

Electronic Supplementary Information

A novel blue luminescent material $\text{Na}_2[\text{Co}(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$: Synthesis, structure, luminescence and magnetic properties

A. Saritha^a, B. Raju^b, M. Narsimhulu^a, D. Narayana Rao^b, P. Raghavaiah^c and K.A. Hussain^{*a}

^aDepartment of Physics, Kakatiya University, Warangal, India-506009,

Email: althaf.ku2@gmail.com

^bSchool of Physics, University of Hyderabad, Hyderabad, India-500046

Email: raju.nano@gmail.com

^cDepartment of Chemistry, Dr. Harisingh Gour University, Saugor [M.P], India-470003

Email: rpallepogu@gmail.com

Table S1. Selected bond lengths [\AA] and bond angles [$^\circ$] for $\text{Na}_2[\text{Co}(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Atom	Atom	Length/ \AA	Atom	Atom	Length/ \AA
Co1	O2	2.0732(10)	O5	Na2	2.3424(13)
Co1	O2 ¹	2.0732(10)	C2	C1	1.559(2)
Co1	O1	2.0837(10)	C2	Na1	3.1279(15)
Co1	O1 ¹	2.0837(10)	O7	Na2	2.3164(15)
Co1	O6 ¹	2.0991(14)	Na1	O3 ²	2.4044(11)
Co1	O6	2.0991(14)	Na1	O4 ²	2.4088(12)
O2	C2	1.2688(18)	Na1	O5 ²	2.3411(14)
O3	C2	1.2330(18)	Na1	C2 ²	3.1279(15)
O3	Na1	2.4044(11)	Na1	Na2	3.3984(3)
O3	Na2	2.5059(12)	Na1	Na2 ³	3.3984(3)
O1	C1	1.2574(18)	Na2	O3 ⁴	2.5059(12)
O4	C1	1.2398(18)	Na2	O5 ⁴	2.3424(13)
O4	Na1	2.4088(12)	Na2	O7 ⁴	2.3164(15)

¹2-X,-Y,-Z; ²2-X,1-Y,1-Z; ³1+X,+Y,+Z; ⁴1-X,1-Y,1-Z; ⁵-1+X,+Y,+Z.

Atom	Atom	Atom	Angle/ $^\circ$	Atom	Atom	Atom	Angle/ $^\circ$
O2 ¹	Co1	O2	180.0	O4 ²	Na1	Na2 ³	88.41(3)
O2 ¹	Co1	O1	100.89(4)	O5 ²	Na1	O3 ²	88.46(4)
O2	Co1	O1	79.11(4)	O5	Na1	O3	88.46(4)
O2 ¹	Co1	O1 ¹	79.11(4)	O5	Na1	O3 ²	91.54(4)
O2	Co1	O1 ¹	100.89(4)	O5 ²	Na1	O3	91.54(4)
O2	Co1	O6	91.75(5)	O5 ²	Na1	O4 ²	90.78(5)
O2 ¹	Co1	O6 ¹	91.75(5)	O5	Na1	O4 ²	89.22(5)
O2 ¹	Co1	O6	88.25(5)	O5 ²	Na1	O4	89.22(5)
O2	Co1	O6 ¹	88.25(5)	O5	Na1	O4	90.79(5)
O1 ¹	Co1	O1	180.0	O5	Na1	O5 ²	180.0
O1	Co1	O6 ¹	89.70(5)	O5 ²	Na1	C2	85.56(4)
O1 ¹	Co1	O6 ¹	90.30(5)	O5	Na1	C2	94.44(4)
O1 ¹	Co1	O6	89.70(5)	O5 ²	Na1	C2 ²	94.44(4)

O1	Co1	O6	90.30(5)	O5	Na1	C2 ²	85.56(4)
O6	Co1	O6 ¹	180.0	O5 ²	Na1	Na2	136.50(3)
C2	O2	Co1	115.04(9)	O5	Na1	Na2	43.50(3)
C2	O3	Na1	114.75(10)	O5 ²	Na1	Na2 ³	43.50(3)
C2	O3	Na2	120.62(10)	O5	Na1	Na2 ³	136.50(3)
Na1	O3	Na2	87.57(3)	C2	Na1	C2 ²	180.00(4)
C1	O1	Co1	114.73(9)	C2 ²	Na1	Na2	119.24(3)
C1	O4	Na1	115.45(10)	C2	Na1	Na2	60.76(3)
Na1	O5	Na2	93.04(5)	C2 ²	Na1	Na2 ³	60.76(3)
O2	C2	C1	115.18(12)	C2	Na1	Na2 ³	119.24(3)
O2	C2	Na1	163.77(10)	Na2 ³	Na1	Na2	180.0
O3	C2	O2	125.77(14)	O3 ⁴	Na2	O3	180.0
O3	C2	C1	119.05(12)	O3 ⁴	Na2	Na1 ⁵	44.98(2)
O3	C2	Na1	44.27(7)	O3	Na2	Na1 ⁵	135.02(2)
C1	C2	Na1	76.31(8)	O3	Na2	Na1	44.98(2)
O1	C1	C2	115.75(12)	O3 ⁴	Na2	Na1	135.02(2)
O4	C1	O1	126.07(14)	O5	Na2	O3 ⁴	93.94(4)
O4	C1	C2	118.17(13)	O5 ⁴	Na2	O3	93.94(4)
O3	Na1	O3 ²	180.0	O5	Na2	O3	86.06(4)
O3 ²	Na1	O4	110.44(4)	O5 ⁴	Na2	O3 ⁴	86.06(4)
O3	Na1	O4	69.56(4)	O5 ⁴	Na2	O5	180.00(4)
O3 ²	Na1	O4 ²	69.56(4)	O5 ⁴	Na2	Na1 ⁵	43.47(3)
O3	Na1	O4 ²	110.44(4)	O5	Na2	Na1 ⁵	136.53(3)
O3	Na1	C2	20.98(4)	O5 ⁴	Na2	Na1	136.53(3)
O3 ²	Na1	C2	159.02(4)	O5	Na2	Na1	43.47(3)
O3 ²	Na1	C2 ²	20.98(4)	O7	Na2	O3	91.46(6)
O3	Na1	C2 ²	159.02(4)	O7 ⁴	Na2	O3 ⁴	91.46(6)
O3	Na1	Na2	47.45(3)	O7 ⁴	Na2	O3	88.54(6)
O3 ²	Na1	Na2	132.55(3)	O7	Na2	O3 ⁴	88.54(6)
O3	Na1	Na2 ³	132.55(3)	O7	Na2	O5 ⁴	95.74(6)

O3 ²	Na1	Na2 ³	47.45(3)	O7 ⁴	Na2	O5 ⁴	84.26(6)
O4	Na1	O4 ²	180.0	O7 ⁴	Na2	O5	95.74(6)
O4	Na1	C2	49.47(4)	O7	Na2	O5	84.26(6)
O4 ²	Na1	C2	130.53(4)	O7 ⁴	Na2	O7	180.0
O4	Na1	C2 ²	130.53(4)	O7 ⁴	Na2	Na1 ⁵	75.69(5)
O4 ²	Na1	C2 ²	49.47(4)	O7 ⁴	Na2	Na1	104.31(5)
O4 ²	Na1	Na2	91.59(3)	O7	Na2	Na1	75.69(5)
O4	Na1	Na2 ³	91.59(3)	O7	Na2	Na1 ⁵	104.31(5)
O4	Na1	Na2	88.41(3)	Na1 ⁵	Na2	Na1	180.0

¹2-X,-Y,-Z; ²2- X,1-Y,1-Z; ³1+X,+Y,+Z; ⁴1-X,1-Y,1-Z; ⁵-1+X,+Y,+Z

Table S2. Fractional Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{Na}_2[\text{Co}(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. U_{eq} is defined as 1/3 of the trace of the orthogonalised U_{IJ} tensor

Atom	x	y	z	U(eq)
Co1	1000.0	0	0	22.05(11)
O2	8300.9(19)	483.7(15)	2455.3(13)	26.9(3)
O3	7965.7(19)	2604.6(16)	4344.2(13)	27.5(3)
O1	1135.2(19)	2597.2(15)	212.3(13)	28.6(3)
O4	1134(2)	4636.7(16)	2078.9(14)	30.8(3)
O5	7575(2)	7325.7(18)	4782.0(19)	32.9(3)
O6	1233(2)	-1549(2)	559.7(18)	38.7(3)
C2	8806(2)	2016(2)	2948.8(18)	20.8(3)
C1	1066(3)	3209(2)	1636.4(18)	21.3(3)
O8	3789(3)	9935(2)	2790(2)	40.8(3)
O7	4486(3)	4792(3)	7757.8(19)	55.0(5)
Na1	1000	5000	5000	28.8(2)
Na2	5000	5000	5000	29.2(2)

Table S3. Hydrogen Atom Coordinates ($\text{\AA}\times 10^4$) and Isotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2\times 10^3$) for $\text{Na}_2[\text{Co}(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U(eq)
H6A	12880(40)	-1060(40)	1220(30)	72(8)
H7A	3700(50)	4070(40)	8510(40)	77(9)
H7B	5420(50)	5000(40)	8060(30)	67(9)
H8A	3520(60)	9110(50)	3590(40)	103(12)
H8B	5070(50)	10230(40)	2330(30)	76(9)
H6B	12060(50)	-2550(40)	810(30)	71(10)
H5A	7810(40)	8010(30)	4080(30)	43(7)
H5B	7220(40)	7990(30)	5520(30)	51(7)