

## Дополнительные материалы

для

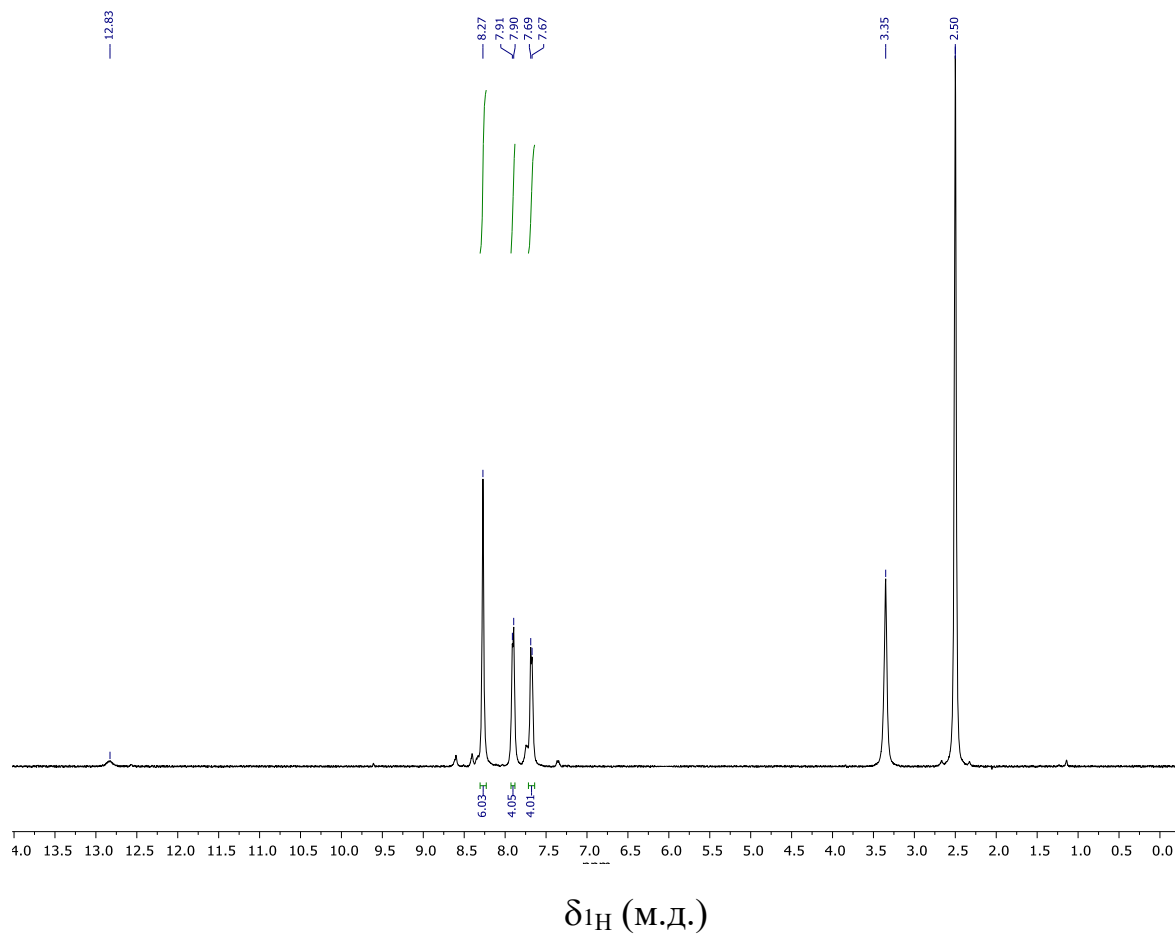
### СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ДИКАРБОКСИЛСОДЕРЖАЩИХ ТРИС-ГЛИОКСИМАТОВ ЖЕЛЕЗА(II) С ЛИНЕЙНОЙ И УГЛОВОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ИХ МОЛЕКУЛ

А.С. Чуприн<sup>a</sup>, С.В. Дудкин<sup>a</sup>, А.В. Вологжанина<sup>a</sup>, Я.З. Волошин<sup>a,b,\*</sup>

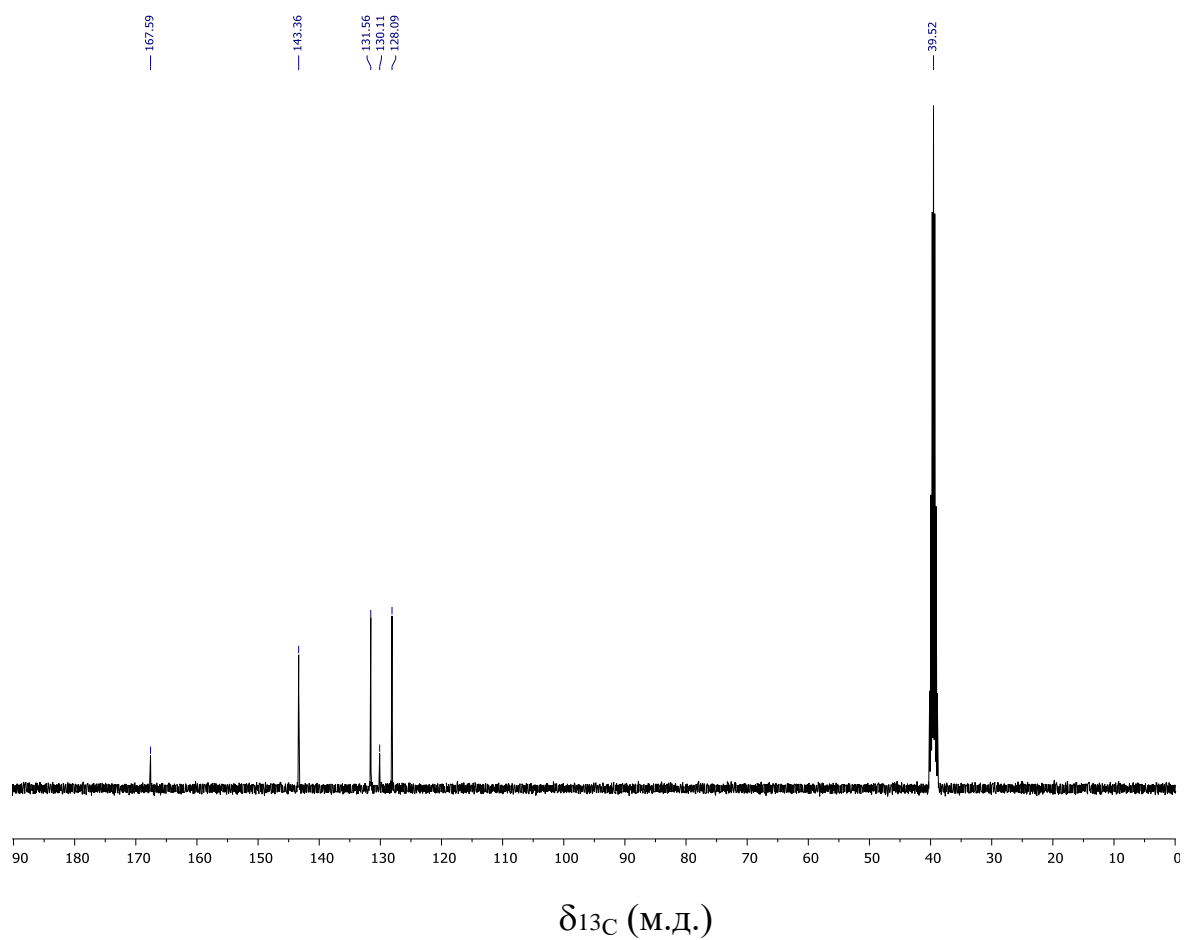
<sup>a</sup>*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,  
ул. Вавилова, 28, стр.1, Москва, 119334 Россия*

<sup>b</sup>*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,  
Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия*

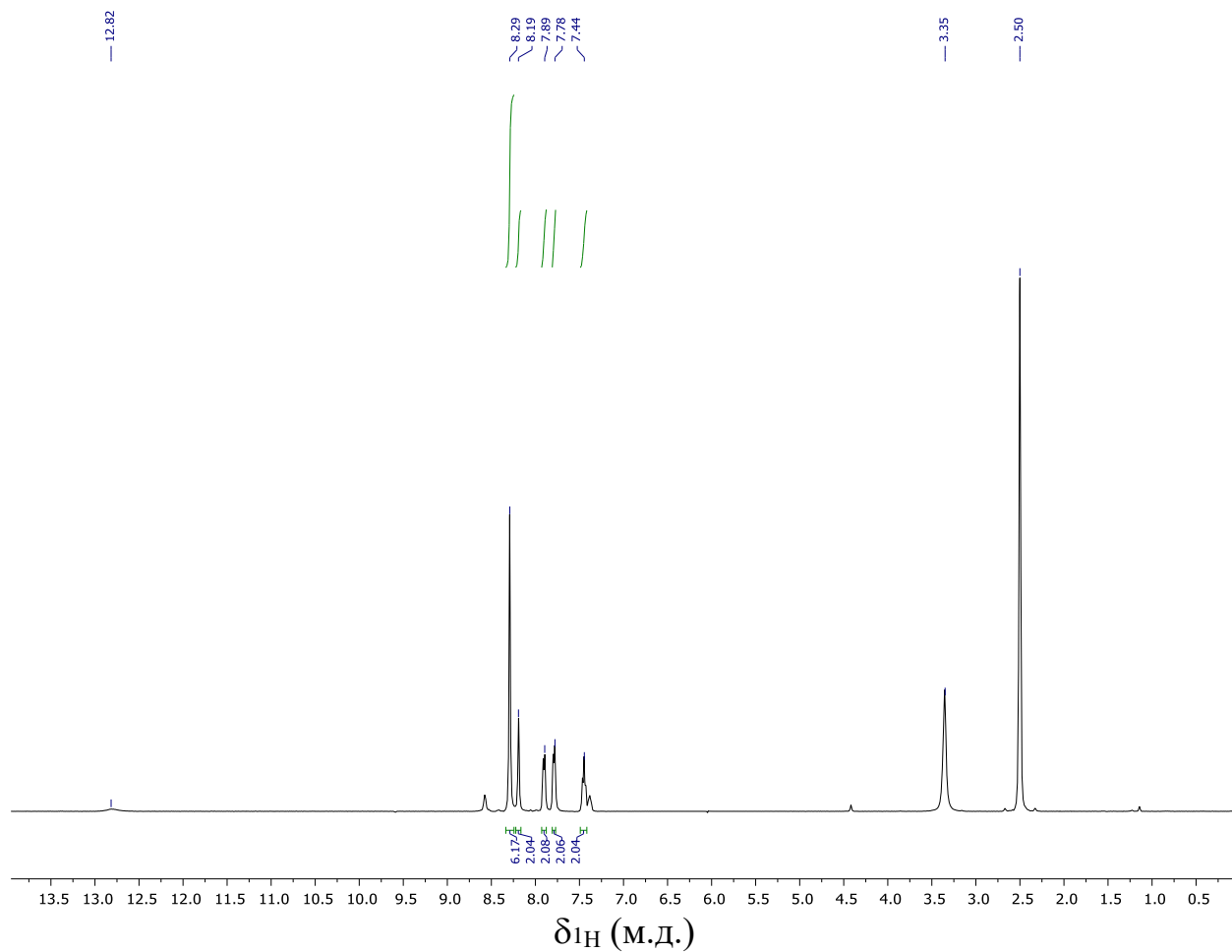
\*e-mails: [voloshin@ineos.ac.ru](mailto:voloshin@ineos.ac.ru)  
[voloshin@igic.ras.ru](mailto:voloshin@igic.ras.ru)



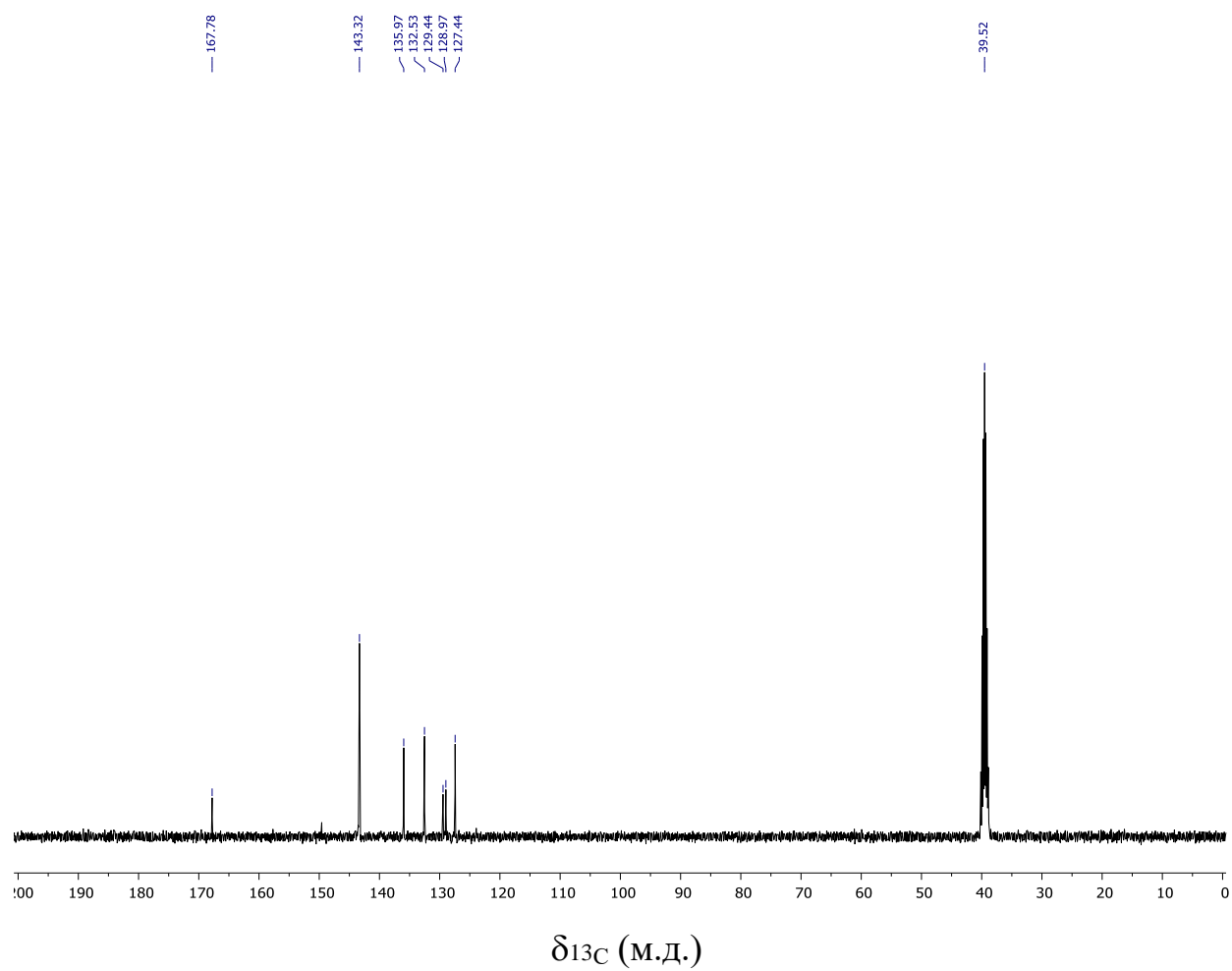
**Рисунок S1.** <sup>1</sup>H ЯМР-спектр раствора клатрохелата FeGm<sub>3</sub>(B4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>COOH)<sub>2</sub> в ДМСО-*d*<sub>6</sub>.



**Рисунок S2.**  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  ЯМР-спектр раствора клатрохелата  $\text{FeGm}_3(\text{B4-C}_6\text{H}_4\text{COOH})_2$  в  $\text{DMSO-}d_6$ .



**Рисунок S3.** <sup>1</sup>H ЯМР-спектр раствора клатрохелата FeGm<sub>3</sub>(B3-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>COOH)<sub>2</sub> в ДМСО-*d*<sub>6</sub>.



**Рисунок S4.**  $^{13}C\{^1H\}$  ЯМР-спектр раствора клатрохелата  $FeGm_3(B3-C_6H_4COOH)_2$  в  $DMCO-d_6$ .

**Таблица S1.** Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения для кристаллов  $\text{FeGm}_3(\text{B3-C}_6\text{H}_4\text{COOH})_2 \cdot 2\text{ДМФА}$  и  $\text{FeGm}_3(\text{B4-C}_6\text{H}_4\text{COOH})_2 \cdot 2\text{Py}$

Параметр	$\text{FeGm}_3(\text{B3-C}_6\text{H}_4\text{COOH})_2 \cdot 2\text{ДМФА}$	$\text{FeGm}_3(\text{B4-C}_6\text{H}_4\text{COOH})_2 \cdot 2\text{Py}$
Fw	724.05	736.06
Сингония, пр. гр., Z	Триклинная, P-1, 2	Моноклиная, P2 <sub>1</sub> /n, 4
a, Å	7.9785(4)	12.5746(2)
b, Å	13.0229(7)	7.8418(1)
c, Å	15.9280(8)	32.1587(4)
$\alpha$ , °	100.514(2)	90
$\beta$ , °	92.776(2)	101.260(1)
$\gamma$ , °	105.623(2)	90
V, Å <sup>3</sup>	1558.72(14)	3110.05(8)
D <sub>x</sub> , г/см <sup>3</sup>	1.543	1.572
$\mu$ , мм <sup>-1</sup>	0.56	4.530
F000	748	1512
Размер образца, мм	0.33×0.16×0.06	0.10×0.07×0.03
$\theta_{\text{max}}$ , град	30.801	77.051
Область h, k, l	-11<h<11 -18<k<18 -22<l<22	-15<h<15 -9<k<9 -40<l<40
Число отражений: измеренных/независимых (N <sub>1</sub> ), R <sub>int</sub> /с I > 2σ(I) (N <sub>2</sub> )	21176 / 9506, 0.0630 / 5041	44835 / 6490, 0.0669 / 5720
Метод уточнения	Полноматричный МНК по F <sup>2</sup>	
Число уточняемых параметров	448	462
Весовая схема	w=1/[σ <sup>2</sup> (F <sub>o</sub> <sup>2</sup> )+(0.012P) <sup>2</sup> ], где P=(F <sub>o</sub> <sup>2</sup> +2F <sub>c</sub> <sup>2</sup> )/3	w=1/[σ <sup>2</sup> (F <sub>o</sub> <sup>2</sup> )+(0.03P) <sup>2</sup> +2.4131 P], где P=(F <sub>o</sub> <sup>2</sup> +2F <sub>c</sub> <sup>2</sup> )/3
Факторы недостовренности:		
wR <sub>2</sub> по N <sub>1</sub>	0.1395	0.0867
R <sub>1</sub> по N <sub>2</sub>	0.0603	0.0364
S	1.009	1.030
Остаточная электронная плотность	0.456 / -0.075	0.328 / -0.348
Δρ <sub>max</sub> / Δρ <sub>min</sub> , э Å <sup>-3</sup>		