

Supporting Information for:

The Synthesis of Boroxifen, A *nido*-Carborane Analogue of Tamoxifen

John F. Valliant, Paul Schaffer, Karin A. Stephenson, and James F. Britten

*Department of Chemistry and Physics and Astronomy, McMaster University, 1280 Main
St. West, Hamilton, Ontario, Canada, L8S 4M1*

Figure S1: ^1H NMR of compound **7** (200 MHz) in CDCl_3

Figure S2: ^{13}C NMR of compound **7** (50 MHz) in CDCl_3

Figure S3: ^1H NMR of compound **9** (300 MHz) in CDCl_3

Figure S4: ^{13}C NMR of compound **9** (50 MHz) in CDCl_3

Figure S5: HPLC of compound **9**.

Figure S6: ^1H NMR assignments

Pages S7-S22: X-ray data for compound **7**

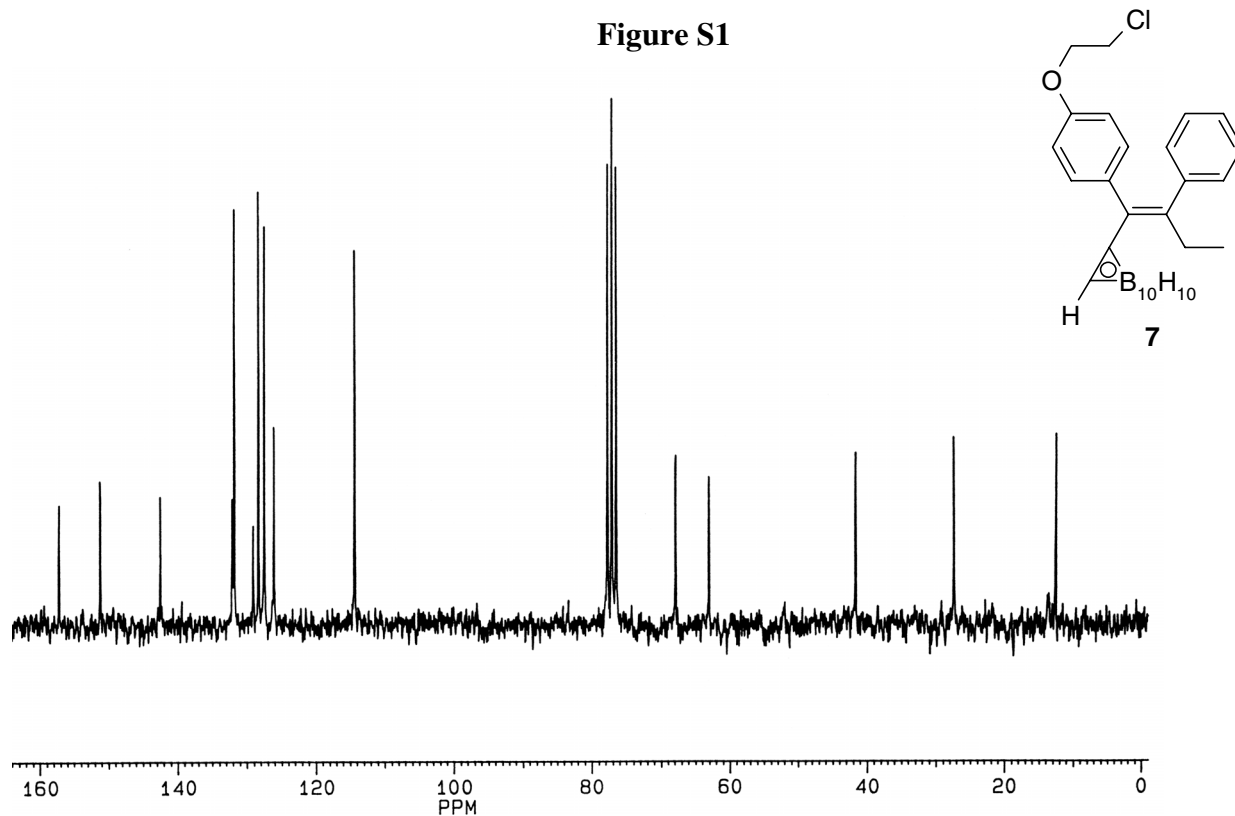
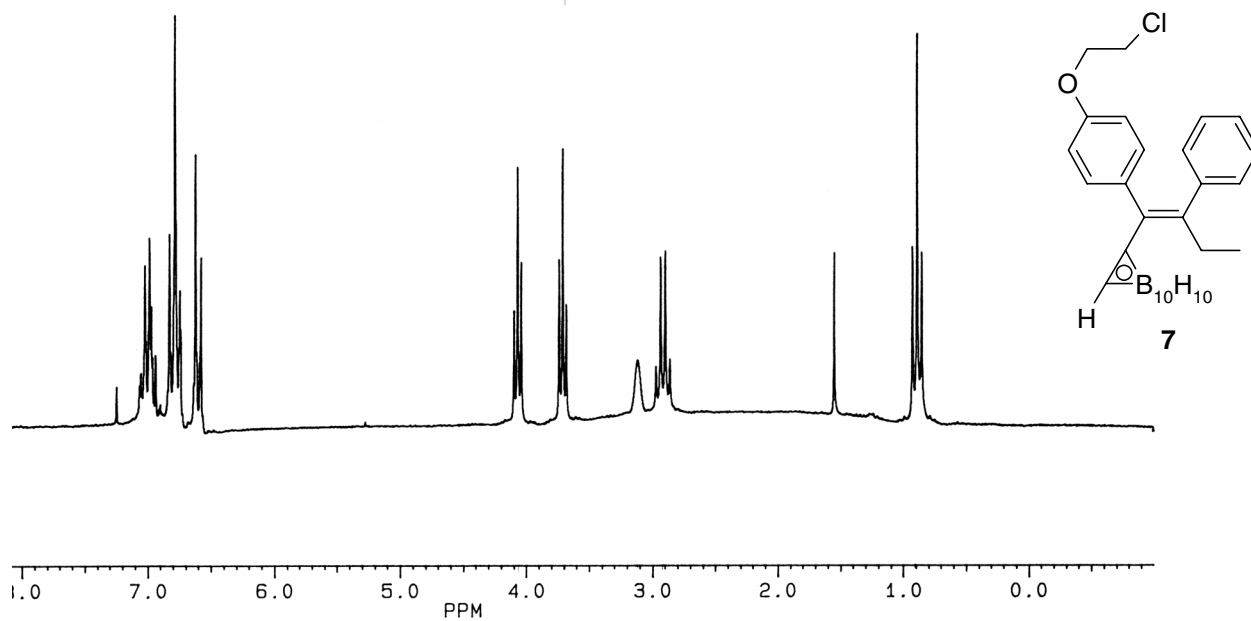


Figure S2

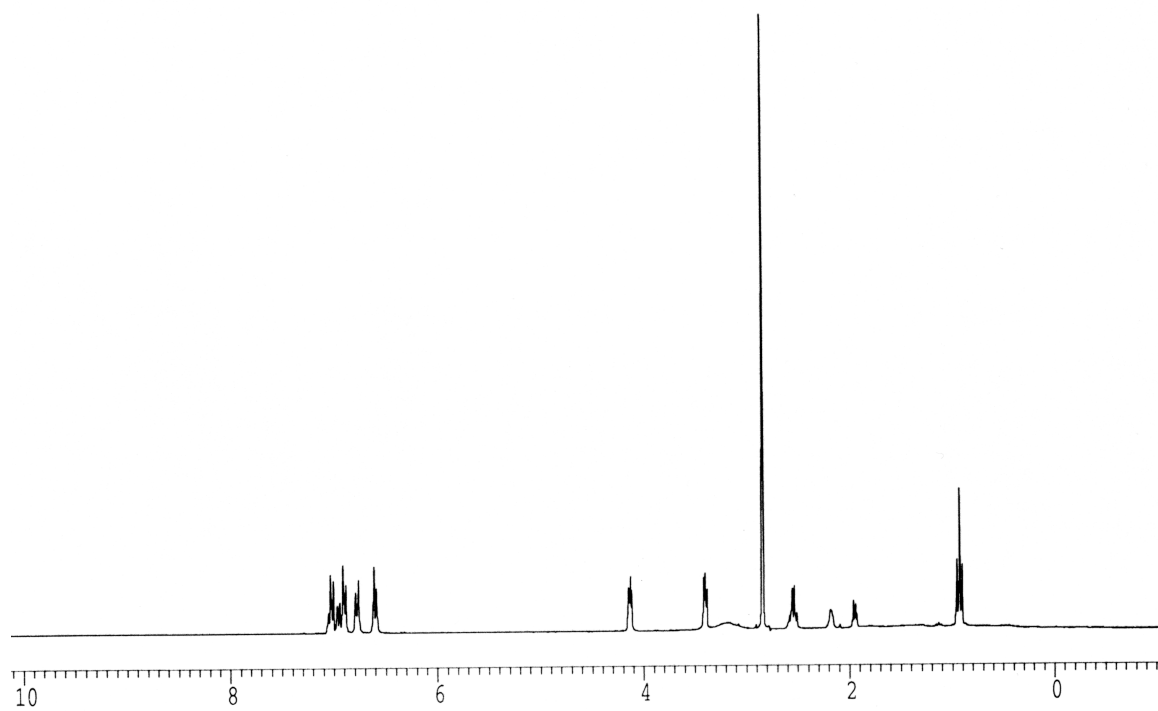


Figure S3

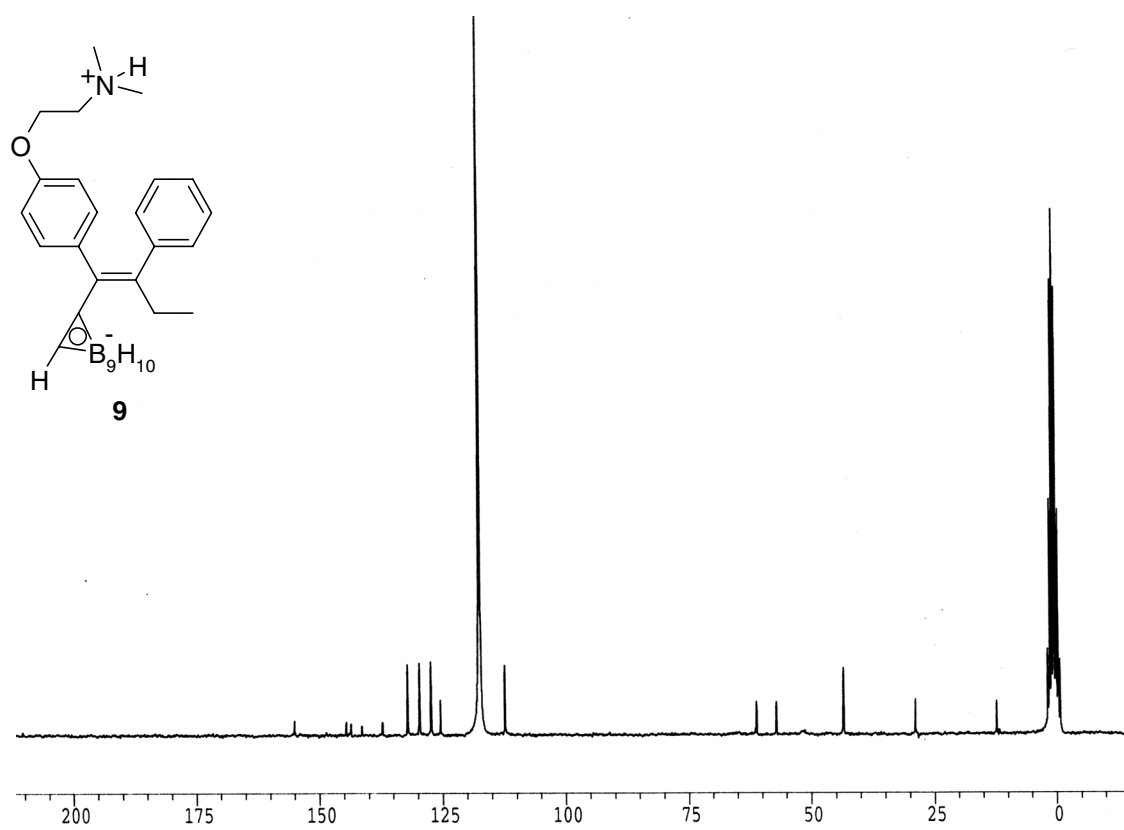


Figure S4

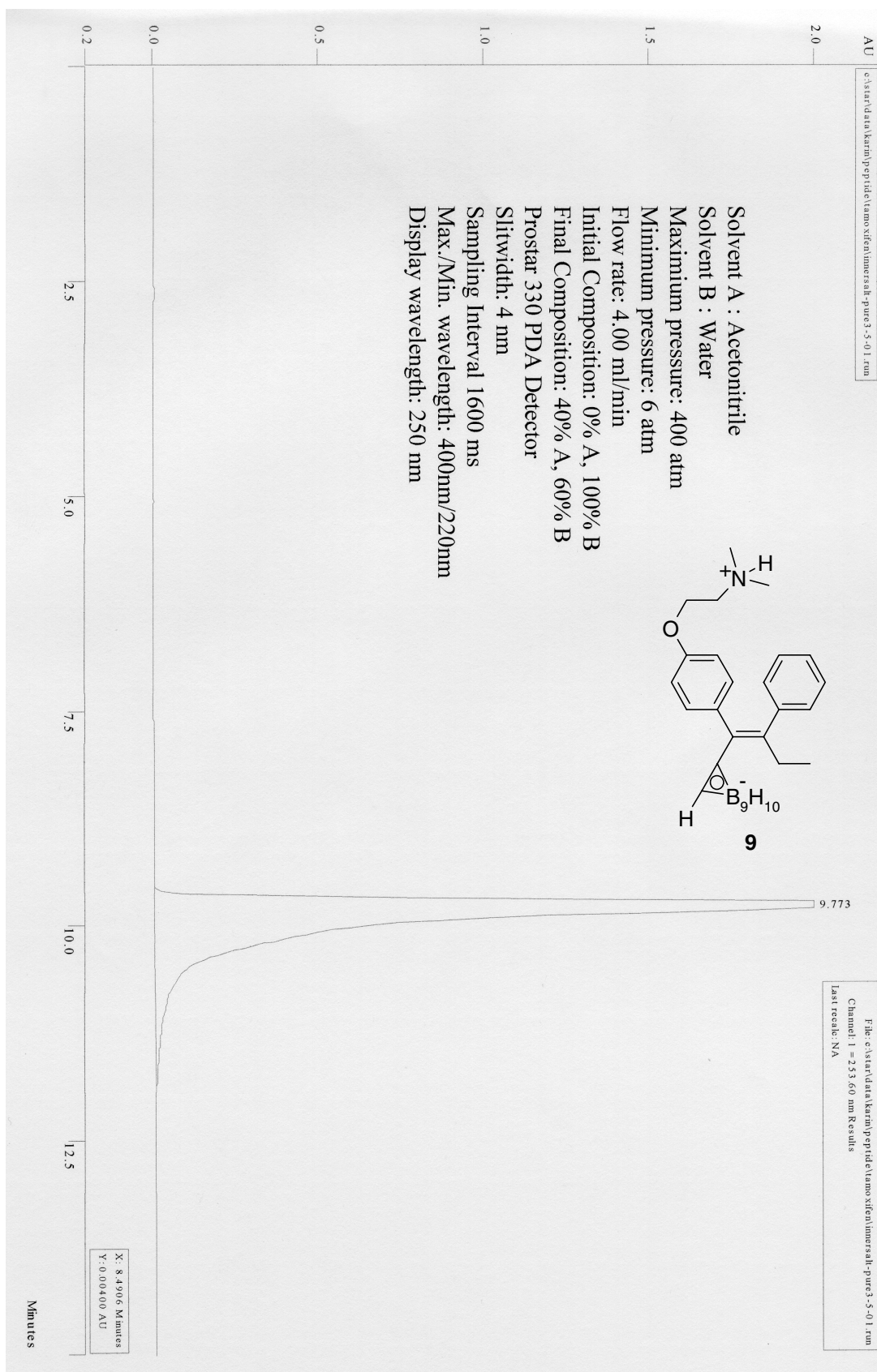


Figure S5

¹H NMR Assignments**3-(4-(2-Chloroethoxy)phenyl)-4-phenyl-hex-3-ene-1-(2-trimethylsilylacetylene) (4)**

¹H NMR (200 MHz, CDCl₃): δ 7.14-6.60 (m, 9H, Ar-H), 4.11 (t, 2H, OCH₂), 3.72 (t, ³J = 6.0 Hz, 3H, CH₂Cl), 2.89 (q, 2H, CH₂), 1.03 (t, ³J = 7.4 Hz, 3H, CH₃), 0.24 (s, 9H, SiMe₃).

3-(4-(2-Chloroethoxy)phenyl)-4-phenyl-hex-3-ene-1-yne (6)

¹H NMR (200 MHz, CDCl₃): δ 7.16-6.64 (m, 9H, Ar-H), 4.12 (t, ³J = 6.0 Hz, 2H, OCH₂), 3.73 (t, 2H, CH₂Cl), 3.29 (s, 1H, CH), 2.91 (q, ³J = 7.5 Hz, 2H, CH₂), 1.03 (t, 3H, CH₃).

Z-1-(1,2-dicarbaclosododecaboranyl)-1-(4-(2-chloroethoxy) phenyl)-2-phenyl-but-1-ene (7)

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 7.16-6.64 (m, Ar-H), 4.09 (t, ³J = 6.0 Hz, 2H, OCH₂), 3.71 (t, 2H, CH₂Cl), 3.13 (s, 1H, CH), 2.92 (q, ³J = 7.5 Hz, 2H, CH₂), 0.91 (t, 3H, CH₃).

Z-1-(1,2-dicarbaclosododecaboranyl)-1-(4-(2-iodoethoxy)phenyl)-2-phenyl-but-1-ene (8)

¹H NMR (200 MHz, CDCl₃): δ 7.01-6.60 (m, 9H, ArH), 4.10 (t, ³J = 6.6 Hz, 2H, OCH₂), 3.32 (t, 2H, CH₂I), 3.13 (s, 1H, CH), 2.92 (q, ³J = 7.3 Hz, 2H, CH₂), 0.91 (t, 3H, CH₃).

Z-1-([3]-1,2-dicarbadodecahydroundecaboranyl)-1-(4-(2-dimethylammonium-methoxy)phenyl)-2-phenyl-but-1-ene. Inner salt. (9)

¹H NMR (300 MHz, CD₃CN): δ 7.03-6.58 (m, 9H, Ar-H); 4.12 (t, ³J = 5.0 Hz, 2H, CH₂N); 3.39 (t, 2H, OCH₂); 2.83 (s, 6H, N(CH₃)₂); 2.55 (q, 2H, CH₂CH₃); 2.17 (s, 1H, CH); 0.92 (t, ³J = 7.4 Hz, 3H, CH₃).

Figure S6

Crystallographic Data

Table 1. Crystal data and structure refinement for compound 7

Identification code	pstl	
Empirical formula	C ₂₀ H ₂₉ B ₁₀ Cl O	
Formula weight	428.98	
Temperature	208(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/c	
Unit cell dimensions	a = 13.0341(5) Å	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 30.6131(9) Å	$\beta = 116.6400(10)^\circ$.
	c = 13.4514(2) Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volume	4797.5(2) Å ³	
Z	8	
Density (calculated)	1.188 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.171 mm ⁻¹	
F(000)	1792	
Crystal size	0.09 x 0.12 x 0.2 mm ³	
Theta range for data collection	1.33 to 27.50°.	
Index ranges	-16 ≤ h ≤ 16, -39 ≤ k ≤ 39, -17 ≤ l ≤ 17	
Reflections collected	46735	
Independent reflections	9509 [R(int) = 0.0671]	
Completeness to theta = 27.50°	86.2 %	
Absorption correction	empirical	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	9509 / 0 / 810	
Goodness-of-fit on F ²	0.911	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0505, wR2 = 0.1228	
R indices (all data)	R1 = 0.1228, wR2 = 0.1500	
Extinction coefficient	0.0007(3)	
Largest diff. peak and hole	0.565 and -0.583 e.Å ⁻³	

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

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Cl(1')	3431(1)	461(1)	4252(1)	71(1)
O(1')	3712(2)	764(1)	2204(1)	50(1)
C(13')	3632(2)	1351(1)	-625(2)	32(1)
C(14')	4621(2)	1379(1)	376(2)	35(1)
C(16')	3744(2)	978(1)	1323(2)	38(1)
C(17')	2738(2)	953(1)	338(2)	43(1)
C(18')	2687(2)	1140(1)	-620(2)	40(1)
C(15')	4684(2)	1200(1)	1350(2)	38(1)
C(3')	3554(2)	1529(1)	-1698(2)	32(1)
B(6')	4474(2)	2367(1)	-1115(2)	33(1)
B(11')	4144(2)	2863(1)	-1862(2)	36(1)
C(2')	3341(2)	2019(1)	-1870(2)	32(1)
C(1')	3348(2)	2294(1)	-805(2)	33(1)
C(7')	3744(2)	771(1)	-2175(2)	40(1)
C(19')	4709(3)	775(1)	3255(2)	51(1)
C(4')	3608(2)	1249(1)	-2445(2)	35(1)
B(10')	2820(2)	2794(1)	-3082(2)	36(1)
B(5')	3823(2)	2356(1)	-2584(2)	35(1)
B(4')	2328(2)	2252(1)	-3080(2)	34(1)
B(9')	1716(2)	2692(1)	-2666(2)	37(1)
C(5')	3546(2)	1342(1)	-3578(2)	41(1)
C(12')	2797(3)	496(1)	-2660(3)	55(1)
B(8')	2372(2)	2704(1)	-1191(2)	37(1)
B(7')	3863(2)	2805(1)	-694(2)	36(1)
C(20')	4614(3)	411(1)	3946(3)	59(1)
C(6')	4691(3)	1252(1)	-3592(3)	52(1)
C(8')	4798(3)	584(1)	-1486(2)	51(1)
B(12')	2844(2)	3073(1)	-1910(2)	37(1)
B(3')	2049(2)	2199(1)	-1911(2)	35(1)
C(9')	4898(4)	135(1)	-1288(3)	68(1)
C(10')	3940(4)	-125(1)	-1752(3)	76(1)
C(11')	2897(4)	50(1)	-2436(3)	73(1)
Cl(1)	278(1)	5705(1)	62(1)	98(1)
O(1)	618(2)	5854(1)	2470(1)	48(1)
C(15)	1890(2)	6092(1)	4245(2)	39(1)
C(16)	769(2)	6055(1)	3435(2)	36(1)
C(3)	1498(2)	6577(1)	6658(2)	30(1)
C(13)	1251(2)	6415(1)	5517(2)	31(1)
C(14)	2134(2)	6273(1)	5269(2)	36(1)
C(7)	1278(2)	5816(1)	7096(2)	37(1)
C(2)	1704(2)	7064(1)	6847(2)	30(1)
C(18)	136(2)	6385(1)	4686(2)	36(1)
C(17)	-111(2)	6207(1)	3648(2)	39(1)
C(1)	1635(2)	7355(1)	5765(2)	33(1)
C(8)	2072(3)	5558(1)	6948(2)	49(1)
C(4)	1506(2)	6289(1)	7426(2)	34(1)
C(5)	1681(2)	6375(1)	8598(2)	41(1)
B(8)	2597(2)	7769(1)	6140(2)	36(1)

B(6)	547(2)	7415(1)	6135(2)	34(1)
B(5)	1250(2)	7390(1)	7608(2)	35(1)
B(3)	2958(2)	7254(1)	6834(2)	33(1)
C(19)	-522(3)	5817(1)	1602(2)	53(1)
C(12)	260(3)	5622(1)	6956(3)	54(1)
B(11)	901(2)	7904(1)	6913(2)	36(1)
B(10)	2253(2)	7825(1)	8101(2)	38(1)
B(9)	3308(2)	7743(1)	7618(2)	36(1)
B(7)	1119(2)	7866(1)	5714(2)	36(1)
C(6)	2681(3)	6120(1)	9466(3)	59(1)
B(4)	2744(2)	7289(1)	8046(2)	34(1)
C(20)	-520(4)	5508(1)	742(3)	67(1)
B(12)	2177(2)	8124(1)	6930(2)	38(1)
C(10)	812(4)	4948(1)	6423(3)	75(1)
C(9)	1838(4)	5128(1)	6613(3)	68(1)
C(11)	24(4)	5189(1)	6600(3)	71(1)

Table 3. Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$] for chloro.tamoxifen carborane

Molecule 1

Cl(1)-C(20)	1.772(4)
O(1)-C(16)	1.369(3)
O(1)-C(19)	1.425(3)
C(15)-C(16)	1.381(3)
C(15)-C(14)	1.383(3)
C(16)-C(17)	1.382(3)
C(3)-C(4)	1.353(3)
C(3)-C(13)	1.504(3)
C(3)-C(2)	1.518(3)
C(13)-C(18)	1.384(3)
C(13)-C(14)	1.403(3)
C(7)-C(8)	1.385(4)
C(7)-C(12)	1.387(4)
C(7)-C(4)	1.506(3)
C(2)-C(1)	1.674(3)
C(2)-B(5)	1.712(3)
C(2)-B(4)	1.717(3)
C(2)-B(3)	1.741(3)
C(2)-B(6)	1.746(3)
C(18)-C(17)	1.394(3)
C(1)-B(8)	1.692(4)
C(1)-B(7)	1.692(4)
C(1)-B(3)	1.707(4)
C(1)-B(6)	1.709(3)
C(8)-C(9)	1.379(4)
C(4)-C(5)	1.512(3)
C(5)-C(6)	1.520(4)
B(8)-B(12)	1.770(4)
B(8)-B(7)	1.772(4)
B(8)-B(9)	1.779(4)
B(8)-B(3)	1.785(4)
B(6)-B(11)	1.765(4)
B(6)-B(5)	1.773(4)
B(6)-B(7)	1.778(4)
B(5)-B(10)	1.774(4)
B(5)-B(11)	1.782(4)
B(5)-B(4)	1.790(4)
B(3)-B(9)	1.769(4)
B(3)-B(4)	1.775(4)
C(19)-C(20)	1.496(4)
C(12)-C(11)	1.397(4)
B(11)-B(7)	1.763(4)
B(11)-B(12)	1.784(4)
B(11)-B(10)	1.787(4)
B(10)-B(4)	1.776(4)
B(10)-B(9)	1.783(4)
B(10)-B(12)	1.785(4)
B(9)-B(12)	1.779(4)
B(9)-B(4)	1.784(4)

B(7)-B(12)	1.782(4)
C(10)-C(9)	1.361(5)
C(10)-C(11)	1.369(5)

Molecule 2

Cl(1')-C(20')	1.771(3)
O(1')-C(16')	1.373(3)
O(1')-C(19')	1.429(3)
C(13')-C(14')	1.388(3)
C(13')-C(18')	1.394(3)
C(13')-C(3')	1.504(3)
C(14')-C(15')	1.388(3)
C(16')-C(17')	1.386(3)
C(16')-C(15')	1.388(3)
C(17')-C(18')	1.383(3)
C(3')-C(4')	1.347(3)
C(3')-C(2')	1.524(3)
B(6')-C(1')	1.710(3)
B(6')-C(2')	1.732(4)
B(6')-B(11')	1.764(4)
B(6')-B(5')	1.767(4)
B(6')-B(7')	1.777(4)
B(11')-B(7')	1.775(4)
B(11')-B(5')	1.776(4)
B(11')-B(10')	1.782(4)
B(11')-B(12')	1.788(4)
C(2')-C(1')	1.657(3)
C(2')-B(5')	1.709(3)
C(2')-B(4')	1.724(3)
C(2')-B(3')	1.749(3)
C(1')-B(7')	1.683(4)
C(1')-B(8')	1.696(4)
C(1')-B(3')	1.704(4)
C(7')-C(8')	1.390(4)
C(7')-C(12')	1.392(4)
C(7')-C(4')	1.498(3)
C(19')-C(20')	1.493(4)
C(4')-C(5')	1.518(3)
B(10')-B(4')	1.779(4)
B(10')-B(5')	1.779(4)
B(10')-B(12')	1.782(4)
B(10')-B(9')	1.790(4)
B(5')-B(4')	1.783(4)
B(4')-B(3')	1.774(4)
B(4')-B(9')	1.778(4)
B(9')-B(3')	1.762(4)
B(9')-B(8')	1.774(4)
B(9')-B(12')	1.794(4)
C(5')-C(6')	1.526(4)
C(12')-C(11')	1.390(4)
B(8')-B(12')	1.767(4)
B(8')-B(3')	1.774(4)
B(8')-B(7')	1.775(4)
B(7')-B(12')	1.779(4)

C(8')-C(9')	1.393(4)
C(9')-C(10')	1.373(5)
C(10')-C(11')	1.364(5)

Molecule 1

C(16)-O(1)-C(19)	117.8(2)
C(16)-C(15)-C(14)	120.6(2)
O(1)-C(16)-C(15)	115.9(2)
O(1)-C(16)-C(17)	124.7(2)
C(15)-C(16)-C(17)	119.4(2)
C(4)-C(3)-C(13)	119.3(2)
C(4)-C(3)-C(2)	124.8(2)
C(13)-C(3)-C(2)	115.85(19)
C(18)-C(13)-C(14)	117.7(2)
C(18)-C(13)-C(3)	120.8(2)
C(14)-C(13)-C(3)	121.5(2)
C(15)-C(14)-C(13)	120.9(2)
C(8)-C(7)-C(12)	117.9(3)
C(8)-C(7)-C(4)	122.0(2)
C(12)-C(7)-C(4)	120.0(2)
C(3)-C(2)-C(1)	116.15(18)
C(3)-C(2)-B(5)	126.16(18)
C(1)-C(2)-B(5)	108.17(18)
C(3)-C(2)-B(4)	123.83(19)
C(1)-C(2)-B(4)	108.39(17)
B(5)-C(2)-B(4)	62.94(15)
C(3)-C(2)-B(3)	114.95(18)
C(1)-C(2)-B(3)	59.95(14)
B(5)-C(2)-B(3)	112.92(18)
B(4)-C(2)-B(3)	61.75(14)
C(3)-C(2)-B(6)	117.95(18)
C(1)-C(2)-B(6)	59.94(14)
B(5)-C(2)-B(6)	61.67(15)
B(4)-C(2)-B(6)	113.14(18)
B(3)-C(2)-B(6)	111.90(18)
C(13)-C(18)-C(17)	121.4(2)
C(16)-C(17)-C(18)	119.9(2)
C(2)-C(1)-B(8)	113.29(19)
C(2)-C(1)-B(7)	113.14(18)
B(8)-C(1)-B(7)	63.14(16)
C(2)-C(1)-B(3)	61.99(14)
B(8)-C(1)-B(3)	63.35(16)
B(7)-C(1)-B(3)	115.8(2)
C(2)-C(1)-B(6)	62.12(14)
B(8)-C(1)-B(6)	115.7(2)
B(7)-C(1)-B(6)	63.04(16)
B(3)-C(1)-B(6)	115.49(19)
C(9)-C(8)-C(7)	121.3(3)
C(3)-C(4)-C(7)	117.9(2)
C(3)-C(4)-C(5)	129.0(2)
C(7)-C(4)-C(5)	113.1(2)
C(4)-C(5)-C(6)	112.8(2)
C(1)-B(8)-B(12)	104.51(19)
C(1)-B(8)-B(7)	58.44(15)

B(12)-B(8)-B(7)	60.42(16)
C(1)-B(8)-B(9)	104.17(19)
B(12)-B(8)-B(9)	60.17(16)
B(7)-B(8)-B(9)	108.38(19)
C(1)-B(8)-B(3)	58.74(15)
B(12)-B(8)-B(3)	107.9(2)
B(7)-B(8)-B(3)	108.15(19)
B(9)-B(8)-B(3)	59.52(16)
C(1)-B(6)-C(2)	57.94(13)
C(1)-B(6)-B(11)	103.52(19)
C(2)-B(6)-B(11)	105.35(19)
C(1)-B(6)-B(5)	103.90(18)
C(2)-B(6)-B(5)	58.22(14)
B(11)-B(6)-B(5)	60.51(16)
C(1)-B(6)-B(7)	58.02(15)
C(2)-B(6)-B(7)	105.72(19)
B(11)-B(6)-B(7)	59.68(16)
B(5)-B(6)-B(7)	108.1(2)
C(2)-B(5)-B(6)	60.10(15)
C(2)-B(5)-B(10)	105.47(18)
B(6)-B(5)-B(10)	108.1(2)
C(2)-B(5)-B(11)	106.03(19)
B(6)-B(5)-B(11)	59.53(16)
B(10)-B(5)-B(11)	60.32(16)
C(2)-B(5)-B(4)	58.67(14)
B(6)-B(5)-B(4)	108.42(18)
B(10)-B(5)-B(4)	59.76(16)
B(11)-B(5)-B(4)	108.02(19)
C(1)-B(3)-C(2)	58.06(13)
C(1)-B(3)-B(9)	103.95(19)
C(2)-B(3)-B(9)	105.58(18)
C(1)-B(3)-B(4)	104.31(18)
C(2)-B(3)-B(4)	58.45(14)
B(9)-B(3)-B(4)	60.46(15)
C(1)-B(3)-B(8)	57.90(15)
C(2)-B(3)-B(8)	105.72(18)
B(9)-B(3)-B(8)	60.07(16)
B(4)-B(3)-B(8)	108.3(2)
O(1)-C(19)-C(20)	108.7(3)
C(7)-C(12)-C(11)	120.1(3)
B(7)-B(11)-B(6)	60.54(16)
B(7)-B(11)-B(5)	108.30(19)
B(6)-B(11)-B(5)	59.96(15)
B(7)-B(11)-B(12)	60.32(16)
B(6)-B(11)-B(12)	108.73(19)
B(5)-B(11)-B(12)	108.0(2)
B(7)-B(11)-B(10)	108.10(19)
B(6)-B(11)-B(10)	107.8(2)
B(5)-B(11)-B(10)	59.61(16)
B(12)-B(11)-B(10)	59.97(16)
B(5)-B(10)-B(4)	60.57(16)
B(5)-B(10)-B(9)	108.48(19)
B(4)-B(10)-B(9)	60.18(16)
B(5)-B(10)-B(12)	108.3(2)

B(4)-B(10)-B(12)	108.35(19)
B(9)-B(10)-B(12)	59.83(16)
B(5)-B(10)-B(11)	60.07(16)
B(4)-B(10)-B(11)	108.5(2)
B(9)-B(10)-B(11)	107.8(2)
B(12)-B(10)-B(11)	59.95(16)
B(3)-B(9)-B(8)	60.41(16)
B(3)-B(9)-B(12)	108.2(2)
B(8)-B(9)-B(12)	59.67(16)
B(3)-B(9)-B(10)	107.53(19)
B(8)-B(9)-B(10)	107.49(19)
B(12)-B(9)-B(10)	60.13(16)
B(3)-B(9)-B(4)	59.93(15)
B(8)-B(9)-B(4)	108.1(2)
B(12)-B(9)-B(4)	108.21(19)
B(10)-B(9)-B(4)	59.70(15)
C(1)-B(7)-B(11)	104.30(19)
C(1)-B(7)-B(8)	58.42(15)
B(11)-B(7)-B(8)	108.2(2)
C(1)-B(7)-B(6)	58.95(15)
B(11)-B(7)-B(6)	59.78(16)
B(8)-B(7)-B(6)	108.4(2)
C(1)-B(7)-B(12)	104.0(2)
B(11)-B(7)-B(12)	60.43(16)
B(8)-B(7)-B(12)	59.74(16)
B(6)-B(7)-B(12)	108.2(2)
C(2)-B(4)-B(3)	59.80(14)
C(2)-B(4)-B(10)	105.18(19)
B(3)-B(4)-B(10)	107.6(2)
C(2)-B(4)-B(9)	105.97(19)
B(3)-B(4)-B(9)	59.61(15)
B(10)-B(4)-B(9)	60.11(16)
C(2)-B(4)-B(5)	58.39(14)
B(3)-B(4)-B(5)	107.68(19)
B(10)-B(4)-B(5)	59.67(16)
B(9)-B(4)-B(5)	107.7(2)
C(19)-C(20)-Cl(1)	112.8(2)
B(8)-B(12)-B(9)	60.16(16)
B(8)-B(12)-B(7)	59.83(16)
B(9)-B(12)-B(7)	107.9(2)
B(8)-B(12)-B(11)	107.4(2)
B(9)-B(12)-B(11)	108.1(2)
B(7)-B(12)-B(11)	59.25(16)
B(8)-B(12)-B(10)	107.8(2)
B(9)-B(12)-B(10)	60.04(16)
B(7)-B(12)-B(10)	107.3(2)
B(11)-B(12)-B(10)	60.09(16)
C(9)-C(10)-C(11)	120.1(3)
C(10)-C(9)-C(8)	120.2(4)
C(10)-C(11)-C(12)	120.2(3)

Molecule 2

C(16')-O(1')-C(19')	118.4(2)
C(14')-C(13')-C(18')	117.6(2)

C(14')-C(13')-C(3')	122.8(2)
C(18')-C(13')-C(3')	119.6(2)
C(13')-C(14')-C(15')	121.8(2)
O(1')-C(16')-C(17')	114.7(2)
O(1')-C(16')-C(15')	125.4(2)
C(17')-C(16')-C(15')	119.8(2)
C(18')-C(17')-C(16')	119.9(2)
C(17')-C(18')-C(13')	121.5(2)
C(16')-C(15')-C(14')	119.4(2)
C(4')-C(3')-C(13')	118.8(2)
C(4')-C(3')-C(2')	125.6(2)
C(13')-C(3')-C(2')	115.52(19)
C(1')-B(6')-C(2')	57.54(14)
C(1')-B(6')-B(11')	103.59(19)
C(2')-B(6')-B(11')	105.58(19)
C(1')-B(6')-B(5')	103.62(18)
C(2')-B(6')-B(5')	58.47(14)
B(11')-B(6')-B(5')	60.42(16)
C(1')-B(6')-B(7')	57.66(15)
C(2')-B(6')-B(7')	105.33(19)
B(11')-B(6')-B(7')	60.19(16)
B(5')-B(6')-B(7')	108.1(2)
B(6')-B(11')-B(7')	60.27(16)
B(6')-B(11')-B(5')	59.88(15)
B(7')-B(11')-B(5')	107.8(2)
B(6')-B(11')-B(10')	108.1(2)
B(7')-B(11')-B(10')	107.67(19)
B(5')-B(11')-B(10')	60.00(16)
B(6')-B(11')-B(12')	108.38(19)
B(7')-B(11')-B(12')	59.90(16)
B(5')-B(11')-B(12')	107.9(2)
B(10')-B(11')-B(12')	59.88(16)
C(3')-C(2')-C(1')	116.03(18)
C(3')-C(2')-B(5')	126.20(19)
C(1')-C(2')-B(5')	108.57(18)
C(3')-C(2')-B(4')	124.02(19)
C(1')-C(2')-B(4')	108.16(18)
B(5')-C(2')-B(4')	62.56(15)
C(3')-C(2')-B(6')	117.79(18)
C(1')-C(2')-B(6')	60.57(14)
B(5')-C(2')-B(6')	61.79(15)
B(4')-C(2')-B(6')	113.01(18)
C(3')-C(2')-B(3')	114.94(18)
C(1')-C(2')-B(3')	59.98(14)
B(5')-C(2')-B(3')	112.60(18)
B(4')-C(2')-B(3')	61.43(14)
B(6')-C(2')-B(3')	112.42(18)
C(2')-C(1')-B(7')	113.34(18)
C(2')-C(1')-B(8')	113.54(19)
B(7')-C(1')-B(8')	63.41(16)
C(2')-C(1')-B(3')	62.70(14)
B(7')-C(1')-B(3')	115.9(2)
B(8')-C(1')-B(3')	62.90(16)
C(2')-C(1')-B(6')	61.89(14)

B(7')-C(1')-B(6')	63.16(16)
B(8')-C(1')-B(6')	115.9(2)
B(3')-C(1')-B(6')	115.83(19)
C(8')-C(7')-C(12')	117.8(3)
C(8')-C(7')-C(4')	122.6(2)
C(12')-C(7')-C(4')	119.6(2)
O(1')-C(19')-C(20')	107.7(2)
C(3')-C(4')-C(7')	118.8(2)
C(3')-C(4')-C(5')	129.1(2)
C(7')-C(4')-C(5')	112.0(2)
B(4')-B(10')-B(5')	60.14(16)
B(4')-B(10')-B(12')	108.07(19)
B(5')-B(10')-B(12')	108.0(2)
B(4')-B(10')-B(11')	108.1(2)
B(5')-B(10')-B(11')	59.84(16)
B(12')-B(10')-B(11')	60.21(16)
B(4')-B(10')-B(9')	59.78(15)
B(5')-B(10')-B(9')	108.03(19)
B(12')-B(10')-B(9')	60.29(16)
B(11')-B(10')-B(9')	108.4(2)
C(2')-B(5')-B(6')	59.74(15)
C(2')-B(5')-B(11')	106.00(19)
B(6')-B(5')-B(11')	59.70(16)
C(2')-B(5')-B(10')	105.82(18)
B(6')-B(5')-B(10')	108.1(2)
B(11')-B(5')-B(10')	60.16(16)
C(2')-B(5')-B(4')	59.12(14)
B(6')-B(5')-B(4')	108.56(18)
B(11')-B(5')-B(4')	108.15(19)
B(10')-B(5')-B(4')	59.92(16)
C(2')-B(4')-B(3')	59.98(14)
C(2')-B(4')-B(9')	106.15(19)
B(3')-B(4')-B(9')	59.48(15)
C(2')-B(4')-B(10')	105.20(19)
B(3')-B(4')-B(10')	107.7(2)
B(9')-B(4')-B(10')	60.41(16)
C(2')-B(4')-B(5')	58.31(14)
B(3')-B(4')-B(5')	107.98(19)
B(9')-B(4')-B(5')	108.4(2)
B(10')-B(4')-B(5')	59.94(16)
B(3')-B(9')-B(8')	60.22(16)
B(3')-B(9')-B(4')	60.13(15)
B(8')-B(9')-B(4')	107.9(2)
B(3')-B(9')-B(10')	107.73(19)
B(8')-B(9')-B(10')	107.10(19)
B(4')-B(9')-B(10')	59.81(15)
B(3')-B(9')-B(12')	107.7(2)
B(8')-B(9')-B(12')	59.36(16)
B(4')-B(9')-B(12')	107.57(19)
B(10')-B(9')-B(12')	59.63(15)
C(4')-C(5')-C(6')	111.5(2)
C(11')-C(12')-C(7')	121.0(3)
C(1')-B(8')-B(12')	104.08(19)
C(1')-B(8')-B(3')	58.78(15)

B(12')-B(8')-B(3')	108.3(2)
C(1')-B(8')-B(9')	104.20(19)
B(12')-B(8')-B(9')	60.87(16)
B(3')-B(8')-B(9')	59.56(16)
C(1')-B(8')-B(7')	57.93(15)
B(12')-B(8')-B(7')	60.29(16)
B(3')-B(8')-B(7')	107.97(19)
B(9')-B(8')-B(7')	108.79(19)
C(1')-B(7')-B(11')	104.2(2)
C(1')-B(7')-B(8')	58.66(15)
B(11')-B(7')-B(8')	108.1(2)
C(1')-B(7')-B(6')	59.18(15)
B(11')-B(7')-B(6')	59.54(16)
B(8')-B(7')-B(6')	108.7(2)
C(1')-B(7')-B(12')	104.1(2)
B(11')-B(7')-B(12')	60.39(16)
B(8')-B(7')-B(12')	59.61(16)
B(6')-B(7')-B(12')	108.2(2)
C(19')-C(20')-Cl(1')	113.9(2)
C(7')-C(8')-C(9')	120.9(3)
B(8')-B(12')-B(7')	60.10(16)
B(8')-B(12')-B(10')	107.8(2)
B(7')-B(12')-B(10')	107.5(2)
B(8')-B(12')-B(11')	107.9(2)
B(7')-B(12')-B(11')	59.71(16)
B(10')-B(12')-B(11')	59.91(16)
B(8')-B(12')-B(9')	59.77(16)
B(7')-B(12')-B(9')	107.8(2)
B(10')-B(12')-B(9')	60.07(16)
B(11')-B(12')-B(9')	108.0(2)
C(1')-B(3')-C(2')	57.32(13)
C(1')-B(3')-B(9')	104.3(2)
C(2')-B(3')-B(9')	105.78(18)
C(1')-B(3')-B(8')	58.32(15)
C(2')-B(3')-B(8')	105.50(18)
B(9')-B(3')-B(8')	60.22(16)
C(1')-B(3')-B(4')	103.84(18)
C(2')-B(3')-B(4')	58.59(14)
B(9')-B(3')-B(4')	60.39(16)
B(8')-B(3')-B(4')	108.1(2)
C(10')-C(9')-C(8')	119.8(3)
C(11')-C(10')-C(9')	120.4(3)
C(10')-C(11')-C(12')	120.0(4)

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for chloro Tamoxifen carborane. 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
Cl(1')	74(1)	95(1)	52(1)	7(1)	34(1)	-4(1)
O(1')	60(1)	54(1)	33(1)	9(1)	18(1)	-11(1)
C(13')	37(1)	32(1)	29(1)	0(1)	16(1)	-2(1)
C(14')	36(1)	33(1)	37(1)	2(1)	16(1)	-2(1)
C(16')	51(2)	33(1)	31(1)	2(1)	18(1)	-2(1)
C(17')	41(2)	49(2)	40(2)	5(1)	19(1)	-9(1)
C(18')	37(2)	46(2)	30(1)	5(1)	11(1)	-5(1)
C(15')	40(2)	40(2)	29(1)	2(1)	10(1)	-1(1)
C(3')	33(1)	35(1)	29(1)	-1(1)	14(1)	-2(1)
B(6')	32(2)	38(2)	31(2)	-2(1)	17(1)	1(1)
B(11')	34(2)	38(2)	39(2)	2(1)	20(1)	2(1)
C(2')	33(1)	35(1)	29(1)	1(1)	16(1)	0(1)
C(1')	37(1)	37(1)	30(1)	1(1)	20(1)	4(1)
C(7')	52(2)	36(1)	38(1)	-1(1)	24(1)	0(1)
C(19')	55(2)	57(2)	35(2)	12(1)	14(2)	-2(2)
C(4')	37(1)	34(1)	33(1)	2(1)	14(1)	0(1)
B(10')	36(2)	40(2)	36(2)	8(1)	19(1)	6(1)
B(5')	34(2)	40(2)	35(2)	3(1)	20(1)	-1(1)
B(4')	37(2)	39(2)	30(2)	2(1)	18(1)	3(1)
B(9')	34(2)	41(2)	38(2)	7(1)	20(1)	6(1)
C(5')	50(2)	38(2)	35(1)	-1(1)	19(1)	-1(1)
C(12')	65(2)	43(2)	55(2)	-5(1)	23(2)	-4(2)
B(8')	37(2)	42(2)	38(2)	3(1)	22(1)	6(1)
B(7')	40(2)	37(2)	35(2)	-4(1)	19(1)	0(1)
C(20')	64(2)	66(2)	45(2)	18(2)	23(2)	4(2)
C(6')	67(2)	49(2)	53(2)	4(2)	39(2)	5(2)
C(8')	57(2)	48(2)	52(2)	8(1)	26(2)	9(2)
B(12')	39(2)	37(2)	41(2)	3(1)	22(1)	5(1)
B(3')	32(2)	41(2)	37(2)	2(1)	19(1)	-1(1)
C(9')	85(3)	56(2)	73(2)	19(2)	44(2)	27(2)
C(10')	122(4)	38(2)	90(3)	5(2)	67(3)	11(2)
C(11')	100(3)	47(2)	80(3)	-14(2)	47(2)	-20(2)
Cl(1)	105(1)	145(1)	55(1)	-26(1)	47(1)	-45(1)
O(1)	55(1)	55(1)	33(1)	-12(1)	18(1)	-5(1)
C(15)	42(2)	42(2)	37(1)	-5(1)	21(1)	-1(1)
C(16)	47(2)	30(1)	30(1)	-3(1)	17(1)	-7(1)
C(3)	28(1)	31(1)	32(1)	-2(1)	16(1)	2(1)
C(13)	36(1)	29(1)	31(1)	0(1)	17(1)	0(1)
C(14)	34(2)	41(2)	33(1)	-4(1)	14(1)	-1(1)
C(7)	44(2)	33(1)	31(1)	5(1)	14(1)	2(1)
C(2)	32(1)	33(1)	27(1)	-1(1)	16(1)	-1(1)
C(18)	34(2)	34(1)	39(1)	1(1)	15(1)	2(1)
C(17)	37(2)	38(2)	36(1)	0(1)	10(1)	1(1)
C(1)	38(1)	35(1)	30(1)	-1(1)	18(1)	-1(1)
C(8)	60(2)	41(2)	49(2)	4(1)	26(2)	6(2)
C(4)	31(1)	36(1)	34(1)	2(1)	15(1)	4(1)
C(5)	49(2)	43(2)	35(1)	2(1)	23(1)	2(1)
B(8)	38(2)	36(2)	36(2)	-3(1)	20(1)	-6(1)
B(6)	36(2)	35(2)	36(2)	1(1)	22(1)	4(1)

B(5)	38(2)	38(2)	38(2)	-4(1)	24(1)	-2(1)
B(3)	32(2)	40(2)	31(2)	-2(1)	17(1)	-1(1)
C(19)	58(2)	59(2)	34(2)	-9(1)	14(2)	-12(2)
C(12)	48(2)	49(2)	59(2)	12(1)	19(2)	-1(2)
B(11)	37(2)	38(2)	41(2)	-3(1)	24(1)	1(1)
B(10)	41(2)	40(2)	36(2)	-6(1)	21(2)	-3(1)
B(9)	36(2)	39(2)	34(2)	-2(1)	17(1)	-3(1)
B(7)	39(2)	36(2)	36(2)	6(1)	18(1)	2(1)
C(6)	66(2)	73(2)	36(2)	8(2)	22(2)	13(2)
B(4)	37(2)	39(2)	31(2)	-3(1)	18(1)	-1(1)
C(20)	80(3)	79(3)	41(2)	-18(2)	27(2)	-25(2)
B(12)	42(2)	37(2)	43(2)	-4(1)	25(2)	-1(1)
C(10)	124(3)	38(2)	55(2)	3(2)	32(2)	-9(2)
C(9)	112(3)	38(2)	61(2)	5(2)	45(2)	13(2)
C(11)	76(3)	55(2)	68(2)	10(2)	21(2)	-24(2)

Table 6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for chloro.tamoxifen carborane

	x	y	z	U(eq)
H(3Z)	3514(19)	7020(8)	6722(19)	42(6)
H(8Y)	1967(17)	2776(7)	-638(18)	35(6)
H(6Y)	5276(17)	2222(6)	-593(16)	22(5)
H(1')	3533(17)	2113(7)	-177(19)	29(6)
H(11Y)	4866(19)	3070(7)	-1816(18)	39(6)
H(1)	1434(18)	7194(7)	5121(19)	30(6)
H(3Y)	1486(18)	1948(7)	-1834(18)	38(6)
H(5Z)	788(18)	7233(7)	8037(18)	38(6)
H(15')	5405(18)	1229(7)	2020(19)	29(6)
H(5Y)	4314(19)	2203(7)	-2970(19)	41(6)
H(9Y)	820(20)	2798(7)	-3188(19)	46(7)
H(7Z)	589(19)	8006(7)	4920(20)	45(7)
H(9Z)	4259(18)	7840(7)	8111(18)	35(6)
H(4Z)	3248(17)	7059(7)	8775(17)	30(6)
H(12Y)	2664(18)	3424(8)	-1889(19)	42(7)
H(14')	5313(18)	1525(7)	415(17)	30(6)
H(12Z)	2323(18)	8485(8)	6947(19)	46(7)
H(4Y)	1875(18)	2044(7)	-3779(18)	35(6)
H(11Z)	170(18)	8102(7)	6926(18)	37(6)
H(10Y)	2651(17)	2951(7)	-3868(18)	34(6)
H(8Z)	3029(16)	7852(7)	5594(17)	32(6)
H(7Y)	4348(18)	2940(7)	102(19)	41(6)
H(5D)	2910(20)	1142(8)	-4110(20)	44(7)
H(5C)	3257(18)	1661(8)	-3889(19)	38(6)
H(14)	2947(19)	6299(7)	5859(19)	35(6)
H(6Z)	-300(20)	7257(7)	5618(19)	42(6)
H(5B)	1789(19)	6690(8)	8796(19)	41(7)
H(18)	-520(20)	6482(8)	4800(20)	51(8)
H(10Z)	2485(18)	7982(7)	8890(20)	45(7)
H(18')	1980(20)	1131(7)	-1280(20)	43(7)
H(5A)	930(20)	6289(8)	8600(20)	57(8)
H(19B)	-1090(20)	5695(8)	1890(20)	51(7)
H(20D)	5300(20)	382(9)	4620(30)	65(9)
H(17)	-880(20)	6188(8)	3140(20)	49(8)
H(15)	2489(19)	5994(7)	4053(19)	41(7)
H(20B)	-1330(30)	5461(9)	190(30)	67(9)
H(12')	2100(20)	635(8)	-3100(20)	43(7)
H(17')	2100(20)	813(9)	320(20)	60(9)
H(6F)	5280(20)	1447(9)	-3090(20)	64(9)
H(8)	2810(20)	5680(8)	7110(20)	56(8)
H(19A)	-820(20)	6126(10)	1270(20)	78(10)
H(10')	4010(30)	-436(11)	-1590(30)	86(11)
H(11)	-680(20)	5103(8)	6530(20)	50(8)
H(6D)	4610(20)	1298(8)	-4320(20)	59(8)
H(6C)	3380(20)	6204(9)	9480(20)	55(9)
H(19D)	5450(20)	737(8)	3190(20)	50(8)
H(6B)	2740(30)	6169(10)	10190(30)	83(10)

H(8')	5460(20)	764(9)	-1150(20)	59(9)
H(12)	-240(20)	5809(9)	7150(20)	59(9)
H(20C)	4520(20)	130(11)	3520(30)	76(10)
H(19C)	4760(20)	1056(10)	3610(20)	63(9)
H(10)	590(30)	4644(13)	6150(30)	108(13)
H(9')	5720(30)	31(10)	-770(30)	90(11)
H(6A)	2610(30)	5778(12)	9370(30)	95(12)
H(11')	2210(20)	-114(9)	-2740(20)	61(9)
H(20A)	-180(30)	5258(11)	1080(30)	85(13)
H(9)	2400(30)	4943(12)	6500(30)	103(13)
H(6E)	4920(20)	961(10)	-3360(20)	65(9)

Packing diagrams for compound 7

