

**Table S-17.** Atomic coordinates [ $\times 10^4 \text{ \AA}$ ] and equivalent isotropic displacement parameters for **3b**.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized tensor.

	x	y	z	U (eq)
Cu(1)	0	6309(1)	2500	84(1)
Cu(2)	708(1)	8157(1)	3291(1)	97(1)
Cl(1)	0	4840(1)	2500	136(1)
Cl(2)	1462(2)	8854(2)	4198(1)	173(1)
Cl(3)	944(1)	7529(1)	2290(1)	84(1)
N(1)	505(3)	6350(4)	3457(3)	90(1)
N(2)	841(3)	7066(4)	3759(3)	97(2)
N(3)	256(3)	9181(3)	2817(3)	109(2)
N(4)	2797(2)	4966(3)	3350(2)	77(1)
C(1)	1161(6)	6872(6)	4425(4)	147(3)
C(2)	1001(7)	6043(7)	4533(5)	180(5)
C(3)	594(5)	5730(5)	3937(5)	125(3)
C(4)	418(5)	10006(4)	3021(6)	152(4)
C(5)	0	10522(7)	2500	158(6)
C(11)	2735(3)	5876(3)	3601(3)	85(2)
C(12)	3405(4)	6465(3)	3517(3)	102(2)
C(13)	3256(4)	7377(4)	3689(4)	112(2)
C(14)	3923(5)	7978(4)	3658(4)	129(3)
C(21)	3572(3)	4537(3)	3731(3)	88(2)
C(22)	3687(4)	4470(4)	4488(4)	105(2)
C(23)	4431(4)	3928(4)	4822(4)	120(2)
C(24)	4326(5)	3004(5)	4684(4)	155(3)
C(31)	2085(3)	4491(3)	3481(3)	87(2)
C(32)	2039(4)	3547(4)	3330(4)	114(2)
C(33)	1339(5)	3177(4)	3606(5)	155(4)
C(34)	1221(8)	2343(6)	3511(7)	235(6)
C(41)	2799(4)	4944(4)	2604(3)	89(2)
C(42)	2105(4)	5384(4)	2140(3)	106(2)
C(43)	2197(5)	5375(4)	1411(4)	126(2)
C(44)	1581(6)	5841(5)	939(4)	162(3)

**Table S-18.** Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for **3b**.

Cu(1)-N(1)	1.927(5)
Cu(1)-N(1)#1	1.927(5)
Cu(1)-Cl(1)	2.291(2)
Cu(1)-Cl(3)	2.5998(16)
Cu(1)-Cl(3)#1	2.5999(16)
Cu(2)-N(2)	1.934(5)
Cu(2)-N(3)	1.932(5)
Cu(2)-Cl(2)	2.265(2)
Cu(2)-Cl(3)	2.3569(16)
N(1)-N(2)	1.340(6)
N(1)-C(3)	1.352(8)

N(2)-C(1)	1.365(9)
N(3)-C(4)	1.360(8)
N(3)-N(3)#1	1.378(11)
N(4)-C(41)	1.502(7)
N(4)-C(31)	1.506(6)
N(4)-C(11)	1.519(6)
N(4)-C(21)	1.534(7)
C(1)-C(2)	1.351(12)
C(2)-C(3)	1.337(12)
C(4)-C(5)	1.387(9)
C(5)-C(4)#1	1.387(9)
C(11)-C(12)	1.515(7)
C(12)-C(13)	1.500(7)
C(13)-C(14)	1.495(9)
C(21)-C(22)	1.496(8)
C(22)-C(23)	1.556(8)
C(23)-C(24)	1.472(8)
C(31)-C(32)	1.503(7)
C(32)-C(33)	1.549(10)
C(33)-C(34)	1.325(10)
C(41)-C(42)	1.506(8)
C(42)-C(43)	1.511(8)
C(43)-C(44)	1.450(10)
N(1)-Cu(1)-N(1)#1	176.2(3)
N(1)-Cu(1)-Cl(1)	91.91(17)
N(1)#1-Cu(1)-Cl(1)	91.91(17)
N(1)-Cu(1)-Cl(3)	88.90(17)
N(1)#1-Cu(1)-Cl(3)	88.31(15)
Cl(1)-Cu(1)-Cl(3)	137.11(3)
N(1)-Cu(1)-Cl(3)#1	88.31(15)
N(1)#1-Cu(1)-Cl(3)#1	88.90(17)
Cl(1)-Cu(1)-Cl(3)#1	137.11(3)
Cl(3)-Cu(1)-Cl(3)#1	85.77(7)
N(2)-Cu(2)-N(3)	163.4(2)
N(2)-Cu(2)-Cl(2)	92.7(2)
N(3)-Cu(2)-Cl(2)	95.45(16)
N(2)-Cu(2)-Cl(3)	91.47(17)
N(3)-Cu(2)-Cl(3)	92.88(17)
Cl(2)-Cu(2)-Cl(3)	135.27(8)
Cu(2)-Cl(3)-Cu(1)	86.05(5)
N(2)-N(1)-C(3)	107.8(6)
N(2)-N(1)-Cu(1)	122.1(4)
C(3)-N(1)-Cu(1)	130.1(6)
N(1)-N(2)-C(1)	107.3(6)
N(1)-N(2)-Cu(2)	121.5(4)
C(1)-N(2)-Cu(2)	130.6(6)
C(4)-N(3)-N(3)#1	108.9(5)
C(4)-N(3)-Cu(2)	127.0(6)
N(3)#1-N(3)-Cu(2)	124.01(16)
C(41)-N(4)-C(31)	110.5(4)
C(41)-N(4)-C(11)	111.7(4)
C(31)-N(4)-C(11)	106.3(4)
C(41)-N(4)-C(21)	107.0(4)
C(31)-N(4)-C(21)	110.4(4)
C(11)-N(4)-C(21)	111.1(4)
C(2)-C(1)-N(2)	108.6(8)
C(3)-C(2)-C(1)	106.9(8)

C(2)-C(3)-N(1)	109.4(8)
N(3)-C(4)-C(5)	106.6(10)
C(4)#1-C(5)-C(4)	109.1(11)
C(12)-C(11)-N(4)	114.7(4)
C(13)-C(12)-C(11)	112.1(5)
C(14)-C(13)-C(12)	114.4(6)
C(22)-C(21)-N(4)	116.1(5)
C(21)-C(22)-C(23)	112.6(6)
C(24)-C(23)-C(22)	113.4(6)
C(32)-C(31)-N(4)	117.0(5)
C(31)-C(32)-C(33)	107.6(6)
C(34)-C(33)-C(32)	114.9(8)
N(4)-C(41)-C(42)	115.4(5)
C(41)-C(42)-C(43)	110.8(6)
C(44)-C(43)-C(42)	114.3(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:  
 #1 -x, y, -z+1/2

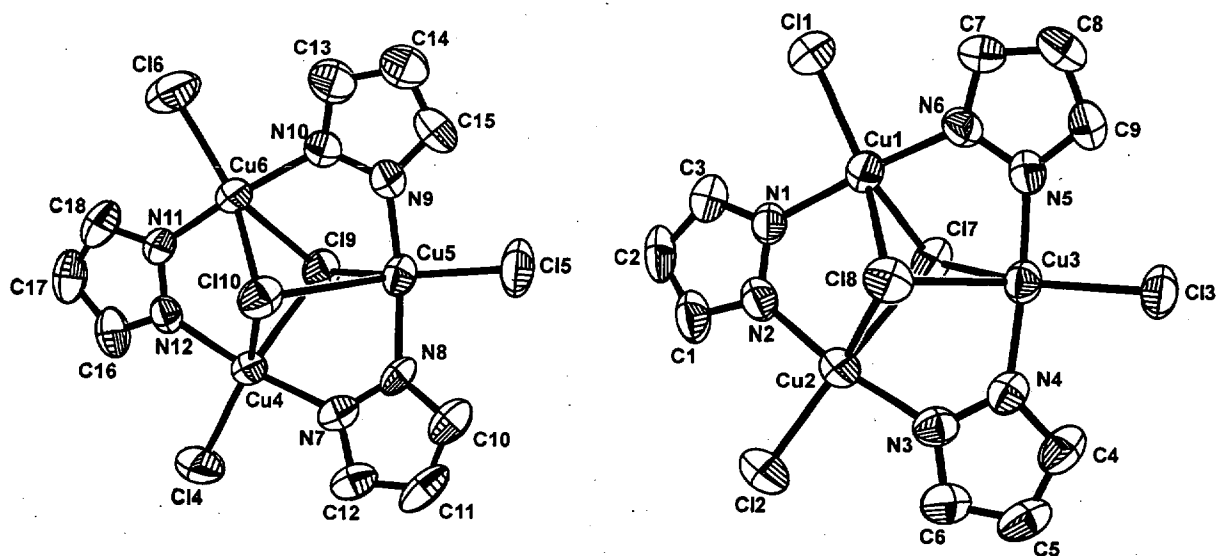
**Table S-19.** Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for **3b**.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	77(1)	71(1)	98(1)	0	10(1)	0
Cu(2)	101(1)	94(1)	100(1)	-27(1)	29(1)	-8(1)
Cl(1)	91(2)	73(1)	219(3)	0	-18(2)	0
Cl(2)	173(2)	198(2)	150(2)	-82(2)	38(2)	-66(2)
Cl(3)	86(1)	87(1)	83(1)	-5(1)	27(1)	-2(1)
N(1)	84(4)	94(4)	93(4)	19(3)	23(3)	14(3)
N(2)	102(4)	113(4)	74(4)	3(3)	18(3)	17(3)
N(3)	74(4)	93(4)	173(7)	-35(3)	57(4)	-19(3)
N(4)	65(3)	70(3)	100(4)	-10(2)	23(3)	-3(2)
C(1)	180(9)	180(9)	69(6)	-10(5)	1(5)	67(8)
C(2)	241(12)	202(11)	102(8)	47(8)	49(8)	125(10)
C(3)	154(8)	125(6)	107(6)	40(5)	55(6)	49(5)
C(4)	94(6)	79(6)	312(13)	-56(6)	106(7)	-14(4)
C(5)	100(9)	61(7)	350(20)	0	122(12)	0
C(11)	86(4)	71(4)	103(5)	-13(3)	31(4)	3(3)
C(12)	103(5)	68(4)	136(6)	-12(3)	33(4)	-3(3)
C(13)	124(6)	83(4)	124(6)	-13(4)	18(5)	-4(4)
C(14)	161(7)	79(4)	139(7)	-5(4)	16(5)	-25(5)
C(21)	70(4)	74(4)	123(6)	-15(3)	26(4)	0(3)
C(22)	78(4)	98(5)	131(6)	-17(4)	7(4)	1(4)
C(23)	93(5)	102(5)	155(7)	-15(4)	9(5)	-4(4)
C(24)	163(8)	144(7)	151(8)	10(6)	17(6)	39(6)
C(31)	66(4)	102(5)	94(4)	9(3)	19(3)	-7(3)
C(32)	99(5)	87(5)	145(6)	-4(4)	7(5)	-28(4)
C(33)	111(6)	77(5)	269(11)	10(6)	29(6)	-33(4)
C(34)	219(13)	175(10)	337(18)	-1(10)	119(13)	-33(9)
C(41)	89(5)	85(4)	99(5)	-13(3)	32(4)	-4(3)
C(42)	120(6)	107(5)	92(5)	-5(4)	25(5)	7(4)
C(43)	144(7)	108(6)	122(7)	0(4)	23(6)	0(5)
C(44)	195(10)	174(8)	112(7)	5(6)	25(7)	27(7)

**Table S-20.** Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA} \times 10^3$ ) for **3b**.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	1442	7248	4751	177
H(2)	1145	5746	4943	216
H(3)	403	5172	3865	150
H(4)	745	10189	3429	183
H(5)	0	11118	2500	190
H(11A)	2234	6119	3356	102
H(11B)	2723	5855	4080	102
H(12A)	3900	6271	3810	122
H(12B)	3464	6436	3049	122
H(13A)	2777	7577	3376	134
H(13B)	3159	7394	4145	134
H(14A)	4401	7789	3968	194
H(14B)	3788	8544	3783	194
H(14C)	4008	7988	3203	194
H(21A)	3591	3964	3548	106
H(21B)	4017	4854	3633	106
H(22A)	3216	4212	4593	126
H(22B)	3744	5041	4683	126
H(23A)	4884	4128	4654	144
H(23B)	4550	4019	5311	144
H(24A)	3974	2770	4946	233
H(24B)	4834	2722	4808	233
H(24C)	4100	2915	4207	233
H(31A)	2074	4568	3956	105
H(31B)	1608	4758	3211	105
H(32A)	2535	3269	3550	136
H(32B)	1948	3450	2842	136
H(33A)	1438	3295	4091	185
H(33B)	855	3475	3388	185
H(34A)	1200	2204	3043	352
H(34B)	726	2186	3622	352
H(34C)	1650	2034	3800	352
H(41A)	2807	4351	2464	107
H(41B)	3288	5209	2543	107
H(42A)	2072	5972	2288	127
H(42B)	1614	5096	2167	127
H(43A)	2711	5620	1398	151
H(43B)	2196	4785	1260	151
H(44A)	1080	5552	896	243
H(44B)	1714	5867	501	243
H(44C)	1542	6411	1106	243

Supplementary material



Labeling scheme for 3a.