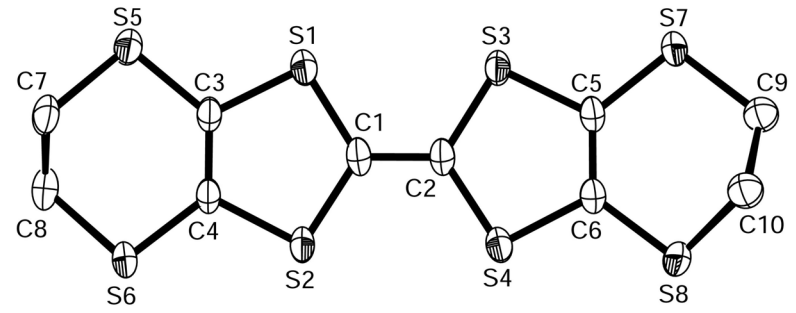
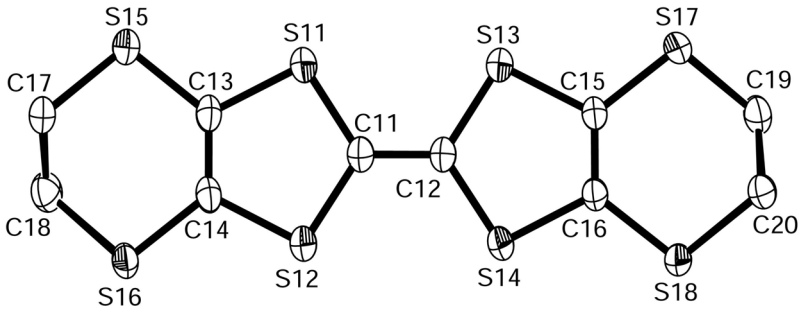
ПРИЛОЖЕНИЕ

α′-(BEDT-TTF)$_4$[OsNOCl$_5$]·NB **(1)**



I



II

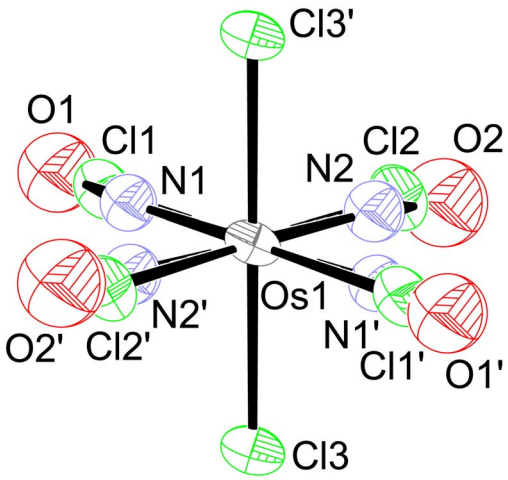


Рис. П**1**. Обозначения атомов в BEDT-TTF I и II и анионе [OsNOCl$_5$] в структуре **1**.

Таблица П**1**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для α′-(BEDT-TTF)$_4$[OsNOCl$_5$]·NB (**1**).

Характеристика			
Дифрактометр	CAD4F	Bruker KappaCCD	
Температура, K	295(2)	130(2)	30(2)
Брутто-формула	$C_{46}H_{37}Cl_5N_2O_3OsS_{32}$	$C_{46}H_{37}Cl_5N_2O_3OsS_{32}$	$C_{46}H_{37}Cl_5N_2O_3OsS_{32}$
Молекулярный вес	2059.15	2059.15	2059.15
Сингония	Триклинная	Триклинная	Триклинная
a, Å	9.6275(6)	9.5722(9)	9.5518(1)
b, Å	11.1599(6)	10.9641(5)	10.9230(2)
c, Å	18.064(1)	17.964(2)	17.9469(2)
α, °	101.478(5)	101.158(6)	101.125(1)
β, °	91.926(6)	91.808(8)	91.801(1)
γ, °	110.894(5)	110.921(6)	110.991(1)
V, Å^3	1765.3(2)	1717.3(3)	1705.00(4)
Пр. группа, Z	$P\,\bar{1}$, 1	$P\,\bar{1}$, 1	$P\,\bar{1}$, 1
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.937	1.991	2.005
μ, см$^{-1}$	29.85	30.69	30.91
F (000)	1024	1024	1024
Диапазон Θ, °	2.01÷30.03	3.85÷32.00	2.04÷27.88
Диапазон индексов	$-13 \le h \le 13$	$-14 \le h \le 14$	$-12 \le h \le 12$
	$-15 \le k \le 15$	$-16 \le k \le 16$	$-14 \le k \le 14$
	$0 \le l \le 25$	$-26 \le l \le 26$	$-23 \le l \le 17$
Число измеренных рефлексов	10582	61823	13467
Число независимых рефлексов	10278	11839	7280
R_{int}, R_σ	0.016, 0.024	0.025, 0.023	0.015, 0.033
Число уточняемых параметров	399	451	443
Добротность уточнения по F^2	1.085	1.035	1.106
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0329	0.0186	0.0205

Таблица П**1**.2. Координаты ($\times10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2\times10^3$) неводородных атомов в структуре **1** при температуре 295K (первая строка), 130K (вторая строка), 30K (третья строка).

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S1	1174(1)	-988(1)	5213(1)	50(1)
	1212(1)	-930(1)	5208(1)	17(1)
	1217(1)	-922(1)	5205(1)	11(1)
S2	3801(1)	1446(1)	5740(1)	46(1)
	3891(1)	1510(1)	5758(1)	16(1)
	3907(1)	1524(1)	5761(1)	10(1)
S3	2194(1)	-1305(1)	3539(1)	44(1)
	2226(1)	-1226(1)	3537(1)	16(1)
	2234(1)	-1215(1)	3535(1)	10(1)
S4	4757(1)	1183(1)	4023(1)	48(1)
	4847(1)	1277(1)	4016(1)	18(1)
	4866(1)	1297(1)	4012(1)	11(1)
S5	-74(1)	-959(1)	6667(1)	55(1)
	-64(1)	-951(1)	6667(1)	18(1)
	-72(1)	-952(1)	6663(1)	11(1)
S6	3133(1)	1917(1)	7327(1)	52(1)
	3209(1)	1934(1)	7355(1)	19(1)
	3214(1)	1941(1)	7359(1)	12(1)
S7	2721(1)	-1766(1)	1932(1)	55(1)
	2710(1)	-1705(1)	1919(1)	20(1)
	2708(1)	-1698(1)	1914(1)	13(1)
S8	5745(1)	1212(1)	2495(1)	51(1)
	5817(1)	1308(1)	2467(1)	20(1)
	5832(1)	1330(1)	2460(1)	13(1)
C1	2786(4)	143(3)	4996(2)	42(1)
	2858(1)	219(1)	4998(1)	16(1)
	2869(2)	233(2)	4995(1)	10(1)
C2	3213(4)	20(3)	4272(2)	41(1)
	3283(1)	107(1)	4272(1)	15(1)
	3297(2)	124(2)	4272(1)	10(1)
C3	1378(4)	-184(3)	6167(2)	40(1)
	1413(1)	-159(1)	6173(1)	15(1)
	1419(2)	-153(2)	6170(1)	10(1)
C4	2597(4)	918(3)	6413(2)	39(1)
	2668(1)	951(1)	6430(1)	14(1)
	2675(2)	960(2)	6431(1)	9(1)
C5	3306(4)	-765(3)	2840(2)	39(1)
	3352(1)	-683(1)	2827(1)	14(1)
	3361(2)	-669(2)	2824(1)	10(1)
C6	4483(4)	388(3)	3063(2)	39(1)
	4553(1)	480(1)	3050(1)	15(1)
	4563(2)	495(2)	3045(1)	10(1)
C7	305(5)	286(4)	7532(2)	55(1)
	309(2)	300(1)	7543(1)	18(1)
	300(2)	294(2)	7543(1)	11(1)
C8	1903(5)	867(4)	7861(2)	54(1)
	1935(2)	859(1)	7887(1)	18(1)
	1932(2)	856(2)	7888(1)	12(1)

Продолжение Таблицы П**1**.2.

C9a*	4011(6)	-885(5)	1343(3)	50(2)
	4048(2)	-846(2)	1322(1)	23(1)
	4059(2)	-846(2)	1316(1)	17(1)
C10a*	4566(7)	597(6)	1591(3)	52(1)
	4636(2)	665(2)	1568(1)	24(1)
	4644(3)	668(2)	1555(1)	18(1)
C9b*	3385(17)	-520(14)	1390(8)	52(4)
	3350(30)	-490(20)	1352(13)	11(4)
	-	-	-	-
C10b*	5000(20)	239(18)	1573(9)	59(4)
	5070(30)	200(30)	1508(15)	17(5)
	-	-	-	-
S11	1746(1)	3914(1)	6306(1)	48(1)
	1772(1)	3907(1)	6307(1)	17(1)
	1778(1)	3914(1)	6305(1)	11(1)
S12	1329(1)	6370(1)	6203(1)	50(1)
	1303(1)	6392(1)	6199(1)	17(1)
	1297(1)	6403(1)	6196(1)	11(1)
S13	2856(1)	3694(1)	4635(1)	53(1)
	2875(1)	3698(1)	4622(1)	19(1)
	2889(1)	3711(1)	4619(1)	11(1)
S14	2429(1)	6137(1)	4518(1)	51(1)
	2398(1)	6172(1)	4503(1)	17(1)
	2391(1)	6183(1)	4497(1)	11(1)
S15	1134(1)	4033(1)	7896(1)	58(1)
	1112(1)	3983(1)	7901(1)	21(1)
	1097(1)	3978(1)	7898(1)	14(1)
S16	593(1)	6957(1)	7771(1)	51(1)
	494(1)	6937(1)	7769(1)	17(1)
	465(1)	6936(1)	7765(1)	11(1)
S17	3737(2)	3179(1)	3097(1)	73(1)
	3688(1)	3163(1)	3053(1)	27(1)
	3689(1)	3168(1)	3045(1)	16(1)
S18	3253(1)	6096(1)	2969(1)	48(1)
	3177(1)	6142(1)	2938(1)	16(1)
	3166(1)	6153(1)	2928(1)	10(1)
C11	1856(4)	5076(3)	5766(2)	42(1)
	1847(1)	5088(1)	5760(1)	15(1)
	1849(2)	5097(2)	5756(1)	11(1)
C12	2323(4)	4987(3)	5064(2)	41(1)
	2309(1)	4994(1)	5052(1)	15(1)
	2310(2)	5007(2)	5049(1)	11(1)
C13	1290(4)	4781(3)	7123(2)	43(1)
	1260(1)	4756(1)	7123(1)	16(1)
	1247(2)	4755(2)	7120(1)	11(1)
C14	1096(4)	5894(3)	7075(2)	42(1)
	1033(1)	5884(1)	7073(1)	15(1)
	1014(2)	5886(2)	7068(1)	10(1)
C15	3170(4)	4199(4)	3778(2)	45(1)
	3131(2)	4191(1)	3748(1)	16(1)
	3129(2)	4197(2)	3739(1)	11(1)
C16	2983(4)	5311(3)	3725(2)	39(1)
	2923(1)	5326(1)	3695(1)	14(1)
	2914(2)	5333(2)	3688(1)	9(1)
C17	277(5)	4956(4)	8527(2)	51(1)
	247(2)	4915(1)	8546(1)	18(1)
	239(2)	4915(2)	8547(1)	12(1)
C18	981(5)	6426(4)	8610(2)	57(1)
	955(2)	6423(1)	8613(1)	20(1)
	948(2)	6427(2)	8611(1)	13(1)

Продолжение Таблицы П1.2.

C19	4523(4)	4246(4)	2472(2)	51(1)
	4545(2)	4306(1)	2448(1)	19(1)
	4553(2)	4320(2)	2441(1)	13(1)
C20	3518(5)	4884(4)	2222(2)	48(1)
	3518(2)	4956(1)	2184(1)	17(1)
	3521(2)	4966(2)	2172(1)	11(1)
C1S*	3452(9)	6201(8)	85(6)	91(4)
	3454(3)	6172(3)	44(2)	33(2)
	3448(4)	6171(4)	31(3)	21(3)
C2S*	4929(10)	6758(6)	-59(5)	107(4)
	4942(3)	6715(2)	-102(2)	39(1)
	4942(4)	6714(3)	-113(2)	26(1)
C3S*	5844(7)	6030(7)	-104(5)	70(3)
	5853(2)	5968(2)	-120(1)	33(1)
	5854(3)	5965(3)	-124(2)	20(2)
C4S*	5284(7)	4746(7)	-6(5)	73(3)
	5274(3)	4678(2)	8(2)	26(1)
	5271(4)	4674(3)	9(2)	15(1)
C5S*	3808(7)	4190(6)	137(4)	60(2)
	3785(3)	4136(2)	154(1)	22(1)
	3776(4)	4131(3)	152(2)	13(1)
C6S*	2892(6)	4917(8)	183(5)	76(3)
	2875(2)	4883(3)	172(1)	31(1)
	2865(3)	4879(4)	163(2)	19(1)
N1S*	6204(14)	3970(12)	-16(7)	93(3)
	6202(7)	3903(4)	8(3)	33(1)
	6210(9)	3905(6)	10(4)	18(1)
O1S*	7356(14)	4299(14)	-291(8)	143(4)
	7376(4)	4212(4)	-304(2)	57(1)
	7375(5)	4210(4)	-309(3)	35(1)
O2S*	5859(15)	3011(12)	247(8)	146(5)
	5817(4)	2949(3)	324(2)	54(1)
	5829(4)	2957(4)	337(2)	33(1)
Os1	0	0	0	39(1)
	0	0	0	16(1)
	0	0	0	12(1)
Cl1*	-64(2)	-1771(1)	561(1)	53(1)
	-59(1)	-1795(1)	565(1)	21(1)
	-61(1)	-1795(1)	565(1)	15(1)
N1*	-184(16)	-1380(12)	454(8)	40(3)
	-242(7)	-1397(6)	465(3)	23(1)
	-230(11)	-1387(11)	460(6)	22(3)
O1*	-260(20)	-2249(14)	691(10)	80(5)
	-331(6)	-2251(6)	675(3)	32(1)
	-325(9)	-2276(8)	675(5)	20(2)
Cl2*	2258(1)	-98(2)	-450(1)	56(1)
	2279(1)	-100(1)	-440(1)	25(1)
	2283(1)	-95(1)	-438(1)	17(1)
N2*	1715(15)	52(15)	-391(9)	47(3)
	1624(7)	29(5)	-364(3)	19(1)
	1630(11)	26(8)	-359(5)	17(2)
O2*	2866(17)	110(20)	-538(13)	98(6)
	2827(7)	3(6)	-539(3)	36(2)
	2829(10)	-20(8)	-535(5)	22(2)
Cl3	1426(1)	1589(1)	1102(1)	53(1)
	1434(1)	1607(1)	1104(1)	22(1)
	1442(1)	1613(1)	1103(1)	16(1)

* Заселенность позиций C9a, C10a 0.72 (295K), 0.95 (130K), 1 (30K); C9b, C10b 0.28 (295K), 0.05 (130K); C1S-O2S 0.5; Cl1, Cl2 0.75; N1, O1, N2, O2 0.25.

Таблица П**1**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF и анионе [$OsNOCl_5$] для структуры **1**

Связь	*d* (295K)	*d* (130K)	*d* (30K)
S1–C1	1.731(4)	1.737(1)	1.738(2)
S1–C3	1.746(3)	1.746(1)	1.745(2)
S2–C1	1.731(4)	1.736(1)	1.740(2)
S2–C4	1.749(3)	1.752(1)	1.752(2)
S3–C2	1.733(4)	1.736(1)	1.739(2)
S3–C5	1.744(3)	1.750(1)	1.750(2)
S4–C2	1.732(4)	1.732(1)	1.733(2)
S4–C6	1.748(3)	1.749(1)	1.751(2)
S5–C3	1.747(3)	1.745(1)	1.749(2)
S5–C7	1.800(4)	1.806(1)	1.807(2)
S6–C4	1.742(3)	1.746(1)	1.745(2)
S6–C8	1.800(4)	1.809(1)	1.810(2)
S7–C5	1.736(3)	1.742(1)	1.745(2)
S7–C9a	1.810(5)	1.814(1)	1.816(2)
S7–C9b	1.80(1)	1.78(2)	–
S8–C6	1.743(3)	1.746(1)	1.750(2)
S8–C10a	1.816(6)	1.807(2)	1.814(2)
S8–C10b	1.76(1)	1.86(3)	–
C1–C2	1.379(4)	1.374(2)	1.368(3)
C3–C4	1.344(5)	1.356(2)	1.356(3)
C5–C6	1.351(5)	1.354(2)	1.350(3)
C7–C8	1.488(6)	1.514(2)	1.516(3)
C9a–C10a	1.510(8)	1.514(2)	1.511(3)
C9b–C10b	1.47(2)	1.53(4)	–
S11–C11	1.748(4)	1.754(1)	1.753(2)
S11–C13	1.757(3)	1.761(1)	1.763(2)
S12–C11	1.750(4)	1.749(1)	1.751(2)
S12–C14	1.757(3)	1.761(1)	1.761(2)
S13–C12	1.748(3)	1.750(1)	1.752(2)
S13–C15	1.751(3)	1.754(1)	1.758(2)
S14–C12	1.746(3)	1.752(1)	1.750(2)
S14–C16	1.749(3)	1.754(1)	1.753(2)
S15–C13	1.750(3)	1.754(1)	1.753(2)
S15–C17	1.801(4)	1.810(1)	1.811(2)
S16–C14	1.754(3)	1.752(1)	1.753(2)
S16–C18	1.807(4)	1.811(1)	1.815(2)
S17–C15	1.743(3)	1.744(1)	1.742(2)
S17–C19	1.794(4)	1.809(1)	1.811(2)
S18–C16	1.743(3)	1.746(1)	1.750(2)
S18–C20	1.805(3)	1.812(1)	1.816(2)
C11–C12	1.356(4)	1.357(2)	1.354(3)
C13–C14	1.338(5)	1.348(2)	1.351(3)
C15–C16	1.337(5)	1.349(2)	1.347(3)
C17–C18	1.508(6)	1.525(2)	1.523(3)
C19–C20	1.495(5)	1.518(2)	1.518(3)
Os1–Cl1	2.3774(9)	2.3666(7)	2.359(1)
Os1–N1	1.84(1)	1.830(7)	1.81(1)
Os1–Cl2	2.3770(9)	2.3755(8)	2.371(1)
Os1–N2	1.80(1)	1.697(6)	1.70(1)
Os1–Cl3	2.3808(7)	2.3810(4)	2.3805(5)
N1–O1	1.116(9)	1.053(7)	1.09(1)
N2–O2	1.131(9)	1.212(7)	1.21(1)

δ-$(BEDT\text{-}TTF)_4[OsNOCl_5]_{1.33}\cdot NB_{0.67}$ **(2)**

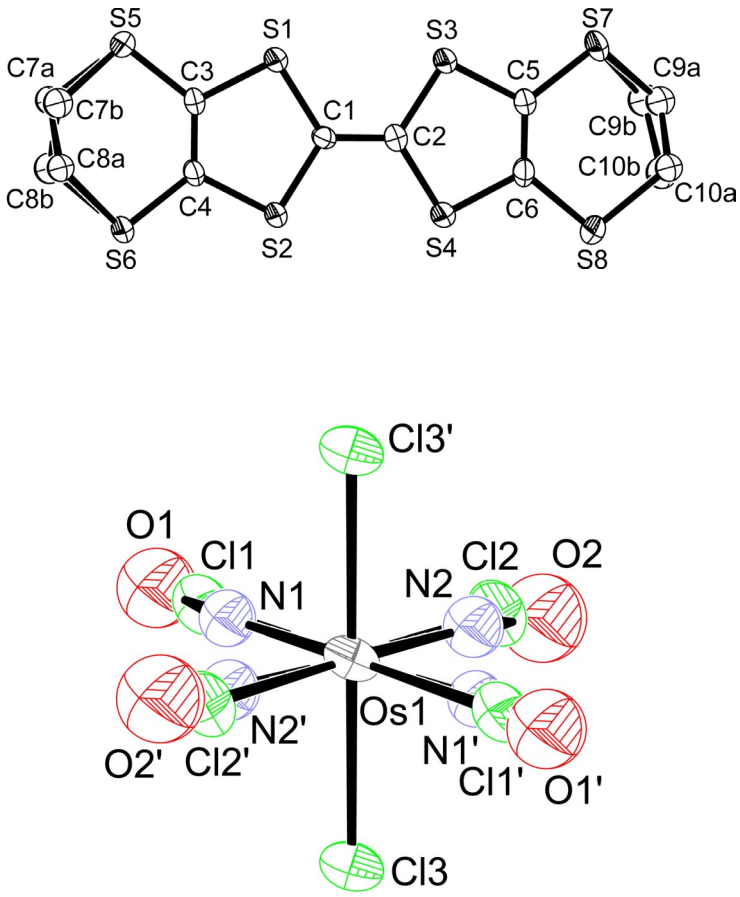


Рис. П**2**. Обозначения атомов в BEDT-TTF и анионе $[OsNOCl_5]$ в структуре **2**.

Таблица П**2**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для δ-(BEDT-TTF)$_4$[OsNOCl$_5$]$_{1.33}$·NB$_{0.67}$ (**2**).

Характеристика	
Дифрактометр	CAD4F
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	$C_{44}H_{35.33}Cl_{6.67}N_2O_{2.67}Os_{1.33}S_{32}$
Молекулярный вес	2173.89
Сингония	Моноклинная
a, Å	15.034(3)
b, Å	6.728(2)
c, Å	35.211(6)
α, °	90
β, °	92.98(1)
γ, °	90
V, Å^3	3556(1)
Пр. группа, *Z*	*I*2/*a*, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	2.030
μ, см$^{-1}$	39.07
F (000)	2140
Диапазон Θ, °	2.32÷24.97
Диапазон индексов	-17≤*h*≤17
	-7≤*k*≤0
	-41≤*l*≤41
Число измеренных рефлексов	6222
Число независимых рефлексов	3100
R_{int}, R_σ	0.114, 0.119
Число уточняемых параметров	223
Добротность уточнения по F^2	1.061
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0437

Таблица П**2**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **2**.

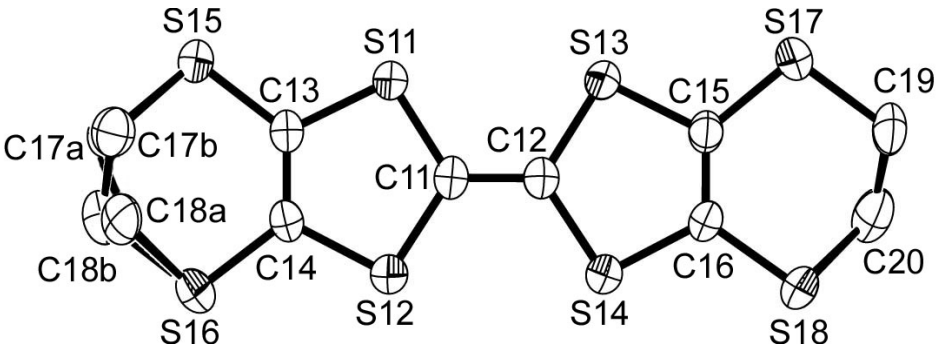
Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(1)	8734(1)	5433(2)	-127(1)	52(1)
S(2)	8476(1)	9623(2)	-322(1)	52(1)
S(6)	7746(1)	8883(3)	-1099(1)	56(1)
S(4)	9116(1)	10858(2)	533(1)	55(1)
S(7)	10109(2)	7434(3)	1506(1)	70(1)
S(3)	9532(1)	6716(2)	705(1)	51(1)
S(5)	7981(2)	3883(3)	-850(1)	84(1)
S(8)	9604(2)	12375(3)	1292(1)	70(1)
C(1)	8812(4)	7890(8)	17(2)	41(1)
C(2)	9132(4)	8433(10)	374(2)	44(1)
C(3)	8249(4)	5953(10)	-572(2)	48(2)
C(4)	8147(4)	7883(9)	-670(2)	44(2)
C(5)	9724(4)	8420(10)	1071(2)	46(2)
C(6)	9530(4)	10306(10)	991(2)	47(2)
C(7A)*	7486(10)	4840(20)	-1272(3)	46(3)
C(8A)*	7975(9)	6767(19)	-1414(3)	45(3)
C(7B)*	7944(11)	5000(20)	-1319(4)	53(3)
C(8B)*	7374(10)	6680(20)	-1356(4)	57(3)
C(9A)*	9947(11)	9390(20)	1826(4)	52(4)
C(10A)*	10227(10)	11260(20)	1711(4)	46(3)
C(9B)*	9537(12)	9240(30)	1817(5)	63(4)
C(10B)*	9817(12)	11340(30)	1747(4)	62(4)
Os(1)*	7500	2500	-2500	51(1)
Cl(1)*	6491(4)	4819(9)	-2253(1)	83(2)
N(1)*	6710(30)	4090(70)	-2310(15)	76(8)
O(1)*	6360(30)	5450(50)	-2165(13)	76(8)
Cl(2)*	6268(3)	447(8)	-2714(1)	68(1)
N(2)*	6620(30)	960(60)	-2652(16)	76(8)
O(2)*	6240(30)	-400(50)	-2797(12)	76(8)
Cl(3)	7599(2)	753(5)	-1919(1)	72(1)
C(1S)*	6240(20)	1040(70)	-2603(18)	113(8)
C(2S)	5890(20)	2920(80)	-2536(19)	113(8)
C(3S)	6460(30)	4510(70)	-2458(15)	113(8)
C(4S)	7380(20)	4230(60)	-2450(20)	113(8)
C(5S)	7730(20)	2360(60)	-2510(30)	113(8)
C(6S)	7160(20)	760(60)	-2590(20)	113(8)
N(1S)	8720(40)	2120(70)	-2539(18)	113(8)
O(1S)	9140(20)	3530(80)	-2416(16)	113(8)
O(2S)	8920(30)	560(80)	-2692(17)	113(8)

***** Заселенность позиций C(7A)-C(10B) 0.5; В ячейке анион Os(1)-Cl(3) и растворитель C(1S)-O(2S) смешаны с заселенностью 0.67 и 0.33 соответственно. Кроме того в анионе NO-группа распределена по четырем позициям: заселенность Cl1, Cl2 0.75; N1, O1, N2, O2 0.25

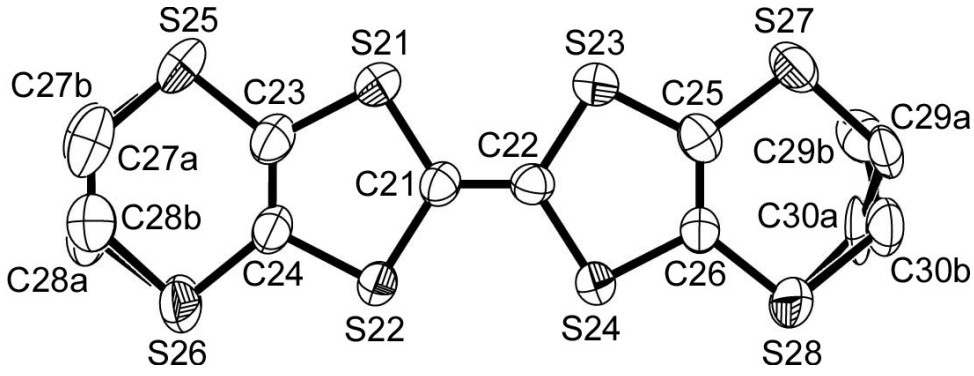
Таблица П**2**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF для структуры **2.**

Связь	*d*
S(1)-C(3)	1.731(5)
S(1)-C(1)	1.731(6)
S(2)-C(1)	1.725(5)
S(2)-C(4)	1.746(6)
S(6)-C(4)	1.735(5)
S(6)-C(8B)	1.81(1)
S(6)-C(8A)	1.85(1)
S(4)-C(2)	1.726(7)
S(4)-C(6)	1.739(6)
S(7)-C(5)	1.738(6)
S(7)-C(9A)	1.76(1)
S(7)-C(9B)	1.87(2)
S(3)-C(2)	1.728(6)
S(3)-C(5)	1.738(6)
S(5)-C(3)	1.737(6)
S(5)-C(7A)	1.75(1)
S(5)-C(7B)	1.81(1)
S(8)-C(6)	1.750(6)
S(8)-C(10B)	1.76(1)
S(8)-C(10A)	1.86(1)
C(1)-C(2)	1.371(8)
C(3)-C(4)	1.350(9)
C(5)-C(6)	1.328(9)
C(7A)-C(8A)	1.59(2)
C(7B)-C(8B)	1.42(2)
C(9A)-C(10A)	1.39(2)
C(9B)-C(10B)	1.50(2)

κ-(BEDT-TTF)$_4$[OsNOCl$_5$]·BN **(3)**



I



II

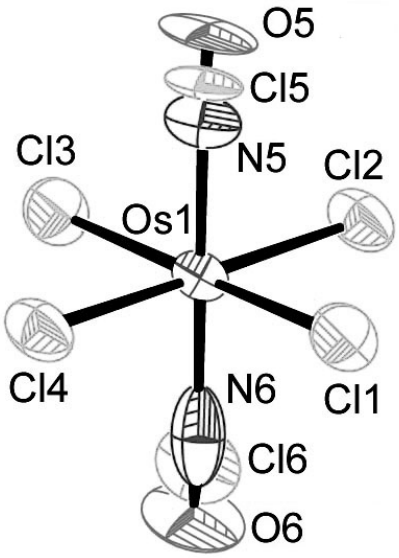


Рис. П**3**. Обозначения атомов в BEDT-TTF I, II (атомы в BEDT-TTF III, IV обозначены аналогично) и анионе [OsNOCl$_5$] в структуре **3**.

Таблица П**3**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов **κ**-(BEDT-TTF)$_4$[OsNOCl$_5$]·BN (**3**) без сверхструктуры (A) и со сверхструктурой (B).

Характеристика	A	B
Дифрактометр	CAD4F	Bruker X8APEX
Температура, K	295(2)	293(2)
Брутто-формула	$C_{47}H_{37}Cl_5N_2O_1Os_1S_{32}$	$C_{47}H_{37}Cl_5N_2O_1Os_1S_{32}$
Молекулярный вес	2039.16	2039.16
Сингония	Триклинная	Триклинная
a, Å	8.7410(4)	8.7540(2)
b, Å	11.9042(6)	11.9199(3)
c, Å	17.1842(6)	34.4221(8)
α, °	95.305(4)	95.305(1)
β, °	92.646(3)	92.6464(9)
γ, °	95.136(4)	95.1342(9)
V, Å^3	1770.6(1)	3556.7(2)
Пр. группа, Z	$P\bar{1}$, 1	$P\bar{1}$, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.912	1.904
μ, см$^{-1}$	29.74	29.61
F (000)	1014	2028
Диапазон Θ, °	2.00÷27.46	0.59÷30.34
Диапазон индексов	$0 \le h \le 11$	$-5 \le h \le 11$
	$-15 \le k \le 15$	$-16 \le k \le 16$
	$-22 \le l \le 22$	$-47 \le l \le 48$
Число измеренных рефлексов	8607	42521
Число независимых рефлексов	8066	17822
R_{int}, R_σ	0.018, 0.043	0.0234, 0.0356
Число уточняемых параметров	434	902
Добротность уточнения по F^2	1.015	1.093
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0363	0.0375

Таблица П**3**.2.1. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **3** кристаллов без сверхструктуры.

Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(11)	-1797(1)	2486(1)	3374(1)	50(1)
S(12)	-4171(1)	620(1)	3488(1)	47(1)
S(13)	-306(1)	2051(1)	5077(1)	45(1)
S(14)	-2722(1)	199(1)	5174(1)	45(1)
S(15)	-2983(2)	3073(1)	1850(1)	68(1)
S(16)	-5773(1)	849(1)	1963(1)	53(1)
S(17)	1305(1)	1701(1)	6584(1)	55(1)
S(18)	-1490(1)	-523(1)	6642(1)	48(1)
C(11)	-2557(4)	1438(3)	3925(2)	38(1)
C(12)	-1924(4)	1246(3)	4634(2)	37(1)
C(13)	-3196(5)	2207(3)	2604(2)	43(1)
C(14)	-4282(5)	1349(3)	2653(2)	39(1)
C(15)	-193(5)	1282(3)	5887(2)	39(1)
C(16)	-1286(4)	415(3)	5929(2)	36(1)
C(17a)*	-4463(14)	2489(8)	1117(5)	64(3)
C(18a)*	-4893(16)	1218(7)	1086(6)	56(3)
C(17b)*	-3704(18)	2046(18)	1082(8)	56(5)
C(18b)*	-5364(18)	1620(20)	1150(12)	56(5)
C(19)	302(6)	1359(4)	7435(3)	60(1)
C(20)	-186(6)	125(4)	7436(2)	59(1)
S(21)	2211(1)	5175(1)	4901(1)	48(1)
S(22)	3761(2)	3294(1)	4169(1)	52(1)
S(23)	3531(1)	4645(1)	6599(1)	45(1)
S(24)	5079(1)	2764(1)	5867(1)	49(1)
S(25)	726(2)	5763(2)	3453(1)	73(1)
S(26)	2457(2)	3446(2)	2587(1)	87(1)
S(27)	4223(2)	4166(1)	8211(1)	78(1)
S(28)	6135(2)	1976(1)	7366(1)	61(1)
C(21)	3385(5)	4091(3)	5020(2)	41(1)
C(22)	3928(4)	3865(3)	5739(2)	39(1)
C(23)	1884(5)	4851(4)	3893(2)	45(1)
C(24)	2575(5)	3979(4)	3562(2)	50(1)
C(25)	4436(5)	3804(3)	7221(2)	43(1)
C(26)	5164(5)	2957(3)	6884(2)	44(1)
C(27a)*	330(20)	5122(13)	2511(7)	68(4)
C(28a)*	1700(20)	4620(15)	2139(6)	68(4)
C(27b)*	1140(30)	5354(17)	2422(9)	60(5)
C(28b)*	1130(30)	4130(20)	2159(10)	67(5)
C(29a)*	4972(13)	2997(7)	8681(5)	60(2)
C(30a)*	4942(9)	1886(6)	8198(4)	49(2)
C(29b)*	4340(20)	2853(14)	8593(10)	64(5)
C(30b)*	5820(20)	2410(20)	8335(13)	103(8)
Os(1)	0	0	0	37(1)
Cl(1)	1829(1)	-995(1)	660(1)	56(1)
Cl(2)	-2015(1)	-869(1)	691(1)	61(1)
Cl(3)*	414(5)	1506(3)	948(2)	53(1)
N(1)*	314(19)	1118(11)	738(8)	51(3)
O(1)*	565(17)	1884(10)	1196(7)	79(3)
C(7S)*	2863(16)	4963(11)	3(8)	77(3)
N(1S)	4144(16)	4958(12)	0(9)	115(4)
C(1S)	280(8)	4026(5)	-135(4)	57(2)
C(2S)	1246(5)	5026(6)	-8(4)	54(2)

Продолжение Таблицы П**3**.2.1.

C(3S)	629(7)	6055(5)	143(4)	55(2)
C(4S)	-954(8)	6085(6)	166(5)	71(3)
C(5S)	-1921(5)	5085(8)	39(5)	78(3)
C(6S)	-1303(7)	4056(6)	-111(5)	71(3)

* Заселенность позиций C17a, C18a 0.65; C17b, C18b 0.35; C27a, C28a 0.6; C27b, C28b 0.4; C29a, C30a 0.45; C29b, C30b 0.55; Cl3-O1 0.5; Заселенность позиций растворителя C(7S)-C(6S) 0.5.

Таблица П**3**.2.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **3** кристаллов со сверхструктурой.

Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(11)	5843(1)	605(1)	-758(1)	49(1)
S(12)	8186(1)	2497(1)	-804(1)	51(1)
S(13)	7288(1)	174(1)	86(1)	47(1)
S(14)	9673(1)	2047(1)	46(1)	47(1)
S(15)	4261(1)	825(1)	-1523(1)	57(1)
S(16)	7017(1)	3088(1)	-1567(1)	69(1)
S(17)	8488(1)	-540(1)	823(1)	50(1)
S(18)	11265(1)	1712(1)	802(1)	58(1)
C(11)	7437(3)	1430(3)	-537(1)	40(1)
C(12)	8074(3)	1238(3)	-182(1)	41(1)
C(13)	5720(3)	1334(3)	-1174(1)	40(1)
C(14)	6804(3)	2211(3)	-1193(1)	43(1)
C(15)	8702(3)	404(2)	469(1)	38(1)
C(16)	9782(3)	1277(2)	449(1)	40(1)
C(17a)*	4610(15)	1667(16)	-1912(5)	46(4)
C(18a)*	6261(15)	2060(15)	-1964(3)	52(4)
C(17b)*	5082(11)	1276(6)	-1966(3)	54(2)
C(18b)*	5518(10)	2539(6)	-1930(2)	70(2)
C(19)	9806(4)	99(3)	1221(1)	60(1)
C(20)	10266(4)	1334(3)	1226(1)	61(1)
S(21)	3771(1)	3282(1)	-409(1)	53(1)
S(22)	2223(1)	5171(1)	-47(1)	50(1)
S(23)	5074(1)	2763(1)	442(1)	50(1)
S(24)	3535(1)	4654(1)	804(1)	46(1)
S(25)	2439(2)	3402(1)	-1200(1)	87(1)
S(26)	726(1)	5738(1)	-773(1)	80(1)
S(27)	6104(1)	1969(1)	1191(1)	63(1)
S(28)	4188(2)	4165(1)	1612(1)	86(1)
C(21)	3379(3)	4080(3)	17(1)	42(1)
C(22)	3932(3)	3864(3)	376(1)	42(1)
C(23)	2563(4)	3961(3)	-714(1)	54(1)
C(24)	1883(4)	4835(3)	-552(1)	49(1)
C(25)	5145(3)	2952(3)	949(1)	46(1)
C(26)	4406(4)	3809(3)	1118(1)	45(1)
C(27a)*	1740(10)	4583(9)	-1425(3)	74(3)
C(28a)*	389(12)	5110(9)	-1254(2)	69(3)
C(27b)*	1084(18)	4155(10)	-1433(4)	72(4)
C(28b)*	1164(19)	5373(9)	-1277(3)	60(4)
C(29a)*	5838(16)	2461(11)	1708(3)	56(4)
C(30a)*	4298(17)	2843(19)	1764(6)	60(5)
C(29b)*	4946(8)	1895(6)	1612(2)	67(2)
C(30b)*	4878(13)	2967(7)	1851(2)	66(3)

Продолжение Таблицы П3.2.2.

S(31)	6475(1)	5365(1)	4205(1)	45(1)
S(32)	4921(1)	7235(1)	4576(1)	49(1)
S(33)	7802(1)	4824(1)	5051(1)	48(1)
S(34)	6249(1)	6695(1)	5422(1)	53(1)
S(35)	5748(2)	5834(1)	3400(1)	74(1)
S(36)	3836(1)	8018(1)	3825(1)	61(1)
S(37)	9274(1)	4210(1)	5773(1)	68(1)
S(38)	7527(2)	6519(1)	6213(1)	86(1)
C(31)	6067(3)	6131(3)	4635(1)	43(1)
C(32)	6619(3)	5908(3)	4992(1)	42(1)
C(33)	5545(4)	6196(3)	3896(1)	45(1)
C(34)	4817(3)	7044(3)	4068(1)	44(1)
C(35)	8111(4)	5119(3)	5558(1)	47(1)
C(36)	7427(4)	5989(3)	5726(1)	51(1)
C(37)	5088(6)	7019(4)	3172(1)	78(1)
C(38)	5022(5)	8074(4)	3403(1)	72(1)
C(39a)*	9690(10)	4884(9)	6250(2)	68(3)
C(40a)*	8328(11)	5341(9)	6431(2)	68(3)
C(39b)*	8940(20)	4605(10)	6289(3)	67(4)
C(40b)*	8942(16)	5823(10)	6435(4)	73(4)
S(41)	289(1)	7945(1)	4968(1)	44(1)
S(42)	2728(1)	9777(1)	4912(1)	45(1)
S(43)	1780(1)	7523(1)	5821(1)	51(1)
S(44)	4185(1)	9365(1)	5754(1)	47(1)
S(45)	-1343(1)	8307(1)	4217(1)	53(1)
S(46)	1474(1)	10506(1)	4181(1)	47(1)
S(47)	2988(1)	6943(1)	6582(1)	70(1)
S(48)	5806(1)	9128(1)	6515(1)	51(1)
C(41)	1913(3)	8739(3)	5187(1)	39(1)
C(42)	2552(3)	8553(2)	5541(1)	39(1)
C(43)	168(3)	8723(2)	4565(1)	39(1)
C(44)	1278(3)	9571(2)	4537(1)	35(1)
C(45)	3202(4)	7797(3)	6203(1)	45(1)
C(46)	4307(3)	8639(2)	6171(1)	40(1)
C(47)	-313(4)	8617(3)	3790(1)	58(1)
C(48)	176(4)	9846(3)	3779(1)	59(1)
C(49a)*	4428(15)	7547(7)	6952(2)	67(3)
C(50a)*	4863(15)	8805(7)	6958(3)	54(2)
C(49b)*	3725(18)	8020(20)	6968(4)	67(5)
C(50b)*	5372(16)	8410(30)	6933(7)	70(6)
Os(1)	3(1)	-50(1)	2507(1)	37(1)
Cl(1)	2015(1)	804(1)	2158(1)	57(1)
Cl(2)	1832(1)	-1054(1)	2835(1)	56(1)
Cl(3)	-2010(1)	-937(1)	2849(1)	61(1)
Cl(4)	-1832(1)	939(1)	2175(1)	54(1)
Cl(5)*	-420(7)	-1568(4)	2021(1)	46(1)
O(6)*	581(15)	1944(7)	3105(4)	93(4)
N(6)*	319(19)	1124(12)	2920(6)	71(4)
Cl(6)*	404(10)	1470(5)	2976(3)	74(1)
O(5)*	-571(15)	-1951(8)	1897(3)	80(3)
N(5)*	-330(20)	-1271(9)	2117(3)	47(2)
C(1S)	-1226(3)	4982(2)	2503(1)	56(1)
C(2S)	-267(3)	5966(2)	2566(1)	65(1)
C(3S)	1296(3)	5932(2)	2555(1)	82(1)
C(4S)	1899(3)	4914(2)	2479(1)	80(1)
C(5S)	940(3)	3930(2)	2416(1)	79(1)
C(6S)	-622(3)	3964(2)	2427(1)	70(1)
C(7S)	-2829(5)	5019(4)	2506(1)	80(1)
N(1S)	-4158(5)	5041(4)	2503(1)	129(2)

Продолжение Таблицы П**3**.2.2.

* Заселенность позиций C(17a), C(18a), C(29a), C(30a) 0.3; C17b, C18b, C(29b), C(30b) 0.7; C(27a), C(28a), C(39a), C(40a) 0.6; C(27b), C(28b), C(39a), C(40a) 0.4; C(49a), C(50a) 0.65; C(49b), C(50b) 0.35; В анионе NO-группа распределена по двум позициям: заселенность Cl(5)-O(5) 0.5.

Таблица П**3**.3.1. Длины связей (*d*, Å) в BEDT-TTF для кристаллов **3** без сверхструктуры.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(11)-C(11)	1.738(4)	S(23)-C(25)	1.741(4)
S(11)-C(13)	1.748(4)	S(24)-C(26)	1.740(4)
S(12)-C(11)	1.739(4)	S(24)-C(22)	1.746(4)
S(12)-C(14)	1.748(4)	S(25)-C(27)	1.730(10)
S(13)-C(12)	1.738(4)	S(25)-C(23)	1.748(4)
S(13)-C(15)	1.739(4)	S(25)-C(27A)	1.853(17)
S(14)-C(12)	1.738(4)	S(26)-C(28A)	1.658(17)
S(14)-C(16)	1.747(4)	S(26)-C(24)	1.732(4)
S(15)-C(13)	1.734(4)	S(26)-C(28)	1.818(13)
S(15)-C(17A)	1.766(15)	S(27)-C(25)	1.739(4)
S(15)-C(17)	1.808(8)	S(27)-C(29A)	1.760(16)
S(16)-C(14)	1.746(4)	S(27)-C(29)	1.827(9)
S(16)-C(18A)	1.78(2)	S(28)-C(30A)	1.74(2)
S(16)-C(18)	1.795(11)	S(28)-C(26)	1.749(4)
S(17)-C(15)	1.740(4)	S(28)-C(30)	1.814(7)
S(17)-C(19)	1.800(5)	C(21)-C(22)	1.362(5)
S(18)-C(16)	1.737(4)	C(23)-C(24)	1.341(6)
S(18)-C(20)	1.805(5)	C(25)-C(26)	1.341(6)
C(11)-C(12)	1.362(5)	C(27)-C(28)	1.52(3)
C(13)-C(14)	1.342(5)	C(27A)-C(28A)	1.49(3)
C(15)-C(16)	1.352(5)	C(29)-C(30)	1.492(9)
C(17)-C(18)	1.521(11)	C(29A)-C(30A)	1.513(17)
C(17A)-C(18A)	1.506(15)	Os(1)-N(1)	1.745(10)
C(19)-C(20)	1.492(7)	Os(1)-Cl(3)	2.299(3)
S(21)-C(21)	1.740(4)	Os(1)-Cl(1)	2.3796(11)
S(21)-C(23)	1.745(4)	Os(1)-Cl(2)	2.3823(11)
S(22)-C(21)	1.728(4)	N(1)-O(1)	1.147(11)
S(22)-C(24)	1.742(5)		
S(23)-C(22)	1.738(4)		

Таблица П**3**.3.2. Длины связей (*d*, Å) в BEDT-TTF для кристаллов **3** со сверхстуктурой.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(11)-C(11)	1.735(3)	S(17)-C(19)	1.816(3)
S(11)-C(13)	1.746(3)	S(18)-C(16)	1.745(3)
S(12)-C(11)	1.737(3)	S(18)-C(20)	1.806(4)
S(12)-C(14)	1.749(3)	C(11)-C(12)	1.365(4)
S(13)-C(12)	1.748(3)	C(13)-C(14)	1.355(4)
S(13)-C(15)	1.752(3)	C(15)-C(16)	1.350(4)
S(14)-C(16)	1.738(3)	C(17A)-C(18A)	1.502(13)
S(14)-C(12)	1.738(3)	C(17B)-C(18B)	1.513(8)
S(15)-C(13)	1.740(3)	C(19)-C(20)	1.490(5)
S(15)-C(17A)	1.770(18)	S(21)-C(21)	1.736(3)
S(15)-C(17B)	1.822(9)	S(21)-C(23)	1.758(4)
S(16)-C(14)	1.740(3)	S(22)-C(21)	1.741(3)
S(16)-C(18B)	1.804(6)	S(22)-C(24)	1.754(3)
S(16)-C(18A)	1.806(13)	S(23)-C(25)	1.736(4)
S(17)-C(15)	1.738(3)	S(23)-C(22)	1.744(3)

Продолжение Таблицы П**3**.3.2

S(24)-C(22)	1.738(3)	C(31)-C(32)	1.357(4)
S(24)-C(26)	1.740(3)	C(33)-C(34)	1.347(4)
S(25)-C(23)	1.737(4)	C(35)-C(36)	1.341(5)
S(25)-C(27B)	1.759(11)	S(41)-C(41)	1.736(3)
S(25)-C(27A)	1.809(8)	S(41)-C(43)	1.742(3)
S(26)-C(24)	1.744(3)	S(42)-C(41)	1.748(3)
S(26)-C(28A)	1.752(7)	S(42)-C(44)	1.752(3)
S(26)-C(28B)	1.816(10)	S(43)-C(42)	1.738(3)
S(27)-C(25)	1.750(3)	S(43)-C(45)	1.757(3)
S(27)-C(29B)	1.810(6)	S(44)-C(42)	1.745(3)
S(27)-C(29A)	1.853(13)	S(44)-C(46)	1.747(3)
S(28)-C(30A)	1.71(2)	S(45)-C(43)	1.748(3)
S(28)-C(26)	1.735(3)	S(45)-C(47)	1.811(4)
S(28)-C(30B)	1.847(9)	S(46)-C(44)	1.734(3)
C(21)-C(22)	1.363(4)	S(46)-C(48)	1.822(4)
C(23)-C(24)	1.335(5)	S(47)-C(45)	1.734(3)
C(25)-C(26)	1.358(4)	S(47)-C(49A)	1.803(8)
C(27A)-C(28A)	1.507(10)	S(47)-C(49B)	1.810(16)
C(27B)-C(28B)	1.496(12)	S(48)-C(46)	1.749(3)
C(29A)-C(30A)	1.476(14)	S(48)-C(50B)	1.78(2)
C(29B)-C(30B)	1.462(9)	S(48)-C(50A)	1.822(11)
C(37)-C(38)	1.432(6)	C(41)-C(42)	1.363(4)
C(39A)-C(40A)	1.493(10)	C(43)-C(44)	1.352(4)
C(39B)-C(40B)	1.491(12)	C(45)-C(46)	1.346(4)
S(31)-C(31)	1.736(3)	C(47)-C(48)	1.492(5)
S(31)-C(33)	1.741(3)	C(49A)-C(50A)	1.511(9)
S(32)-C(34)	1.739(3)	C(49B)-C(50B)	1.491(14)
S(32)-C(31)	1.746(3)	Os(1)-O(5)	1.878(8)
S(33)-C(32)	1.747(3)	Os(1)-O(6)	1.895(15)
S(33)-C(35)	1.752(3)	Os(1)-Cl(6)	2.305(6)
S(34)-C(32)	1.737(3)	Os(1)-Cl(5)	2.338(3)
S(34)-C(36)	1.756(4)	Os(1)-Cl(1)	2.3839(8)
S(35)-C(33)	1.745(3)	Os(1)-Cl(4)	2.3856(8)
S(35)-C(37)	1.803(4)	Os(1)-Cl(2)	2.3870(8)
S(36)-C(34)	1.753(3)	Os(1)-Cl(3)	2.3873(8)
S(36)-C(38)	1.827(4)	N(6)-O(6)	1.114(14)
S(37)-C(35)	1.743(3)	N(5)-O(5)	1.057(8)
S(37)-C(39A)	1.765(7)	C(1S)-C(2S)	1.3741(17)
S(37)-C(39B)	1.837(10)	C(1S)-C(6S)	1.3741(17)
S(38)-C(36)	1.734(3)	C(1S)-C(7S)	1.409(4)
S(38)-C(40B)	1.738(10)	C(2S)-C(3S)	1.3743(17)
S(38)-C(40A)	1.830(8)	C(3S)-C(4S)	1.3741(17)
		C(4S)-C(5S)	1.3742(17)
		C(5S)-C(6S)	1.3742(17)
		C(7S)-N(1S)	1.165(5)

β-(BEDT-TTF)$_2$[OsNOCl$_5$] **(4)**

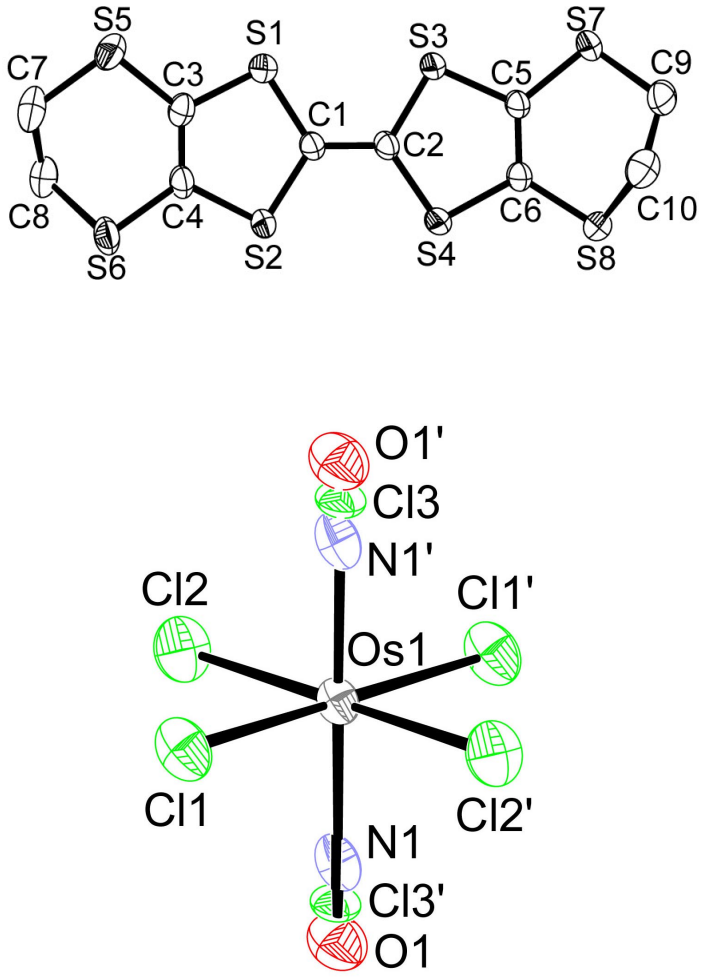


Рис. П**4**. Обозначения атомов в молекуле BEDT-TTF и анионе [OsNOCl$_5$] в структуре **4**.

Таблица П**4**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β-(BEDT-TTF)$_2$[OsNOCl$_5$] (**4**).

Характеристика	
Дифрактометр	CAD4F
Температура, K	291(2)
Брутто-формула	$C_{20}\ H_{16}\ Cl_5\ N_1\ O_1\ Os_1\ S_{16}$
Молекулярный вес	1166.74
Сингония	Триклинная
a, Å	8.7249(3)
b, Å	10.3380(5)
c, Å	11.0927(6)
α, °	110.410(4)
β, °	98.410(4)
γ, °	103.834(4)
V, Å^3	881.06(7)
Пр. группа, *Z*	$P\ \bar{1}$, 1
$\rho_{выч.}$, г/см^3	2.199
μ, см$^{-1}$	49.71
F (000)	568
Диапазон Θ, °	2.02÷30.01
Диапазон индексов	$-12 \le h \le 11$
	$-14 \le k \le 13$
	$-15 \le l \le 15$
Число измеренных рефлексов	10214
Число независимых рефлексов	5133
R_{int}, R_σ	0.021, 0.029
Число уточняемых параметров	214
Добротность уточнения по F^2	1.031
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0238

Таблица П**4**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **4**.

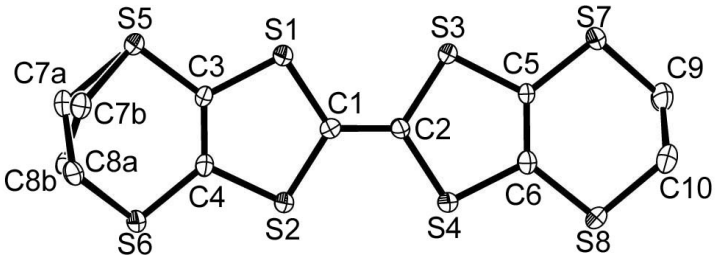
Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(1)	2900(1)	6581(1)	5924(1)	35(1)
S(2)	1875(1)	3909(1)	3534(1)	32(1)
S(3)	4770(1)	5145(1)	7526(1)	34(1)
S(4)	3695(1)	2399(1)	5206(1)	31(1)
S(5)	842(1)	8024(1)	4887(1)	50(1)
S(6)	-264(1)	4942(1)	1981(1)	47(1)
S(7)	6372(1)	4063(1)	9339(1)	40(1)
S(8)	5161(1)	849(1)	6658(1)	40(1)
C(1)	2929(3)	4822(3)	5181(2)	28(1)
C(2)	3720(3)	4179(3)	5880(2)	28(1)
C(3)	1487(3)	6494(3)	4591(3)	33(1)
C(4)	1031(3)	5257(3)	3478(3)	33(1)
C(5)	5288(3)	3706(3)	7754(2)	29(1)
C(6)	4810(3)	2440(3)	6661(3)	30(1)
C(7)	-147(5)	7800(5)	3221(4)	53(1)
C(8)	310(4)	6789(4)	2103(4)	44(1)
C(9)	6044(5)	2278(4)	9392(3)	51(1)
C(10)	4783(4)	1032(4)	8257(4)	46(1)
Os(1)	0	0	0	24(1)
Cl(1)	1855(1)	268(1)	1930(1)	41(1)
Cl(2)	1802(1)	2180(1)	99(1)	44(1)
Cl(3)*	1386(3)	-1311(3)	-1370(3)	28(1)
O(1)*	-1668(14)	1512(13)	1624(12)	46(2)
N(1)*	-1140(14)	1038(11)	1075(10)	36(2)

* Заселенность позиций равна 0.5.

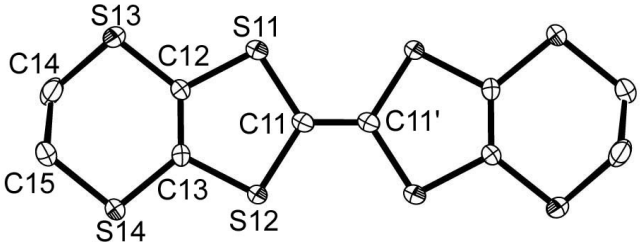
Таблица П**4**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF и анионе [$OsNOCl_5$] для структуры **4**.

Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.723(3)
S(1)-C(3)	1.742(3)
S(2)-C(1)	1.721(2)
S(2)-C(4)	1.739(3)
S(3)-C(2)	1.724(2)
S(3)-C(5)	1.741(3)
S(4)-C(2)	1.721(3)
S(4)-C(6)	1.740(3)
S(5)-C(3)	1.745(3)
S(5)-C(7)	1.831(4)
S(6)-C(4)	1.743(3)
S(6)-C(8)	1.805(3)
S(7)-C(5)	1.737(3)
S(7)-C(9)	1.821(4)
S(8)-C(6)	1.742(3)
S(8)-C(10)	1.805(3)
C(1)-C(2)	1.393(3)
C(3)-C(4)	1.353(4)
C(5)-C(6)	1.358(4)
C(7)-C(8)	1.493(5)
C(9)-C(10)	1.497(5)
Os(1)-Cl(3)	2.344(2)
Os(1)-Cl(1)	2.3743(7)
Os(1)-Cl(2)	2.3763(8)
O(1)-N(1)	0.898(11)

β″-(BEDT-TTF)$_3$[OsNOCl$_5$] **(5)**



I



II

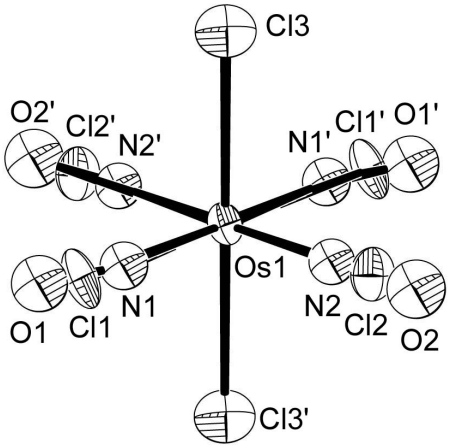


Рис. П**5**. Обозначения атомов в BEDT-TTF I, II и анионе [OsNOCl$_5$] в структуре **5**.

Таблица П**5**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β''-(BEDT-TTF)$_3$[OsNOCl$_5$] (**5**).

Характеристика	
Дифрактометр	Bruker KappaCCD
Температура, K	291(2)
Брутто-формула	$C_{30}\ H_{24}\ Cl_5\ N_1\ O_1\ Os_1\ S_{24}$
Молекулярный вес	1551.39
Сингония	Триклинная
a, Å	7.6672(8)
b, Å	9.866(1)
c, Å	17.973(1)
α, °	91.115(9)
β, °	93.636(7)
γ, °	102.434(9)
V, Å^3	1324.2(2)
Пр. группа, *Z*	$P\ \bar{1}$, 1
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.945
μ, см$^{-1}$	36.38
F (000)	764
Диапазон Θ, °	3.89-27.99
Диапазон индексов	$-10 \le h \le 10$
	$-13 \le k \le 13$
	$-23 \le l \le 23$
Число измеренных рефлексов	26451
Число независимых рефлексов	5653
R_{int}, R_σ	0.054, 0.051
Число уточняемых параметров	312
Добротность уточнения по F^2	1.083
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0475

Таблица П**5**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **5**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(1)	1652(3)	-3438(2)	6421(1)	44(1)
S(2)	3897(2)	-656(2)	6446(1)	37(1)
S(3)	520(3)	-3139(2)	4662(1)	46(1)
S(4)	2404(3)	-234(2)	4770(1)	40(1)
S(5)	2453(3)	-3944(2)	8009(1)	43(1)
S(6)	5204(3)	-606(2)	8021(1)	45(1)
S(7)	-846(3)	-3092(2)	3102(1)	48(1)
S(8)	1305(3)	441(2)	3252(1)	48(1)
C(1)	2410(9)	-1953(6)	5939(4)	34(1)
C(2)	1851(9)	-1791(7)	5212(3)	33(1)
C(3)	2839(9)	-2831(6)	7269(3)	33(1)
C(4)	3885(9)	-1525(6)	7280(3)	32(1)
C(5)	385(9)	-2171(6)	3872(3)	31(1)
C(6)	1229(9)	-822(7)	3921(3)	35(1)
C(7a)*	4060(20)	-3017(13)	8737(7)	52(4)
C(8a)*	4210(30)	-1478(13)	8805(8)	40(4)
C(7b)*	2900(30)	-2680(20)	8752(10)	37(6)
C(8b)*	4810(30)	-1870(30)	8773(14)	34(6)
C(9)	-125(13)	-1914(8)	2363(4)	54(2)
C(10)	-259(13)	-486(9)	2517(4)	55(2)
S(11)	5318(3)	6719(2)	4233(1)	47(1)
S(12)	3538(3)	3752(2)	4050(1)	46(1)
S(13)	4518(3)	7398(2)	2681(1)	54(1)
S(14)	2415(3)	3853(2)	2465(1)	45(1)
C(11)	4760(10)	5099(7)	4643(4)	37(2)
C(12)	4310(9)	6125(7)	3341(4)	36(1)
C(13)	3509(9)	4779(7)	3261(4)	35(1)
C(14)	4113(12)	6326(8)	1832(4)	53(2)
C(15)	2393(11)	5242(8)	1813(4)	48(2)
Os(1)	0	0	0	31(1)
Cl(1)*	-840(5)	-1753(3)	-954(2)	49(1)
Cl(2)*	-1867(5)	1324(4)	-602(2)	50(1)
Cl(3)	2427(3)	1144(3)	-658(1)	66(1)
N(1)*	-710(40)	-1250(30)	-767(19)	53(9)
O(1)*	-820(50)	-2210(40)	-1090(20)	74(11)
N(2)*	-1420(50)	950(30)	-495(19)	49(9)
O(2)*	-2340(50)	1700(40)	-660(20)	80(13)

* Заселенность позиций C(7a), C(8a) 0.65; C(7b), C(8b) 0.35; В анионе NO-группа разупорядочена по четырем позициям: заселенность Cl(1), Cl(2) 0.75, N(1)-O(2) 0.25.

Таблица П**5**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF и анионе [$OsNOCl_5$] для структуры **5**.

Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.727(6)
S(1)-C(3)	1.749(6)
S(2)-C(1)	1.720(7)
S(2)-C(4)	1.742(6)
S(3)-C(5)	1.737(6)
S(3)-C(2)	1.739(6)
S(4)-C(2)	1.727(6)
S(4)-C(6)	1.745(7)
S(5)-C(3)	1.742(6)
S(5)-C(7A)	1.774(19)
S(5)-C(7)	1.823(12)
S(6)-C(4)	1.733(6)
S(6)-C(8)	1.792(15)
S(6)-C(8A)	1.85(2)
S(7)-C(5)	1.745(6)
S(7)-C(9)	1.817(8)
S(8)-C(6)	1.743(7)
S(8)-C(10)	1.815(9)
C(1)-C(2)	1.372(9)
C(3)-C(4)	1.362(9)
C(5)-C(6)	1.347(9)
C(7)-C(8)	1.500(15)
C(7A)-C(8A)	1.504(19)
C(9)-C(10)	1.457(11)
S(11)-C(11)	1.752(7)
S(11)-C(12)	1.766(7)
S(12)-C(11)	1.749(7)
S(12)-C(13)	1.761(7)
S(13)-C(12)	1.734(7)
S(13)-C(14)	1.812(9)
S(14)-C(13)	1.747(7)
S(14)-C(15)	1.823(8)
C(11)-C(11)’	1.344(14)
C(12)-C(13)	1.338(9)
C(14)-C(15)	1.506(12)
Os(1)-N(2)	1.79(3)
Os(1)-N(1)	1.81(3)
Os(1)-Cl(3)	2.359(2)
Os(1)-Cl(2)	2.365(4)
Os(1)-Cl(1)	2.368(3)
N(1)-O(1)	1.092(19)
N(2)-O(2)	1.157(19)

β″-(BEDT-TTF)$_2$[NP] **(6)**

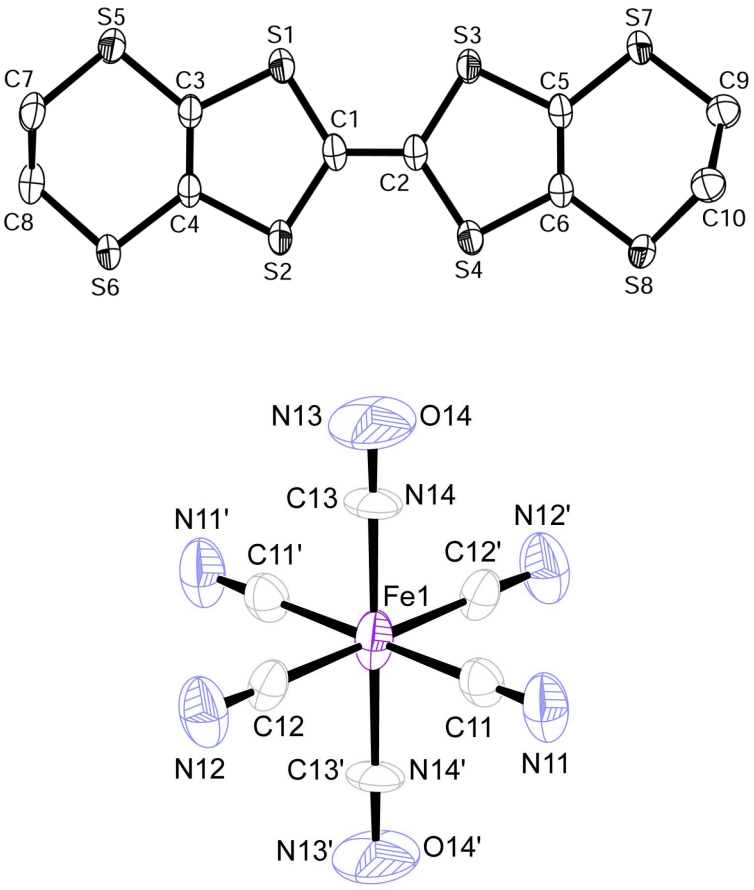


Рис. П**6**. Обозначения атомов в BEDT-TTF и анионе [NP] в структуре **6**.

Таблица П**6**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β''-(BEDT-TTF)$_2$[NP] (**6**).

Характеристика	
Дифрактометр	CAD4F
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	$C_{25}\ H_{16}\ Fe_1\ N_6\ O_1\ S_{16}$
Молекулярный вес	985.25
Сингония	Триклинная
a, Å	6.686(1)
b, Å	8.672(1)
c, Å	16.095(3)
α, °	99.91(1)
β, °	101.54(1)
γ, °	94.59(1)
V, Å^3	894.3(2)
Пр. группа, *Z*	$P\ \bar{1}$, 1
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.829
μ, см$^{-1}$	13.92
F (000)	498
Диапазон Θ, °	50
Диапазон индексов	$-7 \le h \le 7$
	$-10 \le k \le 10$
	$0 \le l \le 19$
Число измеренных рефлексов	3457
Число независимых рефлексов	3079
R_{int}, R_σ	0.040, 0.0604
Число уточняемых параметров	223
Добротность уточнения по F^2	1.009
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.056

Таблица П**6**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **6**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(1)	5436(2)	3687(2)	3717(1)	31(1)
S(2)	1151(2)	4203(2)	3355(1)	35(1)
S(3)	4758(2)	2098(2)	5318(1)	33(1)
S(4)	514(2)	2773(2)	5028(1)	34(1)
S(5)	6444(2)	4937(2)	2253(1)	40(1)
S(6)	1237(2)	5488(2)	1800(1)	44(1)
S(7)	4616(2)	528(2)	6781(1)	35(1)
S(8)	-555(2)	1278(2)	6409(1)	44(1)
C(1)	3094(8)	3524(6)	4005(3)	28(1)
C(2)	2830(7)	2881(6)	4705(3)	27(1)
C(3)	4631(8)	4548(6)	2840(3)	28(1)
C(4)	2599(8)	4772(6)	2653(3)	30(1)
C(5)	3295(7)	1456(6)	6000(3)	24(1)
C(6)	1307(8)	1763(6)	5856(3)	28(1)
C(7)	4788(9)	4840(7)	1219(4)	38(1)
C(8)	3197(8)	5964(7)	1229(4)	38(1)
C(9)	2554(10)	-160(9)	7251(5)	54(2)
C(10)	1001(10)	867(9)	7382(4)	55(2)
Fe(1)	0	0	0	44(1)
C(11)	1041(9)	1882(6)	-341(4)	39(1)
C(12)	1786(8)	651(7)	1132(3)	38(1)
N(11)	1639(9)	2993(6)	-548(4)	61(2)
N(12)	2826(9)	997(7)	1807(3)	63(2)
C(13)*	2128(11)	-1098(10)	-405(6)	46(2)
N(13)*	3385(12)	-1745(11)	-647(6)	102(3)
N(14)*	-1869(18)	937(15)	346(9)	46(2)
O(14)*	-3170(20)	1560(18)	578(11)	102(3)

* Заселенность позиций равна 0.5.

Таблица П**6**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF и анионе [NP] для структуры **6**.

Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.721(5)
S(1)-C(3)	1.721(5)
S(2)-C(1)	1.709(5)
S(2)-C(4)	1.735(5)
S(3)-C(2)	1.720(5)
S(3)-C(5)	1.739(5)
S(4)-C(2)	1.730(5)
S(4)-C(6)	1.737(5)
S(5)-C(3)	1.727(5)
S(5)-C(7)	1.790(6)
S(6)-C(4)	1.728(5)
S(6)-C(8)	1.804(5)
S(7)-C(5)	1.740(5)
S(7)-C(9)	1.808(6)
S(8)-C(6)	1.734(5)
S(8)-C(10)	1.805(6)
C(1)-C(2)	1.375(7)
C(3)-C(4)	1.368(7)
C(5)-C(6)	1.359(7)
C(7)-C(8)	1.500(8)
C(9)-C(10)	1.444(9)
Fe(1)-N(14)	1.678(11)
Fe(1)-C(13)	1.932(5)
Fe(1)-C(11)	1.931(4)
Fe(1)-C(12)	1.932(4)
C(11)-N(11)	1.141(5)
C(12)-N(12)	1.142(5)
C(13)-N(13)	1.141(6)
N(14)-O(14)	1.150(14)

β″-(BEDT-TTF)$_3$[NP]·EG **(7)**

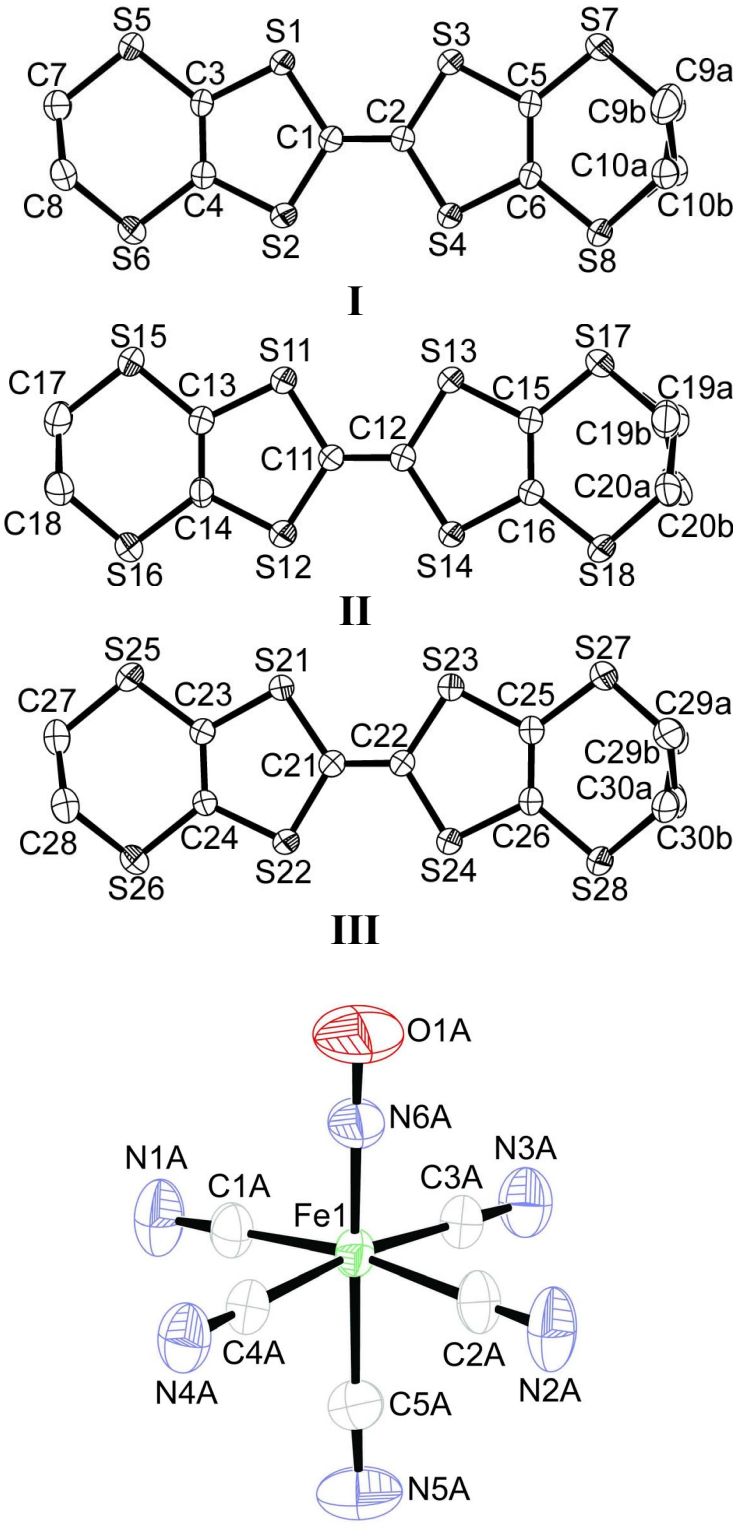


Рис. П7. Обозначения атомов в BEDT-TTF I, II, III и анионе [NP] в структуре **7**.

Таблица П**7**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β''-(BEDT-TTF)$_3$[NP]·EG (**7**).

Характеристика	
Дифрактометр	Bruker X8APEX
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	C_{37} H_{30} Fe_1 N_6 O_3 S_{24}
Молекулярный вес	1431.96
Сингония	Триклинная
a, Å	19.481(3)
b, Å	8.641(1)
c, Å	16.441(2)
α, °	98.89(1)
β, °	93.17(1)
γ, °	101.27(1)
V, Å^3	2680.5(1)
Пр. группа, *Z*	$P\ \bar{1}$, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.774
μ, см$^{-1}$	12.62
F (000)	1456
Диапазон Θ, °	65.42
Диапазон индексов	-28 ≤ h ≤ 27 -13 ≤ k ≤ 11 -24 ≤ l ≤ 22
Число измеренных рефлексов	27538
Число независимых рефлексов	14818
R_{int}, R_σ	0.023, 0.050
Число уточняемых параметров	694
Добротность уточнения по F^2	0.961
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.047

Таблица П**7**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **7**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(1)	4026(1)	3590(1)	-1338(1)	37(1)
S(2)	3728(1)	3696(1)	128(1)	33(1)
S(3)	2528(1)	5269(1)	-1546(1)	34(1)
S(4)	2095(1)	5320(1)	-92(1)	34(1)
S(5)	5379(1)	2065(1)	-1312(1)	48(1)
S(6)	5075(1)	2193(1)	456(1)	40(1)
S(7)	984(1)	6694(1)	-1903(1)	46(1)
S(8)	526(1)	6785(1)	-139(1)	36(1)
C(1)	3447(3)	4124(1)	-663(1)	29(1)
C(2)	2773(3)	4829(1)	-758(1)	27(1)
C(3)	4697(3)	2820(1)	-847(1)	31(1)
C(4)	4569(3)	2881(1)	-157(1)	29(1)
C(5)	1566(3)	6051(1)	-1263(1)	29(1)
C(6)	1384(3)	6085(1)	-586(1)	27(1)
C(7)	5876(3)	1358(2)	-661(1)	42(1)
C(8)	4830(3)	1274(2)	-123(1)	39(1)
C(9a)*	626(5)	7558(3)	-1375(2)	37(1)
C(10a)*	-421(5)	7302(3)	-849(2)	35(1)
C(9b)*	-190(20)	7295(14)	-1501(11)	57(6)
C(10b)*	380(20)	7597(10)	-774(9)	38(4)
S(11)	4600(1)	3037(1)	2074(1)	39(1)
S(12)	4348(1)	3127(1)	3545(1)	35(1)
S(13)	3129(1)	4704(1)	1874(1)	35(1)
S(14)	2721(1)	4782(1)	3332(1)	34(1)
S(15)	5801(1)	1466(1)	2054(1)	50(1)
S(16)	5568(1)	1576(1)	3839(1)	41(1)
S(17)	1531(1)	6115(1)	1499(1)	44(1)
S(18)	1139(1)	6238(1)	3261(1)	42(1)
C(11)	4045(3)	3563(1)	2758(1)	30(1)
C(12)	3375(3)	4267(1)	2668(1)	30(1)
C(13)	5199(3)	2232(2)	2548(1)	33(1)
C(14)	5090(3)	2282(1)	3236(1)	29(1)
C(15)	2153(3)	5482(1)	2141(1)	29(1)
C(16)	1988(3)	5525(1)	2824(1)	28(1)
C(17)	6489(4)	809(2)	2706(1)	50(1)
C(18)	5472(4)	673(2)	3256(1)	47(1)
C(19a)*	1226(5)	7002(3)	2018(2)	41(1)
C(20a)*	212(5)	6772(2)	2563(2)	40(1)
C(19b)*	410(20)	6713(12)	1899(10)	46(5)
C(20b)*	1112(19)	7050(10)	2650(8)	40(4)
S(21)	3575(1)	4141(1)	5252(1)	35(1)
S(22)	3097(1)	4229(1)	6707(1)	35(1)
S(23)	1875(1)	5790(1)	5020(1)	38(1)
S(24)	1477(1)	5823(1)	6484(1)	37(1)
S(25)	5031(1)	2639(1)	5342(1)	43(1)
S(26)	4394(1)	2720(1)	7056(1)	51(1)
S(27)	496(1)	7300(1)	4722(1)	49(1)
S(28)	24(1)	7317(1)	6484(1)	42(1)
C(21)	2876(3)	4660(1)	5908(1)	30(1)
C(22)	2160(3)	5339(1)	5806(1)	29(1)
C(23)	4218(3)	3379(1)	5771(1)	29(1)
C(24)	3991(3)	3424(1)	6442(1)	29(1)
C(25)	1025(3)	6604(2)	5330(1)	33(1)
C(26)	843(3)	6618(1)	6004(1)	30(1)

Продолжение Таблицы П7.2.

C(27)	5360(3)	1900(2)	5976(1)	44(1)
C(28)	4201(3)	1809(2)	6477(1)	43(1)
C(29a)*	110(6)	8121(4)	5286(3)	39(1)
C(30a)*	-958(6)	7837(3)	5804(2)	39(1)
C(29b)*	-646(13)	7881(8)	5136(6)	42(3)
C(30b)*	-38(14)	8155(6)	5885(5)	45(3)
Fe(1)	393(1)	-238(1)	1608(1)	30(1)
C(1A)	2145(3)	-719(2)	2097(1)	37(1)
C(2A)	-1561(3)	164(2)	1237(1)	41(1)
C(3A)	994(3)	726(2)	2283(1)	36(1)
C(4A)	-389(3)	-1275(2)	1033(1)	36(1)
C(5A)	-766(3)	-720(2)	2290(1)	39(1)
N(1A)	3171(3)	-1003(2)	2391(1)	59(1)
N(2A)	-2702(3)	407(2)	1011(1)	65(1)
N(3A)	1348(3)	1301(2)	2670(1)	54(1)
N(4A)	-835(3)	-1886(2)	693(1)	55(1)
N(5A)	-1413(3)	-970(2)	2716(1)	70(1)
N(6A)	1376(3)	189(1)	1035(1)	47(1)
O(1A)	2033(3)	485(2)	636(1)	96(1)
O(1S)	-20(3)	-360(2)	4102(1)	83(1)
O(2S)	2567(3)	35(2)	5298(1)	99(1)
C(1S)	1589(4)	-337(3)	4062(2)	76(1)
C(2S)	2688(4)	57(3)	4650(2)	100(2)

* Заселенность позиций C(9a), C(10a), C(19a), C(20a) 0.8; C(9b), C(10b), C(19b), C(20b) 0.2; C(29a), C(30a) 0.67; C(29b), C(30b) 0.33.

Таблица П**7**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDT-TTF и анионе [NP] для структуры **7**.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.728(2)	S(21)-C(21)	1.743(2)
S(1)-C(3)	1.737(2)	S(21)-C(23)	1.747(2)
S(2)-C(1)	1.723(2)	S(22)-C(24)	1.731(2)
S(2)-C(4)	1.730(2)	S(22)-C(21)	1.738(2)
S(3)-C(2)	1.726(2)	S(23)-C(22)	1.733(2)
S(3)-C(5)	1.749(2)	S(23)-C(25)	1.752(2)
S(4)-C(2)	1.726(2)	S(24)-C(22)	1.742(2)
S(4)-C(6)	1.745(2)	S(24)-C(26)	1.749(2)
S(5)-C(3)	1.731(2)	S(25)-C(23)	1.742(2)
S(5)-C(7)	1.807(2)	S(25)-C(27)	1.799(3)
S(6)-C(4)	1.736(2)	S(26)-C(24)	1.737(2)
S(6)-C(8)	1.798(3)	S(26)-C(28)	1.791(3)
S(7)-C(5)	1.735(2)	S(27)-C(29b)	1.739(11)
S(7)-C(9b)	1.771(19)	S(27)-C(25)	1.743(2)
S(7)-C(9a)	1.806(4)	S(27)-C(29a)	1.801(6)
S(8)-C(6)	1.736(2)	S(28)-C(26)	1.751(2)
S(8)-C(10a)	1.803(4)	S(28)-C(30a)	1.776(4)
S(8)-C(10b)	1.874(16)	S(28)-C(30b)	1.855(9)
C(1)-C(2)	1.383(3)	C(21)-C(22)	1.365(3)
C(3)-C(4)	1.368(3)	C(23)-C(24)	1.356(3)
C(5)-C(6)	1.356(3)	C(25)-C(26)	1.351(3)
C(7)-C(8)	1.500(3)	C(27)-C(28)	1.515(3)
C(9a)-C(10a)	1.519(6)	C(29a)-C(30a)	1.529(7)
C(9b)-C(10b)	1.45(2)	C(29b)-C(30b)	1.479(14)
S(11)-C(11)	1.727(2)	Fe(1)-C(1A)	1.940(2)
S(11)-C(13)	1.745(2)	Fe(1)-C(2A)	1.942(2)
S(12)-C(11)	1.723(2)	Fe(1)-C(3A)	1.944(3)
S(12)-C(14)	1.739(2)	Fe(1)-C(4A)	1.945(3)
S(13)-C(12)	1.733(2)	Fe(1)-C(5A)	1.932(3)
S(13)-C(15)	1.741(2)	Fe(1)-N(6A)	1.645(2)
S(14)-C(12)	1.732(2)	C(1A)-N(1A)	1.144(3)
S(14)-C(16)	1.739(2)	C(2A)-N(2A)	1.145(3)
S(15)-C(13)	1.740(2)	C(3A)-N(3A)	1.142(3)
S(15)-C(17)	1.794(3)	C(4A)-N(4A)	1.146(3)
S(16)-C(14)	1.739(2)	C(5A)-N(5A)	1.142(3)
S(16)-C(18)	1.800(3)	N(6A)-O(1A)	1.129(3)
S(17)-C(19b)	1.732(17)	O(1S)-C(1S)	1.401(3)
S(17)-C(15)	1.736(2)	O(2S)-C(2S)	1.287(4)
S(17)-C(19a)	1.807(4)	C(1S)-C(2S)	1.404(5)
S(18)-C(16)	1.736(2)		
S(18)-C(20a)	1.795(3)		
S(18)-C(20b)	1.837(14)		
C(11)-C(12)	1.378(3)		
C(13)-C(14)	1.359(3)		
C(15)-C(16)	1.362(3)		
C(17)-C(18)	1.507(4)		
C(19a)-C(20a)	1.520(5)		
C(19b)-C(20b)	1.52(2)		

α′-(EDT-TTF-$CONH_2$)$_4$[NP] **(8)**

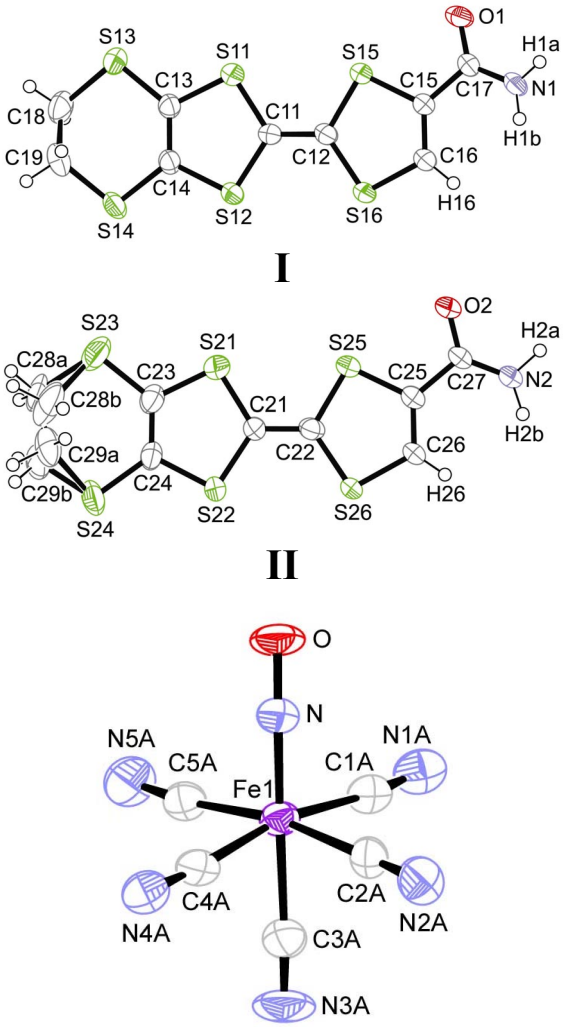


Рис. П**8**. Обозначения атомов в EDT-TTF-$CONH_2$ I, II и анионе [NP] в структуре **8**.

Таблица П**8**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов α′-(EDT-TTF-$CONH_2$)$_4$[NP] (**8**).

Характеристика	
Дифрактометр	CAD4F
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	$C_{41}\ H_{28}\ Fe_1\ N_{10}\ O_5\ S_{24}$
Молекулярный вес	1566.0
Сингония	Моноклинная
a, Å	12.6780(7)
b, Å	7.7065(4)
c, Å	30.733(1)
α, °	90
β, °	90.229(4)
γ, °	90
V, Å^3	3002.7(3)
Пр. группа, *Z*	$P2_1/c$, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.732
μ, см$^{-1}$	11.39
F (000)	1588
Диапазон Θ, °	2.08÷27.47
Диапазон индексов	$-16 \le h \le 16$
	$-10 \le k \le 0$
	$-39 \le l \le 39$
Число измеренных рефлексов	17870
Число независимых рефлексов	6837
R_{int}, R_σ	0.036, 0.032
Число уточняемых параметров	472
Добротность уточнения по F^2	1.007
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0316

Таблица П**8**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **8**.

Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(1)	2893(1)	8127(1)	7162(1)	46(1)
S(2)	799(1)	9737(1)	7120(1)	45(1)
S(3)	2950(1)	7739(1)	8108(1)	50(1)
S(4)	426(1)	9662(1)	8062(1)	49(1)
S(5)	3112(1)	8447(1)	6129(1)	41(1)
S(6)	1033(1)	10131(1)	6072(1)	39(1)
C(11)	1907(2)	9045(3)	6840(1)	37(1)
C(12)	2004(2)	9191(3)	6400(1)	35(1)
C(13)	2232(2)	8429(3)	7655(1)	38(1)
C(14)	1273(2)	9159(3)	7636(1)	37(1)
C(15)	2631(2)	8982(3)	5615(1)	36(1)
C(16)	1693(2)	9763(3)	5592(1)	39(1)
C(17)	3366(2)	8505(3)	5258(1)	43(1)
C(18)	2127(2)	8484(4)	8547(1)	54(1)
C(19)	965(2)	8226(4)	8471(1)	55(1)
O(1)	4255(1)	8020(3)	5358(1)	74(1)
N(1)	3023(2)	8626(4)	4855(1)	58(1)
S(21)	5841(1)	7800(1)	2379(1)	55(1)
S(22)	7995(1)	6429(1)	2390(1)	39(1)
S(23)	5693(1)	8143(1)	1432(1)	68(1)
S(24)	8254(1)	6598(1)	1433(1)	54(1)
S(25)	5695(1)	7615(1)	3399(1)	47(1)
S(26)	7801(1)	6038(1)	3462(1)	40(1)
C(21)	6900(2)	7050(3)	2687(1)	38(1)
C(22)	6825(1)	6932(3)	3131(1)	37(1)
C(23)	6469(2)	7586(3)	1878(1)	42(1)
C(24)	7462(2)	6970(3)	1885(1)	38(1)
C(25)	6129(2)	6954(3)	3912(1)	39(1)
C(26)	7086(2)	6251(3)	3936(1)	39(1)
C(27)	5346(2)	7262(3)	4264(1)	45(1)
C(28A)*	6418(4)	7480(8)	969(1)	74(1)
C(29A)*	7227(5)	6078(6)	1046(2)	63(1)
C(28B)*	6277(11)	6510(20)	1076(4)	80(5)
C(29B)*	7433(14)	6840(20)	971(5)	105(9)
O(2)	4445(1)	7705(3)	4155(1)	62(1)
N(2)	5657(2)	7045(4)	4670(1)	64(1)
Fe(1)*	-29(1)	282(2)	-62(1)	37(1)
C(1A)	493(12)	-1963(12)	-262(5)	37(2)
N(1A)	730(30)	-3230(20)	-417(7)	54(4)
C(2A)	1394(7)	1184(11)	-58(5)	39(2)
N(2A)	2222(9)	1703(14)	-53(6)	53(2)
C(4A)	-381(12)	2420(12)	241(5)	38(2)
N(4A)	-670(20)	3640(20)	406(7)	48(3)
C(5A)	-1435(7)	-613(11)	42(5)	38(2)
N(5A)	-2282(9)	-1095(15)	54(6)	61(3)
C(3A)	311(11)	-600(20)	518(5)	55(5)
N(3A)	438(12)	-1200(20)	857(5)	82(4)
N	-324(10)	824(18)	-560(4)	47(3)
O	-604(9)	961(16)	-922(4)	60(2)

* Заселенность позиций C(28A), C(29A) 0.75; C(28B), C(29B) 0.25; Заселенность позиций аниона Fe(1)-O равна 0.5.

Таблица П**8**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах EDT-TTF-($CONH_2$) и анионе [NP] для структуры **8**.

Связь	*d*
S(1)-C(11)	1.740(2)
S(1)-C(13)	1.751(2)
S(2)-C(11)	1.7340(19)
S(2)-C(14)	1.7490(19)
S(3)-C(13)	1.741(2)
S(3)-C(18)	1.803(3)
S(4)-C(14)	1.7408(19)
S(4)-C(19)	1.807(3)
S(5)-C(12)	1.7342(19)
S(5)-C(15)	1.7408(19)
S(6)-C(16)	1.7214(19)
S(6)-C(12)	1.7450(19)
C(11)-C(12)	1.364(3)
C(13)-C(14)	1.342(3)
C(15)-C(16)	1.335(3)
C(15)-C(17)	1.487(2)
C(17)-O(1)	1.226(2)
C(17)-N(1)	1.315(3)
C(18)-C(19)	1.504(4)
S(21)-C(21)	1.738(2)
S(21)-C(23)	1.743(2)
S(22)-C(21)	1.732(2)
S(22)-C(24)	1.7424(19)
S(23)-C(23)	1.739(2)
S(23)-C(28A)	1.772(4)
S(23)-C(28B)	1.828(12)
S(24)-C(24)	1.740(2)
S(24)-C(29B)	1.766(12)
S(24)-C(29A)	1.805(4)
S(25)-C(22)	1.7369(19)
S(25)-C(25)	1.743(2)
S(26)-C(26)	1.7271(19)
S(26)-C(22)	1.740(2)
C(21)-C(22)	1.371(3)
C(23)-C(24)	1.346(3)
C(25)-C(26)	1.330(3)
C(25)-C(27)	1.491(3)
C(27)-O(2)	1.237(2)
C(27)-N(2)	1.317(3)
C(28A)-C(29A)	1.508(6)
C(28B)-C(29B)	1.523(16)
Fe(1)-N	1.627(13)
Fe(1)-C(2A)	1.933(8)
Fe(1)-C(5A)	1.939(8)
Fe(1)-C(4A)	1.946(9)
Fe(1)-C(1A)	1.953(10)
Fe(1)-C(3A)	1.957(14)
C(1A)-N(1A)	1.125(11)
C(2A)-N(2A)	1.124(10)
C(4A)-N(4A)	1.131(11)
C(5A)-N(5A)	1.137(10)
C(3A)-N(3A)	1.148(15)
N-O	1.171(13)

β-(EDT-TTF-$(CONH_2)_2)_4$[NP]·NB **(9)**

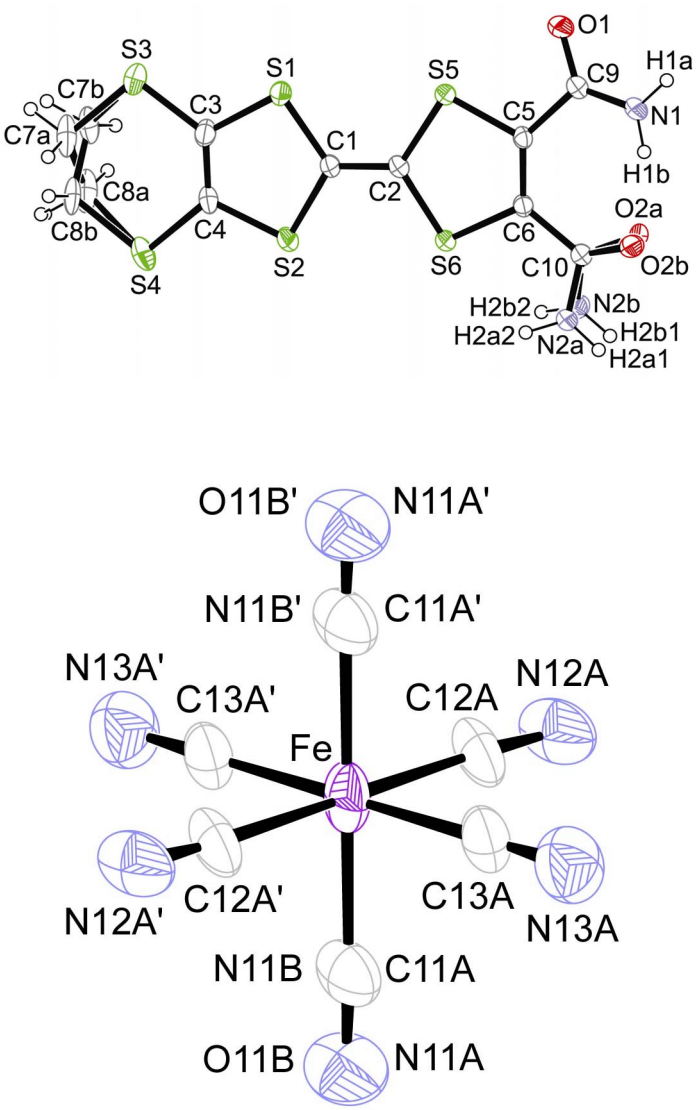


Рис. П**9**. Обозначения атомов в EDT-TTF-$(CONH_2)_2$ и анионе [NP] в структуре **9**.

Таблица П**9**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β-(EDT-TTF-$(CONH_2)_2)_4$[NP]·NB (**9**).

Характеристика	
Дифрактометр	CAD4F
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	$C_{51}\ H_{37}\ Fe_1\ N_{15}\ O_{11}\ S_{24}$
Молекулярный вес	1861.2
Сингония	Триклинная
a, Å	7.595(1)
b, Å	12.468(1)
c, Å	12.133(1)
α, °	121.72(1)
β, °	96.07(1)
°	90.72(1)
Å^3	968.7(2)
Пр. группа, *Z*	$P\ \bar{1}$, 0.5
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.595
μ, см$^{-1}$	9.04
F (000)	473
Диапазон Θ, °	2.71÷25.02
Диапазон индексов	$0 \le h \le 9$
	$-14 \le k \le 14$
	$-14 \le l \le 14$
Число измеренных рефлексов	3406
Число независимых рефлексов	3130
R_{int}, R_σ	0.120, 0.050
Число уточняемых параметров	313
Добротность уточнения по F^2	1.078
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0457

Таблица П**9**.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **9**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(1)	3400(1)	-1402(1)	5531(1)	38(1)
S(2)	3026(1)	-1479(1)	3062(1)	37(1)
S(3)	4513(2)	-3969(1)	4434(1)	60(1)
S(4)	4066(2)	-4068(1)	1474(1)	56(1)
S(5)	1968(1)	1437(1)	6956(1)	32(1)
S(6)	1683(1)	1256(1)	4435(1)	33(1)
C(1)	2845(5)	-630(3)	4716(3)	31(1)
C(2)	2257(5)	554(3)	5310(3)	28(1)
C(3)	3880(6)	-2791(4)	4149(4)	38(1)
C(4)	3705(5)	-2830(3)	3018(4)	35(1)
C(5)	1323(5)	2765(3)	6930(3)	26(1)
C(6)	1183(5)	2685(3)	5762(3)	28(1)
C(7A)*	4977(11)	-5231(6)	2843(7)	60(2)
C(8A)*	3794(13)	-5376(8)	1705(10)	62(3)
C(7B)*	3810(30)	-5282(13)	2834(13)	53(4)
C(8B)*	4640(30)	-5286(18)	1780(20)	46(5)
C(9)	941(5)	3769(3)	8282(3)	33(1)
O(1)	879(5)	3414(3)	9052(3)	50(1)
N(1)	754(5)	4915(3)	8562(3)	43(1)
C(10)	642(5)	3652(3)	5443(3)	32(1)
O(2A)*	115(17)	4637(15)	6263(17)	47(3)
N(2A)*	881(13)	3425(8)	4282(8)	44(2)
O(2B)*	808(16)	4793(15)	6262(16)	40(3)
N(2B)*	-125(12)	3193(8)	4224(8)	41(2)
Fe*	5000	0	0	40(1)
C(11A)	5683(12)	1327(8)	-186(8)	48(2)
N(11A)	6004(18)	2050(9)	-317(12)	65(3)
N(11B)	5683(12)	1327(8)	-186(8)	48(2)
O(11B)	6004(18)	2050(9)	-317(12)	65(3)
C(12)	3682(13)	1115(8)	1429(7)	43(2)
N(12)	3041(13)	1773(7)	2272(9)	54(2)
C(13)	7129(13)	434(8)	1222(8)	45(2)
N(13)	8361(12)	724(9)	1962(8)	60(2)
C(1S)	7570(20)	548(15)	125(15)	37(3)
C(2S)	8720(20)	316(16)	905(17)	42(4)
C(3S)	9210(30)	-964(18)	341(18)	52(4)
C(4S)	8650(30)	-1876(19)	-885(19)	53(4)
C(5S)	7530(30)	-1580(20)	-1620(20)	53(6)
C(6S)	6950(20)	-338(15)	-1135(14)	30(3)
N(1S)	7050(30)	1847(19)	650(20)	69(5)
O(1S)	7600(40)	2620(30)	1730(30)	134(8)
O(2S)	6600(40)	2220(30)	90(30)	89(9)

* Заселенность позиций C(7A), C(8A) 0.70; C(7B), C(8B) 0.30; O(2A), N(2A), O(2B), N(2B) 0.50; В ячейке анион [NP] Fe(1)-N(13) и растворитель C(1S)-O(2S) смешаны с заселенностью 0.5 и 0.25, соответственно. Кроме того в анионе NO-группа распределена по двум позициям: заселенность C(11A), N(11A), N(11B), O(11B) 0.5

Таблица П**9**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах EDT-TTF-$(CONH_2)_2$ и анионе $[NP]^{2-}$ для структуры **9**.

Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.733(4)
S(1)-C(3)	1.743(4)
S(2)-C(1)	1.731(4)
S(2)-C(4)	1.744(4)
S(3)-C(3)	1.739(4)
S(3)-C(7B)	1.774(12)
S(3)-C(7A)	1.814(7)
S(4)-C(4)	1.745(4)
S(4)-C(8B)	1.795(13)
S(4)-C(8A)	1.806(8)
S(5)-C(2)	1.742(3)
S(5)-C(5)	1.747(3)
S(6)-C(2)	1.724(4)
S(6)-C(6)	1.743(3)
C(1)-C(2)	1.365(5)
C(3)-C(4)	1.339(6)
C(5)-C(6)	1.360(5)
C(5)-C(9)	1.515(5)
C(6)-C(10)	1.498(5)
C(7A)-C(8A)	1.489(9)
C(7B)-C(8B)	1.477(17)
C(9)-O(1)	1.231(5)
C(9)-N(1)	1.296(5)
C(10)-O(2A)	1.212(17)
C(10)-N(2A)	1.316(9)
C(10)-O(2B)	1.228(16)
C(10)-N(2B)	1.332(9)
Fe-N(11B)	1.859(8)
Fe-C(11A)	1.859(8)
Fe-C(13)	1.932(10)
Fe-C(12)	1.951(8)
C(11A)-N(11A)	1.025(12)
C(12)-N(12)	1.091(11)
C(13)-N(13)	1.133(12)

β″-(BEDO-TTF)$_{2.43}${K$_2$[CrNO(CN)$_5$]} **(10)**

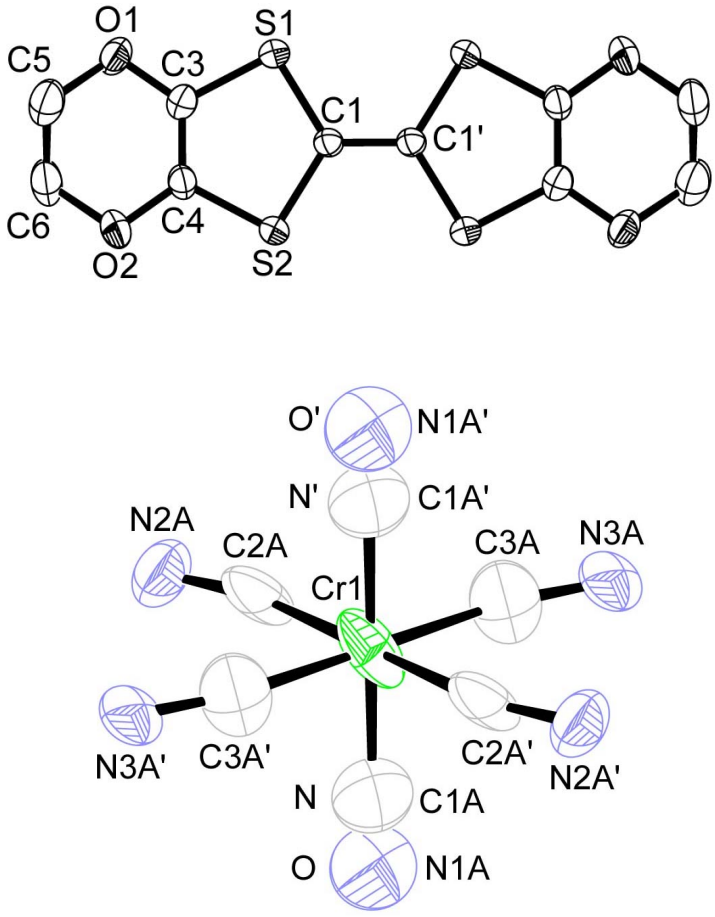


Рис. П**10**. Обозначения атомов в BEDO-TTF и анионе [CrNO(CN)$_5$] в структуре **10**.

Таблица П**10**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β''-$(BEDO\text{-}TTF)_{2.43}\{K_2[CrNO(CN)_5]\}$ (**10**).

Характеристика		
Дифрактометр	CAD4F	
Температура, K	295(2)	
Брутто-формула	$C_{29.3}H_{19.44}Cr_1K_2N_6O_{10.72}S_{9.72}$	
Молекулярный вес	1154.47	
Ячейка	Катионная	Анионная
Сингония	Триклинная	Триклинная
a, Å	3.9938(3)	4.519(1)
b, Å	5.3544(5)	4.336(1)
c, Å	19.303(1)	19.218(3)
α, °	95.291(8)	91.43(2)
β, °	94.407(7)	93.96(2)
γ, °	98.741(7)	119.14(2)
V, Å^3	404.51(6)	327.0(1)
Пр. группа, *Z*	$P\bar{1}$, 0.5	$P\bar{1}$, 0.5
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.315	1.274
μ, см$^{-1}$	5.88	11.72
F (000)	164	123
Диапазон Θ, °	3.87÷24.95	5.35÷19.97
Диапазон индексов	$0 \le h \le 4$	$-4 \le h \le 0$
	$-6 \le k \le 6$	$-3 \le k \le 4$
	$-22 \le l \le 22$	$-18 \le l \le 18$
Число измеренных рефлексов	1424	591
Число независимых рефлексов	1222	506
R_{int}, R_σ	0.2021, 0.0762	0.1149, 0.0729
Число уточняемых параметров	84	67
Добротность уточнения по F^2	1.058	2.016
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.0641	0.0931

Таблица П**10**.2.1. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в катионной ячейке структуры **10**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
C(1)	9952(12)	5223(9)	4654(3)	26(1)
C(2)	8672(14)	4902(10)	3338(3)	31(1)
C(3)	10845(14)	7105(9)	3516(3)	32(1)
C(4)	9383(18)	5307(13)	2183(4)	53(2)
C(5)	10004(19)	8127(13)	2392(4)	52(2)
S(1)	7496(3)	3100(2)	4004(1)	31(1)
S(2)	12211(3)	7944(2)	4390(1)	30(1)
O(1)	7426(11)	4002(8)	2677(2)	42(1)
O(2)	12029(11)	8745(7)	3057(2)	43(1)

Таблица П**10**.2.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) атомов в анионной ячейке структуры **10**.

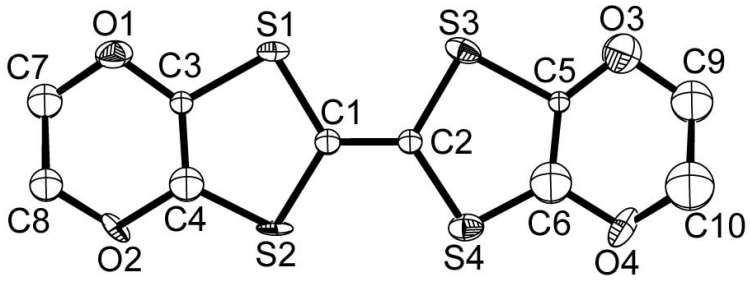
Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
Cr(1)*	0	0	0	57(6)
N	-2120(20)	1760(20)	-536(4)	83(15)
O	-3160(30)	2620(30)	-799(5)	50(13)
C(1A)	-2120(20)	1760(20)	-536(4)	80(16)
N(1A)	-3160(30)	2620(30)	-799(5)	90(30)
C(2A)	-3754(18)	-1910(30)	578(5)	57(6)
N(2A)	-6520(30)	-3920(40)	815(8)	54(8)
C(3A)	2240(20)	4358(14)	583(4)	69(8)
N(3A)	4370(30)	7386(19)	839(7)	46(7)
K(1)*	0	0	0	99(9)

* В ячейке анион [CrNO(CN)5] Cr(1)-N(3A) и катион K(1) смешаны с заселенностью 0.33 и 0.67, соответственно. Кроме того в анионе NO-группа распределена по двум позициям: заселенность N, O, C(1A), N(1A) 0.5.

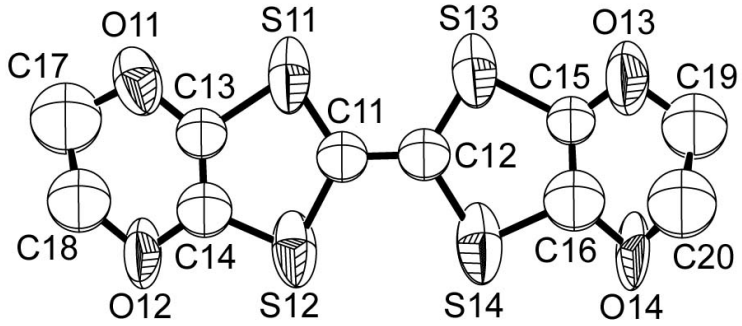
Таблица П**10**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDO-TTF и анионе $[CrNO(CN)_5]$ для структуры **10**.

Связь	*d*
C(1)-C(1)'	1.379(10)
C(1)-S(2)	1.733(5)
C(1)-S(1)	1.742(5)
C(2)-C(3)	1.353(8)
C(2)-O(1)	1.351(7)
C(2)-S(1)	1.729(5)
C(3)-O(2)	1.363(7)
C(3)-S(2)	1.730(6)
C(4)-O(1)	1.442(8)
C(4)-C(5)	1.504(10)
C(5)-O(2)	1.446(8)
Cr(1)-N	1.7821
Cr(1)-C(1A)	1.7821
Cr(1)-C(3A)	1.9301
Cr(1)-C(2A)	1.9324
N-O	0.8731
C(1A)-N(1A)	0.8731
C(2A)-N(2A)	1.2525
C(3A)-N(3A)	1.2510

β″-(BEDO-TTF)$[Fe_{0.5}Co_{0.5}(CN)_6]_{1/3}$ **(11)**



I



II

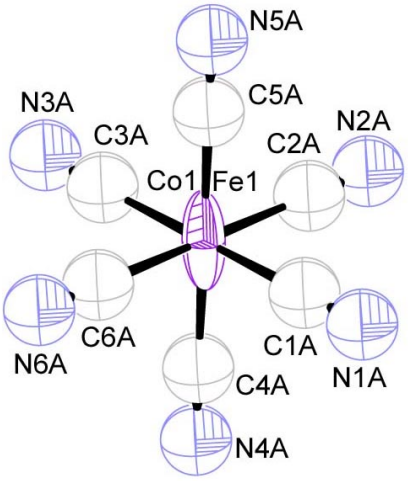


Рис. П**11**. Обозначения атомов в BEDO-TTF I, II и анионе $[Fe_{0.5}Co_{0.5}(CN)_6]$ в структуре **11**.

Таблица П**11**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов β''-(BEDO-TTF)$_2$[$Fe_{0.5}Co_{0.5}(CN)_6$]$_{1/3}$ (**11**).

Характеристика	
Дифрактометр	Bruker X8APEX
Температура, K	295(2)
Брутто-формула	$C_{22}\,H_{16}\,Co_{0.17}\,Fe_{0.17}\,N_2\,O_8\,S_8$
Молекулярный вес	1154.47
Сингония	Моноклинная
a, Å	4.075(6)
b, Å	10.32(1)
c, Å	37.73(5)
α, °	90
β, °	90
γ, °	99.19(2)
V, Å^3	1566(3)
Пр. группа, *Z*	*Pb*, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.509
μ, см$^{-1}$	7.73
F (000)	725
Диапазон Θ, °	1.62÷27.14
Диапазон индексов	$-5 \le h \le 5$
	$-10 \le k \le 12$
	$-48 \le l \le 48$
Число измеренных рефлексов	8848
Число независимых рефлексов	4510
R_{int}, R_σ	0.0798, 0.110
Число уточняемых параметров	271
Добротность уточнения по F^2	1.586
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.1225

Таблица П**11.**2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **11.**

Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(1)	4258(15)	4512(8)	216(1)	23(1)
S(2)	-385(14)	1955(7)	225(1)	24(1)
S(3)	4172(13)	4468(7)	-636(1)	27(1)
S(4)	-536(13)	1923(7)	-631(1)	27(1)
O(1)	4310(30)	4504(14)	929(3)	36(3)
O(2)	-240(30)	1987(13)	936(2)	30(3)
O(3)	3760(30)	4423(14)	-1344(3)	57(4)
O(4)	-790(30)	1900(13)	-1334(3)	35(3)
C(1)	1840(50)	3182(19)	-20(2)	19(2)
C(2)	1780(40)	3160(18)	-389(2)	16(2)
C(3)	3000(30)	3766(15)	634(4)	12(3)
C(4)	880(50)	2595(19)	609(5)	42(5)
C(5)	2750(30)	3693(14)	-1059(3)	15(3)
C(6)	480(50)	2569(19)	-1016(5)	47(5)
C(7)	2550(40)	3946(16)	1244(4)	37(4)
C(8)	1790(40)	2413(15)	1243(3)	31(4)
C(9)	2100(40)	3776(16)	-1653(4)	47(4)
C(10)	1370(50)	2224(18)	-1638(5)	76(6)
S(11)	5860(20)	884(13)	5229(2)	143(4)
S(12)	1220(20)	-1690(16)	5211(2)	145(4)
S(13)	6050(20)	905(13)	4384(2)	145(4)
S(14)	1410(30)	-1634(17)	4367(2)	163(5)
O(11)	5670(40)	810(20)	5923(5)	140(8)
O(12)	1200(50)	-1760(20)	5898(4)	155(9)
O(13)	5960(60)	740(20)	3686(5)	190(11)
O(14)	1140(50)	-1760(20)	3666(4)	171(10)
C(11)	3710(70)	-340(30)	4990(7)	99(7)
C(12)	3790(70)	-320(30)	4615(7)	107(8)
C(13)	4390(70)	20(30)	5634(7)	97(7)
C(14)	2370(80)	-1120(30)	5614(8)	123(9)
C(15)	4570(60)	200(30)	3942(7)	93(7)
C(16)	2820(90)	-1090(30)	3932(9)	144(11)
C(17)	3920(90)	410(30)	6252(7)	202(16)
C(18)	3230(80)	-1120(30)	6185(7)	159(12)
C(19)	4350(80)	70(30)	3382(6)	163(13)
C(20)	4000(70)	-1460(30)	3449(8)	203(15)
Fe(1)*	2670(30)	3768(16)	2509(3)	157(5)
Co(1)*	2670(30)	3768(16)	2509(3)	157(5)
C(1A)	-560(40)	3910(20)	2880(4)	157(7)
C(2A)	-700(40)	3890(20)	2149(4)	157(7)
C(3A)	5910(40)	3620(20)	2136(4)	157(7)
C(4A)	3920(50)	5670(16)	2502(4)	157(7)
C(5A)	1430(50)	1861(17)	2512(4)	157(7)
C(6A)	6050(40)	3640(20)	2867(4)	157(7)
N(1A)	-2380(70)	4020(40)	3084(6)	157(7)
N(2A)	-2580(50)	3960(30)	1951(6)	157(7)
N(3A)	7700(50)	3450(40)	1953(10)	157(7)
N(4A)	4590(70)	6730(20)	2502(7)	157(7)
N(5A)	720(70)	802(18)	2510(6)	157(7)
N(6A)	7940(50)	3580(30)	3064(6)	157(7)

* Заселенность позиций аниона $[Fe_{0.5}Co_{0.5}(CN)_6]$ равна 0.33. Кроме того два аниона $[Fe(CN)_6]$ и $[Co(CN)_6]$ равновероятно смешаны в одной позиции.

Таблица П**11**.3**.** Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BEDO-TTF и анионе $[Fe_{0.5}Co_{0.5}(CN)_6]$ для структуры **11**.

Связь	*d*
S(1)-C(3)	1.795(14)
S(1)-C(1)	1.793(17)
S(2)-C(4)	1.641(18)
S(2)-C(1)	1.706(17)
S(3)-C(2)	1.793(16)
S(3)-C(5)	1.839(14)
S(4)-C(6)	1.623(19)
S(4)-C(2)	1.723(16)
O(1)-C(3)	1.402(17)
O(1)-C(7)	1.460(11)
O(2)-C(4)	1.43(2)
O(2)-C(8)	1.451(11)
O(3)-C(5)	1.337(17)
O(3)-C(9)	1.455(12)
O(4)-C(6)	1.44(2)
O(4)-C(10)	1.450(12)
C(1)-C(2)	1.394(12)
C(3)-C(4)	1.373(15)
C(5)-C(6)	1.373(17)
C(7)-C(8)	1.562(12)
C(9)-C(10)	1.583(14)
S(11)-C(11)	1.68(3)
S(11)-C(13)	1.82(3)
S(12)-C(14)	1.67(3)
S(12)-C(11)	1.79(3)
S(13)-C(12)	1.69(3)
S(13)-C(15)	1.88(3)
S(14)-C(12)	1.80(3)
S(14)-C(16)	1.80(3)
O(11)-C(13)	1.41(3)
O(11)-C(17)	1.457(15)
O(12)-C(14)	1.31(3)
O(12)-C(18)	1.455(15)
O(13)-C(15)	1.21(3)
O(13)-C(19)	1.443(14)
O(14)-C(16)	1.34(4)
O(14)-C(20)	1.420(15)
C(11)-C(12)	1.42(3)
C(13)-C(14)	1.33(3)
C(15)-C(16)	1.41(4)
C(16)-C(20)	1.94(4)
C(17)-C(18)	1.587(17)
C(19)-C(20)	1.582(17)
Fe(1)-C(1A)	1.944(9)
Fe(1)-C(6A)	1.948(9)
Fe(1)-C(4A)	1.948(9)
Fe(1)-C(3A)	1.949(9)
Fe(1)-C(5A)	1.952(9)
Fe(1)-C(2A)	1.951(9)
C(1A)-N(1A)	1.088(18)
C(2A)-N(2A)	1.078(12)
C(3A)-N(3A)	1.040(16)
C(4A)-N(4A)	1.080(12)
C(6A)-N(6A)	1.080(12)

κ-$(BDH\text{-}TTP)_4[Hg(SCN)_4]\cdot(NB)$ **(12)**

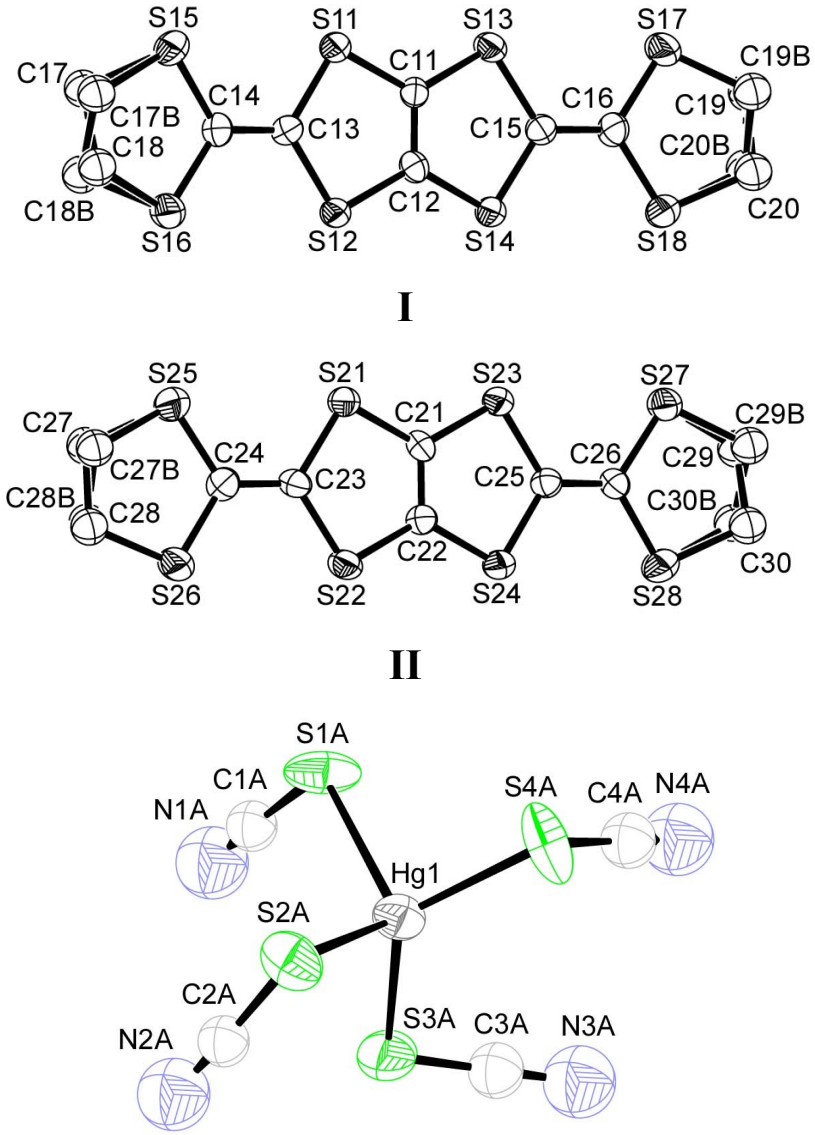


Рис. П**12**. Обозначения атомов в BDH-TTP I, II и анионе $[Hg(SCN)_4]$ в усредненной структуре **12** (аналогично обозначены атомы в BDH-TTP I, II, III, IV и анионах $[Hg(SCN)_4]$ в удвоенной ячейке **12** с учетом сверхструктуры)

Таблица П**12**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов **κ**-(BDH-TTP)$_4$[Hg(SCN)$_4$]·(NB) (**12**).

Характеристика		
Дифрактометр	CAD4F	Bruker X8APEX
Температура, K	293(2)	293(2)
Брутто-формула	$C_{50}H_{32}Hg_1N_5O_2S_{36}$	$C_{50}H_{32}Hg_1N_5O_2S_{36}$
Молекулярный вес	2089.56	2089.56
Сингония	Триклинная	Триклинная
a, Å	8.0634(3)	8.0626(2)
b, Å	11.0512(4)	11.0506(3)
c, Å	20.8943(8)	41.787(1)
α, °	94.528(1)	94.527(1)
β, °	97.970(1)	97.964(1)
γ, °	90.143(1)	90.143(1)
V, Å^3	1838.0(1)	3675.3(4)
Пр. группа, *Z*	$P\bar{1}$, 1	*P*1, 2
$\rho_{выч.}$, г/см^3	1.888	1.893
μ, см$^{-1}$	31.62	31.62
F (000)	1039	2088
Диапазон Θ, °	2.02÷28.96	0.49÷28.99
Диапазон индексов	-10≤*h*≤10	-10≤*h*≤10
	-14≤*k*≤7	-14≤*k*≤7
	-27≤*l*≤27	-55≤*l*≤54
Число измеренных рефлексов	12415	24681
Число независимых рефлексов	7570	21850
R_{int}, R_σ	0.023, 0.046	0.030, 0.078
Число уточняемых параметров	387	1470
Добротность уточнения по F^2	1.059	1.071
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.063	0.063

Таблица П**12**.2.1. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в усредненной структуре **12**.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(11)	372(2)	-2180(2)	4966(1)	37(1)
S(12)	2707(2)	-290(2)	4638(1)	35(1)
S(13)	909(2)	-1146(2)	6377(1)	39(1)
S(14)	3238(2)	732(2)	6053(1)	35(1)
S(15)	-233(3)	-3229(2)	3477(1)	47(1)
S(16)	1938(3)	-1302(2)	3132(1)	46(1)
S(17)	1868(3)	-232(2)	7905(1)	62(1)
S(18)	4300(3)	1495(2)	7565(1)	58(1)
C(11)	1328(8)	-1173(5)	5591(3)	29(1)
C(12)	2382(8)	-329(6)	5440(3)	32(1)
C(13)	1351(8)	-1536(6)	4366(3)	33(1)
C(14)	1050(8)	-1967(6)	3737(3)	33(1)
C(15)	2378(8)	28(6)	6660(3)	34(1)
C(16)	2808(8)	367(6)	7295(3)	37(2)
C(17)*	-260(12)	-3123(10)	2626(3)	47(1)
C(18)*	1429(12)	-2559(8)	2534(5)	47(1)
C(17B)*	350(40)	-3360(20)	2678(7)	47(1)
C(18B)*	1020(40)	-2220(20)	2428(8)	47(1)
C(19)*	2874(17)	733(13)	8571(5)	47(1)
C(20)*	4455(17)	1332(15)	8416(4)	47(1)
C(19B)*	3480(16)	281(13)	8547(6)	47(1)
C(20B)*	3970(20)	1565(13)	8396(4)	47(1)
S(21)	2519(2)	5783(2)	6048(1)	37(1)
S(22)	4999(2)	3854(2)	6379(1)	40(1)
S(23)	2034(2)	4761(2)	4631(1)	36(1)
S(24)	4530(2)	2836(2)	4966(1)	38(1)
S(25)	2576(3)	6548(2)	7578(1)	55(1)
S(26)	5164(3)	4746(2)	7894(1)	57(1)
S(27)	1729(2)	3732(2)	3123(1)	45(1)
S(28)	4077(3)	1776(2)	3486(1)	48(1)
C(21)	2913(8)	4723(6)	5431(3)	32(1)
C(22)	4045(8)	3855(6)	5578(3)	32(1)
C(23)	3780(8)	5054(6)	6654(3)	34(1)
C(24)	3819(8)	5391(6)	7297(3)	38(2)
C(25)	3167(8)	3506(6)	4362(3)	32(1)
C(26)	2993(8)	3061(6)	3738(3)	32(1)
C(27)*	3189(17)	6442(15)	8431(4)	47(1)
C(28)*	4684(18)	5642(13)	8594(5)	47(1)
C(27B)*	3644(19)	6653(13)	8399(4)	47(1)
C(28B)*	4042(19)	5315(12)	8537(6)	47(1)
C(29)*	1814(12)	2489(8)	2519(4)	47(1)
C(30)*	3511(12)	1887(10)	2637(3)	47(1)
C(29B)*	2220(40)	2770(20)	2445(9)	47(1)
C(30B)*	2870(40)	1570(20)	2696(8)	47(1)
Hg(1)*	356(1)	3081(1)	158(1)	56(1)
S(1A)	3035(7)	3602(5)	-247(3)	81(2)
S(2A)	-2051(7)	3496(6)	-736(3)	68(2)
S(3A)	-442(9)	1126(6)	565(3)	82(2)
S(4A)	249(8)	4633(6)	1152(3)	73(2)
C(1A)	4290(30)	2570(20)	11(14)	85(2)
C(2A)	-1160(40)	4470(30)	-1091(16)	85(2)
C(3A)	1340(30)	820(30)	963(13)	85(2)

Продолжение Таблицы П**12**.2.1.

C(4A)	1430(40)	5710(30)	992(17)	85(2)
N(1A)	5200(20)	1749(17)	127(10)	85(2)
N(2A)	-410(30)	5140(20)	-1371(11)	85(2)
N(3A)	2590(20)	501(17)	1284(9)	85(2)
N(4A)	2370(30)	6480(20)	927(13)	85(2)
C(1S)*	-3492(18)	-1027(11)	-436(8)	85(2)
C(2S)	-4648(16)	-1629(15)	-134(9)	85(2)
C(3S)	-4280(20)	-2762(15)	89(9)	85(2)
C(4S)	-2750(20)	-3293(12)	11(9)	85(2)
C(5S)	-1593(16)	-2691(13)	-290(8)	85(2)
C(6S)	-1965(15)	-1558(12)	-513(6)	85(2)
N(1S)	-740(20)	-958(17)	-843(10)	85(2)
O(1S)	-1309(19)	-110(13)	-1126(7)	85(2)
O(2S)	554(18)	-1474(17)	-828(9)	85(2)

***** Заселенность позиций C(17A), C(18A), C(29A), C(30A) 0.75; C(17B), C(18B), C(29B), C(30B) 0.25; C(19A), C(19B), C(20A), C(20B), C(27A), C(27B), C(28A), C(28B) 0.50. В ячейке анион $[Hg(SCN)_4]$ Hg(1)-N(4A) и растворитель C(1S)-O(2S) равновероятно смешаны.

Таблица П**12**.2.2. Координаты ($\times10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2\times10^3$) неводородных атомов в удвоенной ячейке **12** с учетом сверхструктуры.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(11)	7284(5)	5280(4)	163(1)	33(1)
S(12)	9627(5)	7164(4)	-3(1)	35(1)
S(13)	6728(5)	4261(4)	-548(1)	34(1)
S(14)	9060(5)	6129(3)	-712(1)	36(1)
S(15)	8083(5)	6304(4)	914(1)	44(1)
S(16)	10249(5)	8216(4)	738(1)	44(1)
S(17)	5677(6)	3483(5)	-1304(1)	54(1)
S(18)	8093(7)	5236(5)	-1473(1)	64(2)
C(11)	7604(17)	5335(12)	-233(3)	30(3)
C(12)	8645(17)	6167(13)	-318(3)	33(3)
C(13)	8570(18)	6491(16)	294(4)	39(4)
C(14)	8953(13)	6951(12)	611(3)	29(3)
C(15)	7618(16)	4958(11)	-844(3)	23(3)
C(16)	7169(18)	4650(13)	-1181(3)	33(3)
C(17)	8680(20)	7513(16)	1222(4)	53(4)
C(18)	10220(20)	8127(16)	1161(4)	53(4)
C(19)	5660(20)	3613(16)	-1715(4)	60(5)
C(20A)*	6750(30)	4620(20)	-1803(4)	44(6)
C(20B)*	7200(40)	4250(40)	-1796(7)	37(11)
S(21)	4498(5)	7818(4)	-40(1)	36(1)
S(22)	2028(5)	9751(4)	-205(1)	34(1)
S(23)	4975(5)	8827(4)	664(1)	39(1)
S(24)	2527(5)	10772(4)	502(1)	34(1)
S(25)	4025(5)	6750(4)	-784(1)	47(1)
S(26)	1716(5)	8732(4)	-959(1)	42(1)
S(27)	5079(7)	9686(5)	1428(1)	63(1)
S(28)	2619(6)	11561(5)	1266(1)	53(1)
C(21)	4012(16)	8812(12)	271(3)	30(3)
C(22)	2922(19)	9683(13)	198(3)	39(4)
C(23)	3143(16)	8488(12)	-349(3)	29(3)

Продолжение Таблицы П**12**.2.2.

C(24)	2963(15)	8034(12)	-653(3)	27(3)
C(25)	3755(16)	10033(12)	808(3)	31(3)
C(26)	3810(19)	10384(16)	1121(3)	43(4)
C(27A)*	3490(20)	6927(19)	-1213(3)	33(4)
C(28A)*	1750(20)	7472(18)	-1265(5)	38(6)
C(29A)*	4180(40)	10270(20)	1749(6)	65(8)
C(27B)*	2910(40)	6610(30)	-1192(5)	39(8)
C(28B)*	2210(40)	7790(20)	-1307(5)	31(7)
C(29B)*	4880(40)	10740(40)	1745(8)	67(13)
C(30)	3240(20)	11412(15)	1693(4)	53(4)
S(31)	348(5)	2808(4)	-38(1)	35(1)
S(32)	2694(5)	4694(3)	-203(1)	31(1)
S(33)	887(5)	3834(4)	666(1)	38(1)
S(34)	3245(5)	5701(3)	503(1)	31(1)
S(35)	-289(5)	1761(4)	-781(1)	45(1)
S(36)	1917(5)	3688(4)	-956(1)	43(1)
S(37)	1859(7)	4732(4)	1429(1)	63(1)
S(38)	4288(6)	6470(5)	1263(1)	58(1)
C(31)	1323(16)	3817(12)	273(3)	26(3)
C(32)	2384(16)	4666(12)	208(3)	27(3)
C(33)	1237(16)	3452(11)	-340(3)	22(3)
C(34)	1026(18)	3007(12)	-655(3)	38(4)
C(35)	2415(18)	4967(13)	820(3)	35(3)
C(36)	2809(17)	5356(13)	1110(3)	35(3)
C(37)	-180(20)	1796(17)	-1204(4)	66(5)
C(38A)*	1460(20)	2380(18)	-1246(5)	31(5)
C(39A)*	2690(30)	5820(20)	1752(5)	52(7)
C(40A)*	4370(30)	6330(20)	1687(4)	46(7)
C(38B)*	920(40)	2780(30)	-1313(5)	45(8)
C(39B)*	3490(40)	5200(30)	1747(7)	55(10)
C(40B)*	3860(40)	6520(20)	1677(4)	28(7)
S(41)	4966(5)	1140(3)	-701(1)	34(1)
S(42)	7449(5)	-784(4)	-537(1)	34(1)
S(43)	5461(5)	2168(3)	10(1)	32(1)
S(44)	7963(5)	235(4)	173(1)	32(1)
S(45)	4800(6)	256(4)	-1456(1)	54(1)
S(46)	7396(6)	-1547(5)	-1297(1)	53(1)
S(47)	5933(5)	3183(4)	759(1)	43(1)
S(48)	8293(5)	1225(4)	927(1)	43(1)
C(41)	5938(16)	1143(12)	-299(3)	31(3)
C(42)	7091(15)	263(12)	-231(3)	21(3)
C(43)	6181(18)	-41(14)	-838(3)	36(3)
C(44)	6143(16)	-387(12)	-1160(3)	28(3)
C(45)	6835(17)	1499(13)	304(3)	33(3)
C(46)	6998(18)	1920(13)	629(3)	34(3)
C(47A)*	5940(30)	-315(19)	-1772(5)	46(6)
C(48A)*	6450(30)	-1592(18)	-1711(4)	44(6)
C(47B)*	5300(30)	-720(20)	-1791(5)	26(6)
C(48B)*	7020(40)	-1260(30)	-1714(5)	48(9)
C(49)	6680(20)	3134(18)	1178(4)	68(5)
C(50)	8230(20)	2446(15)	1236(4)	57(4)
S(51)	3185(4)	5737(3)	5508(1)	31(1)
S(52)	867(5)	3854(4)	5668(1)	35(1)
S(53)	2681(4)	4709(3)	4799(1)	30(1)
S(54)	350(5)	2807(4)	4961(1)	35(1)
S(55)	4242(6)	6491(5)	6262(1)	60(2)
S(56)	1808(6)	4773(4)	6432(1)	54(1)
S(57)	1932(5)	3715(4)	4046(1)	42(1)
S(58)	-231(5)	1764(4)	4213(1)	45(1)
C(51)	2338(16)	4629(12)	5202(3)	27(3)
C(52)	1289(16)	3823(11)	5266(3)	25(3)

Продолжение Таблицы П**12**.2.2.

C(53)	2311(16)	5045(12)	5797(3)	25(3)
C(54)	2717(17)	5337(14)	6138(3)	36(4)
C(55)	1417(18)	3437(14)	4661(3)	32(3)
C(56)	1069(16)	3054(11)	4346(3)	29(3)
C(58A)*	3340(30)	5290(20)	6751(4)	39(6)
C(58B)*	2890(30)	5660(30)	6762(5)	26(7)
C(57)	4280(20)	6368(15)	6677(4)	64(5)
C(59)	1320(20)	2568(16)	3736(4)	57(5)
C(60)	-170(20)	1908(19)	3792(4)	65(5)
S(61)	7914(5)	238(4)	5162(1)	33(1)
S(62)	5430(5)	2144(3)	4993(1)	34(1)
S(63)	7463(5)	-772(4)	4452(1)	32(1)
S(64)	4978(5)	1135(4)	4289(1)	35(1)
S(65)	8233(5)	1283(4)	5917(1)	39(1)
S(66)	5864(5)	3224(4)	5731(1)	45(1)
S(67)	7439(5)	-1521(4)	3682(1)	46(1)
S(68)	4734(5)	206(4)	3534(1)	45(1)
C(61)	7052(18)	301(11)	4752(3)	31(3)
C(62)	5951(17)	1136(13)	4684(3)	37(3)
C(63)	6788(17)	1480(13)	5301(3)	33(3)
C(64)	6964(15)	1947(12)	5602(3)	27(3)
C(65)	6177(14)	-60(9)	4138(3)	26(3)
C(66)	6141(17)	-406(13)	3834(4)	31(3)
C(67)	7986(19)	2435(15)	6239(4)	59(4)
C(68A)*	6340(20)	3088(16)	6151(3)	27(4)
C(68B)*	7050(40)	3510(20)	6122(6)	36(8)
C(69)	6378(19)	-1593(13)	3265(3)	45(4)
C(70)	5700(20)	-409(13)	3190(3)	49(4)
S(71)	6748(5)	4240(3)	4453(1)	32(1)
S(72)	9057(5)	6142(4)	4290(1)	35(1)
S(73)	7258(5)	5272(4)	5160(1)	31(1)
S(74)	9570(5)	7171(4)	4995(1)	33(1)
S(75)	5653(6)	3489(4)	3697(1)	48(1)
S(76)	8109(6)	5200(4)	3523(1)	52(1)
S(77)	8022(5)	6296(4)	5912(1)	45(1)
S(78)	10177(5)	8234(4)	5739(1)	45(1)
C(71)	7581(16)	5268(13)	4756(3)	26(3)
C(72)	8658(16)	6174(13)	4678(3)	30(3)
C(73)	7587(18)	4981(12)	4130(3)	34(3)
C(74)	7169(18)	4599(12)	3843(4)	35(4)
C(75)	8709(19)	6509(13)	5299(4)	29(3)
C(76)	8915(16)	6983(13)	5608(3)	33(3)
C(77)	5922(17)	3450(12)	3275(3)	43(3)
C(78A)*	6430(30)	4666(16)	3191(5)	54(5)
C(79A)*	8540(20)	7583(15)	6210(4)	30(4)
C(80A)*	10210(20)	8144(17)	6171(3)	28(4)
C(78B)*	7260(90)	4180(60)	3163(9)	60(20)
C(79B)*	9130(40)	7160(20)	6262(5)	23(7)
C(80B)*	9560(50)	8360(30)	6144(6)	35(9)
S(81)	4516(5)	7837(3)	4977(1)	34(1)
S(82)	1988(5)	9765(4)	4804(1)	31(1)
S(83)	4949(5)	8862(4)	5684(1)	37(1)
S(84)	2457(5)	10791(4)	5511(1)	33(1)
S(85)	4077(5)	6762(4)	4247(1)	42(1)
S(86)	1739(5)	8704(4)	4049(1)	41(1)
S(87)	5130(6)	9763(4)	6435(1)	51(1)
S(88)	2507(6)	11555(4)	6278(1)	50(1)
C(81)	4021(15)	8844(12)	5277(3)	29(3)
C(82)	2844(14)	9748(13)	5201(3)	26(3)
C(83)	3127(17)	8478(11)	4676(3)	28(3)
C(84)	3023(17)	8049(13)	4352(3)	34(3)

Продолжение Таблицы П**12**.2.2.

C(85)	3686(18)	10069(14)	5810(3)	37(4)
C(86)	3723(18)	10421(14)	6142(3)	37(4)
C(87)	3480(20)	6816(18)	3815(4)	64(5)
C(88)	1863(16)	7453(13)	3757(3)	41(3)
C(89A)*	3970(30)	10314(17)	6762(4)	44(5)
C(90A)*	3550(30)	11633(18)	6687(4)	40(6)
C(89B)*	4630(30)	10720(30)	6780(5)	32(7)
C(90B)*	2940(40)	11310(40)	6705(5)	47(9)
Hg(1)	323(1)	8074(1)	2559(1)	51(1)
S(1)	227(6)	9631(5)	3055(1)	69(1)
C(1)	1441(18)	10773(14)	2982(4)	51(3)
N(1)	2420(20)	11490(18)	2952(5)	105(2)
S(2)	-2067(5)	8475(5)	2113(1)	66(1)
C(2)	-1118(18)	9385(13)	1916(3)	52(3)
N(2)	-510(20)	10037(18)	1782(5)	105(2)
S(3)	2964(6)	8598(4)	2354(1)	73(1)
C(3)	4190(20)	7528(15)	2459(4)	63(4)
N(3)	5070(20)	6688(16)	2534(5)	105(2)
S(4)	-473(6)	6137(4)	2768(1)	79(2)
C(4)	1209(18)	5664(14)	2981(4)	63(4)
N(4)	2510(20)	5478(15)	3142(4)	105(2)
C(11S)	7990(9)	3401(8)	2237(2)	45(3)
C(12S)	6408(10)	3880(7)	2253(2)	58(3)
C(13S)	5249(9)	3263(9)	2399(2)	64(4)
C(14S)	5671(12)	2168(9)	2529(2)	64(4)
C(15S)	7253(13)	1689(8)	2513(3)	79(5)
C(16S)	8412(10)	2306(9)	2367(3)	84(4)
N(11)	9242(19)	4043(13)	2062(3)	75(4)
O(11)	8681(16)	4846(12)	1906(3)	93(4)
O(12)	10500(20)	3661(15)	2068(4)	111(5)
Hg(2)	-386(2)	11909(1)	7402(1)	43(1)
S(5)	-341(10)	10322(8)	6886(2)	57(2)
C(5)	-1540(30)	9200(20)	6992(6)	48(3)
N(5)	-2390(70)	8390(50)	7091(16)	105(2)
S(6)	2104(8)	11482(7)	7854(2)	50(2)
C(6)	1060(30)	10430(20)	8025(6)	48(3)
N(6)	610(50)	9410(20)	8102(11)	105(2)
S(7)	-3038(10)	11375(9)	7612(2)	72(2)
C(7)	-4280(30)	12536(18)	7493(6)	48(3)
N(7)	-5020(40)	13500(20)	7416(9)	105(2)
S(8)	461(12)	13851(10)	7196(2)	76(3)
C(8)	-1530(20)	14090(20)	7024(6)	48(3)
N(8)	-3070(20)	14090(30)	6923(7)	105(2)
C(21S)	1980(20)	6477(17)	7741(5)	119(4)
C(22S)	3490(30)	5950(20)	7686(6)	119(4)
C(23S)	4600(30)	6570(30)	7528(7)	119(4)
C(24S)	4200(30)	7710(30)	7426(7)	119(4)
C(25S)	2690(40)	8240(20)	7480(8)	119(4)
C(26S)	1580(30)	7619(19)	7638(7)	119(4)
N(21)	660(40)	5770(30)	7957(9)	119(4)
O(21)	1160(30)	4710(20)	7955(6)	119(4)
O(22)	-550(30)	6470(30)	7945(7)	119(4)
Hg(3)	321(2)	8066(2)	7559(1)	75(1)
S(9A)	231(15)	9718(10)	8101(4)	87(4)
C(9A)	1460(30)	10700(20)	7948(7)	48(3)
N(9A)	1340(50)	11780(30)	7875(10)	105(2)
S(9B)	-2130(20)	8485(17)	7082(6)	84(4)
C(9B)	-1150(30)	9610(20)	6927(6)	48(3)
N(9B)	60(50)	10360(40)	6987(13)	105(2)
S(9C)	3060(15)	8506(13)	7365(5)	143(7)
C(9C)	4500(30)	7470(20)	7484(7)	48(3)

Продолжение Таблицы П**12**.2.2.

N(9C)	4740(50)	6440(30)	7588(10)	105(2)
S(9D)	-610(15)	6193(15)	7777(3)	107(5)
C(9D)	1340(20)	5840(30)	7939(7)	48(3)
N(9D)	2060(50)	5010(30)	8091(10)	105(2)
C(31S)	-2330(30)	13340(20)	7213(5)	119(4)
C(32S)	-3990(30)	13650(20)	7231(7)	119(4)
C(33S)	-5000(30)	12910(30)	7381(8)	119(4)
C(34S)	-4350(40)	11870(30)	7513(7)	119(4)
C(35S)	-2690(40)	11560(30)	7495(8)	119(4)
C(36S)	-1680(30)	12300(20)	7345(7)	119(4)
N(31)	-1060(40)	14300(30)	7047(10)	119(4)
O(31)	-2090(40)	14870(30)	6870(8)	119(4)
O(32)	300(40)	13780(40)	7081(9)	119(4)

***** Заселенность позиций C(20A), C(27A), C(28A), C(89A), C(90A) 0.65; C(20B), C(27B), C(28B), C(89B), C(90B) 0.35; C(29A), C(38A), C(39A), C(40A), C(47A), C(48A), C(58A) 0.60; C(29B), C(38B), C(39B), C(40B), C(47B), C(48B), C(58B) 0.40; C(68A), C(79A), C(80A) 0.70; C(68B), C(79B), C(80B) 0.30; C(78A) 0.80; C(78B) 0.20. В ячейке анионы [$Hg(SCN)_4$] Hg(2)-N(8), Hg(3)-N(9D) и растворители C(21S)-O(22), C(31S)-O(32) смешаны с заселенностью 0.56, 0.44 и 0.56, 0.44, соответственно.

Таблица П**12**.3.1. Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BDH-TTP и анионе [$Hg(SCN)_4$] для усредненной структуры **12**.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(11)-C(11)	1.739(6)	S(24)-C(22)	1.724(6)
S(11)-C(13)	1.765(7)	S(24)-C(25)	1.765(6)
S(12)-C(12)	1.735(6)	S(25)-C(24)	1.742(7)
S(12)-C(13)	1.764(6)	S(25)-C(27)	1.795(8)
S(13)-C(11)	1.720(6)	S(25)-C(27B)	1.803(8)
S(13)-C(15)	1.764(7)	S(26)-C(24)	1.735(7)
S(14)-C(12)	1.733(6)	S(26)-C(28)	1.789(8)
S(14)-C(15)	1.759(7)	S(26)-C(28B)	1.796(8)
S(15)-C(14)	1.740(7)	S(27)-C(26)	1.740(6)
S(15)-C(17)	1.787(7)	S(27)-C(29B)	1.794(8)
S(15)-C(17B)	1.791(8)	S(27)-C(29)	1.799(7)
S(16)-C(14)	1.745(7)	S(28)-C(26)	1.753(7)
S(16)-C(18B)	1.787(8)	S(28)-C(30)	1.785(7)
S(16)-C(18)	1.800(7)	S(28)-C(30B)	1.796(9)
S(17)-C(16)	1.743(7)	C(21)-C(22)	1.349(9)
S(17)-C(19)	1.783(8)	C(23)-C(24)	1.362(9)
S(17)-C(19B)	1.789(8)	C(25)-C(26)	1.345(9)
S(18)-C(16)	1.736(7)	C(27)-C(28)	1.513(13)
S(18)-C(20B)	1.787(8)	C(27B)-C(28B)	1.556(13)
S(18)-C(20)	1.788(8)	C(29)-C(30)	1.520(11)
C(11)-C(12)	1.345(9)	C(29B)-C(30B)	1.527(15)
C(13)-C(14)	1.350(9)	Hg(1)-S(3A)	2.498(6)
C(15)-C(16)	1.346(9)	Hg(1)-S(1A)	2.509(5)
C(17)-C(18)	1.539(11)	Hg(1)-S(2A)	2.570(5)
C(17B)-C(18B)	1.533(15)	Hg(1)-S(4A)	2.597(5)
C(19)-C(20)	1.521(13)	S(1A)-C(1A)	1.605(18)
C(19B)-C(20B)	1.540(13)	S(2A)-C(2A)	1.577(19)
S(21)-C(21)	1.736(6)	S(3A)-C(3A)	1.606(18)
S(21)-C(23)	1.758(6)	S(4A)-C(4A)	1.600(19)
S(22)-C(22)	1.742(6)	C(1A)-N(1A)	1.185(19)
S(22)-C(23)	1.760(7)	C(2A)-N(2A)	1.19(2)
S(23)-C(21)	1.728(6)	C(3A)-N(3A)	1.204(19)
S(23)-C(25)	1.761(6)	C(4A)-N(4A)	1.17(2)

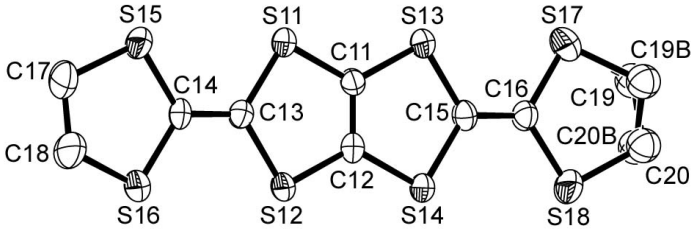
Таблица П**12**.3.2. Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BDH-TTP и анионах $[Hg(SCN)_4]$ для удвоенной ячейки **12** с учетом сверхструктуры.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(11)-C(13)	1.699(18)	S(34)-C(32)	1.689(14)
S(11)-C(11)	1.714(13)	S(34)-C(35)	1.808(14)
S(12)-C(12)	1.746(15)	S(35)-C(34)	1.738(14)
S(12)-C(13)	1.804(18)	S(35)-C(37)	1.783(18)
S(13)-C(15)	1.741(12)	S(36)-C(34)	1.749(16)
S(13)-C(11)	1.769(13)	S(36)-C(38A)	1.814(17)
S(14)-C(12)	1.720(13)	S(36)-C(38B)	1.81(2)
S(14)-C(15)	1.741(13)	S(37)-C(39B)	1.781(18)
S(15)-C(14)	1.728(11)	S(37)-C(39A)	1.791(16)
S(15)-C(17)	1.796(17)	S(37)-C(36)	1.805(13)
S(16)-C(14)	1.746(13)	S(38)-C(36)	1.733(14)
S(16)-C(18)	1.782(17)	S(38)-C(40A)	1.785(15)
S(17)-C(19)	1.735(16)	S(38)-C(40B)	1.807(16)
S(17)-C(16)	1.758(15)	C(31)-C(32)	1.337(17)
S(18)-C(16)	1.685(14)	C(33)-C(34)	1.356(17)
S(18)-C(20A)	1.727(15)	C(35)-C(36)	1.250(19)
S(18)-C(20B)	1.738(19)	C(37)-C(38A)	1.505(16)
C(11)-C(12)	1.344(19)	C(37)-C(38B)	1.538(18)
C(13)-C(14)	1.38(2)	C(39A)-C(40A)	1.530(17)
C(15)-C(16)	1.417(16)	C(39B)-C(40B)	1.546(19)
C(17)-C(18)	1.48(2)	S(41)-C(43)	1.741(16)
C(19)-C(20A)	1.516(16)	S(41)-C(41)	1.750(13)
C(19)-C(20B)	1.522(18)	S(42)-C(42)	1.710(13)
S(21)-C(21)	1.722(14)	S(42)-C(43)	1.765(15)
S(21)-C(23)	1.780(13)	S(43)-C(41)	1.735(12)
S(22)-C(22)	1.746(15)	S(43)-C(45)	1.749(16)
S(22)-C(23)	1.771(14)	S(44)-C(42)	1.739(12)
S(23)-C(21)	1.717(13)	S(44)-C(45)	1.762(15)
S(23)-C(25)	1.775(13)	S(45)-C(44)	1.726(14)
S(24)-C(22)	1.742(14)	S(45)-C(47A)	1.785(15)
S(24)-C(25)	1.761(14)	S(45)-C(47B)	1.788(16)
S(25)-C(24)	1.749(14)	S(46)-C(44)	1.744(13)
S(25)-C(27B)	1.811(17)	S(46)-C(48B)	1.779(17)
S(25)-C(27A)	1.812(14)	S(46)-C(48A)	1.786(15)
S(26)-C(24)	1.746(13)	S(47)-C(46)	1.730(15)
S(26)-C(28B)	1.811(16)	S(47)-C(49)	1.778(17)
S(26)-C(28A)	1.817(15)	S(48)-C(46)	1.739(15)
S(27)-C(29A)	1.70(2)	S(48)-C(50)	1.797(16)
S(27)-C(29B)	1.72(2)	C(41)-C(42)	1.366(18)
S(27)-C(26)	1.756(17)	C(43)-C(44)	1.368(19)
S(28)-C(26)	1.739(18)	C(45)-C(46)	1.387(18)
S(28)-C(30)	1.806(15)	C(47A)-C(48A)	1.503(17)
C(21)-C(22)	1.33(2)	C(47B)-C(48B)	1.514(18)
C(23)-C(24)	1.319(18)	C(49)-C(50)	1.47(2)
C(25)-C(26)	1.330(19)	S(52)-C(53)	1.756(13)
C(27A)-C(28A)	1.521(17)	S(53)-C(55)	1.746(15)
C(29A)-C(30)	1.488(17)	S(53)-C(51)	1.754(13)
C(27B)-C(28B)	1.513(19)	S(54)-C(52)	1.718(13)
C(29B)-C(30)	1.521(19)	S(54)-C(55)	1.798(15)
S(31)-C(33)	1.735(12)	S(55)-C(57)	1.744(17)
S(31)-C(31)	1.741(13)	S(55)-C(54)	1.766(14)
S(32)-C(32)	1.769(13)	S(56)-C(54)	1.674(15)
S(32)-C(33)	1.809(12)	S(56)-C(58A)	1.747(16)
S(33)-C(31)	1.725(13)	S(56)-C(58B)	1.756(17)
S(33)-C(35)	1.773(14)	S(57)-C(56)	1.724(12)

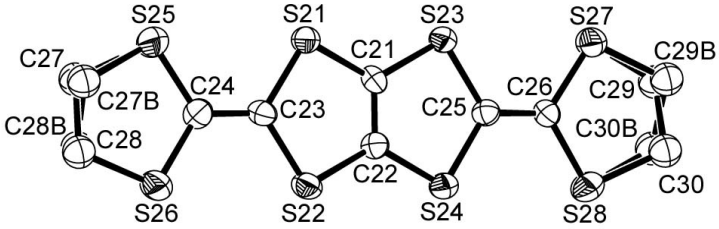
Продолжение Таблицы П**12**.3.2.

S(57)-C(59)	1.757(16)	S(81)-C(81)	1.701(12)
S(58)-C(56)	1.773(13)	S(81)-C(83)	1.757(14)
S(58)-C(60)	1.786(18)	S(82)-C(82)	1.709(12)
C(51)-C(52)	1.294(18)	S(82)-C(83)	1.781(13)
C(53)-C(54)	1.430(15)	S(83)-C(81)	1.761(12)
C(55)-C(56)	1.342(18)	S(83)-C(85)	1.771(16)
C(58A)-C(57)	1.483(16)	S(84)-C(82)	1.725(14)
C(58B)-C(57)	1.462(17)	S(84)-C(85)	1.731(14)
C(59)-C(60)	1.46(2)	S(85)-C(84)	1.717(15)
S(61)-C(63)	1.751(15)	S(85)-C(87)	1.809(18)
S(61)-C(61)	1.764(14)	S(86)-C(84)	1.726(15)
S(62)-C(62)	1.737(16)	S(86)-C(88)	1.783(14)
S(62)-C(63)	1.775(13)	S(87)-C(86)	1.755(15)
S(63)-C(61)	1.726(12)	S(87)-C(89B)	1.812(17)
S(63)-C(65)	1.789(13)	S(87)-C(89A)	1.827(15)
S(64)-C(62)	1.724(15)	S(88)-C(86)	1.704(15)
S(64)-C(65)	1.767(11)	S(88)-C(90A)	1.793(15)
S(65)-C(64)	1.760(13)	S(88)-C(90B)	1.813(17)
S(65)-C(67)	1.811(17)	C(81)-C(82)	1.404(18)
S(66)-C(64)	1.757(14)	C(83)-C(84)	1.392(18)
S(66)-C(68A)	1.761(14)	C(85)-C(86)	1.409(18)
S(66)-C(68B)	1.78(2)	C(87)-C(88)	1.49(2)
S(67)-C(66)	1.756(17)	C(89A)-C(90A)	1.543(17)
S(67)-C(69)	1.827(14)	C(89B)-C(90B)	1.511(19)
S(68)-C(66)	1.748(16)	Hg(1)-S(3)	2.487(4)
S(68)-C(70)	1.814(14)	Hg(1)-S(4)	2.489(4)
C(61)-C(62)	1.302(19)	Hg(1)-S(2)	2.554(4)
C(63)-C(64)	1.312(18)	Hg(1)-S(1)	2.595(4)
C(65)-C(66)	1.295(19)	S(1)-C(1)	1.667(15)
C(67)-C(68B)	1.483(18)	C(1)-N(1)	1.15(2)
C(67)-C(68A)	1.526(15)	S(2)-C(2)	1.605(15)
C(69)-C(70)	1.460(18)	C(2)-N(2)	1.10(2)
S(71)-C(71)	1.697(14)	S(3)-C(3)	1.595(16)
S(71)-C(73)	1.837(14)	C(3)-N(3)	1.201(19)
S(72)-C(72)	1.695(13)	S(4)-C(4)	1.627(16)
S(72)-C(73)	1.770(15)	C(4)-N(4)	1.19(2)
S(73)-C(71)	1.740(13)	Hg(2)-S(8)	2.501(11)
S(73)-C(75)	1.804(15)	Hg(2)-S(7)	2.507(8)
S(74)-C(72)	1.734(14)	Hg(2)-S(6)	2.629(7)
S(74)-C(75)	1.737(14)	Hg(2)-S(5)	2.676(9)
S(75)-C(74)	1.744(15)	S(5)-C(5)	1.694(13)
S(75)-C(77)	1.801(13)	C(5)-N(5)	1.259(19)
S(76)-C(74)	1.797(12)	S(6)-C(6)	1.693(13)
S(76)-C(78B)	1.86(3)	C(6)-N(6)	1.258(19)
S(76)-C(78A)	1.857(18)	S(7)-C(7)	1.693(13)
S(77)-C(76)	1.764(16)	C(7)-N(7)	1.265(18)
S(77)-C(79B)	1.808(17)	S(8)-C(8)	1.694(13)
S(77)-C(79A)	1.823(13)	C(8)-N(8)	1.261(18)
S(78)-C(76)	1.721(14)	Hg(3)-S(9D)	2.481(15)
S(78)-C(80A)	1.816(13)	Hg(3)-S(9C)	2.514(11)
S(78)-C(80B)	1.826(17)	Hg(3)-S(9B)	2.67(2)
C(71)-C(72)	1.410(18)	Hg(3)-S(9A)	2.803(16)
C(73)-C(74)	1.240(19)	S(9A)-C(9A)	1.685(14)
C(75)-C(76)	1.34(2)	C(9A)-N(9A)	1.257(19)
C(77)-C(78A)	1.485(15)	S(9B)-C(9B)	1.690(14)
C(77)-C(78B)	1.49(2)	C(9B)-N(9B)	1.259(19)
C(79A)-C(80A)	1.517(16)	S(9C)-C(9C)	1.685(14)
C(79B)-C(80B)	1.508(19)	C(9C)-N(9C)	1.249(19)
		S(9D)-C(9D)	1.683(14)
		C(9D)-N(9D)	1.253(19)

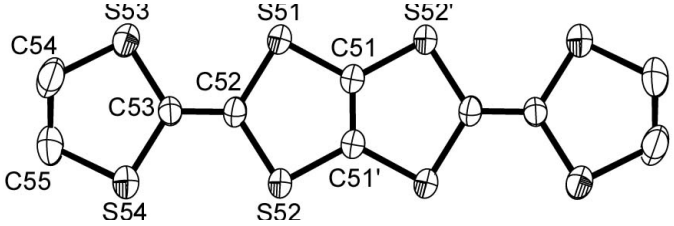
α′-(BDH-TTP)$_6$[Hg(SCN)$_4$][Hg(SCN)$_3$] **(13)**



I



II



V

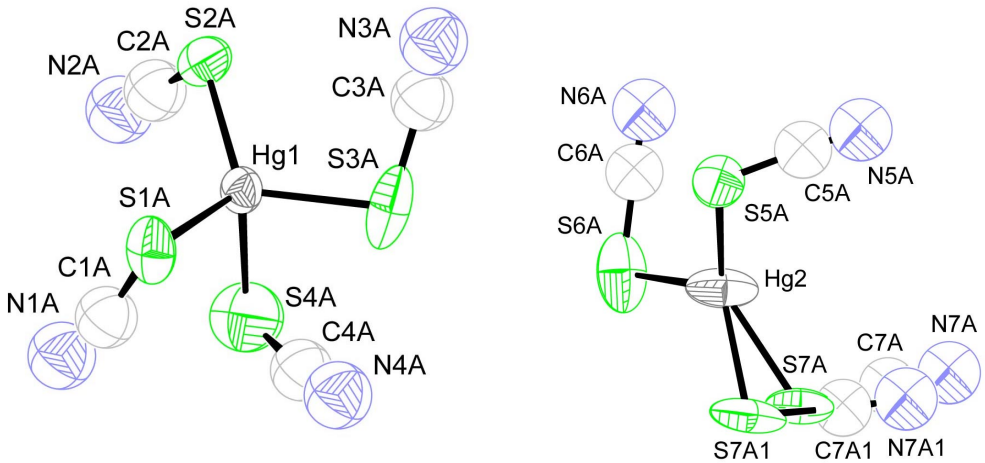


Рис. П**13**. Обозначения атомов в BDH-TTP I, II, V (III, IV аналогичны I; VI, VII, VIII аналогичны V) и анионах [Hg(SCN)$_4$] и [Hg(SCN)$_3$] в структуре **13** при комнатной температуре. Атомы в BDH-TTP и анионах [Hg(SCN)$_4$] и [Hg(SCN)$_3$] в структуре **13** при низкой температуре обозначены таким же образом

Таблица П**13**.1. Кристаллографические данные и параметры эксперимента для кристаллов α′-(BDH-TTP)$_6$[Hg(SCN)$_4$][Hg(SCN)$_3$] (**13**).

Характеристика		
Дифрактометр	Bruker X8APEX	
Температура, K	293(2)	100(2)
Брутто-формула	$C_{68}H_{48}Hg_2N_8S_{56}$	$C_{68}H_{48}Hg_2N_8S_{56}$
Молекулярный вес	3173.68	3173.68
Сингония	Триклинная	Триклинная
a, Å	11.760(2)	11.6116(6)
b, Å	12.579(2)	22.884(1)
c, Å	38.149(1)	38.985(2)
α, °	91.16(2)	76.743(3)
β, °	95.25(3)	85.327(3)
γ, °	113.47(2)	85.722(3)
V, Å^3	5145(2)	10032.8(9)
Пр. группа, *Z*	*P* $\bar{1}$, 2	*P* $\bar{1}$, 4
$\rho_{выч.}$, г/см^3	2.049	2.063
μ, см$^{-1}$	41.66	42.50
F (000)	3136	6156
Диапазон Θ, °	0.54÷27.25	1.61÷36.73
Диапазон индексов	-12≤*h*≤14	-19≤*h*≤19
	-15≤*k*≤14	-38≤*k*≤38
	-47≤*l*≤47	-65≤*l*≤65
Число измеренных рефлексов	50143	409813
Число независимых рефлексов	19566	98647
R_{int}, R_σ	0.033, 0.060	0.0709, 0.0802
Число уточняемых параметров	1084	2329
Добротность уточнения по F^2	1.092	1.130
R – фактор [$I > 2\sigma(I)$]	0.069	0.068

Таблица П**13**.2.1. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **13** при комнатной температуре.

Атом	*x*/*a*	*y*/*b*	*z*/*c*	$U_{экв.}$
S(11)	-1011(2)	5711(2)	160(1)	39(1)
S(12)	1480(2)	7631(2)	113(1)	39(1)
S(13)	-198(2)	5456(2)	926(1)	39(1)
S(14)	2306(2)	7346(2)	874(1)	39(1)
S(15)	-1821(2)	5973(2)	-651(1)	45(1)
S(16)	616(2)	7938(2)	-681(1)	51(1)
S(17)	606(2)	5252(2)	1733(1)	59(1)
S(18)	3106(2)	7085(2)	1693(1)	55(1)
C(11)	71(7)	6092(6)	525(2)	33(2)
C(12)	1207(7)	6973(7)	507(2)	36(2)
C(13)	-11(7)	6740(6)	-100(2)	32(2)
C(14)	-366(7)	6852(6)	-437(2)	33(2)
C(15)	1284(7)	6332(6)	1138(2)	34(2)
C(16)	1623(7)	6244(7)	1477(2)	37(2)
C(17)	-1646(8)	6678(8)	-1057(2)	66(3)
C(18)	-314(7)	7428(10)	-1094(2)	81(4)
C(19)*	1541(13)	5790(20)	2147(3)	53(1)
C(20)*	2884(17)	6243(18)	2074(4)	53(1)
C(19B)*	1799(10)	5341(10)	2075(3)	53(1)
C(20B)*	2742(13)	6585(10)	2122(2)	53(1)
S(21)	4763(2)	6300(2)	1007(1)	42(1)
S(22)	7133(2)	6279(2)	790(1)	40(1)
S(23)	3955(2)	6600(2)	247(1)	41(1)
S(24)	6310(2)	6545(2)	28(1)	39(1)
S(25)	5695(2)	6097(3)	1814(1)	67(1)
S(26)	8052(2)	6118(2)	1603(1)	55(1)
S(27)	3114(2)	6923(2)	-557(1)	47(1)
S(28)	5400(2)	6763(2)	-774(1)	46(1)
C(21)	4998(7)	6436(7)	567(2)	37(2)
C(22)	6067(7)	6426(7)	471(2)	34(2)
C(23)	6225(7)	6251(6)	1135(2)	36(2)
C(24)	6604(8)	6171(7)	1474(2)	42(2)
C(25)	4866(7)	6650(6)	-97(2)	35(2)
C(26)	4505(7)	6758(6)	-433(2)	34(2)
C(27)*	6676(11)	5772(16)	2142(4)	53(1)
C(28)*	8018(13)	6349(16)	2066(2)	53(1)
C(27B)*	6945(12)	6360(15)	2157(3)	53(1)
C(28B)*	7724(17)	5735(15)	2043(3)	53(1)
C(29)*	3232(10)	6845(11)	-1021(2)	53(1)
C(30)*	4571(9)	7263(10)	-1102(3)	53(1)
C(29B)*	3330(30)	7230(30)	-1007(4)	53(1)
C(30B)*	4270(20)	6790(30)	-1119(6)	53(1)
S(31)	1340(2)	6620(2)	5000(1)	40(1)
S(32)	-1030(2)	6658(2)	5218(1)	40(1)
S(33)	571(2)	7006(2)	4246(1)	40(1)
S(34)	-1803(2)	7023(2)	4459(1)	39(1)
S(35)	2109(2)	6136(2)	5787(1)	42(1)
S(36)	-130(2)	6353(2)	6020(1)	41(1)
S(37)	-337(2)	7198(2)	3437(1)	49(1)
S(38)	-2723(2)	7132(2)	3644(1)	50(1)
C(31)	299(7)	6782(6)	4678(2)	34(2)
C(32)	-782(7)	6808(7)	4778(2)	37(2)

Продолжение Таблицы П**13**.2.1.

C(33)	405(7)	6536(6)	5341(2)	33(2)
C(34)	751(7)	6370(6)	5674(2)	35(2)
C(35)	-886(7)	7052(6)	4118(2)	34(2)
C(36)	-1272(7)	7112(6)	3773(2)	35(2)
C(37)	2064(7)	6253(9)	6254(2)	60(3)
C(38)	733(6)	5850(8)	6337(2)	48(2)
C(39)*	-1384(9)	7371(13)	3094(3)	53(1)
C(40)*	-2697(11)	6765(13)	3189(2)	53(1)
C(39B)*	-1598(14)	6828(19)	3092(4)	53(1)
C(40B)*	-2420(20)	7420(20)	3196(3)	53(1)
S(41)	3592(2)	2438(2)	4924(1)	37(1)
S(42)	6098(2)	4335(2)	4875(1)	38(1)
S(43)	4464(2)	2060(2)	5673(1)	39(1)
S(44)	6964(2)	3947(2)	5621(1)	38(1)
S(45)	2799(2)	2689(2)	4109(1)	42(1)
S(46)	5230(2)	4670(2)	4082(1)	45(1)
S(47)	5249(2)	2016(2)	6510(1)	50(1)
S(48)	7740(2)	3810(2)	6440(1)	47(1)
C(41)	4707(7)	2795(6)	5285(2)	34(2)
C(42)	5838(7)	3642(6)	5264(2)	34(2)
C(43)	4611(7)	3465(6)	4662(2)	30(2)
C(44)	4247(7)	3576(6)	4326(2)	33(2)
C(45)	5934(7)	2964(6)	5886(2)	33(2)
C(46)	6266(7)	2944(6)	6235(2)	33(2)
C(47)	2938(8)	3513(8)	3729(2)	65(3)
C(48)	4288(7)	4153(8)	3670(2)	60(3)
C(49)*	6186(13)	2731(19)	6910(3)	53(1)
C(50)*	7522(16)	3060(20)	6839(4)	53(1)
C(49B)*	6363(11)	2407(11)	6892(3)	53(1)
C(50B)*	7405(13)	3585(11)	6886(2)	53(1)
S(51)	1662(2)	761(2)	359(1)	41(1)
S(52)	-821(2)	-1195(2)	385(1)	40(1)
S(53)	2386(2)	535(2)	1176(1)	53(1)
S(54)	-11(2)	-1481(2)	1193(1)	48(1)
C(51)	560(7)	448(7)	-5(2)	36(2)
C(52)	631(7)	-296(6)	609(2)	33(2)
C(53)	969(7)	-391(6)	952(2)	33(2)
C(54)	2218(8)	-274(8)	1556(2)	67(3)
C(55)	874(8)	-898(9)	1615(2)	63(3)
S(61)	5747(2)	119(2)	-494(1)	41(1)
S(62)	3495(2)	339(2)	-254(1)	42(1)
S(63)	4693(2)	249(2)	-1299(1)	53(1)
S(64)	2582(2)	639(2)	-1043(1)	49(1)
C(61)	5507(7)	-59(7)	-55(2)	37(2)
C(62)	4337(7)	276(7)	-605(2)	37(2)
C(63)	3927(7)	376(6)	-945(2)	35(2)
C(64)	3771(7)	690(9)	-1621(2)	59(3)
C(65)	2508(8)	438(10)	-1505(2)	65(3)
S(71)	774(2)	97(2)	4512(1)	39(1)
S(72)	-1592(2)	151(2)	4725(1)	37(1)
S(73)	-101(2)	365(2)	3709(1)	45(1)
S(74)	-2384(2)	526(2)	3927(1)	43(1)
C(71)	545(7)	-10(7)	4948(2)	36(2)
C(72)	-629(7)	226(6)	4386(2)	32(2)
C(73)	-997(7)	348(6)	4049(2)	33(2)
C(74)	-981(7)	836(7)	3389(2)	46(2)
C(75)	-2323(7)	345(9)	3463(2)	59(3)
S(81)	4168(2)	-1155(2)	5394(1)	40(1)
S(82)	6681(2)	739(2)	5351(1)	38(1)
S(83)	4980(2)	-1378(2)	6209(1)	44(1)
S(84)	7421(2)	570(2)	6173(1)	44(1)

Продолжение Таблицы П**13**.2.1.

C(81)	4437(7)	-429(6)	5011(2)	33(2)
C(82)	5642(7)	-261(7)	5611(2)	35(2)
C(83)	5962(7)	-349(6)	5956(2)	35(2)
C(84)	5903(7)	-762(8)	6625(2)	51(2)
C(85)	7259(7)	-245(8)	6560(2)	53(2)
Hg(1)	-1139(1)	1826(1)	2432(1)	62(1)
S(1A)	-1693(3)	2607(3)	1874(1)	92(1)
C(1A)	-3020(12)	2602(14)	1935(4)	114(2)
N(1A)	-4090(13)	2392(12)	1943(4)	135(2)
S(2A)	-1392(3)	-232(3)	2428(1)	82(1)
C(2A)	-2802(12)	-879(14)	2538(4)	114(2)
N(2A)	-3777(12)	-1336(13)	2607(4)	135(2)
S(3A)	770(4)	3228(3)	2816(1)	117(2)
C(3A)	1822(14)	2419(13)	2819(4)	114(2)
N(3A)	2315(13)	1926(12)	2805(4)	135(2)
S(4A)	-2564(5)	2439(5)	2823(1)	148(2)
C(4A)	-1498(13)	4006(11)	2767(4)	114(2)
N(4A)	-756(13)	4924(12)	2731(4)	135(2)
Hg(2)	4029(1)	2050(1)	2411(1)	99(1)
S(5A)	3285(3)	2930(3)	1905(1)	90(1)
C(5A)	1770(12)	2336(13)	1922(4)	114(2)
N(5A)	740(12)	1892(12)	1908(4)	135(2)
S(6A)	5558(4)	3640(4)	2836(1)	125(2)
C(6A)	4688(13)	4563(12)	2768(4)	114(2)
N(6A)	4120(13)	5109(12)	2712(4)	135(2)
S(7A)*	3607(9)	-117(8)	2448(2)	88(3)
C(7A)*	2110(20)	-860(30)	2508(14)	114(2)
N(7A)*	1090(20)	-1370(30)	2559(8)	135(2)
S(7A1)*	4458(10)	324(9)	2392(3)	116(4)
C(7A1)*	2950(20)	-610(30)	2474(12)	114(2)
N(7A1)*	1920(20)	-1200(30)	2514(13)	135(2)

* Заселенность позиций C(19), C(20), C(39B), C(40B), C(49), C(50) 0.40; C(19B), C(20B), C(39), C(40), C(49B), C(50B) 0.60; C(27), C(28), C(27B), C(28B), S(7A), C(7A), N(7A), S(7A1), C(7A1), N(7A1) 0.50; C(29), C(30) 0.75; C(29B), C(30B) 0.25.

Таблица П**13**.2.2. Координаты ($\times 10^4$) и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($Å^2 \times 10^3$) неводородных атомов в структуре **13** при низкой температуре.

Атом	*x/a*	*y/b*	*z/c*	$U_{экв.}$
S(1)	10119(1)	1249(1)	5084(1)	10(1)
S(2)	8528(1)	260(1)	5135(1)	10(1)
S(3)	9423(1)	1801(1)	4330(1)	11(1)
S(4)	7856(1)	804(1)	4382(1)	10(1)
S(5)	10623(1)	734(1)	5906(1)	11(1)
S(6)	9176(1)	-295(1)	5936(1)	12(1)
S(7)	9040(1)	2214(1)	3481(1)	13(1)
S(8)	7330(1)	1295(1)	3571(1)	11(1)
C(1)	9371(4)	1247(2)	4717(1)	9(1)
C(2)	8649(4)	790(2)	4741(1)	9(1)
C(3)	9492(4)	602(2)	5346(1)	9(1)
C(4)	9731(4)	376(2)	5687(1)	8(1)
C(5)	8519(4)	1436(2)	4114(1)	10(1)

Продолжение Таблицы П**13**.2.2.

C(6)	8333(3)	1624(2)	3765(1)	8(1)
C(7)	10758(4)	104(2)	6284(1)	13(1)
C(8)	9632(4)	-204(2)	6356(1)	14(1)
C(9)	8162(5)	2249(2)	3110(1)	17(1)
C(10)	7797(4)	1624(2)	3120(1)	15(1)
S(11)	7193(1)	4150(1)	5625(1)	11(1)
S(12)	5566(1)	3178(1)	5679(1)	12(1)
S(13)	6485(1)	4717(1)	4877(1)	11(1)
S(14)	4866(1)	3741(1)	4929(1)	10(1)
S(15)	7625(1)	3676(1)	6453(1)	14(1)
S(16)	6018(1)	2714(1)	6512(1)	14(1)
S(17)	5806(1)	5290(1)	4083(1)	12(1)
S(18)	4342(1)	4271(1)	4108(1)	11(1)
C(11)	6368(4)	4180(2)	5269(1)	10(1)
C(12)	5632(4)	3732(2)	5292(1)	10(1)
C(13)	6506(4)	3530(2)	5895(1)	10(1)
C(14)	6685(4)	3334(2)	6242(1)	10(1)
C(15)	5503(4)	4386(2)	4667(1)	9(1)
C(16)	5245(4)	4618(2)	4326(1)	9(1)
C(17)	7572(6)	3111(3)	6862(2)	37(2)
C(18)	6452(6)	2829(3)	6921(1)	29(1)
C(19)	5361(4)	5208(2)	3661(1)	16(1)
C(20)	4223(4)	4901(2)	3731(1)	16(1)
S(21)	8656(1)	2682(1)	5376(1)	9(1)
S(22)	7071(1)	1690(1)	5414(1)	11(1)
S(23)	7925(1)	3277(1)	4632(1)	10(1)
S(24)	6352(1)	2281(1)	4666(1)	10(1)
S(25)	9079(1)	2182(1)	6205(1)	11(1)
S(26)	7573(1)	1180(1)	6238(1)	12(1)
S(27)	7405(1)	3806(1)	3817(1)	11(1)
S(28)	5956(1)	2787(1)	3832(1)	12(1)
C(21)	7853(4)	2706(2)	5013(1)	8(1)
C(22)	7153(4)	2256(2)	5029(1)	10(1)
C(23)	7983(4)	2042(2)	5638(1)	9(1)
C(24)	8179(4)	1834(2)	5983(1)	8(1)
C(25)	7008(4)	2926(2)	4407(1)	10(1)
C(26)	6820(4)	3142(2)	4064(1)	9(1)
C(27)	9147(4)	1569(2)	6593(1)	13(1)
C(28)	7979(4)	1289(2)	6657(1)	13(1)
C(29)	7041(4)	3700(2)	3393(1)	15(1)
C(30)	5884(4)	3407(2)	3448(1)	16(1)
S(31)	5571(1)	810(1)	5000(1)	10(1)
S(32)	3039(1)	721(1)	5217(1)	11(1)
S(33)	4989(1)	1369(1)	4241(1)	10(1)
S(34)	2468(1)	1280(1)	4451(1)	11(1)
S(35)	6179(1)	163(1)	5797(1)	11(1)
S(36)	3680(1)	174(1)	6023(1)	10(1)
S(37)	4390(1)	1922(1)	3429(1)	12(1)
S(38)	1910(1)	1718(1)	3626(1)	14(1)
C(31)	4592(4)	1045(2)	4676(1)	9(1)
C(32)	3446(4)	1007(2)	4774(1)	9(1)
C(33)	4483(4)	597(2)	5343(1)	9(1)
C(34)	4745(4)	348(2)	5679(1)	8(1)
C(35)	3569(4)	1466(2)	4106(1)	11(1)
C(36)	3324(4)	1678(2)	3764(1)	10(1)
C(37)	5808(4)	16(2)	6270(1)	13(1)
C(38)	4649(4)	-276(2)	6338(1)	12(1)
C(39)	3493(4)	1936(2)	3068(1)	17(1)
C(40)	2279(4)	2136(2)	3181(1)	15(1)
S(41)	4055(1)	2278(1)	5283(1)	9(1)
S(42)	1532(1)	2218(1)	5505(1)	11(1)

Продолжение Таблицы П**13**.2.2.

S(43)	3465(1)	2771(1)	4515(1)	11(1)
S(44)	942(1)	2712(1)	4739(1)	10(1)
S(45)	4654(1)	1687(1)	6088(1)	11(1)
S(46)	2149(1)	1679(1)	6308(1)	12(1)
S(47)	2805(1)	3324(1)	3708(1)	12(1)
S(48)	313(1)	3323(1)	3948(1)	11(1)
C(41)	3073(4)	2505(2)	4958(1)	9(1)
C(42)	1922(4)	2480(2)	5061(1)	10(1)
C(43)	2970(4)	2084(2)	5628(1)	10(1)
C(44)	3223(4)	1844(2)	5967(1)	9(1)
C(45)	2026(4)	2911(2)	4395(1)	9(1)
C(46)	1752(4)	3157(2)	4058(1)	9(1)
C(47)	4261(4)	1551(2)	6561(1)	14(1)
C(48)	3128(4)	1247(2)	6628(1)	13(1)
C(49)	1809(4)	3760(2)	3396(1)	15(1)
C(50)	659(4)	3462(2)	3474(1)	14(1)
S(51)	2597(1)	3737(1)	5541(1)	12(1)
S(52)	90(1)	3603(1)	5760(1)	12(1)
S(53)	1981(1)	4300(1)	4781(1)	12(1)
S(54)	-536(1)	4179(1)	5005(1)	11(1)
S(55)	3207(1)	3268(1)	6356(1)	16(1)
S(56)	725(1)	3122(1)	6573(1)	16(1)
S(57)	1295(1)	4850(1)	3976(1)	12(1)
S(58)	-1192(1)	4836(1)	4217(1)	12(1)
C(51)	1602(4)	4006(2)	5222(1)	11(1)
C(52)	457(4)	3952(2)	5324(1)	10(1)
C(53)	1514(4)	3541(2)	5888(1)	10(1)
C(54)	1780(4)	3339(2)	6228(1)	11(1)
C(55)	538(4)	4409(2)	4661(1)	10(1)
C(56)	256(4)	4663(2)	4327(1)	10(1)
C(57A)*	2797(6)	3236(3)	6815(2)	18(1)
C(58A)*	1739(6)	2864(3)	6914(2)	21(1)
C(57B)*	2810(15)	2912(9)	6815(4)	19(4)
C(58B)*	1598(14)	3121(10)	6939(4)	20(4)
C(59)	300(4)	5277(2)	3661(1)	15(1)
C(60)	-860(4)	4984(2)	3742(1)	14(1)
S(61)	6052(1)	2765(1)	168(1)	11(1)
S(62)	7607(1)	3767(1)	121(1)	11(1)
S(63)	6617(1)	2265(1)	935(1)	11(1)
S(64)	8196(1)	3254(1)	886(1)	11(1)
S(65)	5508(1)	3296(1)	-650(1)	13(1)
S(66)	6930(1)	4328(1)	-672(1)	15(1)
S(67)	7083(1)	1771(1)	1746(1)	18(1)
S(68)	8770(1)	2690(1)	1708(1)	17(1)
C(61)	7474(4)	3239(2)	514(1)	9(1)
C(62)	6761(4)	2782(2)	538(1)	9(1)
C(63)	6663(4)	3418(2)	-89(1)	11(1)
C(64)	6413(4)	3646(2)	-432(1)	9(1)
C(65)	7561(4)	2610(2)	1149(1)	10(1)
C(66)	7777(4)	2394(2)	1493(1)	10(1)
C(67)	5478(5)	3888(2)	-1048(1)	21(1)
C(68)	6547(5)	4235(3)	-1094(1)	25(1)
C(69)	8050(6)	1630(3)	2099(1)	29(1)
C(70)	8422(5)	2218(3)	2142(1)	25(1)
S(71)	6778(1)	1747(1)	-879(1)	12(1)
S(72)	8344(1)	2749(1)	-925(1)	11(1)
S(73)	7385(1)	1225(1)	-114(1)	11(1)
S(74)	8925(1)	2239(1)	-158(1)	11(1)
S(75)	6259(1)	2263(1)	-1699(1)	15(1)
S(76)	7789(1)	3257(1)	-1744(1)	17(1)
S(77)	8049(1)	674(1)	683(1)	17(1)

Продолжение Таблицы П**13**.2.2.

S(78)	9457(1)	1712(1)	661(1)	12(1)
C(71)	7503(4)	1766(2)	-508(1)	10(1)
C(72)	8197(4)	2225(2)	-529(1)	11(1)
C(73)	7400(4)	2397(2)	-1138(1)	10(1)
C(74)	7182(4)	2614(2)	-1483(1)	11(1)
C(75)	8317(4)	1581(2)	102(1)	10(1)
C(76)	8556(4)	1357(2)	442(1)	10(1)
C(77A)*	6479(8)	2765(3)	-2128(2)	18(2)
C(78A)*	6712(7)	3373(4)	-2069(2)	22(2)
C(77B)*	6209(13)	2866(6)	-2089(4)	18(3)
C(78B)*	7369(13)	3140(7)	-2159(3)	25(3)
C(79)	8429(5)	777(3)	1103(1)	26(1)
C(80)	9486(5)	1124(2)	1060(1)	23(1)
S(81)	6130(1)	5215(1)	356(1)	12(1)
S(82)	4600(1)	4202(1)	389(1)	12(1)
S(83)	6575(1)	4711(1)	1178(1)	18(1)
S(84)	5155(1)	3676(1)	1206(1)	14(1)
C(81)	5343(4)	5229(2)	-7(1)	12(1)
C(82)	5496(4)	4562(2)	613(1)	10(1)
C(83)	5711(4)	4344(2)	956(1)	11(1)
C(84)	6672(5)	4099(2)	1561(1)	25(1)
C(85)	5547(5)	3792(2)	1627(1)	24(1)
S(91)	1076(1)	216(1)	368(1)	11(1)
S(92)	-387(1)	-809(1)	378(1)	12(1)
S(93)	1464(1)	-304(1)	1193(1)	14(1)
S(94)	190(1)	-1375(1)	1191(1)	12(1)
C(91)	331(4)	232(2)	-1(1)	11(1)
C(92)	475(4)	-456(2)	611(1)	10(1)
C(93)	681(4)	-684(2)	954(1)	10(1)
C(94)	1567(4)	-919(2)	1578(1)	16(1)
C(95)	478(5)	-1269(2)	1623(1)	18(1)
S(101)	511(1)	3180(1)	263(1)	12(1)
S(102)	3033(1)	3254(1)	38(1)	12(1)
S(103)	1117(1)	2651(1)	1028(1)	12(1)
S(104)	3632(1)	2741(1)	802(1)	12(1)
S(105)	-106(1)	3757(1)	-546(1)	15(1)
S(106)	2398(1)	3748(1)	-770(1)	14(1)
S(107)	1794(1)	2146(1)	1841(1)	18(1)
S(108)	4262(1)	2310(1)	1616(1)	17(1)
C(101)	1503(4)	2936(2)	584(1)	12(1)
C(102)	2649(4)	2971(2)	482(1)	10(1)
C(103)	1585(4)	3367(2)	-86(1)	11(1)
C(104)	1329(4)	3594(2)	-425(1)	11(1)
C(105)	2561(4)	2563(2)	1152(1)	11(1)
C(106)	2833(4)	2371(2)	1492(1)	11(1)
C(107)	266(5)	3924(3)	-1019(1)	24(1)
C(108)	1459(5)	4173(3)	-1096(1)	22(1)
C(109)	2754(5)	2159(3)	2180(1)	30(1)
C(110)	3930(5)	1969(3)	2077(1)	29(1)
S(111)	1373(1)	2274(1)	-788(1)	12(1)
S(112)	3898(1)	2349(1)	-1007(1)	12(1)
S(113)	1953(1)	1755(1)	-22(1)	11(1)
S(114)	4481(1)	1812(1)	-243(1)	11(1)
S(115)	779(1)	2784(1)	-1606(1)	21(1)
S(116)	3275(1)	2890(1)	-1813(1)	29(1)
S(117)	2562(1)	1266(1)	787(1)	12(1)
S(118)	5073(1)	1241(1)	570(1)	13(1)
C(111)	2350(4)	2036(2)	-465(1)	10(1)
C(112)	3499(4)	2066(2)	-565(1)	11(1)
C(113)	2456(4)	2458(2)	-1134(1)	12(1)
C(114)	2205(4)	2677(2)	-1474(1)	14(1)

Продолжение Таблицы П**13**.2.2.

C(115)	3394(4)	1632(2)	103(1)	10(1)
C(116)	3649(4)	1410(2)	443(1)	10(1)
C(17A)*	1188(10)	3285(6)	-2031(3)	35(3)
C(18A)*	2321(9)	3041(6)	-2169(3)	22(2)
C(17B)*	1139(11)	2874(6)	-2067(3)	34(3)
C(18B)*	2276(10)	3241(6)	-2143(3)	31(3)
C(119)	3492(4)	811(2)	1107(1)	14(1)
C(120)	4689(4)	1077(2)	1043(1)	14(1)
S(121)	4075(1)	-287(1)	502(1)	11(1)
S(122)	6578(1)	-305(1)	249(1)	12(1)
S(123)	4873(1)	-733(1)	1317(1)	13(1)
S(124)	7297(1)	-875(1)	1028(1)	12(1)
C(121)	5571(4)	-5(2)	-58(1)	10(1)
C(122)	5533(4)	-439(2)	608(1)	10(1)
C(123)	5852(4)	-656(2)	945(1)	11(1)
C(124)	5865(4)	-1199(2)	1618(1)	16(1)
C(125)	7093(4)	-1003(2)	1507(1)	14(1)
S(131)	1574(1)	4700(1)	253(1)	12(1)
S(132)	-939(1)	4696(1)	498(1)	12(1)
S(133)	2261(1)	4157(1)	1045(1)	13(1)
S(134)	-200(1)	4244(1)	1309(1)	14(1)
C(131)	-580(4)	4999(2)	57(1)	12(1)
C(132)	515(4)	4556(2)	609(1)	11(1)
C(133)	816(4)	4348(2)	948(1)	12(1)
C(134)	1995(4)	4081(3)	1516(1)	21(1)
C(135)	800(4)	3840(2)	1625(1)	21(1)
Hg(1)	6876(1)	-334(1)	2439(1)	13(1)
S(1A)	8083(1)	175(1)	2802(1)	16(1)
S(1B)	7677(1)	-1371(1)	2415(1)	18(1)
S(1C)	6348(1)	326(1)	1848(1)	15(1)
S(1D)	4969(1)	-148(1)	2810(1)	16(1)
C(1A)	9356(4)	-205(2)	2770(1)	16(1)
C(1B)	6485(5)	-1754(2)	2535(1)	21(1)
C(1C)	4916(4)	409(2)	1917(1)	18(1)
C(1D)	5280(4)	570(2)	2770(1)	13(1)
N(1A)	10235(4)	-455(2)	2757(1)	27(1)
N(1B)	5696(5)	-2046(3)	2626(2)	41(1)
N(1C)	3931(4)	493(3)	1943(1)	36(1)
N(1D)	5514(4)	1059(2)	2736(1)	23(1)
Hg(2)	2099(1)	-7(1)	2372(1)	18(1)
S(2A)	2340(1)	571(1)	2833(1)	19(1)
S(2B)	917(1)	606(1)	1890(1)	20(1)
S(2C)	3245(2)	-958(1)	2371(1)	38(1)
C(2A)	1138(4)	1030(2)	2771(1)	20(1)
C(2B)	-195(4)	173(2)	1912(1)	16(1)
C(2C)	2232(7)	-1450(3)	2455(2)	37(2)
N(2A)	334(4)	1363(2)	2730(2)	32(1)
N(2B)	-978(4)	-98(2)	1906(1)	24(1)
N(2C)	1546(7)	-1820(3)	2515(2)	54(2)
Hg(3)*	6601(1)	4723(1)	2440(1)	26(1)
S(3B)	7396(2)	3675(1)	2467(1)	38(1)
S(3C)	5817(2)	5465(1)	1918(1)	44(1)
C(3B)	6208(5)	3278(3)	2525(2)	40(2)
N(3B)	5434(6)	2981(3)	2567(2)	55(2)
C(3C)	4510(5)	5201(3)	1936(2)	33(1)
N(3C)	3615(6)	5014(3)	1932(2)	55(2)
S(3A1)	7642(3)	5260(1)	2824(1)	20(1)
C(3A1)	8914(9)	4865(6)	2814(4)	46(2)
N(3A1)	9625(15)	4486(8)	2772(5)	82(2)
S(3D1)	4657(3)	4715(2)	2848(1)	49(1)
C(3D1)	4833(12)	5457(4)	2820(4)	46(2)

Продолжение Таблицы П**13**.2.2.

N(3D1)	4973(15)	5961(5)	2793(6)	82(2)
S(3A2)	7218(6)	5410(3)	2832(1)	45(1)
C(3A2)	6081(12)	5899(7)	2789(5)	46(2)
N(3A2)	5219(14)	6169(10)	2739(7)	82(2)
Hg(4)*	1665(1)	4739(1)	2422(1)	24(1)
S(4B)	2397(2)	3687(1)	2447(1)	32(1)
S(4C)	810(2)	5400(1)	1886(1)	46(1)
C(4B)	1167(5)	3338(3)	2539(2)	41(2)
N(4B)	347(6)	3062(3)	2608(2)	53(2)
C(4C)	-533(5)	5160(3)	1938(2)	44(2)
N(4C)	-1461(6)	5000(4)	1956(2)	70(2)
S(4A1)	2111(4)	5425(2)	2821(1)	41(1)
C(4A1)	955(10)	5914(6)	2758(4)	46(2)
N(4A1)	106(13)	6218(8)	2742(6)	82(2)
S(4A2)	2693(4)	5230(2)	2816(1)	22(1)
C(4A2)	3918(12)	4768(7)	2811(5)	46(2)
N(4A2)	4587(17)	4337(8)	2790(6)	82(2)
S(4D2)	-233(5)	4755(3)	2834(1)	69(2)
C(4D2)	-31(16)	5497(5)	2807(5)	46(2)
N(4D2)	190(20)	6015(6)	2754(8)	82(2)

***** Заселенность позиций C(57A), C(58A) 0.75; C(57B), C(58B) 0.25; C(77A), C(78A) 0.65; C(77B), C(78B) 0.35; C(17A), C(18A), C(17B), C(18B) 0.50. Анионы $[Hg(SCN)_4]$ Hg(3)-N(3D1) и $[Hg(SCN)_3]$ Hg(3)-N(3C), S(3A2)-N(3A2) занимают одну позицию в ячейке с заселенностью 0.55 и 0.45; также анионы $[Hg(SCN)_4]$ Hg(4)-N(4C), S(4A2)-N(4D2) и $[Hg(SCN)_3]$ Hg(4)-N(4A1) занимают одну позицию в ячейке с заселенностью 0.45 и 0.55.

Таблица П**13**.3.1. Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BDH-TTP и анионах $[Hg(SCN)_4]$ и $[Hg(SCN)_3]$ для структуры **13** при комнатной температуре.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(11)-C(11)	1.719(7)	S(22)-C(22)	1.733(7)
S(11)-C(13)	1.759(7)	S(22)-C(23)	1.759(8)
S(12)-C(12)	1.724(7)	S(23)-C(21)	1.726(8)
S(12)-C(13)	1.770(7)	S(23)-C(25)	1.753(8)
S(13)-C(11)	1.735(7)	S(24)-C(22)	1.741(7)
S(13)-C(15)	1.755(8)	S(24)-C(25)	1.778(7)
S(14)-C(12)	1.733(8)	S(25)-C(24)	1.735(8)
S(14)-C(15)	1.771(7)	S(25)-C(27)	1.788(7)
S(15)-C(14)	1.738(7)	S(25)-C(27B)	1.797(7)
S(15)-C(17)	1.786(6)	S(26)-C(24)	1.755(8)
S(16)-C(14)	1.749(7)	S(26)-C(28B)	1.792(7)
S(16)-C(18)	1.783(6)	S(26)-C(28)	1.792(7)
S(17)-C(16)	1.737(8)	S(27)-C(26)	1.753(8)
S(17)-C(19)	1.791(8)	S(27)-C(29B)	1.786(8)
S(17)-C(19B)	1.792(7)	S(27)-C(29)	1.791(7)
S(18)-C(16)	1.753(8)	S(28)-C(26)	1.746(8)
S(18)-C(20B)	1.790(7)	S(28)-C(30)	1.791(7)
S(18)-C(20)	1.792(8)	S(28)-C(30B)	1.795(8)
C(11)-C(12)	1.363(10)	C(21)-C(22)	1.346(11)
C(13)-C(14)	1.342(10)	C(23)-C(24)	1.349(10)
C(15)-C(16)	1.341(10)	C(25)-C(26)	1.342(10)
C(17)-C(18)	1.495(8)	C(27)-C(28)	1.510(8)
C(19)-C(20)	1.506(9)	C(27B)-C(28B)	1.510(8)
C(19B)-C(20B)	1.510(8)	C(29)-C(30)	1.512(8)
S(21)-C(21)	1.728(7)	C(29B)-C(30B)	1.509(9)
S(21)-C(23)	1.768(8)		

Продолжение Таблицы П**13**.3.1.

S(31)-C(31)	1.727(7)	S(61)-C(61)	1.727(7)
S(31)-C(33)	1.759(7)	S(61)-C(62)	1.762(8)
S(32)-C(32)	1.731(8)	S(62)-C(61)'	1.729(7)
S(32)-C(33)	1.776(8)	S(62)-C(62)	1.753(8)
S(33)-C(31)	1.716(7)	S(63)-C(63)	1.728(8)
S(33)-C(35)	1.762(8)	S(63)-C(64)	1.803(9)
S(34)-C(32)	1.732(8)	S(64)-C(63)	1.750(8)
S(34)-C(35)	1.757(8)	S(64)-C(65)	1.767(9)
S(35)-C(34)	1.753(7)	C(61)-C(61)'	1.361(15)
S(35)-C(37)	1.792(6)	C(62)-C(63)	1.370(10)
S(36)-C(34)	1.747(8)	C(64)-C(65)	1.500(7)
S(36)-C(38)	1.791(6)	S(71)-C(71)	1.707(7)
S(37)-C(36)	1.743(8)	S(71)-C(72)	1.746(7)
S(37)-C(39)	1.790(7)	S(72)-C(71)'	1.735(7)
S(37)-C(39B)	1.794(8)	S(72)-C(72)	1.774(7)
S(38)-C(36)	1.741(8)	S(73)-C(73)	1.739(7)
S(38)-C(40B)	1.790(8)	S(73)-C(74)	1.789(8)
S(38)-C(40)	1.792(7)	S(74)-C(73)	1.756(8)
C(31)-C(32)	1.373(11)	S(74)-C(75)	1.794(9)
C(33)-C(34)	1.343(10)	C(71)-C(71)'	1.387(15)
C(35)-C(36)	1.365(10)	C(72)-C(73)	1.352(10)
C(37)-C(38)	1.507(7)	C(74)-C(75)	1.504(7)
C(39)-C(40)	1.507(8)	S(81)-C(81)	1.726(7)
C(39B)-C(40B)	1.505(9)	S(81)-C(82)	1.761(8)
S(41)-C(41)	1.730(7)	S(82)-C(81)'	1.740(7)
S(46)-C(44)	1.755(8)	S(82)-C(82)	1.761(8)
S(46)-C(48)	1.783(6)	S(83)-C(83)	1.734(8)
S(47)-C(46)	1.748(7)	S(83)-C(84)	1.803(8)
S(47)-C(49B)	1.787(7)	S(84)-C(83)	1.756(8)
S(47)-C(49)	1.790(8)	S(84)-C(85)	1.797(8)
S(48)-C(46)	1.737(8)	C(81)-C(81)'	1.346(14)
S(48)-C(50B)	1.783(7)	C(82)-C(83)	1.355(10)
S(48)-C(50)	1.793(8)	C(84)-C(85)	1.508(7)
C(41)-C(42)	1.344(10)	Hg(1)-S(2A)	2.485(3)
C(43)-C(44)	1.341(10)	Hg(1)-S(1A)	2.502(3)
C(45)-C(46)	1.357(10)	Hg(1)-S(3A)	2.537(3)
C(47)-C(48)	1.507(8)	Hg(1)-S(4A)	2.659(5)
C(49)-C(50)	1.508(9)	S(1A)-C(1A)	1.597(12)
C(49B)-C(50B)	1.503(8)	C(1A)-N(1A)	1.182(13)
S(51)-C(51)	1.731(7)	S(2A)-C(2A)	1.630(12)
S(41)-C(43)	1.772(7)	C(2A)-N(2A)	1.118(13)
S(42)-C(42)	1.726(7)	S(3A)-C(3A)	1.888(12)
S(42)-C(43)	1.759(7)	C(3A)-N(3A)	1.007(13)
S(43)-C(41)	1.745(7)	N(3A)-Hg(2)	2.582(14)
S(43)-C(45)	1.756(8)	S(4A)-C(4A)	1.897(13)
S(44)-C(42)	1.732(7)	C(4A)-N(4A)	1.157(13)
S(44)-C(45)	1.760(7)	Hg(2)-S(7A1)	2.418(8)
S(45)-C(44)	1.739(8)	Hg(2)-S(5A)	2.501(3)
S(45)-C(47)	1.781(6)	Hg(2)-S(6A)	2.518(4)
S(51)-C(52)	1.768(8)	Hg(2)-S(7A)	2.579(8)
S(52)-C(51)'	1.728(7)	S(5A)-C(5A)	1.643(12)
S(52)-C(52)	1.755(8)	C(5A)-N(5A)	1.109(13)
S(53)-C(53)	1.736(8)	S(6A)-C(6A)	1.836(12)
S(53)-C(54)	1.770(9)	C(6A)-N(6A)	1.143(13)
S(54)-C(53)	1.744(7)	S(7A)-C(7A)	1.670(17)
S(54)-C(55)	1.801(9)	C(7A)-N(7A)	1.158(18)
C(51)-C(51)'	1.355(14)	S(7A1)-C(7A1)	1.759(18)
C(52)-C(53)	1.355(10)	C(7A1)-N(7A1)	1.166(18)
C(54)-C(55)	1.499(8)		

Таблица П**13**.3.2. Длины связей (*d*, Å) в катион-радикалах BDH-TTP и анионах $[Hg(SCN)_4]$ и $[Hg(SCN)_3]$ для структуры **13** при низкой температуре.

Связь	*d*	Связь	*d*
S(1)-C(1)	1.732(4)	S(27)-C(29)	1.814(4)
S(1)-C(3)	1.765(4)	S(28)-C(26)	1.759(4)
S(2)-C(2)	1.728(4)	S(28)-C(30)	1.815(5)
S(2)-C(3)	1.766(4)	C(21)-C(22)	1.346(6)
S(3)-C(1)	1.733(4)	C(23)-C(24)	1.352(5)
S(3)-C(5)	1.763(4)	C(25)-C(26)	1.344(5)
S(4)-C(2)	1.732(4)	C(27)-C(28)	1.520(6)
S(4)-C(5)	1.766(4)	C(29)-C(30)	1.524(7)
S(5)-C(4)	1.749(4)	S(31)-C(31)	1.735(4)
S(5)-C(7)	1.816(4)	S(31)-C(33)	1.770(4)
S(6)-C(4)	1.753(4)	S(32)-C(32)	1.739(4)
S(6)-C(8)	1.825(5)	S(32)-C(33)	1.770(4)
S(7)-C(6)	1.748(4)	S(33)-C(31)	1.729(4)
S(7)-C(9)	1.820(5)	S(33)-C(35)	1.753(4)
S(8)-C(6)	1.742(4)	S(34)-C(32)	1.742(4)
S(8)-C(10)	1.802(5)	S(34)-C(35)	1.779(5)
C(1)-C(2)	1.370(6)	S(35)-C(34)	1.759(4)
C(3)-C(4)	1.356(5)	S(35)-C(37)	1.819(4)
C(5)-C(6)	1.358(6)	S(36)-C(34)	1.746(4)
C(7)-C(8)	1.509(7)	S(36)-C(38)	1.818(4)
C(9)-C(10)	1.511(7)	S(37)-C(36)	1.749(4)
S(11)-C(11)	1.735(4)	S(37)-C(39)	1.813(5)
S(11)-C(13)	1.761(4)	S(38)-C(36)	1.759(4)
S(12)-C(12)	1.737(4)	S(38)-C(40)	1.811(5)
S(12)-C(13)	1.772(4)	C(31)-C(32)	1.358(6)
S(13)-C(11)	1.732(4)	C(33)-C(34)	1.352(5)
S(13)-C(15)	1.765(4)	C(35)-C(36)	1.354(6)
S(14)-C(12)	1.727(4)	C(37)-C(38)	1.523(6)
S(14)-C(15)	1.764(4)	C(39)-C(40)	1.513(6)
S(15)-C(14)	1.749(4)	S(41)-C(41)	1.738(4)
S(15)-C(17)	1.807(6)	S(41)-C(43)	1.769(4)
S(16)-C(14)	1.752(4)	S(42)-C(42)	1.729(4)
S(16)-C(18)	1.789(5)	S(42)-C(43)	1.760(4)
S(17)-C(16)	1.753(4)	S(43)-C(41)	1.727(4)
S(17)-C(19)	1.814(5)	S(43)-C(45)	1.759(4)
S(18)-C(16)	1.741(4)	S(44)-C(42)	1.730(4)
S(18)-C(20)	1.812(4)	S(44)-C(45)	1.767(4)
C(11)-C(12)	1.366(6)	S(45)-C(44)	1.753(4)
C(13)-C(14)	1.350(6)	S(45)-C(47)	1.823(5)
C(15)-C(16)	1.361(5)	S(46)-C(44)	1.743(4)
C(17)-C(18)	1.473(8)	S(46)-C(48)	1.822(4)
C(19)-C(20)	1.519(7)	S(47)-C(46)	1.750(4)
S(21)-C(21)	1.745(4)	S(47)-C(49)	1.819(5)
S(21)-C(23)	1.775(4)	S(48)-C(46)	1.751(4)
S(22)-C(22)	1.741(4)	S(48)-C(50)	1.819(4)
S(22)-C(23)	1.769(4)	C(41)-C(42)	1.366(6)
S(23)-C(21)	1.739(4)	C(43)-C(44)	1.356(5)
S(23)-C(25)	1.774(4)	C(45)-C(46)	1.358(5)
S(24)-C(22)	1.745(4)	C(47)-C(48)	1.510(7)
S(24)-C(25)	1.771(4)	C(49)-C(50)	1.521(7)
S(25)-C(24)	1.752(4)	S(51)-C(51)	1.740(4)
S(25)-C(27)	1.815(4)	S(51)-C(53)	1.772(4)
S(26)-C(24)	1.758(4)	S(52)-C(52)	1.737(4)
S(26)-C(28)	1.812(4)	S(52)-C(53)	1.750(5)
S(27)-C(26)	1.752(4)	S(53)-C(51)	1.733(4)

Продолжение Таблицы П**13**.3.2.

S(53)-C(55)	1.760(4)	C(77A)-C(78A)	1.508(10)
S(54)-C(52)	1.730(4)	C(77B)-C(78B)	1.507(15)
S(54)-C(55)	1.772(4)	C(79)-C(80)	1.489(7)
S(55)-C(54)	1.754(5)	S(81)-C(81)	1.739(4)
S(55)-C(57A)	1.800(6)	S(81)-C(82)	1.771(4)
S(55)-C(57B)	1.824(13)	S(82)-C(81)'	1.740(4)
S(56)-C(54)	1.754(5)	S(82)-C(82)	1.769(4)
S(56)-C(58B)	1.814(13)	S(83)-C(83)	1.750(4)
S(56)-C(58A)	1.815(6)	S(83)-C(84)	1.801(5)
S(57)-C(56)	1.746(4)	S(84)-C(83)	1.750(5)
S(57)-C(59)	1.821(5)	S(84)-C(85)	1.821(5)
S(58)-C(56)	1.763(4)	C(81)-C(81)'	1.353(9)
S(58)-C(60)	1.818(5)	C(82)-C(83)	1.353(6)
C(51)-C(52)	1.363(6)	C(84)-C(85)	1.506(8)
C(53)-C(54)	1.355(6)	S(91)-C(91)	1.730(4)
C(55)-C(56)	1.355(6)	S(91)-C(92)	1.770(4)
C(57A)-C(58A)	1.520(9)	S(92)-C(91)'	1.738(4)
C(57B)-C(58B)	1.528(17)	S(92)-C(92)	1.756(4)
C(59)-C(60)	1.527(6)	S(93)-C(93)	1.756(4)
S(61)-C(62)	1.731(4)	S(93)-C(94)	1.814(5)
S(61)-C(63)	1.760(4)	S(94)-C(93)	1.747(4)
S(62)-C(61)	1.725(4)	S(94)-C(95)	1.816(5)
S(62)-C(63)	1.757(4)	C(91)-C(91)'	1.353(9)
S(63)-C(62)	1.723(4)	C(92)-C(93)	1.351(6)
S(63)-C(65)	1.761(4)	C(94)-C(95)	1.524(7)
S(64)-C(61)	1.740(4)	S(101)-C(101)	1.738(4)
S(64)-C(65)	1.765(4)	S(101)-C(103)	1.768(5)
S(65)-C(64)	1.748(4)	S(102)-C(102)	1.739(4)
S(65)-C(67)	1.810(5)	S(102)-C(103)	1.771(4)
S(66)-C(64)	1.747(4)	S(103)-C(101)	1.739(4)
S(66)-C(68)	1.799(5)	S(103)-C(105)	1.767(4)
S(67)-C(66)	1.747(4)	S(104)-C(102)	1.725(4)
S(67)-C(69)	1.803(6)	S(104)-C(105)	1.767(4)
S(68)-C(66)	1.740(5)	S(105)-C(104)	1.758(4)
S(68)-C(70)	1.817(5)	S(105)-C(107)	1.817(5)
C(61)-C(62)	1.364(6)	S(106)-C(104)	1.745(5)
C(63)-C(64)	1.364(6)	S(106)-C(108)	1.802(5)
C(65)-C(66)	1.356(6)	S(107)-C(106)	1.755(5)
C(67)-C(68)	1.500(8)	S(107)-C(109)	1.803(5)
C(69)-C(70)	1.491(8)	S(108)-C(106)	1.753(5)
S(71)-C(71)	1.740(4)	S(108)-C(110)	1.809(5)
S(71)-C(73)	1.762(4)	C(101)-C(102)	1.360(6)
S(72)-C(72)	1.730(4)	C(103)-C(104)	1.354(6)
S(72)-C(73)	1.767(4)	C(105)-C(106)	1.351(6)
S(73)-C(71)	1.740(4)	C(107)-C(108)	1.518(8)
S(73)-C(75)	1.772(4)	C(109)-C(110)	1.455(8)
S(74)-C(72)	1.743(4)	S(111)-C(111)	1.730(4)
S(74)-C(75)	1.769(4)	S(111)-C(113)	1.766(5)
S(75)-C(74)	1.758(4)	S(112)-C(112)	1.735(4)
S(75)-C(77B)	1.804(11)	S(112)-C(113)	1.768(5)
S(75)-C(77A)	1.809(7)	S(113)-C(111)	1.738(4)
S(76)-C(74)	1.747(4)	S(113)-C(115)	1.765(4)
S(76)-C(78B)	1.810(12)	S(114)-C(112)	1.737(4)
S(76)-C(78A)	1.816(7)	S(114)-C(115)	1.768(4)
S(77)-C(76)	1.745(4)	S(115)-C(114)	1.758(5)
S(77)-C(79)	1.798(5)	S(115)-C(17B)	1.778(10)
S(78)-C(76)	1.753(4)	S(115)-C(17A)	1.833(10)
S(78)-C(80)	1.808(5)	S(116)-C(114)	1.748(5)
C(71)-C(72)	1.355(6)	S(116)-C(18A)	1.801(9)
C(73)-C(74)	1.360(6)	S(116)-C(18B)	1.812(10)
C(75)-C(76)	1.352(6)	S(117)-C(116)	1.756(4)

Продолжение Таблицы П**13**.3.2.

S(117)-C(119)	1.806(4)	Hg(2)-S(2C)	2.4651(15)
S(118)-C(116)	1.754(4)	Hg(2)-S(2A)	2.5045(13)
S(118)-C(120)	1.821(4)	Hg(2)-S(2B)	2.5103(12)
C(111)-C(112)	1.360(6)	S(2A)-C(2A)	1.683(5)
C(113)-C(114)	1.351(6)	S(2B)-C(2B)	1.671(5)
C(115)-C(116)	1.353(6)	S(2C)-C(2C)	1.650(8)
C(17A)-C(18A)	1.498(13)	C(2A)-N(2A)	1.157(7)
C(17B)-C(18B)	1.589(14)	C(2B)-N(2B)	1.142(7)
C(119)-C(120)	1.538(6)	C(2C)-N(2C)	1.178(10)
S(121)-C(121)’	1.731(4)	Hg(3)-S(3B)	2.4862(16)
S(121)-C(122)	1.766(4)	Hg(3)-S(3C)	2.5177(17)
S(122)-C(121)	1.732(4)	Hg(3)-S(3A1)	2.561(3)
S(122)-C(122)	1.764(4)	Hg(3)-S(3A2)	2.599(6)
S(123)-C(123)	1.753(5)	Hg(3)-S(3D1)	2.652(4)
S(123)-C(124)	1.819(4)	S(3B)-C(3B)	1.681(6)
S(124)-C(123)	1.750(4)	S(3C)-C(3C)	1.665(6)
S(124)-C(125)	1.819(4)	C(3B)-N(3B)	1.145(7)
C(121)-C(121)’	1.367(9)	C(3C)-N(3C)	1.157(7)
C(122)-C(123)	1.363(6)	S(3A1)-C(3A1)	1.675(8)
C(124)-C(125)	1.526(7)	C(3A1)-N(3A1)	1.181(9)
S(131)-C(131)’	1.732(4)	S(3D1)-C(3D1)	1.703(8)
S(131)-C(132)	1.764(5)	C(3D1)-N(3D1)	1.156(9)
S(132)-C(131)	1.727(5)	S(3A2)-C(3A2)	1.659(9)
S(132)-C(132)	1.764(4)	C(3A2)-N(3A2)	1.143(10)
S(133)-C(133)	1.752(4)	Hg(4)-S(4B)	2.4743(17)
S(133)-C(134)	1.805(5)	Hg(4)-S(4C)	2.5119(16)
S(134)-C(133)	1.746(5)	Hg(4)-S(4A2)	2.517(3)
S(134)-C(135)	1.808(5)	Hg(4)-S(4A1)	2.554(3)
C(131)-C(131)’	1.383(9)	Hg(4)-S(4D2)	2.623(6)
C(132)-C(133)	1.363(6)	S(4B)-C(4B)	1.661(6)
C(134)-C(135)	1.524(7)	S(4C)-C(4C)	1.674(6)
Hg(1)-S(1B)	2.5025(12)	C(4B)-N(4B)	1.161(7)
Hg(1)-S(1C)	2.5417(11)	C(4C)-N(4C)	1.155(7)
Hg(1)-S(1A)	2.5771(12)	S(4A1)-C(4A1)	1.679(8)
Hg(1)-S(1D)	2.6071(12)	C(4A1)-N(4A1)	1.162(9)
S(1A)-C(1A)	1.668(5)	S(4A2)-C(4A2)	1.708(9)
S(1B)-C(1B)	1.670(6)	C(4A2)-N(4A2)	1.223(9)
S(1C)-C(1C)	1.667(5)	S(4D2)-C(4D2)	1.709(9)
S(1D)-C(1D)	1.678(5)	C(4D2)-N(4D2)	1.198(10)
C(1A)-N(1A)	1.135(7)		
C(1B)-N(1B)	1.159(8)		
C(1C)-N(1C)	1.145(7)		
C(1D)-N(1D)	1.147(7)		