

大环硫氮冠醚金属配合物的研究 I. 1,4,10,13-四硫-7,16-二氮杂环十八烷的硝酸盐及氯化镍配合物的合成、晶体结构和电子结构

王瑾玲, 缪方明, 周游, 韩玉真, 唐有祺

天津师范大学化学系; 北京大学物理化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 作为系统研究大环硫氮杂冠醚结构的一部分, 合成了1,4,10,13-四硫-7,16-二氮杂环十八冠醚的硝酸盐[H₂(C₁₂H₂₆N₂S₄)(NO₃)₂]₁和镍配合物[Ni(C₁₂H₂₆N₂S₄)Cl₂·4H₂O]₂, 并测定和计算了它们的晶体结构和电子结构。化合物1属单斜晶系, 空间群P2₁/c, a=7.936(5), b=8.866(7), c=14.756(5)埃, β=95.33(4)°, V=1033.7埃³, Z=2, D_o=1.45g·cm⁻³, μ=43.7cm⁻¹, F(000)=480, 最终偏离因子R=0.059, R_w=0.059。化合物2属三斜晶系, 空间群P1, a=6.941(4), b=9.862(3), c=16.507(3)埃, α=98.78(2), β=95.52(3), γ=93.48(3)°, V=1108.3埃³, Z=2, D_c=1.58g·cm⁻³, μ=14.9cm⁻¹, F(000)=556; 最终偏离因子R=0.060, R_w=0.065。晶体结构测定结果表明: 化合物1与自由配体L相比较, N原子的构型变化最大, 在氯化镍配合物2中, 四硫二氮大环发生严重扭曲, 其中四个S和两个N原子在Ni原子周围形成八面体配位, Ni-N距离从2.109到2.140埃, Ni-S距离从2.370到2.435埃。同时, 量化计算结果说明, S、N原子与Ni²⁺本位时均为电子授体, 且S对Ni²⁺的授电子能力, 似略大于N原子。

关键词 [晶体结构测定](#) [氯化物](#) [氮杂环化合物](#) [量子化学](#) [冠式化合物](#) [硝酸盐](#) [大环化合物](#)
[微分重叠全忽略近似](#) [电子结构](#) [镍络合物](#) [硫杂环化合物](#) [十二碳化合物](#) [八面体配位](#)

分类号 [O611.662](#)

Study of complexes of macrocyclic crown ethers containing N,S atoms. I. Synthesis, crystal and electronic structures of nitrate and complex of nickel chloride of 1,4,10,13-tetrathia-7,16-diazacyclooctadecane

WANG JINLING, MIAO FANGMING, ZHOU YOU, HAN YUZHEN, TANG YOUQI

Abstract

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [CHLORIDE](#) [NITROGEN HETEROCYCLICS](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [CROWN ETHER COMPOUNDS](#) [NITRATE](#) [MACROCYCLIC COMPOUNDS](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [NICKEL COMPLEX](#) [SULFUR HETEROCYCLICS COMPOUNDS](#) [C12 COMPOUNDS](#) [OCTAHEDRAL COORDINATION](#)

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](#)

- [王瑾玲](#)
- [缪方明](#)
- [周游](#)
- [韩玉真](#)
- [唐有祺](#)