

Таблица S1. Рассчитанные (B3LYP) значения частот (ω_i , cm^{-1}), интенсивностей (в скобках, km/mol) и приближенное описание колебаний в диапазоне $650\text{-}1700\text{ cm}^{-1}$ комплексов МЕР-II (конформер I).

i	Сим.	CoEP-II	NiEP-II	CuEP-II	ZnEP-II	Приближенное описание [*]
61	A	675(0.0)	675(0.0)	673(0.0)	673(0.0)	$r(C_{\beta}''-C1)$, def(Py)
62	A	687(0.0)	687(0.0)	686(0.0)	685(0.0)	$r(C_{\beta}'-C_{Me})$, def(Py)
63	B ₁	699(0.0)	699(0.0)	695(0.0)	693(0.0)	$r(C_{\beta}''-C1)$, $C_{\beta}'-C_{Me}$, $C_{\beta}-C_{\alpha}$
64	A	703(0.0)	697(0.0)	701(0.0)	711(0.0)	twist(m-ring), OPB(C _β ['])
65	B ₂	709(12.4)	707(12.0)	708(11.6)	711(11.7)	OPB(C _α ['] , C _β ['] , r(C _β ^{''} -C1), r(C _β ['] -C _{Me})
66	B ₂	719(21.1)	716(20.9)	717(20.5)	720(20.8)	OPB(C _α , N, C _β ['] , r(C _β ['] -C _{Me}), r(C _β ^{''} -C1)
67	B ₃	720(33.9)	718(34.7)	720(35.3)	722(34.7)	$r(C_{\beta}'-C_{Me})$, twist(Py), $r(C_{\beta}''-C1)$, r(M-N)
68	B ₁	728(0.1)	727(0.1)	726(0.2)	728(0.2)	chair(m-ring), OPB(C _β ['])
69	B ₃	731(2.5)	728(1.1)	728(0.9)	730(1.6)	chair(m-ring)
70	B ₁	751(0.9)	749(0.6)	746(0.8)	748(1.0)	chair(m-ring), OPB(C _β ^{''})
71	A	744(0.0)	742(0.0)	745(0.0)	748(0.0)	OPB(C _β , C _α ^{''})
72	B ₂	748(6.0)	746(6.3)	747(6.9)	749(7.5)	chair(m-ring), OPB(C _β ^{''})
73	B ₃	747(12.6)	746(12.0)	747(12.0)	749(14.3)	OPB(C _α ^{''} , C _β ^{''})
74	B ₃	766(18.7)	766(17.1)	764(18.2)	763(21.0)	$\phi(HCC)_{Et}$, bre(Py), OPB(C _β ^{''})
75	B ₂	771(24.3)	771(22.4)	769(25.5)	768(29.5)	$\phi(HCC)_{Et}$, bre(Py)
76	B ₁	768(0.5)	767(0.7)	765(0.4)	769(0.4)	bre(Py)
77	B ₁	789(0.1)	789(0.1)	788(0.1)	787(0.1)	$\phi(HCC)_{Et}$
78	A	790(0.0)	790(0.0)	789(0.0)	789(0.0)	$\phi(HCC)_{Et}$, $r(C_{\beta}''-C1)$, bre(Py)
79	B ₂	811(18.7)	812(17.8)	809(16.3)	807(15.9)	$\phi(HCC)_{Et}$, bre(Py)
80	A	823(0.0)	823(0.0)	823(0.0)	823(0.0)	$\phi(HCC)_{Et}$, $r(C_{\beta}'-C_{Me})$, bre(Py)
81	B ₃	833(5.2)	834(5.0)	831(4.6)	828(3.9)	$\phi(HCC)_{Et}$, bre(Py)
82	B ₁	866(49.2)	864(49.2)	865(49.4)	867(49.2)	OPB(H _m), OPB(C _m)
83	B ₃	866(0.0)	865(0.0)	866(0.0)	868(0.0)	OPB(H _m), OPB(C _m)
84	B ₂	869(0.2)	868(0.2)	868(0.2)	870(0.2)	OPB(H _m), OPB(C _m)
85	B ₁	871(1.7)	869(2.2)	869(2.3)	872(1.5)	OPB(H _m), OPB(C _m)
86	B ₁	931(0.1)	933(0.1)	927(0.1)	922(0.1)	$r(C_{\alpha}'-C_{\beta}')$, r(C1-C2), $\phi(HCC)_{Et,Me}$
87	B ₃	942(5.2)	944(6.1)	938(1.6)	933(0.0)	$r(C1-C2)$, $r(C_{\alpha}'-C_{\beta}')$, $\phi(HCC)_{Et,Me}$
88	B ₂	945(43.1)	945(40.6)	938(50.3)	933(63.3)	$r(C1-C2)$, $\phi(HCC)_{Et,Me}$
89	A	956(0.0)	956(0.0)	955(0.0)	955(0.0)	$r(C1-C2)$, $\phi(HCC)_{Et}$
90	B ₁	975(0.0)	976(0.0)	974(0.0)	972(0.1)	$r(C1-C2)$, $\phi(HCC)_{Et,Me}$
91	B ₂	985(31.6)	986(32.5)	980(19.6)	977(15.1)	$r(C1-C2)$, $\phi(HCC)_{Et,Me}$
92	B ₃	993(79.4)	994(69.6)	984(54.6)	979(98.1)	$r(C1-C2)$, $\phi(HCC)_{Et,Me}$
93	B ₃	986(27.4)	986(31.2)	983(57.9)	982(31.4)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C1-C2)$, $r(C_{\alpha}-C_{\beta})$, $r(C_{\beta}-C_{\beta})$
94	A	1006(0.0)	1006(0.0)	1004(0.0)	1004(0.0)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\alpha}-C_{\beta})$
95	B ₁	1012(0.1)	1014(0.1)	1011(0.1)	1009(0.0)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\alpha}''-C_{\beta}'')$
96	B ₂	1017(24.4)	1019(21.4)	1014(30.0)	1011(35.1)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\alpha}''-C_{\beta}'')$
97	A	1025(0.0)	1027(0.0)	1019(0.0)	1014(0.0)	bre(m-ring), r(C1-C2)
98	B ₂	1056(2.0)	1056(2.0)	1056(2.2)	1056(2.4)	$\phi(HCC)_{Me}$
99	B ₁	1056(0.1)	1056(0.1)	1056(0.1)	1056(0.1)	$\phi(HCC)_{Me}$
100	B ₃	1056(6.2)	1056(6.3)	1056(6.3)	1056(6.4)	$\phi(HCC)_{Me}$
101	A	1056(0.0)	1056(0.0)	1056(0.0)	1056(0.0)	$\phi(HCC)_{Me}$
102	B ₂	1079(7.9)	1079(7.8)	1079(8.0)	1078(8.2)	$\phi(HCC)_{Et}$, r(C1-C2)
103	B ₁	1080(1.4)	1080(1.4)	1080(1.5)	1080(1.5)	$\phi(HCC)_{Et}$, r(C1-C2)
104	B ₃	1081(50.4)	1081(50.0)	1080(52.1)	1080(54.9)	$\phi(HCC)_{Et}$, r(C1-C2)
105	A	1081(0.0)	1081(0.0)	1081(0.0)	1080(0.0)	$\phi(HCC)_{Et}$, r(C1-C2)
106	A	1121(0.0)	1122(0.0)	1119(0.0)	1117(0.0)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$
107	B ₂	1125(11.0)	1125(10.1)	1122(11.9)	1120(14.4)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\beta}''-C1)$
108	B ₃	1133(8.3)	1134(8.0)	1132(8.7)	1130(10.0)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\beta}'-C_{Me})$
109	B ₁	1142(0.6)	1142(0.6)	1144(0.6)	1144(0.6)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\beta}'-C_{Me})$, $r(C_{\beta}''-C1)$
110	B ₁	1158(0.5)	1156(0.5)	1156(0.6)	1159(0.7)	r(N-C _α), IPB(H _m)
111	A	1159(0.0)	1159(0.0)	1158(0.0)	1159(0.0)	$\phi(HCC)_{Et,Me}$, $r(C_{\beta}''-C1)$, $r(C_{\beta}'-C_{Me})$, bre(Py)
112	B ₃	1156(2.5)	1155(1.9)	1161(0.1)	1164(0.3)	r(N-C _α), IPB(H _m)
113	B ₁	1154(0.1)	1153(0.2)	1161(0.0)	1165(0.0)	r(N-C _α), IPB(H _m)

114	B ₂	1157(0.1)	1155(0.0)	1161(1.1)	1165(5.9)	r(N-C _α), IPB(H _m)
115	B ₂	1170(45.8)	1169(42.0)	1169(50.1)	1170(59.5)	φ(HCC) _{Et,Me} , r(C' _β -C _{Me})
116	B ₃	1172(50.4)	1172(45.7)	1172(57.8)	1173(73.8)	φ(HCC) _{Et,Me} , r(C'' _β -C1)
117	A	1182(0.0)	1181(0.0)	1185(0.0)	1187(0.0)	r(N-C _α), r(C'' _β -C1), r(C' _β -C _{Me})
118	B ₁	1247(0.5)	1249(0.6)	1240(0.5)	1234(0.4)	r(C _α -C _β), IPB(H _m)
119	B ₂	1256(19.1)	1256(21.6)	1249(16.0)	1245(7.6)	r(C _α -C _β), IPB(H _m), r(N-C _α)
120	B ₃	1266(48.4)	1267(52.7)	1258(40.3)	1252(24.4)	r(C _α -C _β), IPB(H _m), r(N-C _α)
121	A	1292(0.0)	1292(0.0)	1291(0.0)	1291(0.0)	φ(HCC) _{Et}
122	B ₃	1294(10.6)	1294(11.2)	1293(8.8)	1293(7.8)	φ(HCC) _{Et}
123	B ₁	1299(0.0)	1300(0.0)	1298(0.0)	1298(0.0)	φ(HCC) _{Et} , r(C' _β -C _{Me})
124	B ₂	1305(28.1)	1305(29.4)	1303(22.6)	1303(17.4)	φ(HCC) _{Et}
125	B ₂	1344(0.4)	1344(0.5)	1342(0.6)	1341(0.9)	φ(HCC) _{Et}
126	B ₁	1343(1.1)	1344(1.1)	1343(2.0)	1343(2.1)	φ(HCC) _{Et} , IPB(H _m)
127	B ₃	1348(23.1)	1349(22.8)	1347(21.7)	1346(19.0)	φ(HCC) _{Et}
128	A	1351(0.0)	1351(0.0)	1350(0.0)	1350(0.0)	φ(HCC) _{Et}
129	B ₁	1349(1.6)	1349(1.7)	1351(0.7)	1351(0.6)	φ(HCC) _{Et} , IPB(H _m), r(N-C _α)
130	B ₃	1388(1.0)	1389(1.0)	1384(0.2)	1381(0.0)	def(Py), r(C'' _β -C1)
131	B ₂	1389(17.3)	1390(16.8)	1385(14.6)	1383(11.5)	φ(HCC) _{Et} , r(C'' _β -C1)
132	A	1399(0.0)	1401(0.0)	1393(0.0)	1390(0.0)	r(C _α -C _β), r(N-C _α)
133	B ₁	1394(1.2)	1395(1.3)	1393(1.1)	1390(0.9)	def(Py), r(C'' _β -C1)
134	A	1405(0.0)	1405(0.0)	1403(0.0)	1402(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me} , r(C _α -C _β)
135	B ₂	1414(0.7)	1414(0.5)	1413(0.4)	1412(0.2)	φ(HCC) _{Et} , IPB(H _m), r(N-C _α), r(C' _α -C' _β)
136	B ₃	1414(2.7)	1414(2.1)	1414(2.3)	1413(2.1)	φ(HCC) _{Et}
137	B ₁	1416(14.3)	1416(14.2)	1416(14.6)	1416(14.7)	φ(HCC) _{Et}
138	B ₃	1418(0.0)	1418(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	φ(HCC) _{Et} , IPB(H _m)
139	B ₂	1417(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	φ(HCC) _{Et}
140	A	1418(0.0)	1418(0.0)	1417(0.0)	1417(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me}
141	B ₁	1426(0.3)	1426(0.3)	1426(0.1)	1423(0.0)	IPB(H _m), r(N-C _α)
142	B ₃	1427(7.8)	1427(8.6)	1426(6.3)	1425(4.4)	φ(HCC) _{Me} , r(C' _β -C _{Me})
143	B ₂	1427(18.4)	1427(19.7)	1426(15.7)	1426(12.9)	φ(HCC) _{Me} , r(C' _β -C _{Me})
144	B ₁	1430(0.8)	1431(0.9)	1429(0.8)	1428(0.8)	φ(HCC) _{Me} , r(C' _β -C _{Me})
145	A	1435(0.0)	1435(0.0)	1433(0.0)	1432(0.0)	φ(HCC) _{Me} , r(C' _β -C _{Me})
146	A	1512(0.0)	1520(0.0)	1486(0.0)	1476(0.0)	r(C _α -C _m), r(N-C _α), r(C _α -C _β), φ(HCC) _{Et,Me} -Co,Ni,Cu
147	B ₃	1510(0.0)	1514(7.1)	1489(0.5)	1478(2.0)	r(C _α -C _m), r(C _α ''-C _β ''), φ(HCC) _{Et,Me} -Co,Ni,Cu
148	B ₂	1519(0.3)	1525(2.5)	1494(3.6)	1481(17.7)	r(C _α -C _m), r(C _α '-C _β '), φ(HCC) _{Et,Me} -Co,Ni,Cu
149	B ₁	1494(9.4)	1494(10.0)	1493(6.7)	1493(4.3)	φ(HCC) _{Et,Me}
150	B ₂	1493(0.1)	1494(0.0)	1493(2.3)	1493(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me}
151	A	1494(0.0)	1494(0.0)	1493(0.0)	1493(0.0)	φ(HCC) _{Me}
152	B ₃	1495(0.9)	1495(1.2)	1494(0.3)	1494(0.9)	φ(HCC) _{Et,Me}
153	B ₁	1495(21.2)	1495(21.0)	1494(23.9)	1494(26.0)	φ(HCC) _{Me}
154	B ₃	1492(3.2)	1493(3.2)	1499(3.4)	1495(5.8)	φ(HCC) _{Et,Me}
155	B ₂	1496(5.7)	1496(5.7)	1495(13.0)	1495(5.5)	φ(HCC) _{Et,Me}
156	A	1491(0.0)	1492(0.0)	1499(0.0)	1496(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me}
157	B ₁	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	φ(HCC) _{Et}
158	B ₂	1502(35.2)	1502(15.8)	1502(29.4)	1502(26.6)	φ(HCC) _{Et} , φ(HCC) _{Me} - Co,Ni
159	A	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	1502(0.0)	φ(HCC) _{Et}
160	B ₃	1502(2.6)	1502(2.7)	1502(3.0)	1502(3.3)	φ(HCC) _{Et}
161	B ₁	1505(1.1)	1506(1.0)	1505(1.4)	1505(1.7)	φ(HCC) _{Et,Me}
162	B ₃	1505(8.4)	1506(9.4)	1506(9.5)	1506(9.9)	φ(HCC) _{Et,Me}
163	B ₂	1501(0.5)	1503(18.4)	1509(0.0)	1507(1.2)	φ(HCC) _{Et,Me}
164	A	1503(0.0)	1505(0.0)	1509(0.0)	1507(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me}
165	A	1518(0.0)	1515(0.0)	1516(0.0)	1512(0.0)	φ(HCC) _{Et,Me} , r(C _α -C _m)
166	B ₂	1515(1.7)	1517(1.4)	1517(0.1)	1517(0.3)	φ(HCC) _{Et} , r(C _α -C _m)-Ni,Co
167	B ₁	1517(10.2)	1518(10.2)	1517(10.3)	1517(10.1)	φ(HCC) _{Et,Me}
168	B ₃	1520(33.2)	1524(25.0)	1518(35.1)	1517(32.2)	φ(HCC) _{Et,Me} , r(C _α -C _m)-Ni,Co
169	A	1543(0.0)	1553(0.0)	1533(0.0)	1521(0.0)	r(C _α -C _m), φ(HCC) _{Et,Me} -Zn
170	B ₃	1597(11.5)	1604(13.0)	1581(6.9)	1564(2.1)	r(C _α -C _m), IPB(H _m)
171	B ₂	1597(3.6)	1604(4.3)	1581(1.4)	1565(0.0)	r(C _α -C _m), IPB(H _m)
172	B ₁	1627(0.0)	1637(0.0)	1609(0.0)	1590(0.0)	r(C _α -C _m), IPB(H _m)
173	B ₁	1611(0.1)	1617(0.1)	1605(0.0)	1594(0.1)	r(C' _β -C'' _β), r(C _α -C _m)
174	A	1640(0.0)	1644(0.0)	1631(0.0)	1622(0.0)	r(C' _β -C'' _β)

175	B ₃	1647(0.5)	1653(0.2)	1636(1.2)	1624(1.7)	r(C _β ^I -C _β ^{II}), r(C _β ^I -C _{Me})
176	B ₂	1647(0.1)	1653(0.0)	1636(0.4)	1624(0.6)	r(C _β ^I -C _β ^{II})
177	B ₁	1687(0.0)	1698(0.0)	1672(0.0)	1653(0.0)	r(C _α -C _m), r(C _β ^I -C _β ^{II}), IPB(H _m)

*) 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: r, φ – 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_αC_mC_αN] (далее обозначается как m-ring) по линиям N...N и C_α...C_α в виде кресла; bre(Py), bre(m-ring) – плоская деформация, напоминающая «дыхание» пиррольного цикла или цикла m-ring.

Таблица S2. Рассчитанные (B3LYP) значения частот (ω_i , см⁻¹), интенсивностей (в скобках, км/моль) и приближенное описание колебаний в диапазоне 3000-3300 см⁻¹ комплексов МЕР-II (конформер I).

i	Сим.	СоЕР-II	NiЕР-II	CuЕР-II	ZnЕР-II	Описание
178	B ₃	3024(0.9)	3024(1.0)	3024(1.1)	3023(1.1)	r(C-H) _{Me}
179	B ₁	3024(0.4)	3024(0.4)	3024(0.4)	3023(0.5)	r(C-H) _{Me}
180	B ₂	3024(159.1)	3025(156.1)	3024(155.6)	3024(156.2)	r(C-H) _{Me}
181	A	3024(0.0)	3025(0.0)	3024(0.0)	3024(0.0)	r(C-H) _{Me}
182	B ₂	3030(13.9)	3030(13.7)	3030(15.1)	3030(15.5)	r(C-H) _{Et}
183	B ₁	3030(66.5)	3030(66.6)	3030(65.7)	3030(65.4)	r(C-H) _{Et}
184	B ₃	3030(123.3)	3030(122.1)	3030(123.5)	3030(124.0)	r(C-H) _{Et}
185	A	3030(0.0)	3030(0.0)	3030(0.0)	3030(0.0)	r(C-H) _{Et}
186	B ₃	3035(68.1)	3035(67.1)	3035(68.2)	3034(69.4)	r(C-H) _{Et}
187	B ₂	3035(13.1)	3036(13.5)	3035(14.0)	3034(13.8)	r(C-H) _{Et}
188	B ₁	3035(60.5)	3036(59.4)	3035(61.1)	3034(62.4)	r(C-H) _{Et}
189	A	3035(0.0)	3036(0.0)	3035(0.0)	3034(0.0)	r(C-H) _{Et}
190	B ₁	3061(0.5)	3061(0.4)	3061(0.4)	3060(0.4)	r(C-H) _{Et}
191	B ₂	3061(44.4)	3061(43.5)	3061(43.9)	3060(45.0)	r(C-H) _{Et}
192	B ₃	3061(2.6)	3062(2.4)	3061(2.5)	3060(2.7)	r(C-H) _{Et}
193	A	3061(0.0)	3062(0.0)	3061(0.0)	3060(0.0)	r(C-H) _{Et}
194	B ₂	3067(0.8)	3067(0.8)	3067(1.1)	3066(1.4)	r(C-H) _{Me}
195	A	3067(0.0)	3067(0.0)	3067(0.0)	3066(0.0)	r(C-H) _{Me}
196	B ₃	3067(0.1)	3068(0.0)	3067(0.1)	3067(0.1)	r(C-H) _{Me}
197	B ₁	3067(58.2)	3068(57.0)	3067(57.5)	3067(58.1)	r(C-H) _{Me}
198	B ₂	3094(4.7)	3095(4.7)	3095(4.6)	3094(4.8)	r(C-H) _{Et}
199	B ₁	3094(18.2)	3095(17.5)	3095(18.3)	3094(18.6)	r(C-H) _{Et}
200	B ₃	3095(193.4)	3095(192.0)	3095(192.8)	3094(194.1)	r(C-H) _{Et}
201	A	3095(0.0)	3095(0.0)	3095(0.0)	3095(0.0)	r(C-H) _{Et}
202	B ₁	3103(0.3)	3103(0.4)	3103(0.2)	3103(0.2)	r(C-H) _{Et}
203	B ₂	3103(113.3)	3103(113.1)	3103(111.0)	3103(109.7)	r(C-H) _{Et}
204	B ₃	3103(0.6)	3104(0.8)	3103(0.4)	3103(0.2)	r(C-H) _{Et}
205	A	3103(0.0)	3104(0.0)	3103(0.0)	3103(0.0)	r(C-H) _{Et}
206	B ₁	3109(0.0)	3109(0.0)	3109(0.0)	3108(0.0)	r(C-H) _{Me}
207	B ₃	3109(95.3)	3109(93.6)	3109(95.5)	3108(97.4)	r(C-H) _{Me}
208	B ₂	3109(42.9)	3110(41.3)	3109(45.0)	3108(48.1)	r(C-H) _{Me}
209	A	3109(0.0)	3110(0.0)	3109(0.0)	3108(0.0)	r(C-H) _{Me}
210	B ₂	3203(8.8)	3208(7.8)	3198(9.5)	3190(10.8)	r(C _m -H _m)
211	A	3203(0.0)	3208(0.0)	3198(0.0)	3190(0.0)	r(C _m -H _m)
212	B ₃	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 (ω_i , см⁻¹), интенсивностей в ИК-спектрах (в скобках, км/моль) и приближенное описание колебаний в диапазоне 0-650 см⁻¹ комплексов МЕР-II (конформер I).

i	Сим.	СоЕР-II	NiЕР-II	CuЕР-II	ZnЕР-II	Приближенное описание ^{*)}
1	A	19(0.0)	16(0.0)	21(0.0)	24(0.0)	sad

2	B ₁	22(0.0)	10(0.0)	30(0.1)	34(0.7)	butterfly(y)
3	B ₁	49(1.8)	50(2.0)	46(1.9)	44(0.9)	butterfly(x)
4	B ₃	49(0.0)	48(0.0)	49(0.0)	48(0.0)	rot(Et)
5	A	50(0.0)	51(0.0)	49(0.0)	48(0.0)	rot(Et)
6	B ₂	51(0.0)	51(0.0)	50(0.0)	49(0.0)	rot(Et)
7	B ₃	51(0.0)	51(0.0)	51(0.0)	50(0.0)	rot(Et), rock(m-ring, x)
8	B ₁	61(1.1)	61(1.4)	59(0.9)	58(0.6)	rot(Et), butterfly(x)
9	B ₂	74(0.0)	73(0.0)	76(0.0)	77(0.0)	OPB(C _β '-C _{Me}), rot(Py, MN)
10	A	75(0.0)	75(0.0)	76(0.0)	77(0.0)	rot(m-ring, x,y), OPB(Et)
11	B ₂	89(0.0)	90(0.0)	85(0.0)	82(0.0)	rot(m-ring, y), OPB(Et)
12	A	108(0.0)	109(0.0)	103(0.0)	99(0.0)	rot(Me)
13	B ₃	109(0.0)	111(0.0)	104(0.0)	100(0.0)	rot(Me)
14	B ₁	111(0.5)	112(0.5)	105(0.6)	101(0.8)	rot(Me)
15	B ₂	111(0.1)	113(0.1)	106(0.1)	102(0.2)	rot(Me)
16	B ₃	133(0.0)	134(0.0)	128(0.0)	123(0.0)	rot(m-ring, x), OPB(Me)
17	B ₁	136(0.0)	136(0.1)	132(0.1)	126(1.9)	OPB(M), fold(MNC' _α C _m C' _α N, ax NN)
18	A	144(0.0)	143(0.0)	139(0.0)	136(0.0)	sad, OPB(Me,Et)
19	B ₁	190(0.0)	187(0.0)	170(0.4)	153(3.4)	r(MN), OPB(M)-Cu, Zn
20	A	161(0.0)	162(0.0)	157(0.0)	155(0.0)	sci(NMN)
21	B ₃	165(1.2)	165(1.1)	163(1.2)	161(1.1)	IPB(Me, Et), rot(Me,Et), r(M-N)
22	B ₂	168(1.6)	169(1.6)	165(1.4)	162(1.0)	IPB(Me, Et), rot(Me,Et), r(M-N)
23	B ₁	201(3.3)	204(1.6)	187(4.8)	173(5.5)	ruf, OPB(M)
24	B ₃	181(0.1)	180(0.2)	181(0.0)	181(0.0)	twist(m-ring)
25	B ₁	207(0.2)	206(0.2)	204(0.0)	204(0.0)	rot(Me in Et)
26	B ₂	212(0.2)	212(0.2)	209(0.0)	205(0.0)	rot(m-ring, y)
27	A	225(0.0)	224(0.0)	213(0.0)	210(0.0)	rot(m-ring, x,y)
28	A	215(0.0)	215(0.0)	214(0.0)	214(0.0)	rot(Me in Et)
29	B ₃	222(0.7)	222(0.7)	220(0.3)	215(0.1)	rot(Me in Et), r(M-N)
30	B ₂	224(0.0)	225(0.0)	218(0.0)	215(0.0)	rot(Me in Et), rot(m-ring, y)
31	B ₂	296(0.1)	295(0.1)	267(1.5)	236(4.3)	r(M-N), IPB(Me)
32	B ₁	291(0.0)	292(0.2)	246(0.6)	238(0.6)	fold(m-ring, ax NN), OPB(M)
33	B ₃	325(0.2)	324(0.3)	279(0.9)	244(4.9)	r(M-N)
34	A	257(0.0)	257(0.0)	248(0.0)	246(0.0)	sci(NMN), sad
35	B ₂	257(0.0)	254(0.0)	260(0.0)	265(0.0)	OPB(C _m), rot(m-ring, y), OPB(Me)
36	B ₁	256(0.4)	258(0.1)	278(0.2)	269(0.2)	fold(m-ring, ax NN), OPB(Me), OPB(M)
37	A	274(0.0)	274(0.0)	270(0.0)	270(0.0)	rot(Me in Et), rot(m-ring, x,y)
38	B ₃	283(0.0)	282(0.0)	270(1.1)	273(0.0)	rot(m-ring, x), OPB(C _m), OPB(Me)
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'' _α C _m C'' _α 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'' _α C _m C'' _α N, ax NN), OPB(Me, Et)
44	A	344(0.0)	343(0.0)	338(0.0)	339(0.0)	rot(Py, C _α C _α)
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)	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), φ(C _β 'C1C2)
49	B ₁	411(3.9)	411(3.8)	408(5.5)	409(6.2)	γ(C _m -C _α -C _β -C _β)
50	A	455(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) IPB
52	B ₃	503(1.3)	500(1.1)	502(3.2)	502(6.5)	twist(m-ring), fold(m-ring, ax C' _α C' _α)
53	A	520(0.0)	519(0.0)	518(0.0)	518(0.0)	twist(m-ring), def(C _β -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' _α C' _α)
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'' _α C'' _α), rot(Py, MN)
57	B ₁	560(0.1)	559(0.1)	563(0.1)	566(0.1)	fold(m-ring, ax C _α C _α), rot(Py, MN), r(C _β '-C1)
58	B ₁	606(0.1)	605(0.1)	607(0.1)	609(0.1)	fold(m-ring, ax C _α C _α)
59	B ₃	613(0.9)	613(0.7)	612(0.9)	611(1.2)	r(C _β '-C1), IPB(Me,Et), def(Py)
60	B ₂	619(0.5)	619(0.4)	617(0.4)	616(0.7)	r(C _β '-C _{Me}), IPB(Me,Et), def(Py)

*) 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)

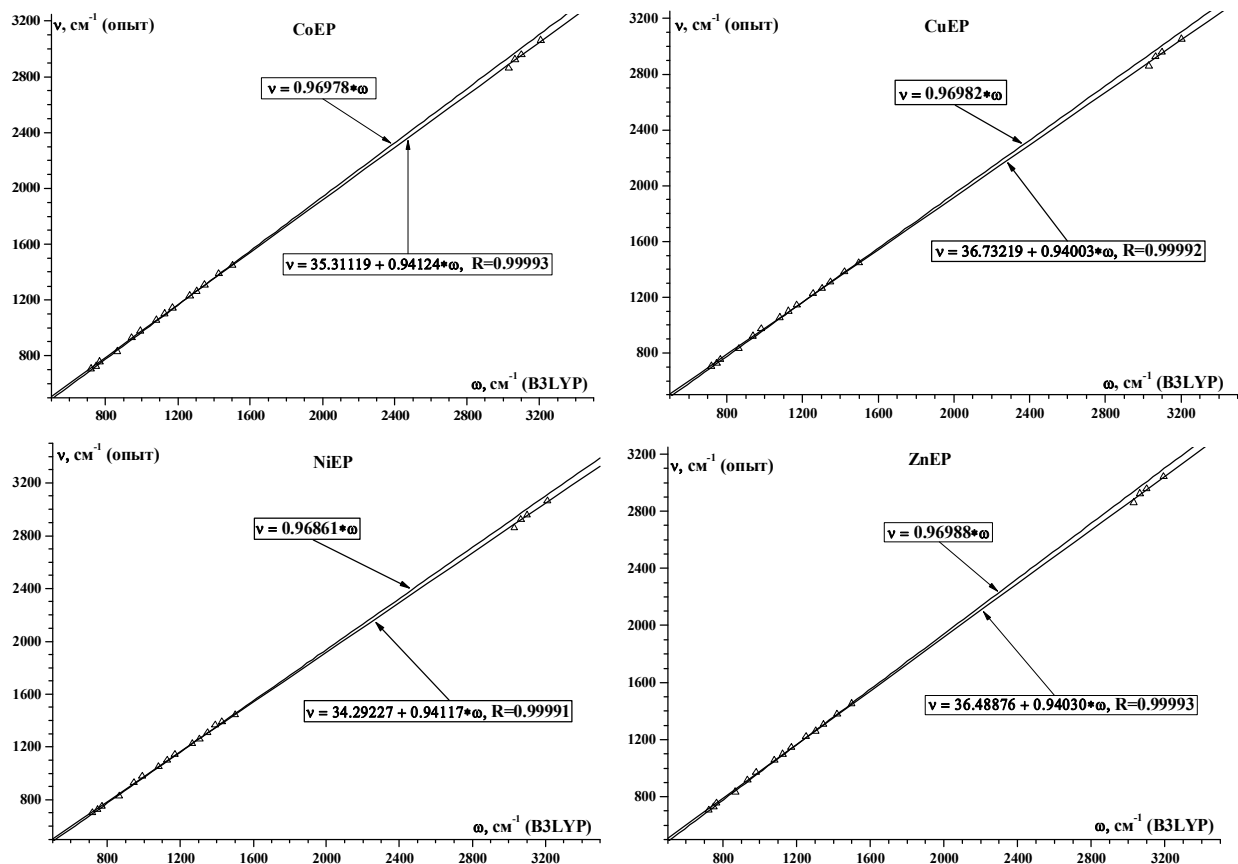


Рисунок S1. Корреляционные зависимости $\nu = f(\omega)$: ν и ω - положения максимумов полос в экспериментальном и модельном спектрах, соответственно. R- коэффициент корреляции.