

10.1071/CH12058_AC

©CSIRO 2012

Australian Journal of Chemistry 2012, 65(7), 862-875

Supplementary Material

Copper(II) and palladium(II) complexes with cytotoxic and antibacterial activity

Anwen M. Krause-Heuer^a, Peter Leverett^a, Albert Bolhuis^b, Janice R. Aldrich-Wright^{a*}

a) School of Science and Health

University of Western Sydney

Locked Bag 1797

Penrith South DC, 2751, NSW

Australia

b) Department of Pharmacy and Pharmacology

University of Bath

Claverton Down

Bath, BA2 7AY

United Kingdom

* Please address editorial correspondence to Prof. Janice R. Aldrich-Wright via e-mail:

j.aldrich-wright@uws.edu.au or via facsimile: +61 2 4620 3025.

Table S1. Crystal data and structure refinement for **7**.

Identification code	7
Empirical formula	C ₁₈ H ₂₆ Cl ₂ CuN ₄ O ₁₀
Formula weight	592.87
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	P1
Unit cell dimensions	
a	8.2002(6) Å
b	12.8404(9) Å
c	12.9871(9) Å
α	65.8920(10)°
β	89.5770(10)°
γ	72.5130(10)°
Volume	1180.01(14) Å ³
Z	2
Density (calculated)	1.669 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.214 mm ⁻¹
F(000)	610
Crystal size	0.04 x 0.04 x 0.05 mm ³
Theta range for data collection	1.73 to 28.29°.
Index ranges	-9<=h<=10, -15<=k<=16, -17<=l<=17
Reflections collected	9300
Independent reflections	7887 [R(int) = 0.0119]
Completeness to theta = 28.29°	88.0 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	7887 / 15 / 655
Goodness-of-fit on F ²	0.990
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0302, wR2 = 0.0792
R indices (all data)	R1 = 0.0338, wR2 = 0.0813
Absolute structure parameter	0.035(11)
Largest diff. peak and hole	0.619 and -0.283 e.Å ⁻³

Table S2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 7. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	5040(1)	3184(1)	316(1)	21(1)
N(14)	4596(5)	1944(4)	1785(3)	21(1)
N(13)	6670(6)	1742(4)	195(4)	32(1)
N(11)	3245(5)	4640(4)	350(3)	22(1)
N(12)	4949(5)	4377(4)	-1323(3)	22(1)
OW1	7181(4)	3446(4)	1220(3)	34(1)
C(11)	2404(6)	4740(5)	1210(5)	27(1)
C(12)	1103(7)	5802(5)	1059(5)	32(1)
C(13)	635(6)	6787(5)	34(4)	28(1)
C(14)	1508(6)	6695(4)	-893(4)	25(1)
C(15)	1121(7)	7654(5)	-1994(5)	33(1)
C(16)	2008(7)	7509(5)	-2866(5)	34(1)
C(17)	3303(6)	6421(5)	-2684(4)	26(1)
C(18)	4276(7)	6216(5)	-3540(4)	30(1)
C(19)	5486(7)	5143(5)	-3275(4)	30(1)
C(110)	5825(7)	4238(5)	-2158(4)	30(1)
C(111)	3710(6)	5452(4)	-1581(4)	22(1)
C(112)	2786(6)	5597(4)	-676(4)	23(1)
C(113)	6322(5)	637(4)	954(3)	28(1)
C(114)	5896(5)	752(3)	2056(3)	22(1)
C(115)	5310(7)	-297(4)	2859(5)	34(1)
C(116)	6761(6)	-1495(4)	3093(4)	37(1)
C(117)	7279(6)	-1614(4)	2025(4)	35(1)
C(118)	7770(6)	-520(4)	1214(4)	31(1)
Cu(2)	2939(1)	990(1)	6990(1)	21(1)
N(23)	3300(5)	2182(4)	5526(4)	27(1)
N(24)	1472(5)	2441(4)	7185(3)	24(1)
N(21)	2999(5)	-209(4)	8619(3)	22(1)
N(22)	4691(5)	-479(4)	6935(4)	23(1)
OW2	746(4)	740(4)	6134(3)	31(1)
C(21)	2149(6)	-34(5)	9432(4)	25(1)
C(22)	2422(6)	-949(5)	10547(4)	32(1)
C(23)	3644(7)	-2062(5)	10801(4)	30(1)
C(24)	4548(6)	-2264(5)	9951(4)	26(1)
C(25)	5865(7)	-3389(5)	10132(5)	33(1)
C(26)	6699(7)	-3532(5)	9303(5)	32(1)
C(27)	6366(6)	-2555(4)	8156(4)	28(1)
C(28)	7198(7)	-2624(5)	7244(5)	33(1)
C(29)	6789(7)	-1657(5)	6192(5)	32(1)
C(210)	5499(6)	-593(5)	6096(5)	29(1)
C(211)	5092(6)	-1453(4)	7973(4)	20(1)
C(212)	4184(6)	-1307(4)	8880(4)	21(1)
C(213)	2715(5)	3415(3)	5501(3)	22(1)
C(214)	1121(5)	3528(3)	6087(3)	24(1)
C(215)	575(6)	4715(4)	6211(4)	28(1)
C(216)	235(6)	5791(4)	5061(4)	36(1)
C(217)	1817(6)	5658(4)	4402(4)	32(1)
C(218)	2376(6)	4443(5)	4347(4)	27(1)

Table S2. Continued.

Atom	x	y	z	U(eq)
Cl(1)	10702(1)	3224(1)	-425(1)	22(1)
O(11)	12434(4)	2755(4)	-631(3)	31(1)
O(12)	10743(4)	2980(4)	765(3)	35(1)
O(13)	9632(4)	2646(4)	-705(3)	38(1)
O(14)	10035(5)	4499(4)	-1116(4)	45(1)
Cl(2)	-2770(1)	964(1)	7730(1)	23(1)
O(21)	-2796(5)	1244(4)	6533(3)	38(1)
O(22)	-4494(4)	1461(4)	7970(3)	33(1)
O(23)	-1661(5)	1495(4)	8038(3)	35(1)
O(24)	-2162(5)	-309(3)	8376(4)	42(1)
Cl(3)	6989(2)	4649(1)	3502(1)	36(1)
O(31)	5845(5)	4506(5)	2781(3)	51(1)
O(32)	8459(6)	4783(6)	2989(4)	83(2)
O(33)	7372(9)	3676(6)	4538(5)	117(3)
O(34)	6109(8)	5721(5)	3621(6)	102(2)
Cl(4)	782(2)	9678(1)	3806(1)	31(1)
O(41)	2043(6)	9777(5)	4491(4)	55(1)
O(42)	-742(5)	9691(4)	4368(3)	46(1)
O(43)	440(6)	10669(4)	2698(4)	61(1)
O(44)	1409(7)	8600(4)	3665(5)	70(1)
OW3	1447(6)	2518(4)	3362(4)	50(1)
OW4	6186(5)	1789(3)	3947(3)	41(1)

Table S3. Bond lengths [Å] for **7**

Atom	Atom	Bond lengths [Å]	Atom	Atom	Bond lengths [Å]
Cu(1)	N(13)	1.997(4)	Cu(2)	N(23)	1.983(4)
Cu(1)	N(11)	2.019(4)	Cu(2)	N(24)	2.004(4)
Cu(1)	N(12)	2.037(4)	Cu(2)	N(22)	2.027(4)
Cu(1)	N(14)	2.041(4)	Cu(2)	N(21)	2.035(4)
Cu(1)	OW1	2.299(4)	Cu(2)	OW2	2.289(4)
Cu(1)	O(11)#1	2.772(4)	Cu(2)	O(22)#2	2.801(4)
N(14)	C(114)	1.480(5)	N(23)	C(213)	1.496(5)
N(14)	H(14A)	0.9000	N(23)	H(23A)	0.9000
N(14)	H(14B)	0.9000	N(23)	H(23B)	0.9000
N(13)	C(113)	1.471(6)	N(24)	C(214)	1.485(5)
N(13)	H(13A)	0.9000	N(24)	H(24A)	0.9000
N(13)	H(13B)	0.9000	N(24)	H(24B)	0.9000
N(11)	C(11)	1.338(6)	N(21)	C(21)	1.320(6)
N(11)	C(112)	1.349(6)	N(21)	C(212)	1.355(6)
N(12)	C(110)	1.339(6)	N(22)	C(210)	1.307(6)
N(12)	C(111)	1.355(6)	N(22)	C(211)	1.369(6)
OW1	HW1A	0.848(18)	OW2	HW2A	0.835(18)
OW1	HW1B	0.852(18)	OW2	HW2B	0.823(19)
C(11)	C(12)	1.395(7)	C(21)	C(22)	1.408(7)
C(11)	H(11)	0.9300	C(21)	H(21)	0.9300
C(12)	C(13)	1.364(7)	C(22)	C(23)	1.384(7)
C(12)	H(12)	0.9300	C(22)	H(22)	0.9300
C(13)	C(14)	1.425(7)	C(23)	C(24)	1.394(7)
C(13)	H(13)	0.9300	C(23)	H(23)	0.9300
C(14)	C(112)	1.398(6)	C(24)	C(212)	1.386(7)
C(14)	C(15)	1.412(7)	C(24)	C(25)	1.449(7)
C(15)	C(16)	1.387(7)	C(25)	C(26)	1.317(8)
C(15)	H(15)	0.9300	C(25)	H(25)	0.9300
C(16)	C(17)	1.406(8)	C(26)	C(27)	1.463(7)
C(16)	H(16)	0.9300	C(26)	H(26)	0.9300
C(17)	C(111)	1.419(7)	C(27)	C(28)	1.383(7)
C(17)	C(18)	1.429(7)	C(27)	C(211)	1.411(6)
C(18)	C(19)	1.341(7)	C(28)	C(29)	1.376(8)
C(18)	H(18)	0.9300	C(28)	H(28)	0.9300
C(19)	C(110)	1.403(7)	C(29)	C(210)	1.412(7)
C(19)	H(19)	0.9300	C(29)	H(29)	0.9300
C(110)	H(110)	0.9300	C(210)	H(210)	0.9300
C(111)	C(112)	1.439(7)	C(211)	C(212)	1.436(7)
C(113)	C(118)	1.505(6)	C(213)	C(218)	1.496(6)
C(113)	C(114)	1.525(5)	C(213)	C(214)	1.506(5)
C(113)	H(113)	0.9800	C(213)	H(213)	0.9800
C(114)	C(115)	1.538(6)	C(214)	C(215)	1.529(6)
C(114)	H(114)	0.9800	C(214)	H(214)	0.9800
C(115)	C(116)	1.548(6)	C(215)	C(216)	1.518(7)
C(115)	H(11A)	0.9700	C(215)	H(21A)	0.9700
C(115)	H(11B)	0.9700	C(215)	H(21B)	0.9700
C(116)	C(117)	1.500(6)	C(216)	C(217)	1.555(7)
C(116)	H(11C)	0.9700	C(216)	H(21C)	0.9700
C(116)	H(11D)	0.9700	C(216)	H(21D)	0.9700

Table S3. Continued.

Atom	Atom	Bond lengths [Å]	Atom	Atom	Bond lengths [Å]
C(117)	C(118)	1.539(7)	C(217)	C(218)	1.521(7)
C(117)	H(11E)	0.9700	C(217)	H(21E)	0.9700
C(117)	H(11F)	0.9700	C(217)	H(21F)	0.9700
C(118)	H(11G)	0.9700	C(218)	H(21G)	0.9700
C(118)	H(11H)	0.9700	C(218)	H(21H)	0.9700
Cl(1)	O(14)	1.433(4)	Cl(3)	O(34)	1.419(6)
Cl(1)	O(11)	1.436(3)	Cl(3)	O(31)	1.431(4)
Cl(1)	O(13)	1.439(4)	Cl(4)	O(44)	1.411(4)
Cl(1)	O(12)	1.444(3)	Cl(4)	O(41)	1.436(4)
Cl(2)	O(24)	1.421(4)	Cl(4)	O(43)	1.437(4)
Cl(2)	O(23)	1.434(4)	Cl(4)	O(42)	1.442(4)
Cl(2)	O(21)	1.443(4)	OW3	HW3A	0.890(19)
Cl(2)	O(22)	1.455(4)	OW3	HW3B	0.878(18)
Cl(3)	O(33)	1.367(5)	OW4	HW4A	0.869(19)
Cl(3)	O(32)	1.395(5)	OW4	HW4B	0.865(19)

Table S4. Bond angles [°] for **7**

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
N(13)	Cu(1)	N(11)	175.25(19)	N(23)	Cu(2)	N(24)	84.89(16)
N(13)	Cu(1)	N(12)	96.41(16)	N(23)	Cu(2)	N(22)	96.17(16)
N(11)	Cu(1)	N(12)	81.83(16)	N(24)	Cu(2)	N(22)	171.89(18)
N(13)	Cu(1)	N(14)	84.31(16)	N(23)	Cu(2)	N(21)	168.60(19)
N(11)	Cu(1)	N(14)	96.27(15)	N(24)	Cu(2)	N(21)	95.28(16)
N(12)	Cu(1)	N(14)	165.30(17)	N(22)	Cu(2)	N(21)	82.09(16)
N(13)	Cu(1)	OW1	92.51(17)	N(23)	Cu(2)	OW2	92.36(17)
N(11)	Cu(1)	OW1	92.16(14)	N(24)	Cu(2)	OW2	95.99(15)
N(12)	Cu(1)	OW1	101.08(16)	N(22)	Cu(2)	OW2	92.00(15)
N(14)	Cu(1)	OW1	93.55(16)	N(21)	Cu(2)	OW2	98.95(16)
N(13)	Cu(1)	O(11)#1	87.11(16)	N(23)	Cu(2)	O(22)#2	85.38(16)
N(11)	Cu(1)	O(11)#1	88.29(14)	N(24)	Cu(2)	O(22)#2	80.79(14)
N(12)	Cu(1)	O(11)#1	82.85(14)	N(22)	Cu(2)	O(22)#2	91.27(14)
N(14)	Cu(1)	O(11)#1	82.52(15)	N(21)	Cu(2)	O(22)#2	83.40(15)
OW1	Cu(1)	O(11)#1	176.07(14)	OW2	Cu(2)	O(22)#2	176.21(13)
C(114)	N(14)	Cu(1)	108.8(3)	C(213)	N(23)	Cu(2)	110.1(3)
C(114)	N(14)	H(14A)	109.9	C(213)	N(23)	H(23A)	109.6
Cu(1)	N(14)	H(14A)	109.9	Cu(2)	N(23)	H(23A)	109.6
C(114)	N(14)	H(14B)	109.9	C(213)	N(23)	H(23B)	109.6
Cu(1)	N(14)	H(14B)	109.9	Cu(2)	N(23)	H(23B)	109.6
H(14A)	N(14)	H(14B)	108.3	H(23A)	N(23)	H(23B)	108.2
C(113)	N(13)	Cu(1)	110.7(3)	C(214)	N(24)	Cu(2)	109.4(3)
C(113)	N(13)	H(13A)	109.5	C(214)	N(24)	H(24A)	109.8
Cu(1)	N(13)	H(13A)	109.5	Cu(2)	N(24)	H(24A)	109.8
C(113)	N(13)	H(13B)	109.5	C(214)	N(24)	H(24B)	109.8
Cu(1)	N(13)	H(13B)	109.5	Cu(2)	N(24)	H(24B)	109.8
H(13A)	N(13)	H(13B)	108.1	H(24A)	N(24)	H(24B)	108.2
C(11)	N(11)	C(112)	117.9(4)	C(21)	N(21)	C(212)	118.2(4)
C(11)	N(11)	Cu(1)	129.1(3)	C(21)	N(21)	Cu(2)	129.3(3)
C(112)	N(11)	Cu(1)	112.8(3)	C(212)	N(21)	Cu(2)	112.4(3)
C(110)	N(12)	C(111)	117.6(4)	C(210)	N(22)	C(211)	118.4(4)
C(110)	N(12)	Cu(1)	130.8(3)	C(210)	N(22)	Cu(2)	129.9(3)
C(111)	N(12)	Cu(1)	111.5(3)	C(211)	N(22)	Cu(2)	111.6(3)
Cu(1)	OW1	HW1A	119(3)	Cu(2)	OW2	HW2A	112(3)
Cu(1)	OW1	HW1B	125(3)	Cu(2)	OW2	HW2B	140(3)
HW1A	OW1	HW1B	106(3)	HW2A	OW2	HW2B	107(3)
N(11)	C(11)	C(12)	121.4(5)	N(21)	C(21)	C(22)	122.2(4)
N(11)	C(11)	H(11)	119.3	N(21)	C(21)	H(21)	118.9
C(12)	C(11)	H(11)	119.3	C(22)	C(21)	H(21)	118.9
C(13)	C(12)	C(11)	121.7(5)	C(23)	C(22)	C(21)	118.8(5)
C(13)	C(12)	H(12)	119.2	C(23)	C(22)	H(22)	120.6
C(11)	C(12)	H(12)	119.2	C(21)	C(22)	H(22)	120.6
C(12)	C(13)	C(14)	117.7(4)	C(22)	C(23)	C(24)	119.7(5)
C(12)	C(13)	H(13)	121.1	C(22)	C(23)	H(23)	120.2
C(14)	C(13)	H(13)	121.1	C(24)	C(23)	H(23)	120.2
C(112)	C(14)	C(15)	120.3(4)	C(212)	C(24)	C(23)	117.1(4)
C(112)	C(14)	C(13)	117.1(4)	C(212)	C(24)	C(25)	118.9(5)
C(15)	C(14)	C(13)	122.6(4)	C(23)	C(24)	C(25)	124.0(5)
C(16)	C(15)	C(14)	120.0(5)	C(26)	C(25)	C(24)	121.8(5)

Table S4. Continued.

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
C(16)	C(15)	H(15)	120.0	C(26)	C(25)	H(25)	119.1
C(14)	C(15)	H(15)	120.0	C(24)	C(25)	H(25)	119.1
C(15)	C(16)	C(17)	121.5(5)	C(25)	C(26)	C(27)	121.8(5)
C(15)	C(16)	H(16)	119.2	C(25)	C(26)	H(26)	119.1
C(17)	C(16)	H(16)	119.2	C(27)	C(26)	H(26)	119.1
C(16)	C(17)	C(111)	119.0(5)	C(28)	C(27)	C(211)	117.7(5)
C(16)	C(17)	C(18)	124.4(5)	C(28)	C(27)	C(26)	125.4(4)
C(111)	C(17)	C(18)	116.6(4)	C(211)	C(27)	C(26)	116.9(5)
C(19)	C(18)	C(17)	119.5(5)	C(29)	C(28)	C(27)	121.2(4)
C(19)	C(18)	H(18)	120.2	C(29)	C(28)	H(28)	119.4
C(17)	C(18)	H(18)	120.2	C(27)	C(28)	H(28)	119.4
C(18)	C(19)	C(110)	120.3(5)	C(28)	C(29)	C(210)	116.8(5)
C(18)	C(19)	H(19)	119.9	C(28)	C(29)	H(29)	121.6
C(110)	C(19)	H(19)	119.9	C(210)	C(29)	H(29)	121.6
N(12)	C(110)	C(19)	122.8(5)	N(22)	C(210)	C(29)	124.3(5)
N(12)	C(110)	H(110)	118.6	N(22)	C(210)	H(210)	117.9
C(19)	C(110)	H(110)	118.6	C(29)	C(210)	H(210)	117.9
N(12)	C(111)	C(17)	123.2(5)	N(22)	C(211)	C(27)	121.5(4)
N(12)	C(111)	C(112)	117.2(4)	N(22)	C(211)	C(212)	117.4(4)
C(17)	C(111)	C(112)	119.6(4)	C(27)	C(211)	C(212)	121.0(4)
N(11)	C(112)	C(14)	124.1(4)	N(21)	C(212)	C(24)	124.0(4)
N(11)	C(112)	C(111)	116.3(4)	N(21)	C(212)	C(211)	116.3(4)
C(14)	C(112)	C(111)	119.6(4)	C(24)	C(212)	C(211)	119.7(4)
N(13)	C(113)	C(118)	115.1(4)	C(218)	C(213)	N(23)	115.6(3)
N(13)	C(113)	C(114)	107.1(3)	C(218)	C(213)	C(214)	110.3(3)
C(118)	C(113)	C(114)	109.8(3)	N(23)	C(213)	C(214)	107.5(3)
N(13)	C(113)	H(113)	108.2	C(218)	C(213)	H(213)	107.7
C(118)	C(113)	H(113)	108.2	N(23)	C(213)	H(213)	107.7
C(114)	C(113)	H(113)	108.2	C(214)	C(213)	H(213)	107.7
N(14)	C(114)	C(113)	109.4(3)	N(24)	C(214)	C(213)	108.4(3)
N(14)	C(114)	C(115)	112.4(3)	N(24)	C(214)	C(215)	113.8(3)
C(113)	C(114)	C(115)	111.2(4)	C(213)	C(214)	C(215)	110.1(4)
N(14)	C(114)	H(114)	107.9	N(24)	C(214)	H(214)	108.2
C(113)	C(114)	H(114)	107.9	C(213)	C(214)	H(214)	108.2
C(115)	C(114)	H(114)	107.9	C(215)	C(214)	H(214)	108.2
C(114)	C(115)	C(116)	108.2(4)	C(216)	C(215)	C(214)	111.3(4)
C(114)	C(115)	H(11A)	110.1	C(216)	C(215)	H(21A)	109.4
C(116)	C(115)	H(11A)	110.1	C(214)	C(215)	H(21A)	109.4
C(114)	C(115)	H(11B)	110.1	C(216)	C(215)	H(21B)	109.4
C(116)	C(115)	H(11B)	110.1	C(214)	C(215)	H(21B)	109.4
H(11A)	C(115)	H(11B)	108.4	H(21A)	C(215)	H(21B)	108.0
C(117)	C(116)	C(115)	113.0(4)	C(215)	C(216)	C(217)	110.9(4)
C(117)	C(116)	H(11C)	109.0	C(215)	C(216)	H(21C)	109.5
C(115)	C(116)	H(11C)	109.0	C(217)	C(216)	H(21C)	109.5
C(117)	C(116)	H(11D)	109.0	C(215)	C(216)	H(21D)	109.5
C(115)	C(116)	H(11D)	109.0	C(217)	C(216)	H(21D)	109.5
H(11C)	C(116)	H(11D)	107.8	H(21C)	C(216)	H(21D)	108.0
C(116)	C(117)	C(118)	111.4(4)	C(218)	C(217)	C(216)	110.7(4)
C(116)	C(117)	H(11E)	109.4	C(218)	C(217)	H(21E)	109.5
C(118)	C(117)	H(11E)	109.4	C(216)	C(217)	H(21E)	109.5

Table S4. Continued.

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
C(116)	C(117)	H(11F)	109.4	C(218)	C(217)	H(21F)	109.5
C(118)	C(117)	H(11F)	109.4	C(216)	C(217)	H(21F)	109.5
H(11E)	C(117)	H(11F)	108.0	H(21E)	C(217)	H(21F)	108.1
C(113)	C(118)	C(117)	110.7(4)	C(213)	C(218)	C(217)	112.1(4)
C(113)	C(118)	H(11G)	109.5	C(213)	C(218)	H(21G)	109.2
C(117)	C(118)	H(11G)	109.5	C(217)	C(218)	H(21G)	109.2
C(113)	C(118)	H(11H)	109.5	C(213)	C(218)	H(21H)	109.2
C(117)	C(118)	H(11H)	109.5	C(217)	C(218)	H(21H)	109.2
H(11G)	C(118)	H(11H)	108.1	H(21G)	C(218)	H(21H)	107.9
O(14)	Cl(1)	O(11)	109.6(3)	O(33)	Cl(3)	O(34)	110.2(5)
O(14)	Cl(1)	O(13)	109.3(2)	O(32)	Cl(3)	O(34)	108.6(4)
O(11)	Cl(1)	O(13)	109.5(2)	O(33)	Cl(3)	O(31)	108.6(4)
O(14)	Cl(1)	O(12)	110.0(2)	O(32)	Cl(3)	O(31)	109.7(3)
O(11)	Cl(1)	O(12)	108.2(2)	O(34)	Cl(3)	O(31)	107.3(3)
O(13)	Cl(1)	O(12)	110.2(2)	O(44)	Cl(4)	O(41)	111.1(3)
O(24)	Cl(2)	O(23)	110.0(2)	O(44)	Cl(4)	O(43)	107.7(3)
O(24)	Cl(2)	O(21)	109.5(3)	O(41)	Cl(4)	O(43)	108.3(3)
O(23)	Cl(2)	O(21)	109.4(2)	O(44)	Cl(4)	O(42)	109.8(3)
O(24)	Cl(2)	O(22)	109.6(3)	O(41)	Cl(4)	O(42)	108.0(3)
O(23)	Cl(2)	O(22)	108.2(2)	O(43)	Cl(4)	O(42)	112.0(2)
O(21)	Cl(2)	O(22)	110.2(2)	HW3A	OW3	HW3B	101(3)
O(33)	Cl(3)	O(32)	112.3(4)	HW4A	OW4	HW4B	104(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x-1,y,z #2 x+1,y,z

Table S5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for cuphen. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2h^2 [a^2 U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cu(1)	24(1)	19(1)	18(1)	-6(1)	4(1)	-4(1)
N(14)	19(2)	22(2)	15(2)	-4(2)	5(1)	-4(2)
N(13)	48(2)	23(2)	25(2)	-12(2)	19(2)	-10(2)
N(11)	27(2)	22(2)	19(2)	-9(2)	4(2)	-10(2)
N(12)	18(2)	27(2)	20(2)	-9(2)	2(2)	-8(2)
OW1	26(2)	48(2)	30(2)	-22(2)	4(2)	-7(2)
C(11)	24(2)	30(3)	26(3)	-9(2)	6(2)	-9(2)
C(12)	37(3)	36(3)	32(3)	-21(2)	18(2)	-17(2)
C(13)	23(2)	22(2)	39(3)	-17(2)	4(2)	-3(2)
C(14)	26(2)	28(3)	25(2)	-12(2)	0(2)	-11(2)
C(15)	28(2)	22(2)	41(3)	-10(2)	-1(2)	-3(2)
C(16)	47(3)	24(3)	24(3)	-3(2)	-3(2)	-13(2)
C(17)	28(2)	25(2)	22(2)	-5(2)	-2(2)	-12(2)
C(18)	38(3)	35(3)	14(2)	-5(2)	1(2)	-18(2)
C(19)	36(3)	37(3)	20(3)	-11(2)	7(2)	-18(2)
C(110)	26(3)	35(3)	31(3)	-14(2)	4(2)	-13(2)
C(111)	16(2)	25(3)	23(2)	-6(2)	0(2)	-11(2)
C(112)	19(2)	25(2)	22(2)	-8(2)	3(2)	-8(2)
C(113)	31(2)	30(2)	22(2)	-12(2)	4(2)	-9(2)
C(114)	18(2)	24(2)	22(2)	-9(1)	-1(1)	-5(2)
C(115)	34(2)	24(2)	36(3)	-6(2)	9(2)	-10(2)
C(116)	32(2)	25(2)	43(3)	-7(2)	7(2)	-7(2)
C(117)	30(2)	22(2)	44(3)	-9(2)	-4(2)	-4(2)
C(118)	33(2)	31(2)	32(2)	-18(2)	7(2)	-6(2)
Cu(2)	21(1)	19(1)	19(1)	-6(1)	3(1)	-3(1)
N(23)	24(2)	23(2)	28(2)	-10(2)	3(2)	-3(2)
N(24)	23(2)	25(2)	23(2)	-8(2)	5(1)	-8(2)
N(21)	24(2)	20(2)	21(2)	-7(2)	2(2)	-8(2)
N(22)	18(2)	20(2)	27(2)	-10(2)	1(2)	-2(2)
OW2	21(2)	44(2)	38(2)	-26(2)	8(2)	-13(2)
C(21)	20(2)	24(3)	23(3)	-7(2)	2(2)	-1(2)
C(22)	25(2)	45(3)	25(3)	-12(3)	7(2)	-14(2)
C(23)	30(3)	30(3)	24(3)	-3(2)	0(2)	-11(2)
C(24)	24(2)	27(3)	28(3)	-10(2)	0(2)	-12(2)
C(25)	34(3)	22(3)	31(3)	-3(2)	-5(2)	-4(2)
C(26)	35(3)	18(2)	30(3)	-3(2)	-6(2)	0(2)
C(27)	24(2)	19(2)	39(3)	-13(2)	-3(2)	-5(2)
C(28)	26(2)	30(3)	41(3)	-18(2)	2(2)	-5(2)
C(29)	30(3)	28(3)	35(3)	-17(2)	4(2)	-1(2)
C(210)	38(3)	25(3)	23(3)	-10(2)	8(2)	-10(2)
C(211)	18(2)	20(2)	24(2)	-11(2)	-2(2)	-9(2)
C(212)	21(2)	19(2)	25(2)	-9(2)	0(2)	-7(2)
C(213)	20(2)	20(2)	24(2)	-7(1)	0(1)	-7(2)
C(214)	28(2)	19(2)	22(2)	-6(1)	1(2)	-5(2)
C(215)	35(2)	21(2)	27(2)	-12(2)	3(2)	-4(2)
C(216)	37(3)	22(2)	43(3)	-12(2)	0(2)	-3(2)
C(217)	33(2)	27(2)	31(2)	-6(2)	0(2)	-13(2)
C(218)	21(2)	31(2)	25(2)	-6(2)	3(2)	-8(2)

Table S5. Continued.

Atom	U¹¹	U²²	U³³	U²³	U¹³	U¹²
Cl(1)	19(1)	25(1)	23(1)	-13(1)	3(1)	-5(1)
O(11)	17(2)	50(2)	34(2)	-26(2)	7(1)	-10(2)
O(12)	28(2)	55(3)	26(2)	-19(2)	7(2)	-16(2)
O(13)	23(2)	50(2)	55(3)	-37(2)	4(2)	-14(2)
O(14)	48(3)	31(2)	43(2)	-11(2)	5(2)	-3(2)
Cl(2)	18(1)	29(1)	25(1)	-15(1)	2(1)	-6(1)
O(21)	29(2)	61(3)	25(2)	-19(2)	4(2)	-16(2)
O(22)	19(2)	41(2)	38(2)	-21(2)	4(2)	-4(2)
O(23)	28(2)	48(2)	43(2)	-28(2)	7(2)	-19(2)
O(24)	48(2)	24(2)	44(2)	-12(2)	-3(2)	-2(2)
Cl(3)	40(1)	40(1)	30(1)	-9(1)	3(1)	-22(1)
O(31)	45(2)	89(3)	34(2)	-27(2)	12(2)	-41(2)
O(32)	45(2)	152(5)	69(3)	-47(3)	20(2)	-58(3)
O(33)	137(5)	122(5)	48(3)	29(3)	-40(3)	-77(4)
O(34)	84(4)	71(3)	178(6)	-72(4)	43(4)	-33(3)
Cl(4)	34(1)	32(1)	27(1)	-12(1)	1(1)	-11(1)
O(41)	45(2)	97(4)	53(3)	-50(3)	17(2)	-39(2)
O(42)	31(2)	52(2)	47(2)	-15(2)	7(1)	-13(2)
O(43)	61(3)	48(2)	44(2)	9(2)	-2(2)	-17(2)
O(44)	74(3)	54(3)	97(3)	-51(3)	18(2)	-18(2)
OW3	57(2)	54(3)	51(2)	-31(2)	4(2)	-21(2)
OW4	54(2)	37(2)	30(2)	-12(2)	5(2)	-14(2)

Table S6. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for **7**.

Atom	x	y	z	U(eq)
H(14A)	4671	2159	2357	31
H(14B)	3529	1909	1699	31
H(13A)	6558	1833	-528	48
H(13B)	7762	1678	383	48
HW1A	7060(50)	3450(40)	1870(20)	40
HW1B	8260(30)	3130(40)	1230(40)	40
H(11)	2694	4089	1923	41
H(12)	540	5839	1674	48
H(13)	-225	7495	-5	41
H(15)	271	8382	-2135	49
H(16)	1740	8147	-3588	50
H(18)	4071	6823	-4277	45
H(19)	6103	4999	-3833	45
H(110)	6696	3510	-1990	45
H(113)	5300	604	598	41
H(114)	6950	714	2440	33
H(11A)	4254	-278	2509	50
H(11B)	5092	-228	3567	50
H(11C)	7762	-1544	3526	55
H(11D)	6374	-2166	3554	55
H(11E)	6331	-1683	1643	52
H(11F)	8254	-2344	2220	52
H(11G)	8799	-503	1560	47
H(11H)	8022	-596	512	47
H(23A)	4425	1974	5440	40
H(23B)	2702	2185	4945	40
H(24A)	471	2336	7415	36
H(24B)	2020	2538	7721	36
HW2A	1090(50)	430(40)	5690(30)	40
HW2B	-300(30)	870(40)	6110(40)	40
H(21)	1342	719	9264	38
H(22)	1793	-807	11103	48
H(23)	3860	-2673	11536	45
H(25)	6128	-4028	10852	50
H(26)	7521	-4273	9450	48
H(28)	8052	-3338	7345	49
H(29)	7334	-1701	5574	48
H(210)	5207	7	5390	43
H(213)	3616	3464	5954	33
H(214)	188	3542	5609	36
H(21A)	-462	4784	6578	43
H(21B)	1477	4714	6691	43
H(21C)	-1	6524	5171	54
H(21D)	-768	5856	4618	54
H(21E)	1522	6300	3636	48
H(21F)	2766	5732	4779	48
H(21G)	1481	4414	3884	41
H(21H)	3414	4356	3983	41

Table S6. Continued

Atom	x	y	z	U(eq)
HW3A	1140(50)	2020(30)	3140(40)	50
HW3B	430(40)	2990(30)	3390(40)	50
HW4A	6170(50)	2532(18)	3680(40)	50
HW4B	7270(30)	1380(30)	4040(40)	50

Table S7. Crystal data and structure refinement for **13**.

Identification code	13
Empirical formula	C ₂₀ H ₃₀ Cl ₂ CuN ₄ O _{10.50}
Formula weight	628.92
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	P1
Unit cell dimensions	
a	7.3877(5) Å
b	13.5404(10) Å
c	13.6856(10) Å
α	96.4910(10)°.
β	94.0010(10)°.
γ	98.3120(10)°.
Volume	1340.77(17) Å ³
Z	2
Density (calculated)	1.558 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.075 mm ⁻¹
F(000)	650
Crystal size	0.15 x 0.10 x 0.10 mm ³
Theta range for data collection	1.50 to 28.27°.
Index ranges	-9<=h<=7, -17<=k<=17, -17<=l<=18
Reflections collected	10544
Independent reflections	8949 [R(int) = 0.0131]
Completeness to theta = 28.27°	87.4 %
Absorption correction	Empirical
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	8949 / 15 / 694
Goodness-of-fit on F ²	1.079
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0397, wR2 = 0.1014
R indices (all data)	R1 = 0.0477, wR2 = 0.1139
Absolute structure parameter	0.015(12)
Largest diff. peak and hole	0.705 and -0.414 e.Å ⁻³

Table S8. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **13**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	6967(1)	6942(1)	2213(1)	21(1)
N(11)	7076(7)	5579(4)	2622(3)	19(1)
N(12)	6610(7)	7279(3)	3662(3)	23(1)
N(13)	6552(8)	8265(4)	1789(4)	27(1)
N(14)	7491(7)	6601(4)	811(3)	23(1)
C(11)	7242(8)	4730(4)	2067(5)	24(1)
C(12)	7532(9)	3846(4)	2509(5)	29(2)
C(13)	7678(8)	3877(5)	3521(4)	27(1)
C(14)	7475(8)	4769(4)	4128(4)	21(1)
C(15)	7607(8)	4875(5)	5213(4)	25(2)
C(16)	7381(9)	5752(5)	5718(4)	28(2)
C(17)	6969(8)	6600(5)	5234(4)	25(1)
C(18)	6663(9)	7544(5)	5703(5)	32(2)
C(19)	6269(10)	8266(5)	5185(5)	34(2)
C(110)	6303(9)	8128(4)	4152(5)	28(1)
C(111)	6927(7)	6512(4)	4183(4)	18(1)
C(112)	7189(8)	5584(4)	3633(4)	22(1)
C(113)	6411(8)	8181(4)	696(3)	29(1)
C(114)	7819(7)	7546(4)	340(3)	27(1)
C(115)	7784(10)	7386(5)	-782(4)	37(2)
C(116)	8021(11)	8400(6)	-1165(5)	55(2)
C(117)	6626(13)	9062(5)	-814(5)	65(2)
C(118)	6644(11)	9194(5)	294(5)	46(2)
C(119)	8052(9)	3978(5)	5706(5)	32(2)
C(120)	7491(10)	5916(5)	6851(4)	36(2)
Cu(2)	2991(1)	3053(1)	7782(1)	23(1)
N(21)	2893(7)	4445(3)	7375(4)	22(1)
N(22)	3462(7)	2759(3)	6354(3)	23(1)
N(23)	3191(8)	1663(4)	8138(4)	31(1)
N(24)	2593(7)	3390(4)	9214(3)	25(1)
C(21)	2742(8)	5291(4)	7918(4)	24(1)
C(22)	2479(9)	6142(5)	7535(4)	26(1)
C(23)	2394(8)	6140(4)	6523(4)	26(1)
C(24)	2577(8)	5262(4)	5918(4)	22(1)
C(25)	2472(8)	5187(4)	4848(4)	22(1)
C(26)	2709(8)	4294(5)	4291(4)	23(1)
C(27)	3098(8)	3464(4)	4801(4)	21(1)
C(28)	3522(9)	2558(5)	4309(4)	28(1)
C(29)	3891(10)	1788(5)	4856(4)	33(2)
C(210)	3844(9)	1912(5)	5879(4)	30(1)
C(211)	3146(8)	3514(4)	5823(4)	23(1)
C(212)	2870(8)	4423(4)	6380(4)	19(1)
C(213)	2390(8)	1571(3)	9110(3)	28(1)
C(214)	3072(8)	2560(4)	9746(3)	27(1)
C(215)	2310(12)	2565(5)	10744(5)	43(2)
C(216)	2805(10)	1671(5)	11243(4)	44(2)
C(217)	2106(10)	681(4)	10585(4)	48(2)
C(218)	2873(11)	689(5)	9580(5)	42(2)

Table S8. Continued

Atom	x	y	z	U(eq)
C(219)	2098(9)	6094(5)	4378(4)	30(2)
C(220)	2570(9)	4158(5)	3186(4)	31(2)
Cl(1)	7603(2)	3961(1)	9011(1)	29(1)
O(11)	6605(7)	3382(4)	8129(3)	42(1)
O(12)	6410(7)	4592(4)	9447(4)	47(1)
O(13)	9223(7)	4542(4)	8733(4)	48(1)
O(14)	8108(8)	3289(4)	9656(4)	61(2)
Cl(2)	8294(3)	11093(1)	3206(2)	48(1)
O(21)	6529(6)	11292(3)	2895(3)	54(1)
O(22A)	7982(16)	10452(8)	4033(8)	76(2)
O(22B)	9569(16)	11688(8)	2708(8)	76(2)
O(23A)	8950(16)	10392(8)	2476(8)	70(2)
O(23B)	8486(17)	10139(9)	3245(9)	70(2)
O(24A)	9632(13)	11900(6)	3545(7)	55(2)
O(24B)	8893(15)	11730(8)	4143(8)	55(2)
Cl(3)	12378(2)	5987(1)	964(1)	25(1)
O(31)	13259(6)	6589(4)	1866(3)	39(1)
O(32)	13643(7)	5386(4)	542(4)	50(1)
O(33)	10763(6)	5363(3)	1176(3)	39(1)
O(34)	11887(8)	6630(4)	252(4)	55(2)
Cl(4)	11988(3)	9032(1)	6729(1)	46(1)
O(41)	11578(10)	8420(4)	5812(4)	88(2)
O(42)	10828(9)	9784(4)	6935(5)	90(2)
O(43A)	13976(18)	9411(10)	6988(9)	80(2)
O(43B)	13725(19)	9669(9)	6683(9)	80(2)
O(44A)	11426(16)	8402(8)	7500(8)	63(2)
O(44B)	12311(16)	8523(8)	7568(8)	63(2)
OW1	10135(6)	7496(4)	2664(4)	37(1)
OW2	-159(6)	2539(3)	7302(3)	35(1)
OW3	11234(8)	9223(4)	4015(4)	50(1)
OW4	13875(6)	9461(3)	2613(3)	44(1)
OW5	8330(12)	895(5)	6057(5)	96(2)

Table S9. Bond lengths [Å] for **13**.

Atom	Atom	Bond lengths [Å]	Atom	Atom	Bond lengths [Å]
Cu(1)	N(14)	1.999(5)	Cu(2)	N(24)	2.014(5)
Cu(1)	N(11)	2.000(5)	Cu(2)	N(22)	2.014(5)
Cu(1)	N(13)	2.002(5)	Cu(2)	N(23)	2.020(5)
Cu(1)	N(12)	2.029(5)	Cu(2)	N(21)	2.034(5)
Cu(1)	OW1	2.368(5)	Cu(2)	OW2	2.355(4)
Cu(1)	O(31)#1	2.710(5)	Cu(2)	O(11)	2.643(5)
N(11)	C(11)	1.331(8)	N(21)	C(21)	1.317(7)
N(11)	C(112)	1.379(7)	N(21)	C(212)	1.357(7)
N(12)	C(110)	1.321(8)	N(22)	C(210)	1.330(8)
N(12)	C(111)	1.361(7)	N(22)	C(211)	1.357(7)
N(13)	C(113)	1.483(6)	N(23)	C(213)	1.504(7)
N(13)	H(13A)	0.9000	N(23)	H(23A)	0.9000
N(13)	H(13B)	0.9000	N(23)	H(23B)	0.9000
N(14)	C(114)	1.494(6)	N(24)	C(214)	1.476(7)
N(14)	H(14A)	0.9000	N(24)	H(24A)	0.9000
N(14)	H(14B)	0.9000	N(24)	H(24B)	0.9000
C(11)	C(12)	1.436(8)	C(21)	C(22)	1.352(8)
C(11)	H(11)	0.9300	C(21)	H(21)	0.9300
C(12)	C(13)	1.377(9)	C(22)	C(23)	1.382(8)
C(12)	H(12)	0.9300	C(22)	H(22)	0.9300
C(13)	C(14)	1.420(9)	C(23)	C(24)	1.399(8)
C(13)	H(13)	0.9300	C(23)	H(23)	0.9300
C(14)	C(112)	1.392(8)	C(24)	C(212)	1.397(8)
C(14)	C(15)	1.470(8)	C(24)	C(25)	1.451(8)
C(15)	C(16)	1.344(9)	C(25)	C(26)	1.395(9)
C(15)	C(119)	1.519(9)	C(25)	C(219)	1.500(9)
C(16)	C(17)	1.447(9)	C(26)	C(27)	1.441(8)
C(16)	C(120)	1.536(8)	C(26)	C(220)	1.498(8)
C(17)	C(18)	1.420(9)	C(27)	C(211)	1.389(8)
C(17)	C(111)	1.428(8)	C(27)	C(28)	1.418(9)
C(18)	C(19)	1.324(9)	C(28)	C(29)	1.397(9)
C(18)	H(18)	0.9300	C(28)	H(28)	0.9300
C(19)	C(110)	1.407(9)	C(29)	C(210)	1.395(8)
C(19)	H(19)	0.9300	C(29)	H(29)	0.9300
C(110)	H(110)	0.9300	C(210)	H(210)	0.9300
C(111)	C(112)	1.435(8)	C(211)	C(212)	1.422(8)
C(113)	C(114)	1.514(7)	C(213)	C(218)	1.494(8)
C(113)	C(118)	1.527(8)	C(213)	C(214)	1.512(7)
C(113)	H(113)	0.9800	C(213)	H(213)	0.9800
C(114)	C(115)	1.524(7)	C(214)	C(215)	1.512(8)
C(114)	H(114)	0.9800	C(214)	H(214)	0.9800
C(115)	C(116)	1.516(9)	C(215)	C(216)	1.531(9)
C(115)	H(11A)	0.9700	C(215)	H(21A)	0.9700
C(115)	H(11B)	0.9700	C(215)	H(21B)	0.9700
C(116)	C(117)	1.529(11)	C(216)	C(217)	1.529(8)
C(116)	H(11C)	0.9700	C(216)	H(21C)	0.9700
C(116)	H(11D)	0.9700	C(216)	H(21D)	0.9700
C(117)	C(118)	1.505(9)	C(217)	C(218)	1.525(9)
C(117)	H(11E)	0.9700	C(217)	H(21E)	0.9700

Table S9. Continued

Atom	Atom	Bond lengths [Å]	Atom	Atom	Bond lengths [Å]
C(117)	H(11F)	0.9700	C(217)	H(21F)	0.9700
C(118)	H(11G)	0.9700	C(218)	H(21G)	0.9700
C(118)	H(11H)	0.9700	C(218)	H(21H)	0.9700
C(119)	H(11I)	0.9600	C(219)	H(21I)	0.9600
C(119)	H(11J)	0.9600	C(219)	H(21J)	0.9600
C(119)	H(11K)	0.9600	C(219)	H(21K)	0.9600
C(120)	H(12A)	0.9600	C(220)	H(22A)	0.9600
C(120)	H(12B)	0.9600	C(220)	H(22B)	0.9600
C(120)	H(12C)	0.9600	C(220)	H(22C)	0.9600
Cl(1)	O(14)	1.408(5)	Cl(3)	O(34)	1.439(5)
Cl(1)	O(12)	1.428(5)	Cl(3)	O(31)	1.456(4)
Cl(1)	O(13)	1.434(5)	Cl(4)	O(41)	1.411(6)
Cl(1)	O(11)	1.452(4)	Cl(4)	O(44B)	1.428(10)
Cl(2)	O(23B)	1.327(12)	Cl(4)	O(42)	1.440(6)
Cl(2)	O(24A)	1.376(9)	Cl(4)	O(43B)	1.449(13)
Cl(2)	O(22B)	1.413(11)	Cl(4)	O(44A)	1.476(10)
Cl(2)	O(21)	1.415(5)	Cl(4)	O(43A)	1.488(13)
Cl(2)	O(23A)	1.456(11)	O(43A)	O(43B)	0.609(16)
Cl(2)	O(24B)	1.465(11)	O(44A)	O(44B)	0.649(14)
Cl(2)	O(22A)	1.512(10)	OW1	HW1A	0.84(2)
O(22A)	O(23B)	1.216(14)	OW1	HW1B	0.868(19)
O(22A)	O(24B)	1.750(14)	OW2	HW2A	0.832(19)
O(22B)	O(24A)	1.144(12)	OW2	HW2B	0.860(19)
O(22B)	O(23A)	1.735(15)	OW3	HW3A	0.836(19)
O(23A)	O(23B)	1.201(14)	OW3	HW3B	0.858(19)
O(24A)	O(24B)	1.044(12)	OW4	HW4A	0.83(2)
Cl(3)	O(33)	1.427(4)	OW4	HW4B	0.869(19)
Cl(3)	O(32)	1.435(5)			

Table S10. Bond angles [°] for **13**

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
N(14)	Cu(1)	N(11)	96.56(19)	N(24)	Cu(2)	N(22)	177.9(2)
N(14)	Cu(1)	N(13)	84.6(2)	N(24)	Cu(2)	N(23)	85.1(2)
N(11)	Cu(1)	N(13)	173.6(2)	N(22)	Cu(2)	N(23)	96.1(2)
N(14)	Cu(1)	N(12)	176.2(2)	N(24)	Cu(2)	N(21)	97.25(19)
N(11)	Cu(1)	N(12)	82.09(19)	N(22)	Cu(2)	N(21)	81.45(19)
N(13)	Cu(1)	N(12)	97.1(2)	N(23)	Cu(2)	N(21)	177.0(2)
N(14)	Cu(1)	OW1	90.22(19)	N(24)	Cu(2)	OW2	93.67(19)
N(11)	Cu(1)	OW1	92.98(18)	N(22)	Cu(2)	OW2	88.01(19)
N(13)	Cu(1)	OW1	93.3(2)	N(23)	Cu(2)	OW2	89.8(2)
N(12)	Cu(1)	OW1	86.28(18)	N(21)	Cu(2)	OW2	91.80(18)
N(14)	Cu(1)	O(31)#1	96.03(17)	N(24)	Cu(2)	O(11)	93.06(18)
N(11)	Cu(1)	O(31)#1	93.05(17)	N(22)	Cu(2)	O(11)	85.39(17)
N(13)	Cu(1)	O(31)#1	80.59(19)	N(23)	Cu(2)	O(11)	84.8(2)
N(12)	Cu(1)	O(31)#1	87.62(16)	N(21)	Cu(2)	O(11)	93.28(18)
OW1	Cu(1)	O(31)#1	170.76(16)	OW2	Cu(2)	O(11)	170.99(16)
C(11)	N(11)	C(112)	118.0(5)	C(21)	N(21)	C(212)	119.2(5)
C(11)	N(11)	Cu(1)	128.8(4)	C(21)	N(21)	Cu(2)	129.6(4)
C(112)	N(11)	Cu(1)	112.8(4)	C(212)	N(21)	Cu(2)	111.0(4)
C(110)	N(12)	C(111)	118.4(5)	C(210)	N(22)	C(211)	118.5(5)
C(110)	N(12)	Cu(1)	130.0(4)	C(210)	N(22)	Cu(2)	128.6(4)
C(111)	N(12)	Cu(1)	111.2(4)	C(211)	N(22)	Cu(2)	112.5(4)
C(113)	N(13)	Cu(1)	109.2(3)	C(213)	N(23)	Cu(2)	107.9(4)
C(113)	N(13)	H(13A)	109.8	C(213)	N(23)	H(23A)	110.1
Cu(1)	N(13)	H(13A)	109.8	Cu(2)	N(23)	H(23A)	110.1
C(113)	N(13)	H(13B)	109.8	C(213)	N(23)	H(23B)	110.1
Cu(1)	N(13)	H(13B)	109.8	Cu(2)	N(23)	H(23B)	110.1
H(13A)	N(13)	H(13B)	108.3	H(23A)	N(23)	H(23B)	108.4
C(114)	N(14)	Cu(1)	109.1(3)	C(214)	N(24)	Cu(2)	108.0(4)
C(114)	N(14)	H(14A)	109.9	C(214)	N(24)	H(24A)	110.1
Cu(1)	N(14)	H(14A)	109.9	Cu(2)	N(24)	H(24A)	110.1
C(114)	N(14)	H(14B)	109.9	C(214)	N(24)	H(24B)	110.1
Cu(1)	N(14)	H(14B)	109.9	Cu(2)	N(24)	H(24B)	110.1
H(14A)	N(14)	H(14B)	108.3	H(24A)	N(24)	H(24B)	108.4
N(11)	C(11)	C(12)	120.9(6)	N(21)	C(21)	C(22)	123.4(6)
N(11)	C(11)	H(11)	119.6	N(21)	C(21)	H(21)	118.3
C(12)	C(11)	H(11)	119.6	C(22)	C(21)	H(21)	118.3
C(13)	C(12)	C(11)	120.0(6)	C(21)	C(22)	C(23)	118.9(6)
C(13)	C(12)	H(12)	120.0	C(21)	C(22)	H(22)	120.5
C(11)	C(12)	H(12)	120.0	C(23)	C(22)	H(22)	120.5
C(12)	C(13)	C(14)	120.1(6)	C(22)	C(23)	C(24)	119.6(6)
C(12)	C(13)	H(13)	119.9	C(22)	C(23)	H(23)	120.2
C(14)	C(13)	H(13)	119.9	C(24)	C(23)	H(23)	120.2
C(112)	C(14)	C(13)	115.7(5)	C(212)	C(24)	C(23)	117.4(5)
C(112)	C(14)	C(15)	120.2(6)	C(212)	C(24)	C(25)	119.3(6)
C(13)	C(14)	C(15)	124.1(5)	C(23)	C(24)	C(25)	123.3(5)
C(16)	C(15)	C(14)	119.4(5)	C(26)	C(25)	C(24)	120.2(5)
C(16)	C(15)	C(119)	123.3(5)	C(26)	C(25)	C(219)	122.1(5)
C(14)	C(15)	C(119)	117.3(6)	C(24)	C(25)	C(219)	117.7(6)
C(15)	C(16)	C(17)	122.4(5)	C(25)	C(26)	C(27)	118.6(5)

Table S10. Continued

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
C(15)	C(16)	C(120)	122.3(6)	C(25)	C(26)	C(220)	122.9(6)
C(17)	C(16)	C(120)	115.3(6)	C(27)	C(26)	C(220)	118.5(6)
C(18)	C(17)	C(111)	115.5(5)	C(211)	C(27)	C(28)	115.2(5)
C(18)	C(17)	C(16)	126.4(5)	C(211)	C(27)	C(26)	121.8(6)
C(111)	C(17)	C(16)	118.1(6)	C(28)	C(27)	C(26)	122.9(5)
C(19)	C(18)	C(17)	121.4(6)	C(29)	C(28)	C(27)	119.5(5)
C(19)	C(18)	H(18)	119.3	C(29)	C(28)	H(28)	120.2
C(17)	C(18)	H(18)	119.3	C(27)	C(28)	H(28)	120.2
C(18)	C(19)	C(110)	119.4(7)	C(210)	C(29)	C(28)	120.1(6)
C(18)	C(19)	H(19)	120.3	C(210)	C(29)	H(29)	119.9
C(110)	C(19)	H(19)	120.3	C(28)	C(29)	H(29)	119.9
N(12)	C(110)	C(19)	122.7(6)	N(22)	C(210)	C(29)	121.2(6)
N(12)	C(110)	H(110)	118.6	N(22)	C(210)	H(210)	119.4
C(19)	C(110)	H(110)	118.6	C(29)	C(210)	H(210)	119.4
N(12)	C(111)	C(17)	122.5(5)	N(22)	C(211)	C(27)	125.3(6)
N(12)	C(111)	C(112)	117.5(5)	N(22)	C(211)	C(212)	115.7(5)
C(17)	C(111)	C(112)	120.1(5)	C(27)	C(211)	C(212)	118.9(5)
N(11)	C(112)	C(14)	125.3(6)	N(21)	C(212)	C(24)	121.3(6)
N(11)	C(112)	C(111)	115.0(5)	N(21)	C(212)	C(211)	117.6(5)
C(14)	C(112)	C(111)	119.7(5)	C(24)	C(212)	C(211)	121.1(5)
N(13)	C(113)	C(114)	107.6(4)	C(218)	C(213)	N(23)	113.0(5)
N(13)	C(113)	C(118)	113.7(4)	C(218)	C(213)	C(214)	112.5(4)
C(114)	C(113)	C(118)	111.5(5)	N(23)	C(213)	C(214)	105.8(4)
N(13)	C(113)	H(113)	108.0	C(218)	C(213)	H(213)	108.5
C(114)	C(113)	H(113)	108.0	N(23)	C(213)	H(213)	108.5
C(118)	C(113)	H(113)	108.0	C(214)	C(213)	H(213)	108.5
N(14)	C(114)	C(113)	106.2(4)	N(24)	C(214)	C(215)	112.8(5)
N(14)	C(114)	C(115)	114.7(4)	N(24)	C(214)	C(213)	108.9(4)
C(113)	C(114)	C(115)	112.6(5)	C(215)	C(214)	C(213)	110.5(4)
N(14)	C(114)	H(114)	107.7	N(24)	C(214)	H(214)	108.2
C(113)	C(114)	H(114)	107.7	C(215)	C(214)	H(214)	108.2
C(115)	C(114)	H(114)	107.7	C(213)	C(214)	H(214)	108.2
C(116)	C(115)	C(114)	109.1(5)	C(214)	C(215)	C(216)	110.2(6)
C(116)	C(115)	H(11A)	109.9	C(214)	C(215)	H(21A)	109.6
C(114)	C(115)	H(11A)	109.9	C(216)	C(215)	H(21A)	109.6
C(116)	C(115)	H(11B)	109.9	C(214)	C(215)	H(21B)	109.6
C(114)	C(115)	H(11B)	109.9	C(216)	C(215)	H(21B)	109.6
H(11A)	C(115)	H(11B)	108.3	H(21A)	C(215)	H(21B)	108.1
C(115)	C(116)	C(117)	113.2(6)	C(217)	C(216)	C(215)	110.7(5)
C(115)	C(116)	H(11C)	108.9	C(217)	C(216)	H(21C)	109.5
C(117)	C(116)	H(11C)	108.9	C(215)	C(216)	H(21C)	109.5
C(115)	C(116)	H(11D)	108.9	C(217)	C(216)	H(21D)	109.5
C(117)	C(116)	H(11D)	108.9	C(215)	C(216)	H(21D)	109.5
H(11C)	C(116)	H(11D)	107.7	H(21C)	C(216)	H(21D)	108.1
C(118)	C(117)	C(116)	111.5(6)	C(218)	C(217)	C(216)	110.6(5)
C(118)	C(117)	H(11E)	109.3	C(218)	C(217)	H(21E)	109.5
C(116)	C(117)	H(11E)	109.3	C(216)	C(217)	H(21E)	109.5
C(118)	C(117)	H(11F)	109.3	C(218)	C(217)	H(21F)	109.5
C(116)	C(117)	H(11F)	109.3	C(216)	C(217)	H(21F)	109.5
H(11E)	C(117)	H(11F)	108.0	H(21E)	C(217)	H(21F)	108.1

Table S10. Continued

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]	Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
C(117)	C(118)	C(113)	111.4(5)	C(213)	C(218)	C(217)	109.9(6)
C(117)	C(118)	H(11G)	109.4	C(213)	C(218)	H(21G)	109.7
C(113)	C(118)	H(11G)	109.4	C(217)	C(218)	H(21G)	109.7
C(117)	C(118)	H(11H)	109.4	C(213)	C(218)	H(21H)	109.7
C(113)	C(118)	H(11H)	109.4	C(217)	C(218)	H(21H)	109.7
H(11G)	C(118)	H(11H)	108.0	H(21G)	C(218)	H(21H)	108.2
C(15)	C(119)	H(11I)	109.5	C(25)	C(219)	H(21I)	109.5
C(15)	C(119)	H(11J)	109.5	C(25)	C(219)	H(21J)	109.5
H(11I)	C(119)	H(11J)	109.5	H(21I)	C(219)	H(21J)	109.5
C(15)	C(119)	H(11K)	109.5	C(25)	C(219)	H(21K)	109.5
H(11I)	C(119)	H(11K)	109.5	H(21I)	C(219)	H(21K)	109.5
H(11J)	C(119)	H(11K)	109.5	H(21J)	C(219)	H(21K)	109.5
C(16)	C(120)	H(12A)	109.5	C(26)	C(220)	H(22A)	109.5
C(16)	C(120)	H(12B)	109.5	C(26)	C(220)	H(22B)	109.5
H(12A)	C(120)	H(12B)	109.5	H(22A)	C(220)	H(22B)	109.5
C(16)	C(120)	H(12C)	109.5	C(26)	C(220)	H(22C)	109.5
H(12A)	C(120)	H(12C)	109.5	H(22A)	C(220)	H(22C)	109.5
H(12B)	C(120)	H(12C)	109.5	H(22B)	C(220)	H(22C)	109.5
O(23B)	O(22A)	Cl(2)	57.0(7)	HW1A	OW1	HW1B	104(3)
O(23B)	O(22A)	O(24B)	101.8(9)	Cu(2)	OW2	HW2A	124(4)
Cl(2)	O(22A)	O(24B)	52.8(5)	Cu(2)	OW2	HW2B	128(4)
O(24A)	O(22B)	Cl(2)	64.1(7)	HW2A	OW2	HW2B	108(3)
O(24A)	O(22B)	O(23A)	107.0(9)	HW3A	OW3	HW3B	106(3)
Cl(2)	O(22B)	O(23A)	53.9(5)	HW4A	OW4	HW4B	106(3)
O(23B)	O(23A)	Cl(2)	59.0(8)	O(14)	Cl(1)	O(12)	111.2(4)
O(23B)	O(23A)	O(22B)	104.9(10)	O(14)	Cl(1)	O(13)	109.4(3)
Cl(2)	O(23A)	O(22B)	51.6(5)	O(12)	Cl(1)	O(13)	111.4(3)
O(23A)	O(23B)	O(22A)	142.9(14)	O(14)	Cl(1)	O(11)	108.6(3)
O(23A)	O(23B)	Cl(2)	70.2(8)	O(12)	Cl(1)	O(11)	107.5(3)
O(22A)	O(23B)	Cl(2)	72.9(9)	O(13)	Cl(1)	O(11)	108.7(3)
O(24B)	O(24A)	O(22B)	140.0(12)	Cl(1)	O(11)	Cu(2)	124.8(3)
O(24B)	O(24A)	Cl(2)	73.0(8)	O(23B)	Cl(2)	O(24A)	124.4(7)
O(22B)	O(24A)	Cl(2)	67.5(7)	O(23B)	Cl(2)	O(22B)	118.2(8)
O(24A)	O(24B)	Cl(2)	64.0(8)	O(24A)	Cl(2)	O(22B)	48.4(5)
O(24A)	O(24B)	O(22A)	111.5(11)	O(23B)	Cl(2)	O(21)	117.2(5)
Cl(2)	O(24B)	O(22A)	55.3(5)	O(24A)	Cl(2)	O(21)	118.0(4)
O(33)	Cl(3)	O(32)	110.5(3)	O(22B)	Cl(2)	O(21)	106.8(5)
O(33)	Cl(3)	O(34)	109.2(3)	O(23B)	Cl(2)	O(23A)	50.9(6)
O(32)	Cl(3)	O(34)	107.8(4)	O(24A)	Cl(2)	O(22B)	48.4(5)
O(33)	Cl(3)	O(31)	109.8(3)	O(23B)	Cl(2)	O(21)	117.2(5)
O(32)	Cl(3)	O(31)	109.3(3)	O(24A)	Cl(2)	O(21)	118.0(4)
O(34)	Cl(3)	O(31)	110.3(3)	O(22B)	Cl(2)	O(21)	106.8(5)
O(41)	Cl(4)	O(44B)	116.1(5)	O(23B)	Cl(2)	O(23A)	50.9(6)
O(41)	Cl(4)	O(42)	116.2(4)	O(24A)	Cl(2)	O(23A)	111.5(6)
O(44B)	Cl(4)	O(42)	111.3(6)	O(22B)	Cl(2)	O(23A)	74.4(6)
O(41)	Cl(4)	O(43B)	107.2(6)	O(21)	Cl(2)	O(23A)	111.4(5)
O(44B)	Cl(4)	O(43B)	103.4(7)	O(23B)	Cl(2)	O(24B)	112.7(7)
O(42)	Cl(4)	O(43B)	100.2(6)	O(24A)	Cl(2)	O(24B)	43.0(5)
Cu(1)	OW1	HW1A	123(4)	O(22B)	Cl(2)	O(24B)	91.2(6)
Cu(1)	OW1	HW1B	132(4)	O(21)	Cl(2)	O(24B)	107.2(5)

Table S10. Continued

Atom	Atom	Atom	Bond Angles [°]
O(23A)	Cl(2)	O(24B)	141.2(7)
O(23B)	Cl(2)	O(22A)	50.2(6)
O(24A)	Cl(2)	O(22A)	108.4(6)
O(22B)	Cl(2)	O(22A)	147.3(7)
O(21)	Cl(2)	O(22A)	104.9(5)
O(23A)	Cl(2)	O(22A)	101.0(6)
O(24B)	Cl(2)	O(22A)	72.0(6)
O(41)	Cl(4)	O(44A)	107.2(5)
O(44B)	Cl(4)	O(44A)	25.7(6)
O(42)	Cl(4)	O(44A)	97.6(6)
O(43B)	Cl(4)	O(44A)	128.5(7)
O(41)	Cl(4)	O(43A)	114.6(6)
O(44B)	Cl(4)	O(43A)	80.0(6)
O(42)	Cl(4)	O(43A)	113.4(6)
O(43B)	Cl(4)	O(43A)	23.9(6)
O(44A)	Cl(4)	O(43A)	105.5(6)
O(43B)	O(43A)	Cl(4)	74(2)
O(43A)	O(43B)	Cl(4)	82(2)
O(44B)	O(44A)	Cl(4)	73.0(15)
O(44A)	O(44B)	Cl(4)	81.2(16)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x-1,y,z

Table S11. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for cu56. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2h^2 [a^2 U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cu(1)	26(1)	19(1)	19(1)	3(1)	5(1)	5(1)
N(11)	19(3)	24(3)	15(2)	5(2)	-2(2)	0(2)
N(12)	22(3)	22(2)	24(3)	6(2)	2(2)	2(2)
N(13)	33(3)	22(2)	28(3)	8(2)	11(2)	7(2)
N(14)	28(3)	21(2)	17(2)	-1(2)	0(2)	3(2)
C(11)	20(3)	26(3)	28(3)	8(3)	10(3)	4(2)
C(12)	28(4)	16(3)	41(4)	1(3)	7(3)	3(3)
C(13)	22(3)	29(3)	32(3)	13(3)	5(3)	7(2)
C(14)	16(3)	17(3)	29(3)	0(2)	-2(2)	1(2)
C(15)	16(3)	36(3)	27(3)	19(3)	-1(2)	2(3)
C(16)	26(3)	36(3)	21(3)	5(3)	5(2)	4(3)
C(17)	21(3)	34(3)	18(3)	-2(3)	6(2)	1(3)
C(18)	34(4)	33(3)	27(3)	-10(3)	2(3)	10(3)
C(19)	34(4)	31(3)	31(3)	-9(3)	2(3)	2(3)
C(110)	34(4)	18(3)	32(3)	3(2)	4(3)	6(2)
C(111)	13(3)	22(3)	20(3)	1(2)	2(2)	5(2)
C(112)	14(3)	23(3)	26(3)	-5(3)	5(2)	-2(2)
C(113)	31(3)	31(2)	27(2)	9(2)	2(2)	4(2)
C(114)	26(3)	34(3)	22(2)	7(2)	9(2)	2(2)
C(115)	47(4)	45(4)	16(3)	3(3)	1(3)	0(3)
C(116)	75(6)	62(4)	30(3)	16(3)	19(3)	5(4)
C(117)	106(7)	57(4)	42(3)	32(3)	11(4)	22(4)
C(118)	67(5)	34(3)	43(4)	14(3)	11(3)	20(3)
C(119)	22(3)	40(3)	37(3)	12(3)	5(3)	8(3)
C(120)	35(4)	54(4)	22(3)	11(3)	-2(3)	12(3)
Cu(2)	31(1)	20(1)	19(1)	4(1)	5(1)	7(1)
N(21)	24(3)	17(2)	24(3)	-1(2)	8(2)	7(2)
N(22)	28(3)	21(2)	20(2)	-2(2)	8(2)	5(2)
N(23)	46(3)	25(3)	23(2)	0(2)	9(2)	11(2)
N(24)	26(3)	25(3)	25(3)	5(2)	2(2)	3(2)
C(21)	27(4)	23(3)	19(3)	-6(2)	1(2)	2(3)
C(22)	28(3)	28(3)	24(3)	-2(3)	8(3)	12(3)
C(23)	26(3)	18(3)	34(3)	3(3)	4(3)	6(2)
C(24)	18(3)	29(3)	22(3)	12(2)	7(2)	4(2)
C(25)	19(3)	26(3)	22(3)	2(2)	2(2)	4(2)
C(26)	11(3)	38(4)	22(3)	10(3)	2(2)	3(3)
C(27)	18(3)	23(3)	22(3)	3(2)	-2(2)	3(2)
C(28)	31(3)	32(3)	18(3)	1(2)	4(2)	-6(3)
C(29)	49(4)	24(3)	27(3)	-3(3)	10(3)	12(3)
C(210)	36(4)	30(3)	26(3)	2(3)	12(3)	11(3)
C(211)	20(3)	27(3)	21(3)	4(3)	4(2)	-3(2)
C(212)	16(3)	21(3)	19(3)	9(2)	1(2)	3(2)
C(213)	35(3)	28(2)	22(2)	9(2)	5(2)	3(2)
C(214)	31(3)	27(2)	23(2)	9(2)	6(2)	3(2)
C(215)	63(5)	42(4)	27(4)	4(3)	8(3)	10(4)
C(216)	64(5)	47(3)	23(3)	19(2)	2(3)	5(3)
C(217)	67(4)	42(3)	35(3)	22(3)	6(3)	-1(3)
C(218)	61(5)	34(3)	35(3)	19(3)	8(3)	5(3)

Table S11. Coninued.

Atom	U¹¹	U²²	U³³	U²³	U¹³	U¹²
C(219)	31(3)	36(3)	24(3)	16(3)	-3(2)	4(3)
C(220)	28(4)	43(4)	21(3)	2(3)	5(3)	-1(3)
Cl(1)	22(1)	36(1)	28(1)	-2(1)	5(1)	4(1)
O(11)	35(3)	54(3)	34(3)	-13(2)	-2(2)	11(2)
O(12)	28(3)	45(3)	63(3)	-21(2)	7(2)	9(2)
O(13)	25(3)	71(3)	48(3)	10(2)	11(2)	-4(2)
O(14)	56(4)	65(4)	63(4)	25(3)	-12(3)	6(3)
Cl(2)	39(1)	39(1)	64(1)	4(1)	2(1)	6(1)
O(21)	42(3)	37(2)	83(3)	13(2)	-9(2)	8(2)
Cl(3)	20(1)	29(1)	25(1)	-3(1)	3(1)	4(1)
O(31)	27(3)	51(3)	31(3)	-16(2)	4(2)	-1(2)
O(32)	26(3)	57(3)	58(3)	-30(3)	15(2)	0(2)
O(33)	24(2)	43(2)	46(3)	3(2)	6(2)	-5(2)
O(34)	61(4)	54(3)	48(3)	18(2)	-9(3)	4(3)
Cl(4)	65(1)	29(1)	49(1)	7(1)	13(1)	15(1)
O(41)	143(7)	51(3)	69(3)	-3(3)	-26(4)	34(3)
O(42)	109(5)	39(2)	120(5)	-16(3)	-28(4)	40(3)
OW1	30(3)	39(3)	38(3)	-14(2)	6(2)	6(2)
OW2	25(3)	37(3)	39(3)	-10(2)	-1(2)	4(2)
OW3	69(4)	40(2)	41(2)	-6(2)	4(2)	13(2)
OW4	40(2)	38(2)	54(2)	0(2)	13(2)	9(2)
OW5	118(6)	60(4)	99(5)	-14(3)	-8(4)	6(4)

Table S12. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for **13**.

Atom	x	y	z	U(eq)
H(13A)	5511	8437	2015	40
H(13B)	7491	8746	2042	40
H(14A)	8488	6290	791	34
H(14B)	6532	6181	481	34
H(11)	7170	4708	1383	36
H(12)	7621	3254	2112	43
H(13)	7911	3312	3807	40
H(18)	6741	7658	6389	48
H(19)	5973	8859	5500	50
H(110)	6102	8656	3800	42
H(113)	5190	7818	450	44
H(114)	9037	7905	599	40
H(11A)	8766	7023	-976	55
H(11B)	6625	6992	-1061	55
H(11C)	7905	8296	-1881	82
H(11D)	9249	8751	-951	82
H(11E)	6906	9717	-1040	98
H(11F)	5407	8759	-1101	98
H(11G)	5659	9555	488	69
H(11H)	7798	9592	578	69
H(11I)	8713	4210	6338	48
H(11J)	8791	3605	5299	48
H(11K)	6932	3552	5791	48
H(12A)	8231	5465	7113	54
H(12B)	6278	5789	7065	54
H(12C)	8031	6598	7083	54
H(23A)	2572	1193	7668	46
H(23B)	4376	1572	8187	46
H(24A)	3307	3971	9467	38
H(24B)	1413	3461	9276	38
H(21)	2821	5303	8601	36
H(22)	2357	6719	7947	39
H(23)	2217	6718	6246	39
H(28)	3554	2477	3627	42
H(29)	4169	1192	4537	49
H(210)	4084	1393	6235	44
H(213)	1049	1497	8997	42
H(214)	4414	2635	9849	40
H(21A)	986	2525	10663	65
H(21B)	2812	3188	11157	65
H(21C)	4128	1743	11375	66
H(21D)	2265	1664	11868	66
H(21E)	2477	127	10901	71
H(21F)	775	582	10499	71
H(21G)	4197	727	9659	63
H(21H)	2368	71	9159	63
H(21I)	2239	5983	3684	45
H(21J)	2948	6671	4675	45

Table S12. Continued

Atom	x	y	z	U(eq)
H(21K)	866	6208	4474	45
H(22A)	2423	4785	2949	47
H(22B)	1530	3660	2938	47
H(22C)	3668	3941	2961	47
HW1A	10960(60)	7290(40)	2340(40)	50
HW1B	10710(80)	8010(40)	3060(40)	50
HW2A	-990(60)	2820(40)	7530(40)	50
HW2B	-680(80)	2020(30)	6900(40)	50
HW3A	10730(90)	9740(30)	4020(40)	60
HW3B	11280(90)	9090(40)	4610(20)	60
HW4A	13060(60)	9350(50)	2990(30)	60
HW4B	13420(80)	9150(40)	2040(20)	60

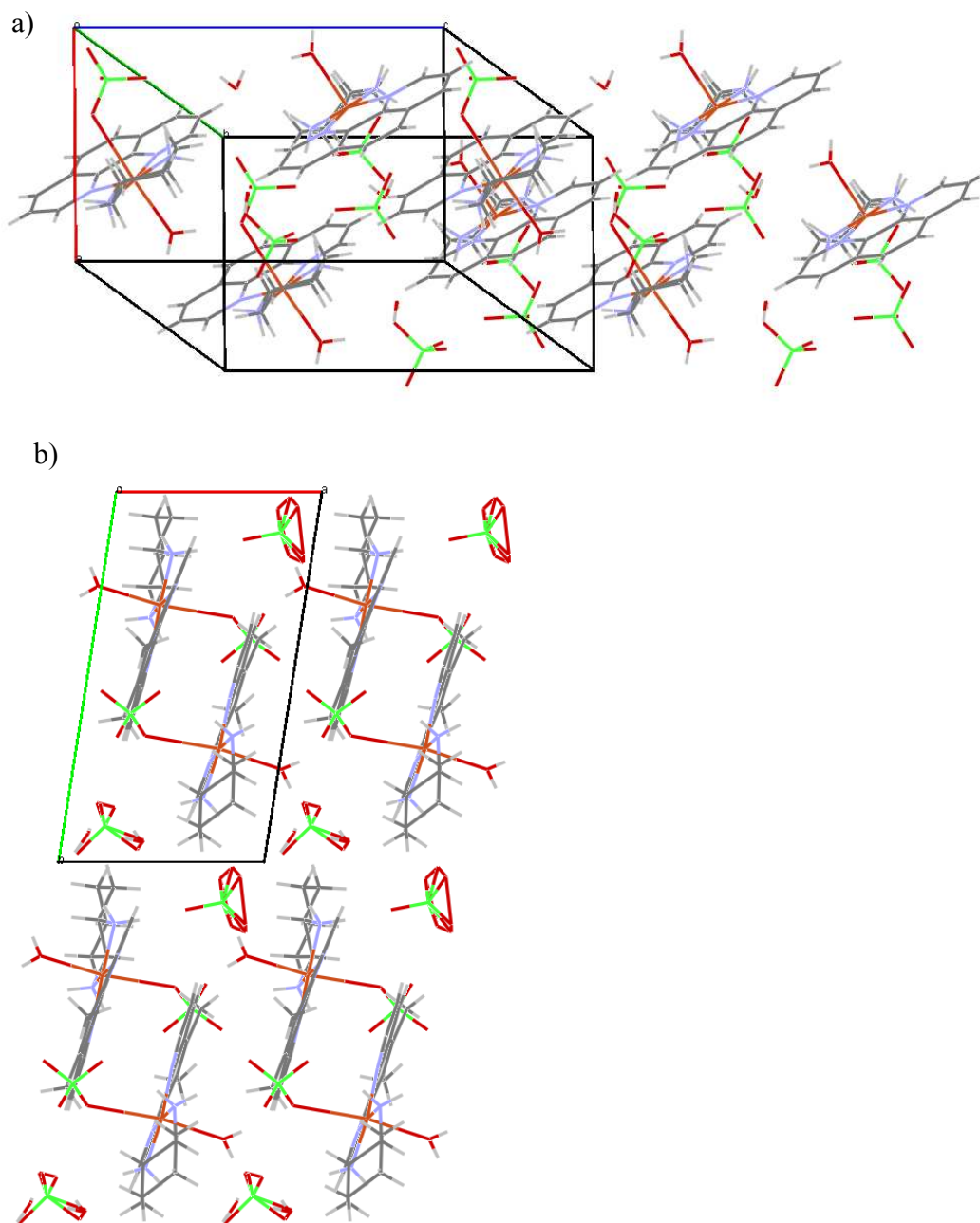


Figure S1 The packing diagram of a) **7** (along b^* -axis) and b) **13** (along c -axis) demonstrating the π - π stacking of the metal complexes in a head-to-tail arrangement.