

C36 0.0454(15) 0.0597(17) 0.0529(17) 0.0085(15) 0.0113(13) -0.0047(14)
 C41 0.0626(14) 0.0464(14) 0.0429(13) -0.0025(11) 0.0370(11) -0.0043(13)
 C42 0.0566(14) 0.0479(15) 0.0294(12) 0.0013(11) 0.0218(10) -0.0054(13)
 C43 0.0553(16) 0.0583(17) 0.0588(16) 0.0169(14) 0.0251(13) -0.0017(15)
 C44 0.0704(19) 0.0712(19) 0.0590(18) 0.0206(16) 0.0158(15) -0.0198(17)
 C45 0.107(2) 0.0524(18) 0.0578(18) 0.0088(15) 0.0314(17) -0.0161(18)
 C46 0.089(2) 0.081(2) 0.0568(17) 0.0240(16) 0.0359(15) 0.0187(19)
 C47 0.0655(16) 0.0559(16) 0.0445(15) 0.0114(13) 0.0274(12) -0.0089(15)
 C51 0.0677(15) 0.0314(12) 0.0391(13) -0.0053(11) 0.0279(12) -0.0026(12)
 C52 0.112(2) 0.077(2) 0.0418(16) -0.0087(15) 0.0345(16) -0.0354(19)
 C53 0.0515(14) 0.0348(13) 0.0501(15) -0.0038(12) 0.0235(12) -0.0017(12)
 C54 0.0746(17) 0.0391(15) 0.102(2) 0.0155(14) 0.0519(15) 0.0224(14)
 C11 0.0997(6) 0.0995(7) 0.1231(7) 0.0117(6) 0.0589(5) -0.0217(6)
 O11A 0.073(3) 0.164(5) 0.111(4) 0.035(4) 0.038(3) -0.006(4)
 O12A 0.217(9) 0.073(4) 0.412(14) 0.068(7) 0.077(10) 0.053(5)
 O13A 0.349(9) 0.151(6) 0.198(6) -0.025(5) 0.173(6) 0.065(7)
 O14A 0.099(4) 0.404(14) 0.236(7) 0.017(9) 0.098(4) -0.078(7)
 O11B 0.129(4) 0.116(4) 0.118(4) 0.047(3) 0.008(3) -0.010(3)
 O12B 0.317(10) 0.127(5) 0.097(4) -0.003(4) -0.004(6) -0.027(6)
 O13B 0.131(4) 0.386(12) 0.220(6) 0.028(7) 0.099(4) -0.092(6)
 O14B 0.138(4) 0.081(3) 0.104(3) 0.025(2) 0.057(3) -0.024(3)
 C12 0.0673(4) 0.0620(4) 0.0672(4) -0.0148(4) 0.0368(3) -0.0170(4)
 O21 0.1137(18) 0.1160(17) 0.1261(19) 0.0294(16) 0.0336(15) -0.0548(16)
 O22A 0.181(4) 0.167(5) 0.173(4) -0.052(4) 0.098(4) 0.060(4)
 O23A 0.136(4) 0.093(3) 0.037(2) -0.015(2) 0.020(2) -0.010(3)
 O24A 0.056(3) 0.124(4) 0.142(4) 0.004(3) 0.003(3) -0.040(3)
 O22B 0.233(6) 0.125(4) 0.138(4) -0.103(3) 0.105(4) -0.101(4)
 O23B 0.088(4) 0.182(7) 0.168(6) 0.075(5) 0.036(4) 0.032(4)
 O24B 0.101(3) 0.127(4) 0.141(4) -0.019(3) 0.084(3) 0.008(3)
 O3 0.143(2) 0.112(2) 0.1127(18) 0.0243(16) 0.0496(17) -0.0014(18)

_geom_special_details

;

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
 are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
 into account individually in the estimation of esds in distances, angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only
 used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic)

treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

;

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

_geom_bond_distance

_geom_bond_site_symmetry_2

_geom_bond_publ_flag

Mn1 O1 1.8727(14) . ?

Mn1 O52 1.9609(16) . ?

Mn1 N11 2.0503(19) . ?

Mn1 O54 2.0569(16) . ?

Mn1 N1 2.130(2) . ?

Mn1 N21 2.2207(19) . ?

Mn2 O53 2.0955(16) . ?

Mn2 O51 2.1302(15) . ?

Mn2 O2 2.143(2) . ?

Mn2 N31 2.2369(18) . ?

Mn2 O1 2.2448(16) . ?

Mn2 N2 2.3528(18) . ?

O1 C1 1.374(3) . ?

O51 C51 1.222(3) . ?

O52 C51 1.285(3) . ?

O53 C53 1.238(3) . ?

O54 C53 1.260(3) . ?

N1 C21 1.492(3) . ?

N1 C11 1.492(3) . ?

N1 C7 1.498(3) . ?

N2 C31 1.484(3) . ?

N2 C8 1.483(3) . ?

N2 C41 1.503(3) . ?

N11 C16 1.327(3) . ?

N11 C12 1.350(3) . ?

N21 C22 1.334(3) . ?

N21 C26 1.340(3) . ?

N31 C36 1.338(3) . ?

N31 C32 1.347(3) . ?

C1 C6 1.385(3) . ?
 C1 C2 1.394(3) . ?
 C2 C3 1.377(3) . ?
 C2 C7 1.510(3) . ?
 C3 C4 1.376(4) . ?
 C4 C5 1.384(4) . ?
 C4 C9 1.513(4) . ?
 C5 C6 1.382(3) . ?
 C6 C8 1.499(3) . ?
 C11 C12 1.490(3) . ?
 C12 C13 1.375(4) . ?
 C13 C14 1.376(4) . ?
 C14 C15 1.365(5) . ?
 C15 C16 1.375(4) . ?
 C21 C22 1.491(3) . ?
 C22 C23 1.373(3) . ?
 C23 C24 1.365(4) . ?
 C24 C25 1.346(4) . ?
 C25 C26 1.368(4) . ?
 C31 C32 1.499(3) . ?
 C32 C33 1.366(3) . ?
 C33 C34 1.370(4) . ?
 C34 C35 1.375(4) . ?
 C35 C36 1.351(4) . ?
 C41 C42 1.512(3) . ?
 C42 C43 1.369(4) . ?
 C42 C47 1.377(4) . ?
 C43 C44 1.377(4) . ?
 C44 C45 1.357(4) . ?
 C45 C46 1.381(5) . ?
 C46 C47 1.378(4) . ?
 C51 C52 1.501(4) . ?
 C53 C54 1.496(3) . ?
 C11 O13B 1.238(8) . ?
 C11 O14A 1.234(9) . ?
 C11 O12A 1.257(7) . ?
 C11 O12B 1.347(7) . ?
 C11 O14B 1.376(5) . ?

C11 O13A 1.465(8) . ?
C11 O11B 1.542(5) . ?
C11 O11A 1.542(5) . ?
C12 O22A 1.337(6) . ?
C12 O24B 1.352(6) . ?
C12 O22B 1.366(5) . ?
C12 O23A 1.372(4) . ?
C12 O21 1.416(3) . ?
C12 O24A 1.419(4) . ?
C12 O23B 1.447(6) . ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle_publ_flag

O1 Mn1 O52 97.72(6) . . ?
O1 Mn1 N11 170.52(7) . . ?
O52 Mn1 N11 90.59(7) . . ?
O1 Mn1 O54 93.61(6) . . ?
O52 Mn1 O54 99.97(7) . . ?
N11 Mn1 O54 80.41(7) . . ?
O1 Mn1 N1 93.75(7) . . ?
O52 Mn1 N1 163.09(7) . . ?
N11 Mn1 N1 79.18(8) . . ?
O54 Mn1 N1 91.63(7) . . ?
O1 Mn1 N21 87.48(7) . . ?
O52 Mn1 N21 89.82(7) . . ?
N11 Mn1 N21 97.13(7) . . ?
O54 Mn1 N21 169.90(8) . . ?
N1 Mn1 N21 78.27(7) . . ?
O53 Mn2 O51 98.80(7) . . ?
O53 Mn2 O2 91.06(8) . . ?
O51 Mn2 O2 87.15(7) . . ?
O53 Mn2 N31 92.98(7) . . ?

O51 Mn2 N31 165.92(7) . . ?
O2 Mn2 N31 100.39(7) . . ?
O53 Mn2 O1 92.38(7) . . ?
O51 Mn2 O1 85.55(6) . . ?
O2 Mn2 O1 172.33(6) . . ?
N31 Mn2 O1 86.28(6) . . ?
O53 Mn2 N2 168.25(7) . . ?
O51 Mn2 N2 92.29(6) . . ?
O2 Mn2 N2 93.38(7) . . ?
N31 Mn2 N2 75.52(6) . . ?
O1 Mn2 N2 84.58(6) . . ?
C1 O1 Mn1 123.65(14) . . ?
C1 O1 Mn2 120.25(13) . . ?
Mn1 O1 Mn2 115.59(7) . . ?
C51 O51 Mn2 136.57(17) . . ?
C51 O52 Mn1 133.27(14) . . ?
C53 O53 Mn2 133.77(17) . . ?
C53 O54 Mn1 136.63(16) . . ?
C21 N1 C11 109.9(2) . . ?
C21 N1 C7 111.03(19) . . ?
C11 N1 C7 110.76(17) . . ?
C21 N1 Mn1 111.77(14) . . ?
C11 N1 Mn1 104.56(16) . . ?
C7 N1 Mn1 108.65(15) . . ?
C31 N2 C8 111.83(18) . . ?
C31 N2 C41 111.26(19) . . ?
C8 N2 C41 108.80(17) . . ?
C31 N2 Mn2 105.21(12) . . ?
C8 N2 Mn2 111.39(13) . . ?
C41 N2 Mn2 108.28(13) . . ?
C16 N11 C12 119.1(2) . . ?
C16 N11 Mn1 125.52(19) . . ?
C12 N11 Mn1 114.47(15) . . ?
C22 N21 C26 118.0(2) . . ?
C22 N21 Mn1 114.18(14) . . ?
C26 N21 Mn1 126.62(18) . . ?
C36 N31 C32 117.8(2) . . ?
C36 N31 Mn2 123.23(16) . . ?

C32 N31 Mn2 115.80(14) . . ?
O1 C1 C6 118.7(2) . . ?
O1 C1 C2 120.3(2) . . ?
C6 C1 C2 121.0(2) . . ?
C3 C2 C1 118.8(2) . . ?
C3 C2 C7 121.5(2) . . ?
C1 C2 C7 119.7(2) . . ?
C2 C3 C4 122.1(2) . . ?
C3 C4 C5 117.3(2) . . ?
C3 C4 C9 121.0(3) . . ?
C5 C4 C9 121.7(2) . . ?
C6 C5 C4 123.1(2) . . ?
C5 C6 C1 117.6(2) . . ?
C5 C6 C8 120.8(2) . . ?
C1 C6 C8 121.6(2) . . ?
N1 C7 C2 112.25(18) . . ?
N2 C8 C6 115.46(18) . . ?
C12 C11 N1 110.10(19) . . ?
N11 C12 C13 120.7(2) . . ?
N11 C12 C11 115.6(2) . . ?
C13 C12 C11 123.5(3) . . ?
C12 C13 C14 119.4(3) . . ?
C15 C14 C13 119.5(3) . . ?
C14 C15 C16 118.5(3) . . ?
N11 C16 C15 122.6(3) . . ?
C22 C21 N1 113.3(2) . . ?
N21 C22 C23 122.1(2) . . ?
N21 C22 C21 116.7(2) . . ?
C23 C22 C21 121.1(2) . . ?
C24 C23 C22 118.5(3) . . ?
C25 C24 C23 120.2(3) . . ?
C24 C25 C26 118.8(3) . . ?
N21 C26 C25 122.3(3) . . ?
N2 C31 C32 112.39(19) . . ?
N31 C32 C33 121.5(2) . . ?
N31 C32 C31 115.9(2) . . ?
C33 C32 C31 122.6(2) . . ?
C32 C33 C34 119.9(3) . . ?

C33 C34 C35 118.4(3) . . ?
C36 C35 C34 119.3(3) . . ?
N31 C36 C35 123.1(3) . . ?
N2 C41 C42 116.2(2) . . ?
C43 C42 C47 118.4(2) . . ?
C43 C42 C41 120.7(2) . . ?
C47 C42 C41 120.8(2) . . ?
C42 C43 C44 121.6(3) . . ?
C45 C44 C43 119.8(3) . . ?
C44 C45 C46 119.5(3) . . ?
C47 C46 C45 120.4(3) . . ?
C46 C47 C42 120.2(3) . . ?
O51 C51 O52 125.3(2) . . ?
O51 C51 C52 119.6(3) . . ?
O52 C51 C52 115.1(2) . . ?
O53 C53 O54 124.7(2) . . ?
O53 C53 C54 118.4(2) . . ?
O54 C53 C54 116.9(2) . . ?
O13B C11 O14A 158.2(7) . . ?
O13B C11 O12A 80.3(7) . . ?
O14A C11 O12A 119.9(8) . . ?
O13B C11 O12B 119.5(6) . . ?
O14A C11 O12B 80.4(7) . . ?
O12A C11 O12B 59.8(6) . . ?
O13B C11 O14B 123.7(6) . . ?
O14A C11 O14B 35.9(6) . . ?
O12A C11 O14B 155.8(7) . . ?
O12B C11 O14B 104.8(4) . . ?
O13B C11 O13A 44.8(6) . . ?
O14A C11 O13A 114.4(7) . . ?
O12A C11 O13A 114.2(8) . . ?
O12B C11 O13A 163.5(6) . . ?
O14B C11 O13A 85.6(5) . . ?
O13B C11 O11B 98.5(4) . . ?
O14A C11 O11B 83.5(5) . . ?
O12A C11 O11B 67.3(5) . . ?
O12B C11 O11B 104.3(4) . . ?
O14B C11 O11B 102.4(3) . . ?

O13A Cl1 O11B 85.4(4) . . ?
O13B Cl1 O11A 74.2(4) . . ?
O14A Cl1 O11A 107.9(5) . . ?
O12A Cl1 O11A 99.0(5) . . ?
O12B Cl1 O11A 70.1(4) . . ?
O14B Cl1 O11A 91.9(3) . . ?
O13A Cl1 O11A 97.2(4) . . ?
O11B Cl1 O11A 165.7(3) . . ?
O22A Cl2 O24B 146.2(4) . . ?
O22A Cl2 O22B 46.0(4) . . ?
O24B Cl2 O22B 112.5(4) . . ?
O22A Cl2 O23A 108.6(3) . . ?
O24B Cl2 O23A 64.5(3) . . ?
O22B Cl2 O23A 132.9(3) . . ?
O22A Cl2 O21 106.2(3) . . ?
O24B Cl2 O21 106.9(3) . . ?
O22B Cl2 O21 113.0(3) . . ?
O23A Cl2 O21 112.3(2) . . ?
O22A Cl2 O24A 111.1(3) . . ?
O24B Cl2 O24A 51.1(3) . . ?
O22B Cl2 O24A 65.8(4) . . ?
O23A Cl2 O24A 110.9(3) . . ?
O21 Cl2 O24A 107.8(2) . . ?
O22A Cl2 O23B 66.5(4) . . ?
O24B Cl2 O23B 109.4(4) . . ?
O22B Cl2 O23B 107.4(4) . . ?
O23A Cl2 O23B 45.8(4) . . ?
O21 Cl2 O23B 107.5(3) . . ?
O24A Cl2 O23B 143.6(4) . . ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.831
_diffn_reflns_theta_full 29.14
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.831
_refine_diff_density_max 0.345
_refine_diff_density_min -0.274
_refine_diff_density_rms 0.064

Figure S1: First derivative of spectrum e in figure 4.

