

## Appendix C

### The Crystallographic data

Table 21. Non - hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of  
[Cu(etu)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
CU(1)	1/3	2/3	0.6640(1)	* 0.0384(2)
S(1)	0.42894(5)	0.55892(5)	0.6642(1)	* 0.0419(4)
N(11)	0.6063(2)	0.7470(2)	0.6245(2)	* 0.047(2)
N(12)	0.6120(2)	0.5804(2)	0.6223(2)	* 0.046(1)
C(1)	0.5543(2)	0.6328(2)	0.6361(1)	* 0.034(1)
C(111)	0.7148(3)	0.7805(2)	0.6024(2)	* 0.048(2)
C(121)	0.7160(2)	0.6615(2)	0.5997(1)	* 0.041(2)
CU(2)	1	1	0.6710(1)	* 0.0351(2)
S(2)	0.97886(5)	0.81243(5)	0.6679(1)	* 0.0354(3)
N(21)	0.8071(2)	0.7618(2)	0.7201(2)	* 0.040(1)
N(22)	0.7929(2)	0.6028(2)	0.6933(2)	* 0.045(1)
C(2)	0.8544(2)	0.7230(2)	0.6945(1)	* 0.031(1)
C(211)	0.6988(2)	0.6637(2)	0.7376(1)	* 0.041(2)
C(221)	0.6926(2)	0.5513(2)	0.7197(1)	* 0.042(2)
S(3)	2/3	4/3	0.6249(1)	* 0.0232(3)
O(1)	0.6539(1)	1.2184(1)	0.6386(1)	* 0.040(1)
O(2)	2/3	4/3	0.5837(2)	* 0.044(1)

Table 22. Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of  
[Cu(etu)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(11)	0.576(5)	0.784(4)	0.632(1)	0.07(1)
H(12)	0.595(3)	0.514(3)	0.6267(8)	0.038(7)
H(111A)	0.707(3)	0.804(3)	0.578(1)	0.056(9)
H(111B)	0.786(4)	0.845(4)	0.612(1)	0.08(1)
H(121A)	0.705(3)	0.633(3)	0.5754(9)	0.047(8)
H(121B)	0.791(4)	0.670(3)	0.610(1)	0.060(9)
H(21)	0.834(3)	0.828(3)	0.726(1)	0.06(1)
H(22)	0.793(3)	0.557(4)	0.680(1)	0.045(9)
H(211A)	0.701(3)	0.658(3)	0.763(1)	0.044(8)
H(211B)	0.625(3)	0.675(3)	0.732(4)	0.041(7)
H(221A)	0.620(3)	0.498(3)	0.708(1)	0.056(9)
H(221B)	0.709(3)	0.509(3)	0.738(1)	0.052(8)

Table 23. Non - hydrogen thermal parameters of  $[\text{Cu}(\text{etu})_3]_2\text{SO}_4$ .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
CU(1)	2U12	2U12	0.0396(2)	0.0189(1)	0	0
S(1)	0.0388(3)	0.0389(3)	0.0505(3)	0.0213(2)	0.0018(2)	0.0082(2)
N(11)	0.054(1)	0.0322(9)	0.060(1)	0.0266(9)	0.014(1)	0.0042(8)
N(12)	0.042(1)	0.0313(9)	0.069(1)	0.0216(8)	0.0066(9)	0.0037(9)
C(1)	0.034(1)	0.0309(9)	0.039(1)	0.0183(8)	-0.0069(8)	-0.0017(7)
C(111)	0.049(1)	0.038(1)	0.058(2)	0.022(1)	0.011(1)	0.006(1)
C(121)	0.040(1)	0.038(1)	0.045(1)	0.0200(9)	-0.0019(9)	-0.0056(9)
CU(2)	2U12	2U12	0.0403(2)	0.01623(7)	0	0
S(2)	0.0341(2)	0.0309(2)	0.0413(2)	0.0165(2)	0.0069(2)	-0.0001(2)
N(21)	0.043(1)	0.0282(8)	0.042(1)	0.0131(8)	0.0089(7)	-0.0042(7)
N(22)	0.050(1)	0.0269(9)	0.049(1)	0.0127(8)	0.0105(9)	-0.0076(8)
C(2)	0.0323(9)	0.0301(9)	0.0293(9)	0.0153(7)	-0.0037(7)	-0.0033(7)
C(211)	0.034(1)	0.038(1)	0.041(1)	0.0110(9)	0.0060(8)	-0.0033(9)
C(221)	0.043(1)	0.0306(9)	0.041(1)	0.0091(9)	0.0019(9)	-0.0017(8)
S(3)	2U12	2U12	0.0299(4)	0.00991(9)	0	0
O(1)	0.0361(8)	0.0260(7)	0.060(1)	0.0170(6)	-0.0135(7)	0.0034(6)
O(2)	2U12	2U12	0.029(1)	0.0260(6)	0	0

Table 24. Non - hydrogen atom coordinates and anisotropic thermal parameters of  $[\text{Cu}_2(\text{detu})_6](\text{NO}_3)_2$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2	PP
CU(1)	0.60633(2)	0.41627(2)	0.48825(1)	* 0.0206(1)	
S(1)	0.60947(4)	0.25562(3)	0.54802(3)	* 0.0218(2)	
S(2)	0.76629(4)	0.41234(3)	0.37356(3)	* 0.0198(2)	
S(3)	0.66999(4)	0.62573(3)	0.62417(3)	* 0.0176(2)	
O(1)	1.1088(1)	0.2404(1)	0.8834(1)	* 0.048(1)	
O(2)	1.1311(1)	0.0797(1)	0.74587(9)	* 0.0354(8)	
O(3)	1.2938(1)	0.1494(1)	0.91844(8)	* 0.0342(8)	
N(1)	1.1784(1)	0.1560(1)	0.8487(1)	* 0.0240(8)	
N(11)	0.8291(2)	0.2072(1)	0.6914(1)	* 0.030(1)	
N(12)	0.8815(1)	0.4082(1)	0.6987(1)	* 0.0243(9)	
N(21)	0.7646(1)	0.1654(1)	0.2912(1)	* 0.0216(8)	
N(22)	0.9703(1)	0.2956(1)	0.4498(1)	* 0.0210(8)	
N(31)	0.5917(1)	0.5284(1)	0.7623(1)	* 0.0189(8)	
N(32)	0.7026(1)	0.7414(1)	0.8458(1)	* 0.0194(8)	
C(1)	0.7861(2)	0.2923(1)	0.6531(1)	* 0.0209(9)	
C(111)	0.7354(2)	0.0779(2)	0.6489(2)	* 0.036(1)	
C(112)	0.6144(3)	0.0664(2)	0.7065(2)	* 0.045(2)	
C(121)	1.0255(2)	0.4588(2)	0.7964(2)	* 0.035(1)	
C(122b)	1.0476(4)	0.5928(3)	0.8689(3)	* 0.034(2)	0.5000(-)
C(122a)	1.0033(4)	0.5200(4)	0.9056(3)	* 0.037(3)	0.5000(-)
C(2)	0.8379(2)	0.2806(1)	0.3706(1)	* 0.0182(9)	
C(211)	0.6163(2)	0.1342(2)	0.1998(1)	* 0.027(1)	
C(212)	0.6369(2)	0.1546(2)	0.0973(1)	* 0.034(1)	

Table 24. (continued).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2	PP
C(221)	1.0411(2)	0.1930(1)	0.4578(1)	* 0.026(1)	
C(222)	1.1836(2)	0.2405(2)	0.5632(1)	* 0.031(1)	
C(3)	0.6532(1)	0.6323(1)	0.7541(1)	* 0.0162(8)	
C(311)	0.5648(2)	0.5235(1)	0.8653(1)	* 0.026(1)	
C(312)	0.5226(3)	0.3880(2)	0.8503(2)	* 0.039(1)	
C(321)	0.7805(2)	0.8605(1)	0.8489(1)	* 0.025(1)	
C(322)	0.9546(2)	0.8729(2)	0.8685(2)	* 0.039(1)	

Table 25. Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of  
 $[\text{Cu}_2(\text{detu})_6](\text{NO}_3)_2$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) Å <sup>2</sup>	PP
H(11)	0.913(2)	0.225(1)	0.745(1)	0.030(5)	
H(111A)	0.682(2)	0.046(2)	0.566(1)	0.040(5)	
H(111B)	0.806(2)	0.029(2)	0.658(1)	0.041(5)	
H(112A)	0.661(2)	0.095(2)	0.789(1)	0.039(5)	
H(112B)	0.552(2)	-0.023(2)	0.673(1)	0.045(5)	
H(112C)	0.542(2)	0.115(2)	0.689(1)	0.043(5)	
H(12)	0.847(2)	0.456(1)	0.669(1)	0.020(4)	
H(121A)	1.102(3)	0.411(2)	0.777(2)	-0.000(6)	0.500(-)
H(121B)	1.041(3)	0.409(3)	0.827(2)	0.12(1)	
H(121C)	1.108(3)	0.528(3)	0.783(2)	0.029(8)	0.500(-)
H(122aA)	0.943(4)	0.447(3)	0.911(3)	0.05(1)	0.500(-)
H(122aC)	1.128(4)	0.593(3)	0.956(3)	0.18(1)	
H(122bA)	1.052(4)	0.626(3)	0.808(3)	0.05(1)	0.500(-)
H(122bB)	0.953(2)	0.603(2)	0.903(1)	0.055(6)	
H(21)	0.802(2)	0.104(1)	0.288(1)	0.022(4)	
H(211A)	0.552(2)	0.183(1)	0.234(1)	0.014(3)	
H(211B)	0.568(2)	0.045(1)	0.177(1)	0.030(4)	
H(212A)	0.690(2)	0.243(2)	0.116(1)	0.044(5)	
H(212B)	0.702(2)	0.105(2)	0.066(1)	0.036(5)	
H(212C)	0.542(2)	0.141(1)	0.042(1)	0.032(4)	
H(22)	1.021(2)	0.369(1)	0.493(1)	0.024(4)	
H(221A)	1.064(2)	0.152(1)	0.390(1)	0.034(4)	
H(221B)	0.970(2)	0.128(1)	0.462(1)	0.021(4)	

Table 25. (continued).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2	PP
H(222A)	1.221(2)	0.172(2)	0.566(1)	0.055(6)	
H(222B)	1.156(2)	0.280(2)	0.633(2)	0.068(6)	
H(222C)	1.265(2)	0.310(2)	0.563(1)	0.057(6)	
H(31)	0.569(2)	0.464(1)	0.706(1)	0.024(4)	
H(311A)	0.658(2)	0.575(1)	0.931(1)	0.023(4)	
H(311B)	0.481(2)	0.568(1)	0.878(1)	0.028(4)	
H(312A)	0.608(2)	0.350(2)	0.838(2)	0.071(7)	
H(312B)	0.431(2)	0.342(2)	0.787(2)	0.046(5)	
H(312C)	0.500(2)	0.386(2)	0.917(2)	0.055(6)	
H(32)	0.700(2)	0.742(1)	0.905(1)	0.024(4)	
H(321A)	0.730(2)	0.866(1)	0.779(1)	0.015(4)	
H(321B)	0.766(2)	0.930(1)	0.908(1)	0.032(4)	
H(322A)	0.972(2)	0.808(2)	0.809(1)	0.037(5)	
H(322B)	1.005(2)	0.958(2)	0.874(2)	0.059(6)	
H(322C)	1.009(2)	0.867(2)	0.939(1)	0.041(5)	

Table 26. Non - hydrogen thermal parameters of  $[\text{Cu}(\text{etu})_3]_2\text{SO}_4$ .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
CU(1)	0.02423(9)	0.02372(9)	0.01672(8)	0.00964(7)	0.00797(7)	0.00924(7)
S(1)	0.0234(2)	0.0217(2)	0.0193(2)	0.0062(1)	0.0032(1)	0.0096(1)
S(2)	0.0203(2)	0.0195(2)	0.0220(2)	0.0076(1)	0.0100(1)	0.0082(1)
S(3)	0.0186(2)	0.0200(2)	0.0139(1)	0.0045(1)	0.0057(1)	0.0065(1)
O(1)	0.0560(8)	0.0440(7)	0.0330(7)	0.0364(7)	0.0000(6)	0.0041(6)
O(2)	0.0451(7)	0.0310(6)	0.0187(5)	0.0131(5)	0.0004(5)	0.0029(5)
O(3)	0.0332(6)	0.0454(7)	0.0219(5)	0.0209(5)	0.0032(5)	0.0118(5)
N(1)	0.0281(7)	0.0214(6)	0.0210(6)	0.0068(5)	0.0044(5)	0.0092(5)
N(11)	0.0299(7)	0.0292(7)	0.0291(7)	0.0119(6)	0.0019(6)	0.0149(6)
N(12)	0.0229(6)	0.0257(7)	0.0225(6)	0.0074(5)	0.0037(5)	0.0098(5)
N(21)	0.0190(6)	0.0196(6)	0.0236(6)	0.0082(5)	0.0060(5)	0.0053(5)
N(22)	0.0210(6)	0.0185(6)	0.0202(6)	0.0063(5)	0.0055(5)	0.0046(5)
N(31)	0.0244(6)	0.0181(6)	0.0136(5)	0.0052(5)	0.0071(5)	0.0051(5)
N(32)	0.0207(6)	0.0214(6)	0.0147(5)	0.0050(5)	0.0065(5)	0.0054(5)
C(1)	0.0243(7)	0.0243(7)	0.0177(6)	0.0119(6)	0.0096(5)	0.0088(6)
C(111)	0.046(1)	0.0250(9)	0.036(1)	0.0167(8)	0.0050(8)	0.0144(8)
C(112)	0.062(1)	0.029(1)	0.041(1)	0.004(1)	0.012(1)	0.0168(9)
C(121)	0.0249(9)	0.037(1)	0.0309(9)	0.0100(8)	0.0002(7)	0.0068(8)
C(122)	0.034(2)	0.033(2)	0.030(2)	0.003(2)	0.002(1)	0.013(2)
C(122a)	0.035(2)	0.045(2)	0.023(2)	0.006(2)	0.006(1)	0.007(2)
C(2)	0.0176(6)	0.0210(7)	0.0180(6)	0.0060(5)	0.0100(5)	0.0022(7)
C(212)	0.0279(9)	0.040(1)	0.0244(8)	0.0123(8)	-0.0004(7)	0.0061(8)
C(221)	0.0271(8)	0.0245(8)	0.0248(8)	0.0117(7)	0.0049(6)	0.0075(7)

Table 26. (continued).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(222)	0.0303(9)	0.0342(9)	0.0270(8)	0.0138(8)	0.0064(7)	0.0119(7)
C(3)	0.0141(6)	0.0202(7)	0.0142(6)	0.0071(5)	0.0042(5)	0.0061(5)
C(311)	0.0358(9)	0.0265(8)	0.0184(7)	0.0089(7)	0.0133(7)	0.0095(6)
C(312)	0.059(1)	0.033(1)	0.0256(9)	0.002(1)	0.0175(9)	0.0148(8)
C(321)	0.0270(8)	0.0195(7)	0.0221(7)	0.0017(6)	0.0087(6)	0.0027(6)
C(322)	0.0262(9)	0.042(1)	0.032(1)	-0.0047(8)	0.0105(8)	0.0003(9)

Table 27. Non - hydrogen atom coordinates and anisotropic thermal parameters of  $[\text{Cu}(\text{detu})_3]_2\text{SO}_3$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
CU(1)	0	0	0.263(1)	* 0.066(2)
CU(2)	2/3	1/3	0.468(1)	* 0.059(2)
S(1)	0.2058(5)	0.1402(5)	0.270(1)	* 0.077(5)
S(2)	0.7353(4)	0.5374(4)	0.462(1)	* 0.061(4)
S(3)	1/3	2/3	0.367(2)	* 0.046(1)
O(1)	0.230(1)	0.613(1)	0.339(2)	* 0.22(2)
N(11)	0.160(1)	0.318(2)	0.248(2)	* 0.11(2)
N(12)	0.292(1)	0.361(1)	0.309(2)	* 0.09(2)
N(21)	0.506(1)	0.487(1)	0.484(2)	* 0.07(1)
N(22)	0.602(1)	0.630(1)	0.420(2)	* 0.08(2)
C(1)	0.222(1)	0.278(1)	0.276(1)	* 0.06(1)
C(111)	0.166(1)	0.435(2)	0.251(2)	* 0.12(2)
C(112)	0.183(3)	0.489(2)	0.204(2)	* 0.26(5)
C(121)	0.351(2)	0.334(2)	0.347(2)	* 0.10(2)
C(122)	0.494(2)	0.374(2)	0.331(2)	* 0.11(2)
C(2)	0.600(1)	0.556(2)	0.453(2)	* 0.08(1)
C(211)	0.378(2)	0.475(3)	0.486(2)	* 0.16(4)
C(212)	0.286(1)	0.386(2)	0.498(2)	* 0.14(2)
C(221)	0.708(2)	0.705(2)	0.389(2)	* 0.10(2)
C(222)	0.802(2)	0.816(2)	0.408(2)	* 0.15(3)

Table 28. Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of  
 $[\text{Cu}(\text{detu})_3]_2\text{SO}_3$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(11)	0.1137(-)	0.2605(-)	0.2223(-)	0.142(-)
H(111a)	0.2347(-)	0.4914(-)	0.2628(-)	0.116(-)
H(111b)	0.0904(-)	0.4181(-)	0.2692(-)	0.116(-)
H(112a)	0.1135(-)	0.5266(-)	0.2233(-)	0.446(-)
H(112b)	0.0895(-)	0.4120(-)	0.1915(-)	0.446(-)
H(112c)	0.2246(-)	0.5240(-)	0.1972(-)	0.446(-)
H(12)	0.3018(-)	0.4448(-)	0.3124(-)	0.115(-)
H(121a)	0.3026(-)	0.2415(-)	0.3559(-)	0.097(-)
H(121b)	0.3449(-)	0.3688(-)	0.3808(-)	0.097(-)
H(122a)	0.5346(-)	0.4685(-)	0.3337(-)	0.153(-)
H(122b)	0.5002(-)	0.3467(-)	0.3049(-)	0.153(-)
H(122c)	0.5383(-)	0.3566(-)	0.3583(-)	0.153(-)
H(21)	0.5078(-)	0.4321(-)	0.5055(-)	0.089(-)
H(211a)	0.3757(-)	0.5116(-)	0.4437(-)	0.196(-)
H(211b)	0.4042(-)	0.5794(-)	0.4927(-)	0.196(-)
H(212a)	0.2451(-)	0.4222(-)	0.5125(-)	0.172(-)
H(212b)	0.3275(-)	0.3601(-)	0.5231(-)	0.172(-)
H(212c)	0.2492(-)	0.3261(-)	0.4764(-)	0.172(-)
H(22)	0.5329(-)	0.6395(-)	0.4228(-)	0.102(-)
H(221a)	0.6839(-)	0.7420(-)	0.3652(-)	0.118(-)
H(221b)	0.7502(-)	0.6682(-)	0.3798(-)	0.118(-)
H(222a)	0.7932(-)	0.8786(-)	0.3957(-)	0.181(-)
H(222b)	0.8854(-)	0.8276(-)	0.4055(-)	0.181(-)

Table 28. (continued).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(222c)	0.7934(-)	0.8181(-)	0.4454(-)	0.181(-)

Table 29. Non - hydrogen thermal parameters of  $[\text{Cu}(\text{detu})_3]_2\text{SO}_3$ .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
CU(1)	2U12	2U12	0.078(2)	0.0297(8)	0	0
CU(2)	2U12	2U12	0.065(2)	0.0281(7)	0	0
S(1)	0.053(3)	0.064(3)	0.115(4)	0.030(3)	-0.003(3)	-0.018(3)
S(2)	0.054(3)	0.056(3)	0.080(3)	0.031(2)	0.002(2)	0.009(2)
S(3)	2U12	2U12	0.058(2)	0.0203(5)	0	0
O(1)	0.151(9)	0.118(9)	0.33(2)	0.027(9)	-0.18(1)	0.00(1)
N(11)	0.07(1)	0.11(1)	0.17(1)	0.05(1)	-0.00(1)	0.04(1)
N(12)	0.10(1)	0.06(1)	0.08(1)	0.019(9)	-0.00(1)	0.013(7)
N(21)	0.066(9)	0.10(1)	0.076(7)	0.062(8)	-0.009(6)	0.008(7)
N(22)	0.08(1)	0.09(1)	0.10(1)	0.06(1)	-0.025(9)	0.012(9)
C(1)	0.047(8)	0.052(9)	0.046(7)	0.003(7)	-0.004(6)	-0.012(6)
C(111)	0.050(8)	0.08(1)	0.22(2)	0.032(8)	0.00(1)	0.04(1)
C(112)	0.48(5)	0.16(2)	0.22(3)	0.23(3)	-0.11(3)	-0.05(2)
C(121)	0.11(2)	0.07(1)	0.10(1)	0.02(1)	0.00(1)	-0.03(1)
C(122)	0.11(2)	0.13(1)	0.08(1)	0.04(1)	-0.03(1)	-0.04(1)
C(2)	0.030(7)	0.08(1)	0.12(1)	0.023(7)	-0.013(8)	-0.05(1)
C(211)	0.15(2)	0.29(4)	0.14(2)	0.18(3)	0.00(2)	0.01(2)
C(212)	0.056(9)	0.16(2)	0.16(2)	0.02(1)	0.01(1)	0.06(1)
C(221)	0.15(2)	0.11(2)	0.055(9)	0.07(1)	0.04(1)	0.04(1)
C(222)	0.16(2)	0.11(2)	0.19(2)	0.08(2)	0.11(2)	0.08(2)

Table 30. Non - hydrogen atom coordinates and anisotropic thermal parameters of  
 $[\text{Cu}_2(\text{detu})_6](\text{ClO}_4)_2$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
CU(1)	0.89930(8)	0.08470(6)	1.01568(5)	* 0.0572(6)
CL(1)	0.3129(2)	0.3451(2)	0.6671(1)	* 0.081(1)
S(1)	0.9043(2)	0.2407(1)	0.9655(1)	* 0.070(1)
S(2)	0.7322(2)	0.0797(1)	1.1170(1)	* 0.059(1)
S(3)	0.8345(2)	-0.1163(1)	0.87178(9)	* 0.049(1)
O(1)	0.345(2)	0.4496(8)	0.659(1)	* 0.26(2)
O(2)	0.186(1)	0.291(1)	0.5821(7)	* 0.27(2)
O(3)	0.402(2)	0.278(1)	0.627(1)	* 0.30(2)
O(4)	0.324(2)	0.365(1)	0.7671(6)	* 0.29(2)
N(11)	0.6357(6)	0.1089(6)	0.8208(5)	* 0.074(5)
N(12)	0.706(1)	0.2933(8)	0.8235(7)	* 0.112(9)
N(21)	0.5265(7)	0.1979(6)	1.0628(5)	* 0.063(5)
N(22)	0.7352(9)	0.3151(6)	1.2131(7)	* 0.082(6)
N(31)	0.9188(6)	-0.0242(5)	0.7451(4)	* 0.059(4)
N(32)	0.7908(7)	-0.2193(5)	0.6528(4)	* 0.070(5)
C(1)	0.7345(8)	0.2106(6)	0.8616(5)	* 0.069(6)
C(111)	0.490(1)	0.067(1)	0.730(1)	* 0.12(1)
C(112)	0.471(3)	-0.020(4)	0.641(2)	* 0.26(3)
C(121)	0.806(2)	0.410(1)	0.860(2)	* 0.17(2)
C(122)	0.849(5)	0.429(2)	0.780(3)	* 0.31(4)
C(2)	0.6607(6)	0.2073(5)	1.1311(5)	* 0.055(5)
C(211)	0.451(1)	0.2968(7)	1.0647(7)	* 0.082(7)
C(212)	0.315(2)	0.259(1)	0.963(1)	* 0.13(1)

Table 30. (continued).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
C(221)	0.884(1)	0.343(1)	1.2943(9)	* 0.095(8)
C(222)	0.868(1)	0.338(1)	1.398(1)	* 0.11(1)
C(3)	0.8493(6)	-0.1201(5)	0.7467(4)	* 0.049(4)
C(311)	0.946(2)	-0.0156(9)	0.6471(7)	* 0.100(9)
C(312)	0.988(4)	0.098(2)	0.663(2)	* 0.27(4)
C(321)	0.710(1)	-0.3327(8)	0.6402(6)	* 0.089(7)
C(322)	0.550(1)	-0.340(1)	0.619(1)	* 0.12(1)

Table 31. Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of  
 $[\text{Cu}_2(\text{detu})_6](\text{ClO}_4)_2$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(11)	0.656(7)	0.059(5)	0.846(5)	0.06(2)
H(111a)	0.45(2)	0.13(1)	0.74(1)	0.28(8)
H(111b)	0.43(2)	0.02(2)	0.73(2)	0.2(1)
H(112a)	0.52(3)	-0.02(2)	0.58(2)	0.16(6)
H(112b)	0.36(2)	-0.06(1)	0.56(1)	0.19(6)
H(112c)	0.47(3)	-0.10(2)	0.61(2)	0.1(1)
H(12)	0.649(6)	0.270(5)	0.776(4)	0.04(2)
H(121a)	0.85(2)	0.44(2)	0.92(1)	0.21(8)
H(121b)	0.76(2)	0.47(2)	0.85(2)	0.25(9)
H(122a)	0.83(6)	0.32(5)	0.65(4)	0.1(4)
H(122b)	0.95(4)	0.26(4)	0.75(3)	0.6(2)
H(122c)	0.90(3)	0.49(2)	0.80(2)	0.4(1)
H(21)	0.497(8)	0.140(6)	1.021(5)	0.06(2)
H(211a)	0.48(1)	0.358(8)	1.006(7)	0.00(3)
H(211b)	0.43(1)	0.348(8)	1.144(7)	0.12(3)
H(212a)	0.27(3)	0.35(2)	0.96(2)	0.6(1)
H(212b)	0.22(2)	0.17(2)	0.93(2)	0.33(9)
H(212c)	0.34(2)	0.22(2)	0.87(2)	0.28(8)
H(22)	0.713(7)	0.352(5)	1.203(5)	0.02(2)
H(221a)	0.93(1)	0.428(9)	1.315(7)	0.13(3)
H(221b)	0.94(1)	0.286(9)	1.259(8)	0.13(4)
H(222a)	0.83(1)	0.41(1)	1.44(1)	0.17(6)
H(222b)	0.94(1)	0.35(1)	1.44(1)	0.12(5)

Table 31. (continued).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(222c)	0.81(1)	0.26(1)	1.395(9)	0.12(5)
H(31)	0.943(6)	0.036(4)	0.798(4)	0.03(1)
H(311a)	0.84(2)	-0.04(1)	0.59(1)	0.20(6)
H(311b)	1.03(1)	-0.07(1)	0.62(1)	0.16(6)
H(312a)	0.835(8)	0.041(8)	0.590(6)	0.05(2)
H(312b)	1.017(8)	0.119(8)	0.644(7)	0.12(2)
H(312c)	0.92(3)	0.16(3)	0.71(2)	0.4(1)
H(32)	0.793(8)	-0.218(6)	0.603(5)	0.08(2)
H(321a)	0.757(9)	-0.369(7)	0.699(7)	0.12(3)
H(321b)	0.736(9)	-0.404(7)	0.580(7)	0.09(2)
H(322a)	0.51(2)	-0.32(1)	0.55(1)	0.22(7)
H(322b)	0.54(1)	-0.29(1)	0.68(1)	0.18(6)
H(322c)	0.49(2)	-0.39(1)	0.58(1)	0.22(7)

Table 32. Non - hydrogen thermal parameters of  $[\text{Cu}_2(\text{detu})_6](\text{ClO}_4)_2$ .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
CU(1)	0.0649(5)	0.0634(5)	0.0475(4)	0.0263(4)	0.0190(3)	0.0255(3)
CL(1)	0.109(1)	0.065(1)	0.0532(8)	0.025(1)	0.0027(9)	0.0234(7)
S(1)	0.080(1)	0.059(1)	0.0656(8)	0.0165(9)	0.0100(8)	0.0301(8)
S(2)	0.056(1)	0.0548(9)	0.0700(9)	0.0214(9)	0.0299(8)	0.0233(7)
S(3)	0.0502(8)	0.0545(8)	0.0392(6)	0.0112(8)	0.0131(6)	0.0175(6)
O(1)	0.43(2)	0.116(6)	0.31(1)	0.094(9)	0.22(1)	0.115(8)
O(2)	0.20(1)	0.36(2)	0.117(6)	-0.04(1)	-0.000(6)	0.023(8)
O(3)	0.43(2)	0.31(2)	0.29(1)	0.31(2)	0.17(2)	0.19(1)
O(4)	0.46(2)	0.30(1)	0.071(4)	0.05(1)	0.071(8)	0.071(6)
N(11)	0.066(4)	0.080(4)	0.074(3)	0.028(3)	0.015(3)	0.037(3)
N(12)	0.130(7)	0.103(6)	0.106(6)	0.037(5)	0.004(5)	0.069(5)
N(21)	0.059(4)	0.054(4)	0.068(3)	0.026(4)	0.021(3)	0.016(3)
N(22)	0.066(5)	0.055(4)	0.100(5)	0.018(4)	0.015(3)	0.018(4)
N(31)	0.072(4)	0.061(3)	0.047(3)	0.016(3)	0.024(3)	0.022(3)
N(32)	0.092(4)	0.066(4)	0.040(3)	0.014(3)	0.022(3)	0.012(3)
C(1)	0.081(5)	0.078(5)	0.062(3)	0.040(4)	0.027(3)	0.036(3)
C(111)	0.083(7)	0.127(9)	0.100(7)	0.042(7)	-0.014(6)	0.019(7)
C(112)	0.17(2)	0.28(3)	0.14(2)	0.14(2)	-0.05(2)	-0.05(2)
C(121)	0.25(2)	0.095(8)	0.16(1)	0.03(1)	-0.00(1)	0.082(8)
C(122)	0.51(5)	0.17(2)	0.24(2)	-0.07(2)	0.19(3)	0.06(2)
C(2)	0.048(4)	0.051(3)	0.064(3)	0.019(3)	0.028(3)	0.017(3)
C(211)	0.089(6)	0.066(5)	0.088(5)	0.049(5)	0.023(5)	0.029(4)

Table 32. (continued).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(212)	0.15(1)	0.13(1)	0.125(9)	0.06(1)	0.035(8)	0.068(7)
C(221)	0.056(5)	0.073(6)	0.108(7)	0.012(5)	0.008(5)	0.005(5)
C(222)	0.091(7)	0.109(9)	0.102(7)	0.032(8)	0.000(6)	0.026(7)
C(3)	0.043(3)	0.058(3)	0.043(3)	0.024(3)	0.013(2)	0.018(3)
C(311)	0.145(9)	0.113(7)	0.081(5)	0.045(8)	0.066(6)	0.060(5)
C(312)	0.53(5)	0.17(2)	0.20(2)	0.01(2)	0.23(3)	0.10(1)
C(321)	0.112(7)	0.071(5)	0.062(4)	0.009(5)	0.030(5)	0.008(4)
C(322)	0.100(8)	0.13(1)	0.104(8)	-0.004(8)	0.028(7)	0.032(7)

Table 33. Non - hydrogen atom coordinates and anisotropic thermal parameters of  $S_8$ .

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
S(1)	0.0357(2)	0.6580(1)	0.37051(7)	* 0.037(1)
S(2)	0.0343(2)	0.7803(1)	0.42376(8)	* 0.040(1)
S(3)	-0.0427(2)	0.7297(1)	0.49588(8)	* 0.038(1)
S(4)	0.1057(2)	0.7028(1)	0.54842(7)	* 0.039(1)

Table 34. Non - hydrogen thermal parameters of  $S_8$ .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
S(1)	0.0282(9)	0.056(1)	0.028(1)	-0.0021(7)	-0.0059(7)	-0.0027(8)
S(2)	0.053(1)	0.0303(9)	0.037(1)	0.0011(8)	-0.0030(8)	0.0084(7)
S(3)	0.0380(9)	0.042(1)	0.035(1)	0.0104(8)	0.0054(7)	-0.0004(8)
S(4)	0.056(1)	0.0322(9)	0.028(1)	0.0036(8)	-0.0048(8)	-0.0082(7)