

## 二乙三胺五乙酸与铜核配合物 $\{[\text{La}_4\text{Cu}_9(\text{DTPA})_6(\text{H}_2\text{O})_{16}]\cdot 2.6\text{H}_2\text{O}\}_n$ 的晶体结构

扬维春, 李俊然, 周永芬, 金天柱

北京大学化学系稀土化学研究中心; 北京大学稀土材料化学及应用国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 在水溶液中合成了二乙三胺五乙酸与铜核配合物蓝色棱柱状晶体, 用X射线衍射方法测定了配合物的晶体结构, 其结构式为  $\{[\text{La}_4\text{Cu}_9(\text{DTPA})_6(\text{H}_2\text{O})_{16}]\cdot 2.6\text{H}_2\text{O}\}_n$ , DTPA为二乙三胺五乙酸根。晶体属三斜晶系, 空间群为P1, 每一晶胞中有1个配合单元, 形成网状结构, 晶胞参数如下:  $a=1.5635(5)$ ,  $b=1.6496(6)$ ,  $c=1.7116(3)\text{nm}$ ,  $\alpha=89.07(2)$ ,  $\beta=73.91(2)$ ,  $\gamma=65.82(3)^\circ$ ,  $V=3.839\text{nm}^3$ ,  $Z=1$ ,  $D_{\text{calc}}=1.822\text{g}/\text{cm}^3$ ,  $D_{\text{ex}}=1.831\text{g}/\text{cm}^3$ 。配合物中镧离子有两种配位方式, 配位数一种是8, 另一种是9, 其配位多面体分别为双冠和三冠三角棱柱体; 铜离子也有两种配位方式, 配位数一种是6, 另一种是5, 分别形成八面体和四方锥型配位多面体。

**关键词** [晶体结构](#) [X射线衍射分析](#) [铜络合物](#) [镧络合物](#) [三乙三胺五乙酸](#)

分类号 [0611.662](#)

## Synthesis and crystal structure of heteronuclear lanthanum and copper complex with diethylenetriaminepentaacetic acid $\{[\text{La}_4\text{Cu}_9(\text{DTPA})_6(\text{H}_2\text{O})_{16}]\cdot 2.6\text{H}_2\text{O}\}_n$

YANG WEICHUN, LI JUNRAN, ZHOU YONGFENG, JIN TIANZHU

**Abstract** The title complex has been synthesized in aqueous solution. The crystal structure of the complex has been determined on a four-circle X-ray diffractometer. The crystal belongs to triclinic, space group P1. The cell parameters are as follows:  $a=1.5635(5)$ ,  $b=1.6469(6)$ ,  $c=1.7116(3)\text{cm}$ ,  $\alpha=89.07(2)$ ,  $\beta=73.91(2)$ ,  $\gamma=65.82(3)^\circ$ ,  $V=3.839\text{nm}^3$ ,  $Z=1$ ,  $D_{\text{calc}}=1.822\text{g}/\text{cm}^3$ . In the crystal, there are two different kinds of coordination numbers for each of La(III) ion and Cu(II) ions. The coordination number of one kind of La(III) ion is 8 and that of other kind of La(III) ion is 9, and their coordination polyhedron are dicapped and tricapped trigonal prisms, respectively; the coordination number of one kind of Cu(II) ion is 5 and that of the other kind of Cu(II) ion is 6, forming a square pyramid and octahedron, respectively.

**Key words** [CRYSTAL STRUCTURE](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [COPPER COMPLEX](#) [LANTHANUM COMPLEX](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(441KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [扬维春](#)
- [李俊然](#)
- [周永芬](#)
- [金天柱](#)