Electronic Supplementary Information (ESI)

A series of mixed-ligand 2D and 3D coordination polymers assembled from a novel multifunctional pyridine-tricarboxylate building block: hydrothermal syntheses, structural and topological diversity, and magnetic and luminescent properties

Jinzhong Gu,*a Yanhui Cui, a Jiang Wu, and Alexander Kirillov b

^{*a*} Key Laboratory of Nonferrous Metal Chemistry and Resources Utilization of Gansu Province and College of Chemistry and Chemical Engineering, Lanzhou University, Lanzhou, 730000 (P. R. China)

Fax: (+86) 931-891-5196

E-mail: gujzh@lzu.edu.cn

^b Centro de Química Estrutural, Complexo I, Instituto Superior Técnico, The University of Lisbon, Av.
 Rovisco Pais, 1049-001, Lisbon (Portugal)

1					
Cd(1)-O(1)	2.458(3)	Cd(1)-O(2)	2.345(3)	Cd(1)-O(6)#1	2.245(3)
Cd(1)-O(7)	2.195(2)	Cd(1)-N(2)	2.418(4)	Cd(1)-N(3)	2.351(3)
Cd(2)-O(3)#3	2.279(3)	Cd(2)-O(5)#1	2.336(3)	Cd(2)-O(7)	2.280(2)
Cd(2)-O(7)#2	2.275(2)	Cd(2)-N(4)	2.433(3)	Cd(2)-N(5)	2.338(3)
O(7)-Cd(1)-O(6)#1	107.28(10)	O(7)-Cd(1)-O(2)	96.51(9)	O(6)#1-Cd(1)-O(2)	103.81(11)
O(7)-Cd(1)-N(3)	108.00(10)	O(6)#1-Cd(1)-N(3)	88.26(12)	O(2)-Cd(1)-N(3)	148.19(11)
O(7)-Cd(1)-N(2)	98.57(10)	O(6)#1-Cd(1)-N(2)	150.48(11)	O(2)-Cd(1)-N(2)	86.82(12)
N(3)-Cd(1)-N(2)	70.04(12)	O(7)-Cd(1)-O(1)	150.51(9)	O(6)#1-Cd(1)-O(1)	87.01(10)
O(2)-Cd(1)-O(1)	54.46(9)	N(3)-Cd(1)-O(1)	97.87(10)	N(2)-Cd(1)-O(1)	76.84(11)
O(7)#2-Cd(2)-O(3)#3	90.46(9)	O(7)#2-Cd(2)-O(7)	81.84(9)	O(3)#3-Cd(2)-O(7)	97.52(9)
O(7)#2-Cd(2)-O(5)#1	167.74(10)	O(3)#3-Cd(2)-O(5)#1	80.68(10)	O(7)-Cd(2)-O(5)#1	90.88(9)
O(7)#2-Cd(2)-N(5)	105.88(10)	O(3)#3-Cd(2)-N(5)	155.19(11)	O(7)-Cd(2)-N(5)	103.12(10)
O(5)#1-Cd(2)-N(5)	85.33(11)	O(7)#2-Cd(2)-N(4)	105.27(11)	O(3)#3-Cd(2)-N(4)	87.39(11)
O(7)-Cd(2)-N(4)	171.40(11)	O(5)#1-Cd(2)-N(4)	82.91(11)	N(5)-Cd(2)-N(4)	70.54(12)
Cd(1)-O(7)-Cd(2)	111.62(9)	Cd(1)-O(7)-Cd(2)#2	127.32(12)	Cd(2)#2-O(7)-Cd(2)	98.16(9)
2					
Mn(1)-O(1)	2.191(4)	Mn(1)-O(8)	2.194(4)	Mn(1)-O(12)#1	2.139(4)
Mn(1)-O(13)	2.198(5)	Mn(1)-N(3)	2.270(5)	Mn(1)-N(4)	2.354(5)
Mn(2)-O(2)	2.135(5)	Mn(2)-O(7)	2.156(5)	Mn(2)-O(9)#3	2.185(4)
Mn(2)-O(10)#3	2.304(4)	Mn(2)-O(11)#2	2.115(4)	Mn(3)-O(3)	2.053(6)
Mn(3)-O(4)#4	2.114(5)	Mn(3)-O(5)#5	2.464(8)	Mn(3)-O(6)#5	2.217(6)
Mn(3)-N(5)	2.280(6)	Mn(3)-N(6)	2.259(6)		
O(12)#1-Mn(1)-O(1)	84.74(16)	O(12)#1-Mn(1)-O(8)	94.53(16)	O(1)-Mn(1)-O(8)	82.92(18)
O(12)#1-Mn(1)-O(13)	85.94(17)	O(1)-Mn(1)-O(13)	168.66(17)	O(8)-Mn(1)-O(13)	91.4(2)
O(12)#1-Mn(1)-N(3)	177.54(19)	O(1)-Mn(1)-N(3)	97.63(17)	O(8)-Mn(1)-N(3)	85.15(17)
O(13)-Mn(1)-N(3)	91.63(19)	O(12)#1-Mn(1)-N(4)	108.83(18)	O(1)-Mn(1)-N(4)	86.64(18)
O(8)-Mn(1)-N(4)	153.39(17)	O(13)-Mn(1)-N(4)	102.52(19)	N(3)-Mn(1)-N(4)	72.04(19)
O(11)#2-Mn(2)-O(2)	93.11(18)	O(11)#2-Mn(2)-O(7)	101.31(18)	O(2)-Mn(2)-O(7)	94.0(2)
O(11)#2-Mn(2)-O(9)#3	99.80(16)	O(2)-Mn(2)-O(9)#3	109.72(18)	O(7)-Mn(2)-O(9)#3	147.11(18)
O(11)#2-Mn(2)-O(10)#3	85.65(17)	O(2)-Mn(2)-O(10)#3	167.51(19)	O(7)-Mn(2)-O(10)#3	98.41(18)
O(9)#3-Mn(2)-O(10)#3	58.44(17)	O(3)-Mn(3)-O(4)#4	107.0(3)	O(3)-Mn(3)-O(6)#5	135.2(2)
O(4)#4-Mn(3)-O(6)#5	82.3(2)	O(3)-Mn(3)-N(6)	108.1(2)	O(4)#4-Mn(3)-N(6)	138.3(2)
O(6)#5-Mn(3)-N(6)	88.5(2)	O(3)-Mn(3)-N(5)	88.8(2)	O(4)#4-Mn(3)-N(5)	86.3(2)
O(6)#5-Mn(3)-N(5)	135.9(2)	N(6)-Mn(3)-N(5)	72.6(2)	O(3)-Mn(3)-O(5)#5	84.0(2)
O(4)#4-Mn(3)-O(5)#5	116.3(2)	O(6)#5-Mn(3)-O(5)#5	54.1(2)	N(6)-Mn(3)-O(5)#5	89.4(2)
N(5)-Mn(3)-O(5)#5	157.5(3)				
3					
Cd(1)-O(4)	2.394(5)	Cd(1)-N(1)	2.308(5)	Cd(1)-N(2)	2.317(6)
Cd(1)-N(3)	2.303(6)	Cd(1)-N(6)	2.485(6)	Cd(1)-N(7)	2.291(6)
Cd(2)-O(1)#2	2.528(6)	Cd(2)-O(2)#2	2.287(5)	Cd(2)-O(5)#1	2.212(5)
Cd(2)-N(5)	2.344(6)	Cd(2)-N(10)	2.357(6)	Cd(2)-N(11)	2.411(8)
N(7)-Cd(1)-N(3)	106.5(2)	N(7)-Cd(1)-N(1)	152.3(2)	N(3)-Cd(1)-N(1)	95.98(19)

Table S1 Selected bond lengths [Å] and angles [°] for the compounds $1-6^a$.

N(/)-Cd(1)-N(2)	94.1(2)	N(3)-Cd(1)-N(2)	73.77(19)	N(1)-Cd(1)-N(2)	107.8(2)
N(7)-Cd(1)-O(4)	84.7(2)	N(3)-Cd(1)-O(4)	168.62(19)	N(1)-Cd(1)-O(4)	72.73(19)
N(2)-Cd(1)-O(4)	107.75(19)	N(7)-Cd(1)-N(6))-Cd(1)-N(6) 72.5(2)		89.72(19)
N(1)-Cd(1)-N(6)	92.03(19)	N(2)-Cd(1)-N(6)	155.1(2)	O(4)-Cd(1)-N(6)	92.14(18)
O(5)#1-Cd(2)-O(2)#2	154.7(2)	O(5)#1-Cd(2)-N(5)	93.51(19)	O(2)#2-Cd(2)-N(5)	93.86(18)
O(5)#1-Cd(2)-N(10)	90.7(2)	O(2)#2-Cd(2)-N(10)	113.3(2)	N(5)-Cd(2)-N(10)	91.3(2)
O(5)#1-Cd(2)-N(11)	89.8(2)	O(2)#2-Cd(2)-N(11)	90.5(2)	N(5)-Cd(2)-N(11)	162.3(3)
N(10)-Cd(2)-N(11)	71.3(3)	O(5)#1-Cd(2)-O(1)#2	101.5(2)	O(2)#2-Cd(2)-O(1)#2	53.6(2)
N(5)-Cd(2)-O(1)#2	115.3(2)	N(10)-Cd(2)-O(1)#2	149.6(3)	N(11)-Cd(2)-O(1)#2	80.9(3)
4					
Pb(1)-O(1)	2.570(5)	Pb(1)-O(2)	2.665(6)	Pb(1)-O(6)#1	2.624(7)
Pb(1)-O(7)#2	2.596(5)	Pb(1)-O(7)	2.620(6)	Pb(1)-N(2)	2.799(7)
Pb(1)-N(3)	2.720(8)	Pb(2)-O(3)	2.647(6)	Pb(2)-O(4)	2.350(6)
Pb(2)-O(5)#3	2.441(6)	Pb(2)-N(4)	2.615(7)	Pb(2)-N(5)	2.556(7)
O(1)-Pb(1)-O(2)	49.7(2)	O(1)-Pb(1)-O(6)#1	75.02(19)	O(1)-Pb(1)-O(7)#2	135.53(19)
O(1)-Pb(1)-O(7)	127.89(19)	O(1)-Pb(1)-N(2)	138.9(2)	O(1)-Pb(1)-N(3)	82.2(2)
O(2)-Pb(1)-N(2)	136.6(2)	O(2)-Pb(1)-N(3)	90.0(2)	O(6)#1-Pb(1)-O(2)	122.84(19)
O(6)#1-Pb(1)-N(2)	93.0(2)	O(6)#1-Pb(1)-N(3)	96.4(2)	O(7)#2-Pb(1)-O(2)	117.1(2)
O(7)-Pb(1)-O(2)	79.08(19)	O(7) -Pb(1)-O(6)#1	156.95(17)	O(7)#2-Pb(1)-O(6)#1	90.62(19)
O(7)#2-Pb(1)- $O(7)$	71.1(2)	O(7)#2-Pb(1)-N(2)	82.5(2)	O(7)-Pb(1)-N(2)	71.2(2)
O(7)-Pb(1)-N(3)	90.2(2)	O(7)#2-Pb(1)-N(3)	141.9(2)	N(3)-Pb(1)-N(2)	59.8(2)
O(4)-Pb(2)-O(3)	52.13(19)	O(4)-Pb(2)-O(5)#3	76.6(2)	O(4)-Pb(2)-N(4)	72.2(2)
O(4)-Pb(2)-N(5)	82.1(2)	O(5)#3-Pb(2)-O(3)	110.7(2)	O(5)#3-Pb(2)-N(4)	131.9(2)
O(5)#3-Pb(2)-N(5)	76.0(2)	N(4)-Pb(2)-O(3)	76 8(2)	N(5)-Pb(2)-Q(3)	127 5(2)
N(5)-Ph(2)-N(4)	64 3(2)		, 0.0(2)		12,10(2)
5	• (_)				
Cd(1)-O(1)	2.281(4)	Cd(1)-O(4)#1	2.233(4)	Cd(1)-O(7)	2.531(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8)	2.281(4) 2.262(4)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4)	2.233(4) 2.344(4)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5)	2.531(5) 2.381(4)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(2)	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(2)-O(2) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 O(1)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) O(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18) 51.4(4) 117.63(16)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2)	2.233(4) $2.344(4)$ $2.533(19)$ $2.352(6)$ $90.64(17)$ $98.47(17)$ $106.34(16)$ $125.6(2)$ $85.6(2)$ $108.3(2)$ $71.7(2)$ $151.62(18)$ $81.9(4)$ $141.8(4)$	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 O(1)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) 6	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$ $117.63(16)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2)	2.233(4) $2.344(4)$ $2.533(19)$ $2.352(6)$ $90.64(17)$ $98.47(17)$ $106.34(16)$ $125.6(2)$ $85.6(2)$ $108.3(2)$ $71.7(2)$ $151.62(18)$ $81.9(4)$ $141.8(4)$	$\begin{array}{c} Cd(1)-O(7)\\ Cd(1)-N(5)\\ Cd(2)-O(3)\#1\\ Cd(2)-N(2)\\ O(8)-Cd(1)-O(1)\\ O(1)-Cd(1)-N(4)\\ O(1)-Cd(1)-N(5)\\ O(8)-Cd(1)-O(7)\\ N(5)-Cd(1)-O(7)\\ N(2)-Cd(2)-O(1)\\ O(1)-Cd(2)-N(3)\\ O(1)-Cd(2)-N(3)\\ O(1)-Cd(2)-O(2)\\ O(3)\#1-Cd(2)-O(2)\\ \end{array}$	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) $Cd(1)-O(8)$ $Cd(2)-O(1)$ $Cd(2)-O(5)#2$ $O(4)#1-Cd(1)-O(8)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(4)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(5)$ $N(4)-Cd(1)-N(5)$ $O(1)-Cd(1)-O(7)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(2)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(3)$ $O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1$ $N(3)-Cd(2)-O(3)#1$ $O(1)-Cd(2)-O(2)$ $Cd(1)-O(1)-Cd(2)$ f $Zn(1)-O(3)$	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$ $117.63(16)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) $Cd(1)-O(8)$ $Cd(2)-O(1)$ $Cd(2)-O(5)#2$ $O(4)#1-Cd(1)-O(8)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(4)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(5)$ $N(4)-Cd(1)-N(5)$ $O(1)-Cd(1)-O(7)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(2)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(3)$ $O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1$ $N(3)-Cd(2)-O(3)#1$ $O(1)-Cd(2)-O(2)$ $Cd(1)-O(1)-Cd(2)$ 6 $Zn(1)-O(3)$ $Zn(1)-N(1)$	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$ $117.63(16)$ $1.995(6)$ $2.037(6)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-O(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) 6 Zn(1)-O(3) Zn(1)-N(1) Zn(2)-O(7)	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$ $117.63(16)$ $1.995(6)$ $2.037(6)$ $2.313(10)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(8)	2.233(4) $2.344(4)$ $2.533(19)$ $2.352(6)$ $90.64(17)$ $98.47(17)$ $106.34(16)$ $125.6(2)$ $85.6(2)$ $108.3(2)$ $71.7(2)$ $151.62(18)$ $81.9(4)$ $141.8(4)$ $1.972(5)$ $2.063(6)$ $2.109(9)$	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-O(2) Zn(2)-N(3)	2.531(5) $2.381(4)$ $2.373(4)$ $2.319(5)$ $135.51(16)$ $95.25(15)$ $118.12(14)$ $52.94(17)$ $146.05(18)$ $109.13(18)$ $107.20(16)$ $80.84(14)$ $85.5(5)$ $119.4(5)$ $1.935(5)$ $2.412(7)$ $2.054(8)$
$\begin{array}{c} Cd(1)-O(1)\\ Cd(1)-O(8)\\ Cd(2)-O(1)\\ Cd(2)-O(5)\#2\\ O(4)\#1-Cd(1)-O(8)\\ O(4)\#1-Cd(1)-N(4)\\ O(4)\#1-Cd(1)-N(5)\\ N(4)-Cd(1)-N(5)\\ O(1)-Cd(1)-O(7)\\ O(5)\#2-Cd(2)-N(2)\\ O(5)\#2-Cd(2)-N(3)\\ O(5)\#2-Cd(2)-O(3)\#1\\ N(3)-Cd(2)-O(3)\#1\\ O(1)-Cd(2)-O(2)\\ Cd(1)-O(1)-Cd(2)\\ \hline {\bf 6}\\ Zn(1)-O(3)\\ Zn(1)-N(1)\\ Zn(2)-O(7)\\ Zn(2)-N(2)\\ \end{array}$	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18) 51.4(4) 117.63(16) 1.995(6) 2.037(6) 2.313(10) 2.065(6)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(8)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4) 1.972(5) 2.063(6) 2.109(9)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-O(2) Zn(2)-N(3)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5) 1.935(5) 2.412(7) 2.054(8)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(3) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) 6 Zn(1)-O(3) Zn(1)-N(1) Zn(2)-O(7) Zn(2)-N(2) O(3)-Zn(1)-N(1)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18) 51.4(4) 117.63(16) 1.995(6) 2.037(6) 2.313(10) 2.065(6) 96.1(2)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) X(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(8) O(4)#2-Zn(1)-O(3)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4) 1.972(5) 2.063(6) 2.109(9) 93.9(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-O(2) Zn(2)-N(3) O(4)#2-Zn(1)-N(1)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) $Cd(1)-O(8)$ $Cd(2)-O(1)$ $Cd(2)-O(5)#2$ $O(4)#1-Cd(1)-O(8)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(4)$ $O(4)#1-Cd(1)-N(5)$ $N(4)-Cd(1)-N(5)$ $O(1)-Cd(1)-O(7)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(2)$ $O(5)#2-Cd(2)-N(3)$ $O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1$ $N(3)-Cd(2)-O(3)#1$ $O(1)-Cd(2)-O(2)$ $Cd(1)-O(1)-Cd(2)$ 6 $Zn(1)-O(3)$ $Zn(1)-N(1)$ $Zn(2)-O(7)$ $Zn(2)-N(2)$ $O(3)-Zn(1)-N(1)$ $O(6)#1-Zn(1)-O(3)$	2.281(4) $2.262(4)$ $2.316(4)$ $2.236(6)$ $98.72(18)$ $148.58(17)$ $79.90(16)$ $70.10(17)$ $86.49(17)$ $118.6(2)$ $135.9(2)$ $80.73(19)$ $79.96(18)$ $51.4(4)$ $117.63(16)$ $1.995(6)$ $2.037(6)$ $2.313(10)$ $2.065(6)$ $96.1(2)$ $109.9(2)$	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(8) O(4)#2-Zn(1)-O(3) O(6)#1-Zn(1)-O(4)#2	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4) 1.972(5) 2.063(6) 2.109(9) 93.9(2) 140.3(2)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-N(3) O(4)#2-Zn(1)-N(1) O(6)#1-Zn(1)-N(1)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 O(1)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) 6 Zn(1)-O(3) Zn(1)-N(1) Zn(2)-N(2) O(3)-Zn(1)-N(1) O(6)#1-Zn(1)-O(3) O(1)-Zn(2)-O(2) O(1)-Zn(2)-O(2)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18) 51.4(4) 117.63(16) 1.995(6) 2.037(6) 2.313(10) 2.065(6) 96.1(2) 109.9(2) 57.9(2)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(3)#1 O(5)#2-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(8) O(4)#2-Zn(1)-O(3) O(6)#1-Zn(1)-O(4)#2 O(1)-Zn(2)-O(7)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4) 1.972(5) 2.063(6) 2.109(9) 93.9(2) 140.3(2) 155.9(3)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(5)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(2)-O(2) Zn(2)-O(2) Zn(2)-N(3) O(4)#2-Zn(1)-N(1) O(1)-Zn(2)-O(8)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5) 1.935(5) 2.412(7) 2.054(8) 105.2(2) 103.3(3) 101.7(3)
Cd(1)-O(1) Cd(1)-O(8) Cd(2)-O(1) Cd(2)-O(5)#2 O(4)#1-Cd(1)-O(8) O(4)#1-Cd(1)-N(4) O(4)#1-Cd(1)-N(5) N(4)-Cd(1)-N(5) O(1)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-N(2) O(5)#2-Cd(2)-O(3)#1 N(3)-Cd(2)-O(3)#1 O(1)-Cd(2)-O(2) Cd(1)-O(1)-Cd(2) f Zn(1)-O(3) Zn(1)-N(1) Zn(2)-O(7) Zn(2)-N(2) O(3)-Zn(1)-N(1) O(6)#1-Zn(1)-O(3) O(1)-Zn(2)-O(2) O(1)-Zn(2)-O(2) O(1)-Zn(2)-O(2)	2.281(4) 2.262(4) 2.316(4) 2.236(6) 98.72(18) 148.58(17) 79.90(16) 70.10(17) 86.49(17) 118.6(2) 135.9(2) 80.73(19) 79.96(18) 51.4(4) 117.63(16) 1.995(6) 2.037(6) 2.313(10) 2.065(6) 96.1(2) 109.9(2) 57.9(2) 101.8(3)	Cd(1)-O(4)#1 Cd(1)-N(4) Cd(2)-O(2) Cd(2)-N(3) O(4)#1-Cd(1)-O(1) O(8)-Cd(1)-N(4) O(8)-Cd(1)-N(5) O(4)#1-Cd(1)-O(7) N(4)-Cd(1)-O(7) O(5)#2-Cd(2)-O(1) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-N(3) N(2)-Cd(2)-O(2) N(3)-Cd(2)-O(2) X(3)-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(4)#1 Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(1) Zn(2)-O(3) O(4)#2-Zn(1)-O(3) O(6)#1-Zn(1)-O(4)#2 O(1)-Zn(2)-O(7) O(7)-Zn(2)-O(2)	2.233(4) 2.344(4) 2.533(19) 2.352(6) 90.64(17) 98.47(17) 106.34(16) 125.6(2) 85.6(2) 108.3(2) 71.7(2) 151.62(18) 81.9(4) 141.8(4) 1.972(5) 2.063(6) 2.109(9) 93.9(2) 140.3(2) 155.9(3) 105.5(3)	Cd(1)-O(7) Cd(1)-N(5) Cd(2)-O(3)#1 Cd(2)-N(2) O(8)-Cd(1)-O(1) O(1)-Cd(1)-N(4) O(1)-Cd(1)-N(5) O(8)-Cd(1)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(7) N(2)-Cd(2)-O(1) O(1)-Cd(2)-N(3) O(1)-Cd(2)-O(3)#1 N(2)-Cd(2)-O(2) O(3)#1-Cd(2)-O(2) Zn(1)-O(6)#2 Zn(2)-O(2) Zn(2)-N(3) O(4)#2-Zn(1)-N(1) O(6)#1-Zn(1)-N(1) O(1)-Zn(2)-O(8) O(8)-Zn(2)-O(2)	2.531(5) 2.381(4) 2.373(4) 2.319(5) 135.51(16) 95.25(15) 118.12(14) 52.94(17) 146.05(18) 109.13(18) 107.20(16) 80.84(14) 85.5(5) 119.4(5) 1.935(5) 2.412(7) 2.054(8) 105.2(2) 103.3(3) 101.7(3) 87.8(3)

O(8)-Zn(2)-O(7)	57.7(3)	N(3)-Zn(2)-O(1)	99.1(3)	N(3)-Zn(2)-O(2)	157.0(3)
N(3)-Zn(2)-O(7)	96.5(4)	N(3)-Zn(2)-O(8)	98.6(3)	N(3)-Zn(2)-N(2)	96.3(3)
N(2)-Zn(2)-O(2)	88.7(3)	N(2)-Zn(2)-O(7)	94.5(3)	N(2)-Zn(2)-O(8)	149.7(3)

^{*a*} Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: #1 -*x*+1, -*y*+2, -*z*+1; #2 -*x*, -*y*+2, -*z*; #3 *x*, *y*+1, *z* for 1; #1 *x*-1/2, -*y*+1/2, *z*+1/2; #2 *x*+1/2, -*y*+1/2, *z*+1/2; #3 *x*+1/2, -*y*+1/2, *z*-1/2; #4 -*x*+2, -*y*, -*z*+1; #5 *x*+1, *y*, *z* for 2; #1 -*x*, *y*-1/2, -*z*+1/2; #2 -*x*+1/2, -*y*+1/2, -*z*+1/2 for 3; #1 *x*+1, *y*, *z*-1; #2 -*x*+2, -*y*+1, -*z*; #3 -*x*, -*y*, -*z*+2 for 4; #1 *x*+1, *y*, *z*; #2 - *x*+2, -*y*+2, -*z* for 5; #1 -*x*+2, *y*+1/2, -*z*+1/2; #2 -*x*+1, *y*+1/2, -*z*+1/2 for 6.

	5	U	5 1			
Complexes	D-HA	d(D-H)	<i>d</i> (HA)	<i>d</i> (DA)	∠DHA	Symmetry code
1	O(7)-H(1)···O(4)	0.85	2.02	2.873	179.8	- <i>x</i> , - <i>y</i> +1, - <i>z</i>
	O(8)-H(1W)····O(2)	0.85	2.07	2.924	179.6	- <i>x</i> +1, - <i>y</i> +1, - <i>z</i> +1
	O(8)-H(2W)…O(4)	0.85	2.01	2.862	179.4	<i>x</i> +1, <i>y</i> , <i>z</i> +1
2	O(14)-H(4W)…N(2)	0.86	1.77	2.628	176.6	- <i>x</i> -1/2, - <i>y</i> +1/2, <i>z</i> +1/2
	O(13)-H(2W)O(14)	0.90	2.10	2.743	127.9	- <i>x</i> +1/2, - <i>y</i> +1/2, <i>z</i> -1/2
	O(13)-H(1W)O(10)	0.90	1.81	2.708	173.3	x-1/2, -y+1/2, z-1/2
3	N(13)-H(13)···O(6)	0.86	2.36	3.089	142.5	- <i>x</i> , <i>y</i> -3//2, - <i>z</i> +1/2
	N(12)-H(12)····O(6)	0.86	1.88	2.686	155.0	- <i>x</i> , <i>y</i> -3//2, - <i>z</i> +1/2
	N(9)-H(9)···O(4)	0.86	1.93	2.742	158.1	- <i>x</i> , - <i>y</i> , - <i>z</i>
	N(8)-H(8)-O(3)	0.86	1.91	2.766	170.8	-x, -y, -z
	N(4)-H(4)···O(2)	0.86	1.90	2.745	168.7	- <i>x</i> +1/2, - <i>y</i> +1/2, - <i>z</i> +1/2
4	O(11)-H(1W)···O(3)	0.86	2.15	3.011	178.8	- <i>x</i> +1, - <i>y</i> +1, - <i>z</i> +1

Table S2 Hydrogen bonds in crystal packing [Å, °] of 1–4.



Fig. S1 The π - π stacking interactions in 1 (green dashed lines represent π - π stacking interactions).



Fig. S2 A perspective of 3D supramolecular framework in 1 (view along the *ab* plane).



Fig. S3 Bridging of the dimeric Mn_2 units by carboxylate groups in 2.



Fig. S4 Bridging of the dimeric Mn₂ units by L^{3–} ligands in **2**. Symmetry code: i = -x + 2, -y, -z + 1.



Fig. S5 A perspective of 3D supramolecular framework in **3** (view along the *ab* plane; blue dashed lines represent the hydrogen bond). Symmetry code: i = -x, -y, -z.



Fig. S6 3D supramolecular structure formed by hydrogen bonding interactions between the adjacent layers in **5** (blue dashed lines represent the C–H…O H-bond).



Fig. S7 A perspective of 3D supramolecular framework of 5 along the *bc* plane.



Fig. S8 The PXRD patterns of compounds 1–6 at room temperature.



Fig. S9 Thermogravimetric analysis (TGA) curves of compounds 1–6.