

Full Paper submitted to Dalton Transactions

Novel Inorganic Heterocycles from Dimetalated Carboranylamidates[†]

Nicole Harmgarth,[‡] Daniel Gräsing,[‡] Peter Dröse,[‡] Cristian G. Hrib,[‡] Peter G. Jones,[§] Volker Lorenz,[‡] Liane Hilfert[‡], Sabine Busse[‡] and Frank T. Edelmann^{*‡}

[‡]*Chemisches Institut der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg, Germany*

[§]*Institut für Anorganische und Analytische Chemie der TU Braunschweig, Hagenring 30, 38106 Braunschweig, Germany*

Electronic supplementary information (ESI)

Complete IR data,

ORTEP drawings and additional X-ray data for compounds

2b, 3b, 4b, 5, 6, 7, 10, 12, and 13.

Complete IR data data for compounds 2b, 3b, 4b, 5, 6, 7, 10, 12, and 13.

(*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NH^{*i*}Cy)(=N^{*i*}Cy)- κ^2 C,N)Li(THF)₂ (2b). IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3404 w (NH), 3388 m, 3068 m, 2981 m, 2931 vs (ν -CH₂-), 2881 s (ν -CH-), 2854 s (ν -CH₂-), 2653 w, 2626 m, 2547 vs (B-H), 1663 s (C=N), 1637 vs, 1505 vs, 1464 m (δ -CH₂-), 1451 s, 1360 w, 1345 m, 1309 m, 1298 w, 1274 m, 1252 m, 1233 m, 1177 m, 1148 m, 1085 m, 1076 m, 1051 vs (ν C-O), 976 m, 916 m, 888 s, 848 w, 841 m, 826 m, 789 w, 778 w, 736 m, 727 m, 706 w, 672 w, 635 w, 611 m, 592 w, 555 w, 543 m, 502 m, 478 m, 453 m, 442 m, 427 m, 408 m.

***o*-C₂B₁₀H₁₁C(NH^{*i*}Cy)(=N^{*i*}Cy) (3b).** IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3385 m (NH), 3067 m, 2930 vs (ν -CH₂-), 2855 s (ν -CH₂-), 2526 vs (BH), 2115 m, 1660 m (C=N), 1618 vs, 1558 s, 1500 m, 1449 s (δ -CH₂-), 1388 m, 1348 m, 1306 m, 1253 m, 1233 m, 1192 m, 1175 m, 1149 m, 1016 s, 975 s, 923 m, 891 s, 842 w, 810 w, 719 m, 669 w.

***o*-C₂B₁₀H₁₀C(N^{*i*}Pr)(=N^{*i*}Pr)Li₂(DME)₂ (4a).** IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 303 m, 2961 s (ν CH), 2876 m (ν CH₃), 2564 vs br (ν B-H), 1634 w (ν C=N), 1533 vs, 1456 m (δ CH), 1408 w, 1371 m, 1365 m, 1353 m, 1317 s, 1303 vs (ν C-N), 1272 m, 1242 m, 1193 m, 1158 m, 1121 s (ν C-O-C), 1105 s, 1087 vs (ν C-O), 1030 m, 1015 m, 973 w, 944 w, 921 w, 901 w, 869 s, 835 w, 807 w, 791 w, 739 w, 722 w, 694 w, 668 w, 610 m, 590 m, 560 m, 545 m, 502 m, 452 m, 417 m, 407 m.

***o*-C₂B₁₀H₁₀C(N^{*i*}Pr)(=N^{*i*}Pr)Li₂(THF)₄ (4b).** IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3678 w, 3407 w, 2964 s, 2875 s, 2556 s, 1980 w, 1867 w, 1665 m, 1633 s, 1527 s, 1469 s, 1372 s, 1356 s, 1301 s, 1198 s, 1167 s, 1121 s, 1085 m, 1044 s, 973 w, 890 s, 861 m, 789 w, 739 m, 723 m, 671 m, 607 m, 589 m, 559 m, 531 s, 496 s.

***o*-C₂B₁₀H₁₀- κ^2 C,N-[C(N^{*i*}PrSiMe₃)(=N^{*i*}Pr)]SiMe₃ (5).** IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3063 s (ν CH), 2968 vs (ν CH₃), 2933 s (ν CH₃), 2875 s (ν CH₃), 2581 vs br (ν B-H), 1666 vs (ν C=N), 1628 vs, 1564 m, 1558 m, 1554 m, 1502 s, 1483 vs, 1463 s (δ CH), 1453 s, 1385 s, 1364 s, 1323 s, 1303 m, 1247 s (ν C-Si), 1214 m, 1187 m, 1170 m, 1143 m, 1121 m, 1111 m, 1081

m, 1014 s, 984 m, 953 w, 926 w, 905 w, 881 m, 841 m (ν N-Si), 806 w, 753 w, 731 m, 720 m, 708 m, 648 w, 509 w, 502 w, 474 w, 456 w, 449 w, 423 w.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(N^{*i*}Pr)(=N^{*i*}Pr)- κ^2 C,N]Sn=Sn[(^{*i*}PrN)₂C^{*''*}Bu]₂ (6): IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3408 m, 3187 w, 3063 w, 2965 vs (ν CH), 2929 s (ν CH), 2872 s (ν CH₃), 2574 vs (B-H), 2120 w, 1866 w, 1666 m (ν C=N), 1620 m (ν C=N), 1600 m (ν C=N), 1510 s, 1455 s (δ CH), 1381 s (δ CH₃), 1363 s (δ CH₃), 1322 m, 1276 m, 1245 s, 1213 s, 1163 m, 1121 m, 1061 m, 1040 m, 994 w, 920 w, 888 m, 852 w, 830 w, 792 w, 731 w (τ CH₂), 695 w, 640 w, 617 w, 587 w, 557 w, 533 w, 479 w, 451 w.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(N^{*i*}Pr)(=N^{*i*}Pr)- κ^2 C,N]PPh (7): IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3288 w, 3072 w (ν C-H (Ph)), 3060 w (ν C-H (Ph)), 2968 vs (ν CH), 2928 s (ν CH), 2868 m (ν CH), 2658 m, 2607 vs (B-H), 2572 vs (ν B-H), 1652 vs (ν C=N), 1462 m (ν P-C), 1435 m (ν P-Ph), 1389 m, 1377 m, 1365 m, 1347 m, 1322 s, 1229 vs, 1183 vs, 1165 vs, 1131 s, 1078 vs, 1013 s, 999 m, 958 w, 933 w, 884 w, 839 w, 821 w, 804 w, 743 vs (γ CH(Ph)), 729 s (γ CH(Ph)), 701 s (γ CH(Ph)), 644 w, 633 w, 591 w, 564 w, 553 w, 532 m, 494 m, 485 m, 462 w, 432 m.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N]SiCl₂ (8): IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3854 w, 3404 w, 3312 m, 3228 w, 3067 w, 2931 vs (ν_s -CH-), 2853 vs (ν_s -CH₂-), 2586 vs (B-H), 2056 m, 1964 m, 1868 m, 1780 w, 1665 vs (C=N), 1500 m, 1475 w, 1463 m, 1449 vs, 1369 m (δ_s -CH₂-), 1347 m, 1328 s, 1309 m, 1256 s, 1243 s, 1205 vs (ν C-N), 1166 vs, 1137 vs, 1105 vs, 1059 s, 996 vs, 966 m, 930 s, 916 s, 888 s, 865 m, 855 s, 843 m, 833 s, 808 s, 790 s, 768 s, 730 s, 686 m, 663 s, 643 vs, 632 s, 600 vs, 579 vs, 529 vs, 496 s, 459 s, 445 s.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N]SiMe₂ (9): IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3404 m, 3067 m, 2932 vs (ν -CH-), 2852 s (ν -CH₂-), 2652 m, 2626 m, 2591 vs (B-H), 2562 s (B-H), 2119 w, 1663 vs (C=N), 1560 m, 1501 s, 1465 m, 1450 m, 1348 m (δ -CH₂-), 1306 m, 1293 m, 1254 s (C-N), 1234 s (C-N), 1197 m, 1176 m, 1147 m, 1101 m, 1076 m, 1016 m, 986 m, 892 m, 862 w, 842 w, 808 m, 722 w, 709 w, 669 w, 546 w, 504 w, 454 w, 440 w.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N]SiPh₂ (10): IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3404 m, 3220 w, 3137 w, 3068 m (ν_s C-H arom.), 3000 w, 2931 vs (ν_s -CH-), 2851 s (ν_s -CH₂-), 2653 m, 2637 m, 2626 s, 2591 vs (B-H), 2562 vs (B-H), 1959 w, 1890 w, 1662 vs (C=N), 1625 s, 1590 m, 1576 m, 1500 s (ν_s C-C arom.), 1476 m, 1448 s, (ν_s C-C arom.), 1429 m, 1372 m (δ_s -CH₂-),

1347 m, 1334 m, 1306 m, 1252 m, 1233 m, 1210 s (ν C-N), 1176 m, 1164 m, 1146 m, 1104 s, 1088 s, 1015 m, 995 m, 976 m, 930 m, 915 m, 891 m, 875 w, 852 w, 841 w, 828 m, 811 w, 791 w, 761 w, 734 m, 721 m, 696 s (δ_s C-H arom.), 632 w, 600 w, 568 w, 558 w, 534 m, 509 m, 493 m, 480 m, 454 w, 439 w, 416 w.

[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N]GeCl₂ (11). IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3403 m, 3281 w, 3066 m, 2931 vs (ν -CH-), 2853 s (ν -CH₂-), 2590 vs (B-H), 2119 w, 1656 vs (C=N), 1501 s, 1464 m, 1450 s (δ -CH-), 1368 m, 1347 m, 1306 m, 1252 m, 1243 m, 1213 s (ν C-N), 1177 m, 1159 m, 1146 m, 1129 m, 1088 s, 1056 m, 1015 m, 991 m, 928 m, 911 m, 890 m, 850 m, 841 m, 822 m, 808 m, 791 m, 754 m, 732 m, 684 w, 670 w, 644 w, 616 w, 584 m, 551 m, 510 m, 495 m, 461 w, 433 s, 415 m.

Cp₂Ti[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N] (12). IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3441 w, 3127 w, 2927 vs (ν_s -CH-), 2850 s (ν_s -CH₂-), 2650 m, 2637 m, 2614 m, 2564 vs (B-H), 1605 vs (C=N), 1447 s, 1401 m, 1369 m (δ_s -CH₂-), 1348 m, 1325 m, 1300 w, 1267 vs (ν C-N), 1242 m, 1233 vs, 1181 m, 1157 m, 1136 w, 1062 s, 1023 m, 1013 m, 983 m, 907 m, 888 w, 870 w, 844 m, 838 m, 818 vs, 733 m, 593 w, 570 w, 531 w, 509 m, 437 w, 415 w.

Cp₂Zr[*o*-C₂B₁₀H₁₀C(NCy)(=NCy)- κ^2 C,N] (13). IR (KBr disk, cm⁻¹): ν_{max} 3930 w, 3469 w, 3218 w, 3115 w, 3067 w, 2924 vs (ν_s -CH-), 2851 m (ν_s -CH₂-), 2632 m, 2613 m, 2552 vs (B-H), 2421 w, 2116 m, 1621 vs (C=N), 1447 m, 1371 w (δ_s -CH₂-), 1348 w, 1330 m, 1280 vs (ν C-N), 1237 m, 1181 m, 1160 m, 1064 m, 1015 m, 984 m, 910 w, 889 w, 853 w, 844 w, 812 vs, 731 m, 598 w, 571 w, 534 w, 509 w, 438 w, 414 w.

*ORTEP drawings and additional X-ray data for compounds
2b, 3b, 4b, 5, 6, 7, 10, 12, and 13.*

Compound 2b

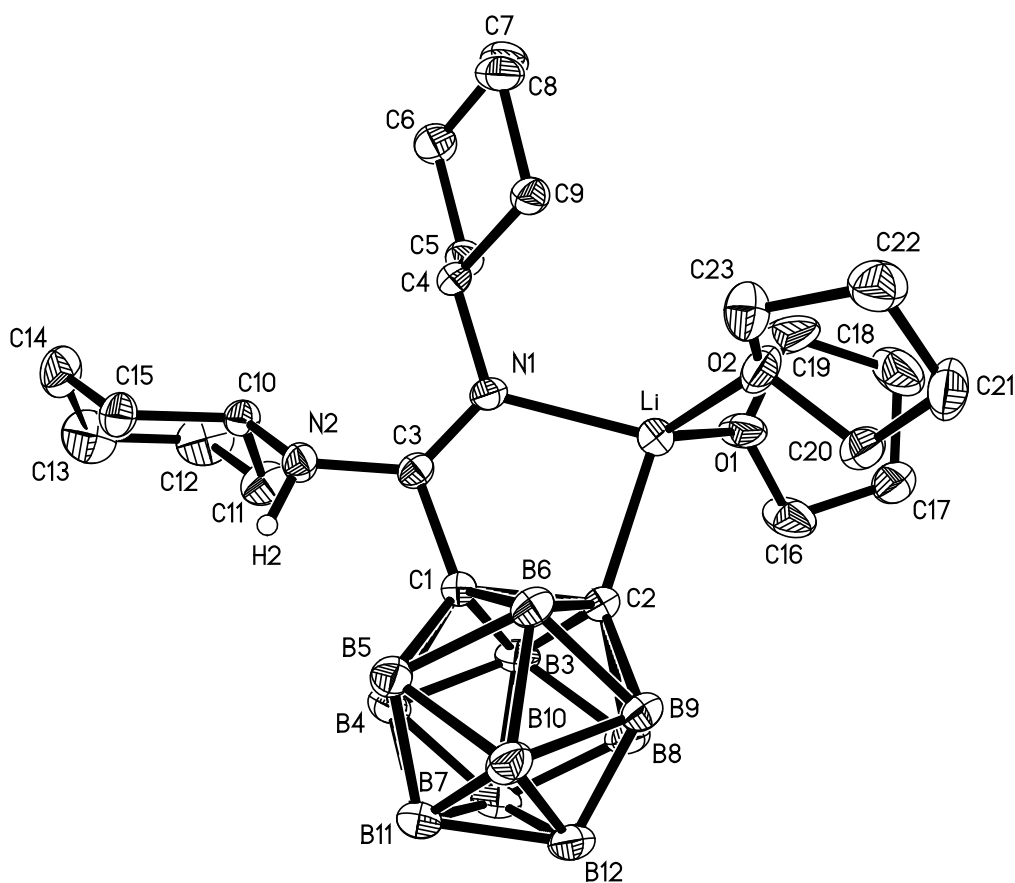


Table 1. Crystal data and structure refinement for **2b**.

Identification code	ip270	
Empirical formula	C ₂₃ H ₄₉ B ₁₀ Li N ₂ O ₂	
Formula weight	500.68	
Temperature	153(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 10.518(2) Å	α = 103.86(3)°
	b = 11.229(2) Å	β = 108.18(3)°
	c = 14.087(3) Å	γ = 96.24(3)°
Volume	1504.1(5) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.105 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.062 mm ⁻¹	
F(000)	540	
Crystal size	0.60 x 0.50 x 0.50 mm ³	
Theta range for data collection	2.81 to 28.28°	
Index ranges	-14 ≤ h ≤ 13, -13 ≤ k ≤ 14, -18 ≤ l ≤ 18	
Reflections collected	17190	
Independent reflections	7418 [R(int) = 0.0501]	
Completeness to theta = 28.00°	99.4 %	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	7418 / 170 / 479	
Goodness-of-fit on F ²	1.000	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0475, wR2 = 0.1170	
R indices (all data)	R1 = 0.0713, wR2 = 0.1259	
Largest diff. peak and hole	0.272 and -0.255 e.Å ⁻³	

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [°] for **2b**.

N(1)-C(3)	1.2773(16)	C(11)-C(12)	1.523(2)
N(1)-C(4)	1.4696(16)	C(11)-H(11A)	0.9900
N(1)-Li	2.057(3)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(2)-C(3)	1.3771(17)	C(12)-C(13)	1.520(3)
N(2)-C(10)	1.4717(16)	C(12)-H(12A)	0.9900
N(2)-H(2)	0.876(18)	C(12)-H(12B)	0.9900
C(1)-C(3)	1.5269(17)	C(13)-C(14)	1.519(2)
C(1)-C(2)	1.6793(18)	C(13)-H(13A)	0.9900
C(1)-B(3)	1.6903(18)	C(13)-H(13B)	0.9900
C(1)-B(6)	1.692(2)	C(14)-C(15)	1.522(2)
C(1)-B(5)	1.7054(19)	C(14)-H(14A)	0.9900
C(1)-B(4)	1.7087(19)	C(14)-H(14B)	0.9900
C(2)-B(8)	1.7127(19)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(2)-B(6)	1.7132(18)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(2)-B(9)	1.717(2)	O(1)-C(16)	1.418(8)
C(2)-B(3)	1.720(2)	O(1)-C(19)	1.432(8)
C(2)-Li	2.102(2)	O(1)-Li	1.913(9)
C(4)-C(9)	1.5244(17)	C(16)-C(17)	1.472(6)
C(4)-C(5)	1.5278(17)	C(16)-H(16A)	0.9900
C(4)-H(4A)	1.0000	C(16)-H(16B)	0.9900
C(5)-C(6)	1.5296(18)	C(17)-C(18)	1.422(6)
C(5)-H(5A)	0.9900	C(17)-H(17A)	0.9900
C(5)-H(5B)	0.9900	C(17)-H(17B)	0.9900
C(6)-C(7)	1.522(2)	C(18)-C(19)	1.534(8)
C(6)-H(6A)	0.9900	C(18)-H(18A)	0.9900
C(6)-H(6B)	0.9900	C(18)-H(18B)	0.9900
C(7)-C(8)	1.516(2)	C(19)-H(19A)	0.9900
C(7)-H(7A)	0.9900	C(19)-H(19B)	0.9900
C(7)-H(7B)	0.9900	O(1')-C(19')	1.427(11)
C(8)-C(9)	1.5260(18)	O(1')-C(16')	1.432(11)
C(8)-H(8A)	0.9900	O(1')-Li	1.941(14)
C(8)-H(8B)	0.9900	C(16')-C(17')	1.443(10)
C(9)-H(9A)	0.9900	C(16')-H(16C)	0.9900
C(9)-H(9B)	0.9900	C(16')-H(16D)	0.9900
C(10)-C(15)	1.5184(18)	C(17')-C(18')	1.407(10)
C(10)-C(11)	1.5262(17)	C(17')-H(17C)	0.9900
C(10)-H(10A)	1.0000	C(17')-H(17D)	0.9900

C(18')-C(19')	1.513(11)	C(23')-H(23D)	0.9900
C(18')-H(18C)	0.9900	B(3)-B(8)	1.753(2)
C(18')-H(18D)	0.9900	B(3)-B(7)	1.785(2)
C(19')-H(19C)	0.9900	B(3)-B(4)	1.797(2)
C(19')-H(19D)	0.9900	B(3)-H(3)	1.103(16)
O(2)-C(23)	1.428(9)	B(4)-B(7)	1.761(2)
O(2)-C(20)	1.463(8)	B(4)-B(11)	1.764(2)
O(2)-Li	1.967(9)	B(4)-B(5)	1.773(2)
C(20)-C(21)	1.422(6)	B(4)-H(4)	1.105(17)
C(20)-H(20A)	0.9900	B(5)-B(10)	1.766(2)
C(20)-H(20B)	0.9900	B(5)-B(11)	1.771(2)
C(21)-C(22)	1.510(9)	B(5)-B(6)	1.793(2)
C(21)-H(21A)	0.9900	B(5)-H(5)	1.120(16)
C(21)-H(21B)	0.9900	B(6)-B(9)	1.753(2)
C(22)-C(23)	1.497(9)	B(6)-B(10)	1.780(2)
C(22)-H(22A)	0.9900	B(6)-H(6)	1.084(16)
C(22)-H(22B)	0.9900	B(7)-B(8)	1.775(2)
C(23)-H(23A)	0.9900	B(7)-B(12)	1.781(3)
C(23)-H(23B)	0.9900	B(7)-B(11)	1.789(2)
O(2')-C(20')	1.423(11)	B(7)-H(7)	1.118(16)
O(2')-C(23')	1.430(10)	B(8)-B(9)	1.746(2)
O(2')-Li	1.983(10)	B(8)-B(12)	1.785(2)
C(20')-C(21')	1.409(9)	B(8)-H(8)	1.077(16)
C(20')-H(20C)	0.9900	B(9)-B(10)	1.775(2)
C(20')-H(20D)	0.9900	B(9)-B(12)	1.777(2)
C(21')-C(22')	1.497(10)	B(9)-H(9)	1.101(18)
C(21')-H(21C)	0.9900	B(10)-B(12)	1.782(2)
C(21')-H(21D)	0.9900	B(10)-B(11)	1.785(3)
C(22')-C(23')	1.499(10)	B(10)-H(10)	1.117(17)
C(22')-H(22C)	0.9900	B(11)-B(12)	1.762(2)
C(22')-H(22D)	0.9900	B(11)-H(11)	1.139(18)
C(23')-H(23C)	0.9900	B(12)-H(12)	1.096(15)
C(3)-N(1)-C(4)	120.88(11)	C(3)-C(1)-C(2)	115.33(10)
C(3)-N(1)-Li	117.26(10)	C(3)-C(1)-B(3)	114.94(10)
C(4)-N(1)-Li	121.63(10)	C(2)-C(1)-B(3)	61.39(8)
C(3)-N(2)-C(10)	124.76(10)	C(3)-C(1)-B(6)	117.28(10)
C(3)-N(2)-H(2)	110.4(12)	C(2)-C(1)-B(6)	61.08(8)
C(10)-N(2)-H(2)	110.9(12)	B(3)-C(1)-B(6)	113.74(10)

C(3)-C(1)-B(5)	121.70(10)	C(7)-C(6)-C(5)	111.27(12)
C(2)-C(1)-B(5)	113.17(10)	C(7)-C(6)-H(6A)	109.4
B(3)-C(1)-B(5)	115.56(10)	C(5)-C(6)-H(6A)	109.4
B(6)-C(1)-B(5)	63.70(9)	C(7)-C(6)-H(6B)	109.4
C(3)-C(1)-B(4)	120.61(11)	C(5)-C(6)-H(6B)	109.4
C(2)-C(1)-B(4)	113.15(10)	H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0
B(3)-C(1)-B(4)	63.81(9)	C(8)-C(7)-C(6)	111.35(11)
B(6)-C(1)-B(4)	115.07(10)	C(8)-C(7)-H(7A)	109.4
B(5)-C(1)-B(4)	62.58(9)	C(6)-C(7)-H(7A)	109.4
C(1)-C(2)-B(8)	107.05(10)	C(8)-C(7)-H(7B)	109.4
C(1)-C(2)-B(6)	59.83(8)	C(6)-C(7)-H(7B)	109.4
B(8)-C(2)-B(6)	111.21(10)	H(7A)-C(7)-H(7B)	108.0
C(1)-C(2)-B(9)	107.17(10)	C(7)-C(8)-C(9)	111.28(11)
B(8)-C(2)-B(9)	61.20(9)	C(7)-C(8)-H(8A)	109.4
B(6)-C(2)-B(9)	61.44(9)	C(9)-C(8)-H(8A)	109.4
C(1)-C(2)-B(3)	59.62(8)	C(7)-C(8)-H(8B)	109.4
B(8)-C(2)-B(3)	61.43(9)	C(9)-C(8)-H(8B)	109.4
B(6)-C(2)-B(3)	111.19(10)	H(8A)-C(8)-H(8B)	108.0
B(9)-C(2)-B(3)	111.21(10)	C(4)-C(9)-C(8)	111.36(11)
C(1)-C(2)-Li	102.59(10)	C(4)-C(9)-H(9A)	109.4
B(8)-C(2)-Li	139.74(10)	C(8)-C(9)-H(9A)	109.4
B(6)-C(2)-Li	107.02(10)	C(4)-C(9)-H(9B)	109.4
B(9)-C(2)-Li	133.04(11)	C(8)-C(9)-H(9B)	109.4
B(3)-C(2)-Li	115.06(10)	H(9A)-C(9)-H(9B)	108.0
N(1)-C(3)-N(2)	128.54(11)	N(2)-C(10)-C(15)	108.43(10)
N(1)-C(3)-C(1)	117.50(11)	N(2)-C(10)-C(11)	112.28(11)
N(2)-C(3)-C(1)	113.92(10)	C(15)-C(10)-C(11)	110.58(11)
N(1)-C(4)-C(9)	108.38(10)	N(2)-C(10)-H(10A)	108.5
N(1)-C(4)-C(5)	110.95(9)	C(15)-C(10)-H(10A)	108.5
C(9)-C(4)-C(5)	109.66(10)	C(11)-C(10)-H(10A)	108.5
N(1)-C(4)-H(4A)	109.3	C(12)-C(11)-C(10)	110.88(12)
C(9)-C(4)-H(4A)	109.3	C(12)-C(11)-H(11A)	109.5
C(5)-C(4)-H(4A)	109.3	C(10)-C(11)-H(11A)	109.5
C(4)-C(5)-C(6)	110.62(10)	C(12)-C(11)-H(11B)	109.5
C(4)-C(5)-H(5A)	109.5	C(10)-C(11)-H(11B)	109.5
C(6)-C(5)-H(5A)	109.5	H(11A)-C(11)-H(11B)	108.1
C(4)-C(5)-H(5B)	109.5	C(13)-C(12)-C(11)	111.07(13)
C(6)-C(5)-H(5B)	109.5	C(13)-C(12)-H(12A)	109.4
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.1	C(11)-C(12)-H(12A)	109.4

C(13)-C(12)-H(12B)	109.4	C(17)-C(18)-H(18B)	110.3
C(11)-C(12)-H(12B)	109.4	C(19)-C(18)-H(18B)	110.3
H(12A)-C(12)-H(12B)	108.0	H(18A)-C(18)-H(18B)	108.5
C(14)-C(13)-C(12)	110.67(13)	O(1)-C(19)-C(18)	102.9(6)
C(14)-C(13)-H(13A)	109.5	O(1)-C(19)-H(19A)	111.2
C(12)-C(13)-H(13A)	109.5	C(18)-C(19)-H(19A)	111.2
C(14)-C(13)-H(13B)	109.5	O(1)-C(19)-H(19B)	111.2
C(12)-C(13)-H(13B)	109.5	C(18)-C(19)-H(19B)	111.2
H(13A)-C(13)-H(13B)	108.1	H(19A)-C(19)-H(19B)	109.1
C(13)-C(14)-C(15)	111.30(13)	C(19')-O(1')-C(16')	109.0(9)
C(13)-C(14)-H(14A)	109.4	C(19')-O(1')-Li	126.1(9)
C(15)-C(14)-H(14A)	109.4	C(16')-O(1')-Li	121.8(9)
C(13)-C(14)-H(14B)	109.4	O(1')-C(16')-C(17')	105.6(8)
C(15)-C(14)-H(14B)	109.4	O(1')-C(16')-H(16C)	110.6
H(14A)-C(14)-H(14B)	108.0	C(17')-C(16')-H(16C)	110.6
C(10)-C(15)-C(14)	110.86(11)	O(1')-C(16')-H(16D)	110.6
C(10)-C(15)-H(15A)	109.5	C(17')-C(16')-H(16D)	110.6
C(14)-C(15)-H(15A)	109.5	H(16C)-C(16')-H(16D)	108.8
C(10)-C(15)-H(15B)	109.5	C(18')-C(17')-C(16')	108.1(7)
C(14)-C(15)-H(15B)	109.5	C(18')-C(17')-H(17C)	110.1
H(15A)-C(15)-H(15B)	108.1	C(16')-C(17')-H(17C)	110.1
C(16)-O(1)-C(19)	107.5(6)	C(18')-C(17')-H(17D)	110.1
C(16)-O(1)-Li	126.8(7)	C(16')-C(17')-H(17D)	110.1
C(19)-O(1)-Li	124.2(6)	H(17C)-C(17')-H(17D)	108.4
O(1)-C(16)-C(17)	107.4(5)	C(17')-C(18')-C(19')	105.0(7)
O(1)-C(16)-H(16A)	110.2	C(17')-C(18')-H(18C)	110.8
C(17)-C(16)-H(16A)	110.2	C(19')-C(18')-H(18C)	110.8
O(1)-C(16)-H(16B)	110.2	C(17')-C(18')-H(18D)	110.8
C(17)-C(16)-H(16B)	110.2	C(19')-C(18')-H(18D)	110.8
H(16A)-C(16)-H(16B)	108.5	H(18C)-C(18')-H(18D)	108.8
C(18)-C(17)-C(16)	106.6(4)	O(1')-C(19')-C(18')	105.8(8)
C(18)-C(17)-H(17A)	110.4	O(1')-C(19')-H(19C)	110.6
C(16)-C(17)-H(17A)	110.4	C(18')-C(19')-H(19C)	110.6
C(18)-C(17)-H(17B)	110.4	O(1')-C(19')-H(19D)	110.6
C(16)-C(17)-H(17B)	110.4	C(18')-C(19')-H(19D)	110.6
H(17A)-C(17)-H(17B)	108.6	H(19C)-C(19')-H(19D)	108.7
C(17)-C(18)-C(19)	107.1(4)	C(23)-O(2)-C(20)	102.5(7)
C(17)-C(18)-H(18A)	110.3	C(23)-O(2)-Li	134.8(8)
C(19)-C(18)-H(18A)	110.3	C(20)-O(2)-Li	110.1(5)

C(21)-C(20)-O(2)	107.3(5)	C(21')-C(22')-C(23')	105.8(8)
C(21)-C(20)-H(20A)	110.3	C(21')-C(22')-H(22C)	110.6
O(2)-C(20)-H(20A)	110.3	C(23')-C(22')-H(22C)	110.6
C(21)-C(20)-H(20B)	110.3	C(21')-C(22')-H(22D)	110.6
O(2)-C(20)-H(20B)	110.3	C(23')-C(22')-H(22D)	110.6
H(20A)-C(20)-H(20B)	108.5	H(22C)-C(22')-H(22D)	108.7
C(20)-C(21)-C(22)	106.8(5)	O(2')-C(23')-C(22')	107.6(8)
C(20)-C(21)-H(21A)	110.4	O(2')-C(23')-H(23C)	110.2
C(22)-C(21)-H(21A)	110.4	C(22')-C(23')-H(23C)	110.2
C(20)-C(21)-H(21B)	110.4	O(2')-C(23')-H(23D)	110.2
C(22)-C(21)-H(21B)	110.4	C(22')-C(23')-H(23D)	110.2
H(21A)-C(21)-H(21B)	108.6	H(23C)-C(23')-H(23D)	108.5
C(23)-C(22)-C(21)	102.6(7)	C(1)-B(3)-C(2)	58.99(8)
C(23)-C(22)-H(22A)	111.2	C(1)-B(3)-B(8)	104.74(11)
C(21)-C(22)-H(22A)	111.2	C(2)-B(3)-B(8)	59.08(8)
C(23)-C(22)-H(22B)	111.2	C(1)-B(3)-B(7)	104.26(10)
C(21)-C(22)-H(22B)	111.2	C(2)-B(3)-B(7)	106.84(11)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.2	B(8)-B(3)-B(7)	60.20(9)
O(2)-C(23)-C(22)	105.6(7)	C(1)-B(3)-B(4)	58.59(8)
O(2)-C(23)-H(23A)	110.6	C(2)-B(3)-B(4)	107.03(10)
C(22)-C(23)-H(23A)	110.6	B(8)-B(3)-B(4)	107.04(11)
O(2)-C(23)-H(23B)	110.6	B(7)-B(3)-B(4)	58.92(9)
C(22)-C(23)-H(23B)	110.6	C(1)-B(3)-H(3)	119.3(8)
H(23A)-C(23)-H(23B)	108.7	C(2)-B(3)-H(3)	120.5(8)
C(20')-O(2')-C(23')	107.4(7)	B(8)-B(3)-H(3)	126.7(8)
C(20')-O(2')-Li	115.3(6)	B(7)-B(3)-H(3)	127.0(8)
C(23')-O(2')-Li	137.0(9)	B(4)-B(3)-H(3)	120.5(8)
C(21')-C(20')-O(2')	112.4(6)	C(1)-B(4)-B(7)	104.50(11)
C(21')-C(20')-H(20C)	109.1	C(1)-B(4)-B(11)	104.74(11)
O(2')-C(20')-H(20C)	109.1	B(7)-B(4)-B(11)	60.97(9)
C(21')-C(20')-H(20D)	109.1	C(1)-B(4)-B(5)	58.62(8)
O(2')-C(20')-H(20D)	109.1	B(7)-B(4)-B(5)	108.75(12)
H(20C)-C(20')-H(20D)	107.9	B(11)-B(4)-B(5)	60.08(9)
C(20')-C(21')-C(22')	105.5(7)	C(1)-B(4)-B(3)	57.60(8)
C(20')-C(21')-H(21C)	110.6	B(7)-B(4)-B(3)	60.21(9)
C(22')-C(21')-H(21C)	110.6	B(11)-B(4)-B(3)	108.43(12)
C(20')-C(21')-H(21D)	110.6	B(5)-B(4)-B(3)	107.18(11)
C(22')-C(21')-H(21D)	110.6	C(1)-B(4)-H(4)	119.2(8)
H(21C)-C(21')-H(21D)	108.8	B(7)-B(4)-H(4)	125.2(8)

B(11)-B(4)-H(4)	127.9(8)	B(4)-B(7)-B(11)	59.59(9)
B(5)-B(4)-H(4)	121.3(8)	B(8)-B(7)-B(11)	107.20(12)
B(3)-B(4)-H(4)	117.9(8)	B(12)-B(7)-B(11)	59.15(10)
C(1)-B(5)-B(10)	104.53(10)	B(3)-B(7)-B(11)	107.86(10)
C(1)-B(5)-B(11)	104.60(10)	B(4)-B(7)-H(7)	121.5(9)
B(10)-B(5)-B(11)	60.60(10)	B(8)-B(7)-H(7)	121.1(9)
C(1)-B(5)-B(4)	58.80(8)	B(12)-B(7)-H(7)	123.7(9)
B(10)-B(5)-B(4)	108.22(11)	B(3)-B(7)-H(7)	119.6(8)
B(11)-B(5)-B(4)	59.71(9)	B(11)-B(7)-H(7)	124.3(8)
C(1)-B(5)-B(6)	57.79(8)	C(2)-B(8)-B(9)	59.54(8)
B(10)-B(5)-B(6)	60.02(9)	C(2)-B(8)-B(3)	59.49(8)
B(11)-B(5)-B(6)	107.88(11)	B(9)-B(8)-B(3)	108.29(10)
B(4)-B(5)-B(6)	107.15(10)	C(2)-B(8)-B(7)	107.62(11)
C(1)-B(5)-H(5)	118.6(8)	B(9)-B(8)-B(7)	108.68(11)
B(10)-B(5)-H(5)	127.8(8)	B(3)-B(8)-B(7)	60.78(9)
B(11)-B(5)-H(5)	126.5(8)	C(2)-B(8)-B(12)	107.32(10)
B(4)-B(5)-H(5)	118.3(9)	B(9)-B(8)-B(12)	60.42(9)
B(6)-B(5)-H(5)	120.9(8)	B(3)-B(8)-B(12)	108.68(11)
C(1)-B(6)-C(2)	59.09(8)	B(7)-B(8)-B(12)	60.06(9)
C(1)-B(6)-B(9)	105.02(10)	C(2)-B(8)-H(8)	118.5(8)
C(2)-B(6)-B(9)	59.40(8)	B(9)-B(8)-H(8)	121.3(9)
C(1)-B(6)-B(10)	104.49(11)	B(3)-B(8)-H(8)	118.5(9)
C(2)-B(6)-B(10)	107.35(10)	B(7)-B(8)-H(8)	123.8(9)
B(9)-B(6)-B(10)	60.31(9)	B(12)-B(8)-H(8)	125.8(9)
C(1)-B(6)-B(5)	58.51(8)	C(2)-B(9)-B(8)	59.27(8)
C(2)-B(6)-B(5)	107.35(10)	C(2)-B(9)-B(6)	59.16(8)
B(9)-B(6)-B(5)	107.48(11)	B(8)-B(9)-B(6)	107.81(11)
B(10)-B(6)-B(5)	59.25(9)	C(2)-B(9)-B(10)	107.41(11)
C(1)-B(6)-H(6)	118.4(9)	B(8)-B(9)-B(10)	108.97(12)
C(2)-B(6)-H(6)	117.5(9)	B(6)-B(9)-B(10)	60.62(9)
B(9)-B(6)-H(6)	125.5(9)	C(2)-B(9)-B(12)	107.46(11)
B(10)-B(6)-H(6)	129.0(9)	B(8)-B(9)-B(12)	60.87(9)
B(5)-B(6)-H(6)	122.4(9)	B(6)-B(9)-B(12)	108.61(12)
B(4)-B(7)-B(8)	107.65(10)	B(10)-B(9)-B(12)	60.22(9)
B(4)-B(7)-B(12)	107.20(11)	C(2)-B(9)-H(9)	117.4(9)
B(8)-B(7)-B(12)	60.25(9)	B(8)-B(9)-H(9)	121.1(8)
B(4)-B(7)-B(3)	60.87(9)	B(6)-B(9)-H(9)	118.2(8)
B(8)-B(7)-B(3)	59.02(9)	B(10)-B(9)-H(9)	124.5(9)
B(12)-B(7)-B(3)	107.44(11)	B(12)-B(9)-H(9)	126.7(8)

B(5)-B(10)-B(9)	107.67(11)	B(11)-B(12)-B(9)	108.01(11)
B(5)-B(10)-B(6)	60.73(9)	B(11)-B(12)-B(7)	60.63(10)
B(9)-B(10)-B(6)	59.07(9)	B(9)-B(12)-B(7)	107.02(11)
B(5)-B(10)-B(12)	107.32(12)	B(11)-B(12)-B(10)	60.47(10)
B(9)-B(10)-B(12)	59.95(9)	B(9)-B(12)-B(10)	59.83(9)
B(6)-B(10)-B(12)	107.16(11)	B(7)-B(12)-B(10)	108.49(11)
B(5)-B(10)-B(11)	59.82(9)	B(11)-B(12)-B(8)	107.92(11)
B(9)-B(10)-B(11)	107.11(11)	B(9)-B(12)-B(8)	58.71(9)
B(6)-B(10)-B(11)	107.82(11)	B(7)-B(12)-B(8)	59.69(9)
B(12)-B(10)-B(11)	59.22(10)	B(10)-B(12)-B(8)	106.94(10)
B(5)-B(10)-H(10)	120.7(9)	B(11)-B(12)-H(12)	122.5(8)
B(9)-B(10)-H(10)	122.4(9)	B(9)-B(12)-H(12)	120.8(9)
B(6)-B(10)-H(10)	120.6(8)	B(7)-B(12)-H(12)	123.0(8)
B(12)-B(10)-H(10)	123.7(8)	B(10)-B(12)-H(12)	121.1(8)
B(11)-B(10)-H(10)	122.9(9)	B(8)-B(12)-H(12)	122.1(8)
B(12)-B(11)-B(4)	107.93(11)	O(1)-Li-O(1')	6.7(8)
B(12)-B(11)-B(5)	108.01(12)	O(1)-Li-O(2)	102.6(5)
B(4)-B(11)-B(5)	60.21(9)	O(1')-Li-O(2)	102.6(6)
B(12)-B(11)-B(10)	60.32(10)	O(1)-Li-O(2')	100.7(6)
B(4)-B(11)-B(10)	107.81(10)	O(1')-Li-O(2')	100.8(7)
B(5)-B(11)-B(10)	59.58(9)	O(2)-Li-O(2')	1.9(7)
B(12)-B(11)-B(7)	60.21(10)	O(1)-Li-N(1)	120.5(4)
B(4)-B(11)-B(7)	59.44(9)	O(1')-Li-N(1)	115.8(6)
B(5)-B(11)-B(7)	107.64(10)	O(2)-Li-N(1)	120.5(3)
B(10)-B(11)-B(7)	108.04(11)	O(2')-Li-N(1)	122.2(3)
B(12)-B(11)-H(11)	123.5(9)	O(1)-Li-C(2)	112.4(3)
B(4)-B(11)-H(11)	119.1(9)	O(1')-Li-C(2)	117.9(4)
B(5)-B(11)-H(11)	121.3(8)	O(2)-Li-C(2)	113.6(4)
B(10)-B(11)-H(11)	124.2(9)	O(2')-Li-C(2)	114.2(5)
B(7)-B(11)-H(11)	120.7(9)	N(1)-Li-C(2)	86.99(10)

Compound **3b**

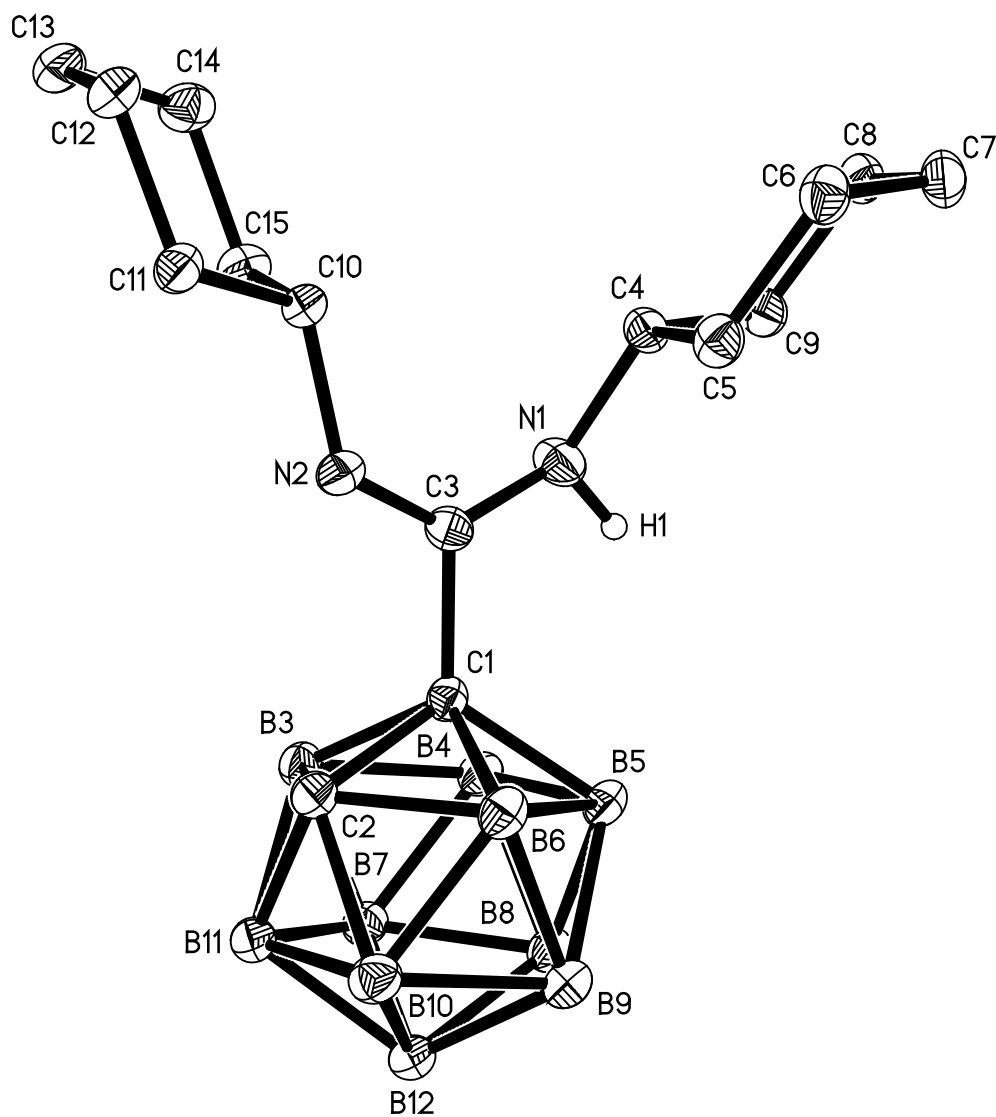


Table 3. Crystal data and structure refinement for **3b**.

Identification code	magd58	
Empirical formula	C ₁₅ H ₃₄ B ₁₀ N ₂	
Formula weight	350.54	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54184 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 6.6180(10) Å	α = 86.218(15)°
	b = 10.2110(18) Å	β = 86.380(14)°
	c = 15.859(3) Å	γ = 77.332(14)°
Volume	1042.1(3) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.117 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.409 mm ⁻¹	
F(000)	376	
Crystal size	0.10 x 0.05 x 0.04 mm ³	
Theta range for data collection	4.44 to 75.79°	
Index ranges	-7 ≤ h ≤ 8, -12 ≤ k ≤ 12, -19 ≤ l ≤ 19	
Reflections collected	37066	
Independent reflections	4309 [R(int) = 0.0238]	
Completeness to theta = 75.79°	99.3 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9838 and 0.9602	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	4309 / 0 / 252	
Goodness-of-fit on F ²	1.049	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0414, wR2 = 0.1090	
R indices (all data)	R1 = 0.0419, wR2 = 0.1094	
Largest diff. peak and hole	0.380 and -0.267 e.Å ⁻³	

Table 4. Bond lengths [Å] and angles [°] for **3b**.

N(1)-C(3)	1.3734(14)	C(11)-H(11A)	0.9900
N(1)-C(4)	1.4730(13)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(1)-H(1)	0.878(18)	C(12)-C(13)	1.5267(15)
N(2)-C(3)	1.2788(14)	C(12)-H(12A)	0.9900
N(2)-C(10)	1.4691(13)	C(12)-H(12B)	0.9900
C(1)-C(3)	1.5279(14)	C(13)-C(14)	1.5263(16)
C(1)-C(2)	1.6316(14)	C(13)-H(13A)	0.9900
C(1)-B(5)	1.7068(15)	C(13)-H(13B)	0.9900
C(1)-B(4)	1.7118(15)	C(14)-C(15)	1.5305(15)
C(1)-B(6)	1.7262(15)	C(14)-H(14A)	0.9900
C(1)-B(3)	1.7274(15)	C(14)-H(14B)	0.9900
C(2)-B(11)	1.6982(16)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(2)-B(10)	1.7041(16)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(2)-B(3)	1.7200(16)	B(3)-B(7)	1.7675(16)
C(2)-B(6)	1.7215(16)	B(3)-B(11)	1.7789(17)
C(2)-H(2)	0.986(14)	B(3)-B(4)	1.7832(16)
C(4)-C(9)	1.5287(14)	B(3)-H(3)	1.1200
C(4)-C(5)	1.5305(14)	B(4)-B(5)	1.7773(16)
C(4)-H(4A)	1.0000	B(4)-B(7)	1.7804(17)
C(5)-C(6)	1.5295(15)	B(4)-B(8)	1.7819(16)
C(5)-H(5A)	0.9900	B(4)-H(4)	1.1200
C(5)-H(5B)	0.9900	B(5)-B(8)	1.7699(16)
C(6)-C(7)	1.5293(15)	B(5)-B(9)	1.7723(17)
C(6)-H(6A)	0.9900	B(5)-B(6)	1.7745(16)
C(6)-H(6B)	0.9900	B(5)-H(5)	1.1200
C(7)-C(8)	1.5255(15)	B(6)-B(9)	1.7710(17)
C(7)-H(7A)	0.9900	B(6)-B(10)	1.7796(17)
C(7)-H(7B)	0.9900	B(6)-H(6)	1.1200
C(8)-C(9)	1.5269(15)	B(7)-B(11)	1.7837(17)
C(8)-H(8A)	0.9900	B(7)-B(12)	1.7907(17)
C(8)-H(8B)	0.9900	B(7)-B(8)	1.7914(17)
C(9)-H(9A)	0.9900	B(7)-H(7)	1.1200
C(9)-H(9B)	0.9900	B(8)-B(12)	1.7785(17)
C(10)-C(11)	1.5291(14)	B(8)-B(9)	1.7855(16)
C(10)-C(15)	1.5343(14)	B(8)-H(8)	1.1200
C(10)-H(10A)	1.0000	B(9)-B(10)	1.7824(17)
C(11)-C(12)	1.5316(14)	B(9)-B(12)	1.7881(17)

B(9)-H(9)	1.1200	B(11)-B(12)	1.7818(17)
B(10)-B(12)	1.7792(17)	B(11)-H(11)	1.1200
B(10)-B(11)	1.7874(17)	B(12)-H(12)	1.1200
B(10)-H(10)	1.1200		
C(3)-N(1)-C(4)	124.40(9)	N(2)-C(3)-N(1)	131.59(10)
C(3)-N(1)-H(1)	111.9(11)	N(2)-C(3)-C(1)	115.24(9)
C(4)-N(1)-H(1)	111.6(11)	N(1)-C(3)-C(1)	113.11(9)
C(3)-N(2)-C(10)	123.23(9)	N(1)-C(4)-C(9)	107.78(8)
C(3)-C(1)-C(2)	115.61(8)	N(1)-C(4)-C(5)	112.31(9)
C(3)-C(1)-B(5)	123.25(8)	C(9)-C(4)-C(5)	110.70(8)
C(2)-C(1)-B(5)	110.55(8)	N(1)-C(4)-H(4A)	108.7
C(3)-C(1)-B(4)	123.22(8)	C(9)-C(4)-H(4A)	108.7
C(2)-C(1)-B(4)	110.91(8)	C(5)-C(4)-H(4A)	108.7
B(5)-C(1)-B(4)	62.65(6)	C(6)-C(5)-C(4)	111.15(9)
C(3)-C(1)-B(6)	115.25(8)	C(6)-C(5)-H(5A)	109.4
C(2)-C(1)-B(6)	61.61(6)	C(4)-C(5)-H(5A)	109.4
B(5)-C(1)-B(6)	62.25(6)	C(6)-C(5)-H(5B)	109.4
B(4)-C(1)-B(6)	114.52(8)	C(4)-C(5)-H(5B)	109.4
C(3)-C(1)-B(3)	115.83(8)	H(5A)-C(5)-H(5B)	108.0
C(2)-C(1)-B(3)	61.52(6)	C(7)-C(6)-C(5)	111.31(9)
B(5)-C(1)-B(3)	114.22(8)	C(7)-C(6)-H(6A)	109.4
B(4)-C(1)-B(3)	62.46(6)	C(5)-C(6)-H(6A)	109.4
B(6)-C(1)-B(3)	114.94(8)	C(7)-C(6)-H(6B)	109.4
C(1)-C(2)-B(11)	112.12(8)	C(5)-C(6)-H(6B)	109.4
C(1)-C(2)-B(10)	111.99(8)	H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0
B(11)-C(2)-B(10)	63.38(7)	C(8)-C(7)-C(6)	111.03(9)
C(1)-C(2)-B(3)	61.98(6)	C(8)-C(7)-H(7A)	109.4
B(11)-C(2)-B(3)	62.72(7)	C(6)-C(7)-H(7A)	109.4
B(10)-C(2)-B(3)	115.47(8)	C(8)-C(7)-H(7B)	109.4
C(1)-C(2)-B(6)	61.90(6)	C(6)-C(7)-H(7B)	109.4
B(11)-C(2)-B(6)	115.42(8)	H(7A)-C(7)-H(7B)	108.0
B(10)-C(2)-B(6)	62.60(7)	C(7)-C(8)-C(9)	111.64(9)
B(3)-C(2)-B(6)	115.58(8)	C(7)-C(8)-H(8A)	109.3
C(1)-C(2)-H(2)	112.4(8)	C(9)-C(8)-H(8A)	109.3
B(11)-C(2)-H(2)	124.5(8)	C(7)-C(8)-H(8B)	109.3
B(10)-C(2)-H(2)	124.0(8)	C(9)-C(8)-H(8B)	109.3
B(3)-C(2)-H(2)	114.7(8)	H(8A)-C(8)-H(8B)	108.0
B(6)-C(2)-H(2)	113.8(8)	C(8)-C(9)-C(4)	111.05(9)

C(8)-C(9)-H(9A)	109.4	C(10)-C(15)-H(15B)	109.2
C(4)-C(9)-H(9A)	109.4	H(15A)-C(15)-H(15B)	107.9
C(8)-C(9)-H(9B)	109.4	C(2)-B(3)-C(1)	56.50(6)
C(4)-C(9)-H(9B)	109.4	C(2)-B(3)-B(7)	104.14(8)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.0	C(1)-B(3)-B(7)	104.52(8)
N(2)-C(10)-C(11)	108.29(8)	C(2)-B(3)-B(11)	58.04(6)
N(2)-C(10)-C(15)	108.58(8)	C(1)-B(3)-B(11)	103.98(8)
C(11)-C(10)-C(15)	111.22(8)	B(7)-B(3)-B(11)	60.39(7)
N(2)-C(10)-H(10A)	109.6	C(2)-B(3)-B(4)	103.65(8)
C(11)-C(10)-H(10A)	109.6	C(1)-B(3)-B(4)	58.34(6)
C(15)-C(10)-H(10A)	109.6	B(7)-B(3)-B(4)	60.19(7)
C(10)-C(11)-C(12)	112.01(8)	B(11)-B(3)-B(4)	108.02(8)
C(10)-C(11)-H(11A)	109.2	C(2)-B(3)-H(3)	125.4
C(12)-C(11)-H(11A)	109.2	C(1)-B(3)-H(3)	125.0
C(10)-C(11)-H(11B)	109.2	B(7)-B(3)-H(3)	122.8
C(12)-C(11)-H(11B)	109.2	B(11)-B(3)-H(3)	122.2
H(11A)-C(11)-H(11B)	107.9	B(4)-B(3)-H(3)	122.3
C(13)-C(12)-C(11)	111.35(9)	C(1)-B(4)-B(5)	58.54(6)
C(13)-C(12)-H(12A)	109.4	C(1)-B(4)-B(7)	104.63(8)
C(11)-C(12)-H(12A)	109.4	B(5)-B(4)-B(7)	107.92(8)
C(13)-C(12)-H(12B)	109.4	C(1)-B(4)-B(8)	104.43(8)
C(11)-C(12)-H(12B)	109.4	B(5)-B(4)-B(8)	59.64(7)
H(12A)-C(12)-H(12B)	108.0	B(7)-B(4)-B(8)	60.38(7)
C(14)-C(13)-C(12)	111.06(9)	C(1)-B(4)-B(3)	59.20(6)
C(14)-C(13)-H(13A)	109.4	B(5)-B(4)-B(3)	108.18(8)
C(12)-C(13)-H(13A)	109.4	B(7)-B(4)-B(3)	59.47(7)
C(14)-C(13)-H(13B)	109.4	B(8)-B(4)-B(3)	107.94(8)
C(12)-C(13)-H(13B)	109.4	C(1)-B(4)-H(4)	124.8
H(13A)-C(13)-H(13B)	108.0	B(5)-B(4)-H(4)	121.6
C(13)-C(14)-C(15)	110.85(9)	B(7)-B(4)-H(4)	122.4
C(13)-C(14)-H(14A)	109.5	B(8)-B(4)-H(4)	122.5
C(15)-C(14)-H(14A)	109.5	B(3)-B(4)-H(4)	121.4
C(13)-C(14)-H(14B)	109.5	C(1)-B(5)-B(8)	105.16(8)
C(15)-C(14)-H(14B)	109.5	C(1)-B(5)-B(9)	105.38(8)
H(14A)-C(14)-H(14B)	108.1	B(8)-B(5)-B(9)	60.54(7)
C(14)-C(15)-C(10)	111.89(9)	C(1)-B(5)-B(6)	59.41(6)
C(14)-C(15)-H(15A)	109.2	B(8)-B(5)-B(6)	108.62(8)
C(10)-C(15)-H(15A)	109.2	B(9)-B(5)-B(6)	59.91(7)
C(14)-C(15)-H(15B)	109.2	C(1)-B(5)-B(4)	58.81(6)

B(8)-B(5)-B(4)	60.31(6)	B(5)-B(8)-B(4)	60.05(6)
B(9)-B(5)-B(4)	109.00(8)	B(12)-B(8)-B(4)	107.96(8)
B(6)-B(5)-B(4)	109.01(8)	B(5)-B(8)-B(9)	59.80(7)
C(1)-B(5)-H(5)	124.4	B(12)-B(8)-B(9)	60.23(7)
B(8)-B(5)-H(5)	122.0	B(4)-B(8)-B(9)	108.21(8)
B(9)-B(5)-H(5)	121.9	B(5)-B(8)-B(7)	107.76(8)
B(6)-B(5)-H(5)	121.0	B(12)-B(8)-B(7)	60.21(7)
B(4)-B(5)-H(5)	120.9	B(4)-B(8)-B(7)	59.77(6)
C(2)-B(6)-C(1)	56.49(6)	B(9)-B(8)-B(7)	108.47(8)
C(2)-B(6)-B(9)	104.18(8)	B(5)-B(8)-H(8)	122.0
C(1)-B(6)-B(9)	104.61(8)	B(12)-B(8)-H(8)	121.7
C(2)-B(6)-B(5)	103.43(8)	B(4)-B(8)-H(8)	121.7
C(1)-B(6)-B(5)	58.34(6)	B(9)-B(8)-H(8)	121.4
B(9)-B(6)-B(5)	59.98(7)	B(7)-B(8)-H(8)	121.6
C(2)-B(6)-B(10)	58.23(6)	B(6)-B(9)-B(5)	60.11(6)
C(1)-B(6)-B(10)	104.15(8)	B(6)-B(9)-B(10)	60.11(7)
B(9)-B(6)-B(10)	60.27(7)	B(5)-B(9)-B(10)	107.63(8)
B(5)-B(6)-B(10)	107.65(8)	B(6)-B(9)-B(8)	108.08(8)
C(2)-B(6)-H(6)	125.4	B(5)-B(9)-B(8)	59.67(6)
C(1)-B(6)-H(6)	124.9	B(10)-B(9)-B(8)	107.62(8)
B(9)-B(6)-H(6)	122.8	B(6)-B(9)-B(12)	107.92(8)
B(5)-B(6)-H(6)	122.6	B(5)-B(9)-B(12)	107.19(8)
B(10)-B(6)-H(6)	122.2	B(10)-B(9)-B(12)	59.77(7)
B(3)-B(7)-B(4)	60.35(6)	B(8)-B(9)-B(12)	59.69(7)
B(3)-B(7)-B(11)	60.12(7)	B(6)-B(9)-H(9)	121.5
B(4)-B(7)-B(11)	107.94(8)	B(5)-B(9)-H(9)	122.1
B(3)-B(7)-B(12)	108.05(8)	B(10)-B(9)-H(9)	121.9
B(4)-B(7)-B(12)	107.49(8)	B(8)-B(9)-H(9)	121.9
B(11)-B(7)-B(12)	59.80(7)	B(12)-B(9)-H(9)	122.1
B(3)-B(7)-B(8)	108.21(8)	C(2)-B(10)-B(12)	103.92(8)
B(4)-B(7)-B(8)	59.85(6)	C(2)-B(10)-B(6)	59.18(6)
B(11)-B(7)-B(8)	107.47(8)	B(12)-B(10)-B(6)	107.93(8)
B(12)-B(7)-B(8)	59.54(6)	C(2)-B(10)-B(9)	104.41(8)
B(3)-B(7)-H(7)	121.3	B(12)-B(10)-B(9)	60.27(7)
B(4)-B(7)-H(7)	121.8	B(6)-B(10)-B(9)	59.63(7)
B(11)-B(7)-H(7)	121.9	C(2)-B(10)-B(11)	58.15(6)
B(12)-B(7)-H(7)	122.1	B(12)-B(10)-B(11)	59.94(7)
B(8)-B(7)-H(7)	122.0	B(6)-B(10)-B(11)	108.28(8)
B(5)-B(8)-B(12)	107.72(8)	B(9)-B(10)-B(11)	108.25(8)

C(2)-B(10)-H(10)	125.2	B(7)-B(11)-H(11)	122.5
B(12)-B(10)-H(10)	122.6	B(10)-B(11)-H(11)	121.3
B(6)-B(10)-H(10)	121.3	B(8)-B(12)-B(10)	108.07(8)
B(9)-B(10)-H(10)	122.3	B(8)-B(12)-B(11)	108.13(8)
B(11)-B(10)-H(10)	121.4	B(10)-B(12)-B(11)	60.26(7)
C(2)-B(11)-B(3)	59.24(6)	B(8)-B(12)-B(9)	60.08(7)
C(2)-B(11)-B(12)	104.06(8)	B(10)-B(12)-B(9)	59.96(7)
B(3)-B(11)-B(12)	107.94(8)	B(11)-B(12)-B(9)	108.25(8)
C(2)-B(11)-B(7)	104.36(8)	B(8)-B(12)-B(7)	60.25(7)
B(3)-B(11)-B(7)	59.49(7)	B(10)-B(12)-B(7)	108.24(8)
B(12)-B(11)-B(7)	60.30(7)	B(11)-B(12)-B(7)	59.90(7)
C(2)-B(11)-B(10)	58.47(7)	B(9)-B(12)-B(7)	108.39(8)
B(3)-B(11)-B(10)	108.56(8)	B(8)-B(12)-H(12)	121.6
B(12)-B(11)-B(10)	59.80(7)	B(10)-B(12)-H(12)	121.6
B(7)-B(11)-B(10)	108.19(8)	B(11)-B(12)-H(12)	121.6
C(2)-B(11)-H(11)	125.1	B(9)-B(12)-H(12)	121.6
B(3)-B(11)-H(11)	121.2	B(7)-B(12)-H(12)	121.5
B(12)-B(11)-H(11)	122.6		

Compound **4a**

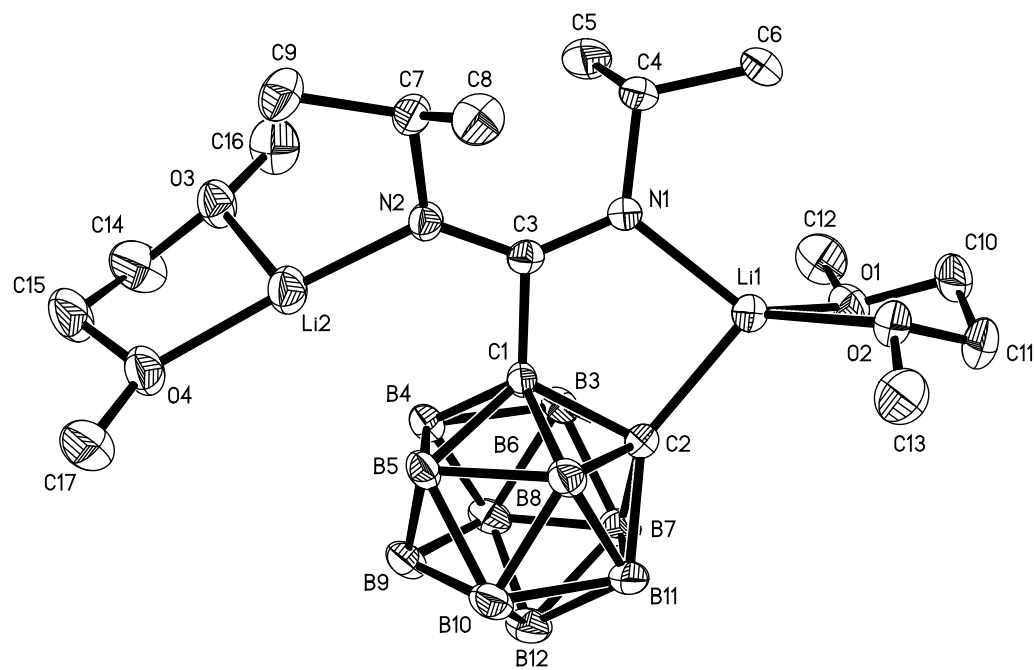


Table 5. Crystal data and structure refinement for **4a**.

Identification code	ip245	
Empirical formula	C ₁₇ H ₄₄ B ₁₀ Li ₂ N ₂ O ₄	
Formula weight	462.52	
Temperature	143(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	
Unit cell dimensions	a = 10.182(2) Å	α = 90°
	b = 13.527(3) Å	β = 90°
	c = 20.850(4) Å	γ = 90°
Volume	2871.8(10) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.070 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.064 mm ⁻¹	
F(000)	992	
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.30 mm ³	
Theta range for data collection	1.95 to 29.24°	
Index ranges	-13 ≤ h ≤ 13, -18 ≤ k ≤ 18, -28 ≤ l ≤ 28	
Reflections collected	30080	
Independent reflections	7686 [R(int) = 0.0697]	
Completeness to theta = 29.24°	99.1 %	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	7686 / 0 / 372	
Goodness-of-fit on F ²	1.082	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0573, wR2 = 0.1037	
R indices (all data)	R1 = 0.0764, wR2 = 0.1092	
Absolute structure parameter	-0.3(8)	
Largest diff. peak and hole	0.209 and -0.160 e.Å ⁻³	

Table 6. Bond lengths [Å] and angles [°] for **4a**.

N(1)-C(3)	1.317(2)	C(10)-H(10A)	0.9900
N(1)-C(4)	1.467(2)	C(10)-H(10B)	0.9900
N(1)-Li(1)	1.988(3)	C(11)-O(2)	1.421(2)
N(2)-C(3)	1.3232(19)	C(11)-H(11A)	0.9900
N(2)-C(7)	1.466(2)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(2)-Li(2)	1.947(3)	C(12)-O(1)	1.422(2)
C(1)-C(3)	1.549(2)	C(12)-H(12A)	0.9800
C(1)-C(2)	1.687(2)	C(12)-H(12B)	0.9800
C(1)-B(6)	1.692(3)	C(12)-H(12C)	0.9800
C(1)-B(3)	1.692(2)	C(13)-O(2)	1.426(2)
C(1)-B(4)	1.707(3)	C(13)-H(13A)	0.9800
C(1)-B(5)	1.715(2)	C(13)-H(13B)	0.9800
C(2)-B(3)	1.703(3)	C(13)-H(13C)	0.9800
C(2)-B(7)	1.714(3)	C(14)-O(3)	1.414(3)
C(2)-B(11)	1.715(3)	C(14)-C(15)	1.482(4)
C(2)-B(6)	1.721(3)	C(14)-Li(2)	2.759(4)
C(2)-Li(1)	2.067(3)	C(14)-H(14A)	0.9900
C(4)-C(6)	1.517(3)	C(14)-H(14B)	0.9900
C(4)-C(5)	1.525(3)	C(15)-O(4)	1.423(3)
C(4)-H(4A)	0.988(19)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(5)-H(5A)	0.9800	C(15)-H(15B)	0.9900
C(5)-H(5B)	0.9800	C(16)-O(3)	1.414(2)
C(5)-H(5C)	0.9800	C(16)-H(16A)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800	C(16)-H(16B)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800	C(16)-H(16C)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800	C(17)-O(4)	1.412(2)
C(7)-C(8)	1.525(3)	C(17)-H(17A)	0.9800
C(7)-C(9)	1.526(2)	C(17)-H(17B)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.950(18)	C(17)-H(17C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800	O(1)-Li(1)	2.015(3)
C(8)-H(8B)	0.9800	O(2)-Li(1)	1.973(3)
C(8)-H(8C)	0.9800	O(3)-Li(2)	1.980(3)
C(9)-H(9A)	0.9800	O(4)-Li(2)	1.973(3)
C(9)-H(9B)	0.9800	B(3)-B(7)	1.753(3)
C(9)-H(9C)	0.9800	B(3)-B(4)	1.788(3)
C(10)-O(1)	1.424(2)	B(3)-B(8)	1.788(3)
C(10)-C(11)	1.494(3)	B(3)-H(3)	1.09(2)

B(4)-B(5)	1.766(3)	B(7)-H(7)	1.08(2)
B(4)-B(9)	1.769(3)	B(8)-B(9)	1.786(3)
B(4)-B(8)	1.771(3)	B(8)-B(12)	1.789(3)
B(4)-Li(2)	2.715(4)	B(8)-H(8)	1.10(2)
B(4)-H(4)	1.11(2)	B(9)-B(12)	1.778(3)
B(5)-B(10)	1.766(3)	B(9)-B(10)	1.793(3)
B(5)-B(9)	1.766(3)	B(9)-H(9)	1.05(2)
B(5)-B(6)	1.787(3)	B(10)-B(11)	1.768(3)
B(5)-Li(2)	2.742(4)	B(10)-B(12)	1.778(3)
B(5)-H(5)	1.046(19)	B(10)-H(10)	1.08(2)
B(6)-B(11)	1.760(3)	B(11)-B(12)	1.787(3)
B(6)-B(10)	1.792(3)	B(11)-H(11)	1.10(2)
B(6)-H(6)	1.11(2)	B(12)-H(12)	1.10(2)
B(7)-B(11)	1.751(3)	Li(2)-H(4)	2.22(2)
B(7)-B(8)	1.771(3)	Li(2)-H(5)	2.25(2)
B(7)-B(12)	1.771(3)		
C(3)-N(1)-C(4)	120.47(13)	C(1)-C(2)-B(7)	107.72(13)
C(3)-N(1)-Li(1)	118.74(13)	B(3)-C(2)-B(7)	61.71(12)
C(4)-N(1)-Li(1)	120.53(13)	C(1)-C(2)-B(11)	107.69(13)
C(3)-N(2)-C(7)	120.72(13)	B(3)-C(2)-B(11)	111.75(14)
C(3)-N(2)-Li(2)	124.92(14)	B(7)-C(2)-B(11)	61.43(13)
C(7)-N(2)-Li(2)	114.29(13)	C(1)-C(2)-B(6)	59.53(10)
C(3)-C(1)-C(2)	116.85(13)	B(3)-C(2)-B(6)	111.01(13)
C(3)-C(1)-B(6)	116.61(13)	B(7)-C(2)-B(6)	111.35(14)
C(2)-C(1)-B(6)	61.24(10)	B(11)-C(2)-B(6)	61.62(11)
C(3)-C(1)-B(3)	117.15(13)	C(1)-C(2)-Li(1)	101.14(12)
C(2)-C(1)-B(3)	60.55(11)	B(3)-C(2)-Li(1)	105.92(14)
B(6)-C(1)-B(3)	113.02(13)	B(7)-C(2)-Li(1)	133.10(14)
C(3)-C(1)-B(4)	121.10(13)	B(11)-C(2)-Li(1)	140.45(15)
C(2)-C(1)-B(4)	112.05(13)	B(6)-C(2)-Li(1)	115.06(14)
B(6)-C(1)-B(4)	114.54(13)	N(1)-C(3)-N(2)	136.18(15)
B(3)-C(1)-B(4)	63.46(11)	N(1)-C(3)-C(1)	112.80(13)
C(3)-C(1)-B(5)	121.22(12)	N(2)-C(3)-C(1)	111.02(13)
C(2)-C(1)-B(5)	112.04(12)	N(1)-C(4)-C(6)	108.72(14)
B(6)-C(1)-B(5)	63.27(11)	N(1)-C(4)-C(5)	109.77(15)
B(3)-C(1)-B(5)	114.16(13)	C(6)-C(4)-C(5)	110.73(17)
B(4)-C(1)-B(5)	62.12(11)	N(1)-C(4)-H(4A)	112.9(11)
C(1)-C(2)-B(3)	59.89(10)	C(6)-C(4)-H(4A)	107.9(12)

C(5)-C(4)-H(4A)	106.7(12)	C(10)-C(11)-H(11A)	110.3
C(4)-C(5)-H(5A)	109.5	O(2)-C(11)-H(11B)	110.3
C(4)-C(5)-H(5B)	109.5	C(10)-C(11)-H(11B)	110.3
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5	H(11A)-C(11)-H(11B)	108.5
C(4)-C(5)-H(5C)	109.5	O(1)-C(12)-H(12A)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5	O(1)-C(12)-H(12B)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
C(4)-C(6)-H(6A)	109.5	O(1)-C(12)-H(12C)	109.5
C(4)-C(6)-H(6B)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5	H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(4)-C(6)-H(6C)	109.5	O(2)-C(13)-H(13A)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5	O(2)-C(13)-H(13B)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5	H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
N(2)-C(7)-C(8)	110.73(14)	O(2)-C(13)-H(13C)	109.5
N(2)-C(7)-C(9)	108.62(14)	H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
C(8)-C(7)-C(9)	109.24(14)	H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
N(2)-C(7)-H(7A)	112.6(10)	O(3)-C(14)-C(15)	107.0(2)
C(8)-C(7)-H(7A)	109.8(11)	O(3)-C(14)-Li(2)	43.18(11)
C(9)-C(7)-H(7A)	105.6(10)	C(15)-C(14)-Li(2)	76.47(14)
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	O(3)-C(14)-H(14A)	110.3
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	C(15)-C(14)-H(14A)	110.3
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5	Li(2)-C(14)-H(14A)	93.9
C(7)-C(8)-H(8C)	109.5	O(3)-C(14)-H(14B)	110.3
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5	C(15)-C(14)-H(14B)	110.3
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5	Li(2)-C(14)-H(14B)	151.4
C(7)-C(9)-H(9A)	109.5	H(14A)-C(14)-H(14B)	108.6
C(7)-C(9)-H(9B)	109.5	O(4)-C(15)-C(14)	107.41(18)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5	O(4)-C(15)-H(15A)	110.2
C(7)-C(9)-H(9C)	109.5	C(14)-C(15)-H(15A)	110.2
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5	O(4)-C(15)-H(15B)	110.2
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5	C(14)-C(15)-H(15B)	110.2
O(1)-C(10)-C(11)	107.14(16)	H(15A)-C(15)-H(15B)	108.5
O(1)-C(10)-H(10A)	110.3	O(3)-C(16)-H(16A)	109.5
C(11)-C(10)-H(10A)	110.3	O(3)-C(16)-H(16B)	109.5
O(1)-C(10)-H(10B)	110.3	H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
C(11)-C(10)-H(10B)	110.3	O(3)-C(16)-H(16C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	108.5	H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
O(2)-C(11)-C(10)	107.26(15)	H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
O(2)-C(11)-H(11A)	110.3	O(4)-C(17)-H(17A)	109.5

O(4)-C(17)-H(17B)	109.5	B(5)-B(4)-B(3)	107.22(14)
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5	B(9)-B(4)-B(3)	108.25(14)
O(4)-C(17)-H(17C)	109.5	B(8)-B(4)-B(3)	60.34(11)
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5	C(1)-B(4)-Li(2)	84.27(11)
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5	B(5)-B(4)-Li(2)	71.96(11)
C(12)-O(1)-C(10)	113.81(15)	B(9)-B(4)-Li(2)	112.51(13)
C(12)-O(1)-Li(1)	123.53(15)	B(8)-B(4)-Li(2)	169.16(14)
C(10)-O(1)-Li(1)	107.66(14)	B(3)-B(4)-Li(2)	130.32(13)
C(11)-O(2)-C(13)	112.39(15)	C(1)-B(4)-H(4)	119.2(10)
C(11)-O(2)-Li(1)	110.30(14)	B(5)-B(4)-H(4)	123.0(10)
C(13)-O(2)-Li(1)	119.43(15)	B(9)-B(4)-H(4)	127.9(10)
C(14)-O(3)-C(16)	114.78(18)	B(8)-B(4)-H(4)	123.6(10)
C(14)-O(3)-Li(2)	107.57(15)	B(3)-B(4)-H(4)	117.1(10)
C(16)-O(3)-Li(2)	122.75(15)	Li(2)-B(4)-H(4)	52.5(10)
C(17)-O(4)-C(15)	112.72(16)	C(1)-B(5)-B(4)	58.70(10)
C(17)-O(4)-Li(2)	131.60(16)	C(1)-B(5)-B(10)	105.05(13)
C(15)-O(4)-Li(2)	110.61(15)	B(4)-B(5)-B(10)	108.60(14)
C(1)-B(3)-C(2)	59.56(10)	C(1)-B(5)-B(9)	105.40(13)
C(1)-B(3)-B(7)	105.71(14)	B(4)-B(5)-B(9)	60.12(11)
C(2)-B(3)-B(7)	59.44(12)	B(10)-B(5)-B(9)	60.99(12)
C(1)-B(3)-B(4)	58.67(10)	C(1)-B(5)-B(6)	57.72(10)
C(2)-B(3)-B(4)	107.41(13)	B(4)-B(5)-B(6)	107.15(13)
B(7)-B(3)-B(4)	107.22(14)	B(10)-B(5)-B(6)	60.59(11)
C(1)-B(3)-B(8)	105.22(13)	B(9)-B(5)-B(6)	108.97(14)
C(2)-B(3)-B(8)	107.33(14)	C(1)-B(5)-Li(2)	83.26(11)
B(7)-B(3)-B(8)	59.99(12)	B(4)-B(5)-Li(2)	70.29(11)
B(4)-B(3)-B(8)	59.37(11)	B(10)-B(5)-Li(2)	169.75(14)
C(1)-B(3)-H(3)	121.0(12)	B(9)-B(5)-Li(2)	111.42(13)
C(2)-B(3)-H(3)	121.2(13)	B(6)-B(5)-Li(2)	129.66(13)
B(7)-B(3)-H(3)	124.8(11)	C(1)-B(5)-H(5)	118.5(11)
B(4)-B(3)-H(3)	121.0(12)	B(4)-B(5)-H(5)	120.3(11)
B(8)-B(3)-H(3)	124.6(13)	B(10)-B(5)-H(5)	126.1(11)
C(1)-B(4)-B(5)	59.18(10)	B(9)-B(5)-H(5)	127.0(12)
C(1)-B(4)-B(9)	105.66(14)	B(6)-B(5)-H(5)	118.7(11)
B(5)-B(4)-B(9)	59.96(11)	Li(2)-B(5)-H(5)	51.5(11)
C(1)-B(4)-B(8)	105.36(14)	C(1)-B(6)-C(2)	59.23(10)
B(5)-B(4)-B(8)	108.40(14)	C(1)-B(6)-B(11)	105.43(14)
B(9)-B(4)-B(8)	60.59(12)	C(2)-B(6)-B(11)	59.02(11)
C(1)-B(4)-B(3)	57.87(10)	C(1)-B(6)-B(5)	59.01(10)

C(2)-B(6)-B(5)	107.05(14)	B(3)-B(8)-H(8)	122.7(11)
B(11)-B(6)-B(5)	107.03(14)	B(12)-B(8)-H(8)	122.4(11)
C(1)-B(6)-B(10)	104.90(14)	B(5)-B(9)-B(4)	59.93(11)
C(2)-B(6)-B(10)	106.25(14)	B(5)-B(9)-B(12)	107.55(15)
B(11)-B(6)-B(10)	59.70(12)	B(4)-B(9)-B(12)	107.83(14)
B(5)-B(6)-B(10)	59.12(11)	B(5)-B(9)-B(8)	107.72(14)
C(1)-B(6)-H(6)	118.2(10)	B(4)-B(9)-B(8)	59.76(11)
C(2)-B(6)-H(6)	120.1(10)	B(12)-B(9)-B(8)	60.27(13)
B(11)-B(6)-H(6)	126.6(10)	B(5)-B(9)-B(10)	59.49(12)
B(5)-B(6)-H(6)	120.8(10)	B(4)-B(9)-B(10)	107.27(14)
B(10)-B(6)-H(6)	127.8(10)	B(12)-B(9)-B(10)	59.71(13)
C(2)-B(7)-B(11)	59.31(12)	B(8)-B(9)-B(10)	107.63(15)
C(2)-B(7)-B(3)	58.85(11)	B(5)-B(9)-H(9)	119.7(10)
B(11)-B(7)-B(3)	107.72(14)	B(4)-B(9)-H(9)	120.8(10)
C(2)-B(7)-B(8)	107.67(13)	B(12)-B(9)-H(9)	123.9(10)
B(11)-B(7)-B(8)	109.37(15)	B(8)-B(9)-H(9)	123.4(11)
B(3)-B(7)-B(8)	61.01(12)	B(10)-B(9)-H(9)	121.9(11)
C(2)-B(7)-B(12)	107.82(15)	B(5)-B(10)-B(11)	107.60(14)
B(11)-B(7)-B(12)	60.96(13)	B(5)-B(10)-B(12)	107.59(15)
B(3)-B(7)-B(12)	109.27(15)	B(11)-B(10)-B(12)	60.51(13)
B(8)-B(7)-B(12)	60.69(12)	B(5)-B(10)-B(6)	60.30(11)
C(2)-B(7)-H(7)	117.4(12)	B(11)-B(10)-B(6)	59.23(11)
B(11)-B(7)-H(7)	120.9(12)	B(12)-B(10)-B(6)	107.75(15)
B(3)-B(7)-H(7)	118.3(12)	B(5)-B(10)-B(9)	59.51(11)
B(8)-B(7)-H(7)	124.3(12)	B(11)-B(10)-B(9)	107.80(15)
B(12)-B(7)-H(7)	126.1(12)	B(12)-B(10)-B(9)	59.74(12)
B(7)-B(8)-B(4)	107.16(15)	B(6)-B(10)-B(9)	107.57(14)
B(7)-B(8)-B(9)	107.09(16)	B(5)-B(10)-H(10)	120.7(11)
B(4)-B(8)-B(9)	59.65(11)	B(11)-B(10)-H(10)	120.5(12)
B(7)-B(8)-B(3)	59.00(12)	B(12)-B(10)-H(10)	124.9(11)
B(4)-B(8)-B(3)	60.29(11)	B(6)-B(10)-H(10)	118.0(12)
B(9)-B(8)-B(3)	107.47(14)	B(9)-B(10)-H(10)	125.3(12)
B(7)-B(8)-B(12)	59.66(13)	C(2)-B(11)-B(7)	59.26(12)
B(4)-B(8)-B(12)	107.26(15)	C(2)-B(11)-B(6)	59.36(11)
B(9)-B(8)-B(12)	59.65(12)	B(7)-B(11)-B(6)	107.78(14)
B(3)-B(8)-B(12)	106.87(16)	C(2)-B(11)-B(10)	107.59(13)
B(7)-B(8)-H(8)	123.5(10)	B(7)-B(11)-B(10)	108.10(15)
B(4)-B(8)-H(8)	121.2(10)	B(6)-B(11)-B(10)	61.07(12)
B(9)-B(8)-H(8)	121.2(11)	C(2)-B(11)-B(12)	107.07(15)

B(7)-B(11)-B(12)	60.07(13)	N(2)-Li(2)-O(4)	160.3(2)
B(6)-B(11)-B(12)	108.80(15)	N(2)-Li(2)-O(3)	112.54(17)
B(10)-B(11)-B(12)	60.01(13)	O(4)-Li(2)-O(3)	83.02(13)
C(2)-B(11)-H(11)	118.8(11)	N(2)-Li(2)-B(4)	82.25(11)
B(7)-B(11)-H(11)	122.6(11)	O(4)-Li(2)-B(4)	104.74(14)
B(6)-B(11)-H(11)	118.0(11)	O(3)-Li(2)-B(4)	108.75(14)
B(10)-B(11)-H(11)	123.3(11)	N(2)-Li(2)-B(5)	76.86(11)
B(12)-B(11)-H(11)	126.1(11)	O(4)-Li(2)-B(5)	97.25(13)
B(7)-B(12)-B(10)	106.81(15)	O(3)-Li(2)-B(5)	145.64(16)
B(7)-B(12)-B(9)	107.41(15)	B(4)-Li(2)-B(5)	37.75(7)
B(10)-B(12)-B(9)	60.54(12)	N(2)-Li(2)-C(14)	141.11(17)
B(7)-B(12)-B(11)	58.98(13)	O(4)-Li(2)-C(14)	56.43(10)
B(10)-B(12)-B(11)	59.48(12)	O(3)-Li(2)-C(14)	29.26(8)
B(9)-B(12)-B(11)	107.62(15)	B(4)-Li(2)-C(14)	101.71(13)
B(7)-B(12)-B(8)	59.65(13)	B(5)-Li(2)-C(14)	128.67(14)
B(10)-B(12)-B(8)	108.13(15)	N(2)-Li(2)-H(4)	92.4(5)
B(9)-B(12)-B(8)	60.08(12)	O(4)-Li(2)-H(4)	101.1(5)
B(11)-B(12)-B(8)	106.97(15)	O(3)-Li(2)-H(4)	85.5(6)
B(7)-B(12)-H(12)	119.2(12)	B(4)-Li(2)-H(4)	23.3(5)
B(10)-B(12)-H(12)	124.3(12)	B(5)-Li(2)-H(4)	60.6(5)
B(9)-B(12)-H(12)	124.5(12)	C(14)-Li(2)-H(4)	80.7(5)
B(11)-B(12)-H(12)	121.1(12)	N(2)-Li(2)-H(5)	81.3(5)
B(8)-B(12)-H(12)	121.1(12)	O(4)-Li(2)-H(5)	86.7(5)
O(2)-Li(1)-N(1)	123.84(16)	O(3)-Li(2)-H(5)	161.0(5)
O(2)-Li(1)-O(1)	83.11(12)	B(4)-Li(2)-H(5)	58.7(5)
N(1)-Li(1)-O(1)	129.15(17)	B(5)-Li(2)-H(5)	21.4(5)
O(2)-Li(1)-C(2)	121.27(16)	C(14)-Li(2)-H(5)	134.0(5)
N(1)-Li(1)-C(2)	89.27(12)	H(4)-Li(2)-H(5)	80.8(7)
O(1)-Li(1)-C(2)	113.95(15)		

Compound 5

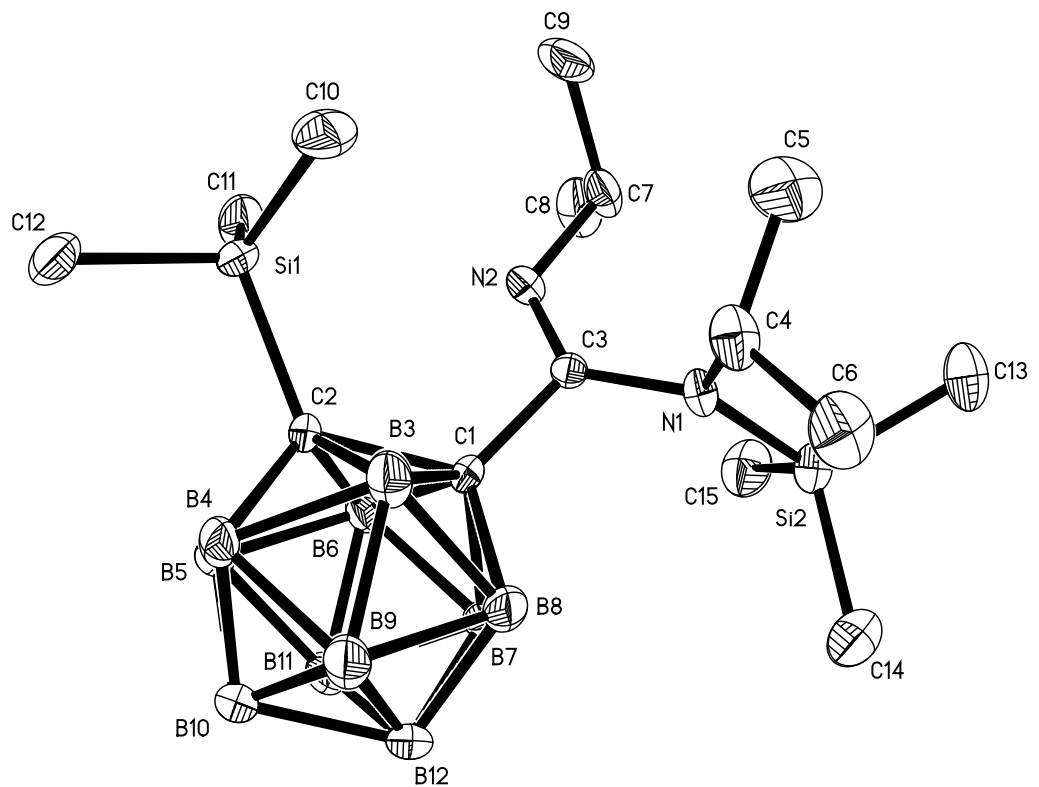


Table 7. Crystal data and structure refinement for **5**.

Identification code	ip187	
Empirical formula	C ₁₅ H ₄₂ B ₁₀ N ₂ Si ₂	
Formula weight	414.79	
Temperature	143(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2 ₁ /n	
Unit cell dimensions	a = 15.616(3) Å	α = 90°
	b = 9.2632(19) Å	β = 111.97(3)°
	c = 19.139(4) Å	γ = 90°
Volume	2567.4(9) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.073 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.144 mm ⁻¹	
F(000)	896	
Crystal size	0.50 x 0.35 x 0.34 mm ³	
Theta range for data collection	2.12 to 26.37°	
Index ranges	-19 ≤ h ≤ 19, -10 ≤ k ≤ 11, -23 ≤ l ≤ 20	
Reflections collected	13083	
Independent reflections	5204 [R(int) = 0.0842]	
Completeness to theta = 26.00°	98.9 %	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	5204 / 0 / 312	
Goodness-of-fit on F ²	0.916	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0603, wR2 = 0.0874	
R indices (all data)	R1 = 0.1222, wR2 = 0.0998	
Largest diff. peak and hole	0.270 and -0.265 e.Å ⁻³	

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [°] for **5**.

Si(1)-C(11)	1.840(3)	C(9)-H(9A)	0.9800
Si(1)-C(10)	1.859(3)	C(9)-H(9B)	0.9800
Si(1)-C(12)	1.866(3)	C(9)-H(9C)	0.9800
Si(1)-C(2)	1.924(3)	C(10)-H(10A)	0.9800
Si(2)-N(1)	1.758(2)	C(10)-H(10B)	0.9800
Si(2)-C(15)	1.853(3)	C(10)-H(10C)	0.9800
Si(2)-C(14)	1.860(3)	C(11)-H(11A)	0.9800
Si(2)-C(13)	1.867(3)	C(11)-H(11B)	0.9800
N(1)-C(3)	1.425(3)	C(11)-H(11C)	0.9800
N(1)-C(4)	1.502(4)	C(12)-H(12A)	0.9800
N(2)-C(3)	1.249(3)	C(12)-H(12B)	0.9800
N(2)-C(7)	1.475(3)	C(12)-H(12C)	0.9800
C(1)-C(3)	1.547(3)	C(13)-H(13A)	0.9800
C(1)-B(8)	1.690(4)	C(13)-H(13B)	0.9800
C(1)-C(2)	1.698(3)	C(13)-H(13C)	0.9800
C(1)-B(7)	1.698(4)	C(14)-H(14A)	0.9800
C(1)-B(3)	1.712(4)	C(14)-H(14B)	0.9800
C(1)-B(6)	1.739(4)	C(14)-H(14C)	0.9800
C(2)-B(5)	1.717(4)	C(15)-H(15A)	0.9800
C(2)-B(4)	1.719(4)	C(15)-H(15B)	0.9800
C(2)-B(3)	1.724(4)	C(15)-H(15C)	0.9800
C(2)-B(6)	1.727(4)	B(3)-B(8)	1.776(5)
C(4)-C(5)	1.511(4)	B(3)-B(4)	1.780(4)
C(4)-C(6)	1.526(4)	B(3)-B(9)	1.783(5)
C(4)-H(4)	1.0000	B(3)-H(13)	1.10(3)
C(5)-H(5A)	0.9800	B(4)-B(5)	1.751(5)
C(5)-H(5B)	0.9800	B(4)-B(10)	1.769(5)
C(5)-H(5C)	0.9800	B(4)-B(9)	1.771(5)
C(6)-H(6A)	0.9800	B(4)-H(14)	1.04(3)
C(6)-H(6B)	0.9800	B(5)-B(10)	1.762(5)
C(6)-H(6C)	0.9800	B(5)-B(11)	1.766(4)
C(7)-C(8)	1.507(4)	B(5)-B(6)	1.773(4)
C(7)-C(9)	1.526(4)	B(5)-H(15)	1.11(2)
C(7)-H(7)	1.0000	B(6)-B(11)	1.768(5)
C(8)-H(8A)	0.9800	B(6)-B(7)	1.782(5)
C(8)-H(8B)	0.9800	B(6)-H(16)	1.05(3)
C(8)-H(8C)	0.9800	B(7)-B(8)	1.752(6)

B(7)-B(12)	1.774(5)	B(9)-H(19)	1.04(3)
B(7)-B(11)	1.775(4)	B(10)-B(12)	1.761(4)
B(7)-H(17)	1.08(3)	B(10)-B(11)	1.773(6)
B(8)-B(12)	1.757(5)	B(10)-H(20)	1.04(2)
B(8)-B(9)	1.769(5)	B(11)-B(12)	1.789(6)
B(8)-H(18)	1.07(3)	B(11)-H(21)	1.07(3)
B(9)-B(12)	1.763(7)	B(12)-H(22)	1.04(3)
B(9)-B(10)	1.784(6)		
C(11)-Si(1)-C(10)	116.43(15)	B(3)-C(1)-B(6)	112.43(19)
C(11)-Si(1)-C(12)	106.09(14)	C(1)-C(2)-B(5)	109.38(19)
C(10)-Si(1)-C(12)	106.78(15)	C(1)-C(2)-B(4)	109.0(2)
C(11)-Si(1)-C(2)	111.37(14)	B(5)-C(2)-B(4)	61.27(19)
C(10)-Si(1)-C(2)	109.13(13)	C(1)-C(2)-B(3)	60.02(16)
C(12)-Si(1)-C(2)	106.44(12)	B(5)-C(2)-B(3)	112.4(2)
N(1)-Si(2)-C(15)	108.76(12)	B(4)-C(2)-B(3)	62.27(18)
N(1)-Si(2)-C(14)	113.85(13)	C(1)-C(2)-B(6)	61.00(16)
C(15)-Si(2)-C(14)	108.03(17)	B(5)-C(2)-B(6)	61.95(17)
N(1)-Si(2)-C(13)	110.65(13)	B(4)-C(2)-B(6)	112.2(2)
C(15)-Si(2)-C(13)	108.03(15)	B(3)-C(2)-B(6)	112.4(2)
C(14)-Si(2)-C(13)	107.35(15)	C(1)-C(2)-Si(1)	124.97(15)
C(3)-N(1)-C(4)	112.68(19)	B(5)-C(2)-Si(1)	117.42(17)
C(3)-N(1)-Si(2)	124.06(18)	B(4)-C(2)-Si(1)	117.81(18)
C(4)-N(1)-Si(2)	123.26(16)	B(3)-C(2)-Si(1)	119.92(19)
C(3)-N(2)-C(7)	123.7(2)	B(6)-C(2)-Si(1)	119.3(2)
C(3)-C(1)-B(8)	122.1(2)	N(2)-C(3)-N(1)	129.8(2)
C(3)-C(1)-C(2)	120.6(2)	N(2)-C(3)-C(1)	114.7(2)
B(8)-C(1)-C(2)	110.75(19)	N(1)-C(3)-C(1)	115.4(2)
C(3)-C(1)-B(7)	116.6(2)	N(1)-C(4)-C(5)	112.3(3)
B(8)-C(1)-B(7)	62.2(2)	N(1)-C(4)-C(6)	113.6(2)
C(2)-C(1)-B(7)	110.42(18)	C(5)-C(4)-C(6)	110.5(2)
C(3)-C(1)-B(3)	122.4(2)	N(1)-C(4)-H(4)	106.7
B(8)-C(1)-B(3)	62.9(2)	C(5)-C(4)-H(4)	106.7
C(2)-C(1)-B(3)	60.73(16)	C(6)-C(4)-H(4)	106.7
B(7)-C(1)-B(3)	113.9(2)	C(4)-C(5)-H(5A)	109.5
C(3)-C(1)-B(6)	114.1(2)	C(4)-C(5)-H(5B)	109.5
B(8)-C(1)-B(6)	113.3(2)	H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
C(2)-C(1)-B(6)	60.32(16)	C(4)-C(5)-H(5C)	109.5
B(7)-C(1)-B(6)	62.44(19)	H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5

H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
C(4)-C(6)-H(6A)	109.5	Si(1)-C(12)-H(12C)	109.5
C(4)-C(6)-H(6B)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5	H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(4)-C(6)-H(6C)	109.5	Si(2)-C(13)-H(13A)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5	Si(2)-C(13)-H(13B)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5	H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
N(2)-C(7)-C(8)	108.2(2)	Si(2)-C(13)-H(13C)	109.5
N(2)-C(7)-C(9)	109.3(2)	H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
C(8)-C(7)-C(9)	109.5(3)	H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
N(2)-C(7)-H(7)	109.9	Si(2)-C(14)-H(14A)	109.5
C(8)-C(7)-H(7)	109.9	Si(2)-C(14)-H(14B)	109.5
C(9)-C(7)-H(7)	109.9	H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	Si(2)-C(14)-H(14C)	109.5
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(7)-C(8)-H(8C)	109.5	Si(2)-C(15)-H(15A)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5	Si(2)-C(15)-H(15B)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5	H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
C(7)-C(9)-H(9A)	109.5	Si(2)-C(15)-H(15C)	109.5
C(7)-C(9)-H(9B)	109.5	H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5	H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
C(7)-C(9)-H(9C)	109.5	C(1)-B(3)-C(2)	59.25(16)
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5	C(1)-B(3)-B(8)	57.94(19)
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5	C(2)-B(3)-B(8)	105.6(3)
Si(1)-C(10)-H(10A)	109.5	C(1)-B(3)-B(4)	105.6(2)
Si(1)-C(10)-H(10B)	109.5	C(2)-B(3)-B(4)	58.72(17)
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5	B(8)-B(3)-B(4)	106.9(3)
Si(1)-C(10)-H(10C)	109.5	C(1)-B(3)-B(9)	104.9(3)
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5	C(2)-B(3)-B(9)	105.6(2)
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5	B(8)-B(3)-B(9)	59.6(2)
Si(1)-C(11)-H(11A)	109.5	B(4)-B(3)-B(9)	59.61(18)
Si(1)-C(11)-H(11B)	109.5	C(1)-B(3)-H(13)	120.2(13)
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5	C(2)-B(3)-H(13)	118.6(14)
Si(1)-C(11)-H(11C)	109.5	B(8)-B(3)-H(13)	124.9(13)
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5	B(4)-B(3)-H(13)	123.1(13)
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5	B(9)-B(3)-H(13)	128.0(15)
Si(1)-C(12)-H(12A)	109.5	C(2)-B(4)-B(5)	59.33(18)
Si(1)-C(12)-H(12B)	109.5	C(2)-B(4)-B(10)	106.3(3)

B(5)-B(4)-B(10)	60.1(2)	C(1)-B(6)-H(16)	119.4(14)
C(2)-B(4)-B(9)	106.3(2)	B(11)-B(6)-H(16)	127.6(15)
B(5)-B(4)-B(9)	108.6(3)	B(5)-B(6)-H(16)	125.5(14)
B(10)-B(4)-B(9)	60.5(2)	B(7)-B(6)-H(16)	122.3(14)
C(2)-B(4)-B(3)	59.01(16)	C(1)-B(7)-B(8)	58.64(19)
B(5)-B(4)-B(3)	108.2(2)	C(1)-B(7)-B(12)	105.3(3)
B(10)-B(4)-B(3)	108.6(2)	B(8)-B(7)-B(12)	59.8(2)
B(9)-B(4)-B(3)	60.29(19)	C(1)-B(7)-B(11)	106.1(2)
C(2)-B(4)-H(14)	115.6(16)	B(8)-B(7)-B(11)	108.4(3)
B(5)-B(4)-H(14)	119.7(17)	B(12)-B(7)-B(11)	60.5(2)
B(10)-B(4)-H(14)	128.8(14)	C(1)-B(7)-B(6)	59.88(17)
B(9)-B(4)-H(14)	127.1(17)	B(8)-B(7)-B(6)	108.3(2)
B(3)-B(4)-H(14)	117.5(15)	B(12)-B(7)-B(6)	108.0(2)
C(2)-B(5)-B(4)	59.40(17)	B(11)-B(7)-B(6)	59.63(18)
C(2)-B(5)-B(10)	106.7(3)	C(1)-B(7)-H(17)	116.6(13)
B(4)-B(5)-B(10)	60.5(2)	B(8)-B(7)-H(17)	119.9(15)
C(2)-B(5)-B(11)	106.25(19)	B(12)-B(7)-H(17)	128.6(14)
B(4)-B(5)-B(11)	108.7(3)	B(11)-B(7)-H(17)	126.9(14)
B(10)-B(5)-B(11)	60.3(2)	B(6)-B(7)-H(17)	118.0(15)
C(2)-B(5)-B(6)	59.29(16)	C(1)-B(8)-B(7)	59.11(19)
B(4)-B(5)-B(6)	108.5(2)	C(1)-B(8)-B(12)	106.4(3)
B(10)-B(5)-B(6)	108.5(2)	B(7)-B(8)-B(12)	60.7(2)
B(11)-B(5)-B(6)	59.96(17)	C(1)-B(8)-B(9)	106.4(2)
C(2)-B(5)-H(15)	115.3(12)	B(7)-B(8)-B(9)	108.8(3)
B(4)-B(5)-H(15)	123.7(13)	B(12)-B(8)-B(9)	60.0(2)
B(10)-B(5)-H(15)	131.4(12)	C(1)-B(8)-B(3)	59.12(18)
B(11)-B(5)-H(15)	124.2(13)	B(7)-B(8)-B(3)	108.2(2)
B(6)-B(5)-H(15)	113.2(13)	B(12)-B(8)-B(3)	108.4(2)
C(2)-B(6)-C(1)	58.68(16)	B(9)-B(8)-B(3)	60.39(19)
C(2)-B(6)-B(11)	105.7(2)	C(1)-B(8)-H(18)	119.9(15)
C(1)-B(6)-B(11)	104.7(3)	B(7)-B(8)-H(18)	120.8(16)
C(2)-B(6)-B(5)	58.75(16)	B(12)-B(8)-H(18)	125.2(15)
C(1)-B(6)-B(5)	105.1(2)	B(9)-B(8)-H(18)	124.1(16)
B(11)-B(6)-B(5)	59.83(18)	B(3)-B(8)-H(18)	119.4(15)
C(2)-B(6)-B(7)	105.3(3)	B(12)-B(9)-B(8)	59.7(2)
C(1)-B(6)-B(7)	57.68(17)	B(12)-B(9)-B(4)	107.3(3)
B(11)-B(6)-B(7)	59.99(18)	B(8)-B(9)-B(4)	107.5(3)
B(5)-B(6)-B(7)	107.2(3)	B(12)-B(9)-B(3)	107.8(3)
C(2)-B(6)-H(16)	120.4(15)	B(8)-B(9)-B(3)	59.99(19)

B(4)-B(9)-B(3)	60.10(18)	B(5)-B(11)-B(7)	107.8(2)
B(12)-B(9)-B(10)	59.5(2)	B(6)-B(11)-B(7)	60.38(17)
B(8)-B(9)-B(10)	107.1(3)	B(10)-B(11)-B(7)	107.4(3)
B(4)-B(9)-B(10)	59.7(2)	B(5)-B(11)-B(12)	106.9(3)
B(3)-B(9)-B(10)	107.7(3)	B(6)-B(11)-B(12)	108.0(2)
B(12)-B(9)-H(19)	122.5(18)	B(10)-B(11)-B(12)	59.3(2)
B(8)-B(9)-H(19)	121.4(15)	B(7)-B(11)-B(12)	59.7(2)
B(4)-B(9)-H(19)	122.2(17)	B(5)-B(11)-H(21)	124.2(15)
B(3)-B(9)-H(19)	120.7(17)	B(6)-B(11)-H(21)	119.2(17)
B(10)-B(9)-H(19)	123.2(15)	B(10)-B(11)-H(21)	125.4(15)
B(12)-B(10)-B(5)	108.3(2)	B(7)-B(11)-H(21)	118.4(14)
B(12)-B(10)-B(4)	107.5(2)	B(12)-B(11)-H(21)	122.3(16)
B(5)-B(10)-B(4)	59.46(19)	B(8)-B(12)-B(10)	108.7(3)
B(12)-B(10)-B(11)	60.8(2)	B(8)-B(12)-B(9)	60.4(2)
B(5)-B(10)-B(11)	59.9(2)	B(10)-B(12)-B(9)	60.8(2)
B(4)-B(10)-B(11)	107.6(2)	B(8)-B(12)-B(7)	59.5(2)
B(12)-B(10)-B(9)	59.6(2)	B(10)-B(12)-B(7)	108.0(3)
B(5)-B(10)-B(9)	107.6(2)	B(9)-B(12)-B(7)	108.1(2)
B(4)-B(10)-B(9)	59.8(2)	B(8)-B(12)-B(11)	107.6(3)
B(11)-B(10)-B(9)	108.3(2)	B(10)-B(12)-B(11)	59.9(2)
B(12)-B(10)-H(20)	121.5(14)	B(9)-B(12)-B(11)	108.5(3)
B(5)-B(10)-H(20)	120.3(15)	B(7)-B(12)-B(11)	59.8(2)
B(4)-B(10)-H(20)	123.9(14)	B(8)-B(12)-H(22)	120.3(16)
B(11)-B(10)-H(20)	118.8(15)	B(10)-B(12)-H(22)	124.0(15)
B(9)-B(10)-H(20)	124.5(15)	B(9)-B(12)-H(22)	123.4(19)
B(5)-B(11)-B(6)	60.21(17)	B(7)-B(12)-H(22)	118.9(17)
B(5)-B(11)-B(10)	59.7(2)	B(11)-B(12)-H(22)	121.2(19)
B(6)-B(11)-B(10)	108.2(3)		

Compound 6

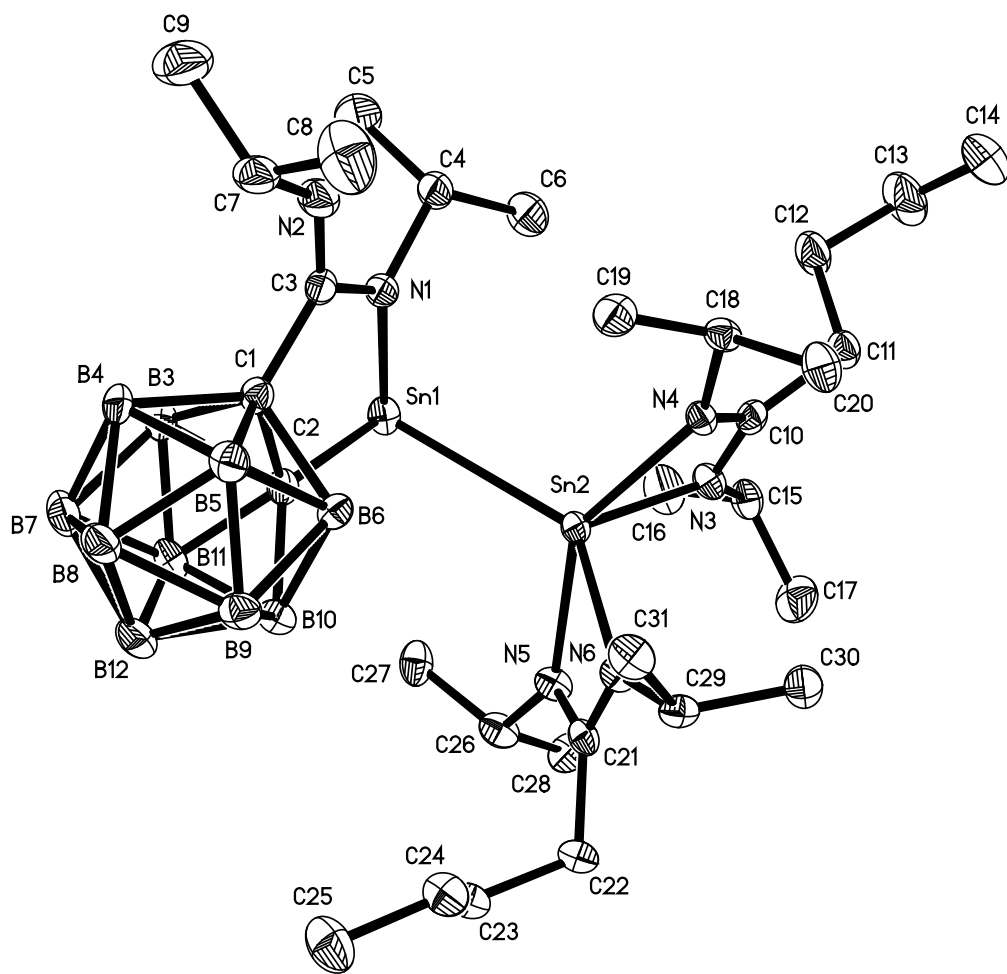


Table 9. Crystal data and structure refinement for **6**.

Identification code	ip228	
Empirical formula	C ₃₁ H ₇₀ B ₁₀ N ₆ Sn ₂ · C ₆ H ₆	
Formula weight	950.52	
Temperature	143(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 10.334(2) Å	α = 104.60(3)°
	b = 12.194(2) Å	β = 90.89(3)°
	c = 19.991(4) Å	γ = 108.06(3)°
Volume	2305.5(8) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.257 Mg/m ³	
Absorption coefficient	1.111 mm ⁻¹	
F(000)	896	
Crystal size	0.34 x 0.23 x 0.23 mm ³	
Theta range for data collection	2.12 to 28.28°	
Index ranges	-13 ≤ h ≤ 13, -16 ≤ k ≤ 16, -26 ≤ l ≤ 25	
Reflections collected	22414	
Independent reflections	11312 [R(int) = 0.0510]	
Completeness to theta = 28.00°	98.8 %	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	11312 / 0 / 482	
Goodness-of-fit on F ²	0.947	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0453, wR2 = 0.0642	
R indices (all data)	R1 = 0.0850, wR2 = 0.0706	
Largest diff. peak and hole	0.780 and -1.245 e.Å ⁻³	

Table 10. Bond lengths [Å] and angles [°] for **6**.

Sn(1)-N(1)	2.110(3)	C(6)-H(6A)	0.9800
Sn(1)-C(2)	2.216(3)	C(6)-H(6B)	0.9800
Sn(1)-Sn(2)	2.9869(8)	C(6)-H(6C)	0.9800
Sn(2)-N(3)	2.139(3)	C(7)-C(8)	1.500(6)
Sn(2)-N(6)	2.150(3)	C(7)-C(9)	1.526(6)
Sn(2)-N(4)	2.295(3)	C(7)-H(7)	1.0000
Sn(2)-N(5)	2.302(3)	C(8)-H(8A)	0.9800
Sn(2)-C(10)	2.657(3)	C(8)-H(8B)	0.9800
Sn(2)-C(21)	2.667(4)	C(8)-H(8C)	0.9800
N(1)-C(3)	1.384(4)	C(9)-H(9A)	0.9800
N(1)-C(4)	1.478(4)	C(9)-H(9B)	0.9800
N(2)-C(3)	1.268(5)	C(9)-H(9C)	0.9800
N(2)-C(7)	1.457(5)	C(10)-C(11)	1.505(5)
N(3)-C(10)	1.337(5)	C(11)-C(12)	1.527(5)
N(3)-C(15)	1.455(5)	C(11)-H(11A)	0.9900
N(4)-C(10)	1.318(4)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(4)-C(18)	1.469(4)	C(12)-C(13)	1.526(5)
N(5)-C(21)	1.323(4)	C(12)-H(12A)	0.9900
N(5)-C(26)	1.463(5)	C(12)-H(12B)	0.9900
N(6)-C(21)	1.332(4)	C(13)-C(14)	1.499(7)
N(6)-C(29)	1.468(4)	C(13)-H(13A)	0.9900
C(1)-C(3)	1.539(5)	C(13)-H(13B)	0.9900
C(1)-C(2)	1.669(5)	C(14)-H(14A)	0.9800
C(1)-B(5)	1.710(5)	C(14)-H(14B)	0.9800
C(1)-B(6)	1.712(5)	C(14)-H(14C)	0.9800
C(1)-B(4)	1.715(5)	C(15)-C(17)	1.515(6)
C(1)-B(3)	1.723(6)	C(15)-C(16)	1.519(5)
C(2)-B(10)	1.704(5)	C(15)-H(15)	1.0000
C(2)-B(11)	1.708(5)	C(16)-H(16A)	0.9800
C(2)-B(3)	1.709(5)	C(16)-H(16B)	0.9800
C(2)-B(6)	1.714(5)	C(16)-H(16C)	0.9800
C(4)-C(6)	1.523(5)	C(17)-H(17A)	0.9800
C(4)-C(5)	1.530(5)	C(17)-H(17B)	0.9800
C(4)-H(4)	1.0000	C(17)-H(17C)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9800	C(18)-C(20)	1.515(5)
C(5)-H(5B)	0.9800	C(18)-C(19)	1.526(5)
C(5)-H(5C)	0.9800	C(18)-H(18)	1.0000

C(19)-H(19A)	0.9800	C(31)-H(31A)	0.9800
C(19)-H(19B)	0.9800	C(31)-H(31B)	0.9800
C(19)-H(19C)	0.9800	C(31)-H(31C)	0.9800
C(20)-H(20A)	0.9800	B(3)-B(11)	1.766(6)
C(20)-H(20B)	0.9800	B(3)-B(7)	1.773(6)
C(20)-H(20C)	0.9800	B(3)-B(4)	1.782(7)
C(21)-C(22)	1.505(5)	B(3)-H(31)	1.04(4)
C(22)-C(23)	1.543(5)	B(4)-B(8)	1.773(6)
C(22)-H(22A)	0.9900	B(4)-B(7)	1.777(7)
C(22)-H(22B)	0.9900	B(4)-B(5)	1.781(6)
C(23)-C(24)	1.510(5)	B(4)-H(41)	1.06(4)
C(23)-H(23A)	0.9900	B(5)-B(6)	1.770(5)
C(23)-H(23B)	0.9900	B(5)-B(9)	1.779(6)
C(24)-C(25)	1.524(5)	B(5)-B(8)	1.784(6)
C(24)-H(24A)	0.9900	B(5)-H(51)	1.07(4)
C(24)-H(24B)	0.9900	B(6)-B(10)	1.773(6)
C(25)-H(25A)	0.9800	B(6)-B(9)	1.774(5)
C(25)-H(25B)	0.9800	B(6)-H(61)	1.06(4)
C(25)-H(25C)	0.9800	B(7)-B(11)	1.768(6)
C(26)-C(27)	1.513(5)	B(7)-B(12)	1.783(7)
C(26)-C(28)	1.526(5)	B(7)-B(8)	1.786(7)
C(26)-H(26)	1.0000	B(7)-H(71)	0.99(4)
C(27)-H(27A)	0.9800	B(8)-B(12)	1.770(7)
C(27)-H(27B)	0.9800	B(8)-B(9)	1.788(6)
C(27)-H(27C)	0.9800	B(8)-H(81)	1.05(4)
C(28)-H(28A)	0.9800	B(9)-B(12)	1.778(7)
C(28)-H(28B)	0.9800	B(9)-B(10)	1.783(6)
C(28)-H(28C)	0.9800	B(9)-H(91)	0.99(3)
C(29)-C(31)	1.511(5)	B(10)-B(11)	1.772(6)
C(29)-C(30)	1.531(5)	B(10)-B(12)	1.774(6)
C(29)-H(29)	1.0000	B(10)-H(101)	1.07(4)
C(30)-H(30A)	0.9800	B(11)-B(12)	1.779(6)
C(30)-H(30B)	0.9800	B(11)-H(111)	1.13(4)
C(30)-H(30C)	0.9800	B(12)-H(121)	1.01(4)
N(1)-Sn(1)-C(2)	78.90(12)	N(3)-Sn(2)-N(4)	59.60(11)
N(1)-Sn(1)-Sn(2)	98.28(8)	N(6)-Sn(2)-N(4)	97.29(11)
C(2)-Sn(1)-Sn(2)	92.21(9)	N(3)-Sn(2)-N(5)	97.70(11)
N(3)-Sn(2)-N(6)	106.13(11)	N(6)-Sn(2)-N(5)	59.35(11)

N(4)-Sn(2)-N(5)	143.39(10)	C(2)-C(1)-B(4)	110.2(3)
N(3)-Sn(2)-C(10)	29.97(11)	B(5)-C(1)-B(4)	62.7(2)
N(6)-Sn(2)-C(10)	105.31(11)	B(6)-C(1)-B(4)	113.6(3)
N(4)-Sn(2)-C(10)	29.74(10)	C(3)-C(1)-B(3)	115.0(3)
N(5)-Sn(2)-C(10)	123.87(11)	C(2)-C(1)-B(3)	60.5(2)
N(3)-Sn(2)-C(21)	105.58(11)	B(5)-C(1)-B(3)	113.9(3)
N(6)-Sn(2)-C(21)	29.71(11)	B(6)-C(1)-B(3)	112.8(3)
N(4)-Sn(2)-C(21)	123.43(10)	B(4)-C(1)-B(3)	62.4(2)
N(5)-Sn(2)-C(21)	29.75(10)	C(1)-C(2)-B(10)	110.8(3)
C(10)-Sn(2)-C(21)	119.98(10)	C(1)-C(2)-B(11)	110.7(3)
N(3)-Sn(2)-Sn(1)	114.62(8)	B(10)-C(2)-B(11)	62.6(2)
N(6)-Sn(2)-Sn(1)	137.56(8)	C(1)-C(2)-B(3)	61.3(2)
N(4)-Sn(2)-Sn(1)	112.89(7)	B(10)-C(2)-B(3)	113.9(3)
N(5)-Sn(2)-Sn(1)	102.49(8)	B(11)-C(2)-B(3)	62.2(2)
C(10)-Sn(2)-Sn(1)	115.78(7)	C(1)-C(2)-B(6)	60.8(2)
C(21)-Sn(2)-Sn(1)	121.84(8)	B(10)-C(2)-B(6)	62.5(2)
C(3)-N(1)-C(4)	115.1(3)	B(11)-C(2)-B(6)	113.8(3)
C(3)-N(1)-Sn(1)	124.9(2)	B(3)-C(2)-B(6)	113.4(3)
C(4)-N(1)-Sn(1)	119.6(2)	C(1)-C(2)-Sn(1)	109.7(2)
C(3)-N(2)-C(7)	128.7(3)	B(10)-C(2)-Sn(1)	131.0(2)
C(10)-N(3)-C(15)	126.0(3)	B(11)-C(2)-Sn(1)	124.1(2)
C(10)-N(3)-Sn(2)	97.0(2)	B(3)-C(2)-Sn(1)	109.1(2)
C(15)-N(3)-Sn(2)	136.9(2)	B(6)-C(2)-Sn(1)	119.0(2)
C(10)-N(4)-C(18)	122.2(3)	N(2)-C(3)-N(1)	120.7(3)
C(10)-N(4)-Sn(2)	90.5(2)	N(2)-C(3)-C(1)	126.9(3)
C(18)-N(4)-Sn(2)	143.7(2)	N(1)-C(3)-C(1)	112.4(3)
C(21)-N(5)-C(26)	122.6(3)	N(1)-C(4)-C(6)	110.6(3)
C(21)-N(5)-Sn(2)	90.6(2)	N(1)-C(4)-C(5)	110.6(3)
C(26)-N(5)-Sn(2)	142.8(2)	C(6)-C(4)-C(5)	111.0(3)
C(21)-N(6)-C(29)	125.3(3)	N(1)-C(4)-H(4)	108.2
C(21)-N(6)-Sn(2)	97.1(2)	C(6)-C(4)-H(4)	108.2
C(29)-N(6)-Sn(2)	137.3(2)	C(5)-C(4)-H(4)	108.2
C(3)-C(1)-C(2)	113.8(3)	C(4)-C(5)-H(5A)	109.5
C(3)-C(1)-B(5)	125.3(3)	C(4)-C(5)-H(5B)	109.5
C(2)-C(1)-B(5)	110.6(3)	H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
C(3)-C(1)-B(6)	116.4(3)	C(4)-C(5)-H(5C)	109.5
C(2)-C(1)-B(6)	60.9(2)	H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
B(5)-C(1)-B(6)	62.3(2)	H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
C(3)-C(1)-B(4)	124.6(3)	C(4)-C(6)-H(6A)	109.5

C(4)-C(6)-H(6B)	109.5	C(11)-C(12)-H(12B)	109.2
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12B)	107.9
C(4)-C(6)-H(6C)	109.5	C(14)-C(13)-C(12)	114.2(4)
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5	C(14)-C(13)-H(13A)	108.7
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5	C(12)-C(13)-H(13A)	108.7
N(2)-C(7)-C(8)	108.4(3)	C(14)-C(13)-H(13B)	108.7
N(2)-C(7)-C(9)	107.6(3)	C(12)-C(13)-H(13B)	108.7
C(8)-C(7)-C(9)	111.3(4)	H(13A)-C(13)-H(13B)	107.6
N(2)-C(7)-H(7)	109.8	C(13)-C(14)-H(14A)	109.5
C(8)-C(7)-H(7)	109.8	C(13)-C(14)-H(14B)	109.5
C(9)-C(7)-H(7)	109.8	H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	C(13)-C(14)-H(14C)	109.5
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(7)-C(8)-H(8C)	109.5	N(3)-C(15)-C(17)	109.8(3)
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5	N(3)-C(15)-C(16)	109.5(3)
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5	C(17)-C(15)-C(16)	112.6(4)
C(7)-C(9)-H(9A)	109.5	N(3)-C(15)-H(15)	108.3
C(7)-C(9)-H(9B)	109.5	C(17)-C(15)-H(15)	108.3
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5	C(16)-C(15)-H(15)	108.3
C(7)-C(9)-H(9C)	109.5	C(15)-C(16)-H(16A)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5	C(15)-C(16)-H(16B)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5	H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
N(4)-C(10)-N(3)	112.5(3)	C(15)-C(16)-H(16C)	109.5
N(4)-C(10)-C(11)	125.1(3)	H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
N(3)-C(10)-C(11)	122.4(3)	H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
N(4)-C(10)-Sn(2)	59.76(18)	C(15)-C(17)-H(17A)	109.5
N(3)-C(10)-Sn(2)	53.05(16)	C(15)-C(17)-H(17B)	109.5
C(11)-C(10)-Sn(2)	172.3(2)	H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(10)-C(11)-C(12)	113.5(3)	C(15)-C(17)-H(17C)	109.5
C(10)-C(11)-H(11A)	108.9	H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
C(12)-C(11)-H(11A)	108.9	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
C(10)-C(11)-H(11B)	108.9	N(4)-C(18)-C(20)	111.8(3)
C(12)-C(11)-H(11B)	108.9	N(4)-C(18)-C(19)	109.3(3)
H(11A)-C(11)-H(11B)	107.7	C(20)-C(18)-C(19)	110.3(3)
C(13)-C(12)-C(11)	112.2(3)	N(4)-C(18)-H(18)	108.4
C(13)-C(12)-H(12A)	109.2	C(20)-C(18)-H(18)	108.4
C(11)-C(12)-H(12A)	109.2	C(19)-C(18)-H(18)	108.4
C(13)-C(12)-H(12B)	109.2	C(18)-C(19)-H(19A)	109.5

C(18)-C(19)-H(19B)	109.5	H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5	H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5
C(18)-C(19)-H(19C)	109.5	N(5)-C(26)-C(27)	109.5(3)
H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5	N(5)-C(26)-C(28)	111.1(3)
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5	C(27)-C(26)-C(28)	111.8(3)
C(18)-C(20)-H(20A)	109.5	N(5)-C(26)-H(26)	108.1
C(18)-C(20)-H(20B)	109.5	C(27)-C(26)-H(26)	108.1
H(20A)-C(20)-H(20B)	109.5	C(28)-C(26)-H(26)	108.1
C(18)-C(20)-H(20C)	109.5	C(26)-C(27)-H(27A)	109.5
H(20A)-C(20)-H(20C)	109.5	C(26)-C(27)-H(27B)	109.5
H(20B)-C(20)-H(20C)	109.5	H(27A)-C(27)-H(27B)	109.5
N(5)-C(21)-N(6)	112.5(3)	C(26)-C(27)-H(27C)	109.5
N(5)-C(21)-C(22)	123.0(3)	H(27A)-C(27)-H(27C)	109.5
N(6)-C(21)-C(22)	124.4(3)	H(27B)-C(27)-H(27C)	109.5
N(5)-C(21)-Sn(2)	59.66(18)	C(26)-C(28)-H(28A)	109.5
N(6)-C(21)-Sn(2)	53.14(17)	C(26)-C(28)-H(28B)	109.5
C(22)-C(21)-Sn(2)	173.3(2)	H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(21)-C(22)-C(23)	113.4(3)	C(26)-C(28)-H(28C)	109.5
C(21)-C(22)-H(22A)	108.9	H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
C(23)-C(22)-H(22A)	108.9	H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(21)-C(22)-H(22B)	108.9	N(6)-C(29)-C(31)	110.9(3)
C(23)-C(22)-H(22B)	108.9	N(6)-C(29)-C(30)	110.4(3)
H(22A)-C(22)-H(22B)	107.7	C(31)-C(29)-C(30)	111.6(3)
C(24)-C(23)-C(22)	114.4(3)	N(6)-C(29)-H(29)	107.9
C(24)-C(23)-H(23A)	108.7	C(31)-C(29)-H(29)	107.9
C(22)-C(23)-H(23A)	108.7	C(30)-C(29)-H(29)	107.9
C(24)-C(23)-H(23B)	108.7	C(29)-C(30)-H(30A)	109.5
C(22)-C(23)-H(23B)	108.7	C(29)-C(30)-H(30B)	109.5
H(23A)-C(23)-H(23B)	107.6	H(30A)-C(30)-H(30B)	109.5
C(23)-C(24)-C(25)	111.5(3)	C(29)-C(30)-H(30C)	109.5
C(23)-C(24)-H(24A)	109.3	H(30A)-C(30)-H(30C)	109.5
C(25)-C(24)-H(24A)	109.3	H(30B)-C(30)-H(30C)	109.5
C(23)-C(24)-H(24B)	109.3	C(29)-C(31)-H(31A)	109.5
C(25)-C(24)-H(24B)	109.3	C(29)-C(31)-H(31B)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24B)	108.0	H(31A)-C(31)-H(31B)	109.5
C(24)-C(25)-H(25A)	109.5	C(29)-C(31)-H(31C)	109.5
C(24)-C(25)-H(25B)	109.5	H(31A)-C(31)-H(31C)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5	H(31B)-C(31)-H(31C)	109.5
C(24)-C(25)-H(25C)	109.5	C(2)-B(3)-C(1)	58.2(2)

C(2)-B(3)-B(11)	58.8(2)	C(1)-B(5)-H(51)	118.2(19)
C(1)-B(3)-B(11)	105.6(3)	B(6)-B(5)-H(51)	117.1(19)
C(2)-B(3)-B(7)	105.3(3)	B(9)-B(5)-H(51)	125(2)
C(1)-B(3)-B(7)	105.3(3)	B(4)-B(5)-H(51)	122(2)
B(11)-B(3)-B(7)	60.0(3)	B(8)-B(5)-H(51)	128.9(19)
C(2)-B(3)-B(4)	105.3(3)	C(1)-B(6)-C(2)	58.3(2)
C(1)-B(3)-B(4)	58.6(2)	C(1)-B(6)-B(5)	58.8(2)
B(11)-B(3)-B(4)	107.9(3)	C(2)-B(6)-B(5)	105.8(3)
B(7)-B(3)-B(4)	60.0(3)	C(1)-B(6)-B(10)	105.6(3)
C(2)-B(3)-H(31)	117(2)	C(2)-B(6)-B(10)	58.5(2)
C(1)-B(3)-H(31)	117(2)	B(5)-B(6)-B(10)	108.4(3)
B(11)-B(3)-H(31)	124(2)	C(1)-B(6)-B(9)	105.7(3)
B(7)-B(3)-H(31)	131(2)	C(2)-B(6)-B(9)	105.5(3)
B(4)-B(3)-H(31)	125(2)	B(5)-B(6)-B(9)	60.3(2)
C(1)-B(4)-B(8)	105.3(3)	B(10)-B(6)-B(9)	60.3(2)
C(1)-B(4)-B(7)	105.4(3)	C(1)-B(6)-H(61)	116.3(19)
B(8)-B(4)-B(7)	60.4(3)	C(2)-B(6)-H(61)	118(2)
C(1)-B(4)-B(5)	58.5(2)	B(5)-B(6)-H(61)	123(2)
B(8)-B(4)-B(5)	60.3(2)	B(10)-B(6)-H(61)	125(2)
B(7)-B(4)-B(5)	108.5(3)	B(9)-B(6)-H(61)	131(2)
C(1)-B(4)-B(3)	59.0(2)	B(11)-B(7)-B(3)	59.8(2)
B(8)-B(4)-B(3)	108.0(3)	B(11)-B(7)-B(4)	107.9(3)
B(7)-B(4)-B(3)	59.8(3)	B(3)-B(7)-B(4)	60.2(3)
B(5)-B(4)-B(3)	107.8(3)	B(11)-B(7)-B(12)	60.1(3)
C(1)-B(4)-H(41)	119.9(19)	B(3)-B(7)-B(12)	107.6(3)
B(8)-B(4)-H(41)	126.5(19)	B(4)-B(7)-B(12)	107.2(3)
B(7)-B(4)-H(41)	124(2)	B(11)-B(7)-B(8)	107.7(3)
B(5)-B(4)-H(41)	121(2)	B(3)-B(7)-B(8)	107.8(3)
B(3)-B(4)-H(41)	119(2)	B(4)-B(7)-B(8)	59.7(3)
C(1)-B(5)-B(6)	58.9(2)	B(12)-B(7)-B(8)	59.5(3)
C(1)-B(5)-B(9)	105.5(3)	B(11)-B(7)-H(71)	120(2)
B(6)-B(5)-B(9)	60.0(2)	B(3)-B(7)-H(71)	119(2)
C(1)-B(5)-B(4)	58.8(2)	B(4)-B(7)-H(71)	122(2)
B(6)-B(5)-B(4)	107.6(3)	B(12)-B(7)-H(71)	124(2)
B(9)-B(5)-B(4)	108.0(3)	B(8)-B(7)-H(71)	125(2)
C(1)-B(5)-B(8)	105.0(3)	B(12)-B(8)-B(4)	108.0(3)
B(6)-B(5)-B(8)	107.7(3)	B(12)-B(8)-B(5)	107.8(3)
B(9)-B(5)-B(8)	60.2(2)	B(4)-B(8)-B(5)	60.1(2)
B(4)-B(5)-B(8)	59.6(2)	B(12)-B(8)-B(7)	60.2(3)

B(4)-B(8)-B(7)	59.9(3)	C(2)-B(10)-H(101)	117.8(19)
B(5)-B(8)-B(7)	108.0(3)	B(11)-B(10)-H(101)	117(2)
B(12)-B(8)-B(9)	60.0(3)	B(6)-B(10)-H(101)	122.0(19)
B(4)-B(8)-B(9)	108.0(3)	B(12)-B(10)-H(101)	125.6(19)
B(5)-B(8)-B(9)	59.8(2)	B(9)-B(10)-H(101)	129(2)
B(7)-B(8)-B(9)	108.2(3)	C(2)-B(11)-B(3)	58.9(2)
B(12)-B(8)-H(81)	121(2)	C(2)-B(11)-B(7)	105.6(3)
B(4)-B(8)-H(81)	123(2)	B(3)-B(11)-B(7)	60.2(2)
B(5)-B(8)-H(81)	121(2)	C(2)-B(11)-B(10)	58.6(2)
B(7)-B(8)-H(81)	123(2)	B(3)-B(11)-B(10)	107.9(3)
B(9)-B(8)-H(81)	120(2)	B(7)-B(11)-B(10)	108.5(3)
B(6)-B(9)-B(12)	107.4(3)	C(2)-B(11)-B(12)	105.0(3)
B(6)-B(9)-B(5)	59.8(2)	B(3)-B(11)-B(12)	108.1(3)
B(12)-B(9)-B(5)	107.6(3)	B(7)-B(11)-B(12)	60.4(3)
B(6)-B(9)-B(10)	59.8(2)	B(10)-B(11)-B(12)	59.9(2)
B(12)-B(9)-B(10)	59.8(2)	C(2)-B(11)-H(111)	117.0(19)
B(5)-B(9)-B(10)	107.6(3)	B(3)-B(11)-H(111)	116.8(19)
B(6)-B(9)-B(8)	107.4(3)	B(7)-B(11)-H(111)	126.2(19)
B(12)-B(9)-B(8)	59.5(3)	B(10)-B(11)-H(111)	121.0(19)
B(5)-B(9)-B(8)	60.0(2)	B(12)-B(11)-H(111)	129.5(19)
B(10)-B(9)-B(8)	107.2(3)	B(8)-B(12)-B(10)	108.4(3)
B(6)-B(9)-H(91)	118.8(19)	B(8)-B(12)-B(9)	60.5(3)
B(12)-B(9)-H(91)	123(2)	B(10)-B(12)-B(9)	60.2(2)
B(5)-B(9)-H(91)	123(2)	B(8)-B(12)-B(11)	108.0(3)
B(10)-B(9)-H(91)	118(2)	B(10)-B(12)-B(11)	59.8(2)
B(8)-B(9)-H(91)	126.3(19)	B(9)-B(12)-B(11)	108.2(3)
C(2)-B(10)-B(11)	58.8(2)	B(8)-B(12)-B(7)	60.3(3)
C(2)-B(10)-B(6)	59.0(2)	B(10)-B(12)-B(7)	107.7(3)
B(11)-B(10)-B(6)	107.9(3)	B(9)-B(12)-B(7)	108.7(3)
C(2)-B(10)-B(12)	105.3(3)	B(11)-B(12)-B(7)	59.5(3)
B(11)-B(10)-B(12)	60.2(2)	B(8)-B(12)-H(121)	122(2)
B(6)-B(10)-B(12)	107.7(3)	B(10)-B(12)-H(121)	121(2)
C(2)-B(10)-B(9)	105.6(3)	B(9)-B(12)-H(121)	121(3)
B(11)-B(10)-B(9)	108.4(3)	B(11)-B(12)-H(121)	122(3)
B(6)-B(10)-B(9)	59.9(2)	B(7)-B(12)-H(121)	123(2)
B(12)-B(10)-B(9)	60.0(3)		

Compound 7

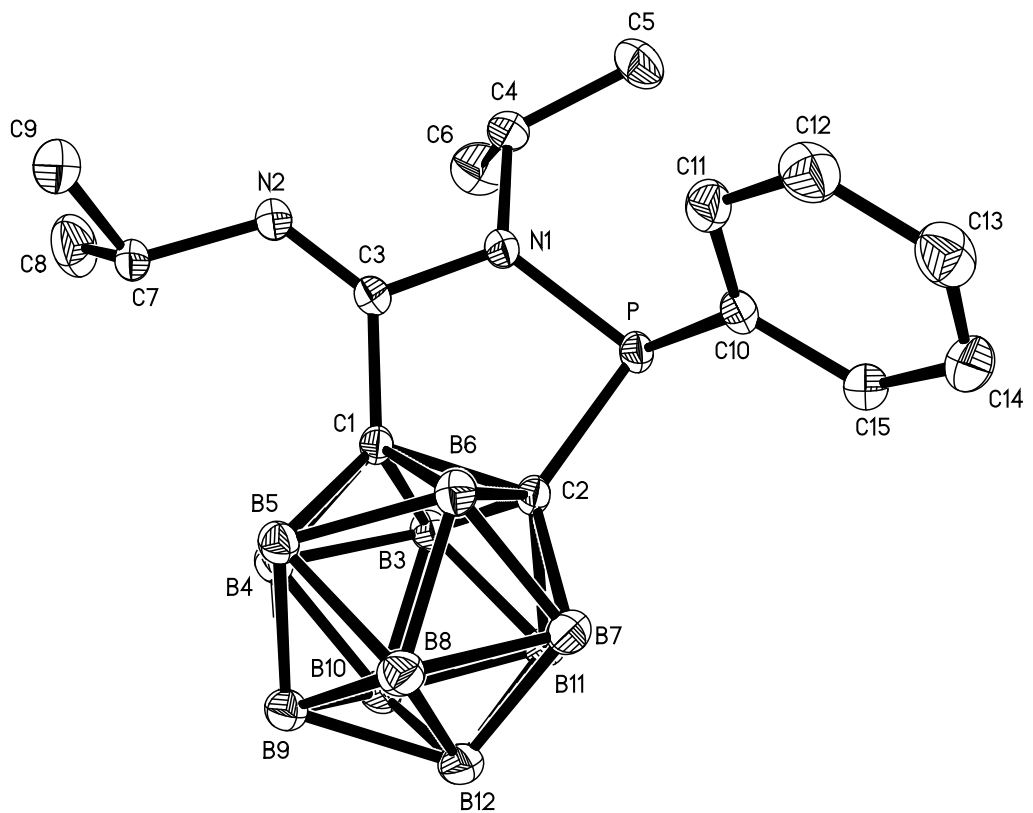


Table 11. Crystal data and structure refinement for 7.

Identification code	ip210	
Empirical formula	C ₁₅ H ₂₉ B ₁₀ N ₂ P	
Formula weight	376.47	
Temperature	143(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	C2/c	
Unit cell dimensions	a = 35.600(7) Å	α = 90°
	b = 6.6979(13) Å	β = 131.32(3)°
	c = 24.238(5) Å	γ = 90°
Volume	4341(2) Å ³	
Z	8	
Density (calculated)	1.152 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.130 mm ⁻¹	
F(000)	1584	
Crystal size	0.30 x 0.22 x 0.18 mm ³	
Theta range for data collection	2.30 to 29.22°	
Index ranges	-48 ≤ h ≤ 48, -9 ≤ k ≤ 9, -32 ≤ l ≤ 33	
Reflections collected	23273	
Independent reflections	5833 [R(int) = 0.0444]	
Completeness to theta = 29.22°	98.9 %	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	5833 / 0 / 369	
Goodness-of-fit on F ²	1.060	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0432, wR2 = 0.0922	
R indices (all data)	R1 = 0.0582, wR2 = 0.0973	
Largest diff. peak and hole	0.367 and -0.271 e.Å ⁻³	

Table 12. Bond lengths [Å] and angles [°] for 7.

P-N(1)	1.7174(14)	C(11)-C(12)	1.385(2)
P-C(10)	1.8249(13)	C(11)-H(11A)	0.963(19)
P-C(2)	1.8475(12)	C(12)-C(13)	1.387(2)
N(1)-C(3)	1.4123(15)	C(12)-H(12A)	0.970(19)
N(1)-C(4)	1.4905(17)	C(13)-C(14)	1.384(2)
N(2)-C(3)	1.2605(17)	C(13)-H(13A)	0.98(2)
N(2)-C(7)	1.4668(16)	C(14)-C(15)	1.3837(19)
C(1)-C(3)	1.5179(17)	C(14)-H(14A)	0.944(19)
C(1)-C(2)	1.6322(18)	C(15)-H(15A)	0.986(18)
C(1)-B(5)	1.7112(18)	B(3)-B(10)	1.751(2)
C(1)-B(4)	1.7149(17)	B(3)-B(11)	1.771(2)
C(1)-B(6)	1.7276(19)	B(3)-B(4)	1.773(2)
C(1)-B(3)	1.7386(18)	B(3)-H(3)	1.084(16)
C(2)-B(7)	1.702(2)	B(4)-B(9)	1.770(2)
C(2)-B(11)	1.7054(18)	B(4)-B(10)	1.781(2)
C(2)-B(3)	1.7235(18)	B(4)-B(5)	1.788(2)
C(2)-B(6)	1.7337(18)	B(4)-H(4)	1.058(16)
C(4)-C(6)	1.511(2)	B(5)-B(9)	1.775(2)
C(4)-C(5)	1.5211(19)	B(5)-B(6)	1.775(2)
C(4)-H(4A)	0.986(17)	B(5)-B(8)	1.776(2)
C(5)-H(5C)	0.98(2)	B(5)-H(5)	1.045(16)
C(5)-H(5B)	0.941(19)	B(6)-B(8)	1.755(2)
C(5)-H(5A)	0.98(2)	B(6)-B(7)	1.780(2)
C(6)-H(6C)	0.99(2)	B(6)-H(6)	1.067(15)
C(6)-H(6B)	0.94(2)	B(7)-B(12)	1.780(2)
C(6)-H(6A)	1.00(2)	B(7)-B(11)	1.782(2)
C(7)-C(9)	1.517(2)	B(7)-B(8)	1.785(2)
C(7)-C(8)	1.521(2)	B(7)-H(7)	1.091(16)
C(7)-H(7A)	0.943(18)	B(8)-B(12)	1.781(2)
C(8)-H(8C)	0.97(2)	B(8)-B(9)	1.782(2)
C(8)-H(8B)	0.97(2)	B(8)-H(8)	1.078(16)
C(8)-H(8A)	0.99(2)	B(9)-B(12)	1.778(2)
C(9)-H(9C)	0.980(19)	B(9)-B(10)	1.783(2)
C(9)-H(9B)	0.98(2)	B(9)-H(9)	1.093(16)
C(9)-H(9A)	0.93(2)	B(10)-B(11)	1.784(2)
C(10)-C(11)	1.3906(18)	B(10)-B(12)	1.787(2)
C(10)-C(15)	1.3943(19)	B(10)-H(10)	1.060(16)

B(11)-B(12)	1.777(2)	B(12)-H(12)	1.081(17)
B(11)-H(11)	1.063(16)		
N(1)-P-C(10)	105.30(6)	B(6)-C(2)-P	117.60(8)
N(1)-P-C(2)	90.99(5)	N(2)-C(3)-N(1)	120.05(11)
C(10)-P-C(2)	101.29(6)	N(2)-C(3)-C(1)	129.54(11)
C(3)-N(1)-C(4)	116.43(11)	N(1)-C(3)-C(1)	110.31(10)
C(3)-N(1)-P	121.18(9)	N(1)-C(4)-C(6)	110.50(11)
C(4)-N(1)-P	118.27(8)	N(1)-C(4)-C(5)	111.25(12)
C(3)-N(2)-C(7)	124.26(11)	C(6)-C(4)-C(5)	111.72(13)
C(3)-C(1)-C(2)	108.80(9)	N(1)-C(4)-H(4A)	105.8(9)
C(3)-C(1)-B(5)	129.54(10)	C(6)-C(4)-H(4A)	108.9(9)
C(2)-C(1)-B(5)	111.25(10)	C(5)-C(4)-H(4A)	108.5(9)
C(3)-C(1)-B(4)	126.58(10)	C(4)-C(5)-H(5C)	108.9(11)
C(2)-C(1)-B(4)	110.78(9)	C(4)-C(5)-H(5B)	112.7(11)
B(5)-C(1)-B(4)	62.91(8)	H(5C)-C(5)-H(5B)	109.6(16)
C(3)-C(1)-B(6)	115.35(10)	C(4)-C(5)-H(5A)	112.1(12)
C(2)-C(1)-B(6)	62.05(8)	H(5C)-C(5)-H(5A)	105.8(17)
B(5)-C(1)-B(6)	62.15(8)	H(5B)-C(5)-H(5A)	107.5(17)
B(4)-C(1)-B(6)	114.31(10)	C(4)-C(6)-H(6C)	110.6(11)
C(3)-C(1)-B(3)	111.57(9)	C(4)-C(6)-H(6B)	110.2(11)
C(2)-C(1)-B(3)	61.40(7)	H(6C)-C(6)-H(6B)	109.3(16)
B(5)-C(1)-B(3)	113.93(9)	C(4)-C(6)-H(6A)	109.8(11)
B(4)-C(1)-B(3)	61.79(8)	H(6C)-C(6)-H(6A)	108.0(16)
B(6)-C(1)-B(3)	114.65(10)	H(6B)-C(6)-H(6A)	108.9(16)
C(1)-C(2)-B(7)	111.83(10)	N(2)-C(7)-C(9)	108.25(11)
C(1)-C(2)-B(11)	112.13(9)	N(2)-C(7)-C(8)	107.99(12)
B(7)-C(2)-B(11)	63.09(8)	C(9)-C(7)-C(8)	111.31(13)
C(1)-C(2)-B(3)	62.34(8)	N(2)-C(7)-H(7A)	113.2(10)
B(7)-C(2)-B(3)	114.64(10)	C(9)-C(7)-H(7A)	108.1(10)
B(11)-C(2)-B(3)	62.20(9)	C(8)-C(7)-H(7A)	108.0(10)
C(1)-C(2)-B(6)	61.67(7)	C(7)-C(8)-H(8C)	109.1(12)
B(7)-C(2)-B(6)	62.41(8)	C(7)-C(8)-H(8B)	109.5(12)
B(11)-C(2)-B(6)	114.81(10)	H(8C)-C(8)-H(8B)	108.7(17)
B(3)-C(2)-B(6)	115.11(9)	C(7)-C(8)-H(8A)	111.0(13)
C(1)-C(2)-P	108.62(8)	H(8C)-C(8)-H(8A)	110.6(18)
B(7)-C(2)-P	130.28(9)	H(8B)-C(8)-H(8A)	107.8(17)
B(11)-C(2)-P	124.10(8)	C(7)-C(9)-H(9C)	109.2(11)
B(3)-C(2)-P	109.06(8)	C(7)-C(9)-H(9B)	110.1(11)

H(9C)-C(9)-H(9B)	108.8(16)	B(9)-B(4)-B(3)	107.42(11)
C(7)-C(9)-H(9A)	110.0(13)	C(1)-B(4)-B(10)	104.79(10)
H(9C)-C(9)-H(9A)	108.7(17)	B(9)-B(4)-B(10)	60.27(9)
H(9B)-C(9)-H(9A)	110.0(17)	B(3)-B(4)-B(10)	59.02(8)
C(11)-C(10)-C(15)	119.33(12)	C(1)-B(4)-B(5)	58.44(7)
C(11)-C(10)-P	125.55(10)	B(9)-B(4)-B(5)	59.84(8)
C(15)-C(10)-P	115.06(10)	B(3)-B(4)-B(5)	108.60(9)
C(12)-C(11)-C(10)	120.01(13)	B(10)-B(4)-B(5)	108.31(11)
C(12)-C(11)-H(11A)	120.1(11)	C(1)-B(4)-H(4)	117.8(9)
C(10)-C(11)-H(11A)	119.9(11)	B(9)-B(4)-H(4)	129.6(9)
C(11)-C(12)-C(13)	120.36(14)	B(3)-B(4)-H(4)	116.9(8)
C(11)-C(12)-H(12A)	118.6(11)	B(10)-B(4)-H(4)	126.3(9)
C(13)-C(12)-H(12A)	121.0(11)	B(5)-B(4)-H(4)	121.1(8)
C(14)-C(13)-C(12)	119.86(13)	C(1)-B(5)-B(9)	104.17(9)
C(14)-C(13)-H(13A)	120.7(12)	C(1)-B(5)-B(6)	59.38(7)
C(12)-C(13)-H(13A)	119.5(12)	B(9)-B(5)-B(6)	107.72(10)
C(13)-C(14)-C(15)	120.01(14)	C(1)-B(5)-B(8)	104.41(9)
C(13)-C(14)-H(14A)	120.4(11)	B(9)-B(5)-B(8)	60.25(8)
C(15)-C(14)-H(14A)	119.6(11)	B(6)-B(5)-B(8)	59.25(9)
C(14)-C(15)-C(10)	120.41(13)	C(1)-B(5)-B(4)	58.65(7)
C(14)-C(15)-H(15A)	121.8(10)	B(9)-B(5)-B(4)	59.57(8)
C(10)-C(15)-H(15A)	117.8(10)	B(6)-B(5)-B(4)	108.53(9)
C(2)-B(3)-C(1)	56.26(7)	B(8)-B(5)-B(4)	107.91(10)
C(2)-B(3)-B(10)	104.96(10)	C(1)-B(5)-H(5)	118.6(9)
C(1)-B(3)-B(10)	105.08(9)	B(9)-B(5)-H(5)	128.5(9)
C(2)-B(3)-B(11)	58.40(8)	B(6)-B(5)-H(5)	117.8(8)
C(1)-B(3)-B(11)	104.19(9)	B(8)-B(5)-H(5)	126.5(9)
B(10)-B(3)-B(11)	60.85(9)	B(4)-B(5)-H(5)	120.7(9)
C(2)-B(3)-B(4)	103.97(9)	C(1)-B(6)-C(2)	56.27(7)
C(1)-B(3)-B(4)	58.45(7)	C(1)-B(6)-B(8)	104.60(9)
B(10)-B(3)-B(4)	60.70(8)	C(2)-B(6)-B(8)	104.14(9)
B(11)-B(3)-B(4)	108.85(11)	C(1)-B(6)-B(5)	58.47(8)
C(2)-B(3)-H(3)	115.6(8)	C(2)-B(6)-B(5)	103.73(9)
C(1)-B(3)-H(3)	115.0(9)	B(8)-B(6)-B(5)	60.40(9)
B(10)-B(3)-H(3)	133.9(8)	C(1)-B(6)-B(7)	103.84(10)
B(11)-B(3)-H(3)	124.9(8)	C(2)-B(6)-B(7)	57.91(8)
B(4)-B(3)-H(3)	124.1(8)	B(8)-B(6)-B(7)	60.65(8)
C(1)-B(4)-B(9)	104.22(10)	B(5)-B(6)-B(7)	108.51(10)
C(1)-B(4)-B(3)	59.76(7)	C(1)-B(6)-H(6)	117.3(9)

C(2)-B(6)-H(6)	118.0(8)	B(12)-B(9)-B(8)	60.04(9)
B(8)-B(6)-H(6)	131.8(8)	B(4)-B(9)-B(10)	60.17(9)
B(5)-B(6)-H(6)	124.0(8)	B(5)-B(9)-B(10)	108.82(10)
B(7)-B(6)-H(6)	124.5(8)	B(12)-B(9)-B(10)	60.27(9)
C(2)-B(7)-B(6)	59.68(8)	B(8)-B(9)-B(10)	108.53(10)
C(2)-B(7)-B(12)	104.07(10)	B(4)-B(9)-H(9)	120.2(9)
B(6)-B(7)-B(12)	107.46(10)	B(5)-B(9)-H(9)	119.9(9)
C(2)-B(7)-B(11)	58.56(8)	B(12)-B(9)-H(9)	123.3(9)
B(6)-B(7)-B(11)	108.85(10)	B(8)-B(9)-H(9)	121.8(8)
B(12)-B(7)-B(11)	59.85(8)	B(10)-B(9)-H(9)	122.0(8)
C(2)-B(7)-B(8)	104.22(10)	B(3)-B(10)-B(4)	60.28(8)
B(6)-B(7)-B(8)	58.99(8)	B(3)-B(10)-B(9)	107.85(10)
B(12)-B(7)-B(8)	59.95(8)	B(4)-B(10)-B(9)	59.56(8)
B(11)-B(7)-B(8)	107.94(10)	B(3)-B(10)-B(11)	60.14(9)
C(2)-B(7)-H(7)	117.1(9)	B(4)-B(10)-B(11)	107.96(10)
B(6)-B(7)-H(7)	117.5(8)	B(9)-B(10)-B(11)	107.49(10)
B(12)-B(7)-H(7)	129.7(9)	B(3)-B(10)-B(12)	107.86(10)
B(11)-B(7)-H(7)	119.6(8)	B(4)-B(10)-B(12)	107.42(10)
B(8)-B(7)-H(7)	128.2(8)	B(9)-B(10)-B(12)	59.74(9)
B(6)-B(8)-B(5)	60.34(8)	B(11)-B(10)-B(12)	59.70(9)
B(6)-B(8)-B(12)	108.50(10)	B(3)-B(10)-H(10)	119.0(9)
B(5)-B(8)-B(12)	108.00(10)	B(4)-B(10)-H(10)	121.1(9)
B(6)-B(8)-B(9)	108.26(10)	B(9)-B(10)-H(10)	124.2(9)
B(5)-B(8)-B(9)	59.84(8)	B(11)-B(10)-H(10)	121.0(9)
B(12)-B(8)-B(9)	59.86(8)	B(12)-B(10)-H(10)	124.1(9)
B(6)-B(8)-B(7)	60.36(8)	C(2)-B(11)-B(3)	59.40(8)
B(5)-B(8)-B(7)	108.23(10)	C(2)-B(11)-B(12)	104.02(10)
B(12)-B(8)-B(7)	59.89(8)	B(3)-B(11)-B(12)	107.41(10)
B(9)-B(8)-B(7)	107.70(10)	C(2)-B(11)-B(7)	58.35(8)
B(6)-B(8)-H(8)	118.5(9)	B(3)-B(11)-B(7)	108.43(10)
B(5)-B(8)-H(8)	119.8(9)	B(12)-B(11)-B(7)	60.01(8)
B(12)-B(8)-H(8)	124.5(9)	C(2)-B(11)-B(10)	104.31(10)
B(9)-B(8)-H(8)	123.4(8)	B(3)-B(11)-B(10)	59.01(9)
B(7)-B(8)-H(8)	121.9(8)	B(12)-B(11)-B(10)	60.26(9)
B(4)-B(9)-B(5)	60.59(8)	B(7)-B(11)-B(10)	108.34(10)
B(4)-B(9)-B(12)	108.33(10)	C(2)-B(11)-H(11)	117.0(9)
B(5)-B(9)-B(12)	108.20(10)	B(3)-B(11)-H(11)	117.5(9)
B(4)-B(9)-B(8)	108.44(10)	B(12)-B(11)-H(11)	129.9(9)
B(5)-B(9)-B(8)	59.91(9)	B(7)-B(11)-H(11)	119.7(9)

B(10)-B(11)-H(11)	127.8(9)	B(9)-B(12)-B(10)	60.00(9)
B(11)-B(12)-B(9)	107.97(11)	B(7)-B(12)-B(10)	108.28(10)
B(11)-B(12)-B(7)	60.14(8)	B(8)-B(12)-B(10)	108.36(11)
B(9)-B(12)-B(7)	108.10(10)	B(11)-B(12)-H(12)	120.7(9)
B(11)-B(12)-B(8)	108.34(10)	B(9)-B(12)-H(12)	123.9(9)
B(9)-B(12)-B(8)	60.09(8)	B(7)-B(12)-H(12)	119.0(9)
B(7)-B(12)-B(8)	60.17(8)	B(8)-B(12)-H(12)	120.8(9)
B(11)-B(12)-B(10)	60.05(8)	B(10)-B(12)-H(12)	123.5(9)

Compound **10**

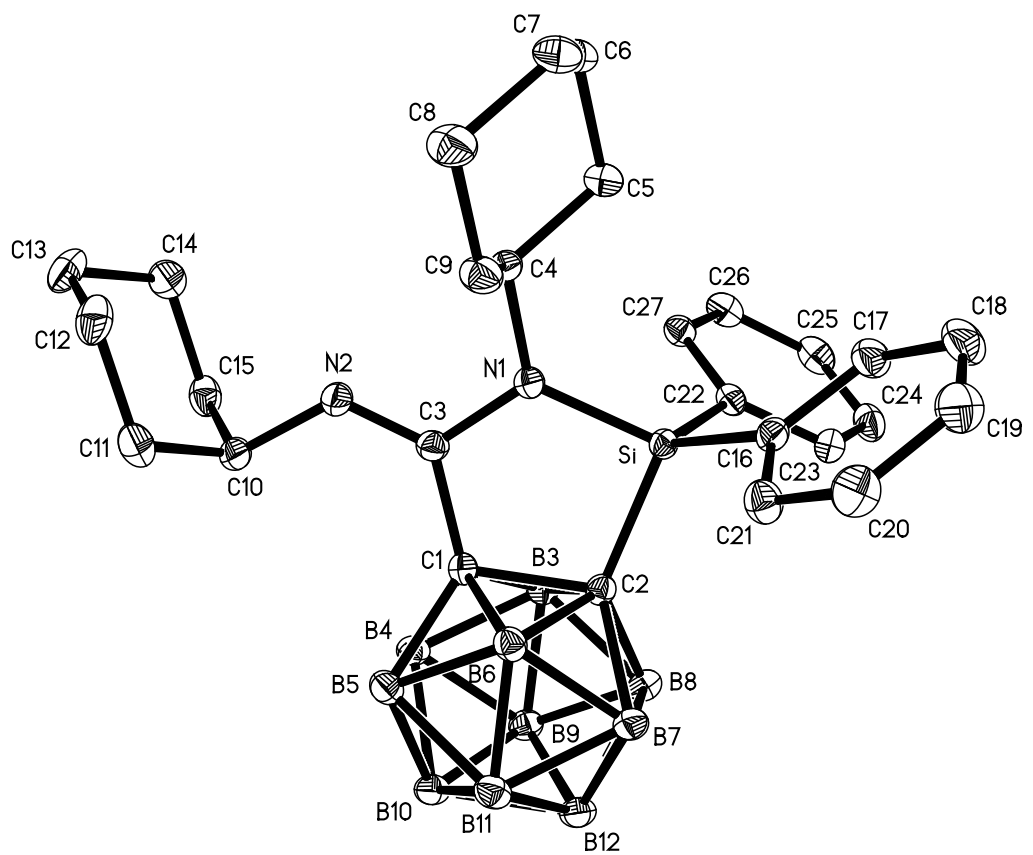


Table 13. Crystal data and structure refinement for **10**.

Identification code	magd57	
Empirical formula	C ₂₇ H ₄₂ B ₁₀ N ₂ Si	
Formula weight	530.82	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54184 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	Cc	
Unit cell dimensions	a = 11.8346(15) Å	α = 90°
	b = 32.995(5) Å	β = 123.079(17)°
	c = 9.2931(11) Å	γ = 90°
Volume	3040.7(7) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.160 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.814 mm ⁻¹	
F(000)	1128	
Crystal size	0.11 x 0.08 x 0.05 mm ³	
Theta range for data collection	4.66 to 75.93°	
Index ranges	-14 ≤ h ≤ 14, -41 ≤ k ≤ 41, -11 ≤ l ≤ 11	
Reflections collected	57605	
Independent reflections	6195 [R(int) = 0.0304]	
Completeness to theta = 75.93°	99.8 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9604 and 0.9158	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	6195 / 2 / 361	
Goodness-of-fit on F ²	1.021	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0275, wR2 = 0.0734	
R indices (all data)	R1 = 0.0276, wR2 = 0.0735	
Absolute structure parameter	-0.006(13)	
Largest diff. peak and hole	0.219 and -0.241 e.Å ⁻³	

Table 14. Bond lengths [Å] and angles [°] for **10**.

Si-N(1)	1.7404(10)	C(10)-H(10A)	1.0000
Si-C(22)	1.8618(13)	C(11)-C(12)	1.527(2)
Si-C(16)	1.8698(12)	C(11)-H(11A)	0.9900
Si-C(2)	1.8964(13)	C(11)-H(11B)	0.9900
C(1)-C(3)	1.5332(16)	C(12)-C(13)	1.5214(19)
C(1)-C(2)	1.6616(15)	C(12)-H(12A)	0.9900
C(1)-B(4)	1.7183(17)	C(12)-H(12B)	0.9900
C(1)-B(5)	1.7188(18)	C(13)-C(14)	1.524(2)
C(1)-B(6)	1.7227(18)	C(13)-H(13A)	0.9900
C(1)-B(3)	1.7383(17)	C(13)-H(13B)	0.9900
C(2)-B(8)	1.6998(17)	C(14)-C(15)	1.5260(19)
C(2)-B(7)	1.7059(18)	C(14)-H(14A)	0.9900
C(2)-B(6)	1.7299(18)	C(14)-H(14B)	0.9900
C(2)-B(3)	1.7311(17)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(3)-N(2)	1.2619(16)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(3)-N(1)	1.4128(15)	C(16)-C(21)	1.3988(18)
C(4)-N(1)	1.4858(15)	C(16)-C(17)	1.3998(18)
C(4)-C(5)	1.5289(17)	C(17)-C(18)	1.3944(19)
C(4)-C(9)	1.5339(17)	C(17)-H(17)	0.9500
C(4)-H(4A)	1.0000	C(18)-C(19)	1.385(2)
C(5)-C(6)	1.5336(16)	C(18)-H(18)	0.9500
C(5)-H(5A)	0.9900	C(19)-C(20)	1.388(2)
C(5)-H(5B)	0.9900	C(19)-H(19)	0.9500
C(6)-C(7)	1.5285(18)	C(20)-C(21)	1.3908(18)
C(6)-H(6A)	0.9900	C(20)-H(20)	0.9500
C(6)-H(6B)	0.9900	C(21)-H(21)	0.9500
C(7)-C(8)	1.5272(19)	C(22)-C(27)	1.4027(17)
C(7)-H(7A)	0.9900	C(22)-C(23)	1.4029(17)
C(7)-H(7B)	0.9900	C(23)-C(24)	1.3902(18)
C(8)-C(9)	1.5294(17)	C(23)-H(23)	0.9500
C(8)-H(8A)	0.9900	C(24)-C(25)	1.391(2)
C(8)-H(8B)	0.9900	C(24)-H(24)	0.9500
C(9)-H(9A)	0.9900	C(25)-C(26)	1.387(2)
C(9)-H(9B)	0.9900	C(25)-H(25)	0.9500
C(10)-N(2)	1.4652(16)	C(26)-C(27)	1.3909(18)
C(10)-C(11)	1.5320(19)	C(26)-H(26)	0.9500
C(10)-C(15)	1.5337(18)	C(27)-H(27)	0.9500

B(3)-B(9)	1.7594(19)	B(7)-B(12)	1.780(2)
B(3)-B(4)	1.777(2)	B(7)-B(11)	1.782(2)
B(3)-B(8)	1.7787(19)	B(7)-H(7)	1.1200
B(3)-H(3)	1.1200	B(8)-B(12)	1.781(2)
B(4)-B(9)	1.7831(19)	B(8)-B(9)	1.7878(19)
B(4)-B(10)	1.7845(19)	B(8)-H(8)	1.1200
B(4)-B(5)	1.7918(19)	B(9)-B(10)	1.790(2)
B(4)-H(4)	1.1200	B(9)-B(12)	1.791(2)
B(5)-B(6)	1.7794(19)	B(9)-H(9)	1.1200
B(5)-B(10)	1.782(2)	B(10)-B(12)	1.785(2)
B(5)-B(11)	1.785(2)	B(10)-B(11)	1.791(2)
B(5)-H(5)	1.1200	B(10)-H(10)	1.1200
B(6)-B(11)	1.764(2)	B(11)-B(12)	1.790(2)
B(6)-B(7)	1.7790(19)	B(11)-H(11)	1.1200
B(6)-H(6)	1.1200	B(12)-H(12)	1.1200
B(7)-B(8)	1.7777(19)		
N(1)-Si-C(22)	114.23(5)	C(1)-C(2)-B(7)	111.09(9)
N(1)-Si-C(16)	116.29(5)	B(8)-C(2)-B(7)	62.93(8)
C(22)-Si-C(16)	109.66(6)	C(1)-C(2)-B(6)	61.02(7)
N(1)-Si-C(2)	92.56(5)	B(8)-C(2)-B(6)	114.31(10)
C(22)-Si-C(2)	108.83(5)	B(7)-C(2)-B(6)	62.36(8)
C(16)-Si-C(2)	114.20(5)	C(1)-C(2)-B(3)	61.60(7)
C(3)-C(1)-C(2)	110.18(9)	B(8)-C(2)-B(3)	62.45(8)
C(3)-C(1)-B(4)	129.10(10)	B(7)-C(2)-B(3)	114.29(9)
C(2)-C(1)-B(4)	110.55(9)	B(6)-C(2)-B(3)	113.84(9)
C(3)-C(1)-B(5)	125.52(10)	C(1)-C(2)-Si	105.28(7)
C(2)-C(1)-B(5)	110.93(9)	B(8)-C(2)-Si	128.57(8)
B(4)-C(1)-B(5)	62.84(8)	B(7)-C(2)-Si	132.25(8)
C(3)-C(1)-B(6)	111.61(9)	B(6)-C(2)-Si	114.54(8)
C(2)-C(1)-B(6)	61.45(7)	B(3)-C(2)-Si	109.75(8)
B(4)-C(1)-B(6)	114.03(9)	N(2)-C(3)-N(1)	120.32(11)
B(5)-C(1)-B(6)	62.27(8)	N(2)-C(3)-C(1)	128.36(11)
C(3)-C(1)-B(3)	116.72(10)	N(1)-C(3)-C(1)	111.25(10)
C(2)-C(1)-B(3)	61.17(7)	N(1)-C(4)-C(5)	112.54(10)
B(4)-C(1)-B(3)	61.87(8)	N(1)-C(4)-C(9)	109.44(10)
B(5)-C(1)-B(3)	113.79(9)	C(5)-C(4)-C(9)	111.27(10)
B(6)-C(1)-B(3)	113.84(9)	N(1)-C(4)-H(4A)	107.8
C(1)-C(2)-B(8)	111.53(9)	C(5)-C(4)-H(4A)	107.8

C(9)-C(4)-H(4A)	107.8	C(10)-C(11)-H(11A)	109.0
C(4)-C(5)-C(6)	110.12(10)	C(12)-C(11)-H(11B)	109.0
C(4)-C(5)-H(5A)	109.6	C(10)-C(11)-H(11B)	109.0
C(6)-C(5)-H(5A)	109.6	H(11A)-C(11)-H(11B)	107.8
C(4)-C(5)-H(5B)	109.6	C(13)-C(12)-C(11)	110.96(11)
C(6)-C(5)-H(5B)	109.6	C(13)-C(12)-H(12A)	109.4
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.2	C(11)-C(12)-H(12A)	109.4
C(7)-C(6)-C(5)	111.34(10)	C(13)-C(12)-H(12B)	109.4
C(7)-C(6)-H(6A)	109.4	C(11)-C(12)-H(12B)	109.4
C(5)-C(6)-H(6A)	109.4	H(12A)-C(12)-H(12B)	108.0
C(7)-C(6)-H(6B)	109.4	C(12)-C(13)-C(14)	110.67(11)
C(5)-C(6)-H(6B)	109.4	C(12)-C(13)-H(13A)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0	C(14)-C(13)-H(13A)	109.5
C(8)-C(7)-C(6)	110.83(10)	C(12)-C(13)-H(13B)	109.5
C(8)-C(7)-H(7A)	109.5	C(14)-C(13)-H(13B)	109.5
C(6)-C(7)-H(7A)	109.5	H(13A)-C(13)-H(13B)	108.1
C(8)-C(7)-H(7B)	109.5	C(13)-C(14)-C(15)	110.73(11)
C(6)-C(7)-H(7B)	109.5	C(13)-C(14)-H(14A)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	108.1	C(15)-C(14)-H(14A)	109.5
C(7)-C(8)-C(9)	110.80(11)	C(13)-C(14)-H(14B)	109.5
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5	C(15)-C(14)-H(14B)	109.5
C(9)-C(8)-H(8A)	109.5	H(14A)-C(14)-H(14B)	108.1
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5	C(14)-C(15)-C(10)	112.48(10)
C(9)-C(8)-H(8B)	109.5	C(14)-C(15)-H(15A)	109.1
H(8A)-C(8)-H(8B)	108.1	C(10)-C(15)-H(15A)	109.1
C(8)-C(9)-C(4)	111.45(11)	C(14)-C(15)-H(15B)	109.1
C(8)-C(9)-H(9A)	109.3	C(10)-C(15)-H(15B)	109.1
C(4)-C(9)-H(9A)	109.3	H(15A)-C(15)-H(15B)	107.8
C(8)-C(9)-H(9B)	109.3	C(21)-C(16)-C(17)	117.78(11)
C(4)-C(9)-H(9B)	109.3	C(21)-C(16)-Si	123.24(9)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.0	C(17)-C(16)-Si	118.98(10)
N(2)-C(10)-C(11)	108.94(10)	C(18)-C(17)-C(16)	121.16(13)
N(2)-C(10)-C(15)	108.16(10)	C(18)-C(17)-H(17)	119.4
C(11)-C(10)-C(15)	110.66(10)	C(16)-C(17)-H(17)	119.4
N(2)-C(10)-H(10A)	109.7	C(19)-C(18)-C(17)	119.88(13)
C(11)-C(10)-H(10A)	109.7	C(19)-C(18)-H(18)	120.1
C(15)-C(10)-H(10A)	109.7	C(17)-C(18)-H(18)	120.1
C(12)-C(11)-C(10)	112.83(11)	C(18)-C(19)-C(20)	119.99(12)
C(12)-C(11)-H(11A)	109.0	C(18)-C(19)-H(19)	120.0

C(20)-C(19)-H(19)	120.0	C(2)-B(3)-H(3)	124.9
C(19)-C(20)-C(21)	119.91(13)	C(1)-B(3)-H(3)	124.6
C(19)-C(20)-H(20)	120.0	B(9)-B(3)-H(3)	122.4
C(21)-C(20)-H(20)	120.0	B(4)-B(3)-H(3)	121.8
C(20)-C(21)-C(16)	121.27(12)	B(8)-B(3)-H(3)	122.1
C(20)-C(21)-H(21)	119.4	C(1)-B(4)-B(3)	59.62(7)
C(16)-C(21)-H(21)	119.4	C(1)-B(4)-B(9)	104.95(9)
C(27)-C(22)-C(23)	118.13(11)	B(3)-B(4)-B(9)	59.23(8)
C(27)-C(22)-Si	121.77(9)	C(1)-B(4)-B(10)	104.53(9)
C(23)-C(22)-Si	119.86(10)	B(3)-B(4)-B(10)	107.61(10)
C(24)-C(23)-C(22)	120.89(12)	B(9)-B(4)-B(10)	60.24(8)
C(24)-C(23)-H(23)	119.6	C(1)-B(4)-B(5)	58.59(7)
C(22)-C(23)-H(23)	119.6	B(3)-B(4)-B(5)	108.47(9)
C(23)-C(24)-C(25)	119.97(12)	B(9)-B(4)-B(5)	108.15(9)
C(23)-C(24)-H(24)	120.0	B(10)-B(4)-B(5)	59.79(8)
C(25)-C(24)-H(24)	120.0	C(1)-B(4)-H(4)	124.5
C(26)-C(25)-C(24)	120.07(12)	B(3)-B(4)-H(4)	121.4
C(26)-C(25)-H(25)	120.0	B(9)-B(4)-H(4)	122.4
C(24)-C(25)-H(25)	120.0	B(10)-B(4)-H(4)	122.6
C(25)-C(26)-C(27)	119.92(12)	B(5)-B(4)-H(4)	121.4
C(25)-C(26)-H(26)	120.0	C(1)-B(5)-B(6)	58.97(7)
C(27)-C(26)-H(26)	120.0	C(1)-B(5)-B(10)	104.60(9)
C(26)-C(27)-C(22)	120.99(11)	B(6)-B(5)-B(10)	107.53(9)
C(26)-C(27)-H(27)	119.5	C(1)-B(5)-B(11)	104.64(9)
C(22)-C(27)-H(27)	119.5	B(6)-B(5)-B(11)	59.32(8)
C(3)-N(1)-C(4)	115.66(9)	B(10)-B(5)-B(11)	60.28(8)
C(3)-N(1)-Si	119.08(8)	C(1)-B(5)-B(4)	58.56(7)
C(4)-N(1)-Si	125.14(8)	B(6)-B(5)-B(4)	107.84(9)
C(3)-N(2)-C(10)	125.27(11)	B(10)-B(5)-B(4)	59.90(8)
C(2)-B(3)-C(1)	57.23(7)	B(11)-B(5)-B(4)	108.06(10)
C(2)-B(3)-B(9)	104.85(9)	C(1)-B(5)-H(5)	124.7
C(1)-B(3)-B(9)	105.12(9)	B(6)-B(5)-H(5)	121.8
C(2)-B(3)-B(4)	104.71(9)	B(10)-B(5)-H(5)	122.4
C(1)-B(3)-B(4)	58.51(7)	B(11)-B(5)-H(5)	122.4
B(9)-B(3)-B(4)	60.56(8)	B(4)-B(5)-H(5)	121.5
C(2)-B(3)-B(8)	57.91(7)	C(1)-B(6)-C(2)	57.54(7)
C(1)-B(3)-B(8)	104.40(9)	C(1)-B(6)-B(11)	105.40(9)
B(9)-B(3)-B(8)	60.70(8)	C(2)-B(6)-B(11)	104.87(9)
B(4)-B(3)-B(8)	108.66(10)	C(1)-B(6)-B(7)	104.93(9)

C(2)-B(6)-B(7)	58.16(7)	B(12)-B(8)-H(8)	122.5
B(11)-B(6)-B(7)	60.40(8)	B(9)-B(8)-H(8)	122.5
C(1)-B(6)-B(5)	58.76(7)	B(3)-B(9)-B(4)	60.21(8)
C(2)-B(6)-B(5)	105.04(9)	B(3)-B(9)-B(8)	60.18(8)
B(11)-B(6)-B(5)	60.51(8)	B(4)-B(9)-B(8)	107.99(9)
B(7)-B(6)-B(5)	108.60(10)	B(3)-B(9)-B(10)	108.13(10)
C(1)-B(6)-H(6)	124.2	B(4)-B(9)-B(10)	59.92(8)
C(2)-B(6)-H(6)	124.6	B(8)-B(9)-B(10)	107.54(10)
B(11)-B(6)-H(6)	122.5	B(3)-B(9)-B(12)	108.07(9)
B(7)-B(6)-H(6)	122.0	B(4)-B(9)-B(12)	107.78(9)
B(5)-B(6)-H(6)	121.7	B(8)-B(9)-B(12)	59.71(8)
C(2)-B(7)-B(8)	58.37(7)	B(10)-B(9)-B(12)	59.78(8)
C(2)-B(7)-B(6)	59.48(7)	B(3)-B(9)-H(9)	121.4
B(8)-B(7)-B(6)	108.22(9)	B(4)-B(9)-H(9)	121.7
C(2)-B(7)-B(12)	104.67(9)	B(8)-B(9)-H(9)	121.9
B(8)-B(7)-B(12)	60.10(8)	B(10)-B(9)-H(9)	121.9
B(6)-B(7)-B(12)	107.71(9)	B(12)-B(9)-H(9)	121.9
C(2)-B(7)-B(11)	105.10(9)	B(5)-B(10)-B(4)	60.31(8)
B(8)-B(7)-B(11)	108.43(9)	B(5)-B(10)-B(12)	108.13(9)
B(6)-B(7)-B(11)	59.38(8)	B(4)-B(10)-B(12)	108.00(10)
B(12)-B(7)-B(11)	60.32(8)	B(5)-B(10)-B(9)	108.24(9)
C(2)-B(7)-H(7)	124.5	B(4)-B(10)-B(9)	59.84(8)
B(8)-B(7)-H(7)	121.4	B(12)-B(10)-B(9)	60.13(8)
B(6)-B(7)-H(7)	121.5	B(5)-B(10)-B(11)	59.94(8)
B(12)-B(7)-H(7)	122.4	B(4)-B(10)-B(11)	108.12(9)
B(11)-B(7)-H(7)	122.2	B(12)-B(10)-B(11)	60.06(8)
C(2)-B(8)-B(7)	58.70(7)	B(9)-B(10)-B(11)	108.17(9)
C(2)-B(8)-B(3)	59.64(7)	B(5)-B(10)-H(10)	121.5
B(7)-B(8)-B(3)	108.56(9)	B(4)-B(10)-H(10)	121.7
C(2)-B(8)-B(12)	104.85(10)	B(12)-B(10)-H(10)	121.7
B(7)-B(8)-B(12)	60.00(8)	B(9)-B(10)-H(10)	121.6
B(3)-B(8)-B(12)	107.64(10)	B(11)-B(10)-H(10)	121.7
C(2)-B(8)-B(9)	104.96(9)	B(6)-B(11)-B(7)	60.22(8)
B(7)-B(8)-B(9)	108.24(10)	B(6)-B(11)-B(5)	60.18(8)
B(3)-B(8)-B(9)	59.12(7)	B(7)-B(11)-B(5)	108.20(10)
B(12)-B(8)-B(9)	60.23(8)	B(6)-B(11)-B(12)	107.94(10)
C(2)-B(8)-H(8)	124.3	B(7)-B(11)-B(12)	59.77(8)
B(7)-B(8)-H(8)	121.2	B(5)-B(11)-B(12)	107.78(10)
B(3)-B(8)-H(8)	121.5	B(6)-B(11)-B(10)	107.83(10)

B(7)-B(11)-B(10)	107.62(10)	B(8)-B(12)-B(11)	107.94(9)
B(5)-B(11)-B(10)	59.79(8)	B(10)-B(12)-B(11)	60.16(8)
B(12)-B(11)-B(10)	59.78(8)	B(7)-B(12)-B(9)	108.02(9)
B(6)-B(11)-H(11)	121.6	B(8)-B(12)-B(9)	60.06(8)
B(7)-B(11)-H(11)	121.7	B(10)-B(12)-B(9)	60.10(8)
B(5)-B(11)-H(11)	121.7	B(11)-B(12)-B(9)	108.23(9)
B(12)-B(11)-H(11)	121.9	B(7)-B(12)-H(12)	121.8
B(10)-B(11)-H(11)	122.0	B(8)-B(12)-H(12)	121.8
B(7)-B(12)-B(8)	59.90(8)	B(10)-B(12)-H(12)	121.6
B(7)-B(12)-B(10)	108.02(9)	B(11)-B(12)-H(12)	121.7
B(8)-B(12)-B(10)	108.07(10)	B(9)-B(12)-H(12)	121.6
B(7)-B(12)-B(11)	59.91(8)		

Compound **12**

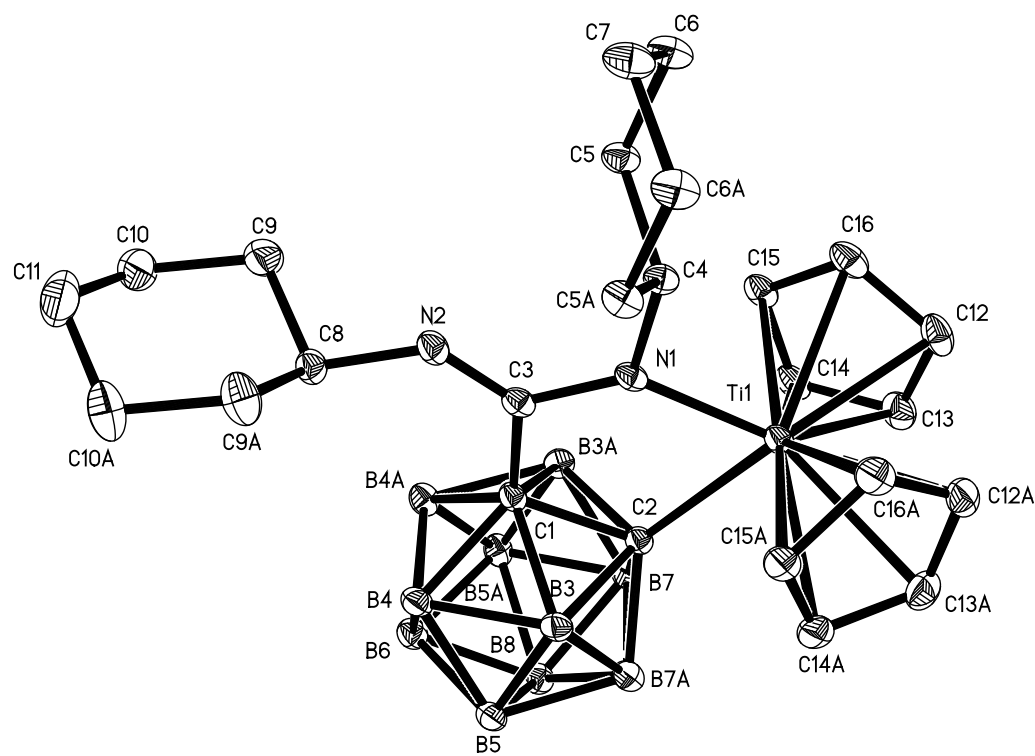


Table 15. Crystal data and structure refinement for **12**.

Identification code	magd45	
Empirical formula	C ₂₉ H ₅₀ B ₁₀ N ₂ O Ti	
Formula weight	598.68	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54180 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	Pmc2 ₁	
Unit cell dimensions	a = 12.608(3) Å	α = 90°
	b = 10.454(2) Å	β = 90°
	c = 24.129(5) Å	γ = 90°
Volume	3180.3(12) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.250 Mg/m ³	
Absorption coefficient	2.466 mm ⁻¹	
F(000)	1272	
Crystal size	0.11 x 0.07 x 0.02 mm ³	
Theta range for data collection	3.51 to 76.17°	
Index ranges	-15 ≤ h ≤ 13, -13 ≤ k ≤ 13, -30 ≤ l ≤ 30	
Reflections collected	54885	
Independent reflections	6908 [R(int) = 0.0542]	
Completeness to theta = 76.17°	99.5 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1.00000 and 0.71948	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	6908 / 1 / 424	
Goodness-of-fit on F ²	1.033	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0466, wR2 = 0.1237	
R indices (all data)	R1 = 0.0487, wR2 = 0.1257	
Absolute structure parameter	0.51(2)	
Largest diff. peak and hole	0.639 and -0.482 e.Å ⁻³	

Table 16. Bond lengths [Å] and angles [°] for **12**.

Ti(1)-N(1)	2.012(3)	C(7)-H(7B)	0.9900
Ti(1)-C(2)	2.339(3)	C(8)-C(9)#1	1.532(3)
Ti(1)-C(15)#1	2.405(3)	C(8)-C(9)	1.532(3)
Ti(1)-C(15)	2.405(3)	C(8)-H(8A)	1.0000
Ti(1)-C(14)#1	2.408(3)	C(9)-C(10)	1.529(4)
Ti(1)-C(14)	2.408(3)	C(9)-H(9A)	0.9900
Ti(1)-C(16)	2.414(3)	C(9)-H(9B)	0.9900
Ti(1)-C(16)#1	2.414(3)	C(10)-C(11)	1.527(4)
Ti(1)-C(13)	2.433(3)	C(10)-H(10A)	0.9900
Ti(1)-C(13)#1	2.433(3)	C(10)-H(10B)	0.9900
Ti(1)-C(12)	2.460(3)	C(11)-C(10)#1	1.527(4)
Ti(1)-C(12)#1	2.460(3)	C(11)-H(11A)	0.9900
N(1)-C(3)	1.372(4)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(1)-C(4)	1.481(4)	C(12)-C(13)	1.405(4)
N(2)-C(3)	1.280(5)	C(12)-C(16)	1.414(4)
N(2)-C(8)	1.452(4)	C(12)-H(12A)	0.9300
C(1)-C(3)	1.531(5)	C(13)-C(14)	1.412(4)
C(1)-C(2)	1.700(5)	C(13)-H(13A)	0.9301
C(1)-B(3)#1	1.704(3)	C(14)-C(15)	1.413(4)
C(1)-B(3)	1.704(3)	C(14)-H(14A)	0.9301
C(1)-B(4)	1.719(4)	C(15)-C(16)	1.407(3)
C(1)-B(4)#1	1.719(4)	C(15)-H(15A)	0.9300
C(2)-B(7)#1	1.736(4)	C(16)-H(16A)	0.9298
C(2)-B(7)	1.736(4)	B(3)-B(7)#1	1.777(4)
C(2)-B(3)	1.736(3)	B(3)-B(5)	1.777(4)
C(2)-B(3)#1	1.736(3)	B(3)-B(4)	1.778(4)
C(4)-C(5)	1.539(3)	B(3)-H(3)	1.0999
C(4)-C(5)#1	1.539(3)	B(4)-B(6)	1.767(5)
C(4)-H(4A)	1.0000	B(4)-B(5)	1.781(4)
C(5)-C(6)	1.534(3)	B(4)-B(4)#1	1.787(6)
C(5)-H(5A)	0.9900	B(4)-H(4)	1.1001
C(5)-H(5B)	0.9900	B(5)-B(7)#1	1.780(4)
C(6)-C(7)	1.523(3)	B(5)-B(8)	1.786(4)
C(6)-H(6A)	0.9900	B(5)-B(6)	1.788(4)
C(6)-H(6B)	0.9900	B(5)-H(5)	1.0972
C(7)-C(6)#1	1.523(3)	B(6)-B(4)#1	1.767(5)
C(7)-H(7A)	0.9900	B(6)-B(5)#1	1.788(4)

B(6)-B(8)	1.800(6)	C(25)-C(26)	1.530(4)
B(6)-H(6)	1.1000	C(25)-H(25A)	0.9900
B(7)-B(7)#1	1.763(6)	C(25)-H(25B)	0.9900
B(7)-B(8)	1.775(5)	C(26)-C(27)	1.533(3)
B(7)-B(3)#1	1.777(4)	C(26)-H(26A)	0.9900
B(7)-B(5)#1	1.780(4)	C(26)-H(26B)	0.9900
B(7)-H(7)	1.1000	C(27)-C(26)#2	1.533(3)
B(8)-B(7)#1	1.775(5)	C(27)-H(27A)	0.9900
B(8)-B(5)#1	1.786(4)	C(27)-H(27B)	0.9900
B(8)-H(8)	1.1000	C(28)-C(29)#2	1.519(3)
Ti(2)-N(3)	2.018(3)	C(28)-C(29)	1.519(3)
Ti(2)-C(22)	2.333(3)	C(28)-H(28A)	1.0000
Ti(2)-C(36)	2.409(3)	C(29)-C(30)	1.536(4)
Ti(2)-C(36)#2	2.409(3)	C(29)-H(29A)	0.9900
Ti(2)-C(35)#2	2.411(3)	C(29)-H(29B)	0.9900
Ti(2)-C(35)	2.411(3)	C(30)-C(31)	1.527(4)
Ti(2)-C(32)#2	2.417(2)	C(30)-H(30A)	0.9900
Ti(2)-C(32)	2.417(2)	C(30)-H(30B)	0.9900
Ti(2)-C(34)	2.436(3)	C(31)-C(30)#2	1.527(4)
Ti(2)-C(34)#2	2.436(3)	C(31)-H(31A)	0.9900
Ti(2)-C(33)#2	2.455(3)	C(31)-H(31B)	0.9900
Ti(2)-C(33)	2.455(3)	C(32)-C(33)	1.413(4)
N(3)-C(23)	1.365(5)	C(32)-C(36)	1.417(3)
N(3)-C(24)	1.478(4)	C(32)-H(32A)	0.9299
N(4)-C(23)	1.288(5)	C(33)-C(34)	1.404(4)
N(4)-C(28)	1.453(5)	C(33)-H(33A)	0.9267
C(21)-C(23)	1.536(5)	C(34)-C(35)	1.420(4)
C(21)-C(22)	1.692(5)	C(34)-H(34A)	0.9303
C(21)-B(23)	1.703(4)	C(35)-C(36)	1.406(4)
C(21)-B(23)#2	1.703(4)	C(35)-H(35A)	0.9301
C(21)-B(24)#2	1.708(4)	C(36)-H(36A)	0.9301
C(21)-B(24)	1.708(4)	B(23)-B(26)	1.768(4)
C(22)-B(23)#2	1.730(3)	B(23)-B(25)	1.772(4)
C(22)-B(23)	1.730(3)	B(23)-B(24)	1.779(4)
C(22)-B(25)#2	1.734(4)	B(23)-H(23)	1.0999
C(22)-B(25)	1.734(4)	B(24)-B(26)	1.780(4)
C(24)-C(25)#2	1.538(3)	B(24)-B(27)	1.782(5)
C(24)-C(25)	1.538(3)	B(24)-B(24)#2	1.783(6)
C(24)-H(24A)	1.0000	B(24)-H(24)	1.1000

B(25)-B(25)#2	1.751(6)	O(1)-C(44)	1.499(6)
B(25)-B(28)	1.780(5)	O(1)-C(41)	1.530(5)
B(25)-B(26)	1.782(4)	C(41)-C(42)	1.507(6)
B(25)-H(25)	1.1000	C(41)-H(41A)	0.9900
B(26)-B(27)	1.785(4)	C(41)-H(41B)	0.9900
B(26)-B(28)	1.787(4)	C(42)-C(43)	1.497(6)
B(26)-H(26)	1.0971	C(42)-H(42A)	0.9900
B(27)-B(24)#2	1.782(5)	C(42)-H(42B)	0.9900
B(27)-B(28)	1.783(7)	C(43)-C(44)	1.371(6)
B(27)-B(26)#2	1.785(4)	C(43)-H(43A)	0.9900
B(27)-H(27)	1.1001	C(43)-H(43B)	0.9900
B(28)-B(25)#2	1.780(5)	C(44)-H(44A)	0.9900
B(28)-B(26)#2	1.787(4)	C(44)-H(44B)	0.9900
B(28)-H(28)	1.1001		
N(1)-Ti(1)-C(2)	75.13(12)	C(15)-Ti(1)-C(16)#1	136.59(9)
N(1)-Ti(1)-C(15)#1	83.81(7)	C(14)#1-Ti(1)-C(16)#1	56.25(9)
C(2)-Ti(1)-C(15)#1	93.79(6)	C(14)-Ti(1)-C(16)#1	149.33(9)
N(1)-Ti(1)-C(15)	83.81(7)	C(16)-Ti(1)-C(16)#1	103.69(13)
C(2)-Ti(1)-C(15)	93.79(6)	N(1)-Ti(1)-C(13)	140.13(7)
C(15)#1-Ti(1)-C(15)	163.31(13)	C(2)-Ti(1)-C(13)	100.95(10)
N(1)-Ti(1)-C(14)#1	109.08(7)	C(15)#1-Ti(1)-C(13)	135.86(10)
C(2)-Ti(1)-C(14)#1	78.80(7)	C(15)-Ti(1)-C(13)	56.58(9)
C(15)#1-Ti(1)-C(14)#1	34.16(9)	C(14)#1-Ti(1)-C(13)	108.91(10)
C(15)-Ti(1)-C(14)#1	162.53(10)	C(14)-Ti(1)-C(13)	33.91(9)
N(1)-Ti(1)-C(14)	109.08(7)	C(16)-Ti(1)-C(13)	56.18(9)
C(2)-Ti(1)-C(14)	78.80(7)	C(16)#1-Ti(1)-C(13)	116.83(10)
C(15)#1-Ti(1)-C(14)	162.53(10)	N(1)-Ti(1)-C(13)#1	140.13(7)
C(15)-Ti(1)-C(14)	34.16(9)	C(2)-Ti(1)-C(13)#1	100.95(10)
C(14)#1-Ti(1)-C(14)	128.37(14)	C(15)#1-Ti(1)-C(13)#1	56.58(9)
N(1)-Ti(1)-C(16)	94.26(8)	C(15)-Ti(1)-C(13)#1	135.86(10)
C(2)-Ti(1)-C(16)	127.72(6)	C(14)#1-Ti(1)-C(13)#1	33.91(9)
C(15)#1-Ti(1)-C(16)	136.59(9)	C(14)-Ti(1)-C(13)#1	108.91(10)
C(15)-Ti(1)-C(16)	33.95(8)	C(16)-Ti(1)-C(13)#1	116.83(10)
C(14)#1-Ti(1)-C(16)	149.33(9)	C(16)#1-Ti(1)-C(13)#1	56.18(9)
C(14)-Ti(1)-C(16)	56.25(9)	C(13)-Ti(1)-C(13)#1	79.72(14)
N(1)-Ti(1)-C(16)#1	94.26(8)	N(1)-Ti(1)-C(12)	127.64(9)
C(2)-Ti(1)-C(16)#1	127.72(6)	C(2)-Ti(1)-C(12)	132.86(9)
C(15)#1-Ti(1)-C(16)#1	33.95(8)	C(15)#1-Ti(1)-C(12)	125.79(9)

C(15)-Ti(1)-C(12)	56.06(9)	B(7)#1-C(2)-B(7)	61.1(2)
C(14)#1-Ti(1)-C(12)	118.44(10)	C(1)-C(2)-B(3)	59.45(14)
C(14)-Ti(1)-C(12)	55.69(9)	B(7)#1-C(2)-B(3)	61.56(15)
C(16)-Ti(1)-C(12)	33.72(9)	B(7)-C(2)-B(3)	110.8(2)
C(16)#1-Ti(1)-C(12)	94.40(9)	C(1)-C(2)-B(3)#1	59.45(14)
C(13)-Ti(1)-C(12)	33.37(9)	B(7)#1-C(2)-B(3)#1	110.8(2)
C(13)#1-Ti(1)-C(12)	84.57(10)	B(7)-C(2)-B(3)#1	61.56(15)
N(1)-Ti(1)-C(12)#1	127.64(9)	B(3)-C(2)-B(3)#1	109.9(3)
C(2)-Ti(1)-C(12)#1	132.86(9)	C(1)-C(2)-Ti(1)	108.6(2)
C(15)#1-Ti(1)-C(12)#1	56.06(9)	B(7)#1-C(2)-Ti(1)	131.75(17)
C(15)-Ti(1)-C(12)#1	125.79(9)	B(7)-C(2)-Ti(1)	131.75(17)
C(14)#1-Ti(1)-C(12)#1	55.69(9)	B(3)-C(2)-Ti(1)	114.58(15)
C(14)-Ti(1)-C(12)#1	118.44(10)	B(3)#1-C(2)-Ti(1)	114.58(15)
C(16)-Ti(1)-C(12)#1	94.40(9)	N(2)-C(3)-N(1)	122.2(3)
C(16)#1-Ti(1)-C(12)#1	33.72(9)	N(2)-C(3)-C(1)	127.3(3)
C(13)-Ti(1)-C(12)#1	84.57(10)	N(1)-C(3)-C(1)	110.6(3)
C(13)#1-Ti(1)-C(12)#1	33.37(9)	N(1)-C(4)-C(5)	114.37(17)
C(12)-Ti(1)-C(12)#1	70.57(13)	N(1)-C(4)-C(5)#1	114.37(17)
C(3)-N(1)-C(4)	119.3(3)	C(5)-C(4)-C(5)#1	111.1(3)
C(3)-N(1)-Ti(1)	133.7(3)	N(1)-C(4)-H(4A)	105.3
C(4)-N(1)-Ti(1)	107.0(2)	C(5)-C(4)-H(4A)	105.3
C(3)-N(2)-C(8)	127.6(3)	C(5)#1-C(4)-H(4A)	105.3
C(3)-C(1)-C(2)	112.0(3)	C(6)-C(5)-C(4)	110.3(2)
C(3)-C(1)-B(3)#1	115.63(16)	C(6)-C(5)-H(5A)	109.6
C(2)-C(1)-B(3)#1	61.33(14)	C(4)-C(5)-H(5A)	109.6
C(3)-C(1)-B(3)	115.63(16)	C(6)-C(5)-H(5B)	109.6
C(2)-C(1)-B(3)	61.33(14)	C(4)-C(5)-H(5B)	109.6
B(3)#1-C(1)-B(3)	113.0(3)	H(5A)-C(5)-H(5B)	108.1
C(3)-C(1)-B(4)	124.6(2)	C(7)-C(6)-C(5)	110.8(2)
C(2)-C(1)-B(4)	112.3(2)	C(7)-C(6)-H(6A)	109.5
B(3)#1-C(1)-B(4)	114.0(2)	C(5)-C(6)-H(6A)	109.5
B(3)-C(1)-B(4)	62.60(15)	C(7)-C(6)-H(6B)	109.5
C(3)-C(1)-B(4)#1	124.6(2)	C(5)-C(6)-H(6B)	109.5
C(2)-C(1)-B(4)#1	112.3(2)	H(6A)-C(6)-H(6B)	108.1
B(3)#1-C(1)-B(4)#1	62.60(15)	C(6)#1-C(7)-C(6)	110.3(3)
B(3)-C(1)-B(4)#1	114.0(2)	C(6)#1-C(7)-H(7A)	109.6
B(4)-C(1)-B(4)#1	62.7(2)	C(6)-C(7)-H(7A)	109.6
C(1)-C(2)-B(7)#1	107.8(2)	C(6)#1-C(7)-H(7B)	109.6
C(1)-C(2)-B(7)	107.8(2)	C(6)-C(7)-H(7B)	109.6

H(7A)-C(7)-H(7B)	108.1	C(15)-C(14)-Ti(1)	72.82(15)
N(2)-C(8)-C(9)#1	108.7(2)	C(13)-C(14)-H(14A)	125.7
N(2)-C(8)-C(9)	108.7(2)	C(15)-C(14)-H(14A)	125.7
C(9)#1-C(8)-C(9)	110.2(3)	Ti(1)-C(14)-H(14A)	119.3
N(2)-C(8)-H(8A)	109.8	C(16)-C(15)-C(14)	107.4(2)
C(9)#1-C(8)-H(8A)	109.8	C(16)-C(15)-Ti(1)	73.38(15)
C(9)-C(8)-H(8A)	109.8	C(14)-C(15)-Ti(1)	73.02(15)
C(10)-C(9)-C(8)	111.0(3)	C(16)-C(15)-H(15A)	126.2
C(10)-C(9)-H(9A)	109.4	C(14)-C(15)-H(15A)	126.4
C(8)-C(9)-H(9A)	109.4	Ti(1)-C(15)-H(15A)	119.1
C(10)-C(9)-H(9B)	109.4	C(15)-C(16)-C(12)	108.3(2)
C(8)-C(9)-H(9B)	109.4	C(15)-C(16)-Ti(1)	72.67(15)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.0	C(12)-C(16)-Ti(1)	74.90(15)
C(11)-C(10)-C(9)	111.8(3)	C(15)-C(16)-H(16A)	126.0
C(11)-C(10)-H(10A)	109.3	C(12)-C(16)-H(16A)	125.7
C(9)-C(10)-H(10A)	109.3	Ti(1)-C(16)-H(16A)	118.6
C(11)-C(10)-H(10B)	109.3	C(1)-B(3)-C(2)	59.22(17)
C(9)-C(10)-H(10B)	109.3	C(1)-B(3)-B(7)#1	105.8(2)
H(10A)-C(10)-H(10B)	107.9	C(2)-B(3)-B(7)#1	59.21(17)
C(10)-C(11)-C(10)#1	110.8(4)	C(1)-B(3)-B(5)	105.6(2)
C(10)-C(11)-H(11A)	109.5	C(2)-B(3)-B(5)	107.0(2)
C(10)#1-C(11)-H(11A)	109.5	B(7)#1-B(3)-B(5)	60.14(16)
C(10)-C(11)-H(11B)	109.5	C(1)-B(3)-B(4)	59.11(17)
C(10)#1-C(11)-H(11B)	109.5	C(2)-B(3)-B(4)	107.8(2)
H(11A)-C(11)-H(11B)	108.1	B(7)#1-B(3)-B(4)	108.4(2)
C(13)-C(12)-C(16)	108.1(2)	B(5)-B(3)-B(4)	60.14(16)
C(13)-C(12)-Ti(1)	72.29(15)	C(1)-B(3)-H(3)	123.8
C(16)-C(12)-Ti(1)	71.38(14)	C(2)-B(3)-H(3)	122.2
C(13)-C(12)-H(12A)	125.8	B(7)#1-B(3)-H(3)	122.0
C(16)-C(12)-H(12A)	126.0	B(5)-B(3)-H(3)	122.4
Ti(1)-C(12)-H(12A)	122.0	B(4)-B(3)-H(3)	121.4
C(12)-C(13)-C(14)	107.6(2)	C(1)-B(4)-B(6)	104.7(2)
C(12)-C(13)-Ti(1)	74.34(16)	C(1)-B(4)-B(3)	58.30(15)
C(14)-C(13)-Ti(1)	72.04(15)	B(6)-B(4)-B(3)	107.9(2)
C(12)-C(13)-H(13A)	126.2	C(1)-B(4)-B(5)	104.8(2)
C(14)-C(13)-H(13A)	126.2	B(6)-B(4)-B(5)	60.52(16)
Ti(1)-C(13)-H(13A)	119.3	B(3)-B(4)-B(5)	59.89(16)
C(13)-C(14)-C(15)	108.5(2)	C(1)-B(4)-B(4)#1	58.67(11)
C(13)-C(14)-Ti(1)	74.04(15)	B(6)-B(4)-B(4)#1	59.62(11)

B(3)-B(4)-B(4)#1	107.25(12)	B(7)#1-B(7)-B(8)	60.21(11)
B(5)-B(4)-B(4)#1	107.98(13)	C(2)-B(7)-B(3)#1	59.24(15)
C(1)-B(4)-H(4)	124.8	B(7)#1-B(7)-B(3)#1	107.67(13)
B(6)-B(4)-H(4)	122.3	B(8)-B(7)-B(3)#1	108.0(2)
B(3)-B(4)-H(4)	121.8	C(2)-B(7)-B(5)#1	106.9(2)
B(5)-B(4)-H(4)	122.0	B(7)#1-B(7)-B(5)#1	108.40(13)
B(4)#1-B(4)-H(4)	122.0	B(8)-B(7)-B(5)#1	60.33(17)
B(3)-B(5)-B(7)#1	59.92(15)	B(3)#1-B(7)-B(5)#1	59.94(16)
B(3)-B(5)-B(4)	59.97(16)	C(2)-B(7)-H(7)	122.8
B(7)#1-B(5)-B(4)	108.13(19)	B(7)#1-B(7)-H(7)	121.5
B(3)-B(5)-B(8)	107.5(2)	B(8)-B(7)-H(7)	121.7
B(7)#1-B(5)-B(8)	59.68(19)	B(3)#1-B(7)-H(7)	122.0
B(4)-B(5)-B(8)	108.1(2)	B(5)#1-B(7)-H(7)	121.8
B(3)-B(5)-B(6)	107.0(2)	B(7)-B(8)-B(7)#1	59.6(2)
B(7)#1-B(5)-B(6)	107.8(2)	B(7)-B(8)-B(5)	107.6(2)
B(4)-B(5)-B(6)	59.35(19)	B(7)#1-B(8)-B(5)	59.99(16)
B(8)-B(5)-B(6)	60.45(19)	B(7)-B(8)-B(5)#1	59.99(16)
B(3)-B(5)-H(5)	122.2	B(7)#1-B(8)-B(5)#1	107.6(2)
B(7)#1-B(5)-H(5)	121.5	B(5)-B(8)-B(5)#1	107.8(3)
B(4)-B(5)-H(5)	121.9	B(7)-B(8)-B(6)	107.5(2)
B(8)-B(5)-H(5)	121.6	B(7)#1-B(8)-B(6)	107.5(2)
B(6)-B(5)-H(5)	122.3	B(5)-B(8)-B(6)	59.83(16)
B(4)-B(6)-B(4)#1	60.8(2)	B(5)#1-B(8)-B(6)	59.83(16)
B(4)-B(6)-B(5)#1	108.6(2)	B(7)-B(8)-H(8)	122.1
B(4)#1-B(6)-B(5)#1	60.13(17)	B(7)#1-B(8)-H(8)	122.1
B(4)-B(6)-B(5)	60.13(17)	B(5)-B(8)-H(8)	121.8
B(4)#1-B(6)-B(5)	108.6(2)	B(5)#1-B(8)-H(8)	121.8
B(5)#1-B(6)-B(5)	107.7(3)	B(6)-B(8)-H(8)	122.0
B(4)-B(6)-B(8)	108.1(2)	N(3)-Ti(2)-C(22)	75.39(13)
B(4)#1-B(6)-B(8)	108.1(2)	N(3)-Ti(2)-C(36)	83.59(7)
B(5)#1-B(6)-B(8)	59.72(16)	C(22)-Ti(2)-C(36)	93.64(6)
B(5)-B(6)-B(8)	59.72(16)	N(3)-Ti(2)-C(36)#2	83.59(7)
B(4)-B(6)-H(6)	121.1	C(22)-Ti(2)-C(36)#2	93.64(6)
B(4)#1-B(6)-H(6)	121.1	C(36)-Ti(2)-C(36)#2	163.16(13)
B(5)#1-B(6)-H(6)	121.9	N(3)-Ti(2)-C(35)#2	108.77(7)
B(5)-B(6)-H(6)	121.9	C(22)-Ti(2)-C(35)#2	78.71(7)
B(8)-B(6)-H(6)	122.1	C(36)-Ti(2)-C(35)#2	162.91(9)
C(2)-B(7)-B(7)#1	59.47(11)	C(36)#2-Ti(2)-C(35)#2	33.93(9)
C(2)-B(7)-B(8)	107.0(2)	N(3)-Ti(2)-C(35)	108.77(7)

C(22)-Ti(2)-C(35)	78.71(7)	C(35)-Ti(2)-C(33)#2	118.95(9)
C(36)-Ti(2)-C(35)	33.93(9)	C(32)#2-Ti(2)-C(33)#2	33.71(9)
C(36)#2-Ti(2)-C(35)	162.91(9)	C(32)-Ti(2)-C(33)#2	94.51(9)
C(35)#2-Ti(2)-C(35)	128.98(13)	C(34)-Ti(2)-C(33)#2	84.93(9)
N(3)-Ti(2)-C(32)#2	93.92(8)	C(34)#2-Ti(2)-C(33)#2	33.36(9)
C(22)-Ti(2)-C(32)#2	127.76(6)	N(3)-Ti(2)-C(33)	127.30(9)
C(36)-Ti(2)-C(32)#2	136.59(9)	C(22)-Ti(2)-C(33)	132.85(9)
C(36)#2-Ti(2)-C(32)#2	34.14(8)	C(36)-Ti(2)-C(33)	56.14(9)
C(35)#2-Ti(2)-C(32)#2	56.29(8)	C(36)#2-Ti(2)-C(33)	126.11(9)
C(35)-Ti(2)-C(32)#2	149.65(9)	C(35)#2-Ti(2)-C(33)	118.95(9)
N(3)-Ti(2)-C(32)	93.92(8)	C(35)-Ti(2)-C(33)	55.80(8)
C(22)-Ti(2)-C(32)	127.76(6)	C(32)#2-Ti(2)-C(33)	94.51(9)
C(36)-Ti(2)-C(32)	34.14(8)	C(32)-Ti(2)-C(33)	33.71(9)
C(36)#2-Ti(2)-C(32)	136.59(9)	C(34)-Ti(2)-C(33)	33.36(9)
C(35)#2-Ti(2)-C(32)	149.65(9)	C(34)#2-Ti(2)-C(33)	84.93(9)
C(35)-Ti(2)-C(32)	56.29(8)	C(33)#2-Ti(2)-C(33)	70.83(13)
C(32)#2-Ti(2)-C(32)	103.54(12)	C(23)-N(3)-C(24)	119.5(3)
N(3)-Ti(2)-C(34)	139.88(7)	C(23)-N(3)-Ti(2)	132.9(3)
C(22)-Ti(2)-C(34)	100.95(9)	C(24)-N(3)-Ti(2)	107.5(2)
C(36)-Ti(2)-C(34)	56.51(9)	C(23)-N(4)-C(28)	127.5(3)
C(36)#2-Ti(2)-C(34)	136.31(9)	C(23)-C(21)-C(22)	111.8(3)
C(35)#2-Ti(2)-C(34)	109.55(10)	C(23)-C(21)-B(23)	115.57(17)
C(35)-Ti(2)-C(34)	34.05(9)	C(22)-C(21)-B(23)	61.29(15)
C(32)#2-Ti(2)-C(34)	117.11(9)	C(23)-C(21)-B(23)#2	115.57(17)
C(32)-Ti(2)-C(34)	56.18(9)	C(22)-C(21)-B(23)#2	61.29(15)
N(3)-Ti(2)-C(34)#2	139.88(7)	B(23)-C(21)-B(23)#2	112.9(3)
C(22)-Ti(2)-C(34)#2	100.95(9)	C(23)-C(21)-B(24)#2	124.1(2)
C(36)-Ti(2)-C(34)#2	136.31(9)	C(22)-C(21)-B(24)#2	112.8(2)
C(36)#2-Ti(2)-C(34)#2	56.51(9)	B(23)-C(21)-B(24)#2	114.5(2)
C(35)#2-Ti(2)-C(34)#2	34.05(9)	B(23)#2-C(21)-B(24)#2	62.88(16)
C(35)-Ti(2)-C(34)#2	109.55(10)	C(23)-C(21)-B(24)	124.1(2)
C(32)#2-Ti(2)-C(34)#2	56.18(9)	C(22)-C(21)-B(24)	112.8(2)
C(32)-Ti(2)-C(34)#2	117.11(9)	B(23)-C(21)-B(24)	62.88(16)
C(34)-Ti(2)-C(34)#2	80.24(13)	B(23)#2-C(21)-B(24)	114.5(2)
N(3)-Ti(2)-C(33)#2	127.30(9)	B(24)#2-C(21)-B(24)	62.9(2)
C(22)-Ti(2)-C(33)#2	132.85(9)	C(21)-C(22)-B(23)#2	59.68(15)
C(36)-Ti(2)-C(33)#2	126.11(9)	C(21)-C(22)-B(23)	59.68(15)
C(36)#2-Ti(2)-C(33)#2	56.14(9)	B(23)#2-C(22)-B(23)	110.3(3)
C(35)#2-Ti(2)-C(33)#2	55.80(8)	C(21)-C(22)-B(25)#2	107.8(2)

B(23)#2-C(22)-B(25)#2	61.53(16)	N(4)-C(28)-C(29)	108.8(2)
B(23)-C(22)-B(25)#2	110.6(2)	C(29)#2-C(28)-C(29)	111.0(3)
C(21)-C(22)-B(25)	107.8(2)	N(4)-C(28)-H(28A)	109.4
B(23)#2-C(22)-B(25)	110.6(2)	C(29)#2-C(28)-H(28A)	109.4
B(23)-C(22)-B(25)	61.53(16)	C(29)-C(28)-H(28A)	109.4
B(25)#2-C(22)-B(25)	60.6(2)	C(28)-C(29)-C(30)	110.5(3)
C(21)-C(22)-Ti(2)	108.8(2)	C(28)-C(29)-H(29A)	109.6
B(23)#2-C(22)-Ti(2)	114.64(15)	C(30)-C(29)-H(29A)	109.6
B(23)-C(22)-Ti(2)	114.64(15)	C(28)-C(29)-H(29B)	109.6
B(25)#2-C(22)-Ti(2)	131.76(18)	C(30)-C(29)-H(29B)	109.6
B(25)-C(22)-Ti(2)	131.76(18)	H(29A)-C(29)-H(29B)	108.1
N(4)-C(23)-N(3)	121.6(3)	C(31)-C(30)-C(29)	111.7(3)
N(4)-C(23)-C(21)	127.3(3)	C(31)-C(30)-H(30A)	109.3
N(3)-C(23)-C(21)	111.1(3)	C(29)-C(30)-H(30A)	109.3
N(3)-C(24)-C(25)#2	114.20(17)	C(31)-C(30)-H(30B)	109.3
N(3)-C(24)-C(25)	114.20(17)	C(29)-C(30)-H(30B)	109.3
C(25)#2-C(24)-C(25)	111.1(3)	H(30A)-C(30)-H(30B)	107.9
N(3)-C(24)-H(24A)	105.5	C(30)-C(31)-C(30)#2	111.3(4)
C(25)#2-C(24)-H(24A)	105.5	C(30)-C(31)-H(31A)	109.4
C(25)-C(24)-H(24A)	105.5	C(30)#2-C(31)-H(31A)	109.4
C(26)-C(25)-C(24)	111.2(2)	C(30)-C(31)-H(31B)	109.4
C(26)-C(25)-H(25A)	109.4	C(30)#2-C(31)-H(31B)	109.4
C(24)-C(25)-H(25A)	109.4	H(31A)-C(31)-H(31B)	108.0
C(26)-C(25)-H(25B)	109.4	C(33)-C(32)-C(36)	108.0(2)
C(24)-C(25)-H(25B)	109.4	C(33)-C(32)-Ti(2)	74.61(14)
H(25A)-C(25)-H(25B)	108.0	C(36)-C(32)-Ti(2)	72.61(15)
C(25)-C(26)-C(27)	110.9(2)	C(33)-C(32)-H(32A)	126.1
C(25)-C(26)-H(26A)	109.5	C(36)-C(32)-H(32A)	125.9
C(27)-C(26)-H(26A)	109.5	Ti(2)-C(32)-H(32A)	118.7
C(25)-C(26)-H(26B)	109.5	C(34)-C(33)-C(32)	108.4(2)
C(27)-C(26)-H(26B)	109.5	C(34)-C(33)-Ti(2)	72.59(15)
H(26A)-C(26)-H(26B)	108.0	C(32)-C(33)-Ti(2)	71.68(14)
C(26)-C(27)-C(26)#2	110.3(3)	C(34)-C(33)-H(33A)	126.1
C(26)-C(27)-H(27A)	109.6	C(32)-C(33)-H(33A)	125.4
C(26)#2-C(27)-H(27A)	109.6	Ti(2)-C(33)-H(33A)	121.1
C(26)-C(27)-H(27B)	109.6	C(33)-C(34)-C(35)	107.5(2)
C(26)#2-C(27)-H(27B)	109.6	C(33)-C(34)-Ti(2)	74.05(16)
H(27A)-C(27)-H(27B)	108.1	C(35)-C(34)-Ti(2)	71.99(15)
N(4)-C(28)-C(29)#2	108.8(2)	C(33)-C(34)-H(34A)	126.3

C(35)-C(34)-H(34A)	126.2	C(21)-B(24)-H(24)	124.8
Ti(2)-C(34)-H(34A)	119.8	B(23)-B(24)-H(24)	122.2
C(36)-C(35)-C(34)	108.5(2)	B(26)-B(24)-H(24)	122.4
C(36)-C(35)-Ti(2)	72.96(15)	B(27)-B(24)-H(24)	122.4
C(34)-C(35)-Ti(2)	73.96(15)	B(24)#2-B(24)-H(24)	121.6
C(36)-C(35)-H(35A)	125.6	C(22)-B(25)-B(25)#2	59.69(11)
C(34)-C(35)-H(35A)	125.8	C(22)-B(25)-B(23)	59.13(16)
Ti(2)-C(35)-H(35A)	118.9	B(25)#2-B(25)-B(23)	107.89(13)
C(35)-C(36)-C(32)	107.6(2)	C(22)-B(25)-B(28)	107.3(2)
C(35)-C(36)-Ti(2)	73.11(15)	B(25)#2-B(25)-B(28)	60.55(11)
C(32)-C(36)-Ti(2)	73.26(15)	B(23)-B(25)-B(28)	107.9(2)
C(35)-C(36)-H(36A)	126.2	C(22)-B(25)-B(26)	106.5(2)
C(32)-C(36)-H(36A)	126.2	B(25)#2-B(25)-B(26)	108.53(13)
Ti(2)-C(36)-H(36A)	119.5	B(23)-B(25)-B(26)	59.64(16)
C(21)-B(23)-C(22)	59.03(18)	B(28)-B(25)-B(26)	60.22(18)
C(21)-B(23)-B(26)	105.3(2)	C(22)-B(25)-H(25)	122.9
C(22)-B(23)-B(26)	107.3(2)	B(25)#2-B(25)-H(25)	121.3
C(21)-B(23)-B(25)	105.6(2)	B(23)-B(25)-H(25)	122.0
C(22)-B(23)-B(25)	59.34(17)	B(28)-B(25)-H(25)	121.6
B(26)-B(23)-B(25)	60.47(17)	B(26)-B(25)-H(25)	121.9
C(21)-B(23)-B(24)	58.69(17)	B(23)-B(26)-B(24)	60.20(17)
C(22)-B(23)-B(24)	107.6(2)	B(23)-B(26)-B(25)	59.89(16)
B(26)-B(23)-B(24)	60.24(16)	B(24)-B(26)-B(25)	108.2(2)
B(25)-B(23)-B(24)	108.7(2)	B(23)-B(26)-B(27)	107.7(2)
C(21)-B(23)-H(23)	124.0	B(24)-B(26)-B(27)	60.00(19)
C(22)-B(23)-H(23)	122.1	B(25)-B(26)-B(27)	107.6(2)
B(26)-B(23)-H(23)	122.3	B(23)-B(26)-B(28)	107.8(2)
B(25)-B(23)-H(23)	122.0	B(24)-B(26)-B(28)	108.2(2)
B(24)-B(23)-H(23)	121.3	B(25)-B(26)-B(28)	59.83(19)
C(21)-B(24)-B(23)	58.43(15)	B(27)-B(26)-B(28)	59.9(2)
C(21)-B(24)-B(26)	104.6(2)	B(23)-B(26)-H(26)	121.9
B(23)-B(24)-B(26)	59.55(16)	B(24)-B(26)-H(26)	121.4
C(21)-B(24)-B(27)	104.6(2)	B(25)-B(26)-H(26)	121.9
B(23)-B(24)-B(27)	107.3(2)	B(27)-B(26)-H(26)	121.9
B(26)-B(24)-B(27)	60.13(18)	B(28)-B(26)-H(26)	121.8
C(21)-B(24)-B(24)#2	58.54(11)	B(24)#2-B(27)-B(24)	60.0(2)
B(23)-B(24)-B(24)#2	107.27(13)	B(24)#2-B(27)-B(28)	108.3(2)
B(26)-B(24)-B(24)#2	108.00(14)	B(24)-B(27)-B(28)	108.3(2)
B(27)-B(24)-B(24)#2	59.99(11)	B(24)#2-B(27)-B(26)	107.8(2)

B(24)-B(27)-B(26)	59.87(16)	C(44)-O(1)-C(41)	102.7(3)
B(28)-B(27)-B(26)	60.13(17)	C(42)-C(41)-O(1)	104.5(3)
B(24)#2-B(27)-B(26)#2	59.87(16)	C(42)-C(41)-H(41A)	110.8
B(24)-B(27)-B(26)#2	107.8(2)	O(1)-C(41)-H(41A)	110.8
B(28)-B(27)-B(26)#2	60.13(17)	C(42)-C(41)-H(41B)	110.8
B(26)-B(27)-B(26)#2	107.8(3)	O(1)-C(41)-H(41B)	110.8
B(24)#2-B(27)-H(27)	121.7	H(41A)-C(41)-H(41B)	108.9
B(24)-B(27)-H(27)	121.7	C(43)-C(42)-C(41)	106.5(3)
B(28)-B(27)-H(27)	121.3	C(43)-C(42)-H(42A)	110.4
B(26)-B(27)-H(27)	121.9	C(41)-C(42)-H(42A)	110.4
B(26)#2-B(27)-H(27)	121.9	C(43)-C(42)-H(42B)	110.4
B(25)-B(28)-B(25)#2	58.9(2)	C(41)-C(42)-H(42B)	110.4
B(25)-B(28)-B(27)	107.7(3)	H(42A)-C(42)-H(42B)	108.6
B(25)#2-B(28)-B(27)	107.7(3)	C(44)-C(43)-C(42)	103.6(3)
B(25)-B(28)-B(26)#2	107.0(3)	C(44)-C(43)-H(43A)	111.0
B(25)#2-B(28)-B(26)#2	59.94(16)	C(42)-C(43)-H(43A)	111.0
B(27)-B(28)-B(26)#2	59.97(17)	C(44)-C(43)-H(43B)	111.0
B(25)-B(28)-B(26)	59.94(16)	C(42)-C(43)-H(43B)	111.0
B(25)#2-B(28)-B(26)	107.0(3)	H(43A)-C(43)-H(43B)	109.0
B(27)-B(28)-B(26)	59.97(17)	C(43)-C(44)-O(1)	108.5(4)
B(26)#2-B(28)-B(26)	107.5(3)	C(43)-C(44)-H(44A)	110.0
B(25)-B(28)-H(28)	122.3	O(1)-C(44)-H(44A)	110.0
B(25)#2-B(28)-H(28)	122.3	C(43)-C(44)-H(44B)	110.0
B(27)-B(28)-H(28)	121.7	O(1)-C(44)-H(44B)	110.0
B(26)#2-B(28)-H(28)	122.1	H(44A)-C(44)-H(44B)	108.4
B(26)-B(28)-H(28)	122.1		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Compound **13**

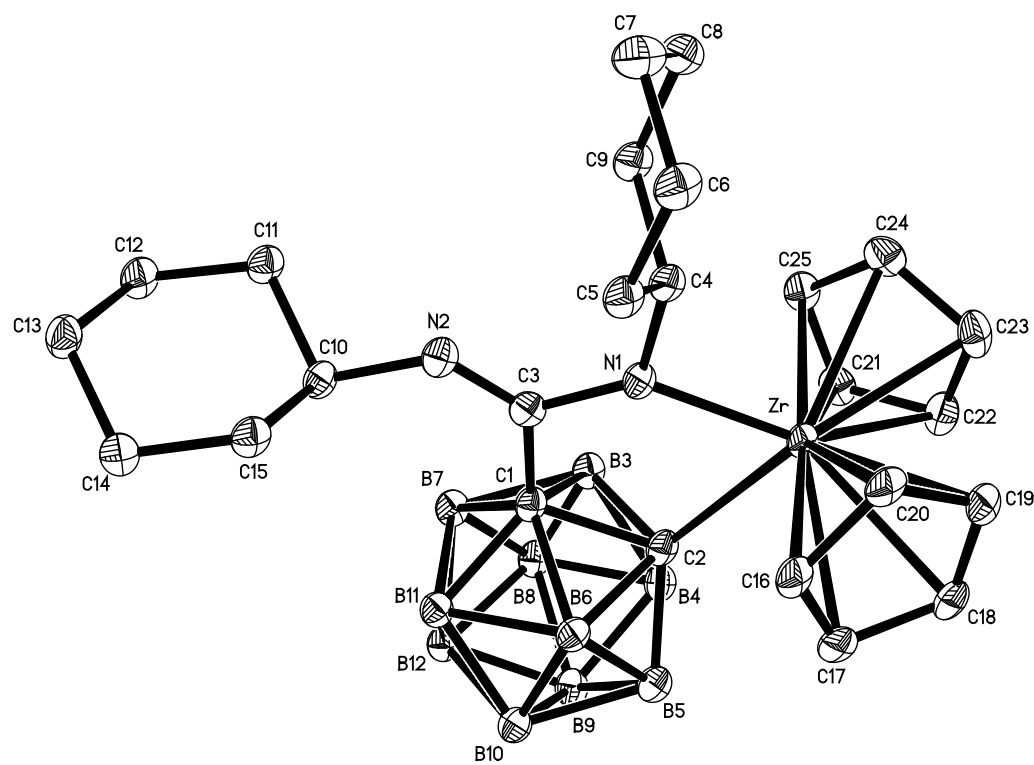


Table 17. Crystal data and structure refinement for **13**.

Identification code	magd52	
Empirical formula	C ₂₅ H ₄₂ B ₁₀ N ₂ Zr	
Formula weight	569.93	
Temperature	100(2) K	
Wavelength	1.54184 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 10.4438(4) Å	α = 107.827(4)°
	b = 10.7747(4) Å	β = 96.672(4)°
	c = 13.2968(6) Å	γ = 93.456(3)°
Volume	1407.49(10) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.345 Mg/m ³	
Absorption coefficient	3.316 mm ⁻¹	
F(000)	592	
Crystal size	0.09 x 0.05 x 0.03 mm ³	
Theta range for data collection	3.53 to 76.18°	
Index ranges	-13 ≤ h ≤ 11, -13 ≤ k ≤ 13, -16 ≤ l ≤ 16	
Reflections collected	33562	
Independent reflections	5822 [R(int) = 0.0896]	
Completeness to theta = 76.18°	98.7 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9071 and 0.7546	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	5822 / 0 / 343	
Goodness-of-fit on F ²	1.039	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0373, wR2 = 0.0946	
R indices (all data)	R1 = 0.0392, wR2 = 0.0967	
Largest diff. peak and hole	1.435 and -0.784 e.Å ⁻³	

Table 18. Bond lengths [Å] and angles [°] for **13**.

Zr-N(1)	2.0782(18)	C(7)-H(7B)	0.9900
Zr-C(2)	2.433(2)	C(8)-C(9)	1.533(3)
Zr-C(25)	2.529(2)	C(8)-H(8A)	0.9900
Zr-C(24)	2.534(2)	C(8)-H(8B)	0.9900
Zr-C(21)	2.538(2)	C(9)-H(9A)	0.9900
Zr-C(16)	2.539(2)	C(9)-H(9B)	0.9900
Zr-C(20)	2.540(2)	C(10)-C(15)	1.533(3)
Zr-C(17)	2.540(2)	C(10)-C(11)	1.537(3)
Zr-C(18)	2.546(2)	C(10)-H(10)	1.0000
Zr-C(19)	2.558(2)	C(11)-C(12)	1.530(3)
Zr-C(22)	2.570(2)	C(11)-H(11A)	0.9900
Zr-C(23)	2.571(2)	C(11)-H(11B)	0.9900
N(1)-C(3)	1.377(3)	C(12)-C(13)	1.532(3)
N(1)-C(4)	1.460(3)	C(12)-H(12A)	0.9900
N(2)-C(3)	1.271(3)	C(12)-H(12B)	0.9900
N(2)-C(10)	1.451(3)	C(13)-C(14)	1.530(3)
C(1)-C(3)	1.531(3)	C(13)-H(13A)	0.9900
C(1)-B(7)	1.711(3)	C(13)-H(13B)	0.9900
C(1)-B(11)	1.713(3)	C(14)-C(15)	1.530(3)
C(1)-B(6)	1.713(3)	C(14)-H(14A)	0.9900
C(1)-B(3)	1.716(3)	C(14)-H(14B)	0.9900
C(1)-C(2)	1.717(3)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(2)-B(4)	1.726(3)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(2)-B(5)	1.729(3)	C(16)-C(17)	1.407(3)
C(2)-B(6)	1.740(3)	C(16)-C(20)	1.412(3)
C(2)-B(3)	1.741(3)	C(16)-H(16)	0.9500
C(4)-C(5)	1.537(3)	C(17)-C(18)	1.424(3)
C(4)-C(9)	1.542(3)	C(17)-H(17)	0.9500
C(4)-H(4A)	1.0000	C(18)-C(19)	1.412(3)
C(5)-C(6)	1.531(3)	C(18)-H(18)	0.9500
C(5)-H(5A)	0.9900	C(19)-C(20)	1.413(3)
C(5)-H(5B)	0.9900	C(19)-H(19)	0.9500
C(6)-C(7)	1.532(3)	C(20)-H(20)	0.9500
C(6)-H(6A)	0.9900	C(21)-C(25)	1.407(3)
C(6)-H(6B)	0.9900	C(21)-C(22)	1.416(3)
C(7)-C(8)	1.524(3)	C(21)-H(21)	0.9500
C(7)-H(7A)	0.9900	C(22)-C(23)	1.412(4)

C(22)-H(22)	0.9500	B(6)-B(11)	1.790(3)
C(23)-C(24)	1.416(4)	B(6)-H(6)	1.1200
C(23)-H(23)	0.9500	B(7)-B(8)	1.775(3)
C(24)-C(25)	1.414(3)	B(7)-B(12)	1.778(4)
C(24)-H(24)	0.9500	B(7)-B(11)	1.783(3)
C(25)-H(25)	0.9500	B(7)-H(7)	1.1200
B(3)-B(4)	1.774(4)	B(8)-B(9)	1.782(4)
B(3)-B(8)	1.780(3)	B(8)-B(12)	1.787(4)
B(3)-B(7)	1.787(3)	B(8)-H(8)	1.1200
B(3)-H(3)	1.1200	B(9)-B(12)	1.774(4)
B(4)-B(5)	1.759(4)	B(9)-B(10)	1.789(4)
B(4)-B(9)	1.776(4)	B(9)-H(9)	1.1200
B(4)-B(8)	1.782(3)	B(10)-B(11)	1.777(3)
B(4)-H(4)	1.1200	B(10)-B(12)	1.790(4)
B(5)-B(6)	1.772(3)	B(10)-H(10A)	1.1200
B(5)-B(9)	1.784(4)	B(11)-B(12)	1.774(3)
B(5)-B(10)	1.787(4)	B(11)-H(11)	1.1200
B(5)-H(5)	1.1200	B(12)-H(12)	1.1200
B(6)-B(10)	1.779(4)		
N(1)-Zr-C(2)	71.57(7)	C(21)-Zr-C(20)	149.44(7)
N(1)-Zr-C(25)	87.30(7)	C(16)-Zr-C(20)	32.29(7)
C(2)-Zr-C(25)	93.95(7)	N(1)-Zr-C(17)	108.84(7)
N(1)-Zr-C(24)	98.64(8)	C(2)-Zr-C(17)	79.01(7)
C(2)-Zr-C(24)	126.35(7)	C(25)-Zr-C(17)	158.86(8)
C(25)-Zr-C(24)	32.42(7)	C(24)-Zr-C(17)	148.06(8)
N(1)-Zr-C(21)	109.59(7)	C(21)-Zr-C(17)	126.70(8)
C(2)-Zr-C(21)	79.65(7)	C(16)-Zr-C(17)	32.17(7)
C(25)-Zr-C(21)	32.23(8)	C(20)-Zr-C(17)	53.36(7)
C(24)-Zr-C(21)	53.45(8)	N(1)-Zr-C(18)	139.04(7)
N(1)-Zr-C(16)	85.97(7)	C(2)-Zr-C(18)	101.21(7)
C(2)-Zr-C(16)	92.47(7)	C(25)-Zr-C(18)	133.65(8)
C(25)-Zr-C(16)	168.75(8)	C(24)-Zr-C(18)	116.07(8)
C(24)-Zr-C(16)	140.50(8)	C(21)-Zr-C(18)	108.45(8)
C(21)-Zr-C(16)	158.85(8)	C(16)-Zr-C(18)	53.53(7)
N(1)-Zr-C(20)	96.69(7)	C(20)-Zr-C(18)	53.33(7)
C(2)-Zr-C(20)	124.76(7)	C(17)-Zr-C(18)	32.51(7)
C(25)-Zr-C(20)	140.40(7)	N(1)-Zr-C(19)	128.63(7)
C(24)-Zr-C(20)	108.55(7)	C(2)-Zr-C(19)	131.40(7)

C(25)-Zr-C(19)	126.33(7)	B(7)-C(1)-B(3)	62.88(14)
C(24)-Zr-C(19)	96.63(7)	B(11)-C(1)-B(3)	114.33(17)
C(21)-Zr-C(19)	118.80(8)	B(6)-C(1)-B(3)	112.74(16)
C(16)-Zr-C(19)	53.41(7)	C(3)-C(1)-C(2)	112.26(17)
C(20)-Zr-C(19)	32.17(7)	B(7)-C(1)-C(2)	112.09(16)
C(17)-Zr-C(19)	53.43(7)	B(11)-C(1)-C(2)	112.18(16)
C(18)-Zr-C(19)	32.12(7)	B(6)-C(1)-C(2)	60.96(13)
N(1)-Zr-C(22)	139.92(7)	B(3)-C(1)-C(2)	60.96(13)
C(2)-Zr-C(22)	100.79(7)	C(1)-C(2)-B(4)	107.39(16)
C(25)-Zr-C(22)	53.35(8)	C(1)-C(2)-B(5)	107.46(16)
C(24)-Zr-C(22)	53.30(8)	B(4)-C(2)-B(5)	61.21(14)
C(21)-Zr-C(22)	32.18(7)	C(1)-C(2)-B(6)	59.42(12)
C(16)-Zr-C(22)	134.10(7)	B(4)-C(2)-B(6)	110.81(17)
C(20)-Zr-C(22)	117.93(7)	B(5)-C(2)-B(6)	61.43(13)
C(17)-Zr-C(22)	107.99(8)	C(1)-C(2)-B(3)	59.49(12)
C(18)-Zr-C(22)	80.72(8)	B(4)-C(2)-B(3)	61.55(14)
C(19)-Zr-C(22)	86.63(7)	B(5)-C(2)-B(3)	111.15(17)
N(1)-Zr-C(23)	130.69(7)	B(6)-C(2)-B(3)	110.22(16)
C(2)-Zr-C(23)	131.22(7)	C(1)-C(2)-Zr	109.44(12)
C(25)-Zr-C(23)	53.30(7)	B(4)-C(2)-Zr	131.12(14)
C(24)-Zr-C(23)	32.20(8)	B(5)-C(2)-Zr	131.67(14)
C(21)-Zr-C(23)	53.07(7)	B(6)-C(2)-Zr	115.19(13)
C(16)-Zr-C(23)	126.82(7)	B(3)-C(2)-Zr	114.06(13)
C(20)-Zr-C(23)	97.94(7)	N(2)-C(3)-N(1)	121.5(2)
C(17)-Zr-C(23)	117.64(8)	N(2)-C(3)-C(1)	129.2(2)
C(18)-Zr-C(23)	85.13(8)	N(1)-C(3)-C(1)	109.34(18)
C(19)-Zr-C(23)	73.66(7)	N(1)-C(4)-C(5)	115.60(17)
C(22)-Zr-C(23)	31.88(8)	N(1)-C(4)-C(9)	114.27(17)
C(3)-N(1)-C(4)	121.46(18)	C(5)-C(4)-C(9)	111.15(18)
C(3)-N(1)-Zr	137.30(15)	N(1)-C(4)-Zr	47.58(9)
C(4)-N(1)-Zr	101.19(13)	C(5)-C(4)-Zr	124.29(13)
C(3)-N(2)-C(10)	126.88(19)	C(9)-C(4)-Zr	124.16(14)
C(3)-C(1)-B(7)	124.68(17)	N(1)-C(4)-H(4A)	104.8
C(3)-C(1)-B(11)	124.29(17)	C(5)-C(4)-H(4A)	104.8
B(7)-C(1)-B(11)	62.77(14)	C(9)-C(4)-H(4A)	104.8
C(3)-C(1)-B(6)	115.23(17)	Zr-C(4)-H(4A)	57.3
B(7)-C(1)-B(6)	114.38(17)	C(6)-C(5)-C(4)	110.87(18)
B(11)-C(1)-B(6)	63.01(13)	C(6)-C(5)-H(5A)	109.5
C(3)-C(1)-B(3)	115.77(17)	C(4)-C(5)-H(5A)	109.5

C(6)-C(5)-H(5B)	109.5	C(11)-C(12)-C(13)	111.31(18)
C(4)-C(5)-H(5B)	109.5	C(11)-C(12)-H(12A)	109.4
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.1	C(13)-C(12)-H(12A)	109.4
C(5)-C(6)-C(7)	110.58(18)	C(11)-C(12)-H(12B)	109.4
C(5)-C(6)-H(6A)	109.5	C(13)-C(12)-H(12B)	109.4
C(7)-C(6)-H(6A)	109.5	H(12A)-C(12)-H(12B)	108.0
C(5)-C(6)-H(6B)	109.5	C(14)-C(13)-C(12)	112.18(18)
C(7)-C(6)-H(6B)	109.5	C(14)-C(13)-H(13A)	109.2
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.1	C(12)-C(13)-H(13A)	109.2
C(8)-C(7)-C(6)	111.4(2)	C(14)-C(13)-H(13B)	109.2
C(8)-C(7)-H(7A)	109.4	C(12)-C(13)-H(13B)	109.2
C(6)-C(7)-H(7A)	109.4	H(13A)-C(13)-H(13B)	107.9
C(8)-C(7)-H(7B)	109.4	C(13)-C(14)-C(15)	110.98(19)
C(6)-C(7)-H(7B)	109.4	C(13)-C(14)-H(14A)	109.4
H(7A)-C(7)-H(7B)	108.0	C(15)-C(14)-H(14A)	109.4
C(7)-C(8)-C(9)	111.27(19)	C(13)-C(14)-H(14B)	109.4
C(7)-C(8)-H(8A)	109.4	C(15)-C(14)-H(14B)	109.4
C(9)-C(8)-H(8A)	109.4	H(14A)-C(14)-H(14B)	108.0
C(7)-C(8)-H(8B)	109.4	C(14)-C(15)-C(10)	110.61(18)
C(9)-C(8)-H(8B)	109.4	C(14)-C(15)-H(15A)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	108.0	C(10)-C(15)-H(15A)	109.5
C(8)-C(9)-C(4)	110.80(17)	C(14)-C(15)-H(15B)	109.5
C(8)-C(9)-H(9A)	109.5	C(10)-C(15)-H(15B)	109.5
C(4)-C(9)-H(9A)	109.5	H(15A)-C(15)-H(15B)	108.1
C(8)-C(9)-H(9B)	109.5	C(17)-C(16)-C(20)	108.0(2)
C(4)-C(9)-H(9B)	109.5	C(17)-C(16)-Zr	73.97(12)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.1	C(20)-C(16)-Zr	73.89(12)
N(2)-C(10)-C(15)	109.44(17)	C(17)-C(16)-H(16)	126.0
N(2)-C(10)-C(11)	107.55(18)	C(20)-C(16)-H(16)	126.0
C(15)-C(10)-C(11)	109.56(18)	Zr-C(16)-H(16)	118.1
N(2)-C(10)-H(10)	110.1	C(16)-C(17)-C(18)	108.0(2)
C(15)-C(10)-H(10)	110.1	C(16)-C(17)-Zr	73.86(12)
C(11)-C(10)-H(10)	110.1	C(18)-C(17)-Zr	73.97(12)
C(12)-C(11)-C(10)	111.81(18)	C(16)-C(17)-H(17)	126.0
C(12)-C(11)-H(11A)	109.3	C(18)-C(17)-H(17)	126.0
C(10)-C(11)-H(11A)	109.3	Zr-C(17)-H(17)	118.1
C(12)-C(11)-H(11B)	109.3	C(19)-C(18)-C(17)	107.9(2)
C(10)-C(11)-H(11B)	109.3	C(19)-C(18)-Zr	74.43(12)
H(11A)-C(11)-H(11B)	107.9	C(17)-C(18)-Zr	73.52(12)

C(19)-C(18)-H(18)	126.1	C(21)-C(25)-C(24)	108.0(2)
C(17)-C(18)-H(18)	126.1	C(21)-C(25)-Zr	74.24(13)
Zr-C(18)-H(18)	118.0	C(24)-C(25)-Zr	73.99(13)
C(18)-C(19)-C(20)	107.8(2)	C(21)-C(25)-H(25)	126.0
C(18)-C(19)-Zr	73.46(12)	C(24)-C(25)-H(25)	126.0
C(20)-C(19)-Zr	73.18(12)	Zr-C(25)-H(25)	117.7
C(18)-C(19)-H(19)	126.1	C(1)-B(3)-C(2)	59.55(12)
C(20)-C(19)-H(19)	126.1	C(1)-B(3)-B(4)	105.31(16)
Zr-C(19)-H(19)	119.2	C(2)-B(3)-B(4)	58.81(13)
C(16)-C(20)-C(19)	108.4(2)	C(1)-B(3)-B(8)	104.81(16)
C(16)-C(20)-Zr	73.82(12)	C(2)-B(3)-B(8)	106.73(17)
C(19)-C(20)-Zr	74.65(12)	B(4)-B(3)-B(8)	60.18(14)
C(16)-C(20)-H(20)	125.8	C(1)-B(3)-B(7)	58.43(13)
C(19)-C(20)-H(20)	125.8	C(2)-B(3)-B(7)	107.37(16)
Zr-C(20)-H(20)	117.7	B(4)-B(3)-B(7)	107.78(17)
C(25)-C(21)-C(22)	108.4(2)	B(8)-B(3)-B(7)	59.69(14)
C(25)-C(21)-Zr	73.52(13)	C(1)-B(3)-H(3)	124.1
C(22)-C(21)-Zr	75.13(13)	C(2)-B(3)-H(3)	122.2
C(25)-C(21)-H(21)	125.8	B(4)-B(3)-H(3)	122.4
C(22)-C(21)-H(21)	125.8	B(8)-B(3)-H(3)	122.7
Zr-C(21)-H(21)	117.5	B(7)-B(3)-H(3)	121.9
C(23)-C(22)-C(21)	107.6(2)	C(2)-B(4)-B(5)	59.47(13)
C(23)-C(22)-Zr	74.12(13)	C(2)-B(4)-B(3)	59.64(13)
C(21)-C(22)-Zr	72.69(13)	B(5)-B(4)-B(3)	108.20(17)
C(23)-C(22)-H(22)	126.2	C(2)-B(4)-B(9)	107.31(17)
C(21)-C(22)-H(22)	126.2	B(5)-B(4)-B(9)	60.62(14)
Zr-C(22)-H(22)	118.9	B(3)-B(4)-B(9)	108.15(17)
C(22)-C(23)-C(24)	108.1(2)	C(2)-B(4)-B(8)	107.29(17)
C(22)-C(23)-Zr	73.99(13)	B(5)-B(4)-B(8)	108.77(17)
C(24)-C(23)-Zr	72.46(13)	B(3)-B(4)-B(8)	60.07(14)
C(22)-C(23)-H(23)	126.0	B(9)-B(4)-B(8)	60.11(14)
C(24)-C(23)-H(23)	126.0	C(2)-B(4)-H(4)	122.6
Zr-C(23)-H(23)	119.4	B(5)-B(4)-H(4)	121.2
C(25)-C(24)-C(23)	107.9(2)	B(3)-B(4)-H(4)	121.7
C(25)-C(24)-Zr	73.59(13)	B(9)-B(4)-H(4)	121.6
C(23)-C(24)-Zr	75.34(13)	B(8)-B(4)-H(4)	121.6
C(25)-C(24)-H(24)	126.1	C(2)-B(5)-B(4)	59.31(13)
C(23)-C(24)-H(24)	126.1	C(2)-B(5)-B(6)	59.58(13)
Zr-C(24)-H(24)	117.1	B(4)-B(5)-B(6)	107.80(17)

C(2)-B(5)-B(9)	106.84(17)	B(12)-B(7)-H(7)	122.3
B(4)-B(5)-B(9)	60.17(14)	B(11)-B(7)-H(7)	121.7
B(6)-B(5)-B(9)	107.82(17)	B(3)-B(7)-H(7)	121.7
C(2)-B(5)-B(10)	107.16(17)	B(7)-B(8)-B(3)	60.36(14)
B(4)-B(5)-B(10)	108.37(18)	B(7)-B(8)-B(4)	107.98(17)
B(6)-B(5)-B(10)	59.99(14)	B(3)-B(8)-B(4)	59.75(14)
B(9)-B(5)-B(10)	60.12(14)	B(7)-B(8)-B(9)	107.75(17)
C(2)-B(5)-H(5)	122.8	B(3)-B(8)-B(9)	107.65(17)
B(4)-B(5)-H(5)	121.6	B(4)-B(8)-B(9)	59.79(14)
B(6)-B(5)-H(5)	121.8	B(7)-B(8)-B(12)	59.88(14)
B(9)-B(5)-H(5)	121.9	B(3)-B(8)-B(12)	107.84(17)
B(10)-B(5)-H(5)	121.6	B(4)-B(8)-B(12)	107.39(17)
C(1)-B(6)-C(2)	59.62(12)	B(9)-B(8)-B(12)	59.62(14)
C(1)-B(6)-B(5)	105.71(16)	B(7)-B(8)-H(8)	121.6
C(2)-B(6)-B(5)	58.99(13)	B(3)-B(8)-H(8)	121.7
C(1)-B(6)-B(10)	105.07(17)	B(4)-B(8)-H(8)	122.0
C(2)-B(6)-B(10)	107.05(17)	B(9)-B(8)-H(8)	122.0
B(5)-B(6)-B(10)	60.44(14)	B(12)-B(8)-H(8)	122.1
C(1)-B(6)-B(11)	58.49(13)	B(12)-B(9)-B(4)	108.17(17)
C(2)-B(6)-B(11)	107.47(16)	B(12)-B(9)-B(8)	60.31(14)
B(5)-B(6)-B(11)	108.08(17)	B(4)-B(9)-B(8)	60.09(14)
B(10)-B(6)-B(11)	59.71(14)	B(12)-B(9)-B(5)	108.17(17)
C(1)-B(6)-H(6)	123.9	B(4)-B(9)-B(5)	59.21(14)
C(2)-B(6)-H(6)	122.1	B(8)-B(9)-B(5)	107.63(18)
B(5)-B(6)-H(6)	122.1	B(12)-B(9)-B(10)	60.31(14)
B(10)-B(6)-H(6)	122.5	B(4)-B(9)-B(10)	107.52(17)
B(11)-B(6)-H(6)	121.8	B(8)-B(9)-B(10)	108.36(17)
C(1)-B(7)-B(8)	105.21(17)	B(5)-B(9)-B(10)	60.02(14)
C(1)-B(7)-B(12)	104.90(17)	B(12)-B(9)-H(9)	121.3
B(8)-B(7)-B(12)	60.38(14)	B(4)-B(9)-H(9)	122.1
C(1)-B(7)-B(11)	58.67(13)	B(8)-B(9)-H(9)	121.5
B(8)-B(7)-B(11)	108.14(17)	B(5)-B(9)-H(9)	122.1
B(12)-B(7)-B(11)	59.78(14)	B(10)-B(9)-H(9)	121.6
C(1)-B(7)-B(3)	58.69(13)	B(11)-B(10)-B(6)	60.46(14)
B(8)-B(7)-B(3)	59.95(14)	B(11)-B(10)-B(5)	107.99(17)
B(12)-B(7)-B(3)	107.90(17)	B(6)-B(10)-B(5)	59.58(14)
B(11)-B(7)-B(3)	107.58(17)	B(11)-B(10)-B(9)	107.38(17)
C(1)-B(7)-H(7)	124.5	B(6)-B(10)-B(9)	107.30(17)
B(8)-B(7)-H(7)	122.0	B(5)-B(10)-B(9)	59.86(14)

B(11)-B(10)-B(12)	59.67(14)	B(12)-B(11)-H(11)	122.2
B(6)-B(10)-B(12)	107.59(17)	B(10)-B(11)-H(11)	121.9
B(5)-B(10)-B(12)	107.35(17)	B(7)-B(11)-H(11)	121.7
B(9)-B(10)-B(12)	59.44(14)	B(6)-B(11)-H(11)	122.0
B(11)-B(10)-H(10A)	121.7	B(9)-B(12)-B(11)	108.15(17)
B(6)-B(10)-H(10A)	121.9	B(9)-B(12)-B(7)	107.99(17)
B(5)-B(10)-H(10A)	121.9	B(11)-B(12)-B(7)	60.26(14)
B(9)-B(10)-H(10A)	122.3	B(9)-B(12)-B(8)	60.06(14)
B(12)-B(10)-H(10A)	122.2	B(11)-B(12)-B(8)	108.02(17)
C(1)-B(11)-B(12)	104.95(17)	B(7)-B(12)-B(8)	59.74(14)
C(1)-B(11)-B(10)	105.18(16)	B(9)-B(12)-B(10)	60.26(14)
B(12)-B(11)-B(10)	60.53(14)	B(11)-B(12)-B(10)	59.80(14)
C(1)-B(11)-B(7)	58.56(13)	B(7)-B(12)-B(10)	108.03(17)
B(12)-B(11)-B(7)	59.96(14)	B(8)-B(12)-B(10)	108.12(17)
B(10)-B(11)-B(7)	108.37(17)	B(9)-B(12)-H(12)	121.6
C(1)-B(11)-B(6)	58.50(13)	B(11)-B(12)-H(12)	121.7
B(12)-B(11)-B(6)	107.78(17)	B(7)-B(12)-H(12)	121.7
B(10)-B(11)-B(6)	59.83(14)	B(8)-B(12)-H(12)	121.8
B(7)-B(11)-B(6)	107.29(17)	B(10)-B(12)-H(12)	121.7
C(1)-B(11)-H(11)	124.6		
