ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

2026. Том 67, № 9 *Сентябрь* *DOI: 10.26902/JSC_id172201*

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

СОХРАНЕНИЕ СУММАРНОГО ПОРЯДКА АКСИАЛЬНЫХ СВЯЗЕЙ *X*—SI И SI←N (*X* = F, Cl, O, N, C) В МОЛЕКУЛАХ СИЛАТРАНОВ

Е.Ф. Белоголова

ФИЦ Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия
E-mail: lena@irioch.irk.ru

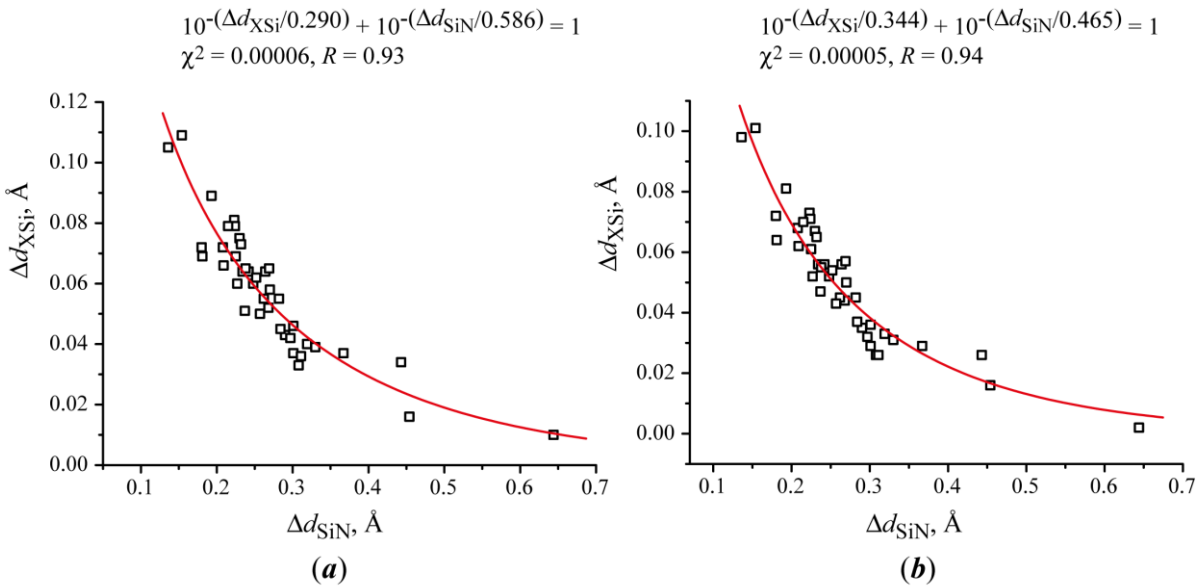


Рис. S1. Взаимосвязь отклонений экспериментальных (РСА, ГЭ) значений межъядерных расстояний X-Si и Si←N силатранов **1** от стандартных значений длин связей X-Si в структурах **2** (табл. S2), рассчитанных на PW6B95-D3(BJ) (***a***) и B3PW91 (***b***) уровнях теории (базис 6-311G(d,p)) и Si-N в **C**, а также положение экспериментальных точек относительно соответствующих корреляционных кривых

Таблица S1

Экспериментальные (РСА и ГЭ [1-5]) значения длин связей Si←N (d_{SiN}), X–Si (d_{XSi}) и R-фактор (R_f) для молекул силатранов $XSi(OCH_2CH_2)_3N$

R_f, %	Код[#1]	X(**1**)	d_{SiN}, Å	d_{XSi}, Å	X(**2**)[#2]
5.91	-	F (gas)	2.324	1.568	F
4.50	-	Cl (gas)	2.313	2.062	Cl
4.00	-	Me (gas)	2.514	1.847	Me
4.05	705143	F	2.050	1.624	F
6.50	CLSITR	Cl	2.023	2.153	Cl
7.57	FUSBIF	H	2.071	1.420	H

© Белоголова Е.Ф., 2026

3.80	RABLEL	MeO	2.127	1.669	MeO
6.80	TALVUX	EtO	2.139	1.665	MeO
3.90	GERJES	*t*BuO	2.189	1.659	MeO
7.30	VOQQEX	*o*-F_2HCO-C_6H_4CHNO	2.073	1.697	MeO
5.32	WIDTAE	$Ph_2P(S)O$	2.060	1.700	MeO
3.02	AZASAV	Me_3SiO	2.178	1.652	MeO
3.50	DOKKUJ	*p*-Me-C_6H_4O	2.107	1.676	PhO
4.10	BIDSIQ	*m*-Cl-C_6H_4O	2.079	1.691	PhO
3.04	RUFPUE	2-PyO	2.078	1.697	PhO
6.00	JAKSAP	*o*-MeO-C_6H_4COO	2.069	1.724	PhCOO
4.65	KAHDED	*p*-Fc-C_6H_4COO	2.051	1.732	PhCOO
3.63	RIPLIL	SCN	2.006	1.800	SCN
3.07	MSILTR04	Me	2.160	1.880	Me
4.70	CIPBUY	Cl_2CH	2.063	1.926	Me
8.10	CMSILT	$ClCH_2$	2.111	1.921	Me
3.39	DAKQEL	CF_3	2.024	1.946	Me
4.90	ACAYEI	1,2,4-triazolylmethyl	2.095	1.906	Me
7.80	BAZCEK10	$NC(CH_2)_3$	2.164	1.885	Me
8.10	BAZXEF	$PhCOOCH_2$	2.123	1.955	Me
6.20	CASSAQ	$NCS(CH_2)_3$	2.209	1.881	Me
4.99	EVIZIS	Indolylmethyl	2.104	1.901	Me
2.90	FIXXEP	Allyl	2.140	1.895	Me
2.40	HEBJUT	2-(Benzothiazolyl) mercaptomethylene	2.100	1.912	Me
4.80	IRUFUW	Carbazolylmethyl	2.097	1.897	Me
9.00	JAKRUI	(2-Pyridylcarboxy) methanol	2.119	1.905	Me
5.90	RIMXAM	$H_2N(CH_2)_2NH(CH_2)_3$	2.165	1.875	Me
5.70	VEBJUH	$HS(CH_2)_3$	2.178	1.871	Me
6.40	KAGYEW	Silatranylethyl	2.230	1.870	Me
5.24	QEQSEK	(Phenylacetoxy)methyl	2.173	1.926	Me
8.30	YEZPOI	$MePhSi(OH)CH_2$	2.214	1.864	Me
6.72	YEZPUO	$MePhSi(H)CH_2$	2.241	1.869	Me
4.46	DOWKIL	1-Imidazolylpropyl	2.138	1.889	Me
3.61	FAJWOE	$H_2N(CH_2)_3$	2.171	1.874	Me
4.07	FAJWUK01	*o*-OH-C_6H_4-$CHN(CH_2)_3$	2.200	1.876	Me
3.81	GEKSUM	Phthalimidylmethyl	2.134	1.901	Me
4.50	IXOKOX	ICH_2	2.118	1.897	Me
7.29	IXOKUD	$I(CH_2)_3$	2.164	1.882	Me

4.09	JUSRUM	4-Py-C(O)S(CH_2)$_3$	2.237	1.874	Me
4.15	VEQJEI	Pyrazolylethyl	2.154	1.882	Me
4.40	VEQJOS	Imidazolylethyl	2.112	1.901	Me
3.26	XORKUL	Succinimidylmethyl	2.102	1.910	Me
2.30	YEPVUN	EtOC(O)(CH_2)$_2$C(O)OCH_2	2.093	1.918	Me
3.20	-	Bn	2.122	1.899	Me
4.50	-	1-Naphthylmethyl	2.139	1.902	Me
6.17	TAKKOG	1-Pyrrolylmethyl	2.090	1.902	Me
8.34	TUKKUF	Cyclopropylmethyl	2.150	1.873	Me
6.80	VAWGOP	Cyclopropyl	2.227	1.943	Me
5.86	FACGAT	SCN(CH_2)$_3$	2.160	1.883	Me
8.20	BACGAN	Vynil	2.150	1.917	H_2C=CH
5.54	RASZEQ	Styryl	2.127	1.857	H_2C=CH
3.92	VAGQEZ	[η^2-C(S)]OsCl(CO)(PPh_3)$_2$	2.085	1.912	H_2C=CH
3.83	DAJTEO	2-Phenylethynyl	2.094	1.884	HC≡C
7.90	PNEOSI11	Ph	2.155	1.908	Ph
3.90	DEKGIJ	*p*-Me-C_6H_4	2.171	1.887	Ph
6.10	NNESIL	*m*-NO_2-C_6H_4	2.116	1.904	Ph
3.82	LEQJIA	*p*-Br-C_6H_4	2.132	1.896	Ph
4.20	JESBIS	[η^5-C_6H_5]Cr(CO)$_3$	2.108	1.906	Ph
2.30	-	*p*-Me_2N-C_6H_4	2.167	1.883	Ph
3.70	-	*p*-MeO-C_6H_4	2.152	1.896	Ph
2.62	DOHDAF	Fc	2.181	1.877	Ph
4.20	VOMBUU	[η^5-6-Ph-C_6H_5]Mn(CO)$_3$	2.170	1.895	Ph
4.67	VIFZOZ	[η^5-6-Me_3COC(O)CH_2-C_6H_5]Mn(CO)$_3$	2.127	1.899	Ph
4.80	KEWMII	*o*-Me_2NCHMe-C_6H_4	2.282	1.896	Ph
3.18	LILPEB	1-Ferrocenylethenyl	2.222	1.901	Ph

Ссылки на литературу:

1. E.F. Belogolova, E.P. Doronina, A.V. Eroshin, S.A. Shlykov. *Inorg. Chem.*, **2025**, *64*, 21509−21525. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.5c03411.

2. Cambridge Structural Database, Ver. 5.40. UK: University of Cambridge, **2018**.

3. Y. Wang. Synthése, réactivité électrochimique et structure électronique de 1-R-métallatranes (M=Si, Sn): Ph.D. (Chem.) Dissertation. Rennes, France: University of Rennes, **2012**.

4. G. Forgács, M. Kolonits, I. Hargittai. *Struct. Chem.*, **1990**, *1*, 245–250. https://doi.org/10.1007/BF00674268.

5. E.F. Belogolova, S.A. Shlykov, A.V. Eroshin, E.P. Doronina, V.F. Sidorkin. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2021**, *23*, 2762–2774. DOI: https://doi.org/10.1039/D0CP05872F.

Таблица S2

Длины связей X–Si (d_{XSi}^0) молекул $XSi(OCH_2CH_2)_3CH$ по данным методов B3PW91и PW6B95-D3(BJ) с базисом 6-311G(d,p)

X	d_{XSi}^0, Å	d_{XSi}^0, Å
	PW6B95-D3(BJ)	B3PW91
Me	1.837	1.845
Ph	1.841	1.851
H_2C=CH	1.833	1.842
HC≡C	1.805	1.813
SCN	1.695	1.702
MeO	1.619	1.626
PhO	1.625	1.629
PhCOO	1.663	1.668
H	1.461	1.469
Cl	2.028	2.036
F	1.590 (1.552)[#1]	1.596 (1.552) [#1]

[#1] Исправленное значение d_{FSi} с учётом ошибки расчётного метода.