

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1997, 16(13), 2963-2970, DOI:[10.1021/om970150r](https://doi.org/10.1021/om970150r)

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

STable 1. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for 1c

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.35829(1)	0.19598(1)	0.03758(3)	0.0453
O(1)	0.28541(16)	0.16288(17)	0.1358(4)	0.042
C(1)	0.2404(2)	0.1505(2)	0.1629(5)	0.039
C(2)	0.2308(2)	0.1842(2)	0.2123(5)	0.040
C(3)	0.1844(3)	0.1695(3)	0.2430(7)	0.051
C(4)	0.1465(3)	0.1233(3)	0.2292(7)	0.055
C(5)	0.1569(3)	0.0915(3)	0.1793(7)	0.052
C(6)	0.2017(3)	0.1034(3)	0.1442(6)	0.046
C(7)	0.2698(3)	0.2363(2)	0.2312(6)	0.047
C(8)	0.3083(3)	0.2388(3)	0.3042(7)	0.059
C(9)	0.2501(4)	0.2657(3)	0.2796(10)	0.075
C(10)	0.2926(4)	0.2605(3)	0.1294(8)	0.066
C(11)	0.0956(3)	0.1069(4)	0.2679(9)	0.064
C(12)	0.0850(5)	0.0717(6)	0.3559(13)	0.101
C(13)	0.0595(4)	0.0829(5)	0.1798(12)	0.091
C(14)	0.0900(4)	0.1496(5)	0.3037(14)	0.101
C(15)	0.2078(3)	0.0659(3)	0.0851(7)	0.053
C(16)	0.1607(4)	0.0183(3)	0.0731(11)	0.079
C(17)	0.2422(4)	0.0535(3)	0.1389(9)	0.071
C(18)	0.2275(4)	0.0853(4)	-0.0213(8)	0.075
C(19)	0.3794(4)	0.2651(3)	-0.1112(7)	0.065
C(20)	0.3395(4)	0.2221(4)	-0.1489(6)	0.071
C(21)	0.3551(4)	0.1890(3)	-0.1708(6)	0.065
C(22)	0.4045(4)	0.2116(3)	-0.1476(7)	0.063
C(23)	0.4193(4)	0.2582(3)	-0.1110(7)	0.060
C(24)	0.3801(7)	0.3106(4)	-0.0857(10)	0.106
C(25)	0.2894(6)	0.2142(7)	-0.1671(12)	0.122
C(26)	0.3260(6)	0.1390(5)	-0.2134(8)	0.087
C(27)	0.4361(5)	0.1909(5)	-0.1648(11)	0.102
C(28)	0.4699(5)	0.2948(5)	-0.0824(12)	0.090

STable 2. Anisotropic Thermal Parameters for 1c

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0422(2)	0.0408(2)	0.0397(1)	0.0218(2)	0.0074(2)	0.0105(2)
O(1)	0.031(2)	0.033(2)	0.051(3)	0.016(2)	0.000(2)	0.001(2)
C(1)	0.032(3)	0.036(3)	0.037(3)	0.017(2)	0.000(2)	0.004(2)
C(2)	0.033(3)	0.030(3)	0.048(3)	0.016(2)	-0.003(2)	-0.001(2)
C(3)	0.040(3)	0.043(4)	0.058(4)	0.022(3)	0.001(3)	-0.003(3)
C(4)	0.034(3)	0.049(4)	0.067(5)	0.022(3)	0.005(3)	-0.004(3)
C(5)	0.033(3)	0.041(4)	0.064(4)	0.011(3)	0.000(3)	-0.010(3)
C(6)	0.037(3)	0.035(3)	0.053(4)	0.017(3)	-0.001(3)	-0.003(3)
C(7)	0.041(3)	0.032(3)	0.054(4)	0.018(3)	0.000(3)	-0.002(3)
C(8)	0.047(4)	0.048(4)	0.062(5)	0.017(3)	-0.011(3)	-0.008(3)
C(9)	0.061(5)	0.042(4)	0.107(8)	0.029(4)	0.005(5)	-0.021(5)
C(10)	0.071(5)	0.041(4)	0.064(5)	0.023(4)	0.005(4)	0.011(3)
C(11)	0.035(4)	0.060(5)	0.080(6)	0.022(4)	0.009(4)	-0.004(4)
C(12)	0.059(6)	0.103(10)	0.108(10)	0.032(7)	0.032(7)	0.030(8)
C(13)	0.042(4)	0.097(8)	0.105(9)	0.028(5)	-0.004(5)	-0.015(7)
C(14)	0.056(6)	0.090(8)	0.136(12)	0.042(6)	0.022(7)	-0.020(8)
C(15)	0.044(4)	0.038(3)	0.060(5)	0.015(3)	0.004(3)	-0.008(3)
C(16)	0.058(5)	0.045(4)	0.107(9)	0.011(4)	0.004(5)	-0.025(5)
C(17)	0.063(5)	0.050(5)	0.087(6)	0.037(4)	0.004(4)	-0.003(4)
C(18)	0.074(6)	0.070(6)	0.051(5)	0.030(5)	0.008(4)	-0.012(4)
C(19)	0.084(6)	0.047(4)	0.048(4)	0.041(4)	0.014(4)	0.016(3)
C(20)	0.068(5)	0.086(6)	0.042(4)	0.051(5)	0.003(4)	0.020(4)
C(21)	0.083(6)	0.054(4)	0.035(3)	0.036(4)	0.012(4)	0.007(3)
C(22)	0.074(6)	0.048(4)	0.053(4)	0.039(4)	0.031(4)	0.022(3)
C(23)	0.061(5)	0.047(4)	0.052(4)	0.024(4)	0.020(4)	0.017(3)
C(24)	0.151(5)	0.063(4)	0.092(6)	0.070(4)	0.044(4)	0.032(5)
C(25)	0.096(8)	0.153(14)	0.086(8)	0.086(10)	-0.012(6)	0.024(8)
C(26)	0.106(9)	0.065(6)	0.050(5)	0.024(6)	0.007(5)	-0.008(4)
C(27)	0.103(8)	0.088(8)	0.099(8)	0.071(7)	0.061(7)	0.045(7)
C(28)	0.065(6)	0.074(7)	0.094(9)	0.012(5)	0.026(6)	0.025(6)

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

STable 3. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for Complex 1c

Sm(1)···Sm(1')	3.8418(5)		
Sm(1) - O(1)	2.425(5)	Sm(1) - O(1')	2.512(6)
Sm(1) - C(19)	2.794(9)	Sm(1) - C(20)	2.768(10)
Sm(1) - C(21)	2.756(8)	Sm(1) - C(22)	2.776(10)
Sm(1) - C(23)	2.799(10)	O(1) - C(1)	1.355(8)
C(1) - C(2)	1.431(10)	C(1) - C(6)	1.435(10)
C(2) - C(3)	1.394(10)	C(2) - C(7)	1.544(10)
C(3) - C(4)	1.396(11)	C(4) - C(5)	1.399(12)
C(4) - C(11)	1.548(12)	C(5) - C(6)	1.382(11)
C(6) - C(15)	1.539(11)	C(7) - C(8)	1.546(12)
C(7) - C(9)	1.529(13)	C(7) - C(10)	1.545(13)
C(11) - C(12)	1.54(3)	C(11) - C(13)	1.554(18)
C(11) - C(14)	1.560(19)	C(15) - C(16)	1.543(14)
C(15) - C(17)	1.537(14)	C(15) - C(18)	1.540(14)
C(19) - C(20)	1.437(15)	C(19) - C(23)	1.418(15)
C(19) - C(24)	1.505(16)	C(20) - C(21)	1.428(15)
C(20) - C(25)	1.531(19)	C(21) - C(22)	1.422(16)
C(21) - C(26)	1.519(16)	C(22) - C(23)	1.420(13)
C(22) - C(27)	1.501(18)	C(23) - C(28)	1.517(17)
O(1) - Sm(1) - O(1')	77.8(2)	O(1) - Sm(1) - C(19)	121.6(3)
O(1) - Sm(1) - C(20)	107.2(3)	O(1) - Sm(1) - C(21)	120.6(3)
O(1) - Sm(1) - C(22)	150.3(3)	O(1) - Sm(1) - C(23)	151.0(3)
O(1') - Sm(1) - C(19)	149.3(3)	O(1') - Sm(1) - C(20)	174.1(3)
O(1') - Sm(1) - C(21)	144.7(3)	O(1') - Sm(1) - C(22)	125.3(3)
O(1') - Sm(1) - C(23)	127.3(3)	C(19) - Sm(1) - C(20)	29.9(4)
C(19) - Sm(1) - C(21)	49.4(3)	C(19) - Sm(1) - C(22)	48.8(3)
C(19) - Sm(1) - C(23)	29.4(4)	C(20) - Sm(1) - C(21)	30.0(4)
C(20) - Sm(1) - C(22)	49.0(3)	C(20) - Sm(1) - C(23)	48.8(4)
C(21) - Sm(1) - C(22)	29.8(4)	C(21) - Sm(1) - C(23)	49.1(3)
C(22) - Sm(1) - C(23)	29.5(3)	Sm(1) - O(1) - Sm(1')	102.2(2)
Sm(1) - O(1) - C(1)	160.0(5)	Sm(1') - O(1) - C(1)	97.8(5)
O(1) - C(1) - C(2)	120.5(6)		
O(1) - C(1) - C(6)	120.6(6)	C(2) - C(1) - C(6)	118.9(6)
C(1) - C(2) - C(3)	118.7(7)	C(1) - C(2) - C(7)	122.5(6)
C(3) - C(2) - C(7)	118.7(7)	C(2) - C(3) - C(4)	123.4(8)
C(3) - C(4) - C(5)	116.5(8)	C(3) - C(4) - C(11)	122.8(8)
C(5) - C(4) - C(11)	120.7(8)	C(4) - C(5) - C(6)	124.0(8)
C(1) - C(6) - C(5)	118.5(7)	C(1) - C(6) - C(15)	122.7(7)
C(5) - C(6) - C(15)	118.8(7)	C(2) - C(7) - C(8)	110.8(6)
C(2) - C(7) - C(9)	112.4(7)	C(2) - C(7) - C(10)	109.7(7)
C(8) - C(7) - C(9)	106.6(8)	C(8) - C(7) - C(10)	110.2(7)
C(9) - C(7) - C(10)	106.9(8)	C(4) - C(11) - C(12)	107.9(9)
C(4) - C(11) - C(13)	109.5(10)	C(4) - C(11) - C(14)	111.9(9)
C(12) - C(11) - C(13)	111.0(11)	C(12) - C(11) - C(14)	110.4(12)
C(13) - C(11) - C(14)	106.2(10)	C(6) - C(15) - C(16)	112.8(8)
C(6) - C(15) - C(17)	111.8(8)	C(6) - C(15) - C(18)	109.2(8)
C(16) - C(15) - C(17)	105.8(8)	C(16) - C(15) - C(18)	108.4(9)
C(17) - C(15) - C(18)	108.8(9)	C(20) - C(19) - C(23)	107.4(9)
C(20) - C(19) - C(24)	126.4(12)	C(23) - C(19) - C(24)	126.0(11)
Sm(1) - C(19) - C(20)	74.0(6)	Sm(1) - C(19) - C(23)	75.5(6)
Sm(1) - C(19) - C(24)	120.5(7)	C(19) - C(20) - C(21)	108.2(10)
C(19) - C(20) - C(25)	125.7(12)	C(21) - C(20) - C(25)	126.0(12)
Sm(1) - C(20) - C(19)	76.0(6)	Sm(1) - C(20) - C(21)	74.5(5)
Sm(1) - C(20) - C(25)	117.8(8)	C(20) - C(21) - C(22)	107.5(9)
C(20) - C(21) - C(26)	127.8(11)	C(22) - C(21) - C(26)	124.7(11)
Sm(1) - C(21) - C(20)	75.5(5)	Sm(1) - C(21) - C(22)	75.9(5)

(Stable 3 continued)

Sm(1) - C(21) - C(26)	115.8(6)	C(21) - C(22) - C(23)	108.5(9)
C(21) - C(22) - C(27)	125.6(10)	C(23) - C(22) - C(27)	125.8(10)
Sm(1) - C(22) - C(21)	74.3(5)	Sm(1) - C(22) - C(23)	76.1(6)
Sm(1) - C(22) - C(27)	118.6(8)	C(19) - C(23) - C(22)	108.4(9)
C(19) - C(23) - C(28)	126.3(10)	C(22) - C(23) - C(28)	125.2(10)
Sm(1) - C(23) - C(19)	75.1(6)	Sm(1) - C(23) - C(22)	74.3(6)
Sm(1) - C(23) - C(28)	119.3(8)		

STable 4. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for 3

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.78211(2)	0.00000	0.06300	0.0289
O(1)	0.9127(3)	0.0000	-0.0723(4)	0.032
C(1)	1.0085(5)	0.0000	-0.1303(6)	0.029
C(2)	1.1086(5)	0.0000	-0.0637(6)	0.030
C(3)	1.2075(5)	0.0000	-0.1321(7)	0.036
C(4)	1.2139(6)	0.0000	-0.2639(6)	0.035
C(5)	1.1123(6)	0.0000	-0.3276(7)	0.036
C(6)	1.0120(5)	0.0000	-0.2688(6)	0.030
C(7)	1.1225(5)	0.0000	0.0849(9)	0.035
C(8)	1.1861(5)	0.0943(6)	0.1223(7)	0.073
C(9)	1.0169(6)	0.0000	0.1604(8)	0.047
C(10)	1.3231(7)	0.0000	-0.3332(8)	0.038
C(11)	1.3119(8)	0.0000	-0.4764(10)	0.070
C(12)	1.3867(5)	0.0922(5)	-0.2947(8)	0.069
C(13)	0.9022(8)	0.0000	-0.3490(9)	0.036
C(14)	0.8413(6)	0.0949(6)	-0.3208(6)	0.068
C(15)	0.9332(8)	0.0000	-0.4921(11)	0.036
C(16)	0.6882(4)	0.1461(4)	0.2193(5)	0.044
C(17)	0.7934(5)	0.1830(3)	0.1839(5)	0.041
C(18)	0.7922(4)	0.2027(3)	0.0515(13)	0.038
C(19)	0.6880(4)	0.1773(4)	0.0074(6)	0.039
C(20)	0.6240(4)	0.1429(4)	0.1095(5)	0.043
C(21)	0.6487(6)	0.1344(5)	0.3529(6)	0.062
C(22)	0.8810(5)	0.2171(4)	0.2760(6)	0.055
C(23)	0.8837(5)	0.2482(4)	-0.0204(6)	0.050
C(24)	0.6415(5)	0.1980(5)	-0.1262(6)	0.058
C(25)	0.5005(4)	0.1259(5)	0.1057(7)	0.066

STable 5. Anisotropic Thermal Parameters for 3

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0265(1)	0.0265(1)	0.0336(1)	0.0000	0.0008(4)	0.0000
O(1)	0.025(2)	0.043(2)	0.029(2)	0.000	0.009(2)	0.000
C(1)	0.030(3)	0.020(2)	0.036(4)	0.000	0.000(3)	0.000
C(2)	0.035(3)	0.027(3)	0.027(3)	0.000	-0.001(3)	0.000
C(3)	0.021(2)	0.039(3)	0.049(4)	0.000	-0.001(3)	0.000
C(4)	0.040(3)	0.034(3)	0.032(3)	0.000	-0.010(3)	0.000
C(5)	0.039(3)	0.037(3)	0.033(3)	0.000	0.005(3)	0.000
C(6)	0.033(3)	0.031(3)	0.025(3)	0.000	0.001(2)	0.000
C(7)	0.035(2)	0.044(3)	0.025(8)	0.000	0.000(3)	0.000
C(8)	0.071(4)	0.094(5)	0.055(3)	-0.035(4)	0.002(3)	-0.030(3)
C(9)	0.037(4)	0.070(5)	0.035(4)	0.000	0.007(3)	0.000
C(10)	0.044(4)	0.041(4)	0.029(5)	0.000	0.012(3)	0.000
C(11)	0.043(4)	0.135(11)	0.033(6)	0.000	0.007(3)	0.000
C(12)	0.058(3)	0.056(3)	0.092(5)	-0.020(3)	0.024(3)	-0.010(3)
C(13)	0.038(5)	0.044(4)	0.027(4)	0.000	-0.002(4)	0.000
C(14)	0.070(4)	0.087(5)	0.047(3)	0.040(4)	-0.013(3)	-0.009(3)
C(15)	0.025(4)	0.047(4)	0.035(4)	0.000	-0.007(3)	0.000
C(16)	0.040(3)	0.040(2)	0.052(3)	0.004(2)	0.001(2)	0.004(2)
C(17)	0.048(3)	0.029(2)	0.047(3)	0.002(2)	-0.003(3)	-0.003(2)
C(18)	0.044(2)	0.027(1)	0.044(5)	0.005(2)	0.004(3)	-0.008(3)
C(19)	0.039(3)	0.034(2)	0.044(2)	0.008(2)	-0.004(2)	-0.001(2)
C(20)	0.039(2)	0.040(2)	0.052(3)	0.010(2)	0.000(2)	-0.004(2)
C(21)	0.079(4)	0.062(3)	0.046(3)	0.024(3)	0.017(3)	0.006(3)
C(22)	0.070(4)	0.041(3)	0.052(3)	0.002(2)	-0.027(3)	-0.013(2)
C(23)	0.050(3)	0.040(3)	0.061(3)	-0.004(2)	0.010(3)	0.001(2)
C(24)	0.053(3)	0.070(4)	0.050(3)	0.016(3)	-0.006(3)	0.003(3)
C(25)	0.033(2)	0.079(4)	0.087(5)	0.012(2)	0.004(2)	-0.007(3)

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

Table 6. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for Complex 3

Sm(1) - O(1)	2.144(5)	Sm(1) - C(16)	2.816(6)
Sm(1) - C(17)	2.783(5)	Sm(1) - C(18)	2.742(4)
Sm(1) - C(19)	2.721(6)	Sm(1) - C(20)	2.778(6)
O(1) - C(1)	1.323(8)	C(1) - C(2)	1.414(9)
C(1) - C(6)	1.460(9)	C(2) - C(3)	1.410(9)
C(2) - C(7)	1.575(12)	C(3) - C(4)	1.391(10)
C(4) - C(5)	1.415(10)	C(4) - C(10)	1.525(12)
C(5) - C(6)	1.378(10)	C(6) - C(13)	1.589(12)
C(7) - C(8)	1.544(9)	C(7) - C(9)	1.519(11)
C(10) - C(11)	1.515(14)	C(10) - C(12)	1.523(15)
C(13) - C(14)	1.512(17)	C(13) - C(15)	1.556(15)
C(16) - C(17)	1.431(8)	C(16) - C(20)	1.400(8)
C(16) - C(21)	1.497(9)	C(17) - C(18)	1.421(15)
C(17) - C(22)	1.519(9)	C(18) - C(19)	1.402(9)
C(18) - C(23)	1.487(10)	C(19) - C(20)	1.410(8)
C(19) - C(24)	1.545(9)	C(20) - C(25)	1.532(8)
O(1) - Sm(1) - C(16)	134.0(2)	O(1) - Sm(1) - C(17)	105.5(2)
O(1) - Sm(1) - C(18)	86.4(3)	O(1) - Sm(1) - C(19)	100.0(2)
O(1) - Sm(1) - C(20)	129.7(2)		
C(16) - Sm(1) - C(17)	29.6(2)	C(16) - Sm(1) - C(18)	49.1(3)
C(16) - Sm(1) - C(19)	48.5(2)	C(16) - Sm(1) - C(20)	29.0(2)
C(17) - Sm(1) - C(18)	29.8(4)	C(17) - Sm(1) - C(19)	48.6(2)
C(17) - Sm(1) - C(20)	48.5(2)	C(18) - Sm(1) - C(19)	29.7(2)
C(18) - Sm(1) - C(20)	49.2(2)	C(19) - Sm(1) - C(20)	29.7(2)
C(16) - Sm(1) - C(16')	88.9(2)	C(16) - Sm(1) - C(17')	111.9(2)
C(16) - Sm(1) - C(18')	138.0(3)	C(16) - Sm(1) - C(19')	124.7(2)
C(16) - Sm(1) - C(20')	95.6(2)	C(17) - Sm(1) - C(17')	125.1(2)
C(17) - Sm(1) - C(18')	154.6(3)	C(17) - Sm(1) - C(19')	154.2(2)
C(17) - Sm(1) - C(20')	124.8(2)	C(18) - Sm(1) - C(18')	172.8(4)
C(18) - Sm(1) - C(19')	152.6(3)	C(18) - Sm(1) - C(20')	137.1(2)
C(19) - Sm(1) - C(19')	123.2(2)	C(19) - Sm(1) - C(20')	110.7(2)
C(20) - Sm(1) - C(20')	88.0(2)	Sm(1) - O(1) - C(1)	165.8(5)
O(1) - C(1) - C(2)	122.7(6)	O(1) - C(1) - C(6)	119.2(6)
C(2) - C(1) - C(6)	118.1(6)	C(1) - C(2) - C(3)	119.4(6)
C(1) - C(2) - C(7)	126.0(6)	C(3) - C(2) - C(7)	114.6(6)
C(2) - C(3) - C(4)	124.1(7)	C(3) - C(4) - C(5)	115.1(7)
C(3) - C(4) - C(10)	121.9(7)	C(5) - C(4) - C(10)	123.0(7)
C(4) - C(5) - C(6)	124.9(7)	C(1) - C(6) - C(5)	118.5(6)
C(1) - C(6) - C(13)	120.5(6)	C(5) - C(6) - C(13)	121.1(7)
C(2) - C(7) - C(8)	108.0(5)	C(2) - C(7) - C(9)	115.4(6)
C(8) - C(7) - C(8')	111.0(6)	C(4) - C(10) - C(11)	113.5(7)
C(4) - C(10) - C(12)	108.7(9)	C(11) - C(10) - C(12)	108.1(10)
C(12) - C(10) - C(12')	109.6(7)	C(6) - C(13) - C(14)	108.3(9)
C(6) - C(13) - C(15)	108.0(8)	C(14) - C(13) - C(14')	115.8(8)
C(14) - C(13) - C(15)	108.1(10)	C(17) - C(16) - C(20)	107.5(5)
C(17) - C(16) - C(21)	125.0(6)	C(20) - C(16) - C(21)	126.3(5)
Sm(1) - C(16) - C(17)	73.9(3)	Sm(1) - C(16) - C(20)	74.0(4)
Sm(1) - C(16) - C(21)	127.5(4)	C(16) - C(17) - C(18)	108.2(5)
C(16) - C(17) - C(22)	125.1(5)	C(18) - C(17) - C(22)	125.3(5)
Sm(1) - C(17) - C(16)	76.5(3)	Sm(1) - C(17) - C(18)	73.5(3)
Sm(1) - C(17) - C(22)	126.6(4)	C(17) - C(18) - C(19)	106.8(7)
C(17) - C(18) - C(23)	124.8(7)	C(19) - C(18) - C(23)	128.2(11)
Sm(1) - C(18) - C(17)	76.7(3)	Sm(1) - C(18) - C(19)	74.3(3)
Sm(1) - C(18) - C(23)	117.9(5)	C(18) - C(19) - C(20)	109.5(7)
C(18) - C(19) - C(24)	126.5(7)	C(20) - C(19) - C(24)	123.4(5)

(Stable 6 continued)

Sm(1) - C(19) - C(18)	76.0(3)	Sm(1) - C(19) - C(20)	77.4(4)
Sm(1) - C(19) - C(24)	120.8(4)	C(16) - C(20) - C(19)	108.0(5)
C(16) - C(20) - C(25)	125.6(6)	C(19) - C(20) - C(25)	125.3(6)
Sm(1) - C(20) - C(16)	77.0(4)	Sm(1) - C(20) - C(19)	72.9(3)
Sm(1) - C(20) - C(25)	125.5(4)		

STable 7. Fractional Atomic Coordinates and U(iso) for 4a

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.04577(9)	0.25000	0.50810(9)	0.053
K(1)	-0.1024(4)	0.2500	-0.0304(4)	0.064
O(1)	0.2148(13)	0.2500	0.5517(12)	0.083
O(2)	-0.2293(13)	0.3777(12)	-0.0607(18)	0.114
C(1)	0.3119(17)	0.2500	0.5652(18)	0.068
C(2)	0.3636(15)	0.1791(19)	0.5778(24)	0.104
C(3)	0.466(2)	0.180(2)	0.596(5)	0.143
C(4)	0.513(3)	0.250	0.599(5)	0.138
C(5)	0.3144(19)	0.0987(17)	0.5762(29)	0.104
C(6)	0.334(5)	0.056(4)	0.461(8)	0.230
C(7)	0.197(4)	0.098(4)	0.539(8)	0.225
C(8)	0.356(6)	0.048(5)	0.671(8)	0.251
C(9)	-0.0957(16)	0.2884(16)	0.6694(19)	0.090
C(10)	-0.0073(19)	0.3135(12)	0.7422(19)	0.099
C(11)	0.050(2)	0.250	0.784(2)	0.096
C(12)	-0.180(3)	0.343(4)	0.615(3)	0.219
C(13)	0.021(4)	0.397(2)	0.775(4)	0.200
C(14)	0.153(3)	0.250	0.871(4)	0.172
C(15)	-0.0901(17)	0.2102(17)	0.2704(13)	0.108
C(16)	-0.003(2)	0.186(1)	0.248(2)	0.089
C(17)	0.052(3)	0.250	0.233(2)	0.121
C(18)	-0.170(4)	0.153(4)	0.282(3)	0.231
C(19)	0.031(5)	0.102(3)	0.226(6)	0.241
C(20)	0.158(3)	0.250	0.215(3)	0.175
C(21)	-0.205(3)	0.458(3)	-0.066(6)	0.158
C(22)	-0.301(5)	0.498(4)	-0.070(8)	0.228
C(23)	-0.373(3)	0.450(4)	-0.058(7)	0.221
C(24)	-0.329(3)	0.367(3)	-0.082(4)	0.160

Table 8. Anisotropic Thermal Parameters for 4a

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0635(5)	0.0507(4)	0.0396(3)	0.0000	0.0136(3)	0.0000
K(1)	0.075(3)	0.066(3)	0.047(2)	0.000	0.017(2)	0.000
O(1)	0.08(1)	0.11(1)	0.06(1)	0.00	0.02(1)	0.00
O(2)	0.12(1)	0.11(1)	0.11(1)	0.02(1)	0.02(1)	0.01(1)
C(1)	0.05(1)	0.10(2)	0.05(1)	0.00	0.01(1)	0.00
C(2)	0.06(1)	0.13(2)	0.11(1)	0.01(1)	0.02(1)	-0.01(1)
C(3)	0.09(2)	0.12(2)	0.20(4)	0.03(1)	0.00(2)	-0.02(2)
C(4)	0.10(2)	0.13(3)	0.17(4)	0.00	0.03(2)	0.00
C(5)	0.11(1)	0.10(2)	0.10(2)	-0.01(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(6)	0.20(4)	0.16(4)	0.31(8)	0.07(4)	0.07(5)	0.03(5)
C(7)	0.16(4)	0.20(6)	0.30(8)	-0.06(4)	-0.05(4)	0.05(5)
C(8)	0.29(7)	0.20(6)	0.25(7)	-0.08(5)	0.06(6)	0.04(5)
C(9)	0.11(1)	0.11(2)	0.05(1)	0.04(1)	0.04(1)	0.02(1)
C(10)	0.15(2)	0.05(1)	0.09(1)	-0.02(1)	0.07(1)	-0.03(1)
C(11)	0.11(2)	0.16(3)	0.02(1)	0.00	0.02(1)	0.00
C(12)	0.21(4)	0.33(6)	0.11(2)	0.19(4)	0.08(2)	0.07(3)
C(13)	0.28(5)	0.09(2)	0.21(3)	-0.08(2)	0.17(4)	-0.08(2)
C(14)	0.08(2)	0.33(9)	0.10(2)	0.00	0.03(2)	0.00
C(15)	0.10(1)	0.17(2)	0.05(1)	-0.06(1)	0.01(1)	-0.01(1)
C(16)	0.16(2)	0.04(1)	0.06(1)	0.03(1)	-0.03(1)	-0.03(1)
C(17)	0.09(2)	0.21(5)	0.06(1)	0.00	0.03(1)	0.00
C(18)	0.27(5)	0.32(7)	0.09(2)	-0.22(5)	-0.03(2)	0.04(3)
C(19)	0.34(7)	0.14(3)	0.23(5)	0.11(4)	-0.14(5)	-0.09(4)
C(20)	0.12(3)	0.35(8)	0.05(1)	0.00	0.03(1)	0.00
C(21)	0.17(3)	0.13(3)	0.16(6)	0.03(2)	0.03(3)	0.03(3)
C(22)	0.23(5)	0.19(5)	0.25(7)	0.06(5)	0.07(5)	0.01(4)
C(23)	0.12(3)	0.22(6)	0.31(7)	0.06(3)	0.03(3)	-0.01(5)
C(24)	0.15(3)	0.14(3)	0.18(3)	0.01(3)	0.02(2)	-0.03(2)

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

STable 9. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for Complex 4a

Sm(1) - O(1)	2.293(18)	Sm(1) - C(9)	2.87(3)
Sm(1) - C(10)	2.87(2)	Sm(1) - C(11)	2.837(19)
Sm(1) - C(15)	2.881(18)	Sm(1) - C(16)	2.867(18)
Sm(1) - C(17)	2.86(3)	K(1) - O(2)	2.79(2)
K(1) - C(15)	3.157(15)	K(1) - C(16)	3.142(19)
K(1) - C(17)	3.13(3)	K(1) - C(9'')	3.19(2)
K(1) - C(10'')	3.10(3)	K(1) - C(11'')	3.11(3)
O(1) - C(1)	1.32(3)	O(2) - C(21)	1.41(6)
O(2) - C(24)	1.36(5)	C(1) - C(2)	1.41(4)
C(2) - C(3)	1.38(4)	C(2) - C(5)	1.54(5)
C(3) - C(4)	1.37(4)	C(5) - C(6)	1.47(8)
C(5) - C(7)	1.60(6)	C(5) - C(8)	1.36(9)
C(9) - C(9')	1.32(4)	C(9) - C(10)	1.38(4)
C(9) - C(12)	1.52(6)	C(10) - C(11)	1.37(3)
C(10) - C(13)	1.51(4)	C(11) - C(14)	1.53(5)
C(15) - C(15')	1.37(5)	C(15) - C(16)	1.33(4)
C(15) - C(18)	1.50(7)	C(16) - C(17)	1.36(4)
C(16) - C(19)	1.55(6)	C(17) - C(20)	1.51(6)
C(21) - C(22)	1.49(8)	C(22) - C(23)	1.32(9)
C(23) - C(24)	1.58(8)		
O(1) - Sm(1) - C(9)	131.6(6)	O(1) - Sm(1) - C(9')	131.6(6)
O(1) - Sm(1) - C(10)	104.2(6)	O(1) - Sm(1) - C(10')	104.2(6)
O(1) - Sm(1) - C(11)	88.4(8)	O(1) - Sm(1) - C(15)	130.1(6)
O(1) - Sm(1) - C(15')	130.1(6)	O(1) - Sm(1) - C(16)	103.7(7)
O(1) - Sm(1) - C(16')	103.7(7)	O(1) - Sm(1) - C(17)	88.5(8)
C(9) - Sm(1) - C(9')	26.6(8)	C(9) - Sm(1) - C(10)	27.8(7)
C(9) - Sm(1) - C(10')	44.7(7)	C(9) - Sm(1) - C(11)	46.1(8)
C(9) - Sm(1) - C(11')	46.1(8)	C(9) - Sm(1) - C(15)	98.3(6)
C(9) - Sm(1) - C(15')	92.0(6)	C(9) - Sm(1) - C(16)	124.5(8)
C(9) - Sm(1) - C(16')	113.0(7)	C(9) - Sm(1) - C(17)	136.7(9)
C(9') - Sm(1) - C(15)	92.0(6)	C(9') - Sm(1) - C(15')	98.3(6)
C(9') - Sm(1) - C(16)	113.0(7)	C(9') - Sm(1) - C(16')	124.5(8)
C(9') - Sm(1) - C(17)	136.7(9)	C(10) - Sm(1) - C(10')	44.6(6)
C(10) - Sm(1) - C(11)	27.8(6)	C(10) - Sm(1) - C(11')	27.8(6)
C(10) - Sm(1) - C(15)	125.5(7)	C(10) - Sm(1) - C(15')	113.6(7)
C(10) - Sm(1) - C(16)	152.1(8)	C(10) - Sm(1) - C(16')	126.4(7)
C(10) - Sm(1) - C(17)	153.9(6)	C(10') - Sm(1) - C(11)	27.8(6)
C(10') - Sm(1) - C(15)	113.6(7)	C(10') - Sm(1) - C(15')	125.5(7)
C(10') - Sm(1) - C(16)	126.4(7)	C(10') - Sm(1) - C(16')	152.1(8)
C(10') - Sm(1) - C(17)	153.9(6)	C(11) - Sm(1) - C(15)	138.2(8)
C(11) - Sm(1) - C(15')	138.2(8)	C(11) - Sm(1) - C(16)	154.1(6)
C(11) - Sm(1) - C(16')	154.1(6)	C(11) - Sm(1) - C(17)	177.0(10)
C(15) - Sm(1) - C(15')	27.4(8)	C(15) - Sm(1) - C(16)	26.8(8)
C(15) - Sm(1) - C(16')	44.7(8)	C(15) - Sm(1) - C(17)	44.7(9)
C(15') - Sm(1) - C(16)	44.7(8)	C(15') - Sm(1) - C(17)	44.7(9)
C(16) - Sm(1) - C(16')	44.9(6)	C(16) - Sm(1) - C(17)	27.5(7)
O(2) - K(1) - O(2')	103.7(6)	O(2) - K(1) - C(9'')	82.0(6)
O(2) - K(1) - C(9''')	100.7(6)	O(2) - K(1) - C(10'')	89.1(6)
O(2) - K(1) - C(10''')	122.6(6)	O(2) - K(1) - C(11'')	114.6(5)
O(2) - K(1) - C(15)	101.4(7)	O(2) - K(1) - C(15')	81.8(7)
O(2) - K(1) - C(16)	122.3(6)	O(2) - K(1) - C(16')	89.2(6)
O(2) - K(1) - C(17)	114.2(5)	C(9'') - K(1) - C(9''')	23.9(7)
C(9'') - K(1) - C(10'')	25.3(6)	C(9'') - K(1) - C(10''')	40.6(6)
C(9'') - K(1) - C(11'')	41.6(6)	C(9'') - K(1) - C(15)	175.3(6)
C(9'') - K(1) - C(15')	155.1(7)	C(9'') - K(1) - C(16)	151.0(7)
C(9'') - K(1) - C(16')	136.9(7)	C(9'') - K(1) - C(17)	135.0(8)

(Stable 9 continued)

C(10'') - K(1) - C(10''')	41.2(6)	C(10'') - K(1) - C(11'')	25.5(5)
C(10'') - K(1) - C(15')	150.6(7)	C(10'') - K(1) - C(15'')	136.0(7)
C(10'') - K(1) - C(16')	130.0(7)	C(10'') - K(1) - C(16'')	113.4(7)
C(10'') - K(1) - C(17')	110.1(8)	C(11'') - K(1) - C(15')	133.8(7)
C(11'') - K(1) - C(15'')	133.8(7)	C(11'') - K(1) - C(16')	109.6(7)
C(11'') - K(1) - C(16'')	109.6(7)	C(11'') - K(1) - C(17')	96.1(8)
C(15') - K(1) - C(15'')	25.0(8)	C(15') - K(1) - C(16')	24.4(7)
C(15') - K(1) - C(16'')	40.6(7)	C(15') - K(1) - C(17')	40.6(8)
C(16') - K(1) - C(16'')	40.8(6)	C(16') - K(1) - C(17')	25.0(6)
Sm(1) - O(1) - C(1)	174.8(12)	K(1) - O(2) - C(21)	128.3(21)
K(1) - O(2) - C(24)	120.5(22)	Sm(1) - C(9) - C(9')	76.7(14)
Sm(1) - C(9) - C(10)	76.1(13)	Sm(1) - C(9) - C(12)	119.1(18)
Sm(1) - C(10) - C(9)	76.2(12)	Sm(1) - C(10) - C(11)	74.7(13)
Sm(1) - C(10) - C(13)	116.9(21)	Sm(1) - C(11) - C(10)	77.5(12)
Sm(1) - C(11) - C(10')	77.5(12)	Sm(1) - C(11) - C(14)	115.6(21)
K(1) - C(9'') - C(9''')	78.1(13)	K(1) - C(9'') - C(10'')	73.6(12)
K(1) - C(9) - C(12)	109.1(17)	K(1) - C(10'') - C(9'')	81.2(13)
K(1) - C(10'') - C(11'')	77.7(14)	K(1) - C(10'') - C(13'')	107.1(20)
K(1) - C(11'') - C(10'')	76.8(16)	K(1) - C(11'') - C(10''')	76.8(16)
K(1) - C(11'') - C(14'')	107.5(18)	Sm(1') - C(9'') - K(1)	131.6(8)
Sm(1') - C(10'') - K(1)	135.8(8)	Sm(1') - C(11'') - K(1)	136.9(11)
O(1) - C(1) - C(2)	119.8(13)	C(2) - C(1) - C(2)	120.1(22)
C(1) - C(2) - C(3)	119.4(28)	C(1) - C(2) - C(5)	124.1(20)
C(3) - C(2) - C(5)	116.5(28)	C(2) - C(3) - C(4)	118.7(33)
C(3) - C(4) - C(3')	123.4(35)	C(2) - C(5) - C(6)	108.0(33)
C(2) - C(5) - C(7)	115.9(32)	C(2) - C(5) - C(8)	116.5(41)
C(6) - C(5) - C(7)	97.9(42)	C(6) - C(5) - C(8)	98.1(48)
C(7) - C(5) - C(8)	116.3(49)	C(9') - C(9) - C(10)	108.2(21)
C(9') - C(9) - C(12)	127.8(28)	C(10) - C(9) - C(12)	123.7(30)
C(9) - C(10) - C(11)	109.0(21)	C(9) - C(10) - C(13)	125.7(27)
C(11) - C(10) - C(13)	125.3(27)	C(11) - C(10) - C(13)	125.3(27)
C(10) - C(11) - C(10')	105.4(24)	C(10) - C(11) - C(14)	127.1(13)
C(10') - C(11) - C(14)	127.1(13)	C(15') - C(15) - C(16)	108.0(22)
C(15') - C(15) - C(18)	130.8(31)	C(16) - C(15) - C(18)	121.0(32)
C(15) - C(16) - C(17)	108.3(24)	C(15) - C(16) - C(19)	128.7(34)
C(17) - C(16) - C(19)	122.7(35)	C(16) - C(17) - C(16')	107.3(30)
C(16) - C(17) - C(20)	126.3(17)	C(16') - C(17) - C(20)	126.3(17)
C(21) - O(2) - C(24)	111.0(30)	O(2) - C(21) - C(22)	104.1(40)
C(21) - C(22) - C(23)	112.2(58)	C(22) - C(23) - C(24)	103.4(46)
O(2) - C(24) - C(23)	105.4(35)		

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

Atom	x/a	y/b	z/c	U(iso)
Sm(1)	0.47113(4)	0.24509(2)	-0.02073(4)	0.058
K(1)	0.62767(15)	0.27314(10)	0.52905(15)	0.069
O(1)	0.2850(4)	0.2274(3)	-0.1071(5)	0.075
O(2)	0.7622(7)	0.4293(4)	0.5707(7)	0.118
O(3)	0.7659(7)	0.1647(5)	0.5632(7)	0.135
C(1)	0.2106(6)	0.2158(4)	-0.0393(7)	0.063
C(2)	0.1799(6)	0.1397(4)	0.0103(7)	0.065
C(3)	0.1161(7)	0.1331(5)	0.1003(9)	0.084
C(4)	0.0720(7)	0.1956(5)	0.1364(10)	0.098
C(5)	0.0910(7)	0.2663(5)	0.0748(10)	0.090
C(6)	0.1568(7)	0.2778(5)	-0.0121(8)	0.071
C(7)	0.2111(6)	0.0649(4)	-0.0443(7)	0.065
C(8)	0.1811(8)	-0.0076(5)	0.0319(9)	0.089
C(9)	0.1425(8)	0.0467(5)	-0.1888(9)	0.086
C(10)	0.3290(7)	0.0722(4)	-0.0435(8)	0.073
C(11)	0.0066(10)	0.1885(7)	0.2376(13)	0.147
C(12)	0.1744(8)	0.3566(5)	-0.0800(8)	0.088
C(13)	0.1026(10)	0.4127(6)	-0.0472(12)	0.138
C(14)	0.2900(9)	0.3996(5)	-0.0333(9)	0.102
C(15)	0.1431(10)	0.3390(6)	-0.2310(10)	0.118
C(16)	0.4500(7)	0.2220(4)	-0.3043(6)	0.069
C(17)	0.5331(7)	0.1820(4)	-0.2452(6)	0.069
C(18)	0.6272(7)	0.2366(5)	-0.1746(7)	0.074
C(19)	0.5999(7)	0.3124(4)	-0.1908(7)	0.077
C(20)	0.4949(7)	0.3043(4)	-0.2692(7)	0.077
C(21)	0.3403(8)	0.1856(6)	-0.3855(8)	0.097
C(22)	0.5288(9)	0.0927(5)	-0.2545(10)	0.118
C(23)	0.7326(8)	0.2192(8)	-0.1110(9)	0.124
C(24)	0.6774(11)	0.3894(6)	-0.1340(10)	0.130
C(25)	0.4303(11)	0.3681(6)	-0.3199(10)	0.150
C(26)	0.6015(7)	0.2090(4)	0.2326(6)	0.065
C(27)	0.6416(6)	0.2901(5)	0.2202(6)	0.064
C(28)	0.5596(7)	0.3321(4)	0.2343(6)	0.062
C(29)	0.4716(6)	0.2775(4)	0.2571(6)	0.059
C(30)	0.5000(6)	0.2016(4)	0.2576(6)	0.057
C(31)	0.6606(9)	0.1421(6)	0.2229(9)	0.106
C(32)	0.7527(8)	0.3264(7)	0.2136(10)	0.105
C(33)	0.5652(10)	0.4202(5)	0.2291(9)	0.104
C(34)	0.3733(8)	0.2970(6)	0.2893(7)	0.091
C(35)	0.4352(9)	0.1282(5)	0.2974(8)	0.094
C(36)	0.7327(12)	0.5041(8)	0.5639(15)	0.161
C(37)	0.8270(15)	0.5591(8)	0.6043(17)	0.186
C(38)	0.9137(12)	0.5234(9)	0.6406(19)	0.212
C(39)	0.8723(11)	0.4417(9)	0.6174(18)	0.189
C(40)	0.8717(12)	0.1958(10)	0.5783(17)	0.187
C(41)	0.9312(14)	0.1386(11)	0.5992(23)	0.247
C(42)	0.8613(13)	0.0663(9)	0.5753(17)	0.204
C(43)	0.7588(12)	0.0831(8)	0.5745(14)	0.162
H(3)	0.098(6)	0.078(4)	0.147(7)	0.086
H(5)	0.046(6)	0.308(4)	0.083(7)	0.090
H(8A)	0.226(6)	0.001(4)	0.121(7)	0.082
H(8B)	0.104(6)	-0.024(4)	0.024(7)	0.085
H(8C)	0.213(6)	-0.054(4)	-0.007(7)	0.085
H(9A)	0.160(6)	0.093(4)	-0.245(7)	0.084

(Stable 10 continued)

H(9B)	0.057(6)	0.034(4)	-0.196(7)	0.090
H(9C)	0.164(6)	0.005(4)	-0.222(7)	0.088
H(10A)	0.383(5)	0.093(4)	0.042(7)	0.074
H(10B)	0.351(6)	0.019(4)	-0.041(7)	0.087
H(10C)	0.333(5)	0.102(4)	-0.107(7)	0.074
H(11A)	-0.02374	0.23185	0.26265	0.050
H(11B)	0.05206	0.17505	0.31795	0.050
H(11C)	-0.05304	0.14525	0.20545	0.050
H(13A)	0.112(6)	0.459(4)	-0.098(7)	0.093
H(13B)	0.028(6)	0.388(5)	-0.084(8)	0.102
H(13C)	0.136(7)	0.433(5)	0.044(8)	0.113
H(14A)	0.338(6)	0.366(4)	-0.049(7)	0.081
H(14B)	0.299(6)	0.444(5)	-0.075(8)	0.096
H(14C)	0.323(7)	0.407(5)	0.070(8)	0.112
H(15A)	0.151(6)	0.383(5)	-0.272(8)	0.104
H(15B)	0.179(6)	0.296(5)	-0.254(8)	0.102
H(15C)	0.059(7)	0.319(5)	-0.260(8)	0.116
H(21A)	0.327(6)	0.195(5)	-0.464(8)	0.100
H(21B)	0.275(6)	0.192(5)	-0.358(8)	0.100
H(21C)	0.324(7)	0.120(5)	-0.367(8)	0.110
H(22A)	0.442(5)	0.073(4)	-0.304(7)	0.074
H(22B)	0.556(6)	0.080(5)	-0.320(8)	0.100
H(22C)	0.526(5)	0.059(3)	-0.181(6)	0.050
H(23A)	0.79608	0.25581	-0.06335	0.050
H(23B)	0.75438	0.19411	-0.18095	0.050
H(23C)	0.71838	0.18091	-0.04855	0.050
H(24A)	0.625(7)	0.417(5)	-0.172(8)	0.106
H(24B)	0.745(5)	0.398(3)	-0.052(6)	0.050
H(24C)	0.730(5)	0.418(3)	-0.191(6)	0.050
H(25A)	0.450(6)	0.392(5)	-0.394(8)	0.099
H(25B)	0.478(6)	0.407(5)	-0.269(8)	0.100
H(25C)	0.365(7)	0.381(5)	-0.310(8)	0.113
H(31A)	0.63348	0.08717	0.23133	0.050
H(31B)	0.72758	0.15537	0.28993	0.050
H(31C)	0.67528	0.14407	0.13663	0.050
H(32A)	0.77983	0.38127	0.20519	0.050
H(32B)	0.76563	0.29837	0.13969	0.050
H(32C)	0.79793	0.31337	0.29469	0.050
H(33A)	0.652(6)	0.441(5)	0.248(8)	0.100
H(33B)	0.495(7)	0.447(5)	0.264(9)	0.122
H(33C)	0.557(7)	0.440(5)	0.178(8)	0.118
H(34A)	0.370(6)	0.299(5)	0.371(7)	0.094
H(34B)	0.347(6)	0.335(5)	0.246(8)	0.102
H(34C)	0.294(7)	0.254(5)	0.245(8)	0.106
H(35A)	0.355(6)	0.134(4)	0.276(7)	0.084
H(35B)	0.462(6)	0.122(4)	0.384(7)	0.079
H(35C)	0.456(6)	0.082(5)	0.266(8)	0.100
H(36A)	0.69037	0.50865	0.62692	0.050
H(36B)	0.69137	0.51195	0.47672	0.050
H(37A)	0.82484	0.59476	0.67585	0.050
H(37B)	0.83424	0.58866	0.52865	0.050
H(38A)	0.94788	0.53688	0.73331	0.050
H(38B)	0.96518	0.53988	0.58941	0.050
H(39A)	0.90285	0.41954	0.55291	0.050
H(39B)	0.88975	0.41584	0.69861	0.050
H(40A)	0.89590	0.23769	0.64773	0.050

(Stable 10 continued)

H(40B)	0.87780	0.21719	0.49533	0.050
H(41A)	0.97090	0.14491	0.69089	0.050
H(41B)	0.98110	0.14201	0.54389	0.050
H(42A)	0.88117	0.03122	0.64365	0.050
H(42B)	0.86137	0.04212	0.49095	0.050
H(43A)	0.70597	0.05602	0.49791	0.050
H(43B)	0.73707	0.06692	0.65341	0.050

STable 11. Anisotropic Thermal Parameters for 4b

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm(1)	0.0803(3)	0.0450(2)	0.0358(1)	0.0115(2)	0.0225(2)	0.0017(1)
K(1)	0.083(1)	0.068(1)	0.043(1)	0.018(1)	0.019(1)	0.001(1)
O(1)	0.092(4)	0.057(3)	0.061(3)	0.017(3)	0.035(3)	0.015(2)
O(2)	0.140(7)	0.098(5)	0.092(5)	0.010(5)	0.021(5)	-0.004(4)
O(3)	0.132(7)	0.159(7)	0.088(5)	0.068(6)	0.028(5)	0.008(5)
C(1)	0.062(5)	0.055(4)	0.059(4)	0.010(4)	0.008(4)	0.003(3)
C(2)	0.064(5)	0.052(4)	0.067(4)	0.011(4)	0.020(4)	0.001(3)
C(3)	0.079(6)	0.059(5)	0.097(6)	0.005(4)	0.041(5)	0.004(4)
C(4)	0.079(6)	0.079(6)	0.118(8)	0.007(5)	0.056(6)	-0.004(5)
C(5)	0.076(6)	0.068(5)	0.107(7)	0.019(4)	0.032(5)	-0.009(5)
C(6)	0.068(5)	0.058(5)	0.073(5)	0.016(4)	0.015(4)	0.002(4)
C(7)	0.072(5)	0.045(4)	0.066(4)	0.010(4)	0.016(4)	0.003(3)
C(8)	0.097(7)	0.053(5)	0.098(6)	0.011(4)	0.031(5)	0.014(4)
C(9)	0.096(7)	0.067(5)	0.078(6)	0.000(5)	0.006(5)	-0.006(4)
C(10)	0.083(6)	0.052(4)	0.071(5)	0.017(4)	0.021(4)	0.003(4)
C(11)	0.128(9)	0.110(10)	0.172(11)	-0.001(7)	0.103(9)	-0.015(8)
C(12)	0.108(7)	0.061(5)	0.076(5)	0.033(5)	0.012(5)	0.009(4)
C(13)	0.16(1)	0.08(1)	0.14(1)	0.07(1)	0.03(1)	0.01(1)
C(14)	0.141(9)	0.054(5)	0.089(6)	0.007(5)	0.027(6)	0.020(4)
C(15)	0.17(1)	0.08(1)	0.09(1)	0.05(1)	0.00(1)	0.01(1)
C(16)	0.089(6)	0.063(4)	0.040(3)	0.017(4)	0.032(4)	0.004(3)
C(17)	0.097(6)	0.050(4)	0.047(4)	0.017(4)	0.041(4)	0.005(3)
C(18)	0.092(6)	0.069(5)	0.047(4)	0.019(4)	0.033(4)	0.009(3)
C(19)	0.110(7)	0.054(4)	0.050(4)	-0.005(4)	0.040(4)	-0.005(3)
C(20)	0.117(7)	0.048(4)	0.047(4)	0.025(4)	0.044(4)	0.012(3)
C(21)	0.102(7)	0.126(8)	0.045(4)	-0.001(6)	0.024(5)	0.001(5)
C(22)	0.18(1)	0.05(0)	0.10(1)	0.03(1)	0.09(1)	0.01(0)
C(23)	0.096(7)	0.191(12)	0.065(6)	0.047(8)	0.031(5)	0.008(7)
C(24)	0.19(1)	0.09(1)	0.08(1)	-0.06(1)	0.06(1)	-0.02(1)
C(25)	0.24(1)	0.09(1)	0.09(1)	0.09(1)	0.09(1)	0.05(1)
C(26)	0.084(6)	0.057(4)	0.039(3)	0.023(4)	0.009(4)	-0.003(3)
C(27)	0.071(5)	0.072(5)	0.039(3)	0.004(4)	0.012(3)	-0.005(3)
C(28)	0.091(6)	0.044(4)	0.037(3)	0.008(4)	0.014(4)	-0.003(3)
C(29)	0.072(5)	0.060(4)	0.034(3)	0.019(4)	0.009(3)	-0.001(3)
C(30)	0.080(5)	0.044(4)	0.035(3)	0.011(3)	0.009(3)	-0.001(3)
C(31)	0.142(9)	0.089(6)	0.064(5)	0.062(6)	0.027(6)	0.003(5)
C(32)	0.098(8)	0.128(8)	0.068(7)	-0.012(6)	0.021(6)	-0.011(6)
C(33)	0.16(1)	0.05(0)	0.08(1)	0.02(1)	0.01(1)	0.00(0)
C(34)	0.101(7)	0.102(7)	0.053(4)	0.047(6)	0.032(5)	0.007(4)
C(35)	0.142(9)	0.069(5)	0.049(4)	0.014(5)	0.030(5)	0.014(4)
C(36)	0.18(1)	0.13(1)	0.14(1)	0.04(1)	-0.02(1)	0.03(1)
C(37)	0.24(2)	0.13(1)	0.15(2)	-0.02(1)	0.04(1)	0.00(1)
C(38)	0.15(1)	0.18(1)	0.27(2)	-0.01(1)	0.09(1)	-0.08(1)
C(39)	0.14(1)	0.18(1)	0.21(2)	0.06(1)	0.05(1)	0.00(1)
C(40)	0.16(1)	0.18(1)	0.19(2)	0.03(1)	0.00(1)	0.00(1)
C(41)	0.1480	0.1940	0.3520	0.0850	0.0600	0.0880
C(42)	0.19(1)	0.19(1)	0.19(2)	0.12(1)	0.03(1)	0.00(1)
C(43)	0.18(1)	0.16(1)	0.11(1)	0.05(1)	0.05(1)	0.06(1)

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

STable 12. Bond Lengths (Å) and Angles (°) for Complex 4b

Sm(1) - O(1)	2.330(6)	Sm(1) - C(16)	2.897(7)
Sm(1) - C(17)	2.889(7)	Sm(1) - C(18)	2.889(8)
Sm(1) - C(19)	2.844(8)	Sm(1) - C(20)	2.859(7)
Sm(1) - C(26)	2.911(7)	Sm(1) - C(27)	2.893(7)
Sm(1) - C(28)	2.877(7)	Sm(1) - C(29)	2.920(6)
Sm(1) - C(30)	2.953(7)	Sm(1) - C(10)	3.176(8)
Sm(1) - H(10A)	2.81(7)	Sm(1) - H(10C)	2.76(7)
K(1) - O(2)	2.888(8)	K(1) - O(3)	2.787(9)
K(1) - C(16)	3.220(8)	K(1) - C(17)	3.214(8)
K(1) - C(18)	3.154(8)	K(1) - C(19)	3.087(8)
K(1) - C(20)	3.110(8)	K(1) - C(26)	3.159(7)
K(1) - C(27)	3.270(7)	K(1) - C(28)	3.214(7)
K(1) - C(29)	3.063(7)	K(1) - C(30)	3.006(7)
O(1) - C(1)	1.317(10)	O(2) - C(36)	1.408(16)
O(2) - C(39)	1.371(16)	O(3) - C(40)	1.352(18)
O(3) - C(43)	1.400(17)	C(1) - C(2)	1.443(11)
C(1) - C(6)	1.434(11)	C(2) - C(3)	1.384(12)
C(2) - C(7)	1.550(10)	C(3) - C(4)	1.390(13)
C(3) - H(3)	1.09(8)	C(4) - C(5)	1.397(13)
C(4) - C(11)	1.496(16)	C(5) - C(6)	1.380(13)
C(5) - H(5)	1.02(8)	C(6) - C(12)	1.549(12)
C(7) - C(8)	1.535(12)	C(7) - C(9)	1.540(12)
C(7) - C(10)	1.513(12)	C(8) - H(8A)	0.96(8)
C(8) - H(8B)	0.97(8)	C(8) - H(8C)	1.07(8)
C(9) - H(9A)	1.02(8)	C(9) - H(9B)	1.07(8)
C(9) - H(9C)	0.90(8)	C(10) - H(10A)	1.00(7)
C(10) - H(10B)	1.00(8)	C(10) - H(10C)	0.85(7)
C(11) - H(11A)	0.961(13)	C(11) - H(11B)	0.959(13)
C(11) - H(11C)	0.960(12)	C(12) - C(13)	1.542(15)
C(12) - C(14)	1.507(15)	C(12) - C(15)	1.528(13)
C(13) - H(13A)	0.97(8)	C(13) - H(13B)	0.97(8)
C(13) - H(13C)	0.96(9)	C(14) - H(14A)	0.96(8)
C(14) - H(14B)	0.90(8)	C(14) - H(14C)	1.04(9)
C(15) - H(15A)	0.89(9)	C(15) - H(15B)	1.00(8)
C(15) - H(15C)	1.05(9)	C(16) - C(17)	1.409(11)
C(16) - C(20)	1.431(10)	C(16) - C(21)	1.487(13)
C(17) - C(18)	1.427(11)	C(17) - C(22)	1.526(11)
C(18) - C(19)	1.416(11)	C(18) - C(23)	1.457(14)
C(19) - C(20)	1.392(12)	C(19) - C(24)	1.520(14)
C(19) - H(24A)	1.76(9)	C(20) - C(25)	1.528(14)
C(21) - H(21A)	0.82(8)	C(21) - H(21B)	0.98(8)
C(21) - H(21C)	1.14(9)	C(22) - H(22A)	1.10(7)
C(22) - H(22B)	0.87(8)	C(22) - H(22C)	0.97(6)
C(23) - H(23A)	0.960(11)	C(23) - H(23B)	0.960(11)
C(23) - H(23C)	0.960(12)	C(24) - H(24A)	0.91(9)
C(24) - H(24B)	1.05(6)	C(24) - H(24C)	1.07(6)
C(25) - H(25A)	0.94(8)	C(25) - H(25B)	0.89(8)
C(25) - H(25C)	0.95(9)	C(26) - C(27)	1.420(11)
C(26) - C(30)	1.390(11)	C(26) - C(31)	1.509(13)
C(27) - C(28)	1.424(11)	C(27) - C(32)	1.485(14)
C(28) - C(29)	1.415(11)	C(28) - C(33)	1.508(11)
C(29) - C(30)	1.420(10)	C(29) - C(34)	1.486(12)
C(30) - C(35)	1.510(12)	C(31) - H(31A)	0.960(10)
C(31) - H(31B)	0.960(10)	C(31) - H(31C)	0.960(9)
C(32) - H(32A)	0.960(11)	C(32) - H(32B)	0.960(11)
C(32) - H(32C)	0.960(11)	C(33) - H(33A)	1.09(8)

(Stable 12 continued)

C(33) - H(33B)	1.22(9)	C(34) - H(34A)	0.86(8)
C(34) - H(34B)	0.88(9)	C(34) - H(34C)	1.15(9)
C(35) - H(35A)	1.03(8)	C(35) - H(35B)	0.90(7)
C(35) - H(35C)	0.96(8)	C(36) - C(37)	1.37(3)
C(36) - H(36A)	0.960(15)	C(36) - H(36B)	0.960(15)
C(37) - C(38)	1.36(3)	C(37) - H(37A)	0.960(16)
C(37) - H(37B)	0.960(17)	C(38) - C(39)	1.40(3)
C(38) - H(38A)	0.960(19)	C(38) - H(38B)	0.960(18)
C(39) - H(39A)	0.960(17)	C(39) - H(39B)	0.960(18)
C(40) - C(41)	1.35(3)	C(40) - H(40A)	0.959(17)
C(40) - H(40B)	0.960(18)	C(41) - C(42)	1.38(3)
C(41) - H(41A)	0.96(3)	C(41) - H(41B)	0.96(3)
C(42) - C(43)	1.41(3)	C(42) - H(42A)	0.961(17)
C(42) - H(42B)	0.960(17)	C(43) - H(43A)	0.961(14)
C(43) - H(43B)	0.960(15)		
O(1) - Sm(1) - C(10)	61.0(2)	O(1) - Sm(1) - C(16)	77.8(3)
O(1) - Sm(1) - C(17)	100.2(2)	O(1) - Sm(1) - C(18)	125.4(2)
O(1) - Sm(1) - C(19)	115.8(3)	O(1) - Sm(1) - C(20)	87.6(3)
O(1) - Sm(1) - C(26)	132.0(2)	O(1) - Sm(1) - C(27)	143.3(2)
O(1) - Sm(1) - C(28)	117.0(3)	O(1) - Sm(1) - C(29)	96.8(2)
O(1) - Sm(1) - C(30)	105.2(2)	C(10) - Sm(1) - C(16)	86.5(3)
C(10) - Sm(1) - C(17)	82.5(3)	C(10) - Sm(1) - C(18)	106.5(3)
C(10) - Sm(1) - C(19)	128.7(3)	C(10) - Sm(1) - C(20)	114.7(2)
C(10) - Sm(1) - C(26)	88.5(3)	C(10) - Sm(1) - C(27)	116.6(3)
C(10) - Sm(1) - C(28)	120.5(2)	C(10) - Sm(1) - C(29)	94.1(2)
C(10) - Sm(1) - C(30)	75.7(2)	C(16) - Sm(1) - C(17)	28.2(3)
C(16) - Sm(1) - C(18)	47.6(3)	C(16) - Sm(1) - C(19)	47.3(3)
C(16) - Sm(1) - C(20)	28.8(2)	C(16) - Sm(1) - C(26)	140.4(3)
C(16) - Sm(1) - C(27)	138.2(3)	C(16) - Sm(1) - C(28)	152.7(3)
C(16) - Sm(1) - C(29)	173.5(3)	C(16) - Sm(1) - C(30)	157.0(2)
C(17) - Sm(1) - C(18)	28.6(3)	C(17) - Sm(1) - C(19)	46.4(3)
C(17) - Sm(1) - C(20)	46.1(2)	C(17) - Sm(1) - C(26)	112.2(3)
C(17) - Sm(1) - C(27)	116.1(3)	C(17) - Sm(1) - C(28)	142.1(3)
C(17) - Sm(1) - C(29)	158.3(3)	C(17) - Sm(1) - C(30)	132.3(2)
C(18) - Sm(1) - C(19)	28.6(3)	C(18) - Sm(1) - C(20)	46.9(3)
C(18) - Sm(1) - C(26)	97.1(3)	C(18) - Sm(1) - C(27)	91.1(3)
C(18) - Sm(1) - C(28)	114.2(3)	C(18) - Sm(1) - C(29)	137.8(3)
C(18) - Sm(1) - C(30)	123.8(3)	C(19) - Sm(1) - C(20)	28.2(3)
C(19) - Sm(1) - C(26)	112.2(3)	C(19) - Sm(1) - C(27)	94.2(3)
C(19) - Sm(1) - C(28)	106.3(3)	C(19) - Sm(1) - C(29)	134.5(3)
C(19) - Sm(1) - C(30)	138.7(3)	C(20) - Sm(1) - C(26)	140.3(3)
C(20) - Sm(1) - C(27)	120.8(3)	C(20) - Sm(1) - C(28)	124.7(2)
C(20) - Sm(1) - C(29)	148.8(2)	C(20) - Sm(1) - C(30)	166.7(3)
C(26) - Sm(1) - C(27)	28.3(3)	C(26) - Sm(1) - C(28)	46.4(2)
C(26) - Sm(1) - C(29)	46.1(3)	C(26) - Sm(1) - C(30)	27.4(3)
C(27) - Sm(1) - C(28)	28.6(3)	C(27) - Sm(1) - C(29)	46.8(3)
C(27) - Sm(1) - C(30)	46.0(3)	C(28) - Sm(1) - C(29)	28.2(3)
C(28) - Sm(1) - C(30)	46.0(2)	C(29) - Sm(1) - C(30)	28.0(2)
O(2) - K(1) - O(3)	106.9(3)	O(2) - K(1) - C(16')	121.4(2)
O(2) - K(1) - C(17')	124.5(2)	O(2) - K(1) - C(18')	100.5(2)
O(2) - K(1) - C(19')	83.5(3)	O(2) - K(1) - C(20')	95.5(3)
O(2) - K(1) - C(26)	108.0(2)	O(2) - K(1) - C(27)	83.4(2)
O(2) - K(1) - C(28)	80.5(2)	O(2) - K(1) - C(29)	103.2(2)
O(2) - K(1) - C(30)	122.6(2)	O(3) - K(1) - C(16')	108.6(3)
O(3) - K(1) - C(17')	84.6(3)	O(3) - K(1) - C(18')	81.7(3)
O(3) - K(1) - C(19')	105.7(3)	O(3) - K(1) - C(20')	123.5(3)

(Stable 12 continued)

O(3) - K(1) - C(26)	78.0(3)	O(3) - K(1) - C(27)	91.0(3)
O(3) - K(1) - C(28)	116.1(3)	O(3) - K(1) - C(29)	119.7(3)
O(3) - K(1) - C(30)	94.1(3)	C(16') - K(1) - C(17')	25.3(2)
C(16') - K(1) - C(18')	43.0(2)	C(16') - K(1) - C(19')	42.8(2)
C(16') - K(1) - C(20')	26.0(2)	C(16') - K(1) - C(26)	123.9(2)
C(16') - K(1) - C(27)	139.5(2)	C(16') - K(1) - C(28)	120.8(2)
C(16') - K(1) - C(29)	97.8(2)	C(16') - K(1) - C(30)	99.6(2)
C(17') - K(1) - C(18')	25.9(2)	C(17') - K(1) - C(19')	42.0(2)
C(17') - K(1) - C(20')	41.7(2)	C(17') - K(1) - C(26)	127.4(2)
C(17') - K(1) - C(27)	151.8(2)	C(17') - K(1) - C(28)	143.2(3)
C(17') - K(1) - C(29)	117.8(2)	C(17') - K(1) - C(30)	110.0(2)
C(18') - K(1) - C(19')	26.2(2)	C(18') - K(1) - C(20')	42.9(3)
C(18') - K(1) - C(26)	148.7(2)	C(18') - K(1) - C(27)	172.5(3)
C(18') - K(1) - C(28)	161.3(3)	C(18') - K(1) - C(29)	140.8(3)
C(18') - K(1) - C(30)	135.7(2)	C(19') - K(1) - C(20')	26.0(3)
C(19') - K(1) - C(26)	166.6(3)	C(19') - K(1) - C(27)	161.2(3)
C(19') - K(1) - C(28)	138.0(3)	C(19') - K(1) - C(29)	128.9(3)
C(19') - K(1) - C(30)	141.3(3)	C(20') - K(1) - C(26)	142.2(3)
C(20') - K(1) - C(27)	143.6(3)	C(20') - K(1) - C(28)	118.5(3)
C(20') - K(1) - C(29)	103.7(3)	C(20') - K(1) - C(30)	116.3(3)
C(26) - K(1) - C(27)	25.4(2)	C(26) - K(1) - C(28)	41.9(2)
C(26) - K(1) - C(29)	43.0(2)	C(26) - K(1) - C(30)	25.9(3)
C(27) - K(1) - C(28)	25.4(2)	C(27) - K(1) - C(29)	42.6(2)
C(27) - K(1) - C(30)	42.5(2)	C(28) - K(1) - C(29)	25.9(2)
C(28) - K(1) - C(30)	42.8(2)	C(29) - K(1) - C(30)	27.0(2)
Sm(1) - O(1) - C(1)	126.7(5)	K(1) - O(2) - C(36)	129.7(8)
K(1) - O(2) - C(39)	122.7(8)	K(1) - O(3) - C(40)	115.7(9)
K(1) - O(3) - C(43)	137.8(8)	Sm(1) - C(10) - C(7)	117.9(5)
Sm(1) - C(16) - C(17)	75.6(4)	Sm(1) - C(16) - C(18)	66.0(3)
Sm(1) - C(16) - C(19)	65.1(3)	Sm(1) - C(16) - C(20)	74.1(4)
Sm(1) - C(16) - C(21)	115.6(6)	Sm(1) - C(17) - C(16)	76.2(5)
Sm(1) - C(17) - C(18)	75.7(5)	Sm(1) - C(17) - C(19)	65.7(3)
Sm(1) - C(17) - C(20)	66.2(3)	Sm(1) - C(17) - C(22)	116.3(6)
Sm(1) - C(18) - C(17)	75.7(5)	Sm(1) - C(18) - C(19)	73.9(5)
Sm(1) - C(18) - C(23)	120.1(6)	Sm(1) - C(19) - C(18)	77.5(5)
Sm(1) - C(19) - C(20)	76.5(5)	Sm(1) - C(19) - C(24)	114.6(6)
Sm(1) - C(20) - C(16)	77.1(4)	Sm(1) - C(20) - C(19)	75.3(5)
Sm(1) - C(20) - C(25)	115.9(6)	Sm(1) - C(26) - K(1)	132.2(3)
Sm(1) - C(26) - C(27)	75.1(4)	Sm(1) - C(26) - C(28)	66.0(3)
Sm(1) - C(26) - C(30)	78.0(4)	Sm(1) - C(26) - C(31)	114.4(5)
Sm(1) - C(27) - K(1)	128.4(3)	Sm(1) - C(27) - C(26)	76.5(4)
Sm(1) - C(27) - C(28)	75.1(4)	Sm(1) - C(27) - C(32)	120.7(6)
Sm(1) - C(28) - K(1)	131.3(3)	Sm(1) - C(28) - C(27)	76.3(4)
Sm(1) - C(28) - C(29)	77.6(4)	Sm(1) - C(28) - C(33)	113.8(5)
Sm(1) - C(29) - K(1)	136.1(3)	Sm(1) - C(29) - C(28)	74.2(4)
Sm(1) - C(29) - C(30)	77.3(4)	Sm(1) - C(29) - C(34)	119.4(5)
Sm(1) - C(30) - K(1)	137.3(3)	Sm(1) - C(30) - C(26)	74.6(4)
Sm(1) - C(30) - C(29)	74.7(4)	Sm(1) - C(30) - C(35)	123.2(5)
Sm(1') - C(16') - K(1)	129.1(3)	Sm(1') - C(17') - K(1)	129.7(3)
Sm(1') - C(18') - K(1)	132.2(3)	Sm(1') - C(19') - K(1)	137.4(3)
Sm(1') - C(20') - K(1)	135.5(3)	K(1) - C(16') - C(17')	77.1(5)
K(1) - C(16') - C(20')	72.7(5)	K(1) - C(16') - C(21')	115.2(5)
K(1) - C(17') - C(16')	77.6(5)	K(1) - C(17') - C(18')	74.7(4)
K(1) - C(17') - C(22')	113.8(6)	K(1) - C(18') - C(17')	79.4(4)
K(1) - C(18') - C(19')	74.3(5)	K(1) - C(18') - C(23')	107.5(6)
K(1) - C(19') - C(18')	79.6(5)	K(1) - C(19') - C(20')	78.0(5)

(Stable 12 continued)

K(1) - C(19') - C(24')	108.0(6)	K(1) - C(20') - C(16')	81.3(5)
K(1) - C(20') - C(19')	76.1(5)	K(1) - C(20') - C(25')	108.6(6)
K(1) - C(26) - C(27)	81.6(4)	K(1) - C(26) - C(30)	70.9(4)
K(1) - C(26) - C(31)	113.1(5)	K(1) - C(27) - C(26)	72.9(4)
K(1) - C(27) - C(28)	75.1(4)	K(1) - C(27) - C(32)	111.0(5)
K(1) - C(28) - C(27)	79.5(4)	K(1) - C(28) - C(29)	71.1(4)
K(1) - C(28) - C(33)	114.7(5)	K(1) - C(29) - C(28)	83.0(4)
K(1) - C(29) - C(30)	74.3(4)	K(1) - C(29) - C(34)	104.4(5)
K(1) - C(30) - C(26)	83.2(4)	K(1) - C(30) - C(29)	78.7(4)
K(1) - C(30) - C(35)	99.4(4)		
C(36) - O(2) - C(39)	107.2(10)	C(40) - O(3) - C(43)	106.4(11)
O(1) - C(1) - C(2)	121.1(7)	O(1) - C(1) - C(6)	121.6(7)
C(2) - C(1) - C(6)	117.3(7)	C(1) - C(2) - C(3)	119.4(7)
C(1) - C(2) - C(7)	120.2(7)	C(3) - C(2) - C(7)	120.2(7)
C(2) - C(3) - C(4)	122.5(8)	C(2) - C(3) - H(3)	121.2(39)
C(4) - C(3) - H(3)	116.3(39)	C(3) - C(4) - C(5)	117.5(9)
C(3) - C(4) - C(11)	121.9(9)	C(5) - C(4) - C(11)	120.6(9)
C(4) - C(5) - C(6)	122.9(9)	C(4) - C(5) - H(5)	118.6(43)
C(6) - C(5) - H(5)	117.8(43)	C(1) - C(6) - C(5)	119.3(8)
C(1) - C(6) - C(12)	119.4(7)	C(5) - C(6) - C(12)	121.3(8)
C(2) - C(7) - C(8)	111.6(7)	C(2) - C(7) - C(9)	106.6(7)
C(2) - C(7) - C(10)	115.6(6)	C(8) - C(7) - C(9)	106.7(7)
C(8) - C(7) - C(10)	107.2(7)	C(9) - C(7) - C(10)	108.8(7)
C(7) - C(8) - H(8A)	108.6(43)	C(7) - C(8) - H(8B)	114.3(43)
C(7) - C(8) - H(8C)	105.7(40)	H(8A) - C(8) - H(8B)	116.0(61)
H(8A) - C(8) - H(8C)	100.2(58)	H(8B) - C(8) - H(8C)	110.7(58)
C(7) - C(9) - H(9A)	110.1(41)	C(7) - C(9) - H(9B)	113.1(40)
C(7) - C(9) - H(9C)	106.6(48)	H(9A) - C(9) - H(9B)	109.4(58)
H(9A) - C(9) - H(9C)	106.1(63)	H(9B) - C(9) - H(9C)	111.3(63)
C(7) - C(10) - H(10A)	116.6(40)	C(7) - C(10) - H(10B)	111.5(43)
C(7) - C(10) - H(10C)	100.5(47)	H(10A) - C(10) - H(10B)	93.5(57)
H(10A) - C(10) - H(10C)	112.9(61)	H(10B) - C(10) - H(10C)	123.0(62)
C(4) - C(11) - H(11A)	121.8(12)	C(4) - C(11) - H(11B)	106.5(11)
C(4) - C(11) - H(11C)	106.8(11)	H(11A) - C(11) - H(11B)	106.1(13)
H(11A) - C(11) - H(11C)	106.2(12)	H(11B) - C(11) - H(11C)	109.0(12)
C(6) - C(12) - C(13)	111.4(8)	C(6) - C(12) - C(14)	110.9(8)
C(6) - C(12) - C(15)	109.1(7)	C(13) - C(12) - C(14)	107.4(8)
C(13) - C(12) - C(15)	107.4(9)	C(14) - C(12) - C(15)	110.6(9)
C(12) - C(13) - H(13A)	108.1(46)	C(12) - C(13) - H(13B)	108.3(48)
C(12) - C(13) - H(13C)	104.9(52)	H(13A) - C(13) - H(13B)	103.3(66)
H(13A) - C(13) - H(13C)	104.2(68)	H(13B) - C(13) - H(13C)	127.1(70)
C(12) - C(14) - H(14A)	110.5(43)	C(12) - C(14) - H(14B)	109.8(50)
C(12) - C(14) - H(14C)	116.5(48)	H(14A) - C(14) - H(14B)	110.4(66)
H(14A) - C(14) - H(14C)	95.0(63)	H(14B) - C(14) - H(14C)	113.7(68)
C(12) - C(15) - H(15A)	110.8(53)	C(12) - C(15) - H(15B)	109.2(46)
C(12) - C(15) - H(15C)	107.4(47)	H(15A) - C(15) - H(15B)	118.1(70)
H(15A) - C(15) - H(15C)	101.5(71)	H(15B) - C(15) - H(15C)	109.1(66)
C(17) - C(16) - C(20)	105.0(7)	C(17) - C(16) - C(21)	126.8(8)
C(20) - C(16) - C(21)	128.2(8)	C(16) - C(17) - C(18)	110.9(7)
C(16) - C(17) - C(22)	126.7(8)	C(18) - C(17) - C(22)	122.3(8)
C(17) - C(18) - C(19)	105.3(7)	C(17) - C(18) - C(23)	127.5(9)
C(19) - C(18) - C(23)	126.9(9)	C(18) - C(19) - C(20)	109.3(7)
C(18) - C(19) - C(24)	123.8(8)	C(20) - C(19) - C(24)	126.9(8)
C(16) - C(20) - C(19)	109.5(7)	C(16) - C(20) - C(25)	121.0(8)
C(19) - C(20) - C(25)	129.5(8)	C(16) - C(21) - H(21A)	115.4(57)
C(16) - C(21) - H(21B)	121.5(47)	C(16) - C(21) - H(21C)	108.4(42)

(Stable 12 continued)

H(21A)- C(21) - H(21B)	104.0(73)	H(21A)- C(21) - H(21C)	114.8(70)
H(21B)- C(21) - H(21C)	90.4(63)	C(17) - C(22) - H(22A)	99.5(36)
C(17) - C(22) - H(22B)	109.9(53)	C(17) - C(22) - H(22C)	124.1(35)
H(22A)- C(22) - H(22B)	98.4(63)	H(22A)- C(22) - H(22C)	93.2(50)
H(22B)- C(22) - H(22C)	121.7(63)	C(18) - C(23) - H(23A)	127.7(12)
C(18) - C(23) - H(23B)	104.8(8)	C(18) - C(23) - H(23C)	104.7(9)
H(23A)- C(23) - H(23B)	104.9(10)	H(23A)- C(23) - H(23C)	104.9(9)
H(23B)- C(23) - H(23C)	109.0(13)	C(19) - C(24) - H(24A)	89.2(53)
C(19) - C(24) - H(24B)	127.7(33)	C(19) - C(24) - H(24C)	119.4(32)
H(24A)- C(24) - H(24B)	137.9(61)	H(24A)- C(24) - H(24C)	91.3(61)
H(24B)- C(24) - H(24C)	86.9(45)	C(20) - C(25) - H(25A)	112.1(49)
C(20) - C(25) - H(25B)	94.2(52)	C(20) - C(25) - H(25C)	134.4(53)
H(25A)- C(25) - H(25B)	87.1(70)	H(25A)- C(25) - H(25C)	111.3(71)
H(25B)- C(25) - H(25C)	101.2(73)	C(27) - C(26) - C(30)	108.9(7)
C(27) - C(26) - C(31)	125.5(8)	C(30) - C(26) - C(31)	125.6(7)
C(26) - C(27) - C(28)	106.6(7)		
C(26) - C(27) - C(32)	127.0(8)	C(28) - C(27) - C(32)	125.9(8)
C(27) - C(28) - C(29)	108.7(6)	C(27) - C(28) - C(33)	126.2(8)
C(29) - C(28) - C(33)	125.1(8)	C(28) - C(29) - C(30)	107.0(7)
C(28) - C(29) - C(34)	126.4(7)	C(30) - C(29) - C(34)	126.3(7)
C(26) - C(30) - C(29)	108.7(7)	C(26) - C(30) - C(35)	126.7(7)
C(29) - C(30) - C(35)	124.1(8)	C(26) - C(31) - H(31A)	125.5(10)
C(26) - C(31) - H(31B)	105.9(8)	C(26) - C(31) - H(31C)	105.1(8)
H(31A)- C(31) - H(31B)	105.3(9)	H(31A)- C(31) - H(31C)	105.4(9)
H(31B)- C(31) - H(31C)	109.0(11)	C(27) - C(32) - H(32A)	126.9(10)
C(27) - C(32) - H(32B)	105.6(9)	C(27) - C(32) - H(32C)	104.1(9)
H(32A)- C(32) - H(32B)	105.2(10)	H(32A)- C(32) - H(32C)	105.2(10)
H(32B)- C(32) - H(32C)	109.0(11)	C(28) - C(33) - H(33A)	101.0(43)
C(28) - C(33) - H(33B)	116.2(43)	H(33A)- C(33) - H(33B)	132.5(60)
C(29) - C(34) - H(34A)	119.0(52)	C(29) - C(34) - H(34B)	115.3(52)
C(29) - C(34) - H(34C)	116.6(42)	H(34A)- C(34) - H(34B)	112.5(73)
H(34A)- C(34) - H(34C)	98.2(66)	H(34B)- C(34) - H(34C)	90.4(66)
C(30) - C(35) - H(35A)	108.5(41)	C(30) - C(35) - H(35B)	109.6(46)
C(30) - C(35) - H(35C)	109.7(49)	H(35A)- C(35) - H(35B)	111.7(61)
H(35A)- C(35) - H(35C)	121.2(63)	H(35B)- C(35) - H(35C)	95.2(66)
O(2) - C(36) - C(37)	106.4(12)	O(2) - C(36) - H(36A)	108.5(12)
O(2) - C(36) - H(36B)	112.3(13)	C(37) - C(36) - H(36A)	107.9(14)
C(37) - C(36) - H(36B)	112.6(14)	H(36A)- C(36) - H(36B)	109.0(14)
C(36) - C(37) - C(38)	111.3(14)	C(36) - C(37) - H(37A)	111.6(17)
C(36) - C(37) - H(37B)	106.5(16)	C(38) - C(37) - H(37A)	110.3(17)
C(38) - C(37) - H(37B)	108.2(17)	H(37A)- C(37) - H(37B)	109.0(14)
C(37) - C(38) - C(39)	105.7(14)	C(37) - C(38) - H(38A)	109.4(16)
C(37) - C(38) - H(38B)	111.1(17)	C(39) - C(38) - H(38A)	110.7(16)
C(39) - C(38) - H(38B)	110.9(16)	H(38A)- C(38) - H(38B)	109.0(16)
O(2) - C(39) - C(38)	109.4(13)	O(2) - C(39) - H(39A)	109.4(15)
O(2) - C(39) - H(39B)	108.9(13)	C(38) - C(39) - H(39A)	109.9(15)
C(38) - C(39) - H(39B)	110.2(17)	H(39A)- C(39) - H(39B)	109.0(15)
O(3) - C(40) - C(41)	110.6(14)	O(3) - C(40) - H(40A)	110.7(14)
O(3) - C(40) - H(40B)	106.3(14)	C(41) - C(40) - H(40A)	112.4(17)
C(41) - C(40) - H(40B)	107.6(17)	H(40A)- C(40) - H(40B)	109.0(16)
C(40) - C(41) - C(42)	107.9(16)	C(40) - C(41) - H(41A)	107.7(19)
C(40) - C(41) - H(41B)	112.1(19)	C(42) - C(41) - H(41A)	109.3(19)
C(42) - C(41) - H(41B)	110.8(19)	H(41A)- C(41) - H(41B)	109.0(18)
C(41) - C(42) - C(43)	105.6(14)	C(41) - C(42) - H(42A)	111.6(17)
C(41) - C(42) - H(42B)	109.6(17)	C(43) - C(42) - H(42A)	109.8(15)
C(43) - C(42) - H(42B)	111.2(15)	H(42A)- C(42) - H(42B)	109.0(16)

(Stable 12 continued)

O(3) - C(43) - C(42)	107.0(12)	O(3) - C(43) - H(43A)	108.2(12)
O(3) - C(43) - H(43B)	111.5(13)	C(42) - C(43) - H(43A)	109.8(14)
C(42) - C(43) - H(43B)	111.4(14)	H(43A) - C(43) - H(43B)	108.9(14)