ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

2026. Том 67, № 7 *Июль* *DOI: 10.26902/JSC_id168942*

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ БИЯДЕРНОГО КОМПЛЕКСА МЕДИ(I) НА ОСНОВЕ 1,3-ДИАЗА-5-ФОСФАЦИКЛОГЕКСАНА

К.Д. Ахмадгалеев[1], А.Г. Шмелев[1,2], Л.В. Французова[1], И.А. Литвинов[1], И.Д. Стрельник[1], А.А. Карасик[1]

[1]*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*
E-mail: kamilahmadgaleev@gmail.com
[2]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

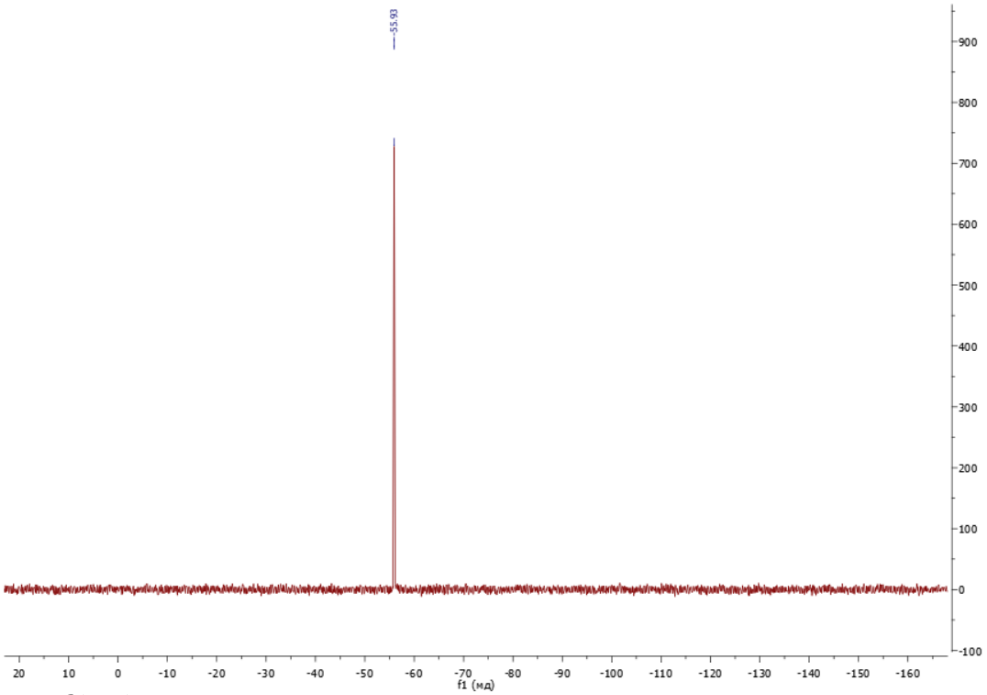


Рисунок S1. $^{31}P\{^{1}H\}$ ЯМР спектр соединения **1** (ДМСО-d_6, 400 МГц)

© Ахмадгалеев К.Д., Шмелев А.Г., Французова Л.В., Литвинов И.А., Стрельник И.Д., Карасик А.А., 2026

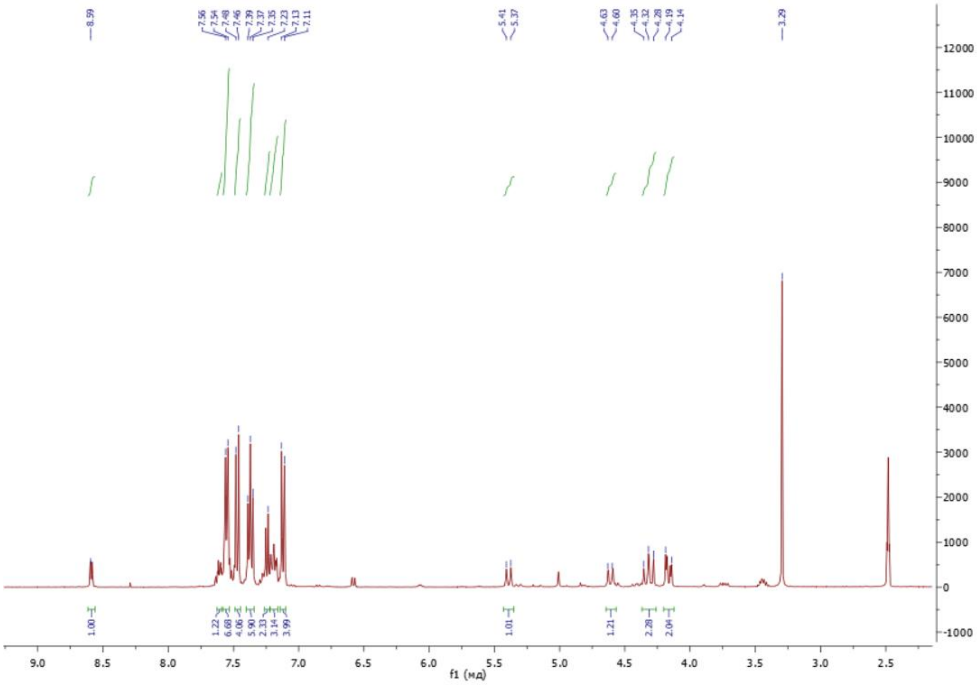


Рисунок S2. ^{1}H ЯМР спектр соединения **1** (ДМСО-d_6, 400 МГц)

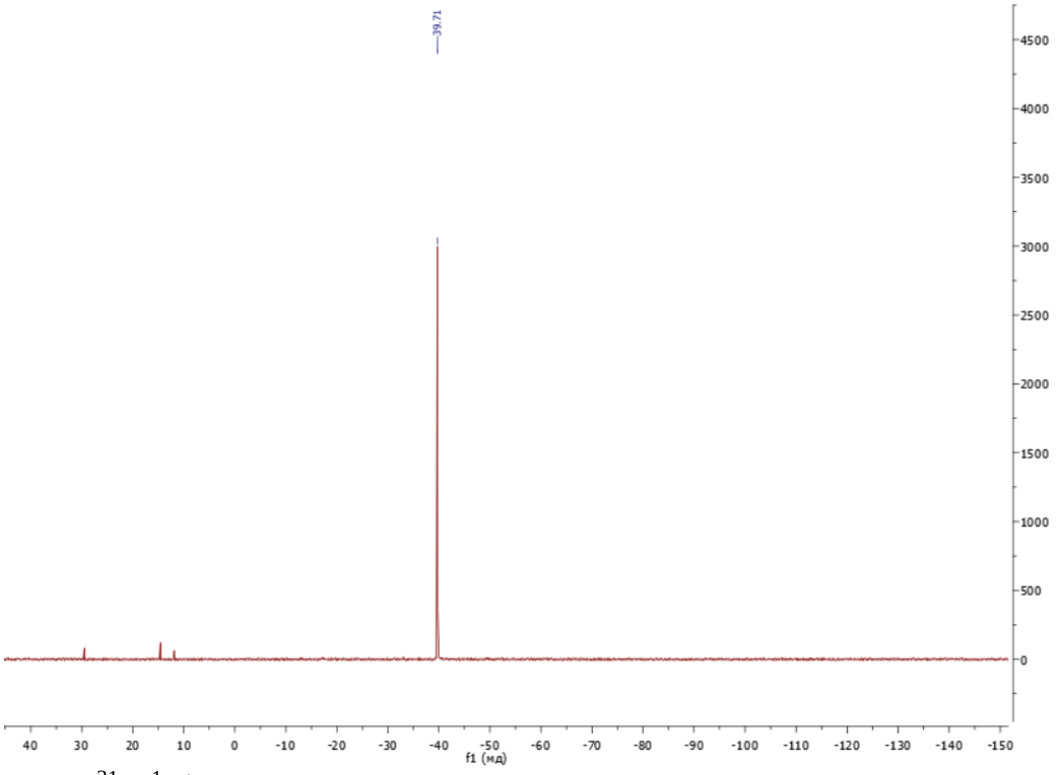


Рисунок S3. ^{31}P{^{1}H} ЯМР спектр соединения **2** ($CDCl_3$, 400 МГц)

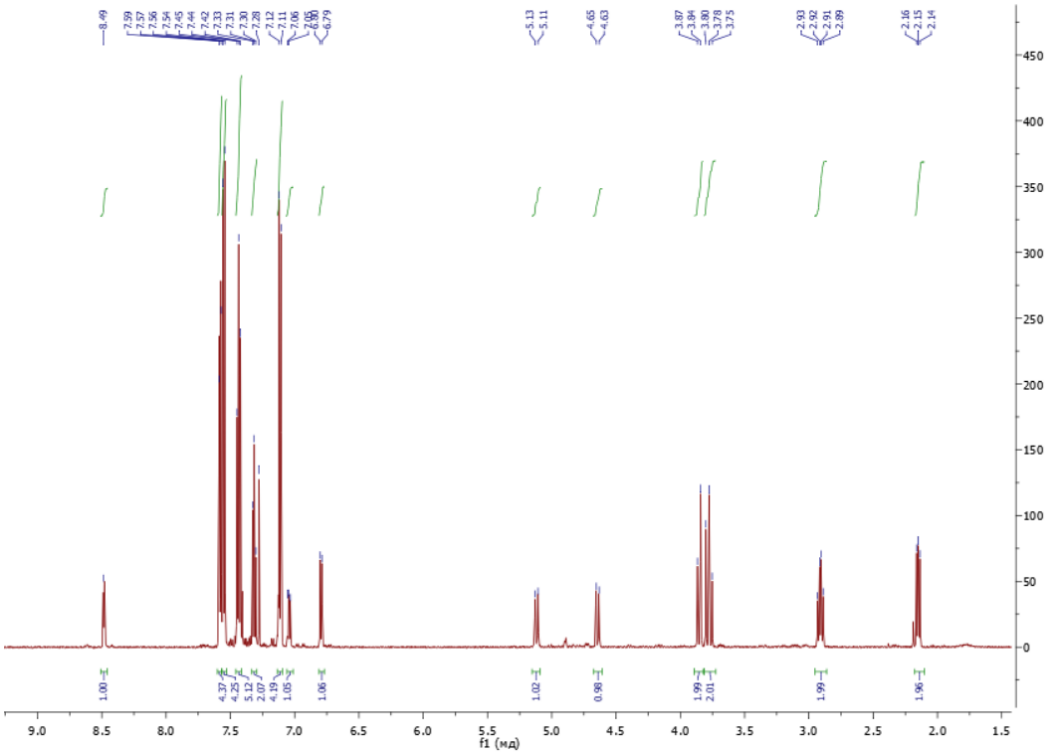


Рисунок S4. ^{1}H ЯМР спектр соединения **2** ($CDCl_3$, 400 МГц)

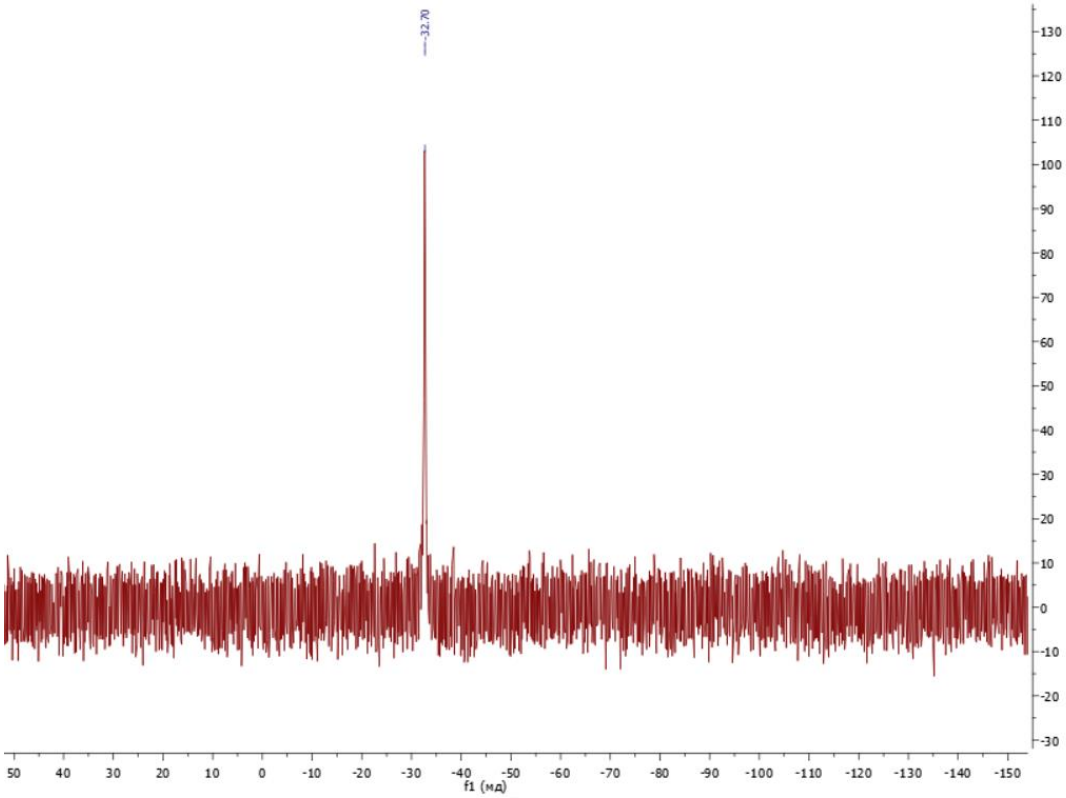


Рисунок S5. $^{31}P\{^{1}H\}$ ЯМР спектр соединения **3** (ДМСО-d_6, 400 МГц)

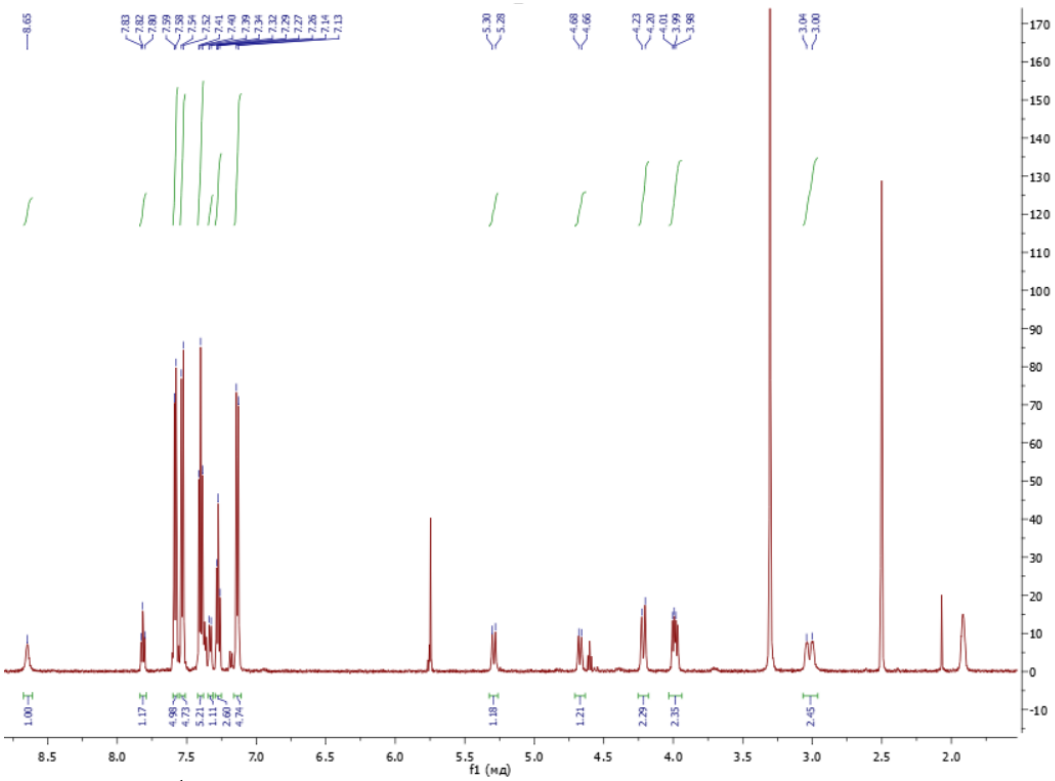


Рисунок S6. ^{1}H ЯМР спектр соединения **3** (ДМСО-d_6, 400 МГц)

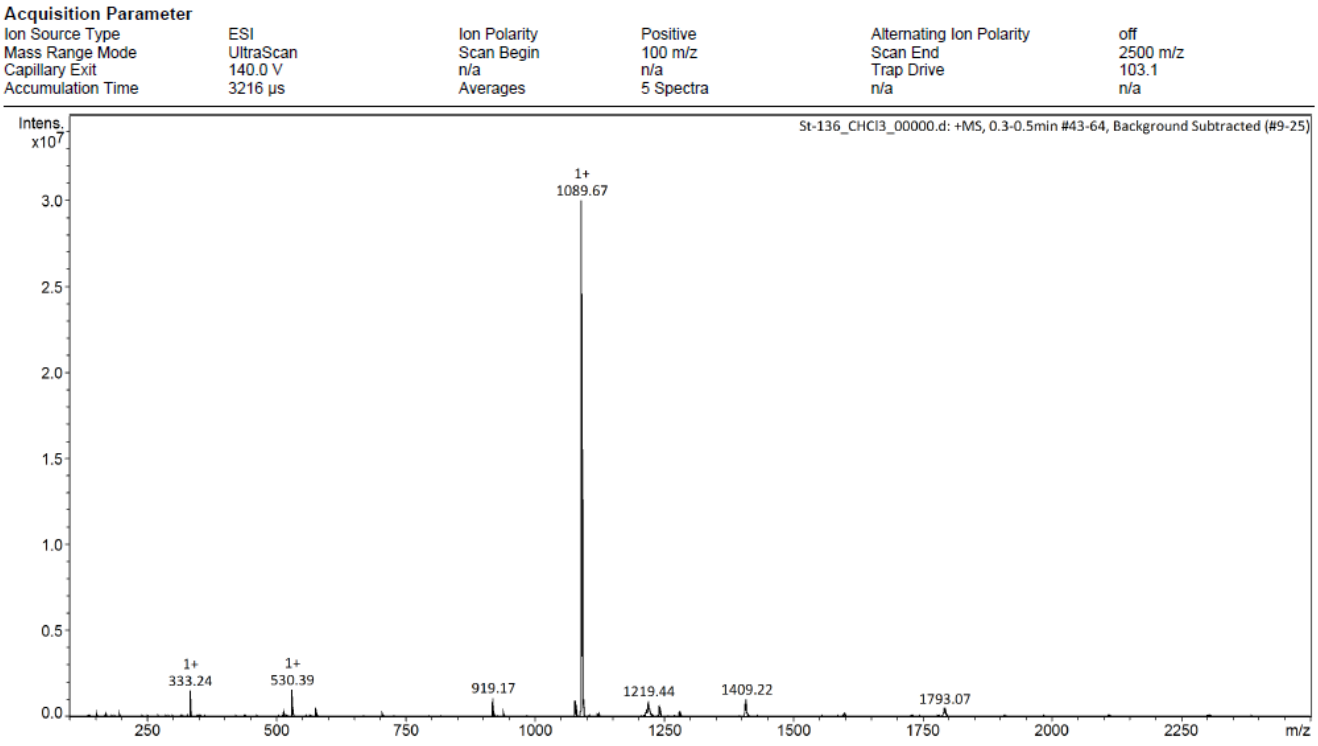


Рисунок S7. Масс (ИЭР) спектр соединения **3**.

Таблица S1. Кристаллографические данные соединений **1** и **3**.

	1	**3**
Moiety Formula	$C_{32}H_{28}N_3P$, C_6H_{12}	$C_{68}H_{64}Cu_2I_2N_6P_2$
Sum Formula	$C_{38}H_{40}N_3P$	$C_{68}H_{64}Cu_2I_2N_6P_2$
formula weight	569.70	1408.09
temperature [K]	150(2)	100(2)
wavelength [Å]	0.71073	0.71073
crystal system	monoclinic,	triclinic,
space group	*Cc* (№ 9),	*P-1(No. 2)*
a [Å]	6.3487(6)	9.6621(4)
b [Å]	36.622(4)	10.0812(4)
c [Å]	13.3005(12)	17.4803(8)
α [deg]	90	74.347(2)
β [deg]	96.485(3)	82.527(2)
γ [deg]	90	62.939(2)
V [Å3]	3072.6(5)	1459.99(11)
Z,	4	1 (molecule in the special position)
Dcalc [g cm−3]	1.232	1.602
absorption coefficient [mm−1]	0.121	1.889
F(000)	1216	708
crystal size [mm]	0.118 x 0.253 x 0.484	0.020 x0.03 x 0.250
Θ range for data collection [deg]	1.9, 27.9	2.336, 31.999
limiting indices	-8 :≤ h ≤ 8, −48 ≤ k ≤ 48, −17 ≤ l ≤ 17	-14 ≤ h ≤ 14, −15 ≤ k ≤ 14, −26 ≤ l ≤ 26
reflections measured	37054	197210
Independent reflections	7386	11718
observed reflections [$I > 2\sigma(I)$]	6885	10306
R(int)	0.059	0.057
GOF on F^2	1.009.	1.027
data/restraints/parameters	7386 / 2 / 379	10114 /0 / 361
final *R* indices [$I > 2\sigma(I)$]	R_1 = 0.0359, wR_2 = 0.0885	R_1 = 0.0266, wR_2 = 0.0619
R indices (all data)	R_1 = 0.0395, wR_2 = 0.0905	R_1 = 0.0329, wR_2 = 0.0638
largest diff. peak and hole [e Å^{-3}]	0.21 and -0.155,	2.180 and -1.04
CCDC number	2531305	2531307