

Polyhedral-based Nonlinear Optical Materials. Part IV.¹ Synthesis and Characterization of Cyano-Substituted Carborane-based Nonlinear Optical Precursor Compounds. Molecular Structure of [1-(4-C₇H₇)-12-(C₅H₃-3-(CN)-3,4-(CH₃)₂)-C₂B₁₀H₁₀].

Jesse Taylor, Wilda Vargas, Ana Torvisco, Karin Ruhlandt-Senge, and James T. Spencer*
Department of Chemistry, Syracuse University, Syracuse, New York 13244-4100 USA

Supplemental Materials

The following crystal structure has been deposited at the Cambridge Crystallographic Data Centre and allocated the deposition number CCDC 667845
Summary of Data CCDC 667845
Authors: J.Taylor, W.Vargas, A.Torvisco, K.Ruhlandt-Senge, J.T.Spencer
Journal: Inorg.Chem. (0009)
Formula: C₁₇ H₂₅ B₁₀ N₁
Unit cell parameters: a 8.6794(17) b 11.021(2) c 43.175(9) beta 91.00(3), space group P21/n

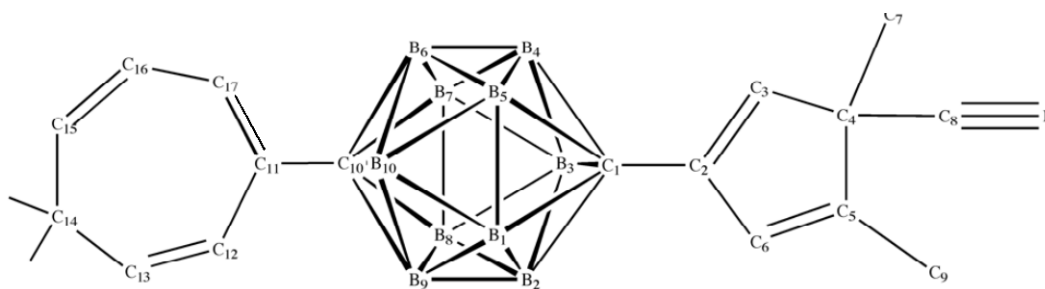


Table 1. Crystal data and structure refinement for **8**.

Identification code	jesse2	
Empirical formula	C ₁₇ H ₂₅ B ₁₀ N	
Formula weight	351.48	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/n	
Unit cell dimensions	a = 8.6794(17) Å	α = 90°.
	b = 11.021(2) Å	β = 91.00(3)°.
	c = 43.175(9) Å	γ = 90°.
Volume	4129.2(14) Å ³	
Z	8	
Density (calculated)	1.131 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.058 mm ⁻¹	

F(000)	1472
Crystal size	0.50 x 0.20 x 0.20 mm ³
Theta range for data collection	1.89 to 24.00°.
Index ranges	-7<=h<=9, -11<=k<=12, -48<=l<=49
Reflections collected	18794
Independent reflections	6392 [R(int) = 0.0691]
Completeness to theta = 24.00°	98.7 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	0.9886 and 0.9718
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	6392 / 0 / 585
Goodness-of-fit on F ²	1.180
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0729, wR2 = 0.1464
R indices (all data)	R1 = 0.0933, wR2 = 0.1566
Largest diff. peak and hole	0.277 and -0.237 e.Å ⁻³

References:

- Data Collection: SMART Software Reference Manual (1994). Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise Dr., Madison, WI 53719-1173, USA.
- Data Reduction: SAINT Version 4 Software Reference Manual (1995). Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise Dr., Madison, WI 53719-1173, USA.
- Structure Solution, Refinement and Graphics: G. M. Sheldrick (1994). SHELXTL Version 5 Reference Manual. Siemens Analytical X-ray Instruments, 6300 Enterprise Dr., Madison, WI 53719-1173, USA.
- Neutral atom scattering factors were taken from International Tables for Crystallography, Vol C, Tables 6.1.1.4, 4.2.6.8, and 4.2.4.2, Kluwer: Boston.
- Method of Absolute Structure Determination: H. D. Flack (1983). Acta Cryst. A39, 876-881.
- Polar Axis Restraints from: H. D. Flack and D. Schwarzenbach (1988). Acta Cryst. A44, 499-506.
- Absorption correction: Performed with SADABS (G.M.Sheldrick) using redundant data according to the method described by R.Blessing, Acta Cryst. (1995) A51 33-38.
- Acknowledgement: Please acknowledge funds from NSF(grant CHE-9527898), Syracuse University, and the W.M.Keck Foundation for the purchase of the X-ray instrument and computers.

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **8**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
B(1)	1447(4)	959(3)	295(1)	29(1)
B(2)	2640(4)	1771(3)	565(1)	29(1)
B(3)	2029(4)	3316(3)	567(1)	27(1)
B(4)	464(4)	3467(3)	296(1)	24(1)
B(5)	105(4)	2006(3)	129(1)	27(1)
B(6)	1138(4)	3114(3)	-75(1)	27(1)
B(7)	2335(4)	3929(3)	192(1)	27(1)
B(8)	3680(4)	2874(3)	357(1)	28(1)
B(9)	3312(4)	1424(3)	192(1)	30(1)
B(10)	1753(4)	1568(3)	-79(1)	30(1)
C(1)	734(3)	2154(2)	507(1)	23(1)
C(2)	-395(3)	1876(2)	758(1)	22(1)
C(3)	-1928(3)	1934(3)	728(1)	33(1)
C(4)	-2636(3)	1513(3)	1028(1)	31(1)
C(5)	-1255(3)	1304(3)	1238(1)	32(1)
C(6)	23(4)	1475(3)	1070(1)	32(1)
C(7)	-3595(4)	342(3)	980(1)	39(1)
C(8)	-3611(4)	2486(3)	1159(1)	33(1)
C(9)	-1397(4)	941(3)	1566(1)	44(1)
N(1)	-4357(3)	3235(3)	1266(1)	44(1)
C(10)	3059(3)	2733(3)	-23(1)	24(1)
C(11)	4179(3)	3018(3)	-282(1)	29(1)
C(12)	5644(4)	2393(3)	-277(1)	51(1)
C(13)	6361(5)	2054(4)	-531(1)	75(2)
C(14)	5834(5)	2282(4)	-845(1)	66(1)
C(15)	5750(4)	3594(4)	-898(1)	48(1)
C(16)	4817(4)	4293(3)	-738(1)	40(1)
C(17)	3865(3)	3905(3)	-486(1)	32(1)
B(11)	6430(4)	5937(3)	2409(1)	29(1)
B(12)	6906(4)	7497(3)	2440(1)	27(1)
B(13)	5599(4)	8327(3)	2201(1)	26(1)

B(14)	4825(4)	5801(3)	2150(1)	28(1)
B(15)	4306(4)	7276(3)	2019(1)	28(1)
B(16)	7470(4)	8008(3)	2073(1)	27(1)
B(17)	7987(4)	6529(3)	2201(1)	28(1)
B(18)	6703(4)	5477(3)	2022(1)	29(1)
B(19)	5392(4)	6306(3)	1782(1)	28(1)
B(20)	5876(4)	7878(3)	1812(1)	29(1)
C(18)	5023(3)	7034(2)	2390(1)	20(1)
C(19)	3978(3)	7162(2)	2663(1)	20(1)
C(20)	2807(3)	6426(3)	2736(1)	25(1)
C(21)	2027(3)	6922(2)	3022(1)	24(1)
C(22)	3035(3)	8016(2)	3109(1)	24(1)
C(23)	4106(3)	8138(3)	2891(1)	26(1)
C(24)	336(3)	7299(3)	2946(1)	28(1)
C(25)	2014(3)	6014(3)	3274(1)	26(1)
N(2)	1962(3)	5313(2)	3471(1)	36(1)
C(26)	2778(3)	8778(3)	3387(1)	30(1)
C(27)	7285(3)	6772(2)	1832(1)	22(1)
C(28)	8380(3)	6638(3)	1562(1)	24(1)
C(29)	8173(3)	5733(3)	1355(1)	30(1)
C(30)	9175(3)	5430(3)	1101(1)	33(1)
C(31)	9965(4)	6233(3)	938(1)	34(1)
C(32)	9761(4)	7556(3)	988(1)	44(1)
C(33)	10387(4)	7842(3)	1304(1)	49(1)
C(34)	9723(4)	7425(3)	1562(1)	37(1)

Table 3. Bond lengths [Å] for **8**.

B(1)-C(1)	1.727(4)	B(8)-H(8)	1.10(3)
B(1)-B(9)	1.762(5)	B(9)-C(10)	1.726(4)
B(1)-B(10)	1.770(5)	B(9)-B(10)	1.778(5)
B(1)-B(5)	1.780(5)	B(9)-H(9)	1.06(3)
B(1)-B(2)	1.786(5)	B(10)-C(10)	1.727(4)
B(1)-H(1)	1.10(3)	B(10)-H(10)	1.08(3)
B(2)-C(1)	1.721(4)	C(1)-C(2)	1.502(4)
B(2)-B(9)	1.765(5)	C(2)-C(3)	1.336(4)
B(2)-B(8)	1.767(5)	C(2)-C(6)	1.458(4)
B(2)-B(3)	1.783(5)	C(3)-C(4)	1.517(4)
B(2)-H(2)	1.07(3)	C(3)-H(3A)	0.9300
B(3)-C(1)	1.719(4)	C(4)-C(8)	1.485(4)
B(3)-B(8)	1.776(4)	C(4)-C(5)	1.506(4)
B(3)-B(7)	1.777(5)	C(4)-C(7)	1.547(4)
B(3)-B(4)	1.783(5)	C(5)-C(6)	1.349(4)
B(3)-H(3)	1.09(3)	C(5)-C(9)	1.482(4)
B(4)-C(1)	1.724(4)	C(6)-H(6A)	0.9300
B(4)-B(6)	1.758(4)	C(7)-H(7A)	0.9600
B(4)-B(7)	1.767(5)	C(7)-H(7B)	0.9600
B(4)-B(5)	1.789(5)	C(7)-H(7C)	0.9600
B(4)-H(4)	1.11(3)	C(8)-N(1)	1.149(4)
B(5)-C(1)	1.720(4)	C(9)-H(9A)	0.9600
B(5)-B(6)	1.759(5)	C(9)-H(9B)	0.9600
B(5)-B(10)	1.769(4)	C(9)-H(9C)	0.9600
B(5)-H(5)	1.08(3)	C(10)-C(11)	1.527(4)
B(6)-C(10)	1.730(4)	C(11)-C(17)	1.342(4)
B(6)-B(7)	1.781(5)	C(11)-C(12)	1.446(4)
B(6)-B(10)	1.785(5)	C(12)-C(13)	1.323(5)
B(6)-H(6)	1.04(3)	C(12)-H(12A)	0.9300
B(7)-C(10)	1.737(4)	C(13)-C(14)	1.445(6)
B(7)-B(8)	1.787(5)	C(13)-H(13A)	0.9300
B(7)-H(7)	1.08(3)	C(14)-C(15)	1.466(5)
B(8)-C(10)	1.725(4)	C(14)-H(14A)	0.9700
B(8)-B(9)	1.777(5)	C(14)-H(14B)	0.9700

C(15)-C(16)	1.322(5)	B(17)-H(17)	1.10(3)
C(15)-H(15A)	0.9300	B(18)-C(27)	1.725(4)
C(16)-C(17)	1.441(4)	B(18)-B(19)	1.778(5)
C(16)-H(16A)	0.9300	B(18)-H(18)	1.12(3)
C(17)-H(17A)	0.9300	B(19)-C(27)	1.732(4)
B(11)-C(18)	1.719(4)	B(19)-B(20)	1.786(5)
B(11)-B(17)	1.763(5)	B(19)-H(19)	1.11(3)
B(11)-B(18)	1.769(5)	B(20)-C(27)	1.727(4)
B(11)-B(12)	1.773(5)	B(20)-H(20)	1.10(3)
B(11)-B(14)	1.778(5)	C(18)-C(19)	1.504(4)
B(11)-H(11)	1.08(3)	C(19)-C(20)	1.343(4)
B(12)-C(18)	1.723(4)	C(19)-C(23)	1.463(4)
B(12)-B(16)	1.759(5)	C(20)-C(21)	1.519(4)
B(12)-B(17)	1.765(5)	C(20)-H(20A)	0.9300
B(12)-B(13)	1.775(5)	C(21)-C(25)	1.481(4)
B(12)-H(12)	1.06(3)	C(21)-C(22)	1.534(4)
B(13)-C(18)	1.722(4)	C(21)-C(24)	1.554(4)
B(13)-B(16)	1.759(5)	C(22)-C(23)	1.341(4)
B(13)-B(20)	1.771(5)	C(22)-C(26)	1.483(4)
B(13)-B(15)	1.785(5)	C(23)-H(23A)	0.9300
B(13)-H(13)	1.11(3)	C(24)-H(24A)	0.9600
B(14)-C(18)	1.717(4)	C(24)-H(24B)	0.9600
B(14)-B(19)	1.764(4)	C(24)-H(24C)	0.9600
B(14)-B(18)	1.767(5)	C(25)-N(2)	1.150(4)
B(14)-B(15)	1.777(5)	C(26)-H(26A)	0.9600
B(14)-H(14)	1.09(3)	C(26)-H(26B)	0.9600
B(15)-C(18)	1.731(4)	C(26)-H(26C)	0.9600
B(15)-B(19)	1.764(5)	C(27)-C(28)	1.524(4)
B(15)-B(20)	1.772(5)	C(28)-C(29)	1.349(4)
B(15)-H(15)	1.11(3)	C(28)-C(34)	1.453(4)
B(16)-C(27)	1.719(4)	C(29)-C(30)	1.450(4)
B(16)-B(20)	1.775(5)	C(29)-H(29A)	0.9300
B(16)-B(17)	1.776(5)	C(30)-C(31)	1.330(4)
B(16)-H(16)	1.10(3)	C(30)-H(30A)	0.9300
B(17)-C(27)	1.716(4)	C(31)-C(32)	1.485(5)
B(17)-B(18)	1.777(5)	C(31)-H(31A)	0.9300

C(32)-C(33)	1.493(5)	C(33)-C(34)	1.345(4)
C(32)-H(32A)	0.9700	C(33)-H(33A)	0.9300
C(32)-H(32B)	0.9700	C(34)-H(34A)	0.9300

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms.

Table 4. Bond angles [°] for **8**.

C(1)-B(1)-B(9)	104.6(2)	B(8)-B(3)-B(4)	107.7(2)
C(1)-B(1)-B(10)	104.8(2)	B(7)-B(3)-B(4)	59.52(19)
B(9)-B(1)-B(10)	60.45(19)	C(1)-B(3)-B(2)	58.84(18)
C(1)-B(1)-B(5)	58.72(17)	B(8)-B(3)-B(2)	59.53(19)
B(9)-B(1)-B(5)	107.9(2)	B(7)-B(3)-B(2)	108.1(2)
B(10)-B(1)-B(5)	59.76(19)	B(4)-B(3)-B(2)	108.1(2)
C(1)-B(1)-B(2)	58.66(18)	C(1)-B(3)-H(3)	118.4(14)
B(9)-B(1)-B(2)	59.65(19)	B(8)-B(3)-H(3)	126.4(14)
B(10)-B(1)-B(2)	108.1(2)	B(7)-B(3)-H(3)	128.1(14)
B(5)-B(1)-B(2)	107.8(2)	B(4)-B(3)-H(3)	120.9(14)
C(1)-B(1)-H(1)	118.7(15)	B(2)-B(3)-H(3)	118.0(14)
B(9)-B(1)-H(1)	127.3(15)	C(1)-B(4)-B(6)	104.5(2)
B(10)-B(1)-H(1)	126.8(15)	C(1)-B(4)-B(7)	105.0(2)
B(5)-B(1)-H(1)	119.3(15)	B(6)-B(4)-B(7)	60.68(19)
B(2)-B(1)-H(1)	119.8(15)	C(1)-B(4)-B(3)	58.68(17)
C(1)-B(2)-B(9)	104.7(2)	B(6)-B(4)-B(3)	108.3(2)
C(1)-B(2)-B(8)	104.8(2)	B(7)-B(4)-B(3)	60.08(18)
B(9)-B(2)-B(8)	60.43(19)	C(1)-B(4)-B(5)	58.59(17)
C(1)-B(2)-B(3)	58.72(17)	B(6)-B(4)-B(5)	59.46(18)
B(9)-B(2)-B(3)	108.3(2)	B(7)-B(4)-B(5)	108.1(2)
B(8)-B(2)-B(3)	60.02(19)	B(3)-B(4)-B(5)	107.7(2)
C(1)-B(2)-B(1)	58.95(18)	C(1)-B(4)-H(4)	119.8(14)
B(9)-B(2)-B(1)	59.5(2)	B(6)-B(4)-H(4)	126.3(14)
B(8)-B(2)-B(1)	108.0(2)	B(7)-B(4)-H(4)	125.9(14)
B(3)-B(2)-B(1)	108.2(2)	B(3)-B(4)-H(4)	119.7(14)
C(1)-B(2)-H(2)	122.6(15)	B(5)-B(4)-H(4)	120.2(14)
B(9)-B(2)-H(2)	123.9(16)	C(1)-B(5)-B(6)	104.7(2)
B(8)-B(2)-H(2)	124.0(16)	C(1)-B(5)-B(10)	105.2(2)
B(3)-B(2)-H(2)	120.9(16)	B(6)-B(5)-B(10)	60.79(19)
B(1)-B(2)-H(2)	120.6(16)	C(1)-B(5)-B(1)	59.08(18)
C(1)-B(3)-B(8)	104.5(2)	B(6)-B(5)-B(1)	108.3(2)
C(1)-B(3)-B(7)	104.8(2)	B(10)-B(5)-B(1)	59.84(19)
B(8)-B(3)-B(7)	60.41(19)	C(1)-B(5)-B(4)	58.81(17)
C(1)-B(3)-B(4)	58.95(17)	B(6)-B(5)-B(4)	59.38(18)

B(10)-B(5)-B(4)	108.3(2)	B(8)-B(7)-H(7)	118.4(15)
B(1)-B(5)-B(4)	108.3(2)	C(10)-B(8)-B(2)	105.5(2)
C(1)-B(5)-H(5)	122.0(15)	C(10)-B(8)-B(3)	105.5(2)
B(6)-B(5)-H(5)	124.4(16)	B(2)-B(8)-B(3)	60.45(18)
B(10)-B(5)-H(5)	124.0(15)	C(10)-B(8)-B(9)	59.02(18)
B(1)-B(5)-H(5)	120.4(16)	B(2)-B(8)-B(9)	59.72(19)
B(4)-B(5)-H(5)	120.8(16)	B(3)-B(8)-B(9)	108.1(2)
C(10)-B(6)-B(4)	105.8(2)	C(10)-B(8)-B(7)	59.22(18)
C(10)-B(6)-B(5)	105.4(2)	B(2)-B(8)-B(7)	108.3(2)
B(4)-B(6)-B(5)	61.16(19)	B(3)-B(8)-B(7)	59.84(18)
C(10)-B(6)-B(7)	59.28(18)	B(9)-B(8)-B(7)	108.2(2)
B(4)-B(6)-B(7)	59.92(18)	C(10)-B(8)-H(8)	119.7(15)
B(5)-B(6)-B(7)	108.9(2)	B(2)-B(8)-H(8)	125.4(15)
C(10)-B(6)-B(10)	58.83(18)	B(3)-B(8)-H(8)	125.7(15)
B(4)-B(6)-B(10)	109.0(2)	B(9)-B(8)-H(8)	119.9(15)
B(5)-B(6)-B(10)	59.87(19)	B(7)-B(8)-H(8)	120.1(15)
B(7)-B(6)-B(10)	108.5(2)	C(10)-B(9)-B(1)	105.7(2)
C(10)-B(6)-H(6)	120.0(15)	C(10)-B(9)-B(2)	105.5(2)
B(4)-B(6)-H(6)	125.3(15)	B(1)-B(9)-B(2)	60.9(2)
B(5)-B(6)-H(6)	124.8(15)	C(10)-B(9)-B(8)	59.00(18)
B(7)-B(6)-H(6)	120.3(15)	B(1)-B(9)-B(8)	108.6(2)
B(10)-B(6)-H(6)	119.3(15)	B(2)-B(9)-B(8)	59.85(19)
C(10)-B(7)-B(4)	105.1(2)	C(10)-B(9)-B(10)	59.03(18)
C(10)-B(7)-B(3)	105.0(2)	B(1)-B(9)-B(10)	60.0(2)
B(4)-B(7)-B(3)	60.40(18)	B(2)-B(9)-B(10)	108.7(2)
C(10)-B(7)-B(6)	58.90(17)	B(8)-B(9)-B(10)	108.3(2)
B(4)-B(7)-B(6)	59.40(18)	C(10)-B(9)-H(9)	119.9(15)
B(3)-B(7)-B(6)	107.5(2)	B(1)-B(9)-H(9)	125.8(15)
C(10)-B(7)-B(8)	58.61(18)	B(2)-B(9)-H(9)	124.5(15)
B(4)-B(7)-B(8)	107.9(2)	B(8)-B(9)-H(9)	119.0(15)
B(3)-B(7)-B(8)	59.75(18)	B(10)-B(9)-H(9)	120.9(15)
B(6)-B(7)-B(8)	107.4(2)	C(10)-B(10)-B(5)	105.1(2)
C(10)-B(7)-H(7)	118.3(15)	C(10)-B(10)-B(1)	105.3(2)
B(4)-B(7)-H(7)	127.9(15)	B(5)-B(10)-B(1)	60.40(19)
B(3)-B(7)-H(7)	126.1(15)	C(10)-B(10)-B(9)	58.98(18)
B(6)-B(7)-H(7)	121.3(15)	B(5)-B(10)-B(9)	107.7(2)

B(1)-B(10)-B(9)	59.5(2)	C(3)-C(4)-C(7)	111.5(3)
C(10)-B(10)-B(6)	58.98(18)	C(6)-C(5)-C(9)	129.4(3)
B(5)-B(10)-B(6)	59.34(19)	C(6)-C(5)-C(4)	108.0(3)
B(1)-B(10)-B(6)	107.6(2)	C(9)-C(5)-C(4)	122.5(3)
B(9)-B(10)-B(6)	107.6(2)	C(5)-C(6)-C(2)	110.2(3)
C(10)-B(10)-H(10)	118.8(14)	C(5)-C(6)-H(6A)	124.9
B(5)-B(10)-H(10)	127.2(14)	C(2)-C(6)-H(6A)	124.9
B(1)-B(10)-H(10)	126.0(14)	C(4)-C(7)-H(7A)	109.5
B(9)-B(10)-H(10)	119.2(14)	C(4)-C(7)-H(7B)	109.5
B(6)-B(10)-H(10)	120.9(14)	H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
C(2)-C(1)-B(3)	118.5(2)	C(4)-C(7)-H(7C)	109.5
C(2)-C(1)-B(5)	117.5(2)	H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
B(3)-C(1)-B(5)	114.1(2)	H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
C(2)-C(1)-B(2)	118.9(2)	N(1)-C(8)-C(4)	178.8(3)
B(3)-C(1)-B(2)	62.45(19)	C(5)-C(9)-H(9A)	109.5
B(5)-C(1)-B(2)	113.7(2)	C(5)-C(9)-H(9B)	109.5
C(2)-C(1)-B(4)	117.9(2)	H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
B(3)-C(1)-B(4)	62.37(18)	C(5)-C(9)-H(9C)	109.5
B(5)-C(1)-B(4)	62.60(18)	H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
B(2)-C(1)-B(4)	113.8(2)	H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
C(2)-C(1)-B(1)	118.1(2)	C(11)-C(10)-B(8)	119.1(2)
B(3)-C(1)-B(1)	114.1(2)	C(11)-C(10)-B(9)	119.2(2)
B(5)-C(1)-B(1)	62.21(19)	B(8)-C(10)-B(9)	61.98(19)
B(2)-C(1)-B(1)	62.40(19)	C(11)-C(10)-B(10)	118.4(2)
B(4)-C(1)-B(1)	113.9(2)	B(8)-C(10)-B(10)	113.1(2)
C(3)-C(2)-C(6)	109.5(2)	B(9)-C(10)-B(10)	61.99(19)
C(3)-C(2)-C(1)	125.6(3)	C(11)-C(10)-B(6)	118.7(2)
C(6)-C(2)-C(1)	124.8(2)	B(8)-C(10)-B(6)	112.6(2)
C(2)-C(3)-C(4)	108.8(3)	B(9)-C(10)-B(6)	112.6(2)
C(2)-C(3)-H(3A)	125.6	B(10)-C(10)-B(6)	62.19(19)
C(4)-C(3)-H(3A)	125.6	C(11)-C(10)-B(7)	118.5(2)
C(8)-C(4)-C(5)	109.5(3)	B(8)-C(10)-B(7)	62.17(19)
C(8)-C(4)-C(3)	110.3(2)	B(9)-C(10)-B(7)	113.1(2)
C(5)-C(4)-C(3)	103.3(2)	B(10)-C(10)-B(7)	113.3(2)
C(8)-C(4)-C(7)	110.2(2)	B(6)-C(10)-B(7)	61.82(19)
C(5)-C(4)-C(7)	111.9(3)	C(17)-C(11)-C(12)	121.6(3)

C(17)-C(11)-C(10)	120.5(3)	B(12)-B(11)-H(11)	120.3(17)
C(12)-C(11)-C(10)	117.6(3)	B(14)-B(11)-H(11)	118.4(17)
C(13)-C(12)-C(11)	123.3(4)	C(18)-B(12)-B(16)	105.1(2)
C(13)-C(12)-H(12A)	118.4	C(18)-B(12)-B(17)	105.1(2)
C(11)-C(12)-H(12A)	118.4	B(16)-B(12)-B(17)	60.52(19)
C(12)-C(13)-C(14)	125.6(4)	C(18)-B(12)-B(11)	58.90(18)
C(12)-C(13)-H(13A)	117.2	B(16)-B(12)-B(11)	108.1(2)
C(14)-C(13)-H(13A)	117.2	B(17)-B(12)-B(11)	59.76(19)
C(13)-C(14)-C(15)	109.5(3)	C(18)-B(12)-B(13)	58.96(17)
C(13)-C(14)-H(14A)	109.8	B(16)-B(12)-B(13)	59.70(19)
C(15)-C(14)-H(14A)	109.8	B(17)-B(12)-B(13)	108.2(2)
C(13)-C(14)-H(14B)	109.8	B(11)-B(12)-B(13)	108.1(2)
C(15)-C(14)-H(14B)	109.8	C(18)-B(12)-H(12)	118.9(15)
H(14A)-C(14)-H(14B)	108.2	B(16)-B(12)-H(12)	125.8(15)
C(16)-C(15)-C(14)	121.5(3)	B(17)-B(12)-H(12)	127.1(15)
C(16)-C(15)-H(15A)	119.3	B(11)-B(12)-H(12)	120.7(16)
C(14)-C(15)-H(15A)	119.3	B(13)-B(12)-H(12)	118.7(15)
C(15)-C(16)-C(17)	125.9(3)	C(18)-B(13)-B(16)	105.1(2)
C(15)-C(16)-H(16A)	117.1	C(18)-B(13)-B(20)	105.4(2)
C(17)-C(16)-H(16A)	117.1	B(16)-B(13)-B(20)	60.37(19)
C(11)-C(17)-C(16)	126.8(3)	C(18)-B(13)-B(12)	58.98(18)
C(11)-C(17)-H(17A)	116.6	B(16)-B(13)-B(12)	59.69(19)
C(16)-C(17)-H(17A)	116.6	B(20)-B(13)-B(12)	108.2(2)
C(18)-B(11)-B(17)	105.4(2)	C(18)-B(13)-B(15)	59.12(17)
C(18)-B(11)-B(18)	105.2(2)	B(16)-B(13)-B(15)	108.0(2)
B(17)-B(11)-B(18)	60.40(19)	B(20)-B(13)-B(15)	59.78(19)
C(18)-B(11)-B(12)	59.09(18)	B(12)-B(13)-B(15)	108.2(2)
B(17)-B(11)-B(12)	59.91(19)	C(18)-B(13)-H(13)	118.7(14)
B(18)-B(11)-B(12)	108.2(2)	B(16)-B(13)-H(13)	126.5(14)
C(18)-B(11)-B(14)	58.77(18)	B(20)-B(13)-H(13)	126.6(14)
B(17)-B(11)-B(14)	108.0(2)	B(12)-B(13)-H(13)	119.4(14)
B(18)-B(11)-B(14)	59.7(2)	B(15)-B(13)-H(13)	119.9(14)
B(12)-B(11)-B(14)	107.9(2)	C(18)-B(14)-B(19)	105.6(2)
C(18)-B(11)-H(11)	117.8(16)	C(18)-B(14)-B(18)	105.4(2)
B(17)-B(11)-H(11)	127.9(16)	B(19)-B(14)-B(18)	60.49(19)
B(18)-B(11)-H(11)	126.5(16)	C(18)-B(14)-B(15)	59.38(18)

B(19)-B(14)-B(15)	59.78(19)	C(27)-B(16)-H(16)	120.5(14)
B(18)-B(14)-B(15)	108.3(2)	B(12)-B(16)-H(16)	125.7(14)
C(18)-B(14)-B(11)	58.90(18)	B(13)-B(16)-H(16)	123.8(14)
B(19)-B(14)-B(11)	108.3(2)	B(20)-B(16)-H(16)	118.5(14)
B(18)-B(14)-B(11)	59.87(19)	B(17)-B(16)-H(16)	121.8(14)
B(15)-B(14)-B(11)	108.4(2)	C(27)-B(17)-B(11)	105.6(2)
C(18)-B(14)-H(14)	118.8(16)	C(27)-B(17)-B(12)	105.3(2)
B(19)-B(14)-H(14)	125.9(17)	B(11)-B(17)-B(12)	60.33(19)
B(18)-B(14)-H(14)	126.5(17)	C(27)-B(17)-B(16)	58.95(17)
B(15)-B(14)-H(14)	119.1(17)	B(11)-B(17)-B(16)	107.9(2)
B(11)-B(14)-H(14)	120.2(17)	B(12)-B(17)-B(16)	59.57(19)
C(18)-B(15)-B(19)	105.0(2)	C(27)-B(17)-B(18)	59.16(18)
C(18)-B(15)-B(20)	105.0(2)	B(11)-B(17)-B(18)	59.98(19)
B(19)-B(15)-B(20)	60.68(19)	B(12)-B(17)-B(18)	108.2(2)
C(18)-B(15)-B(14)	58.59(17)	B(16)-B(17)-B(18)	108.0(2)
B(19)-B(15)-B(14)	59.75(19)	C(27)-B(17)-H(17)	120.8(14)
B(20)-B(15)-B(14)	108.1(2)	B(11)-B(17)-H(17)	125.6(14)
C(18)-B(15)-B(13)	58.64(17)	B(12)-B(17)-H(17)	123.9(15)
B(19)-B(15)-B(13)	108.1(2)	B(16)-B(17)-H(17)	119.3(15)
B(20)-B(15)-B(13)	59.71(19)	B(18)-B(17)-H(17)	121.7(15)
B(14)-B(15)-B(13)	107.4(2)	C(27)-B(18)-B(14)	105.2(2)
C(18)-B(15)-H(15)	118.9(14)	C(27)-B(18)-B(11)	104.9(2)
B(19)-B(15)-H(15)	126.8(15)	B(14)-B(18)-B(11)	60.39(19)
B(20)-B(15)-H(15)	126.4(15)	C(27)-B(18)-B(17)	58.66(17)
B(14)-B(15)-H(15)	120.1(15)	B(14)-B(18)-B(17)	107.9(2)
B(13)-B(15)-H(15)	119.6(15)	B(11)-B(18)-B(17)	59.62(19)
C(27)-B(16)-B(12)	105.5(2)	C(27)-B(18)-B(19)	59.23(18)
C(27)-B(16)-B(13)	105.7(2)	B(14)-B(18)-B(19)	59.67(19)
B(12)-B(16)-B(13)	60.61(19)	B(11)-B(18)-B(19)	108.0(2)
C(27)-B(16)-B(20)	59.24(18)	B(17)-B(18)-B(19)	108.0(2)
B(12)-B(16)-B(20)	108.7(2)	C(27)-B(18)-H(18)	118.9(16)
B(13)-B(16)-B(20)	60.13(19)	B(14)-B(18)-H(18)	127.0(16)
C(27)-B(16)-B(17)	58.78(17)	B(11)-B(18)-H(18)	126.2(16)
B(12)-B(16)-B(17)	59.91(19)	B(17)-B(18)-H(18)	119.3(16)
B(13)-B(16)-B(17)	108.4(2)	B(19)-B(18)-H(18)	120.2(16)
B(20)-B(16)-B(17)	108.3(2)	C(27)-B(19)-B(14)	105.0(2)

C(27)-B(19)-B(15)	105.2(2)	B(14)-C(18)-B(12)	113.2(2)
B(14)-B(19)-B(15)	60.47(19)	B(11)-C(18)-B(12)	62.01(19)
C(27)-B(19)-B(18)	58.84(18)	B(13)-C(18)-B(12)	62.05(19)
B(14)-B(19)-B(18)	59.84(19)	C(19)-C(18)-B(15)	119.9(2)
B(15)-B(19)-B(18)	108.4(2)	B(14)-C(18)-B(15)	62.03(19)
C(27)-B(19)-B(20)	58.79(17)	B(11)-C(18)-B(15)	113.3(2)
B(14)-B(19)-B(20)	108.0(2)	B(13)-C(18)-B(15)	62.24(19)
B(15)-B(19)-B(20)	59.87(19)	B(12)-C(18)-B(15)	113.2(2)
B(18)-B(19)-B(20)	107.9(2)	C(20)-C(19)-C(23)	109.5(2)
C(27)-B(19)-H(19)	118.7(16)	C(20)-C(19)-C(18)	126.6(2)
B(14)-B(19)-H(19)	125.4(16)	C(23)-C(19)-C(18)	123.8(2)
B(15)-B(19)-H(19)	127.8(16)	C(19)-C(20)-C(21)	108.9(2)
B(18)-B(19)-H(19)	117.5(16)	C(19)-C(20)-H(20A)	125.6
B(20)-B(19)-H(19)	121.6(16)	C(21)-C(20)-H(20A)	125.6
C(27)-B(20)-B(13)	104.9(2)	C(25)-C(21)-C(20)	111.4(2)
C(27)-B(20)-B(15)	105.1(2)	C(25)-C(21)-C(22)	111.2(2)
B(13)-B(20)-B(15)	60.50(19)	C(20)-C(21)-C(22)	102.9(2)
C(27)-B(20)-B(16)	58.76(18)	C(25)-C(21)-C(24)	108.5(2)
B(13)-B(20)-B(16)	59.50(19)	C(20)-C(21)-C(24)	111.0(2)
B(15)-B(20)-B(16)	107.9(2)	C(22)-C(21)-C(24)	111.9(2)
C(27)-B(20)-B(19)	59.02(18)	C(23)-C(22)-C(26)	128.7(3)
B(13)-B(20)-B(19)	107.7(2)	C(23)-C(22)-C(21)	107.8(2)
B(15)-B(20)-B(19)	59.44(19)	C(26)-C(22)-C(21)	123.5(2)
B(16)-B(20)-B(19)	107.7(2)	C(22)-C(23)-C(19)	110.7(2)
C(27)-B(20)-H(20)	119.6(16)	C(22)-C(23)-H(23A)	124.6
B(13)-B(20)-H(20)	125.3(16)	C(19)-C(23)-H(23A)	124.6
B(15)-B(20)-H(20)	126.9(16)	C(21)-C(24)-H(24A)	109.5
B(16)-B(20)-H(20)	118.8(16)	C(21)-C(24)-H(24B)	109.5
B(19)-B(20)-H(20)	121.5(16)	H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(19)-C(18)-B(14)	119.5(2)	C(21)-C(24)-H(24C)	109.5
C(19)-C(18)-B(11)	117.8(2)	H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
B(14)-C(18)-B(11)	62.3(2)	H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(19)-C(18)-B(13)	118.5(2)	N(2)-C(25)-C(21)	178.2(3)
B(14)-C(18)-B(13)	113.2(2)	C(22)-C(26)-H(26A)	109.5
B(11)-C(18)-B(13)	113.1(2)	C(22)-C(26)-H(26B)	109.5
C(19)-C(18)-B(12)	117.3(2)	H(26A)-C(26)-H(26B)	109.5

C(22)-C(26)-H(26C)	109.5	C(28)-C(29)-C(30)	126.6(3)
H(26A)-C(26)-H(26C)	109.5	C(28)-C(29)-H(29A)	116.7
H(26B)-C(26)-H(26C)	109.5	C(30)-C(29)-H(29A)	116.7
C(28)-C(27)-B(17)	118.6(2)	C(31)-C(30)-C(29)	124.7(3)
C(28)-C(27)-B(16)	119.1(2)	C(31)-C(30)-H(30A)	117.6
B(17)-C(27)-B(16)	62.28(19)	C(29)-C(30)-H(30A)	117.6
C(28)-C(27)-B(18)	118.3(2)	C(30)-C(31)-C(32)	120.8(3)
B(17)-C(27)-B(18)	62.18(19)	C(30)-C(31)-H(31A)	119.6
B(16)-C(27)-B(18)	113.2(2)	C(32)-C(31)-H(31A)	119.6
C(28)-C(27)-B(20)	118.7(2)	C(31)-C(32)-C(33)	107.3(3)
B(17)-C(27)-B(20)	113.4(2)	C(31)-C(32)-H(32A)	110.3
B(16)-C(27)-B(20)	62.00(19)	C(33)-C(32)-H(32A)	110.3
B(18)-C(27)-B(20)	113.3(2)	C(31)-C(32)-H(32B)	110.3
C(28)-C(27)-B(19)	118.5(2)	C(33)-C(32)-H(32B)	110.3
B(17)-C(27)-B(19)	113.1(2)	H(32A)-C(32)-H(32B)	108.5
B(16)-C(27)-B(19)	112.9(2)	C(34)-C(33)-C(32)	122.1(3)
B(18)-C(27)-B(19)	61.93(19)	C(34)-C(33)-H(33A)	119.0
B(20)-C(27)-B(19)	62.19(19)	C(32)-C(33)-H(33A)	119.0
C(29)-C(28)-C(34)	122.6(3)	C(33)-C(34)-C(28)	124.0(3)
C(29)-C(28)-C(27)	120.1(2)	C(33)-C(34)-H(34A)	118.0
C(34)-C(28)-C(27)	116.9(2)	C(28)-C(34)-H(34A)	118.0

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **8**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
B(1)	37(2)	21(2)	31(2)	-1(2)	7(2)	7(2)
B(2)	25(2)	33(2)	29(2)	7(2)	5(1)	8(2)
B(3)	24(2)	29(2)	28(2)	-2(2)	4(1)	-1(2)
B(4)	30(2)	21(2)	22(2)	2(1)	2(1)	3(1)
B(5)	27(2)	31(2)	24(2)	-5(2)	2(1)	0(2)
B(6)	29(2)	29(2)	25(2)	2(2)	1(1)	8(2)
B(7)	31(2)	23(2)	26(2)	0(1)	7(1)	0(2)
B(8)	26(2)	36(2)	22(2)	4(2)	5(1)	2(2)
B(9)	32(2)	28(2)	29(2)	5(2)	6(2)	10(2)
B(10)	33(2)	27(2)	28(2)	-5(2)	7(2)	1(2)
C(1)	26(2)	20(2)	22(1)	0(1)	1(1)	3(1)
C(2)	25(2)	20(2)	22(1)	-3(1)	2(1)	3(1)
C(3)	35(2)	41(2)	23(2)	2(1)	1(1)	7(2)
C(4)	26(2)	34(2)	34(2)	2(1)	6(1)	2(1)
C(5)	37(2)	28(2)	32(2)	3(1)	6(1)	-6(1)
C(6)	29(2)	34(2)	34(2)	3(1)	0(1)	-1(1)
C(7)	37(2)	31(2)	51(2)	-7(2)	4(2)	2(2)
C(8)	38(2)	26(2)	36(2)	8(1)	10(2)	-3(2)
C(9)	34(2)	57(2)	40(2)	11(2)	5(2)	-8(2)
N(1)	48(2)	33(2)	49(2)	5(1)	21(1)	4(1)
C(10)	25(2)	24(2)	24(2)	1(1)	2(1)	4(1)
C(11)	32(2)	29(2)	25(2)	-2(1)	4(1)	2(1)
C(12)	41(2)	63(2)	50(2)	31(2)	19(2)	22(2)
C(13)	77(3)	77(3)	74(3)	32(2)	43(2)	49(3)
C(14)	71(3)	59(3)	69(3)	-25(2)	50(2)	-31(2)
C(15)	42(2)	72(3)	30(2)	5(2)	0(2)	-12(2)
C(16)	41(2)	43(2)	35(2)	11(2)	-2(2)	-4(2)
C(17)	30(2)	33(2)	32(2)	5(1)	4(1)	2(1)
B(11)	41(2)	25(2)	22(2)	4(2)	8(2)	10(2)
B(12)	24(2)	33(2)	25(2)	-8(2)	1(1)	-1(2)

B(13)	30(2)	19(2)	30(2)	2(2)	8(2)	1(1)
B(14)	36(2)	22(2)	26(2)	-5(2)	10(2)	-8(2)
B(15)	25(2)	35(2)	23(2)	6(2)	-2(1)	1(2)
B(16)	28(2)	24(2)	30(2)	-7(2)	7(2)	-6(2)
B(17)	30(2)	33(2)	22(2)	-2(2)	1(1)	6(2)
B(18)	41(2)	21(2)	24(2)	1(1)	12(2)	-1(2)
B(19)	27(2)	35(2)	21(2)	-4(2)	3(1)	-8(2)
B(20)	28(2)	27(2)	32(2)	7(2)	5(2)	4(2)
C(18)	25(2)	16(1)	20(1)	1(1)	1(1)	-3(1)
C(19)	24(2)	18(1)	19(1)	1(1)	1(1)	4(1)
C(20)	28(2)	22(2)	25(2)	-4(1)	4(1)	1(1)
C(21)	27(2)	22(2)	22(1)	1(1)	3(1)	4(1)
C(22)	25(2)	22(2)	25(2)	-1(1)	-3(1)	4(1)
C(23)	27(2)	20(2)	30(2)	-2(1)	2(1)	-1(1)
C(24)	27(2)	29(2)	28(2)	0(1)	-1(1)	2(1)
C(25)	24(2)	25(2)	28(2)	-4(1)	2(1)	1(1)
N(2)	38(2)	35(2)	36(2)	7(1)	3(1)	0(1)
C(26)	31(2)	32(2)	25(2)	-4(1)	0(1)	1(1)
C(27)	27(2)	17(1)	21(1)	-1(1)	0(1)	-3(1)
C(28)	26(2)	25(2)	21(1)	2(1)	2(1)	0(1)
C(29)	31(2)	34(2)	26(2)	-4(1)	4(1)	-5(1)
C(30)	35(2)	41(2)	24(2)	-8(1)	2(1)	0(2)
C(31)	33(2)	46(2)	24(2)	-3(2)	1(1)	8(2)
C(32)	46(2)	48(2)	38(2)	13(2)	22(2)	8(2)
C(33)	45(2)	36(2)	66(3)	-17(2)	30(2)	-16(2)
C(34)	34(2)	41(2)	37(2)	-18(2)	11(1)	-12(2)
