



J | A | C | S
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

J. Am. Chem. Soc., 1997, 119(44), 10641-10651, DOI: [10.1021/ja9715760](https://doi.org/10.1021/ja9715760)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

Spectroscopic Data for 2

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 1.70 (br, 1H; NH), 4.04 (s, 2H; CH_2N), 4.68 (s, 2H; CH_2N), 7.27-7.41 (m, 9H; aromatic CH and anthracene H-2, H-3, H-6, H-7), 7.99 (d, $J_{1,2} = J_{7,8} = 9.0$ Hz, 2H; anthracene H-1, H-8), 8.21 (d, $J_{3,4} = J_{5,6} = 9.0$ Hz, 2H; anthracene H-4, H-5), 8.39 (s, 1H; anthracene H-10); ^{13}C NMR (75.5 MHz, CDCl_3): δ 44.9, 54.4, 124.2, 125.0, 126.1, 127.2, 127.3, 128.4, 128.5, 130.4, 131.6, 140.3; MS (FAB): m/z 298 $[\text{M} + \text{H}]^+$, 207 $[\text{M} + \text{H} - \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2]^+$, 191 $[\text{M} - \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{NH}]^+$; $\text{C}_{22}\text{H}_{19}\text{N}$: calcd C 88.9, H 6.44, N 4.71; found C 88.8 H 6.53, N 4.69.

Spectroscopic Data for 2-H $\cdot$ PF₆

^1H NMR (300 MHz, CD_3COCD_3): δ 3.69 (br, 2H; CH_2N), 4.72 (br, 2H; CH_2N), 7.23 (s, 5H; aromatic CH), 7.36-7.41 (m, 2H; anthracene H-2, H-7), 7.47-7.53 (m, 2H; anthracene H-3, H-6), 7.85 (d, $J_{2,3} = J_{7,8} = 9.0$ Hz, 2H; anthracene H-1, H-8), 8.01 (d, $J_{4,3} = J_{5,6} = 9.0$ Hz, 2H; anthracene H-4, H-5), 8.32 (s, 1H; anthracene H-10), 10.10 (br, 2H; NH_2); MS (FAB): m/z 297 $[\text{M} - \text{Cl}]^+$, 207 $[\text{M} - \text{Cl} - \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2]^+$, 191 $[\text{M} - \text{Cl} - \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{NH}]^+$; $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{NCl}$: calcd C 79.2, H 6.04, N 4.20; found C 79.0, H 5.97, N 4.18.

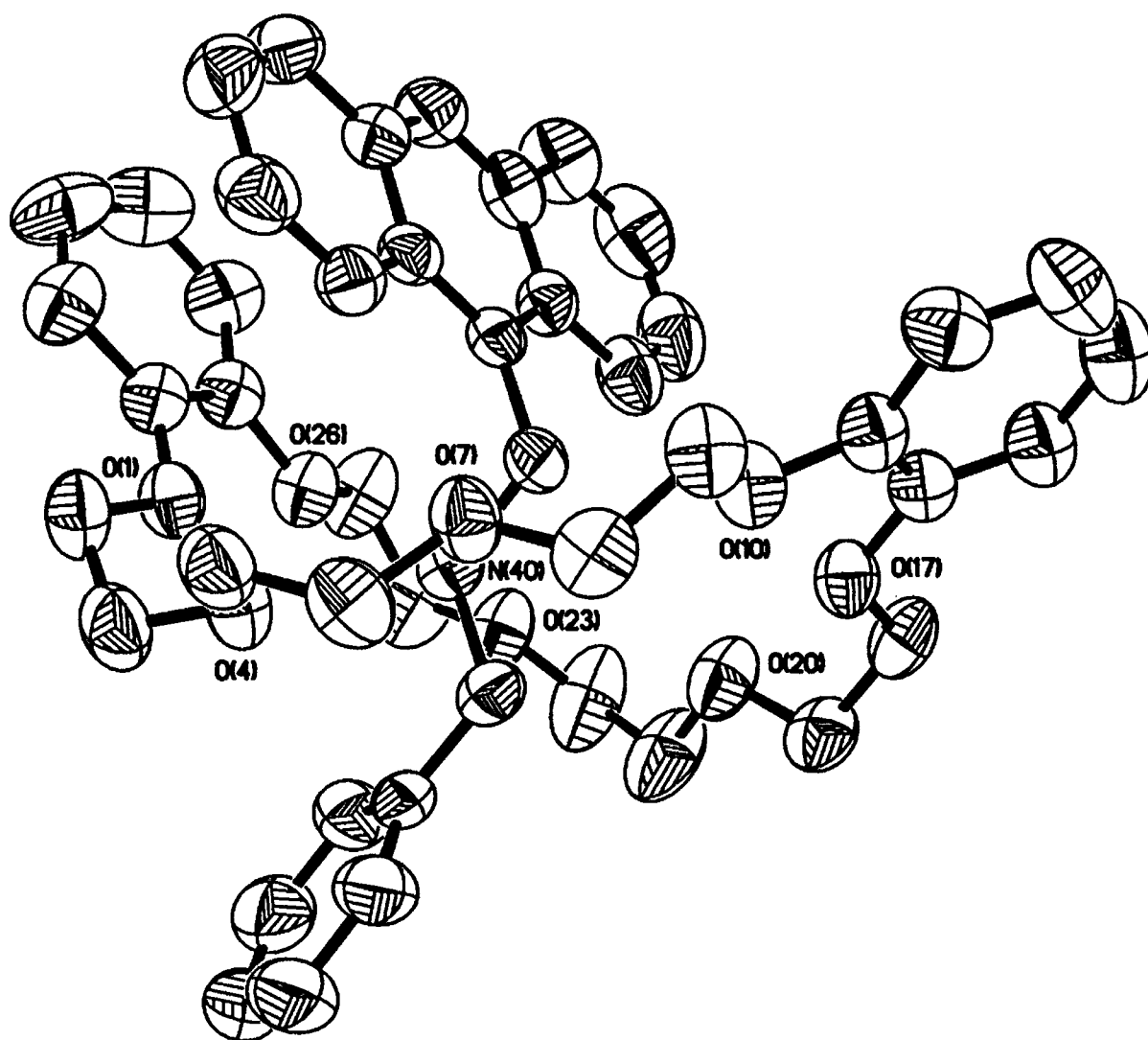


Figure 1

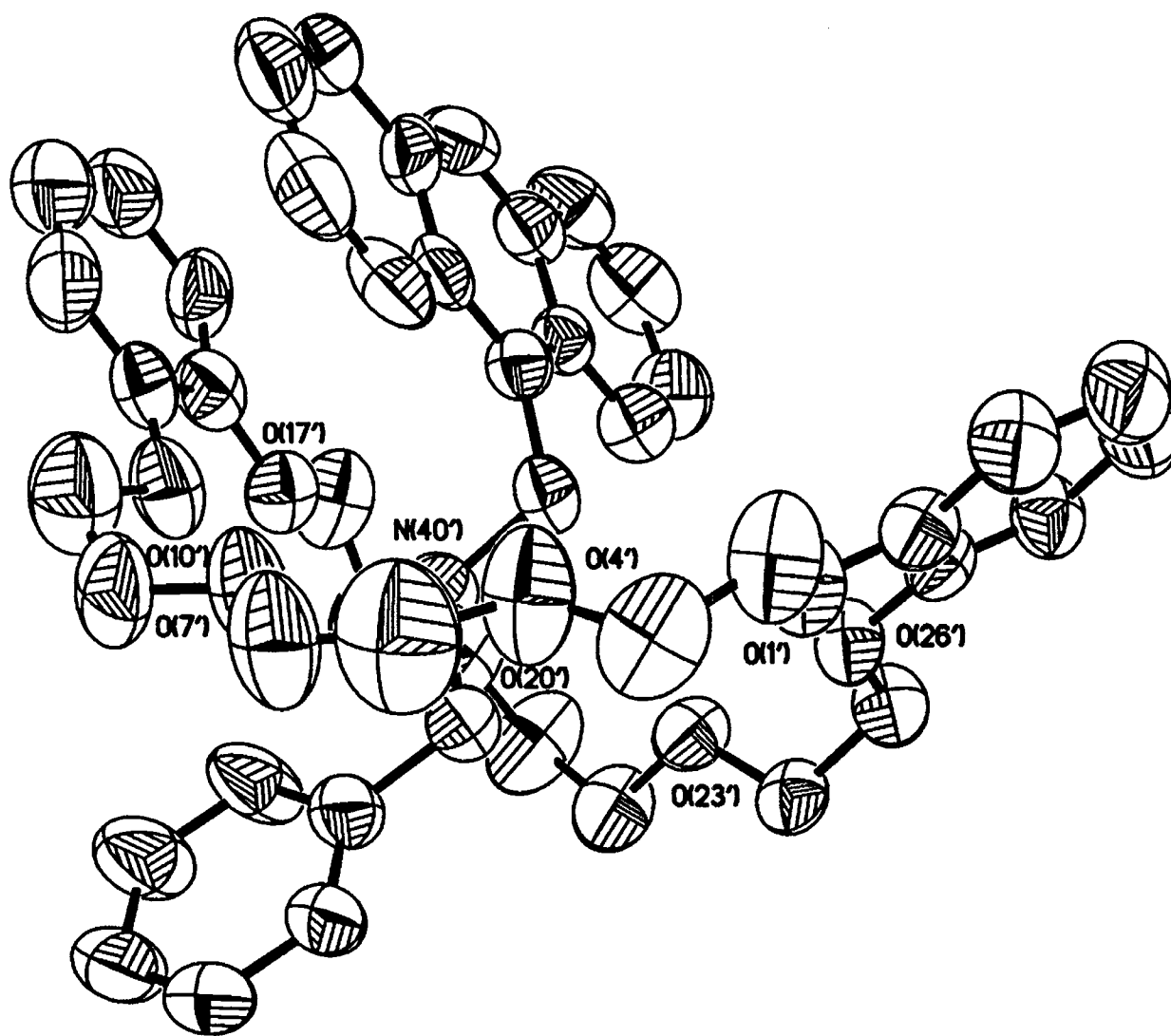


Figure 2

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	fs9638
Empirical formula	$C_{46}H_{52}NO_8 \cdot PF_6$
Formula weight	891.86
Temperature	293(2) K
Diffractometer used	Siemens P4/PC
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 12.622(2)$ Å $\alpha = 94.36(2)^\circ$ $b = 17.099(2)$ Å $\beta = 102.53(2)^\circ$ $c = 21.970(5)$ Å $\gamma = 103.162(13)^\circ$
Volume, Z	$4468(2)$ Å ³ , 4
Density (calculated)	1.326 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.140 mm ⁻¹
F(000)	1872
Crystal morphology/size	colourless prisms, 0.73 x 0.66 x 0.60 mm
θ range for data collection	1.84 to 22.50°
Limiting indices	$0 \leq h \leq 13$, $-18 \leq k \leq 17$, $-23 \leq l \leq 23$
Reflections collected	12327
Independent reflections	11689 ($R_{int} = 0.0433$)
Observed reflections	5173 [$F > 4\sigma(F)$]
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	11687 / 96 / 1120
Goodness-of-fit on F^2	1.037
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0847$, $wR2 = 0.1977$
R indices (all data)	$R1 = 0.1908$, $wR2 = 0.2650$
Largest diff. peak and hole	0.771 and -0.250 eÅ ⁻³

displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
O(1)	536(4)	6627(3)	7033(2)	68(1)
C(2)	489(8)	6083(5)	6491(4)	86(3)
C(3)	-339(8)	6207(5)	5970(4)	90(3)
O(4)	-8(5)	6968(3)	5742(2)	76(2)
C(5)	470(7)	6929(5)	5222(4)	81(2)
C(6)	351(7)	7636(5)	4878(4)	83(2)
O(7)	1000(4)	8376(3)	5253(2)	73(2)
C(8)	873(7)	9044(5)	4950(3)	75(2)
C(9)	1683(7)	9796(5)	5291(3)	75(2)
O(10)	1312(4)	10086(3)	5809(2)	71(1)
C(11)	1776(7)	10891(5)	6052(3)	66(2)
C(12)	2712(7)	11372(6)	5917(4)	86(3)
C(13)	3101(9)	12181(7)	6159(5)	107(3)
C(14)	2534(10)	12507(6)	6537(5)	104(3)
C(15)	1642(8)	12029(6)	6703(4)	84(3)
C(16)	1255(7)	11228(5)	6465(3)	64(2)
O(17)	342(5)	10711(3)	6591(2)	68(1)
C(18)	-278(7)	11078(5)	6960(4)	78(2)
C(19)	-1270(7)	10475(5)	7016(4)	83(3)
O(20)	-945(5)	9955(4)	7454(3)	91(2)
C(21)	-1826(9)	9510(7)	7668(6)	125(4)
C(22)	-1487(10)	9097(7)	8182(5)	128(4)
O(23)	-829(5)	8574(3)	8073(2)	84(2)
C(24)	-721(9)	8043(6)	8535(4)	111(3)
C(25)	315(9)	7803(6)	8621(4)	100(3)
O(26)	459(5)	7450(3)	8052(2)	71(1)
C(27)	1330(7)	7085(5)	8093(4)	69(2)
C(28)	2158(9)	7159(6)	8641(4)	87(3)
C(29)	2980(9)	6755(8)	8657(5)	110(3)
C(30)	2958(8)	6259(7)	8142(6)	109(3)
C(31)	2170(8)	6189(5)	7582(5)	89(3)
C(32)	1352(7)	6627(5)	7557(4)	67(2)
C(33)	-2460(6)	7420(4)	5669(3)	93(3)
C(34)	-3428(6)	6791(5)	5533(3)	124(4)
C(35)	-3812(4)	6435(3)	6019(5)	122(4)
C(36)	-3230(6)	6709(4)	6640(4)	118(4)
C(37)	-2263(6)	7338(4)	6775(2)	87(3)
C(38)	-1878(4)	7694(3)	6290(3)	66(2)
C(39)	-865(6)	8372(5)	6407(3)	67(2)
N(40)	115(5)	8280(3)	6886(3)	63(2)
C(41)	1148(6)	8947(4)	6939(3)	63(2)
C(42)	2148(6)	8865(4)	7417(3)	57(2)
C(43)	2405(7)	9279(4)	8036(4)	64(2)
C(44)	1740(8)	9760(5)	8242(4)	85(3)
C(45)	2041(11)	10151(6)	8842(6)	109(3)
C(46)	3000(12)	10067(7)	9268(5)	117(4)
C(47)	3644(9)	9617(6)	9105(4)	104(3)
C(48)	3387(8)	9212(5)	8473(4)	76(2)
C(49)	4054(7)	8753(5)	8295(4)	78(2)
C(50)	3839(7)	8351(5)	7697(4)	65(2)
C(51)	4541(7)	7881(5)	7508(5)	86(3)
C(52)	4296(9)	7499(5)	6918(5)	93(3)

C(53')	3367(8)	7561(5)	6472(3)	86(3)
C(54)	2678(7)	8006(4)	6621(4)	67(2)
C(55)	2866(6)	8413(4)	7243(3)	57(2)
O(1')	3998(5)	8443(4)	3957(3)	93(2)
C(2')	3581(10)	8071(7)	4422(5)	123(4)
C(3')	3661(10)	7260(8)	4415(5)	124(4)
O(4')	3004(7)	6757(4)	3888(3)	131(3)
C(5')	2792(15)	5937(10)	3942(7)	193(6)
C(6')	2431(12)	5358(6)	3485(6)	138(4)
O(7')	2035(6)	5419(4)	2880(4)	112(2)
C(8')	1594(10)	4728(6)	2467(6)	125(4)
C(9')	764(12)	4719(7)	1936(6)	154(5)
O(10')	1080(6)	5368(3)	1559(3)	102(2)
C(11')	204(11)	5450(6)	1110(5)	88(3)
C(12')	-905(14)	5081(6)	1055(7)	121(4)
C(13')	-1720(14)	5222(10)	590(9)	158(6)
C(14')	-1462(14)	5748(9)	200(7)	138(5)
C(15')	-336(12)	6135(6)	237(5)	108(3)
C(16')	496(10)	5973(6)	689(5)	87(3)
O(17')	1619(6)	6310(4)	755(2)	87(2)
C(18')	1937(10)	6789(7)	297(4)	112(4)
C(19')	3132(11)	6919(7)	353(4)	131(4)
O(20')	3776(6)	7304(4)	953(3)	107(2)
C(21')	4849(10)	7729(8)	917(5)	147(5)
C(22')	5624(8)	8001(6)	1508(5)	113(3)
O(23')	5247(5)	8480(4)	1918(3)	88(2)
C(24')	6076(7)	8898(5)	2444(4)	79(2)
C(25')	5676(7)	9522(5)	2775(4)	85(3)
O(26')	4878(4)	9127(3)	3104(2)	78(2)
C(27')	4548(6)	9618(6)	3501(4)	69(2)
C(28')	4653(7)	10431(6)	3473(4)	87(3)
C(29')	4283(8)	10884(6)	3887(5)	110(3)
C(30')	3813(9)	10537(8)	4334(5)	125(4)
C(31')	3709(8)	9721(7)	4367(5)	108(3)
C(32')	4071(7)	9253(6)	3957(4)	80(2)
C(33')	3746(6)	5558(4)	1610(3)	125(4)
C(34')	3900(6)	4802(4)	1433(3)	149(5)
C(35')	4533(6)	4433(3)	1866(4)	134(4)
C(36')	5013(5)	4821(4)	2476(4)	111(3)
C(37')	4858(5)	5577(4)	2653(2)	88(3)
C(38')	4225(5)	5946(3)	2220(3)	82(2)
C(39')	3984(7)	6725(5)	2446(3)	73(2)
N(40')	2912(5)	6851(4)	2102(3)	74(2)
C(41')	2567(7)	7540(4)	2405(3)	74(2)
C(42')	1492(7)	7647(5)	2008(4)	70(2)
C(43')	1510(8)	8157(5)	1545(4)	68(2)
C(44')	2511(8)	8634(6)	1446(4)	90(3)
C(45')	2490(11)	9131(6)	982(6)	118(3)
C(46')	1452(14)	9148(8)	577(5)	124(4)
C(47')	475(12)	8722(7)	658(5)	115(4)
C(48')	478(10)	8206(6)	1147(4)	84(3)
C(49')	-512(10)	7772(7)	1228(5)	97(3)
C(50')	-553(10)	7267(6)	1699(6)	93(3)
C(51')	-1612(10)	6801(8)	1786(7)	121(4)
C(52')	-1608(15)	6317(8)	2251(9)	148(6)
C(53')	-620(16)	6280(7)	2660(7)	127(5)
C(54')	368(11)	6699(6)	2585(5)	104(3)
C(55')	475(9)	7208(5)	2104(4)	76(2)
P(10)	3240(2)	2218(2)	453(1)	81(1)
F(11)	2350(6)	1406(4)	401(3)	166(3)
F(12)	2990(5)	2114(4)	-285(2)	136(2)
F(13)	4205(5)	1787(5)	442(3)	159(3)
F(14)	3479(6)	2299(5)	1181(2)	162(3)

F(16)	4095(6)	3039(4)	487(4)	184(3)
P(20)	7343(2)	5151(2)	4247(1)	89(1)
F(21)	6280(17)	5438(19)	4016(13)	162(14)
F(22)	7618(11)	5423(8)	3597(5)	152(5)
F(23)	6787(10)	4313(5)	3836(7)	151(4)
F(24)	6860(17)	4950(10)	4827(7)	187(6)
F(25)	7857(10)	6058(6)	4572(7)	132(5)
F(26)	8595(8)	5051(8)	4371(6)	138(4)
F(21")	6193(26)	5414(26)	4076(23)	151(19)
F(22")	7317(18)	4834(16)	3589(8)	147(7)
F(23")	6733(17)	4239(12)	4309(12)	166(8)
F(24")	7513(15)	5350(13)	4956(8)	115(6)
F(25")	8103(21)	5990(14)	4289(13)	171(12)
F(26")	8154(16)	4655(11)	4568(9)	135(8)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

O(1)-C(32)	1.369(9)	O(1)-C(2)	1.437(8)
C(2)-C(3)	1.436(10)	C(3)-O(4)	1.436(9)
O(4)-C(5)	1.407(9)	C(5)-C(6)	1.494(10)
C(6)-O(7)	1.423(8)	O(7)-C(8)	1.389(8)
C(8)-C(9)	1.476(10)	C(9)-O(10)	1.419(8)
O(10)-C(11)	1.380(8)	C(11)-C(12)	1.381(10)
C(11)-C(16)	1.393(10)	C(12)-C(13)	1.379(12)
C(13)-C(14)	1.372(12)	C(14)-C(15)	1.369(12)
C(15)-C(16)	1.364(10)	C(16)-O(17)	1.378(8)
O(17)-C(18)	1.444(8)	C(18)-C(19)	1.464(10)
C(19)-O(20)	1.418(9)	O(20)-C(21)	1.390(10)
C(21)-C(22)	1.418(12)	C(22)-O(23)	1.392(10)
O(23)-C(24)	1.417(9)	C(24)-C(25)	1.435(11)
C(25)-O(26)	1.414(9)	O(26)-C(27)	1.373(9)
C(27)-C(32)	1.372(10)	C(27)-C(28)	1.390(11)
C(28)-C(29)	1.368(12)	C(29)-C(30)	1.353(13)
C(30)-C(31)	1.382(12)	C(31)-C(32)	1.401(11)
C(33)-C(34)	1.39	C(33)-C(38)	1.39
C(34)-C(35)	1.39	C(35)-C(36)	1.39
C(36)-C(37)	1.39	C(37)-C(38)	1.39
C(38)-C(39)	1.477(8)	C(39)-N(40)	1.487(8)
N(40)-C(41)	1.500(8)	C(41)-C(42)	1.498(9)
C(42)-C(55)	1.411(9)	C(42)-C(43)	1.419(10)
C(43)-C(44)	1.415(10)	C(43)-C(48)	1.427(11)
C(44)-C(45)	1.366(12)	C(45)-C(46)	1.403(14)
C(46)-C(47)	1.323(13)	C(47)-C(48)	1.438(11)
C(48)-C(49)	1.370(11)	C(49)-C(50)	1.375(10)
C(50)-C(51)	1.429(11)	C(50)-C(55)	1.435(10)
C(51)-C(52)	1.343(11)	C(52)-C(53)	1.387(12)
C(53)-C(54)	1.352(10)	C(54)-C(55)	1.430(9)
O(1')-C(32')	1.367(10)	O(1')-C(2')	1.380(10)
C(2')-C(3')	1.412(13)	C(3')-O(4')	1.368(11)
O(4')-C(5')	1.38(2)	C(5')-C(6')	1.28(2)
C(6')-O(7')	1.337(12)	O(7')-C(8')	1.359(11)
C(8')-C(9')	1.385(13)	C(9')-O(10')	1.468(12)
O(10')-C(11')	1.354(11)	C(11')-C(12')	1.373(14)
C(11')-C(16')	1.382(12)	C(12')-C(13')	1.36(2)
C(13')-C(14')	1.32(2)	C(14')-C(15')	1.41(2)
C(15')-C(16')	1.374(13)	C(16')-O(17')	1.374(11)
O(17')-C(18')	1.413(10)	C(18')-C(19')	1.451(13)
C(19')-O(20')	1.411(10)	O(20')-C(21')	1.406(11)
C(21')-C(22')	1.418(12)	C(22')-O(23')	1.399(9)
O(23')-C(24')	1.398(9)	C(24')-C(25')	1.487(10)
C(25')-O(26')	1.441(8)	O(26')-C(27')	1.359(9)
C(27')-C(28')	1.373(10)	C(27')-C(32')	1.393(10)
C(28')-C(29')	1.374(11)	C(29')-C(30')	1.360(13)
C(30')-C(31')	1.381(13)	C(31')-C(32')	1.376(12)
C(33')-C(34')	1.39	C(33')-C(38')	1.39
C(34')-C(35')	1.39	C(35')-C(36')	1.39
C(36')-C(37')	1.39	C(37')-C(38')	1.39
C(38')-C(39')	1.505(8)	C(39')-N(40')	1.471(8)
N(40')-C(41')	1.503(8)	C(41')-C(42')	1.502(10)
C(42')-C(43')	1.391(10)	C(42')-C(55')	1.400(11)
C(43')-C(44')	1.410(11)	C(43')-C(48')	1.427(11)
C(44')-C(45')	1.374(12)	C(45')-C(46')	1.425(14)
C(46')-C(47')	1.337(14)	C(47')-C(48')	1.439(13)
C(48')-C(49')	1.356(12)	C(49')-C(50')	1.398(13)
C(50')-C(55')	1.434(13)	C(50')-C(51')	1.452(14)
C(51')-C(52')	1.36(2)	C(52')-C(53')	1.39(2)

P(10)-F(16)	1.549(7)	P(10)-F(15)	1.549(6)
P(10)-F(14)	1.551(5)	P(10)-F(11)	1.553(6)
P(10)-F(13)	1.563(6)	P(10)-F(12)	1.569(5)
P(20)-F(22")	1.50(2)	P(20)-F(25")	1.52(2)
P(20)-F(24")	1.53(2)	P(20)-F(21)	1.530(14)
P(20)-F(24)	1.556(10)	P(20)-F(23)	1.560(8)
P(20)-F(26")	1.56(2)	P(20)-F(25)	1.583(9)
P(20)-F(21")	1.59(2)	P(20)-F(26)	1.595(9)
P(20)-F(23")	1.61(2)	P(20)-F(22)	1.618(8)
F(23")-F(26")	1.72(3)		
C(32)-O(1)-C(2)	115.7(6)	O(1)-C(2)-C(3)	108.7(7)
O(4)-C(3)-C(2)	113.2(7)	C(5)-O(4)-C(3)	114.7(6)
O(4)-C(5)-C(6)	109.0(7)	O(7)-C(6)-C(5)	110.9(6)
C(8)-O(7)-C(6)	111.9(6)	O(7)-C(8)-C(9)	111.8(7)
O(10)-C(9)-C(8)	110.0(6)	C(11)-O(10)-C(9)	116.3(6)
C(12)-C(11)-O(10)	124.7(8)	C(12)-C(11)-C(16)	118.6(8)
O(10)-C(11)-C(16)	116.7(7)	C(13)-C(12)-C(11)	121.3(9)
C(14)-C(13)-C(12)	118.7(9)	C(15)-C(14)-C(13)	120.6(9)
C(16)-C(15)-C(14)	120.7(9)	C(15)-C(16)-O(17)	124.5(8)
C(15)-C(16)-C(11)	119.8(8)	O(17)-C(16)-C(11)	115.7(7)
C(16)-O(17)-C(18)	115.9(6)	O(17)-C(18)-C(19)	110.1(6)
O(20)-C(19)-C(18)	109.7(7)	C(21)-O(20)-C(19)	113.8(7)
O(20)-C(21)-C(22)	114.1(9)	O(23)-C(22)-C(21)	114.6(8)
C(22)-O(23)-C(24)	112.6(7)	O(23)-C(24)-C(25)	112.5(7)
O(26)-C(25)-C(24)	112.1(8)	C(27)-O(26)-C(25)	117.0(6)
O(26)-C(27)-C(32)	116.6(8)	O(26)-C(27)-C(28)	123.1(8)
C(32)-C(27)-C(28)	120.3(8)	C(29)-C(28)-C(27)	120.2(9)
C(30)-C(29)-C(28)	119.6(10)	C(29)-C(30)-C(31)	121.8(10)
C(30)-C(31)-C(32)	118.7(9)	O(1)-C(32)-C(27)	115.9(8)
O(1)-C(32)-C(31)	124.9(8)	C(27)-C(32)-C(31)	119.3(8)
C(34)-C(33)-C(38)	120.0	C(35)-C(34)-C(33)	120.0
C(34)-C(35)-C(36)	120.0	C(35)-C(36)-C(37)	120.0
C(36)-C(37)-C(38)	120.0	C(37)-C(38)-C(33)	120.0
C(37)-C(38)-C(39)	122.2(6)	C(33)-C(38)-C(39)	117.8(6)
C(38)-C(39)-N(40)	115.3(6)	C(39)-N(40)-C(41)	112.8(5)
N(40)-C(41)-C(42)	113.8(6)	C(55)-C(42)-C(43)	120.1(7)
C(55)-C(42)-C(41)	120.0(7)	C(43)-C(42)-C(41)	119.8(7)
C(44)-C(43)-C(42)	123.4(8)	C(44)-C(43)-C(48)	118.3(8)
C(42)-C(43)-C(48)	118.3(7)	C(45)-C(44)-C(43)	120.5(9)
C(44)-C(45)-C(46)	120.3(10)	C(47)-C(46)-C(45)	121.8(11)
C(46)-C(47)-C(48)	120.2(11)	C(49)-C(48)-C(43)	120.3(7)
C(49)-C(48)-C(47)	120.9(10)	C(43)-C(48)-C(47)	118.8(9)
C(48)-C(49)-C(50)	123.0(8)	C(49)-C(50)-C(51)	123.1(8)
C(49)-C(50)-C(55)	118.4(8)	C(51)-C(50)-C(55)	118.5(7)
C(52)-C(51)-C(50)	120.9(8)	C(51)-C(52)-C(53)	121.1(9)
C(54)-C(53)-C(52)	120.6(9)	C(53)-C(54)-C(55)	121.6(8)
C(42)-C(55)-C(54)	122.9(7)	C(42)-C(55)-C(50)	119.9(7)
C(54)-C(55)-C(50)	117.2(7)	C(32')-O(1')-C(2')	117.8(7)
O(1')-C(2')-C(3')	112.5(9)	O(4')-C(3')-C(2')	113.9(10)
C(3')-O(4')-C(5')	115.4(10)	C(6')-C(5')-O(4')	126.0(13)
C(5')-C(6')-O(7')	126.7(11)	C(6')-O(7')-C(8')	118.6(8)
O(7')-C(8')-C(9')	119.4(10)	C(8')-C(9')-O(10')	113.4(10)
C(11')-O(10')-C(9')	113.0(9)	O(10')-C(11')-C(12')	125.8(13)
O(10')-C(11')-C(16')	114.6(11)	C(12')-C(11')-C(16')	119.6(12)
C(13')-C(12')-C(11')	120.7(14)	C(14')-C(13')-C(12')	121(2)
C(13')-C(14')-C(15')	121(2)	C(16')-C(15')-C(14')	119.3(12)
C(15')-C(16')-O(17')	123.5(11)	C(15')-C(16')-C(11')	119.2(11)
O(17')-C(16')-C(11')	117.3(10)	C(16')-O(17')-C(18')	118.0(8)
O(17')-C(18')-C(19')	109.7(9)	O(20')-C(19')-C(18')	112.5(8)
C(21')-O(20')-C(19')	110.5(7)	O(20')-C(21')-C(22')	114.3(8)
O(23')-C(22')-C(21')	113.2(9)	C(24')-O(23')-C(22')	114.3(7)

C(25')-C(24')-C(23')	110.0(7)	O(26')-C(27')-C(28')	108.9(8)
C(27')-O(26')-C(25')	116.2(6)	C(28')-C(27')-C(32')	124.1(7)
O(26')-C(27')-C(32')	116.3(8)	C(30')-C(29')-C(28')	119.6(8)
C(27')-C(28')-C(29')	120.6(9)	C(32')-C(31')-C(30')	120.5(10)
C(29')-C(30')-C(31')	119.3(10)	O(1')-C(32')-C(27')	121.3(10)
O(1')-C(32')-C(31')	125.0(9)	C(34')-C(33')-C(38')	116.2(8)
C(31')-C(32')-C(27')	118.8(9)	C(34')-C(35')-C(36')	120.0
C(33')-C(34')-C(35')	120.0	C(38')-C(37')-C(36')	120.0
C(37')-C(36')-C(35')	120.0	C(37')-C(38')-C(39')	120.0
C(37')-C(38')-C(33')	120.0	C(40')-C(39')-C(38')	118.4(5)
C(33')-C(38')-C(39')	121.4(5)	N(40')-C(41')-C(42')	114.4(6)
C(39')-N(40')-C(41')	114.2(6)	C(43')-C(42')-C(41')	110.5(6)
C(43')-C(42')-C(55')	120.7(8)	C(42')-C(43')-C(44')	120.5(8)
C(55')-C(42')-C(41')	118.7(8)	C(44')-C(43')-C(48')	122.9(8)
C(42')-C(43')-C(48')	119.4(9)	C(44')-C(45')-C(46')	117.7(9)
C(45')-C(44')-C(43')	121.0(9)	C(46')-C(47')-C(48')	120.2(11)
C(47')-C(46')-C(45')	121.2(11)	C(49')-C(48')-C(47')	119.3(11)
C(49')-C(48')-C(43')	120.3(10)	C(48')-C(49')-C(50')	121.4(10)
C(43')-C(48')-C(47')	120.4(11)	C(49')-C(50')-C(51')	121.4(13)
C(49')-C(50')-C(55')	119.3(10)	C(52')-C(51')-C(50')	119.3(14)
C(55')-C(50')-C(51')	119.3(12)	C(54')-C(53')-C(52')	120(2)
C(51')-C(52')-C(53')	122(2)	C(42')-C(55')-C(54')	125.0(10)
C(53')-C(54')-C(55')	123.6(12)	C(54')-C(55')-C(50')	116.2(10)
C(42')-C(55')-C(50')	118.9(9)	F(16)-P(10)-F(14)	91.0(4)
F(16)-P(10)-F(15)	91.1(4)	F(16)-P(10)-F(11)	177.8(5)
F(15)-P(10)-F(14)	88.7(4)	F(14)-P(10)-F(11)	90.4(4)
F(15)-P(10)-F(11)	87.2(4)	F(15)-P(10)-F(13)	179.1(4)
F(16)-P(10)-F(13)	88.6(4)	F(11)-P(10)-F(13)	93.1(4)
F(14)-P(10)-F(13)	92.2(4)	F(15)-P(10)-F(12)	91.8(3)
F(16)-P(10)-F(12)	90.2(4)	F(11)-P(10)-F(12)	88.5(4)
F(14)-P(10)-F(12)	178.7(4)	F(22'')-P(20)-F(25'')	98.9(13)
F(13)-P(10)-F(12)	87.3(3)	F(25'')-P(20)-F(24'')	85.2(11)
F(22'')-P(20)-F(24'')	168.2(11)	F(21)-P(20)-F(23)	90.5(12)
F(21)-P(20)-F(24)	85.0(14)	F(22'')-P(20)-F(26'')	95.2(11)
F(24)-P(20)-F(23)	96.9(9)	F(24'')-P(20)-F(26'')	73.1(10)
F(25'')-P(20)-F(26'')	103.6(12)	F(24)-P(20)-F(25)	89.4(9)
F(21)-P(20)-F(25)	84.3(13)	F(22'')-P(20)-F(21'')	96(2)
F(23)-P(20)-F(25)	171.5(8)	F(24'')-P(20)-F(21'')	95(2)
F(25'')-P(20)-F(21'')	96(2)	F(21)-P(20)-F(26)	163.0(14)
F(26'')-P(20)-F(21'')	155(2)	F(23)-P(20)-F(26)	95.8(6)
F(24)-P(20)-F(26)	109.7(9)	F(22'')-P(20)-F(23'')	86.2(12)
F(25)-P(20)-F(26)	87.4(6)	F(24'')-P(20)-F(23'')	87.9(11)
F(25'')-P(20)-F(23'')	168.8(13)	F(21'')-P(20)-F(23'')	93(2)
F(26'')-P(20)-F(23'')	65.8(9)	F(24)-P(20)-F(22)	168.4(8)
F(21)-P(20)-F(22)	83.4(13)	F(25)-P(20)-F(22)	89.4(7)
F(23)-P(20)-F(22)	83.3(6)	P(20)-F(23'')-F(26'')	55.9(8)
F(26)-P(20)-F(22)	81.8(7)		
P(20)-F(26'')-F(23'')	58.3(9)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	86(4)	63(3)	58(3)	0(3)	24(3)	18(3)
C(2)	115(8)	58(5)	84(6)	2(5)	20(6)	24(5)
C(3)	109(8)	65(6)	78(6)	-11(5)	2(6)	13(5)
O(4)	98(4)	55(4)	70(4)	1(3)	19(3)	13(3)
C(5)	86(6)	66(6)	83(6)	-5(5)	14(5)	10(5)
C(6)	94(7)	85(7)	60(5)	-5(5)	16(5)	11(5)
O(7)	93(4)	61(4)	58(3)	4(3)	10(3)	15(3)
C(8)	94(7)	88(7)	50(5)	6(5)	22(5)	30(5)
C(9)	98(7)	78(6)	60(5)	13(5)	42(5)	22(5)
O(10)	93(4)	67(4)	62(3)	9(3)	38(3)	21(3)
C(11)	81(6)	64(6)	52(5)	12(4)	15(4)	16(5)
C(12)	81(7)	101(8)	79(6)	21(6)	36(5)	14(6)
C(13)	112(9)	88(8)	98(8)	16(6)	20(7)	-16(7)
C(14)	146(10)	67(7)	93(8)	5(6)	27(7)	16(7)
C(15)	100(7)	67(6)	82(6)	7(5)	20(6)	14(6)
C(16)	72(6)	64(6)	52(5)	7(4)	10(4)	16(5)
O(17)	84(4)	58(3)	67(3)	3(3)	27(3)	22(3)
C(18)	102(7)	76(6)	73(6)	3(4)	28(5)	50(6)
C(19)	81(7)	89(7)	97(7)	12(5)	41(5)	41(6)
O(20)	107(5)	96(4)	103(4)	42(4)	57(4)	53(4)
C(21)	122(9)	138(9)	180(11)	81(9)	104(9)	81(8)
C(22)	183(11)	126(9)	144(10)	69(8)	114(9)	90(9)
O(23)	114(5)	88(4)	85(4)	26(3)	60(3)	53(4)
C(24)	155(10)	136(9)	89(7)	52(7)	79(7)	71(8)
C(25)	143(9)	114(8)	75(6)	31(6)	51(6)	67(7)
O(26)	94(4)	75(4)	57(3)	9(3)	31(3)	32(3)
C(27)	75(6)	70(6)	68(6)	20(5)	31(5)	16(5)
C(28)	94(7)	103(7)	72(7)	27(5)	28(6)	27(6)
C(29)	99(9)	160(11)	69(7)	32(7)	19(6)	25(8)
C(30)	82(7)	168(11)	98(8)	58(8)	25(7)	56(7)
C(31)	101(7)	101(7)	89(7)	29(5)	53(6)	41(6)
C(32)	74(6)	70(6)	63(6)	15(5)	28(5)	19(5)
C(33)	70(6)	96(7)	101(8)	-10(6)	6(6)	19(6)
C(34)	85(9)	112(9)	150(11)	-32(8)	-9(8)	23(7)
C(35)	67(7)	85(8)	201(13)	9(9)	15(9)	13(6)
C(36)	81(8)	107(9)	173(12)	39(8)	35(8)	27(7)
C(37)	73(7)	86(7)	100(7)	24(6)	21(6)	10(5)
C(38)	50(5)	63(5)	85(6)	-2(5)	8(5)	23(4)
C(39)	65(5)	73(5)	65(5)	12(4)	8(4)	26(5)
N(40)	61(4)	68(4)	62(4)	8(3)	13(3)	20(4)
C(41)	59(5)	57(5)	73(5)	16(4)	23(4)	8(4)
C(42)	51(5)	51(5)	66(5)	13(4)	15(4)	5(4)
C(43)	68(6)	58(5)	68(6)	6(4)	24(5)	14(4)
C(44)	97(7)	65(6)	92(7)	-3(5)	40(6)	10(5)
C(45)	128(10)	73(7)	141(11)	4(7)	72(9)	20(7)
C(46)	148(12)	99(9)	97(9)	-13(7)	53(9)	7(8)
C(47)	122(9)	111(8)	67(7)	-2(6)	14(6)	20(7)
C(48)	95(7)	65(6)	61(6)	4(5)	22(5)	4(5)
C(49)	74(6)	82(6)	67(6)	18(5)	-1(5)	14(5)
C(50)	61(5)	66(5)	64(6)	6(4)	13(5)	12(4)
C(51)	66(6)	91(7)	101(8)	23(6)	16(6)	23(5)
C(52)	92(8)	86(7)	115(8)	9(6)	47(7)	33(6)

C(53)	77(7)	84(7)	95(7)	0(5)	33(6)	8(6)
C(54)	66(6)	66(5)	67(6)	3(4)	14(4)	16(5)
C(55)	52(5)	55(5)	62(5)	13(4)	16(4)	5(4)
O(1')	119(5)	88(5)	76(4)	17(3)	49(4)	7(4)
C(2')	168(11)	104(9)	83(7)	23(7)	44(7)	-8(8)
C(3')	144(10)	142(11)	76(7)	47(8)	26(7)	8(9)
O(4')	201(7)	89(5)	84(4)	38(4)	22(4)	0(4)
C(5')	258(11)	156(9)	155(9)	59(8)	32(8)	36(8)
C(6')	212(14)	77(8)	117(10)	39(7)	32(10)	16(8)
O(7')	175(7)	65(4)	91(5)	28(4)	30(5)	18(4)
C(8')	150(11)	65(7)	143(10)	34(7)	18(9)	3(7)
C(9')	182(9)	108(7)	153(8)	24(7)	20(7)	16(7)
O(10')	152(6)	65(4)	87(4)	18(3)	20(5)	26(4)
C(11')	114(10)	63(6)	80(7)	-10(6)	20(7)	22(7)
C(12')	138(12)	79(8)	141(12)	-7(7)	59(10)	2(9)
C(13')	129(13)	117(13)	198(18)	-51(12)	5(13)	25(11)
C(14')	127(13)	100(11)	157(13)	-26(9)	-31(10)	44(10)
C(15')	120(10)	77(7)	100(8)	-14(6)	-6(8)	6(7)
C(16')	107(9)	82(7)	61(6)	-12(5)	-7(7)	33(7)
O(17')	103(5)	88(4)	60(4)	7(3)	4(4)	17(4)
C(18')	143(11)	127(9)	43(6)	5(6)	2(6)	7(8)
C(19')	136(11)	176(11)	67(7)	-14(7)	32(7)	9(9)
O(20')	107(5)	142(6)	55(4)	-18(4)	31(4)	-4(4)
C(21')	118(10)	217(14)	87(8)	-35(8)	54(8)	-8(9)
C(22')	96(8)	140(9)	99(8)	-22(7)	50(7)	10(7)
O(23')	74(4)	115(5)	72(4)	-7(3)	26(3)	18(4)
C(24')	67(6)	82(6)	89(6)	7(5)	38(5)	1(5)
C(25')	91(7)	82(6)	89(6)	11(5)	47(5)	12(5)
O(26')	88(4)	69(4)	75(4)	3(3)	41(3)	0(3)
C(27')	59(5)	78(6)	61(5)	4(5)	16(4)	2(5)
C(28')	98(7)	83(7)	81(6)	0(5)	37(5)	12(6)
C(29')	105(8)	87(7)	141(9)	-5(7)	60(7)	9(6)
C(30')	116(9)	128(11)	127(10)	-27(8)	61(8)	7(8)
C(31')	115(8)	113(9)	99(7)	-1(7)	62(6)	8(7)
C(32')	73(6)	95(7)	68(6)	1(5)	30(5)	8(5)
C(33')	154(10)	133(9)	85(7)	-27(6)	-21(7)	92(8)
C(34')	150(9)	152(9)	130(8)	-41(7)	-28(7)	85(8)
C(35')	114(9)	123(9)	157(11)	-27(9)	-8(8)	66(8)
C(36')	84(7)	109(9)	133(10)	1(7)	2(7)	42(6)
C(37')	83(7)	83(7)	96(7)	3(5)	3(5)	34(5)
C(38')	83(6)	84(6)	77(6)	-7(5)	10(5)	28(5)
C(39')	85(6)	76(6)	58(5)	8(4)	9(5)	25(5)
N(40')	84(5)	77(5)	60(4)	2(3)	5(4)	33(4)
C(41')	95(7)	60(5)	65(5)	1(4)	15(5)	24(5)
C(42')	70(6)	69(6)	67(6)	-2(5)	12(5)	19(5)
C(43')	76(7)	64(6)	60(5)	-1(4)	9(5)	21(5)
C(44')	99(8)	93(7)	81(7)	18(6)	19(6)	28(6)
C(45')	131(10)	105(8)	119(9)	28(7)	34(8)	24(7)
C(46')	172(13)	130(11)	92(8)	41(7)	38(10)	68(10)
C(47')	144(12)	125(10)	92(8)	21(7)	19(8)	73(9)
C(48')	99(8)	79(7)	75(7)	-1(5)	11(6)	37(6)
C(49')	92(9)	113(9)	86(7)	-17(7)	-4(6)	55(7)
C(50')	89(9)	68(7)	109(8)	-32(6)	32(7)	4(6)
C(51')	95(9)	86(8)	172(13)	-46(8)	43(9)	16(8)
C(52')	164(15)	78(10)	216(19)	-27(10)	104(15)	18(10)
C(53')	182(15)	72(8)	158(13)	17(8)	89(12)	45(10)
C(54')	141(11)	76(7)	125(9)	15(7)	66(8)	53(7)
C(55')	96(8)	51(6)	84(7)	-11(5)	23(6)	28(5)
P(10)	76(2)	96(2)	66(2)	2(1)	17(1)	18(2)
F(11)	194(7)	118(5)	169(6)	-8(4)	88(5)	-28(5)
F(12)	112(4)	233(7)	71(4)	16(4)	22(3)	58(4)
F(13)	139(5)	244(8)	121(5)	14(5)	16(4)	119(6)
F(14)	182(6)	241(8)	65(4)	13(4)	21(4)	65(6)

F(16)	185(7)	136(6)	205(7)	-15(5)	85(6)	-33(5)
P(20)	104(2)	76(2)	75(2)	-7(1)	11(2)	17(2)
F(21)	122(14)	240(23)	120(13)	-23(9)	-30(8)	112(13)
F(22)	232(13)	113(8)	118(8)	29(7)	110(9)	-11(8)
F(23)	211(12)	47(5)	148(10)	-22(6)	23(9)	-29(6)
F(24)	283(18)	191(15)	150(11)	94(11)	135(12)	80(13)
F(25)	111(8)	88(8)	170(11)	-57(7)	31(8)	-2(6)
F(26)	75(7)	146(10)	177(11)	-54(8)	8(7)	43(7)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	293(8)	5527(5)	6576(4)	103
H(2B)	1216(8)	6186(5)	6390(4)	103
H(3A)	-484(8)	5771(5)	5630(4)	108
H(3B)	-1032(8)	6181(5)	6100(4)	108
H(5A)	95(7)	6428(5)	4944(4)	98
H(5B)	1257(7)	6938(5)	5364(4)	98
H(6A)	596(7)	7578(5)	4491(4)	100
H(6B)	-431(7)	7648(5)	4768(4)	100
H(8A)	117(7)	9104(5)	4915(3)	90
H(8B)	977(7)	8956(5)	4528(3)	90
H(9A)	2412(7)	9689(5)	5439(3)	90
H(9B)	1758(7)	10203(5)	5008(3)	90
H(12A)	3087(7)	11146(6)	5658(4)	103
H(13A)	3735(9)	12499(7)	6067(5)	128
H(14A)	2758(10)	13059(6)	6682(5)	125
H(15A)	1296(8)	12252(6)	6981(4)	101
H(18A)	-507(7)	11520(5)	6760(4)	94
H(18B)	196(7)	11298(5)	7375(4)	94
H(19A)	-1790(7)	10745(5)	7155(4)	99
H(19B)	-1646(7)	10159(5)	6609(4)	99
H(21A)	-2320(9)	9117(7)	7323(6)	150
H(21B)	-2252(9)	9874(7)	7792(6)	150
H(22A)	-1070(10)	9494(7)	8542(5)	154
H(22B)	-2151(10)	8787(7)	8289(5)	154
H(24A)	-1341(9)	7564(6)	8412(4)	133
H(24B)	-762(9)	8310(6)	8932(4)	133
H(25A)	934(9)	8274(6)	8793(4)	120
H(25B)	327(9)	7417(6)	8922(4)	120
H(28A)	2153(9)	7485(6)	8999(4)	105
H(29A)	3551(9)	6821(8)	9019(5)	132
H(30A)	3489(8)	5956(7)	8165(6)	131
H(31A)	2181(8)	5858(5)	7229(5)	107
H(33A)	-2203(6)	7657(4)	5344(3)	111
H(34A)	-3817(8)	6607(7)	5118(4)	149
H(35A)	-4460(5)	6014(4)	5928(7)	146
H(36A)	-3487(9)	6472(6)	6965(6)	141
H(37A)	-1873(9)	7522(6)	7191(3)	105
H(39A)	-1057(6)	8865(5)	6541(3)	80
H(39B)	-646(6)	8439(5)	6014(3)	80
H(40A)	259(5)	7802(3)	6783(3)	76
H(40B)	-57(5)	8273(3)	7262(3)	76
H(41A)	990(6)	9461(4)	7049(3)	75
H(41B)	1328(6)	8955(4)	6532(3)	75
H(44A)	1094(8)	9809(5)	7965(4)	102
H(45A)	1607(11)	10475(6)	8970(6)	131
H(46A)	3188(12)	10335(7)	9676(5)	140
H(47A)	4265(9)	9563(6)	9400(4)	125
H(49A)	4681(7)	8711(5)	8591(4)	93
H(51A)	5177(7)	7838(5)	7797(5)	103
H(52A)	4758(9)	7188(5)	6808(5)	111
H(53A)	3215(8)	7294(5)	6066(5)	104
H(54A)	2067(7)	8048(4)	6313(4)	80
H(2'A)	2802(10)	8082(7)	4366(5)	147

H(2'A)	3553(10)	5272(7)	1825(5)	117
H(3'A)	4436(10)	7249(8)	4446(5)	148
H(3'B)	3450(10)	7053(8)	4782(5)	148
H(5'A)	3487(15)	5854(10)	4185(7)	232
H(5'B)	2263(15)	5841(10)	4205(7)	232
H(6'A)	1841(12)	4971(6)	3601(6)	166
H(6'B)	3040(12)	5096(6)	3495(6)	166
H(8'A)	1294(10)	4304(6)	2698(6)	150
H(8'B)	2207(10)	4579(6)	2327(6)	150
H(9'A)	92(12)	4771(7)	2064(6)	185
H(9'B)	588(12)	4201(7)	1676(6)	185
H(12B)	-1102(14)	4731(6)	1339(7)	145
H(13B)	-2463(14)	4946(10)	545(9)	190
H(14B)	-2030(14)	5863(9)	-99(7)	166
H(15B)	-156(12)	6497(6)	-42(5)	130
H(18C)	1754(10)	7307(7)	356(4)	135
H(18D)	1528(10)	6519(7)	-120(4)	135
H(19C)	3301(11)	6401(7)	271(4)	158
H(19D)	3343(11)	7249(7)	37(4)	158
H(21C)	4780(10)	8195(8)	700(5)	177
H(21D)	5148(10)	7381(8)	667(5)	177
H(22C)	5770(8)	7534(6)	1704(5)	135
H(22D)	6326(8)	8311(6)	1442(5)	135
H(24C)	6743(7)	9155(5)	2314(4)	95
H(24D)	6272(7)	8519(5)	2730(4)	95
H(25C)	6305(7)	9895(5)	3071(4)	102
H(25D)	5326(7)	9829(5)	2473(4)	102
H(28B)	4978(7)	10676(6)	3171(4)	105
H(29B)	4354(8)	11433(6)	3861(5)	132
H(30B)	3566(9)	10845(8)	4614(5)	150
H(31B)	3388(8)	9482(7)	4672(5)	129
H(33B)	3322(6)	5805(4)	1320(3)	150
H(34B)	3580(9)	4543(6)	1025(3)	179
H(35B)	4637(9)	3927(4)	1748(6)	161
H(36B)	5436(7)	4574(6)	2766(5)	133
H(37B)	5179(7)	5836(6)	3061(3)	106
H(39C)	3985(7)	6734(5)	2888(3)	88
H(39D)	4586(7)	7174(5)	2409(3)	88
H(40C)	2372(5)	6393(4)	2067(3)	89
H(40D)	2963(5)	6946(4)	1710(3)	89
H(41C)	3152(7)	8036(4)	2456(3)	88
H(41D)	2467(7)	7431(4)	2818(3)	88
H(44B)	3196(8)	8612(6)	1697(4)	108
H(45B)	3157(11)	9457(6)	934(6)	141
H(46B)	1452(14)	9462(8)	249(5)	149
H(47B)	-198(12)	8757(7)	402(5)	138
H(49B)	-1178(10)	7810(7)	965(5)	117
H(51B)	-2285(10)	6832(8)	1527(7)	145
H(52B)	-2286(15)	6003(8)	2295(9)	177
H(53B)	-643(16)	5965(7)	2987(7)	153
H(54B)	1019(11)	6656(6)	2860(5)	125

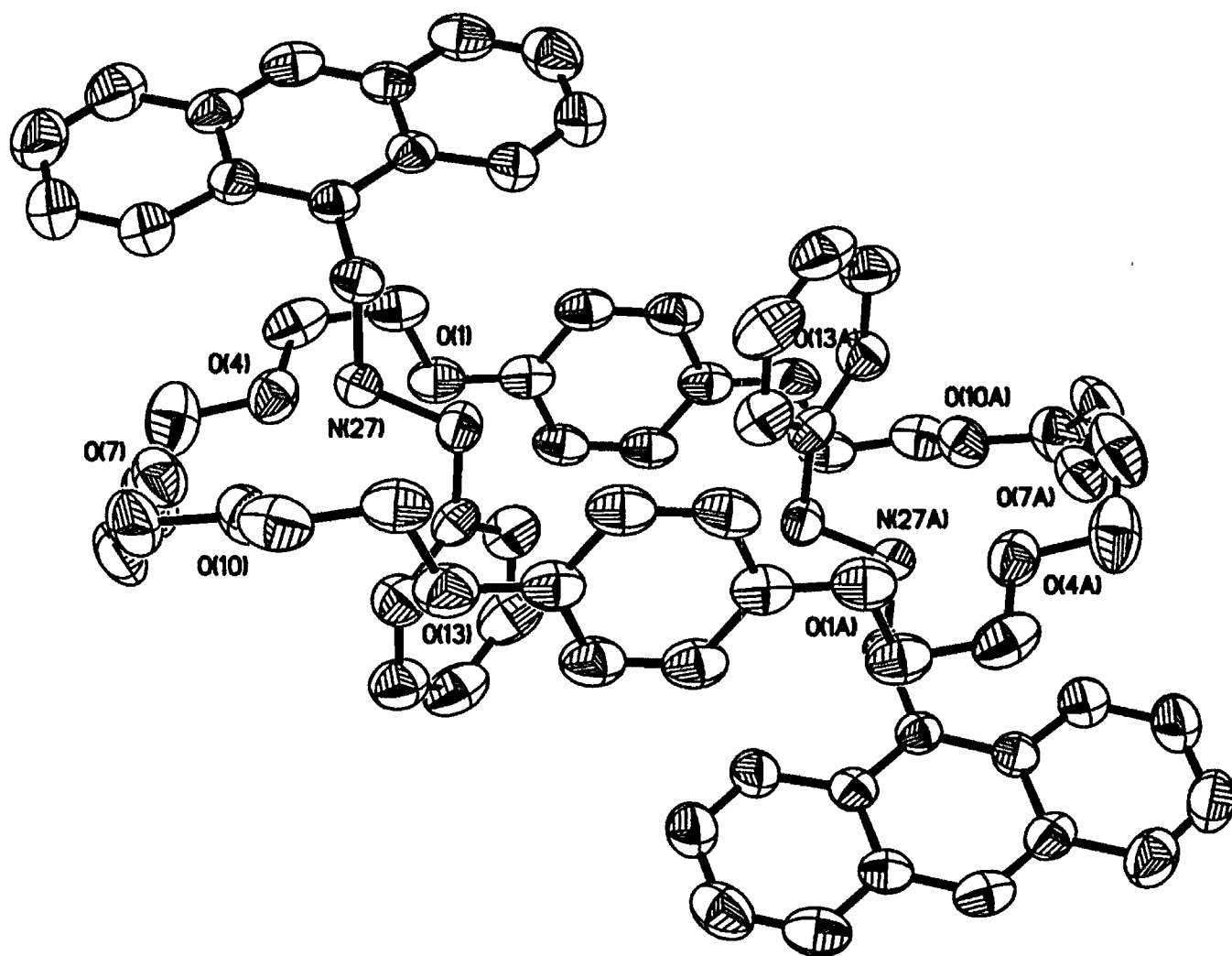


Figure 3

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	FS9637
Empirical formula	$C_{72}H_{80}N_2O_{10} \cdot 2PF_6$
Formula weight	1423.32
Temperature	293(2) K
Diffractometer used	Siemens P4/PC
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 11.0225(13)$ Å $\alpha = 74.265(10)^\circ$ $b = 12.5938(14)$ Å $\beta = 72.634(11)^\circ$ $c = 14.259(2)$ Å $\gamma = 64.172(9)^\circ$
Volume, Z	$1677.4(4)$ Å ³ , 1
Density (calculated)	1.409 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.160 mm ⁻¹
F(000)	744
Crystal morphology/size	colourless prisms, 0.63 x 0.33 x 0.30 mm
θ range for data collection	1.82 to 22.50°
Limiting indices	$0 \leq h \leq 11$, $-12 \leq k \leq 13$, $-14 \leq l \leq 15$
Reflections collected	4668
Independent reflections	4390 ($R_{int} = 0.0259$)
Observed reflections	2984 [$F > 4\sigma(F)$]
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4390 / 0 / 461
Goodness-of-fit on F^2	1.035
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0473$, $wR2 = 0.1092$
R indices (all data)	$R1 = 0.0835$, $wR2 = 0.1292$
Extinction coefficient	$0.0015(8)$
Largest diff. peak and hole	0.196 and -0.169 eÅ ⁻³

Table 2. Atomic coordinates [$\times 10^3$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
O(1)	4491(3)	8204(2)	4841(2)	60(1)
C(2)	4845(4)	8300(4)	3786(3)	58(1)
C(3)	5628(4)	7090(4)	3520(3)	64(1)
O(4)	4733(2)	6482(2)	3675(2)	56(1)
C(5)	5476(4)	5274(4)	3510(3)	76(1)
C(6)	4538(5)	4648(4)	3736(3)	83(2)
O(7)	3666(3)	5121(2)	3040(2)	61(1)
C(8)	2910(5)	4422(3)	3125(3)	74(1)
C(9)	2019(5)	4986(3)	2377(3)	71(1)
O(10)	1053(3)	6123(2)	2602(2)	57(1)
C(11)	-134(4)	6551(4)	2187(3)	63(1)
C(12)	-1036(4)	7780(3)	2406(3)	58(1)
O(13)	-1494(3)	7696(2)	3465(2)	62(1)
C(14)	-2241(4)	8740(3)	3852(3)	51(1)
C(15)	-2586(4)	8629(4)	4874(3)	58(1)
C(16)	-3332(4)	9612(4)	5340(3)	55(1)
C(17)	-3753(4)	10749(3)	4778(3)	51(1)
C(18)	-3416(4)	10859(4)	3754(3)	56(1)
C(19)	-2674(4)	9874(3)	3285(3)	55(1)
C(20)	1235(4)	8249(4)	5349(3)	59(1)
C(21)	1105(4)	7644(5)	6316(3)	75(1)
C(22)	889(4)	6606(4)	6537(3)	71(1)
C(23)	786(4)	6171(4)	5795(3)	64(1)
C(24)	892(4)	6775(3)	4836(3)	53(1)
C(25)	1133(3)	7814(3)	4599(2)	44(1)
C(26)	1235(3)	8513(3)	3554(2)	46(1)
N(27)	2221(3)	7749(2)	2795(2)	41(1)
C(28)	2419(3)	8425(3)	1736(2)	44(1)
C(29)	3764(3)	8587(3)	1422(2)	40(1)
C(30)	4974(4)	7662(3)	1051(2)	45(1)
C(31)	5007(4)	6560(3)	935(3)	61(1)
C(32)	6196(5)	5683(4)	601(3)	81(1)
C(33)	7457(5)	5837(4)	336(3)	83(2)
C(34)	7494(4)	6864(4)	406(3)	69(1)
C(35)	6266(4)	7808(3)	769(2)	51(1)
C(36)	6289(4)	8865(4)	854(2)	52(1)
C(37)	5116(4)	9785(3)	1228(2)	44(1)
C(38)	5166(5)	10857(4)	1333(3)	61(1)
C(39)	4035(5)	11742(4)	1691(3)	70(1)
C(40)	2754(5)	11644(3)	1958(3)	66(1)
C(41)	2642(4)	10645(3)	1869(2)	51(1)
C(42)	3818(3)	9657(3)	1515(2)	41(1)
P(50)	8757(1)	1971(1)	784(1)	52(1)
F(51)	7358(3)	2428(2)	1556(2)	96(1)
F(52)	8297(3)	1068(2)	554(2)	99(1)
F(53)	9438(2)	981(2)	1644(2)	87(1)
F(54)	9227(3)	2868(2)	1014(2)	106(1)
F(55)	8062(3)	2972(2)	-71(2)	86(1)
F(56)	10159(3)	1518(2)	13(2)	95(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

O(1)-C(17)#1	1.372(4)	O(1)-C(2)	1.422(4)
C(2)-C(3)	1.478(5)	C(3)-O(4)	1.429(4)
O(4)-C(5)	1.427(4)	C(5)-C(6)	1.472(6)
C(6)-O(7)	1.419(5)	O(7)-C(8)	1.416(5)
C(8)-C(9)	1.488(6)	C(9)-O(10)	1.416(4)
O(10)-C(11)	1.424(4)	C(11)-C(12)	1.489(5)
C(12)-O(13)	1.433(4)	O(13)-C(14)	1.375(4)
C(14)-C(15)	1.377(5)	C(14)-C(19)	1.389(5)
C(15)-C(16)	1.372(5)	C(16)-C(17)	1.390(5)
C(17)-O(1)#1	1.372(4)	C(17)-C(18)	1.379(5)
C(18)-C(19)	1.376(5)	C(20)-C(21)	1.382(5)
C(20)-C(25)	1.379(5)	C(21)-C(22)	1.367(6)
C(22)-C(23)	1.369(5)	C(23)-C(24)	1.371(5)
C(24)-C(25)	1.380(5)	C(25)-C(26)	1.510(4)
C(26)-N(27)	1.494(4)	N(27)-C(28)	1.523(4)
C(28)-C(29)	1.503(4)	C(29)-C(30)	1.406(5)
C(29)-C(42)	1.416(4)	C(30)-C(31)	1.426(5)
C(30)-C(35)	1.438(5)	C(31)-C(32)	1.347(5)
C(32)-C(33)	1.412(6)	C(33)-C(34)	1.343(6)
C(34)-C(35)	1.423(5)	C(35)-C(36)	1.381(5)
C(36)-C(37)	1.384(5)	C(37)-C(38)	1.425(5)
C(37)-C(42)	1.434(5)	C(38)-C(39)	1.332(6)
C(39)-C(40)	1.400(6)	C(40)-C(41)	1.359(5)
C(41)-C(42)	1.425(5)	P(50)-F(52)	1.569(3)
P(50)-F(54)	1.570(3)	P(50)-F(56)	1.575(2)
P(50)-F(51)	1.574(2)	P(50)-F(53)	1.590(2)
P(50)-F(55)	1.596(2)		
C(17)#1-O(1)-C(2)	117.0(3)	O(1)-C(2)-C(3)	109.1(3)
O(4)-C(3)-C(2)	110.9(3)	C(5)-O(4)-C(3)	112.1(3)
O(4)-C(5)-C(6)	110.9(3)	O(7)-C(6)-C(5)	110.9(3)
C(8)-O(7)-C(6)	112.8(3)	O(7)-C(8)-C(9)	109.1(3)
O(10)-C(9)-C(8)	108.6(3)	C(9)-O(10)-C(11)	113.1(3)
O(10)-C(11)-C(12)	108.9(3)	O(13)-C(12)-C(11)	107.6(3)
C(14)-O(13)-C(12)	118.1(3)	O(13)-C(14)-C(15)	116.4(3)
O(13)-C(14)-C(19)	124.6(3)	C(15)-C(14)-C(19)	118.9(4)
C(16)-C(15)-C(14)	121.4(4)	C(15)-C(16)-C(17)	120.0(3)
O(1)#1-C(17)-C(18)	116.2(3)	O(1)#1-C(17)-C(16)	125.3(3)
C(18)-C(17)-C(16)	118.6(4)	C(19)-C(18)-C(17)	121.6(4)
C(18)-C(19)-C(14)	119.6(3)	C(21)-C(20)-C(25)	120.1(4)
C(20)-C(21)-C(22)	120.5(4)	C(23)-C(22)-C(21)	119.6(4)
C(22)-C(23)-C(24)	120.3(4)	C(25)-C(24)-C(23)	120.8(4)
C(24)-C(25)-C(20)	118.7(3)	C(24)-C(25)-C(26)	122.3(3)
C(20)-C(25)-C(26)	118.9(3)	N(27)-C(26)-C(25)	112.6(3)
C(26)-N(27)-C(28)	114.6(2)	C(29)-C(28)-N(27)	112.0(3)
C(30)-C(29)-C(42)	120.1(3)	C(30)-C(29)-C(28)	119.6(3)
C(42)-C(29)-C(28)	120.3(3)	C(29)-C(30)-C(31)	123.5(3)
C(29)-C(30)-C(35)	119.6(3)	C(31)-C(30)-C(35)	116.9(3)
C(32)-C(31)-C(30)	121.6(4)	C(31)-C(32)-C(33)	120.8(4)
C(34)-C(33)-C(32)	120.6(4)	C(33)-C(34)-C(35)	120.6(4)
C(36)-C(35)-C(34)	121.3(4)	C(36)-C(35)-C(30)	119.2(3)
C(34)-C(35)-C(30)	119.5(4)	C(35)-C(36)-C(37)	122.4(3)
C(36)-C(37)-C(38)	121.6(4)	C(36)-C(37)-C(42)	119.3(3)
C(38)-C(37)-C(42)	119.1(3)	C(39)-C(38)-C(37)	121.5(4)
C(38)-C(39)-C(40)	120.2(4)	C(41)-C(40)-C(39)	120.9(4)
C(40)-C(41)-C(42)	121.5(4)	C(29)-C(42)-C(41)	123.9(3)
C(29)-C(42)-C(37)	119.4(3)	C(41)-C(42)-C(37)	116.7(3)
F(52)-P(50)-F(54)	179.7(2)	F(52)-P(50)-F(56)	90.2(2)
F(54)-P(50)-F(56)	89.6(2)	F(52)-P(50)-F(51)	90.0(2)

F(54)-P(50)-F(51)	90.2(2)	F(50)-P(50)-F(51)	179.8(2)
F(52)-P(50)-F(53)	89.74(14)	F(54)-P(50)-F(53)	90.0(2)
F(56)-P(50)-F(53)	90.06(14)	F(51)-P(50)-F(53)	89.94(13)
F(52)-P(50)-F(55)	90.5(2)	F(54)-P(50)-F(55)	89.8(2)
F(56)-P(50)-F(55)	90.47(14)	F(51)-P(50)-F(55)	89.52(14)
F(53)-P(50)-F(55)	179.42(14)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	73(2)	68(2)	38(2)	4(1)	-15(1)	-31(2)
C(2)	59(3)	77(3)	44(2)	4(2)	-14(2)	-35(2)
C(3)	46(2)	97(3)	45(2)	-4(2)	-11(2)	-29(2)
O(4)	47(2)	58(2)	55(2)	-11(1)	-11(1)	-11(1)
C(5)	67(3)	72(3)	76(3)	-23(2)	-35(2)	5(3)
C(6)	116(4)	48(3)	77(3)	-5(2)	-51(3)	-9(3)
O(7)	76(2)	44(2)	58(2)	-2(1)	-26(1)	-16(1)
C(8)	105(4)	38(2)	77(3)	-8(2)	-21(3)	-24(2)
C(9)	93(3)	55(3)	77(3)	-24(2)	-14(3)	-36(3)
O(10)	71(2)	52(2)	60(2)	-13(1)	-18(1)	-29(1)
C(11)	85(3)	76(3)	47(2)	0(2)	-21(2)	-50(3)
C(12)	67(3)	69(3)	44(2)	6(2)	-19(2)	-37(2)
O(13)	73(2)	65(2)	43(2)	5(1)	-12(1)	-29(2)
C(14)	48(2)	62(3)	46(2)	6(2)	-16(2)	-27(2)
C(15)	57(3)	63(3)	47(2)	12(2)	-15(2)	-27(2)
C(16)	57(3)	70(3)	39(2)	10(2)	-16(2)	-31(2)
C(17)	48(2)	63(3)	45(2)	4(2)	-16(2)	-29(2)
C(18)	66(3)	60(3)	43(2)	12(2)	-20(2)	-31(2)
C(19)	62(3)	68(3)	39(2)	8(2)	-17(2)	-34(2)
C(20)	61(3)	74(3)	56(3)	-20(2)	-7(2)	-34(2)
C(21)	71(3)	117(4)	47(3)	-25(3)	-6(2)	-43(3)
C(22)	58(3)	99(4)	43(2)	-1(2)	-5(2)	-29(3)
C(23)	68(3)	70(3)	49(3)	-2(2)	-7(2)	-30(2)
C(24)	63(3)	55(2)	44(2)	-7(2)	-13(2)	-25(2)
C(25)	32(2)	55(2)	45(2)	-12(2)	-3(2)	-16(2)
C(26)	42(2)	45(2)	47(2)	-12(2)	-6(2)	-12(2)
N(27)	41(2)	38(2)	42(2)	-4(1)	-7(1)	-16(1)
C(28)	48(2)	44(2)	40(2)	0(2)	-13(2)	-19(2)
C(29)	42(2)	44(2)	33(2)	0(2)	-9(2)	-18(2)
C(30)	49(2)	43(2)	36(2)	0(2)	-8(2)	-15(2)
C(31)	64(3)	55(3)	55(2)	-8(2)	-4(2)	-22(2)
C(32)	90(4)	51(3)	75(3)	-15(2)	5(3)	-16(3)
C(33)	69(3)	65(3)	71(3)	-7(2)	3(3)	1(3)
C(34)	52(3)	73(3)	58(3)	-1(2)	-10(2)	-9(2)
C(35)	44(2)	59(3)	34(2)	6(2)	-8(2)	-13(2)
C(36)	45(2)	74(3)	40(2)	7(2)	-15(2)	-30(2)
C(37)	53(2)	53(2)	30(2)	3(2)	-14(2)	-27(2)
C(38)	77(3)	76(3)	47(2)	5(2)	-21(2)	-48(3)
C(39)	107(4)	61(3)	57(3)	-7(2)	-20(3)	-45(3)
C(40)	78(3)	52(3)	58(3)	-12(2)	-3(2)	-22(2)
C(41)	57(3)	47(2)	45(2)	-4(2)	-9(2)	-19(2)
C(42)	49(2)	45(2)	26(2)	4(2)	-12(2)	-18(2)
P(50)	53(1)	55(1)	47(1)	-3(1)	-9(1)	-23(1)
F(51)	72(2)	102(2)	64(2)	-4(1)	9(1)	-8(1)
F(52)	106(2)	94(2)	128(2)	-25(2)	-34(2)	-56(2)
F(53)	80(2)	84(2)	80(2)	18(1)	-31(1)	-26(1)
F(54)	138(3)	89(2)	123(2)	-18(2)	-43(2)	-62(2)
F(55)	96(2)	86(2)	56(1)	8(1)	-23(1)	-23(2)
F(56)	74(2)	95(2)	85(2)	-17(2)	20(1)	-27(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	5400(4)	8778(4)	3506(3)	70
H(2B)	4016(4)	8690(4)	3517(3)	70
H(3A)	6099(4)	7151(4)	2826(3)	76
H(3B)	6318(4)	6632(4)	3923(3)	76
H(5A)	6152(4)	4861(4)	3929(3)	91
H(5B)	5965(4)	5262(4)	2821(3)	91
H(6A)	5072(5)	3803(4)	3717(3)	99
H(6B)	3980(5)	4732(4)	4402(3)	99
H(8A)	2345(5)	4371(3)	3790(3)	89
H(8B)	3538(5)	3619(3)	3012(3)	89
H(9A)	2578(5)	5072(3)	1713(3)	85
H(9B)	1542(5)	4488(3)	2396(3)	85
H(11A)	-632(4)	6026(4)	2474(3)	76
H(11B)	140(4)	6564(4)	1473(3)	76
H(12A)	-526(4)	8298(3)	2154(3)	69
H(12B)	-1819(4)	8111(3)	2089(3)	69
H(15A)	-2307(4)	7872(4)	5258(3)	70
H(16A)	-3555(4)	9516(4)	6032(3)	66
H(18A)	-3697(4)	11617(4)	3372(3)	67
H(19A)	-2464(4)	9967(3)	2593(3)	66
H(20A)	1392(4)	8950(4)	5204(3)	71
H(21A)	1166(4)	7946(5)	6821(3)	90
H(22A)	813(4)	6198(4)	7188(3)	85
H(23A)	643(4)	5463(4)	5942(3)	77
H(24A)	802(4)	6481(3)	4339(3)	64
H(26A)	330(3)	8886(3)	3391(2)	55
H(26B)	1529(3)	9144(3)	3529(2)	55
H(27A)	1920(3)	7187(2)	2802(2)	49
H(27B)	3045(3)	7370(2)	2972(2)	49
H(28A)	2389(3)	7989(3)	1283(2)	53
H(28B)	1667(3)	9203(3)	1693(2)	53
H(31A)	4187(4)	6443(3)	1093(3)	73
H(32A)	6186(5)	4968(4)	545(3)	97
H(33A)	8270(5)	5220(4)	112(3)	100
H(34A)	8329(4)	6960(4)	215(3)	83
H(36A)	7123(4)	8963(4)	654(2)	63
H(38A)	6007(5)	10940(4)	1149(3)	73
H(39A)	4097(5)	12428(4)	1763(3)	84
H(40A)	1970(5)	12271(3)	2201(3)	79
H(41A)	1777(4)	10606(3)	2042(2)	62

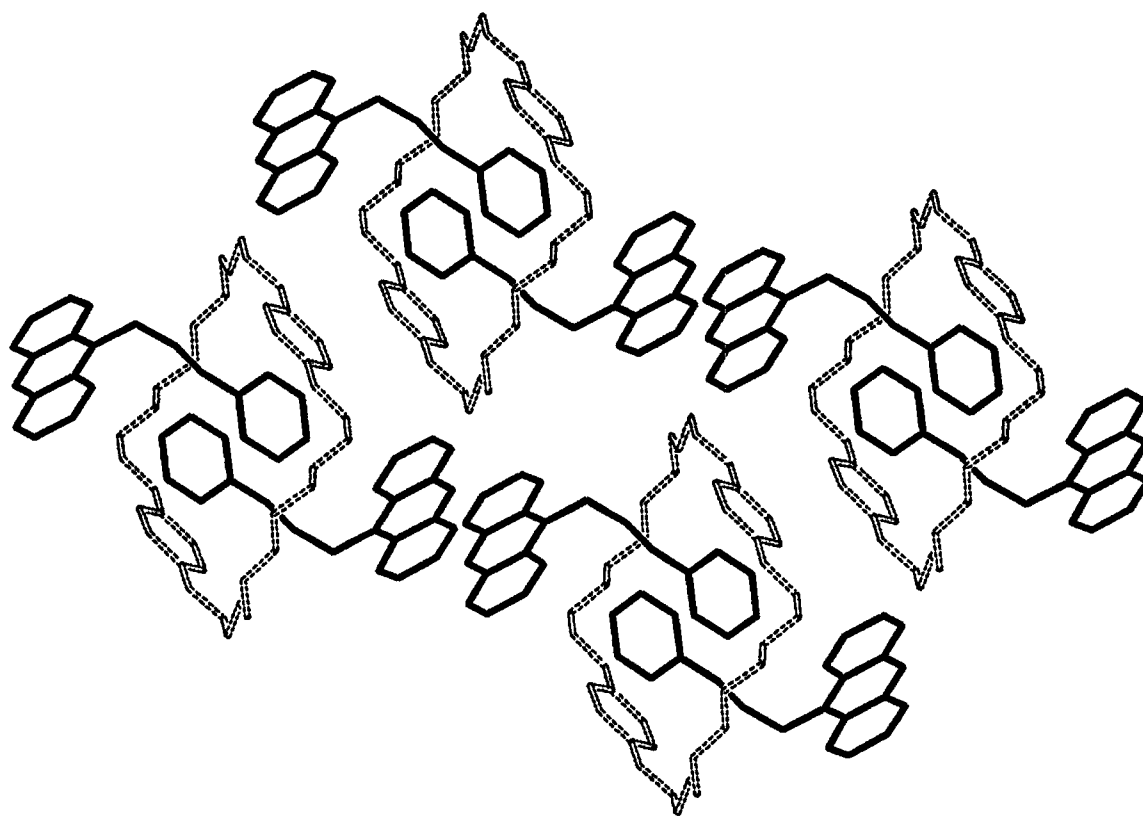


Figure 4

Identification code	fs9639
Empirical formula	$C_{80}H_{84}N_2O_{10} \cdot 2PF_6 \cdot MeCN \cdot HCCl_3$
Formula weight	1844.28
Temperature	293(2) K
Diffractionmeter used	Siemens P4/PC
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 11.335(2) \text{ Å}$ $\alpha = 70.962(10)^\circ$ $b = 13.126(2) \text{ Å}$ $\beta = 73.032(13)^\circ$ $c = 17.640(3) \text{ Å}$ $\gamma = 66.499(11)^\circ$
Volume, Z	$2235.4(6) \text{ Å}^3, 1$
Density (calculated)	1.370 Mg/m^3
Absorption coefficient	2.805 mm^{-1}
F(000)	956
Crystal morphology/size	$0.46 \times 0.33 \times 0.27 \text{ mm}$
θ range for data collection	2.70 to 59.99°
Limiting indices	$-10 \leq h \leq 12, -14 \leq k \leq 14, -19 \leq l \leq 16$
Reflections collected	6958
Independent reflections	6570 ($R_{\text{int}} = 0.0316$)
Observed reflections	4377 [$F > 4\sigma(F)$]
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	6569 / 36 / 558
Goodness-of-fit on F^2	1.022
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0810, wR2 = 0.2129$
R indices (all data)	$R1 = 0.1162, wR2 = 0.2510$
Extinction coefficient	$0.0028(5)$
Largest diff. peak and hole	0.408 and -0.412 eÅ^{-3}

Table 1. Atomic coordinates [$\text{\AA} \times 10^3$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
O(1)	8624(3)	4345(3)	5980(2)	63(1)
C(2)	8328(5)	4715(4)	6711(3)	58(1)
C(3)	8710(5)	3682(4)	7396(3)	58(1)
O(4)	7778(3)	3108(3)	7640(2)	57(1)
C(5)	8150(5)	2090(4)	8280(3)	68(1)
C(6)	7243(6)	1442(4)	8471(4)	74(2)
O(7)	5968(3)	2087(3)	8806(2)	63(1)
C(8)	5140(6)	1414(5)	9148(3)	76(2)
C(9)	3805(6)	2134(5)	9471(3)	78(2)
O(10)	3272(3)	3017(3)	8809(2)	68(1)
C(11)	1900(5)	3379(5)	8943(3)	70(2)
C(12)	1396(5)	4380(5)	8289(3)	68(1)
O(13)	1809(4)	4057(3)	7540(2)	74(1)
C(14)	1397(5)	4876(4)	6863(3)	59(1)
C(15)	742(5)	6013(5)	6841(3)	66(1)
C(16)	362(5)	6766(4)	6121(3)	68(1)
C(17)	653(5)	6405(4)	5426(3)	64(1)
C(18)	1362(4)	5237(4)	5423(3)	50(1)
C(19)	1709(5)	4826(4)	4705(3)	54(1)
C(20)	2351(5)	3687(4)	4726(3)	62(1)
C(21)	2666(6)	2926(4)	5465(3)	72(2)
C(22)	2379(6)	3276(4)	6162(3)	68(1)
C(23)	1726(5)	4450(4)	6147(3)	54(1)
C(24)	6238(14)	3526(9)	5738(8)	72(5)
C(25)	6750(11)	2537(10)	5452(7)	77(5)
C(26)	6383(13)	1587(9)	5903(9)	80(5)
C(27)	5504(14)	1627(11)	6640(9)	75(5)
C(28)	4991(14)	2617(14)	6926(7)	59(4)
C(29)	5358(16)	3566(11)	6475(9)	54(6)
C(24')	5894(11)	3838(8)	5655(6)	70(3)
C(25')	6362(9)	2967(9)	5248(4)	82(3)
C(26')	6288(11)	1890(8)	5669(6)	88(4)
C(27')	5746(14)	1683(9)	6496(6)	93(4)
C(28')	5278(15)	2554(11)	6903(5)	80(4)
C(29')	5352(14)	3632(10)	6482(6)	63(5)
C(30)	4786(5)	4630(4)	6840(3)	56(1)
N(31)	4875(4)	4336(3)	7710(2)	48(1)
C(32)	4268(5)	5334(4)	8115(3)	55(1)
C(33)	5191(4)	5951(4)	8010(3)	48(1)
C(34)	5177(5)	6965(4)	7385(3)	56(1)
C(35)	4268(6)	7499(5)	6841(3)	74(2)
C(36)	4349(8)	8458(5)	6233(4)	92(2)
C(37)	5321(9)	8926(5)	6140(4)	102(2)
C(38)	6161(8)	8476(5)	6651(4)	85(2)
C(39)	6116(6)	7488(4)	7301(3)	63(1)
C(40)	6952(6)	7062(5)	7842(3)	68(1)
C(41)	6935(5)	6093(4)	8485(3)	58(1)
C(42)	7784(5)	5674(5)	9056(4)	75(2)
C(43)	7807(6)	4712(6)	9655(4)	83(2)
C(44)	6993(6)	4118(5)	9712(3)	75(2)
C(45)	6156(5)	4489(4)	9194(3)	60(1)
C(46)	6062(5)	5520(4)	8554(3)	51(1)

P(10)	-85(2)	1979(1)	1423(1)	66(1)
F(11)	-129(5)	3270(3)	1104(3)	121(2)
F(12)	-521(11)	2092(6)	600(5)	125(3)
F(13)	-1508(7)	2403(7)	1813(7)	149(4)
F(14)	414(10)	1883(6)	2186(4)	119(2)
F(15)	1394(6)	1579(5)	949(5)	118(2)
F(12')	-1586(15)	2384(13)	1337(9)	93(4)
F(13')	-704(19)	2085(13)	2354(9)	118(4)
F(14')	1229(18)	1586(14)	1630(13)	136(5)
F(15')	283(15)	1876(12)	597(9)	97(4)
F(16)	-40(4)	695(3)	1724(2)	106(1)
N(51)	8481(12)	9519(8)	4845(7)	204(5)
C(52)	9270(12)	9417(8)	4304(7)	147(4)
C(53)	10307(14)	9212(11)	3642(6)	213(6)
C(61)	7502(7)	381(6)	1355(4)	88(2)
Cl(62)	5992(3)	1227(3)	1099(2)	180(1)
Cl(63)	7371(4)	-624(3)	2244(2)	210(2)
Cl(64)	8502(2)	-274(2)	579(2)	139(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

O(1)-C(19)#1	1.366(5)	O(1)-C(2)	1.428(5)
C(2)-C(3)	1.502(7)	C(3)-O(4)	1.423(6)
O(4)-C(5)	1.443(6)	C(5)-C(6)	1.484(8)
C(6)-O(7)	1.417(6)	O(7)-C(8)	1.417(6)
C(8)-C(9)	1.489(8)	C(9)-O(10)	1.430(6)
O(10)-C(11)	1.403(6)	C(11)-C(12)	1.476(7)
C(12)-O(13)	1.412(6)	O(13)-C(14)	1.374(6)
C(14)-C(15)	1.369(7)	C(14)-C(23)	1.437(6)
C(15)-C(16)	1.392(7)	C(16)-C(17)	1.362(7)
C(17)-C(18)	1.421(7)	C(18)-C(23)	1.406(6)
C(18)-C(19)	1.427(6)	C(19)-O(1)#1	1.366(5)
C(19)-C(20)	1.370(7)	C(20)-C(21)	1.401(7)
C(21)-C(22)	1.358(7)	C(22)-C(23)	1.413(7)
C(24)-C(25)	1.39	C(24)-C(29)	1.39
C(25)-C(26)	1.39	C(26)-C(27)	1.39
C(27)-C(28)	1.39	C(28)-C(29)	1.39
C(29)-C(30)	1.551(12)	C(24')-C(25')	1.39
C(24')-C(29')	1.39	C(25')-C(26')	1.39
C(26')-C(27')	1.39	C(27')-C(28')	1.39
C(28')-C(29')	1.39	C(29')-C(30)	1.470(9)
C(30)-N(31)	1.479(5)	N(31)-C(32)	1.517(5)
C(32)-C(33)	1.500(6)	C(33)-C(46)	1.403(6)
C(33)-C(34)	1.423(6)	C(34)-C(35)	1.426(8)
C(34)-C(39)	1.433(7)	C(35)-C(36)	1.377(8)
C(36)-C(37)	1.410(10)	C(37)-C(38)	1.331(10)
C(38)-C(39)	1.432(7)	C(39)-C(40)	1.370(8)
C(40)-C(41)	1.404(7)	C(41)-C(46)	1.423(7)
C(41)-C(42)	1.423(8)	C(42)-C(43)	1.352(8)
C(43)-C(44)	1.393(9)	C(44)-C(45)	1.349(7)
C(45)-C(46)	1.441(7)	P(10)-F(15')	1.43(2)
P(10)-F(14')	1.48(2)	P(10)-F(13)	1.507(7)
P(10)-F(14)	1.558(6)	P(10)-F(16)	1.577(3)
P(10)-F(11)	1.588(4)	P(10)-F(15)	1.597(6)
P(10)-F(12')	1.60(2)	P(10)-F(12)	1.611(6)
P(10)-F(13')	1.62(2)	N(51)-C(52)	1.103(12)
C(52)-C(53)	1.403(14)	C(61)-Cl(63)	1.701(7)
C(61)-Cl(62)	1.724(7)	C(61)-Cl(64)	1.727(6)
C(19)#1-O(1)-C(2)	116.8(4)	O(1)-C(2)-C(3)	108.7(4)
O(4)-C(3)-C(2)	109.7(4)	C(3)-O(4)-C(5)	110.6(4)
O(4)-C(5)-C(6)	110.0(4)	O(7)-C(6)-C(5)	110.0(4)
C(8)-O(7)-C(6)	111.6(4)	O(7)-C(8)-C(9)	109.6(5)
O(10)-C(9)-C(8)	108.8(4)	C(11)-O(10)-C(9)	112.8(4)
O(10)-C(11)-C(12)	110.4(4)	O(13)-C(12)-C(11)	109.5(4)
C(14)-O(13)-C(12)	117.7(4)	C(15)-C(14)-O(13)	124.7(4)
C(15)-C(14)-C(23)	121.0(5)	O(13)-C(14)-C(23)	114.3(4)
C(14)-C(15)-C(16)	119.8(4)	C(17)-C(16)-C(15)	121.5(5)
C(16)-C(17)-C(18)	120.2(5)	C(23)-C(18)-C(17)	119.6(4)
C(23)-C(18)-C(19)	118.4(4)	C(17)-C(18)-C(19)	122.0(4)
O(1)#1-C(19)-C(20)	124.6(4)	O(1)#1-C(19)-C(18)	114.6(4)
C(20)-C(19)-C(18)	120.8(4)	C(19)-C(20)-C(21)	119.1(4)
C(22)-C(21)-C(20)	122.5(5)	C(21)-C(22)-C(23)	119.1(5)
C(18)-C(23)-C(22)	120.2(4)	C(18)-C(23)-C(14)	118.0(4)
C(22)-C(23)-C(14)	121.8(4)	C(25)-C(24)-C(29)	120.0
C(26)-C(25)-C(24)	120.0	C(25)-C(26)-C(27)	120.0
C(28)-C(27)-C(26)	120.0	C(29)-C(28)-C(27)	120.0
C(28)-C(29)-C(24)	120.0	C(28)-C(29)-C(30)	117.5(10)
C(24)-C(29)-C(30)	122.5(10)	C(25')-C(24')-C(29')	120.0
C(24')-C(25')-C(26')	120.0	C(27')-C(26')-C(25')	120.0

C(28')-C(29')-C(24')	120.0	C(29')-C(28')-C(27')	120.0
C(24')-C(29')-C(30)	115.8(7)	C(29')-C(30)-N(31)	113.3(6)
N(31)-C(30)-C(29)	112.7(7)	C(30)-N(31)-C(32)	115.3(3)
C(33)-C(32)-N(31)	113.2(4)	C(46)-C(33)-C(34)	120.1(4)
C(46)-C(33)-C(32)	118.6(4)	C(34)-C(33)-C(32)	121.3(4)
C(33)-C(34)-C(35)	123.6(5)	C(33)-C(34)-C(39)	118.3(5)
C(35)-C(34)-C(39)	118.0(5)	C(36)-C(35)-C(34)	120.0(6)
C(35)-C(36)-C(37)	120.8(6)	C(38)-C(37)-C(36)	121.1(6)
C(37)-C(38)-C(39)	120.7(6)	C(40)-C(39)-C(38)	120.1(5)
C(40)-C(39)-C(34)	120.7(5)	C(38)-C(39)-C(34)	119.2(6)
C(39)-C(40)-C(41)	121.6(5)	C(40)-C(41)-C(46)	118.8(5)
C(40)-C(41)-C(42)	121.1(5)	C(46)-C(41)-C(42)	120.1(5)
C(43)-C(42)-C(41)	121.0(5)	C(42)-C(43)-C(44)	119.6(6)
C(45)-C(44)-C(43)	121.6(6)	C(44)-C(45)-C(46)	121.6(5)
C(33)-C(46)-C(41)	120.4(4)	C(33)-C(46)-C(45)	123.6(4)
C(41)-C(46)-C(45)	116.0(5)	F(15')-P(10)-F(14')	100.0(10)
F(13)-P(10)-F(14)	93.7(6)	F(15')-P(10)-F(16)	89.7(6)
F(14')-P(10)-F(16)	88.2(7)	F(13)-P(10)-F(16)	92.0(4)
F(14)-P(10)-F(16)	91.8(3)	F(15')-P(10)-F(11)	89.3(6)
F(14')-P(10)-F(11)	92.2(7)	F(13)-P(10)-F(11)	88.3(4)
F(14)-P(10)-F(11)	89.0(3)	F(16)-P(10)-F(11)	179.0(2)
F(13)-P(10)-F(15)	176.1(6)	F(14)-P(10)-F(15)	89.7(5)
F(16)-P(10)-F(15)	89.9(3)	F(11)-P(10)-F(15)	89.7(3)
F(15')-P(10)-F(12')	88.1(8)	F(14')-P(10)-F(12')	171.7(10)
F(16)-P(10)-F(12')	90.0(6)	F(11)-P(10)-F(12')	89.8(6)
F(13)-P(10)-F(12)	89.3(6)	F(14)-P(10)-F(12)	176.5(5)
F(16)-P(10)-F(12)	89.7(3)	F(11)-P(10)-F(12)	89.3(3)
F(15)-P(10)-F(12)	87.2(5)	F(15')-P(10)-F(13')	171.6(9)
F(14')-P(10)-F(13')	87.8(10)	F(16)-P(10)-F(13')	87.5(5)
F(11)-P(10)-F(13')	93.5(5)	F(12')-P(10)-F(13')	84.0(8)
N(51)-C(52)-C(53)	176.2(12)	Cl(63)-C(61)-Cl(62)	111.7(4)
Cl(63)-C(61)-Cl(64)	109.9(4)	Cl(62)-C(61)-Cl(64)	110.1(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+1,-z+1

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	84(2)	57(2)	42(2)	-14(2)	-2(2)	-22(2)
C(2)	63(3)	71(3)	45(3)	-19(2)	2(2)	-30(3)
C(3)	55(3)	74(3)	48(3)	-17(2)	-1(2)	-29(3)
O(4)	64(2)	56(2)	48(2)	-6(1)	-7(2)	-24(2)
C(5)	70(3)	55(3)	60(3)	-3(2)	-12(3)	-10(3)
C(6)	83(4)	45(3)	73(3)	-3(2)	-7(3)	-14(3)
O(7)	71(2)	46(2)	60(2)	-1(2)	-3(2)	-22(2)
C(8)	95(4)	61(3)	68(3)	10(3)	-11(3)	-43(3)
C(9)	91(4)	90(4)	45(3)	13(3)	-6(3)	-51(4)
O(10)	70(2)	76(2)	51(2)	3(2)	0(2)	-39(2)
C(11)	78(4)	97(4)	42(3)	-19(3)	8(2)	-49(3)
C(12)	64(3)	88(4)	53(3)	-28(3)	0(2)	-23(3)
O(13)	95(3)	73(2)	44(2)	-21(2)	-11(2)	-16(2)
C(14)	66(3)	65(3)	46(3)	-18(2)	-3(2)	-24(3)
C(15)	78(4)	67(3)	53(3)	-29(3)	3(2)	-24(3)
C(16)	78(4)	53(3)	64(3)	-23(3)	0(3)	-16(3)
C(17)	78(4)	55(3)	53(3)	-13(2)	-3(2)	-22(3)
C(18)	51(3)	52(3)	43(2)	-15(2)	3(2)	-19(2)
C(19)	61(3)	56(3)	45(3)	-12(2)	-2(2)	-24(2)
C(20)	72(3)	61(3)	49(3)	-23(2)	-4(2)	-17(3)
C(21)	97(4)	49(3)	59(3)	-16(2)	-10(3)	-13(3)
C(22)	86(4)	53(3)	53(3)	-15(2)	-11(3)	-11(3)
C(23)	59(3)	54(3)	48(3)	-19(2)	0(2)	-20(2)
C(24')	68(7)	99(7)	41(5)	-23(5)	5(5)	-32(6)
C(25')	77(6)	111(8)	50(5)	-35(6)	-8(5)	-14(6)
C(26')	107(8)	95(7)	68(7)	-53(6)	-3(6)	-21(7)
C(27')	126(9)	80(7)	84(7)	-54(5)	20(7)	-47(6)
C(28')	107(9)	79(7)	61(6)	-34(5)	9(6)	-44(6)
C(29')	73(7)	90(8)	46(6)	-29(4)	5(4)	-51(5)
C(30)	74(3)	58(3)	42(2)	-6(2)	-8(2)	-33(2)
N(31)	59(2)	46(2)	45(2)	-10(2)	-5(2)	-26(2)
C(32)	55(3)	53(3)	56(3)	-18(2)	0(2)	-21(2)
C(33)	54(3)	48(2)	43(2)	-18(2)	3(2)	-21(2)
C(34)	72(3)	44(3)	49(3)	-16(2)	2(2)	-20(2)
C(35)	95(4)	56(3)	66(3)	-16(3)	-14(3)	-18(3)
C(36)	132(6)	63(4)	67(4)	-6(3)	-31(4)	-18(4)
C(37)	168(8)	59(4)	69(4)	-6(3)	-7(5)	-46(5)
C(38)	128(6)	62(4)	67(4)	-17(3)	9(4)	-50(4)
C(39)	83(4)	46(3)	57(3)	-21(2)	16(3)	-32(3)
C(40)	74(4)	62(3)	78(4)	-30(3)	5(3)	-36(3)
C(41)	59(3)	60(3)	61(3)	-30(2)	2(2)	-22(2)
C(42)	64(3)	88(4)	88(4)	-45(4)	-7(3)	-27(3)
C(43)	87(4)	95(5)	63(4)	-28(3)	-21(3)	-17(4)
C(44)	92(4)	70(4)	54(3)	-17(3)	-12(3)	-17(3)
C(45)	76(3)	61(3)	46(3)	-18(2)	1(2)	-29(3)
C(46)	59(3)	50(3)	46(2)	-22(2)	5(2)	-21(2)
P(10)	79(1)	55(1)	71(1)	-22(1)	-8(1)	-29(1)
F(11)	160(4)	61(2)	161(4)	-17(2)	-45(3)	-53(2)
F(12)	189(8)	90(4)	129(6)	-16(4)	-100(6)	-39(5)
F(13)	77(5)	129(6)	195(10)	-54(7)	34(6)	-19(4)
F(14)	184(8)	118(5)	87(4)	-29(4)	-53(5)	-59(5)
F(15)	86(4)	105(4)	119(5)	-28(4)	39(4)	-29(3)

N(51)	215(11)	129(7)	163(9)	-43(7)	20(8)	16(7)
C(52)	167(10)	105(7)	110(7)	-19(6)	-26(7)	10(6)
C(53)	256(15)	204(12)	75(6)	15(7)	10(7)	-39(11)
C(61)	105(5)	89(4)	81(4)	-29(3)	2(3)	-49(4)
Cl(62)	144(2)	196(3)	204(3)	-117(3)	-52(2)	9(2)
Cl(63)	285(4)	170(3)	121(2)	21(2)	23(2)	-111(3)
Cl(64)	132(2)	159(2)	130(2)	-77(2)	24(1)	-53(2)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^3$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	7400(5)	5135(4)	6835(3)	70
H(2B)	8808(5)	5218(4)	6642(3)	70
H(3A)	9571(5)	3168(4)	7219(3)	70
H(3B)	8746(5)	3914(4)	7855(3)	70
H(5A)	8122(5)	2300(4)	8765(3)	81
H(5B)	9038(5)	1614(4)	8108(3)	81
H(6A)	7221(6)	1281(4)	7977(4)	89
H(6B)	7552(6)	719(4)	8857(4)	89
H(8A)	5493(6)	782(5)	9585(3)	92
H(8B)	5095(6)	1099(5)	8734(3)	92
H(9A)	3248(6)	1667(5)	9735(3)	94
H(9B)	3851(6)	2470(5)	9872(3)	94
H(11A)	1539(5)	3578(5)	9466(3)	84
H(11B)	1627(5)	2760(5)	8956(3)	84
H(12A)	447(5)	4673(5)	8418(3)	82
H(12B)	1721(5)	4981(5)	8248(3)	82
H(15A)	552(5)	6280(5)	7305(3)	79
H(16A)	-101(5)	7534(4)	6114(3)	81
H(17A)	386(5)	6925(4)	4953(3)	77
H(20A)	2575(5)	3424(4)	4257(3)	74
H(21A)	3087(6)	2152(4)	5479(3)	87
H(22A)	2609(6)	2751(4)	6642(3)	82
H(24A)	6483(14)	4161(9)	5436(8)	87
H(25A)	7339(15)	2510(14)	4959(8)	92
H(26A)	6726(19)	926(10)	5712(12)	96
H(27A)	5259(19)	992(14)	6942(12)	90
H(28A)	4403(19)	2643(19)	7419(9)	71
H(24B)	5943(11)	4559(8)	5373(6)	84
H(25B)	6725(14)	3105(12)	4695(5)	98
H(26B)	6602(17)	1307(10)	5397(8)	106
H(27B)	5697(20)	962(10)	6778(8)	111
H(28B)	4915(21)	2416(14)	7456(5)	96
H(30A)	5255(5)	5159(4)	6531(3)	68
H(30B)	3875(5)	5013(4)	6786(3)	68
H(31A)	5725(4)	4010(3)	7753(2)	58
H(31B)	4482(4)	3811(3)	7988(2)	58
H(32A)	3504(5)	5870(4)	7886(3)	66
H(32B)	3977(5)	5053(4)	8693(3)	66
H(35A)	3621(6)	7200(5)	6898(3)	89
H(36A)	3754(8)	8801(5)	5880(4)	110
H(37A)	5377(9)	9559(5)	5715(4)	122
H(38A)	6784(8)	8807(5)	6584(4)	102
H(40A)	7545(6)	7422(5)	7780(3)	82
H(42A)	8332(5)	6067(5)	9017(4)	90
H(43A)	8363(6)	4450(6)	10026(4)	99
H(44A)	7027(6)	3448(5)	10118(3)	90
H(45A)	5627(5)	4069(4)	9251(3)	72
H(53B)	11000(14)	9421(11)	3687(6)	255
H(53C)	10004(14)	9660(11)	3141(6)	255
H(53A)	10627(14)	8415(11)	3645(6)	255
H(61A)	7906(7)	872(6)	1424(4)	106

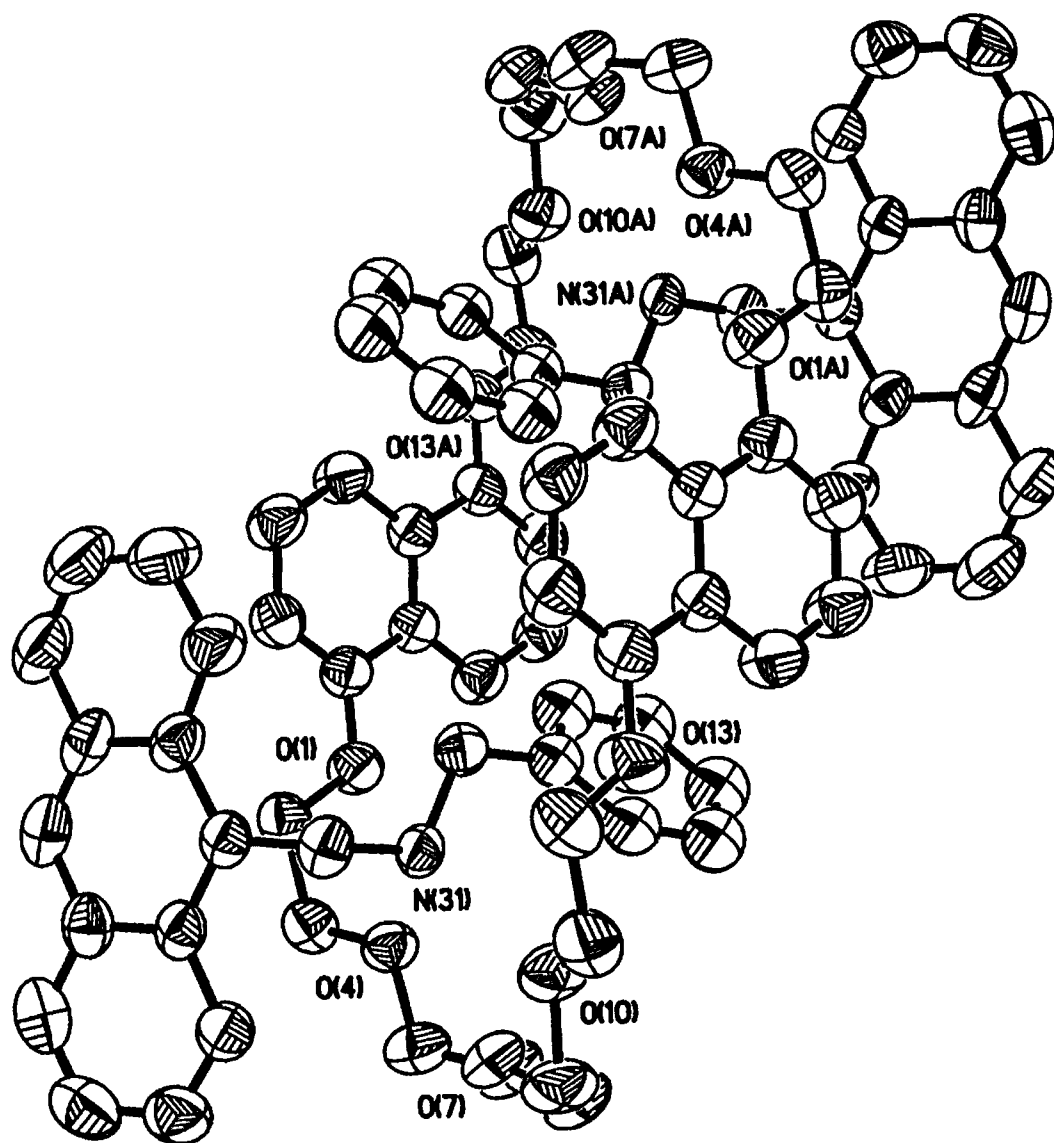


Figure 5

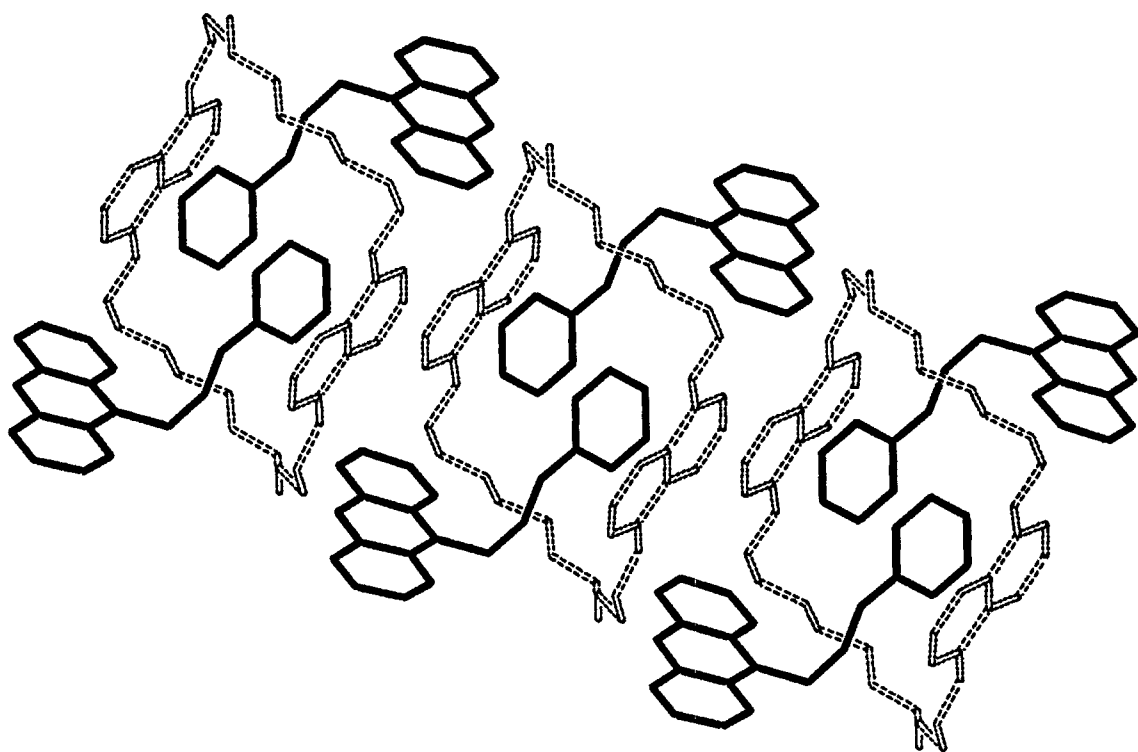


Figure 6

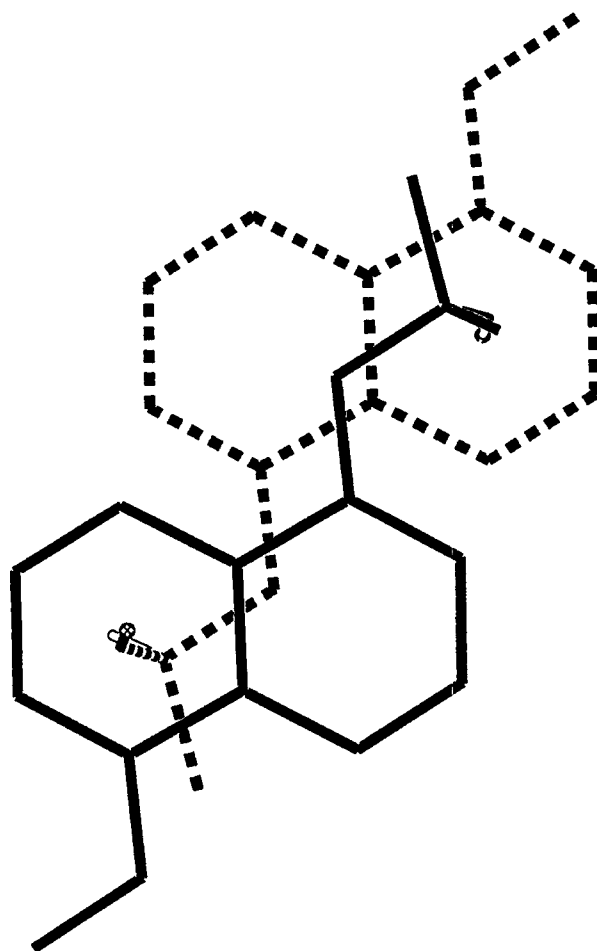


Figure 7