Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry
Inorg. Chem., 1998, 37(25), 6532-6534, DOI:10.1021/ic980499m

Supplementary material n° 1.

Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for ArPyNi. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ni	8420(1)	0(1)	7517(1)	30(1)
N(1)	9972(3)	38(3)	7746(2)	35(1)
N(2)	8549(3)	558(3)	8513(2)	35(1)
N(3)	6880(3)	-33(3)	7295(2)	35(1)
N(4)	8287(3)	-565(2)	6529(2)	33(1)
C(1)	10596(4)	-391(3)	7390(3)	38(1)
C(2)	11728(4)	-202(4)	7744(3)	56(2)
C(3)	11774(4)	360(4)	8266(4)	54(1)
C(4)	10690(4)	502(3)	8284(3)	43(1)
C(5)	10442(4)	991(3)	8864(3)	41(1)
C(6)	9427(4)	977(3)	8981(3)	42(1)
C(7)	9183(4)	1315(4)	9666(3)	51(1)
C(8)	8195(5)	1082(4)	9651(3)	53(2)
C(9)	7791(4)	625(3)	8922(3)	38(1)
C(10)	6730(4)	369(3)	8632(3)	42(1)
C(11)	6298(4)	109(3)	7835(3)	39(1)
C(12)	5146(4)	17(5)	7426(3)	51(1)
C(13)	5041(4)	-140(4)	6631(3)	54(2)
C(14)	6105(4)	-195(3)	6551(3)	38(1)
C(15)	6334(4)	-482(3)	5854(3)	39(1)
C(16)	7355(4)	-686(3)	5879(3)	39(1)
C(17)	7599(5)	-1125(4)	5235(3)	52(1)
C(18)	8674(5)	-1273(4)	5497(4)	54(1)
C(19)	9091(4)	-917(3)	6291(3)	37(1)
C(20)	10193(4)	-880(3)	6727(3)	37(1)
N(5)	11252(4)	-150(3)	5705(3)	57(1)
N(6)	10422(4)	1299(3)	5633(3)	56(1)
N(7)	5670(3)	2253(3)	7067(3)	48(1)
N(8)	5418(3)	1659(3)	8608(3)	47(1)
O(1)	11485(8)	-20(5)	4466(4)	134(3)
O(2)	8938(4)	735(3)	4795(3)	75(1)
O(3)	7211(3)	2360(3)	8126(2)	58(1)
O(4)	3671(3)	1853(4)	7909(3)	94(2)
C(21)	10984(4)	-1295(3)	6380(3)	44(1)
C(22)	11188(5)	-2058(4)	6565(4)	58(2)
C(23)	11890(6)	-2464(4)	6228(5)	69(2)
C(24)	12358(6)	-2089(4)	5710(4)	67(2)
C(25)	12154(6)	-1332(4)	5521(5)	65(2)
C(26)	11461(4)	-931(3)	5862(4)	47(1)
C(27)	11278(7)	251(4)	5049(5)	70(2)
C(28)	11059(6)	1103(4)	5082(5)	66(2)
C(29)	12136(7)	1515(6)	5359(7)	94(3)
C(30)	9368(5)	1122(3)	5421(4)	53(1)
C(31)	8715(4)	1406(3)	5948(3)	46(1)
C(32)	7607(5)	1255(3)	5685(4)	48(1)
C(33)	6945(4)	1498(3)	6139(3)	45(1)
C(34)	7395(4)	1901(3)	6881(3)	41(1)
C(35)	8508(4)	2035(4)	7131(4)	50(1)
C(36)	9149(4)	1776(4)	6684(4)	54(1)
C(37)	6754(4)	2192(4)	7399(3)	43(1)

Supplementary material n° 1. (con't)

	x	y	z	U(eq)
C(38)	4992(4)	2606(4)	7512(3)	52(1)
C(39)	4076(5)	3046(5)	6941(5)	71(2)
C(40)	4612(4)	1997(4)	8034(3)	52(1)
C(41)	5328(4)	1055(4)	9105(3)	47(1)
C(42)	4577(5)	1049(5)	9555(4)	62(2)
C(43)	4517(6)	454(6)	10042(5)	78(2)
C(44)	5180(7)	-175(6)	10109(5)	91(3)
C(45)	5943(6)	-184(5)	9652(4)	75(2)
C(46)	5998(4)	417(4)	9155(3)	47(1)
N(9)	11484(4)	487(4)	10443(3)	60(1)
N(10)	10493(4)	-865(3)	10387(3)	61(1)
N(11)	10168(5)	-2306(5)	8343(4)	82(2)
N(12)	7043(4)	-2825(3)	6825(3)	49(1)
N(13)	5287(4)	-1912(3)	5658(3)	43(1)
O(5)	11968(6)	519(5)	11841(3)	114(3)
O(6)	8666(4)	-787(3)	10043(3)	65(1)
O(7)	6385(3)	-1837(3)	7373(2)	53(1)
O(8)	5379(3)	-2906(3)	4829(2)	57(1)
C(47)	11325(4)	1457(4)	9429(3)	48(1)
C(48)	11682(5)	2123(4)	9181(4)	62(2)
C(49)	12501(5)	2532(5)	9729(5)	72(2)
C(50)	12982(5)	2294(5)	10493(5)	76(2)
C(51)	12658(5)	1614(5)	10751(4)	67(2)
C(52)	11841(5)	1191(4)	10233(4)	53(2)
C(53)	11441(5)	236(5)	11175(4)	70(2)
C(54)	10670(5)	-433(5)	11149(3)	64(2)
C(55)	11011(8)	-939(7)	11915(4)	98(3)
C(56)	9483(5)	-1023(4)	9896(3)	50(1)
C(57)	9395(4)	-1510(3)	9159(3)	46(1)
C(58)	10255(5)	-1860(5)	8998(4)	65(2)
C(59)	8368(5)	-1627(3)	8588(3)	46(1)
C(60)	8269(4)	-2095(3)	7924(3)	46(1)
C(61)	9184(5)	-2417(5)	7821(4)	63(2)
C(62)	7148(5)	-2238(4)	7340(3)	47(1)
C(63)	6012(5)	-3122(3)	6273(3)	52(1)
C(64)	5182(6)	-3287(5)	6727(4)	70(2)
C(65)	5539(4)	-2639(3)	5519(3)	41(1)
C(66)	4886(4)	-1365(3)	5028(3)	37(1)
C(67)	4001(4)	-1515(4)	4349(3)	47(1)
C(68)	3628(5)	-973(4)	3754(4)	58(2)
C(69)	4135(5)	-282(4)	3812(4)	68(2)
C(70)	4995(5)	-116(4)	4496(3)	61(2)
C(71)	5399(4)	-653(3)	5116(3)	41(1)
OW1	8544(5)	-4051(4)	6801(3)	87(2)
OW2	11582(4)	2328(5)	6964(4)	107(2)
OW3	12593(5)	-1538(5)	10600(4)	112(2)
OW7	14260(13)	-1757(12)	8059(10)	240(7)
OW4	8116(11)	-327(10)	11479(8)	208(5)
OW5	11081(18)	3921(17)	7020(13)	321(10)
OW6	13419(16)	-2042(15)	9432(11)	291(9)
OW8	14058(19)	-534(20)	11834(14)	353(11)

Supplementary material n° 2.

Bond lengths [Å] for ArPyNi.

Ni-N(3)	1.912(3)	C(27)-C(28)	1.530(11)
Ni-N(4)	1.915(4)	C(28)-C(29)	1.513(12)
Ni-N(2)	1.920(4)	C(30)-C(31)	1.492(8)
Ni-N(1)	1.927(3)	C(31)-C(36)	1.370(8)
N(1)-C(4)	1.360(7)	C(31)-C(32)	1.391(8)
N(1)-C(1)	1.372(6)	C(32)-C(33)	1.383(8)
N(2)-C(9)	1.367(6)	C(33)-C(34)	1.410(8)
N(2)-C(6)	1.384(7)	C(34)-C(35)	1.392(7)
N(3)-C(11)	1.375(6)	C(34)-C(37)	1.471(7)
N(3)-C(14)	1.383(6)	C(35)-C(36)	1.361(8)
N(4)-C(19)	1.372(6)	C(38)-C(39)	1.499(8)
N(4)-C(16)	1.382(6)	C(38)-C(40)	1.562(9)
C(1)-C(20)	1.388(7)	C(41)-C(46)	1.406(9)
C(1)-C(2)	1.441(7)	C(41)-C(42)	1.407(7)
C(2)-C(3)	1.318(9)	C(42)-C(43)	1.351(11)
C(3)-C(4)	1.433(7)	C(43)-C(44)	1.384(12)
C(4)-C(5)	1.417(7)	C(44)-C(45)	1.429(8)
C(5)-C(6)	1.387(7)	C(45)-C(46)	1.370(9)
C(5)-C(47)	1.494(7)	N(9)-C(53)	1.336(9)
C(6)-C(7)	1.425(7)	N(9)-C(52)	1.405(9)
C(7)-C(8)	1.335(9)	N(10)-C(56)	1.348(8)
C(8)-C(9)	1.435(7)	N(10)-C(54)	1.459(8)
C(9)-C(10)	1.385(7)	N(11)-C(61)	1.326(8)
C(10)-C(11)	1.377(7)	N(11)-C(58)	1.338(9)
C(10)-C(46)	1.484(7)	N(12)-C(62)	1.333(8)
C(11)-C(12)	1.449(6)	N(12)-C(63)	1.474(7)
C(12)-C(13)	1.345(8)	N(13)-C(65)	1.358(7)
C(13)-C(14)	1.426(7)	N(13)-C(66)	1.415(7)
C(14)-C(15)	1.400(7)	O(5)-C(53)	1.235(8)
C(15)-C(16)	1.356(7)	O(6)-C(56)	1.230(7)
C(15)-C(71)	1.485(6)	O(7)-C(62)	1.228(7)
C(16)-C(17)	1.452(7)	O(8)-C(65)	1.221(6)
C(17)-C(18)	1.350(8)	C(47)-C(48)	1.372(10)
C(18)-C(19)	1.436(7)	C(47)-C(52)	1.406(9)
C(19)-C(20)	1.393(7)	C(48)-C(49)	1.381(9)
C(20)-C(21)	1.513(7)	C(49)-C(50)	1.325(12)
N(5)-C(27)	1.328(8)	C(50)-C(51)	1.383(13)
N(5)-C(26)	1.411(8)	C(51)-C(52)	1.371(9)
N(6)-C(30)	1.336(8)	C(53)-C(54)	1.535(11)
N(6)-C(28)	1.465(7)	C(54)-C(55)	1.527(10)
N(7)-C(37)	1.347(6)	C(56)-C(57)	1.494(8)
N(7)-C(38)	1.458(7)	C(57)-C(58)	1.370(9)
N(8)-C(40)	1.333(7)	C(57)-C(59)	1.401(7)
N(8)-C(41)	1.384(8)	C(59)-C(60)	1.371(8)
O(1)-C(27)	1.202(8)	C(60)-C(61)	1.370(9)
O(2)-C(30)	1.243(8)	C(60)-C(62)	1.509(8)
O(3)-C(37)	1.234(7)	C(63)-C(65)	1.504(8)
O(4)-C(40)	1.197(7)	C(63)-C(64)	1.528(9)
C(21)-C(26)	1.377(8)	C(66)-C(67)	1.381(7)
C(21)-C(22)	1.387(9)	C(66)-C(71)	1.404(7)
C(22)-C(23)	1.407(8)	C(67)-C(68)	1.367(9)
C(23)-C(24)	1.378(10)	C(68)-C(69)	1.371(10)
C(24)-C(25)	1.378(11)	C(69)-C(70)	1.374(8)
C(25)-C(26)	1.397(8)	C(70)-C(71)	1.393(8)

Supplementary material n° 3.

Angles (deg.) for ArPyNi.

N(3)-Ni-N(4)	90.1(2)	O(2)-C(30)-C(31)	120.7(6)
N(3)-Ni-N(2)	89.8(2)	N(6)-C(30)-C(31)	118.5(5)
N(4)-Ni-N(2)	179.4(2)	C(36)-C(31)-C(32)	118.8(5)
N(3)-Ni-N(1)	179.7(2)	C(36)-C(31)-C(30)	123.9(5)
N(4)-Ni-N(1)	90.2(2)	C(32)-C(31)-C(30)	117.3(5)
N(2)-Ni-N(1)	89.9(2)	C(33)-C(32)-C(31)	120.9(5)
C(4)-N(1)-C(1)	104.7(4)	C(32)-C(33)-C(34)	119.9(5)
C(4)-N(1)-Ni	127.8(3)	C(35)-C(34)-C(33)	117.7(5)
C(1)-N(1)-Ni	127.5(3)	C(35)-C(34)-C(37)	118.5(5)
C(9)-N(2)-C(6)	104.6(4)	C(33)-C(34)-C(37)	123.8(5)
C(9)-N(2)-Ni	127.5(3)	C(36)-C(35)-C(34)	121.5(5)
C(6)-N(2)-Ni	128.0(3)	C(35)-C(36)-C(31)	121.2(5)
C(11)-N(3)-C(14)	104.8(3)	O(3)-C(37)-N(7)	121.4(5)
C(11)-N(3)-Ni	127.7(3)	O(3)-C(37)-C(34)	119.9(4)
C(14)-N(3)-Ni	127.5(3)	N(7)-C(37)-C(34)	118.8(5)
C(19)-N(4)-C(16)	104.5(4)	N(7)-C(38)-C(39)	111.4(5)
C(19)-N(4)-Ni	128.3(3)	N(7)-C(38)-C(40)	110.2(5)
C(16)-N(4)-Ni	127.2(3)	C(39)-C(38)-C(40)	113.5(5)
N(1)-C(1)-C(20)	124.9(4)	O(4)-C(40)-N(8)	124.1(6)
N(1)-C(1)-C(2)	110.3(4)	O(4)-C(40)-C(38)	121.5(6)
C(20)-C(1)-C(2)	124.4(5)	N(8)-C(40)-C(38)	114.3(5)
C(3)-C(2)-C(1)	106.7(5)	N(8)-C(41)-C(46)	119.0(4)
C(2)-C(3)-C(4)	107.5(5)	N(8)-C(41)-C(42)	122.5(6)
N(1)-C(4)-C(5)	125.5(4)	C(46)-C(41)-C(42)	118.4(6)
N(1)-C(4)-C(3)	110.7(5)	C(43)-C(42)-C(41)	121.1(7)
C(5)-C(4)-C(3)	123.4(5)	C(42)-C(43)-C(44)	121.4(5)
C(6)-C(5)-C(4)	120.9(5)	C(43)-C(44)-C(45)	118.5(7)
C(6)-C(5)-C(47)	119.3(4)	C(46)-C(45)-C(44)	120.1(7)
C(4)-C(5)-C(47)	119.3(4)	C(45)-C(46)-C(41)	120.5(5)
N(2)-C(6)-C(5)	125.0(5)	C(45)-C(46)-C(10)	119.2(5)
N(2)-C(6)-C(7)	110.2(4)	C(41)-C(46)-C(10)	120.2(5)
C(5)-C(6)-C(7)	124.3(5)	C(53)-N(9)-C(52)	129.6(5)
C(8)-C(7)-C(6)	107.7(5)	C(56)-N(10)-C(54)	121.2(6)
C(7)-C(8)-C(9)	106.5(5)	C(61)-N(11)-C(58)	117.7(6)
N(2)-C(9)-C(10)	125.2(4)	C(62)-N(12)-C(63)	125.8(5)
N(2)-C(9)-C(8)	111.0(4)	C(65)-N(13)-C(66)	124.1(4)
C(10)-C(9)-C(8)	123.4(4)	C(48)-C(47)-C(52)	118.5(5)
C(11)-C(10)-C(9)	121.4(4)	C(48)-C(47)-C(5)	122.3(5)
C(11)-C(10)-C(46)	117.7(4)	C(52)-C(47)-C(5)	119.1(6)
C(9)-C(10)-C(46)	120.8(5)	C(47)-C(48)-C(49)	119.9(7)
N(3)-C(11)-C(10)	125.2(4)	C(50)-C(49)-C(48)	122.1(8)
N(3)-C(11)-C(12)	110.5(4)	C(49)-C(50)-C(51)	119.1(6)
C(10)-C(11)-C(12)	124.1(4)	C(52)-C(51)-C(50)	121.0(7)
C(13)-C(12)-C(11)	106.3(4)	C(51)-C(52)-C(47)	119.3(7)
C(12)-C(13)-C(14)	107.6(4)	C(51)-C(52)-N(9)	124.3(6)
N(3)-C(14)-C(15)	124.5(4)	C(47)-C(52)-N(9)	116.5(5)
N(3)-C(14)-C(13)	110.6(4)	O(5)-C(53)-N(9)	123.6(8)
C(15)-C(14)-C(13)	124.2(4)	O(5)-C(53)-C(54)	120.5(7)
C(16)-C(15)-C(14)	121.6(4)	N(9)-C(53)-C(54)	115.9(5)
C(16)-C(15)-C(71)	120.5(4)	N(10)-C(54)-C(55)	112.3(7)
C(14)-C(15)-C(71)	117.5(4)	N(10)-C(54)-C(53)	110.5(5)
C(15)-C(16)-N(4)	126.1(4)	C(55)-C(54)-C(53)	114.0(6)
C(15)-C(16)-C(17)	123.4(4)	O(6)-C(56)-N(10)	122.4(5)
N(4)-C(16)-C(17)	110.3(4)	O(6)-C(56)-C(57)	120.8(5)
C(18)-C(17)-C(16)	107.0(5)	N(10)-C(56)-C(57)	116.8(5)
C(17)-C(18)-C(19)	106.3(5)	C(58)-C(57)-C(59)	116.9(5)
N(4)-C(19)-C(20)	124.5(4)	C(58)-C(57)-C(56)	124.4(5)

Supplementary material n° 3. (con't)

N(4)-C(19)-C(18)	111.8(4)	C(59)-C(57)-C(56)	118.7(5)
C(20)-C(19)-C(18)	123.5(4)	N(11)-C(58)-C(57)	124.1(6)
C(1)-C(20)-C(19)	122.1(4)	C(60)-C(59)-C(57)	119.3(5)
C(1)-C(20)-C(21)	118.9(4)	C(61)-C(60)-C(59)	119.0(5)
C(19)-C(20)-C(21)	118.2(4)	C(61)-C(60)-C(62)	122.7(5)
C(27)-N(5)-C(26)	128.5(5)	C(59)-C(60)-C(62)	118.3(5)
C(30)-N(6)-C(28)	119.9(6)	N(11)-C(61)-C(60)	122.9(6)
C(37)-N(7)-C(38)	122.0(5)	O(7)-C(62)-N(12)	123.5(5)
C(40)-N(8)-C(41)	126.7(5)	O(7)-C(62)-C(60)	119.8(5)
C(26)-C(21)-C(22)	120.3(5)	N(12)-C(62)-C(60)	116.6(5)
C(26)-C(21)-C(20)	120.8(5)	N(12)-C(63)-C(65)	113.4(5)
C(22)-C(21)-C(20)	118.9(5)	N(12)-C(63)-C(64)	112.6(5)
C(21)-C(22)-C(23)	120.1(6)	C(65)-C(63)-C(64)	111.8(5)
C(24)-C(23)-C(22)	118.7(7)	O(8)-C(65)-N(13)	123.4(5)
C(23)-C(24)-C(25)	121.4(6)	O(8)-C(65)-C(63)	120.4(5)
C(24)-C(25)-C(26)	119.6(6)	N(13)-C(65)-C(63)	116.2(4)
C(21)-C(26)-C(25)	119.9(6)	C(67)-C(66)-C(71)	120.2(5)
C(21)-C(26)-N(5)	118.5(5)	C(67)-C(66)-N(13)	121.5(5)
C(25)-C(26)-N(5)	121.6(6)	C(71)-C(66)-N(13)	118.3(4)
O(1)-C(27)-N(5)	123.5(7)	C(68)-C(67)-C(66)	120.1(6)
O(1)-C(27)-C(28)	120.5(7)	C(67)-C(68)-C(69)	120.7(5)
N(5)-C(27)-C(28)	115.9(6)	C(68)-C(69)-C(70)	119.8(6)
N(6)-C(28)-C(29)	109.4(6)	C(69)-C(70)-C(71)	121.1(6)
N(6)-C(28)-C(27)	113.5(5)	C(70)-C(71)-C(66)	118.0(5)
C(29)-C(28)-C(27)	108.6(7)	C(70)-C(71)-C(15)	121.5(5)
O(2)-C(30)-N(6)	120.8(6)	C(66)-C(71)-C(15)	120.5(5)

Supplementary material n° 4.

Anisotropic displacement parameters ($A^2 \times 10^3$) for ArPyNi.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ni	30(1)	31(1)	29(1)	-2(1)	9(1)	1(1)
N(1)	33(2)	42(2)	27(2)	-4(2)	8(1)	-1(2)
N(2)	32(2)	41(2)	33(2)	-2(2)	9(2)	2(2)
N(3)	35(2)	34(2)	36(2)	-6(2)	13(1)	2(2)
N(4)	35(2)	29(2)	33(2)	-3(2)	9(1)	1(2)
C(1)	33(2)	41(3)	39(2)	-3(2)	11(2)	2(2)
C(2)	34(2)	84(5)	51(3)	-17(3)	18(2)	4(3)
C(3)	36(2)	74(4)	54(3)	-21(3)	15(2)	-6(3)
C(4)	41(2)	47(3)	37(2)	-6(2)	8(2)	0(2)
C(5)	34(2)	50(3)	38(2)	-11(2)	8(2)	0(2)
C(6)	40(2)	47(3)	36(2)	-7(2)	7(2)	3(2)
C(7)	45(3)	64(4)	42(3)	-19(3)	9(2)	3(3)
C(8)	51(3)	67(4)	40(3)	-15(3)	12(2)	6(3)
C(9)	42(2)	44(3)	31(2)	2(2)	13(2)	11(2)
C(10)	40(2)	45(3)	44(2)	-1(2)	18(2)	7(2)
C(11)	35(2)	43(3)	41(2)	2(2)	15(2)	2(2)
C(12)	33(2)	63(3)	55(3)	-11(3)	11(2)	-5(3)
C(13)	30(2)	64(4)	61(3)	-11(3)	3(2)	0(3)
C(14)	35(2)	37(3)	40(2)	-1(2)	7(2)	2(2)
C(15)	39(2)	34(3)	39(2)	1(2)	6(2)	-5(2)
C(16)	41(2)	38(3)	33(2)	-6(2)	6(2)	-4(2)
C(17)	51(3)	59(4)	41(3)	-20(3)	5(2)	-2(3)
C(18)	51(3)	60(4)	52(3)	-18(3)	18(2)	2(3)
C(19)	42(2)	36(2)	35(2)	-9(2)	14(2)	-1(2)
C(20)	42(2)	40(3)	36(2)	-4(2)	21(2)	1(2)
N(5)	75(3)	42(3)	73(3)	-1(2)	50(3)	9(2)
N(6)	65(3)	52(3)	63(3)	-4(2)	38(2)	4(2)
N(7)	36(2)	58(3)	47(2)	3(2)	8(2)	7(2)
N(8)	36(2)	56(3)	53(2)	2(2)	18(2)	4(2)
O(1)	270(9)	69(3)	124(5)	15(4)	151(6)	34(6)
O(2)	81(3)	80(4)	67(3)	-21(3)	27(2)	-1(3)
O(3)	40(2)	80(3)	53(2)	-2(2)	12(2)	9(2)
O(4)	37(2)	152(6)	89(3)	46(4)	12(2)	0(3)
C(21)	44(2)	43(3)	47(3)	-9(2)	18(2)	6(2)
C(22)	68(4)	46(3)	67(4)	1(3)	32(3)	12(3)
C(23)	83(4)	49(4)	90(5)	-4(3)	48(4)	19(3)
C(24)	75(4)	61(4)	76(4)	-6(3)	38(4)	25(4)
C(25)	82(4)	55(4)	78(4)	-3(3)	53(4)	8(4)
C(26)	47(3)	44(3)	56(3)	0(3)	25(2)	7(2)
C(27)	98(5)	60(4)	75(4)	6(3)	60(4)	12(4)
C(28)	84(4)	57(4)	79(4)	6(3)	58(4)	3(3)
C(29)	92(6)	79(6)	143(8)	-3(6)	85(6)	-15(5)
C(30)	62(3)	40(3)	64(3)	2(3)	30(3)	5(3)
C(31)	49(3)	42(3)	52(3)	3(2)	21(2)	0(2)
C(32)	49(3)	38(3)	51(3)	-1(2)	7(2)	2(2)
C(33)	39(2)	39(3)	55(3)	3(2)	10(2)	-4(2)
C(34)	38(2)	40(3)	45(3)	10(2)	10(2)	6(2)
C(35)	40(3)	56(4)	53(3)	-4(3)	14(2)	-4(3)
C(36)	36(2)	61(4)	64(3)	-5(3)	13(2)	0(3)
C(37)	34(2)	46(3)	46(3)	6(2)	9(2)	4(2)

Supplementary material n° 4.(con't)

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(38)	38(3)	62(4)	53(3)	5(3)	10(2)	5(3)
C(39)	44(3)	80(5)	89(5)	27(4)	21(3)	17(3)
C(40)	43(3)	65(4)	50(3)	2(3)	17(2)	9(3)
C(41)	38(2)	62(4)	42(3)	-4(3)	13(2)	-1(2)
C(42)	53(3)	89(5)	57(3)	2(4)	35(3)	16(3)
C(43)	66(4)	107(6)	81(4)	19(5)	51(4)	17(4)
C(44)	98(5)	107(8)	96(5)	39(5)	71(5)	28(5)
C(45)	81(4)	77(6)	87(4)	27(4)	55(4)	25(4)
C(46)	40(2)	62(4)	43(3)	1(3)	21(2)	1(3)
N(9)	61(3)	68(4)	37(2)	-17(2)	-7(2)	6(3)
N(10)	64(3)	61(3)	43(2)	-5(2)	-4(2)	10(3)
N(11)	55(3)	118(6)	67(3)	-31(4)	10(3)	0(4)
N(12)	54(2)	45(3)	43(2)	-2(2)	5(2)	3(2)
N(13)	52(2)	39(2)	34(2)	-8(2)	8(2)	-7(2)
O(5)	122(5)	171(7)	49(3)	-34(4)	24(3)	-70(5)
O(6)	64(3)	67(3)	56(2)	-15(2)	6(2)	8(2)
O(7)	59(2)	49(2)	47(2)	-5(2)	8(2)	5(2)
O(8)	56(2)	59(3)	49(2)	-18(2)	4(2)	9(2)
C(47)	36(2)	58(4)	48(3)	-22(3)	11(2)	-3(2)
C(48)	56(3)	65(4)	66(4)	-23(3)	21(3)	-9(3)
C(49)	60(4)	69(5)	92(5)	-36(4)	29(4)	-22(3)
C(50)	52(3)	96(6)	79(5)	-53(5)	19(3)	-25(4)
C(51)	43(3)	91(6)	59(4)	-35(4)	5(3)	7(4)
C(52)	43(3)	64(4)	53(3)	-24(3)	15(2)	3(3)
C(53)	60(3)	100(6)	45(3)	-30(3)	7(3)	-6(4)
C(54)	65(4)	73(4)	42(3)	-10(3)	-2(2)	3(3)
C(55)	121(7)	103(7)	48(4)	6(4)	-8(4)	6(6)
C(56)	59(3)	44(3)	40(3)	-1(2)	3(2)	5(3)
C(57)	51(3)	43(3)	37(2)	5(2)	3(2)	-5(2)
C(58)	49(3)	83(5)	59(3)	-14(4)	11(3)	-2(3)
C(59)	56(3)	38(3)	38(2)	4(2)	5(2)	4(2)
C(60)	53(3)	46(3)	37(3)	4(2)	9(2)	-3(3)
C(61)	61(4)	72(4)	58(3)	-18(3)	21(3)	-6(3)
C(62)	57(3)	41(3)	39(3)	2(2)	7(2)	-6(3)
C(63)	66(3)	36(3)	50(3)	-6(2)	11(3)	-5(3)
C(64)	79(4)	64(4)	67(4)	0(3)	22(3)	-27(4)
C(65)	42(2)	38(3)	42(2)	-8(2)	10(2)	-7(2)
C(66)	36(2)	39(3)	36(2)	-6(2)	10(2)	-1(2)
C(67)	45(3)	45(3)	48(3)	-15(3)	9(2)	-1(2)
C(68)	45(3)	65(4)	48(3)	-16(3)	-10(2)	7(3)
C(69)	71(4)	57(4)	55(3)	4(3)	-13(3)	7(3)
C(70)	69(3)	41(4)	56(3)	5(3)	-7(3)	-3(3)
C(71)	39(2)	40(3)	40(2)	-6(2)	6(2)	1(2)
OW1	126(5)	67(3)	79(3)	7(3)	45(3)	14(3)
OW2	44(2)	147(7)	119(5)	-26(5)	11(3)	-9(3)
OW3	84(4)	147(7)	94(4)	38(5)	10(3)	27(5)

Supplementary material n° 5.

Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for ArPyNi.

	x	y	z	U(eq)
H(2)	12311(4)	-433(4)	7627(3)	72
H(3)	12396(4)	618(4)	8567(4)	70
H(7)	9632(4)	1639(4)	10054(3)	67
H(8)	7838(5)	1193(4)	10037(3)	69
H(12)	4591(4)	57(5)	7665(3)	66
H(13)	4391(4)	-202(4)	6209(3)	70
H(17)	7109(5)	-1277(4)	4736(3)	68
H(18)	9067(5)	-1550(4)	5218(4)	70
H(5)	11085(4)	100(3)	6084(3)	74
H(6)	10725(4)	1527(3)	6093(3)	73
H(7A)	5368(3)	2079(3)	6578(3)	62
H(8A)	6061(3)	1834(3)	8678(3)	62
H(22)	10861(5)	-2302(4)	6913(4)	75
H(23)	12036(6)	-2975(4)	6352(5)	90
H(24)	12823(6)	-2353(4)	5484(4)	88
H(25)	12474(6)	-1089(4)	5168(5)	85
H(28)	10662(6)	1274(4)	4523(5)	86
H(29A)	12011(7)	2051(6)	5382(7)	122
H(29B)	12532(7)	1419(6)	4974(7)	122
H(29C)	12549(7)	1338(6)	5896(7)	122
H(32)	7307(5)	988(3)	5196(4)	62
H(33)	6205(4)	1395(3)	5955(3)	59
H(35)	8821(4)	2307(4)	7614(4)	65
H(36)	9895(4)	1852(4)	6882(4)	70
H(38)	5449(4)	2970(4)	7901(3)	67
H(39A)	4362(5)	3409(5)	6639(5)	92
H(39B)	3685(5)	3308(5)	7257(5)	92
H(39C)	3596(5)	2704(5)	6561(5)	92
H(42)	4113(5)	1461(5)	9516(4)	81
H(43)	4020(6)	468(6)	10339(5)	101
H(44)	5131(7)	-583(6)	10444(5)	118
H(45)	6401(6)	-599(5)	9691(4)	98
H(9)	11260(4)	171(4)	10042(3)	78
H(10)	11044(4)	-1021(3)	10248(3)	79
H(12A)	7629(4)	-3050(3)	6814(3)	64
H(13A)	5376(4)	-1775(3)	6160(3)	56
H(48)	11373(5)	2299(4)	8645(4)	81
H(49)	12721(5)	2989(5)	9557(5)	94
H(50)	13531(5)	2580(5)	10850(5)	99
H(51)	12999(5)	1441(5)	11284(4)	87
H(54)	9968(5)	-212(5)	11130(3)	83
H(55A)	10495(8)	-1343(7)	11857(4)	127
H(55B)	11036(8)	-642(7)	12394(4)	127
H(55C)	11716(8)	-1148(7)	11975(4)	127
H(58)	10943(5)	-1783(5)	9367(4)	85
H(59)	7761(5)	-1389(3)	8659(3)	60
H(61)	9111(5)	-2728(5)	7365(4)	82
H(63)	6184(5)	-3613(3)	6071(3)	67
H(64A)	5512(6)	-3596(5)	7203(4)	91
H(64B)	4573(6)	-3552(5)	6365(4)	91
H(64C)	4941(6)	-2817(5)	6898(4)	91
H(67)	3659(4)	-1985(4)	4297(3)	61
H(68)	3023(5)	-1074(4)	3304(4)	76

Supplementary material n° 6.

Labeling scheme for ArPyNi.