

## ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

## АНАЛИЗ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЛИКОЛУРИЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

С.Ю. Паньшина<sup>1,2</sup>, О.В. Пономаренко<sup>3</sup>, А.А. Бакибаев<sup>1</sup>, В.С. Мальков<sup>1</sup><sup>1</sup>Томский государственный университет, Томск, Россия<sup>2</sup>Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: janim\_svetatusik@mail.ru

<sup>3</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Республика Казахстан

## Таблицы

Таблица Д1 - Водородные связи в гликолурилах **3** и **4**

№	Связи	Длины связей, Å			угол, град
		D-H	H...A	D...A	
<b>3</b>	N <sub>4</sub> -H...O <sub>1</sub>	0.75(6)	2.14(6)	2.88(1)	165.6
<b>4a</b>	N <sub>4a</sub> -H...O <sub>1a</sub>	0.75(3)	2.17(3)	2.812(5)	169.6
	N <sub>6a</sub> -H...O <sub>2b</sub>	0.86(4)	2.08(4)	2.890(5)	158.3
	N <sub>4b</sub> -H...O <sub>1b</sub>	0.77(3)	2.12(3)	2.892(4)	173.3
	N <sub>6b</sub> -H...O <sub>1a</sub>	0.80(4)	1.96(4)	2.837(5)	162.4

Таблица Д2 - Расстояния между металлическими центрами и валентные углы комплексов **15a-e**

№	Координационное число	Расстояние, Å		Валентные углы, град		
		Me...Me	Me...O	1. MeOC	2. MeOC	OMeO
<b>15a</b>	7	8.7261(9)	2.149(2)	131.37(2)	157.75(2)	85.16(7)
<b>15b</b>	10	9.8726(7)	2.5502(18) и 2.5012(18)	144.04(1)	166.98(2)	69.96(6)
<b>15c</b>	10	9.7904(4)	2.506(1) и 2.460(2)	143.51(1)	166.47(1)	70.29(5)
<b>15d</b>	10	9.7433(6)	2.489(2) и 2.442(3)	143.26(2)	166.24(2)	70.48(8)
<b>15e</b>	9	6.8697(4)	2.3671(14)	136.54(1)	132.88(1)	152.52(5)

Таблица Д3 - Геометрические параметры водородных связей в структурах **15a-e**

№	Связь	Расстояние, Å			Угол, град	№	Связь	Расстояние, Å			Угол, град
		D-H	H...A	D...A				D-H	H...A	D...A	
<b>15a</b>	C <sub>6</sub> -H <sub>9</sub> ...O	0.93(18)	2.45(18)	3.375(3)	177.(2)	<b>15c</b>	O <sub>w</sub> -H <sub>15</sub> ...O <sub>4</sub>	0.80(3)	2.16(3)	2.902(17)	154.(3)
	C <sub>6</sub> -H <sub>10</sub> ...O	0.93(18)	2.66(2)	3.519(3)	155.(3)		O <sub>w</sub> -H <sub>17</sub> ...O <sub>2</sub>	0.75(3)	2.03(3)	2.734(19)	156.(3)
	O <sub>9</sub> -H <sub>15</sub> ...O	0.81(4)	2.14(4)	2.934(3)	166.(3)		O <sub>w</sub> -H <sub>18</sub> ...O <sub>8</sub>	0.77(3)	2.38(3)	3.098(2)	156.(3)
	O <sub>9</sub> -H <sub>6</sub> ...O	0.83(4)	1.85(4)	2.677(4)	171.(4)		O <sub>w</sub> -H <sub>1</sub> ...O <sub>7</sub>	0.85(2)	2.22(2)	2.911(3)	139.(3)
	O <sub>10</sub> -H <sub>18</sub> ...O	0.83 (10)	2.19(14)	3.007(3)	164.(4)	<b>15d</b>	O <sub>w</sub> -H <sub>2</sub> ...O <sub>4</sub>	0.85(2)	2.14(17)	2.899(3)	149.(3)
	O <sub>10</sub> -H <sub>17</sub> ...N <sub>2</sub>	0.84(10)	2.68(14)	3.504(3)	169.(4)		O <sub>w</sub> -H <sub>3</sub> ...O <sub>2</sub>	0.85(2)	1.94(12)	2.731(3)	154.(2)
	O <sub>10</sub> -H <sub>17</sub> ...O <sub>5</sub>	0.84(10)	2.30(18)	3.100(3)	160.(4)		O <sub>w</sub> -H <sub>1</sub> ...O <sub>11</sub>	0.85(2)	2.23(12)	3.059(3)	166.(4)
<b>15b</b>	O <sub>11</sub> -H <sub>1</sub> ...O <sub>3</sub>	0.73(4)	2.03(4)	2.727(4)	163.(3)	<b>15e</b>	C <sub>6</sub> -H <sub>4</sub> ...O <sub>9</sub>	0.93(3)	2.63(3)	3.059(3)	169.(2)
	O <sub>11</sub> -H <sub>2</sub> ...O <sub>4</sub>	0.82(5)	2.42(5)	3.220(3)	168.(4)		C <sub>8</sub> -H <sub>10</sub> ...O <sub>10</sub>	0.95(3)	2.62(3)	3.059(3)	157.(2)
	O <sub>10</sub> -H <sub>3</sub> ...O <sub>7</sub>	0.77(4)	2.19(4)	2.902(3)	154.(4)		O <sub>12</sub> -H <sub>15</sub> ...O <sub>1</sub>	0.92(3)	1.78(3)	3.059(3)	173.(3)
	O <sub>10</sub> -H <sub>4</sub> ...O <sub>6</sub>	0.71(4)	2.30(5)	2.936(3)	152.(5)		O <sub>12</sub> -H <sub>16</sub> ...O <sub>3</sub>	0.74(3)	2.17(3)	2.920(3)	178.(3)
							O <sub>12</sub> -H <sub>16</sub> ...O <sub>4</sub>	0.93(3)	2.64(3)	2.920(3)	128.(3)

Таблица Д4 - Геометрические параметры комплексов мебикара **15a-e**

Связи, Å	Комплексы				
	15a	15b	15c	15d	15e
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.23	1.24	1.24	1.24	1.24
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub>	1.24	1.25	1.24	1.25	1.25
C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	1.55	1.54	1.55	1.55	1.55
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.45	1.45	1.45	1.45
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.34	1.35	1.35	1.35	1.35
N <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.35	1.35	1.34	1.35
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.45	1.45	1.45	1.45
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.45	1.45	1.44	1.45
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.34	1.35	1.35	1.35	1.35
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.5	1.45	1.45	1.45
N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.35	1.35	1.35	1.34
Диэдральный угол, град.	120.3	124	123.9	123.7	117.1

Таблица Д5 – Значение длин связей для гликолурила **1** и N-алкилзамещенных гликолурилов **2-14, 16** и металлических комплексов **3a, 6a и 15a-e**

Связи, Å	1	2	3	3a	4	5	6	6a	7	8	9	10	11	12	13	14	15a	15b	15c	15d	15e	16
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.24	1.24	1.21	1.24	1.23	1.23	1.22	1.24	1.23	1.23	1.23	1.24	1.23	1.23	1.23	1.22	1.23	1.24	1.24	1.24	1.24	1.24
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub>	1.24	1.24	1.21	1.24	1.23	1.23	1.24	1.24	1.23	1.23	1.23	1.24	1.23	1.24	1.22	1.23	1.24	1.25	1.24	1.25	1.25	1.23
C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	1.56	1.56	1.55	1.56	1.55	1.54	1.50	1.56	1.55	1.55	1.55	1.57	1.55	1.55	1.55	1.55	1.55	1.54	1.55	1.55	1.55	1.54
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.44	1.45	1.44	1.45	1.44	1.44	1.44	1.43	1.44	1.45	1.46	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.45	1.45	1.45	1.45	1.43
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.36	1.36	1.37	1.35	1.36	1.35	1.35	1.33	1.36	1.37	1.37	1.37	1.35	1.36	1.37	1.34	1.35	1.35	1.35	1.35	1.36
N <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.36	1.36	1.34	1.35	1.36	1.35	1.36	1.31	1.37	1.38	1.36	1.39	1.35	1.37	1.37	1.35	1.35	1.35	1.34	1.35	1.34
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.45	1.45	1.45	1.43	1.45	1.44	1.46	1.48	1.45	1.46	1.44	1.45	1.45	1.46	1.44	1.44	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.44	1.45	1.42	1.43	1.46	1.44	1.44	1.44	1.45	1.44	1.45	1.44	1.44	1.44	1.45	1.44	1.45	1.45	1.44	1.45	1.43
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.36	1.36	1.36	1.35	1.36	1.37	1.35	1.38	1.37	1.37	1.35	1.36	1.35	1.36	1.37	1.34	1.35	1.35	1.35	1.35	1.36
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.45	1.45	1.43	1.45	1.45	1.44	1.46	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45	1.44	1.45	1.44	1.44	1.50	1.45	1.45	1.45	1.45
N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.36	1.36	1.36	1.35	1.37	1.37	1.35	1.36	1.36	1.37	1.36	1.35	1.35	1.37	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35	1.34	1.35
N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	1.44	1.48	-	1.47	1.45	1.46	1.47	1.44	1.47	1.49	1.45	-	-	-	-	-	-	-	-	-
N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	1.44	-	-	1.46	1.43	1.46	1.46	1.45	1.44	1.45	-	-	1.44	1.44	1.46	-	-	-	-	-	1.44
N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	1.45	1.44	1.46	1.46	1.46	1.45	-	1.45	1.47	1.47	-	-	-	1.45	1.45	-	-	-	-	-	-
N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	-	-	1.43	1.46	-	-	1.45	1.45	-	-	-	1.45	1.45	-	-	-	-	-	1.43

Таблица Д6 – Значение углов в градусах для N-алкилзамещенных соединений **1-10, 12-16** и металлических комплексов **3a, 6a**

Углы, град	1	2	3	3a	4	5	6	6a	7	8	9	10	12	13	14	16
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	112.6	113.1	112.9	111.3	112.5	112.7	111.0	111.4	112.5	122.7	112.3	112.3	112.5	113.1	111.7	111.8
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	112.6	111.9	113.5	112.7	113.6	111.5	113.0	111.7	111.2	112.6	112.5	111.3	112.1	112.7	112.6	112.1
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	112.2	112.9	112.6	113.6	111.7	111.0	111.8	108.8	111.6	112.0	113.4	112.2	113.1	111.9	112.5
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	112.5	113.5	112.6	112.5	110.9	110.0	111.9	112.6	112.9	111.6	112.1	112.6	111.7	113.2	112.5
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	102.7	103.1	104.2	103.1	113.3	113.0	-	111.7	103.4	103.5	102.8	102.9	103.5	103.6	103.5
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub>	114.7	114.8	113.8	113.2	114.6	113.3	113.6	-	115.5	114.9	114.8	114.6	115.1	112.9	113.8	114.3
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	109.1	108.6	107.5	109.4	108.3	108.6	107.9	-	110.0	108.1	107.9	109.6	108.7	108.1	108.2	109.1
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	103.5	102.7	101.7	102.7	104.0	104.0	-	102.2	102.6	102.3	103.3	103.1	102.4	103.0	114.3
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub>	114.7	114.6	113.8	115.0	114.4	114.4	114.5	-	113.6	114.4	114.4	114.7	114.4	115.1	114.6	114.0
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	103.4	103.1	103.2	102.7	103.8	104.0	-	105.4	104.1	103.6	103.0	103.2	103.2	103.0	103.4
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	109.1	109.1	107.5	108.5	108.3	109.8	107.9	-	110.6	108.5	108.3	108.9	108.5	108.2	108.7	108.4
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	102.6	102.7	102.5	103.1	104.5	103.3	-	103.8	102.3	102.5	103.0	102.7	103.5	103.0	102.3
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	125.5	125.3	125.6	124.2	125.9	125.2	126.7	-	125.4	126.2	125.6	126.4	125.3	125.1	125.3	125.5
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub>	125.5	126.0	126.7	126.3	125.8	126.2	125.4	-	124.4	125.8	126.5	124.0	126.0	126.8	126.5	125.4
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	125.5	125.4	125.6	124.6	-	125.3	-	-	127.2	125.3	125.3	125.9	126.1	125.4	126.5	125.6
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub>	125.5	125.5	126.7	126.8	-	124.9	124.6	-	122.2	126.2	126.3	125.2	125.4	126.4	124.9	126.0
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	124.0	-	124.8	123.9	123.2	-	123.1	121.8	-	-	107.5	122.5	123.1

C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	-	-	124.4	112.7	123.4	125.6	119.2	124.2	122.6	-				
C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	-	-	122.1	121.4	121.6	122.6	128.2	123.1	126.5	-				-
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	122.8	-	121.6	-	124.2	121.0	121.0	126.0	123.4	122.7	123.2	122.1	122.0	120.7	124.9
C <sub>5</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	123.3		122.4	-	124.2	123.4	124.3	122.0	123.2	122.8	125.4	123.6	123.2	124.9	122.9
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	123.3	121.4	-	-	111.7	123.9	127.9	124.4	122.0	123.0	-		123.4	122.5	-
C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	123.7	124.5	-	-	122.2	125.2	120.1	125.6	126.2	124.0	-		123.5	122.1	-
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	122.2	-	124.8	121.1	124.7	-	123.1	120.8	-		114.8	124.7	124.3
Угол между плоскостями	124.1	121.4	121.0	120.4	119.0	118.9	119.1	119.0	118.5	120.5	121.8	122.4	125.5	120.9	121.9	118.7

Таблица Д7 – Формирование водородных связей молекул **17a** и **17b**.

<b>17a</b> Связь	Расстояние, Å			Угол, град	<b>17b</b> Связь	Расстояние, Å			Угол, град
	D-H	H...A	D...A			D-H	H..A	D..A	
N <sub>6</sub> -H...O <sub>1</sub>	0.89	2.03	2.91	173.3	N <sub>6</sub> -H...O <sub>1</sub>	0.85	2.08	2.94	167.2
N <sub>8</sub> -H...O <sub>2</sub>	0.87	2.06	2.93	170.6	N <sub>8</sub> -H...O <sub>2</sub>	0.87	2.12	2.99	170.0

Таблица Д8 – Значение длин связей для гликолурила **1** и его N-фенил-, арильных производных **17–19**

Связи, Å	<b>1</b>	<b>17a</b>	<b>17b</b>	<b>18</b>	<b>19</b>
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.24	1.24	1.24	1.22	1.24
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub>	1.24	1.23	1.24	1.22	1.25
C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	1.56	1.56	1.55	1.56	1.57
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.45	1.44	1.45	1.44
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.36	1.36	1.38	1.36
N <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.36	1.36	1.38	1.36
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.46	1.46	1.44	1.46
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.45	.44	1.45	1.44
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.37	1.37	1.37	1.35
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.44	1.45	1.45	1.45
N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.36	1.35	1.37	1.35
N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	1.45	1.44	1.46	1.44
N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	1.47	1.47	1.46	1.44
N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	-	1.44	-
N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	1.45	-

Таблица Д9 – Значение углов в градусах для гликолурила **1** и его N-фенил-, арильных производных **17–19**

Углы, град	<b>1</b>	<b>17a</b>	<b>17b</b>	<b>18</b>	<b>19</b>
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	112.6	112.5	112.6	112.1	111.8
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	112.6	112.3	112.4	112.3	112.4
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	111.9	112.1	112.6	113.0
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	113.1	113.1	112.4	112.9
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	103.5	103.6	103.4	103.0
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub>	114.7	114.6	113.8	113.7	114.4
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	109.1	109.2	108.5	107.9	109.3
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	102.5	102.5	103.6	103.1
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub>	114.7	114.4	114.9	114.2	114.1
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	103.5	103.5	102.9	102.0
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	109.1	108.1	108.4	108.1	108.8
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	102.5	102.4	103.6	103.2
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	125.5	125.0	126.1	126.1	124.8
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub>	125.5	125.8	125.4	126.0	125.9
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	125.5	125.6	126.7	126.0	125.7
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub>	125.5	126.4	124.9	125.9	125.5
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	121.7	-
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	121.8	122.1	122.1	122.9
C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	125.7	124.9	121.3	122.3
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	121.0	122.4	120.2	123.9
C <sub>5</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	126.2	125.1	122.7	123.5
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	-	123.5	-
C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	-	122.5	-
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	121.6	-
Угол между плоскостями	124.1	122.1	118.8	124.2	11 .3

Таблица Д10 – Водородные связи в молекуле **20**

Связь	Расстояние, Å		Угол, град
	D...A	H...A	
N <sub>4</sub> -H...O <sub>1</sub>	2.882(2)	2.06	163
N <sub>6</sub> -H...O <sub>3</sub>	2.924(2)	2.06	156
N <sub>8</sub> -H...O <sub>1</sub>	3.054(2)	2.29	165

O <sub>4</sub> -H...O <sub>2</sub>	2.626(2)	1.69	170
O <sub>W</sub> -H <sub>W</sub> ...O <sub>1</sub>	2.780(3)	1.85	152
O <sub>W</sub> -H <sub>W</sub> ...N <sub>4</sub>	3.310(3)	2.36	152
C <sub>5</sub> -H...O <sub>2</sub>	3.231(3)	2.17	172

Таблица Д11 – Значение длин связей для гликолурила **1** и его производных **20–24**

Связи, Å	<b>1</b>	<b>20</b>	<b>21</b>	<b>22</b>	<b>23</b>	<b>24</b>
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.24	1.24	1.22	1.20	1.20	1.19
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub>	1.24	1.24	1.22	1.21	1.21	1.19
C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	1.56	1.56	1.56	1.53	1.57	1.55
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.45	1.45	1.45	1.47	1.48
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.35	1.36	1.40	1.43	1.41
N <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.35	1.39	1.40	1.34	1.40
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.44	1.45	1.48	1.44	1.45
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.44	1.45	1.45	1.46	1.47
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.35	1.36	1.41	1.41	1.42
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.44	1.45	1.47	1.44	1.46
N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.36	1.36	1.39	1.35	1.41
N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	1.46	1.44	1.42	1.36	1.40
N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	1.43	1.40	-	1.44
N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	1.44	1.42	1.39	1.40
N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	1.43	1.41	-	1.43

Таблица Д12 – Значение углов для гликолурила **1** и его производных **20–24**

Углы, град	<b>1</b>	<b>20</b>	<b>21</b>	<b>22</b>	<b>23</b>	<b>24</b>
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	112.6	111.9	113.7	111.0	114.2	114.7
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	112.6	112.5	111.7	12.0	116.0	112.3
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	112.8	-	110.8	114.9	114.7
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	111.9	-	112.0	104.1	112.1
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	102.8	-	104.7	100.2	99.8
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub>	114.7	-	-	111.4	-	113.0
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	109.1	109.3	108.0	106.7	104.8	105.1
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	103.1	103.7	101.3	104.3	105.7
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub>	114.7	114.4	112.9	113.0	-	111.4
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	102.3	102.7	104.2	100.1	100.1
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	109.1	108.9	-	106.5	105.0	104.6
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	103.3	-	101.6	100.1	105.4
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	125.5	125.4	125.5	127.0	129.4	128.3
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub>	125.5	125.3	126.4	126.3	125.8	126.6
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	125.5	125.3	124.6	127.3	127.9	127.9
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub>	125.5	125.7	126.8	126.1	127.2	127.5
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	120.0	-	121.2
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	123.1	122.7	121.0	120.6	120.1
C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	122.5	123.4	125.2	125.2	121.1
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	120.3	126.3	-	123.5
C <sub>5</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	124.8	121.7	-	119.3
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	-	119.5	117.2	119.6
C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	-	125.9	126.2	122.0
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	-	127.7	-	124.4
Угол между плоскостями	124.1	119.1	123.2	115.8	117.9	115.0

Таблица Д13 - Геометрия водородных связей **25**

Связь	Расстояние, Å			Угол, град
	D-H	H...A	D...A	D-H...A
N <sub>1</sub> -H <sub>1a</sub> ...O <sub>3</sub> <sup>i</sup>	0.90(3)	2.22(3)	3.098(3)	164.(3)
N <sub>1</sub> -H <sub>1b</sub> ...O <sub>7</sub> <sup>ii</sup>	0.89(3)	2.15(3)	3.039(3)	170.(3)
N <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> ...O <sub>7</sub> <sup>iii</sup>	0.86(3)	2.01(3)	2.833(3)	159.(3)
N <sub>4</sub> -H <sub>4</sub> ...N <sub>1</sub> <sup>iv</sup>	0.92(3)	2.09(3)	3.005(3)	177.(3)
N <sub>5</sub> -H <sub>5a</sub> ...O <sub>3</sub> <sup>i</sup>	0.93(3)	2.25(3)	3.153(3)	165.(3)
N <sub>5</sub> -H <sub>5b</sub> ...O <sub>7</sub> <sup>ii</sup>	0.94(3)	2.40(3)	3.280(3)	155.(3)
N <sub>6</sub> -H <sub>6</sub> ...N <sub>5</sub> <sup>v</sup>	0.88(3)	2.19(3)	3.066(3)	177.(3)
N <sub>8</sub> -H <sub>8</sub> ...O <sub>3</sub> <sup>vi</sup>	0.85(3)	2.49(4)	3.236(3)	146.(3)

Таблица Д14 – Система водородных связей молекулы **26**

Связь	Расстояние, Å			Угол, град
	D-H	H...A	D...A	D-H...A
N <sub>1</sub> -H <sub>1</sub> ...O <sub>2</sub> <sup>i</sup>	0.86	2.15	2.963(3)	158
N <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> ...O <sub>7</sub> <sup>ii</sup>	0.86	2.10	2.927(3)	162
N <sub>3</sub> -H <sub>3</sub> ...O <sub>1</sub> <sup>iii</sup>	0.86	2.11	2.937(3)	161
N <sub>4</sub> -H <sub>4</sub> ...O <sub>8</sub> <sup>iv</sup>	0.86	2.21	2.879(3)	134
N <sub>5</sub> -H <sub>5</sub> ...O <sub>1</sub> <sup>v</sup>	0.86	2.22	2.870(3)	133
N <sub>6</sub> -H <sub>6</sub> ...O <sub>7</sub> <sup>v</sup>	0.86	2.09	2.925(3)	164
N <sub>7</sub> -H <sub>7</sub> ...O <sub>2</sub> <sup>ii</sup>	0.86	2.16	2.973(3)	158

Связь	Расстояние, Å			Угол, град
	D-H	H...A	D...A	
N8-H8...O8v <sup>i</sup>	0.86	2.12	2.963(3)	165
C16-H16...O3 <sup>vii</sup>	0.96	2.51	3.087(5)	119
C10-H10...O11 <sup>v</sup>	0.96	2.32	3.162(5)	146

Таблица Д15 – Значение длин связей для гликолурила **1** и его производных **25–32**

Связи, Å	<b>1</b>	<b>25</b>	<b>26</b>	<b>27</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>31</b>	<b>32</b>
O1-C3	1.24	1.23	1.22	1.24	1.22	1.22	1.21	1.20	1.21
O2-C7	1.24	1.23	1.23	1.24	1.22	1.24	1.22	1.21	1.21
C1-C5	1.56	1.61	1.59	1.58	1.57	1.57	1.57	1.57	1.55
N2-C1	1.44	1.44	1.43	1.44	1.44	1.50	1.50	1.47	1.44
N2-C3	1.35	1.35	1.36	1.34	1.34	1.40	1.40	1.40	1.37
N4-C3	1.35	1.36	1.36	1.34	1.44	1.34	1.35	1.36	1.38
N4-C5	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.48	1.46	1.45	1.46
N6-C5	1.44	1.45	1.44	1.44	1.44	1.46	1.46	1.45	1.45
N6-C7	1.35	1.35	1.35	1.34	1.44	1.36	1.35	1.34	1.35
N8-C1	1.44	1.44	1.44	1.44	1.44	1.43	1.46	1.49	1.48
N8-C7	1.35	1.36	1.36	1.34	1.34	1.35	1.41	1.40	1.40
N2-C10	-	-	-	-	1.43	1.37	1.38	1.43	-
N4-C9	-	-	-	-	-	1.45	1.45	1.46	1.44
N6-C8	-	-	-	-	-	1.45	1.44	1.46	1.46
N8-C11	-	-	-	-	1.43	-	1.41	1.40	1.38

Таблица Д16 – Значение углов для гликолурила **1** и его производных **25–32**

Углы, град	<b>1</b>	<b>25</b>	<b>26</b>	<b>27</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>31</b>	<b>32</b>
C1-N2-C3	112.6	113.8	113.5	113.9	113.7	112.1	111.6	111.8	111.7
C3-N4-C5	112.6	112.8	112.7	113.9	113.0	113.3	113.5	114.0	111.2
C5-N6-C7	112.6	113.8	113.0	113.9	-	111.6	114.1	114.0	113.5
C1-N8-C7	112.6	113.1	113.4	113.9	-	112.0	110.4	111.1	111.3
N2-C1-C5	102.8	100.9	102.3	101.8	102.0	100.5	100.7	102.7	102.7
N2-C1-N8	114.7	114.7	116.1	112.4	112.2	113.3	111.4	110.2	112.6
N2-C3-N4	109.1	108.9	108.2	108.4	108.6	107.6	107.8	107.3	108.1
N4-C5-C1	102.8	102.6	102.2	101.8	102.6	102.3	102.9	102.0	101.8
N4-C5-N6	114.7	114.8	115.3	112.4	111.8	112.4	111.5	112.6	112.7
N6-C5-C1	102.8	101.2	102.8	101.8	-	100.4	101.7	102.9	102.4
N6-C7-N8	109.1	108.9	109.0	108.4	-	108.7	107.6	107.8	106.9
N8-C1-C5	102.8	102.1	101.6	101.8	-	102.7	102.7	101.1	101.2
O1-C3-N4	125.5	125.9	125.6	125.8	125.1	125.8	125.2	127.1	125.9
O1-C3-N2	125.5	125.2	126.2	125.8	126.4	126.5	127.0	125.6	126.0
O2-C7-N8	125.5	126.0	125.8	125.8	-	124.8	126.6	125.7	126.2
O2-C7-N6	125.5	125.1	125.2	125.8	-	126.6	125.8	126.5	126.9
C1-N8-C11	-	-	-	-	-	-	125.7	122.0	121.4
C1-N2-C10	-	-	-	-	124.7	119.8	122.2	126.4	-
C3-N2-C10	-	-	-	-	121.5	128.1	126.1	121.6	-
C3-N4-C9	-	-	-	-	-	123.3	121.0	121.1	118.9
C5-N4-C9	-	-	-	-	-	123.1	125.4	124.1	124.6
C5-N6-C8	-	-	-	-	-	124.0	124.9	124.4	124.8
C7-N6-C8	-	-	-	-	-	120.5	120.4	121.6	121.1
C7-N8-C11	-	-	-	-	-	-	123.4	126.9	127.2
Угол между плоскостями	124.1	123.6	112.5	130.0	118.6	117.6	113.5	118.4	116.3

Таблица Д17 – Значение длин связей для гликолурила **1** и его производных **33–39**. Сравнение длин связей для соединений **1, 33–39** отображены в графике на рисунке 61.

Связи, Å	<b>1</b>	<b>33</b>	<b>34</b>	<b>35</b>	<b>36</b>	<b>37</b>	<b>38</b>	<b>39</b>
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.24	1.23	1.23	1.23	1.22	1.23	1.23	1.21
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub>	1.24	1.22	1.22	1.24	1.23	1.23	1.24	1.21
C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	1.56	1.59	1.59	1.59	1.61	1.60	1.60	1.61
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.46	1.44	1.45	1.44	1.45	1.46	1.45
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.34	1.37	1.38	1.35	1.37	1.37	1.39
N <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.35	1.36	1.36	1.35	1.37	1.36	1.38	1.39
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.44	1.45	1.47	1.47	1.46	1.44	1.47
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.44	1.45	1.45	1.45	1.46	1.46	1.46	1.45
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.34	1.36	1.37	1.38	1.38	1.36	1.39
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.44	1.46	1.46	1.45	1.46	1.45	1.47
N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.35	1.36	1.36	1.36	1.36	1.36	1.37	1.39
N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	1.45	1.45	-	-	1.45	1.69
N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	1.45	1.46	1.46	1.46	1.46	1.70
N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	1.45	-	1.47	1.47	-	1.70
N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	1.45	-	-	-	1.45	1.69

Таблица Д18 – Значение углов для гликолурила **1** и его производных **33–39**

Углы, град	<b>1</b>	<b>33</b>	<b>34</b>	<b>35</b>	<b>36</b>	<b>37</b>	<b>38</b>	<b>39</b>
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	112.6	113.9	111.8	109.5	113.0	110.7	112.9	112.7
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	112.6	112.8	112.6	112.6	100.9	112.4	110.7	114.0
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	113.8	111.9	110.3	111.0	110.0	112.0	113.1
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	112.6	112.9	112.6	112.5	113.4	112.5	111.5	113.6
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	100.6	102.1	101.9	101.9	102.0	100.4	100.7
N <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub>	114.7	112.6	113.2	111.9	112.5	113.0	112.6	112.4
N <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	109.1	108.9	109.0	108.9	109.6	109.1	107.9	105.5
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	102.0	101.1	99.6	100.9	99.8	101.6	99.5
N <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub>	114.7	112.7	113.4	112.3	112.8	113.4	112.6	112.0
N <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>1</sub>	102.8	100.5	102.0	101.6	101.9	102.0	100.4	100.7
N <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	109.1	108.9	108.9	108.8	108.9	109.3	108.9	105.7
N <sub>8</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>5</sub>	102.8	102.2	100.9	99.9	100.9	100.0	101.5	99.9
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	125.5	125.5	126.0	127.0	124.8	124.5	126.0	127.4
O <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub>	125.5	125.6	125.0	124.1	125.8	126.4	126.0	127.1
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	125.5	125.6	125.7	125.9	126.9	125.5	123.7	127.0
O <sub>2</sub> -C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub>	125.5	125.5	125.4	125.3	124.2	125.2	127.4	127.3
C <sub>1</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	124.9	-	-	-	128.2	121.4
C <sub>1</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	125.1	119.0	-	-	123.1	118.9
C <sub>3</sub> -N <sub>2</sub> -C <sub>10</sub>	-	-	120.9	120.3	-	-	123.9	117.1
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	121.9	124.1	118.8	121.0	119.1	117.7
C <sub>5</sub> -N <sub>4</sub> -C <sub>9</sub>	-	-	124.5	112.6	123.4	126.1	119.5	122.1
C <sub>5</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	123.6	-	122.4	125.2	-	119.3
C <sub>7</sub> -N <sub>6</sub> -C <sub>8</sub>	-	-	120.7	-	119.2	120.2	-	117.1
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> -C <sub>11</sub>	-	-	122.1	-	-	-	119.3	117.3
Угол между плоскостями	124.1	114.7	114.8	110.1	116.1	113.4	112.7	111.5

## Рисунки

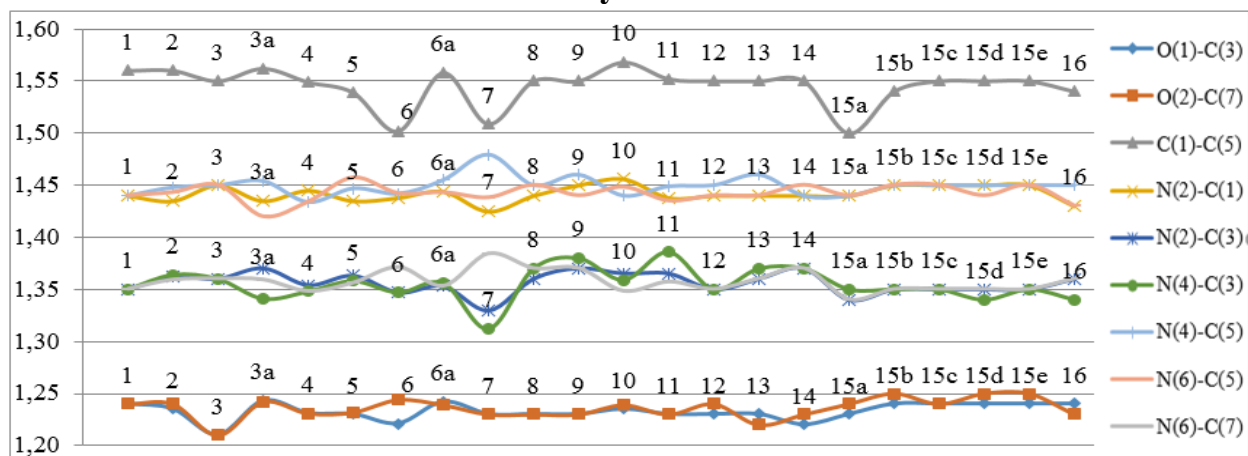


Рис. Д1. Сравнение длин связей (ангстрем, Å) для гликолурила **1** и N-алкилзамещенных соединений **2**–**14**, **16** и металлических комплексов **3a**, **6a** и **15a**–**e**.

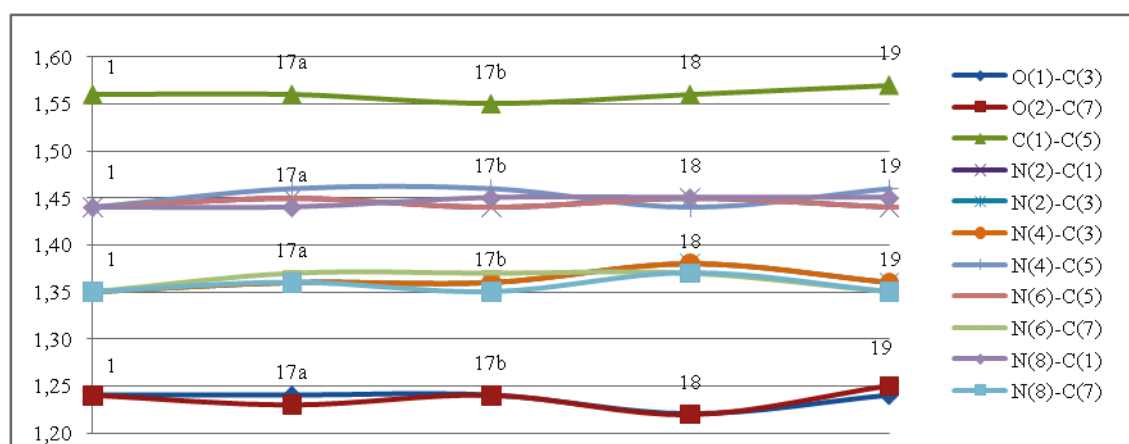


Рис. Д2. Сравнение длин связей гликолурила **1** с его производными **17**–**19**

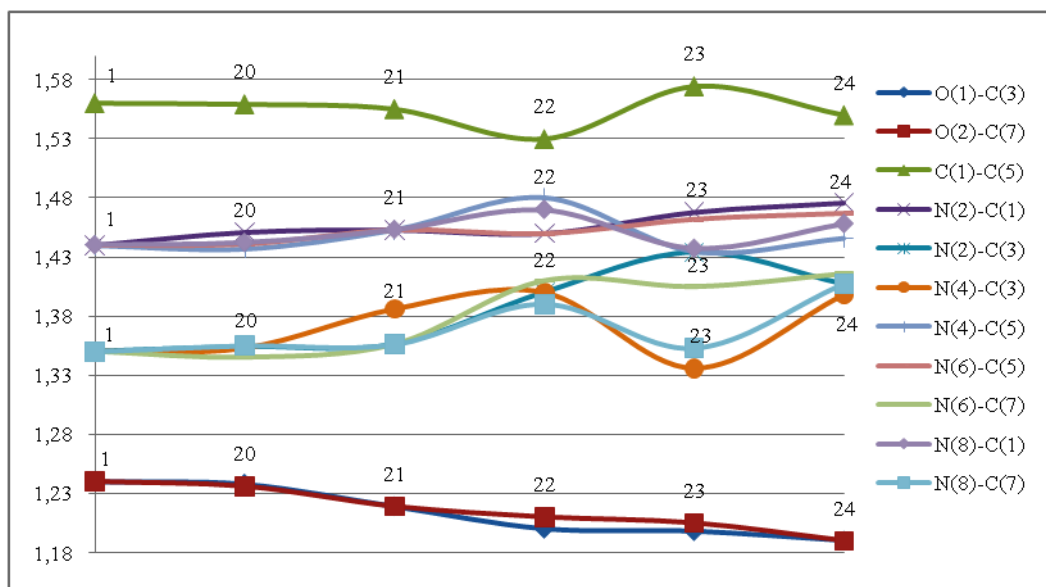


Рис. Д3. Сравнение длин связей гликолурила **1** с его производными **20–24**

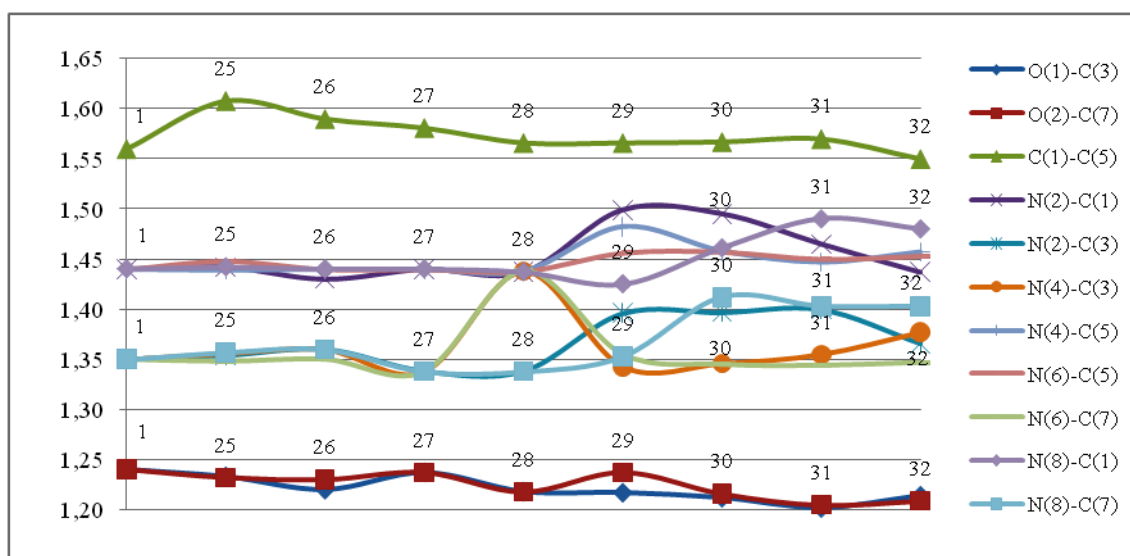
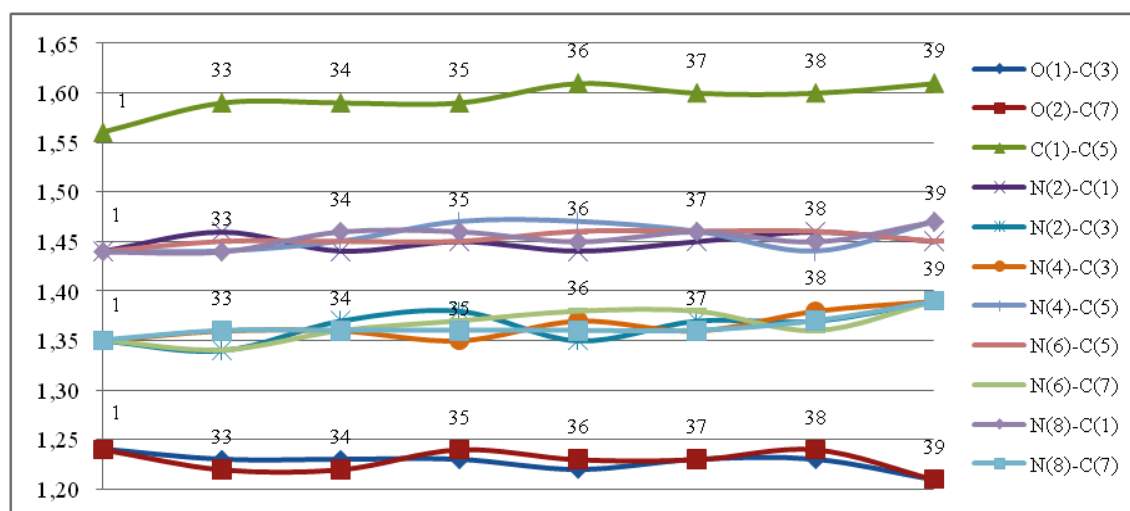


Рис. Д4. Сравнение длин связей гликолурила **1** с его производными **25–32**



Рис. Д5. Сравнение длин связей гликолурила **1** с его производными **33–39**