

Научная статья

УДК 546.865+547.53.024+547.56+548.312.5+548.73

DOI: 10.14529/chem260206

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ЗАПОЛНЕНИЯ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРЫ АТОМА МЕТАЛЛА В МОЛЕКУЛАХ ДИАРОКСИДОВ ТРИАРИЛСУРЬМЫ И μ_2 -ОКСО-БИС[(АРОКСО)ТРИАРИЛСУРЬМЫ]

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

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

[✉] efremov_an94@mail.ru

Аннотация. На основании данных рентгеноструктурного анализа монокристаллов двадцати одного диароксида триарилсурьмы и одиннадцати μ_2 -оксо-бис[(ароксо)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 диароксидов триарилсурьмы варьирует в пределах 83,96–89,97 %, что свидетельствует о том, что координационная сфера центрального атома является стерически насыщенной. Максимальные значения параметра G (88 и 90 %) наблюдаются в молекулах, в которых имеют место внутримолекулярные $\pi \cdots \pi$ -взаимодействия ароматических колец арильного и ароксидных лигандов. Большое значение G-параметра (89,54 %) в структуре бис(2,4,6-трибромфеноксида) трис(пара-толил)сурьмы обусловлено, очевидно, большим стерическим объемом ароксидных лигандов. В соединениях общей формулы $(Ar_3SbOAr)_2O$ параметр G варьирует в пределах 87,93–96,14 % что на 2–4 % больше, чем в диароксидах триарилсурьмы. Наибольшие значения G-параметра соответствуют соединениям, в которых наблюдаются внутримолекулярные контакты $Sb \cdots OMe$ (94,03–96,14 %) или присутствуют объемные ароксидные лиганды (90,68–92,09 %).

Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 2179019 (1), 1476218 (2), 2217062 (3), 1474591 (4), 1483785 (5), 2082753 (6), 1982326 (7), 1470829 (8), 1060629 (9), 1060381 (10), 1474589 (11), 1470476 (12), 1472954 (13), 1971836 (14), 1047500 (15), 1048172 (16), 1048212 (17), 1062337 (18), 1473422 (19), 1473384 (20), 2205070 (21), 1890704 (22), 1976209 (23), 1465099 (24), 1890706 (25), 1060994 (26), 2178725 (27), 1465132 (28), 2064392 (29), 1986167 (30), 1471841 (31), 1064064 (32); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

Ключевые слова: арксиды 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 молекулах диароксидов триарилсурьмы и μ_2 -оксо-бис[(ароксо)триарилсурьмы] // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2026. Т. 18, № 2. С. 70–82. DOI: 10.14529/chem260206

ASSESSMENT OF THE METAL ATOM COORDINATION SPHERE OCCUPATION DEGREE IN THE MOLECULES OF TRIARYLANTIMONY DIAROXYDES AND μ_2 -OXO-BIS[(AROXO)TRIARYLANTIMONY]

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

South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

[✉] efremov_an94@mail.ru

Abstract. Based on the X-ray diffraction analysis data of single crystal twenty-one triarylantimony di-oxides and eleven μ_2 -oxo-bis[(aroxo)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 intramolecular interactions presence leading to distortion of the molecular geometric characteristics. The G-factor (%) for triarylantimony di-oxide molecules varies within 83.96–89.97 %, which indicates that the coordination sphere of the central atom is sterically saturated. The maximum values of the G-factor (88 and 90 %) are observed in molecules in which intramolecular $\pi \cdots \pi$ -interactions of the aromatic rings of the aryl and aroxide ligands take place. The large value of the G-factor (89.54 %) in the structure of *tris*(para-tolyl)antimony bis(2,4,6-tribromophenoxide) is obviously due to the large steric volume of the aroxide ligands. In compounds of the general formula $(Ar_3SbOAr)_2O$, the G-factor varies within 87.93–96.14 %, which is 2–4 % greater than in triarylantimony di-oxides. The highest values of the G-factor correspond to compounds in which intramolecular contacts $Sb \cdots OMe$ are observed (94.03–96.14 %) or bulky aroxide ligands are present (90.68–92.09 %).

Complete tables of atomic coordinates, bond lengths and bond angles are deposited in the Cambridge Crystallographic Data Centre (№2179019 (1), 1476218 (2), 2217062 (3), 1474591 (4), 1483785 (5), 2082753 (6), 1982326 (7), 1470829 (8), 1060629 (9), 1060381 (10), 1474589 (11), 1470476 (12), 1472954 (13), 1971836 (14), 1047500 (15), 1048172 (16), 1048212 (17), 1062337 (18), 1473422 (19), 1473384 (20), 2205070 (21), 1890704 (22), 1976209 (23), 1465099 (24), 1890706 (25), 1060994 (26), 2178725 (27), 1465132 (28), 2064392 (29), 1986167 (30), 1471841 (31), 1064064 (32); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>).

Keywords: triarylantimony aroxydes, 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 the molecules of triarylantimony di-oxides and μ_2 -oxo-bis[(aroxo)triarylantimony]. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2026;18(2):70–82. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem260206

Введение

С фундаментальной точки зрения органические соединения сурьмы(V) представляют большой интерес, поскольку для них характерны разнообразные структуры, в которых проявляются внутри- и межмолекулярные взаимодействия [1–31]. Выявление таких взаимодействий, безусловно, является важной задачей, поскольку развивает представления об их различных типах. Установлено, что в образовании дополнительных внутримолекулярных связей может участвовать атом сурьмы, имеющий незаполненные *d*-орбитали, при условии, если в окружающих его лигандах имеются пространственно доступные атомы с неподеленными электронными парами [10–31]. Возникающие контакты $Sb \cdots E$ увеличивают координационное число атома металла и насыщают его координационную сферу. 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 [32]. Ранее нами был проведен расчет G-параметра для дикарбоксилатов триарилсурьмы [33] и выявлено, что на значения G-параметра (80,19–94,90 %) для молекул дикарбоксилатов триарилсурьмы основное влияние имеют сильные взаимодействия $Sb \cdots O=C$, а не объе-

мы органических групп карбоновых кислот, как ожидалось. В молекулах диоксиматов триарилсурьмы степень заполнения координационного пространства (G-параметр 80,19–85,70 %) также определяется наличием коротких контактов $Sb \cdots N$ [34].

В молекулах диароксидов триарилсурьмы взаимодействия типа $Sb \cdots E$ с лигандами отсутствуют, поэтому представляет интерес осуществить расчет G-параметра для этого класса сурьмаорганических соединений и выявить, какие факторы влияют на степень заполнения координационной сферы центрального атома.

Надо отметить, что для выявления каких-либо закономерностей необходимо иметь достаточно многочисленный ряд структурно охарактеризованных соединений. Однако до последнего времени диароксиды триарилсурьмы в литературе были представлены относительно небольшим числом соединений [35–39], как и биядерные соединения с мостиковым атомом кислорода $(Ar_3SbOAr')_2O$ [40–42]. Нами были синтезированы 32 ароксиды три(*para*-толил)-, *трис*(4-фторфенил)- и *трис*(3-фторфенил)сурьмы, для монокристаллов которых проведены рентгеноструктурные исследования и количественная оценка степени заполнения координационной сферы атома металла в их молекулах.

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 перекрытия телесных углов лигандов (G_v , %) использовали программу *Solid-G* [32]. Представленные в работе параметры определены с погрешностью $\pm 0,02$ %.

Для осуществления необходимых расчетов в программе *Solid-G* требуется файл с расширением .хуз, который должен содержать в себе только тип атома, его номер и координаты. Файл формировали с помощью программ *OLEX2* [43] и *SHELXL/PC* [44].

Расчет искоемых 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 [45–50].

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

PCA кристаллов осуществлен на дифрактометре Bruker D8 QUEST (автоматический, четырехкружный, Mo K_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* [51]. Структуры определены прямым методом и уточнены (МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов) с помощью программного обеспечения *OLEX2* [43] и *SHELXL/PC* [44]. 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 кристалле соединения **29** присутствуют по два типа кристаллографически независимых молекул **a** и **b**. Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 2179019 (**1**), 1476218 (**2**), 2217062 (**3**), 1474591 (**4**), 1483785 (**5**), 2082753 (**6**), 1982326 (**7**), 1470829 (**8**), 1060629 (**9**), 1060381 (**10**), 1474589 (**11**), 1470476 (**12**), 1472954 (**13**), 1971836 (**14**), 1047500 (**15**), 1048172 (**16**), 1048212 (**17**), 1062337 (**18**), 1473422 (**19**), 1473384 (**20**), 2205070 (**21**), 1890704 (**22**), 1976209 (**23**), 1465099 (**24**), 1890706 (**25**), 1060994 (**26**), 2178725 (**27**), 1465132 (**28**), 2064392 (**29**), 1986167 (**30**), 1471841 (**31**), 1064064 (**32**); deposit@ccdc.cam.ac.uk; <http://www.ccdc.cam.ac.uk>). Основные длины связей и валентные углы приведены в табл. 1 и 2.

Таблица 1
Основные геометрические параметры молекул диароксидов триарилсурьмы $Ar_3Sb(OAr')_2$

№	Ar, Ar'	$\varphi(OSbO)$, град.	Интервал изменения $\varphi(CSbC)$, град.	Ср. знач. $d(Sb-C)$, Å	Ср. знач. $d(Sb-O)$, Å
1	Ph, C ₆ F ₅	179,4(1)	114,6(2)–123,5(1)	2,091(3)	2,083(2), 2,092(2)
2	Ph, C ₆ Cl ₅	174,0(2)	103,3(2)–142,3(13)	2,111(6)	2,100(4), 2,100(4)
3	Ph, C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	175,4(1)	118,7(2)–122,5(1)	2,102(2)	2,063(2), 2,063(2)
4	<i>p</i> -Tol, C ₆ F ₅	179,4(1)	114,7(1)–127,7(1)	2,093(3)	2,084(2), 2,095(2)
5	<i>p</i> -Tol, C ₆ Cl ₅	174,8(11)	102,1(2)–138,4(2)	2,114(4)	2,108(3), 2,120(3)
6	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	179,3(2)	114,8(6)–127,0(6)	2,105(2)	2,051(5), 2,054(5)
7	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	179,8(2)	118,8(2)–120,7(2)	2,105(4)	2,058(3), 2,065(3)
8	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ Br-4	179,2(2)	114,8(3)–122,7(3)	2,094(7)	2,044(4), 2,064(4)
9	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	179,6(3)	115,2(4)–126,0(4)	2,105(1)	2,068(7), 2,088(7)
10	<i>p</i> -Tol C ₆ H ₂ Br ₃ -2,4,6	178,5(2)	117,5(3)–123,8(3)	2,094(7)	2,102(4), 2,103(4)
11	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -4	177,8(1)	111,5(1)–126,4(2)	2,106(4)	2,077(2), 2,079(2)
12	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ F ₅	177,8(1)	118,1(1)–121,1(1)	2,094(3)	2,073(2), 2,093(2)
13	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ Cl ₅	174,3(2)	113,1(2)–123,5(2)	2,112(6)	2,133(5), 2,137(5)
14	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	174,7(2)	118,2(2)–123,5(3)	2,104(5)	2,073(4), 2,073(4)
15	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Cl-4	177,2(8)	115,7(1)–126,4(1)	2,112(2)	2,049(2), 2,050(2)
16	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-4	177,3(1)	115,4(2)–126,4(2)	2,118(4)	2,045(3), 2,056(3)
17	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	179,5(2)	112,3(2)–124,4(2)	2,104(5)	2,058(3), 2,066(3)
18	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -4	179,2(1)	114,4(1)–122,8(1)	2,106(3)	2,062(2), 2,077(2)
19	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ Cl ₅	174,8(1)	100,8(1)–136,1(1)	2,116(3)	2,098(2), 2,106(2)
20	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	176,2(2)	116,1(3)–122,1(3)	2,109(7)	2,053(4), 2,057(4)
21	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -4	178,1(2)	116,8(3)–123,1(3)	2,118(7)	2,060(5), 2,065(5)

Таблица 2
Основные геометрические параметры молекул μ_2 -оксо-бис[(ароксо)триарилсурьмы] $(Ar_3SbOAr')_2O$

№	Ar, Ar'	$\varphi(O_{терм}SbO_{мост})$, град.	Интервал изменения $\varphi(CSbC)$, град.	$\varphi(SbO_{мост}Sb)$, град.	Ср. знач. $d(Sb-C)$, Å	$d(Sb-O_{терм})$, Å	$d(Sb-O_{мост})$, Å
1	2	3	4	5	6	7	8
22	Ph, C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -2,5	175,3(1), 176,8(1)	112,9(1)–131,4(1)	139,7(1)	2,103(3)	2,113(5), 2,117(6)	1,985(5), 1,976(6)
23	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ F ₂ -2,5	175,7(2), 176,4(2)	114,7(4)–129,2(4)	142,4(3)	2,110(9)	2,113(5), 2,117(6)	1,985(5), 1,976(6)
24	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -2,4	178,8(1), 176,5(1)	116,8(2)–124,4(2)	177,7(2)	2,110(4)	2,207(3), 2,189(3)	1,948(3), 1,957(3)
25	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -2,5	177,5(1), 178,2(1)	113,9(1)–126,0(1)	142,3(1)	2,110(3)	2,191(2), 2,191(3)	1,976(2), 1,976(2)
26	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₂ Br ₃ -2,4,6	176,7(5), 176,7(5)	109,8(7)–130,9(7)	153,6(7)	2,091(2)	2,125(1), 2,146(1)	1,964(1), 1,969(1)
27	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂ -2,4	179,3(2), 176,9(3)	115,5(4)–127,5(4)	142,5(3)	2,099(9)	2,198(6), 2,179(6)	1,974(6), 1,967(6)
28	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₂ Br ₃ -2,4,6	177,6(2), 177,8(2)	116,5(4)–124,1(3)	147,7(3)	2,096(8)	2,134(5), 2,135(6)	1,976(5), 1,974(5)
29a	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	173,3(4), 176,9(4)	114,7(6)–126,2(6)	163,9(6)	2,135(16)	2,122(12), 2,208(11)	1,993(11), 1,946(11)
29б	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	173,4(4), 176,9(4)	113,4(6)–128,3(6)	164,1(6)	2,154(15)	2,084(12), 2,184(11)	1,962(11), 1,937(11)
30	Ph, C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	176,3(1), 179,0(1)	115,6(1)–123,4(1)	140,9(1)	2,111(3)	2,118(3), 2,141(2)	1,984(2), 1,994(2)

1	2	3	4	5	6	7	8
31	<i>p</i> -Tol, C ₆ Cl ₅	178,2(1), 178,2(1)	115,4(1)–123,5(1)	154,8(2)	2,103(3)	2,195(2), 2,195(2)	1,973(1), 1,973(1)
32	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₂ Br ₃ -2,4,6	176,2(1), 176,2(1)	118,0(2)–120,8(1)	152,6(2)	2,104(4)	2,206(2), 2,206(2)	1,964(9), 1,964(9)

Обсуждение результатов

Атом сурьмы в молекулах диароксидов триарилсурьмы **1–21** имеет тригонально-бипирамидальную координацию с атомами кислорода ароксидных лигандов в аксиальных положениях (рис. 1) [45–50]. Молекулы соединений **3** и **14** симметричны и содержат поворотную ось второго порядка, проходящую через атом сурьмы и атом углерода арильного лиганда C(7) и C(21) соответственно.

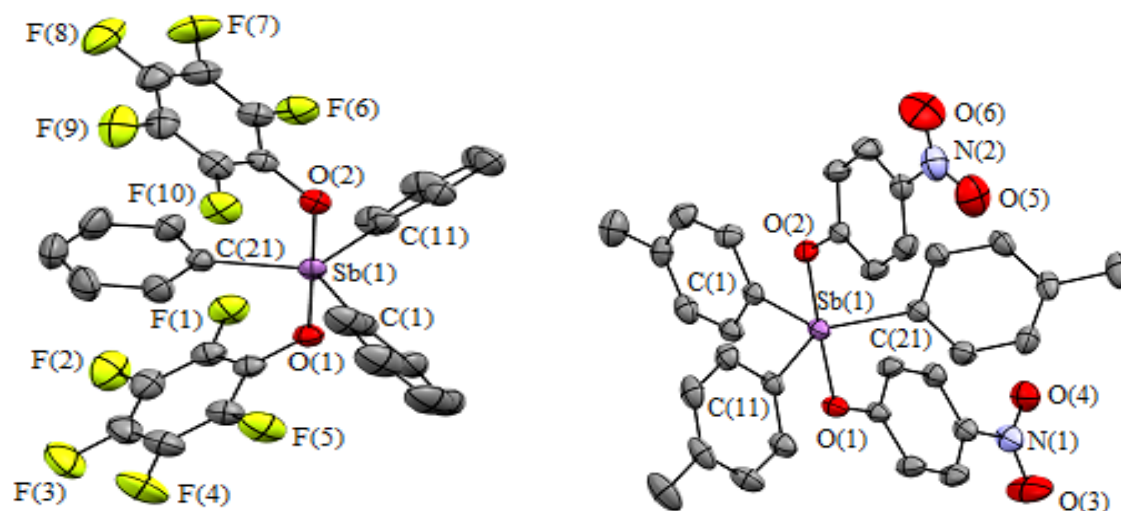


Рис. 1. Молекулярное строение диароксидов триарилсурьмы на примере соединений **1** (слева) и **11** (справа) (атомы водорода не приведены)

Как следует из табл. 1, значения аксиальных углов OSbO в **1–21** близки к идеальному (180°). Наибольшее отклонение от теоретического значения, которое не превышает 6°, наблюдается в *бис*(пентахлорфеноксидах) триарилсурьмы **2**, **5**, **13**, **19** и *бис*(2,4-дифторфеноксидах) триарилсурьмы **14**.

Суммы экваториальных углов в **1–21** равны 360° в пределах погрешности эксперимента. Значения индивидуальных углов отличаются от теоретического на 2°–8°. Исключение составляют молекулы *бис*(пентахлорфеноксидах) триарилсурьмы **2**, **5** и **19**, где один из углов значительно меньше 120° (103,3(2)°, 102,1(2)°, 100,8(1)° соответственно). Очевидно, что наблюдаемое искажение углов обусловлено расположением арильных колец в экваториальной плоскости.

Как правило, в пентакоординированных соединениях сурьмы арильные кольца в экваториальной плоскости имеют пропеллерную конформацию, которая считается наиболее энергетически выгодной. В молекулах **2**, **5** и **19** одно из колец практически компланарно экваториальной плоскости, тогда как два других составляют с ней углы близкие к 90°. Так, в молекуле **2** плоскость кольца [C(21)–C(26)] составляет с экваториальной плоскостью [C₃] угол 14,11°, при этом два других двугранных угла равны 79,20° (для [C(11)–C(16)]) и 55,88° (для [C(1)–C(6)]); в **5** соответствующие двугранные углы равны 13,30° (для [C(21)–C(26)]), 86,28° (для [C(1)–C(6)]), 87,57° (для [C(11)–C(16)]); в **19** – 5,69° (для [C(21)–C(26)]), 89,59° (для [C(1)–C(6)]), 87,06° (для [C(11)–C(16)]). Наименьшим экваториальным углом является угол C(1)Sb(1)C(11) (рис. 2).

Наблюдаемая конформация арильных заместителей при атоме сурьмы обеспечивает возможность взаимодействия ароматических систем ароксидных лигандов с π-системой одного из арильных колец ([C(21)–C(26)] в **2**, **5**, **19**) в экваториальной плоскости (π⋯π-стекинг). Отметим,

что в **13** имеет место пропеллерное расположение экваториальных заместителей и взаимодействие π -систем не наблюдается.

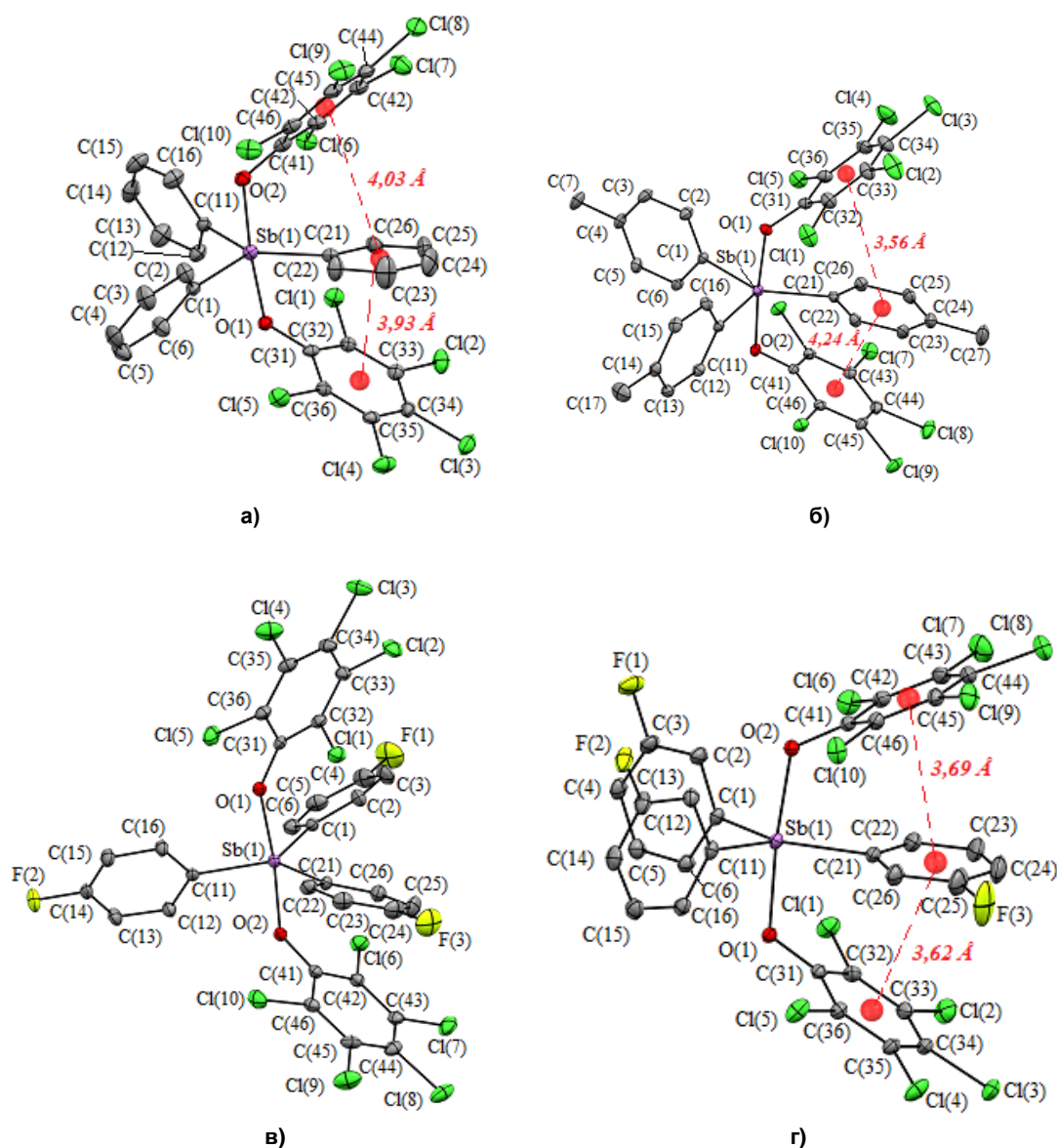


Рис. 2. Молекулярные структуры **2** (а), **5** (б), **13** (в) и **19** (г)
(атомы водорода не приведены)

Согласно литературным данным, расстояние между центроидами ароматических π -систем при наличии $\pi \cdots \pi$ -стекинга варьирует в пределах 3,3–3,8 Å [52, 53], однако допускаются значения до 4 Å и более. В структурах **2**, **5** и **19** расстояние между центрами π -систем арильного и ароксидного лигандов, а также угол между плоскостями ароматических колец этих лигандов, составляют: для [C(21)–C(26)] и [C(31)–C(36)] – 3,93 Å, угол – 36,37°, для [C(21)–C(26)] и [C(41)–C(46)] – 4,03 Å, угол 42,65° (**2**); для [C(21)–C(26)] и [C(31)–C(36)] – 3,56 Å, угол – 21,19°, для [C(21)–C(26)] и [C(41)–C(46)] – 4,24 Å, угол – 51,76° (**5**); для [C(21)–C(26)] и [C(31)–C(36)] – 3,62 Å, угол – 27,83°, для [C(21)–C(26)] и [C(41)–C(46)] – 3,69 Å, угол – 31,24° (**19**) (см. рис. 2). Наименьшие расстояния $C_{Ar} \cdots C_{ArO}$ равны 3,04 Å для C(21) \cdots C(31) и 3,06 Å C(21) \cdots C(41) в **2**, 2,96 Å для C(21) \cdots C(41) и 3,07 Å для C(21) \cdots C(31) в **5**, 2,93 Å для C(21) \cdots C(31) и 2,93 Å для C(21) \cdots C(41) в **19**. При этом наименьший угол SbOC наблюдается в соединении **19** (123,6(1)°, 123,3(1)°), в **2** аналогичные углы равны 126,8(3)°, 125,9(4)°; в **5** – 126,5(3)°, 124,3(2)°.

Анализируя конформацию арильных лигандов, расстояния между центроидами ароматических π -систем ароксидных и арильного лигандов, наименьшие расстояния $S_{Ar} \cdots C_{ArO}$, можно полагать, что более сильное $\pi \cdots \pi$ -взаимодействие проявляется в том случае, когда плоскости одного арильного кольца и экваториальной практически совпадают, а углы между плоскостями двух других арильных колец и этой же плоскостью близки к 90° .

Частичное взаимодействие π -систем ароматических колец арильного и ароксидных лигандов прослеживается и в производных пентафторфенола **1**, **4** и **12** (рис. 3), однако заметного искажения экваториальных углов при этом не наблюдается (см. табл. 1), поскольку, несмотря на то, что одно и арильных колец практически компланарно экваториальной плоскости, конформация двух других – пропеллерная. Углы между плоскостями арильных лигандов и экваториальной плоскостью составляют $5,73^\circ$ (для [C(21)–C(26)]), $48,15^\circ$ (для [C(1)–C(6)]), $45,71^\circ$ (для [C(11)–C(16)]) в **1**; $12,30^\circ$ (для [C(11)–C(16)]), $36,22^\circ$ (для [C(1)–C(6)]), $58,48^\circ$ (для [C(21)–C(26)]) в **4**; $6,03^\circ$ (для [C(1)–C(6)]), $44,28^\circ$ (для [C(21)–C(26)]), $58,92^\circ$ (для [C(11)–C(16)]) в **12**.

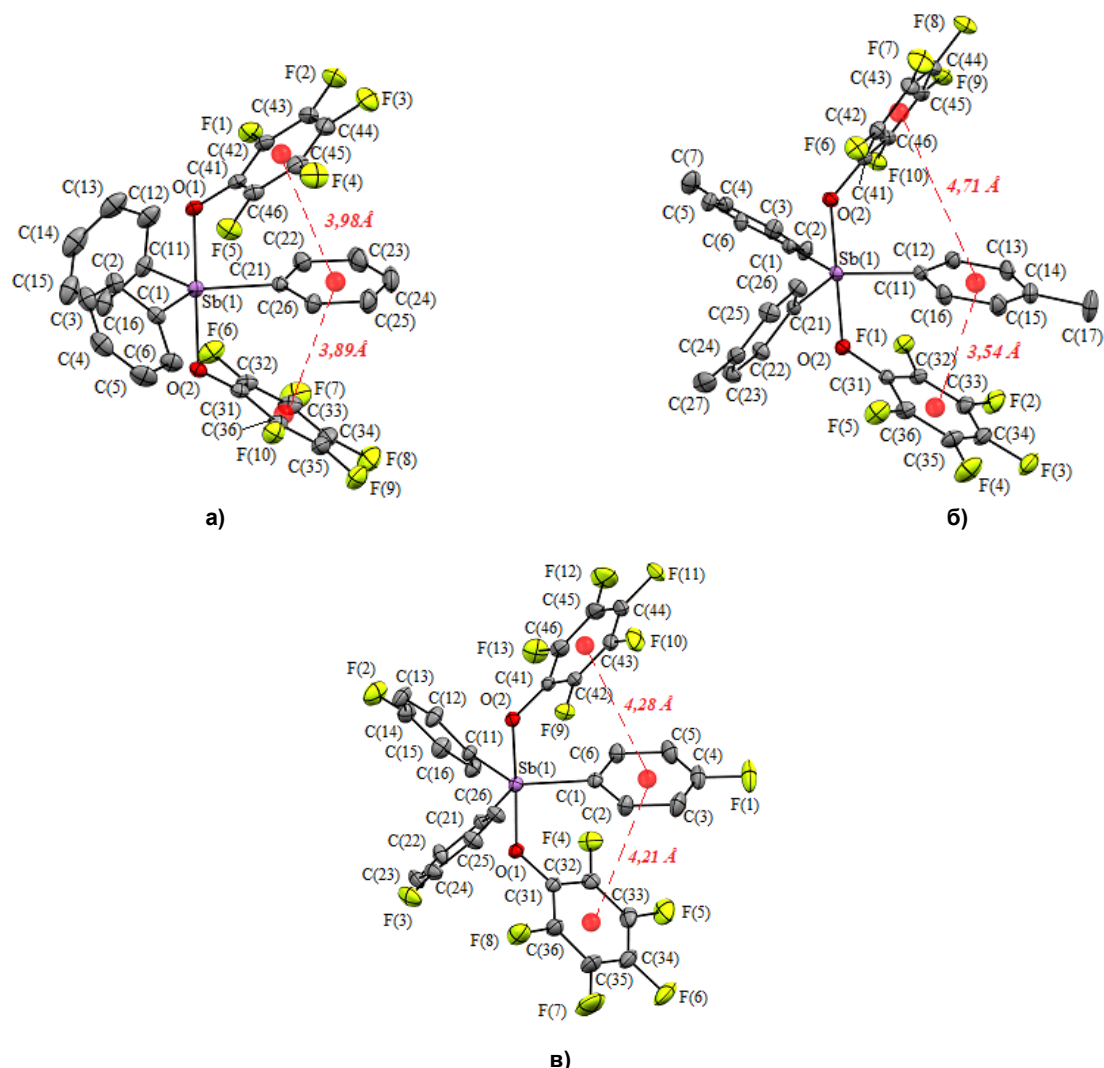


Рис. 3. Молекулярные структуры **1** (а), **4** (б) и **12** (в) (атомы водорода не приведены)

$\pi \cdots \pi$ -Стекинг наиболее выражен в структуре **1**, где расстояния между центроидами ароматических колец арильного и ароксидных лигандов составляют $3,89 \text{ \AA}$ для [C(21)–C(26)] и [C(31)–C(36)] и $3,98 \text{ \AA}$ для [C(21)–C(26)] и [C(41)–C(46)], при этом самые короткие расстояния $S_{Ar} \cdots C_{ArO}$ имеют значения $3,03 \text{ \AA}$ для $C(21) \cdots C(31)$ и $3,06 \text{ \AA}$ $C(21) \cdots C(41)$, а углы $SbOC$ являются наименьшими в этой группе соединений ($123,5(2)^\circ$, $124,4(2)^\circ$ в **1**; $125,6(2)^\circ$, $128,5(2)^\circ$ в **5** и $127,5(2)^\circ$, $128,2(2)^\circ$ в **12**).

π -Системы ароксидных лигандов в **4** контактируют с π -системой арильного лиганда различного. Стекинг-эффект между ароматическими кольцами арильного [C(11)–C(16)] и ароксидного [C(41)–C(46)] лигандов практически отсутствует, так как расстояние между центрами данных колец составляет 4,71 Å, но при этом расстояние C(11)_{Ar}...C(41)_{ArO} равно 3,28 Å. π ... π -Взаимодействие наблюдается между ароматическими кольцами [C(41)–C(46)] и [C(31)–C(36)]. Расстояние между центроидами плоскостей этих колец составляет 3,54 Å и является самым коротким в структурах, где обнаруживается стекинг-эффект (**1, 2, 4, 5, 12 и 19**).

В структуре **12** наблюдается только частичное взаимодействие π -систем. Расстояния между центрами ароматических колец [C(1)–C(6)] и [C(31)–C(36)], [C(1)–C(6)] и [C(41)–C(46)] превышают 4 Å и составляют 4,21 и 4,28 Å соответственно, однако наименьшие расстояния C_{Ar}...C_{ArO} при этом равны 3,17 Å для C(21)·...C(31) и C(21)·...C(41).

В молекулах **1–21** фрагменты SbC₃ практически плоские, атом металла отклоняется от плоскости [C₃] максимально в соединении **20** на 0,040 Å, в молекулах **3** и **14** – лежит в этой плоскости.

В достаточно узком интервале изменяются средние значения Sb–C_{экр} (2,091(3)–2,118(7) Å). Варьирование средних значений аксиальных связей Sb–O составляет 2,050(2)–2,078(2) Å для соединений, содержащих один или два электроотрицательных заместителя в ароксидном лиганде, 2,083(2)–2,114(3) Å – для соединений с большим числом электроотрицательных групп. Максимальное расстояние Sb–O (2,135(5) Å ср.) наблюдается в **13**. Среднее значение длин связей Sb–C в структурах **2, 3, 6–9, 11, 14–21** превышает расстояния Sb–O, например, в **6** $d_{\text{ср}}(\text{Sb–C})$ 2,105(2) Å, $d_{\text{ср}}(\text{Sb–O})$ 2,052(5) Å. В молекуле **13**, наоборот $d_{\text{ср}}(\text{Sb–C})$ 2,112(2) Å меньше, чем $d_{\text{ср}}(\text{Sb–O})$ 2,135(5) Å. Связи Sb–O и Sb–C практически равны в молекулах **1, 4, 5, 10 и 12**, например, в **4** $d_{\text{ср}}(\text{Sb–C})$ 2,093(3) Å, $d_{\text{ср}}(\text{Sb–O})$ 2,089(2) Å.

По данным таблицы 1, различия в параметрах координационного полиэдра центрального атома в молекулах соединений, содержащих разные арильные группы при атоме сурьмы, но одинаковые ароксидные лиганды, незначительны. Средняя длина связей Sb–C в таких соединениях равна в пределах погрешности эксперимента. Закономерного изменения длин связей Sb–O в ряду производных с пентафторфеноксидными лигандами и паре соединений **8, 16** не наблюдается: связи практически равны. Однако можно отметить, что для большинства соединений при замене в арильных лигандах при атоме сурьмы метильной группы на атом фтора обнаруживается небольшое укорочение связей Sb–O, например, это наблюдается в производных с пентахлор-, 2,4-дибром- и 4-нитрофеноксидными лигандами. Среди соединений **2, 5, 13 и 19** выпадает из этой закономерности производное *трис*(4-фторфенил)сурьмы **13**. Отметим, что в молекуле **13** расстояния Sb–O имеют наибольшие значения и составляют 2,133(5), 2,137(5) Å. В соединениях **3, 6 и 14** более длинные связи Sb–O обнаруживаются в производном *трис*(4-фторфенил)сурьмы **14**, по сравнению с аналогичными расстояниями в производном **6** с 4-метилфенильными лигандами и **3** – с фенильными.

Таким образом, можно утверждать, что к введению различных заместителей в арильные лиганды при атоме сурьмы более чувствительна связь Sb–O, при этом значения экваториальных связей практически не меняются. На величину экваториальных углов при атоме сурьмы влияет конформация арильных колец в экваториальной плоскости.

На основании полученных рентгеноструктурных данных впервые для диароксидов 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 перекрытия (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 диароксидах триарилсурьмы показал, что интервал изменения G-параметра составляет 83,96–89,97 % (табл. 3), что свидетельствует о том, что координационная сфера центрального атома является стерически насыщенной. Максимальные значения параметра G наблюдаются в молекулах **2, 5, 19** (более 89 %) (рис. 4) и **1, 4** (более 88 %), в которых имеют место внутримолекулярные π ... π -взаимодействия.

Значения параметров G и $G_{2,28}$ для молекул диароксидов триарилсурьмы $Ar_3Sb(OAr')_2$

№	Ar, Ar'	G, %	$G_{2,28}(Ar)$, %	$G_{2,28}(OAr')$, %
1	Ph, C ₆ F ₅	88,29	15,42, 15,38, 15,44	16,98, 16,88
2	Ph, C ₆ Cl ₅	89,97	15,42, 15,35, 15,36	18,47, 18,35
3	Ph, C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	85,69	15,37, 15,39, 15,38	15,67, 15,67
4	<i>p</i> -Tol, C ₆ F ₅	88,77	15,35, 15,37, 15,38	16,82, 16,47
5	<i>p</i> -Tol, C ₆ Cl ₅	89,11	15,39, 15,32, 15,37	18,36, 19,14
6	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	83,96	15,37, 15,38, 15,43	14,53, 13,66
7	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	85,44	15,32, 15,33, 15,34	14,69, 14,72
8	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ Br-4	85,62	15,35, 15,35, 15,27	14,72, 14,24
9	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	84,57	15,23, 15,39, 15,35	14,93, 15,21
10	<i>p</i> -Tol C ₆ H ₂ Br ₃ -2,4,6	89,54	15,51, 15,18, 15,30	19,22, 19,29
11	<i>p</i> -Tol, C ₆ H ₄ NO ₂ -4	85,10	15,33, 15,38, 15,39	15,02, 14,94
12	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ F ₅	86,51	15,37, 15,40, 15,34	16,10, 16,16
13	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ Cl ₅	87,16	15,39, 15,42, 15,35	18,36, 18,37
14	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ F ₂ -2,4	85,82	15,31, 15,39, 15,40	16,02, 16,02
15	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Cl-4	84,61	15,38, 15,34, 15,35	15,06, 14,23
16	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ Br-4	84,38	15,37, 15,40, 15,39	14,24, 15,04
17	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	85,30	15,36, 15,38, 15,37	14,87, 14,77
18	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -4	85,40	15,39, 15,35, 15,35	15,00, 14,99
19	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ Cl ₅	89,29	15,46, 15,52, 15,46	19,14, 19,16
20	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ Br ₂ -2,4	84,74	15,35, 15,47, 15,30	14,24, 14,73
21	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₄ NO ₂ -4	83,70	15,40, 15,40, 15,42	14,60, 14,61

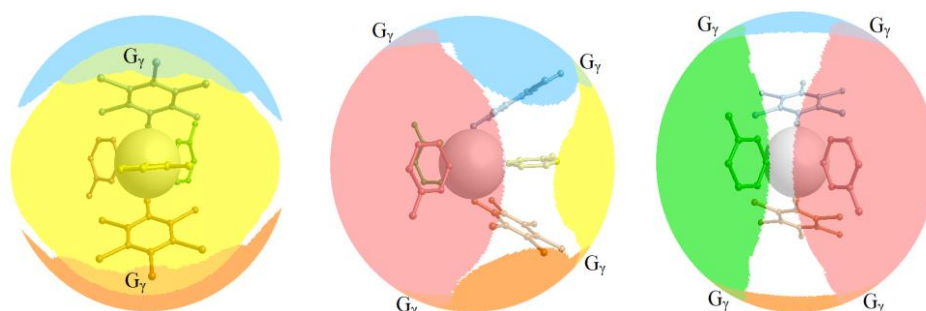


Рис. 4. Проекция лигандов соединения **19** на сферу с радиусом 8 Å с разных ракурсов. Для удобства визуализации атом сурьмы представлен в виде большой светло-серой сферы произвольного радиуса, ароксидные лиганды и их проекции обозначены оранжевым и голубым цветами, арильные лиганды и их проекции – зеленым, желтым и красным. Области перекрытия телесных углов лигандов (наложение двух цветов) обозначены как G_γ

Большое значение G -параметра (89,54 %) в структуре **10** связано, очевидно, с большими стерическими размерами ароксидных лигандов. Отметим, что процент заполнения координационной сферы металла арильными группами, связанными с атомом сурьмы, примерно одинаков (15,18–15,52 %) и не зависит от наличия заместителей, их природы и положения в кольце.

Методом РСА также охарактеризовано строение ароксидов триарилсурьмы **22–32** с мостиковым атомом кислорода (рис. 5) [54–56].

В молекулах **22–29**, **30–32** тригонально-бипирамидальная координация атомов сурьмы сохраняется, в аксиальных позициях расположены атомы кислорода ароксидного лиганда и мостиковый атом кислорода [54–56]. Молекулы соединений **31** и **32** являются симметричными и содержат поворотную ось C_2 , которая проходит через мостиковый атом кислорода, молекулы соединения **31** – центр инверсии, совпадающий с координатами мостикового атома кислорода. В кристалле соединения **29** присутствуют кристаллографически независимые молекулы двух типов (**а** и **б**).

Атомы сурьмы выходят из экваториальной плоскости $[C_3]$ в сторону мостикового атома кислорода. Расстояние от атома металла до плоскости $[C_3]$ изменяется в интервале 0,001–0,216 Å, при этом наибольшие и наименьшие отклонения наблюдаются в молекулах **29a** (0,001 и 0,208 Å) и **29б** (0,022 и 0,216 Å).

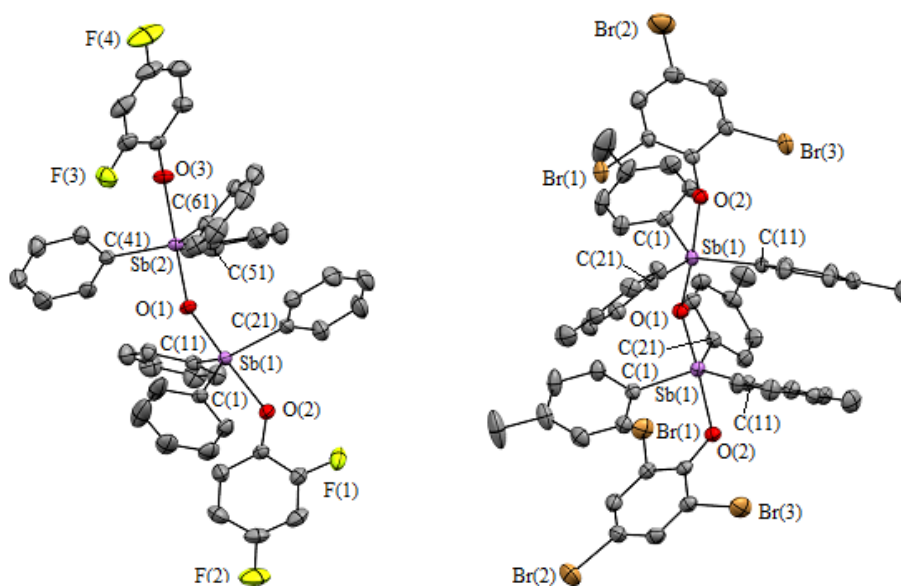


Рис. 5. Молекулярное строение μ_2 -оксо-бис[арлко]триарилсурьмы на примере соединений **32** (слева) и **34** (справа) (атомы водорода не приведены)

Средние значения длин связей Sb–C сопоставимы с аналогичными в диароксидах триарилсурьмы, кроме **29a** и **29б**, где $d_{cp}(Sb-C)$ составляют 2,135(16) и 2,154(15) Å соответственно, что длиннее, чем в диароксидах триарилсурьмы. Концевые связи Sb–O больше средних значений расстояний Sb–C (исключения **29a** и **29б**, в которых только для одной из связей это справедливо) и связей Sb–O_{мост.}

Увеличение расстояний Sb–O_{мост.} в ряду соединений **24**, **29a**, **29б**, **31**, **26**, **32**, **28**, **27**, **23**, **25**, **30**, **22** коррелирует с уменьшением угла SbOSb (177,7(2)° (**24**), 173,4(4)° (**29a**), 164,1(6)° (**29б**), 154,8(2)° (**31**), 153,6(7)° (**26**), 152,6(2)° (**32**), 147,7(3)° (**28**), 142,5(3)° (**27**), 142,4(3)° (**23**), 142,3(1)° (**25**), 140,9(1)° (**30**), 139,7(1)° (**22**)), что согласуется с предположением о возможном взаимодействии неподеленных электронных пар атома кислорода с вакантными *d*-орбиталями атомов сурьмы (*n, d*-взаимодействие), которое тем значимее, чем ближе к линейному угол при атоме кислорода, когда обеспечивается наиболее полное перекрытие орбиталей.

Искажение тригонально-бипирамидальной координации атомов сурьмы в молекулах μ_2 -оксо-бис[ароксо]триарилсурьмы проявляется в большей степени, чем в молекулах диароксидов триарилсурьмы, за счет выхода атома металла из экваториальной плоскости $[C_3]$. Искажение полиэдра наиболее выражено в молекуле соединения **29**, где оно обусловлено пространственными затруднениями из-за дополнительной координации атомов кислорода метоксигрупп арильных лигандов на атом сурьмы. В соединениях с разными арильными лигандами и одинаковыми ароксидными наблюдается закономерное изменение длин аксиальных связей атома сурьмы с терминальным и мостиковым атомом кислорода. В ряду соединений **32** (CH₃- в *para*-положении), **26** (F- в *para*-положении), **28** (F- в *meta*-положении) наблюдается укорочение расстояний Sb–O_{терм.} Увеличение угла SbOSb приводит к сокращению длин связей Sb–O_{мост.}

В соединениях ангидридного строения с ароксидными лигандами процент заполнения координационной сферы атома сурьмы выше, чем в диароксидах триарилсурьмы, и составляет 87,93–96,14 % (табл. 4). Однако, в диароксиде триарилсурьмы **5** G-параметр больше (89,11 %), чем в соединении **31** (87,93 и 87,93 %) с такими же ароксидными лигандами. Это связано с наличием π -стекинга в соединении **5**. Наибольшие значения G-параметра соответствуют соединениям **29**, в котором наблюдаются внутримолекулярные контакты Sb \cdots O_{Me} (94,03–96,14 %), и **26** (91,06, 92,09 %), **28** (91,60, 91,96 %), **32** (90,68, 90,68 %) с объемными ароксидными лигандами.

Значения параметров G и G_{2,28} для молекул μ₂-оксо-бис[(ароксо)триарилсурьмы] (Ar₃SbOAr')₂O

№	Ar, Ar'	G(Sb1), G(Sb2), %	G _{2,28} (ArSb1), %	G _{2,28} (ArSb2), %	G _{2,28} (OAr ^{Sb1}), %	G _{2,28} (OAr ^{Sb2}), %
22	Ph, C ₆ H ₃ (NO ₂) _{2-2,5}	88,20, 91,16	15,38, 15,43, 15,40	15,34, 15,44, 15,50	15,26	16,67
23	p-Tol, C ₆ H ₃ F _{2-2,5}	89,60, 90,12	15,28, 15,48, 15,39	15,29, 15,29, 15,36	14,45	14,66
24	p-Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) _{2-2,4}	88,43, 88,27	15,31, 15,31, 15,34	15,29, 15,34, 15,27	15,34	14,84
25	p-Tol, C ₆ H ₃ (NO ₂) _{2-2,5}	89,26, 91,44	15,31, 15,35, 15,31	15,32, 15,32, 15,33	15,57	16,53
26	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₂ Br _{3-2,4,6}	91,06, 92,09	15,14, 15,20, 15,29	15,07, 15,33, 15,39	18,38	19,87
27	4-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₃ (NO ₂) _{2-2,4}	90,48, 90,08	15,38, 15,24, 15,38	15,37, 15,32, 15,27	17,14	15,41
28	3-FC ₆ H ₄ , C ₆ H ₂ Br _{3-2,4,6}	91,60, 91,96	15,32, 15,39, 15,43	15,41, 15,43, 15,38	18,57	18,61
29a	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	94,03, 96,14	17,56, 18,01, 17,93	17,59, 18,17, 17,62	16,42	15,54
29б	2-MeO-5-BrC ₆ H ₃ , C ₆ H ₃ Cl-2-F-4	94,33, 95,95	17,70, 17,72, 18,07	17,96, 17,79, 17,75	16,42	15,56
30	Ph, C ₆ H ₃ F _{2-2,4}	88,03, 91,55	15,34, 15,28, 15,34	15,35, 15,35, 15,32	14,25	16,14
31	p-Tol, C ₆ Cl ₅	87,93, 87,93	15,32, 15,32, 15,37	15,37, 15,39, 15,39	17,21	17,21
32	p-Tol, C ₆ H ₂ Br _{3-2,4,6}	90,68, 90,68	15,35, 15,35, 15,35	15,35, 15,35, 15,35	20,50	20,50

Заключение

Впервые проведена количественная оценка заполнения координационной сферы атома сурьмы лигандами (стерический фактор) в молекулах ароксидов триарилсурьмы. G-параметр (%) для соединений общей формулы Ar₃Sb(OAr)₂ варьирует в пределах 83,96–89,97 %. Насыщение координационного пространства центрального атома (G ≥ 88 %) обусловлено, в основном, наличием внутримолекулярных невалентных взаимодействий π··π-типа. Стерическая перегруженность приводит к искажению геометрических характеристик молекул. Заполняемость координационной сферы металла в соединениях (Ar₃SbOAr)₂O с мостиковым атомом кислорода на 2–4 % больше, чем в производных Ar₃Sb(OAr)₂.

Список источников

1. Smolyaninov I.V., Poddel'sky A.I., Shataeva A.I. et al. // *Molecules*. 2022. V. 27, No. 19. P. 6484. DOI: 10.3390/molecules27196484.
2. Schulz J., Antala J., Rezazgui D. et al. // *Inorg. Chem.* 2023. V. 62. P. 14028. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c02075.
3. Okhlopkova L.S., Poddelsky A.I., Smolyaninov I.V. et al. // *J. Organomet. Chem.* 2019. V. 897. P. 32. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2019.06.025.
4. Jiang C., Lee E., Schaefer J. et al. // *ACS Catal.* 2025. V. 15, No. 24. P. 17882. DOI: 10.1021/acscatal.5c03781.
5. Poddelsky A.I., Smolyaninov I.V., Fukin G.K. et al. // *J. Organomet. Chem.* 2018. V. 867. P. 238. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2017.12.006.
6. Okhlopkova L.S., Poddel'sky A.I., Fukin G.K. et al. // *Russ. J. Coord. Chem.* 2020. V. 46, No. 6. P. 386. DOI: 10.1134/S107032842005005X.

7. Okhlopkova L.S., Baranov E.V., Poddel'skii A.I. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2020. V. 46, No. 7. P. 466. DOI: 10.1134/S1070328420060081.
8. Fukin G.K., Baranov E.V., Cherkasov A.V. et al. // Russ. Chem. Bull. 2019. V. 68, No. 9. P. 1650. DOI: 10.1007/s11172-019-2607-z.
9. Arsen'ev M.V., Okhlopkova L.S., Poddel'skii A.I. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2018. V. 44, No. 2. P. 162. DOI: 10.1134/S1070328418020021.
10. Murphy B.L., L.T. Maltz, Gabbai D. // Inorg. Chem. 2024. V. 63. P. 23568. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c03178.
11. Holzer N., Sharma J.K., Peterson S. et al. // Dalton Trans. 2022. V. 51. P. 5890. DOI: 10.1039/D2DT00675h.
12. Tarai A., Pain T., Kar S. et al. // Chem. Commun. 2025. V. 61, No. 75. P. 14580. DOI: 10.1039/d5cc03140k.
13. Kong F., Webber C.K., Kumawat J. et al. // Inorg. Chem. 2025. V. 64. P. 16721. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5c02934.
14. Гуцин А.В., Лаханина Е.А., Андреев П.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2017. Т. 9, № 4. С. 67. DOI: 10.14529/chem170411.
15. Poddel'sky A.I., Arsen'ev M.V., Okhlopkova L.S. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2017. V. 43, No. 12. P. 843. DOI: 10.1134/S1070328417120089.
16. Гуцин А.В., Калистратова О.С., Верховых Р. и др. // Вестник Нижегородского университета. 2013. Т. 1, № 1. С. 86. EDN: PWZKAR
17. Fukin G.K., Samsonov M.A., Baranov E.V. et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2017. V. 43, No. 12. P. 858. DOI: 10.1134/S1070328417120028.
18. Kalistratova O.S., Andreev P.V., Gushchin A.V. et al. // Crystallogr. Rep. 2016. V. 61, No. 3. P. 391. DOI: 10.1134/S1063774516030135.
19. Малеева А.И., Гуцин А.В., Калистратова О.С. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2019. Т. 11, № 3. С. 66. DOI: 10.14529/chem190308.
20. Murgin A.L., Ovsetsina T.I., Maleeva A.I. et al. // Crystallogr. Rep. 2020. V. 65, No. 3. P. 449. DOI: 10.1134/S1063774520030220.
21. Fukin G.K., Samsonov M.A., Baranov E.V. et al. // Russ. Chem. Bull. 2016. V. 65, No. 1. P. DOI: 54.10.1007/s11172-016-1264-8.
22. Fukin G.K., Samsonov M.A., Kalistratova O.S. et al. // Struct. Chem. 2016. V. 27. P. 357. DOI: 10.1007/s11224-015-0604-x.
23. Gushchin A.V., Lakhanina E.A., Andreev P.V. // Russ. J. Gen. Chem. 2017. V. 87, No. 11. P. 2596. DOI: 10.1134/S1070363217110135.
24. Fukin G.K., Baranov E.V., Romyantsev R.V. et al. // Struct. Chem. 2020. V. 31. P. 1841. DOI: 10.1007/s11224-020-01548-2.
25. Kalistratova O.S., Andreev P.V., Gushchin A.V. et al. // Crystallogr. Rep. 2016. V. 61, No. 3. P. 391. DOI: 10.1134/S1063774516030135.
26. Zarrabi N., Sharma J.K., Andzelevich K. et al. // Inorg. Chem. 2025. V. 64. P. 8958. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5c00294.
27. Amankrah S.A., Salpadoru T., Cotton K. et al. // Molecules. 2024. V. 29. P. 5779. DOI: 10.3390/molecules29235779.
28. Tofan D., Gabbai F.P. // Chem. Sci. 2016. V. 7. P. 6768. DOI: 10.1039/c6sc02558g.
29. Murphy B.L., Gabbai F.P. // J. Am. Chem. Soc. 2024. V. 146, No. 11. P. 7146. DOI: 10.1021/jacs.4c00202.
30. Gushchin A.V., Vakhitov V.R., Shatalin L.A. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2025. V. 95, No. 1. P. 96. DOI: 10.1134/S1070363224613267.
31. Duffin R.N., Blair V.L., Kedzierski L. et al. // J. Inorg. Biochem. 2021. V. 219. P. 111385. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111385.
32. Guzei I.A., Wendt M. // Dalton Trans. 2006. V. 33. P. 3991. DOI: 10.1039/b605102b.
33. Ефремов А.Н., Шарутин В.В., Шарутина О.К. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2025. Т. 17, № 2. С. 54. DOI: 10.14529/chem250202.
34. Ефремов А.Н., Шарутина О.К., Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 4. С. 106. DOI: 10.14529/chem240409.
35. Cambridge Crystallographic Database. UK: University of Cambridge. 2023.

36. Sharutin V.V., Sharutina O.K. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2016. V. 8, No. 1. P. 57. DOI: 10.14529/chem160109.
37. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Osipov P.E. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2001. V. 71, No. 6. P. 983. DOI: 10.1023/A:1012368510207.
38. Senchurin V.S., Sharutin V.V., Sharutina O.K. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2015. V. 60, No. 10. P. 1204. DOI: 10.1134/S0036023615100174.
39. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Senchurin S.V. // Bull. South Ural State Univ. Ser. Chem. 2015. V. 7, No. 4. P. 86. DOI: 10.14529/chem150413.
40. Шарутин В.В., Шарутина О.К. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2016. Т. 8, № 4. С. 61. DOI: 10.14529/chem160408.
41. Шарутин В.В., Пакусуна А.П., Шарутина О.К. и др. // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. 2002. Т. 3, № 11. С. 13. EDN: GZCCWA.
42. Шарутин В.В., Шарутина О.К. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2012. Т. 8, № 13. С. 10. EDN: OXQGDH
43. 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.
44. 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.
45. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Coord. Chem. 2016. V. 42, No. 11. P. 737. DOI: 10.1134/S1070328416110087.
46. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Gen. Chem. 2016. V. 86, No. 5. P. 1212. DOI: 10.1134/S107036321605042X.
47. Sharutin V.V., O.K. Sharutina, A.N. Efremov et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62, No. 10. P. 1320. DOI: 10.1134/S0036023617100163.
48. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Coord. Chemistry. 2017. V. 43, No. 9. P. 565. DOI: 10.1134/S1070328417090081.
49. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63, No. 2. P. 174. DOI: 10.1134/S0036023618020195.
50. Efremov A.N., Sharutin V.V., Sharutina O.K. // Russ. J. Struct. Chem. 2022. V. 63, No. 3. P. 344. DOI: 10.1134/S0022476622030039.
51. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
52. Janiak C. // J. Chem. Soc., Dalton Trans. 2000. No. 21. P. 3885. DOI: 10.1039/b003010o.
53. Alvarez S. // Dalton Trans. 2013. V. 42, No. 24. P. 8617. DOI: 10.1039/c3dt50599e.
54. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63, No. 3. P. 343. DOI: 10.1134/S0036023618030208.
55. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Efremov A.N. // Russ. J. Coord. Chem. 2020. V. 46, No. 1. P. 42. DOI: 10.1134/S1070328419120066.
56. Ефремов А.Н. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2020. Т. 12, № 2. С. 5. DOI: 10.14529/chem200201.

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: sharutinaok@susu.ru

Статья поступила в редакцию 30 января 2026 г.

The article was submitted 30 January 2026.