

表 S1 配合物 **1** 的部分键长
Tab. S1 Selected bond lengths for complex **1**

化学键	键长/pm
Zn(1)—O(4W)	207.71(18)
Zn(1)—O(2W)	209.22(17)
Zn(1)—O(1W)	209.99(19)
Zn(1)—O(3W)	215.08(18)
Zn(1)—N(1)	215.6(2)
Zn(1)—N(3) # 1	223.9(2)

注:表中()内的数值为最后一位(或两位)
有效数字的误差值,下同.对称代码 # 1:
 $-x, -y+1, -z+1$.

表 S2 配合物 **1** 的部分键角
Tab. S2 Selected bond angles for complex **1**

化学键	键角/(°)	化学键	键角/(°)
O(4W)—Zn(1)—O(2W)	87.91(8)	O(1W)—Zn(1)—N(1)	175.35(8)
O(4W)—Zn(1)—O(1W)	85.52(8)	O(3W)—Zn(1)—N(1)	90.22(7)
O(2W)—Zn(1)—O(1W)	91.64(7)	O(4W)—Zn(1)—N(3) # 1	92.22(8)
O(4W)—Zn(1)—O(3W)	173.83(8)	O(2W)—Zn(1)—N(3) # 1	174.50(7)
O(2W)—Zn(1)—O(3W)	90.21(7)	O(1W)—Zn(1)—N(3) # 1	82.90(8)
O(1W)—Zn(1)—O(3W)	88.66(8)	O(3W)—Zn(1)—N(3) # 1	89.09(7)
O(4W)—Zn(1)—N(1)	95.74(8)	N(1)—Zn(1)—N(3) # 1	92.57(7)
O(2W)—Zn(1)—N(1)	92.89(7)		

注:对称代码同表 S1.

表 S3 配合物 **1** 的氢键键长和键角
Tab. S3 Hydrogen bond lengths and angles for complex **1**

$D^* - H \cdots A^{**}$	$d(D-H)/\text{pm}$	$d(H \cdots A)/\text{pm}$	$d(D \cdots A)/\text{pm}$	键角/(°)
O(1W)—H(1C) $\cdots$ O(3) # 2	84.7(10)	187.3(11)	271.9(3)	177(3)
O(1W)—H(1D) $\cdots$ O(4) # 3	84.1(10)	189.3(11)	273.3(3)	175(4)
O(2W)—H(2C) $\cdots$ O(3)	84.5(10)	186.0(11)	270.0(2)	172(3)
O(2W)—H(2D) $\cdots$ O(4) # 2	84.4(10)	192.7(11)	276.5(2)	171(3)
O(3W)—H(3C) $\cdots$ O(3)	84.0(10)	216.3(18)	293.2(3)	152(3)
O(3W)—H(3D) $\cdots$ O(2) # 3	84.1(10)	193.3(12)	275.9(3)	167(3)
O(4W)—H(4C) $\cdots$ O(1) # 4	84.5(10)	186.0(14)	267.7(3)	162(3)
O(4W)—H(4D) $\cdots$ O(4) # 5	84.6(10)	195.9(11)	280.0(2)	173(3)
N(3)—H(3A) $\cdots$ O(1) # 6	89.2(10)	200.5(11)	288.6(3)	169(3)
N(3)—H(3B) $\cdots$ O(2) # 7	88.9(10)	210.2(11)	298.0(3)	169(3)

注: * 表示氢键供体; ** 表示氢键受体.对称代码 # 1: $-x, -y+1, -z+1$; # 2: $x-1/2, y, -z+1/2$;
3: $-x+1/2, y+1/2, z$; # 4: $-x+1/2, y-1/2, z$; # 5: $x-1, y, z$; # 6: $-x+1, -y+1, -z+1$;
7: $x-1/2, -y+1/2, -z+1$.

表 S4 配合物 **2** 的部分键长
Tab. S4 Selected bond lengths for complex **2**

化学键	键长/pm
Cd(1)—O(1)	227.0(2)
Cd(1)—O(3) # 1	229.8(3)
Cd(1)—N(1)	233.3(3)
O(3)—Cd(1) # 2	229.8(3)
Cd(1)—O(1W)	229.5(3)
Cd(1)—O(2W)	231.1(3)
Cd(1)—N(4)	234.6(3)

注:对称代码 # 1: $x, -y+1/2, z-1/2$; # 2: $x, -y+1/2, z+1/2$.

表 S5 配合物 **2** 的部分键角
Tab. S5 Selected bond angles for complex **2**

化学键	键角/(°)	化学键	键角/(°)
O(1)—Cd(1)—O(1W)	173.02(9)	O(1)—Cd(1)—O(3) # 1	107.40(10)
O(1W)—Cd(1)—O(3) # 1	79.36(10)	O(1)—Cd(1)—O(2W)	91.21(10)
O(1W)—Cd(1)—O(2W)	82.07(10)	O(3) # 1—Cd(1)—O(2W)	161.38(11)
O(1)—Cd(1)—N(1)	89.10(9)	O(1W)—Cd(1)—N(1)	88.98(9)
O(3) # 1—Cd(1)—N(1)	91.20(9)	O(2W)—Cd(1)—N(1)	89.70(10)
O(1)—Cd(1)—N(4)	92.84(9)	O(1W)—Cd(1)—N(4)	89.21(9)
O(3) # 1—Cd(1)—N(4)	87.22(9)	O(2W)—Cd(1)—N(4)	91.31(10)
N(1)—Cd(1)—N(4)	177.79(10)	S(1)—O(3)—Cd(1) # 2	142.32(17)

注:对称代码同表 S4.

表 S6 配合物 **2** 的氢键键长和键角
Tab. S6 Hydrogen bond lengths and angles for complex **2**

D*—H...A**	$d(\text{D—H})/\text{pm}$	$d(\text{H...A})/\text{pm}$	$d(\text{D...A})/\text{pm}$	键角/(°)
O(1W)—H(1WA)...N(6) # 3	85.8(18)	196(2)	281.1(4)	174(3)
O(1W)—H(1WB)...N(3) # 4	85.6(18)	196(2)	281.1(4)	171(4)
O(2W)—H(2WA)...O(1W) # 2	85.7(19)	201(3)	282.3(4)	159(4)
O(2W)—H(2WA)...O(3)	85.7(19)	251(4)	300.3(4)	117(3)
O(2W)—H(2WB)...O(2) # 5	85.8(19)	206(2)	287.2(4)	159(4)
O(2W)—H(2WB)...S(1) # 5	85.8(19)	285(2)	369.1(3)	166(3)

注: * 表示氢键供体; ** 表示氢键受体.对称代码 # 1: $x, -y+1/2, z-1/2$; # 2: $x, -y+1/2, z+1/2$; # 3: $-x+1, y+1/2, -z+1/2$; # 4: $-x+1, y-1/2, -z+1/2$; # 5: $x+1, y, z$.