

## ***Electronic Supplementary Information (ESI)***

### **3d–4f Heterometallic trinuclear complexes derived from amine-phenol tripodal ligand exhibiting magnetic and luminescent properties**

**He-Rui Wen,<sup>\*a</sup> Piao-Ping Dong,<sup>a</sup> Sui-Jun Liu,<sup>a</sup> Jin-Sheng Liao,<sup>a</sup> Fu-Yong Liang<sup>a</sup> and Cai-Ming Liu<sup>\*b</sup>**

*<sup>a</sup>School of Metallurgical and Chemical Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou, 341000, China. E-mail: wenherui63@163.com (H.-R. Wen)*

*<sup>b</sup>Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, Center for Molecular Science, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China. E-mail: cmliu@iccas.ac.cn (C.-M. Liu)*

**Table S1.** Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **1**

Gd1—O8	2.193(4)	Ni1—O3	2.075(4)
Gd1—O9	2.327(3)	Ni1—N1	2.134(5)
Gd1—O5	2.334(4)	Ni1—N2	2.154(5)
Gd1—O11	2.342(4)	Ni1—N4	2.236(5)
Gd1—O3	2.370(4)	Ni2—O9	2.057(4)
Gd1—O4	2.594(4)	Ni2—O11	2.065(3)
Gd1—O10	2.603(4)	Ni2—N8	2.073(4)
Gd1—O2	2.654(4)	Ni2—N6	2.111(5)
Ni1—O5	2.059(4)	Ni2—N5	2.145(5)
Ni1—N3	2.068(4)	Ni2—N7	2.202(5)
O8—Gd1—O9	96.47(13)	O5—Ni1—O3	76.13(14)
O8—Gd1—O5	139.77(14)	N3—Ni1—O3	90.29(16)
O9—Gd1—O5	86.40(12)	O5—Ni1—N1	80.26(16)
O8—Gd1—O11	87.09(14)	N3—Ni1—N1	99.91(18)
O9—Gd1—O11	67.32(12)	O3—Ni1—N1	95.84(16)
O5—Gd1—O11	129.82(13)	O5—Ni1—N2	110.73(16)
O8—Gd1—O3	146.23(13)	N3—Ni1—N2	82.70(18)
O9—Gd1—O3	109.18(12)	O3—Ni1—N2	171.84(16)
O5—Gd1—O3	65.59(12)	N1—Ni1—N2	81.35(18)
O11—Gd1—O3	83.14(13)	O5—Ni1—N4	85.09(15)
O8—Gd1—O4	82.99(13)	N3—Ni1—N4	100.06(17)
O9—Gd1—O4	142.09(12)	O3—Ni1—N4	104.44(16)
O5—Gd1—O4	118.09(12)	N1—Ni1—N4	151.32(18)
O11—Gd1—O4	74.80(12)	N2—Ni1—N4	81.00(17)
O3—Gd1—O4	63.26(12)	O9—Ni2—O11	77.80(14)
O8—Gd1—O10	73.68(13)	O9—Ni2—N8	90.81(16)
O9—Gd1—O10	64.09(12)	O11—Ni2—N8	168.56(17)
O5—Gd1—O10	71.70(12)	O9—Ni2—N6	173.84(16)
O11—Gd1—O10	124.55(12)	O11—Ni2—N6	107.26(17)
O3—Gd1—O10	137.18(12)	N8—Ni2—N6	84.04(18)
O4—Gd1—O10	147.84(12)	O9—Ni2—N5	95.16(16)
O8—Gd1—O2	69.49(14)	O11—Ni2—N5	80.85(16)
O9—Gd1—O2	145.26(12)	N8—Ni2—N5	99.30(18)
O5—Gd1—O2	85.50(13)	N6—Ni2—N5	82.38(19)
O11—Gd1—O2	139.28(13)	O9—Ni2—N7	101.97(17)
O3—Gd1—O2	97.96(12)	O11—Ni2—N7	85.66(16)
O4—Gd1—O2	69.78(12)	N8—Ni2—N7	97.95(19)
O10—Gd1—O2	81.30(12)	N6—Ni2—N7	82.15(19)
O5—Ni1—N3	166.33(17)	N5—Ni2—N7	155.43(18)
Ni1—O3—Gd1	108.02(15)	Ni2—O9—Gd1	107.21(15)
Ni1—O5—Gd1	109.92(15)	Ni2—O11—Gd1	106.40(15)

**Table S2.** Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **2**

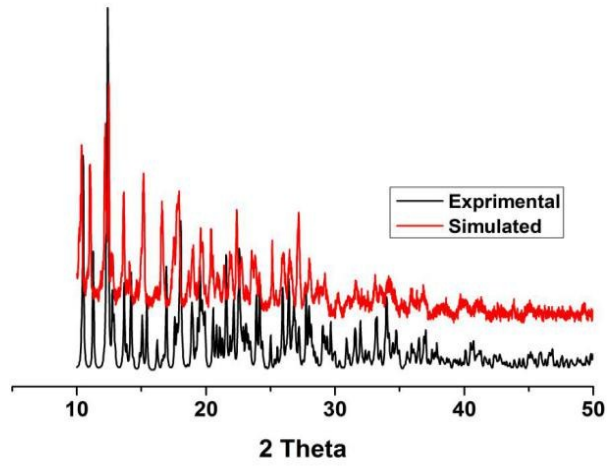
Dy1—O8	2.142(4)	Ni1—O5	2.069(3)
Dy1—O9	2.281(3)	Ni1—N1	2.097(4)
Dy1—O5	2.286(4)	Ni1—N2	2.129(5)
Dy1—O11	2.303(4)	Ni1—N4	2.227(5)
Dy1—O3	2.329(3)	Ni2—O9	2.040(4)
Dy1—O4	2.580(4)	Ni2—O11	2.042(3)
Dy1—O10	2.607(4)	Ni2—N8	2.052(5)
Dy1—O2	2.646(4)	Ni2—N6	2.101(5)
Ni1—O3	2.052(4)	Ni2—N5	2.120(5)
Ni1—N3	2.068(5)	Ni2—N7	2.192(5)
O8—Dy1—O9	96.94(14)	O3—Ni1—O5	76.52(14)
O8—Dy1—O5	138.04(14)	N3—Ni1—O5	166.19(16)
O9—Dy1—O5	86.41(12)	O3—Ni1—N1	96.09(16)
O8—Dy1—O11	88.37(14)	N3—Ni1—N1	99.86(19)
O9—Dy1—O11	68.13(12)	O5—Ni1—N1	80.79(16)
O5—Dy1—O11	130.50(13)	O3—Ni1—N2	171.82(16)
O8—Dy1—O3	145.35(14)	N3—Ni1—N2	83.19(18)
O9—Dy1—O3	110.09(13)	O5—Ni1—N2	110.45(16)
O5—Dy1—O3	67.15(12)	N1—Ni1—N2	81.19(18)
O11—Dy1—O3	82.30(13)	O3—Ni1—N4	104.66(17)
O8—Dy1—O4	82.73(13)	N3—Ni1—N4	99.93(19)
O9—Dy1—O4	142.84(12)	O5—Ni1—N4	84.88(16)
O5—Dy1—O4	118.40(12)	N1—Ni1—N4	151.24(19)
O11—Dy1—O4	74.72(12)	N2—Ni1—N4	80.68(19)
O3—Dy1—O4	62.62(12)	O9—Ni2—O11	77.94(14)
O8—Dy1—O10	72.72(14)	O9—Ni2—N8	89.75(17)
O9—Dy1—O10	64.06(12)	O11—Ni2—N8	167.69(17)
O5—Dy1—O10	71.41(12)	O9—Ni2—N6	173.12(18)
O11—Dy1—O10	125.20(12)	O11—Ni2—N6	107.73(17)
O3—Dy1—O10	138.48(12)	N8—Ni2—N6	84.5(2)
O4—Dy1—O10	146.82(12)	O9—Ni2—N5	94.43(17)
O8—Dy1—O2	69.75(14)	O11—Ni2—N5	81.54(17)
O9—Dy1—O2	144.94(13)	N8—Ni2—N5	99.1(2)
O5—Dy1—O2	83.70(13)	N6—Ni2—N5	82.8(2)
O11—Dy1—O2	139.93(13)	O9—Ni2—N7	103.63(17)
O3—Dy1—O2	96.79(12)	O11—Ni2—N7	84.95(17)
O4—Dy1—O2	69.66(12)	N8—Ni2—N7	98.7(2)
O10—Dy1—O2	80.91(12)	N6—Ni2—N7	81.0(2)
O3—Ni1—N3	89.72(16)	N5—Ni2—N7	154.6(2)
Ni2—O11—Dy1	105.95(15)	Ni1—O5—Dy1	108.56(14)
Ni2—O9—Dy1	106.82(14)	Ni1—O3—Dy1	107.57(14)

**Table S3.** Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **3**

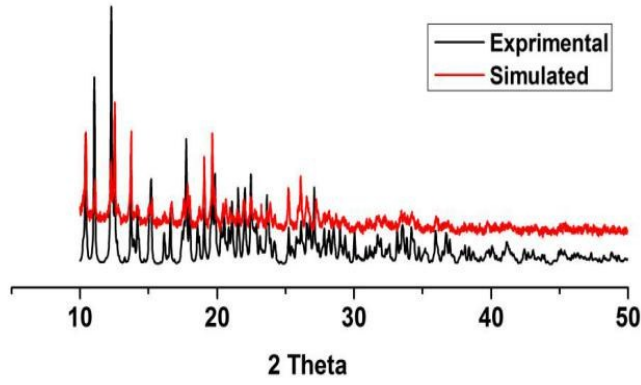
Gd1—O8	2.190(4)	Zn1—N3	2.113(5)
Gd1—O11	2.312(4)	Zn1—N1	2.168(5)
Gd1—O5	2.313(4)	Zn1—N2	2.236(5)
Gd1—O9	2.334(4)	Zn1—N4	2.266(5)
Gd1—O3	2.364(4)	Zn2—O11	2.062(4)
Gd1—O4	2.604(4)	Zn2—O9	2.071(4)
Gd1—O10	2.607(4)	Zn2—N8	2.114(5)
Gd1—O2	2.612(4)	Zn2—N5	2.191(5)
Zn1—O3	2.083(4)	Zn2—N6	2.196(5)
Zn1—O5	2.090(4)	Zn2—N7	2.280(5)
O8—Gd1—O11	88.49(15)	O3—Zn1—N3	89.29(17)
O8—Gd1—O5	139.27(15)	O5—Zn1—N3	165.32(18)
O11—Gd1—O5	128.67(14)	O3—Zn1—N1	98.14(17)
O8—Gd1—O9	97.13(14)	O5—Zn1—N1	80.79(17)
O11—Gd1—O9	67.49(13)	N3—Zn1—N1	101.71(19)
O5—Gd1—O9	85.21(13)	O3—Zn1—N2	169.61(16)
O8—Gd1—O3	146.16(14)	O5—Zn1—N2	113.24(17)
O11—Gd1—O3	81.41(13)	N3—Zn1—N2	81.40(19)
O5—Gd1—O3	66.65(13)	N1—Zn1—N2	79.39(18)
O9—Gd1—O3	108.36(13)	O3—Zn1—N4	107.30(16)
O8—Gd1—O4	83.53(14)	O5—Zn1—N4	85.34(16)
O11—Gd1—O4	74.41(12)	N3—Zn1—N4	99.23(18)
O5—Gd1—O4	118.69(13)	N1—Zn1—N4	147.06(19)
O9—Gd1—O4	141.85(13)	N2—Zn1—N4	78.93(17)
O3—Gd1—O4	62.66(13)	O11—Zn2—O9	77.27(15)
O8—Gd1—O10	73.91(14)	O11—Zn2—N8	166.86(18)
O11—Gd1—O10	124.67(12)	O9—Zn2—N8	89.59(17)
O5—Gd1—O10	70.94(13)	O11—Zn2—N5	81.96(16)
O9—Gd1—O10	63.53(12)	O9—Zn2—N5	96.59(17)
O3—Gd1—O10	137.41(13)	N8—Zn2—N5	99.9(2)
O4—Gd1—O10	149.10(12)	O11—Zn2—N6	110.21(17)
O8—Gd1—O2	69.60(14)	O9—Zn2—N6	171.34(17)
O11—Gd1—O2	139.66(14)	N8—Zn2—N6	82.90(19)
O5—Gd1—O2	85.82(14)	N5—Zn2—N6	80.54(19)
O9—Gd1—O2	145.85(13)	O11—Zn2—N7	84.37(16)
O3—Gd1—O2	98.04(13)	O9—Zn2—N7	106.30(17)
O4—Gd1—O2	69.91(13)	N8—Zn2—N7	99.4(2)
O10—Gd1—O2	82.40(12)	N5—Zn2—N7	149.96(19)
O3—Zn1—O5	76.03(15)	N6—Zn2—N7	79.3(2)
Zn1—O3—Gd1	107.71(15)	Zn2—O9—Gd1	106.40(15)
Zn1—O5—Gd1	109.34(16)	Zn2—O11—Gd1	107.48(16)

**Table S4.** Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **4**

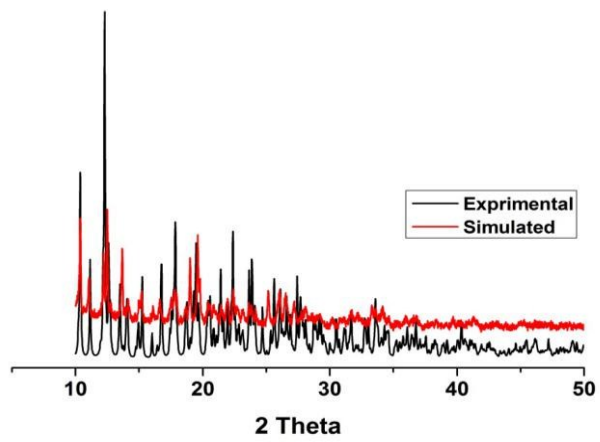
Dy1—O8	2.171(4)	Zn1—N3	2.116(5)
Dy1—O11	2.290(4)	Zn1—N1	2.169(4)
Dy1—O5	2.295(3)	Zn1—N2	2.245(5)
Dy1—O9	2.310(3)	Zn1—N4	2.267(5)
Dy1—O3	2.340(3)	Zn2—O11	2.068(3)
Dy1—O10	2.602(4)	Zn2—O9	2.077(4)
Dy1—O4	2.614(4)	Zn2—N8	2.112(5)
Dy1—O2	2.638(4)	Zn2—N5	2.190(5)
Zn1—O3	2.084(4)	Zn2—N6	2.218(5)
Zn1—O5	2.102(3)	Zn2—N7	2.278(5)
O8—Dy1—O11	88.52(15)	O3—Zn1—N3	89.17(16)
O8—Dy1—O5	138.02(14)	O5—Zn1—N3	164.73(16)
O11—Dy1—O5	130.35(13)	O3—Zn1—N1	98.44(15)
O8—Dy1—O9	97.95(14)	O5—Zn1—N1	81.26(15)
O11—Dy1—O9	67.82(12)	N3—Zn1—N1	101.32(18)
O5—Dy1—O9	85.84(12)	O3—Zn1—N2	169.57(16)
O8—Dy1—O3	145.78(13)	O5—Zn1—N2	113.88(16)
O11—Dy1—O3	81.73(12)	N3—Zn1—N2	81.34(18)
O5—Dy1—O3	67.19(12)	N1—Zn1—N2	79.33(17)
O9—Dy1—O3	108.30(12)	O3—Zn1—N4	107.51(16)
O8—Dy1—O10	73.29(14)	O5—Zn1—N4	85.49(16)
O11—Dy1—O10	124.83(12)	N3—Zn1—N4	99.41(18)
O5—Dy1—O10	71.05(12)	N1—Zn1—N4	146.82(18)
O9—Dy1—O10	64.08(12)	N2—Zn1—N4	78.52(18)
O3—Dy1—O10	138.04(12)	O11—Zn2—O9	76.51(13)
O8—Dy1—O4	82.96(13)	O11—Zn2—N8	165.94(17)
O11—Dy1—O4	74.32(12)	O9—Zn2—N8	89.45(17)
O5—Dy1—O4	118.55(12)	O11—Zn2—N5	82.10(16)
O9—Dy1—O4	142.06(12)	O9—Zn2—N5	96.65(16)
O3—Dy1—O4	62.83(12)	N8—Zn2—N5	100.4(2)
O10—Dy1—O4	148.09(11)	O11—Zn2—N6	111.63(17)
O8—Dy1—O2	69.89(14)	O9—Zn2—N6	170.66(17)
O11—Dy1—O2	139.29(13)	N8—Zn2—N6	82.4(2)
O5—Dy1—O2	84.12(12)	N5—Zn2—N6	80.4(2)
O9—Dy1—O2	146.61(13)	O11—Zn2—N7	84.51(17)
O3—Dy1—O2	96.90(12)	O9—Zn2—N7	107.18(17)
O10—Dy1—O2	82.54(12)	N8—Zn2—N7	99.3(2)
O4—Dy1—O2	69.23(12)	N5—Zn2—N7	149.0(2)
O3—Zn1—O5	75.56(13)	N6—Zn2—N7	78.8(2)
Zn1—O3—Dy1	108.01(14)	Zn2—O9—Dy1	106.72(14)
Zn1—O5—Dy1	109.07(14)	Zn2—O11—Dy1	107.80(15)



1



2



3

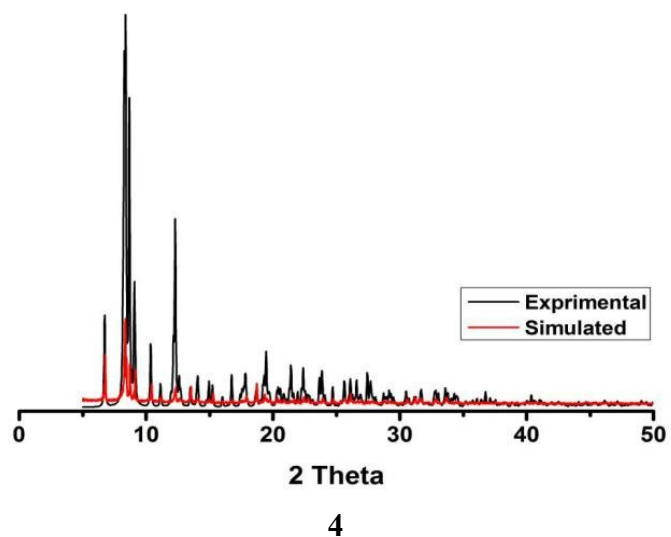


Fig. S1 The PXRD of 1-4

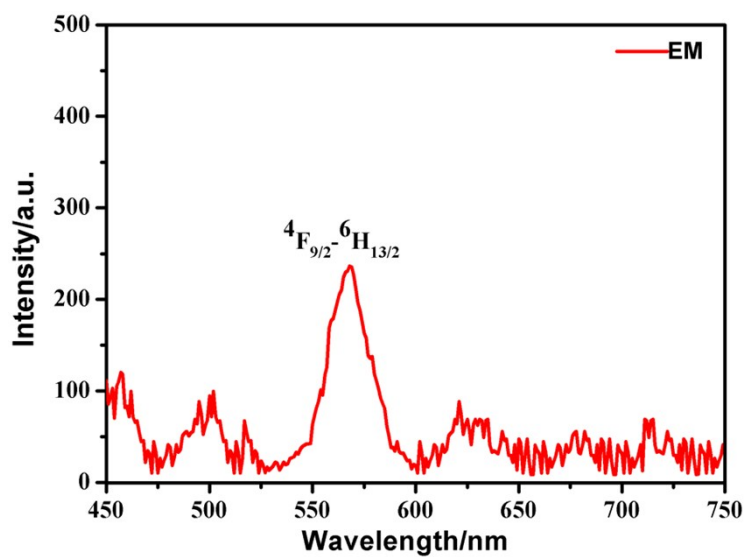


Fig. S2 The emission spectrum of complex 2 at 573 nm ( $\lambda_{ex} = 306$  nm)