

CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1997, 9(4), 1021-1029, DOI:[10.1021/cm9606134](https://doi.org/10.1021/cm9606134)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

Table S1. Crystallographic Data for (Me₃NO)₂Ba₂Cu₄(Ot-Bu)₈

Formula	C ₃₈ H ₉₀ Ba ₂ Cu ₄ N ₂ O ₁₀
Formula Wt., g/mol	3172.94
Space Group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>
<i>a</i> , Å	25.142(3) Å
<i>b</i> , Å	18.043(2) Å
<i>c</i> , Å	35.522(4) Å
β, deg	108.43(1)
<i>V</i> , Å ³	15287.81
<i>Z</i>	4
<i>T</i> , °C	-172 °C
Radiation, Å ^a	.71069
ρ _{calc} , g/cm ³	1.379
μ, cm ⁻¹	21.5
Number of Unique Intensities	16757
Number with <i>F</i> > 0.0	14845
Number with <i>F</i> > 3 σ(<i>F</i>)	11088
<i>R</i> for Averaging of 4027 unique intensities more than once:	.099
For 2742 having <i>I</i> > 2.33σ(<i>I</i>):	.079
<i>R</i> ^b (<i>R</i> _w) ^c , %	.0822 (.0801)
Goodness of Fit for the Last Cycle	1.95
Maximum Δ/σ for Last Cycle	.07

^a Graphite monochromator. ^b $R = 100 \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$ ^c $R_w = 100 [\sum w(|F_o| - |F_c|)^2 / \sum w|F_o|^2]^{1/2}$

where $w = 1/\sigma^2(|F_o|)$

Table S2. Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters^a

	10 ⁴ x	10 ⁴ y	10 ⁴ z	10 B _{iso}
Ba (1) A	9653.8 (4)	7487.9 (4)	3740.4 (3)	23
Ba (2) A	11810.7 (4)	8251.5 (5)	4064.2 (3)	30
Cu (3) A	10901 (1)	6735 (1)	3580 (1)	35
Cu (4) A	10954 (1)	7270 (1)	4549 (1)	31
Cu (5) A	10563 (1)	9034 (1)	4201 (1)	32
Cu (6) A	10509 (1)	8518 (1)	3281 (1)	31
O (7) A	8638 (4)	7151 (5)	3619 (3)	36
N (8) A	8077 (5)	6978 (7)	3516 (4)	30
C (9) A	7769 (6)	7663 (8)	3551 (6)	38
C (10) A	7965 (8)	6425 (10)	3798 (7)	56
C (11) A	7885 (8)	6737 (9)	3112 (6)	48
O (12) A	12846 (5)	8501 (8)	4211 (5)	63
N (13) A	13423 (6)	8671 (12)	4292 (6)	74
C (14) A	13525 (10)	8844 (33)	3943 (13)	212
C (15) A	13528 (21)	9545 (24)	4461 (14)	66 (11)
C (15) 'A	13638 (18)	8938 (21)	4714 (12)	54 (9)
C (16) A	13718 (12)	8011 (21)	4426 (17)	193
O (17) A	9862 (4)	8690 (5)	4162 (3)	31
C (18) A	9598 (6)	8963 (8)	4436 (6)	38
C (19) A	9984 (9)	8933 (12)	4847 (6)	56
C (20) A	9409 (9)	9767 (11)	4320 (8)	72
C (21) A	9098 (7)	8482 (12)	4393 (7)	58
O (22) A	9750 (4)	8413 (5)	3207 (3)	32
C (23) A	9375 (6)	8968 (9)	2991 (5)	37
C (24) A	9626 (7)	9743 (9)	3106 (7)	55
C (25) A	8833 (6)	8868 (9)	3085 (6)	40
C (26) A	9311 (8)	8846 (11)	2546 (6)	55
O (27) A	10141 (4)	6577 (5)	3379 (3)	35
C (28) A	9931 (7)	6182 (8)	3030 (5)	38
C (29) A	10107 (11)	6484 (13)	2705 (6)	71
C (30) A	9282 (10)	6227 (12)	2923 (7)	72
C (31) A	10070 (11)	5363 (12)	3091 (8)	94
O (32) A	10263 (4)	6832 (5)	4393 (3)	31
C (33) A	10171 (7)	6146 (9)	4553 (6)	44
C (34) A	9578 (10)	5964 (14)	4382 (12)	142
C (35) A	10503 (18)	5548 (14)	4432 (13)	145
C (36) A	10312 (19)	6181 (18)	4976 (7)	153
O (37) A	11642 (4)	6907 (5)	3790 (4)	39
C (38) A	12036 (7)	6323 (8)	3899 (7)	52
C (39) A	12596 (10)	6616 (12)	4057 (17)	187
C (40) A	11911 (15)	5816 (14)	4185 (12)	134
C (41) A	11974 (19)	5816 (20)	3540 (11)	155
O (42) A	11652 (4)	7702 (5)	4697 (3)	36
C (43) A	11902 (7)	7894 (8)	5095 (5)	39
C (44) A	12051 (7)	7181 (9)	5350 (6)	45

C(45)A	11545(7)	8399(11)	5243(6)	48
C(46)A	12462(9)	8282(11)	5124(6)	58
O(47)A	11277(4)	9376(5)	4253(3)	33
C(48)A	11378(7)	10140(9)	4242(5)	37
C(49)A	11270(8)	10520(9)	4586(7)	52
C(50)A	12005(8)	10226(10)	4271(7)	51
C(51)A	11015(9)	10458(9)	3845(6)	54
O(52)A	11257(4)	8636(5)	3349(3)	34
C(53)A	11416(7)	8710(9)	2992(6)	36
C(54)A	11208(8)	9429(12)	2794(6)	55
C(55)A	12045(9)	8666(14)	3112(8)	77
C(56)A	11162(14)	8059(14)	2724(9)	96
Ba(1)B	6744.7(4)	7846(1)	1227.6(3)	34
Ba(2)B	4872.1(4)	7341.9(5)	1578.3(3)	33
Cu(3)B	5321(1)	8524(1)	895(1)	42
Cu(4)B	5581(1)	6566(1)	929(1)	46
Cu(5)B	6318(1)	6773(1)	1946(1)	35
Cu(6)B	6012(1)	8627(1)	1875(1)	31
O(7)B	7710(5)	7984(8)	1142(4)	55
N(8)B	8243(6)	8090(9)	1120(5)	47
C(9)B	8649(11)	7953(25)	1507(8)	136
C(10)B	8334(10)	7564(10)	838(9)	78
C(11)B	8263(11)	8802(13)	955(13)	117
O(12)B	3963(5)	6984(6)	1696(4)	46
N(13)B	3467(5)	6859(7)	1770(5)	41
C(14)B	3298(9)	7546(14)	1894(10)	92
C(15)B	3593(8)	6271(14)	2080(7)	68
C(16)B	3055(7)	6583(10)	1398(6)	51
O(17)B	6919(5)	6775(6)	1752(3)	37
C(18)B	7262(9)	6162(10)	1774(6)	58
C(19)B	7251(18)	5899(25)	1424(7)	182
C(20)B	7123(28)	5606(21)	2004(20)	288
C(21)B	7836(27)	6424(31)	1975(31)	577
O(22)B	6707(4)	8701(5)	1803(3)	35
C(23)B	7152(8)	8979(9)	2133(6)	45
C(24)B	7270(8)	8492(11)	2476(6)	53
C(25)B	7657(9)	9027(13)	1984(7)	67
C(26)B	6994(10)	9750(11)	2250(7)	81
O(27)B	5984(5)	8788(6)	821(4)	49
C(28)B	6068(9)	9469(12)	699(8)	68
C(29)B	5999(14)	10054(14)	984(11)	109
C(30)B	6639(10)	9524(12)	677(7)	68
C(31)B	5652(10)	9628(18)	290(8)	123
O(32)B	6111(5)	6904(6)	716(3)	44
C(33)B	6024(9)	6829(13)	326(6)	62
C(34)B	6456(20)	7225(19)	203(8)	151
C(35)B	5418(12)	7026(26)	87(8)	128
C(36)B	6076(14)	6029(18)	203(9)	108
O(37)B	4663(5)	8208(6)	964(4)	45
C(38)B	4155(8)	8356(11)	646(7)	63

C(39)B	3730(11)	7951(21)	747(10)	155
C(40)B	4040(10)	9193(15)	622(10)	105
C(41)B	4225(11)	8207(14)	240(7)	85
O(42)B	5048(5)	6248(6)	1146(4)	51
C(43)B	4848(14)	5520(14)	1123(10)	104
C(44)B	4646(30)	5246(25)	745(14)	272
C(45)B	5555(17)	5081(19)	1349(12)	46(8)
C(45)'	5225(21)	4998(24)	1009(15)	64(11)
C(46)B	4664(11)	5327(12)	1455(9)	82
O(47)B	5719(4)	6742(6)	2134(4)	37
C(48)B	5824(7)	6679(9)	2541(6)	45
C(49)B	6087(7)	5932(10)	2690(6)	49
C(50)B	5228(8)	6704(10)	2611(6)	50
C(51)B	6191(7)	7320(9)	2765(6)	41
O(52)B	5324(4)	8542(5)	1954(3)	36
C(53)B	5070(6)	9192(8)	2031(6)	37
C(54)B	5339(9)	9397(9)	2482(6)	59
C(55)B	4463(8)	8997(9)	1966(7)	54
C(56)B	5091(8)	9830(10)	1782(6)	50
C(1)S1	8522(12)	11072(14)	3334(8)	80(7)
C(2)S1	8628(11)	11411(13)	3705(7)	69(6)
C(3)S1	8495(11)	12229(13)	3730(8)	74(6)
C(4)S1	8250(11)	12542(13)	3385(8)	70(6)
C(5)S1	8175(9)	12262(11)	3025(6)	53(4)
C(6)S1	8294(12)	11490(14)	2988(8)	79(6)
C(7)S1	8264(12)	11132(14)	2617(8)	81(7)
C(1)S2	7466(11)	4577(12)	3238(7)	67(5)
C(2)S2	7979(10)	4611(12)	3086(7)	63(5)
C(3)S2	8474(10)	4546(11)	3365(7)	62(5)
C(4)S2	8632(14)	4438(16)	3741(10)	95(8)
C(5)S2	8166(11)	4407(12)	3907(7)	70(6)
C(6)S2	7623(9)	4469(11)	3657(6)	54(5)
C(7)S2	7135(14)	4468(16)	3824(10)	103(9)
C(1)S3	2336(10)	4735(12)	850(7)	65(5)
C(2)S3	2252(12)	4765(14)	1185(9)	80(7)
C(3)S3	2592(12)	4583(14)	1548(8)	79(6)
C(4)S3	3128(12)	4333(13)	1557(8)	75(6)
C(5)S3	3254(11)	4287(13)	1209(8)	75(6)
C(6)S3	2858(10)	4523(11)	844(7)	57(5)
C(7)S3	2987(20)	4521(23)	437(13)	152(14)
C(1)S4	7361(11)	8500(14)	-256(8)	58(6)
C(2)S4	7554(19)	9246(22)	-170(13)	114(12)
C(3)S4	8009(19)	9620(22)	-67(13)	108(11)
C(4)S4	8345(17)	8914(21)	-83(11)	97(10)
C(5)S4	8359(15)	8217(19)	-130(11)	84(8)
C(6)S4	7811(16)	8028(19)	-242(11)	87(9)
C(7)S4	7768(16)	7314(20)	-296(11)	95(10)
C(1)S5	5562(16)	7666(18)	3965(10)	87(9)
C(2)S5	6089(15)	7436(18)	3859(10)	83(8)
C(3)S5	6202(17)	6741(22)	3881(11)	99(10)

C(4)S5	6013(19)	6100(22)	3911(12)	109(11)
C(5)S5	5536(15)	6273(18)	4076(10)	85(8)
C(6)S5	5308(14)	6888(17)	4092(9)	77(8)
C(1)S6	13313(15)	7830(18)	2964(10)	76(8)
C(2)S6	13458(19)	8641(21)	2830(13)	97(10)
C(3)S6	14033(23)	8662(28)	2953(16)	131(15)
C(4)S6	14294(18)	8006(24)	3051(12)	100(11)
C(5)S6	14244(13)	7412(17)	3141(9)	66(7)
C(6)S6	13536(26)	7163(32)	3076(17)	161(20)
C(7)S6	13745(17)	6627(21)	3216(12)	91(10)
C(1)S7	9959(12)	7290(14)	1010(9)	74(6)
C(2)S7	10072(12)	7300(14)	1408(9)	66(6)
C(3)S7	10145(17)	6984(21)	1755(11)	66(9)
C(4)S7	10196(19)	7595(25)	1775(13)	45(9)
C(5)S7	10122(24)	8347(28)	1688(16)	139(17)
C(6)S7	9941(17)	8766(22)	1158(13)	102(11)
C(7)S7	9782(16)	8458(20)	705(12)	78(9)
C(8)S7	9782(16)	7668(19)	683(11)	46(8)
C(9)S7	9898(18)	6971(22)	713(13)	57(9)
C(10)S7	10027(21)	8360(25)	1386(15)	124(13)
C(11)S7	9930(19)	8230(23)	984(14)	66(10)

(a) Isotropic values for those atoms refined anisotropically are calculated using the formula given by W. C. Hamilton, *Acta Cryst.* **1959**, *12*, 609.

Table S3. Anisotropic Thermal Parameters

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Ba(1)A	24.8(5)	26.9(5)	36(1)	-1.7(4)	8.6(5)	-1.8(4)
Ba(2)A	24(1)	40(1)	50(1)	0.9(4)	11(1)	5.5(5)
Cu(3)A	39(1)	39(1)	58(1)	2(1)	20(1)	-9(1)
Cu(4)A	26(1)	43(1)	44(1)	-3(1)	5(1)	4(1)
Cu(5)A	30(1)	35(1)	56(1)	-3(1)	14(1)	-7(1)
Cu(6)A	24(1)	46(1)	49(1)	-1(1)	11(1)	11(1)
O(7)A	27(6)	40(6)	63(8)	-3(5)	2(7)	-13(5)
N(8)A	15(7)	59(8)	37(8)	-5(6)	2(7)	-9(7)
C(9)A	22(8)	43(9)	78(13)	14(7)	12(10)	-18(9)
C(10)A	55(12)	52(11)	106(18)	-4(10)	24(14)	8(11)
C(11)A	52(12)	59(11)	62(13)	-3(10)	4(12)	-19(10)
O(12)A	20(6)	115(11)	105(13)	-8(7)	19(8)	17(9)
N(13)A	25(9)	169(20)	87(15)	-11(11)	16(11)	66(14)
C(14)A	26(14)	567(88)	206(43)	-4(28)	30(21)	251(54)
C(16)A	54(19)	175(35)	432(78)	5(21)	-26(33)	135(43)
O(17)A	24(6)	37(6)	59(8)	-5(5)	18(6)	-13(5)
C(18)A	27(9)	37(9)	75(14)	0(7)	10(11)	-22(9)
C(19)A	52(12)	121(18)	47(12)	8(12)	25(12)	-33(12)
C(20)A	50(13)	58(12)	151(25)	-2(10)	14(16)	-27(14)
C(21)A	30(10)	104(16)	106(18)	-11(10)	48(12)	-56(14)
O(22)A	22(6)	49(6)	51(7)	-2(5)	11(6)	7(5)
C(23)A	16(8)	63(11)	56(12)	7(8)	2(9)	18(9)
C(24)A	35(11)	47(10)	112(18)	8(8)	0(12)	35(11)
C(25)A	21(9)	63(11)	73(14)	-7(8)	21(10)	8(10)
C(26)A	53(13)	93(15)	53(13)	9(11)	0(12)	15(11)
O(27)A	26(6)	48(6)	58(8)	-7(5)	13(6)	-25(6)
C(28)A	48(11)	40(9)	59(13)	-5(8)	19(11)	-10(9)
C(29)A	103(20)	120(19)	48(13)	-22(16)	28(15)	-32(13)
C(30)A	92(19)	90(16)	85(18)	-21(14)	20(17)	-46(14)
C(31)A	115(22)	74(15)	132(24)	18(15)	-13(20)	-75(16)
O(32)A	30(6)	43(6)	44(7)	-9(5)	12(6)	4(5)
C(33)A	48(12)	49(10)	60(13)	-16(9)	6(11)	6(9)
C(34)A	58(16)	89(18)	326(52)	-29(14)	-32(25)	127(26)
C(35)A	286(47)	64(17)	316(51)	80(23)	256(46)	79(23)
C(36)A	328(58)	188(32)	58(17)	-205(38)	50(26)	-6(18)
O(37)A	19(6)	45(6)	79(9)	12(5)	8(7)	-9(6)
C(38)A	44(11)	28(9)	123(19)	15(8)	21(13)	-15(11)
C(39)A	59(17)	41(14)	585(91)	27(13)	67(32)	73(28)
C(40)A	183(33)	78(18)	279(47)	98(21)	114(36)	89(25)
C(41)A	256(51)	165(33)	158(34)	133(35)	53(38)	-22(27)
O(42)A	36(7)	46(6)	47(7)	-4(5)	1(6)	-1(5)
C(43)A	44(11)	45(10)	45(11)	-4(8)	-7(11)	1(8)
C(44)A	33(10)	60(11)	74(14)	-8(9)	11(11)	10(10)
C(45)A	29(9)	89(14)	57(13)	12(10)	5(10)	-9(11)
C(46)A	58(13)	84(14)	72(15)	-28(11)	15(13)	2(12)
O(47)A	27(6)	31(6)	71(8)	-13(5)	19(6)	-8(5)
C(48)A	27(9)	62(11)	54(12)	1(8)	14(10)	-11(9)
C(49)A	46(11)	39(10)	105(18)	-16(8)	14(13)	-16(10)
C(50)A	46(11)	60(12)	89(16)	-14(9)	21(13)	-5(11)
C(51)A	74(14)	37(10)	83(15)	-7(9)	7(14)	2(10)

O(52)A	30(6)	51(7)	55(8)	-1(5)	22(7)	10(6)
C(53)A	32(9)	50(10)	67(13)	2(8)	35(11)	12(9)
C(54)A	48(12)	97(16)	74(15)	5(11)	32(13)	22(12)
C(55)A	51(13)	135(21)	124(23)	31(14)	55(16)	73(18)
C(56)A	148(28)	100(19)	129(25)	-36(19)	60(25)	-35(18)
Ba(1)B	29(1)	54(1)	44(1)	1.3(5)	6(1)	7.4(5)
Ba(2)B	24(1)	38(1)	59(1)	-6.5(4)	10(1)	-7.7(5)
Cu(3)B	33(1)	62(1)	56(2)	2(1)	0(1)	14(1)
Cu(4)B	37(1)	70(1)	66(2)	-4(1)	12(1)	-22(1)
Cu(5)B	33(1)	45(1)	55(1)	-1(1)	13(1)	3(1)
Cu(6)B	24(1)	37(1)	54(1)	-3(1)	6(1)	-2(1)
O(7)B	46(8)	107(10)	54(9)	-4(8)	12(8)	15(7)
N(8)B	30(8)	108(14)	59(11)	-15(9)	38(9)	1(9)
C(9)B	57(17)	367(54)	72(20)	-61(27)	-10(18)	8(27)
C(10)B	84(17)	45(12)	169(26)	15(11)	43(19)	-24(14)
C(11)B	115(23)	62(15)	341(51)	0(14)	175(31)	7(22)
O(12)B	38(7)	48(7)	86(10)	-6(6)	15(8)	-5(6)
N(13)B	21(8)	51(9)	87(12)	-3(7)	24(9)	-20(8)
C(14)B	47(13)	114(20)	194(32)	-18(13)	48(19)	-55(21)
C(15)B	43(12)	156(23)	64(15)	-40(14)	24(13)	8(15)
C(16)B	38(11)	70(12)	71(14)	-11(9)	-4(12)	5(10)
O(17)B	43(7)	60(7)	46(7)	20(6)	25(7)	10(6)
C(18)B	67(15)	66(13)	65(15)	34(11)	-12(13)	7(11)
C(19)B	247(45)	348(54)	57(18)	256(45)	-7(25)	-44(26)
C(20)B	610(101)	143(31)	640(100)	248(50)	621(95)	253(51)
C(21)B	394(80)	488(96)	888(213)	426(80)	-398(117)	-363(121)
O(22)B	16(5)	50(6)	59(8)	-7(5)	0(6)	7(6)
C(23)B	53(12)	42(10)	61(13)	-3(9)	-2(12)	6(9)
C(24)B	42(11)	107(16)	56(13)	-31(11)	23(11)	5(12)
C(25)B	51(13)	114(18)	87(18)	-37(13)	21(14)	-9(14)
C(26)B	66(16)	77(15)	129(23)	-25(12)	-18(17)	-10(14)
O(27)B	49(8)	70(8)	62(9)	-7(6)	7(8)	26(7)
C(28)B	56(14)	91(17)	112(22)	8(13)	29(16)	43(16)
C(29)B	152(29)	78(18)	228(40)	34(18)	124(31)	57(21)
C(30)B	70(15)	95(16)	88(18)	-29(13)	16(16)	18(13)
C(31)B	71(17)	236(33)	123(24)	-51(20)	-23(18)	159(25)
O(32)B	59(8)	66(8)	41(8)	-12(6)	10(7)	-5(6)
C(33)B	53(14)	123(20)	60(16)	-2(13)	20(14)	-4(14)
C(34)B	313(59)	197(35)	73(20)	-171(39)	77(30)	-56(20)
C(35)B	75(19)	369(55)	62(18)	-31(28)	52(19)	17(25)
C(36)B	150(28)	185(30)	135(26)	-89(25)	128(26)	-83(23)
O(37)B	36(7)	53(7)	60(8)	-4(5)	-13(7)	0(6)
C(38)B	37(12)	82(15)	90(18)	16(11)	-22(14)	-18(13)
C(39)B	51(16)	322(48)	165(32)	-77(24)	-39(21)	171(34)
C(40)B	62(16)	119(22)	185(33)	38(16)	-10(21)	24(21)
C(41)B	78(18)	138(22)	75(18)	19(16)	-20(17)	-3(16)
O(42)B	48(7)	44(7)	105(11)	-14(6)	29(8)	-25(7)
C(43)B	147(30)	96(21)	147(30)	-55(21)	42(29)	-53(20)
C(44)B	531(108)	222(47)	186(45)	-285(63)	-21(59)	-68(38)
C(46)B	93(19)	76(16)	169(29)	-49(14)	81(22)	-29(17)
O(47)B	25(6)	59(7)	63(8)	-6(5)	23(7)	-4(6)
C(48)B	44(11)	53(11)	64(14)	-7(9)	5(11)	10(9)
C(49)B	35(10)	63(12)	88(16)	1(9)	17(12)	23(11)
C(50)B	52(11)	68(12)	81(15)	7(10)	35(12)	10(11)
C(51)B	35(9)	59(11)	69(13)	1(8)	28(10)	21(9)
O(52)B	29(6)	40(6)	68(8)	-4(5)	18(7)	-7(5)
C(53)B	29(9)	33(9)	74(14)	3(7)	14(10)	9(9)
C(54)B	75(15)	46(11)	76(15)	8(10)	-15(14)	-22(10)
C(55)B	49(12)	51(11)	109(18)	10(9)	32(13)	-26(11)
C(56)B	41(11)	62(12)	90(16)	2(9)	24(12)	-21(11)

Form of the anisotropic thermal parameter:

$$\exp[-2(\pi^2)[h^2(a^2)U_{11}+k^2(b^2)U_{22}+l^2(c^2)U_{33}+2hk(a^2)(b^2)U_{12}+2hl(a^2)(c^2)U_{13}+2kl(b^2)(c^2)U_{23}]]$$

All values are $\times 10^{-3}$