

Complexation of the cesium cation by the host p-tert-butyl-calix[6]arene-hexaacetamide.

Urs C. Meier and Christian Detellier

Submitted for publication to J.C.S. Dalton Trans. On July 9, 2003

Supplementary crystallographic data, compound I

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^3$) for cd001. (\mathcal{I})
 $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
N(1)	7455(2)	9246(2)	-7(1)	63(1)
N(2)	4119(3)	9132(3)	1596(2)	109(2)
N(3)	-191(2)	3605(2)	765(1)	58(1)
O(1)	6033(2)	7457(2)	-680(1)	46(1)
O(2)	6081(2)	8613(2)	203(1)	70(1)
O(3)	3064(1)	7743(2)	533(1)	45(1)
O(4)	2780(2)	8314(2)	1552(1)	94(1)
O(5)	2227(1)	4014(2)	1032(1)	42(1)
O(6)	1083(2)	2855(2)	509(2)	100(1)
O(7)	895(3)	8061(4)	1608(2)	129(2)
C(1)	5432(1)	7612(1)	-1116(1)	38(1)
C(2)	5706(1)	7491(1)	-1652(1)	40(1)
C(3)	5082(1)	7640(2)	-2083(1)	46(1)
C(4)	4184(1)	7911(2)	-1978(1)	50(1)
C(5)	3911(1)	8032(2)	-1442(1)	48(1)
C(6)	4535(1)	7883(2)	-1011(1)	41(1)
C(7)	3490(3)	8077(3)	-2453(2)	73(1)
C(8)	3964(6)	8757(8)	-2876(4)	115(4)
C(9)	3394(6)	7169(7)	-2774(4)	120(3)
C(10)	2572(6)	8469(10)	-2285(3)	134(5)
C(8')	3801(12)	7902(17)	-2986(8)	115(4)
C(9')	2617(13)	7404(15)	-2372(8)	120(3)
C(10')	3107(12)	9089(19)	-2398(7)	134(5)
C(11)	6804(2)	8078(3)	-618(2)	54(1)
C(12)	6740(2)	8675(2)	-107(2)	52(1)
C(13)	8231(4)	9344(5)	-353(3)	118(3)
C(14)	8213(11)	10102(8)	-663(5)	118(3)
C(13')	8231(4)	9344(5)	-353(3)	118(3)
C(14')	9066(10)	9519(7)	-271(5)	118(3)
C(15)	7457(3)	9812(3)	498(2)	82(2)
C(16)	8041(4)	9378(5)	941(2)	125(2)
C(17)	4175(2)	7911(2)	-433(1)	44(1)
C(18)	3264(1)	6940(1)	238(1)	34(1)
C(19)	3757(1)	6984(1)	-242(1)	37(1)
C(20)	3876(1)	6190(1)	-555(1)	37(1)
C(21)	3503(1)	5352(1)	-388(1)	35(1)
C(22)	3010(1)	5308(1)	92(1)	36(1)
C(23)	2891(1)	6102(1)	405(1)	35(1)
C(24)	3658(2)	4480(2)	-752(1)	43(1)
C(25)	4706(3)	4290(3)	-782(2)	80(1)
C(26)	3323(3)	4682(3)	-1332(2)	63(1)
C(27)	3162(4)	3635(3)	-553(2)	89(2)
C(28)	3830(2)	8158(3)	817(2)	56(1)
C(29)	3520(3)	8558(3)	1339(2)	62(1)
C(30)	5041(4)	9400(4)	1392(2)	96(2)
C(31)	5805(4)	8829(5)	1630(3)	115(2)
C(32)	3902(4)	9335(4)	2251(2)	74(2)
C(33)	3529(6)	10135(5)	2255(4)	153(3)
C(32')	3719(19)	10024(16)	1826(11)	74(2)

C(33')	3529(6)	10135(5)	2255(4)	153(3)
C(34)	2354(2)	6030(2)	939(1)	39(1)
C(35)	2850(1)	5455(1)	1386(1)	37(1)
C(36)	3397(1)	5926(1)	1768(1)	41(1)
C(37)	3910(1)	5435(1)	2158(1)	44(1)
C(38)	3877(1)	4472(1)	2165(1)	41(1)
C(39)	3331(1)	4000(1)	1782(1)	41(1)
C(40)	2817(1)	4492(1)	1393(1)	37(1)
C(41)	4459(2)	5972(2)	2617(1)	49(1)
C(42)	4902(4)	6838(3)	2388(2)	99(2)
C(43)	5239(3)	5392(3)	2852(2)	88(2)
C(44)	3790(4)	6226(5)	3069(2)	130(3)
C(45)	1303(2)	3944(3)	1221(1)	49(1)
C(46)	725(2)	3424(3)	802(2)	52(1)
C(47)	-643(3)	4367(4)	1052(3)	107(2)
C(48)	-599(5)	5284(5)	716(4)	158(3)
C(49)	-769(3)	3087(3)	377(2)	72(1)
C(50)	-1213(4)	2261(4)	608(3)	123(2)
C(51)	3329(2)	2927(2)	1790(1)	42(1)
C(52)	537(4)	7909(4)	1092(2)	99(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for cd001.

N(1)-C(12)	1.342(5)
N(1)-C(13)	1.432(6)
N(1)-C(15)	1.481(5)
N(2)-C(29)	1.344(5)
N(2)-C(32')	1.52(3)
N(2)-C(30)	1.490(6)
N(2)-C(32)	1.666(7)
N(3)-C(46)	1.355(4)
N(3)-C(49)	1.458(5)
N(3)-C(47)	1.467(6)
O(1)-C(1)	1.381(3)
O(1)-C(11)	1.439(4)
O(2)-C(12)	1.238(4)
O(3)-C(18)	1.399(2)
O(3)-C(28)	1.430(4)
O(4)-C(29)	1.255(5)
O(5)-C(40)	1.397(2)
O(5)-C(45)	1.433(4)
O(6)-C(46)	1.213(4)
O(7)-C(52)	1.372(6)
C(1)-C(2)	1.3900
C(1)-C(6)	1.3900
C(2)-C(3)	1.3900
C(2)-C(51)#1	1.570(4)
C(3)-C(4)	1.3900
C(4)-C(5)	1.3900
C(4)-C(7)	1.539(4)
C(5)-C(6)	1.3900
C(6)-C(17)	1.520(4)
C(7)-C(8')	1.41(2)
C(7)-C(10)	1.514(9)
C(7)-C(9)	1.533(10)
C(7)-C(10')	1.57(2)
C(7)-C(8)	1.594(9)
C(7)-C(9')	1.612(18)
C(11)-C(12)	1.523(5)
C(13)-C(14)	1.331(13)
C(15)-C(16)	1.498(8)
C(17)-C(19)	1.545(3)
C(18)-C(19)	1.3900
C(18)-C(23)	1.3900
C(19)-C(20)	1.3900
C(20)-C(21)	1.3900
C(21)-C(22)	1.3900
C(21)-C(24)	1.560(3)
C(22)-C(23)	1.3900
C(23)-C(34)	1.540(3)
C(24)-C(27)	1.503(5)
C(24)-C(26)	1.518(5)
C(24)-C(25)	1.549(5)
C(28)-C(29)	1.482(5)
C(30)-C(31)	1.490(8)
C(32)-C(33)	1.275(8)
C(34)-C(35)	1.539(3)
C(35)-C(36)	1.3900
C(35)-C(40)	1.3900

C(36)-C(37)	1.3900
C(37)-C(38)	1.3900
C(37)-C(41)	1.567(3)
C(38)-C(39)	1.3900
C(39)-C(40)	1.3900
C(39)-C(51)	1.548(3)
C(41)-C(43)	1.510(6)
C(41)-C(42)	1.519(6)
C(41)-C(44)	1.533(6)
C(45)-C(46)	1.509(5)
C(47)-C(48)	1.559(9)
C(49)-C(50)	1.474(7)
C(51)-C(2)#1	1.570(13)

C(12)-N(1)-C(13)	124.7(4)
C(12)-N(1)-C(15)	118.4(3)
C(13)-N(1)-C(15)	116.9(3)
C(29)-N(2)-C(32')	116.3(10)
C(29)-N(2)-C(30)	125.4(3)
C(32')-N(2)-C(30)	104.9(10)
C(29)-N(2)-C(32)	115.0(4)
C(32')-N(2)-C(32)	54.2(9)
C(30)-N(2)-C(32)	117.9(4)
C(46)-N(3)-C(49)	119.6(3)
C(46)-N(3)-C(47)	124.2(3)
C(49)-N(3)-C(47)	115.9(3)
C(1)-O(1)-C(11)	117.1(2)
C(18)-O(3)-C(28)	115.4(2)
C(40)-O(5)-C(45)	113.3(2)
O(1)-C(1)-C(2)	121.37(16)
O(1)-C(1)-C(6)	118.62(16)
C(2)-C(1)-C(6)	120.0
C(3)-C(2)-C(1)	120.0
C(3)-C(2)-C(51)#1	117.79(17)
C(1)-C(2)-C(51)#1	121.80(17)
C(2)-C(3)-C(4)	120.0
C(5)-C(4)-C(3)	120.0
C(5)-C(4)-C(7)	119.7(2)
C(3)-C(4)-C(7)	120.3(2)
C(4)-C(5)-C(6)	120.0
C(5)-C(6)-C(1)	120.0
C(5)-C(6)-C(17)	117.97(18)
C(1)-C(6)-C(17)	121.62(18)
C(8')-C(7)-C(10)	128.3(8)
C(8')-C(7)-C(9)	53.2(9)
C(10)-C(7)-C(9)	112.8(7)
C(8')-C(7)-C(4)	116.8(7)
C(10)-C(7)-C(4)	114.7(4)
C(9)-C(7)-C(4)	107.7(4)
C(8')-C(7)-C(10')	111.5(11)
C(10)-C(7)-C(10')	46.7(8)
C(9)-C(7)-C(10')	144.1(8)
C(4)-C(7)-C(10')	108.0(7)
C(8')-C(7)-C(8)	50.0(9)
C(10)-C(7)-C(8)	110.1(6)
C(9)-C(7)-C(8)	103.2(6)
C(4)-C(7)-C(8)	107.5(4)
C(10')-C(7)-C(8)	59.1(9)
C(8')-C(7)-C(9')	105.9(12)
C(10)-C(7)-C(9')	59.4(9)

C(9)-C(7)-C(9')	59.0(8)
C(4)-C(7)-C(9')	108.5(7)
C(10')-C(7)-C(9')	105.6(11)
C(8)-C(7)-C(9')	143.4(7)
O(1)-C(11)-C(12)	112.1(3)
O(2)-C(12)-N(1)	122.7(4)
O(2)-C(12)-C(11)	121.6(3)
N(1)-C(12)-C(11)	115.7(3)
C(14)-C(13)-N(1)	114.3(9)
N(1)-C(15)-C(16)	111.3(4)
C(6)-C(17)-C(19)	113.9(2)
C(19)-C(18)-C(23)	120.0
C(19)-C(18)-O(3)	120.97(15)
C(23)-C(18)-O(3)	118.78(16)
C(18)-C(19)-C(20)	120.0
C(18)-C(19)-C(17)	120.57(17)
C(20)-C(19)-C(17)	119.43(17)
C(21)-C(20)-C(19)	120.0
C(20)-C(21)-C(22)	120.0
C(20)-C(21)-C(24)	118.10(17)
C(22)-C(21)-C(24)	121.90(17)
C(23)-C(22)-C(21)	120.0
C(22)-C(23)-C(18)	120.0
C(22)-C(23)-C(34)	118.94(16)
C(18)-C(23)-C(34)	121.05(16)
C(27)-C(24)-C(26)	108.2(3)
C(27)-C(24)-C(25)	110.5(3)
C(26)-C(24)-C(25)	106.4(3)
C(27)-C(24)-C(21)	113.2(3)
C(26)-C(24)-C(21)	109.4(3)
C(25)-C(24)-C(21)	108.9(3)
O(3)-C(28)-C(29)	109.5(3)
O(4)-C(29)-N(2)	122.0(4)
O(4)-C(29)-C(28)	121.8(3)
N(2)-C(29)-C(28)	115.9(3)
N(2)-C(30)-C(31)	113.1(5)
C(33)-C(32)-N(2)	104.9(6)
C(23)-C(34)-C(35)	113.6(2)
C(36)-C(35)-C(40)	120.0
C(36)-C(35)-C(34)	117.71(17)
C(40)-C(35)-C(34)	122.14(17)
C(35)-C(36)-C(37)	120.0
C(38)-C(37)-C(36)	120.0
C(38)-C(37)-C(41)	120.14(18)
C(36)-C(37)-C(41)	119.66(18)
C(37)-C(38)-C(39)	120.0
C(40)-C(39)-C(38)	120.0
C(40)-C(39)-C(51)	121.18(17)
C(38)-C(39)-C(51)	118.80(17)
C(39)-C(40)-C(35)	120.0
C(39)-C(40)-O(5)	119.49(16)
C(35)-C(40)-O(5)	120.39(15)
C(43)-C(41)-C(42)	106.0(4)
C(43)-C(41)-C(44)	109.9(4)
C(42)-C(41)-C(44)	110.5(4)
C(43)-C(41)-C(37)	111.3(3)
C(42)-C(41)-C(37)	110.8(3)
C(44)-C(41)-C(37)	108.3(3)
O(5)-C(45)-C(46)	109.0(3)
O(6)-C(46)-N(3)	121.6(3)

O(6)-C(46)-C(45)	119.9(3)
N(3)-C(46)-C(45)	118.5(3)
N(3)-C(47)-C(48)	111.1(5)
N(3)-C(49)-C(50)	114.6(4)
C(39)-C(51)-C(2)#1	112.3(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
#1 -x+1,-y+1,-z

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^3$) for cd001. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(1)	46(2)	67(2)	77(2)	-18(2)	-1(2)	-12(2)
N(2)	72(3)	139(4)	118(3)	-96(3)	29(2)	-39(3)
N(3)	36(2)	67(2)	72(2)	-11(2)	-13(2)	-2(1)
O(1)	44(1)	49(1)	44(1)	7(1)	-11(1)	-3(1)
O(2)	58(2)	77(2)	76(2)	-24(2)	4(2)	-12(1)
O(3)	36(1)	42(1)	57(1)	-11(1)	-7(1)	2(1)
O(4)	57(2)	128(3)	98(2)	-59(2)	22(2)	-21(2)
O(5)	32(1)	54(1)	40(1)	0(1)	-6(1)	-7(1)
O(6)	54(2)	96(2)	149(3)	-68(2)	-23(2)	9(2)
O(7)	75(2)	218(5)	94(3)	-38(3)	16(2)	-26(3)
C(1)	38(2)	36(2)	39(2)	10(1)	-10(2)	-6(1)
C(2)	39(2)	38(2)	43(2)	8(2)	-6(2)	-6(1)
C(3)	48(2)	45(2)	43(2)	7(2)	-8(2)	-2(2)
C(4)	47(2)	50(2)	52(2)	6(2)	-13(2)	1(2)
C(5)	38(2)	46(2)	59(2)	8(2)	-5(2)	2(2)
C(6)	43(2)	35(2)	46(2)	8(2)	-6(2)	-3(1)
C(7)	60(3)	99(3)	59(3)	5(2)	-25(2)	18(2)
C(8)	86(5)	161(8)	98(6)	81(7)	-31(4)	-2(6)
C(9)	93(6)	163(8)	102(6)	-15(6)	-58(5)	-10(6)
C(10)	60(6)	268(16)	73(5)	31(7)	-16(5)	72(7)
C(8')	86(5)	161(8)	98(6)	81(7)	-31(4)	-2(6)
C(9')	93(6)	163(8)	102(6)	-15(6)	-58(5)	-10(6)
C(10')	60(6)	268(16)	73(5)	31(7)	-16(5)	72(7)
C(11)	40(2)	63(2)	57(2)	-4(2)	-9(2)	-6(2)
C(12)	39(2)	53(2)	64(2)	-4(2)	-5(2)	4(2)
C(13)	71(4)	149(6)	134(5)	-60(5)	30(4)	-64(4)
C(14)	156(9)	80(6)	119(7)	-15(5)	31(6)	-9(5)
C(13')	71(4)	149(6)	134(5)	-60(5)	30(4)	-64(4)
C(14')	156(9)	80(6)	119(7)	-15(5)	31(6)	-9(5)
C(15)	59(3)	70(3)	116(4)	-41(3)	14(3)	-12(2)
C(16)	92(4)	198(7)	84(4)	-40(4)	-18(3)	4(4)
C(17)	41(2)	41(2)	50(2)	2(2)	-3(2)	0(1)
C(18)	30(2)	35(2)	37(2)	-5(1)	-5(1)	4(1)
C(19)	29(2)	36(2)	45(2)	2(2)	-9(1)	3(1)
C(20)	34(2)	42(2)	35(2)	4(2)	-5(1)	2(1)
C(21)	30(2)	39(2)	35(2)	2(1)	-9(1)	4(1)
C(22)	34(2)	35(2)	39(2)	4(2)	-7(1)	2(1)
C(23)	30(2)	41(2)	34(2)	0(1)	-12(1)	5(1)
C(24)	48(2)	42(2)	39(2)	-5(2)	-10(2)	8(2)
C(25)	61(3)	86(3)	93(3)	-35(3)	-21(2)	29(2)
C(26)	75(3)	65(2)	49(2)	-13(2)	-14(2)	6(2)
C(27)	144(5)	49(3)	74(3)	-20(2)	24(3)	-20(3)
C(28)	45(2)	64(2)	60(2)	-22(2)	-1(2)	-12(2)
C(29)	44(2)	71(3)	72(3)	-35(2)	8(2)	-5(2)
C(30)	86(4)	104(4)	98(4)	-51(3)	19(3)	-47(3)
C(31)	76(4)	147(5)	121(5)	2(4)	14(3)	-20(4)
C(32)	86(4)	66(4)	69(4)	12(3)	-6(3)	-12(3)
C(33)	163(7)	115(6)	185(9)	-26(6)	77(6)	-17(5)
C(32')	86(4)	66(4)	69(4)	12(3)	-6(3)	-12(3)
C(33')	163(7)	115(6)	185(9)	-26(6)	77(6)	-17(5)

C(34)	31(2)	43(2)	44(2)	-1(2)	0(2)	2(1)
C(35)	27(2)	48(2)	36(2)	-1(2)	1(1)	2(1)
C(36)	38(2)	45(2)	41(2)	0(2)	4(2)	2(1)
C(37)	33(2)	58(2)	40(2)	-4(2)	-1(2)	1(2)
C(38)	38(2)	45(2)	40(2)	4(2)	-5(2)	-2(2)
C(39)	31(2)	53(2)	39(2)	0(2)	0(2)	-3(1)
C(40)	30(2)	46(2)	35(2)	-3(2)	0(1)	-1(1)
C(41)	45(2)	54(2)	46(2)	-13(2)	-10(2)	-2(2)
C(42)	110(4)	86(3)	99(4)	-1(3)	-55(3)	-34(3)
C(43)	84(3)	80(3)	96(3)	-24(3)	-50(3)	6(2)
C(44)	78(3)	221(7)	91(4)	-104(4)	2(3)	-12(4)
C(45)	37(2)	64(2)	47(2)	-1(2)	-2(2)	-8(2)
C(46)	42(2)	47(2)	66(2)	-3(2)	-9(2)	-1(2)
C(47)	40(2)	121(5)	160(5)	-51(4)	-6(3)	3(3)
C(48)	109(5)	96(5)	268(10)	-25(6)	-34(6)	16(4)
C(49)	50(2)	73(3)	92(3)	-12(2)	-28(2)	-4(2)
C(50)	95(4)	108(4)	164(6)	21(4)	-51(4)	-50(3)
C(51)	43(2)	43(2)	41(2)	6(2)	-4(2)	-6(1)
C(52)	83(4)	107(4)	107(4)	-19(3)	-9(3)	9(3)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for cd001.

	x	y	z	U(eq)
H(7)	1466	8081	1598	193
H(3A)	5267	7558	-2446	55
H(5A)	3304	8215	-1370	57
H(8A)	3538	8883	-3179	173
H(8B)	4516	8467	-3014	173
H(8C)	4128	9333	-2694	173
H(9A)	3107	6704	-2548	180
H(9B)	3999	6955	-2878	180
H(9C)	3015	7272	-3100	180
H(10A)	2330	8099	-1989	201
H(10B)	2143	8454	-2594	201
H(10C)	2654	9104	-2162	201
H(8'A)	4052	7280	-3003	173
H(8'B)	4275	8348	-3076	173
H(8'C)	3289	7960	-3246	173
H(9'A)	2810	6764	-2406	180
H(9'B)	2148	7541	-2649	180
H(9'C)	2368	7504	-2012	180
H(10D)	3606	9529	-2437	201
H(10E)	2836	9165	-2043	201
H(10F)	2641	9198	-2682	201
H(11A)	6829	8481	-940	64
H(11B)	7375	7716	-598	64
H(13A)	8794	9353	-123	141
H(13B)	8262	8800	-591	141
H(14A)	8745	10106	-896	177
H(14B)	8228	10648	-431	177
H(14C)	7654	10107	-888	177
H(13C)	8238	8761	-558	141
H(13D)	8032	9817	-618	141
H(14D)	9384	9498	-615	177
H(14E)	9331	9064	-22	177
H(14F)	9130	10133	-112	177
H(15A)	6824	9877	624	98
H(15B)	7692	10433	418	98
H(16A)	8055	9779	1260	187
H(16B)	8662	9293	813	187
H(16C)	7784	8781	1039	187
H(17A)	3704	8395	-412	53
H(17B)	4682	8081	-181	53
H(20A)	4210	6220	-879	44
H(22A)	2758	4741	205	43
H(25A)	4808	3749	-1008	120
H(25B)	4957	4179	-416	120
H(25C)	5009	4823	-940	120
H(26A)	3423	4142	-1559	95
H(26B)	3662	5204	-1475	95
H(26C)	2671	4829	-1332	95
H(27A)	3285	3116	-793	133
H(27B)	2505	3755	-553	133
H(27C)	3376	3487	-185	133

H(28A)	4095	8647	591	68
H(28B)	4307	7690	890	68
H(30A)	5155	10053	1480	115
H(30B)	5037	9337	993	115
H(31A)	6384	9020	1474	172
H(31B)	5695	8180	1547	172
H(31C)	5836	8914	2023	172
H(32A)	3482	8866	2393	89
H(32B)	4472	9330	2473	89
H(33A)	3370	10295	2627	230
H(33B)	2976	10130	2025	230
H(33C)	3958	10590	2118	230
H(32C)	4161	10514	1741	89
H(32D)	3162	10154	1605	89
H(33D)	3277	10753	2295	230
H(33E)	4072	10070	2491	230
H(33F)	3072	9680	2357	230
H(34A)	1751	5750	857	47
H(34B)	2247	6657	1079	47
H(36A)	3419	6578	1763	50
H(38A)	4224	4139	2428	50
H(42A)	4431	7230	2221	149
H(42B)	5343	6663	2114	149
H(42C)	5216	7174	2681	149
H(43A)	4993	4828	3007	131
H(43B)	5565	5741	3135	131
H(43C)	5661	5236	2564	131
H(44A)	3510	5666	3209	195
H(44B)	3313	6631	2920	195
H(44C)	4122	6542	3363	195
H(45A)	1047	4565	1276	59
H(45B)	1300	3615	1572	59
H(47A)	-340	4459	1410	129
H(47B)	-1288	4204	1111	129
H(48A)	-884	5780	919	238
H(48B)	-924	5202	369	238
H(48C)	39	5440	652	238
H(49A)	-391	2893	71	87
H(49B)	-1250	3502	231	87
H(50A)	-1565	1943	322	185
H(50B)	-1623	2448	895	185
H(50C)	-745	1847	758	185
H(51A)	2868	2699	1524	51
H(51B)	3151	2712	2153	51
H(52A)	232	7311	1080	149
H(52B)	1030	7917	832	149
H(52C)	94	8392	1000	149
