

Electronic Supplementary Information (ESI)

Homochiral luminescent lanthanide dinuclear complexes derived from a chiral carboxylate

He-Rui Wen,^{*a} Xin-Rong Xie,^a Sui-Jun Liu,^a Jun Bao,^a Feng-Feng Wang,^c Cai-Ming Liu^{*b} and Jin-Sheng Liao^a

^aSchool of Metallurgy and Chemical Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, Jiangxi Province, P.R. China

^bBeijing National Laboratory for Molecular Sciences, Center for Molecular Science, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P.R. China

^cBeijing City Key Laboratory of Polymorphic Drugs, Center of Pharmaceutical Polymorphs, Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences and Peking Union Medical College, Beijing 100050, P.R. China.

*Corresponding author. E-mail: wenherui63@163.com, cmliu@iccas.ac.cn. Tel: +86-797-8312553.

CONTENTS

Section 1. Experimental Section (page S2)

Section 2. Supplementary Structural Figures and Characterizations (pages S3-S4)

Section 3. Supplementary Tables (pages S5-S26)

Section 1. Experimental Section

Crystallographic data and structure refinements

The single-crystal X-ray diffraction data of **1'-10'** were collected on a Bruker D8 QUEST diffractometer using monochromated Mo-K α radiation ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$). The program *CrystalClear* was used for the integration of the diffraction profiles. The structures were solved by direct method using the SHELXS program of the SHELXTL package and refined by full-matrix least-squares methods with SHELXL. The non-hydrogen atoms were located in successive difference Fourier syntheses and refined with anisotropic thermal parameters on F^2 . All hydrogen atoms of ligands were generated theoretically at the specific atoms and refined isotropically with fixed thermal factors. A summary of the crystallographic data, data collection and refinement parameters for **1-10** is provided in Tables S12–14. Notably, the crystal data and refinement parameters of complexes **1'**, **3'** and **5'** are incomplete due to the limited crystal quality.

Section 2. Supplementary Structural Figures and Characterizations

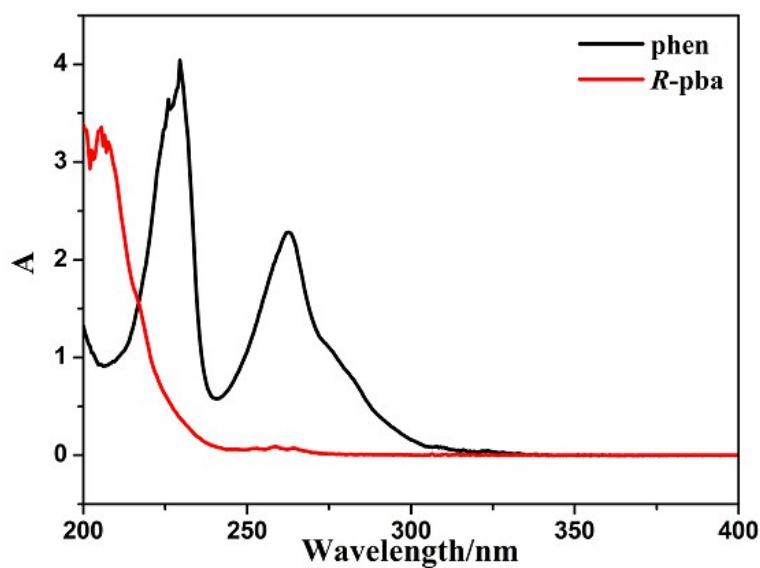


Fig. S1. UV-vis absorption spectra of two organic ligands in CH_3CN solution.

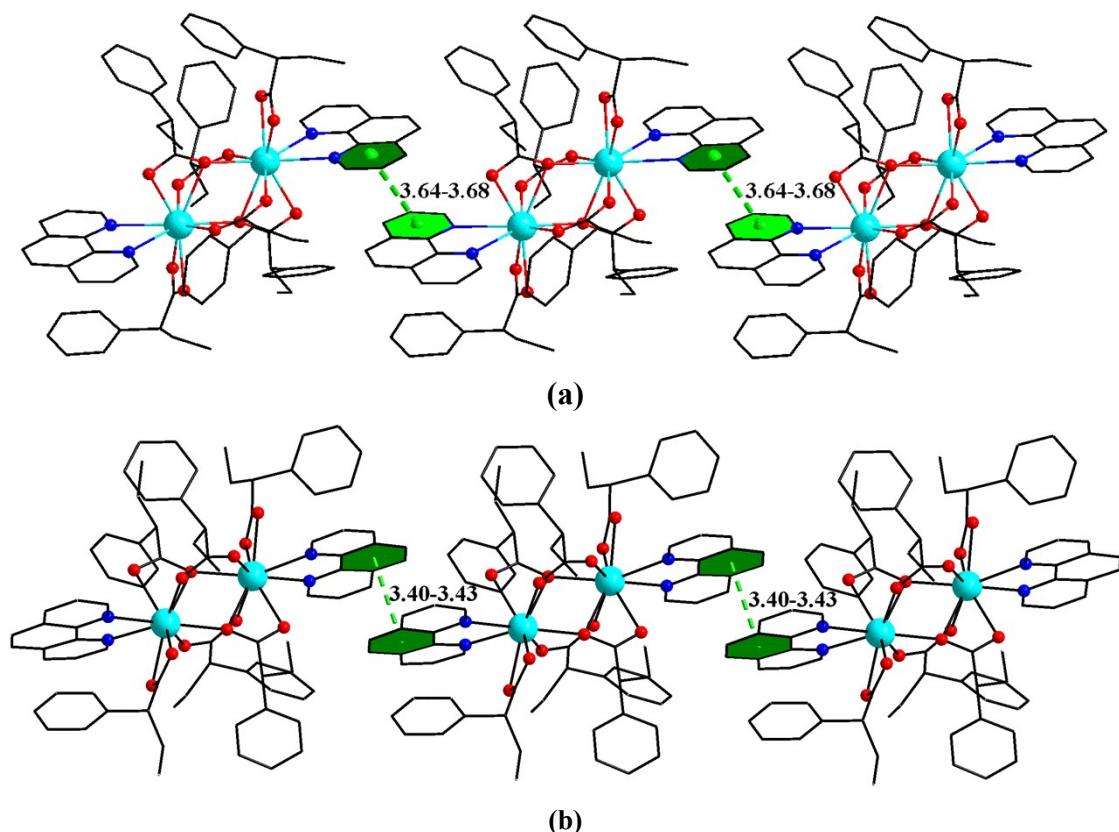


Fig. S2. Views of (a) the 1D structure for **1–6** via the $\pi \cdots \pi$ stacking interactions; (b) the 1D structure for **7–10** via the $\pi \cdots \pi$ stacking interactions (all the hydrogen atoms omitted for clarity).

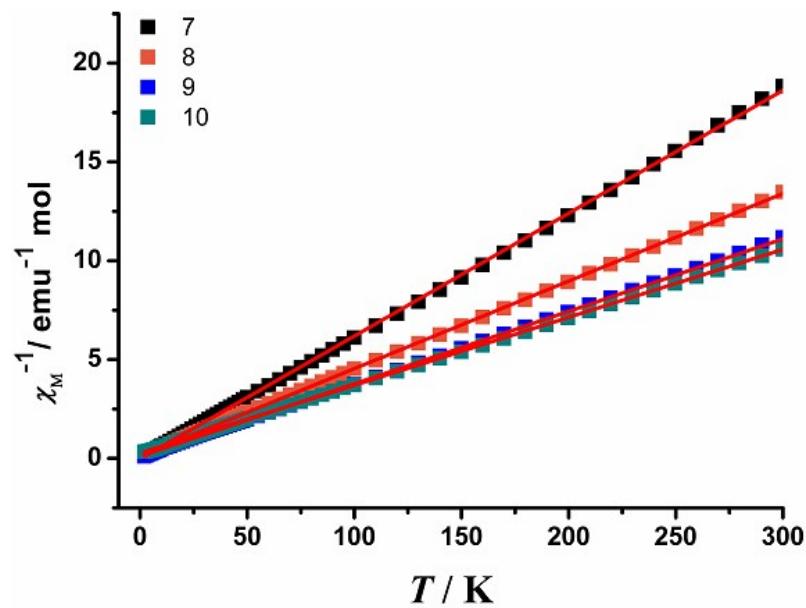


Fig. S3. Plots of χ_M^{-1} vs. T for **7–10** (red part for the Curie-Weiss fitting).

Section 3. Supplementary Tables

Table S1. Selected IR spectra data and elemental analyses

Complex	IR (KBr, ν/cm^{-1})	Elemental analyses (%)
1	3444(w), 3059(w), 3027(w), 2960(m), 2930(w), 2872(w), 1597(vs), 1544(s), 1516(w), 1409(vs), 863(w), 845(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{La}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 61.52; H, 5.15; N, 3.35.
2	3443(w), 3059(w), 3027(w), 2960(m), 2930(w), 2872(w), 1597(vs), 1544(s), 1516(w), 1411(vs), 862(w), 844(w), 741(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Ce}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 62.11; H, 5.18; N, 3.29.
3	3423(w), 3059(w), 3027(w), 2960(m), 2929(w), 2872(w), 1598(vs), 1544(s), 1516(w), 1414(vs), 862(w), 844(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Pr}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 61.22; H, 5.20; N, 3.28.
4	3445(w), 3083(w), 3060(w), 3027(w), 2961(m), 2931(w), 2873(w), 1599(vs), 1544(s), 1517(w), 1412(vs), 863(w), 845(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Nd}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 62.57; H, 5.18; N, 3.53.
5	3445(w), 3083(w), 3060(w), 3027(w), 2961(m), 2930(w), 2872(w), 1603(vs), 1548(s), 1517(w), 1418(vs), 863(w), 844(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Sm}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 62.73; H, 5.15; N, 3.58.
6	3419(w), 3084(w), 3060(w), 3027(w), 2962(m), 2931(w), 2872(w), 1605(vs), 1550(s), 1517(w), 1423(vs), 863(w), 844(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Eu}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 61.72; H, 5.12; N, 3.28.
7	3386(w), 3084(w), 3060(w), 3027(w), 2962(m), 2931(w), 2873(w), 1637(s), 1603(vs), 1552(s), 1423(vs), 863(w), 845(w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Gd}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 61.58; H, 5.03; N, 3.37.
8	3443(w), 3084(w), 3059(w), 3026(w), 2961(m), 2931(w), 2872(w), 1639 (s), 1611(vs), 1591(s), 1551(m), 1424(vs), 844 (w), 731(m), 699(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Tb}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 62.15; H, 5.20; N, 3.37.
9	3423(w), 3084(w), 3059(w), 3025(w), 2959(m), 2931(w), 2872(w), 1643(s), 1613(vs), 1591(s), 1555(m), 1424(vs), 845(w), 731(m), 698(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Dy}$: C, 62.32; H, 5.07; N, 3.46. Found: C, 61.83; H, 4.98; N, 3.29.
10	3445(w), 3084(w), 3059(w), 3026(w), 2959(m), 2931(w), 2872(w), 1645(s), 1614(vs), 1591(m), 1557(m), 1424(vs), 846(w), 731(m), 698(m)	Calcd. for $\text{C}_{42}\text{H}_{41}\text{N}_2\text{O}_6\text{Ho}$: C, 62.02; H, 5.11; N, 3.37. Found: C, 62.32; H, 5.06; N, 3.44.

Table S2. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **1**

La1—O1	2.469(5)	La2—O2	2.483(4)
La1—O3	2.633(5)	La2—O4	2.466(4)
La1—O4	2.668(4)	La2—O6	2.445(5)
La1—O5	2.484(4)	La2—O7	2.712(5)
La1—O7	2.457(4)	La2—O10	2.572(5)
La1—O8	2.583(5)	La2—O11	2.575(5)
La1—O9	2.531(5)	La2—O17	2.578(5)
La1—N1	2.730(5)	La2—N3	2.717(5)
La1—N2	2.724(5)	La2—N4	2.712(6)
O1—La1—O3	81.60(17)	O2—La2—O7	69.13(15)
O1—La1—O4	70.95(15)	O2—La2—O10	82.62(17)
O1—La1—O5	134.74(16)	O2—La2—O11	128.31(18)
O1—La1—O8	77.08(17)	O2—La2—O17	85.19(17)
O1—La1—O9	126.61(17)	O2—La2—N3	141.13(17)
O1—La1—N1	138.28(17)	O2—La2—N4	82.27(17)
O1—La1—N2	80.61(16)	O4—La2—O2	77.12(15)
O3—La1—O4	48.70(13)	O4—La2—O7	74.22(13)
O3—La1—N1	74.40(16)	O4—La2—O10	88.54(16)
O3—La1—N2	72.99(15)	O4—La2—O11	81.36(17)
O4—La1—N1	113.36(16)	O4—La2—O17	122.92(14)
O4—La1—N2	117.14(15)	O4—La2—N3	141.69(17)
O5—La1—O3	87.68(17)	O4—La2—N4	152.03(17)
O5—La1—O4	69.11(15)	O6—La2—O2	134.12(16)
O5—La1—O8	130.80(17)	O6—La2—O4	73.32(16)
O5—La1—O9	84.42(17)	O6—La2—O7	69.53(17)
O5—La1—N1	78.36(16)	O6—La2—O10	129.99(19)
O5—La1—N2	137.32(16)	O6—La2—O11	80.7(2)
O7—La1—O1	74.00(16)	O6—La2—O17	82.40(18)
O7—La1—O3	123.55(14)	O6—La2—N3	76.11(17)
O7—La1—O4	75.17(14)	O6—La2—N4	134.30(18)
O7—La1—O5	76.00(16)	O7—La2—N3	115.45(16)
O7—La1—O8	82.17(16)	O10—La2—O7	149.39(16)
O7—La1—O9	87.31(16)	O10—La2—O11	50.20(18)
O7—La1—N1	147.59(17)	O10—La2—O17	142.49(17)
O7—La1—N2	146.17(16)	O10—La2—N3	93.82(18)
O8—La1—O3	140.07(16)	O10—La2—N4	70.08(19)
O8—La1—O4	144.74(16)	O11—La2—O7	145.71(17)
O8—La1—N1	100.28(17)	O11—La2—O17	144.40(17)
O8—La1—N2	70.49(16)	O11—La2—N3	71.33(18)
O9—La1—O4	150.95(15)	O11—La2—N4	97.2(2)
O9—La1—O8	50.67(16)	O17—La2—O7	48.84(13)
O9—La1—N1	70.68(17)	O17—La2—N3	74.29(16)

O9—La1—N2	90.29(17)	O17—La2—N4	73.21(17)
N4—La2—N3	60.48(19)	N4—La2—O7	115.60(17)
O9—La1—O3	145.07(16)		

Table S3. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **2**

Ce1—O10	2.643(4)	Ce2—O10	2.444(4)
Ce1—O6	2.434(4)	Ce2—O6	2.695(4)
Ce1—N4	2.699(5)	Ce2—O5	2.554(4)
Ce1—O4	2.445(4)	Ce2—O3	2.461(4)
Ce1—O7	2.565(4)	Ce2—O12	2.422(5)
Ce1—O9	2.604(4)	Ce2—O2	2.554(5)
Ce1—O11	2.461(4)	Ce2—N1	2.691(5)
Ce1—O8	2.510(4)	Ce2—O1	2.544(5)
Ce1—N3	2.705(5)	Ce2—N2	2.690(5)
O10—Ce1—N4	117.51(14)	O8—Ce1—N3	70.67(15)
O10—Ce1—N3	113.29(14)	O10—Ce2—O6	73.91(12)
O6—Ce1—Ce2	39.80(10)	O10—Ce2—O5	123.03(13)
O6—Ce1—O10	75.03(12)	O10—Ce2—O3	77.08(14)
O6—Ce1—N4	145.89(15)	O10—Ce2—O2	81.48(15)
O6—Ce1—O4	74.19(14)	O10—Ce2—N1	141.66(15)
O6—Ce1—O7	81.87(14)	O10—Ce2—O1	88.56(15)
O6—Ce1—O9	123.95(13)	O10—Ce2—N2	151.61(16)
O6—Ce1—O11	76.23(14)	O5—Ce2—O6	49.25(12)
O6—Ce1—O8	87.41(14)	O5—Ce2—N1	74.34(15)
O6—Ce1—N3	147.50(15)	O5—Ce2—N2	73.05(16)
N4—Ce1—N3	60.41(15)	O3—Ce2—O6	69.19(13)
O4—Ce1—O10	70.80(14)	O3—Ce2—O5	85.27(15)
O4—Ce1—N4	80.42(15)	O3—Ce2—O2	128.39(16)
O4—Ce1—O7	76.90(15)	O3—Ce2—N1	141.18(15)
O4—Ce1—O9	81.58(15)	O3—Ce2—O1	82.34(16)
O4—Ce1—O11	135.08(14)	O3—Ce2—N2	81.70(15)
O4—Ce1—O8	126.88(15)	O12—Ce2—O10	73.47(15)
O4—Ce1—N3	138.21(16)	O12—Ce2—O6	69.59(15)
O7—Ce1—O10	144.25(14)	O12—Ce2—O5	82.50(16)
O7—Ce1—N4	70.34(15)	O12—Ce2—O3	134.36(15)
O7—Ce1—O9	139.90(14)	O12—Ce2—O2	80.50(18)
O7—Ce1—N3	100.89(16)	O12—Ce2—N1	75.95(16)
O9—Ce1—O10	49.24(12)	O12—Ce2—O1	130.11(17)
O9—Ce1—N4	72.99(14)	O12—Ce2—N2	134.62(17)
O9—Ce1—N3	73.93(15)	O2—Ce2—O6	145.46(15)
O11—Ce1—O10	69.38(14)	O2—Ce2—O5	144.20(15)
O11—Ce1—N4	137.28(14)	O2—Ce2—N1	71.08(16)
O11—Ce1—O7	130.77(15)	O2—Ce2—N2	97.55(18)
O11—Ce1—O9	87.84(15)	N1—Ce2—O6	115.78(14)

O11—Ce1—O8	84.15(15)	O1—Ce2—O6	149.08(15)
O11—Ce1—N3	77.87(15)	O1—Ce2—O5	142.26(15)
O8—Ce1—O10	150.90(14)	O1—Ce2—O2	50.53(17)
O8—Ce1—N4	90.01(15)	O1—Ce2—N1	93.85(17)
O8—Ce1—O7	51.01(14)	O1—Ce2—N2	69.96(17)
O8—Ce1—O9	144.59(14)	N2—Ce2—O6	115.61(15)

Table S4. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **3**

Pr1—O2	2.631(4)	Pr2—O2	2.430(4)
Pr1—O8	2.407(4)	Pr2—O8	2.677(4)
Pr1—O12	2.428(5)	Pr2—O7	2.526(4)
Pr1—O9	2.546(5)	Pr2—O4	2.395(5)
Pr1—O1	2.580(4)	Pr2—O11	2.445(4)
Pr1—N14	2.677(5)	Pr2—O5	2.536(5)
Pr1—O10	2.485(5)	Pr2—N20	2.670(5)
Pr1—O3	2.439(4)	Pr2—O6	2.519(5)
Pr1—N23	2.684(5)	Pr2—N39	2.662(6)
O2—Pr1—N14	117.65(14)	O2—Pr2—O7	123.34(14)
O2—Pr1—N23	113.06(16)	O2—Pr2—O11	77.08(15)
O8—Pr1—O2	74.89(13)	O2—Pr2—O5	81.43(16)
O8—Pr1—O12	74.65(15)	O2—Pr2—N20	141.40(17)
O8—Pr1—O9	81.97(15)	O2—Pr2—O6	88.35(15)
O8—Pr1—O1	124.01(14)	O2—Pr2—N39	151.42(17)
O8—Pr1—N14	146.26(16)	O7—Pr2—O8	49.78(13)
O8—Pr1—O10	87.10(14)	O7—Pr2—C15	24.50(16)
O8—Pr1—O3	75.95(15)	O7—Pr2—O5	143.97(16)
O8—Pr1—N23	146.77(16)	O7—Pr2—N20	74.36(16)
O12—Pr1—O2	70.85(15)	O7—Pr2—N39	72.84(17)
O12—Pr1—O9	76.92(17)	O4—Pr2—O2	73.78(16)
O12—Pr1—O1	81.76(16)	O4—Pr2—O8	69.28(16)
O12—Pr1—N14	80.35(17)	O4—Pr2—O7	82.32(17)
O12—Pr1—O10	127.00(16)	O4—Pr2—O11	134.61(16)
O12—Pr1—O3	135.22(15)	O4—Pr2—O5	80.56(19)
O12—Pr1—N23	138.52(17)	O4—Pr2—N20	75.62(18)
O9—Pr1—O2	144.18(15)	O4—Pr2—O6	130.76(18)
O9—Pr1—O1	140.17(15)	O4—Pr2—N39	134.53(18)
O9—Pr1—N14	70.45(15)	O11—Pr2—O8	69.57(14)
O9—Pr1—N23	101.32(17)	O11—Pr2—O7	85.58(15)
O1—Pr1—O2	49.37(13)	O11—Pr2—O5	128.25(17)
O1—Pr1—N14	73.08(15)	O11—Pr2—N20	141.41(17)
O1—Pr1—N23	73.73(16)	O11—Pr2—O6	81.52(17)
N14—Pr1—N23	60.89(17)	O11—Pr2—N39	81.43(17)
O10—Pr1—O2	150.54(15)	O5—Pr2—O8	145.05(17)
O10—Pr1—O9	51.13(15)	O5—Pr2—N20	70.78(17)

O10—Pr1—O1	144.51(15)	O5—Pr2—N39	97.71(19)
O10—Pr1—N14	90.24(16)	N20—Pr2—O8	116.02(15)
O10—Pr1—N23	70.79(16)	O6—Pr2—O8	148.55(16)
O3—Pr1—O2	69.33(14)	O6—Pr2—O7	141.91(16)
O3—Pr1—O9	130.73(16)	O6—Pr2—O5	51.15(18)
O3—Pr1—O1	87.58(15)	O6—Pr2—N20	94.20(18)
O3—Pr1—N14	137.17(16)	O6—Pr2—N39	69.88(18)
O3—Pr1—O10	83.93(16)	N39—Pr2—O8	115.87(17)
O3—Pr1—N23	77.26(16)	N39—Pr2—N20	61.42(19)
O2—Pr2—O8	73.68(13)		

Table S5. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **4**

Nd1—O10	2.615(5)	Nd2—O10	2.412(4)
Nd1—O7	2.401(4)	Nd2—O7	2.666(5)
Nd1—O3	2.546(5)	Nd2—O6	2.391(5)
Nd1—O1	2.419(5)	Nd2—O8	2.510(5)
Nd1—O9	2.563(5)	Nd2—O2	2.433(4)
Nd1—N1	2.665(5)	Nd2—O12	2.528(6)
Nd1—O5	2.427(4)	Nd2—N4	2.658(5)
Nd1—O4	2.479(5)	Nd2—O11	2.507(5)
Nd1—N2	2.676(6)	Nd2—N3	2.652(6)
O10—Nd1—N1	118.09(16)	O10—Nd2—O8	123.45(15)
O10—Nd1—N2	113.30(17)	O10—Nd2—O2	77.25(16)
O7—Nd1—O10	74.77(14)	O10—Nd2—O12	81.34(17)
O7—Nd1—O3	81.52(16)	O10—Nd2—N4	141.30(18)
O7—Nd1—O1	74.56(16)	O10—Nd2—O11	88.30(17)
O7—Nd1—O9	124.31(15)	O10—Nd2—N3	151.25(18)
O7—Nd1—N1	145.50(17)	O6—Nd2—O10	73.90(17)
O7—Nd1—O5	76.25(16)	O6—Nd2—O7	69.49(17)
O7—Nd1—O4	87.09(16)	O6—Nd2—O8	82.25(19)
O7—Nd1—N2	146.76(17)	O6—Nd2—O2	134.93(17)
O3—Nd1—O10	143.58(16)	O6—Nd2—O12	80.1(2)
O3—Nd1—O9	139.95(16)	O6—Nd2—N4	75.29(18)
O3—Nd1—N1	70.07(17)	O6—Nd2—O11	130.47(19)
O3—Nd1—N2	101.73(18)	O6—Nd2—N3	134.58(19)
O1—Nd1—O10	70.78(16)	O8—Nd2—O7	49.93(14)
O1—Nd1—O3	76.54(17)	O8—Nd2—O12	143.66(17)
O1—Nd1—O9	81.74(17)	O8—Nd2—N4	74.10(17)
O1—Nd1—O5	135.56(16)	O8—Nd2—N3	72.83(18)
O1—Nd1—O4	127.19(17)	O2—Nd2—O7	69.59(15)
O1—Nd1—N2	138.61(18)	O2—Nd2—O8	85.69(17)
O9—Nd1—O10	49.81(14)	O2—Nd2—O12	128.50(18)
O9—Nd1—N1	73.31(16)	O2—Nd2—N4	141.34(17)
O9—Nd1—N2	73.69(17)	O2—Nd2—O11	81.66(18)

N1—Nd1—N2	61.43(18)	O2—Nd2—N3	81.05(18)
O5—Nd1—O10	69.67(16)	O12—Nd2—O7	144.82(18)
O5—Nd1—O3	130.64(17)	O12—Nd2—N4	70.78(18)
O5—Nd1—O9	87.93(17)	O12—Nd2—N3	98.0(2)
O5—Nd1—N1	137.53(17)	N4—Nd2—O7	115.93(16)
O5—Nd1—O4	83.43(17)	O11—Nd2—O7	148.61(16)
O5—Nd1—N2	76.96(17)	O11—Nd2—O8	142.07(17)
O4—Nd1—O10	150.30(15)	O11—Nd2—O12	51.24(19)
O4—Nd1—O3	51.66(16)	O11—Nd2—N4	94.29(19)
O4—Nd1—O9	144.28(16)	O11—Nd2—N3	69.95(19)
O4—Nd1—N1	90.15(18)	N3—Nd2—O7	115.80(18)
O4—Nd1—N2	70.60(18)	N3—Nd2—N4	61.77(19)
O10—Nd2—O7	73.65(14)		

Table S6. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **5**

Sm1—O6	2.378(4)	Sm2—O1	2.358(5)
Sm1—O2	2.403(4)	Sm2—O5	2.403(4)
Sm1—O9	2.600(4)	Sm2—O9	2.380(4)
Sm1—O7	2.521(4)	Sm2—O3	2.644(4)
Sm1—O3	2.365(4)	Sm2—O4	2.476(4)
Sm1—O10	2.537(4)	Sm2—O11	2.499(5)
Sm1—N3	2.628(5)	Sm2—N2	2.627(5)
Sm1—O8	2.442(4)	Sm2—O12	2.479(5)
Sm1—N4	2.653(5)	Sm2—N1	2.620(5)
O6—Sm1—O2	135.61(14)	O1—Sm2—O5	135.28(15)
O6—Sm1—O9	70.70(14)	O1—Sm2—O9	74.37(15)
O6—Sm1—O7	76.45(15)	O1—Sm2—O3	69.62(15)
O6—Sm1—O10	81.77(15)	O1—Sm2—O4	82.44(16)
O6—Sm1—N3	79.84(15)	O1—Sm2—O11	79.79(18)
O6—Sm1—O8	127.77(15)	O1—Sm2—N2	75.10(16)
O6—Sm1—N4	138.65(16)	O1—Sm2—O12	130.54(17)
O2—Sm1—O9	69.55(13)	O1—Sm2—N1	135.00(17)
O2—Sm1—O7	130.79(15)	O5—Sm2—O3	69.66(13)
O2—Sm1—O10	87.69(14)	O5—Sm2—O4	85.74(14)
O2—Sm1—N3	137.43(14)	O5—Sm2—O11	128.50(16)
O2—Sm1—O8	83.11(15)	O5—Sm2—N2	141.46(15)
O2—Sm1—N4	76.51(14)	O5—Sm2—O12	81.30(15)
O9—Sm1—N3	118.26(14)	O5—Sm2—N1	80.32(15)
O9—Sm1—N4	113.17(14)	O9—Sm2—O5	77.12(14)
O7—Sm1—O9	143.19(14)	O9—Sm2—O3	73.52(12)
O7—Sm1—O10	140.07(14)	O9—Sm2—O4	123.87(13)
O7—Sm1—N3	70.26(15)	O9—Sm2—O11	81.10(15)
O7—Sm1—N4	102.35(15)	O9—Sm2—N2	141.26(15)
O3—Sm1—O6	74.88(14)	O9—Sm2—O12	87.91(15)

O3—Sm1—O2	76.27(14)	O9—Sm2—N1	150.38(16)
O3—Sm1—O9	74.60(13)	O4—Sm2—O3	50.46(12)
O3—Sm1—O7	81.29(14)	O4—Sm2—O11	143.60(15)
O3—Sm1—O10	124.55(13)	O4—Sm2—N2	74.35(15)
O3—Sm1—N3	145.58(14)	O4—Sm2—O12	141.82(15)
O3—Sm1—O8	87.07(14)	O4—Sm2—N1	72.69(16)
O3—Sm1—N4	146.43(15)	O11—Sm2—O3	144.34(16)
O10—Sm1—O9	50.19(12)	O11—Sm2—N2	70.49(16)
O10—Sm1—N3	73.23(14)	O11—Sm2—N1	98.58(18)
O10—Sm1—N4	73.31(15)	N2—Sm2—O3	116.51(14)
N3—Sm1—N4	61.78(15)	O12—Sm2—O3	148.19(14)
O8—Sm1—O9	149.85(13)	O12—Sm2—O11	51.63(17)
O8—Sm1—O7	52.26(14)	O12—Sm2—N2	94.21(16)
O8—Sm1—O10	143.78(14)	O12—Sm2—N1	69.80(17)
O8—Sm1—N3	90.36(15)	N1—Sm2—O3	115.86(15)
O8—Sm1—N4	70.48(15)	N1—Sm2—N2	62.50(17)

Table S7. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **6**

Eu1—O3	2.370 (7)	Eu2—O2	2.359 (8)
Eu1—O1	2.389 (6)	Eu2—O4	2.394 (6)
Eu1—O8	2.586 (7)	Eu2—N1	2.620 (8)
Eu1—O7	2.510 (7)	Eu2—N2	2.605 (9)
Eu1—O5	2.350 (6)	Eu2—O8	2.373 (6)
Eu1—N3	2.631 (8)	Eu2—O5	2.636 (7)
Eu1—N4	2.645 (8)	Eu2—O6	2.460 (7)
Eu1—O12	2.519 (7)	Eu2—O9	2.458 (8)
Eu1—O11	2.442 (7)	Eu2—O10	2.488 (9)
O3—Eu1—O1	136.1 (2)	O2—Eu2—O8	74.37 (17)
O3—Eu1—O8	70.8 (2)	O2—Eu2—O4	135.46 (17)
O3—Eu1—O7	81.8 (3)	O8—Eu2—O4	77.10 (16)
O3—Eu1—N3	79.4 (3)	O2—Eu2—O9	130.1 (2)
O3—Eu1—N4	138.6 (3)	O8—Eu2—O9	87.47 (18)
O3—Eu1—O12	75.9 (3)	O4—Eu2—O9	81.20 (18)
O3—Eu1—O11	127.4 (3)	O2—Eu2—O6	82.75 (19)
O1—Eu1—O8	69.8 (2)	O8—Eu2—O6	124.05 (16)
O1—Eu1—O7	87.9 (3)	O4—Eu2—O6	85.75 (17)
O1—Eu1—N3	137.7 (2)	O9—Eu2—O6	142.02 (18)
O1—Eu1—N4	76.3 (2)	O2—Eu2—O10	78.8 (2)
O1—Eu1—O12	130.9 (3)	O8—Eu2—O10	80.99 (18)
O1—Eu1—O11	83.1 (2)	O4—Eu2—O10	129.09 (19)
O8—Eu1—N3	118.6 (2)	O9—Eu2—O10	52.3 (2)
O8—Eu1—N4	113.5 (2)	O6—Eu2—O10	143.16 (19)
O7—Eu1—O8	50.5 (2)	O2—Eu2—N2	135.4 (2)
O7—Eu1—N3	73.5 (2)	O8—Eu2—N2	149.94 (18)

O7—Eu1—N4	73.5 (2)	O4—Eu2—N2	80.05 (18)
O7—Eu1—O12	139.8 (2)	O9—Eu2—N2	69.8 (2)
O5—Eu1—O3	74.7 (2)	O6—Eu2—N2	72.84 (19)
O5—Eu1—O1	76.7 (2)	O10—Eu2—N2	98.9 (2)
O5—Eu1—O8	74.5 (2)	O2—Eu2—N1	75.23 (19)
O5—Eu1—O7	124.7 (2)	O8—Eu2—N1	141.31 (18)
O5—Eu1—N3	144.8 (2)	O4—Eu2—N1	141.40 (17)
O5—Eu1—N4	146.6 (3)	O9—Eu2—N1	94.2 (2)
O5—Eu1—O12	80.9 (2)	O6—Eu2—N1	74.49 (17)
O5—Eu1—O11	87.2 (2)	O10—Eu2—N1	70.09 (19)
N3—Eu1—N4	62.2 (3)	N2—Eu2—N1	62.7 (2)
O12—Eu1—O8	142.7 (2)	O2—Eu2—O5	69.78 (17)
O12—Eu1—N3	69.9 (2)	O8—Eu2—O5	73.16 (14)
O12—Eu1—N4	102.6 (3)	O4—Eu2—O5	69.61 (15)
O11—Eu1—O8	150.0 (2)	O9—Eu2—O5	147.72 (17)
O11—Eu1—O7	143.8 (2)	O6—Eu2—O5	50.99 (14)
O11—Eu1—N3	90.1 (3)	O10—Eu2—O5	143.52 (19)
O11—Eu1—N4	70.3 (3)	N2—Eu2—O5	116.34 (18)
O11—Eu1—O12	52.4 (2)	N1—Eu2—O5	117.09 (16)

Table S8. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **7**

Gd1—O5	2.336(4)	Gd2—O5	2.610(4)
Gd1—O4	2.565(4)	Gd2—O4	2.340(3)
Gd1—O7	2.383(4)	Gd2—O2	2.333(4)
Gd1—O1	2.352(4)	Gd2—O6	2.336(4)
Gd1—O9	2.517(4)	Gd2—O8	2.472(4)
Gd1—O10	2.483(3)	Gd2—O12	2.503(3)
Gd1—O11	2.453(4)	Gd2—O13	2.430(4)
Gd1—N1	2.606(5)	Gd2—N4	2.550(4)
Gd1—N2	2.556(5)	Gd2—N3	2.625(4)
O5—Gd1—O4	74.49(11)	O5—Gd2—N3	109.52(13)
O5—Gd1—O7	72.52(15)	O4—Gd2—O5	73.55(12)
O5—Gd1—O1	77.51(16)	O4—Gd2—O8	123.68(13)
O5—Gd1—O9	124.57(14)	O4—Gd2—O12	79.31(11)
O5—Gd1—O10	79.45(12)	O4—Gd2—O13	89.53(17)
O5—Gd1—O11	95.74(16)	O4—Gd2—N4	144.33(13)
O5—Gd1—N1	146.14(18)	O4—Gd2—N3	147.17(17)
O5—Gd1—N2	146.22(16)	O2—Gd2—O5	70.75(14)
O4—Gd1—N1	103.51(14)	O2—Gd2—O4	74.61(14)
O7—Gd1—O4	71.43(15)	O2—Gd2—O6	136.23(14)
O7—Gd1—O9	95.26(14)	O2—Gd2—O8	91.39(15)
O7—Gd1—O10	126.00(15)	O2—Gd2—O12	126.83(15)
O7—Gd1—O11	85.35(14)	O2—Gd2—O13	81.44(15)
O7—Gd1—N1	74.88(16)	O2—Gd2—N4	139.22(14)

O7—Gd1—N2	138.70(16)	O2—Gd2—N3	75.86(14)
O1—Gd1—O4	72.20(14)	O6—Gd2—O5	70.30(14)
O1—Gd1—O7	137.65(14)	O6—Gd2—O4	75.92(17)
O1—Gd1—O9	77.81(14)	O6—Gd2—O8	78.90(15)
O1—Gd1—O10	75.22(15)	O6—Gd2—O12	77.38(14)
O1—Gd1—O11	127.34(13)	O6—Gd2—O13	129.83(14)
O1—Gd1—N1	135.02(15)	O6—Gd2—N4	79.70(14)
O1—Gd1—N2	79.95(15)	O6—Gd2—N3	136.66(15)
O9—Gd1—O4	50.85(11)	O8—Gd2—O5	50.59(11)
O9—Gd1—N1	67.19(15)	O8—Gd2—O12	141.03(14)
O9—Gd1—N2	73.74(13)	O8—Gd2—N4	75.49(12)
O10—Gd1—O4	141.76(14)	O8—Gd2—N3	70.87(15)
O10—Gd1—O9	138.24(15)	O12—Gd2—O5	141.76(14)
O10—Gd1—N1	113.64(15)	O12—Gd2—N4	70.18(13)
O10—Gd1—N2	70.63(14)	O12—Gd2—N3	107.93(13)
O11—Gd1—O4	156.54(15)	O13—Gd2—O5	150.32(16)
O11—Gd1—O9	138.01(14)	O13—Gd2—O8	142.93(15)
O11—Gd1—O10	52.37(15)	O13—Gd2—O12	52.63(14)
O11—Gd1—N1	72.58(15)	O13—Gd2—N4	86.43(15)
O11—Gd1—N2	78.43(15)	O13—Gd2—N3	72.11(14)
N2—Gd1—O4	121.46(14)	N4—Gd2—O5	121.49(14)
N2—Gd1—N1	64.09(17)	N4—Gd2—N3	63.36(14)

Table S9. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **8**

Tb1—O7	2.558(6)	Tb2—O7	2.330(5)
Tb1—O8	2.328(6)	Tb2—O8	2.595(6)
Tb1—O13	2.503(6)	Tb2—O14	2.459(6)
Tb1—O10	2.338(6)	Tb2—O11	2.326(6)
Tb1—O12	2.371(7)	Tb2—O9	2.321(6)
Tb1—O15	2.478(5)	Tb2—O17	2.500(5)
Tb1—N4	2.543(7)	Tb2—N1	2.547(8)
Tb1—O16	2.438(7)	Tb2—N2	2.620(7)
Tb1—N3	2.593(8)	Tb2—O18	2.417(7)
O7—Tb1—N3	103.6(2)	O7—Tb2—O8	73.40(19)
O8—Tb1—O7	74.13(18)	O7—Tb2—O14	123.6(2)
O8—Tb1—O13	124.5(2)	O7—Tb2—O17	79.0(2)
O8—Tb1—O10	77.2(3)	O7—Tb2—N1	144.2(2)
O8—Tb1—O12	72.6(2)	O7—Tb2—N2	147.2(3)
O8—Tb1—O15	79.50(19)	O7—Tb2—O18	90.3(3)
O8—Tb1—N4	146.2(2)	O8—Tb2—N2	109.3(2)
O8—Tb1—O16	95.7(3)	O14—Tb2—O8	50.77(18)
O8—Tb1—N3	145.8(3)	O14—Tb2—O17	141.0(2)
O13—Tb1—O7	51.14(18)	O14—Tb2—N1	75.6(2)
O13—Tb1—N4	73.5(2)	O14—Tb2—N2	70.8(2)

O13—Tb1—N3	67.3(2)	O11—Tb2—O7	75.8(3)
O10—Tb1—O7	72.2(2)	O11—Tb2—O8	70.8(2)
O10—Tb1—O13	77.9(2)	O11—Tb2—O14	79.0(3)
O10—Tb1—O12	137.7(2)	O11—Tb2—O17	76.9(2)
O10—Tb1—O15	75.2(2)	O11—Tb2—N1	79.7(2)
O10—Tb1—N4	79.9(2)	O11—Tb2—N2	136.7(2)
O10—Tb1—O16	127.7(2)	O11—Tb2—O18	129.2(2)
O10—Tb1—N3	135.5(2)	O9—Tb2—O7	74.4(2)
O12—Tb1—O7	71.5(2)	O9—Tb2—O8	71.0(2)
O12—Tb1—O13	95.5(2)	O9—Tb2—O14	92.2(2)
O12—Tb1—O15	125.8(2)	O9—Tb2—O11	136.7(2)
O12—Tb1—N4	138.7(3)	O9—Tb2—O17	126.2(2)
O12—Tb1—O16	84.7(2)	O9—Tb2—N1	139.3(2)
O12—Tb1—N3	74.5(3)	O9—Tb2—N2	75.8(2)
O15—Tb1—O7	141.6(2)	O9—Tb2—O18	81.6(2)
O15—Tb1—O13	138.1(2)	O17—Tb2—O8	141.5(2)
O15—Tb1—N4	70.7(2)	O17—Tb2—N1	70.2(2)
O15—Tb1—N3	113.8(2)	O17—Tb2—N2	108.5(2)
N4—Tb1—O7	121.5(2)	N1—Tb2—O8	122.0(2)
N4—Tb1—N3	64.5(3)	N1—Tb2—N2	63.5(2)
O16—Tb1—O7	156.0(2)	O18—Tb2—O8	150.9(3)
O16—Tb1—O13	138.1(2)	O18—Tb2—O14	142.6(3)
O16—Tb1—O15	52.7(2)	O18—Tb2—O17	52.5(2)
O16—Tb1—N4	79.0(2)	O18—Tb2—N1	85.3(3)
O16—Tb1—N3	72.5(2)	O18—Tb2—N2	72.0(2)

Table S10. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **9**

Dy1—O6	2.277(16)	Dy2—O8	2.301(17)
Dy1—O3	2.324(15)	Dy2—O1	2.307(15)
Dy1—O7	2.351(16)	Dy2—O5	2.375(16)
Dy1—O10	2.414(16)	Dy2—O12	2.429(14)
Dy1—O2	2.433(16)	Dy2—O11	2.430(15)
Dy1—N2	2.512(19)	Dy2—O4	2.491(17)
Dy1—O9	2.534(14)	Dy2—N3	2.51(2)
Dy1—N1	2.628(19)	Dy2—O3	2.532(15)
Dy1—O1	2.630(15)	Dy2—N4	2.59(2)
O6—Dy1—O3	75.1(6)	O5—Dy2—O11	85.7(6)
O6—Dy1—O7	137.1(6)	O12—Dy2—O11	52.5(6)
O3—Dy1—O7	74.4(6)	O8—Dy2—O4	77.3(7)
O6—Dy1—O10	128.7(6)	O1—Dy2—O4	126.1(6)
O3—Dy1—O10	90.0(6)	O5—Dy2—O4	95.0(6)
O7—Dy1—O10	80.6(6)	O12—Dy2—O4	138.7(6)
O6—Dy1—O2	80.2(7)	O11—Dy2—O4	135.8(6)
O3—Dy1—O2	123.2(6)	O8—Dy2—N3	78.6(7)

O7—Dy1—O2	92.2(6)	O1—Dy2—N3	144.6(7)
O10—Dy1—O2	142.8(6)	O5—Dy2—N3	140.0(7)
O6—Dy1—N2	80.1(6)	O12—Dy2—N3	70.5(7)
O3—Dy1—N2	144.5(6)	O11—Dy2—N3	78.3(6)
O7—Dy1—N2	139.0(6)	O4—Dy2—N3	73.2(6)
O10—Dy1—N2	85.9(7)	O8—Dy2—O3	71.6(5)
O2—Dy1—N2	75.9(6)	O1—Dy2—O3	75.0(5)
O6—Dy1—O9	75.3(6)	O5—Dy2—O3	70.9(6)
O3—Dy1—O9	79.6(5)	O12—Dy2—O3	142.2(6)
O7—Dy1—O9	126.7(7)	O11—Dy2—O3	156.5(6)
O10—Dy1—O9	53.6(6)	O4—Dy2—O3	51.9(5)
O2—Dy1—O9	140.5(6)	N3—Dy2—O3	121.3(6)
N2—Dy1—O9	69.7(6)	O8—Dy2—N4	133.6(7)
O6—Dy1—N1	137.9(6)	O1—Dy2—N4	147.0(7)
O3—Dy1—N1	146.9(6)	O5—Dy2—N4	75.4(7)
O7—Dy1—N1	75.6(6)	O12—Dy2—N4	113.5(6)
O10—Dy1—N1	71.5(6)	O11—Dy2—N4	71.8(6)
O2—Dy1—N1	71.4(6)	O4—Dy2—N4	65.8(7)
N2—Dy1—N1	63.4(6)	N3—Dy2—N4	64.8(7)
O9—Dy1—N1	108.2(6)	O3—Dy2—N4	103.3(6)
O6—Dy1—O1	72.0(6)	O8—Dy2—O1	78.0(7)
O3—Dy1—O1	72.9(5)	O8—Dy2—O5	137.2(6)
O7—Dy1—O1	70.6(6)	O1—Dy2—O5	73.0(6)
O10—Dy1—O1	149.4(6)	O8—Dy2—O12	76.9(6)
O2—Dy1—O1	51.0(5)	O1—Dy2—O12	78.5(5)
N2—Dy1—O1	122.7(6)	O5—Dy2—O12	125.5(7)
O9—Dy1—O1	141.5(5)	O8—Dy2—O11	128.9(6)
N1—Dy1—O1	109.6(5)	O1—Dy2—O11	96.4(6)

Table S11. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **10**

Ho1—O2	2.310(5)	Ho2—O2	2.535(6)
Ho1—O6	2.295(6)	Ho2—O7	2.296(6)
Ho1—O7	2.594(6)	Ho2—O1	2.479(6)
Ho1—O8	2.426(6)	Ho2—O12	2.468(5)
Ho1—O4	2.480(5)	Ho2—O5	2.314(6)
Ho1—O10	2.301(6)	Ho2—O11	2.416(6)
Ho1—O3	2.383(6)	Ho2—N1	2.520(7)
Ho1—N4	2.511(7)	Ho2—N2	2.578(7)
Ho1—N3	2.577(7)	Ho2—O9	2.343(6)
O2—Ho1—O7	73.00(17)	O2—Ho2—N2	103.3(2)
O2—Ho1—O8	123.8(2)	O7—Ho2—O2	74.36(18)
O2—Ho1—O4	79.13(18)	O7—Ho2—O1	125.0(2)
O2—Ho1—O3	89.8(2)	O7—Ho2—O12	78.66(17)
O2—Ho1—N4	143.9(2)	O7—Ho2—O5	77.8(3)

O2—Ho1—N3	147.0(3)	O7—Ho2—O11	95.7(2)
O6—Ho1—O2	74.8(2)	O7—Ho2—N1	145.5(2)
O6—Ho1—O7	70.8(2)	O7—Ho2—N2	146.2(3)
O6—Ho1—O8	91.4(2)	O7—Ho2—O9	72.8(2)
O6—Ho1—O4	126.8(2)	O1—Ho2—O2	51.57(17)
O6—Ho1—O10	136.5(2)	O1—Ho2—N1	73.6(2)
O6—Ho1—O3	81.0(2)	O1—Ho2—N2	67.2(2)
O6—Ho1—N4	139.3(2)	O12—Ho2—O2	141.0(2)
O6—Ho1—N3	75.1(2)	O9—Ho2—O11	84.7(2)
O8—Ho1—O7	51.26(18)	O9—Ho2—N1	138.8(2)
O8—Ho1—O4	141.0(2)	O9—Ho2—N2	74.5(2)
O8—Ho1—N4	75.79(19)	O12—Ho2—O1	137.5(2)
O8—Ho1—N3	70.3(2)	O12—Ho2—N1	70.5(2)
O4—Ho1—O7	141.3(2)	O12—Ho2—N2	114.7(2)
O4—Ho1—N4	69.9(2)	O5—Ho2—O2	72.1(2)
O4—Ho1—N3	108.9(2)	O5—Ho2—O1	76.7(2)
O10—Ho1—O2	75.9(2)	O5—Ho2—O12	75.1(2)
O10—Ho1—O7	70.3(2)	O5—Ho2—O11	128.0(2)
O10—Ho1—O8	79.0(2)	O5—Ho2—N1	79.6(2)
O10—Ho1—O4	77.2(2)	O5—Ho2—N2	134.6(2)
O10—Ho1—O3	130.1(2)	O5—Ho2—O9	138.1(2)
O10—Ho1—N4	79.5(2)	O11—Ho2—O2	156.1(2)
O10—Ho1—N3	136.8(2)	O11—Ho2—O1	137.9(2)
O3—Ho1—O7	149.8(2)	O11—Ho2—O12	53.2(2)
O3—Ho1—O8	142.5(2)	O11—Ho2—N1	78.3(2)
O3—Ho1—O4	53.1(2)	O11—Ho2—N2	72.7(2)
O3—Ho1—N4	86.2(2)	N1—Ho2—O2	122.1(2)
O3—Ho1—N3	72.3(2)	N1—Ho2—N2	64.7(3)
N4—Ho1—O7	122.2(2)	O9—Ho2—O2	71.7(2)
N4—Ho1—N3	64.2(2)	O9—Ho2—O1	96.4(2)
N3—Ho1—O7	109.2(2)	O9—Ho2—O12	125.7(2)

Table S12. Crystal data and refinement for the complexes **1'–4'**

Complex	S-La (1')	S-Ce (2')	S-Pr (3')	S-Nd (4')
formula	C ₈₄ H ₈₂ La ₂ N ₄ O ₁₂	C ₈₄ H ₈₂ Ce ₂ N ₄ O ₁₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Pr ₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ Nd ₂ O ₁₂
formula weight	1617.35	1619.78	1621.36	1628.02
T (K)	297(2)	300(2)	298(2)	297(2)
crystal system	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic
space group	P2 ₁	P2 ₁	P2 ₁	P2 ₁
<i>a</i> (Å)	12.9694	12.9206(6)	12.9039	12.8447(8)
<i>b</i> (Å)	23.1150	23.1315(10)	23.1509	23.1063(14)
<i>c</i> (Å)	13.4799	13.4632(6)	13.4600	13.4261(8)
β (°)	108.995	109.1390(10)	109.195	109.2940(10)

V (Å ³)	3801.4(3)	3761.0(4)
Z, D_c (Mg/m ³)	2, 3.600	2, 3.638
μ (mm ⁻¹)	13.216	14.933
F (000)	3600	3608
R (int)	0.029	0.111
goodness of fit	1.037	0.994
final R_1^a , wR_2^b [I>2σ(I)]	0.0263, 0.0550	0.0530, 0.0818
R_1, wR_2 (all data)	0.0346, 0.0587	0.1232, 0.1042

$$^a R_1 = \Sigma ||F_o| - |F_c|| / \Sigma |F_o|; ^b wR_2 = [\Sigma [w(F_o^2 - F_c^2)^2] / \Sigma w(F_o^2)^2]^{1/2}.$$

Table S13. Crystal data and refinement for the complexes **5'-8'**

Complex	S-Sm (5')	S-Eu (6')	S-Gd (7')	S-Tb (8')
formula	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Sm ₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Eu ₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Gd ₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Tb ₂
formula weight	1640.24	1643.46	1654.04	1657.38
T (K)	293(2)	297(2)	293(2)	293(2)
crystal system	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic
space group	$P2_1$	$P2_1$	$P2_1$	$P2_1$
a (Å)	12.8050	12.7995(6)	12.834(5)	12.8412(4)
b (Å)	23.1710	23.1832(11)	22.937(9)	22.9613(7)
c (Å)	13.4460	13.4448(6)	13.499(5)	13.4713(4)
β (°)	109.348	109.2700(10)	109.093(9)	109.0860(10)
V (Å ³)		3766.0(3)	3755(3)	3753.7(2)
Z, D_c (Mg/m ³)		2, 3.697	2, 3.808	2, 1.466
μ (mm ⁻¹)		17.657	18.740	1.933
F (000)		3655	3698	1680
R (int)		0.027	0.045	0.036
Goodness of fit		1.029	1.051	1.106
final R_1^a, wR_2^b [I>2σ(I)]		0.0264, 0.0561	0.0408, 0.0700	0.0281, 0.0480
R_1, wR_2 (all data)		0.0367, 0.0646	0.0599, 0.0752	0.0368, 0.0514

$$^a R_1 = \Sigma ||F_o| - |F_c|| / \Sigma |F_o|; ^b wR_2 = [\Sigma [w(F_o^2 - F_c^2)^2] / \Sigma w(F_o^2)^2]^{1/2}.$$

Table S14. Crystal data and refinement for the complexes **9'-10'**

Complex	S-Dy (9')	S-Ho (10')
formula	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Dy ₂	C ₈₄ H ₈₂ N ₄ O ₁₂ Ho ₂
formula weight	1664.54	1669.40
T (K)	291(2)	294(2)
crystal system	Monoclinic	Monoclinic
space group	<i>P</i> 2 ₁	<i>P</i> 2 ₁
<i>a</i> (Å)	12.8392(4)	12.8115(13)
<i>b</i> (Å)	22.9440(7)	22.891(2)
<i>c</i> (Å)	13.4526(4)	13.4059(13)
β (°)	109.1260(10)	109.187(2)
<i>V</i> (Å ³)	3744.2(2)	3713.1(6)
<i>Z</i> , <i>D</i> _c (Mg/m ³)	2, 1.476	2, 1.493
μ (mm ⁻¹)	2.045	2.181
F (000)	1684	1688
<i>R</i> (int)	0.035	0.059
Goodness of fit	1.162	1.110
final <i>R</i> ₁ ^a , <i>wR</i> ₂ ^b [I>2σ(I)]	0.0325, 0.0575	0.0573, 0.1390
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.0408, 0.0613	0.0779, 0.1480

^a*R*₁ = $\Sigma ||F_o| - |F_c|| / \Sigma |F_o|$; ^b*wR*₂ = $[\Sigma [w(F_o^2 - F_c^2)^2] / \Sigma w(F_o^2)]^{1/2}$.

Table S15. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **2'**

Ce1—O3	2.441(3)	Ce2—O11	2.413(3)
Ce1—O12	2.456(2)	Ce2—O4	2.456(3)
Ce1—O2	2.505(3)	Ce2—O7	2.538(3)
Ce1—O1	2.559(3)	Ce2—O6	2.547(3)
Ce1—O10	2.599(3)	Ce2—O8	2.552(3)
Ce1—O9	2.641(3)	Ce2—N3	2.688(3)
Ce1—N1	2.700(3)	Ce2—N4	2.691(3)
Ce1—N2	2.702(3)	Ce2—O5	2.691(2)
O3—Ce1—O12	135.12(9)	O11—Ce2—O4	134.45(9)
O3—Ce1—O2	127.01(9)	O11—Ce2—O7	130.24(11)
O12—Ce1—O2	83.92(9)	O4—Ce2—O7	82.14(10)
O3—Ce1—O1	76.89(9)	O11—Ce2—O6	82.37(10)
O12—Ce1—O1	130.81(10)	O4—Ce2—O6	85.48(9)
O2—Ce1—O1	51.20(9)	O7—Ce2—O6	142.22(10)
O3—Ce1—O10	81.61(9)	O11—Ce2—O8	80.50(11)
O12—Ce1—O10	87.73(9)	O4—Ce2—O8	128.35(10)

O2—Ce1—O10	144.67(9)	O7—Ce2—O8	50.66(11)
O1—Ce1—O10	139.97(9)	O6—Ce2—O8	144.02(10)
O3—Ce1—O9	70.88(9)	O11—Ce2—N3	134.52(10)
O12—Ce1—O9	69.31(9)	O4—Ce2—N3	81.68(10)
O2—Ce1—O9	150.57(9)	O7—Ce2—N3	69.96(11)
O1—Ce1—O9	144.29(9)	O6—Ce2—N3	73.01(10)
O10—Ce1—O9	49.19(7)	O8—Ce2—N3	97.55(11)
O3—Ce1—N1	138.27(10)	O11—Ce2—N4	75.90(10)
O12—Ce1—N1	77.76(9)	O4—Ce2—N4	141.11(9)
O2—Ce1—N1	70.71(10)	O7—Ce2—N4	94.01(10)
O1—Ce1—N1	100.91(10)	O6—Ce2—N4	74.09(9)
O10—Ce1—N1	73.98(9)	O8—Ce2—N4	71.15(10)
O9—Ce1—N1	113.26(9)	N3—Ce2—N4	60.99(10)
O3—Ce1—N2	80.42(9)	O11—Ce2—O5	69.46(9)
O12—Ce1—N2	137.25(9)	O4—Ce2—O5	69.36(8)
O2—Ce1—N2	90.20(10)	O7—Ce2—O5	149.01(9)
O1—Ce1—N2	70.28(9)	O6—Ce2—O5	49.44(7)
O10—Ce1—N2	73.14(9)	O8—Ce2—O5	145.30(10)
O9—Ce1—N2	117.63(9)	N3—Ce2—O5	115.74(10)
N1—Ce1—N2	60.48(10)	N4—Ce2—O5	115.70(9)

Table S16. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **4'**

Nd1—O9	2.408(6)	Nd2—O3	2.347(8)
Nd1—O11	2.421(7)	Nd2—O5	2.398(6)
Nd1—O4	2.438(6)	Nd2—O12	2.437(6)
Nd1—O7	2.474(7)	Nd2—O1	2.508(7)
Nd1—O8	2.532(7)	Nd2—O10	2.515(6)
Nd1—O6	2.554(6)	Nd2—O2	2.520(8)
Nd1—O5	2.624(6)	Nd2—N1	2.631(9)
Nd1—N3	2.648(7)	Nd2—O9	2.642(6)
Nd1—N4	2.670(8)	Nd2—N2	2.659(8)
O9—Nd1—O11	73.5(2)	O3—Nd2—O5	74.4(2)
O9—Nd1—O4	76.9(2)	O3—Nd2—O12	134.6(2)
O11—Nd1—O4	135.7(2)	O5—Nd2—O12	76.8(2)
O9—Nd1—O7	88.1(2)	O3—Nd2—O1	129.9(3)
O11—Nd1—O7	127.5(2)	O5—Nd2—O1	87.9(2)
O4—Nd1—O7	82.9(2)	O12—Nd2—O1	82.6(2)
O9—Nd1—O8	81.6(2)	O3—Nd2—O10	82.1(3)
O11—Nd1—O8	76.8(3)	O5—Nd2—O10	123.1(2)
O4—Nd1—O8	130.1(2)	O12—Nd2—O10	85.2(2)
O7—Nd1—O8	51.7(2)	O1—Nd2—O10	142.8(2)
O9—Nd1—O6	124.1(2)	O3—Nd2—O2	79.4(3)
O11—Nd1—O6	82.1(2)	O5—Nd2—O2	81.2(2)
O4—Nd1—O6	88.2(2)	O12—Nd2—O2	129.4(2)

O7—Nd1—O6	143.6(2)	O1—Nd2—O2	51.4(2)
O8—Nd1—O6	140.1(2)	O10—Nd2—O2	143.6(2)
O9—Nd1—O5	74.3(2)	O3—Nd2—N1	133.6(3)
O11—Nd1—O5	70.6(2)	O5—Nd2—N1	151.6(3)
O4—Nd1—O5	70.1(2)	O12—Nd2—N1	82.4(3)
O7—Nd1—O5	150.3(2)	O1—Nd2—N1	70.2(3)
O8—Nd1—O5	143.7(2)	O10—Nd2—N1	73.4(3)
O6—Nd1—O5	50.18(19)	O2—Nd2—N1	97.7(3)
O9—Nd1—N3	146.0(2)	O3—Nd2—O9	70.5(2)
O11—Nd1—N3	81.0(2)	O5—Nd2—O9	74.1(2)
O4—Nd1—N3	136.5(2)	O12—Nd2—O9	68.3(2)
O7—Nd1—N3	89.9(2)	O1—Nd2—O9	148.4(2)
O8—Nd1—N3	70.8(2)	O10—Nd2—O9	49.20(19)
O6—Nd1—N3	72.7(2)	O2—Nd2—O9	145.0(3)
O5—Nd1—N3	118.1(2)	N1—Nd2—O9	115.8(3)
O9—Nd1—N4	147.7(2)	O3—Nd2—N2	75.1(3)
O11—Nd1—N4	138.8(2)	O5—Nd2—N2	141.5(2)
O4—Nd1—N4	76.6(2)	O12—Nd2—N2	141.6(2)
O7—Nd1—N4	70.7(2)	O1—Nd2—N2	94.1(2)
O8—Nd1—N4	102.0(3)	O10—Nd2—N2	74.6(2)
O6—Nd1—N4	72.9(2)	O2—Nd2—N2	70.5(3)
O5—Nd1—N4	112.9(2)	N1—Nd2—N2	60.8(3)
N3—Nd1—N4	60.6(2)	O9—Nd2—N2	116.3(2)

Table S17. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **6'**

Eu1—O3	2.357(3)	Eu1—O3	2.357(3)
Eu1—O5	2.375(3)	Eu1—O5	2.375(3)
Eu1—O12	2.389(3)	Eu1—O12	2.389(3)
Eu1—O1	2.434(3)	Eu1—O1	2.434(3)
Eu1—O2	2.503(3)	Eu1—O2	2.503(3)
Eu1—O10	2.518(3)	Eu1—O10	2.518(3)
Eu1—O9	2.602(3)	Eu1—O9	2.602(3)
Eu1—N2	2.621(3)	Eu1—N2	2.621(3)
Eu1—N1	2.638(4)	Eu1—N1	2.638(4)
O3—Eu1—O5	74.78(10)	O11—Eu2—O9	74.57(11)
O3—Eu1—O12	76.28(10)	O11—Eu2—O6	135.07(11)
O5—Eu1—O12	135.49(10)	O9—Eu2—O6	76.97(10)
O3—Eu1—O1	87.42(10)	O11—Eu2—O4	82.55(12)
O5—Eu1—O1	128.24(11)	O9—Eu2—O4	124.00(10)
O12—Eu1—O1	82.90(11)	O6—Eu2—O4	85.43(11)
O3—Eu1—O2	81.30(10)	O11—Eu2—O8	130.53(13)
O5—Eu1—O2	76.76(11)	O9—Eu2—O8	87.39(11)
O12—Eu1—O2	130.60(12)	O6—Eu2—O8	81.35(12)
O1—Eu1—O2	52.38(11)	O4—Eu2—O8	141.96(12)

O3—Eu1—O10	124.23(10)	O11—Eu2—O7	79.53(14)
O5—Eu1—O10	81.63(11)	O9—Eu2—O7	81.18(11)
O12—Eu1—O10	87.58(11)	O6—Eu2—O7	129.05(13)
O1—Eu1—O10	143.59(10)	O4—Eu2—O7	143.42(12)
O2—Eu1—O10	140.39(10)	O8—Eu2—O7	52.00(13)
O3—Eu1—O9	74.14(9)	O11—Eu2—N4	135.41(13)
O5—Eu1—O9	70.28(10)	O9—Eu2—N4	149.76(12)
O12—Eu1—O9	69.70(10)	O6—Eu2—N4	80.16(11)
O1—Eu1—O9	149.75(10)	O4—Eu2—N4	72.96(12)
O2—Eu1—O9	142.91(11)	O8—Eu2—N4	69.71(13)
O10—Eu1—O9	50.32(9)	O7—Eu2—N4	98.53(14)
O3—Eu1—N2	145.64(11)	O11—Eu2—N3	75.11(12)
O5—Eu1—N2	80.06(11)	O9—Eu2—N3	141.28(12)
O12—Eu1—N2	137.35(11)	O6—Eu2—N3	141.57(11)
O1—Eu1—N2	90.16(11)	O4—Eu2—N3	74.60(11)
O2—Eu1—N2	70.33(11)	O8—Eu2—N3	94.42(13)
O10—Eu1—N2	73.53(10)	O7—Eu2—N3	70.10(12)
O9—Eu1—N2	118.58(10)	N4—Eu2—N3	62.85(13)
O3—Eu1—N1	146.39(11)	O11—Eu2—O3	69.71(11)
O5—Eu1—N1	138.82(11)	O7—Eu2—N4	98.53(14)
O12—Eu1—N1	76.03(11)	O11—Eu2—N3	75.11(12)
O1—Eu1—N1	70.58(11)	O9—Eu2—O3	73.51(9)
O2—Eu1—N1	102.95(11)	O6—Eu2—O3	69.27(10)
O10—Eu1—N1	73.02(11)	O4—Eu2—O3	50.58(9)
O9—Eu1—N1	112.94(11)	O8—Eu2—O3	147.71(11)
N2—Eu1—N1	62.07(11)	O7—Eu2—O3	144.21(12)
N3—Eu2—O3	116.83(11)	N4—Eu2—O3	116.08(12)

Table S18. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **7'**

Gd1—O5	2.333(4)	Gd2—O12	2.338(3)
Gd1—O9	2.339(4)	Gd2—O6	2.349(4)
Gd1—O1	2.351(3)	Gd2—O11	2.383(4)
Gd1—O7	2.423(4)	Gd2—O4	2.455(4)
Gd1—O13	2.465(4)	Gd2—O3	2.488(3)
Gd1—O8	2.498(3)	Gd2—O2	2.512(4)
Gd1—N3	2.561(5)	Gd2—N2	2.557(5)
Gd1—O12	2.610(4)	Gd2—O1	2.565(4)
Gd1—N4	2.624(4)	Gd2—N1	2.608(5)
O5—Gd1—O9	136.50(14)	O12—Gd2—O6	76.88(15)
O5—Gd1—O1	74.38(14)	O12—Gd2—O11	72.81(14)
O9—Gd1—O1	76.58(16)	O6—Gd2—O11	137.33(14)
O5—Gd1—O7	81.27(15)	O12—Gd2—O4	95.99(15)
O9—Gd1—O7	130.18(14)	O6—Gd2—O4	127.37(13)
O1—Gd1—O7	89.55(16)	O11—Gd2—O4	85.50(14)

O5—Gd1—O13	91.47(15)	O12—Gd2—O3	79.08(11)
O9—Gd1—O13	78.59(15)	O6—Gd2—O3	75.13(15)
O1—Gd1—O13	123.76(13)	O11—Gd2—O3	125.99(15)
O7—Gd1—O13	142.72(14)	O4—Gd2—O3	52.50(14)
O5—Gd1—O8	126.81(15)	O12—Gd2—O2	124.72(13)
O9—Gd1—O8	77.68(14)	O6—Gd2—O2	78.07(14)
O1—Gd1—O8	79.70(11)	O11—Gd2—O2	95.26(14)
O7—Gd1—O8	52.66(14)	O4—Gd2—O2	137.69(13)
O13—Gd1—O8	140.90(13)	O3—Gd2—O2	138.26(15)
O5—Gd1—N3	139.34(14)	O12—Gd2—N2	146.05(15)
O9—Gd1—N3	79.24(13)	O6—Gd2—N2	80.35(14)
O1—Gd1—N3	144.40(13)	O11—Gd2—N2	138.63(15)
O7—Gd1—N3	86.42(15)	O4—Gd2—N2	78.30(14)
O13—Gd1—N3	75.52(12)	O3—Gd2—N2	70.91(14)
O8—Gd1—N3	69.85(13)	O2—Gd2—N2	73.52(13)
O5—Gd1—O12	70.74(14)	O12—Gd2—O1	74.61(11)
O9—Gd1—O12	70.38(14)	O6—Gd2—O1	71.80(14)
O1—Gd1—O12	73.52(11)	O11—Gd2—O1	71.67(15)
O7—Gd1—O12	150.19(15)	O4—Gd2—O1	156.94(14)
O13—Gd1—O12	50.68(11)	O3—Gd2—O1	141.43(14)
O8—Gd1—O12	142.06(13)	O2—Gd2—O1	50.87(11)
N3—Gd1—O12	121.58(13)	O2—Gd2—N2	73.52(13)
O5—Gd1—N4	76.03(14)	N2—Gd2—O1	121.17(14)
O9—Gd1—N4	136.13(14)	O12—Gd2—N1	146.45(17)
O1—Gd1—N4	147.06(16)	O6—Gd2—N1	135.40(15)
O7—Gd1—N4	71.86(14)	O11—Gd2—N1	74.95(15)
O13—Gd1—N4	70.90(15)	O4—Gd2—N1	72.29(14)
O8—Gd1—N4	107.45(13)	O3—Gd2—N1	113.67(15)
N3—Gd1—N4	63.31(14)	O2—Gd2—N1	67.20(14)
O12—Gd1—N4	109.67(12)	N2—Gd2—N1	63.92(17)

Table S19. Selected bond lengths (\AA) and angles (deg) for **8'**

Tb1—O11	2.318(3)	Tb2—O2	2.322(3)
Tb1—O5	2.333(3)	Tb2—O12	2.337(3)
Tb1—O9	2.336(3)	Tb2—O6	2.379(3)
Tb1—O4	2.422(3)	Tb2—O7	2.438(3)
Tb1—O1	2.464(3)	Tb2—O8	2.479(3)
Tb1—O3	2.503(2)	Tb2—O10	2.508(3)
Tb1—N1	2.547(4)	Tb2—N4	2.541(4)
Tb1—O2	2.602(3)	Tb2—O9	2.557(3)
Tb1—N2	2.614(3)	Tb2—N3	2.597(4)
O11—Tb1—O5	136.48(11)	O2—Tb2—O12	77.33(12)
O11—Tb1—O9	74.78(11)	O2—Tb2—O6	72.57(11)
O5—Tb1—O9	76.12(13)	O12—Tb2—O6	137.77(10)

O11—Tb1—O4	81.32(11)	O2—Tb2—O7	96.00(12)
O5—Tb1—O4	130.13(11)	O12—Tb2—O7	127.44(10)
O9—Tb1—O4	89.80(13)	O6—Tb2—O7	85.08(10)
O11—Tb1—O1	91.88(12)	O2—Tb2—O8	79.29(9)
O5—Tb1—O1	78.21(13)	O12—Tb2—O8	74.99(11)
O9—Tb1—O1	123.64(10)	O6—Tb2—O8	125.84(12)
O4—Tb1—O1	142.94(12)	O7—Tb2—O8	52.72(11)
O11—Tb1—O3	126.78(12)	O2—Tb2—O10	124.59(10)
O5—Tb1—O3	77.38(11)	O12—Tb2—O10	77.99(11)
O9—Tb1—O3	79.08(9)	O6—Tb2—O10	95.42(11)
O4—Tb1—O3	52.89(11)	O7—Tb2—O10	137.70(11)
O1—Tb1—O3	140.67(11)	O8—Tb2—O10	138.26(12)
O11—Tb1—N1	139.28(11)	O2—Tb2—N4	146.08(12)
O5—Tb1—N1	79.45(11)	O12—Tb2—N4	79.92(12)
O9—Tb1—N1	143.99(10)	O6—Tb2—N4	138.75(12)
O4—Tb1—N1	86.07(12)	O7—Tb2—N4	78.37(12)
O1—Tb1—N1	75.57(10)	O8—Tb2—N4	70.69(11)
O3—Tb1—N1	69.99(11)	O10—Tb2—N4	73.73(10)
O11—Tb1—O2	70.88(11)	O2—Tb2—O9	74.41(9)
O5—Tb1—O2	70.18(11)	O12—Tb2—O9	72.45(11)
O9—Tb1—O2	73.31(9)	O6—Tb2—O9	71.40(12)
O4—Tb1—O2	150.30(12)	O7—Tb2—O9	156.28(11)
O1—Tb1—O2	50.87(8)	O8—Tb2—O9	141.70(11)
O3—Tb1—O2	141.35(10)	O10—Tb2—O9	50.99(9)
N1—Tb1—O2	121.91(11)	N4—Tb2—O9	121.61(11)
O11—Tb1—N2	75.67(11)	O2—Tb2—N3	145.97(13)
O5—Tb1—N2	136.34(12)	O12—Tb2—N3	135.33(11)
O9—Tb1—N2	147.26(13)	O6—Tb2—N3	74.61(12)
O4—Tb1—N2	72.04(11)	O7—Tb2—N3	72.34(11)
O1—Tb1—N2	70.98(11)	O8—Tb2—N3	113.97(11)
O3—Tb1—N2	108.34(10)	O10—Tb2—N3	67.17(12)
N1—Tb1—N2	63.61(11)	N4—Tb2—N3	64.43(13)
O2—Tb1—N2	109.55(9)	O9—Tb2—N3	103.32(10)

Table S20. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **9'**

Dy1—O7	2.308(3)	Dy2—O1	2.308(3)
Dy1—O5	2.316(3)	Dy2—O8	2.330(3)
Dy1—O9	2.324(3)	Dy2—O6	2.367(3)
Dy1—O4	2.404(4)	Dy2—O11	2.425(4)
Dy1—O2	2.448(3)	Dy2—O12	2.463(3)
Dy1—O3	2.501(3)	Dy2—O10	2.498(4)
Dy1—N1	2.541(4)	Dy2—N4	2.527(4)
Dy1—O1	2.592(4)	Dy2—O9	2.553(3)
Dy1—N2	2.602(4)	Dy2—N3	2.591(5)

O7—Dy1—O5	136.63(13)	O1—Dy2—O8	77.09(14)
O7—Dy1—O9	74.83(13)	O1—Dy2—O6	72.42(14)
O5—Dy1—O9	76.41(16)	O8—Dy2—O6	137.65(12)
O7—Dy1—O4	81.30(14)	O1—Dy2—O11	95.97(15)
O5—Dy1—O4	130.37(14)	O8—Dy2—O11	127.66(11)
O9—Dy1—O4	89.93(16)	O6—Dy2—O11	84.67(12)
O7—Dy1—O2	91.90(14)	O1—Dy2—O12	79.36(11)
O5—Dy1—O2	78.04(16)	O8—Dy2—O12	74.74(13)
O9—Dy1—O2	123.82(12)	O6—Dy2—O12	125.83(15)
O4—Dy1—O2	142.65(14)	O11—Dy2—O12	53.15(13)
O7—Dy1—O3	126.87(14)	O1—Dy2—O10	124.43(13)
O5—Dy1—O3	77.21(14)	O8—Dy2—O10	78.08(13)
O9—Dy1—O3	78.79(11)	O6—Dy2—O10	95.62(14)
O4—Dy1—O3	53.25(13)	O11—Dy2—O10	137.81(13)
O2—Dy1—O3	140.61(13)	O12—Dy2—O10	138.11(14)
O7—Dy1—N1	139.20(13)	O1—Dy2—N4	145.90(14)
O5—Dy1—N1	79.32(13)	O8—Dy2—N4	79.92(14)
O9—Dy1—N1	143.95(12)	O6—Dy2—N4	139.06(15)
O4—Dy1—N1	85.84(15)	O11—Dy2—N4	78.63(14)
O2—Dy1—N1	75.57(12)	O12—Dy2—N4	70.46(13)
O3—Dy1—N1	70.07(13)	O10—Dy2—N4	73.88(12)
O7—Dy1—O1	70.93(14)	O1—Dy2—O9	74.20(10)
O5—Dy1—O1	70.09(13)	O8—Dy2—O9	72.48(12)
O9—Dy1—O1	73.20(10)	O6—Dy2—O9	71.41(14)
O4—Dy1—O1	150.33(15)	O11—Dy2—O9	155.87(13)
O2—Dy1—O1	51.14(10)	O12—Dy2—O9	141.52(12)
O3—Dy1—O1	140.86(12)	O10—Dy2—O9	51.06(10)
N1—Dy1—O1	122.13(13)	N4—Dy2—O9	121.78(13)
O7—Dy1—N2	75.42(13)	O1—Dy2—N3	145.82(16)
O5—Dy1—N2	136.20(14)	O8—Dy2—N3	135.64(13)
O9—Dy1—N2	147.08(15)	O6—Dy2—N3	74.53(14)
O4—Dy1—N2	71.91(13)	O11—Dy2—N3	72.36(14)
O2—Dy1—N2	70.84(14)	O12—Dy2—N3	114.26(13)
O3—Dy1—N2	108.83(12)	O10—Dy2—N3	67.20(14)
N1—Dy1—N2	63.78(13)	N4—Dy2—N3	64.85(16)
O1—Dy1—N2	109.57(11)	O9—Dy2—N3	103.22(12)

Table S21. Selected bond lengths (Å) and angles (deg) for **10'**

Ho1—O7	2.261(9)	Ho2—O4	2.285(7)
Ho1—O5	2.293(9)	Ho2—O6	2.341(8)
Ho1—O12	2.327(8)	Ho2—O8	2.350(8)
Ho1—O1	2.379(10)	Ho2—O10	2.427(9)
Ho1—O3	2.398(8)	Ho2—O9	2.458(8)
Ho1—O2	2.484(7)	Ho2—O11	2.501(9)

Ho1—N1	2.502(10)	Ho2—O12	2.519(9)
Ho1—N2	2.562(10)	Ho2—N4	2.527(10)
Ho1—O4	2.599(9)	Ho2—N3	2.613(12)
O7—Ho1—O5	136.1(3)	N2—Ho1—O4	108.9(3)
O7—Ho1—O12	76.4(4)	O4—Ho2—O6	77.2(3)
O5—Ho1—O12	74.4(3)	O4—Ho2—O8	72.9(3)
O7—Ho1—O1	131.4(3)	O6—Ho2—O8	138.4(3)
O5—Ho1—O1	80.6(3)	O4—Ho2—O10	96.0(3)
O12—Ho1—O1	89.8(4)	O6—Ho2—O10	126.8(3)
O7—Ho1—O3	76.8(4)	O8—Ho2—O10	85.0(3)
O5—Ho1—O3	92.6(4)	O4—Ho2—O9	78.1(3)
O12—Ho1—O3	123.2(3)	O6—Ho2—O9	74.2(4)
O1—Ho1—O3	143.4(3)	O8—Ho2—O9	125.3(4)
O7—Ho1—O2	78.3(3)	O10—Ho2—O9	53.0(4)
O5—Ho1—O2	126.6(4)	O4—Ho2—O11	125.7(3)
O12—Ho1—O2	79.5(3)	O6—Ho2—O11	78.5(4)
O1—Ho1—O2	53.3(3)	O8—Ho2—O11	96.1(3)
O3—Ho1—O2	140.1(3)	O10—Ho2—O11	136.8(3)
O7—Ho1—N1	79.3(3)	O9—Ho2—O11	138.1(3)
O5—Ho1—N1	139.7(3)	O4—Ho2—O12	75.0(3)
O12—Ho1—N1	144.0(3)	O6—Ho2—O12	73.0(3)
O1—Ho1—N1	86.6(3)	O8—Ho2—O12	71.8(4)
O3—Ho1—N1	75.4(3)	O10—Ho2—O12	156.6(3)
O2—Ho1—N1	69.7(3)	O9—Ho2—O12	141.2(3)
O7—Ho1—N2	136.7(4)	O11—Ho2—O12	51.6(3)
O5—Ho1—N2	74.6(3)	O4—Ho2—N4	145.8(4)
O12—Ho1—N2	146.3(4)	O6—Ho2—N4	80.0(3)
O1—Ho1—N2	72.2(3)	O8—Ho2—N4	138.4(4)
O3—Ho1—N2	71.2(3)	O10—Ho2—N4	77.8(3)
O2—Ho1—N2	109.2(3)	O9—Ho2—N4	71.3(3)
N1—Ho1—N2	65.1(3)	O11—Ho2—N4	73.1(3)
O7—Ho1—O4	69.4(3)	O12—Ho2—N4	121.7(3)
O5—Ho1—O4	70.9(3)	O4—Ho2—N3	146.7(4)
O12—Ho1—O4	72.7(2)	O6—Ho2—N3	135.0(3)
O1—Ho1—O4	149.6(3)	O8—Ho2—N3	75.0(4)
O3—Ho1—O4	51.1(2)	O10—Ho2—N3	72.4(3)
O2—Ho1—O4	141.2(3)	O9—Ho2—N3	114.5(4)
N1—Ho1—O4	122.2(3)	O11—Ho2—N3	66.4(3)
N4—Ho2—N3	63.8(4)	O12—Ho2—N3	103.3(3)

Table S22. Selected IR spectra data

Complex	IR (KBr, ν/cm^{-1})
1'	3744(w), 3442(s), 3058(w), 2958(m), 2355(w), 2336(w), 1594(vs), 1407(vs), 1347(m), 1294(m), 1242(w), 906(w)
2'	3058(m), 2959(s), 2929(w), 1944(w), 1806(w), 1595(vs), 1408(vs), 1347(s), 1295(s), 1242(m), 956(w), 906(m), 803(m), 509(w), 454(w)
3'	3421(w), 3058(w), 2959(m), 2929(w), 1598(vs), 1411(vs), 1347(m), 1296(m), 1242(m), 957(w), 906(w), 510(w)
4'	3444(m), 3059(w), 3027(w), 2960(m), 2930(m), 2361(w), 1890(w), 1599(vs), 1413(s), 1348(w), 1299(w), 1241(w), 1191(w), 1033(w), 1001(w), 962(w), 919(w), 466(w)
5'	3442(w), 3060(w), 2962(m), 2931(w), 2872(w), 1601(vs), 1546(s), 1416(vs), 1298(m), 907(w), 808(w), 615(w), 549(w), 510(w)
6'	3061(w), 2962(m), 2930(m), 2872(w), 2358(w), 1603(vs), 1418(vs), 1298(w), 1244(s), 907(w), 809(vs), 614(w)
7'	3060(w), 3027(w), 2962(m), 2930(w), 2872(w), 1804(vs), 1421(vs), 1299(w), 1245(w), 1273(w), 845(m), 613(w), 569(w), 522(w)
8'	3059(w), 3025(w), 2959(m), 2360(w), 1611(vs), 1420(m), 1296(w), 1029(w), 907(w), 848(m)
9'	3444(w), 3059(w), 3025(w), 2959(m), 2357(w), 1555(vs), 1420(vs), 1297(w), 1240(w), 907(w), 848(m), 509(w),
10'	3921(w), 3675(w), 3025(w), 2959(m), 2360(m), 1645(vs), 1556(s), 1421(vs), 1297(m), 1240(m), 1029(w), 972(w), 906(w), 849(m), 580(w), 541(w), 441(w)

