

## APPENDIX 3

*X-ray Crystallography Reports*

*Relevant to Chapter 1*

### A3.1 CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS FOR COMPOUND 52

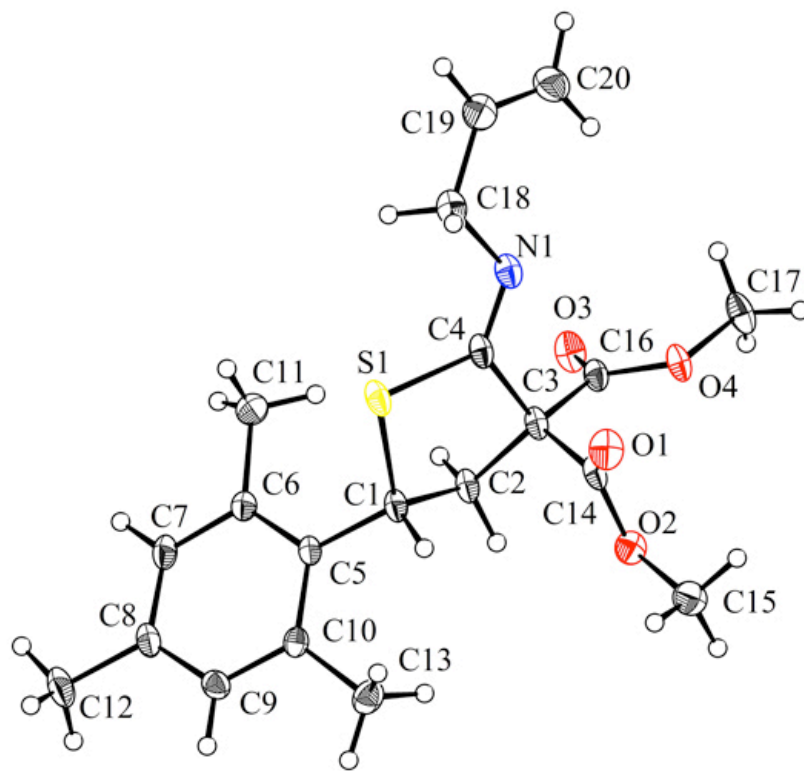


Table A3.1.1. Crystal data and structure analysis details for **52**.

Empirical formula	C <sub>20</sub> H <sub>25</sub> N O <sub>4</sub> S
Formula weight	375.47
Crystallization solvent	Benzene/Heptane/Ethyl Acetate
Crystal shape	?
Crystal color	colourless
Crystal size	0.08 x 0.19 x 0.46 mm

### Data Collection

Preliminary photograph(s)	rotation
Type of diffractometer	Bruker KAPPA APEX II
Wavelength	0.71073 $\approx$ MO K
Data collection temperature	100.15 K
Theta range for 5787 reflections used in lattice determination	2.521 to 31.600 $^\circ$
Unit cell dimensions	a = 14.5982(10) $\approx$ $\alpha = 90^\circ$ b = 16.1620(12) $\approx$ $\beta = 92.145(4)^\circ$ c = 8.2014(6) $\approx$ $\gamma = 90^\circ$
Volume	1933.7(2) $\approx^3$
Z	4
Crystal system	monoclinic
Space group	P 1 2 <sub>1</sub> /c 1 (# 14)
Density (calculated)	1.290 g/cm <sup>3</sup>
F(000)	800
Theta range for data collection	1.4 to 37.4 $^\circ$
Completeness to theta = 25.00 $^\circ$	100.0%
Index ranges	-24 $\leq$ h $\leq$ 24, 0 $\leq$ k $\leq$ 27, 0 $\leq$ l $\leq$ 13
Data collection scan type	narrow and scans
Reflections collected	15085
Independent reflections	15085 [ $R_{\text{int}} = 0.0000$ ]
Reflections > 2 $\sigma$ (I)	10418
Average $\sigma$ (I)/(net I)	0.0676
Absorption coefficient	0.19 mm <sup>-1</sup>
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	0.9848 and 0.9170

Reflections monitored for decay 0  
 Decay of standards 0%

### Structure Solution and Refinement

Primary solution method direct  
 Secondary solution method difmap  
 Hydrogen placement geom  
 Refinement method Full-matrix least-squares on F<sup>2</sup>  
 Data / restraints / parameters 15085 / 0 / 241  
 Treatment of hydrogen atoms constr  
 Goodness-of-fit on F<sup>2</sup> 1.06  
 Final R indices [I>2σ(I), 10418 reflections] R1 = 0.0592, wR2 = 0.1221  
 R indices (all data) R1 = 0.1034, wR2 = 0.1431  
 Type of weighting scheme used calc  
 Weighting scheme used calc  
 $w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0645P)^2+0.3700P]$  where  $P=(F_o^2+2F_c^2)/3$   
 Max shift/error 0.001  
 Average shift/error 0.000  
 Largest diff. peak and hole 0.49 and -0.37 e<sup>Σ</sup>≈<sup>3</sup>

### Programs Used

Cell refinement SAINT V8.18C (Bruker-AXS, 2007)  
 Data collection APEX2 2012.2-0 (Bruker-AXS, 2007)  
 Data reduction SAINT V8.18C (Bruker-AXS, 2007)  
 Structure solution SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)  
 Structure refinement SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)  
 Graphics DIAMOND 3 (Crystal Impact, 1999)

Table A3.1.2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\approx^2 \times 10^3$ ) for rac13.  $U(eq)$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	$U_{eq}$
S(1)	7001(1)	6892(1)	2895(1)	22(1)
O(1)	8360(1)	6282(1)	6404(1)	27(1)
O(2)	7480(1)	5212(1)	7100(1)	22(1)
O(3)	7866(1)	4219(1)	2706(1)	26(1)
O(4)	8857(1)	4560(1)	4768(1)	22(1)
N(1)	8660(1)	6157(1)	2476(1)	20(1)
C(1)	6183(1)	6259(1)	4018(2)	18(1)
C(2)	6567(1)	5375(1)	4014(2)	18(1)
C(3)	7607(1)	5456(1)	4275(2)	17(1)
C(4)	7894(1)	6152(1)	3131(2)	18(1)
C(5)	5192(1)	6358(1)	3430(1)	15(1)
C(6)	4890(1)	6274(1)	1789(1)	18(1)
C(7)	3969(1)	6418(1)	1363(2)	20(1)
C(8)	3336(1)	6643(1)	2493(2)	20(1)
C(9)	3634(1)	6687(1)	4121(2)	19(1)
C(10)	4541(1)	6543(1)	4608(1)	17(1)
C(11)	5514(1)	6056(1)	420(2)	26(1)
C(12)	2354(1)	6831(1)	1995(2)	29(1)
C(13)	4795(1)	6554(1)	6414(1)	24(1)
C(14)	7874(1)	5710(1)	6034(2)	18(1)
C(15)	7719(1)	5383(1)	8800(2)	26(1)
C(16)	8111(1)	4667(1)	3805(2)	18(1)
C(17)	9433(1)	3862(1)	4390(2)	29(1)
C(18)	8876(1)	6851(1)	1424(2)	23(1)
C(19)	9690(1)	6694(1)	428(2)	27(1)
C(20)	10218(1)	6036(1)	521(2)	31(1)

Table A3.1.3. Bond lengths [ $\approx$ ] and angles [ $\infty$ ] for **52**.

---

S(1)-C(1)	1.8457(13)
S(1)-C(4)	1.7750(12)
O(1)-C(14)	1.1975(14)
O(2)-C(14)	1.3343(15)
O(2)-C(15)	1.4511(15)
O(3)-C(16)	1.1997(14)
O(4)-C(16)	1.3320(15)
O(4)-C(17)	1.4486(16)
N(1)-C(4)	1.2587(17)
N(1)-C(18)	1.4571(16)
C(1)-H(1)	1.0000
C(1)-C(2)	1.5343(16)
C(1)-C(5)	1.5167(17)
C(2)-H(2A)	0.9900
C(2)-H(2B)	0.9900
C(2)-C(3)	1.5308(17)
C(3)-C(4)	1.5333(17)
C(3)-C(14)	1.5361(17)
C(3)-C(16)	1.5297(16)
C(5)-C(6)	1.4066(16)
C(5)-C(10)	1.4121(18)
C(6)-C(7)	1.3959(18)
C(6)-C(11)	1.5136(19)
C(7)-H(7)	0.9500
C(7)-C(8)	1.3812(19)
C(8)-C(9)	1.3904(17)
C(8)-C(12)	1.5075(18)
C(9)-H(9)	0.9500
C(9)-C(10)	1.3892(17)
C(10)-C(13)	1.5126(16)
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800

C(13)-H(13C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9900
C(18)-H(18B)	0.9900
C(18)-C(19)	1.489(2)
C(19)-H(19)	0.9500
C(19)-C(20)	1.313(2)
C(20)-H(20A)	0.9500
C(20)-H(20B)	0.9500

C(4)-S(1)-C(1)	93.31(6)
C(14)-O(2)-C(15)	114.91(10)
C(16)-O(4)-C(17)	116.24(10)
C(4)-N(1)-C(18)	118.20(11)
S(1)-C(1)-H(1)	106.7
C(2)-C(1)-S(1)	105.80(9)
C(2)-C(1)-H(1)	106.7
C(5)-C(1)-S(1)	114.20(8)
C(5)-C(1)-H(1)	106.7
C(5)-C(1)-C(2)	116.22(10)
C(1)-C(2)-H(2A)	110.5
C(1)-C(2)-H(2B)	110.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	108.7
C(3)-C(2)-C(1)	106.28(9)
C(3)-C(2)-H(2A)	110.5
C(3)-C(2)-H(2B)	110.5
C(2)-C(3)-C(4)	105.66(9)
C(2)-C(3)-C(14)	111.69(10)
C(4)-C(3)-C(14)	108.25(9)
C(16)-C(3)-C(2)	112.20(10)
C(16)-C(3)-C(4)	108.18(10)
C(16)-C(3)-C(14)	110.60(9)
N(1)-C(4)-S(1)	127.60(9)
N(1)-C(4)-C(3)	122.25(10)
C(3)-C(4)-S(1)	110.15(9)
C(6)-C(5)-C(1)	123.69(11)
C(6)-C(5)-C(10)	118.76(11)
C(10)-C(5)-C(1)	117.55(10)

C(5)-C(6)-C(11)	123.86(11)
C(7)-C(6)-C(5)	119.14(11)
C(7)-C(6)-C(11)	116.99(11)
C(6)-C(7)-H(7)	118.7
C(8)-C(7)-C(6)	122.59(11)
C(8)-C(7)-H(7)	118.7
C(7)-C(8)-C(9)	117.69(11)
C(7)-C(8)-C(12)	121.68(12)
C(9)-C(8)-C(12)	120.63(12)
C(8)-C(9)-H(9)	119.1
C(10)-C(9)-C(8)	121.88(11)
C(10)-C(9)-H(9)	119.1
C(5)-C(10)-C(13)	121.74(11)
C(9)-C(10)-C(5)	119.79(11)
C(9)-C(10)-C(13)	118.41(11)
C(6)-C(11)-H(11A)	109.5
C(6)-C(11)-H(11B)	109.5
C(6)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(8)-C(12)-H(12A)	109.5
C(8)-C(12)-H(12B)	109.5
C(8)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(10)-C(13)-H(13A)	109.5
C(10)-C(13)-H(13B)	109.5
C(10)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
O(1)-C(14)-O(2)	124.42(11)
O(1)-C(14)-C(3)	124.85(12)
O(2)-C(14)-C(3)	110.72(10)
O(2)-C(15)-H(15A)	109.5
O(2)-C(15)-H(15B)	109.5
O(2)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
O(3)-C(16)-O(4)	125.53(11)

O(3)-C(16)-C(3)	124.03(11)
O(4)-C(16)-C(3)	110.43(10)
O(4)-C(17)-H(17A)	109.5
O(4)-C(17)-H(17B)	109.5
O(4)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
N(1)-C(18)-H(18A)	109.0
N(1)-C(18)-H(18B)	109.0
N(1)-C(18)-C(19)	112.84(11)
H(18A)-C(18)-H(18B)	107.8
C(19)-C(18)-H(18A)	109.0
C(19)-C(18)-H(18B)	109.0
C(18)-C(19)-H(19)	117.1
C(20)-C(19)-C(18)	125.79(13)
C(20)-C(19)-H(19)	117.1
C(19)-C(20)-H(20A)	120.0
C(19)-C(20)-H(20B)	120.0
H(20A)-C(20)-H(20B)	120.0

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:



Table A3.1.4. Anisotropic displacement parameters ( $\approx 2 \times 10^4$ ) for **52**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2 [ h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
S(1)	146(1)	147(1)	372(2)	67(1)	-20(1)	19(1)
O(1)	275(6)	192(4)	326(5)	-16(4)	-66(4)	-65(4)
O(2)	204(5)	218(4)	232(4)	-6(3)	-28(3)	-45(3)
O(3)	261(5)	201(4)	313(5)	-57(4)	-71(4)	32(4)
O(4)	175(5)	176(4)	300(5)	-10(3)	-55(3)	60(3)
N(1)	170(5)	157(4)	275(5)	8(4)	-34(4)	-1(4)
C(1)	140(6)	152(5)	228(5)	21(4)	-52(4)	-1(4)
C(2)	142(6)	134(5)	259(6)	23(4)	-55(4)	-3(4)
C(3)	136(6)	125(5)	245(5)	10(4)	-47(4)	5(4)
C(4)	160(6)	127(5)	256(6)	6(4)	-50(5)	11(4)
C(5)	138(5)	139(5)	181(5)	20(4)	-28(4)	4(4)
C(6)	174(6)	184(5)	173(5)	13(4)	-19(4)	7(4)
C(7)	185(6)	211(6)	210(5)	35(4)	-70(5)	-12(5)
C(8)	145(6)	157(5)	286(6)	54(4)	-41(5)	-6(4)
C(9)	177(6)	168(5)	237(5)	19(4)	25(5)	20(4)
C(10)	192(6)	127(5)	180(5)	16(4)	-14(4)	13(4)
C(11)	258(7)	331(7)	186(5)	-2(5)	10(5)	35(6)
C(12)	152(6)	289(7)	436(8)	87(6)	-65(6)	12(5)
C(13)	311(8)	249(6)	171(5)	-12(5)	-13(5)	31(5)
C(14)	130(6)	132(5)	272(6)	0(4)	-39(4)	27(4)
C(15)	236(7)	302(7)	241(6)	-38(5)	-11(5)	-12(5)
C(16)	158(6)	137(5)	248(6)	31(4)	-22(5)	14(4)
C(17)	232(7)	237(7)	401(8)	-37(6)	-48(6)	116(5)
C(18)	207(7)	182(5)	301(6)	22(5)	-30(5)	-21(5)
C(19)	219(7)	292(7)	309(7)	32(5)	-34(5)	-87(5)
C(20)	211(7)	391(8)	323(7)	-5(6)	2(6)	-20(6)

Table A3.1.5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^3$ ) and isotropic displacement parameters ( $\approx^2 \times 10^3$ ) for **52**.

	x	y	z	U <sub>iso</sub>
H(1)	622	645	518	21
H(2A)	631	504	490	22
H(2B)	641	510	296	22
H(7)	377	636	25	24
H(9)	320	682	492	23
H(11A)	516	576	-44	39
H(11B)	601	570	84	39
H(11C)	578	656	-2	39
H(12A)	227	677	81	44
H(12B)	221	740	230	44
H(12C)	195	645	255	44
H(13A)	424	663	704	37
H(13B)	522	701	665	37
H(13C)	509	603	672	37
H(15A)	839	538	896	39
H(15B)	745	496	949	39
H(15C)	748	593	910	39
H(17A)	907	335	441	44
H(17B)	994	382	520	44
H(17C)	968	394	330	44
H(18A)	899	735	211	28
H(18B)	834	697	68	28
H(19)	984	711	-34	33
H(20A)	1009	561	128	37
H(20B)	1072	599	-17	37

## A3.2 CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS FOR COMPOUND (R)-60•HBr

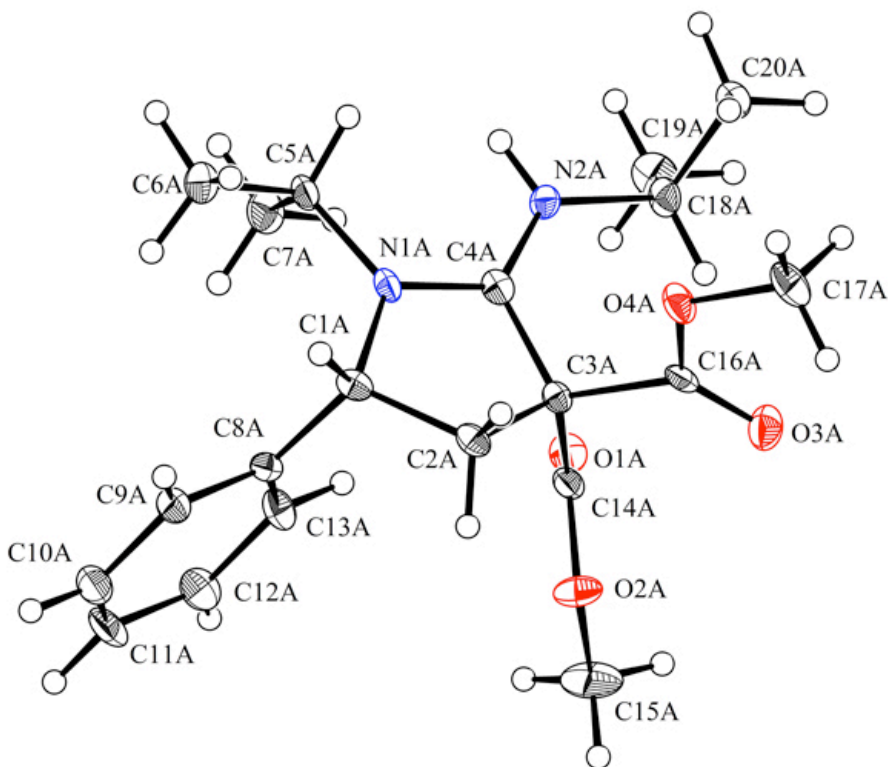


Table A3.2.1. Crystal data and structure analysis details for (R)-60•HBr.

Empirical formula	C <sub>20</sub> H <sub>31</sub> Br N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
Formula weight	459.38
Crystallization solvent	diethyl ether / dichloromethane
Crystal shape	prism
Crystal color	colourless
Crystal size	0.17 x 0.18 x 0.47 mm

**Data Collection**

Preliminary photograph(s)	rotation
Type of diffractometer	Bruker KAPPA APEX II
Wavelength	0.71073 $\approx$ MO K

Data collection temperature	100.15 K	
Theta range for 9397 reflections used in lattice determination	2.620 to 31.334 $^{\circ}$	
Unit cell dimensions	a = 8.0748(6) $\approx$ b = 15.1323(12) $\approx$ c = 29.190(2) $\approx$	$\alpha$ = 98.815(5) $^{\circ}$ $\beta$ = 92.189(5) $^{\circ}$ $\gamma$ = 105.250(4) $^{\circ}$
Volume	3388.9(5) $\approx^3$	
Z	6	
Crystal system	triclinic	
Space group	P 1 (# 1)	
Density (calculated)	1.351 g/cm $^3$	
F(000)	1440	
Theta range for data collection	1.7 to 35.3 $^{\circ}$	
Completeness to theta = 25.00 $^{\circ}$	99.7%	
Index ranges	-12 $\leq$ h $\leq$ 12, -24 $\leq$ k $\leq$ 24, -46 $\leq$ l $\leq$ 45	
Data collection scan type	narrow and scans	
Reflections collected	161414	
Independent reflections	54469 [R $_{int}$ = 0.0430]	
Reflections > 2 $\sigma$ (I)	44420	
Average $\sigma$ (I)/(net I)	0.0781	
Absorption coefficient	1.85 mm $^{-1}$	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1.0000 and 0.8047	
Reflections monitored for decay	0	
Decay of standards	0%	

### Structure Solution and Refinement

Primary solution method	direct
Secondary solution method	difmap
Hydrogen placement	geom
Refinement method	Full-matrix least-squares on F $^2$
Data / restraints / parameters	54469 / 21 / 1585
Treatment of hydrogen atoms	mixed
Goodness-of-fit on F $^2$	1.65
Final R indices [I > 2 $\sigma$ (I), 44420 reflections]	R1 = 0.0568, wR2 = 0.1138
R indices (all data)	R1 = 0.0743, wR2 = 0.1159
Type of weighting scheme used	calc
Weighting scheme used	calc w=1/[ $^2$ (Fo $^2$ ) + (0.0000P) $^2$ + 0.0000P] where

$$P=(F_o^2+2F_c^2)/3$$

Max shift/error	0.001
Average shift/error	0.000
Absolute structure parameter	0.029(3)
Largest diff. peak and hole	3.05 and -1.34 e $\Sigma$ $\approx$ <sup>3</sup>

### Programs Used

Cell refinement	SAINT V8.18C (Bruker-AXS, 2007)
Data collection	APEX2_2011.2-3 (Bruker-AXS, 2007)
Data reduction	SAINT V8.18C (Bruker-AXS, 2007)
Structure solution	SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)
Structure refinement	
Graphics	

Table A3.2.2. Atomic coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\approx^2 \times 10^3$ ) for (R)-**60**•HBr.  $U_{eq}$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

	x	y	z	$U_{eq}$
O(1A)	5205(3)	3297(1)	8553(1)	18(1)
O(2A)	8042(3)	3464(1)	8523(1)	23(1)
O(3A)	7013(3)	1830(2)	9013(1)	23(1)
O(4A)	6394(3)	573(1)	8452(1)	19(1)
N(1A)	4511(3)	1542(2)	7520(1)	13(1)
N(2A)	2967(3)	1288(2)	8164(1)	14(1)
C(1A)	6285(4)	1836(2)	7379(1)	14(1)
C(2A)	7391(4)	1877(2)	7827(1)	14(1)
C(3A)	6203(4)	1976(2)	8227(1)	12(1)
C(4A)	4428(4)	1573(2)	7975(1)	14(1)
C(5A)	2951(4)	1256(2)	7188(1)	16(1)
C(6A)	3358(5)	925(2)	6694(1)	24(1)
C(7A)	2076(4)	2039(2)	7207(1)	23(1)
C(8A)	6672(4)	2728(2)	7175(1)	15(1)
C(9A)	7542(4)	2761(2)	6775(1)	18(1)
C(10A)	8003(4)	3575(2)	6590(1)	21(1)
C(11A)	7600(4)	4364(2)	6807(1)	23(1)
C(12A)	6731(4)	4340(2)	7206(1)	22(1)
C(13A)	6259(4)	3527(2)	7390(1)	18(1)
C(14A)	6408(4)	2992(2)	8455(1)	14(1)
C(15A)	8393(5)	4430(2)	8746(1)	34(1)

C(16A)	6583(4)	1461(2)	8621(1)	14(1)
C(17A)	6827(5)	27(2)	8784(1)	25(1)
C(18A)	2705(4)	1332(2)	8666(1)	18(1)
C(19A)	1333(5)	1853(2)	8773(1)	26(1)
C(20A)	2143(4)	350(2)	8781(1)	23(1)
O(1B)	2761(3)	3136(1)	5141(1)	17(1)
O(2B)	5580(3)	3478(1)	5045(1)	21(1)
O(3B)	5020(3)	2039(1)	5691(1)	20(1)
O(4B)	4388(3)	642(1)	5224(1)	15(1)
N(1B)	2497(3)	1144(2)	4168(1)	13(1)
N(2B)	861(3)	1029(2)	4810(1)	13(1)
C(1B)	4227(4)	1579(2)	4036(1)	12(1)
C(2B)	5323(4)	1771(2)	4507(1)	14(1)
C(3B)	4061(4)	1890(2)	4879(1)	11(1)
C(4B)	2345(4)	1315(2)	4624(1)	10(1)
C(5B)	1134(4)	495(2)	3828(1)	16(1)
C(6B)	1108(6)	-489(2)	3872(1)	34(1)
C(7B)	1377(5)	664(2)	3331(1)	25(1)
C(8B)	4279(4)	2426(2)	3819(1)	16(1)
C(9B)	5329(4)	2597(2)	3455(1)	20(1)
C(10B)	5427(5)	3384(2)	3252(1)	27(1)
C(11B)	4507(5)	4012(2)	3411(1)	27(1)
C(12B)	3444(5)	3838(2)	3769(1)	29(1)
C(13B)	3321(4)	3048(2)	3970(1)	21(1)
C(14B)	4016(4)	2910(2)	5039(1)	14(1)
C(15B)	5731(5)	4454(2)	5218(1)	35(1)
C(16B)	4545(4)	1538(2)	5321(1)	11(1)
C(17B)	4834(4)	217(2)	5610(1)	19(1)
C(18B)	562(4)	1128(2)	5308(1)	16(1)
C(19B)	-769(4)	1662(2)	5395(1)	24(1)
C(20B)	24(5)	159(2)	5438(1)	23(1)
O(1C)	7414(3)	3248(1)	1843(1)	18(1)
O(2C)	10170(3)	3462(1)	1676(1)	20(1)
O(3C)	9486(3)	1908(1)	2270(1)	18(1)
O(4C)	8375(3)	559(1)	1779(1)	17(1)
N(1C)	6577(3)	1420(2)	803(1)	12(1)
N(2C)	5107(3)	1248(2)	1469(1)	14(1)
C(1C)	8322(4)	1713(2)	645(1)	14(1)
C(2C)	9463(4)	1764(2)	1090(1)	14(1)
C(3C)	8351(4)	1926(2)	1498(1)	12(1)
C(4C)	6541(4)	1503(2)	1260(1)	12(1)
C(5C)	4995(4)	1095(2)	474(1)	16(1)
C(6C)	5401(5)	735(2)	-8(1)	25(1)
C(7C)	4090(4)	1873(2)	480(1)	23(1)
C(8C)	8674(4)	2610(2)	448(1)	14(1)
C(9C)	9607(4)	2662(2)	57(1)	17(1)
C(10C)	10051(4)	3492(2)	-124(1)	22(1)
C(11C)	9592(4)	4260(2)	85(1)	21(1)
C(12C)	8658(4)	4211(2)	475(1)	19(1)
C(13C)	8190(4)	3389(2)	650(1)	17(1)
C(14C)	8566(4)	2959(2)	1696(1)	15(1)
C(15C)	10528(5)	4459(2)	1838(1)	28(1)
C(16C)	8817(4)	1481(2)	1902(1)	13(1)
C(17C)	8809(5)	56(2)	2138(1)	24(1)

C(18C)	4905(4)	1339(2)	1975(1)	15(1)
C(19C)	3653(5)	1915(2)	2094(1)	24(1)
C(20C)	4316(4)	374(2)	2103(1)	20(1)
O(1D)	1240(3)	5108(1)	6240(1)	20(1)
O(2D)	3700(3)	4743(1)	6402(1)	20(1)
O(3D)	4660(3)	6149(1)	5724(1)	18(1)
O(4D)	5282(3)	7583(1)	6158(1)	16(1)
N(1D)	3160(3)	7177(2)	7194(1)	15(1)
N(2D)	1547(3)	7222(2)	6524(1)	14(1)
C(1D)	4426(4)	6735(2)	7354(1)	16(1)
C(2D)	5261(4)	6488(2)	6909(1)	15(1)
C(3D)	3823(4)	6343(2)	6516(1)	13(1)
C(4D)	2718(4)	6949(2)	6737(1)	12(1)
C(5D)	2529(5)	7876(2)	7495(1)	21(1)
C(6D)	3492(7)	8846(2)	7419(1)	44(1)
C(7D)	2737(6)	7782(3)	8001(1)	40(1)
C(8D)	3631(4)	5924(2)	7600(1)	16(1)
C(9D)	4577(4)	5780(2)	7978(1)	19(1)
C(10D)	3931(5)	5037(2)	8204(1)	24(1)
C(11D)	2319(5)	4419(2)	8048(1)	24(1)
C(12D)	1365(4)	4564(2)	7676(1)	24(1)
C(13D)	2023(4)	5321(2)	7453(1)	19(1)
C(14D)	2742(4)	5328(2)	6366(1)	14(1)
C(15D)	2805(5)	3759(2)	6283(1)	26(1)
C(16D)	4603(4)	6663(2)	6069(1)	18(1)
C(17D)	6055(4)	7985(2)	5766(1)	20(1)
C(18D)	1059(4)	7056(2)	6019(1)	16(1)
C(19D)	-850(4)	6519(2)	5928(1)	22(1)
C(20D)	1460(5)	7990(2)	5849(1)	23(1)
O(1E)	8189(3)	5002(1)	2884(1)	17(1)
O(2E)	10789(3)	4812(1)	3084(1)	20(1)
O(3E)	11510(3)	6349(1)	2459(1)	19(1)
O(4E)	11784(3)	7706(1)	2936(1)	16(1)
N(1E)	9306(3)	6863(2)	3901(1)	14(1)
N(2E)	7912(3)	7004(2)	3214(1)	13(1)
C(1E)	10840(4)	6612(2)	4078(1)	15(1)
C(2E)	11850(4)	6544(2)	3643(1)	16(1)
C(3E)	10485(4)	6346(2)	3224(1)	13(1)
C(4E)	9125(4)	6767(2)	3441(1)	12(1)
C(5E)	8093(4)	7202(2)	4207(1)	17(1)
C(6E)	8924(5)	7597(2)	4695(1)	24(1)
C(7E)	6434(4)	6429(2)	4205(1)	25(1)
C(8E)	10401(4)	5743(2)	4298(1)	14(1)
C(9E)	11448(4)	5716(2)	4684(1)	18(1)
C(10E)	11196(5)	4923(2)	4890(1)	24(1)
C(11E)	9887(4)	4130(2)	4696(1)	25(1)
C(12E)	8829(4)	4150(2)	4313(1)	22(1)
C(13E)	9087(4)	4951(2)	4113(1)	20(1)
C(14E)	9677(4)	5308(2)	3044(1)	13(1)
C(15E)	10098(5)	3806(2)	2945(1)	28(1)
C(16E)	11305(4)	6788(2)	2820(1)	13(1)
C(17E)	12685(5)	8211(2)	2588(1)	22(1)
C(18E)	7528(4)	6881(2)	2704(1)	14(1)
C(19E)	5668(4)	6298(2)	2585(1)	19(1)

C(20E)	7882(4)	7829(2)	2556(1)	20(1)
O(1F)	3235(3)	5134(1)	-412(1)	19(1)
O(2F)	5671(3)	4755(1)	-225(1)	18(1)
O(3F)	6672(3)	6143(1)	-899(1)	18(1)
O(4F)	7152(3)	7587(1)	-500(1)	16(1)
N(1F)	5150(3)	7135(2)	573(1)	13(1)
N(2F)	3519(3)	7236(2)	-81(1)	12(1)
C(1F)	6479(4)	6698(2)	719(1)	14(1)
C(2F)	7291(4)	6503(2)	261(1)	14(1)
C(3F)	5819(4)	6356(2)	-119(1)	12(1)
C(4F)	4727(4)	6948(2)	117(1)	12(1)
C(5F)	4508(5)	7803(2)	905(1)	21(1)
C(6F)	5459(6)	8792(2)	852(1)	36(1)
C(7F)	4692(5)	7654(2)	1401(1)	27(1)
C(8F)	5722(4)	5850(2)	939(1)	16(1)
C(9F)	6733(5)	5676(2)	1296(1)	21(1)
C(10F)	6146(5)	4885(2)	1498(1)	26(1)
C(11F)	4527(5)	4264(2)	1334(1)	32(1)
C(12F)	3517(5)	4448(2)	988(1)	30(1)
C(13F)	4112(4)	5250(2)	793(1)	22(1)
C(14F)	4735(4)	5344(2)	-269(1)	14(1)
C(15F)	4757(5)	3776(2)	-342(1)	23(1)
C(16F)	6572(4)	6673(2)	-552(1)	11(1)
C(17F)	7860(4)	7967(2)	-903(1)	20(1)
C(18F)	3033(4)	7127(2)	-582(1)	15(1)
C(19F)	1129(4)	6619(2)	-683(1)	21(1)
C(20F)	3407(5)	8094(2)	-714(1)	23(1)
Br(1A)	8079(1)	123(1)	6649(1)	21(1)
Br(1B)	6474(1)	134(1)	3290(1)	18(1)
Br(1C)	137(1)	-30(1)	-14(1)	21(1)
Br(1D)	8418(1)	8234(1)	7949(1)	23(1)
Br(1E)	4521(1)	8396(1)	4618(1)	20(1)
Br(1F)	358(1)	8210(1)	1391(1)	21(1)
O(5A)	9657(3)	349(1)	7734(1)	19(1)
O(5B)	7574(3)	112(2)	4381(1)	21(1)
O(5C)	1767(3)	255(2)	1077(1)	20(1)
O(5D)	9265(3)	8257(2)	6859(1)	25(1)
O(5E)	5655(3)	8046(1)	3544(1)	18(1)
O(5F)	1187(3)	8178(2)	296(1)	24(1)

---



Table A3.2.3. Bond lengths [ $\approx$ ] and angles [ $\infty$ ] for (R)-**60**•HBr.

---

O(1A)-C(14A)	1.207(4)
O(2A)-C(14A)	1.316(4)
O(2A)-C(15A)	1.456(3)
O(3A)-C(16A)	1.189(3)
O(4A)-C(16A)	1.326(3)
O(4A)-C(17A)	1.454(4)
N(1A)-C(1A)	1.479(4)
N(1A)-C(4A)	1.327(3)
N(1A)-C(5A)	1.483(4)
N(2A)-H(2A)	0.8800
N(2A)-C(4A)	1.319(4)
N(2A)-C(18A)	1.482(4)
C(1A)-H(1A)	1.0000
C(1A)-C(2A)	1.539(4)
C(1A)-C(8A)	1.521(4)
C(2A)-H(2AA)	0.9900
C(2A)-H(2AB)	0.9900
C(2A)-C(3A)	1.555(4)
C(3A)-C(4A)	1.513(4)
C(3A)-C(14A)	1.541(4)
C(3A)-C(16A)	1.548(4)
C(5A)-H(5A)	1.0000
C(5A)-C(6A)	1.531(4)
C(5A)-C(7A)	1.527(4)
C(6A)-H(6AA)	0.9800
C(6A)-H(6AB)	0.9800
C(6A)-H(6AC)	0.9800
C(7A)-H(7AA)	0.9800
C(7A)-H(7AB)	0.9800
C(7A)-H(7AC)	0.9800
C(8A)-C(9A)	1.386(4)
C(8A)-C(13A)	1.401(4)
C(9A)-H(9A)	0.9500
C(9A)-C(10A)	1.388(4)
C(10A)-H(10A)	0.9500
C(10A)-C(11A)	1.386(5)
C(11A)-H(11A)	0.9500
C(11A)-C(12A)	1.382(4)
C(12A)-H(12A)	0.9500
C(12A)-C(13A)	1.385(4)
C(13A)-H(13A)	0.9500
C(15A)-H(15G)	0.9800
C(15A)-H(15H)	0.9800
C(15A)-H(15I)	0.9800
C(17A)-H(17G)	0.9800
C(17A)-H(17H)	0.9800
C(17A)-H(17I)	0.9800
C(18A)-H(18A)	1.0000
C(18A)-C(19A)	1.535(5)
C(18A)-C(20A)	1.529(4)

C(19A)-H(19G)	0.9800
C(19A)-H(19H)	0.9800
C(19A)-H(19I)	0.9800
C(20A)-H(20G)	0.9800
C(20A)-H(20H)	0.9800
C(20A)-H(20I)	0.9800
O(1B)-C(14B)	1.186(4)
O(2B)-C(14B)	1.325(3)
O(2B)-C(15B)	1.456(4)
O(3B)-C(16B)	1.204(3)
O(4B)-C(16B)	1.314(3)
O(4B)-C(17B)	1.458(3)
N(1B)-C(1B)	1.473(4)
N(1B)-C(4B)	1.332(3)
N(1B)-C(5B)	1.485(3)
N(2B)-H(2B)	0.8800
N(2B)-C(4B)	1.330(4)
N(2B)-C(18B)	1.473(3)
C(1B)-H(1B)	1.0000
C(1B)-C(2B)	1.552(4)
C(1B)-C(8B)	1.505(4)
C(2B)-H(2BA)	0.9900
C(2B)-H(2BB)	0.9900
C(2B)-C(3B)	1.540(4)
C(3B)-C(4B)	1.524(4)
C(3B)-C(14B)	1.552(4)
C(3B)-C(16B)	1.544(4)
C(5B)-H(5B)	1.0000
C(5B)-C(6B)	1.509(5)
C(5B)-C(7B)	1.523(4)
C(6B)-H(6BA)	0.9800
C(6B)-H(6BB)	0.9800
C(6B)-H(6BC)	0.9800
C(7B)-H(7BA)	0.9800
C(7B)-H(7BB)	0.9800
C(7B)-H(7BC)	0.9800
C(8B)-C(9B)	1.398(4)
C(8B)-C(13B)	1.401(4)
C(9B)-H(9B)	0.9500
C(9B)-C(10B)	1.395(4)
C(10B)-H(10B)	0.9500
C(10B)-C(11B)	1.391(5)
C(11B)-H(11B)	0.9500
C(11B)-C(12B)	1.391(5)
C(12B)-H(12B)	0.9500
C(12B)-C(13B)	1.393(4)
C(13B)-H(13B)	0.9500
C(15B)-H(15D)	0.9800
C(15B)-H(15E)	0.9800
C(15B)-H(15F)	0.9800
C(17B)-H(17D)	0.9800
C(17B)-H(17E)	0.9800
C(17B)-H(17F)	0.9800
C(18B)-H(18B)	1.0000

C(18B)-C(19B)	1.513(5)
C(18B)-C(20B)	1.527(4)
C(19B)-H(19D)	0.9800
C(19B)-H(19E)	0.9800
C(19B)-H(19F)	0.9800
C(20B)-H(20D)	0.9800
C(20B)-H(20E)	0.9800
C(20B)-H(20F)	0.9800
O(1C)-C(14C)	1.194(4)
O(2C)-C(14C)	1.327(4)
O(2C)-C(15C)	1.457(3)
O(3C)-C(16C)	1.192(3)
O(4C)-C(16C)	1.334(3)
O(4C)-C(17C)	1.470(4)
N(1C)-C(1C)	1.476(4)
N(1C)-C(4C)	1.322(3)
N(1C)-C(5C)	1.492(4)
N(2C)-H(2C)	0.8800
N(2C)-C(4C)	1.324(4)
N(2C)-C(18C)	1.481(3)
C(1C)-H(1C)	1.0000
C(1C)-C(2C)	1.544(4)
C(1C)-C(8C)	1.517(4)
C(2C)-H(2CA)	0.9900
C(2C)-H(2CB)	0.9900
C(2C)-C(3C)	1.546(4)
C(3C)-C(4C)	1.524(4)
C(3C)-C(14C)	1.544(4)
C(3C)-C(16C)	1.525(4)
C(5C)-H(5C)	1.0000
C(5C)-C(6C)	1.510(4)
C(5C)-C(7C)	1.539(4)
C(6C)-H(6CA)	0.9800
C(6C)-H(6CB)	0.9800
C(6C)-H(6CC)	0.9800
C(7C)-H(7CA)	0.9800
C(7C)-H(7CB)	0.9800
C(7C)-H(7CC)	0.9800
C(8C)-C(9C)	1.392(4)
C(8C)-C(13C)	1.391(4)
C(9C)-H(9C)	0.9500
C(9C)-C(10C)	1.403(4)
C(10C)-H(10C)	0.9500
C(10C)-C(11C)	1.373(5)
C(11C)-H(11C)	0.9500
C(11C)-C(12C)	1.390(4)
C(12C)-H(12C)	0.9500
C(12C)-C(13C)	1.383(4)
C(13C)-H(13C)	0.9500
C(15C)-H(15A)	0.9800
C(15C)-H(15B)	0.9800
C(15C)-H(15C)	0.9800
C(17C)-H(17A)	0.9800
C(17C)-H(17B)	0.9800

C(17C)-H(17C)	0.9800
C(18C)-H(18C)	1.0000
C(18C)-C(19C)	1.516(5)
C(18C)-C(20C)	1.522(4)
C(19C)-H(19A)	0.9800
C(19C)-H(19B)	0.9800
C(19C)-H(19C)	0.9800
C(20C)-H(20A)	0.9800
C(20C)-H(20B)	0.9800
C(20C)-H(20C)	0.9800
O(1D)-C(14D)	1.197(4)
O(2D)-C(14D)	1.333(4)
O(2D)-C(15D)	1.454(3)
O(3D)-C(16D)	1.184(4)
O(4D)-C(16D)	1.335(3)
O(4D)-C(17D)	1.462(3)
N(1D)-C(1D)	1.460(4)
N(1D)-C(4D)	1.335(3)
N(1D)-C(5D)	1.478(4)
N(2D)-H(2D)	0.8800
N(2D)-C(4D)	1.300(4)
N(2D)-C(18D)	1.477(4)
C(1D)-H(1D)	1.0000
C(1D)-C(2D)	1.529(4)
C(1D)-C(8D)	1.525(4)
C(2D)-H(2DA)	0.9900
C(2D)-H(2DB)	0.9900
C(2D)-C(3D)	1.549(4)
C(3D)-C(4D)	1.531(4)
C(3D)-C(14D)	1.541(4)
C(3D)-C(16D)	1.559(4)
C(5D)-H(5D)	1.0000
C(5D)-C(6D)	1.523(5)
C(5D)-C(7D)	1.514(4)
C(6D)-H(6DA)	0.9800
C(6D)-H(6DB)	0.9800
C(6D)-H(6DC)	0.9800
C(7D)-H(7DA)	0.9800
C(7D)-H(7DB)	0.9800
C(7D)-H(7DC)	0.9800
C(8D)-C(9D)	1.394(4)
C(8D)-C(13D)	1.384(4)
C(9D)-H(9D)	0.9500
C(9D)-C(10D)	1.385(4)
C(10D)-H(10D)	0.9500
C(10D)-C(11D)	1.400(5)
C(11D)-H(11D)	0.9500
C(11D)-C(12D)	1.384(5)
C(12D)-H(12D)	0.9500
C(12D)-C(13D)	1.397(4)
C(13D)-H(13D)	0.9500
C(15D)-H(15P)	0.9800
C(15D)-H(15Q)	0.9800
C(15D)-H(15R)	0.9800

C(17D)-H(17P)	0.9800
C(17D)-H(17Q)	0.9800
C(17D)-H(17R)	0.9800
C(18D)-H(18D)	1.0000
C(18D)-C(19D)	1.533(4)
C(18D)-C(20D)	1.527(4)
C(19D)-H(19P)	0.9800
C(19D)-H(19Q)	0.9800
C(19D)-H(19R)	0.9800
C(20D)-H(20P)	0.9800
C(20D)-H(20Q)	0.9800
C(20D)-H(20R)	0.9800
O(1E)-C(14E)	1.215(4)
O(2E)-C(14E)	1.325(4)
O(2E)-C(15E)	1.462(3)
O(3E)-C(16E)	1.200(3)
O(4E)-C(16E)	1.325(3)
O(4E)-C(17E)	1.465(3)
N(1E)-C(1E)	1.485(4)
N(1E)-C(4E)	1.327(3)
N(1E)-C(5E)	1.486(4)
N(2E)-H(2E)	0.8800
N(2E)-C(4E)	1.317(4)
N(2E)-C(18E)	1.481(4)
C(1E)-H(1E)	1.0000
C(1E)-C(2E)	1.541(4)
C(1E)-C(8E)	1.515(4)
C(2E)-H(2EA)	0.9900
C(2E)-H(2EB)	0.9900
C(2E)-C(3E)	1.553(4)
C(3E)-C(4E)	1.520(4)
C(3E)-C(14E)	1.533(4)
C(3E)-C(16E)	1.532(4)
C(5E)-H(5E)	1.0000
C(5E)-C(6E)	1.514(4)
C(5E)-C(7E)	1.528(4)
C(6E)-H(6EA)	0.9800
C(6E)-H(6EB)	0.9800
C(6E)-H(6EC)	0.9800
C(7E)-H(7EA)	0.9800
C(7E)-H(7EB)	0.9800
C(7E)-H(7EC)	0.9800
C(8E)-C(9E)	1.394(4)
C(8E)-C(13E)	1.394(4)
C(9E)-H(9E)	0.9500
C(9E)-C(10E)	1.396(4)
C(10E)-H(10E)	0.9500
C(10E)-C(11E)	1.398(5)
C(11E)-H(11E)	0.9500
C(11E)-C(12E)	1.390(5)
C(12E)-H(12E)	0.9500
C(12E)-C(13E)	1.396(4)
C(13E)-H(13E)	0.9500
C(15E)-H(15M)	0.9800

C(15E)-H(15N)	0.9800
C(15E)-H(15O)	0.9800
C(17E)-H(17M)	0.9800
C(17E)-H(17N)	0.9800
C(17E)-H(17O)	0.9800
C(18E)-H(18E)	1.0000
C(18E)-C(19E)	1.525(4)
C(18E)-C(20E)	1.520(4)
C(19E)-H(19M)	0.9800
C(19E)-H(19N)	0.9800
C(19E)-H(19O)	0.9800
C(20E)-H(20M)	0.9800
C(20E)-H(20N)	0.9800
C(20E)-H(20O)	0.9800
O(1F)-C(14F)	1.209(4)
O(2F)-C(14F)	1.328(4)
O(2F)-C(15F)	1.451(3)
O(3F)-C(16F)	1.212(3)
O(4F)-C(16F)	1.321(3)
O(4F)-C(17F)	1.459(3)
N(1F)-C(1F)	1.481(4)
N(1F)-C(4F)	1.329(3)
N(1F)-C(5F)	1.497(4)
N(2F)-H(2F)	0.8800
N(2F)-C(4F)	1.316(4)
N(2F)-C(18F)	1.473(3)
C(1F)-H(1F)	1.0000
C(1F)-C(2F)	1.533(4)
C(1F)-C(8F)	1.517(4)
C(2F)-H(2FA)	0.9900
C(2F)-H(2FB)	0.9900
C(2F)-C(3F)	1.542(4)
C(3F)-C(4F)	1.526(4)
C(3F)-C(14F)	1.537(4)
C(3F)-C(16F)	1.513(4)
C(5F)-H(5F)	1.0000
C(5F)-C(6F)	1.526(5)
C(5F)-C(7F)	1.506(4)
C(6F)-H(6FA)	0.9800
C(6F)-H(6FB)	0.9800
C(6F)-H(6FC)	0.9800
C(7F)-H(7FA)	0.9800
C(7F)-H(7FB)	0.9800
C(7F)-H(7FC)	0.9800
C(8F)-C(9F)	1.398(4)
C(8F)-C(13F)	1.383(4)
C(9F)-H(9F)	0.9500
C(9F)-C(10F)	1.394(4)
C(10F)-H(10F)	0.9500
C(10F)-C(11F)	1.410(5)
C(11F)-H(11F)	0.9500
C(11F)-C(12F)	1.381(6)
C(12F)-H(12F)	0.9500
C(12F)-C(13F)	1.397(4)

C(13F)-H(13F)	0.9500
C(15F)-H(15J)	0.9800
C(15F)-H(15K)	0.9800
C(15F)-H(15L)	0.9800
C(17F)-H(17J)	0.9800
C(17F)-H(17K)	0.9800
C(17F)-H(17L)	0.9800
C(18F)-H(18F)	1.0000
C(18F)-C(19F)	1.521(4)
C(18F)-C(20F)	1.527(4)
C(19F)-H(19J)	0.9800
C(19F)-H(19K)	0.9800
C(19F)-H(19L)	0.9800
C(20F)-H(20J)	0.9800
C(20F)-H(20K)	0.9800
C(20F)-H(20L)	0.9800
O(5A)-H(5AA)	0.846(17)
O(5A)-H(5AB)	0.830(17)
O(5B)-H(5BA)	0.863(17)
O(5B)-H(5BB)	0.845(17)
O(5C)-H(5CA)	0.882(17)
O(5C)-H(5CB)	0.850(17)
O(5D)-H(5DA)	0.874(18)
O(5D)-H(5DB)	0.895(17)
O(5E)-H(5EA)	0.857(17)
O(5E)-H(5EB)	0.891(17)
O(5F)-H(5FA)	0.866(19)
O(5F)-H(5FB)	0.896(18)

C(14A)-O(2A)-C(15A)	115.9(3)
C(16A)-O(4A)-C(17A)	115.2(2)
C(1A)-N(1A)-C(5A)	123.7(2)
C(4A)-N(1A)-C(1A)	113.8(2)
C(4A)-N(1A)-C(5A)	122.5(2)
C(4A)-N(2A)-H(2A)	116.3
C(4A)-N(2A)-C(18A)	127.4(3)
C(18A)-N(2A)-H(2A)	116.3
N(1A)-C(1A)-H(1A)	108.2
N(1A)-C(1A)-C(2A)	102.6(2)
N(1A)-C(1A)-C(8A)	113.9(2)
C(2A)-C(1A)-H(1A)	108.2
C(8A)-C(1A)-H(1A)	108.2
C(8A)-C(1A)-C(2A)	115.3(2)
C(1A)-C(2A)-H(2AA)	110.7
C(1A)-C(2A)-H(2AB)	110.7
C(1A)-C(2A)-C(3A)	105.2(2)
H(2AA)-C(2A)-H(2AB)	108.8
C(3A)-C(2A)-H(2AA)	110.7
C(3A)-C(2A)-H(2AB)	110.7
C(4A)-C(3A)-C(2A)	101.9(2)
C(4A)-C(3A)-C(14A)	109.6(2)
C(4A)-C(3A)-C(16A)	114.3(2)
C(14A)-C(3A)-C(2A)	113.6(2)
C(14A)-C(3A)-C(16A)	106.5(2)

C(16A)-C(3A)-C(2A)	111.1(2)
N(1A)-C(4A)-C(3A)	110.6(2)
N(2A)-C(4A)-N(1A)	122.7(3)
N(2A)-C(4A)-C(3A)	126.8(2)
N(1A)-C(5A)-H(5A)	107.5
N(1A)-C(5A)-C(6A)	111.8(3)
N(1A)-C(5A)-C(7A)	110.5(2)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	107.5
C(7A)-C(5A)-H(5A)	107.5
C(7A)-C(5A)-C(6A)	111.9(3)
C(5A)-C(6A)-H(6AA)	109.5
C(5A)-C(6A)-H(6AB)	109.5
C(5A)-C(6A)-H(6AC)	109.5
H(6AA)-C(6A)-H(6AB)	109.5
H(6AA)-C(6A)-H(6AC)	109.5
H(6AB)-C(6A)-H(6AC)	109.5
C(5A)-C(7A)-H(7AA)	109.5
C(5A)-C(7A)-H(7AB)	109.5
C(5A)-C(7A)-H(7AC)	109.5
H(7AA)-C(7A)-H(7AB)	109.5
H(7AA)-C(7A)-H(7AC)	109.5
H(7AB)-C(7A)-H(7AC)	109.5
C(9A)-C(8A)-C(1A)	118.4(3)
C(9A)-C(8A)-C(13A)	119.2(3)
C(13A)-C(8A)-C(1A)	122.3(3)
C(8A)-C(9A)-H(9A)	119.8
C(8A)-C(9A)-C(10A)	120.4(3)
C(10A)-C(9A)-H(9A)	119.8
C(9A)-C(10A)-H(10A)	120.0
C(11A)-C(10A)-C(9A)	120.0(3)
C(11A)-C(10A)-H(10A)	120.0
C(10A)-C(11A)-H(11A)	119.9
C(12A)-C(11A)-C(10A)	120.1(3)
C(12A)-C(11A)-H(11A)	119.9
C(11A)-C(12A)-H(12A)	119.9
C(11A)-C(12A)-C(13A)	120.1(3)
C(13A)-C(12A)-H(12A)	119.9
C(8A)-C(13A)-H(13A)	119.9
C(12A)-C(13A)-C(8A)	120.1(3)
C(12A)-C(13A)-H(13A)	119.9
O(1A)-C(14A)-O(2A)	125.7(3)
O(1A)-C(14A)-C(3A)	123.3(3)
O(2A)-C(14A)-C(3A)	111.1(2)
O(2A)-C(15A)-H(15G)	109.5
O(2A)-C(15A)-H(15H)	109.5
O(2A)-C(15A)-H(15I)	109.5
H(15G)-C(15A)-H(15H)	109.5
H(15G)-C(15A)-H(15I)	109.5
H(15H)-C(15A)-H(15I)	109.5
O(3A)-C(16A)-O(4A)	126.2(3)
O(3A)-C(16A)-C(3A)	123.8(2)
O(4A)-C(16A)-C(3A)	110.0(2)
O(4A)-C(17A)-H(17G)	109.5
O(4A)-C(17A)-H(17H)	109.5



O(4A)-C(17A)-H(17I)	109.5
H(17G)-C(17A)-H(17H)	109.5
H(17G)-C(17A)-H(17I)	109.5
H(17H)-C(17A)-H(17I)	109.5
N(2A)-C(18A)-H(18A)	109.3
N(2A)-C(18A)-C(19A)	107.7(3)
N(2A)-C(18A)-C(20A)	109.9(2)
C(19A)-C(18A)-H(18A)	109.3
C(20A)-C(18A)-H(18A)	109.3
C(20A)-C(18A)-C(19A)	111.3(3)
C(18A)-C(19A)-H(19G)	109.5
C(18A)-C(19A)-H(19H)	109.5
C(18A)-C(19A)-H(19I)	109.5
H(19G)-C(19A)-H(19H)	109.5
H(19G)-C(19A)-H(19I)	109.5
H(19H)-C(19A)-H(19I)	109.5
C(18A)-C(20A)-H(20G)	109.5
C(18A)-C(20A)-H(20H)	109.5
C(18A)-C(20A)-H(20I)	109.5
H(20G)-C(20A)-H(20H)	109.5
H(20G)-C(20A)-H(20I)	109.5
H(20H)-C(20A)-H(20I)	109.5
C(14B)-O(2B)-C(15B)	115.1(3)
C(16B)-O(4B)-C(17B)	115.6(2)
C(1B)-N(1B)-C(5B)	122.4(2)
C(4B)-N(1B)-C(1B)	113.4(2)
C(4B)-N(1B)-C(5B)	123.9(2)
C(4B)-N(2B)-H(2B)	116.3
C(4B)-N(2B)-C(18B)	127.4(2)
C(18B)-N(2B)-H(2B)	116.3
N(1B)-C(1B)-H(1B)	109.3
N(1B)-C(1B)-C(2B)	101.5(2)
N(1B)-C(1B)-C(8B)	112.3(2)
C(2B)-C(1B)-H(1B)	109.3
C(8B)-C(1B)-H(1B)	109.3
C(8B)-C(1B)-C(2B)	114.9(2)
C(1B)-C(2B)-H(2BA)	110.8
C(1B)-C(2B)-H(2BB)	110.8
H(2BA)-C(2B)-H(2BB)	108.9
C(3B)-C(2B)-C(1B)	104.9(2)
C(3B)-C(2B)-H(2BA)	110.8
C(3B)-C(2B)-H(2BB)	110.8
C(2B)-C(3B)-C(14B)	114.4(2)
C(2B)-C(3B)-C(16B)	110.6(2)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	101.5(2)
C(4B)-C(3B)-C(14B)	110.4(2)
C(4B)-C(3B)-C(16B)	113.9(2)
C(16B)-C(3B)-C(14B)	106.2(2)
N(1B)-C(4B)-C(3B)	110.4(2)
N(2B)-C(4B)-N(1B)	122.7(2)
N(2B)-C(4B)-C(3B)	126.9(2)
N(1B)-C(5B)-H(5B)	108.1
N(1B)-C(5B)-C(6B)	108.7(3)
N(1B)-C(5B)-C(7B)	112.4(2)

C(6B)-C(5B)-H(5B)	108.1
C(6B)-C(5B)-C(7B)	111.1(3)
C(7B)-C(5B)-H(5B)	108.1
C(5B)-C(6B)-H(6BA)	109.5
C(5B)-C(6B)-H(6BB)	109.5
C(5B)-C(6B)-H(6BC)	109.5
H(6BA)-C(6B)-H(6BB)	109.5
H(6BA)-C(6B)-H(6BC)	109.5
H(6BB)-C(6B)-H(6BC)	109.5
C(5B)-C(7B)-H(7BA)	109.5
C(5B)-C(7B)-H(7BB)	109.5
C(5B)-C(7B)-H(7BC)	109.5
H(7BA)-C(7B)-H(7BB)	109.5
H(7BA)-C(7B)-H(7BC)	109.5
H(7BB)-C(7B)-H(7BC)	109.5
C(9B)-C(8B)-C(1B)	118.6(3)
C(9B)-C(8B)-C(13B)	118.9(3)
C(13B)-C(8B)-C(1B)	122.4(3)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	120.0
C(10B)-C(9B)-C(8B)	120.0(3)
C(10B)-C(9B)-H(9B)	120.0
C(9B)-C(10B)-H(10B)	119.6
C(11B)-C(10B)-C(9B)	120.8(3)
C(11B)-C(10B)-H(10B)	119.6
C(10B)-C(11B)-H(11B)	120.3
C(10B)-C(11B)-C(12B)	119.3(3)
C(12B)-C(11B)-H(11B)	120.3
C(11B)-C(12B)-H(12B)	119.9
C(11B)-C(12B)-C(13B)	120.2(3)
C(13B)-C(12B)-H(12B)	119.9
C(8B)-C(13B)-H(13B)	119.7
C(12B)-C(13B)-C(8B)	120.6(3)
C(12B)-C(13B)-H(13B)	119.7
O(1B)-C(14B)-O(2B)	125.7(3)
O(1B)-C(14B)-C(3B)	124.5(2)
O(2B)-C(14B)-C(3B)	109.8(2)
O(2B)-C(15B)-H(15D)	109.5
O(2B)-C(15B)-H(15E)	109.5
O(2B)-C(15B)-H(15F)	109.5
H(15D)-C(15B)-H(15E)	109.5
H(15D)-C(15B)-H(15F)	109.5
H(15E)-C(15B)-H(15F)	109.5
O(3B)-C(16B)-O(4B)	127.1(3)
O(3B)-C(16B)-C(3B)	123.2(2)
O(4B)-C(16B)-C(3B)	109.7(2)
O(4B)-C(17B)-H(17D)	109.5
O(4B)-C(17B)-H(17E)	109.5
O(4B)-C(17B)-H(17F)	109.5
H(17D)-C(17B)-H(17E)	109.5
H(17D)-C(17B)-H(17F)	109.5
H(17E)-C(17B)-H(17F)	109.5
N(2B)-C(18B)-H(18B)	108.8
N(2B)-C(18B)-C(19B)	108.8(3)
N(2B)-C(18B)-C(20B)	108.3(2)

C(19B)-C(18B)-H(18B)	108.8
C(19B)-C(18B)-C(20B)	113.3(3)
C(20B)-C(18B)-H(18B)	108.8
C(18B)-C(19B)-H(19D)	109.5
C(18B)-C(19B)-H(19E)	109.5
C(18B)-C(19B)-H(19F)	109.5
H(19D)-C(19B)-H(19E)	109.5
H(19D)-C(19B)-H(19F)	109.5
H(19E)-C(19B)-H(19F)	109.5
C(18B)-C(20B)-H(20D)	109.5
C(18B)-C(20B)-H(20E)	109.5
C(18B)-C(20B)-H(20F)	109.5
H(20D)-C(20B)-H(20E)	109.5
H(20D)-C(20B)-H(20F)	109.5
H(20E)-C(20B)-H(20F)	109.5
C(14C)-O(2C)-C(15C)	116.4(2)
C(16C)-O(4C)-C(17C)	114.6(2)
C(1C)-N(1C)-C(5C)	122.5(2)
C(4C)-N(1C)-C(1C)	114.1(2)
C(4C)-N(1C)-C(5C)	123.3(2)
C(4C)-N(2C)-H(2C)	116.0
C(4C)-N(2C)-C(18C)	128.0(2)
C(18C)-N(2C)-H(2C)	116.0
N(1C)-C(1C)-H(1C)	108.9
N(1C)-C(1C)-C(2C)	101.6(2)
N(1C)-C(1C)-C(8C)	113.8(2)
C(2C)-C(1C)-H(1C)	108.9
C(8C)-C(1C)-H(1C)	108.9
C(8C)-C(1C)-C(2C)	114.5(2)
C(1C)-C(2C)-H(2CA)	110.6
C(1C)-C(2C)-H(2CB)	110.6
C(1C)-C(2C)-C(3C)	105.5(2)
H(2CA)-C(2C)-H(2CB)	108.8
C(3C)-C(2C)-H(2CA)	110.6
C(3C)-C(2C)-H(2CB)	110.6
C(4C)-C(3C)-C(2C)	101.2(2)
C(4C)-C(3C)-C(14C)	109.0(2)
C(4C)-C(3C)-C(16C)	115.9(2)
C(14C)-C(3C)-C(2C)	114.2(2)
C(16C)-C(3C)-C(2C)	110.4(2)
C(16C)-C(3C)-C(14C)	106.4(2)
N(1C)-C(4C)-N(2C)	123.3(3)
N(1C)-C(4C)-C(3C)	110.4(2)
N(2C)-C(4C)-C(3C)	126.3(2)
N(1C)-C(5C)-H(5C)	107.5
N(1C)-C(5C)-C(6C)	111.3(3)
N(1C)-C(5C)-C(7C)	110.1(2)
C(6C)-C(5C)-H(5C)	107.5
C(6C)-C(5C)-C(7C)	112.6(3)
C(7C)-C(5C)-H(5C)	107.5
C(5C)-C(6C)-H(6CA)	109.5
C(5C)-C(6C)-H(6CB)	109.5
C(5C)-C(6C)-H(6CC)	109.5
H(6CA)-C(6C)-H(6CB)	109.5

H(6CA)-C(6C)-H(6CC)	109.5
H(6CB)-C(6C)-H(6CC)	109.5
C(5C)-C(7C)-H(7CA)	109.5
C(5C)-C(7C)-H(7CB)	109.5
C(5C)-C(7C)-H(7CC)	109.5
H(7CA)-C(7C)-H(7CB)	109.5
H(7CA)-C(7C)-H(7CC)	109.5
H(7CB)-C(7C)-H(7CC)	109.5
C(9C)-C(8C)-C(1C)	117.5(2)
C(13C)-C(8C)-C(1C)	123.6(2)
C(13C)-C(8C)-C(9C)	118.8(3)
C(8C)-C(9C)-H(9C)	120.0
C(8C)-C(9C)-C(10C)	119.9(3)
C(10C)-C(9C)-H(9C)	120.0
C(9C)-C(10C)-H(10C)	119.8
C(11C)-C(10C)-C(9C)	120.4(3)
C(11C)-C(10C)-H(10C)	119.8
C(10C)-C(11C)-H(11C)	120.0
C(10C)-C(11C)-C(12C)	119.9(3)
C(12C)-C(11C)-H(11C)	120.0
C(11C)-C(12C)-H(12C)	120.1
C(13C)-C(12C)-C(11C)	119.8(3)
C(13C)-C(12C)-H(12C)	120.1
C(8C)-C(13C)-H(13C)	119.4
C(12C)-C(13C)-C(8C)	121.1(3)
C(12C)-C(13C)-H(13C)	119.4
O(1C)-C(14C)-O(2C)	125.9(3)
O(1C)-C(14C)-C(3C)	123.2(3)
O(2C)-C(14C)-C(3C)	110.9(2)
O(2C)-C(15C)-H(15A)	109.5
O(2C)-C(15C)-H(15B)	109.5
O(2C)-C(15C)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15C)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15C)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15C)-H(15C)	109.5
O(3C)-C(16C)-O(4C)	126.0(3)
O(3C)-C(16C)-C(3C)	124.1(2)
O(4C)-C(16C)-C(3C)	109.9(2)
O(4C)-C(17C)-H(17A)	109.5
O(4C)-C(17C)-H(17B)	109.5
O(4C)-C(17C)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17C)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17C)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17C)-H(17C)	109.5
N(2C)-C(18C)-H(18C)	108.7
N(2C)-C(18C)-C(19C)	109.0(2)
N(2C)-C(18C)-C(20C)	109.0(2)
C(19C)-C(18C)-H(18C)	108.7
C(19C)-C(18C)-C(20C)	112.7(3)
C(20C)-C(18C)-H(18C)	108.7
C(18C)-C(19C)-H(19A)	109.5
C(18C)-C(19C)-H(19B)	109.5
C(18C)-C(19C)-H(19C)	109.5
H(19A)-C(19C)-H(19B)	109.5

H(19A)-C(19C)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(19C)-H(19C)	109.5
C(18C)-C(20C)-H(20A)	109.5
C(18C)-C(20C)-H(20B)	109.5
C(18C)-C(20C)-H(20C)	109.5
H(20A)-C(20C)-H(20B)	109.5
H(20A)-C(20C)-H(20C)	109.5
H(20B)-C(20C)-H(20C)	109.5
C(14D)-O(2D)-C(15D)	115.9(3)
C(16D)-O(4D)-C(17D)	114.6(2)
C(1D)-N(1D)-C(5D)	123.8(2)
C(4D)-N(1D)-C(1D)	113.7(2)
C(4D)-N(1D)-C(5D)	122.3(2)
C(4D)-N(2D)-H(2D)	116.2
C(4D)-N(2D)-C(18D)	127.6(3)
C(18D)-N(2D)-H(2D)	116.2
N(1D)-C(1D)-H(1D)	108.5
N(1D)-C(1D)-C(2D)	102.4(2)
N(1D)-C(1D)-C(8D)	112.9(2)
C(2D)-C(1D)-H(1D)	108.5
C(8D)-C(1D)-H(1D)	108.5
C(8D)-C(1D)-C(2D)	115.6(2)
C(1D)-C(2D)-H(2DA)	110.9
C(1D)-C(2D)-H(2DB)	110.9
C(1D)-C(2D)-C(3D)	104.1(2)
H(2DA)-C(2D)-H(2DB)	109.0
C(3D)-C(2D)-H(2DA)	110.9
C(3D)-C(2D)-H(2DB)	110.9
C(2D)-C(3D)-C(16D)	110.7(2)
C(4D)-C(3D)-C(2D)	102.1(2)
C(4D)-C(3D)-C(14D)	111.0(2)
C(4D)-C(3D)-C(16D)	112.7(2)
C(14D)-C(3D)-C(2D)	114.5(2)
C(14D)-C(3D)-C(16D)	106.1(2)
N(1D)-C(4D)-C(3D)	109.1(2)
N(2D)-C(4D)-N(1D)	124.0(3)
N(2D)-C(4D)-C(3D)	126.9(2)
N(1D)-C(5D)-H(5D)	108.5
N(1D)-C(5D)-C(6D)	109.5(3)
N(1D)-C(5D)-C(7D)	111.0(3)
C(6D)-C(5D)-H(5D)	108.5
C(7D)-C(5D)-H(5D)	108.5
C(7D)-C(5D)-C(6D)	110.9(3)
C(5D)-C(6D)-H(6DA)	109.5
C(5D)-C(6D)-H(6DB)	109.5
C(5D)-C(6D)-H(6DC)	109.5
H(6DA)-C(6D)-H(6DB)	109.5
H(6DA)-C(6D)-H(6DC)	109.5
H(6DB)-C(6D)-H(6DC)	109.5
C(5D)-C(7D)-H(7DA)	109.5
C(5D)-C(7D)-H(7DB)	109.5
C(5D)-C(7D)-H(7DC)	109.5
H(7DA)-C(7D)-H(7DB)	109.5
H(7DA)-C(7D)-H(7DC)	109.5

H(7DB)-C(7D)-H(7DC)	109.5
C(9D)-C(8D)-C(1D)	118.6(3)
C(13D)-C(8D)-C(1D)	121.9(3)
C(13D)-C(8D)-C(9D)	119.5(3)
C(8D)-C(9D)-H(9D)	119.7
C(10D)-C(9D)-C(8D)	120.7(3)
C(10D)-C(9D)-H(9D)	119.7
C(9D)-C(10D)-H(10D)	120.3
C(9D)-C(10D)-C(11D)	119.5(3)
C(11D)-C(10D)-H(10D)	120.3
C(10D)-C(11D)-H(11D)	119.9
C(12D)-C(11D)-C(10D)	120.1(3)
C(12D)-C(11D)-H(11D)	119.9
C(11D)-C(12D)-H(12D)	120.1
C(11D)-C(12D)-C(13D)	119.9(3)
C(13D)-C(12D)-H(12D)	120.1
C(8D)-C(13D)-C(12D)	120.3(3)
C(8D)-C(13D)-H(13D)	119.9
C(12D)-C(13D)-H(13D)	119.9
O(1D)-C(14D)-O(2D)	125.5(3)
O(1D)-C(14D)-C(3D)	123.7(3)
O(2D)-C(14D)-C(3D)	110.8(2)
O(2D)-C(15D)-H(15P)	109.5
O(2D)-C(15D)-H(15Q)	109.5
O(2D)-C(15D)-H(15R)	109.5
H(15P)-C(15D)-H(15Q)	109.5
H(15P)-C(15D)-H(15R)	109.5
H(15Q)-C(15D)-H(15R)	109.5
O(3D)-C(16D)-O(4D)	127.4(3)
O(3D)-C(16D)-C(3D)	124.0(3)
O(4D)-C(16D)-C(3D)	108.5(2)
O(4D)-C(17D)-H(17P)	109.5
O(4D)-C(17D)-H(17Q)	109.5
O(4D)-C(17D)-H(17R)	109.5
H(17P)-C(17D)-H(17Q)	109.5
H(17P)-C(17D)-H(17R)	109.5
H(17Q)-C(17D)-H(17R)	109.5
N(2D)-C(18D)-H(18D)	108.8
N(2D)-C(18D)-C(19D)	108.8(2)
N(2D)-C(18D)-C(20D)	108.8(2)
C(19D)-C(18D)-H(18D)	108.8
C(20D)-C(18D)-H(18D)	108.8
C(20D)-C(18D)-C(19D)	112.7(3)
C(18D)-C(19D)-H(19P)	109.5
C(18D)-C(19D)-H(19Q)	109.5
C(18D)-C(19D)-H(19R)	109.5
H(19P)-C(19D)-H(19Q)	109.5
H(19P)-C(19D)-H(19R)	109.5
H(19Q)-C(19D)-H(19R)	109.5
C(18D)-C(20D)-H(20P)	109.5
C(18D)-C(20D)-H(20Q)	109.5
C(18D)-C(20D)-H(20R)	109.5
H(20P)-C(20D)-H(20Q)	109.5
H(20P)-C(20D)-H(20R)	109.5

H(20Q)-C(20D)-H(20R)	109.5
C(14E)-O(2E)-C(15E)	115.7(2)
C(16E)-O(4E)-C(17E)	115.6(2)
C(1E)-N(1E)-C(5E)	123.7(2)
C(4E)-N(1E)-C(1E)	113.6(2)
C(4E)-N(1E)-C(5E)	122.7(3)
C(4E)-N(2E)-H(2E)	116.0
C(4E)-N(2E)-C(18E)	128.1(3)
C(18E)-N(2E)-H(2E)	116.0
N(1E)-C(1E)-H(1E)	108.6
N(1E)-C(1E)-C(2E)	102.3(2)
N(1E)-C(1E)-C(8E)	113.7(2)
C(2E)-C(1E)-H(1E)	108.6
C(8E)-C(1E)-H(1E)	108.6
C(8E)-C(1E)-C(2E)	114.8(2)
C(1E)-C(2E)-H(2EA)	110.7
C(1E)-C(2E)-H(2EB)	110.7
C(1E)-C(2E)-C(3E)	105.2(2)
H(2EA)-C(2E)-H(2EB)	108.8
C(3E)-C(2E)-H(2EA)	110.7
C(3E)-C(2E)-H(2EB)	110.7
C(4E)-C(3E)-C(2E)	101.4(2)
C(4E)-C(3E)-C(14E)	109.2(2)
C(4E)-C(3E)-C(16E)	114.9(2)
C(14E)-C(3E)-C(2E)	113.6(2)
C(16E)-C(3E)-C(2E)	109.9(2)
C(16E)-C(3E)-C(14E)	107.9(2)
N(1E)-C(4E)-C(3E)	110.5(2)
N(2E)-C(4E)-N(1E)	123.4(3)
N(2E)-C(4E)-C(3E)	126.1(2)
N(1E)-C(5E)-H(5E)	107.7
N(1E)-C(5E)-C(6E)	111.4(3)
N(1E)-C(5E)-C(7E)	110.5(2)
C(6E)-C(5E)-H(5E)	107.7
C(6E)-C(5E)-C(7E)	111.8(3)
C(7E)-C(5E)-H(5E)	107.7
C(5E)-C(6E)-H(6EA)	109.5
C(5E)-C(6E)-H(6EB)	109.5
C(5E)-C(6E)-H(6EC)	109.5
H(6EA)-C(6E)-H(6EB)	109.5
H(6EA)-C(6E)-H(6EC)	109.5
H(6EB)-C(6E)-H(6EC)	109.5
C(5E)-C(7E)-H(7EA)	109.5
C(5E)-C(7E)-H(7EB)	109.5
C(5E)-C(7E)-H(7EC)	109.5
H(7EA)-C(7E)-H(7EB)	109.5
H(7EA)-C(7E)-H(7EC)	109.5
H(7EB)-C(7E)-H(7EC)	109.5
C(9E)-C(8E)-C(1E)	117.9(2)
C(13E)-C(8E)-C(1E)	123.2(3)
C(13E)-C(8E)-C(9E)	118.8(3)
C(8E)-C(9E)-H(9E)	119.2
C(8E)-C(9E)-C(10E)	121.6(3)
C(10E)-C(9E)-H(9E)	119.2

C(9E)-C(10E)-H(10E)	120.6
C(9E)-C(10E)-C(11E)	118.8(3)
C(11E)-C(10E)-H(10E)	120.6
C(10E)-C(11E)-H(11E)	120.0
C(12E)-C(11E)-C(10E)	120.0(3)
C(12E)-C(11E)-H(11E)	120.0
C(11E)-C(12E)-H(12E)	119.8
C(11E)-C(12E)-C(13E)	120.5(3)
C(13E)-C(12E)-H(12E)	119.8
C(8E)-C(13E)-C(12E)	120.2(3)
C(8E)-C(13E)-H(13E)	119.9
C(12E)-C(13E)-H(13E)	119.9
O(1E)-C(14E)-O(2E)	125.6(2)
O(1E)-C(14E)-C(3E)	122.3(3)
O(2E)-C(14E)-C(3E)	112.1(2)
O(2E)-C(15E)-H(15M)	109.5
O(2E)-C(15E)-H(15N)	109.5
O(2E)-C(15E)-H(15O)	109.5
H(15M)-C(15E)-H(15N)	109.5
H(15M)-C(15E)-H(15O)	109.5
H(15N)-C(15E)-H(15O)	109.5
O(3E)-C(16E)-O(4E)	126.0(3)
O(3E)-C(16E)-C(3E)	123.6(2)
O(4E)-C(16E)-C(3E)	110.3(2)
O(4E)-C(17E)-H(17M)	109.5
O(4E)-C(17E)-H(17N)	109.5
O(4E)-C(17E)-H(17O)	109.5
H(17M)-C(17E)-H(17N)	109.5
H(17M)-C(17E)-H(17O)	109.5
H(17N)-C(17E)-H(17O)	109.5
N(2E)-C(18E)-H(18E)	108.7
N(2E)-C(18E)-C(19E)	108.1(2)
N(2E)-C(18E)-C(20E)	109.4(2)
C(19E)-C(18E)-H(18E)	108.7
C(20E)-C(18E)-H(18E)	108.7
C(20E)-C(18E)-C(19E)	113.2(3)
C(18E)-C(19E)-H(19M)	109.5
C(18E)-C(19E)-H(19N)	109.5
C(18E)-C(19E)-H(19O)	109.5
H(19M)-C(19E)-H(19N)	109.5
H(19M)-C(19E)-H(19O)	109.5
H(19N)-C(19E)-H(19O)	109.5
C(18E)-C(20E)-H(20M)	109.5
C(18E)-C(20E)-H(20N)	109.5
C(18E)-C(20E)-H(20O)	109.5
H(20M)-C(20E)-H(20N)	109.5
H(20M)-C(20E)-H(20O)	109.5
H(20N)-C(20E)-H(20O)	109.5
C(14F)-O(2F)-C(15F)	115.7(2)
C(16F)-O(4F)-C(17F)	116.4(2)
C(1F)-N(1F)-C(5F)	122.3(2)
C(4F)-N(1F)-C(1F)	113.4(2)
C(4F)-N(1F)-C(5F)	123.9(2)
C(4F)-N(2F)-H(2F)	116.3



C(4F)-N(2F)-C(18F)	127.5(2)
C(18F)-N(2F)-H(2F)	116.3
N(1F)-C(1F)-H(1F)	109.2
N(1F)-C(1F)-C(2F)	101.6(2)
N(1F)-C(1F)-C(8F)	112.3(2)
C(2F)-C(1F)-H(1F)	109.2
C(8F)-C(1F)-H(1F)	109.2
C(8F)-C(1F)-C(2F)	115.1(2)
C(1F)-C(2F)-H(2FA)	110.9
C(1F)-C(2F)-H(2FB)	110.9
C(1F)-C(2F)-C(3F)	104.4(2)
H(2FA)-C(2F)-H(2FB)	108.9
C(3F)-C(2F)-H(2FA)	110.9
C(3F)-C(2F)-H(2FB)	110.9
C(4F)-C(3F)-C(2F)	101.8(2)
C(4F)-C(3F)-C(14F)	110.5(2)
C(14F)-C(3F)-C(2F)	115.0(2)
C(16F)-C(3F)-C(2F)	109.2(2)
C(16F)-C(3F)-C(4F)	114.2(2)
C(16F)-C(3F)-C(14F)	106.4(2)
N(1F)-C(4F)-C(3F)	109.5(2)
N(2F)-C(4F)-N(1F)	123.0(3)
N(2F)-C(4F)-C(3F)	127.5(2)
N(1F)-C(5F)-H(5F)	108.0
N(1F)-C(5F)-C(6F)	108.8(3)
N(1F)-C(5F)-C(7F)	112.4(3)
C(6F)-C(5F)-H(5F)	108.0
C(7F)-C(5F)-H(5F)	108.0
C(7F)-C(5F)-C(6F)	111.4(3)
C(5F)-C(6F)-H(6FA)	109.5
C(5F)-C(6F)-H(6FB)	109.5
C(5F)-C(6F)-H(6FC)	109.5
H(6FA)-C(6F)-H(6FB)	109.5
H(6FA)-C(6F)-H(6FC)	109.5
H(6FB)-C(6F)-H(6FC)	109.5
C(5F)-C(7F)-H(7FA)	109.5
C(5F)-C(7F)-H(7FB)	109.5
C(5F)-C(7F)-H(7FC)	109.5
H(7FA)-C(7F)-H(7FB)	109.5
H(7FA)-C(7F)-H(7FC)	109.5
H(7FB)-C(7F)-H(7FC)	109.5
C(9F)-C(8F)-C(1F)	117.4(3)
C(13F)-C(8F)-C(1F)	122.6(3)
C(13F)-C(8F)-C(9F)	120.0(3)
C(8F)-C(9F)-H(9F)	119.9
C(10F)-C(9F)-C(8F)	120.3(3)
C(10F)-C(9F)-H(9F)	119.9
C(9F)-C(10F)-H(10F)	120.5
C(9F)-C(10F)-C(11F)	119.0(3)
C(11F)-C(10F)-H(10F)	120.5
C(10F)-C(11F)-H(11F)	119.7
C(12F)-C(11F)-C(10F)	120.6(3)
C(12F)-C(11F)-H(11F)	119.7
C(11F)-C(12F)-H(12F)	120.1

C(11F)-C(12F)-C(13F)	119.8(3)
C(13F)-C(12F)-H(12F)	120.1
C(8F)-C(13F)-C(12F)	120.3(3)
C(8F)-C(13F)-H(13F)	119.8
C(12F)-C(13F)-H(13F)	119.8
O(1F)-C(14F)-O(2F)	125.8(2)
O(1F)-C(14F)-C(3F)	123.1(3)
O(2F)-C(14F)-C(3F)	111.1(2)
O(2F)-C(15F)-H(15J)	109.5
O(2F)-C(15F)-H(15K)	109.5
O(2F)-C(15F)-H(15L)	109.5
H(15J)-C(15F)-H(15K)	109.5
H(15J)-C(15F)-H(15L)	109.5
H(15K)-C(15F)-H(15L)	109.5
O(3F)-C(16F)-O(4F)	124.5(2)
O(3F)-C(16F)-C(3F)	123.4(2)
O(4F)-C(16F)-C(3F)	112.0(2)
O(4F)-C(17F)-H(17J)	109.5
O(4F)-C(17F)-H(17K)	109.5
O(4F)-C(17F)-H(17L)	109.5
H(17J)-C(17F)-H(17K)	109.5
H(17J)-C(17F)-H(17L)	109.5
H(17K)-C(17F)-H(17L)	109.5
N(2F)-C(18F)-H(18F)	109.5
N(2F)-C(18F)-C(19F)	109.5(2)
N(2F)-C(18F)-C(20F)	108.1(2)
C(19F)-C(18F)-H(18F)	109.5
C(19F)-C(18F)-C(20F)	110.7(3)
C(20F)-C(18F)-H(18F)	109.5
C(18F)-C(19F)-H(19J)	109.5
C(18F)-C(19F)-H(19K)	109.5
C(18F)-C(19F)-H(19L)	109.5
H(19J)-C(19F)-H(19K)	109.5
H(19J)-C(19F)-H(19L)	109.5
H(19K)-C(19F)-H(19L)	109.5
C(18F)-C(20F)-H(20J)	109.5
C(18F)-C(20F)-H(20K)	109.5
C(18F)-C(20F)-H(20L)	109.5
H(20J)-C(20F)-H(20K)	109.5
H(20J)-C(20F)-H(20L)	109.5
H(20K)-C(20F)-H(20L)	109.5
H(5AA)-O(5A)-H(5AB)	117(3)
H(5BA)-O(5B)-H(5BB)	113(3)
H(5CA)-O(5C)-H(5CB)	109(2)
H(5DA)-O(5D)-H(5DB)	105(2)
H(5EA)-O(5E)-H(5EB)	107(2)
H(5FA)-O(5F)-H(5FB)	107(4)

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table A3.2.4. Anisotropic displacement parameters ( $\approx \times 10^4$ ) for (R)-**60**•HBr. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
O(1A)	246(12)	132(9)	182(10)	11(8)	35(9)	80(8)
O(2A)	202(12)	132(9)	284(12)	-45(8)	-6(10)	-9(8)
O(3A)	331(14)	195(10)	173(11)	39(8)	-26(9)	90(9)
O(4A)	285(12)	137(9)	176(10)	71(8)	42(9)	65(8)
N(1A)	177(13)	123(10)	105(10)	40(8)	46(9)	41(9)
N(2A)	155(12)	152(11)	102(10)	1(8)	21(9)	42(9)
C(1A)	149(14)	90(11)	175(13)	15(9)	50(11)	44(10)
C(2A)	140(14)	140(12)	166(13)	42(10)	68(11)	49(10)
C(3A)	147(14)	99(11)	127(12)	30(9)	28(10)	48(9)
C(4A)	192(15)	94(11)	134(12)	6(9)	48(11)	67(10)
C(5A)	163(15)	194(13)	128(13)	75(10)	35(11)	34(11)
C(6A)	268(18)	294(16)	135(14)	33(12)	30(13)	16(14)
C(7A)	220(17)	257(16)	255(16)	115(13)	-14(13)	95(13)
C(8A)	149(14)	127(12)	145(13)	25(10)	14(11)	4(10)
C(9A)	168(15)	212(14)	163(13)	51(11)	30(11)	29(11)
C(10A)	199(16)	235(15)	212(15)	95(12)	31(12)	45(12)
C(11A)	228(17)	202(14)	290(17)	162(12)	62(14)	43(12)
C(12A)	259(17)	168(13)	260(16)	73(11)	35(13)	94(12)
C(13A)	190(16)	203(13)	187(14)	96(11)	63(12)	100(11)
C(14A)	140(14)	141(12)	161(13)	67(10)	21(11)	28(10)
C(15A)	360(20)	110(13)	450(20)	-96(14)	49(18)	-22(13)
C(16A)	117(14)	129(12)	180(13)	69(10)	40(11)	3(10)
C(17A)	302(19)	203(14)	296(17)	153(13)	75(14)	93(13)
C(18A)	193(16)	232(14)	115(13)	25(11)	59(11)	65(12)
C(19A)	259(18)	254(16)	277(17)	30(13)	97(14)	104(14)
C(20A)	185(16)	288(16)	213(16)	120(12)	7(13)	4(13)
O(1B)	177(11)	139(9)	201(11)	-4(8)	21(9)	82(8)
O(2B)	154(11)	78(8)	366(13)	-25(8)	34(10)	-8(7)
O(3B)	257(12)	180(10)	138(10)	-21(8)	-66(9)	43(9)
O(4B)	246(12)	108(8)	107(9)	31(7)	-2(8)	55(8)
N(1B)	116(12)	124(10)	121(10)	30(8)	7(9)	-3(8)
N(2B)	113(12)	158(11)	100(10)	4(8)	13(9)	1(9)
C(1B)	119(13)	108(11)	130(12)	20(9)	38(10)	4(9)
C(2B)	114(13)	121(11)	168(13)	28(10)	7(11)	21(10)
C(3B)	104(13)	107(11)	104(11)	5(9)	-30(10)	13(9)
C(4B)	115(13)	72(10)	113(12)	21(9)	9(10)	35(9)
C(5B)	144(14)	199(13)	96(12)	-27(10)	6(10)	-10(11)
C(6B)	490(20)	151(14)	245(17)	-70(12)	-74(17)	-43(15)
C(7B)	207(17)	349(18)	140(14)	29(12)	38(12)	-12(14)
C(8B)	162(15)	128(12)	167(13)	19(10)	-22(11)	-9(10)
C(9B)	205(16)	190(14)	179(14)	59(11)	19(12)	-31(12)
C(10B)	277(19)	219(15)	241(16)	117(12)	7(14)	-80(13)

C(11B)	350(20)	161(14)	267(17)	92(12)	-67(15)	-32(13)
C(12B)	400(20)	211(15)	274(18)	68(13)	-41(15)	112(14)
C(13B)	270(18)	165(13)	208(15)	52(11)	16(13)	69(12)
C(14B)	155(14)	87(11)	158(13)	29(9)	11(11)	16(10)
C(15B)	340(20)	73(13)	550(20)	-81(14)	87(18)	-24(13)
C(16B)	122(13)	81(11)	116(12)	1(9)	15(10)	-4(9)
C(17B)	277(17)	193(13)	122(13)	67(10)	20(12)	100(12)
C(18B)	198(16)	172(13)	74(12)	-18(10)	23(11)	7(11)
C(19B)	122(15)	279(16)	282(17)	-48(13)	56(13)	44(12)
C(20B)	232(17)	285(16)	180(15)	103(12)	63(13)	32(13)
O(1C)	224(12)	106(9)	222(11)	35(8)	32(9)	54(8)
O(2C)	191(12)	114(9)	264(11)	14(8)	58(9)	-16(8)
O(3C)	211(12)	148(9)	152(10)	8(7)	-45(8)	31(8)
O(4C)	276(12)	117(9)	126(9)	37(7)	7(8)	61(8)
N(1C)	160(12)	110(10)	107(10)	28(8)	49(9)	39(9)
N(2C)	150(12)	162(11)	83(10)	17(8)	14(9)	30(9)
C(1C)	205(15)	133(12)	116(12)	57(10)	76(11)	71(11)
C(2C)	175(15)	139(12)	130(12)	40(9)	53(11)	63(10)
C(3C)	117(13)	100(11)	131(12)	9(9)	13(10)	27(9)
C(4C)	156(14)	80(11)	120(12)	33(9)	20(10)	37(10)
C(5C)	183(15)	176(13)	95(12)	27(10)	4(11)	27(11)
C(6C)	291(19)	258(16)	136(14)	-22(12)	0(13)	3(13)
C(7C)	197(17)	208(14)	280(17)	79(12)	-25(13)	51(12)
C(8C)	176(15)	122(12)	119(12)	32(9)	19(11)	39(10)
C(9C)	222(16)	183(13)	124(13)	54(10)	83(11)	51(11)
C(10C)	269(18)	221(14)	201(15)	137(12)	107(13)	49(13)
C(11C)	280(18)	154(13)	213(15)	108(11)	56(13)	43(12)
C(12C)	275(17)	124(12)	199(14)	51(10)	31(12)	73(11)
C(13C)	246(17)	155(13)	161(13)	49(10)	98(12)	102(11)
C(14C)	205(15)	111(12)	96(12)	29(9)	1(11)	-5(10)
C(15C)	320(20)	139(13)	348(19)	12(12)	154(16)	-19(13)
C(16C)	98(14)	131(12)	192(14)	64(10)	31(11)	54(10)
C(17C)	350(20)	200(14)	228(15)	150(12)	56(14)	115(13)
C(18C)	160(15)	214(13)	83(12)	53(10)	0(10)	29(11)
C(19C)	311(19)	283(16)	89(13)	-87(11)	12(12)	92(14)
C(20C)	206(16)	223(15)	157(14)	76(11)	13(12)	10(12)
O(1D)	206(12)	167(10)	223(11)	30(8)	2(9)	26(8)
O(2D)	223(12)	110(9)	280(12)	53(8)	49(9)	69(8)
O(3D)	225(12)	131(9)	181(10)	15(8)	12(9)	35(8)
O(4D)	216(11)	87(8)	170(10)	36(7)	16(8)	4(8)
N(1D)	224(14)	153(11)	80(10)	19(8)	-16(9)	79(9)
N(2D)	181(13)	132(10)	105(10)	19(8)	5(9)	63(9)
C(1D)	184(15)	166(13)	128(13)	35(10)	-17(11)	64(11)
C(2D)	134(14)	177(13)	175(13)	64(10)	-15(11)	77(11)
C(3D)	118(13)	113(11)	148(13)	17(9)	2(10)	22(10)
C(4D)	167(14)	70(10)	127(12)	23(9)	-21(10)	26(10)
C(5D)	310(18)	229(14)	132(13)	-30(11)	-18(12)	167(13)
C(6D)	750(30)	164(15)	360(20)	-54(14)	0(20)	124(18)
C(7D)	780(30)	490(20)	120(15)	39(14)	63(17)	510(20)
C(8D)	174(15)	148(12)	171(13)	43(10)	-12(11)	77(11)
C(9D)	209(16)	158(13)	192(14)	28(11)	-26(12)	59(11)
C(10D)	312(19)	235(15)	202(15)	74(12)	-17(14)	108(13)
C(11D)	308(19)	221(15)	211(15)	116(12)	57(14)	76(13)
C(12D)	223(17)	249(15)	206(15)	93(12)	-12(13)	-12(13)

C(13D)	159(15)	240(14)	152(14)	86(11)	-33(11)	2(12)
C(14D)	174(15)	132(12)	115(12)	57(9)	36(11)	20(10)
C(15D)	330(20)	115(13)	308(18)	33(12)	31(15)	43(12)
C(16D)	137(15)	141(13)	296(17)	48(12)	79(13)	57(11)
C(17D)	227(17)	170(13)	199(15)	86(11)	30(12)	31(12)
C(18D)	166(15)	187(13)	120(13)	29(10)	-25(11)	64(11)
C(19D)	229(17)	246(15)	180(15)	49(12)	-67(13)	67(13)
C(20D)	274(18)	202(14)	207(15)	74(12)	-23(13)	51(12)
O(1E)	127(11)	105(9)	242(11)	17(8)	-31(9)	-22(7)
O(2E)	186(11)	130(9)	271(12)	11(8)	-32(9)	54(8)
O(3E)	205(12)	141(9)	192(10)	5(8)	50(9)	13(8)
O(4E)	206(11)	121(9)	142(9)	41(7)	-18(8)	-3(8)
N(1E)	182(13)	111(10)	108(11)	17(8)	-20(9)	32(9)
N(2E)	147(12)	147(11)	117(11)	22(8)	4(9)	62(9)
C(1E)	146(14)	134(12)	139(13)	24(10)	-37(11)	-6(10)
C(2E)	113(14)	146(12)	192(14)	63(10)	-21(11)	-20(10)
C(3E)	118(13)	97(11)	149(12)	26(9)	-8(10)	-6(9)
C(4E)	113(13)	91(11)	131(12)	15(9)	-13(10)	-22(9)
C(5E)	233(16)	159(13)	131(13)	39(10)	28(11)	78(11)
C(6E)	330(20)	286(16)	104(13)	37(11)	-32(13)	89(14)
C(7E)	231(18)	286(17)	260(17)	79(13)	89(14)	70(13)
C(8E)	150(14)	136(12)	139(12)	34(10)	-17(10)	33(10)
C(9E)	159(15)	203(13)	176(14)	60(11)	-20(11)	35(11)
C(10E)	284(19)	223(15)	235(16)	93(12)	-43(13)	83(13)
C(11E)	278(18)	203(14)	275(17)	115(12)	-25(14)	54(13)
C(12E)	209(17)	175(13)	258(16)	114(12)	-28(13)	-8(12)
C(13E)	185(16)	198(14)	208(15)	85(11)	-32(12)	43(12)
C(14E)	168(14)	113(11)	108(12)	32(9)	3(10)	30(10)
C(15E)	330(20)	83(12)	420(20)	14(12)	-59(16)	79(12)
C(16E)	115(13)	116(11)	167(13)	44(10)	15(11)	15(10)
C(17E)	259(18)	179(14)	194(15)	105(11)	14(13)	-8(12)
C(18E)	173(15)	177(13)	87(12)	35(10)	-15(10)	75(11)
C(19E)	150(15)	196(14)	222(15)	-15(11)	-45(12)	65(11)
C(20E)	226(17)	224(14)	194(15)	100(12)	23(12)	93(12)
O(1F)	190(12)	151(10)	243(11)	61(8)	13(9)	47(8)
O(2F)	231(12)	101(9)	213(11)	20(8)	15(9)	35(8)
O(3F)	243(12)	163(9)	150(10)	-4(8)	55(9)	67(8)
O(4F)	257(12)	107(8)	99(9)	34(7)	29(8)	12(8)
N(1F)	168(13)	136(10)	110(10)	33(8)	-17(9)	80(9)
N(2F)	141(12)	133(10)	98(10)	20(8)	-12(9)	52(9)
C(1F)	147(14)	163(12)	135(12)	46(10)	1(11)	71(10)
C(2F)	167(14)	134(12)	121(12)	35(9)	7(11)	39(10)
C(3F)	126(13)	91(11)	132(12)	27(9)	-2(10)	16(9)
C(4F)	140(14)	81(11)	132(12)	26(9)	10(10)	17(9)
C(5F)	326(18)	192(14)	160(14)	0(11)	9(13)	160(13)
C(6F)	630(30)	219(16)	240(17)	2(13)	13(18)	172(17)
C(7F)	380(20)	330(17)	125(14)	-28(12)	-34(14)	192(15)
C(8F)	225(16)	146(12)	131(13)	35(10)	39(11)	85(11)
C(9F)	310(18)	229(15)	174(14)	68(11)	42(13)	174(13)
C(10F)	430(20)	278(16)	180(15)	111(12)	94(14)	237(15)
C(11F)	550(30)	199(15)	261(17)	104(13)	208(17)	145(15)
C(12F)	430(20)	203(15)	258(17)	91(13)	153(16)	59(15)
C(13F)	246(18)	229(15)	183(15)	69(12)	45(13)	60(13)
C(14F)	157(14)	123(12)	128(12)	21(9)	13(11)	24(10)

C(15F)	350(20)	72(11)	238(15)	8(10)	62(14)	23(12)
C(16F)	132(14)	155(12)	50(11)	17(9)	-21(10)	62(10)
C(17F)	238(17)	216(14)	155(14)	107(11)	27(12)	22(12)
C(18F)	177(15)	168(12)	99(12)	22(10)	-28(11)	61(11)
C(19F)	215(17)	139(13)	200(15)	-5(11)	-47(13)	-39(11)
C(20F)	351(19)	240(15)	129(13)	76(11)	-9(13)	130(13)
Br(1A)	265(2)	205(1)	172(1)	6(1)	-6(1)	118(1)
Br(1B)	212(2)	209(1)	143(1)	38(1)	18(1)	89(1)
Br(1C)	286(2)	173(1)	186(2)	-11(1)	-24(1)	92(1)
Br(1D)	242(2)	223(2)	175(2)	45(1)	22(1)	-12(1)
Br(1E)	225(2)	166(1)	142(1)	0(1)	31(1)	-40(1)
Br(1F)	212(2)	228(2)	157(1)	45(1)	-2(1)	10(1)
O(5A)	202(12)	160(10)	207(11)	8(8)	11(9)	47(8)
O(5B)	155(11)	210(10)	200(11)	29(8)	-5(9)	-74(9)
O(5C)	189(12)	159(10)	246(12)	43(8)	21(9)	55(9)
O(5D)	342(15)	272(12)	219(12)	50(9)	23(10)	202(11)
O(5E)	200(12)	176(10)	162(10)	29(8)	54(9)	63(8)
O(5F)	253(13)	291(12)	214(12)	35(9)	37(10)	159(10)

---

Table A3.2.5. Hydrogen coordinates ( $\times 10^3$ ) and isotropic displacement parameters ( $\approx^2 \times 10^3$ ) for (R)-**60**•HBr.

	x	y	z	U <sub>iso</sub>
H(2A)	204	104	797	17
H(1A)	646	133	714	16
H(2AA)	842	242	787	17
H(2AB)	776	130	782	17
H(5A)	213	72	729	19
H(6AA)	404	146	657	37
H(6AB)	228	64	650	37
H(6AC)	402	47	670	37
H(7AA)	186	224	753	35
H(7AB)	98	182	702	35
H(7AC)	282	256	709	35
H(9A)	782	222	663	22
H(10A)	859	359	632	25
H(11A)	792	492	668	27
H(12A)	646	488	735	26
H(13A)	565	351	766	21
H(15G)	784	477	855	51
H(15H)	964	472	878	51
H(15I)	794	446	905	51
H(17G)	691	-57	862	37
H(17H)	593	-8	900	37
H(17I)	793	36	896	37
H(18A)	381	168	885	21
H(19G)	173	248	870	38
H(19H)	114	190	910	38
H(19I)	25	151	859	38
H(20G)	99	3	863	35
H(20H)	211	38	912	35
H(20I)	296	1	867	35
H(2B)	-4	75	461	16
H(1B)	460	112	381	15
H(2BA)	580	124	454	16
H(2BB)	628	234	453	16
H(5B)	0	59	391	20
H(6BA)	226	-58	383	50
H(6BB)	27	-92	363	50
H(6BC)	78	-61	418	50
H(7BA)	134	130	331	37
H(7BB)	45	22	312	37
H(7BC)	249	58	324	37
H(9B)	598	218	334	25
H(10B)	613	349	300	32

H(11B)	460	456	328	33
H(12B)	280	426	388	35
H(13B)	258	293	421	25
H(15D)	494	467	503	53
H(15E)	692	482	520	53
H(15F)	543	453	554	53
H(17D)	488	-42	549	28
H(17E)	396	20	584	28
H(17F)	596	58	576	28
H(18B)	166	149	549	19
H(19D)	-33	229	532	36
H(19E)	-101	171	572	36
H(19F)	-183	134	520	36
H(20D)	-108	-19	527	35
H(20E)	-10	21	577	35
H(20F)	90	-16	536	35
H(2C)	416	99	128	16
H(1C)	849	121	40	17
H(2CA)	1052	228	112	17
H(2CB)	979	118	109	17
H(5C)	419	57	59	19
H(6CA)	606	125	-15	37
H(6CB)	432	43	-20	37
H(6CC)	608	29	1	37
H(7CA)	386	208	80	34
H(7CB)	300	164	28	34
H(7CC)	483	240	36	34
H(9C)	994	214	-9	21
H(10C)	1067	352	-39	26
H(11C)	991	482	-4	25
H(12C)	834	474	62	23
H(13C)	753	336	91	21
H(15A)	1026	476	158	42
H(15B)	1175	471	195	42
H(15C)	982	457	209	42
H(17A)	855	-61	201	36
H(17B)	813	14	240	36
H(17C)	1004	30	224	36
H(18C)	605	167	215	18
H(19A)	412	254	202	36
H(19B)	349	197	243	36
H(19C)	254	161	192	36
H(20A)	317	5	195	30
H(20B)	427	43	244	30
H(20C)	513	2	200	30
H(2D)	98	754	670	16
H(1D)	531	721	758	19
H(2DA)	563	591	691	18
H(2DB)	628	700	687	18
H(5D)	128	777	740	26
H(6DA)	471	898	753	65
H(6DB)	300	931	760	65
H(6DC)	339	888	709	65
H(7DA)	236	712	803	60



H(7DB)	204	812	818	60
H(7DC)	395	804	812	60
H(9D)	568	620	808	22
H(10D)	458	495	846	29
H(11D)	188	390	820	28
H(12D)	26	415	757	28
H(13D)	136	542	720	23
H(15P)	229	362	596	38
H(15Q)	190	360	649	38
H(15R)	363	339	631	38
H(17P)	515	793	552	30
H(17Q)	688	765	564	30
H(17R)	665	864	587	30
H(18D)	176	667	586	19
H(19P)	-101	589	600	33
H(19Q)	-123	649	560	33
H(19R)	-153	684	613	33
H(20P)	67	834	598	34
H(20Q)	132	788	551	34
H(20R)	265	834	596	34
H(2E)	725	727	339	16
H(1E)	1153	714	432	18
H(2EA)	1241	603	363	19
H(2EB)	1274	713	364	19
H(5E)	778	772	408	20
H(6EA)	909	709	485	36
H(6EB)	818	791	487	36
H(6EC)	1004	804	468	36
H(7EA)	600	615	388	38
H(7EB)	557	669	436	38
H(7EC)	667	595	437	38
H(9E)	1236	625	481	22
H(10E)	1190	492	516	29
H(11E)	972	358	483	30
H(12E)	792	362	419	26
H(13E)	836	496	385	23
H(15M)	935	367	266	42
H(15N)	943	355	319	42
H(15O)	1105	352	290	42
H(17M)	1192	808	230	32
H(17N)	1372	801	252	32
H(17O)	1302	888	271	32
H(18E)	830	654	255	17
H(19M)	557	566	263	29
H(19N)	533	629	226	29
H(19O)	491	656	279	29
H(20M)	708	816	269	30
H(20N)	772	775	222	30
H(20O)	907	819	266	30
H(2F)	294	753	11	15
H(1F)	736	716	95	17
H(2FA)	771	594	25	17
H(2FB)	827	704	23	17
H(5F)	326	770	82	25

H(6FA)	669	891	94	54
H(6FB)	499	923	105	54
H(6FC)	530	887	53	54
H(7FA)	413	700	142	40
H(7FB)	415	806	160	40
H(7FC)	592	780	150	40
H(9F)	782	610	140	26
H(10F)	683	477	174	31
H(11F)	413	372	146	38
H(12F)	242	403	88	35
H(13F)	341	538	56	26
H(15J)	426	364	-66	34
H(15K)	383	363	-14	34
H(15L)	556	340	-30	34
H(17J)	696	780	-116	30
H(17K)	882	771	-100	30
H(17L)	828	864	-82	30
H(18F)	373	676	-76	18
H(19J)	93	599	-62	31
H(19K)	78	660	-101	31
H(19L)	45	695	-49	31
H(20J)	267	844	-55	34
H(20K)	318	804	-105	34
H(20L)	462	843	-62	34
H(5AA)	998(5)	-14(2)	771(1)	29
H(5AB)	915(5)	48(2)	797(1)	29
H(5BA)	681(4)	-35(2)	445(1)	32
H(5BB)	758(5)	62(1)	454(1)	32
H(5CA)	145(5)	-29(1)	117(1)	29
H(5CB)	114(4)	59(2)	119(1)	29
H(5DA)	897(5)	875(2)	681(1)	38
H(5DB)	901(5)	820(2)	715(1)	38
H(5EA)	601(5)	860(2)	349(1)	26
H(5EB)	528(5)	808(2)	383(1)	26
H(5FA)	230(2)	832(3)	35(1)	35
H(5FB)	75(5)	820(3)	57(1)	35

---