

## SUPPORTING INFORMATION

### NEW MIXED-VALENCE DISK-LIKE [Co<sub>7</sub>] CLUSTERS WITH AMINOALCOHOL LIGANDS

Adrian Alexandru APOSTOL,<sup>a,b</sup> Georgiana VASILE<sup>a</sup>, Teodora MOCANU,<sup>a,c</sup>

Catalin MAXIM,<sup>a</sup> Violeta TUDOR<sup>a,\*</sup> and Marius ANDRUH<sup>a,\*</sup>

Table S1. BVS calculations for compound **3**

Atoms		Distance (Å)	r' <sub>0</sub>	S <sub>ij</sub>	Valence
Co 1	O 13	2.104	1.727	0.36098498	2.26
Co 1	O 15	2.089	1.727	0.37592021	
Co 1	O 9	2.075	1.727	0.39041674	
Co 1	O 11	2.094	1.727	0.37087437	
Co 1	O 8	2.100	1.727	0.36490869	
Co 1	O 16	2.071	1.727	0.39466036	
Co 2	O 13	2.163	1.727	0.30777743	2.24
Co 2	O 12	1.982	1.727	0.50198292	
Co 2	O 16	2.186	1.727	0.28922784	
Co 2	O 17	1.978	1.727	0.50743920	
Co 2	O 2	2.116	1.727	0.34946518	
Co 2	O 1	2.191	1.727	0.28534564	
Co 3	O 13	1.908	1.687	0.55029692	3.46
Co 3	O 15	1.909	1.687	0.54881164	
Co 3	O 12	1.889	1.687	0.57929354	
Co 3	O 14	1.881	1.687	0.59195520	
Co 3	N 3	1.944	1.759	0.60653066	
Co 3	N 2	1.960	1.759	0.58086132	
Co 4	O 11	1.915	1.687	0.53998376	3.51
Co 4	O 16	1.911	1.687	0.54585309	
Co 4	O 17	1.875	1.687	0.60163273	
Co 4	O 21	1.876	1.687	0.60000889	
Co 4	N 4	1.943	1.759	0.60817215	
Co 4	N 10	1.941	1.759	0.61146847	

Co 5	O 9	1.906	1.687	0.55327955	3.49
Co 5	O 8	1.911	1.687	0.54585309	
Co 5	O 10	1.879	1.687	0.59516362	
Co 5	O 7	1.881	1.687	0.59195520	
Co 5	N 5	1.940	1.759	0.61312332	
Co 5	N 6	1.952	1.759	0.59355724	
Co 6	O 15	2.173	1.727	0.29957053	2.24
Co 6	O 9	2.186	1.727	0.28922784	
Co 6	O 14	1.983	1.727	0.50062804	
Co 6	O 7	1.975	1.727	0.51157030	
Co 6	O 5	2.133	1.727	0.33377195	
Co 6	O 6	2.164	1.727	0.30694672	
Co 7	O 11	2.183	1.727	0.29158246	2.17
Co 7	O 8	2.189	1.727	0.28689223	
Co 7	O 21	1.983	1.727	0.50062804	
Co 7	O 10	1.993	1.727	0.48727876	
Co 7	O 3	2.141	1.727	0.32663272	
Co 7	O 4	2.203	1.727	0.27623965	

Table S2. Selected bond lengths (Å) in compounds **(1)**, **(2)**, and **(4)**.

<b>(1)</b>			<b>(2)</b>			<b>(4)</b>		
Co1	O4	1.917(9)	Co1	O1	1.917(3)	Co1	O9A	2.154(8)
Co1	O6	1.925(9)	Co1	O2	1.867(3)	Co1	O11A	2.119(9)
Co1	O11	1.886(11)	Co1	N1	2.038(4)	Co1	O6A	2.100(9)
Co1	N1	2.001(11)	Co2	O1	2.085(2)	Co1	O3A	2.057(9)
Co1	O20	1.882(11)	Co3	O1	2.199(3)	Co1	O4A	2.044(9)
Co1	N6	1.999(14)	Co3	O2	1.989(3)	Co1	O33	2.077(9)
Co2	O5	1.887(9)	Co3	O3	2.124(3)	Co2	O11A	2.203(9)
Co2	O7	1.929(10)	Co2	Co3	3.160	Co2	O4A	2.100(10)
Co2	O8	1.919(9)	Co2	Co1	3.054	Co2	O5A	2.022(8)
Co2	O16	1.872(9)				Co2	O1A	1.983(10)
Co2	N4	1.997(14)				Co2	O5	2.107(9)

Co2	N5	1.994(16)	Co2	O3	2.184(11)
Co3	O4	2.223(10)	Co3	O6A	2.207(9)
Co3	O9	1.981(9)	Co3	O33	2.141(9)
Co3	O12	2.209(9)	Co3	O8A	2.014(10)
Co3	O20	2.004(9)	Co3	O7A	2.003(9)
Co3	O21	2.161(10)	Co3	O99	2.112(13)
Co3	O23	2.129(11)	Co3	O13A	2.148(12)
Co4	O4	2.085(9)	Co4	O11A	1.917(8)
Co4	O6	2.074(9)	Co4	O3A	1.906(10)
Co4	O7	2.097(9)	Co4	O12A	1.914(11)
Co4	O8	2.123(10)	Co4	O1A	1.884(9)
Co4	O12	2.128(11)	Co4	N7	1.987(14)
Co4	O13	2.083(9)	Co4	N2	1.979(14)
Co5	O7	2.208(10)	Co5	O9A	1.922(8)
Co5	O13	2.264(10)	Co5	O33	1.959(10)
Co5	O15	1.965(10)	Co5	O8A	1.875(9)
Co5	O16	2.007(10)	Co5	O10A	1.911(10)
Co5	O17	2.123(11)	Co5	N6	1.903(11)
Co5	O18	2.126(10)	Co5	N5	1.901(12)
Co6	O15	1.871(10)	Co6	O9A	2.199(8)
Co6	O9	1.902(9)	Co6	O3A	2.140(10)
Co6	O13	1.914(10)	Co6	O12A	1.948(11)
Co6	O12	1.909(10)	Co6	O10A	1.956(10)
Co6	N2	2.015(12)	Co6	O2	2.193(12)
Co6	N3	2.002(14)	Co6	O1	2.111(13)
Co7	O5	1.972(9)	Co7	O6A	1.961(8)
Co7	O6	2.250(9)	Co7	O4A	1.907(9)
Co7	O8	2.195(9)	Co7	O5A	1.900(10)
Co7	O10	2.168(11)	Co7	O7A	1.848(11)
Co7	O11	2.007(10)	Co7	N4	1.901(13)
Co7	O22	2.142(13)	Co7	N3	1.981(15)
Co4	Co1	3.188	Co1-	Co2	3.137
Co4	Co2	3.065	Co1	Co3	3.172
Co4	Co3	3.057	Co1	Co4	3.012

Co4	Co5	3.196	Co1	Co5	2.998
Co4	Co6	3.062	Co1	Co6	3.189
Co4	Co7	3.163	Co1	Co7	2.982

Table S3. Selected angles (°) in (1), (2), and (4).

<b>1</b>				<b>2</b>				<b>4</b>			
O6	Co1	O4	84.2(4)	O1	Co1	O1	84.7(2)	O6A	Co1	O9A	95.6(3)
O11	Co1	O4	96.0(4)	O1	Co1	N1	163.2(2)	O6A	Co1	O11A	97.4(3)
O11	Co1	O6	84.0(4)	O1	Co1	N1	86.1(2)	O3A	Co1	O9A	85.0(4)
N1	Co1	O4	162.3(5)	O2	Co1	O1	82.1(1)	O3A	Co1	O11A	77.9(3)
N1	Co1	O6	86.3(4)	O2	Co1	O1	96.8(1)	O3A	Co1	O6A	175.3(4)
N1	Co1	O11	97.8(5)	O2	Co1	O2	178.5(2)	O4A	Co1	Co5	138.6(3)
O20	Co1	O4	82.5(4)	O2	Co1	N1	95.7(2)	O4A	Co1	Co7	39.3(3)
O20	Co1	O6	93.4(4)	O2	Co1	N1	85.1(2)	O4A	Co1	O9A	175.7(3)
O20	Co1	O11	177.2(4)	N1	Co1	N1	105.9(2)	O4A	Co1	O11A	86.0(4)
O20	Co1	N1	83.3(5)	O1	Co2	O1	98.0(2)	O4A	Co1	O6A	80.2(3)
N6	Co1	O4	87.0(5)	O1	Co2	O1	87.7(2)	O4A	Co1	O3A	99.3(4)
N6	Co1	O6	164.9(5)	O1	Co2	O1	172.6(2)	O33	Co1	O11A	175.2(4)
N6	Co1	O11	84.7(5)	O1	Co2	O1	76.5(2)	O33	Co1	O6A	85.9(3)
N6	Co1	N1	105.2(5)	O1	Co3	O1	82.1(2)	O33	Co1	O3A	98.8(4)
N6	Co1	O20	97.6(5)	O2	Co3	O1	98.3(2)	O33	Co1	O4A	98.1(4)
O7	Co2	O5	96.8(4)	O2	Co3	O1	72.6(1)	O4A	Co2	O11A	82.6(3)
O8	Co2	O5	82.0(4)	O2	Co3	O2	168.3(2)	O5A	Co2	O11A	93.5(3)
O8	Co2	O7	85.8(4)	O2	Co3	O3	91.7(1)	O5A	Co2	O4A	74.5(4)
O16	Co2	O5	178.5(4)	O2	Co3	O3	98.3(1)	O1A	Co2	O11A	73.4(3)
O16	Co2	O7	82.6(4)	O3	Co3	O1	161.6(2)	O1A	Co2	O4A	98.2(4)
O16	Co2	O8	96.6(4)	O3	Co3	O1	110.1(2)	O1A	Co2	O5A	165.9(4)
N4	Co2	O5	85.3(5)	O3	Co3	O3	61.7(2)	O5	Co2	O11A	162.1(4)
N4	Co2	O7	86.2(5)	Co2	O1	Co3	95.0(1)	O5	Co2	O4A	108.8(4)
N4	Co2	O8	164.1(5)					O5	Co2	O5A	102.8(4)
N4	Co2	O16	96.0(5)					O5	Co2	O1A	91.0(4)
N5	Co2	O5	96.8(5)					O3	Co2	O11A	110.3(3)
N5	Co2	O7	162.9(5)					O3	Co2	O4A	162.1(4)
N5	Co2	O8	85.9(5)					O3	Co2	O5A	91.8(4)

N5	Co2	O16	83.6(5)
N5	Co2	N4	105.2(6)
O9	Co3	O4	98.2(4)
O12	Co3	O4	82.3(4)
O12	Co3	O9	72.8(4)
O20	Co3	O4	72.4(4)
O20	Co3	O9	167.3(4)
O20	Co3	O12	97.1(4)
O21	Co3	O4	110.8(4)
O21	Co3	O9	96.2(4)
O21	Co3	O12	164.3(4)
O21	Co3	O20	95.1(4)
O23	Co3	O4	159.4(4)
O23	Co3	O9	101.3(4)
O23	Co3	O12	109.8(4)
O23	Co3	O20	89.2(4)
O23	Co3	O21	60.6(4)
O6	Co4	O4	76.5(3)
O7	Co4	O4	172.6(4)
O7	Co4	O6	97.6(4)
O8	Co4	O4	98.5(4)
O8	Co4	O6	89.0(3)
O8	Co4	O7	76.7(4)
O12	Co4	O4	87.6(4)
O12	Co4	O6	97.5(4)
O12	Co4	O7	97.7(4)
O12	Co4	O8	172.1(4)
O13	Co4	O4	96.8(4)
O13	Co4	O6	171.1(4)
O13	Co4	O7	89.5(4)
O13	Co4	O8	98.0(4)
O13	Co4	O12	76.1(4)
O13	Co5	O7	82.3(3)
O15	Co5	O7	98.3(4)

O3	Co2	O1A	97.5(4)
O3	Co2	O5	62.4(4)
O33	Co3	O6A	81.7(3)
O8A	Co3	O6A	90.7(3)
O8A	Co3	O33	74.3(4)
O7A	Co3	O6A	74.9(4)
O7A	Co3	O33	94.3(4)
O7A	Co3	O8A	162.9(4)
O99	Co3	O6A	108.4(5)
O99	Co3	O33	167.1(4)
O99	Co3	O8A	97.1(4)
O99	Co3	O7A	96.1(5)
O13A	Co3	O6A	167.7(5)
O13A	Co3	O33	109.0(5)
O13A	Co3	O8A	98.0(5)
O13A	Co3	O7A	97.7(5)
O13A	Co3	O99	62.1(6)
O3A	Co4	O11A	86.7(4)
O12A	Co4	O11A	96.5(4)
O12A	Co4	O3A	80.8(4)
O1A	Co4	O11A	82.5(4)
O1A	Co4	O3A	99.0(5)
O1A	Co4	O12A	179.0(4)
N7	Co4	O11A	87.5(4)
N7	Co4	O3A	164.4(5)
N7	Co4	O12A	85.4(5)
N7	Co4	O1A	94.6(5)
N2	Co4	O11A	167.1(6)
N2	Co4	O3A	89.5(6)
N2	Co4	O12A	95.1(6)
N2	Co4	O1A	85.9(6)
N2	Co4	N7	99.1(6)
O33	Co5	O9A	89.3(4)
O8A	Co5	O9A	94.0(4)

O15	Co5	O13	71.8(4)
O16	Co5	O7	72.9(4)
O16	Co5	O13	98.3(4)
O16	Co5	O15	167.8(4)
O17	Co5	O7	109.6(4)
O17	Co5	O13	161.4(4)
O17	Co5	O15	92.0(5)
O17	Co5	O16	98.9(5)
O18	Co5	O7	165.2(4)
O18	Co5	O13	109.6(4)
O18	Co5	O15	93.9(4)
O18	Co5	O16	96.1(4)
O18	Co5	O17	61.5(5)
O12	Co6	O9	81.7(4)
O13	Co6	O9	96.8(4)
O13	Co6	O12	85.5(4)
O15	Co6	O9	177.7(4)
O15	Co6	O12	96.1(4)
O15	Co6	O13	82.3(4)
N2	Co6	O9	85.0(4)
N2	Co6	O12	163.3(5)
N2	Co6	O13	86.2(5)
N2	Co6	O15	97.1(5)
N3	Co6	O9	94.0(5)
N3	Co6	O12	86.6(5)
N3	Co6	O13	165.6(5)
N3	Co6	O15	86.6(5)
N3	Co6	N2	104.3(5)
O6	Co7	O5	97.9(4)
O8	Co7	O5	73.4(3)
O8	Co7	O6	82.9(3)
O10	Co7	O5	95.9(4)
O10	Co7	O6	108.6(4)
O10	Co7	O8	165.6(4)

O8A	Co5	O33	81.8(4)
O10A	Co5	O9A	82.5(4)
O10A	Co5	O33	98.5(4)
O10A	Co5	O8A	176.6(4)
N6	Co5	O9A	86.2(4)
N6	Co5	O33	165.2(4)
N6	Co5	O8A	84.5(4)
N6	Co5	O10A	94.9(4)
N5	Co5	O9A	170.3(5)
N5	Co5	O33	88.6(4)
N5	Co5	O8A	95.1(5)
N5	Co5	O10A	88.4(5)
N5	Co5	N6	98.1(5)
O9A	Co6	O1	164.8(5)
O3A	Co6	O1	106.9(5)
O3A	Co6	O9A	81.9(3)
O12A	Co6	O1	99.0(6)
O12A	Co6	O9A	95.3(4)
O12A	Co6	O3A	74.4(4)
O10A	Co6	O1	91.8(5)
O10A	Co6	O9A	74.7(3)
O10A	Co6	O3A	96.4(4)
O10A	Co6	O12A	167.5(4)
O2	Co6	O1	62.8(5)
O2	Co6	O9A	110.4(4)
O2	Co6	O3A	165.8(4)
O2	Co6	O12A	96.9(4)
O2	Co6	O10A	93.7(5)
O4A	Co7	O6A	87.3(4)
O5A	Co7	O6A	93.5(4)
O5A	Co7	O4A	81.9(4)
O7A	Co7	O6A	84.6(4)
O7A	Co7	O4A	98.3(5)
O7A	Co7	O5A	178.0(4)

O11	Co7	O5	168.8(4)	N4	Co7	O6A	169.2(5)
O11	Co7	O6	73.4(4)	N4	Co7	O4A	90.6(5)
O11	Co7	O8	98.2(3)	N4	Co7	O5A	96.7(5)
O11	Co7	O10	93.6(4)	N4	Co7	O7A	85.2(5)
O22	Co7	O5	100.2(5)	N3	Co7	O6A	86.5(5)
O22	Co7	O6	160.4(4)	N3	Co7	O4A	164.9(5)
O22	Co7	O8	109.3(5)	N3	Co7	O5A	84.7(5)
O22	Co7	O10	62.3(5)	N3	Co7	O7A	94.8(6)
O22	Co7	O11	89.4(5)	N3	Co7	N4	97.9(6)
Co4	O12	Co3	94.6(4)	Co1	O11A	Co2	93.1(3)
Co4	O4	Co3	95.4(4)	Co1	O4A	Co2	98.4(4)
Co4	O6	Co7	94.0(4)	Co1	O6A	Co3	94.9(3)
Co4	O8	Co7	94.2(4)	Co1	O33	Co3	97.5(4)
Co4	O13	Co5	93.5(4)	Co1	O9A	Co6	94.2(3)
Co4	O7	Co5	94.8(4)	Co1	O3A	Co6	98.9(4)