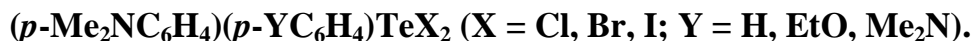


Australian Journal of Chemistry

Observation of Secondary Te $\cdots\pi$ and X \cdots X Bonding in

Para-Substituted Diphenyltellurium Dihalides.



Jens Beckmann,^a * Dainis Dakternieks,^a Andrew Duthie,^a Cassandra Mitchell^a and
Markus Schürmann^b

^a Centre for Chiral and Molecular Technologies, Deakin University, Geelong 3217, Australia ¹

^b Lehrstuhl für Anorganische Chemie II, Universität Dortmund, D-44221 Dortmund, Germany

Accessory Materials

- Figure A1. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeCl}_2$ (**1**).
Figure A2. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeBr}_2$ (**2**).
Figure A3. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeI}_2$ (**3**).
Figure A4. DTA trace of Ph_2TeI_2 .
Table A1. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for **1**.
Table A2. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for **1**.
Table A3. Selected geometric parameters (Å, °) for **1**.
Table A4. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for **2**.
Table A5. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for **2**.

* Corresponding author. Present address: Institut für Chemie, Freie Universität Berlin, Fabeckstraße 34-36, D-14195 Berlin, Germany, E-mail: beckmann@chemie.fu-berlin.de

- Table A6. Selected geometric parameters (\AA , $^\circ$) for **2**.
- Table A7. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in \AA^2) for **3**.
- Table A8. Anisotropic displacement parameters (in \AA^2) for **3**.
- Table A9. Selected geometric parameters (\AA , $^\circ$) for **3**.
- Table A10. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in \AA^2) for **4**.
- Table A11. Anisotropic displacement parameters (in \AA^2) for **4**.
- Table A12. Selected geometric parameters (\AA , $^\circ$) for **4**.
- Table A13. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in \AA^2) for **5**.
- Table A14. Anisotropic displacement parameters (in \AA^2) for **5**.
- Table A15. Selected geometric parameters (\AA , $^\circ$) for **5**.

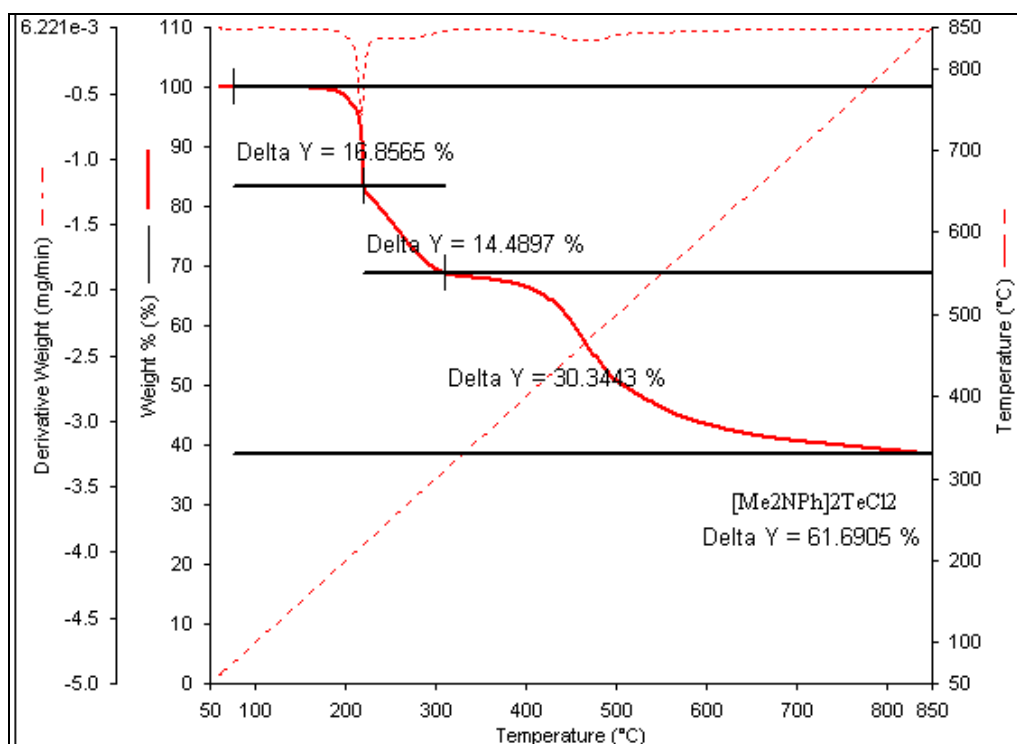


Figure A 1. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeCl}_2$ (1).

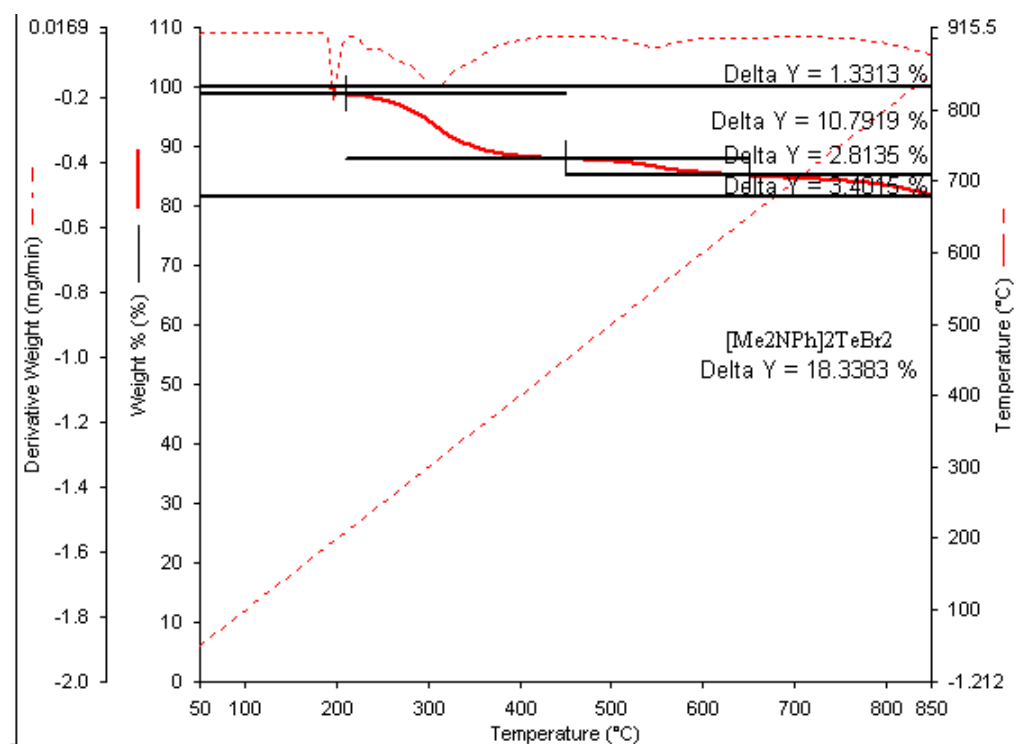


Figure A 2. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeBr}_2$ (2).

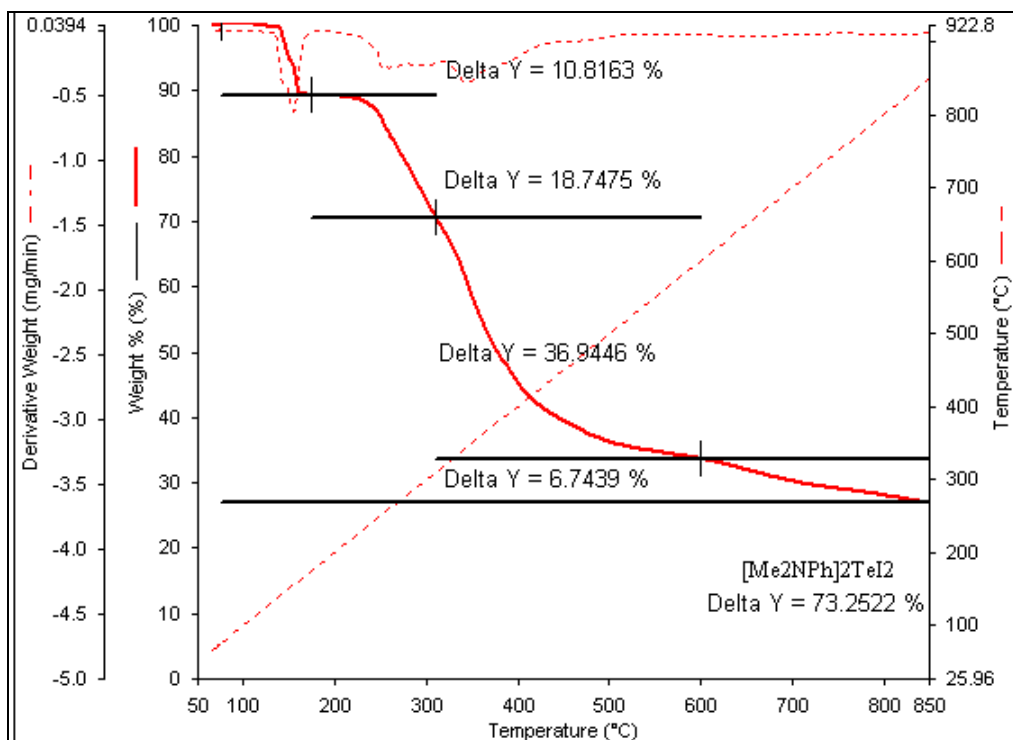


Figure A 3. DTA trace of $(p\text{-Me}_2\text{NC}_6\text{H}_4)_2\text{TeI}_2$ (3)

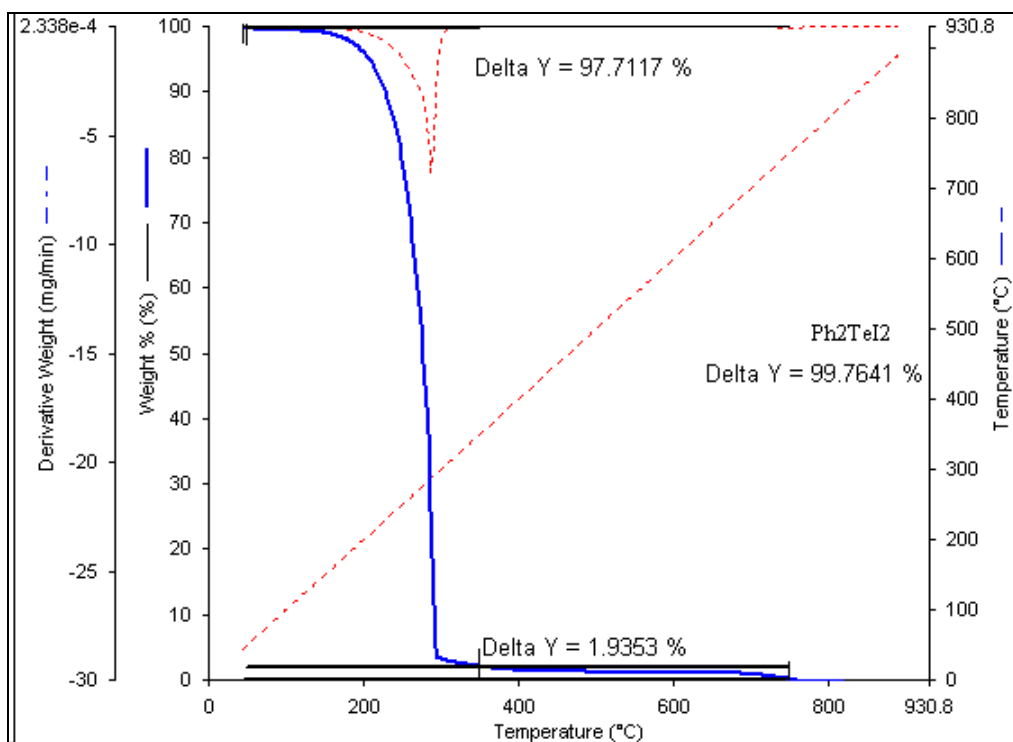


Figure A 4. DTA trace of Ph_2TeI_2 .

Table A1. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for 1.

Atom	Wyck.	Symm.	x	y	z	U
C1	4e	1	0.2656(2)	0.89561(15)	0.33922(11)	
C2	4e	1	0.1607(2)	0.80803(16)	0.33718(12)	
H2	4e	1	0.09000	0.79680	0.28910	0.0290
C3	4e	1	0.1579(2)	0.73683(16)	0.40453(12)	
H3	4e	1	0.08740	0.67610	0.40160	0.0300
C4	4e	1	0.2594(2)	0.75391(16)	0.47759(12)	
C5	4e	1	0.3670(2)	0.84177(17)	0.47687(12)	
H5	4e	1	0.43910	0.85340	0.52430	0.0340
C6	4e	1	0.3704(2)	0.91113(17)	0.40928(12)	
H6	4e	1	0.44420	0.96950	0.41050	0.0320
C7	4e	1	0.1345(3)	0.60382(19)	0.54754(15)	
H7A	4e	1	0.14740	0.56480	0.60090	0.0580
H7B	4e	1	0.14130	0.54910	0.50310	0.0580
H7C	4e	1	0.03470	0.64070	0.53960	0.0580
C8	4e	1	0.3256(3)	0.7292(2)	0.62556(14)	
H8A	4e	1	0.31210	0.67340	0.66840	0.0680
H8B	4e	1	0.27860	0.80070	0.63880	0.0680
H8C	4e	1	0.43450	0.74090	0.62290	0.0680
C11	4e	1	0.2402(2)	0.89499(16)	0.14525(11)	
C12	4e	1	0.1661(2)	0.92556(16)	0.06784(12)	
H12	4e	1	0.11280	0.99520	0.06140	0.0300
C13	4e	1	0.1699(2)	0.85507(17)	0.00059(12)	
H13	4e	1	0.11880	0.87700	-0.05160	0.0310
C14	4e	1	0.2486(2)	0.75086(15)	0.00813(12)	
C15	4e	1	0.3179(2)	0.71945(16)	0.08801(12)	
H15	4e	1	0.36660	0.64810	0.09590	0.0290
C16	4e	1	0.3153(2)	0.79164(16)	0.15456(11)	
H16	4e	1	0.36530	0.77040	0.20720	0.0280
C17	4e	1	0.2133(3)	0.72922(18)	-0.14164(13)	
H17A	4e	1	0.22770	0.67130	-0.18280	0.0510
H17B	4e	1	0.27560	0.79540	-0.15080	0.0510
H17C	4e	1	0.10570	0.75120	-0.14680	0.0510
C18	4e	1	0.3490(3)	0.58154(17)	-0.05179(13)	
H18A	4e	1	0.34370	0.54470	-0.10590	0.0490
H18B	4e	1	0.30870	0.53050	-0.01250	0.0490
H18C	4e	1	0.45530	0.60000	-0.03200	0.0490
Cl1	4e	1	-0.03087(6)	1.02128(4)	0.23537(3)	
Cl2	4e	1	0.54102(6)	1.01500(4)	0.24993(3)	
N1	4e	1	0.2536(2)	0.68828(15)	0.54611(11)	
N2	4e	1	0.2592(2)	0.68444(14)	-0.05917(10)	
Te	4e	1	0.25531(1)	1.01216(1)	0.24173(1)	

Table A2. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for 1.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C1	0.0260(9)	0.0218(9)	0.0170(8)	0.0031(7)	0.0041(7)	0.0004(7)
C2	0.0259(9)	0.026(1)	0.0210(9)	0.0016(8)	0.0030(7)	-0.0020(7)
C3	0.0277(10)	0.0237(9)	0.0238(10)	0.0004(7)	0.0071(8)	-0.0009(7)
C4	0.031(1)	0.0244(9)	0.0202(9)	0.0093(8)	0.0066(8)	-0.0003(7)
C5	0.0325(10)	0.0287(10)	0.0211(9)	0.0045(8)	-0.0025(8)	-0.0022(8)
C6	0.0275(10)	0.0240(9)	0.0275(10)	-0.0010(8)	0.0022(8)	-0.0038(8)
C7	0.0457(13)	0.0351(12)	0.0394(12)	0.010(1)	0.0216(10)	0.0117(10)
C8	0.0705(18)	0.0436(13)	0.0212(11)	0.0124(12)	0.0015(11)	0.0057(9)
C11	0.0261(9)	0.0220(9)	0.0192(9)	-0.0012(7)	0.0054(7)	-0.0007(7)
C12	0.0266(9)	0.0242(9)	0.0253(10)	0.0037(8)	0.0033(7)	0.0013(7)
C13	0.0271(9)	0.0298(10)	0.0210(9)	0.0017(8)	0.0004(7)	0.0014(8)
C14	0.0241(9)	0.0234(9)	0.0228(9)	-0.0049(7)	0.0056(7)	-0.0008(7)
C15	0.028(1)	0.0195(9)	0.0248(10)	-0.0001(7)	0.0066(8)	0.0028(7)
C16	0.0285(9)	0.0224(9)	0.0187(9)	-0.0014(7)	0.0044(7)	0.0039(7)
C17	0.0467(13)	0.0335(11)	0.0215(10)	-0.0044(9)	0.0050(9)	-0.0026(8)
C18	0.0451(12)	0.0239(10)	0.0308(11)	0.0002(9)	0.0148(9)	-0.0015(8)
C11	0.0284(2)	0.0331(3)	0.0296(3)	0.00689(19)	0.00392(19)	0.00160(19)
C12	0.0279(2)	0.0337(3)	0.0308(3)	-0.00507(19)	0.00550(19)	0.00044(19)
N1	0.0476(11)	0.0308(9)	0.0224(9)	0.0065(8)	0.0068(8)	0.0049(7)
N2	0.0355(9)	0.0273(9)	0.0219(8)	0.0003(7)	0.0058(7)	-0.0029(7)
Te	0.02793(9)	0.01903(8)	0.01998(8)	0.00065(4)	0.00475(5)	-0.00025(4)

Table A3. Selected geometric parameters (Å, °) for 1.

Te—C11	2.523(1)	C6—C1	1.393(3)
Te—C12	2.514(1)	C4—N1	1.368(3)
Te—C1	2.100(2)	C11—C12	1.397(3)
Te—C11	2.090(2)	C12—C13	1.382(3)
C1—C2	1.390(3)	C13—C14	1.415(3)
C2—C3	1.388(3)	C14—C15	1.420(3)
C3—C4	1.416(3)	C15—C16	1.384(3)
C4—C5	1.411(3)	C16—C11	1.392(3)
C5—C6	1.378(3)	C14—N2	1.363(3)
C11—Te—C12	176.71(2)	C6—C1—C2	119.57(17)
C11—Te—C1	90.53(5)	C6—C1—Te	119.83(13)
C11—Te—C11	91.51(5)	Te—C11—C12	119.21(13)
C12—Te—C1	91.07(5)	C11—C12—C13	120.42(18)
C12—Te—C11	91.14(5)	C12—C13—C14	121.17(18)
C1—Te—C11	97.27(7)	C13—C14—N2	121.01(17)
Te—C1—C2	120.40(13)	C13—C14—C15	117.43(17)
C1—C2—C3	120.77(17)	C14—C15—C16	120.73(17)
C3—C4—N1	121.55(18)	C15—C16—C11	120.75(17)
C3—C4—C5	117.19(17)	C16—C11—Te	121.08(14)
C4—C5—C6	121.82(18)	C16—C11—C12	119.41(17)
C5—C6—C1	120.01(18)		

Table A4. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for 2.

Atom	Wyck.	x	y	z	U
C1	4e	0.7390(7)	0.6443(5)	0.6544(4)	
C6	4e	0.6568(8)	0.6650(6)	0.5840(4)	
H6	4e	0.59310	0.72580	0.57960	0.0730
C5	4e	0.6660(7)	0.5954(6)	0.5162(4)	
H5	4e	0.61060	0.61290	0.46740	0.0710
C4	4e	0.7518(8)	0.5052(6)	0.5205(5)	
C3	4e	0.8331(8)	0.4811(6)	0.5943(4)	
H3	4e	0.89250	0.41800	0.59950	0.0620
C2	4e	0.8263(7)	0.5498(5)	0.6596(4)	
H2	4e	0.88170	0.53250	0.70850	0.0550
C8	4e	0.7068(9)	0.4801(6)	0.3765(4)	
H8A	4e	0.72510	0.42440	0.33740	0.1330
H8B	4e	0.75640	0.54770	0.36470	0.1330
H8C	4e	0.60200	0.49350	0.37410	0.1330
C7	4e	0.8630(9)	0.3518(6)	0.4564(4)	
H7A	4e	0.85620	0.31730	0.40400	0.1260
H7B	4e	0.83910	0.29850	0.49590	0.1260
H7C	4e	0.96220	0.37870	0.47060	0.1260
C11	4e	0.7611(8)	0.6470(5)	0.8449(4)	
C16	4e	0.6737(7)	0.5527(5)	0.8376(4)	
H16	4e	0.61700	0.53720	0.78880	0.0590
C15	4e	0.6700(7)	0.4809(6)	0.9031(4)	
H15	4e	0.61440	0.41590	0.89680	0.0610
C14	4e	0.7505(8)	0.5059(6)	0.9793(5)	
C13	4e	0.8451(8)	0.6030(6)	0.9830(4)	
H13	4e	0.90520	0.61900	1.03070	0.0730
C12	4e	0.8474(7)	0.6701(6)	0.9191(4)	
H12	4e	0.90700	0.73320	0.92350	0.0640
C18	4e	0.6404(7)	0.3417(6)	1.0413(4)	
H18A	4e	0.64650	0.30590	1.09330	0.1090
H18B	4e	0.67190	0.29100	1.00200	0.1090
H18C	4e	0.53980	0.36400	1.02530	0.1090
C17	4e	0.7968(9)	0.4802(7)	1.1279(4)	
H17A	4e	0.78040	0.42610	1.16850	0.1410
H17B	4e	0.74840	0.54850	1.13930	0.1410
H17C	4e	0.90140	0.49310	1.12840	0.1410
N1	4e	0.7606(7)	0.4432(5)	0.4544(4)	
N2	4e	0.7351(7)	0.4382(5)	1.0466(4)	
Br2	4e	0.45366(8)	0.77137(7)	0.74388(5)	
Br1	4e	1.04634(8)	0.77132(7)	0.75614(5)	
Te1	4e	0.75006(6)	0.76037(2)	0.75002(4)	

Table A5. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for 2.

Atom	<i>U</i>₁₁	<i>U</i>₂₂	<i>U</i>₃₃	<i>U</i>₁₂	<i>U</i>₁₃	<i>U</i>₂₃
C1	0.040(5)	0.048(4)	0.036(4)	-0.003(3)	0.004(3)	0.000(4)
C6	0.057(6)	0.057(5)	0.067(6)	0.012(4)	0.002(4)	-0.001(5)
C5	0.056(5)	0.074(5)	0.044(5)	0.000(4)	-0.007(4)	-0.006(4)
C4	0.061(6)	0.037(4)	0.048(5)	-0.001(4)	0.015(4)	-0.003(4)
C3	0.079(6)	0.039(4)	0.041(4)	0.007(4)	0.022(4)	0.000(4)
C2	0.045(4)	0.050(5)	0.044(4)	0.011(3)	0.007(4)	0.009(4)
C8	0.133(8)	0.077(6)	0.054(6)	-0.022(6)	0.005(5)	-0.017(5)
C7	0.128(8)	0.061(5)	0.069(6)	-0.023(5)	0.037(5)	-0.012(5)
C11	0.054(6)	0.035(4)	0.049(5)	-0.002(3)	0.015(4)	-0.002(4)
C16	0.065(5)	0.048(5)	0.035(4)	0.002(4)	0.007(4)	0.000(4)
C15	0.056(5)	0.044(5)	0.054(5)	-0.004(4)	0.009(4)	-0.009(4)
C14	0.060(6)	0.060(6)	0.045(5)	0.022(4)	0.009(4)	-0.002(4)
C13	0.074(6)	0.057(5)	0.049(5)	-0.016(4)	-0.004(4)	-0.002(4)
C12	0.058(5)	0.051(5)	0.049(5)	-0.015(4)	-0.001(4)	-0.002(4)
C18	0.089(6)	0.058(5)	0.080(6)	-0.008(4)	0.045(5)	0.011(5)
C17	0.130(9)	0.103(8)	0.047(6)	0.009(6)	0.000(5)	0.009(5)
N1	0.101(6)	0.052(4)	0.051(4)	0.003(4)	0.006(4)	-0.004(4)
N2	0.089(5)	0.066(5)	0.046(4)	0.012(4)	0.020(4)	0.014(4)
Br2	0.0445(6)	0.0722(6)	0.0697(6)	0.0074(4)	0.0075(5)	-0.0048(5)
Br1	0.0444(6)	0.0727(6)	0.0696(6)	-0.0070(4)	0.0083(5)	0.0031(5)
Te1	0.04391(16)	0.03880(16)	0.04730(17)	0.0001(3)	0.00844(11)	-0.0002(3)

Table A6. Selected geometric parameters (Å, °) for 2.

Te1—Br1	2.680(1)	C6—C1	1.339(9)
Te1—Br2	2.681(1)	Te1—C11	2.078(6)
Te1—C1	2.109(6)	C11—C12	1.412(9)
C1—C2	1.383(9)	C12—C13	1.335(10)
C2—C3	1.370(9)	C13—C14	1.447(10)
C3—C4	1.389(10)	C14—N2	1.402(10)
C4—N1	1.337(10)	C14—C15	1.421(10)
C4—C5	1.333(10)	C15—C16	1.392(9)
C5—C6	1.413(10)	C16—C11	1.382(9)
Br1—Te1—Br2	174.35(3)	C4—C5—C6	121.70(67)
Br1—Te1—C1	91.47(18)	C5—C6—C1	120.62(62)
Br1—Te1—C11	92.23(20)	C6—C1—C2	117.87(61)
Br2—Te1—C1	92.27(18)	Te1—C11—C12	120.52(48)
Br2—Te1—C11	91.48(20)	C11—C12—C13	121.22(62)
C1—Te1—C11	97.47(25)	C12—C13—C14	121.04(66)
Te1—C1—C2	121.22(45)	C13—C14—N2	123.09(64)
C1—C2—C3	121.47(60)	C13—C14—C15	116.92(64)
C2—C3—C4	120.41(65)	C14—C15—C16	120.64(63)
C3—C4—N1	122.26(72)	C15—C16—C11	120.27(59)
C3—C4—C5	117.86(68)	C16—C11—C12	119.7(6)

Table A7. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for 3.

Atom	Wyck.	x	y	z	U
I1	8f	0.59102(9)	0.18461(2)	0.23383(6)	
I2	8f	0.89644(9)	0.17079(3)	0.23397(7)	
I3	8f	0.60427(8)	0.05091(3)	0.27141(6)	
I4	8f	0.91065(8)	0.05292(3)	0.27133(6)	
I5	8f	0.59255(8)	-0.07756(3)	0.23561(6)	
I6	8f	0.89823(8)	-0.06736(3)	0.23459(6)	
I7	8f	0.59711(8)	-0.18837(3)	0.25009(7)	
I8	8f	0.90159(9)	-0.20517(3)	0.24959(7)	
Te1	8f	0.74525(9)	0.18090(3)	0.23497(7)	
Te2	8f	0.7565(1)	0.05526(3)	0.27006(7)	
Te3	8f	0.74560(9)	-0.06948(3)	0.23651(7)	
Te4	8f	0.75051(8)	-0.19399(3)	0.24970(6)	
N1	8f	0.6091(10)	0.2646(3)	-0.0523(8)	
N2	8f	0.9019(11)	0.2673(3)	0.5110(9)	
N3	8f	0.6139(9)	0.1351(3)	-0.0263(8)	
N4	8f	0.9056(9)	0.1457(3)	0.5408(8)	
N5	8f	0.5889(11)	0.0236(3)	-0.0250(8)	
N6	8f	0.8762(10)	0.0067(3)	0.5383(8)	
N7	8f	0.6200(11)	-0.1158(3)	-0.0486(8)	
N8	8f	0.9079(10)	-0.1027(3)	0.5141(8)	
C1	8f	0.7102(13)	0.2107(5)	0.1428(10)	
C2	8f	0.6739(14)	0.2360(4)	0.1452(11)	
H2A	8f	0.67220	0.24140	0.19090	0.0550
C3	8f	0.6395(13)	0.2541(4)	0.0813(11)	
H3A	8f	0.61330	0.27070	0.08440	0.0550
C4	8f	0.6437(13)	0.2475(4)	0.0105(11)	
C5	8f	0.6845(12)	0.2213(4)	0.0116(9)	
H5A	8f	0.69010	0.21630	-0.03240	0.0550
C6	8f	0.7159(13)	0.2032(4)	0.0738(10)	
H6A	8f	0.74100	0.18620	0.07130	0.0500
C7	8f	0.5562(12)	0.2881(4)	-0.0524(10)	
H7A	8f	0.56810	0.29330	-0.00030	0.0850
H7B	8f	0.50320	0.28150	-0.07820	0.0850
H7C	8f	0.56290	0.30490	-0.07870	0.0850
C8	8f	0.5973(12)	0.2535(3)	-0.1273(9)	
H8A	8f	0.63400	0.23820	-0.12040	0.0940
H8B	8f	0.60480	0.26900	-0.15680	0.0940
H8C	8f	0.54520	0.24600	-0.15420	0.0940
C11	8f	0.7925(11)	0.2115(4)	0.3252(10)	
C12	8f	0.7814(12)	0.2083(4)	0.3898(11)	
H12A	8f	0.74920	0.19350	0.39230	0.0520
C13	8f	0.8173(13)	0.2268(4)	0.4511(10)	
H13A	8f	0.80950	0.22380	0.49480	0.0610
C14	8f	0.8634(12)	0.2492(4)	0.4512(11)	
C15	8f	0.8749(12)	0.2530(4)	0.3825(10)	
H15A	8f	0.90640	0.26800	0.37970	0.0480
C16	8f	0.8387(12)	0.2342(4)	0.3212(10)	
H16A	8f	0.84530	0.23680	0.27670	0.0360
C17	8f	0.904(1)	0.2605(4)	0.5892(9)	
H17A	8f	0.86750	0.24520	0.58340	0.1050
H17B	8f	0.89030	0.27770	0.60900	0.1050
H17C	8f	0.95550	0.25430	0.62430	0.1050
C18	8f	0.9552(10)	0.2899(4)	0.5116(9)	
H18A	8f	0.95040	0.29250	0.46040	0.0870
H18B	8f	1.00770	0.28420	0.54540	0.0870
H18C	8f	0.94290	0.30780	0.52930	0.0870
C21	8f	0.7159(11)	0.0839(4)	0.1754(9)	
C22	8f	0.6678(12)	0.1071(4)	0.1702(10)	
H22A	8f	0.65820	0.11150	0.21230	0.0440
C23	8f	0.6337(11)	0.1240(4)	0.1051(10)	
H23A	8f	0.60060	0.13910	0.10360	0.0550
C24	8f	0.6477(13)	0.1188(4)	0.0409(10)	
C25	8f	0.6960(12)	0.0951(4)	0.0461(9)	

H25A	8f	0.70700	0.09090	0.00490	0.0520
C26	8f	0.7276(12)	0.0780(4)	0.1114(10)	
H26A	8f	0.75780	0.06190	0.11220	0.0460
C27	8f	0.5579(13)	0.1569(4)	-0.0327(9)	
H27A	8f	0.56420	0.16210	0.01780	0.1100
H27B	8f	0.50630	0.14940	-0.06230	0.1100
H27C	8f	0.56560	0.17380	-0.05780	0.1100
C28	8f	0.6191(13)	0.1245(4)	-0.0955(9)	
H28A	8f	0.65990	0.11020	-0.08110	0.1340
H28B	8f	0.63040	0.14050	-0.12100	0.1340
H28C	8f	0.57040	0.11570	-0.12970	0.1340
C31	8f	0.7940(12)	0.0869(4)	0.3571(10)	
C32	8f	0.7928(12)	0.0827(4)	0.4265(10)	
H32A	8f	0.76690	0.06650	0.43280	0.0480
C33	8f	0.8284(12)	0.1017(4)	0.4876(9)	
H33A	8f	0.82650	0.09790	0.53400	0.0490
C34	8f	0.8675(12)	0.1266(4)	0.4805(9)	
C35	8f	0.8696(9)	0.1316(4)	0.4095(9)	
H35A	8f	0.89380	0.14830	0.40280	0.0410
C36	8f	0.8356(11)	0.1119(4)	0.3493(9)	
H36A	8f	0.83980	0.11480	0.30360	0.0360
C37	8f	0.9138(12)	0.1368(3)	0.6168(9)	
H37A	8f	0.87570	0.12210	0.61080	0.1010
H37B	8f	0.90590	0.15340	0.64280	0.1010
H37C	8f	0.96510	0.12910	0.64650	0.1010
C38	8f	0.9577(12)	0.1683(3)	0.5357(9)	
H38A	8f	0.94420	0.17220	0.48250	0.1050
H38B	8f	1.01070	0.16170	0.56110	0.1050
H38C	8f	0.95200	0.18580	0.56000	0.1050
C41	8f	0.6992(12)	-0.0360(4)	0.1523(10)	
C42	8f	0.6609(13)	-0.0128(4)	0.1644(11)	
H42A	8f	0.65930	-0.01020	0.21140	0.0530
C43	8f	0.6251(12)	0.0065(4)	0.1052(9)	
H43A	8f	0.59860	0.02220	0.11320	0.0480
C44	8f	0.6258(13)	0.0040(4)	0.032(1)	
C45	8f	0.6692(13)	-0.0197(4)	0.0238(9)	
H45A	8f	0.67400	-0.02170	-0.02180	0.0500
C46	8f	0.7044(12)	-0.0401(4)	0.0813(9)	
H46A	8f	0.73080	-0.05600	0.07420	0.0470
C47	8f	0.5382(9)	0.0462(3)	-0.0177(9)	
H47A	8f	0.55010	0.04870	0.03560	0.0590
H47B	8f	0.48470	0.04040	-0.04590	0.0590
H47C	8f	0.54650	0.06430	-0.03810	0.0590
C48	8f	0.5794(10)	0.0167(4)	-0.1021(8)	
H48A	8f	0.61570	0.00170	-0.09910	0.0730
H48B	8f	0.58910	0.03380	-0.12520	0.0730
H48C	8f	0.52720	0.01000	-0.13290	0.0730
C51	8f	0.7840(12)	-0.0423(4)	0.3346(9)	
C52	8f	0.7674(12)	-0.0502(4)	0.3964(9)	
H52A	8f	0.73620	-0.06630	0.39230	0.0470
C53	8f	0.7975(12)	-0.0339(4)	0.4621(9)	
H53A	8f	0.78650	-0.03920	0.50270	0.0490
C54	8f	0.8458(12)	-0.0089(4)	0.4704(10)	
C55	8f	0.8584(12)	-0.0012(4)	0.4062(9)	
H55A	8f	0.88750	0.01530	0.40790	0.0450
C56	8f	0.8276(12)	-0.0182(4)	0.341(1)	
H56A	8f	0.83710	-0.01290	0.29940	0.0460
C57	8f	0.8786(11)	-0.0058(3)	0.6062(9)	
H57A	8f	0.83690	-0.01970	0.59280	0.0820
H57B	8f	0.87280	0.00920	0.63780	0.0820
H57C	8f	0.92760	-0.01550	0.63390	0.0820
C58	8f	0.9381(12)	0.0289(4)	0.5505(10)	
H58A	8f	0.93250	0.03590	0.50160	0.0890
H58B	8f	0.98850	0.02010	0.57780	0.0890
H58C	8f	0.93300	0.04490	0.58010	0.0890
C61	8f	0.7170(12)	-0.1663(4)	0.1519(10)	
C62	8f	0.6719(11)	-0.1406(4)	0.1481(10)	

H62A	8f	0.66190	-0.13530	0.18930	0.0340
C63	8f	0.644(1)	-0.1243(4)	0.0819(9)	
H63A	8f	0.61760	-0.10710	0.08080	0.0410
C64	8f	0.6525(12)	-0.1316(4)	0.0169(9)	
C65	8f	0.6970(13)	-0.1568(4)	0.0234(10)	
H65A	8f	0.70680	-0.16250	-0.01770	0.0570
C66	8f	0.7265(12)	-0.1734(4)	0.0903(10)	
H66A	8f	0.75410	-0.19030	0.09190	0.0500
C67	8f	0.5673(11)	-0.0925(4)	-0.0563(9)	
H67A	8f	0.57380	-0.08650	-0.00620	0.0740
H67B	8f	0.51460	-0.09900	-0.08620	0.0740
H67C	8f	0.57800	-0.07630	-0.08180	0.0740
C68	8f	0.6214(12)	-0.1281(4)	-0.1179(8)	
H68A	8f	0.65910	-0.14360	-0.10360	0.0900
H68B	8f	0.63530	-0.11310	-0.14440	0.0900
H68C	8f	0.57080	-0.13560	-0.15120	0.0900
C71	8f	0.7958(12)	-0.1619(4)	0.3346(9)	
C72	8f	0.7922(12)	-0.1640(4)	0.4024(10)	
H72A	8f	0.76360	-0.17930	0.40890	0.0430
C73	8f	0.8277(12)	-0.1452(4)	0.4621(10)	
H73A	8f	0.82290	-0.14780	0.50750	0.0540
C74	8f	0.8725(12)	-0.1214(3)	0.4551(10)	
C75	8f	0.8788(10)	-0.1186(4)	0.3856(9)	
H75A	8f	0.90750	-0.10340	0.37870	0.0430
C76	8f	0.8418(13)	-0.1387(4)	0.3274(11)	
H76A	8f	0.84710	-0.13710	0.28200	0.0460
C77	8f	0.9110(14)	-0.1072(4)	0.5899(10)	
H77A	8f	0.87430	-0.12200	0.58690	0.1210
H77B	8f	0.89820	-0.08930	0.60760	0.1210
H77C	8f	0.96260	-0.11320	0.62530	0.1210
C78	8f	0.9611(12)	-0.0802(3)	0.5074(9)	
H78A	8f	0.95210	-0.07860	0.45460	0.0750
H78B	8f	1.01430	-0.08580	0.53850	0.0750
H78C	8f	0.95120	-0.06170	0.52470	0.0750

Table A8. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for 3.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
I1	0.0350(7)	0.0563(7)	0.0483(6)	0.0037(5)	0.0248(5)	0.0074(5)
I2	0.0402(8)	0.0431(6)	0.0581(6)	0.0046(5)	0.0308(5)	0.0039(5)
I3	0.0376(7)	0.0544(6)	0.0498(6)	-0.0070(5)	0.0274(5)	-0.0086(5)
I4	0.0333(7)	0.0584(6)	0.0421(5)	0.0009(5)	0.0214(5)	-0.0021(5)
I5	0.0340(7)	0.0449(6)	0.0454(6)	-0.0029(5)	0.0219(5)	-0.0030(4)
I6	0.0351(7)	0.0546(6)	0.0490(6)	0.0057(5)	0.0262(5)	0.0114(5)
I7	0.0380(7)	0.0426(6)	0.0564(6)	-0.0028(5)	0.0279(5)	-0.0054(4)
I8	0.0372(8)	0.0438(6)	0.0558(6)	0.0029(5)	0.0269(5)	0.0033(4)
Te1	0.0336(9)	0.0285(7)	0.0419(6)	0.0000(4)	0.0208(5)	0.0003(5)
Te2	0.0324(9)	0.0317(7)	0.0355(5)	0.0001(5)	0.0179(5)	-0.0003(5)
Te3	0.0311(8)	0.0300(7)	0.0365(5)	0.0012(5)	0.0180(5)	0.0018(4)
Te4	0.0332(8)	0.0298(7)	0.0458(6)	-0.0007(4)	0.0216(6)	-0.0015(4)
N1	0.075(12)	0.029(7)	0.037(7)	-0.004(7)	0.016(7)	0.006(5)
N2	0.070(12)	0.051(9)	0.048(8)	0.003(7)	0.025(8)	-0.006(7)
N3	0.053(9)	0.042(7)	0.043(8)	-0.006(6)	0.003(7)	0.011(6)
N4	0.035(8)	0.052(8)	0.046(8)	0.000(6)	0.003(7)	-0.007(7)
N5	0.053(11)	0.045(8)	0.038(7)	0.006(7)	0.017(7)	0.006(6)
N6	0.048(10)	0.043(8)	0.038(7)	-0.011(6)	0.023(7)	0.002(6)
N7	0.061(12)	0.046(8)	0.042(8)	-0.003(7)	0.020(7)	0.002(6)
N8	0.035(9)	0.037(7)	0.040(7)	-0.007(6)	0.013(6)	-0.001(6)
C1	0.036(13)	0.049(11)	0.039(10)	0.001(9)	0.020(9)	0.001(8)
C2	0.065(16)	0.038(11)	0.038(10)	-0.014(10)	0.025(10)	-0.014(8)
C3	0.074(15)	0.027(9)	0.054(11)	-0.001(8)	0.044(10)	-0.007(7)
C4	0.054(13)	0.032(9)	0.045(11)	-0.006(8)	0.014(9)	-0.005(8)
C5	0.056(12)	0.057(11)	0.029(8)	-0.002(8)	0.024(8)	-0.008(7)
C6	0.051(13)	0.034(8)	0.048(10)	-0.008(8)	0.030(9)	-0.007(7)
C7	0.048(11)	0.049(9)	0.061(10)	-0.001(8)	0.012(8)	0.009(7)
C8	0.081(13)	0.056(10)	0.052(10)	-0.016(8)	0.030(9)	-0.008(7)
C11	0.033(11)	0.036(9)	0.044(9)	0.008(8)	0.033(8)	-0.001(7)
C12	0.034(11)	0.037(8)	0.061(11)	0.007(7)	0.022(9)	0.002(8)
C13	0.063(14)	0.056(12)	0.043(9)	0.015(10)	0.034(9)	0.008(8)
C14	0.034(11)	0.049(10)	0.045(10)	0.009(7)	0.006(8)	-0.010(8)
C15	0.050(12)	0.024(8)	0.048(10)	-0.001(7)	0.022(9)	0.003(6)
C16	0.039(12)	0.032(8)	0.026(8)	0.002(7)	0.019(8)	0.000(6)
C17	0.055(11)	0.111(15)	0.04(1)	0.02(1)	0.017(8)	-0.018(9)
C18	0.031(9)	0.074(11)	0.055(10)	0.011(8)	0.007(8)	-0.020(8)
C21	0.017(10)	0.042(9)	0.033(8)	0.008(7)	0.006(7)	-0.003(7)
C22	0.035(11)	0.048(10)	0.031(8)	-0.006(8)	0.018(8)	-0.005(7)
C23	0.040(11)	0.029(9)	0.053(11)	0.002(7)	0.006(9)	0.000(7)
C24	0.061(15)	0.036(9)	0.038(9)	-0.017(8)	0.010(9)	-0.005(8)
C25	0.057(12)	0.041(9)	0.036(8)	0.001(8)	0.023(8)	0.002(6)
C26	0.040(11)	0.038(8)	0.040(9)	0.001(7)	0.021(8)	-0.003(7)
C27	0.095(17)	0.054(10)	0.055(10)	0.003(10)	0.019(10)	0.027(8)
C28	0.111(19)	0.094(14)	0.045(10)	0.006(12)	0.017(11)	0.025(10)
C31	0.017(9)	0.025(8)	0.052(10)	-0.002(7)	0.020(8)	0.000(7)
C32	0.030(11)	0.045(9)	0.045(10)	-0.003(8)	0.017(8)	0.000(8)
C33	0.041(11)	0.046(9)	0.038(8)	0.001(8)	0.021(8)	-0.006(7)
C34	0.044(11)	0.035(9)	0.034(9)	0.007(8)	0.016(8)	-0.009(7)
C35	0.011(7)	0.038(9)	0.040(9)	-0.004(6)	-0.002(6)	-0.008(7)
C36	0.026(9)	0.032(9)	0.031(8)	-0.002(7)	0.012(7)	0.005(6)
C37	0.107(16)	0.049(10)	0.040(9)	-0.002(9)	0.027(9)	-0.015(7)
C38	0.080(15)	0.031(8)	0.065(11)	-0.006(8)	-0.001(10)	-0.010(7)
C41	0.033(12)	0.043(10)	0.028(8)	-0.002(8)	0.009(7)	0.008(7)
C42	0.047(14)	0.04(1)	0.047(10)	0.007(9)	0.021(9)	-0.007(8)
C43	0.060(13)	0.030(8)	0.037(8)	0.002(8)	0.027(8)	-0.007(7)
C44	0.042(12)	0.031(9)	0.038(9)	-0.006(7)	0.016(8)	-0.001(7)
C45	0.052(13)	0.043(10)	0.041(8)	0.002(9)	0.030(8)	-0.002(7)
C46	0.036(12)	0.047(10)	0.042(9)	-0.008(8)	0.024(8)	0.003(7)
C47	0.014(8)	0.050(9)	0.049(8)	-0.003(6)	0.011(6)	0.009(6)
C48	0.035(9)	0.070(11)	0.041(9)	0.015(7)	0.018(7)	0.021(7)
C51	0.029(10)	0.033(9)	0.027(7)	-0.001(7)	0.017(7)	0.002(6)
C52	0.046(12)	0.031(8)	0.040(8)	-0.009(8)	0.019(8)	-0.004(7)
C53	0.045(12)	0.036(9)	0.046(9)	-0.007(7)	0.023(8)	0.007(7)

C54	0.036(11)	0.033(9)	0.042(9)	0.003(7)	0.021(8)	0.000(7)
C55	0.053(13)	0.026(8)	0.041(9)	0.005(7)	0.027(9)	0.004(6)
C56	0.045(13)	0.030(9)	0.038(9)	0.003(8)	0.017(8)	-0.002(7)
C57	0.061(13)	0.033(8)	0.054(9)	0.011(7)	0.011(8)	0.001(7)
C58	0.071(15)	0.036(9)	0.050(9)	-0.011(8)	0.008(9)	-0.001(7)
C61	0.016(10)	0.051(10)	0.033(8)	-0.008(8)	0.008(7)	-0.001(7)
C62	0.018(10)	0.027(8)	0.043(10)	0.003(7)	0.016(8)	-0.008(7)
C63	0.019(9)	0.043(10)	0.035(9)	0.004(7)	0.007(7)	0.000(7)
C64	0.031(11)	0.044(9)	0.035(9)	-0.007(8)	0.020(8)	-0.002(7)
C65	0.068(14)	0.048(10)	0.041(9)	0.003(9)	0.037(9)	-0.007(7)
C66	0.041(12)	0.037(9)	0.044(9)	-0.005(7)	0.016(8)	-0.006(7)
C67	0.031(10)	0.068(11)	0.042(9)	-0.003(8)	0.009(7)	0.021(8)
C68	0.100(16)	0.054(9)	0.027(7)	0.013(9)	0.028(8)	0.005(6)
C71	0.027(11)	0.045(10)	0.028(8)	0.000(8)	-0.001(7)	-0.012(7)
C72	0.038(11)	0.032(8)	0.05(1)	-0.009(7)	0.031(8)	-0.001(7)
C73	0.038(12)	0.05(1)	0.054(10)	-0.011(9)	0.025(8)	-0.003(8)
C74	0.028(10)	0.027(9)	0.048(10)	-0.006(7)	0.018(8)	-0.003(7)
C75	0.012(9)	0.039(9)	0.041(9)	-0.001(6)	-0.002(7)	-0.004(7)
C76	0.039(14)	0.038(10)	0.037(9)	-0.002(8)	0.016(9)	0.011(7)
C77	0.15(2)	0.042(9)	0.046(10)	-0.004(10)	0.040(12)	-0.001(7)
C78	0.066(13)	0.036(8)	0.041(8)	-0.015(8)	0.017(8)	0.002(6)

Table A9. Selected geometric parameters (Å, °) for **3**.

Te1—I1	2.939(3)	Te3—I5	2.937(2)
Te1—I2	2.931(3)	Te3—I6	2.931(2)
Te1—C1	2.107(20)	Te3—C41	2.127(18)
Te1—C11	2.107(18)	Te3—C51	2.113(17)
C1—C2	1.362(32)	C41—C42	1.368(31)
C2—C3	1.390(26)	C42—C43	1.368(24)
C3—C4	1.438(34)	C43—C44	1.425(30)
C4—N1	1.349(23)	C44—N5	1.355(22)
C4—C5	1.427(29)	C44—C45	1.417(31)
C5—C6	1.364(24)	C45—C46	1.380(23)
C6—C1	1.427(32)	C46—C41	1.431(30)
C11—C12	1.363(33)	C51—C52	1.411(31)
C12—C13	1.371(25)	C52—C53	1.364(23)
C13—C14	1.352(31)	C53—C54	1.435(29)
C14—N2	1.348(23)	C54—N6	1.379(23)
C14—C15	1.448(34)	C54—C55	1.409(31)
C15—C16	1.380(24)	C55—C56	1.375(24)
C16—C11	1.388(30)	C56—C51	1.356(29)
Te2—I3	2.924(3)	Te4—I7	2.942(2)
Te2—I4	2.933(3)	Te4—I8	2.930(2)
Te2—C21	2.104(17)	Te4—C61	2.129(19)
Te2—C31	2.095(18)	Te4—C71	2.088(17)
C21—C22	1.380(29)	C61—C62	1.442(28)
C22—C23	1.374(25)	C62—C63	1.371(25)
C23—C24	1.400(33)	C63—C64	1.377(29)
C24—N3	1.388(22)	C64—N7	1.350(21)
C24—C25	1.40(3)	C64—C65	1.407(29)
C25—C26	1.379(24)	C65—C66	1.389(25)
C26—C21	1.377(31)	C66—C61	1.321(32)
C31—C32	1.365(31)	C71—C72	1.345(30)
C32—C33	1.382(24)	C72—C73	1.359(24)
C33—C34	1.403(29)	C73—C74	1.429(29)
C34—N4	1.382(21)	C74—N8	1.347(20)
C34—C35	1.409(28)	C74—C75	1.406(30)
C35—C36	1.388(23)	C75—C76	1.384(24)
C36—C31	1.439(29)	C76—C71	1.424(31)
I1—Te1—I2	174.17(9)	I5—Te3—I6	174.57(8)
I1—Te1—C1	90.64(72)	I5—Te3—C41	90.44(66)
I1—Te1—C11	91.77(62)	I5—Te3—C51	91.82(65)
I2—Te1—C1	92.57(71)	I6—Te3—C41	92.78(66)
I2—Te1—C11	92.64(61)	I6—Te3—C51	92.11(66)
C1—Te1—C11	97.43(70)	C41—Te3—C51	97.16(66)
Te1—C1—C2	120.04(152)	Te3—C41—C42	120.31(138)
C1—C2—C3	121.79(183)	C41—C42—C43	117.91(179)
C2—C3—C4	121.19(176)	C42—C43—C44	123.99(158)
C3—C4—N1	121.61(169)	C43—C44—N5	121.71(155)
C3—C4—C5	114.92(176)	C43—C44—C45	115.70(174)
C4—C5—C6	123.44(171)	C44—C45—C46	122.10(174)
C5—C6—C1	119.52(160)	C45—C46—C41	117.95(149)
C6—C1—Te1	120.50(128)	C46—C41—Te3	117.26(121)
Te1—C11—C12	120.27(134)	Te3—C51—C52	119.33(117)
C11—C12—C13	120.35(176)	C51—C52—C53	119.21(150)
C12—C13—C14	123.31(182)	C52—C53—C54	121.93(166)
C13—C14—N2	125.32(179)	C53—C54—N6	120.12(157)
C13—C14—C15	116.79(189)	C53—C54—C55	116.85(178)
C14—C15—C16	119.44(163)	C54—C55—C56	119.70(155)
C15—C16—C11	120.75(176)	C55—C56—C51	122.95(173)
C16—C11—Te1	120.30(135)	C56—C51—Te3	121.31(132)
I3—Te2—I4	173.93(9)	I7—Te4—I8	174.95(8)
I3—Te2—C21	93.58(61)	I7—Te4—C61	92.23(66)
I3—Te2—C31	91.74(67)	I7—Te4—C71	90.30(66)
I4—Te2—C21	90.86(61)	I8—Te4—C61	90.90(65)
I4—Te2—C31	91.77(67)	I8—Te4—C71	93.21(65)

C21—Te2—C31	97.55(66)	C61—Te4—C71	97.86(65)
Te2—C21—C22	121.58(131)	Te4—C61—C62	118.19(127)
C21—C22—C23	122.27(173)	C61—C62—C63	118.12(166)
C22—C23—C24	121.17(165)	C62—C63—C64	124.45(155)
C23—C24—N3	123.14(159)	C63—C64—N7	122.37(149)
C23—C24—C25	116.41(184)	C63—C64—C65	115.26(176)
C24—C25—C26	121.09(169)	C64—C65—C66	121.02(169)
C25—C26—C21	122.14(161)	C65—C66—C61	122.95(170)
C26—C21—Te2	121.03(122)	C66—C61—Te4	123.13(136)
Te2—C31—C32	122.96(132)	Te4—C71—C72	122.30(125)
C31—C32—C33	122.44(162)	C71—C72—C73	124.18(167)
C32—C33—C34	120.81(170)	C72—C73—C74	120.0(17)
C33—C34—N4	122.59(164)	C73—C74—N8	120.29(147)
C33—C34—C35	118.13(166)	C73—C74—C75	117.78(166)
C34—C35—C36	120.50(146)	C74—C75—C76	119.23(155)
C35—C36—C31	120.44(166)	C75—C76—C71	122.29(176)
C36—C31—Te2	118.48(129)	C76—C71—Te4	120.64(133)

Table A10. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for 4.

Atom	Wyck.	x	y	z	U
C12	8 <i>d</i>	0.24582(4)	0.79711(12)	0.91023(5)	
C11	8 <i>d</i>	0.31687(12)	0.8580(3)	0.7340(2)	
C12	8 <i>d</i>	0.30095(14)	0.8560(4)	0.6503(2)	
H12	8 <i>d</i>	0.28800	0.76590	0.62540	0.0730
C15	8 <i>d</i>	0.34004(19)	1.1225(4)	0.7237(3)	
H15	8 <i>d</i>	0.35370	1.21240	0.74810	0.0920
C13	8 <i>d</i>	0.30449(16)	0.9894(5)	0.6039(3)	
H13	8 <i>d</i>	0.29330	0.98970	0.54770	0.0890
C16	8 <i>d</i>	0.33554(15)	0.9912(4)	0.7714(2)	
H16	8 <i>d</i>	0.34500	0.99300	0.82820	0.0720
C14	8 <i>d</i>	0.32438(17)	1.1205(5)	0.6407(3)	
H14	8 <i>d</i>	0.32730	1.20960	0.60910	0.0940
N1	8 <i>d</i>	0.52932(14)	0.7437(5)	1.0404(2)	
C7	8 <i>d</i>	0.58339(18)	0.8128(6)	1.0106(3)	
H7A	8 <i>d</i>	0.61150	0.81930	1.05580	0.1550
H7B	8 <i>d</i>	0.57500	0.91360	0.98990	0.1550
H7C	8 <i>d</i>	0.59970	0.75180	0.96620	0.1550
C8	8 <i>d</i>	0.5252(2)	0.7027(7)	1.1285(3)	
H8A	8 <i>d</i>	0.56220	0.72570	1.15590	0.1700
H8B	8 <i>d</i>	0.51710	0.59540	1.13350	0.1700
H8C	8 <i>d</i>	0.49380	0.75990	1.15440	0.1700
Te1	8 <i>d</i>	0.30951(1)	0.65429(2)	0.80446(1)	
Cl1	8 <i>d</i>	0.37346(5)	0.53000(11)	0.69634(6)	
C1	8 <i>d</i>	0.38380(13)	0.6848(4)	0.88107(19)	
C6	8 <i>d</i>	0.38205(15)	0.6340(4)	0.9633(2)	
H6	8 <i>d</i>	0.34780	0.58730	0.98350	0.0740
C3	8 <i>d</i>	0.48393(14)	0.7688(5)	0.9031(2)	
H3	8 <i>d</i>	0.51830	0.81400	0.88230	0.0850
C5	8 <i>d</i>	0.43002(16)	0.6518(4)	1.0150(2)	
H5	8 <i>d</i>	0.42770	0.61620	1.06990	0.0830
C4	8 <i>d</i>	0.48224(15)	0.7217(5)	0.9879(2)	
C2	8 <i>d</i>	0.43631(14)	0.7494(5)	0.8512(2)	
H2	8 <i>d</i>	0.43890	0.77950	0.79540	0.0790

Table A11. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for 4.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Cl2	0.0591(5)	0.0770(6)	0.0591(5)	0.0037(4)	0.0128(4)	-0.0023(4)
C11	0.0453(16)	0.0437(17)	0.0541(18)	0.0028(12)	0.0061(13)	0.0059(13)
C12	0.062(2)	0.063(2)	0.055(2)	-0.0019(16)	0.0003(15)	0.0043(16)
C15	0.076(3)	0.047(2)	0.107(3)	-0.0046(18)	0.002(2)	0.009(2)
C13	0.073(2)	0.089(3)	0.061(2)	0.008(2)	0.0017(17)	0.029(2)
C16	0.065(2)	0.0467(18)	0.069(2)	-0.0049(16)	-0.0034(17)	0.0006(16)
C14	0.070(2)	0.067(3)	0.099(3)	0.005(2)	0.014(2)	0.038(2)
N1	0.0639(19)	0.120(3)	0.072(2)	0.000(2)	-0.0080(16)	0.004(2)
C7	0.061(2)	0.144(5)	0.105(4)	-0.007(3)	-0.006(2)	-0.014(3)
C8	0.100(4)	0.160(5)	0.081(3)	0.000(3)	-0.028(3)	0.009(3)
Te1	0.05583(15)	0.04085(13)	0.05059(14)	-0.00330(8)	0.00772(8)	0.00228(8)
Cl1	0.1100(8)	0.0563(5)	0.0713(6)	0.0128(5)	0.0237(5)	-0.0123(4)
C1	0.0494(17)	0.0555(19)	0.0500(17)	0.0034(14)	0.0075(13)	0.0049(14)
C6	0.059(2)	0.071(2)	0.0545(19)	0.0021(16)	0.0105(15)	0.0153(16)
C3	0.0461(18)	0.096(3)	0.070(2)	-0.0028(18)	0.0106(16)	0.013(2)
C5	0.068(2)	0.090(3)	0.0483(19)	0.0069(19)	0.0042(16)	0.0155(17)
C4	0.0542(19)	0.079(2)	0.058(2)	0.0115(17)	0.0034(15)	0.0003(18)
C2	0.059(2)	0.087(3)	0.0517(19)	0.0017(18)	0.0103(15)	0.0157(18)

Table A12. Selected geometric parameters (Å, °) for 4.

Te1—Cl1	2.495(1)	C4—C5	1.393(5)
Te1—Cl2	2.541(1)	C5—C6	1.367(5)
Te1—C1	2.087(3)	C6—C1	1.385(4)
Te1—C11	2.113(3)	C11—C12	1.382(4)
Te1—Cl2a	3.763(1)	C12—C13	1.384(6)
C1—C2	1.394(5)	C13—C14	1.364(6)
C2—C3	1.364(5)	C14—C15	1.369(7)
C3—C4	1.414(5)	C15—C16	1.381(5)
C4—N1	1.364(5)	C16—C11	1.375(4)
Cl1—Te1—Cl2	176.36(3)	C3—C4—N1	121.65(30)
Cl1—Te1—Cl2a	97.96(3)	C3—C4—C5	116.56(30)
Cl1—Te1—C1	89.88(9)	C4—C5—C6	121.94(33)
Cl1—Te1—C11	87.43(8)	C5—C6—C1	120.78(30)
Cl2—Te1—Cl2a	85.66(3)	C6—C1—Te1	119.34(22)
Cl2—Te1—C1	90.04(9)	Te1—C11—C12	118.83(23)
Cl2—Te1—C11	88.98(8)	C11—C12—C13	119.37(33)
Cl2a—Te1—C1	96.26(9)	C12—C13—C14	119.88(39)
Cl2a—Te1—C11	97.96(3)	C13—C14—C15	120.72(42)
C1—Te1—Cl1	89.88(9)	C14—C15—C16	120.16(39)
Te1—C1—C2	122.07(22)	C15—C16—C11	119.25(31)
C1—C2—C3	120.61(30)	C16—C11—Te1	120.56(21)
C2—C3—C4	121.49(30)		

Symmetry codes:

(a) 0.5-x, -0.5+y, z.

Table A13. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters (in Å²) for 5.

Atom	Wyck.	x	y	z	U
Te1	4e	0.64864(7)	0.87713(1)	0.17341(4)	
Cl2	4e	0.6969(3)	0.94400(5)	0.29744(19)	
Cl1	4e	0.6086(4)	0.80829(5)	0.05868(19)	
C1	4e	0.3552(11)	0.89997(19)	0.0382(6)	
C2	4e	0.1708(12)	0.8743(2)	-0.0133(7)	
H2	4e	0.17060	0.84740	0.01750	0.0680
C11	4e	0.4612(10)	0.85416(18)	0.3273(6)	
C4	4e	-0.0191(12)	0.9276(2)	-0.1601(7)	
C3	4e	-0.0135(13)	0.8879(2)	-0.1097(7)	
H3	4e	-0.13760	0.87010	-0.14190	0.0670
C5	4e	0.1692(14)	0.9535(2)	-0.1053(7)	
H5	4e	0.17050	0.98050	-0.13560	0.0760
C6	4e	0.3496(13)	0.94013(19)	-0.0089(7)	
H6	4e	0.47140	0.95810	0.02620	0.0740
C16	4e	0.2686(11)	0.87660(19)	0.3655(6)	
H16	4e	0.22040	0.90120	0.32260	0.0560
N1	4e	-0.2002(11)	0.94114(18)	-0.2578(6)	
C15	4e	0.1538(11)	0.86101(18)	0.4682(7)	
H15	4e	0.02460	0.87540	0.49370	0.0570
C14	4e	0.2230(11)	0.82495(18)	0.5347(6)	
C13	4e	0.4181(12)	0.80399(19)	0.4984(7)	
H13	4e	0.47000	0.78000	0.54430	0.0630
C12	4e	0.5353(11)	0.81850(18)	0.3951(6)	
H12	4e	0.66550	0.80420	0.37090	0.0580
C7	4e	-0.3893(13)	0.9135(2)	-0.3183(7)	
H7A	4e	-0.50010	0.92820	-0.38430	0.1150
H7B	4e	-0.47240	0.90290	-0.24740	0.1150
H7C	4e	-0.32010	0.89130	-0.36320	0.1150
C8	4e	-0.1970(17)	0.9815(2)	-0.3145(8)	
H8A	4e	-0.33800	0.98550	-0.38080	0.1580
H8B	4e	-0.05680	0.98470	-0.35840	0.1580
H8C	4e	-0.19430	1.00130	-0.24220	0.1580
O1	4e	0.0924(8)	0.81224(14)	0.6331(5)	
C17	4e	0.1605(13)	0.7755(2)	0.7065(7)	
H17A	4e	0.31980	0.77830	0.75850	0.0780
H17B	4e	0.16180	0.75270	0.64320	0.0780
C18	4e	-0.0189(14)	0.7682(2)	0.8010(7)	
H18A	4e	0.02030	0.74340	0.85170	0.1080
H18B	4e	-0.17580	0.76570	0.74840	0.1080
H18C	4e	-0.01700	0.79080	0.86380	0.1080

Table A14. Anisotropic displacement parameters (in Å²) for 5.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Te1	0.0419(3)	0.0487(3)	0.0500(3)	-0.0019(2)	0.00933(18)	0.0051(2)
Cl2	0.0721(13)	0.0537(10)	0.0661(12)	-0.0123(10)	-0.0059(10)	-0.0031(9)
Cl1	0.0871(15)	0.0529(10)	0.0697(13)	0.0049(10)	0.0273(10)	-0.0032(9)
C1	0.044(4)	0.048(4)	0.042(4)	-0.007(3)	0.001(3)	0.001(3)
C2	0.053(4)	0.054(4)	0.062(5)	-0.001(4)	0.006(4)	0.009(4)
C11	0.030(3)	0.045(4)	0.042(4)	0.006(3)	0.008(3)	0.002(3)
C4	0.051(4)	0.056(4)	0.045(4)	-0.004(4)	0.008(3)	0.001(3)
C3	0.052(4)	0.063(5)	0.054(4)	-0.023(4)	0.012(4)	-0.002(3)
C5	0.076(6)	0.054(4)	0.054(5)	-0.004(4)	-0.009(4)	0.008(4)
C6	0.079(5)	0.049(4)	0.051(4)	-0.025(4)	-0.014(4)	-0.002(3)
C16	0.044(4)	0.049(4)	0.046(4)	0.005(3)	0.007(3)	-0.002(3)
N1	0.063(4)	0.071(4)	0.062(4)	-0.004(3)	-0.017(3)	0.014(3)
C15	0.034(4)	0.046(4)	0.064(5)	0.017(3)	0.015(3)	0.006(3)
C14	0.042(4)	0.047(4)	0.042(4)	-0.006(3)	0.005(3)	-0.005(3)
C13	0.055(5)	0.050(4)	0.054(4)	0.013(4)	0.011(3)	0.015(3)
C12	0.047(4)	0.047(4)	0.052(4)	0.015(3)	0.007(3)	0.006(3)
C7	0.056(5)	0.110(7)	0.060(5)	-0.002(5)	-0.004(4)	-0.008(4)
C8	0.119(8)	0.088(6)	0.094(7)	0.012(6)	-0.039(6)	0.023(5)
O1	0.059(3)	0.071(3)	0.053(3)	0.004(3)	0.016(2)	0.010(2)
C17	0.073(5)	0.073(5)	0.051(5)	0.007(4)	0.015(4)	0.019(4)
C18	0.083(6)	0.072(5)	0.062(5)	-0.009(5)	0.010(4)	0.011(4)

Table A15. Selected geometric parameters (Å, °) for 5.

Te1—C11	2.510(2)	C5—C6	1.357(10)
Te1—C12	2.496(2)	C6—C1	1.389(9)
Te1—C1	2.102(6)	C11—C12	1.376(8)
Te1—C11	2.105(6)	C12—C13	1.373(10)
C1—C2	1.373(9)	C13—C14	1.385(9)
C2—C3	1.374(9)	C14—O1	1.362(8)
C3—C4	1.386(9)	C14—C15	1.375(8)
C4—N1	1.369(9)	C15—C16	1.373(9)
C4—C5	1.402(10)	C16—C11	1.405(9)
C11—Te1—C12	177.37(6)	C4—C5—C6	121.50(67)
C11—Te1—C1	91.29(17)	C5—C6—C1	120.98(60)
C11—Te1—C11	88.98(17)	C6—C1—Te1	121.56(46)
C12—Te1—C1	91.05(17)	Te1—C11—C12	120.07(43)
C12—Te1—C11	89.48(17)	C11—C12—C13	120.36(56)
C1—Te1—C11	98.64(23)	C12—C13—C14	120.32(61)
Te1—C1—C2	120.00(46)	C13—C14—O1	124.28(57)
C1—C2—C3	120.83(63)	C13—C14—C15	118.77(56)
C2—C3—C4	121.63(62)	C14—C15—C16	122.37(58)
C3—C4—N1	121.91(61)	C15—C16—C11	117.89(56)
C3—C4—C5	116.75(60)	C16—C11—Te1	119.60(42)