

联吡啶桥联乙酰丙酮铜配合物的晶体结构和波谱研究

徐元植,施舒

浙江大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 研究了联吡啶桥联乙酰丙酮铜配合物 $[\mu\text{-}4,4\text{-bipy-Cu}(\text{acac})_2]$ 的晶体结构和电子结构,晶体属单斜晶系,空间群 $P2_1/n$ ,晶胞参数: $a=11.288(5)$ ,  $b=14.507(6)$ ,  $c=11.978(3)\text{\AA}$ ;  $\beta=94.17^\circ$ ,  $Z=4$ . 非权重偏离因子 $R=0.054$ . 结构测定表明:在晶体中 $\text{Cu}(\text{acac})_2$ 与 $4,4\text{-bipy}$ 是以1:1形成一维无限的链状结构.利用UV,IR,ESR等波谱,比较了 $[\mu\text{-}4,4\text{-bipy-Cu}(\text{acac})_2]$ 和 $\text{Cu}(\text{acac})_2$ 成键情况的差异,近似地计算了分子轨道系数 $\alpha_1, \alpha_1'$ 和 $\epsilon\text{-}x$ .分析了 $^1\text{H}$  NMR谱中接触位移,准接触位移和各向异性效应的存在和相对大小。

关键词 [紫外分光光度法](#) [红外分光光度法](#) [晶体结构](#) [铜络合物](#) [光谱分析](#) [质子磁共振谱法](#) [戊二酮](#) [分子轨道理论](#) [电子自旋共振](#) [多核络合物](#) [联吡啶](#) [P](#)

分类号 [0627](#) [064.16](#)

## Study of spectra and crystal structure of bipyridine bridging Cu(II) acetylacetonate complex [ $\mu\text{-}4,4\text{-bipy-Cu}(\text{acac})_2$ ]

XU YUANZH, SHI SHU

### Abstract

**Key words** [ULTRAVIOLET SPECTROPHOTOMETRY](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [COPPER COMPLEX](#) [SPECTROGRAPHIC ANALYSIS](#) [PROTON MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [PENTANEDIONE](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ELECTRON SPIN RESONANCE](#) [POLYNUCLEAR COMPLEX](#) [BIPYRIDINE](#) [P](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“紫外分光光度法”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [徐元植](#)

· [施舒](#)