10.1071/CH13630_AC
© CSIRO 2014
Australian Journal of Chemistry 2014, 67(6), 895-900

Supplementary Material

Construction of Lanthanide–Organic Frameworks from the Flexible Bifunctional Ligand 1,3-Bis(2-cyano-4-pyridyl)propane

Baoming Ji,[A,D] *Chunying Xu,*[A] *Leilei Liu,*[C] *Guojie Yin,*[A,B] *and Chenxia Du*[B,D]

[A]College of Chemistry and Chemical Engineering, Luoyang Normal University, Luoyang 471022, PR China.

[B]College of Chemistry and Molecular Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, PR China.

[C]College of Chemistry and Chemical Engineering, Anyang Normal University, Anyang 455000, PR China.

[D]Corresponding authors. Email: lyhxxjbm@126.com; dcx@zzu.edu.cn

Table S1. Selected Bond Lengths (Å) and Bond Angles (deg) for **1**–**4**[a]

Polymer 1					
Eu(1)-O(8)#1	2.368(3)	Eu(1)-O(1)	2.370(3)	Eu(1)-O(3)#2	2.399(3)
Eu(1)-O(6)#3	2.419(3)	Eu(1)-O(5)	2.443(3)	Eu(1)-N(4)#1	2.599(3)
Eu(1)-N(2)#2	2.601(3)	Eu(1)-N(3)	2.636(4)	Eu(1)-N(1)	2.706(4)
O(8)#1-Eu(1)-O(1)	134.58(11)	O(3)#2-Eu(1)-N(4)#1	133.87(11)	O(6)#3-Eu(1)-N(3)	142.09(11)
O(8)#1-Eu(1)-O(3)#2	79.12(10)	O(6)#3-Eu(1)-N(4)#1	132.80(11)	O(5)-Eu(1)-N(3)	62.35(10)
O(1)-Eu(1)-O(3)#2	140.27(10)	O(5)-Eu(1)-N(4)#1	74.18(10)	N(4)#1-Eu(1)-N(3)	72.48(12)
O(8)#1-Eu(1)-O(6)#3	90.82(10)	O(8)#1-Eu(1)-N(2)#2	142.62(12)	N(2)#2-Eu(1)-N(3)	98.42(12)
O(1)-Eu(1)-O(6)#3	84.85(11)	O(1)-Eu(1)-N(2)#2	78.13(12)	O(8)#1-Eu(1)-N(1)	73.99(11)
O(3)#2-Eu(1)-O(6)#3	72.43(11)	O(3)#2-Eu(1)-N(2)#2	64.20(11)	O(1)-Eu(1)-N(1)	63.14(11)
O(8)#1-Eu(1)-O(5)	127.58(10)	O(6)#3-Eu(1)-N(2)#2	72.16(11)	O(3)#2-Eu(1)-N(1)	128.81(11)
O(1)-Eu(1)-O(5)	68.91(11)	O(5)-Eu(1)-N(2)#2	75.25(10)	O(6)#3-Eu(1)-N(1)	65.38(11)
O(3)#2-Eu(1)-O(5)	110.48(10)	N(4)#1-Eu(1)-N(2)#2	148.82(11)	O(5)-Eu(1)-N(1)	120.51(11)
O(6)#3-Eu(1)-O(5)	141.59(9)	O(8)#1-Eu(1)-N(3)	74.57(11)	N(4)#1-Eu(1)-N(1)	69.02(11)
O(8)#1-Eu(1)-N(4)#1	65.12(11)	O(1)-Eu(1)-N(3)	130.18(11)	N(2)#2-Eu(1)-N(1)	123.62(12)
O(1)-Eu(1)-N(4)#1	85.35(11)	O(3)#2-Eu(1)-N(3)	70.55(11)	N(3)-Eu(1)-N(1)	137.75(11)
Polymer 2					
Sm(1)-O(3)#1	2.373(2)	Sm(1)-O(8)#2	2.434(2)	Sm(1)-N(1)	2.613(3)
Sm(1)-O(5)	2.381(2)	Sm(1)-O(7)#3	2.448(2)	Sm(1)-N(4)#3	2.651(3)
Sm(1)-O(1)	2.405(2)	Sm(1)-N(3)	2.608(3)	Sm(1)-N(2)#1	2.708(3)
O(3)#1-Sm(1)-O(5)	134.80(8)	O(1)-Sm(1)-N(3)	133.40(8)	O(8)#2-Sm(1)-N(4)#3	142.42(8)
O(3)#1-Sm(1)-O(1)	139.97(8)	O(8)#2-Sm(1)-N(3)	133.28(8)	O(7)#3-Sm(1)-N(4)#3	62.06(7)
O(5)-Sm(1)-O(1)	79.32(8)	O(7)#3-Sm(1)-N(3)	74.09(8)	N(3)-Sm(1)-N(4)#3	71.74(8)
O(3)#1-Sm(1)-O(8)#2	84.49(8)	O(3)#1-Sm(1)-N(1)	78.09(9)	N(1)-Sm(1)-N(4)#3	98.85(9)
O(5)-Sm(1)-O(8)#2	91.48(8)	O(5)-Sm(1)-N(1)	142.43(8)	O(3)#1-Sm(1)-N(2)#1	62.69(8)
O(1)-Sm(1)-O(8)#2	72.54(8)	O(1)-Sm(1)-N(1)	63.84(8)	O(5)-Sm(1)-N(2)#1	74.69(8)
O(3)#1-Sm(1)-O(7)#3	69.16(8)	O(8)#2-Sm(1)-N(1)	71.47(8)	O(1)-Sm(1)-N(2)#1	129.34(8)
O(5)-Sm(1)-O(7)#3	127.04(8)	O(7)#3-Sm(1)-N(1)	75.81(8)	O(8)#2-Sm(1)-N(2)#1	65.59(8)
O(1)-Sm(1)-O(7)#3	110.25(8)	N(3)-Sm(1)-N(1)	149.37(8)	O(7)#3-Sm(1)-N(2)#1	120.18(8)
O(8)#2-Sm(1)-O(7)#3	141.48(7)	O(3)#1-Sm(1)-N(4)#3	130.13(8)	N(3)-Sm(1)-N(2)#1	69.45(8)
O(3)#1-Sm(1)-N(3)	86.07(8)	O(5)-Sm(1)-N(4)#3	74.22(8)	N(1)-Sm(1)-N(2)#1	123.11(9)
O(5)-Sm(1)-N(3)	64.58(8)	O(1)-Sm(1)-N(4)#3	70.74(8)	N(4)#3-Sm(1)-N(2)#1	137.79(8)
Polymer 3					
Nd(1)-O(1)	2.399(3)	Nd(1)-O(6)#3	2.455(2)	Nd(1)-N(4)#1	2.637(3)
Nd(1)-O(8)#1	2.408(2)	Nd(1)-O(5)	2.470(2)	Nd(1)-N(3)	2.672(3)
Nd(1)-O(3)#2	2.438(2)	Nd(1)-N(2)#2	2.634(3)	Nd(1)-N(1)	2.720(3)
O(1)-Nd(1)-O(8)#1	134.23(9)	O(3)#2-Nd(1)-N(2)#2	63.19(9)	O(6)#3-Nd(1)-N(3)	142.49(9)
O(1)-Nd(1)-O(3)#2	139.77(9)	O(6)#3-Nd(1)-N(2)#2	71.61(9)	O(5)-Nd(1)-N(3)	61.53(8)
(8)#1-Nd(1)-O(3)#2	80.46(8)	O(5)-Nd(1)-N(2)#2	75.75(9)	N(2)#2-Nd(1)-N(3)	98.08(9)
O(1)-Nd(1)-O(6)#3	84.60(9)	O(1)-Nd(1)-N(4)#1	85.79(9)	N(4)#1-Nd(1)-N(3)	71.67(9)
(8)#1-Nd(1)-O(6)#3	92.47(8)	O(8)#1-Nd(1)-N(4)#1	63.90(9)	O(1)-Nd(1)-N(1)	62.46(9)
(3)#2-Nd(1)-O(6)#3	72.32(8)	O(3)#2-Nd(1)-N(4)#1	133.80(9)	O(8)#1-Nd(1)-N(1)	74.72(9)

O(1)-Nd(1)-O(5)	69.30(9)	O(6)#3-Nd(1)-N(4)#1	133.83(9)	O(3)#2-Nd(1)-N(1)	129.58(9)
O(8)#1-Nd(1)-O(5)	126.00(8)	O(5)-Nd(1)-N(4)#1	73.57(8)	O(6)#3-Nd(1)-N(1)	65.80(9)
O(3)#2-Nd(1)-O(5)	110.05(8)	N(2)#2-Nd(1)-N(4)#1	148.87(9)	O(5)-Nd(1)-N(1)	120.11(9)
O(6)#3-Nd(1)-O(5)	141.53(8)	O(1)-Nd(1)-N(3)	129.78(9)	N(2)#2-Nd(1)-N(1)	123.51(10)
O(1)-Nd(1)-N(2)#2	78.59(10)	O(8)#1-Nd(1)-N(3)	74.22(9)	N(4)#1-Nd(1)-N(1)	69.73(9)
(8)#1-Nd(1)-N(2)#2	143.13(9)	O(3)#2-Nd(1)-N(3)	70.96(9)	N(3)-Nd(1)-N(1)	138.11(9)
Polymer 4					
Pr(1)-O(1)	2.415(4)	Pr(1)-O(6)#3	2.458(3)	Pr(1)-N(4)#1	2.656(4)
Pr(1)-O(8)#1	2.422(3)	Pr(1)-O(5)	2.476(3)	Pr(1)-N(3)	2.686(4)
Pr(1)-O(3)#2	2.449(3)	Pr(1)-N(2)#2	2.647(4)	Pr(1)-N(1)	2.734(4)
O(1)-Pr(1)-O(8)#1	133.83(12)	O(3)#2-Pr(1)-N(2)#2	62.74(12)	O(6)#3-Pr(1)-N(3)	142.58(12)
O(1)-Pr(1)-O(3)#2	139.48(12)	O(6)#3-Pr(1)-N(2)#2	71.95(12)	O(5)-Pr(1)-N(3)	61.51(11)
O(8)#1-Pr(1)-O(3)#2	80.90(11)	O(5)-Pr(1)-N(2)#2	75.83(11)	N(2)#2-Pr(1)-N(3)	97.45(12)
O(1)-Pr(1)-O(6)#3	84.25(12)	O(1)-Pr(1)-N(4)#1	85.65(12)	N(4)#1-Pr(1)-N(3)	72.12(12)
O(8)#1-Pr(1)-O(6)#3	92.69(11)	O(8)#1-Pr(1)-N(4)#1	63.63(12)	O(1)-Pr(1)-N(1)	62.14(12)
O(3)#2-Pr(1)-O(6)#3	72.09(11)	O(3)#2-Pr(1)-N(4)#1	134.35(12)	O(8)#1-Pr(1)-N(1)	74.59(12)
O(1)-Pr(1)-O(5)	69.47(11)	O(6)#3-Pr(1)-N(4)#1	133.47(12)	O(3)#2-Pr(1)-N(1)	129.52(12)
O(8)#1-Pr(1)-O(5)	125.71(11)	O(5)-Pr(1)-N(4)#1	73.48(11)	O(6)#3-Pr(1)-N(1)	65.89(12)
O(3)#2-Pr(1)-O(5)	110.52(11)	N(2)#2-Pr(1)-N(4)#1	148.89(12)	O(5)-Pr(1)-N(1)	119.69(12)
O(6)#3-Pr(1)-O(5)	141.60(10)	O(1)-Pr(1)-N(3)	130.00(11)	N(2)#2-Pr(1)-N(1)	124.06(13)
O(1)-Pr(1)-N(2)#2	79.02(13)	O(8)#1-Pr(1)-N(3)	74.38(11)	N(4)#1-Pr(1)-N(1)	69.25(12)
O(8)#1-Pr(1)-N(2)#2	143.22(12)	O(3)#2-Pr(1)-N(3)	71.26(11)	N(3)-Pr(1)-N(1)	138.16(12)

[a] Symmetry transformations used to generate equivalent atoms in complex (**1**): #1 -x+1,-y+1,-z; #2 x+1/2,y+1/2,z; #3 -x+3/2,y-1/2,-z+1/2. (**2**): #1 x+1/2,y-1/2,z; #2 x,-y+1,z+1/2 ; #3 -x+3/2,-y+3/2,-z. (**3**): #1 -x+1,-y+1,-z; #2 x+1/2,y+1/2,z; #3 -x+3/2,y-1/2,-z+1/2. (**4**): #1 -x+1,-y+1,-z; #2 x+1/2,y+1/2,z; #3 -x+3/2,y-1/2,-z+1/2.

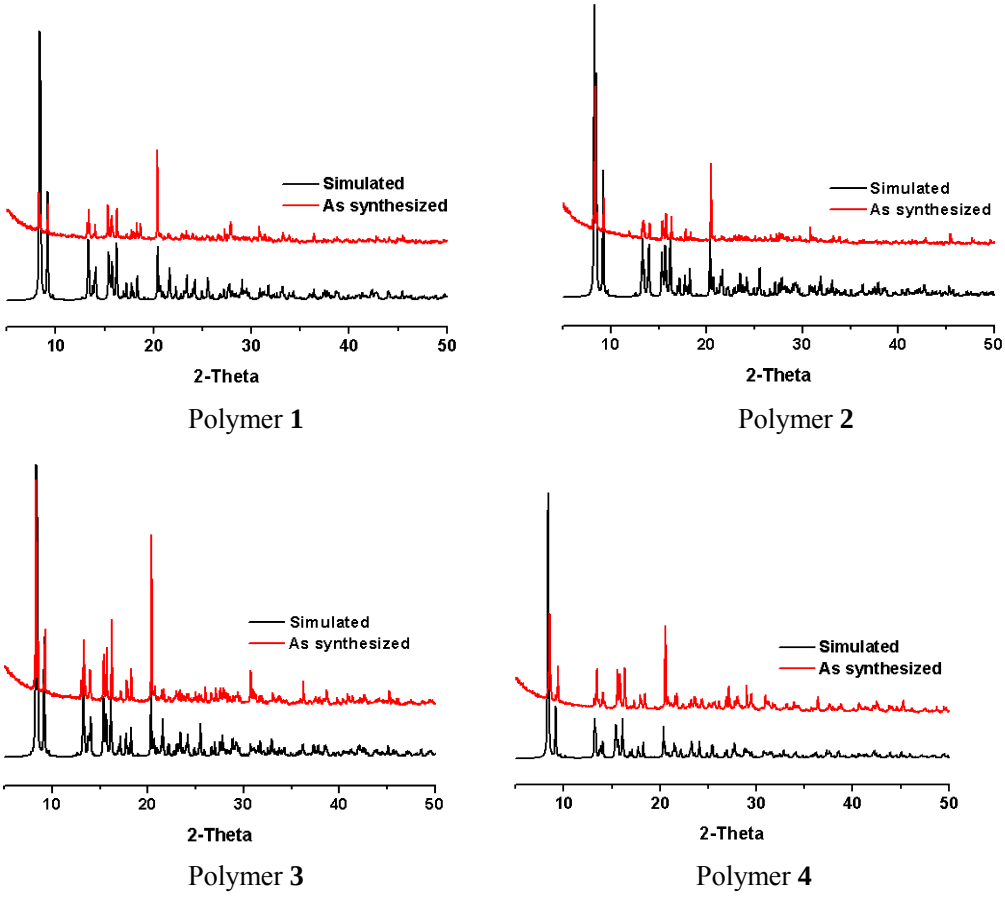

Figure S1. Experimental(red) and simulated(black) PXRD patterns of **1**–**4**.