



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 36760

(13) U

(51) МПК (2006)

C01G 9/00

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ
І НАУКИ УКРАЇНИДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІОПИС
ДО ПАТЕНТУ
НА КОРИСНУ МОДЕЛЬвидається під
відповідальність
власника
патенту

(54) МОЛЕКУЛЯРНИЙ КОМПЛЕКС ЦИНКУ З 3-(ПІРИДИН-2-ІЛ)-5-(2-САЛІЦИЛІДЕНІМІНОФЕНІЛ)-1Н-1,2,4-ТРИАЗОЛОМ

1

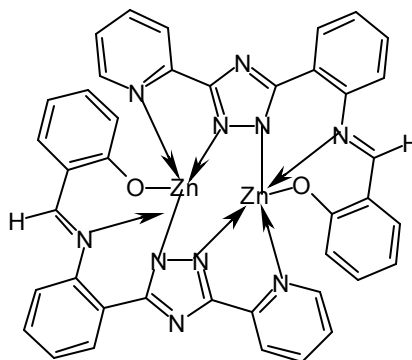
2

(21) u200805938

(22) 07.05.2008

(24) 10.11.2008

(46) 10.11.2008, Бюл. № 21, 2008 р.

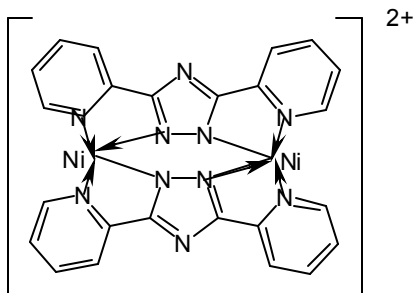
(72) ШУЛЬГІН ВІКТОР ФЕДОРОВИЧ, UA, ГУСЕВ
ОЛЕКСІЙ МИКОЛАЄВИЧ, UA(73) ТАВРІЙСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИ-
ТЕТ ІМ. В.І. ВЕРНАДСЬКОГО, UA(57) Молекулярний комплекс цинку з 3-(піридин-2-
іл)-5-(2-саліциліденімінофеніл)-1Н-1,2,4-триазолом
формули

Технічне рішення належить до області коор-
динаційних сполук, які мають люмінесцентні влас-
тивості, зокрема, координаційних сполук металів з
похідними 1,2,4-триазолу.

Відомі комплекси 1,2,4-триазолу та його
похідних із цинком, рутенієм і рядом інших
металів, які мають люмінесцентну активність.
[Jaap G. Haasnoot. Coord. Chem. Rev. -2000. - 200-
202. P.131-185].

Недоліком аналогів є обмежена розчинність у
малополярних розчинниках через їх іоногенну
природу.

За найближчий аналог було обрано біядерний
комплекс нікелю (II) з 3,5-ди(піридин-2-іл)-1,2,4-
триазолом.

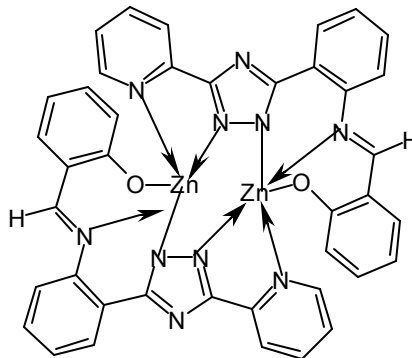


[F.S. Keij, R.A.G. de Graaff, J.G. Haasnoot, J.
Reedijk, J. Chem. Soc. Dalton Trans.-1984.-P.2093].

Недоліком найближчого аналога є іоногенна
природа речовини, яка приводить до зниження
розчинності комплексу у малополярних розчинни-
ках.

В основу корисної моделі поставлено завдан-
ня вдосконалити комплекси похідних 1,2,4-
триазолу.

Поставлене завдання вирішується тим, що
пропонується молекулярний комплекс цинку з 3-
(піридин-іл)-5-(саліциліденіміно-феніл)-1Н-1,2,4-
триазолом, формули

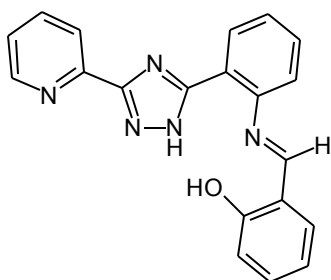


Наявність двох рухливих атомів водню у вихі-
дному проліганді

(13) U

(11) 36760

(19) UA



дозволяє йому координувати катіон цинку з утворенням біядерної координаційної сполуки неіоногенної природи.

Досліджувана координаційна сполука отримана за наступною методикою. 2,1 ммоль саліцилового альдегіду в 10 мл етанолу додали до розчину 2 ммоль 3-(піридин-2-іл)-5-(2-амінофеніл)-1H-1,2,4-триазолу в 10 ммоль етанолу. Отриманий розчин перемішували на магнітній мішалці при нагріванні протягом однієї години. До реакційної суміші додали 2 ммоль дигідрату ацетату цинку і перемішували ще 2 години. При цьому утворились жовті кристали комплексної сполуки. Осад залишили на 12 годин під маточним розчином, відфільтрували, промили спиртом, висушили на повітрі. Вихід продукту склав 75 % від теоретичного у розрахунку на триазол. За результатами елементного аналізу склад сполуки відповідає формулі $[Zn_2L_2] \cdot 0,5EtOH$

($H_2L = 3$ -(піридин-2-іл)-5-(2-саліциліденіміно-феніл)-1H-1,2,4-триазол. Знайдено, %: Zn - 15,62; N 16,36. Для складу $C_{41}H_{29}N_{10}O_{2,5}Zn_2$, обчислено, %: Zn - 15,59; N 16,66.

Брутто-формула: $C_{41}H_{29}N_{10}O_{2,5}Zn_2$

Структура:

Комплекс кристалізується із суміші диметилсульфоксид - етанол (~2:1 за об'ємом) у вигляді сольвату з етанолом складу $[Zn_2L_2] \cdot 0,5EtOH$. У біядерному комплексі два іони цинку координовані двома містковими лігандами. Кожний атом цинку перебуває у перекрученому тетрагонально-пірамідальному оточенні, яке утворено з чотирьох атомів азоту і одного атома кисню, що займає аксіальну позицію. Центральний шестичленний металоцикл - Zn_2N_4 - має конформацію ванни. Атоми цинку зміщено із площини чотирьох атомів азоту в бік на 0,57 і 0,64 Å; у той же бік зміщено апікальні атоми кисню, внутрішньо молекулярна відстань $Zn \dots Zn$ дорівнює 4,038 Å. Між атомами кисню ліганду і сольватної молекули етанолу спостерігається утворення водневого зв'язку ($O \dots O$ складає 2,84 Å).

Молекулярна природа комплексу збільшує його розчинність у малополярних органічних розчинниках, зокрема у хлороформі, дихлоретані, діоксані.