

Table 1S. Selected bond distances (Å) for $[V_{12}B_{18}O_{60}H_6]^{11-}$ for compound (2)

Tetrahedral boron		V1—O10	1.625(5)
B1—O25 ⁱ	1.428(8)	V1—O7	1.937(5)
B1—O1	1.480(9)	V1—O2	1.942(5)
B1—O19	1.497(8)	V1—O1	1.954(5)
B1—O17 ⁱ	1.523(8)	V1—O9	1.955(5)
B2—O20	1.430(9)	V2—O11	1.630(4)
B2—O8 ⁱ	1.489(9)	V2—O1	1.929(4)
B2—O27 ⁱ	1.497(9)	V2—O2	1.947(5)
B2—O16	1.519(9)	V2—O3	1.953(5)
B3—O20	1.429(9)	V2—O16	2.008(5)
B3—O3	1.465(9)	V3—O12	1.630(5)
B3—O21	1.498(9)	V3—O4	1.921(5)
B3—O18 ⁱ	1.513(9)	V3—O2	1.941(5)
B5—O30 ⁱ	1.448(9)	V3—O3	1.958(5)
B5—O9 ⁱ	1.461(9)	V3—O5	1.965(5)
B5—O23	1.484(9)	V4—O13	1.636(5)
B5—O17	1.513(9)	V4—O6	1.919(5)
B7—O25	1.422(9)	V4—O5	1.941(5)
B7—O6	1.486(8)	V4—O4	1.957(5)
B7—O26	1.500(8)	V4—O17	1.998(5)
B7—O16 ⁱ	1.504(9)	V5—O14	1.637(5)
B9—O30	1.432(9)	V5—O7	1.932(5)
B9—O5 ⁱ	1.484(9)	V5—O4	1.933(5)
B9—O18	1.495(9)	V5—O6	1.946(5)
B9—O29	1.493(9)	V5—O8	1.958(5)
Trigonal Boron		V6—O15	1.625(5)
B4—O29 ⁱ	1.352(9)	V6—O8	1.929(5)
B4—O21	1.367(10)	V6—O9	1.946(5)
B4—O22	1.385(10)	V6—O7	1.963(5)
B6—O23	1.336(9)	V6—O18	2.027(5)
B6—O24	1.373(9)		
B6—O19 ⁱ	1.377(9)		
B8—O26	1.356(10)		
B8—O27	1.363(10)		
B8—O28	1.375(10)		

Symmetry code: i 1.5-x, 0.5-y, 1-z

Table 2S. Selected angles (°) for [V₁₂B₁₈O₆₀H₆]¹¹⁻ for compound **(2)**

O25 ⁱ —B1—O1	111.9(5)	O30 ⁱ —B5—O9 ⁱ	111.3(5)
O25 ⁱ —B1—O19	106.3(5)	O30 ⁱ —B5—O23	106.0(5)
O1—B1—O19	109.2(5)	O9 ⁱ —B5—O23	109.7(6)
O25 ⁱ —B1—O17 ⁱ	113.6(5)	O30 ⁱ —B5—O17	111.5(6)
O1—B1—O17 ⁱ	108.0(5)	O9 ⁱ —B5—O17	109.1(5)
O19—B1—O17 ⁱ	107.7(5)	O23—B5—O17	109.2(5)
O20—B2—O8 ⁱ	110.8(6)	O23—B6—O24	118.3(6)
O20—B2—O27 ⁱ	106.3(5)	O23—B6—O19 ⁱ	122.9(6)
O8 ⁱ —B2—O27 ⁱ	109.4(6)	O24—B6—O19 ⁱ	118.8(6)
O20—B2—O16	113.5(6)	O25—B7—O6	110.2(5)
O8 ⁱ —B2—O16	107.9(5)	O25—B7—O26	107.2(5)
O27 ⁱ —B2—O16	108.8(5)	O6—B7—O26	107.2(5)
O20—B3—O3	110.9(6)	O25—B7—O16 ⁱ	114.3(5)
O20—B3—O21	106.5(5)	O6—B7—O16 ⁱ	107.9(5)
O3—B3—O21	107.5(6)	O26—B7—O16 ⁱ	109.7(5)
O20—B3—O18 ⁱ	113.6(6)	O26—B8—O27	122.1(7)
O3—B3—O18 ⁱ	109.0(5)	O26—B8—O28	120.3(7)
O21—B3—O18 ⁱ	109.2(5)	O27—B8—O28	117.6(7)
O29 ⁱ —B4—O21	123.4(7)	O30—B9—O5 ⁱ	110.4(6)
O29 ⁱ —B4—O22	116.6(7)	O30—B9—O29	106.5(5)
O21—B4—O22	120.0(7)	O5 ⁱ —B9—O29	108.4(6)
		O30—B9—O18	113.2(6)
		O5 ⁱ —B9—O18	108.9(5)
		O29—B9—O18	109.3(5)
O10—V1—O7	107.7(2)	O11—V2—O1	110.2(2)
O10—V1—O2	107.4(2)	O11—V2—O2	106.6(2)
O7—V1—O2	93.3(2)	O1—V2—O2	79.70(19)
O10—V1—O1	107.3(2)	O11—V2—O3	106.9(2)
O7—V1—O1	144.8(2)	O1—V2—O3	141.0(2)
O2—V1—O1	79.20(19)	O2—V2—O3	78.7(2)
O10—V1—O9	108.8(3)	O11—V2—O16	106.3(2)
O7—V1—O9	78.3(2)	O1—V2—O16	91.32(19)
O2—V1—O9	143.7(2)	O2—V2—O16	147.0(2)
O1—V1—O9	87.7(2)	O3—V2—O16	89.4(2)

O12—V3—O4	110.5(3)	O14—V5—O7	110.4(2)
O12—V3—O2	106.3(3)	O14—V5—O4	106.2(2)
O4—V3—O2	91.8(2)	O7—V5—O4	94.3(2)
O12—V3—O3	106.3(3)	O14—V5—O6	106.5(2)
O4—V3—O3	143.2(2)	O7—V5—O6	143.0(2)
O2—V3—O3	78.75(19)	O4—V5—O6	77.8(2)
O12—V3—O5	107.7(3)	O14—V5—O8	109.4(2)
O4—V3—O5	79.2(2)	O7—V5—O8	78.6(2)
O2—V3—O5	145.8(2)	O4—V5—O8	143.9(2)
O3—V3—O5	88.9(2)	O6—V5—O8	86.8(2)
O13—V4—O6	106.2(2)	O15—V6—O8	110.3(2)
O13—V4—O5	112.9(2)	O15—V6—O9	110.2(2)
O6—V4—O5	139.1(2)	O8—V6—O9	137.7(2)
O13—V4—O4	108.6(3)	O15—V6—O7	108.2(3)
O6—V4—O4	77.8(2)	O8—V6—O7	78.57(19)
O5—V4—O4	79.0(2)	O9—V6—O7	77.9(2)
O13—V4—O17	105.3(2)	O15—V6—O18	106.0(3)
O6—V4—O17	90.2(2)	O8—V6—O18	90.3(2)
O5—V4—O17	90.7(2)	O9—V6—O18	89.8(2)
O4—V4—O17	146.0(2)	O7—V6—O18	145.76(19)

Symmetry code: i 1.5-x, 0.5-y, 1-z

Table 3S. Selected bond distances (Å) for $[\text{V}_{12}\text{B}_{18}\text{O}_{60}\text{H}_6]^{11-}$ for compound **(3)**

Tetrahedral boron		V1—O2	1.623(6)
B1—O21	1.439(11)	V1—O3	1.927(6)
B1—O9	1.471(10)	V1—O15	1.936(6)
B1—O22	1.47(1)	V1—O16	1.947(6)
B1—O1 ⁱⁱⁱ	1.516(11)	V1—O1	2.019(6)
B2—O18	1.446(11)	V2—O4	1.637(6)
B2—O17	1.479(10)	V2—O16	1.931(6)
B2—O19	1.494(11)	V2—O6	1.934(6)
B2—O20	1.503(11)	V2—O3	1.940(6)
B4—O21	1.449(11)	V2—O17	1.970(6)
B4—O15 ⁱⁱⁱ	1.475(12)	V3—O7	1.624(6)
B4—O26	1.483(11)	V3—O17	1.928(6)
B4—O8	1.504(12)	V3—O9	1.943(6)
B5—O5	1.442(10)	V3—O6	1.964(6)
B5—O3	1.474(11)	V3—O8	2.027(6)
B5—O27	1.483(11)	V4—O23	1.627(6)
B5—O20	1.510(11)	V4—O11	1.940(6)
B6—O5	1.425(11)	V4—O6	1.941(6)
B6—O24 ⁱⁱⁱ	1.496(10)	V4—O10	1.954(6)
B6—O10 ⁱⁱⁱ	1.498(10)	V4—O9	1.959(6)
B6—O1	1.498(10)	V5—O12	1.636(6)
B8—O18	1.425(11)	V5—O10	1.934(6)
B8—O13 ⁱⁱⁱ	1.482(12)	V5—O11	1.937(6)
B8—O29	1.506(11)	V5—O13	1.936(6)
B8—O8	1.521(11)	V5—O20 ⁱⁱⁱ	2.008(6)
Trigonal Boron		V6—O14	1.635(6)
B3—O22	1.363(12)	V6—O16	1.932(6)
B3—O25	1.368(12)	V6—O11	1.940(6)
B3—O24	1.373(12)	V6—O13	1.959(6)
B7—O26	1.356(11)	V6—O15	1.971(6)
B7—O29	1.380(11)		
B7—O28	1.382(12)		
B9—O27	1.360(12)		
B9—O30	1.377(11)		
B9—O19	1.382(11)		

Symmetry code: iii 0.5-x, 0.5-y, -z

Table 4S. Selected angles (°) for $[V_{12}B_{18}O_{60}H_6]^{11-}$ for compound **(3)**

O21—B1—O9	111.7(6)	O5—B5—O3	110.0(7)
O21—B1—O22	106.6(7)	O5—B5—O27	106.3(7)
O9—B1—O22	110.0(7)	O3—B5—O27	108.5(7)
O21—B1—O1 ⁱⁱⁱ	111.8(7)	O5—B5—O20	113.2(7)
O9—B1—O1 ⁱⁱⁱ	107.5(6)	O3—B5—O20	108.6(7)
O22—B1—O1 ⁱⁱⁱ	109.3(6)	O27—B5—O20	110.2(7)
O18—B2—O17	110.9(6)	O5—B6—O24 ⁱⁱⁱ	85.3(5)
O18—B2—O19	104.7(7)	O5—B6—O10 ⁱⁱⁱ	76.4(5)
O17—B2—O19	109.8(7)	O24 ⁱⁱⁱ —B6—O10 ⁱⁱⁱ	47.9(4)
O18—B2—O20	113.1(7)	O5—B6—O1	156.3(6)
O17—B2—O20	109.0(7)	O24 ⁱⁱⁱ —B6—O1	68.6(4)
O19—B2—O20	109.3(6)	O10 ⁱⁱⁱ —B6—O1	17.9(3)
O22—B3—O25	118.0(9)	O26—B7—O29	106.1(6)
O22—B3—O24	122.8(8)	O26—B7—O28	111.2(7)
O25—B3—O24	119.2(8)	O29—B7—O28	108.5(7)
O21—B4—O15 ⁱⁱⁱ	110.2(7)	O18—B8—O13 ⁱⁱⁱ	114.7(7)
O21—B4—O26	106.0(7)	O18—B8—O29	108.9(7)
O15 ⁱⁱⁱ —B4—O26	109.8(8)	O13 ⁱⁱⁱ —B8—O29	107.2(6)
O21—B4—O8	112.1(7)	O18—B8—O8	122.5(8)
O15 ⁱⁱⁱ —B4—O8	109.3(7)	O13 ⁱⁱⁱ —B8—O8	118.7(8)
O26—B4—O8	109.4(7)	O29—B8—O8	118.8(8)
		O27—B9—O30	110.7(7)
		O27—B9—O19	106.9(7)
		O30—B9—O19	107.0(8)
O2—V1—O3	106.5(3)	O4—V2—O16	105.9(3)
O2—V1—O15	112.4(3)	O4—V2—O6	110.3(3)
O3—V1—O15	139.4(2)	O16—V2—O6	95.1(2)
O2—V1—O16	108.6(3)	O4—V2—O3	106.2(3)
O3—V1—O16	77.8(2)	O16—V2—O3	77.8(2)
O15—V1—O16	79.3(2)	O6—V2—O3	143.3(3)
O2—V1—O1	105.3(3)	O4—V2—O17	109.5(3)
O3—V1—O1	90.1(2)	O16—V2—O17	144.1(3)
O15—V1—O1	90.6(2)	O6—V2—O17	78.4(2)
O16—V1—O1	146.0(2)	O3—V2—O17	86.6(2)

O7—V3—O17	110.1(3)	O23—V4—O11	107.6(3)
O7—V3—O9	110.6(3)	O23—V4—O6	107.4(3)
O17—V3—O9	137.6(3)	O11—V4—O6	93.7(2)
O7—V3—O6	108.2(3)	O23—V4—O10	107.3(3)
O17—V3—O6	78.7(2)	O11—V4—O10	78.8(2)
O9—V3—O6	78.2(2)	O6—V4—O10	145.1(2)
O7—V3—O8	105.6(3)	O23—V4—O9	109.2(3)
O17—V3—O8	90.7(2)	O11—V4—O9	143.0(3)
O9—V3—O8	89.2(2)	O6—V4—O9	78.4(2)
O6—V3—O8	146.1(2)	O10—V4—O9	87.4(2)
O12—V5—O10	110.4(3)	O14—V6—O16	108.9(3)
O12—V5—O11	107.5(3)	O14—V6—O11	106.7(3)
O10—V5—O11	79.4(2)	O16—V6—O11	92.0(2)
O12—V5—O13	106.9(3)	O14—V6—O13	108.2(3)
O10—V5—O13	141.0(2)	O16—V6—O13	142.9(3)
O11—V5—O13	78.6(3)	O11—V6—O13	78.0(2)
O12—V5—O20iii	105.6(3)	O14—V6—O15	108.6(3)
O10—V5—O20iii	91.2(2)	O16—V6—O15	78.8(2)
O11—V5—O20iii	146.8(2)	O11—V6—O15	144.6(2)
O13—V5—O20iii	89.9(2)	O13—V6—O15	88.9(2)

Symmetry code: iii 0.5-x, 0.5-y, -z