

УДК 546.98+547.792+543.429.23

Ю. Огороднік, студ., yulia.ohorodnik15@gmail.com,  
 Д. Хоменко, канд. хім. наук,  
 Р. Дорошук, канд. хім. наук,  
 Р. Лампека, д-р хім. наук,

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ

## СИНТЕЗ ЕТИЛОВИХ ЕСТЕРІВ 3-(2-ПІРИДИЛ)-N-МЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ІЛ ОЦТОВОЇ КИСЛОТИ ТА КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК Pd(II) НА ЇХ ОСНОВІ

Алкілюванням метилового естеру 3-(2-піридил)-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти йодистим метилом було отримано ліганди етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>1</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти (L<sup>1</sup>), етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти (L<sup>2</sup>) та комплекси паладію(II) PdL<sup>1</sup>Cl<sub>2</sub> та PdL<sup>2</sup>Cl<sub>2</sub> на їх основі. Також вдалося виділити невелику кількість етилового естеру 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл-α-пропіонової кислоти (L<sup>3</sup>), що є продуктом алкілювання метилової групи в L<sup>2</sup> та синтезувати відповідний комплекс Pd(L<sup>3</sup>)Cl<sub>2</sub>. Будову отриманих лігандів та комплексів було досліджено за допомогою ІЧ та <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії.

Ключові слова: 1,2,4-триазол, паладій(II), ІЧ-спектроскопія, ЯМР-спектроскопія.

**Вступ.** Дослідженню сполук, що містять 1,2,4-триазольний фрагмент, присвячено багато робіт [1–3], але більшість описаних комплексів синтезовані на основі триазолвмісних сполук, які не містять груп, здатних брати участь у хімічних перетвореннях за м'яких умов. Це, у свою чергу, суттєво ускладнює модифікацію координаційних сполук. Разом із тим, різноманітність способів координації триазолів, що обумовлена присутністю трьох атомів нітрогену у п'ятичленному циклі, а також можливість введення у цикл замісників різної природи призводить до отримання комплексів із різною будовою та властивостями. Крім того, комплекси N-алкіл-1,2,4-триазолів мають високу стабільність, що обумовлена наявністю як σ-донорних і π-акцепторних властивостей [4, 5]. Виходячи з викладеного вище, актуальним є дослідження координаційних сполук Pd(II) з похідними 1,2,4-триазолів не тільки з метою створення матеріалів для нової техніки, а й для доповнення існуючих даних про координаційно-хімічну поведінку гетероциклічних лігандів.

У пропонованій роботі описано синтез, результати досліджень будови та спектральних характеристик нових органічних лігандів і комплексів складу Pd(L)Cl<sub>2</sub>, де L<sup>1</sup> – етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>1</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти, L<sup>2</sup> – етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти та L<sup>3</sup> етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл-α-пропіонової кислоти. Ліганди такого класу здатні до хелатоутворення і, на відміну від неалкільованих аналогів, координуються виключно в молекулярній формі [6, 7].

**Об'єкти і методи досліджень.** Під час проведення експериментальних робіт були використані органічні розчинники: метанол (ч.д.а.), етанол (ч.д.а.), ацетонітрил (ч.д.а.), хлористий метилен (ч.д.а.), диметилформамід (ч.д.а.), метил-трет-бутиловий етер (ч.д.а.), а в синтезах використовували метилйодид (ч.д.а.) та карбонат калію (ч.). При одержанні координаційних сполук як вихідні використовували PdCl<sub>2</sub>·2CH<sub>3</sub>CN ("Aldrich"). Етиловий естер 3-(2-піридил)-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти було отримано за раніше описаною методикою [6]. ІЧ-спектроскопічне дослідження синтезованих сполук проводилося на спектрометрі "Spektrum BX Perkin Elmer" у діапазоні 400–4000 см<sup>-1</sup> з використанням таблеток KBr. ЯМР-спектри отриманих сполук було отримано за допомогою приладу "Mercury 400" фірми Varian. Як розчинники використано ДМСО-d<sub>6</sub>, CDCl<sub>3</sub>. Елементний аналіз синтезованих сполук виконано за допомогою CHN-аналізатора фірми "Carlo Erba".

**Алкілювання етилового ефіру 5-(2-піридил)-1,2,4-триазоліоцтової кислоти метилйодидом.** До суспензії 18,06 г (0,129 моль) карбонату калію в 200 мл диметилформаміду додавали 20 г (0,086 моль) етилового ефіру 3-(2-піридил)-1,2,4-триазол-5-ілоцтової кислоти та

6,17 мл (0,099 моль) метилйодиду. Отриману реакційну суміш перемішували 12 год за кімнатної температури. Осад відфільтровували, фільтрат випарювали. Отриманий залишок розчиняли у воді й екстрагували дихлорметаном (тричі по 100 мл). Органічну фазу сушили над сульфатом натрію та випарювали. За допомогою тонкошарової хроматографії було встановлено, що залишок після упарювання складається з декількох речовин. Використовуючи колонкову хроматографію (сорбент – SiO<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O, елюент – суміш МТБЕ : Етанол = 9 : 1) вдалося виділити (R<sub>f</sub>=0,7) етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>1</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти (L<sup>1</sup>). Вихід: 7,4 г (37%). <sup>1</sup>H ЯМР (ДМСО-d<sub>6</sub>, 400 МГц); δ м.ч.: 8,74(1H, d, py-H<sub>6</sub>); 8,10(1H, d, py-H<sub>3</sub>); 8,00(1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,52(1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 4,23(3H, s, CH<sub>3</sub>); 4,13(2H, q, OCH<sub>2</sub>); 3,70(2H, s, CH<sub>2</sub>); 1,21(3H, t, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3446, 2925, 1739, 1490, 1455, 1233, 790, 560. Теоретично розраховано для C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>: C, 58,53; H, 5,69; N, 22,76. Знайдено: C, 58,65; H, 5,66; N, 23,04. Продовжуючи елюювання тією самою сумішшю розчинників вдалося отримати (R<sub>f</sub>=0,4) етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл-β-пропіонової кислоти (L<sup>3</sup>). Вихід: 1,1 г (5,5%). <sup>1</sup>H ЯМР (ДМСО-d<sub>6</sub>, 400 МГц); δ м.ч.: 8,62(1H, d, py-H<sub>6</sub>); 7,99(1H, d, py-H<sub>3</sub>); 7,87(1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,40(1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 4,36(1H, q, -CH); 3,91(3H, s, CH<sub>3</sub>); 4,12(2H, q, OCH<sub>2</sub>); 1,54(3H, d, CH<sub>3</sub>); 1,16(3H, t, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3212, 2871, 1741, 1470, 1314, 981, 768, 682. Теоретично розраховано для C<sub>13</sub>H<sub>16</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>: C, 60,00; H, 6,15; N, 21,54. Знайдено: C, 60,37; H, 5,96; N, 21,11. При подальшому елююванні вдалося отримати (R<sub>f</sub>=0,3) етиловий естер 3-(2-піридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти (L<sup>2</sup>). Вихід: 6,1 г (30,5%). <sup>1</sup>H ЯМР (ДМСО-d<sub>6</sub>, 400 МГц); δ м.ч.: 8,62(1H, d, py-H<sub>6</sub>); 7,99(1H, d, py-H<sub>3</sub>); 7,87(1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,40(1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 4,13(2H, q, OCH<sub>2</sub>); 3,88(3H, s, CH<sub>3</sub>); 4,17(2H, s, CH<sub>2</sub>); 1,20(3H, q, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3216, 2981, 1739, 1490, 1323, 1198, 1004, 775, 692. Теоретично розраховано для C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>: C, 58,53; H, 5,69; N, 22,76. Знайдено: C, 58,77; H, 5,46; N, 23,01.

**Синтез Pd(L<sup>1-3</sup>)Cl<sub>2</sub> (загальна методика).** Розчин ліганду L<sup>1-3</sup> (0,771 ммоль) у 5 мл CH<sub>3</sub>CN приливали до розчину PdCl<sub>2</sub>·2CH<sub>3</sub>CN (0,200 г, 0,771 ммоль) у 5 мл CH<sub>3</sub>CN. Одержаний темно-жовтий розчин залишали при кімнатній температурі на одну добу. Оранжевий осад, що утворюється, відфільтровували та сушили на повітрі.

**Pd(L<sup>1</sup>)Cl<sub>2</sub>.** Вихід: 0,245 г (58%). <sup>1</sup>H ЯМР (ДМСО-d<sub>6</sub>, 400 МГц); δ м.ч.: 9,15(1H, d, py-H<sub>6</sub>); 8,32(1H, d, py-H<sub>3</sub>); 8,40(1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,87(1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 4,32(3H, s, CH<sub>3</sub>); 4,23(2H, s, CH<sub>2</sub>); 4,11(2H, q, OCH<sub>2</sub>); 1,21(3H, t, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3446, 3078, 1615, 1510, 1469, 1434, 1143, 796, 747, 630. Теоретично розраховано для C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>Pd: C, 34,04; H, 3,31; N, 13,24. Знайдено: C, 33,90; H, 3,81; N, 13,15.

**Pd(L<sup>2</sup>)Cl<sub>2</sub>.** Вихід: 0,232 г (55%). <sup>1</sup>H ЯМР (DMCO-d<sub>6</sub>, 400 MHz); δ м.ч.: 9,00 (1H, d, py-H<sub>6</sub>); 8,11 (1H, d, py-H<sub>3</sub>); 8,30 (1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,79 (1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 4,60 (2H, s, CH<sub>2</sub>); 4,16 (2H, q, OCH<sub>2</sub>); 4,00 (3H, s, CH<sub>3</sub>); 1,22 (3H, t, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3425, 2981, 1736, 1356, 1098, 986, 765, 679. Теоретично розраховано для C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>Pd: С, 34,04; Н, 3,31; N, 13,24. Знайдено: С, 34,20, Н, 3,70, N, 13,05.

**Pd(L<sup>3</sup>)Cl<sub>2</sub>.** Вихід: 0,240 г (61%). <sup>1</sup>H ЯМР (DMCO-d<sub>6</sub>, 400 MHz); δ м.ч.: 9,03 (1H, d, py-H<sub>6</sub>); 8,13 (1H, d, py-H<sub>3</sub>); 8,30 (1H, dd, py-H<sub>4</sub>); 7,79 (1H, dd, py-H<sub>5</sub>); 5,72 (1H, q, -CH-); 4,20 (2H, q, OCH<sub>2</sub>); 3,94 (3H, s, CH<sub>3</sub>); 1,54 (3H, d, CH<sub>3</sub>); 1,21 (3H, t, CH<sub>3</sub>). ІЧ (табл. KBr); см<sup>-1</sup>: 3415, 2883, 1736, 1376, 976, 762, 687. Теоретично розраховано для C<sub>13</sub>H<sub>16</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>Pd: С, 35,68; Н, 3,66; N, 12,81. Знайдено: С, 34,80, Н, 3,70, N, 13,09.

**Результати та їх обговорення.** Як ліганди в роботі використовували похідні етилового естеру 3-(2-піридил)-N-метил-1,2,4-триазол-5-ілоцтової кислоти, отримані алкілюванням зазначеної вище сполуки метилйодидом (рис.). При цьому співвідношення продуктів алкілювання по N<sup>1</sup> та N<sup>2</sup> становить приблизно 1 : 1. Також вдалося виділити невелику кількість L<sup>3</sup>, що є продуктом алкілювання метиленової групи в L<sup>2</sup>. На основі L<sup>1-3</sup> синтезовано координаційні сполуки паладію (II). За взаємодії еквімолярних кількостей PdCl<sub>2</sub>·2CH<sub>3</sub>CN і лігандів утворювалися моноядерні комплекси Pd(L<sup>1</sup>)Cl<sub>2</sub>, Pd(L<sup>2</sup>)Cl<sub>2</sub> та Pd(L<sup>3</sup>)Cl<sub>2</sub>. Результати досліджень сполук фізико-хімічними методами свідчать про реалізацію в усіх випадках бідентатно-хелатного способу координації ліганду через атоми нітрогену піридинового циклу та N<sup>4</sup>-триазолу.

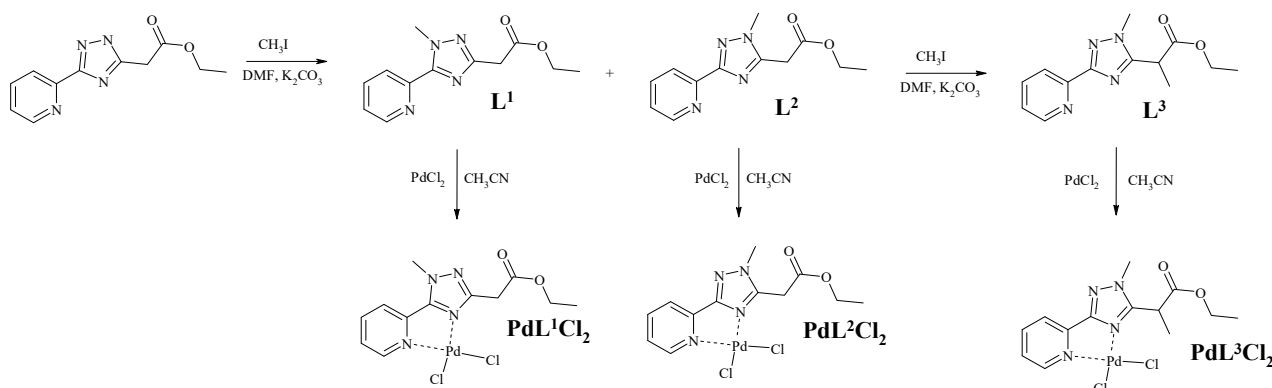
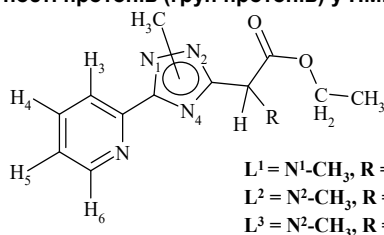


Рис. Схема синтезу L<sup>1-3</sup> та комплексів Pd(L<sup>1-3</sup>)Cl<sub>2</sub>

ІЧ-спектри некоординованих L<sup>1-3</sup> мають спільні риси, зумовлені їхньою структурною схожістю. Так, у спектрах спостерігаються смуги валентних і деформаційних коливань подвійних зв'язків піридинового фрагменту на ділянці 1600–1450 см<sup>-1</sup> та дві інтенсивні смуги поглинання, що належать до валентних коливань складноєфірної групи ν(C=O) та ν(C–O) на ділянках 1720–1730 см<sup>-1</sup> та 1210–1180 см<sup>-1</sup> відповідно. Унаслідок координації всі сигнали піридинового та триазольного фрагментів зазнають зсуву в низькочастотну ділянку на 10–55 см<sup>-1</sup>, крім сигналів складноєфірної групи, що вказує на відсутність координації через атоми кисню карбонільної групи.

<sup>1</sup>H ЯМР-спектри отриманих лігандів також дещо подібні. У <sup>1</sup>H ЯМР-спектрі сигнали протонів піридинового циклу етилового естеру 3-(2-піридил)-N<sup>1</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-ілоцтової кислоти зміщені на 0,11–0,13 м.ч. порівняно з ізомерним продуктом. Сигнали N<sup>1</sup>-CH<sub>3</sub> знаходяться у більш слабкому полі, ніж N<sup>2</sup>-CH<sub>3</sub>, що можна пояснити близькістю перших до області від'ємної магнітної анізотропії, утвореної піридиновим циклом. Метильні та метиленові сигнали складноєфірної групи знаходяться майже в однаковій області.

Хімічні зсуви та мультиплетності протонів (груп протонів) у ПМР спектрах сполук L та Pd(L<sup>1-3</sup>)Cl<sub>2</sub>\*



Сполука	Значення хімічного зсуву (м.ч.) та мультиплетності							
	py-H <sub>3</sub>	py-H <sub>4</sub>	py-H <sub>5</sub>	py-H <sub>6</sub>	N-CH <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> (H, CH <sub>3</sub> ) -	-OCH <sub>2</sub> -	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
L <sup>1</sup>	8,10(д.)	8,00(дд.)	7,52(дд.)	8,74(д.)	4,23(с.)	3,70(с.)	4,13(к.)	1,21(т.)
Pd(L <sup>1</sup> )Cl <sub>2</sub>	8,32(д.)	8,40(дд.)	7,87(дд.)	9,15(д.)	4,32(с.)	4,23(с.)	4,11(к.)	1,21(т.)
Δρ	+0,22	+0,40	+0,35	+0,41	+0,09	+0,53	-0,02	+0,00
L <sup>2</sup>	7,99(д.)	7,87(дд.)	7,40(дд.)	8,62(д.)	3,88(с.)	4,17(с.)	4,13(к.)	1,20(т.)
Pd(L <sup>2</sup> )Cl <sub>2</sub>	8,11(д.)	8,30(дд.)	7,79(дд.)	9,00(д.)	4,00(с.)	4,60(с.)	4,16(к.)	1,22(т.)
Δρ	+0,12	+0,43	+0,39	+0,38	+0,12	+0,43	+0,03	+0,02
L <sup>3</sup>	7,99(д.)	7,87(дд.)	7,40(дд.)	8,62(д.)	3,91(с.)	4,36(к.)	1,54(д.)	4,12(к.)
Pd(L <sup>3</sup> )Cl <sub>2</sub>	8,13(д.)	8,30(дд.)	7,79(дд.)	9,03(д.)	3,94(с.)	5,72(к.)	1,54(д.)	4,20(к.)
Δρ	+0,14	+0,43	+0,39	+0,41	+0,03	+1,36	+0,00	+0,08

\*Спектри отримано в DMCO-d<sub>6</sub>.

Координація L<sup>1-3</sup> іоном Pd<sup>2+</sup> призводить до значного слабкопольного зсуву сигналів протонів піридинового кі-

льця. Приблизно однакові значення Δρ для py-H<sub>4-6</sub> свідчать про те, що визначну роль в утворенні між паладієм

та лігандами відіграють π-електрони, оскільки ефективний перерозподіл електронної густини між металоцентром та атомами, що знаходяться на відстані більше, ніж два зв'язки є неможливим при утворенні σ- або донорно-акцепторного зв'язку. Слід також відзначити значний зсув сигналу метинових протонів в  $\text{Pd}(\text{L}^3)\text{Cl}_2$  +1,36 м.ч. Це може бути зумовлено стабілізацією певної конформації ліганду внаслідок комплексоутворення, у якій метиновий протон дезекранується іоном хлору, або навіть утворенням внутрішньомолекулярного водневого зв'язку. Сигнали складноєфірної групи майже не зазнають зсуву, що свідчить про відсутність координації через атом кисню.

**Висновки.** Описано методики синтезу нових похідних етилового естеру 3-(2-піридил)-N-метил-1,2,4-триазол-5-іл оцтової кислоти та продуктів їхньої взаємодії з  $\text{Pd}(\text{II})$ . Синтезовані органічні ліганди й комплекси паладію були досліджені за допомогою  $^{13}\text{C}$  та  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії, елементного аналізу. Методом  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії встановлено, що комплекси  $\text{Pd}(\text{L}^1)\text{Cl}_2$ ,  $\text{Pd}(\text{L}^2)\text{Cl}_2$

та  $\text{Pd}(\text{L}^3)\text{Cl}_2$  моноядерні, у всіх випадках реалізується бідентатно-хелатний спосіб координації ліганду через атоми нітрогену піридинового циклу та  $\text{N}^4$  триазолу.

#### Список використаних джерел

1. Rosenberg B., Van Camp L., Krigas T. Nature, 1965, 205, P. 698–709.
2. Gaccioli F., Franchi-Gazzola R., Lanfranchi M., Marchir L., Metta G., Pellinghelli M.A., Tardito S., Tegoni M. J. Inorg. Biochem., 2005, 99, P. 1573–1584.
3. Lipinsky C.A., LaMattina J.L., Oates P.J. J. Med. Chem., 1986, 29, P. 2154–2163.
4. Ainsworth C., Reuben G.J. J. Amer. Chem. Soc., 1954, 76, P. 5651–5654.
5. Джоуль Дж., Миллс К. Химия гетероциклических соединений. М.: Мир, 2004.
6. Хоменко Д.М., Дорошук Р.О., Лампека Р.Д. Укр. хим. журнал, 2009, 75(7), 30–33.
7. Хоменко Д.М., Дорошук Р.О., Лампека Р.Д. Укр. хим. журнал, 2012, 78(7), 45–49.
8. Хоменко Д.М., Дорошук Р.О., Лампека Р.Д. Укр. хим. журнал, 2012, 78(7), 45–49.

Надійшла до редколегії 24.02.17

Ю. Огородник, студ., yulia.ohorodnik15@gmail.com,

Д. Хоменко, канд. хим. наук,

Р. Дорошук, канд. хим. наук,

Р. Лампека д-р хим. наук,

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

### СИНТЕЗ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА 3-(2-ПИРИДИЛ)-N-МЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ИЛ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Pd}(\text{II})$ НА ИХ ОСНОВЕ

*Алкилирование метилового эфира 3-(2-пиридил)-1,2,4-триазол-5-ил уксусной кислоты йодистым метилом было получено лиганды: этиловый эфир 3-(2-пиридил)-N<sup>1</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-ил уксусной кислоты ( $\text{L}^1$ ) и этиловый эфир 3-(2-пиридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-ил уксусной кислоты ( $\text{L}^2$ ) и комплексы палладия(II) состава  $\text{PdL}^1\text{Cl}_2$ ,  $\text{PdL}^2\text{Cl}_2$ . Также удалось выделить небольшое количество этилового эфира 3-(2-пиридил)-N<sup>2</sup>-метил-1,2,4-триазол-5-ил-α-пропионовой кислоты ( $\text{L}^3$ ), который является продуктом алкилирования метиленовой группы в  $\text{L}^2$  и синтезировать комплекс палладия(II)  $\text{Pd}^3\text{Cl}_2$ . Строение полученных комплексов исследовано с помощью ИК и  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопии.*

*Ключевые слова:* 1,2,4-триазола, этиловый эфир, палладий (II), ИК спектроскопия, ЯМР-спектроскопия.

Yu. Ogorodnik, Student, yulia.ohorodnik15@gmail.com,

D. Khomenko, PhD,

R. Doroshuk, PhD,

R. Lampeka, Dr. Sci.,

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

### SYNTHESIS OF 3-(2-PYRIDYL)-N-METHYL-1,2,4-TRIAZOLE-5-ACETIC ACID ETHYL ESTER AND THEIR COORDINATION COMPOUNDS WITH $\text{Pd}(\text{II})$

*Alkylation of 3-(2-pyridyl)-1,2,4-triazole-5-acetic acid with iodomethane leads to formation of 3-(2-pyridyl)-N<sup>1</sup>-methyl-1,2,4-triazole-5-acetic acid ethyl ester ( $\text{L}^1$ ) and 3-(2-pyridyl)-N<sup>2</sup>-1,2,4-triazole-5-acetic acid ethyl ester ( $\text{L}^2$ ). It was also managed to identify the compound ethyl ester 3-(2-pyridyl)-N<sup>2</sup>-methyl-1,2,4-triazole-5-yl-α-propionic acid ( $\text{L}^3$ ) which is the product of alkylation of  $\text{L}^2$  in the methylene group.  $\text{L}^{1-3}$  were used for synthesis of palladium(II) complexes  $\text{PdL}^1\text{Cl}_2$ ,  $\text{PdL}^2\text{Cl}_2$  and  $\text{PdL}^3\text{Cl}_2$ . The composition and structure of obtained compounds were proposed on the basis of IR and  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy data and elemental analysis.*

*IR spectra of synthesized ligands have a lot in common, due to their structure similarity. As a result of coordination all signals in the IR spectra are shifted besides bands of ester groups.  $^1\text{H}$  NMR spectra of obtained ligands is bit similar, this is due to their structure. Signals of pyridine ring protons 3-(2-pyridyl)-N<sup>1</sup>-methyl-1,2,4-triazole-5-acetic acid ethyl ester shifted to 0.11–0.13 ppm in a weak field in compare with isomers. N<sup>1</sup>-CH<sub>3</sub> signals are shifted to lower field than N<sup>2</sup>-CH<sub>3</sub>, it can be explained by the influence of negative magnetic anisotropy of pyridine ring. Methyl and methylene signals of ester group are located nearly in the same field in  $\text{L}^{1-3}$ .*

*Coordination of all ligands occurs through the nitrogen atom of pyridine ring and N<sup>4</sup>-triazole. In this case all  $\text{L}^1$ ,  $\text{L}^2$  and  $\text{L}^3$  signals of pyridine protons suffer shift to a low field. Methyl and methylene signals of ester group almost no shifted what indicate that no coordination through oxygen atom.*

*Keywords:* 1,2,4-triazole, palladium(II), IR spectroscopy, NMR spectroscopy.