

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.737

МОЛЕКУЛЯРНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СМЕШАННО-ЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСА КАДМИЯ С *n*-ГИДРОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТОЙ И МОНОЭТАНОЛАМИНОМА.Б. Ибрагимов¹, Ж.М. Ашуров², Б.С. Закиров¹¹Институт общей и неорганической химии АН республики Узбекистан, Ташкент

E-mail: aziz_ibragimov@mail.ru

²Институт биорганической химии АН республики Узбекистан, Ташкент

Статья поступила 31 мая 2016 г.

Из раствора $\text{Cd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$, *n*-гидроксibenзойной кислоты (ПГБК) и моноэтанолamina (МЭА) в водном этаноле выращены монокристаллы смешанно-лигандного комплекса кадмия состава $\text{Cd}(\text{ПГБК})_2(\text{МЭА})_2$. Кристаллографические данные: $a = 11,6400(2)$, $b = 10,1363(1)$, $c = 16,6296(2)$ Å, $\beta = 93,937(1)^\circ$, пр. гр. $I2/a$, $V = 1957,44(5)$ Å³, $Z = 4$. В комплексной молекуле, расположенной на оси второго порядка, лиганды обоих типов бидентатно связаны к иону кадмия, имеющему координационное число 8. В кристаллической структуре две Н-связи $\text{O}—\text{H}\cdots\text{O}$ типа объединяют комплексные молекулы в слои, параллельные плоскости *ab*.

DOI: 10.15372/JSC20170320

Ключевые слова: *n*-гидроксibenзойная кислота, моноэтанолamin, комплекс кадмия, PCA, молекулярная структура.

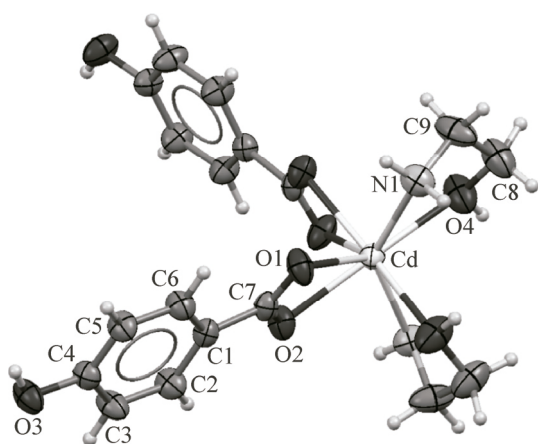
Нами проводится систематическое изучение образования смешанно-лигандных металлокомплексов на основе простых производных бензойной кислоты и этаноламинов. Так, на примере *n*-нитробензойной кислоты и триэтанолamina мы получили смешанно-лигандные комплексы трех металлов с различным составом и строением [1].

n-Гидроксibenзойная кислота (ПГБК), которая является природным соединением, обладает широким спектром биологического действия [2], в том числе слабой ростстимулирующей [3] и антимикробной [4] активностью. Последние могут быть заметно увеличены с помощью получения смешанно-лигандных комплексов металлов с участием второго лиганда, проявляющего такое же биологическое действие, например, моноэтанолamina (МЭА), который характеризуется умеренными ростстимулирующими и антимикробными свойствами [5].

В рамках наших систематических исследований впервые получили смешанно-лигандный комплекс кадмия с ПГБК и МЭА (1). Настоящее сообщение посвящено молекулярной и кристаллической структуре этого соединения.

Экспериментальная часть. Для синтеза соединения **1** к раствору 0,115 г (0,5 ммоль) $\text{Cd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ в 5 мл смеси вода—этанол (1:0,25 по объему) прибавляли горячий этанольный раствор 0,138 г (1 ммоль) ПГБК. К полученной смеси прикапывали 60 мкл МЭА при постоянном перемешивании. Через 10 сут выпадали призматические кристаллы, из которых выбрали монокристаллы для последующего PCA.

Экспериментальные данные для PCA (7328 отражений) были собраны с помощью программы *StuysAlisPro* [6] на рентгеновском дифрактометре *Xcalibur R* (Великобритания) на $\text{CuK}\alpha$ -излучении. Параметры кристалла с брутто-формулой $\text{C}_{18}\text{H}_{24}\text{CdN}_2\text{O}_8$: $a = 11,64001(17)$,

Строение молекулы **1**.

Пронумерованы неводородные атомы независимой части элементарной ячейки. Термические эллипсоиды показаны на уровне 50%-й вероятности

$b = 10,13628(14)$, $c = 16,6296(2)$ Å; $\beta = 93,9373(13)^\circ$, $V = 1957,44(5)$ Å³, $Z = 4$, пр. гр. $I2/a$, $d_{\text{выч}} = 1,727$ г/см³. Поправка на поглощение была введена мультискан-методом этой же программы. Структура была расшифрована прямым методом [7] и уточнена методом наименьших квадратов по 2034 независимым отражениям с помощью пакета программ SHELXS-97 [8]. Все неводородные атомы были уточнены анизотропно, а атомы водорода были размещены на

расчетных позициях, их термические параметры были фиксированы и координаты уточнены изотропно до $R = 0,036$ и $\text{GOOF} = 1,04$. Молекулярная структура была нарисована с помощью программного комплекса MERCURY [9]. Структура зарегистрирована в Кембриджском банке структурных данных <http://www.ccdc.cam.ac.uk>, e-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk; номер депозита CCDC 1482125.

Обсуждение результатов. В координационном соединении **1** ион кадмия расположен на оси второго порядка. Поэтому в независимой части элементарной ячейки находится половина комплексной молекулы, содержащей молекулу ПГБК и молекулу МЭА (см. рисунок). ПГБК бидентатно скоординирована через карбоксилатную группу. МЭА хелатно связан к иону металла с помощью атомов азота и кислорода. В результате симметрического преобразования двойной оси к иону кадмия окажутся связанными четыре молекулы лигандов с координационным числом 8. Координационный полиэдр трудно описывается известными многогранниками, но приблизительно находится между двухшапчной тригональной призмой и свернутым кубом.

Компенсация заряда Cd^{2+} осуществляется за счет перехода двух скоординированных молекул ПГБК в бензоатную форму. Карбоксилатная группа этих молекул наклонена на $12,10^\circ$ по отношению к ароматическому циклу. Длины связей атома металла находятся в достаточно широком интервале $2,312(3)$ — $2,629(2)$ Å, в то время как валентные углы покрывают интервал $51,79(7)$ — $160,02(9)^\circ$.

В кристаллической структуре комплексная молекула **I** (x, y, z) имеет Н-связь $\text{O4—H}\cdots\text{O1}$ ($2,660(4)$ Å, $167(6)^\circ$) с молекулой **II** ($-1/2+x, -y, z$) и замыкает centrosymmetricный цикл с графсетом $R_2^2(8)$ [10]. Эта же молекула **I** (x, y, z) образует другую Н-связь $\text{O3—H}\cdots\text{O2}$ ($2,666(3)$ Å, 175°) с молекулой **III** ($1/2+x, 1-y, z$) с закрытием centrosymmetricного цикла большего размера — $R_2^2(20)$. Оба атома водорода аминогруппы не участвуют в образовании Н-связей. Две указанные Н-связи $\text{O—H}\cdots\text{O}$ типа генерируют двумерную структуру, параллельную плоскости ab .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashurov J.M., Ibragimov A.B., Ibragimov B.T. // Polyhedron. – 2015. – **102**. – P. 441 – 446.
2. Manuja R., Sachdeva Sh., Jain A., Chaudhary J. // Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res. – 2003. – **22**, N 2. – P. 109 – 115.
3. Kamaya Y., Tsuboi S., Takada T. et al. // Arch. Environ. Contam. Toxicol. – 2006. – **51**. – P. 537 – 541.
4. Cho J.Y., Moon J.H., Seong K.Y. et al. // Biosci. Biotechnol. Biochem. – 1998. – **62**, N 11. – P. 2273 – 2276.
5. Ethanolamines — Advances in Research and Application. Edition. / Eds. Q. Ashton Acton. – Scholarly editions, Atlanta, USA, 2013.
6. CrysAlisPro. Ver. 1.171.33.40. – UK: Oxford Diffraction, 2007.
7. Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr. – 1990. – **A46**. – P. 467 – 473.
8. Sheldrick G.M. // SHELXS97, SHELXL97, Programs for Crystal Structures Solution and Refinement. – University of Göttingen, Göttingen, Germany, 1997.
9. Macrae C.F., Bruno I.J., Chisholm J.A. et al. // J. Appl. Cryst. – 2008. – **41**. – P. 466 – 470.
10. Etter M.C. // Acc. Chem. Res. – 1990. – **23**. – P. 120 – 126.