

ПРИЛОЖЕНИЕ

Супрамолекулярные гибридные комплексы на основе октаэдрического йодидного кластера молибдена(II) и порфирина цинка(II)

© 2023 г. М. В. Волостных^{a,*}, П. А. Лобода^b, А. А. Синельщикова^a, П. В.
Дороватовский^c, Г. А. Киракосян^{a,d}, М. А. Михайлов^e, М. Н. Соколов^e,
Ю. Г. Горбунова^{a,b,d}

^aИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
Ленинский пр-т, 31, корп. 4, Москва, 119071 Россия

^bМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет
фундаментальной физико-химической инженерии, ул. Колмогорова, 1с51, Москва, 119234
Россия

^cНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт», ул. Академика
Курчатова, 1, Москва, 123182 Россия

^dИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
Ленинский пр-т, 31, корп. 1, Москва, 119991 Россия

^eИнститут неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН
пр-т Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090 Россия

*e-mail: marinavolostnykh@gmail.com

Оглавление

1. ЯМР спектроскопия.....	S2
2. Рентгеноструктурный анализ.....	S2
2.1. РСА супрамолекулярного комплекса CP_{6+2}	S2
2.2. РСА супрамолекулярного комплекса CP_{4+2}	S14

1. ЯМР спектроскопия

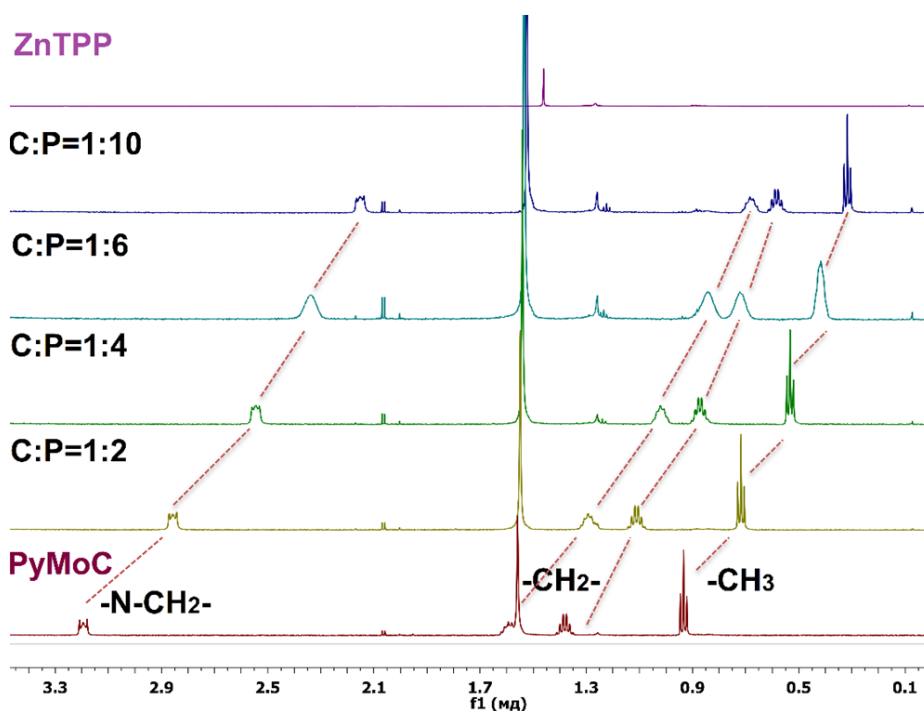


Рис. S1. Спектры ЯМР ^1H (CDCl_3 , 600 МГц, 303 К, алифатическая область), полученные при титровании **PyMoC** ($5 \cdot 10^{-4}$ М) раствором **ZnTPP** ($8 \cdot 10^{-3}$ М) до достижения следующих молярных соотношений: C:P = 1:2, 1:4, 1:6, 1:10.

2. Рентгеноструктурный анализ

2.1. PCA супрамолекулярного комплекса CP_{6+2} .

Табл. S1. Кристаллографические параметры и детали уточнения структуры CP_{6+2} .

Параметр	CP_{6+2}	CP_{6+2} [1]
Брутто-формула	$\text{C}_{426}\text{H}_{326}\text{Cl}_{12}\text{I}_8\text{Mo}_6\text{N}_{40}\text{O}_{14}\text{Zn}_8$	$\text{C}_{344}\text{H}_{300}\text{Cl}_8\text{I}_8\text{Mo}_6\text{N}_{40}\text{O}_{14}\text{Zn}_8$
CCDC	2259980	1843801
М.м.	8768.45	7615.81
T/K	100(2)	100(2)
Сингония	triclinic	triclinic
Пр.гр.	P-1	P-1
a/Å	20.503(4)	20.2530(10)
b/Å	21.903(4)	20.5959(11)
c/Å	26.674(5)	21.6995(10)
$\alpha/^\circ$	102.98(3)	103.620(2),
$\beta/^\circ$	111.36(3)	107.057(3),
$\gamma/^\circ$	99.37(3)	98.424(2)
V/Å ³	10469(4)	8180.5(7)
Z	1	1
Z'	0.5	-

$\rho_{\text{расч. Г/см}^3}$	1.391	1.546
$\mu/\text{мм}^{-1}$	1.522	1.681
F(000)	4394.0	-
Размер кристалла/ мм^3	$0.15 \times 0.12 \times 0.08$	$0.4 \times 0.2 \times 0.06$
Источник излучения	synchrotron ($\lambda = 0.745$)	MoK α ($\lambda = 0.71073$)
2 Θ область сканирования/ $^\circ$	3.398 to 62.026	4.085 – 27.499
Интервалы индексов отражений	$-28 \leq h \leq 28, -30 \leq k \leq 30, -36 \leq l \leq 36$	$-26 \leq h \leq 26, -26 \leq k \leq 26, -28 \leq l \leq 28$
Число отражений	199610	75927
Число независимых отражений	57681 [$R_{\text{int}} = 0.0372, R_{\text{sigma}} = 0.0363$]	-
Данные/ограничения/параметры	57681/42/2298	37364/1486/1932
GOOF	1.051	0.935
R[I>>2 σ (I)]	$R_1 = 0.0585, wR_2 = 0.1591$	$R_1 = 0.0869, wR_2 = 0.2088$
R [по всем рефлексам]	$R_1 = 0.0728, wR_2 = 0.1691$	$R_1 = 0.2530, wR_2 = 0.3163$
Max/min пики электронной плотности/ $\text{e } \text{\AA}^{-3}$	2.35/-2.25	3.49/-1.88

Табл. S2. Длины связей в CP_{6+2} .

Атом	Атом	$d/\text{\AA}$		Атом	Атом	$d/\text{\AA}$
I(1)	Mo(1)	2.8027(9)		C(220)	C(221)	1.378(7)
I(1)	Mo(2)	2.7914(17)		C(221)	C(222)	1.380(7)
I(1)	Mo(3)	2.7767(11)		C(223)	C(224)	1.442(5)
I(2)	Mo(1)	2.7687(9)		C(224)	C(225)	1.335(6)
I(2)	Mo(2) ¹	2.7713(8)		C(225)	C(226)	1.461(6)
I(2)	Mo(3) ¹	2.7596(10)		C(226)	C(227)	1.399(6)
I(3)	Mo(1)	2.7680(7)		C(227)	C(228)	1.494(6)
I(3)	Mo(2) ¹	2.7655(16)		C(227)	C(234)	1.402(6)
I(3)	Mo(3)	2.7801(10)		C(228)	C(229)	1.398(7)
I(4)	Mo(1) ¹	2.7922(7)		C(228)	C(233)	1.385(6)
I(4)	Mo(2) ¹	2.8032(8)		C(229)	C(230)	1.394(7)
I(4)	Mo(3)	2.7977(10)		C(230)	C(231)	1.357(9)
Mo(1)	Mo(2) ¹	2.6454(10)		C(231)	C(232)	1.381(9)
Mo(1)	Mo(2)	2.6609(10)		C(232)	C(233)	1.393(7)
Mo(1)	Mo(3) ¹	2.6543(16)		C(234)	C(235)	1.441(6)
Mo(1)	Mo(3)	2.6541(8)		C(235)	C(236)	1.365(6)
Mo(1)	O(11)	2.092(3)		C(236)	C(237)	1.432(7)
Mo(2)	Mo(3)	2.6612(7)		C(237)	C(238)	1.408(6)
Mo(2)	Mo(3) ¹	2.6605(9)		C(238)	C(239)	1.500(6)
Mo(2)	O(21)	2.110(2)		C(239)	C(240)	1.392(8)
Mo(3)	O(31)	2.093(3)		C(239)	C(244)	1.369(8)
Zn(11)	N(11)	2.119(4)		C(240)	C(241)	1.397(8)
Zn(11)	N(12)	2.067(4)		C(241)	C(242)	1.362(11)
Zn(11)	N(13)	2.067(5)		C(242)	C(243)	1.343(11)

Табл. S2. Длины связей в CP ₆₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
Zn(11)	N(14)	2.076(5)		C(243)	C(244)	1.393(9)
Zn(11)	N(15)	2.055(5)		C(301)	C(302)	1.441(8)
Zn(21)	N(21)	2.121(3)		C(301)	C(338)	1.397(8)
Zn(21)	N(22)	2.080(4)		C(302)	C(303)	1.350(8)
Zn(21)	N(23)	2.071(4)		C(303)	C(304)	1.441(8)
Zn(21)	N(24)	2.071(3)		C(304)	C(305)	1.410(7)
Zn(21)	N(25)	2.073(4)		C(305)	C(306)	1.486(9)
Zn(31)	N(31)	2.127(3)		C(305)	C(312)	1.416(8)
Zn(31)	N(32)	2.068(5)		C(306)	C(307)	1.375(7)
Zn(31)	N(33)	2.061(4)		C(306)	C(311)	1.413(10)
Zn(31)	N(34)	2.071(4)		C(307)	C(308)	1.380(10)
Zn(31)	N(35)	2.069(4)		C(308)	C(309)	1.351(10)
O(11)	C(16)	1.282(5)		C(309)	C(310)	1.353(11)
O(12)	C(16)	1.217(5)		C(310)	C(311)	1.401(12)
O(21)	C(26)	1.290(5)		C(312)	C(313)	1.444(7)
O(22)	C(26)	1.216(5)		C(313)	C(314)	1.346(9)
O(31)	C(36)	1.278(5)		C(314)	C(315)	1.445(8)
O(32)	C(36)	1.232(5)		C(315)	C(316)	1.389(9)
N(11)	C(13)	1.268(6)		C(316)	C(317)	1.501(7)
N(11)	C(14)	1.300(7)		C(316)	C(323)	1.406(8)
N(12)	C(101)	1.365(6)		C(317)	C(318)	1.388(9)
N(12)	C(104)	1.368(6)		C(317)	C(322)	1.388(8)
N(13)	C(112)	1.373(8)		C(318)	C(319)	1.413(8)
N(13)	C(115)	1.368(7)		C(319)	C(320)	1.362(12)
N(14)	C(123)	1.349(9)		C(320)	C(321)	1.384(12)
N(14)	C(126)	1.355(9)		C(321)	C(322)	1.401(8)
N(15)	C(134)	1.376(7)		C(323)	C(324)	1.436(9)
N(15)	C(137)	1.366(6)		C(324)	C(325)	1.339(8)
N(21)	C(23)	1.336(5)		C(325)	C(326)	1.447(7)
N(21)	C(24)	1.341(5)		C(326)	C(327)	1.398(7)
N(22)	C(201)	1.370(6)		C(327)	C(328)	1.492(8)
N(22)	C(204)	1.371(6)		C(327)	C(334)	1.414(7)
N(23)	C(212)	1.373(5)		C(328)	C(329)	1.400(8)
N(23)	C(215)	1.378(6)		C(328)	C(333)	1.391(7)
N(24)	C(223)	1.380(5)		C(329)	C(330)	1.376(9)
N(24)	C(226)	1.366(6)		C(330)	C(331)	1.374(9)
N(25)	C(234)	1.374(6)		C(331)	C(332)	1.390(9)
N(25)	C(237)	1.372(6)		C(332)	C(333)	1.388(9)
N(31)	C(33)	1.332(5)		C(334)	C(335)	1.444(7)
N(31)	C(34)	1.343(5)		C(335)	C(336)	1.345(8)
N(32)	C(301)	1.376(6)		C(336)	C(337)	1.444(8)
N(32)	C(304)	1.360(8)		C(337)	C(338)	1.389(8)
N(33)	C(312)	1.371(8)		C(338)	C(339)	1.500(6)

Табл. S2. Длины связей в CP ₆₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
N(33)	C(315)	1.379(6)		C(339)	C(340)	1.383(8)
N(34)	C(323)	1.370(6)		C(339)	C(344)	1.366(7)
N(34)	C(326)	1.365(7)		C(340)	C(341)	1.384(8)
N(35)	C(334)	1.358(7)		C(341)	C(342)	1.356(8)
N(35)	C(337)	1.376(6)		C(342)	C(343)	1.352(8)
C(11)	C(12)	1.326(7)		C(343)	C(344)	1.389(7)
C(11)	C(15)	1.370(8)		Zn(41)	O(41)	2.108(3)
C(11)	C(16)	1.502(6)		Zn(41)	N(41)	2.053(4)
C(12)	C(13)	1.389(7)		Zn(41)	N(42)	2.065(4)
C(14)	C(15)	1.377(8)		Zn(41)	N(43)	2.055(4)
C(21)	C(22)	1.392(6)		Zn(41)	N(44)	2.064(4)
C(21)	C(25)	1.392(5)		N(41)	C(401)	1.378(6)
C(21)	C(26)	1.508(5)		N(41)	C(404)	1.369(5)
C(22)	C(23)	1.382(5)		N(42)	C(412)	1.362(6)
C(24)	C(25)	1.375(5)		N(42)	C(415)	1.344(8)
C(31)	C(32)	1.390(5)		N(43)	C(423)	1.342(8)
C(31)	C(35)	1.388(5)		N(43)	C(426)	1.368(6)
C(31)	C(36)	1.507(5)		N(44)	C(434)	1.375(5)
C(32)	C(33)	1.383(6)		N(44)	C(437)	1.359(6)
C(34)	C(35)	1.368(6)		C(401)	C(402)	1.451(6)
C(101)	C(102)	1.430(7)		C(401)	C(438)	1.396(6)
C(101)	C(138)	1.407(7)		C(402)	C(403)	1.344(6)
C(102)	C(103)	1.337(8)		C(403)	C(404)	1.453(6)
C(103)	C(104)	1.441(7)		C(404)	C(405)	1.394(6)
C(104)	C(105)	1.413(7)		C(405)	C(406)	1.491(6)
C(105)	C(106)	1.474(8)		C(405)	C(412)	1.407(7)
C(105)	C(112)	1.415(7)		C(406)	C(407)	1.388(6)
C(106)	C(107)	1.393(8)		C(406)	C(411)	1.392(6)
C(106)	C(111)	1.396(7)		C(407)	C(408)	1.396(7)
C(107)	C(108)	1.384(9)		C(408)	C(409)	1.362(9)
C(108)	C(109)	1.390(9)		C(409)	C(410)	1.372(9)
C(109)	C(110)	1.375(9)		C(410)	C(411)	1.390(7)
C(110)	C(111)	1.381(8)		C(412)	C(413)	1.426(7)
C(112)	C(113)	1.436(8)		C(413)	C(414)	1.340(10)
C(113)	C(114)	1.345(11)		C(414)	C(415)	1.457(9)
C(114)	C(115)	1.410(12)		C(415)	C(416)	1.404(9)
C(115)	C(116)	1.409(12)		C(416)	C(423)	1.416(9)
C(116)	C(117)	1.597(9)		C(416)	C(1)	1.590(9)
C(116)	C(123)	1.378(13)		C(423)	C(424)	1.445(8)
C(117)	C(118)	1.3900		C(424)	C(425)	1.343(9)
C(117)	C(122)	1.3900		C(425)	C(426)	1.449(7)
C(118)	C(119)	1.3900		C(426)	C(427)	1.392(7)
C(119)	C(120)	1.3900		C(427)	C(428)	1.500(6)

Табл. S2. Длины связей в CP_{6+2} .						
Атом	Атом	$d/\text{\AA}$		Атом	Атом	$d/\text{\AA}$
C(120)	C(121)	1.3900		C(427)	C(434)	1.413(7)
C(121)	C(122)	1.3900		C(428)	C(429)	1.370(6)
C(123)	C(124)	1.454(10)		C(428)	C(433)	1.392(7)
C(124)	C(125)	1.332(13)		C(429)	C(430)	1.392(6)
C(125)	C(126)	1.448(8)		C(430)	C(431)	1.365(8)
C(126)	C(127)	1.396(9)		C(431)	C(432)	1.351(9)
C(127)	C(128)	1.510(9)		C(432)	C(433)	1.380(8)
C(127)	C(134)	1.401(8)		C(434)	C(435)	1.435(7)
C(128)	C(129)	1.377(8)		C(435)	C(436)	1.349(7)
C(128)	C(133)	1.364(8)		C(436)	C(437)	1.446(6)
C(129)	C(130)	1.392(12)		C(437)	C(438)	1.412(6)
C(130)	C(131)	1.401(11)		C(438)	C(439)	1.484(7)
C(131)	C(132)	1.378(10)		C(439)	C(440)	1.388(7)
C(132)	C(133)	1.372(10)		C(439)	C(444)	1.406(7)
C(134)	C(135)	1.440(9)		C(440)	C(441)	1.387(7)
C(135)	C(136)	1.351(8)		C(441)	C(442)	1.386(8)
C(136)	C(137)	1.442(8)		C(442)	C(443)	1.365(10)
C(137)	C(138)	1.405(7)		C(443)	C(444)	1.396(9)
C(138)	C(139)	1.500(7)		Cl(1S)	C(1S)	1.902(8)
C(139)	C(140)	1.388(8)		Cl(2S)	C(1S)	1.733(6)
C(139)	C(144)	1.396(10)		C(1S)	Cl(1)	1.983(9)
C(140)	C(141)	1.370(11)		Cl(3S)	C(2S)	1.753(16)
C(141)	C(142)	1.398(18)		Cl(4S)	C(2S)	1.700(11)
C(142)	C(143)	1.34(2)		N(51)	C(51)	1.514(8)
C(143)	C(144)	1.402(12)		N(51)	C(61)	1.529(7)
C(201)	C(202)	1.446(6)		N(51)	C(71)	1.539(7)
C(201)	C(238)	1.394(7)		N(51)	C(81)	1.511(8)
C(202)	C(203)	1.347(8)		C(51)	C(52)	1.510(8)
C(203)	C(204)	1.451(6)		C(52)	C(53)	1.486(8)
C(204)	C(205)	1.407(7)		C(53)	C(54)	1.538(8)
C(205)	C(206)	1.485(6)		C(61)	C(62)	1.528(9)
C(205)	C(212)	1.401(6)		C(62)	C(63)	1.533(11)
C(206)	C(207)	1.400(7)		C(63)	C(64)	1.549(12)
C(206)	C(211)	1.397(7)		C(71)	C(72)	1.511(9)
C(207)	C(208)	1.378(8)		C(72)	C(73)	1.544(8)
C(208)	C(209)	1.389(10)		C(73)	C(74)	1.524(9)
C(209)	C(210)	1.375(10)		C(81)	C(82)	1.535(9)
C(210)	C(211)	1.391(7)		C(82)	C(83)	1.504(13)
C(212)	C(213)	1.430(7)		C(83)	C(84)	1.379(16)
C(213)	C(214)	1.368(6)		Cl(6S)	C(3S)	1.81(2)
C(214)	C(215)	1.437(6)		Cl(5S)	C(3S)	1.85(2)
C(215)	C(216)	1.408(6)		C(20)	C(419)	1.3900
C(216)	C(217)	1.497(6)		C(20)	C(421)	1.3900

Табл. S2. Длины связей в CP ₆₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
C(216)	C(223)	1.392(6)		C(419)	C(418)	1.3900
C(217)	C(218)	1.384(6)		C(418)	C(1)	1.3900
C(217)	C(222)	1.400(5)		C(1)	C(422)	1.3900
C(218)	C(219)	1.402(6)		C(422)	C(421)	1.3900
C(219)	C(220)	1.395(6)				

¹I-X, I-Y, I-Z

Табл. S3. Валентные углы в CP ₆₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
Mo(2)	I(1)	Mo(1)	56.80(4)	C(136)	C(135)	C(134)	106.9(5)
Mo(3)	I(1)	Mo(1)	56.81(3)	C(135)	C(136)	C(137)	107.3(5)
Mo(3)	I(1)	Mo(2)	57.10(3)	N(15)	C(137)	C(136)	109.5(5)
Mo(1)	I(2)	Mo(2) ¹	57.05(3)	N(15)	C(137)	C(138)	124.6(5)
Mo(3) ¹	I(2)	Mo(1)	57.39(3)	C(138)	C(137)	C(136)	125.9(5)
Mo(3) ¹	I(2)	Mo(2) ¹	57.517(19)	C(101)	C(138)	C(139)	117.2(5)
Mo(1)	I(3)	Mo(3)	57.16(2)	C(137)	C(138)	C(101)	126.0(5)
Mo(2) ¹	I(3)	Mo(1)	57.12(2)	C(137)	C(138)	C(139)	116.9(5)
Mo(2) ¹	I(3)	Mo(3)	57.34(2)	C(140)	C(139)	C(138)	121.0(6)
Mo(1) ¹	I(4)	Mo(2) ¹	56.79(2)	C(140)	C(139)	C(144)	119.9(6)
Mo(1) ¹	I(4)	Mo(3)	56.70(3)	C(144)	C(139)	C(138)	119.0(6)
Mo(3)	I(4)	Mo(2) ¹	56.72(2)	C(141)	C(140)	C(139)	120.7(9)
I(2)	Mo(1)	I(1)	176.637(14)	C(140)	C(141)	C(142)	119.9(9)
I(2)	Mo(1)	I(4) ¹	89.56(3)	C(143)	C(142)	C(141)	119.1(9)
I(3)	Mo(1)	I(1)	89.95(3)	C(142)	C(143)	C(144)	123.0(12)
I(3)	Mo(1)	I(2)	90.20(3)	C(139)	C(144)	C(143)	117.3(10)
I(3)	Mo(1)	I(4) ¹	175.735(14)	N(22)	C(201)	C(202)	109.1(4)
I(4) ¹	Mo(1)	I(1)	90.04(3)	N(22)	C(201)	C(238)	126.2(4)
Mo(2)	Mo(1)	I(1)	61.38(3)	C(238)	C(201)	C(202)	124.7(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	I(1)	121.36(3)	C(203)	C(202)	C(201)	107.3(4)
Mo(2)	Mo(1)	I(2)	121.19(4)	C(202)	C(203)	C(204)	107.4(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	I(2)	61.53(3)	N(22)	C(204)	C(203)	108.8(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	I(3)	61.39(4)	N(22)	C(204)	C(205)	126.1(4)
Mo(2)	Mo(1)	I(3)	121.73(2)	C(205)	C(204)	C(203)	125.2(4)
Mo(2)	Mo(1)	I(4) ¹	61.81(2)	C(204)	C(205)	C(206)	118.0(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	I(4) ¹	122.02(4)	C(212)	C(205)	C(204)	124.8(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	Mo(2)	90.29(3)	C(212)	C(205)	C(206)	117.2(4)
Mo(2) ¹	Mo(1)	Mo(3) ¹	60.28(3)	C(207)	C(206)	C(205)	122.4(5)
Mo(2) ¹	Mo(1)	Mo(3)	60.27(2)	C(211)	C(206)	C(205)	120.3(4)
Mo(3)	Mo(1)	I(1)	61.10(3)	C(211)	C(206)	C(207)	117.3(5)
Mo(3) ¹	Mo(1)	I(1)	121.45(4)	C(208)	C(207)	C(206)	121.5(6)
Mo(3)	Mo(1)	I(2)	121.79(3)	C(207)	C(208)	C(209)	120.3(6)
Mo(3) ¹	Mo(1)	I(2)	61.13(4)	C(210)	C(209)	C(208)	119.3(5)

Табл. S3. Валентные углы в CP_{6+2} .

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
Mo(3)	Mo(1)	I(3)	61.65(3)	C(209)	C(210)	C(211)	120.6(6)
Mo(3) ¹	Mo(1)	I(3)	121.66(3)	C(210)	C(211)	C(206)	121.0(5)
Mo(3) ¹	Mo(1)	I(4) ¹	61.76(2)	N(23)	C(212)	C(205)	125.4(4)
Mo(3)	Mo(1)	I(4) ¹	121.88(3)	N(23)	C(212)	C(213)	110.0(4)
Mo(3) ¹	Mo(1)	Mo(2)	60.07(3)	C(205)	C(212)	C(213)	124.6(4)
Mo(3)	Mo(1)	Mo(2)	60.09(2)	C(214)	C(213)	C(212)	106.9(4)
Mo(3) ¹	Mo(1)	Mo(3)	90.33(3)	C(213)	C(214)	C(215)	107.0(4)
O(11)	Mo(1)	I(1)	84.18(10)	N(23)	C(215)	C(214)	109.5(4)
O(11)	Mo(1)	I(2)	92.46(10)	N(23)	C(215)	C(216)	124.8(4)
O(11)	Mo(1)	I(3)	89.18(9)	C(216)	C(215)	C(214)	125.7(4)
O(11)	Mo(1)	I(4) ¹	86.57(9)	C(215)	C(216)	C(217)	115.6(4)
O(11)	Mo(1)	Mo(2) ¹	138.51(9)	C(223)	C(216)	C(215)	125.6(4)
O(11)	Mo(1)	Mo(2)	131.13(9)	C(223)	C(216)	C(217)	118.6(4)
O(11)	Mo(1)	Mo(3) ¹	136.86(10)	C(218)	C(217)	C(216)	122.1(4)
O(11)	Mo(1)	Mo(3)	132.55(10)	C(218)	C(217)	C(222)	118.5(4)
I(1)	Mo(2)	I(4) ¹	90.05(3)	C(222)	C(217)	C(216)	119.3(4)
I(2) ¹	Mo(2)	I(1)	89.20(3)	C(217)	C(218)	C(219)	120.6(4)
I(2) ¹	Mo(2)	I(4) ¹	176.740(13)	C(220)	C(219)	C(218)	119.7(4)
I(3) ¹	Mo(2)	I(1)	176.338(13)	C(221)	C(220)	C(219)	119.8(4)
I(3) ¹	Mo(2)	I(2) ¹	90.20(3)	C(220)	C(221)	C(222)	120.3(4)
I(3) ¹	Mo(2)	I(4) ¹	90.35(3)	C(221)	C(222)	C(217)	121.1(4)
Mo(1)	Mo(2)	I(1)	61.81(3)	N(24)	C(223)	C(216)	125.9(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	I(1)	121.18(3)	N(24)	C(223)	C(224)	109.2(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	I(2) ¹	61.43(2)	C(216)	C(223)	C(224)	124.9(4)
Mo(1)	Mo(2)	I(2) ¹	120.84(2)	C(225)	C(224)	C(223)	107.7(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	I(3) ¹	61.49(3)	C(224)	C(225)	C(226)	107.1(4)
Mo(1)	Mo(2)	I(3) ¹	121.44(3)	N(24)	C(226)	C(225)	109.0(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	I(4) ¹	121.56(2)	N(24)	C(226)	C(227)	125.9(4)
Mo(1)	Mo(2)	I(4) ¹	61.40(2)	C(227)	C(226)	C(225)	125.1(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	Mo(1)	89.71(3)	C(226)	C(227)	C(228)	116.9(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	Mo(3)	60.02(4)	C(226)	C(227)	C(234)	125.3(4)
Mo(1) ¹	Mo(2)	Mo(3) ¹	60.03(3)	C(234)	C(227)	C(228)	117.8(4)
Mo(1)	Mo(2)	Mo(3)	59.83(2)	C(229)	C(228)	C(227)	121.1(4)
Mo(3) ¹	Mo(2)	I(1)	121.64(4)	C(233)	C(228)	C(227)	120.8(4)
Mo(3)	Mo(2)	I(1)	61.17(2)	C(233)	C(228)	C(229)	118.1(4)
Mo(3) ¹	Mo(2)	I(2) ¹	121.45(3)	C(230)	C(229)	C(228)	120.9(5)
Mo(3)	Mo(2)	I(2) ¹	61.02(2)	C(231)	C(230)	C(229)	120.1(6)
Mo(3) ¹	Mo(2)	I(3) ¹	61.61(4)	C(230)	C(231)	C(232)	120.2(5)
Mo(3)	Mo(2)	I(3) ¹	121.50(2)	C(231)	C(232)	C(233)	120.2(5)
Mo(3)	Mo(2)	I(4) ¹	121.20(3)	C(228)	C(233)	C(232)	120.5(5)
Mo(3) ¹	Mo(2)	I(4) ¹	61.54(3)	N(25)	C(234)	C(227)	125.5(4)
Mo(3) ¹	Mo(2)	Mo(1)	59.84(4)	N(25)	C(234)	C(235)	109.4(4)
Mo(3) ¹	Mo(2)	Mo(3)	90.04(3)	C(227)	C(234)	C(235)	124.9(4)

Табл. S3. Валентные углы в CP_{6+2} .

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
O(21)	Mo(2)	I(1)	86.35(8)	C(236)	C(235)	C(234)	106.8(4)
O(21)	Mo(2)	I(2) ¹	90.83(8)	C(235)	C(236)	C(237)	107.2(4)
O(21)	Mo(2)	I(3) ¹	90.05(8)	N(25)	C(237)	C(236)	109.7(4)
O(21)	Mo(2)	I(4) ¹	85.96(8)	N(25)	C(237)	C(238)	125.0(4)
O(21)	Mo(2)	Mo(1)	132.27(8)	C(238)	C(237)	C(236)	125.3(4)
O(21)	Mo(2)	Mo(1) ¹	138.02(8)	C(201)	C(238)	C(237)	125.9(4)
O(21)	Mo(2)	Mo(3) ¹	134.61(8)	C(201)	C(238)	C(239)	116.5(4)
O(21)	Mo(2)	Mo(3)	135.18(8)	C(237)	C(238)	C(239)	117.6(4)
I(1)	Mo(3)	I(3)	90.24(3)	C(240)	C(239)	C(238)	121.0(5)
I(1)	Mo(3)	I(4)	175.998(14)	C(244)	C(239)	C(238)	120.4(5)
I(2) ¹	Mo(3)	I(1)	89.74(3)	C(244)	C(239)	C(240)	118.5(5)
I(2) ¹	Mo(3)	I(3)	176.737(14)	C(239)	C(240)	C(241)	120.2(6)
I(2) ¹	Mo(3)	I(4)	89.63(3)	C(242)	C(241)	C(240)	119.9(7)
I(3)	Mo(3)	I(4)	90.16(3)	C(243)	C(242)	C(241)	120.2(6)
Mo(1)	Mo(3)	I(1)	62.09(2)	C(242)	C(243)	C(244)	121.2(7)
Mo(1) ¹	Mo(3)	I(1)	121.41(3)	C(239)	C(244)	C(243)	120.1(7)
Mo(1)	Mo(3)	I(2) ¹	121.53(2)	N(32)	C(301)	C(302)	109.0(5)
Mo(1) ¹	Mo(3)	I(2) ¹	61.48(3)	N(32)	C(301)	C(338)	125.6(5)
Mo(1)	Mo(3)	I(3)	61.19(2)	C(338)	C(301)	C(302)	125.4(5)
Mo(1) ¹	Mo(3)	I(3)	121.14(3)	C(303)	C(302)	C(301)	107.1(5)
Mo(1) ¹	Mo(3)	I(4)	61.55(3)	C(302)	C(303)	C(304)	107.3(6)
Mo(1)	Mo(3)	I(4)	121.45(2)	N(32)	C(304)	C(303)	109.4(5)
Mo(1) ¹	Mo(3)	Mo(1)	89.67(3)	N(32)	C(304)	C(305)	125.4(5)
Mo(1)	Mo(3)	Mo(2) ¹	59.71(3)	C(305)	C(304)	C(303)	125.1(6)
Mo(1) ¹	Mo(3)	Mo(2) ¹	60.09(4)	C(304)	C(305)	C(306)	118.6(5)
Mo(1) ¹	Mo(3)	Mo(2)	59.70(2)	C(304)	C(305)	C(312)	124.7(6)
Mo(1)	Mo(3)	Mo(2)	60.08(2)	C(312)	C(305)	C(306)	116.7(5)
Mo(2)	Mo(3)	I(1)	61.73(4)	C(307)	C(306)	C(305)	121.5(6)
Mo(2) ¹	Mo(3)	I(1)	121.78(3)	C(307)	C(306)	C(311)	115.3(6)
Mo(2) ¹	Mo(3)	I(2) ¹	121.55(4)	C(311)	C(306)	C(305)	123.2(5)
Mo(2)	Mo(3)	I(2) ¹	61.46(2)	C(306)	C(307)	C(308)	121.4(6)
Mo(2) ¹	Mo(3)	I(3)	61.06(4)	C(309)	C(308)	C(307)	121.2(6)
Mo(2)	Mo(3)	I(3)	121.27(2)	C(308)	C(309)	C(310)	121.0(8)
Mo(2) ¹	Mo(3)	I(4)	61.75(3)	C(309)	C(310)	C(311)	117.5(8)
Mo(2)	Mo(3)	I(4)	121.22(4)	C(310)	C(311)	C(306)	123.0(7)
Mo(2) ¹	Mo(3)	Mo(2)	89.96(3)	N(33)	C(312)	C(305)	126.5(5)
O(31)	Mo(3)	I(1)	90.99(9)	N(33)	C(312)	C(313)	109.2(5)
O(31)	Mo(3)	I(2) ¹	90.79(9)	C(305)	C(312)	C(313)	124.2(6)
O(31)	Mo(3)	I(3)	85.94(9)	C(314)	C(313)	C(312)	107.1(6)
O(31)	Mo(3)	I(4)	85.07(9)	C(313)	C(314)	C(315)	107.9(5)
O(31)	Mo(3)	Mo(1)	135.35(9)	N(33)	C(315)	C(314)	108.5(5)
O(31)	Mo(3)	Mo(1) ¹	134.69(9)	N(33)	C(315)	C(316)	125.5(5)
O(31)	Mo(3)	Mo(2) ¹	130.95(8)	C(316)	C(315)	C(314)	126.0(5)

Табл. S3. Валентные углы в CP₆₊₂.

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
O(31)	Mo(3)	Mo(2)	139.09(8)	C(315)	C(316)	C(317)	117.4(5)
N(12)	Zn(11)	N(11)	100.33(16)	C(315)	C(316)	C(323)	126.0(5)
N(12)	Zn(11)	N(14)	161.02(16)	C(323)	C(316)	C(317)	116.6(6)
N(13)	Zn(11)	N(11)	101.1(2)	C(318)	C(317)	C(316)	120.2(5)
N(13)	Zn(11)	N(12)	88.40(17)	C(322)	C(317)	C(316)	121.0(6)
N(13)	Zn(11)	N(14)	88.3(2)	C(322)	C(317)	C(318)	118.9(5)
N(14)	Zn(11)	N(11)	98.65(17)	C(317)	C(318)	C(319)	120.0(7)
N(15)	Zn(11)	N(11)	96.54(15)	C(320)	C(319)	C(318)	120.5(8)
N(15)	Zn(11)	N(12)	88.91(16)	C(319)	C(320)	C(321)	120.2(6)
N(15)	Zn(11)	N(13)	162.31(19)	C(320)	C(321)	C(322)	119.7(7)
N(15)	Zn(11)	N(14)	88.6(2)	C(317)	C(322)	C(321)	120.8(7)
N(22)	Zn(21)	N(21)	95.56(13)	N(34)	C(323)	C(316)	125.2(5)
N(23)	Zn(21)	N(21)	96.39(14)	N(34)	C(323)	C(324)	109.0(5)
N(23)	Zn(21)	N(22)	87.95(15)	C(316)	C(323)	C(324)	125.7(5)
N(23)	Zn(21)	N(24)	88.78(14)	C(325)	C(324)	C(323)	107.9(5)
N(23)	Zn(21)	N(25)	162.42(13)	C(324)	C(325)	C(326)	106.8(6)
N(24)	Zn(21)	N(21)	104.90(13)	N(34)	C(326)	C(325)	109.3(4)
N(24)	Zn(21)	N(22)	159.52(13)	N(34)	C(326)	C(327)	125.8(5)
N(24)	Zn(21)	N(25)	88.29(15)	C(327)	C(326)	C(325)	124.9(6)
N(25)	Zn(21)	N(21)	101.12(14)	C(326)	C(327)	C(328)	118.4(5)
N(25)	Zn(21)	N(22)	88.75(15)	C(326)	C(327)	C(334)	124.7(6)
N(32)	Zn(31)	N(31)	97.42(16)	C(334)	C(327)	C(328)	116.9(4)
N(32)	Zn(31)	N(34)	166.03(16)	C(329)	C(328)	C(327)	121.9(5)
N(32)	Zn(31)	N(35)	89.26(18)	C(333)	C(328)	C(327)	121.1(5)
N(33)	Zn(31)	N(31)	97.59(16)	C(333)	C(328)	C(329)	117.0(6)
N(33)	Zn(31)	N(32)	89.25(19)	C(330)	C(329)	C(328)	121.3(5)
N(33)	Zn(31)	N(34)	88.80(19)	C(331)	C(330)	C(329)	121.4(6)
N(33)	Zn(31)	N(35)	162.08(16)	C(330)	C(331)	C(332)	118.3(6)
N(34)	Zn(31)	N(31)	96.54(15)	C(333)	C(332)	C(331)	120.5(6)
N(35)	Zn(31)	N(31)	100.31(15)	C(332)	C(333)	C(328)	121.4(5)
N(35)	Zn(31)	N(34)	88.35(17)	N(35)	C(334)	C(327)	125.7(5)
C(16)	O(11)	Mo(1)	139.6(3)	N(35)	C(334)	C(335)	109.7(4)
C(26)	O(21)	Mo(2)	130.8(2)	C(327)	C(334)	C(335)	124.6(5)
C(36)	O(31)	Mo(3)	135.8(3)	C(336)	C(335)	C(334)	107.1(5)
C(13)	N(11)	Zn(11)	123.9(3)	C(335)	C(336)	C(337)	107.2(4)
C(13)	N(11)	C(14)	116.6(5)	N(35)	C(337)	C(336)	109.1(5)
C(14)	N(11)	Zn(11)	119.2(4)	N(35)	C(337)	C(338)	126.4(5)
C(101)	N(12)	Zn(11)	126.0(3)	C(338)	C(337)	C(336)	124.5(4)
C(101)	N(12)	C(104)	106.4(4)	C(301)	C(338)	C(339)	117.6(5)
C(104)	N(12)	Zn(11)	127.4(3)	C(337)	C(338)	C(301)	125.6(4)
C(112)	N(13)	Zn(11)	126.4(4)	C(337)	C(338)	C(339)	116.7(5)
C(115)	N(13)	Zn(11)	125.9(4)	C(340)	C(339)	C(338)	121.6(5)
C(115)	N(13)	C(112)	106.3(6)	C(344)	C(339)	C(338)	121.1(4)

Табл. S3. Валентные углы в CP_{6+2} .

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
C(123)	N(14)	Zn(11)	125.8(5)	C(344)	C(339)	C(340)	117.2(5)
C(123)	N(14)	C(126)	106.8(5)	C(339)	C(340)	C(341)	121.0(6)
C(126)	N(14)	Zn(11)	126.3(4)	C(342)	C(341)	C(340)	120.8(6)
C(134)	N(15)	Zn(11)	125.7(4)	C(343)	C(342)	C(341)	118.7(5)
C(137)	N(15)	Zn(11)	125.8(4)	C(342)	C(343)	C(344)	121.1(6)
C(137)	N(15)	C(134)	106.7(5)	C(339)	C(344)	C(343)	121.0(5)
C(23)	N(21)	Zn(21)	119.8(3)	N(41)	Zn(41)	O(41)	96.44(14)
C(23)	N(21)	C(24)	117.9(3)	N(41)	Zn(41)	N(42)	88.64(16)
C(24)	N(21)	Zn(21)	122.3(3)	N(41)	Zn(41)	N(43)	164.48(18)
C(201)	N(22)	Zn(21)	126.1(3)	N(41)	Zn(41)	N(44)	88.48(15)
C(201)	N(22)	C(204)	107.5(4)	N(42)	Zn(41)	O(41)	98.20(18)
C(204)	N(22)	Zn(21)	126.1(3)	N(43)	Zn(41)	O(41)	99.08(17)
C(212)	N(23)	Zn(21)	125.4(3)	N(43)	Zn(41)	N(42)	88.95(16)
C(212)	N(23)	C(215)	106.5(4)	N(43)	Zn(41)	N(44)	88.91(17)
C(215)	N(23)	Zn(21)	125.5(3)	N(44)	Zn(41)	O(41)	100.42(13)
C(223)	N(24)	Zn(21)	126.4(3)	N(44)	Zn(41)	N(42)	161.35(19)
C(226)	N(24)	Zn(21)	126.6(3)	C(401)	N(41)	Zn(41)	125.6(3)
C(226)	N(24)	C(223)	106.9(3)	C(404)	N(41)	Zn(41)	126.3(3)
C(234)	N(25)	Zn(21)	126.0(3)	C(404)	N(41)	C(401)	106.6(4)
C(237)	N(25)	Zn(21)	126.5(3)	C(412)	N(42)	Zn(41)	127.2(3)
C(237)	N(25)	C(234)	106.9(4)	C(415)	N(42)	Zn(41)	126.3(4)
C(33)	N(31)	Zn(31)	120.4(3)	C(415)	N(42)	C(412)	106.5(4)
C(33)	N(31)	C(34)	118.3(4)	C(423)	N(43)	Zn(41)	126.6(4)
C(34)	N(31)	Zn(31)	121.3(3)	C(423)	N(43)	C(426)	106.3(4)
C(301)	N(32)	Zn(31)	125.7(4)	C(426)	N(43)	Zn(41)	126.5(4)
C(304)	N(32)	Zn(31)	126.3(3)	C(434)	N(44)	Zn(41)	126.7(3)
C(304)	N(32)	C(301)	107.1(5)	C(437)	N(44)	Zn(41)	126.7(3)
C(312)	N(33)	Zn(31)	125.7(3)	C(437)	N(44)	C(434)	106.5(4)
C(312)	N(33)	C(315)	107.3(5)	N(41)	C(401)	C(402)	109.1(4)
C(315)	N(33)	Zn(31)	125.9(4)	N(41)	C(401)	C(438)	125.6(4)
C(323)	N(34)	Zn(31)	125.1(4)	C(438)	C(401)	C(402)	125.2(4)
C(326)	N(34)	Zn(31)	126.2(3)	C(403)	C(402)	C(401)	107.5(4)
C(326)	N(34)	C(323)	107.0(5)	C(402)	C(403)	C(404)	106.9(4)
C(334)	N(35)	Zn(31)	127.3(3)	N(41)	C(404)	C(403)	109.7(4)
C(334)	N(35)	C(337)	106.9(4)	N(41)	C(404)	C(405)	125.4(4)
C(337)	N(35)	Zn(31)	125.8(4)	C(405)	C(404)	C(403)	124.8(4)
C(12)	C(11)	C(15)	115.6(5)	C(404)	C(405)	C(406)	117.0(4)
C(12)	C(11)	C(16)	123.5(4)	C(404)	C(405)	C(412)	125.4(4)
C(15)	C(11)	C(16)	120.6(4)	C(412)	C(405)	C(406)	117.5(4)
C(11)	C(12)	C(13)	120.4(5)	C(407)	C(406)	C(405)	123.4(4)
N(11)	C(13)	C(12)	124.0(5)	C(407)	C(406)	C(411)	118.5(4)
N(11)	C(14)	C(15)	123.2(6)	C(411)	C(406)	C(405)	118.1(4)
C(11)	C(15)	C(14)	119.7(6)	C(406)	C(407)	C(408)	119.9(5)

Табл. S3. Валентные углы в CP_{6+2} .

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
O(11)	C(16)	C(11)	112.4(4)	C(409)	C(408)	C(407)	120.5(5)
O(12)	C(16)	O(11)	127.1(4)	C(408)	C(409)	C(410)	120.7(5)
O(12)	C(16)	C(11)	120.5(4)	C(409)	C(410)	C(411)	119.3(5)
C(22)	C(21)	C(25)	118.6(3)	C(410)	C(411)	C(406)	121.1(5)
C(22)	C(21)	C(26)	121.7(3)	N(42)	C(412)	C(405)	125.1(4)
C(25)	C(21)	C(26)	119.8(4)	N(42)	C(412)	C(413)	110.3(5)
C(23)	C(22)	C(21)	118.4(4)	C(405)	C(412)	C(413)	124.6(5)
N(21)	C(23)	C(22)	123.2(4)	C(414)	C(413)	C(412)	107.1(5)
N(21)	C(24)	C(25)	123.0(4)	C(413)	C(414)	C(415)	106.2(6)
C(24)	C(25)	C(21)	118.8(4)	N(42)	C(415)	C(414)	109.8(6)
O(21)	C(26)	C(21)	113.5(3)	N(42)	C(415)	C(416)	126.2(6)
O(22)	C(26)	O(21)	127.0(3)	C(416)	C(415)	C(414)	123.9(6)
O(22)	C(26)	C(21)	119.4(3)	C(415)	C(416)	C(423)	124.6(7)
C(32)	C(31)	C(36)	121.3(3)	C(415)	C(416)	C(1)	114.0(6)
C(35)	C(31)	C(32)	118.5(4)	C(423)	C(416)	C(1)	113.2(6)
C(35)	C(31)	C(36)	120.2(3)	N(43)	C(423)	C(416)	125.4(6)
C(33)	C(32)	C(31)	118.8(4)	N(43)	C(423)	C(424)	110.8(5)
N(31)	C(33)	C(32)	122.6(4)	C(416)	C(423)	C(424)	123.8(6)
N(31)	C(34)	C(35)	122.9(4)	C(425)	C(424)	C(423)	106.6(6)
C(34)	C(35)	C(31)	118.9(4)	C(424)	C(425)	C(426)	106.5(5)
O(31)	C(36)	C(31)	112.2(3)	N(43)	C(426)	C(425)	109.8(5)
O(32)	C(36)	O(31)	127.3(4)	N(43)	C(426)	C(427)	125.7(5)
O(32)	C(36)	C(31)	120.4(3)	C(427)	C(426)	C(425)	124.5(4)
N(12)	C(101)	C(102)	109.6(4)	C(426)	C(427)	C(428)	118.9(5)
N(12)	C(101)	C(138)	125.2(4)	C(426)	C(427)	C(434)	125.4(4)
C(138)	C(101)	C(102)	125.2(4)	C(434)	C(427)	C(428)	115.6(4)
C(103)	C(102)	C(101)	107.7(4)	C(429)	C(428)	C(427)	121.2(4)
C(102)	C(103)	C(104)	106.8(5)	C(429)	C(428)	C(433)	117.6(5)
N(12)	C(104)	C(103)	109.5(4)	C(433)	C(428)	C(427)	121.1(4)
N(12)	C(104)	C(105)	125.9(4)	C(428)	C(429)	C(430)	121.0(5)
C(105)	C(104)	C(103)	124.6(5)	C(431)	C(430)	C(429)	120.2(5)
C(104)	C(105)	C(106)	118.5(4)	C(432)	C(431)	C(430)	119.5(5)
C(104)	C(105)	C(112)	124.0(5)	C(431)	C(432)	C(433)	121.0(6)
C(112)	C(105)	C(106)	117.5(5)	C(432)	C(433)	C(428)	120.6(6)
C(107)	C(106)	C(105)	121.5(5)	N(44)	C(434)	C(427)	125.0(4)
C(107)	C(106)	C(111)	117.7(5)	N(44)	C(434)	C(435)	109.5(4)
C(111)	C(106)	C(105)	120.8(5)	C(427)	C(434)	C(435)	125.5(4)
C(108)	C(107)	C(106)	120.5(5)	C(436)	C(435)	C(434)	107.5(4)
C(107)	C(108)	C(109)	120.5(6)	C(435)	C(436)	C(437)	106.5(5)
C(110)	C(109)	C(108)	119.8(6)	N(44)	C(437)	C(436)	109.9(4)
C(109)	C(110)	C(111)	119.4(5)	N(44)	C(437)	C(438)	126.0(4)
C(110)	C(111)	C(106)	122.0(5)	C(438)	C(437)	C(436)	124.1(5)
N(13)	C(112)	C(105)	126.1(5)	C(401)	C(438)	C(437)	124.2(5)

Табл. S3. Валентные углы в CP_{6+2} .

Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
N(13)	C(112)	C(113)	109.4(5)	C(401)	C(438)	C(439)	117.6(4)
C(105)	C(112)	C(113)	124.5(6)	C(437)	C(438)	C(439)	118.2(4)
C(114)	C(113)	C(112)	106.4(7)	C(440)	C(439)	C(438)	120.3(4)
C(113)	C(114)	C(115)	108.3(6)	C(440)	C(439)	C(444)	118.2(5)
N(13)	C(115)	C(114)	109.6(7)	C(444)	C(439)	C(438)	121.3(5)
N(13)	C(115)	C(116)	123.8(8)	C(441)	C(440)	C(439)	120.5(5)
C(116)	C(115)	C(114)	126.5(7)	C(442)	C(441)	C(440)	120.6(6)
C(115)	C(116)	C(117)	122.0(6)	C(443)	C(442)	C(441)	119.9(6)
C(123)	C(116)	C(115)	127.0(6)	C(442)	C(443)	C(444)	120.1(6)
C(123)	C(116)	C(117)	107.8(8)	C(443)	C(444)	C(439)	120.6(6)
C(118)	C(117)	C(116)	131.3(5)	Cl(2S)	C(1S)	Cl(1S)	98.4(4)
C(118)	C(117)	C(122)	120.0	Cl(2S)	C(1S)	Cl(1)	95.3(3)
C(122)	C(117)	C(116)	108.6(6)	Cl(4S)	C(2S)	Cl(3S)	113.1(8)
C(119)	C(118)	C(117)	120.0	C(51)	N(51)	C(61)	111.7(5)
C(118)	C(119)	C(120)	120.0	C(51)	N(51)	C(71)	106.7(4)
C(121)	C(120)	C(119)	120.0	C(61)	N(51)	C(71)	110.1(5)
C(122)	C(121)	C(120)	120.0	C(81)	N(51)	C(51)	111.2(5)
C(121)	C(122)	C(117)	120.0	C(81)	N(51)	C(61)	106.7(4)
N(14)	C(123)	C(116)	125.6(6)	C(81)	N(51)	C(71)	110.5(5)
N(14)	C(123)	C(124)	109.7(8)	C(52)	C(51)	N(51)	115.0(4)
C(116)	C(123)	C(124)	124.7(7)	C(53)	C(52)	C(51)	112.0(5)
C(125)	C(124)	C(123)	106.9(6)	C(52)	C(53)	C(54)	114.1(5)
C(124)	C(125)	C(126)	106.7(7)	C(62)	C(61)	N(51)	116.0(5)
N(14)	C(126)	C(125)	109.9(6)	C(61)	C(62)	C(63)	110.9(6)
N(14)	C(126)	C(127)	126.2(5)	C(62)	C(63)	C(64)	112.8(7)
C(127)	C(126)	C(125)	123.9(7)	C(72)	C(71)	N(51)	114.4(4)
C(126)	C(127)	C(128)	118.7(5)	C(71)	C(72)	C(73)	109.2(5)
C(126)	C(127)	C(134)	124.8(6)	C(74)	C(73)	C(72)	112.9(6)
C(134)	C(127)	C(128)	116.5(6)	N(51)	C(81)	C(82)	118.6(5)
C(129)	C(128)	C(127)	121.0(6)	C(83)	C(82)	C(81)	112.3(6)
C(133)	C(128)	C(127)	118.8(5)	C(84)	C(83)	C(82)	117.3(14)
C(133)	C(128)	C(129)	119.8(6)	Cl(6S)	C(3S)	Cl(5S)	92.5(10)
C(128)	C(129)	C(130)	119.3(7)	C(419)	C(20)	C(421)	120.0
C(129)	C(130)	C(131)	121.2(8)	C(418)	C(419)	C(20)	120.0
C(132)	C(131)	C(130)	116.8(8)	C(419)	C(418)	C(1)	120.0
C(133)	C(132)	C(131)	121.9(7)	C(418)	C(1)	C(416)	110.9(7)
C(128)	C(133)	C(132)	120.5(6)	C(422)	C(1)	C(416)	129.0(7)
N(15)	C(134)	C(127)	126.0(6)	C(422)	C(1)	C(418)	120.0
N(15)	C(134)	C(135)	109.5(5)	C(421)	C(422)	C(1)	120.0
C(127)	C(134)	C(135)	124.4(5)	C(422)	C(421)	C(20)	120.0

¹I-X, I-Y, I-Z

Табл. S4. Длины водородных связей в CP ₆₊₂ .						
D	H	A	d(D-H)/Å	d(H-A)/Å	d(D-A)/Å	D-H-A/°
O(41)	H(41A)	O(12)	0.85	1.97	2.744(5)	150.2
O(41)	H(41B)	O(22) ¹	0.85	1.91	2.743(4)	165.4

¹1-X,1-Y,1-Z

2.2. PCA супрамолекулярного комплекса CP₄₊₂.

Табл. S5. Кристаллографические параметры и детали уточнения структуры CP₄₊₂.

Параметр	CP ₄₊₂
Брутто-формула	C ₃₃₀ H ₂₇₄ Cl ₂₀ I ₈ Mo ₆ N ₃₀ O ₁₂ Zn ₆
CCDC	2259979
М.м.	7543.84
T/K	100(2)
Сингония	моноклинная
Пр.гр.	P2 ₁ /c
a/Å	21.347(4)
b/Å	25.990(5)
c/Å	33.172(7)
α/°	90
β/°	104.19(3)
γ/°	90
V/Å ³	17843(7)
Z	2
ρ _{calc} г/см ³	1.404
μ/мм ⁻¹	1.690
Φ(000)	7512.0
Размер кристалла/мм ³	0,07 × 0,07 × 0,05
Источник излучения	синхротрон (λ = 0,745)
2Θ область сканирования/°	2.636 до 62.096
Интервалы индексов отражений	-29 ≤ ч ≤ 29, -25 ≤ κ ≤ 35, -36 ≤ л ≤ 45
Число отражений	141005
Число независимых отражений	48949 [R _{int} = 0,0958, R _{сигма} = 0,0979]
Данные/ограничения/параметры	48949/33/1843
GOOF	1.004
R[I>=2σ(I)]	R ₁ = 0,0833, wR ₂ = 0.2225
R [по всем рефлексам]	R ₁ = 0,1675, wR ₂ = 0,2763
Max/min пики электронной плотности/ е Å ⁻³	2.99/-1.60

Табл. S6. Длины связей в CP ₄₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
I1	Mo2	2.7780(11)		N31	C304	1.366(13)

Табл. S6. Длины связей в CP ₄₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
I1	Mo1	2.7720(11)		N31	C301	1.423(14)
I1	Mo3	2.7720(12)		C119	C120	1.358(15)
I2	Mo2 ¹	2.7993(11)		C217	C218	1.371(14)
I2	Mo1	2.7849(10)		C205	C204	1.386(15)
I2	Mo3	2.7828(10)		C205	C206	1.504(13)
I4	Mo2 ¹	2.7741(12)		C15	C13	1.368(11)
I4	Mo1 ¹	2.7702(10)		C113	C112	1.454(13)
I4	Mo3	2.7601(11)		N32	C312	1.412(14)
I3	Mo2 ¹	2.7881(12)		N32	C315	1.363(13)
I3	Mo1	2.7866(11)		C112	C105	1.368(12)
I3	Mo3 ¹	2.7928(11)		Cl5	C3S	1.67(3)
Mo2	Mo1	2.6323(10)		C137	C138	1.404(13)
Mo2	Mo1 ¹	2.6595(12)		C137	C136	1.463(14)
Mo2	Mo3	2.6525(11)		C226	C227	1.382(12)
Mo2	Mo3 ¹	2.6696(12)		C226	C225	1.443(13)
Mo2	O3	2.109(5)		C327	C326	1.376(14)
Mo1	Mo3	2.6587(12)		C327	C328	1.498(14)
Mo1	Mo3 ¹	2.6663(11)		C201	C202	1.456(16)
Mo1	O1	2.111(5)		C237	C236	1.423(13)
Mo3	O5	2.213(9)		C233	C232	1.413(15)
Zn1	N14	2.074(7)		C236	C235	1.343(14)
Zn1	N12	2.076(7)		C326	C325	1.436(14)
Zn1	N13	2.055(7)		C204	C203	1.439(16)
Zn1	N11	2.147(6)		C128	C129	1.358(16)
Zn1	N15	2.066(7)		C128	C133	1.331(17)
Zn2	N23	2.075(7)		C220	C221	1.338(19)
Zn2	N21	2.141(7)		C220	C219	1.408(18)
Zn2	N24	2.069(7)		C324	C325	1.351(16)
Zn2	N22	2.069(8)		C324	C323	1.416(16)
Zn2	N25	2.084(8)		C339	C344	1.356(14)
Zn3	O6	2.081(7)		C339	C338	1.514(15)
Zn3	N34	2.079(8)		C339	C340	1.368(16)
Zn3	N33	2.057(8)		C305	C312	1.355(16)
Zn3	N31	2.031(9)		C305	C304	1.403(16)
Zn3	N32	2.070(9)		C305	C306	1.478(15)
Cl1	C1S	1.765(12)		C337	C338	1.390(14)
Cl2	C1S	1.758(11)		C337	C336	1.425(14)
O1	C14	1.300(9)		C344	C343	1.409(16)
Cl3	C2S	1.757(19)		C312	C313	1.419(15)
O3	C24	1.274(10)		C219	C218	1.391(16)
Cl6	C3S	1.49(3)		C328	C333	1.360(15)
O2	C14	1.202(9)		C328	C329	1.377(16)
Cl8	C4S	1.743(18)		C230	C229	1.353(14)

Табл. S6. Длины связей в CP ₄₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
O4	C24	1.210(10)		C230	C231	1.328(16)
N14	C126	1.369(11)		C206	C207	1.398(15)
N14	C123	1.366(11)		C206	C211	1.360(16)
C19	C5S	1.80(2)		C105	C106	1.517(11)
N23	C215	1.367(12)		C33	C32	1.470(17)
N23	C212	1.360(11)		C33	C34	1.51(2)
C14	C2S	1.60(2)		C315	C316	1.357(15)
N12	C101	1.369(12)		C315	C314	1.408(14)
N12	C104	1.353(11)		C303	C304	1.444(16)
N13	C115	1.387(11)		C303	C302	1.334(17)
N13	C112	1.395(11)		C138	C139	1.515(12)
N21	C26	1.311(11)		C316	C323	1.426(14)
N21	C21	1.328(11)		C316	C317	1.528(16)
C110	C5S	1.67(2)		C322	C317	1.372(16)
N24	C223	1.372(11)		C322	C321	1.330(17)
N24	C226	1.381(10)		C333	C332	1.381(16)
N11	C11	1.312(10)		C338	C301	1.381(15)
N11	C16	1.316(10)		N3	C31	1.593(16)
N22	C201	1.377(14)		N3	C39	1.443(18)
N22	C204	1.361(12)		N3	C43	1.475(18)
C223	C224	1.437(12)		N3	C35	1.61(2)
C223	C216	1.407(11)		C32	C31	1.562(17)
N15	C134	1.385(11)		C129	C130	1.383(18)
N15	C137	1.372(11)		C332	C331	1.381(17)
N25	C234	1.368(12)		C329	C330	1.354(16)
N25	C237	1.376(12)		C317	C318	1.374(16)
C127	C126	1.413(13)		C336	C335	1.377(15)
C127	C134	1.392(13)		C207	C208	1.411(17)
C127	C128	1.482(12)		C203	C202	1.335(17)
C126	C125	1.438(12)		C106	C111	1.3900
N34	C334	1.386(12)		C106	C107	1.3900
N34	C337	1.425(13)		C111	C110	1.3900
C115	C116	1.406(12)		C110	C109	1.3900
C115	C114	1.414(13)		C109	C108	1.3900
C118	C117	1.380(11)		C108	C107	1.3900
C118	C119	1.378(14)		C232	C231	1.323(17)
C101	C102	1.444(13)		C306	C311	1.355(16)
C101	C138	1.380(13)		C306	C307	1.393(17)
C224	C225	1.334(12)		C136	C135	1.338(15)
C14	C13	1.500(10)		C314	C313	1.377(16)
C123	C116	1.406(13)		C211	C210	1.424(17)
C123	C124	1.417(13)		C301	C302	1.464(15)
C12	C11	1.403(10)		C343	C342	1.366(18)

Табл. S6. Длины связей в CP ₄₊₂ .						
Атом	Атом	d/Å		Атом	Атом	d/Å
C12	C13	1.377(11)		C210	C209	1.35(2)
C122	C117	1.373(12)		C133	C132	1.378(18)
C122	C121	1.381(13)		C131	C130	1.32(2)
C25	C26	1.371(11)		C131	C132	1.39(2)
C25	C23	1.362(11)		C45	C44	1.63(2)
C116	C117	1.494(13)		C45	C46	1.46(4)
C103	C104	1.466(13)		C331	C330	1.342(17)
C103	C102	1.364(14)		C342	C341	1.384(18)
C23	C24	1.532(12)		C208	C209	1.352(19)
C23	C22	1.413(13)		C321	C320	1.26(2)
C125	C124	1.357(14)		C320	C319	1.40(2)
C216	C215	1.370(12)		C340	C341	1.375(18)
C216	C217	1.511(13)		C311	C310	1.357(19)
Cl7	C4S	1.758(18)		C40	C39	1.64(2)
N33	C326	1.388(12)		C40	C41	1.60(3)
N33	C323	1.344(13)		C307	C308	1.372(18)
C222	C217	1.403(14)		C310	C309	1.409(19)
C222	C221	1.394(16)		C308	C309	1.40(2)
C215	C214	1.429(12)		C318	C319	1.42(2)
C234	C227	1.407(13)		C43	C44	1.60(2)
C234	C235	1.434(13)		C139	C144	1.3900
C121	C120	1.394(14)		C139	C140	1.3900
C212	C213	1.414(14)		C144	C143	1.3900
C212	C205	1.412(14)		C143	C142	1.3900
C134	C135	1.425(14)		C142	C141	1.3900
C114	C113	1.354(14)		C141	C140	1.3900
C16	C15	1.383(10)		C35	C36	1.37(2)
C334	C327	1.397(14)		C37	C36	1.58(2)
C334	C335	1.430(13)		C37	C38	1.32(2)
C21	C22	1.363(12)		C41	C42	1.53(3)
C214	C213	1.350(14)		C243	C244	1.3900
C104	C105	1.372(13)		C243	C242	1.3900
C238	C201	1.397(15)		C244	C239	1.3900
C238	C237	1.393(14)		C239	C240	1.3900
C238	C239	1.481(13)		C240	C241	1.3900
C228	C227	1.507(12)		C241	C242	1.3900
C228	C233	1.376(13)		Cl11	C6S	2.01(4)
C228	C229	1.351(14)		Cl12	C6S	1.54(4)

¹I-X,I-Y,I-Z

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
Mo1	I1	Mo2	56.62(3)	N25	C234	C227	124.5(8)

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
Mo1	I1	Mo3	57.31(3)	N25	C234	C235	108.5(9)
Mo3	I1	Mo2	57.10(3)	C227	C234	C235	127.0(9)
Mo1	I2	Mo2 ¹	56.88(3)	N11	C11	C12	123.8(7)
Mo3	I2	Mo2 ¹	57.14(3)	C125	C124	C123	109.0(9)
Mo3	I2	Mo1	57.05(3)	C122	C121	C120	119.0(9)
Mo1 ¹	I4	Mo2 ¹	56.69(3)	N23	C212	C213	108.8(8)
Mo3	I4	Mo2 ¹	57.68(3)	N23	C212	C205	126.3(9)
Mo3	I4	Mo1 ¹	57.65(3)	C205	C212	C213	124.8(9)
Mo2 ¹	I3	Mo3 ¹	56.76(2)	N15	C134	C127	126.1(9)
Mo1	I3	Mo2 ¹	56.99(3)	N15	C134	C135	109.0(9)
Mo1	I3	Mo3 ¹	57.09(2)	C127	C134	C135	125.0(9)
I1	Mo2	I2 ¹	176.36(3)	C113	C114	C115	107.5(9)
I1	Mo2	I3 ¹	90.45(3)	N11	C16	C15	122.3(8)
I4 ¹	Mo2	I1	90.71(3)	N34	C334	C327	125.0(9)
I4 ¹	Mo2	I2 ¹	89.36(3)	N34	C334	C335	108.8(9)
I4 ¹	Mo2	I3 ¹	176.16(3)	C327	C334	C335	126.2(10)
I3 ¹	Mo2	I2 ¹	89.25(3)	N21	C21	C22	122.5(9)
Mo1 ¹	Mo2	I1	121.59(4)	C213	C214	C215	107.6(9)
Mo1	Mo2	I1	61.57(3)	N12	C104	C103	109.0(8)
Mo1 ¹	Mo2	I2 ¹	61.29(3)	N12	C104	C105	126.5(9)
Mo1	Mo2	I2 ¹	121.49(4)	C105	C104	C103	124.4(9)
Mo1	Mo2	I4 ¹	61.58(2)	C214	C213	C212	107.5(8)
Mo1 ¹	Mo2	I4 ¹	120.74(4)	C201	C238	C239	116.6(10)
Mo1 ¹	Mo2	I3 ¹	61.48(3)	C237	C238	C201	125.2(10)
Mo1	Mo2	I3 ¹	122.11(3)	C237	C238	C239	118.2(9)
Mo1	Mo2	Mo1 ¹	90.06(3)	C233	C228	C227	119.9(10)
Mo1	Mo2	Mo3	60.41(3)	C229	C228	C227	122.5(9)
Mo1	Mo2	Mo3 ¹	60.38(3)	C229	C228	C233	117.6(10)
Mo1 ¹	Mo2	Mo3 ¹	59.85(4)	C304	N31	Zn3	129.4(8)
Mo3 ¹	Mo2	I1	121.94(3)	C304	N31	C301	105.7(9)
Mo3	Mo2	I1	61.34(3)	C301	N31	Zn3	124.8(7)
Mo3	Mo2	I2 ¹	121.52(3)	C120	C119	C118	119.2(10)
Mo3 ¹	Mo2	I2 ¹	61.12(3)	C222	C217	C216	119.3(9)
Mo3 ¹	Mo2	I4 ¹	60.90(3)	C218	C217	C216	120.9(9)
Mo3	Mo2	I4 ¹	121.99(3)	C218	C217	C222	119.7(10)
Mo3	Mo2	I3 ¹	61.71(3)	C212	C205	C206	118.2(10)
Mo3 ¹	Mo2	I3 ¹	121.29(4)	C204	C205	C212	125.0(9)
Mo3	Mo2	Mo1 ¹	60.26(3)	C204	C205	C206	116.8(10)
Mo3	Mo2	Mo3 ¹	90.71(3)	C13	C15	C16	120.1(8)
O3	Mo2	I1	88.48(16)	C114	C113	C112	108.0(9)
O3	Mo2	I2 ¹	87.88(16)	O3	C24	C23	113.1(7)
O3	Mo2	I4 ¹	91.01(19)	O4	C24	O3	128.6(8)
O3	Mo2	I3 ¹	85.36(19)	O4	C24	C23	118.3(7)

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
O3	Mo2	Mo1 ¹	132.93(15)	C312	N32	Zn3	125.6(7)
O3	Mo2	Mo1	136.97(15)	C315	N32	Zn3	126.5(7)
O3	Mo2	Mo3 ¹	136.2(2)	C315	N32	C312	107.5(9)
O3	Mo2	Mo3	133.0(2)	C12	C13	C14	119.8(7)
I1	Mo1	I2	89.63(3)	C15	C13	C14	122.1(7)
I1	Mo1	I3	175.67(3)	C15	C13	C12	118.1(7)
I2	Mo1	I3	89.57(3)	C21	C22	C23	118.8(8)
I4 ¹	Mo1	I1	90.92(3)	N13	C112	C113	107.7(8)
I4 ¹	Mo1	I2	176.33(3)	C105	C112	N13	124.1(8)
I4 ¹	Mo1	I3	89.61(3)	C105	C112	C113	128.1(9)
Mo2 ¹	Mo1	I1	121.60(4)	N15	C137	C138	126.0(9)
Mo2	Mo1	I1	61.80(3)	N15	C137	C136	108.2(9)
Mo2 ¹	Mo1	I2	61.83(3)	C138	C137	C136	125.7(9)
Mo2	Mo1	I2	121.60(4)	N24	C226	C227	124.7(9)
Mo2 ¹	Mo1	I4 ¹	120.72(3)	N24	C226	C225	109.6(8)
Mo2	Mo1	I4 ¹	61.73(3)	C227	C226	C225	125.7(8)
Mo2 ¹	Mo1	I3	61.54(3)	C334	C327	C328	116.5(9)
Mo2	Mo1	I3	122.07(3)	C326	C327	C334	125.0(9)
Mo2	Mo1	Mo2 ¹	89.94(3)	C326	C327	C328	118.5(9)
Mo2	Mo1	Mo3 ¹	60.51(3)	N22	C201	C238	126.9(10)
Mo2	Mo1	Mo3	60.17(3)	N22	C201	C202	108.5(10)
Mo2 ¹	Mo1	Mo3 ¹	59.74(3)	C238	C201	C202	124.5(11)
Mo3	Mo1	I1	61.34(3)	C119	C120	C121	121.2(9)
Mo3 ¹	Mo1	I1	122.30(3)	C234	C227	C228	115.3(8)
Mo3	Mo1	I2	61.43(3)	C226	C227	C234	127.0(8)
Mo3 ¹	Mo1	I2	121.55(3)	C226	C227	C228	117.7(8)
Mo3 ¹	Mo1	I4 ¹	60.99(3)	N25	C237	C238	125.7(9)
Mo3	Mo1	I4 ¹	121.90(3)	N25	C237	C236	109.3(9)
Mo3 ¹	Mo1	I3	61.57(3)	C238	C237	C236	124.9(9)
Mo3	Mo1	I3	121.76(4)	C228	C233	C232	118.3(11)
Mo3	Mo1	Mo2 ¹	60.26(3)	C235	C236	C237	107.1(9)
Mo3	Mo1	Mo3 ¹	90.65(3)	N33	C326	C325	107.9(9)
O1	Mo1	I1	89.30(16)	C327	C326	N33	127.6(9)
O1	Mo1	I2	84.24(15)	C327	C326	C325	124.5(10)
O1	Mo1	I4 ¹	92.14(15)	N22	C204	C205	126.1(10)
O1	Mo1	I3	86.39(16)	N22	C204	C203	108.4(10)
O1	Mo1	Mo2	138.58(14)	C205	C204	C203	125.4(10)
O1	Mo1	Mo2 ¹	131.44(14)	C103	C102	C101	106.2(9)
O1	Mo1	Mo3 ¹	136.21(17)	C129	C128	C127	121.4(10)
O1	Mo1	Mo3	132.88(17)	C133	C128	C127	121.0(10)
I1	Mo3	I2	89.67(3)	C133	C128	C129	117.3(11)
I1	Mo3	I3 ¹	90.48(3)	C236	C235	C234	108.0(9)
I2	Mo3	I3 ¹	177.14(4)	C221	C220	C219	121.7(12)

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
I4	Mo3	I1	176.60(4)	C325	C324	C323	107.2(11)
I4	Mo3	I2	89.98(3)	C344	C339	C338	119.4(10)
I4	Mo3	I3 ¹	89.69(3)	C344	C339	C340	118.4(11)
Mo2 ¹	Mo3	I1	121.21(4)	C340	C339	C338	122.2(10)
Mo2	Mo3	I1	61.56(3)	C220	C221	C222	120.7(12)
Mo2 ¹	Mo3	I2	61.74(3)	C312	C305	C304	127.1(10)
Mo2	Mo3	I2	120.93(4)	C312	C305	C306	117.7(12)
Mo2	Mo3	I4	121.36(3)	C304	C305	C306	115.2(11)
Mo2 ¹	Mo3	I4	61.42(4)	N34	C337	C336	109.5(9)
Mo2	Mo3	I3 ¹	61.54(3)	C338	C337	N34	122.7(10)
Mo2 ¹	Mo3	I3 ¹	120.45(3)	C338	C337	C336	127.8(10)
Mo2	Mo3	Mo2 ¹	89.29(3)	C339	C344	C343	120.9(12)
Mo2	Mo3	Mo1 ¹	60.00(3)	N32	C312	C313	108.1(10)
Mo2	Mo3	Mo1	59.42(3)	C305	C312	N32	125.3(10)
Mo1 ¹	Mo3	I1	121.56(4)	C305	C312	C313	126.6(11)
Mo1	Mo3	I1	61.34(3)	C218	C219	C220	117.5(12)
Mo1	Mo3	I2	61.52(2)	C324	C325	C326	107.3(10)
Mo1 ¹	Mo3	I2	120.85(4)	C224	C225	C226	106.6(8)
Mo1 ¹	Mo3	I4	61.37(3)	C333	C328	C327	119.4(10)
Mo1	Mo3	I4	121.29(4)	C333	C328	C329	117.7(11)
Mo1	Mo3	I3 ¹	120.95(3)	C329	C328	C327	122.9(10)
Mo1 ¹	Mo3	I3 ¹	61.34(3)	C231	C230	C229	121.4(12)
Mo1	Mo3	Mo2 ¹	59.88(3)	C207	C206	C205	120.6(10)
Mo1 ¹	Mo3	Mo2 ¹	59.12(3)	C211	C206	C205	121.1(11)
Mo1	Mo3	Mo1 ¹	89.35(3)	C211	C206	C207	118.3(11)
O5	Mo3	I1	86.5(2)	C104	C105	C106	116.6(8)
O5	Mo3	I2	89.2(3)	C112	C105	C104	127.3(9)
O5	Mo3	I4	90.1(2)	C112	C105	C106	116.1(8)
O5	Mo3	I3 ¹	88.0(3)	C32	C33	C34	106.8(12)
O5	Mo3	Mo2 ¹	137.2(3)	N32	C315	C314	109.0(10)
O5	Mo3	Mo2	133.5(3)	C316	C315	N32	124.3(9)
O5	Mo3	Mo1	134.5(2)	C316	C315	C314	126.6(11)
O5	Mo3	Mo1 ¹	136.1(2)	C302	C303	C304	107.2(11)
N14	Zn1	N12	162.5(3)	C217	C218	C219	121.3(12)
N14	Zn1	N11	98.3(3)	C101	C138	C137	125.5(9)
N12	Zn1	N11	99.2(2)	C101	C138	C139	119.0(8)
N13	Zn1	N14	89.1(3)	C137	C138	C139	115.5(8)
N13	Zn1	N12	88.6(3)	C315	C316	C323	127.4(10)
N13	Zn1	N11	98.0(3)	C315	C316	C317	118.2(10)
N13	Zn1	N15	160.9(3)	C323	C316	C317	114.4(10)
N15	Zn1	N14	88.3(3)	C321	C322	C317	119.4(13)
N15	Zn1	N12	88.2(3)	C328	C333	C332	122.4(12)
N15	Zn1	N11	101.1(3)	Cl2	Cl5	Cl1	112.0(6)

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
N23	Zn2	N21	99.5(3)	C337	C338	C339	115.9(10)
N23	Zn2	N25	162.6(3)	C301	C338	C339	117.2(10)
N24	Zn2	N23	88.6(3)	C301	C338	C337	126.9(10)
N24	Zn2	N21	96.7(3)	C31	N3	C35	104.2(12)
N24	Zn2	N25	88.1(3)	C39	N3	C31	107.0(10)
N22	Zn2	N23	88.6(3)	C39	N3	C43	117.3(13)
N22	Zn2	N21	102.7(3)	C39	N3	C35	113.3(15)
N22	Zn2	N24	160.6(3)	C43	N3	C31	110.2(11)
N22	Zn2	N25	88.9(3)	C43	N3	C35	104.1(11)
N25	Zn2	N21	97.9(3)	C33	C32	C31	110.9(10)
N34	Zn3	O6	101.1(3)	C128	C129	C130	122.3(14)
N33	Zn3	O6	98.1(3)	C32	C31	N3	117.7(10)
N33	Zn3	N34	88.4(3)	C331	C332	C333	117.7(13)
N33	Zn3	N32	88.2(3)	N33	C323	C324	110.4(9)
N31	Zn3	O6	100.7(3)	N33	C323	C316	124.1(10)
N31	Zn3	N34	89.6(4)	C324	C323	C316	125.4(10)
N31	Zn3	N33	161.2(3)	C330	C329	C328	120.2(12)
N31	Zn3	N32	88.2(4)	C322	C317	C316	121.7(10)
N32	Zn3	O6	96.2(3)	C322	C317	C318	117.3(12)
N32	Zn3	N34	162.7(3)	C318	C317	C316	121.0(12)
C14	O1	Mo1	136.3(5)	C335	C336	C337	106.4(9)
C24	O3	Mo2	131.9(5)	C228	C229	C230	122.0(11)
C126	N14	Zn1	126.7(6)	C206	C207	C208	118.0(11)
C123	N14	Zn1	124.8(6)	N31	C304	C305	123.5(11)
C123	N14	C126	106.4(7)	N31	C304	C303	111.1(11)
C215	N23	Zn2	125.6(6)	C305	C304	C303	125.4(11)
C212	N23	Zn2	125.5(6)	C336	C335	C334	109.1(10)
C212	N23	C215	108.2(7)	C202	C203	C204	108.8(11)
C101	N12	Zn1	126.6(6)	C111	C106	C105	119.3(7)
C104	N12	Zn1	125.3(6)	C111	C106	C107	120.0
C104	N12	C101	107.7(7)	C107	C106	C105	120.6(7)
C115	N13	Zn1	126.6(6)	C106	C111	C110	120.0
C115	N13	C112	106.5(7)	C109	C110	C111	120.0
C112	N13	Zn1	126.7(6)	C108	C109	C110	120.0
C26	N21	Zn2	121.9(6)	C109	C108	C107	120.0
C26	N21	C21	118.8(7)	C108	C107	C106	120.0
C21	N21	Zn2	119.2(6)	C231	C232	C233	121.7(12)
C223	N24	Zn2	126.3(5)	C311	C306	C305	121.5(12)
C223	N24	C226	106.3(7)	C311	C306	C307	114.9(12)
C226	N24	Zn2	127.1(6)	C307	C306	C305	123.3(11)
C11	N11	Zn1	122.7(5)	C135	C136	C137	107.2(10)
C11	N11	C16	118.0(7)	C313	C314	C315	108.6(10)
C16	N11	Zn1	119.2(5)	C206	C211	C210	123.2(13)

Табл. S7. Валентные углы в CP ₄₊₂ .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
C201	N22	Zn2	124.3(7)	N31	C301	C302	107.6(10)
C204	N22	Zn2	126.3(7)	C338	C301	N31	126.8(10)
C204	N22	C201	107.8(9)	C338	C301	C302	125.6(11)
N24	C223	C224	109.0(7)	C342	C343	C344	120.1(12)
N24	C223	C216	124.8(8)	C303	C302	C301	108.4(11)
C216	C223	C224	126.1(8)	C209	C210	C211	117.3(14)
C134	N15	Zn1	126.1(6)	C128	C133	C132	120.6(15)
C137	N15	Zn1	126.2(6)	C130	C131	C132	117.1(14)
C137	N15	C134	107.3(8)	C46	C45	C44	108.1(16)
C234	N25	Zn2	126.2(6)	C330	C331	C332	119.7(13)
C234	N25	C237	107.0(8)	C136	C135	C134	108.4(10)
C237	N25	Zn2	124.8(6)	C343	C342	C341	118.6(13)
C126	C127	C128	116.2(9)	C232	C231	C230	118.8(11)
C134	C127	C126	125.5(8)	C209	C208	C207	122.2(14)
C134	C127	C128	118.3(9)	C203	C202	C201	106.4(11)
N14	C126	C127	124.6(8)	C320	C321	C322	126.3(16)
N14	C126	C125	110.5(8)	C321	C320	C319	119.4(15)
C127	C126	C125	124.8(8)	C131	C130	C129	120.5(16)
C334	N34	Zn3	126.6(7)	C339	C340	C341	121.6(12)
C334	N34	C337	106.2(8)	C314	C313	C312	106.8(10)
C337	N34	Zn3	126.4(7)	C208	C209	C210	121.0(13)
N13	C115	C116	124.6(8)	C306	C311	C310	125.2(14)
N13	C115	C114	110.3(8)	C331	C330	C329	121.8(13)
C116	C115	C114	125.1(9)	C41	C40	C39	104.6(16)
C119	C118	C117	120.5(10)	C308	C307	C306	122.8(13)
N12	C101	C102	110.1(8)	N3	C39	C40	107.0(14)
N12	C101	C138	125.5(8)	Cl10	C5S	Cl9	118.6(14)
C138	C101	C102	124.4(9)	C311	C310	C309	118.9(14)
C225	C224	C223	108.5(9)	C307	C308	C309	120.0(14)
O1	C14	C13	111.1(6)	C317	C318	C319	121.2(16)
O2	C14	O1	127.1(7)	C340	C341	C342	120.2(14)
O2	C14	C13	121.8(7)	N3	C43	C44	109.6(11)
N14	C123	C116	125.8(8)	C144	C139	C138	122.9(8)
N14	C123	C124	109.1(9)	C144	C139	C140	120.0
C116	C123	C124	125.0(9)	C140	C139	C138	117.1(8)
C13	C12	C11	117.6(7)	C143	C144	C139	120.0
C117	C122	C121	119.9(9)	C144	C143	C142	120.0
C23	C25	C26	119.8(8)	C143	C142	C141	120.0
N21	C26	C25	122.8(8)	C140	C141	C142	120.0
C115	C116	C123	125.8(9)	C141	C140	C139	120.0
C115	C116	C117	118.6(8)	Cl8	C4S	Cl7	114.9(10)
C123	C116	C117	115.6(8)	C43	C44	C45	108.0(13)
C102	C103	C104	107.1(9)	C320	C319	C318	116.4(15)

Табл. S7. Валентные углы в CP_{4+2} .							
Атом	Атом	Атом	Угол/°	Атом	Атом	Атом	Угол/°
C25	C23	C24	121.7(8)	C36	C35	N3	115.8(14)
C25	C23	C22	117.2(8)	Cl6	C3S	Cl5	128.1(17)
C22	C23	C24	121.1(7)	C38	C37	C36	124.9(19)
C124	C125	C126	104.9(8)	C133	C132	C131	121.2(16)
C223	C216	C217	117.6(8)	Cl4	C2S	Cl3	117.7(14)
C215	C216	C223	126.4(8)	C42	C41	C40	115(2)
C215	C216	C217	116.0(7)	C35	C36	C37	117.2(15)
C326	N33	Zn3	125.7(6)	C308	C309	C310	117.5(13)
C323	N33	Zn3	126.3(7)	C244	C243	C242	120.0
C323	N33	C326	107.1(8)	C239	C244	C243	120.0
C221	C222	C217	118.9(11)	C244	C239	C238	119.2(9)
C118	C117	C116	119.1(8)	C244	C239	C240	120.0
C122	C117	C118	120.0(9)	C240	C239	C238	120.8(9)
C122	C117	C116	120.8(7)	C241	C240	C239	120.0
N23	C215	C216	126.1(8)	C240	C241	C242	120.0
N23	C215	C214	107.8(8)	C241	C242	C243	120.0
C216	C215	C214	126.1(9)	Cl12	C6S	Cl11	111(2)

¹1-X,1-Y,1-Z

Табл. S8. Длины водородных связей в CP_{4+2} .						
D	H	A	d(D-H)/Å	d(H-A)/Å	d(D-A)/Å	D-H-A/°
O6	H6A	O4	0.85	1.91	2.716(8)	156.2
O6	H6B	O2	0.85	2.04	2.810(9)	149.4

В структурах обоих гибридов CP_{4+2} и CP_{6+2} , геометрия кластера $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{PyCOO})_6]^{2-}$ совпадает с ранее опубликованными структурами гексаядерных молибденовых комплексов; обе гибридные системы кристаллизуются в виде тетра-*n*-бутиламмониевых солей. Порфирилат цинка(II) также имеет типичную геометрию, где цинк расположен в ядре порфирина и имеет один аксиальный пиридинный лиганд (табл. S2, S6). Атом цинка принимает квадратно-пирамидальную геометрию. Его координационная сфера состоит из четырех атомов азота порфиринового ядра (расстояния Zn--N(порфирин) составляют 2.055(7)--2.084(8) Å для CP_{4+2} и 2.055(5)--2.080(4) Å для CP_{6+2} , и атома азота пиридинового мотива кластера (расстояния Zn--N_{Py} сопоставимы с ранее сообщенными [1, 2] и равны 2.147(6) Å и 2.141(7) Å; 2.119(4) Å, 2.121(3) Å и 2.127(3) Å для каждого симметрично

независимого порфирина цинка(II) в **CP₄₊₂** и **CP₆₊₂**, соответственно. Вследствие аксиальной координации атом Zn выходит из N₄ плоскости порфирина в направлении пиридинского фрагмента: отклонение составляет 0.328(3) Å и 0.332(4) Å для **CP₄₊₂**, и 0.329(2), 0.343(2) и 0.286(2) Å для **CP₆₊₂** для каждого симметрично независимого **ZnTPP**, что сопоставимо с аналогичными значениями для гибридных комплексов на основе **ZnDTolP** [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Volostnykh M.V., Mikhaylov M.A., Sinelshchikova A.A. et al.* // Dalt. Trans. 2019. V. 48. № 5. P. 1835. <https://doi.org/10.1039/c8dt04452j>
2. *Tat F.T., Zhou Z., MacMahon S. et al.* // J. Org. Chem. 2004. V. 69. № 14. P. 4602. <https://doi.org/10.1021/jo049671w>