

Constantin Hoch

Department Chemie, LMU München, Butenandtstraße 5-13(D), D-81377 München, Germany

Syntheses and crystal structures of solvate complexes of alkaline earth and lanthanoid metal iodides with N,N-Dimethylformamide

—Supporting Information—

Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters from single crystal structure refinements for the complex compounds

[Mg(DMF) ₆]I ₂		p. 2
[Ca(DMF) ₆]I ₂		p. 3
[Sr(DMF) ₇]I ₂		p. 4
[Ba(DMF) ₈]I ₂		p. 5
[Sc(DMF) ₆](I ₃) ₃		p. 6
[La(DMF) ₉]I ₃		p. 7
[Nd(DMF) ₈]I ₃		p. 9
[Sm(DMF) ₈]I ₃		p. 10
[Eu(DMF) ₈]I ₃		p. 11
[Dy(DMF) ₈]I ₃		p. 12
[Gd(DMF) ₈]I ₃		p. 13
[Er(DMF) ₈]I ₃		p. 14
[Yb(DMF) ₈]I ₃		p. 15
[Lu(DMF) ₉]I ₃		p. 16

Table 1: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Mg}(\text{DMF})_6]\text{I}_2$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$	Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
I1	0.64655(3)	0.41963(5)	0.15268(2)	0.0881(2)	Mg2	1/2	0	0	0.0473(6)
I2	0.14205(3)	0.41443(4)	0.16060(2)	0.0851(2)	O21	0.5480(3)	0.0263(4)	0.09543(17)	0.0683(10)
Mg1	0	1/2	1/2	0.0535(6)	N21	0.5744(3)	-0.0465(5)	0.1990(2)	0.0701(13)
O11	0.0934(3)	0.4997(4)	0.57707(17)	0.0767(12)	C211	0.5654(4)	-0.0561(7)	0.1356(3)	0.0840(19)
N11	0.2095(3)	0.4448(4)	0.64413(19)	0.0577(11)	H211	0.5729	-0.1341	0.1181	0.101
C111	0.1714(4)	0.4633(5)	0.5862(3)	0.0598(14)	C212	0.5969(6)	-0.1471(9)	0.2415(4)	0.131(3)
H111	0.2052	0.4481	0.5492	0.072	H21A	0.5488	-0.1606	0.2712	0.196
C112	0.1572(5)	0.4550(8)	0.7020(3)	0.101(2)	H21B	0.6516	-0.1289	0.2665	0.196
H11A	0.1155	0.5218	0.6967	0.152	H21C	0.6055	-0.2193	0.2155	0.196
H11B	0.1966	0.4697	0.7398	0.152	C213	0.5624(5)	0.0675(7)	0.2322(4)	0.113(3)
H11C	0.1244	0.3803	0.7083	0.152	H21D	0.5529	0.1313	0.2001	0.170
C113	0.3012(4)	0.3996(6)	0.6533(4)	0.091(2)	H21E	0.6152	0.0854	0.2592	0.170
H11D	0.3321	0.4074	0.6126	0.137	H21F	0.5108	0.0622	0.2594	0.170
H11E	0.2999	0.3150	0.6662	0.137	O22	0.4004(3)	-0.1115(4)	0.03773(18)	0.0677(10)
H11F	0.3323	0.4464	0.6871	0.137	N22	0.2836(3)	-0.2370(4)	0.0535(2)	0.0658(12)
O12	0.0926(3)	0.5653(4)	0.43631(19)	0.0774(12)	C221	0.3376(4)	-0.1725(5)	0.0164(3)	0.0632(14)
N12	0.1325(3)	0.6536(5)	0.3418(2)	0.0678(13)	H221	0.3266	-0.1740	-0.0291	0.076
C121	0.0786(4)	0.6383(6)	0.3904(3)	0.0643(15)	C222	0.2962(5)	-0.2418(6)	0.1235(3)	0.102(2)
H121	0.0263	0.6852	0.3906	0.077	H22A	0.2999	-0.3257	0.1375	0.154
C122	0.2157(4)	0.5832(7)	0.3386(3)	0.100(2)	H22B	0.2462	-0.2028	0.1437	0.154
H12A	0.2213	0.5299	0.3762	0.151	H22C	0.3511	-0.2002	0.1364	0.154
H12B	0.2663	0.6380	0.3386	0.151	C223	0.2075(4)	-0.3032(7)	0.0221(4)	0.102(2)
H12C	0.2143	0.5353	0.2988	0.151	H22D	0.1521	-0.2621	0.0316	0.154
C123	0.1139(5)	0.7396(7)	0.2889(3)	0.103(2)	H22E	0.2060	-0.3852	0.0390	0.154
H12D	0.1079	0.6962	0.2477	0.155	H22F	0.2145	-0.3055	-0.0248	0.154
H12E	0.1626	0.7972	0.2869	0.155	O23	0.4197(2)	0.1505(4)	0.00749(18)	0.0661(10)
H12F	0.0588	0.7825	0.2968	0.155	N23	0.3781(3)	0.3449(4)	0.0278(2)	0.0598(11)
O13	0.0358(3)	0.3247(4)	0.4766(2)	0.0925(14)	C231	0.4347(4)	0.2530(5)	0.0315(2)	0.0582(13)
N13	0.0735(3)	0.1740(6)	0.4110(3)	0.0843(16)	H231	0.4899	0.2655	0.0538	0.070
C131	0.0579(5)	0.2521(15)	0.4492(8)	0.315(13)	C232	0.3982(5)	0.4631(6)	0.0570(3)	0.092(2)
H131	0.1020	0.2277	0.4803	0.378	H23A	0.4570	0.4609	0.0785	0.138
C132	0.0863(10)	0.178(2)	0.3474(6)	0.343(13)	H23B	0.3538	0.4823	0.0888	0.138
H13A	0.0913	0.2616	0.3336	0.515	H23C	0.3972	0.5246	0.0231	0.138
H13B	0.0361	0.1400	0.3241	0.515	C233	0.2908(4)	0.3304(6)	-0.0067(3)	0.0854(19)
H13C	0.1408	0.1348	0.3379	0.515	H23D	0.2867	0.2498	-0.0255	0.128
C133	0.0824(9)	0.0564(13)	0.4326(9)	0.291(11)	H23E	0.2848	0.3903	-0.0412	0.128
H13D	0.1445	0.0320	0.4310	0.437	H23F	0.2435	0.3414	0.0239	0.128
H13E	0.0459	0.0036	0.4047	0.437					
H13F	0.0630	0.0508	0.4772	0.437					

Table 2: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Ca}(\text{DMF})_6\text{I}_2]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Ca1	0	0	0	0.0467(3)
I1	0.33682(2)	0.00778(4)	0.34125(3)	0.0839(2)
O1	0.02678(17)	0.0899(5)	0.1354(2)	0.0847(11)
N1	0.10520(17)	0.0612(5)	0.2341(2)	0.0611(9)
C11	0.0715(2)	0.1344(6)	0.1783(3)	0.0657(12)
H11	0.0822	0.2277	0.1704	0.079
C12	0.1559(3)	0.1270(8)	0.2843(4)	0.097(2)
H12A	0.1919	0.0724	0.2789	0.117
H12B	0.1468	0.1314	0.3437	0.117
H12C	0.1620	0.2202	0.2631	0.117
C13	0.4084(3)	0.4179(8)	0.2487(5)	0.098(2)
H13A	0.3714	0.3650	0.2424	0.117
H13B	0.4336	0.3803	0.2955	0.117
H13C	0.4292	0.4119	0.1965	0.117
O2	0.4804(2)	0.2862(4)	0.0602(3)	0.0983(14)
N2	0.45044(19)	0.0735(4)	0.0995(3)	0.0658(10)
C21	0.4885(4)	0.1660(8)	0.0842(5)	0.108(2)
H21	0.5288	0.1387	0.0925	0.129
C22	0.3877(4)	0.1104(14)	0.0887(7)	0.155(4)
H22A	0.3838	0.2019	0.0631	0.185
H22B	0.3705	0.1111	0.1437	0.185
H22C	0.3668	0.0430	0.0519	0.185
C23	0.0450(7)	0.4317(11)	0.3824(8)	0.195(6)
H23A	0.0814	0.3850	0.4036	0.234
H23B	0.0394	0.4185	0.3213	0.234
H23C	0.0110	0.3930	0.4097	0.234
O3	0.10058(15)	0.0590(6)	0.4967(3)	0.0999(14)
N3	0.19632(16)	0.0503(5)	0.5519(3)	0.0643(10)
C31	0.14424(18)	0.1117(6)	0.5357(3)	0.0627(11)
H31	0.1401	0.2031	0.5555	0.075
C32	0.2527(2)	0.3771(7)	0.4037(5)	0.095(2)
H32A	0.2192	0.3754	0.4399	0.114
H32B	0.2643	0.2827	0.3909	0.114
H32C	0.2411	0.4255	0.3512	0.114
C33	0.2065(4)	0.0936(8)	0.0259(7)	0.128(3)
H33A	0.2258	0.1446	0.0732	0.153
H33B	0.1684	0.1369	0.0090	0.153
H33C	0.2320	0.0945	-0.0217	0.153

Table 3: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Sr}(\text{DMF})_7\text{I}_2]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$	Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Sr1	0.77684(3)	0.35683(2)	0.23531(4)	0.03112(11)	C42	0.6171(6)	0.1375(2)	0.3831(6)	0.0676(18)
I1	0.26014(3)	0.17171(2)	0.27736(4)	0.05787(13)	H42A	0.5357	0.1359	0.3716	0.101
I2	0.26802(4)	0.50525(2)	0.27447(4)	0.06146(14)	H42B	0.6407	0.1258	0.4609	0.101
O1	0.1100(3)	0.78662(13)	0.1810(3)	0.0463(9)	H42C	0.6505	0.1177	0.3247	0.101
N1	0.0069(3)	0.76568(14)	0.0121(4)	0.0384(9)	C43	0.6256(8)	0.2102(3)	0.2588(7)	0.100(3)
C11	0.0312(4)	0.76502(17)	0.1271(5)	0.0404(11)	H43A	0.6472	0.2438	0.2631	0.150
H11	-0.0158	0.7464	0.1722	0.061	H43B	0.5452	0.2078	0.2397	0.150
C12	0.0740(5)	0.7063(2)	0.4331(5)	0.0496(13)	H43C	0.6656	0.1943	0.1984	0.150
H12A	0.1121	0.7281	0.3824	0.074	O5	0.1420(3)	0.59250(15)	0.5999(4)	0.0601(11)
H12B	0.0248	0.6851	0.3856	0.074	N5	0.0248(4)	0.07843(17)	0.0064(4)	0.0537(12)
H12C	0.1293	0.6873	0.4790	0.074	C51	0.0850(5)	0.5733(2)	0.5171(5)	0.0526(14)
C13	0.0851(5)	0.2636(2)	0.0439(6)	0.0580(15)	H51	0.1234	0.5533	0.4668	0.079
H13A	0.0540	0.2875	0.0947	0.087	C52	0.0931(6)	0.3916(3)	0.4340(6)	0.0691(18)
H13B	0.1251	0.2797	-0.0161	0.087	H52A	0.1480	0.4115	0.3978	0.104
H13C	0.1367	0.2429	0.0900	0.087	H52B	0.0449	0.3760	0.3734	0.104
O2	0.0380(3)	0.87015(14)	0.3545(4)	0.0553(10)	H52C	0.1317	0.3673	0.4826	0.104
N2	0.0119(4)	0.08845(17)	0.4836(5)	0.0513(12)	C53	0.0839(8)	0.0530(3)	0.1041(8)	0.097(3)
C21	0.0100(4)	0.4043(2)	0.0983(5)	0.0477(13)	H53A	0.1181	0.0762	0.1591	0.145
H21	0.0478	0.4268	0.1482	0.072	H53B	0.1419	0.0327	0.0745	0.145
C22	0.0772(6)	0.0495(2)	0.4354(7)	0.0728(19)	H53C	0.0308	0.0332	0.1435	0.145
H22A	0.1083	0.0292	0.4988	0.109	O6	0.5683(3)	0.37656(16)	0.1975(4)	0.0606(11)
H22B	0.1380	0.0630	0.3935	0.109	N6	0.3889(3)	0.35074(16)	0.1517(4)	0.0471(11)
H22C	0.0287	0.0304	0.3819	0.109	C61	0.4656(4)	0.3826(2)	0.1912(5)	0.0438(12)
C23	0.0504(5)	0.6200(3)	0.1006(6)	0.0683(18)	H61	0.4391	0.4125	0.2165	0.066
H23A	0.1035	0.6010	0.1493	0.102	C62	0.4197(5)	0.3030(2)	0.1102(6)	0.0603(16)
H23B	-0.0018	0.6358	0.1497	0.102	H62A	0.5010	0.3000	0.1146	0.090
H23C	0.0908	0.6441	0.0585	0.102	H62B	0.3903	0.2989	0.0295	0.090
O3	0.6629(4)	0.33166(15)	0.4152(4)	0.0634(12)	H62C	0.3881	0.2786	0.1589	0.090
N3	0.5067(4)	0.36316(18)	0.4920(4)	0.0535(12)	C63	0.2691(5)	0.3617(3)	0.1471(7)	0.0701(19)
C31	0.6126(5)	0.3655(2)	0.4654(6)	0.0596(16)	H63A	0.2585	0.3945	0.1735	0.105
H31	0.6532	0.3937	0.4845	0.089	H63B	0.2319	0.3396	0.1977	0.105
C32	0.4540(7)	0.0957(3)	0.0482(7)	0.083(2)	H63C	0.2372	0.3583	0.0672	0.105
H32A	0.5097	0.0706	0.0640	0.124	O7	0.7628(3)	0.43609(13)	0.1286(4)	0.0566(10)
H32B	0.3929	0.0833	-0.0037	0.124	N7	0.3510(4)	0.00205(16)	0.3594(6)	0.0602(14)
H32C	0.4248	0.1061	0.1213	0.124	C71	0.7084(4)	0.46986(19)	0.0830(6)	0.0511(14)
C33	0.4370(7)	0.3217(3)	0.4661(7)	0.077(2)	H71	0.7088	0.4733	0.0012	0.077
H33A	0.4779	0.2986	0.4216	0.116	C72	0.6427(7)	0.4987(3)	0.2665(9)	0.091(3)
H33B	0.3692	0.3315	0.4204	0.116	H72A	0.5682	0.4879	0.2840	0.137
H33C	0.4168	0.3070	0.5388	0.116	H72B	0.6573	0.5301	0.3016	0.137
O4	0.7296(3)	0.30533(14)	0.0592(3)	0.0525(9)	H72C	0.6984	0.4759	0.2983	0.137
N4	0.6537(4)	0.18724(15)	0.3710(4)	0.0446(10)	C73	0.4104(7)	0.0413(2)	0.4207(10)	0.102(3)
C41	0.2955(4)	0.71138(19)	0.0391(5)	0.0436(12)	H73A	0.3760	0.0717	0.3964	0.152
H41	0.2773	0.7438	0.0519	0.065	H73B	0.4886	0.0412	0.4019	0.152
					H73C	0.4061	0.0373	0.5046	0.152

Table 4: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Ba}(\text{DMF})_8\text{I}_2]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Ba1	0	0.60698(2)	1/4	0.0506(2)
I1	0	0.26938(4)	1/4	0.1230(4)
I2	0	0.92050(4)	1/4	0.0959(3)
O1	0.3498(10)	0.1378(4)	0.3674(8)	0.184(2)
N1	0.2239(6)	0.1599(3)	0.4559(7)	0.098(2)
C11	0.3178(11)	0.1575(5)	0.4425(12)	0.148(5)
H11	0.3634	0.1721	0.4949	0.222
C12	0.1842(14)	0.1843(6)	0.5436(13)	0.203(8)
H12A	0.1571	0.2173	0.5212	0.305
H12B	0.2366	0.1889	0.6011	0.305
H12C	0.1320	0.1632	0.5681	0.305
C13	0.1480(17)	0.1419(9)	0.380(2)	0.260(12)
H13A	0.1456	0.1049	0.3827	0.389
H13B	0.1616	0.1527	0.3094	0.389
H13C	0.0845	0.1557	0.3960	0.389
O2	0.4304(10)	0.1832(4)	0.1175(8)	0.184(2)
N2	0.3782(5)	0.2633(2)	0.0890(5)	0.0782(17)
C21	0.4195(8)	0.2212(3)	0.0610(7)	0.095(3)
H21	0.4424	0.2198	-0.0068	0.142
C22	0.3704(8)	0.3065(3)	0.0138(9)	0.105(3)
H22A	0.3010	0.3130	-0.0094	0.157
H22B	0.4055	0.2982	-0.0475	0.157
H22C	0.3997	0.3366	0.0487	0.157
C23	0.3424(11)	0.2702(4)	0.1927(9)	0.136(5)
H23A	0.3571	0.2400	0.2356	0.203
H23B	0.2711	0.2758	0.1840	0.203
H23C	0.3749	0.2995	0.2277	0.203
O3	0.0628(10)	0.5212(4)	0.1479(8)	0.184(2)
N3	0.1085(6)	0.4395(2)	0.1458(5)	0.0774(18)
C31	0.1120(15)	0.4864(4)	0.1609(11)	0.161(7)
H31	0.1750	0.4959	0.1930	0.242
C32	0.0147(12)	0.4156(6)	0.0963(11)	0.151(5)
H32A	-0.0188	0.3986	0.1508	0.226
H32B	0.0305	0.3910	0.0431	0.226
H32C	-0.0283	0.4419	0.0627	0.226
C33	0.1874(10)	0.4027(6)	0.1685(13)	0.163(6)
H33A	0.1698	0.3793	0.2232	0.245
H33B	0.2484	0.4204	0.1932	0.245
H33C	0.1971	0.3837	0.1043	0.245
O4	0.3299(11)	0.0531(4)	0.1110(8)	0.184(2)
N4	0.1941(6)	0.0314(5)	0.0712(8)	0.122(4)
C41	0.2965(12)	0.0810(4)	0.1268(8)	0.132(5)
H41	0.3049	0.1143	0.1539	0.199
C42	0.0990(12)	0.0567(5)	0.0886(12)	0.154(6)
H42A	0.1121	0.0914	0.1131	0.230
H42B	0.0668	0.0380	0.1419	0.230
H42C	0.0561	0.0573	0.0224	0.230
C43	0.1858(11)	0.0180(6)	0.5228(14)	0.164(6)
H43A	0.1431	0.0394	0.5615	0.246
H43B	0.1574	0.0147	0.4494	0.246
H43C	0.2511	0.0334	0.5247	0.246

Table 5: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in Å² for [Sc(DMF)₆(I₃)₃]. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Sc1	0.24733(14)	0.0021(2)	0.24866(18)	0.0686(9)
I1	0.01549(7)	0.36386(12)	0.25449(9)	0.1188(5)
I2	0.08586(7)	0.79532(11)	0.05250(9)	0.1186(6)
I3	0.11964(6)	0.35278(9)	0.15071(7)	0.0901(4)
I4	0.22498(7)	0.33832(12)	0.05195(9)	0.1212(5)
I5	0.39475(11)	0.2290(2)	0.49698(17)	0.2251(12)
I6	0.46083(7)	0.17373(12)	0.36089(10)	0.1314(6)
I7	0.53364(15)	0.1208(2)	0.22791(14)	0.2374(13)
I8	0.68136(8)	0.14308(13)	0.10106(10)	0.1370(6)
I9	0.79627(7)	0.17595(10)	0.02389(8)	0.1026(5)
O4	0.1743(5)	0.0448(8)	0.1661(7)	0.083(3)
C41	0.0542(8)	0.0846(12)	0.1017(10)	0.083(5)
C42	0.1052(10)	0.3968(17)	0.4736(13)	0.125(7)
C43	0.1692(8)	0.0652(13)	0.0929(11)	0.080(5)
N4	0.1088(7)	0.0826(10)	0.0615(8)	0.084(4)
O3	0.1835(5)	0.0047(9)	0.3325(6)	0.087(3)
C31	0.0378(10)	0.1070(17)	0.4065(13)	0.130(8)
C32	0.8982(10)	0.4438(18)	0.0590(13)	0.132(8)
C33	0.1362(10)	0.0558(15)	0.3427(12)	0.092(6)
N3	0.0956(6)	0.0414(10)	0.3923(8)	0.079(4)
O2	0.2642(5)	0.1546(9)	0.2739(7)	0.094(3)
C21	0.2589(10)	0.3426(16)	0.3356(12)	0.118(7)
C22	0.3477(11)	0.3852(19)	0.2512(14)	0.149(9)
C23	0.3030(9)	0.2179(16)	0.2480(11)	0.089(6)
N2	0.2994(7)	0.3156(12)	0.2806(8)	0.093(4)
O6	0.3077(6)	0.0046(10)	0.1626(7)	0.103(4)
C61	0.5505(13)	0.438(2)	0.4349(16)	0.166(10)
C62	0.3510(14)	0.004(2)	0.1194(15)	0.138(9)
C63	0.601(2)	0.351(4)	0.324(3)	0.294(19)
N6	0.6033(10)	0.4421(17)	0.3840(12)	0.141(7)
O5	0.6821(5)	0.4623(8)	0.1636(7)	0.086(3)
C51	0.5755(10)	0.3904(15)	0.0803(11)	0.112(7)
C52	0.3661(12)	0.573(2)	0.0416(16)	0.161(9)
C53	0.6844(10)	0.4600(16)	0.0891(14)	0.105(7)
N5	0.6298(8)	0.4273(12)	0.0474(10)	0.109(5)
O1	0.7740(5)	0.3493(8)	0.2710(6)	0.083(3)
C11	0.1301(9)	0.6330(16)	0.2560(11)	0.113(7)
C12	0.2295(10)	0.6509(16)	0.1831(12)	0.119(7)
C13	0.1845(9)	0.7930(17)	0.2499(11)	0.090(6)
N1	0.1809(7)	0.6938(12)	0.2304(9)	0.097(5)

Table 6: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in Å² for [La(DMF)₉I₃]. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$	Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
La1	0.74272(11)	0.78668(8)	0.08909(7)	0.0551(5)	C193	0.465(3)	0.559(2)	-0.0635(19)	0.160(18)
La2	0.76248(11)	-0.27451(9)	0.58780(7)	0.0579(5)	H19D	0.4393	0.5722	-0.1024	0.240
I3	0.74010(18)	0.96573(14)	-0.15927(11)	0.1020(8)	H19E	0.4162	0.5209	-0.0458	0.240
I4	0.7366(2)	0.52033(15)	0.34312(12)	0.1172(9)	H19F	0.5305	0.5372	-0.0683	0.240
I5	0.73371(19)	-0.02970(13)	0.38109(12)	0.1098(8)	O21	0.8827(17)	-0.3586(15)	0.5278(14)	0.140(10)
I6	0.75357(18)	0.25450(14)	0.64476(12)	0.1117(8)	N21	1.018(2)	-0.3949(15)	0.4813(14)	0.103(9)
I7	0.76555(17)	0.24813(14)	0.15149(12)	0.1080(8)	C211	0.919(3)	-0.3844(18)	0.4841(18)	0.113(13)
I8	0.7597(2)	0.51273(17)	-0.10680(13)	0.1345(10)	H211	0.8771	-0.3979	0.4504	0.135
O11	0.6259(17)	0.8759(13)	0.0427(12)	0.119(9)	C212	1.056(3)	-0.428(2)	0.4279(19)	0.158(18)
N11	0.4771(17)	0.8950(14)	-0.0078(12)	0.077(7)	H21A	0.9992	-0.4482	0.4021	0.237
C111	0.576(3)	0.8894(17)	-0.004(2)	0.108(12)	H21B	1.0971	-0.4699	0.4380	0.237
H111	0.6143	0.8961	-0.0390	0.130	H21C	1.0987	-0.3889	0.4072	0.237
C112	0.426(3)	0.911(2)	-0.064(2)	0.165(19)	C213	1.102(4)	-0.379(3)	0.527(2)	0.20(2)
H11A	0.4106	0.9641	-0.0633	0.247	H21D	1.1553	-0.3432	0.5110	0.296
H11B	0.3630	0.8769	-0.0683	0.247	H21E	1.1302	-0.4272	0.5359	0.296
H11C	0.4711	0.9010	-0.0970	0.247	H21F	1.0745	-0.3569	0.5629	0.296
C113	0.415(4)	0.885(3)	0.043(3)	0.21(3)	O22	0.839(2)	-0.3728(14)	0.6543(13)	0.152(11)
H11D	0.4350	0.8417	0.0649	0.308	N22	0.916(4)	-0.446(2)	0.7147(13)	0.139(15)
H11E	0.3437	0.8759	0.0304	0.308	C221	0.880(5)	-0.406(4)	0.687(2)	0.23(4)
H11F	0.4242	0.9319	0.0683	0.308	H221	0.9030	-0.3618	0.7107	0.282
O12	0.8473(15)	0.9169(14)	0.0679(11)	0.104(7)	C222	1.005(4)	-0.431(5)	0.753(3)	0.29(5)
N12	0.8926(17)	1.0392(14)	0.0420(12)	0.071(6)	H22A	1.0380	-0.3801	0.7460	0.437
C121	0.847(2)	0.9717(19)	0.0335(14)	0.076(9)	H22B	1.0520	-0.4698	0.7448	0.437
H121	0.8093	0.9623	-0.0025	0.091	H22C	0.9836	-0.4338	0.7946	0.437
C122	0.887(3)	1.0979(17)	-0.0003(14)	0.101(11)	C223	0.879(8)	-0.521(4)	0.726(3)	0.34(6)
H12A	0.8535	1.0759	-0.0367	0.152	H22D	0.8611	-0.5250	0.7676	0.508
H12B	0.9557	1.1199	-0.0093	0.152	H22E	0.9307	-0.5554	0.7158	0.508
H12C	0.8476	1.1381	0.0163	0.152	H22F	0.8177	-0.5349	0.7010	0.508
C123	0.952(3)	1.0593(19)	0.0935(18)	0.111(11)	O23	0.6667(17)	-0.4048(12)	0.5704(11)	0.108(7)
H12D	0.9375	1.0207	0.1234	0.167	N23	0.6129(15)	-0.5328(13)	0.5478(12)	0.074(7)
H12E	0.9360	1.1094	0.1093	0.167	C231	0.655(2)	-0.465(2)	0.5332(15)	0.082(9)
H12F	1.0245	1.0618	0.0835	0.167	H231	0.6780	-0.4592	0.4937	0.098
O13	0.8026(18)	0.7741(15)	-0.0200(13)	0.131(9)	C232	0.612(2)	-0.5941(18)	0.4994(17)	0.115(12)
N13	0.8864(15)	0.7439(11)	-0.1027(10)	0.060(6)	H23A	0.6027	-0.5714	0.4609	0.173
C131	0.818(3)	0.775(2)	-0.0751(16)	0.119(14)	H23B	0.5569	-0.6338	0.5060	0.173
H131	0.7731	0.8026	-0.0980	0.143	H23C	0.6775	-0.6169	0.4999	0.173
C132	0.888(2)	0.748(2)	-0.1638(14)	0.112(12)	C233	0.571(3)	-0.550(2)	0.6039(17)	0.152(17)
H13A	0.8735	0.7995	-0.1751	0.169	H23D	0.6232	-0.5372	0.6349	0.228
H13B	0.8373	0.7100	-0.1815	0.169	H23E	0.5489	-0.6050	0.6047	0.228
H13C	0.9561	0.7382	-0.1780	0.169	H23F	0.5131	-0.5204	0.6111	0.228
C133	0.962(2)	0.697(2)	-0.0736(16)	0.121(13)	O24	0.683(2)	-0.271(2)	0.6937(12)	0.156(12)
H13D	1.0301	0.7113	-0.0887	0.181	N24	0.600(2)	-0.2842(16)	0.7770(14)	0.102(9)
H13E	0.9430	0.6423	-0.0827	0.181	C241	0.650(3)	-0.248(3)	0.742(2)	0.129(14)
H13F	0.9615	0.7063	-0.0305	0.181	H241	0.6674	-0.1954	0.7518	0.154
O14	0.9397(17)	0.7685(15)	0.0904(12)	0.119(8)	C242	0.557(3)	-0.252(3)	0.832(2)	0.19(3)
N14	1.099(2)	0.764(3)	0.1280(19)	0.162(19)	H24A	0.6027	-0.2594	0.8657	0.290
C141	1.019(4)	0.792(3)	0.1231(18)	0.142(18)	H24B	0.4899	-0.2777	0.8392	0.290
H141	1.0136	0.8371	0.1464	0.170	H24C	0.5521	-0.1969	0.8279	0.290
C142	1.114(5)	0.690(4)	0.095(4)	0.33(6)	C243	0.588(7)	-0.370(2)	0.767(3)	0.32(5)
H14A	1.1864	0.6885	0.0854	0.490	H24D	0.5324	-0.3842	0.7389	0.480
H14B	1.0742	0.6872	0.0576	0.490	H24E	0.5734	-0.3943	0.8049	0.480
H14C	1.0916	0.6466	0.1189	0.490	H24F	0.6517	-0.3866	0.7513	0.480
C143	1.175(3)	0.797(4)	0.171(3)	0.25(4)	O25	0.5600(19)	-0.2592(15)	0.5885(11)	0.116(8)
H14D	1.1478	0.8403	0.1921	0.378	N25	0.402(2)	-0.246(2)	0.6220(16)	0.120(12)
H14E	1.2365	0.8156	0.1497	0.378	C251	0.482(3)	-0.279(2)	0.6151(14)	0.109(13)
H14F	1.1906	0.7585	0.1987	0.378	H251	0.4816	-0.3266	0.6334	0.131

Table 7: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in Å² for [La(DMF)₉I₃] (continued). All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$	Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
O15	0.7682(18)	0.6421(13)	0.0912(10)	0.113(8)	C252	0.321(3)	-0.282(3)	0.653(2)	0.167(19)
N15	0.836(2)	0.5262(14)	0.0964(14)	0.098(11)	H25A	0.3334	-0.3355	0.6592	0.250
C151	0.811(3)	0.580(3)	0.067(2)	0.127(16)	H25B	0.2576	-0.2802	0.6307	0.250
H151	0.8207	0.5779	0.0250	0.153	H25C	0.3154	-0.2557	0.6920	0.250
C152	0.887(3)	0.4689(16)	0.063(2)	0.159(19)	C253	0.392(4)	-0.175(3)	0.590(3)	0.20(3)
H15A	0.8670	0.4698	0.0207	0.238	H25D	0.4416	-0.1346	0.6057	0.303
H15B	0.8669	0.4180	0.0778	0.238	H25E	0.3232	-0.1599	0.5946	0.303
H15C	0.9607	0.4802	0.0667	0.238	H25F	0.4050	-0.1849	0.5476	0.303
C153	0.793(6)	0.510(3)	0.1608(17)	0.27(4)	O26	0.724(2)	-0.1273(13)	0.5954(14)	0.134(10)
H15D	0.7239	0.5251	0.1636	0.408	N26	0.658(2)	-0.0190(14)	0.5896(13)	0.085(8)
H15E	0.8370	0.5391	0.1905	0.408	C261	0.689(2)	-0.078(2)	0.5684(16)	0.096(11)
H15F	0.7928	0.4550	0.1682	0.408	H261	0.6852	-0.0855	0.5265	0.115
O16	0.8181(19)	0.7592(16)	0.1949(11)	0.127(9)	C262	0.622(3)	0.036(2)	0.5526(19)	0.131(14)
N16	0.896(2)	0.7539(17)	0.2830(15)	0.104(10)	H26A	0.6379	0.0238	0.5113	0.196
C161	0.847(3)	0.781(3)	0.248(2)	0.138(16)	H26B	0.6542	0.0869	0.5641	0.196
H161	0.8235	0.8277	0.2611	0.166	H26C	0.5477	0.0359	0.5566	0.196
C162	0.922(3)	-0.219(3)	0.3427(16)	0.18(2)	C263	0.663(5)	-0.001(3)	0.650(3)	0.25(4)
H16A	0.8862	-0.1735	0.3523	0.265	H26D	0.6930	-0.0426	0.6702	0.374
H16B	0.9958	-0.2049	0.3457	0.265	H26E	0.5951	0.0044	0.6647	0.374
H16C	0.9026	-0.2590	0.3706	0.265	H26F	0.7065	0.0467	0.6566	0.374
C163	0.946(3)	0.683(2)	0.269(2)	0.162(19)	O27	0.6965(16)	-0.2662(16)	0.4838(10)	0.122(9)
H16D	0.9301	0.6660	0.2280	0.243	N27	0.6031(17)	-0.2531(13)	0.3979(10)	0.065(6)
H16E	0.9211	0.6429	0.2959	0.243	C271	0.676(2)	-0.2770(16)	0.4311(17)	0.082(9)
H16F	1.0198	0.6938	0.2741	0.243	H271	0.7207	-0.3079	0.4105	0.099
O17	0.5922(16)	0.7319(14)	0.1503(11)	0.113(8)	C272	0.537(2)	-0.2022(18)	0.4296(16)	0.101(11)
N17	0.4874(19)	0.6451(13)	0.1984(9)	0.073(6)	H27A	0.5328	-0.2155	0.4715	0.151
C171	0.574(3)	0.670(2)	0.1781(15)	0.098(10)	H27B	0.4683	-0.2085	0.4117	0.151
H171	0.6290	0.6393	0.1841	0.117	H27C	0.5649	-0.1488	0.4267	0.151
C172	0.397(3)	0.687(2)	0.1892(19)	0.129(14)	C273	0.590(3)	-0.264(2)	0.3376(14)	0.127(14)
H17A	0.4155	0.7315	0.1646	0.194	H27D	0.6380	-0.2987	0.3224	0.191
H17B	0.3727	0.7051	0.2276	0.194	H27E	0.6020	-0.2143	0.3185	0.191
H17C	0.3435	0.6534	0.1691	0.194	H27F	0.5202	-0.2856	0.3289	0.191
C173	0.472(3)	0.570(3)	0.223(2)	0.18(2)	O28	0.8990(19)	-0.1928(16)	0.5267(14)	0.146(10)
H17D	0.5188	0.5360	0.2054	0.264	N28	1.026(2)	-0.1206(17)	0.4788(13)	0.093(9)
H17E	0.4015	0.5481	0.2155	0.264	C281	0.933(3)	-0.1424(17)	0.4893(14)	0.098(11)
H17F	0.4839	0.5739	0.2664	0.264	H281	0.8836	-0.1191	0.4671	0.117
O18	0.703(2)	0.8926(15)	0.1667(10)	0.133(9)	C282	1.048(3)	-0.061(2)	0.4359(18)	0.130(15)
N18	0.603(2)	0.9770(16)	0.2109(11)	0.087(8)	H28A	1.0943	-0.0790	0.4058	0.195
C181	0.677(3)	0.9581(19)	0.1820(17)	0.104(12)	H28B	1.0808	-0.0148	0.4563	0.195
H181	0.7214	0.9998	0.1692	0.125	H28C	0.9849	-0.0491	0.4169	0.195
C182	0.521(4)	0.9141(19)	0.230(2)	0.160(18)	C283	1.111(3)	-0.159(2)	0.509(2)	0.150(16)
H18A	0.5317	0.8654	0.2098	0.240	H28D	1.0970	-0.1638	0.5511	0.226
H18B	0.4532	0.9288	0.2200	0.240	H28E	1.1761	-0.1288	0.5036	0.226
H18C	0.5259	0.9083	0.2732	0.240	H28F	1.1146	-0.2106	0.4906	0.226
C183	0.590(3)	1.057(2)	0.232(2)	0.165(19)	O29	0.903(2)	-0.206(2)	0.6565(15)	0.166(13)
H18D	0.6394	1.0925	0.2125	0.248	N29	1.006(3)	-0.112(3)	0.7051(12)	0.126(13)
H18E	0.5997	1.0614	0.2749	0.248	C291	0.925(5)	-0.140(3)	0.685(2)	0.16(2)
H18F	0.5206	1.0692	0.2217	0.248	H291	0.8694	-0.1094	0.6900	0.194
O19	0.5981(17)	0.7169(13)	0.0236(11)	0.110(8)	C292	1.100(4)	-0.153(3)	0.699(3)	0.19(2)
N19	0.479(2)	0.6300(14)	-0.0234(12)	0.087(7)	H29A	1.0941	-0.1868	0.6634	0.286
C191	0.576(3)	0.654(2)	-0.0091(17)	0.108(12)	H29B	1.1097	-0.1826	0.7339	0.286
H191	0.6290	0.6258	-0.0230	0.129	H29C	1.1591	-0.1148	0.6947	0.286
C192	0.392(3)	0.670(2)	0.005(2)	0.145(16)	C293	1.015(4)	-0.034(4)	0.732(2)	0.24(4)
H19A	0.4174	0.7005	0.0404	0.217	H29D	1.0518	0.0009	0.7045	0.365
H19B	0.3376	0.6317	0.0170	0.217	H29E	1.0529	-0.0336	0.7693	0.365
H19C	0.3641	0.7042	-0.0233	0.217	H29F	0.9473	-0.0178	0.7387	0.365

Table 8: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Nd}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Nd1	0	0.25096(2)	1/4	0.03193(8)
I1	0	0.23615(3)	3/4	0.0634(1)
I2	0.24498(2)	0.08430(2)	0.19980(3)	0.0733(1)
O1	-0.03891(13)	0.37036(18)	0.1337(2)	0.0626(8)
N1	-0.07417(15)	0.4394(2)	-0.0291(3)	0.0567(8)
C11	-0.04150(18)	0.3832(2)	0.0296(3)	0.0528(9)
H11	-0.0184	0.3503	-0.0097	0.079
C12	-0.0744(2)	0.4526(3)	-0.1515(4)	0.0752(14)
H121	-0.0579	0.5056	-0.1627	0.113
H122	-0.1146	0.4499	-0.1926	0.113
H123	-0.0509	0.4109	-0.1798	0.113
C13	-0.1135(3)	0.4895(4)	0.0249(5)	0.121(3)
H131	-0.1206	0.4633	0.0941	0.182
H132	-0.1506	0.4965	-0.0268	0.182
H133	-0.0955	0.5422	0.0434	0.182
O2	-0.07849(12)	0.2959(2)	0.3499(2)	0.0641(8)
N2	-0.16796(13)	0.3217(2)	0.3992(2)	0.0460(7)
C21	-0.12969(17)	0.3246(2)	0.3283(3)	0.0486(9)
H21	-0.1416	0.3498	0.2573	0.073
C22	-0.22774(18)	0.3545(4)	0.3677(4)	0.0754(14)
H221	-0.2287	0.3930	0.3058	0.113
H222	-0.2389	0.3817	0.4330	0.113
H223	-0.2551	0.3106	0.3436	0.113
C23	-0.1534(2)	0.2793(3)	0.5078(4)	0.0733(14)
H231	-0.1682	0.2241	0.4994	0.110
H232	-0.1713	0.3073	0.5648	0.110
H233	-0.1110	0.2783	0.5316	0.110
O3	0.03278(14)	0.13202(18)	0.1546(2)	0.0687(8)
N3	0.07175(14)	0.0486(2)	0.0368(2)	0.0483(7)
C31	0.04893(18)	0.1181(3)	0.0618(3)	0.0533(10)
H31	0.0445	0.1596	0.0068	0.080
C32	0.0929(3)	0.0370(3)	-0.0708(4)	0.0760(14)
H321	0.0820	0.0837	-0.1197	0.114
H322	0.0753	-0.0116	-0.1081	0.114
H323	0.1354	0.0314	-0.0560	0.114
C33	0.0801(2)	-0.0185(3)	0.1187(4)	0.0678(12)
H331	0.1212	-0.0212	0.1546	0.102
H332	0.0689	-0.0692	0.0794	0.102
H333	0.0558	-0.0096	0.1765	0.102
O4	0.08513(14)	0.2108(2)	0.3913(2)	0.0731(9)
N4	0.17014(13)	0.1807(2)	0.5094(3)	0.0495(8)
C41	0.13490(17)	0.1792(3)	0.4094(3)	0.0510(9)
H41	0.1482	0.1529	0.3486	0.077
C42	0.2275(2)	0.1388(3)	0.5264(4)	0.0738(13)
H421	0.2342	0.1163	0.4545	0.111
H422	0.2275	0.0953	0.5813	0.111
H423	0.2586	0.1771	0.5545	0.111
C43	0.1524(2)	0.2204(3)	0.6086(4)	0.0758(14)
H431	0.1775	0.2671	0.6305	0.114
H432	0.1563	0.1823	0.6716	0.114
H433	0.1117	0.2380	0.5893	0.114

Table 9: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Sm}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Sm1	0	0.25060(5)	1/4	0.0516(3)
I1	0	0.23718(8)	3/4	0.0801(5)
I2	0.24497(6)	0.08467(7)	0.69865(10)	0.0910(4)
O1	0.0327(5)	0.1329(5)	0.6574(8)	0.081(3)
O2	-0.0385(5)	0.3682(5)	0.6349(8)	0.082(3)
C1	-0.0408(6)	0.3830(7)	0.5323(12)	0.065(4)
H1A	-0.0523	0.3320	0.4920	0.078
H1B	-0.0002	0.3938	0.5228	0.078
C2	0.0498(6)	0.1181(7)	0.5666(13)	0.069(4)
H2A	0.0810	0.1576	0.5615	0.083
H2B	0.0169	0.1320	0.5058	0.083
N1	0.0695(5)	0.0483(6)	0.5384(9)	0.061(3)
N2	-0.0730(6)	0.4399(6)	0.4746(10)	0.073(3)
O3	-0.0777(5)	0.2958(6)	0.8474(9)	0.081(3)
C3	0.0798(8)	-0.0180(8)	0.6197(13)	0.083(5)
H3A	0.1205	-0.0170	0.6582	0.124
H3B	0.0717	-0.0693	0.5800	0.124
H3C	0.0541	-0.0120	0.6753	0.124
O4	0.0834(5)	0.2101(6)	0.8903(9)	0.086(3)
C4	-0.1281(7)	0.3242(8)	0.8255(12)	0.068(4)
H4A	-0.1473	0.2982	0.7547	0.082
H4B	-0.1237	0.3818	0.8076	0.082
C5	0.1348(7)	0.1774(7)	0.9085(13)	0.067(4)
H5A	0.1565	0.2013	0.8531	0.080
H5B	0.1291	0.1198	0.8885	0.080
N3	-0.1669(5)	0.3211(6)	0.8977(9)	0.060(3)
N4	0.1702(5)	0.1800(7)	1.0082(10)	0.068(3)
C6	0.2277(7)	0.1392(11)	1.0220(13)	0.086(4)
H6A	0.2247	0.0857	1.0544	0.129
H6B	0.2567	0.1711	1.0724	0.129
H6C	0.2396	0.1341	0.9482	0.129
C7	-0.2281(7)	0.3561(11)	0.8669(15)	0.091(5)
H7A	-0.2294	0.3942	0.8044	0.137
H7B	-0.2382	0.3841	0.9325	0.137
H7C	-0.2561	0.3126	0.8441	0.137
C8	-0.1535(8)	0.2802(9)	1.0072(15)	0.093(5)
H8A	-0.1663	0.2240	0.9985	0.139
H8B	-0.1739	0.3072	1.0611	0.139
H8C	-0.1114	0.2820	1.0351	0.139
C9	0.1533(8)	0.2208(10)	1.1085(15)	0.092(5)
H9A	0.1204	0.2570	1.0834	0.138
H9B	0.1865	0.2518	1.1481	0.138
H9C	0.1420	0.1802	1.1595	0.138
C10	-0.1124(11)	0.4923(12)	0.5277(17)	0.124(7)
H10A	-0.1280	0.4617	0.5851	0.186
H10B	-0.1445	0.5111	0.4699	0.186
H10C	-0.0904	0.5386	0.5632	0.186
C11	0.0933(9)	0.0368(9)	0.4304(14)	0.098(6)
H11A	0.0792	0.0801	0.3775	0.146
H11B	0.0802	-0.0151	0.3966	0.146
H11C	0.1360	0.0379	0.4473	0.146
C12	-0.0754(8)	0.4548(10)	0.3534(13)	0.089(5)
H12A	-0.0502	0.4162	0.3237	0.133
H12B	-0.0619	0.5096	0.3425	0.133
H12C	-0.1156	0.4486	0.3134	0.133

Table 10: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Eu}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Eu1	0	0.25062(2)	1/4	0.02886(8)
I1	0	0.23641(4)	3/4	0.05951(16)
I2	0.24514(2)	0.08482(3)	0.19857(3)	0.06921(13)
O1	-0.03901(15)	0.36874(19)	0.1369(2)	0.0565(9)
N1	-0.07388(18)	0.4388(3)	-0.0250(3)	0.0513(11)
C11	-0.0411(2)	0.3820(3)	0.0330(4)	0.0507(13)
H11	-0.0178	0.3493	-0.0061	0.076
C12	-0.0738(3)	0.4529(3)	-0.1482(4)	0.0713(17)
H121	-0.0562	0.5054	-0.1583	0.107
H122	-0.1142	0.4518	-0.1895	0.107
H123	-0.0509	0.4106	-0.1771	0.107
C13	-0.1111(3)	0.4910(5)	0.0293(5)	0.112(3)
H131	-0.1125	0.4707	0.1050	0.168
H132	-0.1509	0.4918	-0.0150	0.168
H133	-0.0951	0.5457	0.0346	0.168
O2	-0.07728(15)	0.2943(2)	0.3492(2)	0.0575(9)
N2	-0.16705(16)	0.3219(2)	0.3977(3)	0.0399(10)
C21	-0.1285(2)	0.3236(3)	0.3264(4)	0.0446(12)
H21	-0.1403	0.3481	0.2551	0.067
C22	-0.2271(2)	0.3561(4)	0.3651(4)	0.0723(17)
H221	-0.2280	0.3919	0.3003	0.108
H222	-0.2373	0.3866	0.4284	0.108
H223	-0.2554	0.3124	0.3451	0.108
C23	-0.1535(2)	0.2788(3)	0.5064(4)	0.0658(17)
H231	-0.1696	0.2242	0.4974	0.099
H232	-0.1712	0.3076	0.5630	0.099
H233	-0.1109	0.2761	0.5307	0.099
O3	0.03328(15)	0.13305(19)	0.1589(3)	0.0605(9)
N3	0.07087(17)	0.0486(2)	0.0388(3)	0.0425(10)
C31	0.0489(2)	0.1187(3)	0.0646(4)	0.0498(12)
H31	0.0446	0.1603	0.0099	0.075
C32	0.0917(3)	0.0367(3)	-0.0704(4)	0.0717(18)
H321	0.0819	0.0843	-0.1178	0.108
H322	0.0724	-0.0106	-0.1087	0.108
H323	0.1343	0.0287	-0.0562	0.108
C33	0.0806(2)	-0.0177(3)	0.1208(4)	0.0610(15)
H331	0.1220	-0.0185	0.1572	0.092
H332	0.0706	-0.0690	0.0820	0.092
H333	0.0558	-0.0099	0.1779	0.092
O4	0.08339(15)	0.2106(2)	0.3906(2)	0.0650(10)
N4	0.16926(16)	0.1805(2)	0.5077(3)	0.0434(10)
C41	0.1334(2)	0.1788(3)	0.4080(4)	0.0467(12)
H41	0.1464	0.1521	0.3473	0.070
C42	0.2269(2)	0.1395(4)	0.5238(4)	0.0708(16)
H421	0.2357	0.1231	0.4506	0.106
H422	0.2258	0.0919	0.5712	0.106
H423	0.2574	0.1764	0.5604	0.106
C43	0.1522(2)	0.2206(4)	0.6064(4)	0.0731(19)
H431	0.1764	0.2687	0.6254	0.110
H432	0.1580	0.1836	0.6705	0.110
H433	0.1107	0.2363	0.5887	0.110

Table 11: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Dy}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Dy1	0	0.25042(2)	1/4	0.02636(15)
I1	0	0.23683(4)	3/4	0.0551(2)
I2	0.24521(2)	0.08547(3)	0.19737(5)	0.0640(2)
O1	-0.0388(2)	0.3678(2)	0.1396(4)	0.0503(11)
N1	-0.0735(2)	0.4393(3)	-0.0221(5)	0.0485(13)
C11	-0.0414(3)	0.3813(4)	0.0352(6)	0.0438(14)
H11	-0.0188	0.3477	-0.0051	0.066
C12	-0.0731(4)	0.4521(5)	-0.1439(7)	0.066(2)
H121	-0.0524	0.5025	-0.1542	0.100
H122	-0.1138	0.4554	-0.1847	0.100
H123	-0.0530	0.4068	-0.1734	0.100
C13	-0.1088(6)	0.4937(6)	0.0354(9)	0.106(4)
H131	-0.1188	0.4667	0.1022	0.159
H132	-0.1452	0.5080	-0.0162	0.159
H133	-0.0862	0.5428	0.0587	0.159
O2	-0.0767(2)	0.2939(3)	0.3480(4)	0.0517(11)
N2	-0.1670(2)	0.3220(3)	0.3954(4)	0.0376(11)
C21	-0.1280(3)	0.3239(3)	0.3266(5)	0.0374(13)
H21	-0.1394	0.3498	0.2557	0.056
C22	-0.2272(3)	0.3562(6)	0.3633(7)	0.069(2)
H221	-0.2277	0.3951	0.3016	0.104
H222	-0.2384	0.3837	0.4287	0.104
H223	-0.2553	0.3126	0.3385	0.104
C23	-0.1526(3)	0.2790(5)	0.5054(7)	0.062(2)
H231	-0.1664	0.2230	0.4961	0.092
H232	-0.1721	0.3061	0.5613	0.092
H233	-0.1098	0.2797	0.5312	0.092
O3	0.0339(2)	0.1333(3)	0.1627(4)	0.0530(12)
N3	0.0707(2)	0.0488(3)	0.0408(4)	0.0392(11)
C31	0.0486(3)	0.1204(3)	0.0677(6)	0.0443(15)
H31	0.0440	0.1626	0.0134	0.066
C32	0.0914(4)	0.0374(5)	-0.0679(6)	0.063(2)
H321	0.0798	0.0842	-0.1168	0.094
H322	0.0737	-0.0116	-0.1049	0.094
H323	0.1345	0.0322	-0.0540	0.094
C33	0.0803(4)	-0.0182(4)	0.1223(7)	0.0585(19)
H331	0.1211	-0.0167	0.1629	0.088
H332	0.0730	-0.0697	0.0820	0.088
H333	0.0532	-0.0128	0.1764	0.088
O4	0.0814(2)	0.2108(3)	0.3911(4)	0.0587(12)
N4	0.1689(2)	0.1802(3)	0.5057(4)	0.0424(12)
C41	0.1323(3)	0.1794(4)	0.4076(5)	0.0435(14)
H41	0.1450	0.1535	0.3455	0.065
C42	0.2271(3)	0.1390(5)	0.5217(7)	0.0631(19)
H421	0.2358	0.1223	0.4480	0.095
H422	0.2262	0.0913	0.5697	0.095
H423	0.2578	0.1762	0.5578	0.095
C43	0.1520(3)	0.2219(5)	0.6071(7)	0.0632(19)
H431	0.1785	0.2678	0.6287	0.095
H432	0.1554	0.1837	0.6702	0.095
H433	0.1113	0.2413	0.5883	0.095

Table 12: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Gd}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Gd1	0	0.25053(3)	1/4	0.02837(17)
I1	0	0.23670(5)	3/4	0.0580(3)
I2	0.24517(3)	0.08499(4)	0.19824(5)	0.0675(2)
O1	-0.0387(2)	0.3681(3)	0.1378(4)	0.0544(14)
N1	-0.0731(3)	0.4390(4)	-0.0240(5)	0.0522(16)
C11	-0.0415(3)	0.3822(4)	0.0342(7)	0.0451(18)
H11	-0.0187	0.3488	-0.0056	0.068
C12	-0.0743(4)	0.4520(5)	-0.1468(7)	0.066(2)
H121	-0.0558	0.5038	-0.1583	0.099
H122	-0.1152	0.4523	-0.1864	0.099
H123	-0.0527	0.4085	-0.1766	0.099
C13	-0.1110(6)	0.4910(7)	0.0313(10)	0.113(5)
H131	-0.1112	0.4714	0.1080	0.170
H132	-0.1511	0.4900	-0.0116	0.170
H133	-0.0960	0.5464	0.0345	0.170
O2	-0.0777(2)	0.2942(3)	0.3490(5)	0.0560(14)
N2	-0.1675(3)	0.3219(4)	0.3959(5)	0.0425(14)
C21	-0.1286(3)	0.3238(4)	0.3266(6)	0.0432(17)
H21	-0.1400	0.3493	0.2555	0.065
C22	-0.2283(3)	0.3548(6)	0.3645(8)	0.066(2)
H221	-0.2299	0.3919	0.3008	0.098
H222	-0.2390	0.3836	0.4290	0.098
H223	-0.2560	0.3103	0.3431	0.098
C23	-0.1532(4)	0.2781(6)	0.5058(7)	0.067(3)
H231	-0.1664	0.2220	0.4956	0.100
H232	-0.1732	0.3042	0.5616	0.100
H233	-0.1106	0.2794	0.5323	0.100
O3	0.0331(3)	0.1333(3)	0.1592(5)	0.0583(15)
N3	0.0705(3)	0.0485(4)	0.0389(5)	0.0434(15)
C31	0.0488(4)	0.1193(4)	0.0650(7)	0.0507(19)
H31	0.0449	0.1612	0.0105	0.076
C32	0.0915(5)	0.0372(6)	-0.0695(7)	0.071(3)
H321	0.0798	0.0837	-0.1185	0.106
H322	0.0741	-0.0119	-0.1064	0.106
H323	0.1344	0.0324	-0.0553	0.106
C33	0.0805(4)	-0.0188(5)	0.1224(8)	0.064(2)
H331	0.1223	-0.0214	0.1556	0.095
H332	0.0684	-0.0699	0.0844	0.095
H333	0.0573	-0.0093	0.1819	0.095
O4	0.0827(3)	0.2114(4)	0.3913(5)	0.0625(15)
N4	0.1691(3)	0.1804(4)	0.5073(5)	0.0463(15)
C41	0.1331(3)	0.1794(4)	0.4077(6)	0.0458(18)
H41	0.1460	0.1534	0.3462	0.069
C42	0.2266(4)	0.1385(6)	0.5249(8)	0.066(2)
H421	0.2331	0.1149	0.4535	0.099
H422	0.2267	0.0957	0.5810	0.099
H423	0.2579	0.1772	0.5519	0.099
C43	0.1525(4)	0.2198(6)	0.6079(8)	0.069(2)
H431	0.1815	0.2616	0.6356	0.104
H432	0.1517	0.1795	0.6671	0.104
H433	0.1135	0.2443	0.5874	0.104

Table 13: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in Å² for [Er(DMF)₈I₃]. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Er1	0	0.25033(2)	1/4	0.02783(9)
I1	0	0.23684(2)	3/4	0.05605(12)
I2	0.24525(2)	0.08586(2)	0.69670(3)	0.06456(12)
O1	0.03463(13)	0.13412(15)	0.6647(3)	0.0522(7)
O2	-0.03883(13)	0.36682(15)	0.6410(2)	0.0506(7)
C1	-0.04119(17)	0.3797(2)	0.5367(4)	0.0451(9)
H1A	-0.0553	0.3288	0.4976	0.054
H1B	0.0003	0.3872	0.5255	0.054
C2	0.04875(17)	0.1204(2)	0.5692(3)	0.0425(8)
H2A	0.0783	0.1620	0.5583	0.051
H2B	0.0129	0.1312	0.5119	0.051
N1	0.07035(14)	0.04949(17)	0.5420(3)	0.0426(7)
N2	-0.07260(16)	0.43910(19)	0.4798(3)	0.0504(8)
O3	-0.07580(12)	0.29233(17)	0.8475(2)	0.0510(7)
C3	0.0802(2)	-0.0177(2)	0.6236(4)	0.0573(11)
H3A	0.1223	-0.0203	0.6573	0.086
H3B	0.0681	-0.0686	0.5847	0.086
H3C	0.0566	-0.0087	0.6831	0.086
O4	0.08027(12)	0.21099(18)	0.8911(3)	0.0572(7)
C4	-0.12753(16)	0.3237(2)	0.8254(3)	0.0414(8)
H4A	-0.1475	0.2989	0.7538	0.050
H4B	-0.1217	0.3815	0.8087	0.050
C5	0.13117(17)	0.1787(2)	0.9060(3)	0.0438(9)
H5A	0.1528	0.2038	0.8504	0.053
H5B	0.1252	0.1212	0.8840	0.053
N3	-0.16657(13)	0.32191(17)	0.8949(3)	0.0398(7)
N4	0.16808(13)	0.17971(18)	1.0056(3)	0.0437(7)
C6	0.2263(2)	0.1374(3)	1.0208(4)	0.0652(12)
H6A	0.2260	0.0918	1.0727	0.098
H6B	0.2579	0.1752	1.0522	0.098
H6C	0.2333	0.1175	0.9476	0.098
C7	-0.22726(18)	0.3563(3)	0.8626(4)	0.0649(12)
H7A	-0.2283	0.3929	0.7982	0.097
H7B	-0.2376	0.3864	0.9267	0.097
H7C	-0.2558	0.3124	0.8418	0.097
C8	-0.1531(2)	0.2790(3)	1.0048(4)	0.0614(12)
H8A	-0.1690	0.2239	0.9959	0.092
H8B	-0.1714	0.3079	1.0610	0.092
H8C	-0.1101	0.2768	1.0301	0.092
C9	0.1519(2)	0.2205(3)	1.1069(4)	0.0657(12)
H9A	0.1106	0.2390	1.0893	0.099
H9B	0.1780	0.2670	1.1278	0.099
H9C	0.1563	0.1822	1.1701	0.099
C10	-0.1096(4)	0.4933(4)	0.5362(6)	0.113(3)
H10A	-0.1173	0.4678	0.6057	0.170
H10B	-0.1473	0.5036	0.4856	0.170
H10C	-0.0887	0.5446	0.5548	0.170
C11	0.0902(2)	0.0375(3)	0.4333(4)	0.0647(12)
H11A	0.0803	0.0853	0.3857	0.097
H11B	0.0704	-0.0100	0.3952	0.097
H11C	0.1332	0.0291	0.4467	0.097
C12	-0.0737(2)	0.4516(3)	0.3566(4)	0.0657(12)
H12A	-0.0499	0.4096	0.3283	0.099
H12B	-0.0573	0.5049	0.3445	0.099
H12C	-0.1147	0.4485	0.3161	0.099

Table 14: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Yb}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
GD1	0	0.25034(3)	1/4	0.03061(17)
I1	0	0.23709(6)	3/4	0.0587(3)
I2	0.24545(3)	0.08617(5)	0.69616(6)	0.0671(2)
O1	0.0353(3)	0.1351(3)	0.6667(5)	0.0545(15)
O2	-0.0386(3)	0.3663(3)	0.6423(4)	0.0523(15)
C1	-0.0413(4)	0.3804(5)	0.5378(7)	0.0472(19)
H1A	-0.0552	0.3296	0.4982	0.057
H1B	0.0003	0.3884	0.5269	0.057
C2	0.0481(4)	0.1202(5)	0.5696(7)	0.0434(18)
H2A	0.0772	0.1619	0.5559	0.052
H2B	0.0113	0.1298	0.5136	0.052
N1	0.0699(3)	0.0490(4)	0.5438(5)	0.0469(16)
N2	-0.0727(3)	0.4389(4)	0.4808(6)	0.0517(17)
O3	-0.0752(3)	0.2918(4)	0.8473(5)	0.0487(14)
C3	0.0795(5)	-0.0171(6)	0.6257(8)	0.058(2)
H3A	0.1222	-0.0231	0.6546	0.088
H3B	0.0638	-0.0674	0.5890	0.088
H3C	0.0588	-0.0051	0.6885	0.088
O4	0.0789(3)	0.2123(4)	0.8900(5)	0.0543(15)
C4	-0.1268(4)	0.3225(5)	0.8249(6)	0.0425(19)
H4A	-0.1468	0.2964	0.7541	0.051
H4B	-0.1210	0.3798	0.8061	0.051
C5	0.1301(4)	0.1794(5)	0.9053(7)	0.046(2)
H5A	0.1521	0.2048	0.8506	0.055
H5B	0.1237	0.1222	0.8821	0.055
N3	-0.1663(3)	0.3223(4)	0.8937(5)	0.0413(15)
N4	0.1675(3)	0.1787(4)	1.0054(5)	0.0449(16)
C6	0.2261(4)	0.1374(7)	1.0198(9)	0.069(3)
H6A	0.2325	0.1166	0.9466	0.104
H6B	0.2267	0.0925	1.0730	0.104
H6C	0.2578	0.1759	1.0492	0.104
C7	-0.2269(4)	0.3552(7)	0.8605(9)	0.069(3)
H7A	-0.2307	0.3809	0.7862	0.104
H7B	-0.2344	0.3954	0.9163	0.104
H7C	-0.2560	0.3113	0.8571	0.104
C8	-0.1528(5)	0.2791(7)	1.0035(8)	0.065(3)
H8A	-0.1100	0.2825	1.0334	0.097
H8B	-0.1644	0.2222	0.9924	0.097
H8C	-0.1751	0.3039	1.0571	0.097
C9	0.1512(5)	0.2202(7)	1.1065(8)	0.070(3)
H9A	0.1079	0.2277	1.0950	0.105
H9B	0.1710	0.2729	1.1166	0.105
H9C	0.1641	0.1870	1.1739	0.105
C10	-0.1089(7)	0.4944(9)	0.5387(11)	0.109(5)
H10A	-0.1510	0.4902	0.5032	0.164
H10B	-0.0952	0.5500	0.5325	0.164
H10C	-0.1044	0.4794	0.6186	0.164
C11	0.0893(5)	0.0376(7)	0.4331(8)	0.066(3)
H11A	0.0757	0.0834	0.3836	0.099
H11B	0.0721	-0.0125	0.3980	0.099
H11C	0.1329	0.0344	0.4449	0.099
C12	-0.0737(5)	0.4513(7)	0.3578(8)	0.066(3)
H12A	-0.0502	0.4089	0.3294	0.098
H12B	-0.0566	0.5043	0.3458	0.098
H12C	-0.1149	0.4490	0.3171	0.098

Table 15: Fractional atomic coordinates and (equivalent) isotropic displacement parameters in $\text{\AA}^2$ for $[\text{Lu}(\text{DMF})_8\text{I}_3]$. All standard deviations are given in units of the last digit. All non-H atoms were refined with anisotropic displacement parameters.

Atom	x	y	z	$U_{eq/iso}$
Lu1	0	0.25044(2)	1/4	0.02697(7)
I1	0	0.23665(3)	3/4	0.05548(13)
I2	0.24548(2)	0.08637(2)	0.19594(3)	0.06433(11)
O1	-0.03898(16)	0.36593(18)	0.1428(2)	0.0489(7)
N1	-0.07212(19)	0.4391(2)	-0.0183(3)	0.0505(9)
C11	-0.0411(2)	0.3790(2)	0.0385(4)	0.0427(9)
H11	-0.0194	0.3440	-0.0018	0.064
C12	-0.0736(3)	0.4516(3)	-0.1417(4)	0.0635(15)
H121	-0.0541	0.5028	-0.1535	0.095
H122	-0.1149	0.4531	-0.1809	0.095
H123	-0.0526	0.4073	-0.1716	0.095
C13	-0.1083(4)	0.4932(5)	0.0374(6)	0.106(3)
H131	-0.1071	0.4755	0.1154	0.159
H132	-0.1494	0.4923	-0.0029	0.159
H133	-0.0926	0.5482	0.0371	0.159
O2	-0.07545(15)	0.2919(2)	0.3465(3)	0.0498(7)
N2	-0.16587(16)	0.3223(2)	0.3935(3)	0.0401(8)
C21	-0.12678(19)	0.3231(2)	0.3239(3)	0.0383(9)
H21	-0.1380	0.3487	0.2529	0.057
C22	-0.2267(2)	0.3584(4)	0.3611(5)	0.0669(15)
H221	-0.2261	0.3989	0.3020	0.100
H222	-0.2384	0.3841	0.4271	0.100
H223	-0.2552	0.3160	0.3329	0.100
C23	-0.1527(3)	0.2790(4)	0.5040(4)	0.0593(13)
H231	-0.1684	0.2240	0.4948	0.089
H232	-0.1714	0.3077	0.5597	0.089
H233	-0.1096	0.2771	0.5298	0.089
O3	0.03497(16)	0.13494(18)	0.1670(3)	0.0505(8)
N3	0.06994(17)	0.0497(2)	0.0442(3)	0.0410(8)
C31	0.0484(2)	0.1210(2)	0.0708(4)	0.0407(9)
H31	0.0430	0.1626	0.0158	0.061
C32	0.0892(3)	0.0375(4)	-0.0661(4)	0.0640(15)
H321	0.0762	0.0834	-0.1155	0.096
H322	0.0714	-0.0121	-0.1010	0.096
H323	0.1326	0.0332	-0.0545	0.096
C33	0.0799(3)	-0.0171(3)	0.1267(4)	0.0586(13)
H331	0.1221	-0.0192	0.1608	0.088
H332	0.0683	-0.0682	0.0882	0.088
H333	0.0560	-0.0082	0.1855	0.088
O4	0.07939(15)	0.2117(2)	0.3909(3)	0.0542(8)
N4	0.16719(16)	0.1796(2)	0.5045(3)	0.0429(8)
C41	0.1297(2)	0.1785(3)	0.4050(4)	0.0414(9)
H41	0.1416	0.1516	0.3431	0.062
C42	0.2256(2)	0.1374(4)	0.5184(5)	0.0665(15)
H421	0.2318	0.1162	0.4454	0.100
H422	0.2259	0.0927	0.5718	0.100
H423	0.2575	0.1753	0.5473	0.100
C43	0.1518(3)	0.2197(4)	0.6057(4)	0.0665(15)
H431	0.1798	0.2637	0.6292	0.100
H432	0.1540	0.1804	0.6671	0.100
H433	0.1113	0.2414	0.5878	0.100