

B(6)-B(2)-Na(2X)-O(3L)#3	-91.23(12)
B(3)-B(2)-Na(2X)-O(3L)#3	169.5(2)
O(2)-B(2)-Na(2X)-O(3L)	-103.90(15)
C(1)-B(2)-Na(2X)-O(3L)	33.49(11)
B(4)#1-B(2)-Na(2X)-O(3L)	138.89(15)
B(5)#1-B(2)-Na(2X)-O(3L)	-171.2(4)
B(6)-B(2)-Na(2X)-O(3L)	88.77(12)
B(3)-B(2)-Na(2X)-O(3L)	-10.5(2)
O(2)-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	-40(100)
C(1)-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	97(100)
B(4)#1-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	-157(100)
B(5)#1-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	-107(100)
B(6)-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	153(100)
B(3)-B(2)-Na(2X)-B(2)#3	53(100)
O(2)-B(2)-Na(2X)-B(6)	167.3(2)
C(1)-B(2)-Na(2X)-B(6)	-55.28(13)
B(4)#1-B(2)-Na(2X)-B(6)	50.12(14)
B(5)#1-B(2)-Na(2X)-B(6)	100.1(4)
B(3)-B(2)-Na(2X)-B(6)	-99.3(2)
O(2)-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	-12.7(2)
C(1)-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	124.72(13)
B(4)#1-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	-129.88(14)
B(5)#1-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	-79.9(4)
B(6)-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	180.0
B(3)-B(2)-Na(2X)-B(6)#3	80.7(2)
O(6)-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	180.0
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	45.1(2)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	-108.6(4)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	-60.3(2)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	87.1(3)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(6)#3	-10.6(2)
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(6)	-134.9(2)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(6)	71.4(4)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(6)	119.7(2)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(6)	-92.9(3)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(6)	169.4(2)

O(6)-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	16.66(18)
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	-118.21(11)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	88.0(4)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	136.39(12)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	-76.3(2)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(2)#3	-173.90(10)
O(6)-B(6)-Na(2X)-O(2)	-163.34(18)
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(2)	61.79(11)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(2)	-92.0(4)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(2)	-43.61(12)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(2)	103.7(2)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(2)	6.10(10)
O(6)-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	-67.04(16)
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	158.09(11)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	4.3(5)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	52.68(14)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	-160.0(2)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(3L)#3	102.40(12)
O(6)-B(6)-Na(2X)-O(3L)	112.96(16)
C(1)-B(6)-Na(2X)-O(3L)	-21.91(11)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-O(3L)	-175.7(5)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-O(3L)	-127.32(14)
B(5)-B(6)-Na(2X)-O(3L)	20.0(2)
B(2)-B(6)-Na(2X)-O(3L)	-77.60(12)
O(6)-B(6)-Na(2X)-B(2)	-169.4(2)
C(1)-B(6)-Na(2X)-B(2)	55.69(13)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-B(2)	-98.1(5)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-B(2)	-49.71(14)
B(5)-B(6)-Na(2X)-B(2)	97.6(2)
O(6)-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	10.6(2)
C(1)-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	-124.31(13)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	81.9(5)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	130.29(14)
B(5)-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	-82.4(2)
B(2)-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	180.0
O(6)-B(6)-Na(2X)-B(2)#3	130(100)

C(1)-B(6)-Na(2X)-B(6)#3	-5(100)
B(3)#1-B(6)-Na(2X)-B(6)#3	-159(100)
B(4)#1-B(6)-Na(2X)-B(6)#3	-110(100)
B(5)-B(6)-Na(2X)-B(6)#3	37(100)
B(2)-B(6)-Na(2X)-B(6)#3	-61(100)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x,-y+2,-z+1 #2 -x,y,-z+1/2 #3 -x+1/2,-y+5/2,-z+1

Table 8. Hydrogen bonds for Na salt 18.(H₂O)₄ [Å and °].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
O(2)-H(2)...O(1W)#4	0.72(3)	2.00(3)	2.722(3)	172(3)
O(3)-H(3)...O(1L)#2	0.77(3)	1.96(3)	2.724(2)	171(3)
O(4)-H(4)...O(5)#5	0.66(3)	2.12(3)	2.784(2)	175(3)
O(5)-H(5)...O(2L)	0.67(3)	2.18(3)	2.737(2)	143(3)
O(6)-H(6)...O(2L)#7	0.62(3)	2.38(3)	2.884(2)	140(4)
O(1Z)-H(1Z1)...O(3L)	0.80	2.32(2)	2.948(3)	137(3)
O(1W)-H(1W1)...O(3)#6	0.75(3)	2.04(3)	2.777(3)	168(3)
O(1W)-H(1W2)...O(1Z)#7	0.72(3)	2.15(3)	2.844(3)	161(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x,-y+2,-z+1 #2 -x,y,-z+1/2 #3 -x+1/2,-y+5/2,-z+1

#4 -x,y+1,-z+1/2 #5 -x,-y+1,-z+1 #6 x,y-1,z

#7 x-1/2,y-1/2,z

Table 1. Crystal data and structure refinement for K salt 19.(H₂O)₄.

Identification code	ahps	
Empirical formula	C ₂ H ₁₄ B ₁₀ K ₂ O ₁₈ S ₂	
Formula weight	576.55	
Temperature	298(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	C2/m	
Unit cell dimensions	a = 12.3129(18) Å	α = 90°.
	b = 10.0702(13) Å	β = 126.471(2)°.
	c = 8.8975(12) Å	γ = 90°.
Volume	887.2(2) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	2.158 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.867 mm ⁻¹	
F(000)	580	
Crystal size	0.05 x 0.1 x 0.3 mm ³	
Theta range for data collection	2.85 to 28.29°.	
Index ranges	-16 ≤ h ≤ 14, -13 ≤ k ≤ 10, -10 ≤ l ≤ 11	
Reflections collected	2957	
Independent reflections	1121 [R(int) = 0.0216]	
Completeness to theta = 28.29°	95.9 %	
Absorption correction	SADABS	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	1121 / 0 / 99	
Goodness-of-fit on F ²	0.516	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0263, wR2 = 0.0705	
R indices (all data)	R1 = 0.0298, wR2 = 0.0745	
Extinction coefficient	0.0028(10)	
Largest diff. peak and hole	0.424 and -0.530 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for Ksalt 19.(H₂O)₄.

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

	x	y	z	U(eq)
C(1)	1112(2)	0	7156(3)	11(1)
B(2)	1414(2)	914(2)	5741(2)	13(1)
O(2)	2594(1)	1641(2)	6488(2)	23(1)
B(3)	199(2)	1473(2)	6130(2)	13(1)
O(3)	344(1)	2641(1)	7063(2)	17(1)
B(4)	-543(2)	0	6392(3)	13(1)
O(4)	-832(2)	0	7685(2)	22(1)
S(1)	2420(1)	0	9683(1)	12(1)
O(1S)	3692(2)	0	9944(2)	23(1)
O(2S)	2177(1)	1199(1)	10347(2)	20(1)
O(1W)	6207(2)	10000	4860(3)	33(1)
K(1)	0	2498(1)	10000	23(1)

Table 3. Selected bond lengths [Å] and angles [°] for K salt 19.(H₂O)₄.

2.8886 (0.0013)	K1 - O3
3.0187 (0.0011)	K1 - O4
2.8300 (0.0013)	K1 - O2S
2.8300 (0.0013)	K1 - O2S_\$5
2.8788 (0.0015)	K1 - O2_\$3
2.8788 (0.0015)	K1 - O2_\$4
2.8886 (0.0013)	K1 - O3_\$5
2.9749 (0.0011)	K1 - O1S_\$3
2.9749 (0.0011)	K1 - O1S_\$7
3.0187 (0.0011)	K1 - O4_\$6
3.1185 (0.0040)	C1 - C1_\$8
6.7760 (0.0013)	S1 - S1_\$8
3.4348 (0.0034)	B2 - B2_\$8
3.4508 (0.0035)	B3 - B3_\$8
3.4439 (0.0047)	B4 - B4_\$8
6.2145 (0.0028)	O2 - O2_\$8
6.2285 (0.0024)	O3 - O3_\$8
6.2169 (0.0035)	O4 - O4_\$8
5.0310 (0.0013)	K1 - K1_\$6 (these are bridged by O4)
5.0392 (0.0013)	K1_\$3 - K1_\$11 (these are bridged by O1S)

Operators for generating equivalent atoms:

```

$1  -x+1/2, y+1/2, -z+1
$2  x-1, y-1, z
$3  -x+1/2, -y+1/2, -z+2
$4  x-1/2, -y+1/2, z
$5  -x, y, -z+2
$6  -x, -y, -z+2
$7  x-1/2, y+1/2, z
$8  -x, -y, -z+1
$9  -x, y, -z+1

```

\$10 $x, -y, z$

\$11 $x+1/2, y-1/2, z$

\$12 $-x, -y+1, -z+2$

Table 4. Bond lengths [Å] and angles [°] for K salt 19.(H₂O)₄.

C(1)-B(4)	1.723(3)
C(1)-B(3)#1	1.754(2)
C(1)-B(3)	1.754(2)
C(1)-B(2)#1	1.768(2)
C(1)-B(2)	1.768(2)
C(1)-S(1)	1.829(2)
B(2)-O(2)	1.392(2)
B(2)-B(3)#2	1.761(2)
B(2)-B(4)#3	1.783(3)
B(2)-B(3)	1.814(2)
B(2)-B(2)#1	1.841(4)
O(2)-K(1)#4	2.8788(15)
B(3)-O(3)	1.389(2)
B(3)-B(2)#2	1.761(2)
B(3)-B(3)#2	1.764(3)
B(3)-B(4)	1.828(2)
O(3)-K(1)	2.8886(13)
B(4)-O(4)	1.391(3)
B(4)-B(2)#3	1.783(3)
B(4)-B(2)#2	1.783(3)
B(4)-B(3)#1	1.828(2)
O(4)-K(1)	3.0187(11)
O(4)-K(1)#5	3.0187(11)
S(1)-O(1S)	1.4402(17)
S(1)-O(2S)	1.4511(12)
S(1)-O(2S)#1	1.4511(12)
O(1S)-K(1)#4	2.9749(11)
O(1S)-K(1)#6	2.9749(11)
O(2S)-K(1)	2.8300(13)
K(1)-O(2S)#7	2.8300(13)
K(1)-O(2)#4	2.8788(15)
K(1)-O(2)#8	2.8788(15)
K(1)-O(3)#7	2.8886(13)

K(1)-O(1S)#4	2.9749(11)
K(1)-O(1S)#9	2.9749(11)
K(1)-O(4)#5	3.0187(11)
K(1)-K(1)#5	5.0310(13)
K(1)-K(1)#10	5.0393(13)
B(4)-C(1)-B(3)#1	63.43(9)
B(4)-C(1)-B(3)	63.43(9)
B(3)#1-C(1)-B(3)	115.45(16)
B(4)-C(1)-B(2)#1	114.80(13)
B(3)#1-C(1)-B(2)#1	62.00(9)
B(3)-C(1)-B(2)#1	114.26(13)
B(4)-C(1)-B(2)	114.80(13)
B(3)#1-C(1)-B(2)	114.26(13)
B(3)-C(1)-B(2)	62.00(9)
B(2)#1-C(1)-B(2)	62.75(13)
B(4)-C(1)-S(1)	117.08(14)
B(3)#1-C(1)-S(1)	117.60(8)
B(3)-C(1)-S(1)	117.60(8)
B(2)#1-C(1)-S(1)	118.11(11)
B(2)-C(1)-S(1)	118.11(11)
O(2)-B(2)-B(3)#2	123.60(15)
O(2)-B(2)-C(1)	122.34(14)
B(3)#2-B(2)-C(1)	104.05(12)
O(2)-B(2)-B(4)#3	125.21(15)
B(3)#2-B(2)-B(4)#3	62.07(10)
C(1)-B(2)-B(4)#3	103.93(12)
O(2)-B(2)-B(3)	119.35(14)
B(3)#2-B(2)-B(3)	59.10(11)
C(1)-B(2)-B(3)	58.62(9)
B(4)#3-B(2)-B(3)	108.68(13)
O(2)-B(2)-B(2)#1	121.73(10)
B(3)#2-B(2)-B(2)#1	108.62(8)
C(1)-B(2)-B(2)#1	58.63(7)
B(4)#3-B(2)-B(2)#1	58.93(7)
B(3)-B(2)-B(2)#1	108.06(8)

B(2)-O(2)-K(1)#4	141.72(10)
O(3)-B(3)-C(1)	126.18(13)
O(3)-B(3)-B(2)#2	120.50(13)
C(1)-B(3)-B(2)#2	103.64(12)
O(3)-B(3)-B(3)#2	122.09(8)
C(1)-B(3)-B(3)#2	104.53(10)
B(2)#2-B(3)-B(3)#2	61.93(10)
O(3)-B(3)-B(2)	123.31(13)
C(1)-B(3)-B(2)	59.38(10)
B(2)#2-B(3)-B(2)	108.39(12)
B(3)#2-B(3)-B(2)	58.96(11)
O(3)-B(3)-B(4)	120.49(14)
C(1)-B(3)-B(4)	57.46(10)
B(2)#2-B(3)-B(4)	59.55(11)
B(3)#2-B(3)-B(4)	108.91(11)
B(2)-B(3)-B(4)	107.71(12)
B(3)-O(3)-K(1)	117.55(10)
O(4)-B(4)-C(1)	119.86(18)
O(4)-B(4)-B(2)#3	126.30(15)
C(1)-B(4)-B(2)#3	104.01(14)
O(4)-B(4)-B(2)#2	126.30(15)
C(1)-B(4)-B(2)#2	104.01(14)
B(2)#3-B(4)-B(2)#2	62.14(14)
O(4)-B(4)-B(3)	119.88(10)
C(1)-B(4)-B(3)	59.12(9)
B(2)#3-B(4)-B(3)	108.24(14)
B(2)#2-B(4)-B(3)	58.37(9)
O(4)-B(4)-B(3)#1	119.88(10)
C(1)-B(4)-B(3)#1	59.12(9)
B(2)#3-B(4)-B(3)#1	58.37(9)
B(2)#2-B(4)-B(3)#1	108.24(14)
B(3)-B(4)-B(3)#1	108.45(16)
B(4)-O(4)-K(1)	114.48(6)
B(4)-O(4)-K(1)#5	114.48(6)
K(1)-O(4)-K(1)#5	112.88(6)
O(1S)-S(1)-O(2S)	113.70(6)

O(1S)-S(1)-O(2S)#1	113.70(6)
O(2S)-S(1)-O(2S)#1	112.56(11)
O(1S)-S(1)-C(1)	106.05(10)
O(2S)-S(1)-C(1)	104.89(6)
O(2S)#1-S(1)-C(1)	104.89(6)
S(1)-O(1S)-K(1)#4	121.92(3)
S(1)-O(1S)-K(1)#6	121.92(3)
K(1)#4-O(1S)-K(1)#6	115.77(6)
S(1)-O(2S)-K(1)	138.70(7)
O(2S)#7-K(1)-O(2S)	124.92(6)
O(2S)#7-K(1)-O(2)#4	123.70(3)
O(2S)-K(1)-O(2)#4	73.96(4)
O(2S)#7-K(1)-O(2)#8	73.96(4)
O(2S)-K(1)-O(2)#8	123.70(3)
O(2)#4-K(1)-O(2)#8	144.95(7)
O(2S)#7-K(1)-O(3)#7	58.88(3)
O(2S)-K(1)-O(3)#7	124.27(4)
O(2)#4-K(1)-O(3)#7	67.23(4)
O(2)#8-K(1)-O(3)#7	110.91(4)
O(2S)#7-K(1)-O(3)	124.27(4)
O(2S)-K(1)-O(3)	58.88(3)
O(2)#4-K(1)-O(3)	110.91(4)
O(2)#8-K(1)-O(3)	67.23(4)
O(3)#7-K(1)-O(3)	174.28(5)
O(2S)#7-K(1)-O(1S)#4	149.51(4)
O(2S)-K(1)-O(1S)#4	85.50(4)
O(2)#4-K(1)-O(1S)#4	61.90(4)
O(2)#8-K(1)-O(1S)#4	87.76(5)
O(3)#7-K(1)-O(1S)#4	108.15(4)
O(3)-K(1)-O(1S)#4	66.66(4)
O(2S)#7-K(1)-O(1S)#9	85.50(4)
O(2S)-K(1)-O(1S)#9	149.51(4)
O(2)#4-K(1)-O(1S)#9	87.76(5)
O(2)#8-K(1)-O(1S)#9	61.90(4)
O(3)#7-K(1)-O(1S)#9	66.66(4)
O(3)-K(1)-O(1S)#9	108.16(4)

O(1S)#4-K(1)-O(1S)#9	64.23(6)
O(2S)#7-K(1)-O(4)	67.98(4)
O(2S)-K(1)-O(4)	66.69(4)
O(2)#4-K(1)-O(4)	134.78(5)
O(2)#8-K(1)-O(4)	78.32(5)
O(3)#7-K(1)-O(4)	119.10(4)
O(3)-K(1)-O(4)	66.23(4)
O(1S)#4-K(1)-O(4)	132.68(4)
O(1S)#9-K(1)-O(4)	137.19(5)
O(2S)#7-K(1)-O(4)#5	66.69(4)
O(2S)-K(1)-O(4)#5	67.98(4)
O(2)#4-K(1)-O(4)#5	78.32(4)
O(2)#8-K(1)-O(4)#5	134.78(5)
O(3)#7-K(1)-O(4)#5	66.23(4)
O(3)-K(1)-O(4)#5	119.10(4)
O(1S)#4-K(1)-O(4)#5	137.19(5)
O(1S)#9-K(1)-O(4)#5	132.68(4)
O(4)-K(1)-O(4)#5	67.12(6)
O(2S)#7-K(1)-K(1)#5	62.46(3)
O(2S)-K(1)-K(1)#5	62.46(3)
O(2)#4-K(1)-K(1)#5	107.53(4)
O(2)#8-K(1)-K(1)#5	107.53(4)
O(3)#7-K(1)-K(1)#5	92.86(3)
O(3)-K(1)-K(1)#5	92.86(3)
O(1S)#4-K(1)-K(1)#5	147.88(3)
O(1S)#9-K(1)-K(1)#5	147.88(3)
O(4)-K(1)-K(1)#5	33.56(3)
O(4)#5-K(1)-K(1)#5	33.56(3)
O(2S)#7-K(1)-K(1)#10	117.54(3)
O(2S)-K(1)-K(1)#10	117.54(3)
O(2)#4-K(1)-K(1)#10	72.47(4)
O(2)#8-K(1)-K(1)#10	72.47(4)
O(3)#7-K(1)-K(1)#10	87.14(3)
O(3)-K(1)-K(1)#10	87.14(3)
O(1S)#4-K(1)-K(1)#10	32.12(3)
O(1S)#9-K(1)-K(1)#10	32.12(3)

O(4)-K(1)-K(1)#10	146.44(3)
O(4)#5-K(1)-K(1)#10	146.44(3)
K(1)#5-K(1)-K(1)#10	180.0

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x, y, z #2 $-x, y, -z+1$ #3 $-x, -y, -z+1$ #4 $-x+1/2, -y+1/2, -z+2$

#5 $-x, -y, -z+2$ #6 $x+1/2, y-1/2, z$ #7 $-x, y, -z+2$

#8 $x-1/2, -y+1/2, z$ #9 $x-1/2, y+1/2, z$ #10 $-x, -y+1, -z+2$

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for K salt $19.(\text{H}_2\text{O})_4$.

. 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}
C(1)	12(1)	12(1)	9(1)	0	6(1)	0
B(2)	13(1)	15(1)	10(1)	0(1)	6(1)	-2(1)
O(2)	19(1)	29(1)	18(1)	0(1)	9(1)	-10(1)
B(3)	14(1)	13(1)	10(1)	0(1)	6(1)	1(1)
O(3)	18(1)	15(1)	14(1)	-4(1)	7(1)	0(1)
B(4)	12(1)	16(1)	10(1)	0	6(1)	0
O(4)	17(1)	37(1)	15(1)	0	12(1)	0
S(1)	12(1)	14(1)	8(1)	0	4(1)	0
O(1S)	13(1)	35(1)	17(1)	0	8(1)	0
O(2S)	21(1)	18(1)	14(1)	-4(1)	7(1)	1(1)
O(1W)	28(1)	27(1)	43(1)	0	22(1)	0
K(1)	24(1)	29(1)	19(1)	0	14(1)	0

Table 6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$)
for K salt 19.(H₂O)₄.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	2720(30)	1650(40)	6110(40)	35
H(3)	1110(30)	2870(20)	7800(30)	26
H(4)	-1460(40)	0	7300(50)	32
H(1W)	5730(30)	9360(30)	4440(40)	49

Table 7. Torsion angles [°] for K salt 19.(H₂O)₄.

B(4)-C(1)-B(2)-O(2)	143.58(15)
B(3)#1-C(1)-B(2)-O(2)	-145.83(16)
B(3)-C(1)-B(2)-O(2)	107.06(18)
B(2)#1-C(1)-B(2)-O(2)	-110.06(15)
S(1)-C(1)-B(2)-O(2)	-1.0(2)
B(4)-C(1)-B(2)-B(3)#2	-2.89(14)
B(3)#1-C(1)-B(2)-B(3)#2	67.70(16)
B(3)-C(1)-B(2)-B(3)#2	-39.41(10)
B(2)#1-C(1)-B(2)-B(3)#2	103.47(10)
S(1)-C(1)-B(2)-B(3)#2	-147.52(10)
B(4)-C(1)-B(2)-B(4)#3	-67.09(13)
B(3)#1-C(1)-B(2)-B(4)#3	3.51(17)
B(3)-C(1)-B(2)-B(4)#3	-103.60(12)
B(2)#1-C(1)-B(2)-B(4)#3	39.28(13)
S(1)-C(1)-B(2)-B(4)#3	148.29(10)
B(4)-C(1)-B(2)-B(3)	36.51(10)
B(3)#1-C(1)-B(2)-B(3)	107.11(17)
B(2)#1-C(1)-B(2)-B(3)	142.88(10)
S(1)-C(1)-B(2)-B(3)	-108.11(10)
B(4)-C(1)-B(2)-B(2)#1	-106.36(11)
B(3)#1-C(1)-B(2)-B(2)#1	-35.77(8)
B(3)-C(1)-B(2)-B(2)#1	-142.88(10)
S(1)-C(1)-B(2)-B(2)#1	109.01(11)
B(3)#2-B(2)-O(2)-K(1)#4	132.74(16)
C(1)-B(2)-O(2)-K(1)#4	-7.2(3)
B(4)#3-B(2)-O(2)-K(1)#4	-149.93(13)
B(3)-B(2)-O(2)-K(1)#4	62.2(2)
B(2)#1-B(2)-O(2)-K(1)#4	-77.76(19)
B(4)-C(1)-B(3)-O(3)	106.20(18)
B(3)#1-C(1)-B(3)-O(3)	143.83(12)
B(2)#1-C(1)-B(3)-O(3)	-147.01(15)
B(2)-C(1)-B(3)-O(3)	-110.96(17)
S(1)-C(1)-B(3)-O(3)	-2.0(2)

B(4)-C(1)-B(3)-B(2)#2	-39.34(12)
B(3)#1-C(1)-B(3)-B(2)#2	-1.7(2)
B(2)#1-C(1)-B(3)-B(2)#2	67.46(16)
B(2)-C(1)-B(3)-B(2)#2	103.51(11)
S(1)-C(1)-B(3)-B(2)#2	-147.57(12)
B(4)-C(1)-B(3)-B(3)#2	-103.41(15)
B(3)#1-C(1)-B(3)-B(3)#2	-65.8(2)
B(2)#1-C(1)-B(3)-B(3)#2	3.39(18)
B(2)-C(1)-B(3)-B(3)#2	39.44(12)
S(1)-C(1)-B(3)-B(3)#2	148.36(13)
B(4)-C(1)-B(3)-B(2)	-142.85(13)
B(3)#1-C(1)-B(3)-B(2)	-105.21(16)
B(2)#1-C(1)-B(3)-B(2)	-36.05(12)
S(1)-C(1)-B(3)-B(2)	108.92(14)
B(3)#1-C(1)-B(3)-B(4)	37.63(16)
B(2)#1-C(1)-B(3)-B(4)	106.79(15)
B(2)-C(1)-B(3)-B(4)	142.85(13)
S(1)-C(1)-B(3)-B(4)	-108.24(15)
O(2)-B(2)-B(3)-O(3)	3.5(2)
B(3)#2-B(2)-B(3)-O(3)	-110.27(12)
C(1)-B(2)-B(3)-O(3)	115.59(16)
B(4)#3-B(2)-B(3)-O(3)	-149.16(13)
B(2)#1-B(2)-B(3)-O(3)	148.41(12)
O(2)-B(2)-B(3)-C(1)	-112.07(16)
B(3)#2-B(2)-B(3)-C(1)	134.14(11)
B(4)#3-B(2)-B(3)-C(1)	95.25(12)
B(2)#1-B(2)-B(3)-C(1)	32.82(8)
O(2)-B(2)-B(3)-B(2)#2	152.65(14)
B(3)#2-B(2)-B(3)-B(2)#2	38.86(15)
C(1)-B(2)-B(3)-B(2)#2	-95.28(12)
B(4)#3-B(2)-B(3)-B(2)#2	-0.03(17)
B(2)#1-B(2)-B(3)-B(2)#2	-62.46(11)
O(2)-B(2)-B(3)-B(3)#2	113.79(16)
C(1)-B(2)-B(3)-B(3)#2	-134.14(11)
B(4)#3-B(2)-B(3)-B(3)#2	-38.88(8)
B(2)#1-B(2)-B(3)-B(3)#2	-101.32(6)

O(2)-B(2)-B(3)-B(4)	-144.38(15)
B(3)#2-B(2)-B(3)-B(4)	101.83(13)
C(1)-B(2)-B(3)-B(4)	-32.31(12)
B(4)#3-B(2)-B(3)-B(4)	62.95(16)
B(2)#1-B(2)-B(3)-B(4)	0.51(12)
C(1)-B(3)-O(3)-K(1)	-56.73(18)
B(2)#2-B(3)-O(3)-K(1)	83.61(14)
B(3)#2-B(3)-O(3)-K(1)	157.63(14)
B(2)-B(3)-O(3)-K(1)	-130.80(12)
B(4)-B(3)-O(3)-K(1)	13.22(18)
B(3)#1-C(1)-B(4)-O(4)	109.03(8)
B(3)-C(1)-B(4)-O(4)	-109.03(8)
B(2)#1-C(1)-B(4)-O(4)	145.00(9)
B(2)-C(1)-B(4)-O(4)	-145.00(9)
S(1)-C(1)-B(4)-O(4)	0.0
B(3)#1-C(1)-B(4)-B(2)#3	-38.83(10)
B(3)-C(1)-B(4)-B(2)#3	103.11(12)
B(2)#1-C(1)-B(4)-B(2)#3	-2.86(12)
B(2)-C(1)-B(4)-B(2)#3	67.13(12)
S(1)-C(1)-B(4)-B(2)#3	-147.86(8)
B(3)#1-C(1)-B(4)-B(2)#2	-103.11(12)
B(3)-C(1)-B(4)-B(2)#2	38.83(10)
B(2)#1-C(1)-B(4)-B(2)#2	-67.13(12)
B(2)-C(1)-B(4)-B(2)#2	2.86(12)
S(1)-C(1)-B(4)-B(2)#2	147.86(8)
B(3)#1-C(1)-B(4)-B(3)	-141.94(16)
B(2)#1-C(1)-B(4)-B(3)	-105.97(13)
B(2)-C(1)-B(4)-B(3)	-35.97(11)
S(1)-C(1)-B(4)-B(3)	109.03(8)
B(3)-C(1)-B(4)-B(3)#1	141.94(16)
B(2)#1-C(1)-B(4)-B(3)#1	35.97(11)
B(2)-C(1)-B(4)-B(3)#1	105.97(13)
S(1)-C(1)-B(4)-B(3)#1	-109.03(8)
O(3)-B(3)-B(4)-O(4)	-6.9(3)
C(1)-B(3)-B(4)-O(4)	109.0(2)
B(2)#2-B(3)-B(4)-O(4)	-116.6(2)

B(3)#2-B(3)-B(4)-O(4)	-155.50(17)
B(2)-B(3)-B(4)-O(4)	142.06(17)
O(3)-B(3)-B(4)-C(1)	-115.91(16)
B(2)#2-B(3)-B(4)-C(1)	134.39(14)
B(3)#2-B(3)-B(4)-C(1)	95.50(15)
B(2)-B(3)-B(4)-C(1)	33.07(12)
O(3)-B(3)-B(4)-B(2)#3	148.36(14)
C(1)-B(3)-B(4)-B(2)#3	-95.73(14)
B(2)#2-B(3)-B(4)-B(2)#3	38.67(12)
B(3)#2-B(3)-B(4)-B(2)#3	-0.22(18)
B(2)-B(3)-B(4)-B(2)#3	-62.66(16)
O(3)-B(3)-B(4)-B(2)#2	109.70(16)
C(1)-B(3)-B(4)-B(2)#2	-134.39(14)
B(3)#2-B(3)-B(4)-B(2)#2	-38.89(13)
B(2)-B(3)-B(4)-B(2)#2	-101.33(12)
O(3)-B(3)-B(4)-B(3)#1	-149.81(11)
C(1)-B(3)-B(4)-B(3)#1	-33.90(14)
B(2)#2-B(3)-B(4)-B(3)#1	100.49(15)
B(3)#2-B(3)-B(4)-B(3)#1	61.6(2)
B(2)-B(3)-B(4)-B(3)#1	-0.83(19)
C(1)-B(4)-O(4)-K(1)	66.29(8)
B(2)#3-B(4)-O(4)-K(1)	-153.53(10)
B(2)#2-B(4)-O(4)-K(1)	-73.88(19)
B(3)-B(4)-O(4)-K(1)	-3.1(2)
B(3)#1-B(4)-O(4)-K(1)	135.64(11)
C(1)-B(4)-O(4)-K(1)#5	-66.29(8)
B(2)#3-B(4)-O(4)-K(1)#5	73.88(19)
B(2)#2-B(4)-O(4)-K(1)#5	153.53(10)
B(3)-B(4)-O(4)-K(1)#5	-135.64(11)
B(3)#1-B(4)-O(4)-K(1)#5	3.1(2)
B(4)-C(1)-S(1)-O(1S)	180.0
B(3)#1-C(1)-S(1)-O(1S)	107.43(12)
B(3)-C(1)-S(1)-O(1S)	-107.43(12)
B(2)#1-C(1)-S(1)-O(1S)	36.18(9)
B(2)-C(1)-S(1)-O(1S)	-36.18(9)
B(4)-C(1)-S(1)-O(2S)	-59.39(6)

B(3)#1-C(1)-S(1)-O(2S)	-131.96(12)
B(3)-C(1)-S(1)-O(2S)	13.18(15)
B(2)#1-C(1)-S(1)-O(2S)	156.79(10)
B(2)-C(1)-S(1)-O(2S)	84.43(12)
B(4)-C(1)-S(1)-O(2S)#1	59.39(6)
B(3)#1-C(1)-S(1)-O(2S)#1	-13.18(15)
B(3)-C(1)-S(1)-O(2S)#1	131.96(12)
B(2)#1-C(1)-S(1)-O(2S)#1	-84.43(12)
B(2)-C(1)-S(1)-O(2S)#1	-156.79(10)
O(2S)-S(1)-O(1S)-K(1)#4	-28.47(13)
O(2S)#1-S(1)-O(1S)-K(1)#4	-159.02(8)
C(1)-S(1)-O(1S)-K(1)#4	86.25(8)
O(2S)-S(1)-O(1S)-K(1)#6	159.02(8)
O(2S)#1-S(1)-O(1S)-K(1)#6	28.47(13)
C(1)-S(1)-O(1S)-K(1)#6	-86.25(8)
O(1S)-S(1)-O(2S)-K(1)	165.21(10)
O(2S)#1-S(1)-O(2S)-K(1)	-63.68(14)
C(1)-S(1)-O(2S)-K(1)	49.80(12)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(2S)#7	34.14(9)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(2)#4	154.36(11)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(2)#8	-59.33(12)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(3)#7	107.45(10)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(3)	-78.24(10)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(1S)#4	-143.62(11)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(1S)#9	-150.29(10)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(4)	-2.86(10)
S(1)-O(2S)-K(1)-O(4)#5	70.73(11)
S(1)-O(2S)-K(1)-K(1)#5	34.14(9)
S(1)-O(2S)-K(1)-K(1)#10	-145.86(9)
B(3)-O(3)-K(1)-O(2S)#7	-47.58(12)
B(3)-O(3)-K(1)-O(2S)	65.85(11)
B(3)-O(3)-K(1)-O(2)#4	120.66(11)
B(3)-O(3)-K(1)-O(2)#8	-97.15(11)
B(3)-O(3)-K(1)-O(3)#7	-169.33(11)
B(3)-O(3)-K(1)-O(1S)#4	165.10(11)
B(3)-O(3)-K(1)-O(1S)#9	-144.67(11)

B(3)-O(3)-K(1)-O(4)	-10.31(10)
B(3)-O(3)-K(1)-O(4)#5	32.70(12)
B(3)-O(3)-K(1)-K(1)#5	10.67(10)
B(3)-O(3)-K(1)-K(1)#10	-169.33(10)
B(4)-O(4)-K(1)-O(2S)#7	153.67(14)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(2S)#7	-72.98(6)
B(4)-O(4)-K(1)-O(2S)	-58.49(14)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(2S)	74.86(6)
B(4)-O(4)-K(1)-O(2)#4	-90.11(14)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(2)#4	43.24(8)
B(4)-O(4)-K(1)-O(2)#8	76.43(14)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(2)#8	-150.23(6)
B(4)-O(4)-K(1)-O(3)#7	-175.99(13)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(3)#7	-42.65(7)
B(4)-O(4)-K(1)-O(3)	6.35(13)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(3)	139.69(7)
B(4)-O(4)-K(1)-O(1S)#4	0.61(16)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(1S)#4	133.95(5)
B(4)-O(4)-K(1)-O(1S)#9	97.81(15)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(1S)#9	-128.84(6)
B(4)-O(4)-K(1)-O(4)#5	-133.34(17)
K(1)#5-O(4)-K(1)-O(4)#5	0.0
B(4)-O(4)-K(1)-K(1)#5	-133.34(17)
B(4)-O(4)-K(1)-K(1)#10	46.66(17)
K(1)#5-O(4)-K(1)-K(1)#10	180.0

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x,-y,z #2 -x,y,-z+1 #3 -x,-y,-z+1 #4 -x+1/2,-y+1/2,-z+2

#5 -x,-y,-z+2 #6 x+1/2,y-1/2,z #7 -x,y,-z+2

#8 x-1/2,-y+1/2,z #9 x-1/2,y+1/2,z #10 -x,-y+1,-z+2

Table 8. Hydrogen bonds for K salt 19.(H₂O)₄.

[Å and °].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
O(1W)-H(1W)...O(3)#11	0.80(3)	2.11(3)	2.8867(18)	165(3)
O(3)-H(3)...O(2S)#4	0.80(3)	1.98(3)	2.7622(17)	167(2)
O(4)-H(4)...O(1W)#12	0.64(4)	2.35(4)	2.953(3)	157(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x,-y,z #2 -x,y,-z+1 #3 -x,-y,-z+1 #4 -x+1/2,-y+1/2,-z+2

#5 -x,-y,-z+2 #6 x+1/2,y-1/2,z #7 -x,y,-z+2

#8 x-1/2,-y+1/2,z #9 x-1/2,y+1/2,z #10 -x,-y+1,-z+2

#11 -x+1/2,y+1/2,-z+1 #12 x-1,y-1,z

Table 1. Crystal data and structure refinement for 20.

Identification code	a home	
Empirical formula	C ₁₄ H ₃₆ B ₁₀ O ₁₆ S ₂	
Formula weight	632.65	
Temperature	298(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	monoclinic	
Space group	P2 ₁ /c	
Unit cell dimensions	a = 15.5395(15) Å	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 13.5678(14) Å	$\beta = 93.092(2)^\circ$.
	c = 13.6715(14) Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volume	2878.3(5) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.460 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.255 mm ⁻¹	
F(000)	1320	
Crystal size	0.45 x 0.45 x 0.1 mm ³	
Theta range for data collection	1.31 to 28.31°	
Index ranges	-14 ≤ h ≤ 20, -18 ≤ k ≤ 12, -17 ≤ l ≤ 17	
Reflections collected	18871	
Independent reflections	6967 [R(int) = 0.0243]	
Completeness to theta = 28.31°	97.4 %	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	6967 / 0 / 438	
Goodness-of-fit on F ²	0.994	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0794, wR2 = 0.2118	
R indices (all data)	R1 = 0.1005, wR2 = 0.2386	
Largest diff. peak and hole	1.639 and -0.285 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 20. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
S(1)	8222(3)	6021(3)	824(4)	41(1)
O(1S)	7456(2)	5420(3)	338(2)	61(1)
C(1S)	6949(9)	4756(12)	840(10)	108(5)
O(2S)	8156(3)	6970(3)	506(4)	88(2)
O(3S)	8211(3)	5822(4)	1873(3)	70(1)
S(1')	8065(9)	5860(11)	838(15)	37(2)
O(2S')	7690(10)	6370(14)	-43(10)	93(7)
O(1S')	7674(8)	5069(10)	1197(10)	80(5)
O(3S')	8312(10)	6464(18)	1582(16)	107(10)
C(1S')	6810(30)	4700(30)	900(20)	54(6)
C(1A)	9152(1)	5438(2)	375(2)	28(1)
B(2A)	9255(2)	4151(2)	368(2)	33(1)
O(2A)	8581(1)	3545(2)	610(1)	47(1)
C(2A)	8602(2)	2941(3)	1451(2)	60(1)
B(3A)	9086(2)	4859(2)	-781(2)	34(1)
O(3A)	8340(1)	4841(2)	-1368(1)	46(1)
C(3A)	7850(2)	3978(3)	-1556(3)	58(1)
B(4A)	9627(2)	6056(2)	-597(2)	33(1)
O(4A)	9345(1)	6948(1)	-978(1)	46(1)
C(4A)	8724(2)	7036(3)	-1774(3)	64(1)
B(5A)	10105(2)	6082(2)	661(2)	33(1)
O(5A)	10126(1)	6909(1)	1254(1)	46(1)
C(5A)	10215(3)	7881(2)	882(3)	70(1)
B(6A)	9888(2)	4903(2)	1261(2)	34(1)
O(6A)	9734(1)	4780(2)	2238(1)	47(1)
C(6A)	10091(2)	5435(2)	2974(2)	51(1)
S(2)	3291(1)	8762(1)	792(1)	44(1)
O(4S)	2489(1)	9253(2)	300(2)	65(1)
C(4S)	1976(2)	9942(3)	881(4)	89(1)
O(5S)	3283(2)	8889(2)	1827(2)	67(1)
O(6S)	3331(2)	7806(2)	424(2)	82(1)

C(1B)	4196(1)	9449(2)	362(2)	27(1)
B(2B)	5138(2)	9445(2)	1145(2)	32(1)
O(2B)	5197(1)	8917(1)	2009(1)	43(1)
C(2B)	5223(2)	9404(3)	2940(2)	55(1)
B(3B)	5072(2)	8719(2)	-3(2)	32(1)
O(3B)	5063(1)	7712(1)	-62(1)	43(1)
C(3B)	5454(3)	7082(2)	662(2)	66(1)
B(4B)	4366(2)	9399(2)	-902(2)	33(1)
O(4B)	3787(1)	8960(1)	-1559(1)	44(1)
C(4B)	3901(2)	7995(2)	-1936(2)	55(1)
B(5B)	4011(2)	10542(2)	-322(2)	31(1)
O(5B)	3213(1)	10964(1)	-471(1)	41(1)
C(5B)	2727(2)	10929(3)	-1386(2)	56(1)
B(6B)	4476(2)	10561(2)	948(2)	32(1)
O(6B)	4029(1)	10906(2)	1719(1)	45(1)
C(6B)	3577(2)	11821(2)	1699(2)	49(1)

Table 4. Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$] for 20.

S(1)-O(3S')	1.200(14)
S(1)-O(2S)	1.362(6)
S(1)-O(3S)	1.461(7)
S(1)-O(2S')	1.486(14)
S(1)-O(1S)	1.561(5)
S(1)-O(1S')	1.643(13)
S(1)-C(1A)	1.785(5)
O(1S)-C(1S)	1.400(13)
S(1')-O(1S')	1.338(17)
S(1')-O(3S')	1.35(2)
S(1')-O(2S')	1.48(2)
O(1S')-C(1S')	1.47(4)
C(1A)-B(5A)	1.745(3)
C(1A)-B(2A)	1.753(4)
C(1A)-B(3A)	1.762(4)
C(1A)-B(4A)	1.766(4)
C(1A)-B(6A)	1.775(4)
B(2A)-O(2A)	1.385(3)
B(2A)-B(4A)#1	1.770(4)
B(2A)-B(5A)#1	1.794(4)
B(2A)-B(6A)	1.836(4)
B(2A)-B(3A)	1.848(4)
O(2A)-C(2A)	1.411(3)
B(3A)-O(3A)	1.375(3)
B(3A)-B(6A)#1	1.787(4)
B(3A)-B(5A)#1	1.793(4)
B(3A)-B(4A)	1.840(4)
O(3A)-C(3A)	1.413(3)
B(4A)-O(4A)	1.381(3)
B(4A)-B(2A)#1	1.770(4)
B(4A)-B(6A)#1	1.777(4)
B(4A)-B(5A)	1.835(4)
O(4A)-C(4A)	1.420(3)
B(5A)-O(5A)	1.384(3)

B(5A)-B(3A)#1	1.793(4)
B(5A)-B(2A)#1	1.794(4)
B(5A)-B(6A)	1.837(4)
O(5A)-C(5A)	1.423(4)
B(6A)-O(6A)	1.379(3)
B(6A)-B(4A)#1	1.777(4)
B(6A)-B(3A)#1	1.787(4)
O(6A)-C(6A)	1.432(3)
S(2)-O(6S)	1.394(3)
S(2)-O(5S)	1.427(3)
S(2)-O(4S)	1.536(2)
S(2)-C(1B)	1.812(2)
O(4S)-C(4S)	1.485(5)
C(1B)-B(6B)	1.753(3)
C(1B)-B(4B)	1.763(4)
C(1B)-B(2B)	1.767(3)
C(1B)-B(5B)	1.769(3)
C(1B)-B(3B)	1.776(3)
B(2B)-O(2B)	1.380(3)
B(2B)-B(5B)#2	1.782(4)
B(2B)-B(4B)#2	1.786(4)
B(2B)-B(6B)	1.843(4)
B(2B)-B(3B)	1.852(4)
O(2B)-C(2B)	1.433(3)
B(3B)-O(3B)	1.369(3)
B(3B)-B(5B)#2	1.780(4)
B(3B)-B(6B)#2	1.792(4)
B(3B)-B(4B)	1.850(4)
O(3B)-C(3B)	1.420(3)
B(4B)-O(4B)	1.373(3)
B(4B)-B(2B)#2	1.786(4)
B(4B)-B(6B)#2	1.806(4)
B(4B)-B(5B)	1.840(4)
O(4B)-C(4B)	1.421(3)
B(5B)-O(5B)	1.370(3)
B(5B)-B(3B)#2	1.780(4)

B(5B)-B(2B)#2	1.782(4)
B(5B)-B(6B)	1.845(4)
O(5B)-C(5B)	1.427(3)
B(6B)-O(6B)	1.375(3)
B(6B)-B(3B)#2	1.792(4)
B(6B)-B(4B)#2	1.806(4)
O(6B)-C(6B)	1.425(3)

O(3S')-S(1)-O(2S)	78.8(14)
O(3S')-S(1)-O(3S)	41.5(14)
O(2S)-S(1)-O(3S)	118.9(4)
O(3S')-S(1)-O(2S')	124.2(13)
O(2S)-S(1)-O(2S')	54.2(8)
O(3S)-S(1)-O(2S')	143.8(6)
O(3S')-S(1)-O(1S)	132.8(10)
O(2S)-S(1)-O(1S)	108.4(5)
O(3S)-S(1)-O(1S)	105.8(3)
O(2S')-S(1)-O(1S)	56.5(8)
O(3S')-S(1)-O(1S')	99.4(14)
O(2S)-S(1)-O(1S')	144.2(6)
O(3S)-S(1)-O(1S')	61.1(6)
O(2S')-S(1)-O(1S')	102.8(9)
O(1S)-S(1)-O(1S')	47.6(5)
O(3S')-S(1)-C(1A)	117.4(8)
O(2S)-S(1)-C(1A)	110.9(3)
O(3S)-S(1)-C(1A)	108.0(4)
O(2S')-S(1)-C(1A)	107.0(5)
O(1S)-S(1)-C(1A)	103.6(3)
O(1S')-S(1)-C(1A)	101.6(5)
C(1S)-O(1S)-S(1)	124.3(7)
O(1S')-S(1')-O(3S')	109.1(19)
O(1S')-S(1')-O(2S')	120.4(14)
O(3S')-S(1')-O(2S')	114.4(18)
S(1')-O(2S')-S(1)	12.8(4)
S(1')-O(1S')-C(1S')	126.8(19)
S(1')-O(1S')-S(1)	4.9(10)

C(1S')-O(1S')-S(1)	131.7(17)
S(1)-O(3S')-S(1')	13.3(7)
B(5A)-C(1A)-B(2A)	115.07(18)
B(5A)-C(1A)-B(3A)	115.59(18)
B(2A)-C(1A)-B(3A)	63.40(15)
B(5A)-C(1A)-B(4A)	63.04(15)
B(2A)-C(1A)-B(4A)	115.27(18)
B(3A)-C(1A)-B(4A)	62.87(15)
B(5A)-C(1A)-B(6A)	62.92(15)
B(2A)-C(1A)-B(6A)	62.70(15)
B(3A)-C(1A)-B(6A)	115.74(18)
B(4A)-C(1A)-B(6A)	115.32(17)
B(5A)-C(1A)-S(1)	113.2(2)
B(2A)-C(1A)-S(1)	121.2(2)
B(3A)-C(1A)-S(1)	119.7(2)
B(4A)-C(1A)-S(1)	115.3(2)
B(6A)-C(1A)-S(1)	116.7(2)
O(2A)-B(2A)-C(1A)	121.3(2)
O(2A)-B(2A)-B(4A)#1	127.7(2)
C(1A)-B(2A)-B(4A)#1	104.18(18)
O(2A)-B(2A)-B(5A)#1	122.8(2)
C(1A)-B(2A)-B(5A)#1	103.52(18)
B(4A)#1-B(2A)-B(5A)#1	61.98(16)
O(2A)-B(2A)-B(6A)	123.8(2)
C(1A)-B(2A)-B(6A)	59.22(14)
B(4A)#1-B(2A)-B(6A)	59.02(15)
B(5A)#1-B(2A)-B(6A)	108.63(19)
O(2A)-B(2A)-B(3A)	115.9(2)
C(1A)-B(2A)-B(3A)	58.54(14)
B(4A)#1-B(2A)-B(3A)	109.00(19)
B(5A)#1-B(2A)-B(3A)	58.97(15)
B(6A)-B(2A)-B(3A)	108.84(18)
B(2A)-O(2A)-C(2A)	123.7(2)
O(3A)-B(3A)-C(1A)	122.6(2)
O(3A)-B(3A)-B(6A)#1	122.0(2)
C(1A)-B(3A)-B(6A)#1	103.80(18)

O(3A)-B(3A)-B(5A)#1	127.3(2)
C(1A)-B(3A)-B(5A)#1	103.19(18)
B(6A)#1-B(3A)-B(5A)#1	61.75(16)
O(3A)-B(3A)-B(4A)	117.4(2)
C(1A)-B(3A)-B(4A)	58.66(14)
B(6A)#1-B(3A)-B(4A)	58.65(15)
B(5A)#1-B(3A)-B(4A)	107.57(19)
O(3A)-B(3A)-B(2A)	124.4(2)
C(1A)-B(3A)-B(2A)	58.06(14)
B(6A)#1-B(3A)-B(2A)	108.51(19)
B(5A)#1-B(3A)-B(2A)	59.02(15)
B(4A)-B(3A)-B(2A)	107.43(18)
B(3A)-O(3A)-C(3A)	123.3(2)
O(4A)-B(4A)-C(1A)	124.3(2)
O(4A)-B(4A)-B(2A)#1	119.6(2)
C(1A)-B(4A)-B(2A)#1	103.78(18)
O(4A)-B(4A)-B(6A)#1	125.7(2)
C(1A)-B(4A)-B(6A)#1	104.08(18)
B(2A)#1-B(4A)-B(6A)#1	62.32(16)
O(4A)-B(4A)-B(5A)	116.1(2)
C(1A)-B(4A)-B(5A)	57.93(14)
B(2A)#1-B(4A)-B(5A)	59.64(16)
B(6A)#1-B(4A)-B(5A)	109.38(19)
O(4A)-B(4A)-B(3A)	126.1(2)
C(1A)-B(4A)-B(3A)	58.47(14)
B(2A)#1-B(4A)-B(3A)	108.78(19)
B(6A)#1-B(4A)-B(3A)	59.20(15)
B(5A)-B(4A)-B(3A)	107.70(18)
B(4A)-O(4A)-C(4A)	123.5(2)
O(5A)-B(5A)-C(1A)	122.0(2)
O(5A)-B(5A)-B(3A)#1	122.0(2)
C(1A)-B(5A)-B(3A)#1	104.27(18)
O(5A)-B(5A)-B(2A)#1	127.2(2)
C(1A)-B(5A)-B(2A)#1	103.66(18)
B(3A)#1-B(5A)-B(2A)#1	62.00(16)
O(5A)-B(5A)-B(4A)	124.0(2)

C(1A)-B(5A)-B(4A)	59.04(14)
B(3A)#1-B(5A)-B(4A)	108.54(19)
B(2A)#1-B(5A)-B(4A)	58.38(15)
O(5A)-B(5A)-B(6A)	116.3(2)
C(1A)-B(5A)-B(6A)	59.33(14)
B(3A)#1-B(5A)-B(6A)	58.98(15)
B(2A)#1-B(5A)-B(6A)	108.68(19)
B(4A)-B(5A)-B(6A)	109.08(18)
B(5A)-O(5A)-C(5A)	122.8(2)
O(6A)-B(6A)-C(1A)	124.8(2)
O(6A)-B(6A)-B(4A)#1	120.5(2)
C(1A)-B(6A)-B(4A)#1	103.02(18)
O(6A)-B(6A)-B(3A)#1	125.6(2)
C(1A)-B(6A)-B(3A)#1	103.28(18)
B(4A)#1-B(6A)-B(3A)#1	62.15(16)
O(6A)-B(6A)-B(2A)	117.5(2)
C(1A)-B(6A)-B(2A)	58.07(14)
B(4A)#1-B(6A)-B(2A)	58.65(15)
B(3A)#1-B(6A)-B(2A)	108.23(19)
O(6A)-B(6A)-B(5A)	125.7(2)
C(1A)-B(6A)-B(5A)	57.75(14)
B(4A)#1-B(6A)-B(5A)	108.38(19)
B(3A)#1-B(6A)-B(5A)	59.28(15)
B(2A)-B(6A)-B(5A)	106.95(19)
B(6A)-O(6A)-C(6A)	121.6(2)
O(6S)-S(2)-O(5S)	118.24(18)
O(6S)-S(2)-O(4S)	107.28(18)
O(5S)-S(2)-O(4S)	109.33(15)
O(6S)-S(2)-C(1B)	108.11(13)
O(5S)-S(2)-C(1B)	107.99(13)
O(4S)-S(2)-C(1B)	105.14(12)
C(4S)-O(4S)-S(2)	119.0(3)
B(6B)-C(1B)-B(4B)	115.75(17)
B(6B)-C(1B)-B(2B)	63.16(14)
B(4B)-C(1B)-B(2B)	115.56(17)
B(6B)-C(1B)-B(5B)	63.17(14)

B(4B)-C(1B)-B(5B)	62.78(14)
B(2B)-C(1B)-B(5B)	115.40(17)
B(6B)-C(1B)-B(3B)	115.72(17)
B(4B)-C(1B)-B(3B)	63.01(14)
B(2B)-C(1B)-B(3B)	63.04(14)
B(5B)-C(1B)-B(3B)	115.12(17)
B(6B)-C(1B)-S(2)	118.18(15)
B(4B)-C(1B)-S(2)	117.26(15)
B(2B)-C(1B)-S(2)	115.74(15)
B(5B)-C(1B)-S(2)	119.70(15)
B(3B)-C(1B)-S(2)	115.13(15)
O(2B)-B(2B)-C(1B)	122.3(2)
O(2B)-B(2B)-B(5B)#2	121.9(2)
C(1B)-B(2B)-B(5B)#2	103.65(17)
O(2B)-B(2B)-B(4B)#2	127.3(2)
C(1B)-B(2B)-B(4B)#2	103.69(17)
B(5B)#2-B(2B)-B(4B)#2	62.07(16)
O(2B)-B(2B)-B(6B)	124.3(2)
C(1B)-B(2B)-B(6B)	58.05(14)
B(5B)#2-B(2B)-B(6B)	109.10(19)
B(4B)#2-B(2B)-B(6B)	59.65(15)
O(2B)-B(2B)-B(3B)	116.5(2)
C(1B)-B(2B)-B(3B)	58.73(14)
B(5B)#2-B(2B)-B(3B)	58.60(15)
B(4B)#2-B(2B)-B(3B)	108.31(19)
B(6B)-B(2B)-B(3B)	107.93(18)
B(2B)-O(2B)-C(2B)	121.1(2)
O(3B)-B(3B)-C(1B)	124.6(2)
O(3B)-B(3B)-B(5B)#2	125.6(2)
C(1B)-B(3B)-B(5B)#2	103.36(17)
O(3B)-B(3B)-B(6B)#2	120.3(2)
C(1B)-B(3B)-B(6B)#2	103.59(18)
B(5B)#2-B(3B)-B(6B)#2	62.18(15)
O(3B)-B(3B)-B(4B)	117.1(2)
C(1B)-B(3B)-B(4B)	58.16(14)
B(5B)#2-B(3B)-B(4B)	108.89(19)

B(6B)#2-B(3B)-B(4B)	59.42(15)
O(3B)-B(3B)-B(2B)	125.5(2)
C(1B)-B(3B)-B(2B)	58.23(14)
B(5B)#2-B(3B)-B(2B)	58.73(15)
B(6B)#2-B(3B)-B(2B)	108.36(19)
B(4B)-B(3B)-B(2B)	107.57(18)
B(3B)-O(3B)-C(3B)	123.8(2)
O(4B)-B(4B)-C(1B)	122.0(2)
O(4B)-B(4B)-B(2B)#2	122.3(2)
C(1B)-B(4B)-B(2B)#2	103.74(18)
O(4B)-B(4B)-B(6B)#2	127.6(2)
C(1B)-B(4B)-B(6B)#2	103.56(17)
B(2B)#2-B(4B)-B(6B)#2	61.74(15)
O(4B)-B(4B)-B(5B)	116.5(2)
C(1B)-B(4B)-B(5B)	58.76(14)
B(2B)#2-B(4B)-B(5B)	58.85(15)
B(6B)#2-B(4B)-B(5B)	108.22(19)
O(4B)-B(4B)-B(3B)	124.2(2)
C(1B)-B(4B)-B(3B)	58.83(14)
B(2B)#2-B(4B)-B(3B)	108.36(18)
B(6B)#2-B(4B)-B(3B)	58.71(15)
B(5B)-B(4B)-B(3B)	108.37(18)
B(4B)-O(4B)-C(4B)	123.1(2)
O(5B)-B(5B)-C(1B)	123.3(2)
O(5B)-B(5B)-B(3B)#2	120.5(2)
C(1B)-B(5B)-B(3B)#2	103.57(17)
O(5B)-B(5B)-B(2B)#2	126.7(2)
C(1B)-B(5B)-B(2B)#2	103.68(17)
B(3B)#2-B(5B)-B(2B)#2	62.66(16)
O(5B)-B(5B)-B(4B)	125.3(2)
C(1B)-B(5B)-B(4B)	58.46(14)
B(3B)#2-B(5B)-B(4B)	109.14(19)
B(2B)#2-B(5B)-B(4B)	59.07(15)
O(5B)-B(5B)-B(6B)	116.0(2)
C(1B)-B(5B)-B(6B)	57.98(13)
B(3B)#2-B(5B)-B(6B)	59.24(15)

B(2B)#2-B(5B)-B(6B)	109.13(18)
B(4B)-B(5B)-B(6B)	107.84(17)
B(5B)-O(5B)-C(5B)	123.3(2)
O(6B)-B(6B)-C(1B)	121.4(2)
O(6B)-B(6B)-B(3B)#2	126.9(2)
C(1B)-B(6B)-B(3B)#2	103.72(18)
O(6B)-B(6B)-B(4B)#2	124.2(2)
C(1B)-B(6B)-B(4B)#2	103.46(17)
B(3B)#2-B(6B)-B(4B)#2	61.87(15)
O(6B)-B(6B)-B(2B)	117.9(2)
C(1B)-B(6B)-B(2B)	58.79(14)
B(3B)#2-B(6B)-B(2B)	108.40(19)
B(4B)#2-B(6B)-B(2B)	58.62(15)
O(6B)-B(6B)-B(5B)	122.6(2)
C(1B)-B(6B)-B(5B)	58.85(14)
B(3B)#2-B(6B)-B(5B)	58.58(15)
B(4B)#2-B(6B)-B(5B)	107.99(18)
B(2B)-B(6B)-B(5B)	108.28(18)
B(6B)-O(6B)-C(6B)	123.3(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+2,-y+1,-z #2 -x+1,-y+2,-z

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 20. 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}
S(1)	27(2)	34(2)	63(1)	-5(1)	18(1)	-2(1)
O(1S)	33(1)	85(3)	65(2)	-4(2)	8(1)	-3(1)
C(1S)	31(4)	83(7)	212(12)	16(7)	38(5)	-10(3)
O(2S)	75(3)	35(2)	160(5)	10(2)	54(3)	19(2)
O(3S)	56(2)	101(4)	55(2)	-18(2)	21(2)	5(2)
S(1')	19(4)	29(4)	66(3)	-1(3)	16(3)	-12(2)
O(2S')	77(10)	110(15)	95(10)	41(9)	25(8)	79(10)
O(1S')	77(9)	77(9)	90(10)	27(7)	35(7)	9(7)
O(3S')	54(8)	150(20)	119(18)	-115(17)	7(9)	13(11)
C(1S')	41(16)	57(13)	68(13)	10(9)	26(9)	-12(10)
C(1A)	27(1)	24(1)	33(1)	0(1)	3(1)	0(1)
B(2A)	34(1)	29(1)	36(1)	2(1)	1(1)	-2(1)
O(2A)	41(1)	48(1)	53(1)	14(1)	1(1)	-14(1)
C(2A)	62(2)	54(2)	62(2)	26(2)	4(2)	-19(2)
B(3A)	35(1)	29(1)	37(1)	-2(1)	-1(1)	-3(1)
O(3A)	42(1)	42(1)	52(1)	2(1)	-12(1)	-6(1)
C(3A)	50(2)	60(2)	62(2)	3(2)	-18(2)	-25(2)
B(4A)	35(1)	28(1)	36(1)	-1(1)	-1(1)	-1(1)
O(4A)	52(1)	29(1)	54(1)	7(1)	-9(1)	3(1)
C(4A)	64(2)	54(2)	71(2)	23(2)	-26(2)	1(2)
B(5A)	39(1)	25(1)	36(1)	-2(1)	3(1)	-3(1)
O(5A)	65(1)	30(1)	45(1)	-10(1)	5(1)	-5(1)
C(5A)	119(3)	24(1)	67(2)	-9(1)	-4(2)	-9(2)
B(6A)	39(1)	28(1)	36(1)	-2(1)	1(1)	-5(1)
O(6A)	63(1)	44(1)	34(1)	-1(1)	8(1)	-12(1)
C(6A)	67(2)	56(2)	31(1)	-6(1)	3(1)	-14(2)
S(2)	38(1)	36(1)	60(1)	6(1)	14(1)	-6(1)
O(4S)	37(1)	74(2)	83(2)	10(1)	2(1)	-3(1)
C(4S)	47(2)	84(3)	140(4)	12(3)	39(2)	17(2)
O(5S)	67(2)	78(2)	58(1)	12(1)	27(1)	-11(1)
O(6S)	75(2)	38(1)	136(2)	-12(1)	44(2)	-22(1)

C(1B)	28(1)	23(1)	32(1)	0(1)	2(1)	0(1)
B(2B)	39(1)	26(1)	33(1)	-1(1)	1(1)	5(1)
O(2B)	62(1)	37(1)	31(1)	5(1)	0(1)	7(1)
C(2B)	80(2)	57(2)	28(1)	2(1)	0(1)	11(2)
B(3B)	34(1)	26(1)	35(1)	0(1)	-1(1)	3(1)
O(3B)	56(1)	23(1)	49(1)	1(1)	-3(1)	4(1)
C(3B)	103(3)	31(2)	61(2)	8(1)	-12(2)	18(2)
B(4B)	37(1)	26(1)	36(1)	-3(1)	-1(1)	4(1)
O(4B)	42(1)	37(1)	52(1)	-13(1)	-15(1)	6(1)
C(4B)	59(2)	41(2)	64(2)	-22(1)	-21(2)	10(1)
B(5B)	34(1)	29(1)	32(1)	-1(1)	-1(1)	3(1)
O(5B)	36(1)	42(1)	46(1)	-5(1)	-6(1)	12(1)
C(5B)	45(2)	65(2)	55(2)	-6(2)	-20(1)	21(1)
B(6B)	33(1)	26(1)	35(1)	0(1)	2(1)	4(1)
O(6B)	56(1)	42(1)	39(1)	-1(1)	12(1)	14(1)
C(6B)	51(2)	45(2)	53(2)	-12(1)	9(1)	15(1)

Table 6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for 20.

	x	y	z	U(eq)
H(1S1)	7314	4349	1260	162
H(1S2)	6629	4348	376	162
H(1S3)	6557	5114	1226	162
H(1S4)	6576	5068	350	82
H(1S5)	6437	4768	1438	82
H(1S6)	6843	4015	726	82
H(2A1)	9178	2702	1587	89
H(2A2)	8219	2392	1339	89
H(2A3)	8424	3316	2000	89
H(3A1)	8176	3525	-1929	87
H(3A2)	7325	4144	-1921	87
H(3A3)	7717	3678	-947	87
H(4A1)	8776	6486	-2209	96
H(4A2)	8819	7637	-2121	96
H(4A3)	8156	7043	-1529	96
H(5A1)	10725	7919	518	105
H(5A2)	10258	8340	1416	105
H(5A3)	9721	8040	459	105
H(6A1)	10705	5347	3038	77
H(6A2)	9847	5292	3588	77
H(6A3)	9962	6104	2789	77
H(4S1)	1549	9578	1212	134
H(4S2)	1697	10417	451	134
H(4S3)	2350	10275	1354	134
H(2B1)	5805	9595	3120	83
H(2B2)	5018	8964	3426	83
H(2B3)	4863	9979	2897	83
H(3B1)	6045	6972	522	98
H(3B2)	5154	6464	660	98
H(3B3)	5428	7386	1295	98

H(4B1)	4491	7909	-2094	83
H(4B2)	3532	7907	-2515	83
H(4B3)	3758	7518	-1452	83
H(5B1)	3066	11190	-1892	83
H(5B2)	2212	11315	-1344	83
H(5B3)	2574	10258	-1537	83
H(6B1)	3970	12344	1883	74
H(6B2)	3126	11796	2150	74
H(6B3)	3333	11939	1050	74

Table 7. Torsion angles [°] for 20.

O(3S')-S(1)-O(1S)-C(1S)	-43(2)
O(2S)-S(1)-O(1S)-C(1S)	-134.9(9)
O(3S)-S(1)-O(1S)-C(1S)	-6.3(9)
O(2S')-S(1)-O(1S)-C(1S)	-151.2(10)
O(1S')-S(1)-O(1S)-C(1S)	13.8(10)
C(1A)-S(1)-O(1S)-C(1S)	107.2(9)
O(1S')-S(1')-O(2S')-S(1)	-177(5)
O(3S')-S(1')-O(2S')-S(1)	50(3)
O(3S')-S(1)-O(2S')-S(1')	-109(4)
O(2S)-S(1)-O(2S')-S(1')	-147(4)
O(3S)-S(1)-O(2S')-S(1')	-56(4)
O(1S)-S(1)-O(2S')-S(1')	14(4)
O(1S')-S(1)-O(2S')-S(1')	2(4)
C(1A)-S(1)-O(2S')-S(1')	109(4)
O(3S')-S(1')-O(1S')-C(1S')	125(2)
O(2S')-S(1')-O(1S')-C(1S')	-10(3)
O(3S')-S(1')-O(1S')-S(1)	-52(11)
O(2S')-S(1')-O(1S')-S(1)	172(13)
O(3S')-S(1)-O(1S')-S(1')	122(12)
O(2S)-S(1)-O(1S')-S(1')	38(11)
O(3S)-S(1)-O(1S')-S(1')	138(12)
O(2S')-S(1)-O(1S')-S(1')	-7(11)
O(1S)-S(1)-O(1S')-S(1')	-19(11)
C(1A)-S(1)-O(1S')-S(1')	-117(12)
O(3S')-S(1)-O(1S')-C(1S')	119(2)
O(2S)-S(1)-O(1S')-C(1S')	35(3)
O(3S)-S(1)-O(1S')-C(1S')	136(2)
O(2S')-S(1)-O(1S')-C(1S')	-9(2)
O(1S)-S(1)-O(1S')-C(1S')	-22(2)
C(1A)-S(1)-O(1S')-C(1S')	-120(2)
O(2S)-S(1)-O(3S')-S(1')	125(5)
O(3S)-S(1)-O(3S')-S(1')	-40(5)
O(2S')-S(1)-O(3S')-S(1')	95(5)
O(1S)-S(1)-O(3S')-S(1')	21(4)