

Complex tunnel structure of new $\text{La}_6(\text{Mo}_2\text{O}_7)(\text{MoO}_4)_8$: crystal growth from flux and high structural complexity

Marie Colmont, Bastien Leclercq, Olivier Mentré and Pascal Roussel

Table S1 Crystal data, measurement and structural refinement parameters of the studied $\text{La}_6(\text{Mo}_2\text{O}_7)(\text{MoO}_4)_8$.

$\text{La}_6(\text{Mo}_2\text{O}_7)(\text{MoO}_4)_8$	
Crystal data	
Crys. symmetry	monoclinic
space group	Cc
a (Å)	23.0800(8)
b (Å)	14.7146(5)
c (Å)	23.0257(7)
β (°)	116.5350(18)
V (Å ³)	6996.1(4)
Z	8
Dx (g/cm ³)	4.5891
μ (mm ⁻¹) (for λ K α =0.7107 Å)	10.711
Appearance	orange-red
Data collection	
$\lambda(\text{Mo K}\alpha)$ (Å)	0.71073
Scan mode	ω and ϕ
$\theta(\text{min-max})$ (°)	1.85–36.79
R(int) (%)	0.032
Recording reciprocal space	$-34 \leq h \leq 33$ $-21 \leq k \leq 21$ $-34 \leq l \leq 34$
Refinement	
Measured, independent obs.*refl.	12209
No. of Refined parameters	599
Refin. method,	F ²
Flack	0.47(5)
$ E^2-1 $	1.091
R1(F ²)(obs) / R1(F ²)(all)	0.0381/0.0369
wR2(F ²)(obs) /wR2(F ²)(all)	0.0663/0.0408
GOF(obs) / GOF(all)	1.11/1.21
$\Delta\rho_{\text{max}}/\Delta\rho_{\text{min}}$ (e Å ⁻³)	2.89/-2.25

Table S2 Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2$) for $\text{La}_6(\text{Mo}_2\text{O}_7)(\text{MoO}_4)_8$.

Atom	X	Y	Z	Ueq	Bvs
La1	0.3948	0.24238(9)	0.2481	0.0091(4)	3.15(4)
La2	0.54682(9)	0.23857(9)	0.08188(8)	0.0072(4)	3.36(5)
La3	0.54335(9)	0.25810(9)	0.58002(8)	0.0081(4)	3.26(4)
La4	0.19696(9)	0.25552(8)	0.44044(8)	0.0101(3)	3.18(4)
La5	0.30387(9)	0.51381(9)	0.70052(8)	0.0078(4)	3.38(4)
La6	0.39433(6)	0.26660(9)	0.75583(5)	0.0101(4)	3.01(4)
La7	0.80422(9)	0.50644(8)	0.70014(8)	0.0080(4)	3.32(4)
La8	0.64603(9)	0.49995(8)	0.85183(8)	0.0118(4)	2.91(4)
La9	0.70365(9)	0.24987(8)	0.42811(8)	0.0120(4)	3.01(4)
La10	0.45517(5)	0.48631(9)	0.02539(5)	0.0086(4)	2.93(4)
La11	0.45116(5)	0.00850(8)	0.53394(4)	0.0089(4)	3.11(4)
La12	0.65301(9)	0.00766(8)	0.84416(8)	0.0106(4)	3.23(4)
Mo1	0.26479(12)	0.00623(13)	0.51159(10)	0.0102(6)	6.19(13)
Mo2	0.73559(12)	0.24454(13)	0.12939(10)	0.0101(6)	6.05(14)
Mo3	0.27269(12)	0.51064(13)	0.51673(10)	0.0076(6)	6.35(13)
Mo4	0.73417(11)	0.25848(13)	0.61670(10)	0.0087(6)	5.99(13)
Mo5	0.45678(12)	0.50582(13)	0.71405(10)	0.0087(6)	5.97(14)
Mo6	0.30488(12)	0.62958(10)	0.86648(10)	0.0124(5)	5.86(11)
Mo7	0.39020(11)	0.25739(13)	0.56489(10)	0.0081(6)	5.98(14)
Mo8	0.53822(12)	0.37094(13)	0.92761(11)	0.0132(6)	5.93(11)
Mo9	0.45979(11)	0.00871(13)	0.72084(10)	0.0089(6)	6.06(14)
Mo10	0.52574(11)	-0.12410(12)	0.92996(10)	0.0113(5)	6.01(12)
Mo11	0.54330(12)	0.12487(10)	0.91626(10)	0.0134(5)	6.03(12)
Mo12	0.39400(11)	0.24469(13)	0.06597(10)	0.0074(6)	6.11(14)
Mo13	0.30940(11)	0.38402(12)	0.85568(10)	0.0100(5)	5.91(11)
Mo14	0.31891(12)	0.87985(13)	0.85084(11)	0.0156(6)	6.02(12)
Mo15	0.33460(13)	0.12647(10)	0.87059(10)	0.0172(6)	5.99(13)
Mo16	0.57876(12)	0.26096(13)	0.76592(10)	0.0093(6)	6.05(13)
Mo17	0.51213(13)	0.37729(10)	0.41079(10)	0.0184(6)	6.14(13)
Mo18	0.61302(12)	0.50368(13)	0.66016(11)	0.0095(5)	6.03(13)
Mo19	0.58341(12)	0.24335(13)	0.27250(10)	0.0089(6)	6.13(13)
Mo20	0.61723(12)	0.00871(13)	0.65798(11)	0.0089(5)	6.35(14)
O1	0.4413(6)	0.1642(8)	0.5717(6)	0.012(3)	
O2	0.4395(6)	0.3497(9)	0.5638(6)	0.013(3)	
O3	0.4456(7)	0.3351(9)	0.0716(6)	0.017(3)	
O4	0.4461(6)	0.1527(8)	0.0734(5)	0.007(2)	
O5	0.2285(6)	0.0915(8)	0.4527(6)	0.012(3)	
O6	0.7267(6)	0.2296(8)	0.5407(5)	0.015(3)	
O7	0.2661(7)	0.1229(9)	0.8828(6)	0.034(3)	
O8	0.3744(7)	0.2465(9)	0.1313(6)	0.017(3)	
O9	0.5312(8)	0.0033(10)	0.7917(7)	0.024(4)	
O10	0.2590(5)	0.0355(7)	0.5834(4)	0.010(2)	
O11	0.5257(6)	0.3565(8)	0.9995(5)	0.015(2)	
O12	0.5282(7)	0.5075(9)	0.7862(6)	0.018(3)	
O13	0.6569(7)	0.2654(9)	0.6152(6)	0.031(3)	
O14	0.5439(6)	0.1501(8)	0.9901(5)	0.026(3)	
O15	0.6884(7)	0.0120(9)	0.6512(6)	0.029(3)	
O16	0.2188(6)	0.5775(8)	0.4489(6)	0.013(3)	
O17	0.3734(7)	0.2584(8)	0.6315(6)	0.015(3)	
O18	0.5588(6)	-0.0676(8)	0.5998(5)	0.008(2)	
O19	0.4623(6)	-0.1680(8)	0.8617(5)	0.015(2)	
O20	0.5801(5)	0.2625(7)	0.9298(5)	0.017(2)	
O21	0.5775(7)	0.6087(10)	0.6351(6)	0.022(3)	
O22	0.3195(6)	0.7571(8)	0.8693(5)	0.027(3)	
O23	0.5595(6)	0.4287(8)	0.5962(5)	0.008(2)	
O24	0.5039(6)	0.2586(8)	0.2635(5)	0.020(3)	
O25	0.7844(6)	0.1855(9)	0.6810(6)	0.014(3)	
O26	0.2157(6)	-0.0896(8)	0.4705(5)	0.021(2)	
O27	0.7738(6)	0.3644(9)	0.6410(6)	0.018(3)	
O28	0.2187(6)	0.2255(8)	0.5514(6)	0.019(3)	
O29	0.5177(6)	-0.1211(8)	1.0047(5)	0.015(2)	
O30	0.2505(5)	0.3114(7)	0.8584(5)	0.017(2)	
O31	0.3799(5)	0.3918(7)	0.9281(5)	0.010(2)	

O32	0.3749(6)	0.5931(7)	0.9314(5)	0.014(2)
O33	0.5807(6)	0.1129(9)	0.6427(6)	0.019(3)
O34	0.3436(7)	-0.0069(8)	0.5290(6)	0.023(3)
O35	0.6302(5)	0.3373(7)	0.3137(5)	0.015(2)
O36	0.4679(6)	0.3617(8)	0.8572(5)	0.021(3)
O37	0.2689(6)	0.5441(8)	0.5880(5)	0.020(3)
O38	0.7856(6)	0.3221(9)	0.1917(6)	0.016(3)
O39	0.6051(6)	0.1506(8)	0.7820(6)	0.027(3)
O40	0.6376(6)	-0.0271(8)	0.7371(5)	0.019(3)
O41	0.3025(6)	0.6062(8)	0.7916(5)	0.021(2)
O42	0.5711(6)	0.2977(8)	0.6916(5)	0.017(3)
O43	0.3269(5)	0.0372(8)	0.8149(5)	0.021(2)
O44	0.6910(6)	0.5054(8)	0.6671(6)	0.022(3)
O45	0.4433(6)	0.3522(8)	0.3390(5)	0.024(3)
O46	0.4998(6)	0.4871(8)	0.4409(5)	0.024(3)
O47	0.5189(6)	0.2964(9)	0.4691(6)	0.033(3)
O48	0.3501(6)	0.5187(8)	0.5254(6)	0.022(3)
O49	0.5747(6)	0.2191(8)	0.1967(6)	0.022(3)
O50	0.2309(6)	0.6418(8)	0.8769(5)	0.021(2)
O51	0.4686(7)	0.5035(9)	0.6456(6)	0.016(3)
O52	0.5979(5)	0.4409(7)	0.9246(5)	0.019(2)
O53	0.4738(6)	0.1636(8)	0.8521(5)	0.020(2)
O54	0.7784(6)	0.1417(8)	0.1525(6)	0.014(3)
O55	0.3260(5)	0.8685(7)	0.7768(5)	0.010(2)
O56	0.5257(6)	-0.0026(8)	0.9148(5)	0.027(3)
O57	0.4698(7)	0.0143(9)	0.6517(6)	0.021(3)
O58	0.3471(6)	0.2320(7)	0.8397(5)	0.022(2)
O59	0.6209(6)	0.4794(8)	0.7388(5)	0.018(3)
O60	0.3211(7)	0.2510(9)	-0.0051(6)	0.015(3)
O61	0.5980(6)	-0.1698(8)	0.9405(5)	0.023(3)
O62	0.3214(6)	0.3933(8)	0.7845(5)	0.013(2)
O63	0.6235(6)	0.1555(8)	0.3316(6)	0.015(3)
O64	0.2463(6)	0.9219(8)	0.8407(5)	0.026(3)
O65	0.3164(7)	0.2445(8)	0.4948(6)	0.014(3)
O66	0.4091(6)	0.0991(8)	0.7249(5)	0.012(3)
O67	0.4986(7)	0.2667(10)	0.7596(6)	0.034(4)
O68	0.2454(6)	0.4001(8)	0.5038(5)	0.025(3)
O69	0.6174(6)	0.1088(8)	0.9104(5)	0.020(2)
O70	0.3816(6)	0.9186(8)	0.9231(5)	0.015(2)
O71	0.2702(6)	0.4913(8)	0.8572(5)	0.023(3)
O72	0.4018(6)	0.1035(8)	0.9447(5)	0.023(3)
O73	0.6328(6)	0.3286(8)	0.8343(5)	0.013(3)
O74	0.5814(6)	0.3735(8)	0.4017(5)	0.025(3)
O75	0.6614(7)	0.2288(9)	0.1336(6)	0.027(3)
O76	0.4055(6)	-0.0814(8)	0.7179(6)	0.012(3)
O77	0.4021(6)	0.4196(8)	0.7163(5)	0.008(2)
O78	0.4056(7)	0.5980(10)	0.7136(6)	0.023(3)

Table S3 Atomic displacement parameters ($\text{\AA}^2$) for $\text{La}_6(\text{Mo}_2\text{O}_7)(\text{MoO}_4)_8$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
La1	0.0081(5)	0.0089(5)	0.0092(5)	0.0004(4)	0.0028(4)	0.0010(4)
La2	0.0050(6)	0.0078(6)	0.0076(5)	0.0006(5)	0.0017(5)	0.0003(4)
La3	0.0054(6)	0.0098(6)	0.0080(5)	0.0003(5)	0.0021(5)	0.0003(4)
La4	0.0082(5)	0.0102(5)	0.0080(4)	-0.0020(4)	0.0001(4)	0.0000(3)
La5	0.0098(6)	0.0060(5)	0.0077(4)	-0.0002(5)	0.0040(5)	0.0005(4)
La6	0.0075(5)	0.0095(5)	0.0109(5)	-0.0016(4)	0.0020(4)	-0.0005(4)
La7	0.0089(6)	0.0079(6)	0.0072(4)	0.0002(5)	0.0036(5)	0.0004(4)
La8	0.0134(6)	0.0095(5)	0.0076(5)	0.0007(4)	0.0003(4)	0.0013(3)
La9	0.0108(6)	0.0102(5)	0.0096(5)	0.0011(4)	-0.0003(4)	-0.0011(4)
La10	0.0079(5)	0.0086(5)	0.0088(5)	-0.0010(4)	0.0032(4)	0.0006(4)
La11	0.0073(5)	0.0068(5)	0.0104(5)	-0.0001(4)	0.0019(4)	-0.0005(4)
La12	0.0081(5)	0.0087(5)	0.0107(5)	0.0000(4)	0.0003(4)	-0.0008(3)
Mo1	0.0126(9)	0.0080(9)	0.0090(7)	0.0019(7)	0.0038(7)	0.0002(6)
Mo2	0.0064(8)	0.0111(9)	0.0084(7)	-0.0002(6)	-0.0006(6)	-0.0011(6)
Mo3	0.0051(8)	0.0095(8)	0.0065(7)	0.0007(6)	0.0010(6)	-0.0004(6)

Mo4	0.0060(8)	0.0100(8)	0.0092(7)	-0.0009(6)	0.0026(6)	0.0014(5)
Mo5	0.0087(9)	0.0077(9)	0.0112(7)	0.0000(6)	0.0059(7)	0.0003(6)
Mo6	0.0125(7)	0.0167(8)	0.0076(6)	0.0036(6)	0.0041(6)	0.0014(5)
Mo7	0.0047(8)	0.0093(9)	0.0084(7)	-0.0005(6)	0.0011(6)	-0.0005(6)
Mo8	0.0158(9)	0.0143(8)	0.0068(7)	-0.0050(6)	0.0025(6)	-0.0003(5)
Mo9	0.0078(9)	0.0082(9)	0.0106(7)	-0.0009(6)	0.0041(7)	0.0004(6)
Mo10	0.0097(8)	0.0162(8)	0.0083(6)	-0.0012(6)	0.0042(6)	-0.0038(5)
Mo11	0.0144(8)	0.0177(8)	0.0067(6)	0.0018(6)	0.0034(6)	0.0010(5)
Mo12	0.0042(8)	0.0094(9)	0.0067(6)	0.0009(6)	0.0006(6)	0.0004(6)
Mo13	0.0083(8)	0.0127(7)	0.0098(7)	0.0032(6)	0.0047(6)	0.0020(5)
Mo14	0.0176(9)	0.0156(8)	0.0100(7)	0.0012(7)	0.0030(6)	-0.0007(6)
Mo15	0.0274(9)	0.0135(8)	0.0113(6)	0.0019(7)	0.0093(7)	0.0018(5)
Mo16	0.0110(8)	0.0093(9)	0.0074(7)	0.0003(7)	0.0038(7)	-0.0001(6)
Mo17	0.0333(10)	0.0131(8)	0.0096(6)	-0.0025(7)	0.0102(7)	-0.0013(5)
Mo18	0.0075(8)	0.0079(8)	0.0100(6)	0.0009(6)	0.0011(6)	0.0004(5)
Mo19	0.0066(8)	0.0100(9)	0.0073(6)	-0.0011(6)	0.0007(6)	-0.0005(6)
Mo20	0.0055(8)	0.0075(8)	0.0112(6)	0.0001(6)	0.0015(6)	0.0001(5)