

СИНТЕЗ, СТРУКТУРНОЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ОСНОВАНИЕМ ШИФФА – ПРОДУКТОМ КОНДЕНСАЦИИ 2-*N*-ТОЗИЛАМИНОБЕНЗАЛЬДЕГИДА И ТРИПТАМИНА

© 2020 г. В. А. Четверикова^a, Л. Д. Попов^{a,*}, С. И. Левченков^{a,b}, А. С. Бурлов^a,
В. А. Лазаренко^c, Я. В. Зубавичус^c, И. Н. Щербаков^a

^a Южный федеральный университет, ул. Зорге 7, Ростов-на-Дону, 344090 Россия

^b Федеральный исследовательский центр «Южный научный центр Российской академии наук»,
Ростов-на-Дону, 344022 Россия

^c Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия
*e-mail: shcherbakov@srfedu.ru

Поступило в Редакцию 1 сентября 2019 г.

После доработки 1 сентября 2019 г.

Принято к печати 5 сентября 2019 г.

Синтезировано и исследовано новое основание Шиффа – продукт конденсации 2-*N*-тозиламинобензальдегида и триптамина. Выполнено физико-химическое исследование и квантово-химическое моделирование таутомерии азометина. Получены и исследованы его комплексы с Zn(II), Cu(II), Ni(II), Co(II) и Fe(III).

Ключевые слова: основания Шиффа, рентгеноструктурный анализ, теория функционала плотности, комплексные соединения

DOI: 10.31857/S0044460X2003014X

Основания Шиффа (азометины) используются в различных областях науки и техники: бионеорганической химии, координационной химии, трибохимии, фармацевтической химии, фотохимии, супромолекулярной химии и т. д. [1–5]. Комплексы с азометинами проявляют магнитные [6–8], фотоактивные [9–10], каталитические [11, 12], биоактивные [13–16] свойства. В литературе описаны многочисленные металлхелаты азометинов на основе *o*-тозиламинобензальдегида, проявляющие выраженные люминесцентные свойства [17–20]. Описан ряд азометинов на основе триптамина, главным образом, производных салицилового альдегида [21–30].

В продолжение исследований по изучению комплексообразующих свойств азометинов и гидразонов 2-*N*-тозиламинобензальдегида нами синтезировано и исследовано основание Шиффа **1** – про-

дукт конденсации 2-*N*-тозиламинобензальдегида и триптамина – и ряд комплексов на его основе. Синтез соединения **1** осуществляли взаимодействием 2-*N*-тозиламинобензальдегида с триптамином в толуоле при кипячении (схема 1).

Состав и строение соединения **1** установлены методами элементного анализа, ИК и ЯМР спектроскопии. Известно, что азометины и гидразоны на основе 2-*N*-тозиламинобензальдегида находятся в аминной таутомерной форме. Соединение **1** не является исключением; согласно данным выполненных квантово-химических расчетов методом DFT/B3LYP/6-311G(d), полная энергия аминного таутомера **A** ниже энергии иминного таутомера **B** на 6.9 ккал/моль в вакууме и на 10.2 ккал/моль в этанольном растворе (табл. 1, рис. 1).

Взаимодействием азометина **1** (HL) с ацетатами цинка(II), меди(II), никеля(II) и кобальта(II)

Схема 1.

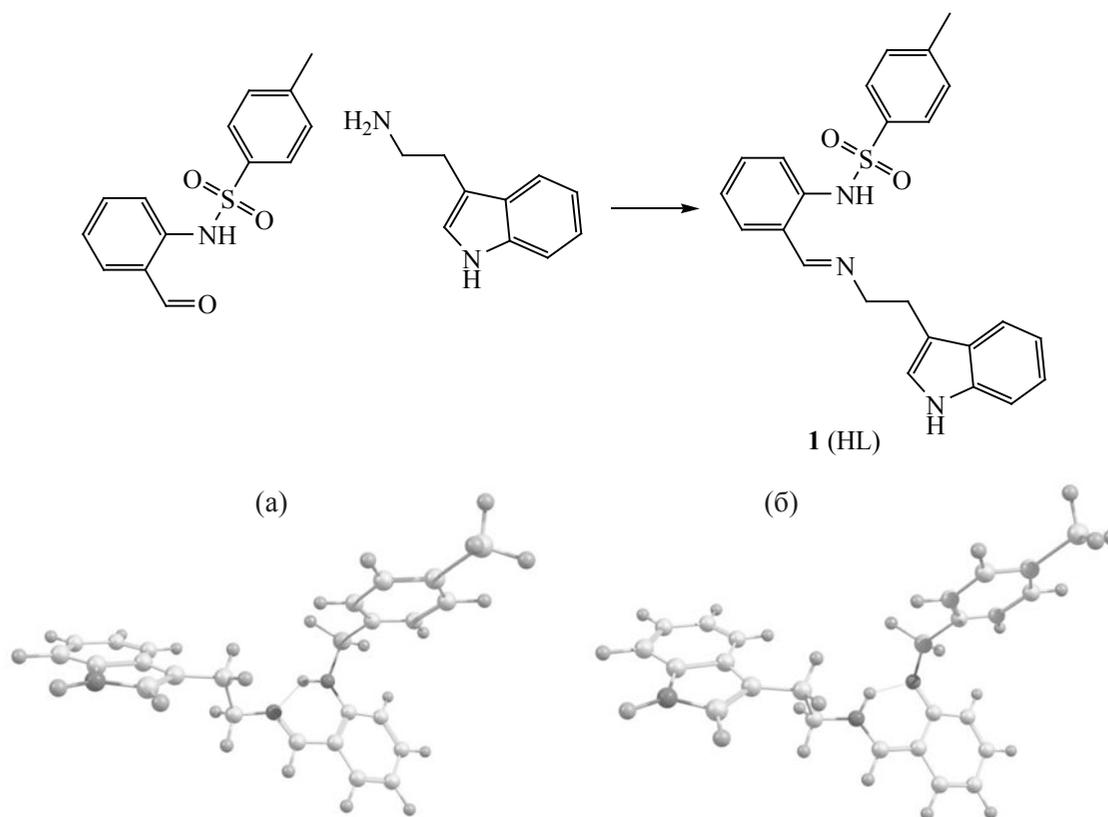


Рис. 1. Общий вид наиболее устойчивых конформеров таутомерных форм (а) **A** и (б) **Б** соединения **1** по данным расчетов.

либо хлоридом железа(III) в метаноле получены комплексы **2–5** состава ML_2 ($M = Zn, Cu, Ni, Co$) и комплекс **6** FeL_2Cl . Состав и строение комплексов установлено методами элементного анализа, ИК и ЯМР 1H спектроскопии, магнетохимии и РСА (для сольвата комплекса кобальта **5**).

В ИК спектрах комплексов по сравнению со спектром исходного азометина отмечено низкочастотное смещение (на $10–25\text{ см}^{-1}$) полосы поглощения $\nu(C=N)$, что указывает на участие в координации азометинового атома азота. Узкая полоса $\nu(N-H)$, проявляющаяся в спектре азометина **1** при 3391 см^{-1} , смещается в область $3456–3460\text{ см}^{-1}$ с

заметным уменьшением относительной интенсивности; незначительное смещение в высокочастотную область претерпевают также полосы симметричных и асимметричных валентных колебаний групп $S=O$.

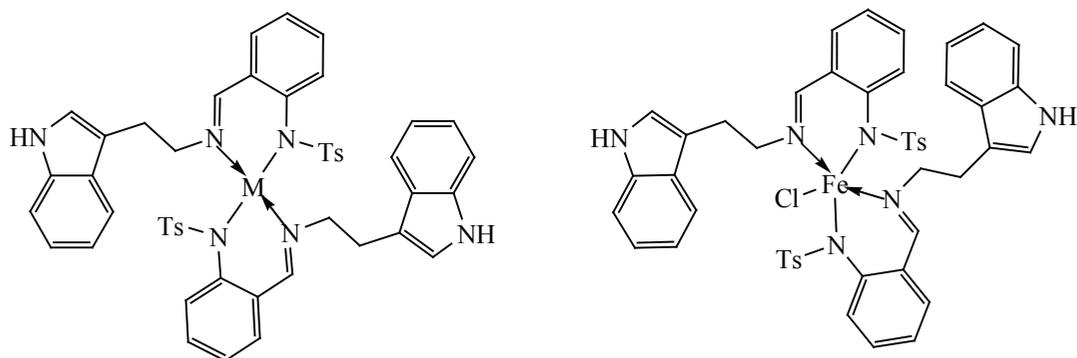
В спектре ЯМР 1H цинкового комплекса **2** отмечено исчезновение сигнала аминного протона при сохранении сигнала протона группы NH индольного фрагмента.

Величины эффективных магнитных моментов комплексов **3–6** находятся в области обычных значений для соответствующих ионов в высокоспиновом состоянии. Существенно завышенные по

Таблица 1. Полная энергия и относительная устойчивость таутомерных форм **A** и **Б** соединения **1** в вакууме и в этаноле

Форма	E , а. е.		ΔE , ккал/моль	
	вакуум	этанол	вакуум	этанол
A	–2331.1496941	–2331.1669446	0.00	0.00
Б	–2331.1395389	–2331.1551575	6.37	7.40

Схема 2.



M = Zn (2), Cu (3), Ni (4), Co (5).

Таблица 2. Избранные межатомные расстояния и валентные углы в координационных полиэдрах атомов кобальта в молекуле сольвата комплекса 5

Связь	<i>d</i> , Å	Связь	<i>d</i> , Å	Угол	α, град	Угол	α, град
Co ¹ –N ¹	2.0069(16)	Co ¹ –N ³	1.9887(18)	N ³ Co ¹ N ¹	132.77(7)	N ² Co ¹ N ¹	94.14(7)
Co ¹ –N ²	2.0067(18)	Co ¹ –N ⁴	2.0060(18)	N ³ Co ¹ N ²	112.24(7)	N ⁴ Co ¹ N ¹	115.22(7)
				N ³ Co ¹ N ⁴	94.18(8)	N ⁴ Co ¹ N ²	107.21(7)

сравнению с чисто спиновым значением величины $\mu_{эфф}$ медного (3) и никелевого (4) комплексов (2.29 и 3.28 М. Б. соответственно при 293 К) позволяют предположить, что ионы Cu(II) и Ni(II) находятся в тетраэдрическом окружении [31].

Совокупность имеющихся данных указывает на бидентатную координацию лиганда к ионам металла в монодепротонированной форме и позволяет приписать комплексам Zn, Cu, Ni, Co строение 2–5, а комплексу Fe – структуру 6 (схема 2).

Строение сольвата кобальтового комплекса 5, полученного медленной кристаллизацией комплекса из раствора в 1,2-дихлорэтано, было установлено методом РСА. Молекулярное строение сольватированного комплекса 5 показано на рис. 2, длины связей и валентные углы в координационных многогранниках металлов приведены в табл. 2.

В комплексных молекулах CoL₂ каждый из органических лигандов координирует ион металла бидентатно-хелатно азотинным и аминным атомами азота. Координационный многогранник иона кобальта может быть описан как искаженный тетраэдр (значение дескрипторов Аддисона $\tau_4 = 0.79$, $\tau_4' = 0.74$) [32]. Двугранный угол между плоскими фрагментами N¹Co¹N² и N³Co¹N⁴ равен 87.7°. При координации органических лигандов к иону металла образуются два шестичленных ме-

таллоцикла, строение которых близко к плоскому вследствие сопряжения с соответствующим бензольным кольцом.

В монокристалле сольвата комплекса 5 группы NH каждого лиганда образуют межмолекулярные водородные связи N–H...O с атомами O¹ сульфогрупп соседних молекул, в результате чего образуются двойные бесконечные цепи молекул, вытянутые вдоль кристаллографической оси *b* (рис. 3). Параметры водородных связей приведены в табл. 3. Молекула 1,2-дихлорэтана занимает пустоты в

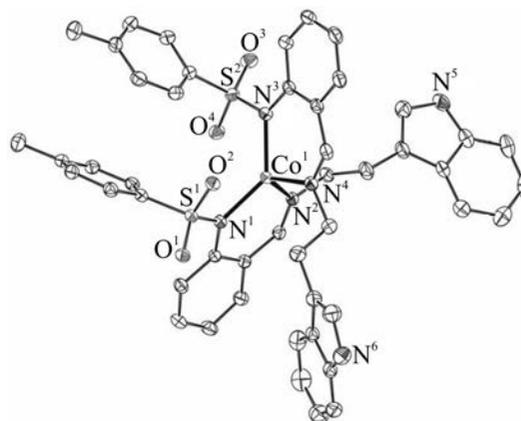


Рис. 2. Общий вид молекулы сольватированного комплекса 5 (молекула 1,2-дихлорэтана и атомы водорода не показаны).

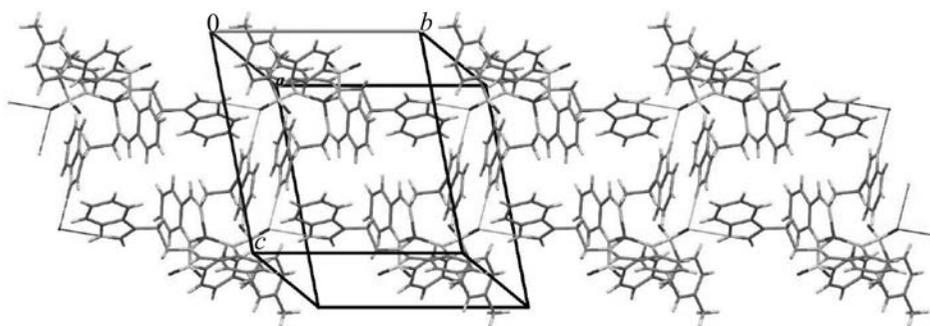


Рис. 3. Упаковка молекул в монокристалле сольвата комплекса **5** (вид вдоль кристаллографической оси *a*).

кристаллической решетке; метиленовые группы разупорядочены по двум кристаллографическим положениям с равной заселенностью.

Структура сольвата комплекса **5** существенно отличается от структуры комплекса кобальта(II) с азометином на основе триптамина и салицилового альдегида (CCDC refcode ATEFOW) [30], который, как и другие комплексы с данным лигандом, имеет группу симметрии C_2 . Понижение симметрии комплексной молекулы в случае сольвата комплекса **5** обусловлено, по-видимому, стерическим влиянием тозилных заместителей; можно предположить, что в сольвате существует слабое π -стекинг-взаимодействие между бензольными кольцами тозилных групп (межцентроидное расстояние 4.067 Å, угол между средними плоскостями 30.6°).

Таким образом, на основе нового азометина – продукта конденсации 2-*N*-тозиламинобензальдегида и триптамина – получены комплексы с ионами Zn(II), Cu(II), Ni(II), Co(II) и Fe(III).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Элементный анализ выполнен на приборе PerkinElmer 240C в Лаборатории микроанализа Южного федерального университета. ИК спектры регистрировали на приборе Varian Scimitar 1000 FT-IR в области 400–4000 cm^{-1} ; образцы готовили

в виде суспензии в вазелиновом масле. Спектры ЯМР ^1H регистрировали в ДМСО- d_6 на спектрометре Varian Unity 300 (300 МГц) в импульсном Фурье-режиме; внутренний стандарт – ГМДС. Удельную магнитную восприимчивость определяли относительным методом Фарадея в интервале 77.4–300 К; в качестве эталона для калибровки использовали $\text{Hg}[\text{Co}(\text{CNS})_4]$.

Монокристалл сольвата комплекса **5** для РСА получен при медленном охлаждении раствора комплекса **5** в 1,2-дихлорэтане. Бесцветные призматические кристаллы ($M_{990.89}$) триклинные при 293 К; параметры элементарной ячейки: $a = 13.214(3)$ Å, $b = 13.484(3)$ Å, $c = 14.457(3)$ Å, $\alpha = 79.18(3)^\circ$, $\beta = 71.39(3)^\circ$, $\gamma = 71.37(3)^\circ$, $V = 2302.7(10)$ Å³, пространственная группа $P-1$, $Z = 2$, $d_{\text{выч}} = 1.429$ г/см³, $\mu = 0.835$. Параметры элементарной ячейки и интенсивности 34657 отражений измеряли на дифрактометре Rayonix SX165 CCD (синхротронное излучение, $\lambda = 0.80246$ Å), ω -сканирование, $2\theta_{\text{max}} = 61.7^\circ$) для монокристаллического образца размером 0.30×0.20×0.10 мм³. Обработку исходного массива измеренных интенсивностей проводили с помощью программы Olex2 1.2 [33, 34]. Структура расшифрована прямым методом и уточнена полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов по F_{hkl}^2 . Атомы водорода помещали в геометрически рассчитанные положе-

Таблица 3. Параметры межмолекулярных водородных связей N–H \cdots O в кристаллической структуре сольвата комплекса **5**

D–H \cdots A	D–H, Å	H \cdots A, Å	D \cdots A, Å	Угол DNA, град
N ⁵ –H \cdots O ^{1a}	0.860	2.273	2.972(2)	138
N ⁶ –H \cdots O ^{1b}	0.860	2.221	2.974(2)	146

Операции симметрии: ^a $x, 1+y, z$. ^b $1-x, -y, 1-z$.

ния и уточняли с использованием модели *наездника* [$U_{\text{iso}}(\text{H}) = nU_{\text{eq}}(\text{C})$, где $n = 1.5$ для атомов углерода метильных групп, $n = 1.2$ для остальных атомов C]. Окончательные факторы расходимости: $R_1 = 0.0463$ и $wR_2 = 0.1234$ для 9181 независимых отражений с $I > 2\sigma(I)$, $R_1 = 0.0490$ и $wR_2 = 0.1254$ для всех 9974 независимых отражений, 607 уточняемых параметров, GOOF 1.071. Все расчеты проведены с использованием программного комплекса SHELXL-2018/3 [35]. Для анализа структуры использовали программу PLATON [36]. Избранные межатомные расстояния и валентные углы приведены в табл. 2. Координаты атомов и температурные факторы депонированы в Кембриджском банке структурных данных (CCDC 1942958).

Квантово-химические расчеты выполнены на кластере WSD Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления» Южно-Российского регионального центра информатизации Южного федерального университета с помощью программы Gaussian'03 [37]. Для подготовки данных и визуализации результатов расчетов использовали программу Chemcraft [38]. Расчеты электронного и пространственного строения соединений проводили в рамках теории функционала плотности (DFT) в газовой фазе и в растворе. Учет влияния растворителя производили в рамках приближения непрерывной поляризуемой среды (PCM) [39]. Применяли гибридный обменно-корреляционный функционал B3LYP [40–42]. В качестве базисного набора использовали расширенный валентно-расщепленный базис 6-311G(d). Геометрическую структуру рассмотренных молекул предварительно оптимизировали по всем естественным переменным без ограничений на симметрию. Минимумы на поверхности потенциальной энергии идентифицировали для каждой структуры расчетом матрицы силовых постоянных и частот нормальных колебаний.

Для синтеза азометина **1** использовали коммерчески доступный триптамин и 2-(*N*-тозиламино)-бензальдегид, полученный по методике [43].

***N*-{2-[(*E*)-{2-(1*H*-Индол-3-ил)этил]имино}-метил]фенил}-4-метилбензолсульфонамид (1)**. К горячему раствору 3 ммоль 2-(*N*-тозиламино)бензальдегида в 10 мл толуола добавляли горячий раствор 3 ммоль триптамина в 5 мл толуола.

Смесь кипятили 1 ч и оставляли на ночь. Осадок отфильтровывали и перекристаллизовывали из CCl_4 . Выход 65%, желтый кристаллический порошок, т. пл. 178°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 3391 (N–H), 1640 (C=N), 1292 (асимм. SO_2), 1161 (симм. SO_2). Спектр ^1H ЯМР (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 13.33 уш. с (1H, NH), 10.82 с (1H, NH_{индол}), 8.40 с (CH=N), 7.58 д (1H, CH_{Ar}, $J = 7.8$ Гц), 7.54 д (2H, CH_{Ar}, $J = 8.2$ Гц), 7.44 д (1H, CH_{Ar}, $J = 8.2$ Гц), 7.40 д. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.8$, $J_2 = 1.5$ Гц), 7.33 м (2H, CH_{Ar}), 7.17 м (3H, CH_{Ar}), 7.05 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.8$, $J_2 = 1.0$ Гц), 7.02 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.8$, $J_2 = 1.0$ Гц), 6.97 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.8$, $J_2 = 1.0$ Гц), 3.94 т (2H, CH₂, $J = 6.9$ Гц), 3.10 т (2H, CH₂, $J = 6.9$ Гц), 2.27 с (3H, CH₃). Найдено, %: C 69.7; H 5.61; N 10.5. $\text{C}_{24}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{O}_2\text{S}$. Вычислено, %: C 69.0; H 5.55; N 10.1.

Общая методика синтеза комплексов 2–6. К горячему раствору 1 ммоль азометина **1** в 10 мл метанола приливали горячий раствор 0.5 ммоль ацетата цинка(II), меди(II), никеля(II), кобальта(II) либо хлорида железа(III) в 10 мл метанола. Реакционную смесь кипятили 1 ч. Осадок отфильтровывали, промывали метанолом и сушили в вакууме. Перекристаллизовывали из смеси этанол-дихлорэтан.

Комплекс ZnL_2 (2). Желтый кристаллический порошок, т. пл. >250°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 3456 (N–H), 1632 (C=N), 1264 (асимм. SO_2), 1133 (симм. SO_2). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 10.72 с (1H, NH_{индол}), 8.67 с (CH=N), 7.99 д (2H, CH_{Ar}, $J = 8.3$ Гц), 7.54 д. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.8$, $J_2 = 1.5$ Гц), 7.40 д (1H, CH_{Ar}, $J = 8.2$ Гц), 7.31 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 7.3$, $J_2 = 1.5$ Гц), 7.25 д (1H, CH_{Ar}, $J = 8.2$ Гц), 7.15 д (2H, CH_{Ar}, $J = 8.2$ Гц), 7.10 д (1H, CH_{Ar}, $J = 8.0$ Гц), 6.99 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 8.3$, $J_2 = 0.9$ Гц), 6.93 т. д (1H, CH_{Ar}, $J_1 = 8.3$, $J_2 = 0.9$ Гц), 6.79 м (2H, CH_{Ar}), 3.74 т (2H, CH₂, $J = 6.9$ Гц), 2.84 т (2H, CH₂, $J = 6.9$ Гц), 2.25 с (3H, CH₃). Найдено, %: C 64.2; H 4.94; N 9.4. $\text{C}_{48}\text{H}_{44}\text{N}_6\text{O}_4\text{S}_2\text{Zn}$. вычислено, %: C 65.1; H 4.95; N 9.1.

Комплекс CuL_2 (3). Красный кристаллический порошок, т. пл. >250°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 3460 (N–H), 1627 (C=N), 1259 (асимм. SO_2), 1136 (симм. SO_2). $\mu_{\text{эфф}}$, М. Б.: 2.29 (293 К), 2.24 (77.4 К). Найдено, %: C 64.9; H 4.90; N 9.7. $\text{C}_{48}\text{H}_{44}\text{CuN}_6\text{O}_4\text{S}_2$. Вычислено, %: C 64.3; H 4.95; N 9.4.

Комплекс NiL₂ (4). Зеленый кристаллический порошок, т. пл. >250°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3459 (N–H), 1625 (C=N), 1254 (асимм. SO₂), 1128 (симм. SO₂). $\mu_{эфф}$, М. Б.: 3.28 (293 К), 3.24 (77.4 К). Найдено, %: С 65.1; Н 5.02; N 9.8. C₄₈H₄₄N₆NiO₄S₂. Вычислено, %: С 64.6; Н 4.97; N 9.4.

Комплекс CoL₂ (5). Красный кристаллический порошок, т. пл. >250°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3456 (N–H), 1621 (C=N), 1262 (асимм. SO₂), 1132 (симм. SO₂). $\mu_{эфф}$, М. Б.: 4.51 (293 К), 4.14 (77.4 К). Найдено, %: С 64.1; Н 4.91; N 9.1. C₄₈H₄₄CoN₆O₄S₂. Вычислено, %: С 64.6; Н 4.97; N 9.4.

Комплекс FeL₂Cl (6). Коричневый кристаллический порошок, т. пл. >250°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3459 (NH), 1615 (C=N), 1253 (асимм. SO₂), 1128 (симм. SO₂). $\mu_{эфф}$, М. Б.: 5.92 (293 К), 5.90 (77.4 К). Найдено, %: С 62.1; Н 4.67; N 8.9. C₄₈H₄₄ClFeN₆O₄S₂. Вычислено, %: С 62.4; Н 4.80; N 9.1.

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Южного федерального университета.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Минбаев В.У. Шиффовы основания. Алма-Ата: Наука, 1989. 140 с.
2. Гарновский А.Д., Васильченко И.С. // Усп. хим. 2002. Т. 71. № 11. С. 1064; *Garnovskii A.D., Vasil'chenko I.S.* // Russ. Chem. Rev. Vol. 71. N 11. P. 943. doi 10.1070/RC2002v071n11ABEH000759
3. *Minkin V.I., Tsukanov A.V., Dubonosov A.D., Bren V.A.* // J. Mol. Struct. 2011. Vol. 998. N 1–3. P. 179. doi 10.1016/j.molstruc.2011.05.029
4. *Segura J.L., Mancheno M.J., Zamora F.* // Chem. Soc. Rev. 2016. Vol. 45. N 20. P. 5635. doi 10.1039/C5CS00878F
5. *Borisova N.E., Reshetova M.D., Ustynyuk Y.A.* // Chem. Rev. 2007. Vol. 107. N 1. P. 46. doi 10.1021/cr0683616
6. *Garnovski A.D., Nivorozhkin A.L., Minkin V.I.* // Coord. Chem. Rev. 1993. Vol. 126. № 1–2. P. 1. doi 10.1016/0010-8545(93)85032-Y
7. *Луков В.В., Коган В.А., Левченков С.И., Щербачев И.Н., Попов Л.Д.* // Коорд. хим. 2015. Т. 41. № 1. С. 3; *Lukov V.V., Kogan V.A., Levchenkov S.I., Shcherbakov I.N., Popov L.D.* // Russ. J. Coord. Chem. 2015. Vol. 41. N 1. P. 1. doi 10.1134/S1070328415010054
8. *Луков В.В., Щербачев И.Н., Левченков С.И., Попов Л.Д., Панков И.В.* // Коорд. хим. 2017. Т. 43. № 1. С. 3; *Lukov V.V., Shcherbakov I.N., Levchenkov S.I., Popov L.D., Pankov I.N.* // Russ. J. Coord. Chem. 2017. Vol. 43. N 1. P. 1. doi 10.1134/S1070328417010055
9. *Метелица А.В., Бурлов А., Безуглый С.О., Бородкина И.Г., Брень В.А., Чарновский А.Р., Минкин В.И.* // Коорд. химия. 2006. Т. 32. № 12. С. 894; *Metelitsa A.V., Burlov A.S., Bezuglyi S.O., Borodkina I.G., Bren V.A., Garnovskii A.D., Minkin V.I.* // Russ. J. Coord. Chem. 2006. Vol. 32. N 12. P. 858. doi 10.1134/S1070328406120025
10. *Zhang J., Xu L., Wong W.Y.* // Coord. Chem. Rev. 2018. Vol. 355. P. 180. doi 10.1016/j.ccr.2017.08.007
11. *Kleij A.W.* // Chem. Eur. J. 2008. Vol. 14. N 34. P. 10520. doi 10.1002/chem.200801149
12. *Liu X., Manzur C., Novoa N., Celedon S., Carrillo D., Hamon J.R.* // Coord. Chem. Rev. 2018. Vol. 357. P. 144. doi 10.1016/j.ccr.2017.11.030
13. *Sarkar S., Dey K.* // Spectrochim. Acta. (A). 2010. Vol. 77. N 4. P. 740. doi 10.1016/j.saa.2010.06.041
14. *Josephus R.S., Nair M.S.* // Arab. J. Chem. 2009. Vol. 62. P. 319. doi 10.1016/j.arabj.2010.05.001
15. *Holm R.H., Solomon E.I.* // Chem. Rev. 2004. Vol. 104. N 2. P. 347. doi 10.1021/cr0206364
16. *Da Silva C.M., Da Silva D.L., Modolo L.V., Alves R.B., De Resende M.A., Martins C.V.B., De Fatima A.* // J. Adv. Res. 2011. Vol. 2. N 1. P. 1. doi 10.1016/j.jare.2010.05.004
17. *Kovalenko A., Rublev P.O., Tcelykh L.O., Goloveshkin A.S., Lepnev L.S., Burlov A.S., Vashchenko A.A., Marciniak L., Magerramov A.M., Shikhaliyev N.G., Vatsadze S.Z., Utochnikova V.V.* // Chem. Mater. 2019. Vol. 31. N 3. P. 759. doi 10.1021/acs.chemmater.8b03675
18. *Burlov A.S., Koshchienko Yu.V., Vlasenko V.G., Dmitriev A.V., Mal'tsev E.I., Lypenko D.A., Pozin S.I., Levchenkov S.I., Makarova N.I., Tsivadze A.Yu., Minkin V.I.* // Inorg. Chim. Acta. 2018. Vol. 482. P. 863. doi 10.1016/j.ica.2018.07.037
19. *Burlov A.S., Vlasenko V.G., Koshchienko Yu.V., Makarova N.I., Zubenko A.A., Drobin Yu.D., Fetisov L.N., Kolodina A.A., Zubavichus Ya.V., Trigub A.L., Levchenkov S.I., Garnovskii D.A.* // Polyhedron. 2018. Vol. 154. P. 65. doi 10.1016/j.poly.2018.07.034
20. *Лифинцева Т.В., Бурлов А.С., Власенко В.Г., Коциенко Ю.В., Мальцев Е.И., Дмитриев А.В., Лыпенко Д.А., Тригуб А.Л., Гарновский Д.А.* // ЖОХ. 2018. Т. 88. № 10. С. 1677; *Lifintseva T.V., Burlo, A.S.,*

- Vlasenk, V.G., Koshchienko Yu.V., Mal'tsev E.I., Dmitriev A.V., Lypenko D.A., Trigub A.L., Garnovskii D.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2018. Vol. 88. N 100. P. 2125. doi 10.1134/S107036321810016X
21. *Gili P., Palacios M.S., Martin-Reyes M.G., Martin-Zarza P., Ruiz-Perez C., Rodriguez-Romero F.V., Lahoz F.V.* // Polyhedron. 1992. Vol. 11. N 17. P. 2171. doi 10.1016/S0277-5387(00)83692-X
22. *Mustafa I.M., Hapipah M.A., Abdulla M.A., Ward T.R.* // Polyhedron. 2009. Vol. 28. N 18. P. 3993. doi 10.1016/j.poly.2009.10.004
23. *Ali H.M., Mustafa M.I.M., Rizal M.R., Ng S.W.* // Acta Crystallogr. (E). 2008. Vol. 64. N 3. P. m787. doi 10.1107/S1600536808012968
24. *Ali H.M., Mustafa M.I.M., Rizal M.R., Ng S.W.* // Acta Crystallogr. (E). 2008. Vol. 64. N 2. P. m421. doi 10.1107/S1600536808002213
25. *Garcia-Raso A., Fiol J.J., Badenas F., Lago E., Molins E.* // Polyhedron. 2001. Vol. 20. N 22–23. P. 2877. doi 10.1016/S0277-5387(01)00900-7
26. *Ishida T., Hatta K.I., Yamashita S., Doi M., Iroue M.* // Chem. Pharm. Bull. 1986. Vol. 34. N 9. P. 3553. doi 10.1248/cpb.34.3553
27. *Gulli P., Zarza P.M., Nunez P., Medina A., Diaz M.C., Martin M.G., Arrieta J.M., Vlasi M., Germain G., Vermeire M., Dupont L.* // J. Coord. Chem. 1989. Vol. 20. N 3. P. 273. doi 10.1080/00958978909408169
28. *Yang S., Zhu X., Zhou S., Wang S., Feng Z., Wei Y., Miao H., Guo L., Wang F., Zhang G., Gu X., Mu X.* // Dalton Trans. 2014. Vol. 43. N 6. P. 2521. doi 10.1039/C3DT51107C
29. *Faizi M.S.H., Sharkina N.O., Davydenko Y.M.* // Acta Crystallogr. (E). 2015. Vol. 71. P. m31. doi 10.1107/S2056989015000778
30. *Liu C., Niu J.-F., Li Y., Xu J.-G., Liu X.-H.* // Chin. J. Struct. Chem. 2016. Vol. 35. P. 1002. doi 10.14102/j.cnki.0254-5861.2011-1049
31. *Kahn O.* Molecular Magnetism. New York: VCH Publishers, 1993. 396 p.
32. *Addison A.W., Rao N.T., Reedijk J., Van Rijn J., Verschoor G.C.* // J. Chem. Soc. Dalton Trans. 1984. N 7. P. 1349. doi 10.1039/DT9840001349
33. *Bourhis L.J., Dolomanov O.V., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H.* // Acta Crystallogr. (A). 2015. Vol. 71. N 1. P. 59. doi 10.1107/S2053273314022207
34. *Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H.* // J. Appl. Cryst. 2009. Vol. 42. N 2. P. 339. doi 10.1107/S0021889808042726
35. *Sheldrick G.M.* // Acta Crystallogr. (A). 2008. Vol. 64. N 1. P. 112. doi 10.1107/S0108767307043930
36. *Spek A.L.* // J. Appl. Cryst. 2003. Vol. 36. P. 7. doi 10.1107/S0021889802022112
37. *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery J.A., Jr., Vreven T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M.W., Gonzalez C., Pople J.A.* Gaussian 03, Revision D.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
38. *Zhurko G.A., Zhurko G.A.* Chemcraft ver. 1.6 (build 338). <http://www.chemcraftprog.com>
39. *Cammi R., Mennucci B., Tomasi J.* // J. Phys. Chem. (A). 2000. Vol. 104. N 23. P. 5631. doi 10.1021/jp0001561
40. *Stephens P.J., Devlin F.J., Chabalowski C.F., Frisch M.J.* // J. Phys. Chem. 1994. Vol. 98. N 45. P. 11623. doi 10.1021/j100096a001
41. *Becke A.D.* // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98. N 7. P. 5648. doi 10.1063/1.464913
42. *Lee C., Yang W., Parr R.G.* // Phys. Rev. (B). 1988. Vol. 37. N 2. P. 785. doi 10.1103/PhysRevB.37.785
43. *Mahia J., Maestro M., Vazquez M., Bermejo M.R., Gonzalez A.M., Maneiro M.* // Acta Crystallogr. (C). 1999. Vol. 55. N 12. P. 2158. doi 10.1107/S0108270199011580

Synthesis, Structural, and Physico-Chemical Studies of Transition Metal Complexes with Schiff Base – A Product of Condensation of 2-*N*-Tosylaminobenzaldehyde and Tryptamine

V. A. Chetverikova^a, L. D. Попов^{a,*}, S. I. Levchenkov^{a,b}, A. S. Burlov^a, V. A. Lazarenko^c,
Y. V. Zubavichus^c, and I. N. Shcherbakov^a

^a Southern Federal University, Rostov-on-Don, 344090 Russia

^b Federal Research Center “Southern Scientific Center of the Russian Academy of Science”,
Rostov-on-Don, 344006 Russia

^c National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia

Received September 1, 2019; revised September 1, 2019; accepted September 5, 2019

A new Schiff base, the condensation product of 2-*N*-tosylaminobenzaldehyde and tryptamine, was synthesized and investigated. A physico-chemical study and quantum chemical modeling of the tautomerism of azomethine were performed. Its complexes with Zn(II), Cu(II), Ni(II), Co(II) and Fe(III) were obtained and studied.

Keywords: Schiff bases, X-ray diffraction, density functional theory, coordination compounds