

配合物 $3\text{AgNO}_3 \cdot 2[(\text{C}_3\text{H}_7\text{S}(\text{CH}_2)_2\text{SC}_3\text{H}_7)]$ 的晶体结构

邵品西,姚心侃,王宏根,王如骥,罗立文,王文虎,王祖陶

南开大学测试计算中心;天津市科学技术进修学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文测定了配合物 $3\text{AgNO}_3 \cdot 2\text{BPrTE}$ 的晶体结构,该晶体属三斜晶系,空间各为 $\text{P}1$,晶胞参数: $a=0.8945(1)$, $b=1.2355(2)$, $c=1.3572(5)\text{nm}$; $\alpha=98.69(2)^\circ$, $\beta=92.74(2)^\circ$, $\gamma=90.45(1)^\circ$; $V=1.480\text{nm}^3$; $Z=2$,

分子中三个 Ag 原子的配位数均为5,但它们的配位多面体各不相同, $\text{Ag}(3)$ 为四方锥体, $\text{Ag}(2)$ 为三角双锥, $\text{Ag}(1)$ 则介于两者之间, NO_3^- 以单齿、不等长双齿和等长双齿两种形式配位于 Ag 原子。配体 BPrTE 也具有两种构象,反式构象具有 C_1 对称性,并以两种形式和 Ag 原子配位,偏转式构象不具有 C_4 对称性,与 Ag 原子形成五元螯合环,分子为三维无限长链结构。

关键词 [晶体结构测定](#) [银](#) [络合物](#) [硝酸银](#) [硫醚](#) [矩阵](#) [最小二乘法](#) [配位化学](#)

分类号 [0611.662](#)

The crystal structure of complex $3\text{AgNO}_3 \cdot 2[(\text{C}_3\text{H}_7\text{S}(\text{CH}_2)_2\text{SC}_3\text{H}_7)]$

SHAO PINXI, YAO XINKAN, WANG HONGGEN, WANG RUJI, LUO LIWEN, WANG WENHU, WANG ZUTAO

Abstract with a 0.8945(1), b 1.2355(2), c 1.3572(5) nm, α 98.69(2), β 92.74(2), and γ 90.45(1)? $Z = 2$. All 3 Ag atoms have the same coordination no. 5, but their coordination polyhedra are different. The tetragonal pyramid and trigonal bipyramid are formed for $\text{Ag}(3)$ and $\text{Ag}(2)$ resp. and the coordination polyhedron of $\text{Ag}(1)$ is between them. The coordination of NO_3^- with Ag may be divided into 2 classes, in 1 of them NO_3^- is bonded to Ag with unidentate and bidentate having unequal bond length and in other with bidentate having equal bond length. The ligand coordinates with Ag also with 2 conformation. The chair conformation has C_i symmetry and its coordination with Ag is again in 2 forms. The gauche conformation has no C_i symmetry and coordinates with Ag to form a 5-membered chelate ring. The complex is a large mol. having 3-dimensional unlimited chains. Atomic coordinates are given.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [SILVER](#) [COMPLEX COMPOUNDS](#) [SILVER NITRATE](#) [SULFUR ETHER](#) [MATRICES](#) [LEAST SQUARE METHODS](#) [COORDINATE CHEMISTRY](#)

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

- [邵品西](#)
- [姚心侃](#)
- [王宏根](#)
- [王如骥](#)
- [罗立文](#)
- [王文虎](#)
- [王祖陶](#)