**SUPPLEMENTARY MATERIALS – ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

**Compounds of chromium(III) with some organic ligands**

**Соединения хрома(III) с некоторыми органическими лигандами**

**N. A. Skorik, R. R. Alimova**

**Н. А. Скорик, Р. Р. Алимова**

**Журнал неорганической химии, 2020, Т.65 (1) Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2020, Т.65 (1)**

**Table S1.** Bond lengths, calculated for chromium(III) picolinate molecule **Таблица S1.** Длины связей, рассчитанные для молекулы пиколината хрома(III)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Атомы, образующие связь | Длина связи, Å | Атомы, образующие связь | Длина связи, Å | Атомы, образующие связь | Длина связи, Å |
| С1Н1 | 1.084 | O4Cr1 | **1.902** | Cr1O6 | **1.900** |
| С1С2 | 1.394 | N2Cr1 | **2.089** | Cr1N3 | **2.122** |
| С1N1 | 1.342 | O4C17 | 1.315 | O6C18 | 1.317 |
| C2H3 | 1.085 | C17O3 | 1.218 | C18O5 | 1.218 |
| C2C3 | 1.396 | C17O10 | 1.519 | C18C15 | 1.506 |
| C3H1 | 1.086 | C10N2 | 1.349 | C15N3 | 1.350 |
| С3C4 | 1.395 | C10C9 | 1.391 | C15C14 | 1.390 |
| C4H4 | 1.084 | C9H8 | 1.084 | C14H12 | 1.085 |
| C4C5 | 1.389 | C9C8 | 1.393 | C14C13 | 1.393 |
| C5N1 | 1.349 | C8H5 | 1.086 | C13H9 | 1.086 |
| C5C16 | 1.504 | C8C7 | 1.396 | C13C12 | 1.397 |
| C16O1 | 1.215 | C7H7 | 1.085 | C12H11 | 1.085 |
| C16O2 | 1.331 | C7C6 | 1.391 | C12C11 | 1.393 |
| N1Cr1 | **2.054** | C6H6 | 1.085 | C11H10 | 1.084 |
| O2Cr1 | **1.877** | C6N2 | 1.342 | C11N3 | 1.347 |

**Table S2.** Values of valence angles in planar five-membered rings, calculated for chromium(III) picolinate molecule

**Таблица S2.** Значения валентных углов в плоских пятичленных циклах,

рассчитанные для молекулы пиколината хрома(III)

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Номер цикла | 1 | 2 | 3 |
| Атомы, образующие угол | (Cr1N1C5) (N1C5C18) (C5C16O2) (C16O2Cr1) (O2Cr1N1) | (O4Cr1N2) (Cr1N2C10) (N2C10C17) (C10C17O4) (C17O4Cr1) | (N3Cr1O6) (Cr1O6C18) (O6C18C15) (C18C15N3) (C15N3Cr1) |
| Валентный угол, град | 112.5  113.8  116.1  120.3  80.7 | 82.8  109.4  115.9  113.9  117.9 | 77.6  123.9  111.2  113.7  113.3 |
| ∑ 543.4 | ∑ 539.9 | ∑ 539.7 |

**Table S3.** Frequencies of the IR spectrum of chromium(III) picolinate, calculated and obtained experimentally

**Таблица S3.** Частоты ИК-спектра пиколината хрома (III), рассчитанные и полученные экспериментально

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Функциональная группа | ν (эксперимент), см−1 | ν (расчет «Gaussian 09»), см−1 |
| –COO− νas (C–O); νs (C–O) | 1637  1469 | 1661  1484 |
| Δ (C–H)  в пиридиновом кольце | 1096 | 1075 |
| ν (Cr–О) | 468 | 479 |
| ν (Cr–N) | 385  370 | 392  383 |