_____ КООРДИНАЦИОННЫЕ ____ СОЕДИНЕНИЯ ____

УДК 549.243+547.53.024+548.312.5

ДИКАРБОКСИЛАТЫ ТРИАРИЛВИСМУТА $Ar_3Bi[OC(O)R]_2$, Ar = *n*-Tol, R = CH₂Cl; Ar = Ph, R = C₆H₄OMe-2, CH=CHPh

© 2019 г. В. В. Шарутин^{1, *}, О. К. Шарутина¹, А. Н. Ефремов¹

¹Южно-Уральский государственный университет, Россия, 454080 Челябинск, пр-т им. В.И. Ленина, 76 *e-mail: vvsharutin@rambler.ru Поступила в релакцию 07.12.2017 г.

Поступила в редакцию 07.12.2017 г. После доработки 08.02.2018 г. Принята к публикации 06.07.2018 г.

Взаимодействием *mpu(napa*-толил)висмута с монохлоруксусной и трифенилвисмута с 2-метоксибензойной и коричной кислотами в метил-*mpem*-бутиловом эфире в присутствии гидропероксида третичного бутила получены с высоким выходом дикарбоксилаты триарилвисмута $Ar_3Bi[OC(O)R]_2$, Ar = n-Tol, $R = CH_2Cl(I)$; Ar = Ph, $R = C_6H_4OMe-2$ (II), CH=CHPh (III). Атомы Bi в I–III имеют искаженную тригонально-бипирамидальную координацию с карбоксилатными лигандами в аксиальных положениях (углы OBiO 171.06(6)° (I), 170.46(12)° (II), 175.39(8)° (III)). Длины связей Sb–O и Sb–C равны 2.283(2), 2.288(2) и 2.185(2)–2.199(2) Å (I); 2.265(7), 2.268(7) и 2.194(7)–2.218(8) Å (II); 2.310(2), 2.310(2) и 2.200(2)–2.210(3) Å (III). В молекулах I–III имеют место внутримолекулярные контакты между атомом Bi и атомами O карбонильных групп: расстояния Bi···O(=C) равны 2.990(2), 2.985(3) Å (I); 2.753(8), 2.739(8) Å (II) и 2.688(2) Å (III). Структурная организация в кристаллах I–III обусловлена слабыми межмолекулярными водородными связями: H···O 2.61–2.65 Å (I), 2.47–2.50 Å (II) и 2.56 Å (III).

Ключевые слова: триарилвисмут, дикарбоксилаты, окислительный метод синтеза, рентгеноструктурный анализ

DOI: 10.1134/S0044457X19020181

Известно, что в дикарбоксилатах триарилвисмута реализуется внутримолекулярное взаимодействие атома висмута с карбонильными атомами кислорода — потенциальными координирующими центрами карбоксилатных лигандов, что позволяет отнести эти производные к комплексам высококоординированного висмута [1-12]. Прочность внутримолекулярных контактов Bi···O(=C), основой которых являются донорно-акцепторные взаимодействия, во многом определяется природой заместителей в арильных кольцах при атоме металла (влияют на акцепторные способности металла) и в органическом радикале остатка карбоновой кислоты (усиливают или ослабляют донорные свойства карбонильного кислорода).

С целью установления особенностей строения дикарбоксилатов триарилвисмута в настоящей работе по реакции окислительного присоединения из триарилвисмута и карбоновых кислот в присутствии гидропероксида третичного бутила синтезировали *бис*(монохлорацетат) три(*пара*-толил)висмута (**I**), *бис*(2-метоксибензоат) трифенилвисмута (**II**), *бис*(циннамат) трифенилвисмута (**III**) и проанализировали геометрические характеристики молекул полученных соединений.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Синтез I. Смесь 100 мг (0.207 ммоль) три(*пара*толил)висмута, 39 мг (0.414 ммоль) монохлоруксусной кислоты и 27 мг (0.207 ммоль) 70%-ного водного раствора *трет*-бутилгидропероксида в 30 мл метил-*трет*-бутилового эфира выдерживали при 20°С 24 ч. После удаления растворителя и перекристаллизации твердого остатка из смеси бензол-гептан (2 : 1) получили 100 мг (72%) бесцветных кристаллов I с $t_{пл} = 165^{\circ}$ С (с разл.).

ИК-спектр (v, см⁻¹): 3051, 2956, 2920, 2866, 2576, 1647, 1612, 1539, 1485, 1448, 1408, 1392, 1373, 1340, 1309, 1276, 1253, 1228, 1207, 1184, 1166, 1116, 1055, 999, 935, 827, 792, 781, 690, 675, 578, 474, 424.

	С	Н
Найдено, %:	44.51;	3.82.
Для C ₂₅ H ₂₅ BiCl ₂ O ₄		
вычислено. %:	44.85:	3.77.

Соединения II, III синтезировали по аналогичной методике.

Ph₃Bi[OC(O)C₆H₄OMe-2]₂ (II): бесцветные кристаллы, выход 84%, $t_{пл} = 146^{\circ}$ С.

Таблица 1. Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения структур I-III

Папалата	Значение				
параметр	Ι	II	III		
M	669.33	742.55	734.57		
<i>Т</i> , К	296(2)	296(2)	296(2)		
Сингония	Триклинная	Триклинная	Моноклинная		
Пр. гр.	$P\overline{1}$	$P\overline{1}$	C2/c		
<i>a</i> , Å	10.340(5)	9.14(3)	13.286(4)		
b, Å	11.708(5)	9.23(3)	21.358(5)		
<i>c,</i> Å	12.679(7)	19.89(6)	12.259(3)		
α, град	106.80(2)	88.98(11)	90.00		
β, град	103.70(2)	89.02(8)	119.920(11)		
ү, град	108.76(2)	62.40(15)	90.00		
V, Å ³	1296.0(11)	1487(9)	3015.1(14)		
Ζ	2	2	4		
$ρ_{\rm выч}, г/cm^3$	1.715	1.658	1.618		
μ, мм ⁻¹	7.035	5.972	5.885		
<i>F</i> (000)	648.0	728.0	1440.0		
Размер кристалла, мм	$0.48 \times 0.37 \times 0.22$	$0.73 \times 0.51 \times 0.22$	$0.71\times0.55\times0.49$		
Область сбора данных по 20, град	5.8-82.8	5.62-60.94	6.66-76.1		
Интервалы индексов отражений	$-19 \le h \le 19,$ $-21 \le k \le 21,$ $-23 \le l \le 23$	$-12 \le h \le 12,$ $-13 \le k \le 12,$ $-28 \le l \le 28$	$-22 \le h \le 21, -36 \le k \le 36, -21 \le l \le 20$		
Измерено отражений	102038	50549	47766		
Независимых отражений	17354 ($R_{\rm int} = 0.0519$)	8780 ($R_{\rm int} = 0.0578$)	$8144 \ (R_{\rm int} = 0.0577)$		
Переменных уточнения	293	372	187		
GOOF	1.016	1.154	1.058		
R -факторы по $F^2 > 2\sigma(F^2)$	$R_1 = 0.0394, wR_2 = 0.0628$	$R_1 = 0.0387, wR_2 = 0.0793$	$R_1 = 0.0313, wR_2 = 0.0624$		
<i>R</i> -факторы по всем отражениям	$R_1 = 0.0777, wR_2 = 0.0712$	$R_1 = 0.0473, wR_2 = 0.0821$	$R_1 = 0.0533, wR_2 = 0.0699$		
Остаточная электронная плотность (min/max), <i>e</i> /A ³	1.88/-1.99	1.07/-2.41	2.33/-2.88		

ИК-спектр (v, см⁻¹): 3078, 3045, 3005, 2962, 2935, 2835, 1917, 1795, 1749, 1604, 1587, 1558, 1508, 1485, 1469, 1436, 1344, 1284, 1273, 1249, 1178, 1161, 1147, 1093, 1049, 1020, 1010, 983, 948, 858, 806, 790, 744, 734, 704, 692, 678, 663, 644, 597, 551, 530, 439, 418.

	С	Н
Найдено, %:	54.34;	4.03.
Для С ₃₄ Н ₂₉ ВіО ₆		
вычислено, %:	54.99;	3.94.

Ph₃Bi[OC(O)CH=CHPh]₂ (III): бесцветные кристаллы, выход 98%, $t_{\text{пл}} = 225^{\circ}\text{C}$ (с разл.).

ИК-спектр (v, см⁻¹): 3082, 3047, 3024, 1699, 1683, 1639, 1577, 1544, 1494, 1473, 1448, 1438, 1369, 1328, 1286, 1253, 1226, 1199, 1190, 1180, 1157, 1070, 1055, 1029, 1012, 987, 968, 914, 871, 848, 839, 771, 740, 727, 713, 682, 646, 588, 532, 482, 445, 418.

	С	Н
Найдено, %:	58.74;	4.07.
Для С ₃₆ Н ₂₉ ВіО ₄		
вычислено, %:	58.86;	3.99.

ИК-спектры соединений I–III записывали на ИК-спектрометре Shimadzu IRAffinity-1S в таблетках KBr в области $4000-400 \text{ см}^{-1}$.

РСА кристаллов I–III проведен на дифрактометре D8 Quest фирмы Bruker (Мо K_{α} -излучение, $\lambda = 0.71073$ Å, графитовый монохроматор) при 296(2) К. Сбор, редактирование данных и уточнение параметров элементарной ячейки, а также учет поглощения проведены по программам SMART и SAINT-*Plus* [13]. Все расчеты по определению и уточнению структур выполнены по программам SHELXL/PC [14] и OLEX2 [15]. Структуры определены прямым методом и уточнены методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов.

Основные кристаллографические данные и результаты уточнения структур I—III приведены в табл. 1, основные длины связей и валентные углы в табл. 2.

Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 1574075 для I; № 1574076 для II; № 1575061 для III; deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Известно, что дикарбоксилаты триарилвисмута успешно получают по реакции окислительного присоединения из триарилвисмута и карбоновой кислоты в диэтиловом эфире в присутствии гидропероксидов [2–5, 16–20].

Синтез дикарбоксилатов триарилвисмута провели с использованием гидропероксида третичного бутила в метил-*трет*-бутиловом эфире, который является более дешевым растворителем, чем применявшийся ранее диэтиловый эфир. Продукты выделили из реакционной смеси с выходом не менее 70%.

 $Ar_{3}Bi + 2HOC(O)R + mpem-BuOOH \rightarrow$

 \rightarrow Ar₃Bi[OC(O)R]₂ + H₂O + mpem-BuOH,

где Ar = n-Tol, R = CH₂Cl (I); Ar = Ph, R = C_6H_4OMe-2 (II), CH=CHPh (III).

По данным РСА. в соединениях I-III атомы висмута имеют искаженную тригонально-бипирамидальную координацию с карбоксилатными лигандами в аксиальных положениях (рис. 1–3). Конформация арильных колец относительно экваториальной плоскости [C₃] в молекулах I и III практически одинакова: двугранные углы между соответствующими плоскостями составляют [C(11)-C(16)], $86.81^{\circ}[C(1)-C(6)], 8.34^{\circ}$ 3.28° [C(21)-C(26)] (I); 75.42° [C(1)-C(2')], 6.35° [C(11)-C(16)], 6.35° [C(11')-C(16')] (III), т.е. одно из арильных колец почти перпендикулярно плоскости $[C_3]$, два других отклоняются от нее незначительно. В молекуле II диапазон углов поворота арильных плоскостей равен 23.29° [С(1)-С(6)], 24.15° [С(11)-С(16)], 62.63° [С(21)-С(26)]. Сум-

Таблица 2	2. Основные	длины	связей	(d)	И	валентные
углы (ω) н	з структурах I	-III				

C B833b $d, Å$ Yron $0, rpad.$ IBi(1)-O(1)2.2832(19)O(1)Bi(1)O(2)171.06(6)Bi(1)-O(2)2.288(2)C(11)Bi(1)O(1)90.79(8)Bi(1)-C(1)2.187(2)C(11)Bi(1)O(2)89.48(9)Bi(1)-C(1)2.199(2)C(11)Bi(1)O(1)85.66(8)C(11)-C(32)1.756(3)C(1)Bi(1)O(1)85.66(8)C(2)-C(34)1.748(4)C(21)Bi(1)O(1)91.79(8)O(1)-C(31)1.287(3)C(21)Bi(1)O(1)93.82(8)O(3)-C(31)1.211(3)C(21)Bi(1)C(11)193.32(9)O(2)-C(33)1.276(3)C(21)Bi(1)C(11)108.79(8)O(4)-C(33)1.220(3)C(31)O(1)Bi(1)110.29(15)C(31)-C(32)1.513(3)C(33)O(2)Bi(1)110.30(16)Bi(1)-C(3)2.990(2)O(3)C(31)O(1)124.4(2)Bi(1)-C(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2)124.3(2)IIBi(1)-C(1)2.194(7)C(1)Bi(1)O(2)91.8(2)Bi(1)-O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)O(2)91.8(2)Bi(1)-O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)-O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)-C(11)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)-C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)-C(1)2.218(7)C(1)Bi(1)O(2)85.8(2)O(2)-C(48)1.276(7)C(21)Bi(1)O(1)85.7(2)O(1)-C(38)1.278(7)C(21)Bi(1)O(1)85.7(2)O(1)-C		5 51		
I Bi(1)-O(1) 2.2832(19) O(1)Bi(1)O(2) 171.06(6) Bi(1)-O(2) 2.288(2) C(11)Bi(1)O(1) 90.79(8) Bi(1)-C(1) 2.187(2) C(11)Bi(1)O(1) 181.89(9) Bi(1)-C(1) 2.185(2) C(1)Bi(1)O(1) 85.66(8) C(1)-C(32) 1.756(3) C(1)Bi(1)O(2) 85.95(8) C(1)-C(34) 1.748(4) C(21)Bi(1)O(2) 93.82(8) O(1)-C(31) 1.287(3) C(21)Bi(1)O(1) 108.79(8) O(4)-C(33) 1.220(3) C(31)O(1)Bi(1) 10.29(15) C(31)-C(32) 1.513(3) C(33)O(2)Bi(1) 10.30(16) Bi(1)-O(3) 2.990(2) O(3)C(3)O(1) 124.4(2) Bi(1)-O(4) 2.985(3) O(4)C(3)O(2) 91.8(2) Bi(1)-O(4) 2.990(2) O(3)C(3)O(1) 124.4(2) Bi(1)-O(4) 2.990(2) O(3)C(3)O(1) 124.4(2) Bi(1)-O(4) 2.990(2) O(3)C(3)O(1) 124.4(2) Bi(1)-O(1) 2.194(7) C(1)Bi(1)O(2) 98.6(3) Bi(1)-O(1)	Связь	<i>d</i> , Å	Угол	ω, град
Bi(1)-O(1)2.2832(19)O(1)Bi(1)O(2)171.06(6)Bi(1)-O(2)2.288(2)C(11)Bi(1)O(1)90.79(8)Bi(1)-C(1)2.187(2)C(11)Bi(1)O(1)85.48(9)Bi(1)-C(1)2.185(2)C(11)Bi(1)O(1)85.66(8)C(1)-C(32)1.756(3)C(1)Bi(1)O(2)85.95(8)C(2)-C(34)1.748(4)C(21)Bi(1)O(2)93.82(8)O(1)-C(31)1.287(3)C(21)Bi(1)O(1)19.79(8)O(3)-C(31)1.211(3)C(21)Bi(1)C(11)139.32(9)O(2)-C(33)1.220(3)C(31)O(1)Bi(1)110.29(15)C(31)-C(32)1.513(3)C(33)O(2)Bi(1)110.30(16)Bi(1)-C(3)2.990(2)O(3)C(31)O(1)124.4(2)Bi(1)-C(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2)124.3(2)IIBi(1)-O(2)2.265(7)C(1)Bi(1)O(3)78.0(3)Bi(1)-O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)C(21)105.6(3)Bi(1)-O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)C(11)150.8(2)Bi(1)-C(11)2.215(8)O(3)Bi(1)O(4)88.2(3)O(2)-C(48)1.276(7)C(21)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)-C(11)2.215(8)O(3)Bi(1)O(4)88.2(3)O(2)-C(48)1.276(7)C(21)Bi(1)O(1)136.4(2)O(3)-C(38)1.239(7)C(21)Bi(1)O(4)136.4(2)O(4)-C(48)1.242(6)C(11)Bi(1)O(4)76.8(3)O(4)-C(48)1.278(7)C(21)Bi(1)O(1)81.2(3)O(4)-C(48)1.278(7)C(21)Bi(1)O(4)136.4(2)O(6)-C(47)1.410(9)C(11]	I	
Bi(1)-O(2)2.288(2)C(11)Bi(1)O(1)90.79(8)Bi(1)-C(1)2.187(2)C(11)Bi(1)O(2) $89.48(9)$ Bi(1)-C(1)2.199(2)C(11)Bi(1)O(1) $85.66(8)$ C(11)-C(32)1.756(3)C(1)Bi(1)O(1) $85.95(8)$ C(12)-C(34)1.748(4)C(21)Bi(1)O(1) $91.79(8)$ O(1)-C(31)1.287(3)C(21)Bi(1)O(1) $91.82(8)$ O(3)-C(31)1.211(3)C(21)Bi(1)C(1) $108.79(8)$ O(4)-C(33)1.220(3)C(31)O(1)Bi(1) $110.29(15)$ C(31)-C(32)1.513(3)C(33)O(2)Bi(1) $110.30(16)$ Bi(1)-C(3)2.990(2)O(3)C(31)O(1) $124.4(2)$ Bi(1)-C(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2) $124.3(2)$ IIBi(1)-C(1)2.194(7)C(1)Bi(1)O(2) $91.8(2)$ Bi(1)-O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)C(21) $105.6(3)$ Bi(1)-O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)C(1) $150.8(2)$ Bi(1)-C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1) $170.46(12)$ Bi(1)-C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1) $170.46(12)$ Bi(1)-C(1)2.215(8)O(3)Bi(1)O(4) $88.2(3)$ O(4)-C(48)1.227(7)C(21)Bi(1)O(1) $135.5(2)$ O(4)-C(48)1.239(7)C(21)Bi(1)O(1) $81.6(3)$ C(32)-O(5)1.338(8)C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ O(5)-C(37)1.418(9)C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ O(5)-C(37)1.418(9)C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ O(5)-C(7)1.241(3)C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ <td>Bi(1)-O(1)</td> <td>2.2832(19)</td> <td>O(1)Bi(1)O(2)</td> <td>171.06(6)</td>	Bi(1)-O(1)	2.2832(19)	O(1)Bi(1)O(2)	171.06(6)
Bi(1)-C(11)2.187(2)C(11)Bi(1)O(2) $89.48(9)$ Bi(1)-C(1)2.199(2)C(11)Bi(1)C(1)111.88(9)Bi(1)-C(21)2.185(2)C(1)Bi(1)O(1) $85.66(8)$ C(12)-C(34)1.748(4)C(21)Bi(1)O(2) $93.82(8)$ O(1)-C(31)1.287(3)C(21)Bi(1)O(1) $93.82(8)$ O(3)-C(31)1.211(3)C(21)Bi(1)C(11) $139.32(9)$ O(2)-C(33)1.276(3)C(21)Bi(1)C(1) $108.79(8)$ O(4)-C(33)1.220(3)C(31)O(1)Bi(1) $110.29(15)$ C(31)-C(32)1.513(3)C(33)O(2)Bi(1) $110.30(16)$ Bi(1)-C(3)2.990(2)O(3)C(31)O(1) $124.4(2)$ Bi(1)-O(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2) $124.3(2)$ IIBi(1)-O(4)2.990(2)C(1)Bi(1)O(2) $91.8(2)$ Bi(1)-O(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2) $124.3(2)$ IIBi(1)-O(1)2.265(7)C(1)Bi(1)O(2) $91.8(2)$ Bi(1)-O(1)2.265(7)C(1)Bi(1)C(11) $150.8(2)$ Bi(1)-O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)O(1) $170.46(12)$ Bi(1)-O(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1) $170.46(12)$ Bi(1)-C(1)2.215(8)O(3)Bi(1)O(4) $88.2(3)$ O(2)-C(48)1.276(7)C(21)Bi(1)O(1) $85.8(2)$ O(4)-C(48)1.242(6)C(21)Bi(1)O(1) $85.7(2)$ O(1)-C(38)1.278(7)C(21)Bi(1)O(1) $84.7(2)$ O(6)-C(47)1.410(9)C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ O(5)-C(37)1.418(9)C(11)Bi(1)O(1) <td>Bi(1)-O(2)</td> <td>2.288(2)</td> <td>C(11)Bi(1)O(1)</td> <td>90.79(8)</td>	Bi(1)-O(2)	2.288(2)	C(11)Bi(1)O(1)	90.79(8)
Bi(1)-C(1) $2.199(2)$ C(11)Bi(1)C(1) $111.88(9)$ Bi(1)-C(21) $2.185(2)$ C(1)Bi(1)O(1) $85.66(8)$ C(11)-C(32) $1.756(3)$ C(21)Bi(1)O(2) $85.95(8)$ C(12)-C(34) $1.748(4)$ C(21)Bi(1)O(2) $93.82(8)$ O(1)-C(31) $1.287(3)$ C(21)Bi(1)C(11) $139.32(9)$ O(2)-C(33) $1.276(3)$ C(21)Bi(1)C(11) $108.79(8)$ O(4)-C(33) $1.220(3)$ C(31)O(1)Bi(1) $110.29(15)$ C(31)-C(32) $1.513(3)$ C(33)O(2)Bi(1) $110.30(16)$ Bi(1)-C(3) $2.990(2)$ O(3)C(31)O(1) $124.4(2)$ Bi(1)-O(3) $2.990(2)$ O(3)C(31)O(1) $124.4(2)$ Bi(1)-O(4) $2.985(3)$ O(4)C(33)O(2) $124.3(2)$ THTTTBi(1)-O(1) $2.194(7)$ C(1)Bi(1)O(2) $91.8(2)$ Bi(1)-O(1) $2.265(7)$ C(1)Bi(1)C(21) $103.6(3)$ Bi(1)-O(1) $2.268(7)$ C(1)Bi(1)C(11) $150.8(2)$ Bi(1)-O(1) $2.268(7)$ C(1)Bi(1)C(11) $150.8(2)$ Bi(1)-C(11) $2.215(8)$ O(3)Bi(1)O(4) $88.2(3)$ O(2)-C(48) $1.276(7)$ C(21)Bi(1)O(1) $85.8(2)$ O(4)-C(48) $1.242(6)$ C(21)Bi(1)O(1) $85.6(2)$ O(4)-C(48) $1.278(7)$ C(21)Bi(1)O(1) $84.7(2)$ O(6)-C(47) $1.410(9)$ C(11)Bi(1)O(1) $84.7(2)$ O(6)-C(47) $1.410(9)$ C(11)Bi(1)O(1) $84.7(3)$ C(32)-O(5) $1.338(8)$ C(11)Bi(1)O(1) $81.2(3)$ O(5)-C(37) 1	Bi(1)-C(11)	2.187(2)	C(11)Bi(1)O(2)	89.48(9)
Bi(1)C(21)2.185(2)C(1)Bi(1)O(1)85.66(8)C(11)C(32)1.756(3)C(1)Bi(1)O(2)85.95(8)C(2)C(34)1.748(4)C(21)Bi(1)O(1)91.79(8)O(1)C(31)1.287(3)C(21)Bi(1)O(1)139.32(9)O(2)C(33)1.276(3)C(21)Bi(1)C(11)139.32(9)O(2)C(33)1.220(3)C(31)O(1)Bi(1)110.29(15)C(31)C(32)1.513(3)C(33)O(2)Bi(1)110.30(16)Bi(1)O(3)2.990(2)O(3)C(31)O(1)124.4(2)Bi(1)O(4)2.985(3)O(4)C(33)O(2)124.3(2)HH110.30(16)124.4(2)Bi(1)O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)O(3)78.0(3)Bi(1)O(4)2.753(9)C(1)Bi(1)O(2)91.8(2)Bi(1)O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)C(1)105.6(3)Bi(1)O(1)2.268(7)C(1)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(1)170.46(12)Bi(1)C(1)2.218(8)O(2)Bi(1)O(4)88.2(3)O(2)-C(48)1.242(6)C(21)Bi(1)O(4)85.8(2)O(4)-C(48)1.242(6)C(21)Bi(1)O(1)85.7(2)O(1)-C(38)1.278(7)C(21)Bi(1)O(1)84.7(2)O(6)-C(47)1.410(9)C(11)Bi(1)O(1)81.2(3)O(5)-C(37)1.418(9)C(11)Bi(1)O(1)81.2(3)O(5)-C(37)1.418(9)C(11)Bi(1)O(1)81.5(8)Bi(1)C(1)2.200(2)C(1)Bi(1)O(2)81.53(8)<	Bi(1) - C(1)	2.199(2)	C(11)Bi(1)C(1)	111.88(9)
$\begin{array}{c cccc} C(11)-C(32) & 1.756(3) & C(1)Bi(1)O(2) & 85.95(8) \\ C(12)-C(34) & 1.748(4) & C(21)Bi(1)O(1) & 91.79(8) \\ O(1)-C(31) & 1.287(3) & C(21)Bi(1)O(1) & 139.32(9) \\ O(2)-C(33) & 1.276(3) & C(21)Bi(1)C(11) & 139.32(9) \\ O(2)-C(33) & 1.220(3) & C(31)O(1)Bi(1) & 110.29(15) \\ C(31)-C(32) & 1.513(3) & C(33)O(2)Bi(1) & 110.30(16) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.990(2) & O(3)C(31)O(1) & 124.4(2) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.985(3) & O(4)C(33)O(2) & 124.3(2) \\ II \\ Bi(1)-C(1) & 2.194(7) & C(1)Bi(1)O(2) & 91.8(2) \\ Bi(1)-O(2) & 2.265(7) & C(1)Bi(1)O(3) & 78.0(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 103.6(3) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.740(8) & C(1)Bi(1)C(21) & 105.6(3) \\ Bi(1)-O(1) & 2.268(7) & C(1)Bi(1)C(1) & 150.8(2) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 170.46(12) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.226(6) & C(21)Bi(1)O(1) & 85.8(2) \\ O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 84.7(2) \\ O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ III \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 81.2(3) \\ O(5)-C(7) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 79.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 150.61(13) \\ \end{array} \right)$	Bi(1)-C(21)	2.185(2)	C(1)Bi(1)O(1)	85.66(8)
$\begin{array}{c ccccc} C(12)-C(34) & 1.748(4) & C(21)Bi(1)O(1) & 91.79(8) \\ O(1)-C(31) & 1.287(3) & C(21)Bi(1)O(2) & 93.82(8) \\ O(3)-C(31) & 1.211(3) & C(21)Bi(1)C(11) & 139.32(9) \\ O(2)-C(33) & 1.220(3) & C(31)O(1)Bi(1) & 110.29(15) \\ C(31)-C(32) & 1.513(3) & C(33)O(2)Bi(1) & 110.30(16) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.990(2) & O(3)C(31)O(1) & 124.4(2) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.985(3) & O(4)C(33)O(2) & 124.3(2) \\ \hline \\ Bi(1)-C(1) & 2.194(7) & C(1)Bi(1)O(2) & 91.8(2) \\ Bi(1)-O(2) & 2.265(7) & C(1)Bi(1)O(3) & 78.0(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 103.6(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 105.6(3) \\ Bi(1)-O(1) & 2.268(7) & C(1)Bi(1)C(11) & 150.8(2) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(2)Bi(1)O(1) & 170.46(12) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(2) & 85.8(2) \\ O(4)-C(48) & 1.224(6) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(4)-C(48) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(4)-C(48) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(1) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 81.2(3) \\ O(5)-C(77) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(1) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 150.61(13) \\ \end{array} \right)$	C(11)-C(32)	1.756(3)	C(1)Bi(1)O(2)	85.95(8)
$\begin{array}{c cccc} O(1)-C(31) & 1.287(3) & C(21)Bi(1)O(2) & 93.82(8) \\ O(3)-C(31) & 1.211(3) & C(21)Bi(1)C(11) & 139.32(9) \\ O(2)-C(33) & 1.276(3) & C(21)Bi(1)C(1) & 108.79(8) \\ O(4)-C(33) & 1.220(3) & C(31)O(1)Bi(1) & 110.29(15) \\ C(31)-C(32) & 1.513(3) & C(33)O(2)Bi(1) & 110.30(16) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.990(2) & O(3)C(31)O(1) & 124.4(2) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.985(3) & O(4)C(33)O(2) & 124.3(2) \\ \\ \\ Bi(1)-C(1) & 2.194(7) & C(1)Bi(1)O(2) & 91.8(2) \\ Bi(1)-O(2) & 2.265(7) & C(1)Bi(1)O(3) & 78.0(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 103.6(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 105.6(3) \\ Bi(1)-O(1) & 2.268(7) & C(1)Bi(1)C(11) & 150.8(2) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(2)Bi(1)O(1) & 170.46(12) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(2) & 85.8(2) \\ O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(4)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(1) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 81.2(3) \\ O(5)-C(77) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(1) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ D(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ O(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ O(1)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 150.61(13) \\ \end{array}$	C(12)-C(34)	1.748(4)	C(21)Bi(1)O(1)	91.79(8)
$\begin{array}{l c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	O(1)-C(31)	1.287(3)	C(21)Bi(1)O(2)	93.82(8)
$\begin{array}{l lllllllllllllllllllllllllllllllllll$	O(3)-C(31)	1.211(3)	C(21)Bi(1)C(11)	139.32(9)
$\begin{array}{c ccccc} O(4)-C(33) & 1.220(3) & C(31)O(1)Bi(1) & 110.29(15) \\ C(31)-C(32) & 1.513(3) & C(33)O(2)Bi(1) & 110.30(16) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.990(2) & O(3)C(31)O(1) & 124.4(2) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.985(3) & O(4)C(33)O(2) & 124.3(2) \\ \\ \hline \\ Bi(1)-C(1) & 2.194(7) & C(1)Bi(1)O(2) & 91.8(2) \\ Bi(1)-O(2) & 2.265(7) & C(1)Bi(1)O(3) & 78.0(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 103.6(3) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.740(8) & C(11)Bi(1)C(21) & 105.6(3) \\ Bi(1)-O(1) & 2.268(7) & C(1)Bi(1)C(11) & 150.8(2) \\ Bi(1)-C(11) & 2.218(8) & O(2)Bi(1)O(1) & 170.46(12) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(2) & 85.8(2) \\ O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(4) & 135.5(2) \\ O(4)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 91.9(2) \\ \\ HII \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1) & 81.73(8) \\ Bi(1)\cdotsO(2) & 2.688(2) & O(2'Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)\cdotsO(2) & 2.688(2) & O(2'Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(1) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	O(2)-C(33)	1.276(3)	C(21)Bi(1)C(1)	108.79(8)
$\begin{array}{c cccc} C(31)-C(32) & 1.513(3) & C(33)O(2)Bi(1) & 110.30(16) \\ Bi(1)\cdotsO(3) & 2.990(2) & O(3)C(31)O(1) & 124.4(2) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.985(3) & O(4)C(33)O(2) & 124.3(2) \\ \\ \hline \\ Bi(1)-C(1) & 2.194(7) & C(1)Bi(1)O(2) & 91.8(2) \\ Bi(1)-O(2) & 2.265(7) & C(1)Bi(1)O(3) & 78.0(3) \\ Bi(1)\cdotsO(4) & 2.753(9) & C(1)Bi(1)C(21) & 103.6(3) \\ Bi(1)-O(1) & 2.268(7) & C(1)Bi(1)C(11) & 150.8(2) \\ Bi(1)-C(11) & 2.218(8) & O(2)Bi(1)O(1) & 170.46(12) \\ Bi(1)-C(11) & 2.215(8) & O(3)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(4) & 88.2(3) \\ O(2)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 135.5(2) \\ O(4)-C(48) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(4) & 84.7(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 91.9(2) \\ HI \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(1) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7) & 1.241(3) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11) & 150.61(13) \\ \end{array} \right)$	O(4)-C(33)	1.220(3)	C(31)O(1)Bi(1)	110.29(15)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	C(31)-C(32)	1.513(3)	C(33)O(2)Bi(1)	110.30(16)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	Bi(1)…O(3)	2.990(2)	O(3)C(31)O(1)	124.4(2)
II $Bi(1)-C(1)$ 2.194(7) $C(1)Bi(1)O(2)$ 91.8(2) $Bi(1)-O(2)$ 2.265(7) $C(1)Bi(1)O(3)$ 78.0(3) $Bi(1)-O(4)$ 2.753(9) $C(1)Bi(1)C(21)$ 103.6(3) $Bi(1)-O(3)$ 2.740(8) $C(11)Bi(1)C(21)$ 105.6(3) $Bi(1)-O(1)$ 2.268(7) $C(1)Bi(1)C(11)$ 150.8(2) $Bi(1)-C(21)$ 2.218(8) $O(2)Bi(1)O(1)$ 170.46(12) $Bi(1)-C(21)$ 2.215(8) $O(3)Bi(1)O(4)$ 88.2(3) $O(2)-C(48)$ 1.276(7) $C(21)Bi(1)O(2)$ 85.8(2) $O(4)-C(48)$ 1.242(6) $C(21)Bi(1)O(4)$ 136.4(2) $O(3)-C(38)$ 1.239(7) $C(21)Bi(1)O(4)$ 136.4(2) $O(3)-C(38)$ 1.278(7) $C(21)Bi(1)O(1)$ 84.7(2) $O(6)-C(42)$ 1.344(9) $C(11)Bi(1)O(4)$ 76.8(3) $C(32)-O(5)$ 1.338(8) $C(11)Bi(1)O(4)$ 76.8(3) $O(5)-C(37)$ 1.418(9) $C(11)Bi(1)O(1)$ 91.9(2) III III III III $Bi(1)-O(1)$ 2.310(2) $O(1)Bi(1)O(1)$ 87.69(4) $Bi(1)-C(1)$ 2.200(2) $C(1)Bi(1)O(1)$ 87.69(4) $Bi(1)-C(1)$ 2.200(2) $C(1)Bi(1)O(1)$ 89.54(8) $O(2)-C(7)$ 1.241(3) $C(11)Bi(1)O(2)$ 79.42(7) $C(7)-C(6)$ 1.480(3) $C(11)Bi(1)C(1)$ 104.70(6) $C(5)-C(21)$ 1.473(3) $C(11)Bi(1)C(11)$ 104.70(6)	Bi(1)…O(4)	2.985(3)	O(4)C(33)O(2)	124.3(2)
Bi(1)-C(1) $2.194(7)$ C(1)Bi(1)O(2) $91.8(2)$ Bi(1)-O(2) $2.265(7)$ C(1)Bi(1)O(3) $78.0(3)$ Bi(1)-O(4) $2.753(9)$ C(1)Bi(1)C(21) $103.6(3)$ Bi(1)-O(3) $2.740(8)$ C(11)Bi(1)C(21) $105.6(3)$ Bi(1)-O(1) $2.268(7)$ C(1)Bi(1)C(11) $150.8(2)$ Bi(1)-C(21) $2.218(8)$ O(2)Bi(1)O(1) $170.46(12)$ Bi(1)-C(11) $2.215(8)$ O(3)Bi(1)O(4) $88.2(3)$ O(2)-C(48) $1.276(7)$ C(21)Bi(1)O(2) $85.8(2)$ O(4)-C(48) $1.242(6)$ C(21)Bi(1)O(4) $136.4(2)$ O(3)-C(38) $1.239(7)$ C(21)Bi(1)O(4) $136.4(2)$ O(6)-C(42) $1.344(9)$ C(11)Bi(1)O(1) $84.7(2)$ O(6)-C(42) $1.344(9)$ C(11)Bi(1)O(1) $84.7(2)$ O(6)-C(47) $1.410(9)$ C(11)Bi(1)O(4) $76.8(3)$ C(32)-O(5) $1.338(8)$ C(11)Bi(1)O(1) $91.9(2)$ IIIBi(1)-O(1) $2.310(2)$ O(1)Bi(1)O(1) $87.69(4)$ Bi(1)-C(1) $2.200(2)$ C(1)Bi(1)O(1) $87.69(4)$ Bi(1)-C(1) $2.200(2)$ C(1)Bi(1)O(1) $89.54(8)$ O(2)-C(7) $1.241(3)$ C(11)Bi(1)O(2) $78.42(7)$ C(7)-C(6) $1.480(3)$ C(11)Bi(1)C(1) $104.70(6)$ C(5)-C(21) $1.473(3)$ C(11)Bi(1)C(11') $150.61(13)$		Ι	Ι	I
Bi(1)-O(2) $2.265(7)$ $C(1)Bi(1)O(3)$ $78.0(3)$ Bi(1)-··O(4) $2.753(9)$ $C(1)Bi(1)C(21)$ $103.6(3)$ Bi(1)-··O(3) $2.740(8)$ $C(11)Bi(1)C(21)$ $105.6(3)$ Bi(1)-O(1) $2.268(7)$ $C(1)Bi(1)C(11)$ $150.8(2)$ Bi(1)-C(21) $2.218(8)$ $O(2)Bi(1)O(1)$ $170.46(12)$ Bi(1)-C(11) $2.215(8)$ $O(3)Bi(1)O(4)$ $88.2(3)$ $O(2)-C(48)$ $1.276(7)$ $C(21)Bi(1)O(2)$ $85.8(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.239(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.247(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.278(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(6)-C(42)$ $1.344(9)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $91.9(2)$ III III III III Bi(1)-O(1) $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ Bi(1)-O(1) $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ Bi(1)-C(1) $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $139.23(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $O(2)-C(7)$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ <	Bi(1)-C(1)	2.194(7)	C(1)Bi(1)O(2)	91.8(2)
Bi(1)O(4)2.753(9) $C(1)Bi(1)C(21)$ 103.6(3)Bi(1)O(3)2.740(8) $C(11)Bi(1)C(21)$ 105.6(3)Bi(1)-O(1)2.268(7) $C(1)Bi(1)C(11)$ 150.8(2)Bi(1)-C(21)2.218(8) $O(2)Bi(1)O(1)$ 170.46(12)Bi(1)-C(11)2.215(8) $O(3)Bi(1)O(4)$ 88.2(3) $O(2)-C(48)$ 1.276(7) $C(21)Bi(1)O(2)$ 85.8(2) $O(4)-C(48)$ 1.242(6) $C(21)Bi(1)O(4)$ 136.4(2) $O(3)-C(38)$ 1.239(7) $C(21)Bi(1)O(4)$ 136.4(2) $O(3)-C(38)$ 1.278(7) $C(21)Bi(1)O(4)$ 135.5(2) $O(1)-C(38)$ 1.278(7) $C(21)Bi(1)O(4)$ 76.8(3) $C(32)-O(5)$ 1.338(8) $C(11)Bi(1)O(4)$ 76.8(3) $C(5)-C(37)$ 1.418(9) $C(11)Bi(1)O(1)$ 91.9(2)HIHIHIHIBi(1)-O(1)2.310(2) $O(1)Bi(1)O(1)$ 87.69(4)Bi(1)-C(1)2.210(3) $C(1)Bi(1)O(1)$ 87.69(4)Bi(1)-C(1)2.200(2) $C(1)Bi(1)O(1)$ 89.54(8) $O(2)-C(7)$ 1.241(3) $C(11)Bi(1)O(1)$ 89.54(8) $O(2)-C(7)$ 1.241(3) $C(11)Bi(1)O(1)$ 79.42(7) $C(7)-C(6)$ 1.480(3) $C(11)Bi(1)C(1)$ 104.70(6) $C(5)-C(21)$ 1.473(3) $C(11)Bi(1)C(11)$ 150.61(13)	Bi(1)-O(2)	2.265(7)	C(1)Bi(1)O(3)	78.0(3)
$Bi(1)\cdots O(3)$ $2.740(8)$ $C(11)Bi(1)C(21)$ $105.6(3)$ $Bi(1)-O(1)$ $2.268(7)$ $C(1)Bi(1)C(11)$ $150.8(2)$ $Bi(1)-C(21)$ $2.218(8)$ $O(2)Bi(1)O(1)$ $170.46(12)$ $Bi(1)-C(11)$ $2.215(8)$ $O(3)Bi(1)O(4)$ $88.2(3)$ $O(2)-C(48)$ $1.276(7)$ $C(21)Bi(1)O(2)$ $85.8(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.239(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $135.5(2)$ $O(1)-C(38)$ $1.278(7)$ $C(21)Bi(1)O(1)$ $84.7(2)$ $O(6)-C(42)$ $1.344(9)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ $Bi(1)-O(1)$ $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7)$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)'$ $150.61(13)$	Bi(1)…O(4)	2.753(9)	C(1)Bi(1)C(21)	103.6(3)
Bi(1)-O(1) $2.268(7)$ $C(1)Bi(1)C(11)$ $150.8(2)$ $Bi(1)-C(21)$ $2.218(8)$ $O(2)Bi(1)O(1)$ $170.46(12)$ $Bi(1)-C(11)$ $2.215(8)$ $O(3)Bi(1)O(4)$ $88.2(3)$ $O(2)-C(48)$ $1.276(7)$ $C(21)Bi(1)O(2)$ $85.8(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.239(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.278(7)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $84.7(2)$ $O(6)-C(42)$ $1.344(9)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $90.5(2)$ $O(6)-C(47)$ $1.410(9)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ $Bi(1)-O(1)$ $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)…O(3)	2.740(8)	C(11)Bi(1)C(21)	105.6(3)
Bi(1)-C(21) $2.218(8)$ $O(2)Bi(1)O(1)$ $170.46(12)$ $Bi(1)-C(11)$ $2.215(8)$ $O(3)Bi(1)O(4)$ $88.2(3)$ $O(2)-C(48)$ $1.276(7)$ $C(21)Bi(1)O(2)$ $85.8(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.239(7)$ $C(21)Bi(1)O(3)$ $135.5(2)$ $O(1)-C(38)$ $1.278(7)$ $C(21)Bi(1)O(1)$ $84.7(2)$ $O(6)-C(42)$ $1.344(9)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $90.5(2)$ $O(6)-C(47)$ $1.410(9)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ $Bi(1)-O(1)$ $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ $Bi(1)-O(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)-O(1)	2.268(7)	C(1)Bi(1)C(11)	150.8(2)
Bi(1)-C(11) $2.215(8)$ $O(3)Bi(1)O(4)$ $88.2(3)$ $O(2)-C(48)$ $1.276(7)$ $C(21)Bi(1)O(2)$ $85.8(2)$ $O(4)-C(48)$ $1.242(6)$ $C(21)Bi(1)O(4)$ $136.4(2)$ $O(3)-C(38)$ $1.239(7)$ $C(21)Bi(1)O(3)$ $135.5(2)$ $O(1)-C(38)$ $1.278(7)$ $C(21)Bi(1)O(1)$ $84.7(2)$ $O(6)-C(42)$ $1.344(9)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $90.5(2)$ $O(6)-C(47)$ $1.410(9)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $76.8(3)$ $C(32)-O(5)$ $1.338(8)$ $C(11)Bi(1)O(4)$ $81.2(3)$ $O(5)-C(37)$ $1.418(9)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $91.9(2)$ IIIBi(1)-O(1) $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)-C(21)	2.218(8)	O(2)Bi(1)O(1)	170.46(12)
$\begin{array}{c ccccc} O(2)-C(48) & 1.276(7) & C(21)Bi(1)O(2) & 85.8(2) \\ O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(1)-C(38) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 84.7(2) \\ O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 90.5(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \end{array}$ $\begin{array}{c} \text{HI} \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1') & 175.39(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ O(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 79.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	Bi(1)-C(11)	2.215(8)	O(3)Bi(1)O(4)	88.2(3)
$\begin{array}{c ccccc} O(4)-C(48) & 1.242(6) & C(21)Bi(1)O(4) & 136.4(2) \\ O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(1)-C(38) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 84.7(2) \\ O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 90.5(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \end{array}$ $\begin{array}{c} HII \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1') & 175.39(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ O(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	O(2)-C(48)	1.276(7)	C(21)Bi(1)O(2)	85.8(2)
$\begin{array}{c ccccc} O(3)-C(38) & 1.239(7) & C(21)Bi(1)O(3) & 135.5(2) \\ O(1)-C(38) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 84.7(2) \\ O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 90.5(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \end{array}$ $\begin{array}{c} \text{III} \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1') & 175.39(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 79.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	O(4)-C(48)	1.242(6)	C(21)Bi(1)O(4)	136.4(2)
$\begin{array}{c ccccc} O(1)-C(38) & 1.278(7) & C(21)Bi(1)O(1) & 84.7(2) \\ O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 90.5(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \end{array}$ $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	O(3)-C(38)	1.239(7)	C(21)Bi(1)O(3)	135.5(2)
$\begin{array}{c ccccc} O(6)-C(42) & 1.344(9) & C(11)Bi(1)O(2) & 90.5(2) \\ O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \end{array}$ $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	O(1)-C(38)	1.278(7)	C(21)Bi(1)O(1)	84.7(2)
$\begin{array}{c ccccc} O(6)-C(47) & 1.410(9) & C(11)Bi(1)O(4) & 76.8(3) \\ C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ & & & \\ III \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1') & 175.39(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.208(2) & O(2')Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 79.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	O(6)-C(42)	1.344(9)	C(11)Bi(1)O(2)	90.5(2)
$\begin{array}{c cccc} C(32)-O(5) & 1.338(8) & C(11)Bi(1)O(3) & 81.2(3) \\ O(5)-C(37) & 1.418(9) & C(11)Bi(1)O(1) & 91.9(2) \\ \\ III \\ Bi(1)-O(1) & 2.310(2) & O(1)Bi(1)O(1') & 175.39(8) \\ Bi(1)-O(2) & 2.688(2) & O(2')Bi(1)O(2) & 81.53(8) \\ Bi(1)-C(1) & 2.210(3) & C(1)Bi(1)O(1) & 87.69(4) \\ Bi(1)-C(11) & 2.200(2) & C(1)Bi(1)O(2) & 139.23(4) \\ O(1)-C(7) & 1.279(3) & C(11)Bi(1)O(1) & 89.54(8) \\ O(2)-C(7') & 1.241(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 79.42(7) \\ C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \\ \end{array}$	O(6)-C(47)	1.410(9)	C(11)Bi(1)O(4)	76.8(3)
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	C(32)-O(5)	1.338(8)	C(11)Bi(1)O(3)	81.2(3)
IIIBi(1)-O(1) $2.310(2)$ O(1)Bi(1)O(1')175.39(8)Bi(1)-O(2) $2.688(2)$ O(2')Bi(1)O(2) $81.53(8)$ Bi(1)-C(1) $2.210(3)$ C(1)Bi(1)O(1) $87.69(4)$ Bi(1)-C(11) $2.200(2)$ C(1)Bi(1)O(2) $139.23(4)$ O(1)-C(7) $1.279(3)$ C(11)Bi(1)O(1) $89.54(8)$ O(2)-C(7') $1.241(3)$ C(11)Bi(1)O(2) $79.42(7)$ C(7)-C(6) $1.480(3)$ C(11)Bi(1)O(2) $78.42(7)$ C(6)-C(5) $1.308(4)$ C(11)Bi(1)C(1) $104.70(6)$ C(5)-C(21) $1.473(3)$ C(11)Bi(1)C(11') $150.61(13)$	O(5)-C(37)	1.418(9)	C(11)Bi(1)O(1)	91.9(2)
Bi(1)-O(1) $2.310(2)$ $O(1)Bi(1)O(1')$ $175.39(8)$ $Bi(1)-O(2)$ $2.688(2)$ $O(2')Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $139.23(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(6)-C(5)$ $1.308(4)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$		Π	ſI	I
$Bi(1)\cdots O(2)$ $2.688(2)$ $O(2')Bi(1)O(2)$ $81.53(8)$ $Bi(1)-C(1)$ $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(11)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $139.23(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(6)-C(5)$ $1.308(4)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)-O(1)	2.310(2)	O(1)Bi(1)O(1')	175.39(8)
Bi(1)-C(1) $2.210(3)$ $C(1)Bi(1)O(1)$ $87.69(4)$ $Bi(1)-C(11)$ $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $139.23(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(6)-C(5)$ $1.308(4)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)…O(2)	2.688(2)	O(2')Bi(1)O(2)	81.53(8)
Bi(1)-C(11) $2.200(2)$ $C(1)Bi(1)O(2)$ $139.23(4)$ $O(1)-C(7)$ $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7')$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(6)-C(5)$ $1.308(4)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)-C(1)	2.210(3)	C(1)Bi(1)O(1)	87.69(4)
O(1)-C(7) $1.279(3)$ $C(11)Bi(1)O(1)$ $89.54(8)$ $O(2)-C(7)$ $1.241(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $79.42(7)$ $C(7)-C(6)$ $1.480(3)$ $C(11)Bi(1)O(2)$ $78.42(7)$ $C(6)-C(5)$ $1.308(4)$ $C(11)Bi(1)C(1)$ $104.70(6)$ $C(5)-C(21)$ $1.473(3)$ $C(11)Bi(1)C(11')$ $150.61(13)$	Bi(1)-C(11)	2.200(2)	C(1)Bi(1)O(2)	139.23(4)
O(2)-C(7')1.241(3)C(11)Bi(1)O(2)79.42(7)C(7)-C(6)1.480(3)C(11)Bi(1)O(2)78.42(7)C(6)-C(5)1.308(4)C(11)Bi(1)C(1)104.70(6)C(5)-C(21)1.473(3)C(11)Bi(1)C(11')150.61(13)	O(1)-C(7)	1.279(3)	C(11)Bi(1)O(1)	89.54(8)
$\begin{array}{c cccc} C(7)-C(6) & 1.480(3) & C(11)Bi(1)O(2) & 78.42(7) \\ C(6)-C(5) & 1.308(4) & C(11)Bi(1)C(1) & 104.70(6) \\ C(5)-C(21) & 1.473(3) & C(11)Bi(1)C(11') & 150.61(13) \end{array}$	O(2)-C(7')	1.241(3)	C(11)Bi(1)O(2)	79.42(7)
C(6)-C(5)1.308(4) $C(11)Bi(1)C(1)$ 104.70(6) $C(5)-C(21)$ 1.473(3) $C(11)Bi(1)C(11')$ 150.61(13)	C(7)-C(6)	1.480(3)	C(11)Bi(1)O(2)	78.42(7)
C(5)-C(21) 1.473(3) $C(11)Bi(1)C(11')$ 150.61(13)	C(6)-C(5)	1.308(4)	C(11)Bi(1)C(1)	104.70(6)
	C(5)-C(21)	1.473(3)	C(11)Bi(1)C(11')	150.61(13)



Рис. 1. Общий вид молекулы І.



Рис. 2. Общий вид молекулы II.

мы углов CBiC в экваториальной плоскости в молекулах равны 360°. При этом наблюдается значительное отклонение индивидуальных углов от теоретической величины 120°: 108.79(8)°, 111.88(9)°, 139.32(9)° (I); 103.6(3)°, 105.6(3)°, 150.8(2)° (II); 104.70(6)°, 104.70(6)°, 150.61(13)° (III). Значения аксиальных углов ОВiO (171.06(6)° (I), 170.46(12)° (II), 175.39(8)° (III)) отличаются от идеальных 180° за счет отклонения связей Bi–O к арильному кольцу, плоскость которого составляет с экваториальной плоскостью максимальный двугранный угол: в молекуле I это цикл C(1)-C(6), в молекуле II – C(21)-C(26), в молекуле III – C(1)-C(2').

Средние значения длин связей Ві-С в І-ІІІ (2.190(2), 2.209(8) и 2.203(2) Å соответственно) мало различаются, в отличие от средних значений длин связей Ві-О (2.286(2) Å (I), 2.267(7) Å (II) и 2.310(2) Å (III)).

Внутримолекулярные расстояния Bi···O=C различаются между собой в большей степени:



Рис. 3. Общий вид молекулы III.

2.990(2), 2.985(3); 2.753(9), 2.740(8); 2.688(2) Å в І. II, III соответственно. Самое слабое внутримолекулярное взаимодействие имеет место в молекуле I, в которой донорные способности карбонильного кислорода ослаблены из-за смещения электронной плотности, обусловленного наличием электроотрицательного атома хлора (-І-эффект) в органическом радикале кислоты. В молекулах II и III с одинаковыми арильными заместителями при атомах висмута невалентные взаимодействия усиливаются с повышением донорных свойств карбонильного атома кислорода за счет +М-эффекта радикала. Меньшему расстоянию Ві-О=С в III соответствует бо́льшая длина связи Bi-O. что свидетельствует о перераспределении электронной плотности при возникновении прочного донорно-акцепторного взаимодействия. В молекулах I, II, III укорочение расстояний $Bi \cdots O(=C)$ коррелирует с увеличением одного из экваториальных углов СВіС со стороны внутримолекулярных контактов: 139.32(9)°, 150.8(2)°, 150.8(2)° соответственно.

Структурная организация в кристаллах соединений I–III обусловлена слабыми межмолекулярными водородными связями: H…O=C 2.61–2.65 Å (I), 2.47–2.50 Å (II) и 2.56 Å (III).

БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках государственного задания № 4.6151.2017/8.9.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Cambridge Crystallographic Data Center. 2016. (http://www.ccdc.cam.ac.uk).
- Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К. // Журн. неорган. химии. 2011. Т. 56. № 10. С. 1644.

ЖУРНАЛ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ том 64 № 2 2019

[Sharutin V.V., Senchurin V.S., Sharutina O.K. // Russ. J. Inorg. Chem. 2011. V. 56. № 10. P. 1565. doi 10.1134/S0036023611100202].

- 3. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчурин В.С. // Журн. неорган. химии. 2014. Т. 59. № 1. С. 42. doi 10.7868/S0044457X14010164
- 4. Шарутин В.В., Шарутина О.К. // Журн. неорган. химии. 2014. Т. 59. № 6. С. 734. [Sharutin V.V., Sharutina O.K. // Russ. J. Inorg. Chem. 2014. V. 59. № 6. Р. 558. doi 10.1134/S0036023614060199].
- Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ермакова В.А., Смагина Я.Р. // Журн. неорган. химии. 2017. Т. 62. № 8. С. 1049. [Sharutin V.V., Sharutina O.K., Ermakova V.A., Smagina Ya.R. // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62. № 8. Р. 1043. doi 10.1134/S0036023617080174].
- 6. *Cui L., Bi C., Fan Y. et al.* // Inorg. Chim. Acta. 2015. V. 437. № 1. P. 41. doi 10.1016/J.ICA.2015.07.008
- Yu L., Ma Y.-Q., Wang G.-C. et al. // J. Organomet. Chem. 2003. V. 679. № 2. P. 173. doi 10.1016/S0022-328X(03)00547-3
- Kumar I., Bhattacharya P., Whitmire K.H. // Organometallics. 2014. V. 33. № 11. P. 2906. doi 10.1021/om500337z
- 9. *Wang G.-C., Xiao J., Lu Y.-N. et al.* // Appl. Organomet. Chem. 2005. V. 19. № 1. P. 113. doi 10.1002/aoc.749
- 10. *Yu L., Ma Y.-Q., Wang G.-C. et al.* // Appl. Organomet. Chem. 2004. V. 18. № 4. P. 187. doi 10.1002/aoc.609
- 11. *Hassan A., Wang S.* // J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1997. № 12. P. 2009. doi 10.1039/A700477J
- 12. Andreev P.V., Somov N.V., Kalistratova O.S. et al. // Acta Crystalllogr., Sect. E. 2013. V. 69. № 6. P. m333. doi 10.1107/S1600536813013317
- Bruker (1998). SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- Bruker (1998). SHELXTL/PC. Versions 5.10. An Integrated System for Solving, Refining and Displaying Crystal Structures from Diffraction Data. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.

- Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Crystallogr. 2009. V. 42. P. 339. doi 10.1107/S0021889808042726
- 16. Verkhovykh V.A., Kalistratova O.S., Grishina A.I. et al. // Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chemistry. 2015. V. 7. № 3. P. 61.
- 17. *Suzuki H.* Organobismuth chemistry. Amsterdam– London–New York–Oxford–Paris–Shannon–Tokyo: Elsevier, 2001. 619 p.
- Gushchin F.V., Kalistratova O.S., Maleeva A.I. et al. // Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chemistry. 2016. V. 8. № 1. P. 51. doi 10.14529/chem160108
- 19. Додонов В.А., Старостина Т.И., Кузнецова Ю.Л. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 1995. № 1. С. 156.
- Гущин А.В., Шашкин Д.В., Прыткова Л.К. и др. // Журн. общей химии. 2011. Т. 81. № 3. С. 397. [Gushchin A.V., Shashkin D.V., Prytkova L.K. et al. // Russ. J. Gen. Chem. 2011. V. 81. № 3. Р. 493. doi 10.1134/S107036321103008X].