УДК 541.49 + 547.789.3

А. П. Ранський[1]
Н. О. Діденко[2]

СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ДИ(*μ*-ХЛОРО)-ДИХЛОРО-БІС[БЕНЗІМІДАЗОЛ-2-N-(4-ЕТОКСИФЕНІЛ) КАРБОТІОАМІД]КУПРУМУ(II)

[1] Вінницький національний технічний університет
[2] Вінницький національний медичний університет імені М. І. Пирогова

Анотація
Методом прямого синтезу отримано координаційну сполуку ди(μ-хлоро)-дихлоро-біс[бензімідазол-2-N-(4-етоксифеніл)карботіоамід]купруму(II). Склад та будову отриманої сполуки встановлено елементним аналізом, ІЧ-спектроскопією та рентгеноструктурним аналізом.
Ключові слова: тіоамідні ліганди, координаційні сполуки купруму(II), прямий синтез, рентгеноструктурний аналіз

Abstract
By the direct synthesis has been obtained the coordination compound di(μ-chloro)-dichloro-bis [benzimidazole-2-N-(4-ethoxyphenyl)carbothioamide]copper(II). The composition and structure of the obtained compound were determined by elemental analysis, IR-spectroscopy and X-ray crystallography.
Keywords: thioamides ligands, coordination compounds of Copper(II), direct synthesis, X-ray crystallography

Вступ

На сьогодні прямий синтез координаційних сполук перехідних 3*d*-металів і тіоамідних лігандів з використанням протонодонорних систем тіоамід (HL) – спирт (ROH) – хлоридна кислота (HCl) – кисень повітря (O_2) практично не досліджений [1]. Між тим, в останній час такі координаційні сполуки знаходять широке використання в техніці як додатки до вуглеводневих матеріалів [2] та як модельні об'єкти біологічно активних комплексів купруму(II) [3] та кобальту(II, III) [4]. Крім того, значний інтерес викликають суто теоретичні дослідження механізмів окисно-відновних реакцій, що проходять на границі поділу фаз метал (M^0) – окисник (Ox) – ліганд (HL) – розчинник (Solv). Враховуючи вище зазначене, нами продовжено дослідження реакції комплексоутворення 3*d*-металів з тіоамідними лігандами методом прямого синтезу.

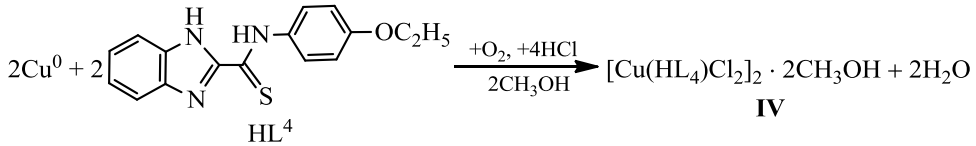
Результати дослідження

Раніше в роботі [1] нами була досліджена протонодонорна система HL–ROH–HCl–O_2 та отримані координаційні сполуки купруму(II) **I – III** за загальною схемою:

$$2Cu^0 + 2HL^{1\text{-}3} + 4HCl \xrightarrow[ROH]{+\,O_2} \underset{\textbf{I – III}}{[Cu(HL^{1\text{-}3})Cl_2]_2} + 2H_2O \qquad (1)$$

$HL^{1\text{-}3}$: $C_7H_5N_2C(=S)NHC_6H_4R^{1\text{-}3}$; R^1 = H, **I**; R^2 = 4–CH_3, **II**; R^3 = 4–Br, **III**.

Елементним аналізом та ІЧ-спектральними дослідженнями було встановлено склад і будову координаційних сполук **I** – **III** та зроблено припущення, що центральний йон купруму(II) є п'ятикоординованим, а самі комплекси **I** – **III** мають димерну будову. З метою підтвердження цього факту нами прямим синтезом додатково було отримано комплекс **IV** за схемою



(2)

Склад координаційної сполуки **IV** визначали елементним аналізом, а будову – ІЧ-спектроскопічними дослідженнями, порівнюючи характеристичні коливання тіоамідної групи (–C(=S)N–) тіоамідного ліганда та сполуки **IV**, що має складну валентно-деформаційну природу; ν (N–H) і (C=N) гетероциклічного фрагменту та тіоамідної групи [1], та методом рентгеноструктурного аналізу.

Рентгеноструктурним аналізом встановлено, що координаційна сполука **IV** являє собою двоядерний комплекс купруму(II) складу $Cu_2L_2Cl_4$ ($L = C_{16}H_{30}N_3OS$) та метилового спирту у співвідношенні 1 : 2. Комплекси знаходяться в окремому положенні в центрі інверсії, розташованій по середині лінії, що поєднує атоми купруму. Кожний атом купруму(II) п'ятикоординований трьома атомами хлору, два із яких є містковими, і атомами нітрогену та сульфуру тіоамідного ліганда. Координаційний поліедр являє собою сильно викривлену тригональну біпіраміду, в якій атоми N(1) і Cl(2A) знаходяться в аксіальному положенні, а S(1), Cl(1) і Cl(2) – в екваторіальному відносно центрального йону Купруму(II).

Висновки

1. Методом прямого синтезу отримано ди(μ-хлоро)-дихлоро-біс[бензімідазол-2-N-(4-етоксифеніл)карботіоамід]купруму(II).
2. Елементним аналізом та ІЧ-спектроскопією досліджено склад та будову комплексу. Рентгеноструктурним аналізом встановлено просторову будову сполуки $[Cu(C_{32}H_{30}N_6O_2S_2)Cl_4] \cdot 2CH_3OH$ та доведено димерну будову комплексних сполук загальної формули $[Cu(HL^{1\text{-}4})Cl_2]_2$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Ranskiy A. Direct synthesis of cuprum(II) complex compounds based on thioamide ligands / A. Ranskiy, N. Didenko // Chemistry and Chemical Technology. – 2014. – Vol. 8, № 4. – P. 371–378.
2. Ранський А. П., Бойченко С. В., Гордієнко О. А., Діденко Н. О., Волошинець В. А. Композиційні мастильні матеріали на основі тіоамідів та їх комплексних сполук. Синтез. Дослідження. Використання. – Вінниця ВНТУ. – 2012. – 328 с.
3. Биометические металл-хелаты меди (II) с N, S, (O, Se)-лигандным окружением – новые синтетические модели активных центров медьсодержащих протеинов / [А. И. Ураев, А. Л. Ниворожкин, О. Ю. Коршунов и др.] // Координац. химия. – 1999, Т. 25. – № 1. – С. 79–80.
4. Діденко Н. О. Синтез, будова та біологічна активність комплексів кобальту (II), (III) / Н. О. Діденко, А. П. Ранський // Вісник Вінницького політехнічного інституту. – 2012. – № 3. – С. 182–188.

Ранський Анатолій Петрович – доктор хім. наук, професор, завідувач кафедри хімії та хімічної технології, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, email: ranskiy@gmail.com

Діденко Наталя Олександрівна – канд. хім. наук, старший викладач кафедри фармацевтичної хімії, Вінницький національний медичний університет імені М. І. Пирогова, м. Вінниця

Anatoliy P. Ranskiy – Dr. Sc. (Chem.), Professor, Head of the Department of Chemistry and Chemical Technology, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, email: ranskiy@gmail.com

Natalya O. Didenko – Ph.D. (Chem.), senior lecturer, Department of Pharmaceutical Chemistry, National Pirogov Memorial Medical University, Vinnytsia