

## Chapter 11. Appendix

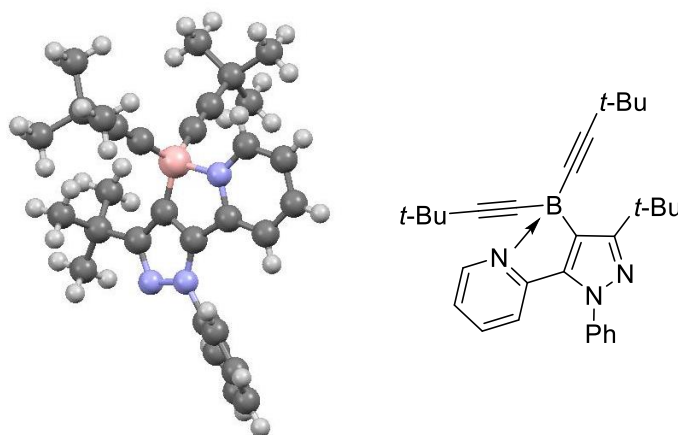
Xray crystal structure for 1-Phenyl-3-*tert*-butyl-4-(di-*tert*-butylethynyl)borane)-5-(2-pyridyl)pyrazole (162)

Table 1. Crystal data and structure refinement for OHJ332MONO\_A.

Identification code	shelx	
Empirical formula	C <sub>40</sub> H <sub>50</sub> B N <sub>3</sub>	
Formula weight	583.64	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54178 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2 <sub>1</sub> /c	
Unit cell dimensions	a = 9.1714(7) Å	α = 90°.
	b = 19.9860(13) Å	β = 90.587(5)°.
	c = 37.899(3) Å	γ = 90°.
Volume	6946.4(8) Å <sup>3</sup>	
Z	8	
Density (calculated)	1.116 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.482 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	2528	
Crystal size	0.160 x 0.140 x 0.040 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.499 to 67.300°.	
Index ranges	-10 ≤ h ≤ 10, -23 ≤ k ≤ 22, -45 ≤ l ≤ 45	
Reflections collected	63047	
Independent reflections	12325 [R(int) = 0.1351]	
Completeness to theta = 66.500°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.99 and 0.91	

Refinement method	Full-matrix least-squares on $F^2$
Data / restraints / parameters	12325 / 0 / 800
Goodness-of-fit on $F^2$	1.039
Final R indices [ $I > 2\sigma(I)$ ]	R1 = 0.1653, wR2 = 0.4228
R indices (all data)	R1 = 0.2089, wR2 = 0.4535
Extinction coefficient	n/a
Largest diff. peak and hole	0.714 and -0.475 e. $\text{\AA}^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for OHJ332MONO\_A.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
B(1A)	1988(13)	5372(5)	5784(3)	28(2)
N(1A)	-553(9)	6875(4)	5542(2)	30(2)
N(2A)	-99(10)	6579(4)	5238(2)	35(2)
N(3A)	2293(9)	5156(4)	5364(2)	28(2)
C(1A)	953(12)	5981(5)	5681(3)	31(2)
C(2A)	51(11)	6511(5)	5803(3)	29(2)
C(3A)	827(13)	6051(5)	5320(3)	33(2)
C(4A)	1609(12)	5542(5)	5132(3)	31(2)
C(5A)	1601(12)	5413(5)	4764(3)	31(2)
C(6A)	2459(13)	4919(5)	4651(3)	35(3)
C(7A)	3341(11)	4534(4)	4887(3)	26(2)
C(8A)	4354(12)	4050(5)	4789(3)	35(2)
C(9A)	5179(12)	3695(5)	5023(3)	33(2)
C(10A)	4984(12)	3798(5)	5389(3)	35(2)
C(11A)	3995(11)	4268(5)	5501(3)	31(2)
C(12A)	3220(11)	4653(4)	5258(3)	28(2)
C(13A)	-390(12)	6897(5)	4904(3)	34(2)
C(14A)	-1817(14)	7050(5)	4817(3)	40(3)
C(15A)	-2075(14)	7399(5)	4498(3)	37(3)
C(16A)	-968(15)	7563(5)	4279(3)	41(3)
C(17A)	492(13)	7396(5)	4374(3)	40(3)
C(18A)	754(11)	7059(5)	4687(3)	31(2)
C(19A)	3449(10)	5552(4)	5979(3)	25(2)
C(20A)	4511(12)	5702(5)	6138(3)	36(2)
C(21A)	5889(14)	5882(6)	6336(3)	50(3)
C(22A)	5577(13)	6096(6)	6714(3)	44(3)
C(23A)	4733(14)	6751(5)	6739(3)	43(3)
C(24A)	4399(16)	6962(6)	7120(3)	51(3)
C(25A)	3710(19)	7644(7)	7136(3)	61(4)
C(26A)	3410(20)	7864(8)	7513(3)	79(5)
C(27A)	1156(10)	4755(5)	5957(2)	26(2)
C(28A)	510(10)	4328(5)	6119(3)	28(2)
C(29A)	-256(11)	3841(5)	6328(3)	31(2)
C(30A)	-1892(12)	3889(5)	6304(3)	36(2)
C(31A)	-2656(11)	3395(5)	6549(3)	33(2)

Chapter 11. Appendix

---

C(32A)	-4289(12)	3429(5)	6538(3)	39(3)
C(33A)	-4894(16)	4085(7)	6688(4)	58(3)
C(34A)	-6482(17)	4086(8)	6740(4)	68(4)
C(35A)	-220(13)	6722(5)	6185(3)	38(2)
C(36A)	136(15)	6186(6)	6446(3)	50(3)
C(37A)	39(15)	6409(6)	6826(3)	48(3)
C(38A)	390(30)	5863(8)	7094(4)	97(7)
C(39A)	-490(30)	5268(9)	7089(5)	123(9)
C(40A)	-130(30)	4746(9)	7350(4)	114(8)
B(1B)	6741(13)	9611(5)	4242(3)	27(2)
N(1B)	4233(11)	8122(4)	4506(2)	37(2)
N(2B)	4837(10)	8412(4)	4804(2)	34(2)
N(3B)	7218(9)	9829(4)	4652(2)	26(2)
C(1B)	5690(11)	8996(5)	4347(2)	27(2)
C(2B)	4794(12)	8462(5)	4235(3)	32(2)
C(3B)	5697(11)	8937(5)	4714(3)	29(2)
C(4B)	6528(12)	9454(4)	4894(3)	29(2)
C(5B)	6681(11)	9591(5)	5253(3)	29(2)
C(6B)	7572(11)	10098(5)	5364(3)	28(2)
C(7B)	8377(11)	10455(5)	5114(3)	29(2)
C(8B)	9403(12)	10959(5)	5219(3)	32(2)
C(9B)	10140(12)	11297(5)	4964(3)	35(2)
C(10B)	9844(11)	11174(5)	4603(3)	31(2)
C(11B)	8899(14)	10700(5)	4495(3)	40(3)
C(12B)	8143(11)	10319(4)	4748(3)	29(2)
C(13B)	4643(12)	8093(4)	5142(3)	28(2)
C(14B)	3258(11)	7945(5)	5236(3)	30(2)
C(15B)	3032(13)	7598(5)	5551(3)	39(3)
C(16B)	4252(12)	7415(5)	5759(3)	32(2)
C(17B)	5631(13)	7581(5)	5658(3)	34(2)
C(18B)	5867(13)	7934(5)	5349(3)	38(3)
C(19B)	8099(11)	9373(5)	4030(3)	27(2)
C(20B)	9093(13)	9194(6)	3848(3)	39(3)
C(21B)	10248(18)	8947(7)	3608(3)	60(4)
C(22B)	9585(13)	8731(7)	3242(3)	50(3)
C(23B)	8511(18)	8157(7)	3272(3)	62(4)
C(24B)	7982(18)	7874(7)	2912(4)	67(4)
C(25B)	9060(20)	7430(7)	2748(4)	76(5)
C(26B)	8480(20)	7080(7)	2419(4)	72(5)
C(27B)	4434(12)	8262(5)	3862(3)	33(2)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(28B)	4340(12)	8855(5)	3606(3)	35(2)
C(29B)	3954(15)	8637(5)	3230(3)	45(3)
C(30B)	3673(16)	9242(6)	2983(3)	54(3)
C(31B)	5020(20)	9653(8)	2922(3)	77(5)
C(32B)	4730(30)	10241(8)	2671(4)	114(9)
C(33B)	5910(13)	10208(5)	4061(3)	34(2)
C(34B)	5297(12)	10640(5)	3894(3)	31(2)
C(35B)	4500(16)	11123(5)	3684(3)	47(3)
C(36B)	2836(13)	11060(6)	3721(3)	40(3)
C(37B)	1955(15)	11540(6)	3486(3)	49(3)
C(38B)	395(15)	11465(6)	3486(4)	55(3)
C(39B)	-146(16)	10795(7)	3340(4)	61(4)
C(40B)	-1724(14)	10768(8)	3268(4)	62(4)

---

Table 3. Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for OHJ332MONO\_A.

---

B(1A)-C(19A)	1.567(15)
B(1A)-C(1A)	1.589(16)
B(1A)-C(27A)	1.595(13)
B(1A)-N(3A)	1.675(14)
N(1A)-C(2A)	1.345(13)
N(1A)-N(2A)	1.363(11)
N(2A)-C(3A)	1.387(14)
N(2A)-C(13A)	1.440(14)
N(3A)-C(4A)	1.323(14)
N(3A)-C(12A)	1.378(13)
C(1A)-C(3A)	1.380(14)
C(1A)-C(2A)	1.423(15)
C(2A)-C(35A)	1.530(14)
C(3A)-C(4A)	1.439(15)
C(4A)-C(5A)	1.417(14)
C(5A)-C(6A)	1.337(15)
C(5A)-H(5A)	0.9500
C(6A)-C(7A)	1.426(15)
C(6A)-H(6A)	0.9500
C(7A)-C(8A)	1.394(14)
C(7A)-C(12A)	1.433(14)
C(8A)-C(9A)	1.360(15)
C(8A)-H(8A)	0.9500
C(9A)-C(10A)	1.415(15)
C(9A)-H(9A)	0.9500
C(10A)-C(11A)	1.376(15)
C(10A)-H(10A)	0.9500
C(11A)-C(12A)	1.388(15)
C(11A)-H(11A)	0.9500
C(13A)-C(18A)	1.377(14)
C(13A)-C(14A)	1.381(17)
C(14A)-C(15A)	1.414(15)
C(14A)-H(14A)	0.9500
C(15A)-C(16A)	1.357(16)
C(15A)-H(15A)	0.9500
C(16A)-C(17A)	1.422(18)
C(16A)-H(16A)	0.9500
C(17A)-C(18A)	1.383(15)

---

C(17A)-H(17A)	0.9500
C(18A)-H(18A)	0.9500
C(19A)-C(20A)	1.178(14)
C(20A)-C(21A)	1.507(16)
C(21A)-C(22A)	1.526(17)
C(21A)-H(21A)	0.9900
C(21A)-H(21B)	0.9900
C(22A)-C(23A)	1.523(16)
C(22A)-H(22A)	0.9900
C(22A)-H(22B)	0.9900
C(23A)-C(24A)	1.537(15)
C(23A)-H(23A)	0.9900
C(23A)-H(23B)	0.9900
C(24A)-C(25A)	1.504(18)
C(24A)-H(24A)	0.9900
C(24A)-H(24B)	0.9900
C(25A)-C(26A)	1.524(17)
C(25A)-H(25A)	0.9900
C(25A)-H(25B)	0.9900
C(26A)-H(26A)	0.9800
C(26A)-H(26B)	0.9800
C(26A)-H(26C)	0.9800
C(27A)-C(28A)	1.209(13)
C(28A)-C(29A)	1.443(13)
C(29A)-C(30A)	1.505(15)
C(29A)-H(29A)	0.9900
C(29A)-H(29B)	0.9900
C(30A)-C(31A)	1.527(13)
C(30A)-H(30A)	0.9900
C(30A)-H(30B)	0.9900
C(31A)-C(32A)	1.499(15)
C(31A)-H(31A)	0.9900
C(31A)-H(31B)	0.9900
C(32A)-C(33A)	1.536(17)
C(32A)-H(32A)	0.9900
C(32A)-H(32B)	0.9900
C(33A)-C(34A)	1.47(2)
C(33A)-H(33A)	0.9900
C(33A)-H(33B)	0.9900
C(34A)-H(34A)	0.9800

---

Chapter 11. Appendix

---

C(34A)-H(34B)	0.9800
C(34A)-H(34C)	0.9800
C(35A)-C(36A)	1.492(16)
C(35A)-H(35A)	0.9900
C(35A)-H(35B)	0.9900
C(36A)-C(37A)	1.511(15)
C(36A)-H(36A)	0.9900
C(36A)-H(36B)	0.9900
C(37A)-C(38A)	1.52(2)
C(37A)-H(37A)	0.9900
C(37A)-H(37B)	0.9900
C(38A)-C(39A)	1.44(3)
C(38A)-H(38A)	0.9900
C(38A)-H(38B)	0.9900
C(39A)-C(40A)	1.47(2)
C(39A)-H(39A)	0.9900
C(39A)-H(39B)	0.9900
C(40A)-H(40A)	0.9800
C(40A)-H(40B)	0.9800
C(40A)-H(40C)	0.9800
B(1B)-C(19B)	1.565(15)
B(1B)-C(33B)	1.571(16)
B(1B)-C(1B)	1.614(14)
B(1B)-N(3B)	1.667(13)
N(1B)-C(2B)	1.338(13)
N(1B)-N(2B)	1.380(12)
N(2B)-C(3B)	1.358(12)
N(2B)-C(13B)	1.444(12)
N(3B)-C(4B)	1.347(11)
N(3B)-C(12B)	1.344(12)
C(1B)-C(3B)	1.395(13)
C(1B)-C(2B)	1.412(13)
C(2B)-C(27B)	1.503(13)
C(3B)-C(4B)	1.450(13)
C(4B)-C(5B)	1.394(14)
C(5B)-C(6B)	1.365(13)
C(5B)-H(5B)	0.9500
C(6B)-C(7B)	1.402(14)
C(6B)-H(6B)	0.9500
C(7B)-C(12B)	1.427(14)

---



C(7B)-C(8B)	1.433(14)
C(8B)-C(9B)	1.363(14)
C(8B)-H(8B)	0.9500
C(9B)-C(10B)	1.411(15)
C(9B)-H(9B)	0.9500
C(10B)-C(11B)	1.346(14)
C(10B)-H(10B)	0.9500
C(11B)-C(12B)	1.413(14)
C(11B)-H(11B)	0.9500
C(13B)-C(14B)	1.357(14)
C(13B)-C(18B)	1.400(16)
C(14B)-C(15B)	1.395(15)
C(14B)-H(14B)	0.9500
C(15B)-C(16B)	1.410(16)
C(15B)-H(15B)	0.9500
C(16B)-C(17B)	1.366(15)
C(16B)-H(16B)	0.9500
C(17B)-C(18B)	1.385(14)
C(17B)-H(17B)	0.9500
C(18B)-H(18B)	0.9500
C(19B)-C(20B)	1.202(15)
C(20B)-C(21B)	1.488(18)
C(21B)-C(22B)	1.569(17)
C(21B)-H(21C)	0.9900
C(21B)-H(21D)	0.9900
C(22B)-C(23B)	1.52(2)
C(22B)-H(22C)	0.9900
C(22B)-H(22D)	0.9900
C(23B)-C(24B)	1.551(18)
C(23B)-H(23C)	0.9900
C(23B)-H(23D)	0.9900
C(24B)-C(25B)	1.47(2)
C(24B)-H(24C)	0.9900
C(24B)-H(24D)	0.9900
C(25B)-C(26B)	1.52(2)
C(25B)-H(25C)	0.9900
C(25B)-H(25D)	0.9900
C(26B)-H(26D)	0.9800
C(26B)-H(26E)	0.9800
C(26B)-H(26F)	0.9800

---

C(27B)-C(28B)	1.534(14)
C(27B)-H(27A)	0.9900
C(27B)-H(27B)	0.9900
C(28B)-C(29B)	1.525(13)
C(28B)-H(28A)	0.9900
C(28B)-H(28B)	0.9900
C(29B)-C(30B)	1.550(15)
C(29B)-H(29C)	0.9900
C(29B)-H(29D)	0.9900
C(30B)-C(31B)	1.50(2)
C(30B)-H(30C)	0.9900
C(30B)-H(30D)	0.9900
C(31B)-C(32B)	1.534(19)
C(31B)-H(31C)	0.9900
C(31B)-H(31D)	0.9900
C(32B)-H(32C)	0.9800
C(32B)-H(32D)	0.9800
C(32B)-H(32E)	0.9800
C(33B)-C(34B)	1.205(15)
C(34B)-C(35B)	1.446(15)
C(35B)-C(36B)	1.540(18)
C(35B)-H(35C)	0.9900
C(35B)-H(35D)	0.9900
C(36B)-C(37B)	1.534(16)
C(36B)-H(36C)	0.9900
C(36B)-H(36D)	0.9900
C(37B)-C(38B)	1.438(19)
C(37B)-H(37C)	0.9900
C(37B)-H(37D)	0.9900
C(38B)-C(39B)	1.530(18)
C(38B)-H(38B)	0.9900
C(38B)-H(38C)	0.9900
C(39B)-C(40B)	1.471(19)
C(39B)-H(39B)	0.9900
C(39B)-H(39C)	0.9900
C(40B)-H(40D)	0.9800
C(40B)-H(40E)	0.9800
C(40B)-H(40F)	0.9800
C(19A)-B(1A)-C(1A)	116.5(8)

---

C(19A)-B(1A)-C(27A)	113.1(9)
C(1A)-B(1A)-C(27A)	113.9(9)
C(19A)-B(1A)-N(3A)	111.0(8)
C(1A)-B(1A)-N(3A)	94.1(8)
C(27A)-B(1A)-N(3A)	106.1(7)
C(2A)-N(1A)-N(2A)	105.0(8)
N(1A)-N(2A)-C(3A)	109.5(8)
N(1A)-N(2A)-C(13A)	119.7(9)
C(3A)-N(2A)-C(13A)	129.8(9)
C(4A)-N(3A)-C(12A)	121.5(9)
C(4A)-N(3A)-B(1A)	113.4(8)
C(12A)-N(3A)-B(1A)	125.0(8)
C(3A)-C(1A)-C(2A)	101.7(9)
C(3A)-C(1A)-B(1A)	111.3(9)
C(2A)-C(1A)-B(1A)	147.0(9)
N(1A)-C(2A)-C(1A)	113.6(9)
N(1A)-C(2A)-C(35A)	118.5(9)
C(1A)-C(2A)-C(35A)	127.8(9)
C(1A)-C(3A)-N(2A)	110.1(9)
C(1A)-C(3A)-C(4A)	112.5(10)
N(2A)-C(3A)-C(4A)	137.2(9)
N(3A)-C(4A)-C(5A)	123.0(10)
N(3A)-C(4A)-C(3A)	108.6(9)
C(5A)-C(4A)-C(3A)	128.2(10)
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.0(10)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.5
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.5
C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.8(9)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1
C(8A)-C(7A)-C(6A)	125.5(10)
C(8A)-C(7A)-C(12A)	115.8(9)
C(6A)-C(7A)-C(12A)	118.6(9)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	123.7(10)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	118.1
C(7A)-C(8A)-H(8A)	118.1
C(8A)-C(9A)-C(10A)	119.2(10)
C(8A)-C(9A)-H(9A)	120.4
C(10A)-C(9A)-H(9A)	120.4
C(11A)-C(10A)-C(9A)	119.5(10)

---

C(11A)-C(10A)-H(10A)	120.3
C(9A)-C(10A)-H(10A)	120.3
C(10A)-C(11A)-C(12A)	120.6(10)
C(10A)-C(11A)-H(11A)	119.7
C(12A)-C(11A)-H(11A)	119.7
N(3A)-C(12A)-C(11A)	121.7(9)
N(3A)-C(12A)-C(7A)	117.4(9)
C(11A)-C(12A)-C(7A)	120.9(9)
C(18A)-C(13A)-C(14A)	122.1(10)
C(18A)-C(13A)-N(2A)	119.6(10)
C(14A)-C(13A)-N(2A)	118.3(10)
C(13A)-C(14A)-C(15A)	117.6(11)
C(13A)-C(14A)-H(14A)	121.2
C(15A)-C(14A)-H(14A)	121.2
C(16A)-C(15A)-C(14A)	121.4(12)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	119.3
C(14A)-C(15A)-H(15A)	119.3
C(15A)-C(16A)-C(17A)	119.8(11)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	120.1
C(17A)-C(16A)-H(16A)	120.1
C(18A)-C(17A)-C(16A)	119.1(10)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.5
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.5
C(13A)-C(18A)-C(17A)	120.0(11)
C(13A)-C(18A)-H(18A)	120.0
C(17A)-C(18A)-H(18A)	120.0
C(20A)-C(19A)-B(1A)	176.9(11)
C(19A)-C(20A)-C(21A)	178.6(12)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	111.8(10)
C(20A)-C(21A)-H(21A)	109.3
C(22A)-C(21A)-H(21A)	109.3
C(20A)-C(21A)-H(21B)	109.3
C(22A)-C(21A)-H(21B)	109.3
H(21A)-C(21A)-H(21B)	107.9
C(23A)-C(22A)-C(21A)	113.6(10)
C(23A)-C(22A)-H(22A)	108.9
C(21A)-C(22A)-H(22A)	108.9
C(23A)-C(22A)-H(22B)	108.9
C(21A)-C(22A)-H(22B)	108.8
H(22A)-C(22A)-H(22B)	107.7

---

Chapter 11. Appendix

---

C(22A)-C(23A)-C(24A)	113.7(10)
C(22A)-C(23A)-H(23A)	108.8
C(24A)-C(23A)-H(23A)	108.8
C(22A)-C(23A)-H(23B)	108.8
C(24A)-C(23A)-H(23B)	108.8
H(23A)-C(23A)-H(23B)	107.7
C(25A)-C(24A)-C(23A)	112.0(10)
C(25A)-C(24A)-H(24A)	109.2
C(23A)-C(24A)-H(24A)	109.2
C(25A)-C(24A)-H(24B)	109.2
C(23A)-C(24A)-H(24B)	109.2
H(24A)-C(24A)-H(24B)	107.9
C(24A)-C(25A)-C(26A)	112.3(11)
C(24A)-C(25A)-H(25A)	109.1
C(26A)-C(25A)-H(25A)	109.1
C(24A)-C(25A)-H(25B)	109.1
C(26A)-C(25A)-H(25B)	109.1
H(25A)-C(25A)-H(25B)	107.9
C(25A)-C(26A)-H(26A)	109.5
C(25A)-C(26A)-H(26B)	109.5
H(26A)-C(26A)-H(26B)	109.5
C(25A)-C(26A)-H(26C)	109.5
H(26A)-C(26A)-H(26C)	109.5
H(26B)-C(26A)-H(26C)	109.5
C(28A)-C(27A)-B(1A)	173.4(10)
C(27A)-C(28A)-C(29A)	177.0(11)
C(28A)-C(29A)-C(30A)	114.5(9)
C(28A)-C(29A)-H(29A)	108.6
C(30A)-C(29A)-H(29A)	108.6
C(28A)-C(29A)-H(29B)	108.6
C(30A)-C(29A)-H(29B)	108.6
H(29A)-C(29A)-H(29B)	107.6
C(29A)-C(30A)-C(31A)	112.8(9)
C(29A)-C(30A)-H(30A)	109.0
C(31A)-C(30A)-H(30A)	109.0
C(29A)-C(30A)-H(30B)	109.0
C(31A)-C(30A)-H(30B)	109.0
H(30A)-C(30A)-H(30B)	107.8
C(32A)-C(31A)-C(30A)	114.9(9)
C(32A)-C(31A)-H(31A)	108.5

---

Chapter 11. Appendix

---

C(30A)-C(31A)-H(31A)	108.5
C(32A)-C(31A)-H(31B)	108.6
C(30A)-C(31A)-H(31B)	108.5
H(31A)-C(31A)-H(31B)	107.5
C(31A)-C(32A)-C(33A)	113.2(10)
C(31A)-C(32A)-H(32A)	108.9
C(33A)-C(32A)-H(32A)	108.9
C(31A)-C(32A)-H(32B)	109.0
C(33A)-C(32A)-H(32B)	108.9
H(32A)-C(32A)-H(32B)	107.8
C(34A)-C(33A)-C(32A)	114.3(12)
C(34A)-C(33A)-H(33A)	108.7
C(32A)-C(33A)-H(33A)	108.7
C(34A)-C(33A)-H(33B)	108.7
C(32A)-C(33A)-H(33B)	108.7
H(33A)-C(33A)-H(33B)	107.6
C(33A)-C(34A)-H(34A)	109.5
C(33A)-C(34A)-H(34B)	109.5
H(34A)-C(34A)-H(34B)	109.5
C(33A)-C(34A)-H(34C)	109.5
H(34A)-C(34A)-H(34C)	109.5
H(34B)-C(34A)-H(34C)	109.5
C(36A)-C(35A)-C(2A)	113.1(9)
C(36A)-C(35A)-H(35A)	109.0
C(2A)-C(35A)-H(35A)	109.0
C(36A)-C(35A)-H(35B)	109.0
C(2A)-C(35A)-H(35B)	109.0
H(35A)-C(35A)-H(35B)	107.8
C(35A)-C(36A)-C(37A)	114.0(10)
C(35A)-C(36A)-H(36A)	108.8
C(37A)-C(36A)-H(36A)	108.8
C(35A)-C(36A)-H(36B)	108.8
C(37A)-C(36A)-H(36B)	108.8
H(36A)-C(36A)-H(36B)	107.7
C(36A)-C(37A)-C(38A)	114.2(10)
C(36A)-C(37A)-H(37A)	108.7
C(38A)-C(37A)-H(37A)	108.7
C(36A)-C(37A)-H(37B)	108.7
C(38A)-C(37A)-H(37B)	108.7
H(37A)-C(37A)-H(37B)	107.6

---

C(39A)-C(38A)-C(37A)	118.0(19)
C(39A)-C(38A)-H(38A)	107.8
C(37A)-C(38A)-H(38A)	107.8
C(39A)-C(38A)-H(38B)	107.8
C(37A)-C(38A)-H(38B)	107.8
H(38A)-C(38A)-H(38B)	107.1
C(38A)-C(39A)-C(40A)	117(2)
C(38A)-C(39A)-H(39A)	108.0
C(40A)-C(39A)-H(39A)	108.0
C(38A)-C(39A)-H(39B)	108.0
C(40A)-C(39A)-H(39B)	108.0
H(39A)-C(39A)-H(39B)	107.2
C(39A)-C(40A)-H(40A)	109.5
C(39A)-C(40A)-H(40B)	109.5
H(40A)-C(40A)-H(40B)	109.5
C(39A)-C(40A)-H(40C)	109.5
H(40A)-C(40A)-H(40C)	109.5
H(40B)-C(40A)-H(40C)	109.5
C(19B)-B(1B)-C(33B)	113.0(8)
C(19B)-B(1B)-C(1B)	112.1(8)
C(33B)-B(1B)-C(1B)	113.5(9)
C(19B)-B(1B)-N(3B)	110.9(8)
C(33B)-B(1B)-N(3B)	109.3(8)
C(1B)-B(1B)-N(3B)	96.9(7)
C(2B)-N(1B)-N(2B)	105.1(8)
C(3B)-N(2B)-N(1B)	110.5(8)
C(3B)-N(2B)-C(13B)	129.7(9)
N(1B)-N(2B)-C(13B)	119.3(7)
C(4B)-N(3B)-C(12B)	121.4(8)
C(4B)-N(3B)-B(1B)	111.6(8)
C(12B)-N(3B)-B(1B)	127.0(8)
C(3B)-C(1B)-C(2B)	103.5(8)
C(3B)-C(1B)-B(1B)	108.3(8)
C(2B)-C(1B)-B(1B)	148.1(9)
N(1B)-C(2B)-C(1B)	112.3(8)
N(1B)-C(2B)-C(27B)	120.3(8)
C(1B)-C(2B)-C(27B)	127.4(9)
N(2B)-C(3B)-C(1B)	108.5(8)
N(2B)-C(3B)-C(4B)	137.6(9)
C(1B)-C(3B)-C(4B)	113.8(8)

---

N(3B)-C(4B)-C(5B)	120.8(9)
N(3B)-C(4B)-C(3B)	109.0(8)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	130.2(8)
C(6B)-C(5B)-C(4B)	119.9(9)
C(6B)-C(5B)-H(5B)	120.0
C(4B)-C(5B)-H(5B)	120.0
C(5B)-C(6B)-C(7B)	119.2(9)
C(5B)-C(6B)-H(6B)	120.4
C(7B)-C(6B)-H(6B)	120.4
C(6B)-C(7B)-C(12B)	119.0(9)
C(6B)-C(7B)-C(8B)	121.3(9)
C(12B)-C(7B)-C(8B)	119.7(9)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	118.7(9)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	120.6
C(7B)-C(8B)-H(8B)	120.6
C(8B)-C(9B)-C(10B)	120.5(9)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	119.8
C(10B)-C(9B)-H(9B)	119.7
C(11B)-C(10B)-C(9B)	122.4(9)
C(11B)-C(10B)-H(10B)	118.8
C(9B)-C(10B)-H(10B)	118.8
C(10B)-C(11B)-C(12B)	119.3(10)
C(10B)-C(11B)-H(11B)	120.3
C(12B)-C(11B)-H(11B)	120.3
N(3B)-C(12B)-C(11B)	121.4(9)
N(3B)-C(12B)-C(7B)	119.4(9)
C(11B)-C(12B)-C(7B)	119.2(9)
C(14B)-C(13B)-C(18B)	123.3(9)
C(14B)-C(13B)-N(2B)	117.1(10)
C(18B)-C(13B)-N(2B)	119.6(9)
C(13B)-C(14B)-C(15B)	118.8(10)
C(13B)-C(14B)-H(14B)	120.6
C(15B)-C(14B)-H(14B)	120.6
C(14B)-C(15B)-C(16B)	118.8(10)
C(14B)-C(15B)-H(15B)	120.6
C(16B)-C(15B)-H(15B)	120.6
C(17B)-C(16B)-C(15B)	120.8(9)
C(17B)-C(16B)-H(16B)	119.6
C(15B)-C(16B)-H(16B)	119.6
C(16B)-C(17B)-C(18B)	120.8(11)

---



Chapter 11. Appendix

---

C(16B)-C(17B)-H(17B)	119.6
C(18B)-C(17B)-H(17B)	119.6
C(17B)-C(18B)-C(13B)	117.3(10)
C(17B)-C(18B)-H(18B)	121.3
C(13B)-C(18B)-H(18B)	121.3
C(20B)-C(19B)-B(1B)	176.0(11)
C(19B)-C(20B)-C(21B)	176.0(12)
C(20B)-C(21B)-C(22B)	111.1(12)
C(20B)-C(21B)-H(21C)	109.4
C(22B)-C(21B)-H(21C)	109.4
C(20B)-C(21B)-H(21D)	109.4
C(22B)-C(21B)-H(21D)	109.4
H(21C)-C(21B)-H(21D)	108.0
C(23B)-C(22B)-C(21B)	112.8(11)
C(23B)-C(22B)-H(22C)	109.0
C(21B)-C(22B)-H(22C)	109.0
C(23B)-C(22B)-H(22D)	109.0
C(21B)-C(22B)-H(22D)	109.0
H(22C)-C(22B)-H(22D)	107.8
C(22B)-C(23B)-C(24B)	114.1(11)
C(22B)-C(23B)-H(23C)	108.7
C(24B)-C(23B)-H(23C)	108.7
C(22B)-C(23B)-H(23D)	108.7
C(24B)-C(23B)-H(23D)	108.7
H(23C)-C(23B)-H(23D)	107.6
C(25B)-C(24B)-C(23B)	112.8(14)
C(25B)-C(24B)-H(24C)	109.0
C(23B)-C(24B)-H(24C)	109.0
C(25B)-C(24B)-H(24D)	109.0
C(23B)-C(24B)-H(24D)	109.0
H(24C)-C(24B)-H(24D)	107.8
C(24B)-C(25B)-C(26B)	113.0(16)
C(24B)-C(25B)-H(25C)	109.0
C(26B)-C(25B)-H(25C)	109.0
C(24B)-C(25B)-H(25D)	109.0
C(26B)-C(25B)-H(25D)	109.0
H(25C)-C(25B)-H(25D)	107.8
C(25B)-C(26B)-H(26D)	109.5
C(25B)-C(26B)-H(26E)	109.5
H(26D)-C(26B)-H(26E)	109.5

---

Chapter 11. Appendix

---

C(25B)-C(26B)-H(26F)	109.5
H(26D)-C(26B)-H(26F)	109.5
H(26E)-C(26B)-H(26F)	109.5
C(2B)-C(27B)-C(28B)	113.6(8)
C(2B)-C(27B)-H(27A)	108.8
C(28B)-C(27B)-H(27A)	108.8
C(2B)-C(27B)-H(27B)	108.8
C(28B)-C(27B)-H(27B)	108.9
H(27A)-C(27B)-H(27B)	107.7
C(29B)-C(28B)-C(27B)	112.3(8)
C(29B)-C(28B)-H(28A)	109.1
C(27B)-C(28B)-H(28A)	109.1
C(29B)-C(28B)-H(28B)	109.1
C(27B)-C(28B)-H(28B)	109.1
H(28A)-C(28B)-H(28B)	107.9
C(28B)-C(29B)-C(30B)	112.1(9)
C(28B)-C(29B)-H(29C)	109.2
C(30B)-C(29B)-H(29C)	109.2
C(28B)-C(29B)-H(29D)	109.2
C(30B)-C(29B)-H(29D)	109.2
H(29C)-C(29B)-H(29D)	107.9
C(31B)-C(30B)-C(29B)	112.8(12)
C(31B)-C(30B)-H(30C)	109.0
C(29B)-C(30B)-H(30C)	109.0
C(31B)-C(30B)-H(30D)	109.0
C(29B)-C(30B)-H(30D)	109.0
H(30C)-C(30B)-H(30D)	107.8
C(30B)-C(31B)-C(32B)	112.0(16)
C(30B)-C(31B)-H(31C)	109.2
C(32B)-C(31B)-H(31C)	109.2
C(30B)-C(31B)-H(31D)	109.2
C(32B)-C(31B)-H(31D)	109.2
H(31C)-C(31B)-H(31D)	107.9
C(31B)-C(32B)-H(32C)	109.5
C(31B)-C(32B)-H(32D)	109.5
H(32C)-C(32B)-H(32D)	109.5
C(31B)-C(32B)-H(32E)	109.5
H(32C)-C(32B)-H(32E)	109.5
H(32D)-C(32B)-H(32E)	109.5
C(34B)-C(33B)-B(1B)	174.3(10)

---

C(33B)-C(34B)-C(35B)	176.1(11)
C(34B)-C(35B)-C(36B)	113.0(10)
C(34B)-C(35B)-H(35C)	109.0
C(36B)-C(35B)-H(35C)	109.0
C(34B)-C(35B)-H(35D)	109.0
C(36B)-C(35B)-H(35D)	109.0
H(35C)-C(35B)-H(35D)	107.8
C(37B)-C(36B)-C(35B)	114.3(10)
C(37B)-C(36B)-H(36C)	108.7
C(35B)-C(36B)-H(36C)	108.7
C(37B)-C(36B)-H(36D)	108.7
C(35B)-C(36B)-H(36D)	108.7
H(36C)-C(36B)-H(36D)	107.6
C(38B)-C(37B)-C(36B)	116.9(11)
C(38B)-C(37B)-H(37C)	108.1
C(36B)-C(37B)-H(37C)	108.1
C(38B)-C(37B)-H(37D)	108.1
C(36B)-C(37B)-H(37D)	108.1
H(37C)-C(37B)-H(37D)	107.3
C(37B)-C(38B)-C(39B)	114.2(12)
C(37B)-C(38B)-H(38B)	108.7
C(39B)-C(38B)-H(38B)	108.7
C(37B)-C(38B)-H(38C)	108.7
C(39B)-C(38B)-H(38C)	108.7
H(38B)-C(38B)-H(38C)	107.6
C(40B)-C(39B)-C(38B)	114.5(12)
C(40B)-C(39B)-H(39B)	108.6
C(38B)-C(39B)-H(39B)	108.6
C(40B)-C(39B)-H(39C)	108.6
C(38B)-C(39B)-H(39C)	108.6
H(39B)-C(39B)-H(39C)	107.6
C(39B)-C(40B)-H(40D)	109.5
C(39B)-C(40B)-H(40E)	109.5
H(40D)-C(40B)-H(40E)	109.5
C(39B)-C(40B)-H(40F)	109.5
H(40D)-C(40B)-H(40F)	109.5
H(40E)-C(40B)-H(40F)	109.5

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

---

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for OHJ332MONO\_A. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\sigma^2 [ h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
B(1A)	34(6)	19(5)	32(6)	3(4)	3(5)	-6(5)
N(1A)	26(4)	26(4)	37(5)	-3(4)	3(4)	-13(3)
N(2A)	48(5)	26(4)	32(5)	2(4)	10(4)	-18(4)
N(3A)	36(5)	22(4)	27(4)	4(3)	-2(4)	-18(4)
C(1A)	39(6)	26(5)	28(5)	3(4)	-9(4)	-20(4)
C(2A)	34(5)	23(5)	31(5)	6(4)	-4(4)	-16(4)
C(3A)	57(7)	15(4)	27(5)	4(4)	-7(5)	-17(5)
C(4A)	40(6)	22(5)	32(5)	2(4)	9(4)	-18(4)
C(5A)	43(6)	19(5)	31(5)	1(4)	-4(4)	-7(4)
C(6A)	58(7)	25(5)	22(5)	-3(4)	1(5)	-28(5)
C(7A)	30(5)	11(4)	36(5)	2(4)	10(4)	-14(4)
C(8A)	36(6)	22(5)	46(6)	-5(4)	2(5)	-16(4)
C(9A)	39(6)	16(5)	44(6)	4(4)	9(5)	-8(4)
C(10A)	41(6)	17(5)	46(6)	-2(4)	4(5)	-19(4)
C(11A)	33(5)	24(5)	37(6)	3(4)	1(4)	-24(4)
C(12A)	30(5)	17(4)	36(5)	-5(4)	7(4)	-10(4)
C(13A)	43(6)	19(5)	40(6)	-7(4)	2(5)	-15(4)
C(14A)	66(8)	20(5)	33(6)	-4(4)	5(5)	-15(5)
C(15A)	56(7)	16(5)	40(6)	-1(4)	-8(5)	-11(5)
C(16A)	73(8)	25(5)	26(5)	-6(4)	4(5)	-3(5)
C(17A)	45(7)	29(5)	45(6)	-14(5)	6(5)	-23(5)
C(18A)	32(5)	28(5)	33(5)	-3(4)	5(4)	-22(4)
C(19A)	19(4)	14(4)	42(6)	3(4)	-4(4)	-11(4)
C(20A)	35(6)	22(5)	51(7)	2(4)	9(5)	-12(4)
C(21A)	47(7)	34(6)	68(8)	-1(6)	-18(6)	-3(5)
C(22A)	44(7)	44(6)	44(6)	1(5)	-11(5)	-12(5)
C(23A)	55(7)	35(6)	40(6)	1(5)	4(5)	-14(5)
C(24A)	75(9)	42(6)	36(6)	3(5)	7(6)	-10(6)
C(25A)	97(11)	53(8)	33(6)	-3(6)	-6(7)	-5(8)
C(26A)	141(17)	58(9)	38(8)	-6(6)	1(9)	1(10)
C(27A)	21(5)	28(5)	29(5)	1(4)	2(4)	-6(4)
C(28A)	27(5)	21(5)	37(6)	4(4)	-1(4)	-4(4)
C(29A)	39(6)	24(5)	29(5)	-1(4)	2(4)	-22(4)
C(30A)	44(6)	29(5)	36(6)	4(4)	2(5)	-13(5)
C(31A)	37(6)	27(5)	33(5)	3(4)	5(4)	-4(4)

Chapter 11. Appendix

---

C(32A)	37(6)	41(6)	40(6)	-4(5)	8(5)	-27(5)
C(33A)	65(9)	52(8)	57(8)	4(6)	13(7)	4(7)
C(34A)	66(9)	74(10)	65(9)	1(8)	2(8)	7(8)
C(35A)	45(6)	30(5)	38(6)	-5(4)	3(5)	-1(5)
C(36A)	62(8)	47(7)	40(7)	-6(5)	1(6)	12(6)
C(37A)	59(8)	43(6)	41(6)	-7(5)	12(6)	5(6)
C(38A)	180(20)	57(9)	58(10)	-2(7)	44(12)	-3(11)
C(39A)	220(30)	76(12)	70(12)	17(10)	16(15)	-11(16)
C(40A)	210(30)	83(12)	51(9)	19(9)	19(13)	-14(16)
B(1B)	37(6)	27(5)	17(5)	-2(4)	5(4)	-6(5)
N(1B)	58(6)	24(4)	27(4)	-2(3)	1(4)	-15(4)
N(2B)	52(6)	23(4)	26(4)	3(3)	6(4)	-20(4)
N(3B)	35(4)	22(4)	22(4)	-1(3)	5(3)	-14(3)
C(1B)	39(6)	19(4)	24(5)	0(4)	5(4)	-15(4)
C(2B)	42(6)	24(5)	28(5)	0(4)	-8(4)	-18(4)
C(3B)	28(5)	30(5)	30(5)	-2(4)	14(4)	-16(4)
C(4B)	42(6)	14(4)	30(5)	-2(4)	14(4)	-14(4)
C(5B)	34(5)	25(5)	28(5)	-1(4)	9(4)	-8(4)
C(6B)	32(5)	30(5)	22(5)	-1(4)	-11(4)	-6(4)
C(7B)	37(6)	19(4)	29(5)	-4(4)	5(4)	0(4)
C(8B)	41(6)	25(5)	31(5)	-5(4)	8(5)	-11(4)
C(9B)	37(6)	22(5)	47(6)	-7(4)	-2(5)	-15(4)
C(10B)	29(5)	30(5)	34(5)	4(4)	6(4)	-14(4)
C(11B)	71(8)	22(5)	28(5)	2(4)	2(5)	-16(5)
C(12B)	38(6)	14(4)	37(6)	-1(4)	6(5)	-3(4)
C(13B)	46(6)	11(4)	29(5)	-9(4)	5(4)	-11(4)
C(14B)	32(5)	22(5)	36(6)	0(4)	9(4)	-7(4)
C(15B)	44(6)	30(5)	44(6)	-2(5)	26(5)	-8(5)
C(16B)	47(6)	22(5)	27(5)	-1(4)	1(5)	-5(5)
C(17B)	52(7)	20(5)	29(5)	0(4)	1(5)	-6(5)
C(18B)	55(7)	26(5)	32(6)	-3(4)	6(5)	-24(5)
C(19B)	31(5)	23(5)	27(5)	2(4)	-2(4)	-21(4)
C(20B)	47(7)	41(6)	30(6)	3(5)	-7(5)	-21(5)
C(21B)	102(12)	53(7)	26(6)	-5(5)	-2(7)	-3(8)
C(22B)	43(7)	69(8)	38(6)	1(6)	10(5)	29(6)
C(23B)	96(11)	54(8)	36(7)	-10(6)	7(7)	15(8)
C(24B)	90(11)	63(9)	47(8)	-15(6)	-8(7)	-3(8)
C(25B)	116(14)	50(8)	63(9)	-16(7)	14(10)	10(9)
C(26B)	125(15)	52(8)	40(7)	-4(6)	-3(8)	-14(9)
C(27B)	35(6)	34(5)	29(5)	-10(4)	10(4)	-7(4)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(28B)	44(6)	36(5)	25(5)	-4(4)	-1(4)	-9(5)
C(29B)	77(9)	33(6)	26(5)	-2(4)	-25(6)	-1(6)
C(30B)	83(10)	48(7)	33(6)	-2(5)	0(6)	-3(7)
C(31B)	127(15)	73(10)	31(7)	5(7)	-8(8)	-20(10)
C(32B)	240(30)	55(9)	52(9)	30(8)	-25(13)	-30(14)
C(33B)	52(7)	25(5)	26(5)	-2(4)	11(5)	-16(5)
C(34B)	41(6)	25(5)	27(5)	-3(4)	9(4)	-11(4)
C(35B)	93(10)	26(5)	20(5)	2(4)	-10(6)	1(6)
C(36B)	47(7)	35(6)	39(6)	-1(5)	-13(5)	1(5)
C(37B)	69(9)	40(7)	38(6)	-5(5)	-7(6)	1(6)
C(38B)	66(9)	46(7)	51(7)	3(6)	-5(6)	-15(6)
C(39B)	56(8)	43(7)	84(10)	11(7)	10(7)	4(6)
C(40B)	47(8)	70(9)	68(9)	16(7)	1(7)	-3(7)

---

Table 5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$ ) for OHJ332MONO\_A.

	x	y	z	U(eq)
H(5A)	1012	5666	4606	37
H(6A)	2482	4821	4405	42
H(8A)	4474	3963	4544	42
H(9A)	5878	3381	4942	40
H(10A)	5531	3544	5556	42
H(11A)	3841	4329	5746	38
H(14A)	-2597	6925	4966	48
H(15A)	-3045	7521	4435	45
H(16A)	-1167	7790	4064	49
H(17A)	1276	7514	4225	48
H(18A)	1722	6939	4753	37
H(21A)	6389	6251	6212	59
H(21B)	6551	5491	6340	59
H(22A)	5012	5739	6832	53
H(22B)	6513	6145	6844	53
H(23A)	3803	6704	6607	52
H(23B)	5305	7109	6625	52
H(24A)	3733	6631	7227	61
H(24B)	5315	6965	7260	61
H(25A)	2783	7639	7000	73
H(25B)	4366	7974	7024	73
H(26A)	2718	7552	7621	119
H(26B)	2986	8315	7511	119
H(26C)	4320	7867	7649	119
H(29A)	48	3894	6578	37
H(29B)	43	3388	6251	37
H(30A)	-2208	3802	6058	44
H(30B)	-2193	4349	6366	44
H(31A)	-2353	2936	6485	39
H(31B)	-2320	3480	6794	39
H(32A)	-4685	3049	6675	47
H(32B)	-4629	3379	6291	47
H(33A)	-4407	4177	6917	70
H(33B)	-4643	4455	6526	70

Chapter 11. Appendix

---

H(34A)	-6973	3942	6522	103
H(34B)	-6804	4538	6802	103
H(34C)	-6726	3777	6932	103
H(35A)	377	7122	6239	45
H(35B)	-1258	6848	6209	45
H(36A)	1137	6023	6402	60
H(36B)	-540	5806	6408	60
H(37A)	-961	6575	6870	57
H(37B)	719	6788	6864	57
H(38A)	1419	5727	7060	117
H(38B)	329	6063	7333	117
H(39A)	-422	5066	6852	147
H(39B)	-1515	5402	7124	147
H(40A)	908	4637	7338	171
H(40B)	-710	4344	7300	171
H(40C)	-357	4909	7587	171
H(5B)	6165	9331	5421	35
H(6B)	7645	10207	5607	34
H(8B)	9567	11057	5461	39
H(9B)	10859	11617	5029	42
H(10B)	10330	11435	4431	37
H(11B)	8742	10622	4250	48
H(14B)	2456	8074	5091	36
H(15B)	2074	7487	5623	47
H(16B)	4113	7173	5971	39
H(17B)	6439	7454	5802	40
H(18B)	6820	8062	5280	45
H(21C)	10751	8561	3718	73
H(21D)	10978	9305	3572	73
H(22C)	9084	9120	3133	60
H(22D)	10386	8597	3084	60
H(23C)	7653	8313	3406	75
H(23D)	8976	7792	3409	75
H(24C)	7066	7621	2947	80
H(24D)	7765	8250	2750	80
H(25C)	9377	7089	2922	92
H(25D)	9930	7698	2684	92
H(26D)	7589	6834	2477	108
H(26E)	9214	6766	2332	108
H(26F)	8258	7413	2236	108

---



---

H(27A)	3489	8022	3859	39
H(27B)	5189	7947	3778	39
H(28A)	3593	9173	3689	42
H(28B)	5289	9091	3604	42
H(29C)	3071	8352	3235	55
H(29D)	4762	8365	3135	55
H(30C)	3295	9077	2754	65
H(30D)	2915	9531	3088	65
H(31C)	5787	9364	2821	93
H(31D)	5389	9827	3151	93
H(32C)	4300	10074	2450	171
H(32D)	5645	10472	2622	171
H(32E)	4047	10554	2782	171
H(35C)	4757	11063	3433	56
H(35D)	4802	11579	3755	56
H(36C)	2546	10595	3663	48
H(36D)	2578	11142	3970	48
H(37C)	2189	12003	3560	59
H(37D)	2294	11487	3240	59
H(38B)	-42	11831	3344	66
H(38C)	46	11515	3731	66
H(39B)	377	10699	3118	74
H(39C)	109	10438	3511	74
H(40D)	-2255	10862	3485	92
H(40E)	-1986	10321	3181	92
H(40F)	-1982	11103	3088	92

---

Table 6. Hydrogen bonds for Zhu\_JCB05\_0m [ $\text{\AA}$  and  $^\circ$ ].

---

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	$\angle$ (DHA)
C(13)-H(13)...O(1S)	0.95	2.29	3.230(3)	167.8

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

**Xray crystal structure for 1-Phenyl-3-*n*-hexyl-4-(di-octynylborane)-5-(2-quinolinyl)pyrazole (163)**

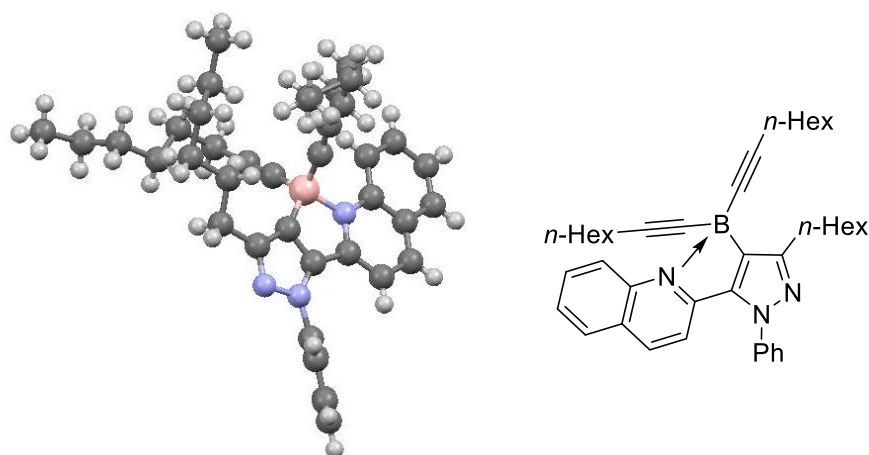


Table 1. Crystal data and structure refinement for OHJ332MONO\_A.

Identification code	shelx	
Empirical formula	C <sub>40</sub> H <sub>50</sub> B N <sub>3</sub>	
Formula weight	583.64	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54178 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2 <sub>1</sub> /c	
Unit cell dimensions	a = 9.1714(7) Å	α = 90°.
	b = 19.9860(13) Å	β = 90.587(5)°.
	c = 37.899(3) Å	γ = 90°.
Volume	6946.4(8) Å <sup>3</sup>	
Z	8	
Density (calculated)	1.116 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.482 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	2528	
Crystal size	0.160 x 0.140 x 0.040 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.499 to 67.300°.	
Index ranges	-10 ≤ h ≤ 10, -23 ≤ k ≤ 22, -45 ≤ l ≤ 45	
Reflections collected	63047	
Independent reflections	12325 [R(int) = 0.1351]	
Completeness to theta = 66.500°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.99 and 0.91	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	12325 / 0 / 800	

## Chapter 11. Appendix

---

Goodness-of-fit on $F^2$	1.039
Final R indices [ $I > 2\sigma(I)$ ]	R1 = 0.1653, wR2 = 0.4228
R indices (all data)	R1 = 0.2089, wR2 = 0.4535
Extinction coefficient	n/a
Largest diff. peak and hole	0.714 and -0.475 e. $\text{\AA}^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for OHJ332MONO\_A.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
B(1A)	1988(13)	5372(5)	5784(3)	28(2)
N(1A)	-553(9)	6875(4)	5542(2)	30(2)
N(2A)	-99(10)	6579(4)	5238(2)	35(2)
N(3A)	2293(9)	5156(4)	5364(2)	28(2)
C(1A)	953(12)	5981(5)	5681(3)	31(2)
C(2A)	51(11)	6511(5)	5803(3)	29(2)
C(3A)	827(13)	6051(5)	5320(3)	33(2)
C(4A)	1609(12)	5542(5)	5132(3)	31(2)
C(5A)	1601(12)	5413(5)	4764(3)	31(2)
C(6A)	2459(13)	4919(5)	4651(3)	35(3)
C(7A)	3341(11)	4534(4)	4887(3)	26(2)
C(8A)	4354(12)	4050(5)	4789(3)	35(2)
C(9A)	5179(12)	3695(5)	5023(3)	33(2)
C(10A)	4984(12)	3798(5)	5389(3)	35(2)
C(11A)	3995(11)	4268(5)	5501(3)	31(2)
C(12A)	3220(11)	4653(4)	5258(3)	28(2)
C(13A)	-390(12)	6897(5)	4904(3)	34(2)
C(14A)	-1817(14)	7050(5)	4817(3)	40(3)
C(15A)	-2075(14)	7399(5)	4498(3)	37(3)
C(16A)	-968(15)	7563(5)	4279(3)	41(3)
C(17A)	492(13)	7396(5)	4374(3)	40(3)
C(18A)	754(11)	7059(5)	4687(3)	31(2)
C(19A)	3449(10)	5552(4)	5979(3)	25(2)
C(20A)	4511(12)	5702(5)	6138(3)	36(2)
C(21A)	5889(14)	5882(6)	6336(3)	50(3)
C(22A)	5577(13)	6096(6)	6714(3)	44(3)
C(23A)	4733(14)	6751(5)	6739(3)	43(3)
C(24A)	4399(16)	6962(6)	7120(3)	51(3)
C(25A)	3710(19)	7644(7)	7136(3)	61(4)
C(26A)	3410(20)	7864(8)	7513(3)	79(5)
C(27A)	1156(10)	4755(5)	5957(2)	26(2)
C(28A)	510(10)	4328(5)	6119(3)	28(2)
C(29A)	-256(11)	3841(5)	6328(3)	31(2)
C(30A)	-1892(12)	3889(5)	6304(3)	36(2)
C(31A)	-2656(11)	3395(5)	6549(3)	33(2)

Chapter 11. Appendix

---

C(32A)	-4289(12)	3429(5)	6538(3)	39(3)
C(33A)	-4894(16)	4085(7)	6688(4)	58(3)
C(34A)	-6482(17)	4086(8)	6740(4)	68(4)
C(35A)	-220(13)	6722(5)	6185(3)	38(2)
C(36A)	136(15)	6186(6)	6446(3)	50(3)
C(37A)	39(15)	6409(6)	6826(3)	48(3)
C(38A)	390(30)	5863(8)	7094(4)	97(7)
C(39A)	-490(30)	5268(9)	7089(5)	123(9)
C(40A)	-130(30)	4746(9)	7350(4)	114(8)
B(1B)	6741(13)	9611(5)	4242(3)	27(2)
N(1B)	4233(11)	8122(4)	4506(2)	37(2)
N(2B)	4837(10)	8412(4)	4804(2)	34(2)
N(3B)	7218(9)	9829(4)	4652(2)	26(2)
C(1B)	5690(11)	8996(5)	4347(2)	27(2)
C(2B)	4794(12)	8462(5)	4235(3)	32(2)
C(3B)	5697(11)	8937(5)	4714(3)	29(2)
C(4B)	6528(12)	9454(4)	4894(3)	29(2)
C(5B)	6681(11)	9591(5)	5253(3)	29(2)
C(6B)	7572(11)	10098(5)	5364(3)	28(2)
C(7B)	8377(11)	10455(5)	5114(3)	29(2)
C(8B)	9403(12)	10959(5)	5219(3)	32(2)
C(9B)	10140(12)	11297(5)	4964(3)	35(2)
C(10B)	9844(11)	11174(5)	4603(3)	31(2)
C(11B)	8899(14)	10700(5)	4495(3)	40(3)
C(12B)	8143(11)	10319(4)	4748(3)	29(2)
C(13B)	4643(12)	8093(4)	5142(3)	28(2)
C(14B)	3258(11)	7945(5)	5236(3)	30(2)
C(15B)	3032(13)	7598(5)	5551(3)	39(3)
C(16B)	4252(12)	7415(5)	5759(3)	32(2)
C(17B)	5631(13)	7581(5)	5658(3)	34(2)
C(18B)	5867(13)	7934(5)	5349(3)	38(3)
C(19B)	8099(11)	9373(5)	4030(3)	27(2)
C(20B)	9093(13)	9194(6)	3848(3)	39(3)
C(21B)	10248(18)	8947(7)	3608(3)	60(4)
C(22B)	9585(13)	8731(7)	3242(3)	50(3)
C(23B)	8511(18)	8157(7)	3272(3)	62(4)
C(24B)	7982(18)	7874(7)	2912(4)	67(4)
C(25B)	9060(20)	7430(7)	2748(4)	76(5)
C(26B)	8480(20)	7080(7)	2419(4)	72(5)
C(27B)	4434(12)	8262(5)	3862(3)	33(2)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(28B)	4340(12)	8855(5)	3606(3)	35(2)
C(29B)	3954(15)	8637(5)	3230(3)	45(3)
C(30B)	3673(16)	9242(6)	2983(3)	54(3)
C(31B)	5020(20)	9653(8)	2922(3)	77(5)
C(32B)	4730(30)	10241(8)	2671(4)	114(9)
C(33B)	5910(13)	10208(5)	4061(3)	34(2)
C(34B)	5297(12)	10640(5)	3894(3)	31(2)
C(35B)	4500(16)	11123(5)	3684(3)	47(3)
C(36B)	2836(13)	11060(6)	3721(3)	40(3)
C(37B)	1955(15)	11540(6)	3486(3)	49(3)
C(38B)	395(15)	11465(6)	3486(4)	55(3)
C(39B)	-146(16)	10795(7)	3340(4)	61(4)
C(40B)	-1724(14)	10768(8)	3268(4)	62(4)

---

Table 3. Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for OHJ332MONO\_A.

---

B(1A)-C(19A)	1.567(15)
B(1A)-C(1A)	1.589(16)
B(1A)-C(27A)	1.595(13)
B(1A)-N(3A)	1.675(14)
N(1A)-C(2A)	1.345(13)
N(1A)-N(2A)	1.363(11)
N(2A)-C(3A)	1.387(14)
N(2A)-C(13A)	1.440(14)
N(3A)-C(4A)	1.323(14)
N(3A)-C(12A)	1.378(13)
C(1A)-C(3A)	1.380(14)
C(1A)-C(2A)	1.423(15)
C(2A)-C(35A)	1.530(14)
C(3A)-C(4A)	1.439(15)
C(4A)-C(5A)	1.417(14)
C(5A)-C(6A)	1.337(15)
C(5A)-H(5A)	0.9500
C(6A)-C(7A)	1.426(15)
C(6A)-H(6A)	0.9500
C(7A)-C(8A)	1.394(14)
C(7A)-C(12A)	1.433(14)
C(8A)-C(9A)	1.360(15)
C(8A)-H(8A)	0.9500
C(9A)-C(10A)	1.415(15)
C(9A)-H(9A)	0.9500
C(10A)-C(11A)	1.376(15)
C(10A)-H(10A)	0.9500
C(11A)-C(12A)	1.388(15)
C(11A)-H(11A)	0.9500
C(13A)-C(18A)	1.377(14)
C(13A)-C(14A)	1.381(17)
C(14A)-C(15A)	1.414(15)
C(14A)-H(14A)	0.9500
C(15A)-C(16A)	1.357(16)
C(15A)-H(15A)	0.9500
C(16A)-C(17A)	1.422(18)
C(16A)-H(16A)	0.9500
C(17A)-C(18A)	1.383(15)

---

C(17A)-H(17A)	0.9500
C(18A)-H(18A)	0.9500
C(19A)-C(20A)	1.178(14)
C(20A)-C(21A)	1.507(16)
C(21A)-C(22A)	1.526(17)
C(21A)-H(21A)	0.9900
C(21A)-H(21B)	0.9900
C(22A)-C(23A)	1.523(16)
C(22A)-H(22A)	0.9900
C(22A)-H(22B)	0.9900
C(23A)-C(24A)	1.537(15)
C(23A)-H(23A)	0.9900
C(23A)-H(23B)	0.9900
C(24A)-C(25A)	1.504(18)
C(24A)-H(24A)	0.9900
C(24A)-H(24B)	0.9900
C(25A)-C(26A)	1.524(17)
C(25A)-H(25A)	0.9900
C(25A)-H(25B)	0.9900
C(26A)-H(26A)	0.9800
C(26A)-H(26B)	0.9800
C(26A)-H(26C)	0.9800
C(27A)-C(28A)	1.209(13)
C(28A)-C(29A)	1.443(13)
C(29A)-C(30A)	1.505(15)
C(29A)-H(29A)	0.9900
C(29A)-H(29B)	0.9900
C(30A)-C(31A)	1.527(13)
C(30A)-H(30A)	0.9900
C(30A)-H(30B)	0.9900
C(31A)-C(32A)	1.499(15)
C(31A)-H(31A)	0.9900
C(31A)-H(31B)	0.9900
C(32A)-C(33A)	1.536(17)
C(32A)-H(32A)	0.9900
C(32A)-H(32B)	0.9900
C(33A)-C(34A)	1.47(2)
C(33A)-H(33A)	0.9900
C(33A)-H(33B)	0.9900
C(34A)-H(34A)	0.9800

---



Chapter 11. Appendix

---

C(34A)-H(34B)	0.9800
C(34A)-H(34C)	0.9800
C(35A)-C(36A)	1.492(16)
C(35A)-H(35A)	0.9900
C(35A)-H(35B)	0.9900
C(36A)-C(37A)	1.511(15)
C(36A)-H(36A)	0.9900
C(36A)-H(36B)	0.9900
C(37A)-C(38A)	1.52(2)
C(37A)-H(37A)	0.9900
C(37A)-H(37B)	0.9900
C(38A)-C(39A)	1.44(3)
C(38A)-H(38A)	0.9900
C(38A)-H(38B)	0.9900
C(39A)-C(40A)	1.47(2)
C(39A)-H(39A)	0.9900
C(39A)-H(39B)	0.9900
C(40A)-H(40A)	0.9800
C(40A)-H(40B)	0.9800
C(40A)-H(40C)	0.9800
B(1B)-C(19B)	1.565(15)
B(1B)-C(33B)	1.571(16)
B(1B)-C(1B)	1.614(14)
B(1B)-N(3B)	1.667(13)
N(1B)-C(2B)	1.338(13)
N(1B)-N(2B)	1.380(12)
N(2B)-C(3B)	1.358(12)
N(2B)-C(13B)	1.444(12)
N(3B)-C(4B)	1.347(11)
N(3B)-C(12B)	1.344(12)
C(1B)-C(3B)	1.395(13)
C(1B)-C(2B)	1.412(13)
C(2B)-C(27B)	1.503(13)
C(3B)-C(4B)	1.450(13)
C(4B)-C(5B)	1.394(14)
C(5B)-C(6B)	1.365(13)
C(5B)-H(5B)	0.9500
C(6B)-C(7B)	1.402(14)
C(6B)-H(6B)	0.9500
C(7B)-C(12B)	1.427(14)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(7B)-C(8B)	1.433(14)
C(8B)-C(9B)	1.363(14)
C(8B)-H(8B)	0.9500
C(9B)-C(10B)	1.411(15)
C(9B)-H(9B)	0.9500
C(10B)-C(11B)	1.346(14)
C(10B)-H(10B)	0.9500
C(11B)-C(12B)	1.413(14)
C(11B)-H(11B)	0.9500
C(13B)-C(14B)	1.357(14)
C(13B)-C(18B)	1.400(16)
C(14B)-C(15B)	1.395(15)
C(14B)-H(14B)	0.9500
C(15B)-C(16B)	1.410(16)
C(15B)-H(15B)	0.9500
C(16B)-C(17B)	1.366(15)
C(16B)-H(16B)	0.9500
C(17B)-C(18B)	1.385(14)
C(17B)-H(17B)	0.9500
C(18B)-H(18B)	0.9500
C(19B)-C(20B)	1.202(15)
C(20B)-C(21B)	1.488(18)
C(21B)-C(22B)	1.569(17)
C(21B)-H(21C)	0.9900
C(21B)-H(21D)	0.9900
C(22B)-C(23B)	1.52(2)
C(22B)-H(22C)	0.9900
C(22B)-H(22D)	0.9900
C(23B)-C(24B)	1.551(18)
C(23B)-H(23C)	0.9900
C(23B)-H(23D)	0.9900
C(24B)-C(25B)	1.47(2)
C(24B)-H(24C)	0.9900
C(24B)-H(24D)	0.9900
C(25B)-C(26B)	1.52(2)
C(25B)-H(25C)	0.9900
C(25B)-H(25D)	0.9900
C(26B)-H(26D)	0.9800
C(26B)-H(26E)	0.9800
C(26B)-H(26F)	0.9800

---

C(27B)-C(28B)	1.534(14)
C(27B)-H(27A)	0.9900
C(27B)-H(27B)	0.9900
C(28B)-C(29B)	1.525(13)
C(28B)-H(28A)	0.9900
C(28B)-H(28B)	0.9900
C(29B)-C(30B)	1.550(15)
C(29B)-H(29C)	0.9900
C(29B)-H(29D)	0.9900
C(30B)-C(31B)	1.50(2)
C(30B)-H(30C)	0.9900
C(30B)-H(30D)	0.9900
C(31B)-C(32B)	1.534(19)
C(31B)-H(31C)	0.9900
C(31B)-H(31D)	0.9900
C(32B)-H(32C)	0.9800
C(32B)-H(32D)	0.9800
C(32B)-H(32E)	0.9800
C(33B)-C(34B)	1.205(15)
C(34B)-C(35B)	1.446(15)
C(35B)-C(36B)	1.540(18)
C(35B)-H(35C)	0.9900
C(35B)-H(35D)	0.9900
C(36B)-C(37B)	1.534(16)
C(36B)-H(36C)	0.9900
C(36B)-H(36D)	0.9900
C(37B)-C(38B)	1.438(19)
C(37B)-H(37C)	0.9900
C(37B)-H(37D)	0.9900
C(38B)-C(39B)	1.530(18)
C(38B)-H(38B)	0.9900
C(38B)-H(38C)	0.9900
C(39B)-C(40B)	1.471(19)
C(39B)-H(39B)	0.9900
C(39B)-H(39C)	0.9900
C(40B)-H(40D)	0.9800
C(40B)-H(40E)	0.9800
C(40B)-H(40F)	0.9800
C(19A)-B(1A)-C(1A)	116.5(8)

---

C(19A)-B(1A)-C(27A)	113.1(9)
C(1A)-B(1A)-C(27A)	113.9(9)
C(19A)-B(1A)-N(3A)	111.0(8)
C(1A)-B(1A)-N(3A)	94.1(8)
C(27A)-B(1A)-N(3A)	106.1(7)
C(2A)-N(1A)-N(2A)	105.0(8)
N(1A)-N(2A)-C(3A)	109.5(8)
N(1A)-N(2A)-C(13A)	119.7(9)
C(3A)-N(2A)-C(13A)	129.8(9)
C(4A)-N(3A)-C(12A)	121.5(9)
C(4A)-N(3A)-B(1A)	113.4(8)
C(12A)-N(3A)-B(1A)	125.0(8)
C(3A)-C(1A)-C(2A)	101.7(9)
C(3A)-C(1A)-B(1A)	111.3(9)
C(2A)-C(1A)-B(1A)	147.0(9)
N(1A)-C(2A)-C(1A)	113.6(9)
N(1A)-C(2A)-C(35A)	118.5(9)
C(1A)-C(2A)-C(35A)	127.8(9)
C(1A)-C(3A)-N(2A)	110.1(9)
C(1A)-C(3A)-C(4A)	112.5(10)
N(2A)-C(3A)-C(4A)	137.2(9)
N(3A)-C(4A)-C(5A)	123.0(10)
N(3A)-C(4A)-C(3A)	108.6(9)
C(5A)-C(4A)-C(3A)	128.2(10)
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.0(10)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.5
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.5
C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.8(9)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1
C(8A)-C(7A)-C(6A)	125.5(10)
C(8A)-C(7A)-C(12A)	115.8(9)
C(6A)-C(7A)-C(12A)	118.6(9)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	123.7(10)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	118.1
C(7A)-C(8A)-H(8A)	118.1
C(8A)-C(9A)-C(10A)	119.2(10)
C(8A)-C(9A)-H(9A)	120.4
C(10A)-C(9A)-H(9A)	120.4
C(11A)-C(10A)-C(9A)	119.5(10)

---

C(11A)-C(10A)-H(10A)	120.3
C(9A)-C(10A)-H(10A)	120.3
C(10A)-C(11A)-C(12A)	120.6(10)
C(10A)-C(11A)-H(11A)	119.7
C(12A)-C(11A)-H(11A)	119.7
N(3A)-C(12A)-C(11A)	121.7(9)
N(3A)-C(12A)-C(7A)	117.4(9)
C(11A)-C(12A)-C(7A)	120.9(9)
C(18A)-C(13A)-C(14A)	122.1(10)
C(18A)-C(13A)-N(2A)	119.6(10)
C(14A)-C(13A)-N(2A)	118.3(10)
C(13A)-C(14A)-C(15A)	117.6(11)
C(13A)-C(14A)-H(14A)	121.2
C(15A)-C(14A)-H(14A)	121.2
C(16A)-C(15A)-C(14A)	121.4(12)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	119.3
C(14A)-C(15A)-H(15A)	119.3
C(15A)-C(16A)-C(17A)	119.8(11)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	120.1
C(17A)-C(16A)-H(16A)	120.1
C(18A)-C(17A)-C(16A)	119.1(10)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.5
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.5
C(13A)-C(18A)-C(17A)	120.0(11)
C(13A)-C(18A)-H(18A)	120.0
C(17A)-C(18A)-H(18A)	120.0
C(20A)-C(19A)-B(1A)	176.9(11)
C(19A)-C(20A)-C(21A)	178.6(12)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	111.8(10)
C(20A)-C(21A)-H(21A)	109.3
C(22A)-C(21A)-H(21A)	109.3
C(20A)-C(21A)-H(21B)	109.3
C(22A)-C(21A)-H(21B)	109.3
H(21A)-C(21A)-H(21B)	107.9
C(23A)-C(22A)-C(21A)	113.6(10)
C(23A)-C(22A)-H(22A)	108.9
C(21A)-C(22A)-H(22A)	108.9
C(23A)-C(22A)-H(22B)	108.9
C(21A)-C(22A)-H(22B)	108.8
H(22A)-C(22A)-H(22B)	107.7

---

Chapter 11. Appendix

---

C(22A)-C(23A)-C(24A)	113.7(10)
C(22A)-C(23A)-H(23A)	108.8
C(24A)-C(23A)-H(23A)	108.8
C(22A)-C(23A)-H(23B)	108.8
C(24A)-C(23A)-H(23B)	108.8
H(23A)-C(23A)-H(23B)	107.7
C(25A)-C(24A)-C(23A)	112.0(10)
C(25A)-C(24A)-H(24A)	109.2
C(23A)-C(24A)-H(24A)	109.2
C(25A)-C(24A)-H(24B)	109.2
C(23A)-C(24A)-H(24B)	109.2
H(24A)-C(24A)-H(24B)	107.9
C(24A)-C(25A)-C(26A)	112.3(11)
C(24A)-C(25A)-H(25A)	109.1
C(26A)-C(25A)-H(25A)	109.1
C(24A)-C(25A)-H(25B)	109.1
C(26A)-C(25A)-H(25B)	109.1
H(25A)-C(25A)-H(25B)	107.9
C(25A)-C(26A)-H(26A)	109.5
C(25A)-C(26A)-H(26B)	109.5
H(26A)-C(26A)-H(26B)	109.5
C(25A)-C(26A)-H(26C)	109.5
H(26A)-C(26A)-H(26C)	109.5
H(26B)-C(26A)-H(26C)	109.5
C(28A)-C(27A)-B(1A)	173.4(10)
C(27A)-C(28A)-C(29A)	177.0(11)
C(28A)-C(29A)-C(30A)	114.5(9)
C(28A)-C(29A)-H(29A)	108.6
C(30A)-C(29A)-H(29A)	108.6
C(28A)-C(29A)-H(29B)	108.6
C(30A)-C(29A)-H(29B)	108.6
H(29A)-C(29A)-H(29B)	107.6
C(29A)-C(30A)-C(31A)	112.8(9)
C(29A)-C(30A)-H(30A)	109.0
C(31A)-C(30A)-H(30A)	109.0
C(29A)-C(30A)-H(30B)	109.0
C(31A)-C(30A)-H(30B)	109.0
H(30A)-C(30A)-H(30B)	107.8
C(32A)-C(31A)-C(30A)	114.9(9)
C(32A)-C(31A)-H(31A)	108.5

---

C(30A)-C(31A)-H(31A)	108.5
C(32A)-C(31A)-H(31B)	108.6
C(30A)-C(31A)-H(31B)	108.5
H(31A)-C(31A)-H(31B)	107.5
C(31A)-C(32A)-C(33A)	113.2(10)
C(31A)-C(32A)-H(32A)	108.9
C(33A)-C(32A)-H(32A)	108.9
C(31A)-C(32A)-H(32B)	109.0
C(33A)-C(32A)-H(32B)	108.9
H(32A)-C(32A)-H(32B)	107.8
C(34A)-C(33A)-C(32A)	114.3(12)
C(34A)-C(33A)-H(33A)	108.7
C(32A)-C(33A)-H(33A)	108.7
C(34A)-C(33A)-H(33B)	108.7
C(32A)-C(33A)-H(33B)	108.7
H(33A)-C(33A)-H(33B)	107.6
C(33A)-C(34A)-H(34A)	109.5
C(33A)-C(34A)-H(34B)	109.5
H(34A)-C(34A)-H(34B)	109.5
C(33A)-C(34A)-H(34C)	109.5
H(34A)-C(34A)-H(34C)	109.5
H(34B)-C(34A)-H(34C)	109.5
C(36A)-C(35A)-C(2A)	113.1(9)
C(36A)-C(35A)-H(35A)	109.0
C(2A)-C(35A)-H(35A)	109.0
C(36A)-C(35A)-H(35B)	109.0
C(2A)-C(35A)-H(35B)	109.0
H(35A)-C(35A)-H(35B)	107.8
C(35A)-C(36A)-C(37A)	114.0(10)
C(35A)-C(36A)-H(36A)	108.8
C(37A)-C(36A)-H(36A)	108.8
C(35A)-C(36A)-H(36B)	108.8
C(37A)-C(36A)-H(36B)	108.8
H(36A)-C(36A)-H(36B)	107.7
C(36A)-C(37A)-C(38A)	114.2(10)
C(36A)-C(37A)-H(37A)	108.7
C(38A)-C(37A)-H(37A)	108.7
C(36A)-C(37A)-H(37B)	108.7
C(38A)-C(37A)-H(37B)	108.7
H(37A)-C(37A)-H(37B)	107.6

---

C(39A)-C(38A)-C(37A)	118.0(19)
C(39A)-C(38A)-H(38A)	107.8
C(37A)-C(38A)-H(38A)	107.8
C(39A)-C(38A)-H(38B)	107.8
C(37A)-C(38A)-H(38B)	107.8
H(38A)-C(38A)-H(38B)	107.1
C(38A)-C(39A)-C(40A)	117(2)
C(38A)-C(39A)-H(39A)	108.0
C(40A)-C(39A)-H(39A)	108.0
C(38A)-C(39A)-H(39B)	108.0
C(40A)-C(39A)-H(39B)	108.0
H(39A)-C(39A)-H(39B)	107.2
C(39A)-C(40A)-H(40A)	109.5
C(39A)-C(40A)-H(40B)	109.5
H(40A)-C(40A)-H(40B)	109.5
C(39A)-C(40A)-H(40C)	109.5
H(40A)-C(40A)-H(40C)	109.5
H(40B)-C(40A)-H(40C)	109.5
C(19B)-B(1B)-C(33B)	113.0(8)
C(19B)-B(1B)-C(1B)	112.1(8)
C(33B)-B(1B)-C(1B)	113.5(9)
C(19B)-B(1B)-N(3B)	110.9(8)
C(33B)-B(1B)-N(3B)	109.3(8)
C(1B)-B(1B)-N(3B)	96.9(7)
C(2B)-N(1B)-N(2B)	105.1(8)
C(3B)-N(2B)-N(1B)	110.5(8)
C(3B)-N(2B)-C(13B)	129.7(9)
N(1B)-N(2B)-C(13B)	119.3(7)
C(4B)-N(3B)-C(12B)	121.4(8)
C(4B)-N(3B)-B(1B)	111.6(8)
C(12B)-N(3B)-B(1B)	127.0(8)
C(3B)-C(1B)-C(2B)	103.5(8)
C(3B)-C(1B)-B(1B)	108.3(8)
C(2B)-C(1B)-B(1B)	148.1(9)
N(1B)-C(2B)-C(1B)	112.3(8)
N(1B)-C(2B)-C(27B)	120.3(8)
C(1B)-C(2B)-C(27B)	127.4(9)
N(2B)-C(3B)-C(1B)	108.5(8)
N(2B)-C(3B)-C(4B)	137.6(9)
C(1B)-C(3B)-C(4B)	113.8(8)

---



N(3B)-C(4B)-C(5B)	120.8(9)
N(3B)-C(4B)-C(3B)	109.0(8)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	130.2(8)
C(6B)-C(5B)-C(4B)	119.9(9)
C(6B)-C(5B)-H(5B)	120.0
C(4B)-C(5B)-H(5B)	120.0
C(5B)-C(6B)-C(7B)	119.2(9)
C(5B)-C(6B)-H(6B)	120.4
C(7B)-C(6B)-H(6B)	120.4
C(6B)-C(7B)-C(12B)	119.0(9)
C(6B)-C(7B)-C(8B)	121.3(9)
C(12B)-C(7B)-C(8B)	119.7(9)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	118.7(9)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	120.6
C(7B)-C(8B)-H(8B)	120.6
C(8B)-C(9B)-C(10B)	120.5(9)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	119.8
C(10B)-C(9B)-H(9B)	119.7
C(11B)-C(10B)-C(9B)	122.4(9)
C(11B)-C(10B)-H(10B)	118.8
C(9B)-C(10B)-H(10B)	118.8
C(10B)-C(11B)-C(12B)	119.3(10)
C(10B)-C(11B)-H(11B)	120.3
C(12B)-C(11B)-H(11B)	120.3
N(3B)-C(12B)-C(11B)	121.4(9)
N(3B)-C(12B)-C(7B)	119.4(9)
C(11B)-C(12B)-C(7B)	119.2(9)
C(14B)-C(13B)-C(18B)	123.3(9)
C(14B)-C(13B)-N(2B)	117.1(10)
C(18B)-C(13B)-N(2B)	119.6(9)
C(13B)-C(14B)-C(15B)	118.8(10)
C(13B)-C(14B)-H(14B)	120.6
C(15B)-C(14B)-H(14B)	120.6
C(14B)-C(15B)-C(16B)	118.8(10)
C(14B)-C(15B)-H(15B)	120.6
C(16B)-C(15B)-H(15B)	120.6
C(17B)-C(16B)-C(15B)	120.8(9)
C(17B)-C(16B)-H(16B)	119.6
C(15B)-C(16B)-H(16B)	119.6
C(16B)-C(17B)-C(18B)	120.8(11)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(16B)-C(17B)-H(17B)	119.6
C(18B)-C(17B)-H(17B)	119.6
C(17B)-C(18B)-C(13B)	117.3(10)
C(17B)-C(18B)-H(18B)	121.3
C(13B)-C(18B)-H(18B)	121.3
C(20B)-C(19B)-B(1B)	176.0(11)
C(19B)-C(20B)-C(21B)	176.0(12)
C(20B)-C(21B)-C(22B)	111.1(12)
C(20B)-C(21B)-H(21C)	109.4
C(22B)-C(21B)-H(21C)	109.4
C(20B)-C(21B)-H(21D)	109.4
C(22B)-C(21B)-H(21D)	109.4
H(21C)-C(21B)-H(21D)	108.0
C(23B)-C(22B)-C(21B)	112.8(11)
C(23B)-C(22B)-H(22C)	109.0
C(21B)-C(22B)-H(22C)	109.0
C(23B)-C(22B)-H(22D)	109.0
C(21B)-C(22B)-H(22D)	109.0
H(22C)-C(22B)-H(22D)	107.8
C(22B)-C(23B)-C(24B)	114.1(11)
C(22B)-C(23B)-H(23C)	108.7
C(24B)-C(23B)-H(23C)	108.7
C(22B)-C(23B)-H(23D)	108.7
C(24B)-C(23B)-H(23D)	108.7
H(23C)-C(23B)-H(23D)	107.6
C(25B)-C(24B)-C(23B)	112.8(14)
C(25B)-C(24B)-H(24C)	109.0
C(23B)-C(24B)-H(24C)	109.0
C(25B)-C(24B)-H(24D)	109.0
C(23B)-C(24B)-H(24D)	109.0
H(24C)-C(24B)-H(24D)	107.8
C(24B)-C(25B)-C(26B)	113.0(16)
C(24B)-C(25B)-H(25C)	109.0
C(26B)-C(25B)-H(25C)	109.0
C(24B)-C(25B)-H(25D)	109.0
C(26B)-C(25B)-H(25D)	109.0
H(25C)-C(25B)-H(25D)	107.8
C(25B)-C(26B)-H(26D)	109.5
C(25B)-C(26B)-H(26E)	109.5
H(26D)-C(26B)-H(26E)	109.5

---

Chapter 11. Appendix

---

C(25B)-C(26B)-H(26F)	109.5
H(26D)-C(26B)-H(26F)	109.5
H(26E)-C(26B)-H(26F)	109.5
C(2B)-C(27B)-C(28B)	113.6(8)
C(2B)-C(27B)-H(27A)	108.8
C(28B)-C(27B)-H(27A)	108.8
C(2B)-C(27B)-H(27B)	108.8
C(28B)-C(27B)-H(27B)	108.9
H(27A)-C(27B)-H(27B)	107.7
C(29B)-C(28B)-C(27B)	112.3(8)
C(29B)-C(28B)-H(28A)	109.1
C(27B)-C(28B)-H(28A)	109.1
C(29B)-C(28B)-H(28B)	109.1
C(27B)-C(28B)-H(28B)	109.1
H(28A)-C(28B)-H(28B)	107.9
C(28B)-C(29B)-C(30B)	112.1(9)
C(28B)-C(29B)-H(29C)	109.2
C(30B)-C(29B)-H(29C)	109.2
C(28B)-C(29B)-H(29D)	109.2
C(30B)-C(29B)-H(29D)	109.2
H(29C)-C(29B)-H(29D)	107.9
C(31B)-C(30B)-C(29B)	112.8(12)
C(31B)-C(30B)-H(30C)	109.0
C(29B)-C(30B)-H(30C)	109.0
C(31B)-C(30B)-H(30D)	109.0
C(29B)-C(30B)-H(30D)	109.0
H(30C)-C(30B)-H(30D)	107.8
C(30B)-C(31B)-C(32B)	112.0(16)
C(30B)-C(31B)-H(31C)	109.2
C(32B)-C(31B)-H(31C)	109.2
C(30B)-C(31B)-H(31D)	109.2
C(32B)-C(31B)-H(31D)	109.2
H(31C)-C(31B)-H(31D)	107.9
C(31B)-C(32B)-H(32C)	109.5
C(31B)-C(32B)-H(32D)	109.5
H(32C)-C(32B)-H(32D)	109.5
C(31B)-C(32B)-H(32E)	109.5
H(32C)-C(32B)-H(32E)	109.5
H(32D)-C(32B)-H(32E)	109.5
C(34B)-C(33B)-B(1B)	174.3(10)

---

C(33B)-C(34B)-C(35B)	176.1(11)
C(34B)-C(35B)-C(36B)	113.0(10)
C(34B)-C(35B)-H(35C)	109.0
C(36B)-C(35B)-H(35C)	109.0
C(34B)-C(35B)-H(35D)	109.0
C(36B)-C(35B)-H(35D)	109.0
H(35C)-C(35B)-H(35D)	107.8
C(37B)-C(36B)-C(35B)	114.3(10)
C(37B)-C(36B)-H(36C)	108.7
C(35B)-C(36B)-H(36C)	108.7
C(37B)-C(36B)-H(36D)	108.7
C(35B)-C(36B)-H(36D)	108.7
H(36C)-C(36B)-H(36D)	107.6
C(38B)-C(37B)-C(36B)	116.9(11)
C(38B)-C(37B)-H(37C)	108.1
C(36B)-C(37B)-H(37C)	108.1
C(38B)-C(37B)-H(37D)	108.1
C(36B)-C(37B)-H(37D)	108.1
H(37C)-C(37B)-H(37D)	107.3
C(37B)-C(38B)-C(39B)	114.2(12)
C(37B)-C(38B)-H(38B)	108.7
C(39B)-C(38B)-H(38B)	108.7
C(37B)-C(38B)-H(38C)	108.7
C(39B)-C(38B)-H(38C)	108.7
H(38B)-C(38B)-H(38C)	107.6
C(40B)-C(39B)-C(38B)	114.5(12)
C(40B)-C(39B)-H(39B)	108.6
C(38B)-C(39B)-H(39B)	108.6
C(40B)-C(39B)-H(39C)	108.6
C(38B)-C(39B)-H(39C)	108.6
H(39B)-C(39B)-H(39C)	107.6
C(39B)-C(40B)-H(40D)	109.5
C(39B)-C(40B)-H(40E)	109.5
H(40D)-C(40B)-H(40E)	109.5
C(39B)-C(40B)-H(40F)	109.5
H(40D)-C(40B)-H(40F)	109.5
H(40E)-C(40B)-H(40F)	109.5

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

---

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for OHJ332MONO\_A. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\sigma^2 [ h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
B(1A)	34(6)	19(5)	32(6)	3(4)	3(5)	-6(5)
N(1A)	26(4)	26(4)	37(5)	-3(4)	3(4)	-13(3)
N(2A)	48(5)	26(4)	32(5)	2(4)	10(4)	-18(4)
N(3A)	36(5)	22(4)	27(4)	4(3)	-2(4)	-18(4)
C(1A)	39(6)	26(5)	28(5)	3(4)	-9(4)	-20(4)
C(2A)	34(5)	23(5)	31(5)	6(4)	-4(4)	-16(4)
C(3A)	57(7)	15(4)	27(5)	4(4)	-7(5)	-17(5)
C(4A)	40(6)	22(5)	32(5)	2(4)	9(4)	-18(4)
C(5A)	43(6)	19(5)	31(5)	1(4)	-4(4)	-7(4)
C(6A)	58(7)	25(5)	22(5)	-3(4)	1(5)	-28(5)
C(7A)	30(5)	11(4)	36(5)	2(4)	10(4)	-14(4)
C(8A)	36(6)	22(5)	46(6)	-5(4)	2(5)	-16(4)
C(9A)	39(6)	16(5)	44(6)	4(4)	9(5)	-8(4)
C(10A)	41(6)	17(5)	46(6)	-2(4)	4(5)	-19(4)
C(11A)	33(5)	24(5)	37(6)	3(4)	1(4)	-24(4)
C(12A)	30(5)	17(4)	36(5)	-5(4)	7(4)	-10(4)
C(13A)	43(6)	19(5)	40(6)	-7(4)	2(5)	-15(4)
C(14A)	66(8)	20(5)	33(6)	-4(4)	5(5)	-15(5)
C(15A)	56(7)	16(5)	40(6)	-1(4)	-8(5)	-11(5)
C(16A)	73(8)	25(5)	26(5)	-6(4)	4(5)	-3(5)
C(17A)	45(7)	29(5)	45(6)	-14(5)	6(5)	-23(5)
C(18A)	32(5)	28(5)	33(5)	-3(4)	5(4)	-22(4)
C(19A)	19(4)	14(4)	42(6)	3(4)	-4(4)	-11(4)
C(20A)	35(6)	22(5)	51(7)	2(4)	9(5)	-12(4)
C(21A)	47(7)	34(6)	68(8)	-1(6)	-18(6)	-3(5)
C(22A)	44(7)	44(6)	44(6)	1(5)	-11(5)	-12(5)
C(23A)	55(7)	35(6)	40(6)	1(5)	4(5)	-14(5)
C(24A)	75(9)	42(6)	36(6)	3(5)	7(6)	-10(6)
C(25A)	97(11)	53(8)	33(6)	-3(6)	-6(7)	-5(8)
C(26A)	141(17)	58(9)	38(8)	-6(6)	1(9)	1(10)
C(27A)	21(5)	28(5)	29(5)	1(4)	2(4)	-6(4)
C(28A)	27(5)	21(5)	37(6)	4(4)	-1(4)	-4(4)
C(29A)	39(6)	24(5)	29(5)	-1(4)	2(4)	-22(4)
C(30A)	44(6)	29(5)	36(6)	4(4)	2(5)	-13(5)
C(31A)	37(6)	27(5)	33(5)	3(4)	5(4)	-4(4)

Chapter 11. Appendix

---

C(32A)	37(6)	41(6)	40(6)	-4(5)	8(5)	-27(5)
C(33A)	65(9)	52(8)	57(8)	4(6)	13(7)	4(7)
C(34A)	66(9)	74(10)	65(9)	1(8)	2(8)	7(8)
C(35A)	45(6)	30(5)	38(6)	-5(4)	3(5)	-1(5)
C(36A)	62(8)	47(7)	40(7)	-6(5)	1(6)	12(6)
C(37A)	59(8)	43(6)	41(6)	-7(5)	12(6)	5(6)
C(38A)	180(20)	57(9)	58(10)	-2(7)	44(12)	-3(11)
C(39A)	220(30)	76(12)	70(12)	17(10)	16(15)	-11(16)
C(40A)	210(30)	83(12)	51(9)	19(9)	19(13)	-14(16)
B(1B)	37(6)	27(5)	17(5)	-2(4)	5(4)	-6(5)
N(1B)	58(6)	24(4)	27(4)	-2(3)	1(4)	-15(4)
N(2B)	52(6)	23(4)	26(4)	3(3)	6(4)	-20(4)
N(3B)	35(4)	22(4)	22(4)	-1(3)	5(3)	-14(3)
C(1B)	39(6)	19(4)	24(5)	0(4)	5(4)	-15(4)
C(2B)	42(6)	24(5)	28(5)	0(4)	-8(4)	-18(4)
C(3B)	28(5)	30(5)	30(5)	-2(4)	14(4)	-16(4)
C(4B)	42(6)	14(4)	30(5)	-2(4)	14(4)	-14(4)
C(5B)	34(5)	25(5)	28(5)	-1(4)	9(4)	-8(4)
C(6B)	32(5)	30(5)	22(5)	-1(4)	-11(4)	-6(4)
C(7B)	37(6)	19(4)	29(5)	-4(4)	5(4)	0(4)
C(8B)	41(6)	25(5)	31(5)	-5(4)	8(5)	-11(4)
C(9B)	37(6)	22(5)	47(6)	-7(4)	-2(5)	-15(4)
C(10B)	29(5)	30(5)	34(5)	4(4)	6(4)	-14(4)
C(11B)	71(8)	22(5)	28(5)	2(4)	2(5)	-16(5)
C(12B)	38(6)	14(4)	37(6)	-1(4)	6(5)	-3(4)
C(13B)	46(6)	11(4)	29(5)	-9(4)	5(4)	-11(4)
C(14B)	32(5)	22(5)	36(6)	0(4)	9(4)	-7(4)
C(15B)	44(6)	30(5)	44(6)	-2(5)	26(5)	-8(5)
C(16B)	47(6)	22(5)	27(5)	-1(4)	1(5)	-5(5)
C(17B)	52(7)	20(5)	29(5)	0(4)	1(5)	-6(5)
C(18B)	55(7)	26(5)	32(6)	-3(4)	6(5)	-24(5)
C(19B)	31(5)	23(5)	27(5)	2(4)	-2(4)	-21(4)
C(20B)	47(7)	41(6)	30(6)	3(5)	-7(5)	-21(5)
C(21B)	102(12)	53(7)	26(6)	-5(5)	-2(7)	-3(8)
C(22B)	43(7)	69(8)	38(6)	1(6)	10(5)	29(6)
C(23B)	96(11)	54(8)	36(7)	-10(6)	7(7)	15(8)
C(24B)	90(11)	63(9)	47(8)	-15(6)	-8(7)	-3(8)
C(25B)	116(14)	50(8)	63(9)	-16(7)	14(10)	10(9)
C(26B)	125(15)	52(8)	40(7)	-4(6)	-3(8)	-14(9)
C(27B)	35(6)	34(5)	29(5)	-10(4)	10(4)	-7(4)

---

Chapter 11. Appendix

---

C(28B)	44(6)	36(5)	25(5)	-4(4)	-1(4)	-9(5)
C(29B)	77(9)	33(6)	26(5)	-2(4)	-25(6)	-1(6)
C(30B)	83(10)	48(7)	33(6)	-2(5)	0(6)	-3(7)
C(31B)	127(15)	73(10)	31(7)	5(7)	-8(8)	-20(10)
C(32B)	240(30)	55(9)	52(9)	30(8)	-25(13)	-30(14)
C(33B)	52(7)	25(5)	26(5)	-2(4)	11(5)	-16(5)
C(34B)	41(6)	25(5)	27(5)	-3(4)	9(4)	-11(4)
C(35B)	93(10)	26(5)	20(5)	2(4)	-10(6)	1(6)
C(36B)	47(7)	35(6)	39(6)	-1(5)	-13(5)	1(5)
C(37B)	69(9)	40(7)	38(6)	-5(5)	-7(6)	1(6)
C(38B)	66(9)	46(7)	51(7)	3(6)	-5(6)	-15(6)
C(39B)	56(8)	43(7)	84(10)	11(7)	10(7)	4(6)
C(40B)	47(8)	70(9)	68(9)	16(7)	1(7)	-3(7)

---

Table 5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$ ) for OHJ332MONO\_A.

	x	y	z	U(eq)
H(5A)	1012	5666	4606	37
H(6A)	2482	4821	4405	42
H(8A)	4474	3963	4544	42
H(9A)	5878	3381	4942	40
H(10A)	5531	3544	5556	42
H(11A)	3841	4329	5746	38
H(14A)	-2597	6925	4966	48
H(15A)	-3045	7521	4435	45
H(16A)	-1167	7790	4064	49
H(17A)	1276	7514	4225	48
H(18A)	1722	6939	4753	37
H(21A)	6389	6251	6212	59
H(21B)	6551	5491	6340	59
H(22A)	5012	5739	6832	53
H(22B)	6513	6145	6844	53
H(23A)	3803	6704	6607	52
H(23B)	5305	7109	6625	52
H(24A)	3733	6631	7227	61
H(24B)	5315	6965	7260	61
H(25A)	2783	7639	7000	73
H(25B)	4366	7974	7024	73
H(26A)	2718	7552	7621	119
H(26B)	2986	8315	7511	119
H(26C)	4320	7867	7649	119
H(29A)	48	3894	6578	37
H(29B)	43	3388	6251	37
H(30A)	-2208	3802	6058	44
H(30B)	-2193	4349	6366	44
H(31A)	-2353	2936	6485	39
H(31B)	-2320	3480	6794	39
H(32A)	-4685	3049	6675	47
H(32B)	-4629	3379	6291	47
H(33A)	-4407	4177	6917	70
H(33B)	-4643	4455	6526	70



---

Chapter 11. Appendix

---

H(34A)	-6973	3942	6522	103
H(34B)	-6804	4538	6802	103
H(34C)	-6726	3777	6932	103
H(35A)	377	7122	6239	45
H(35B)	-1258	6848	6209	45
H(36A)	1137	6023	6402	60
H(36B)	-540	5806	6408	60
H(37A)	-961	6575	6870	57
H(37B)	719	6788	6864	57
H(38A)	1419	5727	7060	117
H(38B)	329	6063	7333	117
H(39A)	-422	5066	6852	147
H(39B)	-1515	5402	7124	147
H(40A)	908	4637	7338	171
H(40B)	-710	4344	7300	171
H(40C)	-357	4909	7587	171
H(5B)	6165	9331	5421	35
H(6B)	7645	10207	5607	34
H(8B)	9567	11057	5461	39
H(9B)	10859	11617	5029	42
H(10B)	10330	11435	4431	37
H(11B)	8742	10622	4250	48
H(14B)	2456	8074	5091	36
H(15B)	2074	7487	5623	47
H(16B)	4113	7173	5971	39
H(17B)	6439	7454	5802	40
H(18B)	6820	8062	5280	45
H(21C)	10751	8561	3718	73
H(21D)	10978	9305	3572	73
H(22C)	9084	9120	3133	60
H(22D)	10386	8597	3084	60
H(23C)	7653	8313	3406	75
H(23D)	8976	7792	3409	75
H(24C)	7066	7621	2947	80
H(24D)	7765	8250	2750	80
H(25C)	9377	7089	2922	92
H(25D)	9930	7698	2684	92
H(26D)	7589	6834	2477	108
H(26E)	9214	6766	2332	108
H(26F)	8258	7413	2236	108

---

---

Chapter 11. Appendix

---

H(27A)	3489	8022	3859	39
H(27B)	5189	7947	3778	39
H(28A)	3593	9173	3689	42
H(28B)	5289	9091	3604	42
H(29C)	3071	8352	3235	55
H(29D)	4762	8365	3135	55
H(30C)	3295	9077	2754	65
H(30D)	2915	9531	3088	65
H(31C)	5787	9364	2821	93
H(31D)	5389	9827	3151	93
H(32C)	4300	10074	2450	171
H(32D)	5645	10472	2622	171
H(32E)	4047	10554	2782	171
H(35C)	4757	11063	3433	56
H(35D)	4802	11579	3755	56
H(36C)	2546	10595	3663	48
H(36D)	2578	11142	3970	48
H(37C)	2189	12003	3560	59
H(37D)	2294	11487	3240	59
H(38B)	-42	11831	3344	66
H(38C)	46	11515	3731	66
H(39B)	377	10699	3118	74
H(39C)	109	10438	3511	74
H(40D)	-2255	10862	3485	92
H(40E)	-1986	10321	3181	92
H(40F)	-1982	11103	3088	92

---

**Xray crystal structure for 4-((S)-1-((R)-tert-butylsulfonamido)propyl)-N-phenylsydnone  
(178b)**

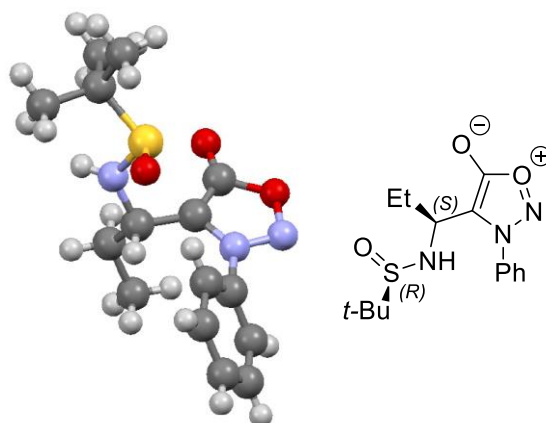


Table 1. Crystal data and structure refinement for ohj335\_0m.

Identification code	ohj335_0m	
Empirical formula	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	
Formula weight	323.41	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54178 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>	
Unit cell dimensions	a = 9.6220(6) Å	α = 90°.
	b = 11.2337(7) Å	β = 90°.
	c = 15.6349(9) Å	γ = 90°.
Volume	1689.99(18) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Density (calculated)	1.271 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	1.837 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	688	
Crystal size	0.240 x 0.200 x 0.200 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	5.398 to 66.697°.	
Index ranges	-11<=h<=11, -13<=k<=13, -18<=l<=18	
Reflections collected	10636	
Independent reflections	2985 [R(int) = 0.0432]	
Completeness to theta = 66.697°	99.4 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.69 and 0.63	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	2985 / 0 / 203	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.063	

## Chapter 11. Appendix

---

Final R indices [ $I > 2\sigma(I)$ ]	R1 = 0.0308, wR2 = 0.0747
R indices (all data)	R1 = 0.0330, wR2 = 0.0759
Absolute structure parameter	0.054(9)
Extinction coefficient	n/a
Largest diff. peak and hole	0.188 and -0.272 e.Å <sup>-3</sup>

Table 2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for ohj335\_0m.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
S(1)	1445(1)	4537(1)	9397(1)	19(1)
O(1)	-877(2)	2603(2)	7401(1)	27(1)
O(2)	-1776(2)	2845(2)	8744(1)	25(1)
O(3)	2929(2)	4742(2)	9168(1)	25(1)
N(1)	1236(2)	3210(2)	9861(1)	19(1)
N(2)	1239(2)	2233(2)	7675(1)	20(1)
N(3)	378(2)	2355(2)	7022(1)	27(1)
C(1)	1390(4)	6736(2)	10037(2)	36(1)
C(2)	1108(3)	5471(2)	10348(2)	22(1)
C(3)	1394(3)	2168(2)	9288(1)	18(1)
C(4)	657(3)	2391(2)	8456(2)	18(1)
C(5)	2671(3)	1952(2)	7476(2)	20(1)
C(6)	3715(3)	2692(2)	7780(2)	19(1)
C(7)	5083(3)	2421(2)	7576(2)	23(1)
C(8)	5391(3)	1433(2)	7072(2)	24(1)
C(9)	-412(3)	5303(3)	10597(2)	38(1)
C(10)	-758(3)	2633(2)	8307(2)	20(1)
C(11)	2954(3)	954(2)	6975(2)	24(1)
C(12)	4323(3)	708(2)	6777(2)	25(1)
C(13)	823(3)	1068(2)	9746(2)	24(1)
C(14)	914(3)	-57(2)	9196(2)	32(1)
C(15)	2084(3)	5141(2)	11074(2)	27(1)

Table 3. Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for ohj335\_0m.

---

S(1)-O(3)	1.4901(19)
S(1)-N(1)	1.671(2)
S(1)-C(2)	1.848(2)
O(1)-N(3)	1.374(3)
O(1)-C(10)	1.421(3)
O(2)-C(10)	1.218(3)
N(1)-C(3)	1.482(3)
N(1)-H(1N)	0.9578
N(2)-N(3)	1.323(3)
N(2)-C(4)	1.355(3)
N(2)-C(5)	1.447(3)
C(1)-C(2)	1.526(4)
C(1)-H(1)	0.9800
C(1)-H(6)	0.9800
C(1)-H(7)	0.9800
C(2)-C(15)	1.520(4)
C(2)-C(9)	1.525(4)
C(3)-C(4)	1.502(3)
C(3)-C(13)	1.530(3)
C(3)-H(15)	1.0000
C(4)-C(10)	1.408(3)
C(5)-C(6)	1.388(4)
C(5)-C(11)	1.394(4)
C(6)-C(7)	1.388(4)
C(6)-H(12)	0.9500
C(7)-C(8)	1.392(4)
C(7)-H(11)	0.9500
C(8)-C(12)	1.390(4)
C(8)-H(2)	0.9500
C(9)-H(3)	0.9800
C(9)-H(4)	0.9800
C(9)-H(5)	0.9800
C(11)-C(12)	1.381(4)
C(11)-H(14)	0.9500
C(12)-H(13)	0.9500
C(13)-C(14)	1.530(4)
C(13)-H(16)	0.9900
C(13)-H(17)	0.9900

---

Chapter 11. Appendix

---

C(14)-H(19)	0.9800
C(14)-H(18)	0.9800
C(14)-H(20)	0.9800
C(15)-H(22)	0.9800
C(15)-H(24)	0.9800
C(15)-H(23)	0.9800
O(3)-S(1)-N(1)	110.97(10)
O(3)-S(1)-C(2)	105.91(11)
N(1)-S(1)-C(2)	97.82(11)
N(3)-O(1)-C(10)	111.39(19)
C(3)-N(1)-S(1)	115.45(14)
C(3)-N(1)-H(1N)	106.0
S(1)-N(1)-H(1N)	110.7
N(3)-N(2)-C(4)	115.0(2)
N(3)-N(2)-C(5)	116.96(19)
C(4)-N(2)-C(5)	128.0(2)
N(2)-N(3)-O(1)	103.80(18)
C(2)-C(1)-H(1)	109.5
C(2)-C(1)-H(6)	109.5
H(1)-C(1)-H(6)	109.5
C(2)-C(1)-H(7)	109.5
H(1)-C(1)-H(7)	109.5
H(6)-C(1)-H(7)	109.5
C(15)-C(2)-C(9)	111.9(2)
C(15)-C(2)-C(1)	110.8(2)
C(9)-C(2)-C(1)	111.5(2)
C(15)-C(2)-S(1)	110.71(18)
C(9)-C(2)-S(1)	107.66(18)
C(1)-C(2)-S(1)	103.93(17)
N(1)-C(3)-C(4)	110.13(18)
N(1)-C(3)-C(13)	108.53(18)
C(4)-C(3)-C(13)	111.7(2)
N(1)-C(3)-H(15)	108.8
C(4)-C(3)-H(15)	108.8
C(13)-C(3)-H(15)	108.8
N(2)-C(4)-C(10)	106.0(2)
N(2)-C(4)-C(3)	124.3(2)
C(10)-C(4)-C(3)	129.2(2)
C(6)-C(5)-C(11)	122.1(2)

---

C(6)-C(5)-N(2)	119.0(2)
C(11)-C(5)-N(2)	118.8(2)
C(5)-C(6)-C(7)	118.4(2)
C(5)-C(6)-H(12)	120.8
C(7)-C(6)-H(12)	120.8
C(6)-C(7)-C(8)	120.4(2)
C(6)-C(7)-H(11)	119.8
C(8)-C(7)-H(11)	119.8
C(12)-C(8)-C(7)	119.9(3)
C(12)-C(8)-H(2)	120.1
C(7)-C(8)-H(2)	120.1
C(2)-C(9)-H(3)	109.5
C(2)-C(9)-H(4)	109.5
H(3)-C(9)-H(4)	109.5
C(2)-C(9)-H(5)	109.5
H(3)-C(9)-H(5)	109.5
H(4)-C(9)-H(5)	109.5
O(2)-C(10)-C(4)	136.3(2)
O(2)-C(10)-O(1)	119.9(2)
C(4)-C(10)-O(1)	103.8(2)
C(12)-C(11)-C(5)	118.3(2)
C(12)-C(11)-H(14)	120.9
C(5)-C(11)-H(14)	120.9
C(11)-C(12)-C(8)	120.8(2)
C(11)-C(12)-H(13)	119.6
C(8)-C(12)-H(13)	119.6
C(14)-C(13)-C(3)	112.6(2)
C(14)-C(13)-H(16)	109.1
C(3)-C(13)-H(16)	109.1
C(14)-C(13)-H(17)	109.1
C(3)-C(13)-H(17)	109.1
H(16)-C(13)-H(17)	107.8
C(13)-C(14)-H(19)	109.5
C(13)-C(14)-H(18)	109.5
H(19)-C(14)-H(18)	109.5
C(13)-C(14)-H(20)	109.5
H(19)-C(14)-H(20)	109.5
H(18)-C(14)-H(20)	109.5
C(2)-C(15)-H(22)	109.5
C(2)-C(15)-H(24)	109.5

---



Chapter 11. Appendix

---

H(22)-C(15)-H(24)	109.5
C(2)-C(15)-H(23)	109.5
H(22)-C(15)-H(23)	109.5
H(24)-C(15)-H(23)	109.5

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

---

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for ohj335\_0m. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\sigma^2 [ h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
S(1)	25(1)	15(1)	16(1)	-1(1)	1(1)	-1(1)
O(1)	23(1)	38(1)	21(1)	-1(1)	-4(1)	2(1)
O(2)	22(1)	28(1)	27(1)	0(1)	2(1)	1(1)
O(3)	32(1)	20(1)	23(1)	-2(1)	9(1)	-5(1)
N(1)	26(1)	17(1)	14(1)	-1(1)	1(1)	-3(1)
N(2)	24(1)	20(1)	16(1)	0(1)	-2(1)	-1(1)
N(3)	25(1)	38(1)	19(1)	-1(1)	-4(1)	5(1)
C(1)	60(2)	19(1)	28(1)	-4(1)	-4(2)	2(1)
C(2)	25(1)	21(1)	19(1)	-6(1)	0(1)	1(1)
C(3)	21(1)	16(1)	17(1)	-1(1)	1(1)	0(1)
C(4)	24(1)	15(1)	15(1)	-1(1)	3(1)	-2(1)
C(5)	25(1)	20(1)	14(1)	3(1)	1(1)	4(1)
C(6)	24(1)	18(1)	16(1)	-1(1)	2(1)	3(1)
C(7)	25(1)	24(1)	19(1)	1(1)	2(1)	1(1)
C(8)	27(1)	26(1)	17(1)	3(1)	3(1)	8(1)
C(9)	26(1)	44(2)	43(2)	-19(2)	3(1)	2(1)
C(10)	23(1)	18(1)	19(1)	0(1)	-2(1)	-1(1)
C(11)	34(1)	22(1)	16(1)	-1(1)	-2(1)	0(1)
C(12)	35(2)	23(1)	18(1)	-1(1)	2(1)	8(1)
C(13)	29(1)	19(1)	24(1)	5(1)	-3(1)	-5(1)
C(14)	30(1)	18(1)	48(2)	0(1)	-11(1)	0(1)
C(15)	35(2)	28(1)	20(1)	-5(1)	-1(1)	1(1)

Table 5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$ ) for ohj335\_0m.

	x	y	z	U(eq)
H(1N)	1899	3101	10311	23
H(1)	1212	7299	10503	54
H(6)	778	6918	9554	54
H(7)	2361	6803	9855	54
H(15)	2405	2044	9169	22
H(12)	3499	3367	8121	23
H(11)	5814	2913	7780	27
H(2)	6328	1256	6930	28
H(3)	-554	4489	10805	56
H(4)	-1003	5441	10096	56
H(5)	-657	5870	11049	56
H(14)	2225	456	6776	29
H(13)	4538	34	6434	30
H(16)	1353	942	10281	29
H(17)	-160	1211	9902	29
H(19)	350	47	8680	48
H(18)	567	-739	9523	48
H(20)	1884	-198	9034	48
H(22)	2033	5748	11523	41
H(24)	3038	5093	10857	41
H(23)	1812	4367	11311	41

Table 6. Hydrogen bonds for ohj335\_0m [ $\text{\AA}$  and  $^\circ$ ].

---

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	$\angle(\text{DHA})$
N(1)-H(1N)...O(2)#1	0.96	2.22	3.134(3)	158.7
C(6)-H(12)...O(3)	0.95	2.32	3.254(3)	168.6
C(13)-H(17)...O(3)#2	0.99	2.58	3.386(3)	138.9

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1  $x+1/2, -y+1/2, -z+2$  #2  $x-1/2, -y+1/2, -z+2$ 

---

**Xray crystal structure for (*R*)-2-methyl-*N*-((*S*)-phenyl(1-phenyl-1*H*-pyrazol-5-yl)methyl)propane-2-sulfonamide (196a)**

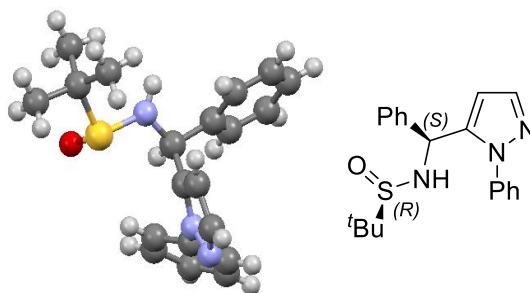


Table 1. Crystal data and structure refinement for ohj347\_0m\_a.

Identification code	ohj347_0m_a	
Empirical formula	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O S	
Formula weight	353.47	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54178 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	
Unit cell dimensions	a = 7.4103(2) Å	α = 90°.
	b = 39.2671(15) Å	β = 90°.
	c = 6.3317(3) Å	γ = 90°.
Volume	1842.40(12) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Density (calculated)	1.274 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	1.651 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	752	
Crystal size	0.120 x 0.120 x 0.060 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.250 to 66.628°.	
Index ranges	-8 ≤ h ≤ 7, -46 ≤ k ≤ 44, -7 ≤ l ≤ 6	
Reflections collected	9613	
Independent reflections	3230 [R(int) = 0.0826]	
Completeness to theta = 66.628°	99.7 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.89 and 0.78	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	3230 / 0 / 229	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.099	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0576, wR2 = 0.1255	
R indices (all data)	R1 = 0.0745, wR2 = 0.1321	
Absolute structure parameter	0.12(2)	
Extinction coefficient	n/a	

Largest diff. peak and hole

0.409 and -0.349 e.Å<sup>-3</sup>

Table 2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for ohj347\_0m\_a.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
S(1)	7678(2)	6851(1)	2282(2)	20(1)
O(1)	7931(6)	6748(1)	45(7)	33(1)
N(1)	3697(5)	6186(1)	3999(7)	16(1)
N(2)	2242(6)	6285(1)	5144(7)	21(1)
N(3)	8299(5)	6541(1)	3943(7)	18(1)
C(1)	2884(7)	6506(1)	6528(9)	24(1)
C(2)	4755(7)	6555(1)	6330(9)	19(1)
C(3)	5246(6)	6346(1)	4682(8)	16(1)
C(4)	7109(6)	6239(1)	3914(9)	18(1)
C(5)	7832(6)	5962(1)	5368(8)	16(1)
C(6)	7746(7)	5625(1)	4761(9)	21(1)
C(7)	8306(7)	5368(1)	6120(10)	24(1)
C(8)	8986(7)	5453(1)	8079(10)	24(1)
C(9)	9100(6)	5791(1)	8682(10)	21(1)
C(10)	8502(6)	6047(1)	7361(9)	18(1)
C(11)	3544(6)	5914(1)	2528(9)	18(1)
C(12)	2726(7)	5612(1)	3173(9)	22(1)
C(13)	2682(8)	5339(1)	1787(9)	29(1)
C(14)	3434(7)	5367(2)	-195(9)	26(1)
C(15)	4192(7)	5673(2)	-846(10)	26(1)
C(16)	4229(6)	5948(1)	513(9)	21(1)
C(17)	9504(6)	7156(1)	2890(9)	18(1)
C(18)	9422(7)	7238(1)	5240(9)	23(1)
C(19)	11320(7)	7013(1)	2177(10)	23(1)
C(20)	9018(8)	7468(1)	1553(9)	23(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for ohj347\_0m\_a.

---

S(1)-O(1)	1.484(4)
S(1)-N(3)	1.673(4)
S(1)-C(17)	1.848(5)
N(1)-N(2)	1.356(6)
N(1)-C(3)	1.380(7)
N(1)-C(11)	1.420(7)
N(2)-C(1)	1.324(7)
N(3)-C(4)	1.478(6)
N(3)-H(3)	0.8800
C(1)-C(2)	1.405(8)
C(1)-H(1)	0.9500
C(2)-C(3)	1.375(8)
C(2)-H(2)	0.9500
C(3)-C(4)	1.523(7)
C(4)-C(5)	1.521(7)
C(4)-H(4)	1.0000
C(5)-C(6)	1.381(7)
C(5)-C(10)	1.396(7)
C(6)-C(7)	1.389(8)
C(6)-H(6)	0.9500
C(7)-C(8)	1.380(8)
C(7)-H(7)	0.9500
C(8)-C(9)	1.386(8)
C(8)-H(8)	0.9500
C(9)-C(10)	1.379(8)
C(9)-H(9)	0.9500
C(10)-H(10)	0.9500
C(11)-C(16)	1.379(8)
C(11)-C(12)	1.395(7)
C(12)-C(13)	1.386(8)
C(12)-H(12)	0.9500
C(13)-C(14)	1.377(8)
C(13)-H(13)	0.9500
C(14)-C(15)	1.388(8)
C(14)-H(14)	0.9500
C(15)-C(16)	1.381(8)
C(15)-H(15)	0.9500
C(16)-H(16)	0.9500

---



C(17)-C(18)	1.523(8)
C(17)-C(19)	1.526(7)
C(17)-C(20)	1.533(7)
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(19)-H(19A)	0.9800
C(19)-H(19B)	0.9800
C(19)-H(19C)	0.9800
C(20)-H(20A)	0.9800
C(20)-H(20B)	0.9800
C(20)-H(20C)	0.9800
O(1)-S(1)-N(3)	111.5(2)
O(1)-S(1)-C(17)	106.4(2)
N(3)-S(1)-C(17)	97.9(2)
N(2)-N(1)-C(3)	111.3(4)
N(2)-N(1)-C(11)	120.2(4)
C(3)-N(1)-C(11)	128.0(4)
C(1)-N(2)-N(1)	104.9(4)
C(4)-N(3)-S(1)	114.3(3)
C(4)-N(3)-H(3)	122.9
S(1)-N(3)-H(3)	122.9
N(2)-C(1)-C(2)	112.6(5)
N(2)-C(1)-H(1)	123.7
C(2)-C(1)-H(1)	123.7
C(3)-C(2)-C(1)	104.4(5)
C(3)-C(2)-H(2)	127.8
C(1)-C(2)-H(2)	127.8
C(2)-C(3)-N(1)	106.8(4)
C(2)-C(3)-C(4)	130.3(5)
N(1)-C(3)-C(4)	121.8(5)
N(3)-C(4)-C(5)	110.8(4)
N(3)-C(4)-C(3)	108.3(4)
C(5)-C(4)-C(3)	108.9(4)
N(3)-C(4)-H(4)	109.6
C(5)-C(4)-H(4)	109.6
C(3)-C(4)-H(4)	109.6
C(6)-C(5)-C(10)	119.7(5)
C(6)-C(5)-C(4)	120.0(5)

---

C(10)-C(5)-C(4)	120.2(5)
C(5)-C(6)-C(7)	120.7(5)
C(5)-C(6)-H(6)	119.6
C(7)-C(6)-H(6)	119.6
C(8)-C(7)-C(6)	119.4(5)
C(8)-C(7)-H(7)	120.3
C(6)-C(7)-H(7)	120.3
C(7)-C(8)-C(9)	120.1(5)
C(7)-C(8)-H(8)	120.0
C(9)-C(8)-H(8)	120.0
C(10)-C(9)-C(8)	120.7(5)
C(10)-C(9)-H(9)	119.6
C(8)-C(9)-H(9)	119.6
C(9)-C(10)-C(5)	119.4(5)
C(9)-C(10)-H(10)	120.3
C(5)-C(10)-H(10)	120.3
C(16)-C(11)-C(12)	120.8(5)
C(16)-C(11)-N(1)	120.4(5)
C(12)-C(11)-N(1)	118.8(5)
C(13)-C(12)-C(11)	119.0(5)
C(13)-C(12)-H(12)	120.5
C(11)-C(12)-H(12)	120.5
C(14)-C(13)-C(12)	120.3(5)
C(14)-C(13)-H(13)	119.9
C(12)-C(13)-H(13)	119.9
C(13)-C(14)-C(15)	120.3(5)
C(13)-C(14)-H(14)	119.8
C(15)-C(14)-H(14)	119.8
C(16)-C(15)-C(14)	119.9(6)
C(16)-C(15)-H(15)	120.0
C(14)-C(15)-H(15)	120.0
C(11)-C(16)-C(15)	119.6(5)
C(11)-C(16)-H(16)	120.2
C(15)-C(16)-H(16)	120.2
C(18)-C(17)-C(19)	113.7(5)
C(18)-C(17)-C(20)	111.2(4)
C(19)-C(17)-C(20)	109.7(4)
C(18)-C(17)-S(1)	108.1(4)
C(19)-C(17)-S(1)	110.3(4)
C(20)-C(17)-S(1)	103.3(4)

---

C(17)-C(18)-H(18A)	109.5
C(17)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(17)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(17)-C(19)-H(19A)	109.5
C(17)-C(19)-H(19B)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5
C(17)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
C(17)-C(20)-H(20A)	109.5
C(17)-C(20)-H(20B)	109.5
H(20A)-C(20)-H(20B)	109.5
C(17)-C(20)-H(20C)	109.5
H(20A)-C(20)-H(20C)	109.5
H(20B)-C(20)-H(20C)	109.5

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

---

Table 4. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for ohj347\_0m\_a. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2 [ h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
S(1)	17(1)	16(1)	26(1)	3(1)	-6(1)	-3(1)
O(1)	44(3)	23(2)	33(2)	1(2)	-9(2)	-7(2)
N(1)	8(2)	23(2)	16(2)	1(2)	-3(2)	1(2)
N(2)	9(2)	24(2)	29(3)	2(2)	5(2)	4(2)
N(3)	9(2)	18(2)	26(3)	3(2)	-3(2)	-4(2)
C(1)	19(3)	23(3)	30(3)	1(2)	3(2)	9(2)
C(2)	18(2)	14(3)	25(3)	2(2)	-6(2)	4(2)
C(3)	11(2)	15(3)	22(3)	2(2)	-2(2)	-1(2)
C(4)	11(2)	16(3)	26(3)	-2(2)	3(2)	1(2)
C(5)	6(2)	19(3)	23(3)	4(2)	3(2)	1(2)
C(6)	10(2)	18(3)	34(3)	-1(2)	6(2)	0(2)
C(7)	20(3)	11(3)	41(4)	-1(3)	4(3)	0(2)
C(8)	16(3)	22(3)	35(4)	12(2)	4(2)	2(2)
C(9)	12(2)	23(3)	28(3)	4(2)	-1(2)	-2(2)
C(10)	10(2)	16(2)	28(3)	0(2)	7(2)	-3(2)
C(11)	11(2)	17(3)	27(3)	2(2)	-7(2)	0(2)
C(12)	16(2)	25(3)	25(3)	8(2)	0(2)	-5(2)
C(13)	27(3)	22(3)	38(4)	3(2)	-9(3)	-10(2)
C(14)	24(3)	22(3)	33(4)	-10(3)	-12(3)	2(2)
C(15)	17(3)	35(4)	25(3)	1(3)	-5(2)	1(2)
C(16)	8(2)	24(3)	30(3)	2(2)	-4(2)	-5(2)
C(17)	14(2)	12(3)	27(3)	0(2)	-2(2)	-5(2)
C(18)	20(3)	21(3)	29(3)	-5(3)	0(2)	-1(2)
C(19)	20(3)	21(3)	29(3)	1(2)	5(3)	-3(2)
C(20)	29(3)	21(3)	20(3)	4(2)	1(2)	-2(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$ ) for ohj347\_0m\_a.

---

	x	y	z	U(eq)
H(3)	9254	6556	4764	21
H(1)	2159	6620	7544	29
H(2)	5510	6699	7149	23
H(4)	7019	6149	2441	21
H(6)	7299	5568	3400	25
H(7)	8221	5136	5703	29
H(8)	9376	5279	9016	29
H(9)	9596	5848	10020	25
H(10)	8546	6278	7804	22
H(12)	2208	5593	4540	26
H(13)	2131	5131	2205	35
H(14)	3434	5177	-1120	32
H(15)	4684	5693	-2226	31
H(16)	4724	6159	63	25
H(18A)	9905	7046	6049	35
H(18B)	8166	7279	5652	35
H(18C)	10141	7442	5528	35
H(19A)	11268	6959	667	35
H(19B)	11592	6806	2977	35
H(19C)	12266	7182	2429	35
H(20A)	9895	7650	1815	35
H(20B)	7807	7547	1935	35
H(20C)	9040	7406	54	35

---

Table 6. Hydrogen bonds for ohj347\_0m\_a [ $\text{\AA}$  and  $^\circ$ ].

---

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	$\angle(\text{DHA})$
C(19)-H(19B)...N(2)#1	0.98	2.51	3.489(7)	177.9
C(2)-H(2)...O(1)#2	0.95	2.57	3.413(7)	147.6
N(3)-H(3)...N(2)#1	0.88	2.47	3.182(6)	138.4
N(3)-H(3)...N(2)#1	0.88	2.47	3.182(6)	138.4
C(2)-H(2)...O(1)#2	0.95	2.57	3.413(7)	147.6
C(19)-H(19B)...N(2)#1	0.98	2.51	3.489(7)	177.9

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1  $x+1, y, z$  #2  $x, y, z+1$ 

---