

Supplementary material for

**pH-Dependent assembly of metal–organic hybrid compounds based
on octamolybdates with a new flexible multidentate ligand**

Zhong-Cheng Yue,^a Li-Xia Shen,^a Huan-Huan Wu,^a Xing-Hui Li,^a and Yun-Yin Niu^{a*}

^a*College of Chemistry and Molecular Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, P. R. China. Email: niuyy@zzu.edu.cn*

Table S1. Selected bond distances(Å) and angles(°)for compound 1-6

Compound 1

Mo4—Mo3	3.2146(6)	Mo3—O10	1.705(4)
Mo4—O26	1.743(3)	Mo7—O23	1.930(3)
Mo4—O7	2.376(3)	Mo7—O12	1.934(3)
Mo4—O8	1.954(3)	Mo7—O21	1.700(3)
Mo4—O13	2.130(3)	Mo7—O20	2.320(3)
Mo4—O15	1.946(3)	Mo7—O13	2.393(3)
Mo4—O14	1.694(3)	Mo7—O22	1.689(3)
Mo5—O16	1.693(3)	Mo9—O28	1.677(4)
Mo5—O3	1.897(3)	Mo9—O31	1.957(3)
Mo5—O18	1.990(3)	Mo9—O27	1.956(3)
Mo5—O7	2.272(3)	Mo9—O29	2.128(3)
Mo5—O15	2.341(3)	Mo9—O30	1.756(3)
Mo5—O17	1.716(4)	Mo11—O36	1.718(4)
Mo6—O20	1.740(3)	Mo11—O34	1.925(3)
Mo6—O18	1.965(3)	Mo11—O30	2.297(4)
Mo6—O7	2.177(3)	Mo11—O35	1.691(3)
Mo6—O9	1.944(3)	Mo11—O37	1.916(3)
Mo6—O13	2.376(3)	Mo12—O38	1.701(3)
Mo6—O19	1.692(3)	Mo12—O39	1.694(4)
Mo8—O24	1.704(3)	Mo12—O31	1.984(3)
Mo8—O23	1.897(3)	Mo1—O3	1.927(4)
Mo8—O18	2.299(3)	Mo1—O1	1.697(3)
Mo8—O13	2.345(3)	Mo1—O26	2.317(3)
Mo8—O15	2.014(3)	Mo1—O7	2.466(3)
Mo8—O25	1.692(4)	Mo1—O2	1.699(3)
Mo2—O5	1.701(3)	Mo1—O4	1.909(3)
Mo2—O7	2.354(3)	Mo3—O12	1.903(3)

Mo2—O9	2.007(3)	Mo3—O11	1.695(3)
Mo2—O8	2.331(3)	Mo3—O9	2.327(3)
Mo2—O4	1.906(3)	Mo3—O8	1.993(3)
Mo2—O6	1.691(4)	Mo3—O13	2.366(3)
O26—Mo4—Mo3	131.78(12)	Mo6—O7—Mo4	103.56(11)
O26—Mo4—O7	80.99(13)	Mo6—O7—Mo5	92.77(13)
O26—Mo4—O8	95.90(14)	Mo6—O7—Mo2	91.0(1)
O26—Mo4—O13	157.11(13)	Mo6—O7—Mo1	164.16(14)
O26—Mo4—O15	95.79(14)	Mo2—O7—Mo4	97.03(12)
O7—Mo4—Mo3	86.53(7)	Mo2—O7—Mo1	84.91(11)
O8—Mo4—Mo3	35.88(8)	Mo6—O9—Mo2	109.87(13)
O8—Mo4—O7	77.84(12)	Mo6—O9—Mo3	112.00(13)
O8—Mo4—O13	79.51(12)	Mo2—O9—Mo3	103.25(14)
O13—Mo4—Mo3	47.38(9)	Mo4—O8—Mo2	111.23(13)
O13—Mo4—O7	76.12(11)	Mo4—O8—Mo3	109.04(15)
O15—Mo4—Mo3	126.56(9)	Mo3—O8—Mo2	103.55(13)
O15—Mo4—O7	77.42(12)	Mo4—O13—Mo6	105.03(11)
O15—Mo4—O8	150.52(13)	Mo4—O13—Mo8	92.45(10)
O15—Mo4—O13	79.22(12)	Mo4—O13—Mo3	91.13(12)
O14—Mo4—Mo3	89.58(11)	Mo4—O13—Mo7	161.95(15)
O14—Mo4—O26	105.19(16)	Mo6—O13—Mo7	93.00(11)
O14—Mo4—O7	173.80(14)	Mo8—O13—Mo6	96.42(12)
O14—Mo4—O8	101.71(15)	Mo8—O13—Mo3	164.87(14)
O14—Mo4—O13	97.70(14)	Mo8—O13—Mo7	86.25(11)
O14—Mo4—O15	101.17(15)	Mo3—O13—Mo6	96.84(11)
O16—Mo5—O3	101.74(15)	Mo3—O13—Mo7	85.80(9)
O16—Mo5—O18	97.35(14)	Mo10—O34—Mo11	117.34(15)
O16—Mo5—O7	95.86(15)	Mo2—O4—Mo1	117.10(18)
O16—Mo5—O15	165.64(13)	Mo4—O15—Mo5	109.66(13)
O16—Mo5—O17	106.00(19)	Mo4—O15—Mo8	109.49(13)
O3—Mo5—O18	147.66(14)	Mo8—O15—Mo5	102.30(14)
O3—Mo5—O7	78.01(13)	Mo9—O29—Mo12	92.27(10)
O3—Mo5—O15	84.15(12)	Mo9—O30—Mo11	117.85(16)
O18—Mo5—O7	74.26(12)	O31—Mo12—O29	72.87(11)
O18—Mo5—O15	71.91(11)	O33—Mo10—O31	166.51(13)
O7—Mo5—O15	72.36(11)	O33—Mo10—O34	100.80(17)
O17—Mo5—O3	98.39(16)	O34—Mo10—O31	84.12(13)
O17—Mo5—O18	101.12(15)	O32—Mo10—O33	104.15(17)
O17—Mo5—O7	158.10(15)	O32—Mo10—O31	87.12(15)
O17—Mo5—O15	85.82(15)	O32—Mo10—O34	100.20(15)
O20—Mo6—O18	96.65(14)	Mo5—O3—Mo1	117.18(15)
O20—Mo6—O7	155.93(13)	Mo4—O26—Mo1	117.66(16)
O20—Mo6—O9	97.53(14)	Mo8—O23—Mo7	115.64(18)
O20—Mo6—O13	80.69(13)	Mo3—O12—Mo7	115.20(15)

O18—Mo6—O7	76.96(12)	Mo6—O20—Mo7	116.15(16)
O18—Mo6—O13	77.25(12)	Mo9—O31—Mo12	109.99(13)
O7—Mo6—O13	75.27(10)	Mo9—O31—Mo10	110.90(15)
O9—Mo6—O18	148.46(13)	Mo12—O31—Mo10	103.07(14)
O9—Mo6—O7	78.64(12)	Mo5—O18—Mo8	104.55(13)
O9—Mo6—O13	77.45(12)	Mo6—O18—Mo5	109.09(15)
O19—Mo6—O20	105.00(16)	Mo6—O18—Mo8	111.02(13)
O19—Mo6—O18	100.18(15)	Mo4—O7—Mo1	92.14(11)
O19—Mo6—O7	98.99(14)	Mo5—O7—Mo4	98.12(11)
O19—Mo6—O9	103.11(15)	Mo5—O7—Mo2	163.06(14)
O19—Mo6—O13	174.07(13)	Mo5—O7—Mo1	86.99(9)
O24—Mo8—O23	102.22(14)	O5—Mo2—O9	96.13(15)
O24—Mo8—O18	162.40(15)	O5—Mo2—O8	161.34(16)
O24—Mo8—O13	94.38(14)	O5—Mo2—O4	102.24(15)
O24—Mo8—O15	93.27(14)	O9—Mo2—O7	73.27(11)
O23—Mo8—O18	85.91(12)	O9—Mo2—O8	71.46(12)
O23—Mo8—O13	77.34(13)	O8—Mo2—O7	71.57(11)
O23—Mo8—O15	147.32(13)	O4—Mo2—O7	77.57(13)
O18—Mo8—O13	71.96(11)	O4—Mo2—O9	145.83(13)
O15—Mo8—O18	72.42(11)	O4—Mo2—O8	82.79(12)
O15—Mo8—O13	72.88(11)	O6—Mo2—O5	104.93(17)
O25—Mo8—O24	105.15(17)	O6—Mo2—O7	162.59(14)
O25—Mo8—O23	101.76(16)	O6—Mo2—O9	99.58(14)
O25—Mo8—O18	88.13(14)	O6—Mo2—O8	91.16(14)
O25—Mo8—O13	160.09(14)	O6—Mo2—O4	103.09(16)
O25—Mo8—O15	101.66(14)	O3—Mo1—O26	77.04(13)
O5—Mo2—O7	91.77(15)	O3—Mo1—O7	72.71(11)
O1—Mo1—O3	97.87(16)	O22—Mo7—O12	100.92(15)
O1—Mo1—O26	166.19(14)	O22—Mo7—O21	105.31(17)
O1—Mo1—O7	97.10(13)	O22—Mo7—O20	91.48(14)
O1—Mo1—O2	105.10(16)	O22—Mo7—O13	161.61(14)
O1—Mo1—O4	100.38(15)	O28—Mo9—O31	101.58(16)
O26—Mo1—O7	69.17(10)	O28—Mo9—O27	101.56(16)
O2—Mo1—O3	101.54(16)	O28—Mo9—O29	99.73(15)
O2—Mo1—O26	88.57(13)	O28—Mo9—O30	104.47(16)
O2—Mo1—O7	157.68(13)	O31—Mo9—O29	78.47(11)
O2—Mo1—O4	102.98(17)	O27—Mo9—O31	149.65(14)
O4—Mo1—O3	144.25(12)	O27—Mo9—O29	78.50(12)
O4—Mo1—O26	77.98(13)	O30—Mo9—O31	96.16(13)
O4—Mo1—O7	74.71(12)	O30—Mo9—O27	96.78(14)
O12—Mo3—Mo4	118.48(10)	O30—Mo9—O29	155.79(16)
O12—Mo3—O9	83.16(12)	O36—Mo11—O34	98.89(16)
O12—Mo3—O8	145.89(14)	O36—Mo11—O30	162.74(13)
O12—Mo3—O13	77.00(12)	O36—Mo11—O37	98.49(16)

O11—Mo3—Mo4	83.16(11)	O34—Mo11—O30	77.59(14)
O11—Mo3—O12	101.15(16)	O35—Mo11—O36	105.60(18)
O11—Mo3—O9	161.14(14)	O35—Mo11—O34	102.17(16)
O11—Mo3—O8	96.12(14)	O35—Mo11—O30	91.65(17)
O11—Mo3—O13	91.96(15)	O35—Mo11—O37	102.04(15)
O11—Mo3—O10	105.31(19)	O37—Mo11—O34	145.01(14)
O9—Mo3—Mo4	78.72(7)	O37—Mo11—O30	76.84(14)
O9—Mo3—O13	70.95(11)	O38—Mo12—O31	101.96(14)
O8—Mo3—Mo4	35.08(9)	O38—Mo12—O29	159.79(16)
O8—Mo3—O9	71.79(11)	O39—Mo12—O38	104.05(19)
O8—Mo3—O13	73.19(12)	O39—Mo12—O31	99.28(15)
O13—Mo3—Mo4	41.49(7)	O39—Mo12—O29	96.11(15)
O10—Mo3—Mo4	137.06(12)	O12—Mo7—O20	77.51(13)
O10—Mo3—O12	101.38(16)	O12—Mo7—O13	75.76(11)
O10—Mo3—O9	91.62(15)	O21—Mo7—O23	100.79(15)
O10—Mo3—O8	102.09(15)	O21—Mo7—O12	97.97(16)
O10—Mo3—O13	162.57(15)	O21—Mo7—O20	163.18(14)
O23—Mo7—O12	146.33(12)	O21—Mo7—O13	93.08(14)
O23—Mo7—O20	76.46(12)	O20—Mo7—O13	70.13(11)
O23—Mo7—O13	75.54(12)	O22—Mo7—O23	100.74(16)

Compound 2

Mo5—Mo1	3.2195(5)	O14—Mo3	1.993(3)
Mo5—O5	2.076(3)	Mo7—O24	1.760(3)
Mo5—O4	2.100(3)	Mo7—O23	1.683(3)
Mo5—O19	2.381(3)	Mo7—O22	1.836(3)
Mo5—O18	1.751(3)	Mo8—O25	1.699(3)
Mo5—O17	1.859(3)	Mo8—O24	2.227(3)
Mo5—O16	1.674(3)	Mo8—O26	1.717(3)
Mo6—O20	1.684(4)	Mo3—O11	1.868(3)
Mo6—O19	2.308(3)	Mo3—O10	2.218(3)
Mo6—O18	2.278(3)	Mo3—O13	1.723(3)
Mo6—O14	1.973(3)	Mo3—O8	2.380(3)
Mo6—O22	1.935(3)	Mo3—O12	1.698(3)
Mo6—O21	1.697(3)	Mo2—O3	2.132(3)
Mo4—O19	1.838(3)	Mo2—O7	1.870(3)
Mo4—O9	1.760(3)	Mo2—O10	2.467(3)
Mo4—O14	2.149(3)	Mo2—O8	1.749(3)
Mo4—O15	1.689(3)	Mo2—O6	1.681(3)
Mo4—O10	1.989(3)	Cu1—O1 ⁱ	1.971(3)
Mo1—O5	2.196(3)	Cu1—O1	1.971(3)
Mo1—O4	1.824(3)	Cu1—O26 ⁱⁱ	2.409(3)
Mo1—O9	2.399(3)	Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	2.409(3)
Mo1—O3	1.980(3)	Cu1—O27 ⁱ	1.937(3)
Mo1—O2	1.694(3)	Cu1—O27	1.937(3)

Mo1—O1	1.762(3)	O5—Mo2	2.007(3)
O5—Mo5—Mo1	42.51(7)	O11—Mo3—O14	142.88(12)
O5—Mo5—O4	72.03(10)	O11—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	37.36(9)
O5—Mo5—O19	75.62(11)	O11—Mo3—O10	74.31(10)
O4—Mo5—Mo1	32.14(7)	O11—Mo3—O8	80.62(12)
O4—Mo5—O19	80.47(11)	O10—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	40.18(7)
O19—Mo5—Mo1	86.01(7)	O10—Mo3—O8	70.45(11)
O18—Mo5—Mo1	134.02(9)	O13—Mo3—O14	99.69(13)
O18—Mo5—O5	91.63(12)	O13—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	145.3(1)
O18—Mo5—O4	155.00(13)	O13—Mo3—O11	108.18(13)
O18—Mo5—O19	77.12(13)	O13—Mo3—O10	155.82(14)
O18—Mo5—O17	101.53(13)	O13—Mo3—O8	86.05(13)
O17—Mo5—Mo1	118.97(9)	O8—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	83.86(7)
O17—Mo5—O5	152.55(14)	O12—Mo3—O14	95.72(14)
O17—Mo5—O4	86.86(12)	O12—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	90.65(11)
O17—Mo5—O19	83.90(12)	O12—Mo3—O11	100.78(14)
O16—Mo5—Mo1	89.11(11)	O12—Mo3—O10	99.21(14)
O16—Mo5—O5	97.84(14)	O12—Mo3—O13	103.76(15)
O16—Mo5—O4	97.64(14)	O12—Mo3—O8	168.92(13)
O16—Mo5—O19	173.45(12)	O5—Mo2—O3	71.3(1)
O16—Mo5—O18	103.37(16)	O5—Mo2—O10	76.81(11)
O16—Mo5—O17	102.31(15)	O3—Mo2—O10	80.06(11)
O20—Mo6—O19	95.83(15)	O7—Mo2—O5	139.82(13)
O20—Mo6—O18	165.00(15)	O7—Mo2—O3	75.12(11)
O20—Mo6—O14	97.34(15)	O7—Mo2—O10	76.23(11)
O20—Mo6—O22	97.07(15)	O8—Mo2—O5	98.75(12)
O20—Mo6—O21	104.71(18)	O8—Mo2—O3	155.65(14)
O18—Mo6—O19	69.76(11)	O8—Mo2—O7	102.95(12)
O14—Mo6—O19	69.65(10)	O8—Mo2—O10	75.98(12)
O14—Mo6—O18	81.85(12)	O6—Mo2—O5	102.14(13)
O22—Mo6—O19	85.60(11)	O6—Mo2—O3	99.77(14)
O22—Mo6—O18	78.19(12)	O6—Mo2—O7	104.74(14)
O22—Mo6—O14	152.43(12)	O6—Mo2—O10	178.95(12)
O21—Mo6—O19	157.51(15)	O6—Mo2—O8	104.10(15)
O21—Mo6—O18	90.21(15)	Mo1—O3—Mo2	108.51(12)
O21—Mo6—O14	98.27(14)	Mo8 ⁱⁱ —O3—Mo1	145.22(14)
O21—Mo6—O22	100.62(15)	Mo8 ⁱⁱ —O3—Mo2	104.58(11)
O19—Mo4—O14	75.78(11)	Mo8 ⁱⁱ —O7—Mo7 ⁱⁱ	95.02(11)
O19—Mo4—O10	140.03(14)	Mo2—O7—Mo7 ⁱⁱ	109.56(13)
O9—Mo4—O19	103.23(12)	Mo2—O7—Mo8 ⁱⁱ	105.45(11)
O9—Mo4—O14	154.59(14)	Mo7—O24—Mo8	115.84(16)
O9—Mo4—O10	96.28(12)	Mo3—O11—Mo7 ⁱⁱ	109.47(13)
O15—Mo4—O19	105.88(14)	Mo4—O10—Mo7 ⁱⁱ	145.22(17)
O15—Mo4—O9	104.99(15)	Mo4—O10—Mo3	104.15(11)

O15—Mo4—O14	99.56(14)	Mo4—O10—Mo2	105.25(11)
O15—Mo4—O10	102.14(13)	Mo7 ⁱⁱ —O10—Mo3	96.62(10)
O10—Mo4—O14	71.90(11)	Mo7 ⁱⁱ —O10—Mo2	99.36(11)
O5—Mo1—Mo5	39.71(7)	Mo3—O10—Mo2	97.18(11)
O5—Mo1—O9	72.14(11)	Mo7—O22—Mo6	157.9(2)
O4—Mo1—Mo5	37.77(9)	Mo1—O1—Cu1	143.03(16)
O4—Mo1—O5	74.66(11)	Mo2—O8—Mo3	115.99(15)
O4—Mo1—O9	80.99(12)	Mo8—O26—Cu1 ^{iv}	139.17(15)
O4—Mo1—O3	143.38(12)	Cu1—O27—H27A	111.000
O9—Mo1—Mo5	84.29(7)	Cu1—O27—H27B	110.600
O3—Mo1—Mo5	109.91(8)	O24—Mo7—Mo3 ^{iv}	132.68(9)
O3—Mo1—O5	70.43(10)	O24—Mo7—O7 ^{iv}	75.91(13)
O3—Mo1—O9	78.19(11)	O24—Mo7—O11 ^{iv}	154.20(13)
O2—Mo1—Mo5	93.83(11)	O24—Mo7—O10 ^{iv}	89.54(11)
O2—Mo1—O5	101.92(14)	O24—Mo7—O22	101.93(13)
O2—Mo1—O4	101.87(14)	O11 ^{iv} —Mo7—Mo3 ^{iv}	33.17(7)
O2—Mo1—O9	172.65(13)	O11 ^{iv} —Mo7—O7 ^{iv}	80.95(11)
O2—Mo1—O3	95.85(14)	O11 ^{iv} —Mo7—O10 ^{iv}	73.26(10)
O2—Mo1—O1	104.48(15)	O23—Mo7—Mo3 ^{iv}	87.13(11)
O1—Mo1—Mo5	144.88(10)	O23—Mo7—O7 ^{iv}	171.18(12)
O1—Mo1—O5	152.11(13)	O23—Mo7—O24	103.93(16)
O1—Mo1—O4	108.11(14)	O23—Mo7—O11 ^{iv}	97.19(14)
O1—Mo1—O9	80.80(12)	O23—Mo7—O10 ^{iv}	96.63(14)
O1—Mo1—O3	97.91(12)	O23—Mo7—O22	103.70(15)
O1—Cu1—O1 ⁱ	179.998(1)	O10 ^{iv} —Mo7—Mo3 ^{iv}	43.19(7)
O1 ⁱ —Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	91.89(12)	O10 ^{iv} —Mo7—O7 ^{iv}	74.57(11)
O1—Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	88.11(12)	O22—Mo7—Mo3 ^{iv}	120.16(10)
O1 ⁱ —Cu1—O26 ⁱⁱ	88.12(12)	O22—Mo7—O7 ^{iv}	84.86(13)
O1—Cu1—O26 ⁱⁱ	91.88(12)	O22—Mo7—O11 ^{iv}	87.04(12)
O26 ⁱⁱ —Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	180.000	O22—Mo7—O10 ^{iv}	153.31(15)
O27—Cu1—O1	90.14(13)	O17—Mo8—O3 ^{iv}	156.99(12)
O27 ⁱ —Cu1—O1	89.86(13)	O17—Mo8—O7 ^{iv}	89.42(11)
O27 ⁱ —Cu1—O1 ⁱ	90.14(13)	O17—Mo8—O24	79.34(12)
O27—Cu1—O1 ⁱ	89.86(13)	O3 ^{iv} —Mo8—O7 ^{iv}	71.24(10)
O27—Cu1—O26 ⁱⁱ	91.94(12)	O3 ^{iv} —Mo8—O24	82.64(11)
O27 ⁱ —Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	91.94(12)	O7 ^{iv} —Mo8—O24	71.45(11)
O27—Cu1—O26 ⁱⁱⁱ	88.06(12)	O25—Mo8—O17	96.43(15)
O27 ⁱ —Cu1—O26 ⁱⁱ	88.06(12)	O25—Mo8—O3 ^{iv}	97.31(14)
O27 ⁱ —Cu1—O27	179.999(1)	O25—Mo8—O7 ^{iv}	94.25(14)
O7 ^{iv} —Mo7—Mo3 ^{iv}	86.68(7)	O25—Mo8—O24	165.00(13)
O26—Mo8—O24	90.34(13)	O25—Mo8—O26	104.64(16)
O14—Mo3—Mo7 ⁱⁱ	110.23(8)	O26—Mo8—O17	101.49(13)
O14—Mo3—O10	70.34(10)	O26—Mo8—O3 ^{iv}	92.78(12)
O14—Mo3—O8	77.30(12)	O26—Mo8—O7 ^{iv}	156.81(13)

Compound 3

Mo1—O1	1.685(2)	Mo3—O9	1.702(3)
Mo1—O2	1.701(3)	Mo3—O10	1.787(2)
Mo1—O3	1.969(3)	Mo4—O3	1.831(3)
Mo1—O4	2.363(2)	Mo4—O11	1.838(2)
Mo1—O5	1.915(2)	Mo4—O12	1.692(3)
Mo1—O10	2.290(3)	Mo4—O13	1.698(3)
Mo2—O4	2.348(3)	Cu3—N2	1.984(3)
Mo2—O5	1.894(2)	Cu3—N2 ⁱⁱ	1.984(3)
Mo2—O6	1.705(3)	Cu3—N4 ⁱⁱⁱ	2.014(3)
Mo2—O7	1.692(3)	Cu3—N4 ^{iv}	2.014(3)
Mo2—O8	2.338(3)	N4—Cu3 ^v	2.014(3)
Mo2—O11 ⁱ	1.977(2)	Mo3—O8	1.753(3)
Mo3—O4 ⁱ	1.831(2)	O9—Mo3—O4 ⁱ	106.33(12)
O1—Mo1—O2	105.79(14)	O9—Mo3—O8	106.83(13)
O1—Mo1—O3	99.92(12)	O9—Mo3—O10	107.02(12)
O1—Mo1—O4	162.81(12)	O10—Mo3—O4 ⁱ	115.24(11)
O1—Mo1—O5	100.52(12)	O3—Mo4—O11	118.96(11)
O1—Mo1—O10	91.97(12)	O12—Mo4—O3	109.58(14)
O2—Mo1—O3	94.36(12)	O12—Mo4—O11	107.73(14)
O2—Mo1—O4	91.00(11)	O12—Mo4—O13	107.04(18)
O2—Mo1—O5	100.38(13)	O13—Mo4—O3	105.20(14)
O2—Mo1—O10	161.37(11)	O13—Mo4—O11	107.74(13)
O3—Mo1—O4	82.08(9)	N2—Cu3—N2 ⁱⁱ	180.000
O3—Mo1—O10	76.7(1)	N2—Cu3—N4 ⁱⁱⁱ	90.89(12)
O5—Mo1—O3	150.40(9)	N2 ⁱⁱ —Cu3—N4 ⁱⁱⁱ	89.11(12)
O5—Mo1—O4	72.21(9)	N2—Cu3—N4 ^{iv}	89.11(12)
O5—Mo1—O10	81.43(10)	N2 ⁱⁱ —Cu3—N4 ^{iv}	90.89(12)
O10—Mo1—O4	71.76(9)	N4 ⁱⁱⁱ —Cu3—N4 ^{iv}	180.000(1)
O5—Mo2—O4	72.91(9)	C9—N2—Cu3	126.8(3)
O5—Mo2—O8	82.76(10)	C10—N2—Cu3	127.1(3)
O5—Mo2—O11 ⁱ	148.94(11)	C13—N4—Cu3 ^v	130.0(3)
O6—Mo2—O4	98.40(11)	C14—N4—Cu3 ^v	122.7(3)
O6—Mo2—O5	100.64(11)	O7—Mo2—O11 ⁱ	101.04(11)
O6—Mo2—O8	167.93(11)	O8—Mo2—O4	71.36(9)
O6—Mo2—O11 ⁱ	93.17(11)	O11 ⁱ —Mo2—O4	77.65(9)
O7—Mo2—O4	157.82(11)	O11 ⁱ —Mo2—O8	78.62(10)
O7—Mo2—O5	102.44(11)	O8—Mo3—O4 ⁱ	110.32(11)
O7—Mo2—O6	103.77(13)	O8—Mo3—O10	110.61(11)

Compound 4

Mo1—O1	1.694(4)	Mo3—O4	1.846(3)
Mo1—O2	1.707(3)	Mo3—O8 ⁱ	1.964(3)
Mo1—O3	1.903(3)	Mo3—O9	1.685(3)
Mo1—O4	2.355(3)	Mo3—O10	1.797(3)

Mo1—O11 ⁱ	2.125(3)	Mo3—O11 ⁱ	2.124(3)
Mo1—N1	2.207(4)	Mo4—O7	1.908(3)
Mo2—O3	1.936(3)	Mo4—O8	2.146(3)
Mo2—O4	2.316(3)	Mo4—O10	2.382(3)
Mo2—O5	1.702(3)	Mo4—O11	1.940(3)
Mo2—O6	1.699(3)	Mo4—O12	1.692(3)
Mo2—O7	1.977(3)	Mo4—O13	1.760(3)
Mo2—O8	2.251(3)	Cu1—O10	1.972(3)
Cu1—N3	1.973(4)	Cu1—O13	2.003(3)
Cu1—N6 ⁱⁱ	1.963(4)	Cu1—O14	2.385(11)
Cu1—O14A	2.362(13)	O4—Mo3—O8 ⁱ	139.52(13)
O1—Mo1—O2	105.27(18)	O4—Mo3—O11 ⁱ	77.64(13)
O1—Mo1—O3	102.91(15)	O8 ⁱ —Mo3—O11 ⁱ	72.53(12)
O1—Mo1—O4	160.65(14)	O9—Mo3—O4	105.24(14)
O1—Mo1—O11 ⁱ	93.60(15)	O9—Mo3—O8 ⁱ	105.05(14)
O1—Mo1—N1	95.59(16)	O9—Mo3—O10	102.51(15)
O2—Mo1—O3	99.97(15)	O9—Mo3—O11 ⁱ	97.14(14)
O2—Mo1—O4	94.07(16)	O10—Mo3—O4	102.39(14)
O2—Mo1—O11 ⁱ	156.23(16)	O10—Mo3—O8 ⁱ	96.56(13)
O2—Mo1—N1	84.57(15)	O10—Mo3—O11 ⁱ	159.52(12)
O3—Mo1—O4	73.71(12)	O7—Mo4—O8	74.87(12)
O3—Mo1—O11 ⁱ	89.50(12)	O7—Mo4—O10	81.42(12)
O3—Mo1—N1	158.92(15)	O7—Mo4—O11	146.92(14)
O11 ⁱ —Mo1—O4	67.56(11)	O8—Mo4—O10	72.63(11)
O11 ⁱ —Mo1—N1	79.24(13)	O11—Mo4—O8	72.49(12)
N1—Mo1—O4	85.48(13)	O11—Mo4—O10	83.91(11)
O3—Mo2—O4	74.08(12)	O12—Mo4—O7	98.17(15)
O3—Mo2—O7	149.59(13)	O12—Mo4—O8	109.18(14)
O3—Mo2—O8	84.18(12)	O12—Mo4—O10	178.01(14)
O5—Mo2—O3	102.76(16)	O12—Mo4—O11	97.41(14)
O5—Mo2—O4	90.47(15)	O12—Mo4—O13	103.68(15)
O5—Mo2—O7	95.73(16)	O13—Mo4—O7	104.21(15)
O5—Mo2—O8	160.54(16)	O13—Mo4—O8	146.95(13)
O6—Mo2—O3	97.51(16)	O13—Mo4—O10	74.58(13)
O6—Mo2—O4	164.50(14)	O13—Mo4—O11	100.17(14)
O6—Mo2—O5	104.24(18)	O10—Cu1—O13	80.09(13)
O6—Mo2—O7	101.10(15)	O10—Cu1—O14	105.7(5)
O6—Mo2—O8	92.66(14)	O10—Cu1—N3	91.38(15)
O7—Mo2—O4	81.92(13)	O10—Cu1—O14A	91.0(5)
O7—Mo2—O8	71.20(12)	O13—Cu1—O14	87.8(4)
O8—Mo2—O4	73.78(10)	O13—Cu1—O14A	81.3(4)
N6 ⁱⁱ —Cu1—O14	89.0(5)	N3—Cu1—O13	170.69(16)
N6 ⁱⁱ —Cu1—N3	96.31(17)	N3—Cu1—O14	90.9(4)
N6 ⁱⁱ —Cu1—O14A	102.9(6)	N3—Cu1—O14A	95.2(5)

O14A—Cu1—O14	15.1(4)	N6 ⁱⁱ —Cu1—O10	163.33(15)
Cu1—O10—Mo4	91.98(12)	N6 ⁱⁱ —Cu1—O13	92.90(15)
Compound 5			
Mo1—O2	1.732(3)	Co1—O19 ⁱⁱ	2.078(2)
Mo1—O3	1.692(3)	Mo5—O17	2.223(3)
Mo1—O4	1.894(3)	Mo5—O18	2.408(3)
Mo1—O5	1.991(2)	Mo5—O19	1.738(3)
Mo1—O6	2.177(3)	Mo5—O20	1.693(3)
Mo1—O7	2.229(3)	Mo5—O21	1.832(2)
Mo2—Mo3	3.2113(4)	Mo6—O11	1.989(2)
Mo2—O6	2.401(3)	Mo6—O14	2.147(3)
Mo2—O7	1.762(3)	Mo6—O18	1.750(3)
Mo2—O8	1.831(3)	Mo6—O22	1.687(3)
Mo2—O9	1.679(3)	Mo6—O23	1.842(2)
Mo2—O10	2.074(3)	Mo7—O8 ⁱ	1.935(3)
Mo2—O11	2.082(2)	Mo7—O14	1.969(2)
Mo3—O10	1.865(2)	Mo7—O23	2.291(3)
Mo3—O11	2.215(3)	Mo7—O24	1.688(3)
Mo3—O12	1.699(3)	Mo7—O25	1.688(3)
Mo3—O13	1.717(3)	Mo7—O26	2.281(3)
Mo3—O14	1.999(3)	Mo8—O4 ⁱ	1.872(3)
Mo3—O15	2.384(3)	Mo8—O17	2.070(2)
Mo4—O5	2.110(3)	Mo8—O21	2.074(3)
Mo4—O6	1.881(2)	Mo8—O23	2.381(3)
Mo4—O11	2.463(3)	Mo8—O26	1.751(3)
Mo4—O15	1.741(3)	Mo8—O27	1.677(3)
Mo4—O16	1.680(3)	Co1—O1 ⁱⁱ	2.026(3)
Mo4—O17	1.998(2)	Co1—O1	2.026(3)
Mo5—Mo8	3.2086(4)	Co1—O2 ⁱⁱ	2.162(3)
Mo5—O5	1.969(2)	Co1—O2	2.162(3)
Co1—O19	2.078(2)	O27—Mo8—O17	97.91(12)
O2—Mo1—O4	103.42(12)	O27—Mo8—O21	97.90(13)
O2—Mo1—O5	89.97(11)	O27—Mo8—O23	174.15(11)
O2—Mo1—O6	154.74(11)	O27—Mo8—O26	103.27(14)
O2—Mo1—O7	89.08(11)	O1—Co1—O1 ⁱⁱ	180.000
O3—Mo1—O2	104.56(13)	O1 ⁱⁱ —Co1—O2 ⁱⁱ	92.04(11)
O3—Mo1—O4	96.46(13)	O1—Co1—O2 ⁱⁱ	87.96(11)
O3—Mo1—O5	96.91(12)	O1—Co1—O2	92.04(11)
O3—Mo1—O6	94.61(12)	O1 ⁱⁱ —Co1—O2	87.96(11)
O3—Mo1—O7	166.36(13)	O1—Co1—O19	89.11(11)
O4—Mo1—O5	158.03(11)	O1 ⁱⁱ —Co1—O19	90.89(11)
O4—Mo1—O6	90.36(10)	O1 ⁱⁱ —Co1—O19 ⁱⁱ	89.11(11)
O4—Mo1—O7	79.97(11)	O1—Co1—O19 ⁱⁱ	90.89(11)
O5—Mo1—O6	71.25(10)	O2 ⁱⁱ —Co1—O2	180.000

O5—Mo1—O7	82.95(10)	O19—Co1—O2	92.14(11)
O6—Mo1—O7	72.36(10)	O19 ⁱⁱ —Co1—O2	87.86(11)
O6—Mo2—Mo3	87.04(6)	O19 ⁱⁱ —Co1—O2 ⁱⁱ	92.14(11)
O7—Mo2—Mo3	132.35(8)	O19—Co1—O2 ⁱⁱ	87.86(11)
O7—Mo2—O6	75.61(11)	O19—Co1—O19 ⁱⁱ	179.998(1)
O7—Mo2—O8	102.39(12)	O14—Mo7—O23	70.27(10)
O7—Mo2—O10	154.24(11)	O14—Mo7—O26	82.48(10)
O7—Mo2—O11	89.15(11)	O24—Mo7—O8 ⁱ	96.60(14)
O8—Mo2—Mo3	120.15(9)	O24—Mo7—O14	97.52(13)
O8—Mo2—O6	85.03(11)	O24—Mo7—O23	96.24(13)
O8—Mo2—O10	86.91(11)	O24—Mo7—O26	165.33(14)
O8—Mo2—O11	153.12(13)	O25—Mo7—O8 ⁱ	100.56(14)
O9—Mo2—Mo3	86.97(9)	O25—Mo7—O14	98.32(13)
O9—Mo2—O6	171.01(12)	O25—Mo7—O23	157.51(13)
O9—Mo2—O7	103.73(14)	O25—Mo7—O24	104.61(16)
O9—Mo2—O8	103.79(14)	O25—Mo7—O26	89.85(13)
O9—Mo2—O10	97.10(12)	O26—Mo7—O23	69.86(9)
O9—Mo2—O11	96.74(12)	O4 ⁱ —Mo8—Mo5	118.33(8)
O10—Mo2—Mo3	33.30(7)	O4 ⁱ —Mo8—O17	152.85(12)
O10—Mo2—O6	81.44(9)	O4 ⁱ —Mo8—O21	86.00(11)
O10—Mo2—O11	73.34(10)	O4 ⁱ —Mo8—O23	83.5(1)
O11—Mo2—Mo3	43.24(7)	O17—Mo8—Mo5	43.48(7)
O11—Mo2—O6	74.32(9)	O17—Mo8—O21	73.16(10)
O10—Mo3—Mo2	37.62(8)	O17—Mo8—O23	76.24(9)
O10—Mo3—O11	74.39(10)	O21—Mo8—Mo5	32.37(7)
O10—Mo3—O14	143.11(11)	O21—Mo8—O23	80.72(10)
O10—Mo3—O15	80.46(10)	O23—Mo8—Mo5	86.68(6)
O11—Mo3—Mo2	40.08(6)	O26—Mo8—Mo5	134.81(9)
O11—Mo3—O15	70.14(9)	O26—Mo8—O4 ⁱ	101.47(12)
O12—Mo3—Mo2	90.53(9)	O26—Mo8—O17	91.46(11)
O12—Mo3—O10	100.66(12)	O26—Mo8—O21	155.39(12)
O12—Mo3—O11	99.43(12)	O26—Mo8—O23	76.94(11)
O12—Mo3—O13	103.89(13)	O27—Mo8—Mo5	89.16(9)
O12—Mo3—O14	95.71(12)	O27—Mo8—O4 ⁱ	102.11(13)
O12—Mo3—O15	168.93(12)	O5—Mo5—Mo8	109.66(7)
O13—Mo3—Mo2	145.23(9)	O5—Mo5—O17	69.96(9)
O13—Mo3—O10	107.86(12)	O5—Mo5—O18	77.46(10)
O13—Mo3—O11	155.58(11)	O17—Mo5—Mo8	39.85(6)
O13—Mo3—O14	99.82(12)	O17—Mo5—O18	71.97(9)
O13—Mo3—O15	86.06(11)	O18—Mo5—Mo8	83.77(6)
O14—Mo3—Mo2	110.17(7)	O19—Mo5—Mo8	144.42(9)
O14—Mo3—O11	70.43(9)	O19—Mo5—O5	98.45(11)
O14—Mo3—O15	77.57(10)	O19—Mo5—O17	152.66(11)
O15—Mo3—Mo2	83.70(6)	O19—Mo5—O18	81.48(11)

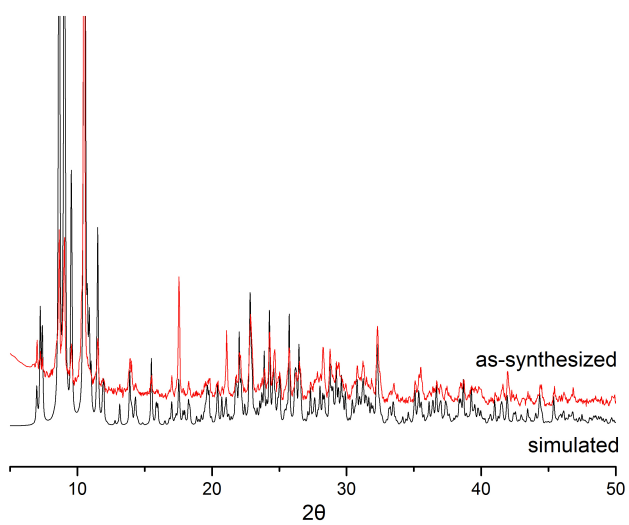
O5—Mo4—O11	80.14(9)	O19—Mo5—O21	107.96(12)
O6—Mo4—O5	74.86(10)	O20—Mo5—Mo8	93.82(9)
O6—Mo4—O11	76.23(10)	O20—Mo5—O5	96.43(12)
O6—Mo4—O17	140.36(12)	O20—Mo5—O17	101.43(12)
O15—Mo4—O5	155.69(11)	O20—Mo5—O18	172.14(12)
O15—Mo4—O6	102.67(12)	O20—Mo5—O19	104.50(13)
O15—Mo4—O11	75.85(11)	O20—Mo5—O21	102.33(12)
O15—Mo4—O17	98.93(11)	O21—Mo5—Mo8	37.30(8)
O16—Mo4—O5	99.67(12)	O21—Mo5—O5	142.24(11)
O16—Mo4—O6	103.96(12)	O21—Mo5—O17	74.33(10)
O16—Mo4—O11	179.70(13)	O21—Mo5—O18	80.27(10)
O16—Mo4—O15	104.32(13)	O11—Mo6—O14	72.06(10)
O16—Mo4—O17	102.31(12)	O18—Mo6—O11	95.91(11)
O17—Mo4—O5	71.87(10)	O18—Mo6—O14	153.99(11)
O17—Mo4—O11	77.41(9)	O18—Mo6—O23	103.13(12)
O23—Mo6—O11	140.49(12)	O22—Mo6—O11	101.95(12)
O23—Mo6—O14	75.92(11)	O22—Mo6—O14	100.12(12)
O8 ⁱ —Mo7—O14	152.69(11)	O22—Mo6—O18	104.99(13)
O8 ⁱ —Mo7—O23	85.06(10)	O22—Mo6—O23	105.97(12)

Compound 6

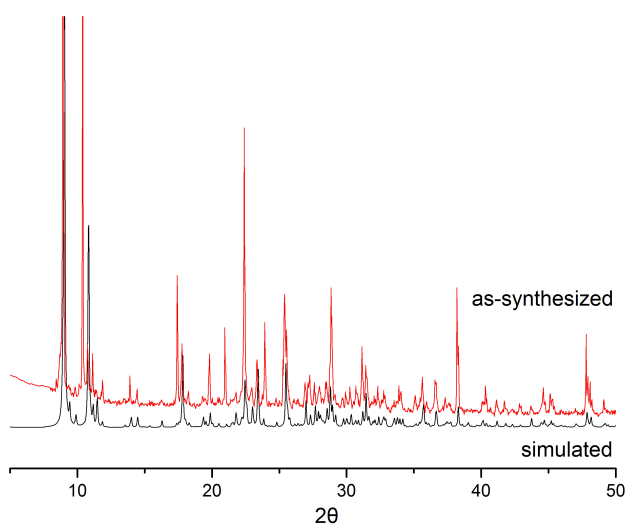
Mo1—O1	1.708(6)	Zn1—O1	1.917(6)
Mo1—O2 ⁱ	1.686(6)	Zn1—N1 ⁱⁱ	1.990(4)
Mo1—O2 ⁱⁱ	1.686(6)	Zn1—N1 ⁱ	1.990(4)
Mo1—O2	1.686(6)	Zn1—N1	1.990(4)
O2—Mo1—O1	111.1(2)	N1 ⁱⁱ —Zn1—N1 ⁱ	111.28(10)
O2 ⁱ —Mo1—O1	111.1(2)	N1 ⁱⁱ —Zn1—N1	111.28(10)
O2 ⁱⁱ —Mo1—O1	111.1(2)	N1 ⁱ —Zn1—N1	111.28(10)
O2 ⁱ —Mo1—O2	107.8(3)	Mo1—O1—Zn1	180.000
O2 ⁱⁱ —Mo1—O2	107.8(3)	H3A—O3—H3B	107.300
O2 ⁱⁱ —Mo1—O2 ⁱ	107.8(3)	C1—N1—Zn1	124.7(3)
O1—Zn1—N1 ⁱⁱ	107.59(11)	C3—N1—Zn1	129.4(3)
O1—Zn1—N1 ⁱ	107.59(11)	O1—Zn1—N1	107.59(11)

Table S2. Selected hydrogen bonds for compound 1-6

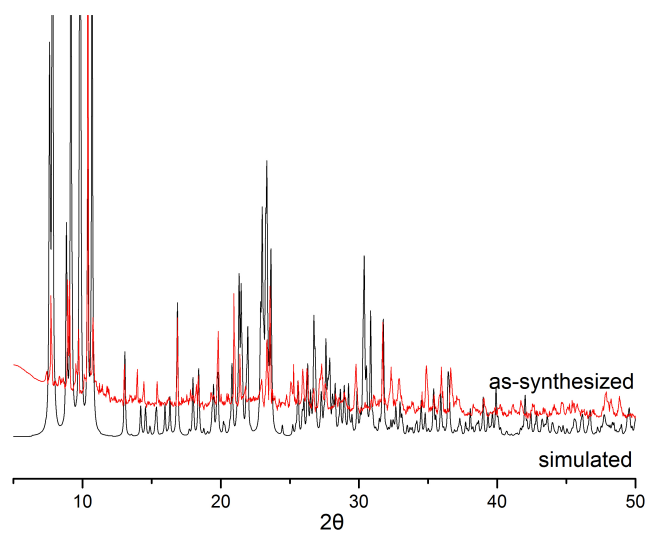
Atoms D,H,A	Dist. D,H [Å]	Dist. H,A [Å]	Dist. D,A [Å]	Angle D,H,A [°]
Compound 1				
N2—H2—O41	0.8600	1.9000	2.752(9)	172.200
N12—H12A—O40	0.8600	2.0300	2.830(8)	155.100
O41—H41B—O17	0.8500	2.2700	2.814(6)	122.000
Compound 2				
O27—H27A—O9	0.8700	1.8800	2.720(4)	160.200
O27—H27B—O28	0.8700	1.7700	2.632(7)	168.200
N4—H4—O26	0.8600	2.0100	2.850(5)	165.900
N6—H6A—O13	0.8600	1.9600	2.809(6)	168.200
O28—H28B—O25	0.8500	2.4300	2.817(7)	108.500
Compound 3				
O14—H14A—O15	0.8500	2.0700	2.876(6)	157.800
O14—H14B—O10	0.8500	2.1500	2.969(5)	160.200
O15—H15A—O9 ⁱ	0.8500	2.1000	2.949(4)	174.600
N6—H6—O14 ⁱⁱ	0.8600	1.9400	2.774(6)	162.900
Compound 4				
C—H···Cg	0.9311	3.6031	3.644(7)	85.169
Compound 5				
O1—H1A—O28	0.8500	1.8300	2.672(6)	166.800
O1—H1A—O28A	0.8500	2.0900	2.74(2)	132.200
O1—H1B—O7	0.8600	2.5000	3.152(4)	133.600
N2—H2—O10 ⁱ	0.8600	2.2500	2.900(6)	132.900
N4—H4—O13 ⁱⁱ	0.8600	1.9800	2.824(5)	167.400
N6—H6—O2 ⁱⁱⁱ	0.8600	2.1800	3.031(5)	170.700
Compound 6				
O3—H3A—O2 ⁱ	0.8500	1.8700	2.716(10)	179.400
O3—H3B—O2 ⁱⁱ	0.8500	2.5200	3.268(11)	147.100



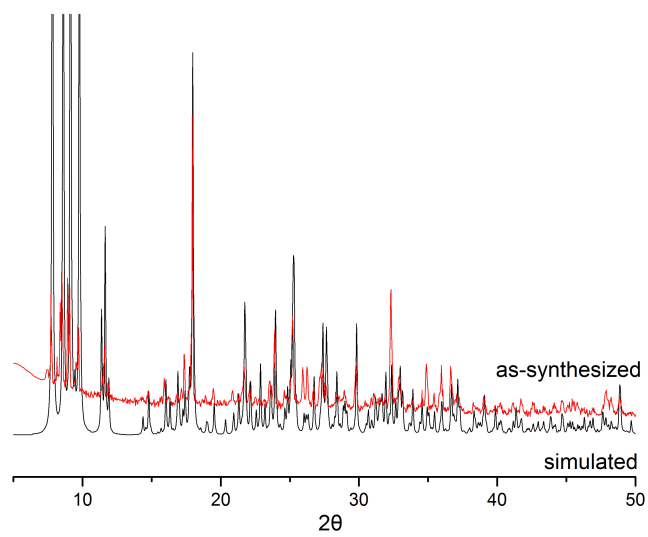
Compound 1



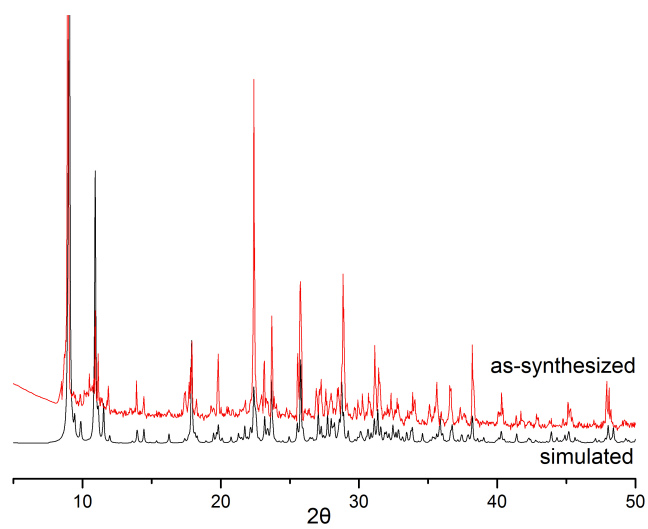
Compound 2



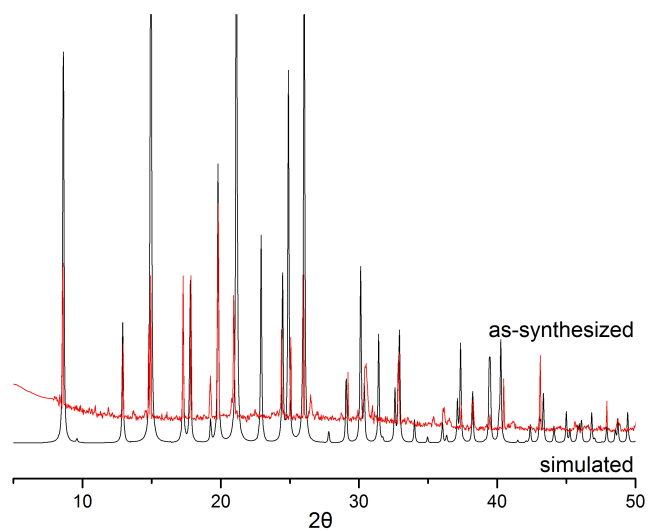
Compound 3



Compound 4

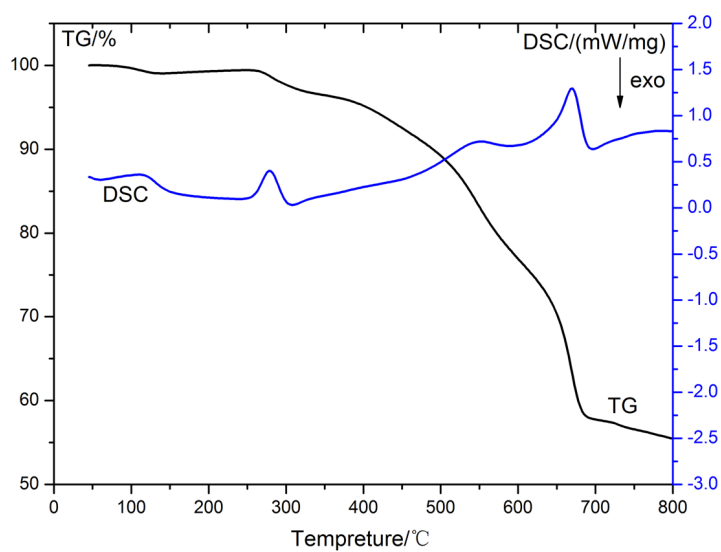


Compound 5

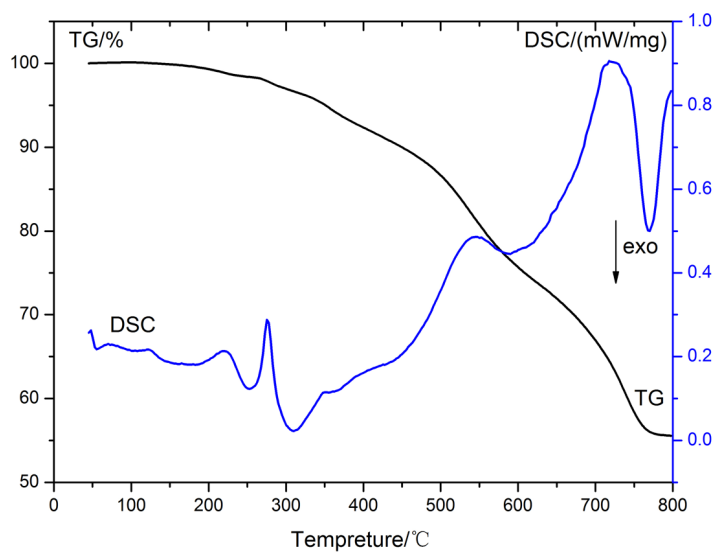


Compound 6

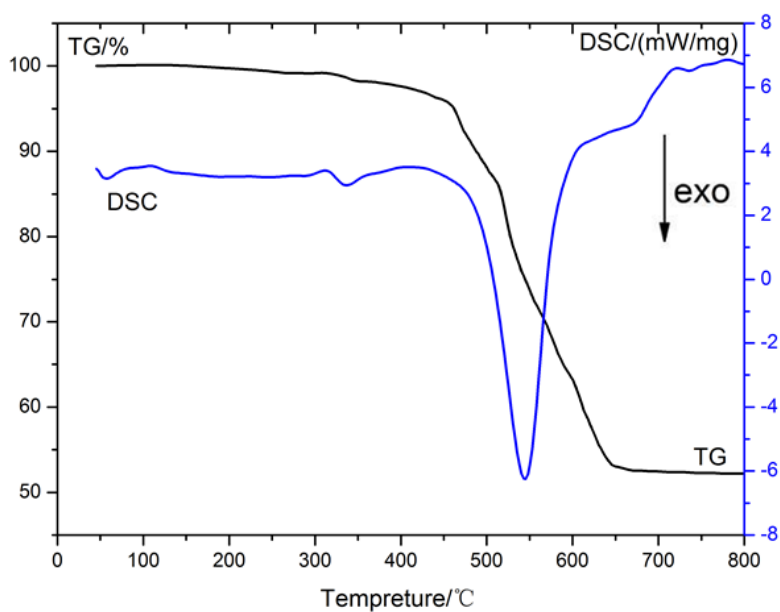
Fig. S1. PXRD patterns of compounds 1-6.



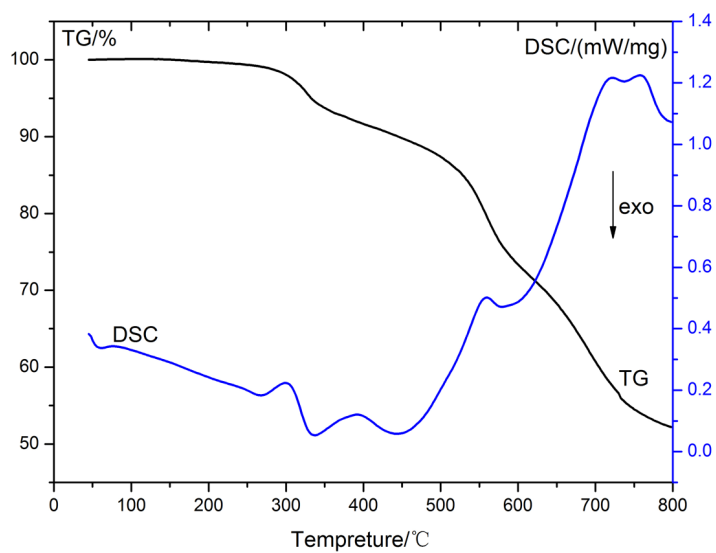
Compound 1



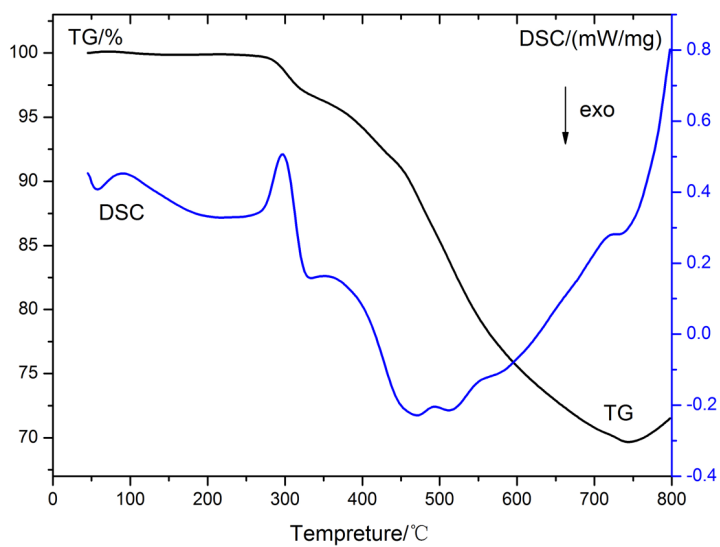
Compound 2



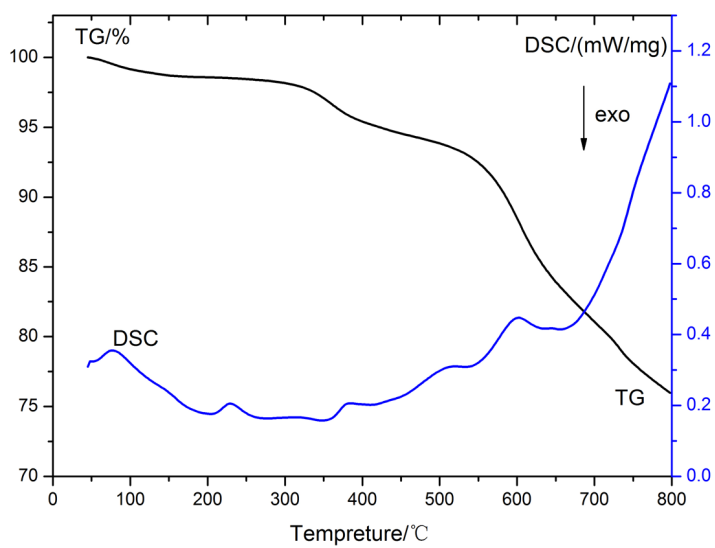
Compound 3



Compound 4



Compound 5



Compound 6

Fig. S2 The TG-DSC curves of compounds 1-6