

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.736:661

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА  $\pi$ -КОМПЛЕКСА  $\text{AgBF}_4$   
С 2-АЛЛИЛ-5-ФЕНИЛ-2Н-ТЕТРАЗОЛОМ СОСТАВА  $[\text{Ag}(\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_4)(\text{BF}_4)]$ 

Ю. И. Слывка

Львовский национальный университет им. И. Франко, Украина  
E-mail: y\_slyvka@franko.lviv.ua

Статья поступила 16 декабря 2013 г.

Взаимодействием  $\text{AgBF}_4$  с 2-аллил-5-фенил-2Н-тетразолом (*2aphet*) в этанольном растворе получен и методом РСА исследован  $\pi$ -комплекс  $[\text{Ag}(2aphet)(\text{BF}_4)]$ .

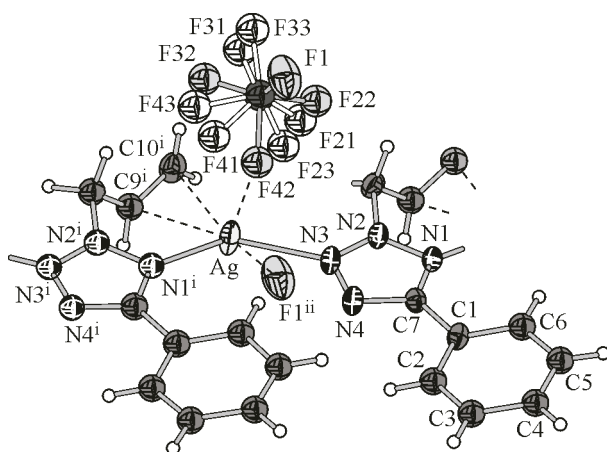
**Ключевые слова:** серебро(I),  $\pi$ -комплекс, тетразол, кристаллическая структура.

Координационные соединения производных тетразолов нашли достаточно широкое применение в органическом синтезе в качестве прекурсоров и катализаторов в получении биологически активных веществ, ингибиторов коррозии, люминофоров, а также эффективных инструментов в кристаллической инженерии металлокомплексов [ 1 ]. Поскольку среди  $\pi$ -координационных соединений *d*-металлов Ib группы с аллильными производными тетразолов исследованы всего лишь три кристаллических  $\pi$ -комплекса Ag(I) [ 2, 3 ], с целью продолжения изучения поведения других замещенных тетразолов относительно  $\text{Ag}^+$  в данной работе представлены результаты синтеза и рентгеноструктурного исследования нового  $\pi$ -комплекса  $\text{AgBF}_4$  с 2-аллил-5-фенил-2Н-тетразолом (*2aphet*) состава  $[\text{Ag}(2aphet)\text{BF}_4]$  (**1**).

**Экспериментальная часть. Синтез.** 5-Фенилтетразол получен по известной методике [ 4 ], исходя из бензонитрила и азиды натрия. Алкилированием 5-фенилтетразола с помощью хлористого аллила в присутствии эквивалентного количества  $\text{NaHCO}_3$  в этанольном растворе получен N-аллил-5-фенилтетразол (*aphet*). Выход — 94 %.

Кристаллы соединения  $[\text{Ag}(2aphet)\text{BF}_4]$  (**1**) получены взаимодействием тетрафторбората серебра(I) (образующегося *in situ* из  $\text{Ag}_2\text{CO}_3$  и  $\text{HBF}_4$ ) с *2-aphet* в этанольном растворе. К раствору 0,27 ммоль (0,05 г) *2-aphet* в 0,7 мл этилового спирта при комнатной температуре добавляли 0,36 ммоль (0,1 г) свежеполученного  $\text{Ag}_2\text{CO}_3$ . Суспензию подкисляли концентрированной  $\text{HBF}_4$  до pH ~ 4, вновь образовавшуюся белую, слегка розоватую суспензию оставляли в темноте при комнатной температуре. Спустя 52 ч на поверхности осадка из раствора образовались бесцветные кристаллы соединения **1** призматического габитуса.

**РСА.** Массив интегральных интенсивностей рефлексов для кристаллов соединения **1** получен на монокристалльном дифрактометре Rigaku AFC7, оснащенном координатным детектором Mercury CCD ( $\text{MoK}_\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор). Структура решена и уточнена с использованием программ SHELXS-97 и SHELXL-97 [ 5 ]. Детали РСА и основные кристаллоструктурные данные **1**: состав  $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_4\text{AgBF}_4$ ,  $M = 380,9$  г/моль, триклинные, пр. гр.  $P\bar{1}$ ,  $a = 6,3063(12)$ ,  $b = 7,0074(12)$ ,  $c = 14,394(3)$  Å,  $\alpha = 80,179(8)$ ,  $\beta = 88,241(7)$ ,  $\gamma = 78,732(6)^\circ$ ,  $V = 614,7(2)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $\rho_{\text{выч}} = 2,06$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu(\text{MoK}_\alpha) = 1,683$  мм<sup>-1</sup>,  $S = 1,077$ ,  $R(F) = 0,0544$  для 2389 рефлексов с  $I \geq 2\sigma(I)$ ,  $R_w = 0,1475$  для всех независимых 2534 рефлексов. Три из четырех атомов F тетрафторборат-аниона разупорядочены в трех позициях. Эти атомы F уточнены в изо-

Фрагмент структуры  $\{Ag(2aphet)BF_4\}_n$  (**1**)

тропном приближении. Координаты атомов и другие параметры соединения **1** депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ CCDC 976329) [www.ccdc.cam.ac.uk/data\\_request/cif](http://www.ccdc.cam.ac.uk/data_request/cif).

**Результаты и их обсуждение.** В структуре **1** молекула *2aphet* действует как мостигово-хелатный  $\pi, \sigma$ -лиганд, координируясь к атому Ag(I) олефиновой связью C=C аллильной группы и двумя атомами N1 и N3 тетразольного ядра (см. рисунок). Таким образом, в структуре образуются линейные металлоорганические катионные цепи состава  $\{Ag(2aphet)\}_n^{n+}$ . Фенильное кольцо в *2aphet* повернуто относительно плоскости тетразольного ядра на  $10,4^\circ$ . Деформированное тригонально-бипирамидальное окружение атома серебра состоит из трех упомянутых активных центров *2aphet* и двух атомов F. Соответствующие расстояния Ag— $m^i$  (где  $m$  — середина связи C=C,  $i = x-1, y, z$ ), Ag—N1<sup>i</sup>, Ag—N3, Ag—F1<sup>ii</sup> ( $ii = 1-x, 1-y, 1-z$ ) и Ag—F42 равны 2,330(4), 2,420(4), 2,231(4), 3,05(1) и 2,53(1) Å соответственно. В целом, соединение **1** топологически близко к ранее исследованным  $\pi$ -комплексам Cu(I) с 2-аллилбензотриазолом [ 6 ].

Автор выражает благодарность д-ру Е. Горешнику (Институт им. Йозефа Штефана, г. Любляна, Словения) за съемку кристаллов соединения **1** на дифрактометре.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гапоник П.Н., Войтехович С.В., Ивашкевич О.А. // Успехи химии. – 2006. – **75**. – Р. 569.
2. Slyvka Yu., Pavlyuk O., Pokhodylo N. et al. // Acta Chim. Slov. – 2011. – **58**. – Р. 134.
3. Слывка Ю.И., Походьло Н.Т., Горешник Е.А., Мыськив М.Г. // Журн. структур. химии. – 2014. – **55**, № 2. – С. 390.
4. Finnegan W.G., Henry R.A., Lofquist R. // J. Amer. Chem. Soc. – 1958. – **80**. – Р. 3908.
5. Sheldrick G.M. SHELXS-97, SHELXL-97, Programs for the solution and refinement of crystal structures. – Germany, University of Göttingen, 1997.
6. Slyvka Yu., Goreshnik E., Pavlyuk A., Myšktiv M. // Centr. Eur. J. Chem. – 2013. – **11**. – Р. 1875.