

Electronic Supplementary Information

Heterotrimetallic Compounds Containing Mo-M-Li [M = K, Rb and Cs] Clusters: Synthesis, Structure, Bonding, Aromaticity and Theoretical Investigations of Li₂M₂ [M = K and Rb] and Cs₄ Rings

Dibakar Deb^a, Soma Duley^a, Slavko Radenković^{*b}, Patrick Bultinck,^{*c} Pratim K. Chattaraj^{*a} and Manish Bhattacharjee^{*a}

^aDepartment of Chemistry, Indian Institute of Technology, Kharagpur 721302, India

^bFaculty of Science, University of Kragujevac, P. O. Box 60, 34000 Kragujevac, Serbia

^cDepartment of Inorganic and Physical Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281 (S3), B-9000 Ghent, Belgium

E-mail: mxb@iitkgp.ac.in, pkc@chem.iitkgp.ernet.in, Patrick.Bultinck@ugent.be, slavkoradenkovic@kg.ac.rs

Table S1 Crystallographic Data for the Compounds $[\text{Li}\{\text{K}(\text{H}_2\text{O})_2\}\text{MoO}_3\text{L}]_n$ (**1**), $[\text{Li}\{\text{Rb}(\text{H}_2\text{O})_2\}\text{MoO}_3\text{L}]_n$ (**2**) and $[\text{Cs}(\text{LiH}_2\text{O})_2\text{MoO}_3\text{L}]_n$ (**3**)

Compounds	1	2	3
Empirical Formula	$\text{C}_6\text{H}_{10}\text{Li}_2\text{KMoNO}_{11}$	$\text{C}_6\text{H}_{10}\text{Li}_2\text{RbMoNO}_{11}$	$\text{C}_6\text{H}_{10}\text{Li}_2\text{CsMoN}_{11}$
FW	421.066	467.435	514.873
<i>T</i> , K	293(2)	293(2)	293(2)
Crystal system	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$	$P2_1/c$	$P2_1/c$
<i>a</i> , Å	7.9807(10)	7.9395(4)	14.0195(13)
<i>b</i> , Å	8.5886(11)	8.5886(4)	13.7541(13)
<i>c</i> , Å	20.424(26)	20.424(10)	7.7115(7)
β , deg	96.724(4)°	96.7070(13)	102.829(2)
γ , deg	90	90	90
<i>V</i> , Å ³	1390.3(3)	1415.61(12)	1449.9(2)
<i>Z</i> , ρ_{calcd} , Mg m ⁻³	4, 2.012	4, 2.193	2, 2.34
μ , mm ⁻¹	1.297	4.396	3.431
<i>F</i> (000)	832	904	960
Crystal size (mm)	0.20 x 0.20 x 0.10	0.20 x 0.10 x 0.10	0.20 x 0.10 x 0.10
Reflections collected	17378	20070	20606
Independent reflections	2837	4132	4789
Absorption correction	None	None	None
Data/restraints/parameters	2837/0/216	4132/0/240	4789/0/229
GOF on <i>F</i> ²	1.055	1.018	1.063
Final <i>R</i> indices [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	0.0331, 0.0660	0.0291, 0.0611	0.0320, 0.0824
<i>R</i> indices (all data)	0.0511, 0.0710	0.0437, 0.0654	0.0403, 0.0861

Table S2 Important Bond Distances (Å) and Bond Angles (°)

1	2	3
Li1-O2 1.898(7)	O1-Mo1 1.7223(18)	N1-Mo1 2.413(3)
Li1-O5 ^{#2} 1.899(7)	O1-Li2 ^{#6} 1.951(5)	O1-Mo1 1.747(3)
Li1-O1W ^{#3} 1.921(8)	O2-Mo1 1.7447(17)	O1-Cs1 3.218(3)
Li1-O5 ^{#1} 2.004(7)	O2-Li1 ^{#6} 1.916(5)	O1-Cs ^{#17} 3.623(3)
Li1-Li1 ^{#4} 2.786(13)	O2-Rb1 3.0423(18)	O2-Mo1 1.735(2)
Li1-K1 ^{#1} 3.579(7)	O2-Rb1 ^{#13} 3.5321(19)	O2-Cs1 ^{#17} 3.030(3)
Li1-K1 3.852(7)	O1W-Li1 ^{#14} 1.898(6)	O2-Cs1 ^{#18} 3.080(2)
Li2-O3 ^{#5} 1.932(7)	O1W-Rb1 ^{#11} 2.926(3)	O2-Cs1 ^{#19} 3.118(3)
Li2-O9 1.939(7)	O3-Mo1 1.7399(17)	O1W-Li1 1.893(6)
Li2-O1 ^{#6} 1.946(7)	O3-Li2 ^{#9} 1.951(4)	O3-Mo1 1.742(3)
Li2-O7 ^{#7} 1.967(7)	O3-Rb1 3.1166(19)	O3-Li1 1.942(6)
Li2-K1 ^{#5} 3.624(6)	O2W-Rb1 ^{#7} 2.918(3)	O3-Cs1 3.129(3)
O1W-Li1 ^{#8} 1.921(8)	O4-Mo1 2.1887(18)	O3-Cs1 ^{#19} 3.364(3)
O1W-K1 ^{#5} 2.780(4)	O4-Rb1 ^{#13} 2.8979(19)	O2W-Li4 1.811(18)
O2W-K1 ^{#9} 2.785(4)	O4-Rb1 3.1286(18)	O2W-Li4 ^{#19} 2.605(14)
O5-Li1 ^{#6} 1.899(7)	O5-Li1 1.902(5)	O4-Mo1 2.190(3)
O5-Li1 ^{#1} 2.004(7)	O5-Li1 ^{#15} 2.033(5)	O4-Cs1 ^{#18} 3.318(3)
O7-Li2 ^{#5} 1.967(7)	O6-Mo1 2.1950(17)	O5-Mo1 2.185(2)
O7-K1 ^{#10} 2.814(3)	O6-Rb1 ^{#13} 3.270(2)	O5-Cs1 ^{#18} 3.083(2)
N1-Mo1 2.407(3)	O7-Li2 ^{#11} 1.975(5)	O7-Li2 ^{#18} 1.929(7)
O1-Mo1 1.718(2)	O7-Rb1 ^{#12} 2.9249(18)	O8-Li3 1.892(6)
O1-Li2 ^{#2} 1.946(7)	O9-Li2 1.933(5)	O9-Li2 1.899(7)
O2-Mo1 1.741(2)	Li1-O1W ^{#16} 1.898(6)	O9-Li3 ^{#21} 1.987(7)
O2-K1 2.958(3)	Li1-O2 ^{#2} 1.916(5)	Mo1-Cs1 3.9376(5)
O2-K1 ^{#1} 3.382(3)	Li1-O5 ^{#15} 2.033(5)	Mo1-Cs1 ^{#18} 3.9610(5)
O3-Mo1 1.737(2)	Li1-Li1 ^{#15} 2.793(9)	Mo1-Cs1 ^{#19} 3.9815(5)
O3-Li2 ^{#7} 1.932(7)	Li1-Rb1 ^{#15} 3.695(5)	Mo1-Cs1 ^{#17} 4.0717(5)
O3-K1 3.030(3)	Li1-Rb1 ^{#2} 3.857(5)	Cs1-O2 ^{#22} 3.030(3)
O4-Mo1 2.201(2)	Li2-O1 ^{#2} 1.951(5)	Cs1-O2 ^{#23} 3.080(2)
O4-K1 ^{#1} 2.780(3)	Li2-O3 ^{#11} 1.951(4)	Cs1-O5 ^{#23} 3.084(2)
O4-K1 3.021(3)	Li2-O7 ^{#9} 1.975(5)	Cs1-O2 ^{#19} 3.118(3)

O6-Mo1 2.186(3)	Li2-Rb1 ^{#11} 3.709(4)	Cs1-O4 ^{#23} 3.318(3)
O6-K1 ^{#1} 3.263(3)	Rb1-O4 ^{#13} 2.8979(19)	Cs1-O3 ^{#19} 3.364(3)
K1-O4 ^{#1} 2.780(3)	Rb1-O2W ^{#5} 2.918(3)	Cs1-O1 ^{#22} 3.623(3)
K1-O1W ^{#7} 2.780(4)	Rb1-O7 ^{#10} 2.9248(18)	Cs1-Li1 3.648(6)
K1-O2W ^{#11} 2.786(4)	Rb1-O1W ^{#9} 2.926(3)	Cs1-Mo1 ^{#23} 3.9610(5)
K1-O7 ^{#12} 2.814(3)	Rb1-O6 ^{#13} 3.270(2)	Li1-O1W ^{#19} 1.894(6)
K1-O6 ^{#1} 3.263(3)	Rb1-O2 ^{#13} 3.5321(19)	Li1-O3 ^{#19} 1.942(6)
K1-O2 ^{#1} 3.382(3)	Rb1-Mo1 3.6687(4)	Li1-Cs1 ^{#19} 3.648(6)
K1-Mo1 3.5737(10)	Rb1-Li1 ^{#15} 3.695(5)	Li2-O9 ^{#24} 1.899(7)
K1-Li1 ^{#1} 3.579(7)	Mo1-N1 2.4069(19)	Li2-O7 ^{#25} 1.929(7)
Mo1-K1 ^{#1} 4.0353(11)	Mo1-Rb1 ^{#13} 4.1455(4)	Li2-O7 ^{#23} 1.929(7)
		Li2-Li3 ^{#21} 2.662(13)
O2-Li1-O5 ^{#2} 118.5(4)	Mo1-O1-Li2 ^{#6} 171.21(18)	Li3-O8 ^{#25} 1.892(6)
O2-Li1-O1W ^{#3} 107.0(3)	Mo1-O2-Li1 ^{#6} 163.49(19)	Li3-O9 ^{#26} 1.987(7)
O5 ^{#2} -Li1-O1W ^{#3} 116.6(4)	Mo1-O2-Rb1 96.27(7)	Li3-O9 ^{#21} 1.987(7)
O2-Li1-O5 ^{#1} 119.7(4)	Li1 ^{#6} -O2-Rb1 99.65(16)	Li3-Li2 ^{#21} 2.662(13)
O5 ^{#2} -Li1-O5 ^{#1} 89.0(3)	Mo1-O2-Rb1 ^{#13} 97.76(7)	Li4-Li4 ^{#19} 1.77(2)
O1W ^{#3} -Li1-O5 ^{#1} 105.0(3)	Li1 ^{#6} -O2-Rb1 ^{#13} 79.37(15)	Li4-O2W ^{#19} 2.605(14)
O2-Li1-Li1 ^{#4} 132.9(5)	Rb1-O2-Rb1 ^{#13} 85.08(5)	Mo1-O1-Cs1 100.73(11)
O5 ^{#2} -Li1-Li1 ^{#4} 46.0(2)	Li1 ^{#14} -O1W-Rb1 ^{#11} 97.69(16)	Mo1-O1-Cs1 ^{#17} 91.80(11)
O1W ^{#3} -Li1-Li1 ^{#4} 119.4(4)	Mo1-O3-Li2 ^{#9} 163.20(17)	Cs1-O1-Cs1 ^{#17} 99.08(7)
O5 ^{#1} -Li1-Li1 ^{#4} 43.0(2)	Mo1-O3-Rb1 93.80(7)	Mo1-O2-Cs1 ^{#17} 114.67(12)
O2-Li1-K1 ^{#1} 68.5(2)	Li2 ^{#9} -O3-Rb1 91.12(14)	Mo1-O2-Cs1 ^{#18} 107.37(11)
O5 ^{#2} -Li1-K1 ^{#1} 166.7(3)	Mo1-O4-Rb1 ^{#13} 108.36(7)	Cs1 ^{#17} -O2-Cs1 ^{#18} 117.10(8)
O1W ^{#3} -Li1-K1 ^{#1} 50.37(18)	Mo1-O4-Rb1 85.31(6)	Mo1-O2-Cs1 ^{#19} 106.77(11)
O5 ^{#1} -Li1-K1 ^{#1} 97.1(2)	Rb1 ^{#13} -O4-Rb1 95.38(5)	Cs1 ^{#17} -O2-Cs1 ^{#19} 102.32(7)
Li1 ^{#4} -Li1-K1 ^{#1} 138.8(3)	Li1-O5-Li1 ^{#15} 90.4(2)	Cs1 ^{#18} -O2-Cs1 ^{#19} 107.85(8)
O2-Li1-K1 48.49(18)	Mo1-O6-Rb1 ^{#13} 96.71(6)	Mo1-O3-Li1 166.7(2)
O5 ^{#2} -Li1-K1 124.4(3)	Li2 ^{#11} -O7-Rb1 ^{#12} 96.47(14)	Mo1-O3-Cs1 104.22(11)
O1W ^{#3} -Li1-K1 118.6(3)	O1W ^{#16} -Li1-O5 115.2(3)	Li1-O3-Cs1 88.80(15)
O5 ^{#1} -Li1-K1 71.4(2)	O1W ^{#16} -Li1-O2 ^{#2} 110.6(2)	Mo1-O3-Cs1 ^{#19} 97.36(10)
Li1 ^{#4} -Li1-K1 99.0(3)	O5-Li1-O2 ^{#2} 115.6(3)	Li1-O3-Cs1 ^{#19} 82.18(15)
K1 ^{#1} -Li1-K1 68.87(12)	O1W ^{#16} -Li1-O5 ^{#15} 103.8(2)	Cs1-O3-Cs1 ^{#19} 103.17(7)
O3 ^{#5} -Li2-O9 119.3(3)	O5-Li1-O5 ^{#15} 89.6(2)	Li4-O2W-Li4 ^{#20} 42.8(6)
O3 ^{#5} -Li2-O1 ^{#6} 104.7(3)	O2 ^{#2} -Li1-O5 ^{#15} 120.3(3)	Mo1-O4-Cs1 ^{#18} 89.54(9)

O9-Li2-O1 ^{#6} 110.1(3)	O1W ^{#16} -Li1-Li1 ^{#15} 117.6(3)	Mo1-O5-Cs1 ^{#18} 95.99(9)
O3 ^{#5} -Li2-O7 ^{#7} 102.8(3)	O5-Li1-Li1 ^{#15} 46.71(15)	Li2-O9-Li3 ^{#21} 86.4(3)
O9-Li2-O7 ^{#7} 114.7(3)	O2 ^{#2} -Li1-Li1 ^{#15} 131.4(3)	O2-Mo1-O3 105.24(13)
O1 ^{#6} -Li2-O7 ^{#7} 103.8(3)	O5 ^{#15} -Li1-Li1 ^{#15} 42.92(14)	O2-Mo1-O1 105.33(13)
O3 ^{#5} -Li2-K1 ^{#5} 56.72(17)	O1W ^{#16} -Li1-Rb1 ^{#15} 51.71(13)	O3-Mo1-O1 103.05(13)
O9-Li2-K1 ^{#5} 118.5(3)	O5-Li1-Rb1 ^{#15} 165.8(2)	O2-Mo1-O5 89.56(11)
O1 ^{#6} -Li2-K1 ^{#5} 131.0(3)	O2 ^{#2} -Li1-Rb1 ^{#15} 69.99(14)	O3-Mo1-O5 89.10(12)
O7 ^{#7} -Li2-K1 ^{#5} 50.42(16)	O5 ^{#15} -Li1-Rb1 ^{#15} 98.61(17)	O1-Mo1-O5 157.24(12)
Li1 ^{#8} -O1W-K1 ^{#5} 97.5(2)	Li1 ^{#15} -Li1-Rb1 ^{#15} 140.3(3)	O2-Mo1-O4 89.52(11)
Li1 ^{#6} -O5-Li1 ^{#1} 91.0(3)	O1W ^{#16} -Li1-Rb1 ^{#2} 122.5(2)	O3-Mo1-O4 158.67(11)
Li2 ^{#5} -O7-K1 ^{#10} 97.0(2)	O5-Li1-Rb1 ^{#2} 121.6(2)	O1-Mo1-O4 87.32(12)
Mo1-O1-Li2 ^{#2} 172.0(2)	O2 ^{#2} -Li1-Rb1 ^{#2} 51.03(13)	O5-Mo1-O4 75.46(11)
Mo1-O2-Li1 161.3(3)	O5 ^{#15} -Li1-Rb1 ^{#2} 69.48(14)	O2-Mo1-N1 156.15(10)
Mo1-O2-K1 95.52(10)	Li1 ^{#15} -Li1-Rb1 ^{#2} 95.8(2)	O3-Mo1-N1 87.40(11)
Li1-O2-K1 102.8(2)	Rb1 ^{#15} -Li1-Rb1 ^{#2} 72.35(8)	O1-Mo1-N1 90.96(12)
Mo1-O2-K1 ^{#1} 98.86(10)	O9-Li2-O1 ^{#2} 109.7(2)	O5-Mo1-N1 70.16(9)
Li1-O2-K1 ^{#1} 80.0(2)	O9-Li2-O3 ^{#11} 119.3(2)	O4-Mo1-N1 73.67(10)
K1-O2-K1 ^{#1} 82.87(7)	O1 ^{#2} -Li2-O3 ^{#11} 104.5(2)	O2-Mo1-Cs1 107.66(8)
Mo1-O3-Li2 ^{#7} 165.0(2)	O9-Li2-O7 ^{#9} 114.1(2)	O3-Mo1-Cs1 50.38(9)
Mo1-O3-K1 93.11(10)	O1 ^{#2} -Li2-O7 ^{#9} 103.0(2)	O1-Mo1-Cs1 53.43(9)
Li2 ^{#7} -O3-K1 91.1(2)	O3 ^{#11} -Li2-O7 ^{#9} 104.7(2)	O5-Mo1-Cs1 138.49(7)
C2-O4-Mo1 122.1(2)	O9-Li2-Rb1 ^{#11} 119.54(18)	O4-Mo1-Cs1 139.74(8)
C2-O4-K1 ^{#1} 116.1(2)	O1 ^{#2} -Li2-Rb1 ^{#11} 130.33(18)	N1-Mo1-Cs1 96.01(6)
Mo1-O4-K1 ^{#1} 107.68(10)	O3 ^{#11} -Li2-Rb1 ^{#11} 57.15(12)	O2-Mo1-Cs1 ^{#18} 47.91(8)
C2-O4-K1 126.6(2)	O7 ^{#9} -Li2-Rb1 ^{#11} 51.58(11)	O3-Mo1-Cs1 ^{#18} 123.15(9)
Mo1-O4-K1 84.84(8)	O4 ^{#13} -Rb1-O2W ^{#5} 110.49(6)	O1-Mo1-Cs1 ^{#18} 129.81(9)
K1 ^{#1} -O4-K1 92.92(7)	O4 ^{#13} -Rb1-O7 ^{#10} 173.54(5)	O5-Mo1-Cs1 ^{#18} 50.73(6)
Mo1-O6-K1 ^{#1} 93.44(9)	O2W ^{#5} -Rb1-O7 ^{#10} 67.50(6)	O4-Mo1-Cs1 ^{#18} 56.89(8)
O4 ^{#1} -K1-O1W ^{#7} 108.59(9)	O4 ^{#13} -Rb1-O1W ^{#9} 105.43(6)	N1-Mo1-Cs1 ^{#18} 108.24(6)
O4 ^{#1} -K1-O2W ^{#11} 102.99(10)	O2W ^{#5} -Rb1-O1W ^{#9} 123.19(8)	Cs1-Mo1-Cs1 ^{#18} 155.008(11)
O1W ^{#7} -K1-O2W ^{#11} 122.30(12)	O7 ^{#10} -Rb1-O1W ^{#9} 71.88(6)	O2-Mo1-Cs1 ^{#19} 48.57(9)
O4 ^{#1} -K1-O7 ^{#12} 169.39(8)	O4 ^{#13} -Rb1-O2 73.73(5)	O3-Mo1-Cs1 ^{#19} 56.92(9)
O1W ^{#7} -K1-O7 ^{#12} 72.03(9)	O2W ^{#5} -Rb1-O2 110.80(7)	O1-Mo1-Cs1 ^{#19} 118.14(10)
O2W ^{#11} -K1-O7 ^{#12} 68.93(10)	O7 ^{#10} -Rb1-O2 112.72(5)	O5-Mo1-Cs1 ^{#19} 84.62(7)
	O1W ^{#9} -Rb1-O2 120.80(6)	O4-Mo1-Cs1 ^{#19} 133.86(7)

O4 ^{#1} -K1-O2 74.45(8)	O4 ^{#13} -Rb1-O3 124.44(5)	N1-Mo1-Cs1 ^{#19} 136.87(7)
O1W ^{#7} -K1-O2 127.06(10)	O2W ^{#5} -Rb1-O3 103.84(6)	Cs1-Mo1-Cs1 ^{#19} 79.978(8)
O2W ^{#11} -K1-O2 107.18(10)	O7 ^{#10} -Rb1-O3 61.82(5)	Cs1 ^{#18} -Mo1-Cs1 ^{#19} 78.205(8)
O7 ^{#12} -K1-O2 114.01(8)	O1W ^{#9} -Rb1-O3 89.58(6)	O2-Mo1-Cs1 ^{#17} 42.54(9)
O4 ^{#1} -K1-O4 87.08(7)	O2-Rb1-O3 53.47(4)	O3-Mo1-Cs1 ^{#17} 112.49(9)
O1W ^{#7} -K1-O4 73.56(9)	O4 ^{#13} -Rb1-O4 84.62(5)	O1-Mo1-Cs1 ^{#17} 62.80(10)
O2W ^{#11} -K1-O4 155.51(10)	O2W ^{#5} -Rb1-O4 154.24(6)	O5-Mo1-Cs1 ^{#17} 130.16(6)
O7 ^{#12} -K1-O4 103.07(8)	O7 ^{#10} -Rb1-O4 99.59(5)	O4-Mo1-Cs1 ^{#17} 88.80(7)
O2-K1-O4 53.58(7)	O1W ^{#9} -Rb1-O4 68.86(6)	N1-Mo1-Cs1 ^{#17} 149.42(7)
O4 ^{#1} -K1-O3 127.29(8)	O2-Rb1-O4 51.98(5)	Cs1-Mo1-Cs1 ^{#17} 81.179(7)
O1W ^{#7} -K1-O3 92.92(10)	O3-Rb1-O4 51.15(5)	Cs1 ^{#18} -Mo1-Cs1 ^{#17} 80.900(7)
O2W ^{#11} -K1-O3 104.64(9)	O4 ^{#13} -Rb1-O6 ^{#13} 51.16(5)	Cs1 ^{#19} -Mo1-Cs1 ^{#17} 72.961(7)
O7 ^{#12} -K1-O3 62.72(7)	O2W ^{#5} -Rb1-O6 ^{#13} 92.98(6)	O2 ^{#22} -Cs1-O2 ^{#23} 94.20(5)
O2-K1-O3 54.85(7)	O7 ^{#10} -Rb1-O6 ^{#13} 122.41(5)	O2 ^{#22} -Cs1-O5 ^{#23} 147.45(6)
O4-K1-O3 53.06(7)	O1W ^{#9} -Rb1-O6 ^{#13} 76.94(6)	O2 ^{#23} -Cs1-O5 ^{#23} 53.62(6)
O4 ^{#1} -K1-O6 ^{#1} 51.80(7)	O2-Rb1-O6 ^{#13} 124.80(5)	O2 ^{#22} -Cs1-O2 ^{#19} 77.68(7)
O1W ^{#7} -K1-O6 ^{#1} 76.04(10)	O3-Rb1-O6 ^{#13} 162.49(5)	O2 ^{#23} -Cs1-O2 ^{#19} 67.30(8)
O2W ^{#11} -K1-O6 ^{#1} 88.13(9)	O4-Rb1-O6 ^{#13} 112.54(5)	O5 ^{#23} -Cs1-O2 ^{#19} 91.82(7)
O7 ^{#12} -K1-O6 ^{#1} 119.55(7)	O4 ^{#13} -Rb1-O2 ^{#13} 48.53(4)	O2 ^{#22} -Cs1-O3 98.75(7)
O2-K1-O6 ^{#1} 126.23(7)	O2W ^{#5} -Rb1-O2 ^{#13} 141.17(6)	O2 ^{#23} -Cs1-O3 160.49(7)
O4-K1-O6 ^{#1} 115.11(7)	O7 ^{#10} -Rb1-O2 ^{#13} 129.05(5)	O5 ^{#23} -Cs1-O3 113.58(7)
O3-K1-O6 ^{#1} 166.42(8)	O1W ^{#9} -Rb1-O2 ^{#13} 57.17(6)	O2 ^{#19} -Cs1-O3 101.26(7)
O4 ^{#1} -K1-O2 ^{#1} 50.74(7)	O2-Rb1-O2 ^{#13} 94.92(5)	O2 ^{#22} -Cs1-O1 70.93(7)
O1W ^{#7} -K1-O2 ^{#1} 58.81(8)	O3-Rb1-O2 ^{#13} 114.90(4)	O2 ^{#23} -Cs1-O1 148.29(7)
O2W ^{#11} -K1-O2 ^{#1} 137.66(9)	O4-Rb1-O2 ^{#13} 64.40(4)	O5 ^{#23} -Cs1-O1 133.11(7)
O7 ^{#12} -K1-O2 ^{#1} 130.83(8)	O6 ^{#13} -Rb1-O2 ^{#13} 48.20(4)	O2 ^{#19} -Cs1-O1 131.91(7)
O2-K1-O2 ^{#1} 97.13(7)	O4 ^{#13} -Rb1-Mo1 96.20(4)	O3-Cs1-O1 50.96(7)
O4-K1-O2 ^{#1} 65.43(7)	O2W ^{#5} -Rb1-Mo1 118.75(6)	O2 ^{#22} -Cs1-O4 ^{#23} 109.23(7)
O3-K1-O2 ^{#1} 117.70(7)	O7 ^{#10} -Rb1-Mo1 90.06(4)	O2 ^{#23} -Cs1-O4 ^{#23} 51.40(7)
O6 ^{#1} -K1-O2 ^{#1} 49.75(6)	O1W ^{#9} -Rb1-Mo1 98.84(5)	O5 ^{#23} -Cs1-O4 ^{#23} 49.29(7)
O4 ^{#1} -K1-Mo1 98.27(6)	O2-Rb1-Mo1 28.21(3)	O2 ^{#19} -Cs1-O4 ^{#23} 118.44(6)
O1W ^{#7} -K1-Mo1 103.94(9)	O3-Rb1-Mo1 28.24(3)	O3-Cs1-O4 ^{#23} 134.97(7)
O2W ^{#11} -K1-Mo1 117.85(8)	O4-Rb1-Mo1 36.48(3)	O1-Cs1-O4 ^{#23} 106.01(7)
O7 ^{#12} -K1-Mo1 91.75(6)	O6 ^{#13} -Rb1-Mo1 142.44(3)	O2 ^{#22} -Cs1-O3 ^{#19} 101.88(7)
O2-K1-Mo1 29.00(5)	O2 ^{#13} -Rb1-Mo1 97.78(3)	O2 ^{#23} -Cs1-O3 ^{#19} 108.67(7)

O4-K1-Mo1 37.82(5)	O4 ^{#13} -Rb1-Li1 ^{#15} 78.30(8)	O5 ^{#23} -Cs1-O3 ^{#19} 94.25(7)
O3-K1-Mo1 29.04(5)	O2W ^{#5} -Rb1-Li1 ^{#15} 149.46(10)	O2 ^{#19} -Cs1-O3 ^{#19} 50.30(6)
O6 ^{#1} -K1-Mo1 145.85(5)	O7 ^{#10} -Rb1-Li1 ^{#15} 100.38(8)	O3-Cs1-O3 ^{#19} 54.40(8)
O2 ^{#1} -K1-Mo1 100.24(5)	O1W ^{#9} -Rb1-Li1 ^{#15} 30.60(9)	O1-Cs1-O3 ^{#19} 101.87(7)
C2 ^{#1} -K1-Mo1 100.19(6)	O2-Rb1-Li1 ^{#15} 99.73(9)	O4 ^{#23} -Cs1-O3 ^{#19} 143.45(7)
O4 ^{#1} -K1-Li1 ^{#1} 81.68(12)	O3-Rb1-Li1 ^{#15} 93.39(8)	O2 ^{#22} -Cs1-O1 ^{#22} 48.18(6)
O1W ^{#7} -K1-Li1 ^{#1} 32.15(13)	O4-Rb1-Li1 ^{#15} 51.74(8)	O2 ^{#23} -Cs1-O1 ^{#22} 64.95(7)
O2W ^{#11} -K1-Li1 ^{#1} 149.04(14)	O6 ^{#13} -Rb1-Li1 ^{#15} 69.32(8)	O5 ^{#23} -Cs1-O1 ^{#22} 105.48(6)
O7 ^{#12} -K1-Li1 ^{#1} 101.70(13)	O2 ^{#13} -Rb1-Li1 ^{#15} 30.64(8)	O2 ^{#19} -Cs1-O1 ^{#22} 100.32(6)
O2-K1-Li1 ^{#1} 103.57(12)	Mo1-Rb1-Li1 ^{#15} 88.00(8)	O3-Cs1-O1 ^{#22} 134.26(6)
O4-K1-Li1 ^{#1} 53.71(12)	O1-Mo1-O3 104.67(9)	O1-Cs1-O1 ^{#22} 85.04(6)
O3-K1-Li1 ^{#1} 95.87(12)	O1-Mo1-O2 107.15(9)	O4 ^{#23} -Cs1-O1 ^{#22} 61.05(6)
O6 ^{#1} -K1-Li1 ^{#1} 70.57(12)	O3-Mo1-O2 105.38(8)	O3 ^{#19} -Cs1-O1 ^{#22} 145.62(6)
O2 ^{#1} -K1-Li1 ^{#1} 31.49(11)	O1-Mo1-O4 159.66(8)	O2 ^{#22} -Cs1-Li1 119.12(11)
Mo1-K1-Li1 ^{#1} 91.16(11)	O3-Mo1-O4 85.87(8)	O2 ^{#23} -Cs1-Li1 128.34(7)
O1-Mo1-O3 104.63(13)	O2-Mo1-O4 86.12(8)	O5 ^{#23} -Cs1-Li1 89.04(10)
O1-Mo1-O2 107.40(12)	O1-Mo1-O6 89.01(9)	O2 ^{#19} -Cs1-Li1 81.78(6)
O3-Mo1-O2 104.99(12)	O3-Mo1-O6 155.52(8)	O3-Cs1-Li1 32.15(6)
O1-Mo1-O6 89.47(12)	O2-Mo1-O6 89.31(8)	O1-Cs1-Li1 82.79(6)
O3-Mo1-O6 154.77(11)	O4-Mo1-O6 75.51(7)	O4 ^{#23} -Cs1-Li1 130.83(11)
O2-Mo1-O6 90.11(11)	O1-Mo1-N1 89.74(8)	O3 ^{#19} -Cs1-Li1 31.83(7)
O1-Mo1-O4 160.17(11)	O3-Mo1-N1 88.23(7)	O1 ^{#22} -Cs1-Li1 165.19(9)
O3-Mo1-O4 85.84(11)	O2-Mo1-N1 154.30(8)	O2 ^{#22} -Cs1-Mo1 82.26(5)
O2-Mo1-O4 85.45(11)	O4-Mo1-N1 72.99(6)	O2 ^{#23} -Cs1-Mo1 174.09(5)
O6-Mo1-O4 75.15(10)	O6-Mo1-N1 71.35(6)	O5 ^{#23} -Cs1-Mo1 129.31(5)
O1-Mo1-N1 90.67(11)	O1-Mo1-Rb1 142.10(7)	O2 ^{#19} -Cs1-Mo1 116.23(5)
O3-Mo1-N1 86.82(11)	O3-Mo1-Rb1 57.96(6)	O3-Cs1-Mo1 25.40(5)
O2-Mo1-N1 154.62(11)	O2-Mo1-Rb1 55.52(6)	O1-Cs1-Mo1 25.85(5)
O6-Mo1-N1 71.96(10)	O4-Mo1-Rb1 58.20(5)	O4 ^{#23} -Cs1-Mo1 125.33(5)
O4-Mo1-N1 72.87(9)	O6-Mo1-Rb1 120.85(5)	O3 ^{#19} -Cs1-Mo1 76.78(4)
N1-Mo1-K1 118.36(7)	N1-Mo1-Rb1 120.16(5)	O1 ^{#22} -Cs1-Mo1 109.30(4)
K1-Mo1-K1 ^{#1} 66.83(2)	O1-Mo1-Rb1 ^{#13} 134.23(7)	Li1-Cs1-Mo1 57.53(4)
	O3-Mo1-Rb1 ^{#13} 120.73(7)	O2 ^{#22} -Cs1-Mo1 ^{#23} 114.52(5)
	O2-Mo1-Rb1 ^{#13} 57.59(6)	O2 ^{#23} -Cs1-Mo1 ^{#23} 24.71(5)
	O4-Mo1-Rb1 ^{#13} 41.56(5)	O5 ^{#23} -Cs1-Mo1 ^{#23} 33.28(5)

O6-Mo1-Rb1 ^{#13} 51.57(5)	O2 ^{#19} -Cs1-Mo1 ^{#23} 86.48(5)
N1-Mo1-Rb1 ^{#13} 96.74(5)	O3-Cs1-Mo1 ^{#23} 146.73(5)
Rb1-Mo1-Rb1 ^{#13} 69.288(8)	O1-Cs1-Mo1 ^{#23} 139.58(5)
	O4 ^{#23} -Cs1-Mo1 ^{#23} 33.57(5)
	O3 ^{#19} -Cs1-Mo1 ^{#23} 114.93(4)
	O1 ^{#22} -Cs1-Mo1 ^{#23} 74.20(4)
	Li1-Cs1-Mo1 ^{#23} 120.61(8)
	Mo1-Cs1-Mo1 ^{#23} 155.007(11)
	O1W-Li1-O1W ^{#19} 109.0(5)
	O1W-Li1-O3 ^{#19} 113.17(13)
	O1W ^{#19} -Li1-O3 ^{#19} 110.71(16)
	O1W-Li1-O3 110.71(16)
	O1W ^{#19} -Li1-O3 113.17(14)
	O3 ^{#19} -Li1-O3 100.0(4)
	O1W-Li1-Cs1 81.37(16)
	O1W ^{#19} -Li1-Cs1 169.3(3)
	O3 ^{#19} -Li1-Cs1 65.99(19)
	O3-Li1-Cs1 59.04(18)
	O1W-Li1-Cs1 ^{#19} 169.3(3)
	O1W ^{#19} -Li1-Cs1 ^{#19} 81.37(16)
	O3 ^{#19} -Li1-Cs1 ^{#19} 59.04(18)
	O3-Li1-Cs1 ^{#19} 65.99(19)
	Cs1-Li1-Cs1 ^{#19} 88.46(19)
	O9 ^{#24} -Li2-O9 96.3(4)
	O9 ^{#24} -Li2-O7 ^{#25} 113.85(16)
	O9-Li2-O7 ^{#25} 115.47(14)
	O9 ^{#24} -Li2-O7 ^{#23} 115.47(14)
	O9-Li2-O7 ^{#23} 113.85(16)
	O7 ^{#25} -Li2-O7 ^{#23} 102.6(5)
	O9 ^{#24} -Li2-Li3 ^{#21} 48.2(2)
	O9-Li2-Li3 ^{#21} 48.2(2)
	O7 ^{#25} -Li2-Li3 ^{#21} 128.7(2)
	O7 ^{#23} -Li2-Li3 ^{#21} 128.7(2)
	O8 ^{#25} -Li3-O8 110.9(5)
	O8 ^{#25} -Li3-O9 ^{#26} 119.02(15)

		O8-Li3-O9 ^{#26} 108.13(15) O8 ^{#25} -Li3-O9 ^{#21} 108.13(15) O8-Li3-O9 ^{#21} 119.02(15) O9 ^{#26} -Li3-O9 ^{#21} 90.8(4) O8 ^{#25} -Li3-Li2 ^{#21} 124.5(2) O8-Li3-Li2 ^{#21} 124.5(2) O9 ^{#26} -Li3-Li2 ^{#21} 45.40(19) O9 ^{#21} -Li3-Li2 ^{#21} 45.40(19) Li4 ^{#20} -Li4-O2W 93.3(8) Li4 ^{#20} -Li4-O2W ^{#20} 44.0(6) O2W-Li4-O2W ^{#20} 97.2(6)
--	--	--

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+1,-z+1 #2 x+1,y,z #3 x+1,-y+3/2,z+1/2 #4 -x+2,-y+1,-z+1 #5 -x,y+1/2,-z+1/2 #6
x-1,y,z #7 -x,y-1/2,-z+1/2 #8 x-1,-y+3/2,z-1/2 #9 -x+1,y+1/2,-z+1/2 #10 x,y+1,z #11 -x+1,y-
1/2,-z+1/2 #12 x,y-1,z #13 -x,-y+1,-z #14 x,-y+1/2,z+1/2 #15 -x+1,-y+1,-z #16 x,-y+1/2,z-
1/2 #17 x,-y+1,z-1/2 #18 x,y,z-1 #19 -x,y,-z+3/2 #20 -x+1,y,-z+1/2 #21 -x+1,-y,-z+2 #22
x,-y+1,z+1/2 #23 x,y,z+1 #24 -x+1,y,-z+5/2 #25 -x+1,y,-z+3/2 #26 x,-y,z-1/2