

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

**ИОННЫЕ КЛАТРАТНЫЕ ГИДРАТЫ НИТРАТА
ТЕТРА-*n*-БУТИЛАММОНИЯ (ТВА NO_3) И СМЕШАННОГО ТВА(NO_3 ,OH):
НОВЫЕ СВЕРХСТРУКТУРЫ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ I**Т.В. Родионова¹, Д.С. Одинцов², А.Ю. Манаков^{1,3}, В.Ю. Комаров^{1,3}¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: tvr@niic.nsc.ru

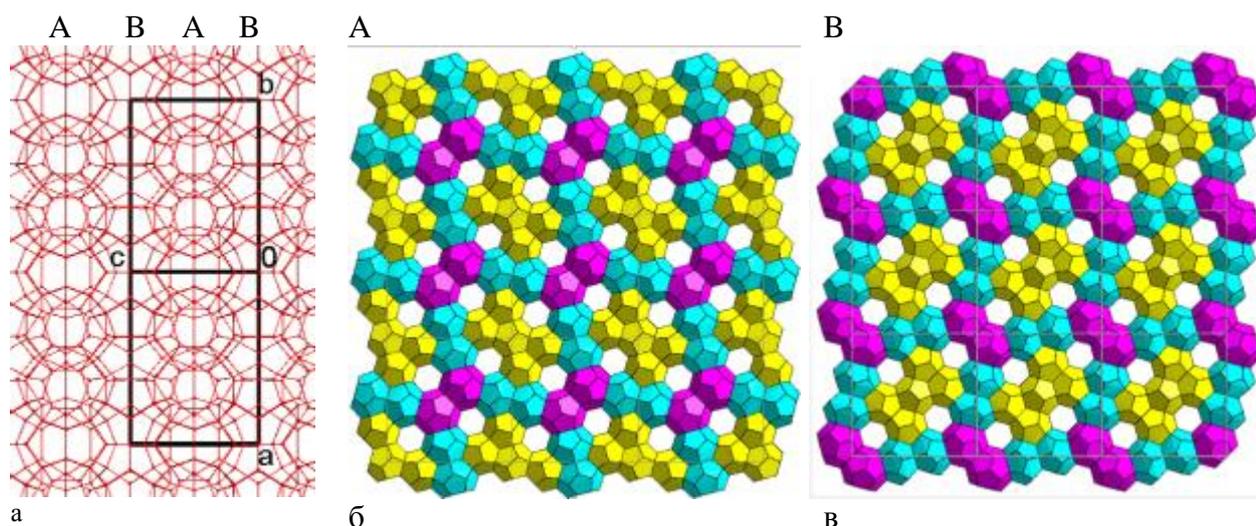
²Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск, Россия³Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Рис. S1. Цветная версия рис. 1. Желтым цветом показаны D-полиэдры, голубым – Т-полиэдры, розовым Р-полиэдры идеализированного каркаса ТС-I. (а) Проекция идеализированного каркаса ТС-I вдоль направления $a+b$ с указанием чередования ДТР-слоев А и В; (б, в) проекции этих слоев вдоль направления c .

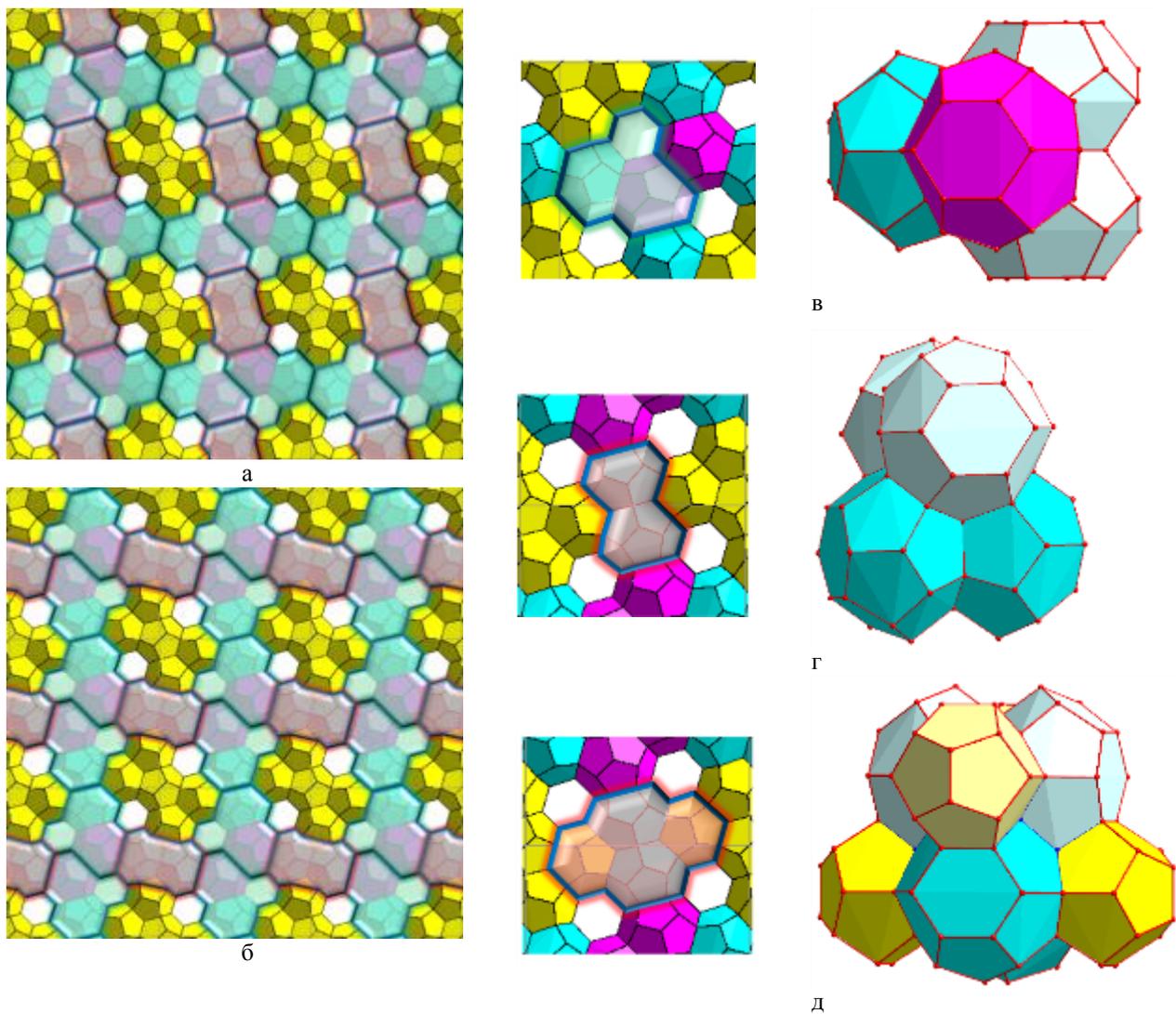


Рис. S2. Цветная версия рис. 2. Выделение многосекционных полостей в DTP-слоях с «горизонтальным», h (а) и «вертикальным», v (б) расположением «цепочек» из T_3P -полостей; (в), (г), (д) – полости T_3P , T_4 и T_4D_4 , соответственно. Желтым цветом показаны D-полости и секции комбинированных полостей, голубым – T-секции, розовым – R-секции. Бледным показаны внеслоевые T-полости и полости из смежных слоев.

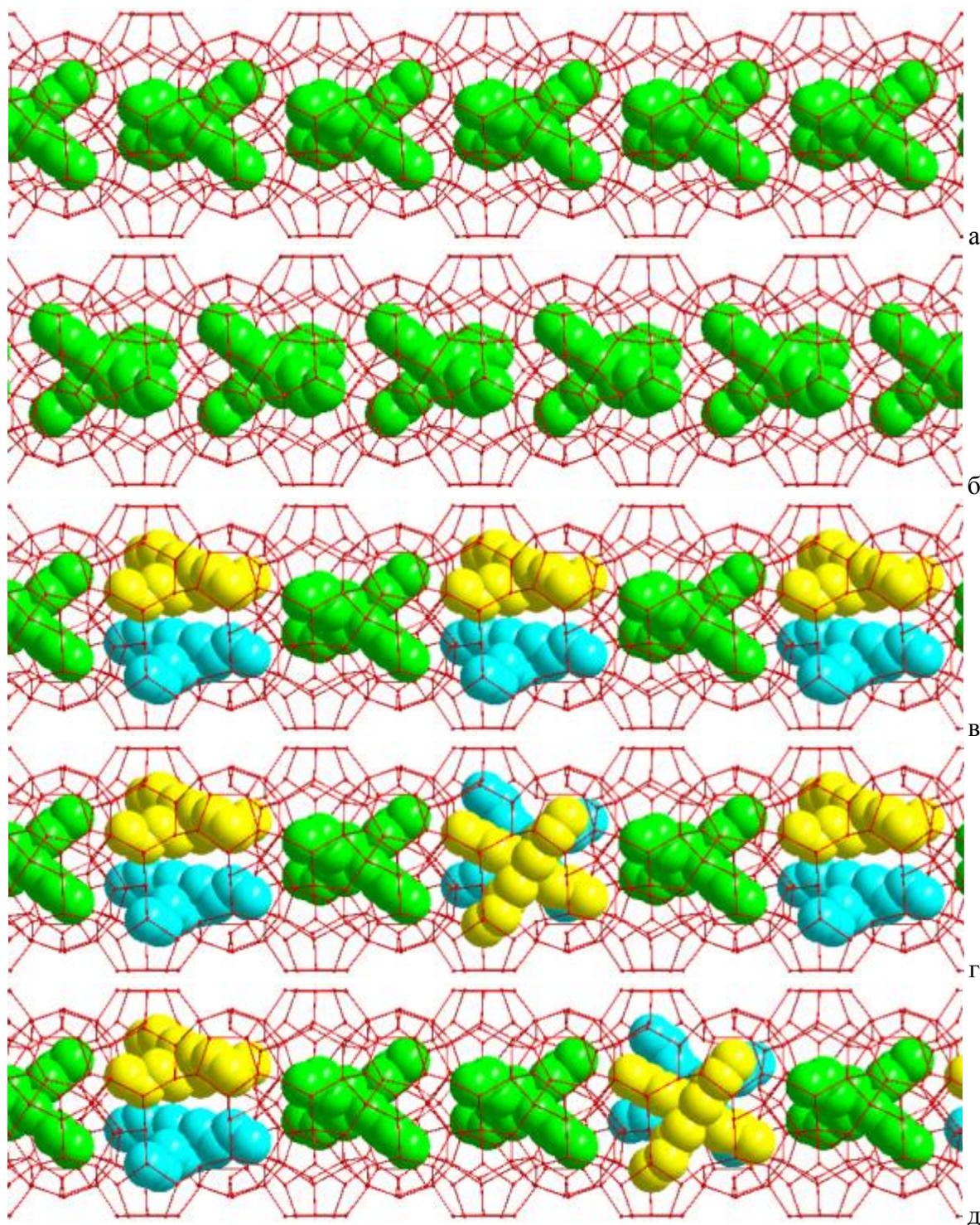


Рис. S3. Цветная расширенная версия рис. 3. Варианты заполнения колонок из комбинированных T_4 - и D_4T_4 -полостей каркасах на базе ТС-I. (а, б) Альтернативные варианты выделения T_4 -полостей, приводящие к позиционному разупорядочению гостя; (в, г) чередование T_4 - и D_4T_4 -полостей в структуре (2) с различным ориентационным упорядочением катионов ТВА, включенных в D_4T_4 -полости. (д) Пример возможного сбоя в чередовании T_4 - и D_4T_4 -полостей в одной колонке. Для упрощения рисунка атомы водородов ТВА и нитрат-ионы опущены.

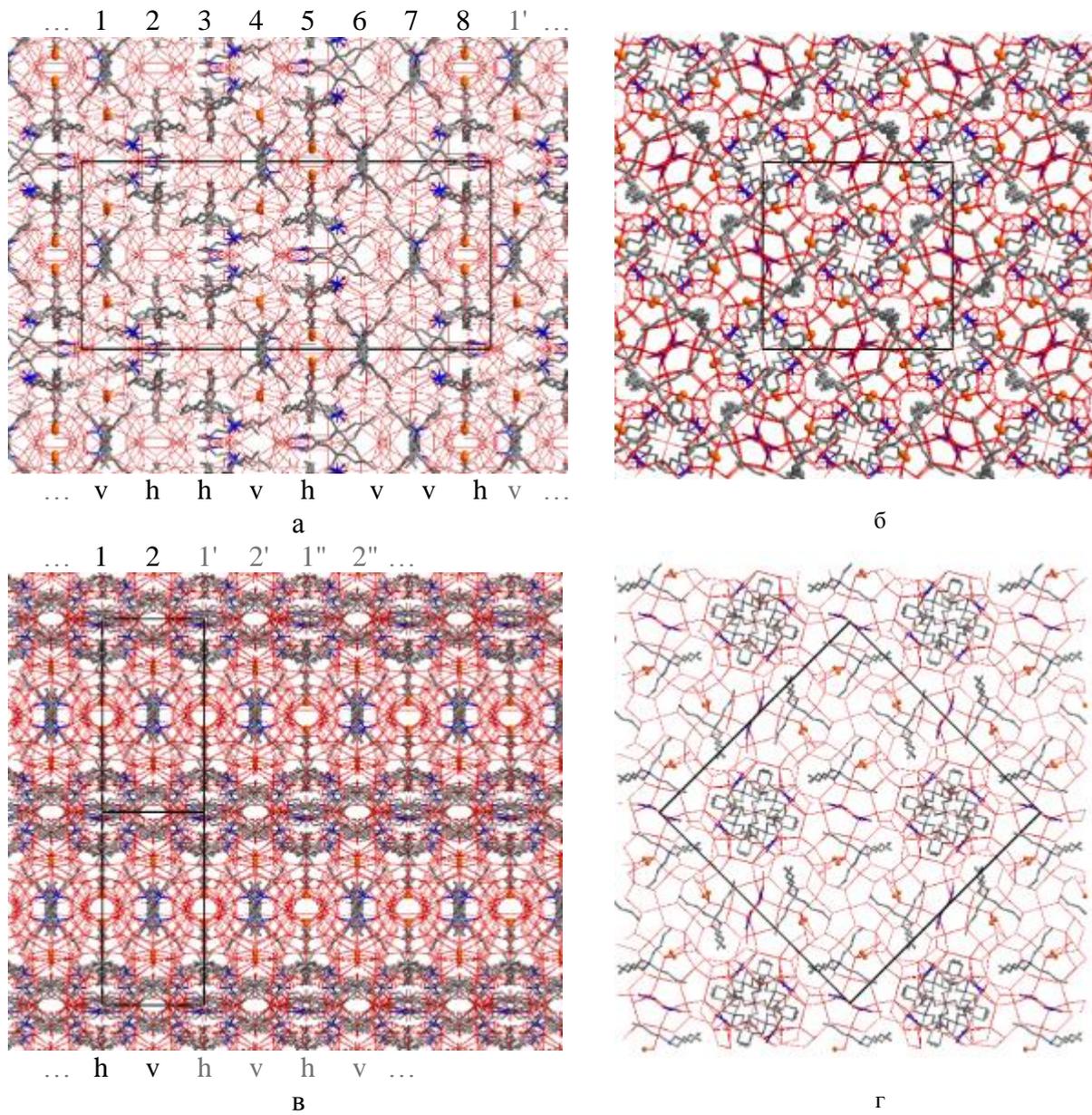


Рис. S4. Дополненный вариант рис. 4. Проекция структур (1) (а, б) и (2) (в, г) перпендикулярно (левая колонка, а, в) и вдоль (правая колонка, б, г) направлению c . Цифрами указана нумерация слоев, используемая в тексте, буквами h и v – тип каждого из слоев.

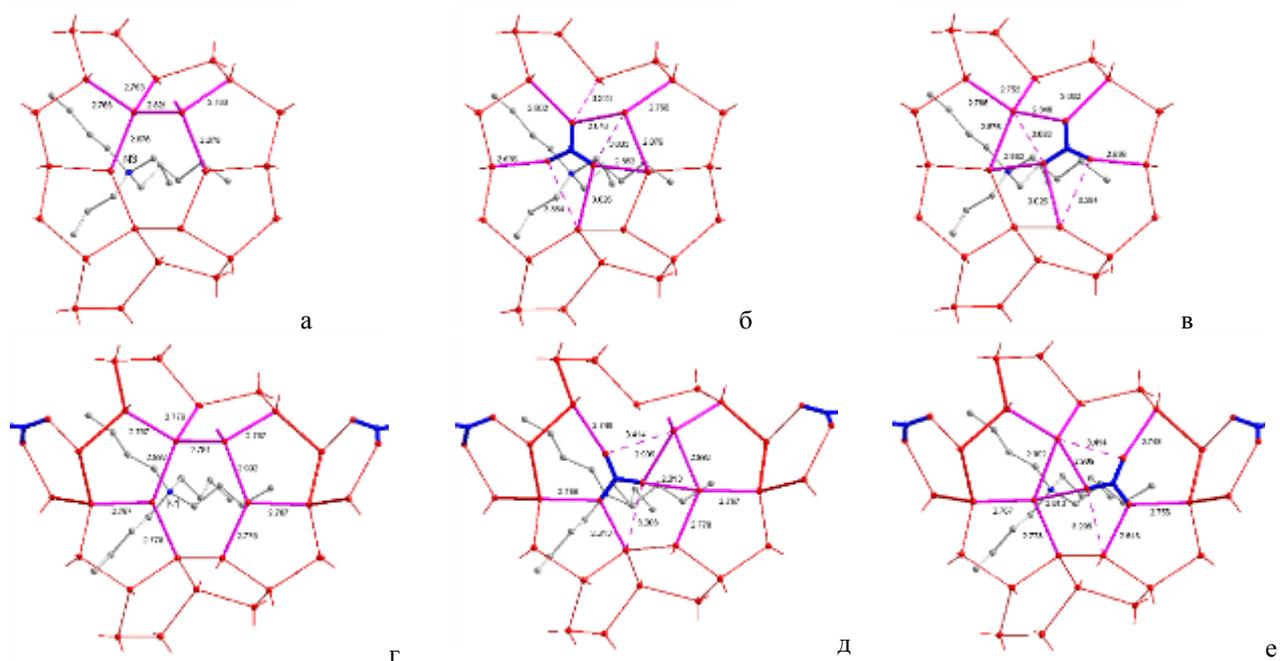


Рис. S5. Внедрение NO_3^- в шестиугольные грани между T_3P -полостями в структуре (1).

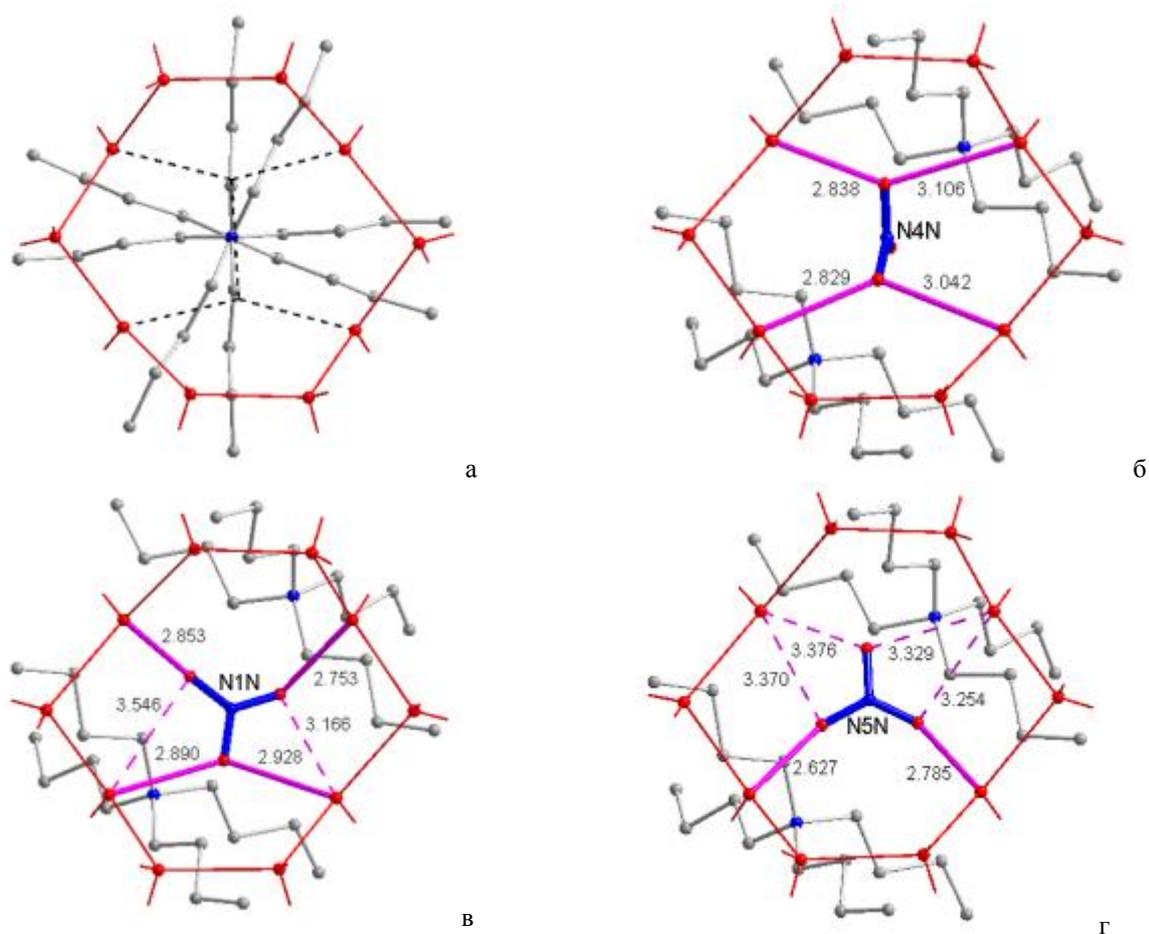


Рис. S6. Варианты «окон» в D_4T_4 -полостях в структуре (1). (а) «незаполненное окно», (б) $\text{O}_2\text{-O}_2\text{-p}$, (в) ob-ob-b_2 , и (г) o-ob-ob варианты размещения нитрат-ионов в «заполненных окнах».

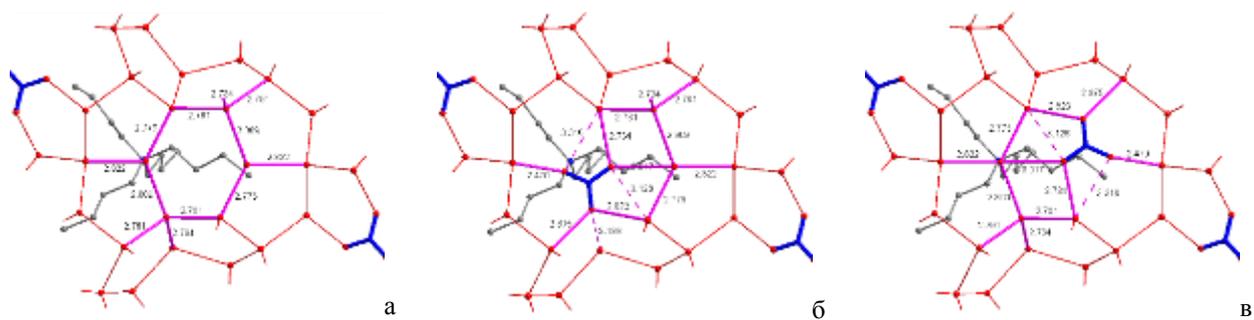


Рис. S7. Внедрение NO_3^- в шестиугольные грани между T_3P -полостями в структуре (2).

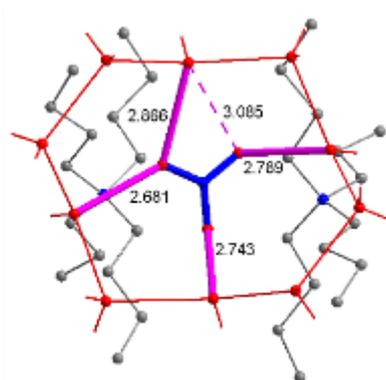


Рис. S8. Вариант внедрения NO_3^- в 10-угольное окно D_4T_4 -полости в структуре (2).