

New Journal of Chemistry

*Electronic Supporting Information*

Yttrium and lanthanide (Ln = La and Gd) complexes with  
cucurbit[10]uril: crystals transforming from supramolecular  
frameworks to coordination nanotubes

Yingjie Zhang<sup>\*a</sup>, Ming Liu<sup>b</sup>, Inna Karatchevtseva<sup>a</sup>, Jason R. Price<sup>c</sup>, Zhu Tao<sup>b</sup>, and Gang Wei<sup>d</sup>

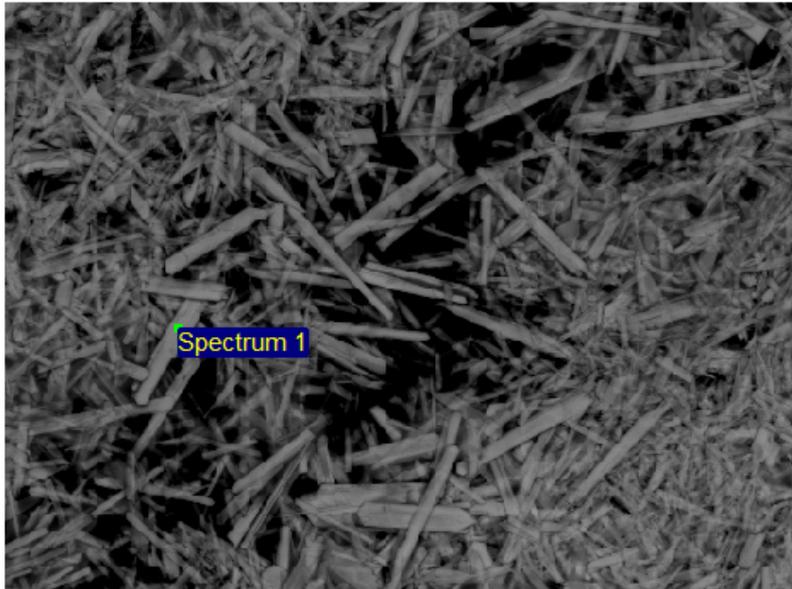
<sup>a</sup> Australian Nuclear Science and Technology Organisation, Locked Bag 2001, Kirrawee DC, NSW 2232, Australia.

<sup>b</sup> Key Laboratory of Macrocyclic and Supramolecular Chemistry of Guizhou Province, Guizhou University, Guiyang, Guizhou 550025, P. R. China.

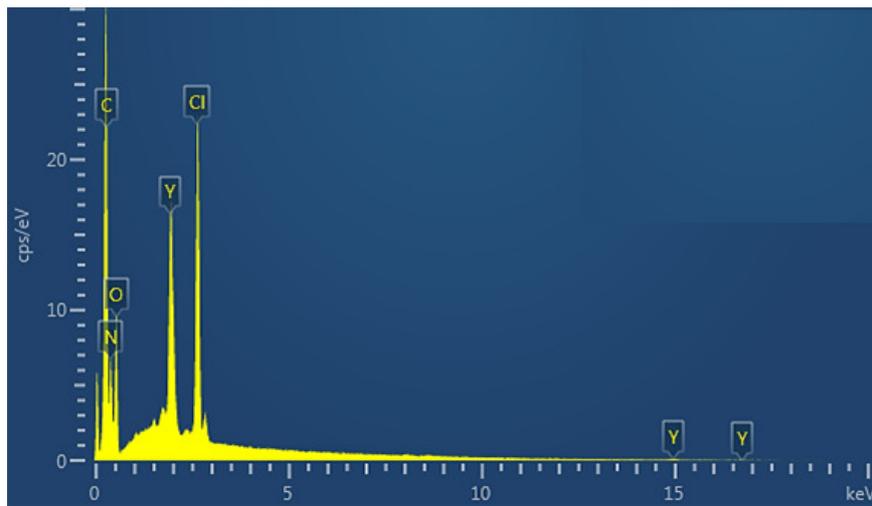
<sup>c</sup> Australian Synchrotron, Australian Nuclear Science and Technology Organisation, 800 Blackburn Road, Clayton, VIC 3168, Australia.

<sup>d</sup> CSIRO Mineral Resources, PO Box 218, Lindfield, NSW 2070, Australia.

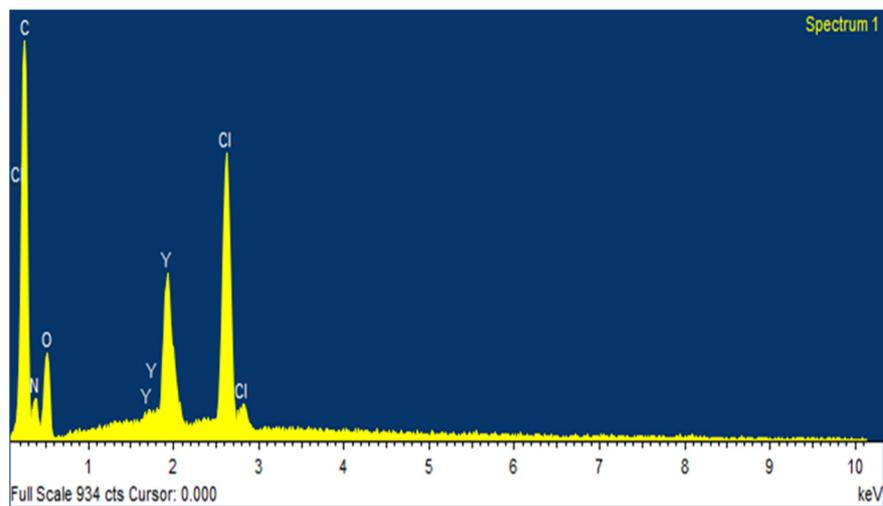
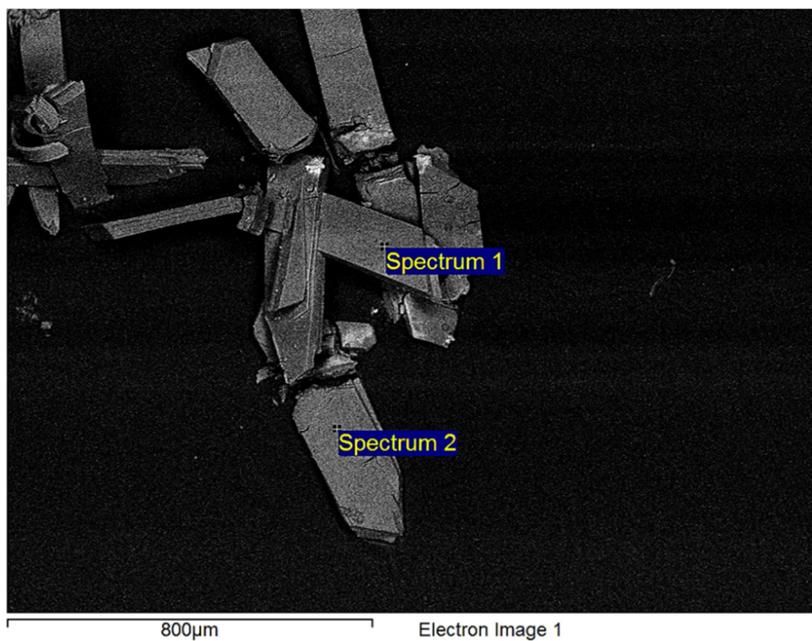
\* Corresponding author: [yzx@ansto.gov.au](mailto:yzx@ansto.gov.au)



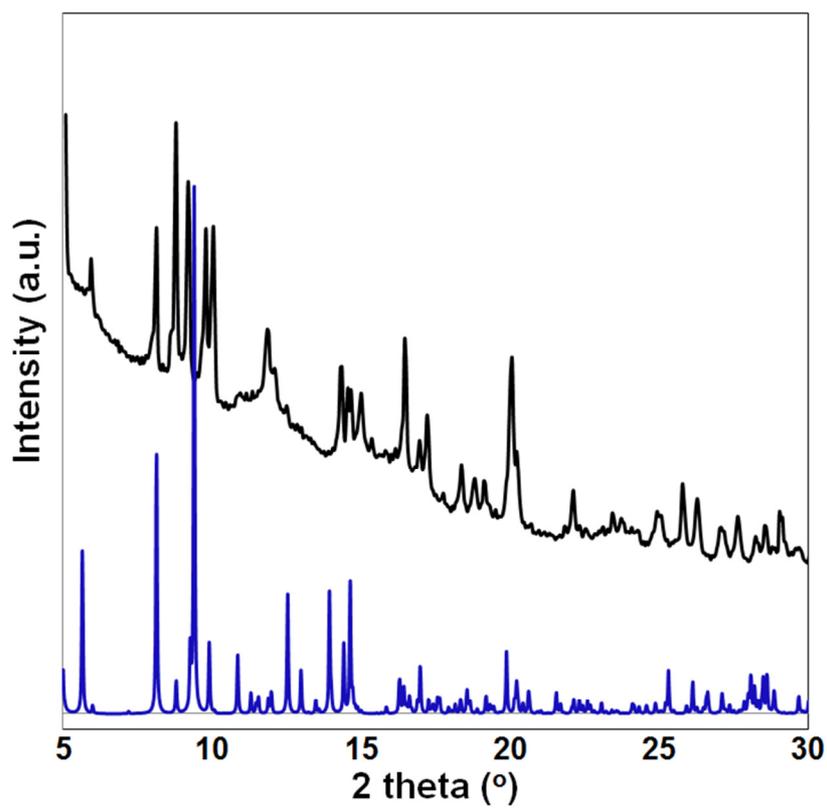
30µm



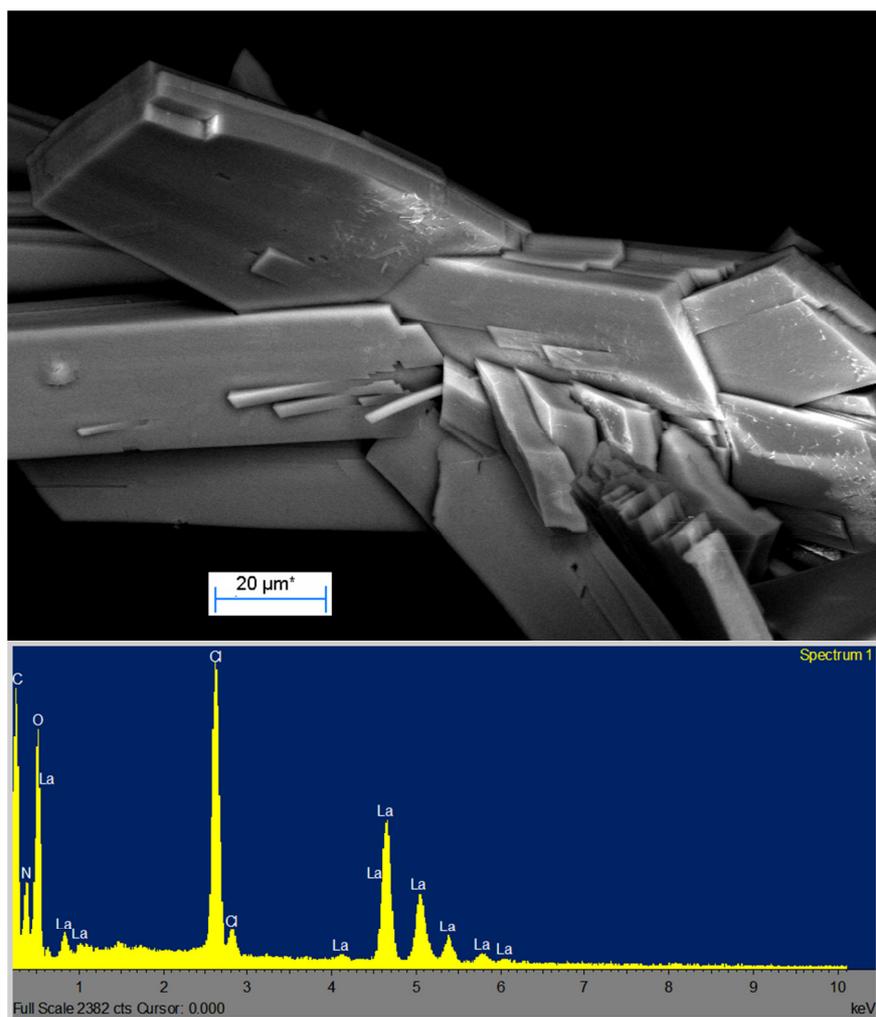
**Fig. S1.** A backscattered SEM image (top) and EDS spectrum (bottom) of **Q[10]-Y1** showing the presence of C, N, O, Cl and Y.



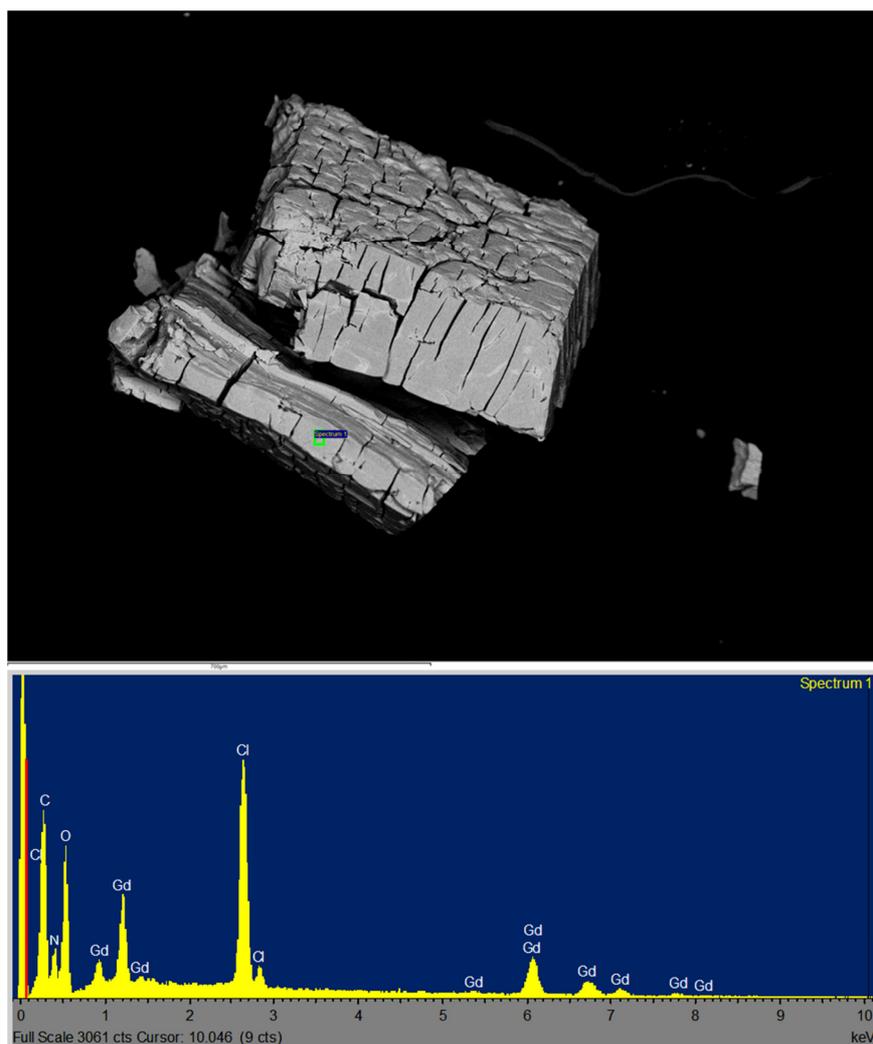
**Fig. S2.** A backscattered SEM image (top) and EDS spectrum (bottom) of **Q[10]-Y2** showing the presence of C, N, O, Cl and Y.



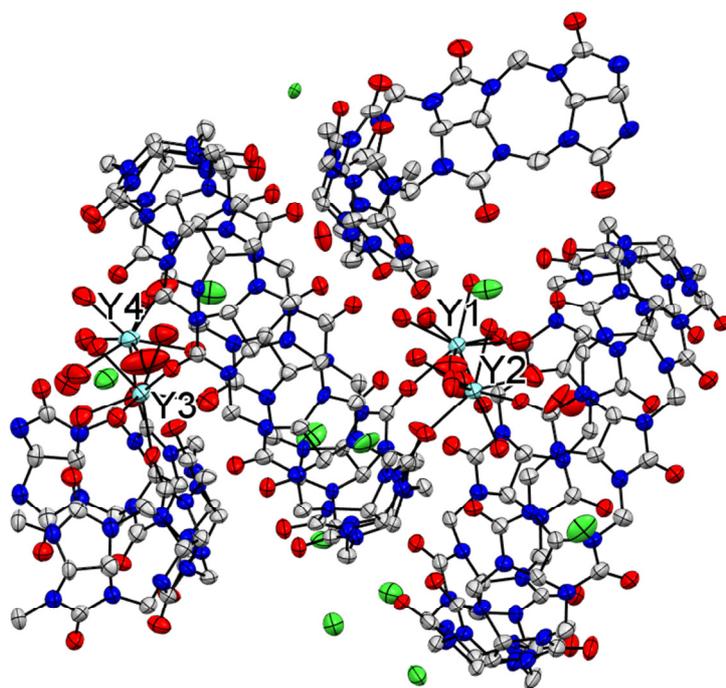
**Fig. S3.** XRD patterns of Q[10]-Y2 with the measured one on top of the simulated one from its single crystal data.



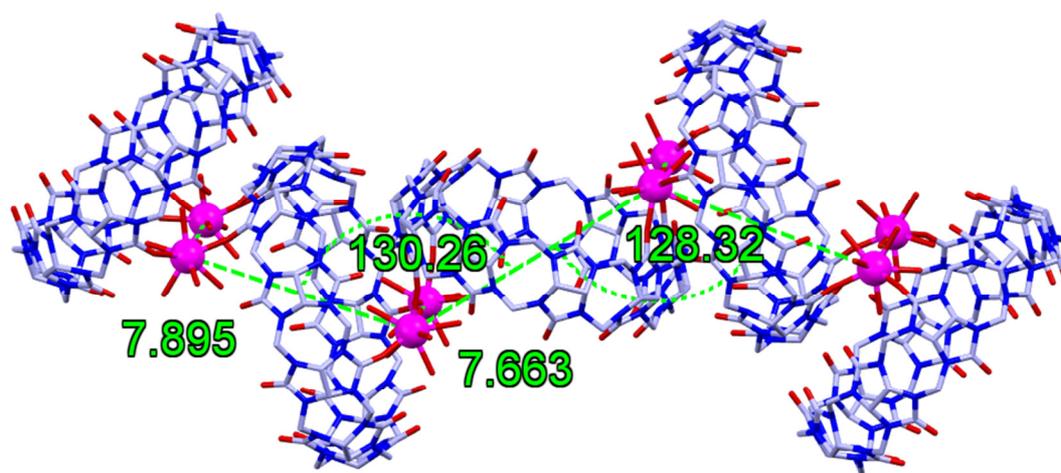
**Fig. S4.** A backscattered SEM image (top) and EDS spectrum (bottom) of **Q[10]-La** showing the presence of C, N, O, Cl and La.



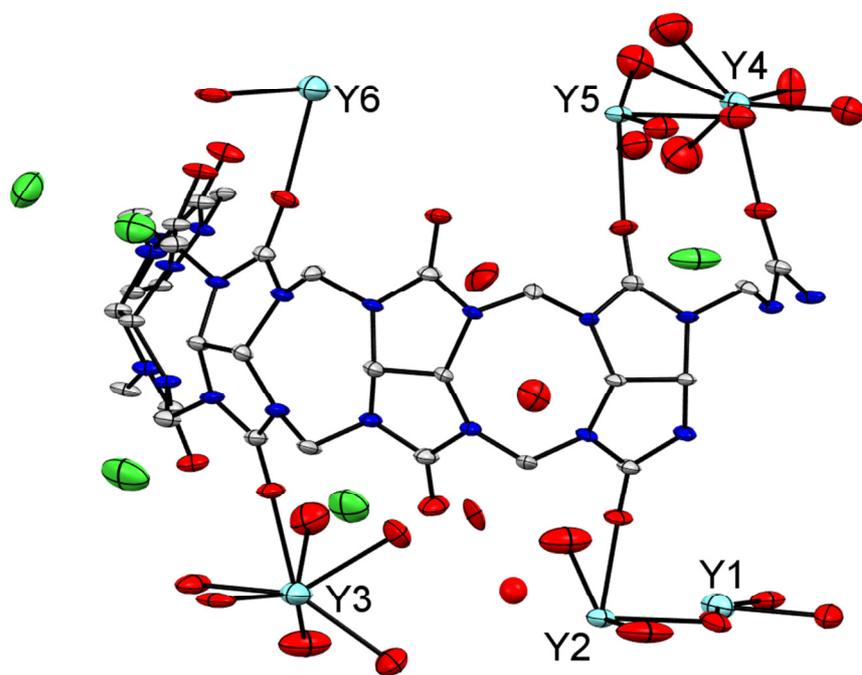
**Fig. S5.** A backscattered SEM image (top) and EDS spectrum (bottom) of **Q[10]-Gd** showing the presence of C, N, O, Cl and Gd.



**Fig. S6.** An ORTEP drawing (50% ellipsoid) of the asymmetric unit of **Q[10]-Y1**.



**Fig. S7.** The Y...Y distances between the four pairs of Y<sup>3+</sup> ions and Y...Y...Y angles in the octanuclear Y complex of Q[10]-Y1.



**Fig. S8.** An ORTEP drawing (50% ellipsoid) of the asymmetric unit of Q[10]-Y2.

**Table S1.** Potential hydrogen bonds calculated for **Q[10]-Y1**.

Donor--- H...Acceptor	D - H	H...A	D...A	D - H...A
O1W --H1WA ..O54	0.88	2.43	3.195(9)	145
O1W --H1WB ..O6W	0.88	2.39	2.757(8)	106
O1W --H1WB ..O10	0.88	1.89	2.736(7)	161'
O3W --H3WA ..O21	0.90	2.52	2.843(7)	102
O3W --H3WB ..O53	0.90	1.93	2.691(8)	142
O4W --H4WA ..O3W	0.94	2.41	2.766(10)	102
O5W --H5WA ..O29W	0.86	2.29	3.138(10)	167
O5W --H5WB ..O2	0.86	1.93	2.762(7)	162
O10W --H10A ..O22	1.00	2.11	2.938(9)	139
O11W --H11B ..O6	0.87	2.43	2.786(8)	105
O11W --H11B ..O23	0.87	2.43	2.756(7)	103'
O6W --H6WB ..O10	0.95	2.27	3.128(8)	149
O12W --H12A ..O11W	0.91	2.55	2.893(9)	103
O12W --H12B ..O8	0.91	2.56	3.137(8)	122
O7W --H7WA ..O23	0.87	2.43	2.783(8)	105
O7W --H7WB ..O10W	0.87	2.44	2.772(11)	103
O14W --H14A ..C15	0.89	1.91	2.714(10)	149
O8W --H8WA ..O7W	0.89	2.50	2.851(8)	104
O8W --H8WA ..O51	0.89	1.96	2.833(6)	165'
O15W --H15B ..O36	0.88	2.04	2.734(7)	134
O8W --H8WB ..O8	0.89	2.12	2.655(7)	118
O9W --H9WB ..O24	0.92	1.80	2.633(8)	149
O19W --H19A ..O13	0.91	2.10	2.845(9)	139
O19W --H19B ..O38	0.90	1.82	2.627(8)	147
O20W --H20B ..O45	0.91	1.81	2.609(8)	144

O23W --H23A ..O22W	0.85	2.53	2.851(8)	104
C5 --H5A ..O1	0.97	2.54	2.919(9)	103
C5 --H5A ..O2	0.97	2.49	2.903(10)	105'
C6 --H6A ..O11	0.97	2.51	2.904(8)	104
C6 --H6A ..O12	0.97	2.49	2.888(9)	104'
C101 --H10C ..O24	0.97	2.45	2.852(10)	105
C101 --H10C ..O25	0.97	2.48	2.899(9)	106'
C102 --H10E ..O34	0.97	2.49	2.901(9)	105
C102 --H10E ..O35	0.97	2.51	2.903(8)	104'
C107 --H10H ..O9W	0.97	2.57	3.501(9)	161
C107 --H10H ..O23	0.97	2.58	2.934(11)	102'
C107 --H10H ..O24	0.97	2.51	2.901(8)	104
C108 --H10J ..O33	0.97	2.47	2.891(10)	106
C108 --H10J ..O34	0.97	2.49	2.874(8)	103'
C11 --H11C ..O2	0.97	2.50	2.883(8)	104
C11 --H11C ..O3	0.97	2.43	2.867(11)	107'
C113 --H11F ..O22	0.97	2.47	2.871(11)	105
C113 --H11F ..O23	0.97	2.46	2.867(9)	105'
C114 --H11G ..O5	0.97	2.55	3.326(8)	137
C114 --H11H ..O32	0.97	2.45	2.855(9)	105
C114 --H11H ..O33	0.97	2.51	2.886(9)	103'
C119 --H11I ..O21	0.97	2.51	2.907(8)	104
C119 --H11I ..O22	0.97	2.47	2.872(9)	105'
C12 --H12C ..O12	0.97	2.47	2.878(9)	105
C12 --H12C ..O13	0.97	2.55	2.897(13)	101'
C120 --H12E ..O31	0.97	2.53	2.897(8)	102
C120 --H12E ..O32	0.97	2.51	2.906(9)	104'
C120 --H12F ..O3	0.97	2.48	3.299(9)	142

C125 --H12H ..O14W	0.97	2.44	3.395(9)	167
C125 --H12H ..O41	0.97	2.50	2.883(11)	103'
C125 --H12H ..O42	0.97	2.48	2.885(10)	105"
C126 --H12J ..O46	0.97	2.54	2.910(9)	103
C126 --H12J ..O47	0.97	2.45	2.860(11)	105'
C131 --H13C ..O17W	0.97	2.53	3.327(9)	140
C131 --H13C ..O42	0.97	2.53	2.923(8)	104'
C131 --H13C ..O43	0.97	2.46	2.860(9)	105"
C131 --H13D ..O33	0.97	2.56	3.368(8)	141
C132 --H13E ..O47	0.97	2.48	2.876(9)	104
C132 --H13E ..O48	0.97	2.54	2.924(9)	104'
C137 --H13H ..O43	0.97	2.45	2.862(9)	105
C137 --H13H ..O44	0.97	2.48	2.887(8)	105'
C138 --H13I ..O48	0.97	2.42	2.844(11)	106
C138 --H13I ..O49	0.97	2.51	2.900(9)	104'
C143 --H14C ..O20W	0.97	2.49	3.432(10)	165
C143 --H14C ..O44	0.97	2.49	2.897(9)	105'
C143 --H14C ..O45	0.97	2.49	2.886(8)	104"
C144 --H14F ..O49	0.97	2.57	2.918(11)	101
C144 --H14F ..O50	0.97	2.51	2.894(9)	103'
C149 --H14G ..O51	0.97	2.48	2.847(12)	102
C149 --H14G ..O60	0.97	2.54	2.932(11)	104'
C15 --H15 ..O47	0.98	2.51	3.241(9)	132
C150 --H15C ..O56	0.97	2.47	2.868(12)	104
C150 --H15C ..O55	0.97	2.49	2.889(10)	105'
C155 --H15E ..O52	0.97	2.48	2.880(11)	105
C156 --H15G ..O26	0.97	2.38	3.135(11)	134
C156 --H15G ..O27	0.97	2.60	3.132(9)	115'

C156 --H15H ..O56	0.97	2.45	2.856(10)	104
C156 --H15H ..O57	0.97	2.42	2.840(11)	106'
C161 --H16B ..O52	0.97	2.46	2.881(11)	106
C161 --H16B ..O53	0.97	2.52	2.901(13)	103'
C162 --H16C ..O57	0.97	2.42	2.844(10)	106
C162 --H16C ..O58	0.97	2.39	2.825(10)	106'
C162 --H16D ..O28	0.97	2.15	2.996(10)	145
C167 --H16F ..O53	0.97	2.44	2.837(13)	104
C167 --H16F ..O54	0.97	2.44	2.863(11)	106'
C168 --H16H ..O58	0.97	2.48	2.875(13)	104
C168 --H16H ..O59	0.97	2.45	2.855(10)	105'
C17 --H17C ..O47	0.97	2.35	3.132(9)	137
C17 --H17D ..O3	0.97	2.53	2.889(8)	102
C17 --H17D ..O4	0.97	2.48	2.881(11)	105'
C173 --H17F ..O54	0.97	2.47	2.886(11)	105
C173 --H17F ..O55	0.97	2.42	2.833(11)	105'
C174 --H17G ..O59	0.97	2.46	2.869(12)	105
C174 --H17G ..O60	0.97	2.54	2.919(10)	103'
C18 --H18D ..O13	0.97	2.54	2.922(13)	104
C18 --H18D ..O14	0.97	2.42	2.835(12)	105'
C20 --H20 ..O48	0.98	2.57	3.038(9)	109
C0AN --H0AB ..O41	0.97	2.54	2.914(10)	103
C0AN --H0AB ..O50	0.97	2.51	2.906(8)	104'
C21 --H21 ..O49	0.98	2.55	3.301(11)	134
C09M --H09A ..O46	0.97	2.54	2.929(10)	104
C09M --H09A ..O45	0.97	2.45	2.851(9)	104'
C23 --H23C ..O49	0.97	2.23	3.075(9)	145
C23 --H23D ..O4	0.97	2.47	2.877(10)	105

C23 --H23D ..O5	0.97	2.44	2.840(9)	105'
C24 --H24A ..O14	0.97	2.48	2.883(14)	105
C24 --H24A ..O15	0.97	2.50	2.904(10)	105'
C26 --H26 ..O49	0.98	2.42	3.209(8)	137
C29 --H29A ..O5	0.97	2.47	2.873(10)	105
C29 --H29A ..O6	0.97	2.51	2.887(8)	103'
C30 --H30A ..O15	0.97	2.50	2.881(11)	103
C30 --H30A ..O16	0.97	2.51	2.907(9)	105'
C35 --H35A ..O6	0.97	2.53	2.913(9)	103
C35 --H35A ..O7	0.97	2.51	2.905(9)	104'
C36 --H36B ..O16	0.97	2.47	2.879(9)	105
C36 --H36B ..O17	0.97	2.43	2.853(10)	106'
C41 --H41B ..O7	0.97	2.47	2.866(8)	104
C41 --H41B ..O8	0.97	2.51	2.909(10)	104'
C42 --H42A ..O17	0.97	2.45	2.863(9)	105
C42 --H42A ..O18	0.97	2.50	2.890(13)	104'
C45 --H45 ..O58	0.98	2.19	3.048(9)	146
C47 --H47A ..O8	0.97	2.49	2.895(10)	105
C47 --H47A ..O9	0.97	2.45	2.858(10)	105'
C48 --H48A ..O58	0.97	2.41	3.242(9)	143
C48 --H48B ..O18	0.97	2.49	2.893(9)	105
C48 --H48B ..O19	0.97	2.48	2.871(10)	104'
C51 --H51 ..O57	0.98	2.53	3.111(8)	118
C53 --H53A ..O9	0.97	2.53	2.912(11)	103
C53 --H53A ..O10	0.97	2.49	2.872(8)	103'
C54 --H54A ..O19	0.97	2.49	2.893(10)	104
C54 --H54A ..O20	0.97	2.47	2.876(8)	105'
C54 --H54B ..O56	0.97	2.35	3.238(9)	151

C56 --H56 ..O55	0.98	2.57	3.015(10)	108
C56 --H56 ..O56	0.98	2.46	3.306(9)	144'
C59 --H59B ..O1	0.97	2.48	2.859(9)	103
C59 --H59B ..O10	0.97	2.51	2.906(10)	104'
C60 --H60B ..O11	0.97	2.43	2.856(9)	106
C60 --H60B ..O20	0.97	2.50	2.905(10)	105'
C62 --H62 ..O3	0.98	2.25	3.124(8)	148
C65 --H65A ..O2W	0.97	2.52	3.460(9)	162
C65 --H65A ..O21	0.97	2.53	2.894(9)	102'
C65 --H65A ..O30	0.97	2.53	2.911(9)	103"
C66 --H66B ..O31	0.97	2.46	2.874(11)	106
C66 --H66B ..O40	0.97	2.51	2.897(9)	104'
C68 --H68 ..C18	0.98	2.74	3.643(11)	153
C71 --H71B ..O29	0.97	2.44	2.868(10)	106
C71 --H71B ..O30	0.97	2.43	2.843(8)	105'
C72 --H72A ..O39	0.97	2.50	2.894(10)	104
C72 --H72A ..O40	0.97	2.45	2.873(9)	106'
C77 --H77A ..C110	0.97	2.82	3.740(11)	159
C77 --H77B ..O28	0.97	2.54	2.880(12)	100
C77 --H77B ..O29	0.97	2.44	2.856(8)	106'
C78 --H78B ..O38	0.97	2.51	2.914(11)	105
C78 --H78B ..O39	0.97	2.50	2.884(8)	103'
C80 --H80 ..O11	0.98	2.49	2.953(8)	108
C81 --H81 ..O20	0.98	2.28	3.171(8)	151
C83 --H83B ..O27	0.97	2.49	2.894(10)	105
C83 --H83B ..O28	0.97	2.51	2.912(11)	104'
C84 --H84A ..O37	0.97	2.51	2.888(11)	103
C84 --H84A ..O38	0.97	2.46	2.854(9)	104'

C86 --H86 ..O19	0.98	2.58	3.233(8)	124
C89 --H89A ..O18	0.97	2.32	3.169(9)	145
C89 --H89B ..O26	0.97	2.48	2.882(8)	104
C89 --H89B ..O27	0.97	2.50	2.887(11)	104'
C90 --H90B ..O36	0.97	2.45	2.858(9)	105
C90 --H90B ..O37	0.97	2.50	2.898(10)	104'
C92 --H92 ..O18	0.98	2.30	3.128(8)	141
C93 --H93 ..O17	0.98	2.49	2.964(9)	109
C95 --H95A ..O25	0.97	2.47	2.873(8)	105
C95 --H95A ..O26	0.97	2.44	2.850(11)	105'
C96 --H96A ..O35	0.97	2.50	2.891(9)	104
C96 --H96A ..O36	0.97	2.47	2.878(10)	105'
C111 --H111 ..O5	0.98	2.20	3.063(8)	147
C117 --H117 ..O4	0.98	2.58	3.107(8)	114
C129 --H129 ..O33	0.98	2.16	3.063(9)	152
C140 --H140 ..O31	0.98	2.23	3.152(8)	157
C152 --H152 ..O25	0.98	2.56	3.197(9)	123
C153 --H153 ..O26	0.98	2.45	3.154(9)	129
C159 --H159 ..O28	0.98	2.46	3.236(10)	136
C164 --H164 ..O28	0.98	2.42	3.216(10)	138
C164 --H164 ..O29	0.98	2.51	3.074(9)	117'

---

**Table S2.** Raman band assignments for Q[10] and Q[10]-Y2.

Raman band position, $\text{cm}^{-1}$		Band assignments
Q[10]	Q[10]-Y2	
1736 m	1748 m-s	$\nu$ (C=O)
–	1656-1598 w	$\nu$ (C=O) (metal coordinated)
1500 w, 1453 m, 1425 s, 1375 m-s	1495 w, 1429 and 1375 s	$\delta$ CH <sub>2</sub> + $\delta$ CH deformation vibrations; plus $\nu_{\text{as}}$ C–N (in N–C–N)
1317 m-w	1316 m	$\nu$ C–N + $\nu$ C–C + $\delta$ CH + $\omega$ CH <sub>2</sub>
1279 m-w	1279 m-w	$\nu_s$ C–N (in N–C–N) + $\tau$ CH <sub>2</sub>
1223–1190 m	1220–1190 m	$\nu$ C–C + $\nu$ C–N + $\tau$ CH <sub>2</sub> + $\delta$ CH
1134 m, br	1132 m, br	$\nu$ (HC–CH) + $\delta$ CH + $\rho$ CH <sub>2</sub>
1043 m, 1020 vw	1041 s, 1000 vw	$\nu$ C–N + $\rho$ CH <sub>2</sub> + $\gamma$ CH
976 w	974 w	$\nu$ (HC–CH) + $\delta$ CH
947 vw, 908 m	918 m	$\rho$ CH <sub>2</sub>
831 vs, 815 s,sh	836 vs	$\delta$ C–N–C (ring R10 deformation) + $\rho$ CH <sub>2</sub> (rocking)
753 s-m	748 s-m	$\delta$ C–N–C out-of-plane ring R10 deformation
702 vw	706 vw	$\rho$ CH <sub>2</sub> + $\omega$ CH
659 m	658 m	$\tau$ HC–CH + ring deformation, $\delta$ C=O (C–CO–C) in-plane deformation vibration
627 vw	625 vw	Vibrational modes of coordinated water molecules
471 sh, 445 vs	441 vs	$\sigma$ N–C–N, ring R10 scissoring
403 m	–	Ring deformation
370 m-w	369 vw	Out-of-plane R10 deformation
339 w	342 vw	Out-of-plane ring deformation
256 w, br		R10 deformation
–	246 w	$\nu$ (Y–O) stretching vibration and R10 deformation
< 200	< 200	Lattice modes