Angewandte Chemie
Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Supporting Information

© Wiley-VCH 2006

69451 Weinheim, Germany

Cationic Terminal Borylene Complexes: Inter-conversion of Amino- and Alkoxy-borylenes *via* an Unprecedented Meerwein-Pondorf Hydride Transfer

Deborah L. Kays (née Coombs), Joanna K. Day, Simon Aldridge,* Ross W. Harrington and William Clegg

Corresponding author: Simon Aldridge, Centre for Fundamental and Applied Main Group Chemistry, School of Chemistry, Cardiff University, Main Building, Park Place, Cardiff, CF10 3AT, UK. AldridgeS@cardiff.ac.uk Tel: +44 (0)2920 875495. Fax: +44 (0)2920 874030.

Crystallographic data for **5** 2

Crystallographic data for 5

Table 1. Crystal data and structure refinement for **5**

Empirical formula	C51 H44 B2 F24 Fe N2 O2	
Formula weight	1250.35	
Temperature	150(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P 21 21 21	
Unit cell dimensions	a = 12.4214(2) Å	α= 90°.
	b = 18.5284(3) Å	β= 90°.
	c = 23.4334(4) Å	γ = 90°.
Volume	5393.17(15) $Å^3$	
Z	4	
Density (calculated)	1.540 Mg/m^3	
Absorption coefficient	0.405 mm^{-1}	
F(000)	2528	
Crystal size	0.50 x 0.13 x 0.13 mm^3	
Theta range for data collection	3.57 to 26.37°.	
Index ranges	-15<=h<=15, -22<=k<=23, -28<=l<=29	
Reflections collected	44066	
Independent reflections	10978 [R(int) = 0.1055]	
Completeness to theta = 26.37°	99.5 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.9493 and 0.8232	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	10978 / 0 / 687	
Goodness-of-fit on F^2	1.036	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.1043, wR2 = 0.2633	
R indices (all data)	R1 = 0.1502, wR2 = 0.2935	
Absolute structure parameter	0.05(4)	
Largest diff. peak and hole	1.355 and -0.679 $e.Å^{-3}$	

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **5**

	x	y	z	U(eq)
C(1)	5865(8)	4879(5)	5470(4)	45(2)
C(2)	6564(8)	4297(5)	5392(4)	49(2)
C(3)	5154(9)	4709(5)	5925(4)	49(2)
C(4)	6295(9)	3751(6)	5788(4)	55(3)
C(5)	5417(8)	4022(5)	6122(4)	48(2)
C(6)	3679(9)	3598(5)	5374(4)	53(3)
C(7)	5266(8)	3245(5)	4769(4)	46(2)
C(8)	5714(6)	4759(5)	3852(4)	39(2)
C(9)	6725(8)	4272(6)	3803(4)	53(3)
C(10)	5593(9)	5241(6)	3297(4)	60(3)
C(11)	4250(7)	3901(5)	3690(3)	39(2)
C(12)	4690(8)	3590(6)	3155(4)	56(3)
C(13)	3180(7)	3581(5)	3875(4)	45(2)
C(14)	3158(7)	5535(5)	4120(4)	39(2)
C(15)	3777(9)	6263(5)	4117(4)	56(3)
C(16)	1990(7)	5650(6)	4019(4)	51(2)
C(17)	2893(8)	5242(5)	5191(4)	46(2)
C(18)	3016(9)	6006(6)	5403(4)	61(3)
C(19)	1732(8)	4977(7)	5219(5)	62(3)
C(20)	1865(5)	1458(3)	2529(3)	20(1)
C(21)	2775(5)	1514(4)	2888(3)	26(2)
C(22)	3206(6)	930(4)	3168(3)	28(2)
C(23)	2761(6)	249(4)	3100(3)	25(2)
C(24)	1877(6)	169(4)	2751(3)	26(2)
C(25)	1434(6)	764(4)	2481(3)	24(2)
C(26)	4167(6)	1012(5)	3536(4)	40(2)
C(27)	1417(7)	-571(4)	2659(4)	37(2)
C(28)	821(6)	2013(4)	1600(3)	22(1)
C(29)	1290(6)	1499(4)	1237(3)	26(2)
C(30)	982(6)	1432(4)	669(3)	31(2)
C(31)	213(7)	1876(4)	436(4)	37(2)
C(32)	-255(7)	2390(4)	777(4)	36(2)
C(33)	59(6)	2462(4)	1348(3)	29(2)
C(34)	1499(7)	858(4)	319(3)	34(2)
C(35)	-1109(9)	2866(4)	554(4)	49(3)
C(36)	283(5)	2362(4)	2686(3)	23(2)
C(37)	-788(6)	2165(4)	2611(3)	26(2)
C(38)	-1593(6)	2323(4)	2997(4)	33(2)
C(39)	-1361(7)	2693(4)	3490(3)	32(2)
C(40)	-301(6)	2893(4)	3602(3)	33(2)
C(41)	490(6)	2724(4)	3201(3)	28(2)
C(44)	2084(6)	2848(4)	2152(3)	27(2)
C(45)	1805(6)	3571(4)	2264(3)	29(2)
C(46)	2490(6)	4138(4)	2132(4)	34(2)
C(47)	3451(7)	4015(5)	1859(4)	40(2)
C(48)	3754(6)	3309(5)	1732(3)	31(2)
C(49)	3082(6)	2749(4)	1887(3)	25(2)
C(50)	2199(8)	4887(5)	2265(5)	52(3)
C(51)	4797(8)	3167(6)	1456(4)	55(3)
C(42)	-2732(7)	2114(5)	2884(5)	47(2)
C(43)	-27(7)	3325(4)	4113(3)	36(2)
N(1)	4696(5)	4376(3)	3996(2)	27(1)
N(2)	3445(5)	5086(4)	4640(3)	32(2)
O(1)	2840(6)	3358(4)	5442(4)	73(2)
O(2)	5471(8)	2802(4)	4454(3)	78(3)

F(1)	4346(8)	1663(5)	3730(5)	54(3)
F(1A)	4637(11)	1696(7)	3488(6)	42(3)
F(2)	4082(8)	607(6)	4018(4)	61(3)
F(2A)	4833(17)	525(11)	3581(9)	88(5)
F(3)	5059(8)	737(5)	3289(4)	52(2)
F(3A)	3905(16)	1042(13)	4109(9)	89(5)
F(4)	827(8)	-621(5)	2174(4)	47(3)
F(4A)	1170(15)	-690(9)	2148(7)	24(4)
F(5)	558(8)	-686(5)	3026(4)	52(2)
F(5A)	914(11)	-835(7)	3105(5)	16(3)
F(6)	2207(7)	-1094(5)	2614(4)	55(2)
F(6A)	2058(13)	-1119(8)	2868(8)	33(4)
F(7)	2565(5)	797(3)	414(2)	59(2)
F(8)	1421(6)	971(4)	-246(3)	78(2)
F(9)	1108(5)	212(3)	426(3)	66(2)
F(10)	-1327(8)	3431(6)	839(4)	114(3)
F(11)	-701(8)	3272(5)	96(4)	117(3)
F(12)	-1856(8)	2560(5)	275(4)	109(3)
F(13)	-2885(9)	1806(6)	2341(5)	45(3)
F(13A)	-2859(10)	1660(7)	2503(6)	34(3)
F(14)	-3323(8)	2716(5)	2703(5)	49(2)
F(14A)	-3397(10)	2616(6)	2997(6)	45(3)
F(15)	-3040(9)	1595(7)	3295(5)	54(3)
F(15A)	-3289(13)	1901(10)	3300(7)	71(5)
F(16)	-784(6)	3319(4)	4507(3)	76(2)
F(17)	873(5)	3085(3)	4375(2)	55(1)
F(18)	183(5)	4010(3)	3988(3)	68(2)
F(19)	2862(9)	5198(6)	2631(5)	64(3)
F(19A)	3145(16)	5224(10)	2474(8)	37(5)
F(20)	2217(10)	5315(6)	1793(5)	80(3)
F(20A)	1687(14)	5258(9)	1949(7)	36(4)
F(21)	1269(11)	4967(7)	2489(6)	95(4)
F(21A)	1444(12)	4897(8)	2800(7)	29(3)
F(22)	5402(9)	2690(6)	1760(5)	77(3)
F(22A)	4910(20)	2582(13)	1180(11)	89(7)
F(23)	4711(9)	2799(6)	956(5)	68(3)
F(23A)	4863(18)	3675(11)	1005(9)	80(5)
F(24)	5423(12)	3740(8)	1364(7)	104(4)
F(24A)	5657(16)	3463(11)	1720(9)	69(5)
Fe(1)	4959(1)	3951(1)	5251(1)	35(1)
B(1)	4256(7)	4556(5)	4616(4)	29(2)
B(2)	1264(7)	2165(4)	2250(4)	25(2)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **5**

C(1)-C(2)	1.398(14)
C(1)-C(3)	1.421(14)
C(1)-Fe(1)	2.118(9)
C(2)-C(4)	1.412(14)
C(2)-Fe(1)	2.121(9)
C(3)-C(5)	1.394(13)
C(3)-Fe(1)	2.127(8)
C(4)-C(5)	1.434(15)
C(4)-Fe(1)	2.115(9)
C(5)-Fe(1)	2.122(9)
C(6)-O(1)	1.145(12)
C(6)-Fe(1)	1.743(11)
C(7)-O(2)	1.132(11)
C(7)-Fe(1)	1.770(9)
C(8)-N(1)	1.489(11)
C(8)-C(9)	1.551(12)
C(8)-C(10)	1.583(14)
C(11)-N(1)	1.264(10)
C(11)-C(12)	1.484(12)
C(11)-C(13)	1.519(13)
C(14)-C(16)	1.485(13)
C(14)-N(2)	1.517(10)
C(14)-C(15)	1.552(14)
C(17)-N(2)	1.491(11)
C(17)-C(18)	1.507(14)
C(17)-C(19)	1.526(13)
C(20)-C(25)	1.397(9)
C(20)-C(21)	1.413(10)
C(20)-B(2)	1.644(10)
C(21)-C(22)	1.376(10)
C(22)-C(23)	1.386(11)
C(22)-C(26)	1.480(11)
C(23)-C(24)	1.378(10)
C(24)-C(25)	1.384(10)
C(24)-C(27)	1.501(11)
C(26)-F(2A)	1.23(2)
C(26)-F(1)	1.308(13)
C(26)-F(3)	1.350(13)
C(26)-F(2)	1.360(14)
C(26)-F(3A)	1.38(2)
C(26)-F(1A)	1.401(16)
C(27)-F(4A)	1.256(18)
C(27)-F(5A)	1.313(15)
C(27)-F(4)	1.355(13)
C(27)-F(6A)	1.381(18)
C(27)-F(6)	1.382(12)
C(27)-F(5)	1.388(12)
C(28)-C(33)	1.390(10)
C(28)-C(29)	1.405(10)
C(28)-B(2)	1.645(11)
C(29)-C(30)	1.390(11)
C(30)-C(31)	1.375(11)
C(30)-C(34)	1.489(11)
C(31)-C(32)	1.371(12)
C(32)-C(33)	1.400(11)
C(32)-C(35)	1.475(12)
C(34)-F(9)	1.316(10)
C(34)-F(8)	1.343(10)

C(34)-F(7)	1.347(10)
C(35)-F(12)	1.269(12)
C(35)-F(10)	1.271(13)
C(35)-F(11)	1.405(14)
C(36)-C(37)	1.390(10)
C(36)-C(41)	1.403(10)
C(36)-B(2)	1.632(10)
C(37)-C(38)	1.379(11)
C(38)-C(39)	1.374(12)
C(38)-C(42)	1.491(12)
C(39)-C(40)	1.392(11)
C(40)-C(41)	1.396(11)
C(40)-C(43)	1.480(11)
C(44)-C(49)	1.398(11)
C(44)-C(45)	1.409(10)
C(44)-B(2)	1.640(11)
C(45)-C(46)	1.387(10)
C(46)-C(47)	1.373(12)
C(46)-C(50)	1.467(13)
C(47)-C(48)	1.393(12)
C(48)-C(49)	1.381(11)
C(48)-C(51)	1.473(12)
C(50)-F(20A)	1.195(18)
C(50)-F(21)	1.277(16)
C(50)-F(19)	1.322(13)
C(50)-F(20)	1.362(15)
C(50)-F(19A)	1.42(2)
C(50)-F(21A)	1.566(19)
C(51)-F(22A)	1.27(3)
C(51)-F(24)	1.333(16)
C(51)-F(24A)	1.35(2)
C(51)-F(23)	1.361(14)
C(51)-F(22)	1.361(15)
C(51)-F(23A)	1.42(2)
C(42)-F(13A)	1.236(15)
C(42)-F(15A)	1.259(18)
C(42)-F(14A)	1.273(14)
C(42)-F(14)	1.402(14)
C(42)-F(13)	1.408(15)
C(42)-F(15)	1.412(15)
C(43)-F(16)	1.318(10)
C(43)-F(18)	1.328(10)
C(43)-F(17)	1.352(10)
N(1)-B(1)	1.586(10)
N(2)-B(1)	1.408(11)
F(5A)-F(6A)	1.62(2)
F(14A)-F(15A)	1.51(2)
Fe(1)-B(1)	2.058(9)

C(2)-C(1)-C(3)	108.3(8)
C(2)-C(1)-Fe(1)	70.9(5)
C(3)-C(1)-Fe(1)	70.8(5)
C(1)-C(2)-C(4)	108.7(9)
C(1)-C(2)-Fe(1)	70.6(5)
C(4)-C(2)-Fe(1)	70.3(5)
C(5)-C(3)-C(1)	107.8(9)
C(5)-C(3)-Fe(1)	70.6(5)
C(1)-C(3)-Fe(1)	70.1(5)
C(2)-C(4)-C(5)	106.7(9)
C(2)-C(4)-Fe(1)	70.7(5)

C(5)-C(4)-Fe(1)	70.5(5)
C(3)-C(5)-C(4)	108.5(9)
C(3)-C(5)-Fe(1)	71.1(5)
C(4)-C(5)-Fe(1)	70.0(5)
O(1)-C(6)-Fe(1)	178.5(11)
O(2)-C(7)-Fe(1)	178.7(9)
N(1)-C(8)-C(9)	115.2(7)
N(1)-C(8)-C(10)	112.0(7)
C(9)-C(8)-C(10)	110.2(8)
N(1)-C(11)-C(12)	126.1(8)
N(1)-C(11)-C(13)	119.5(7)
C(12)-C(11)-C(13)	114.4(8)
C(16)-C(14)-N(2)	115.9(7)
C(16)-C(14)-C(15)	111.0(8)
N(2)-C(14)-C(15)	111.4(7)
N(2)-C(17)-C(18)	115.0(8)
N(2)-C(17)-C(19)	114.1(8)
C(18)-C(17)-C(19)	112.6(9)
C(25)-C(20)-C(21)	115.0(6)
C(25)-C(20)-B(2)	121.9(6)
C(21)-C(20)-B(2)	122.7(6)
C(22)-C(21)-C(20)	122.5(6)
C(21)-C(22)-C(23)	120.4(7)
C(21)-C(22)-C(26)	120.7(7)
C(23)-C(22)-C(26)	118.8(7)
C(24)-C(23)-C(22)	118.9(6)
C(23)-C(24)-C(25)	120.2(7)
C(23)-C(24)-C(27)	119.1(7)
C(25)-C(24)-C(27)	120.7(7)
C(24)-C(25)-C(20)	122.9(7)
F(2A)-C(26)-F(1)	122.2(12)
F(2A)-C(26)-F(3)	37.5(10)
F(1)-C(26)-F(3)	110.9(9)
F(2A)-C(26)-F(2)	65.0(12)
F(1)-C(26)-F(2)	103.5(10)
F(3)-C(26)-F(2)	102.2(8)
F(2A)-C(26)-F(3A)	96.0(15)
F(1)-C(26)-F(3A)	70.5(12)
F(3)-C(26)-F(3A)	128.6(12)
F(2)-C(26)-F(3A)	36.6(9)
F(2A)-C(26)-F(1A)	112.9(13)
F(1)-C(26)-F(1A)	28.6(6)
F(3)-C(26)-F(1A)	87.9(8)
F(2)-C(26)-F(1A)	126.7(10)
F(3A)-C(26)-F(1A)	98.0(13)
F(2A)-C(26)-C(22)	121.2(12)
F(1)-C(26)-C(22)	115.8(8)
F(3)-C(26)-C(22)	112.0(8)
F(2)-C(26)-C(22)	111.4(7)
F(3A)-C(26)-C(22)	112.3(10)
F(1A)-C(26)-C(22)	112.5(8)
F(4A)-C(27)-F(5A)	125.3(12)
F(4A)-C(27)-F(4)	19.3(9)
F(5A)-C(27)-F(4)	112.6(9)
F(4A)-C(27)-F(6A)	110.5(12)
F(5A)-C(27)-F(6A)	73.6(11)
F(4)-C(27)-F(6A)	124.0(10)
F(4A)-C(27)-F(6)	88.7(11)
F(5A)-C(27)-F(6)	97.9(9)
F(4)-C(27)-F(6)	105.8(8)

F(6A)-C(27)-F(6)	26.1(7)
F(4A)-C(27)-F(5)	112.2(11)
F(5A)-C(27)-F(5)	23.4(6)
F(4)-C(27)-F(5)	95.4(8)
F(6A)-C(27)-F(5)	96.3(10)
F(6)-C(27)-F(5)	119.0(8)
F(4A)-C(27)-C(24)	113.0(10)
F(5A)-C(27)-C(24)	114.0(9)
F(4)-C(27)-C(24)	112.9(7)
F(6A)-C(27)-C(24)	113.7(9)
F(6)-C(27)-C(24)	112.4(7)
F(5)-C(27)-C(24)	110.1(7)
C(33)-C(28)-C(29)	115.5(6)
C(33)-C(28)-B(2)	121.3(6)
C(29)-C(28)-B(2)	122.6(6)
C(30)-C(29)-C(28)	121.8(7)
C(31)-C(30)-C(29)	121.2(7)
C(31)-C(30)-C(34)	120.6(7)
C(29)-C(30)-C(34)	118.2(7)
C(32)-C(31)-C(30)	118.6(8)
C(31)-C(32)-C(33)	120.3(7)
C(31)-C(32)-C(35)	120.9(8)
C(33)-C(32)-C(35)	118.8(8)
C(28)-C(33)-C(32)	122.6(7)
F(9)-C(34)-F(8)	107.7(7)
F(9)-C(34)-F(7)	104.8(6)
F(8)-C(34)-F(7)	104.4(7)
F(9)-C(34)-C(30)	112.7(7)
F(8)-C(34)-C(30)	113.6(7)
F(7)-C(34)-C(30)	113.0(7)
F(12)-C(35)-F(10)	118.9(11)
F(12)-C(35)-F(11)	96.3(8)
F(10)-C(35)-F(11)	92.1(8)
F(12)-C(35)-C(32)	116.1(8)
F(10)-C(35)-C(32)	117.5(8)
F(11)-C(35)-C(32)	109.3(9)
C(37)-C(36)-C(41)	114.1(6)
C(37)-C(36)-B(2)	125.2(7)
C(41)-C(36)-B(2)	120.5(6)
C(38)-C(37)-C(36)	123.7(7)
C(39)-C(38)-C(37)	120.3(7)
C(39)-C(38)-C(42)	118.5(8)
C(37)-C(38)-C(42)	121.1(8)
C(38)-C(39)-C(40)	119.3(7)
C(39)-C(40)-C(41)	118.6(7)
C(39)-C(40)-C(43)	120.9(7)
C(41)-C(40)-C(43)	120.3(7)
C(40)-C(41)-C(36)	123.8(7)
C(49)-C(44)-C(45)	115.2(7)
C(49)-C(44)-B(2)	120.8(6)
C(45)-C(44)-B(2)	123.6(7)
C(46)-C(45)-C(44)	121.9(7)
C(47)-C(46)-C(45)	120.8(7)
C(47)-C(46)-C(50)	118.0(7)
C(45)-C(46)-C(50)	121.2(8)
C(46)-C(47)-C(48)	119.3(7)
C(49)-C(48)-C(47)	119.1(7)
C(49)-C(48)-C(51)	120.9(8)
C(47)-C(48)-C(51)	120.0(8)
C(48)-C(49)-C(44)	123.6(7)

F(20A)-C(50)-F(21)	73.0(12)
F(20A)-C(50)-F(19)	118.9(12)
F(21)-C(50)-F(19)	104.2(12)
F(20A)-C(50)-F(20)	33.8(8)
F(21)-C(50)-F(20)	106.3(11)
F(19)-C(50)-F(20)	105.2(9)
F(20A)-C(50)-F(19A)	113.7(13)
F(21)-C(50)-F(19A)	123.7(13)
F(19)-C(50)-F(19A)	21.1(9)
F(20)-C(50)-F(19A)	90.6(11)
F(20A)-C(50)-C(46)	123.0(12)
F(21)-C(50)-C(46)	114.9(9)
F(19)-C(50)-C(46)	113.3(9)
F(20)-C(50)-C(46)	112.0(10)
F(19A)-C(50)-C(46)	106.6(10)
F(20A)-C(50)-F(21A)	99.9(12)
F(21)-C(50)-F(21A)	29.3(7)
F(19)-C(50)-F(21A)	81.3(10)
F(20)-C(50)-F(21A)	130.8(11)
F(19A)-C(50)-F(21A)	102.3(12)
C(46)-C(50)-F(21A)	109.2(9)
F(22A)-C(51)-F(24)	122.2(15)
F(22A)-C(51)-F(24A)	119.5(17)
F(24)-C(51)-F(24A)	44.8(9)
F(22A)-C(51)-F(23)	30.9(11)
F(24)-C(51)-F(23)	107.9(10)
F(24A)-C(51)-F(23)	131.4(12)
F(22A)-C(51)-F(22)	69.6(15)
F(24)-C(51)-F(22)	106.3(11)
F(24A)-C(51)-F(22)	65.6(11)
F(23)-C(51)-F(22)	99.7(10)
F(22A)-C(51)-F(23A)	100.4(16)
F(24)-C(51)-F(23A)	46.9(10)
F(24A)-C(51)-F(23A)	91.5(13)
F(23)-C(51)-F(23A)	72.3(11)
F(22)-C(51)-F(23A)	142.1(13)
F(22A)-C(51)-C(48)	118.3(14)
F(24)-C(51)-C(48)	116.2(10)
F(24A)-C(51)-C(48)	114.9(11)
F(23)-C(51)-C(48)	113.6(8)
F(22)-C(51)-C(48)	111.8(8)
F(23A)-C(51)-C(48)	105.1(12)
F(13A)-C(42)-F(15A)	106.0(12)
F(13A)-C(42)-F(14A)	124.4(11)
F(15A)-C(42)-F(14A)	73.2(12)
F(13A)-C(42)-F(14)	104.7(10)
F(15A)-C(42)-F(14)	101.3(11)
F(14A)-C(42)-F(14)	30.7(6)
F(13A)-C(42)-F(13)	19.0(7)
F(15A)-C(42)-F(13)	119.9(11)
F(14A)-C(42)-F(13)	113.3(10)
F(14)-C(42)-F(13)	88.6(9)
F(13A)-C(42)-F(15)	89.7(10)
F(15A)-C(42)-F(15)	27.2(8)
F(14A)-C(42)-F(15)	100.4(10)
F(14)-C(42)-F(15)	127.3(10)
F(13)-C(42)-F(15)	107.7(9)
F(13A)-C(42)-C(38)	115.3(9)
F(15A)-C(42)-C(38)	117.8(11)
F(14A)-C(42)-C(38)	112.8(9)

F(14)-C(42)-C(38)	110.1(8)
F(13)-C(42)-C(38)	113.2(8)
F(15)-C(42)-C(38)	108.3(9)
F(16)-C(43)-F(18)	107.6(7)
F(16)-C(43)-F(17)	105.6(7)
F(18)-C(43)-F(17)	104.6(7)
F(16)-C(43)-C(40)	113.5(8)
F(18)-C(43)-C(40)	112.5(7)
F(17)-C(43)-C(40)	112.4(6)
C(11)-N(1)-C(8)	125.2(7)
C(11)-N(1)-B(1)	121.0(7)
C(8)-N(1)-B(1)	113.6(6)
B(1)-N(2)-C(17)	120.0(7)
B(1)-N(2)-C(14)	121.3(7)
C(17)-N(2)-C(14)	118.7(6)
C(27)-F(5A)-F(6A)	55.1(9)
C(27)-F(6A)-F(5A)	51.3(8)
C(42)-F(14A)-F(15A)	52.9(9)
C(42)-F(15A)-F(14A)	53.8(9)
C(6)-Fe(1)-C(7)	91.4(5)
C(6)-Fe(1)-B(1)	86.4(4)
C(7)-Fe(1)-B(1)	91.8(4)
C(6)-Fe(1)-C(4)	123.5(4)
C(7)-Fe(1)-C(4)	94.6(4)
B(1)-Fe(1)-C(4)	149.1(4)
C(6)-Fe(1)-C(1)	138.6(5)
C(7)-Fe(1)-C(1)	129.8(4)
B(1)-Fe(1)-C(1)	87.6(3)
C(4)-Fe(1)-C(1)	65.3(4)
C(6)-Fe(1)-C(2)	161.0(4)
C(7)-Fe(1)-C(2)	96.9(4)
B(1)-Fe(1)-C(2)	110.3(4)
C(4)-Fe(1)-C(2)	38.9(4)
C(1)-Fe(1)-C(2)	38.5(4)
C(6)-Fe(1)-C(5)	96.3(4)
C(7)-Fe(1)-C(5)	126.9(4)
B(1)-Fe(1)-C(5)	140.9(4)
C(4)-Fe(1)-C(5)	39.6(4)
C(1)-Fe(1)-C(5)	64.9(3)
C(2)-Fe(1)-C(5)	65.1(4)
C(6)-Fe(1)-C(3)	103.3(5)
C(7)-Fe(1)-C(3)	159.6(4)
B(1)-Fe(1)-C(3)	103.1(4)
C(4)-Fe(1)-C(3)	65.5(4)
C(1)-Fe(1)-C(3)	39.1(4)
C(2)-Fe(1)-C(3)	65.0(4)
C(5)-Fe(1)-C(3)	38.3(4)
N(2)-B(1)-N(1)	115.4(7)
N(2)-B(1)-Fe(1)	130.8(6)
N(1)-B(1)-Fe(1)	113.7(6)
C(36)-B(2)-C(44)	112.3(6)
C(36)-B(2)-C(20)	105.6(6)
C(44)-B(2)-C(20)	112.8(6)
C(36)-B(2)-C(28)	111.6(6)
C(44)-B(2)-C(28)	102.1(6)
C(20)-B(2)-C(28)	112.5(6)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 x\ 10^3$) for **5**

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(1)	58(6)	39(5)	37(5)	1(4)	-17(4)	-14(4)
C(2)	45(5)	60(6)	43(5)	-2(4)	-17(4)	-21(5)
C(3)	71(7)	42(5)	34(4)	-10(4)	-5(5)	-4(5)
C(4)	64(7)	56(6)	44(5)	-1(4)	-36(5)	-6(5)
C(5)	52(5)	57(6)	36(5)	15(4)	-14(4)	-23(5)
C(6)	63(7)	47(5)	50(6)	24(4)	-19(5)	-16(5)
C(7)	65(6)	31(4)	40(5)	5(4)	-23(5)	0(4)
C(8)	22(4)	52(5)	42(5)	-7(4)	0(4)	12(4)
C(9)	41(5)	90(8)	30(4)	-12(5)	4(4)	8(5)
C(10)	55(6)	76(7)	49(6)	5(5)	13(5)	-12(6)
C(11)	29(4)	53(5)	35(4)	-7(4)	-12(3)	11(4)
C(12)	38(5)	89(7)	40(5)	-25(5)	-20(4)	22(5)
C(13)	36(5)	56(6)	44(5)	-8(4)	-12(4)	-6(4)
C(14)	39(5)	44(5)	33(4)	1(4)	2(4)	6(4)
C(15)	68(7)	58(6)	43(5)	4(5)	-5(5)	10(5)
C(16)	38(5)	69(6)	45(5)	-10(5)	8(4)	23(5)
C(17)	44(5)	50(5)	44(5)	3(4)	10(4)	2(4)
C(18)	64(7)	77(7)	43(5)	-15(5)	18(5)	14(6)
C(19)	36(5)	107(9)	43(5)	-1(6)	15(5)	2(5)
C(20)	16(3)	22(3)	22(3)	-1(3)	2(3)	1(3)
C(21)	17(3)	28(4)	34(4)	-7(3)	-1(3)	0(3)
C(22)	22(4)	33(4)	30(4)	5(3)	7(3)	-3(3)
C(23)	18(3)	32(4)	26(4)	8(3)	4(3)	10(3)
C(24)	29(4)	22(4)	28(4)	3(3)	4(3)	3(3)
C(25)	20(3)	21(3)	31(4)	2(3)	-1(3)	-3(3)
C(26)	27(4)	31(4)	62(6)	10(4)	-7(4)	1(4)
C(27)	37(5)	33(4)	42(5)	5(4)	-1(4)	-2(3)
C(28)	24(4)	18(3)	24(4)	0(3)	-2(3)	-3(3)
C(29)	24(4)	28(4)	28(4)	-2(3)	7(3)	1(3)
C(30)	30(4)	41(4)	23(4)	3(3)	1(3)	-10(3)
C(31)	39(5)	33(4)	39(4)	6(3)	-7(4)	-1(3)
C(32)	34(5)	34(4)	40(5)	3(3)	-3(4)	-1(3)
C(33)	28(4)	26(3)	32(4)	-5(3)	-8(4)	6(3)
C(34)	48(5)	33(4)	20(4)	4(3)	-4(3)	2(3)
C(35)	73(7)	21(4)	54(6)	0(4)	-34(5)	-8(4)
C(36)	14(3)	30(4)	25(4)	5(3)	2(3)	5(3)
C(37)	23(4)	20(3)	34(4)	-1(3)	-4(3)	-1(3)
C(38)	35(4)	13(3)	51(5)	2(3)	3(4)	3(3)
C(39)	38(4)	18(4)	39(4)	4(3)	11(4)	7(3)
C(40)	38(5)	23(4)	37(4)	0(3)	-3(3)	5(3)
C(41)	25(4)	23(4)	36(4)	0(3)	-6(3)	0(3)
C(44)	25(4)	31(4)	25(4)	0(3)	-5(3)	-1(3)
C(45)	30(4)	23(4)	36(4)	6(3)	-2(3)	-2(3)
C(46)	26(4)	28(4)	47(5)	8(3)	-7(4)	-8(3)
C(47)	43(5)	35(5)	42(5)	9(4)	-13(4)	-15(4)
C(48)	26(4)	48(5)	20(4)	7(3)	3(3)	-7(3)
C(49)	27(4)	29(4)	18(3)	-4(3)	-2(3)	-7(3)
C(50)	35(5)	42(5)	80(7)	4(5)	-20(5)	-14(4)
C(51)	50(6)	85(7)	30(4)	-5(5)	11(4)	-33(5)
C(42)	28(4)	43(5)	71(6)	-1(5)	5(4)	6(4)
C(43)	43(5)	36(4)	30(4)	-4(3)	17(4)	1(4)
N(1)	27(3)	31(3)	22(3)	-8(3)	-5(2)	9(3)
N(2)	29(3)	38(4)	30(4)	-5(3)	-2(3)	4(3)
O(1)	56(5)	79(5)	85(6)	38(4)	-7(4)	-27(4)
O(2)	127(8)	39(4)	69(5)	-25(4)	-43(5)	22(4)

Fe(1)	42(1)	34(1)	29(1)	3(1)	-10(1)	-8(1)
B(1)	27(4)	33(4)	26(4)	-4(3)	-4(3)	-13(3)
B(2)	22(4)	24(4)	30(4)	-2(3)	1(3)	2(3)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2a^{*2}U^{11} + ... + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$x 10^3) for **5**

	x	y	z	U(eq)
H(1)	5881	5343	5252	53
H(2)	7163	4273	5108	59
H(3)	4581	5032	6084	59
H(4)	6674	3279	5841	66
H(5)	5062	3764	6446	58
H(8)	5857	5100	4174	46
H(9A)	6749	3939	4128	80
H(9B)	7373	4573	3802	80
H(9C)	6691	3995	3447	80
H(10A)	5599	4931	2959	90
H(10B)	6192	5584	3277	90
H(10C)	4911	5506	3314	90
H(12A)	5407	3791	3082	83
H(12B)	4211	3708	2836	83
H(12C)	4743	3064	3193	83
H(13A)	2998	3758	4257	68
H(13B)	3234	3054	3882	68
H(13C)	2617	3726	3605	68
H(14)	3428	5259	3783	46
H(15A)	3618	6524	3763	84
H(15B)	4552	6170	4141	84
H(15C)	3550	6555	4445	84
H(16A)	1597	5204	4104	76
H(16B)	1873	5783	3619	76
H(16C)	1729	6038	4267	76
H(17)	3285	4942	5478	55
H(18A)	3744	6179	5318	92
H(18B)	2897	6018	5817	92
H(18C)	2488	6317	5214	92
H(19A)	1270	5301	4996	93
H(19B)	1490	4972	5617	93
H(19C)	1689	4488	5061	93
H(21)	3101	1974	2937	31
H(23)	3062	-156	3291	31
H(25)	808	697	2254	29
H(29)	1832	1188	1383	32
H(31)	9	1829	47	45
H(33)	-261	2831	1572	35
H(37)	-975	1907	2276	31
H(39)	-1918	2810	3752	38
H(41)	1211	2861	3281	34
H(45)	1129	3673	2435	35
H(47)	3905	4408	1758	48
H(49)	3311	2269	1810	30

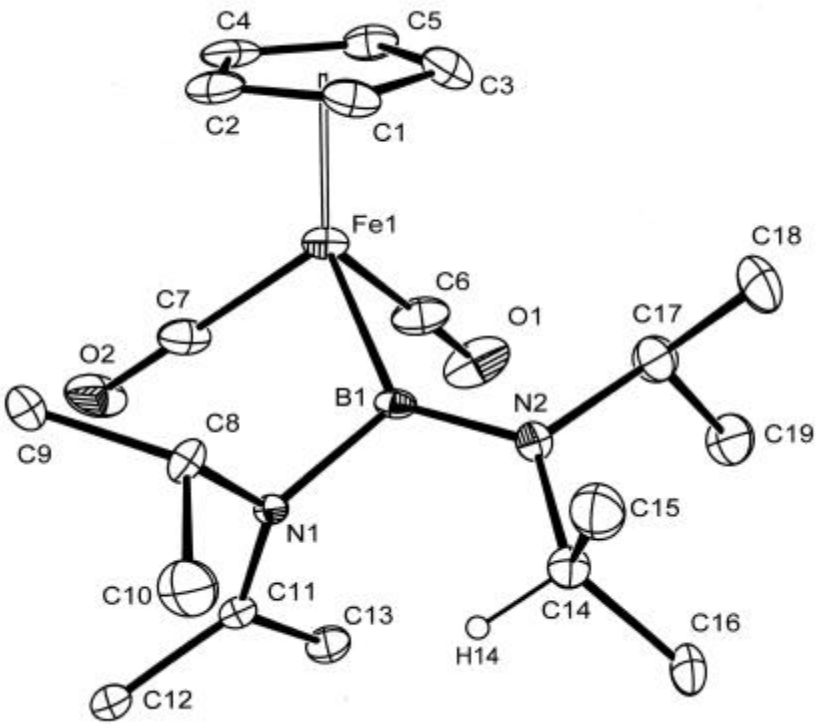

Figure S1: Structure of the cationic component of $[CpFe(CO)_2B(N^iPr_2)\{N(^iPr)CMe_2\}]^+$ $[BAr^f{}_4]^-$ (**5**) [50 % ellipsoids; H atoms (except that attached to C14) and anion omitted for clarity].