

Table 1. Crystal data and structure refinement.

Archive code	98_10IS06
Identification code	CZ2
Empirical formula	C ₅ H ₁₉ B ₉ S
Formula weight	208.55
Temperature	150(2) K
Wavelength	0.71073 Å [Mo-K _α]
Crystal system	Monoclinic
Space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 6.65370(10) Å $\alpha = 90^\circ$ <i>b</i> = 22.4790(3) Å $\beta = 109.7170(7)^\circ$ <i>c</i> = 8.86450(10) Å $\gamma = 90^\circ$
Volume	1248.12(3) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.110 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.212 mm ⁻¹
<i>F</i> (000)	440
Crystal size	0.65 x 0.52 x 0.39 mm
Data collection range	$3.38 \leq \theta \leq 25.99^\circ$
Index ranges	$-8 \leq h \leq 8$, $-27 \leq k \leq 27$, $-10 \leq l \leq 10$
Reflections collected	4664
Independent reflections	2367 [<i>R</i> (int) = 0.0097]
Absorption correction	Empirical [<i>via</i> SORTAV]
Max. and min. transmission	0.9220 and 0.8746
Refinement method	Full-matrix least-squares on <i>F</i> ²
Data / restraints / parameters	2367 / 0 / 180
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	1.064
Final <i>R</i> indices [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> ₁ = 0.0272, <i>wR</i> ₂ = 0.0735
<i>R</i> indices (all data)	<i>R</i> ₁ = 0.0278, <i>wR</i> ₂ = 0.0740
Largest diff. peak and hole	0.227 and -0.168 e.Å ⁻³
Extinction coefficient	0.02(2)

Table 2. Atomic co-ordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) with estimated standard deviations (e.s.d.s) in parentheses. U_{eq} is defined as $1/3$ of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
B(1)	5255.6(18)	1515.4(5)	12733.7(14)	20.7(2)
B(2)	3231.1(19)	1483.1(6)	13582.7(14)	22.5(3)
B(3)	3159(2)	2049.6(5)	12206.6(15)	23.5(3)
B(4)	4108.9(18)	1756.4(5)	10706.8(14)	19.3(2)
C(4)	5141.8(19)	2184.3(5)	9748.2(15)	31.7(3)
B(5)	4647.6(17)	992.0(5)	11134.9(13)	17.7(2)
B(6)	4059.6(18)	812.0(5)	12936.7(13)	18.9(2)
C(7)	940.0(17)	1638.4(5)	12039.9(13)	23.1(2)
C(8)	1387.5(16)	1764.3(5)	10466.9(12)	19.7(2)
B(9)	2202.9(18)	1200.2(5)	9751.2(13)	16.5(2)
S(9)	1553.8(4)	1177.86(11)	7511.8(3)	20.34(13)
C(91)	3053(2)	553.2(6)	7212.8(14)	34.4(3)
C(92)	-1112(2)	886.9(6)	6776.5(15)	37.3(3)
B(10)	2268.5(18)	583.4(5)	11013.2(13)	19.2(2)
B(11)	1265.4(19)	935.3(6)	12523.5(14)	22.6(3)

Table 3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$). 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}
B(1)	19.4(5)	22.3(6)	17.6(5)	0(4)	2.3(4)	-2.9(4)
B(2)	25.2(6)	26.3(6)	15.2(5)	-1.9(4)	5.9(4)	0.7(5)
B(3)	28.7(6)	20.0(6)	19.6(6)	-2.9(4)	5.4(5)	0.2(5)
B(4)	19.4(5)	19.1(5)	18.1(5)	1.5(4)	4.6(4)	-1.7(4)
C(4)	32.9(6)	30.1(6)	31.7(6)	8.0(5)	10.3(5)	-7.8(5)
B(5)	16.5(5)	19.7(5)	16.1(5)	2.1(4)	4.5(4)	1.2(4)
B(6)	20.0(5)	21.0(6)	14.2(5)	2.3(4)	3.8(4)	-0.6(4)
C(7)	21.3(5)	29.9(6)	19.1(5)	-0.9(4)	8.3(4)	5.7(4)
C(8)	19.9(5)	21.0(5)	17.0(5)	1.8(4)	4.5(4)	3.6(4)
B(9)	17.2(5)	18.8(6)	12.5(5)	1.2(4)	3.8(4)	-0.2(4)
S(9)	26.02(18)	20.85(18)	13.14(17)	2.67(8)	5.28(11)	1.61(9)
C(91)	48.5(7)	35.1(7)	20.6(5)	0.6(5)	13.0(5)	15.9(5)
C(92)	30.0(6)	47.7(8)	24.6(6)	2.4(5)	-3.5(5)	-6.0(5)
B(10)	21.7(5)	19.6(5)	15.3(5)	1.3(4)	4.8(4)	-3.0(4)
B(11)	20.6(5)	30.6(7)	17.6(6)	2.0(4)	7.8(4)	-2.5(5)

Table 4. Hydrogen atom co-ordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) with e.s.d.s in parentheses.

	x	y	z	U_{eq}
H(1)	689(2)	1633(6)	13443(16)	29(3)
H(2)	340(2)	1598(6)	14797(18)	36(4)
H(3)	317(2)	2529(7)	12433(16)	35(4)
H(4a)	4021	2340	8801	48
H(4b)	6185	1962	9411	48
H(4c)	5858	2516	10439	48
H(5)	588(2)	752(6)	10808(15)	26(3)
H(6)	495(2)	482(6)	13778(16)	29(3)
H(7)	-18(2)	1866(6)	12193(17)	33(4)
H(8)	50(2)	2072(6)	9784(15)	23(3)
H(91a)	2690	200	7714	52
H(91b)	4583	636	7699	52
H(91c)	2707	483	6062	52
H(92a)	-1508	803	5628	56
H(92b)	-2103	1180	6950	56
H(92c)	-1182	519	7349	56
H(10)	224(2)	104(6)	10750(16)	30(3)
H(101)	50(2)	748(6)	11019(17)	36(4)
H(11)	38(2)	711(6)	13229(17)	36(4)

Table 5. Interatomic distances (Å) with e.s.d.s in parentheses.

B(1)-B(2)	1.752(2)	B(1)-B(3)	1.779(2)
B(1)-B(5)	1.780(2)	B(1)-B(4)	1.783(2)
B(1)-B(6)	1.806(2)	B(1)-H(1)	1.090(13)
B(2)-C(7)	1.706(2)	B(2)-B(3)	1.753(2)
B(2)-B(6)	1.767(2)	B(2)-B(11)	1.811(2)
B(2)-H(2)	1.076(14)	B(3)-C(7)	1.706(2)
B(3)-C(8)	1.718(2)	B(3)-B(4)	1.780(2)
B(3)-H(3)	1.10(2)	B(4)-C(4)	1.585(2)
B(4)-C(8)	1.751(2)	B(4)-B(5)	1.770(2)
B(4)-B(9)	1.779(2)	B(5)-B(9)	1.739(2)
B(5)-B(10)	1.802(2)	B(5)-B(6)	1.814(2)
B(5)-H(5)	1.098(13)	B(6)-B(11)	1.791(2)
B(6)-B(10)	1.795(2)	B(6)-H(6)	1.077(14)
C(7)-C(8)	1.5471(14)	C(7)-B(11)	1.633(2)
C(7)-H(7)	0.952(14)	C(8)-B(9)	1.5928(14)
C(8)-H(8)	0.974(13)	B(9)-B(10)	1.773(2)
B(9)-S(9)	1.8845(11)	S(9)-C(91)	1.7932(12)
S(9)-C(92)	1.7942(12)	B(10)-B(11)	1.862(2)
B(10)-H(10)	1.101(14)	B(10)-H(101)	1.235(14)
B(11)-H(101)	1.325(14)	B(11)-H(11)	1.114(14)

Table 6. Angles between interatomic vectors (°) with e.s.d.s in parentheses

B(2)-B(1)-B(3)	59.51(7)	B(2)-B(1)-B(5)	108.27(8)
B(3)-B(1)-B(5)	106.83(8)	B(2)-B(1)-B(4)	108.41(8)
B(3)-B(1)-B(4)	59.95(7)	B(5)-B(1)-B(4)	59.57(6)
B(2)-B(1)-B(6)	59.51(7)	B(3)-B(1)-B(6)	106.51(8)
B(5)-B(1)-B(6)	60.75(6)	B(4)-B(1)-B(6)	108.26(8)
B(2)-B(1)-H(1)	121.7(7)	B(3)-B(1)-H(1)	122.0(7)
B(5)-B(1)-H(1)	122.3(7)	B(4)-B(1)-H(1)	120.8(7)
B(6)-B(1)-H(1)	122.9(7)		
C(7)-B(2)-B(1)	104.82(8)	C(7)-B(2)-B(3)	59.08(7)
B(1)-B(2)-B(3)	61.02(7)	C(7)-B(2)-B(6)	101.96(8)
B(1)-B(2)-B(6)	61.76(7)	B(3)-B(2)-B(6)	109.45(8)
C(7)-B(2)-B(11)	55.23(6)	B(1)-B(2)-B(11)	109.32(8)
B(3)-B(2)-B(11)	106.73(8)	B(6)-B(2)-B(11)	60.07(7)
C(7)-B(2)-H(2)	121.1(8)	B(1)-B(2)-H(2)	125.7(8)
B(3)-B(2)-H(2)	119.4(8)	B(6)-B(2)-H(2)	126.2(8)
B(11)-B(2)-H(2)	119.8(8)		
C(7)-B(3)-C(8)	53.72(6)	C(7)-B(3)-B(2)	59.08(7)
C(8)-B(3)-B(2)	101.70(8)	C(7)-B(3)-B(1)	103.66(8)
C(8)-B(3)-B(1)	102.91(8)	B(2)-B(3)-B(1)	59.47(7)
C(7)-B(3)-B(4)	104.46(8)	C(8)-B(3)-B(4)	60.02(6)
B(2)-B(3)-B(4)	108.52(8)	B(1)-B(3)-B(4)	60.12(6)
C(7)-B(3)-H(3)	120.2(7)	C(8)-B(3)-H(3)	119.5(7)
B(2)-B(3)-H(3)	126.2(7)	B(1)-B(3)-H(3)	131.1(7)
B(4)-B(3)-H(3)	121.1(7)		
C(4)-B(4)-C(8)	123.12(9)	C(4)-B(4)-B(5)	127.65(9)
C(8)-B(4)-B(5)	99.34(7)	C(4)-B(4)-B(9)	122.65(9)
C(8)-B(4)-B(9)	53.65(6)	B(5)-B(4)-B(9)	58.67(6)
C(4)-B(4)-B(3)	120.20(9)	C(8)-B(4)-B(3)	58.24(6)
B(5)-B(4)-B(3)	107.25(8)	B(9)-B(4)-B(3)	103.90(8)
C(4)-B(4)-B(1)	127.51(9)	C(8)-B(4)-B(1)	101.48(8)
B(5)-B(4)-B(1)	60.14(6)	B(9)-B(4)-B(1)	105.08(8)
B(3)-B(4)-B(1)	59.92(7)		
B(9)-B(5)-B(4)	60.91(6)	B(9)-B(5)-B(1)	106.91(8)
B(4)-B(5)-B(1)	60.29(6)	B(9)-B(5)-B(10)	60.07(6)
B(4)-B(5)-B(10)	111.82(8)	B(1)-B(5)-B(10)	110.10(8)
B(9)-B(5)-B(6)	104.65(7)	B(4)-B(5)-B(6)	108.49(8)
B(1)-B(5)-B(6)	60.33(6)	B(10)-B(5)-B(6)	59.52(6)
B(9)-B(5)-H(5)	123.3(7)	B(4)-B(5)-H(5)	122.3(7)
B(1)-B(5)-H(5)	123.0(7)	B(10)-B(5)-H(5)	116.9(7)
B(6)-B(5)-H(5)	121.7(7)		
B(2)-B(6)-B(11)	61.20(7)	B(2)-B(6)-B(10)	111.88(8)

Table 6 (continued)

B(11)-B(6)-B(10)	62.56(6)	B(2)-B(6)-B(1)	58.73(7)
B(11)-B(6)-B(1)	107.82(8)	B(10)-B(6)-B(1)	109.25(8)
B(2)-B(6)-B(5)	106.18(8)	B(11)-B(6)-B(5)	107.62(8)
B(10)-B(6)-B(5)	59.90(6)	B(1)-B(6)-B(5)	58.92(6)
B(2)-B(6)-H(6)	121.6(7)	B(11)-B(6)-H(6)	122.7(7)
B(10)-B(6)-H(6)	119.7(7)	B(1)-B(6)-H(6)	120.8(7)
B(5)-B(6)-H(6)	122.0(7)		
C(8)-C(7)-B(11)	111.40(8)	C(8)-C(7)-B(3)	63.56(7)
B(11)-C(7)-B(3)	117.87(9)	C(8)-C(7)-B(2)	111.62(8)
B(11)-C(7)-B(2)	65.66(7)	B(3)-C(7)-B(2)	61.84(7)
C(8)-C(7)-H(7)	115.4(8)	B(11)-C(7)-H(7)	121.6(8)
B(3)-C(7)-H(7)	113.3(8)	B(2)-C(7)-H(7)	121.8(9)
C(7)-C(8)-B(9)	114.11(8)	C(7)-C(8)-B(3)	62.72(7)
B(9)-C(8)-B(3)	115.59(8)	C(7)-C(8)-B(4)	113.23(8)
B(9)-C(8)-B(4)	64.08(7)	B(3)-C(8)-B(4)	61.74(7)
C(7)-C(8)-H(8)	115.5(7)	B(9)-C(8)-H(8)	122.1(7)
B(3)-C(8)-H(8)	112.3(7)	B(4)-C(8)-H(8)	117.7(7)
C(8)-B(9)-B(5)	107.25(8)	C(8)-B(9)-B(10)	108.09(8)
B(5)-B(9)-B(10)	61.73(6)	C(8)-B(9)-B(4)	62.27(6)
B(5)-B(9)-B(4)	60.41(6)	B(10)-B(9)-B(4)	112.79(8)
C(8)-B(9)-S(9)	116.93(7)	B(5)-B(9)-S(9)	124.29(7)
B(10)-B(9)-S(9)	126.30(7)	B(4)-B(9)-S(9)	113.18(7)
C(91)-S(9)-C(92)	101.08(7)	C(91)-S(9)-B(9)	103.61(5)
C(92)-S(9)-B(9)	103.86(6)		
B(9)-B(10)-B(6)	104.05(8)	B(9)-B(10)-B(5)	58.21(6)
B(6)-B(10)-B(5)	60.57(6)	B(9)-B(10)-B(11)	100.55(8)
B(6)-B(10)-B(11)	58.63(6)	B(5)-B(10)-B(11)	105.15(8)
B(9)-B(10)-H(10)	129.5(7)	B(6)-B(10)-H(10)	116.1(7)
B(5)-B(10)-H(10)	117.7(7)	B(11)-B(10)-H(10)	125.7(7)
B(9)-B(10)-H(101)	87.0(7)	B(6)-B(10)-H(101)	103.8(7)
B(5)-B(10)-H(101)	131.7(7)	B(11)-B(10)-H(101)	45.3(7)
H(10)-B(10)-H(101)	110.2(10)		
C(7)-B(11)-B(6)	103.89(8)	C(7)-B(11)-B(2)	59.10(7)
B(6)-B(11)-B(2)	58.73(6)	C(7)-B(11)-B(10)	105.69(8)
B(6)-B(11)-B(10)	58.81(6)	B(2)-B(11)-B(10)	106.88(8)
C(7)-B(11)-H(101)	94.1(6)	B(6)-B(11)-H(101)	100.1(6)
B(2)-B(11)-H(101)	134.6(6)	B(10)-B(11)-H(101)	41.5(6)
C(7)-B(11)-H(11)	122.4(7)	B(6)-B(11)-H(11)	121.6(7)
B(2)-B(11)-H(11)	116.3(7)	B(10)-B(11)-H(11)	126.7(7)
H(101)-B(11)-H(11)	109.0(10)		



