

УДК 546.561:547.831.1:547.833.1

## ТРИФТОРАЦЕТАТНІ КОМПЛЕКСИ АРГЕНТУМУ(I) З N-АЛІЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ ХІНОЛІНУ ТА ІЗОХІНОЛІНУ: СИНТЕЗ ТА КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА

О. Павлюк

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна  
e-mail: oleksiy.pavlyuk@lnu.edu.ua

Методом прямої взаємодії компонентів, виходячи з етанольних розчинів аргентуму трифторацетату та відповідними N-алілхіноліній та N-алілізохіноліній хлоридами  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]\text{Cl}$ , отримано у вигляді монокристалів та рентгеноструктурно досліджено нові комплекси складу  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$  (I): просторова група  $P1$ ,  $Z = 2$ ,  $a = 12,6915(3)$ ,  $b = 12,9395(2)$ ,  $c = 20,6042(3)$  Å,  $\alpha = 87,732(2)$ ,  $\beta = 75,309(2)$ ,  $\gamma = 65,506(2)^\circ$ ,  $V = 2\,970,2(1)$  Å<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{обч.}} = 1,983$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu(\text{MoK}\alpha) = 1,43$  мм<sup>-1</sup>,  $\theta_{\text{макс.}} = 36,8^\circ$ , 40 788 виміряних рефлексів, 26 075 використано,  $R(F^2) = 0,043$ ,  $S = 1,03$ ; та  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_4\text{Ag}_5(\text{CF}_3\text{COO})_6\text{CF}_3\text{COOH}$  (II): просторова група  $P2_1$ ,  $Z = 4$ ,  $a = 8,231(4)$ ,  $b = 15,997(5)$ ,  $c = 15,174(5)$  Å,  $\beta = 91,87(3)^\circ$ ,  $V = 1\,997(1)$  Å<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{обч.}} = 1,956$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu(\text{MoK}\alpha) = 1,35$  мм<sup>-1</sup>,  $\theta_{\text{макс.}} = 35,0^\circ$ , 21 594 виміряні рефлекси, 8 770 використано,  $R(F^2) = 0,038$ ,  $S = 0,93$ .

У кристалічній структурі досліджених сполук атоми аргентуму(I) перебувають у координаційному оточенні, побудованому виключно з атомів кисню трифторацетат іонів. Місткова бідентатна функція останніх призводить до реалізації в структурі сполуки I ізольованих глобулярних топологічних одиниць  $[\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7]^{3-}$ . Своєю чергою, в сполуці II місткова функція  $\text{CF}_3\text{COO}^-$  угруповань приводить до утворення в структурі сполуки топологічних одиниць  $\{\text{Ag}_2(\text{CF}_3\text{COO})_5\}_n^{2n+}$ . Катиони N-алілхінолінію та N-алілізохінолінію в досліджених сполуках не беруть участі в координації з атомами Ag.

*Ключові слова:* аргентум(I), сигма-комплекси, N-алільні похідні, кристалічна структура.

DOI: <https://doi.org/10.30970/vch.6401.157>

### 1. Вступ

Координаційні сполуки аргентуму віддавна привертають увагу науковців з теоретичної точки зору як об'єкти для вивчення особливостей хімічного зв'язку та для потреб супрамолекулярної хімії [1]. Водночас комплекси купруму мають широке практичне використання: як каталізатори [2–4]; антибактеріальні агенти [5]; під час виробництва сучасних джерел світла [6] тощо.

Своєю чергою, катиони N-алільних похідних моноазотистих гетероциклів демонструють цікаву поведінку як з погляду утворення топологічно різноманітних комплексних сполук [7], так і участі у каталітичних перетвореннях [8]. Катиони N-алілхінолінію та N-алілізохінолінію, так само незважаючи на однакову стехіометрію та достатньо подібну просторову будову, демонструють різну координаційну поведінку в купрумвмісних комплексах [9, 10]. Ацетат іон [11] та його функціональні похідні, зокрема трифторацетат [12], досить часто використовують як протиіони під час синтезу комплексів, які цікаві як з погляду своєї будови, так і властивостей.

У такому контексті цікаво дослідити особливості комплексоутворення аргентум трифторацетату з катіонами N-алілхінолінію та N-алілізохінолінію.

## 2. Матеріали та методика експерименту

Хлориди N-алілхінолінію та N-алілізохінолінію синтезували впродовж взаємодії відповідного гетероциклу з аліл хлоридом у хлороформі [13]. Розчин хіноліну (ізохіноліну) та незначного надлишку свіжоперегнаного алілу хлористого у хлороформі кип'ятили зі зворотним холодильником упродовж 20 (25) год. Після відгонки розчинника отримано жовто-оранжеві дрібнокристалічні порошки складу  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]\text{Cl}$  практично з кількісним виходом.

Під час додавання надлишку етанольного розчину аргентум трифторацетату у етанолі до розчину відповідного ліганду у тому самому розчиннику утворювався білий осад аргентум хлориду. Подальше випаровування частини розчинника призводило до утворення на поверхні осаду злегка забарвлених призм сполук складу  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$  (**I**) та  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_4\text{Ag}_5(\text{CF}_3\text{COO})_9\text{CF}_3\text{COOH}$  (**II**). Якість кристалів, приблизні параметри ґратки та дифракційний клас визначали з рентгенограм обертання та вайсенбергограм.

Масиви дифракційних даних для монокристалів комплексів **I–II** отримано на дифрактометрах *KUMA KM-4CCD* та *Xcalibur, Ruby\**. Обробку масиву експериментальних даних (пошук комірки, індексування, врахування поглинання) виконували за допомогою пакета *CrysAlis Pro* [14] (табл. 1). Структури розв'язано прямими методами й уточнено методом повноматричного уточнення з використанням пакетів програм *SHELXT*, *SHELXL-2014* та графічної оболонки – програми *OLEX<sup>2</sup>* [15–17]. Координати атомів і параметри теплового зміщення наведено в табл. 2, основні довжини зв'язків та валентні кути – у табл. 3. Уточнення параметрів атомів проводили в анізотропному, а для атомів гідрогену – в ізотропному наближенні. Відсутність додаткових елементів симетрії та правильність вибору нецентросиметричної групи *P1* для сполуки **I** підтверджено за допомогою програми *PLATON* [18].

## 3. Результати досліджень та їх обговорення

У кристалічній структурі сполуки  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$  (**I**) усі чотири кристалографічно-незалежні атоми металу перебувають у деформованому тригонально-призматичному координаційному оточенні з атомів оксигену трифторацетат іонів (рис. 1, відстань Ag–O становить 2,290–2,556 Å).

Топологічна роль трифторацетатних груп різниться. Частина виконує місткову функцію між двома атомами металу (кожен атом оксигену входить до координаційної сфери одного Ag), інші – місткові між чотирма атомами металу (атоми оксигену карбонільних груп координовані з двома атомами металу). Відповідні взаємодії призводять до утворення ізольованих глобул  $[\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7]^{3-}$ , а додаткове зв'язування між атомами металу (Ag...Ag 2,837–2,960 Å) стабілізує їх існування у кристалічній структурі. Окремо хочемо звернути увагу на розупорядкування трифторметильних груп частини аніонів  $\text{CF}_3\text{COO}^-$ . У порожнинах між глобулярними фрагментами розташовані катіони N-алілхінолінію, які зв'язані з неорганічними аніонами, крім електростатичного притягання, водневими зв'язками (рис. 2, табл. 4).

Кафедра кристалографії Вроцлавського університету. Висловлюємо подяку др. В. Кінжибало за допомогу в проведенні рентгенівського експерименту.

У кристалічній структурі сполуки  $[C_9H_7N(C_3H_5)]_4Ag_5 \times (CF_3COO)_9CF_3COOH$  (II) характер координаційного оточення атомів металу дещо інший. До координаційного многогранника атома Ag(1) входять чотири оксигени різних трифторацетатних груп (табл. 4.3, Ag–O – 2,337–2,519 Å). Проте існування додаткового контакту (2,708(4) Å) зі ще одним атомом оксигену одного з  $CF_3COO^-$  іонів свідчить про те, що остання частинка насправді займає лише одне координаційне місце і KM Ag(1) – тригональна піраміда  $[AgO_3(O_2)]$ .

Другий атом аргентуму формує деформоване тригонально-пірамідалне оточення з чотирьох атомів оксигену трифторацетат іонів. Особливістю координаційного многогранника є T-подібна основа піраміди (кути O–Ag(2)–O становлять 86,8, 106,1, 161,7°, вихід атома металу з площини основи – 0,23 Å).

Таблиця 1

Основні кристалографічні параметри та умови рентгенівського експерименту для сполук I та II

Table 1

Selected crystal data and structure refinement parameters of I and II compounds

Параметр	I*	II*
Брутто формула	$C_{50}H_{36}Ag_4F_{21}N_3O_{14}$	$C_{68}H_{50}Ag_5F_{30}N_4O_{20}$
M, ат. од.	1 733,28	364,99
T, K	100	150
Колір, форма	червоні призми	прозорі призми
Дифрактометр	KUMA KM-4CCD	Xcalibur, Ruby
Просторова група	$P1$	$P2_1$
a, Å	12,6915(3)	8,231(4)
b, Å	12,9395(2)	15,997(5)
c, Å	20,6042(3)	15,174(5)
$\alpha$ , °	87,732(2)	90
$\beta$ , °	75,309(2)	91,87(3)
$\gamma$ , °	65,506(2)	90
V, Å <sup>3</sup>	2 970,2(1)	1 997(1)
Z	2	4
$\rho_{обч.}$ , г/см <sup>3</sup>	1,983	1,956
F(000)	656	1 151
$\lambda$ , Å	0,71073	0,71073
$\mu$ , мм <sup>-1</sup>	1,43	1,35
hkl	-18 < h < 19 -18 < k < 19 -34 < l < 27	-10 < h < 11 -17 < k < 25 -19 < l < 24
Кількість відбить: виміряних	40 788	21 594
використано під час уточнення	26 075	8 770
$\theta_{макс.}$ , град.	36,8	35,0
Кількість уточнених параметрів	1 688	633
Вагова схема** $[\sigma^2(F_{вим.}^2) + (AP)^2]^{-1}$	0,0704	0,00455
$R(F^2)$	0,043	0,038
$R_w(F^2)$	0,117	0,067
Goof	1,03	0,93
Flack	0,10(2)	0,08(2)

$$** P = (F_{вим.}^2 + 2F_{обч.}^2).$$

Місткова функція трьох  $\text{CF}_3\text{COO}^-$  іонів призводить до утворення в структурі сполуки топологічних одиниць  $\{\text{Ag}_2(\text{CF}_3\text{COO})_5\}_n^{2n-}$ .

Третій атом металу перебуває у п'ятивершинному координаційному оточенні з атомів оксигену ацетатних груп органічних аніонів ( $\text{Ag}-\text{O} - 2,336-2,556 \text{ \AA}$ ). Зважаючи на те, що атом  $\text{Ag}(3)$  виконує місткову функцію між двома топологічними одиницями  $\{\text{Ag}_2(\text{CF}_3\text{COO})_5\}_n^{2n-}$ , а позиція  $\text{Ag}(3)$  зайнята у структурі сполуки **II** на половину, можна стверджувати про існування в кристалічній ґратці “переривчастих” ланцюгових фрагментів  $\{\text{Ag}_5(\text{CF}_3\text{COO})_9\text{CF}_3\text{COOH}\}_n^{4n-}$  (рис. 3).

За відсутності  $\pi$ -взаємодії  $\text{Ag}(\text{I})-(\text{C}=\text{C})$  катіони *N*-алілізохінолінію пов'язані з металоорганічними поліаніонами електростатичними взаємодіями та водневими зв'язками (табл. 4).

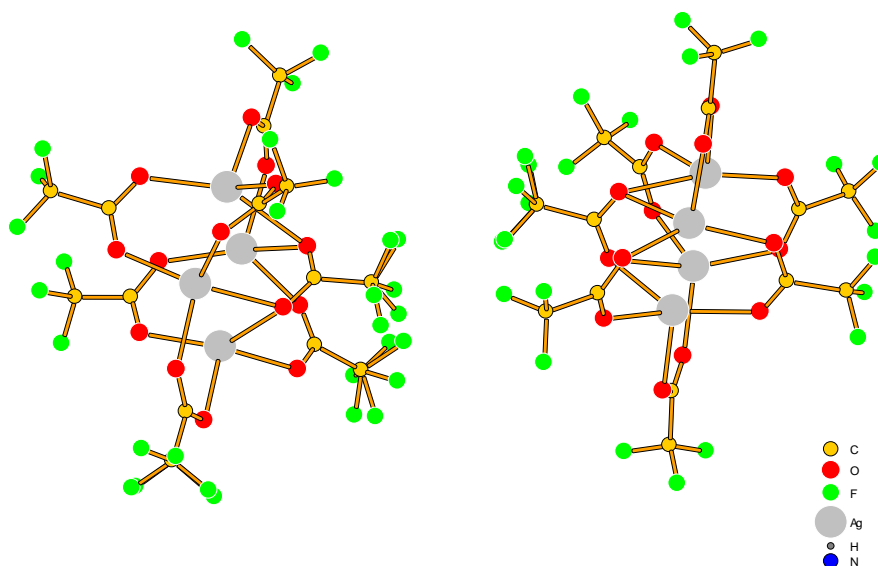


Рис. 1. Будова топологічних одиниць  $\{\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7\}^{3-}$  в структурі сполуки  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$   
 Fig. 1. Structure of topological units  $\{\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7\}^{3-}$  in the crystal structure of  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$

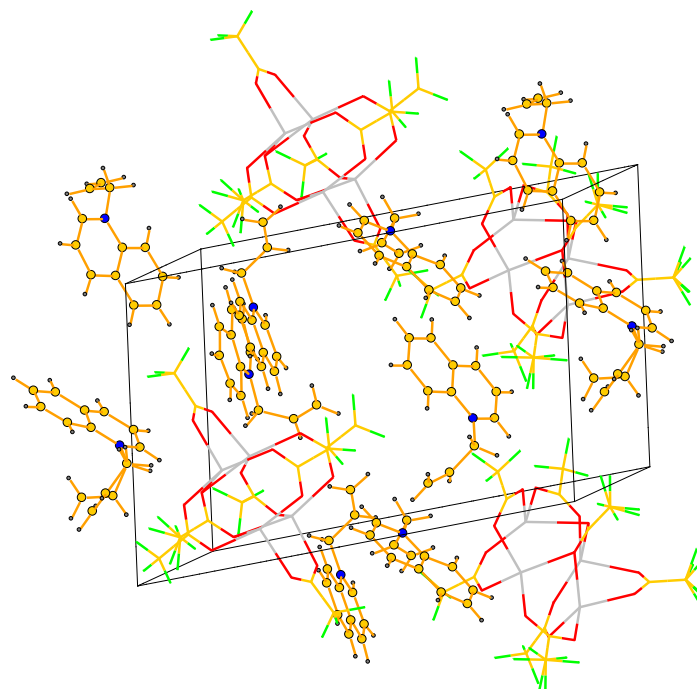


Рис. 2. Укладка катіонів N-алілкинолінію в порожнинах між аніонами  $\{Ag_4(CF_3COO)_7\}^{3-}$  в структурі сполуки **I**  
Fig. 2. Stacking of N-allylquinolinium cations in cavities between anions  $\{Ag_4(CF_3COO)_7\}^{3-}$  in the crystal structure **I**

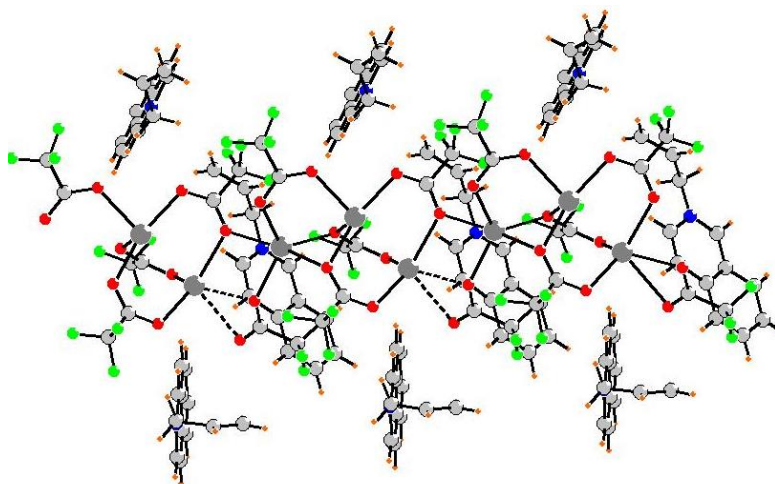


Рис. 3. Розташування аніонних та катіонних фрагментів у структурі сполуки  $[C_9H_7N(C_3H_5)]_4Ag_5(CF_3COO)_9CF_3COOH$   
Fig. 3. Location of anionic and cationic fragments in the structure of the compound  $[C_9H_7N(C_3H_5)]_4Ag_5(CF_3COO)_9CF_3COOH$

Таблиця 2

Координати атомів та їх параметри теплових змішень у структурі комплексів I та II

Table 2

Fractional atomic coordinates and thermal displacement parameters in the structures of I and II

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв}}/U_{\text{ізо}} \text{ \AA}^2*$	КЗП
<b>I</b>					
Ag1	-0,20331(6)	0,28018(5)	-0,19968(3)	0,04757(15)	
Ag2	0,01083(5)	0,10417(5)	-0,28366(3)	0,04249(14)	
Ag3	0,12139(5)	0,25982(4)	-0,27992(3)	0,03851(12)	
Ag4	-0,08776(5)	0,42521(5)	-0,18529(2)	0,04078(13)	
Ag5	0,13950(5)	-0,33308(5)	0,22778(3)	0,05120(17)	
Ag6	-0,01325(5)	-0,10663(4)	0,28208(2)	0,03902(13)	
Ag7	-0,24658(5)	-0,11278(5)	0,31514(3)	0,04120(13)	
Ag8	-0,09171(5)	-0,34607(5)	0,25193(3)	0,04983(17)	
C10I	-0,4323(8)	-0,1769(9)	0,1711(4)	0,060(2)	
C10E	0,2006(6)	0,3053(6)	-0,6554(3)	0,0359(15)	
C11I	-0,1028(8)	-0,1233(7)	0,0849(4)	0,060(2)	
C112	-0,0785(7)	-0,1624(7)	0,1536(3)	0,0453(17)	
C11E	0,1895(9)	0,0309(7)	-0,6996(4)	0,061(2)	
C12	-0,2620(8)	0,3980(7)	-0,0560(3)	0,0504(19)	
C121	0,2710(8)	-0,0920(9)	0,1000(4)	0,057(2)	
C122	0,2036(7)	-0,1479(8)	0,1568(4)	0,0490(18)	
C12E	0,1840(14)	-0,0362(9)	-0,6396(5)	0,091(4)	
C131	0,2296(10)	-0,6880(9)	0,1442(4)	0,082(4)	
C132	0,1693(10)	-0,5629(9)	0,1789(4)	0,063(3)	
C13E	0,2719(18)	-0,1278(10)	-0,6318(7)	0,146(9)	
C141	-0,2813(7)	0,2337(6)	0,3956(3)	0,0402(16)	
C142	-0,2193(6)	0,1140(5)	0,3578(3)	0,0307(13)	
C171	-0,2826(8)	-0,0270(8)	-0,2452(4)	0,051(2)	
C172	-0,2159(7)	0,0505(7)	-0,2439(4)	0,0392(16)	
C202	0,7524(6)	-0,0344(6)	-0,4922(3)	0,0354(14)	
C203	0,8450(6)	-0,0043(7)	-0,4915(3)	0,0403(16)	
C204	0,8248(6)	0,0849(6)	-0,4489(3)	0,0364(14)	
C205	0,6837(7)	0,2388(7)	-0,3635(3)	0,0421(16)	
C206	0,5695(7)	0,3007(7)	-0,3247(4)	0,0461(18)	
C207	0,4791(7)	0,2665(8)	-0,3265(4)	0,0468(19)	
C208	0,5005(5)	0,1752(6)	-0,3673(3)	0,0345(14)	
C209	0,6165(6)	0,1147(6)	-0,4096(3)	0,0311(13)	
C21	0,0736(11)	0,1042(9)	-0,0794(5)	0,100(5)	
C210	0,7100(6)	0,1466(6)	-0,4074(3)	0,0320(14)	
C22	0,0318(7)	0,1686(7)	-0,1391(3)	0,0450(17)	
C2A1	0,5460(5)	-0,0096(6)	-0,4587(3)	0,0340(13)	
C2A2	0,4732(6)	0,0679(6)	-0,5028(3)	0,0374(14)	
C2A3	0,3552(6)	0,1213(7)	-0,4853(4)	0,0429(16)	
C2E	0,0440(8)	0,2263(7)	-0,6759(4)	0,054(2)	
C3	-0,3455(7)	-0,1945(8)	0,2141(3)	0,0500(19)	
C302	0,0210(8)	0,7448(8)	-0,3417(4)	0,053(2)	
C303	-0,0219(7)	0,6624(6)	-0,3427(4)	0,0389(15)	
C304	0,0551(7)	0,5594(7)	-0,3737(4)	0,0435(17)	

Продовження табл. 2

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв.}}/U_{130} \cdot \text{Å}^{2*}$	КЗП
C305	0,2566(8)	0,4262(7)	-0,4376(4)	0,0478(18)	
C306	0,3707(8)	0,4042(8)	-0,4672(5)	0,057(2)	
C307	0,4125(8)	0,4896(9)	-0,4668(5)	0,063(2)	
C308	0,3409(8)	0,5925(8)	-0,4347(5)	0,055(2)	
C309	0,2164(7)	0,6186(7)	-0,4031(4)	0,0414(16)	
C31	0,3919(8)	-0,1035(7)	-0,2757(5)	0,067(3)	
C310	0,1747(7)	0,5346(6)	-0,4044(3)	0,0366(15)	
C32	0,2747(6)	-0,0010(6)	-0,2785(4)	0,0415(15)	
C3A1	0,1807(10)	0,8129(8)	-0,3620(5)	0,062(2)	
C3A2	0,1767(12)	0,8840(9)	-0,4215(6)	0,080(3)	
C3A3	0,2707(17)	0,9000(12)	-0,4550(7)	0,110(5)	
C3E	0,0026(8)	0,3398(8)	-0,6599(4)	0,0496(19)	
C402	0,0844(18)	0,5450(9)	0,0355(5)	0,108(6)	
C403	0,0184(16)	0,4880(13)	0,0112(6)	0,112(5)	
C404	0,0890(10)	0,4058(9)	-0,0416(5)	0,069(3)	
C405	0,2797(10)	0,2973(9)	-0,1175(5)	0,065(2)	
C406	0,4026(13)	0,2699(13)	-0,1459(8)	0,107(5)	
C407	0,4557(13)	0,3247(13)	-0,1212(7)	0,094(4)	
C408	0,3961(10)	0,3971(12)	-0,0726(5)	0,073(3)	
C409	0,2720(15)	0,4369(9)	-0,0411(6)	0,090(4)	
C41	0,0101(6)	0,2827(6)	-0,4762(3)	0,0363(14)	
C410	0,2098(9)	0,3801(8)	-0,0647(5)	0,058(2)	
C42	0,0214(5)	0,2515(5)	-0,4037(3)	0,0296(12)	
C4A1	0,2623(15)	0,5783(12)	0,0353(8)	0,102(4)	
C4A2	0,301(3)	0,660(3)	-0,0091(13)	0,154(9)	0,83(3)
C4A3	0,242(3)	0,714(2)	-0,0510(11)	0,154(9)	0,83(3)
C4B2	0,270(4)	0,675(5)	0,0019(17)	0,035(10)*	0,17(3)
C4B3	0,326(3)	0,657(4)	-0,0595(16)	0,035(10)*	0,17(3)
C4E	0,0820(7)	0,3819(7)	-0,6524(3)	0,0430(16)	
C502	-0,4923(9)	0,3416(8)	0,1947(4)	0,061(2)	
C503	-0,4354(10)	0,2239(8)	0,1891(4)	0,069(3)	
C504	-0,3115(12)	0,1779(9)	0,1878(4)	0,088(4)	
C505	-0,1330(18)	0,214(2)	0,1889(8)	0,151(8)	
C506	-0,0952(14)	0,306(2)	0,1929(8)	0,129(7)	
C507	-0,1784(15)	0,4103(16)	0,2004(6)	0,119(6)	
C508	-0,2905(13)	0,4652(13)	0,2044(5)	0,092(4)	
C509	-0,3286(13)	0,3721(10)	0,1994(4)	0,073(3)	
C51	-0,2810(8)	0,5552(8)	-0,3452(4)	0,0522(19)	
C510	-0,2623(10)	0,2572(11)	0,1925(4)	0,072(3)	
C52	-0,2288(6)	0,4810(6)	-0,2917(3)	0,0369(14)	
C5A1	-0,5254(14)	0,5394(11)	0,2020(6)	0,118(6)	
C5A2	-0,5902(12)	0,5943(10)	0,2699(6)	0,087(4)	
C5A3	-0,5717(12)	0,5618(11)	0,3264(6)	0,086(3)	
C5E	0,2879(7)	0,3442(7)	-0,6457(4)	0,0441(17)	
C602	-0,1024(8)	-0,2293(8)	-0,1068(4)	0,055(2)	
C603	-0,0628(11)	-0,1497(10)	-0,1173(5)	0,067(3)	
C604	-0,1385(12)	-0,0374(10)	-0,0986(5)	0,073(3)	

Продовження табл. 2

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв.}}/U_{\text{ізо.}} \text{ \AA}^2*$	КЗП
C605	-0,3413(15)	0,1030(9)	-0,0394(5)	0,097(5)	
C606	-0,4542(17)	0,1244(10)	-0,0070(7)	0,141(8)	
C607	-0,4968(16)	0,0377(11)	0,0017(7)	0,150(9)	
C608	-0,4189(12)	-0,0739(9)	-0,0216(5)	0,087(4)	
C609	-0,3017(9)	-0,0962(7)	-0,0533(4)	0,055(2)	
C61	0,2015(7)	0,5571(7)	-0,2173(4)	0,052(2)	
C610	-0,2572(10)	-0,0113(8)	-0,0636(4)	0,058(2)	
C62	0,1320(7)	0,4860(7)	-0,2195(4)	0,0414(17)	
C6A1	-0,2548(9)	-0,3039(7)	-0,0683(4)	0,059(2)	
C6A2	-0,3102(10)	-0,3098(8)	-0,1233(5)	0,063(2)	
C6A3	-0,4112(11)	-0,3151(14)	-0,1147(8)	0,115(5)	
C6E	0,4023(7)	0,2664(9)	-0,6494(4)	0,057(2)	
C7	-0,3159(11)	0,4172(9)	0,0175(4)	0,079(3)	
C7E	0,4380(7)	0,1523(7)	-0,6653(4)	0,0498(19)	
C81	0,0337(8)	-0,3288(7)	0,4553(4)	0,0480(19)	
C82	0,0390(7)	-0,2894(7)	0,3831(3)	0,0426(16)	
C8E	0,3579(7)	0,1126(7)	-0,6763(3)	0,0440(18)	
C91	-0,3218(10)	-0,3650(9)	0,4550(4)	0,061(2)	
C92	-0,2507(6)	-0,3138(6)	0,3994(3)	0,0385(15)	
C9E	0,2399(7)	0,1890(7)	-0,6713(3)	0,0412(16)	
F1	-0,2281(17)	0,3668(14)	0,0508(5)	0,144(7)	0,60(2)
F101	-0,3835(6)	-0,2445(7)	0,1151(3)	0,093(2)	
F102	-0,4754(7)	-0,0725(6)	0,1527(4)	0,098(2)	
F103	-0,5275(6)	-0,1955(7)	0,2040(3)	0,0866(19)	
F11A	-0,0766(10)	-0,2055(8)	0,0408(4)	0,073(3)	0,579(15)
F11B	-0,2315(9)	-0,0677(9)	0,0951(4)	0,073(3)	0,579(15)
F11D	-0,0697(10)	-0,0443(9)	0,0650(5)	0,073(3)	0,579(15)
F11E	-0,1704(16)	-0,1576(16)	0,0639(7)	0,095(5)	0,421(15)
F11F	-0,1254(16)	-0,0161(14)	0,0718(8)	0,095(5)	0,421(15)
F121	0,2095(6)	-0,0570(8)	0,0535(3)	0,098(2)	
F122	0,2807(6)	-0,0053(6)	0,1252(3)	0,0818(17)	
F123	0,3815(5)	-0,1673(6)	0,0699(3)	0,0757(16)	
F12A	-0,3899(17)	0,3704(15)	0,0447(6)	0,144(7)	0,60(2)
F12B	-0,307(2)	0,3228(18)	0,0472(8)	0,112(8)	0,40(2)
F131	0,2475(12)	-0,7621(5)	0,1828(3)	0,175(6)	
F132	0,1969(11)	-0,7006(6)	0,0957(4)	0,131(4)	
F133	0,3397(10)	-0,7003(9)	0,1033(6)	0,185(6)	
F13A	-0,3674(17)	0,5219(14)	0,0438(6)	0,144(7)	0,60(2)
F13B	-0,4377(19)	0,4816(18)	0,0312(7)	0,112(8)	0,40(2)
F141	-0,3359(7)	0,3102(4)	0,3576(3)	0,092(2)	
F142	-0,2079(4)	0,2640(5)	0,4151(3)	0,0724(17)	
F143	-0,3648(4)	0,2407(4)	0,4519(3)	0,0639(14)	
F171	-0,3965(7)	0,0186(8)	-0,2093(6)	0,137(4)	
F172	-0,2328(6)	-0,1253(5)	-0,2203(3)	0,0679(15)	
F2	-0,2794(6)	-0,0539(5)	-0,3077(3)	0,0715(17)	
F21A	0,122(3)	-0,006(2)	-0,0896(15)	0,091(9)	0,25(3)
F21B	0,0810(11)	0,0012(9)	-0,0757(7)	0,088(4)	0,75(3)
F22A	-0,039(2)	0,139(2)	-0,0330(12)	0,091(9)	0,25(3)



Продовження табл. 2

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв.}}/U_{\text{Iзо.}} \text{ \AA}^2*$	КЗП
F22B	0,020(2)	0,1536(11)	-0,0230(5)	0,188(14)	0,75(3)
F23A	0,133(3)	0,147(2)	-0,0533(12)	0,091(9)	0,25(3)
F23B	0,1898(16)	0,0792(18)	-0,0866(12)	0,199(12)	0,75(3)
F3	-0,285(2)	0,472(2)	0,0555(8)	0,112(8)	0,40(2)
F31	0,4859(6)	-0,0871(6)	-0,2859(5)	0,110(3)	
F32	0,4256(8)	-0,1812(8)	-0,3258(7)	0,170(5)	
F33	0,3788(8)	-0,1577(12)	-0,2252(6)	0,233(9)	
F4	0,0101(15)	-0,1788(14)	0,0352(6)	0,095(5)	0,421(15)
F41	0,0789(4)	0,1909(4)	-0,5193(2)	0,0549(12)	
F42	0,0408(5)	0,3659(4)	-0,4968(2)	0,0564(12)	
F43	-0,1013(4)	0,3124(4)	-0,4805(2)	0,0536(11)	
F51	-0,1918(6)	0,5447(7)	-0,4008(3)	0,093(2)	
F52	-0,3223(7)	0,6654(5)	-0,3273(4)	0,095(2)	
F53	-0,3591(7)	0,5359(7)	-0,3650(4)	0,100(2)	
F61A	0,3179(9)	0,5015(10)	-0,2326(8)	0,062(3)	0,446(16)
F61B	0,3008(9)	0,5281(9)	-0,2725(5)	0,063(2)	0,554(16)
F62A	0,1760(11)	0,5888(11)	-0,1461(7)	0,062(3)	0,446(16)
F62B	0,2324(11)	0,5611(10)	-0,1645(5)	0,063(2)	0,554(16)
F63A	0,1680(11)	0,6571(12)	-0,2410(8)	0,062(3)	0,446(16)
F63B	0,1359(10)	0,6634(10)	-0,2325(6)	0,063(2)	0,554(16)
F81	0,0686(7)	-0,2723(5)	0,4900(3)	0,090(2)	
F82	-0,0815(6)	-0,2985(6)	0,4940(3)	0,0821(19)	
F83	0,0875(7)	-0,4356(4)	0,4600(2)	0,085(2)	
F91	-0,2551(8)	-0,4712(5)	0,4637(3)	0,109(3)	
F92	-0,4157(8)	-0,3610(10)	0,4377(4)	0,135(4)	
F93	-0,3616(6)	-0,3064(5)	0,5129(2)	0,086(2)	
H11A	0,134041	0,026712	-0,724582	0,074*	
H11B	0,271688	-0,003219	-0,729761	0,074*	
H12E	0,111295	-0,009790	-0,604970	0,109*	
H13A	0,345783	-0,156334	-0,665600	0,175*	
H13B	0,262870	-0,166986	-0,592250	0,175*	
H202	0,767821	-0,097147	-0,521261	0,042*	
H203	0,922575	-0,045374	-0,520516	0,048*	
H204	0,888706	0,104487	-0,447746	0,044*	
H205	0,746329	0,259101	-0,360504	0,050*	
H206	0,552096	0,365703	-0,296981	0,055*	
H207	0,400502	0,307946	-0,298637	0,056*	
H208	0,437939	0,152908	-0,367220	0,041*	
H2A2	0,514882	0,078985	-0,545810	0,045*	
H2AA	0,492984	-0,005268	-0,413481	0,041*	
H2AB	0,582106	-0,089200	-0,478204	0,041*	
H2AC	0,310782	0,112046	-0,442621	0,051*	
H2AD	0,314497	0,169128	-0,515495	0,051*	
H2E	-0,010378	0,198183	-0,683575	0,064*	
H302	-0,032437	0,818011	-0,320050	0,064*	
H303	-0,103483	0,678187	-0,322029	0,047*	
H304	0,026913	0,502094	-0,374559	0,052*	

Продовження табл. 2

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв.}}/U_{\text{ізо.}} \text{ \AA}^{-2*}$	КЗП
H305	0,229344	0,368246	-0,438701	0,057*	
H306	0,423999	0,330837	-0,488652	0,068*	
H307	0,493180	0,473755	-0,489759	0,075*	
H308	0,371695	0,647548	-0,432684	0,066*	
H3A2	0,104432	0,918089	-0,435250	0,096*	
H3AA	0,129793	0,862273	-0,320474	0,074*	
H3AB	0,264007	0,775427	-0,357680	0,074*	
H3AC	0,343517	0,866330	-0,441781	0,132*	
H3AD	0,266008	0,945347	-0,492491	0,132*	
H3E	-0,079782	0,388908	-0,653902	0,060*	
H402	0,040886	0,603249	0,071062	0,130*	
H403	-0,064229	0,506528	0,030200	0,134*	
H404	0,054350	0,367497	-0,061845	0,083*	
H405	0,243511	0,257667	-0,135224	0,078*	
H406	0,447534	0,213152	-0,182154	0,128*	
H407	0,537794	0,308432	-0,140647	0,112*	
H408	0,438793	0,429108	-0,054693	0,088*	
H4A2	0,368734	0,670291	-0,005693	0,185*	0,83(3)
H4AA	0,220674	0,603240	0,083288	0,123*	0,17(3)
H4AB	0,344835	0,521818	0,033411	0,123*	0,17(3)
H4AC	0,334811	0,519340	0,045697	0,123*	0,83(3)
H4AD	0,208526	0,621463	0,078323	0,123*	0,83(3)
H4AE	0,173996	0,704096	-0,054669	0,185*	0,83(3)
H4AF	0,267232	0,764925	-0,078444	0,185*	0,83(3)
H4B2	0,235579	0,748299	0,024884	0,043*	0,17(3)
H4BA	0,360340	0,583111	-0,081181	0,043*	0,17(3)
H4BB	0,334484	0,718554	-0,084067	0,043*	0,17(3)
H4E	0,057324	0,461583	-0,645418	0,052*	
H502	-0,575228	0,374890	0,196088	0,073*	
H503	-0,475828	0,177358	0,186380	0,082*	
H504	-0,264120	0,098020	0,183998	0,106*	
H505	-0,080192	0,135725	0,184535	0,181*	
H506	-0,014117	0,290303	0,190131	0,155*	
H507	-0,144580	0,462358	0,204170	0,143*	
H508	-0,337441	0,545210	0,209334	0,110*	
H5A2	-0,656492	0,665535	0,271777	0,104*	
H5AA	-0,475420	0,578879	0,179557	0,142*	
H5AB	-0,584909	0,550346	0,176270	0,142*	
H5AC	-0,507006	0,491448	0,328679	0,103*	
H5AD	-0,622532	0,607916	0,366402	0,103*	
H5E	0,265682	0,422946	-0,636752	0,053*	
H602	-0,047448	-0,305697	-0,121825	0,066*	
H603	0,019632	-0,170039	-0,138209	0,080*	
H604	-0,111081	0,020765	-0,109223	0,087*	
H605	-0,316578	0,163402	-0,046487	0,117*	
H606	-0,507780	0,199950	0,010755	0,170*	
H607	-0,578577	0,056158	0,023513	0,180*	

Продовження табл. 2

Атом	x/a	y/b	z/c	Уекв./Уізо. Å <sup>2</sup> *	КЗП
H608	-0,445718	-0,133010	-0,015942	0,105*	
H6A2	-0,266816	-0,309541	-0,168260	0,075*	
H6AA	-0,313565	-0,292896	-0,024191	0,071*	
H6AB	-0,184336	-0,376738	-0,069513	0,071*	
H6AC	-0,457350	-0,315555	-0,070523	0,138*	
H6AD	-0,440163	-0,318608	-0,152412	0,138*	
H6E	0,458452	0,291445	-0,640941	0,068*	
H7E	0,518730	0,100310	-0,668607	0,060*	
H8E	0,383179	0,033877	-0,687274	0,053*	
N1E	0,1568(6)	0,1532(5)	-0,6814(3)	0,0398(13)	
N201	0,6420(5)	0,0231(5)	-0,4528(3)	0,0345(12)	
N301	0,1367(7)	0,7239(6)	-0,3706(3)	0,0511(17)	
N401	0,2003(12)	0,5184(9)	0,0100(5)	0,084(3)	
N501	-0,4436(10)	0,4102(8)	0,1981(4)	0,073(2)	
N601	-0,2167(8)	-0,2083(5)	-0,0757(3)	0,0529(18)	
O104	-0,2541(6)	-0,2859(5)	0,2022(3)	0,0670(18)	
O105	-0,3816(6)	-0,1169(6)	0,2588(3)	0,0715(19)	
O113	-0,0078(5)	-0,2620(5)	0,1543(2)	0,0523(14)	
O114	-0,1346(5)	-0,0879(5)	0,2006(2)	0,0524(14)	
O123	0,2490(5)	-0,2505(5)	0,1577(3)	0,0571(15)	
O124	0,1114(6)	-0,0743(5)	0,1920(3)	0,0586(15)	
O13	-0,1725(5)	0,4219(5)	-0,0746(2)	0,0478(12)	
O133	0,0586(7)	-0,5262(6)	0,1968(3)	0,069(2)	
O134	0,2366(6)	-0,5216(5)	0,1833(4)	0,073(2)	
O14	-0,3125(5)	0,3639(5)	-0,0875(3)	0,0576(14)	
O143	-0,1133(5)	0,0801(4)	0,3318(3)	0,0457(13)	
O144	-0,2899(4)	0,0690(5)	0,3609(2)	0,0438(12)	
O173	-0,1097(6)	0,0065(5)	-0,2783(3)	0,0530(14)	
O174	-0,2738(6)	0,1392(6)	-0,2100(3)	0,0537(15)	
O23	0,0800(5)	0,2305(4)	-0,1636(2)	0,0423(11)	
O24	-0,0511(5)	0,1521(4)	-0,1520(2)	0,0435(11)	
O33	0,2901(5)	0,0793(5)	-0,3067(3)	0,0523(13)	
O34	0,1819(4)	-0,0155(4)	-0,2574(3)	0,0427(11)	
O43	0,0706(5)	0,2977(4)	-0,3789(2)	0,0392(10)	
O44	-0,0179(5)	0,1816(5)	-0,3817(3)	0,0493(13)	
O53	-0,1595(5)	0,5078(5)	-0,2715(3)	0,0486(12)	
O54	-0,2633(6)	0,4055(6)	-0,2754(3)	0,0604(15)	
O63	0,1853(5)	0,4013(5)	-0,2623(2)	0,0415(12)	
O64	0,0328(5)	0,5219(5)	-0,1795(2)	0,0434(12)	
O83	-0,0204(5)	-0,1874(4)	0,3802(2)	0,0524(15)	
O84	0,1008(5)	-0,3664(4)	0,3383(2)	0,0504(14)	
O93	-0,1735(5)	-0,3845(5)	0,3545(3)	0,0597(18)	
O94	-0,2853(5)	-0,2113(5)	0,4061(2)	0,0519(13)	

Продовження табл. 2

II					
Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв.}}/U_{\text{в.о.}} \text{ \AA}^{2*}$	КЗП
Ag1	0,49882(4)	0,71947(2)	0,30268(3)	0,02437(9)	
Ag2	0,29991(5)	0,86526(2)	0,26488(3)	0,02770(10)	
Ag3	-0,06317(9)	0,80644(4)	0,28624(6)	0,02501(18)	0,5
C1	0,7835(6)	0,6260(3)	0,3638(3)	0,0260(11)	
C11	0,3725(6)	0,5085(3)	0,4498(4)	0,0297(13)	
C12	0,6104(6)	0,8668(4)	0,1657(3)	0,0286(11)	
C13	0,3561(7)	0,4112(4)	0,5639(4)	0,0378(15)	
C14	0,3259(7)	0,3485(4)	0,5084(4)	0,0376(14)	
C15	0,2852(7)	0,2992(4)	0,3562(5)	0,0447(16)	
C16	0,2755(7)	0,3185(5)	0,2684(5)	0,0518(19)	
C17	0,2949(7)	0,4011(5)	0,2389(5)	0,0516(18)	
C18	0,3256(7)	0,4641(4)	0,2960(4)	0,0383(14)	
C19	0,3374(6)	0,4455(4)	0,3870(4)	0,0307(13)	
C1A1	0,4278(8)	0,5567(5)	0,5996(5)	0,0539(19)	
C1A2	0,6053(8)	0,5507(4)	0,6236(4)	0,0440(16)	
C1A3	0,7136(8)	0,5123(4)	0,5798(4)	0,0409(15)	
C2	0,9461(7)	0,5851(4)	0,3881(4)	0,0398(15)	
C20	0,3166(5)	0,3639(4)	0,4175(4)	0,0314(12)	
C21	0,4153(7)	1,0697(3)	-0,0654(4)	0,0291(12)	
C22	0,1982(6)	0,6901(3)	0,1686(4)	0,0244(11)	
C23	0,2626(7)	0,9771(3)	0,0180(4)	0,0291(12)	
C24	0,1218(6)	0,8588(3)	-0,0504(4)	0,0285(11)	
C25	0,0775(7)	0,8162(3)	-0,1254(4)	0,0331(13)	
C26	0,1347(7)	0,8422(3)	-0,2066(4)	0,0331(13)	
C27	0,2302(6)	0,9111(3)	-0,2145(4)	0,0295(12)	
C28	0,2762(6)	0,9562(3)	-0,1388(4)	0,0247(11)	
C29	0,2191(6)	0,9308(3)	-0,0564(3)	0,0219(11)	
C2A1	0,4086(8)	1,0891(4)	0,0955(4)	0,0366(14)	
C2A2	0,3995(7)	1,1820(4)	0,0825(4)	0,0371(14)	
C3	0,7159(7)	0,8891(4)	0,0872(4)	0,0425(16)	
C31	0,1942(7)	0,7841(4)	0,5393(4)	0,0375(14)	
C32	0,2574(6)	0,7737(3)	0,4458(3)	0,0243(11)	
C3A3	0,5240(7)	1,2313(4)	0,0999(4)	0,0421(15)	
C4	0,1043(7)	0,6340(3)	0,1019(4)	0,0420(15)	
C41	-0,0497(7)	1,0864(3)	0,2237(4)	0,0314(13)	
C42	-0,0035(6)	0,9946(3)	0,2423(3)	0,0211(11)	
C4A	0,3764(7)	1,0285(3)	-0,1407(4)	0,0315(13)	
F21	0,9407(4)	0,5033(2)	0,3956(3)	0,0611(11)	
F22	1,0044(6)	0,6126(3)	0,4673(3)	0,0828(15)	
F23	1,0597(5)	0,6070(3)	0,3352(3)	0,0852(16)	
F31	0,0427(5)	0,8073(3)	0,5419(3)	0,0683(13)	
F32	0,2085(6)	0,7183(3)	0,5885(2)	0,0806(14)	
F33	0,2788(5)	0,8459(3)	0,5804(3)	0,0715(13)	
F3A1	0,810(3)	0,9517(15)	0,0892(11)	0,123(11)	0,45(2)
F3A2	0,795(2)	0,8200(11)	0,0567(13)	0,081(8)	0,45(2)
F3A3	0,620(3)	0,9001(17)	0,0165(11)	0,071(7)	0,45(2)
F3B1	0,7447(11)	0,9716(6)	0,0883(9)	0,037(3)	0,55(2)
F3B2	0,8666(10)	0,8594(7)	0,1013(7)	0,048(3)	0,55(2)
F3B3	0,653(2)	0,8692(12)	0,0109(9)	0,068(5)	0,55(2)
F41	-0,2061(4)	1,1027(2)	0,2278(2)	0,0498(10)	

Закінчення табл. 2

Атом	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$U_{\text{екв}}/U_{130}$ $\text{\AA}^2*$	КЗП
F42	0,0263(5)	1,1378(2)	0,2795(3)	0,0642(12)	
F43	-0,0075(5)	1,1100(2)	0,1425(2)	0,0545(11)	
F4A1	0,132(4)	0,6518(11)	0,0243(8)	0,171(11)	0,56(2)
F4A2	0,1300(19)	0,5560(6)	0,1122(11)	0,056(4)	0,56(2)
F4A3	-0,0510(16)	0,6411(13)	0,111(2)	0,149(10)	0,56(2)
F4B1	0,1945(14)	0,6212(15)	0,0298(9)	0,091(8)	0,44(2)
F4B2	0,071(3)	0,5596(12)	0,1307(17)	0,130(11)	0,44(2)
F4B3	-0,030(2)	0,6656(14)	0,0682(11)	0,071(6)	0,44(2)
H1	0,677161	0,536181	0,379467	0,052*	
H11	0,391148	0,564225	0,431019	0,036*	
H13	0,361477	0,400569	0,625547	0,045*	
H14	0,310652	0,293534	0,530239	0,045*	
H15	0,271126	0,243241	0,375574	0,054*	
H16	0,255255	0,275262	0,226553	0,062*	
H17	0,286231	0,412688	0,177501	0,062*	
H18	0,338868	0,519762	0,275512	0,046*	
H1A2	0,641364	0,577937	0,676284	0,053*	
H1AA	0,403798	0,612384	0,573944	0,065*	
H1AB	0,363885	0,550375	0,653326	0,065*	
H1AC	0,683474	0,484049	0,526617	0,049*	
H1AD	0,823691	0,512058	0,600571	0,049*	
H21	0,484328	1,117235	-0,067241	0,035*	
H23	0,223926	0,960426	0,073615	0,035*	
H24	0,087156	0,840023	0,005335	0,034*	
H25	0,008009	0,768893	-0,122361	0,040*	
H26	0,105968	0,810916	-0,258010	0,040*	
H27	0,265113	0,928295	-0,270737	0,035*	
H2A2	0,300262	1,205942	0,061085	0,045*	
H2AA	0,521430	1,073109	0,112582	0,044*	
H2AB	0,337340	1,072600	0,143819	0,044*	
H3AA	0,624185	1,208413	0,121415	0,051*	
H3AB	0,514001	1,289885	0,090947	0,051*	
H4A	0,416045	1,047876	-0,195147	0,038*	
N12	0,3793(5)	0,4901(3)	0,5344(3)	0,0334(11)	
N22	0,3572(5)	1,0442(3)	0,0132(3)	0,0259(10)	
O1	0,6640(4)	0,5811(2)	0,3514(3)	0,0349(9)	
O13	0,4843(5)	0,9093(2)	0,1689(3)	0,0386(10)	
O14	0,6605(4)	0,8118(2)	0,2155(3)	0,0363(10)	
O2	0,7895(5)	0,7034(2)	0,3582(3)	0,0396(10)	
O23	0,1341(5)	0,7550(2)	0,1887(3)	0,0325(9)	
O24	0,3350(4)	0,6608(2)	0,1908(2)	0,0295(9)	
O33	0,1869(5)	0,8189(2)	0,3900(3)	0,0333(9)	
O34	0,3734(4)	0,7260(2)	0,4382(2)	0,0298(8)	
O43	0,1323(4)	0,9758(2)	0,2121(2)	0,0267(8)	
O44	-0,0997(4)	0,9530(2)	0,2839(2)	0,0302(9)	

\*Для негідрогенових атомів  $U_{\text{екв}} = 1/3 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* (\vec{a}_i \vec{a}_j)$ ; для H –  $U_{130}$ .

Таблиця 3  
 Основні довжини зв'язків ( $d$ ) та валентні ( $\omega$ ) кути у координаційних многогранниках металу  
 в структурі сполук **I** та **II**

Table 3  
 Selected bond distances ( $d$ ) and valence angles ( $\omega$ ) angles in the coordination polyhedra of the metal  
 in the structure of the compounds of **I** and **II**

Зв'язок	$d$ , Å	Кут	$\omega$ , °
<b>I</b>			
Ag1–O24	2,371(5)	O174–Ag1–O14	102,2(2)
Ag1–O14	2,400(5)	O174–Ag1–Ag2	79,35(17)
Ag1–O54	2,240(6)	O174–Ag1–Ag4	172,04(16)
Ag1–O174	2,378(6)	O24–Ag1–O174	91,47(19)
Ag2–O173	2,335(6)	O24–Ag1–O14	87,05(19)
Ag2–O34	2,269(5)	O54–Ag1–O174	106,1(2)
Ag2–O44	2,264(5)	O54–Ag1–O24	151,2(2)
Ag2–O24	2,647(5)	O54–Ag1–O14	110,5(2)
Ag3–O63	2,361(5)	O34–Ag2–O173	108,1(2)
Ag3–O33	2,388(5)	O44–Ag2–O173	95,42(19)
Ag3–O43	2,267(4)	O44–Ag2–O34	130,2(2)
Ag3–O23	2,370(5)	O63–Ag3–O33	109,59(19)
Ag4–O64	2,369(6)	O63–Ag3–O23	91,70(18)
Ag4–O13	2,268(5)	O43–Ag3–O63	104,16(17)
Ag4–O53	2,233(5)	O43–Ag3–O33	102,59(19)
Ag4–O23	2,651(7)	O43–Ag3–O23	152,87(18)
Ag1...Ag2	2,8916(9)	O23–Ag3–O33	92,30(18)
Ag1...Ag4	2,8821(8)	O123–Ag5–O134	101,9(2)
Ag2...Ag3	2,9055(8)	O123–Ag5–O113	87,0(2)
Ag4...Ag3	2,9022(8)	O134–Ag5–O113	97,0(3)
Ag5–O113	2,556(5)	O84–Ag5–O123	136,9(2)
Ag5–O123	2,290(6)	O84–Ag5–O134	98,1(2)
Ag5–O134	2,329(6)	O84–Ag5–O113	127,9(2)
Ag5–O84	2,269(5)	O83–Ag6–O114	129,0(2)
Ag6–O114	2,494(5)	O83–Ag6–O143	94,41(19)
Ag6–O124	2,263(6)	O83–Ag6–O124	143,5(2)
Ag6–O143	2,344(5)	O143–Ag6–O114	98,45(19)
Ag6–O83	2,238(5)	O124–Ag6–O114	83,1(2)
Ag7–O105	2,319(6)	O124–Ag6–O143	97,4(2)
Ag7–O114	2,513(5)	O144–Ag7–O114	94,59(19)
Ag7–O144	2,358(6)	O94–Ag7–O114	155,54(19)
Ag7–O94	2,290(5)	O94–Ag7–O144	105,08(19)
Ag8–O104	2,362(6)	O94–Ag7–O105	100,4(3)
Ag8–O113	2,463(6)	O105–Ag7–O114	83,8(2)
Ag8–O133	2,405(7)	O105–Ag7–O144	114,8(2)
Ag8–O93	2,242(5)	O133–Ag8–O113	85,4(2)
Ag6...Ag7	2,8996(8)	O93–Ag8–O133	105,7(2)
Ag6...Ag5	2,8364(8)	O93–Ag8–O113	166,0(2)
Ag8...Ag7	2,9606(8)	O93–Ag8–O104	101,7(3)
Ag8...Ag5	2,9238(10)	O104–Ag8–O133	108,7(2)
		O104–Ag8–O113	82,1(2)

Закінчення табл. 3

Зв'язок	II		$\omega, ^\circ$
	d, Å	Кут	
Ag1–Ag2	2,8961(9)	O24–Ag1–O2	136,19(12)
Ag1–O2	2,523(4)	O24–Ag1–O14	99,42(14)
Ag1–O24	2,331(4)	O24–Ag1–O34	113,45(13)
Ag1–O14	2,412(4)	O14–Ag1–O2	73,20(12)
Ag1–O34	2,334(3)	O34–Ag1–O2	98,77(12)
Ag2–Ag3	3,1599(16)	O34–Ag1–O14	136,38(14)
Ag2–O23	2,492(4)	O13–Ag2–O23	106,96(14)
Ag2–O13	2,251(4)	O13–Ag2–O33	161,55(14)
Ag2–O33	2,265(4)	O13–Ag2–O43	86,86(13)
Ag2–O43	2,366(4)	O33–Ag2–O23	85,62(14)
Ag3–O2i	2,337(4)	O33–Ag2–O43	106,10(12)
Ag3–O23	2,380(4)	O43–Ag2–O23	93,85(12)
Ag3–O14i	2,485(4)	O2i–Ag3–O23	114,95(13)
Ag3–O33	2,558(4)	O2i–Ag3–O14i	75,19(13)
Ag3–O44	2,364(4)	O2i–Ag3–O33	100,79(13)
		O2i–Ag3–O44	129,67(13)
		O23–Ag3–O14i	112,12(14)
		O23–Ag3–O33	81,84(13)
		O14i–Ag3–O33	165,95(13)
		O44–Ag3–O23	115,01(13)
		O44–Ag3–O14i	81,10(13)
		O44–Ag3–O33	91,78(12)

Положення атомів гідрогену молекули трифторацетатної кислоти в структурі II визначити не вдалося. Використання стандартного підходу порівняння відстаней C–O (для фрагмента C–O–H вона зазвичай дещо більша) не дало можливості однозначно обрати атоми кисню, поблизу яких повинен бути гідроген. Водночас аналіз відстаней O...O (керуючись припущенням про утворення водневих зв'язків O–H...O) засвідчив, що найбільш імовірно розташування атомів гідрогену поруч з атомами O(5), O(6), O(9), O(10) (відстані O(5)–O(9), O(6)–O(10) становлять 3,14 та 3,18 Å, відповідно).

Таблиця 4  
 Основні геометричні характеристики водневих контактів у структурах I та II  
 Table 4

Selected hydrogen contacts in the I–II structures

D–H...A	Код симетрії	D–H, Å	H...A, Å	D...A, Å	D–H...A, °
<b>I</b>					
C2E–H2E...O143	$x, y, -I+z$	0,95	2,36	3,246(12)	156
C4E–H4E...O84	$x, I+y, -I+z$	0,95	2,50	3,358(10)	151
C7E–H7E...O144	$I+x, y, -I+z$	0,95	2,52	3,345(11)	145
C11E–H11A...O124	$x, y, -I+z$	0,99	2,34	3,210(12)	146
C202–H202...O94	$I+x, y, -I+z$	0,95	2,53	3,414(9)	155
C204–H204...O44	$I+x, y, z$	0,95	2,48	3,329(10)	148
C207–H207...O63		0,95	2,40	3,314(12)	160
C208–H208...O33		0,95	2,49	3,341(10)	150
C302–H302...O173	$x, I+y, z$	0,95	2,32	3,243(11)	162
C304–H304...O43		0,95	2,47	3,314(10)	148
C305–H305...O43		0,95	2,57	3,383(12)	144
C402–H402...O113	$x, I+y, z$	0,95	2,27	3,195(12)	163
C405–H405...O23		0,95	2,45	3,343(15)	156
C406–H406...F171	$I+x, y, z$	0,95	2,45	3,249(19)	142
C407–H407...O174	$I+x, y, z$	0,95	2,59	3,350(18)	137
C502–H502...O134	$-I+x, I+y, z$	0,95	2,28	3,218(14)	168
C504–H504...O114		0,95	2,36	3,281(13)	164
C602–H602...O64	$x, -I+y, z$	0,95	2,27	3,170(11)	159
C604–H604...O24		0,95	2,20	3,143(14)	170
C606–H606...F133	$-I+x, I+y, z$	0,95	2,30	3,102(19)	141
<b>II</b>					
C1A–H1A...O10	$x, y, -I+z$	0,95	2,27	3,171(8)	157
C1B–H1B...O7	$I-x, I/2+y, I-z$	0,95	2,60	3,483(8)	156
C4A–H4A...O1	$I-x, I/2+y, I-z$	0,95	2,50	3,310(8)	143
C4B–H4B...O2		0,95	2,40	3,248(8)	148
C8B–H8B...O3	$I-x, I/2+y, I-z$	0,95	2,59	3,527(8)	167
C11A–H11B...O10	$x, y, -I+z$	0,99	2,53	3,435(8)	152

#### 4. Висновки

Отже, на відміну від споріднених координаційних сполук купруму, S=C зв'язок алільних груп катіонів як N-алілхінолінію, так і N-алілізохінолінію не бере участі в координації атомів аргентуму у структурі сполук  $[C_9H_7N(C_3H_5)]_3Ag_4(CF_3COO)_7$  та  $[C_9H_7N(C_3H_5)]_4Ag_5(CF_3COO)_9CF_3COOH$ , програючи конкурентну боротьбу атомам кисню трифторацетат іонів – більш м'яким основам Пірсона.



1. *Burgess J., Steel P. J.* Is the silver–alkene interaction a useful new supramolecular synthon? // *Coord. Chem. Rev.* 2011. Vol. 255, No. 17–18. P. 2094–2103. DOI: [10.1016/j.ccr.2011.01.024.1](https://doi.org/10.1016/j.ccr.2011.01.024.1)
2. *Guo C., Liu Z., Li X.* et al. Silver-catalyzed monofluoroalkylation of heteroarenes with  $\alpha$ -fluorocarboxylic acids: an insight into the solvent effect // *Chem. Commun.* 2022. Vol. 58, No. 8. P. 1147–1150. DOI: [10.1039/D1CC06466E](https://doi.org/10.1039/D1CC06466E)
3. *Yang Y., Liu X., Lu J.* et al.  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]_2\text{SO}_4$ : a strategy for the coordination of cationic moieties to design nonlinear optical materials // *Angew. Chemie Int. Ed.* 2021. Vol. 60, No. 39. P. 21216–21220. DOI: [10.1002/anie.202107780](https://doi.org/10.1002/anie.202107780)
4. *Mudarra Á. L., Martínez de Salinas S., Pérez-Temprano M. H.* Beyond the traditional roles of Ag in catalysis: the transmetalating ability of organosilver(I) species in Pd-catalysed reactions // *Org. Biomol. Chem.* 2019. Vol. 17, No. 7. P. 1655–1667. DOI: [10.1039/C8OB02611D](https://doi.org/10.1039/C8OB02611D)
5. *Zhang W., Ye G., Liao D.* et al. Recent advances of silver-based coordination polymers on antibacterial applications // *Molecules.* 2022. Vol. 27, No. 21. P. 7166. DOI: [10.3390/molecules27217166](https://doi.org/10.3390/molecules27217166)
6. *Anjum S., Chaudhary R., Khan A.K.* et al. Light-emitting diode (led)-directed green synthesis of silver nanoparticles and evaluation of their multifaceted clinical and biological activities // *RSC Adv.* 2022. Vol. 12, No. 34. P. 22266–22284. DOI: [10.1039/D2RA03503K](https://doi.org/10.1039/D2RA03503K)
7. *Slyvka Y., Goreshnik E., Pavlyuk O.* et al. Copper(I)  $\pi$ -complexes with allyl derivatives of heterocyclic compounds: structural survey of their crystal engineering // *Open Chem. (Central. Eur. J. Chem.).* 2013. Vol. 11, No. 12. P. 43–61. DOI: [10.2478/s11532-013-0323-3](https://doi.org/10.2478/s11532-013-0323-3)
8. *Pavlyuk O., Lis T., Mys'kiv M. G.* Structural aspect of CuCN catalytic cyclodimerization of N-allylquinolinium halides // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2005. Vol. 631, No. 10. P. 1893–1897. DOI: [10.1002/zaac.200500057](https://doi.org/10.1002/zaac.200500057)
9. *Pavlyuk A. V., Davydov V. N., Mys'kiv M. G. et al.* Synthesis and structure of complexes formed in the  $\text{CuCl}_2$ –Cu–N-allylquinolinium chloride system // *Russ. J. Coord. Chem.* 2001. Vol. 27, No. 12. P. 865–877. DOI: [10.1023/A:1013065129446](https://doi.org/10.1023/A:1013065129446)
10. *Filinchuk Y. E., Pavlyuk A. V., Ciunik L. Z.* et al. Structure of complexes formed in the  $\text{CuX}_2$ –Cu–N-allylisoquinolinium chloride system (X = Cl, Br) // *Russ. J. Coord. Chem.* 2004. Vol. 30, No. 11. P. 818–824. DOI: [10.1023/B:RUCO.0000047471.83836.3a](https://doi.org/10.1023/B:RUCO.0000047471.83836.3a)
11. *Braga D., Giuffreda S. L., Grepioni F.* et al. Mechanochemical and solution preparation of the coordination polymers  $\text{Ag}[\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}]_2[\text{CH}_3\text{COO}]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{Zn}[\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}]\text{Cl}_2$  // *Cryst.Eng.Comm.* 2004. Vol. 6, No. 75. P. 458–462. DOI: [10.1039/B406375A](https://doi.org/10.1039/B406375A)
12. *Dulani Dhanapala B., Mannino N. A., Mendoza L. M.* et al. Synthesis of bimetallic trifluoroacetates through a crystallochemical investigation of their monometallic counterparts: the case of  $(\text{A}, \text{A}')(\text{CF}_3\text{COO})_2\cdot \text{NH}_2\text{O}$  (A, A' = Mg, Ca, Sr, Ba, Mn) // *Dalt. Trans.* 2017. Vol. 46, No. 5. P. 1420–1430. DOI: [10.1039/C6DT04152C](https://doi.org/10.1039/C6DT04152C)
13. *Hilgetag G., Martini A.* Weygand/Hilgetag preparative organic chemistry. Berlin: John Wiley & Sons, 1972. 1181 p.
14. CrysAlisPro 1.171.38.34a (Rigaku OD, 2015).

15. *Sheldrick G. M.* SHELXT – integrated space-group and crystal-structure determination // *Acta Cryst. A.* 2015. Vol. 71, No. 1. P. 3–8.  
DOI: [10.1107/S2053273314026370](https://doi.org/10.1107/S2053273314026370)
16. *Sheldrick G. M.* Crystal structure refinement with Shelxl // *Acta Cryst. C.* 2015. Vol. 71, No. 1. P. 3–8. DOI: [10.1107/S2053229614024218](https://doi.org/10.1107/S2053229614024218)
17. *Dolomanov O. V., Bourhis L. J., Gildea R. J.* et al. OLEX2: a complete structure solution, refinement and analysis program // *J. Appl. Crystallogr.* 2009. Vol. 42, No. 2. P. 339–341. DOI: [10.1107/S0021889808042726](https://doi.org/10.1107/S0021889808042726)
18. *Spek A. L.* Structure validation in chemical crystallography // *Acta Cryst. D.* 2009. Vol. 65, No. 2. P. 148–155. DOI: [10.1107/S090744490804362X](https://doi.org/10.1107/S090744490804362X)

## SILVER(I) TRIFLUOROACETATE COMPLEXES WITH N-ALLYLIC DERIVATIVES OF QUINOLINE AND ISOQUINOLINE: SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE

O. Pavlyuk

*Ivan Franko National University of Lviv,  
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine  
e-mail: oleksiy.pavlyuk@lnu.edu.ua*

By means of direct interaction of components, starting from ethanol solutions of argentum trifluoroacetate and the corresponding N-allylquinolinium and N-allylisoquinolinium chlorides  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]\text{Cl}$ , single crystals of new compound were obtained and X-ray structurally investigated  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_3\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7$  (**I**) (sp. gr.  $P1$  (2),  $Z = 2$ ,  $a = 12.6915(3)$ ,  $b = 12.9395(2)$ ,  $c = 20.6042(3)$  Å,  $\alpha = 87.732(2)$ ,  $\beta = 75.309(2)$ ,  $\gamma = 65.506(2)^\circ$ ,  $V = 2970.2(1)$  Å<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{calc.}} = 1.983$  g/cm<sup>3</sup>,  $\mu(\text{MoK}\alpha) = 1.43$  mm<sup>-1</sup>,  $\theta_{\text{max.}} = 36.8^\circ$ , 40788 measured, 26075 used reflections,  $R(F^2) = 0.043$ ,  $S = 1.03$ ); and  $[\text{C}_9\text{H}_7\text{N}(\text{C}_3\text{H}_5)]_4\text{Ag}_5(\text{CF}_3\text{COO})_9\text{CF}_3\text{COOH}$  (**II**) (sp. gr.  $P2_1$  (4),  $Z = 4$ ,  $a = 8.231(4)$ ,  $b = 15.997(5)$ ,  $c = 15.174(5)$  Å,  $\beta = 91.87(3)^\circ$ ,  $V = 1997(1)$  Å<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{calc.}} = 1.956$  g/cm<sup>3</sup>,  $\mu(\text{MoK}\alpha) = 1.35$  mm<sup>-1</sup>,  $\theta_{\text{max.}} = 35.0^\circ$ , 21594 measured, 8770 used reflections,  $R(F^2) = 0.038$ ,  $S = 0.93$ ).

In the crystal structure of the studied compounds, atoms of Ag(I) formed a coordination environment exclusively from oxygen atoms of trifluoroacetate ions. The bridging bidentate function of the latter leads to the realization in the structure of compound **I** of isolated globular topological units  $[\text{Ag}_4(\text{CF}_3\text{COO})_7]^{3-}$ . In turn, in compound **II**, the bridging function of  $\text{CF}_3\text{COO}$  groups leads to the formation of topological units  $\{\text{Ag}_2(\text{CF}_3\text{COO})_5\}_n^{2n-}$  in the structure of the compound **I**. Both N-allylquinolinium and N-allylisoquinolinium cations do not participate in coordination with Ag atoms in the crystal structure of studied compounds.

*Keywords:* silver(I),  $\sigma$ -complexes, N-allyl derivatives, crystal structure.

Стаття надійшла до редколегії 01.11.2022

Прийнята до друку 17.05.2023