

Supporting Information

A systematic study of halide-template effects in the assembly of lanthanide hydroxide complexes with histidine

Weiming Huang,^{a,+} Zhonghao Zhang,^{b,+} Yinglan Wu,^{b,+} Wanmin Chen,^a David A. Rotsch,^c Louis Messerle,^{c*} and Zhiping Zheng^{a,b*}

a. Department of Chemistry and Shenzhen Grubbs Institute, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China.

b. Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Arizona, Tucson, AZ 85721, USA

c. Department of Chemistry, The University of Iowa, Iowa City, IA 52242, USA

Contents

Table S1 Purity and source of chemical reagents used in this work.....	S3
Table S2 Crystal data as well as details of data collection and refinement for 1 to 5	S4
Table S3 Crystal data as well as details of data collection and refinement for 6 to 10	S5
Fig. S1 The monodantate coordination mode of deprotonated histidine ligand in 8 as representative.....	S6
Fig. S2 One of the deprotonated histidine ligands in 3 (front view, a) shows a unique coordination mode (b) not observed in the other clusters in this work.	S6
Fig. S3 A fragment of two corner-shared $[\text{Er}_4(\mu_3\text{-OH})_4]^{8+}$ units in 10 with the showing of a $\mu_3\text{-}\eta^1, \eta^2, \eta^1$ mode of the side-capping histidinate ligand.	S7
Table S4 Selective interatomic distances (Å) and angles (deg) for 1-3 and 6	S7
Table S5 Selected distances for 1	S8
Table S6 Selected distances for 2	S9
Table S7 Selected distances for 3	S10
Table S8 Selected distances for 4	S11
Table S9 Selected distances for 5	S12
Table S10 Selected distances for 6	S13
Table S11 Selected distances for 7	S14
Table S12 Selected distances for 8	S15
Table S13 Selected distances for 9	S16
Table S14 Selected distances for 10	S17
Fig. S4 The χ_M^{-1} vs T and the Curie-Weiss linear fit for 6	S17
Fig. S5 The temperature dependence of in-phase (χ') and out-of-phase (χ'') ac susceptibility data in 0 Oe and 1000 Oe dc field for 6	S18
Fig. S6 Field-dependent experimental magnetization plots for 6 at the indicated temperatures.	S19

Table S1 Purity and source of chemical reagents used in this work.

Reagent	Purity	Source
Nd ₂ O ₃	AR, 99.99%	HWRK CHEM
Gd ₂ O ₃	AR, 99.99%	HWRK CHEM
Er ₂ O ₃	AR, 99.99%	HWRK CHEM
HClO ₄	AR, 70.0-72.0%	Aladdin
L-Histidine	AR, 99%	9 Ding Chemistry
NaCl	AR, 99.5%	Guangzhou Jinhua Chemical Reagent
NaBr	AR, 99%	General-Reagent
NaI	AR, 99%	Jiangsu Aikon CHEM
NaOH	AR, 96%	Damao Chemical Reagent Factory

Table S2 Crystal data as well as details of data collection and refinement for **1** to **5**

	1	2	3	4	5
Formula	C ₉₀ H ₁₆₃ Cl ₁₅ N ₄₅ Nd ₁₅ O ₁₀₆	C ₈₄ H ₁₆₀ Br ₄ Cl ₁₁ N ₄₂ Nd ₁₅ O ₁₁₀	C ₉₀ H ₁₆₂ Cl ₁₂ I _{1.5} N ₄₅ Nd ₁₅ O _{113.5}	C ₈₄ H ₁₅₂ Cl ₁₅ Gd ₁₅ N ₄₂ O ₉₃	C ₉₀ H ₁₅₇ Br ₅ Cl ₁₀ Gd ₁₅ N ₄₅ O ₁₀₆
Formula Weight	6266.99	6391.72	6469.99	6128.97	6678.4
Temperature(K)	99.98	99.98	100.02	99.99	99.99
Crystal System	monoclinic	monoclinic	monoclinic	triclinic	monoclinic
Space Group	<i>P</i> 2 ₁	<i>P</i> 2 ₁	<i>P</i> 2 ₁	<i>P</i> 1	<i>C</i> 2
<i>a</i> (Å)	18.5339(14)	18.6802(13)	17.3647(18)	17.5188(10)	20.5426(8)
<i>b</i> (Å)	31.828(3)	31.9692(18)	31.613(3)	18.4535(9)	30.5938(12)
<i>c</i> (Å)	19.0479(16)	19.1153(12)	18.823(2)	18.5247(9)	33.6496(16)
α (°)	90	90	90	66.794(2)	90
β (°)	106.292(2)	106.950(3)	91.431(4)	78.846(2)	98.4455(13)
γ (°)	90	90	90	88.209(2)	90
Volume(Å ³)	10785.2(15)	10919.6(12)	10329.9(19)	5393.5(5)	20918.6(15)
<i>Z</i>	2	2	2	1	4
<i>D</i> _{calcd} (g/cm ³)	1.93	1.944	2.08	1.887	2.121
μ (mm ⁻¹)	3.823	4.458	4.181	4.813	5.865
<i>F</i> (000)	6042	6130	6217	2909	12660
Crystal size(mm ³)	0.24 × 0.11 × 0.08	0.16 × 0.12 × 0.08	0.18 × 0.12 × 0.1	0.24 × 0.22 × 0.07	0.15 × 0.1 × 0.08
Radiation	MoK α	MoK α	MoK α	MoK α	MoK α
Reflections Collected	288440	182775	185873	181651	134746
Independent Ref.	49518	50179	47449	49411	47860
(<i>R</i> _{int})	[<i>R</i> _{int} = 0.0258]	[<i>R</i> _{int} = 0.0678]	[<i>R</i> _{int} = 0.0448]	[<i>R</i> _{int} = 0.0265]	[<i>R</i> _{int} = 0.0613]
Final <i>R</i> indexes [<i>I</i> ≥ 2σ(<i>I</i>)] ^{<i>a, b</i>}	<i>R</i> ₁ = 0.0341, <i>wR</i> ₂ = 0.0971	<i>R</i> ₁ = 0.0458, <i>wR</i> ₂ = 0.1228	<i>R</i> ₁ = 0.0364, <i>wR</i> ₂ = 0.1019	<i>R</i> ₁ = 0.0337, <i>wR</i> ₂ = 0.0948	<i>R</i> ₁ = 0.0578, <i>wR</i> ₂ = 0.1329
Final <i>R</i> indexes [all data] ^{<i>a, b</i>}	<i>R</i> ₁ = 0.0348, <i>wR</i> ₂ = 0.0977	<i>R</i> ₁ = 0.0521, <i>wR</i> ₂ = 0.1281	<i>R</i> ₁ = 0.0369, <i>wR</i> ₂ = 0.1023	<i>R</i> ₁ = 0.0348, <i>wR</i> ₂ = 0.0960	<i>R</i> ₁ = 0.0697, <i>wR</i> ₂ = 0.1389
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	1.028	1.025	1.051	1.026	1.018
Flack parameter	0.017(10)	0.069(13)	0.061(11)	0.049(9)	0.050(16)
CCDC number	2015727	2015728	2015729	2015730	2015731

$${}^a R_1 = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|} \quad {}^b wR_2 = \left\{ \frac{\sum [w(F_o^2 - F_c^2)^2]}{\sum [w(F_o^2)^2]} \right\}^{1/2}$$

Table S3 Crystal data as well as details of data collection and refinement for **6** to **10**

	6	7	8	9	10
Formula	C ₄₈ H ₁₂₀ Cl ₁₀ Gd ₁₂ I ₂ N ₂₄ O ₁₁₀	C ₈₄ H ₁₅₄ Cl ₁₀ Gd ₁₅ I _{4.5} N ₄₂ O _{100.5}	C ₈₄ H ₁₄₈ Cl ₁₅ Er ₁₅ N ₄₂ O ₁₀₇	C ₈₄ H ₁₄₈ Br ₅ Cl ₁₀ Er ₁₅ N ₄₂ O ₁₁₀	C ₄₈ H ₁₂₀ Cl ₁₀ Er ₁₂ I ₂ N ₂₄ O ₁₀₆
Formula Weight	5288.97	6644.78	6499.08	6769.38	5345.09
Temperature(K)	100.02	99.99	100.02	99.99	99.99
Crystal System	tetragonal	orthorhombic	monoclinic	orthorhombic	tetragonal
Space Group	<i>P</i> 4 ₂ ₁ 2	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	<i>P</i> 2 ₁	<i>C</i> 222 ₁	<i>P</i> 4 ₂ ₁ 2
<i>a</i> (Å)	21.9575(12)	19.544(3)	17.242(2)	18.1758(5)	21.9494(8)
<i>b</i> (Å)	21.9575(12)	31.669(5)	35.945(4)	29.6838(9)	21.9494(8)
<i>c</i> (Å)	18.8536(9)	34.405(5)	17.279(2)	36.2340(11)	18.7742(6)
<i>α</i> (°)	90	90	90	90	90
<i>β</i> (°)	90	90	116.095(4)	90	90
<i>γ</i> (°)	90	90	90	90	90
Volume(Å ³)	9089.9(11)	21294(5)	9617.4(19)	19549.2(10)	9045.0(7)
<i>Z</i>	2	4	2	4	2
<i>D</i> _{calcd} (g/cm ³)	1.932	2.073	2.244	2.3	1.963
<i>μ</i> (mm ⁻¹)	4.896	5.47	6.78	7.627	6.085
<i>F</i> (000)	5000	12498	6154	12764	5032
Crystal size(mm ³)	0.08 × 0.06 × 0.04	0.18 × 0.1 × 0.08	0.17 × 0.13 × 0.1	0.17 × 0.14 × 0.1	0.15 × 0.12 × 0.1
Radiation	MoK _α	MoK _α	MoK _α	MoK _α	MoK _α
Reflections Collected	72573	326979	267523	132009	61367
Independent Ref.	9310	43700	44348	22479	9277
(<i>R</i> _{int})	[<i>R</i> _{int} = 0.0661]	[<i>R</i> _{int} = 0.0812]	[<i>R</i> _{int} = 0.0680]	[<i>R</i> _{int} = 0.0463]	[<i>R</i> _{int} = 0.0444]
Final <i>R</i> indexes	<i>R</i> ₁ = 0.0421,	<i>R</i> ₁ = 0.0761,	<i>R</i> ₁ = 0.0656,	<i>R</i> ₁ = 0.0379,	<i>R</i> ₁ = 0.0353,
[<i>I</i> ≥ 2σ(<i>I</i>)] ^{<i>a, b</i>}	<i>wR</i> ₂ = 0.1149	<i>wR</i> ₂ = 0.1992	<i>wR</i> ₂ = 0.1554	<i>wR</i> ₂ = 0.1015	<i>wR</i> ₂ = 0.0990
Final <i>R</i> indexes	<i>R</i> ₁ = 0.0475,	<i>R</i> ₁ = 0.0908,	<i>R</i> ₁ = 0.0692,	<i>R</i> ₁ = 0.0417,	<i>R</i> ₁ = 0.0412,
[all data] ^{<i>a, b</i>}	<i>wR</i> ₂ = 0.1203	<i>wR</i> ₂ = 0.2114	<i>wR</i> ₂ = 0.1571	<i>wR</i> ₂ = 0.1044	<i>wR</i> ₂ = 0.1035
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	1.046	1.016	1.134	1.058	1.05
Flack parameter	0.021(8)	0.11(2)	0.099(17)	0.033(14)	0.015(6)
CCDC number	2015732	2015733	2015734	2015735	2015736

$${}^a R_1 = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|} \quad {}^b wR_2 = \left\{ \frac{\sum [w(F_o^2 - F_c^2)^2]}{\sum [w(F_o^2)]} \right\}^{1/2}$$

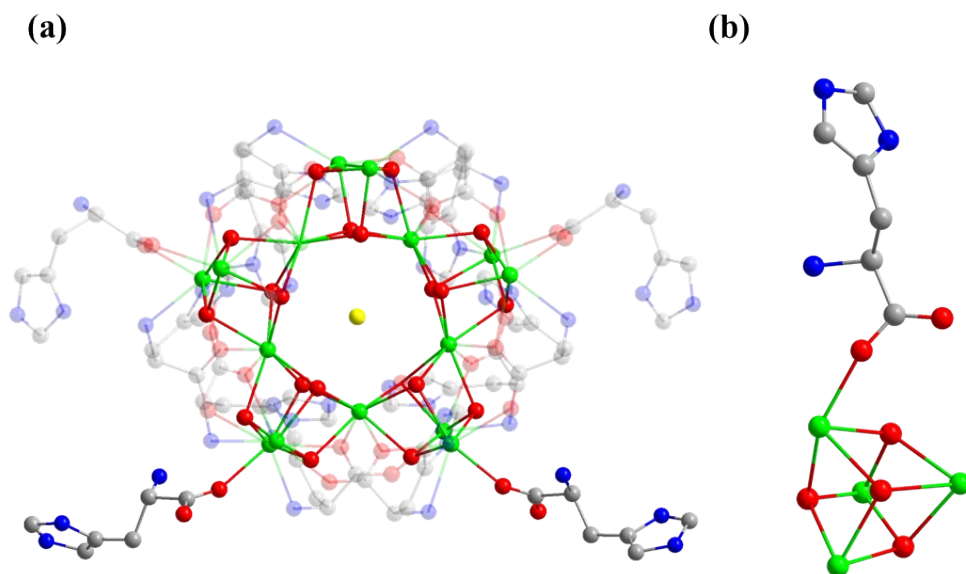


Fig. S1 The monodantate coordination mode of deprotonated histidine ligand in **8** as representative. Color legends: C, gray; N, blue; O, red; Nd, green; Cl, yellow (H atoms are discarded for clarity).

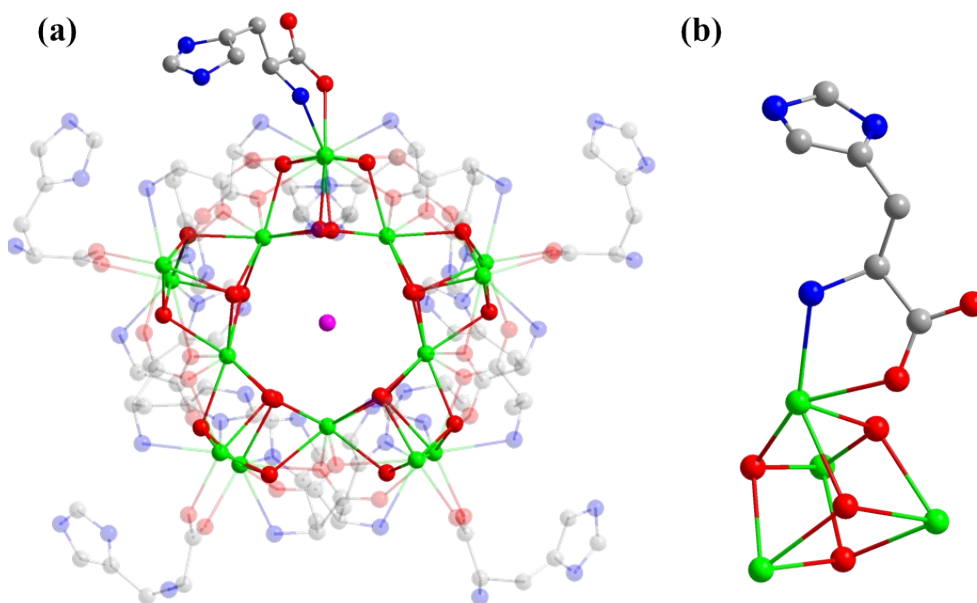


Fig. S2 One of the deprotonated histidine ligands in **3** (front view, a) shows a unique coordination mode (b) not observed in the other clusters in this work. Color legends: C, grey; N, blue; O, red; Er, green; I, purple (H atoms are discarded for clarity).

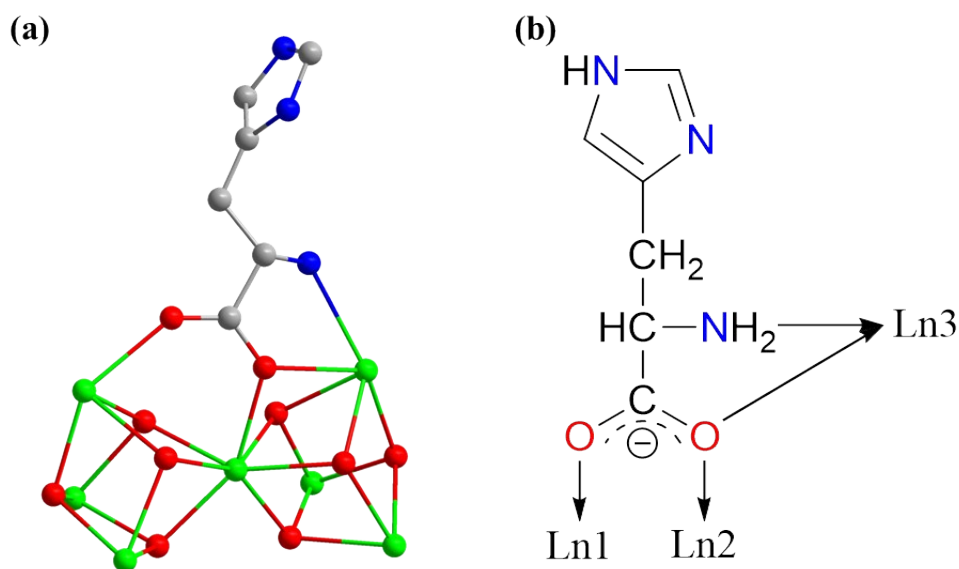


Fig. S3 A fragment of two corner-shared $[\text{Er}_4(\mu_3\text{-OH})_4]^{8+}$ units in **10** with the showing of a $\mu_3:\eta^1, \eta^2, \eta^1$ mode of the side-capping histidinate ligand. Color legends: C, grey; N, blue; O, red; Er, green (H atoms are discarded for clarity).

Table S4 Selective interatomic distances (\AA) and angles (deg) for **1-3** and **6**

Complex	1	2	3	6
Ln-O(μ_3 -OH)	2.403(6)-2.516(5)	2.418(7)-2.504(9)	2.423(6)-2.509(7)	2.303(9)-2.406(8)
Average	2.456	2.459	2.466	2.347
Ln-O (carboxylato)	2.402(7)-2.614(7)	2.340(2)-2.620(8)	2.409(9)-2.625(8)	2.358(8)-2.520(9)
Average	2.512	2.514	2.512	2.440
Ln-N	2.562(12)-2.657(8)	2.576(15)-2.660(12)	2.660(10)-2.528(15)	2.554(12)-2.566(10)
Average	2.614	2.613	2.615	2.560
Ln-O(μ_3 -OH)-Ln	99.9(2)-112.0(2)	98.4(3)-111.8(4)	98.4(2)-112.5(3)	97.1(3)-110.0(3)
Average	105.8	106.0	106.0	105.0
O(μ_3 -OH)-Ln-O(μ_3 -OH)	66.7(2)-75.8(2)	66.4(3)-74.8(3)	65.9(3)-75.3(2)	68.8(3)-76.7(3)
Average	71.1	70.8	70.8	72.2

Table S5 Selected distances for **1**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Nd1	O1	2.521(6)	Nd6	O6Q	2.467(6)	Nd11	O8	2.480(7)
Nd1	O1Q	2.426(6)	Nd6	O7Q	2.476(6)	Nd11	O9	2.553(6)
Nd1	O2Q	2.470(5)	Nd6	O8Q	2.451(6)	Nd11	O13Q	2.428(6)
Nd1	O3Q	2.436(6)	Nd6	O18	2.483(7)	Nd11	O15Q	2.431(6)
Nd1	O11	2.535(6)	Nd6	O19	2.589(6)	Nd11	O16Q	2.421(6)
Nd1	O17Q	2.462(5)	Nd6	O24	2.467(8)	Nd11	O27	2.407(7)
Nd1	O18Q	2.403(6)	Nd6	N28	2.620(10)	Nd11	N13	2.586(8)
Nd1	O20Q	2.475(6)	Nd6	N29	2.645(10)	Nd11	N14	2.622(9)
Nd2	O1Q	2.434(6)	Nd7	O5	2.497(6)	Nd12	O14	2.489(7)
Nd2	O2	2.490(7)	Nd7	O5Q	2.478(6)	Nd12	O14Q	2.474(6)
Nd2	O3	2.545(6)	Nd7	O6Q	2.412(6)	Nd12	O15	2.590(6)
Nd2	O3Q	2.439(6)	Nd7	O8Q	2.491(6)	Nd12	O15Q	2.468(6)
Nd2	O4Q	2.457(6)	Nd7	O9Q	2.431(6)	Nd12	O16Q	2.452(6)
Nd2	O21	2.402(7)	Nd7	O10Q	2.468(6)	Nd12	O28	2.499(9)
Nd2	N4	2.614(11)	Nd7	O11Q	2.494(6)	Nd12	N22	2.640(10)
Nd2	N5	2.562(12)	Nd7	O17	2.490(6)	Nd12	N23	2.611(10)
Nd3	O2Q	2.454(5)	Nd8	O6	2.501(9)	Nd13	O9	2.562(6)
Nd3	O3Q	2.466(6)	Nd8	O7	2.614(7)	Nd13	O13	2.512(6)
Nd3	O4Q	2.446(6)	Nd8	O9Q	2.463(6)	Nd13	O13Q	2.459(6)
Nd3	O11	2.591(6)	Nd8	O11Q	2.456(7)	Nd13	O14Q	2.420(6)
Nd3	O20	2.462(7)	Nd8	O12Q	2.469(7)	Nd13	O16Q	2.509(6)
Nd3	O22	2.519(7)	Nd8	O25	2.427(9)	Nd13	O17Q	2.427(5)
Nd3	N16	2.599(8)	Nd8	N10	2.645(10)	Nd13	O18Q	2.480(6)
Nd3	N17	2.657(8)	Nd8	N11	2.603(13)	Nd13	O19Q	2.466(7)
Nd4	O1Q	2.463(6)	Nd9	O10Q	2.472(5)	Nd14	O1	2.581(6)
Nd4	O2Q	2.452(6)	Nd9	O11Q	2.465(7)	Nd14	O10	2.470(7)
Nd4	O3	2.573(6)	Nd9	O12Q	2.451(7)	Nd14	O17Q	2.465(5)
Nd4	O4Q	2.516(5)	Nd9	O16	2.487(8)	Nd14	O19Q	2.450(7)
Nd4	O5Q	2.422(6)	Nd9	O17	2.578(6)	Nd14	O20Q	2.452(6)
Nd4	O6Q	2.487(6)	Nd9	O26	2.463(9)	Nd14	O29	2.478(8)
Nd4	O7Q	2.445(6)	Nd9	N25	2.648(10)	Nd14	N1	2.632(9)
Nd4	O19	2.515(6)	Nd9	N26	2.597(10)	Nd14	N2	2.605(9)
Nd5	O4	2.510(8)	Nd10	O7	2.550(6)	Nd15	O12	2.505(6)
Nd5	O5	2.572(7)	Nd10	O9Q	2.463(6)	Nd15	O13	2.594(6)
Nd5	O5Q	2.463(6)	Nd10	O10Q	2.417(6)	Nd15	O18Q	2.445(6)
Nd5	O7Q	2.461(7)	Nd10	O12Q	2.454(6)	Nd15	O19Q	2.443(6)
Nd5	O8Q	2.451(6)	Nd10	O13Q	2.410(6)	Nd15	O20Q	2.457(6)
Nd5	O23	2.433(7)	Nd10	O14Q	2.474(6)	Nd15	O30	2.407(8)
Nd5	N7	2.639(10)	Nd10	O15	2.539(6)	Nd15	N19	2.592(9)
Nd5	N8	2.576(10)	Nd10	O15Q	2.461(6)	Nd15	N20	2.581(9)

Table S6 Selected distances for **2**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Nd13	O13	2.538(9)	Nd1	O2Q	2.494(8)	Nd3	O2Q	2.442(8)
Nd13	O18Q	2.471(8)	Nd1	O18Q	2.450(8)	Nd3	O11	2.565(9)
Nd13	O9	2.534(8)	Nd1	O1Q	2.434(9)	Nd3	O20	2.486(9)
Nd13	O14Q	2.420(7)	Nd1	O11	2.507(8)	Nd3	O22	2.481(10)
Nd13	O19Q	2.445(8)	Nd1	O20Q	2.490(8)	Nd3	O4Q	2.460(10)
Nd13	O13Q	2.487(7)	Nd1	O1	2.559(8)	Nd3	O3Q	2.468(9)
Nd13	O16Q	2.484(8)	Nd1	O3Q	2.458(8)	Nd3	N18	2.618(14)
Nd13	O17Q	2.436(8)	Nd1	O17Q	2.475(8)	Nd3	N17	2.638(14)
Nd15	O13	2.577(8)	Nd14	O29	2.423(10)	Nd2	O1Q	2.453(8)
Nd15	O18Q	2.455(8)	Nd14	O10	2.494(9)	Nd2	O2	2.496(11)
Nd15	O12	2.489(10)	Nd14	O20Q	2.454(9)	Nd2	O21	2.437(10)
Nd15	O30	2.476(10)	Nd14	O1	2.587(8)	Nd2	O3	2.585(10)
Nd15	O20Q	2.456(9)	Nd14	O19Q	2.447(8)	Nd2	O4Q	2.452(9)
Nd15	O19Q	2.466(8)	Nd14	O17Q	2.451(7)	Nd2	O3Q	2.445(10)
Nd15	N20	2.654(11)	Nd14	N3	2.618(12)	Nd2	N6	2.608(13)
Nd15	N21	2.626(12)	Nd14	N2	2.576(15)	Nd2	N5	2.582(15)
Nd10	O15	2.518(7)	Nd11	O27	2.446(10)	Nd9	O17	2.607(9)
Nd10	O7	2.555(9)	Nd11	O9	2.580(8)	Nd9	O10Q	2.461(7)
Nd10	O15Q	2.453(8)	Nd11	O15Q	2.471(8)	Nd9	O12Q	2.462(8)
Nd10	O14Q	2.475(8)	Nd11	O8	2.482(8)	Nd9	O16	2.495(9)
Nd10	O10Q	2.434(7)	Nd11	O13Q	2.441(8)	Nd9	O26	2.34(2)
Nd10	O13Q	2.418(7)	Nd11	O16Q	2.472(8)	Nd9	O11Q	2.462(9)
Nd10	O9Q	2.474(7)	Nd11	N15	2.618(11)	Nd9	N26	2.585(13)
Nd10	O12Q	2.490(8)	Nd11	N14	2.635(13)	Nd9	N27	2.634(12)
Nd12	O14	2.495(8)	Nd7	O5	2.531(8)	Nd5	O23	2.49(2)
Nd12	O15	2.620(8)	Nd7	O17	2.530(8)	Nd5	O5	2.599(9)
Nd12	O15Q	2.453(8)	Nd7	O10Q	2.475(7)	Nd5	O7Q	2.439(10)
Nd12	O14Q	2.458(7)	Nd7	O9Q	2.427(8)	Nd5	O4	2.484(13)
Nd12	O28	2.430(11)	Nd7	O8Q	2.456(8)	Nd5	O8Q	2.469(9)
Nd12	O16Q	2.435(8)	Nd7	O11Q	2.470(9)	Nd5	O5Q	2.457(8)
Nd12	N23	2.608(11)	Nd7	O6Q	2.435(9)	Nd5	N9	2.639(15)
Nd12	N24	2.582(11)	Nd7	O5Q	2.473(8)	Nd5	N8	2.579(16)
Nd4	O2Q	2.437(9)	Nd8	O25	2.54(3)	Nd6	O24	2.42(2)
Nd4	O19	2.503(8)	Nd8	O6	2.488(9)	Nd6	O19	2.556(9)
Nd4	O1Q	2.483(8)	Nd8	O7	2.569(8)	Nd6	O18	2.517(10)
Nd4	O3	2.512(9)	Nd8	O9Q	2.435(8)	Nd6	O7Q	2.477(10)
Nd4	O7Q	2.504(9)	Nd8	O12Q	2.431(8)	Nd6	O8Q	2.477(9)
Nd4	O6Q	2.474(8)	Nd8	O11Q	2.444(9)	Nd6	O6Q	2.450(8)
Nd4	O4Q	2.503(9)	Nd8	N12	2.593(10)	Nd6	N29	2.585(13)
Nd4	O5Q	2.447(9)	Nd8	N11	2.617(12)	Nd6	N30	2.660(12)

Table S7 Selected distances for **3**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Nd1	O1	2.479(7)	Nd6	O6Q	2.446(6)	Nd11	O8	2.494(9)
Nd1	O1Q	2.451(7)	Nd6	O7Q	2.463(7)	Nd11	O9	2.533(9)
Nd1	O2Q	2.493(7)	Nd6	O8Q	2.453(7)	Nd11	O13Q	2.457(7)
Nd1	O3Q	2.474(7)	Nd6	O18	2.490(8)	Nd11	O15Q	2.446(7)
Nd1	O11	2.481(7)	Nd6	O19	2.582(7)	Nd11	O16Q	2.468(7)
Nd1	O17Q	2.509(7)	Nd6	O24	2.409(9)	Nd11	O27	2.423(8)
Nd1	O18Q	2.438(7)	Nd6	N29	2.598(10)	Nd11	N14	2.598(15)
Nd1	O20Q	2.462(7)	Nd6	N30	2.613(10)	Nd11	N15	2.644(11)
Nd2	O1Q	2.463(7)	Nd7	O5	2.540(7)	Nd12	O14	2.496(9)
Nd2	O2	2.519(8)	Nd7	O5Q	2.489(7)	Nd12	O14Q	2.482(7)
Nd2	O3	2.550(7)	Nd7	O6Q	2.444(6)	Nd12	O15	2.576(7)
Nd2	O3Q	2.449(7)	Nd7	O8Q	2.440(6)	Nd12	O15Q	2.470(7)
Nd2	O4Q	2.493(7)	Nd7	O9Q	2.434(7)	Nd12	O16Q	2.460(8)
Nd2	O21	2.440(8)	Nd7	O10Q	2.502(6)	Nd12	O28	2.476(8)
Nd2	N5	2.636(9)	Nd7	O11Q	2.432(7)	Nd12	N23	2.647(9)
Nd2	N6	2.629(9)	Nd7	O17	2.497(6)	Nd12	N24	2.599(10)
Nd3	O2Q	2.478(7)	Nd8	O6	2.517(7)	Nd13	O9	2.525(7)
Nd3	O3Q	2.491(7)	Nd8	O7	2.625(8)	Nd13	O13	2.471(7)
Nd3	O4Q	2.449(7)	Nd8	O9Q	2.449(7)	Nd13	O13Q	2.492(7)
Nd3	O11	2.586(7)	Nd8	O11Q	2.450(7)	Nd13	O14Q	2.447(7)
Nd3	O20	2.501(8)	Nd8	O12Q	2.467(7)	Nd13	O16Q	2.472(7)
Nd3	O22	2.460(8)	Nd8	O25	2.439(8)	Nd13	O17Q	2.423(7)
Nd3	N17	2.647(10)	Nd8	N11	2.528(15)	Nd13	O18Q	2.503(7)
Nd3	N18	2.614(10)	Nd8	N12	2.660(10)	Nd13	O19Q	2.477(8)
Nd4	O1Q	2.493(7)	Nd9	O10Q	2.467(7)	Nd14	O1	2.546(7)
Nd4	O2Q	2.448(7)	Nd9	O11Q	2.462(7)	Nd14	O10	2.500(10)
Nd4	O3	2.490(7)	Nd9	O12Q	2.496(7)	Nd14	O17Q	2.468(7)
Nd4	O4Q	2.452(6)	Nd9	O16	2.478(8)	Nd14	O19Q	2.450(8)
Nd4	O5Q	2.453(7)	Nd9	O17	2.617(7)	Nd14	O20Q	2.466(7)
Nd4	O6Q	2.494(7)	Nd9	O26	2.451(9)	Nd14	N2	2.606(10)
Nd4	O7Q	2.486(6)	Nd9	N26	2.610(10)	Nd14	N3	2.629(11)
Nd4	O19	2.495(7)	Nd9	N27	2.613(9)	Nd15	O12	2.519(8)
Nd5	O4	2.497(7)	Nd10	O7	2.546(8)	Nd15	O13	2.592(8)
Nd5	O5	2.611(7)	Nd10	O9Q	2.491(6)	Nd15	O18Q	2.491(7)
Nd5	O5Q	2.464(6)	Nd10	O10Q	2.423(6)	Nd15	O19Q	2.494(8)
Nd5	O7Q	2.451(7)	Nd10	O12Q	2.462(7)	Nd15	O20Q	2.482(8)
Nd5	O8Q	2.456(6)	Nd10	O13Q	2.455(7)	Nd15	O29	2.486(13)
Nd5	O23	2.519(9)	Nd10	O14Q	2.482(7)	Nd15	N20	2.596(13)
Nd5	N8	2.653(9)	Nd10	O15	2.494(7)	Nd15	N21	2.620(10)
Nd5	N9	2.590(9)	Nd10	O15Q	2.453(7)	Nd15	N45	2.580(15)

Table S8 Selected distances for **4**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Gd1	O2Q	2.405(6)	Gd13	O9	2.474(8)	Gd5	O5	2.580(7)
Gd1	O1	2.430(7)	Gd13	O19Q	2.411(7)	Gd5	O8Q	2.369(5)
Gd1	O1Q	2.393(6)	Gd14	O1	2.590(9)	Gd5	O7Q	2.394(7)
Gd1	O3Q	2.436(7)	Gd14	O17Q	2.502(8)	Gd5	O5Q	2.421(6)
Gd1	O11	2.544(8)	Gd14	O10	2.549(13)	Gd5	O4	2.429(7)
Gd1	O17Q	2.405(7)	Gd14	O20Q	2.275(11)	Gd5	N9	2.555(9)
Gd1	O18Q	2.354(6)	Gd15	O13	2.459(8)	Gd5	N8	2.552(10)
Gd1	O20Q	2.394(7)	Gd15	O18Q	2.352(7)	Gd5	O23	2.447(8)
Gd10	O15	2.433(6)	Gd15	O19Q	2.455(9)	Gd6	O7Q	2.386(6)
Gd10	O10Q	2.354(5)	Gd15	O12	2.433(10)	Gd6	O6Q	2.374(6)
Gd10	O14Q	2.389(5)	Gd15	N26	2.452(16)	Gd6	O18	2.446(6)
Gd10	O12Q	2.446(6)	Gd15	N27	2.525(13)	Gd6	O24	2.340(8)
Gd10	O7	2.554(6)	Gd15	O20Q	2.459(9)	Gd6	N20	2.510(10)
Gd10	O9Q	2.404(6)	Gd2	Gd3	3.9097(7)	Gd6	N21	2.537(9)
Gd10	O13Q	2.380(6)	Gd2	O3	2.546(6)	Gd7	O5	2.515(6)
Gd10	O15Q	2.386(6)	Gd2	O1Q	2.427(5)	Gd7	O11Q	2.365(6)
Gd11	O13Q	2.366(6)	Gd2	O4Q	2.396(6)	Gd7	O17	2.505(6)
Gd11	O15Q	2.371(7)	Gd2	O3Q	2.428(7)	Gd7	O8Q	2.381(6)
Gd11	O16Q	2.380(7)	Gd2	O2	2.470(8)	Gd7	O10Q	2.406(5)
Gd11	O9	2.477(8)	Gd2	O21	2.443(8)	Gd7	O9Q	2.370(6)
Gd11	O27	2.311(8)	Gd2	N5	2.573(9)	Gd7	O5Q	2.417(5)
Gd11	O8	2.476(9)	Gd2	N6	2.568(9)	Gd7	O6Q	2.375(6)
Gd11	N15	2.546(10)	Gd3	O2Q	2.353(6)	Gd8	O11Q	2.413(7)
Gd11	N14	2.521(11)	Gd3	O4Q	2.387(6)	Gd8	O12Q	2.369(6)
Gd12	O15	2.530(6)	Gd3	O3Q	2.360(8)	Gd8	O7	2.513(8)
Gd12	O14Q	2.442(5)	Gd3	O11	2.475(8)	Gd8	O9Q	2.360(6)
Gd12	O15Q	2.409(7)	Gd3	O20	2.459(9)	Gd8	O6	2.418(7)
Gd12	O14	2.457(8)	Gd3	O22	2.348(7)	Gd8	O25	2.320(8)
Gd12	O16Q	2.412(7)	Gd3	N23	2.536(11)	Gd8	N12	2.556(11)
Gd12	N29	2.570(9)	Gd3	N24	2.560(10)	Gd8	N11	2.539(11)
Gd12	O28	2.491(8)	Gd4	O19	2.513(7)	Gd9	O11Q	2.383(6)
Gd12	N30	2.547(9)	Gd4	O7Q	2.432(6)	Gd9	O17	2.573(6)
Gd13	O14Q	2.391(6)	Gd4	O3	2.466(6)	Gd9	O10Q	2.428(5)
Gd13	O13Q	2.391(6)	Gd4	O2Q	2.376(6)	Gd9	O12Q	2.424(6)
Gd13	O13	2.441(7)	Gd4	O5Q	2.345(6)	Gd9	O16	2.447(6)
Gd13	O17Q	2.354(7)	Gd4	O6Q	2.411(6)	Gd9	N17	2.576(8)
Gd13	O16Q	2.450(7)	Gd4	O1Q	2.396(6)	Gd9	N18	2.514(8)
Gd13	O18Q	2.405(7)	Gd4	O4Q	2.376(6)	Gd9	O26	2.514(8)

Table S9 Selected distances for **5**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Gd10	O9Q	2.425(12)	Gd1	O3Q	2.475(12)	Gd12	O15Q	2.401(14)
Gd10	O15Q	2.441(13)	Gd1	O2Q	2.426(11)	Gd12	O16Q	2.418(12)
Gd10	O7	2.459(13)	Gd1	O18Q	2.370(11)	Gd12	O15	2.517(13)
Gd10	O12Q	2.426(12)	Gd1	O11	2.532(12)	Gd12	O14Q	2.389(11)
Gd10	O15	2.444(13)	Gd1	O20Q	2.401(11)	Gd12	O14	2.430(14)
Gd10	O14Q	2.409(13)	Gd1	O1Q	2.348(12)	Gd12	O28	2.304(16)
Gd10	O13Q	2.332(13)	Gd1	O17Q	2.398(12)	Gd12	N23	2.58(2)
Gd10	O10Q	2.373(12)	Gd1	O1	2.407(14)	Gd12	N22	2.52(2)
Gd6	O7Q	2.366(12)	Gd15	O18Q	2.355(11)	Gd3	O3Q	2.361(12)
Gd6	O18	2.416(12)	Gd15	O20Q	2.374(12)	Gd3	O2Q	2.347(12)
Gd6	O6Q	2.425(11)	Gd15	O19Q	2.379(12)	Gd3	O11	2.510(13)
Gd6	O8Q	2.414(12)	Gd15	O13	2.484(13)	Gd3	O20	2.407(13)
Gd6	O24	2.447(12)	Gd15	O30	2.331(13)	Gd3	O22	2.316(13)
Gd6	O19	2.556(13)	Gd15	O12	2.464(13)	Gd3	O4Q	2.415(12)
Gd6	N28	2.561(16)	Gd15	N19	2.541(16)	Gd3	N16	2.551(17)
Gd6	N29	2.581(18)	Gd15	N20	2.481(19)	Gd3	N17	2.519(19)
Gd9	O17	2.546(12)	Gd7	O5Q	2.438(12)	Gd14	O20Q	2.389(12)
Gd9	O12Q	2.438(13)	Gd7	O9Q	2.374(12)	Gd14	O19Q	2.404(12)
Gd9	O11Q	2.386(13)	Gd7	O5	2.525(12)	Gd14	O17Q	2.452(12)
Gd9	O10Q	2.436(13)	Gd7	O17	2.412(12)	Gd14	O1	2.522(13)
Gd9	O16	2.446(13)	Gd7	O6Q	2.378(12)	Gd14	O29	2.497(14)
Gd9	O26	2.374(15)	Gd7	O8Q	2.445(11)	Gd14	O10	2.443(14)
Gd9	N26	2.56(2)	Gd7	O11Q	2.409(13)	Gd14	N1	2.571(16)
Gd9	N25	2.537(17)	Gd7	O10Q	2.420(12)	Gd14	N2	2.601(18)
Gd4	O7Q	2.348(12)	Gd5	O7Q	2.385(12)	Gd8	O9Q	2.356(12)
Gd4	O5Q	2.378(11)	Gd5	O5Q	2.329(11)	Gd8	O7	2.525(13)
Gd4	O2Q	2.358(11)	Gd5	O23	2.327(12)	Gd8	O12Q	2.395(13)
Gd4	O1Q	2.432(11)	Gd5	O5	2.500(13)	Gd8	O11Q	2.405(14)
Gd4	O3	2.508(13)	Gd5	O8Q	2.365(12)	Gd8	O6	2.494(15)
Gd4	O6Q	2.420(11)	Gd5	O4	2.404(13)	Gd8	O25	2.370(16)
Gd4	O4Q	2.359(12)	Gd5	N7	2.561(17)	Gd8	N10	2.549(17)
Gd4	O19	2.530(12)	Gd5	N8	2.517(18)	Gd8	N11	2.54(3)
Gd13	O18Q	2.447(11)	Gd2	O3Q	2.408(12)	Gd11	O15Q	2.380(14)
Gd13	O19Q	2.475(11)	Gd2	O1Q	2.411(13)	Gd11	O16Q	2.412(13)
Gd13	O16Q	2.394(12)	Gd2	O3	2.597(13)	Gd11	O13Q	2.370(12)
Gd13	O13	2.482(12)	Gd2	O4Q	2.385(12)	Gd11	O9	2.519(14)
Gd13	O17Q	2.385(13)	Gd2	O2	2.485(16)	Gd11	O8	2.451(15)
Gd13	O14Q	2.385(12)	Gd2	O21	2.540(19)	Gd11	O27	2.390(17)
Gd13	O13Q	2.441(13)	Gd2	N4	2.534(17)	Gd11	N14	2.51(3)
Gd13	O9	2.409(12)	Gd2	N5	2.533(18)	Gd11	N13	2.544(19)

Table S10 Selected distances for **6**

Atom1	Atom2	Distance/ Å	Atom1	Atom2	Distance/ Å
Gd1	O3Q	2.320(8)	Gd2	O4Q	2.368(8)
Gd1	O1Q	2.303(9)	Gd2	O1	2.530(9)
Gd1	O1Q ¹	2.340(8)	Gd2	N1	2.566(10)
Gd1	O13 ¹	2.364(8)	Gd2	O2 ²	2.432(8)
Gd1	O2Q ¹	2.318(8)	Gd3	O3Q	2.347(8)
Gd1	O2Q	2.334(8)	Gd3	O1Q	2.395(9)
Gd1	O4Q ¹	2.315(8)	Gd3	O13	2.524(9)
Gd1	O1	2.358(8)	Gd3	O4Q	2.356(8)
Gd2	O3Q	2.362(8)	Gd3	N4	2.554(12)
Gd2	O2Q	2.406(8)	Gd3	O15 ¹	2.396(10)

Table S11 Selected distances for **7**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Gd3	O2Q	2.433(13)	Gd14	O1	2.515(17)	Gd9	O17	2.556(15)
Gd3	O3Q	2.397(17)	Gd14	O20Q	2.417(18)	Gd9	O10Q	2.422(14)
Gd3	O11	2.570(18)	Gd14	O19Q	2.43(2)	Gd9	O16	2.469(15)
Gd3	O27	2.368(19)	Gd14	O10	2.41(3)	Gd9	O12Q	2.402(16)
Gd3	O4Q	2.423(17)	Gd14	N3	2.49(3)	Gd9	O23	2.477(17)
Gd3	O20	2.47(2)	Gd14	N2	2.56(3)	Gd9	N23	2.55(2)
Gd3	N18	2.48(3)	Gd7	O11Q	2.363(13)	Gd9	N24	2.50(2)
Gd3	N17	2.54(3)	Gd7	O6Q	2.376(13)	Gd8	O11Q	2.384(14)
Gd2	O3	2.492(14)	Gd7	O5Q	2.394(13)	Gd8	O9Q	2.350(14)
Gd2	O3Q	2.443(18)	Gd7	O17	2.533(16)	Gd8	O6	2.427(17)
Gd2	O1Q	2.454(15)	Gd7	O8Q	2.363(12)	Gd8	O24	2.331(18)
Gd2	O2	2.410(18)	Gd7	O9Q	2.365(14)	Gd8	O7	2.488(15)
Gd2	O4Q	2.363(16)	Gd7	O5	2.518(16)	Gd8	O12Q	2.366(15)
Gd2	O28	2.40(2)	Gd7	O10Q	2.393(14)	Gd8	N11	2.52(2)
Gd2	N5	2.59(3)	Gd5	O5Q	2.441(14)	Gd8	N12	2.53(2)
Gd2	N6	2.54(2)	Gd5	O8Q	2.408(13)	Gd10	O9Q	2.423(14)
Gd12	O15	2.524(16)	Gd5	O7Q	2.402(14)	Gd10	O10Q	2.384(15)
Gd12	O16Q	2.45(2)	Gd5	O5	2.565(17)	Gd10	O13Q	2.356(15)
Gd12	O14Q	2.447(15)	Gd5	O4	2.476(15)	Gd10	O15	2.428(15)
Gd12	O15Q	2.417(17)	Gd5	O26	2.438(17)	Gd10	O7	2.514(17)
Gd12	O14	2.45(2)	Gd5	N8	2.58(2)	Gd10	O12Q	2.456(16)
Gd12	O21	2.39(2)	Gd5	N9	2.51(2)	Gd10	O14Q	2.421(15)
Gd12	N27	2.55(3)	Gd4	O2Q	2.363(14)	Gd10	O15Q	2.423(16)
Gd12	N26	2.58(3)	Gd4	O6Q	2.421(13)	Gd1	O2Q	2.430(14)
Gd15	O13	2.487(19)	Gd4	O5Q	2.382(14)	Gd1	O3Q	2.389(17)
Gd15	O18Q	2.409(13)	Gd4	O7Q	2.441(13)	Gd1	O18Q	2.385(17)
Gd15	O12	2.42(2)	Gd4	O3	2.443(14)	Gd1	O11	2.435(19)
Gd15	O20Q	2.379(18)	Gd4	O19	2.511(16)	Gd1	O17Q	2.422(17)
Gd15	O19Q	2.367(19)	Gd4	O1Q	2.412(14)	Gd1	O1Q	2.356(15)
Gd15	N29	2.57(3)	Gd4	O4Q	2.396(15)	Gd1	O1	2.449(16)
Gd15	N30	2.52(2)	Gd6	O6Q	2.346(12)	Gd1	O20Q	2.413(18)
Gd11	O13Q	2.421(13)	Gd6	O8Q	2.392(14)	Gd13	O13Q	2.432(15)
Gd11	O16Q	2.420(18)	Gd6	O7Q	2.342(13)	Gd13	O16Q	2.368(18)
Gd11	O9	2.57(2)	Gd6	O25	2.318(16)	Gd13	O13	2.497(18)
Gd11	O15Q	2.408(19)	Gd6	O19	2.447(14)	Gd13	O18Q	2.432(16)
Gd11	O22	2.41(2)	Gd6	O18	2.438(15)	Gd13	O17Q	2.383(18)
Gd11	O8	2.455(19)	Gd6	N21	2.505(19)	Gd13	O9	2.436(19)
Gd11	N15	2.53(3)	Gd6	N20	2.53(2)	Gd13	O14Q	2.353(17)
Gd11	N14	2.53(3)	Gd9	O11Q	2.419(13)	Gd13	O19Q	2.440(18)
Gd14	O17Q	2.445(16)						

Table S12 Selected distances for **8**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Er1	O1	2.443(16)	Er5	O8Q	2.347(15)	Er11	O8	2.430(19)
Er1	O11	2.360(16)	Er6	O18	2.316(17)	Er11	O9	2.50(2)
Er1	O1Q	2.293(16)	Er6	O19	2.458(17)	Er11	O27	2.45(3)
Er1	O2Q	2.370(18)	Er6	N29	2.45(2)	Er11	N14	2.53(2)
Er1	O4Q	2.333(17)	Er6	N30	2.464(16)	Er11	N15	2.49(2)
Er1	O17Q	2.384(15)	Er6	O6Q	2.335(17)	Er11	O13Q	2.393(19)
Er1	O18Q	2.287(18)	Er6	O7Q	2.305(16)	Er11	O15Q	2.357(15)
Er1	O20Q	2.433(15)	Er6	O8Q	2.428(14)	Er11	O16Q	2.291(16)
Er2	O2	2.410(19)	Er7	O5	2.467(16)	Er12	O14	2.374(17)
Er2	O3	2.449(16)	Er7	O17	2.486(16)	Er12	O15	2.469(16)
Er2	O21	2.30(3)	Er7	O5Q	2.327(17)	Er12	O28	2.29(2)
Er2	N5	2.49(3)	Er7	O6Q	2.301(18)	Er12	N23	2.45(2)
Er2	N6	2.476(19)	Er7	O8Q	2.307(15)	Er12	N24	2.47(2)
Er2	O1Q	2.375(14)	Er7	O9Q	2.32(2)	Er12	O14Q	2.37(2)
Er2	O3Q	2.354(16)	Er7	O10Q	2.369(16)	Er12	O15Q	2.326(16)
Er2	O4Q	2.380(18)	Er7	O11Q	2.347(15)	Er12	O16Q	2.344(17)
Er3	O11	2.489(17)	Er8	O6	2.381(16)	Er13	O9	2.367(18)
Er3	O20	2.396(16)	Er8	O7	2.429(17)	Er13	O13	2.49(2)
Er3	O22	2.60(3)	Er8	N11	2.46(2)	Er13	O13Q	2.406(16)
Er3	N17	2.54(2)	Er8	N12	2.49(2)	Er13	O14Q	2.320(19)
Er3	N18	2.50(2)	Er8	O9Q	2.307(19)	Er13	O16Q	2.377(16)
Er3	O2Q	2.373(15)	Er8	O11Q	2.392(15)	Er13	O17Q	2.300(16)
Er3	O3Q	2.359(15)	Er8	O12Q	2.353(17)	Er13	O18Q	2.346(19)
Er3	O4Q	2.33(2)	Er9	O16	2.431(19)	Er13	O19Q	2.426(16)
Er4	O3	2.424(18)	Er9	O17	2.394(17)	Er14	O1	2.417(16)
Er4	O19	2.386(18)	Er9	O25	2.263(18)	Er14	O10	2.354(18)
Er4	O1Q	2.372(16)	Er9	N26	2.48(2)	Er14	N2	2.47(3)
Er4	O2Q	2.287(16)	Er9	N27	2.504(19)	Er14	N3	2.49(2)
Er4	O3Q	2.407(15)	Er9	O10Q	2.319(16)	Er14	O17Q	2.279(14)
Er4	O5Q	2.268(17)	Er9	O11Q	2.363(18)	Er14	O19Q	2.336(17)
Er4	O6Q	2.373(17)	Er9	O12Q	2.334(16)	Er14	O20Q	2.283(13)
Er4	O7Q	2.393(16)	Er10	O7	2.339(17)	Er15	O12	2.324(17)
Er5	O4	2.45(2)	Er10	O15	2.427(16)	Er15	O13	2.441(19)
Er5	O5	2.438(16)	Er10	O9Q	2.377(16)	Er15	N20	2.46(2)
Er5	O23	2.277(15)	Er10	O10Q	2.269(17)	Er15	N21	2.49(2)
Er5	N8	2.46(2)	Er10	O12Q	2.402(15)	Er15	O18Q	2.307(16)
Er5	N9	2.449(18)	Er10	O13Q	2.301(17)	Er15	O19Q	2.321(16)
Er5	O5Q	2.341(16)	Er10	O14Q	2.37(2)	Er15	O20Q	2.388(16)
Er5	O7Q	2.336(15)	Er10	O15Q	2.349(14)			

Table S13 Selected distances for **9**

Atom1	Atom2	Distance /Å	Atom1	Atom2	Distance /Å
Er1	O1	2.454(9)	Er5	O3	2.420(9)
Er1	O13	2.354(9)	Er5	O8	2.381(9)
Er1	N2	2.480(12)	Er5	O3Q	2.365(8)
Er1	N3	2.478(11)	Er5	O4Q	2.326(8)
Er1	O1Q	2.294(8)	Er5	O6Q	2.397(9)
Er1	O2Q ¹	2.373(9)	Er5	O7Q	2.298(8)
Er1	O2Q	2.292(8)	Er5	O9Q ¹	2.407(9)
Er2	O1	2.460(9)	Er5	O10Q ¹	2.413(8)
Er2	O14	2.406(8)	Er6	O5 ¹	2.429(9)
Er2	O1Q ¹	2.313(8)	Er6	O5	2.429(9)
Er2	O1Q	2.391(8)	Er6	O7Q ¹	2.351(9)
Er2	O2Q	2.433(9)	Er6	O7Q	2.351(9)
Er2	O3Q	2.330(8)	Er6	O8Q	2.352(8)
Er2	O4Q	2.353(8)	Er6	O8Q ¹	2.352(8)
Er2	O5Q	2.322(8)	Er6	O9Q ¹	2.295(8)
Er3	O7	2.428(9)	Er6	O9Q	2.295(8)
Er3	O9	2.456(11)	Er7	O4	2.420(9)
Er3	O14	2.467(8)	Er7	O5	2.434(8)
Er3	N20	2.522(11)	Er7	O11	2.249(9)
Er3	N21	2.502(11)	Er7	N8	2.468(12)
Er3	O4Q	2.392(8)	Er7	N9	2.466(12)
Er3	O5Q	2.329(9)	Er7	O7Q	2.314(8)
Er3	O6Q	2.354(9)	Er7	O8Q	2.328(9)
Er4	O2	2.388(9)	Er7	O10Q ¹	2.348(9)
Er4	O3	2.464(9)	Er8	O6	2.351(9)
Er4	O10	2.261(9)	Er8	O8 ¹	2.418(9)
Er4	N5	2.454(11)	Er8	N11	2.468(13)
Er4	N6	2.468(10)	Er8	N12	2.467(11)
Er4	O3Q	2.300(8)	Er8	O8Q ¹	2.389(8)
Er4	O5Q	2.346(9)	Er8	O9Q	2.312(8)
Er4	O6Q	2.345(9)	Er8	O10Q	2.335(9)

Table S14 Selected distances for **10**

Atom1	Atom2	Distance/Å	Atom1	Atom2	Distance/Å
Er1	O1Q ¹	2.332(8)	Er2	O3	2.407(7)
Er1	O3Q ²	2.343(8)	Er2	O2Q	2.330(8)
Er1	O3Q	2.337(7)	Er2	O4 ²	2.535(8)
Er1	O4Q	2.336(7)	Er2	N4	2.565(10)
Er1	O4Q ²	2.315(7)	Er3	O1Q	2.319(7)
Er1	O2	2.343(7)	Er3	O3Q ²	2.343(8)
Er1	O2Q	2.319(7)	Er3	O2	2.509(8)
Er1	O4	2.333(7)	Er3	O2Q	2.319(7)
Er2	O1Q	2.326(7)	Er3	O1	2.390(9)
Er2	O4Q ²	2.369(7)	Er3	N1	2.528(10)

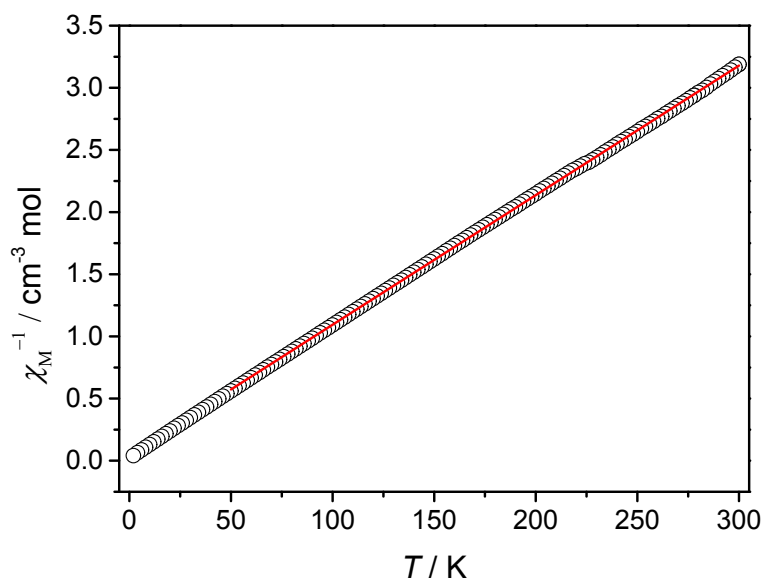


Fig. S4 The χ_M^{-1} vs T and the Curie-Weiss linear fit for **6**.

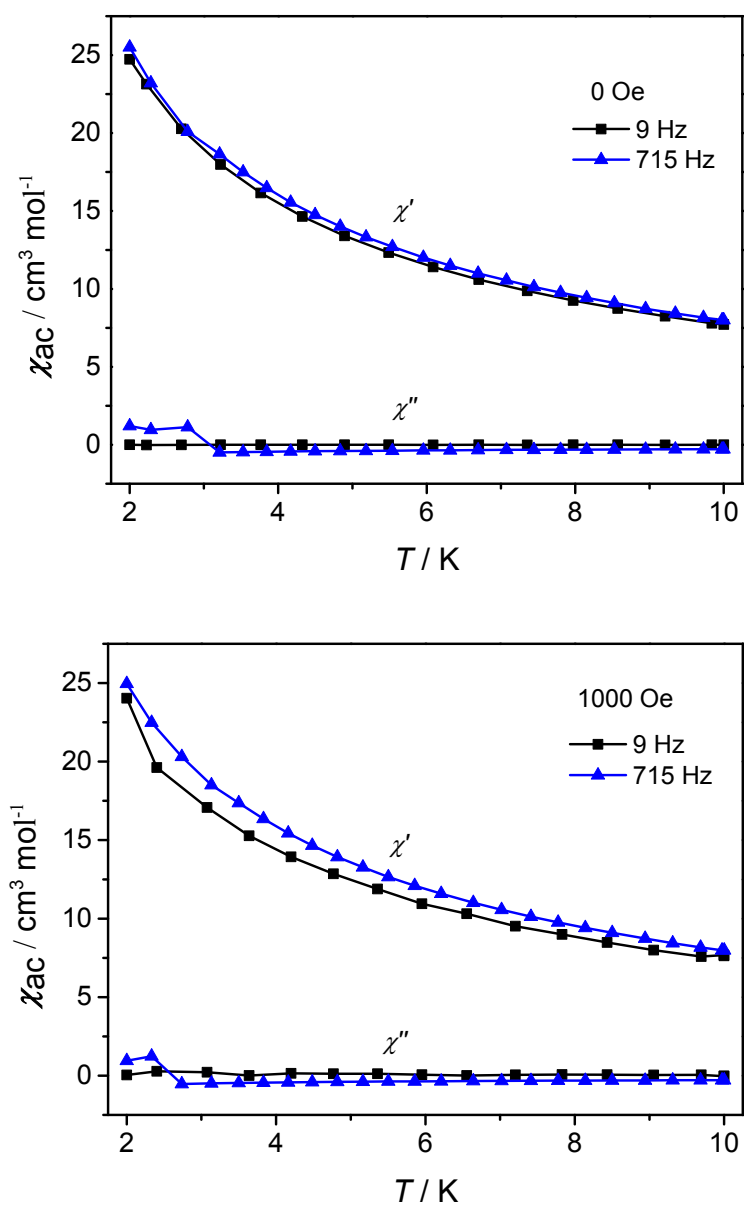


Fig. S5 The temperature dependence of in-phase (χ') and out-of-phase (χ'') ac susceptibility data in 0 Oe and 1000 Oe dc field for **6**.

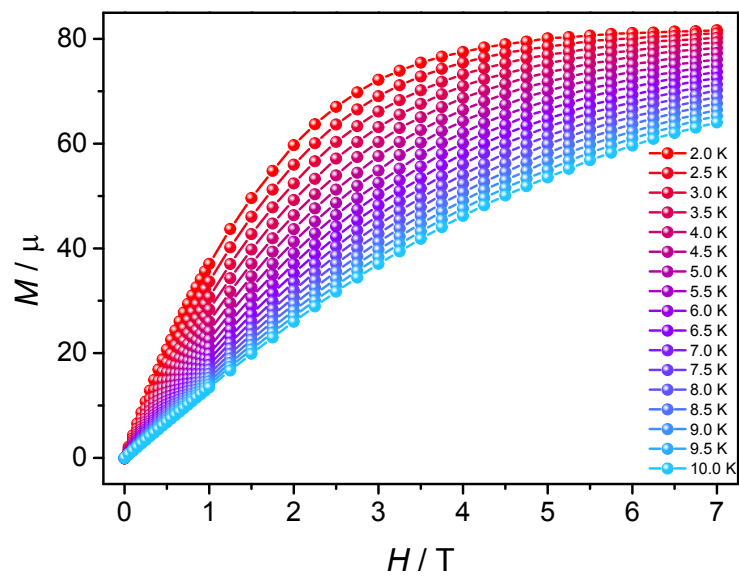


Fig. S6 Field-dependent experimental magnetization plots for **6** at the indicated temperatures.