Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry
Inorg. Chem., 1996, 35(25), 7190-7195, DOI:10.1021/ic960683c

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 © 1996 American Chemical Society

STable 1. Atomic Parameters for Complex **1** with e. s. d.'s in Parentheses.

Positional parameters are multiplied by 10^4.

The equivalent isotropic temperature factor is defined by

$$Beq = 4/3\Sigma_i\Sigma_j \beta_{ij} (\alpha_i \alpha_j).$$

ATOM	X	Y	Z	Beq,Å^2
SM	4618.5(8)	1717.7(20)	7403.0(6)	3.4
O1	3151(12)	2059(7)	5996(9)	4.1
O2	5843(13)	764(8)	8411(9)	4.4
O3	6610(13)	2117(8)	6354(10)	5.0
O4	2440(12)	1273(8)	8268(11)	5.0
O5	5421(14)	2982(9)	8381(12)	5.3
C11	2347(17)	2323(13)	5250(15)	4.4
C12	1722(17)	3097(10)	5263(13)	3.4
C13	851(19)	3369(12)	4464(16)	4.5
C14	520(21)	2892(14)	3597(17)	5.4
C15	1043(19)	2114(12)	3568(15)	4.5
C16	1990(14)	1869(10)	4370(12)	2.8
C121	2059(19)	3663(13)	6170(16)	4.8
C122	1609(22)	3308(14)	7118(16)	5.2
C123	3658(25)	3870(14)	6278(19)	6.0
C124	1433(31)	4524(15)	5967(21)	8.1
C141	-546(24)	3205(16)	2755(17)	6.5
C161	2566(20)	997(12)	4278(16)	4.8
C162	4120(24)	1071(16)	4277(20)	6.8
C163	2100(27)	556(15)	3271(19)	6.9
C164	2190(22)	451(13)	5117(17)	5.2
C21	6618(17)	133(12)	8794(13)	3.8
C22	6567(17)	-598(11)	8315(13)	3.5
C23	7415(18)	-1203(12)	8728(14)	4.0
C24	8232(21)	-1101(13)	9625(17)	5.2
C25	8195(19)	-387(13)	10138(16)	4.7
C26	7384(17)	246(12)	9747(15)	4.2
C221	5735(19)	-733(13)	7294(18)	5.4
C222	4152(20)	-619(14)	7496(19)	5.6
C223	6179(24)	-192(15)	6433(17)	5.9
C224	5819(26)	-1609(15)	6937(22)	7.4
C241	9151(27)	-1800(17)	10067(21)	7.4
C261	7385(23)	1068(13)	10354(16)	5.2
C262	7973(21)	1800(24)	9712(18)	6.7
C263	5901(25)	1256(15)	10593(20)	6.5
C264	8264(31)	997(18)	11374(20)	8.3
C31	8006(17)	1907(15)	6589(17)	5.7
C32	8508(24)	1709(38)	5582(20)	9.8
C33	7504(26)	2086(25)	4809(21)	11.1
C34	6492(29)	2566(18)	5436(20)	7.7
C41	2502(27)	814(16)	9217(18)	6.9
C42	1275(26)	242(18)	8964(24)	8.3
C43	568(28)	447(17)	7917(25)	8.7
C44	1060(23)	1261(18)	7778(23)	8.7
C51	6541(25)	3493(14)	8159(17)	6.1
C52	6544(36)	4181(18)	8849(23)	9.5
C53	5653(35)	3964(20)	9663(23)	9.9
C54	4784(28)	3279(18)	9236(20)	7.5

STable 2. Mean Square Displacement Tensors (x 10^3 $Å^2$) for Complex **1** with e. s. d.'s in Parentheses.

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
SM	36.3(4)	44.7(4)	47.6(4)	-0.2(10)	-1.4(3)	10.6(9)
O1	49(7)	53(8)	52(7)	-10(6)	-9(5)	6(6)
O2	64(8)	44(7)	55(8)	-2(6)	-11(6)	2(6)
O3	55(8)	68(9)	69(9)	0(7)	11(7)	8(7)
O4	38(7)	61(9)	92(10)	3(6)	6(7)	12(8)
O5	61(9)	57(9)	82(10)	4(7)	6(8)	-4(8)
C11	40(9)	67(13)	58(12)	-8(9)	-7(8)	20(10)
C12	45(9)	37(9)	47(10)	13(8)	2(8)	6(8)
C13	51(11)	48(12)	72(13)	8(9)	-1(10)	7(10)
C14	61(13)	66(14)	73(14)	-6(11)	-15(11)	-1(12)
C15	57(11)	50(11)	65(13)	0(9)	8(10)	13(10)
C16	39(7)	6(13)	61(9)	8(6)	4(6)	8(7)
C121	48(11)	65(14)	67(13)	21(10)	6(10)	-4(11)
C122	67(13)	76(15)	56(13)	-1(12)	10(10)	-10(12)
C123	84(16)	54(14)	90(17)	-9(12)	2(13)	-5(13)
C124	140(25)	54(15)	105(21)	45(16)	-38(18)	-23(14)
C141	81(16)	96(19)	63(14)	-1(15)	-31(13)	6(13)
C161	52(11)	56(12)	74(14)	16(10)	-7(10)	-18(11)
C162	66(15)	93(19)	101(19)	23(14)	8(13)	-11(16)
C163	104(20)	68(16)	89(18)	-16(14)	-1(15)	-38(14)
C164	70(14)	46(13)	79(15)	-3(11)	-11(12)	3(11)
C21	35(9)	71(13)	41(10)	1(9)	14(8)	11(9)
C22	42(9)	51(11)	42(10)	2(8)	13(8)	4(8)
C23	46(10)	55(12)	53(11)	16(9)	4(8)	21(9)
C24	63(13)	59(13)	78(15)	30(11)	19(11)	28(12)
C25	44(10)	64(14)	68(13)	3(10)	-5(9)	16(11)
C26	37(9)	55(12)	65(12)	-5(9)	-11(9)	9(10)
C221	40(11)	65(14)	100(17)	24(10)	-4(10)	-12(13)
C222	44(10)	63(14)	105(18)	-1(10)	-6(11)	-16(13)
C223	88(17)	76(16)	61(14)	9(14)	20(12)	-14(12)
C224	92(18)	62(15)	125(23)	18(14)	-15(16)	-55(16)
C241	93(18)	87(19)	99(19)	44(16)	3(15)	2(16)
C261	86(15)	48(12)	61(13)	-2(12)	-12(11)	0(10)
C262	84(13)	34(14)	130(18)	-15(18)	-21(12)	28(20)
C263	77(16)	76(17)	97(19)	2(13)	20(14)	-13(15)
C264	129(24)	95(21)	81(18)	-1(19)	-45(17)	-12(16)
C31	34(8)	69(23)	115(16)	-2(10)	6(9)	24(14)
C32	88(16)	156(26)	130(21)	21(42)	26(15)	-43(42)
C33	75(16)	259(56)	90(18)	-18(23)	25(14)	-16(24)
C34	105(21)	113(23)	79(18)	-17(18)	20(15)	26(17)
C41	104(20)	91(19)	69(15)	-23(16)	16(14)	29(14)
C42	67(16)	101(22)	151(27)	-16(16)	32(17)	37(20)
C43	85(18)	74(18)	164(29)	-14(15)	-43(19)	31(19)
C44	48(13)	140(25)	135(23)	-23(15)	-36(14)	39(20)
C51	97(17)	73(16)	66(14)	-26(14)	27(13)	-37(13)
C52	165(31)	90(22)	108(23)	-43(21)	20(21)	-47(19)
C53	167(31)	115(26)	103(22)	-58(23)	56(21)	-42(20)
C54	105(20)	102(21)	83(18)	19(17)	31(15)	-9(16)

STable 3. Bond Lengths and Angles for Complex **1**.

ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST	SIG(DIS)	ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST	SIG(DIS)	ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST	SIG(DIS)
SM	-O1	(1)	2.3311	0.0112	SM	-O2	(1)	2.3468	0.0126	SM	-O3	(1)	2.6013	0.0136
SM	-O4	(1)	2.6400	0.0135	SM	-O5	(1)	2.5679	0.0148	O1	-C11	(1)	1.2903	0.0213
O2	-C21	(1)	1.3753	0.0226	O3	-C31	(1)	1.4329	0.0213	O3	-C34	(1)	1.4264	0.0309
O4	-C41	(1)	1.4708	0.0288	O4	-C44	(1)	1.4590	0.0262	O5	-C51	(1)	1.4510	0.0287
O5	-C54	(1)	1.4353	0.0316	C11	-C12	(1)	1.4351	0.0266	C11	-C16	(1)	1.4101	0.0250
C12	-C13	(1)	1.3819	0.0254	C12	-C121	(1)	1.5444	0.0269	C13	-C14	(1)	1.4133	0.0301
C14	-C15	(1)	1.4016	0.0299	C14	-C141	(1)	1.5562	0.0308	C15	-C16	(1)	1.4145	0.0238
C16	-C161	(1)	1.5739	0.0262	C121	-C122	(1)	1.4947	0.0305	C121	-C123	(1)	1.6147	0.0306
C121	-C124	(1)	1.5808	0.0332	C161	-C162	(1)	1.5444	0.0309	C161	-C163	(1)	1.5592	0.0326
C161	-C164	(1)	1.5125	0.0311	C21	-C22	(1)	1.3759	0.0270	C21	-C26	(1)	1.4273	0.0248
C22	-C23	(1)	1.3958	0.0254	C22	-C221	(1)	1.5367	0.0276	C23	-C24	(1)	1.3877	0.0274
C24	-C25	(1)	1.3775	0.0307	C24	-C241	(1)	1.5625	0.0341	C25	-C26	(1)	1.3988	0.0277
C26	-C261	(1)	1.5927	0.0292	C221	-C222	(1)	1.6253	0.0283	C221	-C223	(1)	1.5510	0.0336
C221	-C224	(1)	1.5453	0.0337	C261	-C262	(1)	1.6287	0.0402	C261	-C263	(1)	1.5624	0.0344
C261	-C264	(1)	1.5467	0.0339	C31	-C32	(1)	1.5028	0.0380	C32	-C33	(1)	1.5007	0.0454
C33	-C34	(1)	1.5788	0.0437	C41	-C42	(1)	1.5600	0.0381	C42	-C43	(1)	1.5360	0.0431
C43	-C44	(1)	1.4628	0.0406	C51	-C52	(1)	1.4706	0.0389	C52	-C53	(1)	1.4991	0.0480
C53	-C54	(1)	1.5120	0.0434										

ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)	ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)
O1	(1)-SM	-O2	(1)	151.11	0.44	O1	(1)-SM	-O3	(1)	87.53	0.41
O1	(1)-SM	-O4	(1)	86.67	0.42	O1	(1)-SM	-O5	(1)	110.21	0.45
O2	(1)-SM	-O3	(1)	95.81	0.44	O2	(1)-SM	-O4	(1)	87.80	0.44
O2	(1)-SM	-O5	(1)	98.64	0.44	O3	(1)-SM	-O4	(1)	173.43	0.42
O3	(1)-SM	-O5	(1)	81.06	0.46	O4	(1)-SM	-O5	(1)	103.88	0.46
SM	(1)-O1	-C11	(1)	174.11	1.24	SM	(1)-O2	-C21	(1)	166.99	1.12
SM	(1)-O3	-C31	(1)	125.74	1.21	SM	(1)-O3	-C34	(1)	125.70	1.35
C31	(1)-O3	-C34	(1)	108.55	1.72	SM	(1)-O4	-C41	(1)	123.08	1.24
SM	(1)-O4	-C44	(1)	125.41	1.43	C41	(1)-O4	-C44	(1)	109.85	1.80
SM	(1)-O5	-C51	(1)	126.10	1.27	SM	(1)-O5	-C54	(1)	123.10	1.38
C51	(1)-O5	-C54	(1)	110.80	1.75	O1	(1)-C11	-C12	(1)	122.43	1.69
O1	(1)-C11	-C16	(1)	122.85	1.75	C12	(1)-C11	-C16	(1)	114.71	1.52
C11	(1)-C12	-C13	(1)	121.90	1.65	C11	(1)-C12	-C121	(1)	119.91	1.51

(STable 3 continued)

ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)	ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)
C13	(1)-C12	-C121	(1)	118.16	1.61	C12	(1)-C13	-C14	(1)	121.41	1.82
C13	(1)-C14	-C15	(1)	119.12	1.85	C13	(1)-C14	-C141	(1)	119.15	1.95
C15	(1)-C14	-C141	(1)	121.35	1.94	C14	(1)-C15	-C16	(1)	118.01	1.74
C11	(1)-C16	-C15	(1)	124.55	1.60	C11	(1)-C16	-C161	(1)	119.80	1.47
C15	(1)-C16	-C161	(1)	115.45	1.49	C12	(1)-C121	-C122	(1)	110.65	1.70
C12	(1)-C121	-C123	(1)	109.96	1.64	C12	(1)-C121	-C124	(1)	111.85	1.67
C122	(1)-C121	-C123	(1)	112.03	1.67	C122	(1)-C121	-C124	(1)	111.26	1.90
C123	(1)-C121	-C124	(1)	100.75	1.79	C16	(1)-C161	-C162	(1)	107.13	1.67
C16	(1)-C161	-C163	(1)	115.08	1.64	C16	(1)-C161	-C164	(1)	112.76	1.68
C162	(1)-C161	-C163	(1)	104.80	1.90	C162	(1)-C161	-C164	(1)	111.08	1.78
C163	(1)-C161	-C164	(1)	105.76	1.76	O2	(1)-C21	-C22	(1)	120.97	1.47
O2	(1)-C21	-C26	(1)	117.40	1.68	C22	(1)-C21	-C26	(1)	121.42	1.71
C21	(1)-C22	-C23	(1)	117.80	1.55	C21	(1)-C22	-C221	(1)	122.15	1.63
C23	(1)-C22	-C221	(1)	119.70	1.67	C22	(1)-C23	-C24	(1)	122.13	1.81
C23	(1)-C24	-C25	(1)	119.38	1.89	C23	(1)-C24	-C241	(1)	120.34	1.96
C25	(1)-C24	-C241	(1)	120.25	1.91	C24	(1)-C25	-C26	(1)	120.83	1.82
C21	(1)-C26	-C25	(1)	118.04	1.82	C21	(1)-C26	-C261	(1)	122.53	1.68
C25	(1)-C26	-C261	(1)	119.40	1.66	C22	(1)-C221	-C222	(1)	106.62	1.77
C22	(1)-C221	-C223	(1)	113.48	1.67	C22	(1)-C221	-C224	(1)	111.74	1.79
C222	(1)-C221	-C223	(1)	113.27	1.77	C222	(1)-C221	-C224	(1)	103.88	1.72
C223	(1)-C221	-C224	(1)	107.49	2.00	C26	(1)-C261	-C262	(1)	111.57	1.85
C26	(1)-C261	-C263	(1)	108.60	1.71	C26	(1)-C261	-C264	(1)	110.56	1.82
C262	(1)-C261	-C263	(1)	109.97	1.83	C262	(1)-C261	-C264	(1)	108.37	1.88
C263	(1)-C261	-C264	(1)	107.70	1.98	O3	(1)-C31	-C32	(1)	104.50	1.74
C31	(1)-C32	-C33	(1)	105.27	2.76	C32	(1)-C33	-C34	(1)	105.44	2.36
O3	(1)-C34	-C33	(1)	100.05	2.20	O4	(1)-C41	-C42	(1)	99.42	1.87
C41	(1)-C42	-C43	(1)	109.89	2.33	C42	(1)-C43	-C44	(1)	101.09	2.29
O4	(1)-C44	-C43	(1)	105.41	2.13	O5	(1)-C51	-C52	(1)	107.05	2.15
C51	(1)-C52	-C53	(1)	106.88	2.55	C52	(1)-C53	-C54	(1)	105.42	2.47
O5	(1)-C54	-C53	(1)	106.39	2.24						

STable 4. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for **2**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.05872(4)	0.09761(6)	0.86721(6)	0.056
I(1)	0.06985(7)	-0.10746(9)	0.97877(10)	0.093
O(1)	0.1371(5)	0.1073(8)	0.7602(7)	0.070
O(2)	-0.0452(6)	0.0545(9)	0.7163(8)	0.081
O(3)	0.0012(7)	0.2636(8)	0.8529(9)	0.090
O(4)	0.1696(6)	0.1589(10)	0.9997(9)	0.092
O(5)	0.0199(13)	0.5467(17)	0.7186(18)	0.288
C(1)	0.1848(8)	0.1116(12)	0.6988(10)	0.062
C(2)	0.2212(8)	0.0279(11)	0.6770(11)	0.060
C(3)	0.2715(9)	0.0369(12)	0.6153(12)	0.072
C(4)	0.2842(8)	0.1207(12)	0.5749(11)	0.068
C(5)	0.2474(9)	0.1994(12)	0.5939(12)	0.071
C(6)	0.1958(8)	0.1987(11)	0.6553(11)	0.064
C(7)	0.2094(10)	-0.0673(12)	0.7225(12)	0.079
C(8)	0.1238(9)	-0.0936(14)	0.6967(13)	0.086
C(9)	0.2401(10)	-0.0635(15)	0.8353(13)	0.089
C(10)	0.2518(13)	-0.1467(14)	0.6809(16)	0.115
C(11)	0.3420(11)	0.1262(14)	0.5064(14)	0.106
C(12)	0.1550(10)	0.2886(12)	0.6729(13)	0.080
C(13)	0.1762(11)	0.3144(14)	0.7835(15)	0.101
C(14)	0.0678(9)	0.2748(14)	0.6349(14)	0.088
C(15)	0.1781(13)	0.3707(14)	0.6110(18)	0.131
C(16)	-0.0487(13)	0.0548(16)	0.6107(13)	0.103
C(17)	-0.0848(13)	-0.0403(18)	0.5762(16)	0.125
C(18)	-0.1342(15)	-0.0576(19)	0.6444(19)	0.143
C(19)	-0.1047(12)	-0.0047(22)	0.7316(16)	0.149
C(20)	-0.0734(11)	0.2778(16)	0.7868(16)	0.104
C(21)	-0.1071(14)	0.3510(19)	0.8354(21)	0.145
C(22)	-0.0530(12)	0.3860(16)	0.9243(17)	0.120
C(23)	0.0204(12)	0.3307(15)	0.9287(16)	0.111
C(24)	0.2463(12)	0.1707(20)	0.9955(18)	0.133
C(25)	0.2921(12)	0.1178(27)	1.0822(20)	0.177
C(26)	0.2427(12)	0.1013(21)	1.1472(16)	0.132
C(27)	0.1697(11)	0.1540(18)	1.1032(13)	0.111
C(28)	0.0021(18)	0.6030(25)	0.8014(23)	0.202
C(29)	-0.016(2)	0.684(3)	0.763(3)	0.228
C(30)	-0.023(2)	0.694(3)	0.658(3)	0.233
C(31)	0.0054(19)	0.6022(26)	0.6267(25)	0.221

STable 5. Anisotropic Thermal Parameters for **2**

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0466(3)	0.0668(5)	0.0507(4)	-.0022(5)	0.0207(3)	0.0029(5)
I(1)	0.0939(9)	0.0786(8)	0.0955(9)	0.0131(8)	0.0604(7)	0.0194(8)
O(1)	0.065(6)	0.082(7)	0.055(6)	-0.002(6)	0.041(5)	0.006(6)
O(2)	0.063(7)	0.112(10)	0.063(7)	-0.007(7)	0.012(6)	-0.003(7)
O(3)	0.093(9)	0.077(8)	0.091(9)	0.015(7)	0.047(7)	0.005(7)
O(4)	0.067(8)	0.127(11)	0.075(8)	-0.013(8)	0.021(6)	-0.009(8)
O(5)	0.34(2)	0.18(2)	0.31(2)	0.08(2)	0.05(2)	0.02(2)
C(1)	0.061(9)	0.070(11)	0.050(8)	-0.010(9)	0.024(7)	-0.008(9)
C(2)	0.053(9)	0.065(11)	0.055(9)	-0.005(8)	0.022(7)	-0.009(8)
C(3)	0.06(1)	0.08(1)	0.06(1)	-0.01(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(4)	0.061(9)	0.079(12)	0.058(9)	-0.010(9)	0.029(7)	0.001(8)
C(5)	0.06(1)	0.08(1)	0.07(1)	0.00(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(6)	0.056(9)	0.066(10)	0.064(10)	-0.010(8)	0.024(8)	0.010(8)
C(7)	0.09(1)	0.06(1)	0.07(1)	-0.01(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(8)	0.07(1)	0.08(1)	0.10(1)	-0.02(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(9)	0.07(1)	0.12(2)	0.07(1)	0.01(1)	0.02(1)	0.03(1)
C(10)	0.14(2)	0.07(1)	0.12(2)	0.02(1)	0.06(2)	-0.01(1)
C(11)	0.10(1)	0.11(2)	0.10(1)	-0.01(1)	0.08(1)	0.01(1)
C(12)	0.08(1)	0.06(1)	0.09(1)	0.01(1)	0.04(1)	0.02(1)
C(13)	0.10(1)	0.08(1)	0.11(2)	-0.01(1)	0.05(1)	-0.03(1)
C(14)	0.05(1)	0.10(2)	0.10(1)	0.01(1)	0.02(1)	0.02(1)
C(15)	0.14(2)	0.07(1)	0.16(2)	0.01(1)	0.10(2)	0.04(1)
C(16)	0.12(2)	0.13(2)	0.05(1)	-0.04(1)	0.01(1)	0.00(1)
C(17)	0.11(2)	0.16(2)	0.09(2)	-0.04(2)	0.04(1)	-0.03(2)
C(18)	0.15(2)	0.14(2)	0.12(2)	-0.06(2)	0.06(2)	-0.03(2)
C(19)	0.09(2)	0.25(3)	0.10(2)	-0.09(2)	0.04(1)	-0.05(2)
C(20)	0.07(1)	0.11(2)	0.12(2)	0.03(1)	0.01(1)	0.00(1)
C(21)	0.10(2)	0.14(2)	0.18(3)	0.04(2)	0.02(2)	-0.05(2)
C(22)	0.11(2)	0.12(2)	0.12(2)	0.05(1)	0.04(1)	0.00(2)
C(23)	0.10(2)	0.10(2)	0.12(2)	0.00(1)	0.04(1)	-0.03(1)
C(24)	0.06(1)	0.21(3)	0.12(2)	-0.04(1)	0.04(1)	-0.02(2)
C(25)	0.07(1)	0.31(4)	0.14(2)	0.03(2)	0.02(1)	0.08(3)
C(26)	0.10(2)	0.18(3)	0.10(2)	0.02(2)	0.03(1)	0.03(2)
C(27)	0.09(1)	0.18(2)	0.06(1)	-0.01(1)	0.01(1)	0.00(1)
C(28)	0.34(3)	0.18(3)	0.06(3)	0.01(3)	0.10(2)	0.00(3)
C(29)	0.35(4)	0.16(4)	0.15(4)	0.04(3)	0.09(3)	-0.10(3)
C(30)	0.39(4)	0.10(4)	0.17(4)	0.04(3)	0.02(3)	0.09(3)
C(31)	0.32(3)	0.24(3)	0.08(3)	0.09(3)	0.13(3)	0.06(3)

$T=\exp[-2\pi^2(U_{11}.h^2.a^{*2}+U_{22}.k^2.b^{*2}+U_{33}.l^2.c^{*2}+2U_{12}.h.k.a^*.b^*+2U_{13}.h.l.a^*.c^*+2U_{23}.k.l.b^*.c^*)]$

STable 6. Bond Lengths and Angles for Complex **2**

Sm(1) - I(1)	3.308(2)	Sm(1) - I(1')	3.534(2)
Sm(1) - O(1)	2.300(10)	Sm(1) - O(2)	2.570(11)
Sm(1) - O(3)	2.589(13)	Sm(1) - O(4)	2.570(12)
O(1) - C(1)	1.356(17)	O(2) - C(16)	1.46(3)
O(2) - C(19)	1.44(3)	O(3) - C(20)	1.48(3)
O(3) - C(23)	1.41(3)	O(4) - C(24)	1.43(3)
O(4) - C(27)	1.44(3)	O(5) - C(28)	1.50(5)
O(5) - C(31)	1.48(5)	C(1) - C(2)	1.44(3)
C(1) - C(6)	1.42(3)	C(2) - C(3)	1.40(3)
C(2) - C(7)	1.54(3)	C(3) - C(4)	1.37(3)
C(4) - C(5)	1.37(3)	C(4) - C(11)	1.58(3)
C(5) - C(6)	1.41(3)	C(6) - C(12)	1.54(3)
C(7) - C(8)	1.57(3)	C(7) - C(9)	1.55(3)
C(7) - C(10)	1.56(3)	C(12) - C(13)	1.55(3)
C(12) - C(14)	1.58(3)	C(12) - C(15)	1.57(3)
C(16) - C(17)	1.54(4)	C(17) - C(18)	1.48(4)
C(18) - C(19)	1.43(4)	C(20) - C(21)	1.46(4)
C(21) - C(22)	1.49(4)	C(22) - C(23)	1.55(4)
C(24) - C(25)	1.51(4)	C(25) - C(26)	1.44(4)
C(26) - C(27)	1.54(4)	C(28) - C(29)	1.28(6)
C(29) - C(30)	1.45(6)	C(30) - C(31)	1.51(6)

I(1) - Sm(1) - I(1')	74.2(1)	I(1) - Sm(1) - O(1)	112.2(3)		
I(1) - Sm(1) - O(2)	97.3(3)	I(1) - Sm(1) - O(3)	146.3(3)		
I(1) - Sm(1) - O(4)	90.6(4)	I(1') - Sm(1) - O(1)	173.5(3)		
I(1') - Sm(1) - O(2)	92.0(3)	I(1') - Sm(1) - O(3)	72.2(3)		
I(1') - Sm(1) - O(4)	94.4(3)	O(1) - Sm(1) - O(2)	86.5(4)		
O(1) - Sm(1) - O(3)	101.4(4)	O(1) - Sm(1) - O(4)	86.4(4)		
O(2) - Sm(1) - O(3)	86.8(4)	O(2) - Sm(1) - O(4)	170.9(4)		
O(3) - Sm(1) - O(4)	89.0(5)	Sm(1) - I(1) - Sm(1')	105.8(1)		
Sm(1) - O(1) - C(1)	178.5(10)	Sm(1) - O(2) - C(16)	132.8(11)		
Sm(1) - O(2) - C(19)	117.8(11)	Sm(1) - O(3) - C(20)	118.5(11)		
Sm(1) - O(3) - C(23)	122.6(12)	Sm(1) - O(4) - C(24)	129.4(13)		
Sm(1) - O(4) - C(27)	121.5(11)				
C(16) - O(2) - C(19)	106.9(15)	C(20) - O(3) - C(23)	114.2(15)		
C(24) - O(4) - C(27)	105.6(15)	C(28) - O(5) - C(31)	110.4(25)		
O(1) - C(1) - C(2)	119.4(14)	O(1) - C(1) - C(6)	119.0(14)		
C(2) - C(1) - C(6)	121.5(14)	C(1) - C(2) - C(3)	117.0(15)		
C(1) - C(2) - C(7)	122.4(14)	C(3) - C(2) - C(7)	120.5(15)		
C(2) - C(3) - C(4)	122.0(16)	C(3) - C(4) - C(5)	120.4(15)		
C(3) - C(4) - C(11)	119.5(15)	C(5) - C(4) - C(11)	120.1(15)		
C(4) - C(5) - C(6)	122.5(16)	C(1) - C(6) - C(5)	116.4(15)		
C(1) - C(6) - C(12)	123.0(14)	C(5) - C(6) - C(12)	120.5(15)		
C(2) - C(7) - C(8)	110.1(14)	C(2) - C(7) - C(9)	109.6(14)		
C(2) - C(7) - C(10)	111.3(15)	C(8) - C(7) - C(9)	110.8(14)		
C(8) - C(7) - C(10)	107.2(15)	C(9) - C(7) - C(10)	107.8(15)		
C(6) - C(12) - C(13)	109.8(15)	C(6) - C(12) - C(14)	109.5(14)		
C(6) - C(12) - C(15)	109.7(15)	C(13) - C(12) - C(14)	111.7(15)		
C(13) - C(12) - C(15)	109.4(16)	C(14) - C(12) - C(15)	106.7(16)		
O(2) - C(16) - C(17)	103.3(16)	C(16) - C(17) - C(18)	103.3(19)		
C(17) - C(18) - C(19)	106.9(22)	O(2) - C(19) - C(18)	109.8(19)		
O(3) - C(20) - C(21)	103.8(18)	C(20) - C(21) - C(22)	110.9(20)		
C(21) - C(22) - C(23)	105.6(19)	O(3) - C(23) - C(22)	104.6(17)		
O(4) - C(24) - C(25)	106.3(19)	C(24) - C(25) - C(26)	105.8(20)		
C(25) - C(26) - C(27)	106.5(21)	O(4) - C(27) - C(26)	103.0(16)		
O(5) - C(28) - C(29)	104.1(29)	C(28) - C(29) - C(30)	117.5(35)		

(STable 6 continued)

C(29) - C(30) - C(31)	104.4(32)	O(5) - C(31) - C(30)	103.0(27)

STable 7. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for **3**

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.41765(3)	0.62458(3)	0.26506(2)	0.045
P(1)	0.22112(16)	0.74522(14)	0.40518(9)	0.058
P(2)	0.40251(17)	0.86584(15)	0.15826(9)	0.066
O(1)	0.2493(4)	0.4372(3)	0.2351(2)	0.060
O(2)	0.4148(5)	0.7832(4)	0.2025(3)	0.081
O(3)	0.3151(4)	0.7122(4)	0.3595(2)	0.073
N(1)	0.2706(6)	0.7545(5)	0.4894(3)	0.079
N(2)	0.0665(5)	0.6498(5)	0.3821(3)	0.073
N(3)	0.2140(7)	0.8736(5)	0.3988(4)	0.096
N(4)	0.5363(6)	0.9879(5)	0.1819(3)	0.077
N(5)	0.2652(6)	0.8986(6)	0.1677(4)	0.107
N(6)	0.3958(6)	0.8147(5)	0.0726(3)	0.080
C(1)	0.1602(6)	0.3344(5)	0.1994(3)	0.053
C(2)	0.0966(6)	0.2470(5)	0.2365(3)	0.057
C(3)	0.0043(6)	0.1390(5)	0.1972(4)	0.064
C(4)	-0.0279(6)	0.1123(5)	0.1234(4)	0.062
C(5)	0.0327(6)	0.1977(5)	0.0872(4)	0.062
C(6)	0.1244(6)	0.3075(5)	0.1235(3)	0.057
C(7)	0.1296(8)	0.2689(6)	0.3187(4)	0.075
C(8)	0.0471(10)	0.1654(7)	0.3486(5)	0.106
C(9)	0.2800(9)	0.2906(9)	0.3424(5)	0.107
C(10)	0.0917(12)	0.3753(7)	0.3551(5)	0.112
C(11)	-0.1229(8)	-0.0090(6)	0.0819(5)	0.085
C(12)	0.1865(7)	0.4000(6)	0.0817(3)	0.070
C(13)	0.1442(9)	0.5088(6)	0.1072(5)	0.095
C(14)	0.3399(8)	0.4334(7)	0.0922(4)	0.093
C(15)	0.1349(10)	0.3560(7)	0.0006(4)	0.100
C(16)	0.6341(6)	0.6051(6)	0.3541(3)	0.064
C(17)	0.6327(6)	0.5321(5)	0.2876(4)	0.067
C(18)	0.6778(6)	0.6043(6)	0.2395(4)	0.072
C(19)	0.7073(6)	0.7214(6)	0.2771(4)	0.075
C(20)	0.6809(6)	0.7222(6)	0.3471(4)	0.066
C(21)	0.5975(8)	0.5658(9)	0.4211(4)	0.108
C(22)	0.6008(9)	0.4004(6)	0.2738(6)	0.109
C(23)	0.7054(9)	0.5659(10)	0.1645(5)	0.135
C(24)	0.7696(8)	0.8271(8)	0.2456(6)	0.130
C(25)	0.6995(9)	0.8248(8)	0.4080(6)	0.119
C(26)	0.3096(11)	0.6605(9)	0.5092(5)	0.150
C(27)	0.2692(12)	0.8423(9)	0.5490(5)	0.139
C(28)	-0.0238(8)	0.6190(8)	0.4333(5)	0.110
C(29)	0.0044(8)	0.6115(8)	0.3076(5)	0.103
C(30)	0.0946(11)	0.9063(9)	0.4062(7)	0.156
C(31)	0.3335(11)	0.9674(8)	0.3943(7)	0.144
C(32)	0.5803(10)	1.0667(7)	0.1349(5)	0.117
C(33)	0.5859(10)	1.0434(8)	0.2574(5)	0.105
C(34)	0.1470(8)	0.8185(9)	0.1847(6)	0.124
C(35)	0.2551(13)	1.0088(11)	0.1567(10)	0.236
C(36)	0.2847(10)	0.7875(11)	0.0165(5)	0.150
C(37)	0.5002(10)	0.7694(8)	0.0484(5)	0.115
H(3)	-0.038(5)	0.074(5)	0.227(3)	0.06(2)
H(5)	0.007(5)	0.177(5)	0.029(3)	0.08(2)
H(8A)	0.092(5)	0.115(5)	0.333(3)	0.08(2)
H(8B)	-0.064(5)	0.135(5)	0.331(3)	0.09(2)
H(8C)	0.061(5)	0.185(5)	0.409(3)	0.10(2)

(STable 7 continued)

H(9A)	0.306(5)	0.313(5)	0.403(3)	0.08(2)
H(9B)	0.335(5)	0.369(5)	0.331(3)	0.10(2)
H(9C)	0.300(5)	0.213(5)	0.311(3)	0.10(2)
H(10A)	0.141(5)	0.387(5)	0.411(3)	0.11(2)
H(10B)	0.154(5)	0.446(5)	0.344(3)	0.10(2)
H(10C)	-0.021(5)	0.340(5)	0.330(3)	0.10(2)
H(11A)	-0.14483	-0.02713	0.03052	0.10(2)
H(11B)	-0.20723	-0.02173	0.09992	0.11(2)
H(11C)	-0.08323	-0.06463	0.09352	0.12(2)
H(13A)	0.050(5)	0.500(5)	0.077(3)	0.10(2)
H(13B)	0.166(5)	0.537(5)	0.160(3)	0.09(2)
H(13C)	0.204(5)	0.577(5)	0.083(3)	0.09(2)
H(14A)	0.397(5)	0.455(5)	0.147(3)	0.08(2)
H(14B)	0.393(5)	0.501(5)	0.073(3)	0.09(2)
H(14C)	0.355(5)	0.367(5)	0.075(3)	0.09(2)
H(15A)	0.166(5)	0.422(5)	-0.024(3)	0.08(2)
H(15B)	0.162(5)	0.295(5)	-0.017(3)	0.08(2)
H(15C)	0.031(5)	0.341(5)	-0.005(3)	0.09(2)
H(21A)	0.663(5)	0.612(5)	0.462(3)	0.10(2)
H(21B)	0.567(5)	0.468(5)	0.405(3)	0.11(2)
H(21C)	0.508(5)	0.596(5)	0.435(3)	0.12(2)
H(22A)	0.511(5)	0.347(5)	0.238(3)	0.10(2)
H(22B)	0.663(5)	0.374(5)	0.285(3)	0.10(2)
H(22C)	0.637(5)	0.378(5)	0.215(3)	0.12(2)
H(23A)	0.784(5)	0.557(5)	0.153(3)	0.11(2)
H(23B)	0.656(5)	0.596(5)	0.122(3)	0.10(2)
H(23C)	0.657(5)	0.492(5)	0.164(3)	0.11(2)
H(24A)	0.707(5)	0.827(5)	0.202(3)	0.10(2)
H(24B)	0.855(5)	0.835(5)	0.229(3)	0.09(2)
H(24C)	0.786(5)	0.879(5)	0.291(3)	0.10(2)
H(25A)	0.630(5)	0.837(5)	0.432(3)	0.11(2)
H(25B)	0.780(5)	0.879(5)	0.442(3)	0.12(2)
H(25C)	0.716(5)	0.867(5)	0.374(3)	0.10(2)
H(26A)	0.406(5)	0.728(5)	0.553(3)	0.10(2)
H(26B)	0.351(5)	0.626(5)	0.478(3)	0.10(2)
H(26C)	0.260(5)	0.626(5)	0.545(3)	0.11(2)
H(27A)	0.353(5)	0.889(5)	0.585(3)	0.11(2)
H(27B)	0.238(5)	0.903(5)	0.523(3)	0.11(2)
H(27C)	0.212(5)	0.800(5)	0.586(3)	0.11(2)
H(28A)	-0.075(5)	0.523(5)	0.422(3)	0.10(2)
H(28B)	0.026(5)	0.668(5)	0.488(3)	0.10(2)
H(28C)	-0.097(5)	0.634(5)	0.419(3)	0.11(2)
H(29A)	0.080(5)	0.638(5)	0.279(3)	0.09(2)
H(29B)	-0.063(5)	0.616(5)	0.286(3)	0.11(2)
H(29C)	-0.053(5)	0.506(5)	0.290(3)	0.11(2)
H(30A)	0.09016	0.98164	0.40252	0.13(2)
H(30B)	0.07326	0.89714	0.45262	0.13(2)
H(30C)	0.02386	0.84874	0.36992	0.13(2)
H(31A)	0.301(5)	1.020(5)	0.366(3)	0.11(2)
H(31B)	0.400(5)	0.939(5)	0.386(3)	0.10(2)
H(31C)	0.358(5)	1.016(5)	0.451(3)	0.12(2)
H(32A)	0.540(5)	1.017(5)	0.077(3)	0.09(2)
H(32B)	0.674(5)	1.105(5)	0.128(3)	0.11(2)
H(32C)	0.549(5)	1.133(5)	0.150(3)	0.09(2)
H(33A)	0.66360	1.11447	0.27110	0.12(2)
H(33B)	0.60790	0.98627	0.27890	0.12(2)

H(33C)	0.51240	1.06067	0.27750	0.12(2)
H(34A)	0.148(5)	0.732(5)	0.187(3)	0.10(2)

(STable 7 continued)

H(34B)	0.114(5)	0.868(5)	0.214(3)	0.11(2)
H(34C)	0.066(5)	0.785(5)	0.135(3)	0.10(2)
H(35A)	0.155(5)	0.945(5)	0.102(3)	0.11(2)
H(35B)	0.198(5)	1.041(5)	0.178(3)	0.11(2)
H(35C)	0.320(5)	1.049(5)	0.122(3)	0.11(2)
H(36A)	0.28077	0.75744	-0.03390	0.13(2)
H(36B)	0.26657	0.85984	0.02010	0.13(2)
H(36C)	0.21037	0.73114	0.02980	0.14(2)
H(37A)	0.49635	0.73928	-0.00200	0.14(2)
H(37B)	0.49875	0.70678	0.07150	0.11(2)
H(37C)	0.58575	0.83238	0.06520	0.12(2)

STable 8. Anisotropic Thermal Parameters for **3**

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0378(1)	0.0367(1)	0.0450(1)	0.0140(1)	0.0071(1)	0.0128(1)
P(1)	0.0500(8)	0.0524(9)	0.0523(9)	0.0256(7)	0.0148(7)	0.0176(7)
P(2)	0.0555(9)	0.0570(9)	0.0625(10)	0.0281(8)	0.0153(8)	0.0278(8)
O(1)	0.064(3)	0.042(2)	0.054(3)	0.006(2)	0.006(2)	0.008(2)
O(2)	0.079(3)	0.064(3)	0.071(3)	0.033(2)	0.020(2)	0.038(2)
O(3)	0.059(3)	0.071(3)	0.063(3)	0.028(2)	0.027(2)	0.012(2)
N(1)	0.083(4)	0.073(4)	0.052(3)	0.038(3)	0.012(3)	0.017(3)
N(2)	0.048(3)	0.072(4)	0.074(4)	0.024(3)	0.012(3)	0.026(3)
N(3)	0.092(5)	0.063(4)	0.100(5)	0.043(3)	0.033(4)	0.038(3)
N(4)	0.070(4)	0.054(3)	0.081(4)	0.023(3)	0.019(3)	0.027(3)
N(5)	0.068(4)	0.097(5)	0.120(6)	0.054(4)	0.029(4)	0.048(4)
N(6)	0.070(4)	0.080(4)	0.060(4)	0.028(3)	0.007(3)	0.016(3)
C(1)	0.046(3)	0.037(3)	0.058(4)	0.012(2)	0.007(3)	0.009(2)
C(2)	0.047(3)	0.044(3)	0.061(4)	0.019(3)	0.012(3)	0.016(3)
C(3)	0.045(3)	0.043(3)	0.084(5)	0.017(3)	0.014(3)	0.019(3)
C(4)	0.049(3)	0.037(3)	0.079(4)	0.012(3)	0.005(3)	0.004(3)
C(5)	0.057(4)	0.048(3)	0.059(4)	0.019(3)	0.000(3)	0.003(3)
C(6)	0.052(3)	0.048(3)	0.051(3)	0.017(3)	0.007(3)	0.009(3)
C(7)	0.083(5)	0.054(4)	0.062(4)	0.020(3)	0.021(4)	0.024(3)
C(8)	0.118(7)	0.074(5)	0.088(6)	0.023(5)	0.037(5)	0.040(5)
C(9)	0.090(6)	0.111(8)	0.082(6)	0.007(5)	-0.010(5)	0.035(6)
C(10)	0.15(1)	0.07(1)	0.08(1)	0.03(1)	0.04(1)	0.02(0)
C(11)	0.074(5)	0.052(4)	0.100(6)	0.007(3)	0.003(4)	-0.004(4)
C(12)	0.078(4)	0.060(4)	0.048(4)	0.012(3)	0.007(3)	0.015(3)
C(13)	0.120(7)	0.057(4)	0.076(6)	0.024(4)	0.002(5)	0.026(4)
C(14)	0.083(5)	0.084(6)	0.081(5)	0.007(4)	0.031(4)	0.018(4)
C(15)	0.120(7)	0.084(6)	0.059(4)	0.014(5)	0.009(4)	0.023(4)
C(16)	0.046(3)	0.068(4)	0.056(4)	0.027(3)	0.003(3)	0.021(3)
C(17)	0.045(3)	0.055(3)	0.078(5)	0.029(3)	0.010(3)	0.015(3)
C(18)	0.041(3)	0.084(5)	0.064(4)	0.027(3)	0.015(3)	0.019(3)
C(19)	0.040(3)	0.062(4)	0.100(5)	0.016(3)	0.005(3)	0.040(4)
C(20)	0.046(3)	0.054(4)	0.075(4)	0.024(3)	-0.004(3)	0.003(3)
C(21)	0.082(5)	0.132(8)	0.069(5)	0.049(5)	0.015(4)	0.046(5)
C(22)	0.079(6)	0.057(4)	0.159(9)	0.039(4)	0.012(6)	0.003(5)
C(23)	0.080(5)	0.196(10)	0.075(5)	0.070(6)	0.032(4)	0.027(6)
C(24)	0.058(5)	0.118(7)	0.173(10)	0.021(4)	0.020(6)	0.098(7)
C(25)	0.083(6)	0.096(6)	0.138(8)	0.034(5)	-0.009(5)	-0.053(6)
C(26)	0.17(1)	0.14(1)	0.08(1)	0.10(1)	0.03(1)	0.06(1)
C(27)	0.19(1)	0.12(1)	0.06(1)	0.06(1)	0.01(1)	0.00(1)
C(28)	0.067(5)	0.112(7)	0.113(7)	0.021(5)	0.040(5)	0.036(6)
C(29)	0.062(5)	0.124(7)	0.085(5)	0.021(5)	-0.019(4)	0.029(5)
C(30)	0.132(8)	0.103(7)	0.182(11)	0.087(7)	0.026(8)	0.045(7)
C(31)	0.139(8)	0.063(5)	0.186(12)	0.041(5)	0.068(8)	0.052(7)
C(32)	0.129(7)	0.062(5)	0.121(7)	0.028(5)	0.056(6)	0.043(5)
C(33)	0.105(7)	0.082(6)	0.094(6)	0.029(5)	0.001(5)	0.005(5)
C(34)	0.068(5)	0.124(8)	0.137(8)	0.045(5)	0.037(5)	0.033(7)
C(35)	0.13(1)	0.15(1)	0.36(2)	0.10(1)	0.08(1)	0.13(1)
C(36)	0.111(7)	0.203(12)	0.076(6)	0.042(7)	0.006(5)	0.065(7)
C(37)	0.111(7)	0.106(7)	0.085(6)	0.052(6)	0.030(5)	0.002(5)

$T=\exp[-2\pi^2(U_{11}.h^2.a^{*2}+U_{22}.k^2.b^{*2}+U_{33}.l^2.c^{*2}+2U_{12}.h.k.a^*.b^*+2U_{13}.h.l.a^*.c^*+2U_{23}.k.l.b^*.c^*)]$

STable 9. Bond Lengths and Angles for Complex **3**

Sm(1) - O(1)	2.345(4)	Sm(1) - O(2)	2.497(5)
Sm(1) - O(3)	2.443(5)	Sm(1) - C(16)	2.827(6)
Sm(1) - C(17)	2.876(7)	Sm(1) - C(18)	2.906(7)
Sm(1) - C(19)	2.868(6)	Sm(1) - C(20)	2.822(6)
P(1) - O(3)	1.481(5)	P(1) - N(1)	1.628(6)
P(1) - N(2)	1.636(6)	P(1) - N(3)	1.637(7)
P(2) - O(2)	1.479(5)	P(2) - N(4)	1.650(6)
P(2) - N(5)	1.636(7)	P(2) - N(6)	1.633(7)
O(1) - C(1)	1.321(7)	N(1) - C(26)	1.451(12)
N(1) - C(27)	1.420(12)	N(2) - C(28)	1.452(11)
N(2) - C(29)	1.442(10)	N(3) - C(30)	1.449(13)
N(3) - C(31)	1.435(13)	N(4) - C(32)	1.453(11)
N(4) - C(33)	1.449(11)	N(5) - C(34)	1.433(12)
N(5) - C(35)	1.451(15)	N(6) - C(36)	1.424(11)
N(6) - C(37)	1.456(12)	C(1) - C(2)	1.432(9)
C(1) - C(6)	1.421(9)	C(2) - C(3)	1.393(8)
C(2) - C(7)	1.539(10)	C(3) - C(4)	1.378(10)
C(4) - C(5)	1.395(10)	C(4) - C(11)	1.521(10)
C(5) - C(6)	1.388(9)	C(6) - C(12)	1.537(10)
C(7) - C(8)	1.547(12)	C(7) - C(9)	1.529(12)
C(7) - C(10)	1.548(12)	C(12) - C(13)	1.550(11)
C(12) - C(14)	1.518(11)	C(12) - C(15)	1.534(10)
C(16) - C(17)	1.411(10)	C(16) - C(20)	1.409(10)
C(16) - C(21)	1.505(11)	C(17) - C(18)	1.418(10)
C(17) - C(22)	1.513(10)	C(18) - C(19)	1.405(10)
C(18) - C(23)	1.513(12)	C(19) - C(20)	1.400(11)
C(19) - C(24)	1.529(13)	C(20) - C(25)	1.493(12)

O(1) - Sm(1) - O(2)	123.3(2)	O(1) - Sm(1) - O(3)	96.3(2)
O(1) - Sm(1) - C(16)	105.6(2)	O(1) - Sm(1) - C(17)	93.0(2)
O(1) - Sm(1) - C(18)	109.8(2)	O(1) - Sm(1) - C(19)	137.4(2)
O(1) - Sm(1) - C(20)	134.5(2)	O(2) - Sm(1) - O(3)	89.2(2)
O(2) - Sm(1) - C(16)	129.5(2)	O(2) - Sm(1) - C(17)	128.1(2)
O(2) - Sm(1) - C(18)	100.0(2)	O(2) - Sm(1) - C(19)	85.1(2)
O(2) - Sm(1) - C(20)	101.1(2)	O(3) - Sm(1) - C(16)	97.9(2)
O(3) - Sm(1) - C(17)	125.4(2)	O(3) - Sm(1) - C(18)	140.3(2)
O(3) - Sm(1) - C(19)	116.9(2)	O(3) - Sm(1) - C(20)	93.5(2)
C(16) - Sm(1) - C(17)	28.6(2)	C(16) - Sm(1) - C(18)	47.2(2)
C(16) - Sm(1) - C(19)	47.2(2)	C(16) - Sm(1) - C(20)	28.9(2)
C(17) - Sm(1) - C(18)	28.4(2)	C(17) - Sm(1) - C(19)	46.6(2)
C(17) - Sm(1) - C(20)	47.0(2)	C(18) - Sm(1) - C(19)	28.2(2)
C(18) - Sm(1) - C(20)	46.8(2)	C(19) - Sm(1) - C(20)	28.5(3)
Sm(1) - O(1) - C(1)	163.6(4)	Sm(1) - O(2) - P(2)	173.2(3)
Sm(1) - O(3) - P(1)	165.7(3)	Sm(1) - C(16) - C(17)	77.6(4)
Sm(1) - C(16) - C(20)	75.4(4)	Sm(1) - C(16) - C(21)	114.9(5)
Sm(1) - C(17) - C(16)	73.7(4)	Sm(1) - C(17) - C(18)	77.0(4)
Sm(1) - C(17) - C(22)	120.0(5)	Sm(1) - C(18) - C(17)	74.6(4)
Sm(1) - C(18) - C(19)	74.5(4)	Sm(1) - C(18) - C(23)	121.8(5)
Sm(1) - C(19) - C(18)	77.4(4)	Sm(1) - C(19) - C(20)	73.9(4)
Sm(1) - C(19) - C(24)	119.2(5)	Sm(1) - C(20) - C(16)	75.7(4)
Sm(1) - C(20) - C(19)	77.6(4)	Sm(1) - C(20) - C(25)	114.3(5)
O(3) - P(1) - N(1)	111.4(3)	O(3) - P(1) - N(2)	112.1(3)
O(3) - P(1) - N(3)	110.5(4)	N(1) - P(1) - N(2)	107.5(4)
N(1) - P(1) - N(3)	107.5(4)	N(2) - P(1) - N(3)	107.5(4)
O(2) - P(2) - N(4)	110.3(3)	O(2) - P(2) - N(5)	110.6(4)
O(2) - P(2) - N(6)	113.7(3)	N(4) - P(2) - N(5)	109.2(4)

(STable 9 continued)

N(4) - P(2) - N(6)	105.6(4)	N(5) - P(2) - N(6)	107.3(4)
P(1) - N(1) - C(26)	119.4(6)	P(1) - N(1) - C(27)	126.5(6)
C(26) - N(1) - C(27)	113.9(7)	P(1) - N(2) - C(28)	123.4(6)
P(1) - N(2) - C(29)	119.4(6)	C(28) - N(2) - C(29)	116.0(7)
P(1) - N(3) - C(30)	123.5(6)	P(1) - N(3) - C(31)	121.0(6)
C(30) - N(3) - C(31)	115.0(8)	P(2) - N(4) - C(32)	123.5(6)
P(2) - N(4) - C(33)	119.3(6)	C(32) - N(4) - C(33)	113.7(7)
P(2) - N(5) - C(34)	121.9(6)	P(2) - N(5) - C(35)	121.6(7)
C(34) - N(5) - C(35)	116.4(8)	P(2) - N(6) - C(36)	127.3(6)
P(2) - N(6) - C(37)	119.6(6)	C(36) - N(6) - C(37)	112.0(7)
O(1) - C(1) - C(2)	120.7(6)	O(1) - C(1) - C(6)	121.1(5)
C(2) - C(1) - C(6)	118.2(6)	C(1) - C(2) - C(3)	119.2(6)
C(1) - C(2) - C(7)	121.6(6)	C(3) - C(2) - C(7)	119.3(6)
C(2) - C(3) - C(4)	122.4(6)	C(3) - C(4) - C(5)	118.5(6)
C(3) - C(4) - C(11)	120.9(6)	C(5) - C(4) - C(11)	120.5(7)
C(4) - C(5) - C(6)	121.7(7)	C(1) - C(6) - C(5)	119.9(6)
C(1) - C(6) - C(12)	120.1(6)	C(5) - C(6) - C(12)	120.0(6)
C(2) - C(7) - C(8)	113.7(6)	C(2) - C(7) - C(9)	110.6(6)
C(2) - C(7) - C(10)	109.8(6)	C(8) - C(7) - C(9)	107.2(7)
C(8) - C(7) - C(10)	105.0(7)	C(9) - C(7) - C(10)	110.4(7)
C(6) - C(12) - C(13)	108.8(6)	C(6) - C(12) - C(14)	110.5(6)
C(6) - C(12) - C(15)	112.8(6)	C(13) - C(12) - C(14)	111.3(7)
C(13) - C(12) - C(15)	106.5(7)	C(14) - C(12) - C(15)	106.9(7)
C(17) - C(16) - C(20)	107.3(6)	C(17) - C(16) - C(21)	126.4(7)
C(20) - C(16) - C(21)	126.3(7)	C(16) - C(17) - C(18)	108.4(6)
C(16) - C(17) - C(22)	124.5(7)	C(18) - C(17) - C(22)	126.9(7)
C(17) - C(18) - C(19)	107.1(6)	C(17) - C(18) - C(23)	127.2(8)
C(19) - C(18) - C(23)	125.3(8)	C(18) - C(19) - C(20)	108.6(6)
C(18) - C(19) - C(24)	123.3(8)	C(20) - C(19) - C(24)	127.9(7)
C(16) - C(20) - C(19)	108.5(6)	C(16) - C(20) - C(25)	122.4(7)
C(19) - C(20) - C(25)	129.1(7)		

STable 10. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for **4**.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.00000	0.05834(7)	0.25000	0.035
I(1)	0.00000	-0.22327(10)	0.25000	0.071
O(1)	-0.0429(4)	0.1191(6)	0.1567(3)	0.040
O(2)	0.1336(4)	0.0817(8)	0.2288(3)	0.054
C(1)	-0.0757(6)	0.1583(9)	0.0984(5)	0.041
C(2)	-0.1129(6)	0.0702(10)	0.0541(4)	0.045
C(3)	-0.1499(6)	0.1156(11)	-0.0029(5)	0.053
C(4)	-0.1494(7)	0.2377(11)	-0.0206(5)	0.053
C(5)	-0.1106(7)	0.3225(11)	0.0221(5)	0.055
C(6)	-0.0732(7)	0.2852(9)	0.0817(5)	0.046
C(7)	-0.1131(7)	-0.0717(11)	0.0669(5)	0.057
C(8)	-0.0265(7)	-0.1185(11)	0.0783(6)	0.061
C(9)	-0.1583(7)	-0.1024(12)	0.1187(6)	0.065
C(10)	-0.1530(11)	-0.1443(13)	0.0083(7)	0.097
C(11)	-0.1886(9)	0.2835(13)	-0.0838(6)	0.070
C(12)	-0.0342(9)	0.3866(10)	0.1267(5)	0.065
C(13)	-0.0779(9)	0.3924(12)	0.1837(6)	0.075
C(14)	0.0548(8)	0.3582(13)	0.1435(7)	0.076
C(15)	-0.0387(12)	0.5179(11)	0.0972(7)	0.101
C(16)	0.2035(8)	0.1323(19)	0.2671(7)	0.104
C(17)	0.2585(10)	0.1467(26)	0.2324(8)	0.179
C(18)	0.2323(8)	0.1085(22)	0.1682(7)	0.115
C(19)	0.1570(8)	0.0455(14)	0.1705(6)	0.074
H(3)	-0.177(5)	0.062(10)	-0.037(4)	0.07
H(5)	-0.098(5)	0.414(9)	0.009(4)	0.06
H(8A)	-0.02658	-0.20638	0.08642	0.12
H(8B)	0.00212	-0.07558	0.11342	0.07
H(8C)	-0.00178	-0.10238	0.04242	0.08
H(9A)	-0.15841	-0.19034	0.12684	0.10
H(9B)	-0.21161	-0.07434	0.10764	0.09
H(9C)	-0.13471	-0.05984	0.15574	0.08
H(10A)	-0.15305	-0.23215	0.01645	0.10
H(10B)	-0.12475	-0.12835	-0.02565	0.08
H(10C)	-0.20615	-0.11575	-0.00265	0.11
H(11A)	-0.179(6)	0.214(9)	-0.121(5)	0.12
H(11B)	-0.244(5)	0.249(10)	-0.084(4)	0.11
H(11C)	-0.201(6)	0.359(9)	-0.080(4)	0.09
H(13A)	-0.05310	0.45509	0.21147	0.10
H(13B)	-0.07520	0.31299	0.20417	0.08
H(13C)	-0.13210	0.41339	0.17027	0.11
H(14A)	0.077(5)	0.414(9)	0.174(4)	0.08
H(14B)	0.082(6)	0.353(9)	0.100(4)	0.07
H(14C)	0.066(6)	0.277(9)	0.163(5)	0.08
H(15A)	-0.01393	0.58060	0.12500	0.10
H(15B)	-0.09313	0.53930	0.08530	0.10
H(15C)	-0.01363	0.51600	0.06080	0.10
H(16A)	0.22120	0.07492	0.30007	0.14
H(16B)	0.19080	0.21032	0.28478	0.11
H(17A)	0.30378	0.09836	0.24897	0.13
H(17B)	0.27278	0.23316	0.23297	0.13
H(18A)	0.26924	0.05269	0.15374	0.11
H(18B)	0.22474	0.17929	0.14104	0.16
H(19A)	0.11780	0.07129	0.13674	0.08
H(19B)	0.16330	-0.04321	0.16874	0.11

16

STable 11. Anisotropic Thermal Parameters for **4**

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0386(3)	0.0327(3)	0.0327(3)	0.0000	-.0029(3)	0.0000
I(1)	0.106(1)	0.037(1)	0.066(1)	0.000	-0.028(1)	0.000
O(1)	0.046(4)	0.034(4)	0.039(4)	0.000(3)	0.000(3)	0.002(3)
O(2)	0.039(4)	0.068(5)	0.053(4)	-0.011(4)	0.004(3)	-0.006(4)
C(1)	0.037(6)	0.042(5)	0.042(5)	0.006(5)	-0.001(4)	0.007(4)
C(2)	0.044(5)	0.046(6)	0.041(5)	0.002(5)	0.000(4)	0.006(5)
C(3)	0.054(7)	0.056(7)	0.045(6)	0.005(5)	0.000(5)	-0.001(5)
C(4)	0.055(7)	0.063(7)	0.039(6)	0.014(6)	0.000(5)	0.011(5)
C(5)	0.068(8)	0.045(6)	0.051(7)	0.018(6)	0.005(6)	0.008(5)
C(6)	0.052(7)	0.043(6)	0.042(6)	0.002(5)	-0.002(5)	0.007(4)
C(7)	0.069(7)	0.045(6)	0.055(6)	-0.012(6)	-0.010(5)	-0.002(5)
C(8)	0.064(7)	0.043(6)	0.072(8)	0.005(5)	0.009(6)	-0.001(6)
C(9)	0.047(7)	0.066(8)	0.077(8)	-0.017(6)	-0.005(6)	0.018(7)
C(10)	0.16(2)	0.05(1)	0.08(1)	-0.02(1)	-0.04(1)	0.00(1)
C(11)	0.09(1)	0.08(1)	0.04(1)	0.01(1)	-0.01(1)	0.02(1)
C(12)	0.11(1)	0.03(1)	0.05(1)	0.00(1)	-0.01(1)	0.00(0)
C(13)	0.11(1)	0.05(1)	0.05(1)	0.02(1)	0.01(1)	-0.01(1)
C(14)	0.073(8)	0.067(9)	0.085(9)	-0.022(7)	-0.003(7)	-0.009(7)
C(15)	0.19(2)	0.03(1)	0.08(1)	-0.01(1)	-0.03(1)	0.00(1)
C(16)	0.056(8)	0.166(19)	0.088(10)	-0.056(10)	-0.013(7)	-0.027(11)
C(17)	0.08(1)	0.35(3)	0.10(1)	-0.11(2)	0.02(1)	-0.05(2)
C(18)	0.058(9)	0.196(22)	0.088(10)	-0.021(12)	0.020(8)	-0.016(13)
C(19)	0.074(9)	0.084(10)	0.061(8)	-0.014(8)	0.027(7)	-0.024(7)

$T=\exp[-2\pi^2(U_{11}.h^2.a^{*2}+U_{22}.k^2.b^{*2}+U_{33}.l^2.c^{*2}+2U_{12}.h.k.a^*.b^*+2U_{13}.h.l.a^*.c^*+2U_{23}.k.l.b^*.c^*)]$

STable 12. Bond Lengths and Angles for Complex **4**

Sm(1) - I(1)	3.024(2)	Sm(1) - O(1)	2.153(7)
Sm(1) - O(2)	2.424(7)		
O(1) - C(1)	1.373(12)	O(2) - C(16)	1.458(17)
O(2) - C(19)	1.442(15)	C(1) - C(2)	1.431(15)
C(1) - C(6)	1.413(15)	C(2) - C(3)	1.392(15)
C(2) - C(7)	1.550(16)	C(3) - C(4)	1.367(17)
C(3) - H(3)	1.00(10)	C(4) - C(5)	1.396(17)
C(4) - C(11)	1.518(17)	C(5) - C(6)	1.415(16)
C(5) - H(5)	1.05(11)	C(6) - C(12)	1.547(16)
C(7) - C(8)	1.556(17)	C(7) - C(9)	1.501(17)
C(7) - C(10)	1.560(19)	C(8) - H(8A)	0.960(12)
C(8) - H(8B)	0.961(13)	C(8) - H(8C)	0.961(13)
C(9) - H(9A)	0.960(13)	C(9) - H(9B)	0.960(12)
C(9) - H(9C)	0.961(13)	C(10) - H(10A)	0.960(14)
C(10) - H(10B)	0.960(16)	C(10) - H(10C)	0.959(18)
C(11) - H(11A)	1.12(10)	C(11) - H(11B)	1.03(10)
C(11) - H(11C)	0.85(10)	C(12) - C(13)	1.548(19)
C(12) - C(14)	1.55(2)	C(12) - C(15)	1.546(16)
C(13) - H(13A)	0.960(14)	C(13) - H(13B)	0.960(13)
C(13) - H(13C)	0.960(16)	C(14) - H(14A)	0.94(10)
C(14) - H(14B)	1.13(10)	C(14) - H(14C)	0.97(10)
C(15) - H(15A)	0.960(15)	C(15) - H(15B)	0.96(2)
C(15) - H(15C)	0.959(17)	C(16) - C(17)	1.31(3)
C(16) - H(16A)	0.960(18)	C(16) - H(16B)	0.96(2)
C(17) - C(18)	1.46(3)	C(17) - H(17A)	0.96(3)
C(17) - H(17B)	0.96(3)	C(18) - C(19)	1.47(3)
C(18) - H(18A)	0.960(19)	C(18) - H(18B)	0.96(3)
C(19) - H(19A)	0.959(13)	C(19) - H(19B)	0.960(15)

I(1) - Sm(1) - O(1)	107.6(2)	I(1) - Sm(1) - O(2)	95.9(3)
O(1) - Sm(1) - O(1')	144.7(3)	O(1) - Sm(1) - O(2)	89.2(3)
O(1) - Sm(1) - O(2')	87.2(3)	O(1') - Sm(1) - O(2)	87.2(3)
O(1') - Sm(1) - O(2')	89.2(3)	O(2) - Sm(1) - O(2')	168.1(3)
Sm(1) - O(1) - C(1)	175.8(6)	Sm(1) - O(2) - C(16)	130.7(7)
Sm(1) - O(2) - C(19)	122.7(7)		
C(16) - O(2) - C(19)	106.7(9)	O(1) - C(1) - C(2)	120.0(9)
O(1) - C(1) - C(6)	120.6(9)	C(2) - C(1) - C(6)	119.4(9)
C(1) - C(2) - C(3)	117.8(10)	C(1) - C(2) - C(7)	122.7(9)
C(3) - C(2) - C(7)	119.5(10)	C(2) - C(3) - C(4)	124.5(11)
C(2) - C(3) - H(3)	123.7(58)	C(4) - C(3) - H(3)	111.7(58)
C(3) - C(4) - C(5)	117.4(11)	C(3) - C(4) - C(11)	123.1(11)
C(5) - C(4) - C(11)	119.5(11)	C(4) - C(5) - C(6)	122.0(11)
C(4) - C(5) - H(5)	121.1(51)	C(6) - C(5) - H(5)	116.0(51)
C(1) - C(6) - C(5)	118.8(10)	C(1) - C(6) - C(12)	122.9(10)
C(5) - C(6) - C(12)	118.3(10)	C(2) - C(7) - C(8)	108.5(9)
C(2) - C(7) - C(9)	111.6(10)	C(2) - C(7) - C(10)	110.9(10)
C(8) - C(7) - C(9)	113.7(10)	C(8) - C(7) - C(10)	105.0(11)
C(9) - C(7) - C(10)	107.0(11)	C(7) - C(8) - H(8A)	108.5(11)
C(7) - C(8) - H(8B)	109.4(11)	C(7) - C(8) - H(8C)	110.1(11)
H(8A) - C(8) - H(8B)	109.9(13)	H(8A) - C(8) - H(8C)	109.9(12)
H(8B) - C(8) - H(8C)	109.0(12)	C(7) - C(9) - H(9A)	111.7(12)
C(7) - C(9) - H(9B)	109.0(12)	C(7) - C(9) - H(9C)	109.0(11)
H(9A) - C(9) - H(9B)	109.1(12)	H(9A) - C(9) - H(9C)	109.0(13)
H(9B) - C(9) - H(9C)	109.0(13)	C(7) - C(10) - H(10A)	110.7(13)
C(7) - C(10) - H(10B)	109.4(14)	C(7) - C(10) - H(10C)	109.1(13)
H(10A)- C(10) - H(10B)	109.4(15)	H(10A)- C(10) - H(10C)	109.3(17)

18

(STable 12continued)

H(10B)- C(10) - H(10C)	109.0(15) C(4) - C(11) - H(11A)	110.0(51)
C(4) - C(11) - H(11B)	100.3(56) C(4) - C(11) - H(11C)	108.3(66)
H(11A)- C(11) - H(11B)	89.7(76) H(11A)- C(11) - H(11C)	139.8(83)
H(11B)- C(11) - H(11C)	95.5(88) C(6) - C(12) - C(13)	108.6(11)
C(6) - C(12) - C(14)	109.2(10) C(6) - C(12) - C(15)	112.9(10)
C(13) - C(12) - C(14)	113.6(11) C(13) - C(12) - C(15)	107.2(11)
C(14) - C(12) - C(15)	105.3(12) C(12) - C(13) - H(13A)	108.1(13)
C(12) - C(13) - H(13B)	110.0(12) C(12) - C(13) - H(13C)	109.5(12)
H(13A)- C(13) - H(13B)	110.1(13) H(13A)- C(13) - H(13C)	110.1(14)
H(13B)- C(13) - H(13C)	109.0(15) C(12) - C(14) - H(14A)	109.2(58)
C(12) - C(14) - H(14B)	109.6(50) C(12) - C(14) - H(14C)	113.7(59)
H(14A)- C(14) - H(14B)	117.0(76) H(14A)- C(14) - H(14C)	103.8(83)
H(14B)- C(14) - H(14C)	103.6(78) C(12) - C(15) - H(15A)	112.8(14)
C(12) - C(15) - H(15B)	108.4(14) C(12) - C(15) - H(15C)	108.8(12)
H(15A)- C(15) - H(15B)	108.8(14) H(15A)- C(15) - H(15C)	108.9(17)
H(15B)- C(15) - H(15C)	109.0(16) O(2) - C(16) - C(17)	108.6(14)
O(2) - C(16) - H(16A)	109.1(16) O(2) - C(16) - H(16B)	109.6(12)
C(17) - C(16) - H(16A)	109.5(16) C(17) - C(16) - H(16B)	111.0(20)
H(16A)- C(16) - H(16B)	109.0(15) C(16) - C(17) - C(18)	112.1(16)
C(16) - C(17) - H(17A)	109.6(19) C(16) - C(17) - H(17B)	108.2(21)
C(18) - C(17) - H(17A)	108.8(20) C(18) - C(17) - H(17B)	109.0(19)
H(17A)- C(17) - H(17B)	109.1(19) C(17) - C(18) - C(19)	103.9(14)
C(17) - C(18) - H(18A)	111.6(16) C(17) - C(18) - H(18B)	111.2(22)
C(19) - C(18) - H(18A)	110.7(20) C(19) - C(18) - H(18B)	110.4(14)
H(18A)- C(18) - H(18B)	109.0(15) O(2) - C(19) - C(18)	105.8(12)
O(2) - C(19) - H(19A)	109.8(12) O(2) - C(19) - H(19B)	110.6(12)
C(18) - C(19) - H(19A)	111.1(14) C(18) - C(19) - H(19B)	110.5(15)
H(19A)- C(19) - H(19B)	109.0(14)	

STable 13. Atomic Parameters for Complex **5** with e. s. d.'s in Parentheses.

Positional parameters are multiplied by 10^4 for Non-Hydrogen Atoms and by 10^3 for Hydrogen Atoms.
The equivalent isotropic temperature factor is defined by

$$Beq = 4/3\Sigma_i\Sigma_j \beta_{ij} (\alpha_i \alpha_j).$$

ATOM	X	Y	Z	Beq,Å^2
SM	44969(4)	9971(3)	57565(3)	3.1
CL	5943(2)	-101(2)	5795(2)	4.8
O1	5337(5)	1923(4)	6390(4)	3.5
O2	3459(5)	538(4)	6559(4)	3.7
O3	3815(5)	1977(5)	4664(5)	4.9
C11	5764(7)	2615(5)	6606(6)	3.2
C12	5330(7)	3124(6)	7202(7)	3.8
C13	5746(8)	3853(6)	7366(8)	4.4
C14	6587(8)	4097(7)	6976(8)	4.7
C15	7015(8)	3573(7)	6435(8)	4.5
C16	6640(7)	2829(6)	6250(7)	3.7
C17	4446(10)	2887(8)	7711(9)	6.0
C18	4157(11)	3544(8)	8343(11)	7.3
C19	3565(11)	2757(13)	7039(15)	11.9
C110	4722(15)	2165(11)	8293(13)	10.9
C111	6979(10)	4904(8)	7150(11)	6.7
C112	7216(8)	2250(7)	5708(8)	5.0
C113	7513(9)	1536(8)	6278(9)	5.7
C114	6618(10)	2011(10)	4822(9)	6.9
C115	8189(10)	2622(10)	5445(12)	8.1
C21	2843(7)	390(6)	7185(6)	3.4
C22	3193(7)	-2(7)	8000(7)	4.0
C23	2572(9)	-59(8)	8698(8)	5.1
C24	1622(9)	240(8)	8588(8)	5.7
C25	1267(8)	574(7)	7780(8)	4.7
C26	1843(7)	633(7)	7058(7)	4.0
C27	4184(8)	-424(7)	8103(8)	4.8
C28	5055(9)	138(8)	8125(9)	6.0
C29	4322(11)	-899(9)	8997(10)	7.2
C211	960(11)	186(11)	9371(9)	8.1
C210	4209(9)	-1022(9)	7317(9)	6.0
C212	1370(7)	909(7)	6133(7)	4.3
C213	1713(10)	1741(8)	5934(10)	6.7
C214	228(9)	940(10)	6129(9)	7.0
C215	1574(9)	329(8)	5367(8)	5.2
C31	4136(13)	2769(9)	4657(12)	9.4
C32	3321(15)	3202(11)	4134(14)	13.3
C33	2580(15)	2599(11)	3727(13)	11.4
C34	3081(10)	1836(9)	3881(9)	6.7

STable 14. Mean Square Displacement Tensors (x 10^3 Å^2) for Complex **5** with e. s. d.'s in Parentheses.

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
SM	36.4(2)	41.0(3)	41.3(3)	-5.0(3)	6.5(2)	-8.0(3)
CL	54(2)	64(2)	60(2)	9(1)	-6(1)	-22(1)
O1	41(4)	46(4)	48(4)	-1(3)	8(3)	-9(3)
O2	40(4)	56(4)	44(4)	-4(3)	7(3)	5(3)
O3	56(4)	60(5)	66(5)	-1(4)	-12(4)	-5(4)
C11	42(5)	37(5)	42(5)	-4(4)	-2(4)	-7(4)
C12	43(5)	41(6)	59(6)	-3(5)	1(5)	-3(5)
C13	52(6)	50(7)	64(7)	-4(5)	0(5)	-3(5)
C14	53(6)	53(7)	68(7)	-2(6)	-11(5)	-3(6)
C15	55(7)	49(6)	67(7)	-11(5)	1(5)	3(5)
C16	44(5)	42(6)	53(6)	-6(4)	4(4)	-7(5)
C17	78(8)	68(8)	89(9)	-12(7)	35(7)	-29(7)
C18	105(11)	69(9)	113(12)	-10(8)	60(9)	-32(8)
C19	49(9)	203(21)	207(20)	-29(11)	43(11)	-118(17)
C110	194(19)	82(12)	159(17)	11(12)	117(15)	19(12)
C111	75(9)	55(8)	124(13)	-18(7)	9(8)	-4(8)
C112	49(6)	68(8)	77(8)	-16(6)	23(6)	-13(6)
C113	56(7)	69(8)	89(9)	8(6)	1(6)	-16(7)
C114	88(10)	120(12)	58(8)	6(9)	21(7)	-27(8)
C115	65(9)	113(13)	140(14)	-21(9)	52(9)	-19(11)
C21	46(5)	48(6)	35(5)	-5(4)	7(4)	-3(4)
C22	42(5)	62(7)	49(6)	2(5)	6(5)	0(5)
C23	61(7)	80(9)	54(7)	3(6)	11(6)	-1(6)
C24	54(7)	103(10)	60(8)	1(7)	15(6)	9(7)
C25	49(6)	80(8)	53(6)	-7(6)	13(5)	1(6)
C26	42(6)	66(7)	44(6)	-4(5)	3(5)	5(5)
C27	53(7)	67(8)	63(7)	11(6)	4(6)	5(6)
C28	50(7)	83(9)	91(10)	-5(7)	-11(7)	-8(8)
C29	88(10)	99(11)	84(9)	20(9)	5(8)	44(9)
C211	86(10)	172(16)	56(9)	21(11)	34(8)	12(10)
C210	80(8)	68(8)	83(9)	14(8)	18(7)	-10(8)
C212	36(5)	68(7)	59(6)	-9(5)	-2(4)	8(6)
C213	74(9)	81(10)	97(11)	-10(8)	-2(8)	30(8)
C214	44(6)	140(13)	79(9)	5(9)	-6(6)	30(10)
C215	64(7)	81(9)	51(7)	-11(6)	-1(6)	-3(6)
C31	132(14)	55(9)	153(15)	-4(9)	-71(12)	14(10)
C32	196(17)	93(13)	194(17)	-19(12)	-85(14)	28(12)
C33	167(17)	102(14)	145(16)	-11(12)	-84(13)	7(12)
C34	79(9)	92(10)	73(9)	7(8)	-41(7)	-11(8)

STable 15. Bond Lengths and Angles for Complex **5**

ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST	SIG(DIS)	ATOM 1	ATOM 2	SYM	DIST	SIG(DIS)
SM	-CL	(1)	2.7415	0.0030	SM	-O1	(1)	2.1345	0.0064
SM	-O2	(1)	2.1100	0.0067	SM	-O3	(1)	2.4691	0.0076
SM	-CL	2(1)	2.8043	0.0030	CL	-SM	2(1)	2.8043	0.0030
O1	-C11	(1)	1.3537	0.0113	O2	-C21	(1)	1.3502	0.0118
O3	-C31	(1)	1.4349	0.0170	O3	-C34	(1)	1.4875	0.0147
C11	-C12	(1)	1.4249	0.0143	C11	-C16	(1)	1.4143	0.0140
C12	-C13	(1)	1.3909	0.0147	C12	-C17	(1)	1.5532	0.0173
C13	-C14	(1)	1.4111	0.0160	C14	-C15	(1)	1.3846	0.0166
C14	-C111	(1)	1.5046	0.0178	C15	-C16	(1)	1.3983	0.0149
C16	-C112	(1)	1.5530	0.0161	C17	-C18	(1)	1.5539	0.0204
C17	-C19	(1)	1.5105	0.0213	C17	-C110	(1)	1.5448	0.0229
C112	-C113	(1)	1.5290	0.0180	C112	-C114	(1)	1.5446	0.0175
C112	-C115	(1)	1.5687	0.0195	C21	-C22	(1)	1.4349	0.0139
C21	-C26	(1)	1.4319	0.0138	C22	-C23	(1)	1.4186	0.0164
C22	-C27	(1)	1.5387	0.0156	C23	-C24	(1)	1.3979	0.0171
C24	-C25	(1)	1.3842	0.0167	C24	-C211	(1)	1.5577	0.0198
C25	-C26	(1)	1.4067	0.0157	C26	-C212	(1)	1.5434	0.0143
C27	-C28	(1)	1.5368	0.0177	C27	-C29	(1)	1.5640	0.0190
C27	-C210	(1)	1.5672	0.0185	C212	-C213	(1)	1.5466	0.0188
C212	-C214	(1)	1.5714	0.0152	C212	-C215	(1)	1.5681	0.0169
C31	-C32	(1)	1.4991	0.0254	C32	-C33	(1)	1.5380	0.0270
C33	-C34	(1)	1.4905	0.0240					

ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)	ATOM 2	(SM)-ATOM 1	-ATOM 3	(SM)	ANGLE	SIG(ANG)
CL	(1)-SM	-O1	(1)	98.50	0.18	CL	(1)-SM	-O2	(1)	105.09	0.19
CL	(1)-SM	-O3	(1)	135.39	0.19	CL	(1)-SM	-CL	2(1)	74.50	0.08
O1	(1)-SM	-O2	(1)	113.19	0.25	O1	(1)-SM	-O3	(1)	86.30	0.25
O1	(1)-SM	-CL	2(1)	147.28	0.19	O2	(1)-SM	-O3	(1)	113.60	0.25
O2	(1)-SM	-CL	2(1)	99.42	0.19	O3	(1)-SM	-CL	2(1)	77.98	0.19
SM	(1)-CL	-SM	2(1)	105.50	0.09	SM	(1)-O1	-C11	(1)	165.13	0.58
SM	(1)-O2	-C21	(1)	167.01	0.62	SM	(1)-O3	-C31	(1)	123.96	0.79
SM	(1)-O3	-C34	(1)	126.35	0.72	C31	(1)-O3	-C34	(1)	109.53	1.02
O1	(1)-C11	-C12	(1)	119.54	0.85	O1	(1)-C11	-C16	(1)	120.35	0.85
C12	(1)-C11	-C16	(1)	120.11	0.86	C11	(1)-C12	-C13	(1)	118.42	0.95
C11	(1)-C12	-C17	(1)	122.90	0.93	C13	(1)-C12	-C17	(1)	118.62	0.99

(STable 15 continued)

C12	(1)-C13	-C14	(1)	122.39	1.04	C13	(1)-C14	-C15	(1)	117.51	1.04
C13	(1)-C14	-C111	(1)	119.92	1.09	C15	(1)-C14	-C111	(1)	122.57	1.09
C14	(1)-C15	-C16	(1)	122.95	1.05	C11	(1)-C16	-C15	(1)	118.40	0.94
C11	(1)-C16	-C112	(1)	121.90	0.89	C15	(1)-C16	-C112	(1)	119.63	0.94
C12	(1)-C17	-C18	(1)	111.62	1.06	C12	(1)-C17	-C19	(1)	109.14	1.20
C12	(1)-C17	-C110	(1)	109.20	1.19	C18	(1)-C17	-C19	(1)	105.99	1.25
C18	(1)-C17	-C110	(1)	107.85	1.24	C19	(1)-C17	-C110	(1)	113.03	1.41
C16	(1)-C112	-C113	(1)	110.26	1.00	C16	(1)-C112	-C114	(1)	111.40	0.95
C16	(1)-C112	-C115	(1)	111.22	1.04	C113	(1)-C112	-C114	(1)	110.68	1.09
C113	(1)-C112	-C115	(1)	106.40	1.00	C114	(1)-C112	-C115	(1)	106.71	1.12
O2	(1)-C21	-C22	(1)	119.93	0.83	O2	(1)-C21	-C26	(1)	120.95	0.82
C22	(1)-C21	-C26	(1)	119.10	0.90	C21	(1)-C22	-C23	(1)	118.92	0.94
C21	(1)-C22	-C27	(1)	121.68	0.94	C23	(1)-C22	-C27	(1)	119.15	0.97
C22	(1)-C23	-C24	(1)	120.89	1.07	C23	(1)-C24	-C25	(1)	119.89	1.14
C23	(1)-C24	-C211	(1)	119.97	1.13	C25	(1)-C24	-C211	(1)	120.14	1.10
C24	(1)-C25	-C26	(1)	121.77	1.02	C21	(1)-C26	-C25	(1)	118.95	0.90
C21	(1)-C26	-C212	(1)	121.38	0.89	C25	(1)-C26	-C212	(1)	119.56	0.88
C22	(1)-C27	-C28	(1)	112.58	1.02	C22	(1)-C27	-C29	(1)	111.24	1.01
C22	(1)-C27	-C210	(1)	108.81	0.90	C28	(1)-C27	-C29	(1)	106.53	0.98
C28	(1)-C27	-C210	(1)	110.73	1.04	C29	(1)-C27	-C210	(1)	106.79	1.07
C26	(1)-C212	-C213	(1)	110.45	0.92	C26	(1)-C212	-C214	(1)	110.08	0.91
C26	(1)-C212	-C215	(1)	111.71	0.92	C213	(1)-C212	-C214	(1)	106.96	1.06
C213	(1)-C212	-C215	(1)	111.67	0.99	C214	(1)-C212	-C215	(1)	105.76	0.93
O3	(1)-C31	-C32	(1)	105.25	1.30	C31	(1)-C32	-C33	(1)	107.50	1.45
C32	(1)-C33	-C34	(1)	104.92	1.46	O3	(1)-C34	-C33	(1)	104.12	1.18

STable 16. Detailed Crystallographic Data for **1-5**

compnd	1	2·2THF	3	4	5
formula	$C_{42}H_{70}O_5Sm$	$C_{62}H_{110}O_{10}I_2Sm_2$	$C_{37}H_{74}N_6O_3P_2Sm$	$C_{38}H_{62}O_4ISm$	$C_{68}H_{108}O_6Cl_2Sm_2$
Fw	805.42	1570.17	863.39	860.22	1393.32
cryst size (mm)	0.41 x 0.34 x 0.30	0.45 x 0.40 x 0.35	0.40 x 0.33 x 0.30	0.47 x 0.36 x 0.35	0.27 x 0.25 x 0.20
cryst syst	monoclinic	monoclinic	triclinic	monoclinic	monoclinic
space group	$P2_1$ (No. 4)	$P2_1/a$ (No. 14)	P-1 (No. 2)	C2/c (No. 15)	$P2_1/n$ (No. 14)
a (Å)	9.903(3)	18.330(6)	10.528(1)	17.191(7)	13.750(3)
b (Å)	16.718(5)	14.320(4)	12.335(2)	10.737(6)	17.231(3)
c (Å)	13.267(2)	13.949(3)	19.260(2)	21.773(7)	14.973(6)
α (deg)			101.33(1)		
β (deg)	95.17(2)	103.16(2)	95.230(9)	98.80(3)	95.81(2)
γ (deg)			108.54(1)		
V ($Å^3$)	2187(2)	3563(2)	2293.1(5)	3971(3)	3529(2)
Z	2	2	2	4	2
D_{calcd} (g cm^{-3})	1.22	1.46	1.25	1.44	1.31
radiation, λ (Å)	Mo-Kα, 0.71073	Mo-Kα, 0.71073	Mo-Kα, 0.71073	Mo-Kα, 0.71073	Mo-Kα, 0.71073
data collcd	±h, +k, +l	+h, +k, ±l	±h, +k, ±l	+h, -k, ±l	±h, +k, +l
scan speed (deg/min)	4	6	10	6	4
2θ range (deg)	4~55	3~55	3~55	3~55	4~55
μ, (mm^{-1})	13.819	25.330	13.886	22.810	17.730
no. of obsd reflns	3111 (F > 5σ(Fo))	3426 (I > 3σ(I))	7583 (I > 3σ(I))	2423 (I > 3σ(I))	4734 (F > 5σ(Fo))
no. of variables	434	343	693	255	353
R (%)	6.34	6.06	3.58	4.67	5.57
Rw (%)	7.38	6.69	4.02	5.30	6.52