

Doktorski rad - dodatak

Katava, Robert

Supplement / Prilog

Publication year / Godina izdavanja: **2020**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:846664>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-18**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



§ 8. DODATAK

Tablica D1. Opći i kristalografski podaci za spojeve H₂L^{1,2,4,6} (**1**, **2**, **4a** i **6**)

Spoj	H ₂ L ¹ (1)	H ₂ L ² (2)	H ₂ L ⁴ (4a)	H ₂ L ⁶ (6)
Molekulska formula	C ₁₄ H ₁₁ N ₃ OS	C ₁₄ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	C ₁₄ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	C ₁₈ H ₁₃ N ₃ OS
Izvor zračenja	Mo K α	Cu K α	Cu K α	Cu K α
Temperatura, T/K	296(2)	296(2)	296(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M _r	269,32	285,32	285,32	319,37
Kristalni sustav, boja, habitus	Monoklinski, žuta, prizma	Rompski, ružičasta, ploča	Triklinski, žuta, prizma	Monoklinski, žuta, prizma
Prostorna grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> bca	<i>P</i> 1	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
Parametri jedinične ćelije:				
<i>a</i> /Å	15,6494(17)	11,8823(2)	7,1134(3)	17,1100(4)
<i>b</i> /Å	4,5910(4)	13,9551(2)	9,4949(5)	4,14620(10)
<i>c</i> /Å	17,639(4)	15,6318(2)	10,1526(6)	22,1248(5)
α /°	90	90	98,270(5)	90
β /°	91,808(16)	90	109,719(5)	108,425(2)
γ /°	90	90	94,703(4)	90
V/Å ³	1266,7(3)	2592,04(7)	632,49(6)	1489,11(6)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	4	8	2	4
Računata gustoća, D _c /g cm ⁻³	1,412	1,462	1,498	1,425
Dimenzije kristala / mm ³	0,49 x 0,16 x 0,10	0,35 x 0,20 x 0,02	0,35 x 0,12 x 0,10	0,40 x 0,15 x 0,10
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ /mm ⁻¹	0,250	2,272	2,328	1,993
Strukturni faktor refleksa, F(000)	560	1184	296	664
θ – područje sakupljanja refleksa / °	4,6 – 27,5	5,7 – 75,8	4,7 – 75,7	4,2 – 75,2
Broj sakupljenih refleksa	5709	7789	5083	6956
Broj neovisnih refleksa	2879	2668	2577	3056
Broj opaženih refleksa [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	1719	2378	2434	2730
Broj utočnjavanih parametara	178	190	190	214
Faktor nepouzdanosti, R(<i>F</i> ₀)	0,060	0,043	0,034	0,035
Težinski faktor nepouzdanosti, R _w (<i>F</i> ₀ ²)	0,113	0,135	0,097	0,099
Valjanost korištene težinske jednadžbe <i>F</i> ² , <i>S</i>	0,984	1,156	1,059	1,052
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ / e Å ⁻³	0,246, -0,220	0,282, -0,217	0,232, -0,169	0,171, -0,204
CCDC broj	1494759			

Tablica D2. Opći i kristalografski podaci za spojeve $\text{H}_2\text{L}^3 \cdot \text{ac}$, $\text{H}_2\text{L}^4 \cdot \text{DMF}$, $\text{H}_2\text{L}^5 \cdot \text{pi}$ i HL^{7a} (**3b**, **4b**, **5b** i **7a**)

Spoj	$\text{H}_2\text{L}^3 \cdot \text{ac}$ (3a)	$\text{H}_2\text{L}^4 \cdot \text{DMF}$ (4b)	$\text{H}_2\text{L}^5 \cdot \text{pi}$ (5b)	H^{7a} (7a)
Molekulska formula	$\text{C}_{17}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_3\text{S}$	$\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{N}_4\text{O}_3\text{S}$	$\text{C}_{19}\text{H}_{16}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$	$\text{C}_{19}\text{H}_{15}\text{N}_3\text{O}_3\text{S}$
Izvor zračenja	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$
Temperatura, T/K	296(2)	296(2)	100(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M_r	343,39	358,41	364,42	333,40
Kristalni sustav, boja, habitus	Trikliniski, žuta, prizma	Monokliniski, žuta, ploča	Trikliniski, žuta, blok	Monokliniski, žuta, prizma
Prostorna grupa	$P \bar{1}$	$P 2_1/c$	$P \bar{1}$	$I 2/a$
Parametri jedinične ćelije:				
$a/\text{\AA}$	6,5830(4)	17,1961(12)	5,7955(5)	21,0027(12)
$b/\text{\AA}$	7,5897(5)	5,8774(2)	8,9450(7)	12,2101(6)
$c/\text{\AA}$	17,1623(10)	18,0564(13)	16,7044(13)	24,9320(14)
α°	90,936(5)	90	77,513(6)	90
β°	92,195(5)	108,593(8)	86,121(6)	99,759(5)
γ°	104,641(5)	90	79,646(7)	90
$V/\text{\AA}^3$	828,73(9)	1729,7(2)	831,34(12)	6301,2(6)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	2	4	2	16
Računata gustoća, $D_c/\text{g cm}^{-3}$	1,376	1,376	1,456	1,406
Dimenzije kristala / mm^3	0,36 x 0,13 x 0,11	0,42 x 0,40 x 0,12	0,16 x 0,12 x 0,08	0,35 x 0,23 x 0,20
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ/mm^{-1}	0,216	0,212	0,217	0,216
Strukturni faktor refleksa, $F(000)$	260	752	380	2784
θ – područje sakupljanja refleksa / $^\circ$	4,3 – 32,5	4,3 – 32,6	1,25 – 25,6	4,2 – 32,4
Broj sakupljenih refleksa	9137	10852	6807	18302
Broj neovisnih refleksa	5393	5667	3102	10211
Broj opaženih refleksa [$I > 2\sigma(I)$]	3977	3511	2746	3941
Broj utočnjenih parametara	228	237	244	441
Faktor nepouzdanosti, $R(F_0)$	0,052	0,065	0,030	0,068
Težinski faktor nepouzdanosti, $R_w(F_0^2)$	0,075	0,143	0,073	0,094
Valjanost korištene težinske jednadžbe F^2 , S	1,034	1,022	1,052	0,998
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}} / \text{e \AA}^{-3}$	0,264, -0,276	0,236, -0,281	0,222, -0,282	0,215, -0,243
CCDC broj				1494760

Tablica D3. Opći i kristalografski podaci za spojeve HL^{7b}, HL⁸⁻¹⁰ (**7b**, **8-10**)

Spoj	HL ^{7b} (7b)	HL ⁸ (8)	HL ⁹ (9)	HL ¹⁰ (10)
Molekulska formula	C ₁₉ H ₁₅ N ₃ OS	C ₁₉ H ₁₅ N ₃ OS	C ₁₉ H ₁₅ N ₃ OS	C ₁₇ H ₁₂ N ₄ S
Izvor zračenja	Mo K α	Mo K α	Mo K α	Mo K α
Temperatura, T/K	100(2)	296(2)	296(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M _r	333,40	333,40	333,40	304,37
Kristalni sustav, boja, habitus	Rompski, žuta, ploča	Monoklinski, žuta, prizma	Monoklinski, žuta, igla	Monoklinski, narančasta, prizma
Prostorna grupa	<i>P bca</i>	<i>P 2₁/n</i>	<i>P 2₁/c</i>	<i>P 2₁</i>
Parametri jedinične ćelije:				
<i>a</i> /Å	12,6835(5)	12,0230(2)	17,5548(10)	8,3487(5)
<i>b</i> /Å	28,6139(14)	6,36980(10)	7,3052(3)	6,2357(3)
<i>c</i> /Å	17,1546(7)	20,7480(2)	26,3033(15)	14,5126(8)
α /°	90	90	90	90
β /°	90	93,3180(10)	107,263(6)	99,731(5)
γ /°	90	90	90	90
<i>V</i> /Å ³	6225,8(5)	1586,30(4)	3221,2(3)	744,66(7)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	16	4	8	2
Računata gustoća, D _c /g cm ⁻³	1,423	1,396	1,375	1,357
Dimenzije kristala / mm ³	0,11 x 0,07 x 0,03	0,37 x 0,20 x 0,12	0,62 x 0,17 x 0,08	0,27 x 0,23 x 0,09
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ /mm ⁻¹	0,219	1,894	0,211	0,218
Strukturni faktor refleksa, F(000)	2784	696	1392	316
θ – područje sakupljanja refleksa / °	1,4 – 25,7	4,1 – 75,8	4,2 – 27,5	4,1 – 27,5
Broj sakupljenih refleksa	17877	14135	15370	6327
Broj neovisnih refleksa	5881	3259	7377	3419
Broj opaženih refleksa [I > 2 σ (I)]	3276	3091	4335	2254
Broj utočnjanih parametara	441	221	441	202
Faktor nepouzdanosti, R(F ₀)	0,066	0,036	0,073	0,057
Težinski faktor nepouzdanosti, R _w (F ₀ ²)	0,138	0,106	0,131	0,066
Valjanost korištene težinske jednadžbe F ² , S	1,034	1,079	1,003	0,987
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ / e Å ⁻³	0,286, -0,318	0,215, -0,286	0,265, -0,265	0,301, -0,171
CCDC broj		1494761	1494762	

Tablica D4. Opći i kristalografski podaci za spojeve HL^{11,13-15} (11, 13-15)

Spoj	HL ¹¹ (11)	HL ¹³ (13)	HL ¹⁴ (14)	HL ¹⁵ (15)
Molekulska formula	C ₁₇ H ₁₂ N ₄ S	C ₁₃ H ₁₀ N ₄ S	C ₁₃ H ₁₀ N ₄ S	C ₁₃ H ₁₀ N ₄ S
Izvor zračenja	Mo K α	Mo K α	Mo K α	Mo K α
Temperatura, T/K	100(2)	296(2)	296(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M _r	304,37	254,31	254,31	254,31
Kristalni sustav, boja, habitus	Trikliniski, žuta, ploča	Monokliniski, žuta, prizma	Monokliniski, žuta, blok	Monokliniski, žuta, prizma
Prostorna grupa	$P \bar{1}$	$I 2/a$	$I 2/a$	$P 2_1/c$
Parametri jedinične ćelije:				
a/Å	10,1401(7)	16,044(3)	13,4751(12)	15,3065(7)
b/Å	11,4134(8)	5,9025(5)	13,5012(7)	5,2877(3)
c/Å	12,4789(8)	25,637(12)	14,370(2)	15,5283(10)
α°	85,398(5)	90	90	90
β°	89,311(5)	99,66(3)	113,868(14)	111,162(6)
γ°	82,880(6)	90	90	90
V/Å ³	1428,46(17)	2393,4(12)	2390.8(5)	1172,05(12)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	4	8	8	4
Računata gustoća, D _c /g cm ⁻³	1,415	1,412	1,413	1,441
Dimenzije kristala / mm ³	0,26 x 0,15 x 0,04	0,40 x 0,21 x 0,21	0,31 x 0,22 x 0,18	0,40 x 0,26 x 0,18
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ /mm ⁻¹	0,228	0,256	0,256	0,261
Strukturni faktor refleksa, F(000)	632	1056	1056	528
θ – područje sakupljanja refleksa / °	1,6 – 25,7	4,2 – 27,5	4,3 – 27,5	4,2 – 27,5
Broj sakupljenih refleksa	9946	5277	5530	3926
Broj neovisnih refleksa	5352	2667	2744	2507
Broj opaženih refleksa [I > 2 σ (I)]	3859	1879	1763	1976
Broj utočnjavanih parametara	403	166	166	166
Faktor nepouzdanosti, R(F ₀)	0,099	0,049	0,060	0,042
Težinski faktor nepouzdanosti, R _w (F ₀ ²)	0,254	0,115	0,146	0,101
Valjanost korištene težinske jednadžbe F ² , S	1,062	1,007	1,046	1,031
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ / e Å ⁻³	0,739, -1,360	0,250, -0,218	0,257, -0,222	0,258, -0,208
CCDC broj				

Tablica D5. Opći i kristalografski podaci za spojeve $[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (**16**), $[\text{VO}_2\text{HL}^3] \cdot \text{EtOH}$ (**18b**), $[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (**19**) i $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (**21**)

Spoj	$[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (16)	$[\text{VO}_2\text{HL}^3] \cdot \text{EtOH}$ (18b)	$[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (19)	$[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (21)
Molekulska formula	$[\text{VO}_2(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_3\text{OS})]$	$[\text{VO}_2(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_3\text{O}_2\text{S}) \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}]$	$[\text{VO}_2(\text{C}_{18}\text{H}_{12}\text{N}_3\text{OS})]$	$[\text{VO}_2\text{C}_{13}\text{H}_{10}\text{SN}_4]$
Izvor zračenja	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$	Cu $K\alpha$	Mo $K\alpha$
Temperatura, T/K	296(2)	296(2)	100(2)	100(2)
Relativna molekulska masa, M_r	351,25	412,31	401,31	336,24
Kristalni sustav, boja, habitus	Monoklinski, žuta prizma	Monoklinski, naračasta, blok	Monoklinski, žuta, ploča	Monoklinski, narančasta, ploča
Prostorna grupa	$P 2_1/c$	$P 2_1/c$	$P 2_1/c$	$P 2_1/n$
Parametri jedinične ćelije:				
$a/\text{\AA}$	10,3771(4)	10,1598(4)	12,1442(5)	7,8130(6)
$b/\text{\AA}$	10,2321(3)	8,2243(4)	10,0260(4)	21,490(2)
$c/\text{\AA}$	12,8731(4)	21,5981(11)	12,8398(5)	7,8098(6)
α°	90	90	90	90
β°	90,656(3)	100,338(4)	100,308(3)	101,754(6)
γ°	90	90	90	90
$V/\text{\AA}^3$	1366,77(8)	1775,38(14)	1538,11(11)	1283,78(19)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	4	4	4	4
Računata gustoća, $D_c/\text{g cm}^{-3}$	1,707	1,543	1,733	1,740
Dimenzije kristala / mm^3	0,42 x 0,13 x 0,06	0,37 x 0,22 x 0,18	0,26 x 0,21 x 0,18	0,19 x 0,11 x 0,04
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ/mm^{-1}	0,894	0,709	6,899	0,944
Strukturni faktor refleksa, $F(000)$	712	844	816	680
θ – područje sakupljanja refleksa / $^\circ$	4,2 – 27,5	4,1 – 27,5	3,7 – 71,7	1,9 – 25,7
Broj sakupljenih refleksa	11306	15284	15634	8354
Broj neovisnih refleksa	3140	4059	2994	2429
Broj opaženih refleksa $[I > 2\sigma(I)]$	2388	2747	2595	1852
Broj utočnjenjanih parametara	202	262	238	190
Faktor nepouzdanosti, $R(F_0)$	0,047	0,047	0,097	0,108
Težinski faktor nepouzdanosti, $R_w(F_0^2)$	0,099	0,108	0,242	0,271
Valjanost korištene težinske jednadžbe F^2 , S	1,044	0,987	1,155	1,165
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\text{max}}$, $\Delta\rho_{\text{min}}$ / $\text{e \AA}^{-3}$	0,623, -0,348	0,363, -0,187	2,201, -0,741	0,673, -0,575
CCDC broj				

Tablica D6. Opći i kristalografski podaci za spojeve $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^1]$ (**22**), $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^2]$ (**23a**) i $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^2] \cdot i\text{-PrOH}$ (**23b**)

Spoj	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^1]$ (22)	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^2]$ (23a)	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^2] \cdot i\text{-PrOH}$ (23b)
Molekulska formula	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{14}\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}]$	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{14}\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2\text{S}]$	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{14}\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2\text{S}] \cdot \text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$
Izvor zračenja	Mo $K\alpha$	Cu $K\alpha$	Mo $K\alpha$
Temperatura, T/K	100(2)	100(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M_r	452,44	468,44	464,47
Kristalni sustav, boja, habitus	Monoklinski, crvena, ploča	Monoklinski, narančasta, ploča	Monoklinska, narančasta, ploča
Prostorna grupa	$P 2_1/c$	$P 2_1/c$	$P 2_1/c$
Parametri jedinične ćelije:			
$a/\text{\AA}$	15,1297(7)	13,4329(9)	19,951(2)
$b/\text{\AA}$	8,4864(2)	18,6190(9)	8,6346(9)
$c/\text{\AA}$	17,0431(7)	8,7961(5)	15,1072(18)
$\alpha/^\circ$	90	90	90
$\beta/^\circ$	109,954(3)	104,023(5)	91,544(9)
$\gamma/^\circ$	90	90	90
$V/\text{\AA}^3$	2056,91(14)	2134,4(2)	2601,5(5)
Broj formulačkih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	4	4	4
Računata gustoća, $D_c/\text{g cm}^{-3}$	1,461	1,458	1,349
Dimenzije kristala / mm^3	0,20 x 0,09 x 0,05	0,48 x 0,21 x 0,05	0,42 x 0,23 x 0,17
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ/mm^{-1}	0,613	5,096	0,205
Strukturni faktor refleksa, $F(000)$	944	976	492
θ – područje sakupljanja refleksa / $^\circ$	1,4 – 29,2	4,1 – 69,6	4,1 – 27,5
Broj sakupljenih refleksa	14307	17163	13406
Broj neovisnih refleksa	3873	3955	5947
Broj opaženih refleksa $[I > 2\sigma(I)]$	3484	2545	2404
Broj utočnjanih parametara	268	280	317
Faktor nepouzdanosti, $R(F_0)$	0,035	0,126	0,105
Težinski faktor nepouzdanosti, $R_w(F_0^2)$	0,100	0,308	0,142
Valjanost korištene težinske jednadžbe F^2 , S	1,031	1,226	1,031
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\text{max}}$, $\Delta\rho_{\text{min}}$ / $\text{e \AA}^{-3}$	0,519, -0,497	2,448, -0,969	0,366, -0,232
CCDC broj			

Tablica D7. Opći i kristalografski podaci za spojeve $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^3] \cdot [\text{VO}(\text{acac})_2]$ (**24b**), $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^4]$ (**25**) i $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^6]$ (**26**)

Spoj	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^3] \cdot [\text{VO}(\text{acac})_2]$ (24b)	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^4]$ (25)	$\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^6]$ (26)
Molekulska formula	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{14}\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}] \cdot [\text{VO}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_2]$	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{14}\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2\text{S}]$	$\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NH}[\text{VO}_2\text{C}_{18}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{OS}]$
Izvor zračenja	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$	Mo $K\alpha$
Temperatura, T/K	100(2)	100(2)	100(2)
Relativna molekulska masa, M_r	732,58	468,44	502,49
Kristalni sustav, boja, habitus	Trikliniski, narančasta, ploča	Monoklinski, narančasta, ploča	Monoklinski, crvena, ploča
Prostorna grupa	$P \bar{1}$	$P 2_1/c$	$P 2_1$
Parametri jedinične ćelije:			
$a/\text{\AA}$	7,8859(5)	17,4080(13)	8,0064(6)
$b/\text{\AA}$	12,1910(9)	8,4930(4)	8,5161(4)
$c/\text{\AA}$	18,3610(12)	15,1369(11)	17,3057(12)
$\alpha/^\circ$	76,529(5)	90	90
$\beta/^\circ$	86,248(5)	110,102(6)	94,796(6)
$\gamma/^\circ$	75,537(5)	90	90
$V/\text{\AA}^3$	1662,2(2)	2101,6(3)	1175,83(13)
Broj formulačkih jedinica u jediničnoj ćeliji, Z	2	4	2
Računata gustoća, $D_c/\text{g cm}^{-3}$	1,464	1,481	1,419
Dimenzije kristala / mm^3	0,24 x 0,14 x 0,05	0,32 x 0,14 x 0,02	0,37 x 0,17 x 0,06
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ/mm^{-1}	0,682	0,606	0,544
Strukturni faktor refleksa, $F(000)$	456	976	524
θ – područje sakupljanja refleksa / $^\circ$	1,8 – 26,8	2,7 – 25,7	1,2 – 25,6
Broj sakupljenih refleksa	13434	8629	8606
Broj neovisnih refleksa	7021	3960	4049
Broj opaženih refleksa [$I > 2\sigma(I)$]	4853	2781	3682
Broj utočnjanih parametara	468	280	304
Faktor nepouzdanosti, $R(F_0)$	0,070	0,094	0,040
Težinski faktor nepouzdanosti, $R_w(F_0^2)$	0,198	0,238	0,103
Valjanost korištene težinske jednadžbe F^2 , S	1,067	1,007	0,975
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}} / \text{e \AA}^{-3}$	0,754, -0,971	1,366, -0,874	0,934, -0,480
CCDC broj			

Tablica D8. Opći i kristalografski podaci za spojeve [VOL¹(phen)] (27), [VOL³(phen)] (29) i [VOL⁴(phen)] (30)

Spoj	[VOL ¹ (phen)] (27)	[VOL ³ (phen)] (29)	[VOL ⁴ (phen)] (30)
Molekulska formula	[VO(C ₁₄ H ₉ SON ₃)(C ₁₂ H ₈ N ₂)]	[VO(C ₁₄ H ₉ SO ₂ N ₃)(C ₁₂ H ₈ N ₂)]	[VO(C ₁₄ H ₉ SO ₂ N ₃)(C ₁₂ H ₈ N ₂)]
Izvor zračenja	Cu K α	Cu K α	Mo K α
Temperatura, T/K	296(2)	296(2)	296(2)
Relativna molekulska masa, M _r	514,45	530,45	530,45
Kristalni sustav, boja, habitus	Monoklinski, ljubičasta, igličast	Tetragonski, ljubičasta, igličast	Tetragonski, ljubičasta, blok
Prostorna grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>I</i> 4 ₁ / <i>a</i>	<i>P</i> 4 ₂ / <i>n</i>
Parametri jedinične ćelije:			
<i>a</i> /Å	8,87810(10)	34,3951(7)	24,0377(6)
<i>b</i> /Å	48,5925(9)	34,3951(7)	24,0377(6)
<i>c</i> /Å	15,8940(3)	8,0542(3)	8,0177(3)
α /°	90	90	90
β /°	92,218(2)	90	90
γ /°	90	90	90
<i>V</i> /Å ³	6851,7(2)	9528,3(5)	4632,7(3)
Broj formulskih jedinica u jediničnoj ćeliji, <i>Z</i>	12	16	8
Računata gustoća, <i>D_c</i> /g cm ⁻³	1,496	1,479	1,521
Dimenzije kristala / mm ³	0,20 x 0,08 x 0,05	0,10 x 0,03 x 0,02	0,32 x 0,25 x 0,16
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ /mm ⁻¹	4,780	4,634	0,559
Strukturni faktor refleksa, <i>F</i> (000)	3156	4336	2168
θ – područje sakupljanja refleksa / °	2,9 – 62,1	3,6 – 56,3	4,2 – 27,5
Broj sakupljenih refleksa	21766	5684	19727
Broj neovisnih refleksa	10494	3066	5309
Broj opaženih refleksa [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	9246	2075	3964
Broj utočnjenih parametara	946	328	325
Faktor nepouzdanosti, <i>R</i> (<i>F</i> ₀)	0,070	0,088	0,047
Težinski faktor nepouzdanosti, <i>R_w</i> (<i>F</i> ₀ ²)	0,176	0,214	0,097
Valjanost korištene težinske jednadžbe <i>F</i> ² , <i>S</i>	1,079	1,009	1,037
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ / e Å ⁻³	2,303, -0,748	0,685, -0,431	0,220, -0,231
CCDC broj			

Tablica D9. Opći i kristalografski podaci za spojeve [VOL⁶(phen)] (31)

Spoj	[VOL ⁶ (phen)] (31)
Molekulska formula	[VO(C ₁₈ H ₁₁ SO ₂ N ₃)(C ₁₂ H ₈ N ₂)]
Izvor zračenja	Cu K α
Temperatura, T/K	296(2)
Relativna molekulska masa, M _r	564,5
Kristalni sustav, boja, habitus	Monoklinski, ljubičasta, ploča
Prostorna grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
Parametri jedinične ćelije:	
<i>a</i> /Å	14,3970(6)
<i>b</i> /Å	26,5107(14)
<i>c</i> /Å	29,5475(13)
α /°	90
β /°	94,394(4)
γ /°	90
<i>V</i> /Å ³	11244,4(9)
Broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji, Z	16
Računata gustoća, <i>D</i> /g cm ⁻³	1,334
Dimenzije kristala / mm ³	0,15 x 0,12 x 0,02
Linearni apsorpcijski koeficijent, μ /mm ⁻¹	3,935
Strukturni faktor refleksa, <i>F</i> (000)	4624
θ – područje sakupljanja refleksa / °	3,0 – 70,0
Broj sakupljenih refleksa	62788
Broj neovisnih refleksa	21314
Broj opaženih refleksa [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	10692
Broj utočnjavanih parametara	1405
Faktor nepouzdanosti, <i>R</i> (<i>F</i> ₀)	0,126
Težinski faktor nepouzdanosti, <i>R</i> _w (<i>F</i> ₀ ²)	0,343
Valjanost korištene težinske jednadžbe <i>F</i> ² , <i>S</i>	1,109
Ostatak elektronske gustoće u ∂F -mapi, $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ / e Å ⁻³	1,712, -0,414
CCDC broj	

Tablica D10. Dihedralni kutevi ($^{\circ}$) između ravnina definiranih atomima benzotiazolnog (I) i arenskog prstena (II)* u nekoordiniranim 2-benzotiazolilhidrazonima

Spoj	$\angle$ I,II
H ₂ L ¹ (1)	5,42(17)
H ₂ L ² (2)	5,22 (8)
H ₂ L ⁴ (4a)	10,99(6)
H ₂ L ⁶ (6)	8,66(6)
H ₂ L ³ · ac (3b)	28,47(6)
H ₂ L ⁴ · DMF (4b)	3,12 (10)
HL ⁵ · pi (5b)	19,41(7)
HL ^{7a} A (7a)	4,47 (11)
HL ^{7a} B (7a)	8,82 (10)
HL ^{7b} A (7b)	10,36 (14)
HL ^{7b} B (7b)	2,86 (14)
HL ⁸ (8)	9,95 (5)
HL ⁹ A (9)	3,37 (8)
HL ⁹ B (9)	6,03 (9)
HL ¹⁰ (10)	9,49 (13)
HL ¹¹ A (11)	6,43 (15)
HL ¹¹ B (11)	8,28 (14)
HL ¹³ (13)	12,64 (10)
HL ¹⁴ (14)	2,26 (8)
HL ¹⁵ (15)	6,49 (11)

* [I: C1–C6, N1, C7. S1; II: C9 – C14 (H₂L¹–H₂L⁵), C9–C18 (H₂L⁶, HL⁸), C19, C110–C118 (HL^{7a,7b} A), C29, C210–C218 (HL^{7a,7b} B), C9–C17, N4 (HL¹⁰), C19, C110, N14, C111–C117 (HL¹¹ A), C29, C210, N24, C211–C217 (HL¹¹ B), C9–C13, N4 (HL¹³), C9–C12, N4, C13 (HL¹⁴), C9–C11, N4, C12, C13 (HL¹⁵)]

Tablica D11. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve $\text{H}_2\text{L}^{1,2,4,6}$ (**1**, **2**, **4a**, **6**), $\text{H}_2\text{L}^3 \cdot \text{ac}$ (**3b**), $\text{H}_2\text{L}^4 \cdot \text{DMF}$ (**4b**) i $\text{H}_2\text{L}^5 \cdot \text{pi}$ (**5b**)

D–H $\cdots$ A	D–H	H $\cdots$ A	D $\cdots$ A	< D–H $\cdots$ A	Simetrijski operator
H_2L^1 (1)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,84(2)	1,89(2)	2,658(3)	153(4)	
N1–H11N $\cdots$ N2	0,83(2)	2,05(2)	2,879(3)	174(2)	1/2-x,1/2+y,1/2-z
H_2L^2 (2)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,86(2)	1,85(2)	2,632(2)	151(3)	
O2–H12O $\cdots$ N2	0,85(2)	2,25(2)	2,987(3)	144(3)	1/2+x,1/2-y,1-z
N1–H11N $\cdots$ N2	0,87(2)	2,34(2)	3,177(3)	161(2)	-x,1-y,1-z
H_2L^4 (4a)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,80(2)	1,89(2)	2,631(2)	153(2)	
N1–H11N $\cdots$ N2	0,87(1)	2,11(1)	2,982(2)	176(2)	1-x,-y,1-z
O2–H12O $\cdots$ O1	0,83(2)	1,99(2)	2,811(2)	171(2)	1+x,y,z
C4–H4 $\cdots$ O2	0,93(1)	2,46(1)	3,352(2)	160(2)	-2+x,-1+y,-1+z
H_2L^6 (6)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,87(2)	1,83(2)	2,612(2)	149(2)	
N1–H11N $\cdots$ N2	0,87(2)	2,04(2)	2,910(2)	174(2)	1/2-x,1/2+y,1/2-z
$\text{H}_2\text{L}^3 \cdot \text{ac}$ (3b)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,82(2)	1,87(2)	2,622(2)	151(2)	
N1–H11N $\cdots$ N2	0,85(2)	2,16(2)	2,996(2)	166(2)	1-x,2-y,1-z
O2–H12O $\cdots$ O3	0,80(2)	1,92(2)	2,701(2)	165(3)	1-x,1-y,-z
C17–H17 $\cdots$ O2	0,96	2,51	3,426(3)	160	-x,1-y,-z
$\text{H}_2\text{L}^4 \cdot \text{DMF}$ (4b)					
O1–H11O $\cdots$ N3	0,80(2)	1,95(2)	2,660(2)	146(3)	
O2–H12O $\cdots$ O3	0,80(2)	1,90(2)	2,693(2)	172(3)	1-x,2-y,1-z
N2–H12N $\cdots$ N1	0,85(2)	2,16(2)	2,994(2)	168(2)	-x,-y+2,-z+1
C17–H17C $\cdots$ O1	0,96	2,64	3,407(4)	137	-x+1,y-1/2,-z +3/2
C17–H17A $\cdots$ O3	0,96	2,69	3,395(3)	131	x,y-1,z
C11–H11 $\cdots$ O3	0,93	2,68	3,517(3)	151	x+1,y-1/2,-z +3/2
$\text{HL}^5 \cdot \text{pi}$ (5b)					
N2–H12N $\cdots$ N1	0,91(1)	2,06(1)	2,972(2)	175(2)	-x,1-y,1-z
O1–H11O $\cdots$ O2	0,84(1)	2,09(2)	2,797(1)	143(2)	2-x,1-y,-z
O2–H11O $\cdots$ N4	0,86(1)	1,81(1)	2,675(2)	176(2)	
C2–H2 $\cdots$ S1	0,95	2,94	3,760(2)	145	-x+1,-y,-z+1
C17–H17 $\cdots$ O1	0,95	2,69	3,567(2)	153	x+1,y+1,z
C15–H15 $\cdots$ O2	0,95	2,51	3,446(2)	166	-x+1,-y+1,-z+2

Tablica D12. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve HL^{7a,7b,8-10} (**7a**, **7b**, **8-10**)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
HL ^{7a} (7a)					
N12–H12N···N21	0,87(2)	2,19(2)	3,040(3)	164(2)	1/2-x,1/2-y,1/2-z
N22–H22N···N11	0,90(2)	2,16(2)	3,062(3)	173(2)	1/2-x,1/2-y,1/2-z
C15–H15···O21	0,93	2,63	3,461(4)	150	
C25–H25···O11	0,93	2,63	3,478(4)	150	
C111–H111···N13	0,93	2,25	2,902(4)	126	
C211–H211···N23	0,93	2,26	2,931(4)	127	
C22–H22···S11	0,93	2,97	3,683(3)	135	x,-y+1/2,+z+1/2
C115–H115···S11	0,93	2,92	3,831(3)	168	
HL ^{7b} (7b)					
N12–H12N···N21	0,90(2)	2,15(2)	3,035(5)	171(4)	
N22–H22N···N11	0,92(2)	2,13(2)	3,033(5)	172(4)	
C15–H15···O21	0,95	2,63	3,502(5)	154	
C25–H25···O11	0,95	2,57	3,400(5)	146	-x+1,-y+1,-z+1
C119–H11A···N21	0,98	2,66	3,615(6)	165	
C217–217···N23	0,95	2,59	3,443(6)	149	x+1/2,+y,-z+1/2
C111–H111···N13	0,95	2,24	2,896(5)	126	
C211–H211···N23	0,95	2,27	2,924(5)	126	
C113–H113···S21	0,95	2,77	3,613(5)	149	-x,-y+1,-z+1
HL ⁸ (8)					
N2–H12N···N1	0,88(2)	2,14(2)	3,010(2)	173(2)	2-x,-1-y,-z
C19–H19B···O1	0,96	2,54	3,440(2)	156	1-x,2-y,-z
C15–H15···N3	0,93	2,31	2,958(2)	126	
HL ⁹ (9)					
N12–H12N···N21	0,86(3)	2,25(3)	3,040(4)	155(3)	1-x,1/2+y,1/2-z
N22–H22N···N11	0,85(3)	2,28(3)	3,110(4)	169(3)	1-x,-1/2+y,1/2-z
C24–H24···O21	0,93	2,55	3,317(4)	140	1+x,1/2-y,1/2+z
HL ¹⁰ (10)					
N2–H12N···N4	0,91(2)	1,90(3)	2,638(5)	136(3)	
C2–H2···S1	0,93	2,95	3,574(4)	126	-x+1,+y+1/2,-z
C15–H15···N1	0,93	2,64	3,486	152	-x+2,+y-1/2,-z+1

Tablica D13. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve HL^{11,13-15} (**11**, **13-15**)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
HL ¹¹ (11)					
N12–H12N···N24	0,90(2)	1,93(2)	2,826(5)	174(4)	
N12–H12N···N24	0,86(2)	1,97(2)	2,853(5)	177(4)	x, y, 1+z
C117–H117···N21	0,95	2,61	3,503	157	x, y, 1+z
HL ¹³ (13)					
N2–H12N···N1	0,89(2)	2,10(2)	2,989(3)	175(2)	-x, 1-y, -z
HL ¹⁴ (14)					
N2–H12N···N4	0,86(2)	2,03(2)	2,885(3)	176(3)	-1/2+x, -y, z
HL ¹⁵ (15)					
N2–H12N···N1	0,85(2)	2,24(2)	3,076(2)	171(2)	1-x, 1-y, -z
C2–H2···S1	0,93	2,94	3,771(2)	149	-x+1, +y+1/2, -z+1/2

Tablica D14. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve [VO₂HL¹] (**16**), [VO₂HL³]·EtOH (**18b**), [VO₂HL⁶] (**19**) i [VO₂L¹³] (**21**)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
[VO ₂ HL ¹] (16)					
N2–H12N···O2	0,84(2)	2,02(2)	2,779(3)	150(3)	x, 1/2-y, -1/2+z
N2–H12N···O3	0,84(2)	2,62(2)	3,333(3)	144(3)	x, 1/2-y, -1/2+z
C5–H5···O2	0,93	2,51	3,136(4)	125	
C8–H8···O3	0,93	2,43	3,307(3)	157	x, 1/2-y, -1/2+z
[VO ₂ HL ³]·EtOH (18b)					
O2–H12O···O3	0,81(2)	1,90(2)	2,702(3)	175(2)	-x, 2-y, -z
N2–H12N···O5	0,87(2)	1,90(3)	2,680(3)	148(4)	1-x, 2-y, -z
O5–H15O···O3	0,82	1,98	2,799(3)	178	1-x, 2-y, -z
C13–H13···O1	0,93	2,64	3,515(3)	157,3	-x, 2-y, -z
[VO ₂ HL ⁶] (19)					
N2–H12N···O2	0,88(2)	1,91(3)	2,742(5)	158(5)	x, 1/2-y, 1/2+z
N2–H12N···O3	0,88(2)	2,70(4)	3,386(5)	135(5)	x, 1/2-y, 1/2+z
C5–H5···O2	0,95	2,53	3,154	124	
C8–H8···O3	0,95	2,34	3,258	162	x, 1/2-y, 1/2+z
[VO ₂ L ¹³] (21)					
C4–H4···S1	0,95	2,79	3,588	143	1+x, y, z
C8–H8···O2	0,95	2,52	3,458	171	-1+x, y, z

Tablica D15. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve Et₃NH[VO₂L¹] (22), Et₃NH[VO₂L²] (23a), Et₃NH[VO₂L²] · *i*-PrOH (23b) i Et₃NH[VO₂L⁴] (25)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
Et ₃ NH[VO ₂ L ¹] (22)					
C2–H2···O2	0,95	2,41	3,316(3)	160	1-x,-1/2+y,1/2-z
N4–H14N···O2	0,89(2)	1,90(2)	2,745(2)	158(2)	x,-1+y,z
C20–H20C···O1	0,98	2,44	3,383(3)	162	x,-1+y,z
C5–H5···O2	0,95	2,19	2,857(2)	126	
Et ₃ NH[VO ₂ L ²] (23a)					
O4–H14O···O3	0,84(2)	2,28(9)	2,803(7)	135(8)	1-x,-y,-z
C5–H5···O4	0,95	2,56	3,318(9)	137	1-x,-y,-z
C5–H5···O2	0,95	2,56	3,163(10)	122	
N4–H14N···O2	0,89(2)	1,90(4)	2,723(7)	153(8)	x,y,1+z
C15–H15A···O3	0,98	2,63	3,367(8)	132	1-x, 1-y, 1-z
C17–H17C···O3	0,99	2,55	3,530(9)	169	1-x,-y,1-z
Et ₃ NH[VO ₂ L ²] · <i>i</i> -PrOH (23b)					
O4–H14O···O5	0,82	2,07	2,800(8)	148	x,1+y,z
O5–H15O···O3	0,82	2,10	2,881(8)	159	
N4–H14N···O2	0,86(2)	1,88(3)	2,708(6)	162(7)	
C5–H5···O2	0,93	2,37	3,026(7)	127	
C16–H16B···N2	0,97	2,66	3,603(10)	166	x,-1/2+y,-1/2+z
C20–H20A···O1	0,96	2,64	3,442(9)	141	x,1+y,z
C8–H8···O2					
Et ₃ NH[VO ₂ L ⁴] (25)					
O4–H14O···O3	0,84(2)	1,86(2)	2,688(5)	174(6)	1-x,-1/2+y,1/2-z
N4–H14N···O2	0,87(2)	1,86(2)	2,717(5)	167(6)	
C2–H2···O2	0,95	2,66	3,561(6)	159	-x, 1/2+y, 1/2-z
C5–H5···O2	0,95	2,38	3,038(6)	126,1	
C8–H8···O2	0,95	2,63	3,573(6)	174	x, 1/2-y,z-1/2
C15–H15B···N2	0,99	2,54	3,520(7)	173	x,3/2-y,1/2+z
C18–H18A···O4	0,98	2,65	3,614(7)	169	
C19–H19B···O4	0,99	2,39	3,324(6)	157	1-x,-1/2+y,1/2-z
C20–H20C···O1	0,98	2,59	3,480(7)	151	x,1-y,z

Tablica D16. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve Et₃NH[VO₂L⁶] (**26**) i Et₃NH[VO₂L³] · [VO(acac)₂] (**24b**)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
Et ₃ NH[VO ₂ L ⁶] (26)					
C2–H2···O2	0,95	2,65	3,536(6)	156	-x+2, y-1/2, -z+1
N4–H14N···O2	0,88(3)	1,86(3)	2,725(5)	167(8)	-1+x,y,z
C19–H19A···O3	0,99	2,32	3,150(8)	141	-1+x,1+y,z
C20–H20C···O1	0,98	2,61	3,352(9)	133	
C5–H5···O2	0,95	2,45	3,079(5)	123	
Et ₃ NH[VO ₂ L ³] · [VO(acac) ₂] (24b)					
O4–H14O···O2A	0,82(2)	1,59(3)	2,403(7)	169(8)	1-x,1-y,1-z
O4–H14O···O2B	0,82(2)	2,12(3)	2,929(10)	169(7)	1-x,1-y,1-z
C8–H8···O8	0,95	2,19	3,063(4)	153	
C11–H11···O1A	0,95	2,43	3,364(8)	168	1-x,1-y,1-z
N4–H14N···O3B	0,86(2)	1,85(4)	2,607(7)	146(7)	
C16A–H16C···O1B	0,98	2,21	3,187(9)	172	
C16B–H16F···O1B	0,98	2,45	3,398(11)	164	
C18–H18A···O7	0,98	2,57	3,553(6)	176	-1+x,1+y,z
C16B–H16F···O1B	0,99	2,63	3,603(6)	167	
C26–H26B···O7	0,98	2,39	3,333(5)	162	1+x,y,z

Tablica D17. Geometrija vodikovih veza (Å, °) za spojeve [VOL¹(phen)] (27), [VOL³(phen)] (29), [VOL⁴(phen)] (30) i [VOL⁶(phen)] (31).

D–H···A	D–H	H···A	D···A	< D–H···A	Simetrijski operator
[VOL ¹ (phen)] (27)					
C22–H22···O22	0,93	2,57	3,347(6)	145	1+x,y,z
C24–H24···N22	0,93	2,62	3,5219(6)	169	1+x,1/2-y,-1/2+z
C32–H32···O32	0,93	2,63	3,439(7)	146	
C34–H34···O22	0,93	2,51	3,403(6)	161	1+x,1/2-y,-1/2+z
C223–H223···O12	0,93	2,43	3,327(7)	163	
C117–H117···N32	0,93	2,66	3,345(6)	132	x, 1/2 - y, 1/2 + z
C119–H119···O11	0,93	2,47	3,2366(6)	140	2-x,-y,2-z
[VOL ³ (phen)] (29)					
C8–H8···O3	0,93	2,29	3,129(10)	163	1/4+y,1/4-x,1/4+z
O3–H13O···O2	0,81(2)	1,89(3)	2,679(7)	164(7)	1/4-y,-1/4+x,3/4+z
[VOL ⁴ (phen)] (30)					
O3–H13O···O1	0,82	1,96	2,658(3)	143	-1/2+y,-x,1/2+z
C2–H2···S1	0,93	2,91	3,781(3)	157	x+1,-y+3/2,-z+1/2
C25–H25···O3	0,93	2,64	3,377(3)	137	x+1/2,-y+1,z+3/2
[VOL ⁶ (phen)] (31)					
C223–H223···O12	0,93	2,62	3,486(2)	155	x-1/2,-y+1/2,+z-1/2
C217–H217···O11	0,93	2,61	3,335(3)	135	
C226–H226···O32	0,93	2,41	3,148(3)	134	
C312–H312···O21	0,93	2,55	3,428(3)	157	
C428–H428···N22	0,93	2,74	3,475(3)	136	x-1,+y,+z
C423–H423···O32	0,93	2,55	3,439(3)	161	x-1/2,-y+1/2,+z+1/2

Cg12–Cg8 ^x	3,8002(2)	-3,5022	-3,5037	0	22,8	1,472
Cg8–Cg12 ^x	3,8002(2)	-3,5037	-3,5022	0	22,8	1,475

Tablica D19. Geometrija π interakcija ($\text{\AA}$, $^\circ$) za spojeve HL¹¹ i HL¹⁴

Interakcija ^a	Cg...Cg udaljenost	Cg...P1 ^b	Cg...P2 ^c	α^d	β^e	Pomak centroida
HL ¹¹ (11)						
Cg13–Cg7 ^x	3,8218(3)	-3,3695	-3,4706	6	24,8	1,600
Cg13–Cg13 ^{vii}	3,6171(3)	3,3394	3,3394	0	22,6	1,390
HL ¹⁴ (14)						
Cg1–Cg2 ⁱ	3,7734(5)	-3,4377	-3,5088	3	21,6	1,388
Cg2–Cg1 ⁱⁱ	3,7734(5)	-3,5088	-3,4377	3	24,4	1,556

^a Prsten Cg1 definiran je atomima S1, C1, C6, N1 i C7 (atomi tiazolnog prstena) u **H₂L¹**, **HL²**, **H₂L⁴**, **H₂L⁵**, **H₂L⁶**, **HL⁸** i **HL¹⁴**. Prsten Cg2 definiran je atomima C2 – C6 (atomi fenilnog dijela benzotiazolnog prstena) u **H₂L¹**, **HL²**, **H₂L⁴**, **H₂L⁵** i **H₂L⁶**, Prsten Cg3 definiran je atomima C9 –C14 fenilnog prstena u **H₂L⁴** i **H₂L⁵** **HL⁸**. Prsten Cg4 definiran je atomima C1–C6, N1, C7, S1 (atomi benzotiazolnog prstena) u **HL²**, **H₂L⁴**. Prsten Cg5 definiran je atomima C15–C19, N4 (atomi piridinskog prstena) u **HL²**. Prsten Cg6 definiran je atomima C110–C115 (atomi fenilnog prstena) u **HL^{7a}A** i **HL^{7b}A**. Prsten Cg7 definiran je atomima C11–C16, N11, C17, S11 (atomi benzotiazolnog prstena) u **HL^{7a}A**. Prsten Cg8 definiran je atomima C19, C110–C118 (atomi naftilnog prstena) u **HL^{7a}A** i **HL^{7b}A** i **HL⁹A**. Prsten Cg9 definiran je atomima C29, C210, C215–C218 (atomi fenilnog prstena) u **HL^{7a}B** i **HL^{7b}B**. Prsten Cg10 definiran je atomima C210–C215 (atomi fenilnog prstena) u **HL^{7a}B** i **HL^{7b}B**. Prsten Cg11 definiran je atomima C29, C210–C218 (atomi naftilnog prstena) u **HL^{7a}B** i **HL^{7b}B**. Prsten Cg12 definiran je atomima C19, C110, C115–C118 (atomi fenilnog prstena) u **HL^{7b}A** i **HL⁹A**.

^b Cg...P1 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^c Cg...P2 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^d Dihedralni kut između P1 and P2.

^e kut između Cg...Cg i Cg...P1 udaljenosti.

i = x, -1+y, z

ii = x, 1+y, z

iii = 1/2-x, -1/2+y, z

iv = -x, -y, 1-z

v = 2-x, 1-y, 2-z

vi = -x, 2-y, 1-z

vii = 1-x, -y, -z

viii = 1/2+x, y, 1/2-z

ix = -1/2+x, y, 1/2-z

x = -x, 1-y, -z

Tablica D20. Geometrija π interakcija ($\text{\AA}$, $^\circ$) za spojeve $[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (**16**), $[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (**19**) i $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (**21**)

Interakcija ^a	Cg...Cg udaljenost	Cg...P1 ^b	Cg...P2 ^c	α^d	β^e	Pomak centroida
$[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (16)						
Cg1–Cg2 ⁱ	3,6973(1)	-3,4341	-3,4258	1	22,1	1,391
Cg2–Cg1 ⁱ	3,6973(1)	-3,4258	-3,4341	1	21,8	1,370
$[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (19)						
Cg1–Cg2 ⁱⁱ	3,6841(2)	3,3564	3,3501	0	24,6	1,533
Cg2–Cg1 ⁱⁱ	3,6841(2)	3,3501	3,3564	0	24,3	1,519
$[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (21)						
Cg3–Cg4 ⁱⁱⁱ	3,6704(3)	3,4110	3,3833	10	22,8	1,423
Cg4–Cg3 ⁱⁱⁱ	3,6704(3)	3,3833	3,4110	10	21,7	1,355
Cg2–Cg3 ⁱⁱⁱ	3,7353(3)	3,2564	3,4307	8	23,2	1,477

^a Prsten Cg1 definiran je atomima S1, C1, C6, N1 i C7 (atomi tiazolnog prstena) u $[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (**16**) i $[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (**20**). Prsten Cg2 definiran je atomima C1–C6, N1, C7, S1 (atomi benzotiazolnog prstena) u $[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (**16**), $[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (**20**) i $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (**22**).). Prsten Cg3 definiran je atomima N4, C9–C13 (atomi piridinskog prstena) u $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (**22**). Prsten Cg4 definiran je atomima C1–C6 (atomi benzenskog prstena benzotiazola) u $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (**22**).

^b Cg...P1 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^c Cg...P2 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^d Dihedralni kut između P1 and P2.

^e kut između Cg...Cg i Cg...P1 udaljenosti.

i = -1-x,-y,-z

ii = -1-x,1-y,-z

iii = 2-x,-y,2-z

Tablica D21. Geometrija π interakcija ($\text{\AA}$, $^\circ$) za spojeve spojeve [VOL¹(phen)] (27), [VOL³(phen)] (29), [VOL⁴(phen)] (30) i [VOL⁶(phen)] (31)

Interakcija ^a	Cg...Cg udaljenost	Cg...P1 ^b	Cg...P2 ^c	α^d	β^e	Pomak centroida
[VOL ¹ (phen)] (27)						
Cg1–Cg3 ⁱ	3,7424(1)	3,4526	3,4805	1	21,6	1,375
Cg1–Cg5 ⁱ	3,9142(1)	3,4441	3,4856	1	27,1	1,781
Cg2–Cg5 ⁱⁱ	3,9805(1)	-3,6909	-3,6984	1	21,7	1,472
Cg3–Cg1 ¹	3,7424(1)	3,4505	3,4526	1	22,7	1,444
Cg3–Cg3 ⁱ	3,6998(1)	3,4651	3,4651	0	20,5	1,297
Cg3–Cg6 ⁱ	3,7897(1)	3,4637	3,4514	1	24,4	1,565
Cg4–Cg4 ⁱ	3,7381(1)	3,4637	3,4637	0	22,1	1,406
Cg4–Cg6 ⁱ	3,7644(1)	3,4588	4,4618	0	23,1	1,479
Cg5–Cg2 ⁱⁱ	3,9805(1)	-3,6984	-3,6909	1	22,0	1,490
Cg6–Cg3 ⁱ	3,7897(1)	3,4514	3,4637	1	23,9	1,538
Cg6–Cg4 ⁱ	3,7644(1)	3,4618	3,4588	0	23,2	4,486
[VOL ³ (phen)] (29)						
Cg1–Cg2 ⁱⁱⁱ	3,7040(1)	-3,3484	-3,3484	0	25,3	1,584
Cg1–Cg3 ⁱⁱ	3,6051(1)	-3,3574	-3,3343	1	22,4	1,371
Cg1–Cg6 ⁱⁱⁱ	3,7280(1)	-3,3549	-3,3070	2	27,5	1,721
Cg3–Cg2 ⁱⁱⁱ	3,6051(1)	-3,3343	-3,3574	1	21,4	1,313
Cg4–Cg4 ⁱⁱⁱ	3,6064(1)	-3,3441	-3,3441	0	22,0	1,350
Cg6–Cg1 ⁱⁱⁱ	3,7280(1)	-3,3070	-3,3549	2	25,9	1,626
[VOL ⁴ (phen)] (30)						
Cg7–Cg10 ^{iv}	3,8692(1)	3,3135	-3,5221	7	24,5	1,602
Cg7–Cg10 ^{iv}	3,8737(1)	3,3604	-3,4925	5	25,6	1,676
Cg8–Cg2 ^{iv}	3,7603(1)	3,2903	-3,4644	6	22,9	1,462
Cg9–Cg12 ^v	3,4934(1)	-3,3987	-3,2472	8	21,6	1,288
Cg11–Cg2 ^{iv}	3,8116(1)	3,3040	-3,448	5	25,3	1,631
Cg1–Cg13 ^{iv}	3,8387(1)	3,3010	-3,5039	7	24,1	1,586
[VOL ⁶ (phen)] (31)						
Cg14–Cg20 ^{vi}	3,6943(2)	3,3198	-3,4400	5	21,5	1,347
Cg15–Cg22 ^{vii}	3,9177(2)	3,6693	3,5848	10	23,8	1,580
Cg16–Cg19 ^{vi}	3,8697(2)	3,4786	-5,5787	4	22,4	1,472
Cg16–Cg20 ^{vi}	3,6858(2)	3,4621	-3,4398	4	21,1	1,324
Cg17–Cg21 ^{vi}	3,7792(2)	3,3966	-3,5030	4	22,0	1,418
Cg18–Cg20 ^{vi}	3,7395(2)	3,3632	-3,4325	5	23,4	1,484
Cg18–Cg21 ^{vi}	3,7992(2)	3,3808	-3,4990	4	22,9	1,480
Cg19–Cg16 ^{vii}	3,8697(2)	3,5787	3,4786	4	26,0	1,695
Cg20–Cg18 ^{vii}	3,7395(2)	3,4325	3,3632	5	25,9	1,635
Cg21–Cg17 ^{vii}	3,7792(2)	3,5030	3,3966	4	26	1,657

^a Prsten Cg1 definiran je atomima N4, C15–C18, C26 (atomi fenantrolinskog prstena) u **30**, **31** te atomima N14, C115–C118, C126 (atomi fenantrolinskog prstena) u **28**. Prsten Cg2 definiran je atomima N5, C21–C25 (atomi fenantrolinskog prstena) u **30** te N15, C121–C125 (atomi fenantrolinskog prstena) u **28**. Prsten Cg3 definiran je atomima C18–C26 (atomi

fenantrolinskog prstena) u **30** te C118–C126 (atomi fenantrolinskog prstena) u **28**. Prsten Cg4 definiran je atomima N4, C15–C26 (atomi fenantrolinskog prstena) u **30** te N14, C115–C126 (atomi fenantrolinskog prstena) **28**. Prsten Cg5 definiran je atomima N15, C118–C126 (atomi fenantrolinskog prstena) u [VOL¹(phen)] (**28**). Prsten Cg6 definiran je atomima N4, C15–C24, N5, C25, C26 (atomi fenantrolinskog prstena) u **30** te N14, C115–C124, N15, C125, C126 (atomi fenantrolinskog prstena) u [VOL¹(phen)] (**28**).

Prsten Cg7 definiran je atomima C1, S1, C6, N1, C7 (atomi tiazolnog prstena benzotiazola) u **31**. Prsten Cg8 definiran je atomima N5, C15–C21 (atomi fenantrolinskog prstena) u **31**. Prsten Cg9 definiran je atomima C9–C14 (atomi benzenskog prstena) u **31**. Prsten Cg10 definiran je atomima C18–C23 (atomi fenantrolinskog prstena) u **31**. Prsten Cg11 definiran je atomima S1, C1–C6, N1, C7 (atomi benzotiazolnog prstena) u **31**. Prsten Cg12 definiran je atomima N4, C12, C18–C24 (atomi fenantrolinskog prstena) u **31**. Prsten Cg13 definiran je atomima N5, C15–C23 (atomi fenantrolinskog prstena) u **31**. Prsten Cg14 definiran je atomima N15, C125–C129 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**.

Prsten Cg15 definiran je atomima C19, C110–C118 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg16 definiran je atomima C122–C125, C129, C130 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg17 definiran je atomima N15, C122–C130 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg18 definiran je atomima N14, C119–C130, N15 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg19 definiran je atomima C29, C210–C213, C218 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg20 definiran je atomima C29, C213–C218 (atomi fenantrolinskog prstena) u **32**. Prsten Cg21 definiran je atomima C29, C210–C218 (atomi benzenskog prstena) u **32**.

^b Cg...P1 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^c Cg...P2 je okomita udaljenost odgovarajućeg centroida i ravnine. Ravnine P1 i P2 definirane su atomima koji definiraju odgovarajuće centroide.

^d Dihedralni kut između P1 and P2.

^e kut između Cg...Cg i Cg...P1 udaljenosti.

i = 2-x,-y,2-z

ii = 1-x,-y,2-z

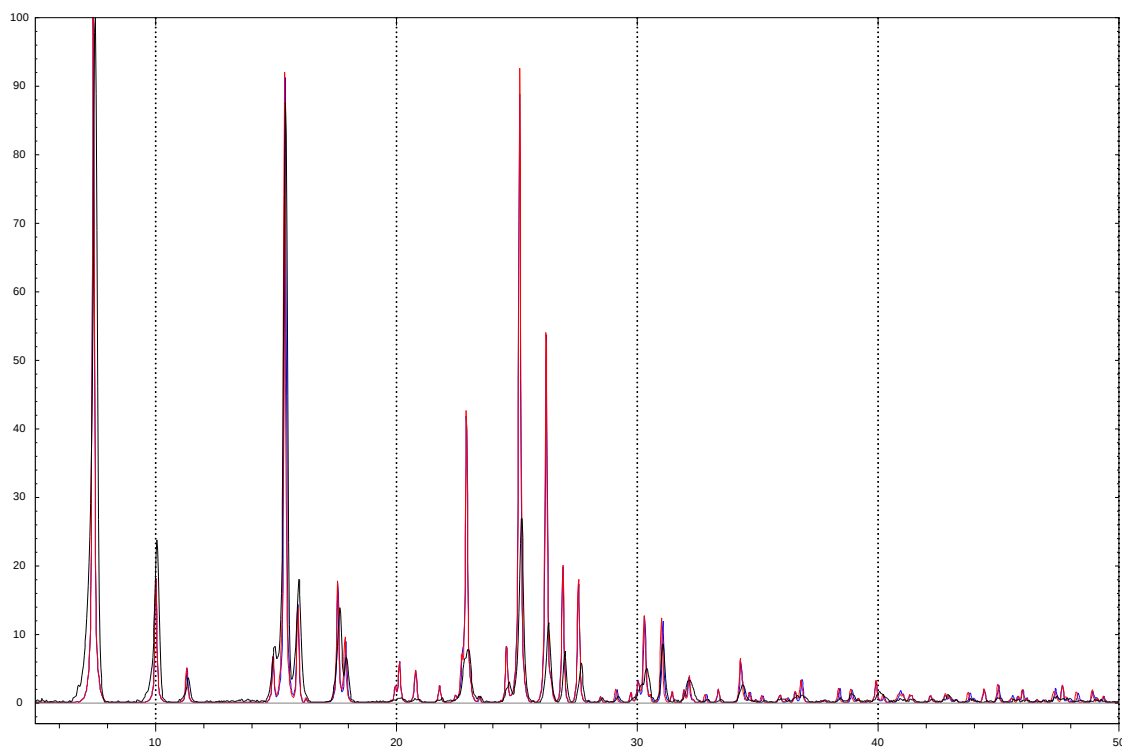
iii = -x,-y,1-z

iv = 1/2-y,x,1/2-z

v = 1/2+y,-x,1/2+z

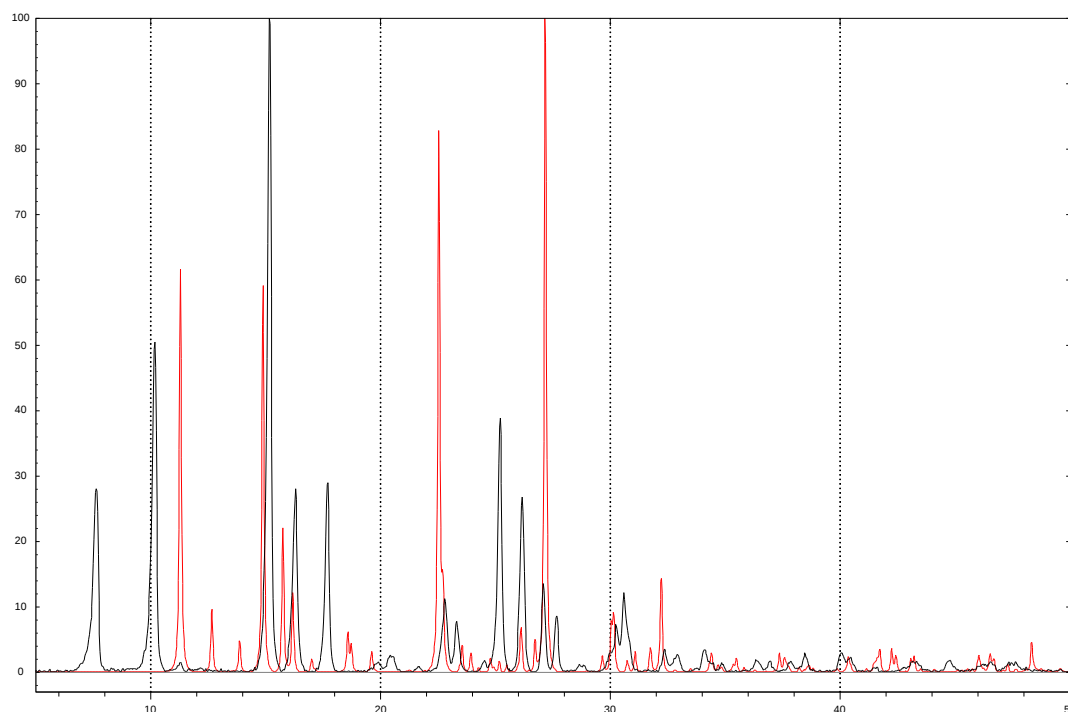
vi = -1/2+x,1/2-y,1/2+z

vii = 1/2+x,1/2-y,-1/2+z

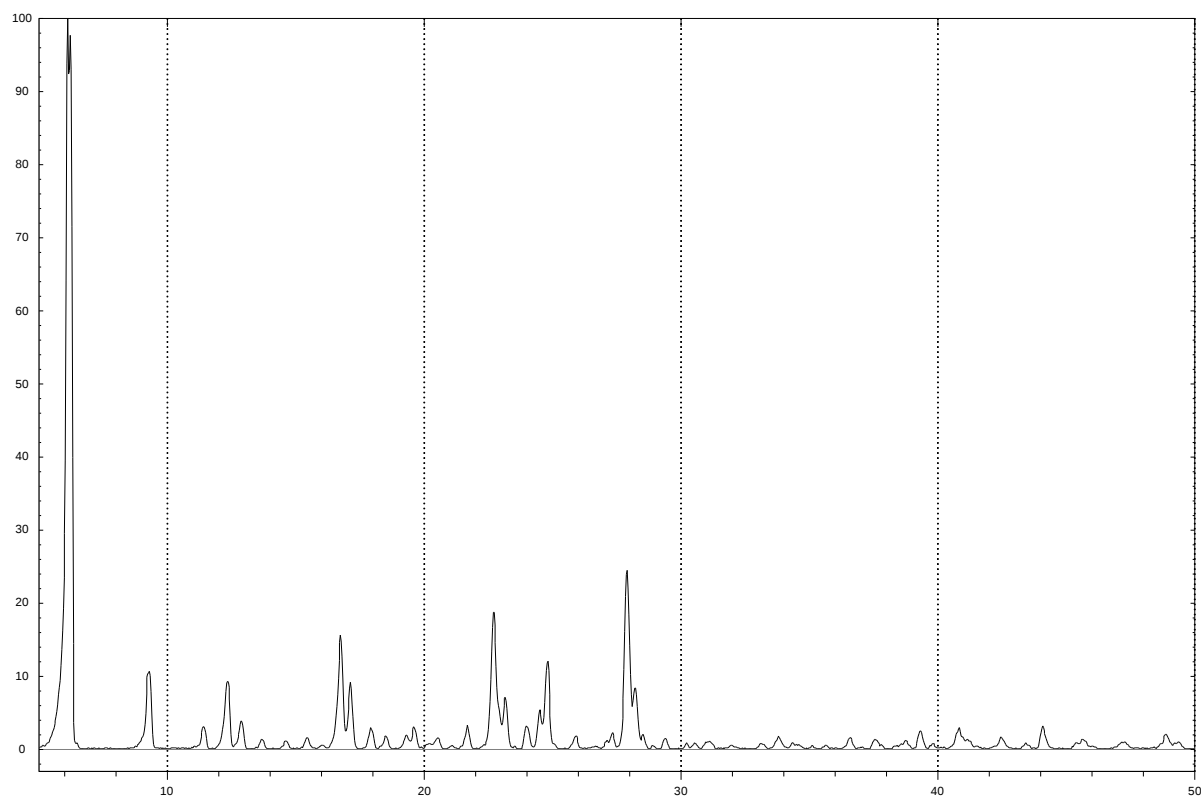
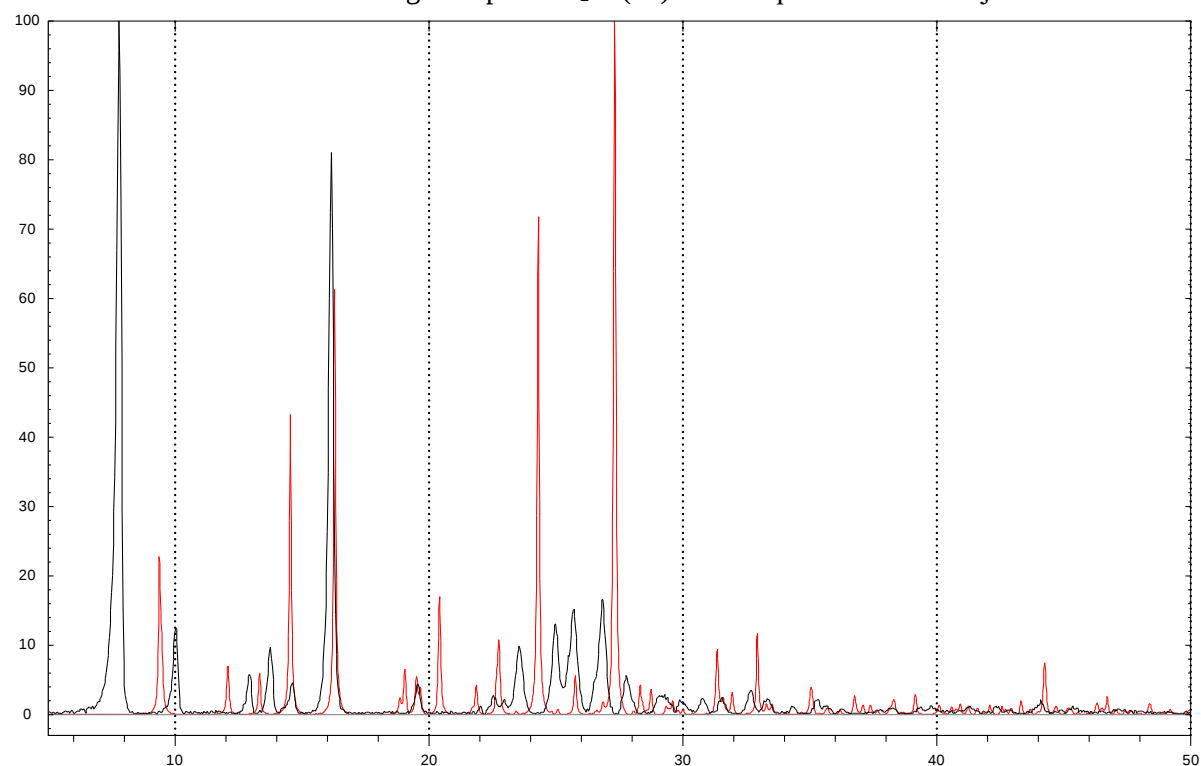


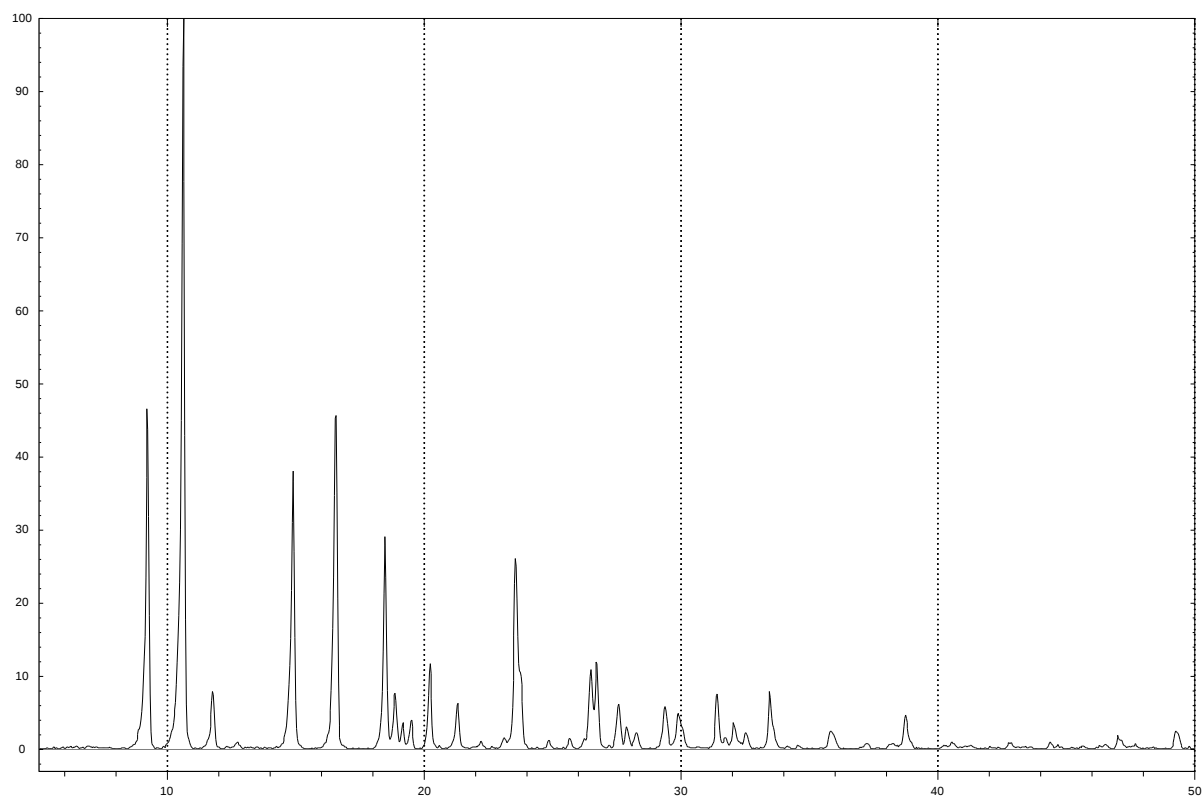
Slika

D1. Usporedba difraktograma praha H₂L¹ (1) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatih difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnim kristalima dobivenim iz matičnice (plava boja) i prekristalizacijom iz DMSO-a (crvena boja).

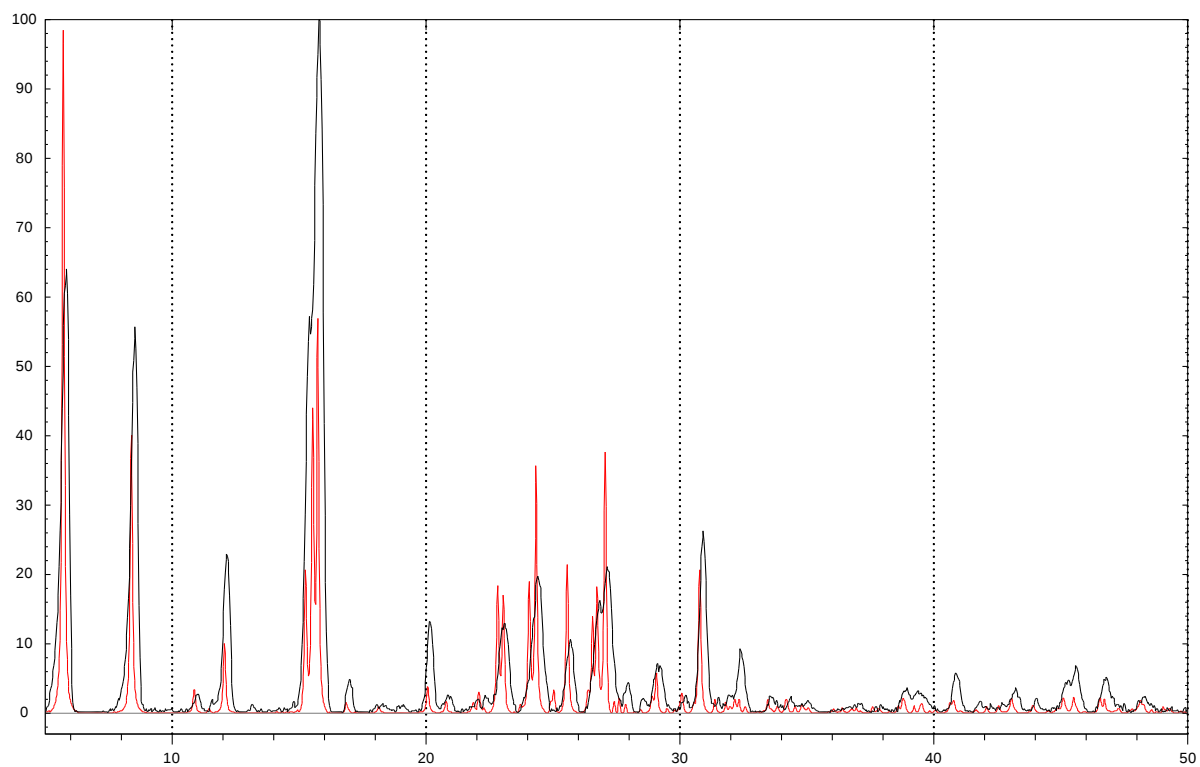


Slika D2. Usporedba difraktograma praha H₂L² (2) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom sintezom u toluenu (crvena boja)

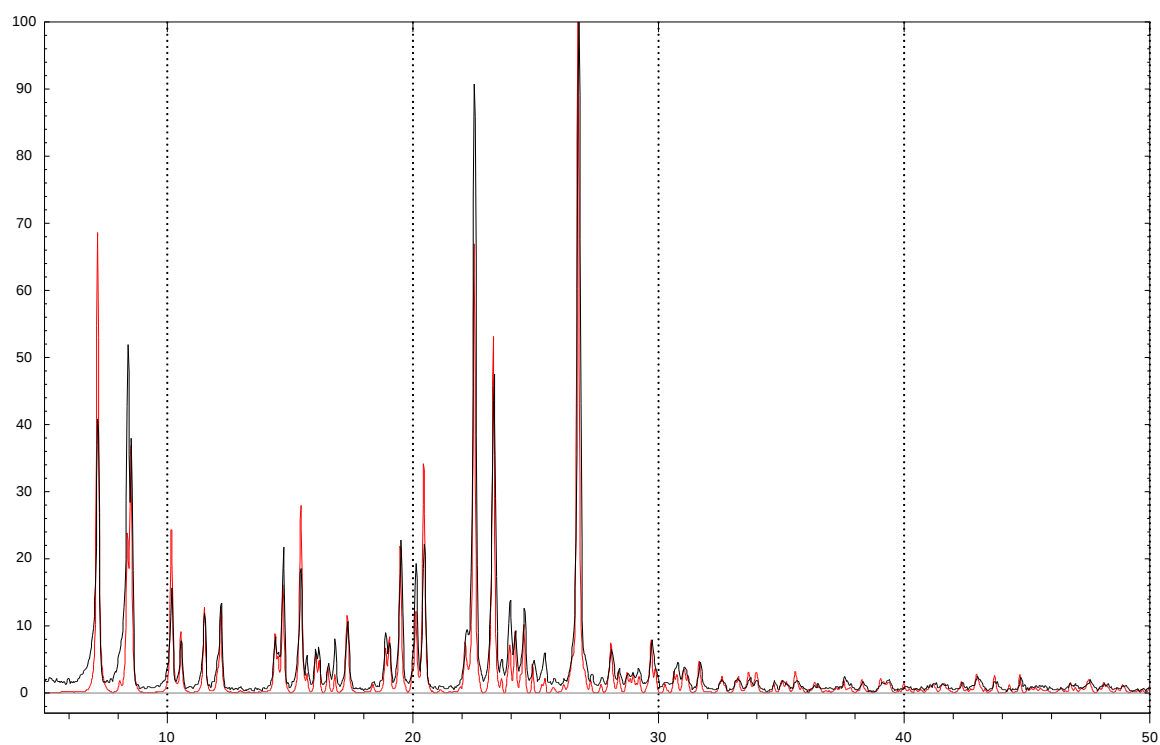
Slika D3. Difraktograma praha H_2L^3 (**3a**) dobiven povratnim hlađenjemSlika D4. Usporedba difraktograma praha H_2L^4 (**4a**) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom sintezom u diklormetanu (crvena boja).



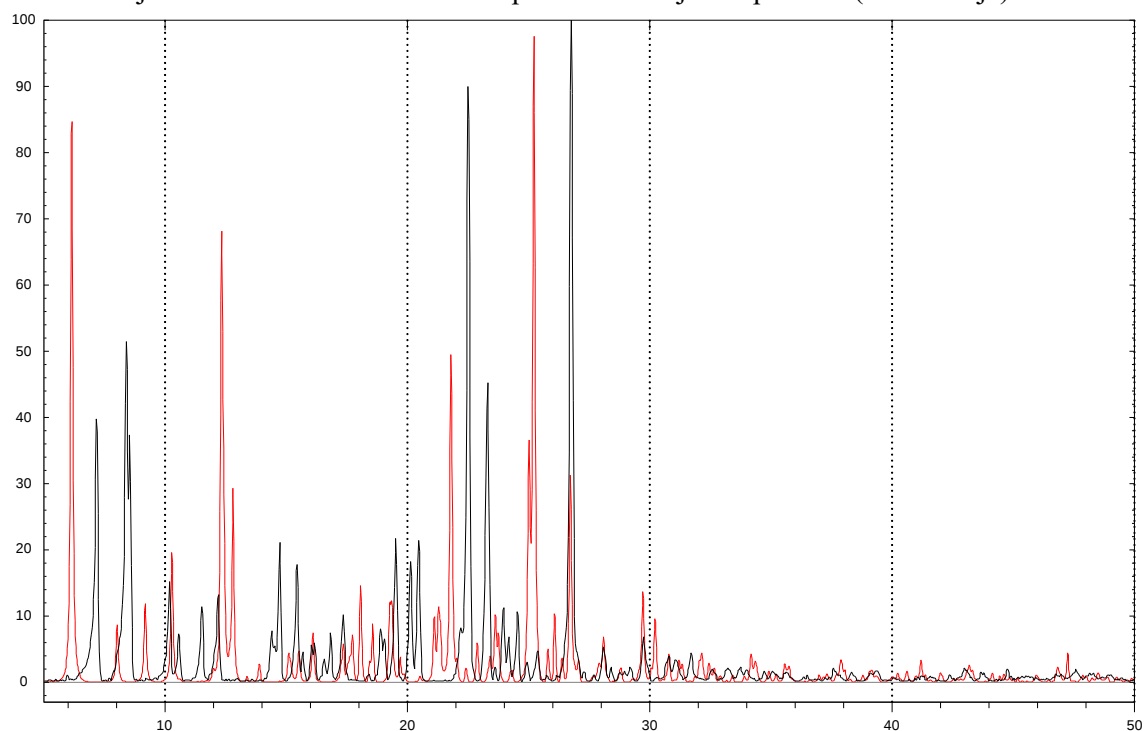
Slika D5. Difraktograma praha H_2L^5 (5a) dobiven povratnim hlađenjem



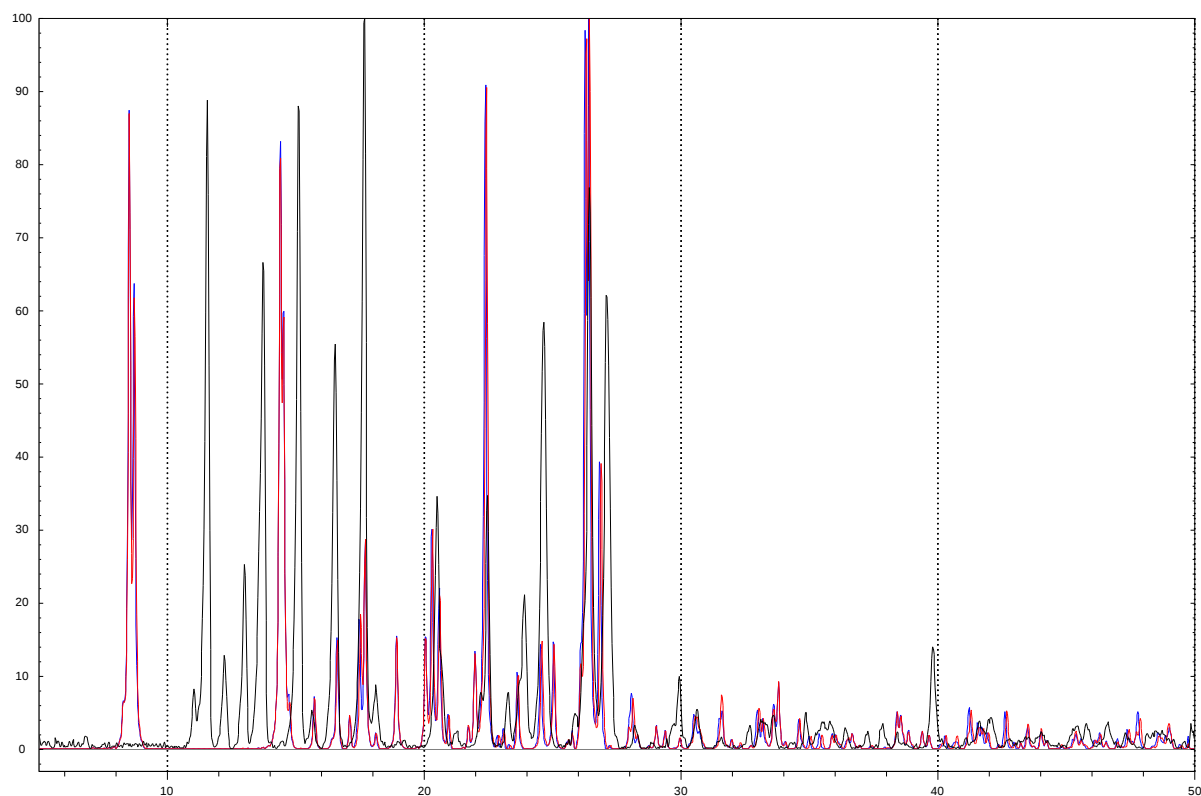
Slika D6. Usporedba difraktograma praha H_2L^6 (6) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom sintezom u toluenu (crvena boja).



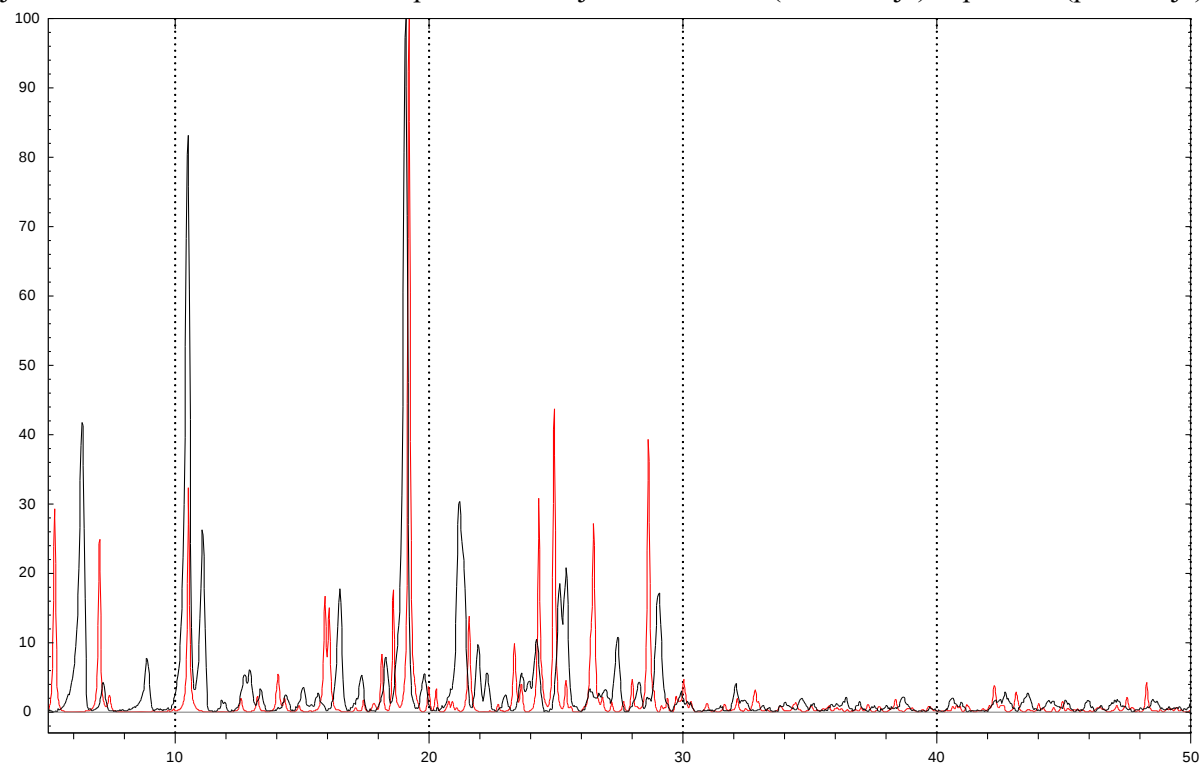
Slika D7. Usporedba difraktograma praha HL^{7a} (**7a**) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizacijom u piridinu (crvena boja).



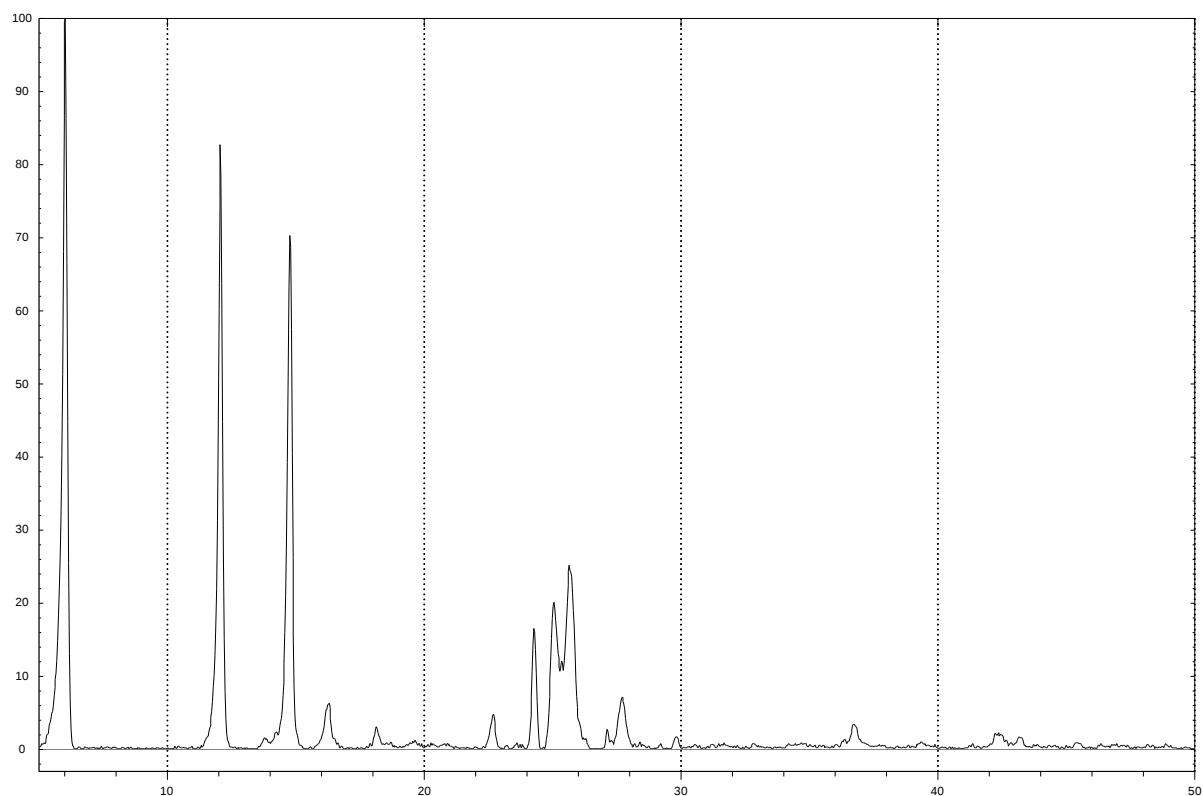
Slika D8. Usporedba difraktograma praha (HL⁷) (**7a**) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizacijom u DMF-u (crvena boja).



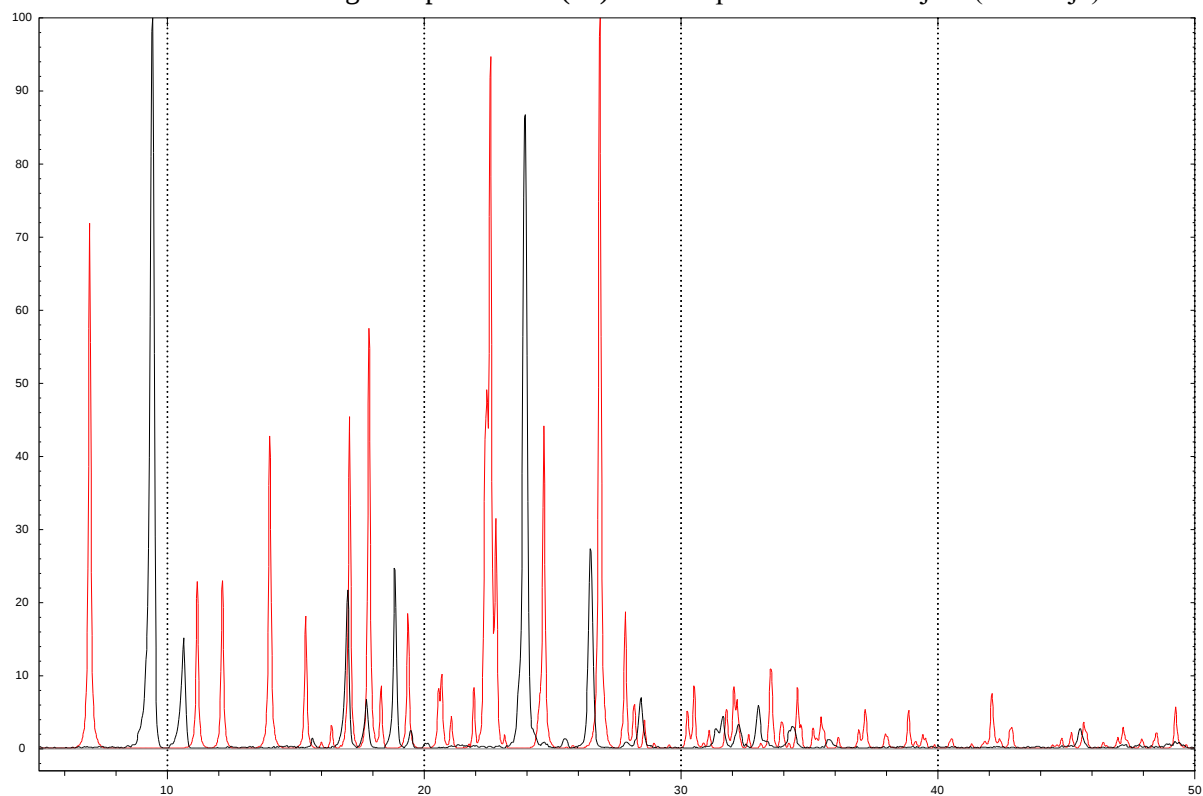
Slika D9. Usporedba difraktograma praha (HL⁸) (8) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatih difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnim kristalima dobivenim prekrizacijom u DMSO-u (crvena boja) te piridinu (plava boja).



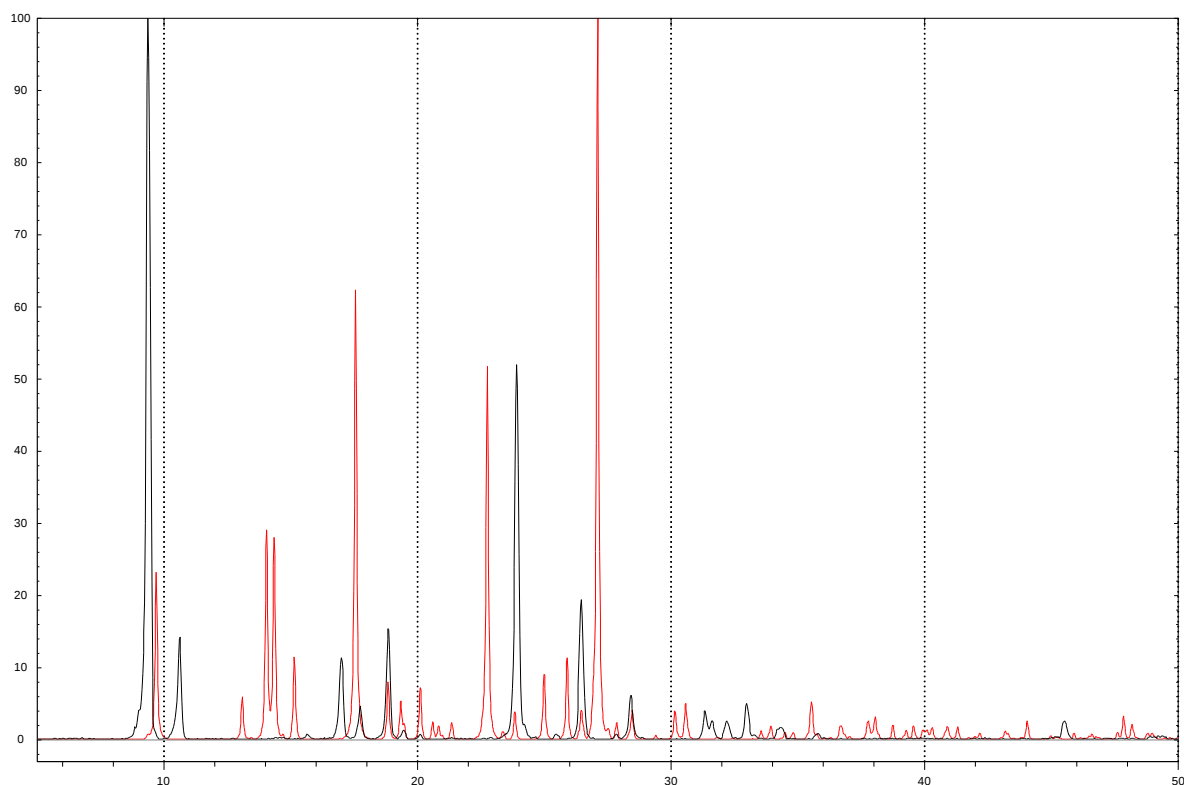
Slika D10. Usporedba difraktograma praha (HL⁹) (9) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizacijom u DMSO-u (crvena boja).



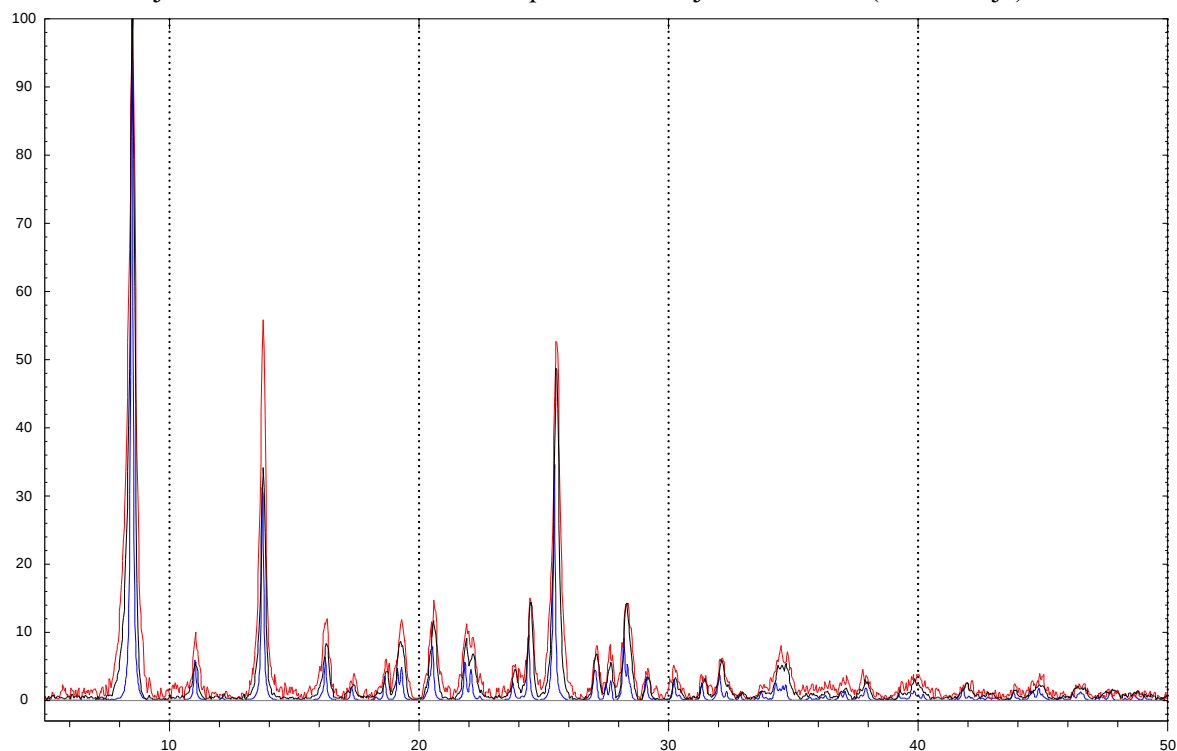
Slika D11. Difraktograma praha HL¹² (12) dobiven povratnim hlađenjem (crna boja)



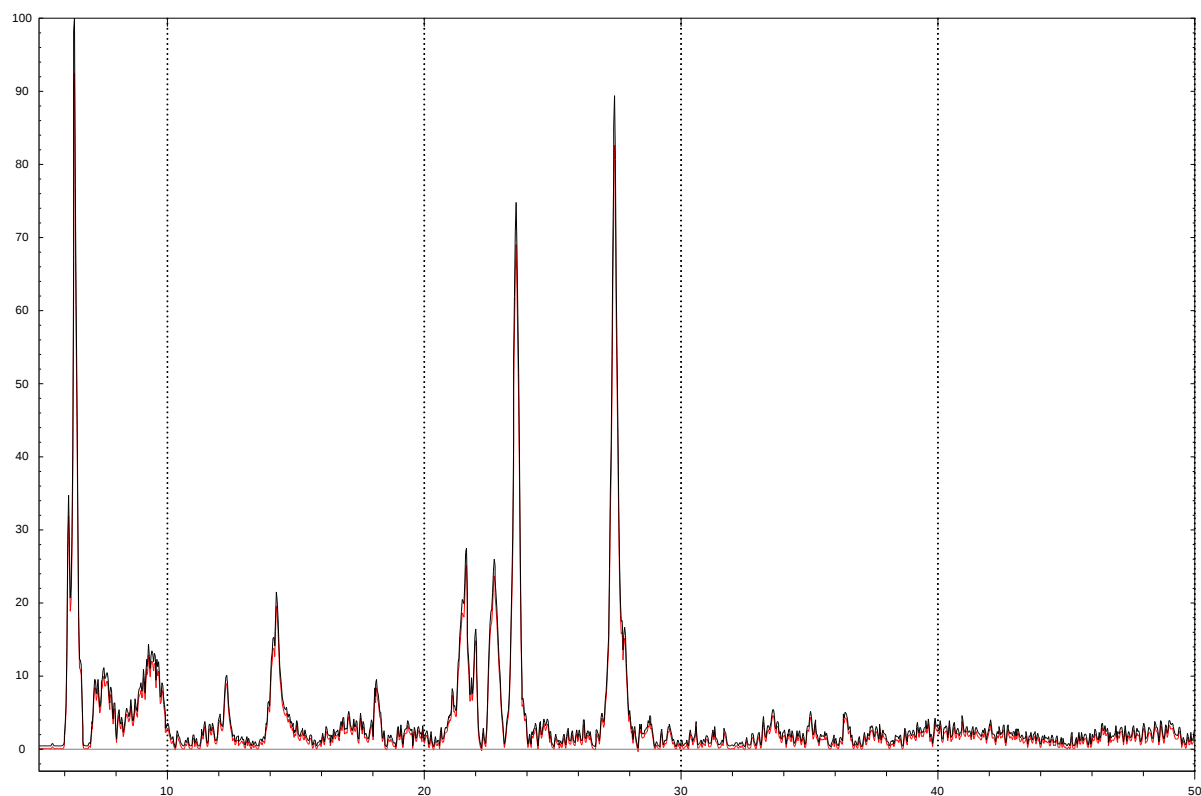
D12. Usporedba difraktograma praha (HL¹³) (13) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizacijom iz etanola (crvena boja).



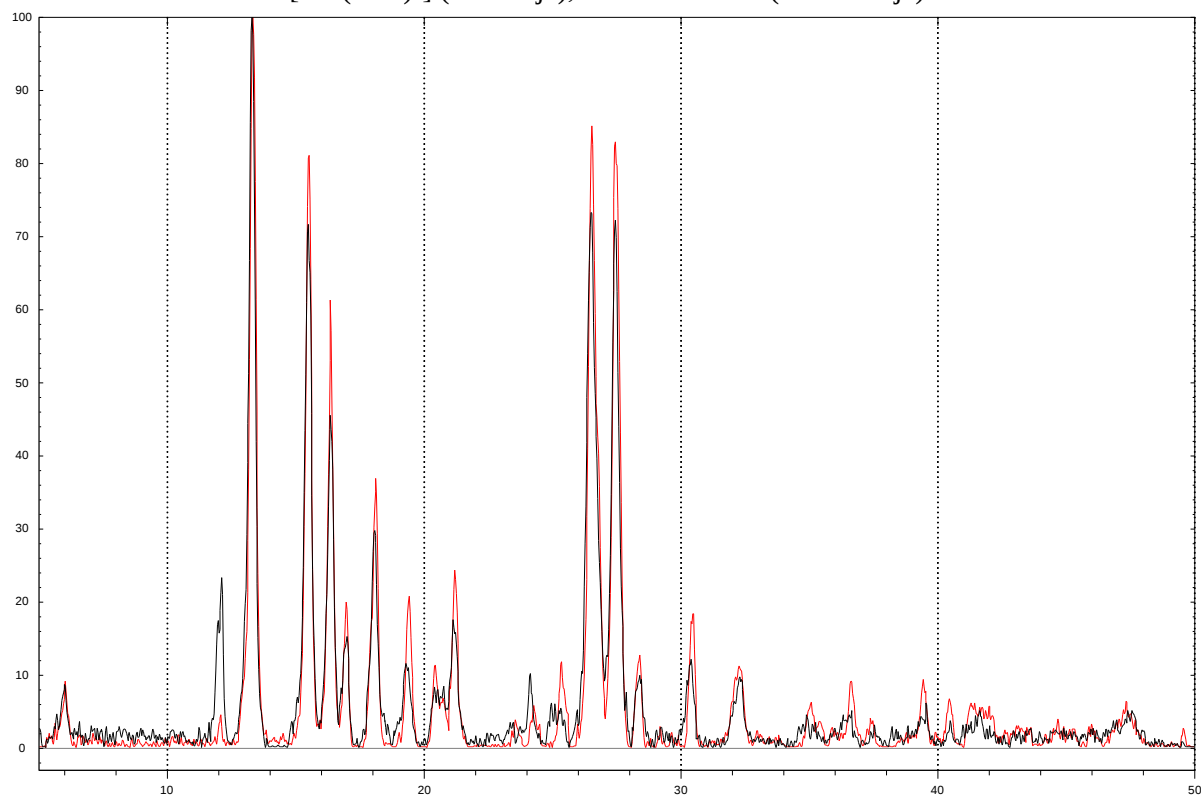
D13. Usporedba difraktograma praha (HL^{14}) (14) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizacijom iz etanola (crvena boja).



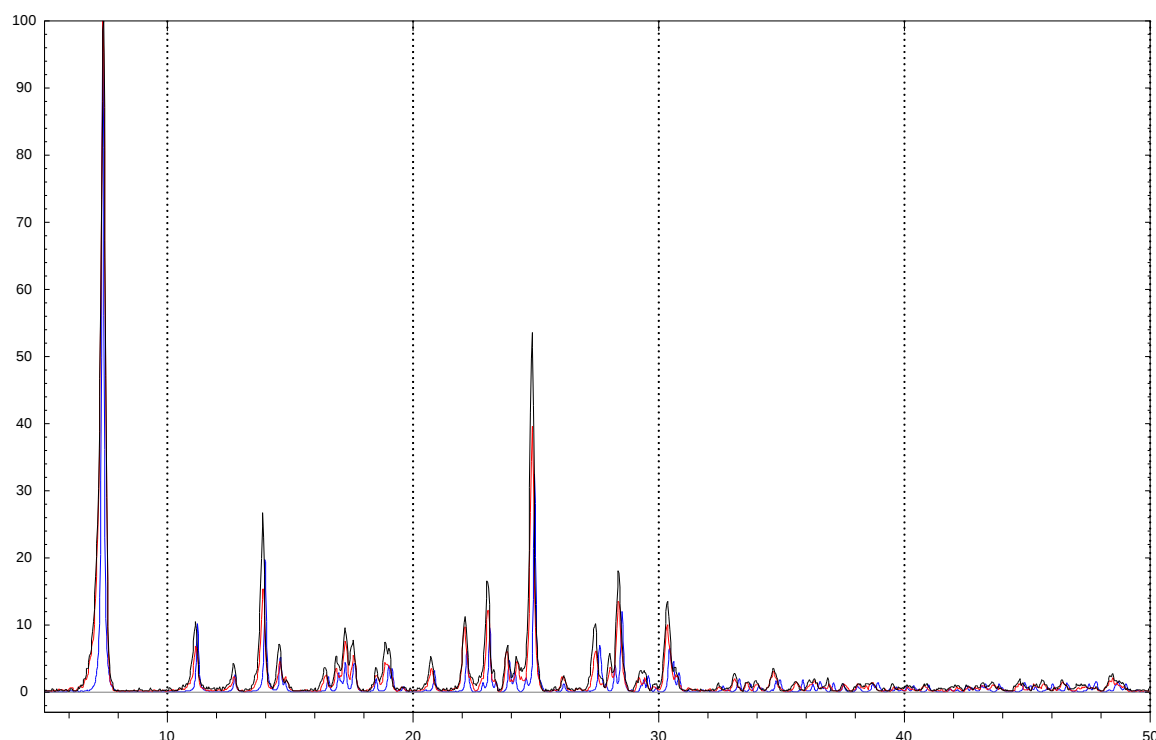
Slika D14. Usporedba difraktograma praha $[\text{VO}_2\text{HL}^1]$ (16) dobivenih povratnim hlađenjem polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (crna boja), $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (crvena boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnim kristalima dobivenim iz matičnice (plava boja).



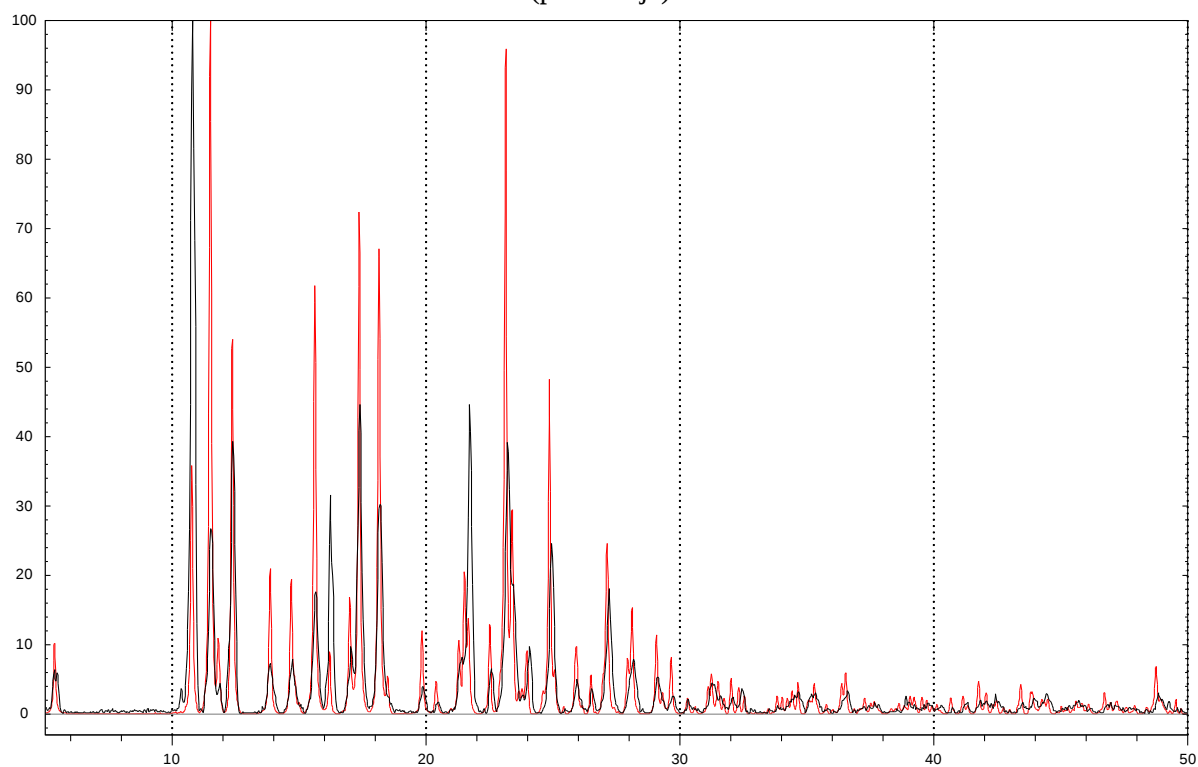
Slika D15. Usporedba difraktograma praha $[\text{VO}_2\text{HL}^2]$ (17) dobivenih povratnim hlađenjem polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (crna boja), $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (crvena boja)



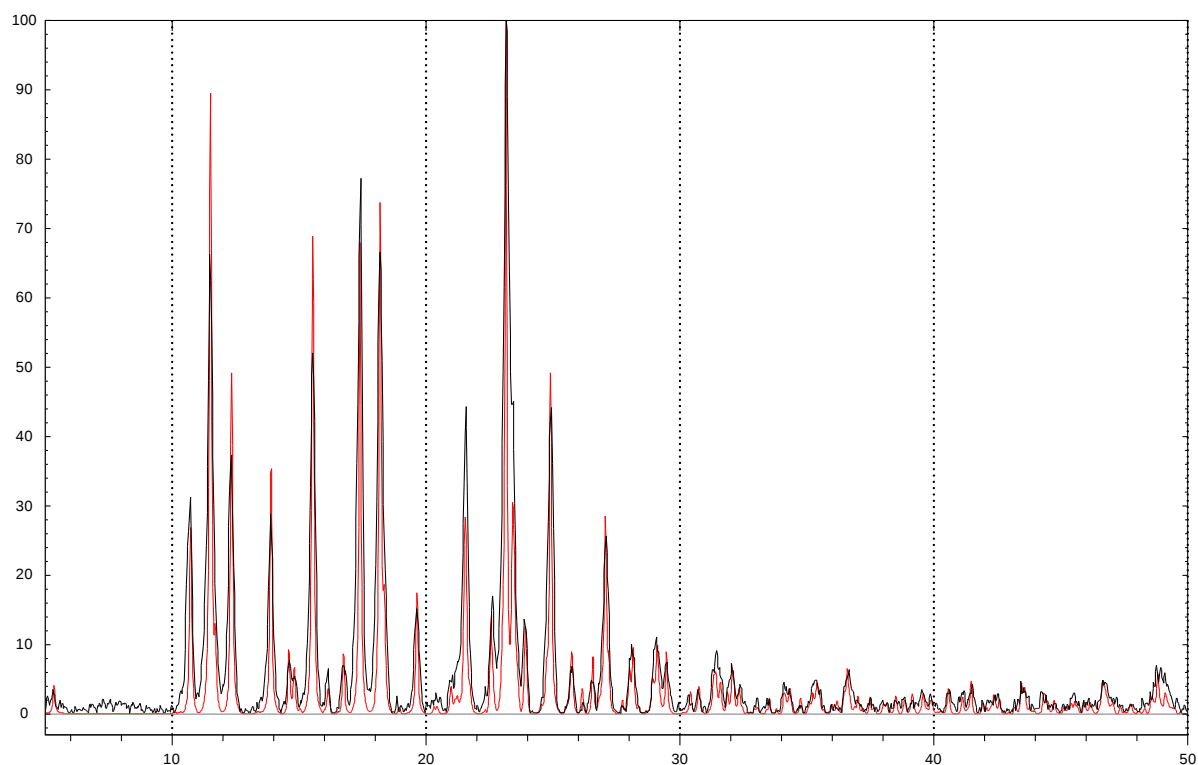
Slika D16. Usporedba difraktograma praha $[\text{VO}_2\text{HL}^3]$ (18a) dobivenih povratnim hlađenjem polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (crna boja), $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (crvena boja)



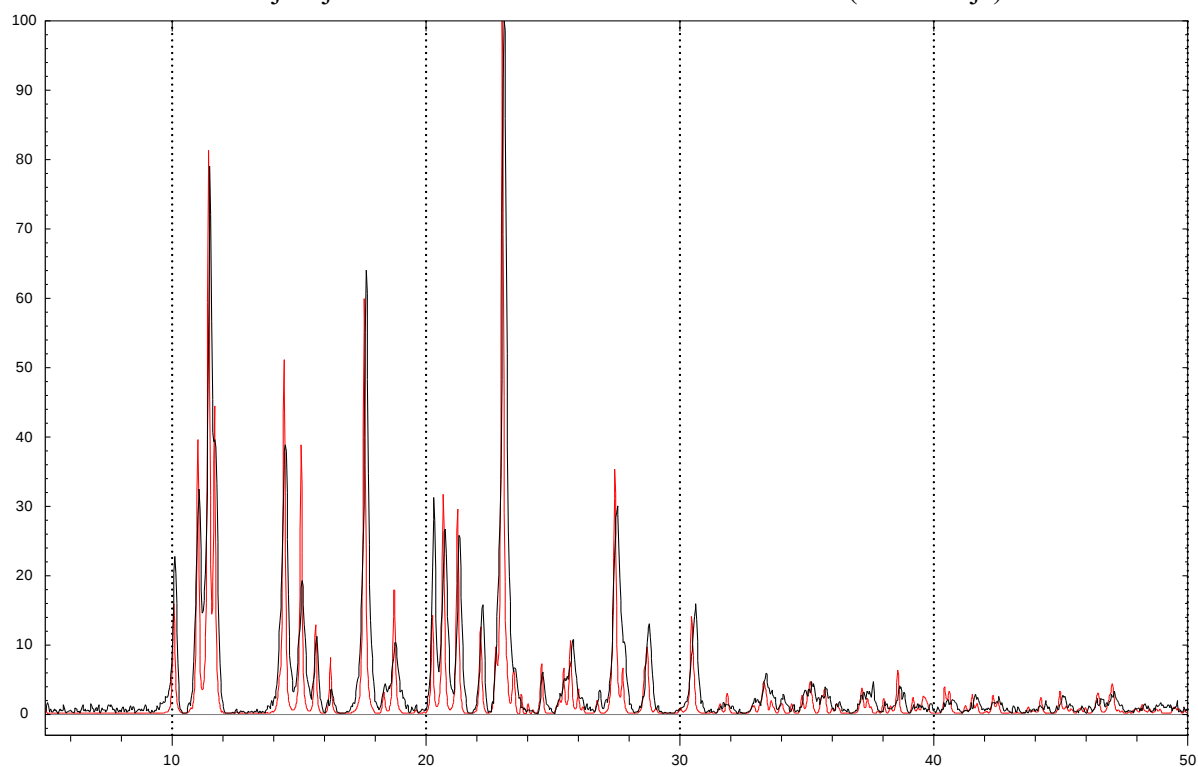
Slika D17. Usporedba difraktograma praha $[\text{VO}_2\text{HL}^6]$ (**19**) dobivenih povratnim hlađenjem polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (crna boja), $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (crvena boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnim kristalima dobivenim iz matičnice (plava boja).



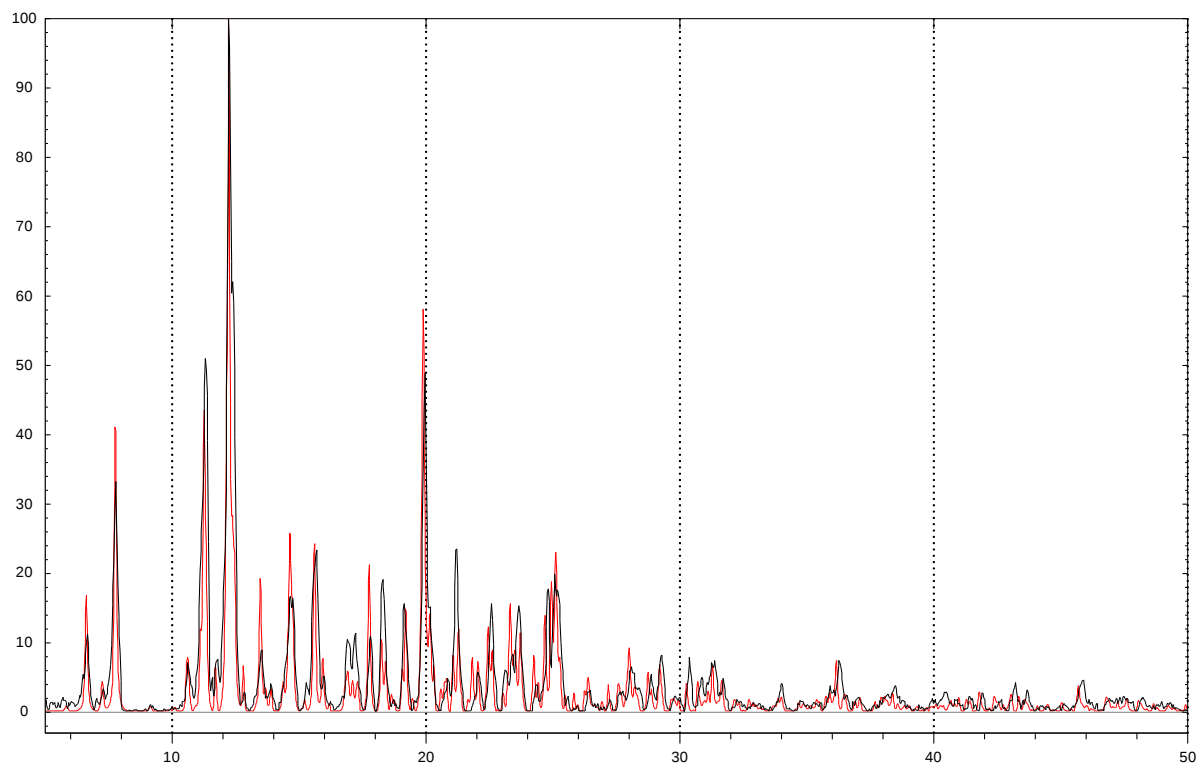
Slika D18. Usporedba difraktograma praha $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^1]$ (**22**) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenim iz prekrizalizacijom iz etanola (crvena boja).



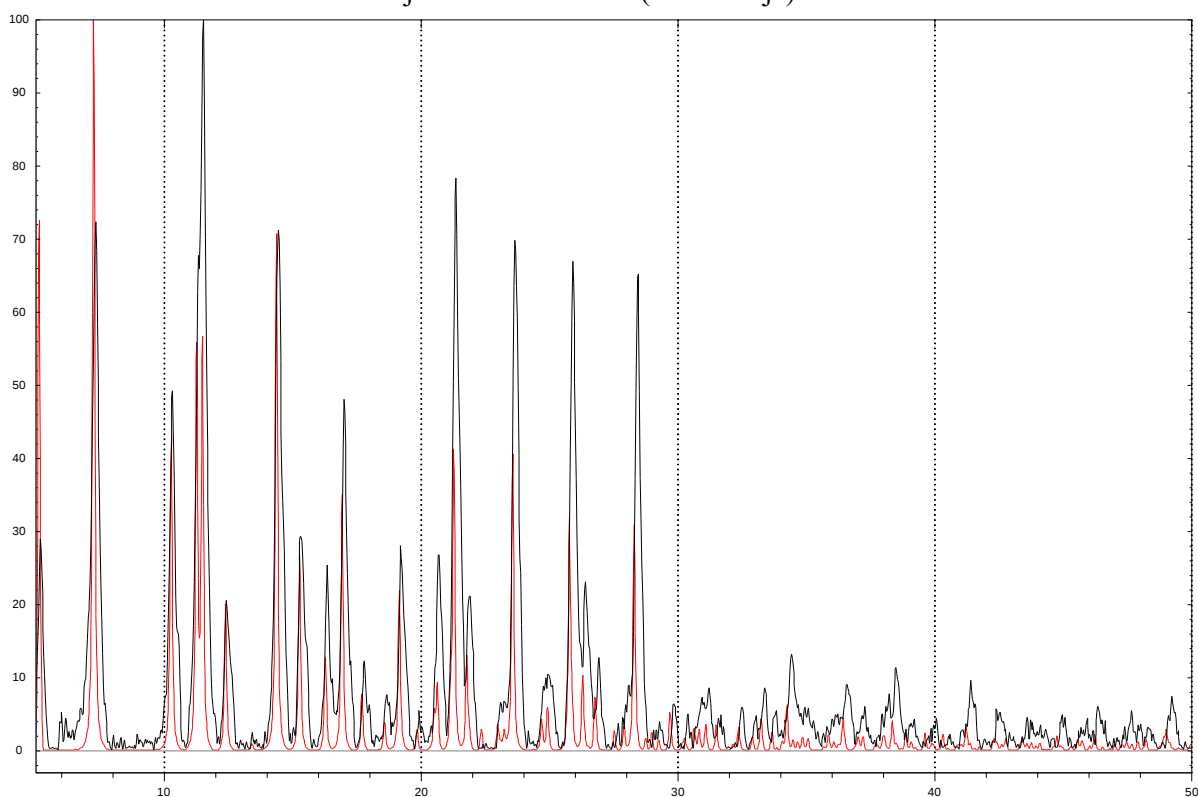
Slika D19. Usporedba difraktograma praha $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^4]$ (25) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom iz matičnice (crvena boja).



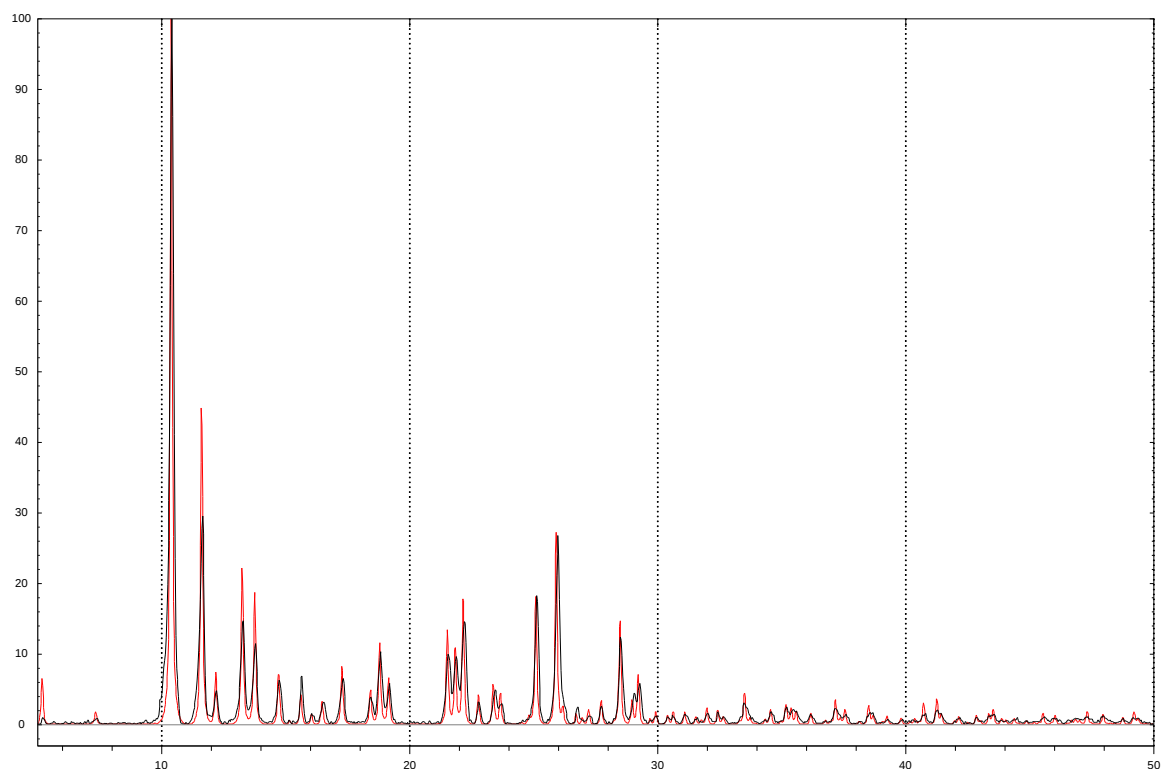
Slika D20. Usporedba difraktograma praha $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^6]$ (26) dobivenog povratnim hlađenjem (crna boja) te izračunatog difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu dobivenom prekrizalizacijom u 1-propanolu (crvena boja).



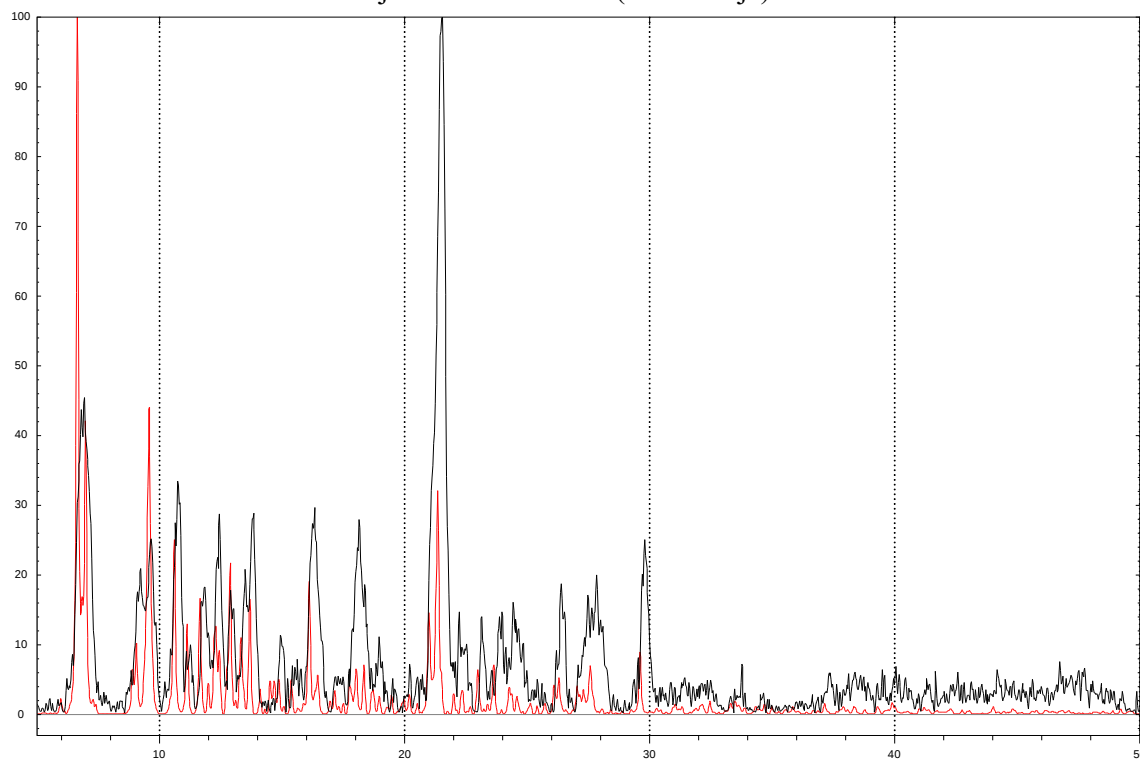
Slika D21. Usporedba difraktograma praha [VOL¹(phen)] (**27**) dobivenog sintezom (crna boja) s izračunatim difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu (crvena boja).



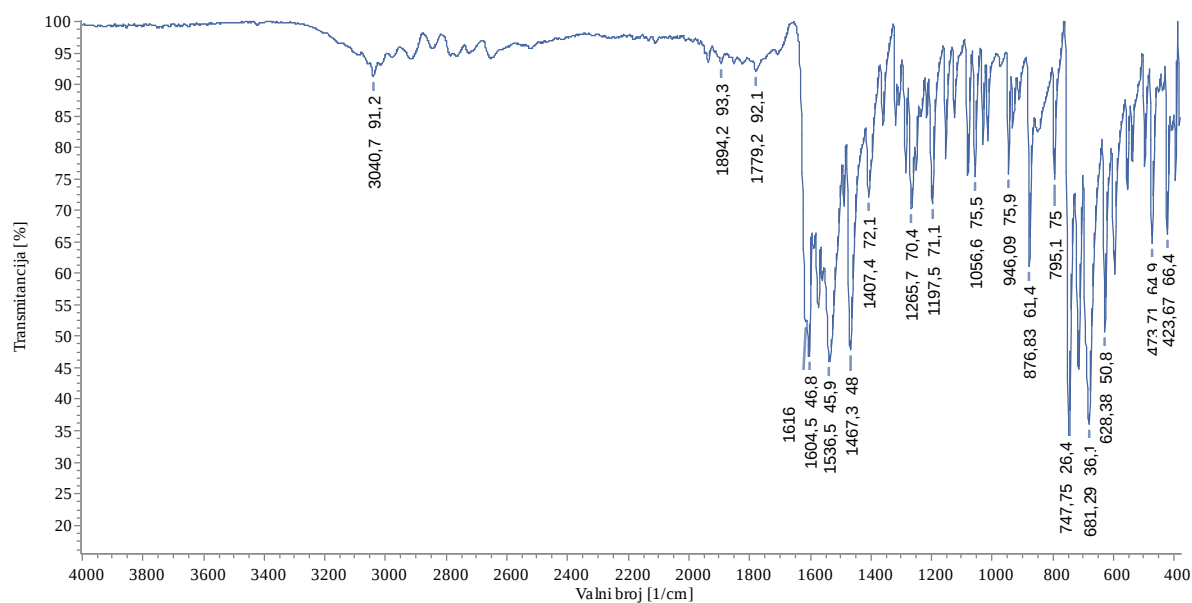
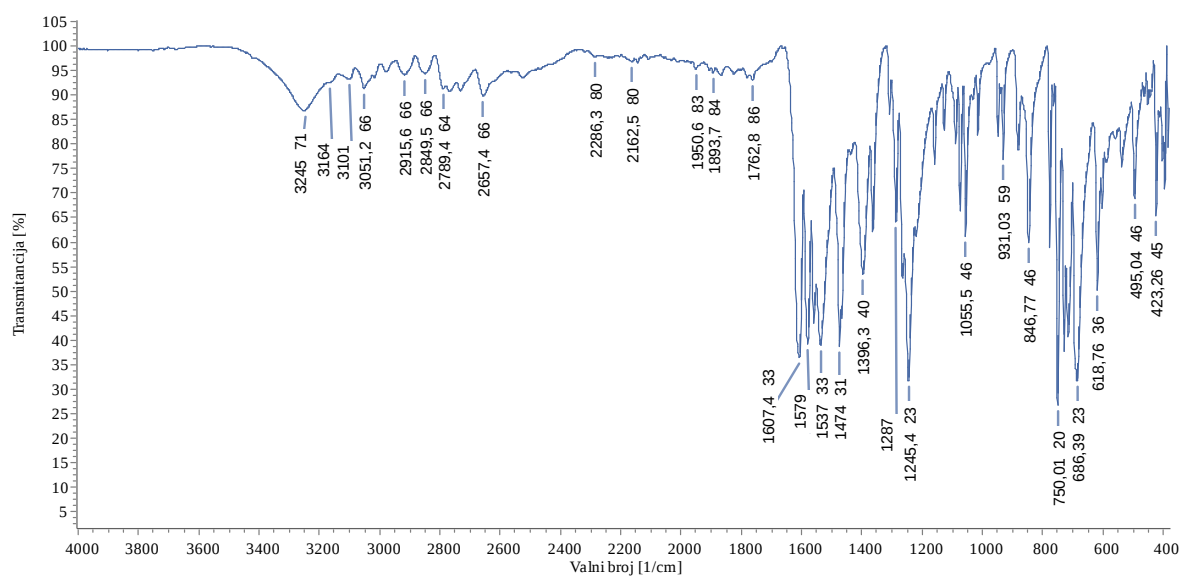
Slika D22. Usporedba difraktograma praha [VOL³(phen)] (**29**) dobivenog sintezom (crna boja) s izračunatim difraktograma praha na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu (crvena boja).

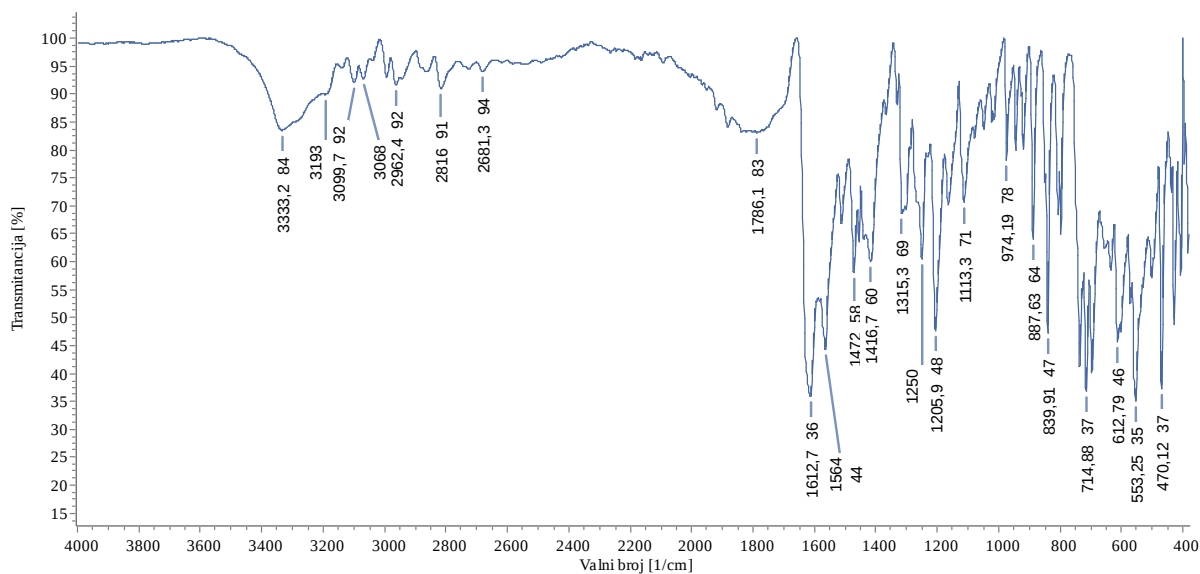
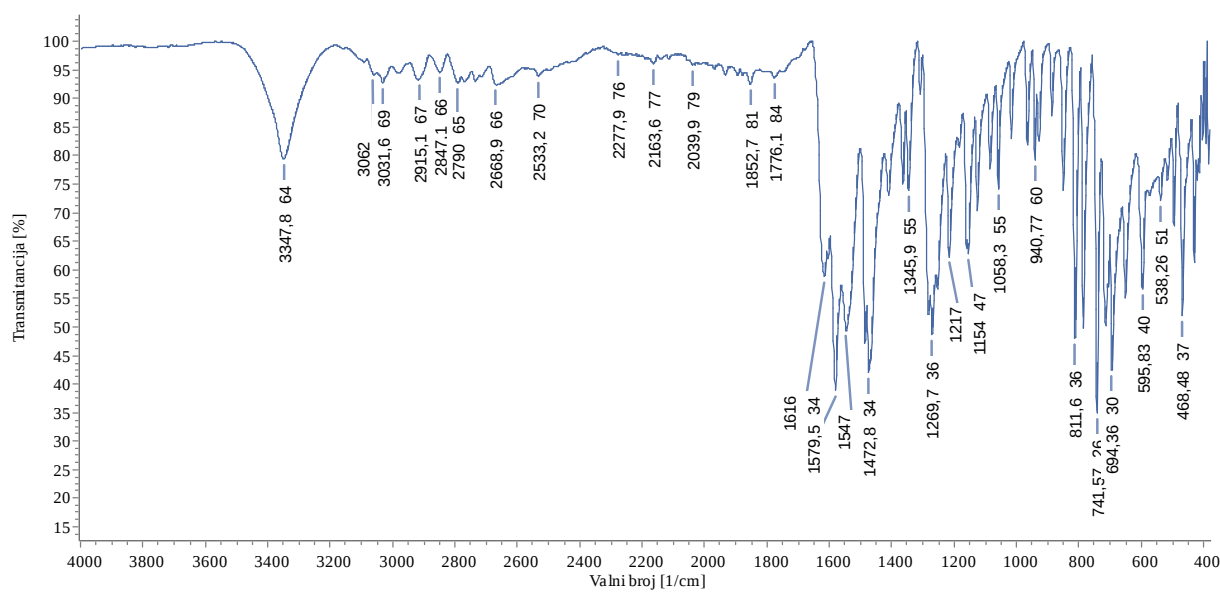


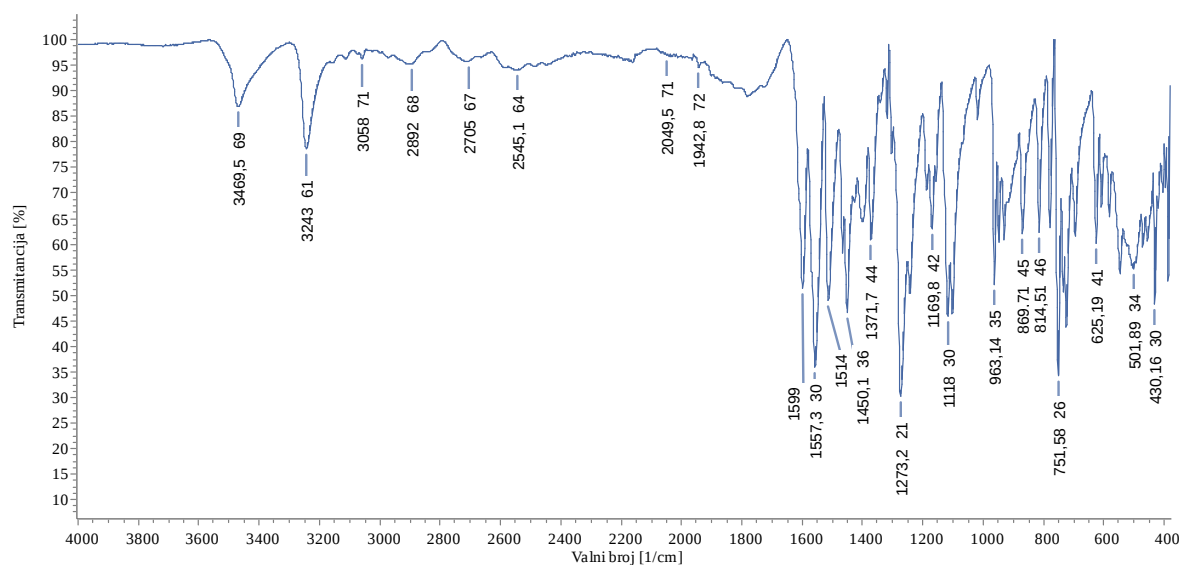
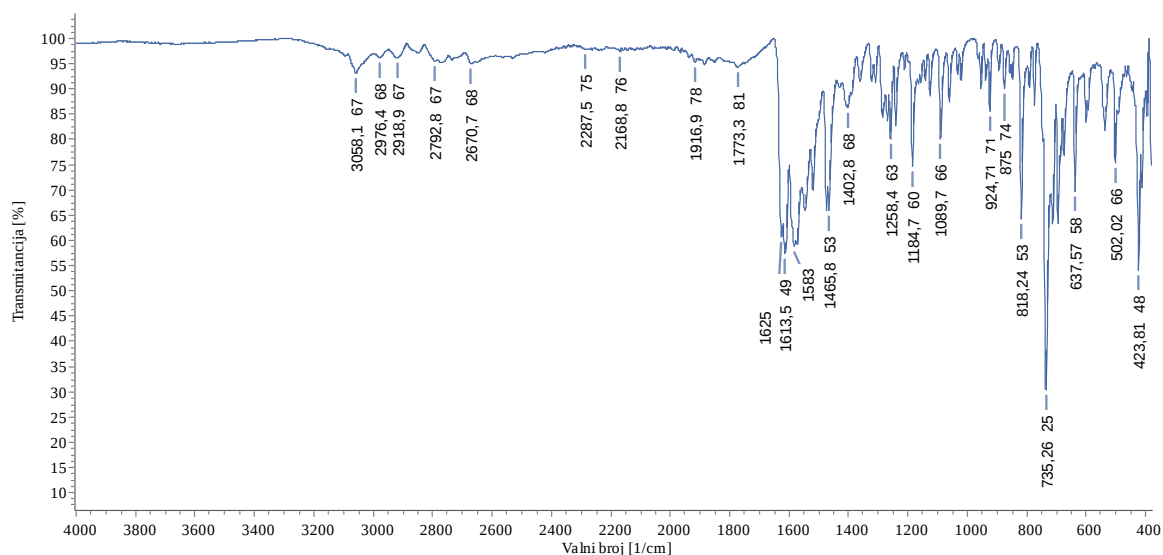
Slika D23. Usporedba difraktograma praša [VOL⁴(phen)] (**30**) dobivenog sintezom (crna boja) s izračunatim difraktograma praša na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu (crvena boja).

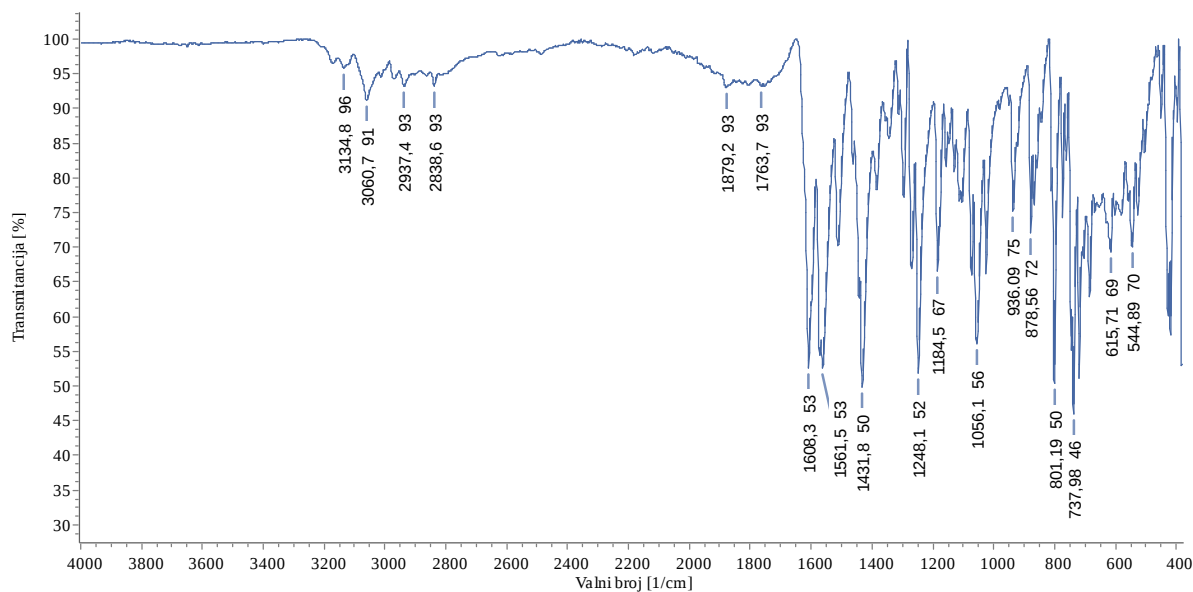
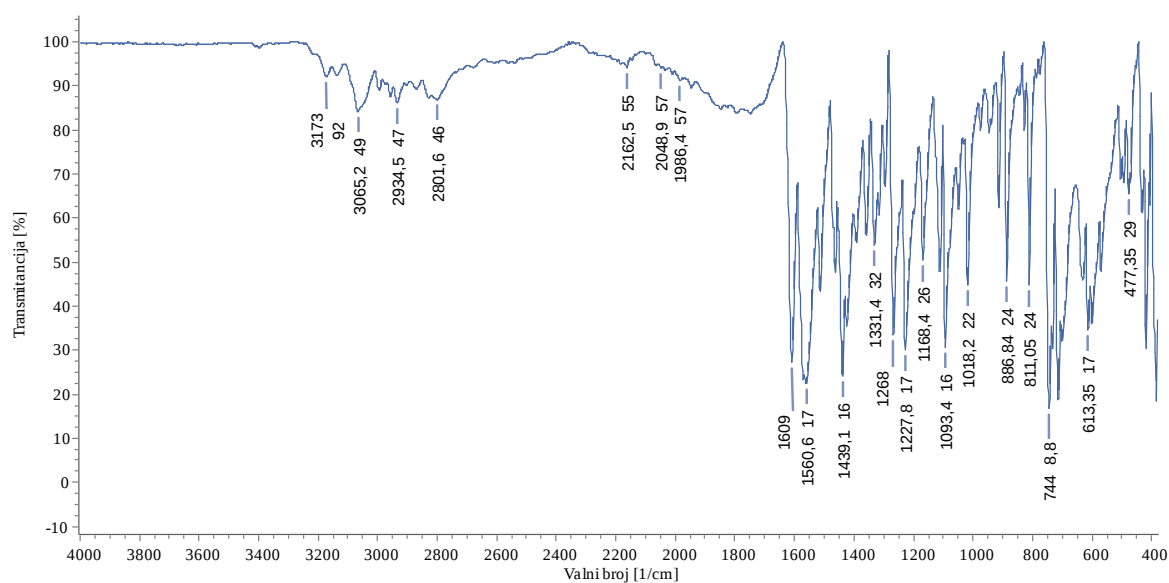


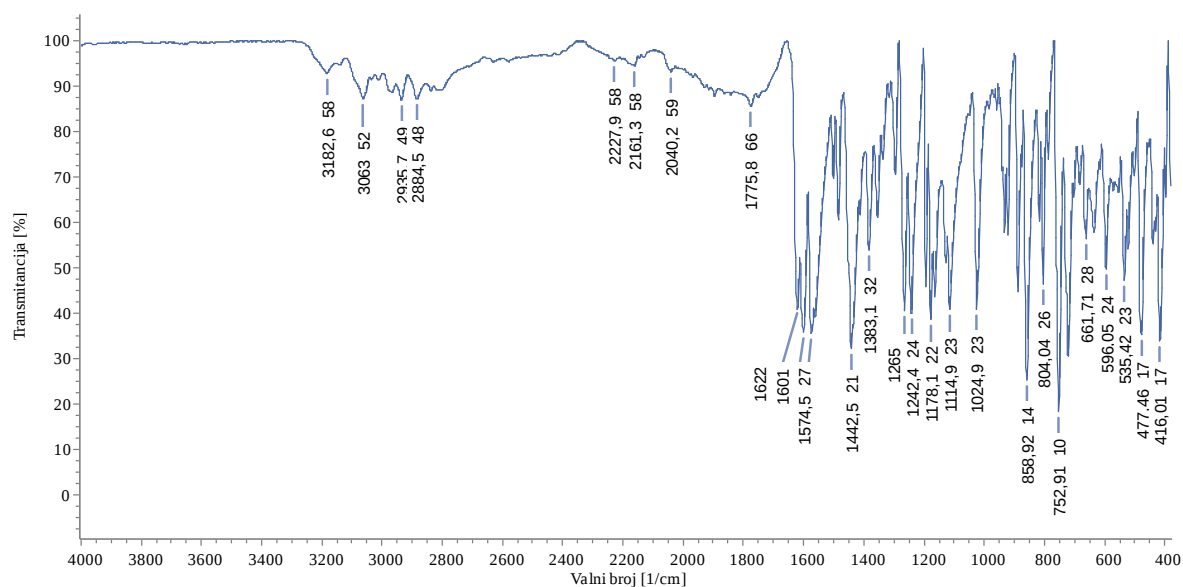
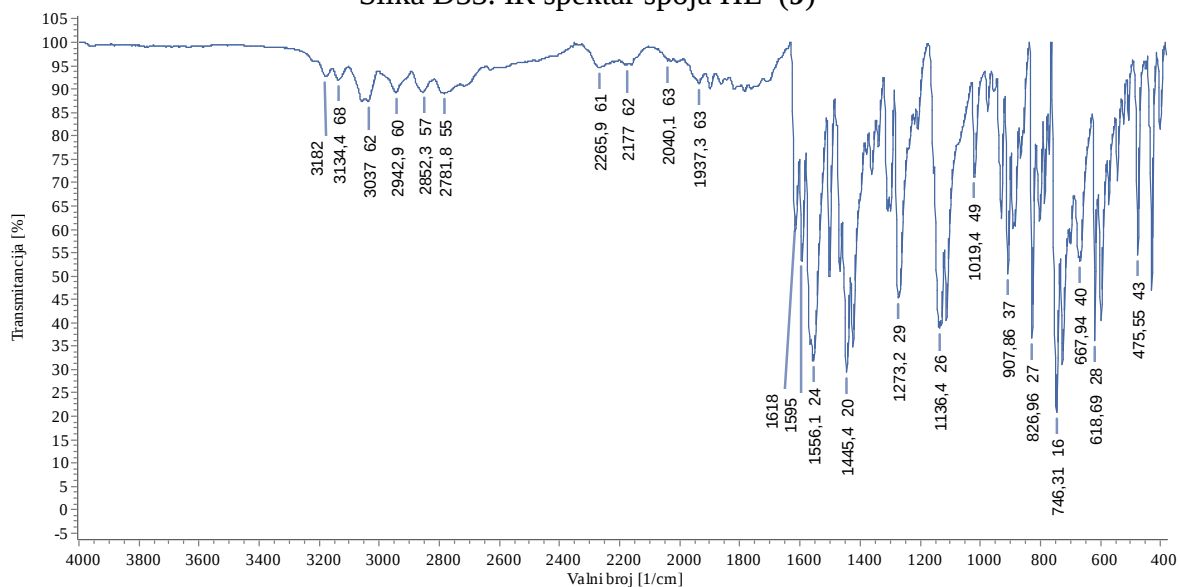
Slika D24. Usporedba difraktograma praša [VOL⁶(phen)] (**31**) dobivenog sintezom (crna boja) s izračunatim difraktograma praša na temelju strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu (crvena boja).

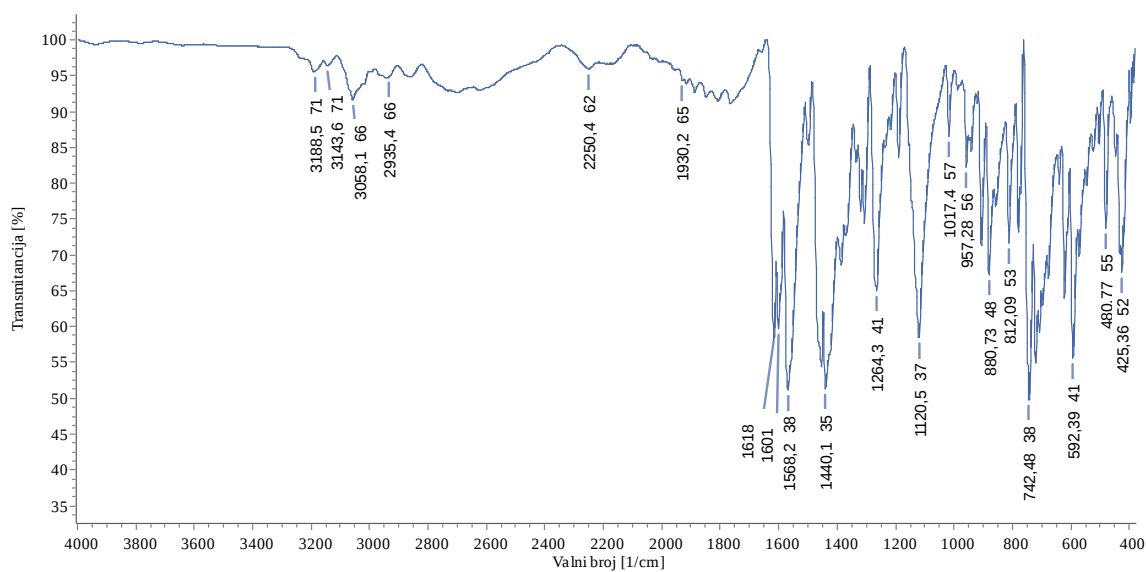
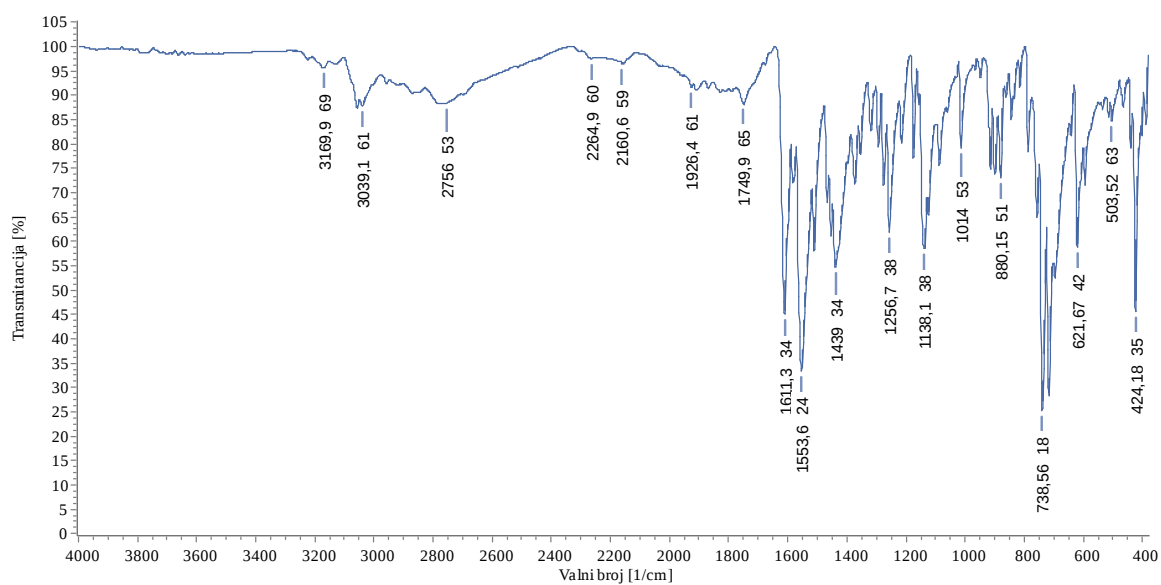
Slika D25. IR spektar spoja H_2L^1 (1)Slika D26. IR spektar spoja H_2L^2 (2)

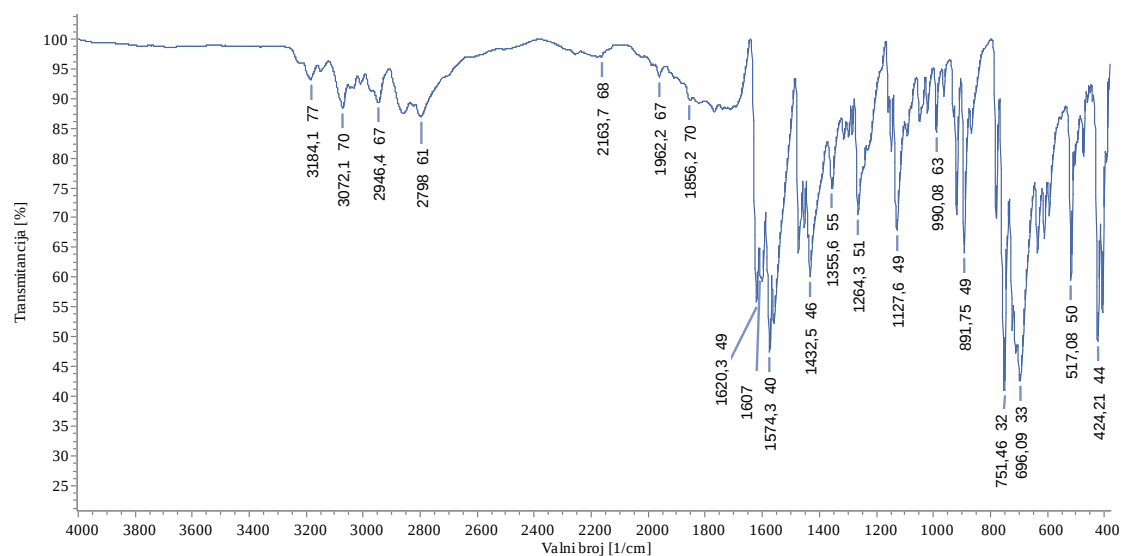
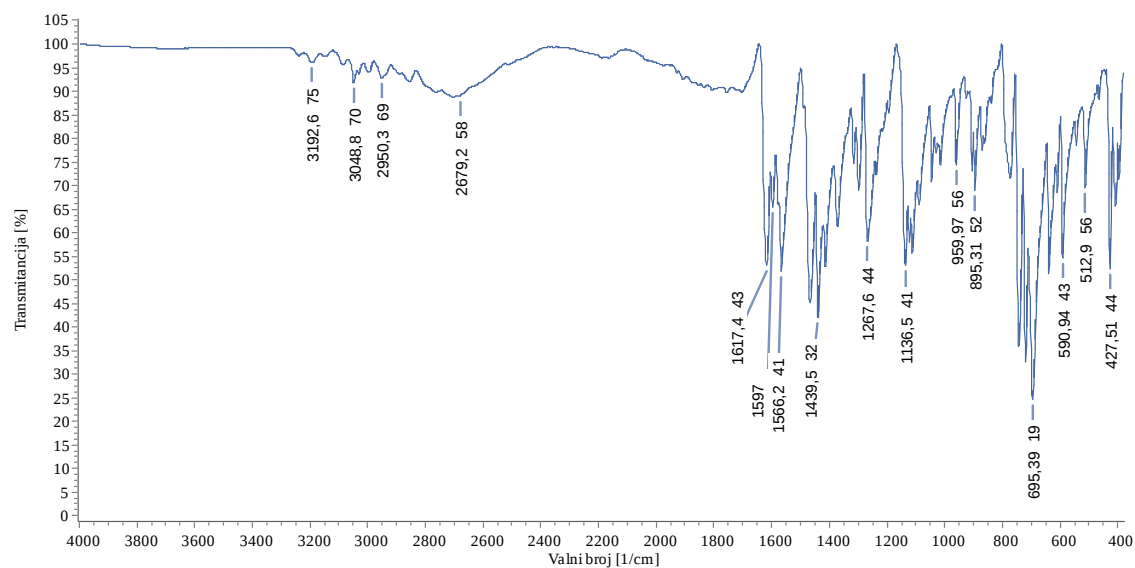
Slika D27. IR spektar spoja H_2L^3 (3)Slika D28. IR spektar spoja H_2L^4 (4)

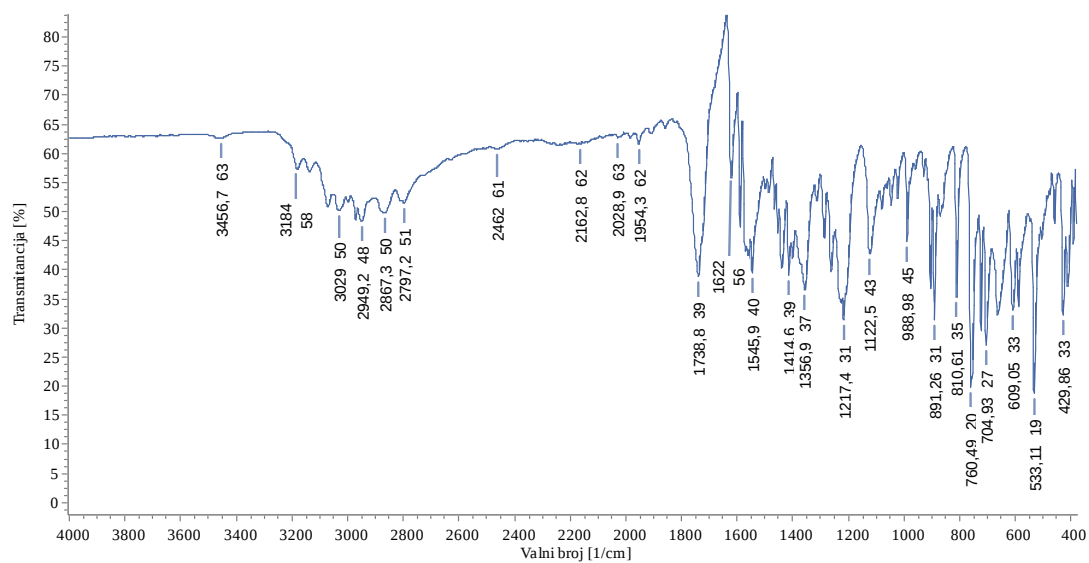
Slika D29. IR spektar spoja HL⁵ (5)Slika D30. IR spektar spoja H₂L⁶ (6)

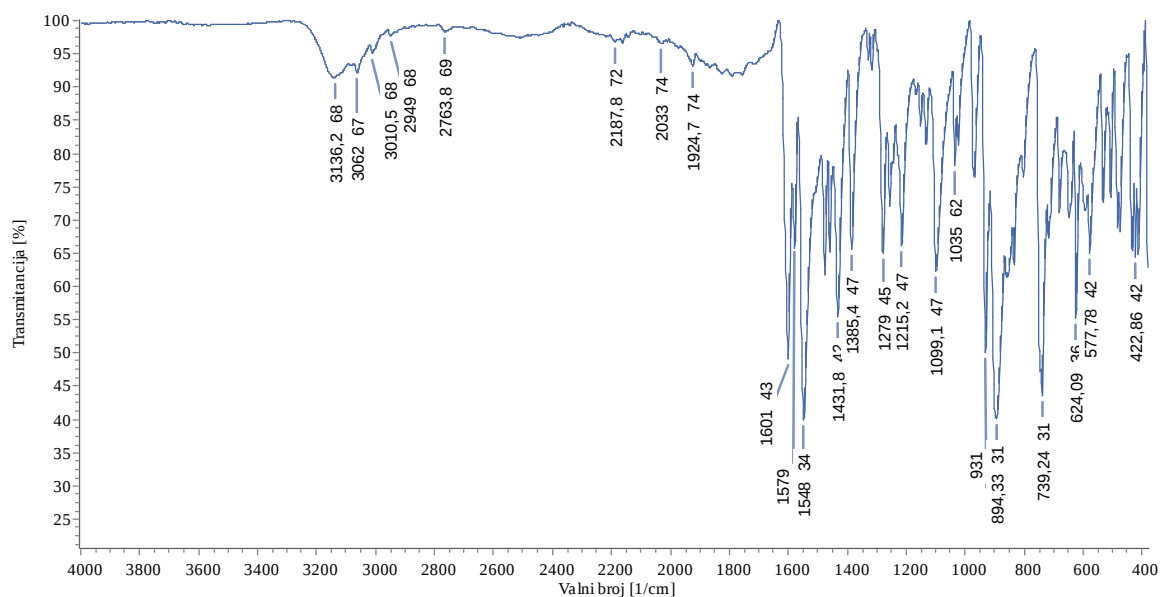
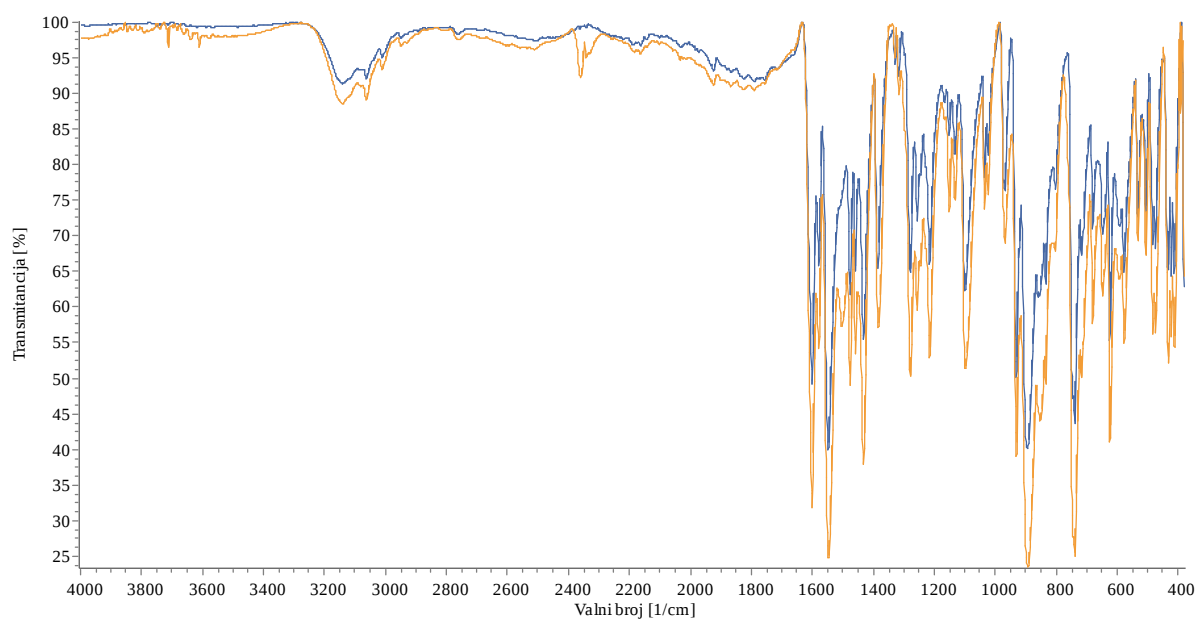
Slika D31. IR spektar spoja HL⁷ (7)Slika D32. IR spektar spoja HL⁸ (8)

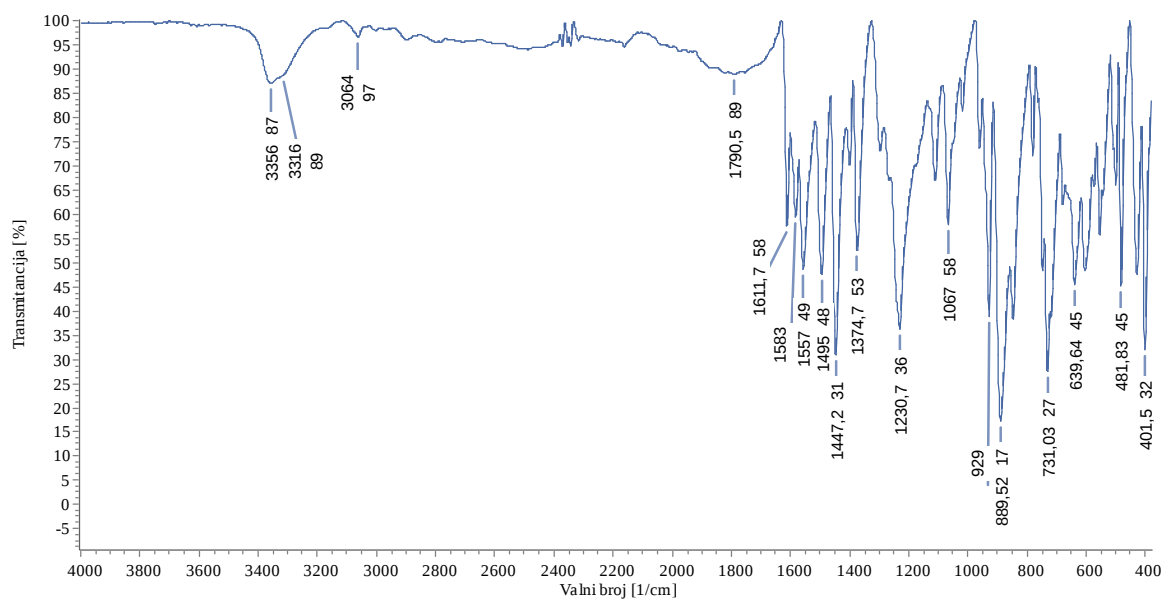
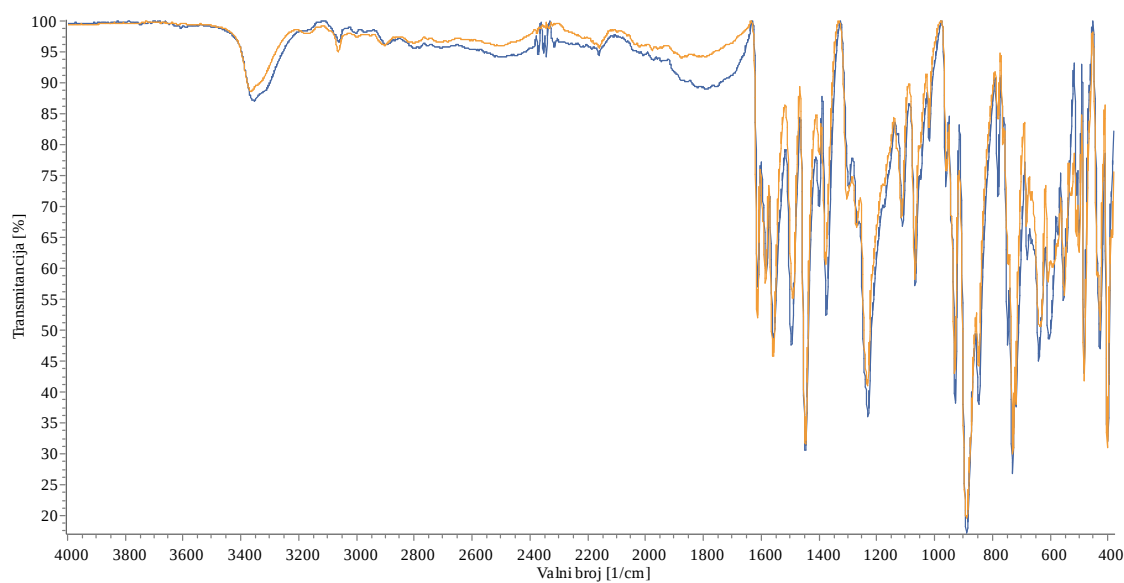
Slika D33. IR spektar spoja HL⁹ (9)Slika D34. IR spektar spoja HL¹⁰ (10)

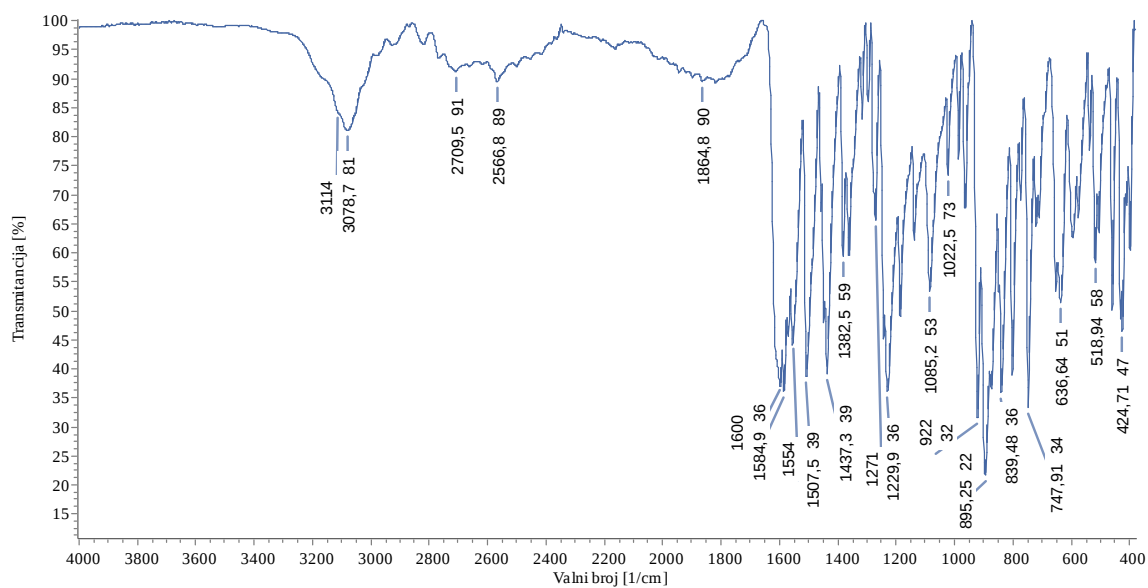
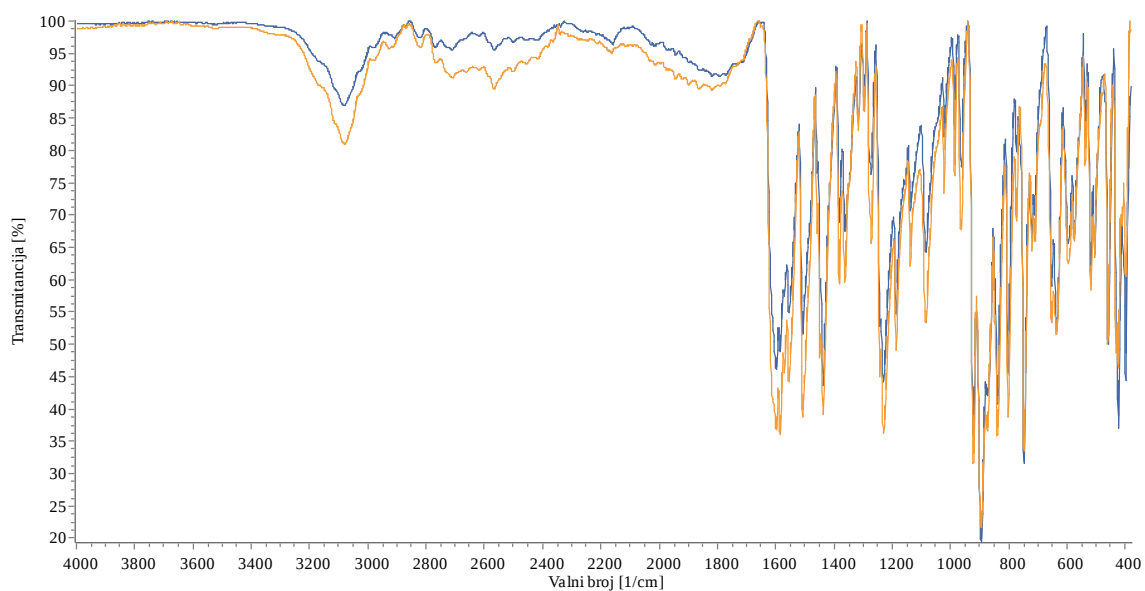
Slika D35. IR spektar spoja HL¹¹ (11)Slika D36. IR spektar spoja HL¹² (12)

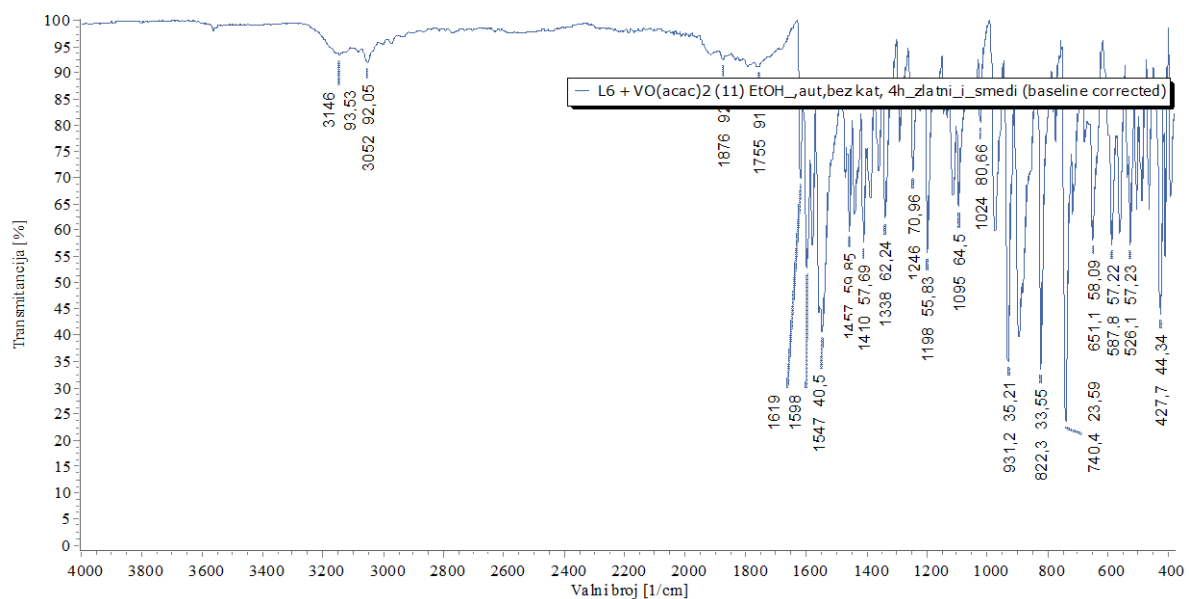
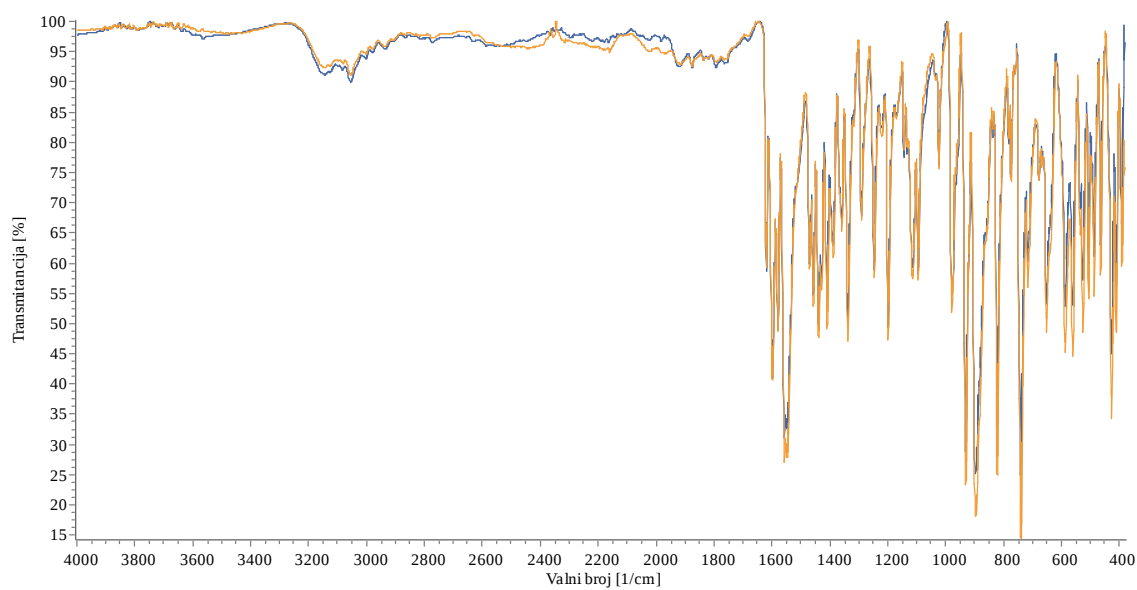
Slika D37. IR spektar spoja HL¹³ (13)Slika D38. IR spektar spoja HL¹⁴ (14)

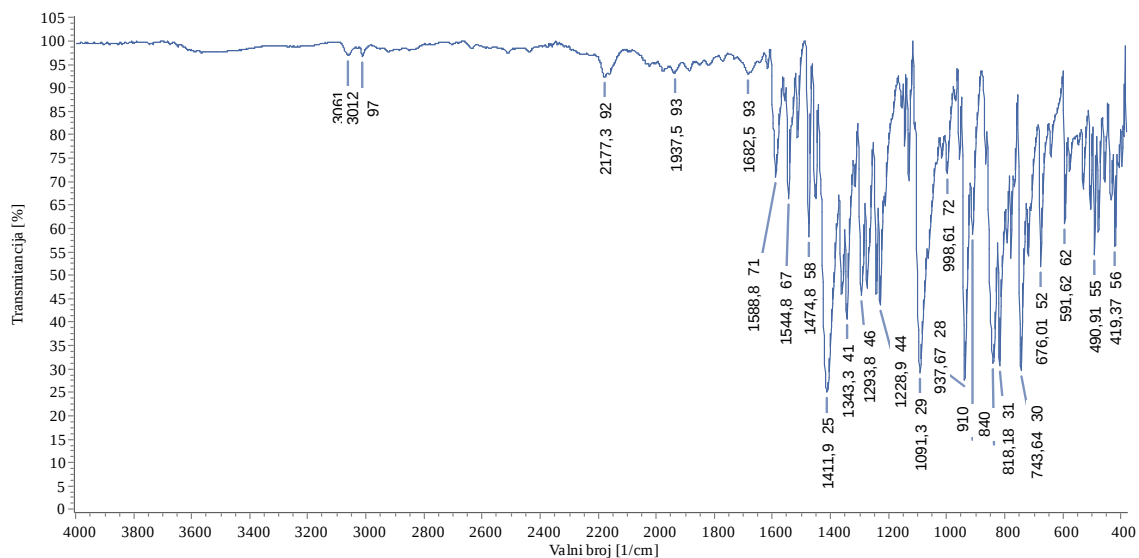
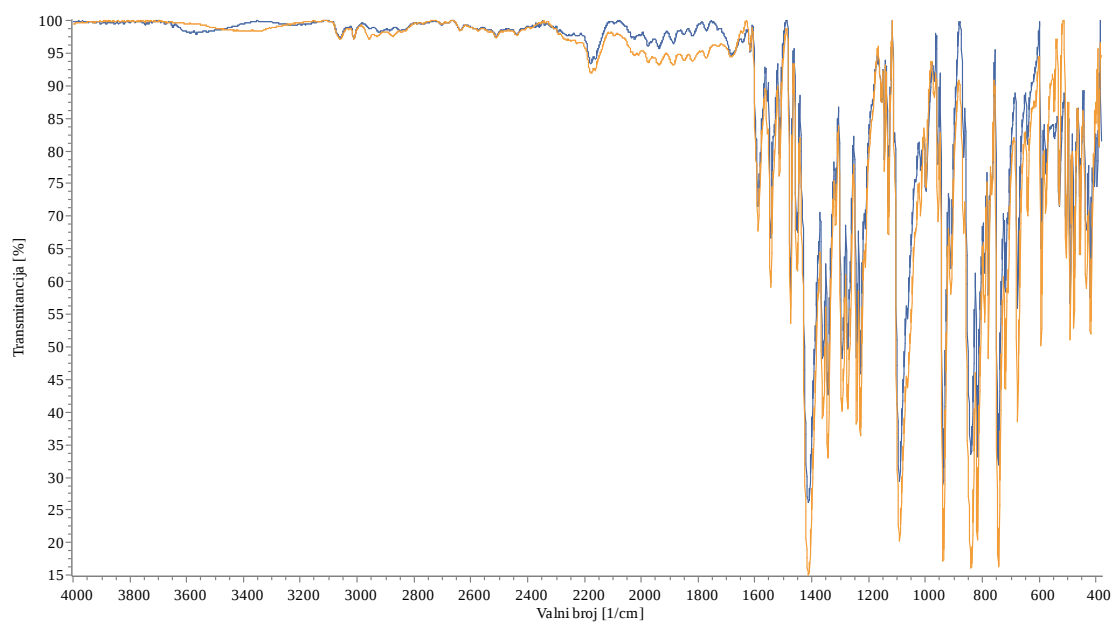
Slika D39. IR spektar spoja HL¹⁵ (15)

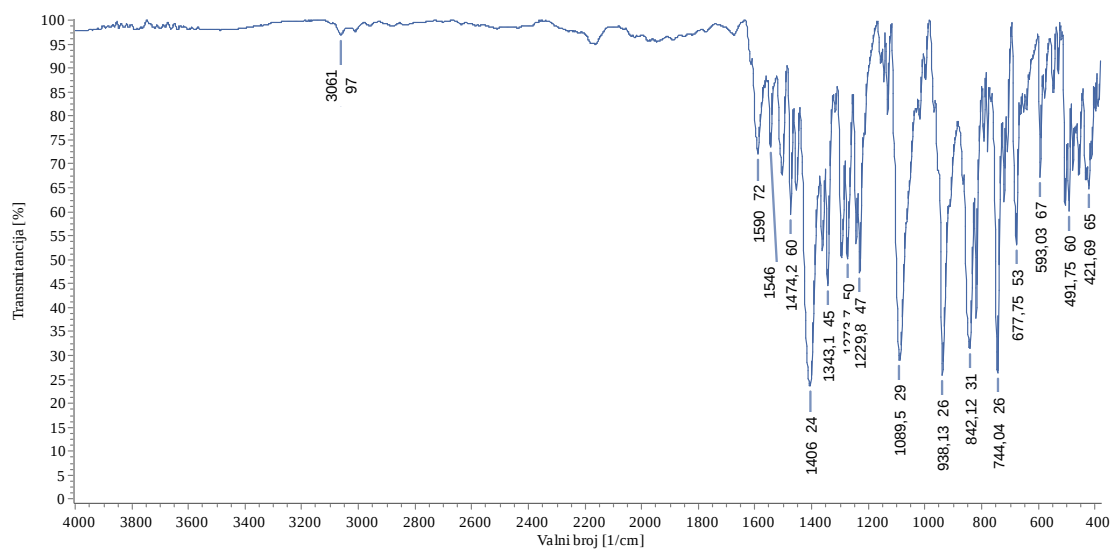
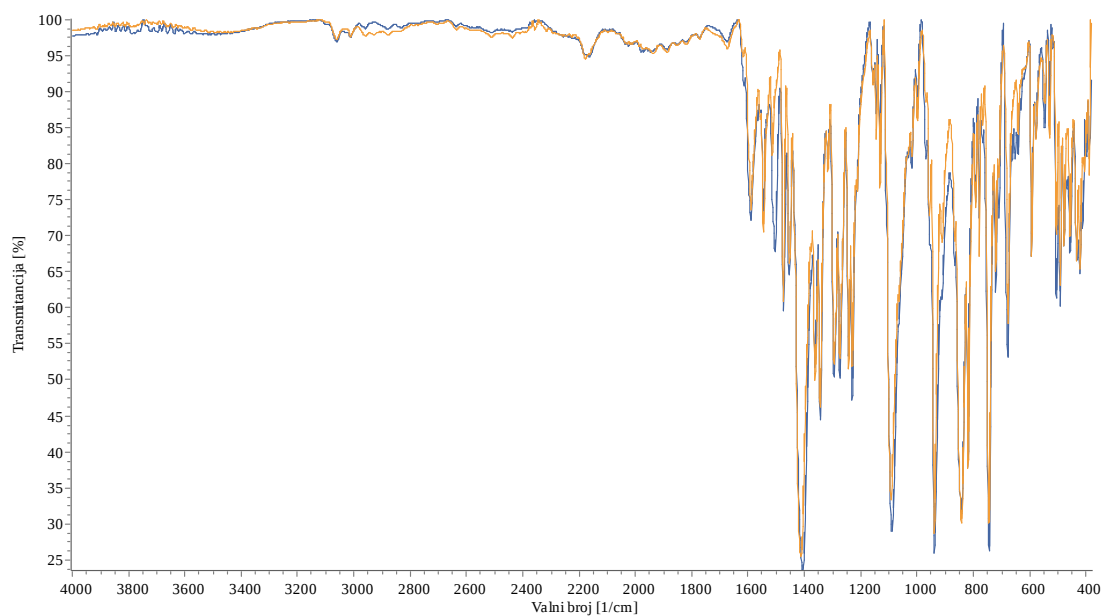
Slika D40. IR spektar spoja [VO₂HL¹] (16)Slika D41. Preklopljeni IR spektri spoja [VO₂HL¹] (16) dobivenog polazeći iz [VO(acac)₂] (plavo) i VOSO₄ · 5H₂O (oker)

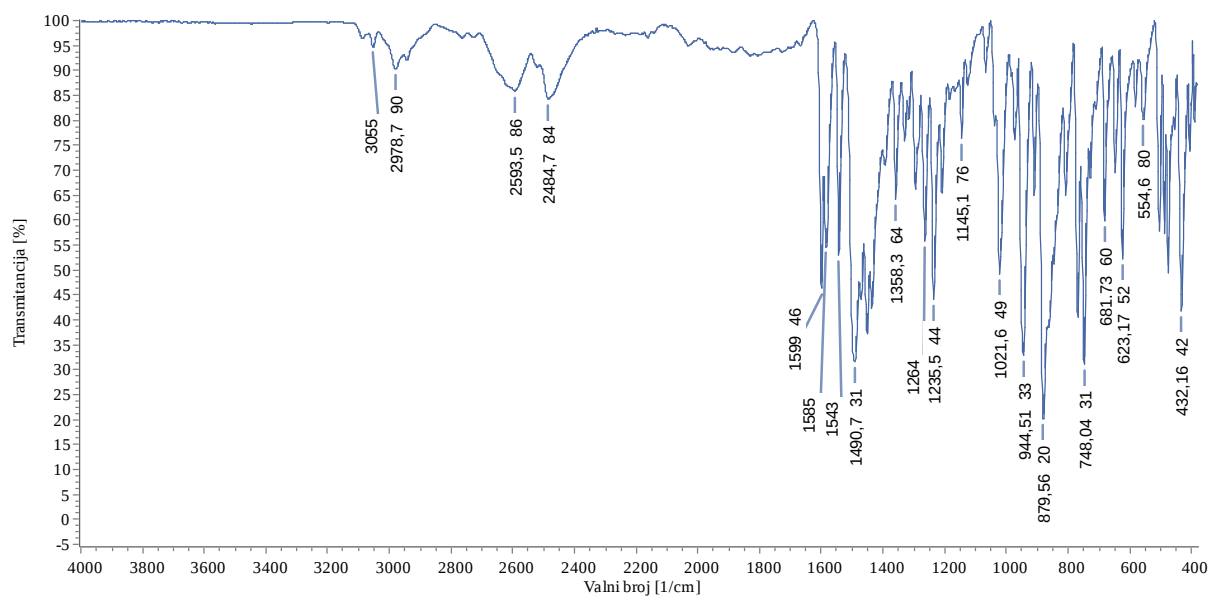
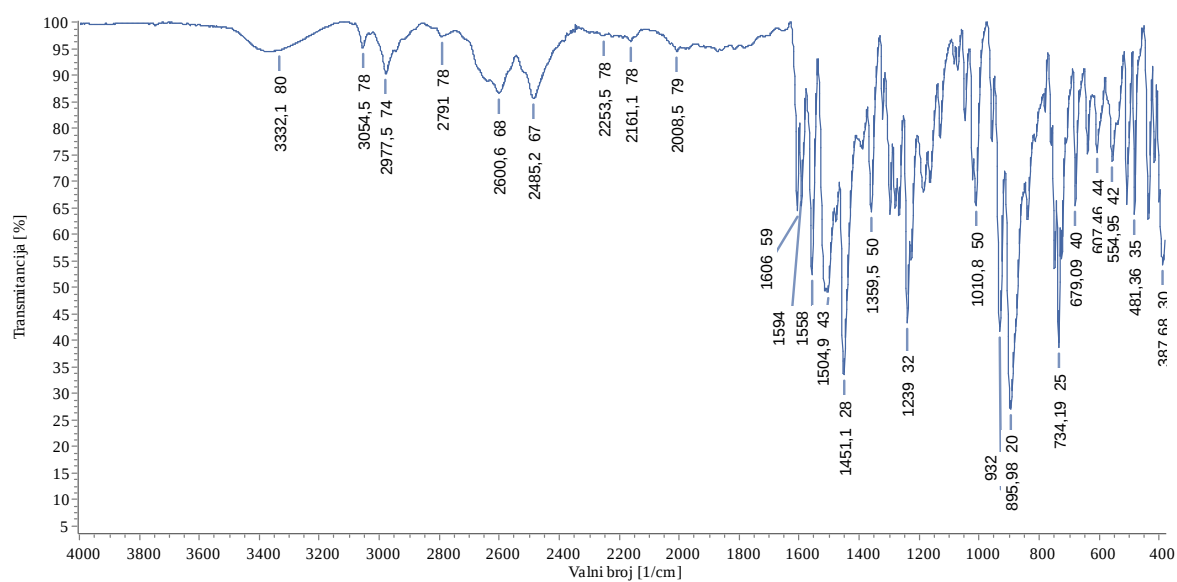
Slika D42. IR spektar spoja [VO₂HL²] (17)Slika D43. Preklopljeni IR spektri spoja [VO₂HL²] (17) dobivenog polazeći iz [VO(acac)₂] (plavo) i VOSO₄ · 5H₂O (oker)

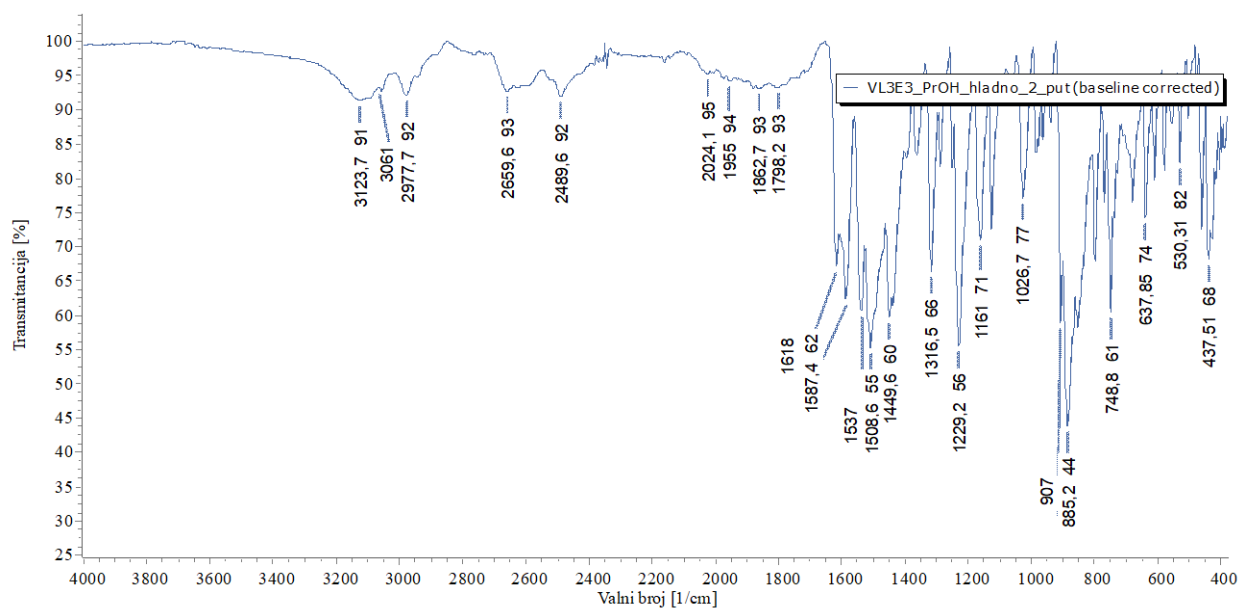
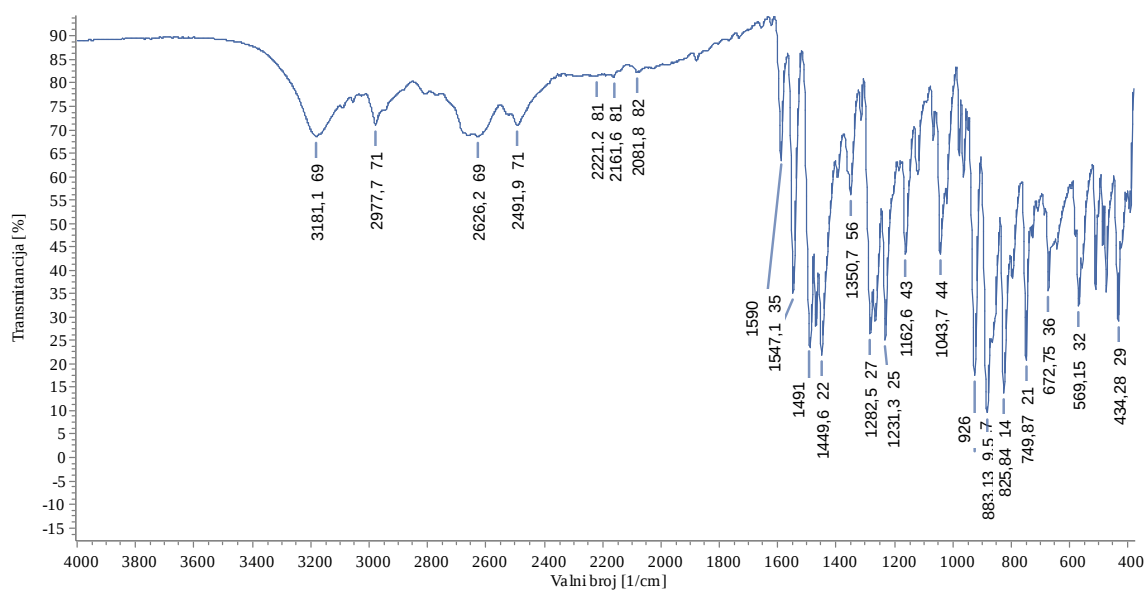
Slika D44. IR spektar spoja $[\text{VO}_2\text{HL}^3]$ (18)Slika D45. Preklopljeni IR spektri spoja $[\text{VO}_2\text{HL}^3]$ (18) dobivenog polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (plavo) i $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (oker)

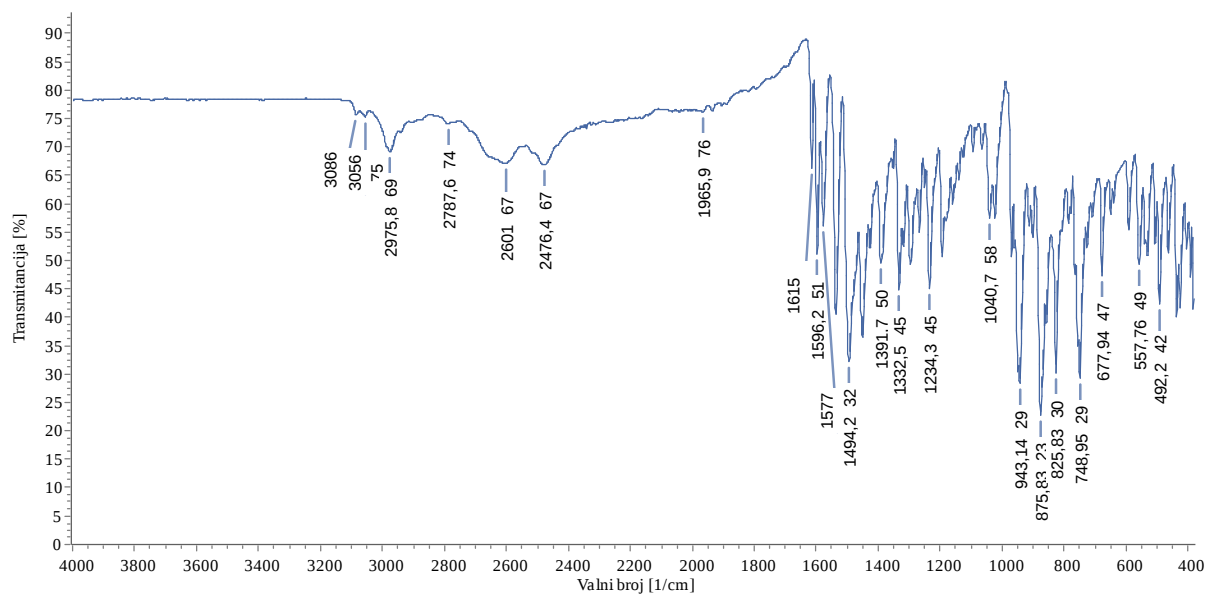
Slika D46. IR spektar spoja [VO₂HL⁶] (19)Slika D47. Preklopljeni IR spektri spoja [VO₂HL⁶] (19) dobivenog polazeći iz [VO(acac)₂] (plavo) i VOSO₄ · 5H₂O (oker)

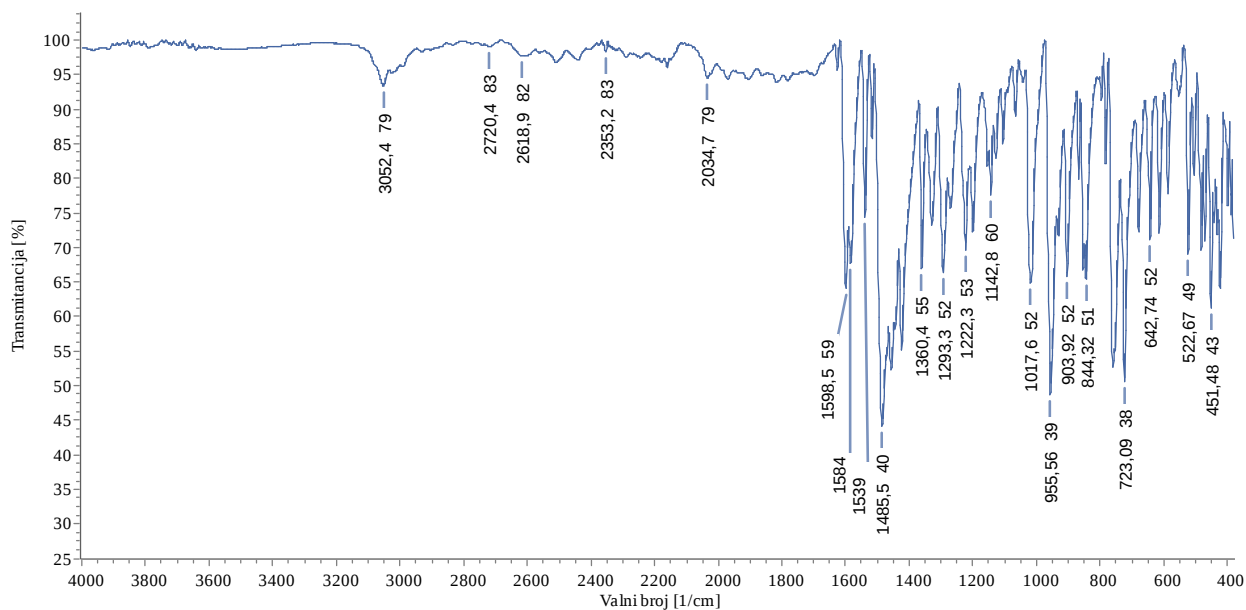
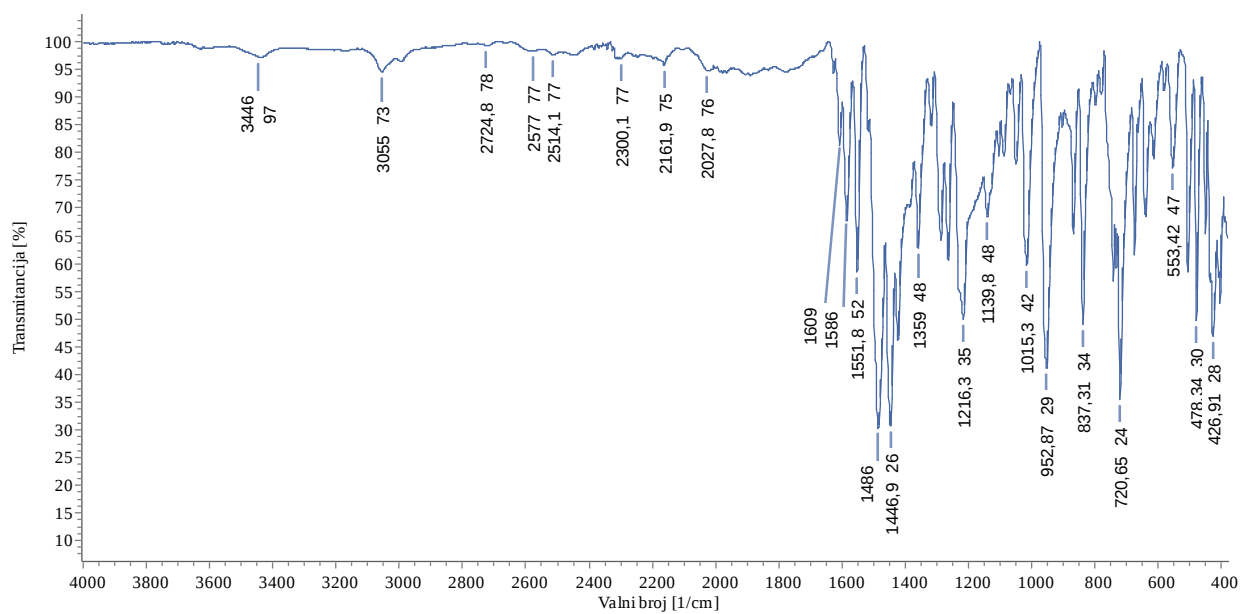
Slika D48. IR spektar spoja $[\text{VO}_2\text{L}^{10}]$ (20)Slika D49. Preklopljeni IR spektri spoja $[\text{VO}_2\text{L}^{10}]$ (20) dobivenog polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (plavo) i $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (oker)

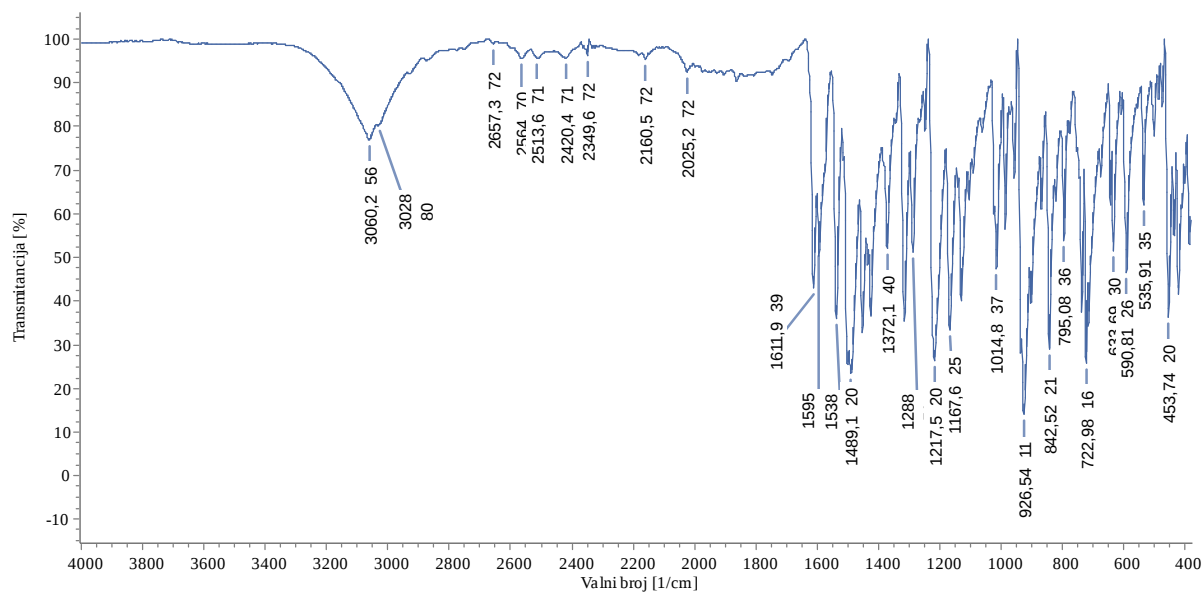
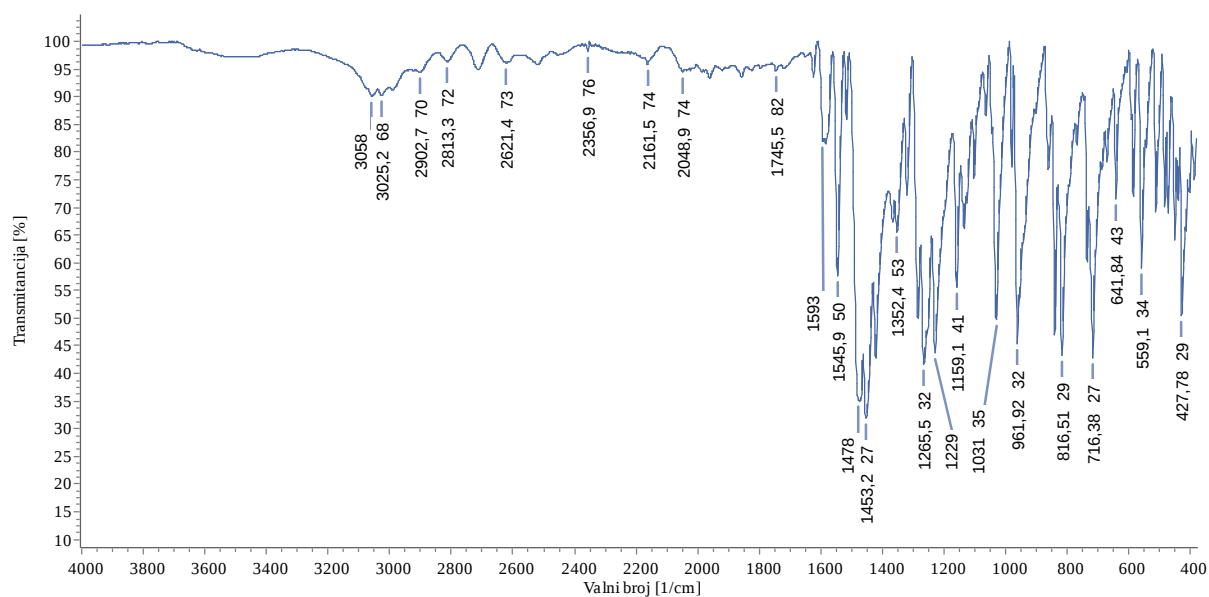
Slika D50. IR spektar spoja $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (21)Slika D51. Preklopljeni IR spektri spoja $[\text{VO}_2\text{L}^{13}]$ (21) dobivenog polazeći iz $[\text{VO}(\text{acac})_2]$ (plavo) i $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (oker)

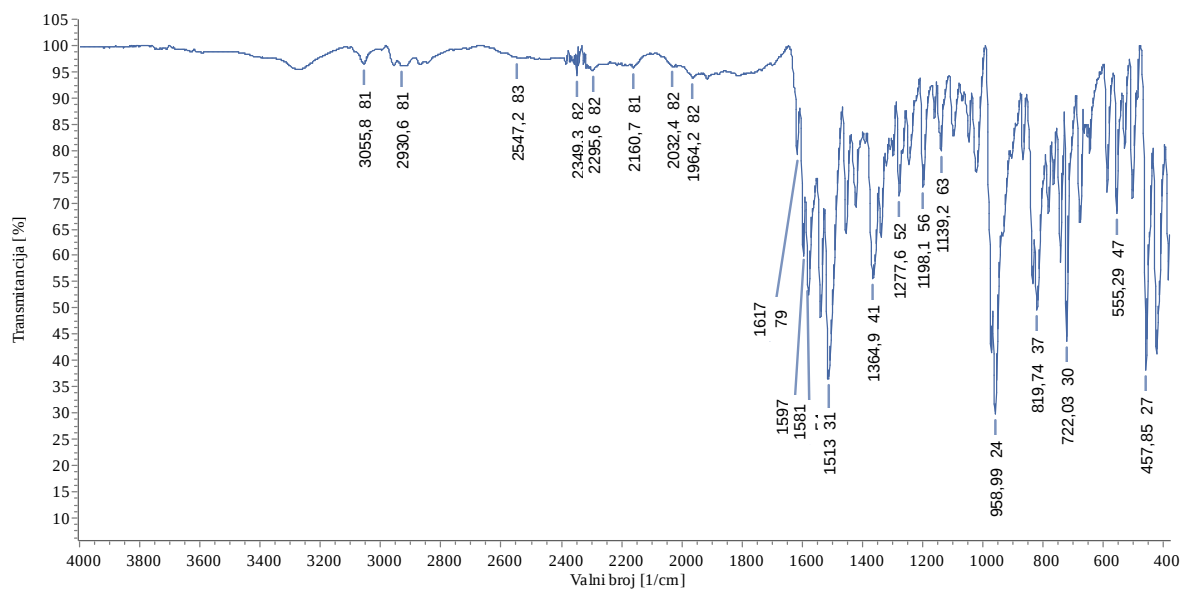
Slika D52. IR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^1]$ (22)Slika D53. IR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^2]$ (23)

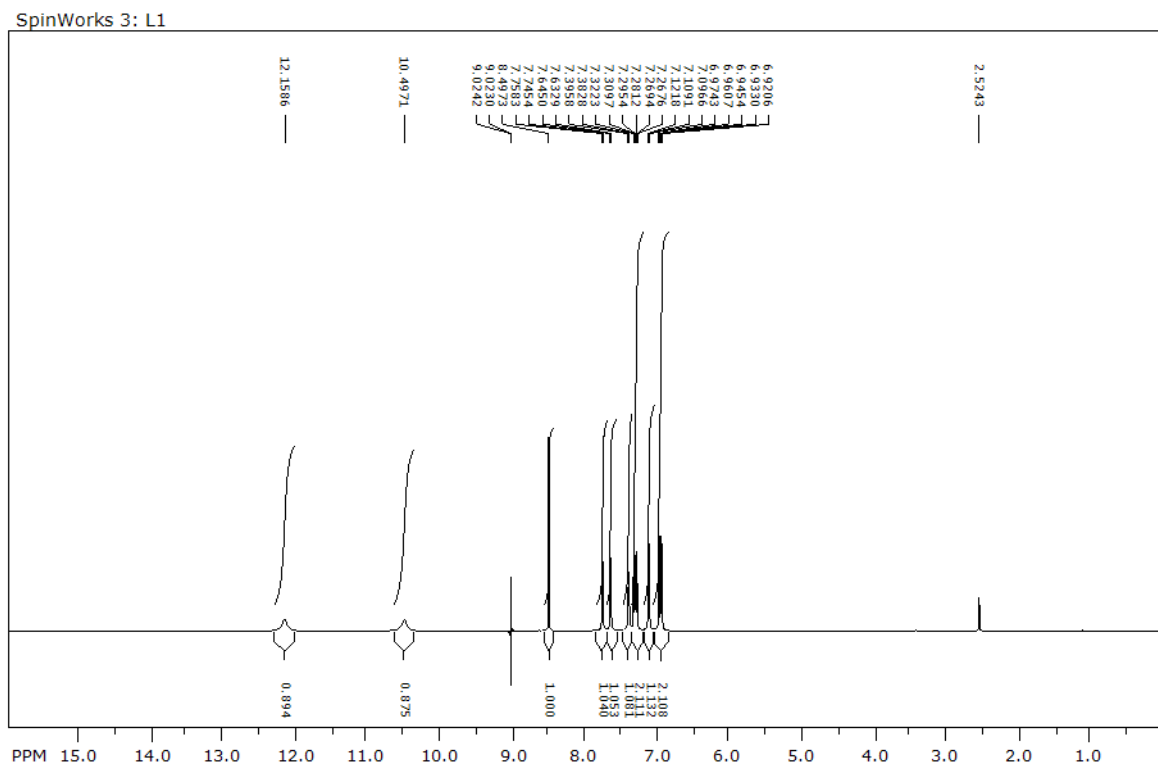
Slika D54. IR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^3]$ (24)Slika D55. IR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^4]$ (25)

Slika D56. IR spektar $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^6]$ (26)

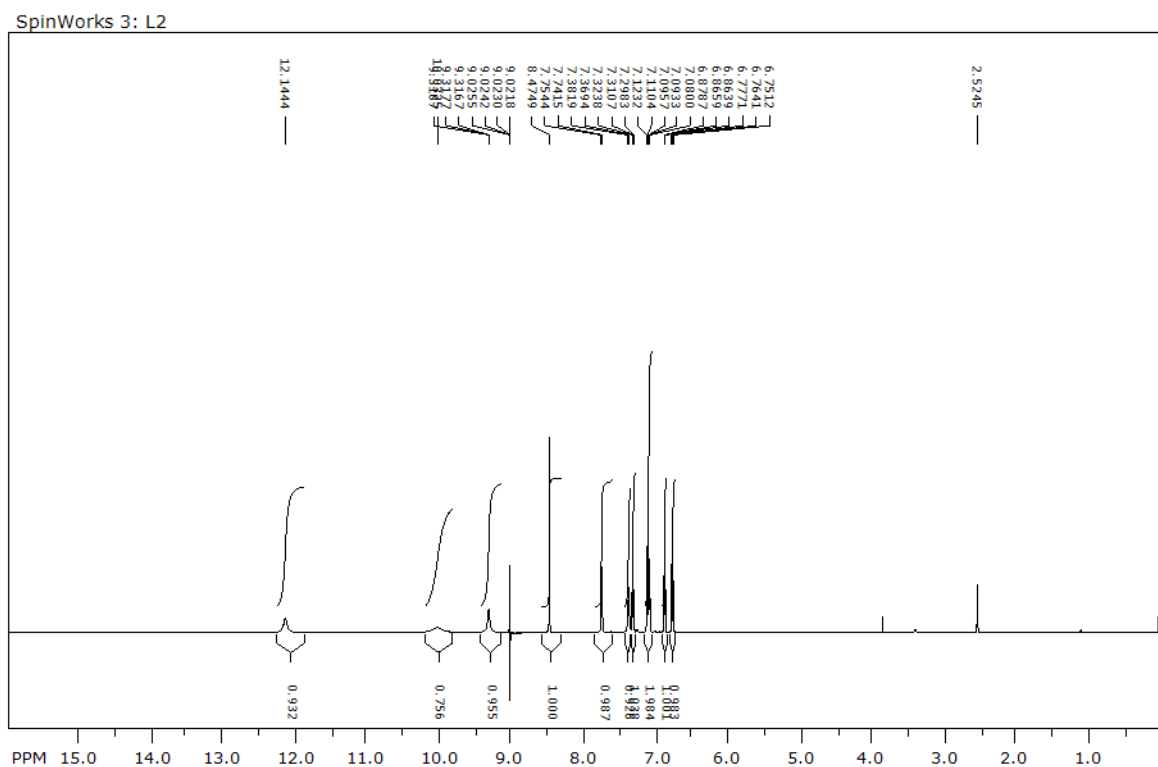
Slika D57. IR spektar spoja [VOL¹(phen)] (27)Slika D58. IR spektar spoja [VOL²(phen)] (22)

Slika D59. IR spektar spoja [VOL³(phen)] (29)Slika D60. IR spektar spoja [VOL⁴(phen)] (30)

Slika D61. IR spektar spoja [VOL⁶(phen)] (31)

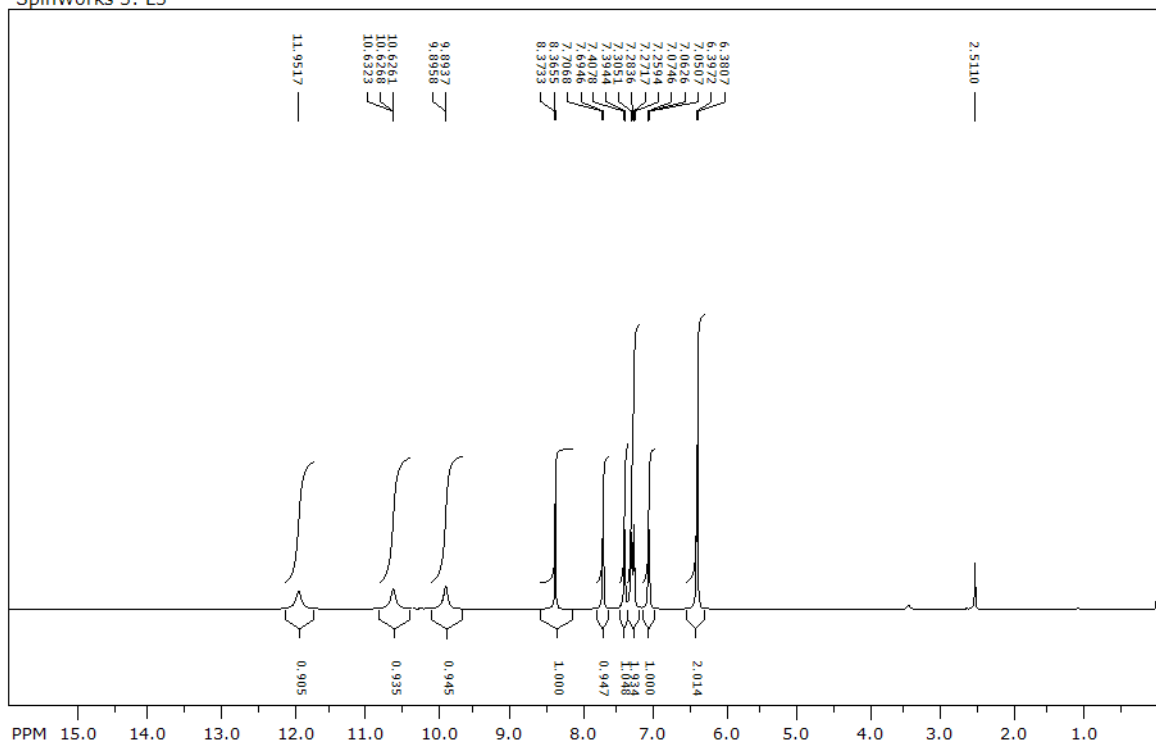


Slika D62. ^1H NMR spektar spoja H_2L^1 (**1**)

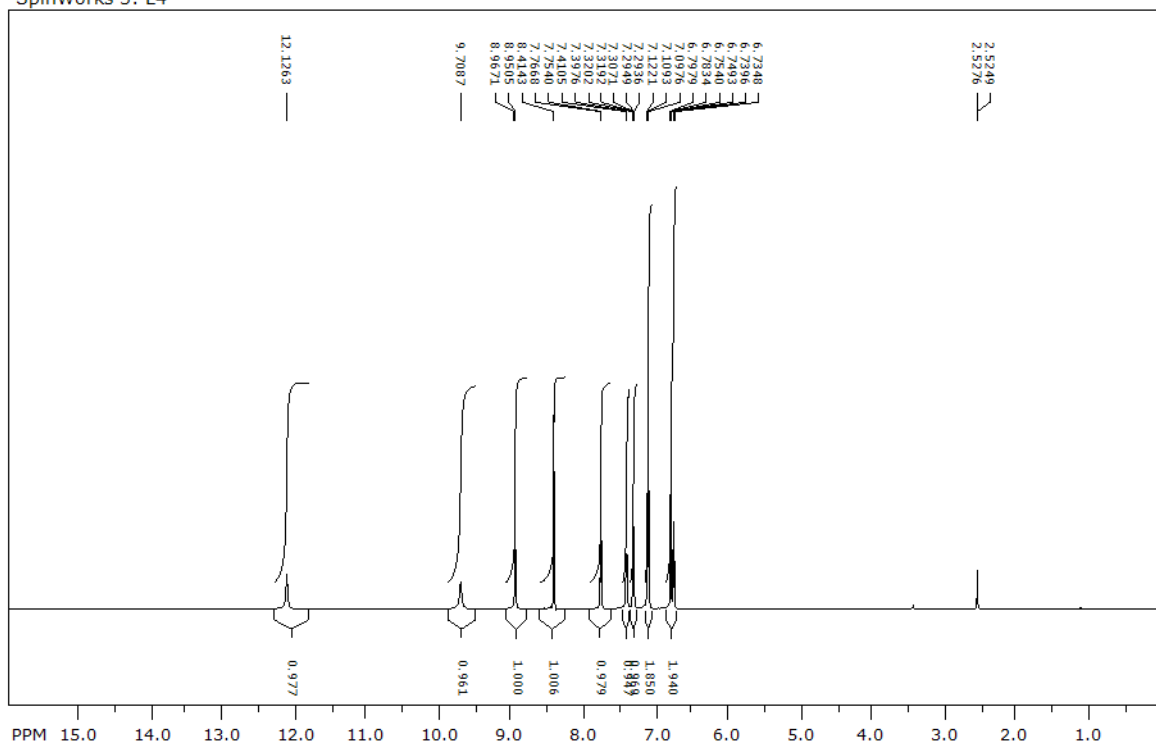


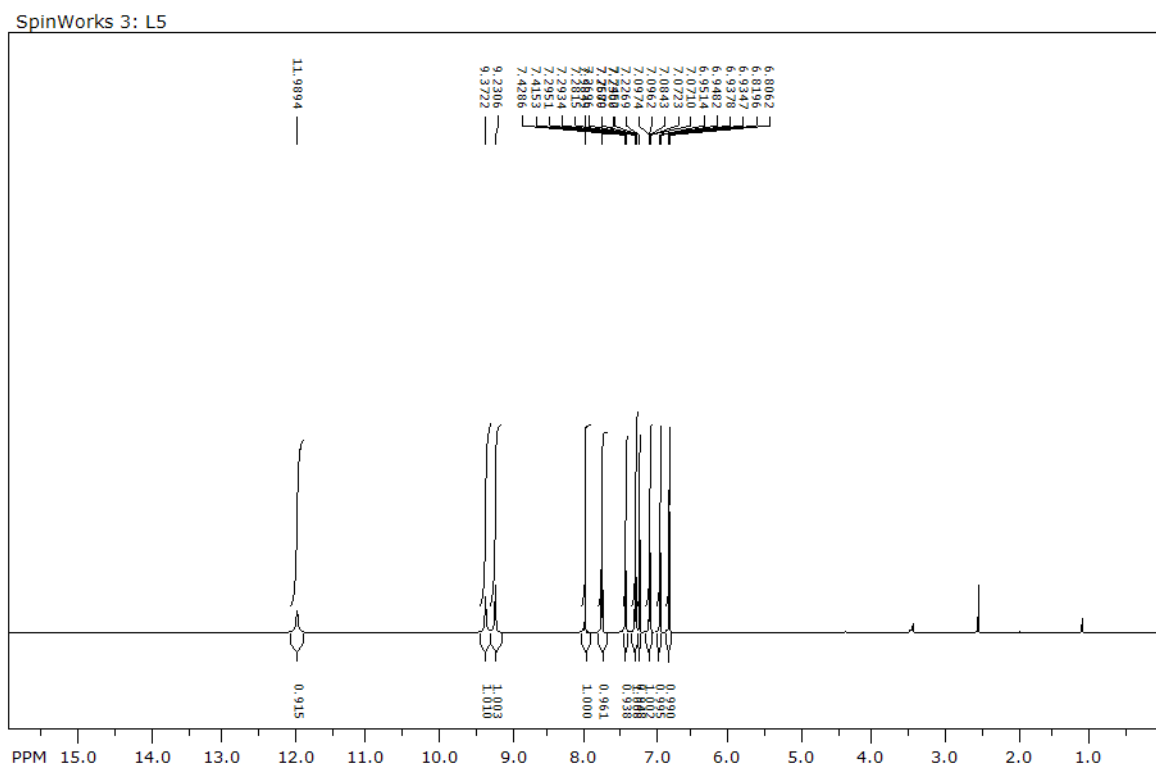
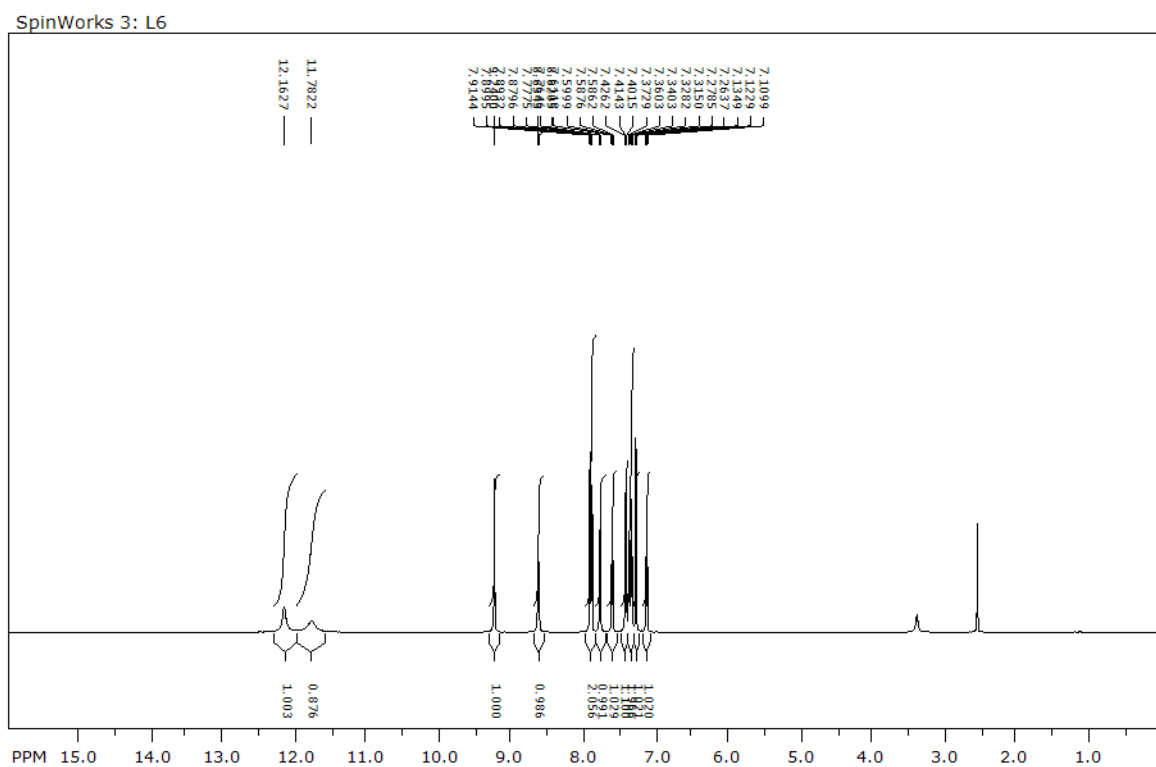
Slika D63. ^1H NMR spektar spoja H_2L^2 (2)

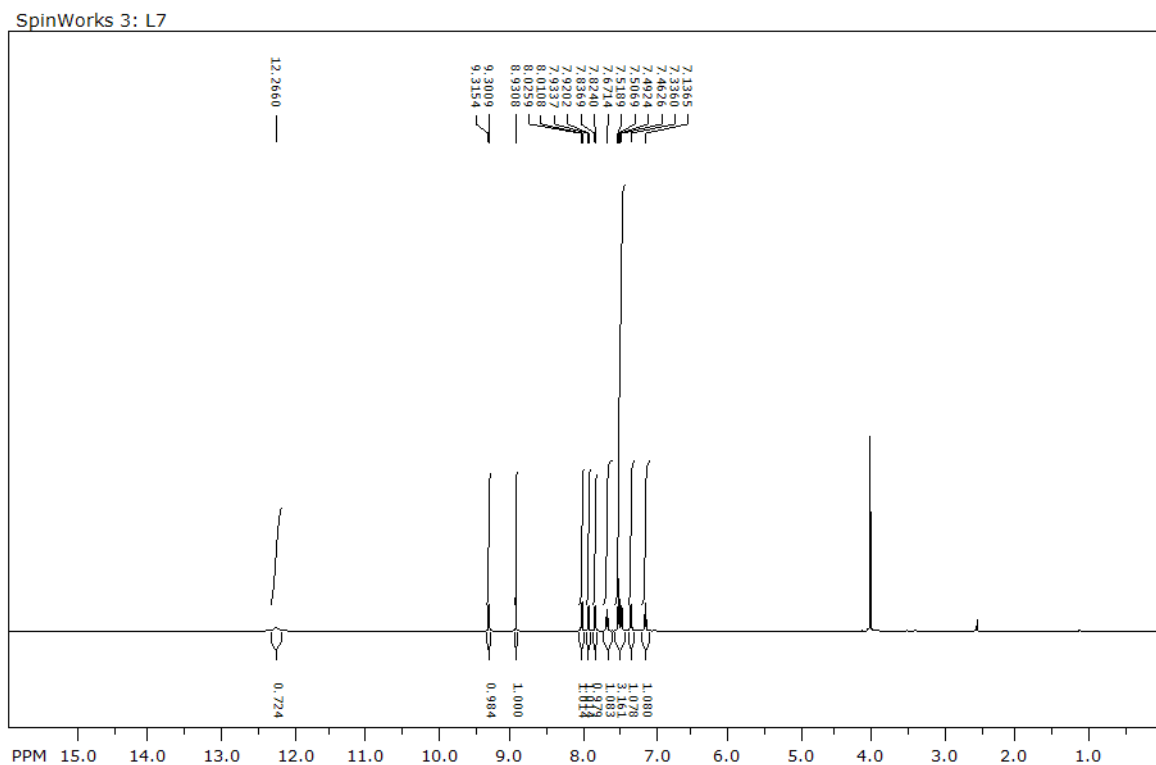
SpinWorks 3: L3

Slika D64. ^1H NMR spektar spoja H_2L^3 (3)

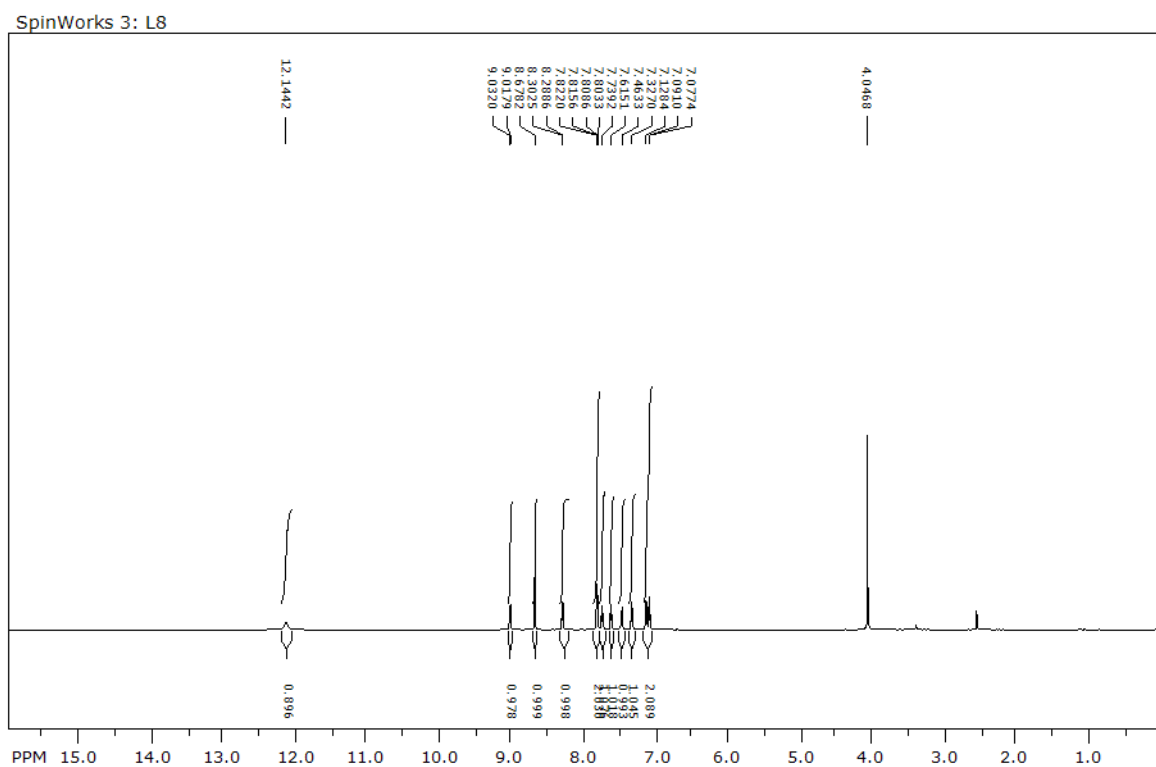
SpinWorks 3: L4

Slika D65. ^1H NMR spektar spoja H_2L^4 (4)

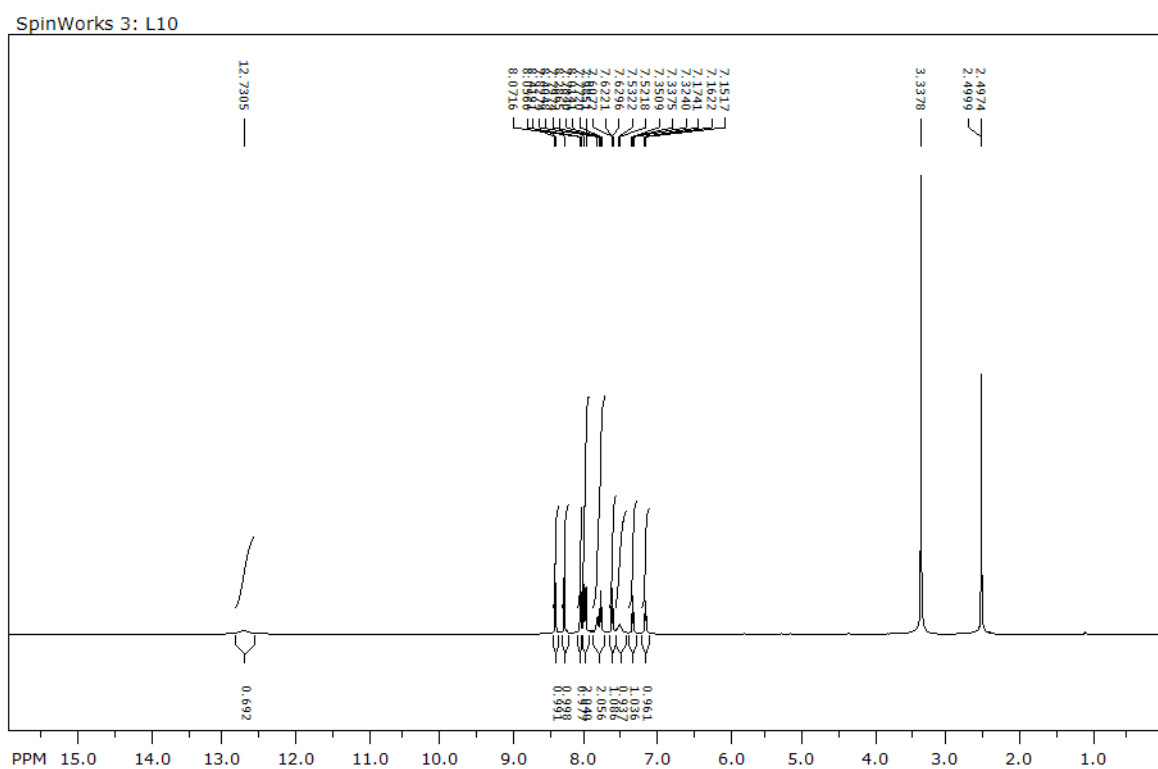
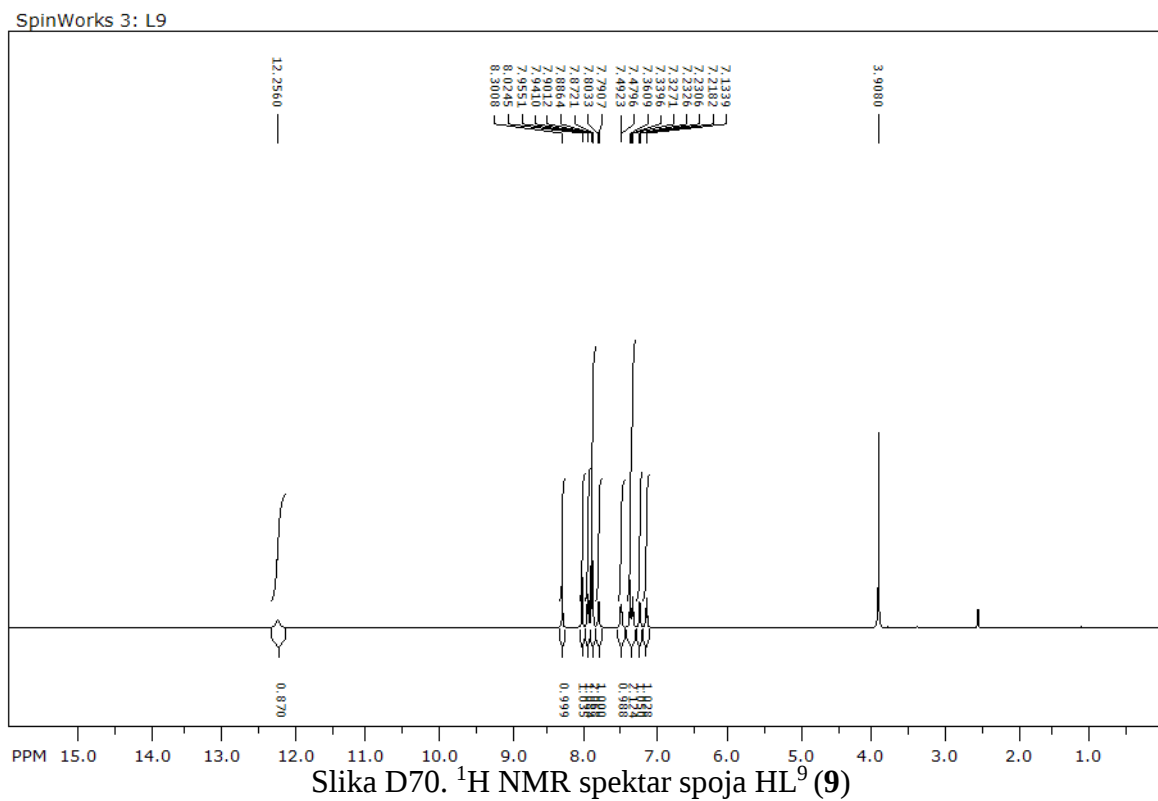
Slika D66. ^1H NMR spektar spoja HL^5 (5)Slika D67. ^1H NMR spektar spoja H_2L^6 (6)

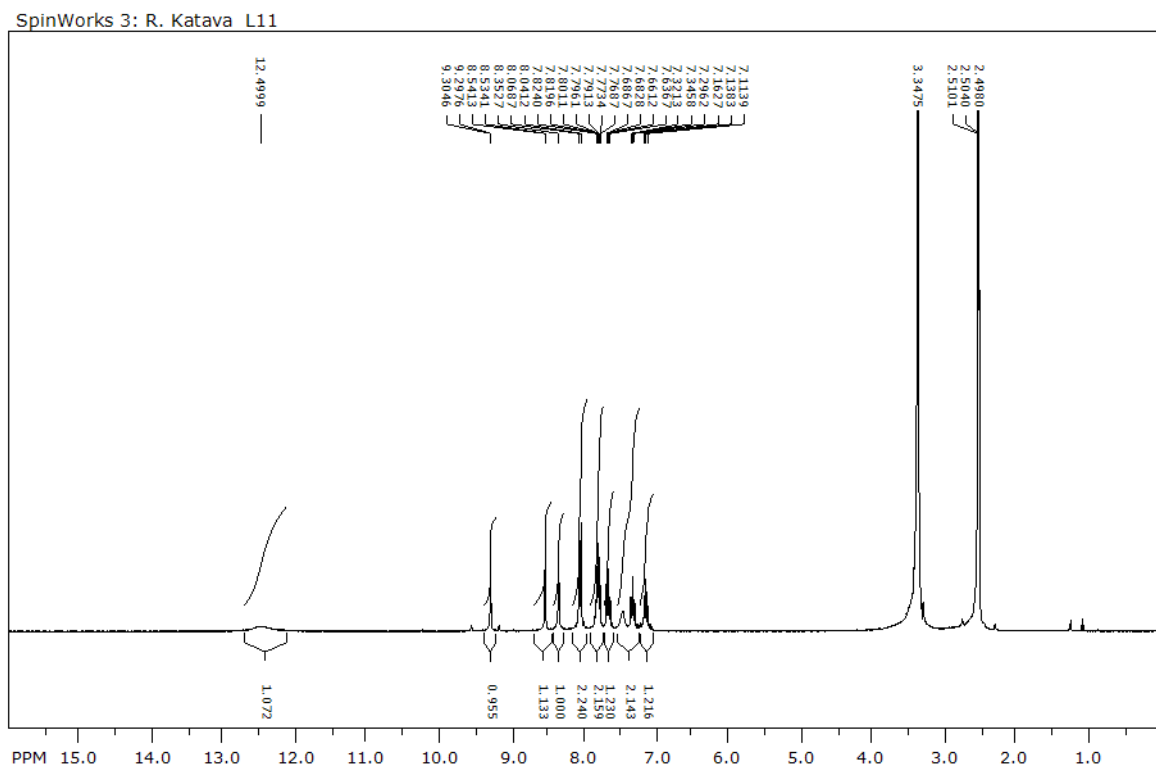
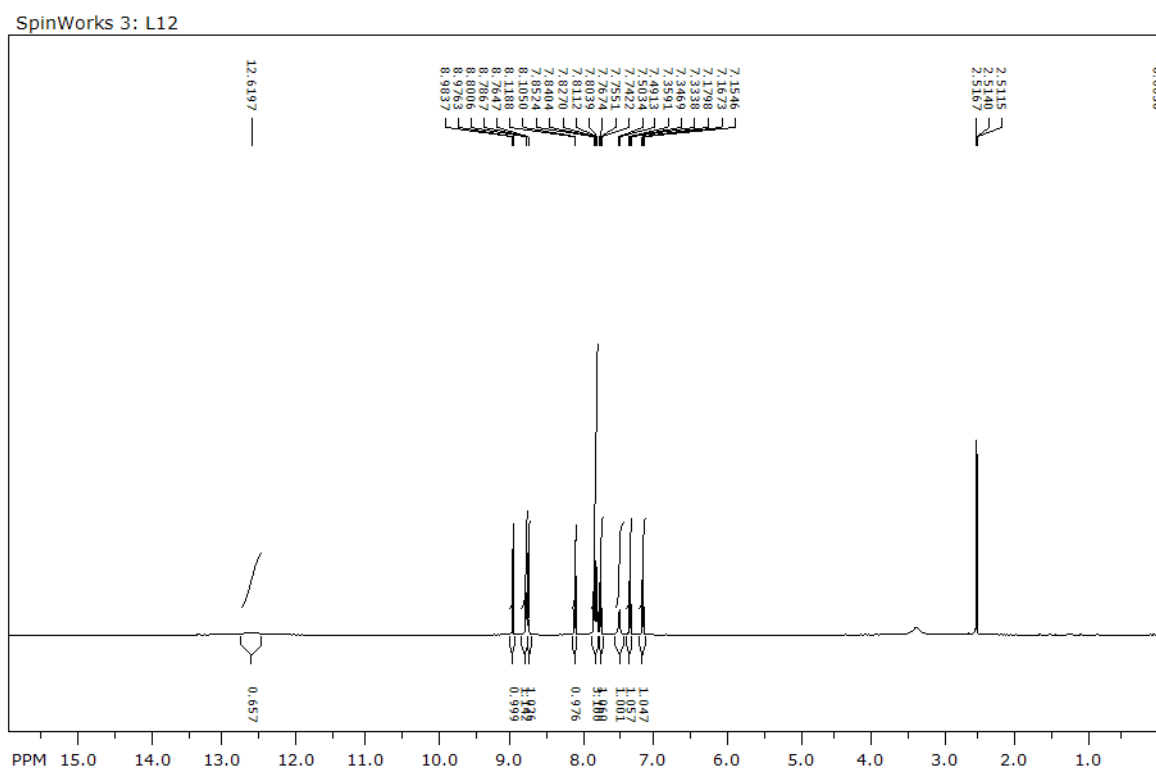


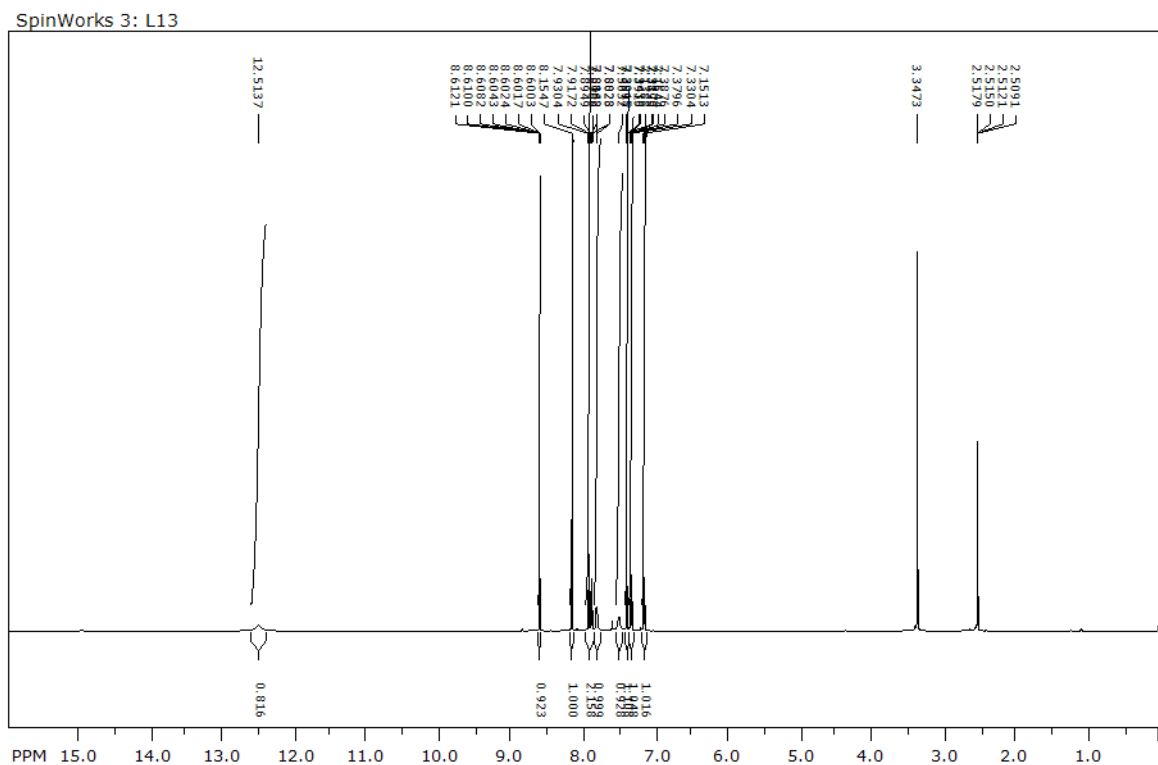
Slika D68. ^1H NMR spektar spoja HL⁷ (7)



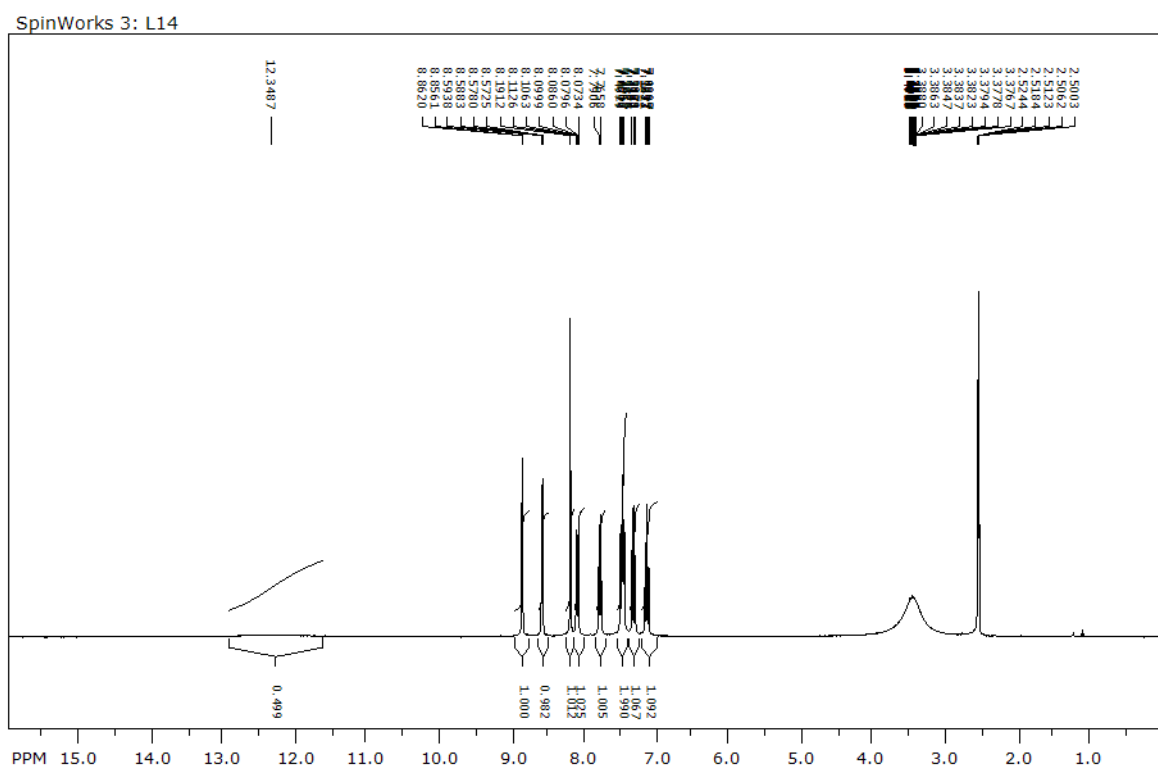
Slika D69. ^1H NMR spektar spoja HL^8 (**8**)



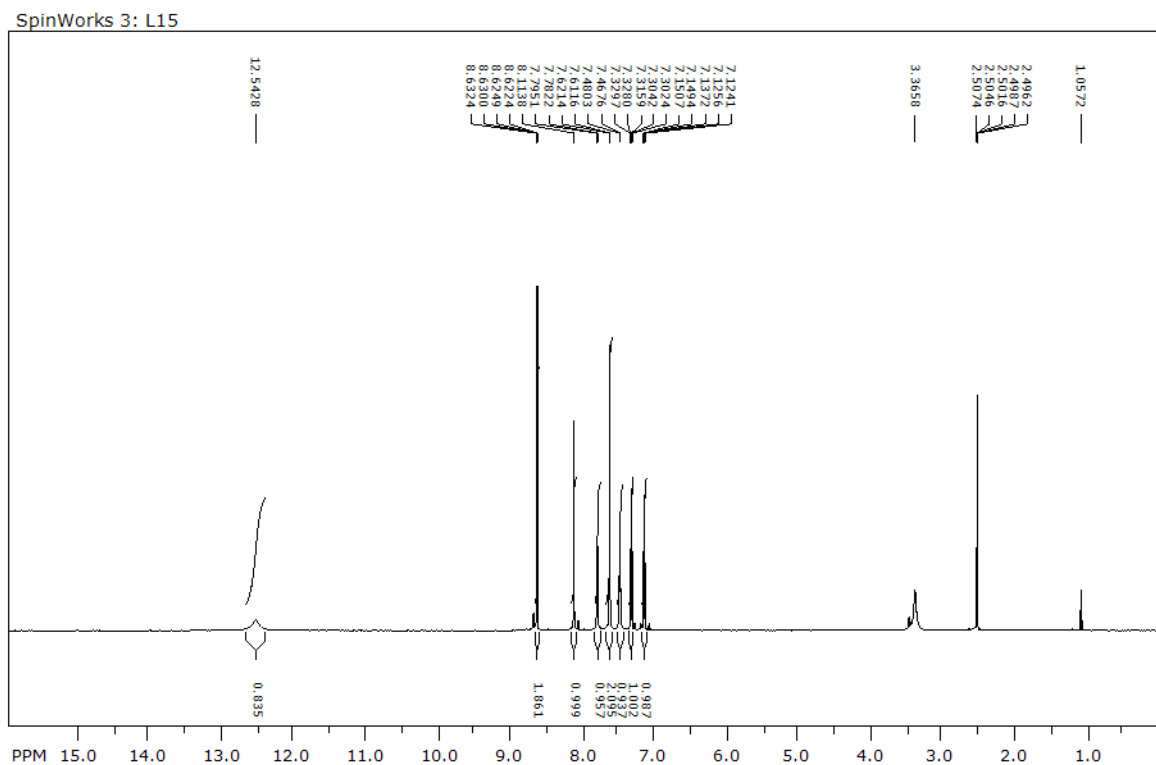
Slika D72. ^1H NMR spektar spoja HL¹¹ (11)Slika D73. ^1H NMR spektar spoja HL¹² (12)

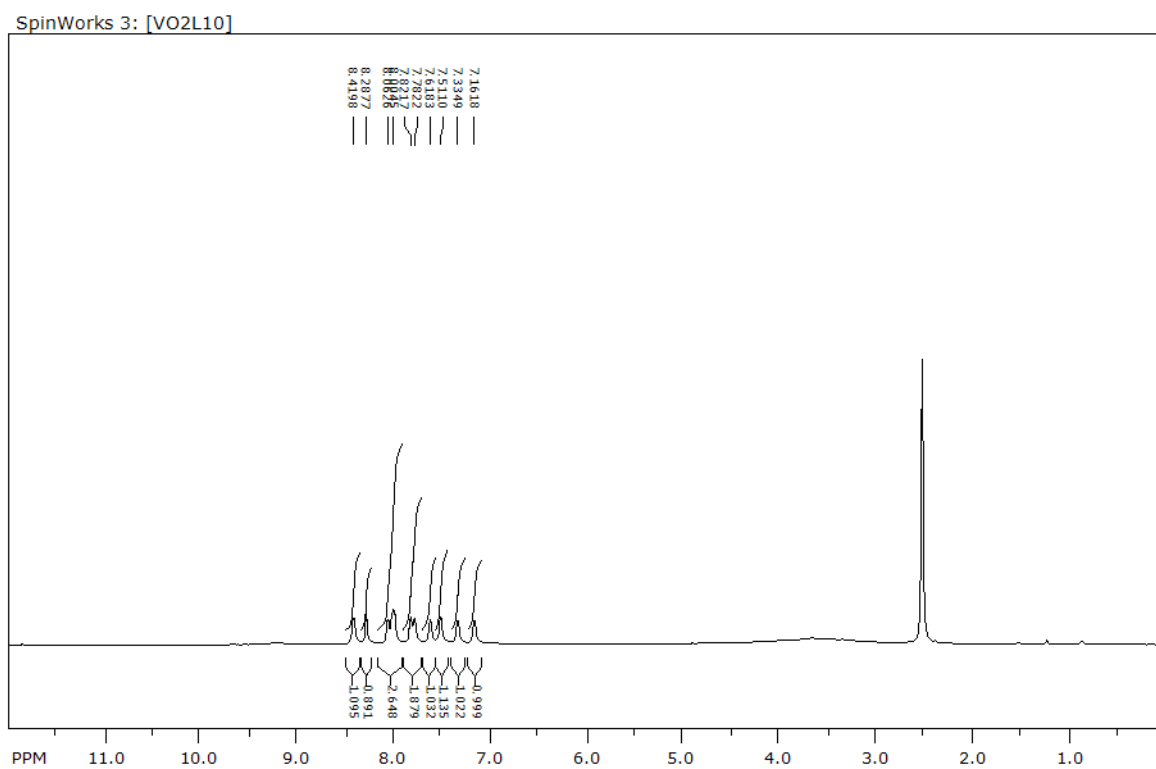
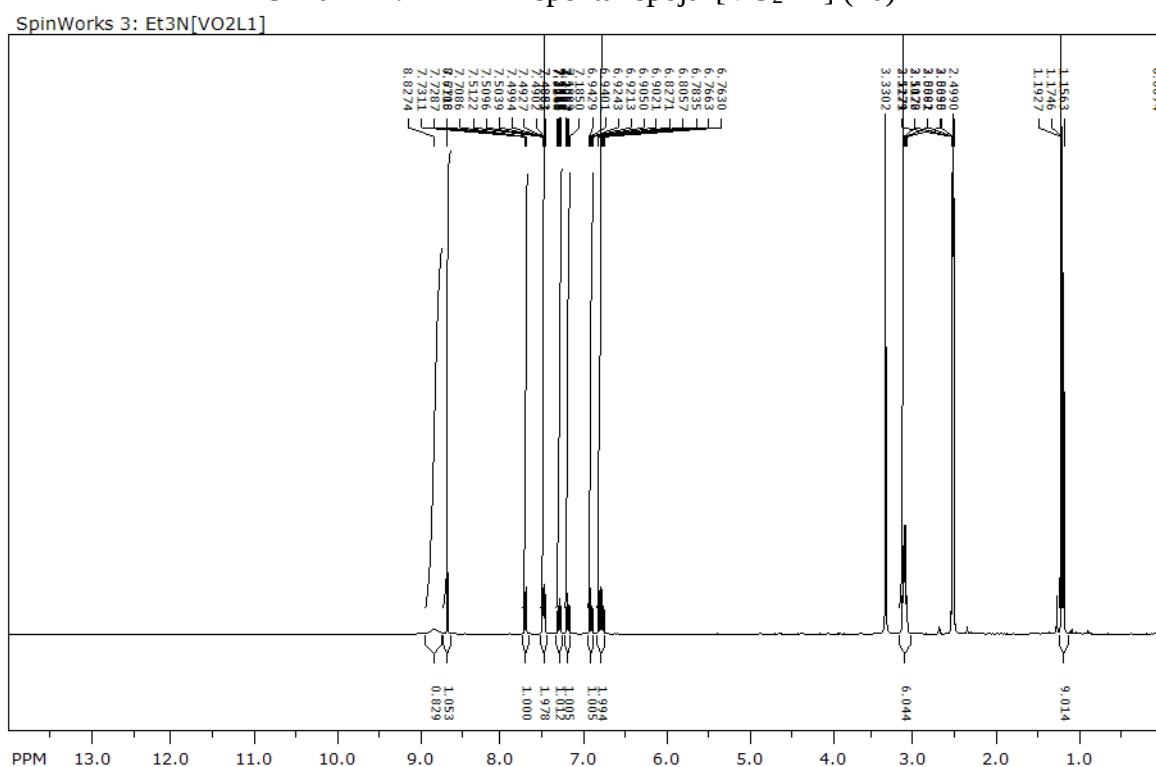


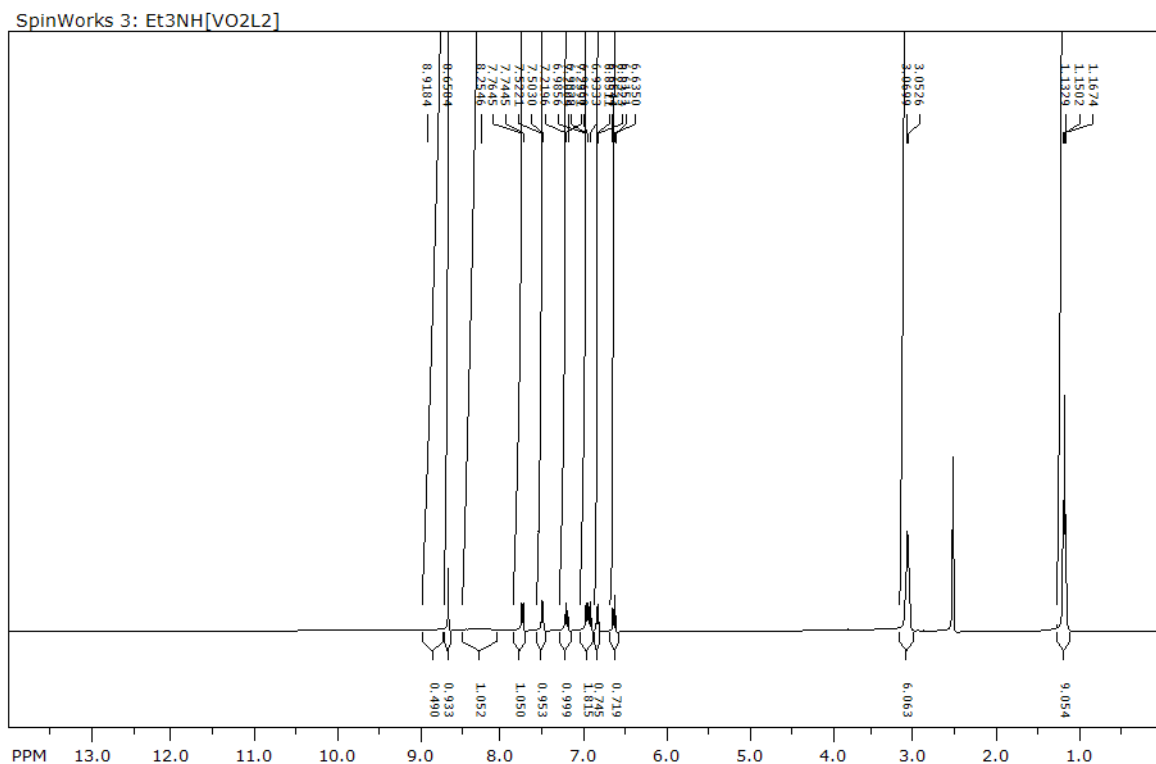
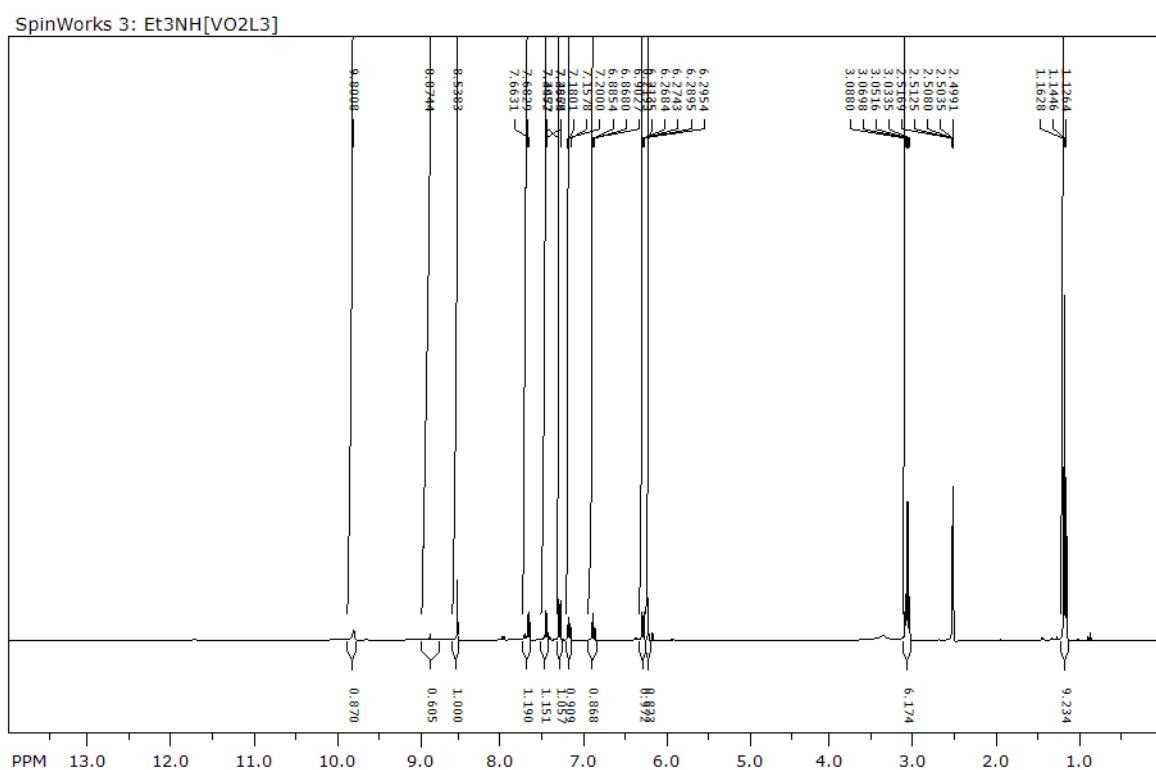
Slika D74. ^1H NMR spektar spoja HL¹³ (**13**)

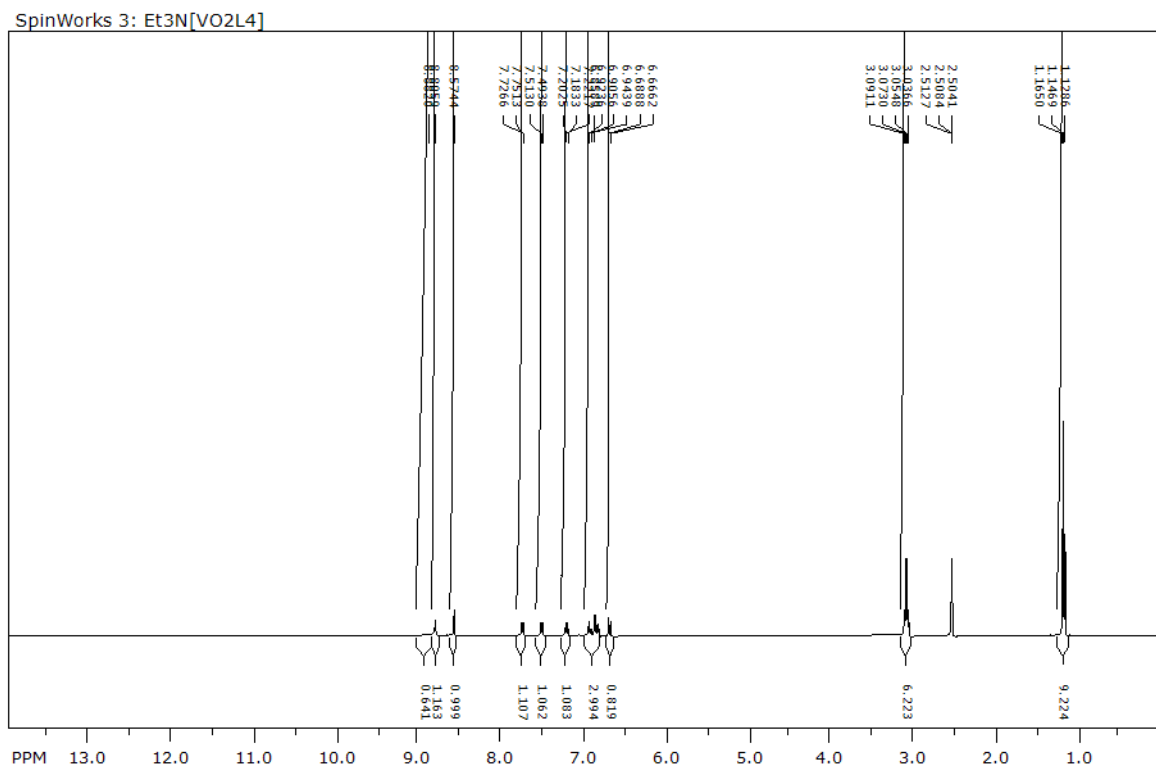


Slika D75. ^1H NMR spektar spoja HL¹⁴ (**14**)

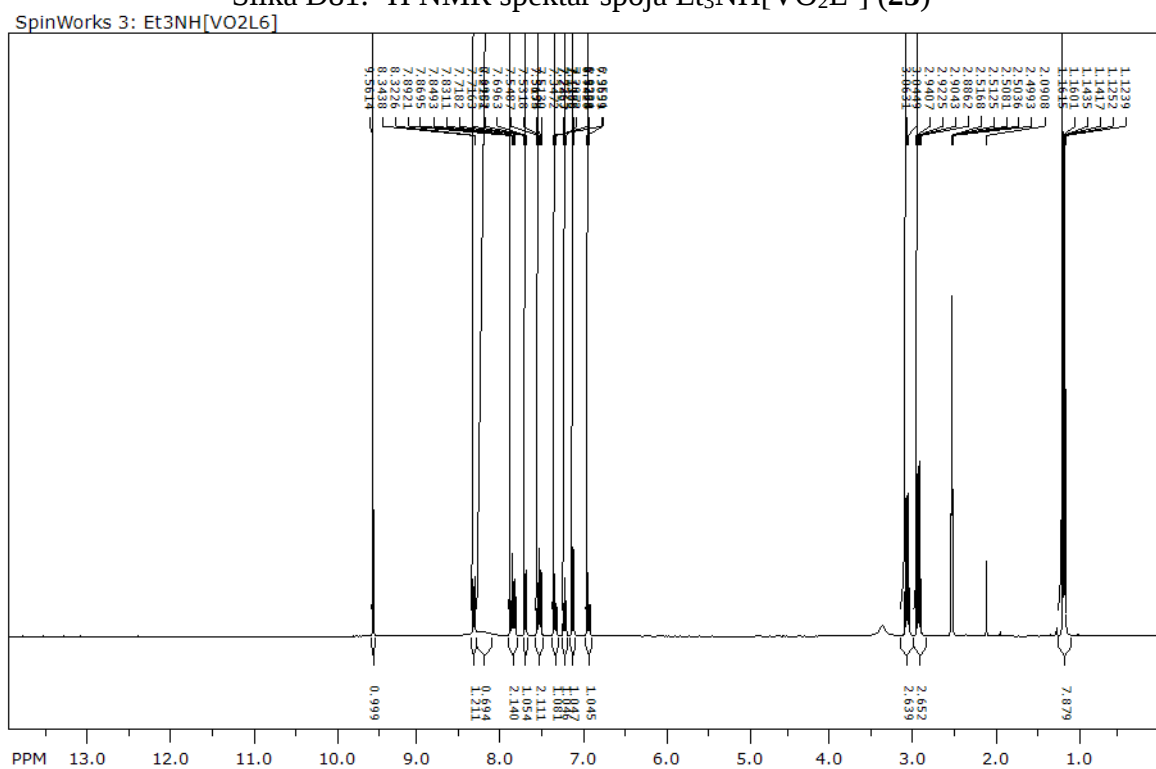
Slika D76. ^1H NMR spektar spoja HL¹⁵ (15)

Slika D77. ¹H NMR spektar spoja [VO₂L¹⁰] (20)Slika D78. ¹H NMR spektar Et₃NH[VO₂L¹] (22)

Slika D79. ¹H NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L²] (23)Slika D80. ¹H NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L³] (24)

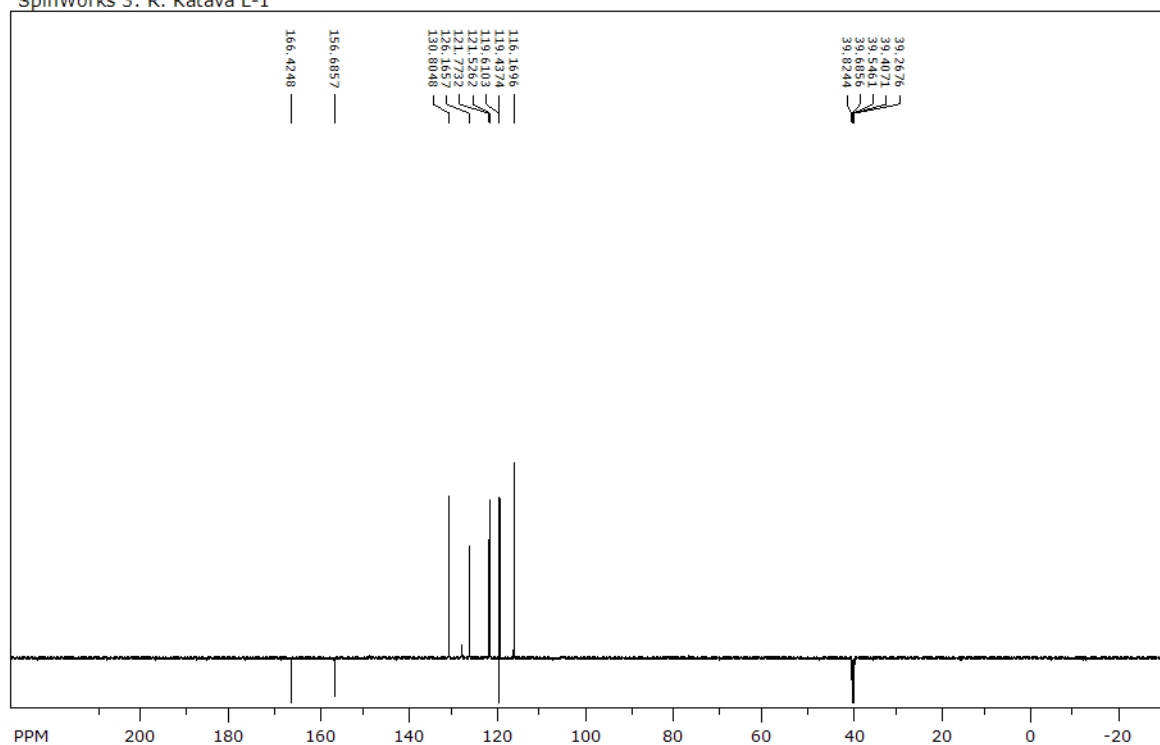


Slika D81. ^1H NMR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^4]$ (25)

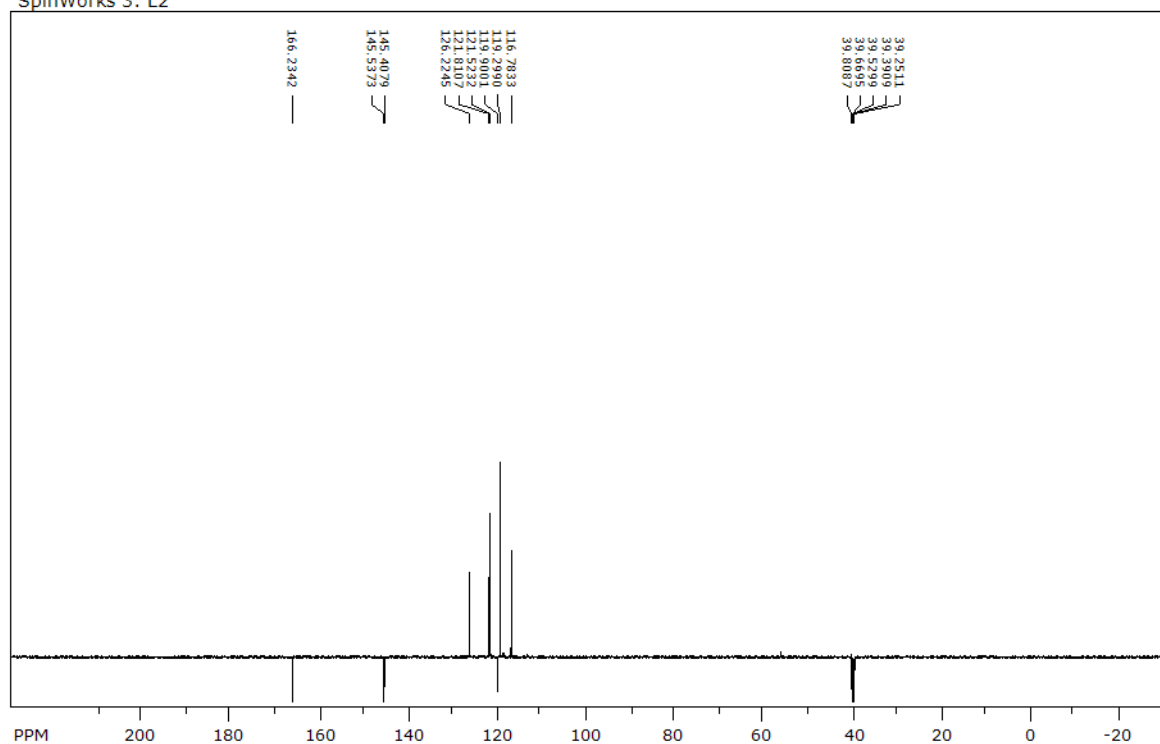


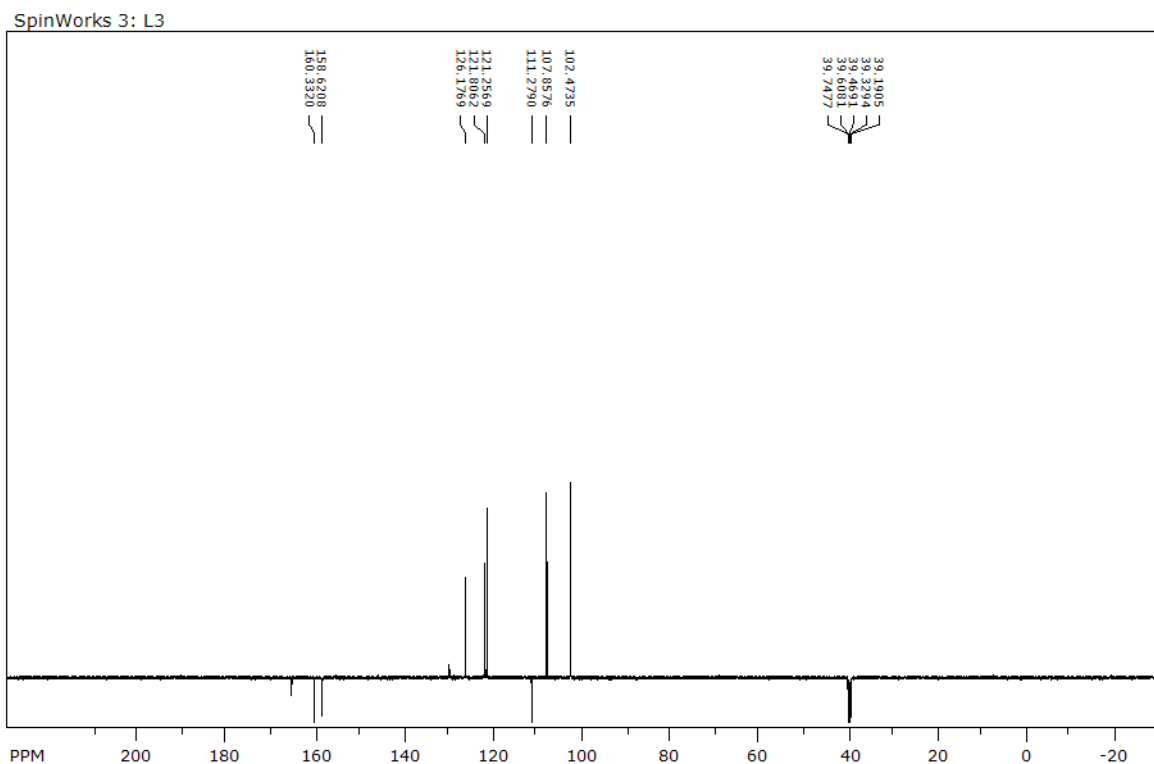
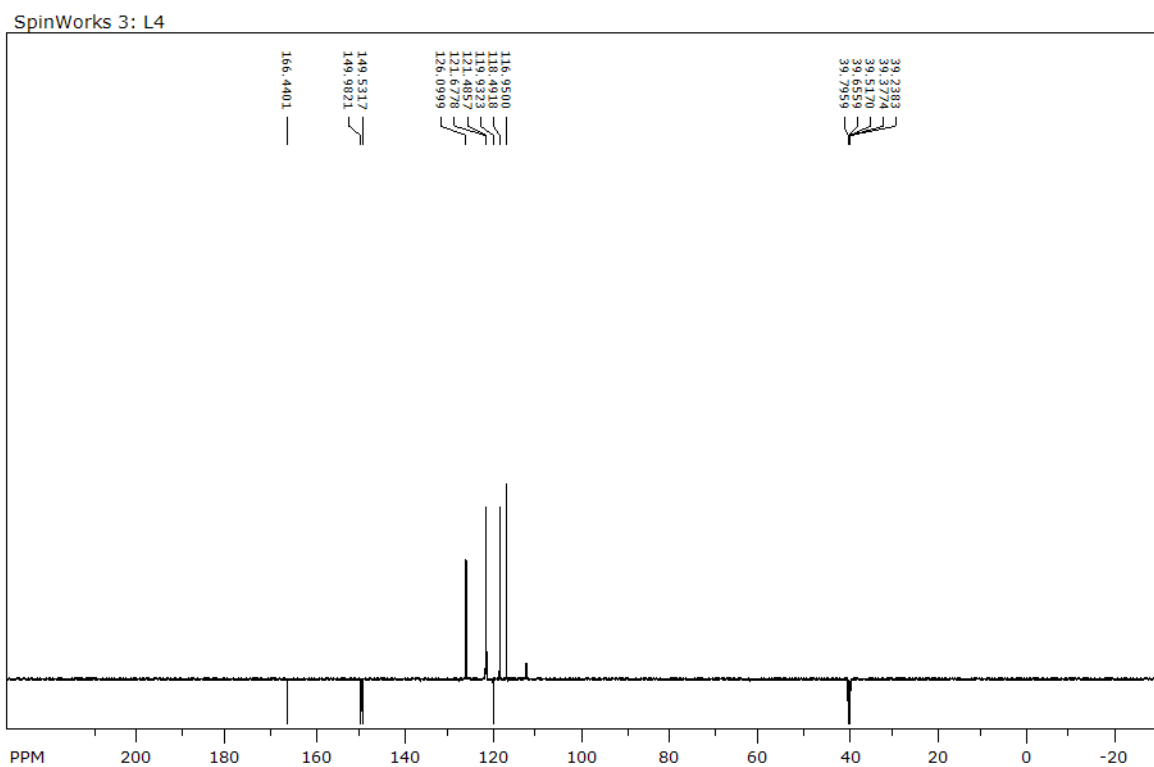
Slika D82. ^1H NMR spektar spoja $\text{Et}_3\text{NH}[\text{VO}_2\text{L}^6]$ (**26**)

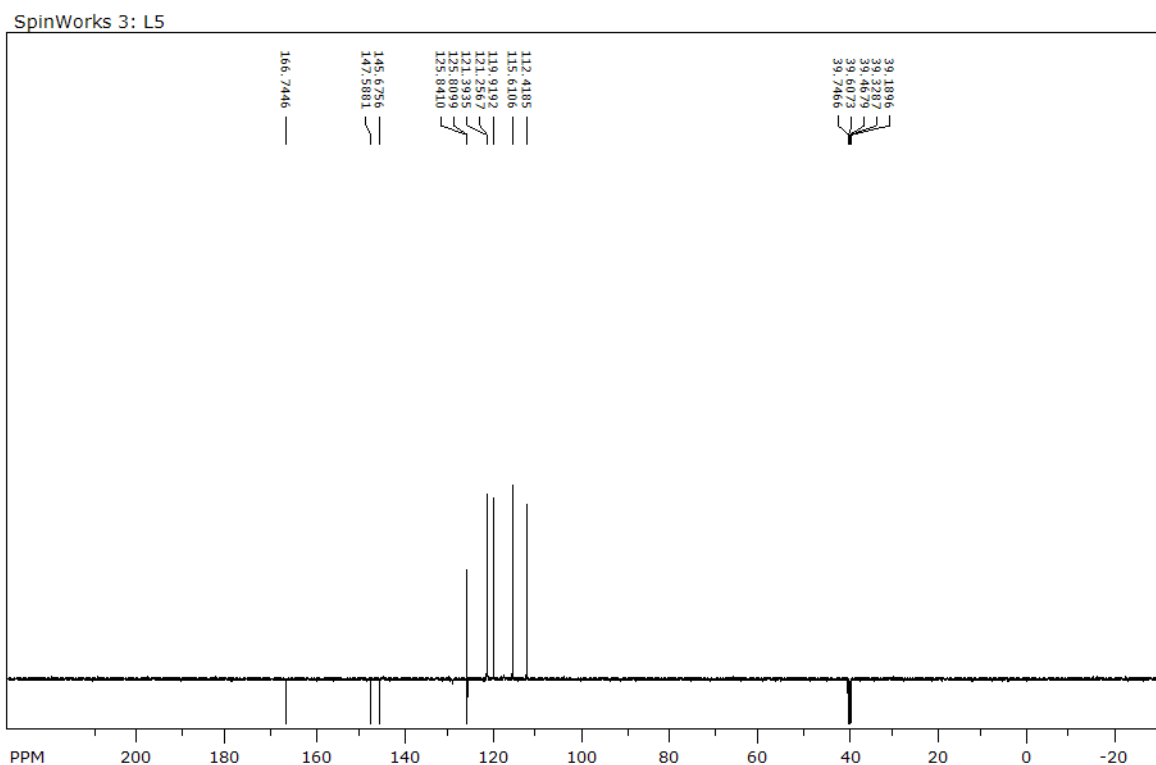
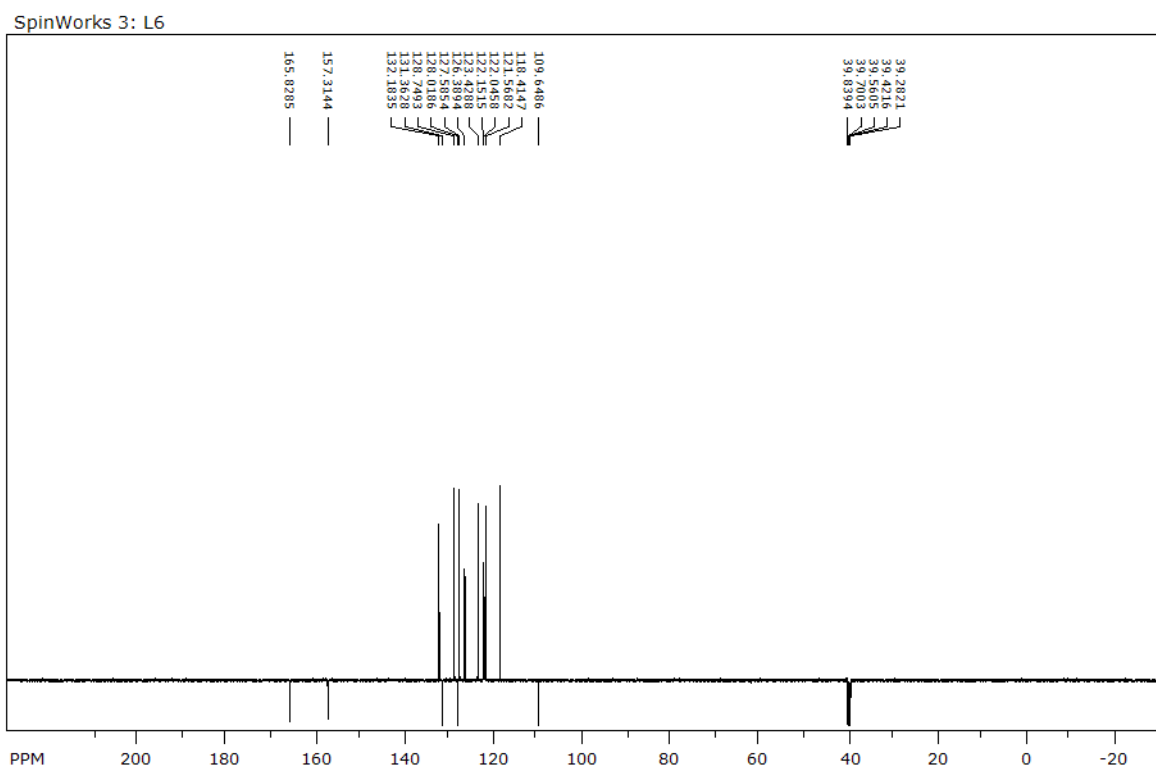
SpinWorks 3: R. Katava L-1

Slika D83. ^{13}C NMR spektar H_2L^1 (1)

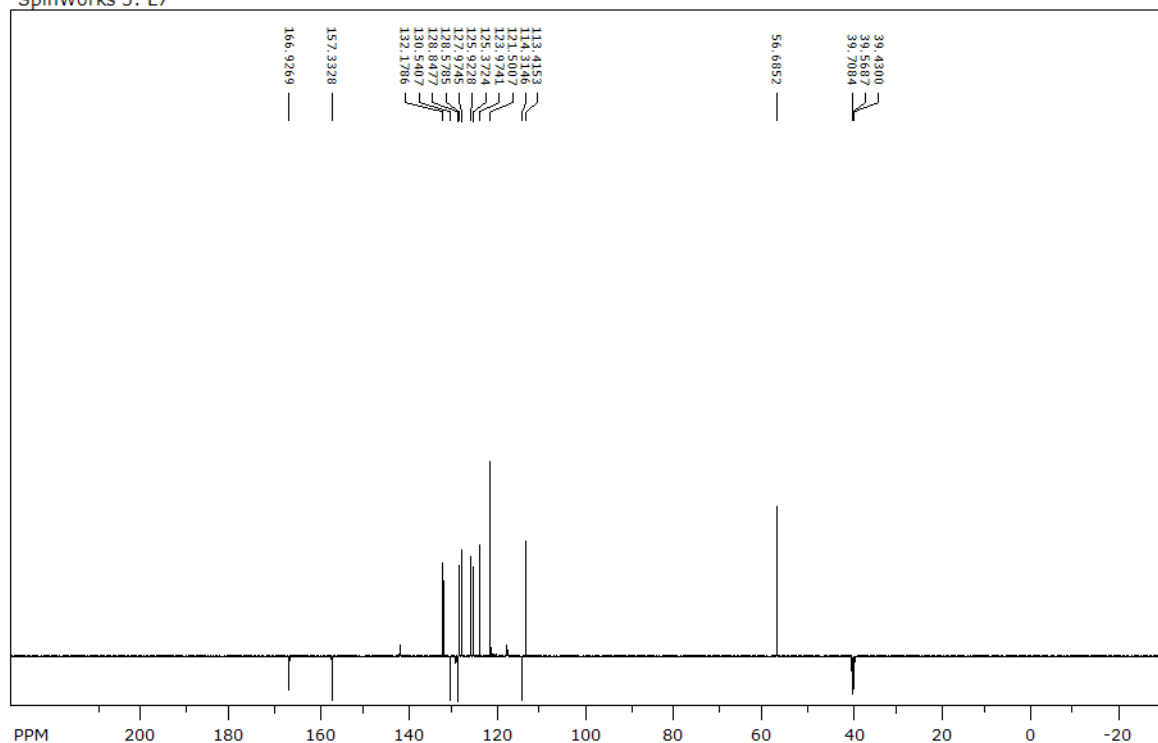
SpinWorks 3: L2

Slika D84. ^{13}C NMR spektar spoja H_2L^2 (2)

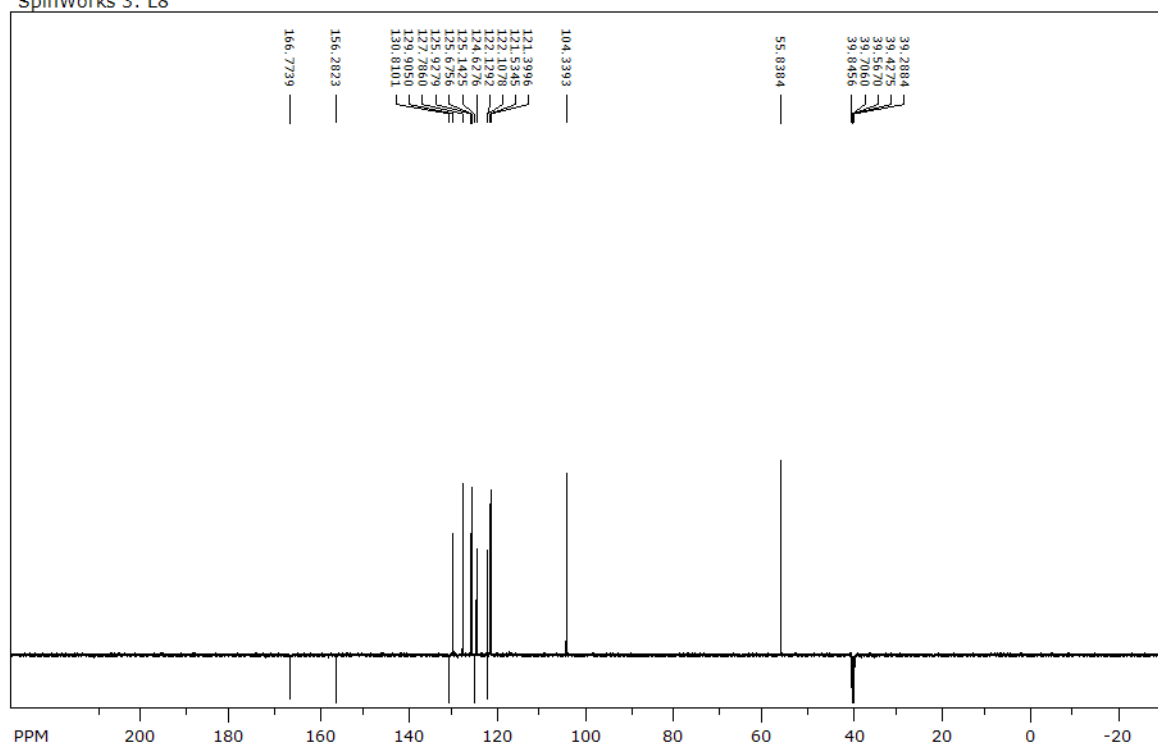
Slika D85. ^{13}C NMR spektar spoja H_2L^3 (3)Slika D86. ^{13}C NMR spektar H_2L^4 (4)

Slika D87. ^{13}C NMR spektar spoja HL^5 (5)Slika D88. ^{13}C NMR spektar spoja H_2L^6 (6)

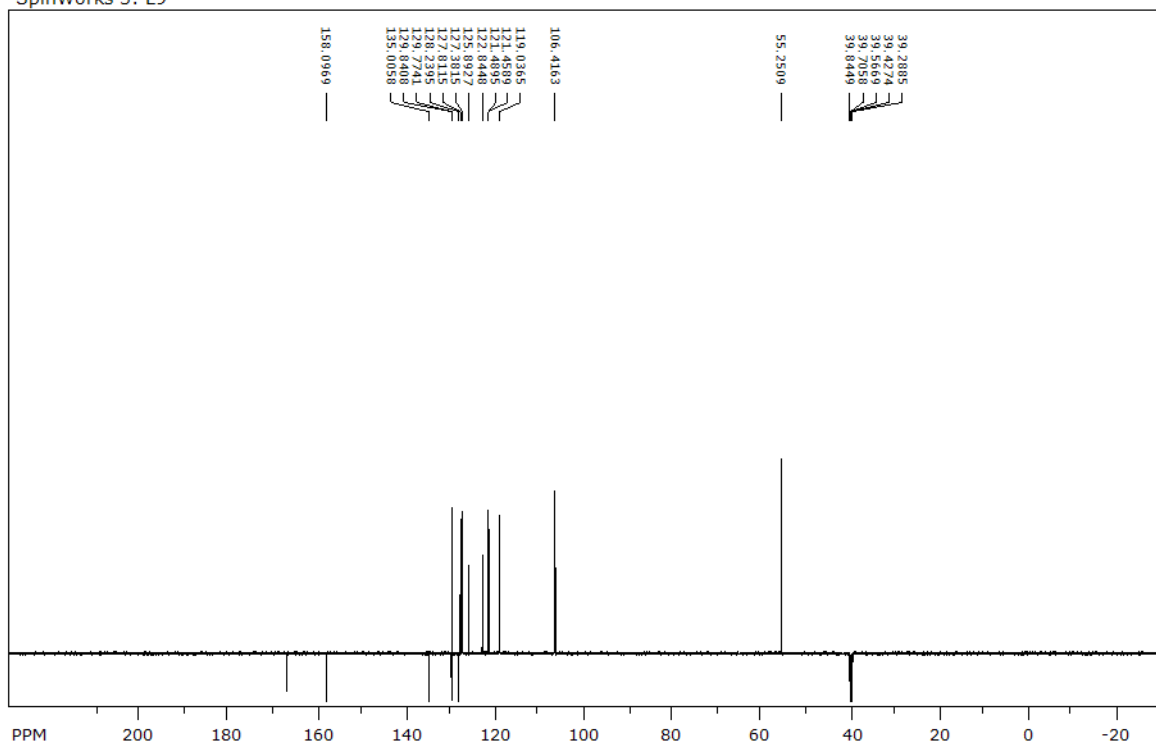
SpinWorks 3: L7

Slika D89. ¹³C NMR spektar spoja HL⁷ (7)

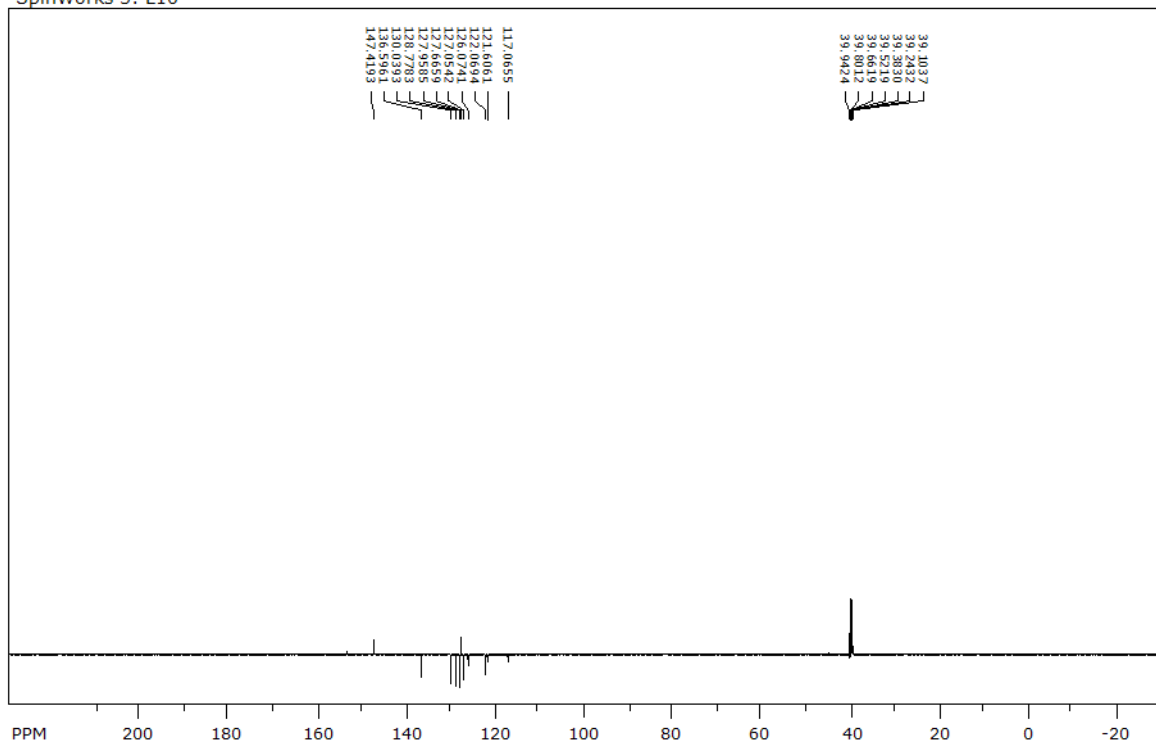
SpinWorks 3: L8

Slika D90. ¹³C NMR spektar spoja HL⁸ (8)

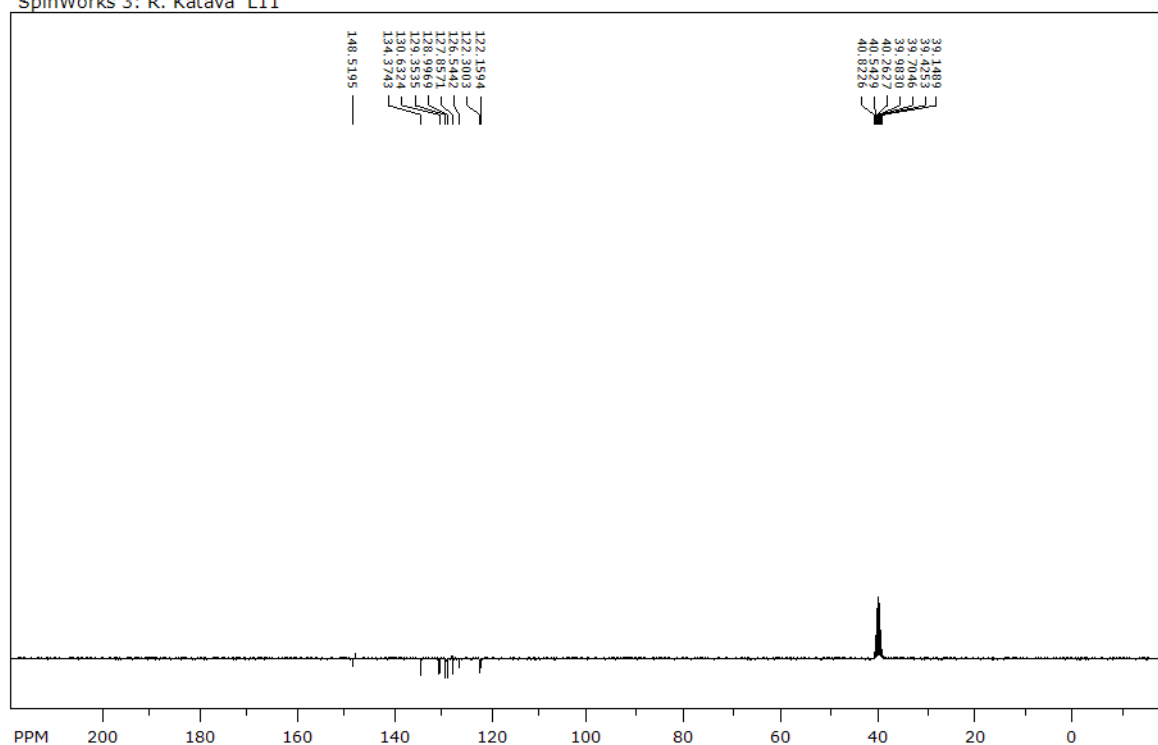
SpinWorks 3: L9

Slika D91. ^{13}C NMR spektar spoja HL⁹ (9)

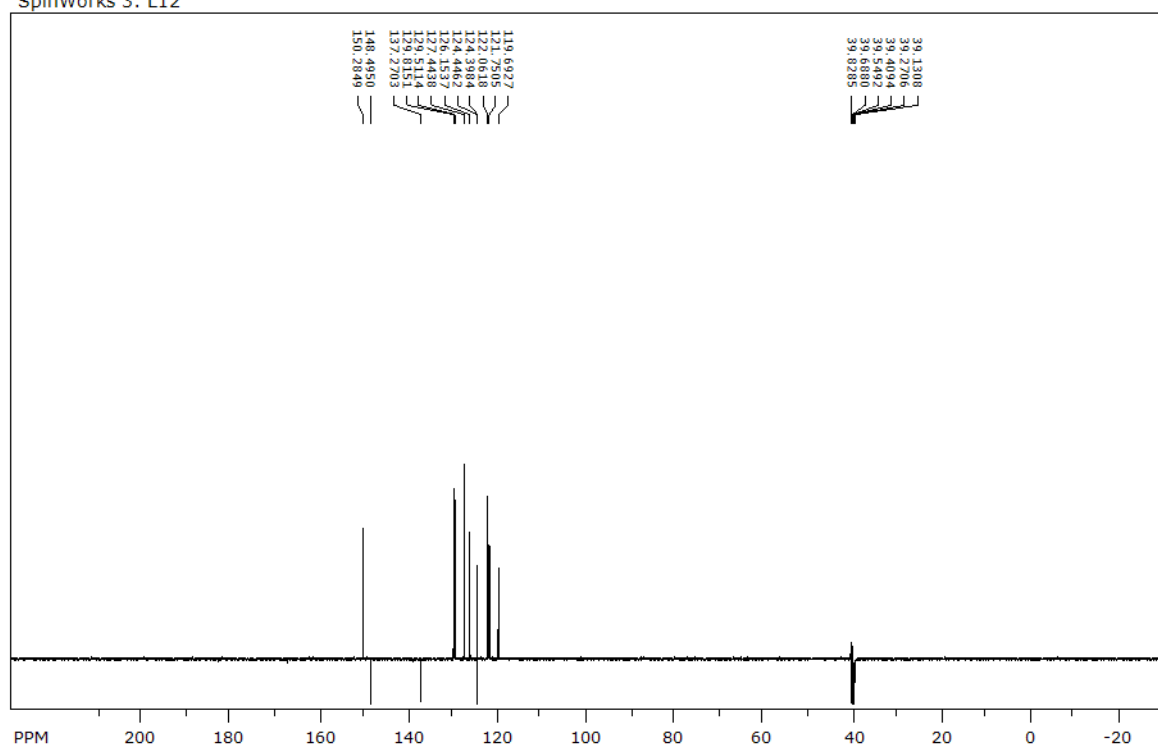
SpinWorks 3: L10

Slika D92. ^{13}C NMR spektar spoja HL¹⁰ (10)

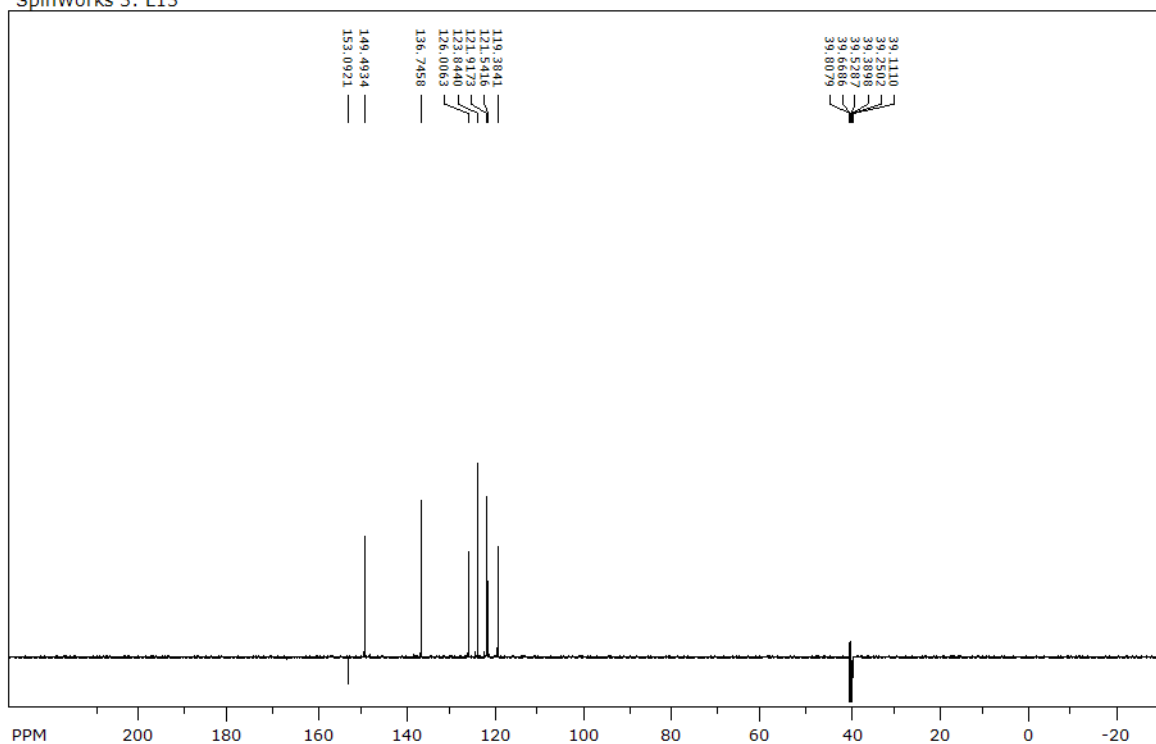
SpinWorks 3: R. Katava L11

Slika D93. ^{13}C NMR spektar spoja HL¹¹ (11)

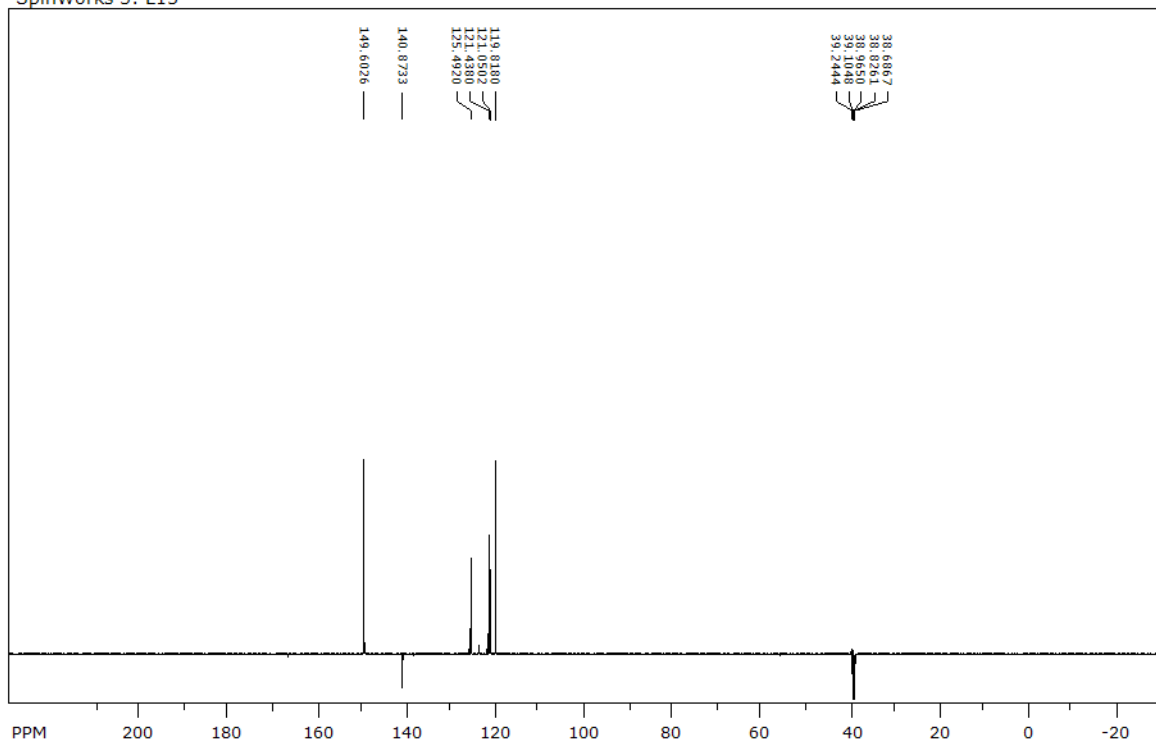
SpinWorks 3: L12

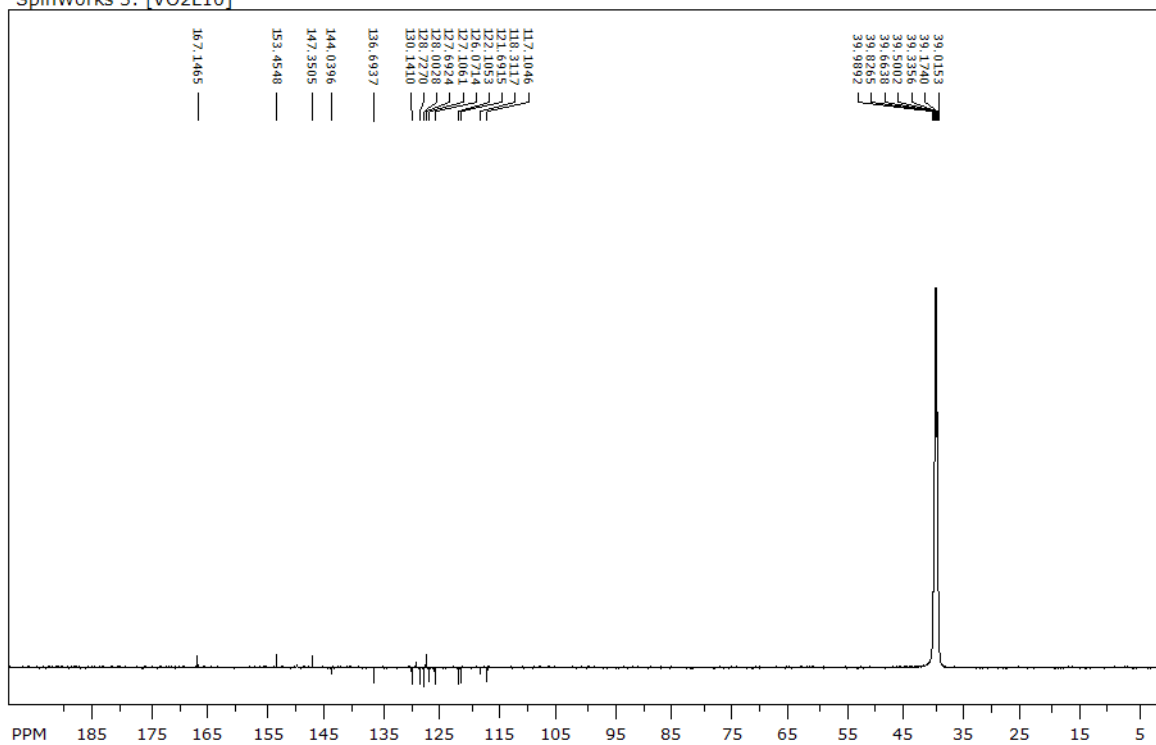
Slika D94. ^{13}C NMR spektar spoja HL¹² (12)

SpinWorks 3: L13

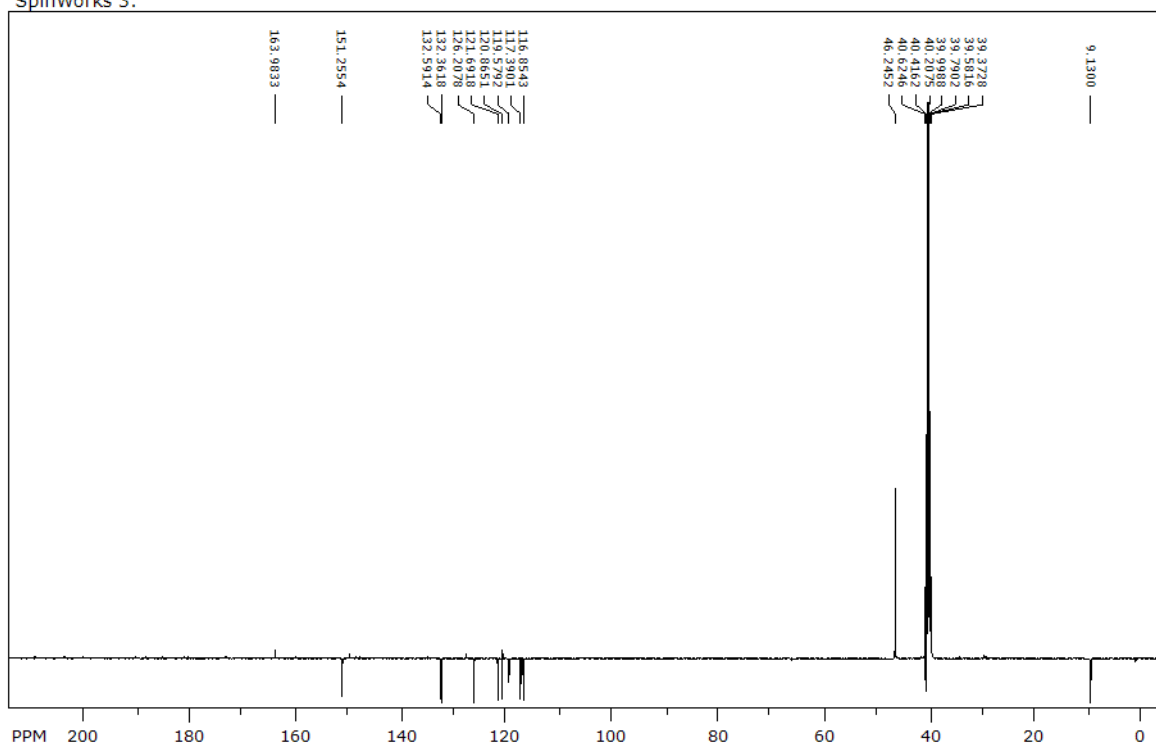
Slika D95. ¹³C NMR spektar spoja HL¹³ (13)

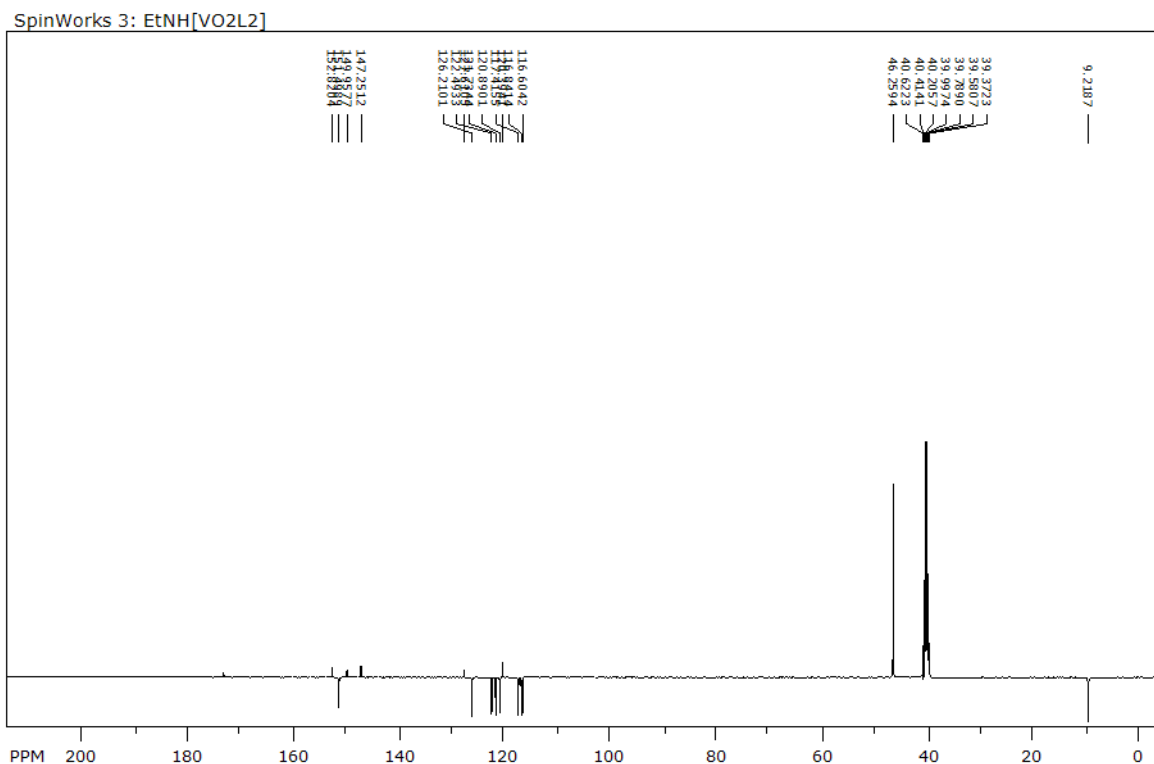
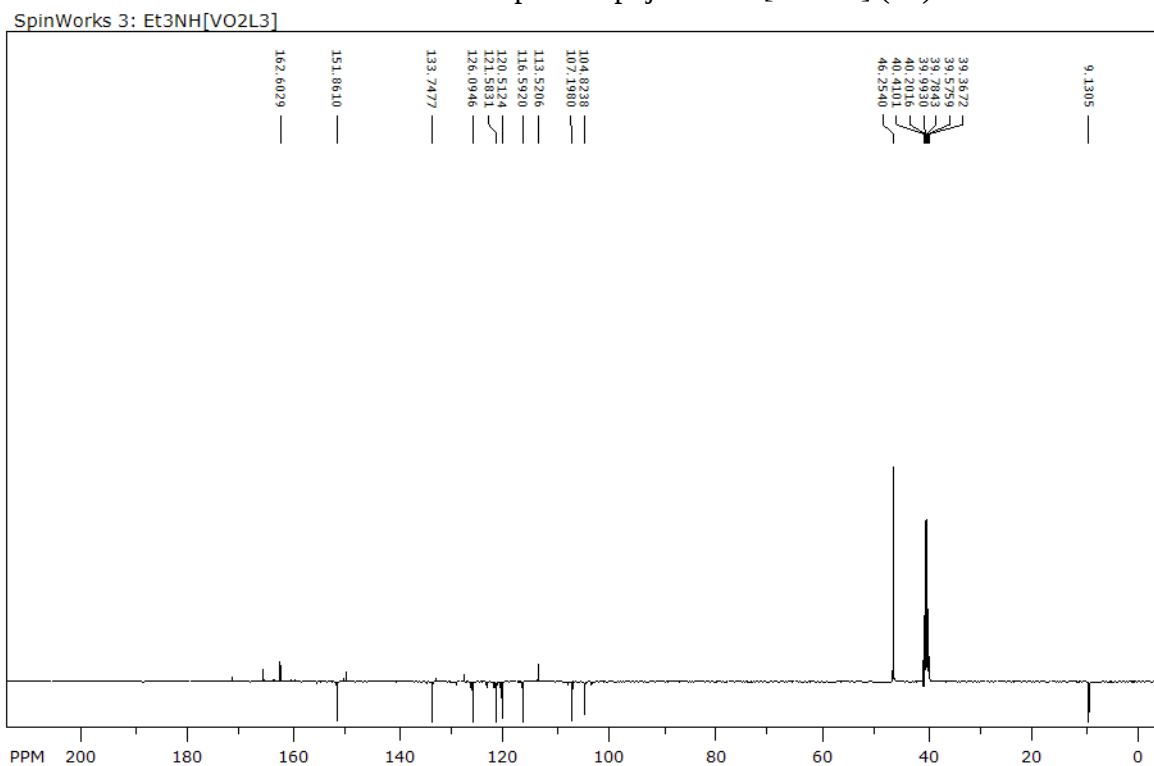
SpinWorks 3: L15

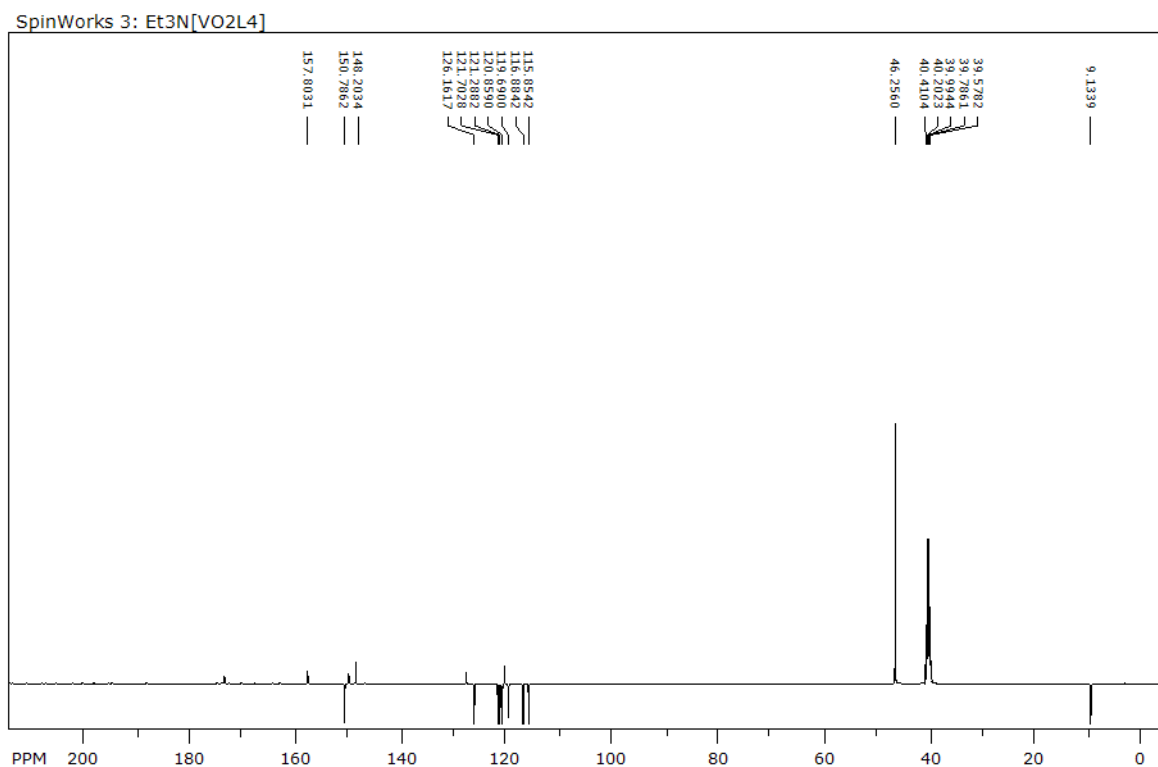
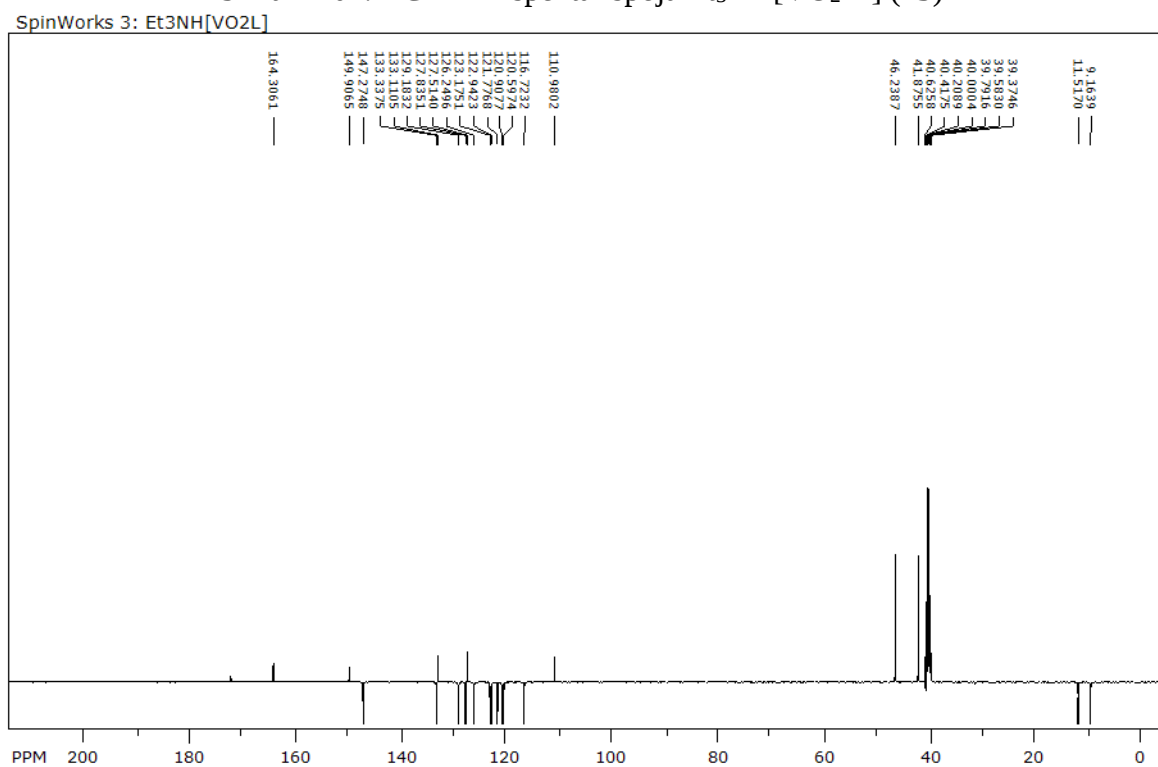
Slika D96. ¹³C NMR spektar spoja HL¹⁵ (15)

SpinWorks 3: [VO₂L¹⁰]Slika D97. ¹³C NMR spektar spoja [VO₂L¹⁰] (20)

SpinWorks 3:

Slika D98. ¹³C NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L¹] (22)

Slika D99. ¹³C NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L²] (23)Slika D100. ¹³C NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L³] (24)

Slika D101. ¹³C NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L⁴] (25)Slika D102. ¹³C NMR spektar spoja Et₃NH[VO₂L⁶] (26)

§ 9. ŽIVOTOPIS

Osobni podaci

Ime i prezime: Robert Katava

Datum rođenja: 17. studeni 1988.

Mjesto rođenja: Doboj, Bosna i Hercegovina

E-mail: robert.katava@ttf.hr, robert.katava@gmail.com

Obrazovanje

2014.– Poslijediplomski sveučilišni studij Kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu, smjer Anorganska i strukturna kemija

2011.–2013. Diplomski sveučilišni studij Kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu, istraživački smjer

2007.–2011. Preddiplomski sveučilišni studij Kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu, istraživački smjer

Diplomski rad pod nazivom "*Synthesis and catalytic properties of molybdenum (VI) complexes with tridentate Schiff base ligands*" izraden je pod vodstvom :

- 1) prof. dr. sc. Marine Cindrić na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu,
- 2) izv. prof. dr. sc. Dominiquea Agustinea u Laboratoriju za koordinacijsku kemiju Sveučilišta Paul Sabatier u Toulouseu u Francuskoj.

Zaposlenje

ožujak 2014. – ožujak 2020. Uposlen na radnom mjestu asistenta na Zavodu za primijenjenu kemiju Tekstilno-tehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

Popis znanstvenih radova u časopisima koje citira baza Current Contents

1. **R. Katava**, F. Zorko, A. D. Mance, H. Otmačić-Ćurković i G. Pavlović, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **642** (2017) 29–37.
 2. **R. Katava**, S. Kraljević Pavelić, A. Harej, T. Hrenar i G. Pavlović, *Struct. Chem.* **28** (2017) 709–721.
 3. G. Pavlović, **R. Katava**, M. Rajić i V. Roje, *Polyhedron* **123** (2017) 285–292.
 4. M. Cindrić, G. Pavlović, R. Katava i D. Agustin, *New J. Chem.* **41** (2017) 594–602.
-

Aktivna sudjelovanja na znanstvenim skupovima

1. **R. Katava**, S. Kraljević Pavelić, P. Grbčić i G. Pavlović, *Oxovanadium(IV) and dioxovanadium(V) complexes derived from 2-benzothiazolyldhydrazones and phenantroline: synthesis, crystal structures and antitumor activity*, The Twenty-Seventh Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting – SCCM27, Rogaška Slatina, Slovenija, 2019 .(predavanje, sažetak, znanstveni)
 2. **R. Katava** i G. Pavlović, *Dioxovanadium(V) complexes with 2-benzothiazolyldhydrazones as potential antitumor agents*, The Twenty-Sixth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting – CSCM26, Poreč, Croatia, 2018 .(predavanje, sažetak, znanstveni)
 3. **R. Katava**, *Kompleksni spojevi vanadija s derivatima 2-benzotiazolilhidrazona*, Dan doktoranada 2018., Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb, Hrvatska, 2018. (poster, domaća recenzija, sažetak, znanstveni)
 4. **R. Katava** i G. Pavlović, *Synthesis and supramolecular solid state structure of dioxovanadium(V) complexes with 2-benzothiazolyldhydrazone ligands*, Hot topics in contemporary crystallography, Poreč, Hrvatska, 2017. (poster, sažetak, znanstveni).
 5. **R. Katava**, S. Kraljević Pavelić, A. Harej, T. Hrenar i G. Pavlović, *Synthesis, crystal structures, potential energy surfaces and evaluation of antiproliferative effect of 2-benzothiazolyldhydrazones*, Third European Crystallography School, Bol, Hrvatska, 2016. (poster, sažetak, znanstveni)
 6. **R. Katava** i G. Pavlović, *Synthesis and structural characterization of vanadium(V) complex with 2-benzothiazolyldhydrazone ligands*, The Twenty-fourth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Bol, Brač, 2016. (predavanje, sažetak, znanstveni)
 7. **R. Katava**, G. Pavlović, A. D. Mance, i H. Otmačić Ćurković, *Bakrovi(II) kompleksi s metilimidazolnim ligandima kao inhibitorima korozije*, 24. hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera, Zagreb, 2015. (poster, domaća recenzija, sažetak, znanstveni)
 8. **R. Katava** i M. Mađor-Božinović, *Alkemija u jezgrama zvijezda*, 13. Festival znanosti Zagreb, Hrvatska, 2015. (Znanstveni skupovi i radionice, usmeno izlaganje)
 9. **R. Katava**, G. Pavlović i M. Cindrić, *The role of methanol molecule in supramolecular assembling of $[MoO_2L(CH_3OH)] \cdot CH_3OH$ and $[MoO_2L(CH_3OH)]$ Schiff base type complexes*, 29th European Crystallographic Meeting, Rovinj, Hrvatska, 2015 (poster, sažetak, znanstveni)
 10. **R. Katava** i G. Pavlović, *Sinteza i identifikacija liganada iz reda 2-hidrazinobenzotiazolnih Schiffovih baza*, 8. znanstveno-stručno savjetovanje Tekstilna znanost i gospodarstvo, Zagreb, 2015. (poster, domaća recenzija, cjeloviti rad (in extenso), znanstveni)
-

Sudjelovanje na studijskim boravcima u inozemstvu, školama i radionicama

- međunarodna stručna praksa "ERASMUS placement ", Laboratorij za koordinacijsku kemiju Sveučilišta Paul Sabatier, Toulouseu u Francuskoj, veljača – kolovoz 2013.
- radionica "ABC radionica dizajna nastave", Sveučilišni računarski centar - SRCE, Zagreb, 2019.
- radionica "Osnove rada s alatima za upravljanje referencama", Sveučilišni računarski centar - SRCE, Zagreb, 2019.
- međunarodna ljetna škola "Hot topics in contemporary crystallography - 2018", Bol, 2018.
- međunarodna ljetna škola "Hot topics in contemporary crystallography", Poreč, 2017.
- radionica "Komunikacijske vještine", Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb, 2016.
- međunarodna ljetna škola "Third European Crystallography School", Bol, 2016.
- radionica "Osnove rada u sustavu Merlin", Sveučilišni računarski centar - SRCE, Zagreb, 2016
- radionica "Kako započeti izradu e-kolegija", Sveučilišni računarski centar - SRCE, Zagreb, 2016
- serija radionica "Programu unaprjeđenja nastavničkih kompetencija: metode učenja i poučavanja, vrednovanje i praćenje rada studenata te evaluacije i kontinuiranog unaprjeđenja kvalitete nastave", Tekstilno-tehnološki fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb, 2016.
- radionica "How to get published", Taylor & Francis, Zagreb, 2016.
- radionica "Olex2 Workshop", Rovinj, 2015.

Sudjelovanje u sveučilišnoj nastavi

- travanj 2014. - : Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet, asistent kolegiji: Opća kemija, Praktikum iz opće kemije, Otpadne vode tekstilne industrije
- listopad 2016. - lipanj 2017.: Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, vanjski suradnik kolegiji: Opća i anorganska kemija, Kemija 2 (laboratorijske vježbe)
- listopad 2014. - lipanj 2015.: Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, vanjski suradnik kolegiji: Praktikum iz opće kemije 1

Neposredna voditeljstva završnih i diplomskih radova:

- 1) diplomski rad studentice Irme Majstorović pod nazivom "Bakrovi kompleksi 2-hidoksifenilbenzotiazolnih derivata", Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb, 2018.,
 - 2) završni rad studentice Anje Judin pod nazivom "Solvothermalne sinteze kompleksa kobalta s 1H-benzimidazol-2-metanolom", Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb, 2017.,
 - 3) završni rad studentice Petre Labazan pod nazivom "Kompleksi kobalta s 2-(hidroksimetil)benzotiazolom kao potencijalna bojila", Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb, 2017.,
-

- 4) diplomski rad studentice Danijele Drčić pod nazivom "Priprava i karakterizacija kompleksa kobalta i željeza s 1H-benzimidazol-2-metanolom", Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb, 2015.

G. Pavlović, **R. Katava**: "Praktikum iz opće kemije", interna skripta za studente Tekstilno-tehnološkog fakulteta, Ver. 3, 2016.

G. Pavlović, **R. Katava**: "Praktikum iz opće kemije", interna skripta za studente Tekstilno-tehnološkog fakulteta, Ver. 4, 2018.

Institucijski doprinos radu Sveučilišta u Zagrebu Tekstilno-tehnološkog fakulteta

- član Središnjeg odbora za odnose s javnošću Tekstilno-tehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu (zaduženja: organizacija Smotre sveučilišta, Dana fakulteta i Otvorenih dana fakulteta) (2018. –)
- član Odbora za organizaciju Tehnologijade (listopad 2018.–svibanj 2019.)
- predstavnik suradničkih zvanja (asistenata i poslijedoktoranada) u Fakultetskom vijeću Tekstilno-tehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu (svibanj 2018.–)
- član Povjerenstva za upravljanje kvalitetom Tekstilno-Tehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu (zaduženja: organizaciju i provedba studentskih Anketa za procjenu nastavnika) (2015.–2019.)
- organizacija i provedba popularno-znanstvene radionice "Advent u laboratoriju" u sklopu Dana otvorenih vrata Tekstilno-tehnološkog fakulteta (2017.)
- provedbe Razredbenih ispita na Tekstilno-tehnološkom fakultetu (2015.–)

Nagrade i stipendije

- nagrada Dekanice za objavljivanje rada u Q1 časopisu s najvećim faktorom odjeka u kategoriji asistenata, 2018.
- stipendija Europske kristalografske zajednice za međunarodnu ljetna školu "Hot topics in contemporary crystallography - 2018", Bol, 2018.
- stipendija Europske kristalografske zajednice za međunarodnu ljetnu školu "Hot topics in contemporary crystallography", Poreč, 2017.
- stipendija Europske kristalografske zajednice za međunarodnu ljetnu školu "Third European Crystallography School", Bol, 2016.
- ERASMUS stipendija za međunarodnu stručnu praksu
- medalja Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu za izvrstan uspjeh u studiju (2013.)
- stipendija Općine Omišalj po kriteriju prosjeka ocjena za učenike srednjih škola i studente sveučilišnih preddiplomskih i diplomskih studija, 2004.–2013.

Članstva u znanstvenim i stručnim udruženjima

- Hrvatsko udruga kristalografa
 - Hrvatsko kemijsko društvo
 - Hrvatska kristalografska zajednica
-