



**Table 2.** Atomic coordinates and displacement parameters (in Å<sup>2</sup>).

Atom	Site	x	y	z	U <sub>iso</sub>
H(1)	4e	0.4230	0.5938	0.6578	0.113
H(2)	4e	0.4979	0.5617	0.8099	0.157
H(3)	4e	0.5436	0.4194	0.8515	0.160
H(4)	4e	0.5429	0.3186	0.7494	0.140
H(5)	4e	0.4730	0.3509	0.5989	0.100
H(8A)	4e	0.3258	0.3969	0.3375	0.060
H(8B)	4e	0.3616	0.4945	0.3532	0.060
H(10)	4e	-0.1522	0.5028	0.0984	0.063
H(11)	4e	-0.2820	0.5364	-0.0300	0.076
H(12)	4e	-0.2563	0.6163	-0.1401	0.082
H(13)	4e	-0.1027	0.6605	-0.1205	0.068
H(16)	4e	0.0499	0.6979	-0.0895	0.069
H(17)	4e	0.2099	0.7348	-0.0422	0.077
H(18)	4e	0.3143	0.6954	0.0992	0.075
H(19)	4e	0.2563	0.6174	0.1893	0.065
H(20)	4e	-0.1614	0.5514	0.2267	0.066
H(21)	4e	-0.3013	0.6101	0.2300	0.079
H(22)	4e	-0.3003	0.6756	0.3575	0.076

**Table 2.** Continued.

Atom	Site	x	y	z	U <sub>iso</sub>
H(23)	4e	-0.1587	0.6778	0.4822	0.067
H(26)	4e	-0.0167	0.6758	0.5937	0.065
H(27)	4e	0.1363	0.6664	0.7021	0.070
H(28)	4e	0.2584	0.6037	0.6681	0.068
H(29)	4e	0.2237	0.5477	0.5279	0.058
H(5C)	4e	0.368(2)	0.385(2)	0.482(2)	0.06(1)
H(3A)	4e	0.266(3)	0.250(3)	0.457(3)	0.092
H(3B)	4e	0.364(3)	0.208(3)	0.519(3)	0.092
H(4A)	4e	0.3319	0.6854	0.4013	0.204
H(4B)	4e	0.2988	0.7342	0.3460	0.204
H(4C)	4e	0.0731	0.6976	0.3129	0.204
H(4D)	4e	0.1495	0.6650	0.3093	0.204
H(5A)	4e	0.5108	0.7469	0.5628	0.204
H(5B)	4e	0.4527	0.6836	0.5612	0.204
H(5D)	4e	0.002(5)	0.424(5)	0.236(4)	0.204
H(6A)	4e	0.4203	0.0663	0.4669	0.204
H(6B)	4e	0.4499	0.1554	0.4479	0.204

**Table 3.** Atomic coordinates and displacement parameters (in Å<sup>2</sup>).

Atom	Site	x	y	z	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>12</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>23</sub>
Cu(1)	4e	0.04726(2)	0.53535(2)	0.35439(2)	0.0364(2)	0.0428(2)	0.0374(2)	0.0024(1)	0.0170(2)	0.0006(1)
Cu(2)	4e	0.06265(2)	0.54483(2)	0.17559(2)	0.0428(2)	0.0429(2)	0.0336(2)	0.0018(1)	0.0150(2)	0.0034(1)
O(1)	4e	0.1883(1)	0.5017(1)	0.2513(1)	0.042(1)	0.049(1)	0.039(1)	0.0055(9)	0.0180(9)	0.0050(9)
O(2)	4e	0.1740(1)	0.4849(1)	0.3822(1)	0.040(1)	0.057(1)	0.036(1)	0.0093(9)	0.0159(9)	0.0033(9)
O(3)	4e	0.3913(2)	0.5756(2)	0.4948(2)	0.068(2)	0.075(2)	0.065(2)	-0.009(1)	0.023(1)	-0.002(1)
O(4)	4e	0.0867(1)	0.6535(1)	0.2837(1)	0.049(1)	0.039(1)	0.051(1)	0.0022(9)	0.0228(9)	0.0007(8)
O(5)	4e	-0.0039(1)	0.4856(1)	0.2381(1)	0.043(1)	0.044(1)	0.038(1)	-0.0029(9)	0.0155(9)	0.0004(8)
O(6)	4e	0.1823(2)	0.2949(2)	0.2802(2)	0.071(2)	0.084(2)	0.097(2)	-0.006(1)	0.043(2)	0.008(2)
O(7)	4e	0.0301(2)	0.2974(1)	0.2474(1)	0.057(1)	0.053(1)	0.055(1)	-0.006(1)	0.007(1)	0.006(1)
O(8)	4e	0.1235(2)	0.2310(2)	0.3634(2)	0.087(2)	0.092(2)	0.068(2)	0.022(2)	0.039(2)	0.035(2)
O(9)	4e	0.2436(3)	0.6048(3)	-0.1546(3)	0.133(3)	0.167(4)	0.095(3)	-0.041(3)	0.028(3)	-0.015(3)
O(10)	4e	0.3616(5)	0.5380(3)	-0.0768(5)	0.219(6)	0.156(5)	0.318(8)	0.093(4)	0.155(6)	0.119(5)
O(11)	4e	0.3740(3)	0.6619(3)	-0.1257(4)	0.102(3)	0.093(3)	0.323(7)	-0.002(2)	0.097(4)	-0.014(3)
N(1)	4e	-0.0534(2)	0.5635(2)	0.0675(2)	0.050(1)	0.041(1)	0.036(1)	0.006(1)	0.014(1)	-0.003(1)
N(2)	4e	0.1215(2)	0.6125(2)	0.1058(2)	0.055(1)	0.043(1)	0.040(1)	0.004(1)	0.023(1)	0.004(1)
N(3)	4e	-0.0788(2)	0.5808(2)	0.3489(2)	0.041(1)	0.046(1)	0.049(2)	-0.001(1)	0.022(1)	0.002(1)
N(4)	4e	0.0867(2)	0.5789(1)	0.4781(2)	0.044(1)	0.042(1)	0.042(1)	0.000(1)	0.021(1)	0.001(1)
N(5)	4e	0.3627(2)	0.4359(2)	0.4615(2)	0.037(1)	0.066(2)	0.052(2)	0.007(1)	0.011(1)	0.010(1)
N(6)	4e	0.1129(2)	0.2742(2)	0.2979(2)	0.063(2)	0.040(1)	0.048(2)	-0.003(1)	0.025(1)	-0.002(1)
N(7)	4e	0.3292(3)	0.6009(3)	-0.1163(3)	0.086(3)	0.074(2)	0.113(3)	0.006(2)	0.038(3)	-0.009(2)
C(1)	4e	0.4475(3)	0.5376(4)	0.6761(3)	0.058(2)	0.162(5)	0.057(3)	0.013(3)	0.016(2)	-0.007(3)
C(2)	4e	0.4901(4)	0.5185(6)	0.7667(4)	0.077(3)	0.249(8)	0.064(3)	0.022(4)	0.023(3)	-0.019(4)
C(3)	4e	0.5202(4)	0.4347(6)	0.7909(4)	0.072(3)	0.254(9)	0.067(4)	0.020(4)	0.020(3)	0.034(5)
C(4)	4e	0.5173(3)	0.3743(5)	0.7308(4)	0.070(3)	0.186(6)	0.074(3)	-0.005(3)	0.003(3)	0.051(4)
C(5)	4e	0.4765(3)	0.3940(3)	0.6412(3)	0.048(2)	0.125(4)	0.065(3)	-0.008(2)	0.008(2)	0.028(2)
C(6)	4e	0.4411(2)	0.4754(3)	0.6135(2)	0.033(2)	0.117(3)	0.048(2)	-0.002(2)	0.011(1)	0.009(2)
C(7)	4e	0.3966(2)	0.4991(3)	0.5189(2)	0.035(2)	0.075(2)	0.060(2)	-0.001(2)	0.018(2)	0.004(2)
C(8)	4e	0.3219(2)	0.4511(2)	0.3679(2)	0.037(2)	0.066(2)	0.046(2)	0.005(1)	0.016(1)	0.003(1)
C(9)	4e	0.2194(2)	0.4817(2)	0.3316(2)	0.039(1)	0.036(1)	0.043(2)	-0.001(1)	0.018(1)	-0.002(1)
C(10)	4e	-0.1421(2)	0.5362(2)	0.0541(2)	0.054(2)	0.055(2)	0.047(2)	0.006(1)	0.017(2)	-0.010(1)
C(11)	4e	-0.2196(3)	0.5554(2)	-0.0225(2)	0.054(2)	0.074(2)	0.055(2)	0.011(2)	0.011(2)	-0.016(2)
C(12)	4e	-0.2042(3)	0.6025(2)	-0.0872(2)	0.072(2)	0.074(2)	0.043(2)	0.024(2)	0.002(2)	-0.005(2)
C(13)	4e	-0.1140(3)	0.6292(2)	-0.0755(2)	0.069(2)	0.055(2)	0.038(2)	0.014(2)	0.011(2)	0.001(1)
C(14)	4e	-0.0386(2)	0.6101(2)	0.0035(2)	0.061(2)	0.039(1)	0.037(2)	0.010(1)	0.019(1)	-0.005(1)
C(15)	4e	0.0607(2)	0.6363(2)	0.0250(2)	0.066(2)	0.037(1)	0.037(2)	0.010(1)	0.024(1)	0.001(1)
C(16)	4e	0.0929(3)	0.6822(2)	-0.0323(2)	0.087(3)	0.052(2)	0.041(2)	0.012(2)	0.033(2)	0.009(1)
C(17)	4e	0.1867(3)	0.7036(2)	-0.0044(2)	0.090(3)	0.052(2)	0.067(2)	0.003(2)	0.048(2)	0.008(2)
C(18)	4e	0.2487(3)	0.6801(2)	0.0790(2)	0.065(2)	0.062(2)	0.070(2)	-0.003(2)	0.037(2)	0.005(2)
C(19)	4e	0.2138(2)	0.6341(2)	0.1323(2)	0.055(2)	0.055(2)	0.054(2)	0.002(2)	0.023(2)	0.010(2)
C(20)	4e	-0.1605(2)	0.5780(2)	0.2792(2)	0.043(2)	0.068(2)	0.052(2)	0.004(2)	0.016(2)	-0.001(2)
C(21)	4e	-0.2441(2)	0.6127(2)	0.2808(3)	0.040(2)	0.076(2)	0.075(3)	0.006(2)	0.015(2)	0.007(2)
C(22)	4e	-0.2436(2)	0.6507(2)	0.3557(3)	0.044(2)	0.068(2)	0.088(3)	0.008(2)	0.036(2)	0.006(2)
C(23)	4e	-0.1600(2)	0.6527(2)	0.4289(2)	0.056(2)	0.055(2)	0.070(2)	0.006(2)	0.039(2)	0.002(2)
C(24)	4e	-0.0781(2)	0.6177(2)	0.4239(2)	0.043(2)	0.041(1)	0.051(2)	0.002(1)	0.027(1)	0.006(1)

Table 3. Continued.

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> <sub>11</sub>	<i>U</i> <sub>22</sub>	<i>U</i> <sub>33</sub>	<i>U</i> <sub>12</sub>	<i>U</i> <sub>13</sub>	<i>U</i> <sub>23</sub>
C(25)	4e	0.0157(2)	0.6161(2)	0.4975(2)	0.052(2)	0.038(1)	0.046(2)	0.001(1)	0.030(1)	0.003(1)
C(26)	4e	0.0334(2)	0.6495(2)	0.5809(2)	0.066(2)	0.054(2)	0.055(2)	0.002(2)	0.037(2)	0.001(2)
C(27)	4e	0.1237(3)	0.6443(2)	0.6448(2)	0.072(2)	0.065(2)	0.042(2)	-0.003(2)	0.026(2)	-0.007(2)
C(28)	4e	0.1953(2)	0.6071(2)	0.6250(2)	0.056(2)	0.067(2)	0.043(2)	-0.006(2)	0.015(2)	-0.000(2)
C(29)	4e	0.1742(2)	0.5744(2)	0.5412(2)	0.045(2)	0.057(2)	0.047(2)	0.002(1)	0.020(1)	-0.001(1)
O(3W)	4e	0.3242(2)	0.2588(2)	0.4885(2)	0.087(2)	0.075(2)	0.097(2)	0.007(2)	0.007(2)	0.005(2)
O(4W)	4e	0.2766(2)	0.6824(2)	0.3542(2)	0.057(1)	0.065(1)	0.092(2)	-0.008(1)	0.023(1)	-0.011(1)
O(5W)	4e	0.4716(5)	0.7341(4)	0.5932(4)	0.284(7)	0.161(4)	0.283(7)	-0.062(5)	0.185(6)	-0.074(5)
O(6W)	4e	0.4357(3)	0.1203(3)	0.4877(4)	0.126(3)	0.117(3)	0.284(6)	0.019(3)	0.049(4)	-0.026(4)

## References

- Hathaway, B. J.; Tomlinson, A. A. G.: Copper(II) ammonia complexes. *Coord. Chem. Rev.* **5** (1970) 1-43.
- Chen, L.; Wang, X.-W.; Chen, J.-Z.; Liu, J.-H.: Crystal Structures and Stability of Two Bipyridyl Complexes of Metal Chloroacetates. *Z. Naturforsch.* **62b** (2007) 1271-1276.
- Sgarabotto, P.; Bisceglie, F.; Pelosi, G.; Abdel-Rahmanb, L.: Synthesis, X-ray crystal structures and characterization of copper(II)-2,2'-bipyridyl derivatives of (4-amino)-hippuric acid and of L-proline. *Polyhedron* **18** (1999) 2505-2510.
- Sheldrick, G. M.: Phase annealing in SHELX-90: direct methods for larger structures. *Acta Crystallogr.* **A46** (1990) 467-473.
- Sheldrick, G. M.: SHELXL-97. Program for the Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany 1997.