

### ข้อมูลผลึก (Crystallographic data)

ตารางที่ 1 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมใน โมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Cl]

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu(1)-P(2)	2.2740(8)
Cu(1)-P(1)	2.2912(8)
Cu(1)-S(1)	2.3921(8)
Cu(1)-Cl(1)	2.4186(8)
S(1)-C(37)	1.690(3)
P(2)-C(19)	1.826(3)
P(2)-C(31)	1.829(3)
P(2)-C(25)	1.842(3)
P(1)-C(1)	1.831(3)
P(1)-C(13)	1.832(3)
P(1)-C(7)	1.835(3)
N(1)-C(37)	1.325(4)
N(1)-C(38)	1.439(4)
N(1)-H(1)	0.8600
N(2)-C(37)	1.320(4)
N(2)-C(39)	1.450(4)
N(2)-H(2)	0.8600
C(1)-C(6)	1.382(4)
C(1)-C(2)	1.390(4)
C(2)-C(3)	1.384(5)
C(2)-H(2A)	0.9300

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(3)-C(4)	1.368(6)
C(3)-H(3)	0.9300
C(4)-C(5)	1.365(6)
C(4)-H(4)	0.9300
C(5)-C(6)	1.381(5)
C(5)-H(5)	0.9300
C(6)-H(6)	0.9300
C(7)-C(8)	1.382(4)
C(7)-C(12)	1.387(4)
C(8)-C(9)	1.382(5)
C(8)-H(8)	0.9300
C(9)-C(10)	1.382(6)
C(9)-H(9)	0.9300
C(10)-C(11)	1.363(6)
C(10)-H(10)	0.9300
C(11)-C(12)	1.371(5)
C(11)-H(11)	0.9300
C(12)-H(12)	0.9300
C(13)-C(14)	1.379(4)
C(13)-C(18)	1.389(4)
C(14)-C(15)	1.387(4)
C(14)-H(14)	0.9300
C(15)-C(16)	1.367(5)
C(15)-H(15)	0.9300
C(16)-C(17)	1.362(5)
C(16)-H(16)	0.9300
C(17)-C(18)	1.388(4)

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(17)-H(17)	0.9300
C(18)-H(18)	0.9300
C(19)-C(20)	1.373(4)
C(19)-C(24)	1.396(4)
C(20)-C(21)	1.404(5)
C(20)-H(20)	0.9300
C(21)-C(22)	1.370(6)
C(21)-H(21)	0.9300
C(22)-C(23)	1.350(6)
C(22)-H(22)	0.9300
C(23)-C(24)	1.378(5)
C(23)-H(23)	0.9300
C(24)-H(24)	0.9300
C(25)-C(30)	1.383(4)
C(25)-C(26)	1.384(4)
C(26)-C(27)	1.392(5)
C(26)-H(26)	0.9300
C(27)-C(28)	1.367(5)
C(27)-H(27)	0.9300
C(28)-C(29)	1.369(5)
C(28)-H(28)	0.9300
C(29)-C(30)	1.385(5)
C(29)-H(29)	0.9300
C(30)-H(30)	0.9300
C(31)-C(36)	1.390(4)
C(31)-C(32)	1.392(4)
C(32)-C(33)	1.385(4)

ตารางที่ 1 (ต่อ )

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(32)-H(32)	0.9300
C(33)-C(34)	1.367(5)
C(33)-H(33)	0.9300
C(34)-C(35)	1.365(5)
C(34)-H(34)	0.9300
C(35)-C(36)	1.388(4)
C(35)-H(35)	0.9300
C(36)-H(36)	0.9300
C(38)-C(39)	1.524(5)
C(38)-H(38A)	0.9700
C(38)-H(38B)	0.9700
C(39)-H(39A)	0.9700
C(39)-H(39B)	0.9700

ตารางที่ 2 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{PPh}_3)_2(\text{etu})\text{Cl}]$

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(2)-Cu(1)-P(1)	129.31(3)
P(2)-Cu(1)-S(1)	99.33(3)
P(1)-Cu(1)-S(1)	103.51(3)
P(2)-Cu(1)-Cl(1)	102.70(3)
P(1)-Cu(1)-Cl(1)	110.60(3)
S(1)-Cu(1)-Cl(1)	110.16(3)
C(37)-S(1)-Cu(1)	105.16(10)
C(19)-P(2)-C(31)	101.76(12)
C(19)-P(2)-C(25)	104.69(12)
C(31)-P(2)-C(25)	102.16(12)
C(19)-P(2)-Cu(1)	111.53(9)
C(31)-P(2)-Cu(1)	120.57(9)
C(25)-P(2)-Cu(1)	114.28(9)
C(1)-P(1)-C(13)	103.96(12)
C(1)-P(1)-C(7)	101.11(13)
C(13)-P(1)-C(7)	103.17(12)
C(1)-P(1)-Cu(1)	114.55(9)
C(13)-P(1)-Cu(1)	116.94(9)
C(7)-P(1)-Cu(1)	115.13(9)
C(37)-N(1)-C(38)	112.5(3)
C(37)-N(1)-H(1)	123.7
C(38)-N(1)-H(1)	123.7
C(37)-N(2)-C(39)	113.1(2)
C(37)-N(2)-H(2)	123.4
C(39)-N(2)-H(2)	123.4
C(6)-C(1)-C(2)	117.9(3)
C(6)-C(1)-P(1)	123.7(2)

ตารางที่ 2 (ต่อ )

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(2)-C(1)-P(1)	118.4(2)
C(3)-C(2)-C(1)	121.0(3)
C(3)-C(2)-H(2A)	119.5
C(1)-C(2)-H(2A)	119.5
C(4)-C(3)-C(2)	120.1(4)
C(4)-C(3)-H(3)	119.9
C(2)-C(3)-H(3)	119.9
C(5)-C(4)-C(3)	119.3(4)
C(5)-C(4)-H(4)	120.3
C(3)-C(4)-H(4)	120.3
C(4)-C(5)-C(6)	121.2(4)
C(4)-C(5)-H(5)	119.4
C(6)-C(5)-H(5)	119.4
C(5)-C(6)-C(1)	120.4(3)
C(5)-C(6)-H(6)	119.8
C(1)-C(6)-H(6)	119.8
C(8)-C(7)-C(12)	118.6(3)
C(8)-C(7)-P(1)	118.1(2)
C(12)-C(7)-P(1)	123.3(2)
C(7)-C(8)-C(9)	120.3(3)
C(7)-C(8)-H(8)	119.8
C(9)-C(8)-H(8)	119.8
C(8)-C(9)-C(10)	119.9(4)
C(8)-C(9)-H(9)	120.0
C(10)-C(9)-H(9)	120.0
C(11)-C(10)-C(9)	120.1(4)
C(11)-C(10)-H(10)	120.0

ตารางที่ 2 (ต่อ )

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(9)-C(10)-H(10)	120.0
C(10)-C(11)-C(12)	120.1(4)
C(10)-C(11)-H(11)	119.9
C(12)-C(11)-H(11)	119.9
C(11)-C(12)-C(7)	121.0(3)
C(11)-C(12)-H(12)	119.5
C(7)-C(12)-H(12)	119.5
C(14)-C(13)-C(18)	118.3(3)
C(14)-C(13)-P(1)	123.9(2)
C(18)-C(13)-P(1)	117.7(2)
C(13)-C(14)-C(15)	120.4(3)
C(13)-C(14)-H(14)	119.8
C(15)-C(14)-H(14)	119.8
C(16)-C(15)-C(14)	120.6(3)
C(16)-C(15)-H(15)	119.7
C(14)-C(15)-H(15)	119.7
C(17)-C(16)-C(15)	119.9(3)
C(17)-C(16)-H(16)	120.0
C(15)-C(16)-H(16)	120.0
C(16)-C(17)-C(18)	120.0(3)
C(16)-C(17)-H(17)	120.0
C(18)-C(17)-H(17)	120.0
C(17)-C(18)-C(13)	120.8(3)
C(17)-C(18)-H(18)	119.6
C(13)-C(18)-H(18)	119.6
C(20)-C(19)-C(24)	118.6(3)
C(20)-C(19)-P(2)	124.3(2)

ตารางที่ 2 (ต่อ )

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(24)-C(19)-P(2)	117.2(2)
C(19)-C(20)-C(21)	119.5(3)
C(19)-C(20)-H(20)	120.2
C(21)-C(20)-H(20)	120.2
C(22)-C(21)-C(20)	120.3(4)
C(22)-C(21)-H(21)	119.8
C(20)-C(21)-H(21)	119.8
C(23)-C(22)-C(21)	120.5(3)
C(23)-C(22)-H(22)	119.7
C(21)-C(22)-H(22)	119.7
C(22)-C(23)-C(24)	119.9(4)
C(22)-C(23)-H(23)	120.1
C(24)-C(23)-H(23)	120.1
C(23)-C(24)-C(19)	121.1(3)
C(23)-C(24)-H(24)	119.5
C(19)-C(24)-H(24)	119.5
C(30)-C(25)-C(26)	118.8(3)
C(30)-C(25)-P(2)	122.5(2)
C(26)-C(25)-P(2)	118.7(2)
C(25)-C(26)-C(27)	120.2(3)
C(25)-C(26)-H(26)	119.9
C(27)-C(26)-H(26)	119.9
C(28)-C(27)-C(26)	120.5(3)
C(28)-C(27)-H(27)	119.7
C(26)-C(27)-H(27)	119.7
C(27)-C(28)-C(29)	119.6(3)
C(27)-C(28)-H(28)	120.2



ตารางที่ 2 (ต่อ )

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(29)-C(28)-H(28)	120.2
C(28)-C(29)-C(30)	120.6(3)
C(28)-C(29)-H(29)	119.7
C(30)-C(29)-H(29)	119.7
C(25)-C(30)-C(29)	120.3(3)
C(25)-C(30)-H(30)	119.8
C(29)-C(30)-H(30)	119.8
C(36)-C(31)-C(32)	118.8(2)
C(36)-C(31)-P(2)	117.3(2)
C(32)-C(31)-P(2)	124.0(2)
C(33)-C(32)-C(31)	119.9(3)
C(33)-C(32)-H(32)	120.0
C(31)-C(32)-H(32)	120.0
C(34)-C(33)-C(32)	120.7(3)
C(34)-C(33)-H(33)	119.7
C(32)-C(33)-H(33)	119.7
C(35)-C(34)-C(33)	120.1(3)
C(35)-C(34)-H(34)	120.0
C(33)-C(34)-H(34)	120.0
C(34)-C(35)-C(36)	120.4(3)
C(34)-C(35)-H(35)	119.8
C(36)-C(35)-H(35)	119.8
C(35)-C(36)-C(31)	120.1(3)
C(35)-C(36)-H(36)	119.9
C(31)-C(36)-H(36)	119.9
N(2)-C(37)-N(1)	109.1(3)
N(2)-C(37)-S(1)	126.1(2)

ตารางที่ 2 (ต่อ )

พันธะ	มุมพันธะ (°)
N(1)-C(37)-S(1)	124.7(2)
N(1)-C(38)-C(39)	103.3(3)
N(1)-C(38)-H(38A)	111.1
C(39)-C(38)-H(38A)	111.1
N(1)-C(38)-H(38B)	111.1
C(39)-C(38)-H(38B)	111.1
H(38A)-C(38)-H(38B)	109.1
N(2)-C(39)-C(38)	101.9(3)
N(2)-C(39)-H(39A)	111.4
C(38)-C(39)-H(39A)	111.4
N(2)-C(39)-H(39B)	111.4
C(38)-C(39)-H(39B)	111.4
H(39A)-C(39)-H(39B)	109.3

ตารางที่ 3 มุม Torsion ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Cl]

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(2)-Cu(1)-S(1)-C(37)	146.08(11)
P(1)-Cu(1)-S(1)-C(37)	-79.51(11)
Cl(1)-Cu(1)-S(1)-C(37)	38.76(11)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	-68.81(10)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	47.33(10)
Cl(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	160.60(10)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	50.37(11)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	166.50(10)
Cl(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	-80.23(10)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	172.71(10)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	-71.16(10)
Cl(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	42.11(10)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(1)	65.47(11)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-48.88(11)
Cl(1)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-166.84(11)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-56.51(11)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-170.86(10)
Cl(1)-Cu(1)-P(1)-C(13)	71.18(10)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(7)	-177.90(10)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(7)	67.76(11)
Cl(1)-Cu(1)-P(1)-C(7)	-50.20(11)
C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	18.4(3)
C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	125.2(3)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-110.4(3)
C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	-161.0(2)
C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-54.2(3)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(2)	70.2(3)

ตารางที่ 3 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-0.8(5)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	178.6(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.9(6)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.4(6)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.3(7)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	0.4(6)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	0.1(5)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-179.3(3)
C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	153.7(3)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	-98.9(3)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(8)	29.7(3)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-27.1(3)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	80.3(3)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-151.1(2)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	1.2(5)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-179.6(3)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-0.9(7)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	0.0(8)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	0.5(7)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	-0.1(7)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	-0.7(5)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	-179.9(3)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	93.3(3)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	-11.9(3)
Cu(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-139.3(2)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-91.4(2)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	163.4(2)

ตารางที่ 3 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
Cu(1)-P(1)-C(13)-C(18)	36.0(2)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	-0.9(5)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	174.3(3)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	0.2(5)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	1.0(5)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-1.3(5)
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	0.5(5)
C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	0.6(4)
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-174.9(2)
C(31)-P(2)-C(19)-C(20)	118.8(3)
C(25)-P(2)-C(19)-C(20)	12.7(3)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(20)	-111.4(2)
C(31)-P(2)-C(19)-C(24)	-61.7(2)
C(25)-P(2)-C(19)-C(24)	-167.8(2)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(24)	68.1(2)
C(24)-C(19)-C(20)-C(21)	2.8(5)
P(2)-C(19)-C(20)-C(21)	-177.8(3)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	0.2(5)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	-2.7(6)
C(21)-C(22)-C(23)-C(24)	2.1(6)
C(22)-C(23)-C(24)-C(19)	1.1(5)
C(20)-C(19)-C(24)-C(23)	-3.5(5)
P(2)-C(19)-C(24)-C(23)	177.0(3)
C(19)-P(2)-C(25)-C(30)	75.1(3)
C(31)-P(2)-C(25)-C(30)	-30.6(3)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(30)	-162.6(2)
C(19)-P(2)-C(25)-C(26)	-106.5(2)

ตารางที่ 3 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(31)-P(2)-C(25)-C(26)	147.7(2)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(26)	15.8(3)
C(30)-C(25)-C(26)-C(27)	0.1(5)
P(2)-C(25)-C(26)-C(27)	-178.3(3)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-0.7(6)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	0.5(6)
C(27)-C(28)-C(29)-C(30)	0.2(6)
C(26)-C(25)-C(30)-C(29)	0.6(5)
P(2)-C(25)-C(30)-C(29)	179.0(3)
C(28)-C(29)-C(30)-C(25)	-0.8(5)
C(19)-P(2)-C(31)-C(36)	157.3(2)
C(25)-P(2)-C(31)-C(36)	-94.7(2)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(36)	33.4(2)
C(19)-P(2)-C(31)-C(32)	-22.8(3)
C(25)-P(2)-C(31)-C(32)	85.2(2)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(32)	-146.8(2)
C(36)-C(31)-C(32)-C(33)	0.4(4)
P(2)-C(31)-C(32)-C(33)	-179.5(2)
C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	-0.1(5)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	0.2(5)
C(33)-C(34)-C(35)-C(36)	-0.4(5)
C(34)-C(35)-C(36)-C(31)	0.6(4)
C(32)-C(31)-C(36)-C(35)	-0.6(4)
P(2)-C(31)-C(36)-C(35)	179.3(2)
C(39)-N(2)-C(37)-N(1)	-0.8(4)
C(39)-N(2)-C(37)-S(1)	-178.8(3)
C(38)-N(1)-C(37)-N(2)	-1.2(4)

ตารางที่ 3 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(38)-N(1)-C(37)-S(1)	176.8(3)
Cu(1)-S(1)-C(37)-N(2)	-31.9(3)
Cu(1)-S(1)-C(37)-N(1)	150.4(3)
C(37)-N(1)-C(38)-C(39)	2.5(5)
C(37)-N(2)-C(39)-C(38)	2.3(4)
N(1)-C(38)-C(39)-N(2)	-2.7(4)

ตารางที่ 4 พิกัดของอะตอม(ยกเว้นไฮโดรเจน) ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Cl]

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
Cu(1)	8776(1)	8140(1)	1447(1)	39(1)
Cl(1)	8440(1)	10094(1)	1438(1)	45(1)
S(1)	8184(1)	7246(1)	2374(1)	50(1)
P(2)	10238(1)	8100(1)	1885(1)	36(1)
P(1)	8051(1)	7298(1)	476(1)	38(1)
N(1)	6502(2)	7365(2)	2609(2)	67(1)
N(2)	6989(2)	8893(2)	2239(1)	57(1)
C(1)	8049(2)	5785(2)	513(1)	45(1)
C(2)	7544(2)	5271(3)	959(2)	61(1)
C(3)	7501(3)	4131(3)	999(2)	75(1)
C(4)	7970(3)	3488(3)	602(2)	80(1)
C(5)	8475(3)	3985(3)	166(2)	82(1)
C(6)	8516(2)	5122(3)	116(2)	61(1)
C(7)	6862(2)	7590(2)	290(1)	44(1)
C(8)	6563(2)	8597(3)	498(2)	63(1)
C(9)	5672(3)	8854(4)	375(2)	89(1)
C(10)	5078(3)	8107(4)	34(2)	92(1)
C(11)	5369(2)	7118(4)	-181(2)	80(1)
C(12)	6252(2)	6858(3)	-55(2)	63(1)
C(13)	8446(2)	7607(2)	-348(1)	40(1)
C(14)	7896(2)	7780(3)	-963(2)	53(1)
C(15)	8243(2)	8106(3)	-1551(2)	61(1)
C(16)	9134(2)	8258(2)	-1530(2)	56(1)
C(17)	9690(2)	8072(3)	-931(2)	55(1)
C(18)	9351(2)	7752(2)	-338(2)	47(1)
C(19)	10577(2)	6732(2)	2221(1)	40(1)



ตารางที่ 4 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
C(20)	10820(2)	6496(3)	2911(2)	58(1)
C(21)	11099(2)	5423(3)	3110(2)	77(1)
C(22)	11133(2)	4618(3)	2621(3)	73(1)
C(23)	10864(2)	4832(3)	1944(2)	68(1)
C(24)	10579(2)	5879(2)	1740(2)	57(1)
C(25)	10551(2)	9044(2)	2621(1)	41(1)
C(26)	9891(2)	9479(3)	2957(2)	56(1)
C(27)	10102(3)	10218(3)	3503(2)	71(1)
C(28)	10963(3)	10511(3)	3717(2)	68(1)
C(29)	11619(3)	10081(3)	3387(2)	67(1)
C(30)	11419(2)	9355(3)	2838(2)	55(1)
C(31)	11081(2)	8398(2)	1332(1)	37(1)
C(32)	11913(2)	7905(2)	1409(2)	46(1)
C(33)	12512(2)	8189(3)	968(2)	56(1)
C(34)	12294(2)	8950(3)	454(2)	57(1)
C(35)	11481(2)	9441(3)	372(2)	56(1)
C(36)	10868(2)	9168(2)	805(1)	46(1)
C(37)	7193(2)	7855(2)	2400(1)	45(1)
C(38)	5763(2)	8103(3)	2611(2)	75(1)
C(39)	6089(2)	9177(3)	2327(2)	73(1)

ตารางที่ 5 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{PPh}_3)_2(\text{etu})\text{Cl}]$

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(1)	6496	6682	2730	80
H(2)	7353	9353	2096	68
H(2A)	7229	5700	1236	73
H(3)	7153	3800	1295	90
H(4)	7945	2722	630	96
H(5)	8796	3549	-102	98
H(6)	8861	5442	-187	73
H(8)	6964	9105	722	75
H(9)	5473	9529	521	107
H(10)	4478	8279	-49	110
H(11)	4969	6619	-414	96
H(12)	6444	6180	-202	75
H(14)	7289	7678	-984	64
H(15)	7866	8223	-1963	73
H(16)	9360	8487	-1925	67
H(17)	10297	8160	-919	66
H(18)	9733	7632	71	57
H(20)	10800	7042	3243	70
H(21)	11263	5258	3577	93
H(22)	11342	3918	2756	88
H(23)	10871	4275	1616	82
H(24)	10386	6018	1274	68
H(26)	9304	9277	2819	67
H(27)	9654	10514	3724	85
H(28)	11101	11000	4084	81
H(29)	12205	10277	3533	81

ตารางที่ 5 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(30)	11870	9075	2614	65
H(32)	12067	7385	1757	55
H(33)	13067	7859	1022	68
H(34)	12701	9133	159	68
H(35)	11337	9962	23	68
H(36)	10313	9501	744	55
H(38A)	5622	8205	3076	90
H(38B)	5243	7827	2316	90
H(39A)	5740	9376	1889	88
H(39B)	6076	9780	2652	88

ตารางที่ 6 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Cl]

อะตอม	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Cu(1)	34(1)	44(1)	39(1)	-5(1)	6(1)	2(1)
Cl(1)	54(1)	35(1)	50(1)	1(1)	18(1)	-1(1)
S(1)	55(1)	46(1)	53(1)	9(1)	21(1)	8(1)
P(2)	33(1)	38(1)	36(1)	-2(1)	4(1)	2(1)
P(1)	37(1)	40(1)	37(1)	-3(1)	4(1)	1(1)
N(1)	55(2)	52(2)	99(2)	26(2)	31(2)	-1(1)
N(2)	48(1)	48(1)	81(2)	22(1)	31(1)	5(1)
C(1)	53(2)	42(2)	37(1)	-3(1)	0(1)	1(1)
C(2)	80(2)	49(2)	55(2)	-5(2)	17(2)	-8(2)
C(3)	112(3)	54(2)	60(2)	4(2)	14(2)	-17(2)
C(4)	129(4)	43(2)	66(2)	1(2)	5(2)	0(2)
C(5)	118(3)	54(2)	77(3)	-13(2)	21(2)	21(2)
C(6)	74(2)	50(2)	61(2)	-2(2)	16(2)	10(2)
C(7)	36(1)	53(2)	41(2)	1(1)	4(1)	0(1)
C(8)	50(2)	63(2)	70(2)	-5(2)	-8(2)	12(2)
C(9)	66(2)	92(3)	103(3)	-14(3)	-9(2)	35(2)
C(10)	43(2)	129(4)	98(3)	1(3)	-8(2)	17(2)
C(11)	44(2)	102(3)	90(3)	-6(2)	-6(2)	-8(2)
C(12)	48(2)	70(2)	69(2)	-12(2)	3(2)	-4(2)
C(13)	44(2)	36(1)	40(1)	-4(1)	6(1)	1(1)
C(14)	45(2)	70(2)	43(2)	1(1)	3(1)	1(1)
C(15)	68(2)	73(2)	40(2)	6(2)	5(2)	10(2)
C(16)	78(2)	45(2)	50(2)	3(1)	26(2)	11(2)
C(17)	52(2)	54(2)	64(2)	-4(2)	22(2)	1(1)
C(18)	43(2)	52(2)	47(2)	-2(1)	7(1)	2(1)
C(19)	32(1)	41(2)	49(2)	5(1)	6(1)	-3(1)

ตารางที่ 6 (ต่อ)

อะตอม	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
C(20)	59(2)	53(2)	58(2)	9(2)	-8(2)	-8(2)
C(21)	70(2)	71(2)	81(3)	31(2)	-24(2)	-10(2)
C(22)	51(2)	45(2)	121(3)	20(2)	2(2)	-1(2)
C(23)	71(2)	42(2)	97(3)	2(2)	29(2)	0(2)
C(24)	68(2)	44(2)	62(2)	1(1)	19(2)	1(1)
C(25)	46(2)	38(1)	38(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)
C(26)	54(2)	64(2)	49(2)	-13(2)	6(1)	0(2)
C(27)	84(3)	74(2)	57(2)	-21(2)	18(2)	1(2)
C(28)	90(3)	60(2)	51(2)	-19(2)	4(2)	-14(2)
C(29)	69(2)	69(2)	60(2)	-13(2)	-3(2)	-22(2)
C(30)	52(2)	58(2)	52(2)	-9(1)	5(1)	-6(1)
C(31)	39(1)	37(1)	35(1)	-4(1)	5(1)	-4(1)
C(32)	40(2)	50(2)	48(2)	2(1)	6(1)	2(1)
C(33)	43(2)	60(2)	69(2)	-10(2)	19(2)	-3(1)
C(34)	65(2)	57(2)	53(2)	-9(2)	28(2)	-19(2)
C(35)	79(2)	45(2)	47(2)	3(1)	15(2)	-10(2)
C(36)	50(2)	40(2)	46(2)	0(1)	5(1)	0(1)
C(37)	51(2)	44(2)	43(2)	5(1)	15(1)	-4(1)
C(38)	50(2)	72(2)	111(3)	28(2)	35(2)	4(2)
C(39)	55(2)	68(2)	104(3)	29(2)	36(2)	12(2)

ตารางที่ 7 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Br]

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu(1)-P(2)	2.2730(8)
Cu(1)-P(1)	2.2881(8)
Cu(1)-S(1)	2.3789(9)
Cu(1)-Br(1)	2.5494(5)
S(1)-C(37)	1.683(3)
P(2)-C(31)	1.824(3)
P(2)-C(19)	1.825(3)
P(2)-C(25)	1.838(3)
P(1)-C(13)	1.829(3)
P(1)-C(7)	1.830(3)
P(1)-C(1)	1.830(3)
N(1)-C(37)	1.325(4)
N(1)-C(38)	1.444(5)
N(1)-H(1)	0.8600
N(2)-C(37)	1.317(4)
N(2)-C(39)	1.447(5)
N(2)-H(2)	0.8600
C(1)-C(6)	1.384(4)
C(1)-C(2)	1.386(5)
C(2)-C(3)	1.384(5)
C(2)-H(2A)	0.9300
C(3)-C(4)	1.364(6)
C(3)-H(3)	0.9300
C(4)-C(5)	1.367(6)
C(4)-H(4)	0.9300
C(5)-C(6)	1.391(5)

ตารางที่ 7 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(5)-H(5)	0.9300
C(6)-H(6)	0.9300
C(7)-C(8)	1.374(5)
C(7)-C(12)	1.384(5)
C(8)-C(9)	1.394(6)
C(8)-H(8)	0.9300
C(9)-C(10)	1.359(7)
C(9)-H(9)	0.9300
C(10)-C(11)	1.356(7)
C(10)-H(10)	0.9300
C(11)-C(12)	1.380(6)
C(11)-H(11)	0.9300
C(12)-H(12)	0.9300
C(13)-C(14)	1.381(4)
C(13)-C(18)	1.391(4)
C(14)-C(15)	1.375(5)
C(14)-H(14)	0.9300
C(15)-C(16)	1.366(5)
C(15)-H(15)	0.9300
C(16)-C(17)	1.368(5)
C(16)-H(16)	0.9300
C(17)-C(18)	1.380(4)
C(17)-H(17)	0.9300
C(18)-H(18)	0.9300
C(19)-C(20)	1.371(4)
C(19)-C(24)	1.399(4)
C(20)-C(21)	1.409(6)

ตารางที่ 7 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(20)-H(20)	0.9300
C(21)-C(22)	1.365(7)
C(21)-H(21)	0.9300
C(22)-C(23)	1.355(6)
C(22)-H(22)	0.9300
C(23)-C(24)	1.377(5)
C(23)-H(23)	0.9300
C(24)-H(24)	0.9300
C(25)-C(26)	1.378(4)
C(25)-C(30)	1.387(4)
C(26)-C(27)	1.391(5)
C(26)-H(26)	0.9300
C(27)-C(28)	1.357(6)
C(27)-H(27)	0.9300
C(28)-C(29)	1.376(6)
C(28)-H(28)	0.9300
C(29)-C(30)	1.377(5)
C(29)-H(29)	0.9300
C(30)-H(30)	0.9300
C(31)-C(36)	1.390(4)
C(31)-C(32)	1.391(4)
C(32)-C(33)	1.380(4)
C(32)-H(32)	0.9300
C(33)-C(34)	1.373(5)
C(33)-H(33)	0.9300
C(34)-C(35)	1.362(5)
C(34)-H(34)	0.9300



ตารางที่ 7 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(35)-C(36)	1.383(5)
C(35)-H(35)	0.9300
C(36)-H(36)	0.9300
C(38)-C(39)	1.524(5)
C(38)-H(38A)	0.9700
C(38)-H(38B)	0.9700
C(39)-H(39A)	0.9700
C(39)-H(39B)	0.9700

ตารางที่ 8 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Br]

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(2)-Cu(1)-P(1)	129.09(3)
P(2)-Cu(1)-S(1)	100.26(3)
P(1)-Cu(1)-S(1)	104.10(3)
P(2)-Cu(1)-Br(1)	101.46(2)
P(1)-Cu(1)-Br(1)	109.90(2)
S(1)-Cu(1)-Br(1)	111.37(2)
C(37)-S(1)-Cu(1)	106.09(11)
C(31)-P(2)-C(19)	101.55(13)
C(31)-P(2)-C(25)	101.97(13)
C(19)-P(2)-C(25)	105.13(14)
C(31)-P(2)-Cu(1)	120.46(10)
C(19)-P(2)-Cu(1)	111.54(10)
C(25)-P(2)-Cu(1)	114.37(10)
C(13)-P(1)-C(7)	103.31(14)
C(13)-P(1)-C(1)	103.87(14)
C(7)-P(1)-C(1)	101.26(15)
C(13)-P(1)-Cu(1)	116.63(10)
C(7)-P(1)-Cu(1)	115.05(10)
C(1)-P(1)-Cu(1)	114.79(10)
C(37)-N(1)-C(38)	112.6(3)
C(37)-N(1)-H(1)	123.7
C(38)-N(1)-H(1)	123.7
C(37)-N(2)-C(39)	113.7(3)
C(37)-N(2)-H(2)	123.2
C(39)-N(2)-H(2)	123.2
C(6)-C(1)-C(2)	118.2(3)
C(6)-C(1)-P(1)	123.1(3)

ตารางที่ 8 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(2)-C(1)-P(1)	118.7(2)
C(3)-C(2)-C(1)	121.0(4)
C(3)-C(2)-H(2A)	119.5
C(1)-C(2)-H(2A)	119.5
C(4)-C(3)-C(2)	120.4(4)
C(4)-C(3)-H(3)	119.8
C(2)-C(3)-H(3)	119.8
C(3)-C(4)-C(5)	119.3(4)
C(3)-C(4)-H(4)	120.4
C(5)-C(4)-H(4)	120.4
C(4)-C(5)-C(6)	121.1(4)
C(4)-C(5)-H(5)	119.4
C(6)-C(5)-H(5)	119.4
C(1)-C(6)-C(5)	119.9(4)
C(1)-C(6)-H(6)	120.0
C(5)-C(6)-H(6)	120.0
C(8)-C(7)-C(12)	117.6(3)
C(8)-C(7)-P(1)	118.5(3)
C(12)-C(7)-P(1)	123.9(3)
C(7)-C(8)-C(9)	120.9(4)
C(7)-C(8)-H(8)	119.6
C(9)-C(8)-H(8)	119.6
C(10)-C(9)-C(8)	119.9(5)
C(10)-C(9)-H(9)	120.1
C(8)-C(9)-H(9)	120.1
C(11)-C(10)-C(9)	120.4(4)
C(11)-C(10)-H(10)	119.8

ตารางที่ 8 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(9)-C(10)-H(10)	119.8
C(10)-C(11)-C(12)	119.8(4)
C(10)-C(11)-H(11)	120.1
C(12)-C(11)-H(11)	120.1
C(11)-C(12)-C(7)	121.4(4)
C(11)-C(12)-H(12)	119.3
C(7)-C(12)-H(12)	119.3
C(14)-C(13)-C(18)	117.7(3)
C(14)-C(13)-P(1)	124.4(2)
C(18)-C(13)-P(1)	117.8(2)
C(15)-C(14)-C(13)	120.7(3)
C(15)-C(14)-H(14)	119.7
C(13)-C(14)-H(14)	119.7
C(16)-C(15)-C(14)	121.0(3)
C(16)-C(15)-H(15)	119.5
C(14)-C(15)-H(15)	119.5
C(15)-C(16)-C(17)	119.3(3)
C(15)-C(16)-H(16)	120.3
C(17)-C(16)-H(16)	120.3
C(16)-C(17)-C(18)	120.2(3)
C(16)-C(17)-H(17)	119.9
C(18)-C(17)-H(17)	119.9
C(17)-C(18)-C(13)	121.0(3)
C(17)-C(18)-H(18)	119.5
C(13)-C(18)-H(18)	119.5
C(20)-C(19)-C(24)	118.7(3)
C(20)-C(19)-P(2)	124.4(3)

ตารางที่ 8 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(24)-C(19)-P(2)	116.9(2)
C(19)-C(20)-C(21)	119.4(4)
C(19)-C(20)-H(20)	120.3
C(21)-C(20)-H(20)	120.3
C(22)-C(21)-C(20)	120.4(4)
C(22)-C(21)-H(21)	119.8
C(20)-C(21)-H(21)	119.8
C(23)-C(22)-C(21)	120.5(4)
C(23)-C(22)-H(22)	119.7
C(21)-C(22)-H(22)	119.7
C(22)-C(23)-C(24)	119.9(4)
C(22)-C(23)-H(23)	120.1
C(24)-C(23)-H(23)	120.1
C(23)-C(24)-C(19)	121.0(4)
C(23)-C(24)-H(24)	119.5
C(19)-C(24)-H(24)	119.5
C(26)-C(25)-C(30)	118.3(3)
C(26)-C(25)-P(2)	119.2(2)
C(30)-C(25)-P(2)	122.5(2)
C(25)-C(26)-C(27)	120.4(3)
C(25)-C(26)-H(26)	119.8
C(27)-C(26)-H(26)	119.8
C(28)-C(27)-C(26)	120.6(4)
C(28)-C(27)-H(27)	119.7
C(26)-C(27)-H(27)	119.7
C(27)-C(28)-C(29)	119.7(4)
C(27)-C(28)-H(28)	120.2
C(29)-C(28)-H(28)	120.2

ตารางที่ 8 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(28)-C(29)-C(30)	120.2(4)
C(28)-C(29)-H(29)	119.9
C(30)-C(29)-H(29)	119.9
C(29)-C(30)-C(25)	120.8(4)
C(29)-C(30)-H(30)	119.6
C(25)-C(30)-H(30)	119.6
C(36)-C(31)-C(32)	118.1(3)
C(36)-C(31)-P(2)	117.4(2)
C(32)-C(31)-P(2)	124.5(2)
C(33)-C(32)-C(31)	120.6(3)
C(33)-C(32)-H(32)	119.7
C(31)-C(32)-H(32)	119.7
C(34)-C(33)-C(32)	120.3(3)
C(34)-C(33)-H(33)	119.8
C(32)-C(33)-H(33)	119.8
C(35)-C(34)-C(33)	120.0(3)
C(35)-C(34)-H(34)	120.0
C(33)-C(34)-H(34)	120.0
C(34)-C(35)-C(36)	120.4(3)
C(34)-C(35)-H(35)	119.8
C(36)-C(35)-H(35)	119.8
C(35)-C(36)-C(31)	120.6(3)
C(35)-C(36)-H(36)	119.7
C(31)-C(36)-H(36)	119.7
N(2)-C(37)-N(1)	108.7(3)
N(2)-C(37)-S(1)	126.8(2)
N(1)-C(37)-S(1)	124.5(3)
N(1)-C(38)-C(39)	103.0(3)

ตารางที่ 8 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
N(1)-C(38)-H(38A)	111.2
C(39)-C(38)-H(38A)	111.2
N(1)-C(38)-H(38B)	111.2
C(39)-C(38)-H(38B)	111.2
H(38A)-C(38)-H(38B)	109.1
N(2)-C(39)-C(38)	101.7(3)
N(2)-C(39)-H(39A)	111.4
C(38)-C(39)-H(39A)	111.4
N(2)-C(39)-H(39B)	111.4
C(38)-C(39)-H(39B)	111.4
H(39A)-C(39)-H(39B)	109.3

ตารางที่ 9 มุม Torsion ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Br]

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(2)-Cu(1)-S(1)-C(37)	145.84(13)
P(1)-Cu(1)-S(1)-C(37)	-79.24(13)
Br(1)-Cu(1)-S(1)-C(37)	39.12(13)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	50.37(12)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	168.14(11)
Br(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	-77.37(11)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	-68.44(12)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	49.33(11)
Br(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	163.82(11)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	172.42(10)
S(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	-69.81(11)
Br(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	44.68(11)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-56.19(11)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-172.33(11)
Br(1)-Cu(1)-P(1)-C(13)	68.30(11)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(7)	-177.44(12)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(7)	66.42(12)
Br(1)-Cu(1)-P(1)-C(7)	-52.95(12)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(1)	65.61(13)
S(1)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-50.53(12)
Br(1)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-169.90(12)
C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	15.9(3)
C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	122.8(3)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(6)	-112.6(3)
C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	-164.3(3)
C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-57.3(3)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(2)	67.2(3)



ตารางที่ 9 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	-0.9(6)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	179.2(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.4(7)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	0.7(7)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-1.4(7)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	0.2(5)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-179.9(3)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	0.9(7)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	-96.8(3)
C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	155.9(3)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(8)	31.5(3)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	83.1(3)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-24.3(3)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-148.7(3)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	0.7(7)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-179.4(4)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-1.8(9)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	1.5(10)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-0.1(9)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	-1.0(8)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	0.7(6)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	-179.2(4)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	-13.5(3)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	91.9(3)
Cu(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-140.7(3)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	162.6(2)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-92.1(3)

ตารางที่ 9 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	-1.6(5)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	174.4(3)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	0.9(6)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	0.8(6)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-1.7(5)
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	1.0(5)
C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	0.7(5)
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	-175.6(2)
C(31)-P(2)-C(19)-C(20)	116.9(3)
C(25)-P(2)-C(19)-C(20)	11.0(3)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(20)	-113.5(3)
C(31)-P(2)-C(19)-C(24)	-62.7(3)
C(25)-P(2)-C(19)-C(24)	-168.6(2)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(24)	66.9(3)
C(24)-C(19)-C(20)-C(21)	3.2(5)
P(2)-C(19)-C(20)-C(21)	-176.4(3)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-0.6(6)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	-1.9(7)
C(21)-C(22)-C(23)-C(24)	1.6(6)
C(22)-C(23)-C(24)-C(19)	1.0(6)
C(20)-C(19)-C(24)-C(23)	-3.4(5)
P(2)-C(19)-C(24)-C(23)	176.2(3)
C(31)-P(2)-C(25)-C(26)	149.3(3)
C(19)-P(2)-C(25)-C(26)	-105.1(3)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(26)	17.6(3)
C(31)-P(2)-C(25)-C(30)	-28.4(3)
C(19)-P(2)-C(25)-C(30)	77.3(3)

ตารางที่ 9 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(30)	-160.0(2)
C(30)-C(25)-C(26)-C(27)	0.1(5)
P(2)-C(25)-C(26)-C(27)	-177.7(3)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-1.0(6)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	1.0(7)
C(27)-C(28)-C(29)-C(30)	0.0(7)
C(28)-C(29)-C(30)-C(25)	-0.9(6)
C(26)-C(25)-C(30)-C(29)	0.9(5)
P(2)-C(25)-C(30)-C(29)	178.5(3)
C(19)-P(2)-C(31)-C(36)	160.3(2)
C(25)-P(2)-C(31)-C(36)	-91.3(2)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(36)	36.6(3)
C(19)-P(2)-C(31)-C(32)	-20.8(3)
C(25)-P(2)-C(31)-C(32)	87.6(3)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(32)	-144.5(2)
C(36)-C(31)-C(32)-C(33)	-0.9(4)
P(2)-C(31)-C(32)-C(33)	-179.9(2)
C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	0.6(5)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	0.1(5)
C(33)-C(34)-C(35)-C(36)	-0.4(5)
C(34)-C(35)-C(36)-C(31)	0.1(5)
C(32)-C(31)-C(36)-C(35)	0.6(4)
P(2)-C(31)-C(36)-C(35)	179.6(2)
C(39)-N(2)-C(37)-N(1)	-0.6(5)
C(39)-N(2)-C(37)-S(1)	-179.1(3)
C(38)-N(1)-C(37)-N(2)	-3.1(5)
C(38)-N(1)-C(37)-S(1)	175.4(3)

ตารางที่ 9 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
Cu(1)-S(1)-C(37)-N(2)	-32.9(4)
Cu(1)-S(1)-C(37)-N(1)	148.8(3)
C(37)-N(1)-C(38)-C(39)	5.2(5)
C(37)-N(2)-C(39)-C(38)	3.7(5)
N(1)-C(38)-C(39)-N(2)	-5.0(5)

ตารางที่ 10 พิกัดของอะตอม(ยกเว้นไฮโดรเจน) ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Br]

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
Cu(1)	8751(1)	8090(1)	1451(1)	42(1)
Br(1)	8438(1)	10143(1)	1390(1)	52(1)
S(1)	8144(1)	7254(1)	2361(1)	55(1)
P(2)	10220(1)	8062(1)	1897(1)	39(1)
P(1)	8029(1)	7249(1)	486(1)	41(1)
N(1)	6457(2)	7372(3)	2562(2)	79(1)
N(2)	6945(2)	8886(2)	2211(2)	68(1)
C(1)	8033(2)	5750(2)	520(2)	47(1)
C(2)	7564(3)	5233(3)	976(2)	68(1)
C(3)	7537(3)	4102(3)	1016(2)	83(1)
C(4)	7978(3)	3472(3)	610(2)	84(1)
C(5)	8456(3)	3969(3)	166(2)	85(1)
C(6)	8484(3)	5105(3)	113(2)	61(1)
C(7)	6838(2)	7534(3)	287(2)	49(1)
C(8)	6535(3)	8537(4)	466(2)	84(1)
C(9)	5633(3)	8794(5)	332(3)	123(2)
C(10)	5045(3)	8058(6)	4(3)	117(2)
C(11)	5327(3)	7065(4)	-181(3)	95(2)
C(12)	6217(2)	6799(3)	-36(2)	74(1)
C(13)	8429(2)	7559(2)	-319(2)	42(1)
C(14)	7885(2)	7707(3)	-941(2)	60(1)
C(15)	8233(3)	8029(3)	-1510(2)	66(1)
C(16)	9125(3)	8197(3)	-1478(2)	61(1)
C(17)	9679(2)	8028(3)	-872(2)	59(1)
C(18)	9337(2)	7720(3)	-295(2)	50(1)
C(19)	10571(2)	6708(2)	2227(2)	45(1)

ตารางที่ 10 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
C(20)	10848(2)	6474(3)	2907(2)	65(1)
C(21)	11151(3)	5410(4)	3097(3)	89(2)
C(22)	11163(3)	4616(3)	2612(3)	84(1)
C(23)	10860(3)	4831(3)	1943(3)	76(1)
C(24)	10558(2)	5864(3)	1747(2)	61(1)
C(25)	10536(2)	9002(2)	2622(1)	43(1)
C(26)	9885(2)	9412(3)	2962(2)	62(1)
C(27)	10100(3)	10155(3)	3497(2)	80(1)
C(28)	10954(3)	10476(3)	3697(2)	75(1)
C(29)	11611(3)	10074(3)	3362(2)	74(1)
C(30)	11404(2)	9349(3)	2826(2)	61(1)
C(31)	11057(2)	8366(2)	1358(1)	40(1)
C(32)	11884(2)	7863(3)	1421(2)	49(1)
C(33)	12478(2)	8146(3)	991(2)	59(1)
C(34)	12261(2)	8936(3)	497(2)	58(1)
C(35)	11457(2)	9446(3)	432(2)	59(1)
C(36)	10853(2)	9168(2)	857(2)	49(1)
C(37)	7155(2)	7861(3)	2371(2)	52(1)
C(38)	5719(3)	8111(3)	2571(3)	90(2)
C(39)	6041(3)	9167(3)	2281(3)	94(2)

ตารางที่ 11 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจน ในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{PPh}_3)_2(\text{etu})\text{Br}]$

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(1)	6446	6690	2668	94
H(2)	7310	9345	2078	82
H(2A)	7263	5652	1258	81
H(3)	7216	3769	1323	100
H(4)	7954	2711	633	100
H(5)	8768	3541	-104	102
H(6)	8806	5430	-195	73
H(8)	6938	9051	679	101
H(9)	5435	9468	467	148
H(10)	4446	8237	-94	141
H(11)	4922	6564	-405	114
H(12)	6404	6112	-158	89
H(14)	7277	7587	-975	72
H(15)	7856	8135	-1924	80
H(16)	9353	8424	-1865	73
H(17)	10289	8122	-848	71
H(18)	9719	7618	117	59
H(20)	10835	7012	3238	78
H(21)	11345	5248	3557	106
H(22)	11381	3923	2742	100
H(23)	10856	4281	1616	91
H(24)	10342	6003	1287	74
H(26)	9299	9190	2834	74
H(27)	9654	10435	3719	96
H(28)	11094	10965	4059	90
H(29)	12197	10292	3498	88

ตารางที่ 11 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(30)	11851	9090	2599	73
H(32)	12039	7332	1756	59
H(33)	13028	7799	1035	71
H(34)	12663	9122	208	70
H(35)	11314	9984	100	71
H(36)	10306	9520	808	58
H(38A)	5599	8218	3034	108
H(38B)	5187	7839	2286	108
H(39A)	5691	9348	1841	113
H(39B)	6024	9776	2594	113



ตารางที่ 12 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)Br]

อะตอม	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Cu(1)	39(1)	46(1)	41(1)	-5(1)	7(1)	2(1)
Br(1)	66(1)	38(1)	58(1)	2(1)	25(1)	0(1)
S(1)	61(1)	50(1)	58(1)	11(1)	25(1)	9(1)
P(2)	39(1)	40(1)	38(1)	-2(1)	5(1)	1(1)
P(1)	40(1)	41(1)	40(1)	-2(1)	5(1)	1(1)
N(1)	65(2)	60(2)	120(3)	34(2)	41(2)	2(2)
N(2)	57(2)	56(2)	102(2)	30(2)	41(2)	9(1)
C(1)	55(2)	43(2)	40(2)	-5(1)	1(1)	2(1)
C(2)	98(3)	50(2)	60(2)	-5(2)	26(2)	-8(2)
C(3)	130(4)	55(2)	69(3)	4(2)	28(3)	-20(2)
C(4)	131(4)	46(2)	71(3)	5(2)	9(3)	-4(2)
C(5)	120(4)	51(2)	86(3)	-11(2)	22(3)	22(2)
C(6)	70(2)	50(2)	65(2)	-1(2)	17(2)	9(2)
C(7)	40(2)	58(2)	47(2)	-2(2)	3(1)	0(2)
C(8)	60(3)	78(3)	102(3)	-16(2)	-20(2)	20(2)
C(9)	79(3)	120(4)	156(5)	-32(4)	-27(3)	48(3)
C(10)	50(3)	158(6)	134(5)	-18(4)	-16(3)	22(3)
C(11)	48(2)	118(4)	114(4)	-24(3)	-2(2)	-8(2)
C(12)	52(2)	82(3)	85(3)	-21(2)	3(2)	-6(2)
C(13)	46(2)	38(2)	43(2)	-2(1)	8(1)	2(1)
C(14)	50(2)	79(2)	49(2)	1(2)	5(2)	-1(2)
C(15)	77(3)	82(3)	39(2)	4(2)	6(2)	11(2)
C(16)	83(3)	51(2)	56(2)	4(2)	33(2)	11(2)
C(17)	54(2)	60(2)	68(2)	-1(2)	23(2)	3(2)
C(18)	45(2)	56(2)	48(2)	-2(2)	6(1)	0(1)
C(19)	35(2)	45(2)	54(2)	4(1)	5(1)	-2(1)
C(20)	63(2)	61(2)	64(2)	10(2)	-13(2)	-8(2)

ตารางที่ 12 (ต่อ)

อะตอม	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
C(21)	81(3)	79(3)	91(3)	36(3)	-31(2)	-15(2)
C(22)	56(2)	51(2)	140(5)	25(3)	1(3)	1(2)
C(23)	75(3)	41(2)	118(4)	3(2)	37(3)	1(2)
C(24)	71(2)	47(2)	69(2)	2(2)	23(2)	1(2)
C(25)	47(2)	42(2)	38(2)	1(1)	1(1)	0(1)
C(26)	63(2)	69(2)	54(2)	-15(2)	10(2)	-3(2)
C(27)	88(3)	90(3)	63(3)	-27(2)	22(2)	-1(2)
C(28)	103(3)	66(2)	54(2)	-19(2)	7(2)	-17(2)
C(29)	74(3)	74(3)	69(3)	-17(2)	0(2)	-25(2)
C(30)	56(2)	64(2)	61(2)	-11(2)	7(2)	-10(2)
C(31)	44(2)	37(2)	39(2)	-4(1)	10(1)	-3(1)
C(32)	44(2)	52(2)	50(2)	3(1)	7(1)	1(1)
C(33)	47(2)	63(2)	69(2)	-9(2)	18(2)	0(2)
C(34)	69(2)	57(2)	56(2)	-12(2)	29(2)	-18(2)
C(35)	78(3)	50(2)	52(2)	6(2)	17(2)	-7(2)
C(36)	53(2)	41(2)	51(2)	0(1)	7(2)	2(1)
C(37)	59(2)	47(2)	56(2)	11(2)	23(2)	0(2)
C(38)	61(2)	81(3)	138(4)	42(3)	49(3)	11(2)
C(39)	70(3)	82(3)	143(4)	46(3)	57(3)	20(2)

ตารางที่ 13 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)I]

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu(1)-P(1)	2.2910(11)
Cu(1)-P(2)	2.3064(11)
Cu(1)-S(2)	2.3468(12)
Cu(1)-I(1)	2.6669(5)
P(1)-C(1)	1.821(4)
P(1)-C(13)	1.830(4)
P(1)-C(7)	1.835(4)
P(2)-C(31)	1.820(4)
P(2)-C(19)	1.840(4)
P(2)-C(25)	1.843(4)
S(2)-C(37)	1.659(5)
N(1)-C(37)	1.338(5)
N(1)-C(38)	1.444(6)
N(1)-H(1)	0.8600
N(2)-C(37)	1.318(5)
N(2)-C(39)	1.454(6)
N(2)-H(2A)	0.8600
C(1)-C(6)	1.371(6)
C(1)-C(2)	1.381(5)
C(2)-C(3)	1.379(6)
C(2)-H(2)	0.9300
C(3)-C(4)	1.363(6)
C(3)-H(3)	0.9300
C(4)-C(5)	1.350(7)
C(4)-H(4)	0.9300
C(5)-C(6)	1.385(6)
C(5)-H(5)	0.9300

ตารางที่ 13 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(6)-H(6)	0.9300
C(7)-C(8)	1.371(6)
C(7)-C(12)	1.377(6)
C(8)-C(9)	1.379(6)
C(8)-H(8)	0.9300
C(9)-C(10)	1.363(7)
C(9)-H(9)	0.9300
C(10)-C(11)	1.356(8)
C(10)-H(10)	0.9300
C(11)-C(12)	1.393(6)
C(11)-H(11)	0.9300
C(12)-H(12)	0.9300
C(13)-C(14)	1.373(6)
C(13)-C(18)	1.396(6)
C(14)-C(15)	1.405(7)
C(14)-H(14)	0.9300
C(15)-C(16)	1.354(8)
C(15)-H(15)	0.9300
C(16)-C(17)	1.376(7)
C(16)-H(16)	0.9300
C(17)-C(18)	1.369(6)
C(17)-H(17)	0.9300
C(18)-H(18)	0.9300
C(19)-C(20)	1.380(6)
C(19)-C(24)	1.383(6)
C(20)-C(21)	1.392(6)
C(20)-H(20)	0.9300

ตารางที่ 13 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(21)-C(22)	1.368(7)
C(21)-H(21)	0.9300
C(22)-C(23)	1.366(7)
C(22)-H(22)	0.9300
C(23)-C(24)	1.380(6)
C(23)-H(23)	0.9300
C(24)-H(24)	0.9300
C(25)-C(30)	1.377(6)
C(25)-C(26)	1.381(6)
C(26)-C(27)	1.382(6)
C(26)-H(26)	0.9300
C(27)-C(28)	1.361(7)
C(27)-H(27)	0.9300
C(28)-C(29)	1.366(7)
C(28)-H(28)	0.9300
C(29)-C(30)	1.381(6)
C(29)-H(29)	0.9300
C(30)-H(30)	0.9300
C(31)-C(36)	1.375(5)
C(31)-C(32)	1.387(5)
C(32)-C(33)	1.374(6)
C(32)-H(32)	0.9300
C(33)-C(34)	1.379(6)
C(33)-H(33)	0.9300
C(34)-C(35)	1.358(6)
C(34)-H(34)	0.9300
C(35)-C(36)	1.387(6)

ตารางที่ 13 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(35)-H(35)	0.9300
C(36)-H(36)	0.9300
C(38)-C(39)	1.533(7)
C(38)-H(38A)	0.9700
C(38)-H(38B)	0.9700
C(39)-H(39A)	0.9700
C(39)-H(39B)	0.9700

ตารางที่ 14 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)I]

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(1)-Cu(1)-P(2)	124.64(4)
P(1)-Cu(1)-S(2)	103.82(4)
P(2)-Cu(1)-S(2)	102.73(4)
P(1)-Cu(1)-I(1)	105.45(3)
P(2)-Cu(1)-I(1)	103.43(3)
S(2)-Cu(1)-I(1)	117.88(4)
C(1)-P(1)-C(13)	104.62(19)
C(1)-P(1)-C(7)	100.69(17)
C(13)-P(1)-C(7)	104.60(18)
C(1)-P(1)-Cu(1)	114.71(13)
C(13)-P(1)-Cu(1)	114.73(13)
C(7)-P(1)-Cu(1)	115.84(13)
C(31)-P(2)-C(19)	103.58(18)
C(31)-P(2)-C(25)	104.54(18)
C(19)-P(2)-C(25)	101.62(18)
C(31)-P(2)-Cu(1)	112.40(13)
C(19)-P(2)-Cu(1)	118.87(13)
C(25)-P(2)-Cu(1)	114.17(13)
C(37)-S(2)-Cu(1)	115.73(16)
C(37)-N(1)-C(38)	113.4(4)
C(37)-N(1)-H(1)	123.3
C(38)-N(1)-H(1)	123.3
C(37)-N(2)-C(39)	114.2(4)
C(37)-N(2)-H(2A)	122.9
C(39)-N(2)-H(2A)	122.9
C(6)-C(1)-C(2)	117.7(4)
C(6)-C(1)-P(1)	124.4(3)

ตารางที่ 14 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(2)-C(1)-P(1)	117.8(3)
C(3)-C(2)-C(1)	121.3(4)
C(3)-C(2)-H(2)	119.3
C(1)-C(2)-H(2)	119.3
C(4)-C(3)-C(2)	120.1(4)
C(4)-C(3)-H(3)	119.9
C(2)-C(3)-H(3)	119.9
C(5)-C(4)-C(3)	119.1(4)
C(5)-C(4)-H(4)	120.5
C(3)-C(4)-H(4)	120.5
C(4)-C(5)-C(6)	121.5(5)
C(4)-C(5)-H(5)	119.3
C(6)-C(5)-H(5)	119.3
C(1)-C(6)-C(5)	120.3(4)
C(1)-C(6)-H(6)	119.9
C(5)-C(6)-H(6)	119.9
C(8)-C(7)-C(12)	117.9(4)
C(8)-C(7)-P(1)	117.5(3)
C(12)-C(7)-P(1)	124.6(3)
C(7)-C(8)-C(9)	122.0(5)
C(7)-C(8)-H(8)	119.0
C(9)-C(8)-H(8)	119.0
C(10)-C(9)-C(8)	119.5(5)
C(10)-C(9)-H(9)	120.3
C(8)-C(9)-H(9)	120.3
C(11)-C(10)-C(9)	119.7(5)
C(11)-C(10)-H(10)	120.1



ตารางที่ 14 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(9)-C(10)-H(10)	120.1
C(10)-C(11)-C(12)	120.9(5)
C(10)-C(11)-H(11)	119.6
C(12)-C(11)-H(11)	119.6
C(7)-C(12)-C(11)	120.0(5)
C(7)-C(12)-H(12)	120.0
C(11)-C(12)-H(12)	120.0
C(14)-C(13)-C(18)	118.7(4)
C(14)-C(13)-P(1)	123.7(3)
C(18)-C(13)-P(1)	117.4(3)
C(13)-C(14)-C(15)	119.9(5)
C(13)-C(14)-H(14)	120.1
C(15)-C(14)-H(14)	120.1
C(16)-C(15)-C(14)	120.3(5)
C(16)-C(15)-H(15)	119.9
C(14)-C(15)-H(15)	119.9
C(15)-C(16)-C(17)	120.4(5)
C(15)-C(16)-H(16)	119.8
C(17)-C(16)-H(16)	119.8
C(18)-C(17)-C(16)	119.9(5)
C(18)-C(17)-H(17)	120.1
C(16)-C(17)-H(17)	120.1
C(17)-C(18)-C(13)	120.9(5)
C(17)-C(18)-H(18)	119.5
C(13)-C(18)-H(18)	119.5
C(20)-C(19)-C(24)	118.4(4)
C(20)-C(19)-P(2)	123.2(3)

ตารางที่ 14 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(24)-C(19)-P(2)	118.4(3)
C(19)-C(20)-C(21)	120.1(5)
C(19)-C(20)-H(20)	120.0
C(21)-C(20)-H(20)	120.0
C(22)-C(21)-C(20)	121.0(5)
C(22)-C(21)-H(21)	119.5
C(20)-C(21)-H(21)	119.5
C(23)-C(22)-C(21)	119.0(5)
C(23)-C(22)-H(22)	120.5
C(21)-C(22)-H(22)	120.5
C(22)-C(23)-C(24)	120.8(5)
C(22)-C(23)-H(23)	119.6
C(24)-C(23)-H(23)	119.6
C(23)-C(24)-C(19)	120.8(5)
C(23)-C(24)-H(24)	119.6
C(19)-C(24)-H(24)	119.6
C(30)-C(25)-C(26)	118.7(4)
C(30)-C(25)-P(2)	122.8(3)
C(26)-C(25)-P(2)	118.5(3)
C(25)-C(26)-C(27)	120.1(4)
C(25)-C(26)-H(26)	119.9
C(27)-C(26)-H(26)	119.9
C(28)-C(27)-C(26)	120.8(5)
C(28)-C(27)-H(27)	119.6
C(26)-C(27)-H(27)	119.6
C(27)-C(28)-C(29)	119.4(5)
C(27)-C(28)-H(28)	120.3

ตารางที่ 14 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(29)-C(28)-H(28)	120.3
C(28)-C(29)-C(30)	120.5(5)
C(28)-C(29)-H(29)	119.7
C(30)-C(29)-H(29)	119.7
C(25)-C(30)-C(29)	120.4(4)
C(25)-C(30)-H(30)	119.8
C(29)-C(30)-H(30)	119.8
C(36)-C(31)-C(32)	118.3(4)
C(36)-C(31)-P(2)	124.1(3)
C(32)-C(31)-P(2)	117.5(3)
C(33)-C(32)-C(31)	120.8(4)
C(33)-C(32)-H(32)	119.6
C(31)-C(32)-H(32)	119.6
C(32)-C(33)-C(34)	120.2(4)
C(32)-C(33)-H(33)	119.9
C(34)-C(33)-H(33)	119.9
C(35)-C(34)-C(33)	119.4(4)
C(35)-C(34)-H(34)	120.3
C(33)-C(34)-H(34)	120.3
C(34)-C(35)-C(36)	120.8(4)
C(34)-C(35)-H(35)	119.6
C(36)-C(35)-H(35)	119.6
C(31)-C(36)-C(35)	120.5(4)
C(31)-C(36)-H(36)	119.8
C(35)-C(36)-H(36)	119.8
N(2)-C(37)-N(1)	107.3(4)
N(2)-C(37)-S(2)	127.1(3)

ตารางที่ 14 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
N(1)-C(37)-S(2)	125.6(3)
N(1)-C(38)-C(39)	101.9(4)
N(1)-C(38)-H(38A)	111.4
C(39)-C(38)-H(38A)	111.4
N(1)-C(38)-H(38B)	111.4
C(39)-C(38)-H(38B)	111.4
H(38A)-C(38)-H(38B)	109.2
N(2)-C(39)-C(38)	101.3(4)
N(2)-C(39)-H(39A)	111.5
C(38)-C(39)-H(39A)	111.5
N(2)-C(39)-H(39B)	111.5
C(38)-C(39)-H(39B)	111.5
H(39A)-C(39)-H(39B)	109.3

ตารางที่ 15 มุม Torsion ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)I]

พันธะ	มุมพันธะ (°)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(1)	62.45(15)
S(2)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-54.03(15)
I(1)-Cu(1)-P(1)-C(1)	-178.61(14)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-58.73(16)
S(2)-Cu(1)-P(1)-C(13)	-175.21(15)
I(1)-Cu(1)-P(1)-C(13)	60.21(15)
P(2)-Cu(1)-P(1)-C(7)	179.17(14)
S(2)-Cu(1)-P(1)-C(7)	62.69(14)
I(1)-Cu(1)-P(1)-C(7)	-61.89(14)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	75.22(15)
S(2)-Cu(1)-P(2)-C(31)	-167.79(14)
I(1)-Cu(1)-P(2)-C(31)	-44.63(14)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	-45.94(16)
S(2)-Cu(1)-P(2)-C(19)	71.05(16)
I(1)-Cu(1)-P(2)-C(19)	-165.79(15)
P(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	-165.91(14)
S(2)-Cu(1)-P(2)-C(25)	-48.93(15)
I(1)-Cu(1)-P(2)-C(25)	74.23(14)
P(1)-Cu(1)-S(2)-C(37)	-123.68(17)
P(2)-Cu(1)-S(2)-C(37)	105.34(17)
I(1)-Cu(1)-S(2)-C(37)	-7.55(18)
C(13)-P(1)-C(1)-C(6)	-69.1(4)
C(7)-P(1)-C(1)-C(6)	39.2(4)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(6)	164.3(4)
C(13)-P(1)-C(1)-C(2)	112.7(3)
C(7)-P(1)-C(1)-C(2)	-139.0(3)
Cu(1)-P(1)-C(1)-C(2)	-13.9(4)

ตารางที่ 15 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	1.1(6)
P(1)-C(1)-C(2)-C(3)	179.4(3)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-0.6(7)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.8(8)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	1.7(9)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-0.3(8)
P(1)-C(1)-C(6)-C(5)	-178.4(4)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	-1.1(9)
C(1)-P(1)-C(7)-C(8)	67.4(4)
C(13)-P(1)-C(7)-C(8)	175.7(3)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(8)	-56.9(4)
C(1)-P(1)-C(7)-C(12)	-112.1(4)
C(13)-P(1)-C(7)-C(12)	-3.7(4)
Cu(1)-P(1)-C(7)-C(12)	123.6(4)
C(12)-C(7)-C(8)-C(9)	1.4(7)
P(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-178.1(4)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-1.3(8)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-0.2(9)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	1.6(10)
C(8)-C(7)-C(12)-C(11)	0.0(7)
P(1)-C(7)-C(12)-C(11)	179.4(4)
C(10)-C(11)-C(12)-C(7)	-1.5(9)
C(1)-P(1)-C(13)-C(14)	-10.1(4)
C(7)-P(1)-C(13)-C(14)	-115.6(4)
Cu(1)-P(1)-C(13)-C(14)	116.4(3)
C(1)-P(1)-C(13)-C(18)	176.0(3)
C(7)-P(1)-C(13)-C(18)	70.5(3)

ตารางที่ 15 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
Cu(1)-P(1)-C(13)-C(18)	-57.5(3)
C(18)-C(13)-C(14)-C(15)	0.9(7)
P(1)-C(13)-C(14)-C(15)	-172.9(4)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-1.3(8)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	1.0(9)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-0.2(8)
C(16)-C(17)-C(18)-C(13)	-0.2(7)
C(14)-C(13)-C(18)-C(17)	-0.1(6)
P(1)-C(13)-C(18)-C(17)	174.1(3)
C(31)-P(2)-C(19)-C(20)	-3.2(4)
C(25)-P(2)-C(19)-C(20)	-111.5(4)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(20)	122.3(3)
C(31)-P(2)-C(19)-C(24)	178.5(3)
C(25)-P(2)-C(19)-C(24)	70.3(3)
Cu(1)-P(2)-C(19)-C(24)	-56.0(3)
C(24)-C(19)-C(20)-C(21)	-0.5(6)
P(2)-C(19)-C(20)-C(21)	-178.7(3)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	0.8(7)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	-0.7(8)
C(21)-C(22)-C(23)-C(24)	0.4(7)
C(22)-C(23)-C(24)-C(19)	-0.1(7)
C(20)-C(19)-C(24)-C(23)	0.2(6)
P(2)-C(19)-C(24)-C(23)	178.5(3)
C(31)-P(2)-C(25)-C(30)	-90.8(4)
C(19)-P(2)-C(25)-C(30)	16.7(4)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(30)	146.0(3)
C(31)-P(2)-C(25)-C(26)	90.6(4)

ตารางที่ 15 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(19)-P(2)-C(25)-C(26)	-161.8(3)
Cu(1)-P(2)-C(25)-C(26)	-32.6(4)
C(30)-C(25)-C(26)-C(27)	0.7(7)
P(2)-C(25)-C(26)-C(27)	179.3(4)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-1.0(8)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	0.8(9)
C(27)-C(28)-C(29)-C(30)	-0.2(8)
C(26)-C(25)-C(30)-C(29)	-0.1(7)
P(2)-C(25)-C(30)-C(29)	-178.7(4)
C(28)-C(29)-C(30)-C(25)	-0.1(8)
C(19)-P(2)-C(31)-C(36)	-98.1(4)
C(25)-P(2)-C(31)-C(36)	8.0(4)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(36)	132.3(3)
C(19)-P(2)-C(31)-C(32)	83.3(3)
C(25)-P(2)-C(31)-C(32)	-170.6(3)
Cu(1)-P(2)-C(31)-C(32)	-46.2(4)
C(36)-C(31)-C(32)-C(33)	0.4(7)
P(2)-C(31)-C(32)-C(33)	179.1(4)
C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	-1.6(8)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	1.3(8)
C(33)-C(34)-C(35)-C(36)	0.2(8)
C(32)-C(31)-C(36)-C(35)	1.1(6)
P(2)-C(31)-C(36)-C(35)	-177.5(3)
C(34)-C(35)-C(36)-C(31)	-1.4(7)
C(39)-N(2)-C(37)-N(1)	2.4(6)
C(39)-N(2)-C(37)-S(2)	-177.9(4)
C(38)-N(1)-C(37)-N(2)	7.1(6)



ตารางที่ 15 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(38)-N(1)-C(37)-S(2)	-172.6(4)
Cu(1)-S(2)-C(37)-N(2)	5.8(5)
Cu(1)-S(2)-C(37)-N(1)	-174.5(4)
C(37)-N(1)-C(38)-C(39)	-12.7(6)
C(37)-N(2)-C(39)-C(38)	-9.8(6)
N(1)-C(38)-C(39)-N(2)	12.4(6)

ตารางที่ 16 พิกัดของอะตอม (ยกเว้นไฮโดรเจน) ในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)I]

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
Cu(1)	1537(1)	6334(1)	2484(1)	36(1)
I(1)	-46(1)	7464(1)	2411(1)	48(1)
P(1)	1166(1)	5876(1)	3525(1)	34(1)
P(2)	1016(1)	5787(1)	1475(1)	35(1)
S(2)	3996(1)	6464(1)	2469(1)	56(1)
N(1)	5913(4)	7430(2)	2232(3)	75(1)
N(2)	3803(4)	7814(2)	2254(2)	64(1)
C(1)	2168(4)	5098(2)	3718(2)	36(1)
C(2)	2803(4)	4768(2)	3193(2)	43(1)
C(3)	3590(5)	4181(2)	3299(2)	53(1)
C(4)	3766(5)	3916(2)	3932(3)	61(1)
C(5)	3175(6)	4243(3)	4452(3)	79(2)
C(6)	2367(6)	4828(2)	4352(2)	68(2)
C(7)	1698(4)	6415(2)	4248(2)	37(1)
C(8)	3075(5)	6629(2)	4295(2)	58(1)
C(9)	3591(6)	7019(3)	4829(3)	71(2)
C(10)	2707(7)	7212(3)	5321(3)	78(2)
C(11)	1332(7)	7020(3)	5279(3)	88(2)
C(12)	815(5)	6614(3)	4748(2)	66(1)
C(13)	-667(4)	5644(2)	3672(2)	40(1)
C(14)	-1110(5)	4984(3)	3784(2)	61(1)
C(15)	-2558(6)	4841(3)	3818(3)	82(2)
C(16)	-3517(6)	5354(4)	3755(3)	79(2)
C(17)	-3086(5)	6018(3)	3646(2)	68(2)
C(18)	-1679(4)	6162(3)	3604(2)	52(1)
C(19)	1542(4)	4884(2)	1377(2)	39(1)

ตารางที่ 16 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
C(20)	596(5)	4367(2)	1216(2)	52(1)
C(21)	1065(6)	3693(2)	1163(3)	69(2)
C(22)	2457(7)	3530(3)	1277(2)	67(2)
C(23)	3393(6)	4043(3)	1436(2)	61(1)
C(24)	2947(5)	4715(2)	1487(2)	51(1)
C(25)	1817(4)	6189(2)	740(2)	38(1)
C(26)	1998(5)	6892(2)	739(2)	53(1)
C(27)	2609(6)	7210(3)	200(3)	73(2)
C(28)	3060(6)	6838(3)	-331(3)	70(2)
C(29)	2889(6)	6142(3)	-332(2)	66(1)
C(30)	2270(5)	5816(2)	199(2)	50(1)
C(31)	-868(4)	5779(2)	1264(2)	35(1)
C(32)	-1770(4)	5597(2)	1768(2)	50(1)
C(33)	-3207(5)	5589(3)	1649(2)	65(1)
C(34)	-3775(5)	5780(3)	1027(3)	63(1)
C(35)	-2900(5)	5961(3)	531(2)	60(1)
C(36)	-1447(4)	5955(2)	642(2)	46(1)
C(37)	4568(4)	7251(2)	2314(2)	43(1)
C(38)	6122(5)	8162(3)	2189(3)	79(2)
C(39)	4604(5)	8425(3)	2094(3)	73(2)

ตารางที่ 17 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจน ในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{PPh}_3)_2(\text{etu})\text{I}]$

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(1)	6588	7137	2206	90
H(2A)	2906	7819	2304	76
H(2)	2698	4946	2760	52
H(3)	4002	3964	2938	63
H(4)	4286	3517	4006	73
H(5)	3314	4070	4886	94
H(6)	1957	5039	4717	81
H(8)	3680	6507	3956	69
H(9)	4535	7150	4853	85
H(10)	3045	7474	5683	94
H(11)	725	7162	5610	105
H(12)	-125	6478	4731	79
H(14)	-452	4632	3836	73
H(15)	-2859	4393	3884	98
H(16)	-4473	5257	3784	95
H(17)	-3749	6368	3602	81
H(18)	-1394	6611	3530	62
H(20)	-356	4468	1143	63
H(21)	423	3348	1049	83
H(22)	2761	3078	1245	81
H(23)	4343	3938	1511	73
H(24)	3599	5057	1598	61
H(26)	1709	7152	1102	64
H(27)	2714	7685	200	87
H(28)	3480	7055	-689	84
H(29)	3192	5885	-695	79

ตารางที่ 17 (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq) A**2
H(30)	2157	5342	192	60
H(32)	-1399	5479	2192	60
H(33)	-3798	5455	1989	78
H(34)	-4748	5784	949	75
H(35)	-3279	6091	111	72
H(36)	-861	6071	294	55
H(38A)	6685	8282	1808	95
H(38B)	6572	8342	2599	95
H(39A)	4416	8798	2402	88
H(39B)	4404	8576	1635	88

ตารางที่ 18 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล [Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(etu)I]

อะตอม	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Cu(1)	34(1)	36(1)	37(1)	1(1)	0(1)	0(1)
I(1)	37(1)	36(1)	71(1)	6(1)	4(1)	4(1)
P(1)	31(1)	36(1)	34(1)	0(1)	3(1)	2(1)
P(2)	34(1)	37(1)	33(1)	0(1)	1(1)	-3(1)
S(2)	34(1)	55(1)	78(1)	11(1)	3(1)	1(1)
N(1)	32(2)	63(3)	131(4)	23(3)	13(2)	0(2)
N(2)	35(2)	54(2)	102(3)	5(2)	9(2)	-4(2)
C(1)	37(2)	33(2)	38(2)	2(2)	-2(2)	1(2)
C(2)	50(3)	42(2)	39(2)	-1(2)	-3(2)	2(2)
C(3)	59(3)	44(3)	54(3)	-7(2)	-6(2)	10(2)
C(4)	73(4)	40(3)	70(4)	4(3)	-13(3)	14(2)
C(5)	128(5)	60(3)	47(3)	16(3)	-3(3)	34(3)
C(6)	105(4)	58(3)	41(3)	6(2)	15(3)	27(3)
C(7)	39(2)	34(2)	38(2)	2(2)	-8(2)	6(2)
C(8)	53(3)	66(3)	54(3)	-6(2)	-3(2)	-6(2)
C(9)	71(4)	69(4)	70(4)	2(3)	-23(3)	-16(3)
C(10)	108(5)	55(3)	69(4)	-19(3)	-34(4)	4(3)
C(11)	91(5)	107(5)	64(4)	-48(3)	-7(3)	15(4)
C(12)	51(3)	90(4)	57(3)	-28(3)	3(2)	5(3)
C(13)	32(2)	55(3)	32(2)	-3(2)	1(2)	-2(2)
C(14)	49(3)	57(3)	76(3)	-17(3)	13(2)	-13(2)
C(15)	66(4)	81(4)	100(5)	-21(3)	20(3)	-28(3)
C(16)	39(3)	120(5)	78(4)	-22(4)	7(3)	-23(3)
C(17)	37(3)	110(5)	55(3)	8(3)	1(2)	5(3)
C(18)	36(3)	75(3)	45(3)	12(2)	2(2)	2(2)
C(19)	49(3)	42(2)	25(2)	1(2)	3(2)	4(2)
C(20)	58(3)	47(3)	52(3)	-3(2)	-7(2)	-1(2)

ตารางที่ 18 (ต่อ)

อะตอม	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
C(21)	98(4)	38(3)	71(4)	-6(2)	-4(3)	-6(3)
C(22)	104(5)	46(3)	52(3)	1(2)	3(3)	19(3)
C(23)	65(3)	68(3)	50(3)	2(3)	5(2)	26(3)
C(24)	54(3)	53(3)	45(3)	2(2)	5(2)	11(2)
C(25)	36(2)	44(2)	35(2)	3(2)	-1(2)	-1(2)
C(26)	63(3)	46(3)	51(3)	-1(2)	12(2)	-1(2)
C(27)	88(4)	51(3)	80(4)	14(3)	22(3)	-16(3)
C(28)	72(4)	84(4)	55(3)	15(3)	23(3)	-12(3)
C(29)	78(4)	75(4)	46(3)	-5(3)	19(3)	-8(3)
C(30)	58(3)	54(3)	40(3)	0(2)	10(2)	-8(2)
C(31)	32(2)	39(2)	35(2)	-4(2)	3(2)	-1(2)
C(32)	38(3)	73(3)	38(2)	-3(2)	1(2)	-6(2)
C(33)	46(3)	96(4)	54(3)	2(3)	16(2)	-7(3)
C(34)	30(2)	87(4)	71(3)	-1(3)	0(2)	-3(2)
C(35)	49(3)	75(4)	54(3)	9(3)	-13(2)	3(3)
C(36)	42(3)	53(3)	43(3)	1(2)	0(2)	-2(2)
C(37)	34(2)	52(3)	44(2)	1(2)	-3(2)	5(2)
C(38)	50(3)	75(4)	112(5)	14(3)	2(3)	-14(3)
C(39)	58(3)	57(3)	105(4)	6(3)	7(3)	-5(3)