TABLES

SUPPLEMENTARY MATERIAL

TABLE 9. Transition State (TS2) of the Reaction of Aminodichloroborane with Ammonia: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl(2)	1.752
B-Cl(3)	2.630
B-N(1)	1.398
B-N(7)	1.545
N(1)-H(8,9)	1.008
N(7)-H(4,5)	1.016
N(7)-H(6)	1.104
Cl-H(6)	1.794
∠(N(1)-B-Cl(2))	122.5
∠(Cl(3)-B-Cl(2))	105.2
∠(N(7)-H(6)-Cl(3))	140.0
∠(H(4)-N-H(5))	109.9
∠(H(9)-N(2)-H(8))	112.0
∠(B-N(2)-H(9))	118.0
∠(H(5)-N-H(6))	112.2
Θ(N(7)-Cl(2)-B-N(1))	157.7
Θ(Cl(2)-B-N(1)-H(9))	25.5

TABLE 10.: Diaminochloroborane Ammonia Adduct (AD3): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	1.910
B-N(1,2)	1.484
B-N(3)	1.665
N(3)-H(8,9,10)	1.016
N(1)-H(4)	1.008
N(1)-H(5)	1.010
N(2)-H(6)	1.011
N(2)-H(7)	1.012
∠(N(1)-B-Cl)	111.7
∠(N(2)-B-Cl)	117.0
∠(N(2)-B-Cl)	99.6
∠(N(1)-B-N(2))	115.6
∠(N(1)-B-N(3))	105.9
∠(H(4)-N(1)-H(5))	110.0
∠(H(6)-N(2)-H(7))	107.2
∠(H(8)-N(3)-H(9))	108.5
∠(H(8)-N(3)-H(10))	109.0
Θ(Cl-B-N(3)-H(8))	61.9
Θ(N(1)-B-N(3)-H(10))	63.7
Θ(H(4)-N(1)-B-Cl)	8.8
Θ(H(7)-N(2)-B-Cl)	37.2
Θ(N(3)-B-N(1)-H(4)	116.4
Θ(N(3)-B-N(1)-H(5)	–114.9
Θ(N(3)-B-N(2)-H(6)	165.4
Θ(N(3)-B-N(2)-H(7)	–72.0

...

TABLE 10.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP

TABLE 11. Transition State (TS3) of the Reaction of Diaminochloroborane with Ammonia: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	2.560
B-N(1,2)	1.425
B-N(3)	1.573
N(1,2)-H	1.009
N(3)-H(8,9)	1.016
N(3)-H(10)	1.054
Cl-H(10)	1.966
∠(N(1,2)-B-Cl)	106.3
∠(N(3)-H(10)-Cl)	129.9
∠(H(4,6)-N(1,2)-H(5,7))	109.3
∠(B-N(1)-H(5))	116.6
∠(B-N(1)-H(4))	116.5
∠(H(9)-N(3)-H(10))	111.8
Θ(N(3)-N(1)-B-N(2))	149.8
Θ(N(1)-B-N(2)-H(7))	163.7

TABLE 12. Van der Waals Complex (ComA) between two ADCB molecules: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	1.766
B-N	1.389
B-N	3.229
N-H	1.007
∠(N-B-Cl)	120.1
∠(Cl-B-Cl)	119.9
∠(H-N-H)	115.5
∠(B-N-B)	83.0
∠(N-B-N)	97.0
Θ(B-N-B-N)	0.1

TABLE 13.: Transition State (TS A) of the Dimerization of ADCB: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1)-Cl(5,6)	1.804
B(3)-Cl(7,8)	1.749
B(1)-N(2)	1.440
B(1)-N(4)	2.036
B(3)-N(4)	1.447
B(3)-N(2)	2.554
N(2)-H(9)	1.016
N(2)-H(10)	1.016
N(4)-H(11)	1.008
N(4)-H(12)	1.013
∠(N(2)-B(1)-Cl(5))	116.8
∠(N(4)-B(3)-Cl(7))	118.9
∠(Cl(7)-B(3)-Cl(8))	121.8
∠(Cl(5)-B(1)-Cl(6))	121.8
∠(H(9)-N(2)-H(10))	112.7
∠(H(11)-N(4)-H(12))	111.5
∠(B(1)-N(4)-B(3))	98.1
∠(B(1)-N(2)-B(3))	78.0
∠(N(2)-B(3)-N(4))	81.3
∠(H(9)-N(2)-B(1))	117.7
∠(H(11)-N(4)-B(3))	116.3
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	0.8
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	0.5
Θ(H(9)-N(2)-B(1)-Cl(5))	3.8
Θ(H(11)-N(4)-B(3)-Cl(7))	19.8

...

TABLE 13.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP

TABLE 14.: Aminodichloroborane Dimer, $[ADCB]_2$: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	1.813
B-N	1.596
N-H	1.016
∠(N-B-Cl)	120.0
∠(Cl-B-Cl)	116.7
∠(H-N-H)	109.3
∠(B-N-B)	88.3
Θ(B-N-B-N)	0.0

TABLE 15. Aminodichloroborane Trimer, $[ADCB]_3$: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl_{ax}	1.808
B-Cl_{eq}	1.850
B-N	1.582
N-H	1.022
∠(N-B-Cl_{ax})	110.8
∠(N-B-Cl_{eq})	106.8
∠(Cl-B-Cl)	113.2
∠(H-N-H)	104.5
∠(B-N-B)	121.9
∠(N-B-N)	108.2
Θ(B-N-B-N)	-43.1

TABLE 16.: Van der Waals Complex between two DACB molecules, Conformer 1 (ComD1): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1,3)-Cl(6,8)	1.788
B(1,3)-N(5,7)	1.426
B(1,3)-N(2,4)	1.405
B(1)-N(4)	3.311
B(3)-N(2)	3.304
N(2,4)-H(9,12)	1.005
N(2,4)-H(10,11)	1.008
N(5,7)-H(13,15)	1.007
N(5,7)-H(14,16)	1.008
∠(N(2,4)-B(1,3)-Cl(6,8))	119.1
∠(N(2,4)-B(1,3)-N(5,7))	123.3
∠(N(7,5)-B(3,1)-Cl(8,6))	117.6
∠(H(9,11)-N(2,4)-H(10,12))	114.2
∠(H(13,16)-N(5,7)-H(14,15))	112.7
∠(B(1)-N(4)-B(3))	89.7
∠(B(1)-N(2)-B(3))	90.0
∠(N(2)-B(3)-N(4))	87.6
∠(H(9)-N(2)-B(1))	121.0
∠(H(11)-N(4)-B(3))	114.2
∠(H(14)-N(5)-B(1))	118.4
∠(H(15)-N(7)-B(3))	117.7
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	26.8
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	11.0
Θ(N(5)-B(1)-N(2)-H(9))	169.7
...	

TABLE 16.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
Θ(N(7)-B(3)-N(4)-H(11))	15.0
Θ(H(13,15)-N(5,7)-B(1,3)-Cl(6,8))	18.9
Θ(Cl(6)-B(1)-N(5)-N(2))	178.7
Θ(N(4)-N(7)-B(3)-Cl(8))	178.7
Θ(H(14,16)-B(1,3)-N(5,7)-H(13,15))	142.7
Θ(H(11,10)-B(3,1)-N(4,2)-H(12,19))	154.8

TABLE 17.: Van der Waals Complex between two DACB molecules, Conformer 2 (ComD2): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1)-Cl(5)	1.793
B(3)-Cl(8)	1.795
B(1)-N(6)	1.417
B(3)-N(7)	1.458
B(1)-N(2)	1.415
B(1)-N(4)	3.209
B(3)-N(4)	1.409
B(3)-N(2)	3.261
N(2)-H(9)	1.005
N(2)-H(10)	1.007
N(4)-H(11)	1.007
N(4)-H(12)	1.006
N(6)-H(13)	1.005
N(6)-H(14)	1.007
N(7)-H(15)	1.005
N(7)-H(16)	1.006
∠(N(2)-B(1)-Cl(5))	118.2
∠(N(2)-B(1)-N(6))	124.1
∠(N(4)-B(3)-Cl(8))	118.1
∠(N(4)-B(3)-N(7))	124.3
∠(N(7)-B(3)-Cl(8))	117.7
∠(N(6)-B(1)-Cl(5))	117.7
∠(H(9)-N(2)-H(10))	113.1
∠(H(11)-N(4)-H(12))	112.9
...	

TABLE 17.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(H(13)-N(6)-H(14))	113.6
∠(H(16)-N(7)-H(15))	113.8
∠(B(1)-N(4)-B(3))	88.7
∠(B(1)-N(2)-B(3))	86.6
∠(N(2)-B(3)-N(4))	91.2
∠(H(9)-N(2)-B(1))	120.1
∠(H(11)-N(4)-B(3))	121.1
∠(H(14)-N(6)-B(1))	120.8
∠(H(15)-N(7)-B(3))	120.6
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	2.3
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	1.0
Θ(H(9)-N(2)-B(1)-Cl(5))	15.4
Θ(H(11)-N(4)-B(3)-N(7))	12.5
Θ(H(13)-N(6)-B(1)-Cl(5))	16.1
Θ(Cl(8)-B(3)-N(7)-H(15))	14.6

TABLE 18.: Transition State, Conformer 1 (TS D1), in the Course of DACB Dimerization: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1)-Cl(6)	1.770
B(3)-Cl(8)	1.892
B(1)-N(5)	1.394
B(3)-N(7)	1.495
B(1)-N(2)	1.522
B(1)-N(4)	2.382
B(3)-N(4)	1.502
B(3)-N(2)	1.654
N(2)-H(9,10)	1.017
N(4)-H(11,12)	1.011
N(5)-H(13)	1.006
N(5)-H(14)	1.013
N(7)-H(15,16)	1.013
∠(N(2)-B(1)-Cl(6))	118.0
∠(N(2)-B(1)-N(5))	117.2
∠(N(4)-B(3)-Cl(8))	114.6
∠(N(4)-B(3)-N(7))	113.2
∠(N(7)-B(3)-Cl(8))	116.1
∠(N(5)-B(1)-Cl(6))	122.6
∠(H(9)-N(2)-H(10))	107.9
∠(H(11)-N(4)-H(12))	108.6
∠(H(13)-N(5)-H(14))	115.7
∠(H(16)-N(7)-H(15))	106.2
∠(B(1)-N(4)-B(3))	74.4

...

TABLE 18.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(B(1)-N(2)-B(3))	101.0
∠(N(2)-B(3)-N(4))	100.9
∠(H(9)-N(2)-B(1))	113.2
∠(H(11)-N(4)-B(3))	115.5
∠(H(14)-N(5)-B(1))	117.0
∠(H(15)-N(7)-B(3))	112.7
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	33.0
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	20.8
Θ(H(9)-N(2)-B(1)-N(5))	42.2
Θ(H(11)-N(4)-B(3)-N(7))	22.5
Θ(Cl(6)-B(1)-N(5)-H(13))	18.6
Θ(Cl(8)-B(3)-N(7)-H(15))	33.1

TABLE 19.: Transition State, Conformer 2 (TS D2), in the Course of DACB Dimerization: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1)-Cl(5)	1.774
B(3)-Cl(8)	1.859
B(1)-N(6)	1.396
B(3)-N(7)	1.458
B(1)-N(2)	1.460
B(1)-N(4)	2.881
B(3)-N(4)	1.440
B(3)-N(2)	2.030
N(2)-H(9,10)	1.013
N(4)-H(11)	1.006
N(4)-H(12)	1.005
N(6)-H(13)	1.005
N(6)-H(14)	1.008
N(7)-H(15,16)	1.009
∠(N(2)-B(1)-Cl(5))	118.5
∠(N(2)-B(1)-N(6))	121.0
∠(N(4)-B(3)-Cl(8))	113.8
∠(N(4)-B(3)-N(7))	119.4
∠(N(7)-B(3)-Cl(8))	118.8
∠(N(6)-B(1)-Cl(5))	120.6
∠(H(9)-N(2)-H(10))	110.2
∠(H(11)-N(4)-H(12))	113.7
∠(H(13)-N(6)-H(14))	114.9
∠(H(16)-N(7)-H(15))	109.6

...

TABLE 19.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(B(1)-N(4)-B(3))	73.2
∠(B(1)-N(2)-B(3))	106.8
∠(N(2)-B(3)-N(4))	104.5
∠(H(9)-N(2)-B(1))	115.3
∠(H(11)-N(4)-B(3))	120.2
∠(H(14)-N(6)-B(1))	120.9
∠(H(15)-N(7)-B(3))	116.7
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	25.9
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	12.8
Θ(Cl(5)-B(1)-N(2)-H(9))	13.3
Θ(H(11)-N(4)-B(3)-N(7))	9.4
Θ(Cl(5)-B(1)-N(6)-H(13))	7.2
Θ(H(15)-N(7)-B(3)-Cl(8))	17.8

TABLE 20.: Diaminochloroborane Dimer, Conformer 1 ([DACB]$_2$ Conf.1): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(5)-Cl	1.833
B(6)-Cl	1.826
B(5)-N(4)	1.589
B(5)-N(3)	1.588
B(6)-N(4)	1.607
B(6)-N(3)	1.638
N(3,4)-H	1.015
B(5)-N(1)	1.479
B(6)-N(2)	1.464
N(1)-H	1.013
N(2)-H(7)	1.011
N(2)-H(8)	1.008
∠(N(2)-B(6)-Cl)	114.5
∠(N(1)-B(5)-Cl)	119.9
∠(N(3)-B(5)-N(4))	92.0
∠(N(3)-B(6)-N(4))	89.6
∠(B(5)-N(4)-B(6))	88.5
∠(B(5)-N(3)-B(6))	87.5
∠(H-N(3,4)-H)	109.2
∠(H(7)-N(1)-H(8))	106.7
∠(H-N(2)-H)	111.1
∠(N(1)-B(5)-N(3))	110.3
∠(N(2)-B(6)-N(3))	117.1
∠(N(1)-B(5)-N(4))	110.5
∠(N(2)-B(6)-N(4))	111.2
...	

TABLE 20.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
Θ(N(3)-B(5)-N(4)-B(6))	11.7
Θ(N(4)-B(6)-N(3)-B(5))	11.3
Θ(Cl-B(5)-N(1)-H)	60.6
Θ(Cl-B(6)-N(2)-H(8))	36.5
Θ(Cl-B(6)-N(2)-H(7))	170.2
Θ(Cl-B(6)-B(5)-Cl)	3.1

TABLE 21. Diaminochloroborane Dimer, Conformer 2 ([DACB]$_2$ Conf.2): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	1.864
B-N	1.599
B-N(1)	1.471
N-H	1.015
N(1)-H	1.012
∠(N(1)-B-Cl)	120.1
∠(N-B-N)	92.6
∠(B-N-B)	87.4
∠(H-N(1)-H)	107.3
∠(H-N-H)	110.7
Θ(B-N-B-N)	0.4
Θ(Cl-B-B-Cl)	120.0
Θ(H-N(1)-B-Cl)	61.0
Θ(H-N-B-Cl)	134.0

TABLE 22.: Diaminochloroborane Trimer, Conformer 1 ([DACB]$_3$ Conf.1): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl	1.871
B-N	1.478
B(6,5,4)-N(3,2,1)	1.583
B(6,5,4)-N(2,1,3)	1.602
N-H(1)	1.009
N-H(2)	1.013
N(1,2,3)-H	1.020
∠(N(1,2,3)-B-N(2,3,1))	104.8
∠(B-N-(1,2,3)-B)	117.3
∠(Cl-B-N)	113.6
∠(H-N-H)	110.5
∠(H-N(1,2,3)-H)	104.8
∠(Cl-B(5,6,4)-N(1,2,3))	105.6
∠(Cl-B(6,5,4)-N(3,2,1))	108.2
∠(N-B(6,5,4)-N(3,2,1))	112.9
∠(N-B(5,6,4)-N(1,2,3))	111.2
Θ(N(2,3,1)-B-N(1,2,3)-B)	56.4
Θ(B(4,5,6)-N(1,2,3)-B(5,6,4)-Cl))	170.6
Θ(H(1)-N-B(6)-Cl)	2.4
Θ(H(1)-N-B(4,5)-Cl)	3.1
Θ(H(2)-N-B(5)-N(2))	9.3
Θ(H(2)-N-B(4,6)-N(2))	8.5
Θ(N(1,2,3)-B-N(2,3,1)-B)	56.1
Θ(Cl-B(4,5,6)-N(1,2,3)-B(5,6,4))	168.5
Θ(N-B(5,6,4)-N(1,2,3)-B(4,5,6))	65.9
...	

TABLE 22.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
Θ(B(5,6,4)-N(1,2,3)-B(4,5,6)-N)	65.0

TABLE 23.: Diaminochloroborane Trimer, Conformer 2 ([DACB]$_3$ Conf.2): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B-Cl(1)	1.875
B-Cl(2)	1.868
B-Cl(3)	1.908
B(1)-N(1)	1.583
B(2)-N(2)	1.586
B(3)-N(3)	1.590
B(2)-N(1)	1.609
B(3)-N(2)	1.571
B(1)-N(3)	1.591
B(2)-N(4)	1.467
B(3)-N(5)	1.468
B(1)-N(6)	1.490
H-N(1,2,3)	1.020
H-N(6)	1.014
H-N(5)	1.011
H(8)-N(4)	1.012
H(7)-N(4)	1.009
∠(N(1)-B(2)-N(2))	104.2
∠(N(2)-B(3)-N(3))	107.3
∠(N(3)-B(1)-N(1))	109.8
∠(B(1)-N(1)-B(2))	122.1
∠(B(2)-N(2)-B(3))	116.7
∠(B(3)-N(3)-B(1))	121.5
∠(Cl(1)-B(1)-N(6))	116.8
∠(Cl(2)-B(2)-N(4))	111.5
...	

TABLE 23.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(Cl(3)-B(3)-N(5))	116.9
∠(H-N(1,3)-H)	105.5
∠(H-N(2)-H)	104.6
∠(H-N(4)-H)	111.2
∠(H-N(5)-H)	108.4
∠(H-N(6)-H)	105.9
Θ(B(3)-N(3)-B(1)-N(1))	32.8
Θ(N(1)-B(2)-N(4)-H(7))	84.7
Θ(N(2)-B(3)-N(5)-H)	168.9
Θ(H-N(6)-B(1)-Cl(1))	60.5

TABLE 24.: Van der Waals Complex (ComT) between two TAB molecules: Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1,3)-N(6,8)	1.433
B(1,3)-N(5,7)	1.453
B(1,3)-N(2,4)	1.427
B(1)-N(4)	3.703
B(3)-N(2)	3.708
N(2,4)-H(9,11)	1.012
N(2,4)-H(10,12)	1.006
N(5,7)-H(15,16,19,20)	1.008
N(6,8)-H(13,14,17,18)	1.005
∠(N(2,4)-B(1,3)-N(6,8))	121.6
∠(N(2,4)-B(1,3)-N(5,7))	118.7
∠(N(7,5)-B(3,1)-N(8,6))	119.6
∠(H(9,11)-N(2,4)-H(10,12))	112.8
∠(H(15,19)-N(5,7)-H(16,20))	109.9
∠(H(17,13)-N(6,8)-H(18,14))	112.4
∠(B(1)-N(4)-B(3))	95.4
∠(B(1)-N(2)-B(3))	95.2
∠(N(2)-B(3)-N(4))	84.3
∠(H(9)-N(2)-B(1))	119.1
∠(H(11)-N(4)-B(3))	118.9
∠(H(20)-N(5)-B(1))	117.6
∠(H(15)-N(7)-B(3))	117.6
∠(H(13)-N(6)-B(1))	117.6
∠(H(17)-N(8)-B(3))	121.0
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	10.7
...	

TABLE 24.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	4.1
Θ(N(5)-B(1)-N(2)-H(9))	23.8
Θ(N(7)-B(3)-N(4)-H(11))	23.5
Θ(H(13,15)-N(5,7)-B(1,3)-Cl(6,8))	18.9
Θ(Cl(6)-B(1)-N(5)-N(2))	178.7
Θ(N(4)-N(7)-B(3)-Cl(8))	178.7
Θ(H(19,16)-N(5,7)-B(1,3)-H(20,15))	132.7
Θ(H(11,10)-B(3,1)-N(4,2)-H(12,9))	146.7

TABLE 25.: Transition State for the Dimerization of TAB (TS T): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(1)-N(6)	1.439
B(3)-N(8)	1.510
B(1)-N(5)	1.446
B(3)-N(7)	1.508
B(1)-N(2)	1.543
B(1)-N(4)	2.106
B(3)-N(4)	1.558
B(3)-N(2)	1.654
N(2)-H(9,10)	1.016
N(4)-H(11,12)	1.013
N(6)-H(13)	1.008
N(6)-H(14)	1.011
N(7)-H(15)	1.014
N(7)-H(16)	1.012
N(8)-H(17)	1.014
N(8)-H(18)	1.012
N(5)-H(19,20)	1.008
∠(N(2)-B(1)-N(6))	117.3
∠(N(2)-B(1)-N(5))	113.1
∠(N(4)-B(3)-N(8))	109.5
∠(N(4)-B(3)-N(7))	119.2
∠(N(7)-B(3)-N(8))	116.4
∠(N(5)-B(1)-N(6))	121.6
∠(H(9)-N(2)-H(10))	107.1
∠(H(11)-N(4)-H(12))	107.8
...	

TABLE 25.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(H(19)-N(5)-H(20))	109.8
∠(H(16)-N(7)-H(15))	107.4
∠(H(13)-N(6)-H(14))	111.8
∠(H(17)-N(8)-H(18))	107.1
∠(B(1)-N(4)-B(3))	74.4
∠(B(1)-N(2)-B(3))	81.4
∠(N(2)-B(3)-N(4))	96.0
∠(H(9)-N(2)-B(1))	113.6
∠(H(11)-N(4)-B(3))	114.7
∠(H(20)-N(5)-B(1))	116.8
∠(H(15)-N(7)-B(3))	112.7
Θ(N(4)-B(3)-N(2)-B(1))	18.1
Θ(N(2)-B(3)-N(4)-B(1))	13.2
Θ(H(9)-N(2)-B(1)-N(5))	1.6
Θ(H(11)-N(4)-B(3)-N(7))	2.5
Θ(H(20)-N(5)-B(1)-N(6))	34.2
Θ(N(8)-B(3)-N(7)-H(15))	50.3
Θ(N(5)-B(1)-N(6)-H(13))	37.4
Θ(N(7)-B(3)-N(8)-H(17))	33.3

TABLE 26.: Triaminoborane Dimer ($[TAB]_2$): Bond Lengths (Å) and Angles (°)

coordinate	RI-MP2//TZVP
B(5)-N(4)	1.590
B(5)-N(3)	1.611
B(6)-N(4)	1.634
B(6)-N(3)	1.645
N(3,4)-H	1.014
B(5)-N(1)	1.514
B(6)-N(2)	1.483
B(5)-N(9)	1.507
B(6)-N(10)	1.490
N(1)-H	1.014
N(2)-H(7)	1.013
N(2)-H(8)	1.011
N(9)-H(11,12)	1.013
N(10)-H(13)	1.009
N(10)-H(14)	1.011
∠(N(2)-B(6)-N(10))	117.9
∠(N(1)-B(5)-N(9))	125.0
∠(N(3)-B(5)-N(4))	92.0
∠(N(3)-B(6)-N(4))	89.1
∠(B(5)-N(4)-B(6))	88.8
∠(B(5)-N(3)-B(6))	87.8
∠(H-N(3)-H)	109.9
∠(H-N(4)-H)	110.1
∠(H(7)-N(2)-H(8))	106.1
∠(H-N(1)-H)	111.1
...	

TABLE 26.: (cont.)

coordinate	RI-MP2//TZVP
∠(H(11)-N(9)-H(12))	106.8
∠(H(13)-N(10)-H(14))	109.1
∠(N(1)-B(5)-N(3))	107.2
∠(N(2)-B(6)-N(3))	115.4
∠(N(1)-B(5)-N(4))	108.1
∠(N(2)-B(6)-N(4))	107.3
∠(N(9)-B(5)-N(3))	109.5
∠(N(10)-B(6)-N(3))	110.6
∠(N(9)-B(5)-N(4))	109.9
∠(N(10)-B(6)-N(4))	112.9
Θ(N(3)-B(5)-N(4)-B(6))	11.6
Θ(N(4)-B(6)-N(3)-B(5))	11.2
Θ(N(9)-B(5)-N(1)-H)	52.9
Θ(N(10)-B(6)-N(2)-H(8))	50.6
Θ(N(10)-B(6)-N(2)-H(7))	179.2
Θ(N(10)-B(6)-B(5)-N(9))	1.4
Θ(N(1)-B(5)-N(9)-H(11))	45.6
Θ(H(13)-N(10)-B(6)-N(2))	109.2
Θ(N(2)-B(6)-N(10)-H(14))	19.8