Atti Accademia Nazionale dei Lincei

Classe Scienze Fisiche Matematiche Naturali

Rendiconti

Gian Luigi Casalone, Carla Mariani, Angelo Mugnoli, Massimo Simonetta

Crystal, Molecular and Electronic Structure of 1,1-diaryl-2-halogenoetkylenes. - II. Crystal and Molecular Structure of 2-bromo—1,1-diphenyl-prop—1—ene

Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. **41** (1966), n.5, p. 245–263.

Accademia Nazionale dei Lincei

<http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1966_8_41_5_245_0>

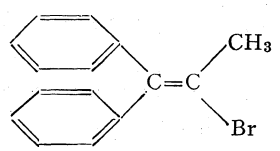
Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali. Rendiconti, Accademia Nazionale dei Lincei, 1966.

Strutturistica chimica. — *Crystal, Molecular and Electronic Structure of* 1,1*–diaryl–*2*–halogenoethylenes.* – II. *Crystal and Molecular Structure of* 2*–bromo–*1,1*–diphenyl–prop–*1*–ene* (*). Nota di GIAN LUIGI CASALONE, CARLA MARIANI, ANGELO MUGNOLI e MASSIMO SIMONETTA, presentata (**) dal Corrisp. M. SIMONETTA.

RIASSUNTO. — La struttura cristallina del 2-bromo-1,1–difenil-prop–1-ene $C_{15}H_{13}Br$ è stata determinata a temperatura ambiente con metodi tridimensionali e affinata con un processo di minimi quadrati a matrice completa con fattori termici anisotropi. Il valore finale dell'indice R è 8,5%. Nella cella monoclina, di parametri $a = 5{,}97$; $b = 16{,}97$; $c = 12{,}63$ Å; $\beta = 103{,}7°$, gruppo spaziale $P2_1/c$, sono presenti quattro molecole. In ciascuna di esse gli atomi sono distribuiti su tre piani: il piano etilenico e quelli dei due anelli benzenici, che risultano ruotati, rispetto al primo, di 70,7° (anello in *trans* al bromo) e di 47,2° (anello in *cis* al bromo). La distanza C—Br è 1,92 Å.

The investigation of the crystal, molecular and electronic structure of 1,1–diaryl–2–halogenoethylenes has been undertaken in our laboratory [1].

The second compound investigated was 2–bromo–1,1–diphenyl–prop–1–ene, $C_{15}H_{13}Br$, m. p. 49° C:



which crystallizes from glacial acetic acid in transparent needles. The unit cell dimensions were determined from rotation and Weissenberg films, using CuKα radiation.

CRYSTAL DATA.

*2–bromo–*1,1*–diphenyl–prop–*1*–ene.*

$C_{15}H_{13}Br$ F. W. 273.2

Monoclinic, $a = 5.97 \pm 0.01$, $b = 16.97 \pm 0.02$, $c = 12.63 \pm 0.01$ Å, $\beta = 103.7 \pm 0.1°$, with λ (CuKα_1) = 1.5405, λ (CuKα_2) = 1.5443, λ (CuKα) = = 1.5418 Å; $V = 1243.2$ Å^3; $D_m = 1.44$ g. cm^{-3} (by flotation); $Z = 4$; D_c = = 1.46 g. cm^{-3}; F (000) = 552; Absorption coefficient for CuKα radiation, 43.9 cm^{-1}.

(*) Work done at the Institute of Physical Chemistry – University of Milan, Milan, Italy.

(**) Nella seduta del 12 novembre 1966.

Space group $P2_1/c$ (No. 14), from systematic absences: $h\,o\,l$ if $l = 2n + 1$, $o\,k\,o$ if $k = 2n + 1$.

Intensity measurements.

The X–ray intensities were estimated visually from sets of multiple-film equi-inclination Weissenberg photographs taken at room temperature about the a axis (6 layers) using a crystal with cross section of 0.19×0.25 mm^2. From a total number of 2850 possible independent reflections for CuKα radiation, 2445 were collected, of which 591 were too low to be observed. The intensities were scaled together within the same layer following Rae [2] and then corrected for Lorentz, polarization and spot-size [3] factors. An evaluation of the σ for each individual observation was obtained from a statistical analysis [4]. A preliminary scaling of the data belonging to different layers was made after the structure was solved, by comparison between the F_o and F_c values; the individual scaling factors for each layer were subsequently refined in the least-squares process. No absorption or extinction correction was applied. Atomic scattering factors were calculated by means of analytical expressions following [5] for bromine and carbon, and [6] for hydrogen atoms.

Structure determination and refinement.

The first step in the solution of the structure was the interpretation of the $P(v, w)$ Patterson projection. This enabled us to recognize the y, z coordinates of the bromine and of all the carbon atoms. A generalized Patterson synthesis [7] gave two possible x coordinates for the bromine atom; considering all the geometries of the molecule consistent with the $o\,k\,l$ projection, by comparison between observed and calculated structure factors within each layer the correct set of x coordinates for the bromine and all the carbon atoms was deduced. At this stage of the research, a structure factor calculation gave an overall reliability index $R = 21\,\%$.

A first isotropic refinement was done by a few cycles of block-diagonal least-squares, which lowered the R index to 16%. The final refinement was achieved by four cycles of full-matrix least-squares, in which anisotropic temperature factors were adopted for each atom in the structure, except for hydrogen atoms. These latter were omitted from the least-squares refinement, being introduced only in the structure factor calculations. Benzenic hydrogen atoms were assumed to lie on the line bisecting the angle between the two bonds from the same carbon atom, with carbon-hydrogen bond distances equal to 1.08 Å. To these atoms an isotropic temperature factor $B = 4$ Å^2 was assigned. The positions of the hydrogen atoms of the methyl group were not determined.

The quantity minimized in the least-squares calculations was $\Sigma w (F_o - |kF_c|)^2$, the weights w being derived from the σ's of each single observation, as determined in the data reduction process. After the final cycle, all the shifts were below one half of the corresponding e.s.d. Unobserved reflections were assigned a threshold value based on the lowest observable intensity, and introduced in the refinement only when $|kF_c|$ exceeded this value. The final R index is 8.5% for the observed reflections.

Table I gives the final atomic coordinates with their e.s.d.'s. Anisotropic temperature factors with their e.s.d.'s are listed in Table II. The numbering of the atoms is included in fig. 1 and 2. Structure factors based on the final parameters are compared with the observed structure amplitudes in Table III.

TABLE I.

Final coordinates with standard deviations ($\times 10^4$).

ATOM	*x/a*	*y/b*	*z/c*	ATOM	*x/a*	*y/b*	*z/c*
Br	.1470 (1)	.1531 (<1)	.0329 (1)	C(13)	.2822 (16)	.4931 (4)	.3477 (5)
C(1)	.0552 (11)	.2158 (3)	.2297 (4)	C(14)	.4802 (14)	.4518 (5)	.3459 (5)
C(2)	.1709 (11)	.2385 (3)	.1348 (4)	C(15)	.4753 (11)	.3921 (4)	.2746 (5)
C(3)	.2706 (10)	.3050 (3)	.1211 (4)	H(1)	.5851	.2187	.0418
C(4)	.3881 (11)	.3255 (3)	.0335 (4)	H(2)	.7931	.2608	—.0945
C(5)	.5502 (12)	.2758 (4)	.0038 (5)	H(3)	.7084	.3895	—.1848
C(6)	.6658 (13)	.2991 (5)	—.0735 (6)	H(4)	.4253	.4761	—.1372
C(7)	.6186 (15)	.3715 (5)	—.1240 (6)	H(5)	.2156	.4360	.0004
C(8)	.4609 (14)	.4196 (4)	—.0975 (5)	H(6)	—.0891	.3965	.1481
C(9)	.3431 (11)	.3971 (4)	—.0192 (5)	H(7)	—.0811	.5049	.2774
C(10)	.2729 (11)	.3699 (3)	.2011 (4)	H(8)	.2881	.5410	.4046
C(11)	.0715 (13)	.4122 (4)	.2039 (6)	H(9)	.6406	.4673	.4020
C(12)	.0750 (14)	.4731 (4)	.2762 (6)	H(10)	.6329	.3608	.2747

The average planes in the molecule were determined as described in [8]. In Table IV the results for three planes are summarized—the planes of the two phenyl rings, *trans* and *cis* with the bromine atom (both including the C(3) atom), and the plane of the molecular skeleton, as defined by the atoms C(2), C(3), C(4), C(7), C(10), C(13). In all the three cases the distances between any atom and the involved plane are of the same order of the correspond-

ing σ_1 (standard deviation for the position along the direction perpendicular to the plane). The bromine atom and the methyl carbon atom lie at 0.07 Å apart from the molecular skeleton plane.

TABLE II.

Thermal exponent coefficients (with e.s.d.'s); b_{ij} as given here are defined by:

$$T = \exp [-10^{-4} (b_{11} h^2 + b_{22} k^2 + b_{33} l^2 + 2 b_{12} hk + 2 b_{13} hl + 2 b_{23} kl)]$$

ATOM	b_{11}	b_{22}	b_{33}	b_{12}	b_{13}	b_{23}
Br	480 (124)	28 (<1)	92 (1)	—12 (1)	69 (1)	—6 (<1)
C(1)	249 (126)	33 (2)	48 (3)	— 6 (5)	51 (7)	8 (2)
C(2)	259 (124)	27 (2)	48 (3)	12 (5)	28 (7)	4 (2)
C(3)	165 (125)	28 (2)	40 (3)	0 (5)	20 (6)	3 (2)
C(4)	167 (127)	28 (2)	48 (3)	10 (5)	23 (6)	0 (2)
C(5)	212 (128)	45 (3)	59 (4)	10 (7)	30 (8)	—2 (3)
C(6)	209 (124)	56 (4)	86 (5)	29 (7)	63 (9)	5 (3)
C(7)	394 (131)	56 (3)	67 (5)	—50 (9)	82 (10)	4 (3)
C(8)	452 (127)	30 (2)	61 (4)	—16 (7)	64 (9)	4 (2)
C(9)	262 (125)	34 (2)	49 (4)	— 5 (6)	37 (7)	5 (2)
C(10)	265 (125)	28 (2)	41 (3)	— 6 (5)	40 (7)	6 (2)
C(11)	260 (124)	39 (3)	81 (5)	12 (6)	58 (9)	—6 (3)
C(12)	449 (129)	26 (2)	85 (5)	— 6 (6)	69 (11)	—2 (3)
C(13)	549 (129)	38 (3)	59 (4)	—32 (8)	91 (11)	0 (3)
C(14)	374 (127)	47 (3)	51 (4)	—40 (8)	13 (9)	—6 (3)
C(15)	213 (125)	41 (2)	44 (3)	—18 (6)	15 (7)	0 (2)

Bond distances and bond angles are reported in fig. 1 and fig. 2, where the molecule is drawn referred to an orthogonal right-handed coordinate system X′ Y′ Z′ whose Y′ Z′ plane is the average plane of the molecular skeleton previously described. The average value of the e.s.d.'s [9, 10] is 0.009 Å for the bond distances and 0.5° for the bond angles. Both the phenyl rings are rotated with respect to the molecular skeleton plane, the dihedral angles being $\vartheta_1 = 70.7°$ and $\vartheta_2 = 47.2°$ for the ring *trans* and *cis* to the bromine atom, respectively.

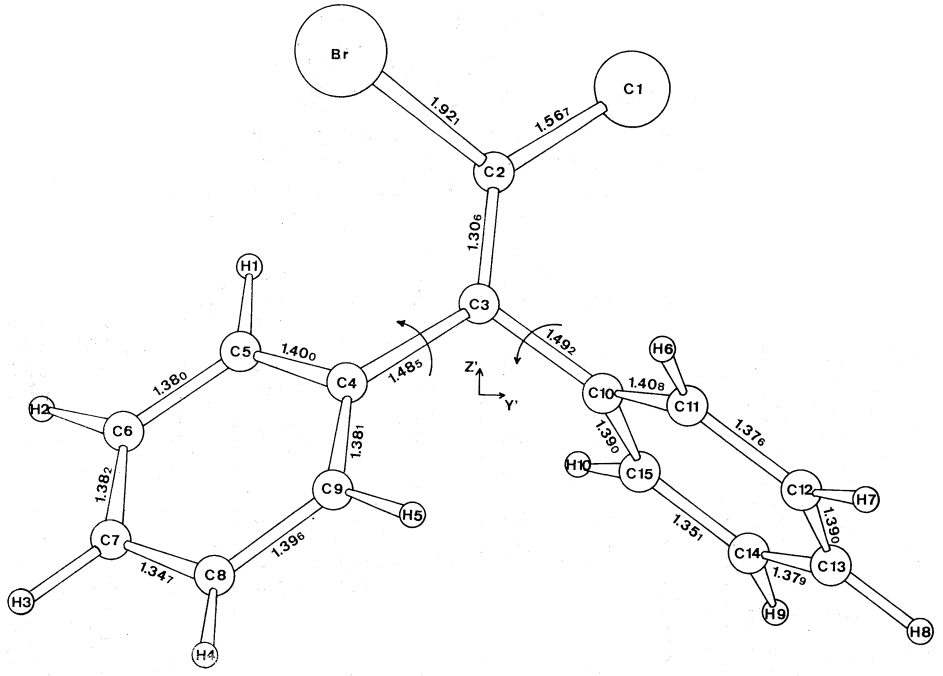


Fig. 1. – Bond lengths (Å) in the crystal. The average e.s.d. is 0.009 Å.

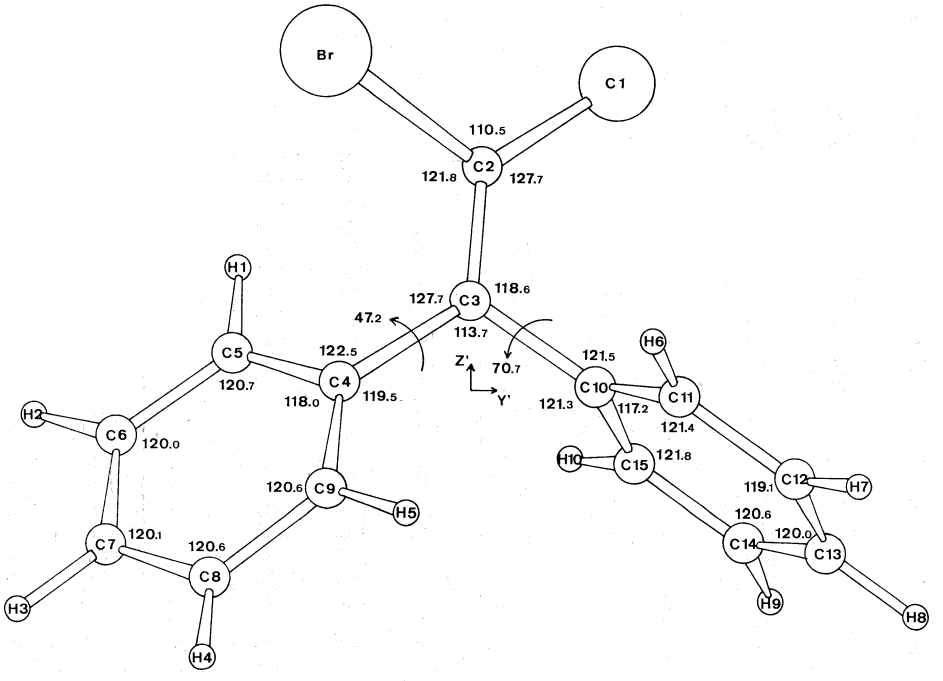


Fig. 2. – Bond angles (degrees) in the crystal. The average e.s.d. is 0.5°.

Both the phenyl rings are rotated with respect to the average plane of the molecular skeleton (see text).

TABLE III [1].

Observed and calculated structure factors. Each group of three columns contains in order l, 10 | F_o | *and* 10 F_c .

A minus sign before the 10 | F_o| value designates unobserved reflection. Reflections indicated by an asterisk were given zero weight in the least-squares refinement and excluded from the R calculation.

ø	ø	L
*2	572	867
4	64ø	71ø
6	327	326
8	252	225
1ø	111	—1ø8
12	235	—252
14	35	—35

ø	1	L
1	238	268
2	436	—536
3	132	17ø
4	295	—359
5	317	325
6	596	—653
7	73	57
8	449	—47ø
9	184	—167
1ø	362	—374
11	217	—215
12	134	—111
13	68	67
14	24	42
15	94	—91

ø	2	L
ø	568	—567
1	2ø4	226
*2	653	—934
*3	855	—12ø8
4	391	—346
5	577	—678
6	—21	—11
7	41ø	—421
8	111	—115
9	358	—396
1ø	—3ø	22
11	146	—14ø
12	111	1ø5
13	128	—134
14	54	39
15	—19	3

ø	3	L
1	21ø	—264
2	466	5ø6
*3	829	—11ø5
4	176	—17ø
5	345	—36ø
6	377	—363
7	91	57
8	8ø	—72
9	113	1ø9
1ø	163	166
11	139	135
12	73	—73
13	85	86
14	94	83
15	94	1øø

ø	4	L
*ø	645	—881
1	6ø7	593
2	675	—751
3	148	—57
4	6ø1	—651
5	426	446
6	117	—99
7	356	362
8	158	157
9	186	196
1ø	—3ø	—2ø
11	—3ø	—7
12	195	2ø7
13	39	—25
14	124	122
15	52	53

ø	5	L
1	243	226
2	5ø6	547
3	391	—336
4	544	621
5	292	237
6	659	743
7	—26	11
8	469	478
9	78	55
1ø	212	2øø
11	—3ø	—6
12	134	142
13	—26	7
14	54	44

ø	6	L
ø	541	654
1	43	27
2	699	794
3	567	552
4	386	425
5	56	67
6	195	2ø5
7	321	299
8	1ø6	—99
9	356	331
1ø	217	—212
11	1ø4	1ø3
12	13ø	—145
13	52	61
14	117	—116

ø	7	L
*1	9ø1	1ø94
2	68	—69
3	655	73ø
4	478	—51ø
5	261	251
6	28ø	—253
7	8ø	64
8	217	—2ø1
9	91	—74
1ø	221	—221
11	37	—4ø
12	139	—143
13	63	—78
14	43	—39

ø	8	L
ø	289	272
1	91	71
2	184	—13ø
3	336	—324
4	139	1ø7
5	43ø	—444
6	1ø8	99
7	434	—441
8	—3ø	17
9	233	—232
1ø	47	—38
11	165	—169
12	47	—54
13	28	—17
14	—17	33

ø	9	L
1	596	—637
2	148	—166
3	513	—523
4	5ø8	—494
5	254	—257
6	367	—347
7	167	—148
8	236	—235
9	37	38
1ø	59	—54
11	28	—38
12	71	—85
13	87	85
14	—15	—13

ø	1ø	L
ø	414	—437
1	42	41
2	577	—62ø
3	91	—64
4	295	—292
5	1ø4	89
6	2ø4	—215
7	52	56
8	73	69
9	68	—61
1ø	154	154
11	28	24
12	1ø4	99
13	45	38

ø	11	L
1	4ø8	—4øø
2	299	298
3	163	—159
4	371	354
5	35	—31
6	423	446
7	37	26
8	353	342
9	52	4ø
1ø	2ø4	2ø8
11	122	111
12	5ø	49
13	63	53

ø	12	L
ø	238	241
1	323	3ø6
2	386	382
3	252	232
4	165	144
5	332	335
6	148	138
7	2ø4	176
8	—3ø	4
9	245	241
1ø	56	—47

(1) *Note added in proofs.* In this Table, a transcription of a computer output, the symbol ø means *zero*, and L means *l*.

Segue: TABLE III.

11	1Ø8	97
12	—19	—25
13	—13	—19

Ø	13	L
1	513	562
2	—28	11
3	317	348
4	43	—39
5	13Ø	132
6	128	114
7	115	118
8	71	—78
9	82	—81
1Ø	37	28
11	154	—14Ø
12	—17	—1Ø

Ø	14	L
Ø	271	267
1	124	—1Ø5
2	228	223
3	236	—237
4	113	95
5	186	—154
6	—3Ø	13
7	182	—167
8	54	—58
9	165	—167
1Ø	—24	—29
11	115	—1Ø8
12	—13	—22

Ø	15	L
1	13Ø	—134
2	128	—114
3	47	44
4	2Ø8	—196
5	—3Ø	—3
6	291	—31Ø
7	—28	18
8	172	—184
9	69	—62
1Ø	13Ø	—114
11	3Ø	32

Ø	16	L
Ø	341	—365
1	—3Ø	—15
2	289	—293
3	99	—1Ø2
4	315	—335
5	152	—155
6	52	—54
7	73	—66
8	—24	—5
9	—21	—24
1Ø	35	27

Ø	17	L
1	215	—226
2	52	47
3	241	—263
4	143	149
5	143	—152
6	1Ø2	1Ø4
7	24	35
8	82	79
9	52	41

Ø	18	L
Ø	—28	—17
1	63	61
2	43	54
3	139	127
4	87	91
5	228	242
6	69	68
7	215	21Ø
8	52	41

Ø	19	L
1	236	223
2	76	8Ø
3	1Ø4	1Ø7
4	73	62
5	1Ø8	99
6	56	48
7	—15	—3

Ø	2Ø	L
Ø	2Ø7	166
1	21	—25
2	21Ø	181
3	—21	8
4	69	61
5	63	—7Ø

Ø	21	L
1	59	51
2	56	—58

I	Ø	L
—14	163	—174
—12	—34	—34
—1Ø	229	214
—8	145	148
—6	553	565
—4	1191	1227
2	78Ø	—936
4	23	—15
6	474	—462
8	353	—334
1Ø	319	—35Ø
12	2ØØ	—198
14	—26	4Ø

I	I	L
—15	37	—43
—14	155	143
—13	—32	—2
—12	19Ø	219
—11	69	61
—1Ø	311	331
—9	273	273
—8	—27	35
—7	273	281
—6	54	42
—5	518	515
—4	357	—3Ø3
—3	835	929
—2	293	17Ø
—1	2Ø5	244
*Ø	796	—1324
*1	775	1Ø56
*2	844	—11Ø7
3	279	231
4	519	—55Ø
5	4Ø1	—388
6	498	—496
7	219	—214
8	156	—144
9	126	—115
1Ø	122	—96
11	66	—81
12	182	195
13	169	—149
14	—26	23

I	2	L
—15	1Ø1	99
—14	—3Ø	7
—13	52	58
—12	—34	37
—11	212	233
—1Ø	61	—64
—9	5Ø8	494
—8	286	—258
—7	36Ø	352
—6	64	—83
—5	496	432
—4	27	32
—3	554	—526
*—2	611	—798
—1	414	—532
Ø	334	—265
1	622	—76Ø
2	735	793
3	519	—583
4	361	359
5	488	—5Ø5
6	51	34
7	416	—394
8	132	118
9	16Ø	—139
1Ø	24Ø	248
11	66	75

12	—34	—Ø
13	—32	5
14	—26	18

I	3	L
—15	—22	—2
—14	3Ø	43
—13	27	5
—12	69	69
—11	54	55
—1Ø	34	27
—9	291	—29Ø
—8	261	247
—7	68Ø	—737
—6	42	37
—5	656	—7Ø8
—4	447	—436
—3	7Ø8	—8Ø4
—2	185	158
*—1	94Ø	—118Ø
Ø	445	—462
*1	78Ø	—1ØØ7
2	73Ø	—729
3	33Ø	—311
4	496	—488
5	195	199
6	211	—167
7	248	229
8	68	57
9	379	37Ø
1Ø	116	—113
11	123	115
12	6Ø	—6Ø
13	16Ø	128
14	—23	—29

I	4	L
—15	37	—36
—14	52	59
—13	77	—75
—12	58	—64
—11	222	—235
—1Ø	92	—87
—9	216	—215
—8	137	—156
—7	248	—227
—6	759	—82Ø
—5	271	—252
—4	256	—323
—3	385	38Ø
*—2	97Ø	—1164
—1	259	314
Ø	6Ø	—87
1	82Ø	941
2	332	—313
3	596	645
4	4Ø	—25
5	588	6Ø9
6	163	165
7	171	148

Segue: TABLE III.

8	342	328
9	97	88
10	156	143
11	163	148
12	51	53
13	—29	42
14	—23	15
1	5	L
—15	23	—20
—14	116	—113
—13	—34	26
—12	205	—219
—11	58	—66
—10	253	—257
—9	66	40
—8	327	—371
—7	185	—163
—6	263	—237
—5	379	405
—4	253	247
—3	390	—379
*—2	707	869
—1	160	121
0	648	730
1	256	231
2	682	807
3	322	300
4	815	914
5	353	294
6	514	499
7	156	—136
8	51	46
9	166	158
10	105	101
11	114	—107
12	—34	—35
13	66	71
14	74	—83
1	6	L
—15	48	—45
—14	—29	—24
—13	100	—110
—12	145	161
—11	122	—134
—10	222	230
—9	—37	—28
—8	334	371
—7	—32	4
—6	541	580
—5	471	—474
—4	907	10005
—3	224	255
—2	664	725
—1	345	328
0	527	557
1	237	247
2	327	296
3	282	265
4	266	—238
5	222	211
6	405	—388
7	197	195
8	211	—202
9	66	—66
10	185	—174
11	37	—43
12	140	—129
13	77	—84
14	34	—43
1	7	L
—15	55	—52
—14	79	74
—13	63	—74
—12	87	86
—11	—37	—10
—10	—37	—12
—9	68	59
—8	142	159
—7	359	373
—6	105	—86
—5	678	770
—4	63	50
—3	641	649
—2	348	—347
—1	259	291
0	293	—276
1	364	367
2	211	—189
3	197	—188
4	251	—249
5	277	—248
6	60	—63
7	234	—238
8	216	—214
9	287	—274
10	129	128
11	160	—168
12	—32	17
13	142	—123
14	40	52
1	8	L
—14	77	—76
—13	190	181
—12	—34	12
—11	203	233
—10	60	—59
—9	203	203
—8	87	—72
—7	314	325
—6	51	48
—5	55	—47
—4	134	—119
—3	89	65
—2	182	168
—1	530	—584
0	137	122
1	588	—655
2	163	134
3	756	—906
4	42	—50
5	445	—449
6	82	—70
7	419	—411
8	—37	—14
9	87	—77
10	68	—62
11	—34	—16
12	—32	—3
13	—23	10
14	—16	13
1	9	L
—14	—21	—15
—13	79	74
—12	89	81
—11	—37	5
—10	205	201
—9	—37	—35
—8	448	457
—7	148	—149
—6	48	—38
—5	311	—318
—4	45	—22
—3	461	—468
—2	195	—190
—1	377	—361
0	433	—421
1	51	—65
2	322	—325
3	100	—87
4	456	—431
5	82	58
6	123	—123
7	263	247
8	153	—144
9	122	111
10	—37	26
11	89	101
12	—29	27
13	79	73
1	10	L
—14	—18	16
—13	—26	—32
—12	—32	1
—11	—34	11
—10	122	—132
—9	122	—122
—8	403	—398
—7	169	—157
—6	416	—403
—5	34	40
—4	530	—541
—3	32	41
—2	664	—703
—1	48	21
0	456	—444
1	179	—138
2	229	—210
3	222	192
4	—34	31
5	148	148
6	279	273
7	51	54
8	305	282
9	58	56
10	163	172
11	79	76
12	105	106
13	—18	—8
1	11	L
—13	—23	16
—12	145	—129
—11	48	68
—10	151	—163
—9	190	—207
—8	227	—212
—7	74	—72
—6	71	—70
—5	251	—262
—4	—34	17
—3	229	—220
—2	374	358
—1	245	—212
0	396	401
1	—32	—9
2	541	585
3	158	136
4	401	368
5	45	—21
6	216	210
8	105	101
9	85	80
10	—34	—21
11	26	49
12	—23	14
13	—14	—13
1	12	L
—13	108	—110
—12	—26	7
—11	190	—173
—10	60	65
—9	153	—156
—8	177	173
—7	66	—68
—6	297	306
—5	82	—84
—4	234	222
—3	222	207
—2	123	126
—1	366	348
0	245	216
1	577	588
2	148	139

Segue: TABLE III.

3	4Ø5	422
4	1Ø5	—91
5	279	267
6	—37	—21
7	242	244
8	129	—136
9	92	1Ø7
1Ø	92	—85
11	32	—44
12	51	—46
1	13	L
—13	—14	—12
—12	—23	2Ø
—11	79	76
—1Ø	—32	—2
—9	158	17Ø
—8	82	—91
—7	216	227
—6	92	—83
—5	374	377
—4	—37	—25
—3	5Ø1	493
—2	97	—84
—1	5Ø4	511
Ø	95	—84
1	156	168
2	—37	—22
3	63	—43
4	—37	32
5	137	—136
6	37	—18
7	1ØØ	—97
8	51	—54
9	126	—145
1Ø	—29	23
11	137	—132
12	—14	—45
1	14	L
—12	—18	—15
—11	122	118
—1Ø	—29	—Ø
—9	123	127
—8	6Ø	52
—7	68	7Ø
—6	245	254
—5	—37	8
—4	3ØØ	3Ø4
—3	58	39
—2	197	189
—1	322	—318
Ø	219	196
1	29Ø	—266
2	—37	32
3	251	—254
4	—37	27
5	224	—237
6	156	—167
7	16Ø	—17Ø
8	74	—73
9	126	—122
1Ø	123	—113
11	—18	24
1	15	L
—11	51	—52
—1Ø	151	134
—9	85	—73
—8	114	123
—7	116	—119
—6	153	138
—5	58	—63
—4	—37	—2
—3	232	—228
—2	114	—116
—1	229	—2Ø7
Ø	287	—29Ø
1	—37	—15
2	3Ø8	—317
3	—37	—24
4	3Ø3	—32Ø
5	1ØØ	—99
6	182	—188
7	—34	—34
8	37	—33
9	51	48
1Ø	—21	—11
1	16	L
—1Ø	—23	—7
—9	82	74
—8	145	—149
—7	89	75
—6	174	—187
—5	—37	—15
—4	287	—316
—3	129	—124
—2	158	—14Ø
—1	182	—174
Ø	256	—263
1	45	—32
2	52	—46
3	142	—14Ø
4	—37	21
5	77	—72
6	123	134
7	—32	—21
8	132	131
9	52	46
1	17	L
—9	85	—86
—8	58	—43
—7	151	—123
—6	89	—83
—5	2Ø3	—2Ø1
—4	1Ø3	119
—3	177	—189
—2	134	135
—1	145	—152
Ø	97	97
1	89	—1ØØ
2	185	196
3	34	34
4	14Ø	153
5	1Ø3	111
6	14Ø	133
7	174	165
8	6Ø	54
1	18	L
—8	—21	3
—7	132	—114
—6	—29	—5
—5	—32	6
—4	32	—34
—3	119	1Ø8
—2	34	—38
—1	142	153
Ø	42	—36
1	2Ø5	232
2	82	88
3	242	221
4	—32	—42
5	2Ø5	194
6	32	—36
7	—21	23
8	—16	17
1	19	L
—7	123	137
—6	52	—55
—5	216	216
—4	—29	—3Ø
—3	19Ø	182
—2	29	44
—1	148	139
Ø	114	111
1	29	36
2	163	127
3	71	82
4	97	85
5	68	—57
6	82	75
1	2Ø	L
—6	87	1Ø3
—5	—21	4
—4	179	159
—3	—23	—34
—2	192	2Ø7
—1	—26	—13
Ø	111	1Ø2
1	1Ø3	—98
2	85	79
3	—23	—21
4	58	—57
5	77	—94
1	21	L
—4	—16	2
—3	51	43
—2	89	—1Ø2
—1	—21	1Ø
Ø	126	—124
1	—18	—7
2	148	—163
3	—16	—2
2	Ø	L
—14	142	148
—12	235	247
—1Ø	378	414
—8	626	61Ø
—6	44Ø	453
—4	764	662
—2	153	—97
2	665	—721
4	111	—117
6	528	—519
8	283	—266
1Ø	154	—168
12	—31	41
14	—18	—22
2	1	L
—16	—17	8
—15	—23	2
—14	82	87
—13	3Ø	43
—12	79	87
—11	44	31
—1Ø	—3Ø	12
—9	391	388
—8	119	—117
—7	24Ø	224
—6	44	—54
—5	452	397
—4	417	—357
—3	34Ø	274
—2	746	—871
*Ø	79Ø	—1Ø32
1	226	—25Ø
2	162	—181
3	515	—518
4	296	—257
5	69	—71
6	111	—1Ø3
7	265	—259
8	44	9
9	136	—114
1Ø	139	149
11	69	—69
12	64	63
13	—26	36
14	—18	—39

Segue: TABLE III.

2	2	L
—16	—14	18
—15	86	95
—14	—28	—35
—13	123	142
—12	7Ø	—82
—11	179	178
—1Ø	182	—177
—9	91	—73
—8	129	—121
—7	361	—343
—6	3Ø8	—294
—5	711	—754
—4	411	—313
—3	934	—921
—2	79	—78
*—1	86Ø	—1Ø7Ø
Ø	281	285
*1	654	—812
2	6Ø	—49
3	647	—7Ø4
4	186	—169
5	154	—13Ø
6	54	45
7	9Ø	96
8	62	56
9	18Ø	173
1Ø	8Ø	81
11	69	76
12	54	—62
13	1Ø8	1Ø2
14	—15	—4

2	3	L
—16	—14	28
—15	—21	—23
—14	—26	—8
—13	7Ø	—64
—12	133	147
—11	254	—269
—1Ø	—3Ø	4
—9	461	—485
—8	231	226
—7	356	—4Ø3
—6	2Ø9	—182
—5	662	—615
—4	56	—72
—3	175	—182
—2	191	—178
—1	45Ø	—375
Ø	1ØØ	74
1	485	515
2	186	159
3	744	799
4	69	—52
5	593	636
6	157	145
7	374	383
8	—36	11
9	172	172
1Ø	—36	35
11	136	141
12	—31	2Ø
13	—26	13

2	4	L
—16	—13	22
—15	8Ø	—8Ø
—14	96	—92
—13	8Ø	—77
—12	152	—165
—11	188	—193
—1Ø	129	—121
—9	93	—87
—8	268	—319
—7	175	168
—6	492	—55Ø
—5	476	529
—4	69	—86
—3	525	633
—2	16Ø	153
—1	2Ø1	242
Ø	178	17Ø
1	657	73Ø
2	217	234
3	31	25
4	618	679
5	136	133
6	5Ø7	524
7	—33	—27
8	124	119
9	—36	—27
1Ø	126	117
11	1Ø8	—118
12	8Ø	64
13	1Ø3	—1Ø3

2	5	L
—15	28	26
—14	165	—15Ø
—13	—33	Ø
—12	67	—67
—11	51	49
—10	57	—59
—9	139	139
—8	—33	5
—7	—31	10
—6	412	471
—5	72	—68
—4	314	356
—3	88	105
—2	6Ø3	727
—1	2Ø1	187
Ø	469	543
1	178	—149
2	6Ø5	648
3	255	—255
4	157	15Ø
5	317	—314
6	133	—115
7	175	—164
8	—36	—46
9	—36	—41
10	124	—133
11	—33	—42
12	98	—85
13	64	—6Ø

2	6	L
—15	51	—37
—14	—28	33
—13	—31	—27
—12	96	93
—11	72	73
—1Ø	1Ø8	1Ø3
—9	—36	—47
—8	364	375
—7	—31	7
—6	293	3Ø5
—5	346	366
—4	325	359
—3	469	52Ø
—2	6Ø	—5Ø
—1	386	418
Ø	479	—485
1	319	334
2	72	—71
3	392	368
4	337	—327
5	—31	19
6	242	—235
7	96	76
8	24Ø	—228
9	16Ø	—178
1Ø	54	—48
11	—31	—1Ø
12	—28	—26
13	—21	—24

2	7	L
—15	49	57
—14	—26	22
—13	72	49
—12	—33	—4Ø
—11	311	352
—1Ø	51	—47
—9	35Ø	381
—8	85	—68
—7	374	375
—6	39	—9
—5	376	392
—4	374	—389
—3	335	322
—2	319	—3Ø2
—1	46	—48
Ø	219	—233
1	299	—3Ø2
2	183	—19Ø
3	383	—387
4	25Ø	—256
5	278	—26Ø
6	—33	—13
7	355	—373
8	1ØØ	1Ø3
9	1Ø8	—93
1Ø	42	—8
11	44	—31
12	—26	18
13	46	—42

2	8	L
—14	28	—2
—13	98	93
—12	—33	—7
—11	98	94
—1Ø	57	75
—9	—36	—22
—8	232	242
—7	64	49
—6	—31	—7
—5	485	—524
—4	25Ø	238
—3	642	—692
—2	15Ø	125
—1	667	—72Ø
Ø	17Ø	—165
1	5Ø5	—546
2	64	— 68
3	329	—331
4	121	—112
5	19Ø	—198
6	186	—174
7	62	66
8	51	—48
9	98	1Ø8
1Ø	—33	—22
11	62	65
12	—23	6

2	9	L
—14	93	95
—13	16Ø	—137
—12	186	145
—11	24Ø	—222
—1Ø	78	64
—9	178	—175
—8	162	—164
—7	559	—619
—6	335	—359
—5	3Ø4	—29Ø
—4	168	—169
—3	154	—151
—2	485	—497
—1	82	75
Ø	5Ø5	—523
1	36	13
2	319	—32Ø
3	343	327
4	186	—192

Segue: TABLE III.

5	361	368
6	165	141
7	154	147
8	—36	—16
9	183	2Ø5
1Ø	78	78
11	75	58
12	6Ø	61
2	1Ø	L
—14	—18	—8
—13	62	—56
—12	115	—128
—11	—33	34
—1Ø	1Ø6	—116
—9	—36	—36
—8	35Ø	—37Ø
—7	219	226
—6	3Ø4	—342
—5	—33	3
—4	229	—212
—3	133	115
—2	2Ø8	—2Ø2
—1	24Ø	227
Ø	157	135
1	19Ø	187
2	25Ø	247
3	281	256
4	512	515
5	—36	—3
6	152	148
7	36	36
8	17Ø	181
9	—33	8
1Ø	1ØØ	89
11	—26	1Ø
12	—18	—6
2	11	L
—13	—23	—14
—12	118	—87
—11	98	—86
—1Ø	93	—1Ø2
—9	8Ø	—67
—8	133	139
—7	—36	—23
—6	289	286
—5	139	—122
—4	386	393
—3	129	1ØØ
—2	482	486
—1	8Ø	—63
Ø	4ØØ	4Ø8
1	196	192
2	317	33Ø
3	281	281
4	98	86
5	62	45
6	118	131
7	129	11Ø

8	6Ø	—72
9	64	64
1Ø	39	—41
11	—23	16
2	12	L
—13	72	—68
—12	—26	26
—11	98	—87
—1Ø	217	2Ø7
—9	—36	9
—8	51	22
—7	62	51
—6	51	31
—5	57	39
—4	72	66
—3	347	389
—2	19Ø	192
—1	3Ø1	3Ø4
Ø	49	—41
1	296	32Ø
2	18Ø	—184
3	51	—19
4	139	—125
5	1Ø8	111
6	142	—133
7	62	—66
8	9Ø	—92
9	144	—128
1Ø	—26	15
11	75	—76
2	13	L
—12	—23	31
—11	162	142
—1Ø	54	—69
—9	25Ø	219
—8	75	8Ø
—7	263	264
—6	—36	29
—5	24Ø	237
—4	44	28
—3	214	2ØØ
—2	188	174
—1	199	—188
Ø	124	115
1	31Ø	—314
2	88	71
3	168	—155
4	57	42
5	258	—266
6	—36	—31
7	199	—212
8	—31	—47
9	193	—186
1Ø	—23	—12
2	14	L
—12	57	53
—11	—23	—17

—1Ø	165	133
—9	—31	—16
—8	18Ø	153
—7	114	—112
—6	183	183
—5	139	—14Ø
—4	139	122
—3	244	—24Ø
—2	1Ø8	9Ø
—1	376	—41Ø
Ø	118	—92
1	24Ø	—26Ø
2	118	—96
3	186	—2ØØ
4	168	—173
5	—36	—29
6	16Ø	—178
7	—31	—17
8	42	—34
9	28	33
1Ø	—18	—26
2	15	L
—11	—21	—11
—1Ø	88	72
—9	—28	—44
—8	—31	—2Ø
—7	62	—6Ø
—6	118	—133
—5	44	—41
—4	412	—437
—3	78	—72
—2	263	—254
—1	62	63
Ø	355	—379
1	—36	28
2	25Ø	—257
3	—36	36
4	1Ø3	—113
5	—33	23
6	—31	—5
7	69	61
8	67	48
9	93	75
2	16	L
—1Ø	165	—17Ø
—9	—26	12
—8	217	—189
—7	—31	14
—6	253	—2Ø2
—5	9Ø	—79
—4	175	—153
—3	49	—31
—2	—36	—8
—1	67	54
Ø	72	—65
1	85	—91
2	247	235
3	—33	—28

4	157	175
5	39	45
6	188	178
7	93	73
8	1Ø6	9Ø
9	—1Ø	—3
2	17	L
—9	85	—86
—8	64	59
—7	186	—167
—6	—31	51
—5	152	—122
—4	114	119
—3	67	—6Ø
—2	96	97
—1	6Ø	57
Ø	142	142
1	42	35
2	136	14Ø
3	144	146
4	67	72
5	16Ø	139
6	—26	19
7	51	62
2	18	L
—9	—13	—11
—8	—21	12
—7	1Ø8	97
—6	—26	17
—5	17Ø	147
—4	—28	—4
—3	25Ø	218
—2	—31	1Ø
—1	291	238
Ø	44	6Ø
1	168	146
2	—28	4
3	154	135
4	—26	22
5	33	48
6	—21	—4
7	—13	—29
2	19	L
—7	82	88
—6	—21	12
—5	114	1Ø4
—4	114	9Ø
—3	—26	24
—2	16Ø	143
—1	—28	33
Ø	115	115
1	46	—6Ø
2	36	39
3	57	—57
4	—21	17
5	118	—135

Segue: TABLE III.

2	2Ø	L
—5	67	—71
—4	93	83
—3	85	—85
—2	—23	4
—1	6Ø	—52
Ø	96	—91
1	62	—56
2	142	—131
3	46	—56

3	Ø	L
—14	117	125
—12	117	1Ø9
—1Ø	237	258
—8	24Ø	225
—6	33	27
—4	16Ø	—131
*—2	2Ø7	—449
Ø	441	—489
2	384	—4Ø4
4	372	—343
6	286	—281
8	17Ø	—166
1Ø	—33	46
12	—23	21

3	1	L
—15	47	48
—14	7Ø	6Ø
—13	136	134
—12	65	—7Ø
—11	147	155
—1Ø	65	—68
—9	94	87
—8	34Ø	—335
—7	65	48
—6	218	—231
—5	334	—298
—4	756	—828
—3	84	—62
—2	3Ø7	—369
—1	452	—512
Ø	2Ø6	—193
1	42Ø	—435
2	167	156
3	35Ø	—339
4	119	113
5	193	—191
6	189	188
7	77	—62
8	243	262
9	—33	3
1Ø	119	127
11	—29	5Ø
12	41	44

3	2	L
—15	—18	24
—14	76	—7Ø

—13	—25	—19
—12	41	—42
—11	93	—84
—1Ø	121	—12Ø
—9	279	—3Ø3
—8	1Ø8	1Ø5
—7	429	—477
—6	—18	5
—5	482	—5Ø7
—4	76	69
—3	3Ø2	—369
—2	258	255
—1	256	—282
Ø	157	15Ø
1	186	—182
2	178	182
3	273	275
4	16Ø	146
5	183	168
6	258	253
7	2Ø1	199
8	44	5Ø
9	—33	41
1Ø	—33	28
11	132	122
12	—23	—36

3	3	L
—15	7Ø	—63
—14	—22	—13
—13	137	—156
—12	78	—88
—11	25Ø	—3ØØ
—1Ø	146	—16Ø
—9	127	—123
—8	183	—195
—7	61	—6Ø
—6	226	—2Ø9
—5	—17	2Ø
—4	222	—238
—3	436	47Ø
—2	41	33
—1	526	632
Ø	232	—235
*1	73Ø	863
2	193	—176
3	3Ø4	32Ø
4	116	1Ø1
5	253	244
6	83	75
7	44	32
8	44	53
9	—33	3
1Ø	—31	5
11	—29	—34
12	46	49

3	4	L
—15	—2Ø	14
—14	86	—63

—13	—31	6
—12	98	—12Ø
—11	142	161
—1Ø	258	—258
—9	395	426
—8	23Ø	—237
—7	369	388
—6	163	—147
—5	237	248
—4	129	128
—3	189	197
—2	196	199
—1	336	325
Ø	292	319
1	111	116
2	289	279
3	16Ø	—136
4	356	351
5	111	—99
6	7Ø	—38
7	18Ø	—173
8	—36	25
9	98	—1Ø1
1Ø	—31	—15
11	52	—53
12	—2Ø	—2

3	5	L
—15	—2Ø	—9
—14	—26	—3
—13	—31	17
—12	86	99
—11	—36	—26
—1Ø	93	1Ø4
—9	144	164
—8	317	345
—7	59	—6Ø
—6	485	543
—5	157	157
—4	546	624
—3	93	—71
—2	58Ø	697
—1	119	119
Ø	73	62
1	235	—199
2	2Ø1	18Ø
3	—29	—18
4	134	—122
5	193	2Ø1
6	157	—141
7	57	51
8	155	—162
9	—33	18
1Ø	119	—97
11	—26	—25
12	41	—35

3	6	L
—15	—18	2Ø
—14	178	173

—13	52	—66
—12	167	138
—11	—36	—6
—1Ø	152	151
—9	7Ø	—58
—8	3Ø9	311
—7	23Ø	224
—6	—31	—3Ø
—5	243	239
—4	196	—195
—3	16Ø	176
—2	3Ø9	—327
—1	83	86
Ø	217	—2Ø3
1	—29	—26
2	452	—448
3	83	—79
4	5Ø3	—477
5	155	—135
6	163	—165
7	176	—167
8	86	—72
9	52	—59
1Ø	—31	—23
11	—26	21
12	—18	—Ø

3	7	L
—14	—23	—14
—13	129	12Ø
—12	—31	3Ø
—11	111	124
—1Ø	—36	8
—9	—36	1Ø
—8	49	41
—7	289	285
—6	3Ø7	—315
—5	212	—184
—4	279	—24Ø
—3	397	—4Ø6
—2	152	—155
—1	395	—4Ø5
Ø	19Ø	—183
1	418	—4Ø9
2	137	—124
3	325	—331
4	—33	—35
5	212	—216
6	111	9Ø
7	126	—129
8	—33	—36
9	—31	1
1Ø	—29	26
11	—23	19
12	—16	4

3	8	L
—14	—2Ø	2
—13	—29	—5
—12	—31	28

Segue: TABLE III.

—11	155	—138
—1Ø	—36	52
—9	224	—233
—8	49	47
—7	312	—351
—6	157	—155
—5	555	—617
—4	—31	—18
—3	26Ø	—242
—2	36	—25
—1	266	—26Ø
Ø	124	—115
1	—31	—4
2	157	—157
3	134	115
4	1ØØ	—83
5	299	293
6	186	188
7	243	236
8	—33	—11
9	173	158
1Ø	—29	3Ø
11	73	62

3	9	L
—14	—18	35
—13	62	—52
—12	41	—33
—11	137	—113
—1Ø	144	—12Ø
—9	132	—111
—8	245	—249
—7	7Ø	68
—6	155	—156
—5	98	88
—4	227	—224
—3	186	161
—2	333	—345
—1	346	323
Ø	—31	—6
1	253	228
2	1Ø3	95
3	279	264
4	16Ø	144
5	16Ø	149
6	77	77
7	59	68
8	—33	53
9	41	—53
1Ø	147	134
11	—18	—7

3	1Ø	L
—13	62	51
—12	183	—156
—11	62	76
—1Ø	247	—229
—9	—36	—47
—8	126	—96
—7	134	126
—6	147	115
—5	—33	27
—4	—33	15
—3	15Ø	143
—2	4ØØ	388
—1	—33	—51
Ø	5Ø8	533
1	126	—116
2	415	4Ø7
3	—33	31
4	273	264
5	173	—163
6	134	139
7	41	4Ø
8	49	49
9	75	—76
1Ø	—23	—15
11	—16	—19

3	11	L
—13	59	—49
—12	62	—25
—11	152	—118
—1Ø	2Ø9	2Ø2
—9	49	—55
—8	183	184
—7	—36	—63
—6	323	322
—5	196	—186
—4	144	134
—3	83	66
—2	338	333
—1	121	1Ø5
Ø	183	178
1	19Ø	161
2	93	91
3	1ØØ	—1Ø1
4	113	—1Ø1
5	87	72
6	96	—94
7	86	79
8	98	—72
9	73	—6Ø
1Ø	83	—83

3	12	L
—13	—16	9
—12	98	93
—11	1Ø6	99
—1Ø	—31	38
—9	129	99
—8	9Ø	79
—7	26Ø	261
—6	16Ø	163
—5	392	385
—4	86	—69
—3	325	319
—2	59	—64
—1	212	194
Ø	214	—216
1	—36	46
2	214	—2Ø1
3	—36	—19
4	44	—29
5	1ØØ	—1ØØ
6	9Ø	—8Ø
7	126	—1Ø4
8	77	—7Ø
9	1Ø3	—94
1Ø	—16	—4Ø

3	13	L
—12	54	53
—11	113	88
—1Ø	67	—7Ø
—9	19Ø	174
—8	—33	—16
—7	—33	21
—6	—36	8
—5	—36	—18
—4	—36	22
—3	2Ø6	—172
—2	—36	—24
—1	193	—166
Ø	152	—149
1	247	—24Ø
2	—36	—2Ø
3	219	—219
4	124	—122
5	144	—137
6	57	—54
7	86	—75
8	—23	21
9	—18	Ø

3	14	L
—12	—1Ø	—12
—11	52	—37
—1Ø	75	75
—9	137	—1Ø1
—8	—31	44
—7	152	—154
—6	—33	—15
—5	18Ø	—187
—4	19Ø	—181
—3	33Ø	—335
—2	2Ø9	—214
—1	142	—136
Ø	16Ø	—15Ø
1	54	6Ø
2	26Ø	—263
3	—33	—Ø
4	7Ø	—73
5	—31	24
6	49	—57
7	77	65
8	—2Ø	2Ø
9	—16	85

3	15	L
—11	—16	—15
—1Ø	111	—11Ø
—9	—26	—22
—8	232	—196
—7	—31	3Ø
—6	2Ø1	—169
—5	—33	51
—4	196	—193
—3	—33	19
—2	111	—98
—1	17Ø	168
Ø	121	—131
1	—33	—16
2	1Ø3	98
3	67	8Ø
4	96	8Ø
5	86	69
6	15Ø	145
7	59	5Ø
8	44	89

3	16	L
—1Ø	44	—76
—9	—2Ø	—29
—8	49	—31
—7	67	—53
—6	—29	—31
—5	116	—83
—4	86	72
—3	—31	—44
—2	176	158
—1	62	—67
Ø	193	197
1	—31	26
2	19Ø	2Ø9
3	—29	4
4	113	11Ø
5	49	44
6	93	83
7	—16	41

3	17	L
—9	49	—1ØØ
—8	98	94
—7	—23	—26
—6	15Ø	12Ø
—5	—29	21
—4	157	13Ø
—3	83	68
—2	36	33
—1	186	143
Ø	132	122
1	121	1Ø6
2	—29	—8
3	18Ø	177
4	59	—51
5	9Ø	73
6	—16	—37

Segue: TABLE III.

3	18	L
—8	—13	—13
—7	126	125
—6	—2ø	—13
—5	165	151
—4	—26	5
—3	157	14ø
—2	93	79
—1	87	68
ø	—26	—12
1	9ø	83
2	—23	—33
3	—2ø	—1ø
4	—18	—14
3	19	L
—6	52	112
—5	—18	—15
—4	119	94
—3	121	—111
—2	—2ø	31
—1	1ø3	—96
ø	—2ø	9
1	132	—131
2	—18	—32
3	49	—1ø5
4	ø	L
—14	112	113
—12	76	89
—1ø	—35	—2
—8	353	—359
—6	236	—184
—4	517	—542
ø	3ø2	—317
2	4ø6	—446
4	78	—52
6	—5ø	—22
8	132	187
1ø	55	86
4	1	L
—15	—27	1ø
—14	132	—118
—13	12ø	112
—12	88	—1øø
—11	46	—56
—1ø	245	—271
—9	—32	17
—8	362	—37ø
—7	—29	—2ø
—6	389	—345
—5	19ø	—153
—4	286	—292
—3	187	—275
—2	182	168
—1	298	—249
ø	12ø	1ø8
1	—35	13
2	225	217
3	62	—67
4	112	98
5	—5ø	24
6	147	15ø
7	—5ø	56
8	7ø	8ø
9	—43	—17
1ø	—35	—16
11	—27	11
4	2	L
—15	—27	—1
—14	62	—61
—13	97	—89
—12	55	49
—11	267	—245
—1ø	88	—1ø1
—9	225	—221
—8	73	56
—7	2ø5	—184
—6	76	49
—5	1øø	29
—4	1øø	67
—3	89	—75
—2	186	174
—1	38	32
ø	21ø	19ø
1	38ø	42ø
2	97	93
3	217	212
4	—47	11
5	248	252
6	—5ø	52
7	97	114
8	—47	—79
9	81	1ø1
1ø	—35	—49
11	—27	27
4	3	L
—15	47	—56
—14	81	—79
—13	78	—79
—12	66	77
—11	—5ø	14
—1ø	—35	—19
—9	—35	—18
—8	71	7ø
—7	28ø	275
—6	1ø5	—1ø4
—5	295	287
—4	58	39
—3	372	39ø
—2	38	8
—1	318	321
ø	93	5ø
1	228	249
2	12ø	127
3	66	—69
4	7ø	89
5	—5ø	26
6	—5ø	1
7	—5ø	—17
8	—47	26
9	—43	—36
1ø	—35	7
11	—23	—32
4	4	L
—15	—23	—18
—14	—35	—41
—13	58	69
—12	—47	1
—11	12ø	1ø1
—1ø	—5ø	—43
—9	—5ø	59
—8	275	256
—7	66	—55
—6	341	324
—5	178	144
—4	376	396
—3	85	84
—2	337	36ø
—1	47	—37
ø	26ø	271
1	186	—162
2	3ø2	3ø3
3	19ø	—214
4	78	—82
5	—5ø	—45
6	—5ø	12
7	58	—7ø
8	—47	—58
9	—43	—23
1ø	43	—54
11	—23	—45
4	5	L
—15	—2ø	—29
—14	1ø8	1ø8
—13	—38	21
—12	155	119
—11	7ø	61
—1ø	225	216
—9	21ø	—2ø6
—8	275	262
—7	58	—77
—6	36ø	333
—5	—43	—4
—4	—38	23
—3	143	—127
—2	182	—16ø
—1	78	—7ø
ø	228	—217
1	58	—48
2	175	—178
3	89	84
4	4ø6	—415
5	—5ø	—24
6	19ø	—2ø8
7	—47	—55
8	7ø	—86
9	—38	—23
1ø	—31	—5ø
11	—2ø	26
4	6	L
—14	31	37
—13	—38	2
—12	—43	51
—11	21ø	217
—1ø	—5ø	—17
—9	81	74
—8	62	—29
—7	341	323
—6	279	—28ø
—5	78	86
—4	353	—334
—3	78	—55
—2	376	—38ø
—1	58	—54
ø	31ø	—3ø7
1	193	—179
2	186	—182
3	—47	—2ø
4	135	—137
5	2ø1	—217
6	1ø5	112
7	—47	31
8	—43	21
9	—38	—24
1ø	38	54
4	7	L
—14	—27	—5ø
—13	—35	51
—12	73	—88
—11	—47	28
—1ø	58	—6ø
—9	62	—63
—8	298	—269
—7	85	—75
—6	112	—1ø9
—5	388	—392
—4	—47	—14
—3	233	—213
—2	112	115
—1	271	—265
ø	89	92
1	155	—144
2	158	171
3	17ø	—174
4	175	17ø
5	—5ø	—27
6	124	155
7	81	111
8	62	83
9	55	86
1ø	—27	27

Segue: TABLE III.

4	8	L
—14	38	22
—13	78	—77
—12	5Ø	5Ø
—11	12Ø	—113
—1Ø	—47	—9
—9	228	—227
—8	128	—134
—7	275	—27Ø
—6	—5Ø	45
—5	198	—191
—4	62	59
—3	—47	—18
—2	198	—2Ø2
—1	58	51
Ø	—47	—25
1	116	1Ø6
2	7Ø	79
3	186	169
4	132	146
5	66	51
6	—47	—39
7	7Ø	67
8	—38	—25
9	—35	—19
1Ø	—23	32

4	9	L
—13	—31	24
—12	12Ø	—95
—11	—43	—12
—1Ø	132	—127
—9	73	8Ø
—8	158	—134
—7	66	47
—6	—5Ø	11
—5	263	25Ø
—4	14Ø	—114
—3	186	165
—2	—47	35
—1	213	211
Ø	147	128
1	147	129
2	135	144
3	124	116
4	128	124
5	—5Ø	—41
6	66	77
7	66	—23
8	85	91
9	—31	—5

4	1Ø	L
—13	—23	—1
—12	12Ø	—113
—11	—38	17
—1Ø	—43	29
—9	—47	26
—8	7Ø	62
—7	7Ø	73
—6	217	193
—5	—5Ø	—23
—4	2Ø5	219
—3	—5Ø	33
—2	321	3Ø2
—1	—5Ø	3
Ø	24Ø	252
1	128	125
2	55	29
3	—5Ø	4Ø
4	—5Ø	1
5	—47	—13
6	55	—69
7	—38	43
8	—35	28
9	—23	—8

4	11	L
—13	—15	—28
—12	143	152
—11	—38	2Ø
—1Ø	193	175
—9	—47	26
—8	1Ø8	94
—7	73	74
—6	151	121
—5	228	221
—4	1Ø1	1Ø4
—3	193	163
—2	73	74
—1	1Ø5	92
Ø	198	—219
1	1Ø5	113
2	213	—223
3	—5Ø	46
4	167	—17Ø
5	—47	4Ø
6	97	—1Ø6
7	62	—66
8	1Ø1	—115
9	—15	—37

4	12	L
—12	73	9Ø
—11	1Ø5	81
—1Ø	—38	—43
—9	167	162
—8	—47	—67
—7	143	147
—6	112	—12Ø
—5	62	63
—4	17Ø	—17Ø
—3	—5Ø	2Ø
—2	158	—154
—1	1Ø5	—1Ø8
Ø	163	—162
1	151	—145
2	—5Ø	—19
3	151	—155
4	55	—73
5	116	—98
6	—38	—31
7	112	—1Ø7
8	—23	3Ø

4	13	L
—11	—27	—8
—1Ø	—35	—21
—9	47	—61
—8	—43	59
—7	158	—132
—6	—47	—29
—5	175	—147
—4	—47	—7
—3	26Ø	—287
—2	93	—93
—1	248	—259
Ø	—47	—5
1	135	—139
2	—47	1Ø
3	66	—73
4	—43	Ø
5	—38	—4Ø
6	—35	2Ø
7	38	41

4	14	L
—11	—15	—25
—1Ø	—27	39
—9	128	—112
—8	62	—68
—7	14Ø	—122
—6	—43	—23
—5	55	—59
—4	97	—9Ø
—3	—47	32
—2	58	—42
—1	143	122
Ø	58	—52
1	—47	3Ø
2	—43	—33
3	93	1Ø3
4	—38	15
5	112	1Ø5
6	—35	35

4	15	L
—1Ø	—2Ø	—78
—9	—27	—5
—8	112	—1Ø4
—7	—38	33
—6	1Ø8	—89
—5	—43	—14
—4	116	—96
—3	—43	—2
—2	55	7Ø
—1	—43	2Ø
Ø	—43	28
1	—43	43
2	163	155
3	—38	47
4	73	72
5	—27	9
6	—2Ø	41

4	16	L
—9	—15	—58
—8	—27	45
—7	55	—6Ø
—6	124	129
—5	—38	—7
—4	19Ø	163
—3	—38	1
—2	147	12Ø
—1	—38	—Ø
Ø	167	156
1	—38	—2
2	62	66
3	62	78
4	—27	2
5	—15	39

4	17	L
—7	43	65
—6	—27	27
—5	132	125
—4	—35	32
—3	116	113
—2	78	71
—1	147	145
Ø	—35	—18
1	73	73
2	—27	—45
3	—23	2Ø

4	18	L
—5	—23	73
—4	—23	—8
—3	—27	1Ø
—2	55	—7Ø
—1	38	—6Ø
Ø	—23	—21
1	5Ø	—69
2	—8	—25

5	Ø	L
—14	95	—91
—12	37	—34
—1Ø	132	—14Ø
—8	215	—2Ø6
—6	186	—14Ø
—4	256	—327
—2	95	—64
Ø	169	—143
2	2Ø9	226
4	13Ø	137

Segue: TABLE III.

6	65	82
8	9Ø	84
5	1	L
—14	—3Ø	—23
—13	—45	—38
—12	85	—7Ø
—11	—55	—29
—1Ø	95	—99
—9	12Ø	—118
—8	62	72
—7	277	—245
—6	26Ø	261
—5	173	—143
—4	21Ø	256
—2	334	358
—1	169	—162
Ø	145	111
1	75	77
2	284	268
3	—55	11
4	9Ø	87
5	55	45
6	85	88
7	5Ø	48
8	—45	—9
5	2	L
—14	—3Ø	—43
—13	225	—214
—12	5Ø	69
—11	—55	—29
—1Ø	55	48
—9	95	—86
—8	12Ø	123
—7	1Ø8	—9Ø
—6	66	5Ø
—5	82	—69
—4	14Ø	141
—3	—21	12
—2	7Ø	63
—1	334	349
Ø	6Ø	—69
1	135	113
2	—55	11
3	125	1Ø9
4	7Ø	—84
5	8Ø	45
6	75	—73
7	—5Ø	28
8	4Ø	—52
5	3	L
—14	—3Ø	6
—13	—4Ø	—1
—12	—5Ø	—17
—11	164	142
—1Ø	9Ø	—77
—9	164	159
—8	—55	—22
—7	244	232
—6	—5Ø	—29
—5	215	2Ø3
—4	55	59
—3	24Ø	248
—2	1Ø5	96
—1	8Ø	47
Ø	5Ø	—28
1	—5Ø	—19
2	114	98
3	—55	—2
4	—55	26
5	55	—45
6	—55	—22
7	6Ø	—65
8	—4Ø	—5
5	4	L
—14	—25	34
—13	75	63
—12	—45	7
—11	11Ø	73
—1Ø	175	163
—9	95	82
—8	8Ø	62
—7	55	32
—6	145	133
—5	9Ø	75
—4	24Ø	22Ø
—3	1Ø5	—1Ø1
—2	—45	—11
—1	12Ø	—126
Ø	—5Ø	29
1	2Ø9	—212
2	—55	—47
3	—55	—42
4	7Ø	—66
5	6Ø	—42
6	5Ø	—61
7	65	—73
8	4Ø	—16
5	5	L
—13	—4Ø	—3
—12	45	44
—11	—5Ø	—2
—1Ø	154	124
—9	—55	—16
—8	8Ø	69
—7	85	69
—6	6Ø	—68
—5	55	34
—4	229	—244
—3	12Ø	—123
—2	135	—133
—1	—5Ø	29
Ø	215	—2Ø4
1	75	—67
2	24Ø	—197
3	—55	35
4	9Ø	—67
5	139	—148
6	—5Ø	33
7	—45	—28
8	—4Ø	19
5	6	L
—13	55	39
—12	75	—63
—11	—5Ø	31
—1Ø	99	—95
—9	—55	22
—8	225	—223
—7	—55	8
—6	274	—272
—5	2Ø9	—228
—4	12Ø	—77
—3	65	—56
—2	85	—68
—1	12Ø	—11Ø
Ø	—55	2
1	8Ø	—6Ø
2	—55	43
3	7Ø	—72
4	1Ø5	129
5	—55	—45
6	11Ø	121
7	—45	11
8	—35	53
5	7	L
—13	35	—46
—12	5Ø	—47
—11	—45	—14
—1Ø	—5Ø	—22
—9	11Ø	—11Ø
—8	65	—52
—7	2Ø4	—197
—6	—55	3Ø
—5	225	—226
—4	85	1Ø8
—3	11Ø	—83
—2	—55	33
—1	139	—133
Ø	—55	33
1	—55	11
2	—55	—5
3	—55	58
4	8Ø	76
5	135	149
6	—45	—49
7	—4Ø	58
8	35	—56
5	8	L
—12	—35	26
—11	125	—119
—1Ø	8Ø	—73
—9	—55	—19
—8	—55	11
—7	—55	35
—6	—55	31
—5	15Ø	163
—4	85	—85
—3	2Ø9	229
—2	—55	—21
—1	194	184
Ø	—55	31
1	19Ø	18Ø
2	55	48
3	175	182
4	19Ø	—85
5	135	134
6	—45	—35
7	—35	23
8	25	25
5	9	L
—12	75	—84
—11	—4Ø	19
—1Ø	—45	—11
—9	5Ø	51
—8	—55	—1Ø
—7	99	1Ø5
—6	—55	—47
—5	145	16Ø
—4	—55	—14
—3	125	123
—2	154	141
—1	7Ø	65
Ø	164	172
1	7Ø	59
2	9Ø	77
3	—55	—9
4	5Ø	38
5	—45	—35
6	—4Ø	11
7	—3Ø	—7
5	1Ø	L
—12	—25	77
—11	—35	3Ø
—1Ø	194	176
—9	—5Ø	—14
—8	16Ø	138
—7	—55	3Ø
—6	164	164
—5	—55	—21
—4	145	136
—3	—55	—6
—2	154	13Ø
—1	—55	2
Ø	—55	—57
1	8Ø	—1ØØ
2	55	—76
3	5Ø	—52

Segue: TABLE III.

4	55	—47	5	12	L	—6	—45	13	1	6Ø	69
5	55	—67	—1Ø	7Ø	—91	—5	8Ø	—87	2	—4Ø	13
6	—35	—2Ø	—9	45	4Ø	—4	—5Ø	—24	3	55	61
7	—25	—25	—8	8Ø	—59	—3	11Ø	—117			
			—7	—5Ø	—45	—2	—5Ø	43	5	15	L
5	11	L	—6	6Ø	—71	—1	—5Ø	—8	—7	—3Ø	—18
—11	—3Ø	25	—5	65	—81	Ø	—5Ø	39	—6	—35	21
—1Ø	7Ø	44	—4	—55	—37	1	—45	—18	—5	45	7Ø
—9	—45	38	—3	1Ø5	—134	2	—45	—17	—4	6Ø	66
—8	—5Ø	—11	—2	75	—73	3	—4Ø	37	—3	—4Ø	43
—7	8Ø	77	—1	12Ø	—125	4	—35	—7	—2	9Ø	1Ø5
—6	6Ø	64	Ø	—5Ø	23	5	25	63	—1	—4Ø	63
—5	—55	7	1	12Ø	—129				Ø	7Ø	7Ø
—4	75	—1Ø1	2	—5Ø	21				1	—35	9
—3	—55	38	3	—45	—36	5	14	L	2	65	94
—2	85	—1ØØ	4	—4Ø	23	—9	—2Ø	—67			
—1	—55	—17	5	—35	—43	—8	7Ø	—8Ø	5	16	L
Ø	19Ø	—21Ø	6	—1Ø	22	—7	—4Ø	1Ø	—5	35	32
1	—55	—6				—6	55	—56	—4	65	85
2	—5Ø	—31				—5	—45	32	—3	—4Ø	46
3	7Ø	—81	5	13	L	—4	99	—89	—2	45	54
4	—55	—46	—1Ø	—2Ø	4Ø	—3	—45	34	—1	5Ø	83
5	4Ø	—39	—9	65	—62	—2	—45	—48	Ø	—25	19
6	—3Ø	—32	—8	—4Ø	17	—1	—45	48	1	—2Ø	68
			—7	16Ø	—167	Ø	—45	—11			

TABLE IV.

Average planes in the molecule.

	q_a	q_b	q_c	d	ϑ
Ring *trans* to Br	—0.3640	—0.6510	0.7334	2.826	70.7
Ring *cis* to Br	0.5774	0.4238	0.5413	3.929	47.2
Molecular skeleton ...	0.7485	—0.3472	0.3716	0.016	

q_a, q_b, q_c = direction cosines of the plane normal (relative to the crystallographic axes); d = distance from the origin (Å); ϑ = dihedral angle with the molecular skeleton plane (degrees).

In fig. 3 the packing in the crystal is viewed along the a axis. Using the following Van der Waals radii: C = 1.7, Br = 1.95, CH_3 = 2.0 Å, no intermolecular distances significantly shorter than the touching distances were found. Considering also the hydrogen atoms in the calculated positions, with a Van der Waals radius of 1.2 Å, only three contacts appear significantly shorter than the touching distance. In two of them the same hydro-

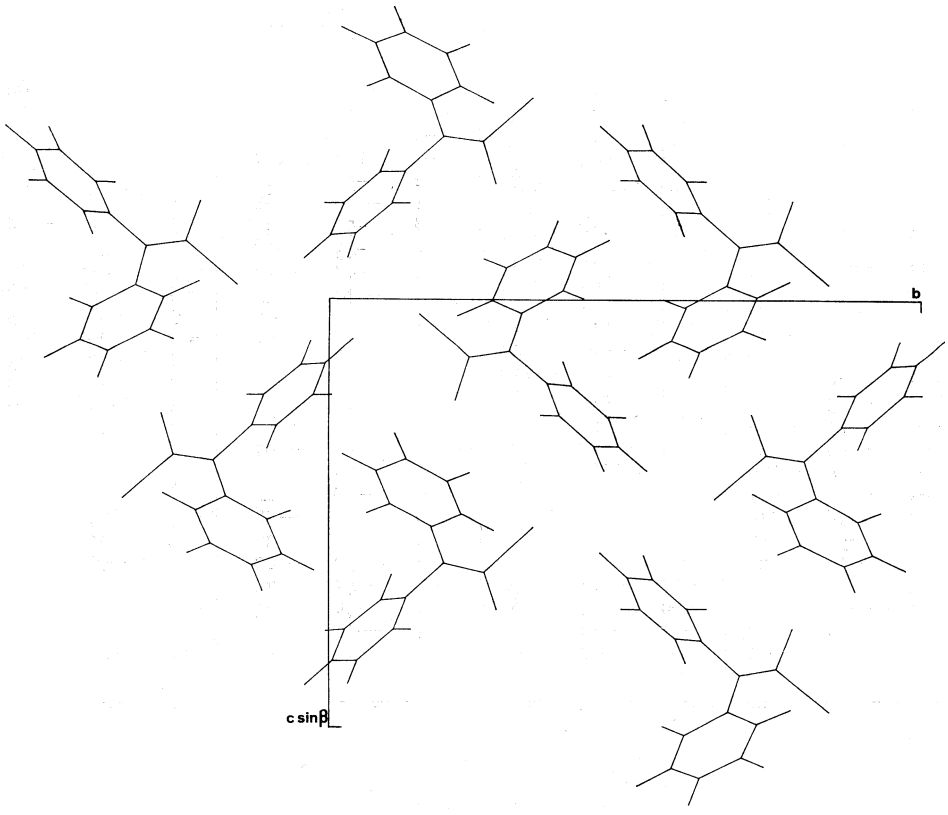


Fig. 3. – The crystal structure viewed along the *a* axis.

gen atom is involved, compressed between a bromine atom and a methyl group:

Atom in x, y, z	with atom	in position	Distance (Å)
C (1)	H (3)	$-1+x$, $1/2-y$, $1/2+z$	3.115
H (2)	Br	$1+x$, y, z	2.964
H (2)	C (1)	$1+x$, $1/2-y$, $-1/2+z$	3.030

Discussion.

With respect to the structure of 2–bromo–1,1–di–*p*–tolylethylene [1], the most striking difference in 2–bromo–1,1–diphenyl–prop–1–ene is the increased value for the rotation angle of the ring in *trans* with the bromine atom (from 24.4° to 70.7°). This is related to the large steric hindrance of the methyl group. Correspondingly, the rotation angle for the *cis* ring decreases from 67.9° to 47.2°. Both the carbon-bromine and carbon-methyl distances are

significantly larger than in [1], while the C(1)–C(2)–Br angle is quite small (110.5°); the ethylenic bond shows a significant shortening. Calculations are in progress to check if this conformation can be explained, as in the bromo-ditolylethylene compound, as corresponding to a minimum of the "total" energy, considering the π–electron, bending, stretching and steric repulsion contributions for an isolated molecule of our compound and in the corresponding model crystal.

The e.s.d.'s on the bond lengths and bond angles result considerably lower than for the bromo-ditolylethylene compound but they seem to be underestimated also in this case. Here, the absence of an absorption correction however appears to be more reasonable, because of the size of the crystal used. The thermal motion is remarkably large, with a pronounced anisotropy for Br, C(7) and C(13).

All the calculations except the full-matrix least-squares refinement were performed on an IBM 1620–20K electronic computer. Structure factors, Fourier syntheses and isotropic block-diagonal least-squares were calculated using available programs [11, 12, 13]. The intensity scaling and correction program has been written by Gramaccioli and Mariani [4]. The final cycles of least-squares refinement were carried on a IBM 7040 electronic computer, using a slightly modified version of the OR–FLS program [14].

Acknowledgement.—The work has been financially supported by the Consiglio Nazionale delle Ricerche.

REFERENCES.

[1] G. L. CASALONE, C. MARIANI, A. MUGNOLI and M. SIMONETTA, «Acta Cryst.», in the press.
[2] A. D. RAE, «Acta Cryst.», *19*, 683 (1965).
[3] D. C. PHILLIPS, «Acta Cryst.», *7*, 746 (1954).
[4] C. M. GRAMACCIOLI and C. MARIANI, to be published.
[5] D. T. CROMER and J. T. WABER, «Acta Cryst.», *18*, 104 (1965).
[6] J. B. FORSYTH and M. WELLS, «Acta Cryst.», *12*, 412 (1959).
[7] N. E. WHITE and C. J. B. CLEWS, «Acta Cryst.», *9*, 586 (1956).
[8] V. SCHOMAKER, J. WASER, R. E. MARSH and G. BERGMAN, «Acta Cryst.», *12*, 600 (1959).
[9] D. W. J. CRUICKSHANK and A. P. ROBERTSON, «Acta Cryst.», *6*, 698 (1953).
[10] S. F. DARLOW, «Acta Cryst.», *13*, 683 (1960).
[11] V. ALBANO, P. L. BELLON and F. POMPA, «Ric. Sci.», *33* (*II–A*), 285 (1963).
[12] F. POMPA, V. ALBANO, P. L. BELLON and V. SCATTURIN, «Ric. Sci.», *33* (*II–A*), 1151 (1963).
[13] V. ALBANO, P. L. BELLON, F. POMPA and V. SCATTURIN, «Ric. Sci.», *33* (*II–A*), 1067 (1963).
[14] W. R. BUSING, K. O. MARTIN and H. A. LEVY, U.S. Atomic Energy Commission Publication ORNL–TM–305 (1962).