

Second Structural Directing Agent Induces the Formation of 1D Organic Templated Terbium Sulfate

Lei Zheng, Xinmin Qiu, Yan Xu, Jie Fu, Yan Yuan, Dunru Zhu

College of Chemistry and Chemical Engineering, State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, Nanjing University of Technology, Nanjing, 210009, PR China.

E-mail: yanxu@njut.edu.cn; Tel: (+86)25-83587857

Table S1 Selected bond lengths (Å) and angles (°) for **1** and **2**.

1					
Tb1—O1 ⁱ	2.318(4)	O1 ⁱ —Tb1—O11	148.99(15)	O4—Tb1—O9	80.25(15)
Tb1—O6	2.347(4)	O6—Tb1—O11	86.74(17)	O11—Tb1—O9	57.12(14)
Tb1—O10 ⁱⁱ	2.307(4)	O10 ⁱⁱ —Tb1—O11	81.54(16)	O3—Tb1—O9	72.95(14)
Tb1—O4	2.391(4)	O10 ⁱⁱ —Tb1—O4	83.17(14)	O1 ⁱ —Tb1—O5	74.65(14)
Tb1—O11	2.423(4)	O4—Tb1—O11	122.40(15)	O6—Tb1—O5	58.43(14)
Tb1—O3	2.419(4)	O1 ⁱ —Tb1—O3	80.63(15)	O10 ⁱⁱ —Tb1—O5	80.14(15)
Tb1—O9	2.458(4)	O6—Tb1—O3	77.31(14)	O4—Tb1—O5	152.90(15)
Tb1—O5	2.461(4)	O10 ⁱⁱ —Tb1—O3	139.63(15)	O11—Tb1—O5	76.00(14)
O1—Tb1 ⁱ	2.318(4)	O4—Tb1—O3	58.05(14)	O3—Tb1—O5	129.84(14)
O10—Tb1 ⁱⁱ	2.307(4)	O11—Tb1—O3	126.95(15)	O9—Tb1—O5	126.16(14)
O1 ⁱ —Tb1—O6	86.37(16)	O1 ⁱ —Tb1—O9	153.27(15)	O1 ⁱ —Tb1—O4	82.48(14)
O1 ⁱ —Tb1—O10 ⁱⁱ	83.82(16)	O6—Tb1—O9	91.62(15)	O6—Tb1—O4	135.13(14)
O6—Tb1—O10 ⁱⁱ	138.55(15)	O10 ⁱⁱ —Tb1—O9	113.98(15)		
2					
Tb1—O5 ⁱ	2.432(4)	O1 ⁱⁱ —Tb2—O6	71.31(12)	O3—Tb2—O12	85.49(13)
Tb1—O7 ⁱⁱ	2.441(4)	O11—Tb2—O6	134.97(12)	O1 ⁱⁱ —Tb2—O12	124.38(12)
Tb1—O19	2.593(4)	O18—Tb2—O6	107.96(12)	O11—Tb2—O12	152.89(12)
Tb1—O6 ⁱⁱⁱ	2.608(4)	O12—Tb2—O6	53.99(11)	O18—Tb2—O12	77.31(14)
Tb2—O2 ⁱⁱ	2.446(3)	O13—Tb2—O6	75.83(12)	O2 ⁱⁱ —Tb2—O13	150.78(11)
Tb2—O3	2.469(3)	O2 ⁱⁱ —Tb2—O2	69.61(14)	O3—Tb2—O13	132.87(11)
Tb2—O1 ⁱⁱ	2.511(4)	O3—Tb2—O2	70.05(12)	O1 ⁱⁱ —Tb2—O13	83.32(12)
Tb2—O11	2.515(4)	O1 ⁱⁱ —Tb2—O2	67.61(11)	O11—Tb2—O13	70.81(12)
Tb2—O18	2.556(4)	O11—Tb2—O2	53.99(11)	O18—Tb2—O13	54.33(11)
Tb2—O12	2.587(4)	O18—Tb2—O2	118.54(12)	O12—Tb2—O13	91.89(14)

Tb2—O13	2.628(4)	O12—Tb2—O2	146.21(13)	O2 ⁱⁱ —Tb2—O6	77.60(11)
Tb2—O6	2.663(3)	O6—Tb2—O2	131.84(10)	O3—Tb2—O6	133.75(13)
Tb2—O2	2.682(4)	O1 ⁱⁱ —Tb2—O18	134.64(13)	O2 ⁱⁱ —Tb2—O18	148.50(13)
Tb3—O23A	2.282(8)	O10 ^v —Tb3—O23	67.9(2)	S3—O1—Tb2 ⁱⁱ	133.5(2)
Tb3—O17 ^{iv}	2.497(4)	O23A—Tb3—O9	78.6(2)	S1—O2—Tb2 ⁱⁱ	150.6(2)
Tb3—O10 ^v	2.542(4)	O17 ^{iv} —Tb3—O9	125.17(13)	S1—O2—Tb2	96.30(16)
Tb3—O23	2.583(10)	O10 ^v —Tb3—O9	156.90(12)	Tb2 ⁱⁱ —O2—Tb2	110.39(14)
Tb3—O21A ^v	2.588(9)	O23A—Tb3—O4	96.3(2)	S3—O3—Tb2	142.3(2)
Tb3—O9	2.592(4)	O17 ^{iv} —Tb3—O4	79.41(13)	S2—O4—Tb3	100.08(19)
Tb3—O4	2.601(4)	O10 ^v —Tb3—O4	126.52(12)	S1—O5—Tb1 ⁱⁱ	136.5(3)
Tb3—O16	2.614(4)	O23—Tb3—O4	106.1(2)	S5—O6—Tb1	99.65(19)
Tb3—O14	2.644(4)	O10 ^v —Tb3—O16	74.64(12)	S5—O6—Tb2	97.80(15)
Tb3—O24A ^v	2.735(12)	O2 ⁱⁱ —Tb2—O11	123.06(12)	Tb1—O6—Tb2	126.77(14)
Tb3—O21	2.747(14)	O9—Tb3—O16	116.79(14)	S3—O7—Tb1 ⁱⁱ	153.4(2)
O5 ⁱ —Tb1—O5 ⁱⁱ	103.05(19)	O4—Tb3—O16	54.16(11)	S4—O9—Tb3	100.6(2)
O7 ⁱ —Tb1—O7 ⁱⁱ	132.86(19)	O10 ^v —Tb3—O14	139.92(14)	S2—O10—Tb3 ^{vi}	128.3(2)
O5 ⁱ —Tb1—O19	167.04(14)	O23—Tb3—O14	149.0(2)	S1—O11—Tb2	104.2(2)
O7 ⁱⁱ —Tb1—O19	124.41(13)	O9—Tb3—O14	53.87(12)	S5—O12—Tb2	101.9(2)
O5 ⁱⁱ —Tb1—O19 ⁱⁱⁱ	167.04(14)	O4—Tb3—O14	70.44(12)	S4—O13—Tb2	97.98(18)
O7 ⁱ —Tb1—O19 ⁱⁱⁱ	124.41(12)	O16—Tb3—O14	120.83(12)	S2—O17—Tb3 ^{iv}	144.2(3)
O5 ⁱ —Tb1—O6	138.22(13)	O10 ^v —Tb3—O21	109.4(2)	S4—O18—Tb2	101.02(18)
O7 ⁱ —Tb1—O6	138.76(13)	O9—Tb3—O21	60.4(2)	S5—O19—Tb1	101.4(2)
O6—Tb1—O6 ⁱⁱⁱ	103.05(16)	O4—Tb3—O21	70.9(3)	S6—O21—Tb3	112.3(7)
O2 ⁱⁱ —Tb2—O1 ⁱⁱ	76.82(12)	O16—Tb3—O21	71.7(3)	S6—O23—Tb3	119.4(6)
O3—Tb2—O1 ⁱⁱ	135.20(12)	O14—Tb3—O21	110.6(2)	S6—O23A—Tb3	154.5(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: **1** (i) -x, -2-y, 1-z; (ii) -x, -2-y, 2-z; **2** (i) 0.5+x, 0.5-y, 0.5+z; (ii) 0.5-x, 0.5-y, 1-z; (iii) 1-x, y, 1.5-z; (iv) -x, y, 0.5-z; (v) x, -y, 0.5+z; (vi) x, -y, -0.5+z; (vii) 1-x, y, 0.5-z.

Table S2 Hydrogen bonds of compounds **1**.

D—H...A	D—H(Å)	H...A(Å)	D...A(Å)	D—H...A(°)
O1W-- H1W...O7	0.86(6)	2.16(6)	2.84(1)	137
N1-- H1A...O5	0.90	2.01	2.87(1)	162
N1-- H1A...O11	0.90	2.47	2.95(1)	114
N1-- H1B...O2	0.90	2.44	3.05(1)	125
N1-- H1B...O4	0.90	2.44	3.18(1)	141
O1W-- H1WB...O4	0.88(7)	2.06(7)	2.92(1)	173
O1W-- H1WC...O6	0.87(7)	2.38(10)	2.97(1)	126
O1W-- H1WC...O6	0.87(7)	2.28(6)	3.01(1)	142
O2W-- H2WA...O8	0.87(7)	2.57(11)	2.92(1)	105
O2W-- H2WA...O8	0.87(7)	1.97(8)	2.82(1)	167
O2W-- H2WB...O9	0.87(8)	2.02(8)	2.89(1)	173
O2W-- H2WC...O2	0.87(9)	2.41(10)	3.00(1)	126
O2W-- H2WC...O2	0.87(9)	2.10(10)	2.92(1)	158

Table S3 Hydrogen bonds of compounds **2**.

D—H...A	D—H(Å)	H...A(Å)	D...A(Å)	D—H...A(°)
N1-- H1D...O9	0.90	2.39	2.88(1)	114
N1-- H1D...O20	0.90	2.56	3.28(1)	138
N1-- H1E...O9	0.90	2.58	2.88(1)	101
N1-- H1E...O21	0.90	1.87	2.76(1)	173
N1-- H1E...O21A	0.90	2.43	3.20(1)	144
N1-- H1E...O22	0.90	2.55	3.22(2)	132
N3-- H3C...O8	0.90	1.92	2.80(1)	166
N4-- H4C...O16	0.90	2.38	2.87(1)	115
N4-- H4C...O10	0.90	2.21	2.98(1)	144
N4-- H4C...O17	0.90	2.59	3.34(1)	142
N5-- H5D...O4	0.90	2.38	3.09(1)	136
N5-- H5D...O14	0.90	2.41	3.19 (1)	146
N6-- H6D...O22A	0.90	2.28	2.93(1)	130
N6-- H6D...O24	0.90	1.97	2.80(1)	154
N6-- H6E...O13	0.90	2.34	2.88(1)	119
N6-- H6E...O20	0.90	2.37	3.03(1)	131
C1-- H1C...O22A	0.96	2.52	3.36(2)	147
C2-- H2A...O18	0.96	2.53	3.27(1)	135
C2-- H2B...O23	0.96	2.22	3.13(1)	159
C2-- H2B...O24	0.96	2.59	3.31(2)	133
C5-- H5A...O11	0.96	2.54	3.19(1)	126
C6-- H6A...O15	0.96	2.55	3.37(1)	144
C6-- H6C...O12	0.96	2.50	3.22(1)	132
C7-- H7A...O24A	0.96	2.16	3.04(2)	153

Figure S1 TG curve of compounds **1**.

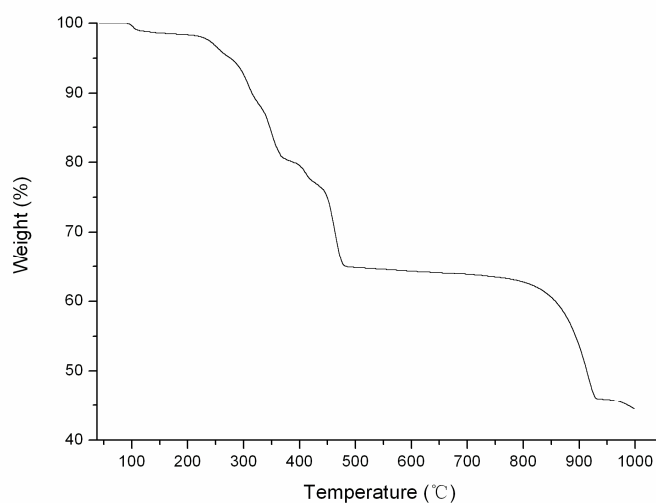


Figure S2 TG curve of compounds **2**.

