

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	pace01
Empirical formula	$C_{76}H_{72}B_6Cu_2N_2P_4$
Formula weight	1329.18
Temperature	256(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	$a = 9.6717(19)$ Å $\alpha = 80.216(13)^\circ$ $b = 10.576(2)$ Å $\beta = 83.631(15)^\circ$ $c = 17.653(2)$ Å $\gamma = 84.642(17)^\circ$
Volume, Z	$1763.4(5)$ Å ³ , 1
Density (calculated)	1.252 g/cm ³
Absorption coefficient	0.737 mm ⁻¹
F(000)	690
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.10 mm
Crystal color	Colorless blade
θ range for data collection	2.12 to 25.00°
Limiting indices	$-11 \leq h \leq 1$, $-12 \leq k \leq 12$, $-20 \leq l \leq 20$
Reflections collected	6801
Independent reflections	5598 ($R_{int} = 0.0446$)
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	5598 / 0 / 418
Goodness-of-fit on F^2	1.013
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0597$, $wR2 = 0.1286$
R indices (all data)	$R1 = 0.1064$, $wR2 = 0.1499$
Largest diff. peak and hole	0.653 and -0.384 eÅ ⁻³

Table 2. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	413.1(6)	-453.7(5)	-1545.3(3)	40(1)
P(1)	1986(1)	-2055(1)	-1877(1)	39(1)
P(2)	-988(1)	512(1)	-2484(1)	41(1)
N(1)	-3497(11)	4235(12)	-4519(5)	198(5)
C(1)	1634(6)	-4601(5)	-2089(3)	58(2)
C(2)	1019(7)	-5742(5)	-1905(4)	74(2)
C(3)	-23(7)	-5905(5)	-1318(4)	73(2)
C(4)	-504(6)	-4911(6)	-914(3)	65(2)
C(5)	117(5)	-3748(5)	-1106(3)	49(1)
C(6)	1194(5)	-3593(4)	-1685(3)	40(1)
C(7)	1920(6)	-2148(5)	-3457(3)	58(2)
C(8)	2408(7)	-1940(6)	-4229(4)	76(2)
C(9)	3679(8)	-1449(7)	-4448(4)	87(2)
C(10)	4458(7)	-1168(6)	-3907(4)	79(2)
C(11)	3983(6)	-1407(5)	-3136(3)	62(2)
C(12)	2699(5)	-1892(4)	-2895(3)	44(1)
C(13)	4316(6)	-3537(5)	-1256(4)	71(2)
C(14)	5544(7)	-3678(6)	-912(5)	90(2)
C(15)	6051(6)	-2656(7)	-680(4)	74(2)
C(16)	5323(6)	-1474(6)	-794(3)	64(2)
C(17)	4076(5)	-1333(5)	-1123(3)	54(1)
C(18)	3562(5)	-2353(5)	-1370(3)	45(1)
C(21)	-2853(6)	1858(5)	-1562(3)	58(2)
C(22)	-4143(7)	2428(5)	-1301(4)	69(2)
C(23)	-5287(7)	2375(6)	-1677(4)	78(2)
C(24)	-5148(7)	1789(6)	-2316(4)	81(2)
C(25)	-3873(6)	1239(5)	-2588(3)	62(2)
C(26)	-2704(5)	1265(4)	-2209(3)	43(1)
C(27)	-1257(6)	-356(5)	-3894(3)	55(1)
C(28)	-1518(6)	-1290(6)	-4320(3)	67(2)
C(29)	-1894(7)	-2457(7)	-3949(4)	75(2)
C(30)	-2043(6)	-2721(6)	-3150(4)	72(2)
C(31)	-1790(5)	-1799(5)	-2733(3)	53(1)
C(32)	-1389(5)	-605(5)	-3094(3)	43(1)
C(33)	-782(7)	2953(6)	-3429(4)	84(2)
C(34)	-43(9)	3880(7)	-3903(5)	105(3)
C(35)	1340(9)	3667(6)	-4107(4)	81(2)
C(36)	2010(7)	2513(7)	-3849(3)	71(2)
C(37)	1278(6)	1585(5)	-3369(3)	58(2)
C(38)	-122(5)	1778(5)	-3151(3)	44(1)
C(100)	-4278(9)	4637(9)	-4064(5)	105(3)
C(101)	-5183(10)	5113(8)	-3492(5)	130(3)
B(1)	568(6)	566(5)	-600(3)	37(1)
B(2)	-883(6)	-344(5)	-353(3)	39(1)
B(3)	742(6)	-998(5)	-56(3)	42(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

Cu(1)-H(1B)	2.10(4)	Cu(1)-B(1)	2.161(5)
Cu(1)-P(1)	2.2764(14)	Cu(1)-P(2)	2.3006(14)
Cu(1)-B(2)	2.341(5)	P(1)-C(6)	1.826(5)
P(1)-C(18)	1.828(5)	P(1)-C(12)	1.838(5)
P(2)-C(32)	1.820(5)	P(2)-C(26)	1.825(5)
P(2)-C(38)	1.825(5)	N(1)-C(100)	1.148(10)
C(1)-C(2)	1.369(7)	C(1)-C(6)	1.390(6)
C(2)-C(3)	1.365(8)	C(3)-C(4)	1.386(8)
C(4)-C(5)	1.392(7)	C(5)-C(6)	1.376(6)
C(7)-C(8)	1.381(8)	C(7)-C(12)	1.385(7)
C(8)-C(9)	1.369(9)	C(9)-C(10)	1.366(9)
C(10)-C(11)	1.375(8)	C(11)-C(12)	1.384(7)
C(13)-C(14)	1.377(8)	C(13)-C(18)	1.384(7)
C(14)-C(15)	1.368(8)	C(15)-C(16)	1.371(8)
C(16)-C(17)	1.380(7)	C(17)-C(18)	1.382(7)
C(21)-C(26)	1.382(7)	C(21)-C(22)	1.399(7)
C(22)-C(23)	1.362(8)	C(23)-C(24)	1.365(9)
C(24)-C(25)	1.386(8)	C(25)-C(26)	1.381(7)
C(27)-C(32)	1.386(7)	C(27)-C(28)	1.395(7)
C(28)-C(29)	1.357(8)	C(29)-C(30)	1.385(8)
C(30)-C(31)	1.372(7)	C(31)-C(32)	1.383(7)
C(33)-C(34)	1.376(9)	C(33)-C(38)	1.382(7)
C(34)-C(35)	1.354(9)	C(35)-C(36)	1.359(9)
C(36)-C(37)	1.378(7)	C(37)-C(38)	1.372(7)
C(100)-C(101)	1.390(11)	B(1)-H(1B)	1.17(4)
B(1)-B(3)#1	1.703(8)	B(1)-B(2)#1	1.717(8)
B(1)-B(2)	1.749(8)	B(1)-B(3)	1.770(7)
B(2)-H(2B)	1.07(5)	B(2)-B(1)#1	1.717(8)
B(2)-B(3)#1	1.721(7)	B(2)-B(3)	1.756(8)
B(3)-H(3B)	1.14(4)	B(3)-B(1)#1	1.703(8)
B(3)-B(2)#1	1.721(7)		
H(1B)-Cu(1)-B(1)	32.0(12)	H(1B)-Cu(1)-P(1)	117.4(12)
B(1)-Cu(1)-P(1)	124.17(15)	H(1B)-Cu(1)-P(2)	104.4(12)
B(1)-Cu(1)-P(2)	117.33(15)	P(1)-Cu(1)-P(2)	115.77(5)
H(1B)-Cu(1)-B(2)	76.1(12)	B(1)-Cu(1)-B(2)	45.5(2)
P(1)-Cu(1)-B(2)	128.28(14)	P(2)-Cu(1)-B(2)	106.80(15)
C(6)-P(1)-C(18)	104.6(2)	C(6)-P(1)-C(12)	104.7(2)
C(18)-P(1)-C(12)	102.4(2)	C(6)-P(1)-Cu(1)	110.45(16)
C(18)-P(1)-Cu(1)	116.68(16)	C(12)-P(1)-Cu(1)	116.69(15)
C(32)-P(2)-C(26)	102.7(2)	C(32)-P(2)-C(38)	104.6(2)
C(26)-P(2)-C(38)	104.4(2)	C(32)-P(2)-Cu(1)	112.36(16)
C(26)-P(2)-Cu(1)	119.86(16)	C(38)-P(2)-Cu(1)	111.42(17)
C(2)-C(1)-C(6)	120.4(5)	C(3)-C(2)-C(1)	120.2(5)
C(2)-C(3)-C(4)	120.7(5)	C(3)-C(4)-C(5)	118.8(5)
C(6)-C(5)-C(4)	120.5(5)	C(5)-C(6)-C(1)	119.2(5)
C(5)-C(6)-P(1)	117.6(4)	C(1)-C(6)-P(1)	123.2(4)
C(8)-C(7)-C(12)	121.4(6)	C(9)-C(8)-C(7)	119.4(6)
C(10)-C(9)-C(8)	120.4(6)	C(9)-C(10)-C(11)	120.0(6)
C(10)-C(11)-C(12)	121.2(6)	C(11)-C(12)-C(7)	117.6(5)
C(11)-C(12)-P(1)	121.1(4)	C(7)-C(12)-P(1)	121.1(4)
C(14)-C(13)-C(18)	120.5(5)	C(15)-C(14)-C(13)	121.0(6)
C(14)-C(15)-C(16)	119.3(6)	C(15)-C(16)-C(17)	120.0(5)
C(16)-C(17)-C(18)	121.4(5)	C(17)-C(18)-C(13)	117.8(5)

C(17)-C(18)-P(1)	118.6(4)	C(13)-C(18)-P(1)	123.4(4)
C(26)-C(21)-C(22)	121.3(5)	C(23)-C(22)-C(21)	119.8(6)
C(22)-C(23)-C(24)	119.2(6)	C(23)-C(24)-C(25)	121.6(6)
C(26)-C(25)-C(24)	120.1(6)	C(25)-C(26)-C(21)	118.0(5)
C(25)-C(26)-P(2)	124.2(4)	C(21)-C(26)-P(2)	117.7(4)
C(32)-C(27)-C(28)	120.6(5)	C(29)-C(28)-C(27)	119.9(5)
C(28)-C(29)-C(30)	120.4(5)	C(31)-C(30)-C(29)	119.5(6)
C(30)-C(31)-C(32)	121.4(5)	C(31)-C(32)-C(27)	118.1(5)
C(31)-C(32)-P(2)	117.6(4)	C(27)-C(32)-P(2)	124.2(4)
C(34)-C(33)-C(38)	120.3(6)	C(35)-C(34)-C(33)	121.2(7)
C(34)-C(35)-C(36)	119.7(6)	C(35)-C(36)-C(37)	119.4(6)
C(38)-C(37)-C(36)	122.1(6)	C(37)-C(38)-C(33)	117.3(5)
C(37)-C(38)-P(2)	118.8(4)	C(33)-C(38)-P(2)	123.8(4)
N(1)-C(100)-C(101)	177.6(10)	H(1B)-B(1)-B(3)#1	136(2)
H(1B)-B(1)-B(2)#1	131(2)	B(3)#1-B(1)-B(2)#1	61.8(3)
H(1B)-B(1)-B(2)	139(2)	B(3)#1-B(1)-B(2)	59.8(3)
B(2)#1-B(1)-B(2)	90.1(4)	H(1B)-B(1)-B(3)	133(2)
B(3)#1-B(1)-B(3)	90.3(4)	B(2)#1-B(1)-B(3)	59.1(3)
B(2)-B(1)-B(3)	59.8(3)	H(1B)-B(1)-Cu(1)	71(2)
B(3)#1-B(1)-Cu(1)	127.5(3)	B(2)#1-B(1)-Cu(1)	142.8(3)
B(2)-B(1)-Cu(1)	72.7(3)	B(3)-B(1)-Cu(1)	83.9(3)
H(2B)-B(2)-B(1)#1	135(2)	H(2B)-B(2)-B(3)#1	132(2)
B(1)#1-B(2)-B(3)#1	62.0(3)	H(2B)-B(2)-B(1)	135(2)
B(1)#1-B(2)-B(1)	89.9(4)	B(3)#1-B(2)-B(1)	58.8(3)
H(2B)-B(2)-B(3)	138(2)	B(1)#1-B(2)-B(3)	58.7(3)
B(3)#1-B(2)-B(3)	90.2(4)	B(1)-B(2)-B(3)	60.7(3)
H(2B)-B(2)-Cu(1)	81(2)	B(1)#1-B(2)-Cu(1)	137.2(4)
B(3)#1-B(2)-Cu(1)	116.6(3)	B(1)-B(2)-Cu(1)	61.8(2)
B(3)-B(2)-Cu(1)	78.9(3)	H(3B)-B(3)-B(1)#1	134(2)
H(3B)-B(3)-B(2)#1	133(2)	B(1)#1-B(3)-B(2)#1	61.5(3)
H(3B)-B(3)-B(2)	137(2)	B(1)#1-B(3)-B(2)	59.5(3)
B(2)#1-B(3)-B(2)	89.8(4)	H(3B)-B(3)-B(1)	137(2)
B(1)#1-B(3)-B(1)	89.7(4)	B(2)#1-B(3)-B(1)	58.9(3)
B(2)-B(3)-B(1)	59.5(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x, -y, -z

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 1.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	42(1)	38(1)	41(1)	-10(1)	-13(1)	2(1)
P(1)	39(1)	34(1)	45(1)	-6(1)	-5(1)	0(1)
P(2)	45(1)	42(1)	39(1)	-6(1)	-16(1)	1(1)
N(1)	168(9)	304(13)	123(7)	-80(8)	-16(6)	62(9)
C(1)	57(4)	47(3)	72(4)	-18(3)	-4(3)	1(3)
C(2)	89(5)	42(3)	97(5)	-24(3)	-10(4)	-4(3)
C(3)	80(5)	42(3)	98(5)	2(3)	-21(4)	-23(3)
C(4)	60(4)	63(4)	70(4)	6(3)	-6(3)	-24(3)
C(5)	54(3)	47(3)	48(3)	-7(2)	-10(3)	-6(3)
C(6)	40(3)	35(3)	42(3)	-3(2)	-9(2)	2(2)
C(7)	53(4)	63(4)	53(4)	-5(3)	-2(3)	3(3)
C(8)	77(5)	92(5)	54(4)	-6(3)	-7(4)	8(4)
C(9)	90(6)	101(5)	53(4)	12(4)	12(4)	10(4)
C(10)	67(4)	82(5)	76(5)	12(4)	10(4)	-8(4)
C(11)	61(4)	58(4)	63(4)	2(3)	-4(3)	-6(3)
C(12)	43(3)	37(3)	48(3)	-2(2)	-5(3)	8(2)
C(13)	61(4)	48(3)	108(5)	-13(3)	-35(4)	2(3)
C(14)	58(4)	63(4)	154(7)	-12(4)	-50(5)	16(3)
C(15)	45(4)	91(5)	86(5)	-7(4)	-29(3)	-2(4)
C(16)	46(4)	69(4)	82(4)	-14(3)	-19(3)	-15(3)
C(17)	45(3)	48(3)	71(4)	-9(3)	-14(3)	-3(3)
C(18)	38(3)	43(3)	55(3)	-4(2)	-9(3)	-1(2)
C(21)	58(4)	51(3)	62(4)	-4(3)	-18(3)	9(3)
C(22)	73(4)	58(4)	73(4)	-14(3)	-7(4)	22(3)
C(23)	53(4)	83(5)	92(5)	-6(4)	-11(4)	20(3)
C(24)	60(4)	87(5)	97(5)	-11(4)	-37(4)	7(4)
C(25)	52(4)	72(4)	68(4)	-16(3)	-31(3)	7(3)
C(26)	45(3)	42(3)	42(3)	-2(2)	-15(3)	1(2)
C(27)	59(4)	59(3)	49(3)	-11(3)	-17(3)	-5(3)
C(28)	71(4)	87(5)	53(4)	-26(3)	-19(3)	-10(4)
C(29)	78(5)	78(5)	85(5)	-43(4)	-20(4)	-10(4)
C(30)	78(4)	58(4)	88(5)	-21(3)	-19(4)	-15(3)
C(31)	58(4)	53(3)	50(3)	-3(3)	-13(3)	-10(3)
C(32)	42(3)	47(3)	42(3)	-8(2)	-16(3)	3(2)
C(33)	76(5)	65(4)	94(5)	24(4)	-11(4)	11(4)
C(34)	109(7)	66(5)	121(7)	31(4)	-11(5)	9(5)
C(35)	116(6)	68(4)	60(4)	6(3)	-8(4)	-36(4)
C(36)	67(4)	91(5)	58(4)	-8(4)	-5(3)	-28(4)
C(37)	64(4)	57(3)	54(3)	-2(3)	-16(3)	-6(3)
C(38)	51(3)	46(3)	37(3)	-7(2)	-14(3)	-7(2)
C(100)	99(7)	121(7)	91(6)	-1(5)	-25(5)	2(5)
C(101)	133(8)	117(7)	136(8)	-47(6)	40(7)	1(6)
B(1)	38(3)	33(3)	40(3)	-6(2)	-9(3)	-6(2)
B(2)	40(3)	44(3)	38(3)	-9(3)	-10(3)	-8(3)
B(3)	47(4)	42(3)	39(3)	-7(3)	-7(3)	-10(3)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2351	-4499	-2486	70
H(2A)	1313	-6409	-2182	89
H(3A)	-416	-6692	-1187	87
H(4A)	-1228	-5018	-521	78
H(5A)	-198	-3071	-842	59
H(7A)	1049	-2466	-3310	69
H(8A)	1879	-2132	-4598	91
H(9A)	4014	-1307	-4967	104
H(10A)	5309	-814	-4060	95
H(11A)	4535	-1241	-2771	75
H(13A)	3992	-4242	-1414	85
H(14A)	6036	-4480	-836	108
H(15A)	6880	-2762	-447	88
H(16A)	5668	-768	-649	77
H(17A)	3572	-536	-1179	65
H(21A)	-2081	1880	-1295	69
H(22A)	-4219	2841	-872	83
H(23A)	-6152	2734	-1501	94
H(24A)	-5928	1759	-2575	97
H(25A)	-3804	851	-3027	75
H(27A)	-992	441	-4149	66
H(28A)	-1434	-1113	-4856	81
H(29A)	-2052	-3084	-4234	90
H(30A)	-2313	-3519	-2898	86
H(31A)	-1889	-1980	-2196	64
H(33A)	-1731	3119	-3295	100
H(34A)	-500	4667	-4086	126
H(35A)	1829	4307	-4422	98
H(36A)	2955	2350	-3996	85
H(37A)	1747	803	-3187	70
H(1B)	1190(50)	1090(40)	-1160(30)	53(13)
H(2B)	-1680(50)	-610(40)	-660(30)	55(14)
H(3B)	1450(40)	-1920(40)	-90(20)	36(11)