

Accessory Publication

Mono- and Di-nuclear Gold(I) Complexes Containing 1,12-Dicarba-closo-dodecaborane(12)

Joseph A. Ioppolo,^A Cameron J. Kepert,^A David J. Price^A and Louis M. Rendina^{A,B}

^A *School of Chemistry, The University of Sydney, Sydney, NSW 2006, Australia.*

^B *Corresponding author. E-mail: rendina@chem.usyd.edu.au*

Correspondence to: Dr Louis M. Rendina
School of Chemistry
The University of Sydney
Sydney, NSW 2006, Australia.

Table 1. Crystal data and structure refinement for C₂₆H₃₀B₁₀P₂.

Identification code	dpj38ab	
Empirical formula	C ₂₆ H ₃₀ B ₁₀ P ₂	
Formula weight	512.54	
Temperature	150(2) K	
Wavelength	0.71073 \approx	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/n	
Unit cell dimensions	a = 9.359(3) \approx	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 13.763(5) \approx	$\beta = 105.490(7)^\circ$.
	c = 10.891(4) \approx	$\gamma = 90^\circ$.
Volume	1352.0(8) \approx^3	
Z	2	
Density (calculated)	1.259 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.178 mm ⁻¹	
F(000)	532	
Crystal size	0.24 x 0.13 x 0.13 mm ³	
Theta range for data collection	2.44 to 28.12 $^\circ$.	
Index ranges	-12 \leq h \leq 12, -18 \leq k \leq 18, -14 \leq l \leq 14	
Reflections collected	13490	
Independent reflections	3233 [R(int) = 0.0405]	
Completeness to theta = 28.00 $^\circ$	98.4 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.977 and 0.958	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	3233 / 0 / 192	
Goodness-of-fit on F ²	1.045	
Final R indices [I > 2 σ (I)]	R1 = 0.0446, wR2 = 0.1107	
R indices (all data)	R1 = 0.0584, wR2 = 0.1199	
Largest diff. peak and hole	0.639 and -0.304 e. \approx^3	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\approx^2 \times 10^3$) for C₂₆H₃₀B₁₀P₂. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
P(1)	3457(1)	1888(1)	3003(1)	18(1)
C(1)	4712(2)	2929(1)	3393(2)	18(1)
C(2)	5313(2)	3343(1)	4592(2)	21(1)
C(3)	6193(2)	4170(1)	4720(2)	24(1)
C(4)	6490(2)	4593(1)	3660(2)	27(1)
C(5)	5915(2)	4189(1)	2470(2)	28(1)
C(6)	5036(2)	3357(1)	2336(2)	23(1)
C(7)	1830(2)	2256(1)	3522(2)	20(1)
C(8)	1720(2)	3079(1)	4235(2)	26(1)
C(9)	384(2)	3312(1)	4500(2)	32(1)
C(10)	-842(2)	2722(1)	4061(2)	31(1)
C(11)	-750(2)	1905(1)	3353(2)	28(1)
C(12)	570(2)	1679(1)	3070(2)	24(1)
C(13)	4301(2)	913(1)	4186(1)	16(1)
B(14)	6122(2)	970(1)	5066(2)	20(1)
B(15)	5573(2)	220(1)	3685(2)	20(1)
B(16)	3776(2)	-237(1)	3588(2)	19(1)
B(17)	3210(2)	231(1)	4910(2)	19(1)
B(18)	4651(2)	982(1)	5820(2)	20(1)

Table 3. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for C26H30B10P2.

P(1)-C(1)	1.8283(17)
P(1)-C(7)	1.8310(17)
P(1)-C(13)	1.8811(16)
C(1)-C(2)	1.398(2)
C(1)-C(6)	1.398(2)
C(2)-C(3)	1.390(2)
C(2)-H(2)	0.9500
C(3)-C(4)	1.386(3)
C(3)-H(3)	0.9500
C(4)-C(5)	1.380(3)
C(4)-H(4)	0.9500
C(5)-C(6)	1.395(2)
C(5)-H(5)	0.9500
C(6)-H(6)	0.9500
C(7)-C(8)	1.393(2)
C(7)-C(12)	1.398(2)
C(8)-C(9)	1.393(3)
C(8)-H(8)	0.9500
C(9)-C(10)	1.383(3)
C(9)-H(9)	0.9500
C(10)-C(11)	1.379(3)
C(10)-H(10)	0.9500
C(11)-C(12)	1.386(3)
C(11)-H(11)	0.9500
C(12)-H(12)	0.9500
C(13)-B(14)	1.719(2)
C(13)-B(15)	1.723(2)
C(13)-B(18)	1.724(2)
C(13)-B(17)	1.726(2)
C(13)-B(16)	1.732(2)
B(14)-B(16)#1	1.761(3)
B(14)-B(17)#1	1.765(3)
B(14)-B(18)	1.781(3)
B(14)-B(15)	1.783(3)
B(14)-H(14)	1.077(19)
B(15)-B(17)#1	1.759(3)

B(15)-B(18)#1	1.770(3)
B(15)-B(16)	1.772(3)
B(15)-H(15)	1.089(19)
B(16)-B(14)#1	1.761(3)
B(16)-B(18)#1	1.768(3)
B(16)-B(17)	1.782(3)
B(16)-H(16)	1.07(2)
B(17)-B(15)#1	1.759(3)
B(17)-B(14)#1	1.765(3)
B(17)-B(18)	1.776(3)
B(17)-H(17)	1.05(2)
B(18)-B(16)#1	1.768(3)
B(18)-B(15)#1	1.770(3)
B(18)-H(18)	1.07(2)
C(1)-P(1)-C(7)	104.31(8)
C(1)-P(1)-C(13)	105.87(7)
C(7)-P(1)-C(13)	102.57(7)
C(2)-C(1)-C(6)	118.39(15)
C(2)-C(1)-P(1)	127.59(13)
C(6)-C(1)-P(1)	113.99(12)
C(3)-C(2)-C(1)	120.52(16)
C(3)-C(2)-H(2)	119.7
C(1)-C(2)-H(2)	119.7
C(4)-C(3)-C(2)	120.37(16)
C(4)-C(3)-H(3)	119.8
C(2)-C(3)-H(3)	119.8
C(5)-C(4)-C(3)	119.93(17)
C(5)-C(4)-H(4)	120.0
C(3)-C(4)-H(4)	120.0
C(4)-C(5)-C(6)	119.97(16)
C(4)-C(5)-H(5)	120.0
C(6)-C(5)-H(5)	120.0
C(5)-C(6)-C(1)	120.82(16)
C(5)-C(6)-H(6)	119.6
C(1)-C(6)-H(6)	119.6
C(8)-C(7)-C(12)	118.45(16)
C(8)-C(7)-P(1)	126.03(13)

C(12)-C(7)-P(1)	115.36(13)
C(9)-C(8)-C(7)	120.44(17)
C(9)-C(8)-H(8)	119.8
C(7)-C(8)-H(8)	119.8
C(10)-C(9)-C(8)	120.06(18)
C(10)-C(9)-H(9)	120.0
C(8)-C(9)-H(9)	120.0
C(11)-C(10)-C(9)	120.19(17)
C(11)-C(10)-H(10)	119.9
C(9)-C(10)-H(10)	119.9
C(10)-C(11)-C(12)	119.93(17)
C(10)-C(11)-H(11)	120.0
C(12)-C(11)-H(11)	120.0
C(11)-C(12)-C(7)	120.90(17)
C(11)-C(12)-H(12)	119.6
C(7)-C(12)-H(12)	119.6
B(14)-C(13)-B(15)	62.38(11)
B(14)-C(13)-B(18)	62.30(11)
B(15)-C(13)-B(18)	113.59(12)
B(14)-C(13)-B(17)	112.89(12)
B(15)-C(13)-B(17)	112.71(12)
B(18)-C(13)-B(17)	61.97(10)
B(14)-C(13)-B(16)	112.98(12)
B(15)-C(13)-B(16)	61.69(10)
B(18)-C(13)-B(16)	113.22(12)
B(17)-C(13)-B(16)	62.03(10)
B(14)-C(13)-P(1)	121.46(10)
B(15)-C(13)-P(1)	112.18(10)
B(18)-C(13)-P(1)	126.64(11)
B(17)-C(13)-P(1)	120.64(11)
B(16)-C(13)-P(1)	111.69(10)
C(13)-B(14)-B(16)#1	105.29(13)
C(13)-B(14)-B(17)#1	105.08(13)
B(16)#1-B(14)-B(17)#1	60.73(11)
C(13)-B(14)-B(18)	58.99(10)
B(16)#1-B(14)-B(18)	59.89(11)
B(17)#1-B(14)-B(18)	108.44(13)
C(13)-B(14)-B(15)	58.92(10)

B(16)#1-B(14)-B(15)	108.06(13)
B(17)#1-B(14)-B(15)	59.43(11)
B(18)-B(14)-B(15)	108.06(13)
C(13)-B(14)-H(14)	120.0(10)
B(16)#1-B(14)-H(14)	127.2(10)
B(17)#1-B(14)-H(14)	123.8(10)
B(18)-B(14)-H(14)	122.5(10)
B(15)-B(14)-H(14)	117.6(10)
C(13)-B(15)-B(17)#1	105.17(12)
C(13)-B(15)-B(18)#1	105.87(13)
B(17)#1-B(15)-B(18)#1	60.45(11)
C(13)-B(15)-B(16)	59.41(10)
B(17)#1-B(15)-B(16)	108.08(13)
B(18)#1-B(15)-B(16)	59.90(10)
C(13)-B(15)-B(14)	58.69(10)
B(17)#1-B(15)-B(14)	59.77(11)
B(18)#1-B(15)-B(14)	108.37(13)
B(16)-B(15)-B(14)	108.12(13)
C(13)-B(15)-H(15)	118.9(10)
B(17)#1-B(15)-H(15)	126.6(10)
B(18)#1-B(15)-H(15)	125.7(10)
B(16)-B(15)-H(15)	119.3(10)
B(14)-B(15)-H(15)	120.1(10)
C(13)-B(16)-B(14)#1	105.32(13)
C(13)-B(16)-B(18)#1	105.54(13)
B(14)#1-B(16)-B(18)#1	60.63(10)
C(13)-B(16)-B(15)	58.90(10)
B(14)#1-B(16)-B(15)	108.32(13)
B(18)#1-B(16)-B(15)	59.99(11)
C(13)-B(16)-B(17)	58.81(10)
B(14)#1-B(16)-B(17)	59.75(11)
B(18)#1-B(16)-B(17)	108.25(13)
B(15)-B(16)-B(17)	107.80(13)
C(13)-B(16)-H(16)	120.2(10)
B(14)#1-B(16)-H(16)	126.3(10)
B(18)#1-B(16)-H(16)	123.9(10)
B(15)-B(16)-H(16)	118.5(10)
B(17)-B(16)-H(16)	122.0(10)

C(13)-B(17)-B(15)#1	105.37(13)
C(13)-B(17)-B(14)#1	105.42(13)
B(15)#1-B(17)-B(14)#1	60.80(10)
C(13)-B(17)-B(18)	58.97(10)
B(15)#1-B(17)-B(18)	60.09(11)
B(14)#1-B(17)-B(18)	108.89(13)
C(13)-B(17)-B(16)	59.16(10)
B(15)#1-B(17)-B(16)	108.19(13)
B(14)#1-B(17)-B(16)	59.52(10)
B(18)-B(17)-B(16)	108.41(13)
C(13)-B(17)-H(17)	120.9(10)
B(15)#1-B(17)-H(17)	126.2(10)
B(14)#1-B(17)-H(17)	122.9(11)
B(18)-B(17)-H(17)	122.4(10)
B(16)-B(17)-H(17)	118.0(10)
C(13)-B(18)-B(16)#1	104.75(12)
C(13)-B(18)-B(15)#1	104.96(12)
B(16)#1-B(18)-B(15)#1	60.11(10)
C(13)-B(18)-B(17)	59.06(10)
B(16)#1-B(18)-B(17)	107.46(13)
B(15)#1-B(18)-B(17)	59.46(11)
C(13)-B(18)-B(14)	58.71(10)
B(16)#1-B(18)-B(14)	59.48(11)
B(15)#1-B(18)-B(14)	107.50(13)
B(17)-B(18)-B(14)	107.61(13)
C(13)-B(18)-H(18)	119.6(11)
B(16)#1-B(18)-H(18)	126.7(11)
B(15)#1-B(18)-H(18)	125.8(11)
B(17)-B(18)-H(18)	119.6(11)
B(14)-B(18)-H(18)	120.9(11)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y,-z+1

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\approx 2 \times 10^3$) for C26H30B10P2. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
P(1)	18(1)	17(1)	18(1)	0(1)	5(1)	0(1)
C(1)	16(1)	17(1)	23(1)	2(1)	8(1)	2(1)
C(2)	22(1)	20(1)	23(1)	2(1)	7(1)	2(1)
C(3)	23(1)	20(1)	28(1)	-3(1)	6(1)	1(1)
C(4)	23(1)	19(1)	40(1)	2(1)	12(1)	-1(1)
C(5)	30(1)	28(1)	31(1)	8(1)	14(1)	-2(1)
C(6)	23(1)	26(1)	21(1)	2(1)	8(1)	1(1)
C(7)	20(1)	19(1)	22(1)	5(1)	6(1)	3(1)
C(8)	25(1)	22(1)	34(1)	-1(1)	11(1)	1(1)
C(9)	32(1)	27(1)	43(1)	-2(1)	18(1)	6(1)
C(10)	24(1)	29(1)	44(1)	10(1)	17(1)	7(1)
C(11)	21(1)	28(1)	36(1)	8(1)	9(1)	-1(1)
C(12)	22(1)	23(1)	27(1)	3(1)	5(1)	2(1)
C(13)	16(1)	16(1)	18(1)	-1(1)	7(1)	0(1)
B(14)	17(1)	19(1)	23(1)	1(1)	4(1)	-1(1)
B(15)	21(1)	19(1)	20(1)	1(1)	9(1)	3(1)
B(16)	22(1)	17(1)	19(1)	-1(1)	4(1)	-1(1)
B(17)	17(1)	20(1)	23(1)	2(1)	9(1)	2(1)
B(18)	23(1)	18(1)	18(1)	-1(1)	7(1)	1(1)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\approx 2 \times 10^{-3}$) for C₂₆H₃₀B₁₀P₂.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	5118	3057	5325	25
H(3)	6593	4446	5539	29
H(4)	7088	5160	3752	32
H(5)	6119	4478	1743	34
H(6)	4653	3079	1516	28
H(8)	2561	3485	4542	32
H(9)	316	3876	4983	39
H(10)	-1749	2880	4247	37
H(11)	-1592	1497	3059	34
H(12)	618	1125	2563	29
H(14)	6780(20)	1605(14)	5013(18)	24(5)
H(15)	5860(20)	425(14)	2814(18)	25(5)
H(16)	3010(20)	-323(14)	2663(19)	24(5)
H(17)	2090(20)	395(14)	4775(18)	24(5)
H(18)	4380(20)	1628(15)	6247(18)	28(5)