

Table S1 Bond lengths [Å].

<b>K6</b>		<b>K12</b>		<b>K14(*)</b>	
C(1)-C(2)	1.392(3)	N(1N)-O(2N)	1.217(3)	C(1A)-C(2A)#1	1.400(4)
C(1)-C(6)	1.395(3)	N(1N)-O(1N)	1.225(3)	C(1A)-C(2A)	1.400(4)
C(1)-C(1M)	1.506(3)	N(1N)-C(1)	1.462(3)	C(1A)-C(5A)	1.505(6)
C(2)-C(3)	1.399(3)	N(1A)-C(1A)	1.347(3)	C(2A)-C(3A)	1.375(5)
C(2)-N(1N)	1.484(3)	N(1A)-C(2)	1.407(3)	C(2A)-N(2A)	1.476(4)
C(3)-C(4)	1.392(3)	C(1A)-O(1A)	1.226(3)	C(3A)-C(4A)	1.385(4)
C(3)-N(1A)	1.406(3)	C(1A)-C(2A)	1.488(4)	C(4A)-N(1A)	1.366(6)
C(4)-C(5)	1.369(3)	C(1M)-C(5)	1.505(4)	C(4A)-C(3A)#1	1.385(4)
C(5)-C(6)	1.378(3)	C(1)-C(6)	1.383(4)	N(2A)-O(1A)	1.205(5)
C(6)-N(2N)	1.474(3)	C(1)-C(2)	1.389(3)	N(2A)-O(2A)	1.219(5)
N(1N)-O(12N)	1.215(3)	C(2)-C(3)	1.395(4)	C(1B)-C(2B)#1	1.399(4)
N(1N)-O(11N)	1.221(3)	C(3)-C(4)	1.368(4)	C(1B)-C(2B)	1.399(4)
N(2N)-O(22N)	1.202(3)	C(4)-C(5)	1.389(4)	C(1B)-C(5B)	1.524(5)
N(2N)-O(21N)	1.204(3)	C(5)-C(6)	1.377(4)	C(2B)-C(3B)	1.371(4)
N(1A)-C(1A)	1.360(3)			C(2B)-N(2B)	1.469(4)
C(1A)-O(1A)	1.225(3)			C(3B)-C(4B)	1.393(4)
C(1A)-C(2A)	1.496(3)			C(4B)-N(1B)	1.367(5)
				C(4B)-C(3B)#1	1.393(4)
				N(2B)-O(2B)	1.219(5)
				N(2B)-O(1B)	1.224(5)
<b>K15</b>		<b>K19(**)</b>		<b>K20</b>	
C(1)-C(6)	1.382(6)	C(1)-C(2)	1.387(2)	C(1)-C(6)	1.381(3)
C(1)-C(2)	1.387(6)	C(1)-C(2)#1	1.387(2)	C(1)-C(2)	1.392(3)
C(1)-BR	1.881(4)	C(1)-C(1M)	1.497(4)	C(1)-C(1M)	1.498(3)
C(2)-C(3)	1.383(6)	C(2)-C(3)	1.369(3)	C(2)-C(3)	1.376(3)
C(3)-C(4)	1.395(6)	C(3)-C(4)	1.383(2)	C(2)-N(1)	1.467(3)
C(3)-I	2.090(4)	C(3)-N(1)	1.470(3)	C(3)-C(4)	1.377(3)
C(4)-C(5)	1.379(6)	C(4)-C(3)#1	1.383(2)	C(3)-N(2)	1.478(3)
C(4)-N(1A)	1.405(5)	C(4)-N(2)	1.471(4)	C(4)-C(5)	1.378(3)
C(5)-C(6)	1.385(6)	N(1)-O(1)	1.208(3)	C(4)-N(3)	1.470(3)
C(6)-N(1N)	1.469(5)	N(1)-O(2)	1.218(2)	C(5)-C(6)	1.369(4)
N(1A)-C(1A)	1.352(6)	N(2)-O(3)#1	1.213(2)	N(1)-O(1)	1.212(3)
C(1A)-O(1A)	1.211(5)	N(2)-O(3)	1.213(2)	N(1)-O(2)	1.221(3)
C(1A)-C(2A)	1.499(6)	N(2)-O(4)	1.206(3)		
N(1N)-O(2N)	1.209(5)	N(2)-O(3)	1.213(3)		
N(1N)-O(1N)	1.222(5)	N(3)-O(6)	1.215(3)		
		N(3)-O(5)	1.219(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: (\*) #1 -x+1,y,z ; (\*\*) #1 -x+1,y,-z+1/2

Table S2 Bond angles [°].

<b>K6</b>		<b>K12</b>		<b>K14(*)</b>	
C(2)-C(1)-C(6)	114.52(18)	O(2N)-N(1N)-O(1N)	124.0(2)	C(2A)#1-C(1A)-C(2A)	111.3(4)
C(2)-C(1)-C(1M)	123.3(2)	O(2N)-N(1N)-C(1)	117.9(2)	C(2A)#1-C(1A)-C(5A)	124.2(2)
C(6)-C(1)-C(1M)	121.8(2)	O(1N)-N(1N)-C(1)	118.1(2)	C(2A)-C(1A)-C(5A)	124.2(2)
C(1)-C(2)-C(3)	124.02(18)	C(1A)-N(1A)-C(2)	124.77(19)	C(3A)-C(2A)-C(1A)	125.4(3)
C(1)-C(2)-N(1N)	117.40(18)	O(1A)-C(1A)-N(1A)	121.3(2)	C(3A)-C(2A)-N(2A)	114.6(3)
C(3)-C(2)-N(1N)	118.43(19)	O(1A)-C(1A)-C(2A)	123.1(3)	C(1A)-C(2A)-N(2A)	119.9(3)
C(4)-C(3)-C(2)	117.5(2)	N(1A)-C(1A)-C(2A)	115.5(2)	C(2A)-C(3A)-C(4A)	120.3(3)
C(4)-C(3)-N(1A)	118.32(18)	C(6)-C(1)-C(2)	122.0(2)	N(1A)-C(4A)-C(3A)	121.4(2)
C(2)-C(3)-N(1A)	124.13(18)	C(6)-C(1)-N(1N)	116.4(2)	N(1A)-C(4A)-C(3A)#1	121.4(2)
C(5)-C(4)-C(3)	120.8(2)	C(2)-C(1)-N(1N)	121.5(2)	C(3A)-C(4A)-C(3A)#1	117.2(4)
C(4)-C(5)-C(6)	119.3(2)	C(1)-C(2)-C(3)	116.1(2)	O(1A)-N(2A)-O(2A)	123.5(3)
C(5)-C(6)-C(1)	123.8(2)	C(1)-C(2)-N(1A)	124.7(2)	O(1A)-N(2A)-C(2A)	118.5(3)
C(5)-C(6)-N(2N)	116.6(2)	C(3)-C(2)-N(1A)	119.1(2)	O(2A)-N(2A)-C(2A)	118.0(3)
C(1)-C(6)-N(2N)	119.7(2)	C(4)-C(3)-C(2)	121.6(2)	C(2B)#1-C(1B)-C(2B)	111.6(4)
O(12N)-N(1N)-O(11N)	125.2(2)	C(3)-C(4)-C(5)	121.9(3)	C(2B)#1-C(1B)-C(5B)	123.99(19)
O(12N)-N(1N)-C(2)	117.48(18)	C(6)-C(5)-C(4)	117.0(3)	C(2B)-C(1B)-C(5B)	123.99(19)
O(11N)-N(1N)-C(2)	117.3(2)	C(6)-C(5)-C(1M)	121.6(3)	C(3B)-C(2B)-C(1B)	125.4(3)
O(22N)-N(2N)-O(21N)	122.8(2)	C(4)-C(5)-C(1M)	121.4(3)	C(3B)-C(2B)-N(2B)	114.7(3)
O(22N)-N(2N)-C(6)	118.4(2)	C(5)-C(6)-C(1)	121.2(2)	C(1B)-C(2B)-N(2B)	119.8(3)
O(21N)-N(2N)-C(6)	118.6(2)			C(2A)#1-C(1A)-C(2A)	111.3(4)
C(1A)-N(1A)-C(3)	125.05(17)			C(2A)#1-C(1A)-C(5A)	124.2(2)
O(1A)-C(1A)-N(1A)	121.1(2)			C(2A)-C(1A)-C(5A)	124.2(2)
O(1A)-C(1A)-C(2A)	123.4(2)			C(3A)-C(2A)-C(1A)	125.4(3)
N(1A)-C(1A)-C(2A)	115.5(2)			C(3A)-C(2A)-N(2A)	114.6(3)
				C(1A)-C(2A)-N(2A)	119.9(3)
				C(2A)-C(3A)-C(4A)	120.3(3)
<b>K15</b>		<b>K19(**)</b>		<b>K20</b>	
C(6)-C(1)-C(2)	117.8(4)	C(2)-C(1)-C(2)#1	117.5(2)	C(6)-C(1)-C(2)	116.0(2)
C(6)-C(1)-Br	124.7(3)	C(2)-C(1)-C(1M)	121.27(12)	C(6)-C(1)-C(1M)	120.6(2)
C(2)-C(1)-Br	117.4(3)	C(2)#1-C(1)-C(1M)	121.27(12)	C(2)-C(1)-C(1M)	123.3(2)
C(3)-C(2)-C(1)	121.0(4)	C(3)-C(2)-C(1)	121.00(17)	C(3)-C(2)-C(1)	122.86(19)
C(2)-C(3)-C(4)	120.8(4)	C(2)-C(3)-C(4)	121.82(17)	C(3)-C(2)-N(1)	118.08(18)
C(2)-C(3)-I	117.6(3)	C(2)-C(3)-N(1)	117.67(17)	C(1)-C(2)-N(1)	119.0(2)
C(4)-C(3)-I	121.5(3)	C(4)-C(3)-N(1)	120.44(19)	C(2)-C(3)-C(4)	119.01(19)
C(5)-C(4)-C(3)	118.3(4)	C(3)#1-C(4)-C(3)	116.9(2)	C(2)-C(3)-N(2)	118.64(19)
C(5)-C(4)-N(1A)	120.0(4)	C(3)#1-C(4)-N(2)	121.55(12)	C(4)-C(3)-N(2)	122.3(2)
C(3)-C(4)-N(1A)	121.7(4)	C(3)-C(4)-N(2)	121.55(12)	C(3)-C(4)-C(5)	119.6(2)
C(4)-C(5)-C(6)	120.5(4)	O(1)-N(1)-O(2)	124.86(18)	C(3)-C(4)-N(3)	121.1(2)
C(1)-C(6)-C(5)	121.6(4)	O(1)-N(1)-C(3)	117.4(2)	C(5)-C(4)-N(3)	119.3(2)
C(1)-C(6)-N(1N)	123.2(4)	O(2)-N(1)-C(3)	117.72(19)	C(6)-C(5)-C(4)	120.1(2)
C(5)-C(6)-N(1N)	115.2(4)	O(3)#1-N(2)-O(3)	126.6(3)	C(5)-C(6)-C(1)	122.4(2)
C(1A)-N(1A)-C(4)	124.1(3)	O(3)#1-N(2)-C(4)	116.69(14)	O(1)-N(1)-O(2)	125.6(2)
O(1A)-C(1A)-N(1A)	122.4(4)	O(3)-N(2)-C(4)	116.69(14)	O(1)-N(1)-C(2)	117.4(2)
O(1A)-C(1A)-C(2A)	121.9(4)			O(2)-N(1)-C(2)	117.0(2)
N(1A)-C(1A)-C(2A)	115.8(4)			O(4)-N(2)-O(3)	125.8(2)
O(2N)-N(1N)-O(1N)	123.4(4)			O(4)-N(2)-C(3)	117.14(19)
O(2N)-N(1N)-C(6)	118.0(3)			O(3)-N(2)-C(3)	117.0(2)
O(1N)-N(1N)-C(6)	118.5(4)			O(6)-N(3)-O(5)	125.6(3)
				O(6)-N(3)-C(4)	116.9(3)
				O(5)-N(3)-C(4)	117.5(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: (\*) #1 -x+1,y,z ; (\*\*) #1 -x+1,y,-z+1/2