

双希夫碱双核铜配合物[$\text{Cu}_2(\text{C}_{20}\text{H}_{12}\text{ClN}_2\text{O}_3)\text{OH}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 的晶体结构

徐正,游效曾,姚元根,黄锦顺,王曼芳

南京大学配位化学研究所;中国科学院福建物质结构研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 标题化合物晶体属于单斜晶系,空间群为 $\text{P}2_1/\text{a}$ 晶胞参数: $a=8.524(3)$, $b=16.962(1)$ \AA , $c=13.744(1)$ \AA , $\beta=98.05(1)$, $V=1967.4(10)$ \AA^3 , $D_c=1.821\text{g/cm}^3$, $z=4$.测定结果证实双希夫碱 $\text{C}_{20}\text{H}_{12}\text{ClN}_2\text{O}_3$ 在 $\text{Cu}(\text{II})$ 离子的催化下,不仅分子构型发生了变化,而且出现了一个新的反应,即在生成双核铜(II)配合物的同时,双希夫碱分子中的2-甲氧基被转化成羟基,得到稳定的平面型双核铜(II)配合物 $[\text{Cu}_2(\text{C}_{20}\text{H}_{12}\text{ClN}_2\text{O}_3)\cdot 2\text{H}_2\text{O}]$.根据简单的EHMO计算,对所得到的结果作了适当的说明。

关键词 [晶体结构测定](#) [X射线衍射分析](#) [量子化学](#) [铜络合物](#) [分子轨道理论](#) [席夫碱](#) [双核络合物](#) [休克尔分子轨道](#)

分类号 [0611.662](#) [074](#)

The crystal structure of binuclear copper (ii) complex $[\text{Cu}_2(\text{C}_{20}\text{H}_{12}\text{ClN}_2\text{O}_3)\text{OH}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ of the bis-schiff base

XU ZHENG, YOU XIAOZENG, YAO YUANGEN, HUANG JINSHUN, WANG MANFANG

Abstract

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [COPPER COMPLEX](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [SCHIFF BASE](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [HUCKEL MOLECULAR ORBITAL](#)

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“晶体结构测定” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [徐正](#)
- [游效曾](#)
- [姚元根](#)
- [黄锦顺](#)
- [王曼芳](#)