

Inorganic Chemistry

including bioinorganic chemistry

Inorg. Chem., 1996, 35(2), 318-324, DOI:[10.1021/ic951101e](https://doi.org/10.1021/ic951101e)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

Supplementary Material

The Synthesis and Characterization of Copper(II), Zinc(II) and Potassium Complexes of a Highly Fluorinated Bis(pyrazolyl)borate Ligand

H. V. Rasika Dias and John D. Gorden

Department of Chemistry & Biochemistry, The University of Texas at Arlington, Arlington,
Texas 76019, USA

Table I contains a detail summary of crystal data, data collection, solution and refinement. Tables 1-5 contain atomic coordinates, bond lengths, bond angles, thermal parameters for each compound. Figs S1 and S2 show disorder models used for **3** and **5**, respectively. All computer programs and the sources of scattering factors are contained in the SHELXTL PC program (version 4.2) (Siemens Industrial Automation, Inc., Madison, WI, USA).

Table S1. Crystal data and summary of data collection and refinement

	[H ₂ B(3,5-(CF ₃) ₂ Pz) ₂]K	[H ₂ B(3,5-(CF ₃) ₂ Pz) ₂] ₂ Cu	[H ₂ B(3,5-(CF ₃) ₂ Pz) ₂] ₂ Zn	[H ₂ B(3,5-(CH ₃) ₂ Pz) ₂] ₂ Zn
formula	C ₁₀ H ₄ BF ₁₂ KN ₄	C ₂₀ H ₈ B ₂ CuF ₂₄ N ₈	C ₂₀ H ₈ B ₂ F ₂₄ N ₈ Zn	C ₂₀ H ₈ B ₂ F ₂₄ N ₈ Zn
fw	458.1	901.5	903.3	471.5
cryst size(mm)	0.40 x 0.42 x 0.61	0.25 x 0.45 x 0.52	0.31 x 0.70 x 0.75	0.03 x 0.37 x 0.41
crystal system	triclinic	monoclinic	triclinic	monoclinic
space group	P $\bar{1}$	C2/c	P $\bar{1}$	C2/c
a, Å	8.385(1)	25.632(3)	9.104(1)	8.445(1)
b, Å	10.097(2)	9.197(1)	9.278(1)	14.514(2)
c, Å	10.317(1)	17.342(2)	18.700(2)	19.983(3)
α , deg	104.193(9)	90	83.560(6)	90
β , deg	104.366(6)	129.292(5)	88.200(10)	90.831(8)
γ , deg	91.733(9)	90	78.637(9)	90
volume, Å ³	816.4(3)	3164.0(6)	1538.8(3)	2449.1(6)
Z	2	4	2	4
D _{calc} , mg/m ³	1.863	1.892	1.950	1.279
μ (MoK α), mm ⁻¹	0.458	0.862	0.975	1.026
F(000)	448	1756	880	992
diffractometer	Siemens P4	Siemens P4	Siemens P4	Siemens P4

monochromator	graphite	graphite	graphite	graphite
T, K	298	298	298	298
λ , Å; (Mo K α)	0.71073	0.71073	0.71073	0.71073
2 θ range, deg	3.5-45	3.5-45	3.5-50	3.5-45
scan type	θ -2 θ	ω	ω	ω
index ranges	-1 $\leq$ h $\leq$ 9	-1 $\leq$ h $\leq$ 27	-1 $\leq$ h $\leq$ 10	-1 $\leq$ h $\leq$ 9
	-10 $\leq$ k $\leq$ 10	-1 $\leq$ k $\leq$ 9	-10 $\leq$ k $\leq$ 10	-1 $\leq$ k $\leq$ 15
	-11 $\leq$ l $\leq$ 10	-18 $\leq$ l $\leq$ 14	-22 $\leq$ l $\leq$ 22	-21 $\leq$ l $\leq$ 21
reflens colld	2634	2579	6481	2183
indpdt reflns	2111	2073	5382	1596
R _{int}	2.25%	3.85%	2.59%	3.11%
obsd reflns	1695 (F > 4.0 σ (F))	1497 (F > 4.0 σ (F))	3981 (F > 4.0 σ (F))	1200 (F > 4.0 σ (F))
weighing scheme, w ⁻¹	$\sigma^2(F) + 0.0008F^2$	$\sigma^2(F) + 0.0008F^2$	$\sigma^2(F) + 0.0008F^2$	$\sigma^2(F) + 0.0008F^2$
params refined	292	254	542	143
R, R _w , %	4.38, 5.23	4.83, 5.31	5.04, 5.42	5.24, 5.37
largest and mean Δ/σ	0.665, 0.071	0.000, 0.000	0.000, 0.000	0.000, 0.000
largest diff peak (e/Å ⁻³)	0.44	0.52	0.53	0.30
largest diff hole (e/Å ⁻³)	-0.21	-0.36	-0.35	-0.31
$R = \sum (F_o - F_c) / \sum F_o \quad R_w = [\sum w(F_o - F_c)^2 / \sum w F_o ^2]^{1/2}$				

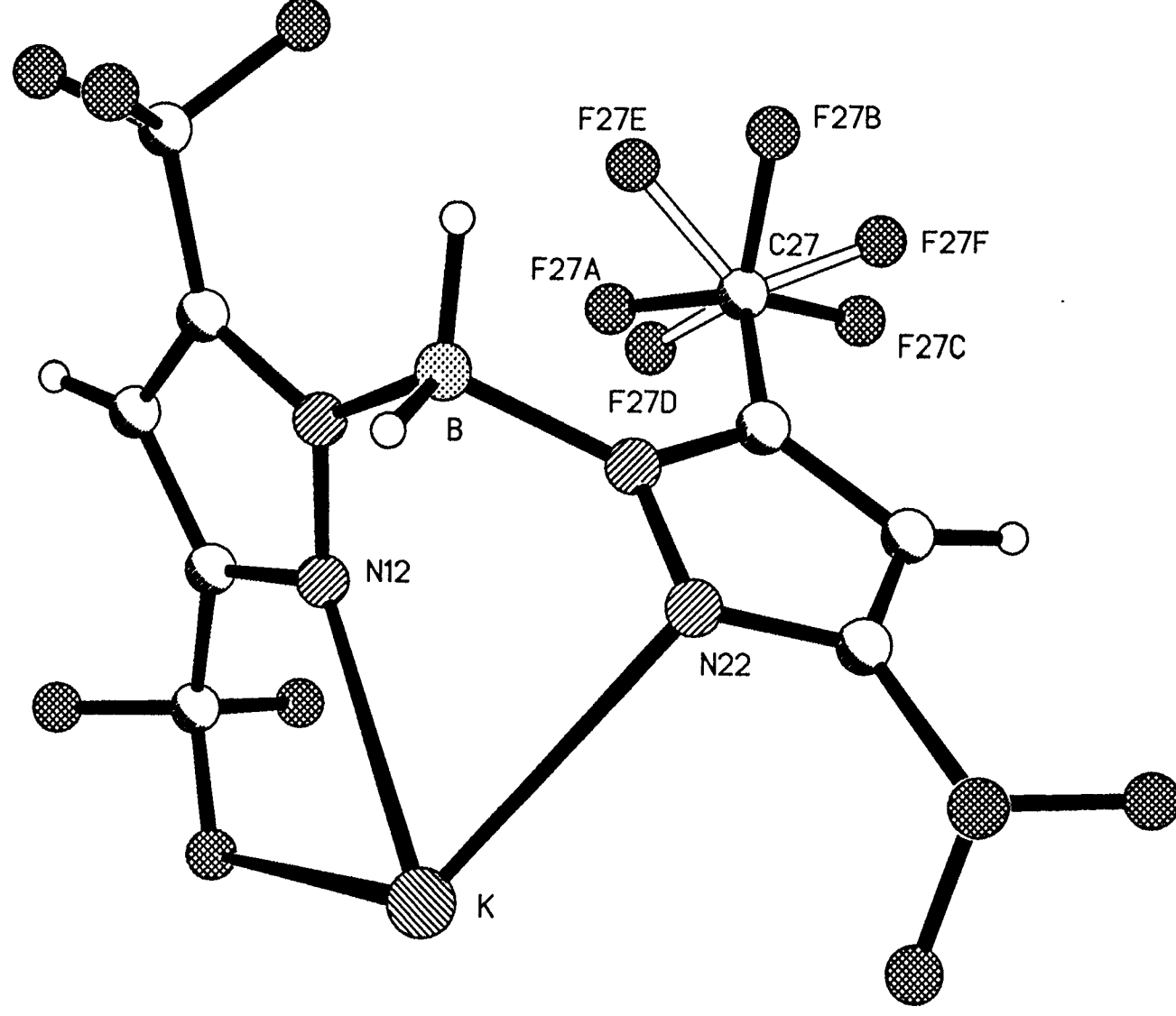


Fig. S 1

P324-M5

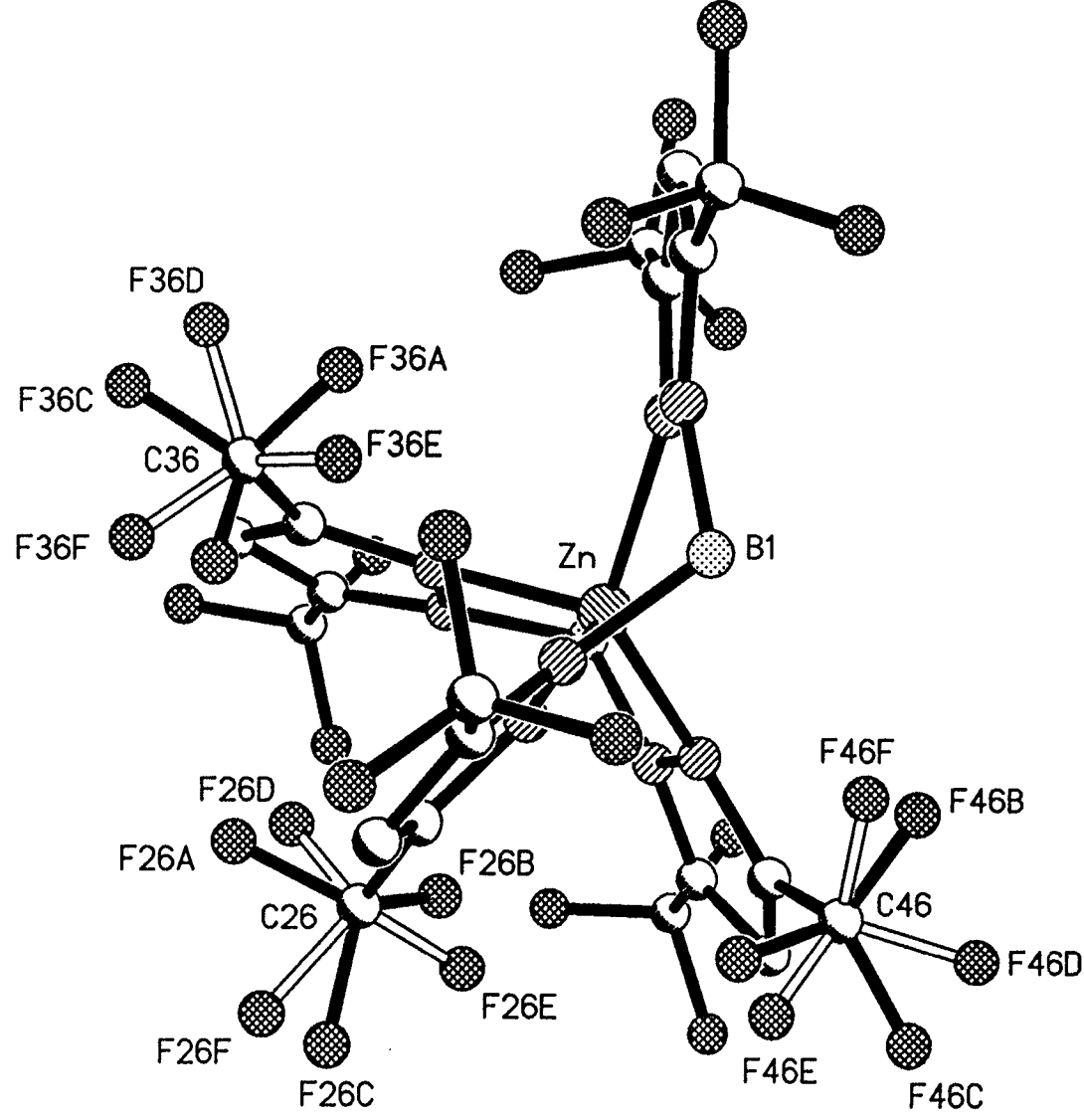


Fig S2

Table 1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) [$\text{H}_2\text{B}(3,5\text{-(CF}_3)_2\text{Pz})_2\text{]K}$

	x	y	z	U(eq)
K	3727(1)	8061(1)	4768(1)	67(1)
N(11)	7336(4)	7248(3)	3382(3)	51(1)
N(12)	6040(4)	6587(3)	3577(3)	58(1)
N(21)	8038(4)	8824(3)	5824(3)	52(1)
N(22)	7043(4)	9668(3)	6394(3)	54(1)
C(13)	5740(5)	5399(4)	2608(4)	59(2)
C(14)	6808(5)	5290(4)	1780(4)	62(2)
C(15)	7805(4)	6485(4)	2300(4)	52(1)
C(16)	4445(7)	4383(5)	2592(6)	83(2)
F(16A)	3203(5)	4916(4)	2971(7)	181(3)
F(16B)	3859(6)	3534(4)	1369(4)	169(2)
F(16C)	4944(4)	3596(3)	3413(4)	119(2)
C(17)	9179(5)	6928(5)	1811(5)	75(2)
F(17A)	9281(4)	6026(4)	669(3)	122(2)
F(17B)	9046(4)	8123(3)	1509(3)	100(1)
F(17C)	10649(3)	7029(4)	2721(3)	115(2)
C(23)	7404(5)	9676(4)	7711(4)	56(2)
C(24)	8608(5)	8833(4)	8036(4)	61(2)
C(25)	8982(5)	8307(4)	6812(4)	58(2)
C(26)	6514(6)	10532(6)	8626(5)	86(2)
F(26A)	4991(4)	10022(5)	8411(4)	143(2)
F(26B)	7188(5)	10650(5)	9922(3)	153(2)
F(26C)	6378(6)	11770(4)	8430(4)	152(3)
C(27)	10213(7)	7340(6)	6556(7)	86(3)
F(27A)	9679(19)	6334(12)	5532(9)	145(5)
F(27B)	11617(17)	7948(11)	6554(28)	131(7)
F(27C)	10635(15)	6794(13)	7613(11)	114(4)
F(27D)	9556(67)	6095(31)	5924(104)	240(51)
F(27E)	10827(57)	7447(57)	5497(50)	119(15)
F(27F)	11335(63)	7287(69)	7635(52)	218(23)
B	8047(8)	8713(5)	4298(5)	66(2)

* Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table 2. Bond lengths (Å)

K-N(12)	2.819 (4)	K-N(22)	3.043 (3)
K-F(16A)	3.215 (4)	K-KB	4.265 (2)
K-N(22A)	2.858 (4)	K-F(16D)	2.859 (4)
K-F(17D)	2.874 (3)	K-F(26D)	3.325 (5)
K-F(27G)	2.872 (25)	K-F(27H)	2.812 (55)
N(11)-N(12)	1.341 (5)	N(11)-C(15)	1.345 (5)
N(11)-B	1.555 (5)	N(12)-C(13)	1.331 (4)
N(21)-N(22)	1.345 (5)	N(21)-C(25)	1.350 (5)
N(21)-B	1.552 (6)	N(22)-C(23)	1.314 (5)
N(22)-KB	2.858 (4)	C(13)-C(14)	1.373 (7)
C(13)-C(16)	1.465 (7)	C(14)-C(15)	1.356 (5)
C(15)-C(17)	1.467 (7)	C(16)-F(16A)	1.289 (8)
C(16)-F(16B)	1.305 (6)	C(16)-F(16C)	1.303 (7)
F(16C)-KC	2.859 (4)	C(17)-F(17A)	1.325 (6)
C(17)-F(17B)	1.319 (7)	C(17)-F(17C)	1.335 (5)
F(17C)-KA	2.874 (3)	C(23)-C(24)	1.372 (6)
C(23)-C(26)	1.478 (7)	C(24)-C(25)	1.361 (6)
C(25)-C(27)	1.469 (7)	C(26)-F(26A)	1.307 (6)
C(26)-F(26B)	1.291 (6)	C(26)-F(26C)	1.318 (8)
F(26C)-KB	3.325 (5)	C(27)-F(27A)	1.249 (11)
C(27)-F(27B)	1.312 (18)	C(27)-F(27C)	1.317 (15)
C(27)-F(27D)	1.299 (38)	C(27)-F(27E)	1.343 (58)
C(27)-F(27F)	1.281 (51)	F(27A)-F(27D)	0.547 (99)
F(27A)-F(27E)	1.471 (58)	F(27B)-F(27E)	1.111 (49)
F(27B)-F(27F)	1.493 (73)	F(27B)-KA	2.872 (25)
F(27C)-F(27D)	1.711 (87)	F(27C)-F(27F)	0.751 (62)
F(27E)-KA	2.812 (55)		

Table 3. Bond angles ($^{\circ}$)

N(12)-K-N(22)	75.9(1)	N(12)-K-F(16A)	53.1(1)
N(22)-K-F(16A)	125.6(1)	N(12)-K-KB	93.0(1)
N(22)-K-KB	42.0(1)	F(16A)-K-KB	142.1(1)
N(12)-K-N(22A)	109.7(1)	N(22)-K-N(22A)	87.5(1)
F(16A)-K-N(22A)	123.9(1)	KB-K-N(22A)	45.5(1)
N(12)-K-F(16D)	74.8(1)	N(22)-K-F(16D)	78.1(1)
F(16A)-K-F(16D)	72.0(1)	KB-K-F(16D)	119.6(1)
N(22A)-K-F(16D)	163.4(1)	N(12)-K-F(17D)	102.6(1)
N(22)-K-F(17D)	163.8(1)	F(16A)-K-F(17D)	60.4(1)
KB-K-F(17D)	122.9(1)	N(22A)-K-F(17D)	77.7(1)
F(16D)-K-F(17D)	117.5(1)	N(12)-K-F(26D)	64.6(1)
N(22)-K-F(26D)	101.2(1)	F(16A)-K-F(26D)	75.3(1)
KB-K-F(26D)	74.4(1)	N(22A)-K-F(26D)	52.6(1)
F(16D)-K-F(26D)	138.0(1)	F(17D)-K-F(26D)	64.5(1)
N(12)-K-F(27G)	142.1(3)	N(22)-K-F(27G)	111.0(3)
F(16A)-K-F(27G)	100.5(2)	KB-K-F(27G)	117.5(2)
N(22A)-K-F(27G)	107.8(3)	F(16D)-K-F(27G)	70.7(4)
F(17D)-K-F(27G)	80.3(4)	F(26D)-K-F(27G)	141.9(4)
N(12)-K-F(27H)	137.1(11)	N(22)-K-F(27H)	133.5(9)
F(16A)-K-F(27H)	85.8(10)	KB-K-F(27H)	129.9(11)
N(22A)-K-F(27H)	103.0(12)	F(16D)-K-F(27H)	81.8(11)
F(17D)-K-F(27H)	58.0(9)	F(26D)-K-F(27H)	121.4(10)
F(27G)-K-F(27H)	22.5(10)	N(12)-N(11)-C(15)	110.1(3)
N(12)-N(11)-B	121.1(4)	C(15)-N(11)-B	128.7(4)
K-N(12)-N(11)	120.7(2)	K-N(12)-C(13)	127.1(3)
N(11)-N(12)-C(13)	105.2(3)	N(22)-N(21)-C(25)	108.6(3)
N(22)-N(21)-B	119.1(3)	C(25)-N(21)-B	132.0(4)
K-N(22)-N(21)	98.8(2)	K-N(22)-C(23)	112.2(3)
N(21)-N(22)-C(23)	106.4(3)	K-N(22)-KB	92.5(1)
N(21)-N(22)-KB	115.0(2)	C(23)-N(22)-KB	127.4(2)
N(12)-C(13)-C(14)	111.9(4)	N(12)-C(13)-C(16)	119.1(4)
C(14)-C(13)-C(16)	128.9(4)	C(13)-C(14)-C(15)	104.1(3)
N(11)-C(15)-C(14)	108.7(4)	N(11)-C(15)-C(17)	123.5(3)
C(14)-C(15)-C(17)	127.8(4)	C(13)-C(16)-F(16A)	113.7(4)
C(13)-C(16)-F(16B)	112.4(5)	F(16A)-C(16)-F(16B)	107.0(5)
C(13)-C(16)-F(16C)	113.9(4)	F(16A)-C(16)-F(16C)	104.5(6)
F(16B)-C(16)-F(16C)	104.6(4)	K-F(16A)-C(16)	118.2(3)
C(16)-F(16C)-KC	176.0(3)	C(15)-C(17)-F(17A)	110.5(4)
C(15)-C(17)-F(17B)	114.0(4)	F(17A)-C(17)-F(17B)	106.5(4)
C(15)-C(17)-F(17C)	113.1(4)	F(17A)-C(17)-F(17C)	105.7(4)
F(17B)-C(17)-F(17C)	106.5(4)	C(17)-F(17C)-KA	163.7(3)
N(22)-C(23)-C(24)	112.2(4)	N(22)-C(23)-C(26)	119.1(4)
C(24)-C(23)-C(26)	128.7(4)	C(23)-C(24)-C(25)	103.6(4)
N(21)-C(25)-C(24)	109.2(4)	N(21)-C(25)-C(27)	123.6(4)
C(24)-C(25)-C(27)	127.2(4)	C(23)-C(26)-F(26A)	112.7(4)
C(23)-C(26)-F(26B)	112.7(5)	F(26A)-C(26)-F(26B)	105.0(5)
C(23)-C(26)-F(26C)	112.6(5)	F(26A)-C(26)-F(26C)	104.6(5)
F(26B)-C(26)-F(26C)	108.7(5)	C(26)-F(26C)-KB	114.5(3)
C(25)-C(27)-F(27A)	114.1(8)	C(25)-C(27)-F(27B)	112.9(7)
F(27A)-C(27)-F(27B)	112.9(13)	C(25)-C(27)-F(27C)	108.5(8)
F(27A)-C(27)-F(27C)	104.2(9)	F(27B)-C(27)-F(27C)	103.1(12)
C(25)-C(27)-F(27D)	113.1(25)	F(27A)-C(27)-F(27D)	24.7(47)
F(27B)-C(27)-F(27D)	129.2(36)	F(27C)-C(27)-F(27D)	81.7(43)
C(25)-C(27)-F(27E)	113.5(24)	F(27A)-C(27)-F(27E)	69.0(22)
F(27B)-C(27)-F(27E)	49.5(22)	F(27C)-C(27)-F(27E)	136.4(24)
F(27D)-C(27)-F(27E)	92.3(51)	C(25)-C(27)-F(27F)	115.1(27)

F(27A)-C(27)-F(27F)	123.4(30)	F(27B)-C(27)-F(27F)	70.3(32)
F(27C)-C(27)-F(27F)	33.6(30)	F(27D)-C(27)-F(27F)	107.6(46)
F(27E)-C(27)-F(27F)	113.0(34)	C(27)-F(27A)-F(27D)	82.7(66)
C(27)-F(27A)-F(27E)	58.5(20)	F(27D)-F(27A)-F(27E)	136.7(67)
C(27)-F(27B)-F(27E)	66.7(30)	C(27)-F(27B)-F(27F)	53.9(20)
F(27E)-F(27B)-F(27F)	113.5(38)	C(27)-F(27B)-KA	141.2(14)
F(27E)-F(27B)-KA	75.7(31)	F(27F)-F(27B)-KA	143.4(24)
C(27)-F(27C)-F(27D)	48.7(19)	C(27)-F(27C)-F(27F)	70.6(45)
F(27D)-F(27C)-F(27F)	109.2(47)	C(27)-F(27D)-F(27A)	72.6(37)
C(27)-F(27D)-F(27C)	49.6(28)	F(27A)-F(27D)-F(27C)	117.9(60)
C(27)-F(27E)-F(27A)	52.5(22)	C(27)-F(27E)-F(27B)	63.8(29)
F(27A)-F(27E)-F(27B)	110.7(45)	C(27)-F(27E)-KA	144.2(26)
F(27A)-F(27E)-KA	144.7(31)	F(27B)-F(27E)-KA	81.8(29)
C(27)-F(27F)-F(27B)	55.8(26)	C(27)-F(27F)-F(27C)	75.8(37)
F(27B)-F(27F)-F(27C)	130.2(50)	N(11)-B-N(21)	109.9(4)

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
K	56(1)	61(1)	88(1)	9(1)	22(1)	26(1)
N(11)	50(2)	47(2)	55(2)	3(1)	11(1)	12(1)
N(12)	55(2)	57(2)	67(2)	2(2)	19(2)	23(2)
N(21)	59(2)	46(2)	50(2)	1(2)	14(2)	10(1)
N(22)	51(2)	59(2)	48(2)	8(2)	12(1)	10(1)
C(13)	55(2)	49(2)	63(2)	-4(2)	-4(2)	20(2)
C(14)	66(3)	55(2)	54(2)	12(2)	4(2)	4(2)
C(15)	49(2)	54(2)	47(2)	5(2)	8(2)	5(2)
C(16)	73(3)	75(3)	92(3)	-13(3)	-7(3)	35(3)
F(16A)	80(2)	133(3)	369(7)	0(2)	83(3)	111(4)
F(16B)	200(4)	158(3)	104(3)	-119(4)	-13(3)	24(2)
F(16C)	123(2)	102(2)	137(3)	-15(2)	10(2)	71(2)
C(17)	60(3)	87(3)	69(3)	6(2)	23(2)	1(3)
F(17A)	110(2)	137(3)	110(2)	6(2)	67(2)	-23(2)
F(17B)	112(2)	103(2)	104(2)	-5(2)	54(2)	33(2)
F(17C)	53(2)	167(3)	120(2)	7(2)	22(2)	30(2)
C(23)	50(2)	64(2)	51(2)	0(2)	14(2)	13(2)
C(24)	60(2)	70(3)	53(2)	-7(2)	10(2)	22(2)
C(25)	54(2)	50(2)	69(3)	2(2)	10(2)	22(2)
C(26)	73(3)	121(5)	62(3)	7(3)	21(2)	19(3)
F(26A)	81(2)	231(4)	127(3)	14(3)	52(2)	40(3)
F(26B)	135(3)	253(5)	58(2)	60(3)	29(2)	9(2)
F(26C)	215(5)	117(3)	166(4)	69(3)	125(4)	31(3)
C(27)	88(4)	72(4)	104(5)	23(3)	25(4)	32(4)
F(27A)	188(11)	87(6)	110(5)	74(7)	-13(6)	-18(4)
F(27B)	92(6)	138(5)	209(15)	46(5)	86(8)	80(8)
F(27C)	105(6)	120(6)	129(6)	53(4)	13(4)	72(6)
F(27D)	218(45)	64(15)	506(121)	32(19)	234(68)	57(32)
F(27E)	106(18)	183(29)	129(21)	90(19)	81(18)	91(19)
F(27F)	122(25)	227(38)	160(36)	101(24)	-78(24)	-108(33)
B	91(4)	50(3)	56(3)	-2(3)	26(3)	10(2)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$-2\pi^2 (h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
H(14)	6829	4550	998	67(11)
H(24)	9070	8634	8909	114(18)
H(1)	9307(55)	8895(41)	4220(39)	76(12)
H(2)	7278(48)	9467(40)	3994(37)	65(11)

Table 1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) [$\text{H}_2\text{B}(3,5-(\text{CF}_3)_2\text{Pz})_2$] 2Cu

	x	y	z	U(eq)
Cu	2500	2500	0	51(1)
N(11)	1503(2)	2362(5)	230(3)	52(3)
N(12)	1673(2)	1674(5)	-276(3)	53(3)
N(21)	2687(2)	2744(5)	1780(3)	55(3)
N(22)	2980(3)	2094(5)	1438(3)	54(3)
C(13)	1203(3)	667(6)	-834(4)	53(3)
C(14)	724(3)	707(7)	-716(4)	63(4)
C(15)	932(3)	1790(7)	-44(5)	58(4)
C(16)	1226(4)	-349(9)	-1471(5)	77(5)
C(17)	605(4)	2317(9)	373(6)	77(5)
C(23)	3525(3)	1399(7)	2211(4)	58(4)
C(24)	3589(3)	1610(7)	3052(4)	64(4)
C(25)	3058(3)	2460(7)	2756(4)	59(4)
C(26)	3957(4)	544(10)	2121(6)	87(6)
C(27)	2882(4)	3049(9)	3366(5)	77(5)
F(16A)	1824(3)	-877(6)	-1018(4)	141(5)
F(16B)	1076(3)	317(6)	-2275(4)	138(5)
F(16C)	806(3)	-1395(5)	-1803(4)	121(4)
F(17A)	963(3)	2119(6)	1329(4)	120(4)
F(17B)	21(3)	1631(5)	-80(4)	113(4)
F(17C)	455(2)	3707(5)	205(3)	100(4)
F(26A)	4382(3)	-255(7)	2861(4)	140(4)
F(26B)	4281(3)	1275(8)	1908(6)	186(8)
F(26C)	3609(3)	-307(9)	1324(5)	172(5)
F(27A)	2866(2)	4493(5)	3358(3)	100(3)
F(27B)	2304(3)	2593(6)	3079(3)	113(4)
F(27C)	3357(3)	2643(5)	4310(3)	112(3)
B	2010(3)	3557(7)	993(5)	53(4)

* Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table 2. Bond lengths ($\text{\AA}$)

Cu-N(12)	2.004 (6)	Cu-N(22)	1.997 (5)
Cu-N(12A)	2.004 (6)	Cu-N(22A)	1.997 (5)
N(11)-N(12)	1.357 (10)	N(11)-C(15)	1.328 (10)
N(11)-B	1.572 (7)	N(12)-C(13)	1.330 (7)
N(21)-N(22)	1.356 (10)	N(21)-C(25)	1.342 (8)
N(21)-B	1.559 (7)	N(22)-C(23)	1.336 (6)
C(13)-C(14)	1.367 (13)	C(13)-C(16)	1.477 (13)
C(14)-H(14)	0.960	C(14)-C(15)	1.358 (10)
C(15)-C(17)	1.494 (16)	C(16)-F(16A)	1.295 (10)
C(16)-F(16B)	1.336 (12)	C(16)-F(16C)	1.277 (10)
C(17)-F(17A)	1.303 (10)	C(17)-F(17B)	1.329 (10)
C(17)-F(17C)	1.313 (9)	C(23)-C(24)	1.374 (12)
C(23)-C(26)	1.446 (15)	C(24)-H(24)	0.960
C(24)-C(25)	1.357 (11)	C(25)-C(27)	1.489 (15)
C(26)-F(26A)	1.266 (9)	C(26)-F(26B)	1.291 (17)
C(26)-F(26C)	1.325 (11)	C(27)-F(27A)	1.328 (9)
C(27)-F(27B)	1.300 (12)	C(27)-F(27C)	1.333 (7)
B-H(1)	1.116	B-H(2)	1.126

Table 3. Bond angles ($^{\circ}$)

N(12)-Cu-N(22)	87.1(2)	N(12)-Cu-N(12A)	180.0(1)
N(22)-Cu-N(12A)	92.9(2)	N(12)-Cu-N(22A)	92.9(2)
N(22)-Cu-N(22A)	180.0(1)	N(12A)-Cu-N(22A)	87.1(2)
N(12)-N(11)-C(15)	108.4(5)	N(12)-N(11)-B	115.9(6)
C(15)-N(11)-B	135.7(7)	Cu-N(12)-N(11)	113.1(3)
Cu-N(12)-C(13)	140.4(6)	N(11)-N(12)-C(13)	106.4(6)
N(22)-N(21)-C(25)	108.6(5)	N(22)-N(21)-B	116.5(5)
C(25)-N(21)-B	134.8(7)	Cu-N(22)-N(21)	112.9(3)
Cu-N(22)-C(23)	140.3(6)	N(21)-N(22)-C(23)	106.8(6)
N(12)-C(13)-C(14)	110.9(7)	N(12)-C(13)-C(16)	122.6(8)
C(14)-C(13)-C(16)	126.5(6)	C(13)-C(14)-H(14)	128.1(3)
C(13)-C(14)-C(15)	104.2(6)	H(14)-C(14)-C(15)	127.7(5)
N(11)-C(15)-C(14)	110.1(8)	N(11)-C(15)-C(17)	121.8(6)
C(14)-C(15)-C(17)	128.1(7)	C(13)-C(16)-F(16A)	112.1(6)
C(13)-C(16)-F(16B)	111.7(7)	F(16A)-C(16)-F(16B)	104.7(10)
C(13)-C(16)-F(16C)	113.0(10)	F(16A)-C(16)-F(16C)	109.1(7)
F(16B)-C(16)-F(16C)	105.8(6)	C(15)-C(17)-F(17A)	114.3(7)
C(15)-C(17)-F(17B)	109.2(7)	F(17A)-C(17)-F(17B)	107.9(9)
C(15)-C(17)-F(17C)	112.6(9)	F(17A)-C(17)-F(17C)	106.8(7)
F(17B)-C(17)-F(17C)	105.6(6)	N(22)-C(23)-C(24)	110.1(7)
N(22)-C(23)-C(26)	122.5(8)	C(24)-C(23)-C(26)	127.4(6)
C(23)-C(24)-H(24)	127.1(4)	C(23)-C(24)-C(25)	105.2(5)
H(24)-C(24)-C(25)	127.5(4)	N(21)-C(25)-C(24)	109.2(8)
N(21)-C(25)-C(27)	122.2(6)	C(24)-C(25)-C(27)	128.5(6)
C(23)-C(26)-F(26A)	115.6(10)	C(23)-C(26)-F(26B)	115.0(8)
F(26A)-C(26)-F(26B)	107.3(8)	C(23)-C(26)-F(26C)	112.2(7)
F(26A)-C(26)-F(26C)	107.0(8)	F(26B)-C(26)-F(26C)	98.0(10)
C(25)-C(27)-F(27A)	112.2(8)	C(25)-C(27)-F(27B)	113.3(6)
F(27A)-C(27)-F(27B)	107.3(8)	C(25)-C(27)-F(27C)	108.6(7)
F(27A)-C(27)-F(27C)	106.9(5)	F(27B)-C(27)-F(27C)	108.2(9)
N(11)-B-N(21)	105.7(5)	N(11)-B-H(1)	110.7(4)
N(21)-B-H(1)	108.7(4)	N(11)-B-H(2)	107.7(5)
N(21)-B-H(2)	114.0(4)	H(1)-B-H(2)	110.0(1)

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cu	51(1)	58(1)	48(1)	1(1)	33(1)	0(1)
N(11)	53(3)	57(3)	55(3)	4(3)	39(2)	0(3)
N(12)	59(3)	58(3)	47(3)	-1(3)	36(3)	-2(3)
N(21)	58(3)	64(3)	45(3)	-1(3)	34(2)	-1(2)
N(22)	61(3)	60(3)	54(3)	3(2)	41(3)	5(2)
C(13)	50(3)	60(4)	45(3)	-4(3)	28(3)	-5(3)
C(14)	52(4)	70(4)	63(4)	-7(3)	35(3)	-2(4)
C(15)	52(4)	64(4)	68(4)	6(3)	42(3)	6(3)
C(16)	72(5)	85(5)	82(5)	-15(5)	53(4)	-20(5)
C(17)	64(4)	87(6)	97(6)	4(4)	59(4)	3(5)
C(23)	48(4)	69(4)	54(4)	2(3)	31(3)	8(3)
C(24)	59(4)	76(5)	45(4)	-6(4)	27(3)	9(3)
C(25)	64(4)	61(4)	53(4)	-5(4)	37(3)	-2(4)
C(26)	68(5)	111(6)	85(6)	14(5)	50(5)	20(5)
C(27)	91(5)	77(6)	54(4)	-6(4)	42(4)	-10(4)
F(16A)	102(4)	164(5)	161(5)	-9(4)	85(4)	-81(4)
F(16B)	233(6)	112(4)	104(3)	-31(4)	124(4)	-32(3)
F(16C)	130(4)	105(3)	158(4)	-57(3)	105(4)	-72(3)
F(17A)	125(4)	180(5)	93(3)	29(3)	86(3)	19(3)
F(17B)	98(3)	117(4)	172(4)	-21(3)	108(3)	-26(3)
F(17C)	99(3)	91(3)	132(4)	17(3)	84(3)	-5(3)
F(26A)	151(4)	174(5)	116(4)	110(4)	95(4)	82(4)
F(26B)	168(6)	197(6)	298(9)	102(5)	197(7)	136(7)
F(26C)	152(5)	225(7)	133(5)	80(6)	88(4)	-16(5)
F(27A)	135(4)	85(3)	79(3)	8(3)	67(3)	-13(2)
F(27B)	123(4)	153(4)	107(3)	-29(4)	94(3)	-28(3)
F(27C)	147(4)	127(4)	55(2)	25(3)	60(3)	6(3)
B	60(4)	47(4)	58(4)	7(3)	40(4)	2(3)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
H(14)	331	107	-1032	55(16)
H(24)	3952	1289	3716	76(19)
H(1)	2096	4393	617	53(14)
H(2)	1786	4081	1311	60(15)

Table 1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) $[\text{H}_2\text{B}(3,5\text{-(CF}_3)_2\text{Pz})_2]_2\text{Zn}$

	x	y	z	U(eq)
Zn	267(1)	1461(1)	2798(1)	54(1)
N(11)	944(4)	-435(4)	1647(2)	54(1)
N(12)	-82(4)	-87(4)	2178(2)	56(1)
N(21)	2505(4)	1580(4)	1647(2)	58(1)
N(22)	1825(4)	2349(4)	2184(2)	56(1)
N(31)	-2307(4)	3368(4)	3394(2)	59(1)
N(32)	-1654(4)	3027(4)	2753(2)	56(1)
N(41)	-238(4)	2100(4)	4274(2)	54(1)
N(42)	851(4)	1431(4)	3830(2)	56(1)
C(13)	-1280(5)	-631(5)	2024(2)	60(2)
C(14)	-1044(6)	-1338(5)	1415(3)	69(2)
C(15)	362(5)	-1198(4)	1192(2)	60(2)
C(16)	-2679(6)	-467(6)	2467(3)	76(2)
C(17)	1205(7)	-1817(6)	563(3)	82(2)
C(23)	2171(5)	3678(5)	2080(2)	61(2)
C(24)	3079(5)	3810(5)	1485(3)	69(2)
C(25)	3250(5)	2470(5)	1224(2)	63(2)
C(26)	1633(6)	4838(6)	2578(3)	74(2)
C(27)	4131(7)	2011(7)	569(3)	86(2)
C(33)	-2363(5)	4004(5)	2245(2)	62(2)
C(34)	-3500(5)	4984(5)	2547(3)	70(2)
C(35)	-3408(5)	4553(5)	3263(3)	63(2)
C(36)	-2001(6)	3973(7)	1466(3)	79(2)
C(37)	-4384(6)	5248(7)	3840(3)	85(2)
C(43)	2156(5)	1290(5)	4169(2)	62(2)
C(44)	1927(5)	1810(5)	4833(2)	68(2)
C(45)	424(5)	2314(4)	4875(2)	59(2)
C(46)	3630(6)	631(7)	3852(3)	85(2)
C(47)	-424(6)	2983(6)	5496(3)	73(2)
B(1)	2571(6)	-135(6)	1692(3)	66(2)
B(2)	-1922(6)	2249(7)	4087(3)	64(2)
F(16A)	-2404(4)	-754(5)	3156(2)	135(2)
F(16B)	-3563(4)	-1312(5)	2289(3)	140(2)
F(16C)	-3481(4)	875(4)	2397(2)	119(2)
F(17A)	2423(5)	-2801(4)	747(2)	117(2)
F(17B)	319(5)	-2494(5)	217(2)	138(2)
F(17C)	1624(4)	-825(4)	91(2)	95(1)
F(26A)	408	5771	2288	104(4)
F(26B)	1148	4326	3191	113(5)
F(26C)	2649	5628	2643	119(4)
F(26D)	158	5311	2600	128(5)
F(26E)	1961	4369	3265	130(5)
F(26F)	2222	6051	2401	106(4)
F(27A)	4620(4)	3165(5)	235(2)	126(2)
F(27B)	5289(4)	964(5)	708(2)	117(2)
F(27C)	3302(4)	1555(4)	103(2)	113(2)
F(36A)	-1695	2601	1277	139(8)
F(36B)	-755	4464	1271	143(9)
F(36C)	-3072	4726	1061	135(6)
F(36D)	-3108	3737	1105	145(8)
F(36E)	-854	2931	1331	106(5)
F(36F)	-1627	5212	1194	144(8)
F(37A)	-5308(4)	6451(4)	3542(2)	131(2)
F(37B)	-5212(4)	4405(5)	4168(2)	117(2)

F(37C)	-3596(4)	5681(4)	4326(2)	119(2)
F(46A)	4032	1581	3297	97(4)
F(46B)	3610	-584	3593	130(5)
F(46C)	4736	569	4286	126(6)
F(46D)	4404	-394	4331	148(5)
F(46E)	4360	1582	3616	195(9)
F(46F)	3444	-221	3335	107(3)
F(47A)	-1258(5)	2125(4)	5834(2)	119(2)
F(47B)	542(4)	3242(4)	5960(2)	115(2)
F(47C)	-1296(3)	4261(3)	5310(2)	92(1)

* Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table 2. Bond lengths (Å)

Zn-N(12)	2.021 (4)	Zn-N(22)	2.039 (3)
Zn-N(32)	2.039 (3)	Zn-N(42)	2.014 (3)
N(11)-N(12)	1.363 (5)	N(11)-C(15)	1.347 (6)
N(11)-B(1)	1.566 (7)	N(12)-C(13)	1.340 (6)
N(21)-N(22)	1.359 (5)	N(21)-C(25)	1.345 (6)
N(21)-B(1)	1.573 (7)	N(22)-C(23)	1.324 (6)
N(31)-N(32)	1.362 (5)	N(31)-C(35)	1.340 (5)
N(31)-B(2)	1.570 (6)	N(32)-C(33)	1.326 (5)
N(41)-N(42)	1.370 (5)	N(41)-C(45)	1.344 (6)
N(41)-B(2)	1.559 (6)	N(42)-C(43)	1.340 (6)
C(13)-C(14)	1.369 (7)	C(13)-C(16)	1.488 (7)
C(14)-C(15)	1.360 (7)	C(15)-C(17)	1.492 (7)
C(16)-F(16A)	1.308 (6)	C(16)-F(16B)	1.302 (8)
C(16)-F(16C)	1.309 (6)	C(17)-F(17A)	1.317 (7)
C(17)-F(17B)	1.337 (8)	C(17)-F(17C)	1.307 (7)
C(23)-C(24)	1.375 (6)	C(23)-C(26)	1.501 (7)
C(24)-C(25)	1.365 (7)	C(25)-C(27)	1.499 (7)
C(26)-F(26A)	1.356 (5)	C(26)-F(26B)	1.290 (5)
C(26)-F(26C)	1.306 (6)	C(26)-F(26D)	1.329 (5)
C(26)-F(26E)	1.332 (5)	C(26)-F(26F)	1.345 (6)
C(27)-F(27A)	1.325 (8)	C(27)-F(27B)	1.296 (7)
C(27)-F(27C)	1.325 (8)	C(33)-C(34)	1.387 (6)
C(33)-C(36)	1.484 (7)	C(34)-C(35)	1.354 (7)
C(35)-C(37)	1.497 (7)	C(36)-F(36A)	1.333 (6)
C(36)-F(36B)	1.330 (6)	C(36)-F(36C)	1.294 (5)
C(36)-F(36D)	1.298 (6)	C(36)-F(36E)	1.315 (5)
C(36)-F(36F)	1.307 (6)	C(37)-F(37A)	1.336 (6)
C(37)-F(37B)	1.285 (7)	C(37)-F(37C)	1.318 (8)
C(43)-C(44)	1.377 (6)	C(43)-C(46)	1.495 (7)
C(44)-C(45)	1.358 (6)	C(45)-C(47)	1.499 (6)
C(46)-F(46A)	1.374 (6)	C(46)-F(46B)	1.280 (7)
C(46)-F(46C)	1.301 (6)	C(46)-F(46D)	1.337 (6)
C(46)-F(46E)	1.241 (7)	C(46)-F(46F)	1.351 (7)
C(47)-F(47A)	1.306 (7)	C(47)-F(47B)	1.328 (7)
C(47)-F(47C)	1.308 (6)	F(26A)-F(26D)	0.739 (1)
F(26A)-F(26F)	1.744 (1)	F(26B)-F(26D)	1.544 (1)
F(26B)-F(26E)	0.766 (1)	F(26C)-F(26E)	1.746 (1)
F(26C)-F(26F)	0.649 (1)	F(36A)-F(36D)	1.512 (1)
F(36A)-F(36E)	0.890 (1)	F(36B)-F(36E)	1.435 (1)
F(36B)-F(36F)	0.949 (1)	F(36C)-F(36D)	0.919 (1)
F(36C)-F(36F)	1.508 (1)	F(46A)-F(46E)	0.674 (1)
F(46B)-F(46D)	1.621 (1)	F(46B)-F(46F)	0.564 (1)
F(46C)-F(46D)	0.993 (1)	F(46C)-F(46E)	1.486 (1)

Table 3. Bond angles ($^{\circ}$)

N(12)-Zn-N(22)	100.0(1)	N(12)-Zn-N(32)	106.0(1)
N(22)-Zn-N(32)	106.8(1)	N(12)-Zn-N(42)	134.7(1)
N(22)-Zn-N(42)	106.4(1)	N(32)-Zn-N(42)	100.7(1)
N(12)-N(11)-C(15)	108.5(3)	N(12)-N(11)-B(1)	120.6(4)
C(15)-N(11)-B(1)	130.3(4)	Zn-N(12)-N(11)	117.0(3)
Zn-N(12)-C(13)	134.5(3)	N(11)-N(12)-C(13)	105.9(3)
N(22)-N(21)-C(25)	107.9(4)	N(22)-N(21)-B(1)	119.6(4)
C(25)-N(21)-B(1)	131.2(4)	Zn-N(22)-N(21)	117.4(3)
Zn-N(22)-C(23)	134.2(3)	N(21)-N(22)-C(23)	106.9(3)
N(32)-N(31)-C(35)	108.0(3)	N(32)-N(31)-B(2)	119.6(3)
C(35)-N(31)-B(2)	131.2(4)	Zn-N(32)-N(31)	116.7(2)
Zn-N(32)-C(33)	135.3(3)	N(31)-N(32)-C(33)	107.2(3)
N(42)-N(41)-C(45)	108.0(3)	N(42)-N(41)-B(2)	119.8(4)
C(45)-N(41)-B(2)	131.4(4)	Zn-N(42)-N(41)	116.1(2)
Zn-N(42)-C(43)	134.4(3)	N(41)-N(42)-C(43)	106.4(3)
N(12)-C(13)-C(14)	111.3(4)	N(12)-C(13)-C(16)	123.5(4)
C(14)-C(13)-C(16)	125.2(5)	C(13)-C(14)-C(15)	104.6(5)
N(11)-C(15)-C(14)	109.7(4)	N(11)-C(15)-C(17)	123.2(5)
C(14)-C(15)-C(17)	127.1(5)	C(13)-C(16)-F(16A)	112.2(4)
C(13)-C(16)-F(16B)	111.7(5)	F(16A)-C(16)-F(16B)	109.1(5)
C(13)-C(16)-F(16C)	113.5(4)	F(16A)-C(16)-F(16C)	104.5(5)
F(16B)-C(16)-F(16C)	105.4(4)	C(15)-C(17)-F(17A)	113.1(4)
C(15)-C(17)-F(17B)	108.6(5)	F(17A)-C(17)-F(17B)	107.3(5)
C(15)-C(17)-F(17C)	114.2(4)	F(17A)-C(17)-F(17C)	106.5(5)
F(17B)-C(17)-F(17C)	106.6(4)	N(22)-C(23)-C(24)	111.3(4)
N(22)-C(23)-C(26)	122.1(4)	C(24)-C(23)-C(26)	126.5(5)
C(23)-C(24)-C(25)	103.9(4)	N(21)-C(25)-C(24)	109.9(4)
N(21)-C(25)-C(27)	123.5(5)	C(24)-C(25)-C(27)	126.6(5)
C(23)-C(26)-F(26A)	108.7(4)	C(23)-C(26)-F(26B)	113.9(4)
F(26A)-C(26)-F(26B)	103.3(4)	C(23)-C(26)-F(26C)	110.6(4)
F(26A)-C(26)-F(26C)	107.1(4)	F(26B)-C(26)-F(26C)	112.6(4)
C(23)-C(26)-F(26D)	115.3(4)	F(26A)-C(26)-F(26D)	31.9(1)
F(26B)-C(26)-F(26D)	72.2(3)	F(26C)-C(26)-F(26D)	126.2(4)
C(23)-C(26)-F(26E)	113.1(4)	F(26A)-C(26)-F(26E)	129.9(4)
F(26B)-C(26)-F(26E)	33.9(1)	F(26C)-C(26)-F(26E)	82.9(3)
F(26D)-C(26)-F(26E)	102.8(4)	C(23)-C(26)-F(26F)	111.6(4)
F(26A)-C(26)-F(26F)	80.5(3)	F(26B)-C(26)-F(26F)	129.9(5)
F(26C)-C(26)-F(26F)	28.3(1)	F(26D)-C(26)-F(26F)	105.8(3)
F(26E)-C(26)-F(26F)	107.5(4)	C(25)-C(27)-F(27A)	109.0(5)
C(25)-C(27)-F(27B)	113.8(4)	F(27A)-C(27)-F(27B)	107.4(5)
C(25)-C(27)-F(27C)	112.0(5)	F(27A)-C(27)-F(27C)	107.0(4)
F(27B)-C(27)-F(27C)	107.2(5)	N(32)-C(33)-C(34)	110.2(4)
N(32)-C(33)-C(36)	123.4(4)	C(34)-C(33)-C(36)	126.4(4)
C(33)-C(34)-C(35)	104.6(4)	N(31)-C(35)-C(34)	110.0(4)
N(31)-C(35)-C(37)	123.4(4)	C(34)-C(35)-C(37)	126.6(4)
C(33)-C(36)-F(36A)	112.3(4)	C(33)-C(36)-F(36B)	113.5(5)
F(36A)-C(36)-F(36B)	102.2(4)	C(33)-C(36)-F(36C)	112.6(4)
F(36A)-C(36)-F(36C)	107.7(4)	F(36B)-C(36)-F(36C)	107.8(4)
C(33)-C(36)-F(36D)	112.1(4)	F(36A)-C(36)-F(36D)	70.1(3)
F(36B)-C(36)-F(36D)	132.8(4)	F(36C)-C(36)-F(36D)	41.6(2)
C(33)-C(36)-F(36E)	113.6(4)	F(36A)-C(36)-F(36E)	39.3(2)
F(36B)-C(36)-F(36E)	65.7(3)	F(36C)-C(36)-F(36E)	131.5(4)
F(36D)-C(36)-F(36E)	105.5(4)	C(33)-C(36)-F(36F)	110.8(5)
F(36A)-C(36)-F(36F)	133.1(4)	F(36B)-C(36)-F(36F)	42.2(2)
F(36C)-C(36)-F(36F)	70.9(3)	F(36D)-C(36)-F(36F)	109.2(4)
F(36E)-C(36)-F(36F)	105.2(4)	C(35)-C(37)-F(37A)	108.8(5)

P-324-m18

S18

C(35)-C(37)-F(37B) 113.8(5)
 C(35)-C(37)-F(37C) 111.9(4)
 F(37B)-C(37)-F(37C) 108.2(5)
 N(42)-C(43)-C(46) 123.0(4)
 C(43)-C(44)-C(45) 104.7(4)
 N(41)-C(45)-C(47) 123.3(4)
 C(43)-C(46)-F(46A) 110.5(4)
 F(46A)-C(46)-F(46B) 106.6(4)
 F(46A)-C(46)-F(46C) 99.3(4)
 C(43)-C(46)-F(46D) 110.1(4)
 F(46B)-C(46)-F(46D) 76.5(3)
 C(43)-C(46)-F(46E) 112.5(5)
 F(46B)-C(46)-F(46E) 126.5(5)
 F(46D)-C(46)-F(46E) 112.1(4)
 F(46A)-C(46)-F(46F) 85.3(3)
 F(46C)-C(46)-F(46F) 131.5(4)
 F(46E)-C(46)-F(46F) 110.5(4)
 C(45)-C(47)-F(47B) 109.1(4)
 C(45)-C(47)-F(47C) 113.4(4)
 F(47B)-C(47)-F(47C) 105.8(4)
 N(31)-B(2)-N(41) 109.4(4)
 C(26)-F(26A)-F(26F) 49.5(2)
 C(26)-F(26B)-F(26D) 55.0(2)
 F(26D)-F(26B)-F(26E) 124.9(1)
 C(26)-F(26C)-F(26F) 79.2(2)
 C(26)-F(26D)-F(26A) 76.1(2)
 F(26A)-F(26D)-F(26B) 127.2(1)
 C(26)-F(26E)-F(26C) 47.9(3)
 C(26)-F(26F)-F(26A) 50.1(2)
 F(26A)-F(26F)-F(26C) 119.6(1)
 C(36)-F(36A)-F(36E) 69.2(3)
 C(36)-F(36B)-F(36E) 56.6(2)
 F(36E)-F(36B)-F(36F) 120.5(1)
 C(36)-F(36C)-F(36F) 55.0(3)
 C(36)-F(36D)-F(36A) 56.0(3)
 F(36A)-F(36D)-F(36C) 119.6(1)
 C(36)-F(36E)-F(36B) 57.6(3)
 C(36)-F(36F)-F(36B) 70.2(2)
 F(36B)-F(36F)-F(36C) 117.4(1)
 C(46)-F(46B)-F(46D) 53.3(2)
 F(46D)-F(46B)-F(46F) 135.3(1)
 C(46)-F(46C)-F(46E) 52.4(3)
 C(46)-F(46D)-F(46B) 50.2(3)
 F(46B)-F(46D)-F(46C) 109.8(1)
 C(46)-F(46E)-F(46C) 56.1(3)
 C(46)-F(46F)-F(46B) 70.6(2)

F(37A)-C(37)-F(37B) 106.8(4)
 F(37A)-C(37)-F(37C) 107.1(5)
 N(42)-C(43)-C(44) 110.7(4)
 C(44)-C(43)-C(46) 126.3(5)
 N(41)-C(45)-C(44) 110.1(4)
 C(44)-C(45)-C(47) 126.6(4)
 C(43)-C(46)-F(46B) 112.9(5)
 C(43)-C(46)-F(46C) 112.2(5)
 F(46B)-C(46)-F(46C) 114.3(4)
 F(46A)-C(46)-F(46D) 133.7(4)
 F(46C)-C(46)-F(46D) 44.2(2)
 F(46A)-C(46)-F(46E) 29.3(1)
 F(46C)-C(46)-F(46E) 71.5(3)
 C(43)-C(46)-F(46F) 110.9(5)
 F(46B)-C(46)-F(46F) 24.6(1)
 F(46D)-C(46)-F(46F) 100.0(4)
 C(45)-C(47)-F(47A) 112.6(5)
 F(47A)-C(47)-F(47B) 108.4(4)
 F(47A)-C(47)-F(47C) 107.3(4)
 N(11)-B(1)-N(21) 109.3(3)
 C(26)-F(26A)-F(26D) 72.0(2)
 F(26D)-F(26A)-F(26F) 111.8(1)
 C(26)-F(26B)-F(26E) 76.1(2)
 C(26)-F(26C)-F(26E) 49.2(2)
 F(26E)-F(26C)-F(26F) 121.6(1)
 C(26)-F(26D)-F(26B) 52.7(2)
 C(26)-F(26E)-F(26B) 70.0(2)
 F(26B)-F(26E)-F(26C) 112.6(1)
 C(26)-F(26F)-F(26C) 72.5(2)
 C(36)-F(36A)-F(36D) 53.9(2)
 F(36D)-F(36A)-F(36E) 117.6(1)
 C(36)-F(36B)-F(36F) 67.6(2)
 C(36)-F(36C)-F(36D) 69.5(3)
 F(36D)-F(36C)-F(36F) 120.1(1)
 C(36)-F(36D)-F(36C) 69.0(3)
 C(36)-F(36E)-F(36A) 71.5(3)
 F(36A)-F(36E)-F(36B) 124.5(1)
 C(36)-F(36F)-F(36C) 54.1(2)
 C(46)-F(46A)-F(46E) 64.4(3)
 C(46)-F(46B)-F(46F) 84.8(3)
 C(46)-F(46C)-F(46D) 69.8(3)
 F(46D)-F(46C)-F(46E) 118.0(1)
 C(46)-F(46D)-F(46C) 66.0(3)
 C(46)-F(46E)-F(46A) 86.3(3)
 F(46A)-F(46E)-F(46C) 138.3(1)

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Zn	46(1)	67(1)	49(1)	-4(1)	10(1)	-22(1)
N(11)	48(2)	60(2)	53(2)	-4(2)	10(2)	-18(2)
N(12)	54(2)	64(2)	51(2)	-6(2)	8(2)	-20(2)
N(21)	43(2)	78(2)	57(2)	-9(2)	11(2)	-25(2)
N(22)	50(2)	70(2)	50(2)	-9(2)	9(2)	-24(2)
N(31)	44(2)	76(2)	59(2)	-4(2)	9(2)	-28(2)
N(32)	45(2)	72(2)	52(2)	-4(2)	7(2)	-21(2)
N(41)	51(2)	64(2)	46(2)	-5(2)	12(2)	-13(2)
N(42)	52(2)	63(2)	53(2)	-3(2)	10(2)	-16(2)
C(13)	57(3)	68(3)	59(3)	-16(2)	9(2)	-17(2)
C(14)	81(3)	72(3)	64(3)	-29(3)	9(2)	-24(2)
C(15)	71(3)	56(2)	56(2)	-14(2)	13(2)	-18(2)
C(16)	75(3)	87(3)	74(3)	-34(3)	18(3)	-24(3)
C(17)	100(4)	80(3)	73(3)	-24(3)	27(3)	-35(3)
C(23)	53(2)	71(3)	62(3)	-15(2)	6(2)	-18(2)
C(24)	64(3)	82(3)	66(3)	-24(2)	8(2)	-10(2)
C(25)	51(2)	85(3)	58(3)	-18(2)	10(2)	-20(2)
C(26)	66(3)	80(3)	82(4)	-19(3)	8(3)	-32(3)
C(27)	78(4)	117(4)	72(3)	-34(4)	28(3)	-30(3)
C(33)	54(3)	69(3)	61(3)	-6(2)	-4(2)	-13(2)
C(34)	57(3)	69(3)	83(3)	-2(2)	-10(2)	-16(2)
C(35)	45(2)	69(3)	75(3)	2(2)	-2(2)	-28(2)
C(36)	74(4)	95(4)	69(3)	-15(3)	-7(3)	-11(3)
C(37)	56(3)	99(4)	97(4)	11(3)	2(3)	-49(3)
C(43)	56(3)	69(3)	55(2)	4(2)	1(2)	-14(2)
C(44)	65(3)	80(3)	54(3)	3(2)	-4(2)	-19(2)
C(45)	66(3)	62(2)	44(2)	-1(2)	4(2)	-9(2)
C(46)	66(3)	101(4)	79(4)	22(3)	-15(3)	-31(3)
C(47)	78(3)	87(3)	51(3)	-3(3)	8(3)	-21(2)
B(1)	51(3)	72(3)	75(4)	0(2)	9(3)	-27(3)
B(2)	52(3)	86(4)	58(3)	-15(3)	11(2)	-16(3)
F(16A)	97(3)	225(5)	73(2)	-18(3)	25(2)	1(2)
F(16B)	108(3)	168(4)	179(4)	-85(3)	64(3)	-93(3)
F(16C)	78(2)	110(3)	164(4)	-5(2)	46(2)	-29(2)
F(17A)	144(3)	86(2)	109(3)	17(2)	41(2)	-34(2)
F(17B)	156(4)	177(4)	118(3)	-85(3)	51(3)	-102(3)
F(17C)	111(2)	114(2)	65(2)	-27(2)	29(2)	-24(2)
F(26A)	101(7)	88(5)	104(5)	37(4)	0(4)	-27(4)
F(26B)	191(10)	78(5)	73(6)	-28(5)	45(6)	-32(4)
F(26C)	105(6)	127(7)	152(8)	-53(5)	20(6)	-82(7)
F(26D)	96(6)	155(8)	155(10)	-36(6)	28(6)	-93(8)
F(26E)	222(11)	89(6)	72(6)	2(6)	-7(6)	-31(5)
F(26F)	145(8)	76(4)	104(5)	-29(5)	23(5)	-32(4)
F(27A)	136(3)	160(3)	98(3)	-70(3)	61(2)	-32(2)
F(27B)	76(2)	158(3)	111(3)	1(2)	37(2)	-46(2)
F(27C)	110(3)	175(3)	69(2)	-48(2)	26(2)	-53(2)
F(36A)	248(21)	103(7)	63(5)	-25(9)	32(8)	-25(4)
F(36B)	110(7)	257(23)	73(5)	-59(10)	18(4)	-35(7)
F(36C)	145(12)	167(12)	64(5)	32(8)	-22(6)	7(5)
F(36D)	97(9)	272(20)	83(6)	-52(10)	-16(5)	-60(7)
F(36E)	107(7)	135(11)	57(4)	28(6)	8(3)	-18(5)
F(36F)	251(20)	111(6)	87(6)	-85(9)	37(8)	-7(4)
F(37A)	99(3)	127(3)	149(3)	48(2)	-5(2)	-60(2)
F(37B)	70(2)	155(3)	131(3)	-15(2)	41(2)	-59(2)
F(37C)	88(2)	157(3)	117(3)	1(2)	3(2)	-89(2)

F(46A)	62(5)	140(9)	74(5)	6(5)	22(4)	0(4)
F(46B)	109(8)	91(6)	182(11)	3(5)	61(7)	-31(7)
F(46C)	69(5)	204(13)	87(6)	23(6)	-26(4)	-22(6)
F(46D)	103(6)	216(11)	81(5)	87(6)	-13(4)	-32(5)
F(46E)	91(7)	163(12)	353(21)	-48(7)	98(10)	-112(12)
F(46F)	103(6)	126(6)	73(4)	40(5)	-1(3)	-41(4)
F(47A)	153(3)	124(3)	80(2)	-37(2)	59(2)	-18(2)
F(47B)	104(2)	170(3)	67(2)	4(2)	-5(2)	-56(2)
F(47C)	91(2)	97(2)	81(2)	14(2)	9(2)	-37(2)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$-2\pi^2(h^2a^2U_{11} + \dots + 2hka*b*U_{12})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
H(14)	-1719	-1817	1187	80
H(24)	3494	4651	1296	80
H(34)	-4186	5796	2303	80
H(44)	2668	1816	5186	80
H(1A)	2931(47)	-557(44)	2256(24)	67(12)
H(1B)	3283(50)	-539(48)	1271(25)	79(14)
H(2A)	-2001(50)	1169(48)	3907(24)	73(13)
H(2B)	-2626(51)	2664(48)	4527(24)	77(13)

Table 1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) [$\text{H}_2\text{B}(3,5-(\text{CH}_3)_2\text{Pz})_2]_2\text{Zn}$

	x	y	z	U(eq)
Zn	0	872(1)	2500	48(1)
N(11)	2462(5)	245(3)	3443(2)	50(2)
N(12)	1793(5)	77(3)	2820(2)	50(2)
N(21)	394(6)	1328(4)	3915(2)	56(2)
N(22)	-647(6)	1413(3)	3379(2)	52(2)
C(13)	2371(7)	-713(4)	2596(3)	57(2)
C(14)	3401(8)	-1078(4)	3073(3)	64(3)
C(15)	3438(7)	-456(5)	3591(3)	61(2)
C(16)	1882(9)	-1074(5)	1925(3)	76(3)
C(17)	4393(8)	-509(6)	4230(3)	88(3)
C(23)	-2098(8)	1562(4)	3629(3)	58(2)
C(24)	-1979(8)	1585(5)	4321(3)	70(3)
C(25)	-407(9)	1445(5)	4484(3)	67(3)
C(26)	-3515(7)	1654(5)	3184(3)	74(3)
C(27)	387(10)	1401(7)	5161(3)	104(4)
B	2196(9)	1191(6)	3779(4)	63(3)

* Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table 2. Bond lengths ($\text{\AA}$)

Zn-N(12)	2.002 (5)	Zn-N(22)	2.007 (5)
Zn-N(12A)	2.002 (5)	Zn-N(22A)	2.007 (5)
N(11)-N(12)	1.382 (6)	N(11)-C(15)	1.339 (8)
N(11)-B	1.547 (9)	N(12)-C(13)	1.326 (8)
N(21)-N(22)	1.381 (6)	N(21)-C(25)	1.342 (8)
N(21)-B	1.563 (9)	N(22)-C(23)	1.348 (8)
C(13)-C(14)	1.386 (9)	C(13)-C(16)	1.494 (9)
C(14)-C(15)	1.374 (9)	C(15)-C(17)	1.502 (9)
C(23)-C(24)	1.384 (9)	C(23)-C(26)	1.486 (9)
C(24)-C(25)	1.377 (10)	C(25)-C(27)	1.504 (9)

Table 3. Bond angles ($^\circ$)

N(12)-Zn-N(22)	99.2(2)	N(12)-Zn-N(12A)	109.6(3)
N(22)-Zn-N(12A)	106.9(2)	N(12)-Zn-N(22A)	106.9(2)
N(22)-Zn-N(22A)	134.0(3)	N(12A)-Zn-N(22A)	99.2(2)
N(12)-N(11)-C(15)	107.9(5)	N(12)-N(11)-B	119.1(5)
C(15)-N(11)-B	132.2(5)	Zn-N(12)-N(11)	118.9(4)
Zn-N(12)-C(13)	132.2(4)	N(11)-N(12)-C(13)	108.0(5)
N(22)-N(21)-C(25)	108.8(5)	N(22)-N(21)-B	119.1(5)
C(25)-N(21)-B	131.9(5)	Zn-N(22)-N(21)	117.8(4)
Zn-N(22)-C(23)	130.4(4)	N(21)-N(22)-C(23)	107.4(4)
N(12)-C(13)-C(14)	109.2(5)	N(12)-C(13)-C(16)	120.5(5)
C(14)-C(13)-C(16)	130.2(6)	C(13)-C(14)-C(15)	105.9(6)
N(11)-C(15)-C(14)	108.9(5)	N(11)-C(15)-C(17)	123.2(6)
C(14)-C(15)-C(17)	127.9(6)	N(22)-C(23)-C(24)	108.7(6)
N(22)-C(23)-C(26)	121.4(5)	C(24)-C(23)-C(26)	129.9(6)
C(23)-C(24)-C(25)	106.7(6)	N(21)-C(25)-C(24)	108.4(5)
N(21)-C(25)-C(27)	122.2(6)	C(24)-C(25)-C(27)	129.4(6)
N(11)-B-N(21)	109.7(5)		

P-324-m22

S22

Table 4. Anisotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Zn	48(1)	50(1)	44(1)	0	-6(1)	0
N(11)	45(3)	59(4)	47(3)	-3(3)	-5(2)	-2(3)
N(12)	51(3)	51(3)	48(3)	2(3)	-11(2)	-2(2)
N(21)	56(3)	65(3)	47(3)	-1(3)	-6(3)	-10(3)
N(22)	51(3)	52(3)	52(3)	3(3)	-2(3)	1(2)
C(13)	58(4)	52(4)	61(4)	-3(4)	0(3)	-4(3)
C(14)	60(4)	59(5)	73(5)	14(3)	2(4)	13(4)
C(15)	48(4)	72(5)	62(4)	2(4)	-5(3)	16(4)
C(16)	85(5)	67(5)	74(5)	9(4)	-4(4)	-24(4)
C(17)	74(5)	123(7)	67(4)	8(5)	-17(4)	22(4)
C(23)	60(4)	53(4)	60(4)	4(3)	12(3)	4(3)
C(24)	69(5)	81(5)	61(4)	11(4)	15(4)	1(4)
C(25)	85(5)	74(5)	44(4)	4(4)	3(4)	-11(3)
C(26)	51(4)	91(6)	80(4)	3(4)	6(4)	5(4)
C(27)	104(6)	155(8)	53(4)	-1(6)	6(4)	-15(5)
B	54(5)	76(6)	57(4)	-14(4)	-12(4)	-10(4)

The anisotropic displacement exponent takes the form:

$$-2\pi^2(h^2a^2U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12})$$

Table 5. H-Atom coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement coefficients ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	U
H(14)	3972	-1648	3049	80
H(16A)	1146	-654	1718	80
H(16B)	2799	-1133	1649	80
H(16C)	1389	-1666	1974	80
H(17A)	4169	28	4493	80
H(17B)	4113	-1051	4476	80
H(17C)	5502	-525	4131	80
H(24)	-2827	1689	4627	80
H(26A)	-3206	1602	2725	80
H(26B)	-4260	1176	3286	80
H(26C)	-3996	2244	3256	80
H(27A)	1496	1285	5106	80
H(27B)	250	1978	5389	80
H(27C)	-69	915	5421	80
H(1)	2595	1730	3406	52(15)
H(2)	2909	1325	4256	55(15)