

СТРОЕНИЕ ДИОКСИМАТОВ ТРИАРИЛСУРЬМЫ И ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ЗАПОЛНЕНИЯ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРЫ АТОМА МЕТАЛЛА

А.Н. Ефремов[✉], О.К. Шарутина, В.В. Шарутин
Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия
[✉]efremovan@susu.ru

Аннотация. На основании данных рентгеноструктурного анализа (РСА) ряда диоксиматов триарилсурьмы $Ar_3Sb(ON=CHR)_2$ проведено сравнительное описание их молекулярных структур и установление особенностей строения. В молекулах диоксиматов триарилсурьмы наблюдаются внутримолекулярные контакты $Sb \cdots N$ (2,728(4)–2,900(6) Å), которые иногда меньше примерно на 1 Å суммы ван-дер-ваальсовых радиусов атомов-партнеров (3,61 Å). Сокращенное расстояние $Sb \cdots N$ не сопровождается ожидаемым удлинением связей N–O в иминокси-группе и не зависит от длин связей Sb–O. Однако укорочение расстояний $Sb \cdots N$ коррелирует с уменьшением валентного угла NOSb. В структурах, содержащих метоксигруппы в арильных лигандах при атоме сурьмы, наблюдаются внутримолекулярные взаимодействия типа $Sb \cdots OMe$. В диоксиматах триарилсурьмы, содержащих разные арильные лиганды при атоме сурьмы, но одинаковые оксиматные зависимости геометрических параметров координационного узла $[SbO_2C_3]$ от природы арильных лигандов не наблюдается, но в некоторых структурах имеет место закономерное удлинение внутримолекулярных расстояний $Sb \cdots N$. Впервые в программе *Solid-G* для диоксиматов триарилсурьмы проведена количественная оценка степени заполнения координационного пространства атома сурьмы в модели телесных углов лигандов (G-параметр) с учетом геометрии молекул в кристаллическом состоянии по результатам РСА, который составил 80,19–85,70 %. Максимальное насыщение координационной сферы (90,93) имеет место в структуре, где наблюдаются внутримолекулярные взаимодействия $Sb \cdots OMe$. В бис(μ_3 -2-оксibenзальдоксимато-О,О',N)-(μ₂-оксо)-тетраарил)дисурьме, где 2-гидроксибензальдоксиматный лиганд является тридентатным мостиковым, а атомы сурьмы гексакоординированы, степень заполнения координационного пространства превышает 90 %.

Ключевые слова: диоксиматы триарилсурьмы, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ, стерический фактор, координационная сфера, G-параметр

Для цитирования: Ефремов А.Н., Шарутина О.К., Шарутин В.В. Строение диоксиматов триарилсурьмы и оценка степени заполнения координационной сферы атома металла // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 4. С. 106–113. DOI: 10.14529/chem240409

Original article
DOI: 10.14529/chem240409

STRUCTURE OF TRIARYLANTIMONY DIOXIMATES AND ASSESSMENT OF THE METAL ATOM COORDINATION SPHERE OCCUPATION DEGREE

A.N. Efremov[✉], O.K. Sharutina, V.V. Sharutin
South Ural State University, Chelyabinsk, Russia
[✉]efremovan@susu.ru

Abstract. On the basis of the X-ray diffraction analysis data for a number of triarylantimony dioximates $Ar_3Sb(ON=CHR)_2$, comparative description of their molecular structures and evaluation of structural features have been carried out. In the triarylantimony dioximate molecules, the $Sb \cdots N$ intramolecular contacts are observed (2.728(4)–2.900(6) Å), which are sometimes smaller by approximately 1 Å than the sum of the van der Waals radii of the partner atoms (3.61 Å). The shortened $Sb \cdots N$ distance is not accompanied

by the expected lengthening of the N–O bonds in the iminoxy group and does not depend on the Sb–O bond lengths. However, the shortening of the Sb···N distances correlates with a decrease in the NOSb bond angle. In structures, containing methoxy groups in aryl ligands at the antimony atom, the intramolecular interactions of the Sb···OMe type are observed. In triarylantimony dioximates, containing different aryl ligands at the antimony atom, but identical oximate ligands, no dependences of the [SbO₂C₃] coordination unit geometric parameters on the nature of aryl ligands are observed, but in some structures there is a regular elongation of the Sb···N intramolecular distances. For the first time in the *Solid-G* program for triarylantimony dioximates, the quantitative assessment of the antimony atom coordination sphere occupation degree in the model of ligand solid angles (G-parameter) has been carried out, taking into account the molecular geometry in the crystalline state according to the X-ray diffraction analysis results, which amounts to 80.19–85.70%. The maximum coordination sphere occupation (90.93%) occurs in the structure where the Sb···OMe intramolecular interactions are observed. In *bis*(μ_3 -2-oxybenzaldoximate-O,O',N)-(μ_2 -oxo)-tetraaryl)disantimony, where the 2-hydroxybenzaldoximate ligand is tridentate, it is a bridging one, while the antimony atoms are hexacoordinated, the coordination sphere occupation degree exceeds 90%.

Keywords: triarylantimony dioximates, molecular structure, X-ray diffraction analysis, G-factor, steric factor, coordination sphere

For citation: Efremov A.N., Sharutina O.K., Sharutin V.V. Structure of triarylantimony dioximates and assessment of the metal atom coordination sphere occupation degree. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2024;16(4):106–113. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem240409

Введение

Органические соединения сурьмы(V) представляют интерес с фундаментальной точки зрения, поскольку для них характерны разнообразные структуры, в которых проявляются внутри- и межмолекулярные взаимодействия. К таким соединениям относятся диоксиматы триарилсурьмы, в молекулах которых наблюдаются внутримолекулярные взаимодействия атома металла с атомами азота оксиматных лигандов. Однако диоксиматы триарилсурьмы в литературе представлены относительно небольшим рядом соединений [1–17], при этом большинство из них являются производными трифенил-, три(*орто*-толил)- и три(*мета*-толил)сурьмы. Диоксиматы три(*пара*-толил)- и *трис*(5-бром-2-метоксифенил)сурьмы представлены единичными примерами, диоксиматы *трис*(4-фторфенил)- и *трис*(3-фторфенил)сурьмы ранее не были известны.

Установлено, что объем лигандов, окружающих центральный атом в элементоорганических соединениях, влияет на их реакционную способность. Одним из методов оценки заполнения координационного пространства центрального атома лигандами в металлоорганических комплексах является расчет G-параметра, который характеризует стерические размеры лигандов и может быть использован как для уже синтезированных комплексов, так и для предсказания возможности получения неизвестных соединений [18]. Расчет G-параметра для диоксиматов триарилсурьмы ранее не проводился.

Экспериментальная часть

Расчет степени заполнения координационной сферы атома металла всеми лигандами (G-параметр, %), доля координационного пространства, занимаемого каждым лигандом на расстоянии в 2,28 Å от атома металла (параметр G_{2,28}, %), а также перекрывания телесных углов лигандов (G_v, %) проводили в программе *Solid-G* [18]. Погрешность рассчитанных параметров составила ±0,02 %.

Файл с расширением .xyz, необходимый для расчетов в программе *Solid-G*, формировали с помощью программ *OLEX2* [19] и *SHELXL/PC* [20].

Расчет искомых параметров проводили очередностью команд, отображаемых в интерфейсе программы *Solid-G*:

1. *Select Atom* – выбор центрального атома, относительно которого будут проводиться расчёты всех параметров.
2. *Identify Ligands* – определение лигандов, связанных с центральным атомом.
3. *Calculate Angles* – запуск расчетов телесных углов и G-параметров.
4. *Start Viewer* – визуализация рассчитанных G-параметров лигандов.

Методики синтеза соединений **1–13** и рентгеновские эксперименты кристаллов осуществлены ранее и опубликованы в работах [21–24].

Расчет G-параметров проведен с учетом геометрии молекул в кристаллическом состоянии по результатам PCA.

Рентгеноструктурный анализ (PCA) кристаллов соединений проведен на автоматическом четырехкружном дифрактометре D8 QUEST фирмы Bruker (Mo K α -излучение, $\lambda = 0,71073$ Å, графитовый монохроматор) при 293 К. Сбор, редактирование данных и уточнение параметров элементарной ячейки, а также учет поглощения проведены с помощью программ SMART и SAINT-Plus [25]. Все расчеты по определению и уточнению структур выполнены с помощью программ SHELXL/PC [20] и OLEX2 [19]. Структуры определены прямым методом и уточнены методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Положение атомов водорода уточняли по модели наездника ($U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1,2U_{\text{экв}}(\text{C})$). В некоторых структурах отдельные фрагменты молекул, сольватные молекулы растворителя были разупорядочены при условиях ограничений на их геометрию и параметры колебаний эллипсоидов смещений. Заселенности разупорядоченных атомов были вычислены автоматически. В кристалле соединения **11** присутствуют два типа кристаллографически независимых молекул (**а** и **б**). Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№№ 1465384 (**1**), 1062231 (**2**), 1059962 (**3**), 1060054 (**4**), 2178726 (**5**), 1471842 (**6**), 1465109 (**7**), 1471948 (**8**), 1060387 (**9**), 2064391 (**10**), 1820147 (**11**), 1834110 (**12**), 1835929 (**13**); deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk). Основные длины связей и валентные углы соединений **1–10** приведены в табл. 1, соединений **11–13** – в табл. 2.

Таблица 1

Основные геометрические параметры молекул диоксиматов триарилсурьмы Ar₃Sb(ON=CHAr')₂

№	Ar, Ar'	Интервал изменения $\varphi(\text{CSbC})$, град.	$\varphi(\text{NOSb})$, град.	Ср. знач. $d(\text{Sb}-\text{C})$, Å	$d(\text{Sb}-\text{O})$, Å	$d(\text{N}-\text{O})$, Å	$d(\text{Sb}\cdots\text{N})$, Å
1	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ Br-2	116,1(2)–122,3(2)	109,1(2), 109,3(2)	2,107(4)	2,072(3), 2,075(3)	1,372(5), 1,386(5)	2,841(3), 2,844(4)
2	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ OH-2	118,3(1)–121,0(1)	107,9(2), 108,2(2)	2,103(4)	2,081(2), 2,086(2)	1,387(3), 1,402(3)	2,839(4), 2,850(3)
3	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -2	116,3(2)–123,4(2)	102,7(2), 109,2(2)	2,104(4)	2,069(3), 2,071(3)	1,381(5), 1,390(4)	2,728(4), 2,849(3)
4	<i>p</i> -Tol, C ₄ H ₃ O	116,2(2)–123,8(3)	108,6(5), 109,6(4)	2,114(6)	2,075(5), 2,076(5)	1,372(8), 1,374(10)	2,831(7), 2,847(6)
5	<i>p</i> -Tol, C ₄ H ₂ O-NO ₂ -5	117,4(5)–121,5(4)	108,5(3), 115,3(7)	2,121(8)	2,083(4), 2,109(2)	1,381(7), 1,369(2)	2,840(5), 2,900(6)
6	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-2	117,5(2)–122,6(2)	110,3(2), 112,1(2)	2,111(4)	2,062(3), 2,068(3)	1,385(5), 1,391(4)	2,865(4), 2,883(4)
7	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ OH-2	119,6(2)–120,2(1)	111,4(2), 111,4(2)	2,106(5)	2,081(3), 2,081(3)	1,397(4), 1,397(4)	2,900(1), 2,900(1)
8	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-2	117,5(2)–122,7(2)	112,1(3), 110,0(3)	2,113(5)	2,108(6), 2,112(5)	1,384(6), 1,385(6)	2,884(6), 2,860(5)
9	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -2	116,2(1)–122,9(1)	104,0(2), 110,5(2)	2,113(3)	2,065(2), 2,085(2)	1,382(4), 1,391(3)	2,765(3), 2,866(3)
10	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₄ Br-2	115,2(2)–125,2(2)	112,3(3), 112,9(3)	2,122(6)	2,069(3), 2,072(3)	1,372(6), 1,374(5)	2,887(4), 2,895(4)

Таблица 2

Основные геометрические параметры молекул бис(μ_3 -2-оксибензальдоксимато-О,О',N)-(μ_2 -оксо)-тетракис(арил)дисурьмы **11–13**

№	Ar	$\varphi(\text{CNO})$, град.	Интервал изменения $d(\text{Sb}-\text{C})$, Å	$d(\text{Sb}-\text{O}_{\text{мост}})$, Å	$d(\text{Sb}-\text{O}_{\text{оксимат}})$, Å	$d(\text{Sb}-\text{O}_{\text{окси}})$, Å	$d(\text{Sb}\cdots\text{N})$, Å
11a	<i>p</i> -Tol	115,7(2)	2,108(7)–2,128(6)	1,943(3)	2,101(4)	2,016(4)	2,257(3)
12	3-FC ₆ H ₄	115,7(2), 115,0(2)	2,117(3)–2,136(3)	1,948(2), 1,954(2)	2,076(2), 2,097(2)	2,002(2), 2,010(2)	2,257(3), 2,230(3)
13	4-FC ₆ H ₄	115,7(2), 115,0(2)	2,130(6)–2,139(7)	1,954(4), 1,958(4)	2,094(5), 2,082(4)	2,015(5), 2,019(4)	2,257(3), 2,230(3)

Обсуждение результатов

В молекулах диоксиматов триарилсурьмы **1–10** атом сурьмы имеет координацию тригональной бипирамиды с атомами кислорода оксиматных лигандов в аксиальных положениях [21–23] (рис. 1). Молекулы соединения **7** симметричны и содержат винтовую ось четвертого порядка, проходящую через атомы Sb(1), C(11), C(14).

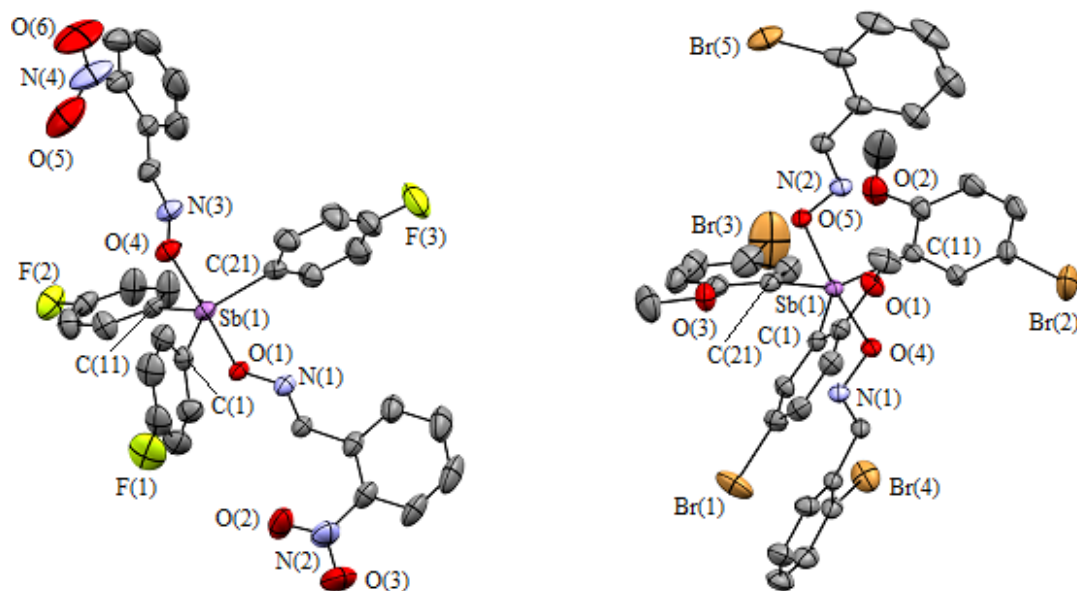


Рис. 1. Молекулярные структуры **9** (слева) и **10** (справа) (атомы водорода не приведены)

В **1–10** суммы экваториальных углов CSbC равны 360° (в пределах погрешности эксперимента), значения индивидуальных углов отклоняются от теоретического не более, чем на 5° . Аксиальные углы OSbO близки к идеальному (180°) (уменьшение не более, чем на 10°).

Фрагменты SbC_3 в структурах диоксиматов триарилсурьмы практически плоские. Наибольшие расстояния $Sb \cdots [C_3]$ наблюдаются в структурах **5** и **10** и составляют 0,068 и 0,073 Å соответственно. В молекуле **7** атом Sb располагается в плоскости $[C_3]$.

В интервале 2,103(4)–2,122(6) Å находятся средние значения длин связей Sb–C. При этом наибольшие значения наблюдаются в молекулах **5** (среднее значение 2,121(8) Å) и **10** (2,122(6) Å). Расстояния Sb–O изменяются в нешироком диапазоне (2,062(3)–2,112(5) Å) и незначительно (не более чем на 0,062 Å) превышают сумму ковалентных радиусов Sb и O (2,05 Å [26]). Длины связей Sb–C во всех структурах превышают расстояния Sb–O, т. е. экваториальные лиганды при атоме сурьмы расположены дальше, чем аксиальные, что является особенностью строения диоксиматов триарилсурьмы.

В молекулах **1–10** наблюдаются внутримолекулярные контакты $Sb \cdots N$ (2,728(4)–2,900(6) Å), которые иногда меньше примерно на 1 Å суммы ван-дер-ваальсовых радиусов атомов-партнеров (3,61 Å [27]). Сокращенное расстояние $Sb \cdots N$ не сопровождается ожидаемым удлинением связей N–O и не зависит от длин связей Sb–O. Однако укорочение расстояний $Sb \cdots N$ приводит к уменьшению валентного угла NOSb.

Расстояния $Sb \cdots OMe$ в структуре **10** составляют 3,035(4), 3,074(6) и 3,165(5) Å, что не превышает сумму ван-дер-ваальсовых радиусов атомов металла и кислорода (3,58 Å) [27]. Данные значения немного больше аналогичных в *трис*(5-бром-2-метоксифенил)сурьме (2,985(1), 3,051(1), 3,052(1) Å) [28].

Анализ данных геометрических параметров диоксиматов триарилсурьмы, содержащих разные арильные лиганды при атоме сурьмы, но одинаковые оксиматные, позволяет сделать вывод о том, что зависимости геометрических параметров координационного узла $[SbO_2C_3]$ от природы арильных лигандов не наблюдается. В структурах с одинаковыми оксиматными лигандами имеет место некоторое удлинение внутримолекулярных расстояний $Sb \cdots N$ в ряду молекул **1**, **8**, **6**, **10**. В соединении **10**, содержащем метоксигруппу во 2-м положении и бром в 5-м положении, обсуждаемые расстояния самые длинные в ряду *бис*(4-бром-бензальдоксиматов) триарилсурьмы.

Ранее было показано, что 2-гидроксибензальдоксим в присутствии пероксида водорода реагирует с трифенилсурьмой с образованием диоксимата трифенилсурьмы [2], а с *трис*(5-бром-2-метоксифенил)сурьмой реакция идет по другой схеме, давая *бис*(μ_3 -2-оксибензальдоксимато-O,O',N)-(μ_2 -оксо)-*тетра*кис(5-бром-2-метоксифенил)дисурьму [29]. Мы установили, что взаимодействие *трис*(3-фторфенил)- и *трис*(4-метилфенил)сурьмы с этим же оксимом в присутствии *трет*-бутилгидропероксида приводит к образованию соединений **7** и **2** соответственно. При проведении реакций с 30%-ным водным раствором пероксида водорода 2-гидроксибензальдоксим проявляет бифункциональные свойства. С повышением степени окисления атома сурьмы наблюдается расщепление одной связи Sb–C, при этом продуктом реакции является биядерный сурьма-органический комплекс, в котором атомы металла шестикоординированы [24].

Предполагаемый нами механизм реакции можно представить схемой:

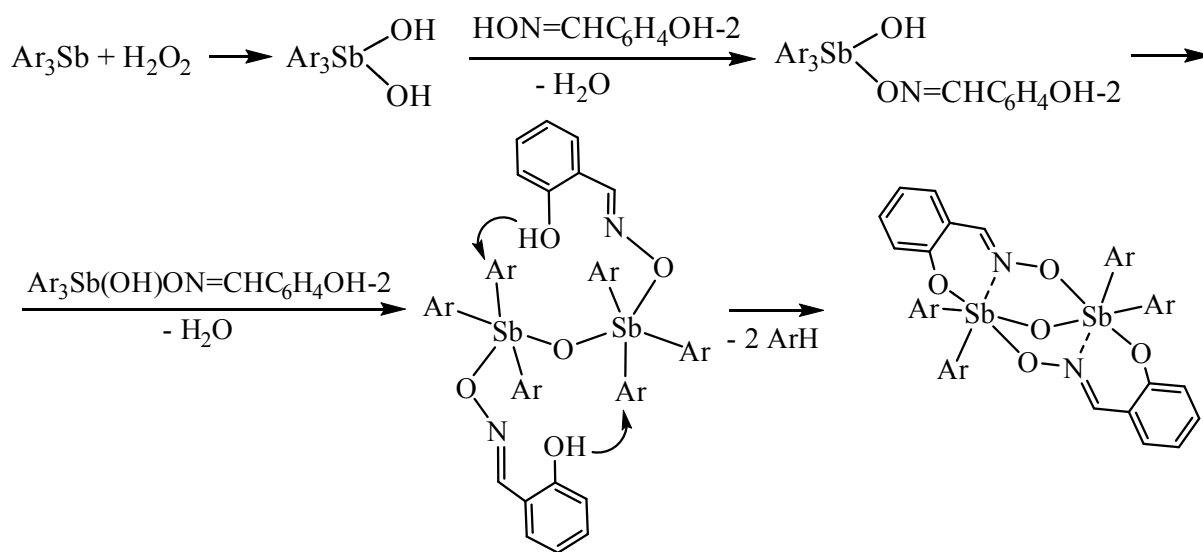


Схема 1

Характер 2-оксибензальдоксиматных лигандов в молекулах **11–13** определяется как триденатный, за счет связывания с одним из атомов Sb через атом кислорода иминокси-группы, а с другим – через атом кислорода гидроксильной группы и координационной связи $\text{Sb} \cdots \text{N}$ (рис. 2–4).

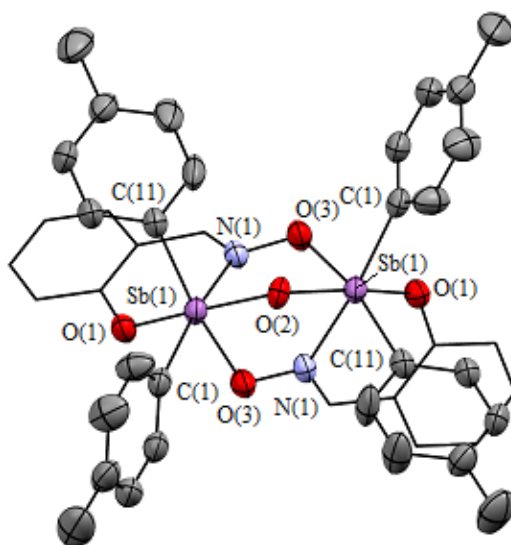


Рис. 2. Молекулярная структура **11а**
(атомы водорода и сольватная молекула толуола не приведены)

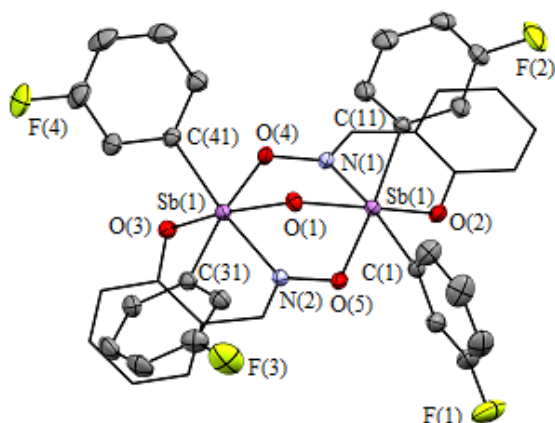


Рис. 3. Молекулярная структура 12 (атомы водорода не приведены)

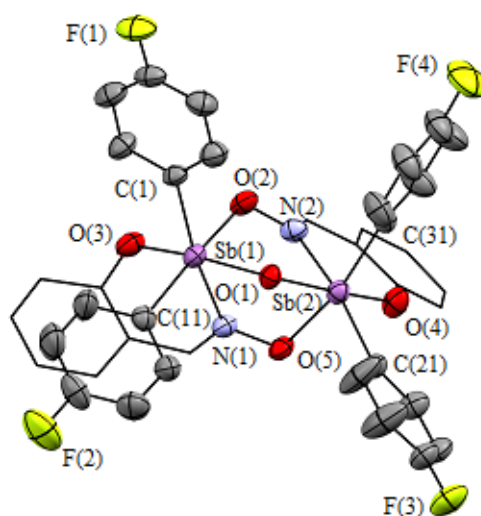


Рис. 4. Молекулярная структура 13 (атомы водорода не приведены)

Координация атомов металла в **11–13** искаженная октаэдрическая: *транс*-углы составляют $162,0(2)^\circ$ – $172,2(2)^\circ$. Длины связей Sb–C варьируют в интервале $2,108(7)$ – $2,139(7)$ Å. Три типа расстояний Sb–O несколько различаются: Sb–O(N=C) – $2,076(2)$ – $2,097(4)$ Å; Sb–O_{мост} – $1,943(3)$ – $1,958(4)$ Å; Sb–O(C_{Ar}) – $2,002(2)$ – $2,020(4)$ Å. Достаточно короткие расстояния Sb···N ($2,230(3)$ – $2,267(5)$ Å при сумме ван-дер-ваальсовых радиусов Sb и N $3,61$ Å [27]) являются доказательством сильного невалентного взаимодействия, которое вызывает уменьшение углов CNO (до $115,0(2)^\circ$ – $116,2(5)^\circ$) по сравнению с 120° .

Электронные эффекты заместителей в арильных радикалах при атоме металла не являются фактором, влияющим на искажение валентных углов и длину связей Sb–O в **11–13**. Наиболее короткие расстояния Sb–C наблюдаются в молекуле **11**, содержащей *пара*-толильные лиганды.

Расстояние между атомами сурьмы жесткого [2.2.1]гептанового фрагмента составляет $3,361(2)$ – $3,378(1)$ Å, что значительно меньше удвоенного ван-дер-ваальсового радиуса Sb ($4,12$ Å [27]).

На основании данных РСА впервые была проведена количественная оценка стерического фактора в молекулах диоксиматов триарилсурьмы по степени заполнения координационной сферы атома сурьмы в модели телесных углов лигандов и выявлена взаимосвязь с наличием внутримолекулярных взаимодействий, приводящих к искажению геометрических характеристик молекул.

Параметр G (%) характеризует процент заполнения координационной сферы атома металла всеми лигандами с учетом областей перекрытия (G_y , %) телесных углов двух и более лигандов. Параметр $G_{2,28}$ (%) оценивает степень заполнения координационного пространства лигандом на расстоянии в $2,28$ Å от атома металла, что позволяет сравнить между собой вклад разных лигандов в заполнение координационной сферы центрального атома.

Согласно расчетам степень заполнения координационного пространства центрального атома (G-параметр) в диоксиматах триарилсурьмы **1–9** составляет 80,19–85,70 % (табл. 3). Параметр $G_{2,28}(\text{Ar})$ практически одинаков во всех структурах и не зависит от наличия заместителей в арильных группах, поэтому заполнение координационной сферы в **1–9** определяется оксиматными лигандами и расстояниями $\text{Sb}\cdots\text{N}$. Так, в группах или парах соединений с одинаковыми оксиматными лигандами (**1, 6, 8; 2, 7** и **3, 9**) наибольшие значения параметра $G_{2,28}$ для оксиматных лигандов имеют место в **1, 2** и **3**, где расстояния $\text{Sb}\cdots\text{N}$ наименьшие (2,841(3), 2,844(4) Å в **1**; 2,839(4), 2,850(3) в Å **2**; 2,728(4), 2,849(3) в Å **3**). В структуре **10** более полное насыщение координационной сферы (90,93 %) обеспечивается, напротив, арильными лигандами, которые формируют внутримолекулярные взаимодействия $\text{Sb}\cdots\text{OMe}$.

В структурах **11–13**, в которых оксиматный лиганд является тридентатным мостиковым, а атомы сурьмы гексакоординированы, степень заполнения координационного пространства превышает 90 % (G_{cp} 93,89 % **11**, 92,30 % **12**, 91,81 % **13**).

Таблица 3

Значения параметров G и $G_{2,28}$ для молекул диоксиматов триарилсурьмы $\text{Ar}_3\text{Sb}(\text{ON}=\text{CHAr}')_2$

№	Ar, Ar'	G, %	$G_{2,28}(\text{Ar})$, %	$G_{2,28}(\text{ON}=\text{CHAr}')$, %
1	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ Br-2	83,55	15,25, 15,33, 15,27	14,02, 14,00
2	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ OH-2	85,70	15,28, 15,33, 15,33	15,24, 15,10
3	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -2	84,60	15,28, 15,24, 15,27	14,09, 14,94
4	<i>p</i> -Tol, C ₄ H ₃ O	83,56	15,51, 15,36, 15,32	13,58, 13,66
5	<i>p</i> -Tol, C ₄ H ₂ O-NO ₂ -5	80,19	15,30, 15,41, 15,33	13,68, 13,62
6	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-2	82,51	15,31, 15,23, 15,35	13,69, 13,83
7	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ OH-2	82,95	15,36, 15,57, 15,35	14,66, 14,66
8	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-2	82,32	15,17, 15,32, 15,37	13,66, 13,85
9	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -2	83,58	15,30, 15,35, 15,36	13,93, 14,74
10	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₄ Br-2	90,93	18,08, 17,97, 17,67	13,65, 13,74

Выводы

С учетом геометрии молекул в кристаллическом состоянии (по данным PCA) впервые проведен количественный расчет степени заполнения координационной сферы атома сурьмы лигандами (G-параметр, %) в диоксиматах триарилсурьмы, что позволяет оценить стерический фактор. G-параметр в молекулах **1–9** варьирует в пределах 80,19–85,70 %. Установлено, что арильные группы, не имеющие координирующих центров, способных образовывать невалентные взаимодействия с атомом сурьмы, вносят примерно одинаковый вклад в насыщение координационной сферы центрального атома, и поэтому G-параметр определяется, главным образом, вкладами оксиматных лигандов. Насыщение координационного пространства центрального атома в соединении **10** (G 90,93 %) обусловлено арильными лигандами, которые образуют внутримолекулярные невалентные взаимодействия $\text{Sb}\cdots\text{OMe}$. Заполняемость координационной сферы металла в соединениях **11–13**, в которых атомы сурьмы гексакоординированы, превышает 90 %.

Список источников

1. Sharutin V.V., Molokova O.V., Sharutina O.K. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2004. V. 74, No. 10. P. 1485. DOI: 10.1007/s11176-005-0041-4.
2. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Molokova O.V. // Russ. J. Inorg. Chem. 2012. V. 57, No. 6. P. 832. DOI: 10.1134/S0036023612010226.
3. Gupta A., Sharma R.K., Bohra R. et al. // Polyhedron. 2002. V. 21. P. 2387. DOI: 10.1016/S0277-5387(02)01155-5.
4. Yin H., Quan L., Li L. // Inorg. Chem. Commun. 2008. V. 11. P. 1121. DOI: 10.1016/j.inoche.2008.06.017.
5. Dodonov V.A., Gushchin A.V., Gor'kaev D.A. et al. // Russ. Chem. Bull. 2002. V. 51. P. 1051. DOI: 10.1023/A:1019634307064.
6. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Molokova O.V. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2002. V. 28, No. 7. P. 464. DOI: 10.1023/A:1016293009968.

7. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Molokova O.V. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2001. V. 71, No. 8. P. 1243. DOI: 10.1023/A:1013220911661.
8. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Artem'eva E.V. et al. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2014. V. 6, No. 2. P. 5. EDN: SAUKZV
9. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Artem'eva E.V. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2015. V. 60, No. 2. P. 170. DOI: 10.1134/S0036023615020138.
10. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Gabitova D.M. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62, No. 1. P. 55. DOI: 10.1134/S003602361701017X.
11. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Artem'eva E.V. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2016. V. 86, No. 12. P. 2671. DOI: 10.1134/S1070363216120161.
12. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Artem'eva E.V. et al. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2015. V. 7, No. 2. P. 17. EDN: TQIWUT
13. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Artem'eva E.V. et al. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2016. V. 8, No. 2. P. 61. DOI: 10.14529/chem160207.
14. Artem'eva E.V., Makerova M.S., Sharutin V.V. et al. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2017. V. 9, No. 2. P. 50. DOI: 10.14529/chem170207.
15. Молокова О.В. Оксиматы тетра- и триарилсурьмы. Синтез и строение: дис. ... канд. хим. наук. Благовещенск, 2001. 118 с.
16. Sharutin V.V., Poddel'sky A.I., Sharutina O.K. // Russ. J. Coord. Chem. 2020. V. 46. P. 663. DOI: 10.1134/s1070328420100012.
17. Cambridge Crystallographic Database. Release 2023. UK: University of Cambridge.
18. Guzei I.A., Wendt M. // Dalton Trans. 2006. V. 33. P. 3991. DOI: 10.1039/b605102b.
19. Bruker. SHELXTL/PC. Versions 5.10. An Integrated System for Solving, Refining and Displaying Crystal Structures from Diffraction Data. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
20. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Cryst. 2009. V. 42. P. 339. DOI: 10.1107/S0021889808042726.
21. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н. // Бутлеровские сообщения. 2016. Т. 47. С. 145. EDN: XHTWFD
22. Sharutin V.V., O.K. Sharutina, A.N. Efremov // Russ. J. Coord. Chem. 2017. V. 43. P. 526. DOI: 10.1134/S1070328417080073.
23. Ефремов А.Н. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2022. Т. 14. С. 34. DOI: 10.14529/chem220403.
24. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. P. 597. DOI: 10.1134/S0036023619050188.
25. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
26. Cordero B., Gómez V., Platero-Prats A.E. et al. // Dalton Trans. 2008. V. 21. P. 2832. DOI: 10.1039/B801115J.
27. Mantina M., Chamberlin A.C., Valero R. et al. // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. P. 5806. DOI: 10.1021/jp8111556.
28. Sharutin V.V., Senchurin V.S., Sharutina O.K. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2011. V. 81. P. 2102. DOI: 10.1134/S1070363211100100.
29. Sharutin V.V., Sharutina O.K. // Russ. J. Inorg. Chem. 2014. V. 59. P. 1263. DOI: 10.1134/S0036023614110229.

Ефремов Андрей Николаевич – кандидат химических наук, доцент кафедры теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: efremovan@susu.ru

Шарутина Ольга Константиновна – доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: sharutinaok@susu.ru

Шарутин Владимир Викторович – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник управления научной и инновационной деятельности, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: sharutin50@mail.ru.

*Статья поступила в редакцию 15 июня 2024 г.
The article was submitted 15 June 2024.*