

Supporting Information

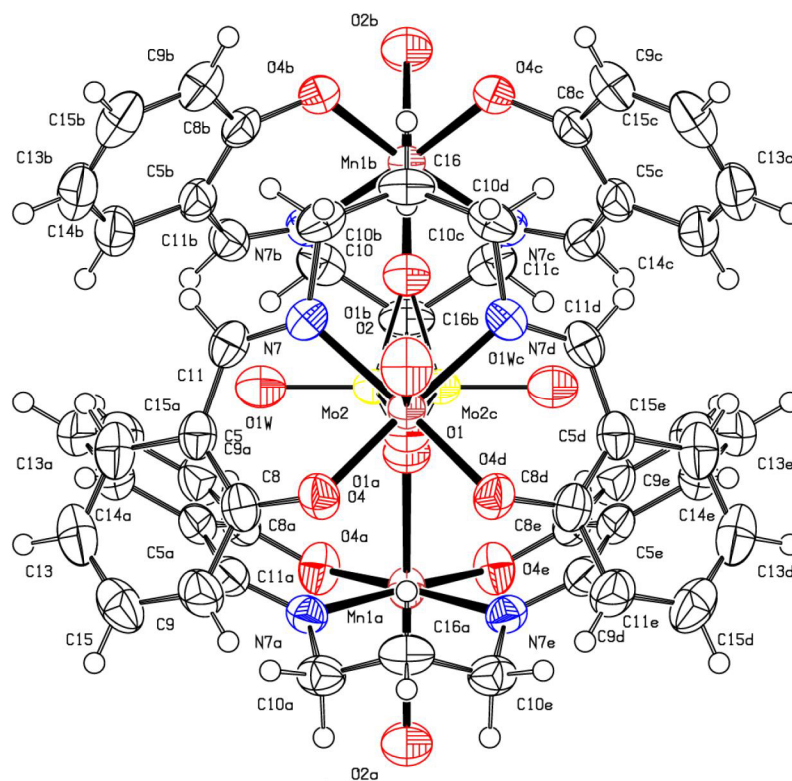


Figure S1. ORTEP drawing of cationic cluster of 1 with thermal ellipsoids at 50% probability.

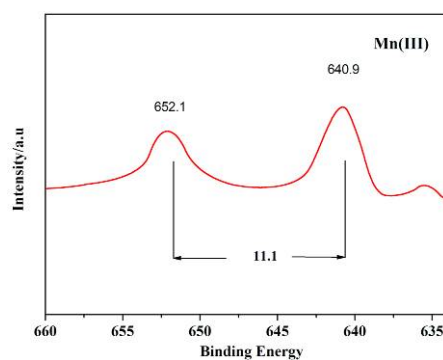


Figure S2. The XPS spectra of **1**.

Table S1. bond lengths of **1**.

Mo1—Mo1ⁱ	1.0015 (19)	C6—C5	1.413 (5)
Mo1—O2 ⁱⁱ	1.744 (3)	C1—C2	1.402 (5)
Mo1—O2	1.744 (3)	C2—H2	0.9300
Mo1—O2 ⁱ	1.744 (3)	C2—C3	1.386 (6)
Mo1—O4	1.665 (9)	C8—H8A	0.9700
Mn1—O2	2.147 (4)	C8—H8B	0.9700
Mn1—O3	2.384 (4)	C8—C9	1.513 (5)

Mn1—O1	1.880 (2)	C7—H7	0.9300
Mn1—O1 ⁱⁱⁱ	1.880 (2)	C4—H4	0.9300
Mn1—N1 ⁱⁱⁱ	2.023 (3)	C4—C5	1.364 (6)
Mn1—N1	2.023 (3)	C4—C3	1.377 (7)
O1—C1	1.340 (4)	C5—H5	0.9300
N1—C8	1.486 (5)	C3—H3	0.9300
N1—C7	1.286 (4)	C9—H9A	0.9700
C6—C1	1.396 (5)	C9—H9B	0.9700
C6—C7	1.448 (5)		

Symmetry code: i: $-x + y - 1, -x - 1, -z + 1/2$; ii: $-y - 1, x - y, z$; iii: $x, y, -z + 1/2$

Table S2. angles in 1.

Mo1ⁱ—Mo1—O2	73.31 (4)	C1—C6—C5	119.4 (4)
Mo1 ⁱ —Mo1—O2 ⁱ	73.31 (4)	C5—C6—C7	117.9 (3)
Mo1 ⁱ —Mo1—O2 ⁱⁱ	73.32 (4)	O1—C1—C6	121.8 (3)
Mo1 ⁱ —Mo1—O4	180.0	O1—C1—C2	119.3 (3)
O2 ⁱⁱ —Mo1—O2 ⁱ	112.11 (4)	C6—C1—C2	118.8 (3)
O2—Mo1—O2 ⁱ	112.11 (4)	C1—C2—H2	119.9
O2—Mo1—O2 ⁱⁱ	112.11 (4)	C3—C2—C1	120.1 (4)
O4—Mo1—O2 ⁱ	106.69 (4)	C3—C2—H2	119.9
O4—Mo1—O2	106.69 (4)	N1—C8—H8A	109.0
O4—Mo1—O2 ⁱⁱ	106.69 (5)	N1—C8—H8B	109.0
O2—Mn1—O3	173.63 (14)	N1—C8—C9	112.8 (3)
O1 ⁱⁱⁱ —Mn1—O2	96.25 (11)	H8A—C8—H8B	107.8
O1—Mn1—O2	96.25 (11)	C9—C8—H8A	109.0
O1—Mn1—O3	88.34 (12)	C9—C8—H8B	109.0
O1 ⁱⁱⁱ —Mn1—O3	88.34 (12)	N1—C7—C6	125.9 (3)
O1—Mn1—O1 ⁱⁱⁱ	87.37 (15)	N1—C7—H7	117.1
O1 ⁱⁱⁱ —Mn1—N1 ⁱⁱⁱ	89.21 (11)	C6—C7—H7	117.1
O1—Mn1—N1 ⁱⁱⁱ	175.55 (11)	C5—C4—H4	120.3
O1—Mn1—N1	89.21 (11)	C5—C4—C3	119.3 (4)
O1 ⁱⁱⁱ —Mn1—N1	175.55 (11)	C3—C4—H4	120.3
N1—Mn1—O2	86.94 (10)	C6—C5—H5	119.4
N1 ⁱⁱⁱ —Mn1—O2	86.94 (10)	C4—C5—C6	121.1 (4)
N1 ⁱⁱⁱ —Mn1—O3	88.72 (11)	C4—C5—H5	119.4
N1—Mn1—O3	88.72 (11)	C2—C3—H3	119.4
N1—Mn1—N1 ⁱⁱⁱ	94.06 (17)	C4—C3—C2	121.2 (4)
Mo1—O2—Mo1 ⁱ	33.37 (9)	C4—C3—H3	119.4
Mo1 ⁱ —O2—Mn1	143.33 (17)	C8—C9—C8 ⁱⁱⁱ	114.1 (4)
Mo1—O2—Mn1	143.34 (17)	C8—C9—H9A	108.7
C1—O1—Mn1	124.9 (2)	C8 ⁱⁱⁱ —C9—H9A	108.7
C8—N1—Mn1	121.5 (2)	C8—C9—H9B	108.7
C7—N1—Mn1	121.4 (2)	C8 ⁱⁱⁱ —C9—H9B	108.7
C7—N1—C8	117.1 (3)	H9A—C9—H9B	107.6
C1—C6—C7	122.4 (3)		

Symmetry code: i: $-x + y - 1, -x - 1, -z + 1/2$; ii: $-y - 1, x - y, z$; iii: $x, y, -z + 1/2$