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 **II**

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for cd002. (II)
U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Cs(1)	3273(1)	8597(1)	852(1)	43(1)
Cs(2)	3031(1)	9990(1)	2069(1)	41(1)
I(1)	3424(1)	7091(1)	-555(1)	91(1)
I(2)	3672(1)	6586(1)	612(1)	86(1)
I(3)	3949(1)	6210(2)	1760(1)	173(1)
I(4)	2314(1)	4275(1)	2234(1)	94(1)
I(5)	2480(1)	3492(1)	3304(1)	79(1)
I(6)	2696(1)	2609(1)	4318(1)	97(1)
O(1)	2258(3)	7998(4)	683(3)	38(2)
O(2)	2302(3)	9338(5)	1058(4)	52(3)
O(3)	2869(3)	8208(4)	2370(3)	37(2)
O(4)	3643(3)	8623(5)	2083(4)	53(3)
O(5)	2735(3)	9943(5)	3172(3)	37(2)
O(6)	3664(4)	9828(8)	3306(4)	93(4)
O(7)	2678(3)	11535(4)	2245(4)	40(2)
O(8)	3561(4)	11469(6)	2107(5)	75(3)
O(9)	2646(3)	10972(5)	849(3)	39(2)
O(10)	3441(3)	10166(5)	1086(4)	43(2)
O(11)	2563(3)	8854(5)	-290(3)	38(2)
O(12)	3498(3)	9221(6)	-130(4)	68(3)
N(1)	1587(4)	9311(5)	1267(5)	63(4)
N(2)	4194(4)	8124(6)	2828(4)	53(3)
N(3)	3895(3)	10091(6)	4224(4)	52(3)
N(4)	3916(3)	12166(6)	2833(4)	51(3)
N(5)	3902(4)	11019(6)	833(6)	71(4)
N(6)	3398(3)	9532(6)	-1036(4)	45(3)
C(1)	2096(3)	6997(4)	24(3)	39(3)
C(2)	2078(3)	6246(4)	-85(2)	39(3)
C(3)	2212(3)	5746(3)	353(3)	41(3)
C(4)	2363(3)	5998(4)	900(3)	48(4)
C(5)	2381(3)	6749(4)	1009(2)	45(3)
C(6)	2247(3)	7249(3)	571(3)	36(3)
C(7)	2177(5)	4904(8)	256(6)	51(4)
C(8)	2052(7)	4690(11)	-362(8)	97(6)
C(9)	1790(6)	4565(10)	476(8)	84(5)
C(10)	2673(7)	4567(11)	568(9)	103(6)
C(11)	1844(4)	8246(7)	833(5)	38(3)
C(12)	1946(5)	9023(7)	1075(5)	38(3)
C(13)	1648(5)	10081(7)	1468(7)	65(5)
C(14)	1224(6)	10532(8)	1194(8)	89(6)
C(15)	1309(7)	8842(14)	1566(8)	53(7)
C(16)	838(7)	8651(14)	1162(11)	60(7)
C(15')	1086(7)	8975(16)	1153(10)	53(7)
C(16')	1064(10)	8529(15)	1636(12)	60(7)
C(17)	2646(5)	7045(7)	1595(5)	42(3)
C(18)	2333(2)	7199(4)	1993(3)	29(3)
C(19)	1944(3)	6744(4)	2001(3)	38(3)
C(20)	1700(2)	6843(4)	2405(3)	31(3)
C(21)	1845(3)	7396(4)	2802(3)	35(3)

C(22)	2234(3)	7850(4)	2794(3)	36(3)
C(23)	2477(2)	7752(4)	2390(3)	37(3)
C(24)	1278(5)	6309(7)	2455(6)	42(3)
C(25)	1123(5)	5811(8)	1950(6)	61(4)
C(26)	1438(5)	5833(8)	2954(7)	62(4)
C(27)	849(6)	6779(9)	2498(7)	74(5)
C(28)	3325(4)	7932(7)	2710(6)	43(3)
C(29)	3727(5)	8257(7)	2505(6)	39(3)
C(30)	4323(6)	7705(7)	3352(6)	69(5)
C(31)	4449(8)	6935(8)	3256(9)	115(7)
C(32)	4606(5)	8414(8)	2656(7)	71(5)
C(33)	4749(6)	9147(8)	2886(8)	98(6)
C(34)	2368(5)	8501(7)	3219(6)	42(3)
C(35)	2046(2)	9173(3)	3132(4)	36(3)
C(36)	1555(3)	9100(3)	3093(4)	41(3)
C(37)	1263(2)	9722(4)	3046(4)	37(3)
C(38)	1464(2)	10418(3)	3037(4)	39(3)
C(39)	1955(2)	10491(3)	3076(4)	36(3)
C(40)	2247(2)	9869(4)	3123(4)	33(3)
C(41)	720(5)	9642(8)	3025(6)	47(4)
C(42)	441(10)	9245(15)	2467(12)	164(11)
C(43)	626(12)	9056(18)	3360(14)	191(13)
C(44)	452(10)	10308(14)	2996(12)	148(10)
C(45)	3030(4)	9991(7)	3734(5)	37(3)
C(46)	3563(5)	9974(8)	3735(7)	56(4)
C(47)	3785(6)	10185(7)	4765(6)	62(4)
C(48)	3797(7)	10956(8)	4934(7)	90(6)
C(49)	4414(5)	10036(8)	4242(8)	77(5)
C(50)	4607(6)	9302(9)	4424(9)	111(7)
C(51)	2167(5)	11249(7)	3075(6)	42(3)
C(52)	1957(3)	11719(4)	2546(3)	37(3)
C(53)	1512(3)	12066(4)	2476(3)	40(3)
C(54)	1315(2)	12493(4)	2004(3)	42(3)
C(55)	1564(3)	12572(4)	1603(3)	41(3)
C(56)	2009(3)	12224(4)	1673(3)	38(3)
C(57)	2206(2)	11798(4)	2145(3)	31(3)
C(58)	851(5)	12929(7)	1960(6)	47(4)
C(59)	482(6)	12491(9)	2131(8)	82(5)
C(60)	964(7)	13573(10)	2375(8)	88(6)
C(61)	638(7)	13260(12)	1386(9)	105(7)
C(62)	3032(5)	12066(7)	2556(6)	48(4)
C(63)	3532(5)	11861(8)	2490(6)	43(3)
C(64)	3898(7)	12649(8)	3299(6)	83(5)
C(65)	3944(8)	12211(12)	3812(6)	123(8)
C(66)	4405(5)	12033(9)	2762(8)	87(6)
C(67)	4609(8)	11339(12)	3023(12)	155(10)
C(68)	2274(5)	12332(8)	1214(6)	49(4)
C(69)	2035(3)	11945(4)	668(3)	39(3)
C(70)	1628(3)	12272(4)	307(3)	46(4)
C(71)	1406(3)	11948(4)	-205(3)	50(4)
C(72)	1589(3)	11296(4)	-356(3)	50(4)
C(73)	1995(3)	10968(4)	4(3)	39(3)
C(74)	2218(2)	11293(4)	516(3)	42(3)
C(75)	976(5)	12339(8)	-632(6)	52(4)
C(76)	771(9)	12957(14)	-382(11)	143(9)
C(77)	1179(8)	12752(13)	-1059(10)	125(8)
C(78)	597(8)	11833(13)	-928(10)	128(8)
C(79)	3060(5)	11271(7)	710(6)	46(4)
C(80)	3481(5)	10768(8)	905(6)	39(3)
C(81)	3968(6)	11737(7)	588(6)	72(5)

C(82)	4219(8)	12249(9)	1020(9)	132(8)
C(83)	4321(7)	10499(11)	944(8)	109(7)
C(84)	4542(7)	10449(13)	1547(8)	136(9)
C(85)	2205(5)	10257(7)	-162(6)	46(4)
C(86)	1854(2)	9565(3)	-319(4)	35(3)
C(87)	1354(2)	9610(3)	-404(4)	38(3)
C(88)	1069(2)	8980(4)	-535(4)	41(3)
C(89)	1284(2)	8305(3)	-580(4)	43(3)
C(90)	1784(3)	8260(3)	-495(4)	41(3)
C(91)	2069(2)	8890(4)	-364(4)	35(3)
C(92)	505(4)	9056(7)	-714(5)	36(3)
C(93)	329(8)	9662(12)	-398(10)	110(7)
C(94)	320(7)	9173(10)	-1324(7)	84(5)
C(95)	290(8)	8375(12)	-557(10)	122(8)
C(96)	2702(5)	9048(8)	-778(6)	52(4)
C(97)	3230(5)	9293(7)	-622(6)	42(3)
C(98)	3109(5)	9646(7)	-1616(5)	47(4)
C(99)	3103(6)	8982(8)	-1961(6)	78(5)
C(100)	3907(5)	9783(8)	-904(8)	77(5)
C(101)	3939(7)	10561(8)	-735(9)	104(7)
C(102)	2032(5)	7501(7)	-484(6)	46(4)
C(104)	4511(7)	8136(14)	347(6)	128(8)
C(105)	3639(9)	14267(14)	2185(9)	166(11)
Cl(1)	4728(2)	8384(4)	1029(2)	123(2)
Cl(2)	4939(2)	8085(7)	-6(3)	199(5)
Cl(3)	3725(4)	13579(5)	1761(4)	203(4)
Cl(4)	4114(3)	14443(5)	2740(3)	152(3)

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for cd002.

Cs(1)-O(10)	2.920(8)
Cs(1)-O(12)	2.933(9)
Cs(1)-O(4)	2.958(9)
Cs(1)-O(1)	3.018(8)
Cs(1)-O(11)	3.040(8)
Cs(1)-O(2)	3.256(9)
Cs(1)-C(6)	3.735(7)
Cs(1)-C(97)	3.861(15)
Cs(1)-I(2)	3.9237(18)
Cs(1)-Cl(1)	4.085(6)
Cs(1)-Cs(2)	4.1581(14)
Cs(2)-O(10)	3.021(9)
Cs(2)-O(2)	3.030(9)
Cs(2)-O(4)	3.034(9)
Cs(2)-O(7)	3.056(8)
Cs(2)-O(8)	3.075(10)
Cs(2)-O(5)	3.099(8)
Cs(2)-O(6)	3.128(11)
Cs(2)-O(3)	3.382(8)
Cs(2)-O(9)	3.436(8)
Cs(2)-C(29)	3.721(13)
Cs(2)-C(63)	3.723(14)
Cs(2)-C(80)	3.770(14)
I(1)-I(2)	2.946(2)
I(2)-I(3)	2.834(3)
I(4)-I(5)	2.945(2)
I(5)-I(6)	2.913(2)
O(1)-C(6)	1.388(9)
O(1)-C(11)	1.414(14)
O(2)-C(12)	1.181(15)
O(3)-C(23)	1.405(9)
O(3)-C(28)	1.435(15)
O(4)-C(29)	1.212(15)
O(5)-C(40)	1.378(9)
O(5)-C(45)	1.424(15)
O(6)-C(46)	1.214(18)
O(7)-C(57)	1.388(9)
O(7)-C(62)	1.455(15)
O(8)-C(63)	1.213(16)
O(9)-C(74)	1.400(10)
O(9)-C(79)	1.432(15)
O(10)-C(80)	1.201(14)
O(11)-C(91)	1.374(9)
O(11)-C(96)	1.427(16)
O(12)-C(97)	1.259(16)
N(1)-C(12)	1.353(16)
N(1)-C(13)	1.479(12)
N(1)-C(15)	1.499(14)
N(1)-C(15')	1.512(14)
N(2)-C(29)	1.376(16)
N(2)-C(32)	1.462(12)
N(2)-C(30)	1.468(12)
N(3)-C(46)	1.339(19)
N(3)-C(49)	1.475(12)
N(3)-C(47)	1.481(12)
N(4)-C(63)	1.313(16)

N(4)-C(64)	1.470(12)
N(4)-C(66)	1.479(12)
N(5)-C(80)	1.348(16)
N(5)-C(81)	1.476(12)
N(5)-C(83)	1.490(13)
N(6)-C(97)	1.329(16)
N(6)-C(98)	1.466(11)
N(6)-C(100)	1.476(12)
C(1)-C(2)	1.3900
C(1)-C(6)	1.3900
C(1)-C(102)	1.532(14)
C(2)-C(3)	1.3900
C(3)-C(4)	1.3900
C(3)-C(7)	1.547(15)
C(4)-C(5)	1.3900
C(5)-C(6)	1.3900
C(5)-C(17)	1.544(14)
C(7)-C(9)	1.50(2)
C(7)-C(8)	1.53(2)
C(7)-C(10)	1.54(2)
C(11)-C(12)	1.531(18)
C(13)-C(14)	1.467(13)
C(15)-C(16)	1.482(15)
C(15')-C(16')	1.470(15)
C(17)-C(18)	1.541(14)
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(20)-C(24)	1.582(14)
C(21)-C(22)	1.3900
C(22)-C(23)	1.3900
C(22)-C(34)	1.563(14)
C(24)-C(26)	1.478(19)
C(24)-C(25)	1.51(2)
C(24)-C(27)	1.52(2)
C(28)-C(29)	1.505(18)
C(30)-C(31)	1.482(13)
C(32)-C(33)	1.463(13)
C(34)-C(35)	1.507(13)
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)	1.548(14)
C(38)-C(39)	1.3900
C(39)-C(40)	1.3900
C(39)-C(51)	1.504(13)
C(41)-C(44)	1.42(3)
C(41)-C(43)	1.42(3)
C(41)-C(42)	1.57(3)
C(45)-C(46)	1.525(19)
C(47)-C(48)	1.459(13)
C(49)-C(50)	1.465(13)
C(51)-C(52)	1.546(14)
C(52)-C(53)	1.3900
C(52)-C(57)	1.3900
C(53)-C(54)	1.3900
C(54)-C(55)	1.3900
C(54)-C(58)	1.523(14)

C(55)-C(56)	1.3900
C(56)-C(57)	1.3900
C(56)-C(68)	1.554(15)
C(58)-C(59)	1.48(2)
C(58)-C(61)	1.52(2)
C(58)-C(60)	1.54(2)
C(62)-C(63)	1.533(19)
C(64)-C(65)	1.482(14)
C(66)-C(67)	1.463(14)
C(68)-C(69)	1.517(15)
C(69)-C(70)	1.3900
C(69)-C(74)	1.3900
C(70)-C(71)	1.3900
C(71)-C(72)	1.3900
C(71)-C(75)	1.555(15)
C(72)-C(73)	1.3900
C(73)-C(74)	1.3900
C(73)-C(85)	1.530(14)
C(75)-C(78)	1.45(2)
C(75)-C(76)	1.48(3)
C(75)-C(77)	1.55(3)
C(79)-C(80)	1.481(18)
C(81)-C(82)	1.453(14)
C(83)-C(84)	1.465(14)
C(85)-C(86)	1.588(14)
C(86)-C(87)	1.3900
C(86)-C(91)	1.3900
C(87)-C(88)	1.3900
C(88)-C(89)	1.3900
C(88)-C(92)	1.556(13)
C(89)-C(90)	1.3900
C(90)-C(91)	1.3900
C(90)-C(102)	1.548(14)
C(92)-C(94)	1.48(2)
C(92)-C(95)	1.48(2)
C(92)-C(93)	1.52(2)
C(96)-C(97)	1.517(18)
C(98)-C(99)	1.481(13)
C(100)-C(101)	1.471(13)
C(104)-Cl(2)	1.700(14)
C(104)-Cl(1)	1.703(15)
C(105)-Cl(4)	1.680(16)
C(105)-Cl(3)	1.700(16)

O(10)-Cs(1)-O(12)	74.2(3)
O(10)-Cs(1)-O(4)	77.7(3)
O(12)-Cs(1)-O(4)	139.8(3)
O(10)-Cs(1)-O(1)	118.5(2)
O(12)-Cs(1)-O(1)	116.8(2)
O(4)-Cs(1)-O(1)	101.6(2)
O(10)-Cs(1)-O(11)	93.9(2)
O(12)-Cs(1)-O(11)	53.3(2)
O(4)-Cs(1)-O(11)	157.5(2)
O(1)-Cs(1)-O(11)	63.9(2)
O(10)-Cs(1)-O(2)	70.5(2)
O(12)-Cs(1)-O(2)	111.7(3)
O(4)-Cs(1)-O(2)	84.4(2)
O(1)-Cs(1)-O(2)	48.7(2)
O(11)-Cs(1)-O(2)	73.1(2)
O(10)-Cs(1)-C(6)	138.9(2)

O(12)-Cs(1)-C(6)	116.2(2)
O(4)-Cs(1)-C(6)	103.9(2)
O(1)-Cs(1)-C(6)	20.38(18)
O(11)-Cs(1)-C(6)	68.90(19)
O(2)-Cs(1)-C(6)	68.89(19)
O(10)-Cs(1)-C(97)	80.3(3)
O(12)-Cs(1)-C(97)	14.5(3)
O(4)-Cs(1)-C(97)	153.1(3)
O(1)-Cs(1)-C(97)	102.3(2)
O(11)-Cs(1)-C(97)	38.8(2)
O(2)-Cs(1)-C(97)	102.4(3)
C(6)-Cs(1)-C(97)	102.8(2)
O(10)-Cs(1)-I(2)	154.13(17)
O(12)-Cs(1)-I(2)	95.2(2)
O(4)-Cs(1)-I(2)	97.93(19)
O(1)-Cs(1)-I(2)	87.32(16)
O(11)-Cs(1)-I(2)	98.41(16)
O(2)-Cs(1)-I(2)	135.00(16)
C(6)-Cs(1)-I(2)	66.94(11)
C(97)-Cs(1)-I(2)	95.27(19)
O(10)-Cs(1)-Cl(1)	88.00(19)
O(12)-Cs(1)-Cl(1)	70.8(2)
O(4)-Cs(1)-Cl(1)	80.26(18)
O(1)-Cs(1)-Cl(1)	153.32(18)
O(11)-Cs(1)-Cl(1)	120.68(17)
O(2)-Cs(1)-Cl(1)	155.84(18)
C(6)-Cs(1)-Cl(1)	133.03(15)
C(97)-Cs(1)-Cl(1)	83.9(2)
I(2)-Cs(1)-Cl(1)	66.16(10)
O(10)-Cs(1)-Cs(2)	46.59(17)
O(12)-Cs(1)-Cs(2)	119.8(2)
O(4)-Cs(1)-Cs(2)	46.81(18)
O(1)-Cs(1)-Cs(2)	88.32(15)
O(11)-Cs(1)-Cs(2)	112.86(16)
O(2)-Cs(1)-Cs(2)	46.29(15)
C(6)-Cs(1)-Cs(2)	104.66(12)
C(97)-Cs(1)-Cs(2)	122.05(19)
I(2)-Cs(1)-Cs(2)	142.47(3)
Cl(1)-Cs(1)-Cs(2)	110.63(9)
O(10)-Cs(2)-O(2)	72.4(2)
O(10)-Cs(2)-O(4)	75.0(2)
O(2)-Cs(2)-O(4)	87.2(2)
O(10)-Cs(2)-O(7)	103.8(2)
O(2)-Cs(2)-O(7)	107.5(2)
O(4)-Cs(2)-O(7)	164.4(2)
O(10)-Cs(2)-O(8)	68.4(3)
O(2)-Cs(2)-O(8)	125.9(3)
O(4)-Cs(2)-O(8)	115.8(3)
O(7)-Cs(2)-O(8)	51.2(2)
O(10)-Cs(2)-O(5)	171.8(2)
O(2)-Cs(2)-O(5)	115.7(2)
O(4)-Cs(2)-O(5)	105.6(2)
O(7)-Cs(2)-O(5)	73.4(2)
O(8)-Cs(2)-O(5)	104.6(3)
O(10)-Cs(2)-O(6)	124.3(3)
O(2)-Cs(2)-O(6)	149.3(3)
O(4)-Cs(2)-O(6)	74.8(3)
O(7)-Cs(2)-O(6)	93.9(3)
O(8)-Cs(2)-O(6)	84.7(3)
O(5)-Cs(2)-O(6)	49.2(2)

O(10)-Cs(2)-O(8)	113.0(2)
O(2)-Cs(2)-O(3)	72.9(2)
O(4)-Cs(2)-O(3)	47.9(2)
O(7)-Cs(2)-O(3)	140.8(2)
O(8)-Cs(2)-O(3)	157.9(3)
O(5)-Cs(2)-O(3)	71.8(2)
O(6)-Cs(2)-O(3)	76.6(3)
O(10)-Cs(2)-O(9)	47.5(2)
O(2)-Cs(2)-O(9)	59.2(2)
O(4)-Cs(2)-O(9)	118.4(2)
O(7)-Cs(2)-O(9)	67.3(2)
O(8)-Cs(2)-O(9)	66.8(3)
O(5)-Cs(2)-O(9)	134.7(2)
O(6)-Cs(2)-O(9)	151.4(3)
O(3)-Cs(2)-O(9)	131.58(19)
O(10)-Cs(2)-C(29)	91.7(3)
O(2)-Cs(2)-C(29)	95.8(3)
O(4)-Cs(2)-C(29)	17.1(2)
O(7)-Cs(2)-C(29)	155.0(3)
O(8)-Cs(2)-C(29)	120.7(3)
O(5)-Cs(2)-C(29)	88.5(3)
O(6)-Cs(2)-C(29)	61.1(3)
O(3)-Cs(2)-C(29)	38.9(2)
O(9)-Cs(2)-C(29)	135.3(3)
O(10)-Cs(2)-C(63)	85.7(3)
O(2)-Cs(2)-C(63)	135.4(3)
O(4)-Cs(2)-C(63)	124.6(3)
O(7)-Cs(2)-C(63)	40.4(2)
O(8)-Cs(2)-C(63)	17.4(3)
O(5)-Cs(2)-C(63)	87.3(3)
O(6)-Cs(2)-C(63)	74.7(3)
O(3)-Cs(2)-C(63)	151.2(3)
O(9)-Cs(2)-C(63)	77.2(3)
C(29)-Cs(2)-C(63)	123.8(3)
O(10)-Cs(2)-C(80)	16.0(2)
O(2)-Cs(2)-C(80)	78.9(3)
O(4)-Cs(2)-C(80)	89.7(3)
O(7)-Cs(2)-C(80)	88.0(3)
O(8)-Cs(2)-C(80)	54.8(3)
O(5)-Cs(2)-C(80)	158.8(3)
O(6)-Cs(2)-C(80)	124.6(3)
O(3)-Cs(2)-C(80)	128.9(2)
O(9)-Cs(2)-C(80)	38.3(2)
C(29)-Cs(2)-C(80)	105.8(3)
C(63)-Cs(2)-C(80)	71.8(3)
I(3)-I(2)-I(1)	175.42(8)
I(3)-I(2)-Cs(1)	94.66(6)
I(1)-I(2)-Cs(1)	82.04(4)
I(6)-I(5)-I(4)	174.31(5)
C(6)-O(1)-C(11)	113.1(8)
C(6)-O(1)-Cs(1)	110.4(5)
C(11)-O(1)-Cs(1)	134.0(7)
C(12)-O(2)-Cs(2)	124.0(9)
C(12)-O(2)-Cs(1)	126.2(8)
Cs(2)-O(2)-Cs(1)	82.8(2)
C(23)-O(3)-C(28)	112.1(8)
C(23)-O(3)-Cs(2)	137.1(5)
C(28)-O(3)-Cs(2)	107.9(6)
C(29)-O(4)-Cs(1)	145.2(9)
C(29)-O(4)-Cs(2)	115.6(8)

Cs(1)-O(4)-Cs(2)	87.9(2)
C(40)-O(5)-C(45)	113.6(8)
C(40)-O(5)-Cs(2)	116.5(5)
C(45)-O(5)-Cs(2)	129.9(7)
C(46)-O(6)-Cs(2)	129.4(10)
C(57)-O(7)-C(62)	111.4(8)
C(57)-O(7)-Cs(2)	129.3(5)
C(62)-O(7)-Cs(2)	118.5(7)
C(63)-O(8)-Cs(2)	113.2(9)
C(74)-O(9)-C(79)	110.2(8)
C(74)-O(9)-Cs(2)	138.8(5)
C(79)-O(9)-Cs(2)	109.3(7)
C(80)-O(10)-Cs(1)	147.3(9)
C(80)-O(10)-Cs(2)	120.1(8)
Cs(1)-O(10)-Cs(2)	88.8(2)
C(91)-O(11)-C(96)	113.4(8)
C(91)-O(11)-Cs(1)	121.7(5)
C(96)-O(11)-Cs(1)	124.3(7)
C(97)-O(12)-Cs(1)	129.7(8)
C(12)-N(1)-C(13)	117.1(11)
C(12)-N(1)-C(15)	121.1(14)
C(13)-N(1)-C(15)	113.4(14)
C(12)-N(1)-C(15')	123.4(15)
C(13)-N(1)-C(15')	117.5(15)
C(15)-N(1)-C(15')	42.0(11)
C(29)-N(2)-C(32)	119.7(11)
C(29)-N(2)-C(30)	125.1(11)
C(32)-N(2)-C(30)	115.2(12)
C(46)-N(3)-C(49)	118.0(12)
C(46)-N(3)-C(47)	124.8(12)
C(49)-N(3)-C(47)	116.7(12)
C(63)-N(4)-C(64)	124.0(12)
C(63)-N(4)-C(66)	120.1(12)
C(64)-N(4)-C(66)	115.9(13)
C(80)-N(5)-C(81)	125.3(11)
C(80)-N(5)-C(83)	117.8(13)
C(81)-N(5)-C(83)	116.5(13)
C(97)-N(6)-C(98)	126.0(10)
C(97)-N(6)-C(100)	118.5(11)
C(98)-N(6)-C(100)	115.2(11)
C(2)-C(1)-C(6)	120.0
C(2)-C(1)-C(102)	115.8(7)
C(6)-C(1)-C(102)	123.2(7)
C(3)-C(2)-C(1)	120.0
C(2)-C(3)-C(4)	120.0
C(2)-C(3)-C(7)	122.1(7)
C(4)-C(3)-C(7)	117.8(7)
C(5)-C(4)-C(3)	120.0
C(4)-C(5)-C(6)	120.0
C(4)-C(5)-C(17)	120.6(7)
C(6)-C(5)-C(17)	118.2(7)
O(1)-C(6)-C(5)	119.7(6)
O(1)-C(6)-C(1)	120.3(6)
C(5)-C(6)-C(1)	120.0
O(1)-C(6)-Cs(1)	49.2(4)
C(5)-C(6)-Cs(1)	104.6(3)
C(1)-C(6)-Cs(1)	114.4(3)
C(9)-C(7)-C(8)	106.0(13)
C(9)-C(7)-C(10)	108.8(14)
C(8)-C(7)-C(10)	109.3(14)

C(9)-C(7)-C(3)	111.8(12)
C(8)-C(7)-C(3)	113.2(12)
C(10)-C(7)-C(3)	107.7(12)
O(1)-C(11)-C(12)	108.5(10)
O(2)-C(12)-N(1)	125.1(12)
O(2)-C(12)-C(11)	120.2(12)
N(1)-C(12)-C(11)	114.6(11)
O(2)-C(12)-Cs(2)	41.1(7)
N(1)-C(12)-Cs(2)	98.8(8)
C(11)-C(12)-Cs(2)	135.3(8)
C(14)-C(13)-N(1)	111.5(11)
C(14)-C(13)-Cs(2)	147.0(10)
N(1)-C(13)-Cs(2)	95.9(7)
C(16)-C(15)-N(1)	107.7(12)
C(16')-C(15')-N(1)	108.9(13)
C(18)-C(17)-C(5)	117.1(9)
C(19)-C(18)-C(23)	120.0
C(19)-C(18)-C(17)	121.0(6)
C(23)-C(18)-C(17)	118.7(6)
C(20)-C(19)-C(18)	120.0
C(19)-C(20)-C(21)	120.0
C(19)-C(20)-C(24)	121.9(6)
C(21)-C(20)-C(24)	117.9(6)
C(22)-C(21)-C(20)	120.0
C(21)-C(22)-C(23)	120.0
C(21)-C(22)-C(34)	119.1(7)
C(23)-C(22)-C(34)	120.8(7)
C(22)-C(23)-C(18)	120.0
C(22)-C(23)-O(3)	121.1(6)
C(18)-C(23)-O(3)	118.9(6)
C(26)-C(24)-C(25)	107.6(12)
C(26)-C(24)-C(27)	109.5(12)
C(25)-C(24)-C(27)	109.9(12)
C(26)-C(24)-C(20)	111.1(10)
C(25)-C(24)-C(20)	110.5(10)
C(27)-C(24)-C(20)	108.1(10)
O(3)-C(28)-C(29)	108.5(11)
O(4)-C(29)-N(2)	122.0(11)
O(4)-C(29)-C(28)	121.8(12)
N(2)-C(29)-C(28)	116.3(12)
O(4)-C(29)-Cs(2)	47.3(7)
N(2)-C(29)-Cs(2)	132.3(8)
C(28)-C(29)-Cs(2)	91.9(7)
N(2)-C(30)-C(31)	111.0(11)
N(2)-C(32)-C(33)	111.9(11)
C(35)-C(34)-C(22)	119.3(10)
C(36)-C(35)-C(40)	120.0
C(36)-C(35)-C(34)	119.9(7)
C(40)-C(35)-C(34)	120.0(7)
C(35)-C(36)-C(37)	120.0
C(38)-C(37)-C(36)	120.0
C(38)-C(37)-C(41)	120.0(7)
C(36)-C(37)-C(41)	120.0(7)
C(39)-C(38)-C(37)	120.0
C(40)-C(39)-C(38)	120.0
C(40)-C(39)-C(51)	120.8(7)
C(38)-C(39)-C(51)	119.2(7)
O(5)-C(40)-C(39)	119.9(6)
O(5)-C(40)-C(35)	120.1(6)
C(39)-C(40)-C(35)	120.0

O(5)-C(40)-Cs(2)	45.1(4)
C(39)-C(40)-Cs(2)	109.9(3)
C(35)-C(40)-Cs(2)	112.2(3)
C(44)-C(41)-C(43)	118(2)
C(44)-C(41)-C(37)	116.4(15)
C(43)-C(41)-C(37)	113.8(16)
C(44)-C(41)-C(42)	102.3(17)
C(43)-C(41)-C(42)	92.6(18)
C(37)-C(41)-C(42)	109.3(14)
O(5)-C(45)-C(46)	108.4(11)
O(6)-C(46)-N(3)	123.6(14)
O(6)-C(46)-C(45)	119.3(14)
N(3)-C(46)-C(45)	117.0(13)
C(48)-C(47)-N(3)	112.4(11)
C(50)-C(49)-N(3)	111.2(11)
C(39)-C(51)-C(52)	116.5(10)
C(53)-C(52)-C(57)	120.0
C(53)-C(52)-C(51)	118.8(7)
C(57)-C(52)-C(51)	121.2(7)
C(52)-C(53)-C(54)	120.0
C(55)-C(54)-C(53)	120.0
C(55)-C(54)-C(58)	120.4(7)
C(53)-C(54)-C(58)	119.3(7)
C(56)-C(55)-C(54)	120.0
C(55)-C(56)-C(57)	120.0
C(55)-C(56)-C(68)	118.1(7)
C(57)-C(56)-C(68)	121.9(7)
O(7)-C(57)-C(56)	119.2(6)
O(7)-C(57)-C(52)	120.2(6)
C(56)-C(57)-C(52)	120.0
C(59)-C(58)-C(61)	110.8(14)
C(59)-C(58)-C(54)	112.2(11)
C(61)-C(58)-C(54)	112.7(12)
C(59)-C(58)-C(60)	104.3(13)
C(61)-C(58)-C(60)	106.7(14)
C(54)-C(58)-C(60)	109.4(11)
O(7)-C(62)-C(63)	108.2(11)
O(8)-C(63)-N(4)	122.1(12)
O(8)-C(63)-C(62)	120.1(13)
N(4)-C(63)-C(62)	117.6(12)
O(8)-C(63)-Cs(2)	49.4(7)
N(4)-C(63)-Cs(2)	139.1(9)
C(62)-C(63)-Cs(2)	87.4(7)
N(4)-C(64)-C(65)	110.4(11)
C(67)-C(66)-N(4)	111.2(12)
C(69)-C(68)-C(56)	114.5(9)
C(70)-C(69)-C(74)	120.0
C(70)-C(69)-C(68)	118.1(7)
C(74)-C(69)-C(68)	121.9(7)
C(71)-C(70)-C(69)	120.0
C(70)-C(71)-C(72)	120.0
C(70)-C(71)-C(75)	120.5(7)
C(72)-C(71)-C(75)	119.3(7)
C(73)-C(72)-C(71)	120.0
C(72)-C(73)-C(74)	120.0
C(72)-C(73)-C(85)	120.5(7)
C(74)-C(73)-C(85)	119.5(7)
C(73)-C(74)-C(69)	120.0
C(73)-C(74)-O(9)	118.0(6)
C(69)-C(74)-O(9)	121.9(6)

C(78)-C(75)-C(76)	111.5(16)
C(78)-C(75)-C(77)	109.1(17)
C(76)-C(75)-C(77)	101.1(16)
C(78)-C(75)-C(71)	113.2(14)
C(76)-C(75)-C(71)	112.8(14)
C(77)-C(75)-C(71)	108.3(13)
O(9)-C(79)-C(80)	109.7(11)
O(10)-C(80)-N(5)	122.7(12)
O(10)-C(80)-C(79)	122.1(12)
N(5)-C(80)-C(79)	115.1(12)
O(10)-C(80)-Cs(2)	43.9(7)
N(5)-C(80)-Cs(2)	137.8(9)
C(79)-C(80)-Cs(2)	93.6(8)
C(82)-C(81)-N(5)	110.6(12)
C(84)-C(83)-N(5)	109.0(12)
C(73)-C(85)-C(86)	117.8(9)
C(87)-C(86)-C(91)	120.0
C(87)-C(86)-C(85)	123.0(6)
C(91)-C(86)-C(85)	117.0(6)
C(86)-C(87)-C(88)	120.0
C(87)-C(88)-C(89)	120.0
C(87)-C(88)-C(92)	119.3(6)
C(89)-C(88)-C(92)	120.1(6)
C(88)-C(89)-C(90)	120.0
C(91)-C(90)-C(89)	120.0
C(91)-C(90)-C(102)	119.5(7)
C(89)-C(90)-C(102)	120.2(7)
O(11)-C(91)-C(90)	120.4(6)
O(11)-C(91)-C(86)	119.6(6)
C(90)-C(91)-C(86)	120.0
C(94)-C(92)-C(95)	109.6(14)
C(94)-C(92)-C(93)	110.7(14)
C(95)-C(92)-C(93)	104.0(14)
C(94)-C(92)-C(88)	110.7(11)
C(95)-C(92)-C(88)	109.0(12)
C(93)-C(92)-C(88)	112.5(12)
O(11)-C(96)-C(97)	110.6(11)
O(12)-C(97)-N(6)	122.5(12)
O(12)-C(97)-C(96)	120.7(12)
N(6)-C(97)-C(96)	116.6(12)
O(12)-C(97)-Cs(1)	35.8(6)
N(6)-C(97)-Cs(1)	157.9(9)
C(96)-C(97)-Cs(1)	84.9(8)
N(6)-C(98)-C(99)	111.8(10)
C(101)-C(100)-N(6)	109.7(11)
C(1)-C(102)-C(90)	119.6(10)
Cl(2)-C(104)-Cl(1)	114.7(12)
Cl(4)-C(105)-Cl(3)	115.4(14)
C(104)-Cl(1)-Cs(1)	80.8(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for cd002.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cs(1)	45(1)	55(1)	31(1)	0(1)	13(1)	-4(1)
Cs(2)	46(1)	51(1)	28(1)	-4(1)	12(1)	0(1)
I(1)	66(1)	115(1)	84(1)	-37(1)	7(1)	0(1)
I(2)	68(1)	94(1)	101(1)	-34(1)	33(1)	-3(1)
I(3)	111(1)	297(3)	127(2)	48(2)	59(1)	62(2)
I(4)	87(1)	105(1)	87(1)	-43(1)	21(1)	-18(1)
I(5)	60(1)	79(1)	98(1)	-50(1)	21(1)	-8(1)
I(6)	97(1)	105(1)	81(1)	-51(1)	9(1)	0(1)
O(1)	48(5)	45(5)	28(5)	-2(4)	22(4)	-4(4)
O(2)	39(6)	56(6)	61(7)	-18(5)	12(5)	-11(5)
O(3)	34(5)	43(5)	31(5)	2(4)	5(4)	-2(4)
O(4)	39(6)	87(7)	34(6)	16(5)	14(4)	7(5)
O(5)	32(5)	60(6)	21(5)	-10(4)	9(4)	-3(4)
O(6)	49(7)	200(14)	30(7)	-26(7)	10(5)	-6(7)
O(7)	33(5)	41(5)	43(6)	-6(4)	7(4)	-8(4)
O(8)	53(7)	86(8)	89(9)	-44(7)	26(6)	-19(6)
O(9)	29(5)	51(6)	38(5)	6(4)	11(4)	-10(4)
O(10)	52(6)	33(5)	50(6)	9(4)	22(5)	2(4)
O(11)	38(5)	57(6)	17(5)	4(4)	7(4)	-4(4)
O(12)	40(6)	128(10)	35(6)	11(6)	8(5)	-24(6)
N(1)	87(10)	41(7)	79(10)	-15(7)	52(8)	-17(7)
N(2)	44(7)	76(9)	42(8)	8(6)	15(6)	3(6)
N(3)	37(7)	87(9)	26(7)	-6(6)	-1(5)	-17(6)
N(4)	34(7)	70(8)	50(8)	-13(6)	13(6)	-2(6)
N(5)	36(7)	61(8)	119(12)	40(8)	29(7)	13(6)
N(6)	44(7)	67(8)	26(7)	5(6)	10(5)	-13(6)
Cl(1)	114(4)	167(6)	71(4)	-11(4)	-1(3)	26(4)
Cl(2)	97(5)	380(14)	139(6)	-48(7)	65(5)	-53(6)
Cl(3)	275(12)	156(7)	164(9)	-19(6)	37(8)	62(7)
Cl(4)	170(7)	195(7)	107(5)	20(5)	63(5)	16(6)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for cd002.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	1975	6075	-455	47
H(4A)	2454	5660	1196	57
H(8A)	2294	4893	-525	146
H(8B)	1734	4885	-556	146
H(8C)	2048	4158	-396	146
H(9A)	1478	4783	289	126
H(9B)	1864	4655	874	126
H(9C)	1778	4039	407	126
H(10A)	2922	4757	412	154
H(10B)	2657	4035	529	154
H(10C)	2751	4696	960	154
H(11A)	1774	7914	1110	45
H(11B)	1561	8253	504	45
H(13A)	1695	10088	1872	78
H(13B)	1939	10291	1394	78
H(14A)	929	10246	1150	134
H(14B)	1247	10686	830	134
H(14C)	1214	10963	1420	134
H(15A)	1493	8393	1707	64
H(15B)	1255	9112	1883	64
H(16A)	638	8385	1353	90
H(16B)	895	8345	869	90
H(16C)	672	9099	1001	90
H(15C)	840	9364	1088	64
H(15D)	1020	8665	819	64
H(16D)	743	8310	1566	90
H(16E)	1127	8839	1965	90
H(16F)	1307	8142	1697	90
H(17A)	2898	6689	1775	50
H(17B)	2811	7503	1549	50
H(19A)	1846	6370	1733	46
H(21A)	1680	7462	3075	42
H(25A)	1397	5509	1928	91
H(25B)	1015	6108	1615	91
H(25C)	859	5496	1983	91
H(26A)	1709	5531	2924	93
H(26B)	1171	5519	2979	93
H(26C)	1539	6138	3285	93
H(27A)	583	6461	2523	111
H(27B)	743	7089	2170	111
H(27C)	947	7085	2829	111
H(28A)	3331	7394	2687	52
H(28B)	3369	8070	3101	52
H(30A)	4049	7709	3514	82
H(30B)	4601	7940	3618	82
H(31A)	4524	6665	3605	173
H(31B)	4730	6930	3111	173
H(31C)	4176	6704	2989	173
H(32A)	4518	8439	2248	85
H(32B)	4883	8078	2780	85
H(33A)	5016	9327	2753	147

H(33B)	4852	9121	3290	147
H(33C)	4475	9481	2767	147
H(34A)	2385	8303	3589	50
H(34B)	2697	8666	3230	50
H(36A)	1419	8629	3099	50
H(38A)	1267	10839	3005	47
H(42A)	103	9179	2458	246
H(42B)	588	8767	2448	246
H(42C)	461	9542	2151	246
H(43A)	736	9196	3750	286
H(43B)	799	8618	3300	286
H(43C)	280	8956	3257	286
H(44A)	604	10613	3317	222
H(44B)	121	10194	2996	222
H(44C)	449	10570	2657	222
H(45A)	2960	9577	3951	44
H(45B)	2960	10449	3904	44
H(47A)	3462	9982	4736	75
H(47B)	4022	9907	5053	75
H(48A)	3719	10991	5287	136
H(48B)	3560	11233	4652	136
H(48C)	4119	11156	4974	136
H(49A)	4450	10137	3871	92
H(49B)	4600	10406	4500	92
H(50A)	4949	9284	4438	167
H(50B)	4430	8936	4162	167
H(50C)	4571	9201	4791	167
H(51A)	2518	11198	3131	51
H(51B)	2121	11520	3395	51
H(53A)	1343	12013	2747	48
H(55A)	1431	12860	1284	50
H(59A)	378	12084	1874	122
H(59B)	205	12801	2126	122
H(59C)	622	12302	2505	122
H(60A)	1087	13383	2751	132
H(60B)	670	13854	2345	132
H(60C)	1208	13889	2291	132
H(61A)	551	12869	1111	157
H(61B)	877	13579	1296	157
H(61C)	351	13545	1384	157
H(62A)	3040	12057	2951	58
H(62B)	2941	12564	2412	58
H(64A)	3589	12919	3203	100
H(64B)	4162	13010	3365	100
H(65A)	3934	12537	4116	185
H(65B)	4251	11947	3907	185
H(65C)	3678	11861	3748	185
H(66A)	4383	12017	2363	104
H(66B)	4621	12440	2930	104
H(67A)	4929	11265	2970	232
H(67B)	4398	10935	2854	232
H(67C)	4637	11357	3419	232
H(68A)	2291	12860	1141	59
H(68B)	2609	12150	1356	59
H(70A)	1504	12713	409	56
H(72A)	1438	11077	-703	60
H(76A)	624	12767	-104	214
H(76B)	526	13211	-671	214
H(76C)	1029	13299	-206	214
H(77A)	1334	12403	-1249	188

H(77B)	[illegible]	13114	-866	188
H(77C)	[illegible]	12998	-1329	188
H(78A)	741	11440	-1091	192
H(78B)	362	12096	-1220	192
H(78C)	435	11626	-669	192
H(79A)	3141	11754	887	55
H(79B)	2985	11337	305	55
H(81A)	4157	11670	320	86
H(81B)	3650	11939	388	86
H(82A)	4260	12717	851	197
H(82B)	4536	12051	1215	197
H(82C)	4029	12321	1282	197
H(83A)	4209	10012	793	131
H(83B)	4562	10677	762	131
H(84A)	4815	10110	1623	204
H(84B)	4303	10271	1725	204
H(84C)	4655	10931	1694	204
H(85A)	2485	10114	148	55
H(85B)	2328	10367	-482	55
H(87A)	1209	10066	-373	46
H(89A)	1091	7879	-668	51
H(93A)	451	10133	-482	165
H(93B)	447	9568	0	165
H(93C)	-24	9671	-510	165
H(94A)	453	9628	-1423	126
H(94B)	-32	9204	-1429	126
H(94C)	418	8765	-1518	126
H(95A)	374	7959	-755	183
H(95B)	-61	8426	-656	183
H(95C)	415	8296	-159	183
H(96A)	2494	9448	-974	62
H(96B)	2658	8624	-1029	62
H(98A)	3245	10060	-1774	56
H(98B)	2775	9774	-1623	56
H(99A)	2905	9075	-2339	117
H(99B)	2967	8571	-1806	117
H(99C)	3432	8864	-1965	117
H(10D)	4111	9483	-601	92
H(10E)	4028	9724	-1232	92
H(10F)	4275	10722	-644	156
H(10G)	3819	10618	-411	156
H(10H)	3744	10858	-1039	156
H(10I)	1847	7227	-812	56
H(10N)	2356	7589	-531	56
H(10J)	4351	7656	328	153
H(10K)	4263	8494	158	153
H(10L)	3557	14719	1963	199
H(10M)	3358	14141	2319	199