

Supporting information

Three new three-dimensional organic–inorganic hybrid compounds based on $\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}^{n-}$ ($n = 3$ or 4) polyanions and Cu^{I} –pyrazine/ Cu^{I} –pyrazine–Cl porous coordination polymers

Ming-Li Qi^{ab}, Kai Yu^{ab}, Zhan-Hua Su^{ab}, Chun-Xiao Wang^{ab}, Chun-Mei Wang^{ab},
Bai-Bin Zhou^{ab}*, Chun-Cheng Zhu^{ab}*

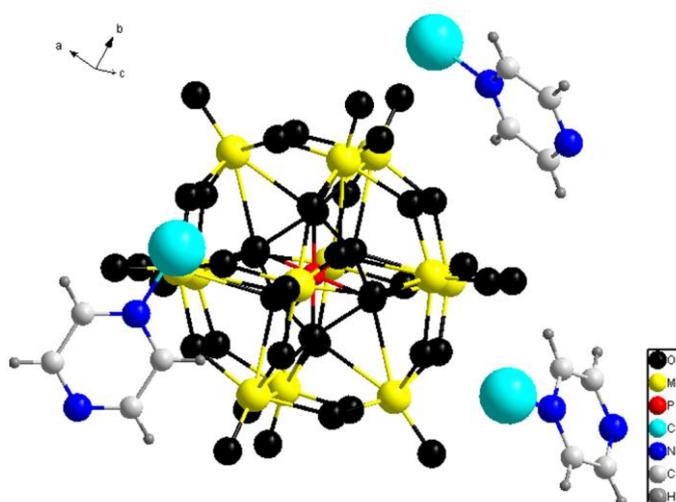


Fig. S1 Ball-stick representation of the 0D structure of compound 1

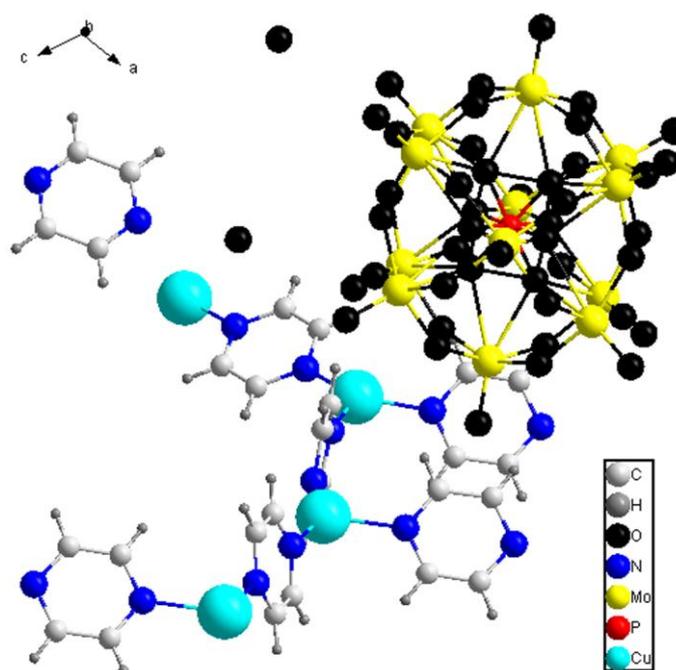


Fig. S2 Ball-stick representation of the 0D structure of compound 2

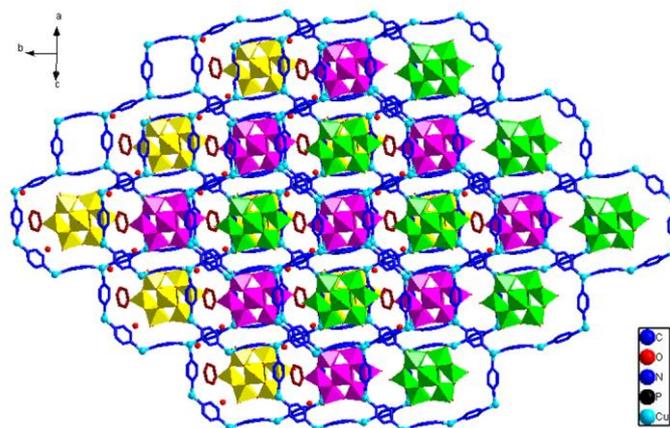


Fig. S3 Stick/polyhedral view showing the arrangement of $\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}^{4-}$ anions in the adjacent layers in **2**.

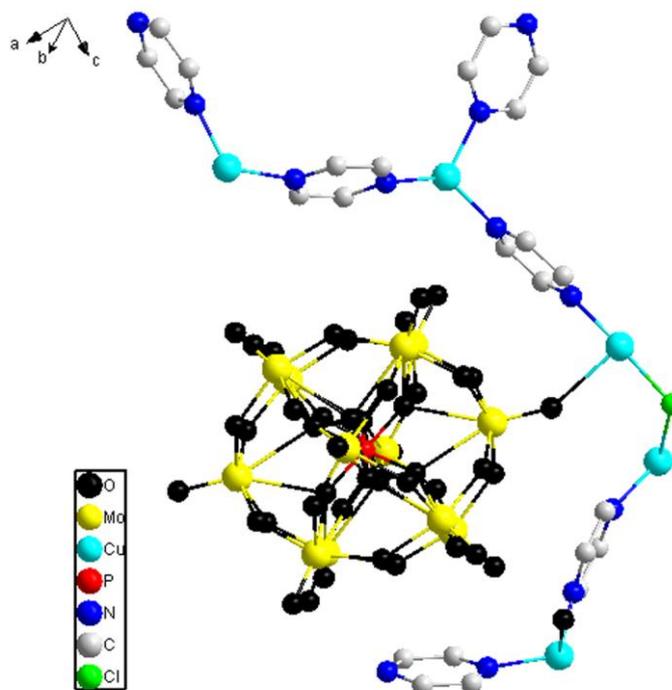


Fig. S4 Ball-stick representation of the 0D structure of compound **3**

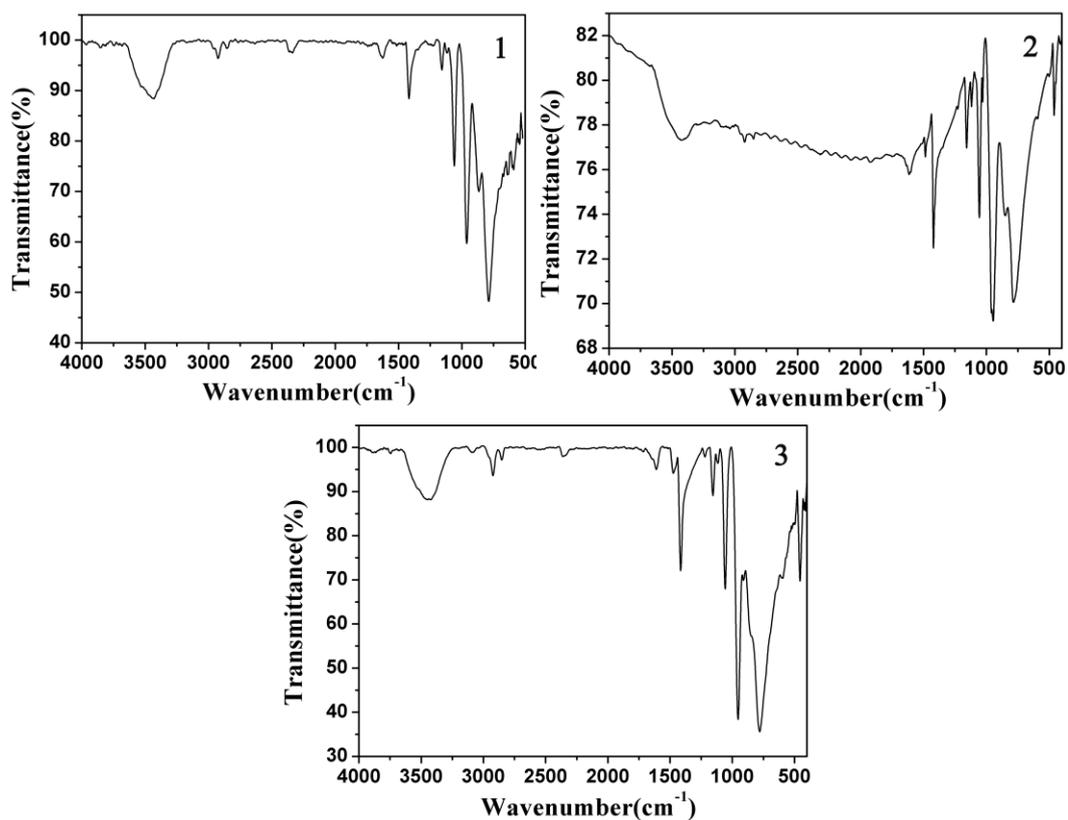


Fig. S5 IR spectra of compounds 1-3

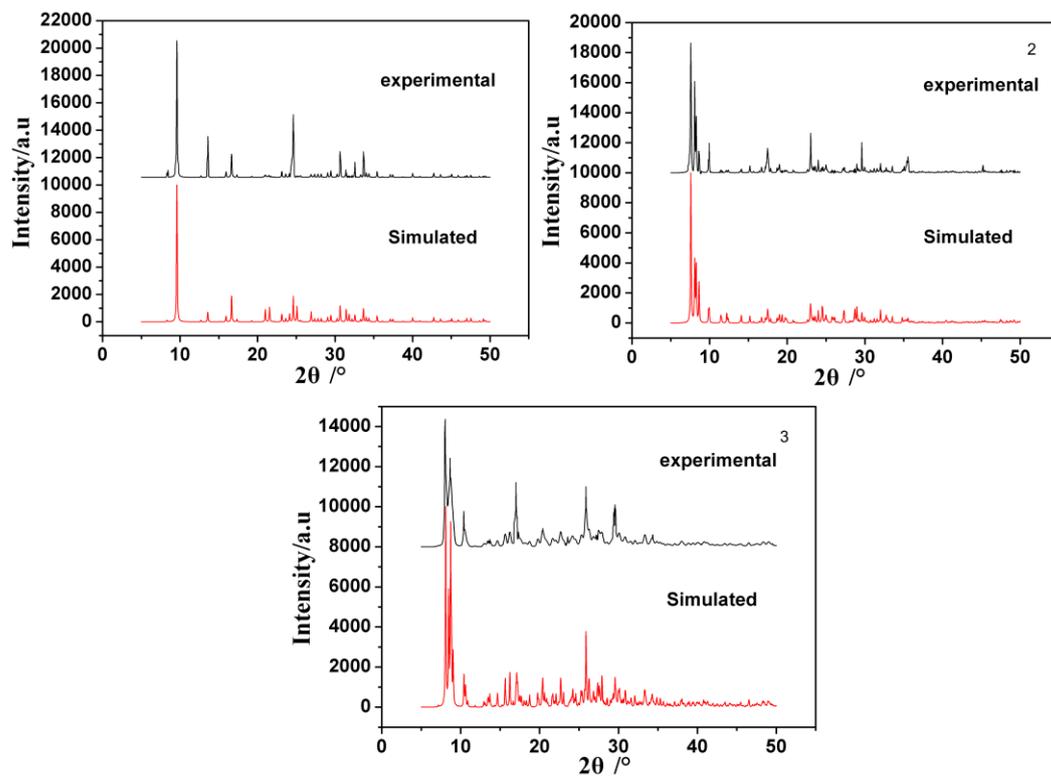


Fig. S6 Simulated and experimental XRD spectra of 1-3

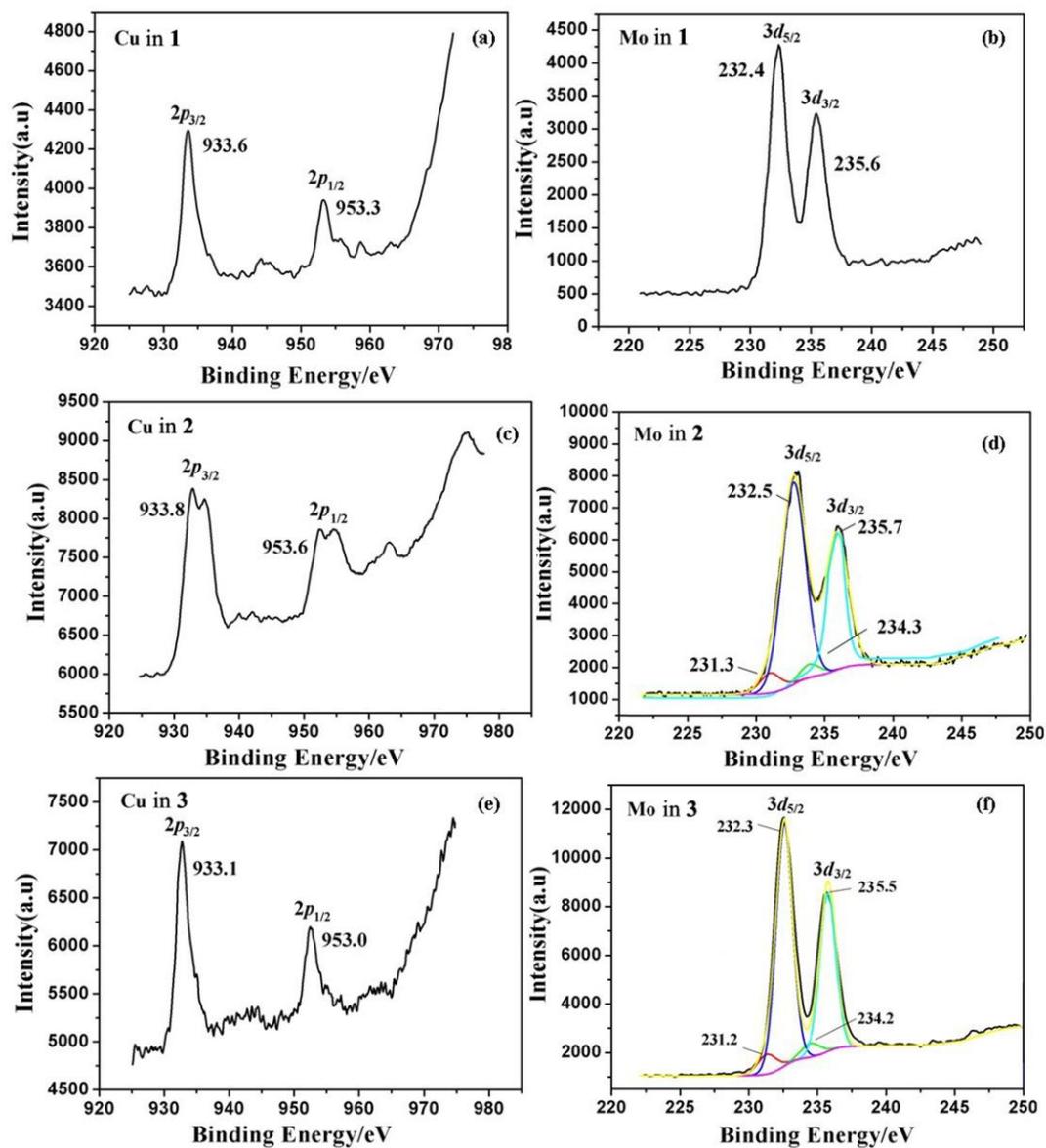


Fig. S7 XPS spectra of compounds 1-3

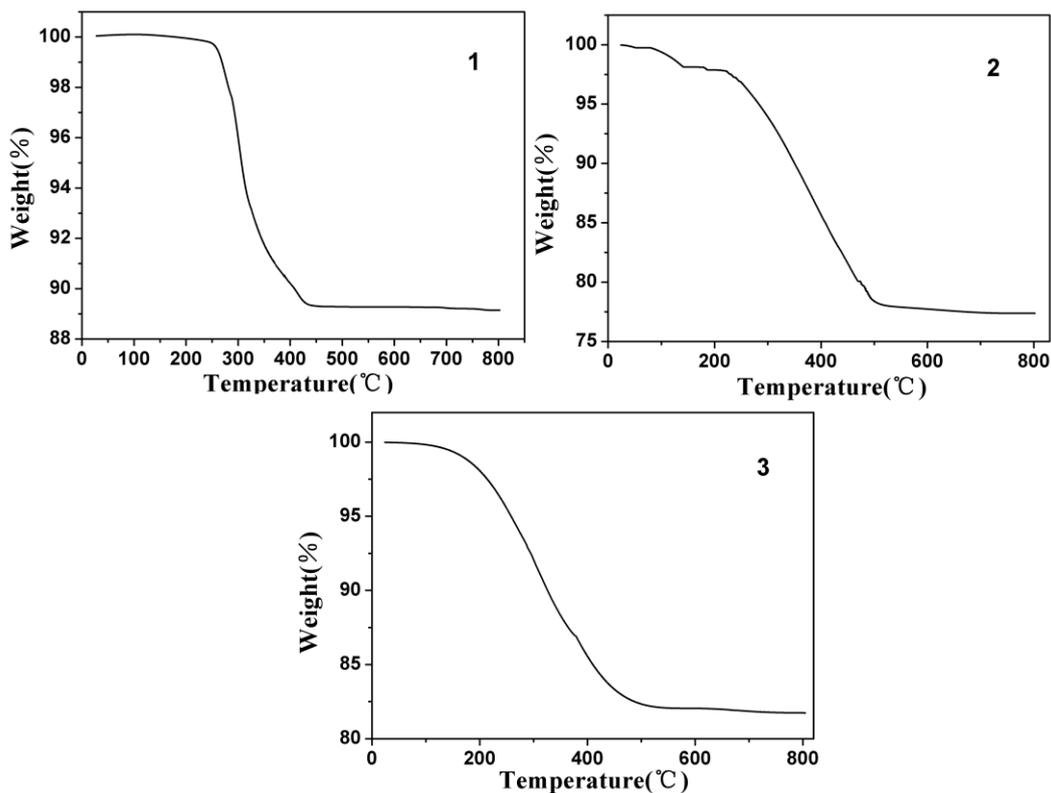


Fig. S8 TG curves of compounds 1-3

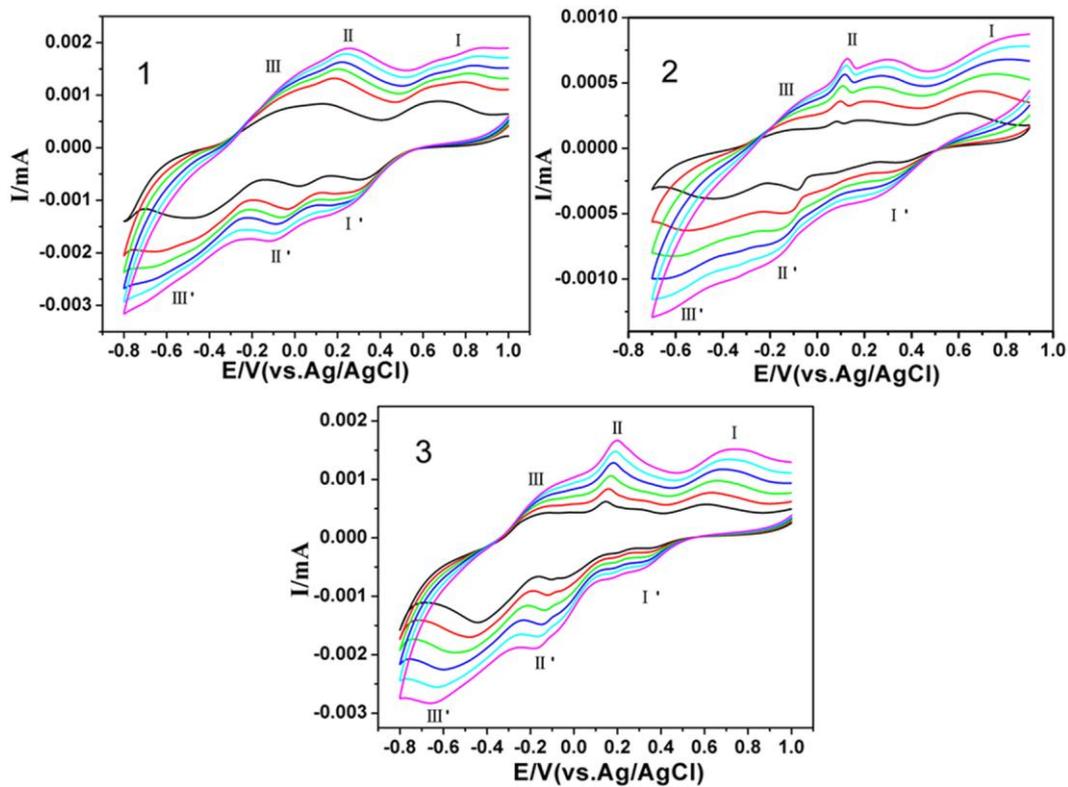


Fig. S9 Cyclic voltammograms of the 1- to 3-CPEs in 1 M H₂SO₄ solution at different scan rates (from inner to outer: 20, 40, 60, 80, 100 and 120 mV s⁻¹).

Table S1 Selected bond lengths (Å) of complexes 1-3

Compound 1			
O3—Mo1	1.830 (8)	Mo2—O4iii	1.967 (10)
O3—Mo1i	1.972 (9)	P3—O8i	1.532 (12)
O5—Mo2i	1.844 (9)	P3—O8iii	1.532 (12)
O5—Mo1	1.952 (8)	P3—O8	1.532 (12)
O4—Mo2	1.833 (10)	P3—O8ii	1.532 (12)
O4—Mo2ii	1.967 (10)	P3—O8v	1.532 (12)
O1—Mo1	1.857 (8)	P3—O8iv	1.532 (12)
O1—Mo2	1.963 (9)	P3—O6v	1.63 (2)
O6—P3	1.63 (2)	Cu1—N1	1.902 (7)
O6—Mo2iii	2.409 (11)	Cu1—N1vi	1.902 (7)
O6—Mo2	2.409 (11)	O8—O8i	1.707 (16)
O6—Mo2ii	2.410 (11)	O8—O8iv	1.707 (16)
O2—Mo1	1.658 (8)	O8—Mo1ii	2.448 (12)
Mo1—O3iv	1.972 (9)	O8—Mo1v	2.461 (12)
Mo1—O8iii	2.448 (12)	N1—C2vii	1.302 (17)
Mo1—O8v	2.461 (12)	N1—C1	1.321 (17)
Mo2—O7	1.659 (7)	C1—C2	1.408 (13)
Mo2—O5iv	1.844 (9)	C2—N1vii	1.302 (17)
Mo1—O3—Mo1i	140.5 (7)	O4iii—Mo2—O6	62.9 (5)
Mo2i—O5—Mo1	140.4 (6)	O8i—P3—O8iii	67.7 (4)
Mo2—O4—Mo2ii	137.7 (8)	O8i—P3—O8	67.7 (4)
Mo1—O1—Mo2	138.9 (5)	O8iii—P3—O8	112.3 (4)
P3—O6—Mo2iii	121.9 (4)	O8i—P3—O8ii	180.0 (9)
P3—O6—Mo2	121.9 (4)	O8iii—P3—O8ii	112.3 (4)
Mo2iii—O6—Mo2	94.7 (5)	O8—P3—O8ii	112.3 (4)
P3—O6—Mo2ii	121.9 (4)	O8i—P3—O8v	112.3 (4)
Mo2iii—O6—Mo2ii	94.7 (5)	O8iii—P3—O8v	67.7 (4)
Mo2—O6—Mo2ii	94.7 (5)	O8—P3—O8v	180.0 (8)
O2—Mo1—O3	102.7 (5)	O8ii—P3—O8v	67.7 (4)
O2—Mo1—O1	103.2 (5)	O8i—P3—O8iv	112.3 (4)
O3—Mo1—O1	94.1 (4)	O8iii—P3—O8iv	179.993 (3)
O2—Mo1—O5	101.4 (5)	O8—P3—O8iv	67.7 (4)
O3—Mo1—O5	86.6 (3)	O8ii—P3—O8iv	67.7 (4)
O1—Mo1—O5	154.5 (5)	O8v—P3—O8iv	112.3 (4)
O2—Mo1—O3iv	101.2 (5)	O8i—P3—O6	106.5 (5)
O3—Mo1—O3iv	155.2 (7)	O8iii—P3—O6	73.5 (5)
O1—Mo1—O3iv	86.8 (3)	O8—P3—O6	73.5 (5)
O5—Mo1—O3iv	82.2 (4)	O8ii—P3—O6	73.5 (5)
O2—Mo1—O8iii	159.5 (5)	O8v—P3—O6	106.5 (5)
O3—Mo1—O8iii	95.7 (5)	O8iv—P3—O6	106.5 (5)
O1—Mo1—O8iii	66.0 (4)	O8i—P3—O6v	73.5 (5)
O5—Mo1—O8iii	88.5 (5)	O8iii—P3—O6v	106.5 (5)

O3iv—Mo1—O8iii	62.0 (4)	O8—P3—O6v	106.5 (5)
O2—Mo1—O8v	159.3 (5)	O8ii—P3—O6v	106.5 (5)
O3—Mo1—O8v	63.3 (5)	O8v—P3—O6v	73.5 (5)
O1—Mo1—O8v	93.4 (5)	O8iv—P3—O6v	73.5 (5)
O5—Mo1—O8v	64.2 (4)	O6—P3—O6v	179.998 (4)
O3iv—Mo1—O8v	91.9 (5)	N1—Cu1—N1vi	176.7 (7)
O8iii—Mo1—O8v	40.7 (5)	P3—O8—O8i	56.1 (2)
O7—Mo2—O4	104.0 (6)	P3—O8—O8iv	56.2 (2)
O7—Mo2—O5iv	101.2 (5)	O8i—O8—O8iv	96.4 (10)
O4—Mo2—O5iv	94.3 (5)	P3—O8—Mo1ii	126.1 (6)
O7—Mo2—O1	98.1 (4)	O8i—O8—Mo1ii	70.0 (6)
O4—Mo2—O1	157.0 (6)	O8iv—O8—Mo1ii	140.5 (10)
O5iv—Mo2—O1	87.7 (4)	P3—O8—Mo1v	125.3 (7)
O7—Mo2—O4iii	101.4 (6)	O8i—O8—Mo1v	134.6 (10)
O4—Mo2—O4iii	87.6 (6)	O8iv—O8—Mo1v	69.3 (6)
O5iv—Mo2—O4iii	156.2 (6)	Mo1ii—O8—Mo1v	93.6 (4)
O1—Mo2—O4iii	81.6 (5)	C2vii—N1—C1	119.8 (9)
O7—Mo2—O6	159.7 (5)	C2vii—N1—Cu1	119.5 (8)
O4—Mo2—O6	64.5 (5)	C1—N1—Cu1	120.7 (9)
O5iv—Mo2—O6	96.6 (5)	N1—C1—C2	120.3 (13)
O1—Mo2—O6	92.5 (4)	N1vii—C2—C1	119.9 (12)
Compound 2			
C8—C7	1.330 (19)	O13—Mo3	1.953 (9)
C8—N4i	1.344 (18)	O14—Mo1	1.627 (8)
O1—Mo4	1.669 (8)	O15—Mo2	1.661 (8)
O2—Mo4ii	1.898 (9)	O16—Mo6	1.900 (10)
O2—Mo2	1.922 (10)	O16—Mo4	1.923 (9)
O3—Mo3	1.865 (14)	O17—Mo3	1.669 (8)
O3—Mo2	1.948 (13)	N1—Cu1	1.978 (12)
C6—N3	1.333 (18)	Mo1—O18	1.859 (10)
C6—C15iii	1.40 (2)	Mo1—O20	2.422 (15)
O4—P1	1.495 (14)	Mo2—O22	1.894 (14)
O4—O20	1.661 (19)	Mo3—O6ii	1.852 (10)
O4—O19	1.735 (18)	Mo3—O21	1.935 (10)
O4—O9ii	1.796 (19)	Mo4—O2ii	1.898 (9)
O4—Mo1	2.445 (14)	Mo4—O19ii	2.441 (14)
O4—Mo5ii	2.515 (13)	Mo4—O20	2.516 (14)
O5—Mo5	1.671 (10)	Mo5—O18ii	1.921 (10)
C3—N1	1.360 (16)	Mo5—O12ii	1.936 (9)
C3—C4	1.369 (17)	Mo5—O19ii	2.433 (15)
O6—Mo3ii	1.852 (10)	Mo5—O4ii	2.515 (13)
O6—Mo1	1.959 (9)	Mo6—O21	1.845 (11)
O7—Mo5	1.859 (10)	Mo6—O22	1.902 (14)

O7—Mo4	1.935 (10)	Mo6—O20	2.501 (14)
O8—Mo6	1.668 (9)	P1—O4ii	1.495 (14)
C1—C2	1.328 (19)	P1—O20	1.522 (13)
C1—N2	1.335 (16)	P1—O20ii	1.522 (13)
C7—N4	1.341 (16)	P1—O19ii	1.542 (16)
C2—N1	1.356 (17)	P1—O19	1.542 (16)
C4—N2	1.329 (15)	P1—O9ii	1.584 (13)
O9—P1	1.584 (13)	Cu2—N7	1.939 (10)
O9—O4ii	1.796 (19)	Cu2—N8	1.949 (12)
O9—O20	1.805 (18)	O18—Mo5ii	1.921 (10)
O9—Mo6	2.423 (13)	O19—O20ii	1.76 (2)
O9—Mo3	2.433 (12)	O19—Mo5ii	2.433 (15)
O9—Mo2	2.486 (14)	O19—Mo4ii	2.441 (14)
O10—Mo4	1.868 (11)	O20—O19ii	1.76 (2)
O10—Mo1	1.938 (10)	C14—N7iii	1.339 (18)
O11—Mo1	1.845 (10)	C9—N9	1.27 (3)
O11—Mo6	1.926 (11)	C9—C11iv	1.43 (4)
N4—C8i	1.344 (18)	N9—C11	1.35 (4)
N4—Cu1	1.967 (10)	N7—C15	1.32 (2)
C5—N3	1.305 (18)	N7—C14iii	1.339 (18)
C5—C14	1.370 (19)	C11—C9iv	1.43 (4)
N3—Cu1	1.996 (9)	C15—C6iii	1.40 (2)
N2—Cu2	2.102 (11)	N8—C17	1.31 (3)
O12—Mo2	1.853 (10)	N8—C16	1.31 (3)
O12—Mo5ii	1.936 (9)	C16—C17v	1.40 (2)
O13—Mo5	1.869 (9)	C17—C16v	1.40 (2)
C7—C8—N4i	121.4 (12)	O2ii—Mo4—O20	94.7 (6)
Mo4ii—O2—Mo2	137.7 (6)	O16—Mo4—O20	64.1 (5)
Mo3—O3—Mo2	139.4 (7)	O7—Mo4—O20	93.4 (6)
N3—C6—C15iii	119.8 (14)	O19ii—Mo4—O20	41.5 (5)
P1—O4—O20	57.4 (7)	O5—Mo5—O7	104.9 (7)
P1—O4—O19	56.5 (7)	O5—Mo5—O13	102.1 (6)
O20—O4—O19	95.3 (10)	O7—Mo5—O13	90.7 (5)
P1—O4—O9ii	56.7 (6)	O5—Mo5—O18ii	99.6 (6)
O20—O4—O9ii	93.9 (9)	O7—Mo5—O18ii	155.4 (6)
O19—O4—O9ii	89.5 (9)	O13—Mo5—O18ii	86.5 (4)
P1—O4—Mo1	126.7 (8)	O5—Mo5—O12ii	101.1 (6)
O20—O4—Mo1	69.3 (7)	O7—Mo5—O12ii	87.9 (4)
O19—O4—Mo1	133.7 (8)	O13—Mo5—O12ii	156.3 (6)
O9ii—O4—Mo1	133.3 (8)	O18ii—Mo5—O12ii	85.0 (5)
P1—O4—Mo5ii	123.4 (7)	O5—Mo5—O19ii	162.0 (6)
O20—O4—Mo5ii	134.1 (9)	O7—Mo5—O19ii	64.0 (6)
O19—O4—Mo5ii	66.9 (7)	O13—Mo5—O19ii	92.4 (5)

O9ii—O4—Mo5ii	126.1 (8)	O18ii—Mo5—O19ii	91.7 (6)
Mo1—O4—Mo5ii	92.3 (5)	O12ii—Mo5—O19ii	65.8 (5)
N1—C3—C4	120.8 (11)	O5—Mo5—O4ii	156.4 (6)
Mo3ii—O6—Mo1	138.5 (6)	O7—Mo5—O4ii	95.5 (6)
Mo5—O7—Mo4	138.9 (8)	O13—Mo5—O4ii	65.3 (5)
C2—C1—N2	122.4 (11)	O18ii—Mo5—O4ii	61.2 (5)
C8—C7—N4	123.0 (14)	O12ii—Mo5—O4ii	91.3 (6)
C1—C2—N1	122.3 (11)	O19ii—Mo5—O4ii	41.0 (4)
N2—C4—C3	122.0 (11)	O8—Mo6—O21	104.4 (6)
P1—O9—O4ii	52.0 (6)	O8—Mo6—O22	100.8 (6)
P1—O9—O20	52.9 (6)	O21—Mo6—O22	88.0 (5)
O4ii—O9—O20	88.7 (9)	O8—Mo6—O16	101.9 (6)
P1—O9—Mo6	123.6 (7)	O21—Mo6—O16	90.7 (5)
O4ii—O9—Mo6	132.7 (8)	O22—Mo6—O16	156.9 (6)
O20—O9—Mo6	70.8 (6)	O8—Mo6—O11	99.9 (6)
P1—O9—Mo3	123.8 (7)	O21—Mo6—O11	155.7 (6)
O4ii—O9—Mo3	71.8 (6)	O22—Mo6—O11	85.8 (5)
O20—O9—Mo3	135.9 (9)	O16—Mo6—O11	85.9 (4)
Mo6—O9—Mo3	93.7 (5)	O8—Mo6—O9	160.2 (5)
P1—O9—Mo2	121.3 (7)	O21—Mo6—O9	63.9 (5)
O4ii—O9—Mo2	131.6 (8)	O22—Mo6—O9	64.4 (5)
O20—O9—Mo2	127.4 (8)	O16—Mo6—O9	94.4 (5)
Mo6—O9—Mo2	92.9 (5)	O11—Mo6—O9	92.3 (5)
Mo3—O9—Mo2	93.3 (4)	O8—Mo6—O20	156.3 (5)
Mo4—O10—Mo1	138.1 (7)	O21—Mo6—O20	95.6 (6)
Mo1—O11—Mo6	141.7 (7)	O22—Mo6—O20	92.5 (5)
C7—N4—C8i	115.6 (11)	O16—Mo6—O20	64.7 (5)
C7—N4—Cu1	122.5 (10)	O11—Mo6—O20	61.3 (5)
C8i—N4—Cu1	121.9 (8)	O9—Mo6—O20	43.0 (4)
N3—C5—C14	122.7 (12)	O4ii—P1—O4	179.999 (2)
C5—N3—C6	117.4 (11)	O4ii—P1—O20	113.2 (8)
C5—N3—Cu1	121.6 (9)	O4—P1—O20	66.8 (8)
C6—N3—Cu1	120.6 (10)	O4ii—P1—O20ii	66.8 (8)
C4—N2—C1	116.9 (11)	O4—P1—O20ii	113.2 (8)
C4—N2—Cu2	119.8 (8)	O20—P1—O20ii	179.998 (2)
C1—N2—Cu2	123.1 (9)	O4ii—P1—O19ii	69.7 (7)
Mo2—O12—Mo5ii	138.8 (7)	O4—P1—O19ii	110.3 (7)
Mo5—O13—Mo3	139.5 (6)	O20—P1—O19ii	70.0 (7)
Mo6—O16—Mo4	139.4 (6)	O20ii—P1—O19ii	110.0 (7)
C2—N1—C3	115.7 (11)	O4ii—P1—O19	110.3 (7)
C2—N1—Cu1	123.1 (9)	O4—P1—O19	69.7 (7)
C3—N1—Cu1	120.6 (9)	O20—P1—O19	110.0 (7)
O14—Mo1—O11	103.6 (6)	O20ii—P1—O19	70.0 (7)

O14—Mo1—O18	103.2 (6)	O19ii—P1—O19	179.998 (3)
O11—Mo1—O18	91.4 (5)	O4ii—P1—O9ii	108.7 (7)
O14—Mo1—O10	100.7 (6)	O4—P1—O9ii	71.3 (7)
O11—Mo1—O10	87.7 (4)	O20—P1—O9ii	109.0 (7)
O18—Mo1—O10	155.5 (6)	O20ii—P1—O9ii	71.0 (7)
O14—Mo1—O6	100.4 (6)	O19ii—P1—O9ii	74.7 (7)
O11—Mo1—O6	155.6 (6)	O19—P1—O9ii	105.3 (7)
O18—Mo1—O6	86.9 (4)	O4ii—P1—O9	71.3 (7)
O10—Mo1—O6	83.9 (4)	O4—P1—O9	108.7 (7)
O14—Mo1—O20	160.3 (6)	O20—P1—O9	71.0 (7)
O11—Mo1—O20	63.9 (5)	O20ii—P1—O9	109.0 (7)
O18—Mo1—O20	92.6 (5)	O19ii—P1—O9	105.3 (7)
O10—Mo1—O20	65.2 (5)	O19—P1—O9	74.7 (7)
O6—Mo1—O20	91.9 (5)	O9ii—P1—O9	180.0 (8)
O14—Mo1—O4	159.6 (6)	N4—Cu1—N1	126.6 (4)
O11—Mo1—O4	92.5 (6)	N4—Cu1—N3	121.8 (4)
O18—Mo1—O4	63.4 (5)	N1—Cu1—N3	110.4 (4)
O10—Mo1—O4	92.2 (5)	N7—Cu2—N8	148.9 (5)
O6—Mo1—O4	65.0 (5)	N7—Cu2—N2	103.8 (4)
O20—Mo1—O4	39.9 (4)	N8—Cu2—N2	107.2 (5)
O15—Mo2—O12	103.1 (5)	Mo1—O18—Mo5ii	142.4 (7)
O15—Mo2—O22	101.6 (6)	P1—O19—O4	53.9 (6)
O12—Mo2—O22	91.1 (6)	P1—O19—O20ii	54.5 (7)
O15—Mo2—O2	100.9 (5)	O4—O19—O20ii	92.3 (9)
O12—Mo2—O2	88.3 (4)	P1—O19—Mo5ii	125.9 (7)
O22—Mo2—O2	157.1 (6)	O4—O19—Mo5ii	72.0 (6)
O15—Mo2—O3	100.2 (5)	O20ii—O19—Mo5ii	135.8 (8)
O12—Mo2—O3	156.6 (6)	P1—O19—Mo4ii	125.9 (8)
O22—Mo2—O3	85.8 (6)	O4—O19—Mo4ii	139.3 (8)
O2—Mo2—O3	85.7 (5)	O20ii—O19—Mo4ii	71.6 (6)
O15—Mo2—O9	156.4 (5)	Mo5ii—O19—Mo4ii	93.6 (5)
O12—Mo2—O9	95.5 (5)	P1—O20—O4	55.8 (7)
O22—Mo2—O9	63.1 (5)	P1—O20—O19ii	55.6 (7)
O2—Mo2—O9	94.1 (5)	O4—O20—O19ii	93.6 (10)
O3—Mo2—O9	62.5 (5)	P1—O20—O9	56.1 (6)
O17—Mo3—O6ii	102.1 (5)	O4—O20—O9	92.3 (9)
O17—Mo3—O3	102.1 (5)	O19ii—O20—O9	88.5 (9)
O6ii—Mo3—O3	90.7 (5)	P1—O20—Mo1	126.6 (8)
O17—Mo3—O21	101.4 (6)	O4—O20—Mo1	70.8 (7)
O6ii—Mo3—O21	156.4 (6)	O19ii—O20—Mo1	135.8 (8)
O3—Mo3—O21	86.9 (5)	O9—O20—Mo1	131.7 (8)
O17—Mo3—O13	101.5 (5)	P1—O20—Mo6	122.3 (7)
O6ii—Mo3—O13	88.6 (4)	O4—O20—Mo6	133.5 (9)

O3—Mo3—O13	156.1 (5)	O19ii—O20—Mo6	124.6 (9)
O21—Mo3—O13	84.3 (5)	O9—O20—Mo6	66.2 (6)
O17—Mo3—O9	158.4 (5)	Mo1—O20—Mo6	92.7 (5)
O6ii—Mo3—O9	95.2 (5)	P1—O20—Mo4	122.5 (8)
O3—Mo3—O9	64.6 (5)	O4—O20—Mo4	131.1 (9)
O21—Mo3—O9	62.6 (5)	O19ii—O20—Mo4	67.0 (7)
O13—Mo3—O9	91.7 (5)	O9—O20—Mo4	129.2 (9)
O1—Mo4—O10	101.2 (6)	Mo1—O20—Mo4	92.1 (4)
O1—Mo4—O2ii	100.9 (6)	Mo6—O20—Mo4	91.3 (5)
O10—Mo4—O2ii	90.6 (5)	Mo6—O21—Mo3	139.2 (8)
O1—Mo4—O16	102.0 (5)	Mo2—O22—Mo6	139.2 (8)
O10—Mo4—O16	88.4 (4)	N7iii—C14—C5	121.0 (13)
O2ii—Mo4—O16	156.8 (6)	N9—C9—C11iv	121 (3)
O1—Mo4—O7	101.9 (6)	C9—N9—C11	119 (4)
O10—Mo4—O7	156.9 (6)	C15—N7—C14iii	116.5 (11)
O2ii—Mo4—O7	87.0 (4)	C15—N7—Cu2	122.3 (10)
O16—Mo4—O7	85.0 (5)	C14iii—N7—Cu2	119.5 (10)
O1—Mo4—O19ii	159.9 (5)	N9—C11—C9iv	120 (3)
O10—Mo4—O19ii	95.0 (6)	N7—C15—C6iii	122.1 (13)
O2ii—Mo4—O19ii	66.8 (5)	C17—N8—C16	117.4 (14)
O16—Mo4—O19ii	90.2 (5)	C17—N8—Cu2	120.3 (14)
O7—Mo4—O19ii	62.9 (5)	C16—N8—Cu2	122.1 (15)
O1—Mo4—O20	158.6 (5)	N8—C16—C17v	119 (2)
O10—Mo4—O20	63.9 (5)	N8—C17—C16v	123 (2)
Compound 3			
O45—Cu2	2.450 (11)	P1—O32	1.491 (8)
Mo1—O31	1.662 (5)	P1—O42	1.514 (8)
Mo1—O26	1.857 (6)	P1—O42ii	1.514 (8)
Mo1—O11	1.871 (6)	P1—O38ii	1.547 (8)
Mo1—O22	1.954 (6)	P1—O38	1.547 (8)
Mo1—O1	1.957 (5)	P1—O43	1.580 (8)
Mo1—O14	2.455 (8)	P1—O43ii	1.580 (8)
Mo1—O40	2.473 (8)	P2—O44i	1.512 (8)
Mo2—O9	1.663 (5)	P2—O44	1.512 (8)
Mo2—O13	1.839 (6)	P2—O40	1.514 (7)
Mo2—O22i	1.853 (6)	P2—O40i	1.514 (7)
Mo2—O33	1.935 (6)	P2—O14	1.528 (7)
Mo2—O27	1.984 (6)	P2—O14i	1.528 (7)
Mo2—O44i	2.447 (8)	P2—O41i	1.605 (8)
Mo2—O14i	2.458 (8)	P2—O41	1.605 (8)
Mo3—O39	1.655 (5)	Cu4—N10	1.941 (6)
Mo3—O33	1.858 (6)	Cu4—N11	1.992 (6)
Mo3—O30	1.872 (5)	Cu4—N3	2.029 (6)

Mo3—O11	1.926 (5)	Cu5—N4	1.947 (6)
Mo3—O4	1.972 (5)	Cu5—N12	1.979 (6)
Mo3—O40	2.460 (8)	Cu5—O17	2.141 (5)
Mo3—O44i	2.472 (8)	Cu5—Cl1iv	2.529 (2)
Mo4—O20	1.665 (5)	N1—C8	1.331 (10)
Mo4—O7	1.888 (5)	N1—C5	1.346 (10)
Mo4—O12	1.897 (6)	N2—C13	1.322 (9)
Mo4—O21	1.903 (5)	N2—C12	1.349 (10)
Mo4—O35	1.910 (6)	N3—C4	1.328 (9)
Mo4—O42ii	2.445 (8)	N3—C1	1.340 (9)
Mo4—O32	2.473 (8)	N4—C6	1.346 (10)
Mo5—O29	1.658 (6)	N4—C7	1.347 (10)
Mo5—O18	1.886 (5)	C3—N5	1.346 (9)
Mo5—O36	1.896 (6)	C3—C4	1.387 (10)
Mo5—O21	1.911 (6)	C14—N6	1.351 (9)
Mo5—O28	1.929 (6)	C14—C11	1.392 (10)
Mo5—O43ii	2.421 (8)	N5—C2	1.342 (9)
Mo6—O8	1.653 (6)	C7—C8	1.389 (10)
Mo6—O16	1.894 (6)	O14—O44	1.716 (11)
Mo6—O24	1.899 (6)	O14—O40	1.722 (11)
Mo6—O18	1.909 (5)	O14—Mo2i	2.458 (8)
Mo6—O7	1.913 (6)	O16—Mo12ii	1.915 (7)
Mo6—O38	2.440 (8)	C6—C5	1.376 (11)
Mo6—O32	2.507 (8)	C2—C1	1.377 (11)
Mo7—O6	1.657 (5)	O19—Mo9i	1.856 (6)
Mo7—O37	1.838 (6)	O22—Mo2i	1.853 (6)
Mo7—O4	1.845 (6)	O23—Mo8i	1.830 (6)
Mo7—O13	1.960 (6)	C12—C22	1.368 (12)
Mo7—O23	1.976 (6)	C9—N7	1.336 (10)
Mo7—O41i	2.451 (8)	C9—C10	1.398 (11)
Mo8—O17	1.687 (5)	O27—Mo9i	1.834 (6)
Mo8—O23i	1.830 (6)	O28—Mo11ii	1.883 (7)
Mo8—O1	1.837 (6)	C10—N6	1.346 (10)
Mo8—O19	1.933 (6)	C13—C23	1.401 (10)
Mo8—O30	1.972 (6)	O32—O42ii	1.647 (12)
Mo8—O41	2.412 (8)	O32—O38	1.731 (11)
Mo9—O3	1.666 (5)	O32—O43ii	1.765 (11)
Mo9—O27i	1.834 (6)	O34—Mo12ii	1.915 (6)
Mo9—O19i	1.856 (6)	C11—N7	1.323 (9)
Mo9—O26	1.943 (6)	O36—Mo10ii	1.899 (7)
Mo9—O37	1.980 (6)	O38—O42	1.769 (11)
Mo9—O41i	2.449 (8)	O38—Mo12ii	2.443 (8)
Mo9—O14	2.511 (8)	N8—C16	1.333 (9)

Mo10—O25	1.669 (5)	N8—C15	1.344 (9)
Mo10—O12	1.891 (6)	N9—C24	1.332 (11)
Mo10—O10	1.896 (6)	N9—C21	1.348 (10)
Mo10—O36ii	1.899 (7)	N10—C18	1.343 (10)
Mo10—O15	1.908 (6)	N10—C19	1.354 (11)
Mo10—O43	2.446 (8)	N11—C17	1.328 (10)
Mo10—O42ii	2.514 (8)	N11—C25	1.344 (11)
Mo11—O2	1.676 (4)	N12—C23v	1.332 (10)
Mo11—O28ii	1.883 (7)	N12—C22v	1.363 (11)
Mo11—O15	1.883 (6)	C23—N12vi	1.332 (10)
Mo11—O34	1.885 (6)	C18—C15vi	1.397 (10)
Mo11—O24	1.900 (7)	O40—O44i	1.687 (11)
Mo11—O43	2.482 (8)	O41—Mo9i	2.449 (8)
Mo11—O38	2.516 (8)	O41—Mo7i	2.451 (8)
Mo12—O5	1.660 (5)	C15—C18v	1.397 (10)
Mo12—O35	1.879 (7)	O42—O32ii	1.647 (12)
Mo12—O10	1.905 (6)	O42—Mo4ii	2.445 (8)
Mo12—O34ii	1.915 (6)	O42—Mo12ii	2.484 (8)
Mo12—O16ii	1.914 (7)	O42—Mo10ii	2.514 (8)
Mo12—O38ii	2.443 (8)	C16—C19v	1.374 (11)
Mo12—O42ii	2.484 (8)	O43—O32ii	1.765 (11)
Cu1—N7	2.005 (6)	O43—Mo5ii	2.421 (8)
Cu1—N5	2.025 (6)	O44—O40i	1.687 (11)
Cu1—N8	2.032 (6)	O44—Mo2i	2.446 (8)
Cu1—Cl1iii	2.505 (2)	O44—Mo3i	2.472 (8)
Cu2—N6	1.959 (6)	C17—C21	1.395 (11)
Cu2—N1	1.978 (6)	C22—N12vi	1.363 (11)
Cu2—N2	2.001 (6)	C19—C16vi	1.374 (11)
Cu3—N9	1.923 (6)	C25—C24	1.398 (12)
Cu3—Cl1	2.1541 (19)	Cl1—Cu1iii	2.505 (2)
P1—O32ii	1.491 (8)	Cl1—Cu5vii	2.529 (2)
O31—Mo1—O26	103.4 (3)	O32ii—P1—O42	66.5 (4)
O31—Mo1—O11	101.8 (3)	O32—P1—O42	113.5 (4)
O26—Mo1—O11	92.6 (3)	O32ii—P1—O42ii	113.5 (4)
O31—Mo1—O22	101.9 (3)	O32—P1—O42ii	66.5 (4)
O26—Mo1—O22	87.3 (2)	O42—P1—O42ii	180.0 (3)
O11—Mo1—O22	155.6 (3)	O32ii—P1—O38ii	69.4 (4)
O31—Mo1—O1	101.0 (3)	O32—P1—O38ii	110.6 (4)
O26—Mo1—O1	155.3 (3)	O42—P1—O38ii	109.4 (4)
O11—Mo1—O1	86.7 (2)	O42ii—P1—O38ii	70.6 (4)
O22—Mo1—O1	83.5 (3)	O32ii—P1—O38	110.6 (4)
O31—Mo1—O14	160.5 (3)	O32—P1—O38	69.4 (4)
O26—Mo1—O14	66.2 (3)	O42—P1—O38	70.6 (4)

O11—Mo1—O14	95.2 (3)	O42ii—P1—O38	109.4 (4)
O22—Mo1—O14	62.5 (3)	O38ii—P1—O38	179.998 (2)
O1—Mo1—O14	89.3 (3)	O32ii—P1—O43	70.1 (4)
O31—Mo1—O40	158.1 (3)	O32—P1—O43	109.9 (4)
O26—Mo1—O40	94.2 (3)	O42—P1—O43	107.1 (4)
O11—Mo1—O40	63.9 (3)	O42ii—P1—O43	72.9 (4)
O22—Mo1—O40	91.8 (3)	O38ii—P1—O43	106.0 (4)
O1—Mo1—O40	63.4 (3)	O38—P1—O43	74.0 (4)
O14—Mo1—O40	40.9 (2)	O32ii—P1—O43ii	109.9 (4)
O9—Mo2—O13	102.1 (3)	O32—P1—O43ii	70.1 (4)
O9—Mo2—O22i	102.6 (3)	O42—P1—O43ii	72.9 (4)
O13—Mo2—O22i	94.2 (3)	O42ii—P1—O43ii	107.1 (4)
O9—Mo2—O33	100.7 (3)	O38ii—P1—O43ii	74.0 (4)
O13—Mo2—O33	88.7 (2)	O38—P1—O43ii	106.0 (4)
O22i—Mo2—O33	155.3 (4)	O43—P1—O43ii	179.999 (1)
O9—Mo2—O27	100.5 (3)	O44i—P2—O44	179.999 (2)
O13—Mo2—O27	156.8 (3)	O44i—P2—O40	67.7 (4)
O22i—Mo2—O27	85.9 (2)	O44—P2—O40	112.3 (4)
O33—Mo2—O27	82.0 (3)	O44i—P2—O40i	112.3 (4)
O9—Mo2—O44i	159.3 (3)	O44—P2—O40i	67.7 (4)
O13—Mo2—O44i	66.7 (3)	O40—P2—O40i	180.0 (6)
O22i—Mo2—O44i	95.8 (3)	O44i—P2—O14	111.2 (4)
O33—Mo2—O44i	63.0 (3)	O44—P2—O14	68.8 (4)
O27—Mo2—O44i	90.2 (3)	O40—P2—O14	68.9 (4)
O9—Mo2—O14i	159.2 (3)	O40i—P2—O14	111.1 (4)
O13—Mo2—O14i	94.6 (3)	O44i—P2—O14i	68.8 (4)
O22i—Mo2—O14i	63.5 (3)	O44—P2—O14i	111.2 (4)
O33—Mo2—O14i	91.9 (3)	O40—P2—O14i	111.1 (4)
O27—Mo2—O14i	64.7 (3)	O40i—P2—O14i	68.9 (4)
O44i—Mo2—O14i	41.0 (2)	O14—P2—O14i	179.999 (2)
O39—Mo3—O33	102.7 (4)	O44i—P2—O41i	72.3 (4)
O39—Mo3—O30	101.7 (3)	O44—P2—O41i	107.7 (4)
O33—Mo3—O30	92.6 (3)	O40—P2—O41i	107.1 (4)
O39—Mo3—O11	101.6 (3)	O40i—P2—O41i	72.9 (4)
O33—Mo3—O11	154.8 (3)	O14—P2—O41i	72.8 (4)
O30—Mo3—O11	88.8 (2)	O14i—P2—O41i	107.2 (4)
O39—Mo3—O4	100.8 (3)	O44i—P2—O41	107.7 (4)
O33—Mo3—O4	86.6 (2)	O44—P2—O41	72.3 (4)
O30—Mo3—O4	157.1 (3)	O40—P2—O41	72.9 (4)
O11—Mo3—O4	82.5 (2)	O40i—P2—O41	107.1 (4)
O39—Mo3—O40	160.1 (3)	O14—P2—O41	107.2 (4)
O33—Mo3—O40	94.0 (3)	O14i—P2—O41	72.8 (4)
O30—Mo3—O40	66.5 (3)	O41i—P2—O41	179.999 (1)

O11—Mo3—O40	63.5 (3)	N10—Cu4—N11	129.2 (3)
O4—Mo3—O40	90.7 (3)	N10—Cu4—N3	122.1 (2)
O39—Mo3—O44i	159.7 (3)	N11—Cu4—N3	106.2 (2)
O33—Mo3—O44i	63.3 (3)	N4—Cu5—N12	132.0 (3)
O30—Mo3—O44i	93.9 (3)	N4—Cu5—O17	121.1 (2)
O11—Mo3—O44i	91.5 (3)	N12—Cu5—O17	102.0 (2)
O4—Mo3—O44i	65.3 (3)	N4—Cu5—Cl1iv	103.3 (2)
O40—Mo3—O44i	40.0 (2)	N12—Cu5—Cl1iv	98.8 (2)
O20—Mo4—O7	101.9 (3)	O17—Cu5—Cl1iv	86.81 (15)
O20—Mo4—O12	102.6 (4)	Mo8—O1—Mo1	141.4 (4)
O7—Mo4—O12	88.0 (3)	C8—N1—C5	116.4 (7)
O20—Mo4—O21	101.5 (3)	C8—N1—Cu2	121.1 (5)
O7—Mo4—O21	87.9 (2)	C5—N1—Cu2	121.9 (5)
O12—Mo4—O21	155.9 (3)	Mo7—O4—Mo3	139.2 (4)
O20—Mo4—O35	101.9 (4)	C13—N2—C12	117.1 (7)
O7—Mo4—O35	156.2 (3)	C13—N2—Cu2	122.1 (5)
O12—Mo4—O35	87.0 (2)	C12—N2—Cu2	120.5 (5)
O21—Mo4—O35	87.2 (3)	C4—N3—C1	117.1 (6)
O20—Mo4—O42ii	160.1 (4)	C4—N3—Cu4	124.5 (5)
O7—Mo4—O42ii	93.0 (3)	C1—N3—Cu4	118.4 (5)
O12—Mo4—O42ii	64.4 (3)	Mo4—O7—Mo6	139.3 (4)
O21—Mo4—O42ii	92.1 (3)	C6—N4—C7	116.6 (7)
O35—Mo4—O42ii	63.9 (3)	C6—N4—Cu5	119.4 (5)
O20—Mo4—O32	160.8 (4)	C7—N4—Cu5	121.7 (5)
O7—Mo4—O32	64.9 (3)	N5—C3—C4	121.4 (6)
O12—Mo4—O32	91.2 (3)	Mo10—O10—Mo12	138.1 (4)
O21—Mo4—O32	65.6 (3)	N6—C14—C11	121.2 (7)
O35—Mo4—O32	92.0 (3)	C2—N5—C3	116.2 (6)
O42ii—Mo4—O32	39.1 (3)	C2—N5—Cu1	121.3 (5)
O29—Mo5—O18	102.0 (3)	C3—N5—Cu1	122.3 (5)
O29—Mo5—O36	102.5 (4)	N4—C7—C8	120.9 (7)
O18—Mo5—O36	88.9 (3)	Mo1—O11—Mo3	139.3 (4)
O29—Mo5—O21	101.4 (3)	Mo10—O12—Mo4	140.2 (4)
O18—Mo5—O21	87.9 (2)	Mo2—O13—Mo7	139.3 (4)
O36—Mo5—O21	156.0 (4)	P2—O14—O44	55.2 (3)
O29—Mo5—O28	101.4 (4)	P2—O14—O40	55.2 (4)
O18—Mo5—O28	156.6 (4)	O44—O14—O40	93.9 (5)
O36—Mo5—O28	86.1 (2)	P2—O14—Mo1	125.2 (4)
O21—Mo5—O28	87.4 (3)	O44—O14—Mo1	138.8 (5)
O29—Mo5—O43ii	158.4 (3)	O40—O14—Mo1	70.1 (4)
O18—Mo5—O43ii	93.8 (3)	P2—O14—Mo2i	124.2 (4)
O36—Mo5—O43ii	62.9 (3)	O44—O14—Mo2i	69.2 (4)
O21—Mo5—O43ii	93.6 (3)	O40—O14—Mo2i	132.6 (5)

O28—Mo5—O43ii	63.6 (3)	Mo1—O14—Mo2i	93.5 (3)
O8—Mo6—O16	102.3 (4)	P2—O14—Mo9	121.6 (4)
O8—Mo6—O24	101.4 (4)	O44—O14—Mo9	125.1 (5)
O16—Mo6—O24	87.7 (3)	O40—O14—Mo9	131.2 (5)
O8—Mo6—O18	102.2 (3)	Mo1—O14—Mo9	91.2 (2)
O16—Mo6—O18	88.1 (3)	Mo2i—O14—Mo9	91.7 (3)
O24—Mo6—O18	156.4 (3)	Mo11—O15—Mo10	139.3 (4)
O8—Mo6—O7	101.1 (3)	Mo6—O16—Mo12ii	139.0 (5)
O16—Mo6—O7	156.5 (4)	N1—C8—C7	122.3 (7)
O24—Mo6—O7	88.1 (3)	Mo8—O17—Cu5	138.6 (3)
O18—Mo6—O7	86.6 (2)	Mo5—O18—Mo6	139.2 (4)
O8—Mo6—O38	159.0 (3)	N4—C6—C5	121.8 (8)
O16—Mo6—O38	63.3 (3)	N5—C2—C1	122.1 (7)
O24—Mo6—O38	64.6 (3)	Mo9i—O19—Mo8	139.2 (5)
O18—Mo6—O38	92.9 (3)	Mo4—O21—Mo5	138.4 (3)
O7—Mo6—O38	94.2 (3)	Mo2i—O22—Mo1	140.1 (5)
O8—Mo6—O32	160.0 (3)	Mo8i—O23—Mo7	138.6 (5)
O16—Mo6—O32	93.2 (3)	N2—C12—C22	121.5 (8)
O24—Mo6—O32	91.7 (3)	Mo6—O24—Mo11	139.9 (4)
O18—Mo6—O32	65.5 (3)	N7—C9—C10	121.4 (7)
O7—Mo6—O32	63.9 (3)	Mo1—O26—Mo9	138.0 (4)
O38—Mo6—O32	40.9 (3)	Mo9i—O27—Mo2	138.0 (4)
O6—Mo7—O37	103.6 (4)	Mo11ii—O28—Mo5	139.5 (5)
O6—Mo7—O4	102.0 (3)	N1—C5—C6	121.7 (7)
O37—Mo7—O4	95.0 (3)	N3—C4—C3	121.8 (6)
O6—Mo7—O13	100.9 (3)	N6—C10—C9	121.4 (8)
O37—Mo7—O13	154.4 (4)	N3—C1—C2	121.4 (6)
O4—Mo7—O13	87.4 (2)	Mo3—O30—Mo8	137.3 (4)
O6—Mo7—O23	101.7 (4)	N2—C13—C23	121.7 (7)
O37—Mo7—O23	87.1 (3)	P1—O32—O42ii	57.4 (4)
O4—Mo7—O23	155.0 (4)	P1—O32—O38	56.8 (4)
O13—Mo7—O23	80.4 (3)	O42ii—O32—O38	95.4 (6)
O6—Mo7—O41i	158.4 (3)	P1—O32—O43ii	57.3 (4)
O37—Mo7—O41i	63.7 (3)	O42ii—O32—O43ii	93.6 (6)
O4—Mo7—O41i	96.6 (3)	O38—O32—O43ii	91.2 (5)
O13—Mo7—O41i	90.7 (3)	P1—O32—Mo4	126.9 (5)
O23—Mo7—O41i	62.0 (3)	O42ii—O32—Mo4	69.5 (4)
O17—Mo8—O23i	100.4 (4)	O38—O32—Mo4	134.1 (5)
O17—Mo8—O1	102.4 (3)	O43ii—O32—Mo4	131.4 (5)
O23i—Mo8—O1	93.8 (3)	P1—O32—Mo6	124.2 (4)
O17—Mo8—O19	101.2 (3)	O42ii—O32—Mo6	133.4 (5)
O23i—Mo8—O19	89.1 (3)	O38—O32—Mo6	67.4 (4)
O1—Mo8—O19	155.4 (4)	O43ii—O32—Mo6	128.1 (5)

O17—Mo8—O30	100.9 (3)	Mo4—O32—Mo6	91.4 (3)
O23i—Mo8—O30	158.2 (4)	Mo3—O33—Mo2	139.9 (5)
O1—Mo8—O30	86.1 (2)	Mo11—O34—Mo12ii	138.8 (4)
O19—Mo8—O30	82.4 (3)	C10—N6—C14	116.4 (6)
O17—Mo8—O41	157.2 (2)	C10—N6—Cu2	121.9 (5)
O23i—Mo8—O41	64.5 (3)	C14—N6—Cu2	121.3 (5)
O1—Mo8—O41	96.0 (3)	N7—C11—C14	122.0 (7)
O19—Mo8—O41	63.3 (3)	Mo12—O35—Mo4	139.6 (4)
O30—Mo8—O41	93.7 (3)	Mo5—O36—Mo10ii	140.2 (5)
O3—Mo9—O27i	103.3 (3)	Mo7—O37—Mo9	139.9 (5)
O3—Mo9—O19i	101.9 (4)	P1—O38—O32	53.8 (4)
O27i—Mo9—O19i	93.4 (3)	P1—O38—O42	53.8 (4)
O3—Mo9—O26	100.9 (3)	O32—O38—O42	91.8 (5)
O27i—Mo9—O26	89.4 (3)	P1—O38—Mo6	125.4 (4)
O19i—Mo9—O26	155.7 (3)	O32—O38—Mo6	71.6 (4)
O3—Mo9—O37	99.2 (3)	O42—O38—Mo6	136.6 (5)
O27i—Mo9—O37	157.1 (4)	P1—O38—Mo12ii	124.0 (4)
O19i—Mo9—O37	86.0 (3)	O32—O38—Mo12ii	136.0 (5)
O26—Mo9—O37	82.3 (3)	O42—O38—Mo12ii	70.2 (4)
O3—Mo9—O41i	155.6 (3)	Mo6—O38—Mo12ii	93.9 (3)
O27i—Mo9—O41i	97.2 (3)	P1—O38—Mo11	120.7 (4)
O19i—Mo9—O41i	63.3 (3)	O32—O38—Mo11	129.1 (5)
O26—Mo9—O41i	92.4 (3)	O42—O38—Mo11	127.2 (5)
O37—Mo9—O41i	62.2 (3)	Mo6—O38—Mo11	92.1 (3)
O3—Mo9—O14	159.7 (3)	Mo12ii—O38—Mo11	91.7 (3)
O27i—Mo9—O14	65.2 (3)	C11—N7—C9	117.3 (6)
O19i—Mo9—O14	95.5 (4)	C11—N7—Cu1	120.3 (5)
O26—Mo9—O14	63.9 (3)	C9—N7—Cu1	122.1 (5)
O37—Mo9—O14	92.1 (3)	C16—N8—C15	116.6 (6)
O41i—Mo9—O14	44.0 (3)	C16—N8—Cu1	120.1 (5)
O25—Mo10—O12	101.8 (3)	C15—N8—Cu1	122.7 (5)
O25—Mo10—O10	102.4 (3)	C24—N9—C21	117.7 (7)
O12—Mo10—O10	87.4 (3)	C24—N9—Cu3	120.4 (6)
O25—Mo10—O36ii	101.6 (4)	C21—N9—Cu3	121.8 (6)
O12—Mo10—O36ii	156.5 (4)	C18—N10—C19	115.2 (6)
O10—Mo10—O36ii	88.3 (3)	C18—N10—Cu4	123.0 (5)
O25—Mo10—O15	100.2 (3)	C19—N10—Cu4	121.3 (5)
O12—Mo10—O15	88.0 (3)	C17—N11—C25	116.5 (7)
O10—Mo10—O15	157.3 (3)	C17—N11—Cu4	126.8 (6)
O36ii—Mo10—O15	87.0 (3)	C25—N11—Cu4	116.5 (6)
O25—Mo10—O43	156.9 (3)	C23v—N12—C22v	116.1 (7)
O12—Mo10—O43	95.0 (3)	C23v—N12—Cu5	125.1 (6)
O10—Mo10—O43	94.0 (3)	C22v—N12—Cu5	118.5 (6)

O36ii—Mo10—O43	62.3 (3)	N12vi—C23—C13	121.5 (7)
O15—Mo10—O43	64.3 (3)	N10—C18—C15vi	122.2 (7)
O25—Mo10—O42ii	159.6 (3)	P2—O40—O44i	56.1 (4)
O12—Mo10—O42ii	63.0 (3)	P2—O40—O14	55.9 (3)
O10—Mo10—O42ii	65.2 (3)	O44i—O40—O14	94.8 (5)
O36ii—Mo10—O42ii	94.4 (4)	P2—O40—Mo3	126.4 (4)
O15—Mo10—O42ii	93.0 (3)	O44i—O40—Mo3	70.4 (4)
O43—Mo10—O42ii	43.5 (3)	O14—O40—Mo3	138.3 (5)
O2—Mo11—O28ii	101.3 (3)	P2—O40—Mo1	124.8 (4)
O2—Mo11—O15	101.5 (3)	O44i—O40—Mo1	132.8 (5)
O28ii—Mo11—O15	87.5 (3)	O14—O40—Mo1	69.0 (4)
O2—Mo11—O34	101.5 (3)	Mo3—O40—Mo1	92.4 (2)
O28ii—Mo11—O34	88.9 (3)	P2—O41—Mo8	122.4 (4)
O15—Mo11—O34	157.0 (4)	P2—O41—Mo9i	121.4 (4)
O2—Mo11—O24	102.2 (3)	Mo8—O41—Mo9i	93.9 (3)
O28ii—Mo11—O24	156.5 (4)	P2—O41—Mo7i	123.3 (4)
O15—Mo11—O24	87.3 (3)	Mo8—O41—Mo7i	94.1 (3)
O34—Mo11—O24	87.1 (3)	Mo9i—O41—Mo7i	94.1 (2)
O2—Mo11—O43	157.4 (3)	N8—C15—C18v	121.3 (7)
O28ii—Mo11—O43	62.8 (3)	P1—O42—O32ii	56.1 (4)
O15—Mo11—O43	63.8 (3)	P1—O42—O38	55.6 (4)
O34—Mo11—O43	94.5 (3)	O32ii—O42—O38	93.9 (6)
O24—Mo11—O43	94.4 (3)	P1—O42—Mo4ii	127.5 (5)
O2—Mo11—O38	158.4 (3)	O32ii—O42—Mo4ii	71.4 (4)
O28ii—Mo11—O38	94.6 (3)	O38—O42—Mo4ii	135.4 (5)
O15—Mo11—O38	93.7 (3)	P1—O42—Mo12ii	123.3 (4)
O34—Mo11—O38	64.0 (3)	O32ii—O42—Mo12ii	134.2 (5)
O24—Mo11—O38	62.9 (3)	O38—O42—Mo12ii	67.7 (4)
O43—Mo11—O38	44.2 (3)	Mo4ii—O42—Mo12ii	92.4 (3)
O5—Mo12—O35	101.7 (3)	P1—O42—Mo10ii	121.5 (4)
O5—Mo12—O10	102.6 (3)	O32ii—O42—Mo10ii	131.2 (5)
O35—Mo12—O10	87.6 (3)	O38—O42—Mo10ii	126.1 (5)
O5—Mo12—O34ii	99.7 (3)	Mo4ii—O42—Mo10ii	91.8 (3)
O35—Mo12—O34ii	89.0 (3)	Mo12ii—O42—Mo10ii	90.5 (3)
O10—Mo12—O34ii	157.8 (3)	N8—C16—C19v	122.1 (7)
O5—Mo12—O16ii	101.3 (3)	P1—O43—O32ii	52.6 (4)
O35—Mo12—O16ii	157.0 (4)	P1—O43—Mo5ii	125.1 (4)
O10—Mo12—O16ii	87.7 (3)	O32ii—O43—Mo5ii	72.5 (4)
O34ii—Mo12—O16ii	86.9 (3)	P1—O43—Mo10	122.1 (4)
O5—Mo12—O38ii	157.6 (3)	O32ii—O43—Mo10	134.4 (5)
O35—Mo12—O38ii	94.8 (3)	Mo5ii—O43—Mo10	94.3 (3)
O10—Mo12—O38ii	93.1 (3)	P1—O43—Mo11	121.1 (4)
O34ii—Mo12—O38ii	65.3 (3)	O32ii—O43—Mo11	131.0 (5)

O16ii—Mo12—O38ii	63.0 (3)	Mo5ii—O43—Mo11	93.7 (3)
O5—Mo12—O42ii	160.3 (3)	Mo10—O43—Mo11	92.3 (3)
O35—Mo12—O42ii	63.4 (3)	P2—O44—O40i	56.2 (4)
O10—Mo12—O42ii	65.8 (3)	P2—O44—O14	56.0 (4)
O34ii—Mo12—O42ii	93.1 (3)	O40i—O44—O14	94.9 (5)
O16ii—Mo12—O42ii	94.3 (3)	P2—O44—Mo2i	125.8 (4)
O38ii—Mo12—O42ii	42.1 (3)	O40i—O44—Mo2i	139.0 (5)
N7—Cu1—N5	121.3 (2)	O14—O44—Mo2i	69.9 (4)
N7—Cu1—N8	115.9 (2)	P2—O44—Mo3i	125.8 (4)
N5—Cu1—N8	114.3 (2)	O40i—O44—Mo3i	69.6 (4)
N7—Cu1—Cl1iii	101.93 (18)	O14—O44—Mo3i	133.2 (5)
N5—Cu1—Cl1iii	89.45 (17)	Mo2i—O44—Mo3i	92.8 (3)
N8—Cu1—Cl1iii	108.28 (18)	N11—C17—C21	122.8 (8)
N6—Cu2—N1	125.0 (2)	N9—C21—C17	120.1 (7)
N6—Cu2—N2	120.6 (2)	C12—C22—N12vi	121.9 (8)
N1—Cu2—N2	114.0 (2)	N10—C19—C16vi	122.6 (7)
N6—Cu2—O45	95.6 (3)	N11—C25—C24	121.6 (8)
N1—Cu2—O45	91.9 (3)	N9—C24—C25	121.2 (8)
N2—Cu2—O45	88.2 (4)	Cu3—Cl1—Cu1iii	99.01 (7)
N9—Cu3—Cl1	164.4 (2)	Cu3—Cl1—Cu5vii	103.72 (7)
O32ii—P1—O32	179.998 (1)	Cu1iii—Cl1—Cu5vii	146.75 (8)

Symmetry codes for **1**: (i) $-z+1/2, x+1/2, y-1$; (ii) $z+1/2, -x+3/2, -y+1$; (iii) $-y+3/2, -z+1, x-1/2$; (iv) $y-1/2, z+1, -x+1/2$; (v) $-x+1, -y+2, -z$; (vi) $-x+1/2, y, -z$; (vii) $-y+5/4, -x+5/4, -z+1/4$.

Symmetry codes for **2**: (i) $-x+1, -y, -z+2$; (ii) $-x+1, -y+1, -z+1$; (iii) $-x+2, -y+1, -z+2$; (iv) $-x, -y, -z+2$; (v) $-x+2, -y, -z+1$.

Symmetry codes for **3**: (i) $-x+1, -y+1, -z+1$; (ii) $-x+1, -y+2, -z$; (iii) $-x, -y, -z-1$; (iv) $x, y+1, z+1$; (v) $x+1, y, z$; (vi) $x-1, y, z$; (vii) $x, y-1, z-1$.