

S1. The number of isomers all considered $(\text{BN})_n\text{-F}_4\text{F}_6\text{F}_8$ clusters by running the revised version of CaGe software.

Mol.	0F8	1F8	2F8	3F8	4F8	5F8	6F8	7F8	8F8	9F8	10F8
$\text{B}_{15}\text{N}_{15}$	2	18	62	77	41	-	-	-	-	-	-
$\text{B}_{16}\text{N}_{16}$	8	24	129	215	153	26	13	-	-	-	-
$\text{B}_{17}\text{N}_{17}$	3	31	205	459	446	143	-	-	-	-	-
$\text{B}_{18}\text{N}_{18}$	7	47	356	1007	1390	598	136	-	-	-	-
$\text{B}_{19}\text{N}_{19}$	7	64	549	2050	3383	2355	603	-	-	-	-
$\text{B}_{20}\text{N}_{20}$	7	76	917	3864	8438	7790	2961	361	48	-	-
$\text{B}_{21}\text{N}_{21}$	5	107	1322	7084	18865	22774	12332	2387	-	-	-
$\text{B}_{22}\text{N}_{22}$	14	154	2033	12629	40326	61979	45873	12575	1720	-	-
$\text{B}_{23}\text{N}_{23}$	6	176	2889	21413	81157	15612	14614	62399	9213	-	-
$\text{B}_{24}\text{N}_{24}$	12	227	4199	35362	158512	366080	439082	250056	60145	4947	423

S2 The relative energies (in kcal/mol) of the three most stable isomers of $(\text{BN})_{15}\text{-F}_4\text{F}_6\text{F}_8$ clusters with different methods.

Molecule	BHandHLYP	B3LYP		MP2
	/6-31G*	/6-31G*	/6-311+G*	/6-31G*
$(\text{BN})_{15}\text{-0F}_8\text{-01}$	0.00	0.00	0.00	0.00
$(\text{BN})_{15}\text{-1F}_8\text{-13}$	59.08	55.46	55.41	61.58
$(\text{BN})_{15}\text{-1F}_8\text{-15}$	58.78	55.73	55.65	61.31

Supplementary Information 3 (S3) The B3LYP/6-31G* relative energy (RE, in kcal/mol), symmetry, the binding energy (BE, in kcal/mol), the number of B₄₄ bonds (E₄₄), HOMO-LUMO gap (in eV), sphericity (SP), asphericity (AS), the nucleus-independent chemical shift (NICS) and the average PA (°) of B (PA_B) and N (PA_N) atoms of (BN)_n-F₄F₆F₈ (n = 15- 24) clusters.

Molecule	sym.	RE	BE	E ₄₄	Gap	HOMO	LUMO	SP	AS	NICS	PA _B	PA _N
(BN)₁₅-0F₈-01	C_{3h}	0.00	-346.51	0	6.58	-7.56	-0.97	0.11	0.30	-3.36	10.28	24.76
(BN) ₁₅ -1F ₈ -13	C ₁	55.46	-342.81	1	6.02	-7.42	-1.40	0.16	0.50	-3.73	9.87	24.07
(BN) ₁₅ -1F ₈ -15	C _S	55.73	-342.79	2	6.14	-7.38	-1.24	0.12	0.35	-4.53	9.98	24.63
(BN) ₁₅ -1F ₈ -14	C ₁	72.62	-341.67	2	6.08	-7.37	-1.29	0.14	0.54	-4.37	10.43	24.13
(BN) ₁₅ -1F ₈ -06	C ₁	83.18	-340.96	3	5.90	-7.48	-1.58	0.13	0.66	-4.67	10.45	24.36
(BN) ₁₅ -2F ₈ -45	C ₁	86.81	-340.72	2	5.95	-7.43	-1.48	0.14	0.45	-3.64	9.82	24.11
(BN) ₁₅ -0F ₈ -02	C ₁	87.02	-340.71	2	5.65	-7.43	-1.78	0.28	1.24	-4.82	10.80	24.88
(BN) ₁₅ -1F ₈ -03	C ₁	94.53	-340.21	2	5.67	-7.45	-1.78	0.25	0.99	-4.39	10.48	24.26
(BN) ₁₅ -2F ₈ -38	C ₁	94.87	-340.18	3	5.92	-7.54	-1.62	0.12	0.41	-4.42	10.25	24.14
(BN) ₁₅ -1F ₈ -11	C ₁	108.22	-339.29	3	5.78	-7.40	-1.62	0.32	1.44	-4.18	10.76	24.94
(BN) ₁₅ -2F ₈ -41	C ₁	111.06	-339.10	3	5.73	-7.38	-1.65	0.23	0.99	-3.92	10.32	24.68
(BN) ₁₅ -2F ₈ -58	C ₁	114.05	-338.90	3	5.98	-7.54	-1.56	0.13	0.62	-4.91	10.28	24.76
(BN) ₁₅ -1F ₈ -04	C ₁	114.15	-338.90	3	5.70	-7.59	-1.89	0.20	0.97	-4.88	10.88	24.66
(BN) ₁₅ -2F ₈ -37	C ₁	114.44	-338.88	3	5.69	-7.29	-1.60	0.23	0.80	-3.43	10.14	24.05
(BN) ₁₅ -1F ₈ -12	C ₁	116.34	-338.75	2	5.68	-7.33	-1.65	0.32	1.47	-4.05	10.62	25.06
(BN) ₁₅ -2F ₈ -18	C ₁	122.41	-338.35	3	5.92	-7.53	-1.61	0.31	1.30	-3.91	10.75	25.14
(BN) ₁₅ -1F ₈ -16	C ₁	130.53	-337.81	2	5.39	-7.32	-1.92	0.22	0.87	-3.48	10.65	24.84
(BN) ₁₅ -2F ₈ -17	C ₁	131.82	-337.72	3	5.65	-7.42	-1.77	0.36	1.57	-4.52	10.45	25.37
(BN) ₁₅ -2F ₈ -42	C ₁	135.84	-337.45	3	5.64	-7.42	-1.78	0.19	0.88	-4.02	10.34	24.91
(BN) ₁₅ -1F ₈ -05	C ₁	136.60	-337.40	3	5.61	-7.38	-1.77	0.47	2.25	-4.05	11.06	25.71
(BN) ₁₅ -2F ₈ -40	C ₁	152.79	-336.32	4	5.87	-7.46	-1.59	0.34	1.74	-4.91	10.74	24.93
(BN) ₁₅ -2F ₈ -39	C _S	159.71	-335.86	4	5.75	-7.37	-1.62	0.46	2.28	-4.18	10.55	24.84
(BN)₁₆-0F₈-02	T_d	0.00	-349.00	0	6.37	-7.38	-1.01	0.00	0.07	-3.53	9.45	22.57
(BN) ₁₆ -0F ₈ -01	C ₁	17.10	-347.93	0	6.46	-7.34	-0.88	0.00	0.13	-4.30	9.60	22.86
(BN) ₁₆ -2F ₈ -59	C ₁	60.85	-345.19	0	6.52	-7.73	-1.21	0.08	0.17	-3.59	8.83	23.08
(BN) ₁₆ -1F ₈ -20	C _{2v}	82.53	-343.84	2	6.18	-7.51	-1.33	0.01	0.25	-4.71	9.74	23.67
(BN) ₁₆ -2F ₈ -38	C ₁	85.40	-343.66	2	6.12	-7.47	-1.34	0.06	0.23	-4.04	9.54	23.11
(BN) ₁₆ -0F ₈ -03	C ₁	96.84	-342.94	2	6.08	-7.52	-1.44	0.18	1.03	-4.55	10.38	24.01
(BN) ₁₆ -1F ₈ -05	C ₁	100.10	-342.74	2	5.87	-7.46	-1.59	0.24	1.31	-3.98	9.95	23.78
(BN) ₁₆ -1F ₈ -03	C ₁	103.28	-342.54	2	5.75	-7.35	-1.60	0.23	1.10	-3.88	9.96	24.03
(BN) ₁₆ -1F ₈ -22	C ₁	106.41	-342.35	2	5.79	-7.27	-1.48	0.17	0.82	-3.58	10.15	23.86
(BN) ₁₆ -2F ₈ -83	C ₁	107.88	-342.25	2	5.76	-7.41	-1.65	0.20	0.88	-3.76	9.73	23.21
(BN) ₁₆ -1F ₈ -04	C ₁	109.61	-342.15	2	6.01	-7.52	-1.51	0.13	0.67	-4.35	9.93	23.59
(BN) ₁₆ -2F ₈ -89	C ₁	110.36	-342.10	3	6.26	-7.56	-1.30	0.10	0.64	-4.72	9.79	23.59
(BN) ₁₆ -2F ₈ -37	C ₁	111.20	-342.05	2	6.03	-7.56	-1.53	0.12	0.52	-3.62	9.62	23.38
(BN) ₁₆ -2F ₈ -101	C ₁	111.32	-342.04	3	5.96	-7.57	-1.61	0.09	0.48	-4.70	9.76	23.53
(BN) ₁₆ -1F ₈ -21	C ₂	111.88	-342.00	2	5.87	-7.39	-1.52	0.14	0.73	-4.29	10.52	23.42
(BN) ₁₆ -2F ₈ -94	C ₁	112.08	-341.99	2	5.79	-7.37	-1.57	0.16	0.64	-3.42	9.81	23.35
(BN) ₁₆ -0F ₈ -05	C ₁	112.83	-341.95	2	5.48	-7.38	-1.90	0.30	1.60	-4.60	10.51	24.34

(BN) ₁₆ -1F ₈ -23	C ₁	118.12	-341.61	2	5.80	-7.42	-1.62	0.15	0.74	-4.25	10.08	24.23
(BN) ₁₆ -0F ₈ -04	C ₁	121.65	-341.39	3	5.95	-7.68	-1.73	0.12	1.05	-5.61	10.83	24.39
(BN) ₁₆ -0F ₈ -06	C ₁	121.81	-341.38	2	5.69	-7.50	-1.81	0.25	1.34	-4.34	10.51	24.13
(BN) ₁₆ -2F ₈ -36	C ₁	126.94	-341.06	2	5.84	-7.46	-1.62	0.06	1.33	-2.89	9.04	23.41
(BN) ₁₆ -1F ₈ -01	C ₁	134.94	-340.56	2	5.69	-7.27	-1.59	0.28	1.36	-3.72	10.30	23.90
(BN) ₁₆ -2F ₈ -30	C ₂	135.25	-340.54	2	5.95	-7.42	-1.47	0.26	1.18	-3.15	10.07	23.86
(BN) ₁₆ -1F ₈ -02	C ₁	143.40	-340.03	3	5.76	-7.43	-1.67	0.14	0.90	-4.19	10.31	23.80
(BN) ₁₆ -2F ₈ -111	C ₁	281.44	-331.41	2	4.07	-6.79	-2.72	0.19	0.80	-2.41	10.55	24.16
(BN)₁₇-0F₈-01	C_S	0.00	-347.72	0	6.07	-7.30	-1.23	0.07	0.33	-4.03	9.35	22.43
(BN) ₁₇ -1F ₈ -026	C ₁	28.88	-346.02	1	6.28	-7.57	-1.28	0.07	0.42	-4.66	9.37	22.55
(BN) ₁₇ -0F ₈ -03	C ₁	31.38	-345.87	1	6.01	-7.50	-1.48	0.18	1.05	-4.12	9.73	23.09
(BN) ₁₇ -2F ₈ -050	C ₁	44.49	-345.10	2	6.27	-7.50	-1.23	0.13	0.68	-3.82	9.12	22.63
(BN) ₁₇ -2F ₈ -148	C ₁	45.72	-345.03	1	5.98	-7.35	-1.36	0.15	0.70	-3.35	9.10	22.66
(BN) ₁₇ -1F ₈ -025	C ₁	50.30	-344.76	1	5.85	-7.34	-1.49	0.17	0.88	-3.36	9.52	23.11
(BN) ₁₇ -2F ₈ -051	C _S	60.44	-344.16	1	6.20	-7.47	-1.27	0.10	0.51	-3.79	9.02	22.63
(BN) ₁₇ -1F ₈ -007	C ₁	63.75	-343.97	2	5.88	-7.41	-1.53	0.20	1.21	-3.89	9.75	23.13
(BN) ₁₇ -2F ₈ -052	C ₁	64.36	-343.93	2	5.99	-7.40	-1.41	0.07	0.35	-3.92	9.42	22.66
(BN) ₁₇ -2F ₈ -144	C ₁	65.32	-343.87	2	5.93	-7.34	-1.41	0.13	0.69	-3.75	9.40	22.97
(BN) ₁₇ -2F ₈ -048	C ₁	68.60	-343.68	2	5.85	-7.38	-1.54	0.08	0.44	-3.90	9.75	22.39
(BN) ₁₇ -2F ₈ -134	C ₁	72.39	-343.46	3	5.83	-7.41	-1.58	0.12	0.72	-3.92	9.84	22.56
(BN) ₁₇ -2F ₈ -123	C ₁	73.35	-343.40	2	6.23	-7.46	-1.23	0.07	0.43	-4.28	9.38	22.93
(BN) ₁₇ -2F ₈ -133	C ₁	73.82	-343.37	2	6.09	-7.47	-1.38	0.15	0.93	-3.93	9.19	22.56
(BN) ₁₇ -1F ₈ -027	C ₁	74.95	-343.31	2	5.92	-7.33	-1.41	0.10	0.72	-4.06	9.90	23.31
(BN) ₁₇ -1F ₈ -015	C ₁	76.44	-343.22	2	5.68	-7.44	-1.76	0.19	1.14	-4.24	9.82	23.66
(BN) ₁₇ -1F ₈ -003	C ₁	81.44	-342.93	2	5.78	-7.32	-1.53	0.20	1.24	-4.39	10.01	23.29
(BN) ₁₇ -1F ₈ -004	C ₁	84.34	-342.76	2	5.68	-7.40	-1.73	0.12	0.86	-3.70	9.89	23.37
(BN) ₁₇ -1F ₈ -008	C ₁	86.78	-342.61	3	5.80	-7.43	-1.63	0.11	0.97	-4.84	10.20	23.35
(BN) ₁₇ -1F ₈ -028	C ₁	89.95	-342.43	2	5.87	-7.45	-1.58	0.15	0.98	-4.36	9.85	23.87
(BN) ₁₇ -0F ₈ -02	C ₁	90.36	-342.40	2	5.41	-7.33	-1.91	0.30	2.00	-4.23	10.30	23.90
(BN) ₁₇ -1F ₈ -018	C ₁	95.62	-342.09	2	5.29	-7.26	-1.97	0.23	1.47	-3.89	9.91	23.46
(BN)₁₈-0F₈-02	S₆	0.00	-349.07	0	6.55	-7.44	-0.90	0.09	0.45	-3.29	8.78	21.71
(BN) ₁₈ -1F ₈ -022	C ₂	9.01	-348.57	0	6.36	-7.50	-1.14	0.16	0.98	-3.94	9.16	22.02
(BN) ₁₈ -0F ₈ -04	C ₂	15.17	-348.23	0	6.23	-7.39	-1.16	0.08	0.49	-4.09	9.17	22.01
(BN) ₁₈ -0F ₈ -05	C _S	24.21	-347.73	0	5.95	-7.40	-1.45	0.09	0.74	-3.87	9.23	22.27
(BN) ₁₈ -1F ₈ -041	C _S	24.78	-347.70	1	6.08	-7.38	-1.30	0.09	0.52	-4.46	9.24	21.64
(BN) ₁₈ -1F ₈ -039	C ₁	30.81	-347.36	1	6.19	-7.45	-1.26	0.08	0.48	-4.40	9.13	21.91
(BN) ₁₈ -2F ₈ -085	C ₁	39.59	-346.87	1	6.13	-7.43	-1.30	0.07	0.37	-3.93	8.75	21.63
(BN) ₁₈ -1F ₈ -042	C _S	42.43	-346.71	1	6.08	-7.37	-1.29	0.09	0.57	-4.46	9.29	21.73
(BN) ₁₈ -2F ₈ -083	C ₂	45.16	-346.56	2	6.25	-7.32	-1.07	0.09	0.53	-4.05	8.98	21.72
(BN) ₁₈ -2F ₈ -312	C ₁	45.63	-346.54	1	6.16	-7.37	-1.21	0.10	0.45	-3.34	9.01	21.81
(BN) ₁₈ -2F ₈ -076	C ₁	46.12	-346.51	1	6.18	-7.47	-1.29	0.09	0.46	-3.57	8.96	21.81
(BN) ₁₈ -2F ₈ -140	C ₁	57.55	-345.87	1	6.18	-7.54	-1.35	0.09	0.51	-3.49	8.98	22.21
(BN) ₁₈ -1F ₈ -037	C ₁	60.25	-345.72	1	5.70	-7.33	-1.63	0.12	0.84	-3.65	9.32	22.52
(BN) ₁₈ -2F ₈ -082	C ₁	66.92	-345.35	2	6.20	-7.42	-1.22	0.09	0.66	-4.32	9.15	21.76
(BN) ₁₈ -1F ₈ -010	C ₁	69.36	-345.22	1	5.81	-7.33	-1.52	0.19	1.29	-3.60	9.45	22.36

(BN) ₁₈ -2F ₈ -036	C ₁	74.63	-344.93	2	6.03	-7.43	-1.40	0.09	0.66	-4.23	9.18	21.81
(BN) ₁₈ -2F ₈ -084	C ₁	79.17	-344.67	2	5.99	-7.37	-1.38	0.08	0.49	-3.69	9.39	21.91
(BN) ₁₈ -2F ₈ -289	C ₁	79.62	-344.65	2	5.93	-7.39	-1.46	0.06	0.59	-4.19	9.15	22.39
(BN) ₁₈ -1F ₈ -012	C ₁	80.54	-344.60	2	5.70	-7.28	-1.58	0.20	1.45	-3.86	9.68	22.62
(BN) ₁₈ -1F ₈ -023	C ₁	81.16	-344.56	2	5.87	-7.40	-1.53	0.13	1.02	-3.70	9.51	22.77
(BN) ₁₈ -2F ₈ -249	C ₁	86.08	-344.29	2	5.78	-7.28	-1.50	0.09	0.61	-3.38	9.41	22.46
(BN) ₁₈ -0F ₈ -03	C ₁	87.57	-344.21	0	5.35	-7.18	-1.83	0.10	0.85	-3.45	9.84	22.91
(BN) ₁₈ -1F ₈ -03	C ₁	93.12	-343.90	1	5.58	-7.25	-1.67	0.19	1.42	-3.93	9.33	22.88
(BN) ₁₈ -0F ₈ -06	C ₁	96.37	-343.72	2	5.39	-7.27	-1.88	0.28	2.36	-3.73	10.06	23.43
(BN) ₁₈ -1F ₈ -040	C ₁	96.55	-343.71	2	5.53	-7.38	-1.85	0.18	1.44	-3.90	9.55	23.39
(BN) ₁₈ -0F ₈ -01	C ₁	116.18	-342.62	3	5.99	-7.58	-1.59	0.11	1.54	-4.16	10.21	23.38
(BN)₁₉-1F₈-049	C₁	0.00	-349.91	0	6.33	-7.37	-1.04	0.07	0.39	-3.81	8.54	21.19
(BN) ₁₉ -0F ₈ -06	C ₃	15.55	-349.09	0	6.22	-7.36	-1.14	0.08	0.65	-4.60	9.03	21.50
(BN) ₁₉ -0F ₈ -04	C _S	22.17	-348.74	1	5.70	-7.36	-1.66	0.11	0.90	-4.45	9.26	21.76
(BN) ₁₉ -2F ₈ -115	C ₁	23.04	-348.70	1	6.07	-7.29	-1.22	0.06	0.31	-3.69	8.45	20.98
(BN) ₁₉ -0F ₈ -03	C _S	30.21	-348.32	1	5.61	-7.33	-1.72	0.11	0.92	-4.40	9.25	21.85
(BN) ₁₉ -2F ₈ -105	C ₁	37.84	-347.92	1	6.03	-7.28	-1.25	0.06	0.33	-3.55	8.39	21.19
(BN) ₁₉ -1F ₈ -050	C ₁	38.10	-347.90	1	6.01	-7.28	-1.28	0.06	0.51	-3.65	8.90	21.50
(BN) ₁₉ -1F ₈ -056	C _S	41.69	-347.71	1	5.99	-7.39	-1.39	0.11	0.78	-4.32	9.05	21.32
(BN) ₁₉ -1F ₈ -051	C ₁	46.94	-347.44	1	5.94	-7.36	-1.42	0.10	0.80	-4.26	9.12	21.63
(BN) ₁₉ -1F ₈ -061	C ₁	54.60	-347.03	1	5.87	-7.27	-1.40	0.08	0.64	-4.11	9.02	21.68
(BN) ₁₉ -2F ₈ -317	C ₁	58.47	-346.83	2	6.18	-7.50	-1.32	0.06	0.51	-4.05	9.00	21.34
(BN) ₁₉ -2F ₈ -498	C _S	58.52	-346.83	0	6.01	-7.35	-1.34	0.12	0.84	-3.19	8.46	21.56
(BN) ₁₉ -2F ₈ -103	C ₁	60.06	-346.75	1	5.92	-7.31	-1.39	0.08	0.60	-3.70	8.67	21.55
(BN) ₁₉ -2F ₈ -110	C ₁	64.42	-346.52	0	6.03	-7.44	-1.41	0.11	0.72	-2.83	8.61	21.65
(BN) ₁₉ -2F ₈ -477	C ₁	68.27	-346.31	2	6.18	-7.32	-1.14	0.07	0.64	-4.02	8.79	21.67
(BN) ₁₉ -2F ₈ -121	C ₁	68.68	-346.29	2	5.89	-7.39	-1.49	0.09	0.72	-3.62	9.02	21.81
(BN) ₁₉ -2F ₈ -422	C ₁	69.19	-346.27	1	5.99	-7.39	-1.40	0.08	0.60	-3.57	8.82	21.74
(BN) ₁₉ -1F ₈ -009	C ₁	72.12	-346.11	1	5.67	-7.29	-1.61	0.21	1.83	-3.08	9.23	22.34
(BN) ₁₉ -1F ₈ -014	C ₁	74.55	-345.98	1	5.83	-7.32	-1.49	0.17	1.41	-3.72	9.10	22.06
(BN) ₁₉ -1F ₈ -016	C ₁	77.67	-345.82	2	5.83	-7.41	-1.58	0.22	2.20	-4.11	9.34	22.57
(BN) ₁₉ -2F ₈ -484	C ₁	79.02	-345.75	1	5.89	-7.31	-1.42	0.11	0.80	-3.74	8.71	21.77
(BN) ₁₉ -0F ₈ -02	C ₁	79.31	-345.73	2	5.92	-7.45	-1.53	0.20	1.92	-4.47	9.67	22.52
(BN) ₁₉ -1F ₈ -057	C ₁	81.39	-345.62	1	5.55	-7.10	-1.54	0.10	0.94	-3.45	8.87	21.89
(BN) ₁₉ -1F ₈ -020	C ₁	86.03	-345.38	2	5.82	-7.37	-1.54	0.10	1.18	-3.91	9.27	22.12
(BN) ₁₉ -0F ₈ -05	C _S	100.19	-344.64	2	5.88	-7.43	-1.56	0.18	1.94	-3.75	9.73	22.57
(BN) ₁₉ -0F ₈ -01	C ₁	109.68	-344.14	2	5.33	-7.24	-1.90	0.28	2.82	-3.54	9.87	23.08
(BN)₂₀-2F₈-343	C_{4h}	0.00	-351.17	0	6.37	-7.47	-1.09	0.01	0.05	-2.81	8.01	20.27
(BN) ₂₀ -2F ₈ -160	C ₂	16.14	-350.36	0	6.40	-7.41	-1.01	0.01	0.13	-3.28	8.01	20.51
(BN) ₂₀ -0F ₈ -06	C ₂	18.60	-350.24	0	6.23	-7.44	-1.22	0.08	0.72	-4.33	8.82	20.98
(BN) ₂₀ -1F ₈ -029	C ₁	27.64	-349.79	0	5.87	-7.24	-1.37	0.07	0.57	-3.68	8.60	20.81
(BN) ₂₀ -1F ₈ -074	C ₁	39.35	-349.20	0	6.04	-7.28	-1.24	0.08	0.64	-3.52	8.54	20.87
(BN) ₂₀ -1F ₈ -063	C ₁	41.22	-349.11	1	6.08	-7.40	-1.31	0.07	0.65	-4.32	8.69	21.13
(BN) ₂₀ -2F ₈ -851	C ₁	47.44	-348.80	1	6.19	-7.31	-1.12	0.02	0.23	-3.45	8.29	20.70
(BN) ₂₀ -1F ₈ -030	C ₁	50.43	-348.65	1	5.91	-7.34	-1.43	0.04	0.51	-4.00	8.87	21.16

(BN) ₂₀ -0F ₈ -04	C ₁	54.97	-348.42	1	5.79	-7.38	-1.60	0.11	1.18	-4.19	9.09	21.50
(BN) ₂₀ -1F ₈ -036	C ₁	55.60	-348.39	1	6.12	-7.43	-1.31	0.10	0.95	-4.11	8.79	21.57
(BN) ₂₀ -1F ₈ -066	C ₁	57.14	-348.31	1	5.84	-7.34	-1.50	0.10	1.03	-4.22	9.07	21.24
(BN) ₂₀ -2F ₈ -775	C ₁	57.66	-348.29	1	6.07	-7.43	-1.36	0.09	0.75	-3.83	8.64	20.77
(BN) ₂₀ -1F ₈ -067	C ₁	58.06	-348.27	1	5.84	-7.34	-1.50	0.10	0.95	-4.09	8.93	21.22
(BN) ₂₀ -0F ₈ -02	C ₁	58.25	-348.26	1	5.98	-7.40	-1.42	0.18	1.97	-3.95	9.11	21.59
(BN) ₂₀ -1F ₈ -037	C ₁	60.00	-348.17	1	6.10	-7.38	-1.27	0.06	0.58	-3.84	8.71	21.36
(BN) ₂₀ -2F ₈ -153	C ₁	61.02	-348.12	0	6.02	-7.34	-1.32	0.14	1.23	-2.84	8.49	21.46
(BN) ₂₀ -2F ₈ -052	C ₁	62.30	-348.05	1	6.12	-7.34	-1.22	0.08	0.74	-3.84	8.37	21.03
(BN) ₂₀ -2F ₈ -813	C ₁	68.34	-347.75	1	6.13	-7.43	-1.29	0.08	0.84	-3.92	8.42	21.02
(BN) ₂₀ -1F ₈ -007	C ₁	69.59	-347.69	1	5.92	-7.37	-1.45	0.13	1.21	-3.59	8.83	21.42
(BN) ₂₀ -1F ₈ -065	C ₁	74.39	-347.45	1	5.93	-7.35	-1.42	0.08	0.81	-4.14	8.85	21.40
(BN) ₂₀ -2F ₈ -195	C ₁	79.27	-347.21	1	5.88	-7.23	-1.35	0.09	0.73	-3.74	8.35	20.96
(BN) ₂₀ -0F ₈ -03	C _s	79.96	-347.17	2	5.93	-7.38	-1.45	0.11	1.54	-4.22	9.33	21.91
(BN) ₂₀ -2F ₈ -171	C ₁	80.01	-347.17	2	6.29	-7.43	-1.14	0.14	1.51	-3.94	8.71	21.41
(BN) ₂₀ -2F ₈ -485	C ₁	80.44	-347.15	1	6.16	-7.46	-1.30	0.09	0.81	-4.15	8.65	20.85
(BN) ₂₀ -0F ₈ -05	C ₁	93.55	-346.49	1	5.36	-7.27	-1.91	0.12	1.43	-4.10	9.18	21.75
(BN)₂₁-0F₈-01	C_{3h}	0.00	-350.91	0	6.58	-7.35	-0.76	0.18	0.06	-3.68	8.56	21.16
(BN) ₂₁ -1F ₈ -046	C ₁	7.26	-350.57	0	5.83	-7.23	-1.40	0.06	0.51	-3.57	8.42	20.36
(BN) ₂₁ -1F ₈ -079	C ₁	8.31	-350.52	0	6.31	-7.39	-1.08	0.12	1.19	-3.67	8.43	20.74
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1235	C ₁	13.45	-350.27	0	5.71	-7.09	-1.38	0.05	0.26	-2.52	8.18	20.01
(BN) ₂₁ -1F ₈ -083	C ₁	13.54	-350.27	0	6.07	-7.36	-1.29	0.08	0.70	-3.51	8.37	20.58
(BN) ₂₁ -2F ₈ -333	C ₁	23.33	-349.80	0	6.10	-7.29	-1.18	0.08	0.34	-3.21	8.04	20.27
(BN) ₂₁ -1F ₈ -087	C ₁	24.74	-349.73	1	6.15	-7.41	-1.25	0.08	0.90	-4.48	8.53	20.77
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1005	C ₁	25.15	-349.71	1	6.17	-7.39	-1.22	0.05	0.50	-3.57	8.24	20.54
(BN) ₂₁ -1F ₈ -081	C ₁	28.75	-349.54	1	6.18	-7.47	-1.29	0.06	0.87	-3.91	8.67	20.89
(BN) ₂₁ -1F ₈ -080	C ₁	28.84	-349.54	1	5.82	-7.34	-1.51	0.05	0.65	-3.90	8.69	20.77
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1024	C ₁	30.81	-349.44	1	6.00	-7.32	-1.31	0.06	0.54	-3.64	8.40	20.35
(BN) ₂₁ -1F ₈ -026	C ₁	30.87	-349.44	1	5.91	-7.39	-1.48	0.11	1.28	-3.94	8.53	20.83
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1208	C ₁	31.64	-349.40	0	6.07	-7.32	-1.25	0.05	0.39	-3.06	8.22	20.31
(BN) ₂₁ -1F ₈ -082	C ₁	32.30	-349.37	1	6.06	-7.40	-1.34	0.10	1.11	-3.80	8.75	20.86
(BN) ₂₁ -2F ₈ -548	C ₁	34.58	-349.26	1	5.87	-7.28	-1.41	0.06	0.64	-3.50	8.29	20.57
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1218	C ₁	37.03	-349.15	0	6.11	-7.33	-1.22	0.10	0.84	-3.22	8.16	20.26
(BN) ₂₁ -2F ₈ -1179	C ₁	40.00	-349.01	1	5.91	-7.27	-1.36	0.08	0.83	-3.54	8.32	20.43
(BN) ₂₁ -2F ₈ -746	C ₁	41.45	-348.94	1	6.04	-7.35	-1.30	0.05	0.55	-3.53	8.41	20.49
(BN) ₂₁ -0F ₈ -03	C ₁	45.21	-348.76	1	5.79	-7.38	-1.59	0.10	1.42	-4.44	8.96	21.12
(BN) ₂₁ -0F ₈ -05	C ₁	45.21	-348.76	1	5.79	-7.38	-1.59	0.10	1.42	-4.44	8.96	21.12
(BN) ₂₁ -0F ₈ -02	C ₁	49.60	-348.55	2	5.69	-7.42	-1.73	0.11	1.55	-4.60	9.18	21.37
(BN) ₂₁ -1F ₈ -091	C ₁	49.66	-348.55	0	5.91	-7.26	-1.35	0.09	0.98	-3.88	8.44	20.77
(BN) ₂₁ -2F ₈ -706	C ₁	50.50	-348.51	1	6.10	-7.44	-1.34	0.10	1.08	-4.00	8.43	20.50
(BN) ₂₁ -0F ₈ -04	C ₁	111.76	-345.59	2	5.18	-7.19	-2.01	0.28	3.86	-3.18	9.54	22.40
(BN)₂₂-0F₈-09	C₃	0.00	-352.87	0	5.83	-7.30	-1.47	0.04	0.63	-3.88	8.33	19.96
(BN) ₂₂ -0F ₈ -06	C ₁	3.62	-352.71	0	6.63	-7.46	-0.84	0.08	0.77	-4.22	8.38	20.06
(BN) ₂₂ -0F ₈ -07	C ₁	10.51	-352.39	0	6.29	-7.41	-1.12	0.07	0.79	-4.06	8.38	20.08
(BN) ₂₂ -1F ₈ -056	C ₂	15.76	-352.16	0	6.46	-7.43	-0.97	0.04	0.48	-3.63	8.10	19.73

(BN) ₂₂ -1F ₈ -058	C ₁	26.48	-351.67	0	6.00	-7.21	-1.21	0.07	0.63	-3.59	8.19	19.81
(BN) ₂₂ -1F ₈ -068	C ₁	32.03	-351.42	0	6.31	-7.32	-1.01	0.11	1.24	-3.53	8.24	20.28
(BN) ₂₂ -2F ₈ -355	C ₁	35.59	-351.25	0	6.31	-7.37	-1.06	0.06	0.68	-3.53	7.92	19.94
(BN) ₂₂ -2F ₈ -346	C _S	45.58	-350.80	0	6.30	-7.36	-1.06	0.10	1.16	-3.76	7.88	19.92
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1907	C ₁	54.72	-350.38	0	6.10	-7.25	-1.16	0.06	0.43	-3.16	8.04	19.78
(BN) ₂₂ -1F ₈ -061	C ₁	56.56	-350.30	0	6.24	-7.31	-1.07	0.05	0.56	-3.61	8.24	20.07
(BN) ₂₂ -1F ₈ -126	C ₁	57.82	-350.24	1	6.11	-7.41	-1.30	0.08	0.94	-3.86	8.48	20.14
(BN) ₂₂ -1F ₈ -123	C ₁	58.07	-350.23	1	6.20	-7.41	-1.22	0.07	1.04	-4.27	8.37	20.39
(BN) ₂₂ -1F ₈ -059	C ₁	58.19	-350.23	0	5.76	-7.19	-1.43	0.07	0.81	-3.56	8.24	20.20
(BN) ₂₂ -1F ₈ -054	C ₁	62.09	-350.05	1	6.02	-7.27	-1.25	0.09	1.10	-3.44	8.65	20.53
(BN) ₂₂ -1F ₈ -010	C ₁	72.88	-349.56	1	5.66	-7.32	-1.66	0.10	1.35	-3.88	8.51	20.51
(BN) ₂₂ -0F ₈ -08	C ₁	73.56	-349.53	1	5.81	-7.41	-1.60	0.11	1.69	-4.19	8.77	20.72
(BN) ₂₂ -1F ₈ -119	C ₁	74.04	-349.51	0	5.99	-7.30	-1.31	0.08	1.15	-3.77	8.33	20.22
(BN) ₂₂ -0F ₈ -04	C ₁	85.09	-349.00	2	5.75	-7.44	-1.69	0.11	1.83	-4.25	9.00	21.04
(BN) ₂₂ -0F ₈ -02	C ₁	88.02	-348.87	2	5.77	-7.43	-1.66	0.14	2.02	-4.36	9.02	21.06
(BN) ₂₂ -0F ₈ -05	C ₁	105.49	-348.08	2	5.44	-7.39	-1.95	0.16	2.28	-4.42	9.10	21.19
(BN) ₂₂ -0F ₈ -03	C _S	107.47	-347.99	2	5.48	-7.33	-1.85	0.10	1.94	-4.25	9.09	21.17
(BN) ₂₂ -0F ₈ -11	C ₁	109.93	-347.88	2	5.94	-7.36	-1.41	0.19	2.99	-3.93	9.12	21.42
(BN) ₂₂ -2F ₈ -385	C ₁	125.16	-347.18	1	5.76	-7.28	-1.52	0.13	1.94	-2.76	8.56	21.24
(BN) ₂₂ -0F ₈ -12	C ₁	126.30	-347.13	2	5.81	-7.36	-1.55	0.20	3.14	-3.72	9.15	21.45
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1047	C _S	145.17	-346.27	3	6.00	-7.55	-1.55	0.06	1.13	-4.35	8.85	21.13
(BN) ₂₂ -0F ₈ -01	C ₁	147.89	-346.15	3	5.77	-7.32	-1.55	0.08	2.35	-4.28	9.25	21.27
(BN) ₂₂ -0F ₈ -10	C ₁	149.94	-346.06	2	5.14	-7.16	-2.02	0.27	4.38	-3.12	9.38	22.13
(BN) ₂₂ -2F ₈ -522	C ₁	185.03	-344.46	3	5.70	-7.36	-1.66	0.11	2.14	-3.63	9.08	21.74
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1246	C ₁	196.18	-343.95	3	5.34	-7.35	-2.00	0.14	2.55	-2.81	9.48	21.54
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1862	C ₁	222.14	-342.77	3	5.49	-7.24	-1.75	0.10	2.04	-3.43	9.15	21.92
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1943	C ₁	271.29	-340.54	2	5.04	-7.27	-2.23	0.23	3.49	-3.75	9.17	22.04
(BN) ₂₂ -2F ₈ -1807	C ₁	314.66	-338.57	4	5.60	-7.44	-1.85	0.07	1.71	-2.93	9.86	22.21
(BN)₂₃-1F₈-126	C₁	0.00	-353.37	0	6.47	-7.42	-0.95	0.04	0.48	-3.76	7.87	19.37
(BN) ₂₃ -0F ₈ -03	C ₁	11.43	-352.87	0	6.28	-7.38	-1.09	0.07	0.95	-4.02	8.22	19.74
(BN) ₂₃ -1F ₈ -067	C ₁	21.78	-352.42	0	6.13	-7.22	-1.09	0.06	0.65	-3.44	8.02	19.53
(BN) ₂₃ -1F ₈ -070	C ₁	29.29	-352.09	0	6.11	-7.30	-1.18	0.06	0.65	-3.80	8.05	19.59
(BN) ₂₃ -1F ₈ -169	C ₁	32.24	-351.97	0	6.33	-7.29	-0.96	0.05	0.56	-3.50	8.01	19.45
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2469	C ₁	32.52	-351.95	0	6.05	-7.13	-1.08	0.05	0.45	-3.06	7.88	19.17
(BN) ₂₃ -1F ₈ -148	C ₁	32.57	-351.95	0	6.25	-7.29	-1.04	0.05	0.59	-3.76	8.04	19.58
(BN) ₂₃ -0F ₈ -05	C _S	33.30	-351.92	0	5.73	-7.29	-1.55	0.09	1.30	-3.57	8.25	19.90
(BN) ₂₃ -2F ₈ -292	C ₁	34.57	-351.86	0	6.21	-7.29	-1.08	0.06	0.59	-3.26	7.91	19.45
(BN) ₂₃ -2F ₈ -293	C ₁	43.10	-351.49	0	6.36	-7.33	-0.97	0.05	0.62	-3.11	7.93	19.71
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2696	C ₁	43.21	-351.49	0	6.01	-7.11	-1.10	0.05	0.47	-3.11	7.84	19.26
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2389	C ₁	49.42	-351.22	0	6.29	-7.31	-1.02	0.05	0.60	-3.41	7.88	19.30
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2677	C ₁	51.56	-351.13	1	6.27	-7.35	-1.08	0.04	0.56	-3.83	8.05	19.37
(BN) ₂₃ -1F ₈ -071	C ₁	54.80	-350.98	0	5.99	-7.24	-1.25	0.10	1.43	-3.24	8.22	20.11
(BN) ₂₃ -1F ₈ -147	C ₁	55.08	-350.97	0	5.78	-7.15	-1.36	0.08	1.10	-3.57	8.11	19.68
(BN) ₂₃ -1F ₈ -133	C ₁	56.11	-350.93	1	6.04	-7.34	-1.30	0.07	1.05	-3.95	8.37	19.77
(BN) ₂₃ -1F ₈ -138	C ₁	57.39	-350.87	0	5.97	-7.31	-1.34	0.09	1.37	-3.97	8.16	19.80

(BN) ₂₃ -1F ₈ -136	C ₁	57.79	-350.85	1	5.89	-7.26	-1.37	0.09	1.32	-3.79	8.27	19.87
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2702	C ₁	58.14	-350.84	0	5.94	-7.20	-1.26	0.06	0.78	-3.17	7.83	19.47
(BN) ₂₃ -0F ₈ -04	C ₁	60.83	-350.72	1	5.88	-7.39	-1.50	0.09	1.67	-4.05	8.57	20.26
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2758	C ₁	61.25	-350.70	0	6.21	-7.27	-1.06	0.05	0.49	-3.33	7.88	19.45
(BN) ₂₃ -2F ₈ -2468	C ₁	66.96	-350.46	0	5.94	-7.18	-1.24	0.05	0.61	-3.12	7.90	19.70
(BN) ₂₃ -0F ₈ -01	C ₁	75.21	-350.10	1	5.93	-7.33	-1.40	0.18	3.20	-3.65	8.63	20.84
(BN) ₂₃ -2F ₈ -1822	C ₁	76.17	-350.06	1	5.72	-7.34	-1.62	0.07	1.12	-3.31	8.03	19.99
(BN) ₂₃ -0F ₈ -02	C ₁	103.09	-348.88	2	5.78	-7.41	-1.63	0.09	2.10	-4.50	8.88	20.76
(BN) ₂₃ -0F ₈ -06	C ₁	153.56	-346.69	2	5.14	-7.14	-2.00	0.26	4.91	-3.13	9.26	21.86
(BN)₂₄-2F₈-1581	S₈	0.00	-354.15	0	6.45	-7.32	-0.86	0.02	0.27	-4.08	7.39	18.72
(BN) ₂₄ -0F ₈ -01	S ₄	2.08	-354.07	0	6.61	-7.44	-0.83	0.04	0.56	-3.71	8.04	19.16
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3789	C ₁	18.69	-353.38	0	6.39	-7.34	-0.94	0.04	0.38	-3.49	7.54	18.83
(BN) ₂₄ -1F ₈ -096	C ₁	24.04	-353.15	0	6.36	-7.24	-0.89	0.03	0.49	-3.67	7.92	19.10
(BN) ₂₄ -1F ₈ -097	C ₁	25.13	-353.11	0	6.19	-7.25	-1.06	0.04	0.57	-3.59	7.87	19.24
(BN) ₂₄ -0F ₈ -09	C ₁	30.26	-352.89	0	6.06	-7.34	-1.28	0.08	1.30	-4.00	8.10	19.49
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3537	C ₁	35.77	-352.66	0	6.13	-7.22	-1.08	0.04	0.43	-3.35	7.74	18.87
(BN) ₂₄ -1F ₈ -115	C ₁	37.34	-352.60	0	6.24	-7.24	-1.00	0.04	0.63	-3.76	7.83	19.17
(BN) ₂₄ -0F ₈ -05	S ₆	42.38	-352.39	0	6.43	-7.27	-0.85	0.18	3.40	-3.38	8.17	20.30
(BN) ₂₄ -1F ₈ -106	C ₁	43.66	-352.34	1	6.02	-7.31	-1.28	0.04	0.78	-3.81	8.29	19.27
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3543	C ₁	44.82	-352.29	0	6.30	-7.24	-0.94	0.03	0.33	-3.40	7.73	19.05
(BN) ₂₄ -1F ₈ -193	C ₁	47.74	-352.17	0	5.95	-7.17	-1.21	0.07	1.03	-3.39	7.90	19.45
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3134	C ₁	48.35	-352.14	1	6.19	-7.33	-1.14	0.05	0.79	-3.81	7.73	19.17
(BN) ₂₄ -1F ₈ -178	C ₁	50.46	-352.05	0	6.22	-7.34	-1.12	0.08	1.43	-3.90	7.97	19.39
(BN) ₂₄ -1F ₈ -101	C ₁	51.02	-352.03	0	5.94	-7.26	-1.31	0.07	1.09	-3.58	7.98	19.33
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3505	C ₁	54.37	-351.89	0	5.95	-7.30	-1.35	0.07	1.06	-3.22	7.82	19.19
(BN) ₂₄ -0F ₈ -08	C ₁	55.26	-351.85	1	5.94	-7.39	-1.45	0.07	1.60	-4.01	8.33	19.87
(BN) ₂₄ -1F ₈ -182	C ₁	55.55	-351.84	1	6.16	-7.38	-1.22	0.08	1.38	-4.12	8.06	19.58
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3242	C ₁	56.88	-351.78	0	6.04	-7.09	-1.05	0.03	0.39	-3.20	7.65	19.07
(BN) ₂₄ -0F ₈ -07	C ₁	57.51	-351.76	1	5.83	-7.41	-1.58	0.09	1.85	-3.88	8.36	19.88
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3690	C ₁	58.49	-351.72	0	6.09	-7.23	-1.14	0.06	0.88	-3.38	7.61	19.16
(BN) ₂₄ -1F ₈ -029	C ₁	58.78	-351.71	0	6.27	-7.35	-1.08	0.13	2.44	-3.55	8.12	19.92
(BN) ₂₄ -2F ₈ -2011	C ₁	59.36	-351.68	0	6.22	-7.26	-1.05	0.03	0.44	-3.46	7.70	19.13
(BN) ₂₄ -2F ₈ -3495	C ₁	60.30	-351.64	0	5.98	-7.19	-1.21	0.07	0.96	-3.11	7.75	19.28
(BN) ₂₄ -1F ₈ -195	C ₁	63.93	-351.49	0	6.06	-7.23	-1.17	0.09	1.61	-3.26	8.09	19.92
(BN) ₂₄ -0F ₈ -02	D _{3d}	72.59	-351.13	0	6.50	-7.40	-0.90	0.06	1.41	-3.54	8.30	19.58
(BN) ₂₄ -0F ₈ -10	C ₂	85.85	-350.58	0	5.57	-7.27	-1.69	0.10	1.87	-3.77	8.21	19.86
(BN) ₂₄ -0F ₈ -11	C ₂	85.85	-350.58	0	5.57	-7.27	-1.69	0.10	1.87	-3.77	8.21	19.87
(BN) ₂₄ -0F ₈ -03	C ₂	121.78	-349.08	2	5.69	-7.40	-1.71	0.14	2.79	-4.34	8.74	20.48
(BN) ₂₄ -0F ₈ -06	C _{3h}	126.90	-348.87	3	5.68	-7.46	-1.78	0.06	2.40	-4.35	8.99	20.73
(BN) ₂₄ -0F ₈ -04	C ₁	170.20	-347.06	2	5.05	-7.10	-2.05	0.26	5.50	-3.02	9.13	21.63

S4. The calculated relative energies (RE) and the average pyramidization angles (PA) of B (PA_B) and N (PA_N) atom of $(BN)_{15}$ (a), $(BN)_{16}$ (b), $(BN)_{17}$ (c), $(BN)_{18}$ (d), $(BN)_{19}$ (e), $(BN)_{20}$ (f), $(BN)_{21}$ (g), $(BN)_{22}$ (h), $(BN)_{23}$ (i), and $(BN)_{24}$ (j) (“■”, “◆”, “▲” denote the PA_B of isomers containing none, one and two octagons, respectively; “●”, “▼”, “◀” denote the PA_N of isomers containing none, one and two octagons, respectively).



