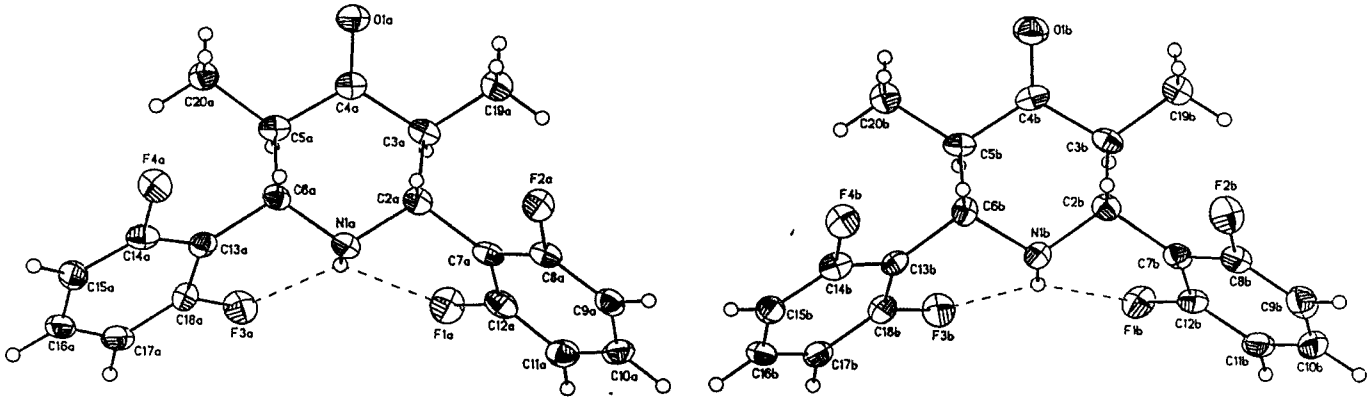
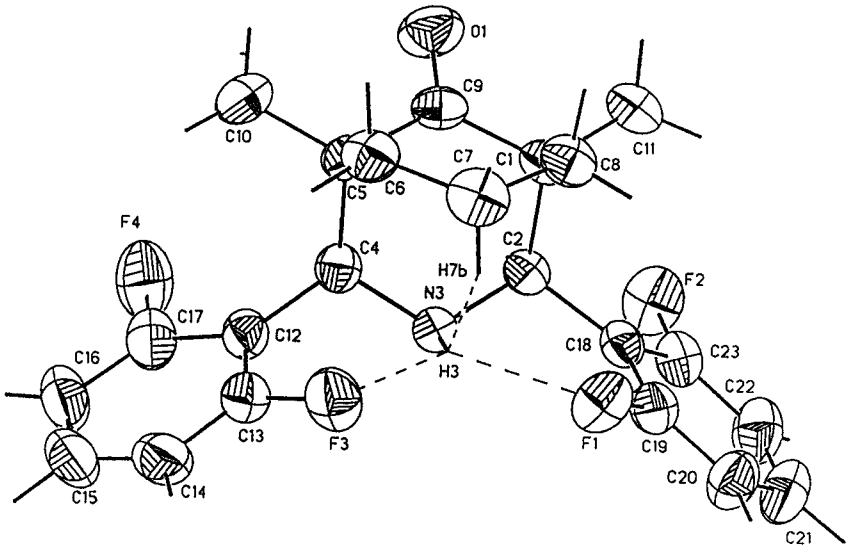
JOC The Journal of Organic Chemistry

J. Org. Chem., 1998, 63(11), 3731-3734, DOI:10.1021/jo9800457



(a)



(b)

Fig. 3. ORTEP representation at 50% probability level of (a) molecules A and B of **3a** and (b) **7b**.

Table 1. Crystal data and structure refinement for 3a.

Empirical formula	$C_{19}H_{17}F_4NO$
Formula weight	351.34
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/n$
Unit cell dimensions	a = 9.727(2) Å α = 90° b = 16.537(3) Å β = 90.92(3)° c = 21.185(4) Å γ = 90°
Volume	3407.3(11) $Å^3$
Z	8
Density (calculated)	1.370 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.114 mm^{-1}
F(000)	1456
Crystal size	0.35 x 0.15 x 0.15 mm
θ range for data collection	1.56 to 23.00°
Index ranges	$-11 \leq h \leq 11$, $0 \leq k \leq 18$, $0 \leq \ell \leq 24$
Reflections collected	4882
Independent reflections	4743 (R_{int} = 0.0199)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3317 / 0 / 460
Goodness-of-fit on F^2	1.008
Final R indices [$I>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0504, wR2 = 0.1262
R indices (all data)	R1 = 0.2367, wR2 = 0.1605
Extinction coefficient	0.0023(7)
Largest diff. peak and hole	0.183 and -0.178 $eÅ^{-3}$

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

	x	y	z	U(eq)
N(1A)	1677(5)	5954(3)	3800(2)	60(1)
C(2A)	1267(5)	6409(3)	4359(3)	56(2)
C(3A)	1812(6)	7282(3)	4378(3)	61(2)
C(4A)	1452(6)	7667(4)	3760(3)	57(2)
C(5A)	1850(6)	7229(4)	3169(3)	63(2)
C(6A)	1301(5)	6364(3)	3210(3)	55(2)
C(7A)	1607(6)	5933(4)	4960(3)	58(2)
C(8A)	650(6)	5768(4)	5417(3)	61(2)
C(9A)	907(8)	5333(4)	5950(3)	70(2)
C(10A)	2215(9)	5039(4)	6051(3)	81(2)
C(11A)	3205(7)	5162(4)	5617(4)	83(2)
C(12A)	2882(6)	5629(4)	5098(3)	66(2)
C(13A)	1643(6)	5852(3)	2652(3)	58(2)
C(14A)	709(7)	5706(4)	2163(3)	69(2)
C(15A)	946(8)	5295(4)	1617(3)	77(2)
C(16A)	2233(9)	4963(4)	1554(3)	83(2)
C(17A)	3214(8)	5072(4)	2016(4)	80(2)
C(18A)	2927(7)	5518(4)	2540(3)	71(2)
C(19A)	1307(6)	7755(4)	4945(3)	81(2)
C(20A)	1392(6)	7672(4)	2578(3)	74(2)
O(1A)	780(4)	8292(3)	3738(2)	80(1)
F(1A)	3898(3)	5760(2)	4673(2)	99(1)
F(2A)	-633(3)	6079(2)	5321(2)	83(1)
F(3A)	3912(3)	5627(2)	2993(2)	98(1)
F(4A)	-574(4)	6026(2)	2226(2)	92(1)
N(1B)	-740(5)	2887(4)	1246(2)	55(1)
C(2B)	-1083(5)	3378(4)	686(3)	59(2)
C(3B)	-2576(5)	3694(3)	662(3)	59(2)
C(4B)	-2854(6)	4109(4)	1285(3)	60(2)
C(5B)	-2570(5)	3608(4)	1868(3)	62(2)
C(6B)	-1055(5)	3304(3)	1833(2)	57(2)
C(7B)	-753(6)	2902(4)	101(3)	61(2)
C(8B)	132(8)	3170(6)	-345(4)	92(2)
C(9B)	449(9)	2755(7)	-905(4)	115(3)
C(10B)	-193(11)	2026(7)	-982(4)	125(4)
C(11B)	-1090(9)	1715(5)	-571(4)	101(2)
C(12B)	-1346(7)	2154(5)	-42(3)	80(2)
C(13B)	-725(5)	2761(4)	2389(3)	51(1)
C(14B)	123(6)	2986(4)	2882(3)	62(2)
C(15B)	395(7)	2545(5)	3419(3)	73(2)
C(16B)	-205(8)	1800(5)	3459(3)	85(2)
C(17B)	-1092(7)	1523(4)	2993(3)	78(2)
C(18B)	-1309(6)	2012(4)	2479(3)	65(2)
C(19B)	-2883(7)	4234(4)	103(3)	94(2)
C(20B)	-2816(6)	4085(4)	2470(3)	92(2)
O(1B)	-3192(5)	4807(3)	1306(2)	93(2)
F(1B)	-2221(4)	1849(2)	376(2)	101(1)
F(2B)	709(4)	3909(3)	-254(2)	118(2)
F(3B)	-2179(4)	1731(2)	2020(2)	87(1)
F(4B)	734(3)	3729(2)	2835(2)	84(1)

Table 3. Selected bond lengths [Å] and angles [°] for 3a.

N(1A)-C(2A)	1.463(6)	N(1A)-C(6A)	1.464(7)
C(2A)-C(7A)	1.529(7)	C(2A)-C(3A)	1.539(7)
C(3A)-C(4A)	1.492(8)	C(3A)-C(19A)	1.522(7)
C(4A)-O(1A)	1.223(6)	C(4A)-C(5A)	1.502(7)
C(5A)-C(20A)	1.511(7)	C(5A)-C(6A)	1.530(7)
C(6A)-C(13A)	1.495(7)	C(7A)-C(12A)	1.365(7)
C(7A)-C(8A)	1.381(7)	C(8A)-C(9A)	1.359(8)
C(8A)-F(2A)	1.362(6)	C(9A)-C(10A)	1.375(8)
C(10A)-C(11A)	1.356(8)	C(11A)-C(12A)	1.376(8)
C(12A)-F(1A)	1.365(6)	C(13A)-C(14A)	1.388(8)
C(13A)-C(18A)	1.389(8)	C(14A)-F(4A)	1.364(6)
C(14A)-C(15A)	1.365(8)	C(15A)-C(16A)	1.376(9)
C(16A)-C(17A)	1.369(9)	C(17A)-C(18A)	1.365(8)
C(18A)-F(3A)	1.357(7)	N(1B)-C(6B)	1.459(6)
N(1B)-C(2B)	1.472(7)	C(2B)-C(7B)	1.505(8)
C(2B)-C(3B)	1.544(7)	C(3B)-C(19B)	1.510(7)
C(3B)-C(4B)	1.515(7)	C(4B)-O(1B)	1.201(6)
C(4B)-C(5B)	1.510(8)	C(5B)-C(20B)	1.522(7)
C(5B)-C(6B)	1.559(7)	C(6B)-C(13B)	1.513(7)
C(7B)-C(8B)	1.362(8)	C(7B)-C(12B)	1.396(8)
C(8B)-F(2B)	1.358(8)	C(8B)-C(9B)	1.410(10)
C(9B)-C(10B)	1.367(11)	C(10B)-C(11B)	1.345(11)
C(11B)-C(12B)	1.362(9)	C(12B)-F(1B)	1.338(7)
C(13B)-C(14B)	1.371(7)	C(13B)-C(18B)	1.377(7)
C(14B)-F(4B)	1.369(6)	C(14B)-C(15B)	1.374(8)
C(15B)-C(16B)	1.366(9)	C(16B)-C(17B)	1.380(9)
C(17B)-C(18B)	1.368(8)	C(18B)-F(3B)	1.362(6)

C(2A)-N(1A)-C(6A)	112.6(5)	N(1A)-C(2A)-C(7A)	110.6(5)
N(1A)-C(2A)-C(3A)	114.0(4)	C(7A)-C(2A)-C(3A)	113.0(5)
C(4A)-C(3A)-C(19A)	113.6(5)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	107.5(5)
C(19A)-C(3A)-C(2A)	112.8(5)	O(1A)-C(4A)-C(3A)	120.8(6)
O(1A)-C(4A)-C(5A)	121.3(6)	C(3A)-C(4A)-C(5A)	117.7(5)
C(4A)-C(5A)-C(20A)	112.3(5)	C(4A)-C(5A)-C(6A)	108.0(5)
C(20A)-C(5A)-C(6A)	113.6(5)	N(1A)-C(6A)-C(13A)	110.9(5)
N(1A)-C(6A)-C(5A)	113.5(5)	C(13A)-C(6A)-C(5A)	113.8(5)
C(12A)-C(7A)-C(8A)	113.4(6)	C(12A)-C(7A)-C(2A)	123.5(5)
C(8A)-C(7A)-C(2A)	123.1(6)	C(9A)-C(8A)-F(2A)	118.7(6)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	124.7(6)	F(2A)-C(8A)-C(7A)	116.6(6)
C(8A)-C(9A)-C(10A)	118.2(6)	C(11A)-C(10A)-C(9A)	120.5(7)
C(10A)-C(11A)-C(12A)	118.0(6)	F(1A)-C(12A)-C(7A)	117.7(6)
F(1A)-C(12A)-C(11A)	117.3(6)	C(7A)-C(12A)-C(11A)	125.0(6)
C(14A)-C(13A)-C(18A)	112.5(6)	C(14A)-C(13A)-C(6A)	122.5(6)
C(18A)-C(13A)-C(6A)	124.9(6)	F(4A)-C(14A)-C(15A)	116.3(6)
F(4A)-C(14A)-C(13A)	116.7(6)	C(15A)-C(14A)-C(13A)	127.0(6)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	116.6(7)	C(17A)-C(16A)-C(15A)	120.2(6)
C(18A)-C(17A)-C(16A)	120.2(7)	F(3A)-C(18A)-C(17A)	119.7(7)
F(3A)-C(18A)-C(13A)	116.9(6)	C(17A)-C(18A)-C(13A)	123.4(6)
C(6B)-N(1B)-C(2B)	112.2(5)	N(1B)-C(2B)-C(7B)	109.1(5)
N(1B)-C(2B)-C(3B)	114.5(4)	C(7B)-C(2B)-C(3B)	111.3(5)
C(19B)-C(3B)-C(4B)	112.3(5)	C(19B)-C(3B)-C(2B)	113.6(5)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	107.8(5)	O(1B)-C(4B)-C(5B)	122.9(6)
O(1B)-C(4B)-C(3B)	121.3(6)	C(5B)-C(4B)-C(3B)	115.6(5)
C(4B)-C(5B)-C(20B)	111.9(5)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	107.3(4)
C(20B)-C(5B)-C(6B)	111.6(5)	N(1B)-C(6B)-C(13B)	109.8(5)
N(1B)-C(6B)-C(5B)	113.9(4)	C(13B)-C(6B)-C(5B)	110.1(4)
C(8B)-C(7B)-C(12B)	113.6(7)	C(8B)-C(7B)-C(2B)	123.1(7)
C(12B)-C(7B)-C(2B)	123.3(6)	F(2B)-C(8B)-C(7B)	117.2(7)
F(2B)-C(8B)-C(9B)	117.5(8)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	125.2(9)
C(10B)-C(9B)-C(8B)	115.1(9)	C(11B)-C(10B)-C(9B)	124.0(10)
C(10B)-C(11B)-C(12B)	117.3(9)	F(1B)-C(12B)-C(11B)	118.1(8)
F(1B)-C(12B)-C(7B)	117.1(6)	C(11B)-C(12B)-C(7B)	124.8(7)
C(14B)-C(13B)-C(18B)	112.5(6)	C(14B)-C(13B)-C(6B)	123.3(6)
C(18B)-C(13B)-C(6B)	124.0(5)	F(4B)-C(14B)-C(13B)	116.5(6)
F(4B)-C(14B)-C(15B)	117.2(6)	C(13B)-C(14B)-C(15B)	126.3(6)
C(16B)-C(15B)-C(14B)	117.0(6)	C(15B)-C(16B)-C(17B)	121.2(7)
C(18B)-C(17B)-C(16B)	117.3(7)	F(3B)-C(18B)-C(17B)	116.9(6)
F(3B)-C(18B)-C(13B)	117.4(6)	C(17B)-C(18B)-C(13B)	125.7(6)

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

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(1A)	47(3)	68(3)	65(4)	-2(3)	1(3)	-4(3)
C(2A)	43(3)	65(4)	61(4)	-9(3)	12(3)	0(3)
C(3A)	53(4)	58(4)	73(5)	-9(4)	8(3)	7(3)
C(4A)	47(4)	47(4)	79(5)	5(4)	11(3)	-6(3)
C(5A)	48(4)	61(4)	81(5)	2(4)	12(3)	-6(3)
C(6A)	42(3)	70(4)	54(4)	5(3)	6(3)	-4(3)
C(7A)	54(4)	68(4)	51(4)	-1(3)	6(3)	-1(3)
C(8A)	48(4)	69(4)	65(5)	-10(4)	1(3)	-8(3)
C(9A)	94(6)	65(4)	53(4)	-3(4)	8(4)	-20(4)
C(10A)	100(6)	75(5)	67(5)	-1(4)	-4(5)	9(5)
C(11A)	73(5)	87(5)	87(5)	2(5)	-16(4)	10(4)
C(12A)	48(4)	80(5)	71(5)	-5(4)	14(4)	1(4)
C(13A)	62(4)	49(4)	64(4)	5(3)	12(4)	-2(3)
C(14A)	70(5)	72(5)	63(5)	-4(4)	7(4)	1(4)
C(15A)	89(6)	74(5)	67(5)	-5(4)	0(4)	-3(4)
C(16A)	138(7)	59(5)	54(5)	-1(4)	22(5)	-7(5)
C(17A)	89(6)	70(5)	82(5)	-5(4)	34(5)	21(4)
C(18A)	71(5)	80(5)	62(5)	7(4)	15(4)	0(4)
C(19A)	74(5)	78(5)	91(5)	-7(4)	-5(4)	6(4)
C(20A)	75(4)	78(5)	70(5)	19(4)	11(3)	6(4)
O(1A)	87(3)	62(3)	90(3)	6(2)	8(2)	13(3)
F(1A)	55(2)	139(4)	105(3)	8(3)	15(2)	21(2)
F(2A)	50(2)	116(3)	82(3)	4(2)	10(2)	0(2)
F(3A)	55(2)	144(4)	93(3)	-10(3)	2(2)	21(2)
F(4A)	66(3)	120(3)	90(3)	-19(2)	-4(2)	0(2)
N(1B)	56(3)	61(4)	49(3)	1(3)	7(2)	-2(3)
C(2B)	57(4)	68(4)	54(4)	-2(3)	5(3)	-18(3)
C(3B)	50(4)	53(4)	73(4)	2(3)	-1(3)	-1(3)
C(4B)	59(4)	55(4)	66(4)	-8(4)	2(3)	4(3)
C(5B)	51(4)	64(4)	72(5)	-2(4)	9(3)	4(3)
C(6B)	54(4)	59(4)	57(4)	1(4)	-1(3)	-9(3)
C(7B)	51(4)	80(5)	52(4)	7(4)	3(3)	6(4)
C(8B)	82(6)	118(7)	76(6)	19(5)	8(4)	13(5)
C(9B)	111(7)	169(10)	66(6)	18(7)	23(5)	56(7)
C(10B)	146(10)	146(10)	81(7)	-6(7)	2(6)	76(8)
C(11B)	121(7)	108(6)	75(6)	-28(6)	-8(5)	25(5)
C(12B)	81(5)	100(6)	58(5)	-16(5)	3(4)	8(5)
C(13B)	46(4)	52(4)	56(4)	-2(3)	1(3)	-6(3)
C(14B)	51(4)	61(4)	74(5)	-5(4)	4(3)	-8(3)
C(15B)	76(5)	91(6)	53(5)	2(4)	-4(3)	17(4)
C(16B)	105(6)	79(6)	72(5)	11(5)	12(4)	31(5)
C(17B)	104(6)	67(5)	64(5)	14(4)	9(4)	4(4)
C(18B)	75(5)	71(5)	50(4)	-13(4)	6(3)	-11(4)
C(19B)	111(6)	90(5)	79(5)	17(4)	-12(4)	13(5)
C(20B)	79(5)	119(6)	78(5)	-10(5)	15(4)	27(4)
O(1B)	123(4)	62(3)	94(3)	-9(3)	-2(3)	20(3)
F(1B)	113(3)	87(3)	102(3)	-20(2)	1(3)	-15(2)
F(2B)	97(3)	143(4)	113(4)	42(3)	30(2)	-22(3)
F(3B)	103(3)	77(2)	81(3)	2(2)	-5(2)	-35(2)
F(4B)	79(3)	90(3)	84(3)	-9(2)	-10(2)	-22(2)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2586(54)	5915(31)	3872(24)	66(19)
H(2A)	285(5)	6454(3)	4327(3)	67
H(3A)	2795(6)	7243(3)	4412(3)	74
H(5A)	2834(6)	7188(4)	3161(3)	76
H(6A)	316(5)	6402(3)	3212(3)	66
H(9A)	197(8)	5248(4)	6253(3)	85
H(10A)	2458(9)	4745(4)	6427(3)	97
H(11A)	4125(7)	4960(4)	5668(4)	99
H(15A)	253(8)	5235(4)	1292(3)	92
H(16A)	2466(9)	4664(4)	1182(3)	100
H(17A)	4117(8)	4846(4)	1972(4)	96
H(19C)	1720(6)	8282(4)	4938(3)	97
H(19B)	325(6)	7807(4)	4916(3)	97
H(19A)	1556(6)	7487(4)	5333(3)	97
H(20B)	1776(6)	8206(4)	2560(3)	89
H(20A)	1699(6)	7362(4)	2224(3)	89
H(20C)	407(6)	7706(4)	2567(3)	89
H(1B)	-1039(46)	2400(30)	1254(22)	45(18)
H(2B)	-485(5)	3839(4)	711(3)	71
H(3B)	-3163(5)	3228(3)	637(3)	71
H(5B)	-3159(5)	3142(4)	1854(3)	75
H(6B)	-465(5)	3769(3)	1855(2)	68
H(9B)	1049(9)	2958(7)	-1224(4)	138
H(10B)	14(11)	1726(7)	-1357(4)	150
H(11B)	-1520(9)	1199(5)	-636(4)	122
H(15B)	970(7)	2755(5)	3753(3)	88
H(16B)	-4(8)	1467(5)	3820(3)	102
H(17B)	-1554(7)	1013(4)	3030(3)	94
H(19F)	-3830(7)	4397(4)	100(3)	112
H(19E)	-2306(7)	4705(4)	123(3)	112
H(19D)	-2696(7)	3937(4)	-276(3)	112
H(20F)	-3759(6)	4253(4)	2489(3)	110
H(20H)	-2602(6)	3744(4)	2825(3)	110
H(20D)	-2229(6)	4551(4)	2480(3)	110

Table 6. **Crystal data and structure refinement for 7a.**

Empirical formula	$C_{22}H_{21}F_4NO$
Formula weight	391.40
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	$P2_12_12_1$
Unit cell dimensions	a = 11.580(3) Å α = 90° b = 12.598(4) Å β = 90° c = 12.699(4) Å γ = 90°
Volume	1852.6(10) Å^3
Z	4
Density (calculated)	1.403 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.113 mm^{-1}
F(000)	816
Crystal size	0.5 x 0.5 x 0.4 mm
θ range for data collection	2.28 to 25.05°
Index ranges	$-13 \leq h \leq 13$, $0 \leq k \leq 15$, $0 \leq \ell \leq 15$
Reflections collected	3587
Independent reflections	3288 (R_{int} = 0.0249)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	3141 / 0 / 337
Goodness-of-fit on F^2	1.058
Final R indices [$I>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0289, wR2 = 0.0759
R indices (all data)	R1 = 0.0399, wR2 = 0.0793
Absolute structure parameter	0.1(5)
Largest diff. peak and hole	0.112 and -0.123 eÅ^{-3}

Table 7. 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)
O(1)	12962(1)	678(1)	1565(1)	63(1)
F(1)	8932(1)	2351(1)	3704(1)	57(1)
F(2)	9577(1)	2488(1)	52(1)	62(1)
F(3)	11327(1)	3378(1)	4958(1)	63(1)
F(4)	14190(1)	4270(1)	2488(1)	75(1)
C(1)	11039(2)	1030(1)	2183(1)	40(1)
C(2)	10638(1)	2211(1)	2026(1)	34(1)
N(3)	11077(1)	2966(1)	2793(1)	36(1)
C(4)	12328(1)	2909(1)	2906(1)	38(1)
C(5)	12826(1)	1766(1)	3110(1)	42(1)
C(6)	12438(2)	1230(2)	4142(2)	50(1)
C(7)	11160(2)	972(2)	4230(1)	51(1)
C(8)	10657(2)	499(1)	3220(2)	48(1)
C(9)	12350(2)	1101(1)	2212(1)	41(1)
C(10)	14149(2)	1806(2)	3071(2)	60(1)
C(11)	10629(2)	363(2)	1251(2)	52(1)
C(12)	12738(2)	3750(1)	3676(1)	42(1)
C(13)	12237(2)	3975(1)	4640(1)	48(1)
C(14)	12590(2)	4773(2)	5303(2)	61(1)
C(15)	13509(2)	5385(2)	5009(2)	68(1)
C(16)	14057(2)	5218(2)	4065(2)	67(1)
C(17)	13653(2)	4420(2)	3428(2)	53(1)
C(18)	9345(1)	2381(1)	1889(1)	36(1)
C(19)	8552(1)	2487(1)	2701(1)	43(1)
C(20)	7415(2)	2756(2)	2572(2)	57(1)
C(21)	7008(2)	2944(2)	1571(2)	64(1)
C(22)	7741(2)	2848(2)	724(2)	60(1)
C(23)	8870(2)	2561(1)	902(1)	44(1)

Table 8. Selected bond lengths [Å] and angles [°] for 7a.

O(1)-C(9)	1.209(2)	F(1)-C(19)	1.358(2)
F(2)-C(23)	1.357(2)	F(3)-C(13)	1.357(2)
F(4)-C(17)	1.360(3)	C(1)-C(9)	1.521(2)
C(1)-C(11)	1.527(2)	C(1)-C(8)	1.542(2)
C(1)-C(2)	1.571(2)	C(2)-N(3)	1.454(2)
C(2)-C(18)	1.522(2)	N(3)-C(4)	1.457(2)
C(4)-C(12)	1.518(2)	C(4)-C(5)	1.573(2)
C(5)-C(9)	1.518(2)	C(5)-C(10)	1.533(3)
C(5)-C(6)	1.540(3)	C(6)-C(7)	1.519(3)
C(7)-C(8)	1.529(3)	C(12)-C(13)	1.384(3)
C(12)-C(17)	1.391(3)	C(13)-C(14)	1.373(3)
C(14)-C(15)	1.366(4)	C(15)-C(16)	1.373(4)
C(16)-C(17)	1.372(3)	C(18)-C(19)	1.387(2)
C(18)-C(23)	1.387(2)	C(19)-C(20)	1.369(3)
C(20)-C(21)	1.376(3)	C(21)-C(22)	1.376(3)
C(22)-C(23)	1.375(3)		

C(9)-C(1)-C(11)	111.2(2)	C(9)-C(1)-C(8)	106.94(14)
C(11)-C(1)-C(8)	109.49(14)	C(9)-C(1)-C(2)	104.06(12)
C(11)-C(1)-C(2)	109.26(14)	C(8)-C(1)-C(2)	115.77(14)
N(3)-C(2)-C(18)	109.20(12)	N(3)-C(2)-C(1)	115.48(13)
C(18)-C(2)-C(1)	116.05(12)	C(2)-N(3)-C(4)	112.45(13)
N(3)-C(4)-C(12)	109.89(13)	N(3)-C(4)-C(5)	115.19(12)
C(12)-C(4)-C(5)	114.68(13)	C(9)-C(5)-C(10)	110.9(2)
C(9)-C(5)-C(6)	106.94(14)	C(10)-C(5)-C(6)	109.5(2)
C(9)-C(5)-C(4)	104.33(13)	C(10)-C(5)-C(4)	109.31(14)
C(6)-C(5)-C(4)	115.74(14)	C(7)-C(6)-C(5)	116.2(2)
C(6)-C(7)-C(8)	113.1(2)	C(7)-C(8)-C(1)	115.96(14)
O(1)-C(9)-C(5)	122.8(2)	O(1)-C(9)-C(1)	122.8(2)
C(5)-C(9)-C(1)	114.38(14)	C(13)-C(12)-C(17)	113.3(2)
C(13)-C(12)-C(4)	125.6(2)	C(17)-C(12)-C(4)	121.1(2)
F(3)-C(13)-C(14)	117.0(2)	F(3)-C(13)-C(12)	118.4(2)
C(14)-C(13)-C(12)	124.6(2)	C(15)-C(14)-C(13)	118.5(2)
C(14)-C(15)-C(16)	120.8(2)	C(17)-C(16)-C(15)	118.0(2)
F(4)-C(17)-C(16)	117.6(2)	F(4)-C(17)-C(12)	117.6(2)
C(16)-C(17)-C(12)	124.8(2)	C(19)-C(18)-C(23)	113.23(14)
C(19)-C(18)-C(2)	125.39(14)	C(23)-C(18)-C(2)	121.03(14)
F(1)-C(19)-C(20)	117.0(2)	F(1)-C(19)-C(18)	118.12(14)
C(20)-C(19)-C(18)	124.8(2)	C(19)-C(20)-C(21)	118.9(2)
C(20)-C(21)-C(22)	119.6(2)	C(23)-C(22)-C(21)	118.8(2)
F(2)-C(23)-C(22)	117.4(2)	F(2)-C(23)-C(18)	117.94(14)
C(22)-C(23)-C(18)	124.6(2)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 9. Anisotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 7a.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2$ [$(ha^*)^2U_{11}$ + ... + $2hka^*b^*U_{12}$]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O(1)	58(1)	72(1)	59(1)	-15(1)	9(1)	16(1)
F(1)	50(1)	81(1)	38(1)	4(1)	6(1)	5(1)
F(2)	64(1)	86(1)	37(1)	5(1)	-2(1)	-3(1)
F(3)	62(1)	73(1)	54(1)	-15(1)	11(1)	-13(1)
F(4)	66(1)	86(1)	72(1)	9(1)	8(1)	-31(1)
C(1)	47(1)	31(1)	40(1)	0(1)	2(1)	0(1)
C(2)	38(1)	32(1)	32(1)	2(1)	2(1)	-2(1)
N(3)	35(1)	35(1)	40(1)	-3(1)	-2(1)	0(1)
C(4)	37(1)	40(1)	38(1)	2(1)	0(1)	-2(1)
C(5)	38(1)	42(1)	46(1)	1(1)	-2(1)	6(1)
C(6)	59(1)	48(1)	44(1)	7(1)	-8(1)	7(1)
C(7)	66(1)	50(1)	39(1)	13(1)	3(1)	0(1)
C(8)	57(1)	36(1)	51(1)	10(1)	3(1)	-4(1)
C(9)	48(1)	36(1)	40(1)	4(1)	4(1)	7(1)
C(10)	42(1)	66(1)	72(1)	-7(1)	-2(1)	11(1)
C(11)	63(1)	41(1)	51(1)	-9(1)	0(1)	-3(1)
C(12)	40(1)	38(1)	48(1)	3(1)	-10(1)	-1(1)
C(13)	44(1)	46(1)	54(1)	-3(1)	-7(1)	0(1)
C(14)	68(1)	51(1)	63(1)	-12(1)	-17(1)	10(1)
C(15)	76(2)	43(1)	84(2)	-9(1)	-32(1)	-3(1)
C(16)	67(1)	47(1)	87(2)	7(1)	-27(1)	-17(1)
C(17)	51(1)	50(1)	59(1)	9(1)	-11(1)	-9(1)
C(18)	40(1)	30(1)	39(1)	1(1)	-2(1)	-6(1)
C(19)	44(1)	45(1)	39(1)	-1(1)	-2(1)	-4(1)
C(20)	38(1)	70(1)	62(1)	-2(1)	4(1)	-2(1)
C(21)	39(1)	79(1)	75(1)	2(1)	-11(1)	-3(1)
C(22)	52(1)	72(1)	57(1)	6(1)	-20(1)	-8(1)
C(23)	46(1)	46(1)	40(1)	-1(1)	-4(1)	-8(1)

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

	x	y	z	U(eq)
H(2)	11012(14)	2425(14)	1362(13)	33(4)
H(3)	10745(17)	2879(15)	3358(17)	43(5)
H(4)	12643(15)	3125(13)	2251(14)	39(4)
H(6B)	12874(21)	552(20)	4150(18)	65(6)
H(6A)	12720(18)	1672(17)	4699(17)	58(6)
H(7B)	10705(15)	1590(15)	4436(14)	37(4)
H(7A)	11118(20)	432(19)	4793(18)	64(6)
H(8B)	9849(19)	476(16)	3248(16)	50(5)
H(8A)	10913(17)	-248(17)	3171(16)	51(5)
H(10C)	14481(23)	1096(22)	3134(20)	77(7)
H(10B)	14443(23)	2235(23)	3617(22)	84(8)
H(10A)	14394(21)	2199(22)	2417(21)	74(7)
H(11C)	10835(17)	691(16)	563(17)	46(5)
H(11B)	9826(22)	252(19)	1258(19)	64(6)
H(11A)	10926(22)	-346(23)	1326(19)	76(7)
H(16)	12202(23)	4810(21)	5974(23)	78(8)
H(15)	13761(25)	5948(23)	5448(21)	82(7)
H(16)	14687(24)	5593(24)	3859(22)	84(8)
H(20)	6925(20)	2805(19)	3180(20)	72(7)
H(21)	6185(22)	3133(20)	1431(18)	71(7)
H(22)	7515(21)	3025(19)	-15(21)	76(7)