

Table S2: Principal atomic distances and angles in Cu(II)-[H(56)NH₂Cl]H₁ complex.

Distances (Å)			
Cu1	-Cl1	2.6736(5)	
Cu1	-N1	1.9896(17)	
Cu1	-N2	1.9756(15)	
Cu1	-N3	1.9783(16)	
Cu1	Cl1_a	2.3229(5)	
O1	-C3	1.277(3)	
O2	-H2D	0.97(2)	
O2	-H2C	0.968(16)	
O3	-H3A	0.97(2)	
O3	-H3B	0.97(2)	
N1	-C1	1.478(3)	
N2	-C3	1.317(3)	
N2	-C4	1.464(3)	
N3	-C5	1.344(3)	
N3	-C9	1.350(3)	
N1	-H1D	0.879(9)	
N1	-H1C	0.880(11)	
C1	-C2	1.518(3)	
C2	-C3	1.514(3)	
C4	-C5	1.501(3)	
C5	-C6	1.391(3)	
C6	-C7	1.383(3)	
C7	-C8	1.390(3)	
C8	-C9	1.373(3)	
C1	-H1B	0.9900	
C1	-H1A	0.9900	
C2	-H2A	0.9900	
C2	-H2B	0.9900	
C4	-H4A	0.9900	
C4	-H4B	0.9900	
C6	-H6	0.9500	
C7	-H7	0.9500	
C8	-H8	0.9500	
C9	-H9	0.9500	
Angles (°)			
Cl1	-Cu1	-N1	88.88(4)
Cl1	-Cu1	-N2	113.46(4)
Cl1	-Cu1	-N3	88.98(4)
Cl1	-Cu1	-Cl1_a	95.55(2)
N1	-Cu1	-N2	94.12(6)
N1	-Cu1	-N3	175.17(6)
Cl1_a	-Cu1	-N1	91.63(5)
N2	-Cu1	-N3	82.77(6)
Cl1_a	-Cu1	-N2	150.49(5)
Cl1_a	-Cu1	-N3	92.88(5)
Cu1	-Cl1	-Cu1_b	107.58(2)
H2C	-O2	-H2D	98.1(19)
H3A	-O3	-H3B	104.9(19)
Cu1	-N1	-C1	111.07(12)
Cu1	-N2	-C3	130.45(14)
C3	-N2	-C4	115.20(16)
Cu1	-N2	-C4	113.80(12)
Cu1	-N3	-C9	124.99(13)
C5	-N3	-C9	119.50(16)
Cu1	-N3	-C5	115.51(12)
H1C	-N1	-H1D	107(2)
C1	-N1	-H1C	110.5(13)
C1	-N1	-H1D	107.1(15)
Cu1	-N1	-H1C	110.4(13)
Cu1	-N1	-H1D	110.8(16)
N1	-C1	-C2	112.21(17)
C1	-C2	-C3	118.80(17)
N2	-C3	-C2	118.45(18)
C6	-C7	-H7	120.00
C7	-C8	-H8	121.00
C9	-C8	-H8	121.00
O1	-C3	-C2	117.31(17)
O1	-C3	-N2	124.24(19)
N2	-C4	-C5	110.32(17)
C4	-C5	-C6	122.63(19)
N3	-C5	-C4	116.29(17)
N3	-C5	-C6	121.08(17)
C5	-C6	-C7	119.1(2)
C6	-C7	-C8	119.53(19)
C7	-C8	-C9	118.46(19)
N3	-C9	-C8	122.30(19)
N1	-C1	-H1A	109.00
C2	-C1	-H1B	109.00
H1A	-C1	-H1B	108.00
N1	-C1	-H1B	109.00
C2	-C1	-H1A	109.00
C3	-C2	-H2A	108.00
C1	-C2	-H2A	108.00
C1	-C2	-H2B	108.00
H2A	-C2	-H2B	107.00
C3	-C2	-H2B	108.00
N2	-C4	-H4B	110.00
C5	-C4	-H4A	110.00
H4A	-C4	-H4B	108.00
C5	-C4	-H4B	110.00
N2	-C4	-H4A	110.00
C5	-C6	-H6	121.00
C7	-C6	-H6	120.00
C8	-C7	-H7	120.00
C8	-C9	-H9	119.00
N3	-C9	-H9	119.00