

Додаток Б

Характеристики рентгенівського експерименту та уточнення досліджених автором структур, координатні та теплові параметри атомів, а також параметри заселення статистичних позицій.

Для кожної структури, перед списком параметрів атомів наведені: порядковий номер та формула сполуки; емпірична формула та молекулярна маса формульної одиниці (M); форма та розмір кристалу, що був використаний для рентгенівського експерименту; структурна амплітуда $F(000)$ відбиття з індексами 000 (кількість “видимих” електронів в елементарній комірці); виміряна та розрахована густина кристалу ($\rho_{\text{вим.}}$ та $\rho_{\text{розрах.}}$); тип використаного рентгенівського випромінювання; лінійний коефіцієнт поглинання кристалу (μ); максимальний кут дифракції в ході експерименту ($2\theta_{\text{макс}}$); кількість вимірних рефлексів ($N_{\text{вим.}}$); кількість незалежних спостережуваних рефлексів ($N_{\text{незал.}}(F \geq n\sigma(F))$); кількість уточнюваних параметрів (P); індекс розбіжності для спостережуваних рефлексів (R1); зважений індекс розбіжності (wR1 для спостережуваних рефлексів або wR2 для всіх рефлексів); коефіцієнт екстинкції (ϵ); параметр Флека (x) (якщо уточнювався, для структур без центру симетрії); вагова схема (w); goodness-of-fit (Goof); висота максимального піку залишкової електронної густини ($\Delta\rho_{\text{макс}}$) та величини статистичного заселення позицій G. В списку параметрів атомів наведені еквівалентні теплові параметри (відповідники симетричним тензорам другого рангу, що характеризують анізотропні теплові коливання атомів) $U_{\text{екв}} = 1/3 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i a_j$ та $U_{\text{ізо}}$, або $B_{\text{екв/ізо}}$, що рівні $8\pi^2 U_{\text{екв/ізо}}$.

Таблиця Б.1

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **30**. $[\text{Cu}_2\text{Cl}_2(\text{АФА})]: \text{Cu}_2\text{Cl}_2\text{ONC}_8\text{H}_9$,

$M=333.2$, монокл. призма $0.4 \times 0.2 \times 0.2$ мм, $F(000)=656$, $\rho_{\text{вим.}}=2.03$ г/см³,

$\rho_{\text{розрах.}}=2.046(2)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=4.53$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=60^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1453$,

$N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1389$, $P=163$, $R1=0.028$, $wR1=0.031$, $w=[\sigma(F_0)^2 + 0.0004F_0^2]^{-1}$,

$\text{Goof}(F)=1.12$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.46$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
Cu(1)	0.08071(4)	0.10961(7)	-0.14396(7)	3.84(2)
Cu(2)	0.04790(4)	0.17704(8)	0.26177(7)	4.35(2)
Cl(1)	0.12440(8)	0.2911(2)	0.1115(1)	4.74(4)
Cl(2)	-0.06228(7)	0.1074(1)	-0.1414(2)	4.86(4)
O	0.1450(2)	0.3584(4)	0.5442(4)	4.4(1)
N	-0.0253(2)	0.2600(4)	0.4590(4)	3.4(1)
C(1)	0.1916(3)	0.0504(6)	-0.2764(6)	4.2(2)
C(2)	0.1283(3)	-0.0338(5)	-0.3837(5)	3.5(1)
C(3)	-0.1154(3)	0.2139(6)	0.4324(6)	4.1(1)
C(4)	-0.0040(3)	0.3521(5)	0.6107(5)	3.6(1)
C(5)	0.0811(3)	0.4059(5)	0.6620(5)	3.6(1)
C(6)	0.1130(4)	0.5010(6)	0.8148(6)	5.0(2)
C(7)	0.2004(4)	0.5132(7)	0.7905(8)	5.7(2)
C(8)	0.2176(4)	0.4268(7)	0.6277(8)	5.3(2)
H(11)	0.208(3)	0.155(6)	-0.274(7)	7(1)
H(12)	0.226(3)	-0.009(5)	-0.233(5)	3.9(9)
H(2)	0.107(3)	0.021(5)	-0.450(6)	5(1)
H(31)	-0.141(3)	0.265(5)	0.531(5)	5(1)
H(32)	-0.138(2)	0.242(4)	0.345(4)	2.6(7)
H(4)	-0.044(3)	0.388(5)	0.699(5)	5(1)
H(6)	0.079(3)	0.546(5)	0.907(6)	4(1)
H(7)	0.237(4)	0.566(8)	0.871(8)	8(2)
H(8)	0.267(4)	0.403(7)	0.562(8)	7(2)

Таблиця Б.2

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **31**. [Cu₂Cl₂(АБА)]: Cu₂Cl₂NC₁₀H₁₁,

M=331.2, монокл. призма 0.5 x 0.2 x 0.3 мм, F(000)=680, ρ_{вим.}=1.92 г/см³,

ρ_{розрах.}=1.945(2) г/см³, MoK_α, μ_{Mo}=4.18 мм⁻¹, 2θ_{макс}=65°, N_{вим.}=1890,

N_{незал.}(F ≥ 6σ(F))=1582, P=180, R1=0.030, wR1=0.030, w=1, GooF(F)=1.09,

Δρ_{макс}=0.36 е/Å³.

Атом	x	y	z	B _{екв/ізо} , Å ²
Cu(1)	-0.08514(4)	0.13776(7)	-0.10912(8)	3.68(2)
Cu(2)	0.04180(4)	0.24716(7)	0.16241(9)	4.29(2)
Cl(1)	-0.12377(9)	-0.1114(1)	-0.2775(2)	4.66(4)
Cl(2)	0.05374(8)	0.1430(2)	-0.1170(2)	5.46(4)
N	-0.0272(2)	0.4370(4)	0.2559(4)	3.1(1)
C(1)	-0.1931(3)	0.2605(6)	-0.0423(6)	4.0(1)
C(2)	-0.1318(3)	0.3616(5)	0.0363(6)	3.3(1)
C(3)	-0.1155(3)	0.4046(6)	0.2151(6)	3.6(1)
C(4)	-0.0082(3)	0.5823(5)	0.3405(5)	3.3(1)
C(5)	0.0747(3)	0.6450(5)	0.3922(5)	3.0(1)
C(6)	0.0832(3)	0.8101(5)	0.4798(6)	4.0(1)
C(7)	0.1591(4)	0.8780(6)	0.5278(7)	4.4(2)
C(8)	0.2288(3)	0.7819(6)	0.4945(7)	4.1(2)
C(9)	0.2217(3)	0.6175(6)	0.4116(6)	3.8(1)
C(10)	0.1460(3)	0.5506(5)	0.3613(6)	3.6(1)
H(11)	-0.222(2)	0.207(4)	0.012(5)	2.6(9)
H(12)	-0.208(3)	0.264(5)	-0.138(6)	4(1)
H(2)	-0.107(2)	0.431(4)	-0.011(5)	2.2(8)
H(31)	-0.145(3)	0.493(5)	0.262(6)	5(1)
H(32)	-0.130(2)	0.326(4)	0.255(5)	2.6(8)
H(4)	-0.049(3)	0.660(5)	0.366(5)	4(1)
H(6)	0.034(2)	0.869(4)	0.500(5)	2.7(9)
H(7)	0.162(3)	0.995(6)	0.585(6)	5(1)

Продовження табл. Б.2

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/изо}}$, Å ²
H(8)	0.283(3)	0.834(6)	0.524(6)	5(1)
H(9)	0.268(3)	0.549(5)	0.389(5)	4(1)
H(10)	0.143(3)	0.448(5)	0.306(6)	4(1)

Таблиця Б.3

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **32**. [Cu₂Br₂(АФА)]: Cu₂Br₂ONC₈H₉,

M=422.1, призма 0.35 x 0.25 x 0.25 мм, *F*(000)=1600, ρ_{вим.}=2.50 г/см³,

ρ_{розрах.}=2.474(3) г/см³, MoK_α, μ_{Mo}=11.3 мм⁻¹, 2θ_{макс}=48°, N_{вим.}=1075,

N_{незал.}(*F* ≥ 2σ(*F*))=1001, P=164, ε=0.00015(2), R1=0.029, wR1=0.029, w=[σ(*F*_o)² + 0.0006*F*_o²]⁻¹, GooF(*F*)=0.99, Δρ_{макс}=0.39 е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/изо}}$, Å ²
Cu(1)	0.33017(8)	-0.07863(6)	0.0177(1)	4.91(5)
Cu(2)	0.47907(9)	0.04768(7)	-0.1800(1)	5.49(5)
Br(1)	0.33727(7)	-0.12770(6)	0.23556(9)	5.50(4)
Br(2)	0.41751(6)	0.07054(5)	0.02849(8)	4.33(3)
O	0.4293(4)	0.1303(3)	-0.3868(6)	5.2(3)
N	0.3890(5)	-0.0313(4)	-0.3119(7)	3.9(3)
C(1)	0.2457(7)	-0.1915(5)	-0.0716(9)	5.2(4)
C(2)	0.2650(6)	-0.1337(5)	-0.1656(8)	3.8(3)
C(3)	0.3449(7)	-0.1179(5)	-0.2715(8)	5.0(4)
C(4)	0.3714(6)	-0.0134(5)	-0.4266(9)	4.4(4)
C(5)	0.3989(6)	0.0679(6)	-0.4749(9)	5.6(4)
C(6)	0.3953(9)	0.0976(8)	-0.594(1)	6.5(6)
C(7)	0.4266(9)	0.1826(8)	-0.583(1)	6.8(5)
C(8)	0.4445(9)	0.1988(7)	-0.460(1)	7.5(6)
H(1.1)	0.171(5)	-0.212(4)	-0.020(6)	4(2)
H(1.2)	0.292(5)	-0.224(4)	-0.050(6)	4(2)
H(2)	0.217(4)	-0.112(4)	-0.174(6)	3(2)

Продовження табл. Б.3

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
H(3.1)	0.398(5)	-0.141(4)	-0.254(7)	5(2)
H(3.2)	0.318(4)	-0.145(3)	-0.348(5)	2(2)
H(4)	0.348(4)	-0.053(4)	-0.462(6)	3(2)
H(6)	0.392(5)	0.080(4)	-0.653(6)	1(2)
H(7)	0.436(7)	0.222(5)	-0.638(9)	7(3)
H(8)	0.467(5)	0.235(4)	-0.416(6)	1(2)

Таблиця Б.4

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **33**. [CuBr(АБА)]: CuBrNC₁₀H₁₁,
 M=288.7, призма 0.45 x 0.3 x 0.08 мм, $F(000)=568$, $\rho_{\text{вим.}}=1.83$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=1.806(1)$ г/см³,
 $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=6.07$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=55^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1334$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 6\sigma(F))=911$, $P=149$, $R1=0.063$,
 $wR1=0.065$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0057F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.03$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.88$ е/Å³. Для C(1.1) и C(2.1)
 $G=0.63(9)$; для C(1.2) и C(2.2) $G=0.37(9)$.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
Cu	0.2777(1)	0.2232(1)	-0.3874(5)	5.52(8)
Br	0.3074(1)	0.1360(1)	-0.9025(4)	5.50(6)
N	0.242(1)	0.3526(8)	-0.506(3)	6.3(6)
C(1.1)	0.401(2)	0.481(3)	-0.366(9)	7(1)
C(1.2)	0.416(3)	0.446(4)	-0.43(1)	5(2)
C(2.1)	0.369(2)	0.399(3)	-0.506(7)	5(1)
C(2.2)	0.350(3)	0.454(5)	-0.48(1)	7(2)
C(3)	0.2953(8)	0.411(1)	-0.676(4)	4.7(5)
C(4)	0.1859(9)	0.391(1)	-0.492(4)	5.2(6)
C(5)	0.1226(8)	0.345(1)	-0.346(4)	4.8(6)
C(6)	0.063(1)	0.402(1)	-0.299(5)	7.2(7)
C(7)	0.005(1)	0.365(2)	-0.171(5)	7.8(8)
C(8)	0.003(1)	0.272(2)	-0.084(5)	7.5(7)
C(9)	0.059(1)	0.215(2)	-0.124(6)	7.2(8)

Продовження табл. Б.4

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
C(10)	0.112(1)	0.249(1)	-0.266(5)	6.7(7)
H(3.1)	0.304(5)	0.397(6)	-0.99(3)	2(3)
H(3.2)	0.280(5)	0.464(6)	-0.78(2)	1(2)
H(4)	0.181(3)	0.442(4)	-0.55(2)	1(1)
H(6)	0.071(6)	0.454(8)	-0.39(3)	6(4)
H(7)	-0.038(6)	0.395(7)	-0.13(3)	3(3)
H(8)	-0.034(6)	0.254(7)	0.01(4)	5(4)
H(9)	0.059(9)	0.171(9)	-0.09(4)	4(6)
H(10)	0.168(6)	0.213(7)	-0.24(3)	2(3)

Таблиця Б.5

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **34**. [CuCl(OAA)]: CuClONC₆H₁₁,
 M=212.2, голка 0.6 x 0.1 x 0.1 мм, $F(000)=432$, $\rho_{\text{вим.}}=1.64$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=1.667(4)$ г/см³,
 MoK_α, $\mu_{\text{Mo}}=2.92$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=60^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1522$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1409$, $P=135$, $R1=0.048$,
 $wR1=0.063$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0055F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.05$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=1.01$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
Cu	0.01518(4)	0.1858(1)	0.11641(8)	4.88(2)
Cl	-0.09315(8)	0.1319(2)	-0.1749(2)	4.65(3)
N	0.1060(3)	0.3153(5)	0.0350(5)	3.9(1)
O	0.0901(3)	0.3132(5)	-0.1611(5)	5.0 (1)
C(1)	-0.0206(4)	0.224(1)	0.3535(8)	6.0(2)
C(2)	0.0706(5)	0.250(1)	0.4008(8)	6.4(2)
C(3)	0.1222(6)	0.410(1)	0.4182(8)	7.4(3)
C(4)	0.1980(4)	0.421(1)	0.3445(8)	6.1(2)
C(5)	0.1750(3)	0.4046(7)	0.1328(7)	4.4(1)
C(6)	0.2342(4)	0.4982(8)	0.0484(9)	5.9(2)
H(O)	0.047(3)	0.255(8)	-0.204(7)	5(1)
H(1.1)	-0.064(5)	0.318(8)	0.300(8)	6(1)

Продовження табл. Б.5

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
H(1.2)	-0.048(5)	0.13(1)	0.378(8)	9(2)
H(2.1)	0.130(7)	0.18(1)	0.47(1)	13(3)
H(3.1)	0.153(6)	0.465(1)	0.54(1)	13(3)
H(3.2)	0.041(4)	0.43(1)	0.329(8)	8(2)
H(4.1)	0.237(4)	0.341(7)	0.398(7)	5(1)
H(4.2)	0.234(4)	0.531(9)	0.432(7)	7(1)
H(6.1)	0.235(7)	0.43(2)	-0.08(1)	16(3)
H(6.2)	0.228(5)	0.59(1)	0.050(9)	9(2)
H(6.3)	0.287(7)	0.44(2)	0.13(1)	15(3)

Таблиця Б.6

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **35**. [CuBr(OAA)]: CuBrONC₆H₁₁,
 M=256.6, голка 0.4 x 0.1 x 0.1 мм, $F(000)=504$, $\rho_{\text{вим.}}=1.90 \text{ г/см}^3$, $\rho_{\text{розрах.}}=1.922(2) \text{ г/см}^3$,
 $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=7.26 \text{ мм}^{-1}$, $2\theta_{\text{макс}}=58^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1016$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=930$, $P=135$, $R1=0.037$,
 $wR1=0.043$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0020F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.04$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.55 \text{ е/}\text{\AA}^3$.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
Cu	0.01924(7)	0.1857(1)	0.1211(2)	5.13(4)
Br	-0.09688(5)	0.1331(1)	-0.1818(1)	4.70(3)
N	0.1080(4)	0.3155(8)	0.0437(9)	4.3(2)
O	0.0947(4)	0.3146(8)	-0.1545(8)	5.5(2)
C(1)	-0.0208(6)	0.225(1)	0.352(1)	6.1(4)
C(2)	0.0672(7)	0.259(2)	0.402(1)	7.9(4)
C(3)	0.1238(9)	0.411(2)	0.4224(1)	9.6(5)
C(4)	0.1959(5)	0.418(1)	0.351(1)	6.0(3)
C(5)	0.1750(5)	0.4034(9)	0.141(1)	4.4(3)
C(6)	0.2350(6)	0.489(1)	0.059(2)	6.8(4)
H(O)	0.064(4)	0.233(9)	-0.19(1)	6(2)
H(1.1)	-0.048(4)	0.333(8)	0.32(1)	4(2)

Продовження табл. Б.6

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
H(1.2)	-0.037(4)	0.09(1)	0.38(1)	6(2)
H(2.1)	0.128(6)	0.20(1)	0.45(1)	9(3)
H(3.1)	0.144(4)	0.456(8)	0.558(9)	4(1)
H(3.2)	0.062(4)	0.439(9)	0.34(1)	6(2)
H(4.1)	0.239(6)	0.35(1)	0.39(1)	10(3)
H(4.2)	0.238(7)	0.50(1)	0.41(2)	14(4)
H(6.1)	0.231(6)	0.46(1)	-0.09(1)	10(3)
H(6.2)	0.231(5)	0.591(9)	0.07(1)	6(2)
H(6.3)	0.298(5)	0.47(1)	0.11(2)	12(3)

Таблиця Б.7

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **36**. [Cu₂Cl₂(A3AA)]: Cu₂Cl₂N₂C₁₂H₂₀,
 M=390.3, голка 0.5 x 0.1 x 0.1 мм, F(000)=1584, ρ_{вим.}=1.71 г/см³, ρ_{розрах.}=1.699(2) г/см³,
 MoK_α, μ_{Mo}=3.22 мм⁻¹, 2θ_{макс}=47°, N_{вим.}=2055, N_{незал.}(F ≥ 4σ(F))=1091, P=243, R1=0.027,
 wR1=0.027, w=[σ(F_o)² + 0.0004F_o²]⁻¹, GooF(F)=1.07, Δρ_{макс}=0.38 е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu(1)	0.58278(3)	0.06394(6)	0.71500(5)	3.55(2)
Cu(2)	0.69211(3)	0.28241(6)	0.75397(5)	3.81(2)
Cl(1)	0.60008(7)	0.2615(1)	0.6472(1)	4.11(4)
Cl(2)	0.67950(7)	-0.0304(1)	0.6683(1)	4.18(4)
N(1)	0.5985(2)	0.1286(3)	0.8570(3)	2.9(1)
N(2)	0.6683(2)	0.1692(3)	0.8653(3)	3.1(1)
C(1)	0.4972(3)	-0.0257(5)	0.6660(4)	4.8(2)
C(2)	0.4763(2)	0.0545(4)	0.7302(4)	3.7(2)
C(3)	0.4626(3)	0.0349(5)	0.8391(4)	4.0(2)
C(4)	0.4799(3)	0.1312(5)	0.9063(4)	4.0(2)
C(5)	0.5532(2)	0.1697(4)	0.9158(3)	2.9(1)
C(6)	0.5704(3)	0.2547(5)	0.9942(4)	4.5(2)

Продовження табл. Б.7

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
C(7)	0.6886(3)	0.0082(5)	0.9731(4)	4.6(2)
C(8)	0.7098(2)	0.1077(4)	0.9169(3)	3.1(1)
C(9)	0.7847(3)	0.1406(6)	0.9173(4)	5.6(2)
C(10)	0.8172(3)	0.1586(6)	0.8180(5)	5.9(2)
C(11)	0.8005(2)	0.2645(6)	0.7647(5)	5.6(2)
C(12)	0.7852(3)	0.2808(7)	0.6723(5)	7.6(3)
H(1.1)	0.496(2)	-0.003(4)	0.598(3)	6(1)
H(1.2)	0.506(2)	-0.094(3)	0.687(3)	2.0(9)
H(2.1)	0.460(2)	0.130(3)	0.710(3)	4(1)
H(3.1)	0.410(2)	0.004(5)	0.847(3)	6(1)
H(3.2)	0.483(2)	-0.023(3)	0.851(3)	1.9(9)
H(4.1)	0.460(2)	0.184(3)	0.890(2)	1(1)
H(4.2)	0.464(2)	0.119(4)	0.974(3)	5(1)
H(6.1)	0.533(2)	0.281(3)	1.015(3)	3(1)
H(6.2)	0.599(3)	0.311(5)	0.972(4)	8(2)
H(6.3)	0.601(3)	0.217(5)	1.045(4)	9(2)
H(7.1)	0.728(2)	-0.037(4)	0.998(3)	6(1)
H(7.2)	0.653(2)	0.022(4)	1.013(3)	5(1)
H(7.3)	0.661(3)	-0.040(5)	0.945(4)	8(2)
H(9.1)	0.805(2)	0.104(3)	0.952(3)	2.1(9)
H(9.2)	0.792(3)	0.215(5)	0.931(4)	12(2)
H(10.1)	0.876(2)	0.147(4)	0.843(4)	6(1)
H(10.2)	0.805(3)	0.093(6)	0.763(5)	12(2)
H(11.1)	0.814(4)	0.314(7)	0.818(6)	16(3)
H(12.1)	0.788(3)	0.342(7)	0.632(6)	17(3)
H(12.2)	0.770(3)	0.225(6)	0.651(5)	13(2)

Таблиця Б.8

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **37**. [Cu₂Br₂(A3AA)]:

Cu₂Br₂N₂C₁₂H₂₀, M=479.2, голка 0.4 x 0.1 x 0.1 мм, F(000)=1872, ρ_{вим.}=1.98 г/см³,
 ρ_{розрах.}=1.970(2) г/см³, MoK_α, μ_{Mo}=7.95 мм⁻¹, 2θ_{макс}=50°, N_{вим.}=1002, N_{незал.}(F ≥ 4σ(F))=738,
 P=243, R1=0.034, wR1=0.031, w=[σ(F_o)² + 0.0004F_o²]⁻¹, GooF(F)=1.15, Δρ_{макс}=0.39 е/Å³.

Атом	x	y	z	B _{екв/изо} , Å ²
Cu(1)	0.58125(8)	0.0542(1)	0.7121(1)	4.41(5)
Cu(2)	0.69315(7)	0.2670(1)	0.7507(1)	4.69(5)
Br(1)	0.59926(7)	0.2469(1)	0.63379(9)	4.95(4)
Br(2)	0.68147(7)	-0.0470(1)	0.6656(1)	4.89(4)
N(1)	0.5992(5)	0.1202(7)	0.8507(6)	3.7(3)
N(2)	0.6685(4)	0.1571(7)	0.8588(6)	3.4(3)
C(1)	0.4945(7)	-0.035(1)	0.668(1)	6.7(5)
C(2)	0.4733(5)	0.045(1)	0.7285(9)	4.7(4)
C(3)	0.4611(6)	0.032(1)	0.8364(9)	5.4(5)
C(4)	0.4789(6)	0.126(1)	0.8999(8)	4.7(4)
C(5)	0.5547(6)	0.1608(9)	0.9092(7)	3.4(4)
C(6)	0.5704(5)	0.239(1)	0.9856(9)	5.4(4)
C(7)	0.6856(6)	-0.001(1)	0.9649(9)	5.3(4)
C(8)	0.7090(6)	0.0974(9)	0.9112(8)	3.6(4)
C(9)	0.7843(6)	0.123(1)	0.9093(9)	6.9(5)
C(10)	0.8176(7)	0.167(2)	0.832(1)	12.7(8)
C(11)	0.7998(6)	0.236(1)	0.761(1)	8.5(6)
C(12)	0.7892(7)	0.266(1)	0.679(1)	9.1(6)
H(1.1)	0.495(4)	0.001(7)	0.607(6)	5(3)
H(1.2)	0.504(4)	-0.099(7)	0.686(7)	5(3)
H(2.1)	0.462(4)	0.126(7)	0.708(7)	6(3)
H(3.1)	0.414(5)	0.014(7)	0.837(7)	5(3)
H(3.2)	0.488(4)	-0.038(7)	0.861(6)	3(2)
H(4.1)	0.456(5)	0.187(7)	0.888(6)	5(3)
H(4.2)	0.463(4)	0.118(7)	0.964(6)	4(3)

Продовження табл. Б.8

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
H(6.1)	0.533(4)	0.286(7)	1.009(6)	5(3)
H(6.2)	0.609(5)	0.299(9)	0.964(8)	11(4)
H(6.3)	0.601(5)	0.229(8)	1.017(8)	9(3)
H(7.1)	0.734(6)	-0.019(7)	1.000(8)	9(3)
H(7.2)	0.662(6)	0.021(8)	1.025(8)	10(4)
H(7.3)	0.652(5)	-0.072(8)	0.932(7)	5(3)
H(9.1)	0.810(5)	0.066(9)	0.930(8)	11(4)
H(9.2)	0.795(5)	0.162(8)	0.960(8)	11(4)
H(10.1)	0.878(5)	0.138(8)	0.838(8)	9(3)
H(10.2)	0.805(5)	0.110(8)	0.765(8)	10(3)
H(11.1)	0.812(6)	0.304(9)	0.821(9)	14(4)
H(12.1)	0.794(6)	0.338(8)	0.665(8)	13(4)
H(12.2)	0.779(6)	0.215(8)	0.638(8)	13(4)

Таблиця Б.9

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **38**. $[\text{Cu}^{\text{I}}\text{Cl}_{2-x}\text{Br}_x(\text{АГУ})]$ $x = 0.516$:
 $\text{CuCl}_{1.484}\text{Br}_{0.516}\text{N}_3\text{C}_4\text{H}_{10}$, $M=257.5$, призма $0.4 \times 0.2 \times 0.2$ мм, $F(000)=509$, $\rho_{\text{вим.}}=1.95$ г/см³,
 $\rho_{\text{розрах.}}=1.980(2)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=5.53$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=63^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1074$,
 $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1018$, $P=132$, $R1=0.023$, $wR1=0.024$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0004F_o^2]^{-1}$,
 $\text{Goof}(F)=0.98$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.35$ е/Å³.

$G(X_i)$: $X(1) = 0.726(3)\text{Cl} + 0.274(3)\text{Br}$; $X(2) = 0.758(3)\text{Cl} + 0.242(3)\text{Br}$.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu	0.51287(3)	0.80710(7)	0.0	2.80(1)
X(1)	0.52789(4)	0.07782(9)	0.1555(1)	2.61(1)
X(2)	0.64809(5)	0.7128(1)	-0.0681(1)	3.55(2)
N(1)	0.2757(2)	0.7166(4)	0.2743(5)	2.64(8)
N(2)	0.2776(2)	0.7674(6)	0.5800(6)	4.0(1)
N(3)	0.1556(2)	0.6786(5)	0.4428(6)	3.46(9)
C(1)	0.4344(3)	0.5837(6)	-0.0059(8)	3.5(1)

Продовження табл. Б.9

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
C(2)	0.3888(3)	0.7237(5)	0.0554(6)	2.65(9)
C(3)	0.3662(3)	0.7545(6)	0.2496(6)	2.9(1)
C(4)	0.2374(2)	0.7224(5)	0.4328(7)	2.50(9)
H(1.1)	0.466(3)	0.501(6)	0.087(8)	4(1)
H(1.2)	0.440(3)	0.558(6)	-0.135(7)	2.8(9)
H(2.1)	0.367(3)	0.772(5)	-0.009(7)	3(1)
H(3.1)	0.400(4)	0.663(8)	0.33(1)	7(1)
H(3.2)	0.377(3)	0.863(5)	0.292(6)	2.6(8)
H(1)	0.249(3)	0.710(5)	0.180(8)	3(1)
H(2)	0.322(2)	0.800(5)	0.575(7)	3(1)
H(3)	0.254(3)	0.775(5)	0.65(1)	4(1)
H(4)	0.141(2)	0.687(4)	0.362(5)	0.3(6)
H(5)	0.129(3)	0.678(6)	0.531(9)	4(1)

Таблиця Б.10

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **39**. $[\text{Cu}^1\text{Br}_2(\text{АГУ})]: \text{CuBr}_2\text{N}_3\text{C}_4\text{H}_{10}$,
 $M=323.5$, призма $0.35 \times 0.3 \times 0.2$ мм, $F(000)=308$, $\rho_{\text{вим.}}=2.40$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=2.425(3)$ г/см³,
 $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=12.0$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=63^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1669$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1453$, $P=131$, $R1=0.030$,
 $wR1=0.032$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0007F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.04$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.58$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu	0.51718(8)	0.78364(9)	0.06834(9)	2.92(2)
Br(1)	0.42871(6)	0.91688(6)	-0.23723(7)	2.56(1)
Br(2)	0.80457(6)	0.66263(7)	0.03490(7)	2.64(1)
N(1)	0.0277(5)	0.8375(6)	0.3443(6)	2.7(1)
N(2)	0.0960(6)	0.7268(6)	0.6462(6)	3.2(1)
N(3)	-0.1579(6)	0.7014(8)	0.5385(7)	4.3(2)
C(1)	0.4278(8)	0.6320(8)	0.3013(9)	3.3(2)
C(2)	0.2968(6)	0.7184(7)	0.2099(7)	2.5(1)

Продовження табл. Б.10

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
C(3)	0.1936(6)	0.8746(6)	0.2779(7)	2.7(1)
C(4)	-0.0094(6)	0.7551(6)	0.5101(6)	2.5(1)
H(1.1)	0.463(7)	0.683(7)	0.397(9)	3(1)
H(1.2)	0.477(8)	0.529(8)	0.272(9)	4(1)
H(2.1)	0.268(8)	0.667(8)	0.122(9)	5(1)
H(3.1)	0.172(7)	0.947(6)	0.202(8)	3(1)
H(3.2)	0.249(5)	0.918(5)	0.375(6)	1.4(9)
H(1)	-0.022(6)	0.843(6)	0.266(7)	2(1)
H(2)	0.187(8)	0.760(7)	0.646(9)	4(1)
H(3)	0.076(8)	0.680(7)	0.732(9)	4(1)
H(4)	-0.21(1)	0.73(1)	0.45(1)	8(2)
H(5)	-0.188(9)	0.684(9)	0.68(1)	6(2)

Таблиця Б.11

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **40**. $[\text{Cu}_2\text{Cl}_{3-x}\text{Br}_x(\text{ДАГУ})]$ $x = 1.364$:

$\text{Cu}_2\text{Cl}_{1.64}\text{Br}_{1.36}\text{N}_3\text{C}_7\text{H}_{14}$, $M=434.3$, трикл. призма $0.25 \times 0.2 \times 0.15$ мм, $F(000)=421$,
 $\rho_{\text{вим.}}=2.20$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=2.226(2)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=8.16$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=49^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1348$,
 $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1175$, $P=195$, $R1=0.050$, $wR1=0.054$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0022F_o^2]^{-1}$,
 $\text{Goof}(F)=1.16$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=1.04$ е/Å³. $G(X_i)$: $X(1) = 0.474(9)\text{Cl} + 0.526(9)\text{Br}$;
 $X(2) = 0.732(8)\text{Cl} + 0.268(8)\text{Br}$; $X(3) = 0.43(1)\text{Cl} + 0.57(1)\text{Br}$.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
Cu(1)	0.8990(2)	0.4878(2)	-0.1748(2)	3.76(5)
Cu(2)	0.4137(2)	0.7639(2)	0.3775(2)	4.42(5)
X(1)	0.8221(2)	0.2002(2)	-0.3269(2)	3.52(5)
X(2)	0.1536(2)	0.5143(2)	-0.1100(2)	3.18(7)
X(3)	0.5311(2)	0.2109(3)	-0.6715(2)	6.14(8)
N(1)	0.808(1)	0.831(1)	0.012(1)	3.7(3)
N(2)	0.740(1)	0.951(1)	0.265(1)	3.4(3)

Продовження табл. Б.11

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
N(3)	0.765(1)	0.086(1)	0.046(1)	3.9(3)
C(1)	0.876(2)	0.598(2)	-0.385(2)	4.3(4)
C(2)	0.800(1)	0.656(1)	-0.266(1)	3.1(3)
C(3)	0.845(2)	0.823(2)	-0.156(2)	3.7(4)
C(4)	0.771(1)	0.954(1)	0.107(1)	2.9(3)
C(5)	0.727(1)	0.812(1)	0.343(1)	3.2(4)
C(6)	0.590(1)	0.691(1)	0.279(2)	3.8(4)
C(7)	0.494(2)	0.701(2)	0.150(2)	4.1(4)
H(1.1)	0.970(9)	0.660(9)	-0.40(1)	1(2)
H(1.2)	0.83(1)	0.50(2)	-0.48(2)	5(4)
H(2.1)	0.70(1)	0.61(1)	-0.28(1)	3(2)
H(3.1)	0.80(1)	0.88(1)	-0.20(1)	2(3)
H(3.2)	0.93(1)	0.85(1)	-0.16(1)	2(2)
H(5.1)	0.746(9)	0.85(1)	0.46(1)	2(2)
H(5.2)	0.81(1)	0.77(1)	0.32(1)	4(3)
H(6.1)	0.58(1)	0.59(1)	0.32(1)	3(2)
H(7.1)	0.44(1)	0.63(1)	0.13(2)	4(3)
H(7.2)	0.507(8)	0.78(1)	0.08(1)	1(2)
H(1)	0.821(7)	0.781(8)	0.058(8)	1(1)
H(2)	0.670(8)	0.024(9)	0.299(9)	1(2)
H(3)	0.71(1)	0.14(1)	0.11(2)	5(3)
H(4)	0.76(2)	0.08(2)	-0.03(2)	11(5)

Таблиця Б.12

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **41**. $[\text{Cu}_3\text{Cl}_{4-x}\text{Br}_x(\text{ТАГУ})] \cdot x = 1.23$:

$\text{Cu}_3\text{Cl}_{2.77}\text{Br}_{1.23}\text{N}_3\text{C}_{10}\text{H}_{18}$, $M=567.4$, сплющ. Призма $0.4 \times 0.3 \times 0.25$ мм, $F(000)=828$,
 $\rho_{\text{вим.}}=2.15$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=2.185(2)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=7.23$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=55^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1324$,

$N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=486$, $P=87$, $R1=0.031$, $wR1=0.031$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0005F_o^2]^{-1}$,

$\text{Goof}(F)=1.09$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.49$ е/Å³. Уточнення проводилось по неусереднених відбиттях.

$G(X_i)$: $X(1) = 0.04(1)\text{Cl} + 0.96(1)\text{Br}$; $X(2) = 0.910(7)\text{Cl} + 0.090(7)\text{Br}$.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
Cu	0.19806(9)	0.04001(9)	0.1447(1)	3.50(3)
X(1)	0	0	0.0	3.54(4)
X(2)	0.1811(2)	0.2237(1)	0.2292(1)	3.07(6)
N	0.3133(6)	-0.2161(6)	0.1494(5)	3.2(2)
C(1)	0.4074(9)	0.1616(9)	0.0833(7)	4.0(3)
C(2)	0.3648(7)	0.0157(7)	0.0730(5)	2.9(2)
C(3)	0.4257(7)	-0.0622(7)	0.1313(6)	3.0(2)
C(4)	1/3	-1/3	0.1512(8)	2.8(2)
H(1.1)	0.463(6)	0.207(6)	0.119(4)	1(1)
H(1.2)	0.38(1)	0.21(1)	0.034(6)	5(2)
H(2.1)	0.319(6)	-0.027(7)	0.030(4)	2(1)
H(3.1)	0.467(8)	-0.016(9)	0.192(6)	5(2)
H(3.2)	0.475(7)	-0.070(7)	0.092(5)	3(2)
H(N)	0.246(8)	-0.234(8)	0.166(5)	2(2)

Таблиця Б.13

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **42**. [Cu¹₃Br₄(ТАГУ)]:

Cu₃Br₃N₃C₁₀H₁₈, M=690.5, сплющ. Призма 0.5 x 0.4 x 0.2 мм, F(000)=978,

$\rho_{\text{вим.}}=2.45 \text{ г/см}^3$, $\rho_{\text{розрах.}}=2.495(2) \text{ г/см}^3$, MoK α , $\mu_{\text{Mo}}=12.8 \text{ мм}^{-1}$, $2\theta_{\text{макс}}=55^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1567$,

$N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=512$, P=85, R1=0.037, wR1=0.038, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0011F_o^2]^{-1}$,

Goof(F)=1.01, $\Delta\rho_{\text{макс}}=1.00 \text{ е/}\text{\AA}^3$. Уточнення проводилось по неусереднених відбиттях.

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}$, \AA^2
Cu	0.1903(1)	0.0299(1)	0.1381(1)	4.35(4)
Br(1)	0	0	0.0	4.32(4)
Br(2)	0.19234(9)	0.22693(9)	0.2274(1)	3.51(3)
N	0.3105(7)	-0.2198(7)	0.1418(6)	4.0(3)
C(1)	0.400(1)	0.149(1)	0.0770(6)	4.6(4)
C(2)	0.357(1)	0.007(1)	0.0687(6)	4.0(3)
C(3)	0.4183(9)	-0.0681(9)	0.1263(5)	3.4(3)
C(4)	1/3	-1/3	0.143(1)	3.5(3)
H(1.1)	0.464(9)	0.22(1)	0.126(6)	3(2)
H(1.2)	0.387(9)	0.21(1)	0.037(6)	5(2)
H(2.1)	0.32(1)	-0.03(1)	0.025(8)	3(3)
H(3.1)	0.472(9)	-0.021(9)	0.185(7)	3(2)
H(3.2)	0.47(1)	-0.08(1)	0.092(6)	2(2)
H(N)	0.24(1)	-0.23(1)	0.151(6)	2(2)

Таблиця Б.14

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **43**. $[\text{Cu}^{\text{I}}(\text{NO}_3)_2(\text{AGY})]$: $\text{CuO}_6\text{N}_5\text{C}_4\text{H}_{10}$,
 $M=287.7$, голка $0.52 \times 0.13 \times 0.09$ мм, $F(000)=584$, $\rho_{\text{вим.}}=1.86$ г/см³, $\rho_{\text{розрах.}}=1.898(3)$ г/см³,
 $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=2.28$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=58^\circ$, $N_{\text{вим.}}=975$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 2\sigma(F))=919$, $P=185$, $R1=0.024$,
 $wR1=0.025$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0007F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.08$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.24$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
Cu	0.43853(5)	0.17990(3)	0.06209(7)	3.14(1)
O(1)	0.2625(3)	0.2219(2)	-0.0356(5)	4.06(8)
O(2)	0.0788(3)	0.1898(2)	-0.1901(6)	5.1(1)
O(3)	0.2202(3)	0.0869(2)	-0.1399(5)	4.05(9)
O(4)	0.5355(3)	0.2732(2)	-0.1120(4)	3.70(8)
O(5)	0.5876(3)	0.1515(2)	-0.2618(4)	3.94(8)
O(6)	0.6668(3)	0.2795(2)	-0.3633(5)	5.6(1)
N(1)	0.2060(3)	0.0824(2)	0.3543(5)	3.00(8)
N(2)	0.1537(3)	-0.0646(2)	0.2725(6)	4.0(1)
N(3)	-0.0025(3)	0.0407(2)	0.2525(6)	3.9(1)
N(4)	0.1860(3)	0.1651(2)	-0.1230(5)	3.15(9)
N(5)	0.5991(3)	0.2341(2)	-0.2497(5)	3.29(8)
C(1)	0.5600(4)	0.1079(3)	0.2306(7)	3.1(1)
C(2)	0.4376(4)	0.0678(2)	0.2318(6)	3.0(1)
C(3)	0.3438(4)	0.0700(3)	0.4055(6)	3.0(1)
C(4)	0.1195(4)	0.0193(2)	0.2945(6)	2.65(9)
H(1.1)	0.587(3)	0.143(2)	0.343(6)	2.6(8)
H(1.2)	0.621(4)	0.089(2)	0.151(6)	2.2(8)
H(2.1)	0.413(4)	0.023(3)	0.136(7)	5(1)
H(3.1)	0.370(3)	0.113(2)	0.483(5)	1.6(7)
H(3.2)	0.350(4)	0.020(3)	0.485(7)	4(1)
H(1)	0.184(3)	0.125(2)	0.353(5)	2.5(7)
H(2)	0.221(3)	-0.076(2)	0.292(5)	1.8(6)
H(3)	0.096(4)	-0.100(3)	0.239(7)	6(1)
H(4)	-0.021(3)	0.091(2)	0.265(5)	2.8(7)
H(5)	-0.053(3)	0.005(2)	0.214(6)	4.0(9)

Таблиця Б.15

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **44**. [Cu¹₂Cl_{3-x}Br_x(ДАІТУ)] x = 0.757:

Cu₂Cl_{2.24}Br_{0.76}SN₂C₉H₁₇, M=452.8, призма 0.35 x 0.3 x 0.2 мм, F(000)=895,

$\rho_{\text{вим.}}=1.94 \text{ г/см}^3$, $\rho_{\text{розрах.}}=1.946(3) \text{ г/см}^3$, MoK α , $\mu_{\text{Mo}}=5.23 \text{ мм}^{-1}$, $2\theta_{\text{макс}}=50^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1279$,

$N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=1090$, P=158, R1=0.024, wR2=0.070, $w = [\sigma^2(F_o^2) + (0.046P)^2 + 1.13P]^{-1}$,

де $P = [F_o^2 + 2F_c^2]/3$, GooF(F^2)=1.07, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.35 \text{ е/}\text{\AA}^3$. G(X_i): X(1) = 0.535(5)Cl +

0.465(5)Br; X(2) = 0.897(5)Cl + 0.103(5)Br; X(3) = 0.802(5)Cl + 0.198(5)Br.

Атом	x	y	z	$U_{\text{екв/изо}}$, \AA^2
Cu(1)	0.10827(9)	0.1062(1)	0.44009(7)	0.0498(3)
Cu(2)	0.34422(9)	0.4287(1)	0.49731(7)	0.0476(3)
X(1)	0.3067(1)	0.1697(1)	0.51419(9)	0.0533(6)
X(2)	-0.0494(1)	0.1506(2)	0.5570(1)	0.0444(7)
X(3)	0.5202(1)	0.5098(2)	0.61754(9)	0.0465(7)
S	-0.3575(2)	0.1523(3)	0.2528(1)	0.0592(6)
N(1)	-0.1911(5)	0.1491(6)	0.3733(4)	0.039(1)
N(2)	-0.3748(5)	0.2200(6)	0.4137(4)	0.039(2)
C(1)	0.0847(8)	0.269(1)	0.3540(5)	0.059(2)
C(2)	0.0262(8)	0.1414(9)	0.3218(5)	0.051(2)
C(3)	-0.1131(7)	0.0749(9)	0.3191(5)	0.055(2)
C(4)	-0.3040(6)	0.1755(8)	0.3556(5)	0.035(2)
C(5)	-0.3381(6)	0.2498(7)	0.5004(4)	0.035(2)
C(6)	-0.2448(6)	0.3952(7)	0.5120(5)	0.037(2)
C(7)	-0.1922(7)	0.4889(8)	0.4508(6)	0.046(2)
C(8)	-0.5284(7)	0.1455(9)	0.2596(5)	0.059(3)
C(9)	-0.6041(9)	0.006(1)	0.2973(7)	0.094(4)
H(1)	-0.1593	0.1780	0.4213	0.047
H(2)	-0.4496	0.2325	0.3990	0.047
H(1A)	0.0367	0.3300	0.3792	0.071
H(1B)	0.1738	0.2980	0.3514	0.071
H(2A)	0.0797	0.0859	0.2975	0.061

Продовження табл. Б.15

Атом	x	y	z	$U_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
H(3A)	-0.1432	0.0776	0.2621	0.066
H(3B)	-0.1259	-0.0277	0.3356	0.066
H(5A)	-0.2992	0.1712	0.5212	0.042
H(5B)	-0.4147	0.2500	0.5332	0.042
H(6)	-0.2212	0.4231	0.5665	0.044
H(7A)	-0.2129	0.4658	0.3953	0.055
H(7B)	-0.1354	0.5765	0.4641	0.055
H(8A)	-0.5420	0.2286	0.2926	0.071
H(8B)	-0.5611	0.1563	0.2039	0.071
H(9A)	-0.5910	-0.0766	0.2653	0.113
H(9B)	-0.6939	0.0092	0.2972	0.113
H(9C)	-0.5761	-0.0023	0.3537	0.113

Таблиця Б.16

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **45**. $[\text{Cu}^1\text{Cl}_2(\text{H}^+\text{АДБА})]$:

$\text{CuCl}_2\text{N}_2\text{C}_{12}\text{H}_{17}$, $M=323.7$, голка $0.4 \times 0.08 \times 0.08$ мм, $F(000)=664$, $\rho_{\text{вим.}}=1.54$ г/см³,
 $\rho_{\text{розрах.}}=1.560(3)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=2.01$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=52^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1144$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=989$,
 $P=222$, $R1=0.035$, $wR1=0.036$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0008F_o^2]^{-1}$, $\text{Goof}(F)=1.08$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.33$ е/Å³.

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu	0.47303(3)	0.7099(1)	-0.0166(1)	3.14(2)
Cl(1)	0.41882(6)	0.7104(3)	-0.2703(2)	3.23(5)
Cl(2)	0.54809(6)	0.6325(3)	-0.1252(2)	3.00(5)
N(1)	0.5655(2)	0.7251(9)	0.3399(8)	3.4(2)
N(2)	0.7939(2)	0.8378(8)	0.1978(9)	3.9(2)
C(1)	0.4403(3)	0.853(1)	0.205(1)	3.4(2)
C(2)	0.4890(2)	0.8626(9)	0.2364(9)	2.6(2)
C(3)	0.5144(3)	0.748(1)	0.386(1)	3.2(3)
C(4)	0.5990(3)	0.829(1)	0.401(1)	3.1(2)

Продовження табл. Б.16

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
C(5)	0.6483(2)	0.823(1)	0.348(1)	3.1(2)
C(6)	0.6815(3)	0.937(1)	0.444(1)	4.1(2)
C(7)	0.7292(3)	0.942(1)	0.401(1)	4.0(2)
C(8)	0.7471(2)	0.831(1)	0.250(1)	3.4(2)
C(9)	0.7137(3)	0.711(1)	0.156(1)	4.0(2)
C(10)	0.6668(3)	0.709(1)	0.202(1)	3.7(2)
C(11)	0.8282(3)	0.955(2)	0.300(2)	5.2(3)
C(12)	0.8114(3)	0.726(2)	0.042(2)	5.5(4)
H(N)	0.570(2)	0.657(7)	0.260(8)	2(1)
H(1.1)	0.425(3)	0.75(1)	0.25(1)	5(2)
H(1.2)	0.427(2)	0.952(9)	0.154(9)	2(2)
H(2.1)	0.508(2)	0.972(9)	0.184(9)	5(2)
H(3.1)	0.504(2)	0.640(8)	0.392(7)	1(1)
H(3.2)	0.515(2)	0.82(1)	0.51(1)	5(2)
H(4.1)	0.591(2)	0.926(8)	0.495(8)	4(1)
H(6.1)	0.671(2)	0.030(7)	0.512(8)	3(1)
H(7.1)	0.748(2)	0.04(1)	0.46(1)	7(2)
H(9.1)	0.723(2)	0.634(8)	0.068(8)	2(1)
H(10.1)	0.646(2)	0.642(7)	0.158(7)	1(1)
H(11.1)	0.817(3)	0.058(9)	0.31(1)	3(2)
H(11.2)	0.836(3)	0.89(1)	0.44(1)	9(3)
H(11.3)	0.861(3)	0.98(1)	0.23(1)	11(3)
H(12.1)	0.809(3)	0.62(1)	0.07(1)	8(4)
H(12.2)	0.788(3)	0.74(1)	-0.08(1)	6(2)
H(12.3)	0.847(2)	0.754(8)	0.02(1)	5(2)

Таблиця Б.17

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **46**. [Cu^IBr₂(H⁺АДБА)]:

CuBr₂N₂C₁₂H₁₇, M=412.6, голка 0.5 x 0.08 x 0.08 мм, F(000)=808, ρ_{вим.}=1.86 г/см³,
 ρ_{розрах.}=1.880(2) г/см³, MoK_α, μ_{Mo}=7.34 мм⁻¹, 2θ_{макс}=53°, N_{вим.}=1158, N_{незал.}(F ≥ 3σ(F))=965,
 P=222, R1=0.053, wR1=0.054, w=[σ(F_o)² + 0.0022F_o²]⁻¹, GooF(F)=1.14, Δρ_{макс}=0.93 е/Å³.

Атом	x	y	z	B _{екв/ізо} , Å ²
Cu	0.47326(8)	0.7078(4)	-0.0120(3)	3.30(7)
Br(1)	0.41686(7)	0.7249(3)	-0.2707(2)	3.06(5)
Br(2)	0.55163(7)	0.6342(3)	-0.1329(3)	2.89(5)
N(1)	0.5652(5)	0.724(2)	0.331(2)	2.7(4)
N(2)	0.7921(6)	0.821(2)	0.207(2)	3.8(5)
C(1)	0.4433(6)	0.854(2)	0.201(2)	2.2(4)
C(2)	0.4879(6)	0.865(2)	0.240(2)	2.3(5)
C(3)	0.5142(7)	0.744(2)	0.377(2)	3.3(6)
C(4)	0.5997(6)	0.814(2)	0.409(2)	2.7(5)
C(5)	0.6475(7)	0.814(2)	0.351(2)	2.6(5)
C(6)	0.6798(6)	0.919(3)	0.447(3)	3.7(6)
C(7)	0.7256(9)	0.921(3)	0.403(3)	4.9(7)
C(8)	0.7448(7)	0.808(3)	0.256(3)	3.3(5)
C(9)	0.7122(9)	0.702(3)	0.164(3)	5.0(8)
C(10)	0.6655(8)	0.697(3)	0.210(3)	3.7(6)
C(11)	0.8272(9)	0.932(3)	0.301(3)	6.6(9)
C(12)	0.8093(8)	0.709(4)	0.055(3)	7.0(9)
H(N)	0.576(6)	0.65(2)	0.25(2)	4(4)
H(1.1)	0.418(5)	0.79(2)	0.25(2)	1(4)
H(1.2)	0.431(4)	0.94(2)	0.16(1)	1(3)
H(2.1)	0.509(6)	0.95(2)	0.19(2)	3(4)
H(3.1)	0.505(5)	0.64(2)	0.40(2)	4(3)
H(3.2)	0.509(7)	0.83(3)	0.50(3)	8(6)
H(4.1)	0.589(6)	0.92(2)	0.50(2)	6(5)

Продовження табл. Б.17

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
H(6.1)	0.671(5)	0.01(2)	0.53(2)	2(3)
H(7.1)	0.740(8)	0.98(3)	0.45(3)	3(7)
H(9.1)	0.723(5)	0.64(2)	0.09(2)	1(3)
H(10.1)	0.647(6)	0.63(2)	0.15(2)	2(4)
H(11.1)	0.818(5)	0.06(2)	0.31(2)	4(3)
H(11.2)	0.829(8)	0.91(3)	0.42(3)	11(7)
H(11.3)	0.85(1)	0.93(4)	0.22(4)	13(9)
H(12.1)	0.812(6)	0.61(2)	0.09(2)	6(5)
H(12.2)	0.787(6)	0.74(2)	-0.07(2)	4(4)
H(12.3)	0.842(6)	0.77(2)	0.02(2)	5(4)

Таблиця Б.18

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **47**. [$\text{Cu}^1_3\text{Cl}_4(\text{H}^+\text{АДБА})$]:
 $\text{Cu}_3\text{Cl}_4\text{N}_2\text{C}_{12}\text{H}_{17}$, $M=521.7$, голка $0.3 \times 0.06 \times 0.06$ мм, $F(000)=1032$, $\rho_{\text{вим.}}=2.02$ г/см³,
 $\rho_{\text{розрах.}}=1.995(1)$ г/см³, $\text{MoK}\alpha$, $\mu_{\text{Mo}}=4.38$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=48^\circ$, $N_{\text{вим.}}=1124$,
 $N_{\text{незал.}}(F \geq 3\sigma(F))=1030$, $P=258$, $R1=0.035$, $wR1=0.037$, $w=[\sigma(F_o)^2 + 0.0009F_o^2]^{-1}$,
 $\text{Goof}(F)=1.10$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.47$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$B_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu(1)	0.52567(4)	0.0531(2)	0.8080(2)	3.18(4)
Cu(2)	0.57784(4)	0.2219(2)	0.1676(2)	4.42(5)
Cu(3)	0.59926(4)	-0.1907(2)	0.1155(2)	4.55(5)
Cl(1)	0.58715(7)	-0.0329(4)	0.8494(4)	2.95(8)
Cl(2)	0.51478(7)	0.2338(4)	0.1200(4)	2.71(8)
Cl(3)	0.60318(8)	0.0009(4)	0.3590(4)	3.69(9)
Cl(4)	0.61902(9)	-0.5059(4)	0.0978(5)	4.26(9)
N(1)	0.5957(2)	0.433(1)	0.676(1)	2.9(2)
N(2)	0.7794(2)	0.477(1)	0.580(1)	4.1(3)
C(1)	0.4943(3)	0.249(2)	0.663(2)	3.1(3)

Продовження табл. Б.18

Атом	x	y	z	$B_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
C(2)	0.5309(3)	0.293(2)	0.617(1)	2.2(3)
C(3)	0.5546(3)	0.465(1)	0.681(2)	2.8(3)
C(4)	0.6199(3)	0.539(2)	0.595(2)	2.9(3)
C(5)	0.6621(3)	0.519(2)	0.597(2)	2.9(3)
C(6)	0.6848(3)	0.661(2)	0.499(2)	3.7(4)
C(7)	0.7240(3)	0.650(2)	0.496(2)	3.5(4)
C(8)	0.7409(3)	0.494(2)	0.584(2)	3.7(4)
C(9)	0.7167(3)	0.347(2)	0.681(2)	3.8(4)
C(10)	0.6791(3)	0.362(2)	0.682(2)	3.8(4)
C(11)	0.8037(3)	0.630(2)	0.489(2)	5.2(4)
C(12)	0.7962(4)	0.311(2)	0.670(2)	6.5(5)
H(1.1)	0.480(2)	0.31(1)	0.74(1)	3(2)
H(1.2)	0.481(2)	0.18(1)	0.59(1)	2(2)
H(2.1)	0.539(2)	0.206(8)	0.534(8)	1(1)
H(3.1)	0.551(2)	0.59(1)	0.61(1)	3(2)
H(3.2)	0.548(2)	0.50(1)	0.81(1)	3(2)
H(N)	0.604(2)	0.32(1)	0.75(1)	3(2)
H(4.1)	0.611(2)	0.650(9)	0.545(9)	1(2)
H(6.1)	0.671(2)	0.782(9)	0.435(9)	1(2)
H(7.1)	0.740(2)	0.76(1)	0.43(1)	5(2)
H(9.1)	0.728(3)	0.24(1)	0.75(1)	4(2)
H(10.1)	0.663(2)	0.29(1)	0.74(1)	1(2)
H(11.1)	0.798(2)	0.62(1)	0.36(1)	2(2)
H(11.2)	0.801(2)	0.80(1)	0.53(1)	2(2)
H(11.3)	0.821(3)	0.57(2)	0.46(1)	5(3)
H(12.1)	0.821(3)	0.30(1)	0.64(1)	4(2)
H(12.2)	0.772(4)	0.14(2)	0.67(2)	10(4)
H(12.3)	0.791(2)	0.36(1)	0.75(1)	1(2)

Таблиця Б.19

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **48**. [Cu(ATCK)]NO₃·1/2H₂O:

CuSO_{3.5}N₄C₄H₁₀, M=265.8, брусок 0.14 x 0.08 x 0.07 мм, F(000)= 560, ρ_{вим.}=1.76 г/см³,
 ρ_{розрах.}=1.751 г/см³, CuK_α, μ_{Cu}=4.88 мм⁻¹, 2θ_{макс}=148°, N_{вим.}=2258, N_{незал.}(F ≥ 4σ(F))=1670,
 P=124, R1=0.052, wR2=0.147, w = [σ²(F²_о) + (0.093P)² + 0.13P]⁻¹, де P = [F²_о + 2F²_с]/3,
 GooF(F²)=1.08, Δρ_{макс}=0.84 е/Å³.

Атом	x	y	z	U _{екв/ізо} , Å ²
Cu	0.14975(7)	0.35091(8)	0.24013(3)	0.0508(2)
S	0.1163(1)	0.6854(1)	0.27541(4)	0.0428(2)
O(1)	0.2080(6)	0.6614(7)	0.6323(2)	0.101(1)
O(2)	0.1016(7)	0.7885(6)	0.5392(2)	0.099(1)
O(3)	0.2315(5)	0.5034(6)	0.5410(2)	0.0781(9)
C(1)	0.3683(6)	0.1802(7)	0.2763(3)	0.068(1)
C(2)	0.2973(5)	0.2495(7)	0.3290(2)	0.0581
C(3)	0.3632(5)	0.4316(7)	0.3700(2)	0.061(1)
N(4)	0.2337(5)	0.5454(6)	0.3972(2)	0.0590(8)
C(5)	0.1217(5)	0.6623(5)	0.3606(2)	0.0454(8)
N(6)	0.0189(5)	0.7706(6)	0.3949(2)	0.0590(8)
N(7)	-0.1327(4)	0.8517(5)	0.3627(2)	0.0551(8)
N(8)	0.1805(5)	0.6515(6)	0.5707(2)	0.0598(9)
H(1A)	0.4628	0.2450	0.2635	0.08(1)
H(1B)	0.3232	0.0673	0.2525	0.08(1)
H(2)	0.2029	0.1823	0.3409	0.05(1)
H(3A)	0.4454	0.3860	0.4068	0.08(1)
H(3B)	0.4209	0.5207	0.3418	0.08(1)
H(4)	0.2286	0.5373	0.4398	0.06(1)
H(6)	0.0463	0.7907	0.4373	0.11(2)
H(7A)	-0.1430	0.9804	0.3769	0.08(1)
H(7B)	-0.2194	0.7797	0.3752	0.08(1)

Таблиця Б.20

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **49**. [Cu(ATCK)]CF₃COO:

CuSF₃O₂N₃C₆H₉, M=307.8, пластинка 0.20 x 0.16 x 0.03 мм, F(000)=616, ρ_{вим.}=1.99 г/см³, ρ_{розрах.}=1.998 г/см³, CuK_α, μ_{Cu}=5.32 мм⁻¹, 2θ_{макс}=148°, N_{вим.}=2379, N_{незал.}(F ≥ 4σ(F))=2188, P=152, R1=0.046, wR2=0.121, x=0.34(4), w=[σ²(F²_о) + (0.084P)² + 0.134P]⁻¹, де P = [F²_о + 2F²_c]/3, GooF(F²)=1.07, Δρ_{макс}=0.66 е/Å³.

Атом	x	y	z	U _{екв/изо} , Å ²
Cu	0.57379(9)	0.68023(6)	0.55795(3)	0.0313(2)
S	0.8995(1)	0.6292(1)	0.51330(4)	0.0264(2)
F(1)	0.6073(6)	0.1901(5)	0.2853(2)	0.079(1)
F(2)	0.3486(6)	0.0439(4)	0.2693(2)	0.073(1)
F(3)	0.4317(6)	0.2104(4)	0.1860(1)	0.0592(8)
O(1)	0.1049(5)	0.3084(4)	0.2744(2)	0.0434(7)
O(2)	0.3581(5)	0.3814(4)	0.3489(2)	0.0477(8)
C(1)	0.3949(7)	0.4934(5)	0.6011(2)	0.0393(9)
C(2)	0.4422(6)	0.4634(4)	0.5291(2)	0.0326(8)
C(3)	0.6102(6)	0.3549(4)	0.5070(2)	0.0333(8)
N(4)	0.7171(5)	0.4007(4)	0.4390(2)	0.0321(7)
C(5)	0.8486(6)	0.5158(4)	0.4365(2)	0.0252(7)
N(6)	0.9446(6)	0.5350(4)	0.3708(2)	0.0323(7)
N(7)	1.0795(5)	0.6578(4)	0.3586(2)	0.0302(6)
C(8)	0.4191(8)	0.1866(6)	0.2606(2)	0.0429(9)
C(9)	0.2783(7)	0.3050(5)	0.2986(2)	0.0346(9)
H(1A)	0.4670	0.4465	0.6396	0.05(1)
H(1B)	0.2901	0.5611	0.6124	0.05(1)
H(2)	0.3682	0.5115	0.4914	0.09(2)
H(3A)	0.7063	0.3489	0.5480	0.034(8)
H(3B)	0.5542	0.2525	0.4997	0.034(8)
H(4)	0.6935	0.3502	0.3984	0.05(1)
H(6)	0.9229	0.4703	0.3352	0.05(1)
H(7A)	1.0488	0.7037	0.3148	0.040(9)
H(7B)	1.2055	0.6197	0.3547	0.040(9)

Таблиця Б.21

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **50**. [Cu₂(ATCK)₂(SO₄)]:
 Cu₂S₃O₄N₆C₈H₁₈, M=485.5, брусок 0.13 x 0.13 x 0.19 мм, F(000)= 984, ρ_{вим.}=1.93 г/см³,
 ρ_{розрах.}=1.9255(6) г/см³, CuK_α, μ_{Cu}=6.89 мм⁻¹, 2θ_{макс}=148°, N_{вим.}=6690,
 N_{незал.}(F ≥ 4σ(F))=4803, P=440, ε=0.00013(3), R1=0.071, wR2=0.209, w = [σ²(F_о) +
 (0.115P)² + 6.49P]⁻¹, де P = [F_о² + 2F_с²]/3, GooF(F²)=1.05, Δρ_{макс}=0.95 е/Å³.

Атом	x	y	z	U _{екв/изо} , Å ²
Cu(1)	0.3897(1)	0.18313(9)	0.50154(7)	0.0417(3)
Cu(2)	0.0056(1)	0.2661(1)	0.46981(7)	0.0418(3)
Cu(3)	0.8878(1)	0.1828(1)	-0.05215(7)	0.0424(3)
Cu(4)	0.4981(1)	0.2635(1)	-0.00567(7)	0.0442(3)
S(1)	0.1366(2)	0.1835(2)	0.5499(1)	0.0356(4)
S(2)	0.8739(3)	0.1067(2)	0.0815(1)	0.0485(5)
S(3)	0.6312(2)	0.1844(2)	-0.0990(1)	0.0362(4)
S(4)	0.3754(2)	0.1072(2)	0.3564(1)	0.0443(5)
S(5)	0.2369(2)	0.4802(1)	0.3618(1)	0.0323(4)
S(6)	0.7406(2)	0.4827(1)	0.1340(1)	0.0327(4)
O(1)	0.3810(7)	0.5151(5)	0.3210(5)	0.064(2)
O(2)	0.2379(7)	0.5518(5)	0.4458(4)	0.055(2)
O(3)	0.1223(8)	0.4913(6)	0.3007(5)	0.066(2)
O(4)	0.1957(6)	0.3622(5)	0.3820(4)	0.043(1)
O(5)	0.8885(8)	0.5195(6)	0.1758(6)	0.073(2)
O(6)	0.7348(8)	0.5531(5)	0.0625(4)	0.057(2)
O(7)	0.6303(9)	0.4929(6)	0.2018(5)	0.074(2)
O(8)	0.6967(6)	0.3642(4)	0.0966(4)	0.042(1)
C(1)	0.488(1)	0.1086(9)	0.5941(6)	0.056(2)
C(2)	0.4741(9)	0.2049(7)	0.6367(5)	0.045(2)
C(3)	0.354(1)	0.2039(7)	0.7031(5)	0.047(2)
N(4)	0.2944(8)	0.2940(6)	0.6979(4)	0.044(2)
C(5)	0.2001(8)	0.2957(6)	0.6325(4)	0.036(2)

Продовження табл. Б.21

Атом	x	y	z	$U_{\text{екв/ізо}}$, Å ²
N(6)	0.1543(9)	0.3831(6)	0.6348(4)	0.049(2)
N(7)	0.0596(8)	0.3975(6)	0.5669(4)	0.042(2)
C(8)	0.816(1)	0.240(1)	0.3936(7)	0.064(3)
C(9)	0.868(1)	0.1525(9)	0.3735(6)	0.058(2)
C(10)	0.949(2)	0.138(1)	0.2881(6)	0.074(3)
N(11)	0.984(1)	0.2316(7)	0.2350(5)	0.065(2)
C(12)	0.957(1)	0.2284(7)	0.1464(5)	0.045(2)
N(13)	1.0050(8)	0.3285(6)	0.1127(5)	0.046(2)
N(14)	0.9690(8)	0.3385(5)	0.0205(5)	0.043(2)
C(15)	0.964(1)	0.0999(8)	-0.1592(6)	0.056(2)
C(16)	0.9636(9)	0.1986(8)	-0.1854(5)	0.045(2)
C(17)	0.846(1)	0.2046(7)	-0.2513(5)	0.044(2)
N(18)	0.7912(7)	0.2972(5)	-0.2274(4)	0.039(1)
C(19)	0.6951(8)	0.2956(6)	-0.1622(4)	0.034(1)
N(20)	0.6511(9)	0.3871(6)	-0.1504(4)	0.046(2)
N(21)	0.5540(8)	0.3959(6)	-0.0810(4)	0.046(2)
C(22)	0.317(1)	0.237(1)	0.0729(7)	0.069(3)
C(23)	0.369(1)	0.1492(9)	0.0770(6)	0.059(3)
C(24)	0.462(1)	0.1362(9)	0.1549(6)	0.067(3)
N(25)	0.501(1)	0.2315(7)	0.2239(5)	0.065(2)
C(26)	0.4660(8)	0.2293(7)	0.3111(5)	0.040(2)
N(27)	0.5102(8)	0.3294(6)	0.3591(4)	0.044(2)
N(28)	0.4730(7)	0.3398(5)	0.4518(4)	0.041(1)
H(1A)	0.4208	0.0394	0.6057	0.06(2)
H(1B)	0.5633	0.1123	0.5534	0.06(2)
H(2)	0.5418	0.2733	0.6242	0.07(3)
H(3A)	0.2733	0.1332	0.6921	0.06(2)
H(3B)	0.3932	0.2079	0.7644	0.06(2)

Продовження табл. Б.21

Атом	x	y	z	$U_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
H(4)	0.3215	0.3495	0.7393	0.05(3)
H(6)	0.1834	0.4339	0.6799	0.11(5)
H(7A)	0.1053	0.4612	0.5412	0.04(2)
H(7B)	-0.0237	0.4034	0.5924	0.04(2)
H(8A)	0.8303	0.2945	0.3533	0.09(3)
H(8B)	0.7670	0.2445	0.4475	0.09(3)
H(9)	0.8525	0.0989	0.4149	0.10(4)
H(10A)	1.0401	0.1254	0.3046	0.08(3)
H(10B)	0.8878	0.0718	0.2510	0.08(3)
H(11)	1.0267	0.2966	0.2634	0.09(4)
H(13)	1.0573	0.3867	0.1467	0.08(4)
H(14A)	1.0508	0.3807	-0.0060	0.04(2)
H(14B)	0.9003	0.3731	0.0197	0.04(2)
H(15A)	0.8913	0.0339	-0.1817	0.06(2)
H(15B)	1.0376	0.0977	-0.1186	0.06(2)
H(16)	1.0369	0.2642	-0.1625	0.09(4)
H(17A)	0.8866	0.2116	-0.3117	0.05(2)
H(17B)	0.7631	0.1351	-0.2537	0.05(2)
H(18)	0.8225	0.3556	-0.2569	0.04(2)
H(20)	0.6830	0.4399	-0.1856	0.17(8)
H(21A)	0.4709	0.4015	-0.1060	0.09(3)
H(21B)	0.5971	0.4590	-0.0443	0.09(3)
H(22A)	0.3380	0.2939	0.1204	0.06(2)
H(22B)	0.2597	0.2401	0.0226	0.06(2)
H(23)	0.3457	0.0938	0.0284	0.05(2)
H(24A)	0.4075	0.0691	0.1832	0.07(2)
H(24B)	0.5522	0.1263	0.1313	0.07(2)
H(25)	0.5521	0.2955	0.2065	0.11(5)

Продовження табл. Б.21

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
H(27)	0.5614	0.3877	0.3337	0.13(6)
H(28A)	0.4045	0.3746	0.4574	0.04(2)
H(28B)	0.5544	0.3820	0.4851	0.04(2)

Таблиця Б.22

Координатні і теплові параметри атомів в структурі **50**. $[\text{Cu}^{\text{I}}(\text{ATCK})(\text{H}^+ \text{ATCK})]\text{SiF}_6$:
 $\text{CuS}_2\text{SiF}_6\text{N}_6\text{C}_8\text{H}_{19}$, $M=469.0$, пластинка $0.60 \times 0.28 \times 0.04$ мм, $F(000)=952$, $\rho_{\text{вим.}}=1.75$ г/см³,
 $\rho_{\text{розрах.}}=1.737$ г/см³, $\text{Cu}K_{\alpha}$, $\mu_{\text{Cu}}=5.16$ мм⁻¹, $2\theta_{\text{макс}}=148^\circ$, $N_{\text{вим.}}=6618$, $N_{\text{незал.}}(F \geq 4\sigma(F))=2763$,
 $P=227$, $R1=0.049$, $wR2=0.153$, $w = [\sigma^2(F^2_o) + (0.087P)^2 + 0.395P]^{-1}$, де $P = [F^2_o + 2F^2_c]/3$,
 $\text{Goof}(F^2)=1.05$, $\Delta\rho_{\text{макс}}=0.45$ е/Å³.

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{екв/ізо}}, \text{Å}^2$
Cu	0.22736(4)	0.00807(6)	0.26478(5)	0.0570(2)
S(1)	0.27694(6)	0.23038(9)	0.32614(8)	0.0519(3)
S(2)	0.13058(6)	0.0250(1)	0.08792(9)	0.0618(3)
Si	0.41976(5)	0.6063(1)	0.27625(8)	0.0418(2)
F(1)	0.3136(1)	0.5969(3)	0.2558(2)	0.0695(7)
F(2)	0.4114(2)	0.6575(3)	0.1328(2)	0.0732(7)
F(3)	0.4187(2)	0.7611(2)	0.3254(3)	0.0703(7)
F(4)	0.5262(1)	0.6136(3)	0.2969(2)	0.0628(6)
F(5)	0.4263(1)	0.5552(2)	0.4215(2)	0.0520(5)
F(6)	0.4232(2)	0.4477(2)	0.2333(2)	0.0621(6)
C(1)	0.2421(4)	-0.1196(5)	0.4139(4)	0.074(1)
C(2)	0.1826(3)	-0.0357(5)	0.4261(4)	0.070(1)
C(3)	0.1964(3)	0.0812(5)	0.5105(4)	0.070(1)
N(4)	0.2841(2)	0.1202(4)	0.5428(3)	0.0580(8)
C(5)	0.3244(2)	0.1826(4)	0.4668(3)	0.0469(8)
N(6)	0.4084(2)	0.2025(4)	0.5071(3)	0.0623(9)
N(7)	0.4558(2)	0.2754(3)	0.4376(3)	0.0485(7)

Продовження табл. Б.22

Атом	x	y	z	$U_{\text{екв/ізо}}, \text{\AA}^2$
C(8)	0.0302(8)	-0.161(2)	-0.351(1)	0.237(8)
C(9)	0.0625(5)	-0.122(1)	-0.2756(8)	0.149(4)
C(10)	0.0901(3)	-0.0073(6)	-0.1919(4)	0.081(2)
N(11)	0.1753(2)	-0.0297(4)	-0.1230(3)	0.0599(9)
C(12)	0.1994(2)	-0.0190(4)	-0.0035(3)	0.0471(8)
N(13)	0.2814(2)	-0.0463(4)	0.0384(3)	0.0567(8)
N(14)	0.3155(2)	-0.0481(3)	0.1620(3)	0.0526(7)
H(1A)	0.2966	-0.1091	0.4586	0.089
H(1B)	0.2300	-0.1899	0.3605	0.089
H(2)	0.1286	-0.0485	0.3803	0.084
H(3A)	0.1636	0.1549	0.4720	0.084
H(3B)	0.1751	0.0600	0.5838	0.084
H(4)	0.3112	0.1022	0.6144	0.070
H(6)	0.4325	0.1702	0.5756	0.075
H(7A)	0.497(1)	0.227(2)	0.420(2)	0.058
H(7B)	0.477(2)	0.345(2)	0.479(1)	0.058
H(7C)	0.4228(9)	0.301(2)	0.370(2)	0.058
H(8A)	-0.0042	-0.1087	-0.4074	0.284
H(8B)	0.0342	-0.2510	-0.3644	0.284
H(9)	0.0911	-0.1927	-0.2351	0.179
H(10A)	0.0896	0.0728	-0.2391	0.097
H(10B)	0.0505	0.0036	-0.1366	0.097
H(11)	0.2138	-0.0519	-0.1636	0.072
H(13)	0.3141	-0.0632	-0.0126	0.068
H(14A)	0.3604	0.0066	0.1767	0.063
H(14B)	0.3340	-0.1298	0.1836	0.063