

Supporting Information

基于三吡啶烯炔配体的一维配位聚合物：合成，结构及光电性质

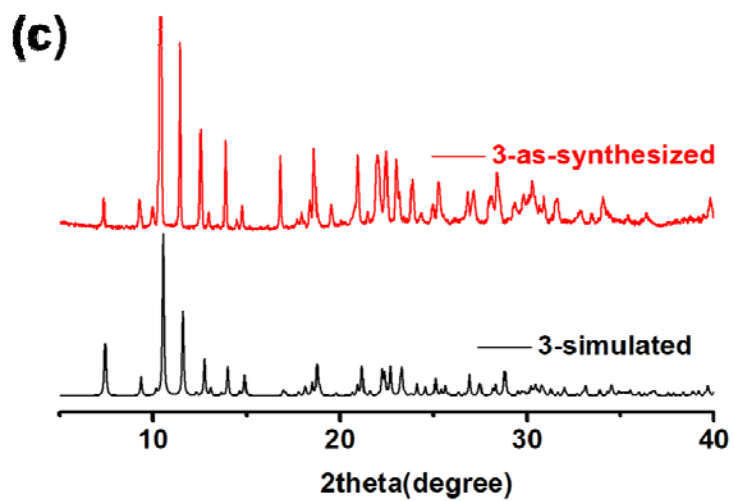
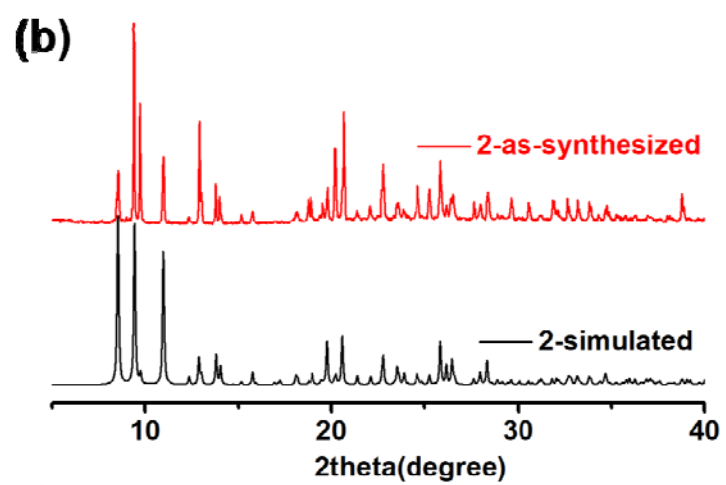
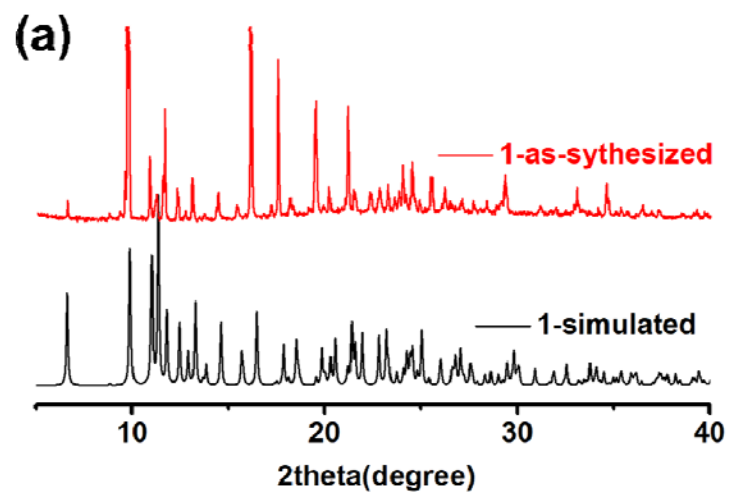
陈慧娴 刘春玉* 周璇 陈敏敏 倪春燕* 郎建平*

(苏州大学材料与化学化工学部，苏州市资源分子精准转化重点实验室，苏州 215123)

联系人， E-mail: 928483592@qq.com, chunyan89.ok@163.com, jplang@suda.edu.cn

Table of Contents

Figure S1 PXRD spectra of compounds 1-4	S4
Figure S2 Thermogravimetric analysis(TGA) of compounds 1-4	S4
Figure S3 Crystal structure of complex 2 : (a) the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ structure in 2 and the weak interactions between the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ and PF_6^- group; (b) the 3D structure of 2 constructed by 1D $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_n$ chains and bridging PF_6^- groups. Atom color codes: C, gray; H, white; N, blue; Ag, yellow; P, pink; F, light green.	S5
Figure S4 Crystal structure of complex 3 : (a) the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ structure in 3 and the weak interactions between the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ and NO_3^- group; (b) the 3D structure of 3 constructed by 1D $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_n$ chains and bridging NO_3^- groups. Atom color codes: C, gray; H, white; N, blue; Ag, yellow; O, red.	S6
Table S1 Selected Bond Lengths (nm) and Angles (deg) for complex 1-4	S7



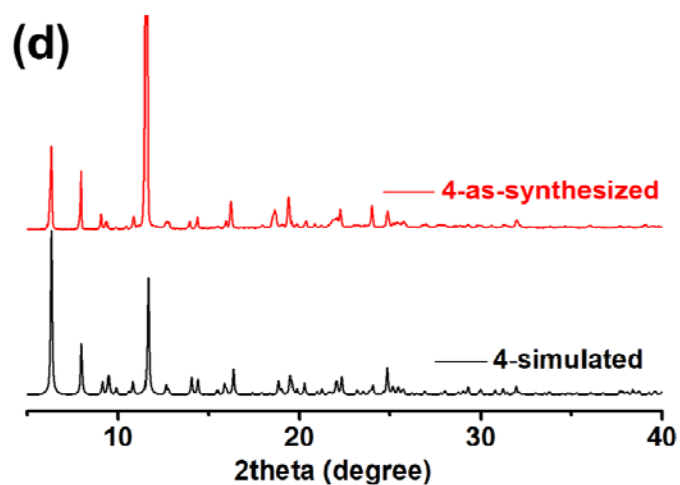


Figure S1 PXRD spectras of complexes 1-4.

图 S1 配合物 1-4 的 PXRD 图。

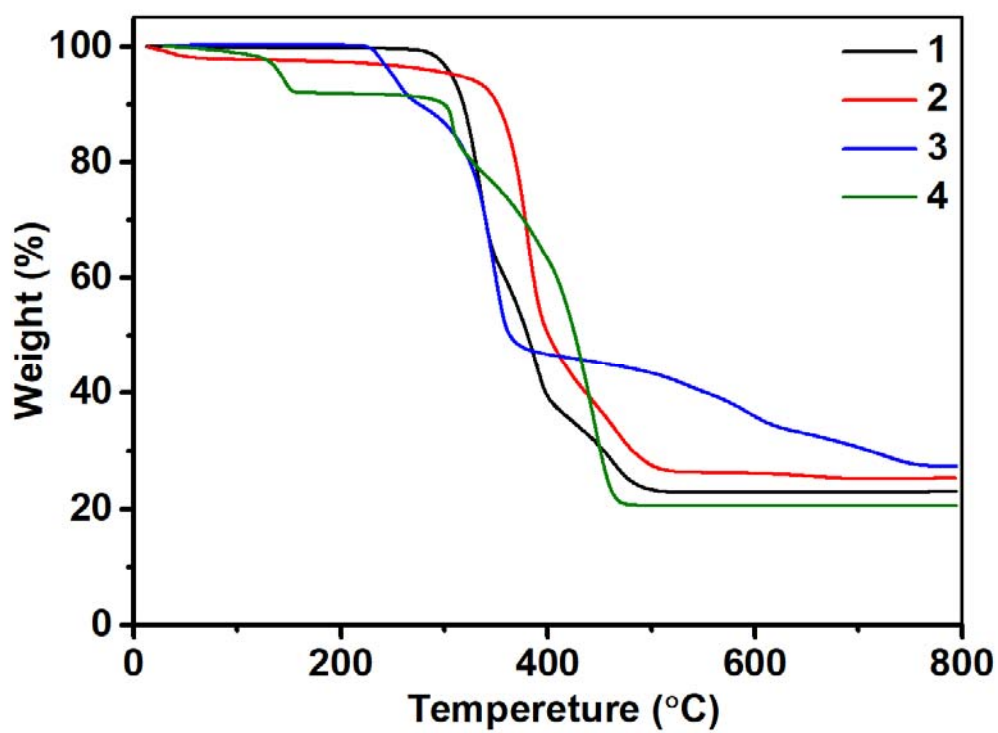
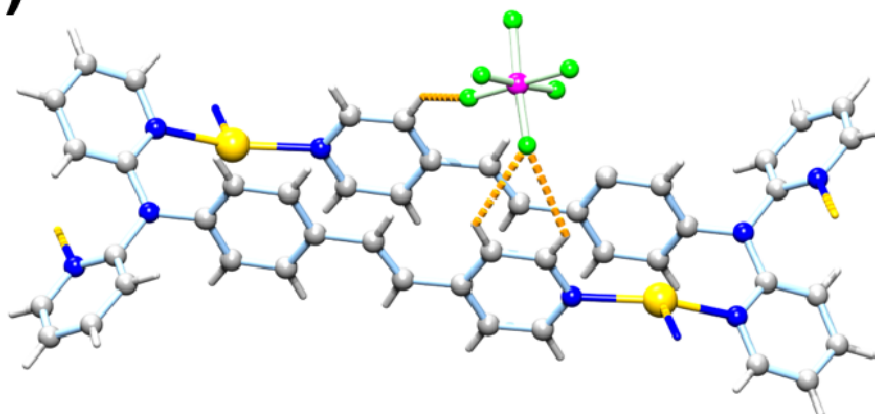


Figure S2 Thermogravimetric analysis (TGA) of complexes 1-4.

图 S2 化合物 1-4 的热重分析 (TGA) 图。

(a)



(b)

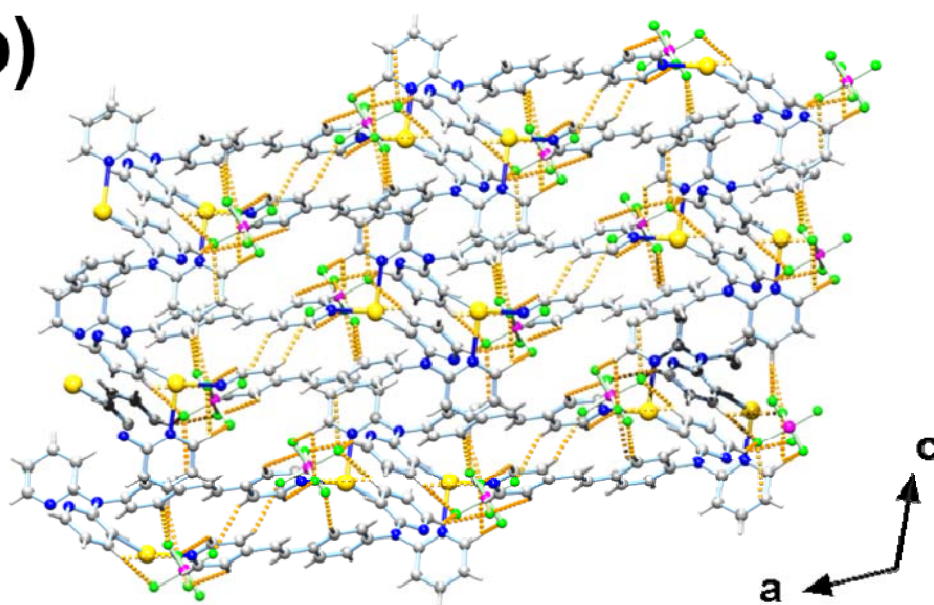


Figure S3 Crystal structure of complex 2: (a) the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ structure in 2 and the weak interactions between the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ and PF_6^- group; (b) the 3D structure of 2 constructed by 1D $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_n$ chains and bridging PF_6^- groups. Atom color codes: C, gray; H, white; N, blue; Ag, yellow; P, pink; F, light green.

图 S3 化合物 2 的结构 : (a) 化合物 2 中的二聚体 $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ 结构及其和阴离子 PF_6^- 之间的弱作用关系图 ; (b) 化合物 2 中一维链由阴离子 PF_6^- 桥联形成的三维结构图。原子颜色标记 : C , 灰色 ; H , 白色 ; N , 蓝色 ; Ag , 黄色 ; P , 粉色 ; F , 草绿色。

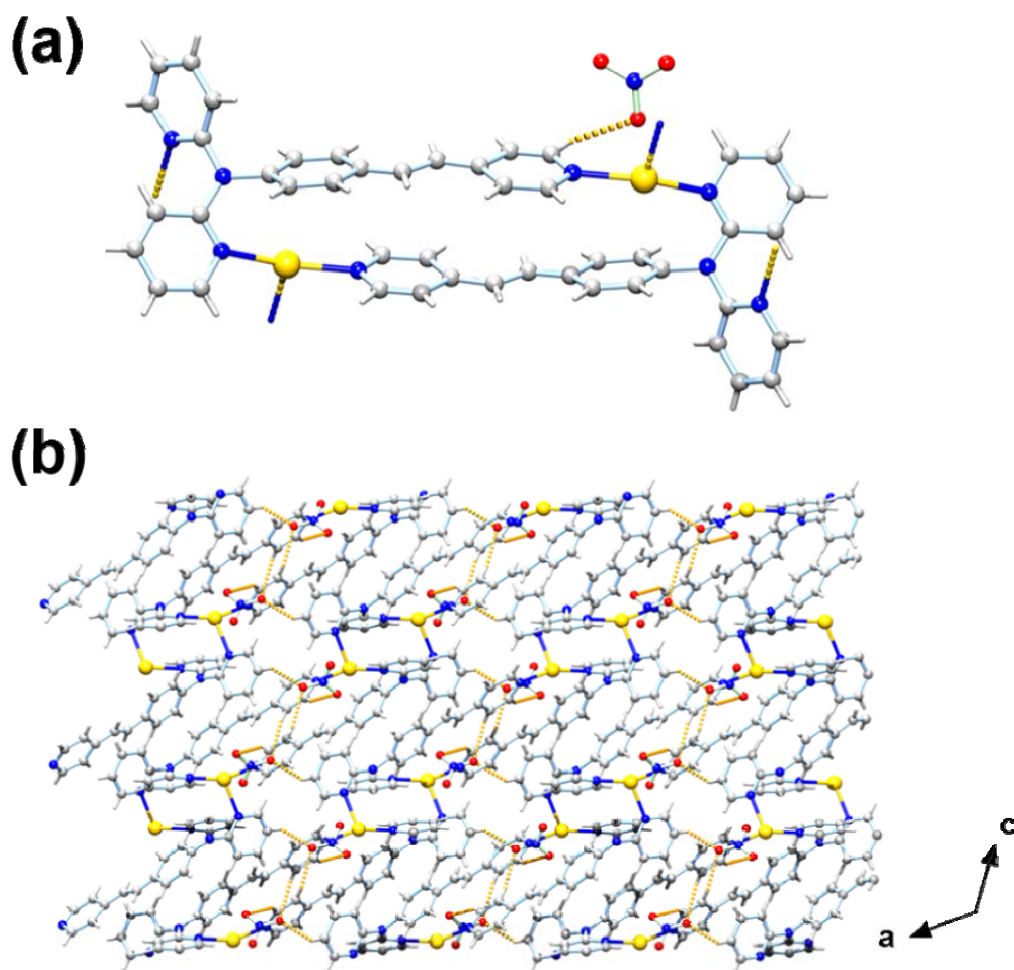


Figure S4 Crystal structure of complex **3**: (a) the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ structure in **3** and the weak interactions between the $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ and NO_3^- group; (b) the 3D structure of **3** constructed by 1D $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_n$ chains and bridging NO_3^- groups. Atom color codes: C, gray; H, white; N, blue; Ag, yellow; O, red.

图 S4 化合物 **3** 的结构 : (a) 化合物 **3** 中的二聚体 $[\text{Ag}(\text{ppvppa})]_2$ 结构及其和阴离子 NO_3^- 之间的弱作用关系图 ; (b) 化合物 **3** 中一维链由阴离子 NO_3^- 桥联形成的三维结构图。原子颜色标记 : C , 灰色 ; H , 白色 ; N , 蓝色 ; Ag , 黄色 ; O , 红色。

表 S1 配合物 **1–4** 的主要键长 (nm) 和键角 (deg)。

Table S1 Selected Bond Lengths (nm) and Angles (deg) for complexes **1–4**.

1			
Ag1- N4A	0.2211(2)	Ag1 -N2B	0.2236(2)
Ag1- N1	0.2504(2)	N4A -Ag1- N2B	154.82(9)
N4A -Ag1 -N1	100.74(9)	N2B -Ag1 -N1	97.98(8)
2			
Ag1- N4A	0.2210(4)	Ag1- N1	0.2436(4)
Ag1 -N2B	0.2234(4)	N4A -Ag1- N1	98.61(15)
N4A- Ag1- N2B	152.30(15)	N2B- Ag1- N1	102.34(13)
3			
Ag1-N2A	0.2253(7)	Ag1 -N1B	0.2460(8)
Ag1- N4	0.2219(7)	N2A- Ag1 -N1B	103.6(3)
N4- Ag1 -N2A	158.3(3)	N4-Ag1 -N1B	95.3(3)
4			
Ni1-O3A	0.2065(6)	Ni1-O5	0.2083(6)
Ni1-O1	0.2075(5)	Ni1-N2	0.2091(6)
Ni1-N4B	0.2124(6)	Ni1-N1	0.2106(7)
O3A-Ni1-O5	92.4(2)	O3A-Ni1-O1	91.3(2)
O5-Ni1-O1	91.4(2)	O3A-Ni1-N2	173.5(2)
O5-Ni1-N2	94.0(2)	O1-Ni1-N2	89.7(2)
O3A-Ni1-N4B	87.0(2)	O5-Ni1-N4B	85.8(2)
O1 -Ni1-N4B	176.6(2)	N2-Ni1-N4B	92.4(2)
O3A-Ni1-N1	88.8(2)	O5-Ni1-N1	178.2(2)
O1-Ni1-N1	87.2(2)	N2-Ni1-N1	84.8(3)
N4B-Ni1-N1	95.7(2)		

Symmetry transformation used to generate equivalent atoms:**1:** A: $x, y + 1, z$; B: $-x + 1, -y + 1, -z$;

2: A: $x - 1/2, y - 1/2, z$; B: $-x - 1/2, -y + 5/2, -z + 1$; **3:** A: $-x + 1, -y + 1, -z + 1$; B: $x + 1/2, y -$

$1/2, z$; **4:** A: $-x + 1, -y, -z + 1$; B: $-x + 2, -y, -z + 2$.