

J | A | C | S

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

J. Am. Chem. Soc., 1998, 120(8), 1705-1717, DOI:[10.1021/ja973812c](https://doi.org/10.1021/ja973812c)

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 © 1998 American Chemical Society

Table 4. Bond angles [deg] for $(\pm)\text{Cy}_{3,5\text{tBz}}^+ 2\text{MeSpB}^-$.

Atoms	Angle
C(57')-N(30')-C(65')	123.4(5)
C(57')-N(30')-C(66')	118.7(6)
C(65')-N(30')-C(66')	117.8(5)
N(56')-C(31')-C(55')	119.5(6)
N(56')-C(31')-C(32')	116.6(6)
C(55')-C(31')-C(32')	123.8(6)
C(33')-C(32')-C(31')	121.2(7)
C(32')-C(33')-C(34')	122.4(6)
C(35')-C(34')-C(33')	123.9(6)
C(35')-C(34')-C(39')	118.2(7)
C(33')-C(34')-C(39')	117.9(6)
C(36')-C(35')-C(34')	121.6(6)
C(35')-C(36')-C(37')	120.1(7)
C(38')-C(37')-C(36')	119.2(7)
C(39')-C(38')-C(37')	120.8(6)
C(38')-C(39')-N(56')	122.0(6)
C(38')-C(39')-C(34')	119.9(6)
N(56')-C(39')-C(34')	118.1(6)
N(56')-C(40')-C(41')	113.1(5)
C(54')-C(41')-C(42')	118.8(6)
C(54')-C(41')-C(40')	122.2(6)
C(42')-C(41')-C(40')	119.0(6)
C(49')-C(42')-C(41')	121.4(7)
C(48')-C(43')-C(54')	117.3(7)
C(48')-C(43')-C(44')	121.7(6)
C(54')-C(43')-C(44')	120.9(6)
C(45')-C(44')-C(45A)	40.1(11)
C(45')-C(44')-C(46A)	135.0(14)
C(45A)-C(44')-C(46A)	111.7(10)
C(45')-C(44')-C(46')	125(2)
C(45A)-C(44')-C(46')	126.4(12)
C(46A)-C(44')-C(46')	31.2(10)
C(45')-C(44')-C(43')	113.9(12)
C(45A)-C(44')-C(43')	114.5(7)
C(46A)-C(44')-C(43')	110.3(9)
C(46')-C(44')-C(43')	115.6(11)
C(45')-C(44')-C(47')	67.9(14)
C(45A)-C(44')-C(47')	106.7(10)
C(46A)-C(44')-C(47')	109.5(10)
C(46')-C(44')-C(47')	78.6(12)
C(43')-C(44')-C(47')	103.6(8)

Atoms	Angle
C(45A)-C(45')-C(44')	73(2)
C(45A)-C(45')-C(47')	133(3)
C(44')-C(45')-C(47')	62.4(12)
C(45')-C(45A)-C(44')	67(2)
C(46A)-C(46')-C(44')	72(2)
C(46A)-C(46')-C(47')	125(3)
C(44')-C(46')-C(47')	53.4(9)
C(46')-C(46A)-C(44')	77(2)
C(44')-C(47')-C(45')	49.7(11)
C(44')-C(47')-C(46')	48.1(9)
C(45')-C(47')-C(46')	88.4(13)
C(49')-C(48')-C(43')	123.2(6)
C(42')-C(49')-C(48')	117.8(6)
C(42')-C(49')-C(50')	118.2(7)
C(48')-C(49')-C(50')	124.0(7)
C(49')-C(50')-C(51')	108.4(7)
C(49')-C(50')-C(53')	107.9(7)
C(51')-C(50')-C(53')	112.1(9)
C(49')-C(50')-C(52')	110.2(8)
C(51')-C(50')-C(52')	110.1(9)
C(53')-C(50')-C(52')	108.2(7)
C(41')-C(54')-C(43')	121.5(6)
C(57')-C(55')-C(31')	126.7(6)
C(31')-N(56')-C(39')	123.4(5)
C(31')-N(56')-C(40')	120.0(5)
C(39')-N(56')-C(40')	116.3(6)
N(30')-C(57')-C(55')	119.6(5)
N(30')-C(57')-C(58')	117.3(6)
C(55')-C(57')-C(58')	123.0(6)
C(59')-C(58')-C(57')	121.1(6)
C(58')-C(59')-C(60')	121.7(6)
C(61')-C(60')-C(59')	123.5(7)
C(61')-C(60')-C(65')	118.5(7)
C(59')-C(60')-C(65')	118.0(7)
C(62')-C(61')-C(60')	121.9(7)
C(61')-C(62')-C(63')	119.3(8)
C(64')-C(63')-C(62')	120.9(7)
C(63')-C(64')-C(65')	120.5(7)
N(30')-C(65')-C(64')	122.8(6)
N(30')-C(65')-C(60')	118.4(6)
C(64')-C(65')-C(60')	118.9(7)
N(30')-C(66')-C(67')	113.6(5)
C(80')-C(67')-C(68')	120.0(6)

Atoms	Angle
C(80')-C(67')-C(66')	118.1(6)
C(68')-C(67')-C(66')	121.9(5)
C(67')-C(68')-C(69')	120.7(6)
C(74')-C(69')-C(68')	117.7(6)
C(74')-C(69')-C(70')	123.3(6)
C(68')-C(69')-C(70')	119.0(5)
C(73')-C(70')-C(72')	109.2(6)
C(73')-C(70')-C(71')	107.6(7)
C(72')-C(70')-C(71')	108.2(6)
C(73')-C(70')-C(69')	110.8(6)
C(72')-C(70')-C(69')	110.3(6)
C(71')-C(70')-C(69')	110.6(6)
C(75')-C(74')-C(69')	122.3(6)
C(74')-C(75')-C(80')	118.5(6)
C(74')-C(75')-C(76')	119.7(6)
C(80')-C(75')-C(76')	121.7(7)
C(77A)-C(76')-C(75')	110.3(9)
C(77A)-C(76')-C(78')	96.0(11)
C(75')-C(76')-C(78')	108.7(7)
C(77A)-C(76')-C(77')	30.9(9)
C(75')-C(76')-C(77')	108.2(9)
C(78')-C(76')-C(77')	123.8(11)
C(77A)-C(76')-C(79')	122.3(11)
C(75')-C(76')-C(79')	111.9(7)
C(78')-C(76')-C(79')	105.4(9)
C(77')-C(76')-C(79')	98.2(11)
C(77A)-C(77')-C(76')	72(2)
C(77')-C(77A)-C(76')	77(2)
C(67')-C(80')-C(75')	120.7(6)
C(6)-C(1)-C(2)	114.3(7)
C(6)-C(1)-B(29)	122.9(6)
C(2)-C(1)-B(29)	122.8(6)
C(3)-C(2)-C(1)	121.4(7)
C(3)-C(2)-C(14)	116.7(7)
C(1)-C(2)-C(14)	121.9(7)
C(4)-C(3)-C(2)	120.2(7)
C(5)-C(4)-C(3)	122.4(8)
C(4)-C(5)-C(6)	116.7(8)
C(1)-C(6)-O(7)	123.3(7)
C(1)-C(6)-C(5)	125.0(7)
O(7)-C(6)-C(5)	111.7(7)
C(8)-O(7)-C(6)	122.8(6)
O(7)-C(8)-C(9)	117.3(7)

Atoms	Angle
O(7)-C(8)-C(13)	122.7(6)
C(9)-C(8)-C(13)	119.8(7)
C(10)-C(9)-C(8)	121.6(8)
C(11)-C(10)-C(9)	120.7(8)
C(10)-C(11)-C(12)	120.4(9)
C(13)-C(12)-C(11)	118.8(9)
C(12)-C(13)-C(8)	118.7(7)
C(12)-C(13)-B(29)	120.3(8)
C(8)-C(13)-B(29)	121.0(6)
C(20)-C(15)-C(16)	115.4(7)
C(20)-C(15)-B(29)	121.4(6)
C(16)-C(15)-B(29)	123.2(6)
C(17)-C(16)-C(15)	120.1(8)
C(17)-C(16)-C(28)	117.9(8)
C(15)-C(16)-C(28)	122.0(6)
C(16)-C(17)-C(18)	121.8(9)
C(19)-C(18)-C(17)	118.2(9)
C(18)-C(19)-C(20)	118.9(10)
C(15)-C(20)-C(19)	125.6(9)
C(15)-C(20)-O(21)	123.5(7)
C(19)-C(20)-O(21)	111.0(8)
C(22)-O(21)-C(20)	121.3(7)
O(21)-C(22)-C(27)	124.0(7)
O(21)-C(22)-C(23)	114.2(9)
C(27)-C(22)-C(23)	121.8(9)
C(22)-C(23)-C(24)	117.7(10)
C(25)-C(24)-C(23)	121.4(10)
C(24)-C(25)-C(26)	118.9(11)
C(25)-C(26)-C(27)	123.5(10)
C(22)-C(27)-C(26)	116.7(7)
C(22)-C(27)-B(29)	121.5(7)
C(26)-C(27)-B(29)	121.8(7)
C(27)-B(29)-C(1)	108.7(5)
C(27)-B(29)-C(15)	108.2(6)
C(1)-B(29)-C(15)	112.0(5)
C(27)-B(29)-C(13)	110.2(6)
C(1)-B(29)-C(13)	107.0(6)
C(15)-B(29)-C(13)	110.8(5)
C(31)-N(30)-C(39)	124.6(6)
C(31)-N(30)-C(40)	118.5(6)
C(39)-N(30)-C(40)	116.8(7)
C(55)-C(31)-N(30)	120.5(6)
C(55)-C(31)-C(32)	124.5(8)

Atoms	Angle
N(30)-C(31)-C(32)	114.9(7)
C(33)-C(32)-C(31)	122.8(8)
C(32)-C(33)-C(34)	121.2(7)
C(35)-C(34)-C(39)	117.9(9)
C(35)-C(34)-C(33)	123.9(8)
C(39)-C(34)-C(33)	118.1(7)
C(36)-C(35)-C(34)	121.7(8)
C(35)-C(36)-C(37)	119.8(9)
C(38)-C(37)-C(36)	120.1(10)
C(37)-C(38)-C(39)	120.4(8)
C(38)-C(39)-N(30)	122.5(7)
C(38)-C(39)-C(34)	120.1(8)
N(30)-C(39)-C(34)	117.4(8)
N(30)-C(40)-C(41)	114.6(5)
C(42)-C(41)-C(54)	118.2(6)
C(42)-C(41)-C(40)	121.8(6)
C(54)-C(41)-C(40)	119.9(6)
C(41)-C(42)-C(43)	122.6(7)
C(42)-C(43)-C(48)	116.9(7)
C(42)-C(43)-C(44)	122.6(7)
C(48)-C(43)-C(44)	120.5(7)
C(45)-C(44)-C(47A)	71(2)
C(45)-C(44)-C(43)	118.1(11)
C(47A)-C(44)-C(43)	113(2)
C(45)-C(44)-C(46)	120.4(11)
C(47A)-C(44)-C(46)	114(2)
C(43)-C(44)-C(46)	113.3(7)
C(45)-C(44)-C(45B)	29.2(10)
C(47A)-C(44)-C(45B)	101(2)
C(43)-C(44)-C(45B)	108.7(11)
C(46)-C(44)-C(45B)	106.7(10)
C(45)-C(44)-C(47)	95.7(12)
C(47A)-C(44)-C(47)	24.7(14)
C(43)-C(44)-C(47)	105.2(9)
C(46)-C(44)-C(47)	98.2(10)
C(45B)-C(44)-C(47)	124.6(12)
C(45B)-C(45)-C(44)	91(3)
C(45B)-C(45)-C(47A)	145(3)
C(44)-C(45)-C(47A)	54.9(13)
C(45)-C(45B)-C(44)	60(2)
C(47A)-C(47)-C(44)	50(3)
C(47)-C(47A)-C(44)	105(4)
C(47)-C(47A)-C(45)	157(4)

Atoms	Angle
C(44)-C(47A)-C(45)	53.7(14)
C(49)-C(48)-C(43)	122.2(7)
C(48)-C(49)-C(54)	118.1(7)
C(48)-C(49)-C(50)	122.3(7)
C(54)-C(49)-C(50)	119.6(7)
C(52)-C(50)-C(49)	112.8(7)
C(52)-C(50)-C(51)	108.5(8)
C(49)-C(50)-C(51)	109.1(7)
C(52)-C(50)-C(53)	108.3(7)
C(49)-C(50)-C(53)	108.6(7)
C(51)-C(50)-C(53)	109.4(8)
C(49)-C(54)-C(41)	122.0(7)
C(31)-C(55)-C(57)	127.2(7)
C(57)-N(56)-C(65)	123.1(6)
C(57)-N(56)-C(66)	117.7(7)
C(65)-N(56)-C(66)	119.2(6)
N(56)-C(57)-C(55)	120.3(6)
N(56)-C(57)-C(58)	116.0(8)
C(55)-C(57)-C(58)	123.6(7)
C(59)-C(58)-C(57)	122.5(7)
C(58)-C(59)-C(60)	121.3(7)
C(61)-C(60)-C(65)	119.0(8)
C(61)-C(60)-C(59)	123.6(7)
C(65)-C(60)-C(59)	117.3(8)
C(62)-C(61)-C(60)	123.0(8)
C(61)-C(62)-C(63)	118.4(9)
C(64)-C(63)-C(62)	120.9(9)
C(63)-C(64)-C(65)	120.3(8)
N(56)-C(65)-C(60)	119.5(7)
N(56)-C(65)-C(64)	122.2(7)
C(60)-C(65)-C(64)	118.3(8)
N(56)-C(66)-C(67)	114.1(5)
C(80)-C(67)-C(68)	119.3(6)
C(80)-C(67)-C(66)	118.9(6)
C(68)-C(67)-C(66)	121.7(6)
C(67)-C(68)-C(69)	120.8(6)
C(74)-C(69)-C(68)	117.7(6)
C(74)-C(69)-C(70)	123.4(6)
C(68)-C(69)-C(70)	119.0(6)
C(73)-C(70)-C(72)	109.6(7)
C(73)-C(70)-C(71)	108.4(6)
C(72)-C(70)-C(71)	108.2(7)
C(73)-C(70)-C(69)	111.1(6)

Atoms	Angle
C(72)-C(70)-C(69)	109.9(6)
C(71)-C(70)-C(69)	109.6(6)
C(69)-C(74)-C(75)	122.8(6)
C(80)-C(75)-C(74)	118.3(6)
C(80)-C(75)-C(76)	120.9(7)
C(74)-C(75)-C(76)	120.7(6)
C(77B)-C(76)-C(78)	111.1(10)
C(77B)-C(76)-C(75)	108.7(8)
C(78)-C(76)-C(75)	109.7(8)
C(77B)-C(76)-C(79)	115.4(10)
C(78)-C(76)-C(79)	99.9(9)
C(75)-C(76)-C(79)	111.7(6)
C(77B)-C(76)-C(78B)	80.6(13)
C(78)-C(76)-C(78B)	33.7(9)
C(75)-C(76)-C(78B)	108.0(11)
C(79)-C(76)-C(78B)	127.9(11)
C(77B)-C(76)-C(77)	27.5(10)
C(78)-C(76)-C(77)	131.3(12)
C(75)-C(76)-C(77)	109.7(11)
C(79)-C(76)-C(77)	91.1(13)
C(78B)-C(76)-C(77)	106(2)
C(77B)-C(77)-C(76)	68(3)
C(77)-C(77B)-C(76)	84(3)
C(77)-C(77B)-C(78B)	131(3)
C(76)-C(77B)-C(78B)	51.9(10)
C(78B)-C(78)-C(76)	78(2)
C(78)-C(78B)-C(76)	68(2)
C(78)-C(78B)-C(77B)	111(3)
C(76)-C(78B)-C(77B)	47.4(9)
C(75)-C(80)-C(67)	121.2(7)
C(6')-C(1')-C(2')	116.5(7)
C(6')-C(1')-B(29')	119.4(6)
C(2')-C(1')-B(29')	124.1(7)
C(3')-C(2')-C(1')	121.4(7)
C(3')-C(2')-C(14')	118.8(7)
C(1')-C(2')-C(14')	119.8(7)
C(2')-C(3')-C(4')	119.9(8)
C(5')-C(4')-C(3')	119.7(8)
C(6')-C(5')-C(4')	118.5(8)
C(5')-C(6')-C(1')	123.9(7)
C(5')-C(6')-O(7')	111.1(7)
C(1')-C(6')-O(7')	125.0(6)
C(8')-O(7')-C(6')	120.0(6)

Atoms	Angle
O(7')-C(8')-C(13')	123.9(7)
O(7')-C(8')-C(9')	114.6(7)
C(13')-C(8')-C(9')	121.4(8)
C(10')-C(9')-C(8')	120.4(8)
C(9')-C(10')-C(11')	120.7(8)
C(10')-C(11')-C(12')	118.6(9)
C(13')-C(12')-C(11')	123.8(8)
C(12')-C(13')-C(8')	114.9(7)
C(12')-C(13')-B(29')	123.3(7)
C(8')-C(13')-B(29')	121.8(7)
C(20')-C(15')-C(16')	115.1(6)
C(20')-C(15')-B(29')	121.6(6)
C(16')-C(15')-B(29')	123.1(6)
C(17')-C(16')-C(15')	122.2(7)
C(17')-C(16')-C(28')	116.5(6)
C(15')-C(16')-C(28')	121.3(7)
C(18')-C(17')-C(16')	120.3(7)
C(19')-C(18')-C(17')	119.4(7)
C(18')-C(19')-C(20')	119.5(7)
C(15')-C(20')-O(21')	123.9(6)
C(15')-C(20')-C(19')	123.4(6)
O(21')-C(20')-C(19')	112.7(6)
C(20')-O(21')-C(22')	121.1(5)
C(27')-C(22')-C(23')	125.0(7)
C(27')-C(22')-O(21')	121.7(6)
C(23')-C(22')-O(21')	113.3(7)
C(22')-C(23')-C(24')	120.0(7)
C(25')-C(24')-C(23')	118.0(7)
C(24')-C(25')-C(26')	120.9(7)
C(25')-C(26')-C(27')	121.9(7)
C(22')-C(27')-C(26')	114.2(6)
C(22')-C(27')-B(29')	124.2(6)
C(26')-C(27')-B(29')	121.6(6)
C(13')-B(29')-C(15')	108.6(6)
C(13')-B(29')-C(27')	107.9(5)
C(15')-B(29')-C(27')	105.7(6)
C(13')-B(29')-C(1')	109.3(6)
C(15')-B(29')-C(1')	113.7(5)
C(27')-B(29')-C(1')	111.4(5)
C(6'')-C(1'')-C(2'')	115.8(7)
C(6'')-C(1'')-B(29'')	123.3(7)
C(2'')-C(1'')-B(29'')	120.9(7)
C(3'')-C(2'')-C(1'')	118.8(7)

Atoms	Angle
C(3")-C(2")-C(14")	118.4(7)
C(1")-C(2")-C(14")	122.8(7)
C(4")-C(3")-C(2")	121.7(8)
C(5")-C(4")-C(3")	121.5(9)
C(4")-C(5")-C(6")	118.0(9)
C(1")-C(6")-O(7")	124.1(7)
C(1")-C(6")-C(5")	124.2(7)
O(7")-C(6")-C(5")	111.7(7)
C(6")-O(7")-C(8")	121.9(6)
C(9")-C(8")-O(7")	115.4(8)
C(9")-C(8")-C(13")	122.4(8)
O(7")-C(8")-C(13")	122.2(6)
C(8")-C(9")-C(10")	118.5(9)
C(11")-C(10")-C(9")	122.1(8)
C(10")-C(11")-C(12")	118.8(8)
C(13")-C(12")-C(11")	122.1(8)
C(12")-C(13")-C(8")	116.1(6)
C(12")-C(13")-B(29")	122.2(7)
C(8")-C(13")-B(29")	121.7(6)
C(16")-C(15")-C(20A)	83(2)
C(16")-C(15")-C(20")	109(2)
C(20A)-C(15")-C(20")	26.8(13)
C(16")-C(15")-B(29")	136.7(14)
C(20A)-C(15")-B(29")	139(2)
C(20")-C(15")-B(29")	114.0(11)
C(16")-C(15")-C(16A)	19.7(11)
C(20A)-C(15")-C(16A)	102(2)
C(20")-C(15")-C(16A)	128.6(12)
B(29")-C(15")-C(16A)	117.4(9)
C(16A)-C(16")-C(15")	127(3)
C(16A)-C(16")-C(17")	97(3)
C(15")-C(16")-C(17")	136(2)
C(16A)-C(16")-C(20A)	178(3)
C(15")-C(16")-C(20A)	50.7(13)
C(17")-C(16")-C(20A)	85(2)
C(16A)-C(16")-C(17A)	66(2)
C(15")-C(16")-C(17A)	166(2)
C(17")-C(16")-C(17A)	30.5(9)
C(20A)-C(16")-C(17A)	116(2)
C(16A)-C(16")-C(28")	12(2)
C(15")-C(16")-C(28")	116(2)
C(17")-C(16")-C(28")	108(2)
C(20A)-C(16")-C(28")	166(2)

Atoms	Angle
C(17A)-C(16'')-C(28'')	78.0(14)
C(16'')-C(16A)-C(28'')	160(3)
C(16'')-C(16A)-C(17A)	88(3)
C(28'')-C(16A)-C(17A)	112(2)
C(16'')-C(16A)-C(28A)	157(3)
C(28'')-C(16A)-C(28A)	7.7(14)
C(17A)-C(16A)-C(28A)	114(2)
C(16'')-C(16A)-C(15'')	33(2)
C(28'')-C(16A)-C(15'')	127(2)
C(17A)-C(16A)-C(15'')	121(2)
C(28A)-C(16A)-C(15'')	124.4(11)
C(16'')-C(16A)-C(17'')	59(2)
C(28'')-C(16A)-C(17'')	142(2)
C(17A)-C(16A)-C(17'')	29.8(9)
C(28A)-C(16A)-C(17'')	143.5(14)
C(15'')-C(16A)-C(17'')	91.5(12)
C(18A)-C(17'')-C(17A)	114(4)
C(18A)-C(17'')-C(18'')	47(2)
C(17A)-C(17'')-C(18'')	161(3)
C(18A)-C(17'')-C(16'')	157(3)
C(17A)-C(17'')-C(16'')	89(3)
C(18'')-C(17'')-C(16'')	111(2)
C(18A)-C(17'')-C(16A)	178(3)
C(17A)-C(17'')-C(16A)	64(2)
C(18'')-C(17'')-C(16A)	135(2)
C(16'')-C(17'')-C(16A)	24.7(8)
C(18A)-C(17'')-C(19A)	63(3)
C(17A)-C(17'')-C(19A)	174(3)
C(18'')-C(17'')-C(19A)	16.6(10)
C(16'')-C(17'')-C(19A)	94.2(14)
C(16A)-C(17'')-C(19A)	118.9(13)
C(18A)-C(17'')-C(20A)	107(3)
C(17A)-C(17'')-C(20A)	138(3)
C(18'')-C(17'')-C(20A)	60.9(14)
C(16'')-C(17'')-C(20A)	49.7(13)
C(16A)-C(17'')-C(20A)	74.5(12)
C(19A)-C(17'')-C(20A)	44.5(10)
C(17'')-C(17A)-C(18A)	33(2)
C(17'')-C(17A)-C(16A)	86(2)
C(18A)-C(17A)-C(16A)	119(2)
C(17'')-C(17A)-C(16'')	61(2)
C(18A)-C(17A)-C(16'')	94(2)
C(16A)-C(17A)-C(16'')	25.4(8)

Atoms	Angle
C(17'')-C(17A)-C(18'')	11(2)
C(18A)-C(17A)-C(18'')	21.4(12)
C(16A)-C(17A)-C(18'')	97.7(14)
C(16'')-C(17A)-C(18'')	72.3(12)
C(19A)-C(18'')-C(18A)	172(3)
C(19A)-C(18'')-C(17'')	139(2)
C(18A)-C(18'')-C(17'')	45(2)
C(19A)-C(18'')-C(19'')	6(2)
C(18A)-C(18'')-C(19'')	171(2)
C(17'')-C(18'')-C(19'')	133(2)
C(19A)-C(18'')-C(20A)	56(2)
C(18A)-C(18'')-C(20A)	128(3)
C(17'')-C(18'')-C(20A)	84(2)
C(19'')-C(18'')-C(20A)	50.2(12)
C(19A)-C(18'')-C(17A)	147(2)
C(18A)-C(18'')-C(17A)	37(2)
C(17'')-C(18'')-C(17A)	8.0(13)
C(19'')-C(18'')-C(17A)	140.9(12)
C(20A)-C(18'')-C(17A)	91.7(13)
C(17'')-C(18A)-C(18'')	89(3)
C(17'')-C(18A)-C(17A)	33(2)
C(18'')-C(18A)-C(17A)	122(3)
C(17'')-C(18A)-C(19A)	91(3)
C(18'')-C(18A)-C(19A)	4(2)
C(17A)-C(18A)-C(19A)	124(2)
C(19A)-C(19'')-C(20'')	104(3)
C(19A)-C(19'')-C(20A)	74(2)
C(20'')-C(19'')-C(20A)	29.3(11)
C(19A)-C(19'')-C(18'')	6(2)
C(20'')-C(19'')-C(18'')	98(2)
C(20A)-C(19'')-C(18'')	69(2)
C(19A)-C(19'')-O(21A)	135(3)
C(20'')-C(19'')-O(21A)	31.3(10)
C(20A)-C(19'')-O(21A)	60.4(14)
C(18'')-C(19'')-O(21A)	130(2)
C(18'')-C(19A)-C(19'')	169(3)
C(18'')-C(19A)-C(20A)	97(2)
C(19'')-C(19A)-C(20A)	72(2)
C(18'')-C(19A)-C(18A)	4(2)
C(19'')-C(19A)-C(18A)	169(2)
C(20A)-C(19A)-C(18A)	99(2)
C(18'')-C(19A)-C(20'')	121(2)
C(19'')-C(19A)-C(20'')	48(2)

Atoms	Angle
C(20A)-C(19A)-C(20")	23.7(10)
C(18A)-C(19A)-C(20")	123(2)
C(18")-C(19A)-C(17")	24(2)
C(19")-C(19A)-C(17")	145(2)
C(20A)-C(19A)-C(17")	73(2)
C(18A)-C(19A)-C(17")	26.1(10)
C(20")-C(19A)-C(17")	96.5(12)
C(20A)-C(20")-O(21A)	171(4)
C(20A)-C(20")-C(19")	84(3)
O(21A)-C(20")-C(19")	96(2)
C(20A)-C(20")-C(15")	49(3)
O(21A)-C(20")-C(15")	131(2)
C(19")-C(20")-C(15")	132(2)
C(20A)-C(20")-O(21")	170(3)
O(21A)-C(20")-O(21")	12.6(12)
C(19")-C(20")-O(21")	106(2)
C(15")-C(20")-O(21")	121.3(12)
C(20A)-C(20")-C(19A)	56(3)
O(21A)-C(20")-C(19A)	124(2)
C(19")-C(20")-C(19A)	28.0(10)
C(15")-C(20")-C(19A)	104(2)
O(21")-C(20")-C(19A)	134(2)
C(20")-C(20A)-C(15")	104(3)
C(20")-C(20A)-C(19")	67(3)
C(15")-C(20A)-C(19")	169(3)
C(20")-C(20A)-C(19A)	101(3)
C(15")-C(20A)-C(19A)	154(3)
C(19")-C(20A)-C(19A)	33.6(10)
C(20")-C(20A)-C(16")	150(4)
C(15")-C(20A)-C(16")	46.7(13)
C(19")-C(20A)-C(16")	140(2)
C(19A)-C(20A)-C(16")	107(2)
C(20")-C(20A)-O(21A)	5(2)
C(15")-C(20A)-O(21A)	105(2)
C(19")-C(20A)-O(21A)	67(2)
C(19A)-C(20A)-O(21A)	101(2)
C(16")-C(20A)-O(21A)	151(2)
C(20")-C(20A)-C(18")	128(4)
C(15")-C(20A)-C(18")	127(2)
C(19")-C(20A)-C(18")	60.7(14)
C(19A)-C(20A)-C(18")	27.1(8)
C(16")-C(20A)-C(18")	80(2)
O(21A)-C(20A)-C(18")	128(2)

Atoms	Angle
C(20")-C(20A)-C(17")	160(4)
C(15")-C(20A)-C(17")	92(2)
C(19")-C(20A)-C(17")	96(2)
C(19A)-C(20A)-C(17")	62.3(14)
C(16")-C(20A)-C(17")	45.0(12)
O(21A)-C(20A)-C(17")	162(2)
C(18")-C(20A)-C(17")	35.2(9)
O(21A)-O(21")-C(22")	122(3)
O(21A)-O(21")-C(23A)	151(2)
C(22")-O(21")-C(23A)	48(2)
O(21A)-O(21")-C(20")	14.5(14)
C(22")-O(21")-C(20")	115(2)
C(23A)-O(21")-C(20")	156(2)
O(21")-O(21A)-C(20")	153(3)
O(21")-O(21A)-C(20A)	155(2)
C(20")-O(21A)-C(20A)	4(2)
O(21")-O(21A)-C(22")	35(2)
C(20")-O(21A)-C(22")	129(2)
C(20A)-O(21A)-C(22")	128.6(13)
O(21")-O(21A)-C(19")	146(2)
C(20")-O(21A)-C(19")	52(2)
C(20A)-O(21A)-C(19")	52.3(13)
C(22")-O(21A)-C(19")	176.5(11)
O(21")-C(22")-C(23A)	88(2)
O(21")-C(22")-C(27")	134(2)
C(23A)-C(22")-C(27")	139(2)
O(21")-C(22")-C(23")	113(2)
C(23A)-C(22")-C(23")	28(2)
C(27")-C(22")-C(23")	112.0(14)
O(21")-C(22")-O(21A)	23.5(11)
C(23A)-C(22")-O(21A)	107(2)
C(27")-C(22")-O(21A)	113.7(10)
C(23")-C(22")-O(21A)	134.2(14)
C(24")-C(23")-C(23A)	156(5)
C(24")-C(23")-C(24A)	14(3)
C(23A)-C(23")-C(24A)	162(4)
C(24")-C(23")-C(22")	132(3)
C(23A)-C(23")-C(22")	44(3)
C(24A)-C(23")-C(22")	124(2)
C(24")-C(23")-C(25")	42(3)
C(23A)-C(23")-C(25")	132(3)
C(24A)-C(23")-C(25")	32.8(9)
C(22")-C(23")-C(25")	91.7(12)

Atoms	Angle
C(23'')-C(23A)-C(22'')	108(4)
C(23'')-C(23A)-C(24'')	12(2)
C(22'')-C(23A)-C(24'')	108(3)
C(23'')-C(23A)-O(21'')	145(4)
C(22'')-C(23A)-O(21'')	44.3(14)
C(24'')-C(23A)-O(21'')	151(3)
C(24A)-C(24'')-C(23'')	151(5)
C(24A)-C(24'')-C(25'')	45(3)
C(23'')-C(24'')-C(25'')	118(3)
C(24A)-C(24'')-C(23A)	157(4)
C(23'')-C(24'')-C(23A)	13(3)
C(25'')-C(24'')-C(23A)	116(2)
C(24A)-C(24'')-C(25A)	32(3)
C(23'')-C(24'')-C(25A)	130(3)
C(25'')-C(24'')-C(25A)	12.9(12)
C(23A)-C(24'')-C(25A)	129(2)
C(24'')-C(24A)-C(25'')	108(4)
C(24'')-C(24A)-C(23'')	15(3)
C(25'')-C(24A)-C(23'')	100(2)
C(24'')-C(24A)-C(25A)	134(4)
C(25'')-C(24A)-C(25A)	26(2)
C(23'')-C(24A)-C(25A)	126(2)
C(25A)-C(25'')-C(24A)	113(4)
C(25A)-C(25'')-C(26'')	90(3)
C(24A)-C(25'')-C(26'')	153(3)
C(25A)-C(25'')-C(24'')	141(4)
C(24A)-C(25'')-C(24'')	28(2)
C(26'')-C(25'')-C(24'')	129(2)
C(25A)-C(25'')-C(23'')	159(3)
C(24A)-C(25'')-C(23'')	47(2)
C(26'')-C(25'')-C(23'')	108(2)
C(24'')-C(25'')-C(23'')	20.7(12)
C(25'')-C(25A)-C(24A)	41(2)
C(25'')-C(25A)-C(26'')	64(3)
C(24A)-C(25A)-C(26'')	103(2)
C(25'')-C(25A)-C(24'')	27(3)
C(24A)-C(25A)-C(24'')	14.5(12)
C(26'')-C(25A)-C(24'')	89.7(13)
C(27'')-C(26'')-C(25'')	109.6(13)
C(27'')-C(26'')-C(25A)	136.1(12)
C(25'')-C(26'')-C(25A)	26.7(9)
C(26'')-C(27'')-C(22'')	117.9(10)
C(26'')-C(27'')-B(29'')	122.4(8)

Atoms	Angle
C(22")-C(27")-B(29")	119.7(10)
C(28A)-C(28")-C(16A)	162(3)
C(28A)-C(28")-C(16")	159(3)
C(16A)-C(28")-C(16")	8.6(12)
C(28")-C(28A)-C(16A)	11(2)
C(15")-B(29")-C(27")	111.8(8)
C(15")-B(29")-C(13")	109.6(6)
C(27")-B(29")-C(13")	108.3(6)
C(15")-B(29")-C(1")	112.1(7)
C(27")-B(29")-C(1")	108.3(6)
C(13")-B(29")-C(1")	106.5(6)
C(57")-N(30")-C(65")	123.8(5)
C(57")-N(30")-C(66")	119.9(6)
C(65")-N(30")-C(66")	116.2(5)
N(56")-C(31")-C(55")	119.1(6)
N(56")-C(31")-C(32")	116.9(6)
C(55")-C(31")-C(32")	123.9(7)
C(33")-C(32")-C(31")	121.3(7)
C(32")-C(33")-C(34")	121.3(6)
C(35")-C(34")-C(39")	120.6(7)
C(35")-C(34")-C(33")	122.3(6)
C(39")-C(34")-C(33")	117.1(6)
C(36")-C(35")-C(34")	120.5(7)
C(35")-C(36")-C(37")	118.9(7)
C(38")-C(37")-C(36")	121.8(8)
C(37")-C(38")-C(39")	120.1(7)
N(56")-C(39")-C(38")	122.1(6)
N(56")-C(39")-C(34")	119.9(6)
C(38")-C(39")-C(34")	118.0(6)
N(56")-C(40")-C(41")	114.2(5)
C(42")-C(41")-C(54")	119.8(6)
C(42")-C(41")-C(40")	122.0(6)
C(54")-C(41")-C(40")	118.2(6)
C(41")-C(42")-C(43")	120.6(7)
C(48")-C(43")-C(42")	117.5(7)
C(48")-C(43")-C(44")	124.2(7)
C(42")-C(43")-C(44")	118.3(7)
C(43")-C(44")-C(47")	109.7(6)
C(43")-C(44")-C(46")	110.6(7)
C(47")-C(44")-C(46")	110.6(8)
C(43")-C(44")-C(45")	113.1(7)
C(47")-C(44")-C(45")	104.3(8)
C(46")-C(44")-C(45")	108.3(7)

Atoms	Angle
C(43")-C(48")-C(49")	123.3(7)
C(54")-C(49")-C(48")	118.2(7)
C(54")-C(49")-C(50")	118.9(7)
C(48")-C(49")-C(50")	122.8(7)
C(53")-C(50")-C(51B)	123.3(12)
C(53")-C(50")-C(49")	115.6(9)
C(51B)-C(50")-C(49")	115.2(11)
C(53")-C(50")-C(51")	110.2(10)
C(51B)-C(50")-C(51")	28.9(10)
C(49")-C(50")-C(51")	107.8(9)
C(53")-C(50")-C(52")	95.8(10)
C(51B)-C(50")-C(52")	90.8(13)
C(49")-C(50")-C(52")	108.5(7)
C(51")-C(50")-C(52")	119.0(11)
C(53")-C(50")-C(53B)	24.8(10)
C(51B)-C(50")-C(53B)	118.9(13)
C(49")-C(50")-C(53B)	103.1(10)
C(51")-C(50")-C(53B)	96.2(11)
C(52")-C(50")-C(53B)	120.5(11)
C(51B)-C(51")-C(50")	74(3)
C(51")-C(51B)-C(50")	77(3)
C(53B)-C(53")-C(50")	101(3)
C(53")-C(53B)-C(50")	54(2)
C(49")-C(54")-C(41")	120.5(7)
C(31")-C(55")-C(57")	126.4(6)
C(31")-N(56")-C(39")	122.5(5)
C(31")-N(56")-C(40")	119.0(5)
C(39")-N(56")-C(40")	118.5(6)
N(30")-C(57")-C(55")	120.3(6)
N(30")-C(57")-C(58")	117.3(6)
C(55")-C(57")-C(58")	122.3(6)
C(59")-C(58")-C(57")	120.4(7)
C(58")-C(59")-C(60")	122.1(6)
C(61")-C(60")-C(59")	122.5(6)
C(61")-C(60")-C(65")	119.2(7)
C(59")-C(60")-C(65")	118.2(7)
C(62")-C(61")-C(60")	121.6(7)
C(61")-C(62")-C(63")	118.6(7)
C(64")-C(63")-C(62")	120.6(7)
C(63")-C(64")-C(65")	122.4(7)
C(64")-C(65")-N(30")	124.6(6)
C(64")-C(65")-C(60")	117.4(7)
N(30")-C(65")-C(60")	118.0(6)

Atoms	Angle
N(30")-C(66")-C(67")	114.4(5)
C(68")-C(67")-C(80")	119.9(7)
C(68")-C(67")-C(66")	118.2(6)
C(80")-C(67")-C(66")	121.9(6)
C(67")-C(68")-C(69")	121.5(7)
C(68")-C(69")-C(74")	116.9(7)
C(68")-C(69")-C(70")	128.2(11)
C(74")-C(69")-C(70")	113.4(11)
C(68")-C(69")-C(70C)	115.0(10)
C(74")-C(69")-C(70C)	126.6(9)
C(70")-C(69")-C(70C)	26.8(9)
C(70C)-C(70")-C(73")	120(3)
C(70C)-C(70")-C(69")	94(3)
C(73")-C(70")-C(69")	143(2)
C(70C)-C(70")-C(71")	110(3)
C(73")-C(70")-C(71")	64(2)
C(69")-C(70")-C(71")	122(2)
C(70C)-C(70")-C(73C)	128(3)
C(73")-C(70")-C(73C)	36(2)
C(69")-C(70")-C(73C)	111(2)
C(71")-C(70")-C(73C)	94(2)
C(70C)-C(70")-C(71C)	45(2)
C(73")-C(70")-C(71C)	113(2)
C(69")-C(70")-C(71C)	101.7(14)
C(71")-C(70")-C(71C)	69(2)
C(73C)-C(70")-C(71C)	147(2)
C(70C)-C(70")-C(72")	35(2)
C(73")-C(70")-C(72")	99(2)
C(69")-C(70")-C(72")	100.3(13)
C(71")-C(70")-C(72")	129(2)
C(73C)-C(70")-C(72")	94(2)
C(71C)-C(70")-C(72")	77.0(14)
C(70")-C(70C)-C(72")	126(3)
C(70")-C(70C)-C(71C)	113(3)
C(72")-C(70C)-C(71C)	116(2)
C(70")-C(70C)-C(73")	37(2)
C(72")-C(70C)-C(73")	103(2)
C(71C)-C(70C)-C(73")	110(2)
C(70")-C(70C)-C(69")	60(2)
C(72")-C(70C)-C(69")	117.1(13)
C(71C)-C(70C)-C(69")	112(2)
C(73")-C(70C)-C(69")	95(2)
C(70")-C(70C)-C(71")	48(2)

Atoms	Angle
C(72")-C(70C)-C(71")	142(2)
C(71C)-C(70C)-C(71")	68(2)
C(73")-C(70C)-C(71")	46.8(12)
C(69")-C(70C)-C(71")	92.4(14)
C(73")-C(71")-C(70")	45.3(13)
C(73")-C(71")-C(71C)	96(2)
C(70")-C(71")-C(71C)	63(2)
C(73")-C(71")-C(70C)	57(2)
C(70")-C(71")-C(70C)	21.8(10)
C(71C)-C(71")-C(70C)	42.7(10)
C(70C)-C(71C)-C(70")	22.5(10)
C(70C)-C(71C)-C(71")	69(2)
C(70")-C(71C)-C(71")	47.8(12)
C(70C)-C(72")-C(70")	19.0(10)
C(73C)-C(73")-C(70")	99(3)
C(73C)-C(73")-C(71")	146(3)
C(70")-C(73")-C(71")	71(2)
C(73C)-C(73")-C(70C)	108(3)
C(70")-C(73")-C(70C)	23.6(14)
C(71")-C(73")-C(70C)	76(2)
C(73")-C(73C)-C(70")	45(2)
C(75")-C(74")-C(69")	123.5(7)
C(74")-C(75")-C(80")	117.0(7)
C(74")-C(75")-C(76")	122.7(7)
C(80")-C(75")-C(76")	120.3(7)
C(78")-C(76")-C(77A)	130(2)
C(78")-C(76")-C(75")	113.9(14)
C(77A)-C(76")-C(75")	108.4(8)
C(78")-C(76")-C(79")	87(2)
C(77A)-C(76")-C(79")	104.0(9)
C(75")-C(76")-C(79")	109.0(7)
C(78")-C(76")-C(78C)	27.5(13)
C(77A)-C(76")-C(78C)	112.4(10)
C(75")-C(76")-C(78C)	109.2(9)
C(79")-C(76")-C(78C)	113.6(10)
C(78")-C(76")-C(77")	114(2)
C(77A)-C(76")-C(77")	24.2(9)
C(75")-C(76")-C(77")	106.2(11)
C(79")-C(76")-C(77")	125.6(11)
C(78C)-C(76")-C(77")	91.5(11)
C(78")-C(76")-C(79A)	119(2)
C(77A)-C(76")-C(79A)	64(2)
C(75")-C(76")-C(79A)	112(2)

Atoms	Angle
C(79")-C(76")-C(79A)	41(2)
C(78C)-C(76")-C(79A)	137(2)
C(77")-C(76")-C(79A)	87(2)
C(77A)-C(77")-C(76")	70(3)
C(77")-C(77A)-C(76")	86(3)
C(77")-C(77A)-C(79A)	144(4)
C(76")-C(77A)-C(79A)	61(2)
C(78C)-C(78")-C(76")	86(4)
C(78")-C(78C)-C(76")	67(3)
C(79A)-C(79")-C(76")	72(3)
C(79")-C(79A)-C(76")	66(2)
C(79")-C(79A)-C(77A)	120(4)
C(76")-C(79A)-C(77A)	55(2)
C(67")-C(80")-C(75")	121.1(7)

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

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(30')	25(3)	52(4)	24(3)	7(3)	1(2)	4(3)
C(31')	27(4)	41(5)	26(4)	2(3)	0(3)	1(3)
C(32')	25(4)	54(5)	31(4)	5(3)	2(3)	0(3)
C(33')	22(3)	52(5)	27(4)	5(3)	-1(3)	1(3)
C(34')	24(4)	51(5)	25(4)	-1(3)	4(3)	8(3)
C(35')	27(4)	50(5)	39(4)	5(4)	-7(3)	6(3)
C(36')	39(4)	72(6)	45(5)	18(4)	-2(4)	18(4)
C(37')	47(5)	50(5)	62(5)	11(4)	-1(4)	6(4)
C(38')	34(4)	64(6)	29(4)	8(4)	-8(3)	4(4)
C(39')	28(4)	48(5)	21(3)	5(3)	0(3)	2(3)
C(40')	17(3)	49(5)	43(4)	7(3)	-7(3)	-1(3)
C(41')	30(4)	44(4)	29(4)	11(3)	-9(3)	5(3)
C(42')	26(4)	56(5)	56(5)	14(4)	-12(3)	-1(4)
C(43')	48(5)	46(5)	34(4)	1(3)	-7(3)	5(4)
C(44')	81(6)	71(6)	28(4)	-17(4)	9(4)	-21(5)
C(47')	177(14)	205(17)	129(12)	96(12)	33(10)	49(12)
C(48')	52(5)	46(5)	33(4)	-4(4)	-11(4)	4(4)
C(49')	35(4)	60(5)	35(4)	4(4)	-21(3)	-2(4)
C(50')	48(5)	104(8)	66(6)	-2(6)	-27(4)	-16(5)
C(51')	79(7)	78(8)	129(10)	5(7)	-17(6)	-38(6)
C(52')	66(6)	142(10)	66(6)	-33(6)	-29(5)	-26(6)
C(53')	30(5)	127(9)	98(8)	-10(7)	-13(5)	-2(5)
C(54')	32(4)	48(5)	39(4)	1(4)	-8(3)	1(3)
C(55')	21(3)	61(5)	18(3)	2(3)	-4(3)	4(3)
N(56')	21(3)	57(4)	23(3)	1(3)	-6(2)	5(3)
C(57')	23(3)	48(5)	23(4)	2(3)	0(3)	8(3)
C(58')	28(4)	64(5)	19(4)	5(3)	2(3)	9(3)
C(59')	25(4)	59(5)	36(4)	-4(4)	0(3)	5(4)
C(60')	21(3)	56(5)	35(4)	7(4)	8(3)	-4(3)
C(61')	39(4)	48(5)	57(5)	5(4)	12(4)	7(4)
C(62')	44(5)	50(5)	63(6)	18(4)	19(4)	6(4)
C(63')	41(4)	59(6)	62(6)	22(4)	15(4)	10(4)
C(64')	32(4)	63(6)	34(4)	17(4)	8(3)	2(4)
C(65')	22(3)	44(5)	34(4)	11(3)	8(3)	6(3)
C(66')	30(4)	52(5)	17(3)	4(3)	4(3)	7(3)
C(67')	29(4)	42(4)	31(4)	7(3)	-3(3)	10(3)
C(68')	23(3)	46(4)	29(4)	7(3)	-1(3)	11(3)
C(69')	29(4)	31(4)	36(4)	4(3)	-3(3)	8(3)

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(70')	29(4)	46(5)	43(4)	10(4)	4(3)	4(3)
C(71')	55(5)	75(6)	77(6)	33(5)	21(4)	14(5)
C(72')	42(4)	60(5)	48(5)	15(4)	8(3)	14(4)
C(73')	57(5)	81(7)	63(6)	-5(5)	16(4)	-22(5)
C(74')	32(4)	44(5)	37(4)	2(3)	-3(3)	3(3)
C(75')	39(4)	42(4)	33(4)	-3(3)	-9(3)	7(3)
C(76')	64(5)	73(6)	32(4)	-2(4)	-12(4)	2(5)
C(78')	240(16)	111(10)	71(8)	-14(7)	-61(9)	-79(10)
C(79')	106(9)	223(15)	26(5)	-17(7)	0(5)	7(9)
C(80')	42(4)	51(5)	24(4)	7(3)	-1(3)	16(4)
C(1)	44(4)	31(4)	18(3)	6(3)	-8(3)	1(3)
C(2)	38(4)	59(5)	18(4)	4(3)	2(3)	-1(4)
C(3)	39(4)	79(7)	33(4)	2(4)	10(3)	-1(4)
C(4)	63(6)	72(7)	36(5)	5(4)	13(4)	0(5)
C(5)	54(5)	41(5)	57(5)	3(4)	12(4)	-1(4)
C(6)	50(5)	58(6)	33(4)	5(4)	1(3)	17(4)
O(7)	41(3)	68(4)	77(4)	6(3)	13(3)	11(3)
C(8)	34(4)	51(5)	36(4)	-5(4)	0(3)	21(4)
C(9)	53(5)	60(6)	53(5)	-1(4)	2(4)	24(4)
C(10)	41(5)	94(8)	55(5)	9(5)	16(4)	25(5)
C(11)	44(5)	136(10)	31(5)	5(5)	2(4)	18(6)
C(12)	29(4)	132(8)	21(4)	-9(4)	1(3)	13(5)
C(13)	33(4)	87(7)	16(4)	-5(4)	-1(3)	8(4)
C(14)	52(5)	79(7)	58(5)	7(5)	13(4)	6(5)
C(15)	31(4)	47(5)	40(4)	12(4)	15(3)	14(3)
C(16)	32(4)	77(6)	27(4)	13(4)	4(3)	6(4)
C(17)	37(5)	131(10)	45(5)	35(6)	-1(4)	9(5)
C(18)	43(5)	151(12)	91(8)	91(8)	23(5)	30(6)
C(19)	56(6)	87(7)	82(7)	55(6)	25(5)	33(5)
C(20)	49(5)	71(6)	54(5)	23(5)	19(4)	21(4)
O(21)	105(5)	53(4)	86(5)	11(4)	22(4)	6(4)
C(22)	74(6)	61(6)	54(6)	-10(5)	18(5)	13(5)
C(23)	117(9)	54(7)	133(11)	-21(7)	45(8)	-8(6)
C(24)	110(9)	92(9)	80(9)	-43(8)	15(7)	-30(8)
C(25)	72(7)	117(10)	66(7)	-33(7)	23(5)	-17(7)
C(26)	34(4)	90(7)	48(5)	-20(5)	12(4)	-2(4)
C(27)	33(4)	48(5)	47(5)	-9(4)	13(3)	0(3)
C(28)	57(5)	92(7)	39(5)	-5(5)	0(4)	9(5)
B(29)	39(5)	38(5)	32(4)	-2(4)	6(3)	8(4)
N(30)	28(3)	79(5)	22(3)	-11(3)	-3(2)	5(3)
C(31)	27(4)	81(6)	23(4)	-11(4)	3(3)	-1(4)
C(32)	28(4)	87(6)	26(4)	-11(4)	-4(3)	-2(4)
C(33)	39(5)	94(7)	22(4)	-10(4)	-1(3)	1(5)

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(34)	34(4)	110(8)	15(4)	-1(4)	3(3)	16(5)
C(35)	44(5)	108(8)	33(5)	14(5)	0(4)	12(5)
C(36)	41(5)	124(9)	55(6)	25(6)	4(4)	28(6)
C(37)	70(6)	94(7)	45(5)	3(5)	-2(4)	18(5)
C(38)	49(5)	85(7)	32(4)	-1(4)	0(3)	20(5)
C(39)	38(4)	87(7)	17(4)	0(4)	-3(3)	10(4)
C(40)	31(4)	74(6)	28(4)	-7(4)	-4(3)	3(4)
C(41)	36(4)	71(6)	20(4)	-5(4)	-8(3)	-1(4)
C(42)	46(5)	78(6)	34(4)	-21(4)	-6(4)	-8(4)
C(43)	53(5)	92(7)	38(5)	-21(5)	4(4)	-16(5)
C(44)	75(6)	135(10)	39(5)	-35(6)	13(5)	-35(6)
C(46)	74(6)	113(8)	52(6)	-12(5)	16(5)	-35(6)
C(48)	55(5)	86(7)	33(4)	-18(4)	-1(4)	-16(5)
C(49)	48(5)	66(6)	34(4)	0(4)	-14(4)	-9(4)
C(50)	42(5)	72(6)	60(6)	-10(5)	-21(4)	-11(4)
C(51)	82(7)	76(7)	96(8)	4(6)	-25(6)	-26(6)
C(52)	76(7)	122(9)	59(6)	-11(6)	-28(5)	-31(6)
C(53)	48(5)	115(9)	72(6)	1(6)	-13(4)	-6(5)
C(54)	35(4)	64(5)	41(4)	3(4)	-5(3)	1(4)
C(55)	41(4)	75(6)	21(4)	5(4)	-4(3)	-4(4)
N(56)	25(3)	79(5)	20(3)	-2(3)	1(2)	-8(3)
C(57)	32(4)	76(6)	20(4)	4(4)	2(3)	-4(4)
C(58)	40(4)	72(6)	23(4)	-9(4)	-11(3)	-12(4)
C(59)	40(5)	84(7)	32(5)	-11(4)	0(3)	-19(4)
C(60)	37(4)	60(6)	38(5)	3(4)	7(3)	-15(4)
C(61)	43(5)	78(7)	60(6)	14(5)	14(4)	-15(5)
C(62)	58(5)	73(6)	56(6)	21(5)	11(4)	-7(5)
C(63)	58(6)	91(8)	51(6)	23(5)	5(4)	-6(5)
C(64)	33(4)	94(8)	45(5)	19(5)	2(4)	-9(5)
C(65)	34(4)	68(6)	43(5)	5(4)	14(3)	-12(4)
C(66)	31(4)	84(6)	26(4)	5(4)	4(3)	-3(4)
C(67)	29(4)	78(6)	22(4)	1(4)	1(3)	1(4)
C(68)	29(4)	85(6)	22(4)	1(4)	-2(3)	-2(4)
C(69)	34(4)	61(5)	26(4)	3(3)	2(3)	0(4)
C(70)	33(4)	67(5)	30(4)	2(4)	6(3)	-4(4)
C(71)	74(6)	83(7)	54(5)	-13(5)	34(5)	-14(5)
C(72)	60(6)	116(9)	72(6)	36(6)	25(5)	13(6)
C(73)	57(5)	102(8)	60(6)	-10(5)	21(4)	-23(5)
C(74)	33(4)	59(5)	36(4)	-2(4)	-6(3)	-1(4)
C(75)	42(4)	56(5)	33(4)	-8(4)	-1(3)	6(4)
C(76)	55(5)	75(6)	23(4)	-8(4)	-14(3)	11(4)
C(79)	114(9)	207(14)	26(5)	-12(7)	-1(5)	-3(9)
C(80)	41(4)	64(5)	22(4)	5(3)	-4(3)	5(4)

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1')	25(4)	42(5)	47(5)	10(4)	9(3)	3(3)
C(2')	30(4)	59(5)	48(5)	10(4)	12(3)	8(4)
C(3')	39(4)	67(6)	62(5)	21(5)	19(4)	13(4)
C(4')	55(5)	68(7)	81(7)	40(5)	27(5)	30(5)
C(5')	55(5)	56(6)	65(6)	11(5)	9(4)	9(4)
C(6')	40(4)	48(5)	56(5)	25(4)	7(4)	20(4)
O(7')	81(4)	39(3)	70(4)	6(3)	-8(3)	15(3)
C(8')	45(5)	46(5)	65(6)	7(4)	10(4)	15(4)
C(9')	60(5)	47(5)	73(6)	-24(5)	-7(5)	3(4)
C(10')	60(6)	71(7)	46(5)	-5(5)	-9(4)	1(5)
C(11')	51(5)	75(7)	53(5)	-3(5)	3(4)	-11(5)
C(12')	38(4)	65(5)	37(4)	11(4)	-1(3)	-2(4)
C(13')	26(4)	40(5)	50(5)	0(4)	10(3)	6(3)
C(14')	41(4)	71(6)	28(4)	13(4)	-2(3)	4(4)
C(15')	31(4)	50(5)	17(3)	13(3)	0(3)	7(3)
C(16')	29(4)	49(5)	34(4)	9(3)	3(3)	11(3)
C(17')	30(4)	76(6)	27(4)	6(4)	3(3)	7(4)
C(18')	34(4)	79(7)	29(4)	2(4)	1(3)	-12(4)
C(19')	45(5)	55(5)	37(4)	10(4)	-1(3)	3(4)
C(20')	27(4)	49(5)	37(4)	14(3)	1(3)	9(3)
O(21')	35(3)	49(3)	71(4)	13(3)	17(2)	4(2)
C(22')	31(4)	45(5)	47(5)	7(4)	1(3)	7(4)
C(23')	36(4)	51(5)	46(5)	2(4)	1(3)	14(4)
C(24')	41(5)	78(7)	44(5)	12(4)	7(4)	29(4)
C(25')	34(4)	85(7)	41(5)	17(4)	10(3)	22(4)
C(26')	34(4)	59(5)	43(4)	20(4)	1(3)	11(4)
C(27')	18(3)	49(5)	26(4)	10(3)	1(3)	5(3)
C(28')	47(5)	102(8)	73(6)	11(5)	13(4)	11(5)
B(29')	25(4)	38(5)	45(5)	17(4)	4(3)	6(4)
C(1'')	38(4)	49(5)	39(4)	6(4)	-2(3)	0(4)
C(2'')	36(4)	68(6)	29(4)	20(4)	3(3)	3(4)
C(3'')	33(4)	117(8)	37(5)	-1(5)	8(3)	8(5)
C(5'')	57(5)	76(6)	48(5)	3(4)	-1(4)	-15(5)
C(6'')	37(4)	62(6)	49(5)	7(4)	-3(3)	5(4)
O(7'')	52(3)	50(4)	84(4)	13(3)	13(3)	9(3)
C(8'')	31(4)	81(7)	44(5)	5(4)	0(3)	17(4)
C(9'')	64(6)	76(7)	51(5)	4(5)	-4(4)	24(5)
C(10'')	45(5)	96(8)	45(5)	9(5)	14(4)	27(5)
C(11'')	48(5)	92(8)	48(5)	14(5)	8(4)	21(5)
C(12'')	35(4)	82(6)	41(5)	4(4)	6(3)	16(4)
C(13'')	32(4)	47(5)	43(4)	11(4)	1(3)	20(3)
C(14'')	63(6)	124(10)	105(8)	37(7)	29(6)	43(6)
C(15'')	45(5)	101(8)	98(8)	67(6)	46(5)	41(5)

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(22")	135(11)	70(8)	134(11)	0(8)	87(9)	6(7)
C(26")	36(5)	123(9)	63(6)	-32(6)	19(4)	3(5)
C(27")	50(5)	30(5)	120(9)	-4(5)	51(5)	-1(4)
B(29")	32(5)	55(6)	74(7)	23(5)	27(4)	14(4)
N(30")	26(3)	42(4)	33(3)	0(3)	2(2)	9(3)
C(31")	35(4)	46(5)	36(4)	-10(3)	7(3)	6(3)
C(32")	22(4)	44(5)	44(4)	-8(3)	2(3)	1(3)
C(33")	32(4)	63(6)	43(4)	-12(4)	9(3)	-1(4)
C(34")	29(4)	51(5)	31(4)	-5(3)	0(3)	4(3)
C(35")	30(4)	62(6)	48(5)	10(4)	-1(3)	17(4)
C(36")	45(5)	59(6)	65(6)	20(4)	6(4)	19(4)
C(37")	50(5)	53(5)	68(6)	9(4)	5(4)	13(4)
C(38")	45(5)	44(5)	52(5)	-3(4)	-2(4)	2(4)
C(39")	35(4)	41(5)	37(4)	-3(3)	6(3)	5(3)
C(40")	24(4)	40(4)	53(5)	-6(4)	0(3)	2(3)
C(41")	31(4)	29(4)	48(4)	-1(3)	0(3)	10(3)
C(42")	41(4)	37(4)	48(5)	-1(4)	0(3)	1(3)
C(43")	49(5)	36(4)	41(4)	-2(3)	6(4)	5(4)
C(44")	68(6)	45(5)	60(5)	-5(4)	22(4)	6(4)
C(45")	109(8)	102(8)	51(6)	2(5)	10(5)	24(6)
C(46")	80(7)	85(7)	75(7)	-13(6)	22(5)	3(6)
C(47")	157(11)	68(7)	111(9)	21(6)	72(8)	22(7)
C(48")	53(5)	47(5)	37(4)	-10(4)	-11(4)	17(4)
C(49")	36(4)	49(5)	54(5)	-12(4)	-8(4)	9(4)
C(50")	44(5)	76(7)	53(5)	-31(5)	-15(4)	3(4)
C(52")	92(9)	93(9)	193(14)	25(9)	-21(8)	-35(7)
C(54")	39(4)	39(4)	38(4)	-4(3)	-8(3)	4(3)
C(55")	35(4)	31(4)	38(4)	-7(3)	0(3)	10(3)
N(56")	23(3)	34(4)	41(3)	-3(3)	-5(2)	7(3)
C(57")	27(4)	48(5)	31(4)	-3(3)	1(3)	2(3)
C(58")	33(4)	36(4)	39(4)	-2(3)	-1(3)	4(3)
C(59")	39(4)	45(5)	43(4)	-7(4)	-2(3)	-6(4)
C(60")	26(4)	44(5)	37(4)	5(3)	3(3)	3(3)
C(61")	45(5)	48(5)	47(5)	-2(4)	6(4)	-7(4)
C(62")	34(4)	44(5)	70(6)	13(4)	21(4)	4(4)
C(63")	44(5)	58(6)	51(5)	24(4)	12(4)	9(4)
C(64")	34(4)	57(6)	42(5)	4(4)	10(3)	4(4)
C(65")	22(4)	57(5)	36(4)	4(4)	11(3)	2(3)
C(66")	35(4)	52(5)	29(4)	-6(3)	4(3)	8(3)
C(67")	32(4)	48(5)	40(4)	-13(4)	3(3)	8(3)
C(68")	49(5)	100(7)	31(4)	-16(4)	9(4)	10(5)
C(69")	43(5)	111(8)	49(5)	-41(5)	-13(4)	12(5)
C(72")	263(21)	313(25)	62(9)	45(12)	-99(11)	-62(18)

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(74 ^{''})	31(4)	91(7)	77(7)	-43(6)	9(4)	-8(4)
C(75 ^{''})	33(4)	52(5)	62(5)	-24(4)	11(4)	0(4)
C(76 ^{''})	40(5)	58(6)	80(6)	-8(5)	27(4)	-7(4)
C(80 ^{''})	32(4)	43(5)	45(4)	-10(3)	10(3)	4(3)

Table 6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{Å}^2 \times 10^3$) for $(\pm)\text{Cy}_{3,5\text{tBz}}^+ 2\text{MeSpB}^-$.

Atom	x	y	z	U(eq)
H(32')	11460(5)	95(3)	9157(2)	44
H(33')	12705(6)	-473(3)	9454(2)	41
H(35')	13192(6)	-1420(3)	9579(2)	48
H(36')	12681(6)	-2351(4)	9479(2)	62
H(37')	10802(7)	-2712(3)	9096(2)	64
H(38')	9483(6)	-2113(3)	8818(2)	52
H(40A)	7875(5)	-996(3)	8811(2)	45
H(40B)	8198(5)	-1565(3)	8917(2)	45
H(42')	6477(6)	-1885(3)	8367(2)	58
H(48')	7377(7)	-1946(3)	7295(2)	55
H(54')	9746(6)	-1165(3)	8193(2)	50
H(55')	8614(5)	-349(3)	8506(2)	41
H(58')	10020(5)	547(3)	9328(2)	44
H(59')	10004(6)	1477(3)	9390(2)	49
H(61')	9418(6)	2339(3)	9104(2)	57
H(62')	8465(6)	2769(3)	8596(2)	61
H(63')	7645(6)	2256(3)	8012(2)	62
H(64')	7768(6)	1315(3)	7936(2)	51
H(66A)	8897(5)	81(3)	8040(2)	39
H(66B)	8612(5)	618(3)	7866(2)	39
H(68')	6755(5)	131(3)	8525(2)	39
H(71A)	5887(25)	-398(8)	8918(11)	99
H(71B)	5389(42)	-938(12)	8660(3)	99
H(71C)	4681(18)	-725(19)	8983(9)	99
H(72A)	4943(8)	466(9)	8803(12)	73
H(72B)	3826(39)	159(3)	8942(8)	73
H(72C)	3654(34)	431(10)	8555(5)	73
H(73A)	2825(26)	-727(20)	8563(2)	103
H(73B)	3368(8)	-953(12)	8205(14)	103
H(73C)	2716(21)	-421(9)	8190(13)	103
H(74')	3804(6)	-400(3)	7716(2)	47
H(80')	6997(6)	150(3)	7385(2)	47
H(3)	13541(7)	2246(4)	6525(2)	60
H(4)	13058(8)	3122(4)	6460(2)	69
H(5)	11204(7)	3391(3)	6587(2)	61
H(9)	7542(7)	3173(3)	6947(2)	66
H(10)	5866(7)	2712(4)	7140(2)	74
H(11)	5822(7)	1796(5)	7228(2)	84
H(12)	7528(6)	1302(4)	7119(2)	74

Atom	x	y	z	U(eq)
H(14A)	11714(27)	1134(5)	6526(12)	94
H(14B)	12309(47)	1285(9)	6955(4)	94
H(14C)	13077(22)	1374(6)	6624(15)	94
H(17)	11533(7)	1660(5)	8211(2)	84
H(18)	11713(8)	715(6)	8175(3)	106
H(19)	11060(8)	193(4)	7582(3)	83
H(23)	9255(10)	-199(4)	6377(4)	122
H(24)	8420(10)	23(6)	5751(4)	119
H(25)	8269(9)	924(5)	5627(3)	105
H(26)	8811(6)	1604(4)	6127(2)	70
H(28A)	10994(43)	2426(6)	7960(6)	96
H(28B)	9770(7)	2337(4)	7675(15)	96
H(28C)	10997(42)	2464(5)	7520(10)	96
H(32)	4847(6)	3280(4)	5858(2)	59
H(33)	6109(7)	2742(4)	6171(2)	64
H(35)	6661(7)	1772(5)	6281(2)	73
H(36)	6131(7)	839(5)	6210(2)	86
H(37)	4206(8)	472(4)	5861(2)	84
H(38)	2799(7)	1054(4)	5624(2)	66
H(40C)	1278(6)	2198(3)	5574(2)	55
H(40D)	1583(6)	1638(3)	5703(2)	55
H(42)	3054(7)	1927(3)	4944(2)	67
H(48)	590(7)	1088(4)	4089(2)	74
H(51A)	-2124(16)	110(14)	4632(16)	136
H(51B)	-1087(59)	376(5)	4957(3)	136
H(51C)	-765(44)	60(12)	4590(14)	136
H(52A)	-1487(64)	1006(5)	3916(3)	140
H(52B)	-2385(24)	511(28)	3980(3)	140
H(52C)	-1018(43)	436(23)	3966(4)	140
H(53A)	-2168(39)	1533(11)	4512(16)	123
H(53B)	-2168(39)	1231(23)	4885(3)	123
H(53C)	-3053(7)	1005(14)	4510(17)	123
H(54)	-212(6)	1303(3)	5172(2)	57
H(55)	2016(6)	2792(4)	5233(2)	56
H(58)	3482(6)	3768(4)	6011(2)	58
H(59)	3462(6)	4689(4)	6035(2)	66
H(61)	2727(7)	5512(4)	5729(2)	72
H(62)	1741(7)	5905(4)	5214(2)	75
H(63)	924(7)	5346(4)	4638(2)	80
H(64)	1110(6)	4409(4)	4591(2)	70
H(66C)	2249(6)	3173(3)	4754(2)	57
H(66D)	1996(6)	3690(3)	4550(2)	57
H(68)	136(6)	3273(3)	5233(2)	56

Atom	x	y	z	U(eq)
H(71D)	-1617(8)	3613(11)	5534(15)	106
H(71E)	-2840(46)	3351(4)	5638(11)	106
H(71F)	-2830(46)	3622(10)	5253(4)	106
H(72D)	-807(35)	2794(7)	5668(12)	119
H(72E)	-1123(47)	2264(16)	5386(3)	119
H(72F)	-1973(15)	2404(22)	5687(12)	119
H(73D)	-3853(24)	2501(23)	5299(3)	112
H(73E)	-3318(7)	2202(10)	4964(16)	112
H(73F)	-3886(22)	2749(12)	4903(13)	112
H(74)	-2829(6)	2720(3)	4443(2)	53
H(80)	333(6)	3232(3)	4085(2)	52
H(3')	2065(6)	2507(4)	8786(2)	64
H(4')	2339(7)	3428(4)	9042(3)	76
H(5')	3421(7)	3668(4)	9670(2)	70
H(9')	5314(7)	3415(4)	10827(3)	76
H(10')	5848(7)	2920(4)	11338(2)	74
H(11')	5452(7)	1968(4)	11271(2)	74
H(12')	4563(6)	1523(3)	10669(2)	57
H(14D)	2336(37)	1393(4)	9252(7)	71
H(14E)	3535(6)	1496(7)	9077(12)	71
H(14F)	2291(36)	1593(4)	8841(5)	71
H(17')	-128(6)	1343(4)	10189(2)	53
H(18')	169(6)	415(4)	10203(2)	59
H(19')	2033(6)	123(3)	10084(2)	55
H(23')	5663(6)	257(3)	9724(2)	53
H(24')	7422(7)	685(4)	9521(2)	63
H(25')	7544(6)	1630(4)	9467(2)	62
H(26')	6050(6)	2144(3)	9656(2)	54
H(28D)	1249(53)	2307(8)	9850(3)	110
H(28E)	1990(26)	2402(5)	10265(14)	110
H(28F)	593(29)	2223(5)	10206(16)	110
H(3'')	3257(7)	4774(4)	6861(2)	75
H(4'')	3676(8)	3885(4)	6913(2)	71
H(5'')	5508(7)	3608(4)	6795(2)	75
H(9'')	9157(8)	3773(4)	6420(2)	77
H(10'')	10838(7)	4232(4)	6202(2)	72
H(11'')	10926(7)	5156(4)	6119(2)	74
H(12'')	9302(6)	5650(4)	6254(2)	63
H(14G)	4602(63)	5746(11)	6441(6)	139
H(14H)	5120(40)	5878(6)	6878(14)	139
H(14I)	3755(25)	5655(8)	6751(21)	139
H(32'')	1919(5)	3612(3)	7525(2)	45
H(33'')	606(6)	4171(3)	7223(2)	56

Atom	x	y	z	U(eq)
H(35")	116(6)	5105(3)	7073(2)	56
H(36")	657(7)	6055(3)	7139(2)	66
H(37")	2545(7)	6414(3)	7501(2)	68
H(38")	3924(7)	5849(3)	7767(2)	58
H(40E)	5177(5)	5257(3)	7699(2)	48
H(40F)	5468(5)	4694(3)	7825(2)	48
H(42")	3650(6)	4937(3)	8451(2)	52
H(45A)	4377(60)	5841(4)	9657(4)	131
H(45B)	5047(31)	5317(24)	9703(6)	131
H(45C)	3713(32)	5321(24)	9788(3)	131
H(46A)	2843(12)	5909(5)	9080(17)	121
H(46B)	2059(23)	5453(21)	9243(11)	121
H(46C)	2287(33)	5383(19)	8815(7)	121
H(47A)	2792(45)	4567(4)	9335(20)	159
H(47B)	4159(27)	4478(6)	9335(19)	159
H(47C)	3284(69)	4465(6)	8945(3)	159
H(48")	6072(7)	5782(3)	9308(2)	57
H(54")	6919(6)	5606(3)	8231(2)	48
H(55")	4722(6)	4108(3)	8163(2)	43
H(58")	3307(6)	3153(3)	7367(2)	44
H(59")	3352(6)	2223(3)	7338(2)	53
H(61")	4005(6)	1397(3)	7635(2)	58
H(62")	4967(6)	996(3)	8153(2)	57
H(63")	5731(6)	1546(3)	8736(2)	60
H(64")	5530(6)	2461(3)	8787(2)	52
H(66E)	4745(6)	3172(3)	8833(2)	47
H(66F)	4524(6)	3704(3)	8645(2)	47
H(68")	6412(7)	3530(4)	9297(2)	73
H(74")	9613(7)	4068(4)	8966(3)	84
H(80")	6611(6)	3653(3)	8166(2)	48

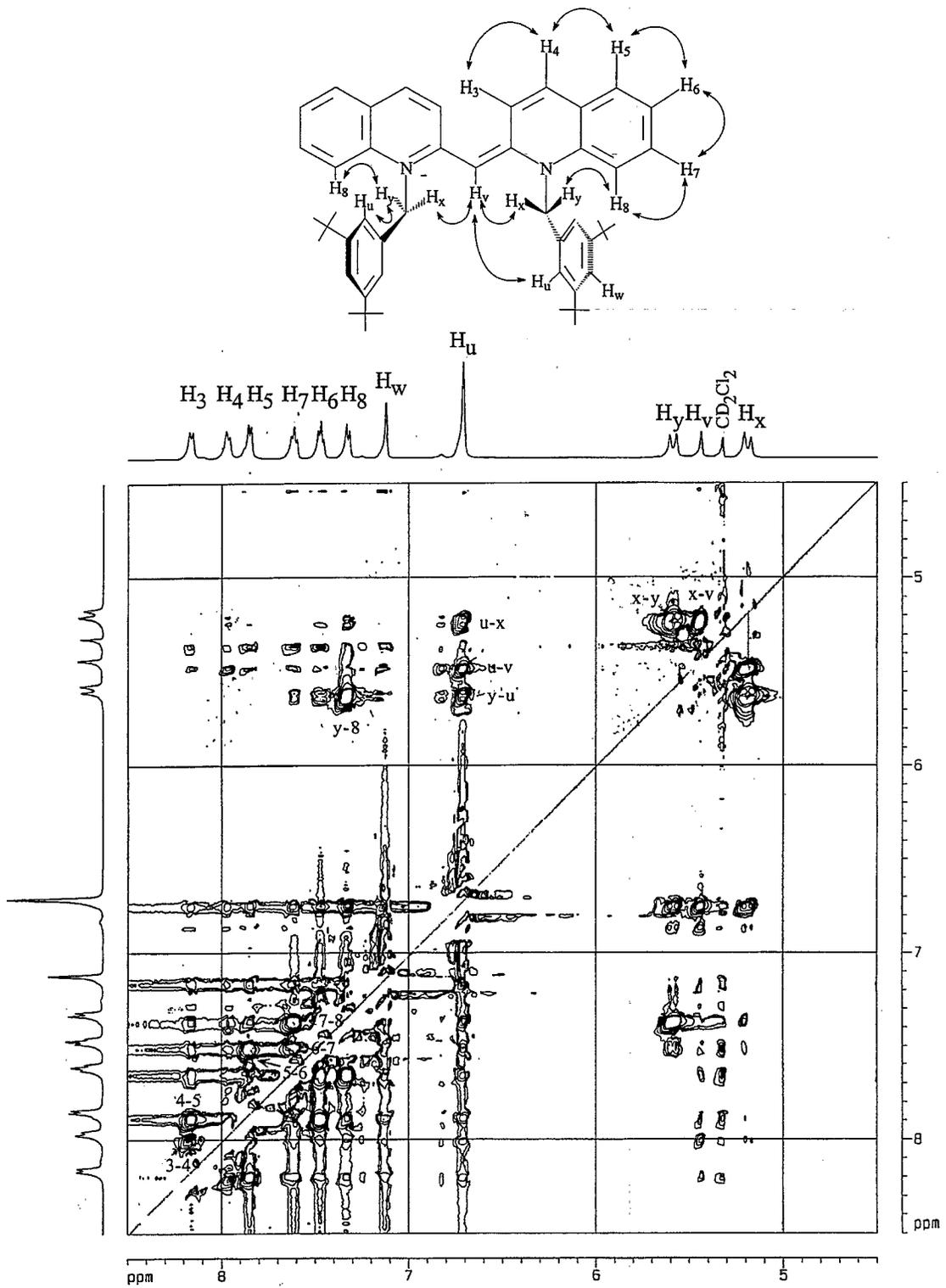


Figure 0.1. Negative peaks (NOE's) from ROESY spectrum of Cy_{3,5tBz}⁺ BF₄⁻ in CD₂Cl₂ at -56° C.

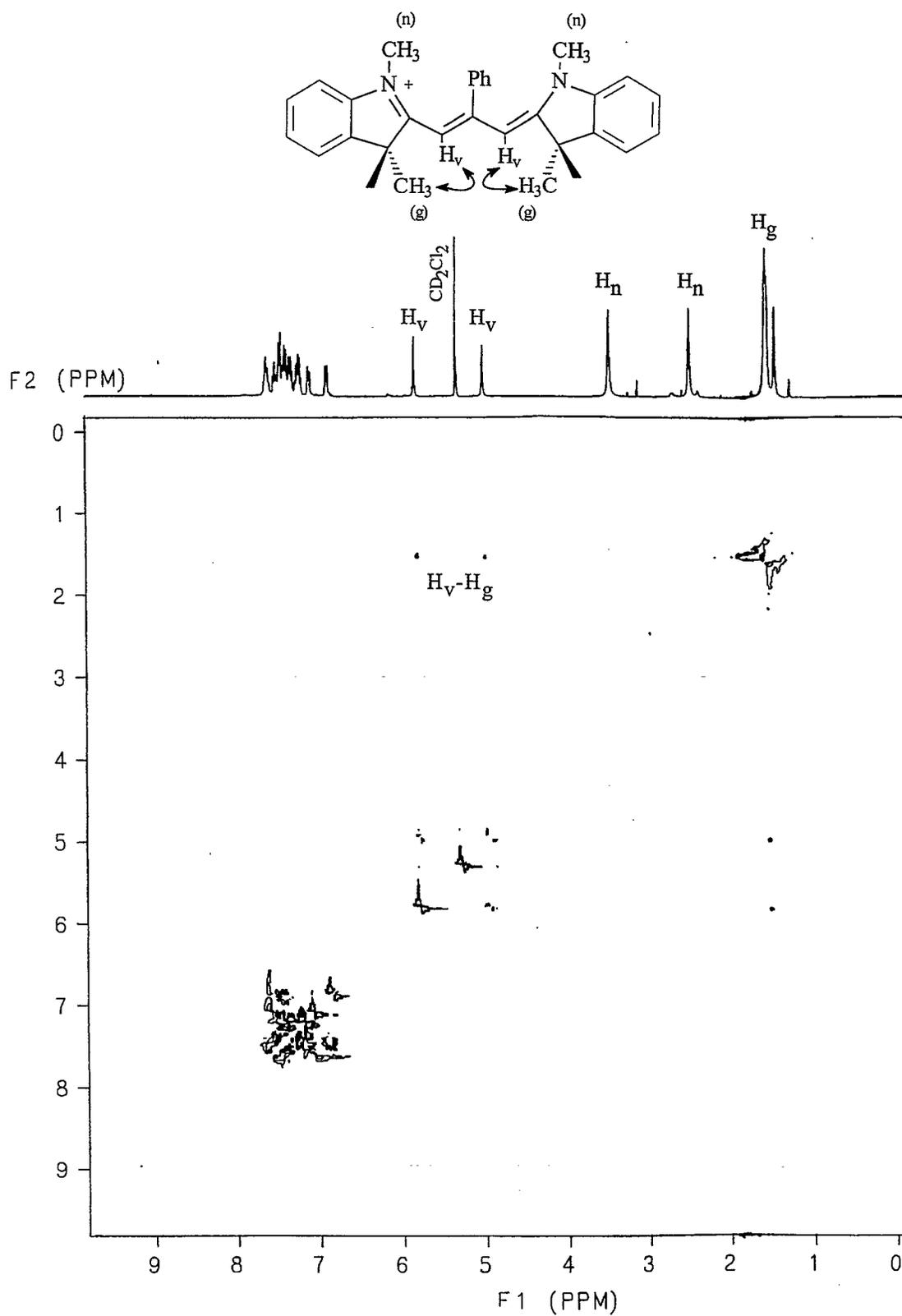


Figure 0.2. Negative peaks (NOE's) from ROESY spectrum of PhCyMe^+ I in CD_2Cl_2 at -80°C .