
Araştırma Makalesi / Research Article

4'-Metil-3-Fenilakrilofenon Bileşiğinin Moleküler ve Kristal Yapı Analizi

Hasan İNAÇ^{*1}, Nermin KAHVECİ YAĞCI²

¹Kırıkkale Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Kırıkkale

²Kırıkkale Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kırıkkale

Öz

Bileşiğin kristal yapısı (C₁₆H₁₄O) 296 K'de tayin edildi. Tek kristal bileşiğin yapısı tek kristal X-ışını kırınımı yöntemi kullanılarak belirlendi. Kristal yapının birim hücre parametreleri a=14.9921(9) Å, b=9.8460(4) Å, c=17.5570(11) Å, α=90°, β=105.721(5)°, γ=90° ve Z=8'dir. Bileşik monoklinik yapıda kristalleşmiş olup uzay grubu C 2/c'dir. Kristal yapıda moleküller arası C-H... O hidrojen bağları, (Bu C-H... O hidrojen bağları zayıf etkileşimli bağlardır) molekülleri üç boyutlu bir ağa bağlar. Bu zayıf etkileşimler, moleküllerin sentrosimetrik dimerik yapı oluşturmaya neden olur.

Anahtar kelimeler: Metilfenil, Fenilakrilofenon, Kristal Yapı, Sentrosimetrik Dimer.

Molecular and Crystal Structure Analysis of 4'-Methyl-3-Phenylacrylophenone Compound

Abstract

The crystal structure of the compound, (C₁₆H₁₄O), was determined at 296 K. The structure of the single crystal compound was determined using a single crystal X-ray diffraction method. The unit cell parameters of the crystal structure are a=14.9921(9) Å, b=9.8460(4) Å, c=17.5570(11) Å, α=90°, β=105.721(5)°, γ=90° and Z=8. The compound crystallizes in monoclinic space group C 2/c. In the crystal structure, intermolecular C-H...O hydrogen bonds link the molecules into a three-dimensional network. These weak interactions cause the molecules to form a centrosymmetric dimeric structure.

Keywords: Methylphenyl, Phenylacrylophenone, Crystal Structure, Centrosymmetric Dimer.

1. Giriş

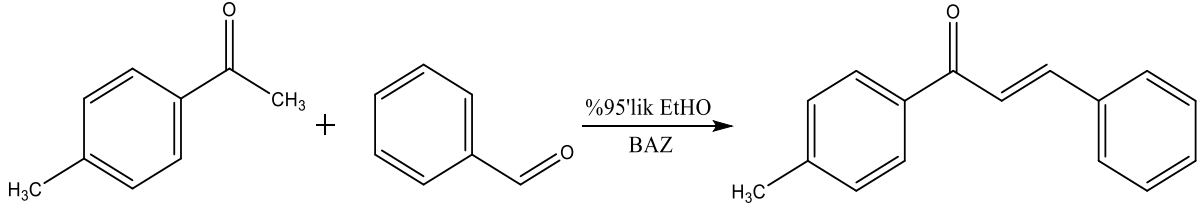
Dünya Sağlık Örgütü'nün 2014 tarihli bir raporuna göre Tüberküloz en önemli hastalıklardan biridir [1]. Maalesef tüberküloza karşı geliştirilen çok az ilaç vardır [2-3]. Bu nedenle etkili yeni antimikrobik bileşiklerin sentezi son derece önemli hale gelmiştir. Kalsinler, türevleri kolay üretilen kimyasal bileşiklerdir. Kalkonlar ve sentetik türevleri; anti-inflamatuvar, antihistaminik, antioksidan, antitüberküloz, antiülser ve antifungal gibi kapsamlı farmakolojik özelliklere sahiptir [4].

Bu çalışmada, bir kalkon türevi ve kısa adı "4'-Metilkalkon" (4'-Methylchalcone) olan "4'-Metil-3-Fenilakrilofenon" (C₁₆H₁₄O) bileşiği sentezlendi. Çalışmamızda elde ettiğimiz bileşiğe benzer diğer çalışmalara literatürden ulaşmak mümkündür (4,4'-Dimetilkalkon [5-6-7] ve kalkon [8]). Elde ettiğimiz bileşiğin tek kristali elde edilip tek kristal X-ışınları difraktometresinde verileri toplanarak bileşiğin kristal yapısı çözülmüştür. Çalışmamızda kullandığımız C₁₆H₁₄O bileşiğinin kimyasal diyagramı Şekil 1'de görülmektedir. Bileşik den elde edilen tek kristal, STOE IPDS II tek kristal X-ışını kırınım metresine takılarak kırınım verileri toplandı. Bu veriler kullanılarak tek kristal yapı çözümü için yazılmış ShelxT bilgisayar programı ile kristalin yapısı çözüldü. Kristalin yapısının geometrik

* Sorumlu yazar: hinac@kku.edu.tr

Geliş Tarihi: 08.08.2018, Kabul Tarihi: 04.01.2019

özellikleri Tablo 1’de, Ortep şekli Şekil 2’de ve bileşiğin moleküllerini bir arada tutarak katı yapıyı oluşturan hidrojen bağları verileri Tablo 2’de verildi.



Şekil 1. Bileşiğin kimyasal diyagramı

2. Materyal ve Metot

2.1. 4'-Metil-3-Fenilakrilofenon Bileşiğinin Sentezi

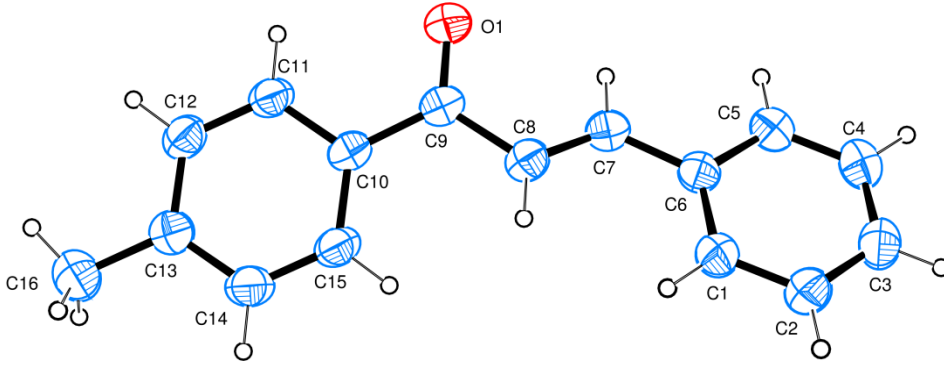
% 95 etanol (10 mL) içindeki 4'-metilasetofenon (1.6 mL, 0.014 mol) çözültisine (% 10, 10 mL), benzaldehid (1.4 mL, 0.012 mol) ilave edildi. Karışım 6 dakika oda sıcaklığında karıştırıldı ve sonra su (10 mL) ilave edildi. Karışım vakumlu filtrasyondan geçirildi. Sıcak etanolden yavaşça soğutulularak renksiz (şeffaf) kristaller elde edildi. Bu kristallerden verisi toplanmak üzere örnek bir kristal seçildi.

2.2. X-Işını Kristalografisi

STOE IPDS-II (Stoe Imaging Plate Diffraction System-II) difraktometresinde elde edilen veriler kullanılarak, X-RED isimli bilgisayar programı yardımı ile yapı çözümü için gerekli olan dosya oluşturuldu [9]. Kristalin yapısını çözmek için WinGX ([10]) paket programı içinde SHELXT ([11]) yapı çözüm programı kullanıldı. Yapı arıtımı için en-küçük kareler yöntemi SHELXL ([11]) programı kullanılarak gerçekleştirildi. Elde edilen sonuçların yayına hazırlanma aşamasında ORTEP-3 ([11]) çizim ve PLATON ([12]) hesaplama programları kullanıldı. Arıtım esnasında hidrojen atomları geometrik olarak (aromatik halka hidrojenleri için bağ uzunluğu 0,93 Å, metil hidrojenleri için bağ uzunluğu 0,96 Å) yerleştirilmiştir.

3. Bulgular ve Tartışma

Literatüre göre, Şekil 1’de kimyasal açık formülü görülen [4'-Metil-3-Fenilakrilofenon Bileşiği, (C₁₆H₁₄O)] ve daha önce tek kristali elde edilip yapısı çözülmemiş olan bu yapı için elde edilen kristalin yapısı çözüldü. Bu çalışmada, Şekil 1’de kimyasal açık formülü görülen [4'-Metil-3-Fenilakrilofenon (C₁₆H₁₄O)] bileşiğin tek kristali elde edildi. Seçilen tek kristalin şiddet verileri X ışını difraktometresi ile toplandı ve elde edilen veriler kristalografide kullanılan bilgisayar programları aracılığı ile incelenerek kristalin yapısı çözüldü. Kristalin yapısının çözülmesi ile elde edilen Ortep şekli yapının çözümünden elde edilen atomik koordinatlar ve atomik yerdeğiştirme parametreleri kullanılarak oluşturulmuş ve Şekil 2’de verilmektedir. Şekildeki tüm yerleşim elipsoitleri %30 olasılıkla çizilmiştir. Bileşiğin kristalografik verileri ve arıtım ayrıntıları Tablo 1’de verilmiştir. Bileşiğin tek kristalinin monoklinik C 2/c uzay grubunda kristallendiği, birim hücresinde sekiz molekül bulunduğu saptanmıştır. Kristal yapı herhangi bir çözücü molekül içermemektedir ve morfolojik yapısı prizma şeklinde ve renksiz (şeffaf)’dir.



Şekil 2. Bileşiğin atomlarının numaralandırılmış çizimi

Moleküler yapı; bir metilvinilbenzen grubu ile bir benzen halkasının keton grubunun karbon atomları üzerinden birleşmesi ile meydana gelmiştir. Molekülün iki benzen halkası arasındaki açı değeri $26.995(8)^\circ$ olup molekülün düzlemsel yapıda olmadığını göstermektedir. Bu açı değeri literatürdeki benzer çalışmalarla uyum içerisindedir ($25.864(7)^\circ$, [5] ve $28.324(9)^\circ$, [7]). Benzer olarak O1—C9—C8—C7 torsiyon açısı $-17.8(2)^\circ$ değerinde olup, Treadwell [7]'in yapmış olduğu çalışmada aynı torsiyon açısı $16,3(3)^\circ$ dir.

Tablo 1. Bileşiğin kristalografik verileri

Kristal Verileri	
Moleküler Formül	(C ₁₆ H ₁₄ O)
Formül Ağırlığı (akb)	222.27
Kristal sistemi, uzay grubu	Monoklinik, C 2/c
Sıcaklık (K)	296
a, b, c (Å)	14.9921(9), 9.8460 (4), 17.5570 (11)
β (°)	105.721 (5)
V (Å ³)	2494.7 (2)
Z	8
X-ışını tipi	Mo K α
μ soğurma katsayısı (mm ⁻¹)	0.07
Kristal boyutları (mm)	0.50 × 0.39 × 0.25
Veri Toplama	
Difraktometre	STOE IPDS 2
Veri toplama sıcaklığı (K)	296
Soğurma Düzeltmesi	Integration
θ_{min} , θ_{max}	2.41°, 26.50°
Ölçülen yansıma, bağımsız yansıma, gözlenen [I > 2 σ (I)] yansıma	27623, 2589, 1776
T _{min} , T _{max}	0.9686, 0.9887
R _{int}	0.040
(sin θ/λ) _{max} (Å ⁻¹)	0.628
Aritım	
R[F ² > 2 σ (F ²)], wR(F ²), S	0.043, 0.111, 1.06
$\Delta\rho_{max}$, $\Delta\rho_{min}$ (e Å ⁻³)	0.10, -0.12
Hidrojen atomları	Geometriye göre yerleştirildi
Yansıma sayısı	2589
Parametre sayısı	155

Bu bileşikteki moleküllerin kristal yapıyı oluşturabilmesi için molekülleri birbirine bağlayan istiflenmeyi oluşturan bir adet moleküller arası C5—H5···O1 H-bağ geometrisi Tablo 2’de ve H-bağları ile oluşan sentrosimetrik dimerik yapı Şekil 3’te gösterilmiştir.

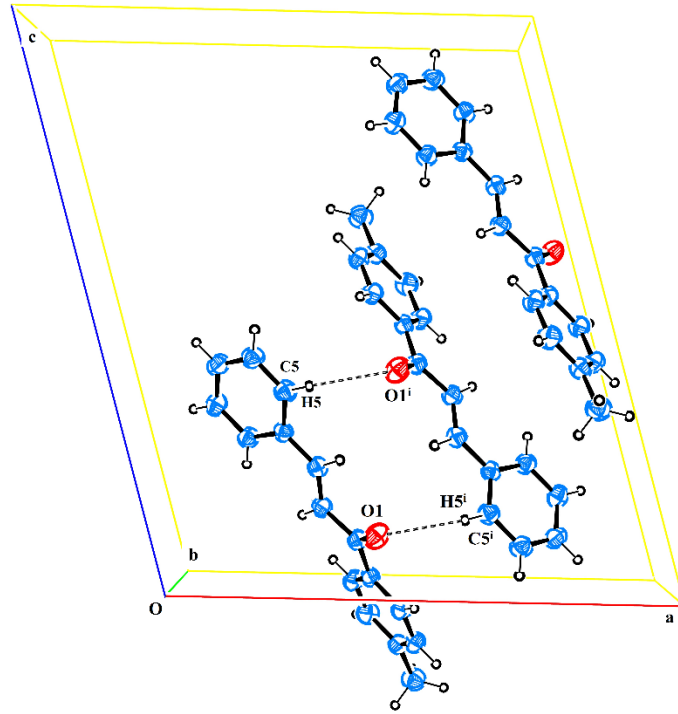
Çalışmamızda Benzen halkalarının düzlemsellikten sapma değerinin C1-C6 benzen halkası için bulunan maksimum değer C3 atomunda 0.0067 Å, C10-C15 benzen halkası için bulunan maksimum değer C12 atomunda 0.0040 Å olduğu tespit edildi. Benzen halkalarından; C1-C6 halkası için düzlemsellikten ortalama sapma 0.0048 Å ve C10-C15 benzen halkası için 0.0024 Å değerinde elde edildi. Ayrıca moleküler yapıya ait seçilen bazı bağ uzunlukları, bağ ve torsiyon açıları Tablo 3’te verilmiştir.

Tablo 2. Hidrojen bağ geometrisi (Å, °)

D—H···A	D—H	D···A	H···A	D—H···A
C5—H5···O1 ⁱ	0.93	3.37.15(19)	2.60	140.7
Simetri kodu: (i) -x, y, -z+3/2.				

Tablo 3. Seçilmiş bazı geometrik veriler (Å, °)

C6—C7	1.459 (2)	C9—C10	1.484 (2)
C9—O1	1.2279 (17)	C8—C7	1.321 (2)
C9—C8	1.474 (2)	C13—C16	1.506 (2)
O1—C9—C8	119.63 (14)	C11—C10—C9	119.39 (13)
O1—C9—C10	120.16 (12)	C15—C10—C9	123.48 (13)
O1—C9—C10—C11	-4.0 (2)	C8—C9—C10—C11	176.13 (12)



Şekil 3. Bileşiğin C—H···O hidrojen bağlarıyla yaptığı paket yapının b eksenine paralel olarak çizimi. Kesikli çizgiler hidrojen bağlarını göstermektedir (simetri kodu i: -x, y, -z+3/2).

4. Sonuç ve Öneriler

Bileşiğin moleküler yapısı bir metilvinilbenzen grubu ile bir benzen halkasının keton grubunun karbon atomları üzerinden birleşmesi ile meydana gelmiştir. Moleküler yapının düzlemselliği hem benzen halkaları ve hem de tüm molekül için ayrı ayrı araştırılmıştır. Benzen halkalarında düzlemsellikten en çok sapan atomların, C1-C6 benzen halkasında bulunan C3 atomu için maksimum değer 0.0067 Å ve C10-C15 benzen halkasında bulunan C12 atomu için maksimum değer 0.0040 Å olduğu gözlenmiştir. Benzen halkalarından; C1-C6 halkası için düzlemsellikten ortalama sapma 0.0048 Å ve C10-C15 benzen halkası için düzlemsellikten ortalama sapma 0.0024 Å değerinde elde edilmiştir. Oldukça küçük bu sapma değerleri ile her iki benzen halkasının da düzlemsel olduğu söylenebilir. Düzlemsel yapıda olmayan molekülün, O1—C9—C8—C7 torsiyon açısı $-17.8(2)^\circ$ dir. Treadwell [7]'in yapmış olduğu benzer bir çalışmada aynı torsiyon açısı $16,3(3)^\circ$ olarak verilmiştir. Moleküler yapıdaki iki benzen halkası da aynı düzlemde değildir. İki benzen halka düzlemi arasındaki dihedral açı $26.995(8)^\circ$ dir. Bu açı değeri literatürdeki benzer iki çalışmada [7,8] sırasıyla $25.864(7)^\circ$, $28.324(9)^\circ$ lik değerleriyle, çalışmamızla uyum içindedir.

Kristal yapı C-H...O tipi zayıf hidrojen bağlarının yanı sıra van der Waals etkileşimleri ile kararlı haldedir. Tablo 2'de geometrisi tanımlanan C-H...O etkileşimleri ile moleküller sentrosimetrik dimerler oluşturacak biçimde bağlanarak kristal yapı içinde Şekil 3'te görüldüğü gibi istiflenmiştir. Ayrıca çalışmamızda elde edilen kristalografik verilerin literatürle uyum içinde olduğu görülmüştür [13-15]. Bu bileşiğin kristal yapısının diğer verileri ekte verilen tablolardan görülebilir.

Kaynaklar

- [1] Kapata P.C., Kapata N., Klinkenberg E., Grobusch M.P, Cobelens F. 2017. The prevalence of HIV among adults with pulmonary TB at a population level in Zambia, BMC infectious diseases, 17(1).
- [2] Magiorakos A.P., Srinivasan A., Carey R.B., Carmeli Y., Falagas M.E., Giske C.E., Harbarth S., Hindler J.F., Kahlmeter G., Olsson B. 2012. Multidrug-resistant, extensively drug-resistant and pandrug-resistant bacteria: an international expert proposal for interim standard definitions for acquired resistance, Clinical Microbiology and Infection, 18: 268-281.
- [3] Tiwari R., Moraski G.C., Krchnak V., Miller P.A., Martinez M.C., Herrero E., Oliver A.G., Miller M.J. 2013. Thiolates chemically induce redox activation of BTZ043 and related potent nitroaromatic anti-tuberculosis agents. Journal of the American Chemical Society, 135: 3539-3549.
- [4] Mahapatra D.K., Bharti S.K., Asati V. 2015. Chalcone scaffolds as anti-infective agents: Structural and molecular target perspectives. European Journal Medicinal Chemistry, 11: 496-524.
- [5] Rabinovich D., Shakked Z. 1974. Optical Induction in Chiral Crystals. I. The Crystal and Molecular Structures of 4,4'-Dimethylchalcone, Acta Crystallographica Section B., B30: 2829-2834.
- [6] Toda F., Tanaka K., Kato M. 1998. Stereoselective photodimerisation of chalcones in the molten state, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1, pp. 1315-1318.
- [7] Treadwell E.M. 2006. 4-Methylchalcone. Acta Crystallographica Section E, E62: o5899-o5900.
- [8] Rabinovich D. 1970. Topochemistry. Part XXX. Crystal and molecular structures of chalcone, Journal of the Chemical Society. (B), pp. 11-16.
- [9] Stoe C. 2002. X-Area (Version 1.18) ve X-Red32 (Version 1.04), Stoe ve Cie, Darmstadt, Germany.
- [10] Farrugia L.J. 2012. WinGX and ORTEP for Windows: an update, Journal Applied Crystallography, 45: 849-854.
- [11] Sheldrick G.M. 2015. SHELXT - Integrated space group and crystal structure determination, Acta Crystallographica Section A, A71, 3-8.
- [12] Spek A.L. 2009. Structure validation in chemical crystallography, Acta Crystallographica Section D, D65: 148-155.
- [13] Raghavendra S., Chidankumar C.S., Jayarama A., Dharmaprakash S.M. 2015. 1-[4-(methylsulfanyl) phenyl]-3-(4-nitrophenyl) prop-2-en-1-one: A reverse saturable absorption based optical limiter, Materials Chemistry and Physics, 149: 487-494.
- [14] Ekbote A., Patil P.S., Maidur S.R., Chia T.S., Quah C.K. 2017. Structure and nonlinear optical properties of (E)-1-(4-aminophenyl)-3-(3-chlorophenyl) prop-2-en-1-one: A promising new D-p-

A-p-D type chalcone derivative crystal for nonlinear optical devices, Journal of Molecular Structure, 1129: 239-247.

- [15] Zainuri D.A., Arshad S., Khalib N.C., Razak I.A., Pillai R., Sulaiman S.F., Hashim N.S., Ooi K.L., Armakovic S., Armakovic S.J., Panicker C.Y., Alsenoy C.V. 2017. Synthesis, XRD crystal structure, spectroscopic characterization (FT-IR, ¹H and ¹³C NMR), DFT studies, chemical reactivity and bond dissociation energy studies using molecular dynamics simulations and evaluation of antimicrobial and antioxidant activities of a novel chalcone derivative, (E)-1-(4-bromophenyl)-3-(4-iodophenyl)prop-2-en-1-one. Journal of Molecular Structure, 1128: 520-533.

Ekler

Ek A. Kesirsel atomik koordinatlar ve izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å²)

	x	y	z	U_{iso}^*/U_{eq}
C6	0.19464 (9)	0.32531 (14)	0.71966 (8)	0.0674 (4)
C9	0.10330 (9)	0.34044 (15)	0.90388 (8)	0.0711 (4)
C10	0.09865 (8)	0.25343 (13)	0.97171 (8)	0.0663 (3)
C8	0.15733 (10)	0.29643 (15)	0.84956 (9)	0.0751 (4)
H8	0.201641	0.228635	0.865607	0.090*
C15	0.13559 (10)	0.12317 (15)	0.98379 (9)	0.0804 (4)
H15	0.167341	0.088638	0.949301	0.096*
O1	0.06199 (8)	0.44943 (11)	0.89262 (7)	0.0936 (4)
C7	0.14436 (10)	0.35088 (15)	0.77865 (9)	0.0726 (4)
H7	0.096675	0.414160	0.764389	0.087*
C11	0.05224 (10)	0.30004 (15)	1.02482 (9)	0.0759 (4)
H11	0.026481	0.386615	1.018399	0.091*
C5	0.16803 (10)	0.39391 (16)	0.64791 (9)	0.0792 (4)
H5	0.117655	0.452743	0.637961	0.095*
C12	0.04349 (10)	0.22101 (16)	1.08677 (9)	0.0794 (4)
H12	0.012489	0.255566	1.121795	0.095*
C13	0.07980 (10)	0.09093 (16)	1.09829 (9)	0.0761 (4)
C1	0.26942 (10)	0.23740 (15)	0.73209 (9)	0.0778 (4)
H1	0.287970	0.189175	0.779296	0.093*
C3	0.28960 (12)	0.29079 (18)	0.60522 (10)	0.0889 (5)
H3	0.321997	0.280192	0.567316	0.107*
C4	0.21511 (12)	0.37616 (18)	0.59127 (10)	0.0899 (5)
H4	0.196119	0.422416	0.543408	0.108*
C14	0.12605 (11)	0.04453 (16)	1.04573 (10)	0.0857 (4)
H14	0.151521	-0.042223	1.052251	0.103*
C16	0.06832 (13)	0.00394 (19)	1.16558 (10)	0.1017 (5)
H16A	0.066802	-0.090015	1.150669	0.153*
H16B	0.011443	0.027242	1.177586	0.153*
H16C	0.119403	0.019154	1.211370	0.153*
C2	0.31663 (11)	0.22045 (17)	0.67550 (10)	0.0869 (4)
H2	0.366850	0.161401	0.684775	0.104*

Ek B. Atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å^2)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
C6	0.0678 (8)	0.0633 (8)	0.0698 (8)	-0.0068 (6)	0.0161 (6)	-0.0041 (6)
C9	0.0673 (8)	0.0684 (9)	0.0768 (9)	0.0024 (7)	0.0184 (6)	-0.0099 (7)
C10	0.0615 (7)	0.0660 (8)	0.0698 (8)	0.0025 (6)	0.0152 (6)	-0.0121 (7)
C8	0.0730 (8)	0.0778 (9)	0.0741 (9)	0.0062 (7)	0.0192 (7)	-0.0053 (7)
C15	0.0848 (9)	0.0764 (10)	0.0834 (10)	0.0161 (7)	0.0286 (8)	-0.0087 (8)
O1	0.1091 (8)	0.0761 (7)	0.1067 (8)	0.0206 (6)	0.0481 (7)	0.0062 (6)
C7	0.0696 (8)	0.0682 (8)	0.0785 (9)	0.0017 (6)	0.0176 (7)	-0.0040 (7)
C11	0.0791 (9)	0.0696 (9)	0.0801 (10)	0.0132 (7)	0.0235 (7)	-0.0063 (7)
C5	0.0798 (9)	0.0759 (10)	0.0798 (10)	0.0001 (7)	0.0181 (8)	0.0075 (8)
C12	0.0791 (9)	0.0844 (10)	0.0787 (10)	0.0092 (8)	0.0280 (7)	-0.0069 (8)
C13	0.0720 (8)	0.0778 (9)	0.0744 (9)	-0.0002 (7)	0.0130 (7)	-0.0024 (7)
C1	0.0804 (9)	0.0778 (9)	0.0765 (9)	0.0044 (7)	0.0234 (7)	0.0063 (7)
C3	0.0956 (11)	0.0966 (12)	0.0818 (11)	-0.0115 (9)	0.0365 (9)	-0.0042 (9)
C4	0.0971 (11)	0.0944 (12)	0.0779 (10)	-0.0084 (9)	0.0235 (9)	0.0113 (8)
C14	0.0945 (11)	0.0697 (10)	0.0922 (11)	0.0155 (8)	0.0239 (9)	-0.0015 (8)
C16	0.1111 (13)	0.0988 (12)	0.0944 (12)	-0.0035 (10)	0.0267 (10)	0.0116 (10)
C2	0.0857 (9)	0.0864 (10)	0.0949 (11)	0.0062 (8)	0.0351 (8)	-0.0005 (9)

Ek C. Geometrik parametreler (Å,°)

C6—C1	1.386 (2)	C15—C14	1.374 (2)
C6—C5	1.3892 (19)	C11—C12	1.372 (2)
C6—C7	1.459 (2)	C5—C4	1.378 (2)
C9—O1	1.2279 (17)	C12—C13	1.385 (2)
C9—C8	1.474 (2)	C13—C14	1.374 (2)
C9—C10	1.484 (2)	C13—C16	1.506 (2)
C10—C11	1.3842 (18)	C1—C2	1.377 (2)
C10—C15	1.3904 (19)	C3—C4	1.366 (2)
C8—C7	1.321 (2)	C3—C2	1.377 (2)
C1—C6—C5	117.88 (14)	C12—C11—C10	121.29 (14)
C1—C6—C7	123.21 (14)	C4—C5—C6	121.03 (15)
C5—C6—C7	118.90 (13)	C11—C12—C13	121.47 (14)
O1—C9—C8	119.63 (14)	C14—C13—C12	117.34 (14)
O1—C9—C10	120.16 (12)	C14—C13—C16	121.56 (15)
C8—C9—C10	120.21 (13)	C12—C13—C16	121.10 (15)
C11—C10—C15	117.08 (14)	C2—C1—C6	120.93 (15)
C11—C10—C9	119.39 (13)	C4—C3—C2	119.88 (16)
C15—C10—C9	123.48 (13)	C3—C4—C5	120.17 (16)
C7—C8—C9	121.62 (14)	C15—C14—C13	121.61 (15)
C14—C15—C10	121.20 (14)	C3—C2—C1	120.10 (16)
C8—C7—C6	128.82 (14)		
O1—C9—C10—C11	-4.0 (2)	C7—C6—C5—C4	178.08 (14)
C8—C9—C10—C11	176.13 (12)	C10—C11—C12—C13	-0.7 (2)
O1—C9—C10—C15	173.30 (14)	C11—C12—C13—C14	0.8 (2)
C8—C9—C10—C15	-6.6 (2)	C11—C12—C13—C16	-178.85 (14)
O1—C9—C8—C7	-17.8 (2)	C5—C6—C1—C2	1.0 (2)
C10—C9—C8—C7	162.09 (13)	C7—C6—C1—C2	-177.67 (14)
C11—C10—C15—C14	0.1 (2)	C2—C3—C4—C5	1.2 (2)
C9—C10—C15—C14	-177.23 (14)	C6—C5—C4—C3	-0.4 (2)
C9—C8—C7—C6	176.22 (13)	C10—C15—C14—C13	0.0 (2)
C1—C6—C7—C8	-2.1 (2)	C12—C13—C14—C15	-0.4 (2)
C5—C6—C7—C8	179.27 (14)	C16—C13—C14—C15	179.20 (15)
C15—C10—C11—C12	0.2 (2)	C4—C3—C2—C1	-0.8 (2)
C9—C10—C11—C12	177.70 (12)	C6—C1—C2—C3	-0.3 (2)
C1—C6—C5—C4	-0.7 (2)		