

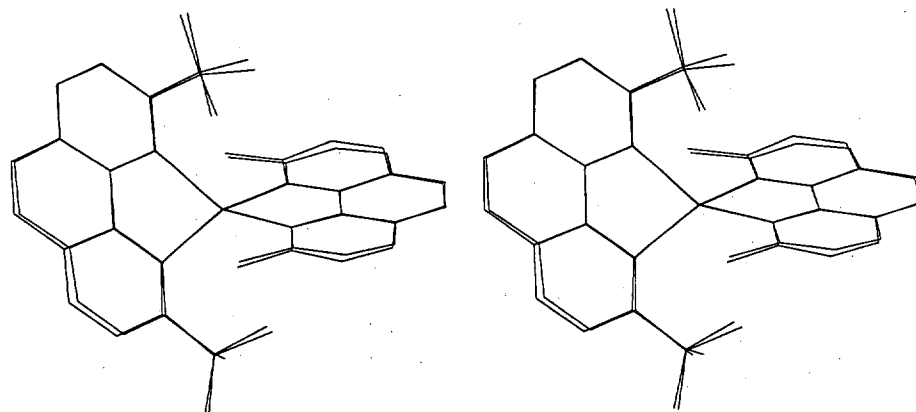


Figure S1. Stereoview of the two independent molecules of [Cu(dbp)(dmp)]⁺ overlaid; rms error for the CuN₄ core = 0.022 Å.

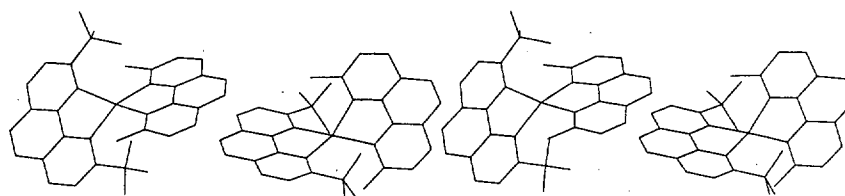


Figure S2. Stereoview of the two independent molecules of [Cu(dbp)(dmp)]⁺ showing their relative orientations in the unit cell. Closest intermolecular C-C distance = 3.4 Å.

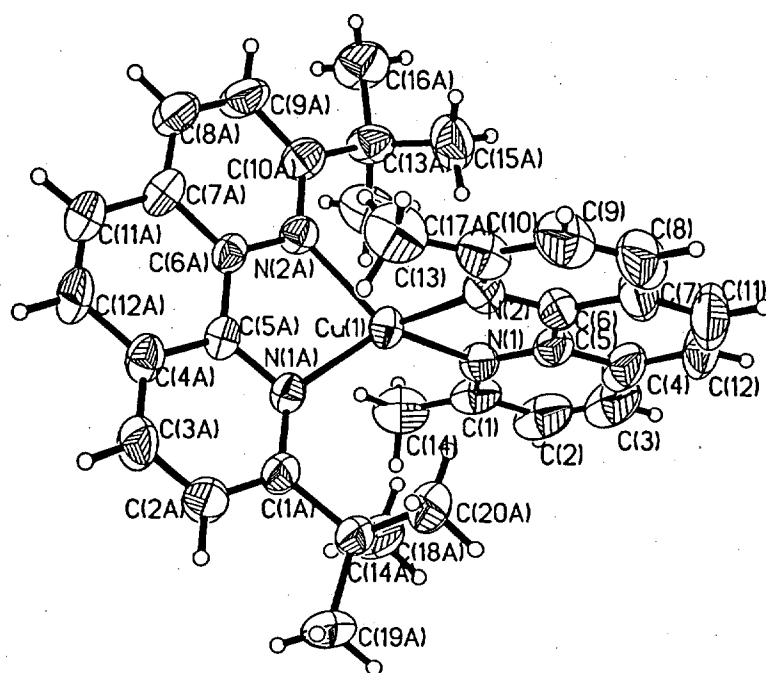


Figure S3. ORTEP view of cation 1 in the structure of $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$. Ellipsoids are drawn at the 50% probability level.

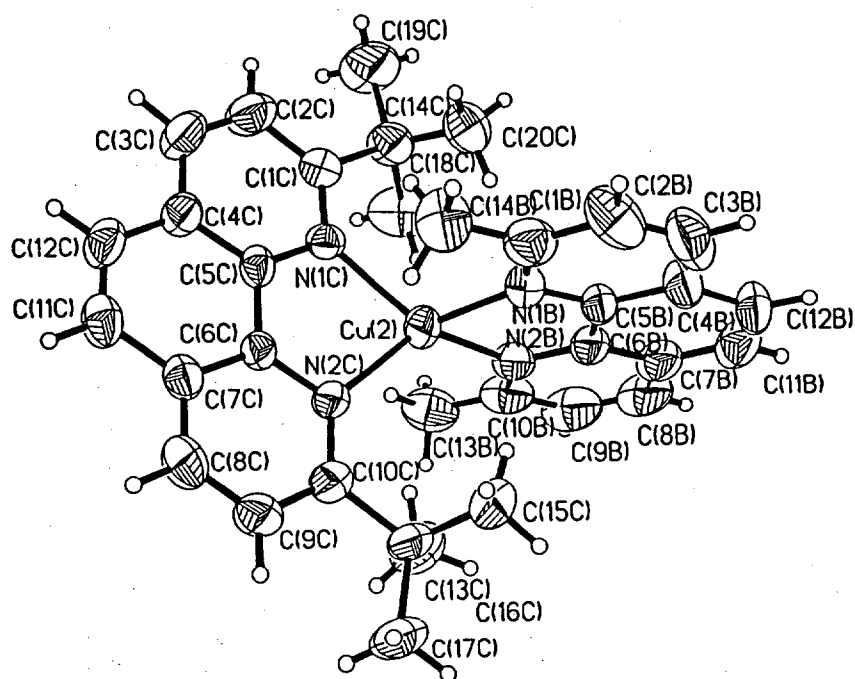


Figure S4. ORTEP view of cation 2 in the structure of $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$. Ellipsoids are drawn at the 50% probability level.

Table S1. Crystallographic Data.

Compound	[Cu(dbp)(dmp)](PF ₆)
Formula	CuC ₃₄ H ₃₆ F ₆ N ₄ P
Color, habit	orange needles
Crystal size (mm)	1.00 x 0.30 x 0.13
Crystal system	monoclinic
Space group	<i>P</i> 2 ₁
<i>a</i> (Å)	15.489(7)
<i>b</i> (Å)	11.983(7)
<i>c</i> (Å)	18.102(13)
α (°)	
β (°)	91.23(5)
γ (°)	
<i>V</i> (Å ³)	3359(4)
<i>Z</i>	4
Formula Weight	709.18
Temperature (K)	295
2 θ Range	3.42-55.00
Reflections Collected	8351
Independent Reflections	8090
Observed Reflections (<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>))	6359
Final <i>R</i> Indices (obs. data)	<i>R</i> = 6.48 %; <i>R</i> _w = 16.62 %
<i>R</i> Indices (all data)	<i>R</i> = 8.77 %; <i>R</i> _w = 19.01 %
Goodness of Fit	1.044
Data-to-Parameter Ratio	9.6:1

Table S2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$. U (eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U (eq)
Cu(1)	608(1)	354(1)	1472(1)	42(1)
N(1)	1636(4)	1272(5)	1116(3)	44(1)
N(2)	474(4)	1735(5)	2163(3)	44(1)
N(1A)	497(4)	-1192(5)	2003(3)	38(1)
N(2A)	-545(4)	-118(5)	941(3)	41(1)
C(1)	2231(5)	1012(9)	598(5)	58(2)
C(2)	2931(6)	1741(12)	457(6)	82(4)
C(3)	3003(7)	2716(12)	796(7)	93(4)
C(4)	2387(6)	3032(9)	1348(6)	74(3)
C(5)	1718(5)	2267(7)	1479(4)	50(2)
C(6)	1090(5)	2508(6)	2047(5)	51(2)
C(7)	1170(8)	3499(7)	2462(6)	76(3)
C(8)	562(9)	3644(10)	3050(7)	87(4)
C(9)	-44(8)	2873(10)	3155(6)	78(3)
C(10)	-106(6)	1917(8)	2691(4)	58(2)
C(11)	1849(11)	4267(10)	2298(9)	106(5)
C(12)	2417(9)	4057(9)	1768(9)	91(4)
C(13)	-779(7)	1057(10)	2799(5)	74(3)
C(14)	2148(6)	-72(10)	202(5)	75(3)
C(1A)	997(5)	-1737(6)	2510(4)	44(2)
C(2A)	684(6)	-2684(8)	2874(5)	60(2)
C(3A)	-124(6)	-3086(8)	2724(5)	62(2)
C(4A)	-649(5)	-2558(7)	2199(4)	48(2)
C(5A)	-310(4)	-1602(6)	1847(3)	38(1)
C(6A)	-866(4)	-1026(6)	1312(4)	40(1)
C(7A)	-1726(5)	-1412(7)	1188(4)	50(2)
C(8A)	-2241(5)	-806(9)	707(5)	60(2)
C(9A)	-1937(5)	91(9)	348(5)	66(2)
C(10A)	-1074(5)	410(8)	441(4)	50(2)
C(11A)	-2014(5)	-2411(7)	1548(5)	54(2)
C(12A)	-1507(5)	-2955(7)	2027(5)	56(2)
C(13A)	-698(5)	1338(8)	-25(4)	57(2)
C(14A)	1893(5)	-1280(7)	2710(4)	49(2)
C(15A)	-439(8)	2362(8)	447(6)	75(3)
C(16A)	-1336(7)	1763(11)	-620(6)	85(3)
C(17A)	92(8)	883(10)	-413(5)	81(3)
C(18A)	2414(5)	-1093(10)	2007(5)	67(2)
C(19A)	2394(6)	-2112(9)	3214(6)	75(3)
C(20A)	1773(6)	-196(8)	3145(5)	65(2)
Cu(2)	5729(1)	5090(1)	3515(1)	47(1)
N(1B)	5651(4)	6590(5)	2939(4)	48(1)
N(2B)	6840(4)	5835(6)	3926(3)	50(1)
N(1C)	5526(4)	3653(5)	2885(3)	40(1)
N(2C)	4593(4)	4611(5)	4038(3)	40(1)
C(1B)	5060(7)	6941(9)	2427(5)	63(2)
C(2B)	5136(8)	7994(10)	2105(6)	81(3)
C(3B)	5780(9)	8693(9)	2285(7)	87(4)
C(4B)	6409(7)	8365(8)	2812(6)	69(3)
C(5B)	6326(5)	7274(6)	3116(4)	50(2)
C(6B)	6960(5)	6868(7)	3652(4)	51(2)

C(7B)	7689(6)	7540(9)	3841(5)	68(3)
C(8B)	8290(7)	7081(13)	4345(6)	85(4)
C(9B)	8158(6)	6058(13)	4618(6)	84(4)
C(10B)	7438(5)	5436(11)	4418(4)	66(2)
C(11B)	7743(8)	8627(10)	3532(7)	82(3)
C(12B)	7149(8)	9043(8)	3050(7)	80(3)
C(13B)	7320(7)	4298(12)	4715(6)	79(3)
C(14B)	4352(7)	6154(10)	2244(6)	76(3)
C(1C)	5945(5)	3174(7)	2330(4)	49(2)
C(2C)	5566(7)	2317(9)	1897(5)	65(2)
C(3C)	4768(6)	1929(8)	2044(5)	64(2)
C(4C)	4320(5)	2364(7)	2633(4)	51(2)
C(5C)	4711(4)	3262(6)	3040(4)	39(1)
C(6C)	4234(4)	3753(5)	3644(3)	37(1)
C(7C)	3405(5)	3324(6)	3788(4)	46(2)
C(8C)	2952(5)	3815(8)	4364(5)	62(2)
C(9C)	3309(5)	4651(8)	4761(5)	60(2)
C(10C)	4149(5)	5033(7)	4605(4)	50(2)
C(11C)	3038(5)	2391(7)	3365(5)	54(2)
C(12C)	3479(5)	1957(7)	2819(5)	57(2)
C(13C)	4547(6)	5977(8)	5077(5)	60(2)
C(14C)	6868(5)	3568(9)	2168(5)	60(2)
C(15C)	4710(9)	7010(9)	4613(6)	88(4)
C(16C)	5400(7)	5538(11)	5414(6)	87(3)
C(17C)	3950(8)	6331(11)	5711(6)	93(4)
C(18C)	7433(6)	3484(14)	2882(6)	95(4)
C(19C)	7269(8)	2853(13)	1564(7)	101(5)
C(20C)	6820(7)	4782(10)	1884(6)	77(3)
P(1)	4842(2)	4881(3)	-74(2)	84(1)
F(1)	5538(7)	4796(12)	-685(7)	176(6)
F(2)	4432(6)	3722(8)	-340(5)	113(3)
F(3)	4250(8)	5437(14)	-671(7)	198(6)
F(4)	5205(9)	6015(12)	178(10)	232(9)
F(5)	5367(14)	4309(18)	459(11)	308(12)
F(6)	4043(7)	5070(11)	443(5)	154(4)
P(1A)	840(2)	5901(3)	4916(2)	83(1)
F(1A)	1027(7)	4621(10)	5024(6)	150(4)
F(2A)	123(5)	5883(12)	5500(4)	146(5)
F(3A)	139(5)	5605(10)	4296(4)	134(4)
F(4A)	1546(5)	5905(9)	4298(4)	129(4)
F(5A)	1540(5)	6137(13)	5516(4)	158(5)
F(6A)	657(9)	7137(10)	4744(7)	177(5)

Table S3. Bond lengths (Å) and angles (°) for [Cu(dbp)(dmp)](PF₆).

Cu(1)-N(1)	2.051(6)
Cu(1)-N(2)	2.087(6)
Cu(1)-N(2A)	2.088(6)
Cu(1)-N(1A)	2.094(6)
N(1)-C(1)	1.365(10)
N(1)-C(5)	1.366(10)
N(2)-C(10)	1.344(10)
N(2)-C(6)	1.350(10)
N(1A)-C(1A)	1.357(9)

N(1A)-C(5A)	1.367(8)
N(2A)-C(10A)	1.363(9)
N(2A)-C(6A)	1.377(9)
C(1)-C(2)	1.420(13)
C(1)-C(14)	1.49(2)
C(2)-C(3)	1.32(2)
C(3)-C(4)	1.45(2)
C(4)-C(5)	1.408(10)
C(4)-C(12)	1.44(2)
C(5)-C(6)	1.459(12)
C(6)-C(7)	1.410(11)
C(7)-C(11)	1.43(2)
C(7)-C(8)	1.45(2)
C(8)-C(9)	1.33(2)
C(9)-C(10)	1.423(13)
C(10)-C(13)	1.481(14)
C(11)-C(12)	1.34(2)
C(1A)-C(2A)	1.402(11)
C(1A)-C(14A)	1.529(10)
C(2A)-C(3A)	1.362(12)
C(3A)-C(4A)	1.391(11)
C(4A)-C(5A)	1.418(9)
C(4A)-C(12A)	1.439(10)
C(5A)-C(6A)	1.457(9)
C(6A)-C(7A)	1.424(9)
C(7A)-C(8A)	1.376(11)
C(7A)-C(11A)	1.437(11)
C(8A)-C(9A)	1.347(13)
C(9A)-C(10A)	1.397(10)
C(10A)-C(13A)	1.520(12)
C(11A)-C(12A)	1.330(12)
C(13A)-C(17A)	1.525(13)
C(13A)-C(16A)	1.533(11)
C(13A)-C(15A)	1.544(14)
C(14A)-C(20A)	1.533(12)
C(14A)-C(18A)	1.538(12)
C(14A)-C(19A)	1.548(11)
Cu(2)-N(2B)	2.064(6)
Cu(2)-N(1B)	2.080(7)
Cu(2)-N(1C)	2.085(6)
Cu(2)-N(2C)	2.096(6)
N(1B)-C(1B)	1.356(11)
N(1B)-C(5B)	1.361(10)
N(2B)-C(6B)	1.347(11)
N(2B)-C(10B)	1.357(10)
N(1C)-C(1C)	1.338(9)
N(1C)-C(5C)	1.381(8)
N(2C)-C(10C)	1.347(9)
N(2C)-C(6C)	1.363(8)
C(1B)-C(2B)	1.396(14)
C(1B)-C(14B)	1.477(14)
C(2B)-C(3B)	1.34(2)
C(3B)-C(4B)	1.41(2)
C(4B)-C(5B)	1.425(12)

C(4B)-C(12B)	1.462(14)
C(5B)-C(6B)	1.450(12)
C(6B)-C(7B)	1.423(10)
C(7B)-C(8B)	1.40(2)
C(7B)-C(11B)	1.42(2)
C(8B)-C(9B)	1.34(2)
C(9B)-C(10B)	1.384(14)
C(10B)-C(13B)	1.48(2)
C(11B)-C(12B)	1.35(2)
C(1C)-C(2C)	1.411(12)
C(1C)-C(14C)	1.539(11)
C(2C)-C(3C)	1.353(13)
C(3C)-C(4C)	1.388(12)
C(4C)-C(5C)	1.431(10)
C(4C)-C(12C)	1.437(11)
C(5C)-C(6C)	1.456(9)
C(6C)-C(7C)	1.413(9)
C(7C)-C(8C)	1.398(11)
C(7C)-C(11C)	1.463(11)
C(8C)-C(9C)	1.346(12)
C(9C)-C(10C)	1.413(10)
C(10C)-C(13C)	1.538(11)
C(11C)-C(12C)	1.321(12)
C(13C)-C(15C)	1.52(2)
C(13C)-C(16C)	1.54(2)
C(13C)-C(17C)	1.550(12)
C(14C)-C(19C)	1.531(13)
C(14C)-C(20C)	1.54(2)
C(14C)-C(18C)	1.550(14)
P(1)-F(5)	1.424(12)
P(1)-F(4)	1.536(11)
P(1)-F(3)	1.553(11)
P(1)-F(1)	1.565(10)
P(1)-F(6)	1.584(9)
P(1)-F(2)	1.597(9)
P(1A)-F(6A)	1.539(12)
P(1A)-F(5A)	1.544(9)
P(1A)-F(2A)	1.549(7)
P(1A)-F(1A)	1.571(11)
P(1A)-F(4A)	1.581(8)
P(1A)-F(3A)	1.585(8)
N(1)-Cu(1)-N(2)	81.4(3)
N(1)-Cu(1)-N(2A)	131.5(2)
N(2)-Cu(1)-N(2A)	113.3(2)
N(1)-Cu(1)-N(1A)	133.6(2)
N(2)-Cu(1)-N(1A)	114.6(2)
N(2A)-Cu(1)-N(1A)	83.9(2)
C(1)-N(1)-C(5)	118.2(7)
C(1)-N(1)-Cu(1)	129.4(6)
C(5)-N(1)-Cu(1)	112.4(5)
C(10)-N(2)-C(6)	119.0(7)
C(10)-N(2)-Cu(1)	129.2(6)
C(6)-N(2)-Cu(1)	111.8(5)
C(1A)-N(1A)-C(5A)	118.1(6)

C(1A)-N(1A)-Cu(1)	133.3(5)
C(5A)-N(1A)-Cu(1)	107.9(4)
C(10A)-N(2A)-C(6A)	118.2(6)
C(10A)-N(2A)-Cu(1)	132.5(5)
C(6A)-N(2A)-Cu(1)	107.6(4)
N(1)-C(1)-C(2)	120.9(10)
N(1)-C(1)-C(14)	118.5(8)
C(2)-C(1)-C(14)	120.5(9)
C(3)-C(2)-C(1)	121.0(11)
C(2)-C(3)-C(4)	120.1(9)
C(5)-C(4)-C(12)	118.8(11)
C(5)-C(4)-C(3)	116.4(10)
C(12)-C(4)-C(3)	124.8(10)
N(1)-C(5)-C(4)	123.3(9)
N(1)-C(5)-C(6)	117.1(6)
C(4)-C(5)-C(6)	119.6(9)
N(2)-C(6)-C(7)	123.4(9)
N(2)-C(6)-C(5)	117.2(7)
C(7)-C(6)-C(5)	119.4(9)
C(6)-C(7)-C(11)	119.1(12)
C(6)-C(7)-C(8)	116.3(10)
C(11)-C(7)-C(8)	124.6(11)
C(9)-C(8)-C(7)	119.6(9)
C(8)-C(9)-C(10)	120.8(10)
N(2)-C(10)-C(9)	120.9(10)
N(2)-C(10)-C(13)	117.6(8)
C(9)-C(10)-C(13)	121.4(9)
C(12)-C(11)-C(7)	121.6(11)
C(11)-C(12)-C(4)	121.5(10)
N(1A)-C(1A)-C(2A)	120.7(7)
N(1A)-C(1A)-C(14A)	119.3(6)
C(2A)-C(1A)-C(14A)	120.0(7)
C(3A)-C(2A)-C(1A)	121.2(8)
C(2A)-C(3A)-C(4A)	119.8(7)
C(3A)-C(4A)-C(5A)	117.2(7)
C(3A)-C(4A)-C(12A)	121.4(7)
C(5A)-C(4A)-C(12A)	121.3(7)
N(1A)-C(5A)-C(4A)	123.0(6)
N(1A)-C(5A)-C(6A)	119.4(6)
C(4A)-C(5A)-C(6A)	117.5(6)
N(2A)-C(6A)-C(7A)	121.8(7)
N(2A)-C(6A)-C(5A)	119.0(6)
C(7A)-C(6A)-C(5A)	119.3(6)
C(8A)-C(7A)-C(6A)	117.1(8)
C(8A)-C(7A)-C(11A)	123.0(7)
C(6A)-C(7A)-C(11A)	119.9(7)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	121.5(7)
C(8A)-C(9A)-C(10A)	120.2(8)
N(2A)-C(10A)-C(9A)	120.9(8)
N(2A)-C(10A)-C(13A)	118.4(6)
C(9A)-C(10A)-C(13A)	120.7(7)
C(12A)-C(11A)-C(7A)	121.3(7)
C(11A)-C(12A)-C(4A)	120.6(7)
C(10A)-C(13A)-C(17A)	108.3(8)

C(10A)-C(13A)-C(16A)	112.6(7)
C(17A)-C(13A)-C(16A)	107.9(8)
C(10A)-C(13A)-C(15A)	111.9(7)
C(17A)-C(13A)-C(15A)	109.8(9)
C(16A)-C(13A)-C(15A)	106.3(9)
C(1A)-C(14A)-C(20A)	107.8(7)
C(1A)-C(14A)-C(18A)	110.3(7)
C(20A)-C(14A)-C(18A)	112.0(7)
C(1A)-C(14A)-C(19A)	110.4(7)
C(20A)-C(14A)-C(19A)	107.9(7)
C(18A)-C(14A)-C(19A)	108.4(8)
N(2B)-Cu(2)-N(1B)	81.2(3)
N(2B)-Cu(2)-N(1C)	132.1(3)
N(1B)-Cu(2)-N(1C)	115.7(2)
N(2B)-Cu(2)-N(2C)	131.0(2)
N(1B)-Cu(2)-N(2C)	115.0(3)
N(1C)-Cu(2)-N(2C)	84.4(2)
C(1B)-N(1B)-C(5B)	118.6(8)
C(1B)-N(1B)-Cu(2)	129.9(6)
C(5B)-N(1B)-Cu(2)	111.5(6)
C(6B)-N(2B)-C(10B)	117.9(8)
C(6B)-N(2B)-Cu(2)	112.6(5)
C(10B)-N(2B)-Cu(2)	129.4(7)
C(1C)-N(1C)-C(5C)	117.9(6)
C(1C)-N(1C)-Cu(2)	134.0(5)
C(5C)-N(1C)-Cu(2)	107.3(5)
C(10C)-N(2C)-C(6C)	118.2(6)
C(10C)-N(2C)-Cu(2)	133.6(5)
C(6C)-N(2C)-Cu(2)	107.9(4)
N(1B)-C(1B)-C(2B)	120.3(10)
N(1B)-C(1B)-C(14B)	116.2(9)
C(2B)-C(1B)-C(14B)	123.5(10)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	122.2(11)
C(2B)-C(3B)-C(4B)	119.6(10)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	116.8(9)
C(3B)-C(4B)-C(12B)	124.9(10)
C(5B)-C(4B)-C(12B)	118.3(10)
N(1B)-C(5B)-C(4B)	122.5(9)
N(1B)-C(5B)-C(6B)	117.5(7)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	120.0(8)
N(2B)-C(6B)-C(7B)	123.1(9)
N(2B)-C(6B)-C(5B)	117.3(7)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	119.6(8)
C(8B)-C(7B)-C(11B)	124.9(10)
C(8B)-C(7B)-C(6B)	116.6(10)
C(11B)-C(7B)-C(6B)	118.5(10)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	119.6(9)
C(8B)-C(9B)-C(10B)	121.7(12)
N(2B)-C(10B)-C(9B)	121.1(12)
N(2B)-C(10B)-C(13B)	118.4(9)
C(9B)-C(10B)-C(13B)	120.5(10)
C(12B)-C(11B)-C(7B)	123.3(9)
C(11B)-C(12B)-C(4B)	120.3(9)
N(1C)-C(1C)-C(2C)	121.7(8)

N(1C)-C(1C)-C(14C)	118.6(7)
C(2C)-C(1C)-C(14C)	119.6(7)
C(3C)-C(2C)-C(1C)	120.8(8)
C(2C)-C(3C)-C(4C)	119.8(8)
C(3C)-C(4C)-C(5C)	117.7(7)
C(3C)-C(4C)-C(12C)	121.5(8)
C(5C)-C(4C)-C(12C)	120.8(7)
N(1C)-C(5C)-C(4C)	122.0(7)
N(1C)-C(5C)-C(6C)	119.7(6)
C(4C)-C(5C)-C(6C)	118.3(6)
N(2C)-C(6C)-C(7C)	122.7(6)
N(2C)-C(6C)-C(5C)	119.3(6)
C(7C)-C(6C)-C(5C)	118.0(6)
C(8C)-C(7C)-C(6C)	117.2(7)
C(8C)-C(7C)-C(11C)	121.1(7)
C(6C)-C(7C)-C(11C)	121.7(7)
C(9C)-C(8C)-C(7C)	120.3(7)
C(8C)-C(9C)-C(10C)	120.3(7)
N(2C)-C(10C)-C(9C)	121.2(7)
N(2C)-C(10C)-C(13C)	119.6(6)
C(9C)-C(10C)-C(13C)	119.2(7)
C(12C)-C(11C)-C(7C)	119.5(7)
C(11C)-C(12C)-C(4C)	121.8(7)
C(15C)-C(13C)-C(16C)	110.3(9)
C(15C)-C(13C)-C(10C)	111.3(8)
C(16C)-C(13C)-C(10C)	107.5(8)
C(15C)-C(13C)-C(17C)	107.1(9)
C(16C)-C(13C)-C(17C)	108.8(9)
C(10C)-C(13C)-C(17C)	111.9(7)
C(19C)-C(14C)-C(1C)	111.0(8)
C(19C)-C(14C)-C(20C)	107.9(9)
C(1C)-C(14C)-C(20C)	108.3(8)
C(19C)-C(14C)-C(18C)	109.2(9)
C(1C)-C(14C)-C(18C)	109.4(8)
C(20C)-C(14C)-C(18C)	111.1(10)
F(5)-P(1)-F(4)	91.4(10)
F(5)-P(1)-F(3)	176.6(11)
F(4)-P(1)-F(3)	91.9(10)
F(5)-P(1)-F(1)	93.1(11)
F(4)-P(1)-F(1)	90.8(7)
F(3)-P(1)-F(1)	86.6(7)
F(5)-P(1)-F(6)	96.4(12)
F(4)-P(1)-F(6)	89.0(6)
F(3)-P(1)-F(6)	83.8(7)
F(1)-P(1)-F(6)	170.5(8)
F(5)-P(1)-F(2)	90.2(9)
F(4)-P(1)-F(2)	177.9(8)
F(3)-P(1)-F(2)	86.4(7)
F(1)-P(1)-F(2)	90.4(6)
F(6)-P(1)-F(2)	89.5(5)
F(6A)-P(1A)-F(5A)	95.1(8)
F(6A)-P(1A)-F(2A)	91.1(7)
F(5A)-P(1A)-F(2A)	91.5(4)
F(6A)-P(1A)-F(1A)	175.5(7)

F(5A)-P(1A)-F(1A)	88.1(7)
F(2A)-P(1A)-F(1A)	92.0(7)
F(6A)-P(1A)-F(4A)	88.9(6)
F(5A)-P(1A)-F(4A)	90.7(5)
F(2A)-P(1A)-F(4A)	177.8(5)
F(1A)-P(1A)-F(4A)	87.9(6)
F(6A)-P(1A)-F(3A)	87.2(7)
F(5A)-P(1A)-F(3A)	177.5(7)
F(2A)-P(1A)-F(3A)	89.4(4)
F(1A)-P(1A)-F(3A)	89.5(7)
F(4A)-P(1A)-F(3A)	88.5(5)

Table S4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [(\text{ha}^*)^2 U_{11} + \dots + 2\text{hka}^* \text{b}^* U_{12}]$.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cu(1)	41(1)	41(1)	43(1)	-1(1)	4(1)	-8(1)
N(1)	40(3)	46(3)	47(3)	10(3)	4(2)	-5(2)
N(2)	52(3)	42(3)	39(3)	-1(2)	-2(2)	3(3)
N(1A)	40(3)	39(3)	34(3)	-2(2)	-1(2)	-7(2)
N(2A)	42(3)	46(3)	34(2)	4(2)	-5(2)	-3(2)
C(1)	38(3)	81(6)	54(4)	24(4)	9(3)	3(4)
C(2)	45(5)	121(10)	80(7)	38(7)	12(4)	-14(6)
C(3)	57(6)	113(10)	108(9)	55(8)	-6(6)	-34(6)
C(4)	63(5)	70(6)	88(7)	32(5)	-19(5)	-30(5)
C(5)	45(4)	49(4)	55(4)	12(3)	-8(3)	-8(3)
C(6)	56(4)	40(3)	56(4)	0(3)	-11(3)	0(3)
C(7)	100(8)	39(4)	87(7)	-6(4)	-40(6)	1(4)
C(8)	119(10)	62(6)	79(7)	-33(6)	-27(7)	17(6)
C(9)	96(8)	77(7)	60(5)	-21(5)	-3(5)	22(6)
C(10)	72(5)	63(5)	40(4)	-8(3)	7(3)	15(4)
C(11)	145(13)	58(6)	113(11)	-2(7)	-56(10)	-30(8)
C(12)	99(9)	58(6)	115(10)	18(6)	-35(8)	-41(6)
C(13)	78(6)	87(7)	57(5)	-6(5)	28(4)	12(5)
C(14)	65(5)	98(8)	63(5)	-2(5)	22(4)	16(5)
C(1A)	44(4)	44(3)	43(3)	-1(3)	-9(3)	-6(3)
C(2A)	65(5)	60(5)	55(5)	19(4)	-17(4)	-12(4)
C(3A)	65(5)	55(4)	66(5)	21(4)	-4(4)	-22(4)
C(4A)	52(4)	51(4)	40(3)	6(3)	0(3)	-16(3)
C(5A)	40(3)	42(3)	31(3)	-3(2)	4(2)	-9(3)
C(6A)	37(3)	41(3)	42(3)	-11(3)	-1(2)	-6(2)
C(7A)	40(3)	65(5)	46(4)	-5(3)	0(3)	-12(3)
C(8A)	41(4)	74(6)	66(5)	5(4)	-9(3)	-7(4)
C(9A)	43(4)	82(6)	71(5)	17(5)	-18(3)	-2(4)
C(10A)	49(3)	60(4)	42(3)	1(4)	-5(3)	-2(4)
C(11A)	45(4)	60(5)	57(4)	-2(4)	4(3)	-15(3)
C(12A)	53(4)	57(4)	60(4)	5(4)	7(3)	-26(4)
C(13A)	53(4)	68(5)	49(4)	18(4)	-9(3)	5(4)
C(14A)	47(4)	46(4)	54(4)	9(3)	-15(3)	-8(3)
C(15A)	93(7)	52(5)	80(7)	13(5)	-3(6)	-12(5)
C(16A)	84(7)	98(8)	72(6)	40(6)	-30(5)	-4(6)
C(17A)	101(8)	92(7)	50(5)	23(5)	16(5)	18(6)
C(18A)	37(4)	92(7)	70(6)	13(5)	4(4)	-3(4)

C(19A)	59(5)	76(6)	88(7)	21(5)	-33(5)	3(5)
C(20A)	68(5)	61(5)	66(5)	-10(4)	-18(4)	-10(4)
Cu(2)	43(1)	48(1)	49(1)	-2(1)	-3(1)	-12(1)
N(1B)	52(3)	42(3)	49(3)	0(3)	1(3)	-6(3)
N(2B)	42(3)	63(4)	43(3)	-6(3)	3(2)	-10(3)
N(1C)	40(3)	43(3)	35(3)	0(2)	0(2)	-1(2)
N(2C)	37(3)	42(3)	39(3)	-5(2)	0(2)	-8(2)
C(1B)	71(6)	61(5)	59(5)	0(4)	4(4)	6(4)
C(2B)	79(7)	82(7)	81(7)	34(6)	6(6)	15(6)
C(3B)	109(9)	54(5)	100(9)	24(6)	36(7)	5(6)
C(4B)	89(7)	49(5)	72(6)	-2(4)	32(5)	-17(5)
C(5B)	60(4)	39(3)	53(4)	-6(3)	20(3)	-12(3)
C(6B)	50(4)	55(4)	47(4)	-11(3)	7(3)	-18(3)
C(7B)	62(5)	82(6)	60(5)	-24(5)	12(4)	-32(5)
C(8B)	54(5)	128(11)	73(6)	-37(7)	-2(4)	-39(6)
C(9B)	48(5)	132(11)	71(6)	-29(7)	-3(4)	-9(6)
C(10B)	44(4)	102(7)	51(4)	-9(5)	-3(3)	0(5)
C(11B)	78(7)	78(7)	90(8)	-31(6)	26(6)	-35(6)
C(12B)	106(9)	47(5)	89(7)	-5(5)	36(7)	-29(5)
C(13B)	79(7)	106(9)	52(5)	7(6)	-8(5)	10(6)
C(14B)	64(5)	82(7)	81(7)	15(6)	-24(5)	-2(5)
C(1C)	52(4)	51(4)	43(3)	0(3)	4(3)	-2(3)
C(2C)	72(6)	69(6)	55(5)	-19(4)	8(4)	0(5)
C(3C)	68(5)	59(5)	65(5)	-24(4)	-2(4)	-8(4)
C(4C)	58(4)	48(4)	47(4)	-2(3)	-5(3)	-8(3)
C(5C)	38(3)	39(3)	41(3)	6(3)	-7(2)	-7(2)
C(6C)	42(3)	34(3)	35(3)	3(2)	-2(2)	-5(2)
C(7C)	43(3)	48(4)	48(4)	5(3)	0(3)	-7(3)
C(8C)	40(4)	73(6)	74(6)	-2(5)	15(4)	-13(4)
C(9C)	50(4)	73(5)	57(4)	-16(4)	21(3)	-10(4)
C(10C)	52(4)	53(4)	44(3)	-8(3)	2(3)	-8(3)
C(11C)	41(4)	57(4)	64(5)	8(4)	-8(3)	-12(3)
C(12C)	54(4)	55(4)	61(5)	-4(4)	-13(4)	-16(4)
C(13C)	67(5)	64(5)	51(4)	-24(4)	18(4)	-14(4)
C(14C)	47(4)	75(6)	59(5)	-11(4)	16(3)	-4(4)
C(15C)	122(10)	60(6)	82(7)	-25(5)	36(7)	-25(6)
C(16C)	91(7)	99(9)	68(6)	-20(6)	-20(5)	-17(7)
C(17C)	98(8)	104(9)	78(7)	-53(7)	34(6)	-30(7)
C(18C)	45(5)	161(13)	78(7)	-9(8)	-9(4)	28(7)
C(19C)	77(7)	129(12)	99(9)	-42(9)	42(6)	-10(7)
C(20C)	65(5)	90(8)	76(6)	-2(5)	22(5)	-22(5)
P(1)	71(2)	97(2)	85(2)	11(2)	0(1)	-31(2)
F(1)	142(8)	217(14)	173(10)	-43(10)	70(8)	-77(9)
F(2)	102(6)	122(7)	115(6)	7(5)	12(5)	-33(5)
F(3)	190(11)	229(15)	176(10)	106(12)	-6(9)	16(12)
F(4)	170(11)	193(13)	335(20)	-128(14)	112(12)	-125(10)
F(5)	343(21)	278(20)	293(20)	21(16)	-259(19)	50(17)
F(6)	164(8)	170(10)	130(7)	-46(7)	64(6)	-84(8)
P(1A)	80(2)	121(3)	49(1)	13(2)	2(1)	32(2)
F(1A)	125(7)	159(9)	166(9)	88(8)	18(7)	39(7)
F(2A)	75(4)	304(16)	61(3)	-34(6)	10(3)	-9(7)
F(3A)	120(6)	215(12)	67(4)	-16(6)	-21(4)	65(7)
F(4A)	127(6)	189(10)	74(4)	50(5)	34(4)	65(6)
F(5A)	92(5)	308(17)	74(5)	-9(7)	2(4)	-11(8)

F(6A) 237(14) 114(8) 181(11) -8(8) 25(10) 63(9)

Table S5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$.

	x	y	z	U (eq)
H(2A)	3346(6)	1530(12)	120(6)	98
H(3A)	3450(7)	3199(12)	680(7)	111
H(8A)	594(9)	4270(10)	3353(7)	104
H(9A)	-431(8)	2962(10)	3537(6)	93
H(11A)	1897(11)	4927(10)	2566(9)	128
H(12A)	2841(9)	4582(9)	1668(9)	110
H(13A)	-1183(29)	1317(29)	3155(33)	110
H(13B)	-513(8)	380(23)	2973(41)	110
H(13C)	-1077(35)	918(48)	2337(11)	110
H(14A)	2657(25)	-511(31)	293(38)	112
H(14B)	2081(55)	63(11)	-319(7)	112
H(14C)	1652(33)	-466(33)	375(34)	112
H(2AA)	1034(6)	-3043(8)	3223(5)	72
H(3AA)	-323(6)	-3712(8)	2973(5)	75
H(8AA)	-2813(5)	-1021(9)	627(5)	72
H(9AA)	-2303(5)	500(9)	36(5)	79
H(11B)	-2566(5)	-2681(7)	1443(5)	65
H(12B)	-1709(5)	-3599(7)	2254(5)	68
H(15A)	-178(51)	2914(31)	139(11)	113
H(15B)	-34(43)	2138(16)	828(30)	113
H(15C)	-943(11)	2671(44)	669(38)	113
H(16A)	-1869(23)	1965(77)	-394(9)	128
H(16B)	-1441(49)	1186(31)	-978(30)	128
H(16C)	-1097(29)	2405(51)	-859(38)	128
H(17A)	-90(9)	371(56)	-793(34)	121
H(17B)	459(30)	502(66)	-61(11)	121
H(17C)	405(31)	1488(12)	-629(41)	121
H(18A)	2439(44)	-1777(20)	1732(23)	100
H(18B)	2988(17)	-858(66)	2141(6)	100
H(18C)	2138(30)	-529(49)	1708(23)	100
H(19A)	2969(18)	-1841(36)	3304(39)	112
H(19B)	2418(47)	-2827(21)	2975(21)	112
H(19C)	2104(31)	-2185(54)	3675(19)	112
H(20A)	1503(42)	354(20)	2832(12)	98
H(20B)	2326(7)	74(33)	3315(34)	98
H(20C)	1416(38)	-337(15)	3562(22)	98
H(2BA)	4724(8)	8217(10)	1753(6)	97
H(3BA)	5812(9)	9391(9)	2062(7)	105
H(8BA)	8778(7)	7484(13)	4489(6)	102
H(9BA)	8560(6)	5758(13)	4951(6)	101
H(11C)	8210(8)	9074(10)	3669(7)	98
H(12C)	7211(8)	9764(8)	2868(7)	96
H(13D)	7279(56)	4332(14)	5243(7)	119
H(13E)	7804(28)	3842(22)	4586(41)	119
H(13F)	6799(30)	3980(29)	4508(37)	119
H(14D)	4589(8)	5485(31)	2038(44)	114
H(14E)	3962(31)	6492(29)	1891(37)	114
H(14F)	4047(35)	5974(56)	2684(11)	114
H(2CA)	5869(7)	2016(9)	1506(5)	78

H(3CA)	4521(6)	1372(8)	1750(5)	77
H(8CA)	2401(5)	3563(8)	4472(5)	75
H(9CA)	3003(5)	4978(8)	5140(5)	72
H(11D)	2499(5)	2106(7)	3480(5)	65
H(12D)	3239(5)	1372(7)	2546(5)	68
H(15D)	4190(19)	7211(49)	4348(43)	131
H(15E)	5158(45)	6857(28)	4269(38)	131
H(15F)	4886(63)	7615(25)	4931(8)	131
H(16D)	5710(29)	5136(67)	5045(16)	130
H(16E)	5280(8)	5048(61)	5819(34)	130
H(16F)	5744(26)	6154(12)	5589(46)	130
H(17D)	3839(54)	5699(24)	6021(33)	139
H(17E)	3414(28)	6607(80)	5506(6)	139
H(17F)	4225(31)	6908(64)	5999(36)	139
H(18D)	7455(55)	2721(20)	3045(32)	142
H(18E)	7188(39)	3938(71)	3261(19)	142
H(18F)	8007(20)	3739(83)	2784(17)	142
H(19D)	7842(28)	3118(60)	1470(44)	151
H(19E)	6922(40)	2904(72)	1120(19)	151
H(19F)	7297(64)	2090(20)	1724(25)	151
H(20D)	6710(51)	5274(12)	2290(9)	115
H(20E)	6362(34)	4847(18)	1521(32)	115
H(20F)	7359(20)	4979(24)	1666(40)	115

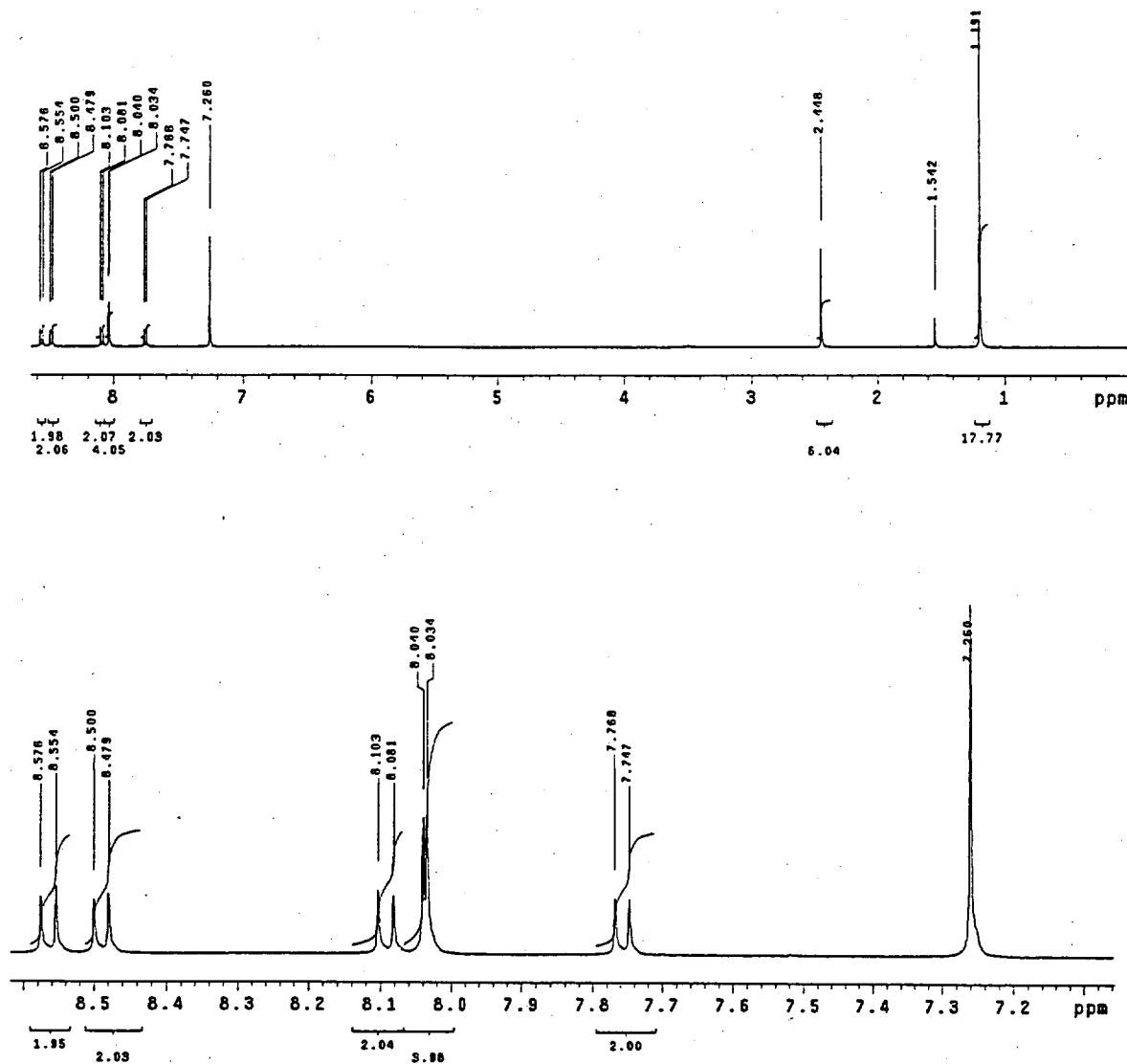


Figure S5. ^1H NMR (CDCl_3 , 400 MHz) spectrum of $[\text{Cu}(\text{dbp})(\text{dmp})](\text{PF}_6)$. δ 1.191 (s, 18H), 2.448 (s, 6H), 7.758 (d, 2H, $J = 8.4$ Hz), 8.034 (s, 2H), 8.040 (s, 2H), 8.092 (d, 2H, $J = 8.8$ Hz), 8.490 (d, 2H, $J = 8.4$ Hz), 8.565 (d, 2H, $J = 8.8$ Hz)

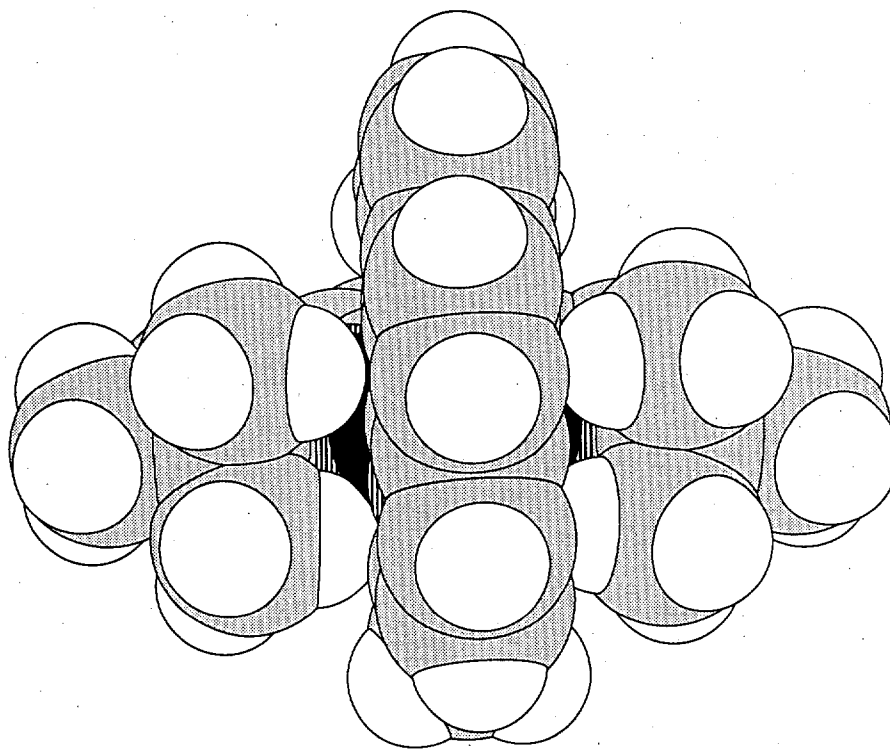


Figure S6. Space-filling view of [Cu(dbp)(dmp)]⁺ showing the interactions between the *t*-butyl groups on dbp and the dmp ligand.