ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

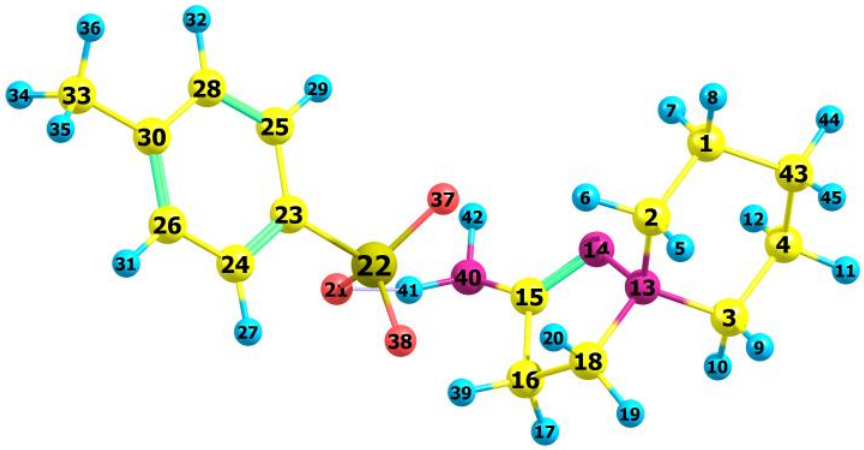
2021. Том 62, № 12 *Декабрь* *DOI: 10.26902/JSC_id85842*

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

РАСЧЕТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОДУКТОВ ТОЗИЛИРОВАНИЯ И *пара*-НИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОХЛОРИРОВАНИЯ β-АМИНОПРОПИОАМИДОКСИМОВ

Э.М. Ергалиева[1,2], Л.А. Каюкова[1], К.Б. Бажыкова[2], М.А. Губенко[3], П. Лангер[4]

[1]*АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», Алматы, Республика Казахстан*
E-mail: erg_el@mail.ru
[2]*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Республика Казахстан*
[3]*Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова, Костанай, Республика Казахстан*
[4]*Ростокский университет, Росток, Германия*



6a (Стереоизомер *axial*)

Таблица 1. Межатомные расстояния соединения **6a** (стереоизомер *axial*), рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	21-22	1.502
1-7	1.093	22-23	1.800
1-8	1.095	22-37	1.496
1-43	1.535	22-38	1.492
2-5	1.096	23-24	1.395
2-6	1.093	23-25	1.395
2-13	1.523	24-26	1.394
3-4	1.526	24-27	1.085
3-9	1.095	25-28	1.394
3-10	1.093	25-29	1.085
3-13	1.513	26-30	1.401
4-11	1.096	26-31	1.087

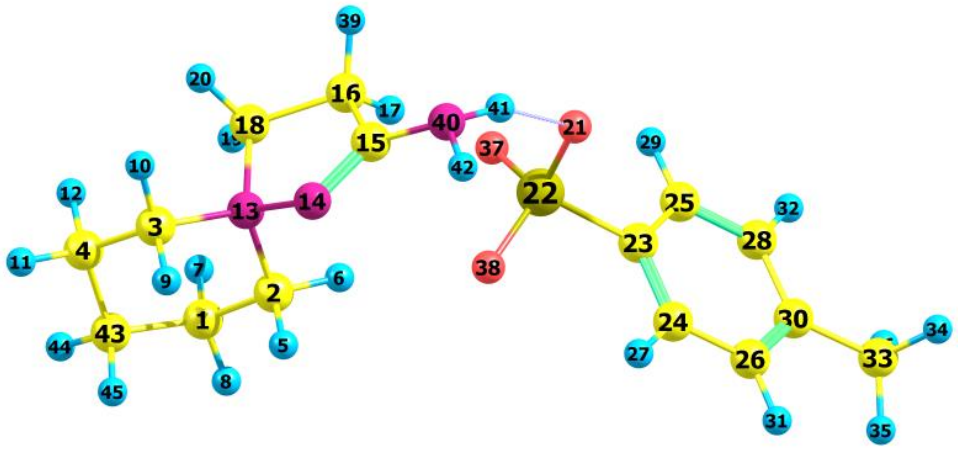
© Ергалиева Э.М., Каюкова Л.А., Бажыкова К.Б., Губенко М.А., Лангер П.· 2021

4-12	1.094	28-30	1.402
4-43	1.535	28-32	1.088
13-14	1.467	30-33	1.511
13-18	1.539	33-34	1.097
14-15	1.302	33-35	1.094
15-16	1.509	33-36	1.094
15-40	1.349	40-41	1.030
16-17	1.096	40-42	1.014
16-18	1.517	43-44	1.095
16-39	1.091	43-45	1.099
18-19	1.090	21-41	1.958
18-20	1.091		

Таблица 2. Колебательные частоты соединения **6a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	16.5	66	1129.3
2	20.3	67	1134.5
3	26.5	68	1154.9
4	31.3	69	1176.9
5	36.4	70	1186.7
6	59.1	71	1198.3
7	82.1	72	1203.1
8	95.3	73	1206.9
9	104.3	74	1217.8
10	124.6	75	1234.5
11	152.7	76	1253.5
12	170.5	77	1274.7
13	207.8	78	1305.0
14	231.4	79	1313.8
15	250.5	80	1320.1
16	283.2	81	1329.6
17	294.4	82	1343.0
18	312.0	83	1347.5
19	319.2	84	1368.2
20	357.1	85	1371.7
21	361.8	86	1398.7
22	384.5	87	1401.3
23	387.1	88	1412.6
24	415.9	89	1425.5
25	449.1	90	1438.8
26	473.3	91	1439.6
27	481.2	92	1486.0
28	492.3	93	1487.5
29	522.8	94	1496.1
30	530.1	95	1497.6
31	534.3	96	1500.1
32	552.6	97	1502.5
33	560.3	98	1506.2
34	571.8	99	1507.5
35	609.9	100	1521.9

36	650.7	101	1524.9
37	660.5	102	1539.1
38	673.0	103	1628.0
39	718.9	104	1658.7
40	766.1	105	1659.6
41	798.6	106	1709.6
42	814.4	107	3027.1
43	823.6	108	3034.8
44	831.7	109	3053.5
45	848.0	110	3063.6
46	857.9	111	3064.5
47	858.7	112	3067.8
48	869.9	113	3070.5
49	912.0	114	3093.4
50	922.2	115	3094.4
51	941.8	116	3108.8
52	953.7	117	3117.1
53	963.0	118	3122.1
54	969.3	119	3122.2
55	976.7	120	3132.2
56	986.1	121	3134.9
57	1011.4	122	3146.9
58	1024.7	123	3171.9
59	1034.1	124	3173.0
60	1040.4	125	3178.6
61	1047.7	126	3216.4
62	1064.4	127	3219.6
63	1084.7	128	3341.7
64	1088.1	129	3607.9
65	1098.1		



6a (Стереоизомер *equatorial*)

Таблица 3. Межатомные расстояния соединения **6a** (стереоизомер *equatorial*), рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

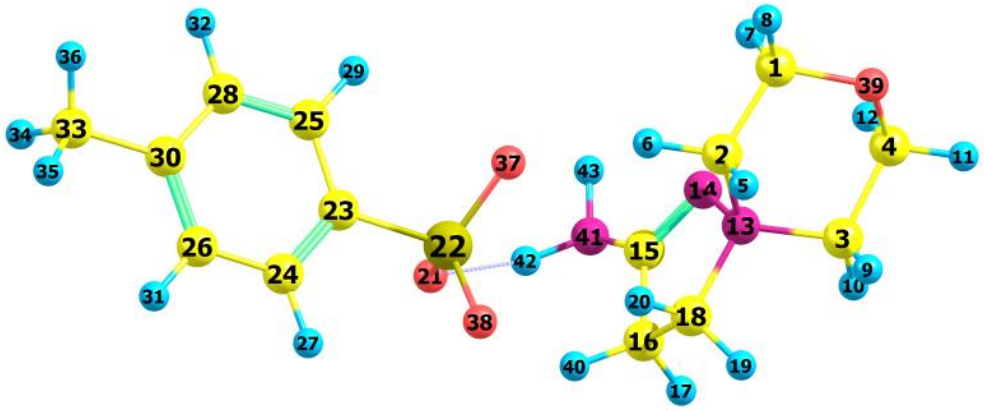
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.526	21-22	1.504

1-7	1.097	22-23	1.799
1-8	1.095	22-37	1.490
1-43	1.535	22-38	1.496
2-5	1.093	23-24	1.395
2-6	1.095	23-25	1.395
2-13	1.530	24-26	1.394
3-4	1.528	24-27	1.085
3-9	1.092	25-28	1.394
3-10	1.092	25-29	1.085
3-13	1.506	26-30	1.401
4-11	1.095	26-31	1.088
4-12	1.097	28-30	1.402
4-43	1.535	28-32	1.087
13-14	1.470	30-33	1.511
13-18	1.525	33-34	1.097
14-15	1.309	33-35	1.094
15-16	1.511	33-36	1.094
15-40	1.342	40-41	1.038
16-17	1.097	40-42	1.013
16-18	1.524	43-44	1.094
16-39	1.093	43-45	1.098
18-19	1.089	21-41	1.810
18-20	1.092		

Таблица 4. Колебательные частоты соединения **6a** (стереоизомер *equatorial*), рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	17.9	66	1128.8
2	23.8	67	1134.0
3	25.8	68	1152.2
4	26.7	69	1182.8
5	37.3	70	1187.8
6	65.3	71	1191.3
7	76.2	72	1205.9
8	91.5	73	1206.3
9	116.7	74	1228.4
10	127.8	75	1234.6
11	158.3	76	1253.6
12	175.0	77	1275.6
13	187.8	78	1296.7
14	236.9	79	1315.5
15	238.4	80	1329.0
16	293.3	81	1347.4
17	303.8	82	1347.9
18	313.6	83	1358.5
19	316.9	84	1368.3
20	355.1	85	1374.1
21	363.4	86	1393.2
22	386.3	87	1395.0
23	395.2	88	1406.6

24	416.1	89	1424.8
25	458.9	90	1432.5
26	467.9	91	1438.9
27	479.3	92	1489.8
28	485.7	93	1493.7
29	514.0	94	1499.1
30	527.6	95	1501.7
31	532.3	96	1502.0
32	555.8	97	1506.1
33	565.2	98	1508.0
34	603.4	99	1512.8
35	629.1	100	1517.3
36	650.5	101	1531.8
37	669.0	102	1539.0
38	675.2	103	1628.1
39	718.6	104	1653.4
40	752.8	105	1658.9
41	803.6	106	1708.2
42	814.4	107	3034.6
43	831.6	108	3038.9
44	835.7	109	3042.1
45	836.9	110	3047.1
46	858.3	111	3054.3
47	862.5	112	3075.0
48	870.3	113	3089.7
49	906.9	114	3094.0
50	917.8	115	3097.1
51	935.3	116	3099.0
52	957.1	117	3102.6
53	970.4	118	3103.6
54	972.2	119	3121.5
55	976.8	120	3125.9
56	984.6	121	3138.8
57	1010.4	122	3149.7
58	1019.7	123	3171.6
59	1035.5	124	3172.9
60	1040.1	125	3177.4
61	1046.5	126	3183.5
62	1064.1	127	3218.0
63	1070.4	128	3218.7
64	1085.6	129	3609.9
65	1095.5		



7a

Таблица 5. Межатомные расстояния соединения **7a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

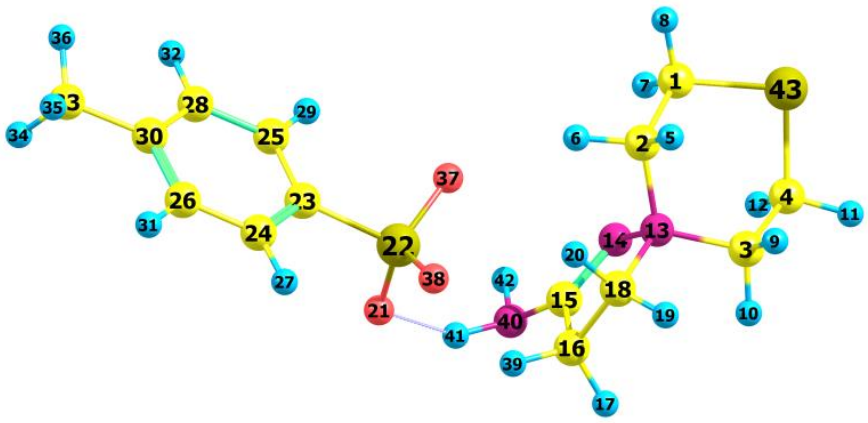
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.522	18-20	1.091
1-7	1.097	21-22	1.501
1-8	1.093	22-23	1.799
1-39	1.426	22-37	1.497
2-5	1.094	22-38	1.492
2-6	1.095	23-24	1.395
2-13	1.521	23-25	1.395
3-4	1.527	24-26	1.394
3-9	1.093	24-27	1.084
3-10	1.092	25-28	1.393
3-13	1.510	25-29	1.085
4-11	1.093	26-30	1.401
4-12	1.098	26-31	1.087
4-39	1.417	28-30	1.402
13-14	1.467	28-32	1.088
13-18	1.540	30-33	1.511
14-15	1.302	33-34	1.097
15-16	1.508	33-35	1.094
15-41	1.349	33-36	1.094
16-17	1.096	41-42	1.029
16-18	1.518	41-43	1.014
16-40	1.091	21-42	1.982
18-19	1.090		

Таблица 6. Колебательные частоты соединения **7a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	16.8	63	1119.6
2	21.8	64	1129.2
3	31.3	65	1134.9
4	34.3	66	1149.0
5	37.9	67	1158.5
6	62.7	68	1175.2
7	87.9	69	1181.6

8	100.8	70	1206.8
9	104.6	71	1210.6
10	128.9	72	1233.6
11	154.4	73	1234.5
12	170.8	74	1253.8
13	205.7	75	1267.8
14	231.5	76	1307.9
15	262.8	77	1313.1
16	292.7	78	1329.7
17	299.7	79	1334.6
18	312.7	80	1343.6
19	320.6	81	1347.5
20	358.0	82	1370.1
21	363.2	83	1380.2
22	387.0	84	1403.4
23	408.5	85	1425.6
24	416.1	86	1429.4
25	465.8	87	1436.4
26	478.6	88	1438.9
27	482.3	89	1484.6
28	498.6	90	1488.7
29	527.0	91	1495.7
30	534.7	92	1497.6
31	545.9	93	1502.1
32	557.6	94	1505.0
33	568.7	95	1506.5
34	581.6	96	1517.2
35	620.2	97	1526.0
36	650.6	98	1539.2
37	669.9	99	1627.9
38	673.6	100	1658.5
39	718.9	101	1659.2
40	775.2	102	1709.8
41	814.3	103	3035.4
42	815.8	104	3045.1
43	831.5	105	3056.5
44	837.4	106	3061.1
45	854.9	107	3065.5
46	857.9	108	3082.7
47	875.1	109	3094.8
48	910.3	110	3104.3
49	923.4	111	3117.5
50	937.6	112	3122.8
51	969.6	113	3125.6
52	974.3	114	3134.3
53	976.8	115	3146.5
54	985.6	116	3149.1
55	1011.4	117	3172.7
56	1020.3	118	3174.0
57	1031.3	119	3175.9

58	1039.7	120	3216.5
59	1040.4	121	3220.1
60	1064.6	122	3361.3
61	1090.1	123	3608.8
62	1097.0		



8a

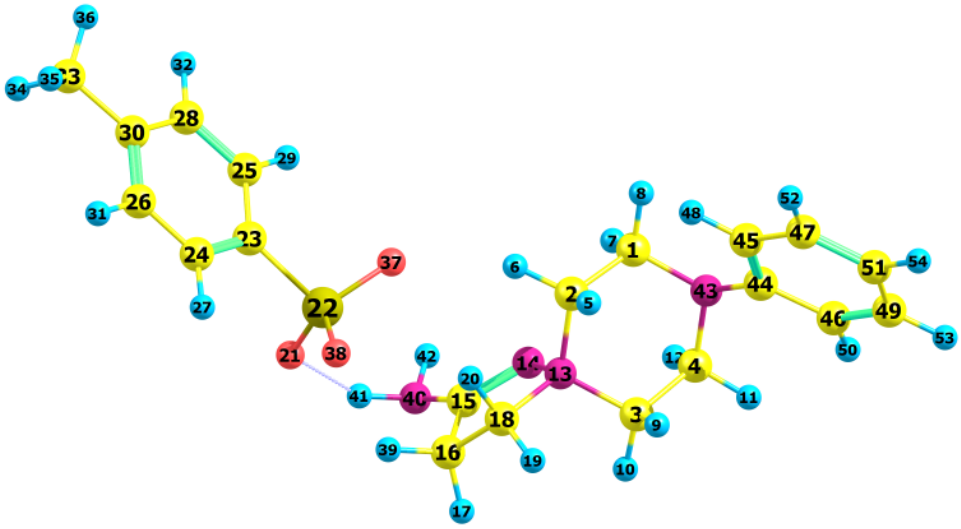
Таблица 7. Межатомные расстояния соединения **8a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.520	18-20	1.091
1-7	1.091	21-22	1.502
1-8	1.093	22-23	1.799
1-43	1.835	22-37	1.497
2-5	1.094	22-38	1.492
2-6	1.096	23-24	1.395
2-13	1.522	23-25	1.395
3-4	1.522	24-26	1.394
3-9	1.093	24-27	1.084
3-10	1.094	25-28	1.394
3-13	1.513	25-29	1.085
4-11	1.093	26-30	1.401
4-12	1.092	26-31	1.087
4-43	1.831	28-30	1.402
13-14	1.467	28-32	1.087
13-18	1.541	30-33	1.511
14-15	1.303	33-34	1.097
15-16	1.509	33-35	1.094
15-40	1.347	33-36	1.094
16-17	1.096	40-41	1.030
16-18	1.517	40-42	1.014
16-39	1.091	21-41	1.950
18-19	1.090		

Таблица 8. Колебательные частоты соединения **8a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	18.2	63	1069.9
2	22.7	64	1088.4
3	30.1	65	1105.1
4	32.9	66	1129.5
5	37.0	67	1134.7
6	60.2	68	1153.3
7	82.9	69	1179.2
8	94.9	70	1196.6
9	104.9	71	1206.5
10	108.3	72	1207.7
11	149.5	73	1225.5
12	171.5	74	1234.2
13	213.4	75	1253.0
14	231.9	76	1263.0
15	248.1	77	1287.7
16	263.0	78	1307.2
17	294.6	79	1318.3
18	297.1	80	1329.8
19	314.3	81	1342.4
20	321.0	82	1347.3
21	361.9	83	1363.1
22	374.8	84	1383.7
23	386.7	85	1402.5
24	416.1	86	1425.8
25	443.8	87	1438.8
26	461.8	88	1445.6
27	481.3	89	1466.7
28	490.2	90	1477.4
29	509.6	91	1486.3
30	524.4	92	1491.1
31	531.1	93	1499.4
32	553.1	94	1502.0
33	560.7	95	1505.5
34	572.3	96	1506.4
35	604.2	97	1527.7
36	650.6	98	1539.4
37	656.9	99	1628.0
38	671.0	100	1656.9
39	673.6	101	1659.0
40	699.9	102	1709.2
41	719.0	103	3035.2
42	765.7	104	3056.4
43	800.9	105	3064.8
44	814.5	106	3073.6
45	824.2	107	3092.1
46	831.8	108	3094.9
47	853.3	109	3098.3
48	858.0	110	3109.1

49	896.4	111	3122.6
50	923.3	112	3127.9
51	936.8	113	3133.8
52	963.4	114	3149.8
53	969.5	115	3151.7
54	977.2	116	3158.9
55	985.3	117	3173.0
56	991.7	118	3174.2
57	1010.1	119	3178.9
58	1011.1	120	3216.6
59	1037.2	121	3220.2
60	1040.3	122	3337.5
61	1064.6	123	3609.2
62	1066.7		



9a

Таблица 9. Межатомные расстояния соединения **9a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

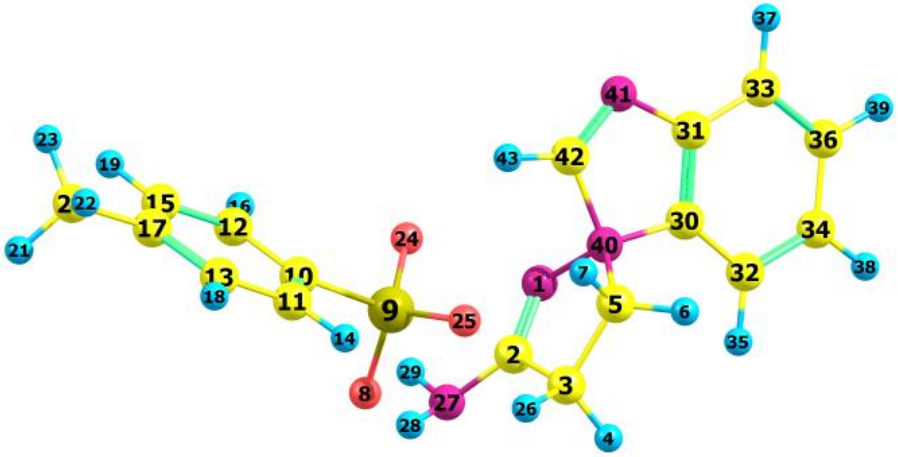
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.530	23-25	1.395
1-7	1.093	24-26	1.394
1-8	1.091	24-27	1.084
1-43	1.461	25-28	1.393
2-5	1.094	25-29	1.085
2-6	1.094	26-30	1.401
2-13	1.522	26-31	1.087
3-4	1.534	28-30	1.402
3-9	1.094	28-32	1.088
3-10	1.093	30-33	1.511
3-13	1.511	33-34	1.097
4-11	1.090	33-35	1.094
4-12	1.094	33-36	1.094
4-43	1.461	40-41	1.029
13-14	1.468	40-42	1.014

13-18	1.539	43-44	1.415
14-15	1.302	44-45	1.408
15-16	1.509	44-46	1.410
15-40	1.349	45-47	1.396
16-17	1.096	45-48	1.083
16-18	1.518	46-49	1.391
16-39	1.091	46-50	1.085
18-19	1.090	47-51	1.392
18-20	1.091	47-52	1.086
21-22	1.501	49-51	1.397
22-23	1.799	49-53	1.086
22-37	1.497	51-54	1.085
22-38	1.492	21-41	1.974
23-24	1.395		

Таблица 10. Колебательные частоты соединения **9a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	13.6	79	1082.6
2	18.8	80	1087.4
3	21.9	81	1108.3
4	27.5	82	1119.2
5	29.0	83	1130.2
6	31.6	84	1134.8
7	51.1	85	1153.8
8	55.7	86	1162.0
9	69.3	87	1178.4
10	84.1	88	1188.9
11	103.4	89	1190.8
12	118.7	90	1206.9
13	141.9	91	1208.6
14	168.2	92	1220.3
15	173.4	93	1229.2
16	197.8	94	1234.6
17	210.2	95	1251.8
18	231.3	96	1258.1
19	287.3	97	1270.4
20	293.2	98	1306.3
21	308.0	99	1314.9
22	319.1	100	1330.0
23	337.7	101	1338.4
24	349.6	102	1343.5
25	362.1	103	1347.4
26	386.3	104	1367.7
27	409.8	105	1368.9
28	416.3	106	1379.7
29	426.3	107	1393.6
30	448.0	108	1412.4
31	465.7	109	1414.3
32	480.2	110	1425.3
33	484.1	111	1432.8

34	490.8	112	1439.1
35	512.9	113	1485.8
36	527.0	114	1489.7
37	532.0	115	1490.8
38	547.8	116	1498.3
39	551.5	117	1500.7
40	558.0	118	1501.5
41	569.7	119	1506.3
42	585.5	120	1509.2
43	617.8	121	1515.1
44	632.6	122	1520.7
45	650.7	123	1539.0
46	666.6	124	1543.5
47	673.3	125	1627.7
48	708.0	126	1631.5
49	718.9	127	1657.8
50	736.8	128	1659.1
51	766.5	129	1660.9
52	771.6	130	1709.7
53	811.9	131	3035.1
54	814.5	132	3064.9
55	828.8	133	3066.0
56	829.7	134	3077.2
57	831.7	135	3091.2
58	852.9	136	3092.7
59	858.4	137	3094.6
60	890.6	138	3105.8
61	893.5	139	3121.9
62	921.8	140	3135.9
63	929.3	141	3142.2
64	949.2	142	3146.4
65	961.6	143	3148.3
66	968.7	144	3158.4
67	971.5	145	3172.4
68	977.9	146	3173.8
69	985.6	147	3176.7
70	987.4	148	3181.5
71	1006.2	149	3187.8
72	1010.7	150	3202.9
73	1014.1	151	3211.0
74	1017.9	152	3216.2
75	1037.5	153	3219.0
76	1040.3	154	3220.8
77	1062.3	155	3353.7
78	1064.4	156	3609.2



10a

Таблица 11. Межатомные расстояния соединения **10a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

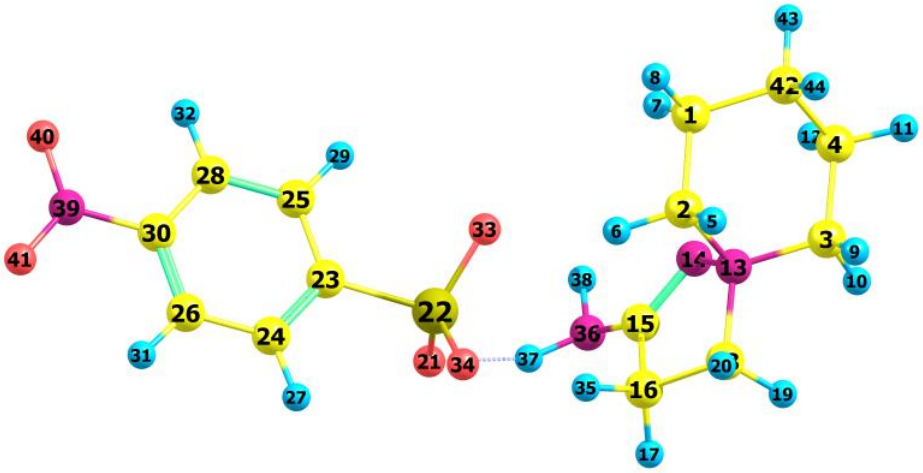
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.304	15-19	1.087
1-40	1.470	17-20	1.510
2-3	1.509	20-21	1.097
2-27	1.348	20-22	1.094
3-4	1.096	20-23	1.095
3-5	1.518	27-28	1.028
3-26	1.091	27-29	1.014
5-6	1.088	30-31	1.395
5-7	1.091	30-32	1.379
5-40	1.557	30-40	1.467
8-9	1.500	31-33	1.388
9-10	1.797	31-41	1.423
9-24	1.500	32-34	1.403
9-25	1.491	32-35	1.085
10-11	1.394	33-36	1.401
10-12	1.396	33-37	1.084
11-13	1.394	34-36	1.399
11-14	1.084	34-38	1.085
12-15	1.393	36-39	1.085
12-16	1.085	40-42	1.523
13-17	1.401	41-42	1.266
13-18	1.087	42-43	1.090
15-17	1.402		

Таблица 12. Колебательные частоты соединения **10a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	18.4	63	1013.3
2	23.3	64	1035.3
3	26.8	65	1038.1
4	35.7	66	1040.7
5	46.7	67	1064.9
6	54.1	68	1088.8

7	69.8	69	1113.7
8	72.5	70	1130.7
9	84.0	71	1134.5
10	101.9	72	1149.9
11	141.5	73	1164.6
12	168.5	74	1179.0
13	188.3	75	1183.7
14	209.7	76	1200.3
15	231.0	77	1207.7
16	254.7	78	1219.6
17	277.1	79	1235.0
18	296.2	80	1238.5
19	317.9	81	1262.5
20	328.8	82	1302.4
21	362.3	83	1310.1
22	385.2	84	1319.9
23	387.1	85	1330.8
24	414.1	86	1347.6
25	416.0	87	1359.9
26	441.5	88	1390.0
27	480.8	89	1426.2
28	489.4	90	1439.5
29	507.3	91	1486.1
30	529.6	92	1498.3
31	539.7	93	1502.3
32	554.8	94	1503.5
33	556.9	95	1506.7
34	566.2	96	1508.9
35	568.1	97	1518.4
36	600.2	98	1539.4
37	642.6	99	1628.0
38	650.6	100	1649.7
39	661.9	101	1651.2
40	673.6	102	1659.0
41	718.7	103	1665.0
42	745.8	104	1689.0
43	761.0	105	1703.2
44	766.3	106	3036.0
45	777.5	107	3068.1
46	814.6	108	3095.5
47	815.3	109	3112.7
48	831.5	110	3123.4
49	843.0	111	3143.6
50	858.0	112	3173.5
51	864.8	113	3174.7
52	884.3	114	3176.0
53	903.7	115	3191.1
54	926.3	116	3200.0
55	933.7	117	3211.0
56	956.6	118	3217.2

57	969.8	119	3220.5
58	977.4	120	3220.9
59	984.9	121	3228.8
60	988.4	122	3376.9
61	998.3	123	3611.5
62	1012.2		



11a

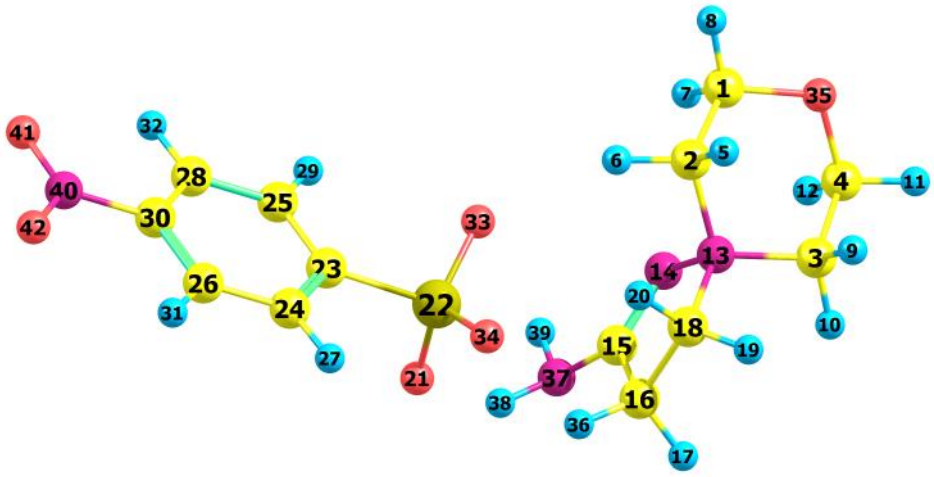
Таблица 13. Межатомные расстояния соединения **11a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.523	18-20	1.090
1-7	1.093	21-22	1.500
1-8	1.095	22-23	1.806
1-42	1.533	22-33	1.493
2-5	1.096	22-34	1.489
2-6	1.093	23-24	1.397
2-13	1.532	23-25	1.397
3-4	1.527	24-26	1.391
3-9	1.096	24-27	1.084
3-10	1.092	25-28	1.392
3-13	1.509	25-29	1.084
4-11	1.096	26-30	1.395
4-12	1.094	26-31	1.083
4-42	1.535	28-30	1.394
13-14	1.468	28-32	1.083
13-18	1.523	30-39	1.470
14-15	1.307	36-37	1.032
15-16	1.513	36-38	1.013
15-36	1.344	39-40	1.232
16-17	1.092	39-41	1.232
16-18	1.524	42-43	1.094
16-35	1.097	42-44	1.099
18-19	1.092	21-37	1.868

Таблица 14. Колебательные частоты соединения **11a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	7.3	64	1088.8
2	20.3	65	1094.7
3	22.9	66	1105.4
4	30.2	67	1121.5
5	58.1	68	1125.3
6	64.5	69	1126.9
7	77.4	70	1165.5
8	91.2	71	1182.4
9	104.3	72	1196.1
10	122.3	73	1197.7
11	143.6	74	1199.4
12	162.2	75	1202.7
13	184.5	76	1223.5
14	220.7	77	1250.2
15	247.1	78	1267.8
16	259.2	79	1303.7
17	260.9	80	1313.5
18	280.4	81	1324.5
19	312.8	82	1342.1
20	342.4	83	1356.9
21	360.4	84	1362.6
22	366.8	85	1372.9
23	383.7	86	1373.7
24	418.3	87	1397.0
25	449.1	88	1401.0
26	468.6	89	1407.4
27	471.3	90	1417.9
28	474.5	91	1432.9
29	495.6	92	1436.6
30	515.7	93	1487.0
31	520.3	94	1491.0
32	534.4	95	1493.7
33	544.1	96	1498.8
34	547.7	97	1501.8
35	585.1	98	1505.9
36	611.4	99	1516.2
37	631.7	100	1516.9
38	639.0	101	1519.9
39	664.1	102	1613.3
40	698.7	103	1640.2
41	744.7	104	1653.2
42	749.9	105	1666.7
43	758.2	106	1708.2
44	807.3	107	3027.9
45	834.3	108	3042.4
46	844.0	109	3055.6
47	850.7	110	3065.2
48	858.1	111	3068.1

49	865.4	112	3076.8
50	871.3	113	3096.3
51	877.8	114	3098.8
52	910.1	115	3119.9
53	922.5	116	3126.1
54	933.5	117	3129.3
55	959.4	118	3135.7
56	971.3	119	3139.0
57	988.2	120	3167.6
58	992.4	121	3225.1
59	994.5	122	3225.8
60	1021.9	123	3245.9
61	1036.0	124	3246.8
62	1038.8	125	3276.8
63	1049.6	126	3611.8



12a

Таблица 15. Межатомные расстояния соединения **12a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

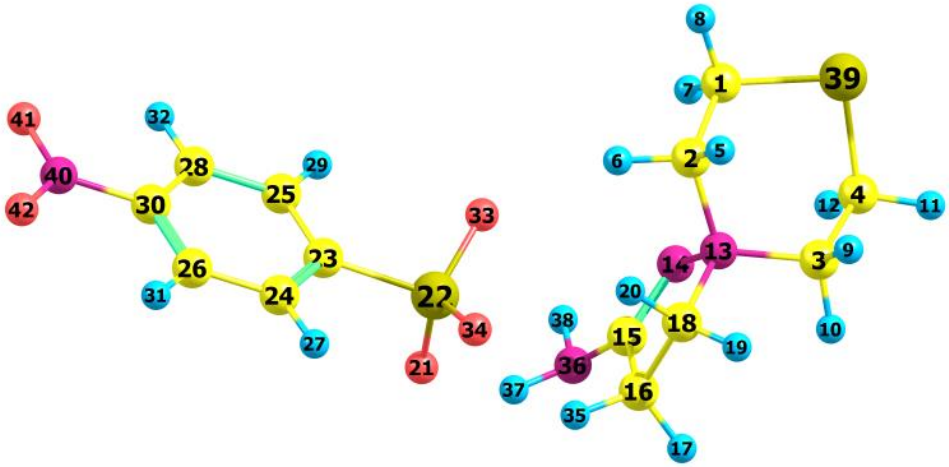
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1,522	18-19	1,090
1-7	1,097	18-20	1,091
1-8	1,093	21-22	1,497
1-35	1,425	22-23	1,806
2-5	1,094	22-33	1,494
2-6	1,094	22-34	1,490
2-13	1,521	23-24	1,397
3-4	1,527	23-25	1,397
3-9	1,093	24-26	1,392
3-10	1,092	24-27	1,084
3-13	1,512	25-28	1,391
4-11	1,093	25-29	1,084
4-12	1,098	26-30	1,394
4-35	1,417	26-31	1,083
13-14	1,467	28-30	1,395
13-18	1,539	28-32	1,083

14-15	1,301	30-40	1,471
15-16	1,509	37-38	1,025
15-37	1,349	37-39	1,014
16-17	1,096	40-41	1,232
16-18	1,519	40-42	1,232
16-36	1,091		

Таблица 16. Колебательные частоты соединения **12a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	12,2	61	1039,0
2	17,7	62	1090,1
3	25,8	63	1096,9
4	34,7	64	1119,2
5	55,2	65	1121,1
6	63,8	66	1125,2
7	81,6	67	1126,7
8	89,1	68	1152,5
9	96,5	69	1170,6
10	124,3	70	1174,7
11	145,5	71	1190,5
12	149,3	72	1195,5
13	194,8	73	1207,1
14	212,3	74	1232,6
15	256,3	75	1253,5
16	260,6	76	1267,4
17	263,3	77	1307,0
18	298,1	78	1312,8
19	318,3	79	1312,9
20	341,4	80	1334,2
21	358,4	81	1346,1
22	365,7	82	1370,8
23	407,0	83	1373,0
24	418,2	84	1379,8
25	465,6	85	1397,2
26	468,4	86	1402,8
27	472,7	87	1429,6
28	479,7	88	1436,1
29	495,2	89	1436,8
30	516,5	90	1483,8
31	531,9	91	1488,7
32	541,3	92	1493,8
33	544,6	93	1497,4
34	552,0	94	1504,6
35	581,0	95	1515,7
36	618,9	96	1516,0
37	631,2	97	1523,5
38	639,1	98	1613,5
39	669,3	99	1640,0
40	698,4	100	1658,7
41	744,6	101	1666,8

42	757,9	102	1710,5
43	774,3	103	3045,8
44	807,5	104	3056,9
45	830,4	105	3066,7
46	847,3	106	3067,3
47	857,3	107	3083,6
48	865,3	108	3109,7
49	874,0	109	3119,4
50	877,6	110	3127,8
51	910,8	111	3139,3
52	925,3	112	3147,3
53	937,9	113	3149,9
54	974,3	114	3179,6
55	989,3	115	3223,4
56	991,3	116	3226,0
57	995,5	117	3245,5
58	1019,4	118	3246,1
59	1030,5	119	3414,2
60	1035,9	120	3615,3



13a

Таблица 17. Межатомные расстояния соединения **13a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

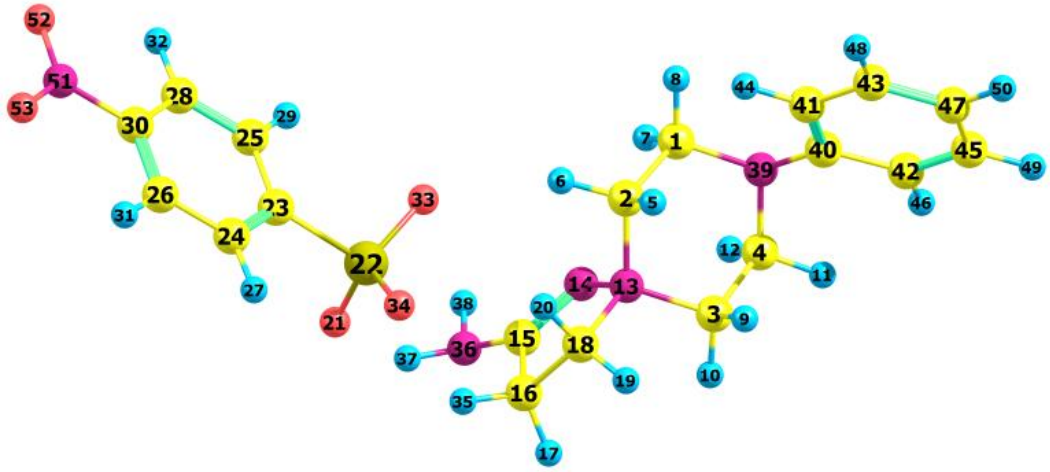
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.520	18-19	1.090
1-7	1.091	18-20	1.091
1-8	1.093	21-22	1.497
1-39	1.834	22-23	1.806
2-5	1.094	22-33	1.494
2-6	1.095	22-34	1.489
2-13	1.524	23-24	1.397
3-4	1.522	23-25	1.398
3-9	1.093	24-26	1.392
3-10	1.094	24-27	1.084
3-13	1.514	25-28	1.391
4-11	1.093	25-29	1.084

4-12	1.092	26-30	1.394
4-39	1.831	26-31	1.083
13-14	1.466	28-30	1.395
13-18	1.541	28-32	1.083
14-15	1.302	30-40	1.471
15-16	1.509	36-37	1.025
15-36	1.348	36-38	1.013
16-17	1.096	40-41	1.232
16-18	1.519	40-42	1.231
16-35	1.091		

Таблица 18. Колебательные частоты соединения **13a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	13.6	61	1036.1
2	16.3	62	1038.9
3	23.2	63	1067.1
4	28.8	64	1068.2
5	53.5	65	1088.3
6	63.9	66	1103.0
7	77.3	67	1121.5
8	87.4	68	1125.6
9	88.7	69	1126.9
10	105.5	70	1168.4
11	135.4	71	1186.8
12	148.8	72	1195.7
13	197.0	73	1196.3
14	211.4	74	1203.6
15	241.8	75	1225.1
16	256.8	76	1252.0
17	258.1	77	1262.7
18	263.0	78	1287.3
19	295.8	79	1307.4
20	313.7	80	1313.8
21	340.8	81	1317.8
22	366.0	82	1342.6
23	373.1	83	1361.3
24	418.2	84	1372.7
25	439.3	85	1384.6
26	461.8	86	1397.2
27	468.4	87	1404.6
28	473.3	88	1436.5
29	482.6	89	1443.6
30	509.4	90	1465.0
31	516.4	91	1476.8
32	521.2	92	1483.4
33	542.3	93	1489.9
34	545.7	94	1495.1
35	554.5	95	1505.1
36	603.3	96	1516.3
37	631.2	97	1525.4

38	639.1	98	1613.8
39	657.3	99	1640.3
40	671.4	100	1657.6
41	697.4	101	1667.1
42	698.4	102	1709.9
43	744.9	103	3059.0
44	757.9	104	3067.2
45	767.2	105	3074.7
46	797.2	106	3092.5
47	810.9	107	3097.6
48	842.3	108	3110.2
49	857.0	109	3129.9
50	865.4	110	3135.3
51	877.9	111	3147.5
52	897.0	112	3152.1
53	921.9	113	3157.4
54	934.4	114	3179.8
55	960.5	115	3222.9
56	989.0	116	3226.8
57	990.7	117	3245.8
58	990.8	118	3246.4
59	996.6	119	3409.4
60	1009.1	120	3616.2



14a

Таблица 19. Межатомные расстояния соединения **14a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

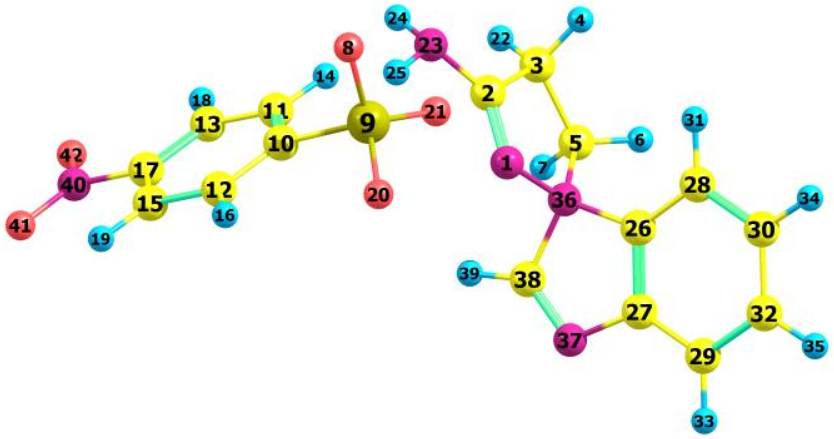
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.530	23-24	1.397
1-7	1.093	23-25	1.397
1-8	1.091	24-26	1.392
1-39	1.460	24-27	1.084
2-5	1.094	25-28	1.391
2-6	1.094	25-29	1.084
2-13	1.522	26-30	1.394
3-4	1.534	26-31	1.083

3-9	1.094	28-30	1.395
3-10	1.093	28-32	1.083
3-13	1.513	30-51	1.470
4-11	1.090	36-37	1.025
4-12	1.094	36-38	1.013
4-39	1.461	39-40	1.416
13-14	1.468	40-41	1.407
13-18	1.539	40-42	1.410
14-15	1.301	41-43	1.396
15-16	1.509	41-44	1.084
15-36	1.349	42-45	1.391
16-17	1.096	42-46	1.085
16-18	1.519	43-47	1.392
16-35	1.091	43-48	1.086
18-19	1.090	45-47	1.397
18-20	1.091	45-49	1.086
21-22	1.497	47-50	1.085
22-23	1.806	51-52	1.232
22-33	1.493	51-53	1.232
22-34	1.490		

Таблица 20. Колебательные частоты соединения **14a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	8.7	78	1038.5
2	16.4	79	1063.1
3	17.4	80	1084.7
4	28.6	81	1086.7
5	29.4	82	1109.1
6	42.7	83	1120.3
7	55.0	84	1121.9
8	63.3	85	1125.0
9	68.9	86	1127.5
10	79.1	87	1161.0
11	89.4	88	1168.6
12	114.6	89	1183.5
13	134.8	90	1190.4
14	149.0	91	1193.5
15	167.9	92	1196.6
16	199.8	93	1205.0
17	210.7	94	1221.9
18	213.5	95	1229.8
19	256.1	96	1251.1
20	263.1	97	1257.4
21	290.2	98	1270.6
22	309.8	99	1307.2
23	335.1	100	1314.0
24	342.8	101	1315.3
25	351.2	102	1338.5
26	366.4	103	1344.7
27	409.4	104	1368.9

28	419.0	105	1370.2
29	425.8	106	1373.0
30	447.9	107	1380.0
31	467.0	108	1392.5
32	468.8	109	1396.8
33	473.3	110	1412.4
34	483.6	111	1414.2
35	494.0	112	1431.5
36	511.2	113	1436.5
37	518.7	114	1486.7
38	530.0	115	1490.1
39	541.5	116	1491.5
40	545.1	117	1500.6
41	551.1	118	1502.9
42	554.8	119	1507.5
43	585.1	120	1513.8
44	617.2	121	1516.6
45	631.4	122	1521.7
46	633.0	123	1543.9
47	639.1	124	1613.2
48	666.3	125	1632.6
49	698.6	126	1640.1
50	708.7	127	1659.2
51	736.9	128	1661.3
52	744.9	129	1666.7
53	758.0	130	1711.2
54	766.9	131	3068.1
55	772.4	132	3069.8
56	806.2	133	3078.6
57	823.1	134	3090.4
58	831.0	135	3092.3
59	843.8	136	3107.7
60	858.0	137	3139.2
61	865.4	138	3143.2
62	877.8	139	3147.4
63	891.9	140	3152.4
64	894.2	141	3158.6
65	922.1	142	3178.0
66	928.3	143	3182.5
67	949.5	144	3188.6
68	963.0	145	3203.1
69	971.8	146	3211.4
70	988.9	147	3218.6
71	989.1	148	3224.1
72	992.0	149	3226.5
73	995.5	150	3245.9
74	1006.9	151	3247.2
75	1013.0	152	3415.0
76	1017.2	153	3616.0
77	1036.3		



15a

Таблица 21. Межатомные расстояния соединения **15a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

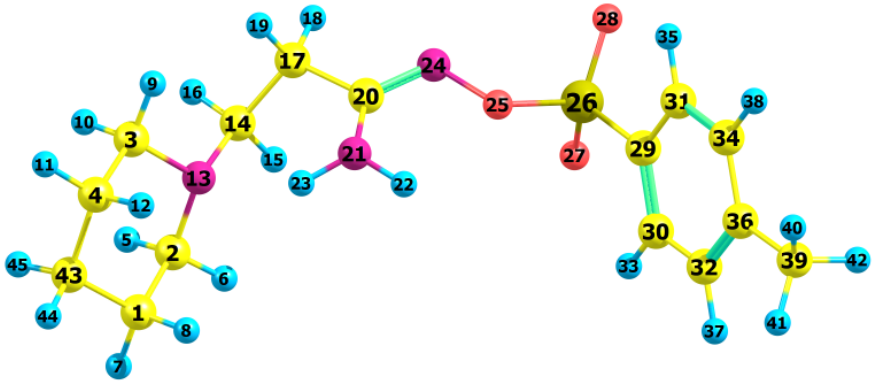
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.303	15-17	1.394
1-36	1.469	15-19	1.083
2-3	1.509	17-40	1.471
2-23	1.349	23-24	1.023
3-4	1.096	23-25	1.014
3-5	1.519	26-27	1.395
3-22	1.091	26-28	1.379
5-6	1.088	26-36	1.468
5-7	1.091	27-29	1.388
5-36	1.555	27-37	1.423
8-9	1.495	28-30	1.403
9-10	1.805	28-31	1.085
9-20	1.496	29-32	1.401
9-21	1.489	29-33	1.084
10-11	1.397	30-32	1.399
10-12	1.397	30-34	1.085
11-13	1.392	32-35	1.085
11-14	1.084	36-38	1.524
12-15	1.391	37-38	1.266
12-16	1.084	38-39	1.090
13-17	1.394	40-41	1.232
13-18	1.083	40-42	1.231

Таблица 22. Колебательные частоты соединения **15a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	13.3	61	990.9
2	19.1	62	993.2
3	23.3	63	994.5
4	32.4	64	1000.0
5	51.1	65	1012.2
6	60.4	66	1033.8

7	63.6	67	1036.4
8	68.2	68	1038.3
9	83.2	69	1088.8
10	86.8	70	1113.3
11	125.8	71	1122.6
12	149.2	72	1126.7
13	177.3	73	1126.8
14	204.5	74	1161.1
15	211.2	75	1170.0
16	251.7	76	1184.5
17	259.5	77	1185.9
18	264.0	78	1195.6
19	279.1	79	1197.5
20	328.0	80	1219.6
21	342.2	81	1237.9
22	365.9	82	1262.8
23	383.7	83	1303.3
24	413.4	84	1310.1
25	418.1	85	1314.9
26	440.6	86	1319.6
27	468.5	87	1363.1
28	473.6	88	1373.1
29	486.8	89	1390.1
30	498.8	90	1397.4
31	517.3	91	1436.9
32	532.9	92	1486.1
33	544.5	93	1495.9
34	549.8	94	1503.4
35	554.4	95	1508.7
36	565.9	96	1517.2
37	599.6	97	1517.7
38	631.1	98	1614.4
39	639.1	99	1640.8
40	640.6	100	1650.3
41	661.1	101	1651.3
42	698.3	102	1665.1
43	745.6	103	1667.6
44	747.0	104	1690.4
45	757.8	105	1704.0
46	760.2	106	3069.5
47	766.4	107	3115.0
48	778.2	108	3145.7
49	801.4	109	3185.5
50	835.5	110	3193.6
51	857.9	111	3201.1
52	863.4	112	3211.8
53	865.5	113	3221.6
54	877.9	114	3225.4
55	886.0	115	3226.9
56	904.5	116	3229.7

57	926.5	117	3246.9
58	933.6	118	3247.4
59	958.2	119	3444.1
60	980.3	120	3618.4



6b

Таблица 23. Межатомные расстояния соединения **6b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

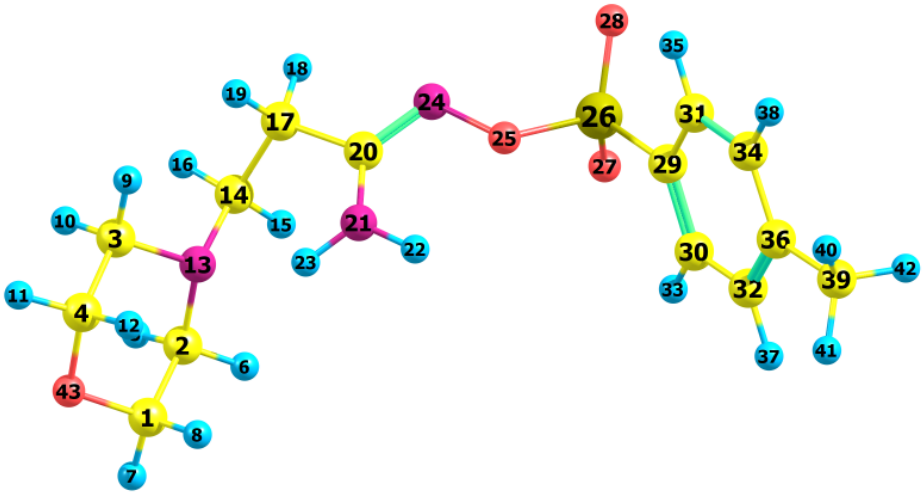
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.531	21-22	1.010
1-7	1.096	21-23	1.018
1-8	1.098	24-25	1.470
1-43	1.534	25-26	1.661
2-5	1.108	26-27	1.462
2-6	1.095	26-28	1.459
2-13	1.472	26-29	1.787
3-4	1.531	29-30	1.395
3-9	1.094	29-31	1.395
3-10	1.108	30-32	1.393
3-13	1.472	30-33	1.084
4-11	1.096	31-34	1.392
4-12	1.097	31-35	1.084
4-43	1.534	32-36	1.402
13-14	1.473	32-37	1.087
14-15	1.095	34-36	1.403
14-16	1.105	34-38	1.087
14-17	1.540	36-39	1.509
17-18	1.092	39-40	1.094
17-19	1.096	39-41	1.094
17-20	1.511	39-42	1.097
20-21	1.361	43-44	1.096
20-24	1.296	43-45	1.099
18-20	1.091		

Таблица 24. Колебательные частоты соединения **6b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	11.5	66	1137.2
2	20.6	67	1141.3

3	30.2	68	1161.4
4	35.1	69	1178.8
5	47.9	70	1184.6
6	49.8	71	1188.8
7	57.0	72	1209.3
8	77.7	73	1210.3
9	101.2	74	1234.9
10	138.8	75	1270.4
11	154.5	76	1290.5
12	164.4	77	1304.5
13	201.3	78	1315.1
14	238.7	79	1331.3
15	251.3	80	1335.7
16	260.9	81	1338.9
17	274.9	82	1356.0
18	299.1	83	1357.0
19	316.9	84	1363.5
20	331.4	85	1389.8
21	343.6	86	1393.4
22	367.8	87	1397.9
23	394.0	88	1414.1
24	416.4	89	1425.4
25	423.3	90	1426.7
26	433.8	91	1441.8
27	466.0	92	1443.1
28	471.6	93	1484.0
29	481.9	94	1491.3
30	487.8	95	1498.7
31	516.6	96	1502.4
32	551.0	97	1502.6
33	558.9	98	1504.7
34	564.7	99	1508.7
35	593.6	100	1514.1
36	648.4	101	1527.7
37	667.2	102	1537.4
38	684.7	103	1623.1
39	713.1	104	1629.7
40	717.5	105	1655.6
41	764.7	106	1723.6
42	768.9	107	2922.8
43	818.4	108	2929.5
44	820.9	109	2959.6
45	825.4	110	3028.6
46	839.4	111	3038.3
47	856.6	112	3040.7
48	858.3	113	3041.8
49	872.3	114	3059.0
50	899.6	115	3075.6
51	912.4	116	3080.9
52	933.0	117	3085.6

53	975.8	118	3086.0
54	981.8	119	3090.7
55	982.7	120	3092.9
56	992.7	121	3103.5
57	1014.5	122	3129.5
58	1020.1	123	3131.0
59	1033.7	124	3184.1
60	1048.6	125	3185.6
61	1056.4	126	3222.9
62	1065.7	127	3223.8
63	1092.2	128	3457.7
64	1099.6	129	3670.4
65	1131.9		



7b

Таблица 25. Межатомные расстояния соединения **7b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

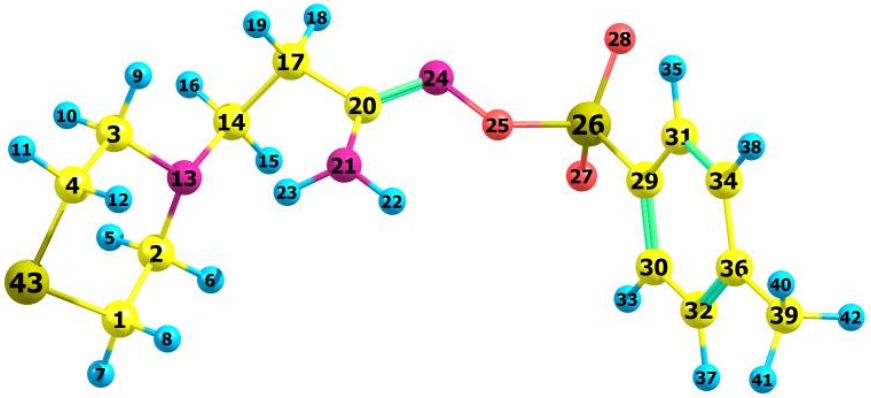
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1,525	20-24	1,302
1-7	1,093	21-22	1,010
1-8	1,101	21-23	1,020
1-43	1,428	24-25	1,475
2-5	1,105	25-26	1,656
2-6	1,095	26-27	1,467
2-13	1,471	26-28	1,466
3-4	1,526	26-29	1,782
3-9	1,095	29-30	1,397
3-10	1,106	29-31	1,397
3-13	1,472	30-32	1,394
4-11	1,093	30-33	1,084
4-12	1,101	31-34	1,394
4-43	1,428	31-35	1,084
13-14	1,473	32-36	1,404
14-15	1,095	32-37	1,086
14-16	1,104	34-36	1,405

14-17	1,540	34-38	1,086
17-18	1,093	36-39	1,509
17-19	1,096	39-40	1,094
17-20	1,512	39-41	1,094
20-21	1,355	39-42	1,097

Таблица 26. Колебательные частоты соединения **7b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	12,4	63	1131,0
2	20,5	64	1134,9
3	28,9	65	1140,8
4	35,1	66	1140,9
5	50,6	67	1144,6
6	56,8	68	1162,3
7	58,8	69	1173,3
8	77,4	70	1207,5
9	101,1	71	1230,9
10	139,1	72	1235,3
11	156,1	73	1245,5
12	163,1	74	1276,0
13	202,7	75	1278,7
14	240,5	76	1302,0
15	258,7	77	1323,1
16	265,9	78	1333,8
17	274,8	79	1334,4
18	302,7	80	1349,7
19	316,3	81	1351,0
20	332,6	82	1366,8
21	352,1	83	1388,3
22	368,4	84	1405,5
23	393,7	85	1415,9
24	415,2	86	1416,8
25	433,1	87	1421,6
26	440,0	88	1433,4
27	464,8	89	1436,5
28	476,4	90	1470,8
29	484,9	91	1485,7
30	494,8	92	1486,6
31	497,3	93	1486,9
32	527,3	94	1488,9
33	556,3	95	1493,6
34	577,8	96	1499,3
35	614,0	97	1508,5
36	644,8	98	1528,1
37	658,3	99	1605,5
38	673,1	100	1618,0
39	719,3	101	1641,1
40	722,0	102	1681,6
41	745,6	103	2949,0
42	775,4	104	2953,7

43	809,0	105	2969,0
44	816,5	106	2996,8
45	833,3	107	3000,3
46	851,1	108	3040,0
47	861,7	109	3060,9
48	863,6	110	3080,9
49	888,5	111	3086,0
50	919,6	112	3092,0
51	934,3	113	3102,0
52	978,6	114	3115,4
53	991,7	115	3117,0
54	992,9	116	3125,0
55	1012,7	117	3130,6
56	1022,8	118	3191,9
57	1027,7	119	3192,8
58	1041,3	120	3223,9
59	1061,4	121	3224,5
60	1064,1	122	3433,6
61	1082,9	123	3669,7
62	1091,9		



8b

Таблица 27. Межатомные расстояния соединения **8b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

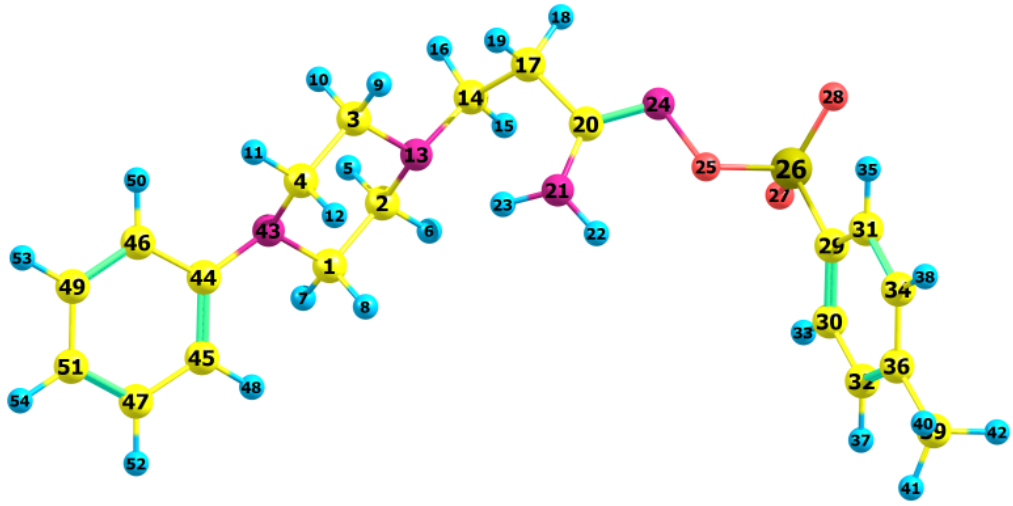
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.527	20-24	1.295
1-7	1.093	21-22	1.010
1-8	1.095	21-23	1.017
1-43	1.833	24-25	1.468
2-5	1.104	25-26	1.664
2-6	1.096	26-27	1.462
2-13	1.473	26-28	1.459
3-4	1.527	26-29	1.786
3-9	1.095	29-30	1.395
3-10	1.105	29-31	1.395
3-13	1.472	30-32	1.393
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.095	31-34	1.392

4-43	1.833	31-35	1.084
13-14	1.476	32-36	1.402
14-15	1.095	32-37	1.087
14-16	1.104	34-36	1.403
14-17	1.540	34-38	1.087
17-18	1.092	36-39	1.509
17-19	1.096	39-40	1.094
17-20	1.511	39-41	1.094
20-21	1.362	39-42	1.097

Таблица 28. Колебательные частоты соединения **8b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	13.7	63	1079.2
2	18.5	64	1100.2
3	30.1	65	1132.6
4	31.2	66	1142.2
5	45.4	67	1146.1
6	47.7	68	1162.0
7	50.8	69	1183.9
8	73.5	70	1193.2
9	96.9	71	1211.0
10	129.1	72	1226.3
11	142.0	73	1234.8
12	164.4	74	1238.4
13	196.8	75	1272.5
14	226.6	76	1303.3
15	251.8	77	1311.4
16	255.6	78	1324.0
17	272.0	79	1332.2
18	277.9	80	1339.7
19	305.9	81	1355.7
20	325.3	82	1357.2
21	335.1	83	1366.0
22	344.8	84	1383.3
23	380.8	85	1411.5
24	396.1	86	1425.8
25	415.9	87	1427.1
26	419.2	88	1441.6
27	444.8	89	1443.7
28	469.9	90	1469.3
29	480.5	91	1477.1
30	486.1	92	1482.3
31	515.2	93	1497.6
32	545.7	94	1502.2
33	558.7	95	1504.5
34	564.7	96	1506.0
35	592.3	97	1520.7
36	647.9	98	1537.3
37	662.2	99	1622.4
38	667.8	100	1629.4

39	673.1	101	1655.4
40	693.8	102	1725.9
41	709.2	103	2961.6
42	714.7	104	2963.9
43	761.4	105	2972.3
44	765.7	106	3042.0
45	816.2	107	3057.5
46	818.7	108	3058.8
47	826.8	109	3062.7
48	842.2	110	3070.4
49	858.4	111	3084.8
50	894.1	112	3089.7
51	919.6	113	3103.7
52	974.2	114	3125.5
53	975.9	115	3127.0
54	979.7	116	3129.7
55	982.1	117	3131.2
56	1000.8	118	3185.1
57	1008.3	119	3186.5
58	1014.5	120	3223.5
59	1027.3	121	3224.1
60	1033.4	122	3477.3
61	1060.6	123	3672.1
62	1065.6		



9b

Таблица 29. Межатомные расстояния соединения **9b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.528	26-28	1.459
1-7	1.093	26-29	1.786
1-8	1.106	29-30	1.394
1-43	1.457	29-31	1.396
2-5	1.105	30-32	1.394
2-6	1.095	30-33	1.084

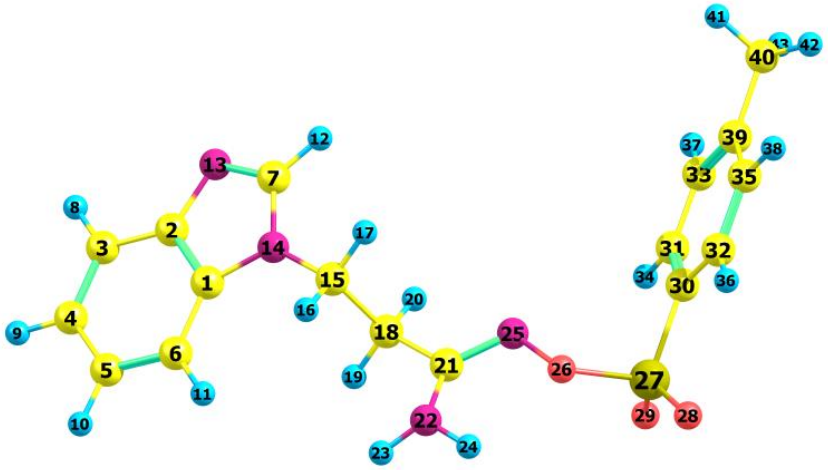
2-13	1.468	31-34	1.392
3-4	1.526	31-35	1.084
3-9	1.094	32-36	1.401
3-10	1.105	32-37	1.087
3-13	1.469	34-36	1.403
4-11	1.091	34-38	1.087
4-12	1.105	36-39	1.509
4-43	1.466	39-40	1.094
13-14	1.473	39-41	1.093
14-15	1.095	39-42	1.097
14-16	1.104	43-44	1.416
14-17	1.539	44-45	1.406
17-18	1.092	44-46	1.409
17-19	1.096	45-47	1.397
17-20	1.511	45-48	1.084
20-21	1.361	46-49	1.390
20-24	1.296	46-50	1.085
21-22	1.010	47-51	1.392
21-23	1.018	47-52	1.087
24-25	1.470	49-51	1.398
25-26	1.663	49-53	1.086
26-27	1.462	51-54	1.085

Таблица 30. Колебательные частоты соединения **9b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	12.3	79	1091.2
2	14.8	80	1099.6
3	16.3	81	1115.6
4	27.4	82	1130.3
5	33.3	83	1142.3
6	40.0	84	1152.7
7	43.0	85	1158.3
8	56.7	86	1161.2
9	69.2	87	1186.9
10	80.0	88	1188.0
11	90.7	89	1200.6
12	118.8	90	1211.5
13	144.5	91	1216.6
14	161.2	92	1230.9
15	166.1	93	1235.4
16	201.4	94	1257.0
17	228.2	95	1261.1
18	258.3	96	1288.9
19	260.6	97	1313.8
20	273.1	98	1332.5
21	276.0	99	1335.8
22	292.9	100	1339.1
23	302.9	101	1344.4
24	324.9	102	1357.1
25	334.5	103	1357.3

26	349.8	104	1365.0
27	375.2	105	1375.7
28	395.5	106	1380.2
29	417.0	107	1394.0
30	420.7	108	1414.3
31	421.9	109	1423.7
32	446.2	110	1426.9
33	470.3	111	1429.8
34	481.8	112	1441.6
35	487.6	113	1444.4
36	498.4	114	1485.2
37	517.9	115	1494.6
38	529.6	116	1497.6
39	540.2	117	1500.5
40	558.6	118	1501.2
41	565.2	119	1504.8
42	595.7	120	1505.7
43	632.2	121	1512.0
44	645.1	122	1521.7
45	647.9	123	1538.0
46	667.5	124	1544.2
47	680.3	125	1623.9
48	709.6	126	1629.5
49	713.7	127	1633.7
50	718.2	128	1655.6
51	750.9	129	1661.3
52	764.0	130	1723.8
53	774.6	131	2938.6
54	783.3	132	2949.0
55	818.7	133	2957.7
56	825.9	134	2959.9
57	837.1	135	2967.6
58	841.2	136	3042.6
59	858.1	137	3058.2
60	868.6	138	3080.5
61	895.9	139	3087.2
62	898.4	140	3096.2
63	920.8	141	3101.4
64	957.4	142	3103.4
65	962.5	143	3130.5
66	963.1	144	3131.5
67	975.6	145	3131.6
68	981.8	146	3178.2
69	987.4	147	3184.6
70	995.2	148	3185.8
71	1009.3	149	3186.7
72	1014.1	150	3199.2
73	1031.4	151	3208.2
74	1034.1	152	3219.0
75	1059.3	153	3223.8

76	1065.8	154	3224.4
77	1068.3	155	3472.4
78	1072.1	156	3670.7



10b

Таблица 31. Межатомные расстояния соединения **10b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

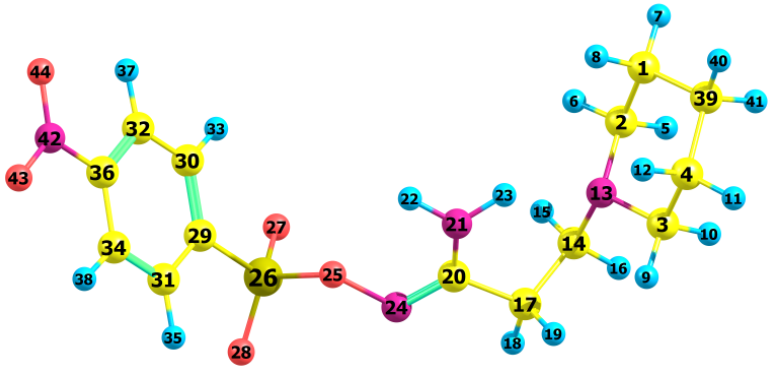
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.416	21-25	1.294
1-6	1.397	22-23	1.008
1-14	1.388	22-24	1.011
2-3	1.400	25-26	1.455
2-13	1.389	26-27	1.671
3-4	1.391	27-28	1.458
3-8	1.085	27-29	1.458
4-5	1.409	27-30	1.781
4-9	1.086	30-31	1.396
5-6	1.393	30-32	1.396
5-10	1.086	31-33	1.392
6-11	1.086	31-34	1.083
7-12	1.083	32-35	1.392
7-13	1.307	32-36	1.084
7-14	1.381	33-37	1.087
14-15	1.451	33-39	1.403
15-16	1.094	35-38	1.086
15-17	1.093	35-39	1.402
15-18	1.545	39-40	1.509
18-19	1.096	40-41	1.097
18-20	1.092	40-42	1.093
18-21	1.507	40-43	1.094
21-22	1.366		

Таблица 32. Колебательные частоты соединения **10b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	11.0	63	1032.7

2	16.5	64	1034.1
3	24.5	65	1038.8
4	28.8	66	1065.4
5	37.1	67	1096.6
6	44.2	68	1104.6
7	45.4	69	1130.4
8	64.7	70	1143.7
9	75.5	71	1151.5
10	98.8	72	1161.6
11	146.6	73	1179.1
12	164.6	74	1190.4
13	178.8	75	1212.6
14	199.2	76	1230.9
15	233.7	77	1235.3
16	250.0	78	1274.3
17	267.7	79	1307.7
18	280.5	80	1317.1
19	302.9	81	1319.6
20	327.6	82	1335.2
21	332.2	83	1347.7
22	366.3	84	1365.2
23	377.8	85	1375.1
24	411.0	86	1400.9
25	416.0	87	1402.9
26	429.3	88	1416.7
27	436.3	89	1422.4
28	453.5	90	1427.1
29	484.1	91	1442.2
30	499.0	92	1491.4
31	532.2	93	1498.5
32	546.2	94	1502.5
33	555.0	95	1504.4
34	565.0	96	1509.5
35	588.0	97	1526.8
36	593.9	98	1536.3
37	620.1	99	1549.7
38	641.9	100	1624.6
39	647.4	101	1628.7
40	656.7	102	1634.1
41	696.5	103	1654.4
42	711.2	104	1671.2
43	756.4	105	1722.7
44	757.7	106	3042.1
45	775.3	107	3061.7
46	777.8	108	3072.2
47	798.4	109	3104.3
48	803.2	110	3118.5
49	817.8	111	3132.9
50	828.9	112	3142.6
51	853.1	113	3181.1

52	854.5	114	3187.4
53	866.6	115	3188.4
54	892.2	116	3191.2
55	897.3	117	3203.7
56	935.5	118	3215.1
57	948.7	119	3226.5
58	973.4	120	3236.0
59	979.0	121	3239.1
60	980.6	122	3586.2
61	1014.9	123	3710.7
62	1026.4		



11b

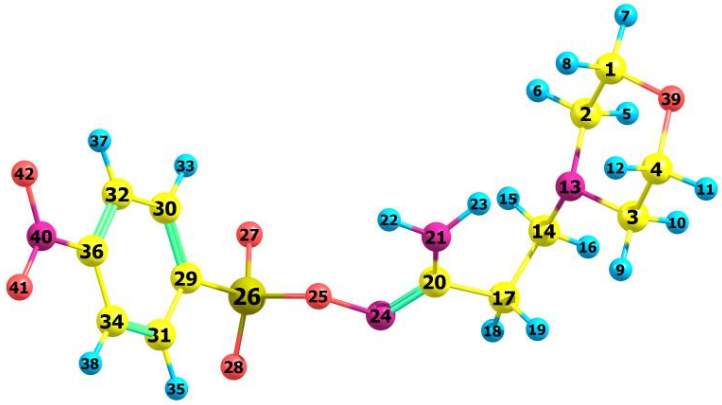
Таблица 33. Межатомные расстояния соединения **11b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.531	21-22	1.009
1-7	1.096	21-23	1.019
1-8	1.098	24-25	1.480
1-39	1.534	25-26	1.652
2-5	1.107	26-27	1.461
2-6	1.095	26-28	1.458
2-13	1.473	26-29	1.798
3-4	1.531	29-30	1.395
3-9	1.094	29-31	1.396
3-10	1.108	30-32	1.393
3-13	1.473	30-33	1.084
4-11	1.096	31-34	1.392
4-12	1.098	31-35	1.084
4-39	1.533	32-36	1.393
13-14	1.473	32-37	1.082
14-15	1.095	34-36	1.394
14-16	1.104	34-38	1.082
14-17	1.540	36-42	1.477
17-18	1.092	39-40	1.096
17-19	1.096	39-41	1.099
17-20	1.511	42-43	1.229
20-21	1.357	42-44	1.230
20-24	1.297		

Таблица 34. Колебательные частоты соединения **11b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	9.3	64	1092.5
2	14.0	65	1095.7
3	23.5	66	1123.7
4	25.2	67	1124.7
5	44.5	68	1131.9
6	52.3	69	1135.4
7	62.2	70	1162.3
8	75.2	71	1178.8
9	92.4	72	1183.2
10	124.7	73	1187.3
11	143.0	74	1196.7
12	152.7	75	1209.1
13	197.4	76	1269.0
14	231.6	77	1289.9
15	238.6	78	1304.0
16	252.6	79	1314.1
17	253.5	80	1314.7
18	262.9	81	1334.7
19	303.8	82	1344.4
20	314.5	83	1355.1
21	341.9	84	1363.5
22	350.7	85	1375.0
23	385.2	86	1388.3
24	419.8	87	1391.7
25	420.5	88	1397.6
26	430.9	89	1400.2
27	460.1	90	1413.6
28	466.6	91	1424.2
29	467.0	92	1439.0
30	478.8	93	1442.2
31	483.4	94	1482.4
32	517.6	95	1491.4
33	536.6	96	1497.5
34	545.7	97	1502.8
35	557.5	98	1509.3
36	589.0	99	1513.1
37	621.9	100	1516.6
38	637.4	101	1526.5
39	687.9	102	1623.0
40	693.3	103	1623.6
41	731.0	104	1641.3
42	745.8	105	1674.3
43	754.4	106	1721.3
44	767.0	107	2925.7
45	773.3	108	2932.5
46	818.5	109	2966.3
47	822.7	110	3027.3

48	855.6	111	3037.6
49	859.0	112	3040.4
50	867.5	113	3060.8
51	872.3	114	3076.2
52	881.0	115	3082.2
53	898.8	116	3086.1
54	913.1	117	3087.2
55	932.2	118	3090.4
56	981.3	119	3091.8
57	992.7	120	3131.0
58	995.4	121	3227.8
59	997.7	122	3228.6
60	1018.7	123	3249.0
61	1031.7	124	3249.8
62	1047.6	125	3439.3
63	1055.6	126	3675.0



12b

Таблица 35. Межатомные расстояния соединения **12b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

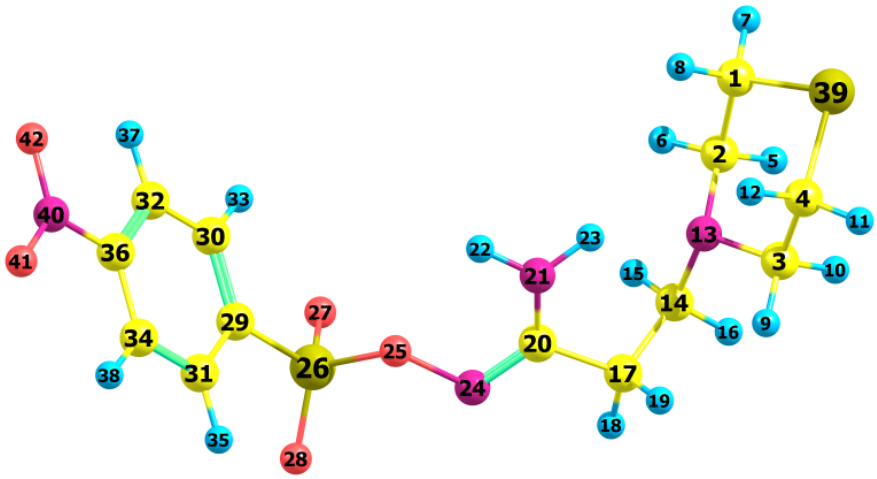
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.526	20-24	1.297
1-7	1.093	21-22	1.009
1-8	1.103	21-23	1.018
1-39	1.420	24-25	1.479
2-5	1.105	25-26	1.653
2-6	1.096	26-27	1.461
2-13	1.471	26-28	1.457
3-4	1.527	26-29	1.798
3-9	1.095	29-30	1.395
3-10	1.105	29-31	1.396
3-13	1.471	30-32	1.393
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.103	31-34	1.392
4-39	1.420	31-35	1.084
13-14	1.473	32-36	1.393
14-15	1.095	32-37	1.082
14-16	1.104	34-36	1.394

14-17	1.539	34-38	1.082
17-18	1.092	36-40	1.477
17-19	1.096	40-41	1.229
17-20	1.512	40-42	1.229
20-21	1.357		

Таблица 36. Колебательные частоты соединения **12b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	9.6	61	1068.9
2	15.8	62	1095.4
3	24.0	63	1102.8
4	26.5	64	1124.1
5	42.3	65	1125.3
6	56.1	66	1146.4
7	61.9	67	1149.6
8	78.0	68	1151.9
9	93.2	69	1162.2
10	124.3	70	1169.7
11	143.1	71	1187.7
12	157.0	72	1197.2
13	201.4	73	1238.5
14	232.2	74	1251.7
15	239.9	75	1281.8
16	253.2	76	1307.6
17	263.5	77	1314.6
18	265.3	78	1327.9
19	305.1	79	1341.8
20	317.9	80	1344.8
21	345.9	81	1356.1
22	355.5	82	1369.6
23	386.8	83	1375.0
24	419.8	84	1394.9
25	431.7	85	1400.1
26	438.2	86	1409.9
27	460.6	87	1423.8
28	465.0	88	1434.1
29	480.0	89	1439.0
30	485.8	90	1443.5
31	498.7	91	1483.3
32	517.5	92	1496.1
33	536.5	93	1500.6
34	547.3	94	1503.9
35	589.6	95	1512.3
36	614.2	96	1516.8
37	622.9	97	1520.4
38	637.2	98	1622.2
39	681.2	99	1623.8
40	692.9	100	1641.3
41	724.3	101	1674.5
42	746.1	102	1720.2

43	754.1	103	2954.8
44	771.8	104	2959.7
45	779.0	105	2968.8
46	822.4	106	2983.2
47	859.1	107	2990.1
48	867.5	108	3060.7
49	869.0	109	3078.4
50	875.8	110	3085.4
51	880.5	111	3092.8
52	894.9	112	3110.0
53	922.6	113	3111.9
54	940.6	114	3130.8
55	995.3	115	3227.6
56	995.8	116	3229.2
57	997.5	117	3249.7
58	1029.4	118	3250.2
59	1031.7	119	3456.6
60	1045.5	120	3676.7



13b

Таблица 37. Межатомные расстояния соединения **13b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.527	20-24	1.296
1-7	1.093	21-22	1.009
1-8	1.095	21-23	1.018
1-39	1.833	24-25	1.478
2-5	1.104	25-26	1.654
2-6	1.096	26-27	1.461
2-13	1.473	26-28	1.457
3-4	1.527	26-29	1.797
3-9	1.095	29-30	1.395
3-10	1.104	29-31	1.396
3-13	1.473	30-32	1.393
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.095	31-34	1.392

4-39	1.833	31-35	1.084
13-14	1.476	32-36	1.393
14-15	1.095	32-37	1.082
14-16	1.104	34-36	1.394
14-17	1.540	34-38	1.082
17-18	1.092	36-40	1.477
17-19	1.096	40-41	1.229
17-20	1.511	40-42	1.229
20-21	1.358		

Таблица 38. Колебательные частоты соединения **13b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	4.8	61	1026.9
2	14.0	62	1031.6
3	22.2	63	1059.4
4	24.7	64	1078.6
5	41.3	65	1095.6
6	46.3	66	1123.7
7	62.4	67	1124.5
8	72.5	68	1131.4
9	89.1	69	1145.3
10	121.4	70	1162.5
11	133.5	71	1184.0
12	143.3	72	1192.8
13	194.5	73	1196.8
14	221.4	74	1226.1
15	234.8	75	1239.2
16	250.9	76	1271.6
17	252.7	77	1302.9
18	253.7	78	1311.1
19	277.2	79	1314.2
20	312.2	80	1325.9
21	329.7	81	1345.1
22	332.6	82	1355.5
23	367.5	83	1366.1
24	390.1	84	1375.1
25	416.8	85	1382.4
26	419.9	86	1400.3
27	442.2	87	1409.9
28	458.4	88	1425.2
29	464.9	89	1439.2
30	477.8	90	1442.8
31	482.1	91	1469.0
32	515.5	92	1477.6
33	536.4	93	1481.0
34	541.7	94	1495.3
35	556.6	95	1506.2
36	587.7	96	1516.7
37	622.0	97	1519.1
38	637.4	98	1623.3

39	662.9	99	1624.0
40	680.5	100	1641.4
41	692.7	101	1674.6
42	694.9	102	1722.7
43	720.2	103	2965.1
44	745.7	104	2967.1
45	754.2	105	2976.2
46	761.1	106	3057.2
47	772.1	107	3060.0
48	815.6	108	3062.9
49	824.0	109	3070.6
50	858.9	110	3081.6
51	867.5	111	3090.7
52	880.4	112	3126.0
53	892.2	113	3127.6
54	918.5	114	3130.8
55	973.9	115	3227.9
56	978.8	116	3228.6
57	995.5	117	3248.9
58	997.7	118	3249.9
59	999.7	119	3464.7
60	1007.5	120	3677.1

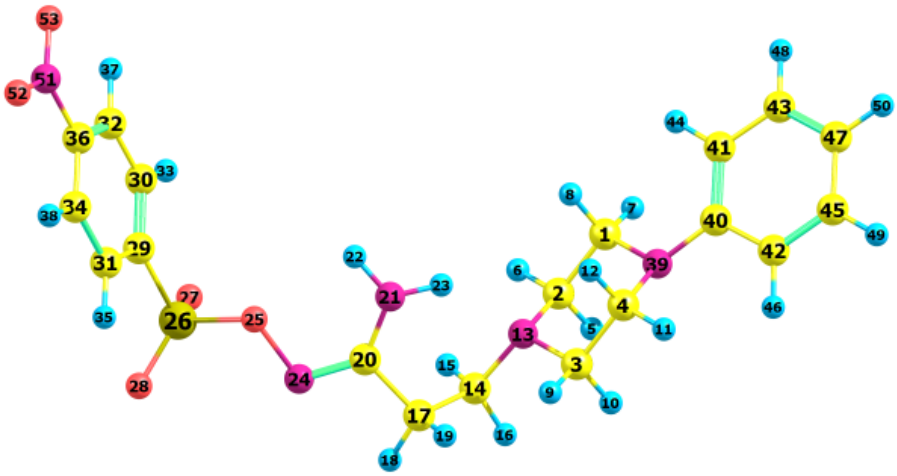


Таблица 39. Межатомные расстояния соединения **14b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.528	26-28	1.457
1-7	1.093	26-29	1.797
1-8	1.106	29-30	1.395
1-39	1.457	29-31	1.396
2-5	1.105	30-32	1.393
2-6	1.095	30-33	1.084
2-13	1.469	31-34	1.392
3-4	1.526	31-35	1.084
3-9	1.094	32-36	1.393
3-10	1.105	32-37	1.082
3-13	1.469	34-36	1.394

4-11	1.091	34-38	1.082
4-12	1.105	36-51	1.477
4-39	1.466	39-40	1.417
13-14	1.473	40-41	1.405
14-15	1.095	40-42	1.409
14-16	1.104	41-43	1.397
14-17	1.539	41-44	1.084
17-18	1.092	42-45	1.390
17-19	1.096	42-46	1.085
17-20	1.512	43-47	1.392
20-21	1.357	43-48	1.086
20-24	1.297	45-47	1.398
21-22	1.009	45-49	1.086
21-23	1.019	47-50	1.085
24-25	1.478	51-52	1.229
25-26	1.653	51-53	1.229
26-27	1.461		

Таблица 40. Колебательные частоты соединения **14b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.4	78	1068.9
2	12.6	79	1071.5
3	21.8	80	1093.2
4	26.1	81	1096.3
5	29.4	82	1115.4
6	35.6	83	1125.5
7	57.6	84	1126.7
8	62.4	85	1132.9
9	69.7	86	1152.8
10	81.1	87	1157.5
11	88.4	88	1162.5
12	110.2	89	1186.2
13	133.9	90	1188.2
14	143.4	91	1198.9
15	162.9	92	1202.1
16	197.9	93	1215.8
17	223.1	94	1234.6
18	236.6	95	1257.3
19	252.1	96	1261.6
20	260.3	97	1289.0
21	264.3	98	1314.5
22	279.9	99	1316.2
23	293.9	100	1337.0
24	308.7	101	1344.8
25	320.5	102	1344.8
26	352.0	103	1357.6
27	360.6	104	1365.7
28	387.7	105	1375.2
29	420.0	106	1376.5
30	421.0	107	1381.3

31	421.7	108	1396.1
32	449.7	109	1400.1
33	459.4	110	1415.6
34	464.5	111	1424.8
35	479.6	112	1430.6
36	485.3	113	1438.8
37	498.5	114	1445.5
38	515.2	115	1484.5
39	529.8	116	1496.6
40	536.6	117	1499.7
41	539.6	118	1504.2
42	551.6	119	1506.2
43	590.1	120	1515.2
44	622.2	121	1517.5
45	632.6	122	1524.2
46	636.9	123	1544.1
47	645.3	124	1623.6
48	682.1	125	1624.3
49	693.1	126	1633.8
50	709.6	127	1641.4
51	727.9	128	1661.5
52	746.9	129	1674.6
53	751.9	130	1721.2
54	754.3	131	2938.5
55	772.7	132	2949.9
56	775.1	133	2960.1
57	784.0	134	2962.3
58	823.2	135	2970.3
59	836.4	136	3061.5
60	859.2	137	3081.5
61	867.5	138	3087.1
62	872.1	139	3096.3
63	880.8	140	3101.3
64	894.9	141	3130.9
65	898.7	142	3133.5
66	919.9	143	3178.8
67	957.1	144	3185.2
68	962.7	145	3199.6
69	962.9	146	3208.3
70	987.8	147	3218.1
71	995.3	148	3228.7
72	996.2	149	3229.7
73	998.4	150	3250.8
74	1009.6	151	3251.1
75	1031.9	152	3454.8
76	1032.4	153	3676.6
77	1059.5		

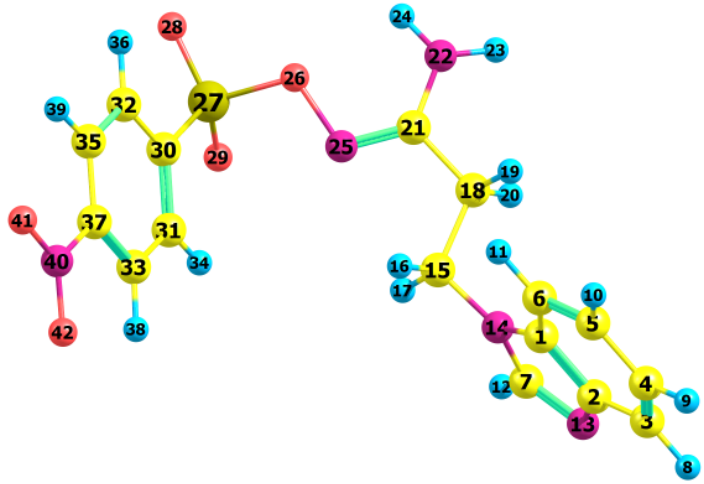


Таблица 41. Межатомные расстояния соединения **15b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

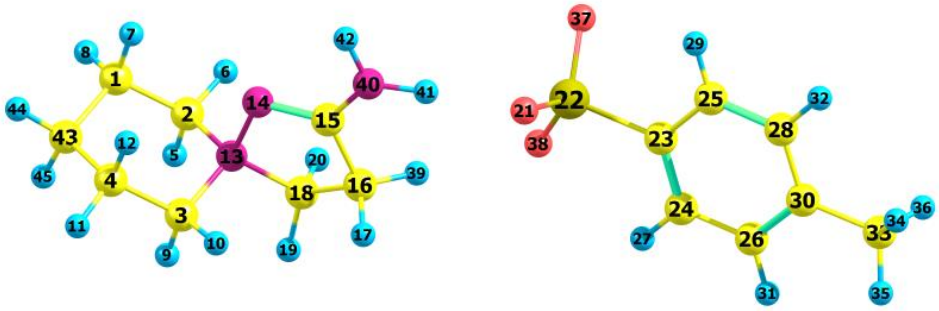
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.416	21-22	1.359
1-6	1.398	21-25	1.295
1-14	1.389	22-23	1.007
2-3	1.400	22-24	1.009
2-13	1.390	25-26	1.458
3-4	1.391	26-27	1.659
3-8	1.085	27-28	1.456
4-5	1.409	27-29	1.456
4-9	1.086	27-30	1.793
5-6	1.393	30-31	1.396
5-10	1.086	30-32	1.396
6-11	1.086	31-33	1.392
7-12	1.084	31-34	1.083
7-13	1.307	32-35	1.392
7-14	1.380	32-36	1.084
14-15	1.453	33-37	1.393
15-16	1.093	33-38	1.082
15-17	1.092	35-37	1.393
15-18	1.537	35-39	1.082
18-19	1.097	37-40	1.478
18-20	1.098	40-41	1.229
18-21	1.511	40-42	1.229

Таблица 42. Колебательные частоты соединения **15b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	9.6	61	979.5
2	12.3	62	993.4
3	19.7	63	995.2
4	23.3	64	1031.2
5	34.8	65	1035.0
6	44.6	66	1048.1
7	58.4	67	1056.2
8	63.2	68	1093.1

9	69.4	69	1108.6
10	97.7	70	1124.6
11	136.4	71	1125.7
12	141.2	72	1133.7
13	182.1	73	1144.9
14	197.8	74	1164.4
15	233.4	75	1177.6
16	236.6	76	1189.0
17	245.6	77	1198.1
18	254.3	78	1230.8
19	275.4	79	1278.8
20	281.8	80	1297.1
21	329.3	81	1315.9
22	334.6	82	1318.5
23	346.1	83	1321.5
24	361.9	84	1360.9
25	419.0	85	1374.3
26	421.7	86	1378.6
27	435.8	87	1392.8
28	450.5	88	1399.9
29	461.9	89	1402.4
30	478.9	90	1416.9
31	490.2	91	1439.6
32	498.6	92	1442.9
33	533.4	93	1488.1
34	547.3	94	1495.7
35	553.2	95	1504.5
36	579.3	96	1515.6
37	588.9	97	1526.4
38	602.1	98	1549.1
39	628.3	99	1624.2
40	634.2	100	1628.7
41	637.0	101	1633.8
42	649.8	102	1640.3
43	689.8	103	1670.5
44	740.0	104	1674.9
45	753.3	105	1722.4
46	757.0	106	3045.5
47	761.9	107	3084.5
48	777.0	108	3090.2
49	781.0	109	3140.4
50	800.9	110	3182.2
51	806.5	111	3192.1
52	852.9	112	3203.9
53	855.2	113	3215.1
54	866.7	114	3230.3
55	867.1	115	3237.1
56	876.8	116	3238.5
57	895.2	117	3250.6
58	897.6	118	3251.5

59	936.6	119	3606.7
60	943.5	120	3734.6



6а (аксиальный изомер)

Таблица 43. Межатомные расстояния соединения **6а (аксиальный изомер)**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

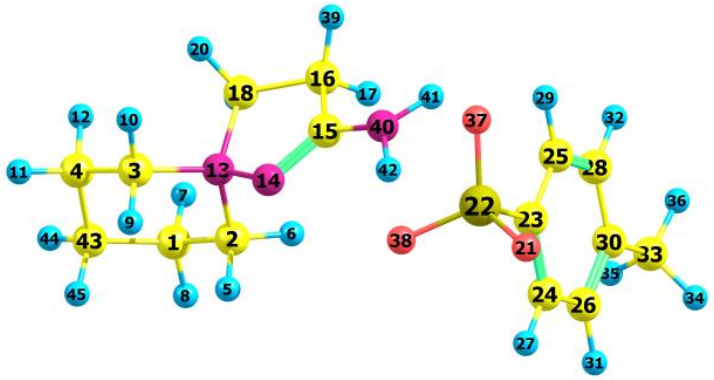
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.527	21-22	1.511
1-7	1.094	22-23	1.806
1-8	1.095	22-37	1.490
1-43	1.535	22-38	1.495
2-5	1.095	23-24	1.395
2-6	1.091	23-25	1.399
2-13	1.517	24-26	1.398
3-4	1.525	24-27	1.084
3-9	1.094	25-28	1.394
3-10	1.091	25-29	1.085
3-13	1.525	26-30	1.402
4-11	1.095	26-31	1.087
4-12	1.094	28-30	1.405
4-43	1.534	28-32	1.087
13-14	1.468	30-33	1.511
13-18	1.529	33-34	1.095
14-15	1.312	33-35	1.094
15-16	1.510	33-36	1.097
15-40	1.333	40-41	1.032
16-17	1.095	40-42	1.011
16-18	1.522	43-44	1.095
16-39	1.094	43-45	1.099
18-19	1.089		
18-20	1.091		

Таблица 44. Колебательные частоты соединения **6а (аксиальный изомер)**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	4.2	66	1097.1
2	11.5	67	1121.3
3	27.7	68	1132.1
4	28.8	69	1160.0
5	38.3	70	1169.9

6	48.1	71	1181.9
7	51.2	72	1196.5
8	72.7	73	1200.1
9	105.5	74	1202.4
10	117.4	75	1229.5
11	146.3	76	1254.7
12	161.3	77	1268.0
13	167.2	78	1297.5
14	233.0	79	1313.8
15	240.7	80	1328.4
16	276.9	81	1328.6
17	288.7	82	1341.7
18	308.9	83	1344.0
19	312.7	84	1359.6
20	360.2	85	1372.2
21	364.0	86	1392.7
22	382.9	87	1398.2
23	389.7	88	1403.4
24	415.4	89	1414.8
25	447.3	90	1423.4
26	475.2	91	1428.7
27	480.0	92	1476.5
28	494.4	93	1483.3
29	513.6	94	1483.7
30	515.0	95	1484.3
31	528.9	96	1486.9
32	548.4	97	1488.3
33	554.8	98	1491.3
34	571.0	99	1496.4
35	612.5	100	1506.9
36	647.7	101	1513.6
37	657.5	102	1530.2
38	667.0	103	1616.7
39	730.2	104	1635.1
40	756.5	105	1645.9
41	799.5	106	1682.6
42	806.1	107	3030.1
43	811.8	108	3034.2
44	831.7	109	3064.7
45	834.4	110	3065.5
46	846.3	111	3065.7
47	854.0	112	3073.3
48	867.9	113	3079.9
49	912.3	114	3092.7
50	918.7	115	3093.4
51	936.1	116	3112.0
52	954.6	117	3112.6
53	958.2	118	3115.6
54	963.2	119	3116.4
55	974.1	120	3120.8

56	989.2	121	3145.7
57	1007.2	122	3150.7
58	1021.7	123	3177.8
59	1032.9	124	3178.9
60	1034.7	125	3179.7
61	1042.0	126	3210.5
62	1061.0	127	3219.7
63	1085.8	128	3229.6
64	1089.8	129	3650.1
65	1095.6		



6a

Таблица 45. Межатомные расстояния соединения **6a (экваториальный изомер)**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

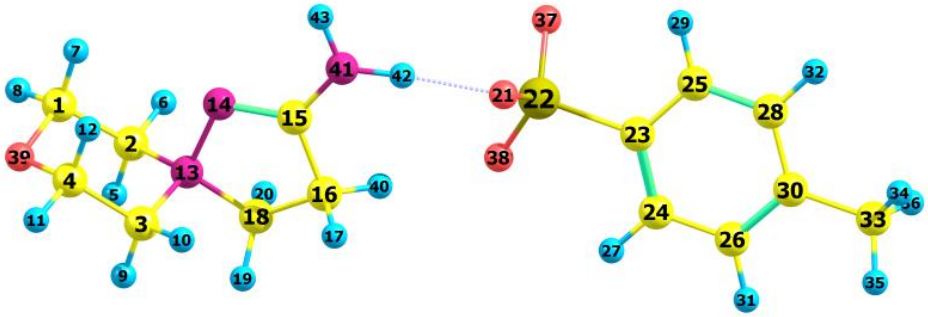
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.528	21-22	1.494
1-7	1.097	22-23	1.809
1-8	1.095	22-37	1.499
1-43	1.534	22-38	1.500
2-5	1.093	23-24	1.400
2-6	1.093	23-25	1.394
2-13	1.529	24-26	1.394
3-4	1.526	24-27	1.085
3-9	1.092	25-28	1.399
3-10	1.091	25-29	1.084
3-13	1.515	26-30	1.406
4-11	1.095	26-31	1.087
4-12	1.097	28-30	1.401
4-43	1.534	28-32	1.087
13-14	1.467	30-33	1.511
13-18	1.531	33-34	1.095
14-15	1.303	33-35	1.097
15-16	1.505	33-36	1.094
15-40	1.346	40-41	1.010
16-17	1.098	40-42	1.011
16-18	1.526	43-44	1.094
16-39	1.093	43-45	1.098

18-19	1.087		
18-20	1.090		

Таблица 46. Колебательные частоты соединения **6a (экваториальный изомер)**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	14.3	66	1115.0
2	19.3	67	1121.1
3	26.6	68	1132.8
4	29.1	69	1144.1
5	39.6	70	1145.4
6	45.6	71	1186.6
7	53.2	72	1191.2
8	60.9	73	1202.3
9	92.2	74	1206.6
10	100.3	75	1229.8
11	133.8	76	1248.0
12	166.8	77	1279.8
13	175.8	78	1292.3
14	218.3	79	1315.6
15	227.5	80	1328.3
16	278.9	81	1337.4
17	301.3	82	1341.8
18	313.4	83	1352.6
19	317.7	84	1360.8
20	352.7	85	1378.2
21	357.2	86	1388.8
22	385.3	87	1395.2
23	388.2	88	1402.3
24	402.7	89	1416.4
25	416.7	90	1424.2
26	457.4	91	1428.5
27	466.7	92	1479.2
28	477.9	93	1483.3
29	480.7	94	1485.0
30	487.8	95	1490.5
31	517.0	96	1490.8
32	533.8	97	1496.4
33	547.6	98	1498.9
34	555.8	99	1506.6
35	581.5	100	1514.0
36	620.1	101	1528.5
37	648.1	102	1530.9
38	658.1	103	1616.6
39	669.8	104	1635.3
40	731.5	105	1646.1
41	763.0	106	1675.4
42	804.5	107	3034.7
43	810.4	108	3037.5
44	830.1	109	3046.4

45	839.5	110	3046.8
46	841.4	111	3053.4
47	853.0	112	3079.0
48	872.9	113	3090.1
49	910.8	114	3091.1
50	918.1	115	3095.2
51	936.4	116	3099.1
52	953.8	117	3102.0
53	968.6	118	3116.1
54	970.6	119	3120.8
55	972.3	120	3126.0
56	987.9	121	3145.0
57	1007.4	122	3154.0
58	1013.5	123	3175.7
59	1032.7	124	3178.3
60	1036.2	125	3194.6
61	1044.8	126	3206.8
62	1062.2	127	3221.6
63	1067.3	128	3590.6
64	1086.1	129	3712.6
65	1095.8		



7a

Таблица 47. Межатомные расстояния соединения **7a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

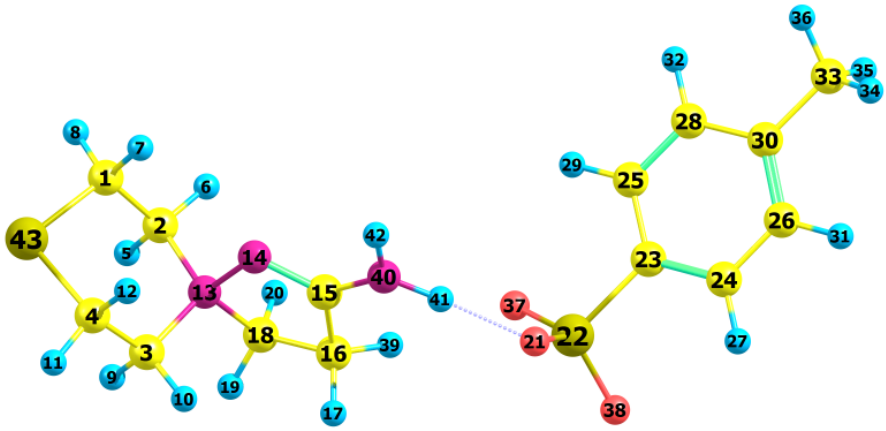
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	18-20	1.091
1-7	1.097	21-22	1.511
1-8	1.092	22-23	1.806
1-39	1.426	22-37	1.490
2-5	1.093	22-38	1.496
2-6	1.091	23-24	1.395
2-13	1.513	23-25	1.398
3-4	1.524	24-26	1.398
3-9	1.093	24-27	1.084
3-10	1.091	25-28	1.395
3-13	1.522	25-29	1.085
4-11	1.092	26-30	1.402
4-12	1.097	26-31	1.087
4-39	1.425	28-30	1.405

13-14	1.468	28-32	1.087
13-18	1.530	30-33	1.511
14-15	1.314	33-34	1.095
15-16	1.510	33-35	1.094
15-41	1.331	33-36	1.097
16-17	1.095	41-42	1.032
16-18	1.522	41-43	1.011
16-40	1.095	21-42	1.773
18-19	1.089		

Таблица 48. Колебательные частоты соединения **7a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.2	63	1094.6
2	21.2	64	1121.1
3	23.8	65	1121.7
4	29.9	66	1132.5
5	38.6	67	1142.8
6	49.1	68	1160.4
7	51.2	69	1164.2
8	74.6	70	1180.7
9	106.1	71	1202.9
10	121.1	72	1229.6
11	150.7	73	1230.3
12	165.1	74	1251.6
13	175.3	75	1265.4
14	234.8	76	1302.2
15	247.5	77	1328.7
16	281.4	78	1328.9
17	296.3	79	1329.5
18	313.1	80	1341.5
19	313.9	81	1342.3
20	362.7	82	1366.6
21	369.0	83	1377.4
22	383.8	84	1401.1
23	405.7	85	1414.0
24	415.3	86	1414.9
25	467.7	87	1427.8
26	475.7	88	1429.0
27	482.5	89	1472.0
28	502.7	90	1484.3
29	513.7	91	1485.1
30	524.7	92	1486.8
31	548.3	93	1488.3
32	554.8	94	1490.0
33	572.0	95	1499.4
34	580.2	96	1501.8
35	622.6	97	1513.0
36	647.7	98	1530.5
37	657.7	99	1616.6

38	673.6	100	1633.0
39	730.2	101	1645.8
40	765.6	102	1683.6
41	809.4	103	3034.4
42	815.5	104	3054.9
43	826.3	105	3057.4
44	831.5	106	3063.0
45	842.6	107	3089.6
46	853.8	108	3093.1
47	862.8	109	3094.8
48	909.3	110	3111.6
49	920.4	111	3116.0
50	940.7	112	3121.1
51	962.5	113	3133.6
52	971.4	114	3134.5
53	974.0	115	3160.0
54	989.0	116	3163.3
55	1007.7	117	3178.3
56	1015.4	118	3179.3
57	1030.9	119	3181.5
58	1033.9	120	3211.9
59	1035.3	121	3213.9
60	1060.9	122	3219.7
61	1088.5	123	3648.9
62	1092.7		



8a

Таблица 49. Межатомные расстояния соединения **8a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

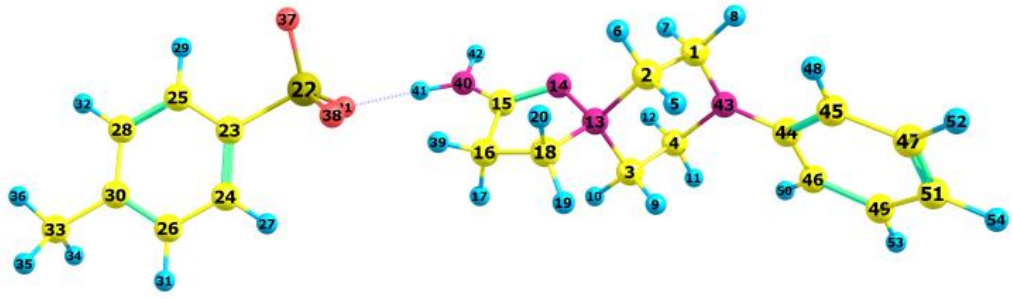
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1,522	18-20	1,090
1-7	1,091	21-22	1,511
1-8	1,093	22-23	1,807
1-43	1,832	22-37	1,496
2-5	1,093	22-38	1,488

2-6	1,092	23-24	1,397
2-13	1,517	23-25	1,396
3-4	1,520	24-26	1,396
3-9	1,092	24-27	1,085
3-10	1,092	25-28	1,397
3-13	1,525	25-29	1,085
4-11	1,093	26-30	1,404
4-12	1,092	26-31	1,087
4-43	1,832	28-30	1,403
13-14	1,467	28-32	1,087
13-18	1,534	30-33	1,511
14-15	1,314	33-34	1,094
15-16	1,510	33-35	1,097
15-40	1,330	33-36	1,094
16-17	1,095	40-41	1,033
16-18	1,522	40-42	1,011
16-39	1,094	21-41	1,766
18-19	1,089		

Таблица 50. Колебательные частоты соединения **8a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	12,6	63	1077,4
2	22,5	64	1086,2
3	25,1	65	1092,5
4	34,7	66	1107,7
5	43,6	67	1120,4
6	50,4	68	1132,7
7	63,0	69	1165,5
8	82,1	70	1167,9
9	93,7	71	1196,5
10	113,7	72	1202,7
11	144,0	73	1221,4
12	160,0	74	1229,8
13	175,9	75	1245,7
14	212,6	76	1266,5
15	237,3	77	1283,8
16	259,0	78	1312,7
17	279,1	79	1326,2
18	297,7	80	1329,2
19	317,0	81	1336,9
20	319,0	82	1341,0
21	354,6	83	1371,6
22	381,9	84	1378,2
23	389,5	85	1404,5
24	416,1	86	1415,2
25	441,1	87	1427,1
26	466,5	88	1428,8
27	475,9	89	1456,3
28	484,5	90	1465,3

29	503,8	91	1476,7
30	517,0	92	1485,6
31	523,1	93	1486,1
32	545,8	94	1488,1
33	554,3	95	1495,3
34	567,6	96	1501,8
35	608,4	97	1521,7
36	647,8	98	1530,6
37	657,4	99	1616,5
38	661,8	100	1633,9
39	669,4	101	1645,4
40	697,6	102	1685,3
41	727,8	103	3034,2
42	760,4	104	3069,2
43	804,9	105	3087,4
44	810,2	106	3090,3
45	823,8	107	3093,7
46	831,8	108	3093,9
47	838,0	109	3095,4
48	854,9	110	3117,4
49	900,6	111	3121,6
50	921,2	112	3122,3
51	933,5	113	3145,9
52	960,2	114	3147,9
53	962,8	115	3154,8
54	973,7	116	3157,5
55	989,4	117	3177,9
56	990,4	118	3180,2
57	1009,5	119	3186,1
58	1011,0	120	3202,9
59	1034,9	121	3215,5
60	1036,8	122	3217,1
61	1058,0	123	3651,5
62	1060,7		



9a

Таблица 51. Межатомные расстояния соединения **9a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å

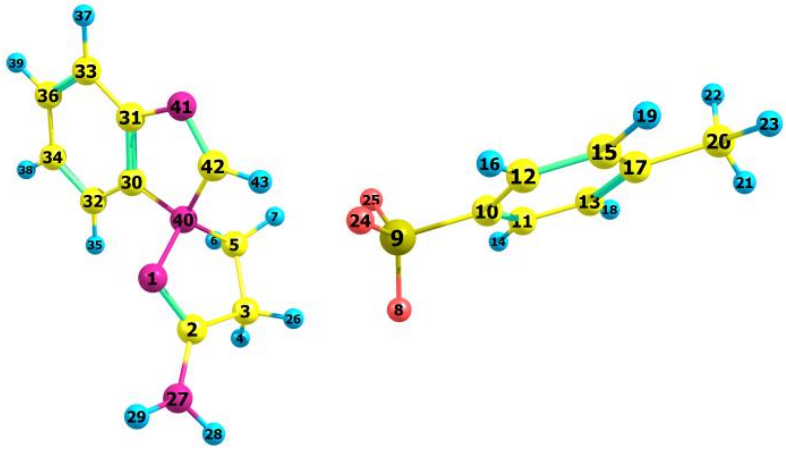
1-2	1.532	23-25	1.394
1-7	1.094	24-26	1.394
1-8	1.090	24-27	1.085
1-43	1.460	25-28	1.399
2-5	1.093	25-29	1.084
2-6	1.091	26-30	1.406
2-13	1.516	26-31	1.087
3-4	1.532	28-30	1.401
3-9	1.093	28-32	1.087
3-10	1.091	30-33	1.511
3-13	1.522	33-34	1.096
4-11	1.089	33-35	1.096
4-12	1.093	33-36	1.093
4-43	1.464	40-41	1.032
13-14	1.469	40-42	1.011
13-18	1.531	43-44	1.414
14-15	1.313	44-45	1.411
15-16	1.510	44-46	1.413
15-40	1.332	45-47	1.398
16-17	1.095	45-48	1.083
16-18	1.522	46-49	1.394
16-39	1.095	46-50	1.084
18-19	1.089	47-51	1.395
18-20	1.091	47-52	1.086
21-22	1.511	49-51	1.399
22-23	1.806	49-53	1.086
22-37	1.489	51-54	1.085
22-38	1.497	21-41	1.782
23-24	1.399		

Таблица 52. Колебательные частоты соединения **9a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.5	79	1076.9
2	18.1	80	1087.5
3	23.5	81	1093.2
4	26.0	82	1108.5
5	27.5	83	1118.5
6	32.9	84	1119.2
7	51.1	85	1132.0
8	57.6	86	1156.5
9	61.0	87	1162.4
10	62.9	88	1174.2
11	91.7	89	1181.3
12	108.4	90	1187.1
13	148.0	91	1203.0
14	158.5	92	1216.2
15	166.8	93	1225.3
16	173.3	94	1230.0
17	201.8	95	1244.9

18	236.2	96	1258.0
19	284.3	97	1267.1
20	293.0	98	1305.2
21	298.5	99	1328.4
22	315.8	100	1329.2
23	344.0	101	1339.1
24	354.2	102	1341.5
25	366.0	103	1342.3
26	386.3	104	1361.9
27	413.7	105	1371.5
28	416.0	106	1378.9
29	430.2	107	1396.5
30	449.9	108	1404.7
31	470.0	109	1412.6
32	475.7	110	1416.0
33	485.5	111	1422.3
34	492.5	112	1428.9
35	505.4	113	1478.0
36	513.6	114	1482.6
37	526.3	115	1483.6
38	543.1	116	1484.4
39	548.3	117	1491.1
40	554.6	118	1493.3
41	568.6	119	1496.5
42	583.4	120	1501.5
43	623.5	121	1508.9
44	631.5	122	1511.7
45	647.3	123	1530.7
46	657.7	124	1533.2
47	670.8	125	1616.9
48	704.0	126	1619.3
49	730.2	127	1633.4
50	733.0	128	1645.3
51	759.0	129	1645.8
52	765.4	130	1682.9
53	808.9	131	3036.5
54	813.5	132	3063.3
55	821.8	133	3086.7
56	829.2	134	3089.1
57	830.8	135	3091.1
58	837.5	136	3095.8
59	851.5	137	3096.2
60	892.3	138	3110.8
61	895.0	139	3115.2
62	919.9	140	3122.4
63	929.6	141	3149.1
64	948.9	142	3155.6
65	962.4	143	3162.4
66	967.7	144	3167.4
67	971.7	145	3176.9

68	974.8	146	3179.1
69	987.1	147	3181.9
70	993.8	148	3183.1
71	1001.8	149	3189.1
72	1007.4	150	3207.2
73	1009.4	151	3211.5
74	1019.2	152	3214.3
75	1033.5	153	3221.3
76	1035.7	154	3223.4
77	1056.2	155	3227.5
78	1062.0	156	3649.4



10a

Таблица 53. Межатомные расстояния соединения **10a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

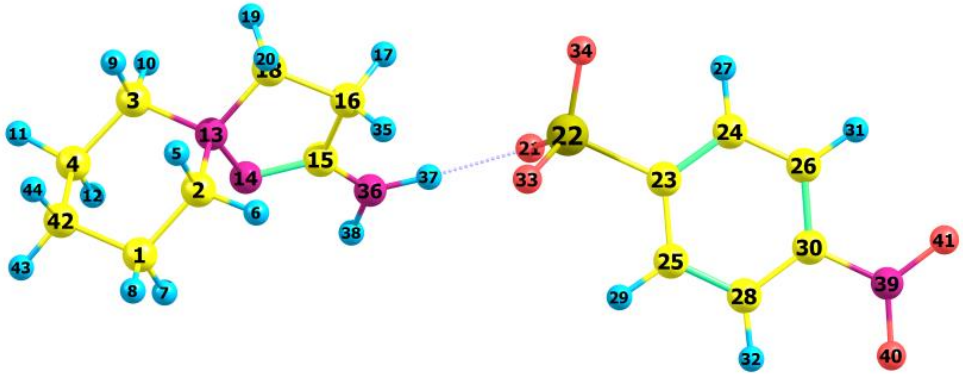
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.306	15-19	1.087
1-40	1.469	17-20	1.511
2-3	1.504	20-21	1.095
2-27	1.341	20-22	1.097
3-4	1.093	20-23	1.094
3-5	1.527	27-28	1.009
3-26	1.097	27-29	1.011
5-6	1.088	30-31	1.393
5-7	1.092	30-32	1.380
5-40	1.552	30-40	1.472
8-9	1.497	31-33	1.389
9-10	1.804	31-41	1.423
9-24	1.500	32-34	1.405
9-25	1.500	32-35	1.085
10-11	1.399	33-36	1.402
10-12	1.394	33-37	1.084
11-13	1.394	34-36	1.401
11-14	1.085	34-38	1.085
12-15	1.399	36-39	1.085

12-16	1.084	40-42	1.529
13-17	1.406	41-42	1.267
13-18	1.087	42-43	1.092
15-17	1.401		

Таблица 54. Колебательные частоты соединения **10a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	16.1	63	1013.1
2	19.2	64	1035.7
3	27.6	65	1037.7
4	36.2	66	1043.6
5	38.1	67	1061.8
6	48.7	68	1090.6
7	55.3	69	1112.3
8	72.5	70	1117.1
9	78.8	71	1120.7
10	86.3	72	1127.4
11	102.1	73	1136.6
12	124.8	74	1140.7
13	170.1	75	1166.9
14	194.7	76	1184.8
15	221.0	77	1203.4
16	256.3	78	1229.8
17	274.6	79	1230.0
18	283.4	80	1243.0
19	317.1	81	1275.4
20	321.3	82	1315.8
21	339.6	83	1329.2
22	357.3	84	1329.8
23	376.2	85	1341.9
24	385.1	86	1348.7
25	405.7	87	1369.4
26	417.8	88	1385.9
27	442.8	89	1416.0
28	470.4	90	1429.1
29	479.0	91	1481.7
30	495.8	92	1484.5
31	515.8	93	1489.6
32	547.1	94	1492.3
33	552.1	95	1500.6
34	557.4	96	1503.7
35	564.6	97	1515.6
36	580.6	98	1531.0
37	597.4	99	1616.6
38	647.2	100	1625.0
39	652.3	101	1642.7
40	661.1	102	1645.9
41	667.1	103	1659.0
42	730.2	104	1666.9

43	741.2	105	1679.5
44	763.6	106	3035.0
45	775.3	107	3049.1
46	782.4	108	3092.9
47	810.3	109	3105.2
48	818.1	110	3119.8
49	830.1	111	3121.9
50	854.4	112	3125.5
51	869.3	113	3178.1
52	888.9	114	3181.1
53	900.9	115	3190.3
54	921.4	116	3204.0
55	922.8	117	3208.8
56	967.9	118	3214.6
57	969.3	119	3221.5
58	973.5	120	3223.8
59	981.4	121	3228.6
60	990.1	122	3595.9
61	1008.1	123	3722.2
62	1008.2		



11a

Таблица 55. Межатомные расстояния соединения **11a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

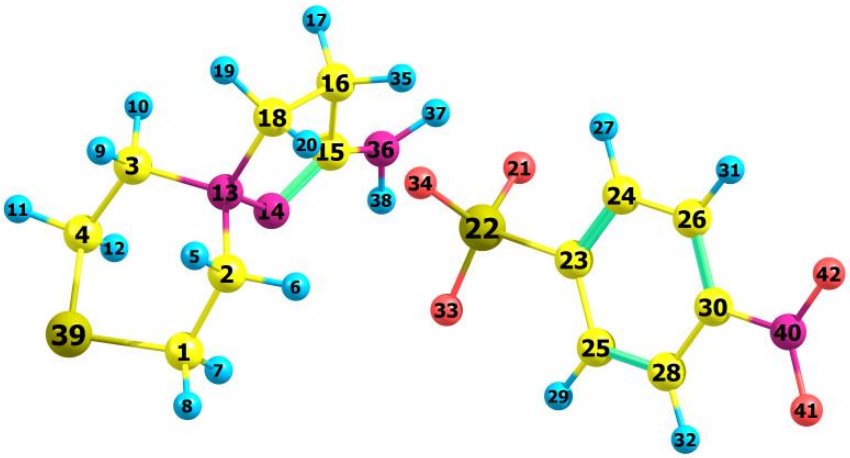
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	18-20	1.089
1-7	1.094	21-22	1.506
1-8	1.095	22-23	1.815
1-42	1.534	22-33	1.491
2-5	1.094	22-34	1.487
2-6	1.091	23-24	1.397
2-13	1.526	23-25	1.400
3-4	1.526	24-26	1.394
3-9	1.095	24-27	1.084
3-10	1.091	25-28	1.392
3-13	1.517	25-29	1.084
4-11	1.095	26-30	1.396

4-12	1.094	26-31	1.083
4-42	1.534	28-30	1.398
13-14	1.467	28-32	1.083
13-18	1.530	30-39	1.468
14-15	1.312	36-37	1.028
15-16	1.511	36-38	1.010
15-36	1.332	39-40	1.235
16-17	1.092	39-41	1.235
16-18	1.523	42-43	1.094
16-35	1.094	42-44	1.099
18-19	1.091	21-37	1.806

Таблица 56. Колебательные частоты соединения **11a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	9.2	64	1085.9
2	19.1	65	1089.7
3	26.7	66	1093.4
4	34.0	67	1108.7
5	45.1	68	1120.6
6	54.5	69	1124.0
7	58.4	70	1126.3
8	75.8	71	1168.0
9	94.5	72	1175.8
10	98.5	73	1183.1
11	135.8	74	1195.5
12	142.0	75	1195.7
13	154.9	76	1198.2
14	208.9	77	1241.3
15	241.8	78	1267.8
16	244.6	79	1298.1
17	254.9	80	1317.9
18	282.6	81	1318.5
19	309.6	82	1320.2
20	336.5	83	1340.2
21	363.7	84	1361.7
22	364.1	85	1367.7
23	390.3	86	1370.9
24	415.4	87	1373.0
25	447.9	88	1395.5
26	457.9	89	1400.1
27	462.9	90	1408.9
28	467.3	91	1428.8
29	480.1	92	1429.5
30	505.4	93	1476.6
31	509.9	94	1481.9
32	531.0	95	1484.4
33	538.1	96	1486.7
34	539.3	97	1491.0
35	560.3	98	1494.2

36	609.9	99	1507.3
37	613.8	100	1511.1
38	636.4	101	1514.6
39	661.7	102	1562.6
40	707.5	103	1630.1
41	739.2	104	1639.1
42	755.6	105	1643.3
43	762.0	106	1685.5
44	771.5	107	3033.2
45	801.0	108	3065.7
46	831.4	109	3067.0
47	847.2	110	3075.4
48	847.8	111	3080.9
49	860.2	112	3091.8
50	870.8	113	3094.7
51	873.5	114	3112.9
52	913.1	115	3115.7
53	918.4	116	3116.9
54	934.2	117	3144.6
55	953.5	118	3147.5
56	957.5	119	3149.2
57	970.9	120	3183.2
58	993.7	121	3223.1
59	1003.3	122	3229.2
60	1019.5	123	3246.7
61	1031.2	124	3247.2
62	1033.4	125	3288.7
63	1045.6	126	3659.3



12a

Таблица 57. Межатомные расстояния соединения **12a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

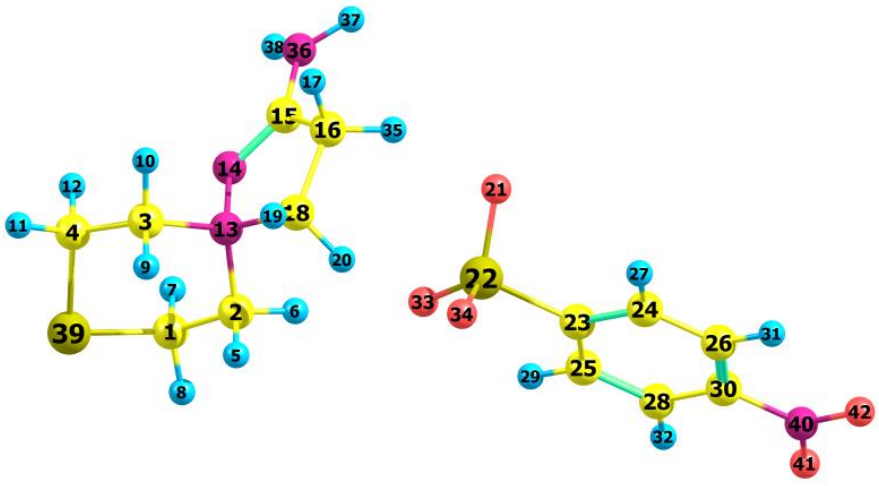
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.521	18-19	1.089
1-7	1.092	18-20	1.091
1-8	1.093	21-22	1.494

1-39	1.833	22-23	1.815
2-5	1.093	22-33	1.492
2-6	1.093	22-34	1.497
2-13	1.524	23-24	1.400
3-4	1.521	23-25	1.397
3-9	1.093	24-26	1.391
3-10	1.093	24-27	1.084
3-13	1.522	25-28	1.395
4-11	1.093	25-29	1.084
4-12	1.092	26-30	1.398
4-39	1.831	26-31	1.083
13-14	1.463	28-30	1.395
13-18	1.542	28-32	1.083
14-15	1.302	30-40	1.467
15-16	1.506	36-37	1.009
15-36	1.345	36-38	1.011
16-17	1.094	40-41	1.235
16-18	1.527	40-42	1.235
16-35	1.094		

Таблица 58. Колебательные частоты соединения **12a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	8.4	61	1030.8
2	18.4	62	1040.9
3	21.6	63	1063.8
4	33.0	64	1069.1
5	41.5	65	1084.8
6	45.1	66	1105.1
7	56.9	67	1114.3
8	77.5	68	1121.0
9	82.1	69	1124.4
10	93.4	70	1137.3
11	99.6	71	1146.1
12	140.1	72	1157.6
13	155.8	73	1193.5
14	198.4	74	1194.9
15	236.1	75	1226.7
16	240.9	76	1247.6
17	255.8	77	1265.2
18	257.2	78	1291.7
19	289.2	79	1310.0
20	312.5	80	1316.2
21	334.0	81	1317.8
22	361.5	82	1343.3
23	362.8	83	1367.6
24	407.1	84	1369.1
25	415.5	85	1370.5
26	440.6	86	1397.3
27	460.7	87	1408.4

28	462.9	88	1429.0
29	467.6	89	1440.0
30	469.6	90	1455.2
31	506.7	91	1461.7
32	510.2	92	1480.1
33	516.0	93	1480.9
34	537.1	94	1486.0
35	538.8	95	1503.3
36	580.1	96	1511.1
37	606.8	97	1530.4
38	615.3	98	1562.2
39	636.2	99	1629.7
40	661.3	100	1632.5
41	674.4	101	1643.1
42	695.8	102	1678.3
43	707.8	103	3072.8
44	739.6	104	3077.1
45	761.9	105	3083.4
46	772.5	106	3091.7
47	798.6	107	3094.2
48	841.8	108	3109.2
49	846.8	109	3124.0
50	860.2	110	3141.4
51	872.9	111	3142.5
52	904.8	112	3151.6
53	910.8	113	3153.1
54	927.5	114	3182.7
55	955.1	115	3221.0
56	975.0	116	3229.9
57	990.7	117	3246.5
58	993.6	118	3247.4
59	1002.4	119	3590.8
60	1007.0	120	3714.0



13a

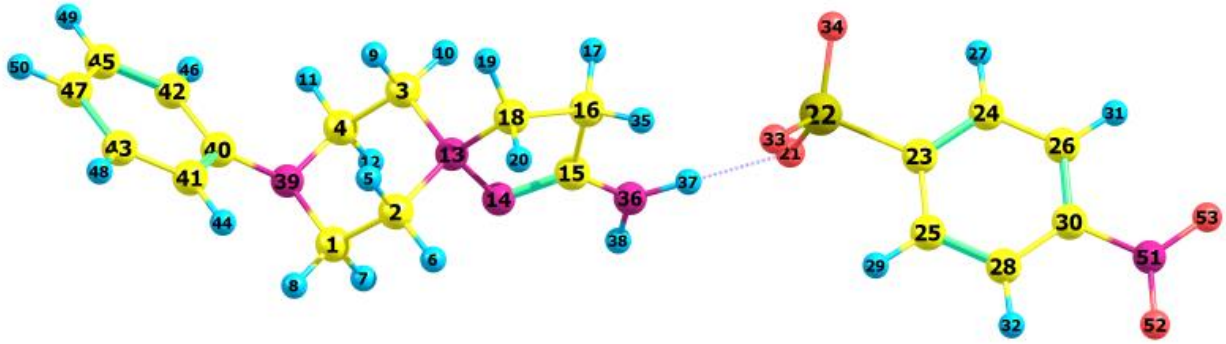
Таблица 59. Межатомные расстояния соединения **13a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.521	18-19	1.089
1-7	1.092	18-20	1.091
1-8	1.093	21-22	1.494
1-39	1.833	22-23	1.815
2-5	1.093	22-33	1.492
2-6	1.093	22-34	1.497
2-13	1.524	23-24	1.400
3-4	1.521	23-25	1.397
3-9	1.093	24-26	1.391
3-10	1.093	24-27	1.084
3-13	1.522	25-28	1.395
4-11	1.093	25-29	1.084
4-12	1.092	26-30	1.398
4-39	1.831	26-31	1.083
13-14	1.463	28-30	1.395
13-18	1.542	28-32	1.083
14-15	1.302	30-40	1.467
15-16	1.506	36-37	1.009
15-36	1.345	36-38	1.011
16-17	1.094	40-41	1.235
16-18	1.527	40-42	1.235
16-35	1.094		

Таблица 60. Колебательные частоты соединения **13a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	8.4	61	1030.8
2	18.4	62	1040.9
3	21.6	63	1063.8
4	33.0	64	1069.1
5	41.5	65	1084.8
6	45.1	66	1105.1
7	56.9	67	1114.3
8	77.5	68	1121.0
9	82.1	69	1124.4
10	93.4	70	1137.3
11	99.6	71	1146.1
12	140.1	72	1157.6
13	155.8	73	1193.5
14	198.4	74	1194.9
15	236.1	75	1226.7
16	240.9	76	1247.6
17	255.8	77	1265.2
18	257.2	78	1291.7
19	289.2	79	1310.0
20	312.5	80	1316.2

21	334.0	81	1317.8
22	361.5	82	1343.3
23	362.8	83	1367.6
24	407.1	84	1369.1
25	415.5	85	1370.5
26	440.6	86	1397.3
27	460.7	87	1408.4
28	462.9	88	1429.0
29	467.6	89	1440.0
30	469.6	90	1455.2
31	506.7	91	1461.7
32	510.2	92	1480.1
33	516.0	93	1480.9
34	537.1	94	1486.0
35	538.8	95	1503.3
36	580.1	96	1511.1
37	606.8	97	1530.4
38	615.3	98	1562.2
39	636.2	99	1629.7
40	661.3	100	1632.5
41	674.4	101	1643.1
42	695.8	102	1678.3
43	707.8	103	3072.8
44	739.6	104	3077.1
45	761.9	105	3083.4
46	772.5	106	3091.7
47	798.6	107	3094.2
48	841.8	108	3109.2
49	846.8	109	3124.0
50	860.2	110	3141.4
51	872.9	111	3142.5
52	904.8	112	3151.6
53	910.8	113	3153.1
54	927.5	114	3182.7
55	955.1	115	3221.0
56	975.0	116	3229.9
57	990.7	117	3246.5
58	993.6	118	3247.4
59	1002.4	119	3590.8
60	1007.0	120	3714.0



14a

Таблица 61. Межатомные расстояния соединения **14a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

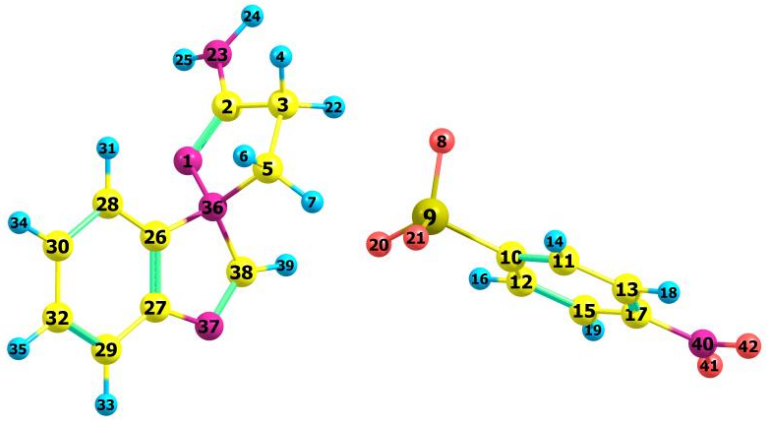
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.532	23-24	1.397
1-7	1.094	23-25	1.399
1-8	1.090	24-26	1.394
1-39	1.459	24-27	1.084
2-5	1.093	25-28	1.392
2-6	1.091	25-29	1.084
2-13	1.516	26-30	1.396
3-4	1.531	26-31	1.083
3-9	1.093	28-30	1.397
3-10	1.091	28-32	1.083
3-13	1.524	30-51	1.468
4-11	1.088	36-37	1.029
4-12	1.093	36-38	1.011
4-39	1.464	39-40	1.414
13-14	1.469	40-41	1.410
13-18	1.529	40-42	1.413
14-15	1.313	41-43	1.398
15-16	1.511	41-44	1.083
15-36	1.331	42-45	1.394
16-17	1.095	42-46	1.084
16-18	1.522	43-47	1.395
16-35	1.094	43-48	1.086
18-19	1.089	45-47	1.399
18-20	1.091	45-49	1.086
21-22	1.505	47-50	1.085
22-23	1.814	51-52	1.235
22-33	1.492	51-53	1.234
22-34	1.486		

Таблица 62. Колебательные частоты соединения **14a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	7.8	78	1032.0
2	12.5	79	1055.7

3	17.8	80	1077.5
4	23.8	81	1088.6
5	28.6	82	1107.4
6	40.8	83	1108.5
7	50.5	84	1117.3
8	53.2	85	1120.7
9	57.7	86	1122.5
10	66.5	87	1125.8
11	76.8	88	1155.0
12	89.0	89	1168.8
13	139.5	90	1174.9
14	145.6	91	1181.5
15	152.5	92	1186.4
16	169.7	93	1194.5
17	199.7	94	1216.4
18	211.9	95	1225.8
19	244.3	96	1242.9
20	254.9	97	1257.7
21	294.3	98	1266.6
22	298.1	99	1305.5
23	335.9	100	1317.2
24	339.6	101	1325.6
25	359.2	102	1338.9
26	364.3	103	1344.1
27	413.0	104	1362.0
28	415.0	105	1367.3
29	429.2	106	1371.4
30	449.2	107	1372.7
31	462.9	108	1379.0
32	466.1	109	1397.8
33	470.9	110	1403.4
34	482.9	111	1412.1
35	488.9	112	1426.2
36	498.0	113	1429.4
37	507.9	114	1476.8
38	524.0	115	1483.8
39	537.7	116	1485.9
40	539.1	117	1491.9
41	540.9	118	1494.4
42	558.2	119	1496.8
43	583.2	120	1508.3
44	613.0	121	1510.7
45	620.1	122	1513.2
46	630.3	123	1533.3
47	636.2	124	1563.2
48	669.0	125	1619.2
49	702.2	126	1630.0
50	706.2	127	1636.1
51	731.3	128	1643.5
52	739.4	129	1645.3

53	758.0	130	1690.1
54	761.1	131	3072.8
55	764.5	132	3085.3
56	770.1	133	3087.5
57	820.6	134	3094.4
58	829.4	135	3096.2
59	835.1	136	3116.5
60	847.7	137	3123.5
61	860.1	138	3150.7
62	873.2	139	3154.2
63	891.0	140	3162.4
64	894.5	141	3170.2
65	919.4	142	3183.6
66	928.9	143	3184.5
67	949.3	144	3189.5
68	965.7	145	3207.8
69	971.3	146	3214.9
70	974.6	147	3224.2
71	993.4	148	3224.5
72	993.9	149	3228.3
73	1001.2	150	3246.5
74	1002.7	151	3247.4
75	1008.3	152	3269.9
76	1020.5	153	3653.0
77	1031.3		



15a

Таблица 63. Межатомные расстояния соединения **15a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

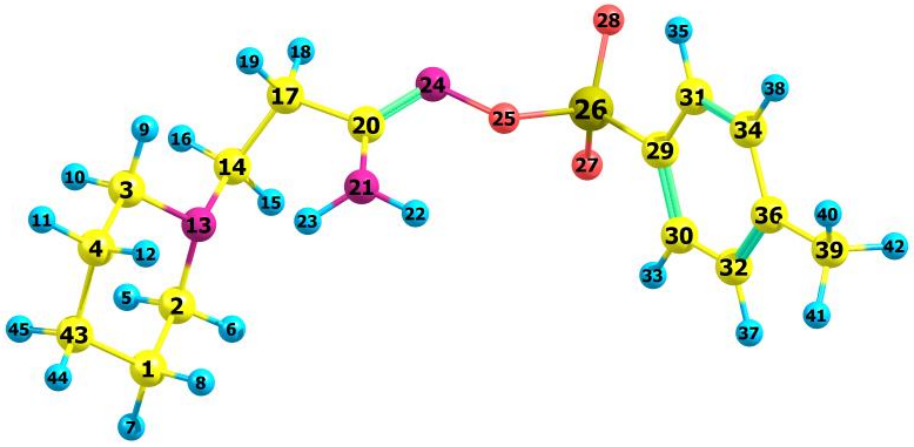
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.307	15-17	1.396
1-36	1.469	15-19	1.083
2-3	1.505	17-40	1.468
2-23	1.340	23-24	1.009
3-4	1.093	23-25	1.011
3-5	1.528	26-27	1.393

3-22	1.096	26-28	1.380
5-6	1.088	26-36	1.473
5-7	1.091	27-29	1.389
5-36	1.551	27-37	1.423
8-9	1.494	28-30	1.405
9-10	1.812	28-31	1.085
9-20	1.497	29-32	1.402
9-21	1.495	29-33	1.084
10-11	1.399	30-32	1.401
10-12	1.398	30-34	1.085
11-13	1.392	32-35	1.085
11-14	1.084	36-38	1.529
12-15	1.393	37-38	1.266
12-16	1.084	38-39	1.091
13-17	1.397	40-41	1.235
13-18	1.083	40-42	1.235

Таблица 64. Колебательные частоты соединения **15a**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.2	61	980.2
2	18.7	62	993.3
3	21.0	63	1002.1
4	33.7	64	1007.8
5	43.9	65	1013.5
6	56.1	66	1031.1
7	61.5	67	1035.7
8	70.1	68	1042.8
9	75.1	69	1090.9
10	85.5	70	1113.2
11	87.3	71	1115.6
12	132.1	72	1121.4
13	147.3	73	1122.6
14	189.9	74	1136.2
15	201.8	75	1143.9
16	244.1	76	1146.3
17	254.9	77	1167.7
18	258.3	78	1184.0
19	273.0	79	1193.7
20	305.8	80	1229.2
21	324.0	81	1241.0
22	335.9	82	1274.5
23	360.7	83	1311.6
24	379.6	84	1316.4
25	405.5	85	1327.3
26	413.7	86	1365.4
27	441.2	87	1366.8
28	462.5	88	1369.2
29	469.4	89	1371.3
30	472.0	90	1386.8

31	497.7	91	1429.3
32	507.2	92	1482.7
33	535.9	93	1494.9
34	539.2	94	1500.2
35	553.4	95	1502.1
36	565.1	96	1510.5
37	580.6	97	1516.2
38	597.3	98	1563.1
39	615.9	99	1624.5
40	636.0	100	1630.0
41	652.7	101	1642.6
42	667.1	102	1643.5
43	704.5	103	1659.7
44	739.5	104	1668.1
45	741.4	105	1681.3
46	759.8	106	3061.5
47	763.2	107	3112.2
48	773.8	108	3123.3
49	783.8	109	3150.8
50	818.0	110	3190.2
51	848.0	111	3204.5
52	860.1	112	3215.2
53	868.5	113	3224.6
54	873.0	114	3225.2
55	888.4	115	3229.1
56	899.9	116	3229.2
57	920.9	117	3246.9
58	924.3	118	3247.6
59	968.3	119	3597.6
60	973.6	120	3725.5



6b

Таблица 65. Межатомные расстояния соединения **6b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

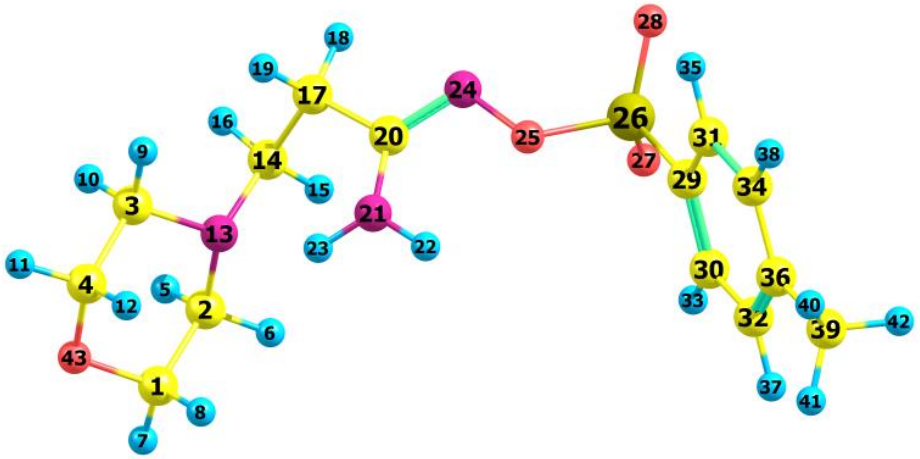
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.531	21-23	1.022

1-7	1.096	24-25	1.477
1-8	1.098	25-26	1.654
1-43	1.535	26-27	1.468
2-5	1.108	26-28	1.466
2-6	1.095	26-29	1.783
2-13	1.474	29-30	1.397
3-4	1.532	29-31	1.397
3-9	1.094	30-32	1.394
3-10	1.108	30-33	1.084
3-13	1.474	31-34	1.394
4-11	1.096	31-35	1.084
4-12	1.098	32-36	1.405
4-43	1.534	32-37	1.086
13-14	1.473	34-36	1.405
14-15	1.095	34-38	1.086
14-16	1.104	36-39	1.509
14-17	1.541	39-40	1.094
17-18	1.093	39-41	1.094
17-19	1.096	39-42	1.097
17-20	1.512	43-44	1.096
20-21	1.354	43-45	1.099
20-24	1.302		
21-22	1.010		

Таблица 66. Колебательные частоты соединения **6b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.3	66	1131.0
2	20.4	67	1135.0
3	28.7	68	1140.9
4	35.2	69	1171.6
5	49.9	70	1173.1
6	57.4	71	1178.9
7	59.1	72	1202.6
8	76.6	73	1207.4
9	100.6	74	1230.9
10	139.5	75	1263.2
11	152.9	76	1278.0
12	162.5	77	1281.3
13	201.1	78	1296.4
14	238.2	79	1306.9
15	250.7	80	1329.5
16	259.0	81	1333.8
17	274.7	82	1349.6
18	299.1	83	1349.8
19	315.0	84	1357.7
20	329.5	85	1381.6
21	343.9	86	1382.2
22	366.2	87	1388.7
23	392.6	88	1408.3

24	415.2	89	1416.0
25	424.8	90	1416.4
26	432.9	91	1433.4
27	464.5	92	1435.1
28	465.8	93	1470.5
29	476.2	94	1479.2
30	484.2	95	1484.4
31	495.2	96	1486.6
32	528.4	97	1486.8
33	554.8	98	1490.7
34	558.0	99	1495.8
35	578.2	100	1500.5
36	644.8	101	1514.0
37	658.9	102	1528.1
38	678.5	103	1604.6
39	719.8	104	1618.0
40	731.2	105	1641.2
41	746.0	106	1680.3
42	764.0	107	2919.0
43	806.7	108	2924.2
44	815.9	109	2961.1
45	819.8	110	3021.0
46	833.0	111	3029.9
47	851.2	112	3032.0
48	851.3	113	3039.9
49	868.9	114	3061.3
50	892.0	115	3071.4
51	909.0	116	3074.3
52	927.3	117	3076.7
53	976.9	118	3080.7
54	978.6	119	3084.5
55	988.8	120	3089.2
56	992.9	121	3101.9
57	1012.6	122	3123.6
58	1015.2	123	3130.4
59	1027.7	124	3191.7
60	1042.5	125	3192.6
61	1051.8	126	3223.9
62	1061.4	127	3224.5
63	1082.9	128	3405.7
64	1087.6	129	3667.6
65	1127.1		



7b

Таблица 67. Межатомные расстояния соединения **7b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

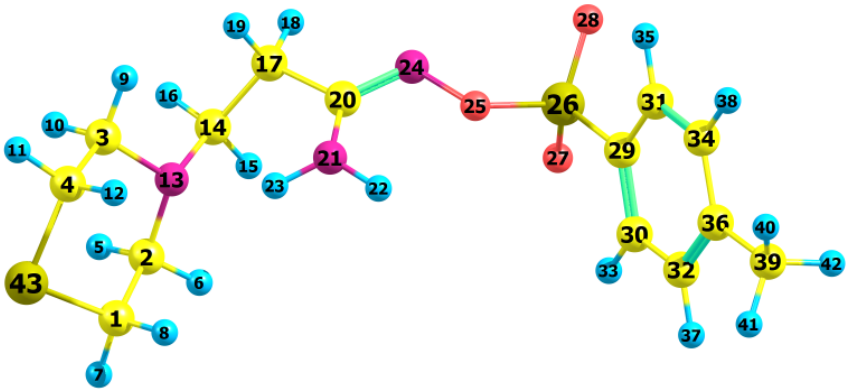
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	20-24	1.302
1-7	1.093	21-22	1.010
1-8	1.101	21-23	1.020
1-43	1.428	24-25	1.475
2-5	1.105	25-26	1.656
2-6	1.095	26-27	1.467
2-13	1.471	26-28	1.466
3-4	1.526	26-29	1.782
3-9	1.095	29-30	1.397
3-10	1.106	29-31	1.397
3-13	1.472	30-32	1.394
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.101	31-34	1.394
4-43	1.428	31-35	1.084
13-14	1.473	32-36	1.404
14-15	1.095	32-37	1.086
14-16	1.104	34-36	1.405
14-17	1.540	34-38	1.086
17-18	1.093	36-39	1.509
17-19	1.096	39-40	1.094
17-20	1.512	39-41	1.094
20-21	1.355	39-42	1.097

Таблица 68. Колебательные частоты соединения **7b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	12,4	63	1131,0
2	20,5	64	1134,9
3	28,9	65	1140,8

4	35,1	66	1140,9
5	50,6	67	1144,6
6	56,8	68	1162,3
7	58,8	69	1173,3
8	77,4	70	1207,5
9	101,1	71	1230,9
10	139,1	72	1235,3
11	156,1	73	1245,5
12	163,1	74	1276,0
13	202,7	75	1278,7
14	240,5	76	1302,0
15	258,7	77	1323,1
16	265,9	78	1333,8
17	274,8	79	1334,4
18	302,7	80	1349,7
19	316,3	81	1351,0
20	332,6	82	1366,8
21	352,1	83	1388,3
22	368,4	84	1405,5
23	393,7	85	1415,9
24	415,2	86	1416,8
25	433,1	87	1421,6
26	440,0	88	1433,4
27	464,8	89	1436,5
28	476,4	90	1470,8
29	484,9	91	1485,7
30	494,8	92	1486,6
31	497,3	93	1486,9
32	527,3	94	1488,9
33	556,3	95	1493,6
34	577,8	96	1499,3
35	614,0	97	1508,5
36	644,8	98	1528,1
37	658,3	99	1605,5
38	673,1	100	1618,0
39	719,3	101	1641,1
40	722,0	102	1681,6
41	745,6	103	2949,0
42	775,4	104	2953,7
43	809,0	105	2969,0
44	816,5	106	2996,8
45	833,3	107	3000,3
46	851,1	108	3040,0
47	861,7	109	3060,9
48	863,6	110	3080,9
49	888,5	111	3086,0
50	919,6	112	3092,0
51	934,3	113	3102,0
52	978,6	114	3115,4
53	991,7	115	3117,0

54	992,9	116	3125,0
55	1012,7	117	3130,6
56	1022,8	118	3191,9
57	1027,7	119	3192,8
58	1041,3	120	3223,9
59	1061,4	121	3224,5
60	1064,1	122	3433,6
61	1082,9	123	3669,7
62	1091,9		



8b

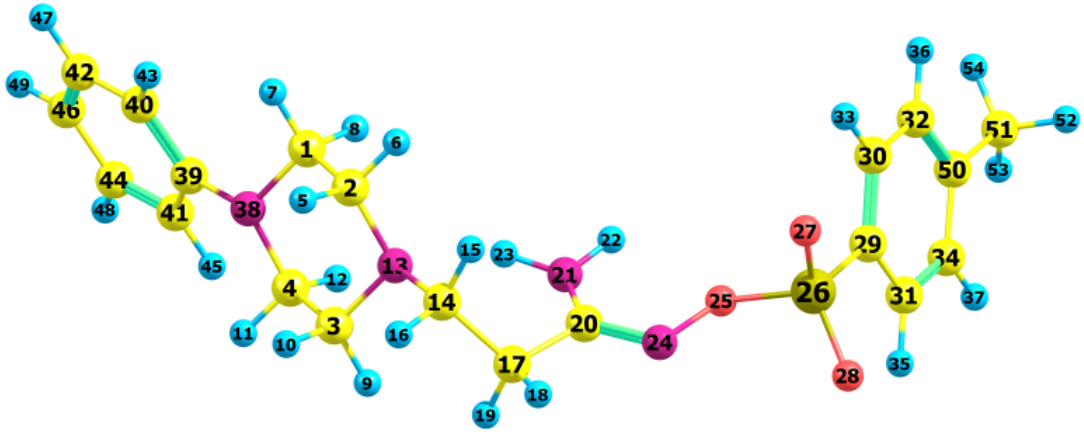
Таблица 69. Межатомные расстояния соединения **8b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.527	20-24	1.302
1-7	1.093	21-22	1.010
1-8	1.095	21-23	1.020
1-43	1.834	24-25	1.475
2-5	1.105	25-26	1.656
2-6	1.096	26-27	1.467
2-13	1.474	26-28	1.466
3-4	1.527	26-29	1.782
3-9	1.095	29-30	1.397
3-10	1.105	29-31	1.397
3-13	1.473	30-32	1.394
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.095	31-34	1.394
4-43	1.834	31-35	1.084
13-14	1.476	32-36	1.405
14-15	1.094	32-37	1.086
14-16	1.103	34-36	1.405
14-17	1.540	34-38	1.086
17-18	1.093	36-39	1.509
17-19	1.096	39-40	1.094
17-20	1.512	39-41	1.094
20-21	1.355	39-42	1.097

Таблица 70. Колебательные частоты соединения **8b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	15.7	63	1074.6
2	19.2	64	1083.7
3	30.0	65	1128.4
4	34.2	66	1135.9
5	47.1	67	1141.4
6	49.5	68	1143.7
7	54.8	69	1169.7
8	75.9	70	1187.4
9	98.1	71	1207.8
10	129.2	72	1223.7
11	143.0	73	1230.7
12	162.9	74	1231.3
13	198.6	75	1267.7
14	228.8	76	1279.3
15	251.8	77	1298.6
16	257.5	78	1306.9
17	273.6	79	1318.4
18	277.3	80	1334.1
19	306.1	81	1349.3
20	324.6	82	1350.9
21	334.8	83	1360.0
22	342.2	84	1378.0
23	380.2	85	1408.6
24	395.7	86	1415.8
25	414.6	87	1417.5
26	420.4	88	1433.1
27	445.5	89	1437.1
28	463.0	90	1458.2
29	476.2	91	1464.7
30	481.5	92	1471.9
31	492.8	93	1485.8
32	526.7	94	1486.8
33	553.3	95	1487.2
34	557.5	96	1495.0
35	577.2	97	1508.2
36	644.3	98	1528.3
37	656.1	99	1605.2
38	660.1	100	1617.8
39	672.2	101	1640.9
40	692.0	102	1683.0
41	718.0	103	2956.5
42	720.4	104	2959.6
43	746.6	105	2973.4
44	759.3	106	3039.9
45	808.8	107	3059.0
46	816.1	108	3061.9
47	818.4	109	3063.2

48	833.2	110	3072.4
49	850.9	111	3086.9
50	886.0	112	3090.5
51	914.6	113	3101.6
52	970.4	114	3125.1
53	977.7	115	3125.3
54	978.1	116	3126.8
55	992.5	117	3130.0
56	997.3	118	3192.1
57	1004.3	119	3192.9
58	1012.0	120	3224.0
59	1025.2	121	3225.1
60	1027.5	122	3436.9
61	1058.3	123	3670.3
62	1061.1		



9b

Таблица 71. Межатомные расстояния соединения **9b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

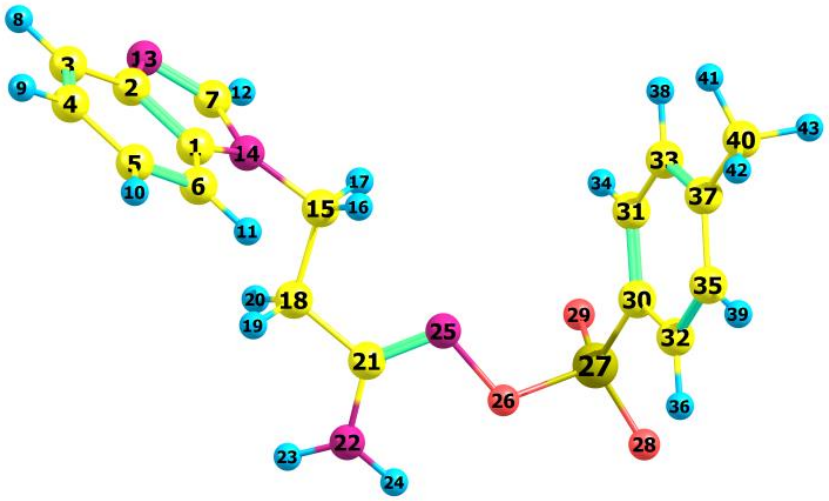
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	26-28	1.466
1-7	1.090	26-29	1.782
1-8	1.105	29-30	1.397
1-38	1.470	29-31	1.397
2-5	1.106	30-32	1.394
2-6	1.095	30-33	1.084
2-13	1.469	31-34	1.394
3-4	1.528	31-35	1.084
3-9	1.094	32-36	1.086
3-10	1.106	32-50	1.405
3-13	1.469	34-37	1.086
4-11	1.093	34-50	1.405
4-12	1.105	38-39	1.414
4-38	1.461	39-40	1.413
13-14	1.473	39-41	1.410

14-15	1.095	40-42	1.393
14-16	1.104	40-43	1.085
14-17	1.540	41-44	1.399
17-18	1.093	41-45	1.083
17-19	1.096	42-46	1.401
17-20	1.512	42-47	1.087
20-21	1.355	44-46	1.395
20-24	1.301	44-48	1.087
21-22	1.010	46-49	1.086
21-23	1.020	50-51	1.509
24-25	1.474	51-52	1.097
25-26	1.655	51-53	1.094
26-27	1.467	51-54	1.094

Таблица 72. Колебательные частоты соединения **9b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	13.1	79	1083.7
2	15.0	80	1085.5
3	20.9	81	1108.9
4	27.0	82	1124.1
5	33.1	83	1136.0
6	43.3	84	1141.6
7	50.8	85	1148.9
8	54.4	86	1155.1
9	68.7	87	1172.7
10	81.7	88	1180.2
11	91.8	89	1194.1
12	122.6	90	1208.6
13	136.0	91	1211.3
14	163.0	92	1229.5
15	172.2	93	1231.0
16	207.3	94	1250.0
17	222.3	95	1256.5
18	243.0	96	1279.5
19	262.8	97	1280.8
20	273.9	98	1311.0
21	275.4	99	1329.5
22	298.4	100	1335.2
23	310.7	101	1338.2
24	324.2	102	1349.4
25	331.6	103	1352.3
26	340.8	104	1362.7
27	375.2	105	1372.1
28	392.9	106	1375.1
29	415.8	107	1389.8
30	420.6	108	1408.9
31	428.5	109	1416.1
32	442.5	110	1417.5
33	462.4	111	1422.3

34	475.9	112	1433.4
35	478.1	113	1436.3
36	491.0	114	1472.3
37	501.0	115	1485.3
38	523.2	116	1486.0
39	528.7	117	1488.0
40	539.3	118	1488.0
41	556.5	119	1491.1
42	574.3	120	1495.0
43	629.3	121	1499.8
44	644.3	122	1509.9
45	645.7	123	1528.9
46	659.0	124	1532.0
47	674.0	125	1608.1
48	704.2	126	1618.0
49	719.6	127	1618.4
50	722.6	128	1641.0
51	746.3	129	1645.5
52	749.1	130	1684.6
53	769.8	131	2942.2
54	781.9	132	2947.9
55	809.9	133	2953.1
56	816.8	134	2957.1
57	833.7	135	2966.5
58	834.5	136	3039.9
59	852.3	137	3061.2
60	865.6	138	3081.7
61	889.9	139	3086.5
62	896.6	140	3097.6
63	916.7	141	3101.7
64	946.8	142	3103.2
65	965.9	143	3125.1
66	974.1	144	3129.8
67	979.7	145	3139.6
68	992.1	146	3179.3
69	993.1	147	3185.5
70	994.2	148	3191.8
71	1003.5	149	3193.3
72	1012.9	150	3202.9
73	1025.6	151	3209.8
74	1027.6	152	3224.4
75	1053.8	153	3225.0
76	1061.3	154	3225.4
77	1064.4	155	3428.1
78	1069.3	156	3668.0



10b

Таблица 73. Межатомные расстояния соединения **10b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

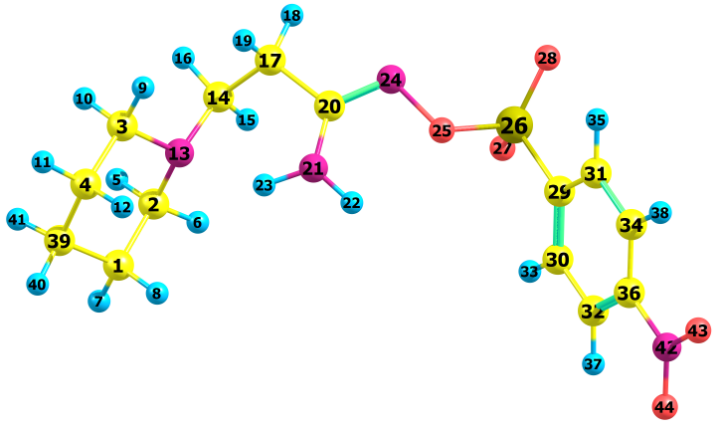
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.417	21-25	1.299
1-6	1.400	22-23	1.009
1-14	1.388	22-24	1.010
2-3	1.402	25-26	1.458
2-13	1.391	26-27	1.661
3-4	1.393	27-28	1.464
3-8	1.086	27-29	1.464
4-5	1.412	27-30	1.781
4-9	1.086	30-31	1.396
5-6	1.395	30-32	1.398
5-10	1.086	31-33	1.395
6-11	1.086	31-34	1.084
7-12	1.083	32-35	1.393
7-13	1.314	32-36	1.084
7-14	1.374	33-37	1.404
14-15	1.459	33-39	1.086
15-16	1.092	35-38	1.405
15-17	1.091	35-39	1.086
15-18	1.536	39-40	1.509
18-19	1.096	40-41	1.093
18-20	1.097	40-42	1.094
18-21	1.512	40-43	1.097
21-22	1.356		

Таблица 74. Колебательные частоты соединения **10b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.2	63	1029.2
2	15.5	64	1048.5
3	21.7	65	1056.6

4	30.1	66	1060.9
5	39.6	67	1082.3
6	48.9	68	1105.0
7	51.9	69	1122.5
8	61.8	70	1135.0
9	81.6	71	1139.9
10	111.6	72	1141.3
11	146.5	73	1172.4
12	158.9	74	1191.8
13	187.2	75	1207.9
14	198.9	76	1225.3
15	229.7	77	1231.2
16	241.4	78	1276.8
17	269.8	79	1297.6
18	270.6	80	1299.2
19	295.1	81	1314.2
20	306.2	82	1320.1
21	318.5	83	1335.4
22	334.8	84	1349.9
23	359.1	85	1370.5
24	374.8	86	1388.3
25	414.9	87	1396.1
26	429.6	88	1410.8
27	436.5	89	1416.7
28	458.1	90	1433.3
29	480.9	91	1435.7
30	490.4	92	1475.7
31	494.5	93	1486.0
32	527.0	94	1487.7
33	544.5	95	1488.4
34	550.4	96	1497.5
35	583.2	97	1515.7
36	588.9	98	1528.0
37	619.5	99	1534.0
38	633.4	100	1618.3
39	639.1	101	1620.9
40	644.1	102	1623.1
41	656.4	103	1640.4
42	711.2	104	1657.7
43	746.7	105	1688.5
44	752.8	106	3040.1
45	774.4	107	3052.6
46	775.5	108	3091.2
47	787.4	109	3097.1
48	802.9	110	3102.0
49	813.5	111	3130.7
50	827.3	112	3148.9
51	849.8	113	3185.9
52	858.3	114	3192.4
53	873.4	115	3193.7

54	886.0	116	3195.8
55	896.2	117	3205.1
56	937.8	118	3211.5
57	945.4	119	3223.7
58	975.7	120	3232.0
59	983.5	121	3248.2
60	992.2	122	3599.8
61	1013.0	123	3724.6
62	1027.1		



11b

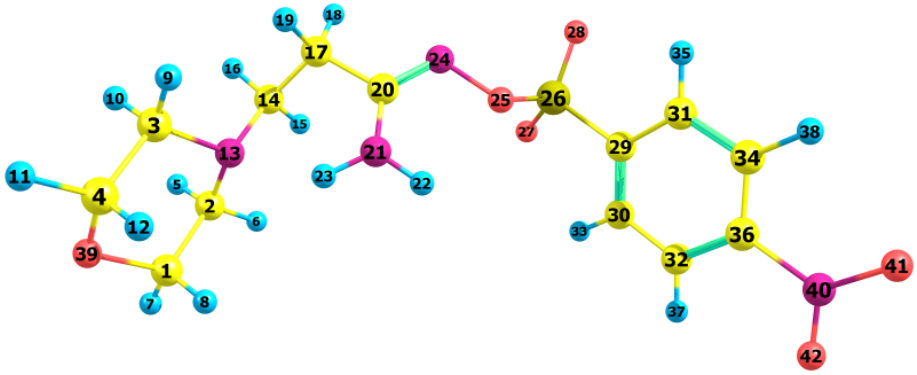
Таблица 75. Межатомные расстояния соединения **11b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.531	21-22	1.010
1-7	1.096	21-23	1.023
1-8	1.098	24-25	1.485
1-39	1.535	25-26	1.644
2-5	1.108	26-27	1.465
2-6	1.095	26-28	1.464
2-13	1.474	26-29	1.797
3-4	1.532	29-30	1.397
3-9	1.094	29-31	1.397
3-10	1.108	30-32	1.394
3-13	1.474	30-33	1.084
4-11	1.096	31-34	1.393
4-12	1.098	31-35	1.084
4-39	1.534	32-36	1.395
13-14	1.473	32-37	1.082
14-15	1.095	34-36	1.395
14-16	1.104	34-38	1.082
14-17	1.541	36-42	1.476
17-18	1.093	39-40	1.096
17-19	1.096	39-41	1.099
17-20	1.512	42-43	1.232
20-21	1.351	42-44	1.232
20-24	1.303		

Таблица 76. Колебательные частоты соединения **11b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	10.7	64	1082.3
2	14.2	65	1087.4
3	20.5	66	1118.3
4	23.8	67	1126.9
5	45.9	68	1128.1
6	49.7	69	1129.2
7	53.3	70	1139.3
8	75.1	71	1171.5
9	92.4	72	1172.9
10	125.5	73	1176.4
11	139.6	74	1195.7
12	151.4	75	1203.0
13	197.3	76	1262.4
14	231.6	77	1280.9
15	237.2	78	1288.2
16	248.7	79	1295.0
17	251.5	80	1306.1
18	262.4	81	1319.2
19	303.1	82	1327.7
20	311.8	83	1348.9
21	341.2	84	1357.2
22	348.4	85	1367.0
23	382.1	86	1378.6
24	415.9	87	1380.8
25	421.0	88	1381.5
26	429.6	89	1388.0
27	454.1	90	1407.6
28	460.0	91	1415.2
29	465.6	92	1433.3
30	473.8	93	1433.3
31	478.0	94	1469.2
32	495.8	95	1478.3
33	525.1	96	1483.6
34	533.4	97	1490.5
35	554.7	98	1496.2
36	575.5	99	1499.4
37	614.0	100	1510.7
38	634.5	101	1512.6
39	681.6	102	1579.2
40	697.4	103	1605.1
41	737.1	104	1631.7
42	749.7	105	1650.2
43	753.4	106	1678.9
44	757.0	107	2919.3
45	764.7	108	2925.0
46	803.9	109	2965.9

47	818.7	110	3019.3
48	848.5	111	3029.3
49	851.0	112	3031.2
50	862.4	113	3063.1
51	868.8	114	3071.9
52	876.3	115	3075.0
53	891.3	116	3076.6
54	909.7	117	3080.6
55	927.2	118	3085.6
56	975.3	119	3087.9
57	988.7	120	3127.3
58	996.7	121	3232.6
59	1003.9	122	3233.1
60	1013.8	123	3251.1
61	1026.6	124	3252.2
62	1041.4	125	3388.3
63	1051.0	126	3668.5



12b

Таблица 77. Межатомные расстояния соединения **12b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

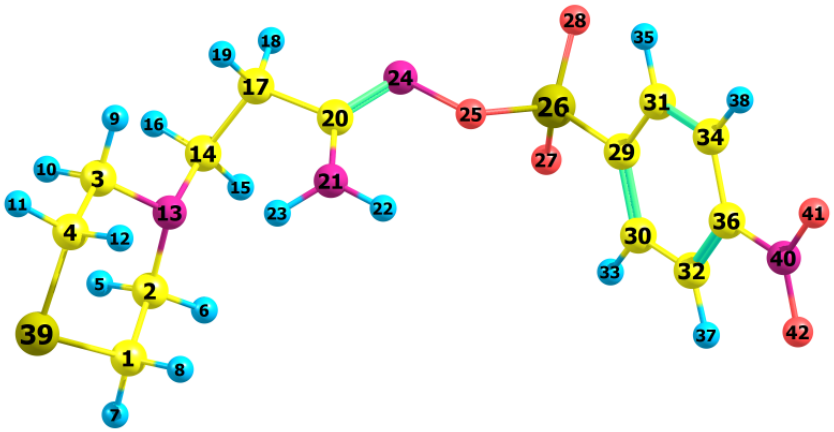
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.525	20-24	1.303
1-7	1.093	21-22	1.010
1-8	1.102	21-23	1.021
1-39	1.428	24-25	1.484
2-5	1.105	25-26	1.645
2-6	1.095	26-27	1.465
2-13	1.472	26-28	1.463
3-4	1.526	26-29	1.797
3-9	1.094	29-30	1.396
3-10	1.106	29-31	1.397
3-13	1.472	30-32	1.394
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.101	31-34	1.393
4-39	1.428	31-35	1.084
13-14	1.473	32-36	1.395
14-15	1.095	32-37	1.082

14-16	1.104	34-36	1.395
14-17	1.540	34-38	1.082
17-18	1.093	36-40	1.476
17-19	1.096	40-41	1.232
17-20	1.513	40-42	1.232
20-21	1.351		

Таблица 78. Колебательные частоты соединения **12b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	11.8	61	1063.2
2	16.3	62	1082.3
3	22.0	63	1091.4
4	28.2	64	1118.2
5	44.2	65	1128.4
6	50.5	66	1131.3
7	56.4	67	1139.3
8	78.4	68	1141.6
9	93.3	69	1145.6
10	125.1	70	1162.4
11	139.6	71	1171.9
12	157.5	72	1196.1
13	200.8	73	1233.5
14	232.4	74	1246.1
15	239.0	75	1276.7
16	248.5	76	1288.9
17	262.0	77	1302.2
18	266.4	78	1319.4
19	304.1	79	1321.1
20	315.9	80	1334.2
21	344.2	81	1351.2
22	354.4	82	1365.6
23	383.4	83	1367.0
24	416.1	84	1381.6
25	431.1	85	1387.6
26	437.8	86	1405.0
27	454.4	87	1415.9
28	457.1	88	1421.6
29	474.5	89	1433.2
30	478.0	90	1436.0
31	493.3	91	1471.6
32	498.1	92	1485.6
33	525.6	93	1488.8
34	533.4	94	1491.8
35	575.4	95	1499.9
36	613.5	96	1506.4
37	616.6	97	1510.9
38	634.5	98	1579.4
39	674.6	99	1604.6
40	697.3	100	1631.7

41	733.9	101	1650.4
42	744.2	102	1678.5
43	753.3	103	2950.9
44	756.6	104	2955.7
45	775.3	105	2970.3
46	805.9	106	2996.0
47	848.5	107	2999.6
48	862.3	108	3063.2
49	862.8	109	3080.5
50	863.9	110	3086.0
51	875.4	111	3093.7
52	887.3	112	3116.0
53	919.7	113	3117.6
54	934.4	114	3127.3
55	991.7	115	3232.7
56	996.7	116	3233.2
57	1003.9	117	3251.3
58	1022.8	118	3252.3
59	1026.6	119	3417.3
60	1041.5	120	3671.8



13b

Таблица 79. Межатомные расстояния соединения **13b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

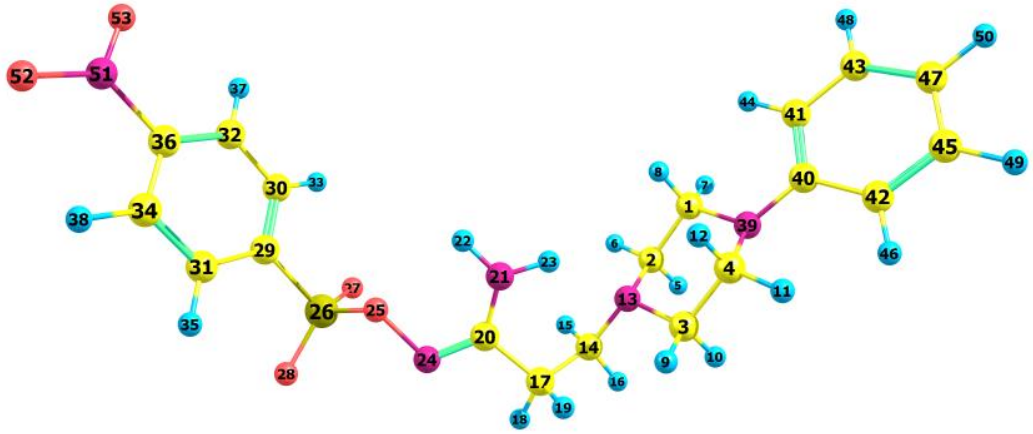
Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.527	20-24	1.303
1-7	1.093	21-22	1.010
1-8	1.095	21-23	1.020
1-39	1.834	24-25	1.483
2-5	1.105	25-26	1.646
2-6	1.096	26-27	1.465
2-13	1.474	26-28	1.463
3-4	1.527	26-29	1.797
3-9	1.095	29-30	1.396
3-10	1.105	29-31	1.397

3-13	1.474	30-32	1.394
4-11	1.093	30-33	1.084
4-12	1.095	31-34	1.393
4-39	1.834	31-35	1.084
13-14	1.477	32-36	1.395
14-15	1.094	32-37	1.082
14-16	1.103	34-36	1.395
14-17	1.541	34-38	1.082
17-18	1.093	36-40	1.476
17-19	1.096	40-41	1.232
17-20	1.512	40-42	1.232
20-21	1.352		

Таблица 80. Колебательные частоты соединения **13b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	11.4	61	1024.1
2	15.8	62	1026.7
3	20.3	63	1056.5
4	25.7	64	1073.7
5	43.0	65	1082.6
6	49.0	66	1118.4
7	52.5	67	1126.9
8	72.4	68	1128.4
9	89.1	69	1139.6
10	122.3	70	1142.5
11	130.4	71	1169.2
12	141.1	72	1187.2
13	194.6	73	1195.9
14	221.6	74	1222.7
15	233.7	75	1232.0
16	247.8	76	1266.9
17	251.2	77	1288.9
18	252.5	78	1298.2
19	277.2	79	1306.3
20	310.2	80	1320.0
21	328.5	81	1320.1
22	332.2	82	1350.6
23	365.1	83	1358.9
24	388.8	84	1367.1
25	415.4	85	1376.5
26	416.4	86	1381.7
27	442.8	87	1405.7
28	451.7	88	1416.8
29	457.0	89	1433.5
30	471.9	90	1436.0
31	474.9	91	1457.7
32	491.7	92	1464.9
33	522.4	93	1468.1
34	533.5	94	1483.7

35	552.7	95	1493.8
36	574.0	96	1505.4
37	613.9	97	1511.2
38	634.4	98	1579.7
39	657.5	99	1607.5
40	674.5	100	1631.8
41	692.0	101	1650.6
42	697.3	102	1680.6
43	731.4	103	2957.7
44	741.5	104	2961.1
45	753.1	105	2976.3
46	756.6	106	3058.5
47	758.6	107	3062.2
48	806.2	108	3064.5
49	817.7	109	3073.2
50	848.7	110	3084.2
51	862.5	111	3091.6
52	875.5	112	3125.3
53	884.6	113	3127.1
54	913.6	114	3128.0
55	969.1	115	3232.2
56	976.0	116	3233.1
57	995.7	117	3251.2
58	997.2	118	3252.3
59	1003.4	119	3427.6
60	1004.2	120	3672.8



14b

Таблица 81. Межатомные расстояния соединения **14b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.528	26-28	1.463
1-7	1.093	26-29	1.797
1-8	1.106	29-30	1.396
1-39	1.461	29-31	1.397

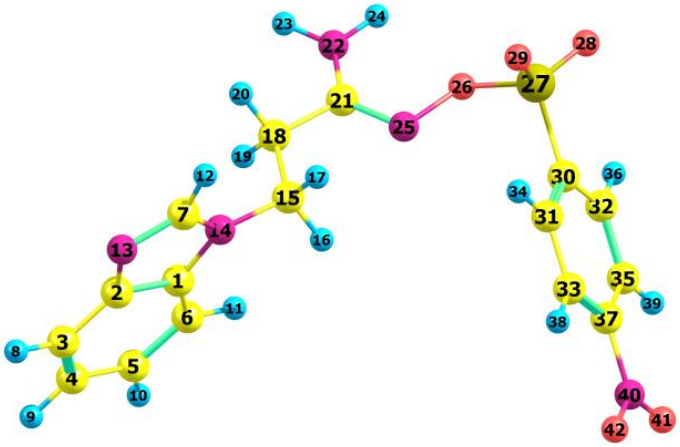
2-5	1.105	30-32	1.394
2-6	1.095	30-33	1.084
2-13	1.469	31-34	1.393
3-4	1.525	31-35	1.084
3-9	1.094	32-36	1.395
3-10	1.106	32-37	1.082
3-13	1.470	34-36	1.395
4-11	1.090	34-38	1.082
4-12	1.105	36-51	1.476
4-39	1.469	39-40	1.413
13-14	1.473	40-41	1.410
14-15	1.095	40-42	1.413
14-16	1.104	41-43	1.399
14-17	1.540	41-44	1.083
17-18	1.093	42-45	1.393
17-19	1.096	42-46	1.085
17-20	1.512	43-47	1.395
20-21	1.351	43-48	1.087
20-24	1.303	45-47	1.400
21-22	1.010	45-49	1.087
21-23	1.021	47-50	1.086
24-25	1.484	51-52	1.232
25-26	1.646	51-53	1.232
26-27	1.465		

Таблица 82. Колебательные частоты соединения **14b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	5.6	78	1063.4
2	12.2	79	1070.8
3	17.6	80	1082.7
4	27.0	81	1086.7
5	29.3	82	1109.0
6	39.2	83	1119.5
7	49.8	84	1125.6
8	59.6	85	1130.6
9	67.9	86	1139.1
10	82.8	87	1147.8
11	89.2	88	1154.6
12	113.4	89	1169.6
13	135.7	90	1180.4
14	141.4	91	1195.3
15	162.0	92	1197.5
16	199.6	93	1211.8
17	224.0	94	1232.7
18	235.4	95	1250.8
19	247.9	96	1256.1
20	259.3	97	1284.9
21	263.8	98	1288.6
22	276.0	99	1310.5

23	294.0	100	1321.7
24	307.6	101	1332.0
25	319.6	102	1339.4
26	348.7	103	1353.0
27	358.9	104	1363.6
28	386.5	105	1367.3
29	416.3	106	1372.9
30	420.7	107	1377.4
31	423.5	108	1381.5
32	448.0	109	1391.4
33	453.0	110	1411.8
34	458.6	111	1418.1
35	474.4	112	1423.0
36	478.9	113	1432.8
37	496.4	114	1438.6
38	500.7	115	1473.4
39	525.3	116	1485.9
40	527.7	117	1490.2
41	533.5	118	1493.3
42	536.6	119	1495.6
43	575.6	120	1501.8
44	614.9	121	1511.7
45	629.8	122	1512.3
46	633.7	123	1532.4
47	645.3	124	1579.5
48	676.5	125	1606.4
49	697.1	126	1618.4
50	703.6	127	1631.7
51	732.8	128	1645.5
52	743.5	129	1650.9
53	747.1	130	1678.8
54	753.5	131	2942.8
55	756.6	132	2948.4
56	769.5	133	2955.2
57	782.3	134	2958.9
58	808.3	135	2970.8
59	832.1	136	3063.9
60	848.6	137	3083.2
61	862.2	138	3087.9
62	867.7	139	3096.9
63	875.4	140	3104.6
64	887.4	141	3128.0
65	895.3	142	3141.3
66	915.5	143	3179.5
67	951.2	144	3185.8
68	963.1	145	3203.1
69	973.7	146	3210.0
70	992.5	147	3224.1
71	993.2	148	3232.7
72	997.0	149	3233.4

73	1003.5	150	3252.6
74	1004.2	151	3253.0
75	1026.5	152	3416.9
76	1027.2	153	3671.6
77	1053.6		



15b

Таблица 83. Межатомные расстояния соединения **15b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

Bond	R, Å	Bond	R, Å
1-2	1.417	21-22	1.353
1-6	1.399	21-25	1.300
1-14	1.389	22-23	1.008
2-3	1.402	22-24	1.009
2-13	1.391	25-26	1.465
3-4	1.393	26-27	1.650
3-8	1.086	27-28	1.462
4-5	1.412	27-29	1.461
4-9	1.086	27-30	1.796
5-6	1.395	30-31	1.396
5-10	1.086	30-32	1.397
6-11	1.085	31-33	1.394
7-12	1.083	31-34	1.083
7-13	1.314	32-35	1.393
7-14	1.375	32-36	1.084
14-15	1.459	33-37	1.394
15-16	1.092	33-38	1.082
15-17	1.092	35-37	1.395
15-18	1.537	35-39	1.082
18-19	1.096	37-40	1.476
18-20	1.097	40-41	1.232
18-21	1.512	40-42	1.232

Таблица 84. Колебательные частоты соединения **15b**, рассчитанные методом DFT B3LYP/6-31G++(d,p) с учетом влияния растворителя (хлороформ)

N	W, cm^{-1}	N	W, cm^{-1}
1	7.8	61	983.8
2	13.3	62	994.5
3	22.4	63	1003.2
4	24.9	64	1026.4
5	41.3	65	1030.4
6	49.2	66	1047.7
7	52.4	67	1058.0
8	59.8	68	1082.1
9	70.2	69	1105.8
10	101.7	70	1119.2
11	136.0	71	1122.9
12	138.1	72	1129.4
13	181.8	73	1140.4
14	198.2	74	1141.0
15	230.0	75	1173.2
16	235.7	76	1192.2
17	243.9	77	1196.8
18	251.5	78	1226.5
19	266.5	79	1279.9
20	275.4	80	1300.6
21	282.7	81	1309.7
22	333.3	82	1315.2
23	344.5	83	1321.4
24	361.5	84	1321.9
25	416.2	85	1367.4
26	419.4	86	1370.7
27	434.2	87	1381.1
28	449.0	88	1391.5
29	455.7	89	1396.5
30	477.5	90	1411.2
31	489.9	91	1433.7
32	500.2	92	1436.1
33	530.3	93	1475.6
34	541.9	94	1489.8
35	549.5	95	1497.7
36	568.1	96	1511.0
37	588.3	97	1516.2
38	595.1	98	1534.9
39	623.9	99	1579.1
40	633.0	100	1622.9
41	634.7	101	1623.4
42	646.5	102	1631.0
43	691.7	103	1650.7
44	735.5	104	1657.8
45	752.4	105	1686.6
46	753.5	106	3055.2
47	757.7	107	3094.4

48	774.9	108	3095.5
49	775.8	109	3147.5
50	788.8	110	3186.1
51	803.7	111	3196.4
52	847.4	112	3205.9
53	858.5	113	3212.1
54	860.7	114	3232.2
55	873.8	115	3239.9
56	874.5	116	3249.5
57	879.6	117	3252.5
58	896.6	118	3253.0
59	936.7	119	3605.4
60	944.8	120	3731.1