УДК 546.98:547-304.7: 547.793.3

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ АЦИКЛИЧЕСКИХ ДИАМИНОКАРБЕНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ(II), СОДЕРЖАЩИХ 1,2,4-ОКСАДИАЗОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

© 2020 г. С. В. Байков^{а,*}, Ю. А. Труханова^b, М. В. Тарасенко^c, М. А. Кинжалов^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб. 7–9, Санкт-Петербург, 199034 Россия ^b Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет, Санкт-Петербург, 197376 Россия ^c Центр трансфера фармацевтических технологий имени М. В. Дорогова, Ярославский государственный педагогический университет имени К.Д. Ушинского, Ярославль, 150000 Россия *e-mail: sergei.v.baikov@yandex.ru

> Поступило в Редакцию 19 августа 2020 г. После доработки 19 августа 2020 г. Принято к печати 24 августа 2020 г.

Реакция анилинов, содержащих 1,2,4-оксадиазольный фрагмент, с бис(ксилилизоцианидным) комплексом Pd(II) приводит к образованию ациклических диаминокарбеновых комплексов. Оксадиазольный цикл при этом во взаимодействии не участвует. Состав и строение полученных комплексов подтверждены данными масс-спектрометрии, спектроскопии ЯМР и данными рентгеноструктурного анализа.

Ключевые слова: ациклические диаминокарбеновые комплексы палладия, оксадиазолы, изоцианидные лиганды, *π*–*π*-стекинг

DOI: 10.31857/S0044460X20100121

Изучение взаимодействия N-нуклеофилов с изоцианидами, координированными к переходным металлам (Pd, Pt, Au), является приоритетным направлением исследований в области неорганической и координационной химии [1-6]. Его актуальность обусловлена большой практической значимостью образующихся в результате данной реакции ациклических диаминокарбеновых комплексов. Например, ациклические диаминокарбеновые комплексы Pd(II) являются эффективными катализаторами реакций кросс-сочетания (Сузуки [7-15], Соногаширы [9, 16-22], Хиямы [23, 24], Хека [25]) и не уступают по своим характеристикам самым популярным катализаторам на основе N-гетероциклических карбенов (NHC) [2, 26]. В дополнение к синтетическому применению относительно недавно подобные комплексы стали активно изучаться в роли антибактериальных средств [27], противораковых агентов [28-30], а также строительных блоков для создания супрамолекулярных ансамблей методами инженерии кристаллов [31, 32].

Реакция N-нуклеофилов с изоцианидными комплексами описана как для соединений с одним нуклеофильным центром (например, амины) [33, 34], так и для полинуклеофилов (фенилендиамины, аминопиридин, аминотиазолы, иминоиндалиноны) [35–40]. В первом случае присоединение нуклеофила, как правило, происходит исключительно к одному изоцианидному лиганду, который превращается в диаминокарбен, а остальные лиганды и металлоцентр не затрагиваются. В случае же ди- и полинуклеофилов во взаимодействии могут участвовать и остальные лиганды, что приводит к образованию различных типов хелатных карбеновых комплексов [5, 6, 27].

Одними из потенциальных полинуклеофилов являются анилины, содержащие 1,2,4-оксадиазо-







п-амино (2, 5), *м*-амино (3, 6), *о*-амино (4, 7).

льный заместитель. Интерес к данным соединениям обусловлен широкой востребованностью производных 1,2,4-оксадиазола в медицинской химии [41–50]. Более того, 1,2,4-оксадиазолы используются в качестве органических лигандов для дизайна металлокомплексных препаратов [51–53]. В частности, описана серия обладающих противоопухолевыми свойствами комплексов Au(I) и Ag(I) с карбеновыми лигандами, в периферию которых включен 1,2,4-оксадиазольный цикл [54]. Поэтому исследование их реакционной способности в отношении координированных с переходными металлами изоцианидов и получение соответствующих диаминокарбеновых комплексов – актуальная задача.

1,2,4-Оксадиазольный цикл, как изоэлектронный аналог амидной и алкоксикарбонильной групп [55], является электроноакцепторным заместителем и должен понижать нуклеофильность аминогруппы. Кроме того, атомы азота гетероцикла способны координироваться с различными переходными металлами [53, 56–59], включая палладий [60, 61]. Целью настоящей работы являлось определение реакционной способности как самого 1,2,4-оксадиазольного цикла, так и аминогруппы ароматического кольца в реакции с *cis*- [PdCl₂(CNXyl)₂]. Работа состояла из трех этапов: синтеза изомерных анилинов с оксадиазольным заместителем в *орто-*, *мета-* и *пара-*положениях, изучения их взаимодействия с *cis-*[PdCl₂(CNXyl)₂] и исследования строения образующихся ациклических диаминокарбеновых комплексов методами спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии высокого разрешения и PCA.

Традиционно анилины, содержащие 1,2,4-оксадиазольный цикл, получают восстановлением соответствующих нитросоединений (схема 1, *a*) [62–66], либо с привлечением защитных групп (схема 1, δ) [67].

Недавно в серии работ [68–70] было показано, что система NaOH–ДМСО является перспективной средой для синтеза разнообразных 3,5-дизамещенных 1,2,4-оксадиазолов. Например, реакция амидоксимов со сложными эфирами, протекающая при температуре окружающей среды, позволяет получать соединения, содержащие в качестве периферийных заместителей ароматические и алифатические амины, а также лабильные гетероциклы [71–73]. Однако сложные эфиры ароматических аминокислот, в том числе метил-4-аминобензоат, оказались малоактивны в данной реакции.



i, CHCl₃, 20°C, 36 ч (**5**, **6**); *ii*, 1,2-дихлорэтан, Δ, 48 ч (**7**). *n*-амино (**5**, **9**), *м*-амино (**6**, **10**), *о*-амино (**7**, **11**).

Поскольку данный метод удобнее многостадийных подходов, изложенных выше, мы попробовали его модифицировать для малоактивных эфиров аминобензойных кислот **2–4**. В результате было обнаружено, что для инициирования целевой реакции достаточно умеренного нагревания реакционной массы (60°С). Таким образом, была синтезирована серия анилинов, содержащих 1,2,4-оксадиазольный фрагмент **5–7** (схема 2).

Далее была изучена реакционная способность соединений 5-7 по отношению к cis-[PdCl₂(CNXyl)₂] 8 (схема 3). Взаимодействие соединений 5-7 и комплекса 8 протекает при комнатной температуре и приводит к образованию диаминокарбеновых комплексов 9-11. Амин 7 оказался малоактивным и в указанных условиях за 72 ч аналитический выход комплекса 11, по данным спектроскопии ЯМР ¹Н, составил всего 21%, поэтому синтез комплекса 11 проводили при кипячении в 1,2-дихлорэтане (DCE) в течение 48 ч (выход 49% после перекристаллизации из CHCl₃). Во всех случаях в реакцию вступает только один изоцианидный лиганд. Это связано с тем, что образующийся карбеновый лиганд является более сильным донором, чем изоцианидный, и дезактивирует второй изоцианидный лиганд в реакциях нуклеофильного присоединения [5].

Синтезированные комплексы 9–11 были охарактеризованы с помощью масс-спектрометрии высокого разрешения с ионизацией электрораспылением, спектроскопии ЯМР ¹Н и ¹³С. В масс-спектрах комплексов присутствуют сигналы, соответствующие продуктам фрагментации с отщеплением

ЖУРНАЛ ОБЩЕЙ ХИМИИ том 90 № 10 2020

хлорид-аниона $[M - Cl]^+$. Во всех случаях сигналы имеют характерное изотопное распределение для соответствующего предполагаемым структурам количества атомов палладия и хлора.

С позиции спектроскопии ЯМР ¹Н об образовании диаминокарбеновой системы говорит присутствие двух синглетных сигналов равной интенсивности NH-протонов фрагмента NCN [36] в области ароматических атомов водорода и в области 10.3-10.6 м. д., а также исчезновение сигнала аминогруппы, присутствующего в спектрах исходных соединений 5-7 в области 5.5-7.1 м. д. Высокочастотное расположение (10.3-10.6 м. д.) сигнала одного из NH-протонов в спектрах комплексов 9-11 обусловлено, скорее всего, нековалентным взаимодействием между ними и хлоридным лигандом в растворе, что также наблюдалось в случае других комплексов с ациклическими диаминокарбеновыми лигандами [6, 74, 75]. В случае комплекса 11 другой NH-протон также расположен в высокочастотной области (9.9 м. д.), что связано с образованием внутримолекулярной водородной связи с атомом азота оксадиазольного кольца. В спектрах ЯМР ¹³С присутствует сигнал в области 182-195 м. д., характерный для четвертичного атома углерода диаминокарбеновой системы в комплексах палладия(II) [24, 39, 76, 77]. Кроме того, в спектрах ЯМР ¹Н и ¹³С наблюдается разделение сигналов протонов и углеродов метильных групп ксилильного заместителя в изоцианидном и карбеновом лигандах. Также в спектрах ЯМР ¹³С всех полученных комплексов присутствуют сигналы углеродов оксадиазольного цикла (168 и 176 м. д.) [46, 63, 70, 78].



Общий вид молекул комплексов (а) 9, (б) 10, (в) 11 в кристалле.

Мелленным упариванием растворов в 1.2-дихлорэтане (комплексы 9 и 10) либо в ацетонитриле (комплекс 11) получены монокристаллы, структуру которых изучили методом РСА (см. рисунок). Кристалл комплекса 9 является моногидратом (9·H₂O), тогда как для комплексов 10 и 11 образовались сольваты состава 10·1/2DCE и 11·1/2MeCN. Все три кристаллических образца имеют триклинную сингонию и пространственную группу Р1 (табл. 1). Из данных РСА следует, что все три комплекса 9-11 имеют практически неискаженное плоскоквадратное координационное окружение металлоцентра с иис-расположенными хлоридными лигандами, одним изоцианидным и одним карбеновым лигандами. Значения длин обеих CN связей в карбеновом фрагменте близки по величине и находятся в диапазоне между длиной простой связи C–N и двойной связи C=N. Это указывает на эффективное $n-\pi$ -сопряжение, характерное для диаминокарбеновых комплексов [8, 14, 15, 34, 36, 79]. Молекулы растворителя в сольватах 10·1/2DCE и 11·1/2MeCN, а также воды в гидрате 9. Н₂О удерживаются за счет водородных связей с молекулами комплекса. Во всех структурах присутствует п-п-стекинг между ароматическими кольцами изоцианидного лиганда. Кроме того, в структуре соединения 10 п–п-стекинговое взаимодействие наблюдается и между 3,5-диарилоксадиазольными фрагментами. Детальные геометрические параметры данных структур в сравнении с литературными данными представлены в табл. 2.

Таким образом, установлено, что анилины, содержащие 1,2,4-оксадиазольный заместитель, вступают в реакцию с координированным к Pd(II) изоцианидом, давая диаминокарбеновый продукт, аналогично другим N-нуклеофилам. При этом 1,2,4-оксадиазольный цикл не участвует во взаимодействии в качестве хелатного лиганда, а его влияние на реакционную способность аминогруппы существенно только в случае *орто*-замещенного анилина. Получены и охарактеризованы физико-химическими методами три новых диаминокарбеновых комплекса Pd(II), содержащих в своей периферии 1,2,4-оксадиазольный фрагмент. Структура всех комплексов изучена с помощью рентгеноструктурного анализа.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Органические и неорганические реагенты и растворители, если это не оговорено отдельно, были получены из коммерческих источников (Merck) и использовались без дополнительной очистки. Бензамидоксим **1** и комплекс *cis*-[PdCl₂(CNXyl)₂] **8** синтезированы по литературным методикам [81] и [38] соответственно.

Масс-спектры получены на спектрометре Вruker micrOTOF с ионизацией электрораспылением. Растворитель – МеОН, область регистрации m/z = 50-3000. Значения m/z приведены для сигналов изотопологов с наибольшим содержанием. Спектры ЯМР ¹Н и ¹³С зарегистрированы на спектрометре Bruker 400 MHz Avance. Измерения про-

Параметр	9	10	11		
M	694.92	726.38	1394.85		
Т, К	100.00(10)	100.00(10)	100.00(10)		
Размер кристалла, мм	$0.16 \times 0.15 \times 0.12$	0.13 imes 0.12 imes 0.12	0.2 imes 0.14 imes 0.11		
Сингония	Триклинная	Триклинная	Триклинная		
Группа симметрии	P1	<i>P</i> 1	<i>P</i> 1		
<i>a</i> , Å	12.6894(2)	11.1620(2)	10.7521(3)		
b, Å	15.7269(3)	12.7179(2)	14.3542(5)		
<i>c</i> , Å	16.0157(3)	13.3786(1)	22.9481(5)		
α, град	90.766(2)	71.717(1)	99.618(2)		
β, град	92.5180(10)	81.543(1)	90.845(2)		
ү, град	90.671(2)	81.716(1)	109.773(3)		
<i>V</i> , Å ³	3192.56(10)	1773.98(5)	3276.38(17)		
Ζ	4	2	2		
$d_{\rm выч}, \Gamma/{\rm cm}^3$	1.446	1.360	1.414		
μ, мм ⁻¹	6.521	6.548	6.339		
F(000)	1416.0	738.0	1420.0		
Область сканирования по 20, град	6.974–155.018	7–154.382	6.656–152.336		
Mutanna III HUHAKOON	$-16 \le h \le 16; -19 \le k \le 19;$	$-14 \le h \le 14; -16 \le k \le 15;$	$-13 \le h \le 12; -17 \le k \le 17;$		
интервалы индексов	$-20 \le l \le 20$	$-16 \le l \le 16$	$-28 \le l \le 27$		
Общее число отражений	62286	58254	19078		
Число независимых	$12992 [R_{int} = 0.0441,$	7324 [$R_{\rm int} = 0.0738$,	$13436 [R_{int} = 0.0363,$		
отражений (R _{int})	$R_{\sigma} = 0.0339$]	$R_{\sigma} = 0.0325$]	$R_{\sigma} = 0.0430$]		
GOOF	1.092	1.081	1.040		
$R\left[I > 2\sigma(I)\right]$	R = 0.0353,	$R_1 = 0.0433,$	R = 0.0336,		
	wR = 0.0919	$wR_2 = 0.0974$	wR = 0.0848		
R (все ланные)	R = 0.0385,	R = 0.0453,	R = 0.0393,		
	wR = 0.0935	wR = 0.0990	wR = 0.0898		
$\Delta \rho_{max} / \Delta \rho_{min} e / A^3$	1.41/-0.92	0.77/-1.22	1.05/-0.90		

Таблица 1. Основные кристаллографические данные, параметры рентгеноструктурных экспериментов и уточнения для соединений **9–11**

Таблица 2. Геометрические параметры кристаллических структур комплексов 9-11

Связь	<i>d</i> , Å		Литературные данные	Угол	ω, град			Литературные данные	
	9	10	11	[75, 80]		9	10	11	[75, 80]
$C^{10} - N^2$	1.318(4)	1.315(4)	1.318(4)	1.319-1.329	$Cl^2Pd^1C^1$	88.55(8)	93.00(9)	93.20(2)	86-88
$C^{10} - N^3$	1.330(4)	1.333(4)	1.337(3)	1.320-1.339	$Cl^1Pd^1C^{10}$	89.89(8)	88.45(8)	89.10(7)	88–90
$Pd1-C^{10}$	1.983(2)	1.985(3)	1.982(3)	1.977-1.989	$Cl^1Pd^1Cl^2$	92.54(2)	92.02(3)	90.53(9)	92–94
Pd^1-C^1	1.923(3)	1.940(3)	1.922(3)	1.928-1.935	$C^1Pd^1C^{10}$	89.00(11)	86.55(12)	87.21(11)	89–92
N^1-C^1	1.144(4)	1.148(4)	1.153(3)	1.147–1.155	$N^{3}C^{10}N^{2}$	119.5(2)	118.5(3)	118.7(2)	116–118

водили в ДМСО-*d*₆ (для аминов **5**–7) и CDCl₃ (для комплексов **9–11**) при комнатной температуре.

Рентгеноструктурный анализ выполнен на дифрактометре Rigaku SuperNova с использованием рентгеновского излучения CuK_{α} ($\lambda = 0.154184$ нм). Решение структур проводили с помощью программы SHELXT (Intrinsic Phasing) [82] и уточняли SHELXL (метод наименьших квадратов) [83], интегрированными в пакет OLEX2 [84]. Кристаллографические данные были депонированы в Кембриджском центре структурных данных (ССDC 2023515–2023517) и доступны по адресу www. ccdc.cam.ac.uk/retrieving.html.

Получение аминооксадиазолов 5–7. К раствору бензамидоксима 1 (200 мг, 1.5 ммоль) и соответствующего эфира аминокислоты 2–4 (150 мг, 1 ммоль) в ДМСО (2 мл) быстро добавляли растертый NaOH (60 мг, 1.5 ммоль). Реакционную смесь перемешивали при 60°С в течение 4 ч, затем разбавляли холодной водой (20 мл). Полученный осадок отфильтровывали, промывали водой (10 мл) и сушили при комнатной температуре.

4-(3-Фенил-1,2,4-оксадиазол-5-ил)анилин (5) [78]. Выход 145 мг (61%), светло-желтый порошок, т. пл. 157–158°С. Спектр ЯМР ¹Н, δ , м. д.: 6.19 уш. с (2H, NH₂), 6.72 д (2H, Ar, ³J_{HH} = 8.4 Гц), 7.54–7.63 м (3H, Ar), 7.85 д (2H, Ar, ³J_{HH} = 8.4 Гц), 8.02–8.11 м (2H, Ar). Спектр ЯМР ¹³С, $\delta_{\rm C}$, м. д: 110.0 (Ar), 114.0 (2CH, Ar), 127.2 (Ar), 127.5 (2CH, Ar), 129.6 (2CH, Ar), 130.2 (2CH, Ar), 131.8 (CH, Ar), 154.1 (Ar), 168.3 (оксадиазол), 176.5 (оксадиазол). Масс-спектр, *m/z*: 260.0780 [*M* + Na]⁺ (вычислено для C₁₄H₁₁N₃NaO⁺: 260.0794).

3-(3-Фенил-1,2,4-оксадиазол-5-ил)анилин (6). Выход 171 мг (72%), светло-желтый порошок, т. пл. 150–151°С. Спектр ЯМР ¹Н, δ , м. д.: 5.59 уш. с (2H, NH₂), 6.89 д. т (1H, Ar, ³J_{HH} = 7.2, ⁴J_{HH} = 2.1 Гц), 7.25–7.36 м (2H, Ar), 7.40–7.42 м (1H, Ar), 7.57– 7.65 м (3H, Ar), 8.06–8.11 м (2H, Ar). Спектр ЯМР ¹³С, $\delta_{\rm C}$, м. д: 112.7 (CH, Ar), 115.4 (CH, Ar), 119.0 (CH, Ar), 124.3 (Ar), 126.8 (Ar), 127.5 (2CH, Ar), 129.7 (2CH, Ar), 130.5 (CH, Ar), 132.0 (CH, Ar), 150.1 (Ar), 168.6 (оксадиазол), 176.6 (оксадиазол). Масс-спектр, *m*/*z*: 260.0791 [*M* + Na]⁺ (вычислено для C₁₄H₁₁N₃NaO⁺: 260.0794).

2-(3-Фенил-1,2,4-оксадиазол-5-ил)анилин (7) [85]. Выход 187 мг (79%), белый порошок, т. пл. 131–132°С. Спектр ЯМР ¹Н, δ , м. д.: 6.68–6.72 м (1H, Ar), 6.95–7.05 м (3H, Ar + NH₂), 7.33–7.37 м (1H, Ar), 7.56–7.65 м (3H, Ar), 7.85 д. д (1H, Ar, ³*J*_{HH} = 8.1, ⁴*J*_{HH} = 1.6 Гц), 8.14–8.16 м (2H, Ar). Спектр ЯМР ¹³С, $\delta_{\rm C}$, м. д: 104.0 (Ar), 116.1 (CH, Ar), 117.1 (CH, Ar), 126.7 (Ar), 127.7 (2CH, Ar), 128.9 (CH, Ar), 129.6 (2CH, Ar), 132.0 (CH, Ar), 134.5 (CH, Ar), 149.3 (Ar), 167.8 (оксадиазол), 175.2 (оксадиазол). Масс-спектр, *m/z*: 260.0785 [*M* + Na]⁺ (вычислено для C₁₄H₁₁N₃NaO⁺: 260.0794).

Синтез карбеновых комплексов 9–11. Комплексы 9 и 10 получали по следующей методике: раствор соответствующего амина 5 или 6 (12 мг, 0.05 ммоль) в CHCl₃ (3 мл) добавляли к *cis*-[PdCl₂(CNXyl)₂] **8** (22 мг, 0.05 ммоль). Реакционную смесь перемешивали при комнатной температуре в течение 36 ч, затем фильтровали и упаривали при комнатной температуре и нормальном давлении. Полученный осадок промывали Et_2O (3 × 1 мл) и оставляли сушиться на воздухе при комнатной температуре.

Комплекс 11 из-за меньшей реакционной способности исходного анилина 7 синтезировали по другой методике: раствор амина 7 (12 мг, 0.05 ммоль) в 1,2-дихлорэтане (5 мл) добавляли к *cis*-[PdCl₂(CNXyl)₂] 8 (22 мг, 0.05 ммоль). Реакционную смесь кипятили при перемешивании в течение 48 ч, затем упаривали при комнатной температуре и пониженном давлении. К остатку добавляли CHCl₃ (0.5 мл) и смесь кипятили 5 мин, после чего фильтровали. Фильтрат упаривали при пониженном давлении.

Комплекс 9. Выход 29 мг (86%). Спектр ЯМР ¹H, δ , м. д.: 2.20 с (6H, CH₃), 2.53 с (6H, CH₃), 6.97 д (2H, Ar, ³J_{HH} = 7.6 Гц), 7.14–7.25 м (4H, Ar), 7.48– 7.58 м (4H, Ar + NH), 8.13–8.21 м (4H, Ar), 8.26 д (2H, Ar, ³J_{HH} = 8.3 Гц), 10.62 с (1H, NH). Спектр ЯМР ¹³С, $\delta_{\rm C}$, м. д: 18.6 (2CH₃), 18.7 (2CH₃), 122.6 (Ar), 124.0 (2CH, Ar), 126.8 (2C, Ar), 127.5 (2CH, Ar), 127.9 (2CH, Ar), 128.9 (2CH, Ar), 129.3 (2CH, Ar), 129.4 (2CH, Ar), 129.7 (Ar), 129.9 (Ar), 131.1 (Ar), 131.3 (CH, Ar), 132.5 (2C, Ar), 136.0 (Ar), 136.7 (Ar), 142.9 (Ar), 169.0 (оксадиазол), 174.7 (оксадиазол), 181.8 (карбен). Масс-спектр, *m*/*z*: 640.1091 [*M* – Cl]⁺ (вычислено для C₃₂H₂₉ClN₅OPd⁺: 640.1090).

Комплекс 10. Выход 31 мг (91%). Спектр ЯМР ¹Н, б, м. д.: 2.21 с (6Н, CH₃), 2.56 с (6Н, CH₃), 6.89 д $(2H, Ar, {}^{3}J_{HH} = 7.6 \Gamma \mu), 7.05 т (1H, Ar, {}^{3}J_{HH} = 7.6 \Gamma \mu),$ 7.19–7.28 м (3Н, Аг), 7.46–7.58 м (4Н, Аг + NН), 7.75 т (1H, Ar, ${}^{3}J_{\text{HH}} = 8.0$ Гц), 7.82 с (1H, Ar), 8.04–8.17 м (3H, Ar), 9.01 \exists (1H, Ar, ${}^{3}J_{HH} = 8.0 \Gamma \mu$), 10.61 c (1H, NH). Спектр ЯМР ¹³С, δ_C, м. д.: 18.6 (2CH₃), 18.8 (2CH₃), 123.0 (CH, Ar), 124.9 (Ar), 125.7 (2C, Ar), 126.6 (Ar), 126.7 (CH, Ar), 127.5 (2CH, Ar), 127.8 (2CH, Ar), 128.9 (2CH, Ar), 129.3 (2CH, Ar), 129.7 (CH, Ar), 129.8 (CH, Ar), 130.1 (CH, Ar), 131.0 (CH, Ar), 131.4 (CH, Ar), 132.5 (2C, Ar), 136.0 (Ar), 136.7 (Ar), 140.2 (Ar), 168.9 (оксадиазол), 174.4 (оксадиазол), 182.2 (карбен). Масс-спектр, m/z: 640.1070 $[M - Cl]^+$ (вычислено для $C_{32}H_{29}ClN_5OPd^+$: 640.1090).

Комплекс 11. Выход 17 мг (49%). Спектр ЯМР ¹Н, δ, м. д. 2.41 с (6Н, СН₃), 2.62 с (6Н, СН₃), 6.96 т (1H, Ar, ${}^{3}J_{\rm HH}$ = 7.6 Гц), 7.21 д (2H, Ar ${}^{3}J_{\rm HH}$ = 7.6 Гц), 7.27–7.35 м (3Н, Аг), 7.41–7.49 м (3Н, Аг), 7.51–7.58 м (4H, Ar), 7.76 д (1H, Ar, ${}^{3}J_{\text{HH}} = 7.3$ Гц), 7.80 д (1H, Ar, ${}^{3}J_{\rm HH} = 7.3$ Гц), 9.89 с (1H, NH), 10.35 с (1Н, NН). Спектр ЯМР ¹³С, б_с, м. д: 18.4 (2CH₃), 19.0 (2CH₃), 106.8 (Ar), 122.7 (Ar), 124.0 (CH, Ar), 126.0 (2C, Ar), 127.4 (2CH Ar), 127.5 (CH, Ar), 128.2 (2CH, Ar), 128.7 (2CH, Ar), 128.8 (CH, Ar), 128.9 (CH, Ar), 129.2 (2CH, Ar), 130.1 (CH, Ar), 131.3 (CH, Ar), 133.0 (2C, Ar), 135.4 (Ar), 136.0 (Ar), 142.9 (Ar), 143.0 (CH, Ar), 152.8 (Ar), 167.6 (оксадиазол), 174.1 (оксадиазол), 194.3 (карбен). Масс-спектр, m/z: 640.1072 $[M - Cl]^+$ (вычислено для C₃₂H₂₉ClN₅OPd⁺: 640.1090).

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (грант МК-1074.2020.3) с использованием оборудования ресурсных центров Санкт-Петербургского государственного университета «Магнитнорезонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Vignolle J., Cattoën X., Bourissou D. // Chem. Rev. 2009. Vol. 109. N 8. P. 3333. doi 10.1021/cr800549j
- Slaughter L.M. // ACS Catal. 2012. Vol. 2. N 8. P. 1802. doi 10.1021/cs300300y
- Boyarskiy V.P., Bokach N.A., Luzyanin K.V., Kukushkin V.Y. // Chem. Rev. 2015. Vol. 115. N 7. P. 2698. doi 10.1021/cr500380d
- Tšupova S., Rudolph M., Rominger F., Hashmi A.S.K. // Adv. Synth. Catal. 2016. Vol. 358. N 24. P. 3999. doi 10.1002/adsc.201600615
- Кинжалов М.А., Боярский В.П. // ЖОХ. 2015. Т. 85. Вып. 10. С. 1681; Kinzhalov М.А., Boyarskii V.P. // Russ. J. Gen. Chem. 2015. Vol. 85. N 10. P. 2313. doi 10.1134/S1070363215100175
- Kinzhalov M.A., Luzyanin K.V. // Coord. Chem. Rev. 2019. Vol. 399. P. 213014. doi 10.1016/j. ccr.2019.213014
- 7. Luzyanin K.V., Tskhovrebov A.G., Carias M.C., Guedes da Silva M.F.C., Pombeiro A.J.L., Kukushkin V.Y. //

ЖУРНАЛ ОБЩЕЙ ХИМИИ том 90 № 10 2020

Organometallics. 2009. Vol. 28. N 22. P. 6559. doi 10.1021/om900682v

- Kinzhalov M.A., Luzyanin K.V., Boyarskiy V.P., Haukka M., Kukushkin V.Y. // Organometallics. 2013. Vol. 32. N 18. P. 5212. doi 10.1021/om4007592
- Хайбулова Т.С., Боярская И.А., Боярский В.П. // ЖОрХ. 2013. Т. 49. Вып. 3. С. 373; Khaibulova T.S., Boyarskaya I.A., Boyarskii V.P. // Russ. J. Org. Chem. 2013. Vol. 49. N 3. P. 360. doi 10.1134/ S1070428013030081
- Боярская Д.В., Боярский В.П. // ЖОХ. 2016. Т. 86. Вып. 9. С. 1466; Boyarskaya D.V., Boyarskii V.P. // Russ. J. Gen. Chem. 2016. Vol. 86. N 9. P. 2033. doi 10.1134/S1070363216090085
- Михайлов В.Н., Савичева Е.А., Сорокоумов В.Н., Боярский В.П. // ЖОрХ. 2013. Т. 49. Вып. 4. С. 567; Mikhailov V.N., Savicheva E.A., Sorokoumov V.N., Boyarskii V.P. // Russ. J. Org. Chem. 2013. Vol. 49. N 4. P. 551. doi 10.1134/S107042801304009X
- Miltsov S., Karavan V., Boyarsky V., Gómez-de Pedro S., Alonso-Chamarro J., Puyol M. // Tetrahedron Lett. 2013. Vol. 54. N 10. P. 1202. doi 10.1016/j.tetlet.2012.12.060
- Mikhaylov V.N., Sorokoumov V.N., Korvinson K.A., Novikov A.S., Balova I.A. // Organometallics. 2016. Vol. 35. N 11. P. 1684. doi 10.1021/acs.organomet.6b00144
- Chay R.S., Luzyanin K.V., Kukushkin V.Y., Guedes da Silva M.F.C., Pombeiro A.J.L. // Organometallics. 2012. Vol. 31. N 6. P. 2379. doi 10.1021/om300020j
- Chay R.S., Luzyanin K.V. // Inorg. Chim. Acta. 2012. Vol. 380. P. 322. doi 10.1016/j.ica.2011.09.047
- Valishina E.A., Guedes da Silva M.F.C., Kinzhalov M.A., Timofeeva S.A., Buslaeva T.M., Haukka M., Pombeiro A.J.L., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Y., Luzyanin K.V. // J. Mol. Catal. (A). 2014. Vol. 395. P. 162. doi 10.1016/j.molcata.2014.08.018
- Timofeeva S.A., Kinzhalov M.A., Valishina E.A., Luzyanin K.V., Boyarskiy V.P., Buslaeva T.M., Haukka M., Kukushkin V.Y. // J. Catal. 2015. Vol. 329. P. 449. doi 10.1016/j.jcat.2015.06.001
- Savicheva E.A., Kurandina D.V., Nikiforov V.A., Boyarskiy V.P. // Tetrahedron Lett. 2014. Vol. 55. N 13. P. 2101. doi 10.1016/j.tetlet.2014.02.044
- Боярский В.П. // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 8. С. 1247; Boyarskii V.P. // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 8. P. 1663. doi 10.1134/S1070363217080035
- Ryabukhin D.S., Sorokoumov V.N., Savicheva E.A., Boyarskiy V.P., Balova I.A., Vasilyev A.V. // Tetrahedron Lett. 2013. Vol. 54. N 19. P. 2369. doi 10.1016/j. tetlet.2013.02.086
- Mikhaylov V.N., Sorokoumov V.N., Liakhov D.M., Tskhovrebov A.G., Balova I.A. // Catalysts. 2018. Vol. 8. N 4. P. 141. doi 10.3390/catal8040141
- Валишина Е.А., Буслаева Т.М., Лузянин К.В. // Изв. АН. Сер. хим. 2013. Т. 62. № 6. С. 1361; Valishina E.A., Buslaeva Т.М., Luzyanin K.V. // Russ. Chem. Bull. 2013. Vol. 62. N 6. Р. 1361. doi 10.1007/s11172-013-0193-z
- 23. Singh C., Prakasham A.P., Ghosh P. // ChemistrySelect.

2019. Vol. 4. N 1. P. 329. doi 10.1002/slct.201803292

- Singh C., Prakasham A.P., Gangwar M.K., Butcher R.J., Ghosh P. // ACS Omega. 2018. Vol. 3. N 2. P. 1740. doi 10.1021/acsomega.7b01974
- 25. *Dhudshia B., Thadani A.N. //* Chem. Commun. 2006. N 6. P. 668. doi 10.1039/b516398f
- Boyarskiy V.P., Luzyanin K.V., Kukushkin V.Y. // Coord. Chem. Rev. 2012. Vol. 256. N 17. P. 2029. doi 10.1016/j. ccr.2012.04.022
- Михердов А.С., Байков С.В., Проскурина И.К., Шетнев А.А., Котов А.Д. // ЖОХ. 2019. Т. 89. Вып. 10. С. 1572; Mikherdov A.S., Baikov S.V., Proskurina I.K., Shetnev A.A., Kotov A.D. // Russ. J. Gen. Chem. 2019. Vol. 89. N 10. P. 2062. doi 10.1134/S1070363219100128
- Serebryanskaya T.V., Kinzhalov M.A., Bakulev V., Alekseev G., Andreeva A., Gushchin P.V., Protas A.V., Smirnov A.S., Panikorovskii T.L., Lippmann P, Ott I. Verbilo C.M., Zuraev A.V., Bunev A.S., Boyarskiy V.P., Kasyanenko N.A. // New. J. Chem. 2020. Vol. 44. N 15. P. 5762. doi 10.1039/D0NJ00060D
- Bertrand B., Romanov A.S., Brooks M., Davis J., Schmidt C., Ott I., O'Connell M., Bochmann M. // Dalton Trans. 2017. Vol. 46. N 45. P. 15875. doi 10.1039/C7DT03189K
- Williams, M., Green A.I., Fernandez-Cestau J., Hughes D.L., O'Connell M.A., Searcey M., Bertrand B., Bochmann M. // Dalton Trans. 2017. Vol. 46. N 39. P. 13408. doi 10.1039/C7DT02804K
- Ivanov D.M., Kinzhalov M.A., Novikov A.S., Ananyev I.V., Romanova A.A., Boyarskiy V.P., Haukka M., Kukushkin V.Y. // Cryst. Growth. Des. 2017. Vol. 17. N 3. P. 1353. doi 10.1021/acs.cgd.6b01754
- Kinzhalov M.A., Baykov S.V., Novikov A.S., Haukka M., Boyarskiy V.P. // Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2019. Vol. 234. N 3. P. 155. doi 10.1515/zkri-2018-2100
- Rassadin V.A., Yakimanskiy A.A., Eliseenkov E.V., Boyarskiy V.P. // Inorg. Chem. Commun. 2015. Vol. 61. P. 21. doi 10.1016/j.inoche.2015.08.008
- Anisimova T.B., Guedes da Silva M.F.C., Kukushkin V.Y., Pombeiro A.J.L., Luzyanin K.V. // Dalton Trans. 2014. Vol. 43. N 42. P. 15861. doi 10.1039/C4DT01917B
- Tskhovrebov A.G., Luzyanin K.V., Dolgushin F.M., Guedes da Silva M.F.C., Pombeiro A.J.L., Kukushkin V.Y. // Organometallics. 2011. Vol. 30. N 12. P. 3362. doi 10.1021/om2002574
- Kinzhalov M.A., Timofeeva S.A., Luzyanin K.V., Boyarskiy V.P., Yakimanskiy A.A., Haukka M., Kukushkin V.Y. // Organometallics. 2016. Vol. 35. N 2. P. 218. doi 10.1021/acs.organomet.5b00936
- Luzyanin K.V., Pombeiro A.J.L., Haukka M., Kukushkin V.Y. // Organometallics. 2008. Vol. 27. N 20. P. 5379. doi 10.1021/om800517c
- Михердов А.С., Орехова Ю.А., Боярский В.П. // ЖОХ. 2018 Т. 88. Вып. 10. С. 1677; Mikherdov A.S., Orekhova Y.A., Boyarskii V.P. // Russ. J. Gen. Chem. 2018. Vol. 88. N 10. P. 2119. doi 10.1134/S1070363218100158
- Михердов А.С., Тюфяков Н.Ю., Полукеев В.А., Боярский В.П. // ЖОХ. 2018 Т. 88. Вып. 4. С. 631;

Mikherdov A.S., Tiuftiakov N.Y., Polukeev V.A., Boyarskii V.P. // Russ. J. Gen. Chem. 2018. Vol. 88. N 4. P. 713. doi 10.1134/S1070363218040151

- Gee J.C., Fuller B.A., Lockett H-M, Sedghi G., Robertson C.M., Luzyanin K.V. // Chem. Commun. 2018. Vol. 54. N 68. P. 9450. doi 10.1039/C8CC04287J
- Biernacki K., Daśko M., Ciupak O., Kubiński K., Rachon J., Demkowicz S. // Pharmaceuticals. 2020. Vol. 13. N 6. P. 111. doi 10.3390/ph13060111
- Pace A., Buscemi S., Palumbo Piccionello A., Pibiri I. // Adv. Heterocycl. Chem. 2015. Vol. 116. P. 85. doi 10.1016/bs.aihch.2015.05.001
- Welch E.M., Barton E.R., Zhuo J., Tomizawa Y., Friesen W.J., Trifillis P., Paushkin S., Patel M., Trotta C.R., Hwang S., Wilde R.G., Karp G., Takasugi J., Chen G., Jones S., Ren H., Moon Y.-C., Corson D. // Nature. 2007. Vol. 447. N 7140. P. 87. doi 10.1038/nature05756
- Lanier G., Sankholkar K., Aronow W.S. // Am. J. Ther. 2014. Vol. 21. N 5. P. 419. doi 10.1097/ MJT.0b013e31824a0ed7
- Hale M., Wild J., Reddy J., Yamada T., Arjona Ferreira J.C. // Lancet Gastroenterol Hepatol. 2017. Vol. 2. N 8. P. 555. doi 10.1016/S2468-1253(17)30105-X
- Krasavin M., Shetnev A., Sharonova T., Baykov S., Kalinin S., Nocentini A., Sharoyko V., Poli G., Tuccinardi T., Presnukhina S., Tennikova T.B., Supuran C.T. // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 164. P. 92. doi 10.1016/j.ejmech.2018.12.049
- Krasavin M., Lukin A., Vedekhina T., Manicheva O., Dogonadze M., Vinogradova T., Zabolotnykh N., Rogacheva E., Kraeva L., Sharoyko V., Tennikova T., B. Dar'in D., Sokolovich E. // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 166. P. 125. doi 10.1016/j.ejmech.2019.01.050
- Atmaram Upare A., Gadekar P.K., Sivaramakrishnan H., Naik N., Khedkar V.M., Sarkar D., Choudhari A., Mohana Roopan S. // Bioorg. Chem. 2019. Vol. 86. P. 507. doi 10.1016/j.bioorg.2019.01.054
- Abdel hameid M.K., Mohammed M.R. // Bioorg. Chem. 2019. Vol. 86. P. 609. doi 10.1016/j.bioorg.2019.01.067
- Caneschi W., Enes K.B., Carvalho de Mendonça C., de Souza Fernandes F., Miguel, F.B., da Silva Martins J., Costa Couri M.R. // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 165. P. 18. doi 10.1016/j.ejmech.2019.01.001
- Salassa G., Terenzi A. // Int. J. Mol. Sci. 2019. Vol. 20. N. 14. P. 3483. doi 10.3390/ijms20143483
- Mayer J.C.P., Sauer A.C., Iglesias B.A., Acunha T.V., Back D.F., Rodrigues O.E.D., Dornelles L. // J. Organomet. Chem. 2017. Vol. 841. P. 1. doi 10.1016/j. jorganchem.2017.04.014.
- Terenzi A., Barone G., Palumbo Piccionello A., Giorgi G., Guarcello A., Portanova P., Calvaruso G., Buscemi S., Vivona N., Pace A. // Dalton Trans. 2010. Vol. 39. N 38. P. 9140. doi 10.1039/c0dt00266f
- 54. Maftei C.V., Fodor E., Jones P.G., Freytag M., Franz M.H., Kelter G., Fiebig H.H., Tamm M., Neda I. // Eur. J. Med. Chem. 2015. Vol. 101 N 1. P. 431. doi 10.1016/j.ejmech.2015.06.053
- 55. Kumari S., Carmona A.V., Tiwari A.K., Trippier P.C. // J.

Med. Chem. 2020. doi 10.1021/acs.jmedchem.0c00530

- Bokach N.A., Khripoun A.V., Kukushkin V.Y., Haukka M., Pombeiro A.J.L. // Inorg. Chem. 2003. Vol. 42. N 3. P. 896. doi 10.1021/ic026103v
- Klapötke T.M., Mayr N., Stierstorfer J., Weyrauther M. // Chem. Eur. J. 2014. Vol. 20. N 5. P. 1410. doi 10.1002/ chem.201303825
- Klingele J., Kaase D., Schmucker M., Meier L. // Eur. J. Inorg. Chem. 2013. Vol. N 28 P. 4931. doi 10.1002/ ejic.201300511
- Terenzi A., Barone G., Palumbo Piccionello A., Giorgi G., Guarcello A., Pace A. // Inorganica Chim. Acta. 2011. Vol. 373. N 1. P. 62. doi 10.1016/j.ica.2011.03.057
- Bokach N.A., Kukushkin V.Y., Haukka M., Pombeiro A.J.L. // Eur. J. Inorg. Chem. 2005. Vol. 2. N 5. P. 845. doi 10.1002/ejic.200400580
- Richardson C., Steel P.J. // Inorg. Chem. Commun. 2007. Vol. 10. N 8. P. 884. doi 10.1016/j.inoche.2007.04.020
- Тарасенко М.В., Кофанов Е.Р., Байков С.В., Красовская Г.Г., Данилова А.С. // ЖОрХ. 2017. Т. 53.
 Вып. 7. С. 1072; Tarasenko M.V., Kofanov E.R., Baikov S.V., Krasovskaya G.G, Danilova A.S. // Russ. J. Org. Chem. 2017. Vol. 53. N 7. P. 1085. doi 10.1134/ S1070428017070211
- Dokla E.M.E., Fang C-S., Abouzid K.A.M., Chen C.S. // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 182. P. 111607. doi 10.1016/j.ejmech.2019.111607
- Maftei C.V., Fodor E., Jones P.G., Franz M.H., Kelter G., Fiebig H., Neda I. // Beilstein J. Org. Chem. 2013. Vol. 9. P. 2202. doi 10.3762/bjoc.9.259
- Pathak S.K., Nath S., De J, Pal S.K., Achalkumar A.S. // New J. Chem. 2017. Vol. 41. N 18. P. 9908. doi 10.1039/ C7NJ01766A
- O'Daniel P.I., Peng Z., Pi H., Testero S.A, Ding D., Spink E., Leemans E., Boudreau M.A., Yamaguchi T., Schroeder V.A., Wolter W.R., Llarrull L.I., Song W., Lastochkin E., Kumarasiri M., Antunes N.T., Espahbodi M., Lichtenwalter K. // J. Am. Chem. Soc. 2014. Vol. 136. N 9. P. 3664. doi 10.1021/ja500053x
- Liu J., Li H., Chen K-X., Zuo J.-P., Guo Y.-W., Tang W., Li X.-W. // J. Med. Chem. 2018. Vol. 61. N 24. P. 11298. doi 10.1021/acs.jmedchem.8b01430
- Sharonova T., Pankrat'eva V., Savko P., Baykov S., Shetnev A. // Tetrahedron Lett. 2018. Vol. 59. N 29. P. 2824. doi 10.1016/j.tetlet.2018.06.019
- Tarasenko M., Duderin N., Sharonova T., Baykov S., Shetnev A., Smirnov A.V. // Tetrahedron Lett. 2017. Vol. 58. N 37. P. 3672. doi 10.1016/j.tetlet.2017.08.020
- Панкратьева В.Е., Шаронова Т.В., Тарасенко М.В., Байков С.В., Кофанов Е.Р. / ЖОрХ. 2018. Т. 54. Вып. 8. С. 1236; Pankrat'eva V.E., Sharonova T.V., Tarasenko M.V., Baikov S.V., Kofanov E.R. // Russ. J. Org. Chem. 2018. Vol. 54. N 8. P. 1250. doi 10.1134/ S1070428018080213
- Baykov S., Sharonova T., Shetnev A., Rozhkov S., Kalinin S., Smirnov A.V. // Tetrahedron. 2017. Vol. 73. N. 7. P. 945. doi 10.1016/j.tet.2017.01.007
- 72. Shetnev A., Osipyan A., Baykov S., Sapegin A., Chirko-

ЖУРНАЛ ОБЩЕЙ ХИМИИ том 90 № 10 2020

va Z., Korsakov M., Petzer A., Engelbrecht I., Petzer J.P. // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2019.Vol. 29. N 1. P. 40. doi 10.1016/j.bmcl.2018.11.018

- Shetnev A., Baykov S., Kalinin S., Belova A., Sharoyko V., Rozhkov A., Zelenkov L., Tarasenko M., Sadykov E., Korsakov M., Krasavin M. // Int. J. Mol. Sci. 2019. Vol. 20. N 7. P. 1699. doi 10.3390/ijms20071699
- Mikhaylov V.N., Sorokoumov V.N., Novikov A.S., Melnik M.V., Tskhovrebov A.G., Balova I.A. // J. Organomet. Chem. 2020. Vol. 912. P. 121174. doi 10.1016/j. jorganchem.2020.121174
- Kinzhalov M.A., Boyarskiy V.P., Luzyanin K.V., Dolgushin F.M., Kukushkin V.Y. // Dalton Trans. 2013. Vol. 42. N 29. P. 10394. doi 10.1039/c3dt51335a
- Кинжалов М.А., Лузянин К.В., Боярский В.П., Хаукка М., Кукушкин В.Ю. // Изв. АН. Сер. Хим. 2013.
 Т. З. С. 757; Kinzhalov М.А., Luzyanin K.V., Boyarskiy V.P., Haukka M., Kukushkin V.Y. // Russ. Chem. Bull. 2013. Vol. 62. N 3. P. 758. doi 10.1007/s11172-013-0103-4
- Conole D., Beck T.M., Jay-Smith M., Tingle M.D., Eason C.T., Brimble M.A., Rennison D. // Bioorg. Med. Chem. 2014. Vol. 22. N 7. P. 2220. doi 10.1016/j. bmc.2014.02.013
- Luzyanin K.V., Guedes da Silva M.F.C., Kukushkin V.Y., Pombeiro A.J.L. // Inorg. Chim. Acta. 2009. Vol. 362. N 3. P. 833. doi 10.1016/j.ica.2008.02.026
- Kinzhalov M.A., Kashina M.V., Mikherdov A.S., Mozheeva E.A., Novikov A.S., Smirnov A.S., Ivanov D.M., Kryukova M.A., Ivanov A.Y., Smirnov S.N., Kukushkin V.Y., Luzyanin K.V. // Angew. Chem. Int. Ed. 2018. Vol. 57. N 39. P. 12785. doi 10.1002/anie.201807642
- Srivastava R.M., Pereira M.C., Faustino W.W.M., Coutinho K., Dos Anjos J.V., De Melo S.J. // Monatsh. Chem. 2009. Vol. 140. N 11. P. 1319. doi 10.1007/ s00706-009-0186-7.
- Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr. (A). 2015. Vol. 71. N 1. P. 3. doi 10.1107/S2053273314026370
- Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr. (C). 2015. Vol. 71. N 1. P. 3. doi 10.1107/S2053229614024218
- Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. // J. Appl. Crystallogr. 2009. Vol. 42. N 2. P. 339. doi 10.1107/S0021889808042726
- Draghici B., El-Gendy B., Katritzky A. // Synthesis.
 2012. Vol. 2012. N 4. P. 547. doi 10.1055/s-0031-1289673

БАЙКОВ и др.

Synthesis and Study of the Structure of Palladium(II) Acyclic Diaminocarbene Complexes Containing a 1,2,4-Oxadiazole Moiety

S. V. Baikov^{a,*}, Yu. A. Trukhanov^b, M. V. Tarasenko^c, and M. A. Kinzhalov^a

^a St. Petersburg State University, St. Petersburg, 199034 Russia ^b St. Petersburg State University of Chemistry and Pharmacy, St. Petersburg, 197376 Russia ^c M.V. Dorogov Center for Transfer of Pharmaceutical Technologies, K.D. Ushinskii Yaroslavl State Pedagogical University, Yaroslavl, 150000 Russia * e-mail: sergei.v.baikov@yandex.ru

Received August 19, 2020; revised August 19, 2020; accepted August 24, 2020

The reaction of anilines containing a 1,2,4-oxadiazole moiety with the bis(xylylisocyanide) Pd(II) complex leads to the formation of acyclic diaminocarbene complexes. The oxadiazole ring is not involved in the reaction. Composition and structure of the obtained complexes were confirmed by means of mass spectrometry, NMR spectroscopy methods and single crystal X-ray diffraction data.

Keywords: acyclic diaminocarbene palladium complexes, oxadiazoles, isocyanide ligands, π - π -stacking