

New J. Chem. ART-02-2014-000212

NH...O and OH...O interactions of glycine derivatives with squaric acid

Michalina Anioła, Zofia Dega-Szafran, Andrzej Katrusiak and Mirosław Szafran

Table S3. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complexes of squaric acid with glycine (**1**), sarcosine (**2**), dimethylglycine (**3**) and betaine (**4**).

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U _{eq}	Atom	x	y	z	U _{eq}
1									
C(1)	8250(1)	11728(2)	9219(1)	24(1)					
C(2)	8295(1)	10837(2)	10033(1)	25(1)					
C(3)	9080(1)	11532(2)	10341(1)	28(1)					
C(4)	9053(1)	12414(2)	9542(1)	29(1)					
O(1)	7754(1)	11845(1)	8543(1)	31(1)					
O(2)	7858(1)	9878(1)	10353(1)	36(1)					
O(3)	9569(1)	11407(2)	11041(1)	42(1)					
O(4)	9513(1)	13373(2)	9257(1)	48(1)					
N(1)	11986(1)	10371(2)	12811(1)	28(1)	N(1')	8586(1)	13570(2)	5551(1)	37(1)
C(5)	11502(1)	11972(2)	11527(1)	26(1)	C(5')	8996(1)	13728(2)	7107(1)	28(1)
C(6)	11264(1)	11074(2)	12276(1)	27(1)	C(6')	8815(1)	14663(2)	6284(1)	30(1)
O(5)	10911(1)	12417(2)	10936(1)	38(1)	O(5')	9082(1)	14682(2)	7776(1)	45(1)
O(6)	12202(1)	12261(1)	11500(1)	37(1)	O(6')	9046(1)	12292(1)	7125(1)	40(1)
H(3)	10379(13)	12050(20)	11059(13)	45					
H(4)	9205(13)	14220(30)	8226(14)	54					
H(61)	11020(10)	11820(20)	12636(11)	33	H(61')	9259(12)	15300(20)	6240(12)	36
H(62)	10889(11)	10320(20)	12115(11)	33	H(62')	8367(11)	15360(20)	6325(11)	36
H(1N)	12344(11)	11070(20)	12943(11)	33	H(1'N)	8415(12)	12530(30)	5720(13)	44
H(2N)	12174(11)	9600(20)	12515(12)	33	H(2'N)	8132(12)	13920(30)	5169(13)	44
H(3N)	11884(11)	10000(20)	13309(12)	33	H(3'N)	8949(13)	13420(30)	5252(14)	44
2									
C(1)	1265(1)	2789(2)	10394(1)	34(1)					
C(2)	363(1)	2841(2)	10383(1)	35(1)					
C(3)	298(1)	1938(2)	9505(1)	33(1)					
C(4)	1160(1)	1971(2)	9548(1)	32(1)					
O(1)	1851(1)	3244(2)	10938(1)	47(1)					
O(2)	-106(1)	3384(2)	10873(1)	51(1)					
O(3)	-267(1)	1366(2)	8964(1)	45(1)					
O(4)	1627(1)	1403(2)	8979(1)	42(1)					
N(1)	-3637(1)	1678(2)	7694(1)	39(1)					
C(5)	-2262(1)	1371(2)	8483(1)	37(1)					
C(6)	-3110(1)	2091(2)	8511(1)	44(1)					
O(5)	-1787(1)	1792(2)	9201(1)	54(1)					
O(6)	-2056(1)	554(2)	7870(1)	51(1)					
C(7)	-3921(1)	-261(2)	7618(1)	47(1)					
O(1W)	0	-853(2)	7500	37(1)					
H(3)	-1261(12)	1520(30)	9126(12)	64					
H(4)	2196(11)	1610(20)	9133(10)	51					
H(61)	-3277	1520	8998	53					
H(62)	-3091	3421	8603	53					
H(1N)	-4117(9)	2460(20)	7662(9)	47					
H(2N)	-3352(9)	1950(20)	7242(10)	47					
H(71)	-4235	-442	7061	57					
H(72)	-4251	-521	8073	57					
H(73)	-3462	-1080	7673	57					
H(1W)	41(9)	-140(20)	7069(9)	44					

3									
C(1)	2704(1)	5777(2)	3824(1)	18(1)	C(1')	3381(1)	5486(2)	1372(1)	18(1)
C(2)	1857(1)	5841(2)	3851(1)	18(1)	C(2')	3150(1)	5071(2)	468(1)	18(1)
C(3)	2178(1)	5352(2)	4718(1)	17(1)	C(3')	2289(1)	5167(2)	432(1)	18(1)
C(4)	2975(1)	5337(2)	4683(1)	18(1)	C(4')	2533(1)	5584(2)	1278(1)	17(1)
O(1)	3024(1)	5979(2)	3287(1)	24(1)	O(1')	4014(1)	5644(2)	1940(1)	23(1)
O(2)	1202(1)	6164(2)	3353(1)	23(1)	O(2')	3509(1)	4804(2)	-26(1)	26(1)
O(3)	1834(1)	5055(2)	5263(1)	23(1)	O(3')	1627(1)	4981(2)	-120(1)	24(1)
O(4)	3693(1)	5053(2)	5188(1)	22(1)	O(4')	2103(1)	5918(2)	1768(1)	23(1)
N(1)	4467(1)	4076(2)	8358(1)	19(1)	N(1')	335(1)	3395(2)	-3509(1)	19(1)
C(5)	3380(1)	4262(2)	7011(1)	19(1)	C(5')	1015(1)	3874(2)	-2045(1)	18(1)
C(6)	3618(1)	3605(3)	7889(1)	22(1)	C(6')	1049(1)	2865(2)	-2814(1)	19(1)
O(5)	2628(1)	4384(2)	6673(1)	26(1)	O(5')	1706(1)	3789(2)	-1471(1)	25(1)
O(6)	3912(1)	4532(2)	6685(1)	23(1)	O(6')	399(1)	4610(2)	-1987(1)	24(1)
C(7)	4566(1)	6261(2)	8623(1)	24(1)	C(7')	345(1)	5572(3)	-3755(1)	28(1)
C(8)	4758(1)	2657(2)	9061(1)	26(1)	C(8')	255(1)	1995(3)	-4215(1)	27(1)
H(3)	2176	4863	5704	28	H(3')	1668(10)	4310(20)	-984(11)	27
H(4)	3708(10)	4850(20)	5691(11)	26	H(4')	2429(10)	6000(30)	2315(11)	27
H(61)	3548(9)	2100(20)	7884(10)	27	H(61')	1521(10)	3250(20)	-2928(9)	23
H(62)	3300(10)	4220(20)	8183(10)	27	H(62')	1049(9)	1400(30)	-2728(9)	23
H(N1)	4754(9)	3890(20)	8017(10)	23	H(N1')	-118(10)	3260(20)	-3352(9)	23
H(71)	4371(10)	7130(30)	8127(10)	28	H(71')	409(10)	6450(30)	-3260(11)	34
H(72)	4253(10)	6480(30)	8986(10)	28	H(72')	-166(11)	5860(30)	-4189(11)	34
H(73)	5117(11)	6480(20)	8900(10)	28	H(73')	786(11)	5710(30)	-4003(10)	33
H(81)	4717(10)	1290(30)	8850(10)	31	H(81')	251(10)	600(30)	-4029(10)	32
H(82)	5301(10)	3040(30)	9387(10)	31	H(82')	719(10)	2250(20)	-4431(10)	32
H(83)	4408(10)	2810(30)	9384(10)	31	H(83')	-263(10)	2290(20)	-4649(10)	32
4									
C(1)	2660(2)	1749(5)	4761(2)	40(1)	C(1')	4896(2)	-6649(5)	3902(2)	43(1)
C(2)	3083(2)	-160(5)	4690(3)	38(1)	C(2')	4470(2)	-4756(6)	3954(3)	37(1)
C(3)	3277(2)	692(6)	3917(2)	37(1)	C(3')	4248(2)	-5641(6)	4707(2)	36(1)
C(4)	2884(2)	2523(5)	3954(2)	40(1)	C(4')	4634(2)	-7528(5)	4673(2)	41(1)
O(1)	2290(1)	2366(4)	5253(2)	64(1)	O(1')	5302(1)	-7210(4)	3448(2)	71(1)
O(2)	3189(1)	-1765(4)	5155(2)	53(1)	O(2')	4377(1)	-3107(4)	3519(1)	54(1)
O(3)	3663(2)	60(4)	3353(2)	54(1)	O(3')	3851(1)	-5093(4)	5260(2)	52(1)
O(4)	2766(1)	4094(4)	3492(2)	63(1)	O(4')	4724(1)	-9180(4)	5118(2)	58(1)
N(1)	12623(1)	11090(4)	2377(2)	37(1)	N(1')	6276(1)	-16220(4)	6176(2)	40(1)
C(5)	1917(2)	8190(5)	3054(3)	43(1)	C(5')	5586(2)	-13305(6)	5548(2)	41(1)
C(6)	1475(2)	10039(5)	3148(3)	34(1)	C(6')	6074(2)	-15018(5)	5409(3)	42(1)
O(5)	1988(1)	7136(4)	3742(2)	54(1)	O(5')	5536(1)	-12081(4)	4891(2)	54(1)
O(6)	2172(2)	7707(5)	2425(2)	86(1)	O(6')	5290(1)	-13122(5)	6149(2)	74(1)
C(7)	1765(2)	12146(6)	1909(3)	56(1)	C(7')	6780(2)	-17699(7)	5911(3)	71(1)
C(8)	943(2)	9426(7)	1839(3)	64(1)	C(8')	6506(2)	-14651(6)	6806(3)	59(1)
C(9)	821(2)	12863(6)	2617(3)	70(1)	C(9')	5777(2)	-17588(6)	6538(2)	58(1)
H(3)	3912(18)	-1210(70)	3490(20)	64	H(3')	3661(17)	-3790(60)	5180(20)	62
H(4)	2183	6007	3661	64	H(4')	5268	-11169	4958	64
H(61)	1128	9477	3442	40	H(61')	5929	-16100	5016	50
H(62)	1656	11175	3488	40	H(62')	6420	-14290	5167	50
H(71)	2045	11029	1739	68	H(71')	6637	-18722	5505	85
H(72)	1966	13200	2254	68	H(72')	6928	-18502	6378	85
H(73)	1607	12885	1434	68	H(73')	7097	-16820	5682	85
H(81)	1221	8299	1672	77	H(81')	6632	-15461	7284	71
H(82)	786	10159	1362	77	H(82')	6194	-13632	6956	71
H(83)	619	8764	2141	77	H(83')	6842	-13848	6587	71
H(91)	1021	13957	2946	83	H(91')	5632	-18611	6133	69
H(92)	499	12216	2927	83	H(92')	5456	-16634	6708	69
H(93)	662	13547	2131	83	H(93')	5926	-18392	7004	69