00225	0.02009
28	C 21	0	1.00000	-0.12083	0.06204	0.68764	0.01437	0.00079	0.03492	0.00054	-0.00356	0.01302
29	H 3	0	1.00000	-0.05712	0.24527	0.62220	4.66003	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
30	H 13	0	1.00000	0.00825	-0.00063	0.75274	5.20082	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
31	H 16A	0	1.00000	-0.22452	0.19894	0.62864	6.03599	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
32	H 16B	0	1.00000	-0.18742	0.16412	0.53803	6.03599	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
33	H 16C	0	1.00000	-0.14023	0.16788	0.76846	6.03599	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
34	H 17A	0	1.00000	0.11927	0.28905	0.64901	6.26445	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
35	H 17B	0	1.00000	0.28446	0.28110	0.79343	6.26445	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
36	H 17C	0	1.00000	0.24261	0.27806	0.56352	6.26445	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
37	H 18A	0	1.00000	0.55031	0.14386	0.78889	5.00377	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
38	H 18B	0	1.00000	0.50084	0.17935	0.67128	5.00377	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
39	H 18C	0	1.00000	0.53486	0.17835	0.90011	5.00377	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
40	H 19A	0	1.00000	0.55636	0.11166	0.79659	5.26879	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
41	H 19B	0	1.00000	0.55582	0.07552	0.90234	5.26879	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
42	H 19C	0	1.00000	0.50501	0.07707	0.67068	5.26879	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
43	H 20A	0	1.00000	0.21150	-0.04022	0.83045	6.74608	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
44	H 20B	0	1.00000	0.33210	-0.02962	0.73944	6.74608	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
45	H 20C	0	1.00000	0.36731	-0.02459	0.96696	6.74608	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
46	H 21A	0	1.00000	-0.18596	0.04150	0.68172	5.68286	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
47	H 21B	0	1.00000	-0.13162	0.07804	0.78517	5.68286	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
48	H 21C	0	1.00000	-0.16302	0.07355	0.55822	5.68286	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

***** crycar *****

a, b, c, alph, beta, gamm

9.905 39.408 7.536 90.00 111.29 90.00

...matrix no. 1

9.9049997	0.0000000	-2.7360075	0.0000000
0.0002605	39.4080009	0.0001982	0.0000000
0.0000000	0.0000000	7.0217915	0.0000000

...matrix no. 2

0.1009591	0.0000000	0.0393382	0.0000000
-0.0000007	0.0253756	-0.0000010	0.0000000

```
  0.0000000    0.0000000    0.1424138        0.0000000

***** cartesian system *****

  1 I 1          2.49394    1.01491    2.32864
  2 I 2          0.52214    3.04238    1.69618
  3 I 3         -1.50763    5.07812    1.06815
  4 I 4          4.34521    4.97663    1.98029
  5 I 5          2.42886    7.17790    1.56677
  6 I 6          0.56621    9.33384    1.09884
  7 S 1         -1.00652    4.89267    4.99481
  8 N 1         -0.83347    6.76967    4.82193
  9 N 5          0.79639    8.46860    4.95795
 10 N 7          1.30596    6.17547    5.19269
 11 N 9          1.35297    3.78026    5.41471
 12 N 11         0.99750    1.46031    5.64854
 13 N 15        -0.75168    3.00149    5.21347
 14 C 2         -1.85089    7.67760    4.63530
 15 C 3         -1.50786    8.97373    4.56100
 16 C 4         -0.19097    9.35485    4.76204
 17 C 6          0.41274    7.23275    4.96743
 18 C 8          0.73987    4.93568    5.22197
 19 C 10         0.48984    2.65593    5.44652
 20 C 12         0.06525    0.45223    5.61877
 21 C 13        -1.26714    0.73868    5.32891
 22 C 14        -1.69952    2.04976    5.13398
 23 C 16        -3.24315    7.11639    4.56388
 24 C 17         0.21209   10.78892    4.72131
 25 C 18         2.71895    6.52270    5.45060
 26 C 19         2.80364    3.52573    5.50881
 27 C 20         0.56466   -0.89984    5.85695
 28 C 21        -3.07821    2.44498    4.82846
 29 H 3         -2.26812    9.66571    4.36896
 30 H 13        -1.97779   -0.02468    5.28558
 31 H 16A       -3.94383    7.83989    4.41418
 32 H 16B       -3.32845    6.46770    3.77793
 33 H 16C       -3.49149    6.61593    5.39597
 34 H 17A       -0.59433   11.39104    4.55721
 35 H 17B        0.64675   11.07782    5.57130
 36 H 17C        0.86126   10.95796    3.95692
 37 H 18A        3.29241    5.66953    5.53942
 38 H 18B        3.12419    7.06809    4.71359
 39 H 18C        2.83508    7.02873    6.32038
 40 H 19A        3.33127    4.40060    5.59349
 41 H 19B        3.03659    2.97642    6.33604
 42 H 19C        3.16714    3.03744    4.70937
 43 H 20A       -0.17721   -1.58477    5.83125
 44 H 20B        1.26634   -1.16703    5.19219
 45 H 20C        0.99260   -0.96876    6.78979
 46 H 21A       -3.70712    1.63552    4.78690
 47 H 21B       -3.45193    3.07552    5.51330
 48 H 21C       -3.14201    2.89853    3.91970
***** symrel *****

# name, s11, 12, 13, tr1,  s21, 22, 23, tr2, s31, 32, 33, tr3

            1  no 1    1.    0.    0.      0.0000
                       0.    1.    0.      0.0000
                       0.    0.    1.      0.0000

            2  no 2   -1.    0.    0.      0.5000
                       0.    1.    0.      0.5000
                       0.    0.   -1.      0.5000

            3  no 3   -1.    0.    0.      0.0000
                       0.   -1.    0.      0.0000
                       0.    0.   -1.      0.0000
```

```
              4  no 4   1.    0.    0.      0.5000
                        0.   -1.    0.      0.5000
                        0.    0.    1.      0.5000

***** sdista *****

#intramolecular geometries  dmax=  4.00  dmin=  1.00
```

Intramolecular Distances (A) with e.s.d. in parentheses

atom	atom	distance	atom	atom	distance
S 1	--C 8	1.76 (1)	N 11	--C 10	1.31 (2)
S 1	--N 1	1.89 (1)	N 11	--C 12	1.37 (2)
S 1	--N 15	1.92 (1)	N 15	--C 10	1.31 (2)
N 1	--C 6	1.34 (2)	N 15	--C 14	1.34 (2)
N 1	--C 2	1.38 (2)	C 2	--C 3	1.34 (2)
N 5	--C 6	1.29 (2)	C 2	--C 16	1.50 (2)
N 5	--C 4	1.34 (2)	C 3	--C 4	1.38 (2)
N 7	--C 8	1.36 (2)	C 4	--C 17	1.49 (2)
N 7	--C 6	1.40 (2)	C 12	--C 13	1.39 (2)
N 7	--C 18	1.48 (2)	C 12	--C 20	1.46 (2)
N 9	--C 8	1.32 (2)	C 13	--C 14	1.39 (2)
N 9	--C 10	1.42 (2)	C 14	--C 21	1.47 (2)
N 9	--C 19	1.48 (2)			
I 1	--I 2	2.898 (1)	N 9	--N 11	2.36 (1)
I 1	--N 11	3.67 (1)	N 9	--C 18	3.06 (2)
I 2	--I 3	2.942 (1)	N 9	--C 14	3.52 (2)
I 2	--N 15	3.74 (1)	N 9	--C 12	3.57 (2)
I 2	--C 10	3.77 (1)	N 9	--C 6	3.61 (2)
I 2	--N 9	3.881 (8)	N 11	--N 15	2.37 (1)
I 3	--S 1	3.963 (3)	N 11	--C 13	2.40 (2)
I 4	--I 5	2.948 (2)	N 11	--C 20	2.41 (2)
I 5	--I 6	2.887 (2)	N 11	--C 19	2.75 (2)
I 5	--N 7	3.926 (9)	N 11	--C 14	2.81 (2)
I 5	--C 18	3.95 (1)	N 11	--C 8	3.51 (2)
I 5	--C 6	3.95 (1)	N 15	--C 13	2.32 (2)
I 5	--N 5	3.98 (1)	N 15	--C 21	2.42 (2)
I 6	--C 4	3.74 (1)	N 15	--C 8	2.44 (2)
I 6	--C 17	3.92 (1)	N 15	--C 12	2.71 (2)
I 6	--N 5	3.962 (8)	N 15	--C 19	3.60 (2)
S 1	--N 9	2.64 (1)	C 2	--C 6	2.33 (2)
S 1	--N 7	2.65 (1)	C 2	--C 4	2.36 (2)
S 1	--C 10	2.73 (1)	C 2	--C 17	3.73 (2)
S 1	--C 6	2.74 (1)	C 2	--C 8	3.82 (2)
S 1	--C 14	2.93 (1)	C 3	--C 17	2.50 (2)
S 1	--C 2	2.93 (1)	C 3	--C 16	2.54 (2)
S 1	--C 16	3.18 (1)	C 3	--C 6	2.62 (2)
S 1	--C 21	3.21 (1)	C 4	--C 6	2.22 (2)
N 1	--N 7	2.25 (1)	C 4	--C 16	3.79 (2)
N 1	--C 3	2.32 (2)	C 6	--C 8	2.33 (2)
N 1	--N 5	2.36 (1)	C 6	--C 18	2.46 (2)
N 1	--C 16	2.45 (2)	C 6	--C 17	3.57 (2)
N 1	--C 8	2.45 (2)	C 6	--C 16	3.68 (2)
N 1	--C 4	2.66 (2)	C 8	--C 10	2.30 (2)
N 1	--C 18	3.62 (2)	C 8	--C 19	2.52 (2)
N 1	--N 9	3.75 (1)	C 8	--C 18	2.55 (2)
N 1	--N 15	3.79 (1)	C 8	--C 14	3.78 (2)
N 5	--N 7	2.36 (1)	C 10	--C 12	2.25 (2)
N 5	--C 3	2.39 (2)	C 10	--C 14	2.29 (2)
N 5	--C 17	2.40 (2)	C 10	--C 19	2.47 (2)
N 5	--C 18	2.78 (2)	C 10	--C 13	2.60 (2)
N 5	--C 2	2.78 (2)	C 10	--C 20	3.58 (2)
N 5	--C 8	3.54 (2)	C 10	--C 21	3.63 (2)
N 7	--N 9	2.40 (1)	C 12	--C 14	2.43 (2)
N 7	--C 19	3.06 (2)	C 12	--C 21	3.80 (2)

N 7	--C 2	3.54 (2)	C 13	--C 20	2.51 (2)
N 7	--C 4	3.54 (2)	C 13	--C 21	2.54 (2)
N 7	--C 10	3.62 (2)	C 14	--C 20	3.79 (2)
N 7	--N 15	3.78 (1)	C 18	--C 19	3.00 (2)
N 9	--N 15	2.25 (1)			

***** sangle *****

#intramolecular geometries dmax= 4.00 dmin= 1.00

Intramolecular Angles (degrees) with e.s.d. in parentheses

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
C 8	--S 1	--N 1	84.1 (5)	C 2	--C 3	--C 4	120 (1)
C 8	--S 1	--N 15	83.0 (5)	N 5	--C 4	--C 3	123 (1)
N 1	--S 1	--N 15	167.1 (5)	N 5	--C 4	--C 17	116 (1)
C 6	--N 1	--C 2	118 (1)	C 3	--C 4	--C 17	121 (1)
C 6	--N 1	--S 1	114.7 (8)	N 5	--C 6	--N 1	127 (1)
C 2	--N 1	--S 1	126.8 (9)	N 5	--C 6	--N 7	122 (1)
C 6	--N 5	--C 4	114 (1)	N 1	--C 6	--N 7	110 (1)
C 8	--N 7	--C 6	115 (1)	N 9	--C 8	--N 7	127 (1)
C 8	--N 7	--C 18	127 (1)	N 9	--C 8	--S 1	117.2 (9)
C 6	--N 7	--C 18	117 (1)	N 7	--C 8	--S 1	115.5 (9)
C 8	--N 9	--C 10	114 (1)	N 15	--C 10	--N 11	129 (1)
C 8	--N 9	--C 19	128 (1)	N 15	--C 10	--N 9	111 (1)
C 10	--N 9	--C 19	117 (1)	N 11	--C 10	--N 9	119 (1)
C 10	--N 11	--C 12	114 (1)	N 11	--C 12	--C 13	120 (1)
C 10	--N 15	--C 14	119 (1)	N 11	--C 12	--C 20	116 (1)
C 10	--N 15	--S 1	113.9 (8)	C 13	--C 12	--C 20	123 (1)
C 14	--N 15	--S 1	126.6 (8)	C 12	--C 13	--C 14	121 (1)
C 3	--C 2	--N 1	117 (1)	N 15	--C 14	--C 13	116 (1)
C 3	--C 2	--C 16	126 (1)	N 15	--C 14	--C 21	119 (1)
N 1	--C 2	--C 16	116 (1)	C 13	--C 14	--C 21	125 (1)
I 2	--I 1	--N 11	80.5 (1)	C 19	--N 15	--N 7	48.9 (3)
I 1	--I 2	--I 3	179.25 (5)	C 19	--N 15	--N 1	83.4 (3)
I 1	--I 2	--N 15	91.1 (1)	I 2	--N 15	--N 7	78.5 (2)
I 1	--I 2	--C 10	73.6 (2)	I 2	--N 15	--N 1	84.2 (2)
I 1	--I 2	--N 9	77.2 (1)	N 7	--N 15	--N 1	34.6 (2)
I 3	--I 2	--N 15	88.5 (1)	C 6	--C 2	--C 4	56.3 (5)
I 3	--I 2	--C 10	106.1 (2)	C 6	--C 2	--N 5	27.6 (4)
I 3	--I 2	--N 9	102.7 (1)	C 6	--C 2	--S 1	61.4 (4)
N 15	--I 2	--C 10	20.1 (2)	C 6	--C 2	--N 7	14.2 (4)
N 15	--I 2	--N 9	34.3 (2)	C 6	--C 2	--C 17	67.6 (5)
C 10	--I 2	--N 9	21.3 (2)	C 6	--C 2	--C 8	35.1 (4)
I 2	--I 3	--S 1	70.66 (5)	C 4	--C 2	--N 5	28.8 (4)
I 6	--I 5	--I 4	178.72 (4)	C 4	--C 2	--S 1	117.7 (6)
I 6	--I 5	--N 7	99.0 (1)	C 4	--C 2	--N 7	70.5 (5)
I 6	--I 5	--C 18	109.3 (2)	C 4	--C 2	--C 17	11.3 (4)
I 6	--I 5	--C 6	78.5 (2)	C 4	--C 2	--C 8	91.4 (5)
I 6	--I 5	--N 5	68.4 (1)	N 5	--C 2	--S 1	89.0 (4)
I 4	--I 5	--N 7	82.3 (1)	N 5	--C 2	--N 7	41.7 (3)
I 4	--I 5	--C 18	72.0 (2)	N 5	--C 2	--C 17	40.0 (3)
I 4	--I 5	--C 6	102.8 (2)	N 5	--C 2	--C 8	62.6 (4)
I 4	--I 5	--N 5	112.9 (1)	S 1	--C 2	--N 7	47.2 (2)
N 7	--I 5	--C 18	21.6 (2)	S 1	--C 2	--C 17	129.0 (4)
N 7	--I 5	--C 6	20.5 (2)	S 1	--C 2	--C 8	26.3 (2)
N 7	--I 5	--N 5	34.7 (2)	N 7	--C 2	--C 17	81.8 (4)
C 18	--I 5	--C 6	36.3 (2)	N 7	--C 2	--C 8	20.9 (2)
C 18	--I 5	--N 5	41.0 (2)	C 17	--C 2	--C 8	102.7 (4)
C 6	--I 5	--N 5	18.8 (2)	N 1	--C 3	--N 5	60.0 (5)
I 5	--I 6	--C 4	88.6 (2)	N 1	--C 3	--C 17	118.8 (7)
I 5	--I 6	--C 17	100.7 (2)	N 1	--C 3	--C 16	60.3 (5)
I 5	--I 6	--N 5	69.0 (2)	N 1	--C 3	--C 6	30.6 (4)
C 4	--I 6	--C 17	22.3 (3)	N 5	--C 3	--C 17	58.7 (5)
C 4	--I 6	--N 5	19.8 (2)	N 5	--C 3	--C 16	120.2 (6)
C 17	--I 6	--N 5	35.5 (2)	N 5	--C 3	--C 6	29.4 (4)
N 9	--S 1	--N 7	54.1 (3)	C 17	--C 3	--C 16	176.2 (6)
N 9	--S 1	--C 10	30.6 (4)	C 17	--C 3	--C 6	88.2 (6)

N 9	--S 1	--C 6	84.2 (3)		C 16	--C 3	--C 6	90.8 (6)
N 9	--S 1	--C 14	78.2 (3)		C 6	--C 4	--C 2	61.1 (6)
N 9	--S 1	--C 2	132.6 (3)		C 6	--C 4	--N 1	30.0 (4)
N 9	--S 1	--C 16	160.6 (3)		C 6	--C 4	--N 7	9.4 (4)
N 9	--S 1	--C 21	105.3 (3)		C 6	--C 4	--I 6	91.7 (5)
N 9	--S 1	--I 3	106.9 (2)		C 6	--C 4	--C 16	70.0 (5)

atom x y z b(equiv.)

Positional parameters and equivalent isotropic thermal parameters with e.s.d. in parentheses

atom	x	y	z	B(eq)
I 1	0.3434 (1)	0.02575 (3)	0.3316 (1)	6.37 (4)
I 2	0.11944 (9)	0.07720 (2)	0.2416 (1)	5.02 (3)
I 3	-0.1102 (1)	0.12886 (3)	0.1521 (1)	7.07 (4)
I 4	0.5166 (1)	0.12628 (3)	0.2820 (1)	6.56 (4)
I 5	0.30684 (9)	0.18214 (3)	0.2231 (1)	5.55 (4)
I 6	0.1004 (1)	0.23685 (3)	0.1565 (1)	7.09 (4)
S 1	0.0949 (3)	0.12415 (8)	0.7113 (4)	4.2 (1)
N 1	0.106 (1)	0.1718 (2)	0.687 (1)	3.8 (3)
N 5	0.275 (1)	0.2149 (2)	0.706 (1)	4.2 (3)
N 7	0.3361 (9)	0.1567 (2)	0.740 (1)	3.8 (3)
N 9	0.350 (1)	0.0959 (2)	0.771 (1)	3.8 (3)
N 11	0.323 (1)	0.0370 (2)	0.804 (1)	4.5 (3)
N 15	0.129 (1)	0.0762 (2)	0.742 (1)	3.9 (3)
C 2	-0.004 (1)	0.1948 (4)	0.660 (2)	4.4 (4)
C 3	0.027 (1)	0.2277 (3)	0.650 (2)	4.8 (4)
C 4	0.168 (1)	0.2374 (3)	0.678 (1)	4.3 (4)
C 6	0.237 (1)	0.1835 (3)	0.707 (1)	3.8 (4)
C 8	0.280 (1)	0.1252 (3)	0.744 (1)	3.8 (4)
C 10	0.264 (1)	0.0674 (3)	0.776 (1)	4.2 (4)
C 12	0.228 (2)	0.0115 (3)	0.800 (2)	5.2 (5)
C 13	0.082 (2)	0.0187 (3)	0.759 (2)	5.4 (5)
C 14	0.030 (1)	0.0520 (3)	0.731 (2)	4.8 (4)
C 16	-0.148 (1)	0.1806 (4)	0.650 (2)	6.4 (5)
C 17	0.207 (1)	0.2738 (3)	0.672 (2)	6.4 (5)
C 18	0.489 (1)	0.1655 (3)	0.776 (2)	5.1 (4)
C 19	0.500 (1)	0.0895 (3)	0.784 (2)	5.6 (4)
C 20	0.287 (2)	-0.0228 (3)	0.834 (2)	7.1 (6)
C 21	-0.121 (1)	0.0620 (3)	0.688 (2)	5.9 (5)
H 3	-0.0571200 (	0.2452700 (	0.6222000 (	4.66 (0)
H 13	0.0082500 (	-0.0006300 (	0.7527400 (	5.20 (0)
H 16A	-0.2245200 (	0.1989400 (	0.6286400 (	6.04 (0)
H 16B	-0.1874200 (	0.1641200 (	0.5380300 (	6.04 (0)
H 16C	-0.1402300 (	0.1678800 (	0.7684600 (	6.04 (0)
H 17A	0.1192700 (	0.2890500 (	0.6490100 (	6.26 (0)
H 17B	0.2844600 (	0.2811000 (	0.7934299 (	6.26 (0)
H 17C	0.2426100 (	0.2780600 (	0.5635200 (	6.26 (0)
H 18A	0.5503100 (	0.1438600 (	0.7888900 (	5.00 (0)
H 18B	0.5008400 (	0.1793500 (	0.6712800 (	5.00 (0)
H 18C	0.5348600 (	0.1783500 (	0.9001100 (	5.00 (0)
H 19A	0.5563600 (	0.1116600 (	0.7965899 (	5.27 (0)
H 19B	0.5558200 (	0.0755200 (	0.9023400 (	5.27 (0)
H 19C	0.5050100 (	0.0770700 (	0.6706800 (	5.27 (0)
H 20A	0.2115000 (	-0.0402200 (	0.8304500 (	6.75 (0)
H 20B	0.3321000 (	-0.0296200 (	0.7394400 (	6.75 (0)
H 20C	0.3673100 (	-0.0245900 (	0.9669600 (	6.75 (0)
H 21A	-0.1859600 (	0.0415000 (	0.6817200 (	5.68 (0)
H 21B	-0.1316200 (	0.0780400 (	0.7851700 (	5.68 (0)
H 21C	-0.1630200 (	0.0735500 (	0.5582200 (	5.68 (0)

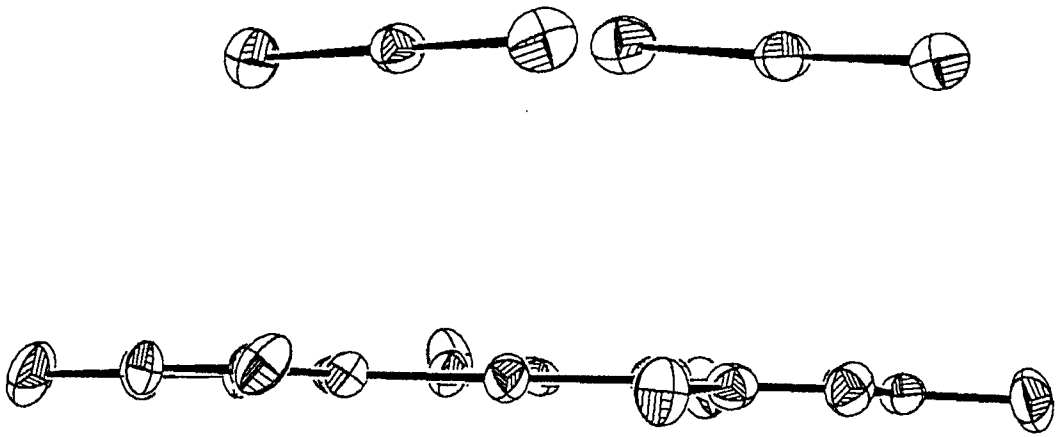
atom u11, 22, 33, 12, 13, 23

U values with e.s.d. in parentheses

atom	u11	u22	u33	u12	u13	u23

I 1	0.0866 (7)	0.0669 (8)	0.0758 (8)	0.0046 (6)	0.0283 (5)	-0.0014 (6)
I 2	0.0589 (5)	0.0708 (8)	0.0521 (7)	-0.0110 (5)	0.0185 (4)	-0.0047 (5)
I 3	0.0588 (6)	0.1094 (8)	0.0846 (9)	0.0145 (6)	0.0142 (5)	-0.0062 (6)
I 4	0.0692 (6)	0.0983 (8)	0.0719 (8)	-0.0050 (6)	0.0280 (5)	-0.0069 (6)
I 5	0.0726 (6)	0.0779 (8)	0.0517 (7)	-0.0202 (6)	0.0242 (4)	-0.0069 (5)
I 6	0.1042 (8)	0.0826 (8)	0.0696 (8)	0.0005 (6)	0.0315 (6)	-0.0057 (6)
S 1	0.053 (2)	0.047 (2)	0.050 (2)	-0.005 (2)	0.010 (1)	-0.002 (2)
N 1	0.054 (6)	0.040 (6)	0.042 (5)	0.001 (5)	0.010 (5)	-0.001 (4)
N 5	0.065 (7)	0.037 (6)	0.046 (6)	0.000 (6)	0.015 (5)	0.002 (5)
N 7	0.049 (6)	0.042 (6)	0.042 (5)	0.006 (5)	0.006 (4)	0.001 (5)
N 9	0.054 (6)	0.033 (6)	0.047 (6)	0.003 (5)	0.014 (5)	-0.002 (5)
N 11	0.082 (7)	0.028 (6)	0.051 (6)	0.002 (6)	0.025 (5)	-0.001 (5)
N 15	0.053 (6)	0.041 (6)	0.046 (5)	-0.005 (5)	0.017 (5)	-0.005 (5)
C 2	0.054 (8)	0.060 (9)	0.045 (7)	0.006 (7)	0.012 (6)	0.001 (6)
C 3	0.059 (8)	0.049 (9)	0.062 (8)	0.010 (7)	0.014 (7)	-0.001 (7)
C 4	0.071 (9)	0.046 (9)	0.036 (6)	0.006 (7)	0.014 (6)	-0.001 (6)
C 6	0.050 (7)	0.046 (9)	0.041 (6)	0.004 (7)	0.010 (6)	-0.001 (6)
C 8	0.051 (7)	0.055 (9)	0.028 (6)	-0.006 (7)	0.006 (5)	0.006 (6)
C 10	0.061 (8)	0.058 (9)	0.033 (6)	-0.018 (7)	0.017 (6)	-0.003 (6)
C 12	0.09 (1)	0.038 (9)	0.060 (8)	-0.005 (8)	0.027 (8)	0.006 (7)
C 13	0.09 (1)	0.039 (9)	0.064 (8)	-0.027 (8)	0.024 (8)	-0.005 (7)
C 14	0.068 (9)	0.050 (9)	0.056 (8)	-0.019 (7)	0.024 (7)	-0.000 (7)
C 16	0.062 (9)	0.06 (1)	0.10 (1)	0.010 (8)	0.029 (8)	0.003 (9)
C 17	0.10 (1)	0.047 (9)	0.08 (1)	-0.003 (8)	0.015 (8)	0.019 (8)
C 18	0.044 (7)	0.059 (9)	0.074 (9)	-0.011 (6)	0.006 (6)	0.013 (7)
C 19	0.061 (8)	0.054 (9)	0.09 (1)	-0.004 (7)	0.031 (7)	0.016 (8)
C 20	0.11 (1)	0.042 (9)	0.10 (1)	0.012 (8)	0.033 (9)	-0.016 (8)
C 21	0.062 (8)	0.062 (9)	0.09 (1)	0.005 (7)	0.021 (7)	-0.025 (8)

a front view



***** bestpl *****

best plane no. 1 (Plane number # 1

best plane consists of following atoms,

N 1 (1) S 1 (1) N 15 (1) C 8 (1)

other atoms only to calculate the distance,

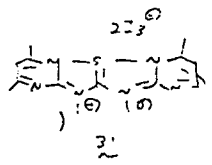
I 3 (1) I 2 (1) I 1 (1) I 6 (1) I 5 (1) I 4 (1)

equation of best plane (lx + my + nz + p = 0)

orthogonal	-0.13277	0.09958	0.98613	-5.54220
original	-0.13277	0.09958	0.96705	-5.54220
normal vector				
reciprocal	-1.31510	3.92406	7.28770	
real	0.02539	0.00253	0.14044	

distance from this plane

N 1	(1)	-0.002	S 1	(1)	0.004	N 15	(1)	-0.002	C 8	(1)	0.001
I 3	(1)	-3.783	I 2	(1)	-3.636	I 1	(1)	-3.476	I 6	(1)	-3.604
I 5	(1)	-3.605	I 4	(1)	-3.671						



の カウンターアニオンと分子面間距離

S63