Сим. CoEP-II NiEP-II CuEP-II ZnEP-II Приближенное описание\*) i 675(0.0) 675(0.0) 673(0.0) 673(0.0)  $r(C_{\beta}^{"}-C1), def(Py)$ 61 А 687(0.0) 687(0.0) 686(0.0) 685(0.0)  $r(C'_{\beta}-C_{Me}), def(Py)$ 62 А 699(0.0) 699(0.0) 695(0.0) 693(0.0)  $r(C_{\beta}^{"}-C1, C_{\beta}^{'}-C_{Me}, C_{\beta}-C_{\alpha})$ 63  $B_1$ 703(0.0) 697(0.0) 701(0.0) 711(0.0) 64 twist(m-ring),  $OPB(C'_{\beta})$ А 709(12.4) 707(12.0) 708(11.6) 711(11.7) OPB( $C'_{\alpha}$ ,  $C'_{\beta}$ , r( $C''_{\beta}$ -C1), r( $C'_{\beta}$ -C<sub>Me</sub>) 65  $B_2$ 719(21.1) 716(20.9) 717(20.5) 720(20.8) OPB( $C_{\alpha}$ , N,  $C'_{\beta}$ , r( $C'_{\beta}$ - $C_{Me}$ ), r( $C''_{\beta}$ -C1) 66  $B_2$ 720(33.9) 718(34.7) 720(35.3) 722(34.7) 67  $B_3$  $r(C'_{\beta}-C_{Me})$ , twist(Py),  $r(C''_{\beta}-C1)$ , r(M-N)728(0.1) 727(0.1) 726(0.2) 728(0.2) chair(m-ring),  $OPB(C'_{\beta})$ 68 B<sub>1</sub> 731(2.5) 728(1.1) 728(0.9) 730(1.6) 69  $B_3$ chair(m-ring) 751(0.9) 749(0.6) 746(0.8) 748(1.0) 70  $B_1$ chair(m-ring),  $OPB(C_{\beta}^{"})$ 748(0.0) 742(0.0) 745(0.0) 744(0.0)  $OPB(C_{\beta}, C_{\alpha}'')$ 71 A 748(6.0) 746(6.3) 747(6.9) 749(7.5) chair(m-ring),  $OPB(C_{\beta}^{"})$ 72  $B_2$ 747(12.6) 746(12.0) 747(12.0) 749(14.3)  $OPB(C_{\alpha}^{"}, C_{\beta}^{"})$ 73 B<sub>3</sub> 766(18.7) 766(17.1) 764(18.2) 763(21.0)  $\phi(HCC)_{Et}$ , bre(Py), OPB(C<sup>"</sup><sub>B</sub>) 74 B 771(24.3) 771(22.4) 769(25.5) 768(29.5) 75 φ(HCC)<sub>Et</sub>, bre(Py)  $B_2$ 76 767(0.7) 768(0.5) 765(0.4) 769(0.4) bre(Py)  $B_1$ 789(0.1) 77 789(0.1) 788(0.1) 787(0.1)  $B_1$ φ(HCC)<sub>Et</sub> 790(0.0) 790(0.0) 789(0.0) 789(0.0)  $\phi(HCC)_{Et}$ , r(C<sup>"</sup><sub>b</sub>-C1), bre(Py) 78 А 79 811(18.7) 812(17.8) 809(16.3) 807(15.9) φ(HCC)<sub>Et</sub>, bre(Py)  $B_2$ 823(0.0) 823(0.0) 823(0.0) 823(0.0)  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}$ , r(C'\_{\beta}-C\_{Me}), bre(Py) 80 А 833(5.2) 834(5.0) 831(4.6) 828(3.9)  $\phi(HCC)_{Et}$ , bre(Py) 81  $B_3$ 866(49.2) 864(49.2) 865(49.4) 867(49.2)  $OPB(H_m), OPB(C_m)$ 82  $B_1$ 83 866(0.0) 865(0.0) 866(0.0) 868(0.0)  $OPB(H_m), OPB(C_m)$ Ba 84  $B_2$ 869(0.2) 868(0.2) 868(0.2) 870(0.2)  $OPB(H_m), OPB(C_m)$ 85  $B_1$ 869(2.2) 869(2.3) 872(1.5)  $OPB(H_m), OPB(C_m)$ 871(1.7) 931(0.1) 933(0.1) 927(0.1) 922(0.1) 86  $B_1$  $r(C'_{\alpha}-C'_{\beta}), r(C1C2), \phi(HCC)_{ELM}$ 942(5.2) 944(6.1) 938(1.6) 933(0.0) r(C1-C2), r( $C'_{\alpha}$ - $C'_{\beta}$ ),  $\phi$ (HCC)<sub>Et,Me</sub> 87  $B_3$ 945(43.1) 945(40.6) 938(50.3) 933(63.3) 88  $B_2$  $r(C1-C2), \phi(HCC)_{Et Me}$ 956(0.0) 956(0.0) 955(0.0) 955(0.0) 89  $r(C1-C2), \phi(HCC)_{Et}$ А 975(0.0) 976(0.0) 974(0.0) 972(0.1) 90  $B_1$ r(C1-C2), φ(HCC)<sub>Et,Me</sub> r(C1-C2), φ(HCC)<sub>Et,Me</sub> 91 985(31.6) 986(32.5) 980(19.6) 977(15.1)  $B_2$ 92 993(79.4) 994(69.6) 984(54.6) 979(98.1) r(C1-C2), φ(HCC)<sub>Et,Me</sub>  $B_3$ 986(27.4) 986(31.2) 983(57.9) 982(31.4) 93  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$ , r(C1-C2), r(C<sub> $\alpha$ </sub>-C<sub> $\beta$ </sub>), r(C<sub> $\beta$ </sub>-C<sub> $\beta$ </sub>)  $B_3$ 94 1006(0.0) 1006(0.0) 1004(0.0) 1004(0.0)  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}, r(C_{\alpha}-C_{\beta})$ А 1009(0.0) 1012(0.1) 1014(0.1) 1011(0.1)  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et.Me}}, r(C_{\alpha}^{"}-C_{\beta}^{"})$ 95  $B_1$ 1017(24.4) 1019(21.4) 1014(30.0) 1011(35.1)  $\varphi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}, r(C_{\alpha}^{"}-C_{\beta}^{"})$ 96  $B_2$ 97 1025(0.0) 1027(0.0) 1019(0.0) 1014(0.0) bre(m-ring), r(C1C2) А 98 1056(2.0) 1056(2.0) 1056(2.2) 1056(2.4)  $B_2$  $\phi(HCC)_{Me}$ 99  $B_1$ 1056(0.1) 1056(0.1) 1056(0.1) 1056(0.1) φ(HCC)<sub>Me</sub> 1056(6.2) 1056(6.3) 1056(6.3) 1056(6.4) 100 φ(HCC)<sub>Me</sub>  $B_3$ 1056(0.0) 101 1056(0.0) 1056(0.0) 1056(0.0) φ(HCC)<sub>Me</sub> А 102 1079(7.9) 1079(7.8) 1079(8.0) 1078(8.2)  $\phi(HCC)_{Et}$ , r(C1-C2)  $B_2$  $\phi(HCC)_{Et}$ , r(C1-C2)  $B_1$ 1080(1.4) 1080(1.4) 1080(1.5) 1080(1.5) 103 1081(50.4) 1081(50.0) 1080(52.1) 1080(54.9) 104  $B_3$ φ(HCC)<sub>Et</sub>, r(C1-C2) 105 1081(0.0) 1081(0.0) 1081(0.0) 1080(0.0)  $\phi(HCC)_{Et}$ , r(C1-C2) А 106 1121(0.0) 1122(0.0) 1119(0.0) 1117(0.0) φ(HCC)<sub>Et.Me</sub> A 1125(11.0) 1125(10.1) 1122(11.9) 1120(14.4) 107  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}, r(C_{\beta}^{"}-C1)$  $B_2$ 1133(8.3) 1134(8.0) 1132(8.7) 1130(10.0) 108  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}, r(C'_{\beta}-C_{\text{Me}})$ B<sub>3</sub> 1142(0.6) 1142(0.6) 1144(0.6) 1144(0.6)  $\varphi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$ , r(C'\_{\beta}-C\_{Me}), r(C'\_{\beta}-C1) 109  $B_1$ 1158(0.5) 1156(0.5) 1156(0.6) 1159(0.7) 110  $r(N-C_{\alpha}), IPB(H_m)$  $B_1$ 1159(0.0) 1159(0.0) 1158(0.0) 1159(0.0)  $\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$ , r(C<sup>"</sup><sub>b</sub>-C1), r(C<sup>'</sup><sub>b</sub>-C<sub>Me</sub>), bre(Py) 111 А 112 B<sub>3</sub> 1156(2.5) 1155(1.9) 1161(0.1) 1164(0.3)  $r(N-C_{\alpha})$ , IPB(H<sub>m</sub>) 113  $B_1$ 1154(0.1) 1153(0.2) 1161(0.0) 1165(0.0)  $r(N-C_{\alpha})$ , IPB(H<sub>m</sub>)

**Таблица S1.** Рассчитанные (B3LYP) значения частот ( $\omega_i$ , см<sup>-1</sup>), интенсивностей (в скобках, км/моль) и приближенное описание колебаний в диапазоне 650-1700 см<sup>-1</sup> комплексов MEP-II (конформер I).

114	$B_2$	1157(0.1)	1155(0.0)	1161(1.1)	1165(5.9)	$r(N-C_{\alpha}), IPB(H_m)$
115	B	1170(45.8)	1169(42.0)	1169(50.1)	1170(59.5)	$(0(\text{HCC})_{\text{Et M2}}, r(C'_{\text{g}}-C_{M2}))$
116	B B	1172(50.4)	1172(45.7)	1172(57.8)	1173(73.8)	$\varphi(HCC) = r(C''C1)$
110	<b>D</b> <sub>3</sub>	11/2(0.0)	1181(0.0)	1185(0.0)	1187(0.0)	$\psi(\Pi CC)_{Et,Me}, \Pi(C_{\beta}-CT)$
11/	A	1102(0.0)	1240(0.6)	1240(0.5)	1137(0.0)	$r(N-C_{\alpha}), r(C_{\beta}-C_{1}), r(C_{\beta}-C_{Me})$
118	B <sub>1</sub>	124/(0.5)	1249(0.0)	1240(0.5)	1234(0.4)	$\frac{\Gamma(C_{\alpha}-C_{\beta}), \operatorname{IPB}(H_{m})}{\Gamma(C_{\alpha}-C_{\beta}), \operatorname{IPB}(H_{m})}$
119	B <sub>2</sub>	1256(19.1)	1256(21.6)	1249(16.0)	1245(7.6)	$r(C_{\alpha}-C_{\beta})$ , $IPB(H_m)$ , $r(N-C_{\alpha})$
120	<b>B</b> <sub>3</sub>	1266(48.4)	1267(52.7)	1258(40.3)	1252(24.4)	$r(C_{\alpha}-C_{\beta}), IPB(H_m), r(N-C_{\alpha})$
121	A	1292(0.0)	1292(0.0)	1291(0.0)	1291(0.0)	$\phi(HCC)_{Et}$
122	B <sub>3</sub>	1294(10.6)	1294(11.2)	1293(8.8)	1293(7.8)	φ(HCC) <sub>Et</sub>
123	$B_1$	1299(0.0)	1300(0.0)	1298(0.0)	1298(0.0)	$\varphi(\text{HCC})_{\text{Et}}, r(C_{\beta}-C_{\text{Me}})$
124	$B_2$	1305(28.1)	1305(29.4)	1303(22.6)	1303(17.4)	φ(HCC) <sub>Et</sub>
125	B <sub>2</sub>	1344(0.4)	1344(0.5)	1342(0.6)	1341(0.9)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}$
126	$B_1$	1343(1.1)	1344(1.1)	1343(2.0)	1343(2.1)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}, \text{IPB}(\text{H}_{\text{m}})$
127	B <sub>3</sub>	1348(23.1)	1349(22.8)	1347(21.7)	1346(19.0)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}$
128	A	1351(0.0)	1351(0.0)	1350(0.0)	1350(0.0)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}$
129	$B_1$	1349(1.6)	1349(1.7)	1351(0.7)	1351(0.6)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}$ , IPB(H <sub>m</sub> ), r(N-C <sub><math>\alpha</math></sub> )
130	B <sub>3</sub>	1388(1.0)	1389(1.0)	1384(0.2)	1381(0.0)	def(Py), $r(C''_{\beta}-C1)$
131	$B_2$	1389(17.3)	1390(16.8)	1385(14.6)	1383(11.5)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}, r(C_{\beta}^{"}-C1)$
132	Α	1399(0.0)	1401(0.0)	1393(0.0)	1390(0.0)	$r(C_{\alpha}-C_{\beta}), r(N-C_{\alpha})$
133	B <sub>1</sub>	1394(1.2)	1395(1.3)	1393(1.1)	1390(0.9)	$def(Pv)$ , $r(C_{B}^{"}-C1)$
134	A	1405(0.0)	1405(0.0)	1403(0.0)	1402(0.0)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et Me}}$ , $r(C_{\alpha}-C_{\beta})$
135	B.	1414(0.7)	1414(0.5)	1413(0.4)	1412(0.2)	$(HCC)_{r}$ (PB(H)) r(N-C)) r(C'-C')
136	B <sub>2</sub>	1414(2.7)	1414(2.1)	1414(2.3)	1413(2.1)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Eb}}$ , $HD(\text{Hm})$ , $(1, C_{\alpha})$ , $1(C_{\alpha} - C_{\beta})$
130	B <sub>1</sub>	1416(14.3)	1416(14.2)	1416(14.6)	1416(14.7)	(HCC) <sub>Et</sub>
138	B <sub>1</sub>	1418(0.0)	1418(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	$\phi(HCC)_{Et}$
130	B.	1417(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et}}, \text{If } D(\text{II}_{\text{m}})$
140	Δ	1418(0.0)	1418(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	(nee) <sub>Et</sub>
140	R.	1476(0.0) 1426(0.3)	1476(0.0) 1426(0.3)	147(0.0) 1426(0.1)	147(0.0) 1423(0.0)	$\frac{\psi(\Pi CC)_{Et,Me}}{IPB(H_{c})}$
142	D] D	1427(7.8)	1427(8.6)	1426(6.3)	1425(0.0)	r(U(C)) = r(C'(C))
142	B <sub>3</sub>	1/27(19.4)	1/27(10.7)	1426(15.7)	1426(12.0)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Me}}, I(C_{\beta}-C_{\text{Me}})$
143	$B_2$	142/(10.4)	1427(19.7)	1420(13.7)	1420(12.9)	$\phi(HCC)_{Me}, r(C_{\beta}-C_{Me})$
144	$B_1$	1430(0.8)	1431(0.9)	1429(0.8)	1428(0.8)	$\varphi(\text{HCC})_{\text{Me}}, r(C_{\beta} - C_{\text{Me}})$
145	Α	1435(0.0)	1435(0.0)	1433(0.0)	1432(0.0)	$\varphi(\text{HCC})_{\text{Me}}, r(C_{\beta} - C_{\text{Me}})$
146	A	1512(0.0)	1520(0.0)	1486(0.0)	1476(0.0)	$r(C_{\alpha}-C_m), r(N-C_{\alpha}), r(C_{\alpha}-C_{\beta}), \phi(HCC)_{Et,Me}-Co,Ni,Cu$
147	B <sub>3</sub>	1510(0.0)	1514(7.1)	1489(0.5)	1478(2.0)	$r(C_{\alpha}-C_{m}), r(C_{\alpha}''-C_{\beta}''), \phi(HCC)_{Et,Me}-Co,Ni,Cu$
148	$B_2$	1519(0.3)	1525(2.5)	1494(3.6)	1481(17.7)	$r(C_{\alpha}-C_m), r(C'_{\alpha}-C'_{\beta}), \phi(HCC)_{Et,Me}-Co,Ni,Cu$
149	$B_1$	1494(9.4)	1494(10.0)	1493(6.7)	1493(4.3)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$
150	<b>B</b> <sub>2</sub>	1493(0.1)	1494(0.0)	1493(2.3)	1493(0.0)	$\varphi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$
151	А	1494(0.0)	1494(0.0)	1493(0.0)	1493(0.0)	φ(HCC) <sub>Me</sub>
152	B <sub>3</sub>	1495(0.9)	1495(1.2)	1494(0.3)	1494(0.9)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$
153	<b>B</b> <sub>1</sub>	1495(21.2)	1495(21.0)	1494(23.9)	1494(26.0)	φ(HCC) <sub>Me</sub>
154	B <sub>3</sub>	1492(3.2)	1493(3.2)	1499(3.4)	1495(5.8)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
155	B <sub>2</sub>	1496(5.7)	1496(5.7)	1495(13.0)	1495(5.5)	φ(HCC) <sub>Et.Me</sub>
156	А	1491(0.0)	1492(0.0)	1499(0.0)	1496(0.0)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
157	<b>B</b> <sub>1</sub>	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	φ(HCC) <sub>Et</sub>
158	$B_2$	1502(35.2)	1502(15.8)	1502(29.4)	1502(26.6)	φ(HCC) <sub>Et</sub> , φ(HCC) <sub>Me</sub> - Co,Ni
159	А	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	φ(HCC) <sub>Et</sub>
160	B <sub>3</sub>	1502(2.6)	1502(2.7)	1502(3.0)	1502(3.3)	φ(HCC) <sub>Et</sub>
161	$B_1$	1505(1.1)	1506(1.0)	1505(1.4)	1505(1.7)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
162	B <sub>3</sub>	1505(8.4)	1506(9.4)	1506(9.5)	1506(9.9)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
163	$B_2$	1501(0.5)	1503(18.4)	1509(0.0)	1507(1.2)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
164	Α	1503(0.0)	1505(0.0)	1509(0.0)	1507(0.0)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
165	A	1518(0.0)	1515(0.0)	1516(0.0)	1512(0.0)	$\varphi(HCC)_{Et,Me}, r(C_{\alpha}-C_m)$
166	$B_2$	1515(1.7)	1517(1.4)	1517(0.1)	1517(0.3)	$\varphi(HCC)_{Et}$ , $r(C_{\alpha}-C_m)$ -Ni,Co
167	$B_1$	1517(10.2)	1518(10.2)	1517(10.3)	1517(10.1)	φ(HCC) <sub>Et,Me</sub>
168	B <sub>3</sub>	1520(33.2)	1524(25.0)	1518(35.1)	1517(32.2)	$\phi(\text{HCC})_{\text{Et,Me}}$ , r(C <sub><math>\alpha</math></sub> -C <sub>m</sub> )-Ni,Co
169	А	1543(0.0)	1553(0.0)	1533(0.0)	1521(0.0)	$r(C_{\alpha}-C_m), \phi(HCC)_{Et,Me}-Zn$
170	B <sub>3</sub>	1597(11.5)	1604(13.0)	1581(6.9)	1564(2.1)	$r(C_{\alpha}-C_m)$ , IPB(H <sub>m</sub> )
171	B <sub>2</sub>	1597(3.6)	1604(4.3)	1581(1.4)	1565(0.0)	$r(\overline{C_{\alpha}-C_{m}}), IPB(H_{m})$
172	<b>B</b> <sub>1</sub>	1627(0.0)	1637(0.0)	1609(0.0)	1590(0.0)	$r(C_{\alpha}-C_m)$ , IPB(H <sub>m</sub> )
173	B	1611(0.1)	1617(0.1)	1605(0.0)	1594(0.1)	$r(C'_{B} - C''_{B}), r(C_{\alpha} - C_{m})$
	•	1640(0.0)	1644(0.0)	1631(0.0)	1622(0.0)	$r(C'_{0}, C''_{0})$
174	A					

175	B <sub>3</sub>	1647(0.5)	1653(0.2)	1636(1.2)	1624(1.7)	$r(C'_{\beta} - C''_{\beta}), r(C'_{\beta} - C_{Me})$
176	B <sub>2</sub>	1647(0.1)	1653(0.0)	1636(0.4)	1624(0.6)	$r(C'_{\beta}-C''_{\beta})$
177	<b>B</b> <sub>1</sub>	1687(0.0)	1698(0.0)	1672(0.0)	1653(0.0)	$r(C_{\alpha}-C_m), r(C'_{\beta}-C''_{\beta}), IPB(H_m)$

<sup>\*)</sup> приближенное описание колебательной моды составлено по данным расчета РПЭ. Первой указана координата с наибольшим вкладом в РПЭ; координаты с вкладом, не превышающим ~10%, не указаны. Обозначения координат: г,  $\varphi$  – изменения указанных в скобках длин связей или валентных углов, соответственно; def(Py) – деформация пиррольного цикла с сохранением его плоскостности; twist – скручивание цикла, указанного в скобках; IPB – движение атома или фрагмента, указанного в скобках, в плоскости макроцикла; OPB – выход атома или связи, указанных в скобках, из плоскости макроцикла; chair(m-ring) – складывание шестичленного цикла [MNC<sub> $\alpha$ </sub>C<sub> $m</sub>C<sub><math>\alpha$ </sub>N] (далее обозначается как m-ring) по линиям N···N и C<sub> $\alpha</sub>···C<sub><math>\alpha$ </sub> в виде кресла; bre(Py), bre(m-ring) – плоская деформация, напоминающая «дыхание» пиррольного цикла или цикла m-ring.</sub></sub>

<b>Таблица S2</b> . Рассчитанные (B3LYP) значения частот ( $\omega_i$ , см <sup>-1</sup> ), интенсивностей (в скобках,
км/моль) и приближенное описание колебаний в диапазоне 3000-3300 см <sup>-1</sup> комплексов
МЕР-II (конформер I).

.

i	Сим.	CoEP-II	NiEP-II	CuEP-II	ZnEP-II	Описание
178	B <sub>3</sub>	3024(0.9)	3024(1.0)	3024(1.1)	3023(1.1)	r(C-H) <sub>Me</sub>
179	$B_1$	3024(0.4)	3024(0.4)	3024(0.4)	3023(0.5)	r(C-H) <sub>Me</sub>
180	$B_2$	3024(159.1)	3025(156.1)	3024(155.6)	3024(156.2)	r(C-H) <sub>Me</sub>
181	Α	3024(0.0)	3025(0.0)	3024(0.0)	3024(0.0)	r(C-H) <sub>Me</sub>
182	$B_2$	3030(13.9)	3030(13.7)	3030(15.1)	3030(15.5)	r(C-H) <sub>Et</sub>
183	$B_1$	3030(66.5)	3030(66.6)	3030(65.7)	3030(65.4)	r(C-H) <sub>Et</sub>
184	B <sub>3</sub>	3030(123.3)	3030(122.1)	3030(123.5)	3030(124.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
185	Α	3030(0.0)	3030(0.0)	3030(0.0)	3030(0.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
186	B <sub>3</sub>	3035(68.1)	3035(67.1)	3035(68.2)	3034(69.4)	r(C-H) <sub>Et</sub>
187	$B_2$	3035(13.1)	3036(13.5)	3035(14.0)	3034(13.8)	r(C-H) <sub>Et</sub>
188	B <sub>1</sub>	3035(60.5)	3036(59.4)	3035(61.1)	3034(62.4)	r(C-H) <sub>Et</sub>
189	А	3035(0.0)	3036(0.0)	3035(0.0)	3034(0.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
190	B <sub>1</sub>	3061(0.5)	3061(0.4)	3061(0.4)	3060(0.4)	r(C-H) <sub>Et</sub>
191	B <sub>2</sub>	3061(44.4)	3061(43.5)	3061(43.9)	3060(45.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
192	B <sub>3</sub>	3061(2.6)	3062(2.4)	3061(2.5)	3060(2.7)	r(C-H) <sub>Et</sub>
193	А	3061(0.0)	3062(0.0)	3061(0.0)	3060(0.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
194	B <sub>2</sub>	3067(0.8)	3067(0.8)	3067(1.1)	3066(1.4)	r(C-H) <sub>Me</sub>
195	А	3067(0.0)	3067(0.0)	3067(0.0)	3066(0.0)	r(C-H) <sub>Me</sub>
196	B <sub>3</sub>	3067(0.1)	3068(0.0)	3067(0.1)	3067(0.1)	r(C-H) <sub>Me</sub>
197	$B_1$	3067(58.2)	3068(57.0)	3067(57.5)	3067(58.1)	r(C-H) <sub>Me</sub>
198	B <sub>2</sub>	3094(4.7)	3095(4.7)	3095(4.6)	3094(4.8)	r(C-H) <sub>Et</sub>
199	$B_1$	3094(18.2)	3095(17.5)	3095(18.3)	3094(18.6)	r(C-H) <sub>Et</sub>
200	B <sub>3</sub>	3095(193.4)	3095(192.0)	3095(192.8)	3094(194.1)	r(C-H) <sub>Et</sub>
201	А	3095(0.0)	3095(0.0)	3095(0.0)	3095(0.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
202	$B_1$	3103(0.3)	3103(0.4)	3103(0.2)	3103(0.2)	r(C-H) <sub>Et</sub>
203	B <sub>2</sub>	3103(113.3)	3103(113.1)	3103(111.0)	3103(109.7)	r(C-H) <sub>Et</sub>
204	B <sub>3</sub>	3103(0.6)	3104(0.8)	3103(0.4)	3103(0.2)	r(C-H) <sub>Et</sub>
205	А	3103(0.0)	3104(0.0)	3103(0.0)	3103(0.0)	r(C-H) <sub>Et</sub>
206	$B_1$	3109(0.0)	3109(0.0)	3109(0.0)	3108(0.0)	r(C-H) <sub>Me</sub>
207	B <sub>3</sub>	3109(95.3)	3109(93.6)	3109(95.5)	3108(97.4)	r(C-H) <sub>Me</sub>
208	B <sub>2</sub>	3109(42.9)	3110(41.3)	3109(45.0)	3108(48.1)	r(C-H) <sub>Me</sub>
209	Ā	3109(0.0)	3110(0.0)	3109(0.0)	3108(0.0)	r(C-H) <sub>Me</sub>
210	$B_2$	3203(8.8)	3208(7.8)	3198(9.5)	3190(10.8)	$r(C_m-H_m)$
211	Ā	3203(0.0)	3208(0.0)	3198(0.0)	3190(0.0)	$r(C_m-H_m)$
212	B <sub>3</sub>	3209(13.4)	3214(12.1)	3204(14.2)	3195(15.7)	$r(C_m-H_m)$
213	A	3209(0.0)	3214(0.0)	3204(0.0)	3195(0.0)	$r(C_m-H_m)$

**Таблица S3.** Рассчитанные (B3LYP) величины частот ( $\omega_i$ , см<sup>-1</sup>), интенсивностей в ИКспектрах (в скобках, км/моль) и приближенное описание колебаний в диапазоне 0-650 см<sup>-1</sup> комплексов МЕР-II (конформер I).

i	Сим.	CoEP-II	NiEP-II	CuEP-II	ZnEP-II	Приближенное описание <sup>*)</sup>
1	Α	19(0.0)	16(0.0)	21(0.0)	24(0.0)	sad

3         8, b         49(1.8)         50(2.0)         44(0.9)         butterffy(r)           4         B.A         4900.0         48(0.0)         rot(Fa)           5         A         500.0.         51(0.0.         50(0.0)         48(0.0)         rot(Fa)           7         B.J.         51(0.0.         51(0.0.         50(0.0)         70(0.0)         rot(Fa)           9         B.         74(0.0)         73(0.0)         76(0.0)         77(0.0)         OPB(C'pC_a), rot(P), MN)           10         A         740.00         73(0.0)         73(0.0)         rot(B)         rot(B)           11         B.         89(0.0)         90(0.0)         83(0.0)         rot(B)         rot(B)           12         A         108(0.0)         109(0.0)         105(0.0)         100(0.0)         rot(Me)           13         B.         109(0.0)         112(0.0)         126(0.0)         rot(Me)           14         B.         111(0.0)         114(0.0)         126(0.0)         136(0.0)         rot(Me)           14         B.         114(0.0)         132(0.0)         126(0.0)         rot(Me)           15         B.         114(0.0) <th132(0.0)< th="">         126(0.</th132(0.0)<>	2	$B_1$	22(0.0)	10(0.0)	30(0.1)	34(0.7)	butterfly( $y$ )
4         B,         490.00         480.00         rot(D)           6         B,         510.00         510.00         490.00         rot(D)           7         B,         511.00         510.00         510.00         500.00         rot(D)           8         B,         611.1         611.40         590.00         770.00         rot(D), rot(D), rot(D)           9         B,         740.00         730.00         770.00         rot(D), rot(D)         PBC           11         B,         890.00         900.00         850.00         rot(D)         rot(D)           12         A         1080.01         1090.00         1100.00         870.00         rot(D)           13         B,         1080.01         1100.01         1040.00         rot(D)         rot(D)           14         B,         1110.01         1130.01         1060.01         1260.01         rot(D)         rot(D)           15         B,         1100.01         1340.01         1260.01         rot(D)         rot(D)         rot(D)           16         B,         1330.01         1360.01         1560.01         rot(D)         rot(D)         rot(D)         rot(D)         rot(D)	3	B <sub>1</sub>	49(1.8)	50(2.0)	46(1.9)	44(0.9)	butterfly(x)
5         A         500.01         510.00         510.00         500.00         900.00         rot(Fa)           7         Ba         510.00         510.00         500.00         rot(Fa)         rot(Fa)           9         Ba         740.00         750.00         750.00         770.00         OPBC/ <sub>2</sub> /C <sub>30</sub> /rot(Py, MN)           10         A         750.00         750.00         770.00         OPBC/2/C <sub>30</sub> /rot(Py, MN)           11         Ba         600.01         900.00         850.00         770.00         OPBC/2/C <sub>30</sub> /rot(Py, MN)           11         Ba         750.00         750.00         750.00         rot(Me)         rot(Me)           12         A         1080.01         1090.00         1090.00         rot(Me)         rot(Me)           13         Ba         1090.01         1140.00         1260.01         1020.21         rot(Me)           14         Ba         1110.01         1130.01         1260.01         1260.01         rot(Me)           15         Ba         1160.01         1360.01         1260.01         rot(Me)         rot(Me)           18         A         1440.00         1390.01         1530.40         rot(Me)         rot(Me)     <	4	B <sub>3</sub>	49(0.0)	48(0.0)	49(0.0)	48(0.0)	rot(Et)
6 $P_{1}$ 51000         51000         51000         50000         rot(Fa)           7 $P_{15}$ 51000         51000         58000         rot(Ea)         rot(m-ring, x)           8 $P_{10}$ 61(1.1)         61(1.4)         590.0         780.0         rot(m-ring, x), OPB(E)           10         A         750.0         750.0         760.0         rot(m-ring, x), OPB(E)           11         B         870.0         730.0         rot(m-ring, x), OPB(E)         rot(Me)           12         A         1080.0         1090.0         1000.0         rot(Me)         rot(Me)           13         R.         1090.0         1110.0         1040.0         1000.0         rot(Me)           14         B,         1110.0         1120.0         1220.0         rot(Me)         rot(Me)           15         B,         1110.0         1120.0         1220.0         1230.0         rot(Me)           16         B,         1360.0         1360.0         1360.0         scd.0PB(M, Sdd         rot(Me)           17         B,         1610.0         1632.0         1550.0         rot(Me)         scd.0PB(M, Sdd         rot(Me)	5	A	50(0.0)	51(0.0)	49(0.0)	48(0.0)	rot(Et)
7       B <sub>b</sub> 51000       51000       58060       rot(D), butcherHyc)         9       B <sub>b</sub> 6101.1       6101.4       590.00       780.00       rot(D), butcherHyc)         9       B <sub>b</sub> 740.00       750.00       750.00       770.00       rot(D), butcherHyc)         10       A       750.00       750.00       750.00       770.00       rot(D)       OPB(C <sub>2,k</sub> ), rot(Py, MN)         11       B <sub>b</sub> 890.00       990.00       820.00       rot(Me)       rot(Me)         12       A       1080.00       1090.00       1000.00       rot(Me)         13       B <sub>b</sub> 1090.01       1100.01       1020.02       rot(Me)         14       B <sub>b</sub> 1110.01       1130.00       1280.01       1280.01       020.01       rot(Me)         18       A       1440.00       1390.01       1360.00       sato       rot(Me)       sato         18       A       1440.00       1430.00       1390.01       1530.00       rest(MN) OPB(Me)       rot(Me)         19       B       1090.01       1530.00       1530.01       rest(Me)       rot(Me)       rot(Me)         21       B       1681.01       16	6	$B_2$	51(0.0)	51(0.0)	50(0.0)	49(0.0)	rot(Et)
8         9         -	7	B <sub>3</sub>	51(0.0)	51(0.0)	51(0.0)	50(0.0)	rot(Et), rock(m-ring, x)
9         B <sub>2</sub> 740.00         750.00         770.00         OPB( $c_{1}^{-}C_{30}^{-}$ , rot( $P_{1}^{-}N_{10}^{-}$ ), rot( $P_{1}^{-}N_{10}^{-}$ )           11         B <sub>1</sub> 880.00         900.00         850.00         820.00         rot( $m$ -ring, $\gamma$ ), OPB(E)           12         A         1080.00         1090.00         1020.00         990.00         rot( $Me$ )           12         A         1080.00         1100.00         1090.00         rot( $Me$ )           13         B, 1690.00         1110.00         1090.00         1280.00         rot( $Me$ )           14         B, 1330.00         1360.00         1280.00         1280.00         rot( $Me$ )         rot( $Me$ )           18         A         1440.00         1320.00         1360.00         1530.00         sci(NNN)           18         A         1440.00         1390.00         1570.00         1570.00         rot( $Me$ , $D_1$ , $MeN$ )           20         A         1610.00         1570.00         1570.00         rot( $Me$ , $D_1$ , $MeN$ )           21         B, 1681.01         1890.02         1810.00         1810.00         rot( $Me$ , $D_1$ , $MeN$ )           22         B, 2013.2         204.01         1570.00         2180.00         2100.00	8	$B_1$	61(1.1)	61(1.4)	59(0.9)	58(0.6)	rot(Et), butterfly(x)
10         A         750.01         750.00         750.00         850.00         980.00         980.00         980.00         980.00         980.00         980.00         980.00         980.00         980.00         760.00	9	$B_2$	74(0.0)	73(0.0)	76(0.0)	77(0.0)	$OPB(C'_{B}-C_{Me})$ , rot(Py, MN)
11       Bs.       890.00       990.00       850.00       850.00       990.00       rot(Me)         13       B.       1090.00       1110.01       1104.00       1004.00       990.00       rot(Me)         14       B.       1110.01       1130.01       1060.01       1010.02       rot(Me)         15       B.       1110.01       1130.01       1050.06       1010.02       rot(Me)         16       B.       1330.00       1340.00       128(0.00       1360.00       1360.00       1360.00         18       A       1440.00       1430.01       1390.00       1537.00       1580.00       sci(NNN, C_C, C_A, N, av N)         18       A       1440.00       1457.00       1537.00       1580.00       sci(NNN, D         21       B.       651.02       1651.10       1651.10       1671.10       PBM.E, E, rot(ME, E, I, rM-N)         22       B.       168(1.0)       1877.83       1877.55       ruf, OPB(A, E, I, rM-N)         23       B.       2070.21       2060.21       2040.00       2040.00       rot(Me in E1)         24       B.       188(1.0)       1810.00       1810.00       rot(Me in E1)         25       B.	10	А	75(0.0)	75(0.0)	76(0.0)	77(0.0)	rot(m-ring, x, y), OPB(Et)
12         A         1080,00         1090,00         1000,00         1000,00         rot(Me)           14         B,         1110,05         1120,05         1050,00         1010,08         rot(Me)           15         B,         1110,01         11340,00         1280,00         1230,00         rot(Me)           16         B,         1330,00         1340,00         1280,00         1230,00         rot(Me)           17         B,         1360,00         1360,00         1360,00         sad, OPB(Me,E)           18         A         1440,00         1430,00         1320,00         sad,00         sad,07,00,00           19         B,         1900,00         1870,00         1700,04         1533,34         rt(NN),0PB(M-Cu, Zn           20         A         1610,00         1632(0,00         153(0,00         sad(NN)         0           21         B,         1651,10         1631,1         1631,1         1631,1         1631,1         1631,1           22         B,         1810,10         1880,02         1811,00,0         1811,00,0         1811,00,0         1811,00,0           23         B,         2210,20         2040,0         2140,00         rot(Me in E),	11	$B_2$	89(0.0)	90(0.0)	85(0.0)	82(0.0)	rot(m-ring, y), OPB(Et)
13       B <sub>3</sub> 199(0.0)       114(0.0)       100(0.0)       rot(Me)         14       B <sub>4</sub> 111(0.5)       112(0.5)       105(0.6)       101(0.8)       rot(Me)         15       B <sub>5</sub> 111(0.5)       112(0.5)       105(0.6)       101(0.8)       rot(Me)         16       B <sub>5</sub> 136(0.0)       134(0.0)       128(0.1)       123(0.1)       126(1.9)       OPB(M) fold (MNC <sub>c</sub> 'C <sub>a</sub> C', N, av N)         18       A       144(0.0)       143(0.0)       136(0.0)       136(0.0)       sad(0.0)       Sad(0.0) <t< td=""><td>12</td><td>A</td><td>108(0.0)</td><td>109(0.0)</td><td>103(0.0)</td><td>99(0.0)</td><td>rot(Me)</td></t<>	12	A	108(0.0)	109(0.0)	103(0.0)	99(0.0)	rot(Me)
14         B.         111(0.5)         112(0.5)         105(0.6)         101(0.8)         rot(Me)           15         B.         1130(0.0)         134(0.0)         128(0.0)         123(0.0)         rot(Me)           16         B.         133(0.0)         134(0.0)         132(0.1)         122(0.1)         OPB(M, E)           17         B.         134(0.0)         132(0.0)         132(0.0)         rot(Me)           18         A         144(0.0)         143(0.0)         132(0.0)         rot(Me)           19         B.         169(0.0)         157(0.0)         155(0.0)         sci(NMN)           21         B.         165(1.2)         165(1.1)         163(1.2)         161(1.1)         PB(Me, E), rot(Me, E), rot(M, E), rot(M-S)           23         B.         201(3.3)         204(1.6)         153(1.4)         163(1.0)         116(0.0)         rot(Me, E), rot(M-E)           24         B.         181(0.1)         180(0.2)         181(0.0)         rot(Me, E), rot(M-E)         rot(M-ring, rot(M-R))           25         B.         221(0.2)         214(0.0)         214(0.0)         rot(M-R)         rot(M-R)           26         B.         212(0.2)         214(0.0)         214(0.0) <t< td=""><td>13</td><td>B<sub>3</sub></td><td>109(0.0)</td><td>111(0.0)</td><td>104(0.0)</td><td>100(0.0)</td><td>rot(Me)</td></t<>	13	B <sub>3</sub>	109(0.0)	111(0.0)	104(0.0)	100(0.0)	rot(Me)
15       B <sub>2</sub> 111(0.1)       112(0.1)       102(0.2)       rct(Me)         16       B <sub>1</sub> 133(0.0)       133(0.0)       132(0.1)       122(1.9)       OPB(M), fold (MNC'_a C_a, C_a, N, ax NN)         17       B <sub>1</sub> 133(0.0)       133(0.1)       132(0.1)       126(1.9)       OPB(M), fold (MNC'_a C_a, C_a, N, ax NN)         18       A       144(0.0)       143(0.0)       130(0.0)       136(0.0)       sad, OPB(M-E_1)         20       A       161(0.0)       163(1.2)       165(1.1)       165(	14	B <sub>1</sub>	111(0.5)	112(0.5)	105(0.6)	101(0.8)	rot(Me)
16       B <sub>3</sub> 133(0.0)       134(0.0)       123(0.0)       rot(m-ring, x), OPB(Me)         17       B <sub>4</sub> 136(0.0)       135(0.1)       132(2.0.1)       125(1.9)       OPB(M), Iold (MNC, 'C, C, '', a NN)         18       A       144(0.0)       143(0.0)       139(0.0)       136(0.0)       sad, OPB(Me, E),         19       B <sub>1</sub> 190(0.0)       187(0.0)       153(3.4)       r(MN), OPB(MH)-Cu, Zn         20       A       161(0.0)       165(1.2)       165(1.1)       163(1.2)       161(1.1)       IPB(Me, E), rot(Me, E), r(M-N)         21       B <sub>2</sub> 168(1.6)       169(1.6)       163(1.4)       162(1.0)       IPB(Me, E), rot(Me, E), rot(Me, E), r(M-N)         23       B <sub>1</sub> 201(3.3)       204(1.6)       187(4.8)       173(5.5)       rd(OPB(M)         24       B <sub>2</sub> 123(0.2)       204(0.0)       214(0.0)       181(0.0)       rot(Me in E)         25       B <sub>1</sub> 207(0.2)       204(0.0)       214(0.0)       rot(Me in E)       173(1.5)         28       A       215(0.0)       214(0.0)       214(0.0)       rot(Me in E)       173(1.5)         29       B <sub>2</sub> 224(0.0)       223(0.0)       224(0.0)       236(0.1)       rot(Me in	15	B <sub>2</sub>	111(0.1)	113(0.1)	106(0.1)	102(0.2)	rot(Me)
17       B <sub>1</sub> 136(0.0)       136(0.1)       122(1.9)       OPB(M), fold (MNC, C <sub>n</sub> , C <sub>n</sub> , N, ar NN)         18       A       144(0.0)       143(0.0)       136(0.0)       136(0.0)       case         20       A       161(0.0)       162(0.0)       157(0.0)       153(0.0)       case       (MN), OPB(M)-Cu, Zn         20       A       161(0.0)       162(0.0)       157(0.0)       155(0.0)       sci(NNN)         21       B <sub>2</sub> 165(1.2)       165(1.2)       165(1.2)       165(1.2)       167(1.4)       177(2.4)         22       B <sub>2</sub> 105(1.2)       165(1.2)       167(1.4)       177(2.5)       rmf, OPB(M)         23       B <sub>1</sub> 201(3.3)       204(1.6)       187(1.48)       177(5.5)       rmf, OPB(M)         24       B <sub>3</sub> 181(0.1)       180(0.2)       204(0.0)       rot(Me in E.0)       case         25       B <sub>1</sub> 201(0.2)       209(0.0)       205(0.0)       rot(Me in E.0)       case         26       B <sub>2</sub> 212(0.2)       212(0.2)       212(0.0)       214(0.0)       rot(Me in E.0)       case         27       A       222(0.0)       224(0.0)       224(0.0)       rot(Me in E.0)       case	16	B <sub>3</sub>	133(0.0)	134(0.0)	128(0.0)	123(0.0)	rot(m-ring, <i>x</i> ), OPB(Me)
18       A       144(0.0)       1430.0)       129(0.0)       136(0.0)       r(MN), OPB(M)-Cu, Zn         20       A       161(0.0)       162(0.0)       157(0.0)       155(0.0)       sci(NMN)         21       B <sub>2</sub> 168(1.6)       165(1.1)       163(1.2)       161(1.1)       IPB(Me, E), rot(Me, E), r(M-N)         23       B <sub>1</sub> 168(1.6)       165(1.4)       162(1.0)       IPB(Me, E), rot(Me, E), rot(E), rot(E)	17	$B_1$	136(0.0)	136(0.1)	132(0.1)	126(1.9)	OPB(M), fold (MNC' <sub><math>\alpha</math></sub> C <sub>m</sub> C' <sub><math>\alpha</math></sub> N, ax NN)
19         B <sub>1</sub> 190(0.0)         187(0.0)         157(0.0)         155(0.0)           21         B <sub>3</sub> 165(1.2)         165(1.1)         163(1.2)         161(1.1)         IPB(Mc, E), rot(Mc, E), r(M-N)           21         B <sub>3</sub> 165(1.2)         165(1.1)         163(1.2)         161(1.1)         IPB(Mc, E), rot(Mc, E), r(M-N)           22         B <sub>1</sub> 201(3.3)         204(1.6)         187(1.48)         173(5.5)         rut, OPB(M)           24         B <sub>3</sub> 181(0.1)         1800.2)         181(0.0)         twis(m-ring, y)           25         B <sub>1</sub> 207(0.2)         206(0.2)         204(0.0)         204(0.0)         rot(Mc in E)           26         B <sub>2</sub> 212(0.2)         212(0.2)         213(0.0)         214(0.0)         rot(Mc in E), rot(M-ring, y)           27         A         225(0.0)         214(0.0)         214(0.0)         rot(Mc in E), rot(M-ring, y)           28         A         212(0.2)         224(0.0)         244(0.0)         rot(Mc in E), rot(M-ring, y)           31         B <sub>2</sub> 296(0.1)         295(0.1)         276(0.6)         238(0.6)         610(m-ring, ar, N), OPB(M)           33         B <sub>3</sub> 325(0.2)         244(0.0)	18	А	144(0.0)	143(0.0)	139(0.0)	136(0.0)	sad, OPB(Me,Et)
20         A         161(0.0)         162(0.0)         157(0.0)         155(0.0)         sci(NMN)           22         B2         168(1.6)         169(1.1)         163(1.2)         161(1.1)         IPB(Me, ED, rot(Me, ED, r(M-N))           23         B1         201(3.3)         204(1.6)         187(4.8)         173(5.5)         ruf, OrDB(M)           24         B3         181(0.1)         181(0.0)         181(0.0)         181(0.0)         ruf         ruf<	19	B <sub>1</sub>	190(0.0)	187(0.0)	170(0.4)	153(3.4)	r(MN), OPB(M)-Cu, Zn
11         B <sub>3</sub> 165(1.2)         165(1.1)         165(1.4)         162(1.0)         IPB(Me, E), rut(Me, E), rut(	20	Α	161(0.0)	162(0.0)	157(0.0)	155(0.0)	sci(NMN)
22         B2         168(1.6)         169(1.6)         165(1.4)         162(1.0)         IPB(Me, ED, rutMe, ED, rutM-N)           24         B3         181(0.1)         180(0.2)         181(0.0)         181(0.0)         rut, OPB(M)           24         B3         181(0.1)         180(0.2)         204(0.0)         204(0.0)         rut, OPB(M)           25         B1         207(0.2)         206(0.2)         204(0.0)         rut, N         rut, OPB(M)           26         B2         212(0.2)         212(0.2)         204(0.0)         214(0.0)         rut, N         rut, N           27         A         225(0.0)         224(0.0)         214(0.0)         rut, N         rut, N         rut, N           28         A         215(0.0)         214(0.0)         214(0.0)         rut, N         rut, N         rut, N           30         B2         224(0.0)         223(0.3)         215(0.1)         rot, M(Me)         rut, N         PR(Me)           32         B1         291(0.0)         224(0.0)         246(0.0)         rut, N         PR(Me)           33         B2         257(0.0)         254(0.0)         260(0.0)         OPB(C_m), rut, N, PR(Me)           34         A	21	B <sub>3</sub>	165(1.2)	165(1.1)	163(1.2)	161(1.1)	IPB(Me, Et), rot(Me,Et), r(M-N)
23         B <sub>1</sub> 201(3.3)         204(1.6)         187(4.8)         173(5.5)         ruf(OPB(M)           25         B <sub>1</sub> 1810(0.1)         1800(2.1)         1810(0.0)         1wis(m-ring)           26         B <sub>2</sub> 212(0.2)         212(0.2)         206(0.0)         205(0.0)         rot(Me in Et)           26         B <sub>2</sub> 212(0.0)         213(0.0)         214(0.0)         rot(Me in Et)           27         A         225(0.0)         224(0.0)         214(0.0)         rot(Me in Et), rot(Me in Et)           28         A         215(0.0)         214(0.0)         214(0.0)         rot(Me in Et), ro	22	B <sub>2</sub>	168(1.6)	169(1.6)	165(1.4)	162(1.0)	IPB(Me, Et), rot(Me,Et), r(M-N)
24       B <sub>3</sub> 181(0.1)       180(0.2)       181(0.0)       twist(m-ring)         25       B <sub>4</sub> 2070(0.2)       206(0.2)       204(0.0)       205(0.0)       rot(Me in Et)         26       B <sub>2</sub> 212(0.2)       212(0.0)       224(0.0)       213(0.0)       210(0.0)       rot(Me in Et)         27       A       225(0.0)       224(0.0)       214(0.0)       114(0.0)       rot(Me in Et)         28       A       215(0.0)       216(0.0)       215(0.0)       rot(Me in Et), rot(m-ring, x, y)         30       B <sub>2</sub> 224(0.0)       225(0.0)       218(0.0)       215(0.0)       rot(Me in Et), rot(m-ring, y)         31       B <sub>3</sub> 226(0.1)       295(0.1)       267(1.5)       236(4.3)       r(M-N), PB(Me)         32       B <sub>3</sub> 291(0.0)       292(0.2)       246(0.0)       266(0.0)       cs(NNN, Sad         34       A       257(0.0)       254(0.0)       266(0.0)       256(0.0)       OPB(Mc), rot(m-ring, x, N)         35       B <sub>3</sub> 257(0.0)       258(0.1)       278(0.2)       269(0.2)       fold(m-ring, ar, NN), OPB(Mc)         36       B <sub>3</sub> 285(0.0)       282(0.0)       270(1.1)       273(0.0)       rot(Me in Et), rot(m-ring, x)	23	B <sub>1</sub>	201(3.3)	204(1.6)	187(4.8)	173(5.5)	ruf, OPB(M)
25       B <sub>1</sub> 207(0.2)       204(0.0)       rot(Me in Ei)         26       B <sub>2</sub> 212(0.2)       209(0.0)       2205(0.0)       rot(m-ring, x, y)         27       A       225(0.0)       224(0.0)       213(0.0)       210(0.0)       rot(Me in Ei)         28       A       215(0.0)       214(0.0)       214(0.0)       rot(Me in Ei)       rot(Me in Ei)         30       B <sub>2</sub> 222(0.7)       222(0.7)       2210(7.1)       215(0.1)       rot(Me in Ei), rot(m-ring, y)         31       B <sub>2</sub> 224(0.0)       225(0.0)       218(0.0)       215(0.1)       rot(Me in E), rot(m-ring, y)         32       B <sub>1</sub> 291(0.0)       295(0.1)       267(1.5)       236(4.3)       r(M-N), PB(Me)         33       B <sub>3</sub> 325(0.2)       324(0.3)       279(0.9)       244(4.9)       r(M-N)         34       A       257(0.0)       254(0.0)       266(0.0)       026(2.2)       fold(m-ring, ar, N), OPB(Me)         35       B <sub>2</sub> 257(0.0)       254(0.0)       269(0.2)       fold(m-ring, ar, N), OPB(Me), OPB(Me)         36       B <sub>1</sub> 256(0.4)       258(0.1)       278(0.0)       270(0.0)       rot(Me in E1)-rot(Me in E1)-rot(Me in E1)         37	24	B <sub>3</sub>	181(0.1)	180(0.2)	181(0.0)	181(0.0)	twist(m-ring)
26       B <sub>2</sub> 212(0.2)       212(0.2)       209(0.0)       205(0.0)       rot(m-ring, y)         27       A       225(0.0)       224(0.0)       214(0.0)       rot(Me in Et)         28       A       215(0.0)       215(0.0)       214(0.0)       rot(Me in Et)         29       B <sub>1</sub> 222(0.7)       222(0.7)       220(0.3)       215(0.1)       rot(Me in Et), rot(m-ring, y)         31       B <sub>2</sub> 224(0.1)       225(0.0)       225(0.0)       225(0.0)       rot(Me in Et), rot(m-ring, x)         32       B <sub>1</sub> 29(0.0)       225(0.0)       227(0.0)       244(4.9)       r(M-N)         33       B <sub>3</sub> 325(0.2)       224(0.0)       246(0.0)       sci(NMN), sad         35       B <sub>2</sub> 257(0.0)       257(0.0)       248(0.0)       246(0.0)       sci(NMN), sad         36       B <sub>1</sub> 256(0.4)       258(0.1)       278(0.2)       269(0.2)       fold(m-ring, ax N), OPB(Me), OPB(M)         37       A       274(0.0)       270(1.1)       273(0.0)       rot(m-ring, x), OPB(Cm), OPB(Cm), OPB(Me)         38       B <sub>3</sub> 288(0.2)       288(0.3)       286(0.1)       PBCam, OPB(Cm), OPB(Cm), OPB(Cm)         39       B <sub>3</sub> 288(0.2)<	25	B <sub>1</sub>	207(0.2)	206(0.2)	204(0.0)	204(0.0)	rot(Me in Et)
21       A       225(0.0)       224(0.0)       214(0.0)       214(0.0)       rot(m-ring, xy)         28       A       215(0.0)       215(0.0)       214(0.0)       rot(Me in Et)       rot(Me in Et), rot(M-ring, y)         30       B <sub>2</sub> 224(0.0)       225(0.1)       226(0.1)       rot(Me in Et), rot(M-ring, y)         31       B <sub>2</sub> 224(0.0)       225(0.1)       226(1.5)       236(4.3)       rf(M-N), PB(Me)         32       B <sub>1</sub> 291(0.0)       292(0.2)       246(0.6)       238(0.6)       fold(m-ring, ax NN), OPB(M)         33       B <sub>3</sub> 252(0.2)       324(0.0)       266(0.0)       sci(NMN), sad         34       A       257(0.0)       254(0.0)       266(0.0)       csi(NMN), sad         35       B <sub>2</sub> 257(0.0)       254(0.0)       266(0.0)       rot(m-ring, x), OPB(Me)         36       B <sub>1</sub> 256(0.4)       258(0.1)       278(0.0)       270(0.0)       rot(m-ring, x), OPB(Me)         37       A       274(0.0)       274(0.1)       273(0.0)       rot(m-ring, x), OPB(Me)       OPB(m)         38       B <sub>3</sub> 283(0.0)       282(0.0)       286(0.1)       PB(Me, Et), rot(m-ring, x), OPB(Me)       OPB(Me)         39 <t< td=""><td>26</td><td>B<sub>2</sub></td><td>212(0.2)</td><td>212(0.2)</td><td>209(0.0)</td><td>205(0.0)</td><td>rot(m-ring, y)</td></t<>	26	B <sub>2</sub>	212(0.2)	212(0.2)	209(0.0)	205(0.0)	rot(m-ring, y)
28         A         215(0.0)         214(0.0)         214(0.0)         rot(Me in E)           30         B2         2220(7)         220(7)         220(7)         220(7)         rot(Me in E)         rot(Me in E)           31         B2         224(0.0)         225(0.0)         218(0.0)         215(0.0)         rot(Me in E)         rot(Me in E)           32         B1         291(0.0)         2246(0.6)         238(0.6)         fold(m-ring, ax NN), OPB(Me)           33         B3         225(0.2)         224(0.3)         274(0.9)         244(4.9)         r(M-N)           34         A         257(0.0)         254(0.0)         260(0.0)         265(0.0)         OPB(C_n), rot(m-ring, ax NN), OPB(Me)           35         B2         257(0.0)         254(0.0)         260(0.0)         269(0.2)         fold(m-ring, ax NN), OPB(Me)           36         B         256(0.4)         258(0.1)         278(0.2)         269(0.2)         fold(m-ring, ax, NP), OPB(Me)           37         A         274(0.0)         270(0.0)         270(0.0)         rot(Me in E1), rot(Me in E1)           38         B3         288(0.2)         286(0.0)         286(0.1)         IPB(Me,E1), rot(Me in E1), PB(Me,E1)           40         B2 <t< td=""><td>27</td><td>A</td><td>225(0.0)</td><td>224(0.0)</td><td>213(0.0)</td><td>210(0.0)</td><td>rot(m-ring, x, y)</td></t<>	27	A	225(0.0)	224(0.0)	213(0.0)	210(0.0)	rot(m-ring, x, y)
29         B <sub>1</sub> 224(0.0)         225(0.0)         215(0.0)         rot(Me in Ef), rot(m-ring, y)           31         B <sub>2</sub> 226(0.1)         225(0.1)         226(1.5)         236(4.3)         r(M-N), PB(Me)           32         B,         291(0.0)         292(0.2)         246(0.6)         238(0.6)         fold(m-ring, ax NN), OPB(M)           34         A         257(0.0)         257(0.0)         248(0.0)         244(4.9)         r(M-N)           34         A         257(0.0)         257(0.0)         248(0.0)         244(0.9)         r(M-N)           36         B <sub>2</sub> 257(0.0)         254(0.0)         269(0.2)         fold(m-ring, ax NN), OPB(Me)           36         B <sub>2</sub> 256(0.4)         258(0.1)         278(0.2)         269(0.2)         fold(m-ring, ax, NN), OPB(Me)           37         A         274(0.0)         274(0.0)         270(0.0)         270(0.0)         rot(Me in EI), rot(m-ring, x)           38         B <sub>3</sub> 288(0.2)         288(0.3)         286(0.1)         IPB(Me,ED), rot(Me in EI)           40         B <sub>2</sub> 325(0.0)         326(0.0)         303(0.2)         299(0.3)         fold(MNC <sup>a</sup> <sub>a</sub> , C <sup>a</sup> <sub>a</sub> , N, ax, NN)-NiCo           41         B <sub>3</sub> 345(0.	28	A	215(0.0)	215(0.0)	214(0.0)	214(0.0)	$\frac{1}{100} \frac{1}{100} \frac{1}$
30         B <sub>2</sub> 224(0.0)         223(0.0)         213(0.0)         213(0.0)         213(0.0)         200(Me in ED, 100(Me in 100(ME in 100(ME in	29	B <sub>3</sub>	222(0.7)	222(0.7)	220(0.3)	215(0.1)	rot(Me in Et), r(M-N)
1       B2       290(0.1)       292(0.1)       294(0.5)       238(0.5)       1(M+N), H2(M+N)         33       B3       325(0.2)       324(0.3)       279(0.9)       244(4.9)       r(M+N)         34       A       257(0.0)       254(0.0)       246(0.6)       sci(NM), sad         35       B2       257(0.0)       254(0.0)       266(0.0)       OPB(C_m), rot(m-ring, x), OPB(Me)         36       B1       256(0.4)       258(0.1)       278(0.2)       269(0.2)       fold(m-ring, ax NN), OPB(Me)         37       A       274(0.0)       270(1.1)       273(0.0)       rot(Me in El), rot(m-ring, x, y)         38       B3       288(0.2)       288(0.0)       286(0.0)       286(0.1)       rot(Me in El), cot(Me in El)         40       B2       325(0.0)       326(0.0)       303(0.2)       299(0.3)       rot(Me in El), cot(Me in El), PR(El),         41       B1       317(0.1)       318(0.1)       313(0.0)       rot(Me in El), Rey(El, Me)         42       B1       345(0.6)       359(0.3)       329(0.2)       fold(MNC_a^m C_m^m, ax NN), OPB(Me, El)         44       A       344(0.0)       343(0.0)       338(0.0)       rot(Py, C_aC_a)         45       B3       346(0.5)	21	D2 D	224(0.0) 206(0.1)	223(0.0) 205(0.1)	218(0.0) 267(1.5)	213(0.0) 226(4.2)	$\frac{100(\text{Me III Et}), 100(\text{III-IIIIg}, y)}{r(M, N), IDP(M_0)}$
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	31	D2 B	290(0.1) 291(0.0)	293(0.1) 292(0.2)	207(1.3) 246(0.6)	230(4.5) 238(0.6)	fold(m ring or NN) OPB(M)
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	32	B.	325(0.2)	324(0.3)	279(0.9)	238(0.0) 244(4.9)	r(M-N)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	34	Δ	257(0.2)	257(0.0)	279(0.9) 248(0.0)	244(4.9) 246(0.0)	sci(NMN) sad
$B_2$ $B_2$ $E_2(0.6)$	35	Ba	257(0.0)	257(0.0)	240(0.0) 260(0.0)	240(0.0) 265(0.0)	$OPB(C_{w})$ rot(m-ring v) $OPB(Me)$
37         A         27(0.0)         27(0.0)         27(0.0)         27(0.0)         rot(Me in El), rot(Pl), rot(Re), rot(Pl), rot(Re), rot(Pl), rot(Re), rot(Pl), rot(Re), rot(Pl), ro	36	$B_1$	257(0.0) 256(0.4)	258(0.1)	278(0.2)	269(0.0)	fold(m-ring ax NN) OPB(Me) OPB(M)
38         B3         283(0.0)         282(0.0)         270(1.1)         273(0.0)         rot(m-ring, x), OPB(C_m), OPB(Me)           39         B3         288(0.2)         288(0.3)         286(0.0)         286(0.1)         PB(Me,Et), rot(Me in Et)           40         B2         325(0.0)         326(0.0)         303(0.2)         299(0.3)         rot(Me in Et)-Cu, Zn, OPB(Me), IPB(Et), fold(MNC <sub>a</sub> <sup>n</sup> Cm <sub>a</sub> <sup>n</sup> , ax NN)-Ni,Co           41         B1         317(0.1)         318(0.1)         315(0.1)         313(0.0)         rot(Me in Et), IPB(Et, Me)           42         B1         345(10.6)         350(8.2)         329(7.1)         327(6.0)         bath           43         B2         339(0.6)         337(0.6)         329(0.3)         329(0.2)         fold(MNC <sub>a</sub> <sup>n</sup> Cm <sub>a</sub> <sup>n</sup> , ax NN), OPB(Me, Et)           44         A         344(0.0)         343(0.0)         338(0.0)         339(0.0)         rot(Py, C <sub>a</sub> C <sub>a</sub> )           45         B3         346(0.5)         345(0.6)         345(0.3)         348(0.1)         r(M-N), IPB (ske)           44         A         345(0.0)         362(0.0)         366(0.0)         twist(m-ring, y), tot(m-ring, x)           47         B2         393(0.0)         391(0.1)         390(0.0)         twist(m-ring, y), rot(m-ring	37	A	274(0.0)	274(0.0)	270(0.0)	270(0.0)	rot(Me in Et), rot(m-ring, $x, y$ )
39 $B_3$ 288(0.2)       288(0.3)       286(0.0)       286(0.1)       IPB(Me,Et), rot(Me in Et)         40 $B_2$ 325(0.0)       326(0.0)       303(0.2)       299(0.3)       rot(Me in Et)-Cu, Zn, OPB(Me), IPB(Et), fold(MNC_a^r C_m C_a^r N, ax NN)-Ni, Co         41 $B_1$ 317(0.1)       318(0.1)       315(0.1)       313(0.0)       rot(Me in Et), IPB(Et, Me)         42 $B_1$ 345(10.6)       350(8.2)       329(7.1)       327(6.0)       bath         43 $B_2$ 339(0.6)       337(0.6)       329(0.3)       329(0.2)       fold(MNC_a^r C_m C_a^r N, ax NN), OPB(Me, Et)         44       A       344(0.0)       343(0.0)       338(0.0)       339(0.0)       rot(Py, $C_a C_a)$ 45 $B_3$ 346(0.5)       345(0.6)       345(0.3)       348(0.1)       r(M-N), IPB (ske)         46       A       365(0.0)       362(0.0)       366(0.0)       twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)         47 $B_2$ 393(0.0)       391(0.1)       390(0.0)       393(0.0)       twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)         48 $B_3$ 407(0.7)       406(0.6)       402(1.0)       401(1.3)       twist(m-ring, x), chair(y), $\phi(C_B^rCL2)$ 50       A	38	B <sub>3</sub>	283(0.0)	282(0.0)	270(1.1)	273(0.0)	$rot(m-ring, x), OPB(C_m), OPB(Me)$
40 $B_2$ $325(0.0)$ $326(0.0)$ $303(0.2)$ $299(0.3)$ rot(Me in Et)-Cu, Zn, OPB(Me), IPB(Et), fold(MNC <sup>a</sup> <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sup>a</sup> <sub>a</sub> N, ax NN)-Ni, Co41 $B_1$ $317(0.1)$ $318(0.1)$ $315(0.1)$ $313(0.0)$ rot(Me in Et), IPB(Et, Me)42 $B_1$ $345(10.6)$ $350(8.2)$ $329(7.1)$ $327(6.0)$ bath43 $B_2$ $339(0.6)$ $337(0.6)$ $329(0.3)$ $329(0.2)$ fold(MNC <sup>a</sup> <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sup>a</sup> <sub>a</sub> N, ax NN), OPB(Me, Et)44A $344(0.0)$ $433(0.0)$ $338(0.0)$ $339(0.0)$ rot(Py, C <sub>a</sub> C <sub>a</sub> )45 $B_3$ $346(0.5)$ $345(0.6)$ $345(0.3)$ $348(0.1)$ r(M-N), IPB (ske)46A $365(0.0)$ $362(0.0)$ $366(0.0)$ twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47 $B_2$ $393(0.0)$ $391(0.1)$ $390(0.0)$ $393(0.0)$ twist(m-ring, y), bath(x)48 $B_3$ $407(0.7)$ $406(0.6)$ $402(1.0)$ $401(1.3)$ twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C^{e}_{p}C1C2)$ 49 $B_1$ $411(3.9)$ $411(3.8)$ $408(5.5)$ $409(6.2)$ $\gamma(C_m-C_a-C_B-C_B)$ 50A $455(0.0)$ $455(0.0)$ $457(0.0)$ twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51 $B_2$ $511(1.4)$ $512(1.2)$ $504(2.7)$ $501(4.8)$ 52 $B_3$ $503(1.3)$ $500(1.1)$ $502(3.2)$ $502(6.5)$ twist(m-ring), fold(m-ring, ax C'_a C'_a)53A $520(0.0)$ $518(0.0)$ $518(0.0)$ twist(m-ring), def(C_B-C1-C2), IPB(Me,Et)54	39	B <sub>3</sub>	288(0.2)	288(0.3)	286(0.0)	286(0.1)	IPB(Me,Et), rot(Me in Et)
40B2 $325(0.0)$ $326(0.0)$ $303(0.2)$ $299(0.3)$ fold(MNC <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sub>a</sub> N, ax NN)-Ni,Co41B1 $317(0.1)$ $318(0.1)$ $315(0.1)$ $313(0.0)$ rot(Me in Et), IPB(Et, Me)42B1 $345(10.6)$ $350(8.2)$ $329(0.3)$ $329(0.2)$ fold(MNC <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sub>a</sub> N, ax NN), OPB(Me, Et)43B2 $339(0.6)$ $337(0.6)$ $329(0.3)$ $329(0.2)$ fold(MNC <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sub>a</sub> N, ax NN), OPB(Me, Et)44A $344(0.0)$ $343(0.0)$ $338(0.0)$ $339(0.0)$ rot(Py, C <sub>a</sub> C <sub>a</sub> )45B3 $346(0.5)$ $345(0.6)$ $345(0.3)$ $348(0.1)$ r(M-N), IPB (ske)46A $365(0.0)$ $362(0.0)$ $366(0.0)$ twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47B2 $393(0.0)$ $391(0.1)$ $390(0.0)$ $393(0.0)$ twist(m-ring, y), bath(x)48B3 $407(0.7)$ $406(0.6)$ $402(1.0)$ $401(1.3)$ twist(m-ring, x), chair(y), $q(C_{\beta}^{c}C1C2)$ 49B1 $411(3.9)$ $411(3.8)$ $408(5.5)$ $409(6.2)$ $\gamma(C_m^{-}C_a^{-}C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A $455(0.0)$ $455(0.0)$ $457(0.0)$ twist(m-ring, x), rot(m-ring, x)51B2 $511(1.4)$ $512(1.2)$ $504(2.7)$ $501(4.8)$ rot(Py) IPB52B3 $503(1.3)$ $500(1.1)$ $502(3.2)$ $524(4.6)$ twist(m-ring), def(C_{p}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3 $529(4.4)$ $529(4.2)$ $524(4.6)$ twist(m-ring), def(C_p-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3	40	P	225(0.0)	22((0,0)	202(0.2)	200(0.2)	rot(Me in Et)-Cu, Zn, OPB(Me), IPB(Et),
41 $B_1$ 317(0.1)318(0.1)315(0.1)313(0.0)rot(Me in Et), IPB(Et, Me)42 $B_1$ 345(10.6)350(8.2)329(7.1)327(6.0)bath43 $B_2$ 339(0.6)337(0.6)329(0.3)329(0.2)fold(MNC_a " C_m C_a " N, ax NN), OPB(Me, Et)44A344(0.0)343(0.0)338(0.0)339(0.0)rot(Py, $C_a C_a)$ 45 $B_3$ 346(0.5)345(0.6)345(0.3)348(0.1)r(M-N), IPB (ske)46A365(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), tot(m-ring, x)47 $B_2$ 393(0.0)391(0.1)390(0.0)twist(m-ring, x), bath(x)48 $B_3$ 407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_B^{C}C1C2)$ 49 $B_1$ 411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a - C_b - C_b)$ 50A455(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51 $B_2$ 511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)52 $B_3$ 503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C_a' C_a'$ )53A520(0.0)518(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_B-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.4)529(4.2)524(4.6)twist(m-ring), def(C_B-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.1)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, ax $C_a' C_a'$ )55 $B_1$ 566(0.0)558(0.0) <td>40</td> <td><math>B_2</math></td> <td>325(0.0)</td> <td>326(0.0)</td> <td>303(0.2)</td> <td>299(0.3)</td> <td>fold(MNC<sup>"</sup><sub>a</sub> C<sub>m</sub>C<sup>"</sup><sub>a</sub> N, ax NN)-Ni,Co</td>	40	$B_2$	325(0.0)	326(0.0)	303(0.2)	299(0.3)	fold(MNC <sup>"</sup> <sub>a</sub> C <sub>m</sub> C <sup>"</sup> <sub>a</sub> N, ax NN)-Ni,Co
42 $B_1$ 345(10.6)350(8.2)329(7.1)327(6.0)bath43 $B_2$ 339(0.6)337(0.6)329(0.3)329(0.2)fold(MNC_a^" C_nC_a" N, ax NN), OPB(Me, Et)44A344(0.0)343(0.0)338(0.0)339(0.0)rot(Py, $C_aC_a$ )45 $B_3$ 346(0.5)345(0.6)345(0.3)348(0.1)r(M-N), IPB (ske)46A365(0.0)362(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47 $B_2$ 393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)48 $B_3$ 407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_p^*C1C2)$ 49 $B_1$ 411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m^-C_a^-C_b^-C_\beta)$ 50A455(0.0)454(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51 $B_2$ 511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52 $B_3$ 503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C_a' C_a')$ 53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_p-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.4)529(4.2)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C_a' C_a')$ 55 $B_1$ 566(0.1)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, ax $C_a' C_a')$ , rot(Py, MN)57 $B_1$ 560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-rin	41	$B_1$	317(0.1)	318(0.1)	315(0.1)	313(0.0)	rot(Me in Et), IPB(Et, Me)
43B2339(0.6)337(0.6)329(0.3)329(0.2)fold(MNC_a C_mC_a N, ax NN), OPB(Me, Et)44A344(0.0)343(0.0)338(0.0)339(0.0)rot(Py, $C_a C_a$ )45B3346(0.5)345(0.6)345(0.3)348(0.1)r(M-N), IPB (ske)46A365(0.0)362(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47B2393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)48B3407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{\beta}^{c}C1C2)$ 49B1411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m - C_a - C_{\beta} - C_{\beta})$ 50A455(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)559(1.4)550(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, ax $C_a C_a C_a)$ 57B1560(0.1)657(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.1)559(0.1)566(0.1)fold(m-ring, ax $C_a C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C_{\mu}^{-}C1) <td>42</td> <td>B<sub>1</sub></td> <td>345(10.6)</td> <td>350(8.2)</td> <td>329(7.1)</td> <td>327(6.0)</td> <td>bath</td>	42	B <sub>1</sub>	345(10.6)	350(8.2)	329(7.1)	327(6.0)	bath
44A344(0.0)343(0.0)338(0.0)339(0.0)rot(Py, $C_aC_a$ )45B3346(0.5)345(0.6)345(0.3)348(0.1)r(M-N), IPB (ske)46A365(0.0)362(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47B2393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), bath(x)48B3407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{\beta}^{c}C1C2)$ 49B1411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m^-C_a^-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )53A520(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN)57B1560(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )59B3613(0.9)	43	$B_2$	339(0.6)	337(0.6)	329(0.3)	329(0.2)	fold(MNC <sup>"</sup> <sub><math>\alpha</math></sub> C <sup>"</sup> <sub><math>n</math></sub> C <sup>"</sup> <sub><math>\alpha</math></sub> N, ax NN), OPB(Me, Et)
45 $B_3$ 346(0.5)345(0.6)345(0.3)348(0.1)r(M-N), IPB (ske)46A365(0.0)362(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47 $B_2$ 393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), bath(x)48 $B_3$ 407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{\beta}^{c}C1C2)$ 49 $B_1$ 411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51 $B_2$ 511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52 $B_3$ 503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ 53A520(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.4)529(4.2)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ 55 $B_1$ 566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56 $B_2$ 560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ , rot(Py, MN)57 $B_1$ 606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a)$ 58 $B_1$ 606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a)$ 59 $B_3$ 613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C_{\beta}^{-}-C1), IPB(Me,E	44	Α	344(0.0)	343(0.0)	338(0.0)	339(0.0)	$rot(Py, C_{\alpha}C_{\alpha})$
46A365(0.0)362(0.0)362(0.0)366(0.0)twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)47B2393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), bath(x)48B3407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{\beta}^{"}C1C2)$ 49B1411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)454(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C'_a C'_a$ )53A520(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)522(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, ax $C'_a C'_a$ )57B1560(0.1)559(0.1)566(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, ax $C_a C_a$ )59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C'_{\beta}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)rt(C'_{\alpha}-C1), IPB(Me,Et)	45	B <sub>3</sub>	346(0.5)	345(0.6)	345(0.3)	348(0.1)	r(M-N), IPB (ske)
47B2393(0.0)391(0.1)390(0.0)393(0.0)twist(m-ring, y), bath(x)48B3407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{B}^{\circ}C1C2)$ 49B1411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)454(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C_a' C_a'$ )53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C_a' C_a')$ 55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, ax $C_a' C_a')$ , rot(Py, MN)57B1560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, ax $C_a C_a)$ , rot(Py, MN), r(C_{\beta}^{-}-C1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, ax $C_a C_a)$ 59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C_{\beta}^{-}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C_{\alpha}^{-}-C_{A_{\alpha}}), IPB(Me,Et), def(Py)	46	Α	365(0.0)	362(0.0)	362(0.0)	366(0.0)	twist(m-ring, y), rot(m-ring, x)
48B3407(0.7)406(0.6)402(1.0)401(1.3)twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{B}^{*}C1C2)$ 49B1411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)454(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C_a' C_a'$ )53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C_a' C_a'$ )55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C_a' C_a'$ ), rot(Py, MN)57B1560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C_{B}^{*}-C1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C_{B}^{*}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C_{B}^{*}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)	47	B <sub>2</sub>	393(0.0)	391(0.1)	390(0.0)	393(0.0)	twist(m-ring, y), bath(x)
49 $B_1$ 411(3.9)411(3.8)408(5.5)409(6.2) $\gamma(C_m-C_a-C_{\beta}-C_{\beta})$ 50A455(0.0)455(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51 $B_2$ 511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52 $B_3$ 503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )55 $B_1$ 566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56 $B_2$ 560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ ), rot(Py, MN)57 $B_1$ 560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C'_{\beta}-C1)58 $B_1$ 606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )59 $B_3$ 613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C'_{\alpha}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60 $B_2$ 619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C'_{\alpha}-C_1), IPB(Me,Et), def(Py)	48	B <sub>3</sub>	407(0.7)	406(0.6)	402(1.0)	401(1.3)	twist(m-ring, x), chair(y), $\varphi(C_{\beta}^{"}C1C2)$
50A455(0.0)454(0.0)455(0.0)457(0.0)twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)51B2511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ )55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_a C'_a$ ), rot(Py, MN)57B1560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C'_{\beta}-C1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C'_{B}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C'_{B}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)	49	B <sub>1</sub>	411(3.9)	411(3.8)	408(5.5)	409(6.2)	$\gamma(C_m-C_{\alpha}-C_{\beta}-C_{\beta})$
51 $B_2$ 511(1.4)512(1.2)504(2.7)501(4.8)rot(Py) IPB52 $B_3$ 503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ 53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54 $B_3$ 529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ 55 $B_1$ 566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56 $B_2$ 560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ , rot(Py, $MN$ )57 $B_1$ 560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a)$ , rot(Py, $MN$ ), r(C''_{\beta}-C1)58 $B_1$ 606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_a C_a)$ 59 $B_3$ 613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C''_{\beta}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60 $B_2$ 619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C''_{\alpha}-C_{M}), IPB(Me,Et), def(Py)	50	Α	455(0.0)	454(0.0)	455(0.0)	457(0.0)	twist(m-ring, x), rot(m-ring, y)
52B3503(1.3)500(1.1)502(3.2)502(6.5)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_{\alpha}C'_{\alpha}$ )53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_{\alpha}C'_{\alpha}$ )55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_{\alpha}C''_{\alpha}$ ), rot(Py, MN)57B1560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ ), rot(Py, MN), r(C'_{\beta}-C1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ )59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C'_{\beta}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C'_{\alpha}-C_{M}), IPB(Me,Et), def(Py)	51	B <sub>2</sub>	511(1.4)	512(1.2)	504(2.7)	501(4.8)	rot(Py) IPB
53A520(0.0)519(0.0)518(0.0)518(0.0)twist(m-ring), def(C_{\beta}-C1-C2), IPB(Me,Et)54B3529(4.4)529(4.2)524(4.6)524(4.6)twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_{\alpha}C'_{\alpha}$ )55B1566(0.0)567(0.0)558(0.0)552(0.0)rot(Py) IPB56B2560(1.4)558(1.4)559(1.4)560(1.5)fold(m-ring, $ax C'_{\alpha}C''_{\alpha}$ ), rot(Py, MN)57B1560(0.1)559(0.1)563(0.1)566(0.1)fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ ), rot(Py, MN), r(C''_{\beta}-C1)58B1606(0.1)605(0.1)607(0.1)609(0.1)fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ )59B3613(0.9)613(0.7)612(0.9)611(1.2)r(C''_{\beta}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)60B2619(0.5)619(0.4)617(0.4)616(0.7)r(C''_{\alpha}-C_{M}), IPB(Me,Et), def(Py)	52	<b>B</b> <sub>3</sub>	503(1.3)	500(1.1)	502(3.2)	502(6.5)	twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C'_{\alpha}C'_{\alpha}$ )
54         B3         529(4.4)         529(4.2)         524(4.6)         524(4.6)         twist(m-ring), fold(m-ring, $ax C'_a C'_a)$ 55         B1         566(0.0)         567(0.0)         558(0.0)         552(0.0)         rot(Py) IPB           56         B2         560(1.4)         558(1.4)         559(1.4)         560(1.5)         fold(m-ring, $ax C'_a C''_a$ ), rot(Py, MN)           57         B1         560(0.1)         559(0.1)         563(0.1)         566(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C''_{\beta}-C1)           58         B1         606(0.1)         605(0.1)         607(0.1)         609(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )           59         B3         613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2)         r(C''_{\beta}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)           60         B2         619(0.5)         619(0.4)         617(0.4)         616(0.7)         r(C''_{\beta}-C_{A_{a}}), IPB(Me,Et), def(Py)	53	Α	520(0.0)	519(0.0)	518(0.0)	518(0.0)	twist(m-ring), def(C <sub><math>\beta</math></sub> -C1-C2), IPB(Me,Et)
55 $B_1$ 566(0.0)         567(0.0)         558(0.0)         552(0.0)         rot(Py) IPB           56 $B_2$ 560(1.4)         558(1.4)         559(1.4)         560(1.5)         fold(m-ring, $ax C_a^{"}C_a^{"})$ , rot(Py, $MN$ )           57 $B_1$ 560(0.1)         559(0.1)         563(0.1)         566(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, $MN$ ), r( $C_{\beta}^{"}$ -C1)           58 $B_1$ 606(0.1)         605(0.1)         607(0.1)         609(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )           59 $B_3$ 613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2)         r( $C_{\beta}^{"}$ -C1), IPB(Me,Et), def(Py)           60 $B_2$ 619(0.5)         619(0.4)         617(0.4)         616(0.7)         r( $C_{\alpha}^{"}$ -C <sub>M</sub> ), IPB(Me,Et), def(Py)	54	<b>B</b> <sub>3</sub>	529(4.4)	529(4.2)	524(4.6)	524(4.6)	twist(m-ring), fold(m-ring, ax $C'_{\alpha}C'_{\alpha}$ )
56         B2         560(1.4)         558(1.4)         559(1.4)         560(1.5)         fold(m-ring, $ax C_a^{"} C_a^{"}$ ), rot(Py, MN)           57         B1         560(0.1)         559(0.1)         563(0.1)         566(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ ), rot(Py, MN), r(C_{\beta}^{"}-C1)           58         B1         606(0.1)         605(0.1)         607(0.1)         609(0.1)         fold(m-ring, $ax C_a C_a$ )           59         B3         613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2)         r(C_{\beta}^{"}-C1), IPB(Me,Et), def(Py)           60         B2         619(0.5)         619(0.4)         617(0.4)         616(0.7)         r(C_{\alpha}^{"}-C_{A_{\alpha}}), IPB(Me,Et), def(Py)	55	$B_1$	566(0.0)	567(0.0)	558(0.0)	552(0.0)	rot(Py) IPB
57 $B_1$ 560(0.1)         559(0.1)         563(0.1)         566(0.1)         fold(m-ring, $ax C_aC_a)$ , rot(Py, $MN$ ), r( $C_{\beta}^{"}$ -C1)           58 $B_1$ 606(0.1)         605(0.1)         607(0.1)         609(0.1)         fold(m-ring, $ax C_aC_a)$ , rot(Py, $MN$ ), r( $C_{\beta}^{"}$ -C1)           59 $B_3$ 613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2)         r( $C_{\beta}^{"}$ -C1), IPB(Me,Et), def(Py)           60 $B_2$ 619(0.5)         619(0.4)         616(0.7)         r( $C_{\alpha}^{"}$ -C <sub>M</sub> ), IPB(Me,Et), def(Py)	56	$B_2$	560(1.4)	558(1.4)	559(1.4)	560(1.5)	fold(m-ring, ax $\overline{C''_{\alpha}C''_{\alpha}}$ ), rot(Py, MN)
58 $B_1$ 606(0.1)         605(0.1)         607(0.1)         609(0.1)         fold(m-ring, $ax C_aC_a)$ 59 $B_3$ 613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2) $r(C_{\beta}^{\mu}$ -C1), IPB(Me,Et), def(Py)           60 $B_2$ 619(0.5)         619(0.4)         616(0.7) $r(C_{\alpha}^{\mu}-C_{Ma})$ , IPB(Me,Et), def(Py)	57	B <sub>1</sub>	560(0.1)	559(0.1)	563(0.1)	566(0.1)	fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ ), rot(Py, MN), r(C <sup>"</sup> <sub>8</sub> -C1)
59 $B_3$ 613(0.9)         613(0.7)         612(0.9)         611(1.2) $r(C_{\beta}^{"}-C1)$ , IPB(Me,Et), def(Py)           60 $B_2$ 619(0.5)         619(0.4)         616(0.7) $r(C_{\alpha}^{"}-C_{Ma})$ , IPB(Me,Et), def(Py)	58	B <sub>1</sub>	606(0.1)	605(0.1)	607(0.1)	609(0.1)	fold(m-ring, $ax C_{\alpha}C_{\alpha}$ )
$\begin{array}{c} 60 \\ B_2 \\ 619(0.5) \\ 619(0.4) \\ 617(0.4) \\ 616(0.7) \\ r(C_{r-C_{Mo}}) \\ PB(Me,Et) \\ def(Pv) \\ \end{array}$	59	B <sub>3</sub>	613(0.9)	613(0.7)	612(0.9)	611(1.2)	$r(C_{\beta}^{"}-C1)$ , IPB(Me.Et). def(Pv)
	60	<b>B</b> <sub>2</sub>	619(0.5)	619(0.4)	617(0.4)	616(0.7)	$r(C_{\text{fr}}^{\text{c}}C_{\text{Me}})$ , IPB(Me.Et). def(Pv)

<sup>\*)</sup> см. примечание к таблице S1. Обозначения координат, отсутствующих в примечании к таблице S1: sad – седлообразная деформация макроцикла; butterfly – неплоская деформация макроцикла, напоминающая махание крыльев бабочки, соответствует комбинации куполообразного и ruffling-искажений (в скобках – ориентация тела «бабочки»); rot – поворот заместителя или фрагмента макроцикла (заместитель или фрагмент и ось вращения (для фрагмента) указаны в скобках); rock – покачивание фрагмента m-ring (в скобках указана ось); sci – движение, похожее на ножницы; ruf –

ruffling-искажение макроцикла; bath – складывание фрагмента m-ring в виде ванны (в скобках – ось, проходящая через фрагмент);  $\gamma(C_m-C_\alpha-C_\beta-C_\beta)$  – зигзагообразное неплоское искажение макроцикла; fold —складывание фрагмента по оси (в скобках указан тип фрагмента и ось складывания)



**Рисунок S1.** Корреляционные зависимости  $v = f(\omega)$ :  $v u \omega$  - положения максимумов полос в экспериментальном и модельном спектрах, соответственно. R- коэффициент корреляции.