

锰(II)配合物修饰的Preyssler型多金属氧酸盐
的合成、晶体结构和催化性能

于沫涵 朱浩天 白建萍 唐洋 张澜萃* 安悦*

(辽宁师范大学 化学化工学院,大连 116029)

Table S1 Selected bond lengths (nm) and angles (°) for compound 1

表 S1 化合物 1 选择的键长 (nm) 和键角 (°)

Bond	Length (nm)	Bond	Length (nm)	Bond	Length (nm)
Mn1–O2W	0.2155(15)	Mn3–N20	0.2256(17)	Mn5–N42	0.2279(17)
Mn1–N3	0.2205(17)	Mn3–N17	0.2257(14)	Mn5–N45	0.229(2)
Mn1–O1W	0.222(2)	Mn3–N19	0.2288(18)	Mn6–N57	0.219(3)
Mn1–N1	0.2253(16)	Mn3–N22	0.2320(17)	Mn6–N58	0.221(3)
Mn1–N2	0.2257(16)	Mn4–N32	0.2264(17)	Mn6–N56	0.2224(17)
Mn1–N4	0.2337(16)	Mn4–N34	0.2275(15)	Mn6–N53	0.2225(19)
Mn2–O3W	0.2213(13)	Mn4–N29	0.2283(15)	Mn6–N54	0.2263(16)
Mn2–O4W	0.2227(13)	Mn4–N33	0.2290(16)	Mn6–N55	0.2290(18)
Mn2–N12	0.2248(15)	Mn4–N30	0.2301(17)	Mn7–N68	0.220(2)
Mn2–N10	0.2254(16)	Mn4–N31	0.2301(15)	Mn7–N66	0.2202(17)
Mn2–N9	0.2263(15)	Mn5–N41	0.2216(17)	Mn7–N67	0.229(2)
Mn2–N11	0.2287(15)	Mn5–N46	0.224(2)	Mn7–N73	0.232(3)
Mn3–N21	0.2221(17)	Mn5–N43	0.224(2)	Mn7–N74	0.233(3)
Mn3–N18	0.2240(15)	Mn5–N44	0.226(2)	Mn7–N65	0.333(19)
Bond	Angle (°)	Bond	Angle (°)	Bond	Angle (°)
N1–Mn1–O2W	169.8(6)	N19–Mn3–N22	162.9(6)	N44–Mn5–N45	154.4(7)
N3–Mn1–O1W	160.4(7)	N21–Mn3–N18	153.7(6)	N54–Mn6–N56	171.6(8)
N2–Mn1–N4	154.2(6)	N34–Mn4–N31	153.8(6)	N55–Mn6–N57	161.2(8)
O4W–Mn2–N10	162.4(5)	N29–Mn4–N32	157.0(6)	N58–Mn6–N53	164.3(9)
N11–Mn2–N9	163.4(5)	N30–Mn4–N33	149.2(6)	N66–Mn7–N74	144.1(9)
O3W–Mn2–N12	156.8(5)	N41–Mn5–N46	156.0(8)	N65–Mn7–N67	146.9(6)
N17–Mn3–N20	157.9(6)	N42–Mn5–N43	161.5(8)	N68–Mn7–N73	148.0(10)

Table S2 Hydrogen bonds for compound 1

表 S2 化合物 1 的氢键表

D–H...A	d(D–H) (nm)	d(H...A) (nm)	d(D...A) (nm)	<(DHA) (°)	D–H...A	d(D–H) (nm)	d(H...A) (nm)	d(D...A) (nm)	<(DHA) (°)
N5–H5A...O47 ⁱ	0.086	0.203	0.287(2)	164.1	N39–H39A...O90 ^{vii}	0.086	0.191	0.274(2)	161.7
N6–H6A...O47 ⁱ	0.086	0.252	0.328(2)	148.4	N40–H40A...O90 ^{vii}	0.086	0.240	0.316(2)	148.2
N7–H7A...O11	0.086	0.224	0.300(2)	147.0	N40–H40A...O42 ^{vii}	0.086	0.253	0.325(2)	141.6
N7–H7A...O64	0.086	0.261	0.321(2)	127.8	N47–H47A...Cl1	0.086	0.239	0.319(2)	154.0
N8–H8A...O64	0.86	0.224	0.303(2)	152.9	N48–H48A...Cl1	0.86	0.225	0.307(2)	158.2
N13–H13A...O105 ⁱⁱ	0.086	0.253	0.304(2)	119.0	N49–H(49A...O8W ^{viii}	0.086	0.199	0.281(3)	158.3
N13–H13A...Cl1 ⁱⁱ	0.086	0.264	0.345 (2)	157.4	N50–H50A...O13W	0.086	0.186	0.271(4)	170.2
N14–H14A...Cl1 ⁱⁱ	0.086	0.240	0.325(2)	166.6	N51–H51A...O109 ^{viii}	0.086	0.221	0.306(3)	168.2
N15–H15A...O9 ⁱⁱⁱ	0.086	0.222	0.291(2)	138.0	N52–H52A...O107 ^{viii}	0.086	0.207	0.277(3)	137.7
N15–H15A...O15 ⁱⁱⁱ	0.086	0.245	0.323(2)	151.0	N59–H59A...O83 ⁱⁱⁱ	0.086	0.191	0.275(2)	163.5
N16–H16A...O15 ⁱⁱⁱ	0.086	0.199	0.283(2)	165.2	N60–H60A...O71 ⁱⁱⁱ	0.086	0.246	0.322(2)	147.4
N23–H23A...O5W	0.086	0.218	0.294(2)	148.0	N60–H60A...O83 ⁱⁱⁱ	0.086	0.249	0.324(3)	146.7
N23–H23A...O34 ^{iv}	0.086	0.251	0.308(2)	125.0	N61–H61A...O34 ^{ix}	0.086	0.215	0.294(3)	152.3
N24–H24A...O5W	0.086	0.207	0.286(2)	151.6	N62–H62A...O11W ^x	0.086	0.205	0.289(4)	168.6
N25–H25A...O85 ^v	0.086	0.193	0.278(2)	167.5	N63–H63A...O12W	0.086	0.240	0.311(6)	140.8
N26–H26A...O97 ^v	0.086	0.223	0.306(2)	163.4	N64–H64A...O17W	0.086	0.186	0.267(5)	157.4
N27–H27A...O56	0.086	0.198	0.273(3)	145.2	N69–H69A...O41 ⁱⁱ	0.086	0.225	0.305(2)	155.1
N28–H28A...O98	0.086	0.258	0.335(2)	150.0	N69–H69A...O100 ⁱⁱ	0.086	0.242	0.304(2)	129.1
N28–H28A...O38	0.086	0.266	0.340(3)	144.8	N70–H70A...O100 ⁱⁱ	0.086	0.222	0.296(2)	143.8
N35–H35A...O3 ^{vi}	0.086	0.239	0.317(2)	150.4	N71–H71A...O7W ⁱⁱ	0.086	0.188	0.274(4)	170.3
N36–H36A...O3 ^{vi}	0.086	0.206	0.289(2)	162.4	N72–H72A...O96 ^{ix}	0.086	0.199	0.271(3)	139.4
N37–H37A...O95 ⁱⁱⁱ	0.086	0.239	0.316(2)	150.9	N76–H76A...O48	0.086	0.233	0.298(3)	133.2
N38–H38A...O95 ⁱⁱⁱ	0.086	0.207	0.289(2)	160.6	N76–H76A...O20	0.086	0.249	0.329(3)	155.3

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: ⁱ -x+1, -y+1, -z+2; ⁱⁱ -x, -y, -z+1; ⁱⁱⁱ -x+1, -y, -z+1;

^{iv} x-1, y, z; ^v -x, -y, -z+2; ^{vi} x+1, y, z; ^{vii} -x+1, -y+1, -z+1; ^{viii} x, y-1, z; ^{ix} x, y, z-1; ^x x+1, y, z-1