
Annex III

Dades referents a l'estructura
cristal·lina de [9]

Les dades referents a l'estructura cristal·lina de [9] es presenten a les següents taules.

Taula III.1: Dades cristal·logràfiques.

Fórmula empírica	$C_{38}H_{52}O_6S$	Índex límit	$-11 \leq h \leq 11$ $-15 \leq k \leq 15$ $-18 \leq l \leq 18$
Pes molecular	636.86 g/mol	Reflexions adquirides	12586
Temperatura d'adquisició	298(2) K	Reflexions independents	12586 ($R_{int}= 0.0$)
Longitud d'ona d'adquisició	0.71073 Å	Correcció d'absorció	Sadabs
Sistema cristal·logràfic	Triclínic	Màx. i mín. de transmissió	0.926779 i 0.673379
Grup espacial	P1	Mètode de refinament	Full-matrix least-squares on F^2
Volum, Z	1888.7(8) Å ³ , 2	Qualitat de la fit a F^2	1.052
Densitat calculada	1.120 Mg/m ³	Índex R final [$I > 2\sigma(I)$]	R1= 0.0850, wR2= 0.2341
Coefficient d'absorció	0.127 mm ⁻¹	Índex R (totes les dades)	R1= 0.1202, wR2= 0.2789
F(000)	688	Paràmetre absolut d'estructura	0.1 (2)
Mida del cristall	0.45 x 0.15 x 0.05 mm	Densitat electrònica màxima i mínima no localitzada	0.824 i -0.549 eÅ ³
Rang de θ a la recollida de dades	1.41-25.03 °	Dades / restriccions / paràmetres	12586 / 3 / 811

Dimensions de la cel·la unitària	a= 9.907(2) Å	$\alpha = 70.52(2)^\circ$
	b= 13.191(3) Å	$\beta = 84.16(2)^\circ$
	c= 15.418(4) Å	$\gamma = 89.80(2)^\circ$

Taula III.2: Coordenades atòmiques i paràmetres de desplaçament isotròpic equivalent (\AA^2). $U(\text{eq})$ es defineix com un terç de la traça del tensor ortogonalitzat U_{ij} .

Àtom	x	y	z	$U(\text{eq})$
S1	0.3917(2)	0.7399(2)	0.84966(13)	0.0703(5)
S2	0.8281(3)	1.0385(3)	0.5592(2)	0.1135(10)
O1	0.3422(6)	0.8358(5)	0.8562(4)	0.094(2)
O2	0.4769(6)	0.6778(6)	0.9168(4)	0.103(2)
O3	0.2698(5)	0.6599(4)	0.8572(3)	0.0705(12)
O4	-0.0765(5)	0.7218(4)	0.8308(3)	0.0705(13)
O5	0.0503(4)	0.6902(3)	0.9517(3)	0.0479(9)
O6	-0.2808(5)	0.5192(4)	0.8978(4)	0.0709(13)
O7	0.7565(11)	1.0725(11)	0.4867(5)	0.201(5)
O8	0.8880(8)	0.9452(5)	0.5795(5)	0.116(2)
O9	0.9341(8)	1.1368(5)	0.5448(6)	0.122(2)
O10	1.2822(7)	1.0626(5)	0.5643(4)	0.090(2)
O11	1.1566(5)	1.0944(3)	0.4463(3)	0.0580(11)
O12	1.4782(5)	1.2611(4)	0.4954(4)	0.083(2)
C1	0.5978(10)	0.7886(7)	0.5628(6)	0.079(2)
C2	0.5149(9)	0.8654(6)	0.5795(6)	0.083(2)
C3	0.4520(7)	0.8544(5)	0.6665(5)	0.064(2)
C4	0.4741(7)	0.7592(6)	0.7383(5)	0.065(2)
C5	0.5533(8)	0.6797(6)	0.7248(5)	0.067(2)
C6	0.6152(9)	0.6989(7)	0.6346(6)	0.083(2)
C7	0.6585(13)	0.8042(10)	0.4661(6)	0.132(4)
C8	0.1607(7)	0.7032(7)	0.8025(5)	0.069(2)
C9	0.0306(7)	0.7059(5)	0.8625(4)	0.0525(15)
C10	0.1354(10)	0.6353(14)	0.7423(9)	0.178(7)
C11	-0.0716(6)	0.6778(5)	1.0104(4)	0.0454(13)
C12	-0.1485(5)	0.5840(4)	1.0302(4)	0.0418(12)
C13	-0.2705(6)	0.5706(5)	1.0853(4)	0.0506(14)
C14	-0.3128(7)	0.6484(5)	1.1228(4)	0.055(2)

Àtom	x	y	z	U(eq)
C15	-0.2318(6)	0.7395(5)	1.1054(4)	0.0507(14)
C16	-0.1085(6)	0.7561(5)	1.0513(4)	0.0485(14)
C17	-0.4507(7)	0.6359(7)	1.1847(5)	0.070(2)
C18	-0.5256(12)	0.5361(11)	1.1884(14)	0.230(11)
C19	-0.4270(12)	0.6392(17)	1.2762(7)	0.203(10)
C20	-0.5404(9)	0.7336(8)	1.1428(7)	0.097(3)
C21	-0.0149(7)	0.8590(5)	1.0338(5)	0.057(2)
C22	0.0034(9)	0.9280(6)	0.9332(6)	0.081(2)
C23	-0.0719(10)	0.9220(8)	1.0927(9)	0.113(4)
C24	0.1210(8)	0.8181(7)	1.0706(6)	0.076(2)
C25	-0.0996(6)	0.4968(4)	0.9930(4)	0.0411(12)
C26	0.0186(6)	0.4432(4)	1.0254(4)	0.0440(12)
C27	0.0681(6)	0.3630(5)	0.9948(4)	0.0473(13)
C28	-0.0026(6)	0.3363(5)	0.9331(4)	0.0499(14)
C29	-0.1185(6)	0.3824(5)	0.8989(4)	0.0529(15)
C30	-0.1673(6)	0.4681(4)	0.9325(4)	0.0488(14)
C31	0.1997(7)	0.3067(6)	1.0267(5)	0.067(2)
C32	0.3014(14)	0.3812(11)	1.0371(23)	0.303(18)
C33	0.1696(14)	0.2187(17)	1.1086(17)	0.380(22)
C34	0.2760(16)	0.2751(24)	0.9600(13)	0.313(18)
C35	-0.1912(8)	0.3509(7)	0.8275(6)	0.072(2)
C36	-0.1189(10)	0.2584(8)	0.8045(8)	0.113(4)
C37	-0.1641(10)	0.4484(9)	0.7320(6)	0.103(3)
C38	-0.3391(8)	0.3255(7)	0.8563(7)	0.085(2)
C39	0.5936(10)	1.0070(9)	0.8306(6)	0.088(3)
C40	0.5822(10)	1.0916(8)	0.7552(8)	0.096(3)
C41	0.6494(10)	1.0984(8)	0.6740(7)	0.088(2)
C42	0.7354(7)	1.0191(7)	0.6650(5)	0.068(2)
C43	0.7436(8)	0.9337(7)	0.7442(7)	0.081(2)
C44	0.6736(9)	0.9265(8)	0.8251(6)	0.084(3)
C45	0.5137(15)	0.9993(13)	0.9250(10)	0.173(7)

Àtom	x	y	z	U(eq)
C46	1.0581(7)	1.1120(8)	0.5881(6)	0.083(2)
C47	1.1768(8)	1.0850(5)	0.5335(5)	0.062(2)
C48	1.0608(11)	1.0804(10)	0.6861(7)	0.120(3)
C49	1.2754(7)	1.1048(5)	0.3843(4)	0.0531(15)
C50	1.3524(7)	1.2000(5)	0.3639(4)	0.0510(15)
C51	1.4722(7)	1.2114(5)	0.3070(4)	0.057(2)
C52	1.5183(7)	1.1329(5)	0.2689(4)	0.057(2)
C53	1.4307(7)	1.0430(6)	0.2907(5)	0.062(2)
C54	1.3068(7)	1.0218(5)	0.3492(4)	0.056(2)
C55	1.6487(7)	1.1456(6)	0.2069(5)	0.068(2)
C56	1.6991(19)	1.2529(10)	0.1645(15)	0.277(15)
C57	1.7411(10)	1.0641(11)	0.2541(9)	0.154(6)
C58	1.6165(12)	1.1214(12)	0.1169(7)	0.138(4)
C59	1.2180(8)	0.9257(6)	0.3639(6)	0.072(2)
C60	1.2814(12)	0.8483(8)	0.3131(8)	0.117(4)
C61	1.1983(11)	0.8545(6)	0.4683(6)	0.086(2)
C62	1.0760(9)	0.9557(8)	0.3357(7)	0.091(3)
C63	1.3001(6)	1.2872(5)	0.3968(4)	0.0455(13)
C64	1.1827(6)	1.3376(5)	0.3669(4)	0.0474(13)
C65	1.1304(6)	1.4203(5)	0.3966(4)	0.0520(14)
C66	1.2012(7)	1.4487(6)	0.4586(5)	0.061(2)
C67	1.3181(6)	1.3981(5)	0.4927(4)	0.058(2)
C68	1.3660(6)	1.3178(5)	0.4617(4)	0.054(2)
C69	1.0009(6)	1.4753(6)	0.3623(5)	0.064(2)
C70	0.9829(18)	1.4759(18)	0.2775(11)	0.273(14)
C71	0.9896(18)	1.5830(12)	0.3766(17)	0.250(12)
C72	0.8885(13)	1.4144(19)	0.4205(18)	0.358(23)
C73	1.3820(8)	1.4293(7)	0.5669(6)	0.072(2)
C74	1.5347(10)	1.4470(10)	0.5429(8)	0.109(3)
C75	1.3314(12)	1.5346(11)	0.5759(10)	0.145(6)
C76	1.3620(15)	1.3409(13)	0.6544(8)	0.152(5)

Taula III.3: Coordenades calculades pels àtoms d'hidrogen i paràmetres de desplaçament isotròpic equivalent (\AA^2).

Hidrogen	x	y	z	U(eq)
H6A	-0.2984(5)	0.5672(4)	0.9195(4)	0.106
H12A	1.5063(5)	1.2839(4)	0.5338(4)	0.124
H2B	0.5007(9)	0.9270(6)	0.5304(6)	0.100
H3A	0.3976(7)	0.9076(5)	0.6770(5)	0.077
H5A	0.5655(8)	0.6164(6)	0.7728(5)	0.081
H6B	0.6713(9)	0.6468(7)	0.6236(6)	0.100
H7B	0.6345(13)	0.8730(10)	0.4257(6)	0.198
H7C	0.6246(13)	0.7485(10)	0.4462(6)	0.198
H7D	0.7556(13)	0.8011(10)	0.4645(6)	0.198
H8A	0.1866(7)	0.7767(7)	0.7622(5)	0.083
H10A	0.2175(10)	0.6330(14)	0.7043(9)	0.267
H10B	0.0656(10)	0.6667(14)	0.7037(9)	0.267
H10C	0.1071(10)	0.5636(14)	0.7812(9)	0.267
H13A	-0.3244(6)	0.5088(5)	1.0973(4)	0.061
H15A	-0.2613(6)	0.7913(5)	1.1310(4)	0.061
H18A	-0.5381(12)	0.5388(11)	1.1267(14)	0.345
H18B	-0.6126(12)	0.5309(11)	1.2236(14)	0.345
H18C	-0.4743(12)	0.4743(11)	1.2173(14)	0.345
H19A	-0.3781(12)	0.7046(17)	1.2691(7)	0.304
H19B	-0.3748(12)	0.5787(17)	1.3068(7)	0.304
H19C	-0.5125(12)	0.6363(17)	1.3124(7)	0.304
H20A	-0.5591(9)	0.7362(8)	1.0822(7)	0.145
H20B	-0.4933(9)	0.7988(8)	1.1385(7)	0.145
H20C	-0.6243(9)	0.7260(8)	1.1819(7)	0.145
H22A	0.0402(9)	0.8859(6)	0.8968(6)	0.121
H22B	0.0646(9)	0.9876(6)	0.9250(6)	0.121
H22C	-0.0828(9)	0.9545(6)	0.9138(6)	0.121
H23A	-0.0827(10)	0.8765(8)	1.1563(9)	0.170

Hidrogen	x	y	z	U(eq)
H23B	-0.1586(10)	0.9484(8)	1.0742(9)	0.170
H23C	-0.0112(10)	0.9815(8)	1.0853(9)	0.170
H24A	0.1633(8)	0.7765(7)	1.0355(6)	0.114
H24B	0.1048(8)	0.7741(7)	1.1345(6)	0.114
H24C	0.1796(8)	0.8784(7)	1.0648(6)	0.114
H26A	0.0630(6)	0.4628(4)	1.0681(4)	0.053
H28A	0.0314(6)	0.2815(5)	0.9126(4)	0.060
H32A	0.2653(14)	0.4121(11)	1.0824(23)	0.455
H32B	0.3240(14)	0.4373(11)	0.9789(23)	0.455
H32C	0.3815(14)	0.3428(11)	1.0569(23)	0.455
H33A	0.1168(14)	0.2421(17)	1.1537(17)	0.570
H33B	0.2526(14)	0.1895(17)	1.1322(17)	0.570
H33C	0.1189(14)	0.1644(17)	1.0957(17)	0.570
H34A	0.2964(16)	0.3363(24)	0.9051(13)	0.469
H34B	0.2253(16)	0.2218(24)	0.9459(13)	0.469
H34C	0.3590(16)	0.2453(24)	0.9831(13)	0.469
H36A	-0.0243(10)	0.2775(8)	0.7862(8)	0.170
H36B	-0.1587(10)	0.2454(8)	0.7548(8)	0.170
H36C	-0.1286(10)	0.1945(8)	0.8581(8)	0.170
H37A	-0.0681(10)	0.4621(9)	0.7161(6)	0.155
H37B	-0.2058(10)	0.5117(9)	0.7385(6)	0.155
H37C	-0.2020(10)	0.4301(9)	0.6841(6)	0.155
H38A	-0.3809(8)	0.3849(7)	0.8701(7)	0.127
H38B	-0.3508(8)	0.2622(7)	0.9104(7)	0.127
H38C	-0.3808(8)	0.3131(7)	0.8070(7)	0.127
H40A	0.5263(10)	1.1470(8)	0.7593(8)	0.115
H41A	0.6380(10)	1.1578(8)	0.6223(7)	0.105
H43A	0.8003(8)	0.8782(7)	0.7418(7)	0.097
H44A	0.6804(9)	0.8662(8)	0.8771(6)	0.101
H45A	0.5341(15)	0.9334(13)	0.9714(10)	0.259
H45B	0.4180(15)	1.0005(13)	0.9193(10)	0.259

Hidrogen	x	y	z	U(eq)
H45C	0.5396(15)	1.0592(13)	0.9426(10)	0.259
H46A	1.0872(7)	1.1870(8)	0.5751(6)	0.100
H48A	0.9792(11)	1.1022(10)	0.7133(7)	0.180
H48B	1.1380(11)	1.1142(10)	0.6994(7)	0.180
H48C	1.0669(11)	1.0037(10)	0.7113(7)	0.180
H51A	1.5250(7)	1.2740(5)	0.2932(4)	0.068
H53A	1.4565(7)	0.9915(6)	0.2638(5)	0.074
H56A	1.6276(19)	1.2976(10)	0.1369(15)	0.415
H56B	1.7719(19)	1.2556(10)	0.1176(15)	0.415
H56C	1.7321(19)	1.2783(10)	0.2102(15)	0.415
H57A	1.6936(10)	0.9956(11)	0.2794(9)	0.231
H57B	1.7746(10)	1.0832(11)	0.3031(9)	0.231
H57C	1.8159(10)	1.0600(11)	0.2108(9)	0.231
H58A	1.5803(12)	1.0491(12)	0.1340(7)	0.208
H58B	1.6984(12)	1.1294(12)	0.0758(7)	0.208
H58C	1.5512(12)	1.1709(12)	0.0862(7)	0.208
H60A	1.2204(12)	0.7877(8)	0.3246(8)	0.176
H60B	1.3665(12)	0.8235(8)	0.3359(8)	0.176
H60C	1.2961(12)	0.8864(8)	0.2477(8)	0.176
H61A	1.1405(11)	0.7931(6)	0.4761(6)	0.130
H61B	1.1573(11)	0.8959(6)	0.5041(6)	0.130
H61C	1.2849(11)	0.8308(6)	0.4888(6)	0.130
H62A	1.0223(9)	0.8914(8)	0.3464(7)	0.137
H62B	1.0824(9)	0.9981(8)	0.2712(7)	0.137
H62C	1.0339(9)	0.9965(8)	0.3717(7)	0.137
H64A	1.1372(6)	1.3158(5)	0.3259(4)	0.057
H66A	1.1691(7)	1.5045(6)	0.4785(5)	0.074
H70A	1.0567(18)	1.5156(18)	0.2345(11)	0.409
H70B	0.8990(18)	1.5093(18)	0.2600(11)	0.409
H70C	0.9802(18)	1.4034(18)	0.2771(11)	0.409
H71A	1.0046(18)	1.5748(12)	0.4390(17)	0.375

Hidrogen	x	y	z	U(eq)
H71B	0.9005(18)	1.6097(12)	0.3652(17)	0.375
H71C	1.0563(18)	1.6328(12)	0.3345(17)	0.375
H72A	0.8951(13)	1.4110(19)	0.4831(18)	0.537
H72B	0.8887(13)	1.3429(19)	0.4174(18)	0.537
H72C	0.8059(13)	1.4480(19)	0.4004(18)	0.537
H74A	1.5535(10)	1.5051(10)	0.4854(8)	0.164
H74B	1.5738(10)	1.3826(10)	0.5370(8)	0.164
H74C	1.5732(10)	1.4645(10)	0.5910(8)	0.164
H75A	1.3463(12)	1.5906(11)	0.5169(10)	0.217
H75B	1.3797(12)	1.5528(11)	0.6199(10)	0.217
H75C	1.2361(12)	1.5269(11)	0.5967(10)	0.217
H76A	1.3955(15)	1.2762(13)	0.6458(8)	0.228
H76B	1.2670(15)	1.3310(13)	0.6759(8)	0.228
H76C	1.4103(15)	1.3572(13)	0.6993(8)	0.228

Taula III.4: Paràmetres de desplaçament anisotròpic (Å^2).

Àtom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
S1	0.0684(11)	0.0816(12)	0.0642(11)	-0.0329(9)	0.0076(8)	-0.0075(9)
S2	0.098(2)	0.149(3)	0.096(2)	-0.050(2)	0.0169(14)	-0.033(2)
O1	0.083(3)	0.104(4)	0.113(4)	-0.069(3)	0.023(3)	-0.012(3)
O2	0.073(3)	0.175(6)	0.055(3)	-0.029(3)	-0.012(2)	0.029(4)
O3	0.056(3)	0.093(3)	0.062(3)	-0.030(2)	0.013(2)	-0.007(2)
O4	0.069(3)	0.090(3)	0.047(3)	-0.015(2)	-0.007(2)	0.010(3)
O5	0.042(2)	0.057(2)	0.052(2)	-0.029(2)	0.004(2)	0.003(2)
O6	0.067(3)	0.073(3)	0.092(3)	-0.047(3)	-0.035(3)	0.029(2)
O7	0.222(10)	0.293(13)	0.063(4)	-0.026(6)	-0.023(6)	-0.101(10)
O8	0.147(6)	0.062(3)	0.147(6)	-0.038(3)	-0.047(5)	0.008(3)
O9	0.137(6)	0.081(4)	0.132(6)	-0.026(4)	0.026(5)	-0.007(4)
O10	0.098(4)	0.108(4)	0.062(3)	-0.027(3)	-0.012(3)	0.045(4)
O11	0.068(3)	0.054(2)	0.056(3)	-0.028(2)	0.006(2)	-0.003(2)
O12	0.082(4)	0.104(4)	0.091(4)	-0.060(3)	-0.048(3)	0.052(3)
C1	0.093(6)	0.076(5)	0.066(5)	-0.021(4)	-0.008(4)	0.000(4)
C2	0.090(6)	0.065(5)	0.074(5)	0.006(4)	-0.018(4)	-0.004(4)
C3	0.052(4)	0.053(4)	0.079(5)	-0.013(3)	-0.002(3)	0.005(3)
C4	0.046(4)	0.077(5)	0.068(4)	-0.020(4)	-0.003(3)	-0.003(3)
C5	0.074(5)	0.059(4)	0.060(4)	-0.010(3)	-0.001(3)	0.008(4)
C6	0.088(6)	0.081(5)	0.086(6)	-0.039(5)	0.005(4)	0.013(4)
C7	0.162(10)	0.159(10)	0.054(5)	-0.017(5)	0.023(5)	-0.003(8)
C8	0.061(4)	0.091(5)	0.064(4)	-0.040(3)	0.011(3)	-0.010(3)
C9	0.059(4)	0.046(3)	0.050(4)	-0.016(3)	0.005(3)	0.000(3)
C10	0.084(6)	0.361(21)	0.189(12)	-0.236(15)	0.027(7)	-0.007(9)
C11	0.044(3)	0.057(4)	0.039(3)	-0.022(3)	0.002(2)	0.009(3)
C12	0.034(3)	0.048(3)	0.046(3)	-0.020(2)	-0.002(2)	0.010(2)
C13	0.049(3)	0.048(3)	0.054(4)	-0.019(3)	0.000(3)	0.000(3)
C14	0.054(4)	0.063(4)	0.056(4)	-0.030(3)	-0.007(3)	0.026(3)
C15	0.053(4)	0.053(3)	0.051(3)	-0.025(3)	-0.001(3)	0.011(3)

Àtom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
C16	0.052(3)	0.047(3)	0.059(4)	-0.033(3)	-0.008(3)	0.010(3)
C17	0.059(4)	0.090(5)	0.059(4)	-0.028(4)	0.008(3)	0.012(4)
C18	0.118(9)	0.178(12)	0.425(27)	-0.207(16)	0.198(14)	-0.091(9)
C19	0.092(8)	0.439(29)	0.051(6)	-0.048(9)	-0.008(5)	0.077(12)
C20	0.072(5)	0.128(7)	0.106(6)	-0.059(6)	-0.008(5)	0.037(5)
C21	0.060(4)	0.052(4)	0.066(4)	-0.030(3)	-0.001(3)	-0.006(3)
C22	0.087(6)	0.053(4)	0.097(6)	-0.018(4)	-0.011(4)	-0.014(4)
C23	0.085(6)	0.093(6)	0.199(11)	-0.105(7)	0.009(6)	-0.009(5)
C24	0.070(5)	0.088(5)	0.081(5)	-0.037(4)	-0.022(4)	-0.015(4)
C25	0.048(3)	0.034(3)	0.042(3)	-0.016(2)	0.005(2)	0.000(2)
C26	0.046(3)	0.045(3)	0.047(3)	-0.021(2)	-0.010(2)	0.007(2)
C27	0.044(3)	0.045(3)	0.054(3)	-0.018(3)	-0.002(3)	0.007(2)
C28	0.048(3)	0.050(3)	0.063(4)	-0.033(3)	-0.006(3)	0.015(3)
C29	0.052(4)	0.054(3)	0.065(4)	-0.034(3)	-0.013(3)	0.006(3)
C30	0.047(3)	0.045(3)	0.061(4)	-0.024(3)	-0.012(3)	0.015(3)
C31	0.066(4)	0.074(4)	0.080(5)	-0.043(4)	-0.031(4)	0.026(4)
C32	0.098(9)	0.115(10)	0.711(54)	-0.118(19)	-0.176(19)	0.028(8)
C33	0.106(9)	0.315(23)	0.417(30)	0.266(24)	0.012(14)	0.102(12)
C34	0.150(13)	0.678(49)	0.235(18)	-0.296(27)	-0.109(13)	0.282(23)
C35	0.069(5)	0.088(5)	0.085(5)	-0.057(4)	-0.030(4)	0.019(4)
C36	0.109(7)	0.131(8)	0.160(9)	-0.116(7)	-0.058(7)	0.047(6)
C37	0.112(7)	0.149(8)	0.063(5)	-0.051(5)	-0.020(5)	0.019(6)
C38	0.068(5)	0.096(5)	0.117(7)	-0.065(5)	-0.031(4)	-0.002(4)
C39	0.090(6)	0.109(7)	0.068(5)	-0.042(5)	0.020(4)	-0.040(5)
C40	0.095(7)	0.087(6)	0.117(9)	-0.048(6)	-0.012(6)	0.016(5)
C41	0.098(7)	0.077(5)	0.081(6)	-0.013(4)	-0.027(5)	0.003(5)
C42	0.059(4)	0.092(6)	0.056(4)	-0.029(4)	0.002(3)	-0.023(4)
C43	0.052(4)	0.083(5)	0.115(8)	-0.039(5)	-0.017(4)	0.005(4)
C44	0.083(6)	0.095(6)	0.061(5)	-0.005(4)	-0.014(4)	-0.026(5)
C45	0.170(12)	0.235(16)	0.157(12)	-0.142(12)	0.047(9)	-0.079(11)
C46	0.047(4)	0.134(7)	0.074(5)	-0.047(5)	0.010(3)	-0.008(4)

Àtom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
C47	0.082(5)	0.046(4)	0.058(4)	-0.021(3)	0.006(4)	0.006(3)
C48	0.121(8)	0.175(10)	0.078(6)	-0.064(6)	0.003(5)	-0.010(7)
C49	0.058(4)	0.054(4)	0.047(3)	-0.019(3)	0.001(3)	0.010(3)
C50	0.068(4)	0.043(3)	0.045(3)	-0.021(3)	-0.003(3)	0.014(3)
C51	0.057(4)	0.051(4)	0.064(4)	-0.023(3)	0.002(3)	0.016(3)
C52	0.060(4)	0.056(4)	0.052(4)	-0.019(3)	0.005(3)	0.009(3)
C53	0.067(4)	0.073(4)	0.064(4)	-0.046(4)	-0.015(3)	0.030(4)
C54	0.062(4)	0.058(4)	0.053(4)	-0.024(3)	-0.007(3)	0.010(3)
C55	0.061(4)	0.066(4)	0.073(5)	-0.024(3)	0.008(3)	0.023(3)
C56	0.302(22)	0.089(7)	0.383(26)	-0.096(11)	0.283(22)	-0.052(10)
C57	0.063(6)	0.189(12)	0.144(10)	0.019(8)	0.028(6)	0.051(7)
C58	0.116(8)	0.213(13)	0.086(7)	-0.061(8)	0.025(6)	0.009(8)
C59	0.078(5)	0.073(5)	0.088(5)	-0.056(4)	-0.015(4)	0.016(4)
C60	0.142(9)	0.100(6)	0.142(9)	-0.094(7)	0.031(7)	-0.017(6)
C61	0.114(7)	0.058(4)	0.090(6)	-0.028(4)	-0.016(5)	0.001(4)
C62	0.080(6)	0.100(6)	0.109(7)	-0.053(5)	-0.019(5)	0.001(5)
C63	0.048(3)	0.050(3)	0.043(3)	-0.022(3)	-0.003(2)	0.010(3)
C64	0.044(3)	0.056(3)	0.048(3)	-0.027(3)	-0.001(2)	0.005(3)
C65	0.048(3)	0.055(4)	0.059(4)	-0.026(3)	-0.009(3)	0.013(3)
C66	0.063(4)	0.066(4)	0.070(4)	-0.040(3)	-0.012(3)	0.022(3)
C67	0.055(4)	0.071(4)	0.060(4)	-0.038(3)	-0.014(3)	0.020(3)
C68	0.048(4)	0.061(4)	0.059(4)	-0.028(3)	-0.010(3)	0.016(3)
C69	0.045(4)	0.070(4)	0.077(5)	-0.026(3)	-0.008(3)	0.023(3)
C70	0.268(19)	0.480(31)	0.202(14)	-0.245(19)	-0.190(15)	0.314(22)
C71	0.226(16)	0.164(12)	0.483(34)	-0.216(18)	-0.237(20)	0.154(12)
C72	0.057(7)	0.364(30)	0.392(32)	0.204(26)	0.028(11)	0.062(11)
C73	0.064(4)	0.100(5)	0.074(5)	-0.055(4)	-0.019(3)	0.016(4)
C74	0.088(6)	0.145(9)	0.134(8)	-0.091(7)	-0.040(6)	0.030(6)
C75	0.128(9)	0.199(12)	0.202(12)	-0.174(11)	-0.084(9)	0.074(9)
C76	0.165(12)	0.229(15)	0.087(8)	-0.079(9)	-0.038(8)	-0.009(11)

Taula III.5: Distàncies d'enllaç (Å).

Àtoms	Distància	Àtom	Distància
S1-O1	1.386(6)	C13-C14	1.380(8)
S1-O2	1.437(6)	C14-C15	1.381(9)
S1-O3	1.577(5)	C14-C17	1.562(9)
S1-C4	1.761(7)	C15-C16	1.381(9)
S2-O8	1.318(7)	C16-C21	1.577(8)
S2-O7	1.334(9)	C17-C19	1.468(14)
S2-O9	1.614(8)	C17-C18	1.495(13)
S2-C42	1.729(8)	C17-C20	1.556(12)
O3-C8	1.438(9)	C21-C23	1.492(10)
O4-C9	1.202(8)	C21-C22	1.507(11)
O5-C9	1.355(8)	C21-C24	1.540(10)
O5-C11	1.409(7)	C25-C30	1.352(8)
O6-C30	1.372(7)	C25-C26	1.413(8)
O9-C46	1.441(11)	C26-C27	1.367(8)
O10-C47	1.186(9)	C27-C28	1.370(8)
O10-C47	1.344(8)	C27-C31	1.540(9)
O11-C49	1.415(8)	C28-C29	1.368(8)
O12-C68	1.385(7)	C29-C30	1.454(8)
C1-C6	1.348(12)	C29-C35	1.539(8)
C1-C2	1.375(12)	C31-C34	1.388(14)
C1-C7	1.497(12)	C31-C33	1.41(2)
C2-C3	1.382(12)	C31-C32	1.466(15)
C3-C4	1.403(10)	C35-C38	1.493(11)
C4-C5	1.366(10)	C35-C36	1.536(11)
C5-C6	1.403(11)	C35-C37	1.598(13)
C8-C9	1.516(9)	C39-C40	1.330(14)
C8-C10	1.525(11)	C39-C44	1.343(13)
C11-C12	1.382(8)	C39-C45	1.557(14)
C11-C16	1.409(7)	C40-C41	1.332(14)

Àtoms	Distància	Àtom	Distància
C12-C13	1.381(8)	C41-C42	1.381(13)
C12-C25	1.506(7)	C42-C43	1.367(12)
C43-C44	1.338(13)	C59-C61	1.562(13)
C46-C48	1.430(12)	C59-C60	1.575(10)
C46-C47	1.488(10)	C63-C64	1.381(8)
C49-C54	1.396(9)	C63-C68	1.411(8)
C49-C50	1.397(9)	C64-C65	1.396(8)
C50-C51	1.379(9)	C65-C66	1.388(9)
C50-C63	1.478(8)	C65-C69	1.525(8)
C51-C52	1.403(9)	C66-C67	1.395(9)
C52-C53	1.398(10)	C67-C68	1.366(8)
C52-C55	1.503(9)	C67-C73	1.530(9)
C53-C54	1.416(10)	C69-C70	1.335(13)
C54-C59	1.486(10)	C69-C72	1.42(2)
C55-C56	1.414(14)	C69-C71	1.509(13)
C55-C57	1.460(12)	C73-C76	1.46(2)
C55-C58	1.587(14)	C73-C75	1.520(12)
C59-C62	1.527(12)	C73-C74	1.520(13)

Taula III.6: Angles (°).

Àtoms	Angle	Àtoms	Angle
O1-S1-O2	119.3(4)	O4-C9-O5	125.7(6)
O1-S1-O3	109.8(3)	O4-C9-C8	121.2(6)
O2-S1-O3	104.0(4)	O5-C9-C8	113.1(6)
O1-S1-C4	110.9(4)	C12-C11-C16	121.7(5)
O2-S1-C4	108.5(3)	C12-C11-O5	117.8(5)
O3-S1-C4	103.0(3)	C16-C11-O5	120.4(5)
O8-S2-O7	121.0(7)	C13-C12-C11	119.3(5)
O8-S2-O9	112.0(5)	C13-C12-C25	120.1(5)
O7-S2-O9	104.4(6)	C11-C12-C25	120.6(5)
O8-S2-C42	98.6(5)	C14-C13-C12	120.2(6)
O7-S2-C42	114.6(6)	C13-C14-C15	119.6(6)
O9-S2-C42	105.4(4)	C13-C14-C17	121.4(6)
C8-O3-S1	116.7(5)	C15-C14-C17	118.9(6)
C9-O5-C11	113.3(5)	C14-C15-C16	122.2(5)
C46-O9-S2	117.6(6)	C15-C16-C11	116.6(5)
C47-O11-C49	115.7(5)	C15-C16-C21	121.9(5)
C6-C1-C2	117.9(8)	C11-C16-C21	121.4(5)
C6-C1-C7	122.5(9)	C19-C17-C18	113.5(13)
C2-C1-C7	119.5(8)	C19-C17-C20	105.5(9)
C3-C2-C1	122.4(7)	C18-C17-C20	108.1(9)
C2-C3-C4	116.9(7)	C19-C17-C14	109.9(7)
C5-C4-C3	122.7(7)	C18-C17-C14	109.8(6)
C5-C4-S1	118.7(6)	C20-C17-C14	110.0(6)
C3-C4-S1	118.5(6)	C23-C21-C22	110.9(7)
C4-C5-C6	116.3(7)	C23-C21-C24	105.2(7)
C1-C6-C5	123.6(8)	C22-C21-C24	112.1(6)
O3-C8-C9	111.6(6)	C23-C21-C16	109.8(6)
O3-C8-C10	109.9(8)	C22-C21-C16	112.0(5)

Àtoms	Angle	Àtoms	Angle
C9-C8-C10	109.0(6)	C24-C21-C16	106.5(5)
C30-C25-C26	120.6(5)	C43-C42-S2	126.1(7)
C30-C25-C12	121.7(5)	C41-C42-S2	118.6(7)
C26-C25-C12	117.6(5)	C44-C43-C42	122.9(9)
C27-C26-C25	120.6(5)	C39-C44-C43	119.5(8)
C26-C27-C28	117.2(5)	C48-C46-O9	122.5(8)
C26-C27-C31	121.2(5)	C48-C46-C47	117.3(8)
C28-C27-C31	121.5(5)	O9-C46-C47	117.3(7)
C29-C28-C27	126.3(5)	O10-C47-O11	123.7(7)
C28-C29-C30	114.8(5)	O10-C47-C46	121.6(7)
C28-C29-C35	123.9(5)	O11-C47-C46	114.6(7)
C30-C29-C35	121.3(5)	C54-C49-C50	125.5(6)
C25-C30-O6	122.6(5)	C54-C49-O11	119.0(6)
C25-C30-C29	120.4(5)	C50-C49-O11	115.5(5)
O6-30-C29	117.0(5)	C51-C50-C49	117.4(5)
C34-C31-C33	110.7(16)	C51-C50-C63	122.2(6)
C34-C31-C32	97.4(15)	C49-C50-C63	120.2(6)
C33-C31-C32	111.8(17)	C50-C51-C52	123.2(7)
C34-C31-C27	114.1(7)	C53-C52-C51	114.7(6)
C33-C31-C27	109.9(8)	C53-C52-C55	122.3(6)
C32-C31-C27	112.3(7)	C51-C52-C55	123.0(6)
C38-C35-C36	111.7(7)	C52-C53-C54	127.2(6)
C38-C35-C29	113.1(6)	C49-C54-C53	112.0(6)
C36-C35-C29	110.4(6)	C49-C54-C59	125.2(6)
C38-C35-C37	112.2(7)	C53-C54-C59	122.6(6)
C36-C35-C37	102.3(8)	C56-C55-C57	118.5(12)
C29-C35-C37	106.5(6)	C56-C55-C52	114.8(7)
C40-C39-C44	119.7(8)	C57-C55-C52	108.4(7)
C40-C39-C45	120.8(12)	C56-C55-C58	98.7(12)
C44-C39-C45	119.5(11)	C57-C55-C58	107.4(9)

Àtoms	Angle	Àtoms	Angle
C39-C40-C41	121.2(10)	C52-C55-C58	107.9(7)
C40-C41-C42	121.5(9)	C54-C59-C62	112.4(6)
C43-C42-C41	115.2(8)	C54-C59-C61	111.0(6)
C62-C59-C61	106.2(8)	C67-C68-O12	121.0(5)
C54-C59-C60	112.7(7)	C67-C68-C63	121.2(5)
C62-C59-C60	109.7(7)	O12-C68-C63	117.8(5)
C61-C59-C60	104.4(7)	C70-C69-C72	105.2(17)
C64-C63-C68	119.0(5)	C70-C69-C71	115.4(12)
C64-C63-C50	120.2(5)	C72-C69-C71	103.3(15)
C68-C63-C50	120.8(5)	C70-C69-C65	112.7(7)
C63-C64-C65	121.7(6)	C72-C69-C65	108.1(8)
C66-C65-C64	116.8(6)	C71-C69-C65	111.2(7)
C66-C65-C69	122.2(6)	C76-C73-C75	112.1(10)
C64-C65-C69	121.0(6)	C76-C73-C74	106.1(9)
C65-C66-C67	123.5(6)	C75-C73-C74	105.0(8)
C68-C67-C66	117.8(5)	C76-C73-C67	109.4(7)
C68-C67-C73	122.7(6)	C75-C73-C67	113.2(7)
C66-C67-C73	119.3(6)	C74-C73-C67	110.7(6)