



STRUCTURAL
CHEMISTRY

Volume 79 (2023)

Supporting information for article:

**X-ray studies of three 3,6-bis(pyridin-2-yl)-1,2,4,5-tetrazine
cocrystals: an unexpected molecular conformation stabilized by
hydrogen bonds**

**Kinga Wzgarda-Raj, Justyna Dominikowska, Sławomir Wojtulewski and
Agnieszka J. Rybarczyk-Pirek**

Table S1 Values of parameters used for calculation of HOMA index.

bond	α_i	$R_{opt,I} [\text{\AA}]$
C-C	257.7	1.388
C-N	93.52	1.334
N-N	130.33	1.309

Table S2 Details of CSD search.

	Refcode	N31-C31...C61-N61	N31-C3...C6-N61	space group	local symmetry	conformation	metal atom
1	AZURAR	-9.622	-5.662	<i>P-1</i>	1	<i>cis</i>	Pb
	AZURAR	1.473	1.512		1	<i>cis</i>	Pb
2	BOQVIO	180	180	<i>C2/c</i>	-1	<i>trans</i>	Mn
3	EJEXIA01	-180	-180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Cd
4	ELEROC	-180	-180	<i>C2/c</i>	-1	<i>trans</i>	Cu
5	FPCOT	44.682	43.49	<i>P2₁/c</i>	1	<i>cis</i>	Ag
	FPCOT	-21.812	-20.747		1	<i>cis</i>	Ag
	FPCOT	-18.779	-19.273		1	<i>cis</i>	Ag
6	FPCOT01	44.506	43.46	<i>P2₁/c</i>	1	<i>cis</i>	Ag
	FPCOT01	-21.536	-20.544		1	<i>cis</i>	Ag
7	FPCOT01	-18.606	-19.294	<i>P2₁/c</i>	1	<i>cis</i>	Ag
	FEWQAZ	-180	180		-1	<i>trans</i>	Cu
8	FIJMER	180	180	<i>P2₁/c</i>	-1	<i>trans</i>	Ir
9	FIMJOD	-180	180	<i>P2₁/n</i>	-1	<i>trans</i>	Hg
10	FIMJUJ	-180	-180	<i>P2₁/c</i>	-1	<i>trans</i>	Hg
11	FIMKEU	180	180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Zn
	FIMKEU	-180	-180		-1	<i>trans</i>	Zn
12	FUFBAM	180	180	<i>I2/a</i>	-1	<i>trans</i>	Cd
13	GURBAW	-180	-180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	-
14	JUMXAQ	180	180	<i>P2₁/n</i>	-1	<i>trans</i>	-
15	JUMXAQ01	180	180	<i>P2₁/n</i>	-1	<i>trans</i>	-
16	LEBFUW	169.052	175.373	<i>P2₁/n</i>	1	<i>trans</i>	Cu
17	LEBGEH	167.949	175.11	<i>P2₁/n</i>	1	<i>trans</i>	Cu
	LOJGUM	167.458	167.734		1	<i>trans</i>	Zn
	LOJGUM	178.952	-173.878		2	<i>trans</i>	Zn
18	LOJGUM	-172.496	-173.245	<i>C222₁</i>	1	<i>trans</i>	Zn
	MIMYIQ	3.204	5.487		<i>P-1</i>	1	<i>cis</i>
19	OCEWAU	180	180	<i>C2/c</i>	-1	<i>trans</i>	Na
21	QEZVEW	-177.999	175.087	<i>P2₁/n</i>	1	<i>trans</i>	Ni
	QEZVEW	-178.419	179.097		1	<i>trans</i>	Ni
	QEZVEW	-178.581	-178.88		1	<i>trans</i>	Ni
	QEZVEW	-174.201	-174.343		1	<i>trans</i>	Ni

22	QUZDUM	180	180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Hg
23	QUZFAU	-180	-180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Hg
24	QUZFEY	-180	180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Hg
25	TUXGIC	180	180	<i>P2₁/c</i>	-1	<i>trans</i>	Yb
26	UVUPIM	180	180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Cd
	UVUPIM	180	180		-1	<i>trans</i>	Cd
27	UVUVUE	-12.866	-15.294	<i>C2/c</i>	1	<i>cis</i>	Cd
	UVUVUE	30.817	28.943		1	<i>cis</i>	Cd
28	WIWBOV	-180	-180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	-
29	WUCVIA	-0.623	0.769	<i>C2/c</i>	1	<i>cis</i>	Ru
30	XELVAM	-4.693	-3.311	<i>R-3</i>	1	<i>cis</i>	Ag
31	XELVUG	180	180	<i>P-1</i>	-1	<i>trans</i>	Ag
32	KEYDUA	-177.003	-177.733	<i>Pccn</i>	1	<i>trans</i>	Ru
33	XUZGOO	-172.611	-178.609	<i>P2₁/a</i>	1	<i>trans</i>	Ag
	XUZGOO	-176.369	-166.05		1	<i>trans</i>	Ag
	ZASTIY	-160.31	-157.577		1	<i>trans</i>	Ag
34	ZASTIY	-163.426	-161.11	<i>P-1</i>	1	<i>trans</i>	Ag
	ZASTIY	-178.557	-170.022		1	<i>trans</i>	Ag
35	ZASTOE	-124.503	-137.632	<i>C2/c</i>	-1	<i>trans</i>	-