

ПРИЛОЖЕНИЕ К СТАТЬЕ

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ АВВВ-ТИПА С НИТРО- И БИС(2- ХЛОРЭТИЛ)АМИНОГРУППАМИ

Е.А. Петухова^{*}, Е.А. Данилова

Петухова Екатерина Александровна (ORCID: 0000-0002-0776-4041),

Данилова Елена Адольфовна (ORCID: 0000-0001-6765-6707)

Кафедра технологии тонкого органического синтеза, Ивановский

государственный химико-технологический университет,

Шереметевский пр., д. 7, Иваново 153000, Россия

e-mail: ek.petukhova@mail.ru^{*}; danilova@isuct.ru

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF ABBB-TYPE MACROHETERACYCLIC COMPOUNDS WITH NITRO- AND BIS(2- CHLOROETHYL)AMINO GROUPS

E.A. Petukhova^{*}, E.A. Danilova

Petukhova E.A. (ORCID: 0000-0002-0776-4041), Danilova E.A. (ORCID: 0000-

0001-6765-6707)

Department of Fine Organic Synthesis Technology, Ivanovo State University of

Chemistry and Technology,

Sheremetevsky avenue, 7, Ivanovo 153000, Russian Federation

e-mail: ek.petukhova@mail.ru^{*}; danilova@isuct.ru

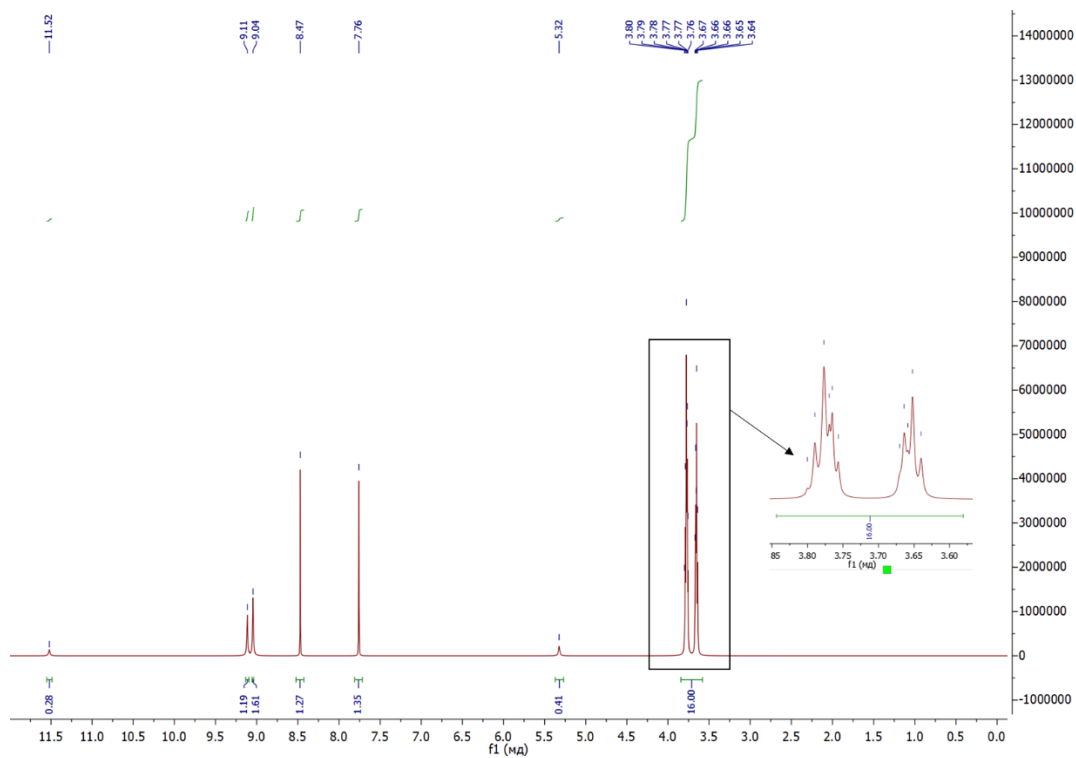


Рис. П1. ^1H ЯМР спектр соединения **3** (ДМСО- d_6)

Fig. P1. ^1H NMR spectrum of compound **3** (DMSO- d_6)

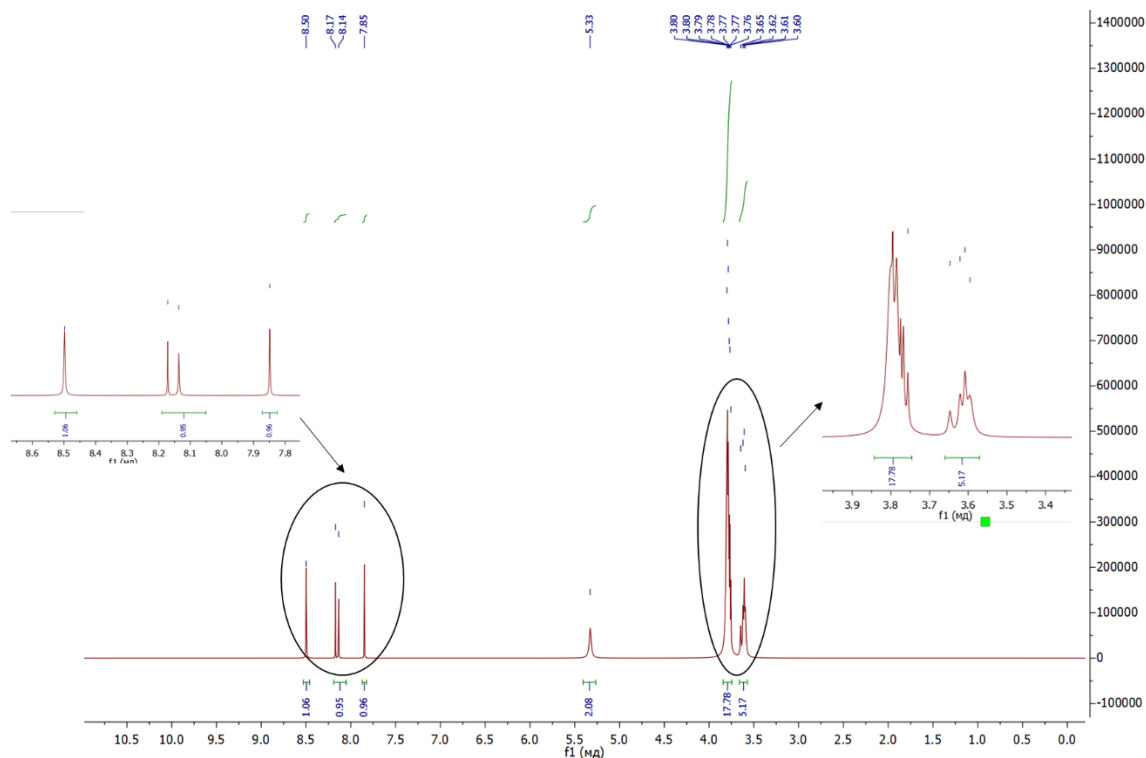


Рис. П2. ^1H ЯМР спектр соединения **4** (ДМСО- d_6)

Fig. P2. ^1H NMR spectrum of compound **4** (DMSO- d_6)

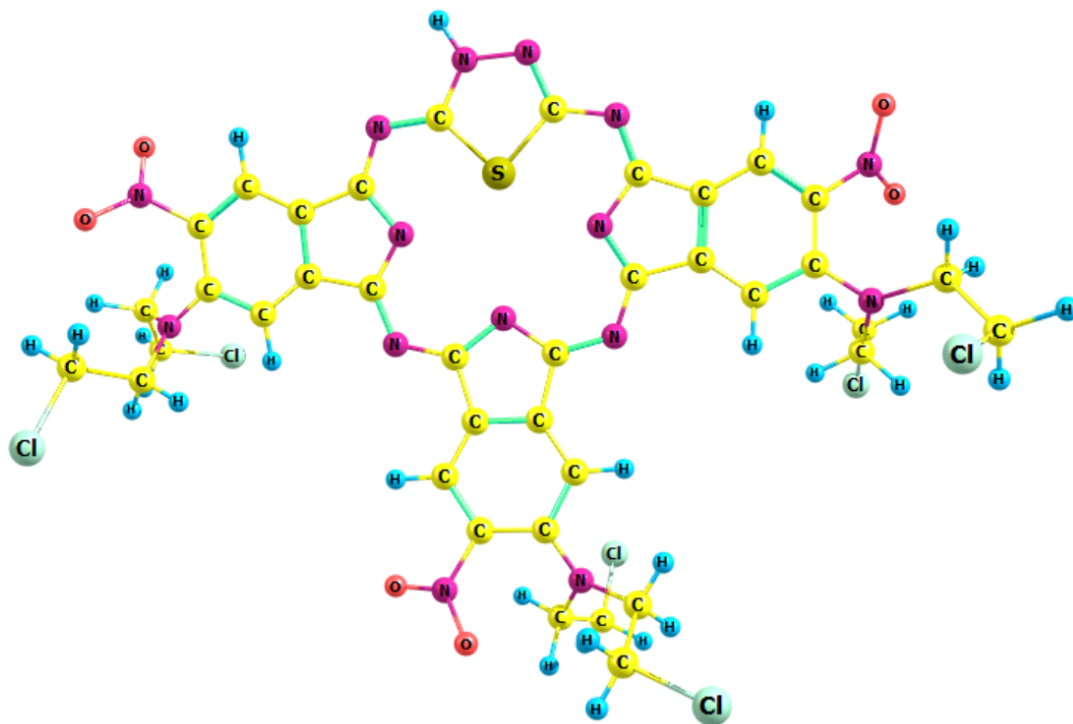


Рис. ПЗ. Вид оптимизированной молекулы соединения **4** (конфигурация **4a**)

Fig. P3. View of the optimized molecule of compound **4**. (configuration **4a**)

$$E = -3\,701\,290,5907 \text{ ккал/моль}$$

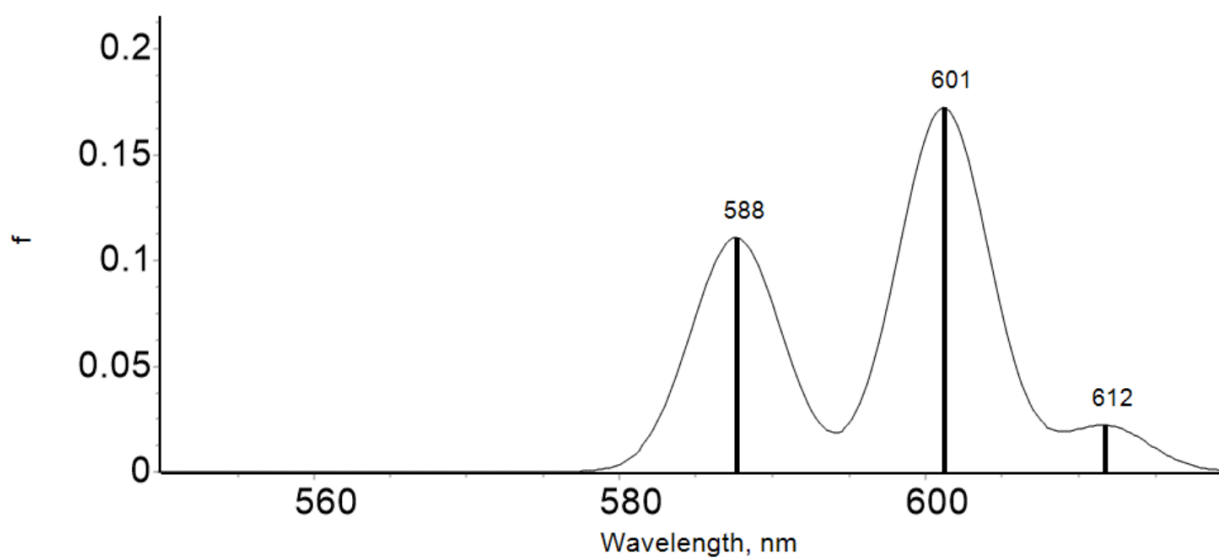


Рис. П4. Спектр TDDFT/B3LYP/6-31G(*d,p*) **4a**

Fig. P4. Spectra TDDFT/B3LYP/6-31G(*d,p*) of **4a**

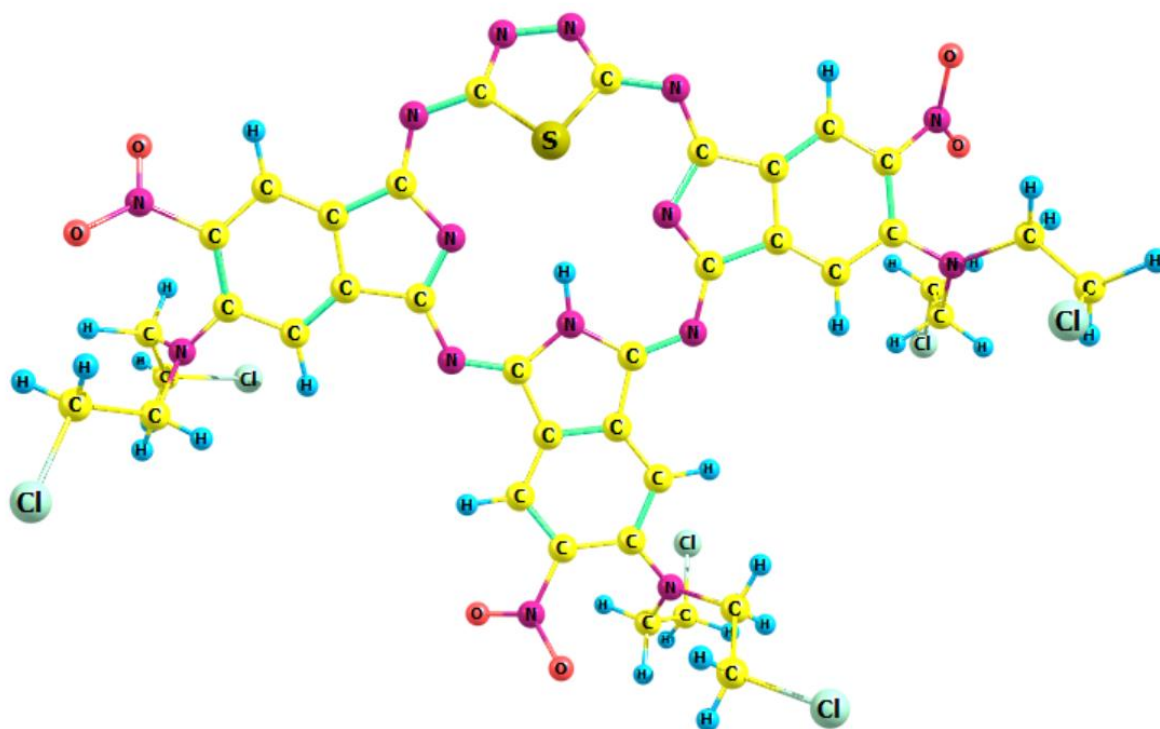


Рис. П5. Вид оптимизированной молекулы соединения **4** (конфигурация **4b**)

Fig. P5. View of the optimized molecule of compound **4**. (configuration **4b**)

$E = -3\,701\,294,8847$ ккал/моль

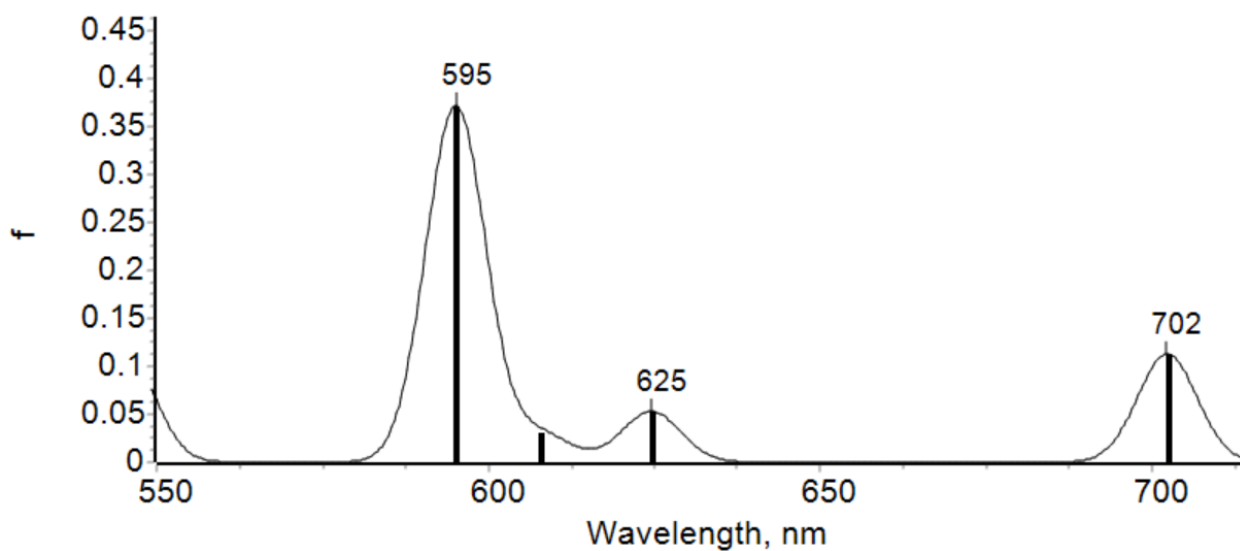


Рис. П6. Спектр TDDFT/B3LYP/6-31G(*d,p*) **4b**

Fig. P6. Spectra TDDFT/B3LYP/6-31G(*d,p*) of **4b**