

C(16)-C(15)-C(14)	121.4(3)	C(36)-C(37)-C(38)	117.9(3)
C(17)-C(16)-C(15)	118.3(3)	C(33)-C(38)-C(37)	121.7(3)
C(18)-C(17)-C(16)	121.9(3)	O(11)-N(6)-O(12)	124.7(3)
C(18)-C(17)-N(3)	118.5(3)	O(11)-N(6)-C(36)	119.1(3)
C(16)-C(17)-N(3)	119.6(3)	O(12)-N(6)-C(36)	116.1(3)
C(17)-C(18)-C(19)	119.1(3)	C(40)-C(39)-C(44)	116.9(3)
C(18)-C(19)-C(14)	121.5(3)	C(40)-C(39)-C(26)	121.0(2)
O(5)-N(3)-O(6)	122.7(3)	C(44)-C(39)-C(26)	122.0(2)
O(5)-N(3)-C(17)	118.5(3)	C(39)-C(40)-C(41)	122.3(3)
O(6)-N(3)-C(17)	118.8(3)	C(42)-C(41)-C(40)	117.4(3)
C(21)-C(20)-C(25)	117.8(3)	C(43)-C(42)-C(41)	122.4(3)
C(21)-C(20)-C(1)	124.1(2)	C(43)-C(42)-N(7)	118.7(3)
C(25)-C(20)-C(1)	118.0(2)	C(41)-C(42)-N(7)	118.9(3)
C(22)-C(21)-C(20)	121.6(3)	C(42)-C(43)-C(44)	118.8(3)
C(23)-C(22)-C(21)	119.0(3)	C(43)-C(44)-C(39)	122.2(3)
C(24)-C(23)-C(22)	121.1(3)	O(13)-N(7)-O(14)	124.4(3)
C(24)-C(23)-N(4)	119.6(3)	O(13)-N(7)-C(42)	117.9(3)
C(22)-C(23)-N(4)	119.3(3)	O(14)-N(7)-C(42)	117.7(3)
C(23)-C(24)-C(25)	119.8(3)	C(46)-C(45)-C(50)	116.8(3)
C(24)-C(25)-C(20)	120.7(3)	C(46)-C(45)-C(26)	123.9(2)
O(7)-N(4)-O(8)	122.6(3)	C(50)-C(45)-C(26)	119.2(2)
O(7)-N(4)-C(23)	119.1(3)	C(47)-C(46)-C(45)	121.9(3)
O(8)-N(4)-C(23)	118.2(3)	C(48)-C(47)-C(46)	119.1(3)
C(39)-C(26)-C(45)	102.38(19)	C(47)-C(48)-C(49)	121.7(3)
C(39)-C(26)-C(27)	112.3(2)	C(47)-C(48)-N(8)	120.0(3)
C(45)-C(26)-C(27)	114.2(2)	C(49)-C(48)-N(8)	118.3(3)
C(39)-C(26)-C(33)	114.3(2)	C(50)-C(49)-C(48)	118.6(3)
C(45)-C(26)-C(33)	110.9(2)	C(49)-C(50)-C(45)	121.7(3)
C(27)-C(26)-C(33)	103.15(19)	O(15)-N(8)-O(16)	124.8(3)
C(32)-C(27)-C(28)	118.1(2)	O(15)-N(8)-C(48)	118.0(3)
C(32)-C(27)-C(26)	122.2(2)	O(16)-N(8)-C(48)	117.1(3)
C(28)-C(27)-C(26)	119.5(2)	C(57)-C(51)-C(52)	125.8(6)
C(29)-C(28)-C(27)	120.6(3)	C(57)-C(51)-C(56)	123.5(6)
C(30)-C(29)-C(28)	119.3(3)	C(52)-C(51)-C(56)	110.7(4)
C(31)-C(30)-C(29)	121.0(3)	C(53)-C(52)-C(58)	114.5(6)
C(31)-C(30)-N(5)	119.1(3)	C(53)-C(52)-C(51)	130.5(6)
C(29)-C(30)-N(5)	119.9(3)	C(58)-C(52)-C(51)	114.9(5)
C(32)-C(31)-C(30)	119.5(3)	C(54)-C(53)-C(52)	112.1(6)
C(31)-C(32)-C(27)	121.3(3)	C(53)-C(54)-C(55)	124.0(6)
O(10)-N(5)-O(9)	122.5(3)	C(56)-C(55)-C(54)	120.0(7)
O(10)-N(5)-C(30)	118.9(3)	C(55)-C(56)-C(51)	122.1(6)
O(9)-N(5)-C(30)	118.5(3)	C(60)-C(59)-C(65)	123.5(6)
C(38)-C(33)-C(34)	117.5(3)	C(60)-C(59)-C(64)	114.6(4)
C(38)-C(33)-C(26)	122.5(2)	C(65)-C(59)-C(64)	121.8(6)
C(34)-C(33)-C(26)	119.9(2)	C(66)-C(60)-C(59)	116.9(5)
C(35)-C(34)-C(33)	121.8(3)	C(66)-C(60)-C(61)	114.5(6)
C(36)-C(35)-C(34)	118.8(3)	C(59)-C(60)-C(61)	128.6(5)
C(35)-C(36)-C(37)	122.2(3)	C(62)-C(61)-C(60)	109.8(6)
C(35)-C(36)-N(6)	119.4(3)	C(61)-C(62)-C(63)	128.1(6)
C(37)-C(36)-N(6)	118.4(3)	C(64)-C(63)-C(62)	118.5(6)
		C(63)-C(64)-C(59)	119.7(6)

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **15**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2a^{*2}U^{11} + \dots + 2hka^*b^*U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	59(2)	47(2)	50(2)	-1(1)	3(1)	-4(1)
C(2)	65(2)	47(2)	50(2)	6(1)	6(1)	-9(1)
C(3)	88(2)	54(2)	56(2)	-3(2)	30(2)	1(2)
C(4)	96(2)	51(2)	66(2)	-1(2)	17(2)	-2(2)
C(5)	73(2)	61(2)	63(2)	-6(2)	11(2)	3(2)
C(6)	78(2)	73(2)	57(2)	-4(2)	23(2)	-2(2)
C(7)	66(2)	48(2)	69(2)	0(2)	17(2)	-7(2)
N(1)	108(2)	68(2)	81(2)	-15(2)	25(2)	1(2)
O(1)	175(2)	68(2)	109(2)	-20(1)	54(2)	7(2)
O(2)	203(3)	105(2)	84(2)	-21(2)	68(2)	-2(2)
C(8)	51(2)	49(2)	49(2)	2(1)	4(1)	3(1)
C(9)	65(2)	55(2)	65(2)	-8(2)	14(2)	-1(2)
C(10)	80(2)	62(2)	59(2)	-6(2)	13(2)	2(2)
C(11)	59(2)	64(2)	66(2)	5(2)	15(2)	12(2)
C(12)	54(2)	68(2)	77(2)	4(2)	3(2)	-2(2)
C(13)	65(2)	60(2)	58(2)	-5(2)	7(2)	-5(2)
N(2)	83(2)	96(2)	91(2)	-4(2)	34(2)	-5(2)
O(3)	74(2)	192(3)	118(2)	-2(2)	29(2)	-38(2)
O(4)	161(2)	186(3)	116(2)	-53(2)	80(2)	-36(2)
C(14)	57(2)	54(2)	49(2)	1(1)	2(1)	-4(2)
C(15)	72(2)	52(2)	71(2)	-4(2)	-4(2)	-11(2)
C(16)	61(2)	78(2)	57(2)	5(2)	-8(2)	3(2)
C(17)	77(2)	56(2)	54(2)	11(2)	7(2)	4(2)
C(18)	87(2)	53(2)	55(2)	-3(2)	-3(2)	0(2)
C(19)	94(2)	56(2)	47(2)	2(2)	1(2)	1(2)
N(3)	89(2)	77(2)	72(2)	14(2)	-5(2)	2(2)
O(5)	176(3)	93(2)	90(2)	16(2)	-50(2)	15(2)
O(6)	146(2)	62(1)	104(2)	19(2)	-21(2)	2(2)
C(20)	54(2)	46(2)	49(2)	-2(1)	0(1)	6(1)
C(21)	61(2)	72(2)	64(2)	3(2)	1(2)	-7(2)
C(22)	58(2)	73(2)	71(2)	-12(2)	14(2)	-7(2)
C(23)	54(2)	80(2)	70(2)	0(2)	1(2)	1(2)
C(24)	66(2)	77(2)	79(2)	15(2)	-2(2)	14(2)
C(25)	65(2)	62(2)	74(2)	8(2)	0(2)	-3(2)
N(4)	57(2)	132(3)	109(2)	11(2)	-1(2)	2(2)
O(7)	60(2)	211(3)	128(2)	13(2)	1(2)	-27(2)
O(8)	93(2)	238(4)	153(3)	81(3)	-44(2)	-23(2)
C(26)	51(2)	52(2)	51(2)	-1(1)	2(1)	-1(1)
C(27)	54(2)	64(2)	50(2)	-4(2)	7(1)	-1(2)
C(28)	55(2)	75(2)	59(2)	16(2)	1(1)	-4(2)
C(29)	67(2)	76(2)	64(2)	24(2)	4(2)	-2(2)
C(30)	58(2)	75(2)	51(2)	2(2)	-5(2)	5(2)
C(31)	51(2)	83(2)	62(2)	6(2)	9(2)	1(2)
C(32)	48(2)	88(2)	56(2)	6(2)	3(1)	4(2)

N(5)	64(2)	101(2)	75(2)	21(2)	-2(1)	8(2)
O(9)	58(1)	164(3)	108(2)	29(2)	-3(1)	6(2)
O(10)	93(2)	180(3)	96(2)	62(2)	-11(2)	13(2)
C(33)	45(1)	55(2)	53(2)	2(1)	1(1)	-2(1)
C(34)	56(2)	65(2)	55(2)	0(2)	14(1)	3(2)
C(35)	68(2)	74(2)	56(2)	-15(2)	8(2)	2(2)
C(36)	67(2)	50(2)	69(2)	-14(2)	-4(2)	9(2)
C(37)	66(2)	58(2)	67(2)	4(2)	2(2)	-7(2)
C(38)	67(2)	63(2)	50(2)	-1(2)	8(2)	-4(2)
N(6)	106(2)	72(2)	86(2)	-19(2)	6(2)	-2(2)
O(11)	194(3)	72(2)	118(2)	-18(2)	19(2)	-32(2)
O(12)	205(3)	129(2)	114(2)	-54(2)	65(2)	-37(2)
C(39)	54(2)	60(2)	51(2)	-2(1)	4(1)	-2(2)
C(40)	53(2)	70(2)	62(2)	-14(2)	12(1)	-4(2)
C(41)	73(2)	69(2)	56(2)	-15(2)	7(2)	-6(2)
C(42)	66(2)	67(2)	54(2)	-8(2)	16(2)	-7(2)
C(43)	50(2)	99(2)	64(2)	-14(2)	11(2)	-11(2)
C(44)	57(2)	95(2)	55(2)	-18(2)	4(2)	-5(2)
N(7)	76(2)	99(2)	76(2)	-22(2)	25(2)	9(2)
O(13)	67(1)	156(2)	110(2)	-32(2)	30(1)	-1(2)
O(14)	103(2)	184(3)	102(2)	-62(2)	41(2)	-7(2)
C(45)	53(2)	54(2)	57(2)	-2(1)	11(1)	-1(2)
C(46)	67(2)	61(2)	55(2)	-4(2)	6(2)	-5(2)
C(47)	85(2)	52(2)	70(2)	-9(2)	13(2)	-2(2)
C(48)	84(2)	52(2)	74(2)	8(2)	18(2)	14(2)
C(49)	66(2)	75(2)	84(2)	17(2)	-15(2)	3(2)
C(50)	58(2)	63(2)	76(2)	14(2)	-2(2)	2(2)
N(8)	116(2)	67(2)	117(3)	18(2)	5(2)	5(2)
O(15)	197(3)	64(2)	128(2)	14(2)	1(2)	-22(2)
O(16)	232(4)	117(2)	147(3)	55(2)	-63(3)	-28(3)
C(51)	100(3)	375(5)	65(2)	24(3)	-2(2)	-102(4)
C(52)	95(3)	357(5)	125(3)	60(3)	-21(3)	-77(4)
C(53)	114(3)	382(5)	128(3)	-19(4)	20(3)	-104(4)
C(54)	139(4)	413(6)	131(4)	40(4)	16(4)	-107(5)
C(55)	158(5)	365(6)	167(4)	81(5)	-12(4)	-118(5)
C(56)	109(3)	384(5)	143(4)	46(4)	22(3)	-94(4)
C(57)	177(5)	628(14)	76(3)	1(5)	1(4)	-138(8)
C(58)	163(6)	362(6)	432(9)	178(7)	-71(8)	-5(7)
C(59)	345(5)	102(3)	76(2)	17(3)	-1(3)	-97(4)
C(60)	320(5)	93(3)	147(3)	46(3)	-39(3)	-75(4)
C(61)	359(5)	116(4)	149(4)	3(4)	46(4)	-94(5)
C(62)	364(6)	142(4)	164(5)	7(4)	-18(4)	-118(5)
C(63)	306(5)	158(5)	174(4)	33(4)	-73(4)	-95(5)
C(64)	348(5)	107(3)	151(4)	1(4)	-31(4)	-95(4)
C(65)	604(14)	162(5)	81(3)	12(4)	-4(5)	-106(8)
C(66)	308(6)	176(6)	465(9)	126(7)	-149(7)	17(7)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 15.

	x	y	z	U(eq)					
H(3)	4853	2008	6187	77	H(62)	7481	3032	7020	273
H(4)	4649	2975	6566	85	H(63)	8494	2957	6716	266
H(6)	3959	1677	7365	82	H(64)	8369	2773	6049	249
H(7)	4183	702	6982	72	H(65A)	7667	2968	5443	430
H(9)	4920	-15	5616	74	H(65B)	7021	3506	5437	430
H(10)	5831	95	5222	80	H(65C)	6876	2680	5436	430
H(12)	6853	1478	5986	80	H(66A)	5716	3343	6139	500
H(13)	5940	1370	6382	73	H(66B)	5923	2872	5791	500
H(15)	5570	462	6976	80	H(66C)	6077	3696	5797	500
H(16)	5981	-519	7356	80					
H(18)	4898	-1813	6557	79					
H(19)	4478	-837	6186	80					
H(21)	3494	-201	6372	79					
H(22)	2406	-295	5975	80					
H(24)	3089	1104	5228	90					
H(25)	4177	1203	5625	81					
H(28)	9992	-108	6978	75					
H(29)	11061	-436	7354	83					
H(31)	12179	463	6562	79					
H(32)	11122	782	6187	77					
H(34)	10155	214	5611	70					
H(35)	9949	-776	5217	79					
H(37)	8731	-1620	5981	77					
H(38)	8980	-633	6388	72					
H(40)	9758	1264	6985	73					
H(41)	8859	1610	7359	79					
H(43)	7384	710	6559	85					
H(44)	8276	398	6187	83					
H(46)	10523	1821	6377	73					
H(47)	10533	2808	5980	83					
H(49)	8944	1962	5226	93					
H(50)	8941	968	5620	80					
H(53)	2839	952	3297	249					
H(54)	2564	2005	2970	273					
H(55)	2565	3078	3295	280					
H(56)	2552	3098	3951	254					
H(57A)	2851	2544	4558	443					
H(57B)	3389	1898	4567	443					
H(57C)	2558	1759	4560	443					
H(58A)	3091	449	3850	492					
H(58B)	2705	729	4202	492					
H(58C)	3528	890	4191	492					
H(61)	6345	3225	6707	248					