

Додаток В

Геометрія водневих зв'язків в досліджених автором структурах.

Таблиця В.1

Геометрія водневих зв'язків в структурах **38-51**

D–H...E	D–H, Å	H...E, Å	D...E, Å	D–H...E, °
38				
C(3)-H(3.1)...X(2)	1.04(6)	3.00(6)	3.730(6)	128(4)
C(3)-H(3.2)...X(1)	0.88(4)	3.03(4)	3.568(7)	121(3)
N(1)-H(1)...X(2)	0.82(6)	2.49(5)	3.273(6)	161(4)
N(2)-H(2)...X(1)	0.75(4)	2.59(4)	3.318(7)	164(4)
N(2)-H(3)...X(2)	0.62(7)	2.69(7)	3.307(6)	176(6)
N(3)-H(5)...X(1)	0.78(6)	2.73(5)	3.372(7)	141(5)
39				
C(2)-H(2.1)...Br(2)	0.83(6)	3.05(6)	3.794(6)	151(5)
N(1)-H(1)...Br(2)	0.70(5)	2.81(5)	3.414(5)	146(5)
N(2)-H(2)...Br(1)	0.82(6)	2.66(6)	3.438(6)	158(5)
N(3)-H(5)...Br(2)	1.02(8)	2.49(8)	3.492(5)	166(6)
40				
C(2)-H(2.1)...X(3)	0.9(1)	3.0(1)	3.63(1)	126(8)
C(5)-H(5.2)...X(2)	1.0(1)	2.9(1)	3.57(1)	130(9)
N(1)-H(1)...X(2)	0.65(7)	2.74(7)	3.33(1)	154(7)
N(2)-H(2)...X(3)	1.04(8)	2.30(8)	3.32(1)	168(6)
N(3)-H(3)...X(3)	0.9(1)	2.6(1)	3.52(1)	162(10)
N(3)-H(4)...X(1)	0.6(2)	2.8(2)	3.36(1)	153(10)
41				
C(3)-H(3.2)...X(2)	0.78(8)	2.83(7)	3.518(9)	147(7)
N-H(N)...X(2)	0.66(9)	2.58(9)	3.196(8)	155(8)
42				
C(3)-H(3.2)...Br(2)	0.8(1)	2.94(9)	3.56(1)	144(9)
N-H(N)...Br(2)	0.7(1)	2.7(1)	3.300(9)	158(10)

Продовження табл. В.1

D–H...E	D–H, Å	H...E, Å	D...E, Å	D–H...E, °
43				
N(1)–H(1)...O(1)	0.68(3)	2.45(3)	3.017(4)	143(3)
N(2)–H(2)...O(5)	0.72(3)	2.27(3)	2.953(4)	158(3)
N(2)–H(3)...O(2)	0.80(4)	2.20(4)	2.999(4)	171(4)
N(3)–H(4)...O(4)	0.78(3)	2.20(3)	2.951(4)	161(3)
N(3)–H(5)...O(3)	0.77(4)	2.19(4)	2.955(4)	170(4)
44				
N(1)–H(1)...X(2)	0.86	2.51	3.305(6)	155
N(2)–H(2)...X(3)	0.86	2.67	3.250(6)	126
45				
N(1)–H(N)...X(1)	0.75(5)	2.68(5)	3.226(7)	131(5)
N(1)–H(N)...X(2)	0.75(5)	2.70(5)	3.284(8)	136(5)
C(11)–H(11.3)...X(2)	1.07(8)	2.85(8)	3.87(2)	161(6)
C(12)–H(12.3)...X(1)	1.01(7)	2.87(7)	3.73(2)	144(5)
47				
N(1)–H(N)...Cl(1)	0.95(8)	2.47(8)	3.296(9)	144(7)
C(4)–H(4.1)...Cl(3)	0.89(6)	2.72(6)	3.59(1)	166(5)
C(6)–H(6.1)...Cl(3)	1.07(7)	2.94(6)	3.92(1)	151(5)
48				
N(4)–H(4)...O(3)	0.86	2.03	2.891(4)	176
N(6)–H(6)...O(2)	0.86	2.03	2.880(5)	170
N(7)–H(7A)...O(2)	0.90	2.26	3.065(5)	149
N(7)–H(7A)...O(1)	0.90	2.42	3.264(5)	157
N(7)–H(7B)...O(3)	0.90	2.52	3.190(5)	132
49				
N(4)–H(4)...F(1)	0.86	2.51	3.372(5)	176
N(6)–H(6)...O(1)	0.86	2.14	2.817(4)	135

Продовження табл. В.1

D–H...E	D–H, Å	H...E, Å	D...E, Å	D–H...E, °
N(7)–H(7A)...O(1)	0.90	2.09	2.969(4)	164
N(7)–H(7B)...O(2)	0.90	2.30	3.027(5)	138
50				
N(4)–H(4)...O(7)	0.86	2.01	2.834(9)	159
N(6)–H(6)...O(5)	0.86	2.32	3.03(1)	140
N(6)–H(6)...O(7)	0.86	2.39	3.12(1)	143
N(7)–H(7A)...O(2)	0.90	2.06	2.888(9)	153
N(7)–H(7B)...O(3)	0.90	2.36	3.15(1)	145
N(7)–H(7B)...O(2)	0.90	2.37	3.114(9)	140
N(11)–H(11)...O(4)	0.86	2.28	2.95(1)	134
N(11)–H(11)...O(3)	0.86	2.35	3.18(1)	163
N(13)–H(13)...O(3)	0.86	2.49	3.27(1)	150
N(14)–H(14A)...O(6)	0.90	2.14	3.02(1)	165
N(14)–H(14B)...O(8)	0.90	2.22	2.927(8)	135
N(18)–H(18)...O(3)	0.86	2.00	2.848(9)	167
N(20)–H(20)...O(1)	0.86	2.26	2.96(1)	139
N(20)–H(20)...O(3)	0.86	2.50	3.22(1)	141
N(21)–H(21A)...O(6)	0.90	2.29	3.03(1)	139
N(21)–H(21A)...O(7)	0.90	2.43	3.21(1)	146
N(21)–H(21B)...O(6)	0.90	2.07	2.90(1)	154
N(25)–H(25)...O(8)	0.86	2.18	2.884(9)	140
N(25)–H(25)...O(7)	0.86	2.38	3.18(1)	157
N(27)–H(27)...O(7)	0.86	2.42	3.21(1)	152
N(28)–H(28A)...O(4)	0.90	2.23	2.945(8)	136
N(28)–H(28B)...O(2)	0.90	2.10	2.986(9)	166
N(4)–H(4)...F(6)	0.86	2.09	2.876(4)	151
N(6)–H(6)...F(6)	0.86	2.16	2.933(4)	149

Продовження табл. В.1

D–H...E	D–H, Å	H...E, Å	D...E, Å	D–H...E, °
51				
N(7)–H(7A)...F(2)	0.88	1.81	2.680(4)	168
N(7)–H(7B)...F(5)	0.88	2.01	2.818(4)	152
N(7)–H(7C)...F(6)	0.88	2.14	2.857(4)	138
N(7)–H(7C)...S(1)	0.88	2.40	2.944(3)	120
N(11)–H(11)...F(1)	0.86	2.02	2.881(4)	174
N(13)–H(13)...F(5)	0.86	2.06	2.864(4)	155
N(14)–H(14A)...F(4)	0.90	2.09	2.985(4)	172
N(14)–H(14B)...F(3)	0.90	2.20	2.959(4)	142