

«КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ  
В АССОЦИАТАХ 4-[(4'-БУТОКСИФЕНИЛ)ДИАЗЕНИЛ]БЕНЗОЛСУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЫ  
И ЕЕ Н-КОМПЛЕКСАХ С ПРОИЗВОДНЫМИ ПИРИДИНА»

М. С. Федоров, А. А. Филиппов, А. С. Феклинова

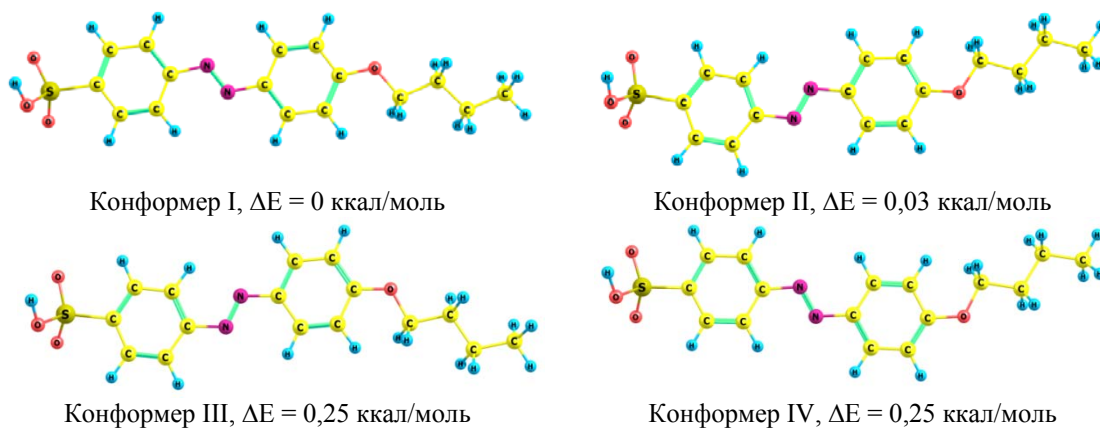


Рис. 1S. Геометрическое строение *транс*-конформеров молекулы 4-*R*-БСК и их относительные электронные энергии  
Fig. 1S. Geometric structure of *trans*-conformers of the 4-*R*-BSA molecule and their relative electronic energies

Таблица 1S. Некоторые геометрические параметры ( $r$  в Å, углы в градусах) конформеров и их относительные электронные энергии

Table 1S. Some geometric parameters ( $r$  in Å, angles in degrees) of conformers and their relative electronic energies

	Конформеры							
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
$r(\text{O-H})$	0,967	0,967	0,967	0,967	0,968	0,968	0,968	0,968
$r(\text{S-O})$	1,630	1,630	1,630	1,630	1,630	1,630	1,632	1,632
$r(\text{N=N})$	1,252	1,253	1,252	1,252	1,242	1,241	1,241	1,241
$r(\text{S=O})_{\text{cp}}$	1,445	1,445	1,445	1,445	1,445	1,445	1,445	1,445
$\varphi(\text{C-C-S-O})$	83,4	86,2	86,1	83,1	83,6	84,4	87,0	89,1
$\varphi(\text{C-N=N-C})$	-179,8	179,7	180,0	-180	10,4	10,01	10,3	10,2
$\varphi(\text{C-C-N=N})$	1,3	178,1	-179,6	-0,6	59,9	61,3	87,0	61,5
$\varphi(\text{C-C-O-C})$	0,4	179,5	-0,1	-180	-180	-179,5	179,4	-178,8
$\Delta E$ , ккал/моль	0	0,03	0,25	0,25	15,78	15,80	16,00	16,17

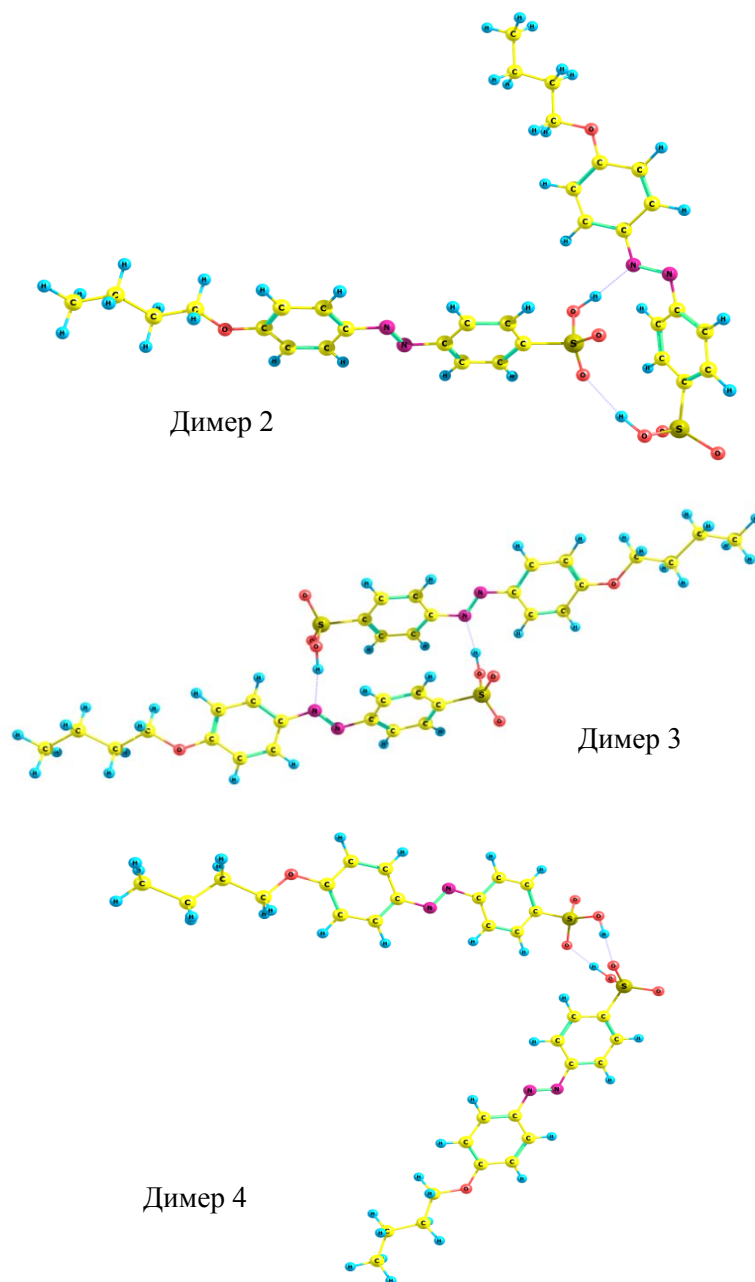
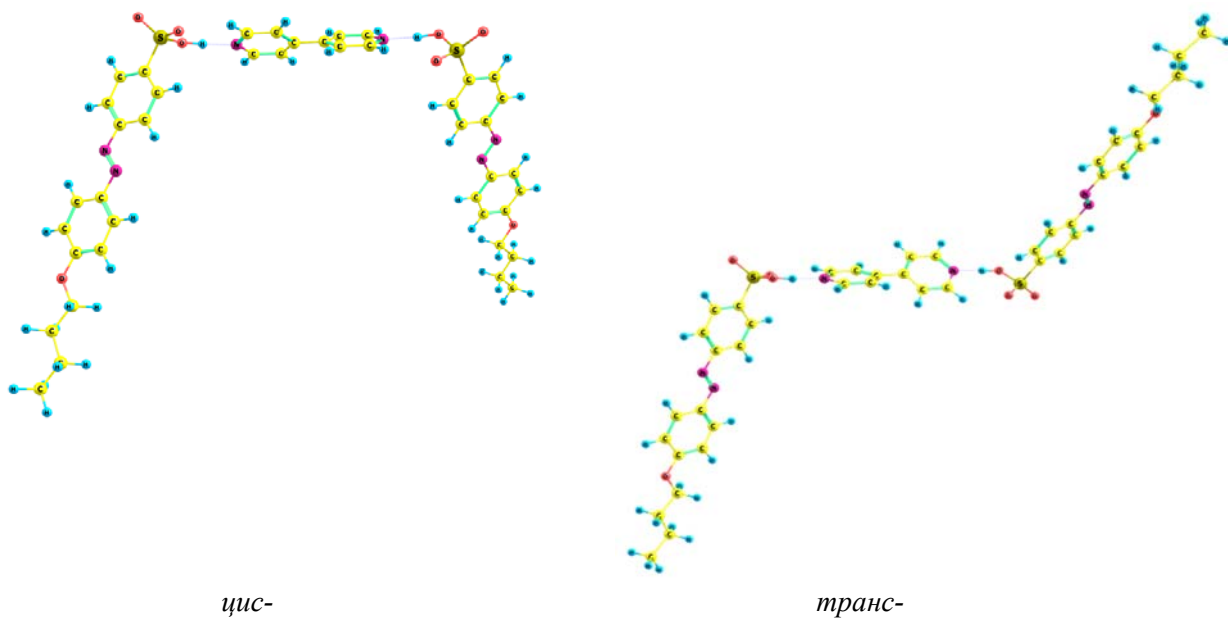


Рис. 2S. Геометрическое строение гомомолекулярных комплексов 4-R-БСК (димеров)

Fig. 2S. Geometric structure of 4-R-BSA homomolecular complexes (dimers)



*Рис. 3S. Геометрическое строение цис- и транс-конформаций Н-комплекса с 4,4'-бипиридином*  
*Fig. 3S. Geometric structure of cis- and trans-conformations of the H-complex with 4,4'-bipyridine*