© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 41

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **6d**.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	7161	4557	2157	139
H(1B)	7853	5115	3013	139
H(1C)	7347	5716	2127	139
H(2A)	5754	4965	971	105
H(2B)	4697	5069	839	105
H(2C)	5345	4241	1478	105
H(4A)	5037	4962	2789	55
H(4B)	5257	6100	3035	55
H(5A)	3865	6146	3167	69
H(5B)	2907	6211	2332	69
H(7A)	4957	7777	2665	81
H(7B)	4956	7652	3607	81
H(7C)	4622	8669	3088	81
H(8A)	3122	8593	3241	116
H(8B)	3399	7569	3757	116
H(8C)	2453	7656	2904	116
H(11A)	1255	8357	1289	192
H(11B)	412	7962	438	192
H(11C)	581	9125	596	192
H(12A)	1517	10390	-179	156
H(12B)	2460	10699	616	156
H(12C)	1583	10359	792	156
H(13A)	2339	9256	-687	63
H(13B)	3307	9490	101	63
H(14A)	3957	8595	-669	60
H(14B)	3946	7417	-669	60
H(16A)	4599	8962	1319	89
H(16B)	5024	9529	733	89
H(16C)	5687	8903	1559	89
H(17A)	6293	7939	629	109
H(17B)	5632	8513	-231	109
H(17C)	5604	7332	-196	109
H(19A)	2450	7397	-1370	62
H(19B)	1746	7722	-956	62
H(21)	1401	5794	-1698	55
H(23)	2323	3784	278	62
H(25A)	3037	4798	1869	75
H(25B)	3868	4443	1630	75
H(27)	33	4681	-2157	86
H(28)	-826	3399	-3036	105
H(29)	1174	1496	-1885	114
H(30)	2085	2695	-936	91
H(1N)	4360(20)	6829(19)	880(17)	41(8)
H(2N)	3002(19)	7530(20)	1262(19)	47(9)

TABLE S36

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 42

Table 6. Torsion angles [°] for **6d**.

C(1)-O(3)-C(3)-C(2)	50.0(4)
C(1)-O(3)-C(3)-C(4)	170.6(3)
C(1)-O(3)-C(3)-C(18)	-70.7(3)
C(5)-N(4)-C(4)-C(3)	-146.5(2)
C(25)-N(4)-C(4)-C(3)	85.6(3)
O(3)-C(3)-C(4)-N(4)	180.0(2)
C(2)-C(3)-C(4)-N(4)	-61.1(3)
C(18)-C(3)-C(4)-N(4)	64.1(3)
C(4)-N(4)-C(5)-C(6)	88.8(3)
C(25)-N(4)-C(5)-C(6)	-142.9(3)
C(9)-N(3)-C(6)-C(7)	-65.2(4)
C(9)-N(3)-C(6)-C(5)	170.1(3)
C(9)-N(3)-C(6)-C(8)	55.1(4)
N(4)-C(5)-C(6)-N(3)	61.4(3)
N(4)-C(5)-C(6)-C(7)	-62.0(4)
N(4)-C(5)-C(6)-C(8)	178.8(3)
C(6)-N(3)-C(9)-O(1)	6.3(5)
C(6)-N(3)-C(9)-C(10)	-172.3(3)
C(11)-O(4)-C(10)-C(13)	-177.4(3)
C(11)-O(4)-C(10)-C(12)	-62.2(4)
C(11)-O(4)-C(10)-C(9)	60.0(4)
O(1)-C(9)-C(10)-O(4)	-132.9(3)
N(3)-C(9)-C(10)-O(4)	45.7(4)
O(1)-C(9)-C(10)-C(13)	108.9(3)
N(3)-C(9)-C(10)-C(13)	-72.5(4)
O(1)-C(9)-C(10)-C(12)	-10.1(5)
N(3)-C(9)-C(10)-C(12)	168.6(3)
C(14)-N(2)-C(13)-C(10)	-147.7(3)
C(19)-N(2)-C(13)-C(10)	85.2(3)
O(4)-C(10)-C(13)-N(2)	-57.3(3)
C(12)-C(10)-C(13)-N(2)	-176.0(3)
C(9)-C(10)-C(13)-N(2)	62.9(4)
C(19)-N(2)-C(14)-C(15)	-143.2(2)
C(13)-N(2)-C(14)-C(15)	89.5(3)
C(18)-N(1)-C(15)-C(14)	168.9(3)
C(18)-N(1)-C(15)-C(16)	-66.8(3)
C(18)-N(1)-C(15)-C(17)	54.1(4)
N(2)-C(14)-C(15)-N(1)	60.3(3)
N(2)-C(14)-C(15)-C(16)	-62.2(3)
N(2)-C(14)-C(15)-C(17)	177.5(2)
C(15)-N(1)-C(18)-O(2)	6.2(4)
C(15)-N(1)-C(18)-C(3)	-169.9(2)
O(3)-C(3)-C(18)-O(2)	1.4(4)
C(2)-C(3)-C(18)-O(2)	-120.7(3)
C(4)-C(3)-C(18)-O(2)	111.6(3)
O(3)-C(3)-C(18)-N(1)	177.6(2)
C(2)-C(3)-C(18)-N(1)	55.5(3)
C(4)-C(3)-C(18)-N(1)	-72.2(3)
C(14)-N(2)-C(19)-C(20)	93.4(3)
C(13)-N(2)-C(19)-C(20)	-138.5(3)
C(24)-N(5)-C(20)-C(21)	0.7(4)
C(24)-N(5)-C(20)-C(19)	179.2(3)
N(2)-C(19)-C(20)-N(5)	11.1(4)
N(2)-C(19)-C(20)-C(21)	-170.4(3)
N(5)-C(20)-C(21)-C(22)	-1.2(4)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-179.6(3)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	0.3(4)
C(20)-C(21)-C(22)-C(26)	-178.8(3)
C(21)-C(22)-C(23)-C(24)	1.0(4)
C(26)-C(22)-C(23)-C(24)	-179.9(3)
C(20)-N(5)-C(24)-C(23)	0.7(4)
C(20)-N(5)-C(24)-C(25)	-179.8(3)
C(22)-C(23)-C(24)-N(5)	-1.5(5)
C(22)-C(23)-C(24)-C(25)	179.0(3)
C(4)-N(4)-C(25)-C(24)	-129.7(3)
C(5)-N(4)-C(25)-C(24)	101.3(3)
N(5)-C(24)-C(25)-N(4)	-3.4(4)
C(23)-C(24)-C(25)-N(4)	176.1(3)
C(23)-C(22)-C(26)-C(30)	-36.6(5)
C(21)-C(22)-C(26)-C(30)	142.5(3)
C(23)-C(22)-C(26)-C(27)	142.6(3)
C(21)-C(22)-C(26)-C(27)	-38.3(5)
C(30)-C(26)-C(27)-C(28)	0.7(5)
C(22)-C(26)-C(27)-C(28)	-178.6(3)
C(29)-N(6)-C(28)-C(27)	-0.2(7)
C(26)-C(27)-C(28)-N(6)	-0.8(7)
C(28)-N(6)-C(29)-C(30)	1.3(7)
N(6)-C(29)-C(30)-C(26)	-1.4(7)
C(27)-C(26)-C(30)-C(29)	0.3(6)
C(22)-C(26)-C(30)-C(29)	179.6(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

TABLE S37

Table 7. Hydrogen bonds for **6d** [Å and °].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
N(3)-H(2N)...N(2)	0.87(3)	2.51(3)	3.075(3)	123(2)
N(3)-H(2N)...N(5)	0.87(3)	2.37(3)	3.219(4)	167(3)
N(1)-H(1N)...N(4)	0.88(3)	2.54(3)	3.091(3)	121(2)
N(1)-H(1N)...N(5)	0.88(3)	2.32(3)	3.192(4)	171(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

TABLE S38

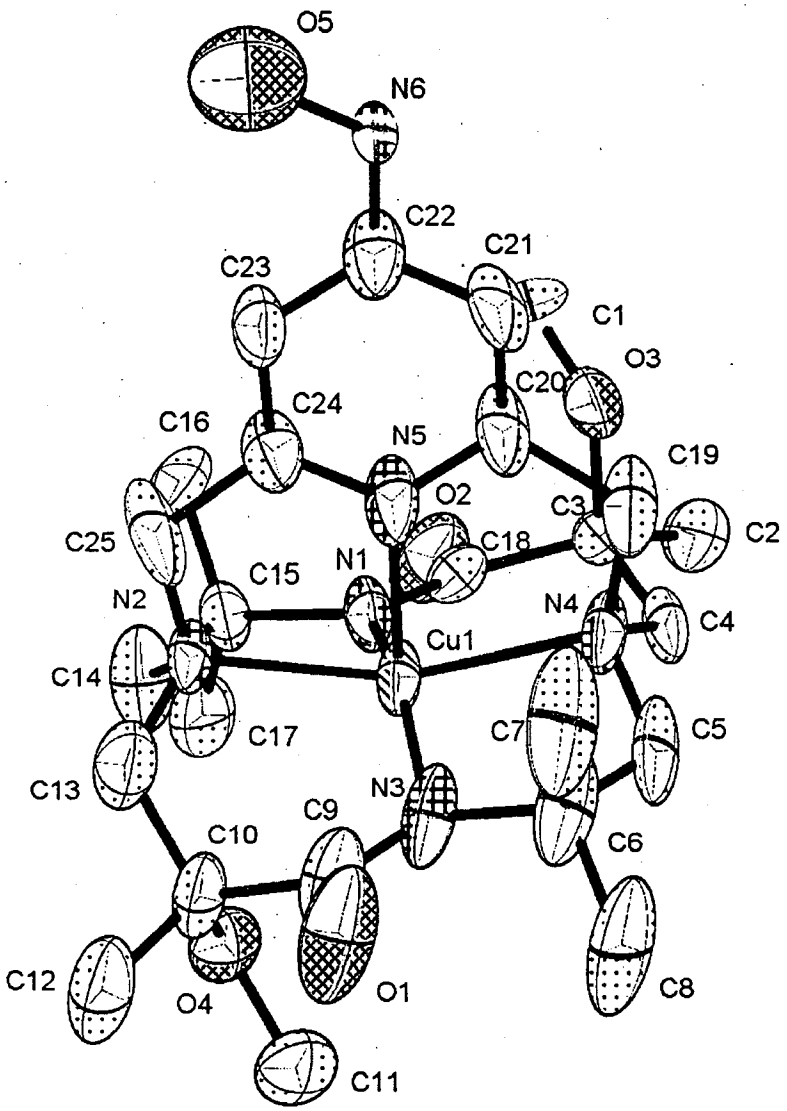

O5
N6
C22
C21
C23
C1
O3
C20
C24
C16
N5
C19
O2
C3
C2
C25
C18
N1
C15
N2
N4
C4
Cu1
C14
C17
C7
C5
C13
N3
C9
C10
C6
C12
O4
O1
C8
C11

FIGURE S20

Table 1. Crystal data and structure refinement for **7a'**.

Identification code	lsh57lt	
Empirical formula	C25 H38 Cu N6 O5	
Formula weight	566.15	
Temperature	155(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/n	
Unit cell dimensions	a = 9.559(3) Å	α= 90°.
	b = 25.274(11) Å	β= 111.926(12)°.
	c = 12.007(5) Å	γ = 90°.
Volume	2690.9(17) $Å^3$	
Z	4	
Density (calculated)	1.397 Mg/m^3	
Absorption coefficient	0.858 mm^{-1}	
F(000)	1196	
Crystal size	? x ? x ? mm^3	
Theta range for data collection	3.22 to 20.84°.	
Index ranges	-9<=h<=9, -25<=k<=25, -11<=l<=11	
Reflections collected	17395	
Independent reflections	2805 [R(int) = 0.0877]	
Completeness to theta = 20.84°	99.4 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	2805 / 0 / 345	
Goodness-of-fit on F^2	0.655	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0674, wR2 = 0.1587	
R indices (all data)	R1 = 0.0949, wR2 = 0.1825	
Extinction coefficient	0.0086(13)	
Largest diff. peak and hole	1.114 and -0.446 $e.Å^{-3}$	

TABLE S39

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 46

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **7a'**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	6757(1)	6139(1)	7164(1)	40(1)
N(1)	7628(7)	5461(3)	7041(6)	43(2)
O(1)	6010(8)	7711(3)	6428(9)	100(3)
C(1)	7017(13)	4465(6)	8929(10)	124(6)
N(2)	8993(6)	6435(3)	7840(5)	37(2)
O(2)	7515(7)	4576(3)	6529(6)	69(2)
C(2)	4705(11)	4398(4)	6403(9)	72(3)
N(3)	5744(8)	6810(3)	6518(7)	59(2)
O(3)	5867(7)	4847(3)	8317(6)	78(2)
C(3)	5487(10)	4900(4)	7026(7)	55(3)
C(4)	4324(9)	5335(4)	6614(7)	51(3)
N(4)	4689(7)	5865(4)	7190(6)	56(2)
O(4)	7799(6)	6800(2)	5321(5)	50(2)
N(5)	7177(8)	6175(4)	9001(6)	69(3)
O(5)	9611(11)	6272(4)	13438(8)	125(3)
C(5)	3637(10)	6265(4)	6422(10)	66(3)
N(6)	8165(7)	6083(3)	12600(5)	42(2)
C(6)	4199(10)	6838(5)	6569(11)	78(4)
C(7)	4264(12)	7099(6)	7743(13)	114(5)
O(7)	2100(30)	1534(11)	1970(30)	115(11)
C(8)	3117(12)	7144(5)	5488(14)	107(5)
C(9)	6458(10)	7246(5)	6429(10)	64(3)
C(10)	7971(9)	7169(4)	6258(9)	52(3)
C(11)	6665(11)	6933(4)	4189(9)	65(3)
C(12)	8577(11)	7700(4)	5991(11)	82(4)
C(13)	9199(10)	6953(4)	7383(10)	69(3)
C(14)	9696(11)	6062(4)	7208(11)	74(3)
C(15)	9224(9)	5490(3)	7133(8)	41(2)
C(16)	10221(10)	5125(4)	8087(9)	78(4)
C(17)	9365(11)	5334(6)	5947(10)	92(4)
C(18)	6982(10)	4983(4)	6831(7)	48(2)
C(19)	4663(10)	5850(5)	8427(8)	81(4)
C(20)	6171(10)	5988(4)	9426(8)	61(3)
C(21)	6497(11)	5957(4)	10622(8)	66(3)
C(22)	7910(10)	6121(4)	11421(8)	54(3)
C(23)	8968(10)	6292(4)	10960(8)	59(3)
C(24)	8555(11)	6310(4)	9727(8)	66(3)
C(25)	9639(14)	6435(8)	9120(9)	152(8)

TABLE S40

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 47

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **7a'**.

Cu(1)-N(1)	1.935(7)	C(12)-H(12A)	0.9800	C(14)-N(2)-Cu(1)	99.3(5)
Cu(1)-N(3)	1.962(8)	C(12)-H(12B)	0.9800	C(3)-C(2)-H(2A)	109.5
Cu(1)-N(5)	2.090(7)	C(12)-H(12C)	0.9800	C(3)-C(2)-H(2B)	109.5
Cu(1)-N(4)	2.106(7)	C(13)-H(13A)	0.9900	H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Cu(1)-N(2)	2.118(6)	C(13)-H(13B)	0.9900	C(3)-C(2)-H(2C)	109.5
N(1)-C(18)	1.336(11)	C(14)-C(15)	1.505(13)	H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
N(1)-C(15)	1.490(10)	C(14)-H(14A)	0.9900	H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
O(1)-C(9)	1.250(11)	C(14)-H(14B)	0.9900	C(9)-N(3)-C(6)	120.5(8)
C(1)-O(3)	1.441(14)	C(15)-C(16)	1.503(12)	C(9)-N(3)-Cu(1)	124.0(6)
C(1)-H(1A)	0.9800	C(15)-C(17)	1.533(14)	C(6)-N(3)-Cu(1)	111.9(7)
C(1)-H(1B)	0.9800	C(16)-H(16A)	0.9800	C(1)-O(3)-C(3)	116.2(9)
C(1)-H(1C)	0.9800	C(16)-H(16B)	0.9800	O(3)-C(3)-C(4)	105.9(8)
N(2)-C(25)	1.426(12)	C(16)-H(16C)	0.9800	O(3)-C(3)-C(2)	109.2(7)
N(2)-C(13)	1.461(11)	C(17)-H(17A)	0.9800	C(4)-C(3)-C(2)	106.3(7)
N(2)-C(14)	1.515(12)	C(17)-H(17B)	0.9800	O(3)-C(3)-C(18)	107.2(6)
O(2)-C(18)	1.260(11)	C(17)-H(17C)	0.9800	C(4)-C(3)-C(18)	117.3(8)
C(2)-C(3)	1.519(13)	C(19)-C(20)	1.531(12)	C(2)-C(3)-C(18)	110.6(9)
C(2)-H(2A)	0.9800	C(19)-H(19A)	0.9900	N(4)-C(4)-C(3)	119.2(7)
C(2)-H(2B)	0.9800	C(19)-H(19B)	0.9900	N(4)-C(4)-H(4A)	107.5
C(2)-H(2C)	0.9800	C(20)-C(21)	1.353(13)	C(3)-C(4)-H(4A)	107.5
N(3)-C(9)	1.323(13)	C(21)-C(22)	1.397(12)	N(4)-C(4)-H(4B)	107.5
N(3)-C(6)	1.503(12)	C(21)-H(21A)	0.9500	C(3)-C(4)-H(4B)	107.5
O(3)-C(3)	1.461(10)	C(22)-C(23)	1.391(12)	H(4A)-C(4)-H(4B)	107.0
C(3)-C(4)	1.511(13)	C(23)-C(24)	1.383(12)	C(5)-N(4)-C(4)	109.7(7)
C(3)-C(18)	1.547(13)	C(23)-H(23A)	0.9500	C(5)-N(4)-C(19)	112.2(8)
C(4)-N(4)	1.488(12)	C(24)-C(25)	1.507(13)	C(4)-N(4)-C(19)	110.6(8)
C(4)-H(4A)	0.9900	C(25)-H(25A)	0.9900	C(5)-N(4)-Cu(1)	100.9(5)
C(4)-H(4B)	0.9900	C(25)-H(25B)	0.9900	C(4)-N(4)-Cu(1)	110.3(5)
N(4)-C(5)	1.480(13)			C(19)-N(4)-Cu(1)	112.7(5)
N(4)-C(19)	1.494(11)	N(1)-Cu(1)-N(3)	153.8(3)	C(10)-O(4)-C(11)	115.0(7)
O(4)-C(10)	1.421(11)	N(1)-Cu(1)-N(5)	101.6(3)	C(24)-N(5)-C(20)	121.4(8)
O(4)-C(11)	1.427(10)	N(3)-Cu(1)-N(5)	104.5(4)	C(24)-N(5)-Cu(1)	117.3(6)
N(5)-C(24)	1.324(11)	N(1)-Cu(1)-N(4)	98.2(3)	C(20)-N(5)-Cu(1)	120.4(6)
N(5)-C(20)	1.334(11)	N(3)-Cu(1)-N(4)	87.8(3)	N(4)-C(5)-C(6)	116.5(8)
O(5)-N(6)	1.453(11)	N(5)-Cu(1)-N(4)	79.1(3)	N(4)-C(5)-H(5B)	108.2
C(5)-C(6)	1.532(15)	N(1)-Cu(1)-N(2)	86.6(3)	C(6)-C(5)-H(5B)	108.2
C(5)-H(5B)	0.9900	N(3)-Cu(1)-N(2)	97.2(3)	N(4)-C(5)-H(5C)	108.2
C(5)-H(5C)	0.9900	N(5)-Cu(1)-N(2)	79.1(3)	C(6)-C(5)-H(5C)	108.2
N(6)-C(22)	1.347(11)	N(4)-Cu(1)-N(2)	158.2(3)	H(5B)-C(5)-H(5C)	107.3
C(6)-C(8)	1.532(17)	C(18)-N(1)-C(15)	116.5(7)	C(22)-N(6)-O(5)	117.1(7)
C(6)-C(7)	1.537(15)	C(18)-N(1)-Cu(1)	129.3(6)	N(3)-C(6)-C(8)	110.6(10)
C(7)-H(7A)	0.9800	C(15)-N(1)-Cu(1)	114.1(5)	N(3)-C(6)-C(5)	104.9(8)
C(7)-H(7B)	0.9800	O(3)-C(1)-H(1A)	109.5	C(8)-C(6)-C(5)	106.4(9)
C(7)-H(7C)	0.9800	O(3)-C(1)-H(1B)	109.5	N(3)-C(6)-C(7)	110.7(8)
C(8)-H(8A)	0.9800	H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5	C(8)-C(6)-C(7)	110.1(10)
C(8)-H(8B)	0.9800	O(3)-C(1)-H(1C)	109.5	C(5)-C(6)-C(7)	113.8(11)
C(8)-H(8C)	0.9800	H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5	C(6)-C(7)-H(7A)	109.5
C(9)-C(10)	1.547(13)	H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5	C(6)-C(7)-H(7B)	109.5
C(10)-C(13)	1.522(13)	C(25)-N(2)-C(13)	109.8(9)	H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
C(10)-C(12)	1.544(13)	C(25)-N(2)-C(14)	116.5(10)	C(6)-C(7)-H(7C)	109.5
C(11)-H(11A)	0.9800	C(13)-N(2)-C(14)	102.8(7)	H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
C(11)-H(11B)	0.9800	C(25)-N(2)-Cu(1)	112.5(5)	H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
C(11)-H(11C)	0.9800	C(13)-N(2)-Cu(1)	115.5(5)	C(6)-C(8)-H(8A)	109.5

TABLE S4

C(6)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
C(6)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
O(1)-C(9)-N(3)	126.7(9)
O(1)-C(9)-C(10)	117.1(10)
N(3)-C(9)-C(10)	116.2(9)
O(4)-C(10)-C(13)	106.9(8)
O(4)-C(10)-C(12)	110.3(8)
C(13)-C(10)-C(12)	105.8(7)
O(4)-C(10)-C(9)	110.5(7)
C(13)-C(10)-C(9)	112.1(9)
C(12)-C(10)-C(9)	111.1(8)
O(4)-C(11)-H(11A)	109.5
O(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
O(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(10)-C(12)-H(12A)	109.5
C(10)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
C(10)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
N(2)-C(13)-C(10)	119.1(7)
N(2)-C(13)-H(13A)	107.5
C(10)-C(13)-H(13A)	107.5
N(2)-C(13)-H(13B)	107.5
C(10)-C(13)-H(13B)	107.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	107.0
C(15)-C(14)-N(2)	116.6(8)
C(15)-C(14)-H(14A)	108.2
N(2)-C(14)-H(14A)	108.2
C(15)-C(14)-H(14B)	108.1
N(2)-C(14)-H(14B)	108.1
H(14A)-C(14)-H(14B)	107.3
N(1)-C(15)-C(14)	109.2(7)
N(1)-C(15)-C(16)	111.5(7)
C(14)-C(15)-C(16)	117.0(8)
N(1)-C(15)-C(17)	111.2(7)
C(14)-C(15)-C(17)	100.0(8)
C(16)-C(15)-C(17)	107.4(9)
C(15)-C(16)-H(16A)	109.5
C(15)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
C(15)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
C(15)-C(17)-H(17A)	109.5
C(15)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
O(2)-C(18)-N(1)	125.8(8)
O(2)-C(18)-C(3)	115.3(9)
N(1)-C(18)-C(3)	118.8(9)
N(4)-C(19)-C(20)	114.4(7)
N(4)-C(19)-H(19A)	108.7
C(20)-C(19)-H(19A)	108.7
N(4)-C(19)-H(19B)	108.6
C(20)-C(19)-H(19B)	108.7
H(19A)-C(19)-H(19B)	107.6
N(5)-C(20)-C(21)	120.9(8)
N(5)-C(20)-C(19)	112.5(8)
C(21)-C(20)-C(19)	126.5(8)
C(20)-C(21)-C(22)	119.5(8)
C(20)-C(21)-H(21A)	120.3
C(22)-C(21)-H(21A)	120.3
N(6)-C(22)-C(23)	124.6(8)
N(6)-C(22)-C(21)	116.8(8)
C(23)-C(22)-C(21)	118.6(8)
C(24)-C(23)-C(22)	118.5(8)
C(24)-C(23)-H(23A)	120.8
C(22)-C(23)-H(23A)	120.8
N(5)-C(24)-C(23)	120.9(8)
N(5)-C(24)-C(25)	115.5(8)
C(23)-C(24)-C(25)	123.5(8)
N(2)-C(25)-C(24)	114.9(8)
N(2)-C(25)-H(25A)	108.5
C(24)-C(25)-H(25A)	108.5
N(2)-C(25)-H(25B)	108.5
C(24)-C(25)-H(25B)	108.6
H(25A)-C(25)-H(25B)	107.5

TABLE S42

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 49

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 x\ 10^3$) for **7a'**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[\ h^2\ a^{*2}U^{11} + ... + 2\ h\ k\ a^*\ b^*\ U^{12}\ ]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cu(1)	21(1)	67(1)	34(1)	-17(1)	14(1)	-12(1)
N(1)	30(4)	52(5)	47(4)	-9(4)	16(3)	-18(4)
O(1)	51(5)	63(5)	170(9)	-41(5)	22(5)	9(4)
C(1)	60(8)	226(17)	53(7)	85(10)	-17(6)	-34(9)
N(2)	20(4)	63(5)	32(4)	-17(4)	16(3)	-8(3)
O(2)	48(4)	56(5)	81(5)	1(4)	0(4)	-9(4)
C(2)	53(6)	90(8)	54(6)	14(6)	-4(5)	-33(6)
N(3)	26(4)	68(6)	80(6)	-36(5)	17(4)	-3(4)
O(3)	54(4)	134(7)	39(4)	13(4)	8(3)	-49(4)
C(3)	36(6)	90(8)	28(5)	14(5)	0(4)	-26(6)
C(4)	37(5)	89(8)	29(5)	-20(5)	15(4)	-40(6)
N(4)	22(4)	108(7)	40(5)	-17(5)	15(4)	-16(5)
O(4)	41(4)	44(4)	60(4)	8(3)	14(3)	11(3)
N(5)	43(5)	130(8)	35(4)	-33(5)	17(4)	-43(5)
O(5)	135(8)	160(9)	80(6)	-6(6)	41(6)	-10(7)
C(5)	27(5)	103(9)	80(7)	-40(7)	33(5)	-19(6)
N(6)	28(4)	94(6)	8(4)	-16(3)	11(3)	-26(4)
C(6)	29(6)	98(9)	108(9)	-38(8)	27(6)	9(6)
C(7)	48(7)	143(12)	171(14)	-81(11)	64(8)	-1(7)
O(7)	63(17)	100(20)	140(30)	-41(19)	-9(17)	14(15)
C(8)	32(6)	87(9)	185(14)	-25(9)	22(8)	11(6)
C(9)	35(6)	59(8)	90(8)	-30(6)	16(5)	1(6)
C(10)	24(5)	50(6)	74(7)	-1(5)	11(5)	0(4)
C(11)	58(6)	51(6)	72(7)	16(5)	11(6)	8(5)
C(12)	37(6)	56(7)	135(11)	13(7)	10(6)	2(5)
C(13)	40(6)	61(7)	91(8)	9(6)	8(6)	-10(5)
C(14)	47(6)	74(8)	108(9)	-13(7)	36(6)	-10(6)
C(15)	27(5)	40(5)	59(6)	9(4)	18(4)	-3(4)
C(16)	43(6)	89(8)	67(7)	32(6)	-21(5)	-28(6)
C(17)	35(6)	170(13)	73(8)	32(8)	22(6)	2(7)
C(18)	36(6)	71(8)	23(5)	2(5)	-5(4)	-17(6)
C(19)	43(6)	167(12)	41(6)	-43(7)	24(5)	-44(7)
C(20)	41(6)	108(9)	46(7)	-32(6)	31(5)	-29(6)
C(21)	54(6)	115(9)	45(6)	-19(6)	38(5)	-33(6)
C(22)	43(6)	72(7)	50(6)	-25(5)	20(5)	-18(5)
C(23)	38(5)	96(8)	42(6)	-15(5)	16(5)	-30(5)
C(24)	54(6)	111(9)	33(6)	-23(5)	18(5)	-41(6)
C(25)	98(9)	330(20)	28(6)	-30(9)	30(6)	-145(13)

TABLE S43

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 50

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **7a'**.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	7185	4463	9786	186
H(1B)	7957	4560	8828	186
H(1C)	6692	4113	8590	186
H(2A)	3782	4344	6563	109
H(2B)	5381	4095	6708	109
H(2C)	4448	4431	5536	109
H(4A)	4066	5385	5742	61
H(4B)	3402	5207	6718	61
H(5B)	2695	6253	6584	79
H(5C)	3378	6161	5573	79
H(7A)	3243	7122	7750	170
H(7B)	4689	7456	7801	170
H(7C)	4900	6887	8427	170
H(8A)	2123	7165	5546	160
H(8B)	3029	6960	4746	160
H(8C)	3509	7502	5481	160
H(11A)	6644	6665	3593	97
H(11B)	6891	7280	3930	97
H(11C)	5680	6946	4265	97
H(12A)	8715	7947	6653	124
H(12B)	7855	7849	5244	124
H(12C)	9547	7642	5906	124
H(13A)	10146	6940	7228	82
H(13B)	9355	7213	8034	82
H(14A)	9453	6194	6380	89
H(14B)	10805	6079	7624	89
H(16A)	9858	4761	7900	117
H(16B)	10198	5227	8868	117
H(16C)	11257	5149	8116	117
H(17A)	8735	5568	5305	138
H(17B)	9032	4967	5751	138
H(17C)	10420	5367	6025	138
H(19A)	4358	5492	8577	97
H(19B)	3888	6102	8465	97
H(21A)	5770	5824	10916	79
H(23A)	9952	6394	11480	70
H(25A)	10086	6788	9393	182
H(25B)	10469	6173	9384	182

TABLE S44

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 51

Table 6. Torsion angles [°] for **7a'**.

N(3)-Cu(1)-N(1)-C(18)	-92.0(9)	N(1)-Cu(1)-N(5)-C(20)	-90.3(9)
N(5)-Cu(1)-N(1)-C(18)	90.4(7)	N(3)-Cu(1)-N(5)-C(20)	90.8(9)
N(4)-Cu(1)-N(1)-C(18)	10.0(7)	N(4)-Cu(1)-N(5)-C(20)	5.9(9)
N(2)-Cu(1)-N(1)-C(18)	168.6(7)	N(2)-Cu(1)-N(5)-C(20)	-174.5(9)
N(3)-Cu(1)-N(1)-C(15)	84.4(8)	C(4)-N(4)-C(5)-C(6)	-155.3(8)
N(5)-Cu(1)-N(1)-C(15)	-93.2(6)	C(19)-N(4)-C(5)-C(6)	81.4(10)
N(4)-Cu(1)-N(1)-C(15)	-173.6(5)	Cu(1)-N(4)-C(5)-C(6)	-38.9(9)
N(2)-Cu(1)-N(1)-C(15)	-15.0(5)	C(9)-N(3)-C(6)-C(8)	54.9(13)
N(1)-Cu(1)-N(2)-C(25)	-95.0(10)	Cu(1)-N(3)-C(6)-C(8)	-145.6(8)
N(3)-Cu(1)-N(2)-C(25)	111.0(10)	C(9)-N(3)-C(6)-C(5)	169.3(9)
N(5)-Cu(1)-N(2)-C(25)	7.5(10)	Cu(1)-N(3)-C(6)-C(5)	-31.2(10)
N(4)-Cu(1)-N(2)-C(25)	8.7(14)	C(9)-N(3)-C(6)-C(7)	-67.5(14)
N(1)-Cu(1)-N(2)-C(13)	137.9(7)	Cu(1)-N(3)-C(6)-C(7)	92.0(10)
N(3)-Cu(1)-N(2)-C(13)	-16.1(7)	N(4)-C(5)-C(6)-N(3)	48.6(11)
N(5)-Cu(1)-N(2)-C(13)	-119.6(7)	N(4)-C(5)-C(6)-C(8)	165.9(8)
N(4)-Cu(1)-N(2)-C(13)	-118.4(10)	N(4)-C(5)-C(6)-C(7)	-72.6(10)
N(1)-Cu(1)-N(2)-C(14)	28.8(6)	C(6)-N(3)-C(9)-O(1)	3.2(17)
N(3)-Cu(1)-N(2)-C(14)	-125.2(6)	Cu(1)-N(3)-C(9)-O(1)	-153.7(9)
N(5)-Cu(1)-N(2)-C(14)	131.3(6)	C(6)-N(3)-C(9)-C(10)	-174.2(9)
N(4)-Cu(1)-N(2)-C(14)	132.5(9)	Cu(1)-N(3)-C(9)-C(10)	28.9(12)
N(1)-Cu(1)-N(3)-C(9)	-87.1(10)	C(11)-O(4)-C(10)-C(13)	179.0(7)
N(5)-Cu(1)-N(3)-C(9)	90.5(8)	C(11)-O(4)-C(10)-C(12)	-66.5(9)
N(4)-Cu(1)-N(3)-C(9)	168.6(8)	C(11)-O(4)-C(10)-C(9)	56.7(10)
N(2)-Cu(1)-N(3)-C(9)	9.9(8)	O(1)-C(9)-C(10)-O(4)	-128.3(10)
N(1)-Cu(1)-N(3)-C(6)	114.3(8)	N(3)-C(9)-C(10)-O(4)	49.4(12)
N(5)-Cu(1)-N(3)-C(6)	-68.2(7)	O(1)-C(9)-C(10)-C(13)	112.6(11)
N(4)-Cu(1)-N(3)-C(6)	9.9(6)	N(3)-C(9)-C(10)-C(13)	-69.8(11)
N(2)-Cu(1)-N(3)-C(6)	-148.8(6)	O(1)-C(9)-C(10)-C(12)	-5.5(13)
C(1)-O(3)-C(3)-C(4)	-177.5(8)	N(3)-C(9)-C(10)-C(12)	172.1(9)
C(1)-O(3)-C(3)-C(2)	68.4(10)	C(25)-N(2)-C(13)-C(10)	-144.8(11)
C(1)-O(3)-C(3)-C(18)	-51.5(11)	C(14)-N(2)-C(13)-C(10)	90.6(10)
O(3)-C(3)-C(4)-N(4)	56.1(9)	Cu(1)-N(2)-C(13)-C(10)	-16.4(12)
C(2)-C(3)-C(4)-N(4)	172.1(7)	O(4)-C(10)-C(13)-N(2)	-59.5(11)
C(18)-C(3)-C(4)-N(4)	-63.5(10)	C(12)-C(10)-C(13)-N(2)	-177.1(9)
C(3)-C(4)-N(4)-C(5)	162.2(7)	C(9)-C(10)-C(13)-N(2)	61.7(12)
C(3)-C(4)-N(4)-C(19)	-73.5(9)	C(25)-N(2)-C(14)-C(15)	80.3(11)
C(3)-C(4)-N(4)-Cu(1)	51.9(9)	C(13)-N(2)-C(14)-C(15)	-159.6(8)
N(1)-Cu(1)-N(4)-C(5)	-139.7(5)	Cu(1)-N(2)-C(14)-C(15)	-40.6(9)
N(3)-Cu(1)-N(4)-C(5)	14.7(5)	C(18)-N(1)-C(15)-C(14)	172.6(8)
N(5)-Cu(1)-N(4)-C(5)	120.0(6)	Cu(1)-N(1)-C(15)-C(14)	-4.3(9)
N(2)-Cu(1)-N(4)-C(5)	118.8(8)	C(18)-N(1)-C(15)-C(16)	-56.6(10)
N(1)-Cu(1)-N(4)-C(4)	-23.7(6)	Cu(1)-N(1)-C(15)-C(16)	126.5(7)
N(3)-Cu(1)-N(4)-C(4)	130.7(6)	C(18)-N(1)-C(15)-C(17)	63.2(10)
N(5)-Cu(1)-N(4)-C(4)	-124.0(6)	Cu(1)-N(1)-C(15)-C(17)	-113.7(8)
N(2)-Cu(1)-N(4)-C(4)	-125.2(8)	N(2)-C(14)-C(15)-N(1)	32.6(12)
N(1)-Cu(1)-N(4)-C(19)	100.4(8)	N(2)-C(14)-C(15)-C(16)	-95.1(11)
N(3)-Cu(1)-N(4)-C(19)	-105.1(8)	N(2)-C(14)-C(15)-C(17)	149.4(9)
N(5)-Cu(1)-N(4)-C(19)	0.1(8)	C(15)-N(1)-C(18)-O(2)	-11.2(12)
N(2)-Cu(1)-N(4)-C(19)	-1.1(14)	Cu(1)-N(1)-C(18)-O(2)	165.1(7)
N(1)-Cu(1)-N(5)-C(24)	79.1(9)	C(15)-N(1)-C(18)-C(3)	165.5(7)
N(3)-Cu(1)-N(5)-C(24)	-99.8(9)	Cu(1)-N(1)-C(18)-C(3)	-18.2(11)
N(4)-Cu(1)-N(5)-C(24)	175.3(9)	O(3)-C(3)-C(18)-O(2)	99.2(9)
N(2)-Cu(1)-N(5)-C(24)	-5.1(8)	C(4)-C(3)-C(18)-O(2)	-141.9(8)

TABLE S45

C(2)-C(3)-C(18)-O(2)	-19.7(10)
O(3)-C(3)-C(18)-N(1)	-77.9(10)
C(4)-C(3)-C(18)-N(1)	41.0(10)
C(2)-C(3)-C(18)-N(1)	163.2(8)
C(5)-N(4)-C(19)-C(20)	-118.3(10)
C(4)-N(4)-C(19)-C(20)	118.9(10)
Cu(1)-N(4)-C(19)-C(20)	-5.1(13)
C(24)-N(5)-C(20)-C(21)	3.8(17)
Cu(1)-N(5)-C(20)-C(21)	172.8(8)
C(24)-N(5)-C(20)-C(19)	-179.1(10)
Cu(1)-N(5)-C(20)-C(19)	-10.1(13)
N(4)-C(19)-C(20)-N(5)	9.7(15)
N(4)-C(19)-C(20)-C(21)	-173.4(11)
N(5)-C(20)-C(21)-C(22)	-0.3(17)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-176.9(11)
O(5)-N(6)-C(22)-C(23)	4.8(14)
O(5)-N(6)-C(22)-C(21)	-177.8(9)
C(20)-C(21)-C(22)-N(6)	179.6(10)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	-2.8(16)
N(6)-C(22)-C(23)-C(24)	179.8(10)
C(21)-C(22)-C(23)-C(24)	2.4(15)
C(20)-N(5)-C(24)-C(23)	-4.2(17)
Cu(1)-N(5)-C(24)-C(23)	-173.5(8)
C(20)-N(5)-C(24)-C(25)	171.0(13)
Cu(1)-N(5)-C(24)-C(25)	1.7(15)
C(22)-C(23)-C(24)-N(5)	1.0(17)
C(22)-C(23)-C(24)-C(25)	-173.7(13)
C(13)-N(2)-C(25)-C(24)	121.1(13)
C(14)-N(2)-C(25)-C(24)	-122.6(13)
Cu(1)-N(2)-C(25)-C(24)	-9.0(18)
N(5)-C(24)-C(25)-N(2)	5(2)
C(23)-C(24)-C(25)-N(2)	-179.9(12)

TABLE S46

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 53

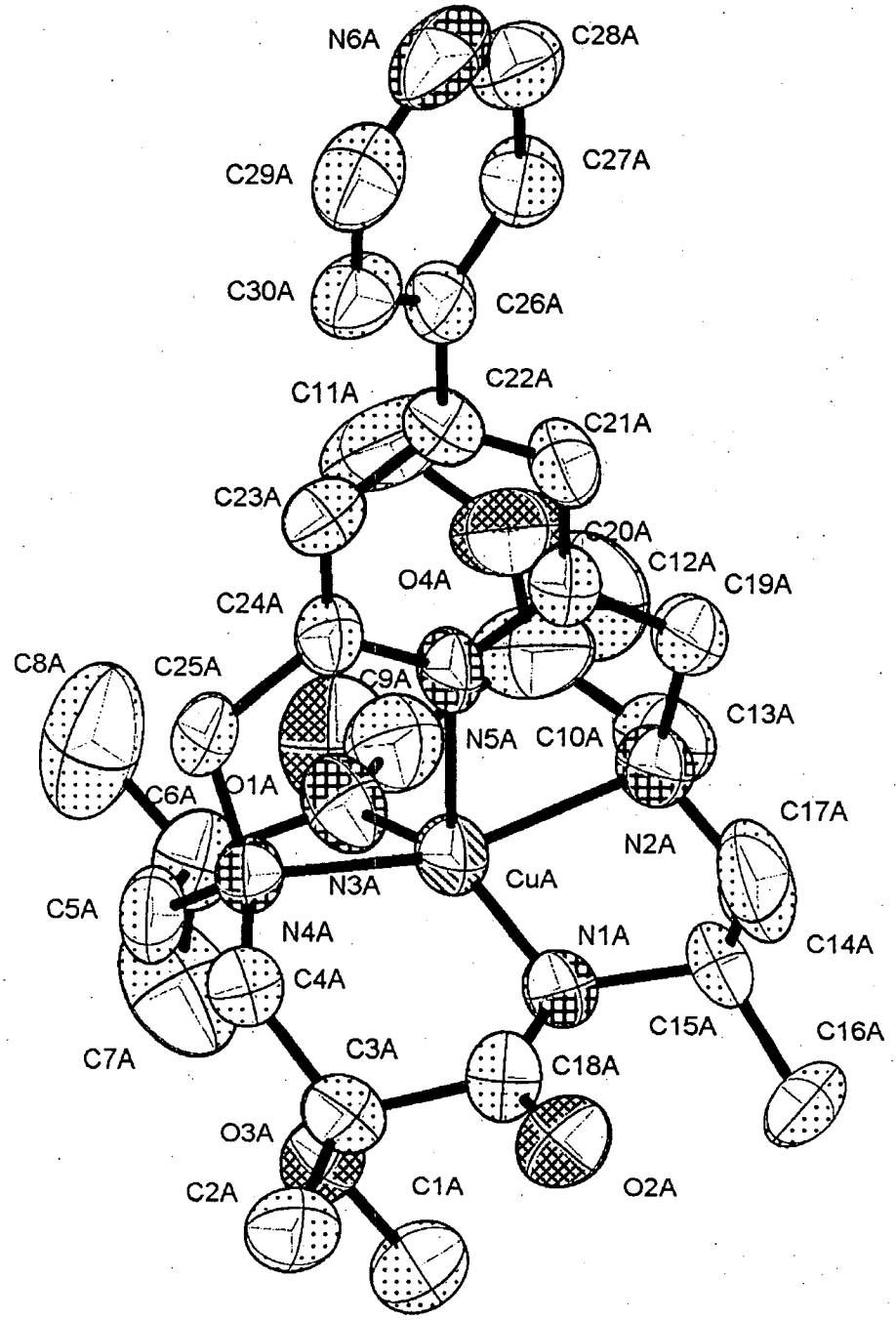


FIGURE S21

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 54

Table 1. Crystal data and structure refinement for **7d**.

Identification code	lsh119m	
Empirical formula	C30 H42 Cu N6 O4	
Formula weight	614.24	
Temperature	298(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/c	
Unit cell dimensions	a = 12.8725(17) Å	α= 90°.
	b = 30.638(4) Å	β= 110.136(3)°.
	c = 16.565(2) Å	γ = 90°.
Volume	6133.7(14) Å^3	
Z	8	
Density (calculated)	1.330 Mg/m^3	
Absorption coefficient	0.756 mm^{-1}	
F(000)	2600	
Crystal size	0.12 x 0.16 x 0.20 mm^3	
Theta range for data collection	3.15 to 23.29°.	
Index ranges	-14<=h<=14, -34<=k<=34, -18<=l<=18	
Reflections collected	39801	
Independent reflections	8804 [R(int) = 0.2048]	
Completeness to theta = 23.29°	99.6 %	
Absorption correction	SADABS	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	8804 / 0 / 769	
Goodness-of-fit on F^2	1.029	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0923, wR2 = 0.1738	
R indices (all data)	R1 = 0.2120, wR2 = 0.2171	
Extinction coefficient	0.00000(19)	
Largest diff. peak and hole	0.681 and -0.313 e.Å^{-3}	

TABLE S47

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 55

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **7d**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
CuA	178(1)	5212(1)	2608(1)	62(1)
O(1A)	1799(8)	5331(3)	5204(6)	116(3)
O(2A)	-1382(6)	4521(2)	387(5)	85(2)
O(3A)	871(5)	4291(2)	2147(5)	80(2)
O(4A)	264(7)	6102(3)	3934(6)	106(3)
N(1A)	-921(6)	4884(2)	1701(6)	65(2)
N(2A)	-1197(7)	5489(3)	2847(6)	67(2)
N(3A)	1304(7)	5265(3)	3731(6)	72(3)
N(4A)	1518(6)	5164(2)	2164(5)	52(2)
N(5A)	110(6)	5830(2)	2080(5)	60(2)
N(6A)	-153(9)	7874(3)	91(8)	97(3)
C(1A)	164(9)	3957(3)	2283(9)	115(5)
C(2A)	633(9)	4195(3)	642(7)	94(4)
C(3A)	501(8)	4503(3)	1323(7)	65(3)
C(4A)	1283(7)	4884(3)	1389(6)	63(3)
C(5A)	2415(7)	4970(3)	2910(7)	68(3)
C(6A)	2379(9)	5069(4)	3805(7)	73(3)
C(7A)	2594(11)	4635(4)	4295(8)	125(5)
C(8A)	3307(10)	5391(5)	4251(8)	147(6)
C(9A)	1170(11)	5398(4)	4453(10)	87(4)
C(10A)	166(13)	5703(4)	4350(9)	103(4)
C(11A)	1260(12)	6334(4)	4275(10)	148(6)
C(12A)	56(11)	5804(4)	5222(8)	130(5)
C(13A)	-991(10)	5496(4)	3775(9)	89(4)
C(14A)	-2087(8)	5164(3)	2411(8)	81(3)
C(15A)	-2115(8)	4988(3)	1545(9)	77(3)
C(16A)	-2827(9)	4577(4)	1383(9)	128(5)
C(17A)	-2561(8)	5317(4)	802(8)	104(4)
C(18A)	-716(9)	4654(4)	1101(8)	67(3)
C(19A)	-1510(8)	5930(3)	2449(7)	79(3)
C(20A)	-705(8)	6104(3)	2048(7)	65(3)
C(21A)	-760(7)	6507(3)	1674(6)	58(3)
C(22A)	34(8)	6637(3)	1324(6)	56(3)
C(23A)	887(8)	6345(3)	1383(5)	53(3)
C(24A)	920(7)	5947(3)	1783(6)	55(3)
C(25A)	1837(7)	5615(3)	1966(7)	68(3)
C(26A)	-17(8)	7057(3)	901(7)	60(3)
C(27A)	-500(8)	7419(4)	1124(7)	74(3)
C(28A)	-533(9)	7806(4)	729(9)	86(4)
C(29A)	331(9)	7519(5)	-129(8)	87(4)
C(30A)	412(8)	7125(3)	253(7)	72(3)
CuB	4993(1)	7781(1)	2904(1)	52(1)
O(1B)	6388(6)	7990(2)	1107(5)	80(2)
O(2B)	3655(6)	8114(2)	4711(4)	75(2)
O(3B)	5819(6)	8505(3)	4149(5)	91(2)
O(4B)	4411(8)	8321(3)	278(7)	122(3)
N(1B)	3969(6)	7966(2)	3445(5)	52(2)
N(2B)	3589(6)	7655(2)	1770(5)	52(2)

TABLE S48

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 56

N(3B)	6067(7)	7910(2)	2371(6)	61(2)
N(4B)	6379(6)	7615(2)	4024(4)	51(2)
N(5B)	4925(6)	7082(2)	2889(5)	45(2)
N(6B)	5109(8)	4805(3)	2388(8)	79(3)
C(1B)	5249(12)	8888(4)	3975(8)	129(5)
C(2B)	5734(7)	8418(3)	5552(5)	64(3)
C(3B)	5516(9)	8219(3)	4709(7)	66(3)
C(4B)	6282(7)	7821(3)	4822(6)	56(3)
C(5B)	7297(7)	7816(3)	3814(6)	57(3)
C(6B)	7209(8)	7778(3)	2867(7)	62(3)
C(7B)	8074(8)	8116(3)	2770(7)	89(4)
C(8B)	7498(8)	7330(3)	2610(6)	71(3)
C(9B)	5782(9)	8019(3)	1560(9)	65(3)
C(10B)	4591(10)	8208(4)	1151(7)	77(4)
C(11B)	4920(20)	8696(6)	156(11)	235(12)
C(12B)	4447(9)	8592(3)	1640(6)	80(4)
C(13B)	3726(8)	7845(3)	991(6)	67(3)
C(14B)	2686(7)	7884(3)	1991(6)	61(3)
C(15B)	2801(8)	7864(3)	2936(6)	59(3)
C(16B)	1977(8)	8221(4)	3030(7)	95(4)
C(17B)	2471(8)	7419(3)	3229(6)	77(3)
C(18B)	4250(9)	8089(3)	4254(7)	58(3)
C(19B)	3322(7)	7186(3)	1637(6)	50(2)
C(20B)	4182(7)	6884(3)	2231(5)	39(2)
C(21B)	4207(7)	6444(3)	2127(5)	45(2)
C(22B)	5039(7)	6198(3)	2703(6)	43(2)
C(23B)	5818(7)	6414(3)	3374(5)	46(2)
C(24B)	5740(7)	6858(3)	3460(6)	42(2)
C(25B)	6527(7)	7134(3)	4165(6)	54(2)
C(26B)	5084(7)	5718(3)	2609(6)	47(2)
C(27B)	4609(7)	5519(3)	1810(7)	57(3)
C(28B)	4626(8)	5071(4)	1753(8)	71(3)
C(29B)	5589(9)	5000(4)	3137(8)	78(3)
C(30B)	5599(8)	5442(3)	3275(7)	66(3)
O	2433(8)	8725(3)	5208(5)	102(3)

TABLE S49

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **7d**.

CuA-N(3A)	1.932(9)
CuA-N(1A)	1.951(8)
CuA-N(5A)	2.076(7)
CuA-N(4A)	2.099(7)
CuA-N(2A)	2.119(7)
O(1A)-C(9A)	1.245(13)
O(2A)-C(18A)	1.266(11)
O(3A)-C(3A)	1.437(11)
O(3A)-C(1A)	1.438(11)
O(4A)-C(11A)	1.404(13)
O(4A)-C(10A)	1.431(13)
N(1A)-C(18A)	1.316(12)
N(1A)-C(15A)	1.503(11)
N(2A)-C(13A)	1.467(12)
N(2A)-C(19A)	1.498(11)
N(2A)-C(14A)	1.501(12)
N(3A)-C(9A)	1.329(14)
N(3A)-C(6A)	1.475(12)
N(4A)-C(4A)	1.487(10)
N(4A)-C(5A)	1.494(10)
N(4A)-C(25A)	1.509(10)
N(5A)-C(20A)	1.329(10)
N(5A)-C(24A)	1.347(10)
N(6A)-C(28A)	1.324(14)
N(6A)-C(29A)	1.366(14)
C(2A)-C(3A)	1.526(12)
C(3A)-C(4A)	1.521(12)
C(3A)-C(18A)	1.551(13)
C(5A)-C(6A)	1.529(12)
C(6A)-C(8A)	1.531(14)
C(6A)-C(7A)	1.533(14)
C(9A)-C(10A)	1.555(17)
C(10A)-C(12A)	1.531(14)
C(10A)-C(13A)	1.597(16)
C(14A)-C(15A)	1.521(14)
C(15A)-C(16A)	1.524(13)
C(15A)-C(17A)	1.541(14)
C(19A)-C(20A)	1.509(12)
C(20A)-C(21A)	1.373(12)
C(21A)-C(22A)	1.394(11)
C(22A)-C(23A)	1.394(11)
C(22A)-C(26A)	1.456(12)
C(23A)-C(24A)	1.381(11)
C(24A)-C(25A)	1.509(11)
C(26A)-C(30A)	1.382(13)
C(26A)-C(27A)	1.383(12)
C(27A)-C(28A)	1.349(13)
C(29A)-C(30A)	1.347(13)
CuB-N(1B)	1.916(7)
CuB-N(3B)	1.921(8)
CuB-N(5B)	2.143(7)
CuB-N(4B)	2.145(7)
CuB-N(2B)	2.147(7)
O(1B)-C(9B)	1.257(11)
O(2B)-C(18B)	1.252(11)
O(3B)-C(1B)	1.361(13)
O(3B)-C(3B)	1.425(11)
O(4B)-C(11B)	1.37(2)
O(4B)-C(10B)	1.426(12)
N(1B)-C(18B)	1.317(11)
N(1B)-C(15B)	1.482(11)
N(2B)-C(19B)	1.477(9)
N(2B)-C(13B)	1.481(11)
N(2B)-C(14B)	1.505(10)
N(3B)-C(9B)	1.309(12)
N(3B)-C(6B)	1.472(11)
N(4B)-C(5B)	1.475(10)
N(4B)-C(25B)	1.493(10)
N(4B)-C(4B)	1.509(10)
N(5B)-C(20B)	1.323(9)
N(5B)-C(24B)	1.336(10)
N(6B)-C(28B)	1.306(12)
N(6B)-C(29B)	1.323(13)
C(2B)-C(3B)	1.460(12)
C(3B)-C(4B)	1.538(12)
C(3B)-C(18B)	1.592(13)
C(5B)-C(6B)	1.538(12)
C(6B)-C(8B)	1.522(12)
C(6B)-C(7B)	1.569(12)
C(9B)-C(10B)	1.559(14)
C(10B)-C(12B)	1.476(13)
C(10B)-C(13B)	1.530(13)
C(14B)-C(15B)	1.523(12)
C(15B)-C(17B)	1.555(12)
C(15B)-C(16B)	1.567(12)
C(19B)-C(20B)	1.516(11)
C(20B)-C(21B)	1.361(10)
C(21B)-C(22B)	1.387(11)
C(22B)-C(23B)	1.383(10)
C(22B)-C(26B)	1.484(11)
C(23B)-C(24B)	1.375(10)
C(24B)-C(25B)	1.513(11)
C(26B)-C(30B)	1.366(12)
C(26B)-C(27B)	1.392(11)
C(27B)-C(28B)	1.378(12)
C(29B)-C(30B)	1.371(13)
N(3A)-CuA-N(1A)	152.8(3)
N(3A)-CuA-N(5A)	103.7(3)
N(1A)-CuA-N(5A)	103.4(3)
N(3A)-CuA-N(4A)	84.8(3)
N(1A)-CuA-N(4A)	99.2(3)
N(5A)-CuA-N(4A)	80.6(3)
N(3A)-CuA-N(2A)	100.6(4)
N(1A)-CuA-N(2A)	85.4(3)
N(5A)-CuA-N(2A)	78.3(3)
N(4A)-CuA-N(2A)	158.9(3)

TABLE S50

C(3A)-O(3A)-C(1A)	116.8(8)
C(11A)-O(4A)-C(10A)	117.3(11)
C(18A)-N(1A)-C(15A)	116.3(9)
C(18A)-N(1A)-CuA	125.1(7)
C(15A)-N(1A)-CuA	116.8(7)
C(13A)-N(2A)-C(19A)	111.8(8)
C(13A)-N(2A)-C(14A)	110.3(8)
C(19A)-N(2A)-C(14A)	109.9(8)
C(13A)-N(2A)-CuA	109.9(7)
C(19A)-N(2A)-CuA	113.2(5)
C(14A)-N(2A)-CuA	101.1(6)
C(9A)-N(3A)-C(6A)	117.3(10)
C(9A)-N(3A)-CuA	127.3(9)
C(6A)-N(3A)-CuA	114.6(7)
C(4A)-N(4A)-C(5A)	110.7(7)
C(4A)-N(4A)-C(25A)	109.2(7)
C(5A)-N(4A)-C(25A)	110.7(7)
C(4A)-N(4A)-CuA	113.3(5)
C(5A)-N(4A)-CuA	103.5(5)
C(25A)-N(4A)-CuA	109.3(5)
C(20A)-N(5A)-C(24A)	121.1(8)
C(20A)-N(5A)-CuA	120.7(6)
C(24A)-N(5A)-CuA	118.1(6)
C(28A)-N(6A)-C(29A)	114.5(10)
O(3A)-C(3A)-C(4A)	106.6(8)
O(3A)-C(3A)-C(2A)	109.6(8)
C(4A)-C(3A)-C(2A)	106.7(8)
O(3A)-C(3A)-C(18A)	109.8(8)
C(4A)-C(3A)-C(18A)	112.2(8)
C(2A)-C(3A)-C(18A)	111.7(9)
N(4A)-C(4A)-C(3A)	115.9(8)
N(4A)-C(5A)-C(6A)	116.7(8)
N(3A)-C(6A)-C(5A)	110.0(9)
N(3A)-C(6A)-C(8A)	109.3(9)
C(5A)-C(6A)-C(8A)	108.5(9)
N(3A)-C(6A)-C(7A)	113.1(9)
C(5A)-C(6A)-C(7A)	106.3(9)
C(8A)-C(6A)-C(7A)	109.6(10)
O(1A)-C(9A)-N(3A)	127.4(13)
O(1A)-C(9A)-C(10A)	116.0(13)
N(3A)-C(9A)-C(10A)	116.5(12)
O(4A)-C(10A)-C(12A)	109.5(10)
O(4A)-C(10A)-C(9A)	111.0(10)
C(12A)-C(10A)-C(9A)	111.2(12)
O(4A)-C(10A)-C(13A)	105.7(11)
C(12A)-C(10A)-C(13A)	105.8(11)
C(9A)-C(10A)-C(13A)	113.4(10)
N(2A)-C(13A)-C(10A)	115.2(9)
N(2A)-C(14A)-C(15A)	117.1(8)
N(1A)-C(15A)-C(14A)	102.9(9)
N(1A)-C(15A)-C(16A)	111.9(8)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	106.1(10)
N(1A)-C(15A)-C(17A)	110.7(9)
C(14A)-C(15A)-C(17A)	113.7(9)
C(16A)-C(15A)-C(17A)	111.3(10)
O(2A)-C(18A)-N(1A)	129.1(10)
O(2A)-C(18A)-C(3A)	115.4(10)
N(1A)-C(18A)-C(3A)	115.4(10)
N(2A)-C(19A)-C(20A)	113.0(8)
N(5A)-C(20A)-C(21A)	120.3(9)
N(5A)-C(20A)-C(19A)	114.3(9)
C(21A)-C(20A)-C(19A)	125.4(9)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	120.8(9)
C(23A)-C(22A)-C(21A)	117.5(8)
C(23A)-C(22A)-C(26A)	120.2(9)
C(21A)-C(22A)-C(26A)	122.3(9)
C(24A)-C(23A)-C(22A)	119.5(9)
N(5A)-C(24A)-C(23A)	120.7(8)
N(5A)-C(24A)-C(25A)	113.4(8)
C(23A)-C(24A)-C(25A)	125.9(8)
N(4A)-C(25A)-C(24A)	114.1(7)
C(30A)-C(26A)-C(27A)	115.0(9)
C(30A)-C(26A)-C(22A)	123.1(10)
C(27A)-C(26A)-C(22A)	122.0(10)
C(28A)-C(27A)-C(26A)	121.2(11)
N(6A)-C(28A)-C(27A)	124.5(12)
C(30A)-C(29A)-N(6A)	123.8(12)
C(29A)-C(30A)-C(26A)	120.9(11)
N(1B)-CuB-N(3B)	150.9(3)
N(1B)-CuB-N(5B)	105.6(3)
N(3B)-CuB-N(5B)	103.5(3)
N(1B)-CuB-N(4B)	99.7(3)
N(3B)-CuB-N(4B)	86.0(3)
N(5B)-CuB-N(4B)	78.0(3)
N(1B)-CuB-N(2B)	87.4(3)
N(3B)-CuB-N(2B)	99.1(3)
N(5B)-CuB-N(2B)	77.9(3)
N(4B)-CuB-N(2B)	155.9(3)
C(1B)-O(3B)-C(3B)	114.9(9)
C(11B)-O(4B)-C(10B)	115.6(12)
C(18B)-N(1B)-C(15B)	120.5(8)
C(18B)-N(1B)-CuB	124.6(7)
C(15B)-N(1B)-CuB	113.5(6)
C(19B)-N(2B)-C(13B)	110.1(7)
C(19B)-N(2B)-C(14B)	109.3(7)
C(13B)-N(2B)-C(14B)	111.2(7)
C(19B)-N(2B)-CuB	112.9(5)
C(13B)-N(2B)-CuB	112.0(5)
C(14B)-N(2B)-CuB	101.1(5)
C(9B)-N(3B)-C(6B)	121.1(9)
C(9B)-N(3B)-CuB	122.2(8)
C(6B)-N(3B)-CuB	115.1(6)
C(5B)-N(4B)-C(25B)	112.3(7)
C(5B)-N(4B)-C(4B)	110.3(7)
C(25B)-N(4B)-C(4B)	108.6(7)
C(5B)-N(4B)-CuB	101.1(5)
C(25B)-N(4B)-CuB	113.1(5)
C(4B)-N(4B)-CuB	111.3(5)
C(20B)-N(5B)-C(24B)	121.1(7)
C(20B)-N(5B)-CuB	118.9(6)
C(24B)-N(5B)-CuB	119.0(6)
C(28B)-N(6B)-C(29B)	114.4(10)

TABLE S5l

O(3B)-C(3B)-C(2B)	111.1(9)
O(3B)-C(3B)-C(4B)	105.1(8)
C(2B)-C(3B)-C(4B)	108.1(8)
O(3B)-C(3B)-C(18B)	108.0(8)
C(2B)-C(3B)-C(18B)	112.6(9)
C(4B)-C(3B)-C(18B)	111.7(8)
N(4B)-C(4B)-C(3B)	117.8(8)
N(4B)-C(5B)-C(6B)	115.1(7)
N(3B)-C(6B)-C(8B)	112.7(8)
N(3B)-C(6B)-C(5B)	104.9(8)
C(8B)-C(6B)-C(5B)	114.5(8)
N(3B)-C(6B)-C(7B)	111.6(8)
C(8B)-C(6B)-C(7B)	108.4(8)
C(5B)-C(6B)-C(7B)	104.4(8)
O(1B)-C(9B)-N(3B)	125.7(11)
O(1B)-C(9B)-C(10B)	119.1(11)
N(3B)-C(9B)-C(10B)	115.2(11)
O(4B)-C(10B)-C(12B)	110.8(9)
O(4B)-C(10B)-C(13B)	98.4(9)
C(12B)-C(10B)-C(13B)	117.0(10)
O(4B)-C(10B)-C(9B)	108.8(10)
C(12B)-C(10B)-C(9B)	110.4(9)
C(13B)-C(10B)-C(9B)	110.7(9)
N(2B)-C(13B)-C(10B)	115.6(8)
N(2B)-C(14B)-C(15B)	114.9(7)
N(1B)-C(15B)-C(14B)	107.2(8)
N(1B)-C(15B)-C(17B)	109.9(8)
C(14B)-C(15B)-C(17B)	114.5(8)
N(1B)-C(15B)-C(16B)	112.7(7)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	104.2(8)
C(17B)-C(15B)-C(16B)	108.3(8)
O(2B)-C(18B)-N(1B)	128.5(10)
O(2B)-C(18B)-C(3B)	116.0(9)
N(1B)-C(18B)-C(3B)	115.5(10)
N(2B)-C(19B)-C(20B)	114.6(7)
N(5B)-C(20B)-C(21B)	121.1(8)
N(5B)-C(20B)-C(19B)	114.5(7)
C(21B)-C(20B)-C(19B)	124.4(8)
C(20B)-C(21B)-C(22B)	119.8(8)
C(23B)-C(22B)-C(21B)	117.9(8)
C(23B)-C(22B)-C(26B)	121.1(8)
C(21B)-C(22B)-C(26B)	121.0(8)
C(24B)-C(23B)-C(22B)	119.9(8)
N(5B)-C(24B)-C(23B)	120.2(8)
N(5B)-C(24B)-C(25B)	114.4(8)
C(23B)-C(24B)-C(25B)	125.4(9)
N(4B)-C(25B)-C(24B)	114.5(7)
C(30B)-C(26B)-C(27B)	115.5(8)
C(30B)-C(26B)-C(22B)	123.6(9)
C(27B)-C(26B)-C(22B)	120.9(9)
C(28B)-C(27B)-C(26B)	119.2(10)
N(6B)-C(28B)-C(27B)	125.5(11)
N(6B)-C(29B)-C(30B)	125.3(11)
C(26B)-C(30B)-C(29B)	120.0(10

TABLE S52

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 60

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 x\ 10^3$) for **7d**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[\ h^2\ a^{*2}U^{11} + ... + 2\ h\ k\ a^*\ b^*\ U^{12}\ ]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
CuA	53(1)	55(1)	87(1)	5(1)	37(1)	3(1)
O(1A)	116(8)	156(9)	79(6)	3(6)	38(6)	4(6)
O(2A)	70(5)	78(5)	100(6)	-12(5)	19(5)	-11(4)
O(3A)	63(5)	67(5)	115(7)	7(5)	36(5)	-6(4)
O(4A)	128(7)	70(6)	139(8)	-20(5)	71(6)	-17(5)
N(1A)	58(6)	54(5)	95(7)	-10(5)	45(5)	-1(4)
N(2A)	67(6)	55(6)	101(8)	4(5)	58(6)	1(5)
N(3A)	72(7)	82(6)	71(7)	2(5)	38(6)	14(5)
N(4A)	39(5)	46(5)	71(6)	10(5)	18(4)	2(4)
N(5A)	49(5)	57(5)	89(6)	9(5)	42(5)	5(4)
N(6A)	75(7)	79(8)	119(10)	39(7)	10(7)	-21(6)
C(1A)	98(9)	66(8)	202(15)	21(8)	79(10)	-11(7)
C(2A)	85(8)	74(8)	133(11)	-46(8)	49(8)	-17(7)
C(3A)	64(8)	55(7)	82(9)	-4(6)	32(7)	5(6)
C(4A)	53(6)	55(6)	87(8)	-1(6)	29(6)	2(5)
C(5A)	36(6)	81(8)	84(9)	4(6)	18(6)	2(5)
C(6A)	64(8)	90(9)	64(8)	-1(7)	23(7)	-7(7)
C(7A)	133(12)	155(13)	98(10)	47(10)	53(9)	53(10)
C(8A)	101(11)	244(18)	111(11)	-69(12)	56(9)	-45(12)
C(9A)	88(10)	85(9)	97(12)	-12(9)	41(10)	-8(8)
C(10A)	158(14)	79(9)	110(11)	-10(8)	96(11)	-22(10)
C(11A)	169(15)	98(11)	186(16)	-48(10)	74(13)	-66(11)
C(12A)	170(14)	143(12)	119(12)	-8(10)	104(11)	2(10)
C(13A)	115(11)	66(8)	125(12)	5(8)	92(10)	4(7)
C(14A)	53(7)	65(7)	138(11)	-2(8)	50(7)	-6(6)
C(15A)	41(7)	64(7)	128(11)	-12(8)	30(7)	14(6)
C(16A)	75(8)	86(9)	245(16)	-70(10)	86(10)	-44(7)
C(17A)	51(7)	129(11)	123(11)	-3(9)	18(7)	31(7)
C(18A)	49(7)	68(8)	86(9)	-1(7)	25(7)	-1(6)
C(19A)	67(7)	50(7)	143(11)	11(7)	67(8)	0(6)
C(20A)	49(7)	53(7)	100(9)	3(6)	33(6)	1(6)
C(21A)	46(6)	63(7)	68(7)	6(6)	22(6)	13(5)
C(22A)	55(7)	47(6)	65(7)	3(5)	20(6)	8(5)
C(23A)	55(7)	50(6)	53(7)	2(5)	17(5)	-10(5)
C(24A)	44(6)	58(7)	70(7)	-12(6)	28(6)	-4(5)
C(25A)	42(6)	55(7)	111(9)	6(6)	34(6)	-7(5)
C(26A)	41(6)	51(7)	84(8)	21(6)	15(6)	9(5)
C(27A)	58(7)	60(7)	102(9)	29(7)	25(6)	6(6)
C(28A)	67(8)	60(8)	116(11)	11(8)	13(8)	-6(6)
C(29A)	67(8)	97(10)	90(10)	11(9)	18(7)	-11(8)
C(30A)	62(7)	57(8)	87(9)	25(6)	13(7)	-4(6)
CuB	48(1)	50(1)	53(1)	-5(1)	12(1)	2(1)
O(1B)	90(6)	85(5)	73(5)	-10(4)	37(5)	-5(4)
O(2B)	77(5)	87(5)	68(5)	-18(4)	35(4)	9(4)
O(3B)	86(6)	76(6)	103(7)	-22(5)	21(5)	17(5)
O(4B)	144(8)	92(7)	129(9)	30(6)	46(7)	1(6)
N(1B)	39(5)	51(5)	58(6)	-13(4)	5(4)	5(4)

TABLE S53

N(2B)	49(5)	40(5)	57(6)	0(4)	8(4)	0(4)
N(3B)	63(6)	61(5)	56(6)	1(5)	16(5)	-9(4)
N(4B)	51(5)	48(5)	50(5)	-8(4)	13(4)	-1(4)
N(5B)	43(5)	51(5)	39(5)	-1(4)	12(4)	2(4)
N(6B)	78(7)	49(6)	107(9)	-5(6)	29(7)	3(5)
C(1B)	167(14)	97(11)	126(12)	-2(9)	53(11)	-15(11)
C(2B)	63(7)	96(8)	25(6)	-5(6)	4(5)	-5(6)
C(3B)	73(8)	63(7)	65(8)	18(6)	28(7)	4(6)
C(4B)	50(6)	57(6)	58(7)	-11(5)	12(5)	3(5)
C(5B)	38(6)	61(6)	74(8)	-9(6)	22(5)	-1(5)
C(6B)	46(7)	64(7)	76(8)	-15(6)	20(6)	-16(6)
C(7B)	73(8)	106(9)	94(9)	-14(7)	35(7)	-32(7)
C(8B)	55(7)	81(8)	76(8)	-7(6)	22(6)	-2(6)
C(9B)	68(9)	46(6)	80(10)	-16(7)	24(8)	-4(6)
C(10B)	86(9)	102(10)	41(7)	43(7)	20(7)	-16(8)
C(11B)	420(40)	190(20)	128(16)	65(15)	130(20)	90(20)
C(12B)	109(9)	101(9)	37(6)	28(6)	34(6)	65(7)
C(13B)	75(7)	73(7)	47(7)	6(6)	12(6)	21(6)
C(14B)	53(6)	57(6)	59(7)	-4(5)	0(6)	15(5)
C(15B)	49(7)	65(7)	63(8)	-16(6)	19(6)	8(6)
C(16B)	66(8)	116(10)	92(9)	-20(7)	14(7)	26(7)
C(17B)	50(7)	96(9)	85(8)	-25(7)	26(6)	-12(6)
C(18B)	73(8)	45(6)	53(8)	-13(5)	17(7)	8(5)
C(19B)	35(5)	53(6)	58(6)	-1(5)	9(5)	6(5)
C(20B)	39(6)	43(6)	34(6)	-14(5)	9(5)	0(5)
C(21B)	49(6)	46(6)	43(6)	-2(5)	20(5)	0(5)
C(22B)	40(6)	49(6)	42(6)	1(5)	16(5)	4(5)
C(23B)	46(6)	46(6)	37(6)	-1(5)	3(5)	9(5)
C(24B)	49(6)	46(6)	38(6)	5(5)	24(5)	0(5)
C(25B)	58(6)	42(6)	52(6)	0(5)	7(5)	4(5)
C(26B)	50(6)	43(6)	51(7)	-9(6)	19(5)	4(5)
C(27B)	59(7)	40(6)	80(8)	-1(6)	33(6)	0(5)
C(28B)	57(7)	57(8)	98(10)	-16(7)	27(7)	-3(6)
C(29B)	84(9)	60(8)	90(10)	24(7)	29(8)	16(7)
C(30B)	72(8)	47(7)	79(8)	-6(6)	26(7)	-3(6)
O	119(7)	113(8)	78(6)	37(6)	38(5)	60(6)

TABLE S54

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 62

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **7d**.

	x	y	z	U(eq)
H(1A1)	-433	4089	2416	172
H(1A2)	584	3774	2753	172
H(1A3)	-129	3783	1772	172
H(2A1)	1359	4067	847	142
H(2A2)	537	4354	123	142
H(2A3)	87	3968	528	142
H(4A1)	1980	4769	1376	76
H(4A2)	974	5066	884	76
H(5A1)	3120	5071	2890	81
H(5A2)	2394	4655	2836	81
H(7A1)	2550	4678	4856	187
H(7A2)	3318	4530	4350	187
H(7A3)	2049	4425	3986	187
H(8A1)	3158	5666	3954	220
H(8A2)	3999	5278	4243	220
H(8A3)	3347	5432	4835	220
H(11A)	1381	6407	4864	222
H(11B)	1220	6597	3950	222
H(11C)	1861	6157	4245	222
H(12A)	741	5921	5603	195
H(12B)	-116	5541	5464	195
H(12C)	-525	6013	5147	195
H(13A)	-1027	5199	3966	107
H(13B)	-1580	5659	3875	107
H(14A)	-2797	5300	2332	97
H(14B)	-2012	4919	2797	97
H(16A)	-2844	4445	854	191
H(16B)	-3566	4653	1345	191
H(16C)	-2521	4376	1848	191
H(17A)	-2064	5560	898	157
H(17B)	-3278	5417	776	157
H(17C)	-2617	5177	269	157
H(19A)	-1551	6133	2887	94
H(19B)	-2240	5913	2012	94
H(21A)	-1334	6696	1654	70
H(23A)	1431	6418	1155	64
H(25A)	2076	5597	1472	81
H(25B)	2462	5715	2451	81
H(27A)	-809	7395	1553	89
H(28A)	-844	8042	918	103
H(29A)	621	7549	-568	105
H(30A)	761	6897	77	86
H(1B1)	4472	8828	3721	194
H(1B2)	5487	9057	3582	194
H(1B3)	5386	9049	4499	194
H(2B1)	6513	8471	5817	96
H(2B2)	5492	8224	5908	96

TABLE S55

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 63

H(2B3)	5339	8689	5487	96
H(4B1)	7018	7907	5190	68
H(4B2)	6030	7598	5128	68
H(5B1)	7984	7682	4169	68
H(5B2)	7335	8123	3966	68
H(7B1)	8133	8087	2210	134
H(7B2)	8782	8061	3201	134
H(7B3)	7837	8406	2838	134
H(8B1)	6947	7123	2628	106
H(8B2)	8208	7241	3002	106
H(8B3)	7522	7343	2037	106
H(11D)	4794	8925	505	352
H(11E)	4629	8779	-438	352
H(11F)	5704	8645	317	352
H(12D)	5008	8804	1668	120
H(12E)	4511	8505	2211	120
H(12F)	3730	8718	1357	120
H(13C)	3017	7961	628	80
H(13D)	3925	7613	674	80
H(14C)	1982	7756	1653	74
H(14D)	2672	8188	1823	74
H(16D)	1952	8213	3602	142
H(16E)	1252	8165	2623	142
H(16F)	2223	8504	2921	142
H(17D)	3001	7201	3219	115
H(17E)	1751	7335	2846	115
H(17F)	2456	7446	3802	115
H(19C)	3232	7112	1047	60
H(19D)	2620	7134	1715	60
H(21B)	3667	6309	1670	54
H(23B)	6394	6260	3767	55
H(25C)	6430	7062	4705	64
H(25D)	7279	7059	4219	64
H(27B)	4284	5687	1320	69
H(28B)	4262	4947	1217	85
H(29B)	5948	4824	3607	94
H(30B)	5957	5554	3823	79
H(1)	2280(70)	8940(20)	5010(50)	30(30)

TABLE S56

Table 6. Torsion angles [°] for **7d**.

N(3A)-CuA-N(1A)-C(18A)	-87.1(11)	CuA-N(4A)-C(4A)-C(3A)	-32.3(10)
N(5A)-CuA-N(1A)-C(18A)	91.8(8)	O(3A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	-47.2(10)
N(4A)-CuA-N(1A)-C(18A)	9.4(9)	C(2A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	-164.3(8)
N(2A)-CuA-N(1A)-C(18A)	168.6(9)	C(18A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	73.0(12)
N(3A)-CuA-N(1A)-C(15A)	108.7(10)	C(4A)-N(4A)-C(5A)-C(6A)	-150.6(8)
N(5A)-CuA-N(1A)-C(15A)	-72.4(8)	C(25A)-N(4A)-C(5A)-C(6A)	88.1(9)
N(4A)-CuA-N(1A)-C(15A)	-154.8(7)	CuA-N(4A)-C(5A)-C(6A)	-28.9(9)
N(2A)-CuA-N(1A)-C(15A)	4.4(7)	C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(5A)	-175.5(9)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(13A)	-18.2(7)	CuA-N(3A)-C(6A)-C(5A)	14.0(10)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(13A)	135.0(7)	C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(8A)	-56.6(13)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(13A)	-120.2(7)	CuA-N(3A)-C(6A)-C(8A)	132.9(8)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(13A)	-121.3(10)	C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(7A)	65.8(13)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(19A)	107.7(7)	CuA-N(3A)-C(6A)-C(7A)	-104.7(9)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(19A)	-99.1(7)	N(4A)-C(5A)-C(6A)-N(3A)	12.1(12)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(19A)	5.7(7)	N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(8A)	-107.3(11)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(19A)	4.6(14)	N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(7A)	134.9(9)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(14A)	-134.8(6)	C(6A)-N(3A)-C(9A)-O(1A)	-9.1(18)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(14A)	18.5(6)	CuA-N(3A)-C(9A)-O(1A)	160.0(10)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(14A)	123.2(7)	C(6A)-N(3A)-C(9A)-C(10A)	165.5(10)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(14A)	122.1(9)	CuA-N(3A)-C(9A)-C(10A)	-25.4(14)
N(1A)-CuA-N(3A)-C(9A)	-94.3(12)	C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(12A)	71.4(14)
N(5A)-CuA-N(3A)-C(9A)	86.8(9)	C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(9A)	-51.8(14)
N(4A)-CuA-N(3A)-C(9A)	165.7(10)	C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(13A)	-175.0(9)
N(2A)-CuA-N(3A)-C(9A)	6.4(10)	O(1A)-C(9A)-C(10A)-O(4A)	113.2(13)
N(1A)-CuA-N(3A)-C(6A)	75.1(10)	N(3A)-C(9A)-C(10A)-O(4A)	-62.0(14)
N(5A)-CuA-N(3A)-C(6A)	-103.8(7)	O(1A)-C(9A)-C(10A)-C(12A)	-9.0(16)
N(4A)-CuA-N(3A)-C(6A)	-24.8(7)	N(3A)-C(9A)-C(10A)-C(12A)	175.8(10)
N(2A)-CuA-N(3A)-C(6A)	175.8(7)	O(1A)-C(9A)-C(10A)-C(13A)	-128.1(12)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(4A)	148.4(6)	N(3A)-C(9A)-C(10A)-C(13A)	56.7(14)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(4A)	-4.5(6)	C(19A)-N(2A)-C(13A)-C(10A)	-76.3(11)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(4A)	-106.7(6)	C(14A)-N(2A)-C(13A)-C(10A)	161.1(9)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(4A)	-105.6(10)	CuA-N(2A)-C(13A)-C(10A)	50.4(10)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(5A)	28.5(6)	O(4A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	47.1(12)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(5A)	-124.4(6)	C(12A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	163.2(9)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(5A)	133.3(6)	C(9A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	-74.7(13)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(5A)	134.4(9)	C(13A)-N(2A)-C(14A)-C(15A)	-157.6(9)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(25A)	-89.5(6)	C(19A)-N(2A)-C(14A)-C(15A)	78.7(10)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(25A)	117.6(6)	CuA-N(2A)-C(14A)-C(15A)	-41.3(10)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(25A)	15.4(6)	C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(14A)	168.8(8)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(25A)	16.4(13)	CuA-N(1A)-C(15A)-C(14A)	-25.6(10)
N(3A)-CuA-N(5A)-C(20A)	-102.8(8)	C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(16A)	55.3(14)
N(1A)-CuA-N(5A)-C(20A)	77.7(8)	CuA-N(1A)-C(15A)-C(16A)	-139.1(9)
N(4A)-CuA-N(5A)-C(20A)	175.0(8)	C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(17A)	-69.4(11)
N(2A)-CuA-N(5A)-C(20A)	-4.6(8)	CuA-N(1A)-C(15A)-C(17A)	96.2(10)
N(3A)-CuA-N(5A)-C(24A)	76.5(7)	N(2A)-C(14A)-C(15A)-N(1A)	45.3(11)
N(1A)-CuA-N(5A)-C(24A)	-103.0(7)	N(2A)-C(14A)-C(15A)-C(16A)	163.0(9)
N(4A)-CuA-N(5A)-C(24A)	-5.7(7)	N(2A)-C(14A)-C(15A)-C(17A)	-74.4(11)
N(2A)-CuA-N(5A)-C(24A)	174.7(7)	C(15A)-N(1A)-C(18A)-O(2A)	3.1(16)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(4A)	171.4(8)	CuA-N(1A)-C(18A)-O(2A)	-161.2(9)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(2A)	-73.5(10)	C(15A)-N(1A)-C(18A)-C(3A)	-173.0(8)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(18A)	49.6(11)	CuA-N(1A)-C(18A)-C(3A)	22.8(12)
C(5A)-N(4A)-C(4A)-C(3A)	83.4(9)	O(3A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	-125.4(10)
C(25A)-N(4A)-C(4A)-C(3A)	-154.4(8)	C(4A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	116.3(10)

TABLE S57

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 65

C(2A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	-3.6(13)
O(3A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	51.2(11)
C(4A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	-67.1(12)
C(2A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	173.0(9)
C(13A)-N(2A)-C(19A)-C(20A)	118.5(10)
C(14A)-N(2A)-C(19A)-C(20A)	-118.7(9)
CuA-N(2A)-C(19A)-C(20A)	-6.4(11)
C(24A)-N(5A)-C(20A)-C(21A)	2.7(15)
CuA-N(5A)-C(20A)-C(21A)	-178.0(7)
C(24A)-N(5A)-C(20A)-C(19A)	-177.0(8)
CuA-N(5A)-C(20A)-C(19A)	2.2(12)
N(2A)-C(19A)-C(20A)-N(5A)	2.9(13)
N(2A)-C(19A)-C(20A)-C(21A)	-176.8(10)
N(5A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	0.0(15)
C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	179.7(9)
C(20A)-C(21A)-C(22A)-C(23A)	-1.1(14)
C(20A)-C(21A)-C(22A)-C(26A)	178.1(9)
C(21A)-C(22A)-C(23A)-C(24A)	-0.4(13)
C(26A)-C(22A)-C(23A)-C(24A)	-179.6(9)
C(20A)-N(5A)-C(24A)-C(23A)	-4.2(14)
CuA-N(5A)-C(24A)-C(23A)	176.5(6)
C(20A)-N(5A)-C(24A)-C(25A)	173.4(9)
CuA-N(5A)-C(24A)-C(25A)	-5.9(10)
C(22A)-C(23A)-C(24A)-N(5A)	3.0(13)
C(22A)-C(23A)-C(24A)-C(25A)	-174.3(9)
C(4A)-N(4A)-C(25A)-C(24A)	101.3(9)
C(5A)-N(4A)-C(25A)-C(24A)	-136.6(8)
CuA-N(4A)-C(25A)-C(24A)	-23.2(10)
N(5A)-C(24A)-C(25A)-N(4A)	19.6(12)
C(23A)-C(24A)-C(25A)-N(4A)	-163.0(9)
C(23A)-C(22A)-C(26A)-C(30A)	28.1(14)
C(21A)-C(22A)-C(26A)-C(30A)	-151.1(10)
C(23A)-C(22A)-C(26A)-C(27A)	-151.8(9)
C(21A)-C(22A)-C(26A)-C(27A)	29.0(14)
C(30A)-C(26A)-C(27A)-C(28A)	-0.4(15)
C(22A)-C(26A)-C(27A)-C(28A)	179.5(9)
C(29A)-N(6A)-C(28A)-C(27A)	-2.4(16)
C(26A)-C(27A)-C(28A)-N(6A)	2.3(17)
C(28A)-N(6A)-C(29A)-C(30A)	0.8(16)
N(6A)-C(29A)-C(30A)-C(26A)	0.9(17)
C(27A)-C(26A)-C(30A)-C(29A)	-1.1(14)
C(22A)-C(26A)-C(30A)-C(29A)	179.0(9)
N(3B)-CuB-N(1B)-C(18B)	-79.1(11)
N(5B)-CuB-N(1B)-C(18B)	100.2(7)
N(4B)-CuB-N(1B)-C(18B)	20.1(8)
N(2B)-CuB-N(1B)-C(18B)	176.9(8)
N(3B)-CuB-N(1B)-C(15B)	114.4(8)
N(5B)-CuB-N(1B)-C(15B)	-66.3(6)
N(4B)-CuB-N(1B)-C(15B)	-146.4(6)
N(2B)-CuB-N(1B)-C(15B)	10.4(6)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(19B)	-103.5(6)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(19B)	105.1(6)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(19B)	3.1(5)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(19B)	4.5(11)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(13B)	131.6(6)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(13B)	-19.8(6)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(13B)	-121.8(6)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(13B)	-120.4(8)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(14B)	13.2(5)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(14B)	-138.2(5)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(14B)	119.8(5)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(14B)	121.2(7)
N(1B)-CuB-N(3B)-C(9B)	-82.2(10)
N(5B)-CuB-N(3B)-C(9B)	98.5(8)
N(4B)-CuB-N(3B)-C(9B)	175.1(8)
N(2B)-CuB-N(3B)-C(9B)	18.8(8)
N(1B)-CuB-N(3B)-C(6B)	111.9(8)
N(5B)-CuB-N(3B)-C(6B)	-67.4(7)
N(4B)-CuB-N(3B)-C(6B)	9.3(6)
N(2B)-CuB-N(3B)-C(6B)	-147.0(6)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(5B)	-135.4(5)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(5B)	15.8(5)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(5B)	120.5(5)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(5B)	119.1(7)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(25B)	104.3(6)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(25B)	-104.5(6)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(25B)	0.2(5)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(25B)	-1.2(11)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(4B)	-18.3(6)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(4B)	132.9(6)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(4B)	-122.4(6)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(4B)	-123.8(7)
N(1B)-CuB-N(5B)-C(20B)	88.1(6)
N(3B)-CuB-N(5B)-C(20B)	-92.3(6)
N(4B)-CuB-N(5B)-C(20B)	-175.1(6)
N(2B)-CuB-N(5B)-C(20B)	4.3(6)
N(1B)-CuB-N(5B)-C(24B)	-103.0(6)
N(3B)-CuB-N(5B)-C(24B)	76.7(6)
N(4B)-CuB-N(5B)-C(24B)	-6.2(6)
N(2B)-CuB-N(5B)-C(24B)	173.2(6)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(2B)	-62.1(12)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(4B)	-178.7(9)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(18B)	61.9(11)
C(5B)-N(4B)-C(4B)-C(3B)	90.7(9)
C(25B)-N(4B)-C(4B)-C(3B)	-145.8(8)
CuB-N(4B)-C(4B)-C(3B)	-20.7(9)
O(3B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	-49.1(11)
C(2B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	-167.8(8)
C(18B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	67.7(11)
C(25B)-N(4B)-C(5B)-C(6B)	82.0(9)
C(4B)-N(4B)-C(5B)-C(6B)	-156.7(7)
CuB-N(4B)-C(5B)-C(6B)	-38.8(8)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(8B)	-71.7(11)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(8B)	94.4(8)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(5B)	163.1(8)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(5B)	-30.9(8)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(7B)	50.5(12)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(7B)	-143.4(7)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-N(3B)	47.7(10)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-C(8B)	-76.4(10)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-C(7B)	165.3(8)
C(6B)-N(3B)-C(9B)-O(1B)	6.1(15)

TABLE S58

CuB-N(3B)-C(9B)-O(1B)	-158.9(8)	C(4B)-C(3B)-C(18B)-N(1B)	-67.4(11)
C(6B)-N(3B)-C(9B)-C(10B)	-172.5(8)	C(13B)-N(2B)-C(19B)-C(20B)	116.7(8)
CuB-N(3B)-C(9B)-C(10B)	22.4(12)	C(14B)-N(2B)-C(19B)-C(20B)	-120.9(7)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(12B)	46.1(16)	CuB-N(2B)-C(19B)-C(20B)	-9.3(9)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(13B)	169.3(13)	C(24B)-N(5B)-C(20B)-C(21B)	1.7(12)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(9B)	-75.4(15)	CuB-N(5B)-C(20B)-C(21B)	170.4(6)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-O(4B)	-0.2(13)	C(24B)-N(5B)-C(20B)-C(19B)	-179.2(7)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-O(4B)	178.5(9)	CuB-N(5B)-C(20B)-C(19B)	-10.5(9)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-C(12B)	-122.0(10)	N(2B)-C(19B)-C(20B)-N(5B)	13.0(10)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-C(12B)	56.7(11)	N(2B)-C(19B)-C(20B)-C(21B)	-168.0(8)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-C(13B)	106.9(10)	N(5B)-C(20B)-C(21B)-C(22B)	-1.8(12)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-C(13B)	-74.4(12)	C(19B)-C(20B)-C(21B)-C(22B)	179.2(7)
C(19B)-N(2B)-C(13B)-C(10B)	-146.0(8)	C(20B)-C(21B)-C(22B)-C(23B)	0.4(11)
C(14B)-N(2B)-C(13B)-C(10B)	92.7(10)	C(20B)-C(21B)-C(22B)-C(26B)	179.6(7)
CuB-N(2B)-C(13B)-C(10B)	-19.6(10)	C(21B)-C(22B)-C(23B)-C(24B)	1.0(12)
O(4B)-C(10B)-C(13B)-N(2B)	-175.8(8)	C(26B)-C(22B)-C(23B)-C(24B)	-178.2(7)
C(12B)-C(10B)-C(13B)-N(2B)	-57.2(12)	C(20B)-N(5B)-C(24B)-C(23B)	-0.2(12)
C(9B)-C(10B)-C(13B)-N(2B)	70.4(12)	CuB-N(5B)-C(24B)-C(23B)	-168.9(6)
C(19B)-N(2B)-C(14B)-C(15B)	84.1(9)	C(20B)-N(5B)-C(24B)-C(25B)	179.2(7)
C(13B)-N(2B)-C(14B)-C(15B)	-154.2(8)	CuB-N(5B)-C(24B)-C(25B)	10.5(9)
CuB-N(2B)-C(14B)-C(15B)	-35.1(8)	C(22B)-C(23B)-C(24B)-N(5B)	-1.2(12)
C(18B)-N(1B)-C(15B)-C(14B)	161.5(8)	C(22B)-C(23B)-C(24B)-C(25B)	179.5(8)
CuB-N(1B)-C(15B)-C(14B)	-31.4(8)	C(5B)-N(4B)-C(25B)-C(24B)	-108.8(8)
C(18B)-N(1B)-C(15B)-C(17B)	-73.5(10)	C(4B)-N(4B)-C(25B)-C(24B)	128.9(7)
CuB-N(1B)-C(15B)-C(17B)	93.7(7)	CuB-N(4B)-C(25B)-C(24B)	4.8(9)
C(18B)-N(1B)-C(15B)-C(16B)	47.4(12)	N(5B)-C(24B)-C(25B)-N(4B)	-9.9(10)
CuB-N(1B)-C(15B)-C(16B)	-145.4(7)	C(23B)-C(24B)-C(25B)-N(4B)	169.5(8)
N(2B)-C(14B)-C(15B)-N(1B)	45.6(10)	C(23B)-C(22B)-C(26B)-C(30B)	23.3(13)
N(2B)-C(14B)-C(15B)-C(17B)	-76.6(10)	C(21B)-C(22B)-C(26B)-C(30B)	-155.9(8)
N(2B)-C(14B)-C(15B)-C(16B)	165.3(8)	C(23B)-C(22B)-C(26B)-C(27B)	-155.4(8)
C(15B)-N(1B)-C(18B)-O(2B)	4.5(14)	C(21B)-C(22B)-C(26B)-C(27B)	25.4(12)
CuB-N(1B)-C(18B)-O(2B)	-161.1(8)	C(30B)-C(26B)-C(27B)-C(28B)	3.9(13)
C(15B)-N(1B)-C(18B)-C(3B)	-176.2(8)	C(22B)-C(26B)-C(27B)-C(28B)	-177.3(8)
CuB-N(1B)-C(18B)-C(3B)	18.1(11)	C(29B)-N(6B)-C(28B)-C(27B)	1.5(15)
O(3B)-C(3B)-C(18B)-O(2B)	-133.0(9)	C(26B)-C(27B)-C(28B)-N(6B)	-3.8(15)
C(2B)-C(3B)-C(18B)-O(2B)	-10.0(12)	C(28B)-N(6B)-C(29B)-C(30B)	0.4(16)
C(4B)-C(3B)-C(18B)-O(2B)	111.9(10)	C(27B)-C(26B)-C(30B)-C(29B)	-2.2(13)
O(3B)-C(3B)-C(18B)-N(1B)	47.6(11)	C(22B)-C(26B)-C(30B)-C(29B)	179.0(9)
C(2B)-C(3B)-C(18B)-N(1B)	170.7(8)	N(6B)-C(29B)-C(30B)-C(26B)	0.0(17)

TABLE S59

Table 7. Hydrogen bonds for **7d** [Å and °].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
O-H(1)...O(2A)#1	0.73(7)	2.10(7)	2.798(11)	160(9)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

TABLE S60

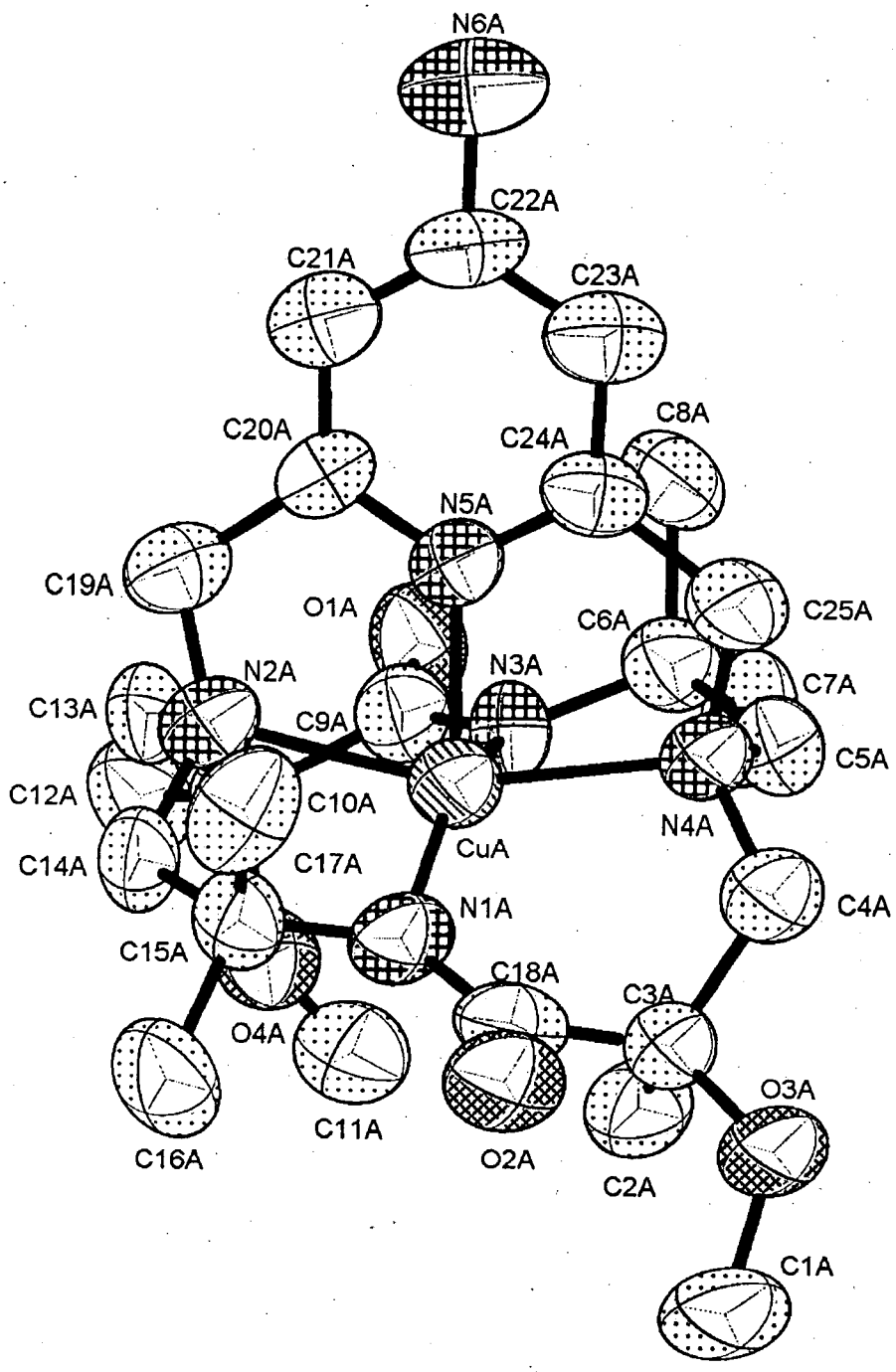

N6A
C22A
C21A
C23A
C20A
C24A
C8A
N5A
C19A
O1A
C6A
C25A
N2A
N3A
C7A
C13A
C9A
C5A
C12A
C10A
N4A
CuA
C14A
C17A
C4A
N1A
C15A
C18A
C3A
O4A
O3A
C11A
O2A
C16A
C2A
C1A

FIGURE S22.

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 69

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

Identification code	lsh116m	
Empirical formula	C26 H42 Cl2 Cu N6 O4	
Formula weight	637.10	
Temperature	298(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 10.4777(14) Å	α= 72.872(2)°.
	b = 14.809(2) Å	β= 76.367(2)°.
	c = 21.418(3) Å	γ = 85.670(2)°.
Volume	3086.3(7) Å^3	
Z	4	
Density (calculated)	1.371 Mg/m^3	
Absorption coefficient	0.921 mm^{-1}	
F(000)	1340	
Crystal size	0.10 x 0.10 x 0.50 mm^3	
Theta range for data collection	3.16 to 23.27°.	
Index ranges	-11<=h<=11, -16<=k<=16, -23<=l<=23	
Reflections collected	20243	
Independent reflections	8864 [R(int) = 0.0981]	
Completeness to theta = 23.27°	99.7 %	
Absorption correction	SADABS	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	8864 / 0 / 732	
Goodness-of-fit on F^2	0.828	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0902, wR2 = 0.2088	
R indices (all data)	R1 = 0.1840, wR2 = 0.2598	
Extinction coefficient	0.0000(11)	
Largest diff. peak and hole	1.343 and -0.470 e.Å^{-3}	

TABLE S6l

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 70

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

	x	y	z	U(eq)
CuA	5796(1)	7855(1)	3984(1)	62(1)
O(1A)	7199(6)	9926(4)	4514(3)	78(2)
O(2A)	5252(7)	6343(5)	2782(3)	85(2)
O(3A)	7835(7)	6170(5)	2592(3)	96(2)
O(4A)	6037(7)	9857(4)	3139(3)	76(2)
N(1A)	5141(7)	7512(5)	3319(3)	68(2)
N(2A)	4047(7)	8668(5)	4131(3)	67(2)
N(3A)	6955(6)	8578(5)	4210(3)	60(2)
N(4A)	7149(7)	6688(5)	4212(3)	64(2)
N(5A)	4753(7)	7033(5)	4921(3)	62(2)
N(6A)	3170(11)	5818(8)	6926(5)	109(4)
C(1A)	7883(13)	6506(8)	1884(5)	120(5)
C(2A)	7940(9)	7750(7)	2693(5)	81(3)
C(3A)	7271(9)	6790(7)	2986(4)	68(3)
C(4A)	7548(9)	6234(6)	3667(4)	71(3)
C(5A)	8300(9)	7172(6)	4276(5)	71(3)
C(6A)	7971(9)	8049(6)	4556(4)	67(3)
C(7A)	9294(8)	8573(7)	4350(6)	93(3)
C(8A)	7489(10)	7779(7)	5326(4)	85(3)
C(9A)	6704(9)	9472(7)	4222(5)	67(3)
C(10A)	5711(10)	10001(6)	3805(5)	70(3)
C(11A)	7311(11)	10182(8)	2766(5)	96(3)
C(12A)	5702(10)	11048(7)	3745(5)	89(3)
C(13A)	4346(9)	9652(6)	4123(4)	63(2)
C(14A)	3543(8)	8686(6)	3528(4)	67(3)
C(15A)	3726(9)	7748(7)	3331(5)	66(2)
C(16A)	3440(11)	7980(8)	2634(5)	109(4)
C(17A)	2859(9)	6924(7)	3810(6)	93(3)
C(18A)	5748(10)	6879(7)	3016(4)	73(3)
C(19A)	3110(9)	8216(6)	4770(4)	69(3)
C(20A)	3685(8)	7405(6)	5228(4)	59(2)
C(21A)	3111(10)	7014(8)	5883(5)	76(3)
C(22A)	3688(11)	6232(8)	6250(5)	73(3)
C(23A)	4829(10)	5866(7)	5937(5)	79(3)
C(24A)	5338(9)	6294(6)	5270(4)	59(2)
C(25A)	6568(9)	5959(6)	4870(4)	75(3)
CuB	2673(1)	2815(1)	1346(1)	68(1)
O(1B)	-532(7)	2995(6)	2789(3)	100(2)
O(2B)	5186(8)	1936(5)	-75(3)	92(2)
O(3B)	3106(8)	2137(5)	-624(3)	105(2)
O(4B)	1526(8)	1158(5)	2394(4)	101(2)
N(1B)	3944(7)	2028(5)	965(4)	72(2)
N(2B)	3539(7)	2393(5)	2204(3)	67(2)
N(3B)	901(7)	3040(5)	1773(3)	70(2)
N(4B)	2215(8)	3764(5)	426(3)	72(2)
N(5B)	3669(7)	4044(6)	1256(4)	68(2)
N(6B)	4466(10)	6637(7)	1452(5)	98(3)
C(1B)	3311(16)	1208(9)	-678(6)	159(6)

TABLE S62

C(2B)	1684(10)	1699(7)	510(5)	92(3)
C(3B)	2895(10)	2282(7)	44(4)	73(3)
C(4B)	2587(10)	3349(6)	-140(4)	74(3)
C(5B)	745(9)	3817(7)	637(4)	78(3)
C(6B)	192(10)	3798(8)	1380(5)	84(3)
C(7B)	-1261(10)	3564(9)	1480(5)	115(4)
C(8B)	311(11)	4741(7)	1530(5)	100(4)
C(9B)	425(11)	2702(8)	2443(5)	79(3)
C(10B)	1192(11)	1833(8)	2785(4)	85(3)
C(11B)	478(12)	674(10)	2317(7)	134(5)
C(12B)	440(12)	1353(9)	3517(5)	129(5)
C(13B)	2503(10)	2125(7)	2837(4)	76(3)
C(14B)	4360(9)	1580(6)	2065(4)	73(3)
C(15B)	5006(11)	1692(7)	1331(5)	77(3)
C(16B)	5464(12)	689(8)	1276(6)	115(4)
C(17B)	6209(10)	2343(9)	1051(5)	109(4)
C(18B)	4135(10)	2028(6)	325(5)	70(3)
C(19B)	4388(10)	3134(7)	2222(5)	76(3)
C(20B)	4165(9)	4114(7)	1764(4)	67(3)
C(21B)	4380(9)	4954(8)	1852(4)	73(3)
C(22B)	4203(10)	5786(8)	1382(5)	78(3)
C(23B)	3752(9)	5731(7)	834(4)	75(3)
C(24B)	3450(8)	4850(7)	800(4)	62(2)
C(25B)	2899(11)	4695(7)	258(5)	89(3)
Cl(2)	1045(11)	7650(13)	554(8)	522(10)
Cl(1)	1147(18)	8926(9)	1147(9)	631(15)
C(1)	1960(40)	7880(40)	1130(30)	690(60)
Cl(4)	-385(5)	4297(3)	4420(2)	180(2)
Cl(3)	1614(6)	4737(5)	3244(3)	246(3)
C(2)	94(12)	4341(11)	3585(8)	148(5)

TABLE S63

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 72

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **8**.

CuA-N(3A)	1.907(7)
CuA-N(1A)	1.923(7)
CuA-N(5A)	2.106(7)
CuA-N(2A)	2.128(7)
CuA-N(4A)	2.167(7)
O(1A)-C(9A)	1.250(10)
O(2A)-C(18A)	1.254(10)
O(3A)-C(3A)	1.429(10)
O(3A)-C(1A)	1.440(11)
O(4A)-C(11A)	1.421(11)
O(4A)-C(10A)	1.460(10)
N(1A)-C(18A)	1.333(11)
N(1A)-C(15A)	1.493(11)
N(2A)-C(19A)	1.488(10)
N(2A)-C(14A)	1.499(10)
N(2A)-C(13A)	1.508(10)
N(3A)-C(9A)	1.337(11)
N(3A)-C(6A)	1.483(11)
N(4A)-C(4A)	1.475(10)
N(4A)-C(5A)	1.502(11)
N(4A)-C(25A)	1.524(10)
N(5A)-C(20A)	1.326(10)
N(5A)-C(24A)	1.329(10)
N(6A)-C(22A)	1.387(13)
C(2A)-C(3A)	1.524(12)
C(3A)-C(4A)	1.532(11)
C(3A)-C(18A)	1.578(13)
C(5A)-C(6A)	1.569(12)
C(6A)-C(8A)	1.544(11)
C(6A)-C(7A)	1.547(12)
C(9A)-C(10A)	1.549(12)
C(10A)-C(13A)	1.490(12)
C(10A)-C(12A)	1.517(12)
C(14A)-C(15A)	1.553(11)
C(15A)-C(16A)	1.527(12)
C(15A)-C(17A)	1.536(13)
C(19A)-C(20A)	1.499(12)
C(20A)-C(21A)	1.356(12)
C(21A)-C(22A)	1.381(13)
C(22A)-C(23A)	1.382(13)
C(23A)-C(24A)	1.373(11)
C(24A)-C(25A)	1.508(12)
CuB-N(1B)	1.901(7)
CuB-N(3B)	1.919(7)
CuB-N(5B)	2.105(8)
CuB-N(2B)	2.147(7)
CuB-N(4B)	2.192(7)
O(1B)-C(9B)	1.233(11)
O(2B)-C(18B)	1.253(10)
O(3B)-C(1B)	1.411(12)
O(3B)-C(3B)	1.471(10)
O(4B)-C(11B)	1.420(12)
O(4B)-C(10B)	1.458(11)
N(1B)-C(18B)	1.336(11)
N(1B)-C(15B)	1.483(12)
N(2B)-C(19B)	1.480(10)
N(2B)-C(14B)	1.488(10)
N(2B)-C(13B)	1.493(10)
N(3B)-C(9B)	1.354(11)
N(3B)-C(6B)	1.460(12)
N(4B)-C(4B)	1.477(10)
N(4B)-C(5B)	1.502(11)
N(4B)-C(25B)	1.509(11)
N(5B)-C(20B)	1.342(10)
N(5B)-C(24B)	1.345(10)
N(6B)-C(22B)	1.368(12)
C(2B)-C(3B)	1.553(12)
C(3B)-C(18B)	1.535(13)
C(3B)-C(4B)	1.540(12)
C(5B)-C(6B)	1.553(12)
C(6B)-C(7B)	1.538(13)
C(6B)-C(8B)	1.542(13)
C(9B)-C(10B)	1.551(14)
C(10B)-C(13B)	1.508(13)
C(10B)-C(12B)	1.558(13)
C(14B)-C(15B)	1.522(12)
C(15B)-C(17B)	1.538(13)
C(15B)-C(16B)	1.554(12)
C(19B)-C(20B)	1.530(12)
C(20B)-C(21B)	1.354(12)
C(21B)-C(22B)	1.374(12)
C(22B)-C(23B)	1.389(12)
C(23B)-C(24B)	1.391(12)
C(24B)-C(25B)	1.492(12)
Cl(2)-C(1)	1.85(3)
Cl(1)-C(1)	1.71(4)
Cl(4)-C(2)	1.722(14)
Cl(3)-C(2)	1.660(13)

N(3A)-CuA-N(1A)	150.1(3)
N(3A)-CuA-N(5A)	103.6(3)
N(1A)-CuA-N(5A)	106.2(3)
N(3A)-CuA-N(2A)	99.5(3)
N(1A)-CuA-N(2A)	86.9(3)
N(5A)-CuA-N(2A)	78.5(3)
N(3A)-CuA-N(4A)	86.2(3)
N(1A)-CuA-N(4A)	99.1(3)
N(5A)-CuA-N(4A)	78.7(3)
N(2A)-CuA-N(4A)	157.2(3)
C(3A)-O(3A)-C(1A)	117.0(7)
C(11A)-O(4A)-C(10A)	113.3(8)
C(18A)-N(1A)-C(15A)	120.4(8)
C(18A)-N(1A)-CuA	122.3(7)
C(15A)-N(1A)-CuA	114.4(5)
C(19A)-N(2A)-C(14A)	112.3(7)
C(19A)-N(2A)-C(13A)	109.2(6)

TABLE S64

C(14A)-N(2A)-C(13A)	111.0(7)
C(19A)-N(2A)-CuA	112.0(5)
C(14A)-N(2A)-CuA	100.9(4)
C(13A)-N(2A)-CuA	111.2(5)
C(9A)-N(3A)-C(6A)	118.1(7)
C(9A)-N(3A)-CuA	122.9(6)
C(6A)-N(3A)-CuA	117.0(5)
C(4A)-N(4A)-C(5A)	110.3(7)
C(4A)-N(4A)-C(25A)	110.3(7)
C(5A)-N(4A)-C(25A)	110.7(7)
C(4A)-N(4A)-CuA	112.3(5)
C(5A)-N(4A)-CuA	101.9(5)
C(25A)-N(4A)-CuA	111.0(5)
C(20A)-N(5A)-C(24A)	119.6(7)
C(20A)-N(5A)-CuA	118.2(6)
C(24A)-N(5A)-CuA	119.5(6)
O(3A)-C(3A)-C(2A)	110.3(7)
O(3A)-C(3A)-C(4A)	100.6(7)
C(2A)-C(3A)-C(4A)	113.6(8)
O(3A)-C(3A)-C(18A)	108.8(8)
C(2A)-C(3A)-C(18A)	111.6(8)
C(4A)-C(3A)-C(18A)	111.3(7)
N(4A)-C(4A)-C(3A)	116.5(7)
N(4A)-C(5A)-C(6A)	116.1(7)
N(3A)-C(6A)-C(8A)	111.9(7)
N(3A)-C(6A)-C(7A)	113.8(7)
C(8A)-C(6A)-C(7A)	109.2(8)
N(3A)-C(6A)-C(5A)	104.4(7)
C(8A)-C(6A)-C(5A)	113.4(8)
C(7A)-C(6A)-C(5A)	103.9(8)
O(1A)-C(9A)-N(3A)	127.7(9)
O(1A)-C(9A)-C(10A)	117.3(9)
N(3A)-C(9A)-C(10A)	115.0(9)
O(4A)-C(10A)-C(13A)	106.8(8)
O(4A)-C(10A)-C(12A)	110.1(7)
C(13A)-C(10A)-C(12A)	107.2(8)
O(4A)-C(10A)-C(9A)	110.5(7)
C(13A)-C(10A)-C(9A)	111.8(7)
C(12A)-C(10A)-C(9A)	110.2(8)
C(10A)-C(13A)-N(2A)	117.3(7)
N(2A)-C(14A)-C(15A)	115.0(7)
N(1A)-C(15A)-C(16A)	111.8(8)
N(1A)-C(15A)-C(17A)	110.2(8)
C(16A)-C(15A)-C(17A)	109.7(8)
N(1A)-C(15A)-C(14A)	103.1(7)
C(16A)-C(15A)-C(14A)	106.2(8)
C(17A)-C(15A)-C(14A)	115.7(8)
O(2A)-C(18A)-N(1A)	128.1(10)
O(2A)-C(18A)-C(3A)	118.0(9)
N(1A)-C(18A)-C(3A)	113.8(9)
N(2A)-C(19A)-C(20A)	113.9(7)
N(5A)-C(20A)-C(21A)	122.0(9)
N(5A)-C(20A)-C(19A)	113.8(7)
C(21A)-C(20A)-C(19A)	123.9(9)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	119.1(9)
C(21A)-C(22A)-N(6A)	121.8(10)
C(21A)-C(22A)-C(23A)	118.9(8)
N(6A)-C(22A)-C(23A)	119.3(11)
C(24A)-C(23A)-C(22A)	118.5(9)
N(5A)-C(24A)-C(23A)	121.8(9)
N(5A)-C(24A)-C(25A)	114.6(7)
C(23A)-C(24A)-C(25A)	123.6(9)
C(24A)-C(25A)-N(4A)	113.6(7)
N(1B)-CuB-N(3B)	150.1(3)
N(1B)-CuB-N(5B)	106.2(3)
N(3B)-CuB-N(5B)	103.7(3)
N(1B)-CuB-N(2B)	87.0(3)
N(3B)-CuB-N(2B)	99.8(3)
N(5B)-CuB-N(2B)	77.7(3)
N(1B)-CuB-N(4B)	99.3(3)
N(3B)-CuB-N(4B)	86.0(3)
N(5B)-CuB-N(4B)	78.9(3)
N(2B)-CuB-N(4B)	156.6(3)
C(1B)-O(3B)-C(3B)	118.5(8)
C(11B)-O(4B)-C(10B)	117.7(9)
C(18B)-N(1B)-C(15B)	119.7(8)
C(18B)-N(1B)-CuB	122.6(7)
C(15B)-N(1B)-CuB	114.2(5)
C(19B)-N(2B)-C(14B)	109.7(7)
C(19B)-N(2B)-C(13B)	110.0(7)
C(14B)-N(2B)-C(13B)	113.4(7)
C(19B)-N(2B)-CuB	112.4(5)
C(14B)-N(2B)-CuB	100.4(5)
C(13B)-N(2B)-CuB	110.7(5)
C(9B)-N(3B)-C(6B)	119.4(8)
C(9B)-N(3B)-CuB	122.5(7)
C(6B)-N(3B)-CuB	116.1(6)
C(4B)-N(4B)-C(5B)	109.8(7)
C(4B)-N(4B)-C(25B)	110.7(7)
C(5B)-N(4B)-C(25B)	114.3(8)
C(4B)-N(4B)-CuB	112.0(5)
C(5B)-N(4B)-CuB	100.5(5)
C(25B)-N(4B)-CuB	109.2(5)
C(20B)-N(5B)-C(24B)	117.8(8)
C(20B)-N(5B)-CuB	120.2(7)
C(24B)-N(5B)-CuB	118.7(6)
O(3B)-C(3B)-C(18B)	111.0(8)
O(3B)-C(3B)-C(4B)	99.4(7)
C(18B)-C(3B)-C(4B)	113.1(8)
O(3B)-C(3B)-C(2B)	108.8(8)
C(18B)-C(3B)-C(2B)	112.4(8)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	111.4(8)
N(4B)-C(4B)-C(3B)	115.9(7)
N(4B)-C(5B)-C(6B)	115.4(7)
N(3B)-C(6B)-C(7B)	112.9(9)
N(3B)-C(6B)-C(8B)	111.2(8)
C(7B)-C(6B)-C(8B)	110.3(9)
N(3B)-C(6B)-C(5B)	105.9(8)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	101.7(8)
C(8B)-C(6B)-C(5B)	114.5(9)
O(1B)-C(9B)-N(3B)	127.4(10)
O(1B)-C(9B)-C(10B)	118.7(9)

TABLE S65

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 74

N(3B)-C(9B)-C(10B)	113.9(9)
O(4B)-C(10B)-C(13B)	104.2(9)
O(4B)-C(10B)-C(9B)	112.4(8)
C(13B)-C(10B)-C(9B)	110.8(9)
O(4B)-C(10B)-C(12B)	111.6(9)
C(13B)-C(10B)-C(12B)	106.2(8)
C(9B)-C(10B)-C(12B)	111.3(9)
N(2B)-C(13B)-C(10B)	116.9(7)
N(2B)-C(14B)-C(15B)	115.5(7)
N(1B)-C(15B)-C(14B)	105.2(8)
N(1B)-C(15B)-C(17B)	112.5(8)
C(14B)-C(15B)-C(17B)	114.8(9)
N(1B)-C(15B)-C(16B)	109.5(8)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	106.7(8)
C(17B)-C(15B)-C(16B)	107.9(9)
O(2B)-C(18B)-N(1B)	129.0(9)
O(2B)-C(18B)-C(3B)	117.4(9)
N(1B)-C(18B)-C(3B)	113.3(9)
N(2B)-C(19B)-C(20B)	113.8(7)
N(5B)-C(20B)-C(21B)	122.8(9)
N(5B)-C(20B)-C(19B)	110.8(8)
C(21B)-C(20B)-C(19B)	126.3(8)
C(20B)-C(21B)-C(22B)	120.4(9)
N(6B)-C(22B)-C(21B)	120.9(10)
N(6B)-C(22B)-C(23B)	121.4(10)
C(21B)-C(22B)-C(23B)	117.7(9)
C(22B)-C(23B)-C(24B)	119.0(9)
N(5B)-C(24B)-C(23B)	122.0(8)
N(5B)-C(24B)-C(25B)	113.5(8)
C(23B)-C(24B)-C(25B)	124.5(9)
C(24B)-C(25B)-N(4B)	115.7(8)
Cl(1)-C(1)-Cl(2)	93.1(17)
Cl(3)-C(2)-Cl(4)	112.5(9)

TABLE S66

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 75

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 x\ 10^3$) for **8**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[\ h^2\ a^{*2}U^{11} + ... + 2\ h\ k\ a^*\ b^*\ U^{12}\ ]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
CuA	73(1)	59(1)	55(1)	-21(1)	-15(1)	8(1)
O(1A)	98(5)	59(4)	94(5)	-34(4)	-42(4)	18(3)
O(2A)	123(6)	68(4)	75(4)	-38(4)	-23(4)	2(4)
O(3A)	136(6)	89(5)	63(4)	-36(4)	-13(4)	42(4)
O(4A)	88(5)	62(4)	76(4)	-16(3)	-18(4)	0(4)
N(1A)	85(6)	64(5)	61(5)	-32(4)	-11(4)	3(4)
N(2A)	74(5)	73(6)	60(5)	-31(4)	-9(4)	7(4)
N(3A)	60(4)	54(5)	67(5)	-16(4)	-18(4)	13(4)
N(4A)	77(5)	63(5)	52(4)	-24(4)	-11(4)	16(4)
N(5A)	65(5)	65(5)	52(4)	-18(4)	-6(4)	6(4)
N(6A)	130(9)	131(9)	68(7)	-37(6)	-7(7)	-26(7)
C(1A)	185(13)	109(10)	64(7)	-44(7)	-12(7)	46(9)
C(2A)	84(7)	70(7)	71(6)	-10(6)	2(5)	0(6)
C(3A)	78(7)	68(7)	55(6)	-19(5)	-13(5)	17(5)
C(4A)	88(7)	65(6)	64(6)	-29(5)	-15(5)	10(5)
C(5A)	72(7)	68(7)	67(6)	-10(5)	-16(5)	13(5)
C(6A)	81(7)	64(6)	61(6)	-22(5)	-20(5)	7(5)
C(7A)	48(6)	98(8)	133(9)	-31(7)	-20(6)	0(6)
C(8A)	114(8)	84(7)	65(6)	-23(6)	-40(6)	28(6)
C(9A)	61(6)	67(7)	64(6)	-12(6)	-8(5)	1(5)
C(10A)	102(8)	49(6)	68(6)	-29(5)	-24(6)	14(6)
C(11A)	109(9)	90(8)	74(7)	-9(6)	-14(7)	8(7)
C(12A)	120(9)	67(7)	88(7)	-24(6)	-44(6)	22(6)
C(13A)	71(7)	52(6)	68(6)	-19(5)	-22(5)	20(5)
C(14A)	69(6)	73(7)	77(6)	-40(5)	-33(5)	26(5)
C(15A)	60(6)	79(7)	72(6)	-33(6)	-29(5)	7(5)
C(16A)	143(10)	116(10)	99(8)	-56(7)	-71(8)	50(8)
C(17A)	74(7)	99(9)	123(9)	-61(8)	-15(7)	-3(6)
C(18A)	106(9)	59(7)	48(5)	-11(5)	-13(6)	-2(6)
C(19A)	78(7)	68(7)	58(6)	-24(5)	-2(5)	-2(5)
C(20A)	56(6)	64(6)	55(6)	-24(5)	0(5)	-6(5)
C(21A)	75(7)	87(8)	66(7)	-28(6)	-8(6)	-9(6)
C(22A)	96(8)	76(7)	44(6)	-20(6)	2(6)	-12(6)
C(23A)	105(8)	68(7)	62(7)	-19(6)	-12(6)	-11(6)
C(24A)	77(6)	49(6)	50(6)	-10(5)	-12(5)	-13(5)
C(25A)	102(8)	53(6)	56(6)	-2(5)	-9(6)	13(5)
CuB	87(1)	65(1)	54(1)	-19(1)	-19(1)	6(1)
O(1B)	95(5)	129(7)	63(4)	-25(4)	4(4)	7(5)
O(2B)	108(6)	91(5)	77(5)	-31(4)	-14(4)	8(4)
O(3B)	169(7)	88(6)	65(4)	-32(4)	-27(4)	12(5)
O(4B)	123(6)	80(5)	95(5)	-26(4)	-11(5)	-18(5)
N(1B)	95(6)	62(5)	53(5)	-20(4)	-6(4)	9(4)
N(2B)	87(6)	63(5)	55(5)	-22(4)	-18(4)	1(4)
N(3B)	91(6)	68(5)	48(5)	-8(4)	-27(4)	17(4)
N(4B)	91(6)	69(6)	62(5)	-29(4)	-15(4)	5(5)
N(5B)	78(5)	70(6)	60(5)	-22(5)	-16(4)	3(4)
N(6B)	150(9)	75(7)	80(6)	-32(6)	-27(6)	-19(6)
C(1B)	273(19)	81(9)	129(11)	-62(9)	-22(11)	12(10)
C(2B)	125(9)	75(7)	82(7)	-15(6)	-40(7)	-25(7)

TABLE S67

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 76

C(3B)	105(8)	63(7)	57(6)	-23(5)	-20(6)	0(6)
C(4B)	99(7)	69(7)	53(6)	-23(5)	-10(5)	5(6)
C(5B)	84(7)	95(8)	70(6)	-32(6)	-43(6)	24(6)
C(6B)	74(7)	109(9)	65(7)	-29(6)	-4(6)	2(6)
C(7B)	80(8)	171(13)	93(8)	-43(8)	-15(7)	16(8)
C(8B)	148(10)	74(8)	72(7)	-31(6)	-11(7)	24(7)
C(9B)	91(8)	84(8)	55(7)	-13(6)	-10(6)	-11(6)
C(10B)	110(9)	85(8)	51(6)	-15(6)	-5(6)	0(7)
C(11B)	128(11)	132(12)	146(12)	-43(10)	-19(9)	-43(9)
C(12B)	138(11)	153(12)	67(7)	2(8)	-2(7)	-24(9)
C(13B)	99(8)	86(8)	43(5)	-15(5)	-20(5)	5(6)
C(14B)	97(7)	67(7)	61(6)	-17(5)	-35(5)	15(6)
C(15B)	109(8)	54(6)	71(7)	-23(5)	-31(6)	29(6)
C(16B)	134(10)	104(9)	122(9)	-59(8)	-39(8)	44(8)
C(17B)	92(8)	143(11)	99(8)	-54(8)	-5(7)	-17(8)
C(18B)	79(7)	59(6)	72(7)	-24(6)	-14(6)	5(5)
C(19B)	103(8)	67(7)	69(6)	-20(6)	-43(6)	4(6)
C(20B)	79(7)	78(8)	51(6)	-25(6)	-17(5)	-3(5)
C(21B)	100(8)	77(8)	52(6)	-29(6)	-23(5)	1(6)
C(22B)	103(8)	72(8)	62(7)	-29(6)	-6(6)	-13(6)
C(23B)	111(8)	54(7)	49(6)	-11(5)	-1(5)	-5(6)
C(24B)	81(6)	59(7)	48(5)	-19(5)	-11(5)	-4(5)
C(25B)	139(10)	63(7)	67(6)	-17(6)	-22(6)	-15(7)
Cl(2)	274(11)	720(30)	530(20)	-211(19)	13(12)	74(14)
Cl(1)	700(30)	301(13)	800(30)	-258(18)	160(20)	-60(16)
C(1)	590(70)	970(120)	1050(130)	-850(110)	-660(90)	540(80)
Cl(4)	197(4)	195(5)	148(4)	-49(3)	-64(3)	81(4)
Cl(3)	219(6)	275(7)	241(6)	-102(6)	9(5)	-65(5)
C(2)	101(10)	163(14)	196(15)	-91(12)	-21(10)	15(9)

TABLE S68

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 77

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **8**.

	x	y	z	U(eq)
H(6A1)	2940(110)	6130(80)	7140(60)	131
H(6A3)	2430(110)	5730(90)	6860(60)	131
H(1A1)	7161	6932	1808	180
H(1A2)	7824	5980	1717	180
H(1A3)	8695	6831	1656	180
H(2A1)	8875	7662	2592	121
H(2A2)	7702	8107	3012	121
H(2A3)	7663	8086	2289	121
H(4A1)	7107	5631	3811	85
H(4A2)	8484	6105	3605	85
H(5A1)	8888	7375	3837	86
H(5A2)	8772	6713	4567	86
H(7A1)	9496	8868	3875	140
H(7A2)	9977	8130	4467	140
H(7A3)	9231	9047	4581	140
H(8A1)	7218	8339	5463	127
H(8A2)	8190	7475	5532	127
H(8A3)	6761	7355	5463	127
H(11A)	7443	10799	2800	144
H(11B)	7391	10213	2304	144
H(11C)	7959	9753	2942	144
H(12A)	6584	11283	3584	134
H(12B)	5341	11144	4177	134
H(12C)	5176	11381	3437	134
H(13A)	3753	10087	3893	76
H(13B)	4145	9680	4583	76
H(14A)	3987	9185	3150	81
H(14B)	2615	8843	3612	81
H(16A)	4035	8459	2327	163
H(16B)	2554	8207	2651	163
H(16C)	3552	7422	2485	163
H(17A)	2892	6429	3601	140
H(17B)	1969	7141	3915	140
H(17C)	3173	6686	4215	140
H(19A)	2359	7991	4667	82
H(19B)	2794	8688	5003	82
H(21A)	2339	7269	6082	91
H(23A)	5241	5342	6172	95
H(25A)	6370	5391	4775	90
H(25B)	7222	5795	5140	90
H(6B1)	4570(90)	6660(70)	1900(50)	118
H(6B2)	4030(100)	7140(70)	1100(50)	118
H(1B1)	4007	914	-464	238
H(1B2)	3547	1225	-1142	238
H(1B3)	2520	851	-463	238
H(2B1)	971	1810	285	138
H(2B2)	1426	1887	914	138

TABLE S69

© 2003 American Chemical Society, J. Org. Chem., Achmatowicz jo0301393 Supporting Info Page 78

H(2B3)	1908	1039	618	138
H(4B1)	3353	3680	-450	89
H(4B2)	1877	3465	-375	89
H(5B1)	375	3291	557	93
H(5B2)	446	4394	353	93
H(7B1)	-1324	2954	1417	173
H(7B2)	-1643	4034	1159	173
H(7B3)	-1722	3558	1925	173
H(8B1)	-191	4710	1973	150
H(8B2)	-19	5246	1209	150
H(8B3)	1216	4854	1501	150
H(11D)	-260	646	2686	202
H(11E)	757	45	2308	202
H(11F)	229	1006	1905	202
H(12D)	-376	1107	3510	193
H(12E)	269	1810	3765	193
H(12F)	964	846	3726	193
H(13C)	2357	2658	3022	91
H(13D)	2840	1609	3155	91
H(14C)	3815	1021	2232	88
H(14D)	5044	1472	2316	88
H(16D)	4718	280	1420	172
H(16E)	6076	442	1556	172
H(16F)	5880	727	819	172
H(17D)	6578	2353	594	164
H(17E)	6855	2111	1313	164
H(17F)	5947	2971	1070	164
H(19C)	5300	2953	2093	91
H(19D)	4232	3170	2679	91
H(21B)	4649	4968	2233	88
H(23B)	3653	6275	495	90
H(25C)	3609	4742	-134	107
H(25D)	2280	5201	137	107
H(1A)	1805	7412	1565	828
H(1B)	2895	7963	940	828
H(2A)	38	3712	3541	177
H(2B)	-505	4749	3343	177

TABLE S70

Table 6. Torsion angles [°] for **8**.

N(3A)-CuA-N(1A)-C(18A)	82.2(9)
N(5A)-CuA-N(1A)-C(18A)	-96.8(7)
N(2A)-CuA-N(1A)-C(18A)	-174.0(7)
N(4A)-CuA-N(1A)-C(18A)	-16.1(8)
N(3A)-CuA-N(1A)-C(15A)	-117.0(7)
N(5A)-CuA-N(1A)-C(15A)	63.9(7)
N(2A)-CuA-N(1A)-C(15A)	-13.2(6)
N(4A)-CuA-N(1A)-C(15A)	144.7(6)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(19A)	-103.3(6)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(19A)	106.1(6)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(19A)	-1.2(5)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(19A)	-0.2(10)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(14A)	137.0(5)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(14A)	-13.6(6)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(14A)	-120.8(6)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(14A)	-119.9(8)
N(3A)-CuA-N(2A)-C(13A)	19.2(6)
N(1A)-CuA-N(2A)-C(13A)	-131.4(5)
N(5A)-CuA-N(2A)-C(13A)	121.3(6)
N(4A)-CuA-N(2A)-C(13A)	122.3(8)
N(1A)-CuA-N(3A)-C(9A)	82.1(9)
N(5A)-CuA-N(3A)-C(9A)	-98.9(7)
N(2A)-CuA-N(3A)-C(9A)	-18.5(7)
N(4A)-CuA-N(3A)-C(9A)	-176.3(7)
N(1A)-CuA-N(3A)-C(6A)	-114.5(7)
N(5A)-CuA-N(3A)-C(6A)	64.5(6)
N(2A)-CuA-N(3A)-C(6A)	145.0(6)
N(4A)-CuA-N(3A)-C(6A)	-12.8(6)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(4A)	-128.7(6)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(4A)	21.7(7)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(4A)	126.6(6)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(4A)	125.6(8)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(5A)	-10.7(5)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(5A)	139.7(5)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(5A)	-115.5(5)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(5A)	-116.4(8)
N(3A)-CuA-N(4A)-C(25A)	107.2(6)
N(1A)-CuA-N(4A)-C(25A)	-102.4(6)
N(5A)-CuA-N(4A)-C(25A)	2.5(6)
N(2A)-CuA-N(4A)-C(25A)	1.5(11)
N(3A)-CuA-N(5A)-C(20A)	86.3(6)
N(1A)-CuA-N(5A)-C(20A)	-94.1(6)
N(2A)-CuA-N(5A)-C(20A)	-10.8(6)
N(4A)-CuA-N(5A)-C(20A)	169.6(7)
N(3A)-CuA-N(5A)-C(24A)	-75.3(6)
N(1A)-CuA-N(5A)-C(24A)	104.2(6)
N(2A)-CuA-N(5A)-C(24A)	-172.4(6)
N(4A)-CuA-N(5A)-C(24A)	8.0(6)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(2A)	-53.6(11)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(4A)	-173.8(9)
C(1A)-O(3A)-C(3A)-C(18A)	69.2(11)
C(5A)-N(4A)-C(4A)-C(3A)	-97.3(9)
C(25A)-N(4A)-C(4A)-C(3A)	140.1(8)
CuA-N(4A)-C(4A)-C(3A)	15.7(10)
O(3A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	177.2(8)
C(2A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	59.4(11)
C(18A)-C(3A)-C(4A)-N(4A)	-67.7(11)
C(4A)-N(4A)-C(5A)-C(6A)	151.7(7)
C(25A)-N(4A)-C(5A)-C(6A)	-85.9(9)
CuA-N(4A)-C(5A)-C(6A)	32.3(8)
C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(8A)	72.8(10)
CuA-N(3A)-C(6A)-C(8A)	-91.4(8)
C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(7A)	-51.6(10)
CuA-N(3A)-C(6A)-C(7A)	144.1(6)
C(9A)-N(3A)-C(6A)-C(5A)	-164.2(7)
CuA-N(3A)-C(6A)-C(5A)	31.5(8)
N(4A)-C(5A)-C(6A)-N(3A)	-42.7(9)
N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(8A)	79.4(10)
N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(7A)	-162.2(7)
C(6A)-N(3A)-C(9A)-O(1A)	-2.6(13)
CuA-N(3A)-C(9A)-O(1A)	160.7(7)
C(6A)-N(3A)-C(9A)-C(10A)	175.5(7)
CuA-N(3A)-C(9A)-C(10A)	-21.3(10)
C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(13A)	178.5(7)
C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(12A)	62.4(10)
C(11A)-O(4A)-C(10A)-C(9A)	-59.6(10)
O(1A)-C(9A)-C(10A)-O(4A)	131.1(8)
N(3A)-C(9A)-C(10A)-O(4A)	-47.1(10)
O(1A)-C(9A)-C(10A)-C(13A)	-110.0(9)
N(3A)-C(9A)-C(10A)-C(13A)	71.7(9)
O(1A)-C(9A)-C(10A)-C(12A)	9.2(11)
N(3A)-C(9A)-C(10A)-C(12A)	-169.1(8)
O(4A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	51.9(9)
C(12A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	169.9(7)
C(9A)-C(10A)-C(13A)-N(2A)	-69.2(10)
C(19A)-N(2A)-C(13A)-C(10A)	143.6(8)
C(14A)-N(2A)-C(13A)-C(10A)	-92.0(9)
CuA-N(2A)-C(13A)-C(10A)	19.5(9)
C(19A)-N(2A)-C(14A)-C(15A)	-80.7(9)
C(13A)-N(2A)-C(14A)-C(15A)	156.7(7)
CuA-N(2A)-C(14A)-C(15A)	38.7(8)
C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(16A)	-50.1(11)
CuA-N(1A)-C(15A)-C(16A)	148.7(7)
C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(17A)	72.2(10)
CuA-N(1A)-C(15A)-C(17A)	-89.0(8)
C(18A)-N(1A)-C(15A)-C(14A)	-163.8(8)
CuA-N(1A)-C(15A)-C(14A)	35.1(8)
N(2A)-C(14A)-C(15A)-N(1A)	-50.0(9)
N(2A)-C(14A)-C(15A)-C(16A)	-167.7(8)
N(2A)-C(14A)-C(15A)-C(17A)	70.4(10)
C(15A)-N(1A)-C(18A)-O(2A)	-8.4(14)
CuA-N(1A)-C(18A)-O(2A)	151.2(7)
C(15A)-N(1A)-C(18A)-C(3A)	174.1(7)
CuA-N(1A)-C(18A)-C(3A)	-26.3(10)
O(3A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	8.3(11)
C(2A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	130.3(9)

TABLE S7|

C(4A)-C(3A)-C(18A)-O(2A)	-101.7(9)
O(3A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	-174.0(7)
C(2A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	-52.0(10)
C(4A)-C(3A)-C(18A)-N(1A)	76.1(10)
C(14A)-N(2A)-C(19A)-C(20A)	124.1(8)
C(13A)-N(2A)-C(19A)-C(20A)	-112.3(8)
CuA-N(2A)-C(19A)-C(20A)	11.3(9)
C(24A)-N(5A)-C(20A)-C(21A)	-4.7(12)
CuA-N(5A)-C(20A)-C(21A)	-166.3(7)
C(24A)-N(5A)-C(20A)-C(19A)	-178.4(7)
CuA-N(5A)-C(20A)-C(19A)	20.0(9)
N(2A)-C(19A)-C(20A)-N(5A)	-20.3(10)
N(2A)-C(19A)-C(20A)-C(21A)	166.1(8)
N(5A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	3.1(13)
C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(22A)	176.2(8)
C(20A)-C(21A)-C(22A)-N(6A)	178.1(9)
C(20A)-C(21A)-C(22A)-C(23A)	-0.6(14)
C(21A)-C(22A)-C(23A)-C(24A)	-0.3(14)
N(6A)-C(22A)-C(23A)-C(24A)	-179.0(9)
C(20A)-N(5A)-C(24A)-C(23A)	3.7(12)
CuA-N(5A)-C(24A)-C(23A)	165.1(7)
C(20A)-N(5A)-C(24A)-C(25A)	-177.9(8)
CuA-N(5A)-C(24A)-C(25A)	-16.5(9)
C(22A)-C(23A)-C(24A)-N(5A)	-1.2(13)
C(22A)-C(23A)-C(24A)-C(25A)	-179.5(8)
N(5A)-C(24A)-C(25A)-N(4A)	17.9(11)
C(23A)-C(24A)-C(25A)-N(4A)	-163.7(8)
C(4A)-N(4A)-C(25A)-C(24A)	-136.3(8)
C(5A)-N(4A)-C(25A)-C(24A)	101.3(8)
CuA-N(4A)-C(25A)-C(24A)	-11.1(9)
N(3B)-CuB-N(1B)-C(18B)	85.4(9)
N(5B)-CuB-N(1B)-C(18B)	-93.9(8)
N(2B)-CuB-N(1B)-C(18B)	-170.2(8)
N(4B)-CuB-N(1B)-C(18B)	-12.8(8)
N(3B)-CuB-N(1B)-C(15B)	-116.0(8)
N(5B)-CuB-N(1B)-C(15B)	64.7(7)
N(2B)-CuB-N(1B)-C(15B)	-11.5(7)
N(4B)-CuB-N(1B)-C(15B)	145.8(6)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(19B)	103.1(6)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(19B)	-106.2(6)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(19B)	-4.2(6)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(19B)	-3.5(10)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(14B)	-13.4(6)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(14B)	137.3(6)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(14B)	-120.7(6)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(14B)	-120.0(8)
N(1B)-CuB-N(2B)-C(13B)	-133.5(6)
N(3B)-CuB-N(2B)-C(13B)	17.2(6)
N(5B)-CuB-N(2B)-C(13B)	119.2(6)
N(4B)-CuB-N(2B)-C(13B)	119.9(8)
N(1B)-CuB-N(3B)-C(9B)	83.7(9)
N(5B)-CuB-N(3B)-C(9B)	-97.0(8)
N(2B)-CuB-N(3B)-C(9B)	-17.4(8)
N(4B)-CuB-N(3B)-C(9B)	-174.6(8)
N(1B)-CuB-N(3B)-C(6B)	-112.3(8)
N(5B)-CuB-N(3B)-C(6B)	67.0(7)
N(2B)-CuB-N(3B)-C(6B)	146.6(6)
N(4B)-CuB-N(3B)-C(6B)	-10.6(7)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(4B)	20.3(7)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(4B)	-130.1(7)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(4B)	125.2(7)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(4B)	124.5(8)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(5B)	136.8(5)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(5B)	-13.6(5)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(5B)	-118.4(5)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(5B)	-119.1(8)
N(1B)-CuB-N(4B)-C(25B)	-102.7(6)
N(3B)-CuB-N(4B)-C(25B)	106.9(6)
N(5B)-CuB-N(4B)-C(25B)	2.2(6)
N(2B)-CuB-N(4B)-C(25B)	1.5(10)
N(1B)-CuB-N(5B)-C(20B)	-94.1(7)
N(3B)-CuB-N(5B)-C(20B)	86.3(7)
N(2B)-CuB-N(5B)-C(20B)	-10.9(6)
N(4B)-CuB-N(5B)-C(20B)	169.3(7)
N(1B)-CuB-N(5B)-C(24B)	107.0(6)
N(3B)-CuB-N(5B)-C(24B)	-72.7(6)
N(2B)-CuB-N(5B)-C(24B)	-169.9(6)
N(4B)-CuB-N(5B)-C(24B)	10.4(6)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(18B)	66.1(13)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(4B)	-174.6(11)
C(1B)-O(3B)-C(3B)-C(2B)	-58.1(13)
C(5B)-N(4B)-C(4B)-C(3B)	-96.6(10)
C(25B)-N(4B)-C(4B)-C(3B)	136.3(9)
CuB-N(4B)-C(4B)-C(3B)	14.1(10)
O(3B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	175.7(8)
C(18B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	-66.5(11)
C(2B)-C(3B)-C(4B)-N(4B)	61.2(11)
C(4B)-N(4B)-C(5B)-C(6B)	153.7(8)
C(25B)-N(4B)-C(5B)-C(6B)	-81.3(10)
CuB-N(4B)-C(5B)-C(6B)	35.5(9)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(7B)	-53.8(12)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(7B)	141.7(7)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(8B)	70.8(11)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(8B)	-93.7(8)
C(9B)-N(3B)-C(6B)-C(5B)	-164.2(8)
CuB-N(3B)-C(6B)-C(5B)	31.3(10)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-N(3B)	-45.7(11)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-C(7B)	-163.9(9)
N(4B)-C(5B)-C(6B)-C(8B)	77.2(11)
C(6B)-N(3B)-C(9B)-O(1B)	-4.6(15)
CuB-N(3B)-C(9B)-O(1B)	158.8(9)
C(6B)-N(3B)-C(9B)-C(10B)	174.1(9)
CuB-N(3B)-C(9B)-C(10B)	-22.5(11)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(13B)	173.6(9)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(9B)	-66.4(12)
C(11B)-O(4B)-C(10B)-C(12B)	59.5(13)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-O(4B)	136.5(10)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-O(4B)	-42.3(12)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-C(13B)	-107.4(10)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-C(13B)	73.8(10)
O(1B)-C(9B)-C(10B)-C(12B)	10.5(14)
N(3B)-C(9B)-C(10B)-C(12B)	-168.3(9)

TABLE S72