

Inorganic Chemistry

including bioinorganic chemistry

Inorg. Chem., 1997, 36(1), 10-18, DOI:[10.1021/ic960621m](https://doi.org/10.1021/ic960621m)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

C(65)-C(66)-C(53)	122.0(4)
C(1)#1-C(1)-C(2)	110(8)
C(3)-C(2)-C(1)	114(4)
C(4)-C(3)-C(2)	89(5)
C(3)-C(4)-C(5)	89(2)
C(7)-C(6)-C(8)	62(5)
C(6)-C(7)-C(8)	86(6)
C(7)-C(8)-C(6)	32(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Table 19. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 4.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Er(1)	39(1)	36(1)	37(1)	13(1)	15(1)	14(1)
N(1)	85(3)	57(2)	42(2)	22(2)	23(2)	39(2)
O(1)	132(4)	133(4)	52(2)	46(3)	30(2)	66(3)
O(2)	57(2)	54(2)	50(2)	21(2)	16(2)	22(2)
O(3)	64(2)	58(2)	58(2)	28(2)	32(2)	30(2)
N(2)	45(2)	42(2)	47(2)	2(2)	7(2)	14(2)
O(4)	55(2)	77(2)	77(2)	15(2)	7(2)	39(2)
O(5)	52(2)	58(2)	43(2)	19(1)	17(1)	25(2)
O(6)	55(2)	53(2)	46(2)	14(2)	18(1)	13(2)
B(1)	55(3)	54(3)	47(3)	20(2)	27(2)	23(2)
N(11)	52(2)	46(2)	50(2)	21(2)	24(2)	15(2)
N(12)	45(2)	42(2)	46(2)	17(2)	16(2)	14(2)
C(13)	46(2)	39(2)	52(2)	19(2)	11(2)	11(2)
C(14)	69(3)	46(3)	71(3)	30(3)	25(3)	14(2)
C(15)	61(3)	56(3)	67(3)	35(3)	27(2)	15(2)
N(21)	45(2)	35(2)	43(2)	10(2)	10(2)	13(2)
C(22)	51(2)	40(2)	49(2)	13(2)	16(2)	15(2)
C(23)	62(3)	52(3)	50(3)	14(2)	19(2)	26(2)
C(24)	79(3)	41(3)	60(3)	14(2)	14(3)	28(2)
C(25)	64(3)	41(2)	61(3)	23(2)	15(2)	19(2)
C(26)	45(2)	39(2)	44(2)	16(2)	6(2)	15(2)
N(31)	51(2)	56(2)	40(2)	15(2)	20(2)	20(2)
N(32)	47(2)	48(2)	37(2)	12(2)	13(2)	15(2)
C(33)	54(3)	47(2)	38(2)	13(2)	10(2)	22(2)
C(34)	68(3)	65(3)	37(2)	9(2)	14(2)	25(3)
C(35)	68(3)	67(3)	41(2)	17(2)	24(2)	32(3)
N(41)	49(2)	44(2)	46(2)	14(2)	12(2)	16(2)
C(42)	57(3)	54(3)	61(3)	19(2)	18(2)	18(2)
C(43)	59(3)	61(3)	82(4)	20(3)	18(3)	6(3)
C(44)	60(3)	60(3)	75(4)	11(3)	-1(3)	1(3)
C(45)	69(3)	52(3)	51(3)	8(2)	3(2)	14(3)
C(46)	48(2)	41(2)	46(2)	11(2)	5(2)	19(2)
N(51)	43(2)	49(2)	45(2)	18(2)	19(2)	17(2)
N(52)	41(2)	46(2)	44(2)	17(2)	18(2)	17(2)

C(53)	45(2)	44(2)	43(2)	15(2)	11(2)	20(2)
C(54)	56(3)	71(3)	61(3)	29(3)	22(2)	40(3)
C(55)	44(2)	70(3)	52(3)	22(2)	22(2)	25(2)
N(61)	47(2)	43(2)	50(2)	19(2)	16(2)	18(2)
C(62)	54(3)	50(3)	73(3)	28(2)	22(2)	16(2)
C(63)	80(4)	57(3)	80(4)	40(3)	31(3)	17(3)
C(64)	100(5)	69(4)	94(4)	55(3)	40(4)	40(3)
C(65)	71(3)	64(3)	72(3)	36(3)	21(3)	33(3)
C(66)	55(3)	42(2)	41(2)	14(2)	14(2)	21(2)
C(1)	223(31)	305(66)	248(53)	176(54)	-5(48)	-48(39)
C(2)	216(33)	254(40)	179(29)	101(30)	-5(25)	6(29)
C(3)	387(58)	267(46)	179(32)	-44(30)	-58(35)	177(44)
C(4)	528(41)	165(15)	198(18)	28(13)	-93(22)	149(20)
C(5)	403(45)	903(89)	547(56)	596(66)	262(43)	266(52)
C(6)	581(66)	366(46)	272(35)	60(32)	-34(38)	-120(45)
C(7)	560(62)	229(30)	359(42)	-65(26)	94(41)	63(37)
C(8)	340(26)	180(16)	173(14)	50(12)	45(16)	87(17)
C(9)	401(34)	206(18)	264(23)	98(17)	-63(23)	103(22)

Table 20. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 4.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	-668 (46)	3174 (38)	3528 (35)	44 (12)
H(14)	-167 (5)	-541 (4)	1628 (4)	73
H(15)	-989 (5)	903 (4)	2878 (4)	70
H(22)	4032 (5)	1555 (4)	-289 (3)	58
H(23)	3979 (5)	-301 (4)	-1174 (4)	66
H(24)	2498 (6)	-1724 (4)	-897 (4)	72
H(25)	1129 (5)	-1223 (4)	265 (4)	65
H(34)	3395 (5)	6129 (5)	5765 (4)	72
H(35)	1101 (5)	4774 (4)	5327 (3)	69
H(42)	5999 (5)	5387 (4)	2055 (4)	70
H(43)	7762 (6)	6890 (5)	3223 (5)	87
H(44)	7616 (6)	7629 (5)	4948 (5)	90
H(45)	5692 (5)	6859 (4)	5427 (4)	76
H(54)	-1143 (5)	5512 (4)	1837 (4)	69
H(55)	-1861 (5)	4270 (4)	2717 (4)	65
H(62)	4412 (5)	5581 (4)	862 (4)	69
H(63)	4080 (6)	6848 (5)	235 (5)	82
H(64)	2103 (7)	7286 (5)	295 (5)	92
H(65)	451 (6)	6410 (5)	950 (4)	76

Table 21. Crystal data and structure refinement for [Sm(Tp^{Py})₂][BPh₄]•Et₂O (5)

Empirical formula	C ₇₆ H ₆₈ B ₃ N ₁₈ O Sm	
Formula weight	1432.26	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 12.254(2) Å	α = 90°
	<i>b</i> = 24.847(4) Å	β = 97.90(1)°
	<i>c</i> = 22.718(5) Å	γ = 90°
Volume	6851(2) Å ³	
<i>Z</i>	4	
Density (calculated)	1.389 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.918 mm ⁻¹	
<i>F</i> (000)	2940	
Crystal size	0.4 × 0.5 × 0.5 mm ³	
Theta range for data collection	2.60 to 24.97°	
Index ranges	0 ≤ <i>h</i> ≤ 11, 0 ≤ <i>k</i> ≤ 23, -26 ≤ <i>l</i> ≤ 21	
Reflections collected	6957	
Independent reflections	6331 [<i>R</i> (int) = 0.0158]	
Refinement method	Full-matrix least-squares on <i>F</i> ²	
Data / restraints / parameters	6329 / 7 / 895	
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	0.961	
Final <i>R</i> indices [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> ₁ = 0.0371, <i>wR</i> ₂ = 0.0847	
<i>R</i> indices (all data)	<i>R</i> ₁ = 0.0684, <i>wR</i> ₂ = 0.1071	
Largest diff. peak and hole	0.355 and -0.628 e.Å ⁻³	
Weighting scheme	<i>w</i> = 1/[σ ² (<i>F</i> _o ²) + (0.0505 <i>P</i>) ² + 17.60 <i>P</i>]	

Table 22. Atomic coordinates ($x \times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for Σ . $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Sm(1)	5000	5000	10000	42(1)
Sm(2)	5000	5000	5000	44(1)
B(1)	3845(7)	5310(4)	8370(4)	54(2)
B(2)	4584(7)	5817(4)	3544(4)	51(2)
B(3)	1119(7)	2608(4)	6747(4)	57(3)
N(111)	5573(4)	3864(2)	9859(3)	49(2)
C(112)	5981(6)	3535(3)	10308(3)	53(2)
C(113)	6148(6)	2995(4)	10239(4)	67(2)
C(114)	5887(7)	2766(4)	9693(5)	83(3)
C(115)	5467(7)	3092(4)	9224(4)	76(3)
C(116)	5319(6)	3633(3)	9322(3)	51(2)
N(121)	4666(4)	4505(2)	8952(2)	43(2)
C(122)	4856(6)	3993(3)	8842(3)	50(2)
C(123)	4548(7)	3877(4)	8243(4)	71(2)
C(124)	4148(7)	4345(4)	7997(3)	68(2)
N(125)	4206(5)	4726(2)	8422(3)	49(2)
N(131)	6800(4)	5785(2)	10150(3)	46(2)
C(132)	7477(6)	5879(3)	10652(4)	54(2)
C(133)	8266(6)	6270(3)	10724(4)	72(3)
C(134)	8405(7)	6582(4)	10242(5)	90(3)
C(135)	7726(7)	6497(4)	9718(4)	77(3)
C(136)	6929(6)	6103(3)	9687(3)	49(2)
N(141)	5385(5)	5645(2)	9121(2)	44(2)
C(142)	6181(6)	6013(3)	9139(3)	46(2)
C(143)	6128(7)	6271(3)	8590(3)	58(2)
C(144)	5271(7)	6046(3)	8249(3)	55(2)
N(145)	4807(5)	5674(2)	8566(2)	48(2)
N(151)	2985(5)	5240(2)	10546(3)	50(2)
C(152)	2891(6)	5179(3)	11123(4)	61(2)
C(153)	1943(7)	5257(4)	11360(4)	76(3)
C(154)	1004(8)	5416(4)	10984(5)	98(3)
C(155)	1078(7)	5484(4)	10393(4)	80(3)
C(156)	2077(6)	5392(3)	10187(4)	52(2)
N(161)	3131(5)	5324(2)	9356(3)	45(2)
C(162)	2170(6)	5443(3)	9559(3)	52(2)
C(163)	1378(7)	5597(3)	9088(4)	72(2)
C(164)	1887(7)	5559(3)	8599(4)	69(2)
N(165)	2935(5)	5404(2)	8761(3)	52(2)
N(211)	3629(5)	5637(2)	5687(3)	48(2)
C(212)	3465(6)	5529(3)	6244(3)	55(2)
C(213)	2802(7)	5833(4)	6550(4)	78(3)
C(214)	2266(8)	6266(4)	6278(4)	94(3)
C(215)	2434(7)	6390(3)	5715(4)	76(3)
C(216)	3116(6)	6059(3)	5420(3)	47(2)
N(221)	3960(5)	5864(2)	4543(2)	45(2)
C(222)	3282(5)	6176(3)	4814(3)	42(2)
C(223)	2814(6)	6578(3)	4434(3)	53(2)
C(224)	3256(6)	6500(3)	3928(3)	53(2)
N(225)	3936(5)	6078(2)	3991(2)	45(2)
N(231)	7433(5)	5108(2)	5291(3)	49(2)
C(232)	8060(6)	4918(3)	5776(3)	56(2)
C(233)	9131(7)	5042(3)	5941(4)	66(2)
C(234)	9646(7)	5387(4)	5586(4)	72(3)
C(235)	9028(7)	5577(3)	5068(4)	63(2)

C(236)	7944(6)	5425(3)	4934(3)	45(2)
N(241)	6180(5)	5554(2)	4315(2)	44(2)
C(242)	7279(6)	5618(3)	4397(3)	46(2)
C(243)	7609(7)	5892(3)	3915(3)	56(2)
C(244)	6663(7)	6000(3)	3548(3)	55(2)
N(245)	5804(5)	5802(2)	3788(2)	47(2)
N(251)	4083(4)	3957(2)	4518(3)	45(2)
C(252)	3988(6)	3513(3)	4839(3)	57(2)
C(253)	3505(7)	3047(3)	4615(4)	67(2)
C(254)	3102(8)	3029(4)	4017(4)	86(3)
C(255)	3207(7)	3474(4)	3681(4)	74(3)
C(256)	3690(6)	3934(3)	3938(3)	48(2)
N(261)	4207(4)	4867(2)	3851(2)	42(2)
C(262)	3787(6)	4414(3)	3597(3)	44(2)
C(263)	3472(6)	4500(3)	2989(3)	59(2)
C(264)	3745(6)	5021(3)	2892(3)	59(2)
N(265)	4166(4)	5244(2)	3411(3)	44(2)
C(301)	828(6)	2128(4)	7193(4)	70(2)
C(302)	968(6)	1585(4)	7058(4)	79(3)
C(303)	765(8)	1160(5)	7427(7)	118(4)
C(304)	434(11)	1277(7)	7960(8)	146(6)
C(305)	337(9)	1801(6)	8145(6)	125(5)
C(306)	517(8)	2223(4)	7749(5)	98(3)
C(307)	764(6)	3196(3)	6994(3)	54(2)
C(308)	1446(7)	3516(4)	7395(3)	63(2)
C(309)	1132(8)	4009(4)	7599(3)	73(3)
C(310)	104(8)	4210(4)	7415(4)	75(3)
C(311)	-604(7)	3913(4)	7018(4)	74(2)
C(312)	-266(7)	3423(3)	6823(4)	67(2)
C(313)	448(6)	2526(3)	6071(3)	55(2)
C(314)	578(7)	2894(3)	5620(4)	70(2)
C(315)	2(8)	2858(4)	5051(4)	78(3)
C(316)	-723(8)	2452(5)	4911(5)	89(3)
C(317)	-892(7)	2089(4)	5336(6)	86(3)
C(318)	-316(7)	2124(3)	5903(4)	70(2)
C(319)	2452(6)	2587(3)	6764(3)	52(2)
C(320)	3154(7)	2496(3)	7302(4)	64(2)
C(321)	4274(8)	2489(3)	7349(4)	75(3)
C(322)	4791(7)	2578(3)	6858(5)	82(3)
C(323)	4166(8)	2662(3)	6321(5)	78(3)
C(324)	3029(7)	2663(3)	6276(4)	60(2)
C(1)	1455(28)	6719(12)	1549(13)	525(35)
C(2)	2467(17)	6803(10)	1920(12)	310(20)
O(3)	2473(19)	7401(9)	1972(12)	464(22)
C(4)	2523(16)	7510(12)	2517(8)	323(24)
C(5)	2348(15)	7968(9)	2933(11)	304(15)

Table 23. Selected bond lengths [Å] and angles [deg] for 5.

Sm(1)-N(141)	2.652(5)
Sm(1)-N(141) #1	2.652(5)
Sm(1)-N(121) #1	2.661(5)
Sm(1)-N(121)	2.661(5)
Sm(1)-N(161)	2.667(6)
Sm(1)-N(161) #1	2.667(6)
Sm(1)-N(131)	2.929(6)
Sm(1)-N(131) #1	2.929(6)
Sm(1)-N(111) #1	2.935(6)
Sm(1)-N(111)	2.935(6)
Sm(1)-N(151)	2.972(6)
Sm(1)-N(151) #1	2.972(6)
Sm(2)-N(221)	2.636(5)
Sm(2)-N(221) #2	2.636(5)
Sm(2)-N(241) #2	2.651(6)
Sm(2)-N(241)	2.651(6)
Sm(2)-N(261) #2	2.678(5)
Sm(2)-N(261)	2.678(5)
Sm(2)-N(211)	2.913(6)
Sm(2)-N(211) #2	2.914(6)
Sm(2)-N(251) #2	2.973(6)
Sm(2)-N(251)	2.973(6)
Sm(2)-N(231) #2	2.976(6)
Sm(2)-N(231)	2.976(6)
B(1)-N(145)	1.503(10)
B(1)-N(125)	1.516(11)
B(1)-N(165)	1.535(10)
B(2)-N(225)	1.517(10)
B(2)-N(245)	1.522(10)
B(2)-N(265)	1.529(10)
B(3)-C(319)	1.630(11)
B(3)-C(301)	1.635(12)
B(3)-C(307)	1.644(12)
B(3)-C(313)	1.653(12)
N(111)-C(116)	1.346(8)
N(111)-C(112)	1.347(8)
C(112)-C(113)	1.371(10)
C(113)-C(114)	1.363(11)
C(114)-C(115)	1.381(11)
C(115)-C(116)	1.379(10)
C(116)-C(122)	1.465(10)
N(121)-C(122)	1.323(8)
N(121)-N(125)	1.372(7)
C(122)-C(123)	1.390(10)
C(123)-C(124)	1.354(10)
C(124)-N(125)	1.347(9)
N(131)-C(132)	1.335(8)
N(131)-C(136)	1.343(8)
C(132)-C(133)	1.363(10)
C(133)-C(134)	1.372(11)
C(134)-C(135)	1.372(11)
C(135)-C(136)	1.376(10)
C(136)-C(142)	1.459(10)
N(141)-C(142)	1.333(8)
N(141)-N(145)	1.362(7)
C(142)-C(143)	1.396(9)
C(143)-C(144)	1.340(10)
C(144)-N(145)	1.345(8)
N(151)-C(152)	1.339(9)
N(151)-C(156)	1.340(9)

377

C(152)-C(153)	1.361(13)
C(153)-C(154)	1.394(11)
C(154)-C(155)	1.369(11)
C(155)-C(156)	1.388(10)
C(156)-C(162)	1.452(10)
N(161)-N(165)	1.355(7)
N(161)-C(162)	1.355(9)
C(162)-C(163)	1.395(10)
C(163)-C(164)	1.351(10)
C(164)-N(165)	1.343(9)
N(211)-C(216)	1.327(8)
N(211)-C(212)	1.335(8)
C(212)-C(213)	1.367(10)
C(213)-C(214)	1.363(11)
C(214)-C(215)	1.358(11)
C(215)-C(216)	1.407(10)
C(216)-C(222)	1.448(9)
N(221)-C(222)	1.344(8)
N(221)-N(225)	1.359(7)
C(222)-C(223)	1.391(9)
C(223)-C(224)	1.350(9)
C(224)-N(225)	1.336(8)
N(231)-C(232)	1.339(9)
N(231)-C(236)	1.345(8)
C(232)-C(233)	1.350(10)
C(233)-C(234)	1.386(11)
C(234)-C(235)	1.391(10)
C(235)-C(236)	1.375(10)
C(236)-C(242)	1.452(9)
N(241)-C(242)	1.344(8)
N(241)-N(245)	1.368(7)
C(242)-C(243)	1.395(9)
C(243)-C(244)	1.359(10)
C(244)-N(245)	1.343(9)
N(251)-C(252)	1.339(9)
N(251)-C(256)	1.341(8)
C(252)-C(253)	1.367(10)
C(253)-C(254)	1.380(11)
C(254)-C(255)	1.361(11)
C(255)-C(256)	1.378(10)
C(256)-C(262)	1.435(9)
N(261)-C(262)	1.336(8)
N(261)-N(265)	1.365(7)
C(262)-C(263)	1.399(9)
C(263)-C(264)	1.363(10)
C(264)-N(265)	1.340(8)
C(301)-C(306)	1.388(12)
C(301)-C(302)	1.401(11)
C(302)-C(303)	1.391(13)
C(303)-C(304)	1.36(2)
C(304)-C(305)	1.38(2)
C(305)-C(306)	1.421(14)
C(307)-C(312)	1.389(10)
C(307)-C(308)	1.397(10)
C(308)-C(309)	1.382(10)
C(309)-C(310)	1.367(11)
C(310)-C(311)	1.378(11)
C(311)-C(312)	1.378(11)
C(313)-C(318)	1.386(10)
C(313)-C(314)	1.397(10)
C(314)-C(315)	1.388(10)
C(315)-C(316)	1.354(13)
C(316)-C(317)	1.357(13)
C(317)-C(318)	1.384(12)

C(319)-C(324)	1.408(10)
C(319)-C(320)	1.412(10)
C(320)-C(321)	1.362(11)
C(321)-C(322)	1.373(12)
C(322)-C(323)	1.364(12)
C(323)-C(324)	1.382(11)
C(1)-C(2)	1.42(3)
C(2)-O(3)	1.49(2)
O(3)-C(4)	1.26(2)
C(4)-C(5)	1.51(2)

N(141)-Sm(1)-N(141) #1	179.999(2)
N(141)-Sm(1)-N(121) #1	111.9(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(121) #1	68.1(2)
N(141)-Sm(1)-N(121)	68.1(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(121)	111.9(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(121)	179.998(1)
N(141)-Sm(1)-N(161)	68.5(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(161)	111.5(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(161)	111.5(2)
N(121)-Sm(1)-N(161)	68.5(2)
N(141)-Sm(1)-N(161) #1	111.6(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(161) #1	68.4(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(161) #1	68.5(2)
N(121)-Sm(1)-N(161) #1	111.5(2)
N(161)-Sm(1)-N(161) #1	179.997(1)
N(141)-Sm(1)-N(131)	58.4(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(131)	121.6(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(131)	64.4(2)
N(121)-Sm(1)-N(131)	115.6(2)
N(161)-Sm(1)-N(131)	116.0(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(131)	64.0(2)
N(141)-Sm(1)-N(131) #1	121.6(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(131) #1	58.4(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(131) #1	115.6(2)
N(121)-Sm(1)-N(131) #1	64.4(2)
N(161)-Sm(1)-N(131) #1	64.0(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(131) #1	116.0(2)
N(131)-Sm(1)-N(131) #1	179.999(1)
N(141)-Sm(1)-N(111) #1	64.6(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(111) #1	115.4(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(111) #1	57.9(2)
N(121)-Sm(1)-N(111) #1	122.1(2)
N(161)-Sm(1)-N(111) #1	64.5(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(111) #1	115.5(2)
N(131)-Sm(1)-N(111) #1	62.3(2)
N(131) #1-Sm(1)-N(111) #1	117.7(2)
N(141)-Sm(1)-N(111)	115.4(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(111)	64.6(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(111)	122.1(2)
N(121)-Sm(1)-N(111)	57.9(2)
N(161)-Sm(1)-N(111)	115.5(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(111)	64.5(2)
N(131)-Sm(1)-N(111)	117.7(2)
N(131) #1-Sm(1)-N(111)	62.3(2)
N(111) #1-Sm(1)-N(111)	179.999(2)
N(141)-Sm(1)-N(151)	115.9(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(151)	64.1(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(151)	64.4(2)
N(121)-Sm(1)-N(151)	115.6(2)
N(161)-Sm(1)-N(151)	57.9(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(151)	122.1(2)
N(131)-Sm(1)-N(151)	118.2(2)
N(131) #1-Sm(1)-N(151)	61.8(2)

N(111) #1-Sm(1)-N(151)	62.4(2)
N(111)-Sm(1)-N(151)	117.6(2)
N(141)-Sm(1)-N(151) #1	64.1(2)
N(141) #1-Sm(1)-N(151) #1	115.9(2)
N(121) #1-Sm(1)-N(151) #1	115.6(2)
N(121)-Sm(1)-N(151) #1	64.4(2)
N(161)-Sm(1)-N(151) #1	122.1(2)
N(161) #1-Sm(1)-N(151) #1	57.9(2)
N(131)-Sm(1)-N(151) #1	61.8(2)
N(131) #1-Sm(1)-N(151) #1	118.2(2)
N(111) #1-Sm(1)-N(151) #1	117.6(2)
N(111)-Sm(1)-N(151) #1	62.4(2)
N(151)-Sm(1)-N(151) #1	179.997(1)
N(221)-Sm(2)-N(221) #2	179.997(2)
N(221)-Sm(2)-N(241) #2	112.4(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(241) #2	67.6(2)
N(221)-Sm(2)-N(241)	67.6(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(241)	112.4(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(241)	180.0
N(221)-Sm(2)-N(261) #2	112.0(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(261) #2	68.0(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(261) #2	69.2(2)
N(241)-Sm(2)-N(261) #2	110.8(2)
N(221)-Sm(2)-N(261)	68.0(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(261)	112.0(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(261)	110.8(2)
N(241)-Sm(2)-N(261)	69.2(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(261)	180.0
N(221)-Sm(2)-N(211)	59.0(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(211)	121.0(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(211)	64.3(2)
N(241)-Sm(2)-N(211)	115.7(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(211)	64.5(2)
N(261)-Sm(2)-N(211)	115.5(2)
N(221)-Sm(2)-N(211) #2	121.0(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(211) #2	59.0(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(211) #2	115.7(2)
N(241)-Sm(2)-N(211) #2	64.3(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(211) #2	115.5(2)
N(261)-Sm(2)-N(211) #2	64.5(2)
N(211)-Sm(2)-N(211) #2	179.999(1)
N(221)-Sm(2)-N(251) #2	64.7(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(251) #2	115.3(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(251) #2	116.4(2)
N(241)-Sm(2)-N(251) #2	63.6(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(251) #2	57.6(2)
N(261)-Sm(2)-N(251) #2	122.4(2)
N(211)-Sm(2)-N(251) #2	63.0(2)
N(211) #2-Sm(2)-N(251) #2	117.0(2)
N(221)-Sm(2)-N(251)	115.3(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(251)	64.7(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(251)	63.6(2)
N(241)-Sm(2)-N(251)	116.4(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(251)	122.4(2)
N(261)-Sm(2)-N(251)	57.6(2)
N(211)-Sm(2)-N(251)	117.0(2)
N(211) #2-Sm(2)-N(251)	63.0(2)
N(251) #2-Sm(2)-N(251)	179.999(1)
N(221)-Sm(2)-N(231) #2	64.5(2)
N(221) #2-Sm(2)-N(231) #2	115.5(2)
N(241) #2-Sm(2)-N(231) #2	58.2(2)
N(241)-Sm(2)-N(231) #2	121.8(2)
N(261) #2-Sm(2)-N(231) #2	116.5(2)
N(261)-Sm(2)-N(231) #2	63.5(2)

N(211)-Sm(2)-N(231)#2 62.2(2)
 N(211)#2-Sm(2)-N(231)#2 117.8(2)
 N(251)#2-Sm(2)-N(231)#2 118.5(2)
 N(251)-Sm(2)-N(231)#2 61.5(2)
 N(221)-Sm(2)-N(231) 115.5(2)
 N(221)#2-Sm(2)-N(231) 64.5(2)
 N(241)#2-Sm(2)-N(231) 121.8(2)
 N(241)-Sm(2)-N(231) 58.2(2)
 N(261)#2-Sm(2)-N(231) 63.5(2)
 N(261)-Sm(2)-N(231) 116.5(2)
 N(211)-Sm(2)-N(231) 117.8(2)
 N(211)#2-Sm(2)-N(231) 62.2(2)
 N(251)#2-Sm(2)-N(231) 61.5(2)
 N(251)-Sm(2)-N(231) 118.5(2)
 N(231)#2-Sm(2)-N(231) 179.998(1)
 N(145)-B(1)-N(125) 110.1(6)
 N(145)-B(1)-N(165) 109.8(6)
 N(125)-B(1)-N(165) 109.2(7)
 N(225)-B(2)-N(245) 110.1(6)
 N(225)-B(2)-N(265) 109.8(6)
 N(245)-B(2)-N(265) 109.6(6)
 C(319)-B(3)-C(301) 105.4(6)
 C(319)-B(3)-C(307) 109.3(6)
 C(301)-B(3)-C(307) 110.2(7)
 C(319)-B(3)-C(313) 112.7(7)
 C(301)-B(3)-C(313) 111.4(7)
 C(307)-B(3)-C(313) 107.8(6)
 C(116)-N(111)-C(112) 116.2(6)
 C(116)-N(111)-Sm(1) 118.7(5)
 C(112)-N(111)-Sm(1) 124.8(5)
 N(111)-C(112)-C(113) 123.7(8)
 C(114)-C(113)-C(112) 119.5(8)
 C(113)-C(114)-C(115) 118.3(8)
 C(116)-C(115)-C(114) 119.3(8)
 N(111)-C(116)-C(115) 123.0(8)
 N(111)-C(116)-C(122) 115.6(7)
 C(115)-C(116)-C(122) 121.4(8)
 C(122)-N(121)-N(125) 106.3(6)
 C(122)-N(121)-Sm(1) 127.2(5)
 N(125)-N(121)-Sm(1) 126.4(4)
 N(121)-C(122)-C(123) 110.7(7)
 N(121)-C(122)-C(116) 120.4(7)
 C(123)-C(122)-C(116) 128.8(8)
 C(124)-C(123)-C(122) 105.0(7)
 N(125)-C(124)-C(123) 109.1(7)
 C(124)-N(125)-N(121) 108.8(6)
 C(124)-N(125)-B(1) 129.1(7)
 N(121)-N(125)-B(1) 122.1(6)
 C(132)-N(131)-C(136) 116.0(6)
 C(132)-N(131)-Sm(1) 125.9(5)
 C(136)-N(131)-Sm(1) 118.0(4)
 N(131)-C(132)-C(133) 125.1(7)
 C(132)-C(133)-C(134) 118.1(8)
 C(133)-C(134)-C(135) 118.5(8)
 C(134)-C(135)-C(136) 119.7(8)
 N(131)-C(136)-C(135) 122.5(7)
 N(131)-C(136)-C(142) 116.7(7)
 C(135)-C(136)-C(142) 120.7(7)
 C(142)-N(141)-N(145) 106.1(5)
 C(142)-N(141)-Sm(1) 126.6(5)
 N(145)-N(141)-Sm(1) 127.3(4)
 N(141)-C(142)-C(143) 110.1(6)
 N(141)-C(142)-C(136) 120.2(7)
 C(143)-C(142)-C(136) 129.6(7)

C(144)-C(143)-C(142)	105.2(7)
C(143)-C(144)-N(145)	109.4(7)
C(144)-N(145)-N(141)	109.1(6)
C(144)-N(145)-B(1)	128.9(7)
N(141)-N(145)-B(1)	122.0(6)
C(152)-N(151)-C(156)	116.8(6)
C(152)-N(151)-Sm(1)	125.0(5)
C(156)-N(151)-Sm(1)	118.1(5)
N(151)-C(152)-C(153)	124.4(8)
C(152)-C(153)-C(154)	118.4(8)
C(155)-C(154)-C(153)	118.4(8)
C(154)-C(155)-C(156)	119.5(8)
N(151)-C(156)-C(155)	122.5(7)
N(151)-C(156)-C(162)	116.9(7)
C(155)-C(156)-C(162)	120.6(8)
N(165)-N(161)-C(162)	105.3(5)
N(165)-N(161)-Sm(1)	127.8(4)
C(162)-N(161)-Sm(1)	126.9(5)
N(161)-C(162)-C(163)	110.2(7)
N(161)-C(162)-C(156)	120.3(6)
C(163)-C(162)-C(156)	129.6(8)
C(164)-C(163)-C(162)	105.1(7)
N(165)-C(164)-C(163)	109.1(7)
C(164)-N(165)-N(161)	110.3(6)
C(164)-N(165)-B(1)	128.9(6)
N(161)-N(165)-B(1)	120.7(6)
C(216)-N(211)-C(212)	118.0(6)
C(216)-N(211)-Sm(2)	117.1(5)
C(212)-N(211)-Sm(2)	124.9(5)
N(211)-C(212)-C(213)	123.2(7)
C(214)-C(213)-C(212)	119.3(8)
C(215)-C(214)-C(213)	118.6(8)
C(214)-C(215)-C(216)	119.6(8)
N(211)-C(216)-C(215)	121.2(7)
N(211)-C(216)-C(222)	118.3(6)
C(215)-C(216)-C(222)	120.5(7)
C(222)-N(221)-N(225)	105.1(5)
C(222)-N(221)-Sm(2)	125.8(4)
N(225)-N(221)-Sm(2)	129.0(4)
N(221)-C(222)-C(223)	111.0(6)
N(221)-C(222)-C(216)	119.7(6)
C(223)-C(222)-C(216)	129.2(7)
C(224)-C(223)-C(222)	104.2(6)
N(225)-C(224)-C(223)	109.9(6)
C(224)-N(225)-N(221)	109.8(6)
C(224)-N(225)-B(2)	129.9(6)
N(221)-N(225)-B(2)	120.3(6)
C(232)-N(231)-C(236)	116.1(6)
C(232)-N(231)-Sm(2)	126.5(5)
C(236)-N(231)-Sm(2)	117.0(4)
N(231)-C(232)-C(233)	125.1(8)
C(232)-C(233)-C(234)	118.8(8)
C(233)-C(234)-C(235)	117.7(8)
C(236)-C(235)-C(234)	119.4(8)
N(231)-C(236)-C(235)	122.9(7)
N(231)-C(236)-C(242)	116.5(7)
C(235)-C(236)-C(242)	120.6(7)
C(242)-N(241)-N(245)	106.2(5)
C(242)-N(241)-Sm(2)	126.7(5)
N(245)-N(241)-Sm(2)	127.0(5)
N(241)-C(242)-C(243)	110.0(6)
N(241)-C(242)-C(236)	120.9(7)
C(243)-C(242)-C(236)	129.1(8)
C(244)-C(243)-C(242)	105.2(7)

N(245)-C(244)-C(243)	109.2(7)
C(244)-N(245)-N(241)	109.3(6)
C(244)-N(245)-B(2)	129.0(6)
N(241)-N(245)-B(2)	121.7(6)
C(252)-N(251)-C(256)	117.1(6)
C(252)-N(251)-Sm(2)	125.1(5)
C(256)-N(251)-Sm(2)	117.8(5)
N(251)-C(252)-C(253)	124.1(7)
C(252)-C(253)-C(254)	118.2(8)
C(255)-C(254)-C(253)	118.5(8)
C(254)-C(255)-C(256)	120.3(8)
N(251)-C(256)-C(255)	121.8(7)
N(251)-C(256)-C(262)	116.7(7)
C(255)-C(256)-C(262)	121.5(7)
C(262)-N(261)-N(265)	106.7(5)
C(262)-N(261)-Sm(2)	126.3(4)
N(265)-N(261)-Sm(2)	126.9(4)
N(261)-C(262)-C(263)	109.6(6)
N(261)-C(262)-C(256)	121.4(6)
C(263)-C(262)-C(256)	128.9(7)
C(264)-C(263)-C(262)	105.4(6)
N(265)-C(264)-C(263)	108.8(6)
C(264)-N(265)-N(261)	109.4(6)
C(264)-N(265)-B(2)	129.4(7)
N(261)-N(265)-B(2)	121.1(6)
C(306)-C(301)-C(302)	114.9(9)
C(306)-C(301)-B(3)	123.3(9)
C(302)-C(301)-B(3)	121.5(9)
C(303)-C(302)-C(301)	124.1(10)
C(304)-C(303)-C(302)	118.4(13)
C(303)-C(304)-C(305)	121.4(14)
C(304)-C(305)-C(306)	118.5(13)
C(301)-C(306)-C(305)	122.4(11)
C(312)-C(307)-C(308)	112.9(7)
C(312)-C(307)-B(3)	122.6(7)
C(308)-C(307)-B(3)	124.5(7)
C(309)-C(308)-C(307)	123.7(8)
C(310)-C(309)-C(308)	120.6(8)
C(309)-C(310)-C(311)	118.4(8)
C(310)-C(311)-C(312)	119.6(8)
C(311)-C(312)-C(307)	124.8(8)
C(318)-C(313)-C(314)	114.2(8)
C(318)-C(313)-B(3)	125.0(7)
C(314)-C(313)-B(3)	120.6(7)
C(315)-C(314)-C(313)	123.1(8)
C(316)-C(315)-C(314)	119.9(9)
C(315)-C(316)-C(317)	119.3(9)
C(316)-C(317)-C(318)	120.8(9)
C(317)-C(318)-C(313)	122.7(9)
C(324)-C(319)-C(320)	113.0(7)
C(324)-C(319)-B(3)	126.0(7)
C(320)-C(319)-B(3)	121.0(7)
C(321)-C(320)-C(319)	123.9(8)
C(320)-C(321)-C(322)	120.4(8)
C(323)-C(322)-C(321)	119.1(8)
C(322)-C(323)-C(324)	120.1(9)
C(323)-C(324)-C(319)	123.5(8)
C(1)-C(2)-O(3)	101(2)
C(4)-O(3)-C(2)	107(3)
O(3)-C(4)-C(5)	142(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

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

Table 24. Anisotropic displacement parameters ($A^2 \times 10^3$) for 5.
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Sm(1)	46(1)	45(1)	34(1)	3(1)	1(1)	-4(1)
Sm(2)	57(1)	42(1)	32(1)	1(1)	3(1)	9(1)
B(1)	63(7)	64(7)	32(5)	8(5)	-5(5)	5(6)
B(2)	64(7)	54(6)	33(5)	10(5)	-1(5)	2(5)
B(3)	55(6)	64(7)	53(6)	7(5)	8(5)	-6(5)
N(111)	37(3)	55(4)	55(4)	2(4)	5(3)	-1(3)
C(112)	53(5)	48(6)	57(5)	2(5)	5(4)	3(4)
C(113)	60(6)	57(7)	82(7)	7(5)	10(5)	1(5)
C(114)	78(7)	46(5)	124(9)	7(7)	9(6)	9(5)
C(115)	95(7)	62(6)	68(6)	-17(5)	1(5)	2(5)
C(116)	51(5)	50(6)	53(6)	-14(5)	12(4)	-4(4)
N(121)	53(4)	45(4)	32(4)	-2(3)	8(3)	-9(3)
C(122)	52(5)	52(6)	44(5)	-14(4)	4(4)	-8(4)
C(123)	98(7)	56(6)	57(6)	-20(5)	1(5)	-7(5)
C(124)	89(6)	72(6)	39(5)	-16(5)	-6(4)	-8(5)
N(125)	52(4)	56(4)	37(4)	-3(4)	-1(3)	-9(3)
N(131)	44(4)	48(4)	44(4)	2(3)	-2(3)	-1(3)
C(132)	47(5)	59(5)	58(6)	10(4)	9(4)	-9(4)
C(133)	53(5)	82(6)	77(7)	5(6)	-9(5)	-26(5)
C(134)	74(7)	95(7)	96(8)	10(7)	-5(6)	-48(6)
C(135)	66(6)	85(7)	78(7)	21(5)	1(5)	-23(6)
C(136)	43(5)	48(5)	56(6)	4(4)	8(4)	-3(4)
N(141)	49(4)	44(4)	38(4)	4(3)	7(3)	-1(3)
C(142)	43(5)	42(5)	53(5)	10(4)	7(4)	1(4)
C(143)	73(6)	52(5)	51(5)	8(5)	16(5)	-9(5)
C(144)	75(6)	52(5)	39(5)	12(4)	12(5)	2(5)
N(145)	53(4)	58(4)	33(4)	4(3)	5(3)	-6(3)
N(151)	52(4)	56(4)	42(4)	1(3)	11(3)	0(3)
C(152)	51(5)	76(6)	57(6)	-4(5)	10(4)	-1(4)
C(153)	64(6)	106(7)	61(6)	-1(5)	20(5)	-3(5)
C(154)	54(6)	151(10)	92(8)	-9(7)	23(6)	14(6)
C(155)	52(6)	117(8)	71(7)	9(6)	5(5)	11(5)
C(156)	43(5)	54(5)	61(6)	-6(4)	10(5)	-2(4)
N(161)	46(4)	45(4)	42(4)	3(3)	4(3)	2(3)
C(162)	42(5)	55(5)	55(5)	6(4)	-5(5)	4(4)
C(163)	54(5)	92(7)	69(6)	12(5)	9(5)	17(5)
C(164)	53(6)	94(7)	53(6)	13(5)	-18(5)	5(5)
N(165)	54(4)	60(4)	38(4)	9(3)	-8(3)	0(3)
N(211)	55(4)	44(4)	43(4)	1(3)	-1(3)	7(3)
C(212)	65(5)	63(5)	36(5)	-1(4)	3(4)	14(4)
C(213)	87(7)	94(7)	56(6)	6(6)	16(5)	25(6)
C(214)	113(8)	113(8)	65(7)	6(6)	37(6)	51(7)
C(215)	88(7)	78(6)	64(6)	10(5)	16(5)	40(5)
C(216)	42(5)	48(5)	50(5)	-9(4)	1(4)	5(4)
N(221)	55(4)	37(4)	40(4)	4(3)	2(3)	10(3)
C(222)	40(4)	34(4)	48(5)	-1(4)	-7(4)	5(4)
C(223)	51(5)	46(5)	60(6)	-6(4)	6(4)	10(4)
C(224)	61(5)	32(5)	61(6)	17(4)	-6(4)	10(4)
N(225)	59(4)	41(4)	33(4)	9(3)	3(3)	6(3)
N(231)	54(4)	53(4)	39(4)	-6(3)	6(4)	4(3)
C(232)	56(6)	64(6)	45(5)	2(4)	-5(4)	12(4)
C(233)	71(6)	69(6)	52(5)	3(5)	-8(5)	7(5)
C(234)	54(6)	80(7)	78(7)	-15(6)	-9(5)	3(5)
C(235)	56(6)	67(6)	67(6)	0(5)	7(5)	-4(5)

C(236)	47(5)	42(5)	47(5)	-7(4)	7(4)	3(4)
N(241)	59(5)	42(4)	32(4)	3(3)	6(3)	5(3)
C(242)	49(6)	45(5)	44(5)	-6(4)	4(4)	1(4)
C(243)	60(6)	53(5)	55(5)	-5(4)	12(5)	-12(4)
C(244)	77(6)	53(5)	34(5)	0(4)	10(5)	-8(5)
N(245)	64(5)	43(4)	32(4)	1(3)	4(4)	3(3)
N(251)	58(4)	41(4)	36(4)	-3(3)	1(3)	1(3)
C(252)	67(5)	55(6)	46(5)	-6(5)	2(4)	3(5)
C(253)	89(6)	47(5)	64(6)	7(5)	5(5)	-9(5)
C(254)	120(8)	60(6)	71(7)	-16(6)	-9(6)	-20(6)
C(255)	108(7)	63(6)	47(5)	-2(5)	-5(5)	-9(5)
C(256)	60(5)	40(5)	43(5)	-11(4)	3(4)	6(4)
N(261)	48(4)	44(4)	33(4)	-4(3)	-2(3)	6(3)
C(262)	50(5)	46(5)	33(5)	-9(4)	-2(4)	4(4)
C(263)	71(6)	57(6)	47(5)	-16(4)	-2(4)	-8(4)
C(264)	74(5)	74(6)	26(4)	-5(5)	-7(4)	2(5)
N(265)	51(4)	50(4)	31(4)	1(3)	0(3)	2(3)
C(301)	51(5)	70(7)	91(7)	30(6)	15(5)	4(5)
C(302)	58(6)	68(6)	111(8)	41(6)	17(5)	-3(5)
C(303)	71(8)	90(9)	189(14)	57(10)	9(8)	5(6)
C(304)	113(11)	149(15)	185(17)	98(14)	52(10)	31(10)
C(305)	93(9)	161(12)	126(11)	64(11)	40(7)	21(9)
C(306)	98(8)	112(8)	90(8)	47(7)	30(6)	7(7)
C(307)	56(5)	63(5)	43(5)	8(4)	8(4)	-1(5)
C(308)	65(6)	81(6)	45(5)	-2(5)	15(5)	13(5)
C(309)	80(7)	92(7)	48(5)	-15(5)	10(5)	7(6)
C(310)	96(7)	65(6)	68(6)	-2(5)	22(6)	14(6)
C(311)	71(6)	76(7)	72(6)	0(5)	3(5)	8(6)
C(312)	65(6)	64(6)	70(6)	2(5)	4(5)	6(5)
C(313)	54(5)	49(5)	62(5)	1(5)	5(4)	5(5)
C(314)	76(6)	66(6)	62(6)	0(5)	-10(5)	5(5)
C(315)	100(7)	67(6)	62(6)	0(5)	-5(5)	32(6)
C(316)	75(7)	92(8)	88(8)	-37(7)	-29(6)	37(7)
C(317)	57(6)	76(8)	120(10)	-37(7)	-6(7)	4(5)
C(318)	60(6)	62(6)	85(7)	-14(5)	4(5)	5(5)
C(319)	55(5)	45(5)	53(5)	-2(4)	-2(5)	-3(4)
C(320)	65(6)	67(6)	60(6)	-3(5)	9(5)	0(5)
C(321)	69(7)	78(6)	72(7)	-7(5)	-18(5)	2(6)
C(322)	46(5)	70(7)	129(10)	2(7)	11(7)	-3(5)
C(323)	69(7)	70(6)	99(8)	13(6)	29(6)	5(5)
C(324)	61(6)	59(6)	60(6)	9(4)	12(5)	-2(4)
C(1)	958(112)	367(45)	273(41)	47(33)	173(56)	-49(59)
C(2)	250(27)	419(43)	298(37)	-127(33)	167(26)	-191(30)
O(3)	239(22)	313(27)	820(69)	-52(33)	8(34)	60(19)
C(4)	68(11)	761(79)	128(15)	-8(25)	-26(10)	-3(22)
C(5)	162(17)	395(35)	376(37)	62(29)	118(21)	139(20)

Table 25. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 5.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	3446(7)	5409(4)	7916(4)	65
H(2)	4522(7)	6014(4)	3126(4)	62
H(112)	6160(6)	3683(3)	10684(3)	63
H(113)	6437(6)	2786(4)	10563(4)	80
H(114)	5990(7)	2399(4)	9638(5)	100
H(115)	5286(7)	2948(4)	8845(4)	91
H(123)	4604(7)	3548(4)	8054(4)	85
H(124)	3876(7)	4396(4)	7598(3)	81
H(132)	7406(6)	5662(3)	10977(4)	65
H(133)	8697(6)	6323(3)	11089(4)	87
H(134)	8949(7)	6845(4)	10269(5)	108
H(135)	7802(7)	6704(4)	9385(4)	93
H(143)	6589(7)	6541(3)	8485(3)	69
H(144)	5034(7)	6133(3)	7854(3)	66
H(152)	3516(6)	5077(3)	11378(4)	74
H(153)	1922(7)	5205(4)	11764(4)	91
H(154)	341(8)	5474(4)	11131(5)	117
H(155)	465(7)	5591(4)	10132(4)	96
H(163)	656(7)	5704(3)	9108(4)	86
H(164)	1563(7)	5629(3)	8212(4)	83
H(212)	3819(6)	5233(3)	6433(3)	66
H(213)	2718(7)	5746(4)	6939(4)	94
H(214)	1795(8)	6473(4)	6475(4)	113
H(215)	2099(7)	6692(3)	5527(4)	92
H(223)	2311(6)	6840(3)	4511(3)	63
H(224)	3108(6)	6709(3)	3587(3)	63
H(232)	7733(6)	4683(3)	6017(3)	67
H(233)	9517(7)	4899(3)	6287(4)	79
H(234)	10378(7)	5487(4)	5690(4)	87
H(235)	9345(7)	5806(3)	4815(4)	76
H(243)	8324(7)	5982(3)	3858(3)	67
H(244)	6617(7)	6183(3)	3188(3)	65
H(252)	4269(6)	3521(3)	5241(3)	68
H(253)	3449(7)	2750(3)	4858(4)	81
H(254)	2765(8)	2720(4)	3848(4)	103
H(255)	2953(7)	3468(4)	3276(4)	89
H(263)	3145(6)	4255(3)	2710(3)	71
H(264)	3654(6)	5194(3)	2525(3)	71
H(302)	1211(6)	1502(4)	6698(4)	94
H(303)	854(8)	806(5)	7312(7)	141
H(304)	270(11)	997(7)	8205(8)	175
H(305)	157(9)	1876(6)	8521(6)	150
H(306)	424(8)	2577(4)	7866(5)	118
H(308)	2150(7)	3391(4)	7532(3)	76
H(309)	1626(8)	4205(4)	7863(3)	88
H(310)	-112(8)	4540(4)	7555(4)	90
H(311)	-1307(7)	4042(4)	6883(4)	88
H(312)	-765(7)	3231(3)	6557(4)	80
H(314)	1074(7)	3176(3)	5706(4)	84
H(315)	114(8)	3114(4)	4766(4)	93
H(316)	-1101(8)	2421(5)	4529(5)	107
H(317)	-1400(7)	1813(4)	5245(6)	103
H(318)	-448(7)	1868(3)	6183(4)	84
H(320)	2832(7)	2436(3)	7644(4)	77
H(321)	4691(8)	2424(3)	7716(4)	90

H(322)	5556(7)	2582(3)	6892(5)	98
H(323)	4506(8)	2718(3)	5985(5)	93
H(324)	2625(7)	2717(3)	5904(4)	72
H(1A)	1347(28)	6340(12)	1479(13)	787
H(1B)	1469(28)	6900(12)	1177(13)	787
H(1C)	862(28)	6858(12)	1739(13)	787
H(2A)	3087(17)	6674(10)	1736(12)	372
H(2B)	2473(17)	6632(10)	2304(12)	372
H(4A)	3268(16)	7399(12)	2668(8)	387
H(4B)	2057(16)	7233(12)	2650(8)	387
H(5A)	2499(15)	7846(9)	3336(11)	455
H(5B)	1598(15)	8090(9)	2853(11)	455
H(5C)	2834(15)	8260(9)	2872(11)	455

Table 26. Crystal data and structure refinement for [Eu(Tp^{Py})₂][BPh₄]•Et₂O (6)

Empirical formula	C ₇₆ H ₆₈ B ₃ Eu N ₁₈ O	
Formula weight	1433.87	
Temperature	293(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 12.159(3) Å	$\alpha = 90^\circ$
	<i>b</i> = 24.769(4) Å	$\beta = 97.94(1)^\circ$
	<i>c</i> = 22.685(5) Å	$\gamma = 90^\circ$
Volume	6766(1) Å ³	
<i>Z</i>	4	
Density (calculated)	1.408 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.989 mm ⁻¹	
<i>F</i> (000)	2944	
Crystal size	0.65 × 0.4 × 0.15 mm ³	
Theta range for data collection	1.98 to 25.02°	
Index ranges	-14 ≤ <i>h</i> ≤ 14, -29 ≤ <i>k</i> ≤ 29, -14 ≤ <i>l</i> ≤ 26	
Reflections collected	31248	
Independent reflections	11848 [<i>R</i> (int) = 0.0365]	
Refinement method	Full-matrix least-squares on <i>F</i> ²	
Data / restraints / parameters	11814 / 0 / 897	
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	1.148	
Final <i>R</i> indices [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> ₁ = 0.0403, <i>wR</i> ₂ = 0.0872	
<i>R</i> indices (all data)	<i>R</i> ₁ = 0.0622, <i>wR</i> ₂ = 0.1078	
Largest diff. peak and hole	0.826 and -0.581 e.Å ⁻³	
Weighting scheme	<i>w</i> = 1/[σ ² (<i>F</i> _o ²) + (0.0251 <i>P</i>) ² + 16.86 <i>P</i>]	

Table 27. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Eu(1)	0	5000	5000	27(1)
B(1)	-1192(4)	4668(2)	3369(2)	35(1)
Eu(2)	0	5000	10000	29(1)
B(2)	403(4)	5816(2)	11468(2)	34(1)
B(3)	6096(4)	7390(2)	11744(2)	41(1)
C(11)	5794(4)	7877(2)	12192(2)	50(1)
C(12)	5961(4)	8419(2)	12062(3)	58(2)
C(13)	5757(5)	8838(3)	12433(4)	78(2)
C(14)	5438(6)	8733(3)	12979(4)	95(3)
C(15)	5313(5)	8198(3)	13145(3)	86(2)
C(16)	5471(5)	7774(3)	12756(2)	67(2)
C(21)	5432(4)	7470(2)	11063(2)	39(1)
C(22)	4671(4)	7885(2)	10884(2)	47(1)
C(23)	4106(4)	7924(2)	10312(3)	54(1)
C(24)	4265(4)	7553(2)	9882(2)	55(2)
C(25)	4999(4)	7137(2)	10037(2)	50(1)
C(26)	5557(4)	7096(2)	10611(2)	44(1)
C(31)	7456(4)	7411(2)	11764(2)	37(1)
C(32)	8137(4)	7503(2)	12309(2)	42(1)
C(33)	9285(5)	7499(2)	12366(3)	55(1)
C(34)	9812(4)	7400(2)	11877(3)	60(2)
C(35)	9185(4)	7316(2)	11334(2)	51(1)
C(36)	8037(4)	7323(2)	11279(2)	40(1)
C(41)	5744(4)	6793(2)	11996(2)	37(1)
C(42)	6433(4)	6470(2)	12390(2)	42(1)
C(43)	6109(4)	5977(2)	12595(2)	48(1)
C(44)	5055(4)	5777(2)	12413(2)	48(1)
C(45)	4342(4)	6086(2)	12025(2)	52(1)
C(46)	4675(4)	6577(2)	11824(2)	46(1)
N(111)	1810(3)	4216(1)	5163(2)	32(1)
C(112)	2498(4)	4128(2)	5673(2)	39(1)
C(113)	3287(4)	3729(2)	5749(2)	49(1)
C(114)	3412(4)	3401(2)	5273(2)	59(2)
C(115)	2738(4)	3481(2)	4744(2)	49(1)
C(116)	1940(3)	3887(2)	4705(2)	34(1)
N(121)	365(3)	4339(1)	4133(1)	31(1)
C(122)	1180(3)	3969(2)	4151(2)	33(1)
C(123)	1142(4)	3705(2)	3602(2)	40(1)
C(124)	262(4)	3926(2)	3255(2)	39(1)
N(125)	-205(3)	4302(1)	3572(1)	32(1)
N(131)	2019(3)	5228(1)	4440(2)	32(1)
C(132)	2099(4)	5158(2)	3858(2)	37(1)
C(133)	3065(4)	5233(2)	3614(2)	52(1)
C(134)	4008(4)	5401(3)	3979(2)	59(2)
C(135)	3953(4)	5476(2)	4576(2)	51(1)
C(136)	2943(3)	5385(2)	4794(2)	35(1)
N(141)	1897(3)	5336(1)	5634(1)	30(1)
C(142)	2860(3)	5448(2)	5426(2)	33(1)
C(143)	3676(4)	5608(2)	5894(2)	45(1)
C(144)	3166(4)	5585(2)	6388(2)	44(1)
N(145)	2103(3)	5424(1)	6233(2)	34(1)
N(151)	571(3)	6142(1)	4840(2)	33(1)
C(152)	989(4)	6477(2)	5281(2)	40(1)
C(153)	1153(4)	7024(2)	5203(3)	49(1)

C(154)	895(4)	7243(2)	4647(3)	58(1)
C(155)	466(4)	6907(2)	4186(3)	53(1)
C(156)	317(3)	6358(2)	4297(2)	36(1)
N(161)	357(3)	4522(1)	6060(1)	30(1)
C(162)	151(3)	4005(2)	6181(2)	35(1)
C(163)	480(4)	3896(2)	6790(2)	49(1)
C(164)	888(4)	4376(2)	7024(2)	45(1)
N(165)	818(3)	4744(2)	6586(2)	34(1)
N(211)	2446(3)	4900(1)	10298(2)	33(1)
C(212)	3064(4)	5091(2)	10792(2)	36(1)
C(213)	4174(4)	4966(2)	10956(2)	43(1)
C(214)	4681(4)	4618(2)	10602(2)	46(1)
C(215)	4068(4)	4423(2)	10086(2)	42(1)
C(216)	2968(3)	4576(2)	9944(2)	33(1)
N(221)	1192(3)	4447(1)	9319(1)	31(1)
C(222)	2307(3)	4385(2)	9399(2)	33(1)
C(223)	2657(4)	4112(2)	8914(2)	36(1)
C(224)	1700(4)	3998(2)	8546(2)	36(1)
N(225)	832(3)	4198(1)	8788(1)	31(1)
N(231)	925(3)	3954(1)	10478(1)	31(1)
C(232)	1019(4)	3507(2)	10154(2)	37(1)
C(233)	1507(4)	3034(2)	10381(2)	45(1)
C(234)	1904(5)	3010(2)	10981(2)	54(1)
C(235)	1811(4)	3458(2)	11325(2)	49(1)
C(236)	1315(3)	3923(2)	11062(2)	34(1)
N(241)	793(3)	4867(1)	11148(1)	30(1)
C(242)	1220(3)	4410(2)	11414(2)	31(1)
C(243)	1513(4)	4494(2)	12028(2)	39(1)
C(244)	1246(4)	5021(2)	12120(2)	38(1)
N(245)	820(3)	5242(1)	11592(1)	31(1)
N(251)	1368(3)	5636(1)	9313(2)	33(1)
C(252)	1538(4)	5529(2)	8752(2)	38(1)
C(253)	2213(4)	5833(2)	8440(2)	50(1)
C(254)	2744(5)	6275(2)	8713(2)	59(2)
C(255)	2578(4)	6397(2)	9285(2)	48(1)
C(256)	1894(3)	6069(2)	9577(2)	31(1)
N(261)	1043(3)	5866(1)	10458(1)	30(1)
C(262)	1727(3)	6183(2)	10188(2)	29(1)
C(263)	2191(3)	6590(2)	10571(2)	34(1)
C(264)	1752(3)	6510(2)	11087(2)	35(1)
N(265)	1070(3)	6079(1)	11015(1)	30(1)
O(1)	12488(5)	7316(4)	12476(3)	138(2)
C(1)	12679(15)	6694(5)	13184(7)	260(11)
C(2)	12651(9)	7225(7)	13158(6)	198(7)
C(3)	12509(9)	7920(7)	12367(9)	216(10)
C(4)	12421(16)	7957(8)	11737(9)	287(12)

Table 28. Selected bond lengths [Å] and angles [deg] for 6.

Eu(1)-N(121)	2.643(3)
Eu(1)-N(121)#1	2.643(3)
Eu(1)-N(161)#1	2.661(3)
Eu(1)-N(161)	2.661(3)
Eu(1)-N(141)	2.677(3)
Eu(1)-N(141)#1	2.677(3)
Eu(1)-N(111)	2.920(3)
Eu(1)-N(111)#1	2.920(3)
Eu(1)-N(151)	2.947(3)
Eu(1)-N(151)#1	2.947(3)
Eu(1)-N(131)	2.971(3)
Eu(1)-N(131)#1	2.971(3)
B(1)-N(165)#1	1.524(6)
B(1)-N(125)	1.524(6)
B(1)-N(145)#1	1.541(6)
Eu(2)-N(261)#2	2.631(3)
Eu(2)-N(261)	2.631(3)
Eu(2)-N(221)	2.643(3)
Eu(2)-N(221)#2	2.643(3)
Eu(2)-N(241)#2	2.670(3)
Eu(2)-N(241)	2.670(3)
Eu(2)-N(251)	2.897(3)
Eu(2)-N(251)#2	2.897(3)
Eu(2)-N(211)	2.967(3)
Eu(2)-N(211)#2	2.967(3)
Eu(2)-N(231)#2	2.970(3)
Eu(2)-N(231)	2.970(3)
B(2)-N(245)	1.523(6)
B(2)-N(225)#2	1.533(6)
B(2)-N(265)	1.538(6)
B(3)-C(31)	1.649(7)
B(3)-C(21)	1.652(7)
B(3)-C(11)	1.652(7)
B(3)-C(41)	1.663(7)
C(11)-C(12)	1.396(7)
C(11)-C(16)	1.413(8)
C(12)-C(13)	1.380(7)
C(13)-C(14)	1.373(10)
C(14)-C(15)	1.392(11)
C(15)-C(16)	1.403(8)
C(21)-C(26)	1.405(6)
C(21)-C(22)	1.405(6)
C(22)-C(23)	1.386(7)
C(23)-C(24)	1.372(8)
C(24)-C(25)	1.376(7)
C(25)-C(26)	1.386(6)
C(31)-C(32)	1.408(6)
C(31)-C(36)	1.404(6)
C(32)-C(33)	1.383(7)
C(33)-C(34)	1.377(8)
C(34)-C(35)	1.372(8)
C(35)-C(36)	1.385(7)
C(41)-C(42)	1.390(6)
C(41)-C(46)	1.411(6)
C(42)-C(43)	1.384(7)
C(43)-C(44)	1.382(7)
C(44)-C(45)	1.379(7)
C(45)-C(46)	1.378(7)
N(111)-C(116)	1.347(5)
N(111)-C(112)	1.349(5)

C(112) -C(113)	1.371(6)
C(113) -C(114)	1.378(7)
C(114) -C(115)	1.371(7)
C(115) -C(116)	1.392(6)
C(116) -C(122)	1.466(6)
N(121) -C(122)	1.346(5)
N(121) -N(125)	1.366(4)
C(122) -C(123)	1.403(6)
C(123) -C(124)	1.354(6)
C(124) -N(125)	1.347(5)
N(131) -C(136)	1.345(5)
N(131) -C(132)	1.348(5)
C(132) -C(133)	1.378(6)
C(133) -C(134)	1.382(7)
C(134) -C(135)	1.379(7)
C(135) -C(136)	1.403(6)
C(136) -C(142)	1.459(6)
N(141) -C(142)	1.350(5)
N(141) -N(145)	1.363(4)
C(142) -C(143)	1.406(6)
C(143) -C(144)	1.356(7)
C(144) -N(145)	1.352(5)
N(145) -B(1) #1	1.541(6)
N(151) -C(156)	1.339(5)
N(151) -C(152)	1.344(5)
C(152) -C(153)	1.382(6)
C(153) -C(154)	1.369(7)
C(154) -C(155)	1.381(7)
C(155) -C(156)	1.401(6)
C(156) -C(162) #1	1.461(6)
N(161) -C(162)	1.340(5)
N(161) -N(165)	1.363(5)
C(162) -C(163)	1.411(6)
C(162) -C(156) #1	1.461(6)
C(163) -C(164)	1.367(7)
C(164) -N(165)	1.342(5)
N(165) -B(1) #1	1.524(6)
N(211) -C(212)	1.345(5)
N(211) -C(216)	1.354(5)
C(212) -C(213)	1.384(6)
C(213) -C(214)	1.381(7)
C(214) -C(215)	1.385(6)
C(215) -C(216)	1.385(6)
C(216) -C(222)	1.458(6)
N(221) -C(222)	1.351(5)
N(221) -N(225)	1.370(4)
C(222) -C(223)	1.406(6)
C(223) -C(224)	1.365(6)
C(224) -N(225)	1.350(5)
N(225) -B(2) #2	1.533(6)
N(231) -C(232)	1.342(5)
N(231) -C(236)	1.346(5)
C(232) -C(233)	1.380(6)
C(233) -C(234)	1.382(7)
C(234) -C(235)	1.370(7)
C(235) -C(236)	1.396(6)
C(236) -C(242)	1.459(6)
N(241) -C(242)	1.351(5)
N(241) -N(245)	1.368(5)
C(242) -C(243)	1.406(6)
C(243) -C(244)	1.367(6)
C(244) -N(245)	1.352(5)
N(251) -C(252)	1.343(5)
N(251) -C(256)	1.346(5)

C(252) -C(253)	1.378(6)
C(253) -C(254)	1.376(7)
C(254) -C(255)	1.373(7)
C(255) -C(256)	1.393(6)
C(256) -C(262)	1.456(6)
N(261) -C(262)	1.351(5)
N(261) -N(265)	1.365(4)
C(262) -C(263)	1.400(6)
C(263) -C(264)	1.367(6)
C(264) -N(265)	1.347(5)
O(1) -C(3)	1.52(2)
O(1) -C(2)	1.550(14)
C(1) -C(2)	1.32(2)
C(3) -C(4)	1.42(2)

N(121) -Eu(1) -N(121) #1	180.0
N(121) -Eu(1) -N(161) #1	68.06(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(161) #1	111.94(10)
N(121) -Eu(1) -N(161)	111.94(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(161)	68.06(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(161)	180.0
N(121) -Eu(1) -N(141)	111.82(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(141)	68.18(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(141)	111.58(10)
N(161) -Eu(1) -N(141)	68.42(10)
N(121) -Eu(1) -N(141) #1	68.18(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(141) #1	111.82(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(141) #1	68.42(10)
N(161) -Eu(1) -N(141) #1	111.57(10)
N(141) -Eu(1) -N(141) #1	180.0
N(121) -Eu(1) -N(111)	58.77(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(111)	121.23(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(111)	115.87(10)
N(161) -Eu(1) -N(111)	64.13(10)
N(141) -Eu(1) -N(111)	63.92(10)
N(141) #1 -Eu(1) -N(111)	116.08(10)
N(121) -Eu(1) -N(111) #1	121.23(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(111) #1	58.77(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(111) #1	64.13(10)
N(161) -Eu(1) -N(111) #1	115.87(10)
N(141) -Eu(1) -N(111) #1	116.08(10)
N(141) #1 -Eu(1) -N(111) #1	63.92(10)
N(111) -Eu(1) -N(111) #1	180.0
N(121) -Eu(1) -N(151)	115.86(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(151)	64.14(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(151)	58.23(10)
N(161) -Eu(1) -N(151)	121.77(10)
N(141) -Eu(1) -N(151)	64.37(10)
N(141) #1 -Eu(1) -N(151)	115.63(10)
N(111) -Eu(1) -N(151)	117.89(9)
N(111) #1 -Eu(1) -N(151)	62.11(9)
N(121) -Eu(1) -N(151) #1	64.14(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(151) #1	115.86(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(151) #1	121.77(10)
N(161) -Eu(1) -N(151) #1	58.23(10)
N(141) -Eu(1) -N(151) #1	115.63(10)
N(141) #1 -Eu(1) -N(151) #1	64.37(10)
N(111) -Eu(1) -N(151) #1	62.11(9)
N(111) #1 -Eu(1) -N(151) #1	117.89(9)
N(151) -Eu(1) -N(151) #1	180.0
N(121) -Eu(1) -N(131)	64.26(10)
N(121) #1 -Eu(1) -N(131)	115.74(10)
N(161) #1 -Eu(1) -N(131)	64.54(9)
N(161) -Eu(1) -N(131)	115.46(10)

N(141) -Eu(1) -N(131)	57.92(10)
N(141) #1-Eu(1) -N(131)	122.08(10)
N(111) -Eu(1) -N(131)	61.82(9)
N(111) #1-Eu(1) -N(131)	118.19(9)
N(151) -Eu(1) -N(131)	62.76(9)
N(151) #1-Eu(1) -N(131)	117.24(9)
N(121) -Eu(1) -N(131) #1	115.74(10)
N(121) #1-Eu(1) -N(131) #1	64.26(10)
N(161) #1-Eu(1) -N(131) #1	115.46(10)
N(161) -Eu(1) -N(131) #1	64.53(9)
N(141) -Eu(1) -N(131) #1	122.07(10)
N(141) #1-Eu(1) -N(131) #1	57.92(10)
N(111) -Eu(1) -N(131) #1	118.18(9)
N(111) #1-Eu(1) -N(131) #1	61.82(9)
N(151) -Eu(1) -N(131) #1	117.24(9)
N(151) #1-Eu(1) -N(131) #1	62.76(9)
N(131) -Eu(1) -N(131) #1	180.0
N(165) #1-B(1) -N(125)	109.5(4)
N(165) #1-B(1) -N(145) #1	109.5(4)
N(125) -B(1) -N(145) #1	109.6(4)
N(261) #2-Eu(2) -N(261)	180.0
N(261) #2-Eu(2) -N(221)	67.65(10)
N(261) -Eu(2) -N(221)	112.35(10)
N(261) #2-Eu(2) -N(221) #2	112.35(10)
N(261) -Eu(2) -N(221) #2	67.65(10)
N(221) -Eu(2) -N(221) #2	179.998(1)
N(261) #2-Eu(2) -N(241) #2	68.04(10)
N(261) -Eu(2) -N(241) #2	111.96(10)
N(221) -Eu(2) -N(241) #2	69.35(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(241) #2	110.65(10)
N(261) #2-Eu(2) -N(241)	111.95(10)
N(261) -Eu(2) -N(241)	68.05(10)
N(221) -Eu(2) -N(241)	110.65(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(241)	69.35(10)
N(241) #2-Eu(2) -N(241)	180.0
N(261) #2-Eu(2) -N(251)	120.80(10)
N(261) -Eu(2) -N(251)	59.20(10)
N(221) -Eu(2) -N(251)	64.26(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(251)	115.74(10)
N(241) #2-Eu(2) -N(251)	64.21(9)
N(241) -Eu(2) -N(251)	115.80(10)
N(261) #2-Eu(2) -N(251) #2	59.20(10)
N(261) -Eu(2) -N(251) #2	120.80(10)
N(221) -Eu(2) -N(251) #2	115.74(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(251) #2	64.26(10)
N(241) #2-Eu(2) -N(251) #2	115.79(10)
N(241) -Eu(2) -N(251) #2	64.20(9)
N(251) -Eu(2) -N(251) #2	180.0
N(261) #2-Eu(2) -N(211)	115.79(10)
N(261) -Eu(2) -N(211)	64.21(10)
N(221) -Eu(2) -N(211)	58.45(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(211)	121.56(10)
N(241) #2-Eu(2) -N(211)	116.63(10)
N(241) -Eu(2) -N(211)	63.37(10)
N(251) -Eu(2) -N(211)	62.38(9)
N(251) #2-Eu(2) -N(211)	117.62(9)
N(261) #2-Eu(2) -N(211) #2	64.21(10)
N(261) -Eu(2) -N(211) #2	115.79(10)
N(221) -Eu(2) -N(211) #2	121.55(10)
N(221) #2-Eu(2) -N(211) #2	58.45(10)
N(241) #2-Eu(2) -N(211) #2	63.37(10)
N(241) -Eu(2) -N(211) #2	116.63(10)
N(251) -Eu(2) -N(211) #2	117.62(9)
N(251) #2-Eu(2) -N(211) #2	62.38(9)

N(211) -Eu(2) -N(211)#2	180.0
N(261)#2-Eu(2) -N(231)#2	115.45(10)
N(261) -Eu(2) -N(231)#2	64.55(10)
N(221) -Eu(2) -N(231)#2	116.72(10)
N(221)#2-Eu(2) -N(231)#2	63.28(10)
N(241)#2-Eu(2) -N(231)#2	57.89(10)
N(241) -Eu(2) -N(231)#2	122.11(10)
N(251) -Eu(2) -N(231)#2	62.95(9)
N(251)#2-Eu(2) -N(231)#2	117.05(9)
N(211) -Eu(2) -N(231)#2	118.21(9)
N(211)#2-Eu(2) -N(231)#2	61.79(9)
N(261)#2-Eu(2) -N(231)	64.55(10)
N(261) -Eu(2) -N(231)	115.45(10)
N(221) -Eu(2) -N(231)	63.28(10)
N(221)#2-Eu(2) -N(231)	116.71(10)
N(241)#2-Eu(2) -N(231)	122.11(10)
N(241) -Eu(2) -N(231)	57.89(10)
N(251) -Eu(2) -N(231)	117.05(9)
N(251)#2-Eu(2) -N(231)	62.95(9)
N(211) -Eu(2) -N(231)	61.79(9)
N(211)#2-Eu(2) -N(231)	118.21(9)
N(231)#2-Eu(2) -N(231)	180.0
N(245) -B(2) -N(225)#2	109.4(4)
N(245) -B(2) -N(265)	109.0(4)
N(225)#2-B(2) -N(265)	109.6(3)
C(31) -B(3) -C(21)	112.4(4)
C(31) -B(3) -C(11)	105.5(4)
C(21) -B(3) -C(11)	111.6(4)
C(31) -B(3) -C(41)	108.8(4)
C(21) -B(3) -C(41)	108.2(4)
C(11) -B(3) -C(41)	110.4(4)
C(12) -C(11) -C(16)	115.7(5)
C(12) -C(11) -B(3)	121.4(5)
C(16) -C(11) -B(3)	122.6(5)
C(13) -C(12) -C(11)	123.3(6)
C(14) -C(13) -C(12)	120.3(7)
C(13) -C(14) -C(15)	118.7(6)
C(14) -C(15) -C(16)	120.8(7)
C(15) -C(16) -C(11)	120.9(7)
C(26) -C(21) -C(22)	113.9(4)
C(26) -C(21) -B(3)	121.0(4)
C(22) -C(21) -B(3)	125.0(4)
C(23) -C(22) -C(21)	122.9(5)
C(24) -C(23) -C(22)	121.2(5)
C(23) -C(24) -C(25)	118.0(5)
C(24) -C(25) -C(26)	120.7(5)
C(25) -C(26) -C(21)	123.3(5)
C(32) -C(31) -C(36)	114.5(4)
C(32) -C(31) -B(3)	119.7(4)
C(36) -C(31) -B(3)	125.7(4)
C(33) -C(32) -C(31)	123.0(5)
C(34) -C(33) -C(32)	120.1(5)
C(35) -C(34) -C(33)	119.2(5)
C(34) -C(35) -C(36)	120.4(5)
C(35) -C(36) -C(31)	122.8(5)
C(42) -C(41) -C(46)	114.2(4)
C(42) -C(41) -B(3)	124.9(4)
C(46) -C(41) -B(3)	120.9(4)
C(43) -C(42) -C(41)	123.3(5)
C(44) -C(43) -C(42)	120.7(5)
C(45) -C(44) -C(43)	117.9(5)
C(46) -C(45) -C(44)	120.9(5)
C(45) -C(46) -C(41)	123.0(5)
C(116) -N(111) -C(112)	116.1(4)

C(116)-N(111)-Eu(1)	118.1(3)
C(112)-N(111)-Eu(1)	125.7(3)
N(111)-C(112)-C(113)	124.4(4)
C(112)-C(113)-C(114)	118.6(4)
C(115)-C(114)-C(113)	118.9(4)
C(114)-C(115)-C(116)	119.3(4)
N(111)-C(116)-C(115)	122.8(4)
N(111)-C(116)-C(122)	116.8(4)
C(115)-C(116)-C(122)	120.4(4)
C(122)-N(121)-N(125)	105.0(3)
C(122)-N(121)-Eu(1)	126.6(3)
N(125)-N(121)-Eu(1)	128.3(2)
N(121)-C(122)-C(123)	110.9(4)
N(121)-C(122)-C(116)	119.7(4)
C(123)-C(122)-C(116)	129.4(4)
C(124)-C(123)-C(122)	104.6(4)
N(125)-C(124)-C(123)	109.2(4)
C(124)-N(125)-N(121)	110.3(3)
C(124)-N(125)-B(1)	128.5(4)
N(121)-N(125)-B(1)	121.1(3)
C(136)-N(131)-C(132)	117.1(4)
C(136)-N(131)-Eu(1)	118.1(3)
C(132)-N(131)-Eu(1)	124.7(3)
N(131)-C(132)-C(133)	123.8(4)
C(134)-C(133)-C(132)	118.9(5)
C(135)-C(134)-C(133)	118.7(5)
C(134)-C(135)-C(136)	119.2(5)
N(131)-C(136)-C(135)	122.3(4)
N(131)-C(136)-C(142)	116.9(4)
C(135)-C(136)-C(142)	120.7(4)
C(142)-N(141)-N(145)	105.5(3)
C(142)-N(141)-Eu(1)	126.9(3)
N(145)-N(141)-Eu(1)	127.6(2)
N(141)-C(142)-C(143)	110.5(4)
N(141)-C(142)-C(136)	120.2(4)
C(143)-C(142)-C(136)	129.4(4)
C(144)-C(143)-C(142)	104.9(4)
N(145)-C(144)-C(143)	109.0(4)
C(144)-N(145)-N(141)	110.2(3)
C(144)-N(145)-B(1)#1	129.0(4)
N(141)-N(145)-B(1)#1	120.8(3)
C(156)-N(151)-C(152)	117.0(4)
C(156)-N(151)-Eu(1)	117.9(3)
C(152)-N(151)-Eu(1)	124.9(3)
N(151)-C(152)-C(153)	123.8(5)
C(154)-C(153)-C(152)	119.1(5)
C(153)-C(154)-C(155)	118.3(5)
C(154)-C(155)-C(156)	119.5(5)
N(151)-C(156)-C(155)	122.3(4)
N(151)-C(156)-C(162)#1	117.0(4)
C(155)-C(156)-C(162)#1	120.7(4)
C(162)-N(161)-N(165)	105.8(3)
C(162)-N(161)-Eu(1)	126.7(3)
N(165)-N(161)-Eu(1)	127.4(2)
N(161)-C(162)-C(163)	110.4(4)
N(161)-C(162)-C(156)#1	120.0(4)
C(163)-C(162)-C(156)#1	129.6(4)
C(164)-C(163)-C(162)	104.6(4)
N(165)-C(164)-C(163)	108.7(4)
C(164)-N(165)-N(161)	110.5(4)
C(164)-N(165)-B(1)#1	127.7(4)
N(161)-N(165)-B(1)#1	121.8(3)
C(212)-N(211)-C(216)	116.6(4)
C(212)-N(211)-Eu(2)	126.0(3)

C(216)-N(211)-Eu(2)	116.8(3)
N(211)-C(212)-C(213)	123.9(4)
C(214)-C(213)-C(212)	118.7(4)
C(213)-C(214)-C(215)	118.6(4)
C(216)-C(215)-C(214)	119.4(4)
N(211)-C(216)-C(215)	122.8(4)
N(211)-C(216)-C(222)	116.6(4)
C(215)-C(216)-C(222)	120.6(4)
C(222)-N(221)-N(225)	105.1(3)
C(222)-N(221)-Eu(2)	127.0(3)
N(225)-N(221)-Eu(2)	127.7(2)
N(221)-C(222)-C(223)	110.9(4)
N(221)-C(222)-C(216)	120.1(4)
C(223)-C(222)-C(216)	129.0(4)
C(224)-C(223)-C(222)	104.7(4)
N(225)-C(224)-C(223)	108.9(4)
C(224)-N(225)-N(221)	110.5(3)
C(224)-N(225)-B(2)#2	128.1(4)
N(221)-N(225)-B(2)#2	121.4(3)
C(232)-N(231)-C(236)	116.7(4)
C(232)-N(231)-Eu(2)	125.1(3)
C(236)-N(231)-Eu(2)	118.2(3)
N(231)-C(232)-C(233)	124.0(4)
C(232)-C(233)-C(234)	118.5(4)
C(235)-C(234)-C(233)	118.8(4)
C(234)-C(235)-C(236)	119.3(4)
N(231)-C(236)-C(235)	122.6(4)
N(231)-C(236)-C(242)	116.6(4)
C(235)-C(236)-C(242)	120.7(4)
C(242)-N(241)-N(245)	105.7(3)
C(242)-N(241)-Eu(2)	127.1(3)
N(245)-N(241)-Eu(2)	127.1(2)
N(241)-C(242)-C(243)	110.4(4)
N(241)-C(242)-C(236)	120.2(4)
C(243)-C(242)-C(236)	129.5(4)
C(244)-C(243)-C(242)	105.0(4)
N(245)-C(244)-C(243)	108.8(4)
C(244)-N(245)-N(241)	110.1(3)
C(244)-N(245)-B(2)	128.2(4)
N(241)-N(245)-B(2)	121.6(3)
C(252)-N(251)-C(256)	116.9(4)
C(252)-N(251)-Eu(2)	125.3(3)
C(256)-N(251)-Eu(2)	117.8(3)
N(251)-C(252)-C(253)	124.1(4)
C(254)-C(253)-C(252)	118.5(4)
C(255)-C(254)-C(253)	118.7(5)
C(254)-C(255)-C(256)	119.8(4)
N(251)-C(256)-C(255)	122.1(4)
N(251)-C(256)-C(262)	117.2(4)
C(255)-C(256)-C(262)	120.7(4)
C(262)-N(261)-N(265)	105.0(3)
C(262)-N(261)-Eu(2)	126.0(3)
N(265)-N(261)-Eu(2)	129.0(2)
N(261)-C(262)-C(263)	111.0(4)
N(261)-C(262)-C(256)	119.7(3)
C(263)-C(262)-C(256)	129.3(4)
C(264)-C(263)-C(262)	104.8(4)
N(265)-C(264)-C(263)	108.6(4)
C(264)-N(265)-N(261)	110.7(3)
C(264)-N(265)-B(2)	128.8(4)
N(261)-N(265)-B(2)	120.5(3)
C(3)-O(1)-C(2)	107.7(12)
C(1)-C(2)-O(1)	101(2)
C(4)-C(3)-O(1)	103.1(11)

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

Table 29. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6.
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Eu (1)	29 (1)	30 (1)	22 (1)	-2 (1)	1 (1)	2 (1)
B (1)	43 (3)	40 (3)	21 (2)	-5 (2)	-2 (2)	4 (2)
Eu (2)	39 (1)	27 (1)	21 (1)	0 (1)	3 (1)	-6 (1)
B (2)	44 (3)	33 (3)	25 (2)	-2 (2)	1 (2)	-1 (2)
B (3)	41 (3)	44 (3)	38 (3)	-9 (2)	6 (2)	-1 (2)
C (11)	43 (3)	53 (3)	56 (3)	-17 (3)	12 (2)	-1 (2)
C (12)	44 (3)	48 (3)	84 (4)	-23 (3)	13 (3)	-1 (2)
C (13)	50 (3)	60 (4)	123 (6)	-44 (4)	11 (4)	-2 (3)
C (14)	73 (4)	91 (6)	125 (7)	-75 (5)	25 (4)	-8 (4)
C (15)	65 (4)	116 (6)	82 (5)	-55 (5)	26 (3)	-10 (4)
C (16)	69 (4)	77 (4)	58 (4)	-28 (3)	19 (3)	-8 (3)
C (21)	35 (2)	37 (2)	44 (3)	1 (2)	6 (2)	-3 (2)
C (22)	42 (3)	39 (3)	61 (3)	7 (2)	9 (2)	0 (2)
C (23)	44 (3)	46 (3)	71 (4)	20 (3)	-1 (3)	-4 (2)
C (24)	51 (3)	58 (3)	52 (3)	18 (3)	-12 (2)	-26 (3)
C (25)	61 (3)	46 (3)	40 (3)	4 (2)	-3 (2)	-17 (3)
C (26)	47 (3)	36 (3)	46 (3)	1 (2)	0 (2)	-4 (2)
C (31)	41 (2)	29 (2)	40 (2)	-5 (2)	7 (2)	-1 (2)
C (32)	47 (3)	42 (3)	37 (2)	1 (2)	5 (2)	-7 (2)
C (33)	57 (3)	47 (3)	56 (3)	5 (3)	-15 (3)	-5 (2)
C (34)	41 (3)	51 (3)	87 (4)	-5 (3)	4 (3)	8 (2)
C (35)	49 (3)	43 (3)	63 (3)	-9 (3)	15 (3)	4 (2)
C (36)	49 (3)	31 (2)	39 (3)	-3 (2)	6 (2)	2 (2)
C (41)	44 (3)	40 (3)	29 (2)	-10 (2)	10 (2)	-2 (2)
C (42)	45 (3)	49 (3)	32 (2)	2 (2)	7 (2)	-3 (2)
C (43)	54 (3)	56 (3)	33 (3)	8 (2)	9 (2)	4 (2)
C (44)	62 (3)	44 (3)	41 (3)	-3 (2)	15 (2)	-9 (2)
C (45)	49 (3)	48 (3)	59 (3)	-2 (3)	4 (2)	-10 (2)
C (46)	47 (3)	44 (3)	46 (3)	-3 (2)	0 (2)	-1 (2)
N (111)	31 (2)	33 (2)	32 (2)	-1 (2)	4 (2)	1 (2)
C (112)	38 (2)	40 (3)	37 (2)	-1 (2)	1 (2)	4 (2)
C (113)	41 (3)	56 (3)	48 (3)	0 (2)	-5 (2)	15 (2)
C (114)	49 (3)	58 (3)	67 (4)	-10 (3)	-4 (3)	27 (3)
C (115)	46 (3)	50 (3)	51 (3)	-13 (2)	5 (2)	15 (2)
C (116)	30 (2)	32 (2)	42 (3)	-4 (2)	9 (2)	1 (2)
N (121)	32 (2)	32 (2)	27 (2)	-4 (2)	4 (1)	1 (2)
C (122)	33 (2)	30 (2)	35 (2)	-2 (2)	6 (2)	2 (2)
C (123)	44 (3)	34 (2)	43 (3)	-7 (2)	12 (2)	4 (2)
C (124)	51 (3)	39 (3)	27 (2)	-11 (2)	8 (2)	0 (2)
N (125)	39 (2)	32 (2)	24 (2)	-4 (2)	5 (2)	1 (2)
N (131)	34 (2)	32 (2)	31 (2)	2 (2)	3 (2)	2 (2)
C (132)	39 (2)	39 (3)	32 (2)	2 (2)	5 (2)	2 (2)
C (133)	46 (3)	76 (4)	34 (3)	-1 (2)	12 (2)	0 (3)
C (134)	36 (3)	93 (4)	52 (3)	7 (3)	14 (2)	-2 (3)
C (135)	31 (2)	73 (4)	49 (3)	0 (3)	6 (2)	-8 (2)
C (136)	29 (2)	35 (2)	41 (2)	3 (2)	4 (2)	0 (2)
N (141)	32 (2)	29 (2)	27 (2)	-2 (1)	1 (1)	3 (1)
C (142)	29 (2)	32 (2)	38 (2)	-1 (2)	3 (2)	2 (2)
C (143)	34 (2)	58 (3)	43 (3)	-7 (2)	-2 (2)	-7 (2)
C (144)	40 (3)	54 (3)	35 (3)	-9 (2)	-8 (2)	-5 (2)
N (145)	35 (2)	40 (2)	26 (2)	-4 (2)	-2 (2)	1 (2)
N (151)	31 (2)	31 (2)	39 (2)	-1 (2)	5 (2)	1 (2)
C (152)	36 (2)	35 (3)	48 (3)	-5 (2)	5 (2)	1 (2)
C (153)	42 (3)	38 (3)	67 (4)	-11 (3)	8 (2)	-4 (2)

C(154)	58(3)	31(3)	87(4)	4(3)	13(3)	-4(2)
C(155)	56(3)	40(3)	62(3)	9(3)	9(3)	-1(2)
C(156)	36(2)	29(2)	45(3)	3(2)	10(2)	7(2)
N(161)	32(2)	32(2)	24(2)	1(2)	3(1)	3(2)
C(162)	35(2)	34(2)	35(2)	9(2)	4(2)	3(2)
C(163)	59(3)	44(3)	42(3)	18(2)	5(2)	4(2)
C(164)	54(3)	49(3)	29(2)	12(2)	1(2)	7(2)
N(165)	36(2)	40(2)	25(2)	3(2)	1(2)	7(2)
N(211)	37(2)	29(2)	31(2)	2(2)	2(2)	-5(2)
C(212)	42(2)	35(2)	32(2)	1(2)	3(2)	-6(2)
C(213)	46(3)	46(3)	34(2)	1(2)	-4(2)	-8(2)
C(214)	39(3)	53(3)	43(3)	4(2)	-1(2)	0(2)
C(215)	41(3)	43(3)	41(3)	1(2)	2(2)	-1(2)
C(216)	38(2)	31(2)	30(2)	5(2)	4(2)	-6(2)
N(221)	35(2)	31(2)	25(2)	2(2)	2(1)	-3(2)
C(222)	40(2)	32(2)	27(2)	5(2)	5(2)	-1(2)
C(223)	39(2)	36(2)	35(2)	3(2)	6(2)	2(2)
C(224)	49(3)	33(2)	27(2)	1(2)	6(2)	3(2)
N(225)	37(2)	30(2)	25(2)	2(2)	2(2)	-2(2)
N(231)	38(2)	28(2)	27(2)	2(2)	5(2)	-4(2)
C(232)	45(3)	32(2)	34(2)	2(2)	4(2)	-6(2)
C(233)	61(3)	33(3)	40(3)	-2(2)	6(2)	1(2)
C(234)	78(4)	34(3)	47(3)	8(2)	-3(3)	14(2)
C(235)	67(3)	42(3)	36(3)	7(2)	-3(2)	8(2)
C(236)	37(2)	32(2)	32(2)	5(2)	3(2)	-5(2)
N(241)	36(2)	30(2)	24(2)	2(1)	2(1)	-6(1)
C(242)	35(2)	30(2)	29(2)	5(2)	0(2)	-5(2)
C(243)	47(3)	42(3)	26(2)	9(2)	0(2)	7(2)
C(244)	45(2)	47(3)	21(2)	2(2)	2(2)	-2(2)
N(245)	39(2)	32(2)	21(2)	2(1)	1(1)	-1(2)
N(251)	38(2)	32(2)	27(2)	3(2)	1(2)	-3(2)
C(252)	46(3)	36(2)	31(2)	0(2)	3(2)	-7(2)
C(253)	58(3)	61(3)	33(3)	1(2)	15(2)	-15(3)
C(254)	69(4)	67(4)	46(3)	-2(3)	24(3)	-32(3)
C(255)	57(3)	46(3)	44(3)	-6(2)	15(2)	-23(2)
C(256)	30(2)	28(2)	35(2)	1(2)	2(2)	-3(2)
N(261)	34(2)	30(2)	25(2)	2(2)	2(1)	-4(1)
C(262)	32(2)	24(2)	31(2)	4(2)	0(2)	-1(2)
C(263)	37(2)	27(2)	38(2)	4(2)	3(2)	-5(2)
C(264)	37(2)	30(2)	37(2)	-6(2)	-1(2)	-4(2)
N(265)	35(2)	29(2)	25(2)	-2(1)	-1(1)	-4(1)
O(1)	95(4)	198(8)	122(5)	37(6)	16(4)	17(5)
C(1)	451(27)	106(9)	290(19)	65(11)	293(20)	86(12)
C(2)	98(8)	288(19)	207(15)	113(14)	15(8)	-48(10)
C(3)	79(7)	218(15)	330(21)	-202(17)	-46(10)	19(8)
C(4)	270(21)	285(25)	348(27)	-85(22)	191(21)	-106(19)

Table 30. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	-1488(4)	4585(2)	2955(2)	42
H(2)	503(4)	6025(2)	11838(2)	41
H(12)	6224(4)	8503(2)	11706(3)	69
H(13)	5835(5)	9193(3)	12313(4)	94
H(14)	5307(6)	9014(3)	13232(4)	114
H(15)	5123(5)	8121(3)	13520(3)	103
H(16)	5361(5)	7420(3)	12870(3)	81
H(22)	4540(4)	8145(2)	11162(2)	56
H(23)	3610(4)	8207(2)	10217(3)	65
H(24)	3889(4)	7582(2)	9498(2)	66
H(25)	5121(4)	6881(2)	9754(2)	60
H(26)	6038(4)	6807(2)	10701(2)	52
H(32)	7800(4)	7570(2)	12645(2)	50
H(33)	9701(5)	7563(2)	12735(3)	66
H(34)	10583(4)	7389(2)	11915(3)	72
H(35)	9534(4)	7255(2)	11000(2)	61
H(36)	7633(4)	7267(2)	10905(2)	47
H(42)	7149(4)	6592(2)	12522(2)	50
H(43)	6605(4)	5778(2)	12858(2)	57
H(44)	4834(4)	5446(2)	12548(2)	58
H(45)	3627(4)	5962(2)	11897(2)	63
H(46)	4171(4)	6774(2)	11563(2)	55
H(112)	2434(4)	4353(2)	5995(2)	47
H(113)	3728(4)	3681(2)	6115(2)	59
H(114)	3944(4)	3129(2)	5310(2)	71
H(115)	2813(4)	3267(2)	4416(2)	59
H(123)	1616(4)	3436(2)	3499(2)	48
H(124)	19(4)	3834(2)	2861(2)	46
H(132)	1466(4)	5053(2)	3607(2)	44
H(133)	3082(4)	5172(2)	3211(2)	62
H(134)	4667(4)	5463(3)	3824(2)	71
H(135)	4577(4)	5585(2)	4832(2)	61
H(143)	4406(4)	5708(2)	5869(2)	54
H(144)	3494(4)	5668(2)	6773(2)	53
H(152)	1179(4)	6333(2)	5660(2)	48
H(153)	1436(4)	7239(2)	5524(3)	59
H(154)	1005(4)	7608(2)	4582(3)	70
H(155)	278(4)	7045(2)	3804(3)	63
H(163)	432(4)	3570(2)	6988(2)	58
H(164)	1167(4)	4437(2)	7421(2)	54
H(212)	2727(4)	5320(2)	11037(2)	43
H(213)	4569(4)	5113(2)	11299(2)	52
H(214)	5419(4)	4517(2)	10707(2)	55
H(215)	4391(4)	4191(2)	9837(2)	50
H(223)	3380(4)	4029(2)	8856(2)	44
H(224)	1653(4)	3812(2)	8187(2)	44
H(232)	738(4)	3517(2)	9751(2)	44
H(233)	1566(4)	2738(2)	10135(2)	54
H(234)	2230(5)	2696(2)	11148(2)	65
H(235)	2075(4)	3452(2)	11730(2)	59
H(243)	1821(4)	4246(2)	12311(2)	47
H(244)	1341(4)	5198(2)	12485(2)	45
H(252)	1178(4)	5232(2)	8563(2)	45
H(253)	2306(4)	5740(2)	8052(2)	60
H(254)	3207(5)	6487(2)	8515(2)	71

H(255)	2920(4)	6697(2)	9476(2)	58
H(263)	2689(3)	6857(2)	10492(2)	41
H(264)	1900(3)	6717(2)	11431(2)	42
H(1A)	12296(130)	6572(6)	13502(52)	389
H(1B)	13437(16)	6574(5)	13255(77)	389
H(1C)	12326(127)	6547(5)	12814(30)	389
H(2A)	13341(9)	7383(7)	13348(6)	238
H(2B)	12037(9)	7370(7)	13339(6)	238
H(3A)	11890(9)	8098(7)	12513(9)	259
H(3B)	13198(9)	8079(7)	12557(9)	259
H(4A)	12964(114)	7725(63)	11598(12)	431
H(4B)	12550(170)	8323(17)	11625(10)	431
H(4C)	11691(56)	7847(81)	11562(10)	431
