Supplementary Material (ESI) for Dalton Transactions This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011

Fig. S1. Structure of second cluster with numbering scheme.



 $_{\text{5}}$ Table S1. Bond lengths (Å) and angles (°) for 1.

Cu1	N2	1.928(6)
Cu1	015	1.954(6)
10 Cu1	N1	1.999(9)
Cu1	01	2.003(6)
Cu1	O42	2.240(8)
Cu2	06	1.937(6)
Cu2	013	1.966(5)
15 Cu2	N3	1.973(6)
Cu2	N4	1.973(7)
Cu2	O43	2.317(8)
Cu3	N6	1.917(6)
Cu3	O18	1.963(6)
20 Cu3	N5	2.006(6)
Cu3	O3	2.008(5)
Cu3	O44	2.217(7)
Cu4	O2	1.932(5)
Cu4	013	1.964(6)
25 Cu4	N7	1.983(6)
Cu4	N8	1.998(6)
Cu4	O21	2.365(6)
Cu5	N10	1.946(6)
Cu5	O24	1.956(5)
30 Cu5	05	1.992(5)
Cu5	N9	2.025(6)
Cu5	O27	2.265(6)
Cu6	O4	1.928(5)
Cu6	013	1.969(5)
35 Cu6	N12	1.974(6)
Cu6	N11	1.982(6)
Cu6	O22	2.375(7)
Cu7	O30	1.938(7)
Cu7	N14	1.943(7)
40 Cu7	07	2.014(5)
Cu7	N13	2.033(7)
Cu7	O45	2.190(8)
Cu8	O14	1.951(6)

Cu8	O10	1.953(5)	
45 C118	N15	1.954(7)	
43 Cuo	1015	1.75+(7)	
Cu8	N16	1.965(6)	
Cu8	033	2.331(6)	
CO	N10	1.041(6)	
Cuy	IN 18	1.941(0)	
Cu9	O36	1.969(7)	
$-C_{11}0$	00	1 078(7)	
50 Cu9	09	1.976(7)	
Cu9	N17	1.986(8)	
C119	046	2 181(6)	
C 10	010	1.000(7)	
Culo	012	1.909(7)	
Cu10	O14	1.949(5)	
Cu10	N10	1.002(6)	
55 Cu10	1119	1.992(0)	
Cu10	N20	1.998(7)	
Cu10	047	2 381(9)	
C 11	017	2.501(5)	
Cull	039	1.940(5)	
Cu11	N22	1.946(6)	
	NO1	2.010(6)	
60 Cu11	1821	2.019(0)	
Cu11	O11	2.030(5)	
Cu11	048	2 264(7)	
Cull	040	2.20+(7)	
Cu12	08	1.925(5)	
Cu12	N24	1.960(6)	
C 12	014	1.900(0)	
65 Cu12	014	1.963(6)	
Cu12	N23	1.985(6)	
N2	Cu1	O15	176.3(3)
N2	Cu1	N1	80.6(3)
112	Cui	111	00.0(3)
70 O15	Cul	N1	97.8(3)
N2	Cu1	01	79.7(3)
015	Cu 1	01	102 2(2)
015	Cui	01	102.2(3)
N1	Cu1	01	159.2(2)
N2	Cu1	042	02 6(3)
112	Cui	042	92.0(3)
75 O15	Cul	O42	83.8(4)
N1	Cu1	042	85 8(3)
01	C 1	0.12	101.0(2)
01	Cul	042	101.8(3)
06	Cu2	013	95.2(2)
06	Cu2	N2	08 0(2)
00	Cuz	183	98.0(2)
80 O13	Cu2	N3	1666(2)
			100.0(5)
06	Cu2	N4	168.3(3)
06	Cu2	N4	168.3(3)
O6 O13	Cu2 Cu2	N4 N4	168.3(3) 88.3(2)
O6 O13 N3	Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4	168.3(3) 88.3(2) 79.3(3)
O6 O13 N3 O6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4 043	168.3(3) 168.3(2) 79.3(3) 86.8(3)
O6 O13 N3 O6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4 O43	168.3(3) 168.3(2) 79.3(3) 86.8(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4 O43 O43	166.6(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4 O43 O43 O43	166.6(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 N4 O43 O43 O43	166.6(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18	166.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3)
06 013 N3 06 85 013 N3 N4 N6 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(2)
06 013 N3 06 85 013 N3 N4 N6 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5	166.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 90 O18 N6 O18 N5	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18 N5 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O3	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18 N5 N6	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3)
06 013 N3 06 85 013 N3 N4 N6 N6 018 N6 018 N5 N6 95 018	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18 N5 N6 95 O18 N5	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 90 O18 N6 018 N5 N6 95 O18 N5	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44	166.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18 N5 N6 95 O18 N5 O3	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44 O44	166.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 90 O18 N5 N6 95 O18 N5 O3 O2	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 043 043 043 043 043 043 018 N5 N5 03 03 03 03 044 044 044 044 013	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3) 93.0(2)
O6 O13 N3 O6 s5 O13 N3 N4 N6 N6 90 O18 N6 O18 N5 N6 95 O18 N5 O3 O2 O2	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44 O44 O13 N7	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3) 93.0(2) 90.0(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 90 O18 N6 018 N5 N6 95 O18 N5 O3 O2 O2	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44 O44 O44 O13 N7	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3) 93.0(2) 99.0(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 90 O18 N6 90 O18 N5 N6 95 O18 N5 O3 O2 O2 O2	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44 O44 O44 O13 N7 N7	166.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3) 93.0(2) 99.0(2) 164.3(2)
O6 O13 N3 O6 85 O13 N3 N4 N6 90 O18 N6 90 O18 N5 N6 95 O18 N5 O3 O2 O2 100 O13 O2	Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu2 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3 Cu3	N4 N4 N4 O43 O43 O43 O43 O43 O18 N5 N5 O3 O3 O3 O3 O3 O44 O44 O44 O44 O44 O44	100.0(3) 168.3(3) 88.3(2) 79.3(3) 86.8(3) 88.2(3) 90.1(3) 104.5(3) 173.0(3) 80.7(3) 100.5(3) 79.4(2) 98.0(2) 157.8(2) 93.5(3) 93.3(3) 97.1(3) 93.9(3) 93.0(2) 99.0(2) 164.3(2) 177.3(2)

S T	Supplementa This journal i	ary Materi is (c) The	al (ESI) for Dalton T Royal Society of Ch	ransactions nemistry 2011			
013	Cu4	N8	88.7(2)		014	Cu10	N19
N7	Cu4	N8	78.9(2)		60 O12	Cu10	N20
02	Cu4	O21	86.0(2)		O14	Cu10	N20
O13	Cu4	O21	89.6(2)		N19	Cu10	N20
5 N7	Cu4	O21	101.1(2)		O12	Cu10	O47
N8	Cu4	O21	96.2(2)		O14	Cu10	O47
N10	Cu5	O24	177.9(2)		65 N19	Cu10	O47
N10	Cu5	05	79.5(2)		N20	Cu10	O47
O24	Cu5	O5	98.4(2)		O39	Cu11	N22
10 N10	Cu5	N9	79.8(2)		O39	Cu11	N21
O24	Cu5	N9	102.3(2)		N22	Cu11	N21
05	Cu5	N9	155.2(2)		70 O39	Cu11	011
N10	Cu5	O27	93.9(3)		N22	Cu11	011
O24	Cu5	O27	86.1(2)		N21	Cu11	011
15 O5	Cu5	O27	104.4(2)		O39	Cu11	O48
N9	Cu5	027	90.6(2)		N22	Cull	048
04	Cu6	013	93.0(2)		75 N21	Cull	048
04	Cu6	N12	176.7(2)		011	Cull	048
013	Cu6	N12	89.4(3)		08	Cu12	N24
20 04	Cub	N11	97.3(2)		08	Cu12	014
013 N12	Cub	N11 N11	158.3(2)		N24	Cu12	014 N22
N12	Cuo	N11 022	19.1(3)		80 U8 N24	Cu12 Cu12	N23
04	Cuo	022	93.4(3)		N24	Cu12 Cu12	N23
015 ~ N12	Cuo	022	92.0(3)		014	Cu12	IN23
25 IN12 N11	Cuo	022	106.4(3)				
030	Cu7	N14	172 3(3)		95		
030	Cu7	07	96.4(2)		65		
N14	Cu7	07	79.3(2)				
30 O 30	Cu7	N13	103.1(3)				
N14	Cu7	N13	79.9(3)				
07	Cu7	N13	157.1(2)		90		
O30	Cu7	O45	88.4(4)				
N14	Cu7	O45	98.5(3)				
35 O 7	Cu7	O45	98.8(3)				
N13	Cu7	O45	93.7(3)				
O14	Cu8	O10	92.6(2)		95		
O14	Cu8	N15	162.8(2)				
O10	Cu8	N15	98.4(2)				
40 O14	Cu8	N16	89.2(2)				
O10	Cu8	N16	177.6(3)				
N15	Cu8	N16	79.5(3)				
014	Cu8	033	95.1(2)				
010	Cus	033	90.5(3)				
45 NIS	Cu8	033	98.1(3)				
N10	Cus	033	90.9(3)				
N10	Cu9 Cu0	030	178.3(4)				
036	Cu9	09	19.1(3)				
50 N18	Cu9	N17	80.6(3)				
036	Cu9	N17	100.1(3)				
09	Cu9	N17	158.6(2)				
N18	Cu9	O46	95.4(3)				
036	Cu9	O46	85.9(3)				
55 O 9	Cu9	O46	96.2(3)				
N17	Cu9	O46	93.9(3)				
012	Cu10	O14	94.2(2)				
012	Cu10	N19	98.2(3)				

167.6(3)

170.4(3)

87.8(2) 80.0(3)

103.7(3)

85.0(3)

91.8(3)

85.8(3)

177.2(2)

99.8(2)

79.9(2)

102.2(2)

78.7(2)

84.6(3)

92.7(3)

94.2(4)

97.9(4)

93.4(2)

89.0(3)

97.3(2)

80.2(3)

163.9(2)

177.4(2)

155.8(2)