

(e-mail: Luc.VanMeervelt@chem.kuleuven.ac.be)

Table 2. Continued.

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso}
H(27A)	2i	0.7432	0.4722	1.0726	0.081
H(27B)	2i	0.7244	0.5837	1.1004	0.081
H(28A)	2i	0.9216	0.5523	1.0762	0.072
H(28B)	2i	0.8724	0.5152	0.9664	0.072
H(29A)	2i	0.8590	0.7088	1.0566	0.095
H(29B)	2i	0.8158	0.6708	0.9458	0.095
H(30A)	2i	1.0546	0.6852	1.0367	0.159
H(30B)	2i	1.0006	0.7530	0.9639	0.159
H(30C)	2i	1.0132	0.6422	0.9268	0.159
H(32)	2i	0.7480	0.4916	0.7394	0.067
H(34)	2i	1.0789	0.5493	0.6974	0.089
H(35)	2i	1.1224	0.3925	0.7079	0.084
H(39A)	2i	0.7225	0.6265	0.6515	0.158

Table 2. Continued.

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso}
H(39B)	2i	0.7795	0.7308	0.6987	0.158
H(39C)	2i	0.7515	0.6542	0.7649	0.158
H(40)	2i	1.0686	0.2333	0.7294	0.082
H(41)	2i	0.8480	0.2000	0.7680	0.085
H(42A)	2i	0.8911	0.0305	0.7099	0.105
H(42B)	2i	1.0267	0.0634	0.7270	0.105
H(43A)	2i	0.8964	0.0657	0.8776	0.140
H(43B)	2i	1.0349	0.0838	0.8890	0.140
H(44A)	2i	0.9624	−0.0902	0.8992	0.205
H(44B)	2i	0.9217	−0.1023	0.7864	0.205
H(45A)	2i	1.1130	−0.0670	0.7691	0.213
H(45B)	2i	1.0985	−0.1618	0.8157	0.213
H(45C)	2i	1.1508	−0.0634	0.8813	0.213

Table 3. Atomic coordinates and displacement parameters (in Å²).

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
La(1)	2i	0.56017(3)	0.26811(2)	0.72623(2)	0.0398(2)	0.0395(2)	0.0522(2)	0.0062(1)	0.0127(1)	0.0031(1)
C(1)	2i	0.6686(4)	0.0791(3)	0.5715(3)	0.050(3)	0.052(3)	0.034(2)	0.012(2)	0.004(2)	−0.002(2)
C(2)	2i	0.7507(4)	0.1278(4)	0.5289(3)	0.061(3)	0.050(3)	0.050(3)	0.016(3)	0.010(3)	0.003(2)
C(3)	2i	0.8279(5)	0.0773(4)	0.4797(4)	0.066(4)	0.069(4)	0.056(3)	0.018(3)	0.014(3)	0.013(3)
C(4)	2i	0.8249(6)	−0.0242(4)	0.4691(4)	0.084(4)	0.076(4)	0.075(4)	0.029(4)	0.034(4)	0.004(3)
C(5)	2i	0.7469(5)	−0.0732(4)	0.5087(4)	0.079(4)	0.051(3)	0.073(4)	0.020(3)	0.009(3)	−0.007(3)
C(6)	2i	0.6670(4)	−0.0247(3)	0.5607(3)	0.057(3)	0.047(3)	0.046(3)	0.009(3)	0.002(3)	−0.006(2)
O(7)	2i	0.5956(3)	0.1271(2)	0.6191(2)	0.068(2)	0.048(2)	0.062(2)	0.008(2)	0.024(2)	−0.005(2)
O(8)	2i	0.9096(4)	0.1189(3)	0.4365(3)	0.082(3)	0.094(3)	0.094(3)	0.023(2)	0.043(2)	0.029(2)
C(9)	2i	0.9200(6)	0.2222(5)	0.4445(5)	0.109(6)	0.098(5)	0.105(5)	0.004(4)	0.047(5)	0.032(4)
C(10)	2i	0.5904(5)	−0.0796(4)	0.6053(3)	0.061(3)	0.046(3)	0.051(3)	0.004(3)	−0.004(3)	−0.002(2)
N(11)	2i	0.5159(4)	−0.0449(3)	0.6589(3)	0.070(3)	0.047(2)	0.059(3)	−0.003(3)	0.010(2)	0.003(2)
C(12)	2i	0.4442(5)	−0.1002(4)	0.7104(4)	0.064(4)	0.061(3)	0.074(4)	−0.011(3)	0.011(3)	0.008(3)
C(13)	2i	0.4904(5)	−0.0827(4)	0.8183(4)	0.073(4)	0.057(3)	0.075(4)	0.005(3)	0.017(3)	0.016(3)
C(14)	2i	0.6092(6)	−0.1206(4)	0.8483(4)	0.083(4)	0.078(4)	0.085(4)	0.005(4)	0.010(4)	0.023(3)
C(15)	2i	0.6493(7)	−0.1062(5)	0.9571(5)	0.139(7)	0.111(6)	0.101(6)	0.005(5)	−0.016(5)	0.031(5)
C(16)	2i	0.4774(4)	0.5089(3)	0.7855(3)	0.043(3)	0.037(3)	0.054(3)	0.006(2)	0.013(2)	0.006(2)
C(17)	2i	0.3949(4)	0.5127(3)	0.7022(3)	0.056(3)	0.043(3)	0.051(3)	0.003(2)	0.013(3)	−0.002(2)
C(18)	2i	0.3244(4)	0.5884(3)	0.6951(3)	0.050(3)	0.047(3)	0.052(3)	0.002(2)	0.013(3)	0.012(2)
C(19)	2i	0.3297(5)	0.6648(3)	0.7728(4)	0.066(4)	0.044(3)	0.068(4)	0.019(3)	0.019(3)	0.011(3)
C(20)	2i	0.4101(4)	0.6642(3)	0.8549(4)	0.063(3)	0.040(3)	0.058(3)	0.011(3)	0.018(3)	0.002(2)
C(21)	2i	0.4866(4)	0.5879(3)	0.8636(3)	0.046(3)	0.037(3)	0.046(3)	0.000(2)	0.010(2)	0.004(2)
O(22)	2i	0.5451(3)	0.4361(2)	0.7923(2)	0.063(2)	0.045(2)	0.068(2)	0.016(2)	0.005(2)	−0.003(2)
O(23)	2i	0.2424(3)	0.5973(3)	0.6166(3)	0.068(2)	0.074(2)	0.060(2)	0.012(2)	0.004(2)	0.018(2)
C(24)	2i	0.2294(5)	0.5224(4)	0.5332(4)	0.087(4)	0.091(4)	0.054(3)	−0.001(4)	−0.003(3)	0.003(3)
C(25)	2i	0.5704(4)	0.5921(3)	0.9488(4)	0.058(3)	0.042(3)	0.059(3)	0.004(3)	0.021(3)	0.002(2)
N(26)	2i	0.6476(4)	0.5277(3)	0.9659(3)	0.055(3)	0.057(3)	0.053(3)	0.004(2)	0.005(2)	0.000(2)
C(27)	2i	0.7411(5)	0.5344(4)	1.0488(4)	0.067(4)	0.072(4)	0.061(3)	0.008(3)	−0.001(3)	0.017(3)
C(28)	2i	0.8604(4)	0.5605(4)	1.0228(4)	0.050(3)	0.068(3)	0.059(3)	0.004(3)	0.002(3)	0.010(3)
C(29)	2i	0.8741(5)	0.6632(4)	1.0014(5)	0.084(5)	0.068(4)	0.085(4)	−0.001(3)	0.007(4)	0.012(3)
C(30)	2i	0.9969(6)	0.6882(5)	0.9803(5)	0.106(6)	0.099(5)	0.114(6)	−0.025(4)	0.024(5)	0.024(4)
C(31)	2i	0.8475(4)	0.3733(4)	0.7425(3)	0.041(3)	0.065(3)	0.049(3)	−0.001(3)	−0.002(2)	0.011(2)
C(32)	2i	0.8229(4)	0.4708(4)	0.7334(3)	0.049(3)	0.064(3)	0.053(3)	0.000(3)	0.009(2)	0.006(3)
C(33)	2i	0.9073(5)	0.5343(4)	0.7159(4)	0.066(4)	0.064(4)	0.058(3)	−0.010(3)	−0.001(3)	0.012(3)
C(34)	2i	1.0209(5)	0.5047(5)	0.7078(4)	0.061(4)	0.081(4)	0.084(4)	−0.014(3)	0.017(3)	0.026(3)
C(35)	2i	1.0470(5)	0.4117(5)	0.7149(4)	0.046(3)	0.096(5)	0.070(4)	0.001(3)	0.010(3)	0.015(3)
C(36)	2i	0.9615(5)	0.3437(4)	0.7328(4)	0.050(3)	0.071(4)	0.054(3)	−0.001(3)	0.000(3)	0.014(3)
O(37)	2i	0.7680(3)	0.3136(2)	0.7600(3)	0.042(2)	0.062(2)	0.092(3)	0.001(2)	0.009(2)	0.022(2)
O(38)	2i	0.8909(4)	0.6283(3)	0.7034(3)	0.098(3)	0.068(3)	0.100(3)	−0.010(3)	0.015(3)	0.023(2)
C(39)	2i	0.7770(7)	0.6627(5)	0.7047(6)	0.115(6)	0.071(4)	0.131(6)	0.018(4)	0.011(5)	0.023(4)
C(40)	2i	0.9922(5)	0.2478(5)	0.7383(4)	0.048(3)	0.090(5)	0.067(4)	0.008(3)	0.003(3)	0.018(3)
N(41)	2i	0.9235(4)	0.1777(4)	0.7545(4)	0.053(3)	0.063(3)	0.093(4)	0.019(3)	−0.001(3)	0.012(3)
C(42)	2i	0.9533(6)	0.0730(5)	0.7524(5)	0.071(4)	0.097(5)	0.087(5)	0.019(4)	−0.005(4)	0.008(4)
C(43)	2i	0.9655(7)	0.0483(6)	0.8485(5)	0.137(7)	0.126(6)	0.108(6)	0.059(6)	0.055(5)	0.038(5)
C(44)	2i	0.9790(9)	−0.0684(7)	0.8401(8)	0.19(1)	0.132(8)	0.25(1)	0.099(8)	0.109(9)	0.119(8)
C(45)	2i	1.0947(8)	−0.0920(6)	0.8254(6)	0.163(9)	0.137(7)	0.144(8)	0.076(7)	0.032(7)	0.051(6)
N(46)	2i	0.6613(4)	0.1932(4)	0.9124(4)	0.081(3)	0.074(3)	0.065(3)	0.023(3)	0.015(3)	0.021(3)
O(47)	2i	0.6722(3)	0.1469(2)	0.8316(3)	0.066(2)	0.055(2)	0.065(2)	0.015(2)	0.016(2)	0.008(2)

Table 3. Continued.

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
O(48)	2i	0.7040(5)	0.1674(4)	0.9881(3)	0.165(5)	0.133(4)	0.066(3)	0.069(4)	0.009(3)	0.031(3)
O(49)	2i	0.6019(4)	0.2690(3)	0.9118(3)	0.113(3)	0.085(3)	0.061(2)	0.048(3)	0.023(2)	0.014(2)
N(50)	2i	0.3289(4)	0.1858(4)	0.7709(3)	0.045(3)	0.082(4)	0.090(4)	0.007(3)	0.025(3)	0.030(3)
O(51)	2i	0.4067(3)	0.1325(3)	0.7448(3)	0.052(2)	0.055(2)	0.123(3)	0.007(2)	0.035(2)	0.008(2)
O(52)	2i	0.2404(4)	0.1499(4)	0.7923(4)	0.056(3)	0.122(4)	0.169(5)	0.013(3)	0.051(3)	0.060(3)
O(53)	2i	0.3457(4)	0.2747(3)	0.7709(3)	0.070(3)	0.070(3)	0.140(4)	0.018(2)	0.044(3)	0.021(3)
N(54)	2i	0.5015(5)	0.3239(3)	0.5249(4)	0.081(4)	0.055(3)	0.054(3)	0.004(3)	0.002(3)	0.005(2)
O(55)	2i	0.4211(3)	0.2905(3)	0.5646(3)	0.061(2)	0.061(2)	0.065(2)	0.002(2)	0.002(2)	0.002(2)
O(56)	2i	0.6013(4)	0.3455(3)	0.5771(3)	0.075(3)	0.072(2)	0.064(2)	−0.006(2)	0.011(2)	0.017(2)
O(57)	2i	0.4846(5)	0.3339(4)	0.4405(3)	0.135(4)	0.132(4)	0.060(3)	−0.003(3)	−0.002(3)	0.036(3)

Acknowledgments. The authors gratefully acknowledge the financial support from FWO-Vlaanderen, K. U. Leuven and IWT (Belgium). KB and RVD are postdoctoral fellows of the FWO-Vlaanderen.

References

1. Binnemans, K.; Galyametdinov, Y. G.; Van Deun, R.; Bruce, D. W.; Collinson, S. R.; Polishchuk, A. P.; Bikchantaev, I.; Haase, W.; Prosvirin, A. V.; Tinchurina, L.; Litvinov, I.; Gubajdullin, A.; Rakhmatullin, A.; Uytterhoeven, K.; Van Meervelt, L.: Rare-Earth-Containing Magnetic Liquid Crystals. *J. Am. Chem. Soc.* **122** (2000) 4335-4344.
2. Galyametdinov, Y.; Athanassopoulou, M. A.; Griesar, K.; Kharitonova, O.; Bustamante, E. A. S.; Tinchurina, L.; Ovchinnikov, I.; Haase, W.: Synthesis and magnetic investigations on rare-earth-containing liquid crystals with large magnetic anisotropy. *Chem. Mater.* **8** (1996) 922-926.
3. Binnemans, K.; Görller-Walrand, C.: Lanthanide-containing liquid crystals and surfactants. *Chem. Rev.* **102** (2002) 2303-2346.
4. Van Meervelt, L.; Uytterhoeven, K.; Van Deun, R.; Moors, D.; Binnemans, K.: Crystal structure of tris(*N*-(*n*-butyl)-4-methoxy-2-hydroxybenzaldimine)-tris(nitrato)europium(III), Eu(LH)₃(NO₃)₃. *Z. Kristallogr. NCS* **218** (2003) 118-120.
5. Sheldrick, G. M.: Phase Annealing in SHELX-90: Direct Methods for Larger Structures. *Acta Crystallogr. A* **46** (1990) 467-473.
6. Sheldrick, G. M.: SHELXL-97. Program for the refinement of crystal structures. University of Göttingen, Germany 1997.
7. Spek, A. L.: PLATON, Molecular Geometry Program. University of Utrecht, The Netherlands 1998.