

**N-氧化吡啶-2-甲醛衍生物的配合物研究 III: N-氧化吡啶-2-甲醛缩氨基硫脲的双核铜配合物的晶体结构和电子结构**

陆勤, 王国雄, 臧焰, 尹湛峰, 曾成, 周忠远

南京大学配位化学研究所; 中国科学院成都分析测试中心

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 合成了N-氧化吡啶-2-

甲醛缩氨基硫脲的双核铜配合物。晶体结构的测定表明两Cu原子之间是通过两个单原子氧桥相联, 每个桥联氧原子既处于一个Cu原子为中心的四方锥底面, 又是另一个Cu原子四方锥的锥顶。晶体属单斜晶系, 空间群为C<sub>2</sub>, 晶体结构参数为a=16.445, b=13.889, c=12.770 Å, β=122.82°。根据半经验MO法的计算结果, 指出了红外谱中N-O键和C=N键特征峰朝不同方向位移的原因, 并对磁偶合常数作了估计。

**关键词** [吡啶 P](#) [红外分光光度法](#) [晶体结构](#) [X射线衍射分析](#) [铜络合物](#) [氧化物](#) [电子结构](#) [双核络合物](#)  
[甲醛 P](#) [氨基硫脲 P](#)

分类号 [0611.662](#)

**Studies on coordination compounds with picolinaldehyde N-oxide derivatives as ligands III: Crystal and electronic structure of binuclear copper (II) complex with picolinaldehyde N-oxide thiosemicarbazone**

LU QIN, WANG GUOXIONG, ZANG YAN, YIN ZHANFENG, ZENG CHENG, ZHOU ZHONGYUAN

**Abstract** thiosemicarbazone) was prepared Crystal structure anal. has shown that 2 Cu atoms are bridged by 2 O atoms. Each O atom lies at the base of a square pyramid containing 1 Cu atom and acts as the top of the square pyramid containing the other Cu atom. The crystal belongs to monoclinic system, space group C<sub>2</sub>, with a 16.445, b 13.889, c 12.770 Å, β 122.82° R = 0.0388, R<sub>w</sub> = 0.0414. The band shifts of the N-O bond and the C:N bond in the IR spectrum were explained by semiempirical MO calcns. and the value of the magnetic coupling parameter was estimated

**Key words** [PYRIDINE P](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [COPPER COMPLEX](#) [OXIDE](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [FORMALDEHYDE P](#) [THIOSEMICARBAZIDE 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“吡啶 P”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [陆勤](#)
- [王国雄](#)
- [臧焰](#)
- [尹湛峰](#)
- [曾成](#)
- [周忠远](#)