CHEMISTRY OF MATERIALS

Chem. Mater., 1996, 8(9), 2218-2222, DOI:10.1021/cm950357f

Supplementary Table II. Anisotropic Displacement Coefficients ($Å^2$ x 10^3)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
I(1)	139(3)	139(3)	139(3)	-6(3)	-6(3)	-6(3)
O(1)	1597(307	1597(307	1597(307	56(308	56(308	56(308)
Br(1)	487(85)	487(85)	487(85)	76(52)	76(52)	76(52)
S(1)	131(15)	131(15)	131(15)	39(8)	39(8)	-39(8)
I(2)	111(7)	111(7)	111(7)	26(8)	26(8)	-26(8)
Cu(1)	388(24)	388(24)	388(24)	-46(12)	-46(12)	-46(12)
Mo(1)	105(6)	105(6)	105(6)	31(7)	31(7)	31(7)
N(1)	249(33)	249(33)	82(40)	0	0	0
C(1)	843(152	300(84)	136(32)	-198(100	-201(51)	80(46)
C(2)	1121(197	155(34)	453(106	147(80)	-458(116	-117(50)
C(4)	826(161	1350(265	3978(304	446(197	1252(231	-198(274)
C(3)	1142(179	192(39)	332(66)	-165(86)	-395(96)	171(44)

The anisotropic displacement exponent takes the form $-2\pi^2(h^2(a^*)^2U_{11} + \ldots + 2hk(a^*)(b^*)U_{12})$

Supplementary Table III. H-Atom coordinates (x 10^4) and isotropic displacement coefficients ($Å^2$ x 10^3).

	x	y	z	U
H(1A)	-594	-133	1926	80
H(1B)	-324	440	1900	80
H(2A)	-885	719	2582	80
H(2B)	-1126	133	2666	80
H(4A)	-2118	995	1931	80
H(4B)	-1991	694	2484	80
H(4C)	-1702	1251	2348	80
H(3A)	-1499	255	1815	80
H(3B)	-1211	809	1680	80

2

Supplementary Table I. Structure Factor Tables for $(n\text{-}Bu_4N)_3[Cu_3MoOS_3BrI_3]$

h	k	l	Fo	Fc	σ
-2	2	2	525	538	4
0	2	2	593	544	21
2	2	2	576	539	6
0	0	4	30	31	2
-2	2	4	320	340	12
0	2	4	345	345	5
2	2	4	330	342	6
-4	4	4	374	425	6
-2	4	4	292	341	8
0	4	4	873	867	16
2	4	4	339	346	5
4	4	4	455	416	7
-1	3	5	288	288	5
1	3	5	292	288	4
-2	2	6	921	882	36
0	2	6	484	484	6
2	2	6	937	891	14
-4	4	6	285	320	4
-2	4	6	309	244	-7
0	4	6	402	367	7
2	4	6	319	243	-4
4	4	6	323	321	6
-6	6	6	223	231	6
-4	6	6	209	232	3
-2	6	6	332	341	4
0	6	6	489	430	10
2	6	6	361	350	7
4	6	6	244	231	4
6	6	6	255	237	4
-1	3	7	84	87	2
1	3	7	90	87	2
-3	5	7	92	97	3
-1	5	7	14	17	-4
1	5	7	14	17	3
3	5	7	97	97	1
0	0	8	501	507	5
-2	2	8	567	561	27
0	2	8	448	454	6
2	2	8	577	574	4
-4	4	8	291	303	21
-2	4	8	176	197	5
0	4	8	349	366	6
2	4	8	185	204	4
4	4	8	294	293	6
-6	6	8	83	89	2
-4	6	8	307	365	-3
-2	6	8	385	401	12
0	6	8	121	123	2
2	6	8	409	402	5
4	6	8	349	361	3
6	6	8	98	95	1
-8	8	8	118	132	4
-6	8	8	176	206	3
-4	8	8	282	303	3
-2	8	8	453	462	3
0	8	8	564	561	19
2	8	8	504	467	11
4	8	8	316	306	5
6	8	8	204	211	4
8	8	8	143	134	2
-1	3	9	69	67	4
1	3	9	70	67	2
-3	5	9	73	73	2
-1	5	9	12	23	-5
1	5	9	9	23	-5
3	5	9	72	73	1
-5	7	9	40	43	3
-3	7	9	69	68	3
-1	7	9	33	43	4
1	7	9	32	43	3
3	7	9	73	68	2
5	7	9	37	43	2
0	0	10	159	155	4
-2	2	10	423	432	17
0	2	10	361	313	7
2	2	10	442	431	4
-4	4	10	426	439	34
-2	4	10	291	289	9
0	4	10	424	404	9
2	4	10	299	294	4
4	4	10	441	433	3
-6	6	10	123	149	3
-4	6	10	220	227	10
-2	6	10	68	68	3
0	6	10	62	64	2
2	6	10	68	64	2
4	6	10	228	222	2
6	6	10	155	141	4
-8	8	10	131	153	2
-6	8	10	203	235	3
-4	8	10	69	71	1
-2	8	10	300	290	11
0	8	10	482	474	13
2	8	10	313	290	6
4	8	10	76	72	1
6	8	10	239	234	2
8	8	10	156	152	2
-10	10	10	10	68	-10
-8	10	10	66	61	4
-6	10	10	192	203	2
-4	10	10	130	141	2
-2	10	10	187	197	2
0	10	10	415	425	15
2	10	10	212	198	6
4	10	10	152	136	4
6	10	10	221	202	3
8	10	10	79	63	2
10	10	10	24	68	-12
-1	3	11	11	23	-5
1	3	11	10	23	-5
-3	5	11	48	44	3
-1	5	11	30	22	5
1	5	11	38	22	4
3	5	11	54	44	2
-5	7	11	10	27	-5
-3	7	11	12	18	-5
-1	7	11	23	24	-6
1	7	11	10	24	-5
3	7	11	11	18	-4
5	7	11	14	27	-4
-7	9	11	11	10	-5
-5	9	11	22	10	5
-3	9	11	10	32	-4
-1	9	11	16	8	-6
1	9	11	12	8	-4
3	9	11	15	32	-4
5	9	11	13	10	-4
7	9	11	12	10	-4
0	0	12	350	335	4
-2	2	12	466	458	21
0	2	12	242	222	5
2	2	12	476	458	4
-4	4	12	273	271	23
-2	4	12	293	284	10
0	4	12	48	47	2
2	4	12	304	280	6
4	4	12	288	271	5
-6	6	12	193	205	13
-4	6	12	54	57	3
-2	6	12	90	96	5
0	6	12	54	51	4
2	6	12	87	100	2
4	6	12	58	57	2
6	6	12	203	208	2
-8	8	12	100	102	3
-6	8	12	112	127	2
-4	8	12	77	85	4
-2	8	12	190	202	9
0	8	12	137	126	5
2	8	12	200	203	7
4	8	12	86	84	1
6	8	12	126	130	1
8	8	12	117	104	2
-10	10	12	77	104	2
-8	10	12	65	76	2
-6	10	12	68	85	2
-4	10	12	73	86	2
-2	10	12	93	89	3
0	10	12	104	104	3
2	10	12	97	93	2
4	10	12	85	88	2
6	10	12	89	83	2
8	10	12	75	78	2
10	10	12	97	106	2
-10	12	12	70	85	3
-8	12	12	77	90	3
-6	12	12	111	140	3
-4	12	12	59	56	3
-2	12	12	115	115	2
0	12	12	104	79	4
2	12	12	127	119	4
4	12	12	66	56	3
6	12	12	141	139	2
8	12	12	96	92	3
10	12	12	96	85	2
-1	3	13	11	15	-6
1	3	13	14	15	-6
-3	5	13	10	15	-5
-1	5	13	14	12	-6
1	5	13	11	12	-5
3	5	13	12	16	-6
-5	7	13	11	9	-5
-3	7	13	12	20	-6
-1	7	13	12	6	-6
1	7	13	18	6	-6
3	7	13	17	20	-7
5	7	13	12	9	-4
-7	9	13	10	9	-7
-5	9	13	16	12	-6
-3	9	13	12	5	-6
-1	9	13	12	8	-6
1	9	13	15	8	-6
3	9	13	12	5	-5
5	9	13	19	12	-6
7	9	13	16	9	-6
-9	11	13	14	6	-6
-7	11	13	14	10	-7
-5	11	13	13	17	-6
-3	11	13	20	10	-5
-1	11	13	12	12	-5
1	11	13	17	12	-5
3	11	13	26	10	5
5	11	13	15	17	-6
7	11	13	16	10	-5
9	11	13	31	6	5
0	0	14	255	260	3
-2	2	14	84	89	5
0	2	14	72	71	2
2	2	14	88	91	2
-4	4	14	179	168	10
-2	4	14	60	59	4
0	4	14	153	170	2
2	4	14	64	56	2
4	4	14	184	165	6
-6	6	14	71	67	7
-4	6	14	116	120	7
-2	6	14	14	25	-6
0	6	14	87	82	4
2	6	14	18	21	-6
4	6	14	123	117	3
6	6	14	80	63	5
-8	8	14	18	18	-18
-6	8	14	74	88	5
-4	8	14	83	89	6
-2	8	14	54	69	5
0	8	14	135	142	4
2	8	14	59	68	4
4	8	14	91	91	3
6	8	14	84	89	2
8	8	14	15	19	-7
-10	10	14	83	93	4
-8	10	14	43	44	5
-6	10	14	71	99	3
-4	10	14	120	126	7
-2	10	14	44	44	4
0	10	14	128	115	5
2	10	14	41	42	4
4	10	14	127	127	2
6	10	14	92	99	2
8	10	14	55	46	3
10	10	14	108	95	3
-8	12	14	19	20	-8
-6	12	14	34	36	4
-4	12	14	45	44	3
-2	12	14	47	50	4
0	12	14	41	64	4
2	12	14	43	48	3
4	12	14	51	42	4
6	12	14	46	38	5
8	12	14	27	22	6
-4	14	14	51	61	5
-2	14	14	45	63	5
0	14	14	131	145	7
2	14	14	52	61	5
4	14	14	59	64	4
-1	3	15	12	13	-6
1	3	15	12	13	-6
-3	5	15	11	3	-6
-1	5	15	13	13	-6
1	5	15	14	13	-6
3	5	15	12	3	-6
-5	7	15	16	10	-6
-3	7	15	19	12	-6
-1	7	15	13	3	-6
1	7	15	25	3	-8
3	7	15	24	12	-10
5	7	15	15	10	-7
-7	9	15	12	9	-6
-5	9	15	13	13	-7
-3	9	15	13	18	-6
-1	9	15	20	6	-7
1	9	15	17	6	-7
3	9	15	12	18	-6
5	9	15	13	13	-5
7	9	15	14	9	-5
-9	11	15	14	1	-10
-7	11	15	11	5	-8
-5	11	15	21	14	-7
-3	11	15	19	7	-7
-1	11	15	15	8	-6
1	11	15	13	8	-7
3	11	15	13	7	-5
5	11	15	13	14	-5
7	11	15	17	5	-6
9	11	15	22	1	-8
-5	13	15	22	10	-7
-3	13	15	14	10	-6
-1	13	15	19	10	-5
1	13	15	17	10	-5
3	13	15	24	10	5
5	13	15	22	10	6
0	0	16	49	59	6
-2	2	16	173	155	8
0	2	16	61	55	5
2	2	16	173	155	2
-4	4	16	78	83	6
-2	4	16	97	92	4
0	4	16	30	45	7
2	4	16	98	94	2
4	4	16	82	79	3
-6	6	16	107	116	12
-4	6	16	34	23	5
-2	6	16	77	90	6
0	6	16	45	37	4
2	6	16	76	86	3
4	6	16	21	19	-7
6	6	16	114	114	2
-8	8	16	87	98	14
-6	8	16	107	128	8
-4	8	16	35	40	7
-2	8	16	91	89	4
0	8	16	102	110	5
2	8	16	92	88	4
4	8	16	47	43	4
6	8	16	115	126	2
8	8	16	101	97	2
-8	10	16	35	21	7
-6	10	16	48	45	5
-4	10	16	48	49	3
-2	10	16	53	54	3
0	10	16	71	63	5
2	10	16	54	54	5
4	10	16	51	47	5
6	10	16	49	45	4
8	10	16	39	21	5
-4	12	16	38	40	5
-2	12	16	70	73	4
0	12	16	20	18	-8
2	12	16	75	70	5
4	12	16	50	38	4
-1	3	17	26	7	-7
1	3	17	13	7	-7
-3	5	17	12	5	-6
-1	5	17	12	12	-6
1	5	17	14	12	-7
3	5	17	16	5	-6
-5	7	17	14	5	-6
-3	7	17	16	7	-7
-1	7	17	12	6	-6
1	7	17	13	6	-7
3	7	17	17	7	-7
5	7	17	16	5	-7
-7	9	17	18	5	-7
-5	9	17	16	10	-7
-3	9	17	25	3	-7
-1	9	17	13	6	-7
1	9	17	12	6	-6
3	9	17	13	3	-7
5	9	17	22	10	-8
7	9	17	16	5	-5
-3	11	17	19	13	-7
-1	11	17	12	10	-6
1	11	17	12	10	-6
3	11	17	14	13	-7
0	0	18	193	184	2
-2	2	18	117	105	8
0	2	18	91	85	2
2	2	18	119	107	3
-4	4	18	121	118	10
-2	4	18	94	85	3
0	4	18	79	83	3
2	4	18	94	86	2
4	4	18	127	122	2
-6	6	18	92	87	13
-4	6	18	66	58	4
-2	6	18	66	69	3
0	6	18	105	108	5
2	6	18	65	66	3
4	6	18	64	61	8
6	6	18	97	89	3
-6	8	18	44	60	4
-4	8	18	24	48	-7
-2	8	18	45	57	5
0	8	18	21	40	-7
2	8	18	51	56	4
4	8	18	32	47	7
6	8	18	49	60	5
0	10	18	18	12	-7
-1	3	19	13	3	-6
1	3	19	13	3	-6
-3	5	19	20	1	-7
-1	5	19	13	3	-7
1	5	19	13	3	-6
3	5	19	13	1	-6
-3	7	19	19	6	-7
-1	7	19	16	7	-7
1	7	19	25	7	-7
3	7	19	25	6	-8
0	0	20	112	113	3
-2	2	20	21	33	-15
0	2	20	57	62	4
2	2	20	29	35	-11
-2	4	20	40	26	7
0	4	20	37	26	8
2	4	20	36	26	8