

One-dimensional coordination polymers constructed from binuclear 3d-4f nodes and isonicotinato spacer.

Andrei A. Patrascu,^{a,b} Sergiu Calancea,^a Rafael A. Allão Cassaro,^c Stéphane Soriano,^{d,e} Augustin M. Madalan,^b Catalin Maxim,^b Miguel A. Novak,^f Maria G. F. Vaz,^{*a} Marius Andruh^{*b}

^a*Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Niterói, Rio de Janeiro, Brazil*

^b*Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry, University of Bucharest, Str. Dumbrava Rosie nr. 23, 020464-Bucharest, Romania*

^c*Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil*

^d*Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Niterói, Rio de Janeiro, Brazil*

^e*Consiglio Nazionale delle Ricerche – Istituto di Chimica dei Composti Organo-Metallici, via Madonna del Piano 10, 50019, Sesto Fiorentino, Firenze, Italy*

^f*Instituto de Física Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil*

Table S1 Selected bond angles (°) for **1 – 3**

1	2	3
O1 - Gd1 - O2 = 68.38(14)	O1 - Gd1 - O2 = 68.71(7)	O1 - Dyl - O2 = 69.08(7)
O1 - Gd1 - O3 = 61.81(13)	O1 - Gd1 - O3 = 60.49(6)	O1 - Dyl - O3 = 60.78(7)
O1 - Gd1 - O4 = 114.64(13)	O1 - Gd1 - O4 = 114.86(6)	O1 - Dyl - O4 = 115.32(7)
O1 - Gd1 - O5 = 74.07(13)	O1 - Gd1 - O5 = 82.45(6)	O1 - Dyl - O5 = 81.73(7)
O1 - Gd1 - O6 = 138.28(14)	O1 - Gd1 - O6 = 139.67(7)	O1 - Dyl - O6 = 139.47(8)
O1 - Gd1 - O7 = 119.71(14)	O1 - Gd1 - O7 = 105.70(7)	O1 - Dyl - O7 = 105.50(8)
O1 - Gd1 - O8 = 141.23(13)	O1 - Gd1 - O8 = 145.17(7)	O1 - Dyl - O8 = 145.93(8)
O1 - Gd1 - O10 = 72.51(14)	O1 - Gd1 - O10 = 74.91(7)	O1 - Dyl - O10 = 75.56(7)
O2 - Gd1 - O3 = 130.14(14)	O2 - Gd1 - O3 = 126.96(6)	O2 - Dyl - O3 = 127.46(7)
O2 - Gd1 - O4 = 60.83(13)	O2 - Gd1 - O4 = 60.57(7)	O2 - Dyl - O4 = 60.73(7)
O2 - Gd1 - O5 = 98.94(13)	O2 - Gd1 - O5 = 96.12(6)	O2 - Dyl - O5 = 95.30(7)
O2 - Gd1 - O6 = 133.27(14)	O2 - Gd1 - O6 = 138.70(8)	O2 - Dyl - O6 = 138.24(8)
O2 - Gd1 - O7 = 146.53(14)	O2 - Gd1 - O7 = 144.69(7)	O2 - Dyl - O7 = 145.32(7)
O2 - Gd1 - O8 = 83.29(14)	O2 - Gd1 - O8 = 90.94(7)	O2 - Dyl - O8 = 90.73(8)
O2 - Gd1 - O10 = 82.10(14)	O2 - Gd1 - O10 = 76.20(7)	O2 - Dyl - O10 = 76.66(7)
O3 - Gd1 - O4 = 145.56(13)	O3 - Gd1 - O4 = 130.27(6)	O3 - Dyl - O4 = 129.83(7)
O3 - Gd1 - O5 = 70.07(14)	O3 - Gd1 - O5 = 64.19(7)	O3 - Dyl - O5 = 64.01(7)
O3 - Gd1 - O6 = 88.92(14)	O3 - Gd1 - O6 = 81.62(7)	O3 - Dyl - O6 = 81.16(8)
O3 - Gd1 - O7 = 66.37(14)	O3 - Gd1 - O7 = 68.00(7)	O3 - Dyl - O7 = 67.51(7)
O3 - Gd1 - O8 = 137.37(14)	O3 - Gd1 - O8 = 140.57(7)	O3 - Dyl - O8 = 140.66(8)
O3 - Gd1 - O10 = 81.40(15)	O3 - Gd1 - O10 = 103.14(7)	O3 - Dyl - O10 = 103.83(8)
O4 - Gd1 - O5 = 76.06(14)	O4 - Gd1 - O5 = 66.12(7)	O4 - Dyl - O5 = 65.97(7)
O4 - Gd1 - O6 = 72.44(13)	O4 - Gd1 - O6 = 78.27(7)	O4 - Dyl - O6 = 77.63(8)
O4 - Gd1 - O7 = 125.48(14)	O4 - Gd1 - O7 = 139.29(7)	O4 - Dyl - O7 = 138.95(7)
O4 - Gd1 - O8 = 69.02(14)	O4 - Gd1 - O8 = 74.38(7)	O4 - Dyl - O8 = 73.41(8)
O4 - Gd1 - O10 = 132.07(14)	O4 - Gd1 - O10 = 124.24(7)	O4 - Dyl - O10 = 124.37(8)
O5 - Gd1 - O6 = 67.94(14)	O5 - Gd1 - O6 = 68.00(7)	O5 - Dyl - O6 = 68.60(7)
O5 - Gd1 - O7 = 114.53(14)	O5 - Gd1 - O7 = 118.18(7)	O5 - Dyl - O7 = 118.31(7)
O5 - Gd1 - O8 = 138.51(14)	O5 - Gd1 - O8 = 129.17(7)	O5 - Dyl - O8 = 128.79(8)
O5 - Gd1 - O10 = 143.48(15)	O5 - Gd1 - O10 = 157.35(7)	O5 - Dyl - O10 = 157.28(8)
O6 - Gd1 - O7 = 64.92(14)	O6 - Gd1 - O7 = 68.41(7)	O6 - Dyl - O7 = 68.39(8)
O6 - Gd1 - O8 = 80.47(14)	O6 - Gd1 - O8 = 73.85(8)	O6 - Dyl - O8 = 73.45(9)
O6 - Gd1 - O10 = 135.37(14)	O6 - Gd1 - O10 = 131.14(7)	O6 - Dyl - O10 = 130.86(8)
O7 - Gd1 - O8 = 71.77(15)	O7 - Gd1 - O8 = 74.39(7)	O7 - Dyl - O8 = 75.32(8)
O7 - Gd1 - O10 = 71.33(14)	O7 - Gd1 - O10 = 68.86(7)	O7 - Dyl - O10 = 68.97(8)
O8 - Gd1 - O10 = 78.00(15)	O8 - Gd1 - O10 = 72.85(8)	O8 - Dyl - O10 = 73.15(9)
O1 - Gd1 - Co1 = 35.31(9)	O1 - Gd1 - Ni1 = 34.48(4)	O1 - Dyl - Ni1 = 34.74(5)
O2 - Gd1 - Co1 = 34.39(10)	O2 - Gd1 - Ni1 = 35.33(5)	O2 - Dyl - Ni1 = 35.52(5)
O3 - Gd1 - Co1 = 96.14(10)	O3 - Gd1 - Ni1 = 94.90(4)	O3 - Dyl - Ni1 = 95.45(5)
O4 - Gd1 - Co1 = 91.47(9)	O4 - Gd1 - Ni1 = 91.77(5)	O4 - Dyl - Ni1 = 92.24(5)
O5 - Gd1 - Co1 = 92.72(9)	O5 - Gd1 - Ni1 = 95.48(4)	O5 - Dyl - Ni1 = 94.84(5)
O6 - Gd1 - Co1 = 157.04(10)	O6 - Gd1 - Ni1 = 163.04(5)	O6 - Dyl - Ni1 = 162.96(6)
O7 - Gd1 - Co1 = 137.34(10)	O7 - Gd1 - Ni1 = 125.73(5)	O7 - Dyl - Ni1 = 125.83(6)
O8 - Gd1 - Co1 = 109.53(10)	O8 - Gd1 - Ni1 = 116.97(6)	O8 - Dyl - Ni1 = 117.10(7)
O10 - Gd1 - Co1 = 67.59(10)	O10 - Gd1 - Ni1 = 65.82(5)	O10 - Dyl - Ni1 = 66.18(5)
O1 - Co1 - O2 = 81.91(16)	O1 - Ni1 - O2 = 81.08(8)	O1 - Ni1 - O2 = 80.42(8)
O1 - Co1 - N1 = 91.34(19)	O1 - Ni1 - N1 = 91.41(9)	O1 - Ni1 - N1 = 91.60(9)
O2 - Co1 - N1 = 172.79(19)	O2 - Ni1 - N1 = 172.42(9)	O2 - Ni1 - N1 = 171.92(9)
O1 - Co1 - N2 = 171.41(19)	O1 - Ni1 - N2 = 170.89(9)	O1 - Ni1 - N2 = 170.54(10)
O2 - Co1 - N2 = 90.86(19)	O2 - Ni1 - N2 = 90.14(9)	O2 - Ni1 - N2 = 90.50(10)
N1 - Co1 - N2 = 95.7(2)	N1 - Ni1 - N2 = 97.31(10)	N1 - Ni1 - N2 = 97.42(11)
O1 - Co1 - O9 = 87.15(15)	O1 - Ni1 - O9 = 91.70(7)	O1 - Ni1 - O9 = 91.63(8)
O2 - Co1 - O9 = 91.92(15)	O2 - Ni1 - O9 = 90.71(8)	O2 - Ni1 - O9 = 90.80(8)

N1 - Co1 - O9 = 85.20(18)
N2 - Co1 - O9 = 88.48(17)
O1 - Co1 - N3#1 = 95.96(16)
O2 - Co1 - N3#1 = 85.69(16)
N1 - Co1 - N3#1 = 97.57(19)
N2 - Co1 - N3#1 = 88.07(18)
O9 - Co1 - N3#1 = 175.78(17)
O1 - Co1 - Gd1 = 43.84(11)
O2 - Co1 - Gd1 = 39.76(11)
N1 - Co1 - Gd1 = 133.07(15)
N2 - Co1 - Gd1 = 128.00(15)
O9 - Co1 - Gd1 = 80.32(11)
N3¹ - Co1 - Gd1 = 99.93(12)
Co1 - O1 - Gd1 = 100.85(16)
Co1 - O2 - Gd1 = 105.85(17)
l = x+1, y, z

N1 - Ni1 - O9 = 88.44(8)
N2 - Ni1 - O9 = 85.94(8)
O1 - Ni1 - N3#1 = 92.70(8)
O2 - Ni1 - N3#1 = 91.11(8)
N1 - Ni1 - N3#1 = 90.30(9)
N2 - Ni1 - N3#1 = 89.89(9)
O9 - Ni1 - N3#1 = 175.46(8)
O1 - Ni1 - Gd1 = 41.17(5)
O2 - Ni1 - Gd1 = 41.29(5)
N1 - Ni1 - Gd1 = 131.15(7)
N2 - Ni1 - Gd1 = 129.73(7)
O9 - Ni1 - Gd1 = 83.33(5)
N3¹ - Ni1 - Gd1 = 100.76(6)
Ni1 - O1 - Gd1 = 104.35(8)
Ni1 - O2 - Gd1 = 103.38(8)
l = x-1/2, y, -z+1/2

N1 - Ni1 - O9 = 88.18(9)
N2 - Ni1 - O9 = 85.81(9)
O1 - Ni1 - N3#1 = 93.03(9)
O2 - Ni1 - N3#1 = 91.36(9)
N1 - Ni1 - N3#1 = 90.28(9)
N2 - Ni1 - N3#1 = 89.81(9)
O9 - Ni1 - N3#1 = 175.13(9)
O1 - Ni1 - Dy1 = 40.89(6)
O2 - Ni1 - Dy1 = 40.99(6)
N1 - Ni1 - Dy1 = 130.95(7)
N2 - Ni1 - Dy1 = 129.66(8)
O9 - Ni1 - Dy1 = 83.15(6)
N3¹ - Ni1 - Dy1 = 101.32(7)
Ni1 - O1 - Dy1 = 104.37(9)
Ni1 - O2 - Dy1 = 103.48(9)
l = x+1/2, y, -z+3/2

Table S2 Summary of crystal data collection and refinement parameters for [Ni(valpn)Pr(hfac)₂(IN)]

	[Ni(valpn)Pr(hfac) ₂ (IN)]
Empirical formula	C ₃₅ H ₂₆ F ₁₂ N ₃ NiO ₁₀ Pr
<i>M</i> (g mol ⁻¹)	1076.21
Temperature, (K)	293(2)
Wavelength, (Å)	0.71073
Crystal system	<i>Orthorhombic</i>
Space group	<i>Pbca</i>
<i>a</i> (Å)	18.346(4)
<i>b</i> (Å)	16.067(3)
<i>c</i> (Å)	28.455(6)
<i>V</i> (Å ³)	8387(3)
<i>Z</i>	8
<i>D_c</i> (g cm ⁻³)	1.705
μ (mm ⁻¹)	1.706
F(000)	4256
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	0.824
Final <i>R</i> ₁ ^a , <i>wR</i> ₂ ^b [<i>I</i> >2σ(<i>I</i>)]	0.0553, 0.077
<i>R</i> ₁ ^a , <i>wR</i> ₂ ^b (all data)	0.1893, 0.1059
Largest diff. peak and hole (eÅ ⁻³)	-1.107, 0.929

The praseodymium derivative has been obtained following the same procedure presented for compounds **2** and **3**.

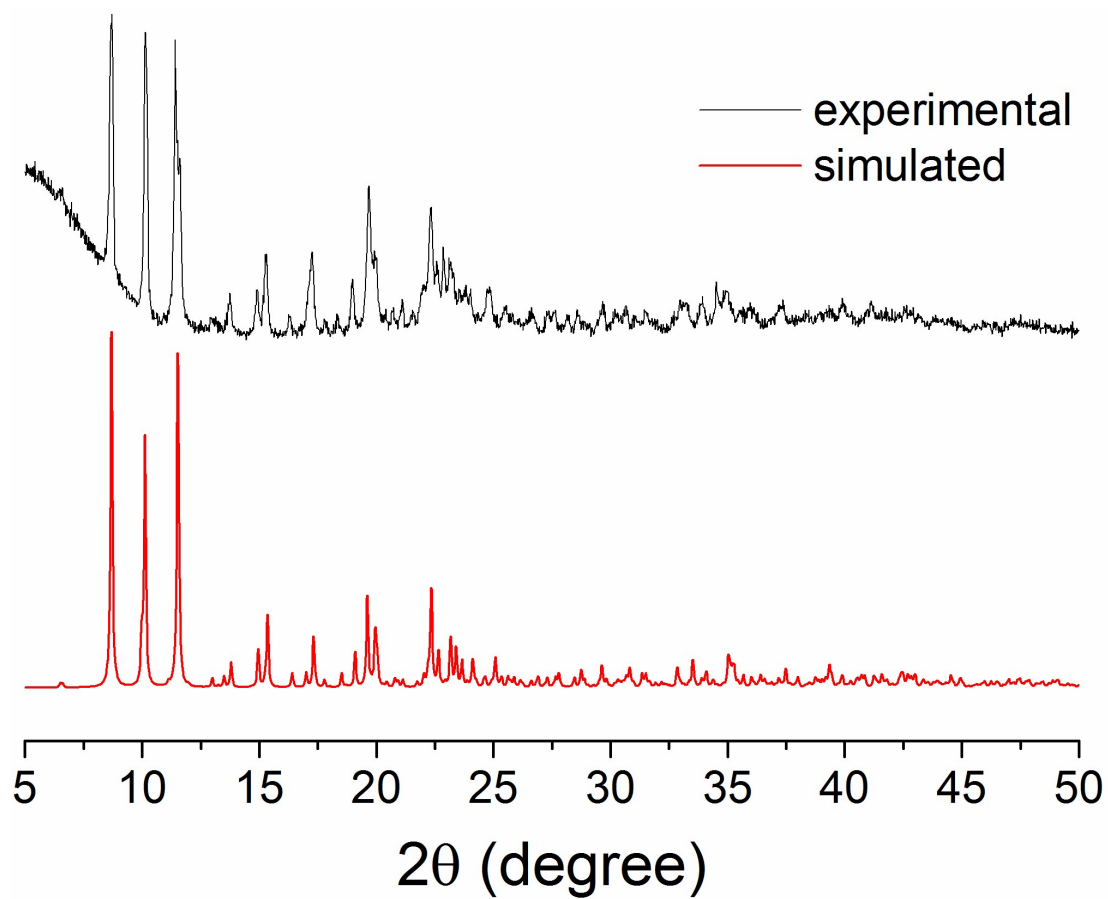


Figure S1: Powder X-ray diffraction pattern of compound **1** at room temperature, together with the calculated pattern from the single crystal data.

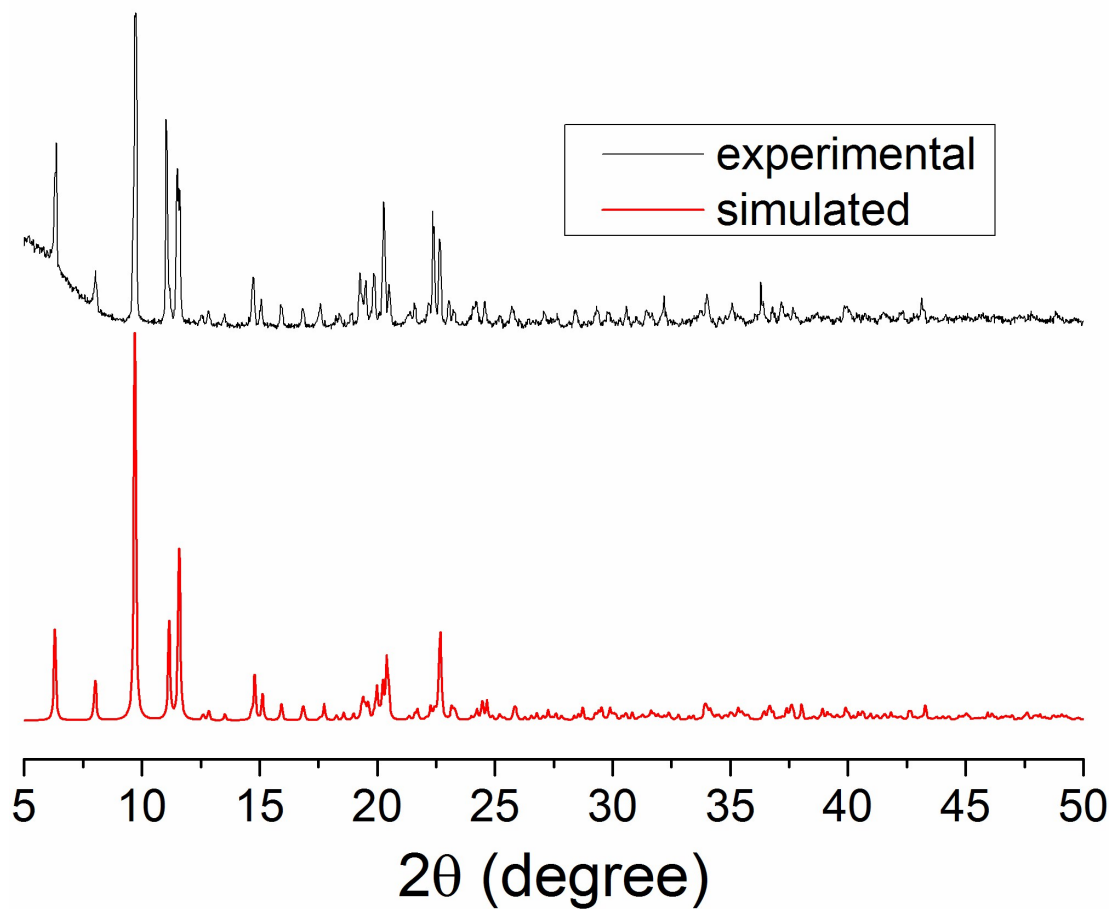


Figure S2: Powder X-ray diffraction pattern of compound 2 at room temperature, together with the calculated pattern from the single crystal data.

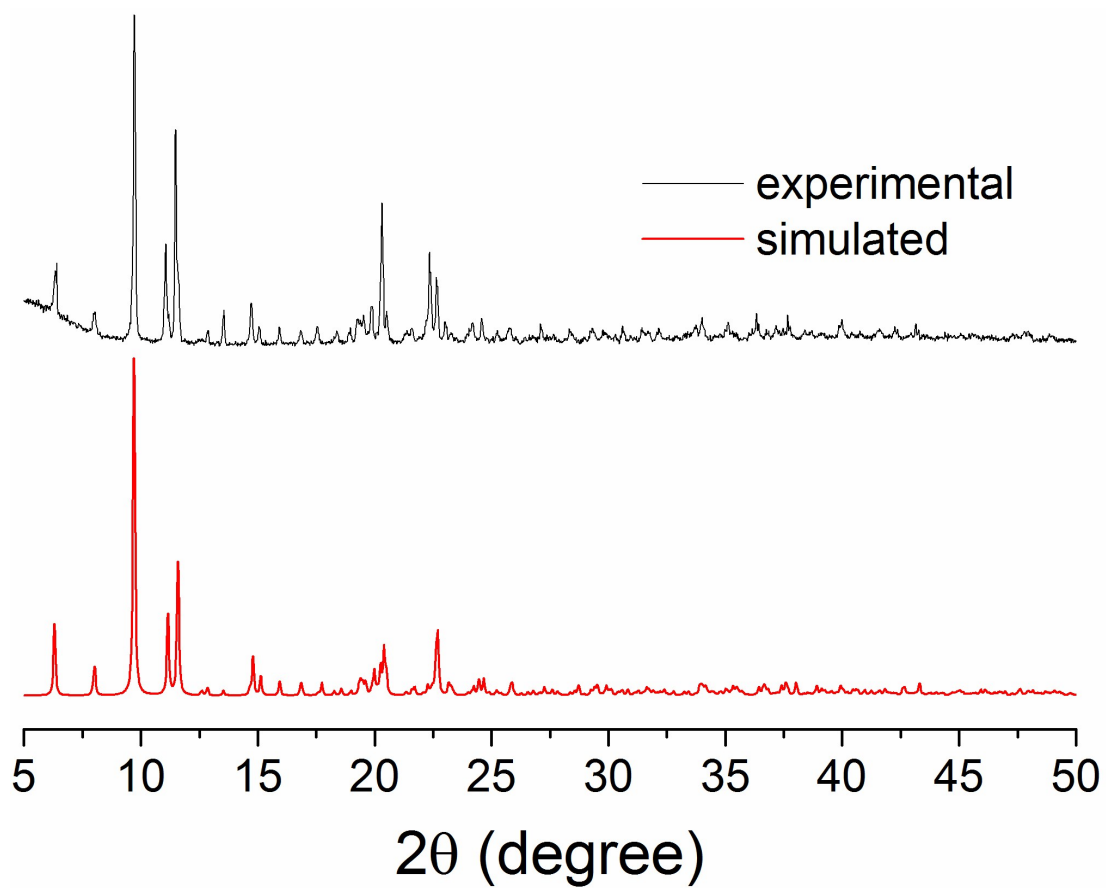
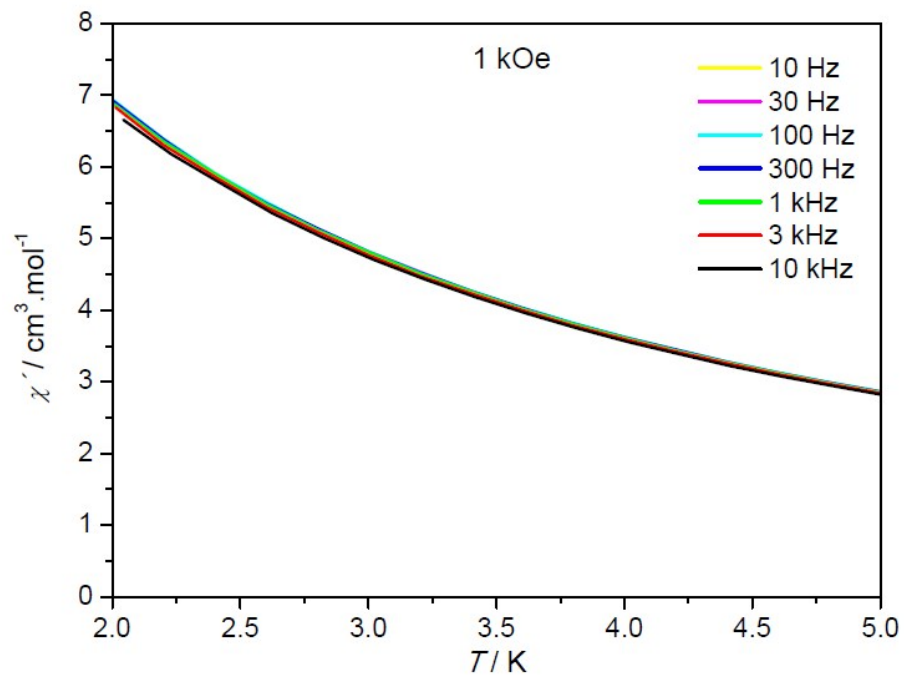
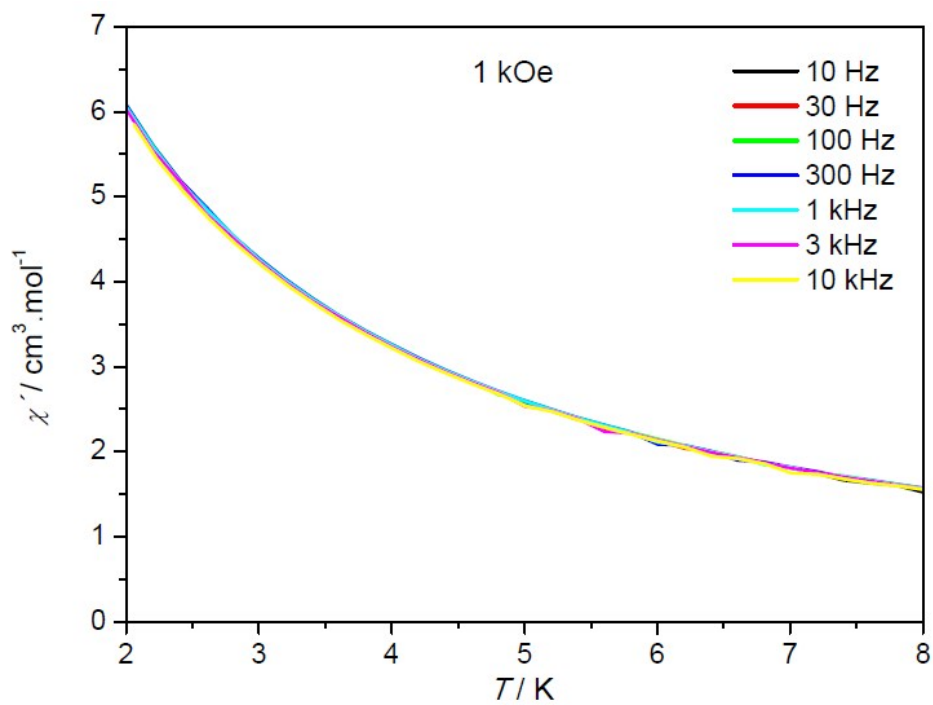


Figure S3: Powder X-ray diffraction pattern of compound **3** at room temperature, together with the calculated pattern from the single crystal data.



a)



b)

Figure S4: Thermal dependence of the in-phase (χ') ac magnetic susceptibility for **1** (a) and **2** (b) under $H_{\text{external}} = 1 \text{ kOe}$, for different oscillating frequencies