## **Supporting materials**

Structural versatile cadmium coordination polymers based on bis(1,2,4-triazole)ethane and rigid aromatic multicarboxylates: Syntheses, structures and properties

Jian-Gang Ding, Xia Zhu, Yan-Feng Cui, Na Liang, Peng-Peng Sun, Qian Chen,

## Bao-Long Li\* and Hai-Yan Li

Key Laboratory of Organic Synthesis of Jiangsu Province, College of Chemistry, Chemical Engineering and Materials Science, Soochow University, Suzhou 215123, P. R. China. E-mail: libaolong@suda.edu.cn

		1	
Cd(1)-O(1)	2.248(2)	Cd(1)-O(3B)	2.490(3)
Cd(1)-O(4B)	2.346(2)	Cd(1)-O(7)	2.322(3)
Cd(1)-N(3)	2.266(3)	Cd(1)-N(6A)	2.342(3)
O(1)-Cd(1)-O(3B)	146.31(8)	O(1)-Cd(1)-O(4B)	92.40(9)
O(1)-Cd(1)-O(7)	85.78(10)	O(4B)-Cd(1)-O(3B)	54.07(8)
O(7)-Cd(1)-O(3B)	96.30(10)	O(7)-Cd(1)-O(4B)	90.01(10)
O(1)-Cd(1)-N(3)	129.98(10)	N(3)-Cd(1)-O(3B)	83.68(9)
N(3)-Cd(1)-O(4B)	137.58(9)	N(3)-Cd(1)-O(7)	91.23(10)
O(1)-Cd(1)-N(6A)	88.19(10)	N(6A)-Cd(1)-O(3B)	86.19(10)
N(6A)-Cd(1)-O(4B)	85.64(10)	O(7)-Cd(1)-N(6A)	172.41(10)
N(3)-Cd(1)-N(6A)	96.18(11)		
		2	
Cd(1)-O(1)	2.295(5)	Cd(1)-O(2)	2.608(6)
Cd(1)-O(4A)	2.267(5)	Cd(1)-O(5)	2.310(5)
Cd(1)-N(3)	2.293(5)	Cd(1)-N(6B)	2.336(6)
O(1)-Cd(1)-O(2)	52.46(15)	O(4A)-Cd(1)-O(1)	92.10(19)
O(1)-Cd(1)-O(5)	89.12(18)	O(4A)-Cd(1)-O(2)	144.45(17)
O(5)-Cd(1)-O(2)	94.31(18)	O(4A)-Cd(1)-O(5)	86.9(2)
N(3)-Cd(1)-O(1)	133.8(2)	N(3)-Cd(1)-O(2)	81.53(19)
O(4A)-Cd(1)-N(3)	134.0(2)	N(3)-Cd(1)-O(5)	90.96(19)

**Table S1** Selected bond lengths [Å] and angles [°] for 1-9

O(1)-Cd(1)-N(6B)	85.4(2)	N(6B)-Cd(1)-O(2)	84.5(2)	
O(4A)-Cd(1)-N(6B)	90.5(2)	5(2) O(5)-Cd(1)-N(6B)		
N(3)-Cd(1)-N(6B)	94.8(2)			
		3		
Cd(1)-O(1)	2.483(2)	Cd(1)-O(3A)	2.543(2)	
Cd(1)-O(4A)	2.259(2)	Cd(1)-O(6)	2.269(3)	
Cd(1)-O(1B)	2.416(2)	Cd(1)-O(2B)	2.438(2)	
Cd(1)-N(3)	2.275(2)			
O(1)-Cd(1)-O(3A)	105.88(7)	O(4A)-Cd(1)-O(1)	90.50(7)	
O(6)-Cd(1)-O(1)	166.13(10)	O(1B)-Cd(1)-O(1)	73.40(8)	
O(2B)-Cd(1)-O(1)	101.33(7)	O(4A)-Cd(1)-O(3A)	53.88(7)	
O(6)-Cd(1)-O(3A)	84.58(9)	O(1B)-Cd(1)-O(3A)	176.13(6)	
O(2B)-Cd(1)-O(3A)	129.70(7)	O(4A)-Cd(1)-O(6)	103.14(10)	
O(4A)-Cd(1)-O(1B)	129.68(7)	O(4A)-Cd(1)-O(2B)	84.87(7)	
O(6)-Cd(1)-O(1B)	95.54(9)	O(6)-Cd(1)-O(2B)	77.76(8)	
O(1B)-Cd(1)-O(2B)	53.98(7)	N(3)-Cd(1)-O(1)	85.82(8)	
N(3)-Cd(1)-O(3A)	86.71(8)	O(4A)-Cd(1)-N(3)	137.65(8)	
O(6)-Cd(1)-N(3)	85.72(9)	N(3)-Cd(1)-O(1B)	89.43(8)	
N(3)-Cd(1)-O(2B)	137.21(8)			
		4		
Cd(1)-N(3)	2.319(3)	Cd(1)-N(6A)	2.334(3)	
Cd(1)-N(9)	2.324(3)	Cd(1)-N(12B)	2.341(3)	
Cd(1)-O(8)	2.288(3)	Cd(1)-O(9)	2.334(3)	
N(3)-Cd(1)-N(6A)	90.71(10)	N(3)-Cd(1)-N(9)	175.29(11)	
N(3)-Cd(1)-N(12B)	90.31(9)	N(9)-Cd(1)-N(6A)	87.50(10)	
N(6A)-Cd(1)-N(12B)	176.77(10)	N(9)-Cd(1)-N(12B)	91.24(10)	
O(8)-Cd(1)-N(3)	87.15(10)	O(8)-Cd(1)-N(6A)	86.99(11)	
O(8)-Cd(1)-N(9)	88.40(11)	O(8)-Cd(1)-N(12B)	90.00(10)	
N(3)-Cd(1)-O(9)	85.81(10)	N(6A)-Cd(1)-O(9)	90.99(10)	
N(9)-Cd(1)-O(9)	98.57(11)	O(9)-Cd(1)-N(12B)	92.14(10)	
O(8)-Cd(1)-O(9)	172.66(10)			
		5		
Cd(1)-O(1)	2.376(4)	Cd(1)-O(2)	2.410(3)	
Cd(1)-O(3)	2.377(4)	Cd(1)-O(4A)	2.235(3)	
Cd(1)-O(5)	2.289(4)	Cd(1)-N(3)	2.301(4)	
O(1)-Cd(1)-O(2)	54.32(13)	O(1)-Cd(1)-O(3)	85.09(15)	
O(4A)-Cd(1)-O(1)	86.42(14)	O(5)-Cd(1)-O(1)	94.79(16)	
O(3)-Cd(1)-O(2)	95.31(13)	O(4A)-Cd(1)-O(2)	137.33(13)	
O(5)-Cd(1)-O(2)	84.55(14)	O(4A)-Cd(1)-O(3) 97.39(13		
O(5)-Cd(1)-O(3)	179.85(13)	O(4A)-Cd(1)-O(5)	82.69(15)	
N(3)-Cd(1)-O(1)	141.73(14)	N(3)-Cd(1)-O(2) 88.57(13)		
N(3)-Cd(1)-O(3)	90.04(13)	O(4A)-Cd(1)-N(3)	131.83(14	
O(5)-Cd(1)-N(3)	90.01(15)			

Cd(1)-O(1)	2.452(4)	Cd(1)-O(2) 2.397(3		
Cd(1)-O(3A)	2.521(4)	Cd(1)-O(4A)	2.328(3)	
Cd(1)-O(5)	2.299(4)	Cd(1)-N(3)	2.315(4)	
Cd(1)-N(6B)	2.349(4)			
O(2)-Cd(1)-O(1)	53.91(11)	O(1)-Cd(1)-O(3A)	134.25(12)	
O(4A)-Cd(1)-O(1)	169.53(13)	O(5)-Cd(1)-O(1)	78.97(17)	
O(2)-Cd(1)-O(3A)	82.27(12)	O(4A)-Cd(1)-O(2)	135.67(12)	
O(5)-Cd(1)-O(2)	87.83(16)	O(4A)-Cd(1)-O(3A)	53.93(13)	
O(5)-Cd(1)-O(3A)	87.83(15)	O(5)-Cd(1)-O(4A)	96.08(17)	
N(3)-Cd(1)-O(1)	99.54(14)	N(3)-Cd(1)-O(2)	88.43(13)	
N(3)-Cd(1)-O(3A)	90.75(13)	N(3)-Cd(1)-O(4A)	85.95(14)	
O(5)-Cd(1)-N(3)	176.15(16)	N(6B)-Cd(1)-O(1)	87.46(13)	
N(6B)-Cd(1)-O(2)	141.21(13)	N(6B)-Cd(1)-O(3A) 136.0		
O(4A)-Cd(1)-N(6B)	83.12(14)	O(5)-Cd(1)-N(6B)	87.99(17)	
N(3)-Cd(1)-N(6B)	95.51(15)			
		7		
Cd(1)-O(1)	2.442(2)	Cd(1)-O(2)	2.2715(19)	
Cd(1)-N(1)	2.263(2)			
O(2)-Cd(1)-O(1)	55.38(7)	O(1A)-Cd(1)-O(1)	85.09(11)	
O(2A)-Cd(1)-O(1)	108.31(7)	O(2)-Cd(1)-O(1A)	108.31(7)	
O(2A)-Cd(1)-O(2)	160.14(10)	O(2A)-Cd(1)-O(1A)	55.38(7)	
N(1)-Cd(1)-O(1)	136.85(7)	N(1A)-Cd(1)-O(1)	99.43(8)	
N(1)-Cd(1)-O(1A)	99.43(8)	N(1A)-Cd(1)-O(1A)	136.85(7)	
N(1)-Cd(1)-O(2)	83.02(8)	N(1A)-Cd(1)-O(2)	109.31(8)	
N(1)-Cd(1)-O(2A)	109.31(8)	N(1A)-Cd(1)-O(2A)	83.02(7)	
N(1)-Cd(1)-N(1A)	105.36(12)			
		8		
Cd(1)-O(1)	2.2605(19)	Cd(1)-O(2)	2.6330(18)	
Cd(1)-O(3A)	2.4233(18)	Cd(1)-O(4A)	2.4295(18)	
Cd(1)-O(7)	2.307(3)	Cd(1)-O(8)	2.292(2)	
Cd(1)-N(2)	2.308(2)			
O(1)-Cd(1)-O(2)	53.00(6)	O(1)-Cd(1)-O(3A)	129.76(6)	
O(1)-Cd(1)-O(4A)	76.85(6)	O(1)-Cd(1)-O(7)	96.49(9)	
O(1)-Cd(1)-O(8)	88.88(9)	O(3A)-Cd(1)-O(2)	176.74(6)	
O(4A)-Cd(1)-O(2)	128.34(6)	O(7)-Cd(1)-O(2)	89.46(8)	
O(8)-Cd(1)-O(2)	84.44(7)	O(3A)-Cd(1)-O(4A)	53.88(6)	
O(7)-Cd(1)-O(3A)	88.44(8)	O(8)-Cd(1)-O(3A)	97.12(7)	
O(7)-Cd(1)-O(4A)	84.18(8)	O(8)-Cd(1)-O(4A)	108.47(7)	
O(8)-Cd(1)-O(7)	167.14(9)	O(1)-Cd(1)-N(2) 150.14(7		
N(2)-Cd(1)-O(2)	97.17(7)	N(2)-Cd(1)-O(3A) 80.03(7)		
N(2)-Cd(1)-O(4A)	131.62(7)	O(7)-Cd(1)-N(2)	80.33(9)	
O(8)-Cd(1)-N(2)	89.19(9)			
		9		
Cd(1)-O(1)	2.286(2)	Cd(1)-O(2)	2.611(3)	

Cd(1)-O(3A)	2.229(3)	Cd(1)-O(5B)	2.290(3)
Cd(1)-N(1)	2.243(3)	Cd(1)-N(5C)	2.340(3)
Cd(2)-O(1)	2.348(2)	Cd(2)-O(1F)	2.348(2)
Cd(2)-O(4A)	2.213(3)	Cd(2)-O(4D)	2.213(3)
Cd(2)-N(4C)	2.325(3)	Cd(2)-N(4E)	2.325(3)
O(1)-Cd(1)-O(2)	53.02(9)	O(3A)-Cd(1)-O(1)	109.26(10)
O(1)-Cd(1)-O(5B)	94.69(10)	O(3A)-Cd(1)-O(2)	160.11(9)
O(5B)-Cd(1)-O(2)	103.26(10)	O(3A)-Cd(1)-O(5B)	85.85(11)
N(1)-Cd(1)-O(1)	140.79(11)	N(1)-Cd(1)-O(2)	88.27(11)
O(3A)-Cd(1)-N(1)	109.95(12)	N(1)-Cd(1)-O(5B)	87.88(11)
O(1)-Cd(1)-N(5C)	87.14(10)	N(5C)-Cd(1)-O(2)	81.62(11)
O(3A)-Cd(1)-N(5C)	89.08(11)	O(5B)-Cd(1)-N(5C)	174.93(11)
N(1)-Cd(1)-N(5C)	93.69(11)		
O(4A)-Cd(2)-O(1)	82.33(10)	N(4C)-Cd(2)-O(1)	84.89(10)
O(4A)-Cd(2)-N(4C)	95.56(11)	O(1)-Cd(2)-O(1F)	180.0
O(4D)-Cd(2)-O(4A)	180.000(1)	N(4E)-Cd(2)-N(4C)	180.000(1)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: A -x, -y+2, -z+1; B x, y-1, z for 1; A x, y+1, z; B -x, -y+1, -z+1 for 2; A -x+1, -y, -z+1; B -x, -y+1, -z+1 for 3; A x, -y+3/2, z+1/2; B x, -y+3/2, z-1/2 for 4; A -x, -y+2, -z+2 for 5; A -x+1/2, y+1/2, -z+1/2; B -x+1, -y, -z for 6; A -x+1, y, -z+1/2 for 7; A x, y+1, z for 8; A x+1, y+1, z; B -x+1, -y+1, -z+1; C -x+2, -y+1, -z+2; D -x+1, -y, -z+1; E x, y, z-1; F -x+2, -y+1, -z+1 for 9.

D-H <sup></sup> A	d(D-H)	d(H <sup></sup> A)	D(D <sup></sup> A)	<(DHA)
		1		
O(7)-H(1W) <sup></sup> O(8) <sup>i</sup>	0.834(19)	1.93(2)	2.758(4)	172(4)
O(7)-H(2W) <sup></sup> O(3) <sup>i</sup>	0.78(5)	1.90(5)	2.685(4)	177(5)
O(8)-H(4W) <sup></sup> O(2)	0.834(18)	1.93(2)	2.768(4)	176(4)
		2		
O(5)-H(1W) <sup></sup> O(2) <sup>i</sup>	0.89(2)	1.83(3)	2.682(7)	159(6)
O(5)-H(2W) <sup></sup> O(6)	0.885(19)	2.02(5)	2.735(8)	137(6)
O(6)-H(3W) <sup></sup> N(5) <sup>ii</sup>	0.905(19)	2.22(3)	3.103(8)	165(4)
O(6)-H(4W) <sup></sup> O(3) <sup>i</sup>	0.903(19)	1.89(3)	2.743(8)	156(5)
		3		
O(5)-H(5) <sup></sup> O(2) <sup>i</sup>	0.82	2.08	2.844(3)	155.8
O(6)-H(1W) <sup></sup> O(7) <sup>ii</sup>	0.864(18)	1.887(19)	2.744(4)	171(3)
O(6)-H(2W) <sup></sup> O(3) <sup>iii</sup>	0.853(18)	1.86(2)	2.695(3)	164(3)
O(7)-H(3W) <sup></sup> O(4)	0.867(18)	1.863(19)	2.729(3)	177(3)
O(7)-H(4W) <sup></sup> N(2) <sup>iv</sup>	0.863(18)	2.66(3)	3.137(4)	116(3)

Table S2 Hydroger	bondings for 1,	2, 3, 4, 5, 6, 8	<b>3</b> and <b>9</b> (Å and $^{\circ}$ )
-------------------	-----------------	------------------	---

$O(2)$ -HW <sup></sup> $O(3)^{i}$	0.93(5)	1.62(5)	2.539(3)	170(5)
O(8)-H(1W) <sup></sup> O(13)	0.840(18)	1.86(2)	2.693(4)	174(4)
O(8)-H(2W) <sup></sup> O(11) <sup>ii</sup>	0.837(18)	1.90(2)	2.724(4)	170(4)
O(9)-H(3W) <sup></sup> O(11) <sup>iii</sup>	0.838(18)	2.113(19)	2.945(4)	172(4)
O(9)-H(4W) <sup></sup> O(7) <sup>iv</sup>	0.853(18)	1.89(2)	2.722(4)	16634
O(10)-H(5W) <sup></sup> O(4)	0.846(19)	1.96(2)	2.790(4)	166(4)
O(10)-H(6W) <sup></sup> O(12)	0.836(19)	2.05(2)	2.881(4)	173(5)
O(11)-H(7W) <sup></sup> O(10)	0.835(19)	2.35(5)	2.761(4)	111(4)
$O(12)-H(9W)^{}N(11)^{v}$	0.843(19)	2.14(2)	2.983(4)	176(4)
O(12)-H(10W) <sup></sup> O(3) <sup>vi</sup>	0.850(19)	2.17(2)	3.006(4)	168(4)
O(13)-H(11W) <sup></sup> O(7)	0.864(18)	2.04(3)	2.832(5)	153(4)
O(13)-H(12W) <sup></sup> O(7) <sup>iii</sup>	0.850(18)	2.39(3)	3.150(7)	150(4)
O(13)-H(12W) <sup></sup> O(5) <sup>iii</sup>	0.850(18)	2.43(3)	3.209(6)	152(4)
		5		
$O(5)-H(1W)^{}O(2)^{i}$	0.868(19)	1.87(3)	2.699(5)	160(7)
O(5)-H(2W) <sup></sup> O(6)	0.862(19)	1.82(2)	2.680(9)	174(7)
		6		
O(5)-H(1W) <sup></sup> O(6)	0.86(2)	1.89(5)	2.606(8)	139(7)
O(5)-H(2W) <sup></sup> O(7)	0.84(2)	2.10(4)	2.881(8)	153(7)
O(6)-H(3W) <sup></sup> O(10)	0.90(2)	1.83(3)	2.703(8)	165(9)
O(7)-H(5W) <sup></sup> O(10) <sup>i</sup>	0.86(2)	2.04(4)	2.803(11)	146(6)
O(7)-H(6W) <sup></sup> O(8) <sup>ii</sup>	0.86(2)	2.27(5)	2.748(8)	115(4)
O(8)-H(7W) <sup></sup> O(9)	0.88(2)	2.00(5)	2.805(9)	152(10)
O(8)-H(8W) <sup></sup> O(1) <sup>iii</sup>	0.87(2)	1.99(3)	2.846(7)	168(9)
O(9)-H(9W) <sup></sup> O(6) <sup>iv</sup>	0.89(2)	1.91(4)	2.723(8)	150(7)
$O(9)-H(10W)^{}O(2)^{v}$	0.87(2)	2.07(5)	2.775(6)	137(6)
		8		
O(7)-H(1W) <sup></sup> O(4) <sup>i</sup>	0.77(3)	2.05(3)	2.809(3)	167(4)
O(7)-H(2W) <sup></sup> O(9) <sup>ii</sup>	0.79(3)	1.97(3)	2.750(4)	169(4)
O(8)-H(3W) <sup></sup> O(2) <sup>iii</sup>	0.79(3)	2.02(3)	2.751(3)	154(3)
O(8)-H(4W) <sup></sup> N(3) <sup>iii</sup>	0.72(2)	2.10(2)	2.821(3)	174(3)
O(9)-H(5W) <sup></sup> O(1) <sup>iv</sup>	0.77(4)	2.39(4)	2.928(3)	128(4)
O(9)-H(6W) <sup></sup> O(4) <sup>v</sup>	0.83(5)	2.14(5)	2.938(4)	160(4)
		9		
O(8)-H(1W) <sup></sup> O(7) <sup>i</sup>	0.851(19)	2.30(2)	2.757(5)	114.4(18)
O(8)-H(2W) <sup></sup> O(8) <sup>ii</sup>	0.850(19)	2.368(13)	2.843(9)	115.8(11)
O(9)-H(3W) <sup></sup> O(2) <sup>i</sup>	0.86(2)	2.41(2)	2.964(5)	123(2)
O(9)-H(4W) <sup></sup> O(8) <sup>iii</sup>	0.85(2)	2.02(2)	2.867(7)	174(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: i -x+1/2, -y+5/2, -z+1 for 1; i -x+1/2, -y+1/2, -z+1; ii -x+1/2, -y+3/2, -z+1 for 2; i -x, -y+1, -z+2; ii -x, -y, -z+1; iii x-1, y, z; iv -x, -y, -z+2 for 3; i -x+2, y-1/2, -z-1/2; ii x, -y+5/2, z+1/2; iii -x+1, -y+2, -z; iv x, -y+3/2, z+1/2; v -x+2, y+1/2, -z+1/2; vi -x+2, y+1/2, -z-1/2; vi -x+2, y+1/2, -z+1/2; vi -x+1, -y+1, -z; v -x+1/2, -z+1/2; vi -x+1, -z+1, -z+1/2; -z+1/

ii x-1, y+1, z; iii -x, -y+2, -z+1; iv x, y-1, z for **8**; i -x+2, -y+1, -z+1; ii -x+3, -y+2, -z+2; iii -x+3, -y+2, -z+1 for **9**.



Fig. S1 The coordination environment of the Cd(II) atom in 1.



Fig. S2 The coordination environment of the Cd(II) atom in 2.



Fig. S3 The coordination environment of the Cd(II) atom in 3.



Fig. S4 The coordination environment of the Cd(II) atom in 4.



Fig. S5 The coordination environment of the Cd(II) atom in 5.



Fig. S6 The coordination environment of the Cd(II) atoms in 6.



Fig. S7 The coordination environment of the Cd(II) atoms in 7.



Fig. S8 The coordination environment of the Cd(II) atoms in 8.



Fig. S9 The coordination environment of the Cd(II) atoms in 9.



Fig. S10 The TG curves of compounds 1-9.