

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА
ЦЕПОЧЕЧНОГО СЕЛЕНОИОДИДА ВАНАДИЯ $[V_3Se_{12}I_2]I_3 \cdot 1/4I_2$ Р.Р. Галиев¹, В.Ю. Комаров¹, С.Г. Козлова^{1,2}, С.Б. Артемкина¹, В.Е. Федоров¹¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия²Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова, Белгород, Россия

E-mail: artem@niic.nsc.ru

Таблица Д1. Оптимизированные координаты атомов в Quantum Espresso (QE) для
структуры $[V_3Se_{12}I_2]I_3 \cdot 1/4I_2$.

Оптимизированные параметры элементарной ячейки (QE):

$a, \text{\AA}$	18.8777
$b, \text{\AA}$	13.8363
$c, \text{\AA}$	18.0076
$\beta, ^\circ$	90.520
$V, \text{\AA}^3$	4703.6

Элемент	X	Y	Z
I	0.9447342138	0.5709549961	0.3564976343
I	0.0552657862	0.0709549961	0.1435023657
I	0.0552657862	0.4290450039	0.6435023657
I	0.9447342138	0.9290450039	0.8564976343
I	0.4404735251	0.5489194031	0.1593966472
I	0.5595264749	0.0489194031	0.3406033528
I	0.5595264749	0.4510805969	0.8406033528
I	0.4404735251	0.9510805969	0.6593966472
I	0.2711363715	0.5320163757	0.5212700695
I	0.7288636285	0.0320163757	0.9787299305
I	0.7288636285	0.4679836243	0.4787299305
I	0.2711363715	0.9679836243	0.0212700695
I	0.2162358703	0.6774983267	0.0279574960
I	0.7837641297	0.1774983267	0.4720425040
I	0.7837641297	0.3225016733	0.9720425040
I	0.2162358703	0.8225016733	0.5279574960
I	0.2513889289	0.4750970124	0.0389315714
I	0.7486110711	0.9750970124	0.4610684286
I	0.7486110711	0.5249029876	0.9610684286

I	0.2513889289	0.0249029876	0.5389315714
I	0.1201708476	0.6054017528	0.5066589228
I	0.8798291524	0.1054017528	0.9933410772
I	0.8798291524	0.3945982472	0.4933410772
I	0.1201708476	0.8945982472	0.0066589228
I	0.2859527346	0.2611096768	0.0415800797
I	0.7140472654	0.7611096768	0.4584199203
I	0.7140472654	0.7388903232	0.9584199203
I	0.2859527346	0.2388903232	0.5415800797
I	0.4177137392	0.8709248995	0.4448749704
I	0.5822862608	0.3709248995	0.0551250296
I	0.5822862608	0.1290751005	0.5551250296
I	0.4177137392	0.6290751005	0.9448749704
I	0.9126414767	0.8177436810	0.0281498213
I	0.0873585233	0.3177436810	0.4718501787
I	0.0873585233	0.1822563190	0.9718501787
I	0.9126414767	0.6822563190	0.5281498213
I	0.4175713502	0.4841230521	0.5231352914
I	0.5824286498	0.9841230521	0.9768647086
I	0.5824286498	0.5158769479	0.4768647086
I	0.4175713502	0.0158769479	0.0231352914
Se	0.0587578191	0.6099788630	0.2276537424
Se	0.9412421809	0.1099788630	0.2723462576
Se	0.9412421809	0.3900211370	0.7723462576
Se	0.0587578191	0.8900211370	0.7276537424
Se	0.3864594904	0.6352181029	0.3040716736
Se	0.6135405096	0.1352181029	0.1959283264
Se	0.6135405096	0.3647818971	0.6959283264
Se	0.3864594904	0.8647818971	0.8040716736
Se	0.2242924613	0.6371818278	0.2071900047
Se	0.7757075387	0.1371818278	0.2928099953
Se	0.7757075387	0.3628181722	0.7928099953
Se	0.2242924613	0.8628181722	0.7071900047
Se	0.0539998552	0.7674340097	0.3799957111
Se	0.9460001448	0.2674340097	0.1200042889
Se	0.9460001448	0.2325659903	0.6200042889
Se	0.0539998552	0.7325659903	0.8799957111
Se	0.7235936439	0.6516486126	0.3030512226
Se	0.2764063561	0.1516486126	0.1969487774
Se	0.2764063561	0.3483513874	0.6969487774
Se	0.7235936439	0.8483513874	0.8030512226
Se	0.2092647580	0.8830701485	0.2085792370
Se	0.7907352420	0.3830701485	0.2914207630
Se	0.7907352420	0.1169298515	0.7914207630

Se	0.2092647580	0.6169298515	0.7085792370
Se	0.2130176860	0.8787266775	0.3378049579
Se	0.7869823140	0.3787266775	0.1621950421
Se	0.7869823140	0.1212733225	0.6621950421
Se	0.2130176860	0.6212733225	0.8378049579
Se	0.2043712798	0.6308864506	0.3364969601
Se	0.7956287202	0.1308864506	0.1635030399
Se	0.7956287202	0.3691135494	0.6635030399
Se	0.2043712798	0.8691135494	0.8364969601
Se	0.0440489998	0.8905766009	0.2926160077
Se	0.9559510002	0.3905766009	0.2073839923
Se	0.9559510002	0.1094233991	0.7073839923
Se	0.0440489998	0.6094233991	0.7926160077
Se	0.7053542779	0.6119373623	0.1762104461
Se	0.2946457221	0.1119373623	0.3237895539
Se	0.2946457221	0.3880626377	0.8237895539
Se	0.7053542779	0.8880626377	0.6762104461
Se	0.5570978233	0.7691533659	0.3369969956
Se	0.4429021767	0.2691533659	0.1630030044
Se	0.4429021767	0.2308466341	0.6630030044
Se	0.5570978233	0.7308466341	0.8369969956
Se	0.3646423943	0.7851998395	0.1584856035
Se	0.6353576057	0.2851998395	0.3415143965
Se	0.6353576057	0.2148001605	0.8415143965
Se	0.3646423943	0.7148001605	0.6584856035
Se	0.5584540463	0.6171982855	0.2827424188
Se	0.4415459537	0.1171982855	0.2172575812
Se	0.4415459537	0.3828017145	0.7172575812
Se	0.5584540463	0.8828017145	0.7827424188
Se	0.8859427097	0.6247411321	0.2058977488
Se	0.1140572903	0.1247411321	0.2941022512
Se	0.1140572903	0.3752588679	0.7941022512
Se	0.8859427097	0.8752588679	0.7058977488
Se	0.3934321676	0.8716590231	0.2651426861
Se	0.6065678324	0.3716590231	0.2348573139
Se	0.6065678324	0.1283409769	0.7348573139
Se	0.3934321676	0.6283409769	0.7651426861
Se	0.8934701491	0.8645153117	0.2087046472
Se	0.1065298509	0.3645153117	0.2912953528
Se	0.1065298509	0.1354846883	0.7912953528
Se	0.8934701491	0.6354846883	0.7087046472
Se	0.7092873721	0.8887399452	0.2639530402
Se	0.2907126279	0.3887399452	0.2360469598
Se	0.2907126279	0.1112600548	0.7360469598

Se	0.7092873721	0.6112600548	0.7639530402
Se	0.0587714261	0.7450158372	0.1508892660
Se	0.9412285739	0.2450158372	0.3491107340
Se	0.9412285739	0.2549841628	0.8491107340
Se	0.0587714261	0.7549841628	0.6508892660
Se	0.8328468870	0.6910039561	0.0951832011
Se	0.1671531130	0.1910039561	0.4048167989
Se	0.1671531130	0.3089960439	0.9048167989
Se	0.8328468870	0.8089960439	0.5951832011
Se	0.3340200443	0.7270479003	0.4032920880
Se	0.6659799557	0.2270479003	0.0967079120
Se	0.6659799557	0.2729520997	0.5967079120
Se	0.3340200443	0.7729520997	0.9032920880
Se	0.8676443329	0.8061239653	0.3262647131
Se	0.1323556671	0.3061239653	0.1737352869
Se	0.1323556671	0.1938760347	0.6737352869
Se	0.8676443329	0.6938760347	0.8262647131
Se	0.7122617831	0.8546201457	0.1374168818
Se	0.2877382169	0.3546201457	0.3625831182
Se	0.2877382169	0.1453798543	0.8625831182
Se	0.7122617831	0.6453798543	0.6374168818
Se	0.5433989609	0.8773585633	0.1782855291
Se	0.4566010391	0.3773585633	0.3217144709
Se	0.4566010391	0.1226414367	0.8217144709
Se	0.5433989609	0.6226414367	0.6782855291
Se	0.5500734200	0.7354773414	0.1111070760
Se	0.4499265800	0.2354773414	0.3888929240
Se	0.4499265800	0.2645226586	0.8888929240
Se	0.5500734200	0.7645226586	0.6111070760
V	0.1337663389	0.7559610560	0.2680539551
V	0.8662336611	0.2559610560	0.2319460449
V	0.8662336611	0.2440389440	0.7319460449
V	0.1337663389	0.7440389440	0.7680539551
V	0.2876270443	0.7595327038	0.2758734623
V	0.7123729557	0.2595327038	0.2241265377
V	0.7123729557	0.2404672962	0.7241265377
V	0.2876270443	0.7404672962	0.7758734623
V	0.6324173686	0.7505039529	0.2227427861
V	0.3675826314	0.2505039529	0.2772572139
V	0.3675826314	0.2494960471	0.7772572139
V	0.6324173686	0.7494960471	0.7227427861
V	0.7870994735	0.7523645232	0.2160002514
V	0.2129005265	0.2523645232	0.2839997486
V	0.2129005265	0.2476354768	0.7839997486

V	0.7870994735	0.7476354768	0.7160002514
V	0.4783005943	0.7326255153	0.2261196393
V	0.5216994057	0.2326255153	0.2738803607
V	0.5216994057	0.2673744847	0.7738803607
V	0.4783005943	0.7673744847	0.7261196393
V	0.9800468119	0.7368212673	0.2664812060
V	0.0199531881	0.2368212673	0.2335187940
V	0.0199531881	0.2631787327	0.7335187940
V	0.9800468119	0.7631787327	0.7664812060
I	0.0699685645	0.4840283644	0.0175217188
I	0.9300314355	0.9840283644	0.4824782812
I	0.9300314355	0.5159716356	0.9824782812
I	0.0699685645	0.0159716356	0.5175217188

Таблица Д2. Характеристики связующих критических точек (вср), обнаруженных методом QTAIM для характерных контактов в структуре $[V_3Se_{12}I_2]I_3 \cdot 1/4I_2$. D – меж-атомное расстояние (Å); q – заряды на атомах (ат.ед.); ρ – плотность заряда, G , V и E – плотности кинетической, потенциальной и полной энергий (ат.ед.). В группах (Se–Se)^{2–} четыре близких длины связей Se–Se; для краткости в таблице приведены данные только для одной из них.

Атомы (принад- лежность к атомной группп- ровке)	D	q	ρ	G	V	E	$ V /G$
I (ионы I_3^-)	2.854; 3.034	-0.188; -0.019; -0.257	0.0051; 0.0370	0.0276; 0.0208	-0.0443; -0.0281	-0.0167; -0.0073	1.605; 1.351
I (молекулы I_2)	2.986	-0.007; -0.215	0.0407	0.0224	-0.0319	-0.0095	1.424
Se–Se (мостико- вый лиганд Se_2^{2-})	2.310	-0.236; -0.244	0.0979	0.0597	-0.1194	-0.0597	2.0
Se–Se–I (мости- ковый лиганд Se_2I)	2.369; 2.549	-0.289; -0.236; 0.020	0.0898; 0.0772	0.0536; 0.0418	-0.1044; -0.0813	-0.0508; -0.0394	1.948; 1.945
I–V	2.920	-0.302; 1.154	0.0337	0.0197	-0.0250	-0.0053	1.269
I–V	2.887;	-0.244; 1.152	0.0371	0.0213	-0.0284	-0.0071	1.333
V...V (между фрагментами V_3Se_8)	3.751	1.159; 1.152	-	-	-	-	-

V...V...V (внутри фрагментов V ₃ Se ₈)	2.971; 2.975	1.152; 1.099; 1.159	-	-	-	-	-
---	-----------------	---------------------------	---	---	---	---	---

Таблица ДЗ. Вычисленные QTAIM заряды на атомах в соответствии с их пространственным положением в кристаллической структуре [V₃Se₁₂I₂]₃·1/4I₂.

N	элемент	заряд	X	Y	Z
1	I	-0.244	8.39509	7.74745	6.35552
2	I	-0.244	10.59426	0.9103	2.68222
3	I	-0.244	10.47311	5.92685	11.71996
4	I	-0.244	8.27394	12.764	15.39326
5	I	-0.302	17.96532	7.42651	2.79989
6	I	-0.302	1.02403	0.58936	6.23785
7	I	-0.302	0.90288	6.24779	15.27558
8	I	-0.302	17.84417	13.08494	11.83763
9	I	-0.143	13.75078	9.32492	0.4837
10	I	-0.143	5.23857	2.48777	8.55404
11	I	-0.143	5.11742	4.34938	17.59178
12	I	-0.143	13.62963	11.18653	9.52144
13	I	-0.019	14.43145	7.24205	9.44028
14	I	-0.019	4.3156	0.4049	17.67294
15	I	-0.019	4.43675	6.43225	8.6352
16	I	-0.019	14.5526	13.2694	0.40254
17	I	-0.007	14.49054	6.54274	0.64096
18	I	-0.007	4.49881	13.37989	8.39678
19	I	-0.007	4.37766	7.13156	17.43452
20	I	-0.007	14.36939	0.29441	9.67869
21	I	-0.257	11.55314	8.12267	9.06106
22	I	-0.257	7.19391	1.28552	18.05216
23	I	-0.257	7.31506	5.55163	9.01442
24	I	-0.257	11.67429	12.38878	0.02332
25	I	-0.215	15.21273	3.64584	0.68361
26	I	-0.215	3.77662	10.48299	8.35412
27	I	-0.215	3.65547	10.02846	17.39186
28	I	-0.215	15.09158	3.19131	9.72135
29	I	0.02	7.79135	11.17874	0.45604
30	I	0.02	11.198	4.34159	8.58169
31	I	0.02	11.07685	2.49556	17.61943
32	I	0.02	7.6702	9.33271	9.49378
33	I	-0.029	10.86101	6.71285	0.30403
34	I	-0.029	8.12834	13.55	8.73371
35	I	-0.029	8.00719	6.96145	17.77145
36	I	-0.029	10.73986	0.1243	9.34177
37	I	-0.021	17.43374	11.75853	8.14065
38	I	-0.021	1.55561	4.92138	0.89709
39	I	-0.021	1.43446	1.91577	9.93482
40	I	-0.021	17.31259	8.75292	17.17839
41	I	-0.188	17.2347	6.71613	9.48818

42	I	-0.188	1.51235	13.55328	17.62504
43	I	-0.188	1.6335	6.95817	8.5873
44	I	-0.188	17.35585	0.12102	0.45044
45	Se	-0.228	10.59533	8.34228	3.99992
46	Se	-0.228	8.39402	1.50513	5.03782
47	Se	-0.228	8.27287	5.33202	14.07555
48	Se	-0.228	10.47417	12.16917	13.03766
49	Se	-0.268	16.86592	8.62479	5.52115
50	Se	-0.268	2.12343	1.78764	3.51658
51	Se	-0.268	2.00228	5.04951	12.55432
52	Se	-0.268	16.74477	11.88666	14.55889
53	Se	-0.235	13.74783	8.65802	3.74072
54	Se	-0.235	5.24152	1.82087	5.29702
55	Se	-0.235	5.12037	5.01628	14.33476
56	Se	-0.235	13.62668	11.85343	12.77846
57	Se	-0.244	13.49398	12.093	3.81646
58	Se	-0.244	5.49537	5.25585	5.22128
59	Se	-0.244	5.37422	1.5813	14.25902
60	Se	-0.244	13.37283	8.41845	12.85419
61	Se	-0.199	4.17626	8.83045	5.39987
62	Se	-0.199	14.81309	1.9933	3.63787
63	Se	-0.199	14.69194	4.84385	12.67561
64	Se	-0.199	4.05511	11.681	14.43761
65	Se	-0.236	13.54313	11.98416	6.12307
66	Se	-0.236	5.44622	5.14701	2.91467
67	Se	-0.236	5.32507	1.69014	11.95241
68	Se	-0.236	13.42198	8.52729	15.16081
69	Se	-0.235	0.97555	10.50391	6.06179
70	Se	-0.235	18.0138	3.66676	2.97595
71	Se	-0.235	17.89265	3.17039	12.01368
72	Se	-0.235	0.8544	10.00754	15.09953
73	Se	-0.258	3.9111	12.16042	4.7656
74	Se	-0.258	15.07825	5.32327	4.27214
75	Se	-0.258	14.9571	1.51388	13.30988
76	Se	-0.258	3.78995	8.35103	13.80334
77	Se	-0.228	10.60733	10.23316	2.6909
78	Se	-0.228	8.38202	3.39601	6.34684
79	Se	-0.228	8.26087	3.44114	15.38458
80	Se	-0.228	10.48618	10.27829	11.72863
81	Se	-0.231	10.47461	10.4473	6.84645
82	Se	-0.231	8.51474	3.61015	2.19129
83	Se	-0.231	8.39359	3.227	11.22903
84	Se	-0.231	10.35346	10.06415	15.88419
85	Se	-0.236	16.42728	10.71286	2.84526
86	Se	-0.236	2.56207	3.87571	6.19248
87	Se	-0.236	2.44092	2.96144	15.23022
88	Se	-0.236	16.30612	9.79859	11.883
89	Se	-0.066	6.33379	9.45482	1.63945
90	Se	-0.066	12.65556	2.61767	7.39829
91	Se	-0.066	12.53441	4.21948	16.43603

92	Se	-0.066	6.21264	11.05663	10.67718
93	Se	-0.223	1.02591	8.42022	5.11355
94	Se	-0.223	17.96344	1.58307	3.92419
95	Se	-0.223	17.84229	5.25408	12.96192
96	Se	-0.223	0.90476	12.09123	14.15129
97	Se	-0.241	13.35995	8.53618	6.03124
98	Se	-0.241	5.6294	1.69903	3.00649
99	Se	-0.241	5.50825	5.13812	12.04423
100	Se	-0.241	13.2388	11.97527	15.06898
101	Se	-0.263	16.96974	11.92809	4.71878
102	Se	-0.263	2.01961	5.09094	4.31895
103	Se	-0.263	1.89846	1.74621	13.35669
104	Se	-0.263	16.84859	8.58336	13.75652
105	Se	-0.289	7.30802	8.53728	3.59431
106	Se	-0.289	11.68133	1.70013	5.44343
107	Se	-0.289	11.56018	5.13702	14.48117
108	Se	-0.289	7.18687	11.97417	12.63205
109	Se	-0.243	10.3128	12.17997	5.33136
110	Se	-0.243	8.67655	5.34282	3.70638
111	Se	-0.243	8.5554	1.49433	12.74411
112	Se	-0.243	10.19165	8.33148	14.3691
113	Se	-0.267	7.41406	11.89842	3.82405
114	Se	-0.267	11.57529	5.06127	5.21369
115	Se	-0.267	11.45413	1.77588	14.25143
116	Se	-0.267	7.29291	8.61303	12.86179
117	Se	-0.262	3.83872	8.33955	3.15128
118	Se	-0.262	15.15063	1.5024	5.88646
119	Se	-0.262	15.02948	5.33475	14.9242
120	Se	-0.262	3.71757	12.1719	12.18902
121	Se	-0.041	15.92368	9.8485	7.31008
122	Se	-0.041	3.06567	3.01135	1.72765
123	Se	-0.041	2.94452	3.8258	10.76539
124	Se	-0.041	15.80253	10.66295	16.34782
125	Se	-0.218	0.74159	12.00604	3.17152
126	Se	-0.218	18.24776	5.16889	5.86622
127	Se	-0.218	18.12661	1.66826	14.90395
128	Se	-0.218	0.62044	8.50541	12.20926
129	Se	-0.246	6.91382	11.0048	5.88646
130	Se	-0.246	12.07553	4.16765	3.15128
131	Se	-0.246	11.95438	2.6695	12.18902
132	Se	-0.246	6.79267	9.50665	14.9242
133	Se	-0.223	3.98676	11.73706	2.50002
134	Se	-0.223	15.00259	4.89991	6.53772
135	Se	-0.223	14.88144	1.93724	15.57546
136	Se	-0.223	3.86561	8.77439	11.53776
137	Se	-0.221	0.90674	10.06196	1.97149
138	Se	-0.221	18.08261	3.22481	7.06625
139	Se	-0.221	17.96146	3.61234	16.10398
140	Se	-0.221	0.78559	10.44949	11.00923
141	V	1.099	12.01751	10.31726	4.82814

142	V	1.099	6.97184	3.48011	4.2096
143	V	1.099	6.85069	3.35704	13.24734
144	V	1.099	11.89636	10.19419	13.86588
145	V	1.159	5.4239	10.28034	3.86689
146	V	1.159	13.56545	3.44319	5.17085
147	V	1.159	13.4443	3.39396	14.20859
148	V	1.159	5.30275	10.23111	12.90462
149	V	1.143	14.98807	10.33367	4.99733
150	V	1.143	4.00128	3.49652	4.04041
151	V	1.143	3.88013	3.34063	13.07815
152	V	1.143	14.86692	10.17778	14.03506
153	V	1.152	9.05664	10.07249	4.77699
154	V	1.152	9.93271	3.23534	4.26075
155	V	1.152	9.81156	3.60181	13.29849
156	V	1.152	8.93549	10.43896	13.81472
157	V	1.154	18.5968	9.98908	4.04981
158	V	1.154	0.39255	3.15193	4.98793
159	V	1.154	0.2714	3.68522	14.02567
160	V	1.154	18.47565	10.52237	13.08755
161	V	1.1	2.44351	10.25573	4.00281
162	V	1.1	16.54584	3.41858	5.03492
163	V	1.1	16.42469	3.41858	14.07266
164	V	1.1	2.32236	10.25573	13.04055