

## Three chiral one-dimensional lanthanide–ditoluoyl-tartrate bifunctional polymers exhibiting luminescence and magnetic behaviors

*Mei-rong Han<sup>a†</sup>, Han-tao Zhang<sup>a†</sup>, Jia-nan Wang<sup>a</sup>, Si-si Feng<sup>\*a,b</sup>, Li-ping Lu<sup>\*a,b</sup>*

<sup>a</sup>Institute of Molecular Science, Key Laboratory of Chemical Biology and Molecular Engineering of the Education Ministry, Shanxi University, Taiyuan, Shanxi 030006, P. R. China.

<sup>b</sup>Key Laboratory of Materials for Energy Conversion and Storage of Shanxi Province; Shanxi University, Taiyuan, Shanxi, 030006, P. R. China.

**Table S1.** Selected bond lengths (Å), Ln...Ln distances (Å) and angles (°) for **1–3**

1					
Tb1—O4 <sup>i</sup>	2.302 (6)	Tb1—O1 <sup>iv</sup>	2.347 (5)	Tb1—O9 <sup>v</sup>	2.554 (8)
Tb1—O4 <sup>ii</sup>	2.302 (6)	Tb1—O1 <sup>v</sup>	2.347 (5)	Tb1—O9	2.554 (8)
Tb1—O4 <sup>iii</sup>	2.302 (6)	Tb1—O1	2.347 (5)	Tb1—O9 <sup>iv</sup>	2.554 (8)
Tb1...Tb1	7.6178(5)				
O4 <sup>i</sup> —Tb1—O4 <sup>ii</sup>	80.3 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O1 <sup>iv</sup>	85.2 (2)	O4 <sup>i</sup> —Tb1—O1	85.3 (2)
O4 <sup>i</sup> —Tb1—O4 <sup>iii</sup>	80.3 (2)	O4 <sup>i</sup> —Tb1—O1 <sup>v</sup>	140.2 (2)	O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O1	133.3 (2)
O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O4 <sup>iii</sup>	80.3 (2)	O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O1 <sup>v</sup>	85.3 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O1	140.2 (2)
O4 <sup>i</sup> —Tb1—O1 <sup>iv</sup>	133.3 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O1 <sup>v</sup>	133.3 (2)	O1 <sup>iv</sup> —Tb1—O1	78.2 (2)
O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O1 <sup>iv</sup>	140.2 (2)	O1 <sup>iv</sup> —Tb1—O1 <sup>v</sup>	78.2 (2)	O1 <sup>v</sup> —Tb1—O1	78.2 (2)
O4 <sup>i</sup> —Tb1—O9 <sup>v</sup>	69.7 (3)	O4 <sup>i</sup> —Tb1—O9	140.3 (3)	O9 <sup>v</sup> —Tb1—O9	119.86 (3)
O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O9 <sup>v</sup>	140.3 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O9	69.7 (3)	O4 <sup>i</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	69.7 (3)
O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O9 <sup>v</sup>	69.7 (3)	O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O9	69.7 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	69.7 (3)
O1 <sup>iv</sup> —Tb1—O9 <sup>v</sup>	63.7 (2)	O1 <sup>iv</sup> —Tb1—O9	70.6 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	140.3 (3)
O1 <sup>v</sup> —Tb1—O9 <sup>v</sup>	134.4 (2)	O1 <sup>v</sup> —Tb1—O9	63.7 (2)	O1 <sup>iv</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	134.4 (2)

O1—Tb1—O9 <sup>v</sup>	70.6 (3)	O1—Tb1—O9	134.4 (2)	O1 <sup>v</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	70.6 (3)
O1—Tb1—O9 <sup>iv</sup>	63.7 (2)	O9 <sup>v</sup> —Tb1—O9 <sup>iv</sup>	119.86 (3)	O9—Tb1—O9 <sup>iv</sup>	119.86 (3)

Symmetry codes: (i)  $x, y, z - 1$ ; (ii)  $-y + 1, x - y + 1, z - 1$ ; (iii)  $-x + y, -x + 1, z - 1$ ; (iv)  $-x + y, -x + 1, z$ ; (v)  $-y + 1, x - y + 1, z$ ; (vi)  $x, y, z + 1$ .

**2**

Dy1—O4 <sup>i</sup>	2.304 (5)	Dy1—O1 <sup>iv</sup>	2.355 (4)	Dy1—O9 <sup>v</sup>	2.576 (5)
Dy1—O4 <sup>ii</sup>	2.304 (5)	Dy1—O1	2.355 (4)	Dy1—O9 <sup>iv</sup>	2.576 (5)
Dy1—O4 <sup>iii</sup>	2.304 (5)	Dy1—O1 <sup>v</sup>	2.355 (4)	Dy1—O9	2.576 (5)
Dy1...Dy1	7.6520 (5)				
O4 <sup>i</sup> —Dy1—O4 <sup>iii</sup>	79.20 (1)	O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O1	86.85 (1)	O4 <sup>i</sup> —Dy1—O9 <sup>v</sup>	139.64 (1)
O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O4 <sup>iii</sup>	79.20 (1)	O1 <sup>iv</sup> —Dy1—O1	76.83 (1)	O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O9 <sup>v</sup>	70.32 (1)
O4 <sup>i</sup> —Dy1—O1 <sup>iv</sup>	134.36 (1)	O4 <sup>i</sup> —Dy1—O1 <sup>v</sup>	86.84 (1)	O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O9 <sup>v</sup>	69.77 (1)
O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O1 <sup>iv</sup>	86.85 (1)	O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O1 <sup>v</sup>	140.38 (1)	O1 <sup>iv</sup> —Dy1—O9 <sup>v</sup>	70.62 (1)
O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O1 <sup>iv</sup>	140.38 (1)	O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O1 <sup>v</sup>	134.36 (1)	O1—Dy1—O9 <sup>v</sup>	64.08 (1)
O4 <sup>i</sup> —Dy1—O1	140.38 (1)	O1 <sup>iv</sup> —Dy1—O1 <sup>v</sup>	76.83 (1)	O1 <sup>v</sup> —Dy1—O9 <sup>v</sup>	133.40 (1)
O4 <sup>i</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	69.77 (1)	O9 <sup>v</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	119.848 (1)	O1 <sup>v</sup> —Dy1—O9	70.62 (1)
O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	139.64 (1)	O4 <sup>i</sup> —Dy1—O9	70.32 (1)	O9 <sup>v</sup> —Dy1—O9	119.850 (1)
O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	70.32 (1)	O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O9	69.77 (1)	O9 <sup>iv</sup> —Dy1—O9	119.847 (1)
O1 <sup>iv</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	133.40 (1)	O4 <sup>iii</sup> —Dy1—O9	139.64 (1)	O1 <sup>v</sup> —Dy1—O9 <sup>iv</sup>	64.08 (1)
O1—Dy1—O9 <sup>iv</sup>	70.62 (1)	O1 <sup>iv</sup> —Dy1—O9	64.08 (1)	O1—Dy1—O9	133.40 (1)
O4 <sup>i</sup> —Dy1—O4 <sup>ii</sup>	79.20 (1)	O4 <sup>ii</sup> —Dy1—O1	134.36 (1)	O1—Dy1—O1 <sup>v</sup>	76.83 (1)

Symmetry codes : (i)  $-x + y, -x, z - 1$ ; (ii)  $-y, x - y, z - 1$ ; (iii)  $x, y, z - 1$ ; (iv)  $-y, x - y, z$ ; (v)  $-x + y, -x, z$ ; (vi)  $x, y, z + 1$ .

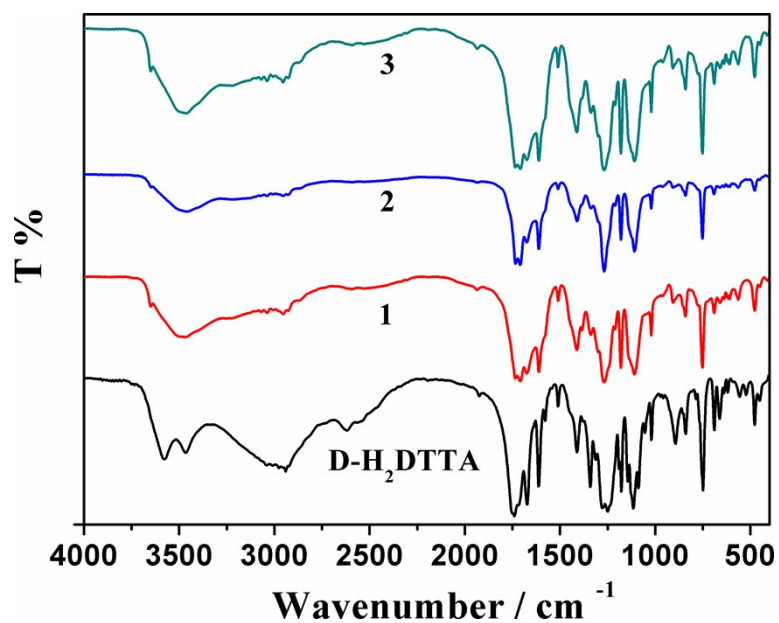
Ho1—O4 <sup>i</sup>	2.297 (8)	Ho1—O1	2.329 (9)	Ho1—O9 <sup>iv</sup>	2.554 (7)
Ho1—O4 <sup>ii</sup>	2.297 (8)	Ho1—O1 <sup>iv</sup>	2.329 (9)	Ho1—O9	2.554 (7)
Ho1—O4 <sup>iii</sup>	2.297 (8)	Ho1—O1 <sup>v</sup>	2.329 (9)	Ho1—O9 <sup>v</sup>	2.554 (7)
Ho1...Ho1	7.6372(5)				
O4 <sup>i</sup> —Ho1—O4 <sup>ii</sup>	79.6 (3)	O4 <sup>i</sup> —Ho1—O1 <sup>iv</sup>	134.4 (4)	O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O1 <sup>v</sup>	134.4 (4)
O4 <sup>i</sup> —Ho1—O4 <sup>iii</sup>	79.6 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O1 <sup>iv</sup>	86.6 (3)	O1—Ho1—O1 <sup>v</sup>	76.9 (3)
O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O4 <sup>iii</sup>	79.6 (3)	O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O1 <sup>iv</sup>	140.1 (4)	O1 <sup>iv</sup> —Ho1—O1 <sup>v</sup>	76.9 (3)
O4 <sup>i</sup> —Ho1—O1	140.1 (4)	O1—Ho1—O1 <sup>iv</sup>	76.9 (3)	O4 <sup>i</sup> —Ho1—O9 <sup>iv</sup>	70.1 (4)
O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O1	134.4 (4)	O4 <sup>i</sup> —Ho1—O1 <sup>v</sup>	86.6 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O9 <sup>iv</sup>	140.3 (3)
O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O1	86.6 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O1 <sup>v</sup>	140.1 (4)	O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O9 <sup>iv</sup>	70.4 (3)
O1—Ho1—O9 <sup>iv</sup>	70.0 (3)	O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O9	140.3 (3)	O4 <sup>i</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	140.3 (3)
O1 <sup>iv</sup> —Ho1—O9 <sup>iv</sup>	133.0 (3)	O1—Ho1—O9	133.0 (3)	O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	70.4 (3)
O1 <sup>v</sup> —Ho1—O9 <sup>iv</sup>	64.0 (4)	O1 <sup>iv</sup> —Ho1—O9	64.0 (4)	O4 <sup>iii</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	70.1 (4)
O4 <sup>i</sup> —Ho1—O9	70.4 (3)	O1 <sup>v</sup> —Ho1—O9	70.0 (3)	O1—Ho1—O9 <sup>v</sup>	64.0 (4)
O4 <sup>ii</sup> —Ho1—O9	70.1 (4)	O9 <sup>iv</sup> —Ho1—O9	119.78 (4)	O1 <sup>iv</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	70.0 (3)
O1 <sup>v</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	133.0 (3)	O9 <sup>iv</sup> —Ho1—O9 <sup>v</sup>	119.79 (4)	O9—Ho1—O9 <sup>v</sup>	119.78 (3)

Symmetry codes: (i)  $-x + y, -x, z - 1$ ; (ii)  $-y, x - y, z - 1$ ; (iii)  $x, y, z - 1$ ; (iv)  $-y, x - y, z$ ; (v)  $-x + y, -x, z$ ; (vi)  $x, y, z + 1$ .

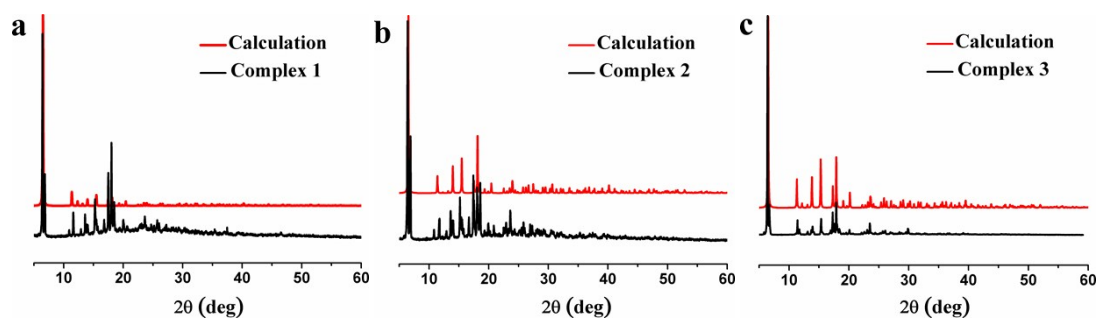
**Table S2.** Hydrogen-bond geometry (Å, °) for **1**

D—H...A	D—H	H...A	D...A	D—H...A
O9—H9...O6 <sup>i</sup>	0.93	2.08	2.960 (14)	157
O2—H2...O3 <sup>ii</sup>	0.83	1.66	2.471 (9)	166
C18 <sup>vi</sup> —H18 <sup>vi</sup> ...Cg <sup>iii</sup>	0.93	2.55	3.419(7)	155

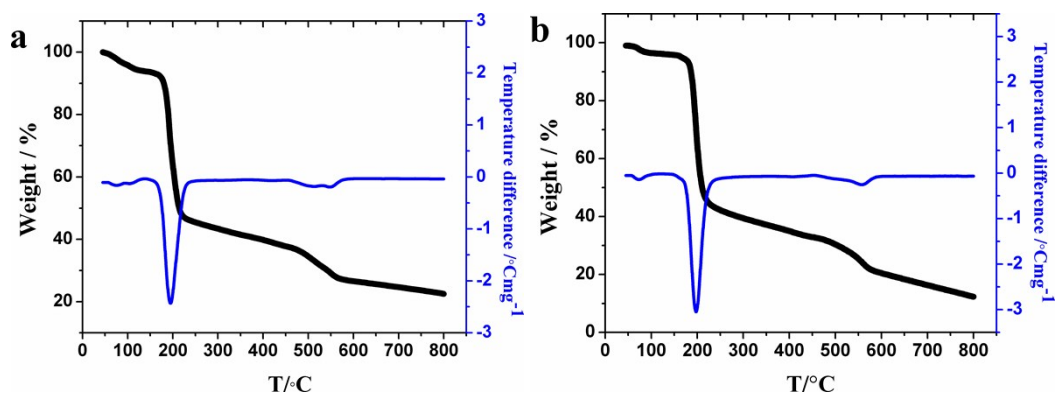
Symmetry codes: (i)  $-x + y, -x + 1, z$ ; (ii)  $x, y, z - 1$ ; (iii)  $x, y, z - 1$ ; (vi)  $x, y, z - 3$ .



**Figure S1.** IR spectra for D-H<sub>2</sub>DTTA and 1–3 (KBr, cm<sup>-1</sup>)



**Figure S2.** The PXRD patterns of complexes 1–3 (calculation and experiment) at room temperature.



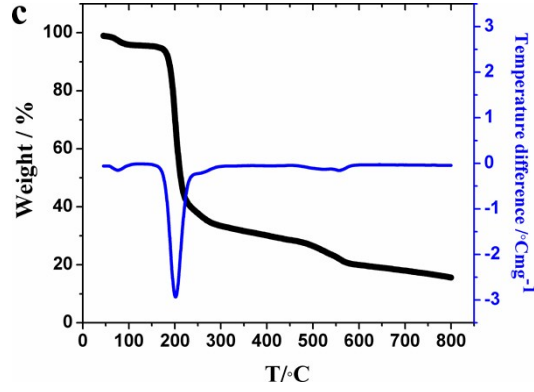


Figure S3. TGA plots of complexes 1–3.

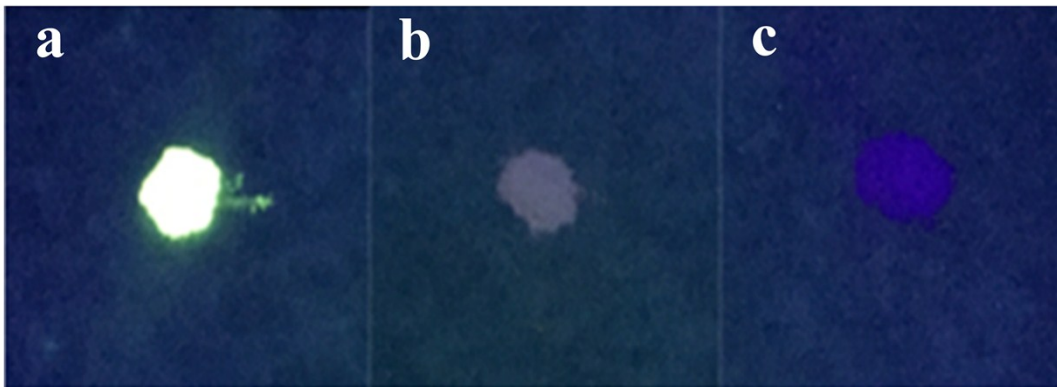


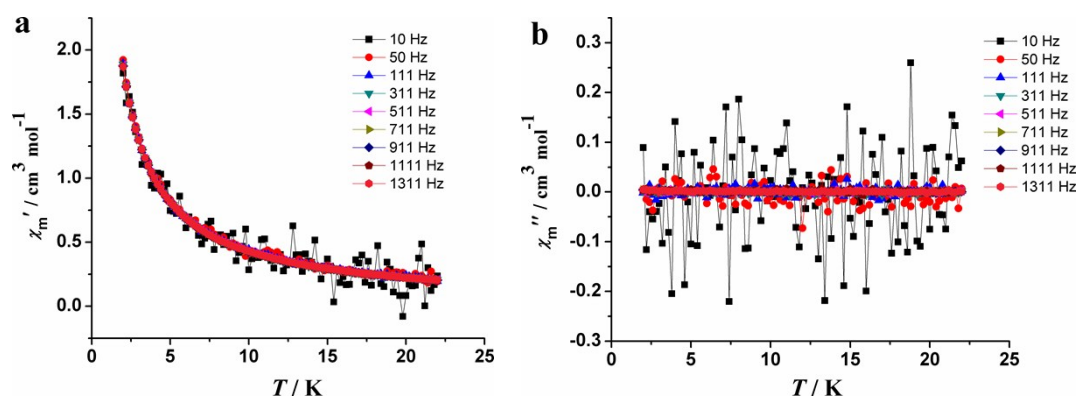
Figure S4. Digital photograph of complexes 1–3 under irradiation of UV light.

**Scheme S1.** Mathematical expressions describing the temperature dependence of the magnetic susceptibility due to the depopulation of the excited Stark levels.

$$\chi_{\text{Tb}} = \frac{\text{Ng}^2 \beta^2}{\text{kT}} \frac{2e^{-\Delta/\text{kT}} + 4e^{-2\Delta/\text{kT}} + 18e^{-9\Delta/\text{kT}} + 32e^{-16\Delta/\text{kT}} + 50e^{-25\Delta/\text{kT}} + 72e^{-36\Delta/\text{kT}}}{1 + 2e^{-\Delta/\text{kT}} + 2e^{-2\Delta/\text{kT}} + 2e^{-9\Delta/\text{kT}} + 2e^{-16\Delta/\text{kT}} + 2e^{-25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-36\Delta/\text{kT}}}$$

$$\chi_{\text{Dy}} = \frac{\text{Ng}^2 \beta^2}{\text{kT}} \frac{0.5e^{-0.25\Delta/\text{kT}} + 4.5e^{-2.25\Delta/\text{kT}} + 12.5e^{-6.25\Delta/\text{kT}} + 24.5e^{-12.25\Delta/\text{kT}} + 40.5e^{-20.25\Delta/\text{kT}} + 60.5e^{-30.25\Delta/\text{kT}} + 84.5e^{-42.25\Delta/\text{kT}} + 112.5e^{-56.25\Delta/\text{kT}}}{1 + 2e^{-0.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-2.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-6.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-12.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-20.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-30.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-42.25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-56.25\Delta/\text{kT}}}$$

$$\chi_{\text{Ho}} = \frac{\text{Ng}^2 \beta^2}{\text{kT}} \frac{2e^{-\Delta/\text{kT}} + 8e^{-4\Delta/\text{kT}} + 18e^{-9\Delta/\text{kT}} + 32e^{-16\Delta/\text{kT}} + 50e^{-25\Delta/\text{kT}} + 72e^{-36\Delta/\text{kT}} + 98e^{-49\Delta/\text{kT}} + 128e^{-64\Delta/\text{kT}}}{1 + 2e^{-\Delta/\text{kT}} + 2e^{-4\Delta/\text{kT}} + 2e^{-9\Delta/\text{kT}} + 2e^{-16\Delta/\text{kT}} + 2e^{-25\Delta/\text{kT}} + 2e^{-36\Delta/\text{kT}} + 2e^{-49\Delta/\text{kT}} + 2e^{-64\Delta/\text{kT}}}$$



**Figure S5.** (a) In-phase  $ac$  magnetic susceptibility ( $\chi_m'$ ) and (b) out-of-phase  $ac$  magnetic susceptibility ( $\chi_m''$ ) for **1** at temperatures from 2 to 22 K.