Support information:

以三乙烯二胺为配体的过渡金属配位化合物合成、晶体结构及荧光性能研究

黄燕萍 [1]　张潇*[1]　刘蕾 [1]　张楠曦 [2]　许宪祝 [1]

([1] 哈尔滨工业大学城市水资源与水环境国家重点实验室；基础与交叉科学研究院，哈尔滨 150001)

([2] 哈尔滨工业大学生命科学与技术学院，哈尔滨 150001)

1.配合物 1～4 部分键长、键角数据：

附表1 配合物 **1~4** 的主要键长、键角数据表

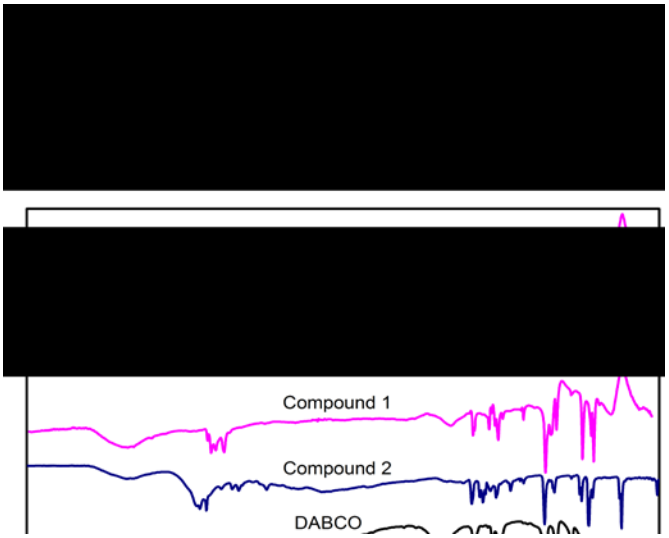
Table 1 Selected bonds lengths (nm) and angles (°) for compound **1** to **4**

compound **1**					
Cd(1)-Cl(1)	0.2483(5)	N(1)-Cl(1)	0.1492(15)	Cl(1)-Cd(1)-Cl(1^{i})	60.0
Cd(1)-N(2)	0.2461(13)	C(1)-C(2)	0.1540(18)	N(2)-Cd(1)-Cl(1)	90.0
compound **2**					
Co(1)-Cl(1)	0.22574(12)	N(1)-Co(1)-Cl(2)	104.85(9)	Cl(2)-Co(1)-Cl(3)	114.22(5)
Co(1)-Cl(2)	0.22460(11)	N(1)-Co(1)-Cl(3)	106.01(10)	Cl(3)-Co1-Cl(1)	111.93(5)
Co(1)-Cl(3)	0.22551(12)	C(2)-N(1)-Co(1)	110.6(2)	N(1)-Co(1)-Cl(1)	107.60(10)
Co(1)-N(1)	0.2076(3)	C(2)-N(1)-C(3)	108.3(3)	C(3)-N(1)-Co(1)	111.7(2)
Cl(2)-Co(1)-Cl(1)	111.59(5)	C(2)-N(1)-C(6)	108.8(3)	C(6)-N(1)-Co(1)	108.8(2)
symmetry code: (i) -x,1/2+y,-z					
compound **3**					
Ni(1)-Cl(1)	0.23963(11)	Ni(1)-O(2)	0.2096(5)	N(1)-C(1)	0.1477(5)
Ni(1)-Cl(1^{i})	0.23963(11)	Ni(1)-N(1)	0.2181(4)	N(1)-C(4)	0.1488(7)
Ni(1)-O(1)	0.2086(3)	N(1)-C(1^{i})	0.1477(5)	N(2)-C(2^{i})	0.1487(7)
Ni(1)-O(1^{i})	0.2086(3)	N(2)-C(3)	0.1477(8)	N(2)-C(2)	0.1487(7)
C(1)-C(2)	0.1534(6)	N(1)-Ni(1)-Cl(1^{i})	92.61(8)	O(1^{i})-Ni(1)-O(1)	86.79(16)
C(3)-C(4)	0.1530(8)	O(1)-Ni(1)-Cl(1^{i})	87.23(8)	O(1)-Ni(1)-O(2)	85.75(13)
Cl(1^{i})-Ni(1)-Cl(1)	98.21(6)	O(1)-Ni(1)-Cl(1)	171.96(9)	O(1^{i})-Ni(1)-O(2)	85.75(13)
O(1^{i})-Ni(1)-Cl(1^{i})	171.96(9)	O(1^{i})-Ni(1)-Cl(1)	87.23(8)	O(1)-Ni(1)-N(1)	93.05(12)
O(1^{i})-Ni(1)-N(1)	93.05(12)	O(2)-Ni(1)-Cl(1)	88.46(9)	Cl(1)-N(1)-Ni(1)	111.3(2)
symmetry code: (i) +x,1/2-y,+z					
compound **4**					
Cu(1)-Cl(1^{i})	0.23716(7)	N(1)-C(1)	0.1484(2)	N(2)-C(2^{i})	0.1475(3)
Cu(1)-Cl(1)	0.23716(7)	N(1)-C1(1^{i})	0.1484(2)	N(2)-C(3)	0.1487(4)

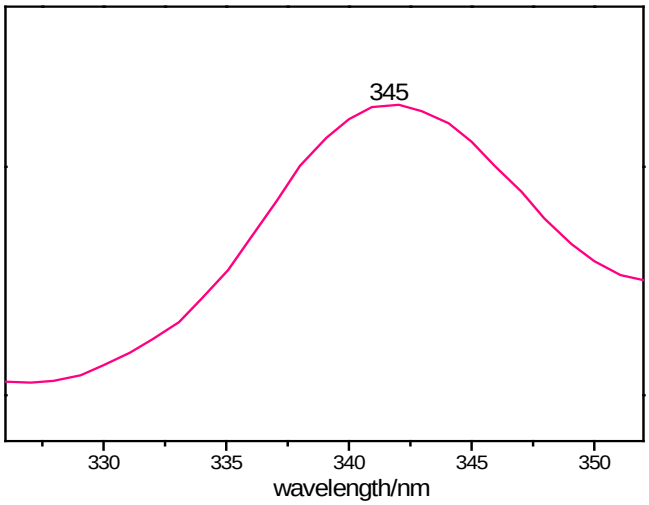
Cu(1)-Cl(2)	0.23378(8)	N(1)-C(4)	0.1483(4)	Cu(1)-N(1)	0.2131(2)
Cu(1)-N(3)	0.2123(2)	N(2)-C(2)	0.1475(3)	N(1)-Cu(1)-Cl(1)	91.50(4)
N(3)-Cu(1)-N(1)	175.55(9)	C(4)-N(1)-Cu(1)	111.70(17)	N(1)-Cu(1)-Cl(1^{i})	91.50(4)
C1(1)-N(1)-Cu(1)	110.41(13)	C(4)-N(1)-C1(1)	108.04(15)	N(1)-Cu(1)-Cl(2)	87.53(6)
Cl(1^{i})-Cu(1)-Cl(1)	111.25(6)	C(4)-N(1)-C(1)	108.04(15)	N(3)-Cu(1)-Cl(1)	91.02(4)
Cl(2)-Cu(1)-Cl(1)	124.37(3)	C(2)-N(2)-C(2^{i})	110.7(3)	N(3)-Cu(1)-Cl(1^{i})	91.02(4)
Cl(2)-Cu(1)-Cl(1^{i})	124.37(3)	C(3)-N(2)-C(2^{i})	109.46(18)	N(3)-Cu(1)-Cl(2)	88.01(6)
C(1)-N(1)-Cu(1)	110.41(13)	C(1)-N(1)-C1(1^{i})	108.1(2)		

symmetry code: (i) +x,1/2-y,+z

2.配合物 1~4 的红外光谱图

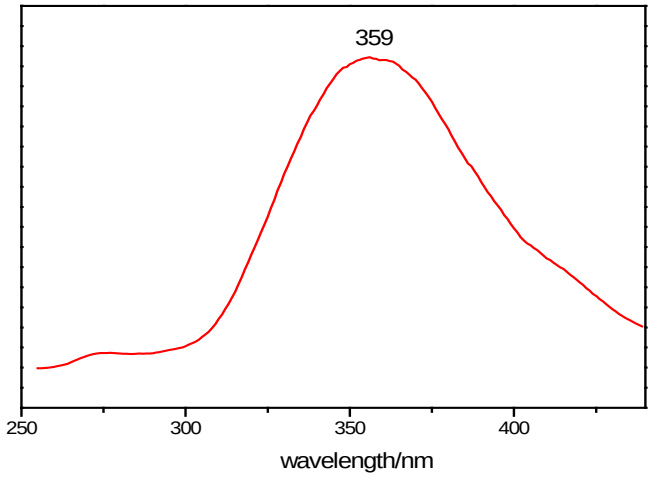


3.$CdCl_2$ 荧光光谱数据



上图为 $CdCl_2$ 在激发波长为 250 nm 条件下得到的发射光谱，λ_{max}(Em)=345nm。

4.三乙烯二胺的荧光光谱数据



.

上图为 dabco 在激发波长为 247 nm 条件下得到的发射光谱，λ_{max}(Em)=359 nm.