

Appendix

Appendix A

Calculation of unit cell volume

The equations of calculation of unit cell volume depend on crystal system:

Crystal system	Equation
Cubic	$V = a^3$
Tetragonal	$V = a^2c$
Orthorhombic	$V = abc$
Hexagonal	$V = 0.866 a^2c$
Monoclinic	$V = abc \sin \beta$
Triclinic	$V = abc(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}$

Calculation of number of molecules per unit cell (Z)

$$Z = \frac{D \times V \times N}{Fw}$$

D = Density of crystal (g/cm^3)

V = Volume of unit cell (cm^3)

N = Avogadro number ($6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$)

Fw = Formula weight

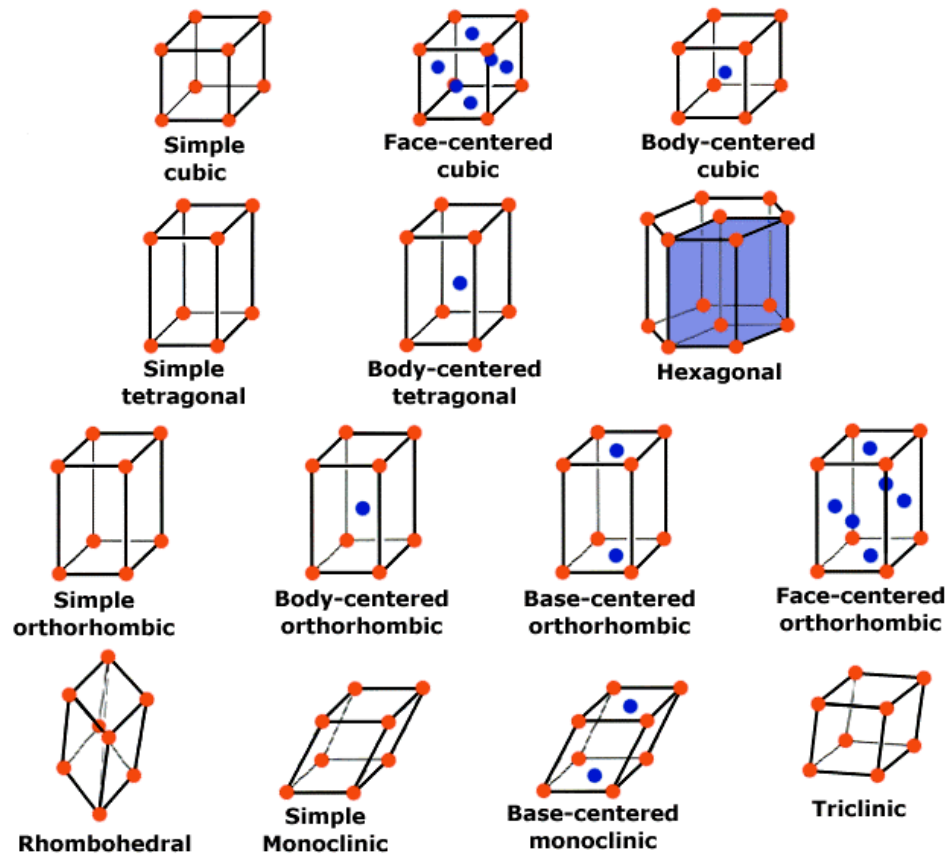


Figure 45 The Bravais lattices.

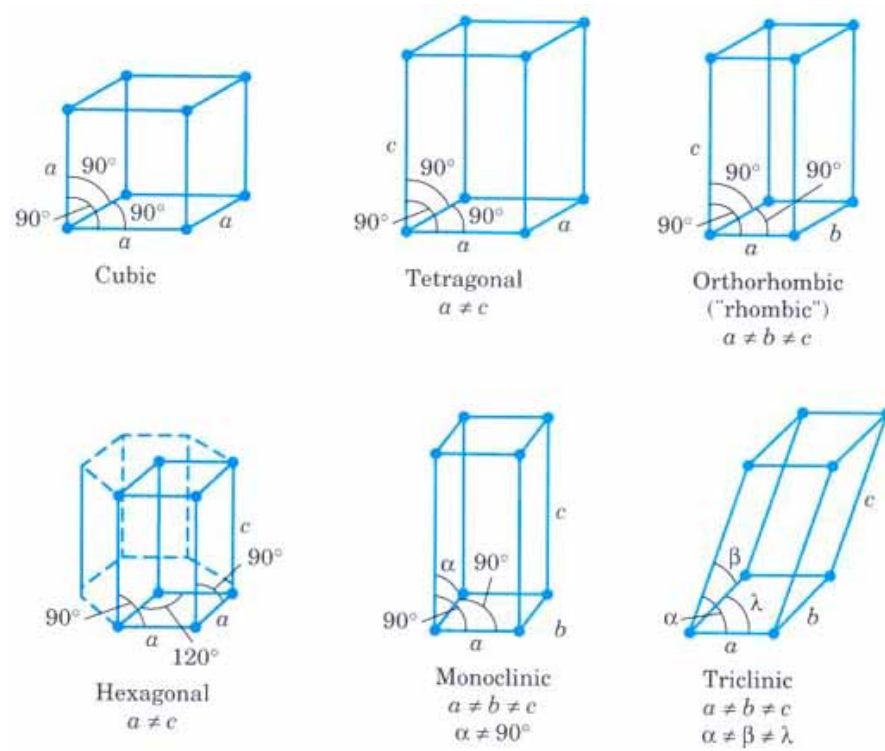


Figure 46 Showing the cell parameters (a , b , c , α , β and γ) of some the Bravais lattice.

Appendix B
The Crystallographic data

Table 17 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu(ptu)₄]Cl.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ²
Cu	0	1/2	3/4	*0.0536(4)
Cl	0	1	1/2	*0.0525(9)
S(1)	-0.0103(1)	0.67294(9)	0.65569(8)	*0.0558(6)
N(1)	0.1420(4)	0.5609(3)	0.5384(3)	*0.054(2)
N(2)	0.1135(5)	0.7529(4)	0.5004(5)	*0.077(3)
C(1)	0.0892(4)	0.6621(3)	0.5580(3)	*0.048(2)
C(11)	0.2085(4)	0.5340(4)	0.4474(3)	*0.049(2)
C(12)	0.1741(5)	0.4419(6)	0.3861(5)	*0.070(3)
C(13)	0.2354(6)	0.4127(8)	0.2975(6)	*0.094(5)
C(14)	0.3312(5)	0.4793(8)	0.2693(5)	*0.088(4)
C(15)	0.3652(5)	0.5713(6)	0.3290(6)	*0.086(4)
C(16)	0.3056(4)	0.5965(5)	0.4208(6)	*0.069(3)

Table 18 Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu(ptu)₄]Cl.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ²
H(1)	0.117(5)	0.495(5)	0.578(5)	0.07(1)
H(12)	0.125(7)	0.401(7)	0.402(7)	0.10(3)
H(13)	0.201(8)	0.360(7)	0.259(9)	0.11(3)
H(14)	0.374(7)	0.486(7)	0.213(6)	0.10(3)
H(15)	0.438(6)	0.628(5)	0.307(6)	0.08(2)
H(16)	0.322(9)	0.648(8)	0.452(8)	0.13(4)
H(21)	0.085(5)	0.806(5)	0.510(5)	0.05(1)
H(22)	0.148(7)	0.751(8)	0.458(7)	0.10(3)

Table 19 Non-hydrogen thermal parameters of [Cu(ptu)₄]Cl.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Cu	0.0648(4)	U11	0.0311(4)	0	0	0
Cl	0.0350(5)	U11	0.088(1)	0	0	0
S(1)	0.0785(7)	0.0436(5)	0.0452(5)	0.0084(5)	0.0121(5)	-0.0062(4)
N(1)	0.074(2)	0.040(2)	0.048(2)	0.014(2)	0.010(2)	0.004(1)
N(2)	0.105(4)	0.046(2)	0.081(3)	0.029(2)	0.042(3)	0.020(2)
C(1)	0.057(2)	0.041(2)	0.044(2)	0.008(2)	0.002(2)	-0.001(1)
C(11)	0.050(2)	0.050(2)	0.047(2)	0.012(2)	0.004(2)	0.001(2)
C(12)	0.056(3)	0.080(3)	0.073(4)	-0.007(3)	0.012(2)	-0.020(3)
C(13)	0.081(4)	0.128(6)	0.072(4)	-0.013(4)	0.018(3)	-0.045(4)
C(14)	0.066(3)	0.128(6)	0.070(4)	0.004(4)	0.027(3)	-0.019(4)
C(15)	0.061(3)	0.094(4)	0.103(5)	0.010(3)	0.033(3)	0.009(4)
C(16)	0.053(3)	0.061(3)	0.094(4)	0.005(2)	0.011(3)	-0.009(3)

Table 20 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)A**2
BR(1A)	0.03109(4)	0.60126(3)	0.81405(2)	* 0.0120(3)
BR(2A)	-0.15929(5)	0.75049(3)	0.57809(2)	* 0.0154(4)
BR(3A)	-0.60937(4)	0.65008(3)	0.75355(2)	* 0.0142(3)
BR(4A)	-0.11747(4)	1.00857(3)	0.90244(2)	* 0.0135(3)
BR(1B)	-0.13729(4)	0.15892(3)	0.76528(2)	* 0.0121(3)
BR(2B)	0.37892(4)	0.49993(3)	0.88282(2)	* 0.0139(3)
BR(3B)	0.52447(4)	0.10068(3)	0.80942(2)	* 0.0118(3)
BR(4B)	0.27550(4)	0.21062(3)	0.55879(2)	* 0.0127(3)
CU(1B)	0.06833(5)	0.20098(3)	0.76107(3)	* 0.0121(4)
CU(4B)	0.26562(5)	0.22807(3)	0.66130(3)	* 0.0122(4)
CU(2A)	-0.18512(5)	0.75479(3)	0.67718(3)	* 0.0140(4)
CU(3B)	0.38432(5)	0.16846(3)	0.78065(3)	* 0.0123(4)
CU(2B)	0.32002(5)	0.36698(3)	0.82299(3)	* 0.0132(4)
CU(4A)	-0.16678(5)	0.87683(3)	0.83750(3)	* 0.0129(4)
CU(3A)	-0.38842(6)	0.71368(3)	0.76379(3)	* 0.0168(4)
CU(1A)	-0.10029(5)	0.67479(3)	0.78654(3)	* 0.0127(4)
S(3B)	0.3806(1)	0.15730(7)	0.68685(6)	* 0.0110(8)
S(6A)	-0.1328(1)	0.86944(7)	0.74635(6)	* 0.0132(8)
S(2A)	-0.3815(1)	0.72280(7)	0.67603(6)	* 0.0138(8)
S(6B)	0.3413(1)	0.34702(7)	0.72668(6)	* 0.0125(8)
S(4B)	0.0791(1)	0.21360(7)	0.67456(6)	* 0.0121(8)
S(1B)	0.1356(1)	0.31905(7)	0.83089(6)	* 0.0109(8)
S(1A)	-0.0985(1)	0.66710(7)	0.69372(6)	* 0.0124(8)
S(5A)	-0.2926(1)	0.62714(7)	0.77382(6)	* 0.0115(8)
S(4A)	-0.0815(1)	0.79092(7)	0.85863(6)	* 0.0134(8)
S(5B)	0.1892(1)	0.12508(7)	0.77176(5)	* 0.0107(8)
S(3A)	-0.3530(1)	0.82447(7)	0.83824(6)	* 0.0114(8)
S(2B)	0.4069(1)	0.28621(7)	0.85025(6)	* 0.0153(9)
N(61A)	-0.2402(4)	0.9069(3)	0.6682(2)	* 0.014(3)
N(41A)	0.1220(4)	0.7812(3)	0.9026(2)	* 0.016(3)
N(51A)	-0.2330(4)	0.5981(2)	0.8650(2)	* 0.015(3)
N(21B)	0.6055(4)	0.2796(3)	0.9017(2)	* 0.016(3)
N(31B)	0.5249(4)	0.1966(3)	0.6266(2)	* 0.014(3)
N(12A)	0.1202(4)	0.6583(3)	0.7082(2)	* 0.016(3)
N(52A)	-0.4216(4)	0.6097(3)	0.8487(2)	* 0.019(4)
N(11A)	0.0593(4)	0.6925(3)	0.6341(2)	* 0.018(3)
N(62A)	-0.2200(4)	0.9891(3)	0.7629(2)	* 0.018(3)
N(32B)	0.6057(4)	0.1773(3)	0.7056(2)	* 0.015(3)
N(22B)	0.5650(5)	0.3962(3)	0.9224(2)	* 0.018(4)
C(1A)	0.0382(4)	0.6740(3)	0.6775(2)	* 0.012(3)
C(5A)	-0.3189(4)	0.6111(3)	0.8345(2)	* 0.013(3)
C(2B)	0.5362(4)	0.3240(3)	0.8948(2)	* 0.012(3)
C(4A)	0.0515(4)	0.8269(3)	0.9004(2)	* 0.012(3)

Table 20 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)A**2
C(6A)	-0.2045(4)	0.9266(3)	0.7241(2)	* 0.013(3)
C(3B)	0.5150(4)	0.1800(3)	0.6730(2)	* 0.011(3)
N(42A)	0.0823(4)	0.8986(2)	0.9288(2)	* 0.018(3)
N(32A)	-0.4200(4)	0.9452(2)	0.8370(2)	* 0.015(3)
N(12B)	0.0808(4)	0.4435(3)	0.8310(2)	* 0.019(4)
N(51B)	0.2589(4)	0.0915(2)	0.8594(2)	* 0.013(3)
N(31A)	-0.5499(4)	0.8360(2)	0.7891(2)	* 0.015(3)
N(11B)	-0.0663(4)	0.3426(2)	0.7987(2)	* 0.013(3)
N(42B)	-0.1103(4)	0.1156(3)	0.6235(2)	* 0.018(3)
C(11B)	-0.1583(4)	0.3739(3)	0.7836(2)	* 0.012(3)
N(52B)	0.0682(4)	0.1008(3)	0.8472(2)	* 0.019(4)
C(31A)	-0.6456(4)	0.8658(3)	0.7749(2)	* 0.012(3)
N(41B)	0.0124(4)	0.1372(2)	0.5637(2)	* 0.014(3)
C(1B)	0.0429(4)	0.3727(3)	0.8182(2)	* 0.012(3)
C(41A)	0.2343(4)	0.7986(3)	0.9355(2)	* 0.014(3)
C(21B)	0.7134(4)	0.3004(3)	0.9389(2)	* 0.014(3)
C(3A)	-0.4486(4)	0.8731(3)	0.8191(2)	* 0.012(3)
C(46A)	0.3191(5)	0.7683(3)	0.9068(2)	* 0.016(4)
C(5B)	0.1695(4)	0.1050(3)	0.8316(2)	* 0.013(3)
C(36A)	-0.7495(5)	0.8416(3)	0.7870(2)	* 0.017(4)
C(4B)	-0.0141(4)	0.1488(3)	0.6157(2)	* 0.013(3)
N(61B)	0.2081(4)	0.3788(3)	0.6529(2)	* 0.016(3)
N(21A)	-0.4657(4)	0.5807(2)	0.6392(2)	* 0.018(3)
N(62B)	0.2787(4)	0.4745(3)	0.7412(2)	* 0.020(4)
C(66A)	-0.4006(5)	0.9709(3)	0.6635(2)	* 0.016(4)
C(16B)	-0.1468(5)	0.4193(3)	0.7529(2)	* 0.015(4)
C(52B)	0.3321(5)	0.0192(3)	0.9084(2)	* 0.016(4)
C(51A)	-0.2321(4)	0.5795(3)	0.9145(2)	* 0.014(3)
C(42B)	-0.1226(4)	0.0262(3)	0.4946(2)	* 0.015(4)
N(22A)	-0.3693(4)	0.6169(3)	0.5772(2)	* 0.020(3)
C(51B)	0.2679(4)	0.0723(3)	0.9086(2)	* 0.012(3)
C(32B)	0.7190(4)	0.2633(3)	0.6380(2)	* 0.014(4)
C(61B)	0.1264(4)	0.4086(3)	0.6273(2)	* 0.013(3)
C(56A)	-0.1736(5)	0.5246(3)	0.9163(2)	* 0.017(4)
C(33A)	-0.7318(5)	0.9437(3)	0.7360(2)	* 0.017(4)
C(15B)	-0.2408(5)	0.4461(3)	0.7374(2)	* 0.019(4)
C(42A)	0.2562(5)	0.8411(3)	0.9939(2)	* 0.017(4)
C(32A)	-0.6363(4)	0.9154(3)	0.7481(2)	* 0.013(4)
C(12B)	-0.2638(4)	0.3553(3)	0.7982(2)	* 0.015(4)
C(6B)	0.2701(4)	0.4052(3)	0.7057(2)	* 0.014(3)
C(56B)	0.2205(5)	0.1075(3)	0.9568(2)	* 0.018(4)
C(31B)	0.6262(4)	0.2098(3)	0.6042(2)	* 0.014(4)
C(14B)	-0.3452(5)	0.4273(3)	0.7521(3)	* 0.023(4)

Table 20 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
C(43A)	0.3654(5)	0.8543(3)	1.0233(3)	* 0.023(4)
C(13B)	-0.3566(5)	0.3819(3)	0.7819(3)	* 0.021(4)
C(35A)	-0.8450(5)	0.8697(3)	0.7743(3)	* 0.021(4)
C(34B)	0.8146(5)	0.2385(3)	0.5554(3)	* 0.019(4)
C(2A)	-0.4059(4)	0.6332(3)	0.6275(2)	* 0.015(4)
C(34A)	-0.8352(5)	0.9208(3)	0.7488(2)	* 0.019(4)
C(41B)	-0.0490(4)	0.0926(3)	0.5075(2)	* 0.012(3)
C(33B)	0.8136(5)	0.2763(3)	0.6133(3)	* 0.019(4)
C(61A)	-0.3114(4)	0.9399(3)	0.6399(2)	* 0.014(3)
C(52A)	-0.2814(5)	0.6173(3)	0.9618(3)	* 0.025(4)
C(62A)	-0.2950(5)	0.9352(3)	0.5854(2)	* 0.020(4)
C(22B)	0.7259(5)	0.3431(3)	0.9969(3)	* 0.019(4)
C(63A)	-0.3662(5)	0.9637(3)	0.5554(3)	* 0.024(4)
C(53B)	0.3517(5)	0.0025(3)	0.9563(2)	* 0.020(4)
C(45A)	0.4289(5)	0.7822(3)	0.9373(3)	* 0.023(4)
C(54B)	0.3059(5)	0.0385(3)	1.0050(2)	* 0.019(4)
C(55B)	0.2401(5)	0.0896(3)	1.0048(3)	* 0.021(4)
C(55A)	-0.1632(5)	0.5075(3)	0.9646(2)	* 0.021(4)
C(65A)	-0.4725(5)	0.9978(3)	0.6325(3)	* 0.021(4)
C(11A)	0.1667(4)	0.6962(3)	0.6147(2)	* 0.017(4)
C(64A)	-0.4551(5)	0.9947(3)	0.5789(3)	* 0.022(4)
C(46B)	-0.0261(5)	0.1159(3)	0.4633(2)	* 0.017(4)
C(43B)	-0.1771(5)	-0.0140(3)	0.4385(2)	* 0.018(4)
C(36B)	0.6272(5)	0.1707(3)	0.5454(3)	* 0.020(4)
C(35B)	0.7219(5)	0.1857(3)	0.5219(3)	* 0.023(4)
C(12A)	0.2084(5)	0.6325(3)	0.5886(2)	* 0.022(4)
C(44B)	-0.1547(5)	0.0101(3)	0.3948(3)	* 0.024(4)
C(26B)	0.8057(5)	0.2742(3)	0.9152(3)	* 0.023(4)
C(54A)	-0.2124(5)	0.5442(4)	1.0112(3)	* 0.026(4)
C(45B)	-0.0790(5)	0.0740(3)	0.4074(2)	* 0.022(4)
C(44A)	0.4506(5)	0.8252(3)	0.9954(3)	* 0.026(5)
C(16A)	0.2279(5)	0.7638(4)	0.6219(3)	* 0.027(4)
C(23B)	0.8307(6)	0.3599(3)	1.0309(3)	* 0.028(5)
C(24B)	0.9226(6)	0.3350(4)	1.0082(3)	* 0.034(5)
C(53A)	-0.2714(5)	0.5987(4)	1.0095(3)	* 0.031(5)
C(25B)	0.9102(5)	0.2916(4)	0.9502(3)	* 0.036(6)
C(66B)	0.0662(5)	0.4595(3)	0.6588(3)	* 0.019(4)
C(26A)	-0.5775(5)	0.4581(3)	0.5876(3)	* 0.021(4)
C(21A)	-0.4728(5)	0.5031(3)	0.6086(2)	* 0.017(4)
C(62B)	0.1021(5)	0.3798(3)	0.5675(3)	* 0.024(4)
C(65B)	-0.0170(5)	0.4821(3)	0.6304(3)	* 0.024(4)
C(22A)	-0.3729(5)	0.4744(3)	0.6035(3)	* 0.021(4)
C(23A)	-0.3803(6)	0.3989(3)	0.5765(3)	* 0.029(5)

Table 20 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameter of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ²
C(64B)	-0.0412(5)	0.4543(3)	0.5711(3)	* 0.030(5)
C(63B)	0.0197(6)	0.4028(4)	0.5395(3)	* 0.033(5)
C(14A)	0.3744(5)	0.7027(4)	0.5763(3)	* 0.032(5)
C(24A)	-0.4841(6)	0.3548(3)	0.5562(3)	* 0.029(5)
C(25A)	-0.5837(6)	0.3828(4)	0.5606(3)	* 0.030(5)
C(13A)	0.3127(5)	0.6361(4)	0.5693(3)	* 0.031(5)
C(15A)	0.3317(6)	0.7672(4)	0.6032(3)	* 0.031(5)

Table 21 Hydrogen Positional and Isotropic Displacement Parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{Br}_4]_2$.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)
H(12B)	-0.278(4)	0.323(3)	0.817(2)	0.01(1)
H(66A)	-0.413(4)	0.969(2)	0.698(2)	0.00(1)
H(4AA)	0.039(4)	0.928(3)	0.925(2)	0.01(1)
H(56B)	0.178(4)	0.143(2)	0.957(2)	-0.00(1)
H(1AA)	0.186(4)	0.659(2)	0.702(2)	0.00(1)
H(3B)	0.466(4)	0.197(3)	0.610(2)	-0.00(1)
H(2A)	-0.502(4)	0.595(3)	0.667(2)	0.01(1)
H(5BA)	0.010(6)	0.111(4)	0.831(3)	0.06(2)
H(32B)	0.715(4)	0.289(3)	0.678(2)	0.02(2)
H(54B)	0.320(4)	0.029(3)	1.040(2)	0.02(2)
H(33A)	-0.721(4)	0.982(2)	0.721(2)	0.01(1)
H(52A)	-0.313(4)	0.652(3)	0.963(2)	0.01(1)
H(34A)	-0.901(4)	0.939(2)	0.742(2)	0.00(1)
H(45A)	0.493(4)	0.760(3)	0.919(2)	0.02(1)
H(32A)	-0.574(4)	0.929(2)	0.737(2)	0.00(1)
H(2BA)	0.622(4)	0.411(3)	0.942(2)	0.01(2)
H(3BA)	0.592(4)	0.163(2)	0.732(2)	0.00(1)
H(14B)	-0.412(5)	0.443(3)	0.742(2)	0.02(2)
H(46B)	0.029(4)	0.159(3)	0.470(2)	0.01(1)
H(56A)	-0.147(4)	0.502(3)	0.887(2)	0.01(1)
H(16B)	-0.078(4)	0.428(2)	0.742(2)	0.00(1)
H(1BA)	0.041(4)	0.472(3)	0.827(2)	0.01(1)
H(2AA)	-0.375(5)	0.572(3)	0.552(2)	0.02(2)
H(44B)	-0.185(4)	-0.015(3)	0.358(2)	0.01(1)
H(6AA)	-0.235(4)	1.023(3)	0.752(2)	0.01(1)
H(45B)	-0.069(4)	0.090(2)	0.377(2)	0.00(1)
H(5AA)	-0.445(5)	0.588(3)	0.866(3)	0.02(2)
H(23B)	0.831(4)	0.385(3)	1.065(2)	0.01(1)
H(15B)	-0.228(4)	0.478(3)	0.716(2)	0.01(1)
H(4AB)	0.142(4)	0.918(3)	0.948(2)	0.01(2)
H(1A)	0.006(4)	0.704(3)	0.621(2)	0.01(1)
H(4BA)	-0.124(6)	0.127(3)	0.660(3)	0.05(2)

Table 21 Hydrogen Positional and Isotropic Displacement Parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{Br}_4]_2$.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)
H(6BA)	0.312(4)	0.489(2)	0.776(2)	0.00(1)
H(66B)	0.081(4)	0.476(3)	0.695(2)	0.01(2)
H(1BB)	0.143(5)	0.458(3)	0.836(2)	0.01(2)
H(42A)	0.201(4)	0.854(2)	1.012(2)	0.00(1)
H(6A)	-0.220(5)	0.870(3)	0.647(3)	0.04(2)
H(26B)	0.786(5)	0.241(3)	0.873(3)	0.03(2)
H(46A)	0.300(4)	0.736(3)	0.868(2)	0.02(2)
H(24A)	-0.500(4)	0.307(3)	0.539(2)	0.01(1)
H(36B)	0.556(4)	0.135(3)	0.521(2)	0.01(1)
H(35B)	0.726(5)	0.156(3)	0.478(2)	0.03(2)
H(44A)	0.519(5)	0.832(3)	1.013(3)	0.04(2)
H(5A)	-0.174(4)	0.600(3)	0.853(2)	0.01(2)
H(13B)	-0.422(4)	0.368(3)	0.792(2)	0.02(2)
H(1AB)	0.105(4)	0.649(3)	0.735(2)	0.00(1)
H(12A)	0.159(5)	0.582(3)	0.584(2)	0.03(2)
H(14A)	0.441(6)	0.711(3)	0.563(3)	0.06(2)
H(43A)	0.376(4)	0.880(3)	1.059(2)	0.01(1)
H(15A)	0.369(5)	0.809(3)	0.607(2)	0.02(2)
H(22A)	-0.304(4)	0.508(3)	0.617(2)	0.02(1)
H(13A)	0.347(5)	0.589(3)	0.551(3)	0.04(2)
H(64A)	-0.502(5)	1.015(3)	0.560(2)	0.02(2)
H(3A)	-0.563(5)	0.789(3)	0.782(3)	0.04(2)
H(5AB)	-0.475(4)	0.617(3)	0.827(2)	0.01(1)
H(6BB)	0.259(5)	0.508(3)	0.732(3)	0.04(2)
H(36A)	-0.748(5)	0.813(3)	0.806(2)	0.03(2)
H(16A)	0.203(5)	0.805(3)	0.642(2)	0.02(2)
H(25B)	0.960(5)	0.275(3)	0.935(2)	0.02(2)
H(24B)	0.994(5)	0.348(3)	1.032(3)	0.05(2)
H(63A)	-0.359(5)	0.956(3)	0.514(3)	0.04(2)
H(54A)	-0.198(4)	0.537(3)	1.047(2)	0.02(2)
H(4A)	0.100(5)	0.743(3)	0.886(2)	0.02(2)
H(3BB)	0.671(4)	0.184(2)	0.696(2)	-0.00(1)

Table 21 Hydrogen Positional and Isotropic Displacement Parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{Br}_4]_2$.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)
H(53A)	-0.302(5)	0.626(3)	1.043(2)	0.03(2)
H(2B)	0.594(5)	0.240(3)	0.884(2)	0.02(2)
H(65A)	-0.531(4)	1.013(3)	0.648(2)	0.02(1)
H(33B)	0.868(4)	0.309(3)	0.632(2)	0.01(1)
H(42B)	-0.141(4)	0.012(3)	0.525(2)	0.02(2)
H(43B)	-0.222(4)	-0.061(2)	0.428(2)	0.00(1)
H(1B)	-0.083(4)	0.301(3)	0.791(2)	0.01(1)
H(5B)	0.315(5)	0.093(3)	0.847(3)	0.03(2)
H(62A)	-0.239(4)	0.916(2)	0.571(2)	0.00(1)
H(2BB)	0.529(6)	0.419(4)	0.919(3)	0.05(3)
H(22B)	0.673(4)	0.360(3)	1.012(2)	0.02(2)
H(53B)	0.403(5)	-0.033(3)	0.958(2)	0.04(2)
H(55A)	-0.117(5)	0.474(3)	0.969(2)	0.03(2)
H(23A)	-0.314(5)	0.383(3)	0.571(2)	0.03(2)
H(65B)	-0.064(4)	0.514(3)	0.650(2)	0.02(2)
H(5BB)	0.047(5)	0.086(3)	0.870(3)	0.03(2)
H(4B)	0.079(5)	0.150(3)	0.561(3)	0.03(2)
H(64B)	-0.098(5)	0.471(3)	0.549(3)	0.05(2)
H(34B)	0.882(5)	0.247(3)	0.537(3)	0.04(2)
H(55B)	0.210(5)	0.112(3)	1.034(2)	0.03(2)
H(25A)	-0.645(5)	0.354(3)	0.550(3)	0.02(2)
H(52B)	0.365(4)	-0.004(3)	0.878(2)	0.01(1)
H(3AA)	-0.354(5)	0.968(3)	0.856(3)	0.03(2)
H(26A)	-0.657(4)	0.479(3)	0.591(2)	0.02(2)
H(35A)	-0.912(4)	0.854(3)	0.780(2)	0.02(1)
H(4BB)	-0.164(5)	0.094(3)	0.593(3)	0.03(2)
H(62B)	0.144(5)	0.345(3)	0.545(3)	0.04(2)
H(63B)	0.011(5)	0.386(3)	0.499(2)	0.03(2)
H(3AB)	-0.460(5)	0.972(3)	0.828(3)	0.04(2)
H(6AB)	-0.190(5)	0.997(3)	0.796(2)	0.02(2)
H(61B)	0.218(5)	0.337(3)	0.630(3)	0.04(2)
H(2AB)	-0.318(5)	0.653(3)	0.567(3)	0.05(2)

Table 22 Non-hydrogen thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
BR(4B)	0.0134(3)	0.0157(3)	0.0099(3)	0.0017(2)	0.0011(2)	0.0062(2)
BR(1B)	0.0098(3)	0.0121(3)	0.0148(3)	-0.0000(2)	0.0008(2)	0.0065(2)
BR(2B)	0.0135(3)	0.0109(3)	0.0148(3)	-0.0009(2)	0.0006(2)	0.0036(2)
BR(4A)	0.0160(3)	0.0110(3)	0.0126(3)	0.0002(2)	0.0026(2)	0.0041(2)
BR(2A)	0.0197(3)	0.0188(3)	0.0120(3)	0.0069(2)	0.0046(2)	0.0092(2)
BR(3B)	0.0126(3)	0.0107(3)	0.0120(3)	0.0028(2)	-0.0008(2)	0.0048(2)
BR(3A)	0.0101(3)	0.0131(3)	0.0194(3)	0.0009(2)	0.0007(2)	0.0073(2)
BR(1A)	0.0142(3)	0.0097(2)	0.0123(3)	0.0029(2)	-0.0012(2)	0.0051(2)
CU(1B)	0.0126(3)	0.0124(3)	0.0112(3)	0.0028(3)	0.0003(3)	0.0048(3)
CU(4B)	0.0121(3)	0.0124(3)	0.0119(4)	0.0023(3)	0.0007(3)	0.0048(3)
CU(2A)	0.0150(3)	0.0144(3)	0.0140(4)	0.0049(3)	0.0018(3)	0.0064(3)
CU(3B)	0.0122(3)	0.0141(3)	0.0119(4)	0.0020(3)	0.0012(3)	0.0067(3)
CU(2B)	0.0118(3)	0.0129(3)	0.0147(4)	0.0021(3)	-0.0004(3)	0.0057(3)
CU(4A)	0.0112(3)	0.0136(3)	0.0144(4)	0.0026(3)	0.0001(3)	0.0064(3)
CU(3A)	0.0237(4)	0.0136(3)	0.0132(4)	0.0077(3)	0.0001(3)	0.0046(3)
CU(1A)	0.0124(3)	0.0137(3)	0.0136(4)	0.0023(3)	0.0012(3)	0.0073(3)
S(3B)	0.0093(6)	0.0134(7)	0.0111(7)	0.0021(5)	0.0008(5)	0.0058(6)
S(6A)	0.0128(7)	0.0141(7)	0.0135(7)	0.0033(5)	0.0002(6)	0.0065(6)
S(2A)	0.0155(7)	0.0121(7)	0.0128(7)	0.0019(5)	0.0008(6)	0.0043(6)
S(6B)	0.0125(7)	0.0115(6)	0.0118(7)	-0.0000(5)	-0.0011(5)	0.0041(6)
S(4B)	0.0108(6)	0.0136(7)	0.0092(7)	-0.0010(5)	-0.0014(5)	0.0031(6)
S(1B)	0.0097(6)	0.0113(6)	0.0116(7)	0.0026(5)	-0.0006(5)	0.0047(5)
S(1A)	0.0125(7)	0.0137(7)	0.0130(7)	0.0039(5)	0.0016(5)	0.0069(6)
S(5A)	0.0123(6)	0.0123(6)	0.0115(7)	0.0027(5)	0.0007(5)	0.0065(6)
S(4A)	0.0105(6)	0.0111(6)	0.0167(7)	0.0020(5)	-0.0037(6)	0.0046(6)
S(5B)	0.0111(6)	0.0137(7)	0.0088(7)	0.0024(5)	0.0010(5)	0.0063(6)
S(3A)	0.0091(6)	0.0116(6)	0.0129(7)	0.0021(5)	-0.0007(5)	0.0045(6)
S(2B)	0.0128(7)	0.0103(6)	0.0178(8)	0.0018(5)	-0.0051(6)	0.0017(6)
N(61A)	0.016(2)	0.017(3)	0.011(3)	0.006(2)	0.001(2)	0.008(2)
N(41A)	0.014(3)	0.011(3)	0.018(3)	0.003(2)	-0.006(2)	0.003(2)
N(51A)	0.015(3)	0.021(3)	0.013(3)	0.003(2)	0.006(2)	0.010(2)
N(21B)	0.017(3)	0.010(3)	0.014(3)	0.005(2)	-0.005(2)	-0.002(2)
N(31B)	0.010(2)	0.021(3)	0.010(3)	0.001(2)	-0.001(2)	0.005(2)
N(12A)	0.009(2)	0.029(3)	0.016(3)	0.006(2)	0.003(2)	0.014(2)
N(52A)	0.014(3)	0.032(3)	0.021(3)	0.004(2)	0.004(2)	0.020(3)
N(11A)	0.012(2)	0.032(3)	0.018(3)	0.007(2)	0.002(2)	0.016(2)
N(62A)	0.029(3)	0.016(3)	0.015(3)	0.007(2)	-0.002(2)	0.011(2)
N(32B)	0.008(2)	0.022(3)	0.019(3)	-0.000(2)	0.004(2)	0.014(2)
N(22B)	0.013(3)	0.017(3)	0.022(3)	0.002(2)	-0.008(2)	0.006(2)
C(1A)	0.016(3)	0.005(2)	0.011(3)	-0.001(2)	0.004(2)	-0.001(2)
C(5A)	0.018(3)	0.007(3)	0.011(3)	0.000(2)	0.001(2)	0.002(2)
C(2B)	0.013(3)	0.014(3)	0.006(3)	0.002(2)	-0.001(2)	0.000(2)
C(4A)	0.013(3)	0.012(3)	0.010(3)	-0.000(2)	0.000(2)	0.003(2)

Table 22 Non-hydrogen thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(6A)	0.015(3)	0.011(3)	0.015(3)	-0.001(2)	0.004(2)	0.007(2)
C(3B)	0.008(3)	0.009(3)	0.017(3)	0.002(2)	-0.000(2)	0.006(2)
N(42A)	0.015(3)	0.008(2)	0.026(3)	0.000(2)	-0.012(2)	0.003(2)
N(32A)	0.012(3)	0.010(2)	0.020(3)	0.003(2)	-0.004(2)	0.001(2)
N(12B)	0.009(3)	0.012(3)	0.035(3)	0.003(2)	0.002(2)	0.009(2)
N(51B)	0.011(2)	0.020(3)	0.013(3)	0.005(2)	0.003(2)	0.012(2)
N(31A)	0.010(2)	0.010(2)	0.024(3)	0.002(2)	-0.003(2)	0.007(2)
N(11B)	0.010(2)	0.005(2)	0.025(3)	-0.001(2)	-0.000(2)	0.007(2)
N(42B)	0.013(3)	0.024(3)	0.012(3)	-0.004(2)	0.001(2)	0.004(2)
C(11B)	0.011(3)	0.011(3)	0.011(3)	0.004(2)	-0.001(2)	-0.001(2)
N(52B)	0.010(2)	0.035(3)	0.021(3)	0.005(2)	0.006(2)	0.021(3)
C(31A)	0.009(3)	0.010(3)	0.013(3)	0.001(2)	-0.003(2)	0.002(2)
N(41B)	0.011(2)	0.019(3)	0.009(2)	-0.003(2)	-0.001(2)	0.004(2)
C(1B)	0.013(3)	0.013(3)	0.010(3)	0.002(2)	0.003(2)	0.007(2)
C(41A)	0.014(3)	0.011(3)	0.015(3)	0.002(2)	-0.003(2)	0.004(2)
C(21B)	0.015(3)	0.010(3)	0.016(3)	-0.000(2)	-0.005(2)	0.006(2)
C(3A)	0.012(3)	0.015(3)	0.010(3)	0.005(2)	0.001(2)	0.006(2)
C(46A)	0.020(3)	0.016(3)	0.014(3)	0.005(2)	-0.003(2)	0.007(3)
C(5B)	0.018(3)	0.009(3)	0.014(3)	0.003(2)	0.005(2)	0.006(2)
C(36A)	0.018(3)	0.019(3)	0.016(3)	0.003(2)	-0.000(2)	0.010(3)
C(4B)	0.016(3)	0.010(3)	0.015(3)	0.003(2)	0.003(2)	0.006(2)
N(61B)	0.021(3)	0.014(2)	0.012(3)	0.009(2)	0.002(2)	0.003(2)
N(21A)	0.017(3)	0.017(3)	0.018(3)	0.000(2)	0.007(2)	0.006(2)
N(62B)	0.028(3)	0.011(3)	0.017(3)	-0.002(2)	-0.007(2)	0.005(2)
C(66A)	0.022(3)	0.021(3)	0.010(3)	0.009(2)	0.005(2)	0.008(3)
C(16B)	0.013(3)	0.010(3)	0.016(3)	-0.002(2)	0.001(2)	0.001(2)
C(52B)	0.014(3)	0.022(3)	0.013(3)	0.002(2)	0.000(2)	0.008(3)
C(51A)	0.014(3)	0.018(3)	0.007(3)	-0.001(2)	-0.002(2)	0.004(2)
C(42B)	0.010(3)	0.019(3)	0.018(3)	0.001(2)	0.001(2)	0.010(3)
N(22A)	0.027(3)	0.016(3)	0.012(3)	-0.004(2)	0.001(2)	0.002(2)
C(51B)	0.008(3)	0.018(3)	0.007(3)	-0.003(2)	-0.003(2)	0.005(2)
C(32B)	0.012(3)	0.015(3)	0.013(3)	0.003(2)	0.001(2)	0.003(2)
C(61B)	0.014(3)	0.007(3)	0.016(3)	-0.001(2)	-0.002(2)	0.004(2)
C(56A)	0.020(3)	0.017(3)	0.010(3)	-0.004(2)	-0.001(2)	0.003(3)
C(33A)	0.021(3)	0.011(3)	0.020(3)	0.000(2)	-0.003(2)	0.008(3)
C(15B)	0.027(3)	0.011(3)	0.017(3)	0.003(2)	-0.001(3)	0.004(3)
C(42A)	0.020(3)	0.013(3)	0.017(3)	0.004(2)	0.005(3)	0.004(2)
C(32A)	0.010(3)	0.011(3)	0.017(3)	-0.007(2)	-0.002(2)	0.006(2)
C(12B)	0.012(3)	0.014(3)	0.014(3)	-0.002(2)	-0.002(2)	0.001(2)
C(6B)	0.017(3)	0.016(3)	0.009(3)	0.001(2)	0.003(2)	0.005(2)
C(56B)	0.016(3)	0.025(3)	0.012(3)	0.008(3)	-0.001(2)	0.007(3)
C(31B)	0.012(3)	0.018(3)	0.017(3)	0.003(2)	-0.001(2)	0.012(2)
C(14B)	0.016(3)	0.018(3)	0.029(4)	0.008(3)	-0.004(3)	0.001(3)

Table 22 Non-hydrogen thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆Br₄]₂ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(43A)	0.034(4)	0.020(3)	0.012(3)	0.003(3)	-0.011(3)	0.007(3)
C(13B)	0.017(3)	0.024(3)	0.019(3)	0.005(3)	0.004(3)	0.004(3)
C(35A)	0.010(3)	0.028(3)	0.027(4)	0.004(3)	0.002(3)	0.014(3)
C(34B)	0.016(3)	0.020(3)	0.029(4)	0.008(3)	0.009(3)	0.015(3)
C(2A)	0.011(3)	0.021(3)	0.012(3)	0.004(2)	-0.003(2)	0.006(2)
C(34A)	0.016(3)	0.022(3)	0.020(3)	0.006(2)	-0.005(2)	0.009(3)
C(41B)	0.014(3)	0.012(3)	0.009(3)	0.004(2)	0.001(2)	0.002(2)
C(33B)	0.014(3)	0.014(3)	0.028(4)	0.000(2)	0.002(3)	0.008(3)
C(61A)	0.021(3)	0.005(2)	0.014(3)	0.001(2)	-0.000(2)	0.003(2)
C(52A)	0.030(4)	0.029(4)	0.020(4)	0.013(3)	0.006(3)	0.009(3)
C(62A)	0.024(3)	0.024(3)	0.017(3)	0.009(3)	0.006(3)	0.011(3)
C(22B)	0.025(3)	0.017(3)	0.016(3)	0.009(3)	0.001(3)	0.008(3)
C(63A)	0.025(3)	0.032(4)	0.017(3)	0.004(3)	-0.000(3)	0.013(3)
C(53B)	0.018(3)	0.019(3)	0.020(3)	-0.004(2)	-0.005(3)	0.009(3)
C(45A)	0.015(3)	0.027(3)	0.032(4)	0.008(3)	0.006(3)	0.015(3)
C(54B)	0.019(3)	0.027(3)	0.011(3)	-0.003(3)	-0.004(2)	0.014(3)
C(55B)	0.020(3)	0.031(4)	0.010(3)	0.000(3)	0.005(3)	0.004(3)
C(55A)	0.024(3)	0.022(3)	0.017(3)	-0.003(3)	-0.005(3)	0.013(3)
C(65A)	0.017(3)	0.016(3)	0.024(4)	0.005(2)	0.002(3)	0.000(3)
C(11A)	0.015(3)	0.029(3)	0.009(3)	0.007(2)	0.001(2)	0.009(3)
C(64A)	0.026(3)	0.018(3)	0.019(3)	0.006(3)	-0.010(3)	0.006(3)
C(46B)	0.019(3)	0.018(3)	0.018(3)	0.002(2)	0.005(3)	0.009(3)
C(43B)	0.024(3)	0.010(3)	0.018(3)	-0.001(2)	-0.002(3)	0.005(2)
C(36B)	0.016(3)	0.022(3)	0.019(3)	-0.002(2)	-0.000(3)	0.007(3)
C(35B)	0.026(3)	0.029(3)	0.013(3)	0.006(3)	0.006(3)	0.007(3)
C(12A)	0.022(3)	0.028(3)	0.018(3)	0.007(3)	0.004(3)	0.011(3)
C(44B)	0.036(4)	0.022(3)	0.005(3)	0.003(3)	-0.013(3)	-0.002(3)
C(26B)	0.021(3)	0.036(4)	0.018(3)	0.007(3)	0.002(3)	0.017(3)
C(54A)	0.027(3)	0.041(4)	0.012(3)	-0.002(3)	-0.004(3)	0.016(3)
C(45B)	0.033(4)	0.020(3)	0.009(3)	-0.004(3)	-0.002(3)	0.005(3)
C(44A)	0.014(3)	0.023(3)	0.038(4)	-0.002(3)	-0.011(3)	0.014(3)
C(16A)	0.026(4)	0.031(4)	0.021(4)	0.004(3)	0.005(3)	0.008(3)
C(23B)	0.044(4)	0.011(3)	0.019(4)	-0.004(3)	-0.014(3)	0.002(3)
C(24B)	0.024(4)	0.028(4)	0.045(5)	-0.012(3)	-0.026(3)	0.021(4)
C(53A)	0.028(4)	0.053(5)	0.013(3)	0.009(3)	0.006(3)	0.012(3)
C(25B)	0.015(3)	0.051(5)	0.052(5)	0.012(3)	0.007(3)	0.031(4)
C(66B)	0.020(3)	0.014(3)	0.015(3)	0.002(2)	0.001(3)	-0.001(3)
C(26A)	0.019(3)	0.021(3)	0.023(3)	-0.000(3)	0.003(3)	0.008(3)
C(21A)	0.024(3)	0.014(3)	0.011(3)	0.000(2)	0.002(2)	0.005(2)
C(62B)	0.030(4)	0.025(3)	0.020(3)	0.012(3)	0.004(3)	0.009(3)
C(65B)	0.020(3)	0.012(3)	0.039(4)	0.006(3)	0.002(3)	0.006(3)
C(22A)	0.020(3)	0.017(3)	0.021(3)	0.002(3)	-0.003(3)	0.006(3)
C(23A)	0.039(4)	0.025(4)	0.027(4)	0.012(3)	0.009(3)	0.012(3)

Table 22 Non-hydrogen thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{Br}_4]_2$ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(64B)	0.028(4)	0.029(4)	0.034(4)	0.014(3)	-0.005(3)	0.014(3)
C(63B)	0.039(4)	0.044(4)	0.019(4)	0.021(3)	-0.002(3)	0.012(3)
C(14A)	0.011(3)	0.072(5)	0.023(4)	0.008(3)	0.006(3)	0.030(4)
C(24A)	0.053(5)	0.009(3)	0.029(4)	0.008(3)	0.014(3)	0.008(3)
C(25A)	0.035(4)	0.025(4)	0.028(4)	-0.003(3)	0.006(3)	0.011(3)
C(13A)	0.023(4)	0.052(4)	0.026(4)	0.021(3)	0.009(3)	0.017(3)
C(15A)	0.027(4)	0.040(4)	0.025(4)	-0.005(3)	0.004(3)	0.016(3)

Table 23 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{I}_4]_2$.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ²
I(1A)	0.08190(3)	0.54019(2)	0.11405(2)	* 0.0453(3)
I(1B)	0.58468(3)	0.04135(2)	0.10795(2)	* 0.0426(3)
I(2A)	0.09496(3)	0.35153(2)	0.44896(2)	* 0.0450(3)
I(2B)	0.54471(3)	-0.12694(2)	0.44803(2)	* 0.0466(3)
I(3A)	0.55061(3)	0.23220(2)	0.24514(2)	* 0.0530(4)
I(3B)	1.04151(3)	-0.26712(2)	0.24427(2)	* 0.0463(3)
I(4A)	-0.09925(3)	0.16154(2)	0.19275(2)	* 0.0388(3)
I(4B)	0.40489(3)	-0.33771(2)	0.18612(2)	* 0.0378(3)
CU(1A)	0.11964(6)	0.42637(4)	0.17763(3)	* 0.0429(6)
CU(1B)	0.61492(6)	-0.07046(4)	0.17575(3)	* 0.0418(5)
CU(2A)	0.12052(6)	0.34493(4)	0.33390(3)	* 0.0435(6)
CU(2B)	0.59698(6)	-0.14710(4)	0.33714(3)	* 0.0435(6)
CU(3A)	0.34112(6)	0.28372(4)	0.24025(3)	* 0.0426(6)
CU(3B)	0.82243(6)	-0.20923(4)	0.24070(3)	* 0.0460(6)
CU(4A)	0.03623(5)	0.24332(4)	0.21886(3)	* 0.0400(5)
CU(4B)	0.53459(5)	-0.25412(4)	0.21818(3)	* 0.0401(5)
S(1A)	0.0677(1)	0.43890(8)	0.27526(6)	* 0.038(1)
S(1B)	0.5617(1)	-0.05602(8)	0.27139(6)	* 0.038(1)
S(2A)	0.3084(1)	0.31647(9)	0.33176(7)	* 0.040(1)
S(2B)	0.7850(1)	-0.18217(8)	0.33198(7)	* 0.038(1)
S(3A)	0.2236(1)	0.20657(9)	0.22707(7)	* 0.038(1)
S(3B)	0.7204(1)	-0.29220(8)	0.22463(7)	* 0.036(1)
S(4A)	0.0358(1)	0.33928(9)	0.15369(7)	* 0.048(1)
S(4B)	0.5307(1)	-0.15778(9)	0.15270(7)	* 0.050(1)
S(5A)	0.3033(1)	0.37677(8)	0.17600(7)	* 0.037(1)
S(5B)	0.7997(1)	-0.11986(8)	0.17298(6)	* 0.035(1)
S(6A)	0.0128(1)	0.26648(8)	0.31221(6)	* 0.037(1)
S(6B)	0.5088(1)	-0.23268(8)	0.31225(6)	* 0.038(1)
N(11A)	0.1976(5)	0.4871(4)	0.3438(3)	* 0.048(5)
N(11B)	0.6537(5)	0.0035(3)	0.3479(3)	* 0.056(5)
N(12A)	0.1340(8)	0.5550(5)	0.2642(4)	* 0.070(7)
N(12B)	0.6453(8)	0.0564(4)	0.2556(4)	* 0.077(7)
N(21A)	0.2455(5)	0.2045(4)	0.3844(3)	* 0.060(5)
N(21B)	0.8525(5)	-0.3070(4)	0.3605(3)	* 0.051(5)
N(22A)	0.4252(6)	0.2216(5)	0.3948(4)	* 0.096(7)
N(22B)	0.7497(6)	-0.2605(4)	0.4271(3)	* 0.063(5)
N(31A)	0.1877(4)	0.1468(3)	0.1386(2)	* 0.051(4)
N(31B)	0.6865(4)	-0.3467(3)	0.1328(2)	* 0.056(4)
N(32A)	0.3686(5)	0.1571(4)	0.1562(4)	* 0.074(6)
N(32B)	0.8660(5)	-0.3318(5)	0.1500(4)	* 0.081(7)
N(41A)	-0.1389(5)	0.3142(4)	0.0993(3)	* 0.053(5)
N(41B)	0.3541(5)	-0.1825(4)	0.1002(3)	* 0.056(5)
N(42A)	-0.0887(6)	0.4176(4)	0.0781(3)	* 0.065(5)

Table 23 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
N(42B)	0.4027(6)	-0.0796(4)	0.0788(4)	* 0.076(6)
N(51A)	0.4955(4)	0.4079(4)	0.2088(3)	* 0.046(5)
N(51B)	0.9835(4)	-0.0907(4)	0.2170(3)	* 0.051(5)
N(52A)	0.3732(5)	0.4918(4)	0.1693(3)	* 0.060(6)
N(52B)	0.8749(6)	-0.0060(4)	0.1687(4)	* 0.059(6)
N(61A)	-0.1481(4)	0.3190(3)	0.3733(2)	* 0.047(4)
N(61B)	0.2971(5)	-0.2414(4)	0.2957(3)	* 0.059(5)
N(62A)	-0.2013(5)	0.2690(4)	0.2995(3)	* 0.054(5)
N(62B)	0.3362(4)	-0.1916(3)	0.3713(3)	* 0.056(5)
C(1A)	0.1395(5)	0.4985(4)	0.2955(3)	* 0.039(5)
C(1B)	0.6261(5)	0.0062(3)	0.2930(3)	* 0.041(5)
C(11A)	0.2714(5)	0.5258(3)	0.3666(3)	* 0.043(5)
C(11B)	0.7129(6)	0.0501(4)	0.3717(3)	* 0.055(5)
C(12A)	0.3376(6)	0.5636(4)	0.3334(3)	* 0.055(5)
C(12B)	0.6656(7)	0.0813(4)	0.4145(4)	* 0.072(7)
C(13A)	0.4129(6)	0.5981(4)	0.3581(4)	* 0.064(6)
C(13B)	0.7258(9)	0.1245(5)	0.4380(5)	* 0.087(8)
C(14A)	0.4212(7)	0.5924(5)	0.4155(4)	* 0.084(8)
C(14B)	0.8296(9)	0.1339(5)	0.4205(4)	* 0.080(8)
C(15A)	0.3567(9)	0.5532(6)	0.4501(4)	* 0.108(9)
C(15B)	0.8754(9)	0.1026(7)	0.3794(6)	* 0.12(1)
C(16A)	0.2796(7)	0.5197(5)	0.4256(3)	* 0.087(7)
C(16B)	0.8171(8)	0.0592(7)	0.3546(5)	* 0.11(1)
C(2A)	0.3269(5)	0.2417(3)	0.3734(3)	* 0.040(5)
C(2B)	0.7963(5)	-0.2550(4)	0.3766(3)	* 0.039(5)
C(21A)	0.2501(8)	0.1382(5)	0.4070(4)	* 0.065(8)
C(21B)	0.8492(6)	-0.3725(4)	0.3845(3)	* 0.045(5)
C(22A)	0.3244(9)	0.0922(8)	0.3873(6)	* 0.09(1)
C(22B)	0.7509(8)	-0.3984(6)	0.3916(4)	* 0.072(8)
C(23A)	0.321(2)	0.0281(9)	0.4100(9)	* 0.14(2)
C(23B)	0.750(1)	-0.4641(7)	0.4120(5)	* 0.09(1)
C(24A)	0.242(3)	0.012(1)	0.453(1)	* 0.19(3)
C(24B)	0.846(1)	-0.5011(6)	0.4273(4)	* 0.08(1)
C(25A)	0.178(2)	0.057(1)	0.4684(7)	* 0.14(2)
C(25B)	0.943(1)	-0.4757(6)	0.4198(4)	* 0.077(9)
C(26A)	0.175(1)	0.1202(8)	0.4485(5)	* 0.09(1)
C(26B)	0.9465(7)	-0.4115(5)	0.3992(4)	* 0.064(7)
C(3A)	0.2637(4)	0.1683(3)	0.1693(3)	* 0.039(4)
C(3B)	0.7611(5)	-0.3253(3)	0.1641(3)	* 0.043(5)
C(31A)	0.2016(5)	0.1115(4)	0.0904(3)	* 0.054(6)
C(31B)	0.7036(6)	-0.3801(5)	0.0835(3)	* 0.064(6)
C(32A)	0.1499(8)	0.0563(5)	0.0913(4)	* 0.072(8)
C(32B)	0.659(1)	-0.4383(7)	0.0851(4)	* 0.081(9)

Table 23 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ²
C(33A)	0.1528(9)	0.0231(5)	0.0431(5)	* 0.090(9)
C(33B)	0.663(1)	-0.4726(6)	0.0380(5)	* 0.12(1)
C(34A)	0.209(1)	0.0470(8)	-0.0032(5)	* 0.11(1)
C(34B)	0.717(1)	-0.447(1)	-0.0091(6)	* 0.15(2)
C(35A)	0.263(1)	0.100(1)	-0.0056(5)	* 0.11(1)
C(35B)	0.763(1)	-0.388(1)	-0.0110(6)	* 0.16(2)
C(36A)	0.2581(7)	0.1346(7)	0.0431(4)	* 0.086(9)
C(36B)	0.7565(7)	-0.3532(7)	0.0366(4)	* 0.103(9)
C(4A)	-0.0728(5)	0.3580(4)	0.1068(3)	* 0.043(5)
C(4B)	0.4199(5)	-0.1383(4)	0.1072(3)	* 0.040(5)
C(41A)	-0.2355(5)	0.3209(3)	0.0647(3)	* 0.047(5)
C(41B)	0.2562(5)	-0.1760(3)	0.0653(3)	* 0.047(5)
C(42A)	-0.3307(7)	0.3022(5)	0.0905(4)	* 0.079(7)
C(42B)	0.2624(7)	-0.1566(4)	0.0076(3)	* 0.064(6)
C(43A)	-0.4271(7)	0.3098(6)	0.0563(6)	* 0.11(1)
C(43B)	0.166(1)	-0.1509(5)	-0.0249(5)	* 0.092(8)
C(44A)	-0.421(1)	0.3341(6)	-0.0008(7)	* 0.13(1)
C(44B)	0.069(1)	-0.1650(6)	0.0009(6)	* 0.11(1)
C(45A)	-0.326(1)	0.3503(5)	-0.0255(4)	* 0.094(9)
C(45B)	0.0636(7)	-0.1850(6)	0.0573(6)	* 0.11(1)
C(46A)	-0.2305(7)	0.3427(4)	0.0070(4)	* 0.072(7)
C(46B)	0.1590(7)	-0.1917(5)	0.0920(4)	* 0.077(7)
C(5A)	0.3970(4)	0.4305(4)	0.1856(3)	* 0.037(5)
C(5B)	0.8921(4)	-0.0670(4)	0.1877(3)	* 0.034(5)
C(51A)	0.5860(4)	0.4437(4)	0.2192(3)	* 0.042(5)
C(51B)	1.0754(4)	-0.0565(4)	0.2294(3)	* 0.043(5)
C(52A)	0.5724(5)	0.4983(4)	0.2459(3)	* 0.050(6)
C(52B)	1.0624(6)	-0.0010(4)	0.2547(3)	* 0.055(6)
C(53A)	0.6634(6)	0.5297(5)	0.2564(3)	* 0.059(6)
C(53B)	1.1550(7)	0.0297(5)	0.2651(4)	* 0.065(7)
C(54A)	0.7670(6)	0.5050(5)	0.2419(4)	* 0.062(7)
C(54B)	1.2575(6)	0.0029(5)	0.2516(4)	* 0.069(7)
C(55A)	0.7810(5)	0.4512(5)	0.2163(4)	* 0.065(7)
C(55B)	1.2706(6)	-0.0522(5)	0.2276(4)	* 0.075(8)
C(56A)	0.6909(5)	0.4183(4)	0.2050(3)	* 0.055(6)
C(56B)	1.1793(6)	-0.0819(5)	0.2167(4)	* 0.068(8)
C(6A)	-0.1225(4)	0.2874(3)	0.3289(3)	* 0.036(4)
C(6B)	0.3704(4)	-0.2207(3)	0.3269(3)	* 0.037(4)
C(61A)	-0.2568(5)	0.3326(3)	0.3952(3)	* 0.041(5)
C(61B)	0.2247(5)	-0.1834(5)	0.3901(3)	* 0.049(6)
C(62A)	-0.3303(6)	0.3799(5)	0.3651(4)	* 0.068(6)
C(62B)	0.1721(7)	-0.2336(6)	0.4140(4)	* 0.072(8)
C(63A)	-0.4355(7)	0.3907(6)	0.3865(4)	* 0.081(8)

Table 23 Non-hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
C(63B)	0.0634(9)	-0.2260(8)	0.4325(4)	* 0.09(1)
C(64A)	-0.4665(7)	0.3576(5)	0.4360(4)	* 0.071(7)
C(64B)	0.0126(8)	-0.166(1)	0.4259(5)	* 0.10(1)
C(65A)	-0.3950(8)	0.3118(5)	0.4667(4)	* 0.082(8)
C(65B)	0.060(1)	-0.112(1)	0.4011(6)	* 0.12(1)
C(66A)	-0.2880(7)	0.2988(5)	0.4455(4)	* 0.070(7)
C(66B)	0.1706(8)	-0.1217(7)	0.3828(5)	* 0.091(9)

Table 24 Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂.

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
H(16A)	0.240(5)	0.489(3)	0.449(3)	0.05(2)
H(46A)	-0.164(5)	0.354(3)	-0.013(3)	0.06(2)
H(4AA)	-0.145(6)	0.425(4)	0.052(3)	0.08(2)
H(52A)	0.502(5)	0.513(3)	0.258(3)	0.05(2)
H(3B)	0.623(5)	-0.338(3)	0.142(3)	0.04(2)
H(43A)	-0.489(5)	0.297(3)	0.077(3)	0.05(2)
H(52B)	0.998(4)	0.017(3)	0.261(2)	0.02(1)
H(5AA)	0.321(5)	0.508(3)	0.152(3)	0.06(2)
H(12A)	0.336(4)	0.568(3)	0.294(2)	0.04(2)
H(6BB)	0.229(5)	-0.239(3)	0.303(2)	0.04(2)
H(36B)	0.776(9)	-0.294(6)	0.034(5)	0.19(5)
H(2BA)	0.764(6)	-0.285(4)	0.455(3)	0.06(2)
H(15A)	0.345(8)	0.561(5)	0.494(5)	0.15(4)
H(6A)	-0.104(4)	0.327(3)	0.388(2)	0.03(2)
H(4BA)	0.359(6)	-0.071(4)	0.056(3)	0.08(3)
H(42B)	0.328(5)	-0.151(3)	-0.012(3)	0.06(2)
H(36A)	0.270(5)	0.183(3)	0.040(3)	0.05(2)
H(3AA)	0.408(4)	0.172(3)	0.171(2)	0.02(2)
H(13A)	0.459(7)	0.634(4)	0.328(4)	0.12(3)
H(4AB)	-0.04(1)	0.446(7)	0.073(6)	0.21(7)
H(3A)	0.123(5)	0.157(3)	0.149(2)	0.04(2)
H(1A)	0.186(4)	0.459(3)	0.362(2)	0.02(2)
H(14A)	0.469(6)	0.624(4)	0.432(3)	0.10(3)
H(44A)	-0.478(9)	0.342(5)	-0.027(5)	0.15(4)
H(6B)	0.375(5)	-0.180(3)	0.387(3)	0.04(2)
H(1AA)	0.151(5)	0.579(4)	0.269(3)	0.00(2)
H(66A)	-0.240(5)	0.266(3)	0.468(3)	0.06(2)
H(13B)	0.696(7)	0.139(4)	0.473(4)	0.12(3)
H(2AA)	0.440(7)	0.194(4)	0.419(4)	0.08(3)
H(6BA)	0.316(5)	-0.257(3)	0.273(3)	0.03(2)

Table 24 Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
H(2BB)	0.706(6)	-0.230(4)	0.426(3)	0.08(3)
H(34B)	0.742(8)	-0.467(5)	-0.042(5)	0.14(4)
H(4A)	-0.126(4)	0.281(3)	0.115(2)	0.03(2)
H(63B)	0.048(8)	-0.271(5)	0.454(4)	0.13(4)
H(24B)	0.845(6)	-0.544(4)	0.442(4)	0.08(3)
H(26B)	1.019(6)	-0.389(4)	0.399(3)	0.10(3)
H(56A)	0.696(4)	0.382(3)	0.185(2)	0.04(2)
H(66B)	0.210(6)	-0.090(4)	0.367(3)	0.06(3)
H(1AB)	0.101(5)	0.565(3)	0.230(3)	0.06(2)
H(5AB)	0.403(5)	0.520(4)	0.175(3)	0.05(2)
H(22B)	0.680(6)	-0.374(4)	0.379(3)	0.09(3)
H(63A)	-0.479(7)	0.418(5)	0.366(4)	0.11(4)
H(54B)	1.306(6)	0.022(4)	0.260(3)	0.06(2)
H(6AB)	-0.264(6)	0.271(4)	0.309(3)	0.08(3)
H(65A)	-0.413(7)	0.286(4)	0.505(4)	0.12(3)
H(53A)	0.655(5)	0.568(4)	0.272(3)	0.06(2)
H(53B)	1.142(6)	0.063(4)	0.282(3)	0.07(3)
H(54A)	0.820(7)	0.534(4)	0.248(4)	0.10(3)
H(46B)	0.157(8)	-0.212(5)	0.129(4)	0.14(4)
H(64A)	-0.540(6)	0.364(4)	0.449(3)	0.08(2)
H(55B)	1.343(6)	-0.069(4)	0.218(3)	0.08(2)
H(62B)	0.195(5)	-0.274(3)	0.421(3)	0.03(2)
H(23B)	0.691(6)	-0.473(4)	0.413(4)	0.07(3)
H(6AA)	-0.178(4)	0.247(3)	0.275(3)	0.04(2)
H(3BA)	0.887(6)	-0.350(4)	0.126(3)	0.07(3)
H(62A)	-0.312(5)	0.398(4)	0.332(3)	0.07(2)
H(4B)	0.356(5)	-0.214(4)	0.115(3)	0.03(2)
H(45A)	-0.305(8)	0.369(5)	-0.069(5)	0.16(4)
H(44B)	0.003(9)	-0.163(5)	-0.025(5)	0.16(4)
H(5BA)	0.830(6)	0.010(4)	0.157(4)	0.07(3)

Table 24 Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
H(25B)	1.010(8)	-0.496(5)	0.433(4)	0.13(4)
H(35A)	0.30(1)	0.136(6)	-0.026(6)	0.17(6)
H(34A)	0.25(1)	0.032(8)	-0.038(7)	0.26(7)
H(32A)	0.117(6)	0.038(4)	0.122(3)	0.08(3)
H(42A)	-0.331(7)	0.289(4)	0.130(4)	0.12(4)
H(55A)	0.856(6)	0.428(4)	0.209(3)	0.09(3)
H(64B)	-0.052(8)	-0.159(5)	0.434(4)	0.12(4)
H(65B)	0.03(1)	-0.077(9)	0.410(8)	0.3(1)
H(3AB)	0.39(1)	0.145(8)	0.112(7)	0.28(8)
H(3BB)	0.911(5)	-0.322(3)	0.175(3)	0.07(2)
H(45B)	-0.012(6)	-0.202(3)	0.080(3)	0.07(2)
H(43B)	0.174(9)	-0.133(5)	-0.062(5)	0.15(4)
H(4BB)	0.431(8)	-0.044(5)	0.080(4)	0.12(4)
H(12B)	0.596(5)	0.066(3)	0.435(3)	0.06(2)
H(14B)	0.875(7)	0.166(4)	0.431(3)	0.10(3)
H(15B)	0.950(7)	0.101(5)	0.367(4)	0.12(3)
H(16B)	0.840(6)	0.045(4)	0.324(3)	0.08(3)
H(22A)	0.372(6)	0.106(4)	0.353(3)	0.07(3)
H(23A)	0.37(1)	-0.026(9)	0.394(7)	0.28(8)
H(24A)	0.267(6)	-0.026(5)	0.459(3)	0.07(3)
H(25A)	0.117(9)	0.058(6)	0.495(5)	0.13(5)
H(26A)	0.127(6)	0.158(4)	0.456(3)	0.06(3)
H(32B)	0.633(8)	-0.460(5)	0.111(4)	0.11(4)
H(35B)	0.792(8)	-0.385(5)	-0.031(4)	0.09(4)
H(56B)	1.185(4)	-0.110(3)	0.202(2)	0.00(1)
H(5BB)	0.908(6)	0.023(4)	0.181(3)	0.08(3)
H(11B)	0.627(5)	-0.031(4)	0.375(3)	0.07(2)
H(21A)	0.187(5)	0.230(3)	0.376(3)	0.06(2)
H(21B)	0.881(5)	-0.301(3)	0.333(3)	0.05(2)
H(51B)	0.985(6)	-0.128(4)	0.234(3)	0.07(3)

Table 24 Hydrogen atom coordinates and isotropic thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	x/a	y/b	z/c	U(eq)Å ^{**2}
H(51A)	0.502(6)	0.368(4)	0.214(3)	0.06(3)
H(1BA)	0.623(9)	0.053(6)	0.216(5)	0.19(5)
H(1BB)	0.667(7)	0.081(5)	0.264(4)	0.07(4)
H(33B)	0.59(1)	0.456(8)	0.045(7)	0.28(7)
H(33A)	0.093(8)	-0.027(5)	0.048(4)	0.16(4)
H(2AB)	0.51(2)	0.26(1)	0.363(9)	0.4(1)

Table 25 Non-hydrogen thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{I}_4]_2$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
I(1A)	0.0474(2)	0.0368(4)	0.0491(3)	-0.0001(2)	-0.0020(2)	0.0005(2)
I(1B)	0.0440(2)	0.0347(4)	0.0464(2)	0.0006(2)	0.0005(2)	0.0006(2)
I(2A)	0.0558(2)	0.0485(4)	0.0302(2)	-0.0026(2)	-0.0050(2)	-0.0052(2)
I(2B)	0.0513(2)	0.0537(4)	0.0368(2)	-0.0057(2)	0.0002(2)	-0.0124(2)
I(3A)	0.0286(2)	0.0436(4)	0.0872(4)	0.0011(2)	-0.0086(2)	-0.0124(3)
I(3B)	0.0253(2)	0.0418(4)	0.0712(3)	-0.0020(2)	-0.0035(2)	-0.0054(2)
I(4A)	0.0384(2)	0.0335(4)	0.0476(2)	-0.0094(2)	-0.0039(2)	-0.0118(2)
I(4B)	0.0417(2)	0.0331(4)	0.0411(2)	-0.0107(2)	-0.0047(2)	-0.0083(2)
CU(1A)	0.0383(4)	0.0406(7)	0.0505(5)	-0.0074(3)	-0.0076(3)	-0.0053(4)
CU(1B)	0.0379(4)	0.0390(7)	0.0493(5)	-0.0078(3)	-0.0076(3)	-0.0047(4)
CU(2A)	0.0391(4)	0.0384(7)	0.0526(5)	-0.0080(4)	-0.0083(3)	-0.0013(4)
CU(2B)	0.0375(4)	0.0400(7)	0.0528(5)	-0.0079(3)	-0.0068(3)	-0.0021(4)
CU(3A)	0.0377(4)	0.0370(7)	0.0540(5)	-0.0082(3)	-0.0044(3)	-0.0058(4)
CU(3B)	0.0514(4)	0.0381(7)	0.0493(5)	-0.0142(4)	-0.0068(4)	-0.0008(4)
CU(4A)	0.0347(4)	0.0412(7)	0.0473(5)	-0.0064(3)	0.0007(3)	-0.0154(4)
CU(4B)	0.0350(4)	0.0416(7)	0.0462(5)	-0.0055(3)	-0.0002(3)	-0.0132(4)
S(1A)	0.0412(8)	0.035(1)	0.0371(8)	-0.0046(7)	-0.0053(6)	-0.0048(7)
S(1B)	0.0380(7)	0.034(1)	0.0409(9)	-0.0036(7)	-0.0050(6)	-0.0047(7)
S(2A)	0.0343(7)	0.042(1)	0.0449(9)	-0.0081(7)	-0.0045(6)	-0.0062(8)
S(2B)	0.0317(7)	0.036(1)	0.0449(9)	-0.0008(7)	-0.0054(6)	-0.0028(7)
S(3A)	0.0287(7)	0.039(1)	0.052(1)	-0.0061(7)	0.0010(6)	-0.0177(8)
S(3B)	0.0288(6)	0.034(1)	0.0474(9)	-0.0045(6)	-0.0012(6)	-0.0126(7)
S(4A)	0.0464(8)	0.039(1)	0.057(1)	-0.0129(8)	-0.0239(8)	0.0025(8)
S(4B)	0.0463(8)	0.039(2)	0.063(1)	-0.0135(8)	-0.0274(8)	0.0059(8)
S(5A)	0.0298(7)	0.030(1)	0.052(1)	-0.0070(7)	-0.0046(6)	-0.0034(7)
S(5B)	0.0278(6)	0.031(1)	0.0475(9)	-0.0060(6)	-0.0041(6)	-0.0024(7)
S(6A)	0.0285(6)	0.045(1)	0.0403(9)	-0.0072(7)	-0.0012(6)	-0.0143(7)
S(6B)	0.0305(7)	0.045(1)	0.0418(9)	-0.0114(7)	0.0004(6)	-0.0144(7)
N(11A)	0.064(4)	0.046(6)	0.035(3)	-0.021(3)	-0.007(3)	0.006(3)
N(11B)	0.077(4)	0.057(6)	0.037(3)	-0.030(3)	-0.000(3)	-0.004(3)

Table 25 Non-hydrogen thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{I}_4]_2$ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
N(12A)	0.112(6)	0.035(9)	0.065(5)	-0.012(5)	-0.035(4)	-0.001(5)
N(12B)	0.148(8)	0.035(8)	0.054(5)	-0.036(5)	-0.013(4)	-0.005(4)
N(21A)	0.040(3)	0.049(7)	0.086(5)	0.000(3)	-0.013(3)	0.008(4)
N(21B)	0.053(4)	0.050(7)	0.047(4)	-0.000(3)	0.009(3)	0.000(4)
N(22A)	0.067(4)	0.098(8)	0.112(7)	-0.014(4)	-0.053(5)	0.034(5)
N(22B)	0.072(4)	0.068(7)	0.039(4)	0.019(4)	-0.002(3)	0.008(3)
N(31A)	0.036(3)	0.077(6)	0.047(3)	-0.006(3)	0.006(2)	-0.033(3)
N(31B)	0.038(3)	0.087(6)	0.048(4)	-0.005(3)	0.003(3)	-0.030(3)
N(32A)	0.030(3)	0.106(7)	0.099(6)	-0.008(3)	0.003(3)	-0.055(5)
N(32B)	0.036(3)	0.127(8)	0.092(6)	0.001(4)	0.003(3)	-0.066(6)
N(41A)	0.061(4)	0.035(6)	0.059(4)	-0.019(3)	-0.033(3)	0.015(3)
N(41B)	0.061(4)	0.035(7)	0.071(4)	-0.028(4)	-0.034(3)	0.018(4)
N(42A)	0.074(4)	0.043(6)	0.073(5)	-0.018(4)	-0.043(4)	0.017(4)
N(42B)	0.083(5)	0.036(7)	0.103(6)	-0.019(4)	-0.060(4)	0.023(4)
N(51A)	0.033(3)	0.028(6)	0.079(4)	-0.005(3)	-0.011(3)	-0.007(3)
N(51B)	0.036(3)	0.029(6)	0.087(5)	-0.010(3)	-0.019(3)	0.005(4)
N(52A)	0.046(4)	0.035(8)	0.096(5)	-0.010(4)	-0.032(4)	0.003(4)
N(52B)	0.045(4)	0.032(7)	0.100(6)	-0.008(4)	-0.025(4)	-0.001(5)
N(61A)	0.033(3)	0.065(5)	0.051(4)	-0.004(3)	-0.005(2)	-0.031(3)
N(61B)	0.031(3)	0.097(7)	0.060(4)	-0.011(3)	-0.003(3)	-0.046(4)
N(62A)	0.034(3)	0.076(6)	0.061(4)	-0.006(3)	-0.002(3)	-0.039(4)
N(62B)	0.035(3)	0.085(6)	0.058(4)	-0.019(3)	0.007(3)	-0.035(4)
C(1A)	0.054(4)	0.028(6)	0.036(4)	-0.001(3)	0.003(3)	-0.008(3)
C(1B)	0.051(4)	0.032(6)	0.042(4)	-0.008(3)	0.002(3)	-0.007(3)
C(11A)	0.050(4)	0.037(6)	0.045(4)	-0.012(3)	-0.002(3)	-0.013(3)
C(11B)	0.069(4)	0.066(7)	0.036(4)	-0.028(4)	-0.001(3)	-0.009(3)
C(12A)	0.066(4)	0.064(7)	0.040(4)	-0.018(4)	0.005(3)	-0.013(4)
C(12B)	0.079(6)	0.070(8)	0.076(6)	-0.024(5)	0.013(5)	-0.033(5)
C(13A)	0.073(5)	0.054(7)	0.070(6)	-0.029(4)	0.010(4)	-0.016(4)
C(13B)	0.115(8)	0.070(9)	0.089(8)	-0.022(6)	0.005(6)	-0.050(6)

Table 25 Non-hydrogen thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{I}_4]_2$ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(14A)	0.089(6)	0.11(1)	0.066(6)	-0.053(6)	0.006(5)	-0.033(6)
C(14B)	0.112(8)	0.055(9)	0.081(7)	-0.039(6)	-0.007(6)	-0.011(5)
C(15A)	0.133(8)	0.17(1)	0.041(5)	-0.095(8)	0.008(5)	-0.024(6)
C(15B)	0.092(8)	0.15(1)	0.14(1)	-0.077(8)	0.039(7)	-0.076(9)
C(16A)	0.105(7)	0.127(9)	0.041(5)	-0.086(6)	-0.001(4)	-0.005(5)
C(16B)	0.095(7)	0.17(1)	0.103(9)	-0.072(7)	0.050(6)	-0.086(9)
C(2A)	0.042(3)	0.032(6)	0.046(4)	0.002(3)	-0.011(3)	-0.005(3)
C(2B)	0.034(3)	0.037(6)	0.043(4)	0.002(3)	-0.009(3)	-0.002(3)
C(21A)	0.085(6)	0.024(9)	0.082(6)	-0.006(5)	-0.046(5)	0.010(5)
C(21B)	0.066(5)	0.025(7)	0.042(4)	-0.000(4)	0.004(3)	-0.001(3)
C(22A)	0.088(7)	0.07(1)	0.12(1)	0.002(8)	-0.030(7)	-0.024(8)
C(22B)	0.078(6)	0.059(9)	0.075(6)	-0.009(5)	-0.012(5)	0.008(5)
C(23A)	0.21(2)	0.02(2)	0.18(2)	0.02(1)	-0.11(1)	-0.01(1)
C(23B)	0.10(1)	0.08(1)	0.090(8)	-0.036(8)	-0.004(7)	-0.006(6)
C(24A)	0.39(4)	0.02(2)	0.15(2)	-0.05(2)	-0.14(2)	0.03(1)
C(24B)	0.14(1)	0.04(1)	0.070(6)	-0.006(8)	0.009(6)	0.000(5)
C(25A)	0.26(2)	0.07(3)	0.11(1)	-0.09(2)	0.00(1)	0.00(1)
C(25B)	0.107(9)	0.03(1)	0.083(7)	0.015(7)	0.015(6)	0.002(5)
C(26A)	0.14(1)	0.03(1)	0.107(9)	-0.024(9)	0.007(7)	0.007(7)
C(26B)	0.075(6)	0.032(9)	0.084(6)	0.013(5)	0.008(4)	-0.014(5)
C(3A)	0.037(3)	0.034(5)	0.048(4)	-0.002(3)	0.005(3)	-0.013(3)
C(3B)	0.037(3)	0.047(6)	0.046(4)	0.002(3)	0.004(3)	-0.013(3)
C(31A)	0.040(3)	0.080(8)	0.043(4)	0.009(4)	-0.002(3)	-0.023(4)
C(31B)	0.046(4)	0.109(9)	0.040(4)	0.008(4)	-0.001(3)	-0.027(4)
C(32A)	0.080(6)	0.071(9)	0.066(6)	0.010(5)	-0.017(5)	-0.030(5)
C(32B)	0.100(7)	0.10(1)	0.049(6)	0.009(7)	-0.017(5)	-0.027(6)
C(33A)	0.110(7)	0.08(1)	0.088(8)	0.026(6)	-0.028(6)	-0.050(6)
C(33B)	0.14(1)	0.12(1)	0.090(9)	0.058(8)	-0.043(7)	-0.072(8)
C(34A)	0.092(8)	0.18(2)	0.067(7)	0.051(9)	-0.012(6)	-0.058(9)
C(34B)	0.13(1)	0.25(2)	0.09(1)	0.08(1)	-0.043(9)	-0.12(1)

Table 25 Non-hydrogen thermal parameters of [Cu₄(ptu)₆I₄]₂ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(35A)	0.082(8)	0.20(2)	0.070(8)	-0.013(9)	0.009(6)	-0.05(1)
C(35B)	0.09(1)	0.33(3)	0.070(9)	-0.00(1)	0.015(7)	-0.10(1)
C(36A)	0.077(6)	0.13(1)	0.056(6)	-0.022(6)	0.010(4)	-0.028(6)
C(36B)	0.075(6)	0.18(1)	0.053(6)	-0.015(6)	0.013(4)	-0.022(6)
C(4A)	0.043(3)	0.042(6)	0.045(4)	-0.016(3)	-0.011(3)	0.000(3)
C(4B)	0.039(3)	0.039(6)	0.042(4)	-0.012(3)	-0.012(3)	0.004(3)
C(41A)	0.048(4)	0.049(6)	0.046(4)	-0.010(3)	-0.017(3)	-0.003(3)
C(41B)	0.044(3)	0.051(6)	0.046(4)	-0.012(3)	-0.018(3)	-0.001(3)
C(42A)	0.060(5)	0.115(9)	0.070(6)	-0.030(5)	-0.012(4)	-0.022(5)
C(42B)	0.070(5)	0.076(7)	0.048(5)	-0.027(4)	-0.011(4)	0.004(4)
C(43A)	0.043(5)	0.15(1)	0.14(1)	-0.037(6)	0.000(6)	-0.043(9)
C(43B)	0.132(9)	0.076(8)	0.067(7)	-0.031(6)	-0.060(7)	0.016(5)
C(44A)	0.13(1)	0.11(1)	0.15(1)	-0.006(8)	-0.11(1)	-0.013(8)
C(44B)	0.093(8)	0.10(1)	0.12(1)	-0.005(6)	-0.076(8)	-0.017(7)
C(45A)	0.134(9)	0.087(9)	0.064(6)	-0.043(7)	-0.052(6)	0.013(5)
C(45B)	0.042(4)	0.14(1)	0.14(1)	-0.035(5)	-0.012(6)	-0.038(8)
C(46A)	0.086(6)	0.083(8)	0.051(5)	-0.034(5)	-0.021(4)	-0.006(4)
C(46B)	0.065(5)	0.106(9)	0.066(6)	-0.037(5)	-0.007(4)	-0.010(5)
C(5A)	0.033(3)	0.028(7)	0.050(4)	-0.002(3)	-0.004(3)	-0.004(3)
C(5B)	0.030(3)	0.022(6)	0.048(4)	-0.003(3)	-0.001(2)	-0.003(3)
C(51A)	0.029(3)	0.041(6)	0.055(4)	-0.008(3)	-0.005(3)	-0.006(3)
C(51B)	0.029(3)	0.031(6)	0.070(5)	-0.005(3)	-0.012(3)	-0.002(4)
C(52A)	0.039(4)	0.046(7)	0.066(5)	0.001(3)	-0.012(3)	-0.014(4)
C(52B)	0.038(4)	0.046(8)	0.081(6)	0.001(4)	-0.009(3)	-0.010(4)
C(53A)	0.070(5)	0.037(8)	0.070(5)	-0.012(4)	-0.021(4)	-0.006(4)
C(53B)	0.067(5)	0.048(9)	0.086(6)	-0.010(4)	-0.018(4)	-0.022(5)
C(54A)	0.050(4)	0.058(9)	0.080(6)	-0.023(4)	-0.013(4)	-0.004(5)
C(54B)	0.039(4)	0.08(1)	0.092(7)	-0.026(4)	-0.014(4)	-0.005(5)
C(55A)	0.032(3)	0.086(9)	0.081(6)	-0.010(4)	-0.003(3)	-0.021(5)
C(55B)	0.032(4)	0.09(1)	0.107(7)	-0.010(4)	-0.005(4)	-0.042(6)

Table 25 Non-hydrogen thermal parameters of $[\text{Cu}_4(\text{ptu})_6\text{I}_4]_2$ (cont).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
C(56A)	0.036(3)	0.063(8)	0.071(5)	-0.005(3)	-0.003(3)	-0.028(5)
C(56B)	0.043(4)	0.07(1)	0.097(7)	-0.004(4)	-0.006(4)	-0.041(6)
C(6A)	0.036(3)	0.033(5)	0.040(3)	-0.008(3)	-0.004(2)	-0.006(3)
C(6B)	0.030(3)	0.036(5)	0.046(4)	-0.010(3)	0.000(2)	-0.008(3)
C(61A)	0.041(3)	0.043(6)	0.043(4)	-0.006(3)	0.002(3)	-0.024(3)
C(61B)	0.041(4)	0.065(8)	0.046(4)	-0.016(4)	0.004(3)	-0.023(4)
C(62A)	0.047(4)	0.090(8)	0.058(5)	0.012(4)	0.006(4)	0.007(5)
C(62B)	0.069(6)	0.07(1)	0.076(6)	-0.015(6)	0.013(4)	-0.001(6)
C(63B)	0.069(6)	0.13(1)	0.074(7)	-0.042(7)	0.019(5)	-0.016(7)
C(64A)	0.047(4)	0.089(9)	0.085(7)	-0.015(5)	0.013(4)	-0.033(6)
C(64B)	0.041(5)	0.20(2)	0.080(7)	-0.027(8)	0.015(5)	-0.056(9)
C(65A)	0.097(7)	0.070(8)	0.077(7)	-0.011(6)	0.042(5)	-0.007(5)
C(65B)	0.071(7)	0.16(2)	0.12(1)	0.019(8)	0.006(7)	-0.05(1)
C(66A)	0.073(5)	0.076(8)	0.059(5)	0.013(5)	0.005(4)	-0.014(5)
C(66B)	0.066(6)	0.10(1)	0.109(8)	-0.013(7)	0.029(5)	-0.032(7)