

СТРУКТУРА КОМПЛЕКСУ БІС(ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОАЦЕТАТО)НІКЕЛЮ(II) З N,N-ДІЕТИЛНІКОТИНАМІДОМ

Ольгерд О. Штоквиш¹, <https://orcid.org/0000-0002-0164-9456>

Вікторія В. Дьяконенко^{1,2}, <https://orcid.org/0000-0003-4613-172X>

Людмила І. Коваль^{1*}, <https://orcid.org/0000-0001-5266-988X>

¹ Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, просп. академіка Палладіна, 32–34, Київ 03142, Україна;

² Інститут хімії функціональних матеріалів НТК “Інститут монокристалів” НАН України, просп. Науки, 60, Харків 61001, Україна

* e-mail: : kamila6719@gmail.com

Синтезовано та досліджено методами рентгеноструктурного аналізу та ІЧ-спектроскопії нову координаційну сполуку Ni(II) з циклогексилацетоацетатом та N,N-діетилнікотинамідом. Молекулярна структура відповідає формулі $[\text{Ni}(\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2]$, кристали моноклінної сингонії, просторова група $P2_1/c$, $a = 7.0360(15) \text{ \AA}$, $b = 13.233(4) \text{ \AA}$, $c = 23.619(5) \text{ \AA}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 93.301(12)^\circ$. Координаційний поліедр атома Ni(II) – викривлений октаедр, який утворено чотирма атомами кисню двох депротонованих молекул β -кетоестеру та двома атомами нітрогену піридинових кілець двох аксіально розташованих молекул N,N-діетилнікотинаміду. Кристалічна упаковка – шари вздовж площини (001), які стабілізовано слабкими С-Н...л взаємодіями між сусідніми молекулами комплексу.

Ключові слова: нікель, β -дикарбонільні комплекси, циклогексилацетоацетат, N,N-діетилнікотинамід, кристалічна структура.

ВСТУП. Координаційні сполуки металів із β -дикарбонільними лігандами відомі вже багато десятиліть і досить широко досліджені [1]. Стосується це зокрема і комплексів нікелю з різними нітрогенвмісними додатковими лігандами, як монодентатними – піридином та його похідними [2, 3, 4], так і полідентатними – етилендіаміном, фенатроліном тощо [5]. Координація N-основ β -дикарбонільними металохелатами, внаслідок заповнення координаційної сфери

металу надає останнім певних фізико-хімічних властивостей і робить більш функціонально придатними для конкретних практичних застосувань [5]. Наприклад, комплекси з алкілдіамінами використовують як леткі прекурсори для отримання тонких плівок оксидів металів методом хімічного осадження з парової фази [6, 7], нерозчинні полімерні металохелати з 4,4'-біпіридином – як каталізатори окиснення в органічних реакціях [8], з бідентатними

P-,N-вмісними лігандами – як хромотропні матеріали [9]. β -Дикарбоніли Ni(II) з піридином, піколіном та амінопіридином широко застосовують у фундаментальних фізичних дослідженнях [10, 11]. Поліядерні піридинвмісні β -дикетонати Ni(II), які мають особливу кубанову структуру, представляють інтерес для створення молекулярних магнетиків [12].

Суттєвий потенціал мають β -дикарбонільні металохелати для фармацевтичних застосувань [13, 14]. У зв'язку з цим потенційно цікавими лігандами є похідні нікотинової кислоти – нікотинамід та N,N-діетилнікотинамід. Нікотинова кислота, що в організмі людини трансформується в нікотинамід (вітамін PP), є біологічно активною сполукою, залученою до ключових метаболічних процесів, її широко застосовують у медичній практиці у антигістамінних та вітамінних препаратах. N,N-діетиламід нікотинової кислоти як ефективний стимулятор центральної нервової системи [15] використовують у невідкладній медицині. Сполуки металів з означеними лігандами також проявляють біологічну активність, часто є більш ефективними порівняно з вільними лігандами [16, 17, 18].

У відомих кристалічних структурах комплексів перехідних металів молекули N,N-діетилнікотинаміду переважно виступають як монодентатні ліганди, координовані до металу через атом нітрогену піридинового кільця. Значно рідше вони функціонують як бідентатні місткові ліганди, сприяючи утворенню димерних або полімерних координаційних сполук [15]. У літературі описано змішанолігандні комплекси Ni(II) з N,N-діетилнікотинамідом у поєднанні з такими органічними лі-

гандами, як бензойна кислота та її похідні [16, 19, 20, 21, 22, 23].

У попередній роботі було досліджено та охарактеризовано структурно комплекси Co(II) та Ni(II) з циклогексилацетоацетатом та піридином [24]. Альтернативою токсичному піридину для металохелатів з екологічно прийнятними β -кетоестерами є нікотинамід та N,N-діетилнікотинамід. β -Дикарбонільні металокомплекси з означеними лігандами в літературі не описано. У цій статті представлено результати синтезу та дослідження структурних і спектральних властивостей нового комплексу нікелю(II) складу $[\text{NiL}_2\text{NK}_2]$, що містить циклогексилацетоацетат (HL) як хелатуючий ліганд та N,N-діетилнікотинамід (NK) як додатковий нейтральний ліганд.

ЕКСПЕРИМЕНТ І ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ. У роботі [25] наведено методику отримання комплексів низки 3d-металів (Co(II), Ni(II), Zn(II)) з β -кетоестерами вищих спиртів у кристалічній формі. Цю методику було модифіковано для синтезу змішанолігандних комплексів Co(II) та Ni(II) з циклогексилацетоацетатом та піридином [24], а також комплексу $[\text{NiL}_2\text{NK}_2]$, який досліджують у цій роботі.

До 0,89 мл розчину $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ у суміші етанол: вода 9:1 із концентрацією солі 0,05 г/мл (0,19 ммоль металу) додавали 0,068 мл циклогексилацетоацетату (0,38 ммоль) та 0,4 мл водного розчину N,N-діетилнікотинаміду з концентрацією 0,25 г/мл (0,57 ммоль), суміш струшували. Пробірку з реакційною сумішшю та окрему пробірку з 0,14 мл (0,76 ммоль) триетиламіну вміщували в посудину, яку герметизували й залишали в холодильнику. Подібно до інших комплексів нікелю з β -кетоестерами

та похідними піридину в умовах наведеного синтезу, сполука схильна до утворення пересичених розчинів. За кілька місяців утворилися слабо забарвлені блакитні і голчасті кристали. Їх фільтрували на скляному фільтрі № 40, промивали декілька разів етанолом і сушили на повітрі не більше кількох годин. Вихід – 0,04 г (28,6 %).

ІЧ-спектр комплексу реєстрували у таблетках із КВг на спектрометрі Specord M-80 в області 4000–400 cm^{-1} . У спектрі спостерігають інтенсивні широкі смуги поглинання валентних коливань спряжених у хелатному циклі зв'язків $\text{C}=\text{O}$ та $\text{C}=\text{C}$ (1625, 1502 cm^{-1}), а також інші характеристичні для β -дикарбонільних комплексів смуги поглинання, зокрема вузький сигнал при 775 cm^{-1} позаплщинного деформаційного коливання $\text{C}-\text{H}$ хелатного циклу [26]. У високочастотній області спектру спостерігаються сигнали валентних коливань алканових $\text{C}-\text{H}$ зв'язків (2855–2990 cm^{-1}) та слабкі сигнали валентних коливань $\text{C}-\text{H}$ піридинового кільця (3080–3110 cm^{-1}). Для вільного N,N -діетилнікотинаміду характеристичні смуги поглинання пов'язані з амідною групою ($\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 1620–1650 cm^{-1}) та піридиновим кільцем ($\nu_{\text{C}=\text{C}}$, $\nu_{\text{C}=\text{N}}$ 1500–1600 cm^{-1}), у спектрі комплексу вони перекриваються зі смугами коливань хелатних циклів та не можуть бути однозначно ідентифіковані. Ще одна характеристична смуга поглинання N,N -діетилнікотинаміду відповідає валентними коливанням $\text{C}-\text{N}$ амідної групи, її спостерігають як у спектрі вільного ліганду, так і в спектрі комплексу при 1300 cm^{-1} . Смуги низької інтенсивності, що з'являються в спектрі комплексу в області 600–400 cm^{-1} , відповідають коливанням зв'язків $\text{Ni}-\text{N}$ та $\text{Ni}-\text{O}$.

Кристали комплексу $\text{C}_{40}\text{H}_{58}\text{N}_4\text{NiO}_8$ ($M = 781.61$ г/моль): моноклінна сингонія, просторова група $\text{P2}_1/\text{c}$, $a = 7.0360(15)$ Å, $b = 13.233(4)$ Å, $c = 23.619(5)$ Å, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 93.301(12)^\circ$, $V = 2195.9$ Å³, $Z = 2$, $T = 294$ К, $\mu(\text{Mo K}\alpha) = 0.492$ mm^{-1} , $D_{\text{обч}} = 1.182$ г/см³, виміряно 13 892 відбиттів, 3 746 незалежних ($R_{\text{int}} = 0.1496$, $R_{\text{sigma}} = 0.1335$). Кінцеві значення $R_1 = 0.0953$ (для відбиттів з інтенсивністю $I > 2\sigma(I)$) та $wR2 = 0.2219$ (для всіх відбиттів).

Параметри елементарної комірки та інтенсивності відбиттів для $\text{C}_{48}\text{H}_{84}\text{Ni}_2\text{O}_{20}$ виміряно на дифрактометрі Bruker APEX-II (MoK α випромінювання, $\lambda = 0.71073$ Å, CCD-детектор, графітовий монохроматор). Використовуючи програму Olex2 [27], структуру розшифровано за допомогою програми SHELXT [28] і уточнено по F^2 повноматричним МНК в анізотропному наближенні для неводневих атомів у комплексі програм SHELXL [29]. Положення атомів гідрогену отримано з карти електронної густини та уточнено з використанням моделі «вершника» $U_{\text{iso}} = nU_{\text{eq}}$ ($n = 1.5$ для метильних груп і $n = 1.2$ для інших атомів гідрогену). Координати атомів, а також повні таблиці довжин зв'язків і валентних кутів депоновано до Кембриджського банку кристалічних даних (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures>), вони доступні із зазначеним номеру CCDC 2539164.

За даними рентгеноструктурного аналізу структура $\text{C}_{40}\text{H}_{58}\text{N}_4\text{NiO}_8$ ($[\text{NiL}_2\text{NK}_2]$, де L^- – енолат-аніон циклогексилацетоацетату, а NK – N,N -діетилнікотинамід) являє собою моноядерний комплекс, який знаходиться в спеціальному положенні відносно центру інверсії.

Координаційний поліедр атому Ni(II) – це викривлений октаедр, який утворено

чотирма атомами кисню двох депротонованих молекул циклогексилацетоацетату та двома атомами нітрогену двох молекул N,N-діетилнікотинаміду (рис. 1). Останні координуються атомом нітрогену піридинового кільця в аксіальному положенні відносно площини хелатних лігандів. Довжини зв'язків Ni-O та Ni-N у координаційному поліедрі змінюються в діапазоні

2.080(4) ÷ 2.109(4) Å та 2.164(5) Å відповідно, а валентні кути O-Ni-O та O-Ni-N – у діапазоні 84.48(17) ÷ 92.52(17) ° (табл. 1).

У кристалі молекули комплексу пов'язані слабкими C-H...π взаємодіями (C20-H20...C14'(π) (x, 1-y, z) H...C 2.94 Å, C-H...C 147.23 °) і утворюють шари в площині (001), що чергуються між собою (рис. 2).

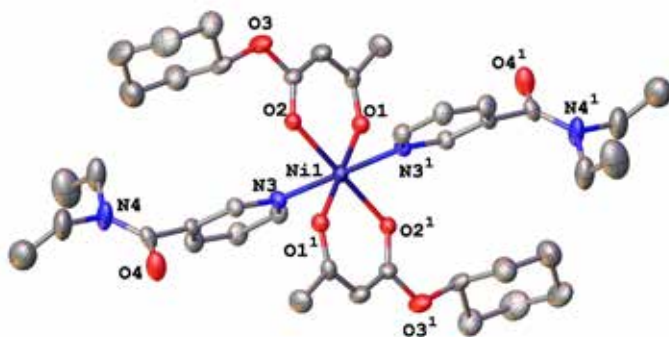


Рис.1. Молекулярна будова комплексу NiL_2NK_2 . (операція симетрії $^1 2-x, -y, 1-z$). Атоми гідрогену прибрано для спрощення

Fig. 1. Molecular structure of the complex NiL_2NK_2 . (symmetry code $^1 2-x, -y, 1-z$). The H-atoms are omitted for clarity.

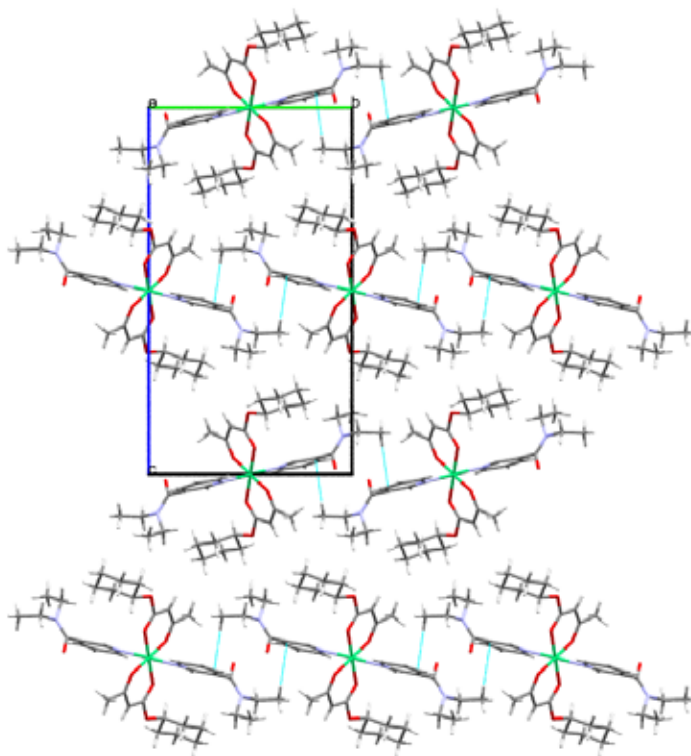


Рис. 2. Кристалічна будова комплексу NiL_2NK_2

Fig. 2. The crystal packing of NiL_2NK_2 complex.

Табл. 1

Деякі довжини зв'язків (Å) та валентні кути (град.) у комплексі NiL_2NK_2 (операція симетрії $^1 2-x, -y, 1-z$)

Table 1.

Some bond lengths (Å) and bond angles (deg.) in the NiL_2NK_2 complex (symmetry operation $^1 2-x, -y, 1-z$).

Ni1—O1	2.080 (4)	Ni1—N3	2.164 (5)
Ni1—O2	2.109 (4)		
O1—Ni1—O2	91.34 (16)	O1 ⁱ —Ni1—N3	87.62 (18)
O1 ⁱ —Ni1—O2	88.66 (16)	O2—Ni1—N3 ⁱ	92.52 (17)
O1—Ni1—N3	92.38 (18)	O2—Ni1—N3	87.48 (17)

ВИСНОВКИ. Синтезовано та структурно охарактеризовано нову сполуку – змішанолігандний комплекс Ni(II) з циклогексилацетоацетатом та N,N-діетилнікотинамідом. Комплекс моноядерний, координаційний поліедр атому Ni(II) – викривлений октаедр, який утворено чотирма атомами оксигену двох депротонованих молекул β-кетоестеру та двома атомами нітрогену піридинових кілець аксіально розташо-

ваних молекул N,N-діетилнікотинаміду. В кристалах молекули комплексу розташовуються шарами, між сусідніми молекулами в шарах спостерігаються слабкі C—H...π взаємодії, що стабілізують кристалічну упаковку. Будова координаційного поліедру описаної сполуки подібна до будови аддуктів β-дикарбонільних комплексів d-металів із піридином.

ДЕТАЛІЗАЦІЯ ВКЛАДУ АВТОРІВ У ПІДГОТОВЦІ РУКОПІСУ / DETAILED DESCRIPTION OF THE AUTHORS' CONTRIBUTION

Ольгерд О. Штоквиш / Olherd O. Shtokvysh – проведення експериментальних досліджень, первинне оброблення результатів / conducting experimental research, initial processing of results.

Вікторія В. Дьяконенко / Viktoriya V. Dyakonenko – проведення рентгеноструктурних досліджень, розшифрування струк-

тури та опис результатів / conducting X-ray structural studies, deciphering the structure and describing the results.

Людмила І. Коваль / Lyudmila I. Koval – пошук і аналіз наукової літератури, оброблення результатів, написання рукопису / literature search and analysis, processing results, writing the manuscript.

Усі автори ознайомилися з результатами дослідження та схвалили остаточну версію статті / All authors reviewed the study results and approved the final version of the article.



Роботу виконано в межах держбюджетної теми «Синтез і фізико-хімічні дослідження нових лігандів та координаційних сполук d-, f-металів із каталітичною і біологічною активністю для медичних і технічних застосувань», державний реєстраційний номер: 0126U002304.

UDK [543.442.2+543.421/.424.54-74]:54-386
(546.742+547.484.34+547.824)
doi: 10.33609/2708-129X.92.2.2026.3-12

STRUCTURE OF THE BIS(CYCLOHEXYLACETOACETATO)NICKEL(II) COMPLEX WITH N,N-DIETHYLNICOTINAMIDE.

**Olherd O. Shtokvysh¹,
Viktoriya V. Dyakonenko^{1,2},
Lyudmila I. Koval^{1*}**

¹ Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine,
32–34 Acad. Palladin Avenue, 03142 Kyiv, Ukraine;

² Institute of Functional Materials Chemistry, SSI «Institute for Single, Crystals» of National Academy of Sciences of Ukraine,
60 Nauki Ave, 61001 Kharkiv, Ukraine

* e-mail: : kamila6719@gmail.com

A new coordination compound of Ni(II) with cyclohexylacetoacetate and N,N-diethylnicotinamide was synthesized and characterized by IR spectroscopy and X-ray analysis. The IR spectrum exhibits intense broad absorption bands corresponding to the stretching vibrations of the C=O and C=C bonds conjugated within the chelate ring (1625, 1502 cm⁻¹), as well as other absorption bands characteristic of β-dicarbonyl complexes, in particular a sharp band at 775 cm⁻¹

attributed to the out-of-plane bending vibration of the C–H bond in the chelate ring. In the high-frequency region of the spectrum, there are signals of stretching vibrations of the C–H bonds of alkyl groups (2855–2990 cm⁻¹) and weak signals of stretching vibrations of the C–H of the pyridine ring (3080–3110 cm⁻¹). The absorption bands of the amide group (ν_{C=O} 1620–1650 cm⁻¹) and the pyridine ring (ν_{C=C}, ν_{C=N} 1500–1600 cm⁻¹) of N,N-diethylnicotinamide overlap with the vibration bands of the chelate rings and cannot be unambiguously assigned. The medium-intensity band at 1300 cm⁻¹, present in both the free ligand and the complex, is assigned to C–N stretching vibrations of the amide group. The low-intensity bands in the 600–400 cm⁻¹ region are assigned to Ni–N and Ni–O vibrations. According to X-ray data, the crystal system of NiL₂NK₂ complex is monoclinic, space group P2₁/c, *a* = 7.0360(15) Å, *b* = 13.233(4) Å, *c* = 23.619(5) Å, α = γ = 90°, β = 93.301(12)°. The structure corresponds to the formula [Ni(C₁₀H₁₅O₃)₂(C₁₀H₁₄N₂O)₂] and represents a mononuclear complex located in a special position relative to the inversion center. The central Ni atom has a O₄N₂ distorted octahedral environment. The axial positions of the coordination polyhedron are occupied by the nitrogen atoms of the pyridine ring of N,N-diethylnicotinamide. The molecules of chelating ligands, coordinated through oxygen atoms, occupy an equatorial position with a *trans* configuration relative to each other. In the crystal, the complex molecules are bound by weak C–H...π interactions and form layers in the (001) plane, alternating with each other. The structure of the coordination polyhedron of the described compound is similar to the structure of adducts of β-dicarbonyl complexes of d-metals with pyridine.

Keywords: nickel, β-dicarbonyl complexes, cyclohexyl acetoacetate, N,N-diethylnicotinamide, crystal structure.

ЛІТЕРАТУРА

1. Vigato P.A., Peruzzo V., Tamburini S. The evolution of β -diketone or β -diketophenol ligands and related complexes, *Coord Chem Rev.* 2009. **253**. P. 1099–1201. doi:10.1016/j.ccr.2008.07.013.
2. Syamal A. Hexa-coordinated Complexes of Nickel(II) bis(methylacetoacetate) with aromatic heterocyclic amines. *J. Prakt. Chem.* 1969. **311**. P. 884–888. <https://doi.org/10.1002/prac.19693110603>.
3. Elder R. C. Conformations and crystal packing. The crystal and molecular structure of trans-bis(2,4-pentanedionato)dipyridinenickel(II), Ni(AA)2(py)2. *Inorg. Chem.* 1968. **7** (11). P. 2316–2322. DOI: 10.1021/ic50069a028.
4. Boutebdja M., Beghidja A., Beghidja C. Bis(acetylacetonato- κ 2O,O')bis(pyridine- κ N)nickel(II) dehydrate. *Acta Cryst. E*, 2013. **69**. P. 131. <https://doi.org/10.1107/S1600536813002699>.
5. Harding P., Harding D. J., Phonsri W., Saitong S., Phetmung H. Synthesis and electrochemical studies of octahedral nickel b-diketonate complexes. *Inorg. Chim. Acta.* 2009. **362**. P. 78–82. doi:10.1016/j.ica.2008.03.014.
6. Invernizzi C., Tabacchi G., Seraglia R., Benedet M., Roverso M., Maccato C., Bogialli S., Barreca D., Fois E. On the Fragmentation of Ni(II) β -Diketonate-Diamine Complexes as Molecular Precursors for NiO Films: A Theoretical and Experimental Investigation. *Molecules*. 2024. **29**. 642. <https://doi.org/10.3390/molecules29030642>.
7. Cosham S.D., Richards S.P., Manning T., Hill M.S., Johnson A.L., Molloy K.C. Precursors for p-type Nickel Oxide: Atmospheric Pressure MOCVD of Nickel Oxide thin films with high work functions. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2017. **13**. P. 1868–1876. <https://doi.org/10.1002/ejic.201601419>.
8. Angelescua E., Pavela O. D., Ionescua R., Birjebab R., Badeac M., Z⁻avoianua R. Transition metal coordination polymers MeX₂(4,4 bipyridine) (Me = Co, Ni, Cu; X = Cl⁻, CH₃OCO⁻, acetylacetonate) selective catalysts for cyclohexene epoxidation with molecular oxygen and isobutyraldehyde. *J. of Mol. Catalysis A: Chemical*. 2012. **352**. P. 21–30.
9. Arakawa M., Suzuki N., Kishi S., Hasegawa M., Satoh K., Horn E., Fukuda Y. Synthesis, Crystal Structure, and Chromotropic Properties of Mixed-Ligand Nickel(II) Complexes with 1,3-Diketonate and P–N Bidentate Ligands. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 2008. **81**. P. 127–135. doi:10.1246/bcsj.81.127.
10. Maitani T., Chikuma M., Tanaka H. Isotropic proton nuclear magnetic resonance shifts of adducts of bis(β -ketoesterato)nickel(II) complexes. *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1979. **41**. P. 1115–1120.
11. Ohtsu H., Tanaka K. Equilibrium of Low- and High-Spin States of Ni(II) Complexes Controlled by the Donor Ability of the Bidentate Ligands. *Inorg. Chem.* 2004. **43** (9). P. 3024–3030. <https://doi.org/10.1021/ic035486>.
12. Petit S., Neugebauer P., Pilet G., Chastanet G., Barra A.-L., Antunes A.B., Wernsdorfer W., Luneau D. Condensation of a Nickel Tetranuclear Cubane into a Heptanuclear Single-Molecule Magnet. *Inorg. Chem.* 2012. **51**. P. 6645–6654. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic3001637>.
13. Sechi M., Bacchi A., Carcelli M., Compari C., Duce E., Fiscaro E., Rogolino D., Gates P., Derudas M., Al-Mawsawi L.Q., Neamati N. From Ligand to Complexes: Inhibition of Human Immunodeficiency Virus Type 1 Integrase by β -Diketo Acid Metal Complexes. *J. Med. Chem.* 2006. **49** (14). P. 4248–4260 <https://doi.org/10.1021/jm060193m>.
14. Pröhl M., Schubert US, Weigand W, Gottschaldt M. Metal complexes of curcumin and curcumin derivatives for molecular imaging and anticancer therapy. *Coord Chem Rev.*

- 2016; **307**. P. 32–41.
<https://doi.org/10.1016/j.ccr.2015.09.001>.
15. Ondrejkořičová I., Galková S., Mroziński J., Kłak J., Lis T., Olejnik Z. New polymeric thio-cyanatoiron(II) complex with *N,N'*-diethyl-nicotinamide – Synthesis, structure, magnetic and spectral properties. *Inorg. Chim. Acta*. 2008. **361** (8). P. 2483–2490.
 16. Kořese D. A., Necefoglu H., Icbudak H. Synthesis and characterization of *N,N*-diethylnicotinamide-acetylsalicylate complexes of Co(II), Ni(II), Cu(II), and Zn(II). *J. Coord. Chem*. 2008. **61** (21). P. 3508–3515.
<http://dx.doi.org/10.1080/00958970802074555>.
 17. Çataldağ E., Köse D.A., Özlük G., Şahin O. Novel mixed-ligand metal complexes containing anisic acid/nicotinamide ligands. Their synthesis, structural characterization and biological applications. *Polyhedron*. 2025. **269**. 117410.
<https://doi.org/10.1016/j.poly.2025.117410>.
 18. Yildirim T., Dursun Ali Köse D.A., Avcı E., Özer D., Şahin O. Novel mixed ligand complexes of acesulfame / nicotinamide with some transition metals. Synthesis, crystal structural characterization, and biological properties. *J. Mol. Struct*. 2019. **1176**. P. 576–582.
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.08.099>.
 19. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F. E., Necefoglu H. Diaquabis(2-chlorobenzoato-κO)bis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹) nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**. P. m545–m546.
<https://doi.org/10.1107/S1600536809014226>.
 20. Sertçelik M., Tercan B., Şahin E., Necefoglu H., Hökelek T. Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹)bis(4-formylbenzoato-κO) nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**. P. m326–m327.
<https://doi.org/10.1107/S1600536809006345>.
 21. Hökelek T., Süzen Y., Tercan B., Aybirdi Ö., Necefoglu H. Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹)bis[4-(dimethylamino)benzoato-κO]nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**. P. m1015–m1016.
<https://doi.org/10.1107/S1600536809030098>.
 22. Köse D. A., Gökçe G., Gökçe S., Uzun I. bis(*N,N*-diethylnicotinamide) *p*-chlorobenzoate complexes of Ni(II), Zn(II) and Cd(II). Synthesis and characterization. *J. Therm. Analysis and Calorimetry*. 2009. **95** (1). P. 247–251. DOI: 10.1007/s10973-008-9150-8.
 23. Çataldağ E., Köse D.A., Özlük G., Şahin O. Novel heteroleptic metal cation complexes of anisic acid/*N,N*-diethylnicotinamide ligands and biological applications. *J. Mol. Struct*. 2026. **1357**. 145219.
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.145219>.
 24. Штоквиш О., Коваль Л., Дьяконенко В., Хоменко Б., Пехньо В. Синтез та кристалічна структура комплексів кобальту(II) та нікелю(II) з циклогексилацетоацетатом і піридином. *Chem. Met. Alloys*. 2021. **14**. P. 38–42.
 25. Штоквиш О. О., Коваль Л. І., Пехньо В. І. Синтез та дослідження комплексів кобальту (II) з естерами ацетооцтової кислоти первинних, вторинних і третинних спиртів. *Укр. хім. журн*. 2015. **81** (12). С. 92–98.
 26. Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. М.: Мир, 1991. 536 с.
 27. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. Olex2: A complete structure solution, refinement and analysis program. *J. Appl. Cryst*. 2009. **42**. P. 339–341.
<https://doi.org/10.1107/S0021889808042726>.
 28. Sheldrick G.M., SHELXT-Integrated space-group and crystal-structure determination. *Acta Cryst*. 2015. **A71**. P. 3–8.
<https://doi.org/10.1107/S2053273314026370>.
 29. Sheldrick G.M. Crystal structure refinement with SHELXL. *Acta Cryst*. 2015. **C71**. P. 3–8.
<https://doi.org/10.1107/S2053229614024218>.

REFERENCES

1. Vigato P.A., Peruzzo V., Tamburini S. The evolution of β -diketone or β -diketophenol ligands and related complexes, *Coord Chem Rev.* 2009. **253**: 1099–1201. doi:10.1016/j.ccr.2008.07.013.
2. Syamal A. Hexa-coordinated Complexes of Nickel(II) bis(methylacetoacetate) with aromatic heterocyclic amines. *J. Prakt. Chem.* 1969. **311**: 884–888. <https://doi.org/10.1002/prac.19693110603>.
3. Elder R. C. Conformations and crystal packing. The crystal and molecular structure of trans-bis(2,4-pentanedionato)dipyridinenickel(II), Ni(AA)₂(py)₂. *Inorg. Chem.* 1968. **7** (11): 2316–2322. DOI: 10.1021/ic50069a028.
4. Boutebdja M., Beghidja A., Beghidja C. Bis(acetylacetonato- κ^2O,O')bis(pyridine- κN) nickel(II) dehydrate. *Acta Cryst. E*, 2013. **69**: m131. <https://doi.org/10.1107/S1600536813002699>.
5. Harding P., Harding D.J., Phonsri W., Saithong S., Phetmung H. Synthesis and electrochemical studies of octahedral nickel b-diketonate complexes. *Inorg. Chim. Acta.* 2009. **362**: 78–82. doi:10.1016/j.ica.2008.03.014.
6. Invernizzi C., Tabacchi G., Seraglia R., Benedet M., Roverso M., Maccato C., Bogialli S., Barreca D., Fois E. On the Fragmentation of Ni(II) β -Diketonate-Diamine Complexes as Molecular Precursors for NiO Films: A Theoretical and Experimental Investigation. *Molecules.* 2024. **29**: 642. <https://doi.org/10.3390/molecules29030642>.
7. Cosham S.D., Richards S.P., Manning T., Hill M.S., Johnson A.L., Molloy K.C. Precursors for p-type Nickel Oxide: Atmospheric Pressure MOCVD of Nickel Oxide thin films with high work functions. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2017. **13**: 1868–1876. <https://doi.org/10.1002/ejic.201601419>.
8. Angelescua E., Pavela O. D., Ionescua R., Birjagab R., Badeac M., Z˘avoianua R. Transition metal coordination polymers MeX₂(4,4 bipyridine) (Me = Co, Ni, Cu; X = Cl⁻, CH₃OCO⁻, acetylacetonate) selective catalysts for cyclohexene epoxidation with molecular oxygen and isobutyraldehyde. *J. of Mol. Catalysis A: Chemical.* 2012. **352**: 21–30.
9. Arakawa M., Suzuki N., Kishi S., Hasegawa M., Satoh K., Horn E., Fukuda Y. Synthesis, Crystal Structure, and Chromotropic Properties of Mixed-Ligand Nickel(II) Complexes with 1,3-Diketonate and P–N Bidentate Ligands. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 2008. **81**: 127–135. doi:10.1246/bcsj.81.127.
10. Maitani T., Chikuma M., Tanaka H. Isotropic proton nuclear magnetic resonance shifts of adducts of bis(β -ketoesterato)nickel(II) complexes. *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1979. **41**: 1115–1120.
11. Ohtsu H., Tanaka K. Equilibrium of Low- and High-Spin States of Ni(II) Complexes Controlled by the Donor Ability of the Bidentate Ligands. *Inorg. Chem.* 2004. **43** (9): 3024–3030. <https://doi.org/10.1021/ic035486>.
12. Petit S., Neugebauer P., Pilet G., Chastanet G., Barra A.-L., Antunes A.B., Wernsdorfer W., Luneau D. Condensation of a Nickel Tetranuclear Cubane into a Heptanuclear Single-Molecule Magnet. *Inorg. Chem.* 2012. **51**: 6645–6654. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic3001637>.
13. Sechi M., Bacchi A., Carcelli M., Compari C., Duce E., Fiscaro E., Rogolino D., Gates P., Derudas M., Al-Mawsawi L.Q., Neamati N. From Ligand to Complexes: Inhibition of Human Immunodeficiency Virus Type 1 Integrase by β -Diketo Acid Metal Complexes. *J. Med. Chem.* 2006. **49** (14): 4248–4260. <https://doi.org/10.1021/jm060193m>.
14. Pröhl M., Schubert US, Weigand W, Gottschaldt M. Metal complexes of curcumin and curcumin derivatives for molecular imaging and anticancer therapy. *Coord Chem Rev.* 2016; **307**. P. 32–41. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2015.09.001>

15. Ondrejkočová I., Galková S., Mroziński J., Klak J., Lis T., Olejnik Z. New polymeric thiocyanatoiron(II) complex with *N,N'*-diethylnicotinamide – Synthesis, structure, magnetic and spectral properties. *Inorg. Chim. Acta*. 2008. **361** (8): 2483–2490.
16. Köse D. A., Necefoglu H., Icbudak H. Synthesis and characterization of *N,N*-diethylnicotinamide-acetylsalicylate complexes of Co(II), Ni(II), Cu(II), and Zn(II). *J. Coord. Chem*. 2008. **61** (21): 3508–3515. <http://dx.doi.org/10.1080/00958970802074555>.
17. Çataldağ E., Köse D.A., Özlük G., Şahin O. Novel mixed-ligand metal complexes containing anisic acid/nicotinamide ligands. Their synthesis, structural characterization and biological applications. *Polyhedron*. 2025. **269**: 117410. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2025.117410>.
18. Yildirim T., Dursun Ali Köse D.A., Avcı E., Özer D., Şahin O. Novel mixed ligand complexes of acesulfame / nicotinamide with some transition metals. Synthesis, crystal structural characterization, and biological properties. *J. Mol. r Struc*. 2019. **1176**: 576–582. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.08.099>.
19. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F. E., Necefoglu H. Diaquabis(2-chlorobenzoato-κO) bis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹)nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**: m545–m546. <https://doi.org/10.1107/S1600536809014226>.
20. Sertçelik M., Tercan B., Şahin E., Necefoglu H., Hökelek T. Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹)bis(4-formylbenzoato-κO)nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**: m326–m327. <https://doi.org/10.1107/S1600536809006345>.
21. Hökelek T., Süzen Y., Tercan B., Aybirdi Ö., Necefoglu H. Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide-κN¹)bis[4-(dimethylamino)benzoato-κO]nickel(II). *Acta Cryst. E*. 2009. **65**: m1015–m1016. <https://doi.org/10.1107/S1600536809030098>.
22. Köse D. A., Gökçe G., Gökçe S., Uzun I. bis-(*N,N*-diethylnicotinamide) *p*-chlorobenzoate complexes of Ni(II), Zn(II) and Cd(II). Synthesis and characterization. *J. Therm. Analysis and Calorimetry*. 2009. **95** (1): 247–251. DOI: 10.1007/s10973-008-9150-8.
23. Çataldağ E., Köse D.A., Özlük G., Şahin O. Novel heteroleptic metal cation complexes of anisic acid/*N,N*-diethylnicotinamide ligands and biological applications. *J. Mol. Struc*. 2026. **1357**: 145219. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.145219>.
24. Shtokvysh O., Koval L., Dyakonenko V., Homenko B., Pekhnyo V. Syntes ta krystalichna struktura kompleksiv kobaltu (II) ta nikel'u (II) z cycloheksylacetoacetatom i pirydynom. *Chem. Met. Alloys*. 2021. **14**: 38–42. (in Ukrainian).
25. Shtokvysh O.O., Koval L.I., Pekhnyo V.I. Syntes ta doslidzhennia kompleksiv kobaltu (II) z esteramy atsetootsotovoï kysloty pervynnykh, vtorynnykh i tretiynnykh spyrtyv. *Ukr. khim. zhurn*. 2015. **81** (12): 92–98. (in Ukrainian).
26. Nakamoto K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. M.: Mir, 1991. 536 p. (in Russian).
27. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. Olex2: A complete structure solution, refinement and analysis program. *J. Appl. Cryst*. 2009. **42**: 339–341. <https://doi.org/10.1107/S0021889808042726>.
28. Sheldrick G.M., SHELXT-Integrated space-group and crystal-structure determination. *Acta Cryst*. 2015. **A71**: 3–8. <https://doi.org/10.1107/S2053273314026370>.
29. Sheldrick G.M. Crystal structure refinement with SHELXL. *Acta Cryst*. 2015. **C71**: 3–8. <https://doi.org/10.1107/S2053229614024218>.

Стаття надійшла: 24.02.2026

Стаття прийнята до друку: 05.03.2026

Стаття опублікована: 25.03.2026