Научная статья УДК 546.865+547.53.024+547.581+548.312.5+548.73 DOI: 10.14529/chem250202

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ЗАПОЛНЕНИЯ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРЫ АТОМА МЕТАЛЛА В ДИКАРБОКСИЛАТАХ ТРИАРИЛСУРЬМЫ И µ₂-ОКСО-*БИС*[(КАРБОКСИЛАТО)ТРИАРИЛСУРЬМЕ]

А.Н. Ефремов, В.В. Шарутин[⊠], О.К. Шарутина

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия ^{III} sharutin50@mail.ru

> Аннотация. На основании данных рентгеноструктурного анализа сорока дикарбоксилатов триарилсурьмы и семи μ_2 -оксо-*бис*[(карбоксилато)триарилсурьмы] впервые была проведена количественная оценка степени заполнения координационной сферы атома металла в модели телесных углов лигандов для выявления взаимосвязи степени заполнения координационного пространства (G-параметр) с наличием внутримолекулярных взаимодействий, приводящих к искажению геометрических характеристик молекул. G-параметр (%) для молекул дикарбоксилатов триарилсурьмы варьирует в пределах 80,19-94,90 %. Наиболее характерны значения Gпараметра от 86 до 88,5 %. Максимально насыщенные координационные сферы центрального атома (более 90 %) обнаружены для соединений, содержащих метоксигруппы в арильных лигандах, которые координируют на атом сурьмы атомами кислорода. Высокие значения G-параметра (89,41–91,34 %) имеют структуры в которых насыщение координационной сферы обусловлено сильными невалентными взаимодействиями Sb····O(=C) (2,543(1)-2,856(6) Å). Стерическая перегруженность приводит к искажению геометрических характеристик молекул, в частности к увеличению одного из экваториальных углов CSbC до 159,3(1)°. В соединениях общей формулы [Ar₃SbOC(O)R]₂O параметр G варьирует в пределах 86,95–91,05 %, что на 2–4 % больше, чем в дикарбоксилатах триарилсурьмы с аналогичными карбоксилатными лигандами. Параметр G для молекул с линейным строением центрального фрагмента Sb-O-Sb в среднем меньше, чем с угловым.

> Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 1821409 (1), 1979844 (2), 1980334 (3), 2121388 (4), 850119 (5), 2089436 (6), 2127828 (7), 1573780 (8), 1573014 (9), 1573486 (10),1883064 (11),1883072 (12), 2055551 (13), 1883065 (14), 1883074 (15), 1573983 (16), 1031560 (17), 2055594 (18), 1015668 (19), 1010868 (20), 1919919 (21), 1880056 (22), 1884115 (23), 1462857 (24), 1576023 (25), 1478437 (26), 1576022 (27), 1457885 (28), 1457894 (29), 1576967 (30), 2178731 (31), 1462849 (32), 2045964 (33), 2060290 (34), 2074511 (35), 2048157 (36), 2041587 (37), 2055804 (38), 2051941 (39), 2077192 (40), 1840588 (41), 2217059 (42), 2225642 (43), 2233180 (44), 2233088 (45), 1841803 (46), 1840585 (47); deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk).

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

> Для цитирования: Ефремов А.Н., Шарутин В.В., Шарутина О.К. Оценка степени заполнения координационной сферы атома металла в дикарбоксилатах триарилсурьмы и µ2-оксобис[(карбоксилато)триарилсурьме] // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17, № 2. С. 54– 64. DOI: 10.14529/chem250202

[©] Ефремов А.Н., Шарутин В.В., Шарутина О.К., 2025.

Original article DOI: 10.14529/chem250202

ASSESSMENT OF THE METAL ATOM COORDINATION SPHERE OCCUPATION DEGREE IN TRIARYLANTIMONY DICARBOXYLATES AND µ₂-OXO-*BIS*[(CARBOXYLATO)TRIARYLANTIMONY]

A.N. Efremov, V.V. Sharutin[™], O.K. Sharutina

South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

[™]sharutin50@mail.ru

Abstract. On the basis of the X-ray diffraction analysis data for forty triarylantimony dicarboxylates and seven μ_2 -oxo-*bis*[(carboxylato)triarylantimony], a quantitative assessment of the metal atom coordination sphere occupation degree in the model of ligand solid angles was carried out for the first time to identify the relationship between the coordination space (G-factor) occupation degree and the presence of intramolecular interactions leading to distortion of molecular geometric characteristics. The G-factor (%) for triarylantimony dicarboxylate molecules varied within the range of 80.19–94.90%. The most typical values of the G-factor are from 86 to 88.5%. The most saturated coordination spheres of a central atom (more than 90%) were found for the compounds containing methoxy groups in aryl ligands, which coordinate oxygen atoms to the antimony atom. High values of the G-factor (89.41-91.34%) have been found in structures in which the coordination sphere saturation is due to the Sb···O(=C) strong non-valent interactions (2.543(1)-2.856(6) Å). Steric congestion leads to distortion of the molecular geometric characteristics, in particular to an increase in one of the CSbC equatorial angles up to $159.3(1)^{\circ}$. In compounds of the general formula $[Ar_3SbOC(O)R]_2O$, the G-factor varies within the range from 86.95 to 91.05%, which is 2–4% higher than in triarylantimony dicarboxylates with similar carboxylate ligands. The G-factor of molecules with a linear structure of the Sb-O-Sb central fragment is smaller on average than with an angular one.

Complete tables of atomic coordinates, bond lengths and bond angles are deposited in the Cambridge Crystallographic Data Centre (\mathbb{N} 1821409 (1), 1979844 (2), 1980334 (3), 2121388 (4), 850119 (5), 2089436 (6), 2127828 (7), 1573780 (8), 1573014 (9), 1573486 (10),1883064 (11),1883072 (12), 2055551 (13), 1883065 (14), 1883074 (15), 1573983 (16), 1031560 (17), 2055594 (18), 1015668 (19), 1010868 (20), 1919919 (21), 1880056 (22), 1884115 (23), 1462857 (24), 1576023 (25), 1478437 (26), 1576022 (27), 1457885 (28), 1457894 (29), 1576967 (30), 2178731 (31), 1462849 (32), 2045964 (33), 2060290 (34), 2074511 (35), 2048157 (36), 2041587 (37), 2055804 (38), 2051941 (39), 2077192 (40), 1840588 (41), 2217059 (42), 2225642 (43), 2233180 (44), 2233088 (45), 1841803 (46), 1840585 (47); deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk).

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

For citation: Efremov A.N., Sharutin V.V., Sharutina O.K. Assessment of the metal atom coordination sphere occupation degree in triarylantimony dicarboxylates and μ_2 -oxo*bis*[(carboxylato)triarylantimony]. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2025;17(2):54–64. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem250202

Введение

Известно, что на реакционную способность соединения влияет объем лигандов, который определяет доступность центрального атома к действию реагента. Стерические эффекты, создаваемые лигандами, также могут оказывать влияние на искажение координационного полиэдра центрального атома. Чаще всего для количественного описания таких эффектов используют конический угол Толмана (θ), телесный угол (Ω), энергию отталкивания лиганда (E_R), стерические параметры Тафта–Дюбуа (E_S) [1–4].

Одним из методов оценки заполнения координационного пространства центрального атома лигандами в металлоорганических комплексах является расчет G-параметра, который может быть использован как для синтезированных комплексов, так и для предсказания возможности

Химия элементоорганических соединений Organometallic chemistry

получения неизвестных соединений. Этот метод основан на расчете телесного угла лиганда и описывает каждый лиганд процентной долей координационной сферы центрального атома, экранированной лигандом. Ряд исследований G-параметров комплексов Ti, Mo и V с такими лигандами, как замещенные три-, тетразолы, тетрагидрофуран, хлор, показал, что существует связь между G-параметром и стабильностью комплексов [5]. Расчет G-параметра для дикарбоксилатов триарилсурмы, которые являются одним из наиболее изученных классов органических соединений сурьмы(V) [6–11], никогда не проводился.

Экспериментальная часть

Для расчета конических (θ , град.) и телесных (Ω , ср) углов лигандов, степени заполнения координационной сферы атома металла лигандами (G-параметр, %), степени заполнения координационного пространства лигандом на расстоянии в 2,28 Å от атома металла (параметр G_{2,28}, %), а также перекрывания телесных углов лигандов (G_γ, %) использовали программу *Solid-G* [5]. Представленные в работе параметры определены с погрешностью ±0,02 %.

Для осуществления необходимых расчетов в программе *Solid-G* требуется файл с расширением *.xyz*, который должен содержать в себе только тип атома, его номер и координаты. Файл формировали с помощью программ *OLEX2* [12] и *SHELXL/PC* [13].

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.

Синтез соединений и рентгеновские эксперименты их кристаллов осуществлены ранее и описаны в работах [14–32].

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

РСА кристаллов осуществлен на дифрактометре Bruker D8 QUEST (автоматический, четырехкружный, Мо К_{α}-излучение, графитовый монохроматор, $\lambda = 0,71073$ Å). Учет поглощения, сбор, редактирование данных эксперимента, уточнение параметров элементарной ячейки проведены с использованием программ SMART и SAINT-Plus [33]. Структуры определены прямым методом и уточнены (МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов) с помощью программного обеспечения OLEX2 [12] и SHELXL/PC [13]. Протоны помещены в рассчитанные геометрическим способом положения и включены в уточнение структуры в модели «наездника». В некоторых структурах отдельные фрагменты молекул, сольватные молекулы были разупорядочены при условиях ограничений на их геометрию и параметры колебаний эллипсоидов смещений. Заселенности разупорядоченных атомов были вычислены автоматически. В кристаллах соединений 5, 6, 40, 42, 44 и 45 присутствуют по два типа кристаллографически независимых молекул а и б. Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 1821409 (1), 1979844 (2), 1980334 (3), 2121388 (4), 850119 (5), 2089436 (6), 2127828 (7), 1573780 (8), 1573014 (9), 1573486 (10), 1883064 (11), 1883072 (12), 2055551 (13), 1883065 (14), 1883074 (15), 1573983 (16), 1031560 (17), 2055594 (18), 1015668 (19), 1010868 (20), 1919919 (21), 1880056 (22), 1884115 (23), 1462857 (24), 1576023 (25), 1478437 (26), 1576022 (27), 1457885 (28), 1457894 (29), 1576967 (30), 2178731 (31), 1462849 (32), 2045964 (33), 2060290 (34), 2074511 (35), 2048157 (36), 2041587 (37), 2055804 (38), 2051941 (39), 2077192 (40), 1840588 (41), 2217059 (42), 2225642 (43), 2233180 (44), 2233088 (45), 1841803 (46), 1840585 (47); deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk). Основные длины связей и валентные углы приведены в табл. 1 и 2.

Оценка степени заполнения координационной сферы атома металла в дикарбоксилатах триарилсурьмы...

Таблица	1

Основные геометрические і	араметры молекул	л дикарбоксилатов т	риарилсурьмы	Ar ₃ Sb[OC(0)R] ₂

Основные теометрические параметры молекул дикарооксилатов триарилсурвмы Атзор[ОС(О)N]2						
		Наиболь-	0	0		
№	Ar, R	шии угол	d(Sh C)	Ср. знач.	<i>d</i> (Sb····O(=C)), Å	
		$\varphi(CSUC),$	<i>u</i> (30–C), A	a(50-0), A		
1	Ph C ₄ HE ₄ -2 3 4 5	137 2(1)	2 103(2)	2 128(2)	3 110(2) 2 984(2)	
2	$\frac{111, 001142, 3, 1, 5}{2000}$	137,2(1) 135.9(1)	2,103(2)	2,120(2)	3,110(2),2,901(2) 3,033(1),3,033(1)	
2 3	$\frac{111, 0611213-5, 4, 5}{2}$	133,9(1) 140.9(1)	2,103(2) 2 112(3)	2,121(2) 2 122(2)	3,054(2),2,959(3)	
<u> </u>	Ph C H ₂ F ₂ -3 4	137.5(1)	2,112(3) 2 105(2)	2,122(2) 2,120(2)	3,020(1), 3,020(1)	
5a	Ph CF ₂ CF ₂	124.6(2)	2,105(2) 2,095(6)	2,120(2)	3,020(1),3,020(1) 3,193(5),3,225(7)	
56	Ph. CF ₂ CF ₃	124.2(2)	2,087(4)	2,124(4)	3.254(6), 3.212(5)	
6a	Ph. CF ₂ CF ₂ CF ₃	124.3(3)	2.099(7)	2.134(5)	3,223(7), 3,227(7)	
6б	Ph, CF ₂ CF ₂ CF ₃	124,6(3)	2,093(7)	2,133(5)	3,211(7), 3,216(7)	
7	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Cl	135,7(1)	2,108(2)	2,144(2)	3,079(3), 3,054(3)	
8	<i>p</i> -Tol. CH ₂ Br	134.4(1)	2.110(3)	2.131(2)	3.101(4), 3.071(3)	
9	p-Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -3	134,4(2)	2,101(4)	2,116(3)	3,168(3), 3,105(4)	
10	p-Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -3,5	135,8(1)	2,102(3)	2,123(2)	3,061(3), 3,095(2)	
11	$4-FC_{6}H_{4}, C_{6}F_{5}$	122,9(2)	2,101(5)	2,119(3)	3,156(4), 3,326(5)	
12	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ HF ₄ -2,3,4,5	143,0(1)	2,119(3)	2,130(2)	3,065(3), 2,895(3)	
13	$4-FC_{6}H_{4}, C_{6}H_{3}F_{2}-2,5$	143,2(1)	2,121(2)	2,128(2)	2,969(2), 2,845(2)	
14	$4-FC_6H_4$, CF_2CF_3	124,3(1)	2,090(3)	2,142(2)	3,196(3), 3,217(2)	
15	$4-FC_6H_4$, $CF_2CF_2CF_3$	124,5(2)	2,093(4)	2,155(3)	3,202(6), 3,181(6)	
16	$4-FC_6H_4$, CH_2Cl	143,4(1)	2,106(3)	2,130(2)	2,943(2), 2,856(2)	
17	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ -NHC ₆ H ₅ -2	146,7(1)	2,114(3)	2,127(2)	2,753(2), 2,842(2)	
18	$4\text{-FC}_6\text{H}_4, C \equiv CC_6\text{H}_5$	139,3(1)	2,093(2)	2,155(3)	2,947(3), 2,909(3)	
19	4-FC ₆ H ₄ , C ₃ H ₅ -цикло	150,5(1)	2,121(2)	2,135(2)	2,773(2), 2,694(1)	
20	$4-FC_{6}H_{4}, C_{10}H_{15}$	147,3(2)	2,113(4)	2,121(3)	2,856(6), 2,741(3)	
21	$4\text{-FC}_{6}\text{H}_{4}, \text{C}_{2}\text{B}_{10}\text{H}_{11}$	131,5(3)	2,093(6)	2,121(5)	3,287(7), 3,317(7)	
22	$4\text{-FC}_{6}\text{H}_{4}, \text{C}_{2}\text{B}_{10}\text{H}_{10}\text{CH}_{3}\text{-}2$	127,4(2)	2,097(4)	2,123(3)	3,240(4), 3,350(3)	
23	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ HF ₄ -2,3,4,5	142,5(2)	2,113(5)	2,132(3)	2,831(4), 2,926(4)	
24	$3-FC_6H_4$, CH_2Cl	144,5(1)	2,123(3)	2,128(2)	2,808(2), 2,932(2)	
25	$3-FC_6H_4$, CH_2Br	143,0(2)	2,105(6)	2,119(4)	2,814(4), 2,930(5)	
26	$3-FC_6H_4$, $C_6H_4NO_2-2$	141,7(2)	2,106(6)	2,105(6)	3,015(4), 3,005(5)	
27	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -3,5	141,1(1)	2,111(3)	2,127(2)	2,968(2), 2,895(3)	
28	3-FC ₆ H ₄ , CH ₂ C ₆ H ₄ NO ₂ -4	141,0(2)	2,118(3)	2,096(3)	2,986(1), 2,986(1)	
29	$3-FC_6H_4, C_{10}H_{15}$	159,3(1)	2,127(2)	2,143(1)	2,590(1), 2,590(1)	
30	$3-FC_6H_4$, CH=CHPh	153,1(2)	2,116(3)	2,143(3)	2,601(1), 2,601(1)	
31	$3-FC_6H_4$, $C_2B_{10}H_{10}CH_3-2$	131,8(3)	2,107(5)	2,113(3)	3,159(1), 3,159(1)	
32	$3-FC_6H_4$, Ph	156,6(1)	2,122(2)	2,136(1)	2,745(1), 2,543(1)	
33	$2\text{-CH}_{3}\text{O-5-BrC}_{6}\text{H}_{3}, \text{C}_{6}\text{F}_{5}$	124,6(2)	2,105(3)	2,103(2)	3,212(3), 3,338(4)	
34	$2-CH_3O-5-BrC_6H_3, C_6H_3F_2-2,3$	129,2(2)	2,121(4)	2,116(4)	3,068(5), 3,056(5)	
35	$\frac{2\text{-CH}_{3}\text{O}\text{-}5\text{-}\text{BrC}_{6}\text{H}_{3}}{2\text{-}\text{CH}_{6}\text{O}\text{-}5\text{-}\text{CH}_{6}\text{-}10\text{-}\text{C}}$	127,6(1)	2,10/(4)	2,089(3)	3,025(4), 3,081(4)	
30 27	$2-CH_{3}O-3-CIC_{6}H_{3}C_{6}H_{3}F_{2}-2,5$	12/,0(1) 128/(1)	2,113(3) 2,112(2)	2,109(2)	2,902(3), 3,120(2) 3,136(2), 2,141(2)	
37	$2 \text{-CH}_{3}\text{O} - 5 \text{-CIC}_{6}\text{H}_{3} \text{-CF}_{2}\text{BI}$	128,4(1)	2,115(5)	2,123(2)	5,150(5), 5,141(2)	
38	$CH_2OC_6H_3Cl_2-2,4$	120,8(1)	2,125(3)	2,115(2)	3,123(3), 3,171(3)	
39	2-CH ₃ O-5-ClC ₆ H ₃	124.5(1)	2.111(2)	2.106(2)	3,266(3), 3,076(2)	
40	$C_6H_3(NO_2)_2-3,5$	10(4(2)	0.115(0)			
40a	$\frac{2 - CH_3 O C_6 H_4, C_6 H_3 F_2 - 2,5}{2 - CH_3 O C_3 H_2 - C_4 H_2 F_2 - 2,5}$	126,4(3)	2,115(6)	2,122(2)	3,003(7), 3,110(7)	
400	$2-CH_{3}OC_{6}H_{4}, C_{6}H_{3}F_{2}-2,5$	127,4(3)	2,111(7)	2,118(3)	3,120(7), 3,120(6)	

≪ $\rho(O_{\text{Tepm}}SbO_{\text{moct}})$ Наибольший Sb···O(=C)), p(SbO_{MOCT}Sb) $d(Sb-O_{MOCT}),$ rep.m. p(CSbC) знач. Ср. знач. град. цоту град. Ar, град. Ó d(Sb-C), № ≪ R Sb-පි Å 2,216(3),1,957(3), 3,280(4), Ph, 175,5(1),125,7(1),2,106(3),41 146,7(1)2,241(3)CF₂CF₃ 176,8(1) 126,8(1)2,115(3)1,971(3) 3,279(5) (2,229(3))2,233(5),Ph, 175,2(2), 122,0(3), 2,104(6),1,960(4), 3,330(2), 42a 141,6(2)2,212(5) CF₂Br 177,1(2) 125,5(3) 2,099(6) 1,971(4) 3,302(6) (2,223(5))Ph. 180,0 42б 174,5(2) 121,8(3)2,090(6)2,209(5) 1,937(1)3,450(8) CF₂Br Ph, 43 176,1(1) 122,4(1)180.0 2,098(3)2,219(3) 1,937(6) 3,507(4) CF₂CF₂CF₃ 2,184(8), 1,994(6), *p*-Tol, 179.0(3). 2,114(12), 124,7(6), 3,18(1), 139,9(3) 2,197(8) 44a 2,105(5) CH₂Br 178,1(3) 124,8(4) 1,971(6) 3,35(1) (2,191(8))p-Tol, 44б 175,7(4) 124,9(9) 180,0 2,086(16)2,248(13)1,956(1) 3,36(2) CH₂Br 2,193(3), p-Tol, 177,7(1), 123,8(2), 2,117(4),1,971(3), 3,379(4), 139,9(1) 2,176(3) 45a CH₂Cl 178,6(1) 125,8(2) 2,114(5) 1,993(3) 3,184(4) (2, 185(3))p-Tol, 45б 174,9(1) 124,7(2)180.0 2,090(6) 2,200(5) 1,959(1) 3,467(8) CH₂Cl 2,200(4),3-FC₆H₄, 1,957(4), 176,8(1), 129,1(2), 2,118(5), 3,273(5), 2,214(4) 46 145,2(2)CF₂CF₃ 179,1(2) 125,6(2) 2,117(5) 1,979(4) 3,300(5) (2,207(4))3-FC₆H₄, 47 174,9(1) 120.9(3)180,0 2,105(7)2,174(4)1,950(1) 3,420(7) C_6F_5

Основные геометрические параметры молекул µ₂-оксо-бис[(карбоксилато)триарилсурьмы] [Ar₃SbOC(O)R]₂O

Таблица 2

Обсуждение результатов

В молекулах дикарбоксилатов триарилсурьмы атомы сурьмы имеют тригональнобипирамидальную координацию с атомами кислорода карбоксилатных лигандов в аксиальных позициях (рис. 1) [14–31].



Рис. 1. Молекулярное строение дикарбоксилатов триарилсурьмы на примере соединений 2 (слева) и 29 (справа) (атомы водорода не приведены)

Суммы экваториальных углов CSbC в структурах 1–40 составляют 360° (в пределах погрешности эксперимента), однако значения индивидуальных углов часто сильно отличаются друг от друга, и разница может достигать нескольких десятков градусов (например, соединения 19, 29, 30 и 32).

Средние значения связей Sb–C изменяются в узком интервале (2,087(4)–2,127(2) Å), минимальные значения (менее 2,100 Å) наблюдаются в фенильных и 4-фторфенильных производных (см. табл. 1). Расстояния Sb–O (ср. знач. 2,089(3)–2,155(3) Å) практически во всех дикарбоксилатах триарилсурьмы несколько больше среднего значения длин связей Sb–C. В связи с потенциальным бидентатным характером карбоксилатных лигандов в структурах дикарбоксилатов триарилсурьмы имеют место внутримолекулярные контакты между атомами Sb и O карбонильных групп. Расстояния Sb···O(=C) изменяются в пределах 2,543(1)–3,317(7) Å (сумма ван-дерваальсовых радиусов атомов Sb и O 3,58 Å).

Прочность внутримолекулярных контактов, возникающих вследствие донорно-акцепторных взаимодействий, зависит от природы органического радикала в остатке кислоты -OC(O)R и заместителей в арильных группах при атоме сурьмы. Так, чем больше электроотрицательность R, тем заметнее смещение электронной плотности с карбоксильной группы и тем в меньшей степени проявляются донорные свойства карбонильного атома кислорода. Например, в ряду соединений с одинаковыми арильными группами **33**, **34**, **35** электроотрицательность R (C₆F₅, C₆H₃F₂-2,3, Ph) уменьшается, и донорно-акцепторные взаимодействия усиливаются, что приводит к укорочению расстояний Sb···O(=C) (ср. знач. 3,275(3) Å в 33, 3,062(5) Å в 34, 3,053(4) Å в 35). Наличие электроноакцепторных заместителей в арильной группе повышает акцепторные способности атома металла, тем самым приводит к упрочнению внутримолекулярных взаимодействий и сокращению расстояний Sb···O(=C). Так, например, в соединениях 7, 16, 24 с одинаковыми карбоксилатными лигандами и разными арильными группами происходит укорочение расстояний Sb···O(=C) (ср. знач. 3,067(3), 2,900(2), 2,870(2) Å) при появлении атомов фтора в арильных кольцах. Наиболее короткие расстояния Sb···O(=C) (менее 2,8 Å) имеют место в соединениях с донорными группами R в остатках карбоновых кислот и фторированными арильными заместителями, например, в **29** 2,590(1) Å, **30** 2,601(1) Å.

Формирование внутримолекулярных контактов Sb···O(=C) в дикарбоксилатах триарилсурьмы может осуществляться двумя способами: внутри одного экваториального угла CSbC или внутри разных углов, что определяется значениями двугранных углов между плоскостями двух карбоксильных групп. В соединениях 1–4, 7–10, 12, 13, 16–32 двугранные углы между плоскостями карбоксильных групп меньше 16°, угол CSbC с наибольшим значением обнаруживается со стороны контактов Sb···O(=C) и варьирует в пределах 127,4(2)°–159,3(1)°, увеличиваясь с возрастанием прочности контактов. Так, экваториальные углы 150,5(1)°, 153,1(2)°, 156,6(1)°, 159,3(1)° обнаружены в структурах 19, 30, 32, 29 соответственно (рис. 2), при этом средние расстояния Sb···O(=C) составляют 2,734(2) Å, 2,601(1) Å, 2,644(1) Å, 2,590(1) Å.



Рис. 2. Молекулярные структуры 29 (слева) и 32 (справа) (атомы водорода не приведены)

Химия элементоорганических соединений Organometallic chemistry

В молекулах соединений 5 (а и б), 6 (а и б), 11, 14, 15, 33–40 (а и б) двугранный угол между плоскостями карбоксильных групп составляет 45°-66°, вследствие чего взаимодействия Sb···O(=C) осуществляются внутри разных углов CSbC; в этих молекулах экваториальные углы изменяются в интервале 108,0(2)-129,2(2)°. В молекулах соединений 33-40 необычное расположение карбоксильных групп можно объяснить стерическим фактором, обусловленным большим объемом арильных групп с координационными центрами в заместителях (Ar = 2-CH₃O-5-ClC₆H₃, 2-CH₃O-5-BrC₆H₃, 2-CH₃OC₆H₄), обеспечивающими возникновение внутримолекулярных контактов атома металла с атомами кислорода метоксигрупп (расстояния Sb…OCH₃ 3,045(5)-3,197(3) Å). В 5, 6, 11, 14, 15 фактор, определяющий расположение карбоксилатных лигандов, не очевиден.

На основании полученных рентгеноструктурных данных впервые для дикарбоксилатов триарилсурьмы была проведена количественная оценка степени заполнения координационной сферы атома металла в модели телесных углов лигандов. Целью такого исследования было выявление взаимосвязи степени заполнения координационного пространства центрального атома с наличием внутримолекулярных взаимодействий, приводящих к искажению геометрических характеристик молекул.

Параметр G (%) характеризует процент заполнения координационной сферы атома металла всеми лигандами с учетом областей перекрывания (G_{γ} , %) телесных углов двух и более лигандов ($G = (\Sigma \Omega_i/4\pi) \cdot 100$ %). 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 заполняемость координационной сферы центрального атома.

Анализ степени заполнения координационного пространства около атома металла в дикарбоксилатах триарилсурьмы показал, что интервал изменения G-параметра составляет 84,60–94,90 % (табл. 3). Однако, относительно низкий процент заполнения координационной сферы (85,14, 84,79, 84,60 %) наблюдается только для трех структур (11, 21, 22). Наиболее характерны значения G-параметра от 86 до 88,5 %. Максимально насыщенные координационные сферы центрального атома (более 90 %) обнаружены для арильных производных 33–40, содержащих метоксигруппы, которые координируют на атом металла. Кроме того, высокие значения Gпараметра имеют структуры 17 (89,80 %), 19 (89,41 %), 20 (89,58 %), 29(91,34 %), 30 (91,17 %), 32 (90,43 %), в которых насыщение координационной сферы обусловлено сильными невалентными взаимодействиями Sb…O(=C) (2,543(1)–2,856(6) Å).

N₂	Ar, R	G, %	$G_{2,28}(Ar), \%$	$G_{2,28}(OC(O)R), \%$
1	Ph, C ₆ HF ₄ -2,3,4,5	86,97	15,46; 15,45; 15,41	16,00; 15,37
2	Ph; C ₆ H ₂ F ₃ -3;4,5	86,87	15,44; 15,20; 15,45	15,69; 15,69
3	Ph, C ₆ H ₃ F ₂ -2,3	87,21	15,46; 15,48; 15,29	16,09; 15,58
4	Ph, $C_6H_3F_2-3,4$	87,26	15,41; 15,42; 15,26	15,72; 15,72
5a	Ph, CF_2CF_3	86,75	15,33; 15,48; 15,39	15,09; 15,29
5б	Ph, CF_2CF_3	86,33	15,36; 15,39; 15,40	14,95; 14,84
6a	Ph, $CF_2CF_2CF_3$	86,12	15,42; 15,50; 15,39	14,93; 15,23
6б	Ph, $CF_2CF_2CF_3$	86,40	15,32; 15,41; 15,44	14,94; 15,46
7	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Cl	86,07	15,40; 15,23; 15,38	15,64; 15,50
8	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Br	86,02	15,37; 15,22; 15,38	15,57; 15,44
9	p-Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -3	86,82	15,38; 15,42; 15,28	15,04; 15,33
10	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -3,5	86,77	15,39; 15,24; 15,38	15,41; 15,49
11	$4-FC_{6}H_{4}, C_{6}F_{5}$	85,14	15,40; 15,31; 15,43	15,20; 14,81
12	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ HF ₄ -2,3,4,5	87,05	15,45; 15,30; 15,42	16,50; 15,55
13	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,5	87,42	15,39; 15,27; 15,43	16,75; 15,98
14	$4-FC_6H_4$, CF_2CF_3	87,37	15,45; 15,44; 15,39	16,56; 15,90
15	$4-FC_6H_4$, $CF_2CF_2CF_3$	87,14	15,40; 15,41; 15,45	16,30; 16,65
16	4-FC ₆ H ₄ , CH ₂ Cl	88,75	15,40; 15,32; 15,40	16,69; 16,16
17	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ -NHPh-2	89,80	15,34; 15,38; 15,42	17,15; 16,65

Таблица 3 Значения параметров G и G_{2.28} для молекул дикарбоксилатов триарилсурьмы Ar₃Sb[OC(O)R]₂

Mo	۸. P	C 9/	$C = (\Lambda r) \theta$	C = (OC(O)P) %
JN <u>0</u>		U, 70	$G_{2.28}(AI), 70$	$G_{2.28}(OC(O)R), 70$
18	$4\text{-}FC_6H_4, C \equiv CPh$	88,21	15,39; 15,37; 15,45	16,37; 16,11
19	4-FC ₆ H ₄ , C ₃ H ₅ -цикло	89,41	15,28; 15,41; 15,40	17,58; 17,06
20	$4\text{-FC}_{6}\text{H}_{4}, \text{C}_{10}\text{H}_{15}$	89,58	15,31; 15,34; 15,38	17,35; 16,93
21	$4\text{-FC}_{6}\text{H}_{4}, \text{C}_{2}\text{B}_{10}\text{H}_{11}$	84,79	15,45; 15,33; 15,49	14,99; 15,05
22	$4\text{-FC}_{6}\text{H}_{4}, \text{C}_{2}\text{B}_{10}\text{H}_{10}\text{CH}_{3}\text{-}2$	84,60	15,41; 15,42; 15,39	14,96; 15,30
23	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ HF ₄ -2,3,4,5	88,49	15,34; 15,42; 15,52	16,31; 16,77
24	$3-FC_6H_4$, CH_2Cl	88,40	15,33; 15,40; 15,41	16,89; 16,23
25	$3-FC_6H_4$, CH_2Br	88,92	15,30; 15,43; 15,40	16,81; 16,13
26	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -2	89,41	15,56; 15,33; 15,54	17,02; 16,67
27	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -3,5	88,01	15,46; 15,28; 15,44	15,99; 16,44
28	3-FC ₆ H ₄ , CH ₂ C ₆ H ₄ NO ₂ -4	87,54	15,44; 15,33; 15,44	17,48; 17,48
29	$3-FC_6H_4$, $C_{10}H_{15}$	91,34	15,39; 15,25; 15,39	18,40; 18,39
30	$3-FC_6H_4$, CH=CHPh	91,17	15,36; 15,63; 15,36	18,16; 18,17
31	$3-FC_6H_4$, $C_2B_{10}H_{10}CH_3-2$	87,26	15,47; 15,42; 15,46	16,66; 16,66
32	$3-FC_6H_4$, Ph	90,43	15,45; 15,28; 15,40	17,12; 18,67
33	$2-CH_{3}O-5-BrC_{6}H_{3}C_{6}F_{5}$	91,15	17,90; 17,74; 17,88	14,96; 14,76
34	2-CH ₃ O-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,3	93,13	17,80; 17,78; 18,09	15,54; 15,67
35	$2-CH_3O-5-BrC_6H_3$, Ph	94,90	17,73; 18,60; 17,90	15,38; 15,58
36	2-CH ₃ O-5-ClC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,5	93,96	17,65; 17,86; 18,04	15,96; 15,34
37	$2-CH_3O-5-ClC_6H_3$, CF ₂ Br	92,25	17,99; 17,75; 17,89	15,50; 15,70
38	2-CH ₃ O-5-ClC ₆ H ₃ , CH ₂ OC ₆ H ₃ Cl ₂ -2,4	92,22	17,66; 18,05; 17,79	16,13; 16,09
39	2-CH ₃ O-5-ClC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -3,5	92,44	17,99; 17,73; 17,59	15,54; 14,66
40a	2-CH ₃ OC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,5	92,58	17,88; 18,20; 17,69	15,51; 15,30
406	2-CH ₃ OC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,5	93,66	17,68; 18,10; 18,09	15,29; 15,25

Окончание табл. 3

Можно констатировать, что определяющим фактором для увеличения степени заполнения координационного пространства центрального атома является наличие внутримолекулярных взаимодействий с окружающими лигандами, а не их размеры. Так, минимальные значения G обнаружены в структурах **21** и **22** – производных карборанилкарбоновых кислот, в которых внутримолекулярные расстояния Sb…O(=C) соизмеримы с суммой ван-дер-ваальсовых радиусов.

Ранее отмечалось, что в молекулах 5, 6, 11, 14, 15 наблюдается нетипичное для дикарбоксилатов триарилсурьмы расположение карбоксилатных лигандов относительно друг друга. Выявлено, что именно в этих структурах процент координационной сферы, заполняемый областями неблагоприятных взаимодействий лигандов, отсутствует или не превышает 1 %.

Методом РСА также охарактеризовано строение карбоксилатов триарилсурьмы 41–47 с мостиковым атомом кислорода (рис. 3) [32].

В соединениях 41-47 аксиальные углы OSbO близки к 180°. Значения индивидуальных углов CSbC отличаются от теоретического на 1°-10°. Небольшое искажение координационного полиэдра атома сурьмы проявляется в выходе атома металла из экваториальной плоскости [С₃] в сторону мостикового атома кислорода на 0,081-0,210 Å. Средние значения длин связей Sb-C (2,086(16)-2,118(5) Å) сопоставимы с аналогичными в дикарбоксилатах триарилсурьмы. Связи Sb-O_{терм} (2,174(4)-2,248(13) Å) длиннее, чем связи Sb-O_{мост} (1,937(1)-1,994(6) Å). Средние значения расстояний Sb-O_{терм} при этом превышают средние длины связей Sb-O в дикарбоксилатах триарилсурьмы с аналогичными арильными и карбоксилатными лигандами на 0,041-0,117 Å. Основное различие в геометрии молекул соединений [Ar₃SbOC(O)R]₂O заключается в строении фрагмента Sb-O-Sb. В большинстве случаев фрагменты имеют угловую форму и лишь иногда линейную. В молекулах соединений 41-47 углы SbOSb имеют значения 139,9(3)°-146,7(1)° или 180°. Впервые были выделены кристаллы, в ячейках которых одновременно присутствуют молекулы с угловым (42а, 44а, 45а) и линейным (42б, 44б, 45б) центральными фрагментами. Какихлибо закономерных изменений геометрических характеристик изомерных молекул не выявлено. Для молекул 41-47 справедливо: чем ближе значение угла SbOSb к 180°, тем меньше длина связи Sb-О_{мост}.



Рис. 3. Молекулярное строение µ₂-оксо-*бис*[(карбоксилато)триарилсурьмы] на примере соединений 93 (слева) и 98 (справа) (атомы водорода не приведены)

В соединениях ангидридного строения с карбоксилатными лигандами G-параметр варьирует в пределах 86,95–91,05 % (табл. 4), что на 2–4 % больше, чем в дикарбоксилатах триарилсурьмы с аналогичными карбоксилатными лигандами, например, в 7 G 86,07 %, в **45a** G 91,05; 88,57 %, в **456** G 88,20 %.

N⁰	Ar, R	G(Sb1), G(Sb2), %	G _{2.28} (Ar _{Sb1}), %	G _{2.28} (Ar _{Sb2}), %	G _{2,28} (OC(O)R _{Sb1}), %	G _{2,28} (OC(O)R _{Sb2}), %
41	Ph, CF ₂ CF ₃	90,78; 88,05	15,28; 15,52; 15,45	15,40; 15,42; 15,33	15,33	15,12
42a	Ph, CF ₂ Br	86,95; 90,43	15,40; 15,36; 15,41	15,28; 15,34; 15,48	12,29	14,91
426	Ph, CF ₂ Br	89,14; 89,14	15,45; 15,33; 15,38	15,45; 15,33; 15,38	14,14	14,14
43	Ph, CF ₂ CF ₂ CF ₃	88,79; 88,79	15,39; 15,45; 15,43	15,39; 15,45; 15,43	14,04	14,04
44a	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Br	90,93; 88,65	15,24; 15,37; 15,20	15,31; 15,31; 15,18	15,27	14,46
44б	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Br	88,32; 88,32	15,14; 15,22; 14,98	15,14; 15,22; 14,98	13,72	13,72
45a	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Cl	91,05; 88,57	15,32; 15,29; 15,27	15,36; 15,33; 15,36	15,25	14,39
456	<i>p</i> -Tol, CH ₂ Cl	88,20; 88,20	15,29; 15,28; 15,30	15,29; 15,28; 15,30	13,83	13,83
46	3-FC ₆ H ₄ , CF ₂ CF ₃	89,53; 89,90	15,47; 15,40; 15,39	15,35; 15,37; 15,41	15,10	14,94
47	$3-FC_6H_4, C_6F_5$	88,77; 88,77	15,45; 15,33; 15,29	15,45; 15,33; 15,29	14,26	14,26

Таблица 4 Значения параметров G и G_{2.28} для молекул µ₂-оксо-бис[(карбоксилато)триарилсурьмы] [Ar₃SbOC(O)R]₂O

Процент заполнения координационной сферы в молекулах с линейным строением фрагмента Sb–O–Sb в среднем немного меньше (ср. значение 88,64 %), чем с угловым (ср. значение 89,48 %). Однако необходимо отметить, что в молекулах с угловым фрагментом G-параметры двух атомов сурьмы отличаются друг от друга на несколько процентов. Так, например, разница в процентах заполнения координационной сферы атомов сурьмы в 42a составляет ~3,5 %. Низкие значения G-параметров в структурах 426, 43, 446, 456 и 47, имеющих линейный фрагмент Sb–O–Sb, являются следствием более длинных расстояний Sb…O(=C).

Заключение

Впервые проведена количественная оценка заполнения координационной сферы атома сурьмы лигандами (стерический фактор). G-параметр (%) для соединений общей формулы $Ar_3Sb[OC(O)R]_2$ варьирует в пределах 80,19-94,90 %. Насыщение координационного пространства центрального атома ($G \ge 88$ %) обусловлено внутримолекулярными невалентными взаимодействиями Sb···OCH₃ и Sb···O(=C). Стерическая перегруженность приводит к искажению геометрических характеристик молекул. Заполняемость координационной сферы металла в соединениях [$Ar_3SbOC(O)R]_2O$ с мостиковым атомом кислорода на 2–4 % больше, чем в производных $Ar_3Sb[OC(O)R]_2$ с аналогичными лигандами –OC(O)R. Параметр G для молекул с линейным строением центрального фрагмента Sb–O–Sb меньше, чем с угловым.

Список источников

1. Tolman C.A. // Chem. Rev. 1977. V. 77. P. 313. DOI: 10.1021/cr60307a002

2. Brown T.L. // Inorg. Chem. 1992. V. 31. P. 1286. DOI: 10.1021/ic00033a029

3. *Taft R.W.* In: Steric effects in organic chemistry. Eds. M.S. Newman. John Wiley and Sons. Inc. New York. 1956. Ch. 13.

4. Lomas J.S., Pham K.L., Dubois J.E. // J. Am. Chem. Soc. 1977. V. 99. P. 5478. DOI: 10.1021/ja00458a041

5. *Guzei I.A., Wendt M. //* Dalton Trans. 2006. V. 33. P. 3991. DOI: 10.1039/b605102b

6. Cambridge Crystallographic Database. UK: University of Cambridge. 2023.

7. Sharutin V.V., Poddel'sky A.I., Sharutina O.K. // Russ. J. Coord. Chem. 2020. V. 46. P. 663. DOI: 10.1134/s1070328420100012

8. Iftikhar T., Rauf M.K., Sarwar S. et al. // J. Organomet. Chem. 2017. V. 851. P. 89. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2017.09.002

9. Sarwar S., Iftikhar T., Rauf M.K. et al. // Inorg. Chim. Acta. 2018. V. 476. P. 12. DOI: 10.1016/j.ica.2018.02.005

10. Kishore P., Ali J., Narasimhulu G. et al. // J. Chem. Sci. 2018. V. 130. P. 100. DOI: 10.1007/s12039-018-1495-3

11. Saleem L., Altaf A.A., Badshah A. et al. // Inorg. Chim. Acta. 2018. V. 474. P. 148. DOI: 10.1016/j.ica.2018.01.036

12. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Cryst. 2009. V. 42, No. 2. P. 339. DOI: 10.1107/S0021889808042726

13. 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.

14. Efremov A.N., Sharutin V.V., Sharutina O.K. // Russ. J. Struct. Chem. 2022. V. 63. P. 344. DOI: 10.1134/S0022476622030039

15. Ефремов А.Н. // Вестник ЮУрГУ. Сер. Хим. 2022. Т. 14. С. 34. DOI: 10.14529/chem220403

16. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н. // Бутлеровские сообщения. 2014. Т. 39. С. 151. EDN: TOLPAF

17. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2016. V. 61. P. 43. DOI: 10.1134/S003602361601023X

18. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Reshetnikova R.V. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62. P. 1450. DOI: 10.1134/S003602361711016X

19. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2018. V. 44. P. 635. DOI: 10.1134/S107032841810010X

20. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. P. 68. DOI: 10.1134/S0036023619010194

21. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. P. 1229. DOI: 10.1134/S0036023619100139

22. Брегадзе В.И., Глазун С.А., Ефремов А.Н. // Вестник ЮУрГУ. Сер. Хим. 2019. Т. 11. С. 17. DOI: 10.14529/chem190402

23. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2020. V. 65. P. 992. DOI: 10.1134/S0036023620070190

24. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // J. Fluorine Chem. 2020, V. 234. 109517. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2020.109517

25. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Coord. Chem. 2021. V. 47. P. 335. DOI: 10.1134/S1070328421050067

26. *Ефремов А.Н., Шарутин В.В.* // Вестник ЮУрГУ. Сер. Хим. 2021. Т. 13. С. 120. DOI: 10.14529/chem210410

27. Artem'eva E.V., Duffin R.N., Munuganti S. et al. // Polyhedron. 2022. V. 213. 115627. DOI: 10.1016/j.poly.2021.115627

28. *Ефремов А.Н., Шарутин В.В.* // Вестник ЮУрГУ. Сер. Хим. 2022. Т. 14. С. 14. DOI: 10.14529/chem220202

29. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Gen. Chem. 2022. V. 92. P. 265. DOI: 10.1134/S1070363222020177

30. Sharutin V.V., Potemkin V.A., Efremov A.N. et al. // Russ. Chem. Bull. 2022. V. 71. P. 707. DOI: 10.1007/s11172-022-3469-3

31. Галиуллина Д.Р., Ефремов А.Н. // Вестник ЮУрГУ. Сер. Хим. 2021. Т. 14. С. 23. DOI: 10.14529/chem220303

32. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2019. V. 89. P. 76. DOI: 10.1134/S1070363219010146

33. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.

Ефремов Андрей Николаевич – кандидат химических наук, доцент кафедры теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: efremov_an94@mail.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.

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

Статья поступила в редакцию 13 января 2025 г. The article was submitted 13 January 2025.