Supporting Information

Synthesis, Structure, Fluorescent and Magnetic Properties of a Series of Coordination Polymers Based on a Long and Flexible Bis-triazole Ligand

Nan Wang, Yue-Chao Feng, Wei Shi, Bin Zhao, Peng Cheng^{*}, Dai-Zheng Liao and Shi-Ping Yan

Department of Chemistry and Key Laboratory of Advanced Energy Materials Chemistry (MOE), Nankai University, Tianjin 300071, China

Catalogue:

Fig. S1 The PXRD patterns of compounds 1-6.

Fig. S2 The plots of TGA for compounds 1-6.

Fig. S3 The decay curves for BTPM and compounds 1-4.

Table S1 Selected bond lengths (Å) and angles (°) for compounds 1-6.

Table S2 The overall formula, formula weight, density and F(000) for 1 and 2.

^{*} Corresponding author. E-mail: <u>pcheng@nankai.edu.cn</u>.







Fig. S1 The PXRD patterns of compounds 1-6.



Fig. S2 The plots of TGA for compounds 1-6.





Fig. S3 The decay curves for BTPM and compounds 1-4.

	1		
Zn1—04	2.028(6)	Zn2—N5 ⁱ	2.171(4)
Zn1—01	2.127(7)	Zn2—N5 ⁱⁱ	2.171(4)
Zn1—N4	2.163(5)	Zn2—N5	2.171(4)
Zn1—N4 ⁱ	2.163(5)	Zn3—O2 ^{iv}	2.081(6)
Zn1—N2 ⁱ	2.185(5)	Zn3—O2	2.081(6)
Zn1—N2	2.185(5)	Zn3—N1 ⁱ	2.184(4)
Zn2—O3 ⁱⁱ	2.081(6)	Zn3—N1 ^v	2.184(4)
Zn2—O3	2.081(6)	Zn3—N1	2.184(4)
Zn2—N5 ⁱⁱⁱ	2.171(4)	Zn3—N1 ^{iv}	2.184(4)
O4—Zn1—O1	<mark>180</mark>	N5 ⁱⁱⁱ —Zn2—N5 ⁱ	<mark>180</mark>
O4—Zn1—N4	94.76(9)	O3 ⁱⁱ —Zn2—N5 ⁱⁱ	93.13(11)
O1—Zn1—N4	84.73(9)	O3—Zn2—N5 ⁱⁱ	86.87(11)
O4—Zn1—N4 ⁱ	94.76(9)	N5 ⁱⁱⁱ —Zn2—N5 ⁱⁱ	89.53(13)
O1—Zn1—N4 ⁱ	84.73(9)	N5 ⁱ —Zn2—N5 ⁱⁱ	90.47(13)
N4—Zn1—N4 ⁱ	91.00(16)	O3 ⁱⁱ —Zn2—N5	86.87(11)
O4—Zn1—N2 ⁱ	88.60(9)	O3—Zn2—N5	93.13(11)
O1—Zn1—N2 ⁱ	91.94(9)	N5 ⁱⁱⁱ —Zn2—N5	90.47(13)
N4—Zn1—N2 ⁱ	90.28(16)	N5 ⁱ —Zn2—N5	89.53(13)
$N4^{i}$ —Zn1— $N2^{i}$	176.30(15)	N5 ⁱⁱ —Zn2—N5	<mark>180</mark>
O4—Zn1—N2	88.60(9)	O2 ^{iv} —Zn3—O2	179.99(18)
01—Zn1—N2	91.94(9)	O2 ^{iv} —Zn3—N ¹ⁱ	86.27(11)
N4—Zn1—N2	176.30(15)	O2—Zn3—N1 ⁱ	93.73(11)
N4 ⁱ —Zn1—N2	90.28(16)	O2 ^{iv} —Zn3—N1 ^v	93.73(11)
N2 ⁱ —Zn1—N2	88.23(15)	O2—Zn3—N1 ^v	86.27(11)
O3 ⁱⁱ —Zn2—O3	<mark>180</mark>	N1 ⁱ —Zn3—N1 ^v	<mark>180</mark>
O3 ⁱⁱ —Zn2—N5 ⁱⁱⁱ	93.13(11)	O2 ^{iv} —Zn3—N1	86.27(11)
O3—Zn2—N5 ⁱⁱⁱ	86.87(11)	O2—Zn3—N1	93.73(11)
$O3^{ii}$ —Zn2—N5 ⁱ	86.87(11)	N1 ⁱ —Zn3—N1	90.34(13)
O3—Zn2—N5 ⁱ	93.13(11)		
		2	
Cd1—O1	2.224(5)	Cd1—N1 ⁱ	2.354(3)
Cd1—O1 ⁱ	2.224(5)	Cd1—N1	2.354(3)
Cd1—N1 ⁱⁱⁱ	2.354(3)		

Table S1 Selected bond lengths (Å) and angles (°) for compounds 1-6.

Electronic Supplemen	tary Material ((ESI) for Crys	stEngComm
This journal is © The I	Royal Society	of Chemistry	2012

N1ⁱⁱ-Cd1-N1ⁱⁱⁱ

O1-Cd1-N1ⁱ

Zn1—N7

Zn1-O2

Zn1—N2

Zn1-N13

Zn1—N4

Zn1---01

N7—Zn1—O2

N7—Zn1—N2

O2-Zn1-N2

N7—Zn1—N13

O2-Zn1-N13

N2-Zn1-N13

N7-Zn1-N4

O2-Zn1-N4

N2-Zn1-N4

N13-Zn1-N4

N7—Zn1—O1

O2-Zn1-O1

N2-Zn1-O1

N13—Zn1—O1

N4-Zn1-01

O1—Cd1—O1 ⁱ	179.98(20)
O1—Cd1—N1 ⁱⁱ	89.47(1)
O1 ⁱ —Cd1—N1 ⁱⁱ	90.53(1)
O1—Cd1—N1 ⁱⁱⁱ	93.35(9)
O1 ⁱ —Cd1—N1 ⁱⁱⁱ	86.65(9)

O1 ⁱ —Cd1—N1 ⁱ	93.35(9)	
	3	
n1—N7	2.093(7)	Zn2—O3
n1—O2	2.135(7)	Zn2—N10 ⁱ
n1—N2	2.146(6)	Zn2—N1
n1—N13	2.160(7)	Zn2—N14
n1—N4	2.175(7)	Zn2—O4
n1—O1	2.217(6)	Zn2—N5
7—Zn1—O2	89.93(23)	O3—Zn2—N10 ⁱ
7—Zn1—N2	93.76(23)	O3—Zn2—N1
2—Zn1—N2	89.11(23)	N10 ⁱ —Zn2—N1
7—Zn1—N13	94.63(23)	O3—Zn2—N14
2—Zn1—N13	173.78(23)	N10 ⁱ —Zn2—N14
2—Zn1—N13	94.79(23)	N1—Zn2—N14
7—Zn1—N4	176.67(23)	O3—Zn2—O4
2—Zn1—N4	88.32(23)	N10 ⁱ —Zn2—O4
2—Zn1—N4	89.04(23)	N1—Zn2—O4
13—Zn1—N4	86.91(23)	N14—Zn2—O4
7—Zn1—O1	89.13(23)	O3—Zn2—N5
2—Zn1—O1	88.01(23)	N10 ⁱ —Zn2—N5

50.26(8)

86.65(9)

N1ⁱⁱ—Cd1—N1ⁱ

N1ⁱⁱⁱ—Cd1—N1ⁱ

O1-Cd1-N1

O1ⁱ—Cd1—N1

N1ⁱⁱ—Cd1—N1

N1ⁱⁱⁱ—Cd1—N1

N1ⁱ-Cd1-N1

37.65(8)

87.90(12)

93.35(9)

86.65(9)

142.35(8)

92.10(12)

180.00(12)

2.119(7)

2.118(7)

2.145(7)

2.157(7)

2.176(5)

2.177(7)

91.42(23)

86.87(23)

95.47(23)

174.83(23)

90.15(23)

97.89(23)

86.02(23)

87.31(22)

172.42(22)

89.14(22)

94.03(23)

173.24(23)

88.84(23)

84.08(23)

89.06(22)

_

N1-Zn2-N5

N14—Zn2—N5

O4—Zn2—N5

175.91(23)

87.84(23)

87.98(23)

	4		
Cd1—N7	2.266(9)	Cd2—O4	2.267(8)
Cd1—O1	2.300(8)	Cd2—N10 ⁱⁱ	2.274(8)
Cd1—N4 ⁱ	2.335(8)	Cd2—N2	2.333(8)
Cd1—N13	2.347(8)	Cd2—O3	2.334(8)
Cd1—N1	2.350(8)	Cd2—N14	2.340(8)
Cd1—O2	2.369(7)	Cd2—N5 ⁱ	2.347(8)
N7—Cd1—O1	89.58(29)	O4—Cd2—N10 ⁱⁱ	90.96(27)
N7—Cd1—N4 ⁱ	177.38(29)	O4—Cd2—N2	90.14(26)
O1—Cd1—N4 ⁱ	87.80(28)	N10 ⁱⁱ —Cd2—N2	96.03(28)
N7—Cd1—N13	98.99(29)	O4—Cd2—O3	79.60(26)
O1—Cd1—N13	168.91(27)	N10 ⁱⁱ —Cd2—O3	87.92(28)

$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	N4 ⁱ —Cd1—N13	169.09(28)		
$O1-Cd1-N1$ $8862(28)$ $N10^3-Cd2-N14$ $88,4$ $N4-Cd1-N1$ $8872(28)$ $N2-Cd2-N14$ 100 $N13-Cd1-O2$ $9427(27)$ $O4-Cd2-N5^4$ $98,3$ $O1-Cd1-O2$ $8788(27)$ $N10^4-Cd2-N5^4$ $98,3$ $O1-Cd1-O2$ $8788(27)$ $N10^4-Cd2-N5^4$ $98,3$ $O1-Cd1-O2$ $8553(26)$ $N2-Cd2-N5^4$ $88,4$ $N1-Cd1-O2$ $8453(27)$ $O3-Cd2-N5^4$ $88,4$ $N1-Cd1-O2$ $8453(27)$ $O3-Cd2-N5^4$ $88,4$ $N1-Cd1-O2$ 19767 $Cu3-N29$ 1.95 $Cu1-O1$ $2.035(7)$ $Cu3-N28$ 2.21 $Cu1-N2$ $2.332(10)$ $Cu3-N4$ 1.99 $Cu1-N3$ $2.05(10)$ $Cu3-N35$ 2.19 $Cu1-N3$ $2.05(10)$ $Cu3-N35$ 2.11 $Cu1-N3$ $2.05(10)$ $Cu3-N35$ 2.11 $Cu1-N3$ $2.523(10)$ $Cu3-N35$ 2.11 $Cu1-N3$ $2.530(7)$ $Cu4-N17$ 2.06 </td <td>N7—Cd1—N1</td> <td>169.10(27)</td>	N7—Cd1—N1	169.10(27)		
N4-Cd1-N1 88.72(28) N2-Cd2-N14 100 N13-Cd1-N1 98.13(27) O3-Cd2-N14 89.5 N7-Cd1-O2 94.27(27) O4-Cd2-N5' 98.3 O1-Cd1-O2 87.85(27) N10"-Cd2-N5' 169. N4-Cd1-O2 85.53(26) N2-Cd2-N5' 89.3 N13-Cd1-O2 84.53(27) O3-Cd2-N5' 88.4 N1-Cd1-O2 173.36(26) N14-Cd2-N5' 88.4 N1-Cd1-O2 173.36(26) N14-Cd2-N5' 88.4 N1-Cd1-O2 1.997(7) Cu3-N29 1.95 Cu1-N13 1.997(7) Cu3-N28 2.21 Cu1-N2 2.332(10) Cu3-N10 2.07 Cu1-N3 2.051(10) Cu3-N35 2.19 Cu1-N8 2.523(10) Cu3-N20 2.57 Cu2-N25 2.016(7) Cu4-N34 2.02 Cu2-N20 1.692(7) Cu4-N17 2.06 Cu2-N11 2.540(7) Cu4-N17 2.06 Cu2-N19 2.540(7) Cu4-N16 2.16 <td>D1—Cd1—N1</td> <td>88.42(28)</td>	D1—Cd1—N1	88.42(28)		
N13Cd1N1 98.13(27) O3Cd2N14 89.5 N7Cd1O2 94.27(27) O4Cd2N5 ⁴ 98.3 O1Cd1-O2 87.85(27) N10 ³ Cd2N5 ⁴ 99.3 N13Cd1-O2 85.53(26) N2Cd2N5 ⁴ 89.3 N13Cd1-O2 84.53(27) O3Cd2N5 ⁴ 89.3 N1Cd1-O2 173.36(26) N14Cd2N5 ⁴ 88.4 N1Cd1-O2 173.36(26) N14Cd2N5 ⁴ 88.4 N1Cd1-O2 2.055(7) Cu3N29 1.95 Cu1N13 1.997(7) Cu3N28 2.21 Cu1-N7 2.026(10) Cu3N4 1.99 Cu1-N7 2.026(10) Cu3N4 1.99 Cu1-N8 2.523(10) Cu3-O2 2.57 Cu2-N25 2.016(7) Cu4N5 2.11 Cu2-N20 1.692(7) Cu4N5 2.11 Cu2-N11 2.540(7) Cu4N5 2.11 Cu2-N13 1.970(7) Cu4N17 2.66 Cu2-N14 2.540(7) Cu4-N	N4 ⁱ —Cd1—N1	100.75(28)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	N13—Cd1—N1	89.50(27)		
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	N7—Cd1—O2	98.31(26)		
$N4^{i}-C41-O2$ $85.53(26)$ $N2-C42-N5^{i}$ 89.3 $N13-C41-O2$ $84.53(27)$ $O3-C42-N5^{i}$ 88.4 $N1-Cd1-O2$ $173.36(26)$ $N14-C42-N5^{i}$ 81.4 D S C C O O $Cu1-O1$ $2.035(7)$ $Cu3-N29$ 1.95 C $Cu1-N2$ $2.332(10)$ $Cu3-N4$ 1.99 C $Cu1-N2$ $2.332(10)$ $Cu3-N35$ 2.19 C $Cu1-N32$ $2.051(10)$ $Cu3-N35$ 2.19 C $Cu1-N8$ $2.523(10)$ $Cu3-O2$ 2.57 $Cu2-N15$ 2.11 $Cu2-N20$ $1.692(7)$ $Cu4-N13$ 2.15 $Cu2-N1$ $2.540(7)$ $Cu4-N12$ 2.60 $Cu2-N19$ $2.540(7)$ $Cu4-N17$ 2.66 $N13-Cu1-O1$ $174.28(29)$ $N29-Cu3-N10$ 95.5 $N13-Cu1-N2$ $92.24(29)$ $N4-Cu3-N10$ 90.0 $01-Cu1-N2$ $82.04(27)$ $N2-Cu3-N35$ 91.0	O1—Cd1—O2	169.27(28)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	N4 ⁱ —Cd1—O2	89.38(28)		
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	N13—Cd1—O2	88.45(28)		
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	N1—Cd1—O2	81.45(27)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—N13	1.958(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—O1	2.218(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—N2	1.999(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—N7	2.072(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—N32	2.197(13)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu1—N8	2.571(10)		
Cu2—01 2.004(7) Cu4—N5 2.11 Cu2—N20 1.692(7) Cu4—N23 2.15 Cu2—N31 1.970(7) Cu4—N17 2.06 Cu2—N19 2.540(7) Cu4—N16 2.16 Cu2—N1 2.541(7) Cu4—O2 2.60 N13—Cu1—O1 174.28(29) N29—Cu3—N10 95.5 N13—Cu1—N2 92.24(29) N4—Cu3—N10 90.0 O1—Cu1—N2 82.04(27) N29—Cu3—N35 91.0 N34—Cu2—N5 86.64(39) N4—Cu3—N35 86.7 N34—Cu2—N23 89.24(36) N10—Cu3—N35 91.2 N5—Cu2—N23 91.06(28) N29—Cu3—O2 85.7 N34—Cu2—O2 87.88(20) N10—Cu3—O2 88.8 N5—Cu2—O2 87.88(20) N10—Cu3—O2 116.6 N23—Cu2—O2 176.69(20) N35—Cu3—O2 91.5 N29—Cu3—N4 174.04(30) 2.10 Co1—N3 2.160(5) Co2—N2 2.10 Co1—N3 2.160(5) Co2—O3 2.09 Co2—N6 ⁴ 58.0	Cu2—N25	2.020(13)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu2—O1	2.116(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu2—N20	2.150(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu2—N31	2.061(7)		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Cu2—N19	2.167(7)		
$\begin{array}{c cccccc} N13-Cu1-O1 & 174.28(29) & N29-Cu3-N10 & 95.5\\ N13-Cu1-N2 & 92.24(29) & N4-Cu3-N10 & 90.0\\ O1-Cu1-N2 & 82.04(27) & N29-Cu3-N35 & 91.0\\ N34-Cu2-N5 & 86.64(39) & N4-Cu3-N35 & 86.7\\ N34-Cu2-N23 & 89.24(36) & N10-Cu3-N35 & 91.2\\ N5-Cu2-N23 & 91.06(28) & N29-Cu3-O2 & 85.7\\ N34-Cu2-O2 & 93.83(31) & N4-Cu3-O2 & 88.8\\ N5-Cu2-O2 & 87.88(20) & N10-Cu3-O2 & 176.\\ N23-Cu2-O2 & 87.88(20) & N10-Cu3-O2 & 91.5\\ N29-Cu3-N4 & 174.04(30) & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	Cu2—N1	2.601(10)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	N13—Cu1—O1	95.52(29)		
$\begin{array}{c ccccc} O1Cu1N2 & 82.04(27) & N29Cu3N35 & 91.0 \\ N34Cu2N5 & 86.64(39) & N4Cu3N35 & 86.7 \\ N34Cu2N23 & 89.24(36) & N10Cu3N35 & 91.2 \\ N5Cu2N23 & 91.06(28) & N29Cu3O2 & 85.7 \\ N34Cu2O2 & 93.83(31) & N4Cu3O2 & 88.8 \\ N5Cu2O2 & 87.88(20) & N10Cu3O2 & 176. \\ N23Cu2O2 & 176.69(20) & N35Cu3O2 & 91.5 \\ N29Cu3N4 & 174.04(30) & & & & & & & & & & & & & & & & & & &$	N13—Cu1—N2	90.04(29)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	D1—Cu1—N2	91.02(38)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	N34—Cu2—N5	86.70(38)		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	N34—Cu2—N23	91.28(35)		
N34—Cu2—O2 93.83(31) N4—Cu3—O2 88.8 N5—Cu2—O2 87.88(20) N10—Cu3—O2 176. N23—Cu2—O2 176.69(20) N35—Cu3—O2 91.5 N29—Cu3—N4 174.04(30) 6 6 Co1—N8 2.111(5) Co2—O3 2.09 Co1—N5 ⁱ 58.100(5) Co2—N2 2.10 Co1—N3 2.160(5) Co2—N6 ⁱ 58.0 Co2—O2 2.081(5) Co2—O1 2.13 Co2—N9 2.095(5) N8—Co1—N3 90.57(18) N9—Co2—N6 ⁱ 57.0 N8 Co1—N3 14.03(13) O3—Co2—N6 ⁱ 57.3 02—Co2—N9 175.81(19) N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	N5—Cu2—N23	85.71(21)		
N5—Cu2—O2 $87.88(20)$ N10—Cu3—O2 176. N23—Cu2—O2 176.69(20) N35—Cu3—O2 91.5 N29—Cu3—N4 174.04(30) 6 Co1—N8 2.111(5) Co2—O3 2.09 Co1—N5 ⁱ 58.100(5) Co2—N2 2.10 Co1—N3 2.160(5) Co2—N6 ⁱ 58.0 Co2—O2 2.081(5) Co2—O1 2.13 Co2—N9 2.095(5) N8—Co1—N3 90.57(18) N9—Co2—N6 ⁱ 57.0 N5 ⁱ —Co1—N3 14.03(13) O3—Co2—N6 ⁱ 57.3 02—Co2—N6 ⁱ 51.3 O2—Co2—N9 175.81(19) N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	N34—Cu2—O2	88.84(21)		
N23-Cu2-O2 176.69(20) N35-Cu3-O2 91.5 N29-Cu3-N4 174.04(30) 6 Co1-N8 2.111(5) Co2-O3 2.09 Co1-N5 ⁱ 58.100(5) Co2-N2 2.10 Co1-N3 2.160(5) Co2-N6 ⁱ 58.0 Co2-O2 2.081(5) Co2-O1 2.13 Co2-N9 2.095(5) N8-Co1-N5 ⁱ 101.23(13) 02-Co2-N6 ⁱ 57.0 N8-Co1-N3 90.57(18) N9-Co2-N6 ⁱ 57.3 N5 ⁱ -Co1-N3 14.03(13) 03-Co2-N6 ⁱ 51.3 O2-Co2-N9 175.81(19) N2-Co2-N6 ⁱ 51.3	N5—Cu2—O2	176.92(21)		
N29—Cu3—N4174.04(30) 6 Co1—N82.111(5)Co2—O32.09Co1—N5 ⁱ 58.100(5)Co2—N22.10Co1—N32.160(5)Co2—N6 ⁱ 58.0Co2—O22.081(5)Co2—O12.13Co2—N92.095(5)N8—Co1—N3 ⁱ 101.23(13)O2—Co2—N6 ⁱ N8—Co1—N390.57(18)N9—Co2—N6 ⁱ 57.0N5 ⁱ —Co1—N314.03(13)O3—Co2—N6 ⁱ 57.3O2—Co2—N9175.81(19)N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	N23—Cu2—O2	91.52(28)		
6Co1N82.111(5)Co2O32.09Co1N5 ⁱ 58.100(5)Co2N22.10Co1N32.160(5)Co2N6 ⁱ 58.0Co2O22.081(5)Co2O12.13Co2N92.095(5)	N29—Cu3—N4			
Co1N82.111(5)Co2O32.09Co1N5 ⁱ 58.100(5)Co2N22.10Co1N32.160(5)Co2N6 ⁱ 58.0Co2O22.081(5)Co2O12.13Co2N92.095(5) $Co2N6^i$ 57.0N8Co1N5 ⁱ 101.23(13)O2Co2N6 ⁱ 57.0N8Co1N390.57(18)N9Co2N6 ⁱ 125.N5 ⁱ Co1N314.03(13)O3Co2N6 ⁱ 57.3O2Co2N9175.81(19)N2Co2N6 ⁱ 51.3	6			
$Co1-N5^i$ $58.100(5)$ $Co2-N2$ 2.10 $Co1-N3$ $2.160(5)$ $Co2-N6^i$ 58.0 $Co2-O2$ $2.081(5)$ $Co2-O1$ 2.13 $Co2-N9$ $2.095(5)$ $Co2-Co2-N6^i$ 57.0 $N8-Co1-N5^i$ $101.23(13)$ $O2-Co2-N6^i$ 57.0 $N8-Co1-N3$ $90.57(18)$ $N9-Co2-N6^i$ $125.$ $N5^i-Co1-N3$ $14.03(13)$ $O3-Co2-N6^i$ 57.3 $O2-Co2-N9$ $175.81(19)$ $N2-Co2-N6^i$ 51.3	Co1—N8	2.099(5)		
Co1-N3 $2.160(5)$ Co2-N6 ⁱ 58.0 Co2-O2 $2.081(5)$ Co2-O1 2.13 Co2-N9 $2.095(5)$ $2.095(5)$ $101.23(13)$ $O2$ -Co2-N6 ⁱ N8-Co1-N3 $90.57(18)$ N9-Co2-N6 ⁱ $125.$ N5 ⁱ -Co1-N3 $14.03(13)$ $O3$ -Co2-N6 ⁱ 57.3 O2-Co2-N9 $175.81(19)$ N2-Co2-N6 ⁱ 51.3	Co1—N5 ⁱ	2.108(5)		
Co2-O2 $2.081(5)$ Co2-O1 2.13 Co2-N9 $2.095(5)$ $2.095(5)$ $2.095(5)$ $2.02-Co2-N6^{i}$ 57.0 N8-Co1-N3 $90.57(18)$ N9-Co2-N6^{i} $125.$ N5^{i}-Co1-N3 $14.03(13)$ $O3-Co2-N6^{i}$ 57.3 O2-Co2-N9 $175.81(19)$ N2-Co2-N6^{i} 51.3	Co1—N3	58.017(5)		
Co2—N92.095(5)N8—Co1—N5 ⁱ 101.23(13)O2—Co2—N6 ⁱ 57.0N8—Co1—N390.57(18)N9—Co2—N6 ⁱ 125.N5 ⁱ —Co1—N314.03(13)O3—Co2—N6 ⁱ 57.3O2—Co2—N9175.81(19)N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	Co2—O2	2.130(4)		
N8—Co1—N5 ⁱ 101.23(13)O2—Co2—N6 ⁱ 57.0N8—Co1—N390.57(18)N9—Co2—N6 ⁱ 125.N5 ⁱ —Co1—N314.03(13)O3—Co2—N6 ⁱ 57.3O2—Co2—N9175.81(19)N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	Co2—N9			
N8—Co1—N3 90.57(18) N9—Co2—N6 ⁱ 125. N5 ⁱ —Co1—N3 14.03(13) O3—Co2—N6 ⁱ 57.3 O2—Co2—N9 175.81(19) N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	N8—Co1—N5 ⁱ	57.07(13)		
N5 ⁱ —Co1—N3 14.03(13) O3—Co2—N6 ⁱ 57.3 O2—Co2—N9 175.81(19) N2—Co2—N6 ⁱ 51.3 O2—Co2—N6 0.00 0.00 0.00	N8—Co1—N3	125.73(13)		
O2—Co2—N9 175.81(19) N2—Co2—N6 ⁱ 51.3	N5 ⁱ —Co1—N3	57.39(13)		
	D2—Co2—N9	51.38(13)		
02—Co2—O3 88.95(19) 02—Co2—O1 88.2	D2—Co2—O3	88.21(18)		
(12 - (12	N5 ⁱ —Co1—N3 D2—Co2—N9	57.39(13) 51.38(13) 88.21(18)		

N9—Co2—O3	90.47(18)	N9—Co2—O1	87.62(18)
O2—Co2—N2	92.70(19)	O3—Co2—O1	89.01(18)
N9—Co2—N2	91.45(19)	N2—Co2—O1	178.76(18)
O3—Co2—N2	90.17(19)	N6 ⁱ —Co2—O1	128.71(11)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(1) (i) x, -y, z; (ii) 1-x, -y, 2-z; (iii) 1-x, y, 2-z; (iv) 1-x, -y, 1-z; (v) 1-x, y, 1-z;

(2) (i) 1.5-x, 2.5-y, 1.5-z; (ii) 1.5-x, 1+y, 1.5-z; (iii) x, 2.5-y, z; (iv) 2-x, y, z;

(3) (i) x, y, -1+z;

(4) (i) 1+x, y, z; (ii) x, 1+y, z; (iii) -1+x, y, z;

(6) (i) -1-x, -y, z;

Table S2 The overall formula, formula weight, density and F(000) for 1 and 2.

compounds	1	2
Formula	$C_{18}H_{20.5}N_7O_{7.25}Zn$	$C_{18}H_{20}N_7O_6Cd$
formula weight	516.30	<mark>542.82</mark>
crystal system	monoclinic	orthorhombic
space group	C2/m	Imma
<i>a</i> (Å)	20.264(2)	8.3699(14)
<i>b</i> (Å)	15.8241(16)	16.482(3)
<i>c</i> (Å)	16.1914(16)	17.686(3)
α (°)	90	90
eta (°)	113.573(3)	90
γ (°)	90	90
$V(\text{\AA}^3)$	4758.7(8)	2439.8(7)
Z	8	4
D_c , g/cm ³	1.441	1.478
μ , mm ⁻¹	1.085	0.940
F(000)	2123	1092